



(19)中華民國智慧財產局

(12)發明說明書公開本

(11)公開編號：TW 201245210 A1

(43)公開日：中華民國 101 (2012) 年 11 月 16 日

(21)申請案號：101107229

(22)申請日：中華民國 101 (2012) 年 03 月 03 日

(51)Int. Cl. : C07D498/04 (2006.01)
H05B33/14 (2006.01)

H01L51/50 (2006.01)
H01M14/00 (2006.01)

(30)優先權：2011/03/03 日本
2011/09/05 日本

2011-046888
2011-193294

(71)申請人：國立大學法人九州大學(日本) KYUSHU UNIVERSITY, NATIONAL UNIVERSITY CORPORATION (JP)

日本

(72)發明人：若宮淳志 WAKAMIYA, ATSUSHI (JP)；西村秀隆 NISHIMURA, HIDETAKA (JP)；村田靖次郎 MURATA, YASUJIRO (JP)；福島達也 FUKUSHIMA, TATSUYA (JP)；尾弘典 KAJI, HIRONORI (JP)

(74)代理人：陳長文

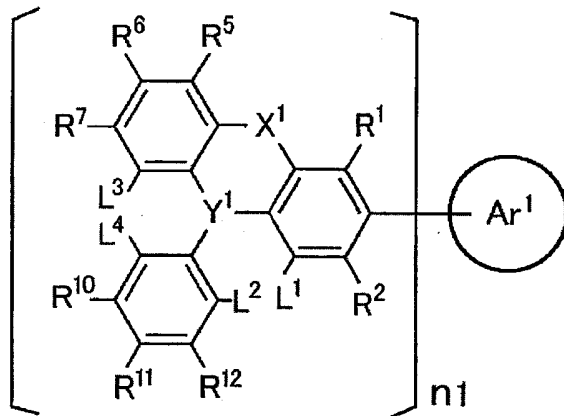
申請實體審查：無 申請專利範圍項數：12 項 圖式數：10 共 123 頁

(54)名稱

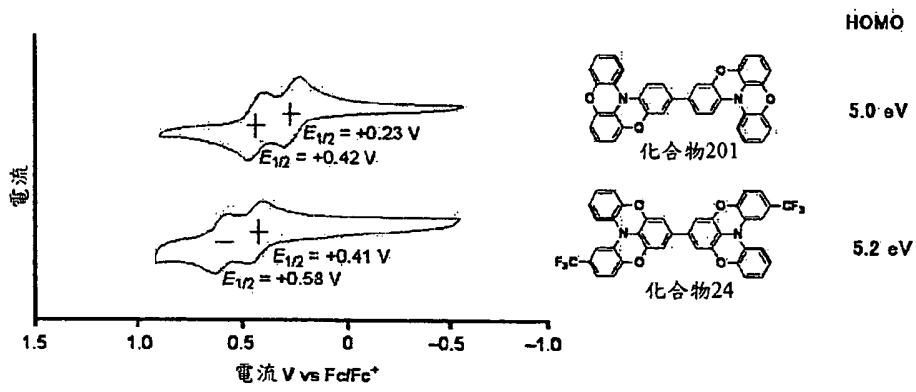
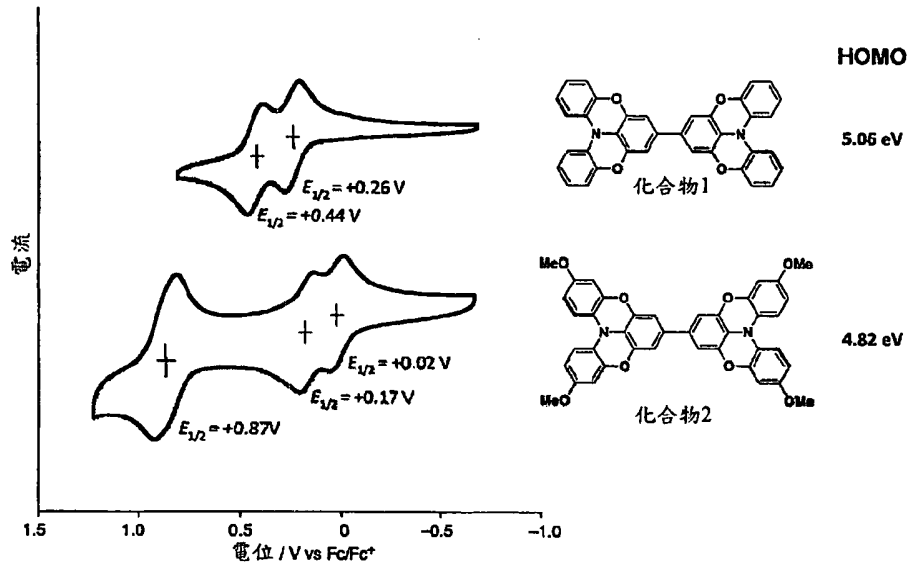
新穎化合物、電荷輸送材料及有機裝置

(57)摘要

下述通式所表示之化合物之熱穩定性較高，具有作為電荷輸送材料之優異特性。



[Ar¹ 表示單鍵、苯環等；X¹ 表示經由氧原子、硫原子、碳原子、氮原子、磷原子或矽原子而連結之連結基；L¹ 與 L²、L³ 與 L⁴ 中之任一者相互連結，表示經由氧原子、硫原子、碳原子、氮原子、磷原子或矽原子而連結之連結基，L¹ 與 L²、L³ 與 L⁴ 中之另一者表示氫原子或取代基；Y¹ 表示經由氮原子、硼原子或磷原子而連結之連結基；R¹、R²、R⁵~R⁷ 及 R¹⁰~R¹² 表示氫原子或取代基；n₁ 表示 2 以上之整數]。





(19)中華民國智慧財產局

(12)發明說明書公開本

(11)公開編號：TW 201245210 A1

(43)公開日：中華民國 101 (2012) 年 11 月 16 日

(21)申請案號：101107229

(22)申請日：中華民國 101 (2012) 年 03 月 03 日

(51)Int. Cl. : C07D498/04 (2006.01)
H05B33/14 (2006.01)

H01L51/50 (2006.01)
H01M14/00 (2006.01)

(30)優先權：2011/03/03 日本
2011/09/05 日本

2011-046888
2011-193294

(71)申請人：國立大學法人九州大學(日本) KYUSHU UNIVERSITY, NATIONAL UNIVERSITY CORPORATION (JP)

日本

(72)發明人：若宮淳志 WAKAMIYA, ATSUSHI (JP)；西村秀隆 NISHIMURA, HIDETAKA (JP)；村田靖次郎 MURATA, YASUJIRO (JP)；福島達也 FUKUSHIMA, TATSUYA (JP)；尾弘典 KAJI, HIRONORI (JP)

(74)代理人：陳長文

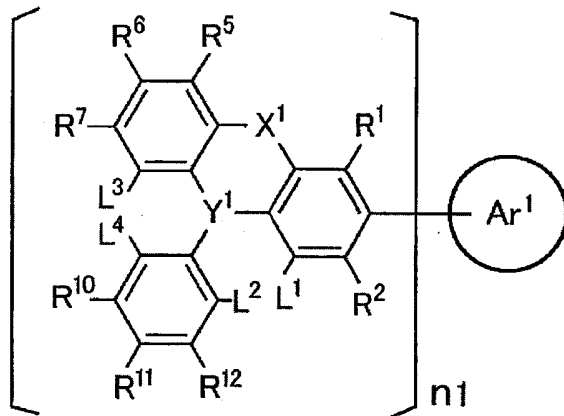
申請實體審查：無 申請專利範圍項數：12 項 圖式數：10 共 123 頁

(54)名稱

新穎化合物、電荷輸送材料及有機裝置

(57)摘要

下述通式所表示之化合物之熱穩定性較高，具有作為電荷輸送材料之優異特性。



[Ar¹ 表示單鍵、苯環等；X¹ 表示經由氧原子、硫原子、碳原子、氮原子、磷原子或矽原子而連結之連結基；L¹ 與 L²、L³ 與 L⁴ 中之任一者相互連結，表示經由氧原子、硫原子、碳原子、氮原子、磷原子或矽原子而連結之連結基，L¹ 與 L²、L³ 與 L⁴ 中之另一者表示氫原子或取代基；Y¹ 表示經由氮原子、硼原子或磷原子而連結之連結基；R¹、R²、R⁵~R⁷ 及 R¹⁰~R¹² 表示氫原子或取代基；n₁ 表示 2 以上之整數]。

六、發明說明：

【發明所屬之技術領域】

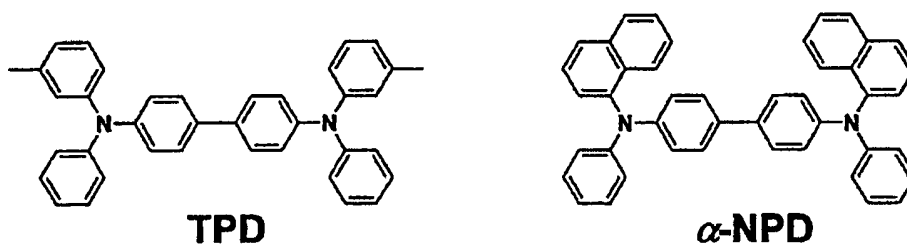
本發明係關於一種新穎化合物與包含該新穎化合物之電荷輸送材料。又，本發明亦係關於使用該新穎化合物之有機電致發光元件或有機薄膜太陽電池等有機裝置。

【先前技術】

於有機電致發光元件或有機薄膜太陽電池等有機裝置中，需要電荷移動率較大之電荷輸送材料。並且，迄今為止已提出各種電荷輸送材料，尤其是已知具有三苯基胺結構之化合物表現出相對較高之電荷移動率。

作為具有三苯基胺結構之化合物，例如廣為人知並得以實用化的是具有以下所示之結構之N,N'-二苯基-N,N'-雙(3-甲基苯基)-1,1'-聯苯基-4,4'-二胺 [TDP] 或 N,N'-二苯基-N,N'-雙(1-萘基)-1,1'-聯苯基-4,4'-二胺 [α -NPD] 等三苯基胺二聚物。

[化 1]



又，亦已知一種三苯基胺衍生物(單體)，其特徵在於利用連結基連結構成三苯基胺之芳香環彼此而提高三苯基胺之平面性(參照專利文獻1)。該三苯基胺衍生物表現出優於TPD之電洞輸送能。然而，於該文獻中關於製造三苯基胺

衍生物之二聚物未作任何記載。

[先前技術文獻]

[專利文獻]

[專利文獻1]日本專利特開平11-339868號公報

【發明內容】

[發明所欲解決之問題]

有機電致發光元件或有機薄膜太陽電池等有機裝置中所使用之電荷輸送材料，較佳為具有非晶狀態穩定而不易結晶化之性質。因此，期望提供一種玻璃轉移溫度(Tg)較高、熱穩定性優異之電荷輸送材料。又，進而期望提供一種有別於先前所知之電荷輸送材料之具有較高電荷輸送效率的材料。

因此，本發明者等人為了提供非晶狀態穩定而不易結晶化、且具有作為電荷輸送材料之優異特性的新穎化合物而進行研究。又，本發明者等人為了提供使用優異之電荷輸送材料之有機電致發光元件或有機薄膜太陽電池等有機裝置而進行研究。

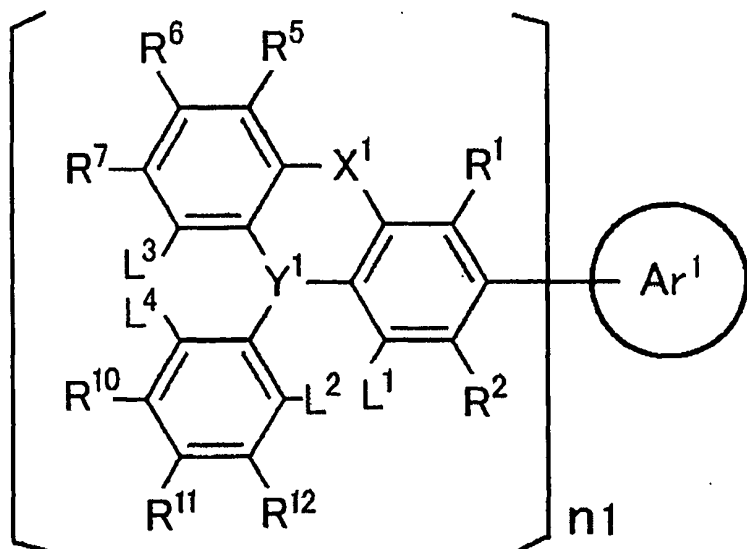
[解決問題之技術手段]

本發明者等人為解決上述問題進行銳意研究，結果發現，分子內具有複數個特定環狀結構之化合物遇熱穩定，具有作為電荷輸送材料之優異特性，可有效地應用於有機裝置中。本發明者等人基於該見解，最終提供出以下本發明作為解決上述問題之手段。

(1) 一種以下述通式[1]表示之化合物：

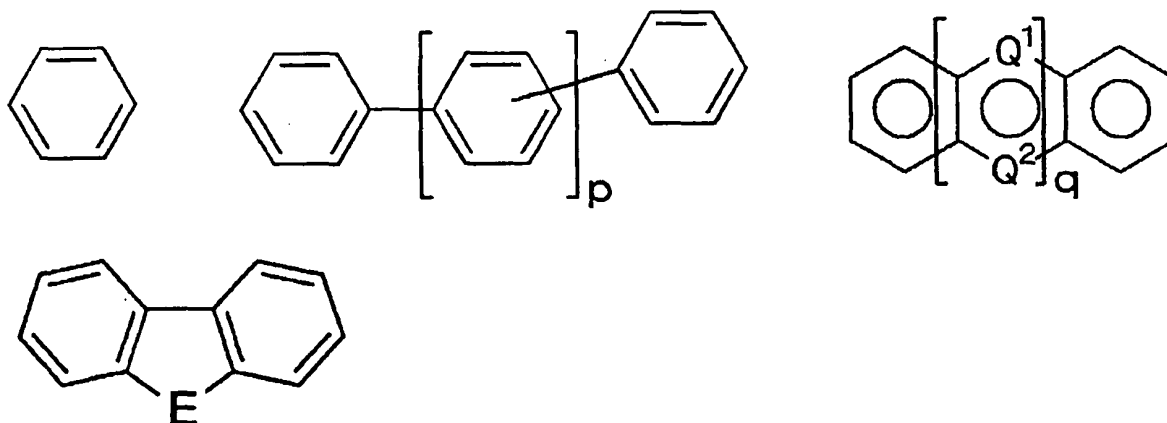
[化2]

通式[1]



[於通式[1]中， Ar^1 表示單鍵或下述任一之結構；

[化3]



Q^1 及 Q^2 均為 $=CH-$ ，或者 Q^1 為單鍵、 Q^2 為 $-CH=CH-$ ，或者 Q^1 為 $-CH=CH-$ 、 Q^2 為單鍵； p 表示0~3中任一整數； q 表示0~3中任一整數； E 表示氧原子、硫原子，或者表示經由碳原子、矽原子、氮原子、磷原子、硼原子或硫原子而連結之原子團；

X^1 表示經由選自由氧原子、硫原子、碳原子、氮原子、磷原子及矽原子所組成群中之1種原子而連結之連結基；

Y^1 表示經由選自由氮原子、硼原子及磷原子所組成群中之1種個原子而連結之連結基；

L^1 與 L^2 、 L^3 與 L^4 中之任一者相互鍵結，表示經由選自由氧原子、硫原子、碳原子、氮原子、磷原子及矽原子所組成群中之1種原子而連結之連結基， L^1 與 L^2 、 L^3 與 L^4 中之另一者各自獨立，表示氫原子或取代基；

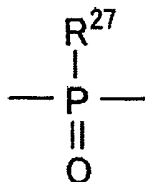
R^1 、 R^2 、 $R^5\sim R^7$ 及 $R^{10}\sim R^{12}$ 各自獨立，表示氫原子或取代基， R^5 與 R^6 、 R^6 與 R^7 、 R^{10} 與 R^{11} 、 R^{11} 與 R^{12} 亦可相互鍵結而形成連結基；

$n1$ 表示2以上之任一整數，分子內所存在之 $n1$ 個之 X^1 、 Y^1 、 R^1 、 R^1 、 $R^5\sim R^7$ 及 $R^{10}\sim R^{12}$ 分別相互可相同亦可不同；

於Ar為單鍵時，鄰接之2個 R^1 彼此可相互鍵結而形成連結基，鄰接之2個 R^2 彼此可相互鍵結而形成連結基]。

(2)如(1)之化合物，其中通式[1]中之 L^1 與 L^2 、 L^3 與 L^4 中之任一者所形成之連結基、與 X^1 所表示之連結基各自獨立，為 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-SO_2-$ 、 $>CR^{21}R^{22}$ 、 $>C=O$ 、 $>C=CR^{23}R^{24}$ 、 $>C=NR^{25}$ 、 $>NR^{26}$ 、

[化4]



或 $>SiR^{28}R^{29}$ ，

Y^1 為 $>N-$ 、 $>B-$ 、 $>P-$ 或 $>P(=O)-$ ，

R^1 、 R^2 、 R^{21} 、 R^{22} 、 R^{28} 及 R^{29} 各自獨立，為氫原子、經取代或未經取代之烷基、或者經取代或未經取代之烷氧基，

R^5 ~ R^7 及 R^{10} ~ R^{12} 各自獨立，為氫原子、經取代或未經取代之烷基、經取代或未經取代之烷氧基、經取代或未經取代之芳基、或者經取代或未經取代之芳氧基， R^5 與 R^6 、 R^6 與 R^7 、 R^{10} 與 R^{11} 、 R^{11} 與 R^{12} 相互鍵結而形成連結基，

R^{23} ~ R^{27} 各自獨立，為氫原子、經取代或未經取代之烷基、或者經取代或未經取代之芳基。

(3)如(1)或(2)之化合物，其中通式[1]中之 L^1 與 L^2 、 L^3 與 L^4 中之任一者所形成之連結基、與 X^1 所表示之連結基為-O-。

(4)如(1)至(3)中任一項之化合物，其中通式[1]中之 Y^1 為>N-。

(5)如(1)至(4)中任一項之化合物，其中通式[1]中之 R^1 及 R^2 為氫原子。

(6)如(1)至(5)中任一項之化合物，其中通式[1]中之 R^5 、 R^7 、 R^{10} 及 R^{12} 為氫原子， R^6 及 R^{11} 為氫原子或烷氧基。

(7)如(1)至(6)中任一項之化合物，其中分子為非對稱。

(8)一種電荷輸送材料，其包含如(1)至(7)中任一項之化合物。

(9)一種有機裝置，其使用如(1)至(7)中任一項之化合物。

(10)一種有機電致發光元件，其使用如(1)至(7)中任一項之化合物。

(11)一種光電轉換元件，其使用如(1)至(7)中任一項之化合物。

(12)一種有機薄膜太陽電池，其使用如(1)至(7)中任一項

之化合物。

[發明之效果]

本發明之化合物係一種非晶狀態穩定而不易結晶化、且具有作為電荷輸送材料之優異特性的化合物。又，使用該化合物之本發明之有機電致發光元件或有機薄膜太陽電池等有機裝置係高效率、抑制耗費電力或發熱量、亦可實現長壽命化者。

【實施方式】

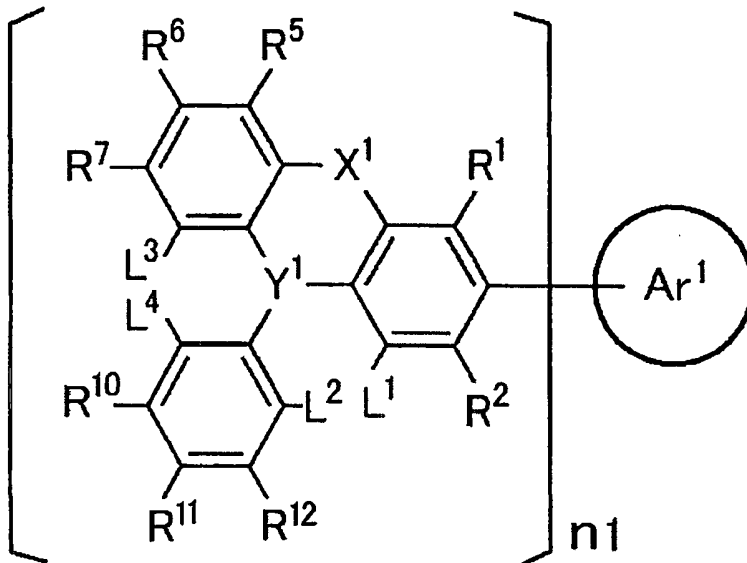
以下，詳細說明本發明之內容。以下所記載之構成要素之說明係基於本發明之具有代表性之實施態樣或具體例而進行，但本發明並不限定於該等實施態樣或具體例。再者，於本說明書中，使用「~」所表示之數值範圍係指包含「~」前後所記載之數值作為下限值與上限值之範圍。

[通式[1]所表示之化合物]

本發明之化合物具有通式[1]所表示之結構。

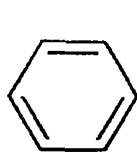
[化5]

通式[1]

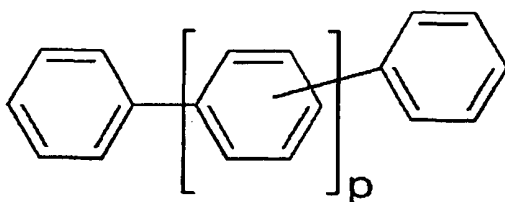


通式[1]中之 Ar^1 表示單鍵或下述[31]~[34]中任一結構。

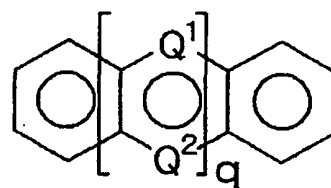
[化6]



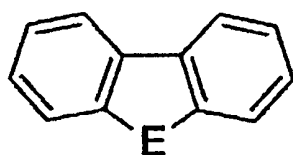
[31]



[32]



[33]



[34]

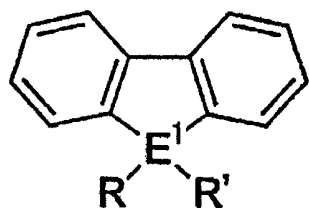
於 Ar^1 為式[31]所表示之苯環之情形時，作為 n_1 為2時之鍵結位置，可列舉：1,3位，1,4位。作為 n_1 為3時之鍵結位置，可列舉：1,3,5位。

於 Ar^1 表示為通式[32]時， p 表示0~3中任一整數。例如，作為 p 為0之聯苯基結構且 n_1 為2時之鍵結位置，可列舉：3,3'位，4,4'位。 p 為1~3中任一整數時， p 個伸苯基各自獨立，較佳為1,3-伸苯基或1,4-伸苯基。又， p 為2或3時， p 個伸苯基之鍵結位置可相同亦可不同。

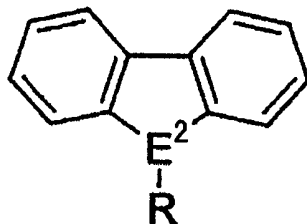
於 Ar^1 表示為通式[33]時， q 表示0~3中任一整數。 Q^1 及 Q^2 均為 $=CH-$ ，或者 Q^1 為單鍵、 Q^2 為 $-CH=CH-$ ，或者 Q^1 為 $-CH=CH-$ 、 Q^2 為單鍵。例如，作為 q 為0之伸苯基結構且 n_1 為2時之鍵結位置，可列舉：1,5位，2,6位，2,7位，1,8位。 q 為2或3時， q 個 Q^1 可相同亦可不同、 q 個 Q^2 可相同亦可不同。

於 Ar^1 表示為通式 [34] 時，E 表示氧原子、硫原子，或者表示經由碳原子、矽原子、氮原子、磷原子、硼原子或硫原子而連結之原子團。通式 [34] 中包含以下通式 [41]、[42] 及 [43]。

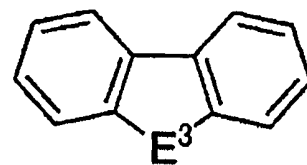
[化 7]



[41]



[42]



[43]

通式 [41] 中之 E^1 表示 C 或 Si，通式 [42] 中之 E^2 表示 N、P、P(=O) 或 B，通式 [43] 中之 E^3 表示 S、 SO_2 或 O。通式 [41] 及 [42] 中之 R 及 R' 各自獨立，表示氫原子或取代基。作為較佳之取代基，例如可列舉：經取代或未經取代之烷基、經取代或未經取代之芳基，關於其說明與較佳之範圍，可參照下述 $R^{21} \sim R^{29}$ 可使用之烷基、芳基之說明與較佳之範圍。

通式 [1] 中之 X^1 表示經由選自由氧原子、硫原子、碳原子、氮原子、磷原子及矽原子所組成群中之 1 種原子而連結之連結基。又， L^1 與 L^2 、 L^3 與 L^4 中之任一者相互鍵結，表示經由選自由氧原子、硫原子、碳原子、氮原子、磷原子及矽原子所組成群中之 1 種原子而連結之連結基。 X^1 所表示之連結基、與 L^1 與 L^2 、 L^3 與 L^4 中之任一者所表示之連結基可相同亦可不同。較佳為相同之情形。經由氧原子而連結之連結基為 -O-。

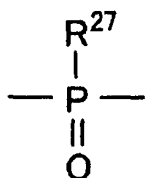
經由硫原子而連結之連結基較佳為-S-或-SO₂-，更佳為-S-。

經由碳原子而連結之連結基較佳為>CR²¹R²²、>C=O、>C=CR²³R²⁴或>C=NR²⁵。R²¹~R²⁵各自獨立，表示氫原子或取代基。R²¹及R²²各自獨立，較佳為氫原子、經取代或未經取代之烷基、經取代或未經取代之烷氧基、經取代或未經取代之芳基、或經取代或未經取代之芳氧基。又，R²³~R²⁵各自獨立，較佳為氫原子、經取代或未經取代之烷基、或者經取代或未經取代之芳基。

經由氮原子而連結之連結基為>NR²⁶。R²⁶較佳為氫原子、經取代或未經取代之烷基、或者經取代或未經取代之芳基。

經由磷原子而連結之連結基較佳為

[化8]



R²⁷較佳為氫原子、經取代或未經取代之烷基、或者經取代或未經取代之芳基。

經由矽原子而連結之連結基較佳為>SiR²⁸R²⁹。R²⁸及R²⁹各自獨立，表示氫原子或取代基。R²⁸及R²⁹各自獨立，較佳為氫原子、經取代或未經取代之烷基、經取代或未經取代之烷氧基、經取代或未經取代之芳基、或者經取代或未經取代之芳氧基。

$R^{21}\sim R^{29}$ 可例示之烷基可為直鏈狀，亦可為分支狀，亦可為環狀。較佳為直鏈狀或分支狀之烷基。烷基之碳數較佳為1~20，更佳為1~12，進而較佳為1~6，進而更佳為1~3(即甲基、乙基、正丙基、異丙基)。作為環狀之烷基，例如可列舉：環戊基、環己基、環庚基。

R^{21} 、 R^{22} 、 R^{28} 及 R^{29} 可使用之烷氧基可為直鏈狀，亦可為分支狀，亦可為環狀。較佳為直鏈狀或分支狀之烷氧基。烷氧基之碳數較佳為1~20，更佳為1~12，進而較佳為1~6，進而更佳為1~3(即甲氧基、乙氧基、正丙氧基、異丙氧基)。作為環狀之烷氧基，例如可列舉：環戊氧基、環己氧基、環庚氧基。

$R^{21}\sim R^{29}$ 可使用之芳基可為包含1個芳香環者，亦可為具有融合有2個以上之芳香環之結構者。芳基之碳數較佳為6~22，更佳為6~18，進而較佳為6~14，進而更佳為6~10(即苯基、1-萘基、2-萘基)。

R^{21} 、 R^{22} 、 R^{28} 及 R^{29} 可使用之芳氧基可為包含1個芳香環者，亦可為具有融合有2個以上之芳香環之結構者。芳氧基之碳數較佳為6~22，更佳為6~18，進而較佳為6~14，進而更佳為6~10(即苯氧基、1-萘氧基、2-萘氧基)。

上述烷基與上述烷氧基進而可經取代，亦可未經取代。作為經取代之情形之取代基，例如可列舉：烷氧基、芳基、芳氧基，關於其說明與較佳之範圍，可參照上述烷氧基、上述芳基、上述芳氧基之記載。

又，上述芳基與上述芳氧基進而可經取代，亦可未經取

代。作為經取代之情形之取代基，例如可列舉：烷基、烷氧基、芳基、芳氧基，關於其說明與較佳之範圍，可參照上述烷基、上述烷氧基、上述芳基、上述芳氧基之記載。

通式[1]中之 Y^1 表示經由選自由氮原子、硼原子及磷原子所組成群中之1種原子而連結之連結基。經由氮原子而連結之連結基為 $>N-$ 。經由硼原子而連結之連結基為 $>B-$ 。經由磷原子而連結之連結基較佳為 $>P-$ 或 $>P(=O)-$ 。

於 Y^1 為 $>N-$ 或 $>P-$ 之情形時，通式[1]之化合物表現出作為電荷輸送材料之有用的性質，尤其是表現出作為電洞輸送材料之有用的性質。又，於 Y^1 為 $>B-$ 或 $>P(=O)-$ 之情形時，通式[1]之化合物表現出作為電荷輸送材料之有用的性質，尤其是表現出作為電子輸送材料之有用的性質。進而，於 Y^1 為 $>N-$ 之情形時，亦包含表現出作為雙極材料之有用的性質者，尤其是於 X^1 為 $-O-$ 之情形時可觀察到該傾向。

於通式[1]中， L^1 與 L^2 、 L^3 與 L^4 中之任一者相互鍵結，表示經由選自由氧原子、硫原子、碳原子、氮原子、磷原子及矽原子所組成群中之1種原子而連結之連結基， L^1 與 L^2 、 L^3 與 L^4 中之另一者各自獨立，表示氫原子或取代基。即，於 L^1 與 L^2 相互鍵結表示上述連結基時， L^3 與 L^4 各自獨立表示氫原子或取代基，又，於 L^3 與 L^4 相互鍵結表示上述連結基時， L^1 與 L^2 各自獨立表示氫原子或取代基。

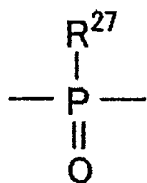
通式[1]中之 R^1 、 R^2 、 $R^5\sim R^7$ 及 $R^{10}\sim R^{12}$ 各自獨立，表示氫原子或取代基。

作為 R^1 、 R^2 、 $R^5\sim R^7$ 、 $R^{10}\sim R^{12}$ 及 $L^1\sim L^4$ 可使用之取代基，例如可列舉：經取代或未經取代之烷基、經取代或未經取代之烷氧基、經取代或未經取代之芳基、經取代或未經取代之芳氧基。關於該等各取代基之說明與較佳之範圍，可參照上述烷基、上述烷氧基、上述芳基、上述芳氧基之記載。

通式[1]中之 R^1 及 R^2 各自獨立，較佳為氫原子、經取代或未經取代之烷基、或者經取代或未經取代之烷氧基。又，於 Ar^1 為單鍵時，亦較佳為鄰接之2個 R^1 彼此相互鍵結而形成連結基，或者鄰接之2個 R^2 彼此相互鍵結而形成連結基。關於此處提及之烷基與烷氧基之說明與較佳之範圍，亦可參照上述烷基與上述烷氧基之記載。作為 R^1 及 R^2 ，更佳為氫原子、甲基或甲氧基。 R^1 及 R^2 兩者均為氫原子之情形亦較佳。

於鄰接之2個 R^1 彼此相互鍵結而形成連結基時，較佳為形成經由選自由氧原子、硫原子、碳原子、氮原子及磷原子所組成群中之1種原子而連結之連結基。具體而言，較佳為形成 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-SO_2-$ 、 $>CR^{21}R^{22}$ 、 $>C=O$ 、 $>C=CR^{23}R^{24}$ 、 $>C=NR^{25}$ 、 $>NR^{26}$ 或

[化9]



或 $>SiR^{28}R^{29}$ 所表示之連結基。關於該等連結基之說明與較佳之範圍，亦可參照上述 X^1 及 X^2 中所對應之連結基之記載。鄰接之2個 R^2 彼此相互鍵結而形成連結基之情形之說明與較佳之範圍，與鄰接之2個 R^1 彼此相互鍵結而形成連結基之情形相同。鄰接之2個 R^1 與鄰接之2個 R^2 可兩者均相互鍵結而形成連結基，亦可僅其中一者相互鍵結而形成連結基。

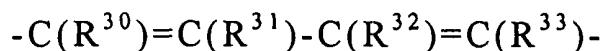
通式[1]中之 $R^5\sim R^7$ 及 $R^{10}\sim R^{12}$ 各自獨立，較佳為氫原子、經取代或未經取代之烷基、經取代或未經取代之烷氧基、經取代或未經取代之芳基、或者經取代或未經取代之芳氧基。關於此處提及之各取代基之說明與較佳之範圍，亦可參照上述烷基、上述烷氧基、上述芳基、上述芳氧基之記載。

未形成連結基之 $L^1\sim L^4$ 更佳為氫原子、碳數1~3之烷基、或碳數1~3之烷氧基，進而更佳為氫原子、甲基或甲氧基。未形成連結基之 $L^1\sim L^4$ 均為氫原子之情形亦較佳。

$R^5\sim R^7$ 及 $R^{10}\sim R^{12}$ 可均為氫原子，亦可至少1個為取代基。於至少1個為取代基之情形時，更佳為 R^6 、 R^7 、 R^{10} 及 R^{11} 中之至少1個為取代基。

通式[1]中之 R^5 與 R^6 、 R^6 與 R^7 、 R^{10} 與 R^{11} 、 R^{11} 與 R^{12} 可相互鍵結而形成連結基。所形成之連結基較佳為連結鏈係由選自由碳原子、氧原子、硫原子、氮原子及磷原子所組成群中之1種以上之原子所構成者，例如可較佳地例示僅由碳原子所構成者。僅由碳原子所構成之連結鏈可為包含雙

鍵者，亦可僅包含單鍵者。連結鏈之原子數較佳為2~6，更佳為3~5，進而較佳為3或4，最佳為4。構成連結鏈之原子上可鍵結氫原子或取代基。較佳之連結基係具有

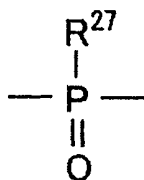


所表示之結構者， $R^{30}\sim R^{33}$ 表示氫原子或取代基， R^{30} 與 R^{31} 、 R^{31} 與 R^{32} 、 R^{32} 與 R^{33} 可相互鍵結進而形成連結基。作為此處提及之取代基，例如可列舉：烷基、烷氧基、芳基、芳氧基。關於其說明與較佳之範圍，可參照上述烷基、上述烷氧基、上述芳基、上述芳氧基之記載。又，關於 R^{30} 與 R^{31} 等所形成之連結基之說明與較佳之範圍，可參照上述 R^5 與 R^6 等所形成之連結基之記載。

通式[1]中之 $n1$ 為2以上之任一整數。 $n1$ 較佳為2~10中任一整數，更佳為2~4中任一整數。例如，可設為2或3。

作為通式[1]所表示之化合物之較佳之範圍，可列舉如下範圍： L^1 與 L^2 、 L^3 與 L^4 中之任一者、與 X^1 各自獨立，為選自 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-SO_2-$ 、 $>CR^{21}R^{22}$ 、 $>C=O$ 、 $>C=CR^{23}R^{24}$ 、 $>C=NR^{25}$ 、 $>NR^{26}$ 、

[化10]



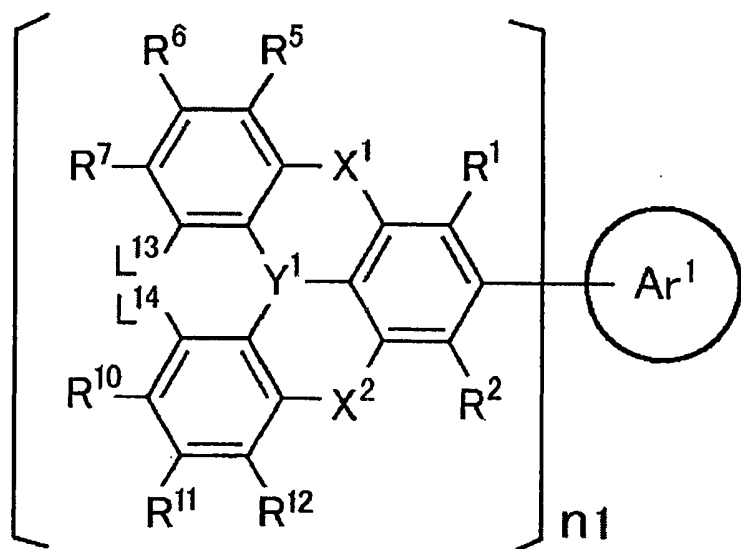
或 $>SiR^{28}R^{29}$ 中之連結基； Y^1 為 $>N-$ 、 $>B-$ 、 $>P-$ 或 $>P(=O)-$ ； R^1 、 R^2 、 R^{21} 、 R^{22} 、 R^{28} 及 R^{29} 各自獨立，為氫原子、經取

代或未經取代之烷基、或者經取代或未經取代之烷氧基，或者於 Ar^1 為單鍵時，鄰接之 2 個 R^1 彼此相互鍵結而形成連結基，或鄰接之 2 個 R^2 彼此相互鍵結而形成連結基；未形成連結基之 $L^1 \sim L^4$ 、 $R^5 \sim R^7$ 及 $R^{10} \sim R^{12}$ 各自獨立，為氫原子、經取代或未經取代之烷基、經取代或未經取代之烷氧基、經取代或未經取代之芳基、或者經取代或未經取代之芳氧基，或者 R^5 與 R^6 、 R^6 與 R^7 、 R^{10} 與 R^{11} 、 R^{11} 與 R^{12} 相互鍵結而形成連結基； $R^{23} \sim R^{27}$ 各自獨立，為氫原子、經取代或未經取代之烷基、或者經取代或未經取代之芳基； $n1$ 為 2~6 中任一整數。

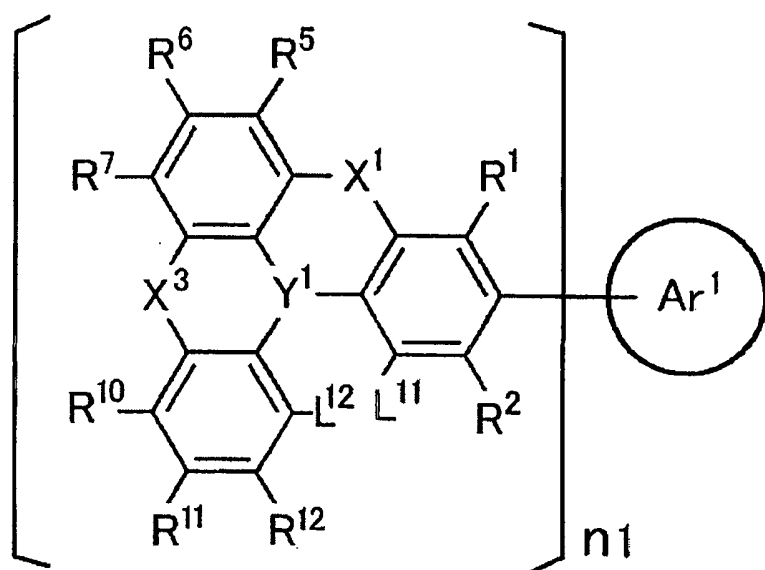
作為通式 [1] 之較佳之結構，可列舉下述通式 [1-1] 及通式 [1-2]。關於通式 [1-1] 及 [1-2] 中之 Ar^1 、 X^1 、 Y^1 、 R^1 、 R^2 、 $R^5 \sim R^7$ 、 $R^{10} \sim R^{12}$ 及 $n1$ 之定義與較佳之範圍，可參照通式 [1] 中所對應之記載。 X^2 與 X^3 之定義與較佳之範圍與通式 [1] 中之 X^1 之定義與較佳之範圍相同。又， $X^1 \sim X^3$ 相互可相同亦可不同。 $L^{11} \sim L^{14}$ 各自獨立，表示氫原子或取代基。關於 $L^{11} \sim L^{14}$ 可使用之取代基之定義與較佳之範圍，可參照通式 [1] 中不為連結基之 $L^1 \sim L^4$ 可使用之取代基之記載。

[化 11]

通式 [1-1]



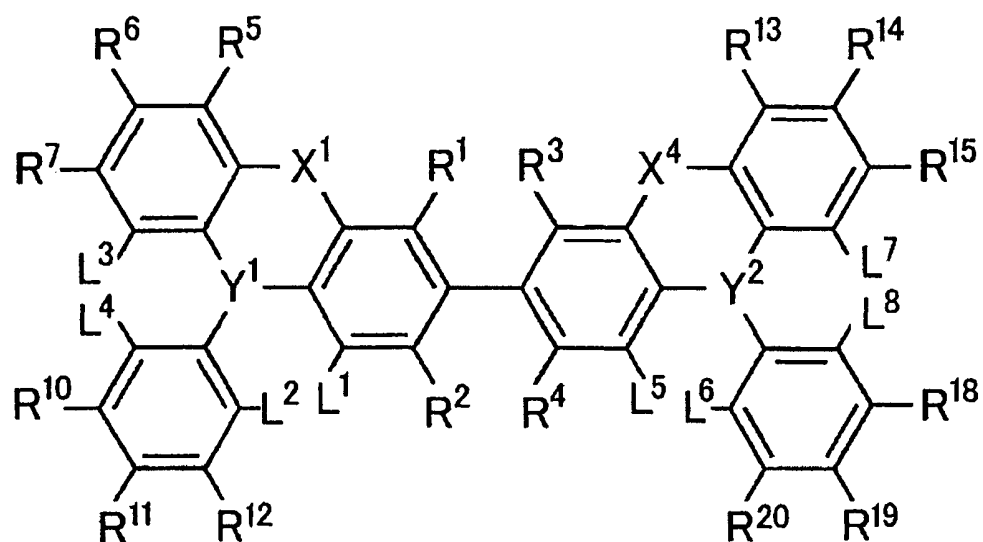
通式 [1-2]



作為通式 [1] 所表示之化合物之另一較佳之範圍，可列舉下述通式 [2] 所表示之化合物。

[化 12]

通式 [2]



於通式[2]中， X^1 及 X^4 各自獨立，表示經由選自由氧原子、硫原子、碳原子、氮原子、磷原子及矽原子所組成群中之1種原子而連結之連結基。關於 X^1 及 X^4 之說明與較佳之範圍，可參照通式[1]之 X^1 之記載。 X^1 及 X^4 可相同亦可不同，較佳為相同。

L^1 與 L^2 、 L^3 與 L^4 中之任一者相互鍵結，表示經由選自由氧原子、硫原子、碳原子、氮原子、磷原子及矽原子所組成群中之1種原子而連結之連結基。又， L^5 與 L^6 、 L^7 與 L^8 中之任一者相互鍵結，表示經由選自由氧原子、硫原子、碳原子、氮原子、磷原子及矽原子所組成群中之1種原子而連結之連結基。於 L^1 與 L^2 相互鍵結表示連結基時，較佳為 L^5 與 L^6 相互鍵結表示連結基。又，於 L^3 與 L^4 相互鍵結表示連結基時，較佳為 L^7 與 L^8 相互鍵結表示連結基。 L^1 與 L^2 、 L^3 與 L^4 中之任一者所表示之連結基、與 L^5 與 L^6 、 L^7 與 L^8 中之任一者所表示之連結基相互可相同亦可不同，較佳為相同。又， L^1 與 L^2 、 L^3 與 L^4 中之任一者所表示之連結

基、與 L^5 與 L^6 、 L^7 與 L^8 中之任一者所表示之連結基、與 X^1 及 X^4 所表示之連結基可相同亦可不同，較佳為相同。

Y^1 及 Y^2 各自獨立，表示經由選自由氮原子、硼原子及磷原子所組成群中之1種原子而連結之連結基。關於 Y^1 及 Y^2 之說明與較佳之範圍，可參照通式[1]之 Y^1 之記載。 Y^1 及 Y^2 可相同亦可不同，較佳為相同。

於通式[2]中， L^1 與 L^2 、 L^3 與 L^4 中之任一者相互鍵結，表示經由選自由氧原子、硫原子、碳原子、氮原子、磷原子及矽原子所組成群中之1種原子而連結之連結基， L^1 與 L^2 、 L^3 與 L^4 中之另一者各自獨立，表示氫原子或取代基。即，於 L^1 與 L^2 相互鍵結表示上述連結基時， L^3 與 L^4 各自獨立，表示氫原子或取代基；又，於 L^3 與 L^4 相互鍵結表示上述連結基時， L^1 與 L^2 各自獨立，表示氫原子或取代基。

同樣地， L^5 與 L^6 、 L^7 與 L^8 中之任一者相互鍵結，表示經由選自由氧原子、硫原子、碳原子、氮原子、磷原子及矽原子所組成群中之1種原子而連結之連結基， L^5 與 L^6 、 L^7 與 L^8 中之另一者各自獨立，表示氫原子或取代基。即，於 L^5 與 L^6 相互鍵結表示上述連結基時， L^7 與 L^8 各自獨立，表示氫原子或取代基；又，於 L^7 與 L^8 相互鍵結表示上述連結基時， L^5 與 L^6 各自獨立，表示氫原子或取代基。

未形成連結基之 L^1 ~ L^8 、與 R^1 ~ R^4 、 R^5 ~ R^7 、 R^{10} ~ R^{12} 、 R^{13} ~ R^{15} 及 R^{18} ~ R^{20} 各自獨立，表示氫原子或取代基， R^1 與 R^3 、 R^2 與 R^4 、 R^5 與 R^6 、 R^6 與 R^7 、 R^{10} 與 R^{11} 、 R^{11} 與 R^{12} 、 R^{13} 與 R^{14} 、 R^{14} 與 R^{15} 、 R^{18} 與 R^{19} 、 R^{19} 與 R^{20} 可相互鍵結而形成

連結基。關於 $R^1\sim R^4$ 之說明與較佳之範圍，可參照通式[1]之 R^1 及 R^2 之記載。關於 $R^5\sim R^7$ 、 $R^{10}\sim R^{12}$ 、 $R^{13}\sim R^{15}$ 及 $R^{18}\sim R^{20}$ 之說明與較佳之範圍，可參照通式[1]之 R^5 及 R^{12} 之記載。

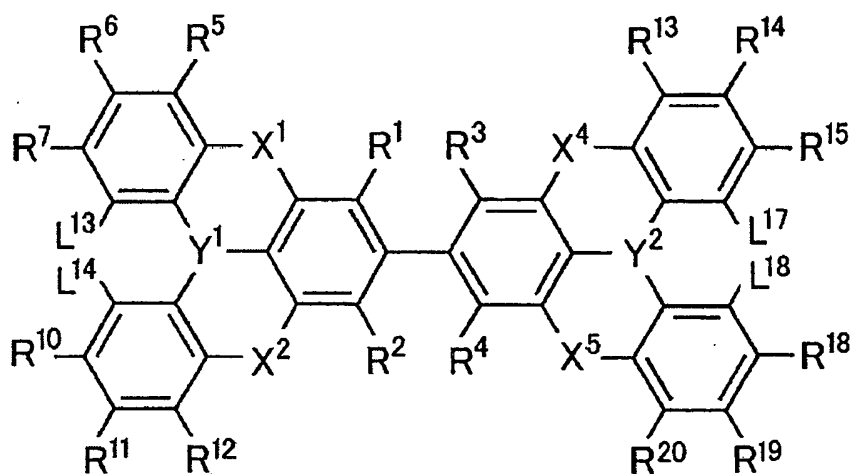
未形成連結基之 $L^1\sim L^8$ 各自獨立，更佳為氫原子、碳數1~3之烷基、或碳數1~3之烷氧基，進而更佳為氫原子、甲基或甲氧基。未形成連結基之 $L^1\sim L^8$ 均為氫原子之情形亦較佳。

$R^1\sim R^4$ 、 $R^5\sim R^7$ 、 $R^{10}\sim R^{12}$ 、 $R^{13}\sim R^{15}$ 及 $R^{18}\sim R^{20}$ 可均為氫原子，亦可至少1個為取代基。於至少1個為取代基之情形時，較佳為 $R^5\sim R^7$ 、 $R^{10}\sim R^{12}$ 、 $R^{13}\sim R^{15}$ 及 $R^{18}\sim R^{20}$ 中之至少1個為取代基，更佳為 R^6 、 R^{11} 、 R^{14} 及 R^{19} 中之至少1個為取代基。於 R^6 、 R^{11} 、 R^{14} 及 R^{19} 中之至少1個為取代基時，更佳為 R^6 、 R^{11} 、 R^{14} 及 R^{19} 中之任意2個為取代基、或均為取代基。

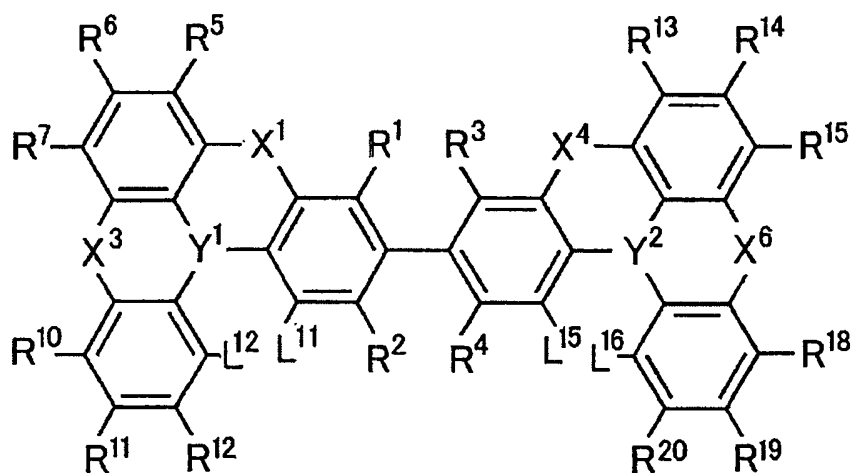
作為通式[2]之較佳之結構，可列舉下述通式[2-1]及通式[2-2]。關於通式[2-1]及[2-2]中之 X^1 、 X^4 、 Y^1 、 Y^2 、 $R^1\sim R^4$ 、 $R^5\sim R^7$ 、 $R^{10}\sim R^{12}$ 、 $R^{13}\sim R^{15}$ 及 $R^{18}\sim R^{20}$ 之定義與較佳之範圍，可參照通式[2]中所對應之記載。 X^2 、 X^3 、 X^5 及 X^6 之定義與較佳之範圍與通式[2]中之 X^1 之定義與較佳之範圍相同。又， $X^1\sim X^6$ 相互可相同亦可不同。 $L^{11}\sim L^{18}$ 各自獨立，表示氫原子或取代基。關於 $L^{11}\sim L^{18}$ 可使用之取代基之定義與較佳之範圍，可參照通式[1]中之不為連結基之 $L^1\sim L^4$ 可使用之取代基之記載。

[化 13]

通式 [2-1]



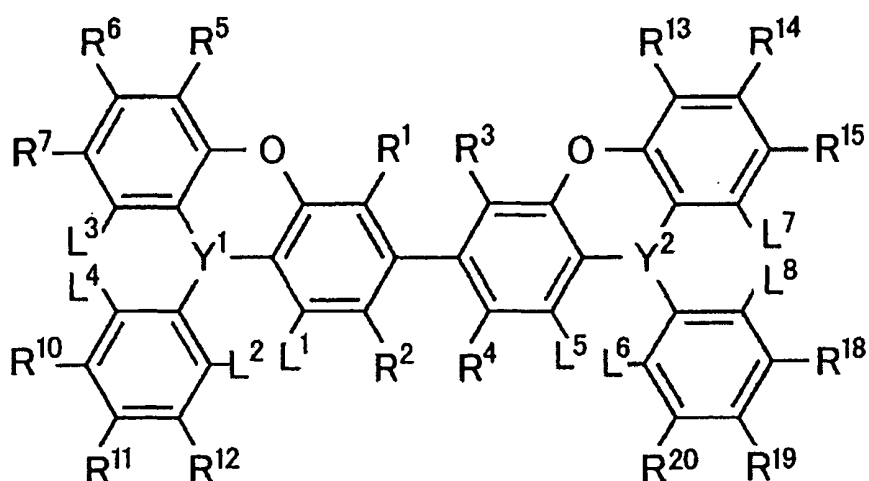
通式 [2-2]



作為通式 [1] 所表示之化合物之另一較佳之範圍，可列舉下述通式 [3] 所表示之化合物。

[化 14]

通式 [3]



關於通式 [3] 中之 Y^1 、 Y^2 、 $R^1 \sim R^4$ 、 $R^5 \sim R^7$ 、 $R^{10} \sim R^{12}$ 、 $R^{13} \sim R^{15}$ 及 $R^{18} \sim R^{20}$ 之定義與較佳之範圍，可參照通式 [1] 及 [2] 中所對應之記載。

通式 [3] 中之 L^1 與 L^2 、 L^3 與 L^4 中之任一者相互鍵結，表示經由氧原子而連結之連結基 (-O-)。又， L^5 與 L^6 、 L^7 與 L^8 中之任一者相互鍵結，表示經由氧原子而連結之連結基 (-O-)。於 L^1 與 L^2 相互鍵結表示連結基時，較佳為 L^5 與 L^6 相互鍵結表示連結基。又，於 L^3 與 L^4 相互鍵結表示連結基時，較佳為 L^7 與 L^8 相互鍵結表示連結基。

於通式 [3] 中， L^1 與 L^2 、 L^3 與 L^4 中之任一者相互鍵結表示連結基 (-O-)， L^1 與 L^2 、 L^3 與 L^4 中之另一者各自獨立表示氫原子或取代基。即，於 L^1 與 L^2 相互鍵結表示連結基 (-O-) 時， L^3 與 L^4 各自獨立表示氫原子或取代基；又，於 L^3 與 L^4 相互鍵結表示連結基 (-O-) 時， L^1 與 L^2 各自獨立表示氫原子或取代基。

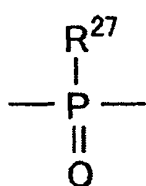
同樣地， L^5 與 L^6 、 L^7 與 L^8 中之任一者相互鍵結表示連結基 (-O-)， L^5 與 L^6 、 L^7 與 L^8 中之另一者各自獨立表示氫原子

或取代基。即，於 L^5 與 L^6 相互鍵結表示連結基(-O-)時， L^7 與 L^8 各自獨立表示氫原子或取代基；又，於 L^7 與 L^8 相互鍵結表示連結基(-O-)時， L^5 與 L^6 各自獨立表示氫原子或取代基。

作為通式[3]所表示之化合物之1個較佳之範圍，可列舉 $R^1\sim R^4$ 為氫原子、碳數1~3之烷基、或碳數1~3之烷氧基的範圍。該範圍更佳為進而 $R^1\sim R^4$ 為氫原子、甲基或甲氧基，進而更佳為 $R^1\sim R^4$ 均為氫原子。

作為通式[3]所表示之化合物之另一較佳之範圍，亦可列舉 R^1 與 R^3 相互鍵結而形成連結基的範圍。更佳為 R^1 與 R^3 相互鍵結形成經由選自由氧原子、硫原子、碳原子、氮原子及磷原子所組成群中之1種原子而連結之連結基，進而更佳為 R^1 與 R^3 相互鍵結形成-O-、-S-、-SO₂-、>CR²¹R²²、>C=O、>C=CR²³R²⁴、>C=NR²⁵、>NR²⁶或

[化15]



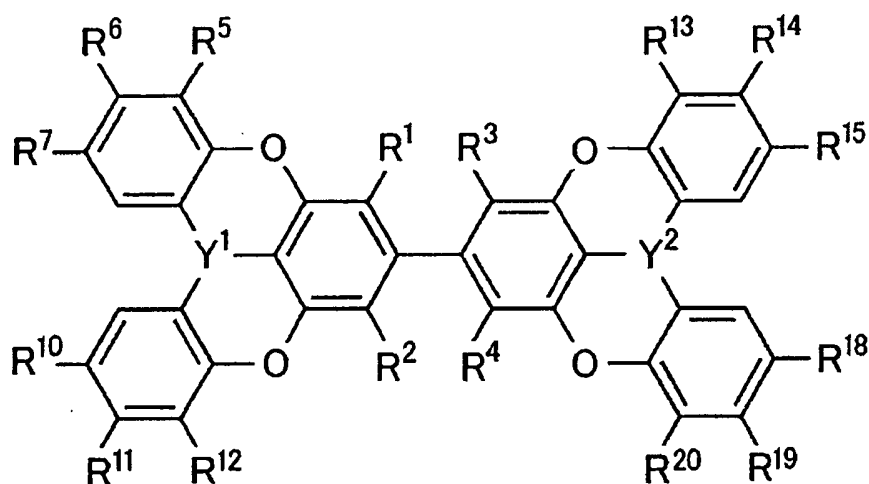
或>SiR²⁸R²⁹所表示之連結基。 R^2 與 R^4 較佳為均為氫原子，或者相互鍵結而形成連結基。 R^2 與 R^4 所形成之連結基之說明與較佳之範圍與通式[3]之 R^1 與 R^3 所形成之連結基相同。作為具體例，可列舉 R^1 與 R^3 相互鍵結形成-O-、 R^2 與 R^4 均為氫原子的情形，作為其他具體例，可列舉 R^1 與 R^3 相互鍵

結形成-O-、 R^2 與 R^4 亦相互鍵結形成-O-的情形。

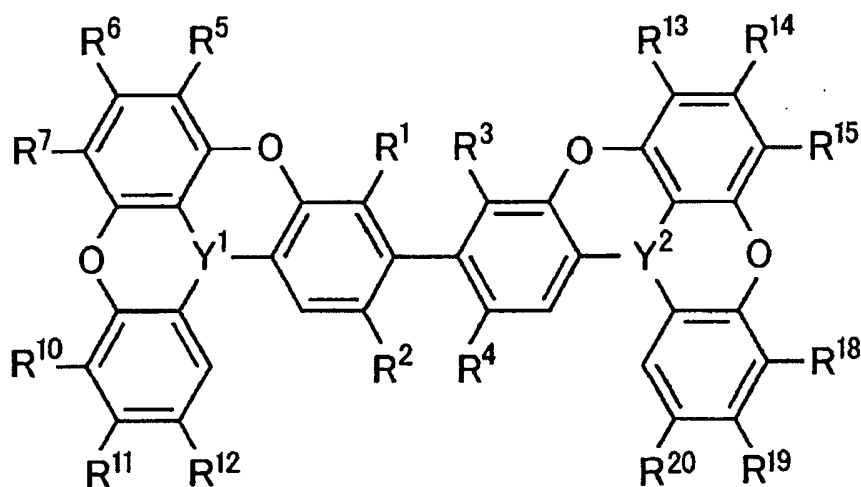
作為通式[3]之較佳之結構，可列舉下述通式[3-1]及通式[3-2]。關於通式[3-1]及[3-2]中之 Y^1 、 Y^2 、 $R^1\sim R^4$ 、 $R^5\sim R^7$ 、 $R^{10}\sim R^{12}$ 、 $R^{13}\sim R^{15}$ 及 $R^{18}\sim R^{20}$ 之定義與較佳之範圍，可參照通式[3]中所對應之記載。

[化16]

通式[3-1]



通式[3-2]

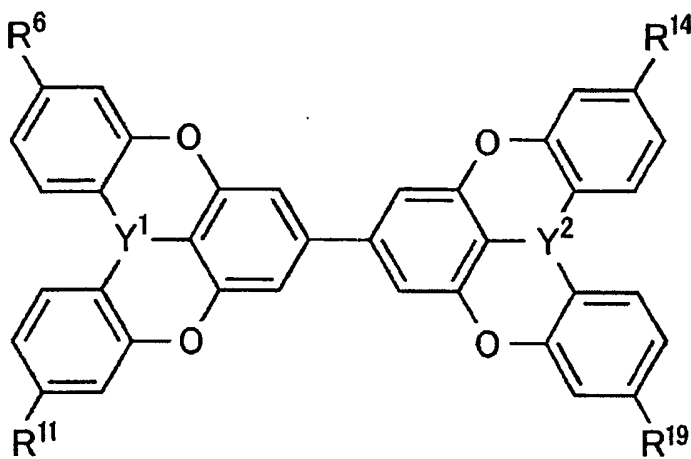


作為通式[1]所表示之化合物之另一較佳之範圍，可列

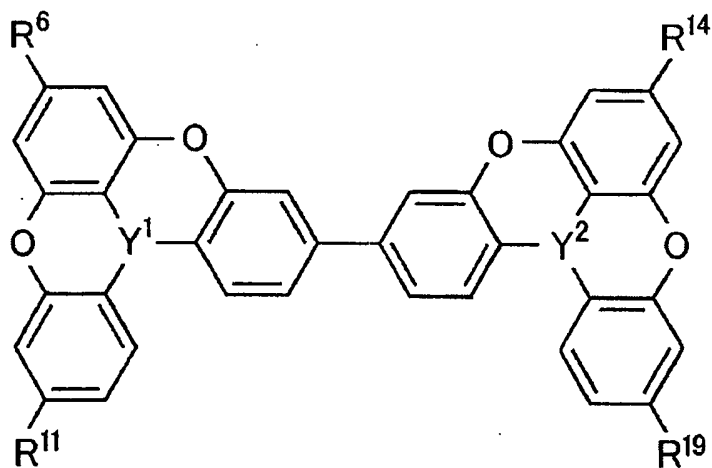
舉下述通式[4-1]、通式[4-2]、通式[4-3]及通式[4-4]所表示之化合物。

[化17]

通式[4-1]

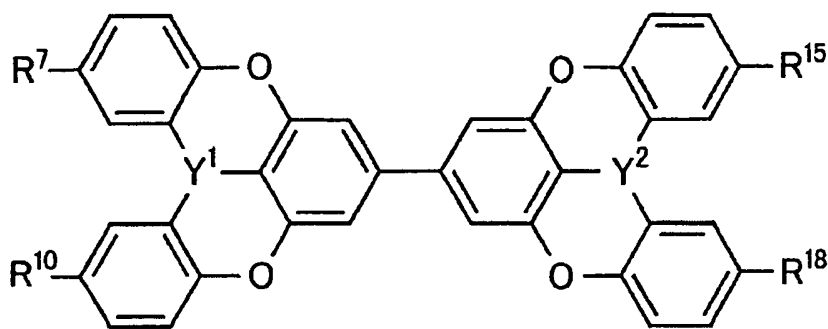


通式[4-2]

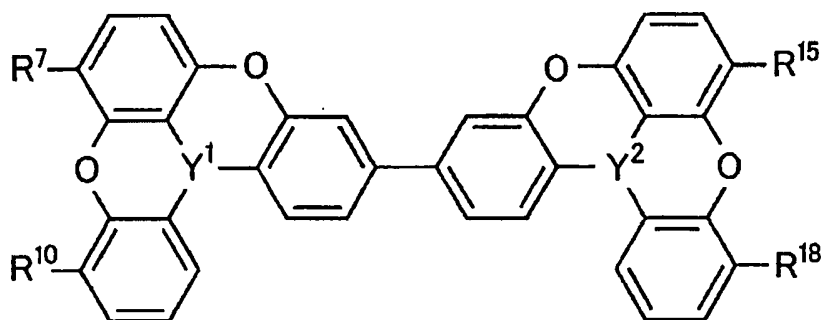


[化18]

通式[4-3]



通式 [4-4]



關於通式 [4] 中之 Y^1 、 Y^2 、 R^6 、 R^7 、 R^{10} 、 R^{11} 、 R^{14} 、 R^{15} 、 R^{18} 及 R^{19} 之定義與較佳之範圍，可參照通式 [1] 及 [2] 中所對應之記載。

作為通式 [4] 所表示之化合物之 1 個較佳之範圍，可列舉 Y^1 及 Y^2 均為氮原子之情形。

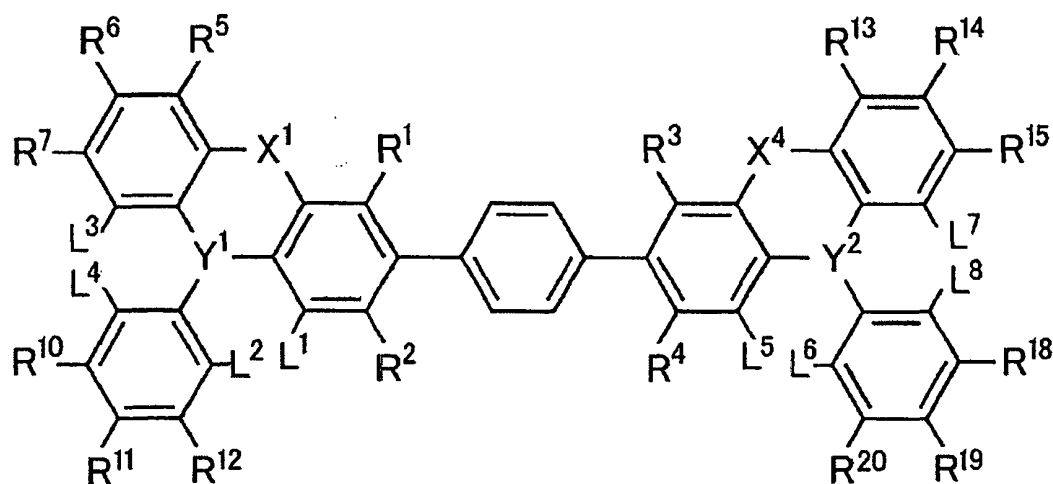
作為通式 [4] 所表示之化合物之另一較佳之範圍，可列舉 R^6 、 R^{11} 、 R^{14} 及 R^{19} 為氫原子或取代基之情形。更佳為 R^6 、 R^{11} 、 R^{14} 及 R^{19} 均為氫原子，或者任意 2 個為取代基，或者均為取代基。又，可列舉 R^7 、 R^{10} 、 R^{15} 及 R^{18} 為氫原子或取代基之情形。更佳為 R^7 、 R^{10} 、 R^{15} 及 R^{18} 均為氫原子，或者任意 2 個為取代基，或者均為取代基。作為 R^6 、 R^7 、 R^{10} 、 R^{11} 、 R^{14} 、 R^{15} 、 R^{18} 及 R^{19} 可使用之取代基，較佳為經

取代或未經取代之烷基、經取代或未經取代之烷氧基、經取代或未經取代之芳基、或者經取代或未經取代之芳氧基。關於此處提及之各取代基之說明與較佳之範圍，可參照通式[1]中所對應之取代基之記載。作為具體例，可列舉： R^{11} 及 R^{14} 為氫原子、 R^6 及 R^{19} 為烷氧基之情形，或者 R^7 及 R^{18} 為三氟甲基、 R^{10} 及 R^{15} 為氫原子之情形。

作為通式[1]所表示之化合物之另一較佳之範圍，可列舉下述通式[5]所表示之化合物。

[化19]

通式[5]



關於通式[5]中之 X^1 、 X^4 、 Y^1 、 Y^2 、 $R^5\sim R^7$ 、 $R^{10}\sim R^{12}$ 、 $R^{13}\sim R^{15}$ 及 $R^{18}\sim R^{20}$ 之定義與較佳之範圍，可參照通式[1]~[3]中所對應之記載。關於通式[5]中之 $L^1\sim L^8$ 之定義與較佳之範圍，可參照通式[2]中所對應之記載。通式[5]中之 $R^1\sim R^4$ 各自獨立表示氫原子或取代基。關於取代基之說明與較佳之範圍，可參照通式[1]之 R^1 及 R^2 可使用之取代基之說明與較佳之範圍。

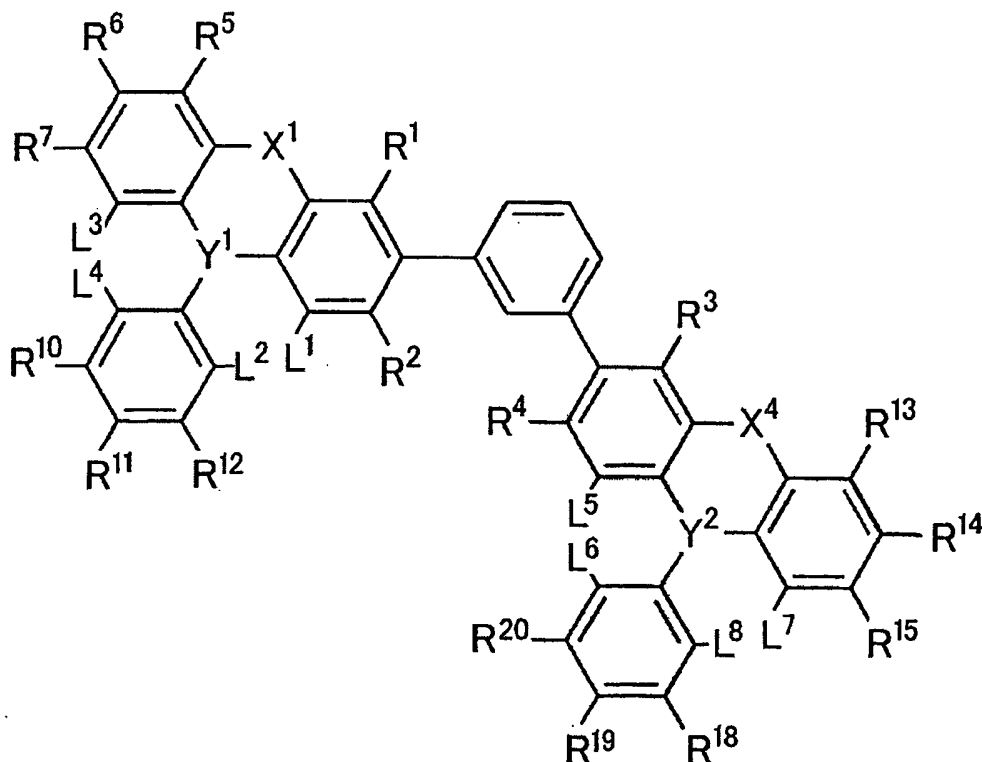
作為通式[5]所表示之化合物之較佳之範圍，例如可列舉如下範圍：X¹及X⁴為氧原子；L¹與L²、L⁵與L⁶均相互連結，為經由氧原子而連結之連結基(-O-)；Y¹及Y²為氮原子；L³、L⁴、L⁷、L⁸、R¹~R⁵、R⁷~R¹⁰、R¹²、R¹³、R¹⁵~R¹⁸及R²⁰為氫原子；R⁶、R¹¹、R¹⁴及R¹⁹各自獨立，為氫原子、經取代或未經取代之烷基、經取代或未經取代之烷氧基、經取代或未經取代之芳基、或者經取代或未經取代之芳氧基。

作為通式[5]所表示之化合物之另一較佳之範圍，例如可列舉如下範圍：X¹及X⁴為氧原子；L³與L⁴、L⁷與L⁸均相互連結，為經由氧原子而連結之連結基(-O-)；Y¹及Y²為氮原子；L¹、L²、L⁵、L⁶、R¹~R⁵、R⁷~R¹⁰、R¹²、R¹³、R¹⁵~R¹⁸及R²⁰為氫原子；R⁶、R¹¹、R¹⁴及R¹⁹各自獨立，為氫原子、經取代或未經取代之烷基、經取代或未經取代之烷氧基、經取代或未經取代之芳基、或者經取代或未經取代之芳氧基。

作為通式[1]所表示之化合物之另一較佳之範圍，可列舉下述通式[6]所表示之化合物。

[化 20]

通式[6]



關於通式 [6] 中之 X^1 、 X^4 、 Y^1 、 Y^2 、 $L^1 \sim L^8$ 、 $R^1 \sim R^4$ 、 $R^5 \sim R^7$ 、 $R^{10} \sim R^{12}$ 、 $R^{13} \sim R^{15}$ 及 $R^{18} \sim R^{20}$ 之定義與較佳之範圍，可參照通式 [5] 中所對應之記載。

作為通式 [6] 所表示之化合物之較佳之範圍，例如可列舉如下範圍： X^1 及 X^4 為氧原子； L^1 與 L^2 、 L^5 與 L^6 均相互連結，為經由氧原子而連結之連結基 (-O-)； Y^1 及 Y^2 為氮原子； L^3 、 L^4 、 L^7 、 L^8 、 $R^1 \sim R^5$ 、 $R^7 \sim R^{10}$ 、 R^{12} 、 R^{13} 、 $R^{15} \sim R^{18}$ 及 R^{20} 為氫原子； R^6 、 R^{11} 、 R^{14} 及 R^{19} 各自獨立，為氫原子、經取代或未經取代之烷基、經取代或未經取代之烷氧基、經取代或未經取代之芳基、或者經取代或未經取代之芳氧基。

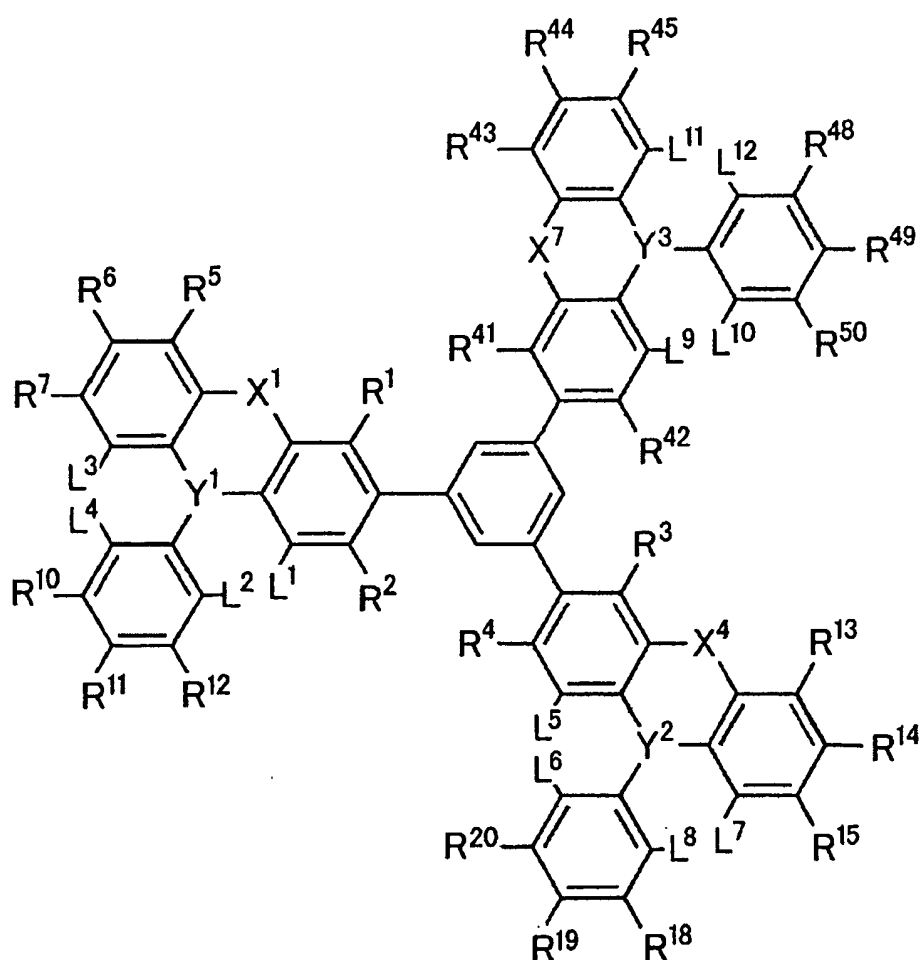
作為通式 [6] 所表示之化合物之另一較佳之範圍，例如可列舉如下範圍： X^1 及 X^4 為氧原子； L^3 與 L^4 、 L^7 與 L^8 均相互連結，為經由氧原子而連結之連結基 (-O-)； Y^1 及 Y^2 為氮

原子； L^1 、 L^2 、 L^5 、 L^6 、 R^1 ~ R^5 、 R^7 ~ R^{10} 、 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{15} ~ R^{18} 及 R^{20} 為氫原子； R^6 、 R^{11} 、 R^{14} 及 R^{19} 各自獨立，為氫原子、經取代或未經取代之烷基、經取代或未經取代之烷氧基、經取代或未經取代之芳基、或者經取代或未經取代之芳氧基。

作為通式[1]所表示之化合物之另一較佳之範圍，可列舉下述通式[7]所表示之化合物。

[化21]

通式[7]



關於通式[7]中之 X^1 、 X^4 、 X^7 之定義與較佳之範圍，可

參照通式[1]之 X^1 之記載。關於通式[7]中之 $Y^1\sim Y^3$ 之定義與較佳之範圍，可參照通式[1]之 Y^1 之記載。關於通式[7]中之 $R^5\sim R^7$ 、 $R^{10}\sim R^{12}$ 、 $R^{13}\sim R^{15}$ 及 $R^{18}\sim R^{20}$ 、 $R^{43}\sim R^{45}$ 及 $R^{48}\sim R^{50}$ 之定義與較佳之範圍，可參照通式[1]中之 $R^5\sim R^7$ 及 $R^{10}\sim R^{12}$ 之記載。關於通式[7]中之 $R^1\sim R^4$ 、 R^{41} 及 R^{42} 之定義與較佳之範圍，可參照通式[1]之 R^1 及 R^2 之記載。關於通式[7]中之 $L^1\sim L^8$ 之定義與較佳之範圍，可參照通式[2]中所對應之記載。

通式[7]中之 L^9 與 L^{10} 、 L^{11} 與 L^{12} 中之任一者相互鍵結，表示經由選自由氧原子、硫原子、碳原子、氮原子、磷原子及矽原子所組成群中之1種原子而連結之連結基。 L^9 與 L^{10} 、 L^{11} 與 L^{12} 中之另一者各自獨立，表示氫原子或取代基。即，於 L^9 與 L^{10} 相互鍵結表示上述連結基時， L^{11} 與 L^{12} 各自獨立表示氫原子或取代基；又，於 L^{11} 與 L^{12} 相互鍵結表示上述連結基時， L^9 與 L^{10} 各自獨立表示氫原子或取代基。於 L^1 與 L^2 相互鍵結表示連結基時，較佳為 L^5 與 L^6 相互鍵結表示連結基、 L^9 與 L^{10} 相互鍵結表示連結基。又，於 L^3 與 L^4 相互鍵結表示連結基時，較佳為 L^7 與 L^8 相互鍵結表示連結基、 L^{11} 與 L^{12} 相互鍵結表示連結基。 L^1 與 L^2 、 L^3 與 L^4 中之任一者所表示之連結基、與 L^5 與 L^6 、 L^7 與 L^8 中之任一者所表示之連結基、與 L^9 與 L^{10} 、 L^{11} 與 L^{12} 中之任一者所表示之連結基相互可相同亦可不同，較佳為相同。又， L^1 與 L^2 、 L^3 與 L^4 中之任一者所表示之連結基、與 L^5 與 L^6 、 L^7 與 L^8 中之任一者所表示之連結基、與 L^9 與 L^{10} 、 L^{11} 與 L^{12} 中之

任一者所表示之連結基、與 X^1 、 X^4 及 X^7 所表示之連結基可相同亦可不同，較佳為相同。

作為通式[7]所表示之化合物之較佳之範圍，例如可列舉如下範圍： X^1 、 X^4 、 X^7 為氧原子； $Y^1\sim Y^3$ 為氮原子； $R^1\sim R^5$ 、 R^7 、 R^{10} 、 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{15} 、 R^{18} 、 R^{20} 、 $R^{41}\sim R^{43}$ 、 R^{45} 、 R^{48} 及 R^{50} 為氫原子； R^6 、 R^{11} 、 R^{14} 、 R^{19} 、 R^{44} 及 R^{49} 各自獨立，為氫原子、經取代或未經取代之烷基、經取代或未經取代之烷氧基、經取代或未經取代之芳基、或者經取代或未經取代之芳氧基。

作為通式[7]所表示之化合物之另一較佳之範圍，例如可列舉如下範圍： X^1 、 X^4 、 X^7 為氧原子； $Y^1\sim Y^3$ 為氮原子； $R^1\sim R^6$ 、 $R^{11}\sim R^{14}$ 、 R^{19} 、 R^{20} 、 $R^{41}\sim R^{43}$ 、 R^{44} 、 R^{49} 及 R^{50} 為氫原子； R^7 、 R^{10} 、 R^{15} 、 R^{18} 、 R^{45} 及 R^{48} 各自獨立，為氫原子、經取代或未經取代之烷基、經取代或未經取代之烷氧基、經取代或未經取代之芳基、或者經取代或未經取代之芳氧基。

通式[1]~[7]所表示之化合物可為具有分子對稱之結構者，亦可為具有非對稱之結構者。此處提及之對稱，係指線對稱或點對稱。

以下例示通式[1]所表示之化合物之具體例。再者，本發明之通式[1]所表示之化合物之範圍不應由以下具體例來限定性解釋。以下表1及2為通式[2-1]所表示之化合物之具體例，以下表3及4為通式[2-2]所表示之化合物之具體例，以下表5及6為通式[5]所表示之化合物之具體例，以下表7

及8為通式[6]所表示之化合物之具體例，以下表9及10為通式[7]所表示之化合物之具體例。

[表 1]

化合物編號	通式 [2-1]											
	X ¹ X ² X ³ X ⁴	Y ¹ Y ²	R ¹ R ²	R ³ R ⁴	R ⁵ R ⁶	R ⁷ R ⁸	R ⁹ R ¹⁰	R ¹¹ R ¹²	R ¹³ R ¹⁴	R ¹⁵ R ¹⁶	R ¹⁷ R ¹⁸	L ¹ L ² L ³ L ⁴ L ⁵ L ⁶
化合物 1	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 2	-O-	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 3	-O-	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 4	-O-	>N-	H	H	H	H	CH ₃	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	H
化合物 5	-O-	>N-	H	H	H	H	C ₆ H ₅ O	C ₆ H ₅ O	C ₆ H ₅ O	C ₆ H ₅ O	H	H
化合物 6	-O-	>N-	H	H	H	H	C ₆ H ₅	C ₆ H ₅	C ₆ H ₅	C ₆ H ₅	H	H
化合物 7	-O-	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 8	-O-	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 9	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 10	-O-	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 11	-O-	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 12	-O-	>N-	H	H	H	H	CH ₃	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	H
化合物 13	-O-	>N-	H	H	H	H	C ₆ H ₅ O	C ₆ H ₅ O	C ₆ H ₅ O	C ₆ H ₅ O	H	H
化合物 14	-O-	>N-	H	H	H	H	C ₆ H ₅	C ₆ H ₅	C ₆ H ₅	C ₆ H ₅	H	H
化合物 15	-O-	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 16	-O-	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 17	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 18	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H
化合物 19	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H
化合物 20	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	H	CH ₃	H	H
化合物 21	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	H	C ₆ H ₅ O	H	H
化合物 22	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	H	C ₆ H ₅	H	H
化合物 23	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H
化合物 24	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H
化合物 25	-S-	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 26	-S-	>N-	H	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H
化合物 27	-S-	>N-	H	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H
化合物 28	-S-	>N-	H	H	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H
化合物 29	-SO ₂ -	>N-	H	H	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H
化合物 30	-SO ₂ -	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 31	-SO ₂ -	>N-	H	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H
化合物 32	-SO ₂ -	>N-	H	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H
化合物 33	-SO ₂ -	>N-	H	H	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H
化合物 34	-SO ₂ -	>N-	H	H	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H

化合物 74	-O-	>N-	-O-	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H	H
化合物 75	-O-	>N-	-O-	-O-	H	H	H	H	H	H	H
化合物 76	-O-	>N-	-O-	-O-	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H	H
化合物 77	-O-	>N-	-O-	-O-	H	H	CH ₃ O	H	H	H	H
化合物 78	-O-	>N-	-O-	-O-	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H	H
化合物 79	-O-	>N-	-O-	-O-	H	H	CF ₃ O	H	H	H	H
化合物 80	-O-	>N-	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H	H
化合物 81	-O-	>N-	H	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
化合物 82	-O-	>N-	H	H	H	CF ₃	CF ₃	H	H	H	H
化合物 83	-O-	>N-	H	H	H	H	H	CF ₃	H	H	H
化合物 84	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	CF ₃	H	H
化合物 85	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	H	CF ₃	H
化合物 86	-O-	>N-	H	H	CF ₃	CF ₃	H	H	H	H	H
化合物 87	-O-	>N-	H	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H
化合物 88	-O-	>N-	H	H	CF ₃	H	H	CF ₃	H	H	H
化合物 89	-O-	>N-	H	H	CF ₃	H	H	H	CF ₃	H	H
化合物 90	-O-	>N-	H	H	CF ₃	H	H	H	H	CF ₃	H
化合物 91	-O-	>N-	H	H	H	H	CF ₃	H	H	H	H
化合物 92	-O-	>N-	H	H	H	H	H	CF ₃	H	H	H
化合物 93	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	CF ₃	H	H
化合物 94	-O-	>N-	H	H	H	CF ₃	H	H	H	CF ₃	H
化合物 95	-O-	>N-	H	H	H	H	CF ₃	CF ₃	H	H	H
化合物 96	-O-	>N-	H	H	H	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H
化合物 97	-O-	>N-	H	H	H	H	CF ₃	H	H	CF ₃	H
化合物 98	-O-	>N-	H	H	H	H	H	CF ₃	CF ₃	H	H
化合物 99	-O-	>N-	H	H	H	H	H	CF ₃	H	CF ₃	H
化合物 100	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	CF ₃	CF ₃	H

(注)R¹、R²、R³、R⁴一起形成-O-
 (注)R¹、R²、R³、R⁴一起形成-O-

[表 3]

化合物 編號	通式[2-2]											
	$X^1 X^2 X^3 X^6$	$Y^1 Y^2$	$R^1 R^3$	$R^2 R^4$	$R^5 R^7$	$R^8 R^{14}$	$R^9 R^{15}$	$R^{10} R^{16}$	$R^{11} R^{17}$	$R^{12} R^{18}$	$R^{13} R^{19}$	R^{20}
化合物 201	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 202	-O-	>N-	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	CH ₃ O	CH ₃ O	CH ₃ O	CH ₃ O	H
化合物 203	-O-	>N-	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H	H	H	H
化合物 204	-O-	>N-	H	H	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H
化合物 205	-O-	>N-	H	H	H	H	C ₆ H ₅ O	C ₆ H ₅ O	C ₆ H ₅ O	C ₆ H ₅ O	H	H
化合物 206	-O-	>N-	H	H	H	H	C ₆ H ₅	C ₆ H ₅	C ₆ H ₅	C ₆ H ₅	H	H
化合物 207	-O-	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 208	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 209	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 210	-O-	>N-	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H	H	H	H
化合物 211	-O-	>N-	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H	H	H	H
化合物 212	-O-	>N-	H	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H
化合物 213	-O-	>N-	H	H	H	C ₆ H ₅ O	C ₆ H ₅ O	H	H	H	H	H
化合物 214	-O-	>N-	H	H	H	C ₆ H ₅	C ₆ H ₅	H	H	H	H	H
化合物 215	-O-	>N-	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H	H	H	H
化合物 216	-O-	>N-	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H	H	H	H
化合物 217	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 218	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H
化合物 219	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H
化合物 220	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	H	CH ₃	H	H
化合物 221	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	H	C ₆ H ₅ O	C ₆ H ₅ O	H
化合物 222	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	H	C ₆ H ₅	C ₆ H ₅	H
化合物 223	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H
化合物 224	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H
化合物 225	-S-	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 226	-S-	>N-	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 227	-S-	>N-	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 228	-S-	>N-	H	H	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 229	-S-	>N-	H	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 230	-SO ₂ -	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 231	-SO ₂ -	>N-	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 232	-SO ₂ -	>N-	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 233	-SO ₂ -	>N-	H	H	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 234	-SO ₂ -	>N-	H	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H

化合物 274	-O-	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H	H
化合物 275	-O-	>N-	-O-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 276	-O-	>N-	-O-	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H	H
化合物 277	-O-	>N-	-O-	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H	H
化合物 278	-O-	>N-	-O-	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H	H
化合物 279	-O-	>N-	-O-	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H	H
化合物 280	-O-	>N-	H	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
化合物 281	-O-	>N-	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H	H
化合物 282	-O-	>N-	H	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
化合物 283	-O-	>N-	H	H	H	H	CF ₃	H	H	H	H
化合物 284	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	CF ₃	H	H
化合物 285	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	H	CF ₃	H
化合物 286	-O-	>N-	H	CF ₃	CF ₃	CF ₃	H	H	H	H	H
化合物 287	-O-	>N-	H	CF ₃	H	H	CF ₃	H	H	H	H
化合物 288	-O-	>N-	H	CF ₃	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H
化合物 289	-O-	>N-	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	CF ₃	H	H
化合物 290	-O-	>N-	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	CF ₃	H
化合物 291	-O-	>N-	H	H	CF ₃	CF ₃	CF ₃	H	H	H	H
化合物 292	-O-	>N-	H	H	CF ₃	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H
化合物 293	-O-	>N-	H	H	CF ₃	CF ₃	H	H	CF ₃	H	H
化合物 294	-O-	>N-	H	H	CF ₃	CF ₃	H	H	H	CF ₃	H
化合物 295	-O-	>N-	H	H	H	H	CF ₃	CF ₃	H	H	H
化合物 296	-O-	>N-	H	H	H	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H
化合物 297	-O-	>N-	H	H	H	H	CF ₃	H	H	CF ₃	H
化合物 298	-O-	>N-	H	H	H	H	H	CF ₃	CF ₃	H	H
化合物 299	-O-	>N-	H	H	H	H	H	CF ₃	H	CF ₃	H
化合物 300	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	CF ₃	CF ₃	H

(註)R¹R²欄之-O-係指R¹與R²一起形成-O-(註)R¹R²欄之-O-係指R¹與R²一起形成-O-

[表 4]

通式 [2-2]

化合物 編號	X ¹ X ⁰ X ⁴ X ⁰	Y ¹ Y ²	R ¹ R ²	R ³ R ⁴ R ⁵ R ⁶	R ⁷ R ⁸ R ⁹ R ¹⁰	L ¹¹ L ¹² R ¹³ R ¹⁴ L ¹⁵ L ¹⁶ R ¹⁷ R ¹⁸	R ¹⁹ R ²⁰ R ²¹ R ²²	L ²³ L ²⁴ R ²⁵ R ²⁶ L ²⁷ L ²⁸ R ²⁹ R ³⁰
化合物 301	-O-	>N-	H	-CH=CH-CH=OH-	H	H		L ¹¹ L ¹² R ¹³ R ¹⁴ L ¹⁵ L ¹⁶ R ¹⁷ R ¹⁸
化合物 302	-O-	>N-	H	-CH(OH)-CH=OH-	-CH(OH)-CH=OH-	H		L ¹¹ L ¹² R ¹³ R ¹⁴ L ¹⁵ L ¹⁶ R ¹⁷ R ¹⁸
化合物 303	-O-	>N-	H				-CH=CH-CH=OH-	L ¹¹ L ¹² R ¹³ R ¹⁴ L ¹⁵ L ¹⁶ R ¹⁷ R ¹⁸
化合物 304	-O-	>N-	H				-CH(OH)-CH=OH-	L ¹¹ L ¹² R ¹³ R ¹⁴ L ¹⁵ L ¹⁶ R ¹⁷ R ¹⁸
化合物 305	-O-	>N-	H	-CH(OH)-CH=OH-		H		L ¹¹ L ¹² R ¹³ R ¹⁴ L ¹⁵ L ¹⁶ R ¹⁷ R ¹⁸
化合物 306	-S-	>N-	H	-CH(OH)-CH=OH-		H		L ¹¹ L ¹² R ¹³ R ¹⁴ L ¹⁵ L ¹⁶ R ¹⁷ R ¹⁸
化合物 307	-S-	>N-	H		-CH(OH)-CH=OH-			L ¹¹ L ¹² R ¹³ R ¹⁴ L ¹⁵ L ¹⁶ R ¹⁷ R ¹⁸
化合物 308	-S-	>N-	H				-CH(OH)-CH=OH-	L ¹¹ L ¹² R ¹³ R ¹⁴ L ¹⁵ L ¹⁶ R ¹⁷ R ¹⁸
化合物 309	-S-	>N-	H				-CH(OH)-CH=OH-	L ¹¹ L ¹² R ¹³ R ¹⁴ L ¹⁵ L ¹⁶ R ¹⁷ R ¹⁸
化合物 310	-S-	>N-	H	-CH(OH)-CH=OH-		H		L ¹¹ L ¹² R ¹³ R ¹⁴ L ¹⁵ L ¹⁶ R ¹⁷ R ¹⁸
化合物 311	-SO ₂ -	>N-	H	-CH(OH)-CH=OH-		H		L ¹¹ L ¹² R ¹³ R ¹⁴ L ¹⁵ L ¹⁶ R ¹⁷ R ¹⁸
化合物 312	-SO ₂ -	>N-	H	-CH(OH)-CH=OH-		H		L ¹¹ L ¹² R ¹³ R ¹⁴ L ¹⁵ L ¹⁶ R ¹⁷ R ¹⁸
化合物 313	-SO ₂ -	>N-	H		-CH(OH)-CH=OH-			L ¹¹ L ¹² R ¹³ R ¹⁴ L ¹⁵ L ¹⁶ R ¹⁷ R ¹⁸
化合物 314	-SO ₂ -	>N-	H				-CH(OH)-CH=OH-	L ¹¹ L ¹² R ¹³ R ¹⁴ L ¹⁵ L ¹⁶ R ¹⁷ R ¹⁸
化合物 315	-SO ₂ -	>N-	H	-CH(OH)-CH=OH-		H		L ¹¹ L ¹² R ¹³ R ¹⁴ L ¹⁵ L ¹⁶ R ¹⁷ R ¹⁸
化合物 316	-CH ₂ -	>N-	H	-CH(OH)-CH=OH-		H		L ¹¹ L ¹² R ¹³ R ¹⁴ L ¹⁵ L ¹⁶ R ¹⁷ R ¹⁸
化合物 317	-CH ₂ -	>N-	H		-CH(OH)-CH=OH-			L ¹¹ L ¹² R ¹³ R ¹⁴ L ¹⁵ L ¹⁶ R ¹⁷ R ¹⁸
化合物 318	-CH ₂ -	>N-	H				-CH(OH)-CH=OH-	L ¹¹ L ¹² R ¹³ R ¹⁴ L ¹⁵ L ¹⁶ R ¹⁷ R ¹⁸
化合物 319	-CH ₂ -	>N-	H				-CH(OH)-CH=OH-	L ¹¹ L ¹² R ¹³ R ¹⁴ L ¹⁵ L ¹⁶ R ¹⁷ R ¹⁸
化合物 320	-CH ₂ -	>N-	H	-CH(OH)-CH=OH-		H		L ¹¹ L ¹² R ¹³ R ¹⁴ L ¹⁵ L ¹⁶ R ¹⁷ R ¹⁸
化合物 321	>C=O	>N-	H	-CH(OH)-CH=OH-		H		L ¹¹ L ¹² R ¹³ R ¹⁴ L ¹⁵ L ¹⁶ R ¹⁷ R ¹⁸
化合物 322	>C=O	>N-	H		-CH(OH)-CH=OH-			L ¹¹ L ¹² R ¹³ R ¹⁴ L ¹⁵ L ¹⁶ R ¹⁷ R ¹⁸
化合物 323	>C=O	>N-	H				-CH(OH)-CH=OH-	L ¹¹ L ¹² R ¹³ R ¹⁴ L ¹⁵ L ¹⁶ R ¹⁷ R ¹⁸
化合物 324	>C=O	>N-	H				-CH(OH)-CH=OH-	L ¹¹ L ¹² R ¹³ R ¹⁴ L ¹⁵ L ¹⁶ R ¹⁷ R ¹⁸
化合物 325	>C=O	>N-	H	-CH(OH)-CH=OH-		H		L ¹¹ L ¹² R ¹³ R ¹⁴ L ¹⁵ L ¹⁶ R ¹⁷ R ¹⁸
化合物 326	>C=O	>N-	H	-CH(OH)-CH=OH-		H		L ¹¹ L ¹² R ¹³ R ¹⁴ L ¹⁵ L ¹⁶ R ¹⁷ R ¹⁸
化合物 327	>C=O	>N-	H	-CH(OH)-CH=OH-		H		L ¹¹ L ¹² R ¹³ R ¹⁴ L ¹⁵ L ¹⁶ R ¹⁷ R ¹⁸
化合物 328	>C=O	>N-	H		-CH(OH)-CH=OH-			L ¹¹ L ¹² R ¹³ R ¹⁴ L ¹⁵ L ¹⁶ R ¹⁷ R ¹⁸
化合物 329	>C=O	>N-	H				-CH(OH)-CH=OH-	L ¹¹ L ¹² R ¹³ R ¹⁴ L ¹⁵ L ¹⁶ R ¹⁷ R ¹⁸
化合物 330	>C=O	>N-	H	-CH(OH)-CH=OH-		H		L ¹¹ L ¹² R ¹³ R ¹⁴ L ¹⁵ L ¹⁶ R ¹⁷ R ¹⁸
化合物 331	>C=NH	>N-	H	-CH(OH)-CH=OH-		H		L ¹¹ L ¹² R ¹³ R ¹⁴ L ¹⁵ L ¹⁶ R ¹⁷ R ¹⁸
化合物 332	>C=NH	>N-	H		-CH(OH)-CH=OH-			L ¹¹ L ¹² R ¹³ R ¹⁴ L ¹⁵ L ¹⁶ R ¹⁷ R ¹⁸
化合物 333	>C=NH	>N-	H				-CH(OH)-CH=OH-	L ¹¹ L ¹² R ¹³ R ¹⁴ L ¹⁵ L ¹⁶ R ¹⁷ R ¹⁸
化合物 334	>C=NH	>N-	H	-CH(OH)-CH=OH-		H		L ¹¹ L ¹² R ¹³ R ¹⁴ L ¹⁵ L ¹⁶ R ¹⁷ R ¹⁸
化合物 335	>C=NH	>N-	H		-CH(OH)-CH=OH-			L ¹¹ L ¹² R ¹³ R ¹⁴ L ¹⁵ L ¹⁶ R ¹⁷ R ¹⁸
化合物 336	>NDM ₃	>N-	H				-CH(OH)-CH=OH-	L ¹¹ L ¹² R ¹³ R ¹⁴ L ¹⁵ L ¹⁶ R ¹⁷ R ¹⁸

[表 5]

化合物 編號	通式 (B)										
	X ¹ X ⁴	L ¹ L ² L ³ L ⁴ L ⁵	Y ¹ Y ²	R ¹ R ⁴	R ² R ³	R ⁵ R ¹³	R ⁶ R ¹⁴	R ⁷ R ¹⁵	R ¹⁰ R ¹⁸	R ¹¹ R ¹⁹	R ¹² R ²⁰
化合物 401	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 402	-O-	H	>N-	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H	H
化合物 403	-O-	H	>N-	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H	H
化合物 404	-O-	H	>N-	H	H	H	CH ₃	CH ₃	H	H	H
化合物 405	-O-	H	>N-	H	H	H	C ₆ H ₅ O	C ₆ H ₅ O	H	H	H
化合物 406	-O-	H	>N-	H	H	H	C ₆ H ₅	C ₆ H ₅	H	H	H
化合物 407	-O-	H	>N-	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H	H
化合物 408	-O-	H	>N-	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H	H
化合物 409	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 410	-O-	H	>N-	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H	H	H
化合物 411	-O-	H	>N-	H	H	CH ₃ O	H	H	H	H	H
化合物 412	-O-	H	>N-	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H
化合物 413	-O-	H	>N-	H	H	C ₆ H ₅ O	C ₆ H ₅ O	H	H	H	H
化合物 414	-O-	H	>N-	H	H	C ₆ H ₅	C ₆ H ₅	H	H	H	H
化合物 415	-O-	H	>N-	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H	H	H
化合物 416	-O-	H	>N-	H	H	CF ₃ O	H	H	H	H	H
化合物 417	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O
化合物 418	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H
化合物 419	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	H	CH ₃	H
化合物 420	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	H	C ₆ H ₅ O	C ₆ H ₅ O
化合物 421	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	H	C ₆ H ₅	C ₆ H ₅
化合物 422	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O
化合物 423	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H
化合物 424	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 425	-S-	H	>N-	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O
化合物 426	-S-	H	>N-	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H
化合物 427	-S-	H	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 428	-S-	H	>N-	H	H	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O
化合物 429	-S-	H	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 430	-SO ₂ -	H	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 431	-SO ₂ -	H	>N-	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O
化合物 432	-SO ₂ -	H	>N-	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H
化合物 433	-SO ₂ -	H	>N-	H	H	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O

化合物 434	-SO ₂ -	H	>N-	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 435	-CH ₂ -	H	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 436	-CH ₂ -	H	>N-	H	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 437	-CH ₂ -	H	>N-	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 438	-CH ₂ -	H	>N-	H	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 439	-CH ₂ -	H	>N-	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 440	>C=O	H	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 441	>C=O	H	>N-	H	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 442	>C=O	H	>N-	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 443	>C=O	H	>N-	H	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 444	>C=O	H	>N-	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 445	>C=OCH ₃	H	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 446	>C=OCH ₃	H	>N-	H	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 447	>C=OCH ₃	H	>N-	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 448	>C=OCH ₃	H	>N-	H	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 449	>C=OCH ₃	H	>N-	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 450	>C=NH	H	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 451	>C=NH	H	>N-	H	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 452	>C=NH	H	>N-	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 453	>C=NH	H	>N-	H	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 454	>C=NH	H	>N-	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 455	>NCH ₃	H	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 456	>NCH ₃	H	>N-	H	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 457	>NCH ₃	H	>N-	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 458	>NCH ₃	H	>N-	H	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 459	>NCH ₃	H	>N-	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 460	-O-	H	>B-	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 461	-O-	H	>B-	H	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 462	-O-	H	>B-	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 463	-O-	H	>B-	H	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 464	-O-	H	>B-	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 465	-O-	H	>P(=O)-	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 466	-O-	H	>P(=O)-	H	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 467	-O-	H	>P(=O)-	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 468	-O-	H	>P(=O)-	H	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 469	-O-	H	>P(=O)-	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 470	H	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 471	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 472	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H

化合物 512	>C=O	H	>C=O	>N-	H	H	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H
化合物 513	>C=O	H	>C=O	>N-	H	H	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H
化合物 514	>C=CH ₂	H	>C=CH ₂	>N-	H	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H
化合物 515	>C=CH ₂	H	>C=CH ₂	>N-	H	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H
化合物 516	>C=CH ₂	H	>C=CH ₂	>N-	H	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H
化合物 517	>C=CH ₂	H	>C=CH ₂	>N-	H	H	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H
化合物 518	>C=CH ₂	H	>C=CH ₂	>N-	H	H	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H
化合物 519	>C=NH	H	>C=NH	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 510	>C=NH	H	>C=NH	>N-	H	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H
化合物 521	>C=NH	H	>C=NH	>N-	H	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H
化合物 522	>C=NH	H	>C=NH	>N-	H	H	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H
化合物 523	>C=NH	H	>C=NH	>N-	H	H	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H
化合物 524	>NCH ₃	H	>NCH ₃	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 525	>NCH ₃	H	>NCH ₃	>N-	H	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H
化合物 526	>NCH ₃	H	>NCH ₃	>N-	H	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H
化合物 527	>NCH ₃	H	>NCH ₃	>N-	H	H	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H
化合物 528	>NCH ₃	H	>NCH ₃	>N-	H	H	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H
化合物 529	-O-	H	-O-	>B-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 530	-O-	H	-O-	>B-	H	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H
化合物 531	-O-	H	-O-	>B-	H	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H
化合物 532	-O-	H	-O-	>B-	H	H	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H
化合物 533	-O-	H	-O-	>B-	H	H	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H
化合物 534	-O-	H	-O-	>P(=O)-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 535	-O-	H	-O-	>P(=O)-	H	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H
化合物 536	-O-	H	-O-	>P(=O)-	H	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H
化合物 537	-O-	H	-O-	>P(=O)-	H	H	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H
化合物 538	-O-	H	-O-	>P(=O)-	H	H	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H
化合物 539	-O-	-O-	H	>N-	H	OF ₃	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 540	-O-	-O-	H	>N-	H	H	OF ₃	H	H	H	H	H	H	H
化合物 541	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	OF ₃	H	H	H	H	H	H
化合物 542	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	H	H	CF ₃	H	H
化合物 543	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H	CF ₃	H
化合物 544	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	CF ₃
化合物 545	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	OF ₃	H	H	H	H	H	H
化合物 546	-O-	-O-	H	>N-	H	H	OF ₃	H	H	H	H	H	H	H
化合物 547	-O-	-O-	H	>N-	H	H	OF ₃	H	H	H	H	H	H	H
化合物 548	-O-	-O-	H	>N-	H	H	OF ₃	H	H	H	H	CF ₃	H	H
化合物 549	-O-	-O-	H	>N-	H	H	OF ₃	H	H	H	H	H	H	CF ₃
化合物 550	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	OF ₃	H	H	H	CF ₃	H	H

化合物 551	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H
化合物 552	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	CF ₃	H	H	CF ₃	H
化合物 553	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	CF ₃	H	H	H	CF ₃
化合物 554	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	CF ₂	CF ₂	H	H
化合物 555	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	CF ₂	H	CF ₂	H
化合物 556	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	CF ₃	H	H	CF ₃
化合物 557	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	CF ₃	CF ₃	H
化合物 558	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	CF ₃	H	CF ₃
化合物 559	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	H	CF ₃	CF ₃
化合物 560	-O-	H	-O-	>N-	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
化合物 561	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	CF ₃	H	H	H	H
化合物 562	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	CF ₃	H	H	H
化合物 563	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	H	CF ₂	H	H
化合物 564	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	CF ₃	H
化合物 565	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	H	CF ₃
化合物 566	-O-	H	-O-	>N-	H	H	CF ₃	CF ₃	H	H	H	H
化合物 567	-O-	H	-O-	>N-	H	H	CF ₃	H	CF ₂	H	H	H
化合物 568	-O-	H	-O-	>N-	H	H	CF ₃	H	H	CF ₂	H	H
化合物 569	-O-	H	-O-	>N-	H	H	CF ₃	H	H	H	CF ₂	H
化合物 570	-O-	H	-O-	>N-	H	H	CF ₃	H	H	H	H	CF ₃
化合物 571	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	CF ₃	CF ₃	H	H	H
化合物 572	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H
化合物 573	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	CF ₃	H	H	CF ₃	H
化合物 574	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	CF ₃	H	H	H	CF ₃
化合物 575	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	CF ₃	CF ₃	H	H
化合物 576	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	CF ₂	H	CF ₂	H
化合物 577	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	CF ₂	H	H	CF ₂
化合物 578	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	H	CF ₃	CF ₃	H
化合物 579	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	H	CF ₃	H	CF ₃
化合物 580	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	CF ₃	CF ₃

[表 7]

通式 [B]

化合物 編號	X ¹ X ⁴	L ¹ L ² , L ³ L ⁶	Y ¹ Y ⁴	R ¹ R ⁴	R ² R ³	R ⁵ R ⁶	R ⁷ R ⁸	R ⁹ R ¹⁰	R ¹¹ R ¹²	R ¹³ R ¹⁴	R ¹⁵ R ¹⁶	R ¹⁷ R ¹⁸	R ¹⁹ R ²⁰
化合物 701	-O-	H	XN-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 702	-O-	H	XN-	H	H	H	CH ₃ O	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 703	-O-	H	XN-	H	H	H	CH ₃ O	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 704	-O-	H	XN-	H	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	H
化合物 705	-O-	H	XN-	H	H	H	C ₆ H ₅ O	H	H	C ₆ H ₅ O	H	H	H
化合物 706	-O-	H	XN-	H	H	H	C ₆ H ₅	H	H	C ₆ H ₅	H	H	H
化合物 707	-O-	H	XN-	H	H	H	CF ₃ O	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 708	-O-	H	XN-	H	H	H	CF ₃ O	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 709	-O-	H	XN-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 710	-O-	H	XN-	H	H	CH ₃ O	H	CH ₃ O	H	H	H	H	H
化合物 711	-O-	H	XN-	H	H	CH ₃ O	H	CH ₃ O	H	H	H	H	H
化合物 712	-O-	H	XN-	H	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	H	H
化合物 713	-O-	H	XN-	H	H	C ₆ H ₅ O	H	C ₆ H ₅ O	H	H	H	H	H
化合物 714	-O-	H	XN-	H	H	C ₆ H ₅	H	C ₆ H ₅	H	H	H	H	H
化合物 715	-O-	H	XN-	H	H	CF ₃ O	H	CF ₃ O	H	H	H	H	H
化合物 716	-O-	H	XN-	H	H	CF ₃ O	H	CF ₃ O	H	H	H	H	H
化合物 717	-O-	H	XN-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 718	-O-	H	XN-	H	H	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O
化合物 719	-O-	H	XN-	H	H	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H
化合物 720	-O-	H	XN-	H	H	H	H	H	H	H	H	CH ₃	H
化合物 721	-O-	H	XN-	H	H	H	H	H	H	H	H	C ₆ H ₅ O	C ₆ H ₅ O
化合物 722	-O-	H	XN-	H	H	H	H	H	H	H	H	C ₆ H ₅	C ₆ H ₅
化合物 723	-O-	H	XN-	H	H	H	H	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O
化合物 724	-O-	H	XN-	H	H	H	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H
化合物 725	-S-	H	XN-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 726	-S-	H	XN-	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 727	-S-	H	XN-	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 728	-S-	H	XN-	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 729	-S-	H	XN-	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 730	-SO ₂ -	H	XN-	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 731	-SO ₂ -	H	XN-	H	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 732	-SO ₂ -	H	XN-	H	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 733	-SO ₂ -	H	XN-	H	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H

化合物 734	-SO ₂ -	-SO ₂ -	H	XN-	H	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 735	-CH ₂ -	-CH ₂ -	H	XN-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 736	-CH ₂ -	-CH ₂ -	H	XN-	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 737	-CH ₂ -	-CH ₂ -	H	XN-	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 738	-CH ₂ -	-CH ₂ -	H	XN-	H	H	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 739	-CH ₂ -	-CH ₂ -	H	XN-	H	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 740	XO=O	XO=O	H	XN-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 741	XO=O	XO=O	H	XN-	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 742	XO=O	XO=O	H	XN-	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 743	XO=O	XO=O	H	XN-	H	H	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 744	XO=O	XO=O	H	XN-	H	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 745	XO=CH ₂	XO=CH ₂	H	XN-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 746	XO=CH ₂	XO=CH ₂	H	XN-	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 747	XO=CH ₂	XO=CH ₂	H	XN-	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 748	XO=CH ₂	XO=CH ₂	H	XN-	H	H	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 749	XO=CH ₂	XO=CH ₂	H	XN-	H	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 750	XO=NH	XO=NH	H	XN-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 751	XO=NH	XO=NH	H	XN-	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 752	XO=NH	XO=NH	H	XN-	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 753	XO=NH	XO=NH	H	XN-	H	H	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 754	XO=NH	XO=NH	H	XN-	H	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 755	XNCH ₂	XNCH ₂	H	XN-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 756	XNCH ₂	XNCH ₂	H	XN-	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 757	XNCH ₂	XNCH ₂	H	XN-	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 758	XNCH ₂	XNCH ₂	H	XN-	H	H	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 759	XNCH ₂	XNCH ₂	H	XN-	H	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 760	-O-	-O-	H	XB-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 761	-O-	-O-	H	XB-	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 762	-O-	-O-	H	XB-	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 763	-O-	-O-	H	XB-	H	H	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 764	-O-	-O-	H	XB-	H	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 765	-O-	-O-	H	>P(=O)-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 766	-O-	-O-	H	>P(=O)-	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 767	-O-	-O-	H	>P(=O)-	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 768	-O-	-O-	H	>P(=O)-	H	H	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 769	-O-	-O-	H	>P(=O)-	H	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 770	-O-	H	-O-	XN-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 771	-O-	H	-O-	XN-	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 772	-O-	H	-O-	XN-	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H

化合物 773	-O-	H	-O-	N-	H	H	H	H	H	CH ₃	H	H	H
化合物 774	-O-	H	-O-	N-	H	H	H	H	H	C ₆ H ₅ O	H	H	H
化合物 775	-O-	H	-O-	N-	H	H	H	H	H	C ₆ H ₅	H	H	H
化合物 776	-O-	H	-O-	N-	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 777	-O-	H	-O-	N-	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 778	-O-	H	-O-	N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 779	-O-	H	-O-	N-	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 780	-O-	H	-O-	N-	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 781	-O-	H	-O-	N-	H	H	H	H	H	CH ₃	H	H	H
化合物 782	-O-	H	-O-	N-	H	H	H	H	H	C ₆ H ₅ O	H	H	H
化合物 783	-O-	H	-O-	N-	H	H	H	H	H	C ₆ H ₅	H	H	H
化合物 784	-O-	H	-O-	N-	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 785	-O-	H	-O-	N-	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 786	-O-	H	-O-	N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 787	-O-	H	-O-	N-	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	CH ₃ O
化合物 788	-O-	H	-O-	N-	H	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H
化合物 789	-O-	H	-O-	N-	H	H	H	H	H	H	H	CH ₃	H
化合物 790	-O-	H	-O-	N-	H	H	H	H	H	H	H	C ₆ H ₅ O	C ₆ H ₅ O
化合物 791	-O-	H	-O-	N-	H	H	H	H	H	H	H	C ₆ H ₅	C ₆ H ₅
化合物 792	-O-	H	-O-	N-	H	H	H	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O
化合物 793	-O-	H	-O-	N-	H	H	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H
化合物 794	-S-	H	-S-	N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 795	-S-	H	-S-	N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 796	-S-	H	-S-	N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 797	-S-	H	-S-	N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 798	-S-	H	-S-	N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 800	-SO ₂ -	H	-SO ₂ -	N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 801	-SO ₂ -	H	-SO ₂ -	N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 802	-SO ₂ -	H	-SO ₂ -	N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 803	-SO ₂ -	H	-SO ₂ -	N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 804	-CH ₂ -	H	-CH ₂ -	N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 805	-CH ₂ -	H	-CH ₂ -	N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 806	-CH ₂ -	H	-CH ₂ -	N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 807	-CH ₂ -	H	-CH ₂ -	N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 808	-CH ₂ -	H	-CH ₂ -	N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 809	>C=O	H	>C=O	N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 810	>C=O	H	>C=O	N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 811	>C=O	H	>C=O	N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H

化合物 812	X=O	H	X=O	XN-	H	H	H	H	H	CF ₃	H	H	H
化合物 813	X=O	H	X=O	XN-	H	H	H	H	H	CF ₃	H	H	H
化合物 814	X=CH ₃	H	X=CH ₃	XN-	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 815	X=CH ₃	H	X=CH ₃	XN-	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 816	X=CH ₃	H	X=CH ₃	XN-	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 817	X=CH ₃	H	X=CH ₃	XN-	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 818	X=CH ₃	H	X=CH ₃	XN-	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 819	X=NH	H	X=NH	XN-	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 819	X=NH	H	X=NH	XN-	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 819	X=NH	H	X=NH	XN-	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 821	X=NH	H	X=NH	XN-	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 822	X=NH	H	X=NH	XN-	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 823	X=NH	H	X=NH	XN-	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 824	XNCH ₃	H	XNCH ₃	XN-	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 825	XNCH ₃	H	XNCH ₃	XN-	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 826	XNCH ₃	H	XNCH ₃	XN-	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 827	XNCH ₃	H	XNCH ₃	XN-	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 828	XNCH ₃	H	XNCH ₃	XN-	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 829	-O-	H	-O-	XB-	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 830	-O-	H	-O-	XB-	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 831	-O-	H	-O-	XB-	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 832	-O-	H	-O-	XB-	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 833	-O-	H	-O-	XB-	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 834	-O-	H	-O-	XB-	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 835	-O-	H	-O-	>P(=O)-	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 836	-O-	H	-O-	>P(=O)-	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 837	-O-	H	-O-	>P(=O)-	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 838	-O-	H	-O-	>P(=O)-	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 838	-O-	H	-O-	>P(=O)-	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 839	-O-	-O-	H	XN-	H	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
化合物 840	-O-	-O-	H	XN-	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 841	-O-	-O-	H	XN-	H	H	H	H	H	CF ₃	H	H	H
化合物 842	-O-	-O-	H	XN-	H	H	H	H	H	H	CF ₃	H	H
化合物 843	-O-	-O-	H	XN-	H	H	H	H	H	H	H	CF ₃	H
化合物 844	-O-	-O-	H	XN-	H	H	H	H	H	H	H	H	CF ₃
化合物 845	-O-	-O-	H	XN-	H	H	H	H	H	CF ₃	H	H	H
化合物 846	-O-	-O-	H	XN-	H	H	H	H	H	CF ₃	H	H	H
化合物 847	-O-	-O-	H	XN-	H	H	H	H	H	H	CF ₃	H	H
化合物 848	-O-	-O-	H	XN-	H	H	H	H	H	H	H	CF ₃	H
化合物 849	-O-	-O-	H	XN-	H	H	H	H	H	H	H	H	CF ₃
化合物 850	-O-	-O-	H	XN-	H	H	H	H	H	CF ₃	H	H	H

化合物 851	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H
化合物 852	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H
化合物 853	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	CF ₃	H	H	H	CF ₃	H
化合物 854	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H
化合物 855	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H
化合物 856	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	CF ₂
化合物 857	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H
化合物 858	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	CF ₃
化合物 859	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	CF ₃	H	CF ₃	H	CF ₃	CF ₃
化合物 860	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
化合物 861	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
化合物 862	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
化合物 863	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	CF ₃	H	H	CF ₃	H	H
化合物 864	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	CF ₃	H	H	H	H	CF ₃
化合物 865	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
化合物 866	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
化合物 867	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
化合物 868	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
化合物 869	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
化合物 870	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	CF ₃	H	H	H	H	CF ₃
化合物 871	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
化合物 872	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	CF ₃	H	H	CF ₃	H	H
化合物 873	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	CF ₃	H	H	CF ₃	H	H
化合物 874	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	CF ₃	H	H	H	H	CF ₃
化合物 875	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	CF ₃	H	H	CF ₃	H	H
化合物 876	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	CF ₃	H	H	CF ₃	H	H
化合物 877	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	CF ₃	H	H	CF ₃	H	CF ₃
化合物 878	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	CF ₃	H	H	CF ₃	H	CF ₃
化合物 879	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	CF ₃	H	H	CF ₃	H	CF ₃
化合物 880	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	CF ₃	H	H	CF ₃	H	CF ₃

[表 8]

通式 [6]

化合物 編號	$X^1 X^4$	$L^1 L^2$ $L^3 L^4$	$L^5 L^6$ $L^7 L^8$	$Y^1 Y^2$	$R^1 R^4$	$R^2 R^3$	$R^5 R^6 R^9 R^{14}$	$R^{11} R^{12} R^{13} R^{16}$	$R^7 R^{10}$ $R^{15} R^{18}$	$R^9 R^2 R^4 R^6$	$R^{10} R^1 R^2 R^{10} R^9$	$R^9 R^{12}$ $R^{13} R^{16}$	$R^5 R^{12}$ $R^{13} R^{16}$
化合物 901	-O-	-O-	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=OH-	H	H				
化合物 902	-O-	-O-	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=OH-	-CH=CH-CH=OH-	H		H	H	H
化合物 903	-O-	-O-	H	>N-	H	H			-CH=CH-CH=OH-		H	H	H
化合物 904	-O-	-O-	H	>N-	H	H			-CH=CH-CH=OH-		-CH=CH-CH=OH-		H
化合物 905	-O-	-O-	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=OH-				-CH=CH-CH=OH-		H
化合物 906	-S-	-S-	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=OH-	H	H				
化合物 907	-S-	-S-	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=OH-	-CH=CH-CH=OH-	H				
化合物 908	-S-	-S-	H	>N-	H	H			-CH=CH-CH=OH-		H	H	H
化合物 909	-S-	-S-	H	>N-	H	H			-CH=CH-CH=OH-		-CH=CH-CH=OH-		H
化合物 910	-S-	-S-	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=OH-				-CH=CH-CH=OH-		H
化合物 911	-SO ₂ -	-SO ₂ -	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=OH-	H	H				
化合物 912	-SO ₂ -	-SO ₂ -	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=OH-	-CH=CH-CH=OH-	H				
化合物 913	-SO ₂ -	-SO ₂ -	H	>N-	H	H			-CH=CH-CH=OH-		H	H	H
化合物 914	-SO ₂ -	-SO ₂ -	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=OH-	-CH=CH-CH=OH-	H		-CH=CH-CH=OH-		H
化合物 915	-SO ₂ -	-SO ₂ -	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=OH-				-CH=CH-CH=OH-		H
化合物 916	-CH ₂ -	-CH ₂ -	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=OH-	H	H				
化合物 917	-CH ₂ -	-CH ₂ -	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=OH-	-CH=CH-CH=OH-	H				
化合物 918	-CH ₂ -	-CH ₂ -	H	>N-	H	H			-CH=CH-CH=OH-		H	H	H
化合物 919	-CH ₂ -	-CH ₂ -	H	>N-	H	H			-CH=CH-CH=OH-		-CH=CH-CH=OH-		H
化合物 920	-CH ₂ -	-CH ₂ -	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=OH-				-CH=CH-CH=OH-		H
化合物 921	>C=O	>C=O	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=OH-	H	H				
化合物 922	>C=O	>C=O	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=OH-	-CH=CH-CH=OH-	H				
化合物 923	>C=O	>C=O	H	>N-	H	H			-CH=CH-CH=OH-		H	H	H
化合物 924	>C=O	>C=O	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=OH-				-CH=CH-CH=OH-		H
化合物 925	>C=O	>C=O	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=OH-	-CH=CH-CH=OH-	H				
化合物 926	>C=O	>C=O	H	>N-	H	H			-CH=CH-CH=OH-		-CH=CH-CH=OH-		H
化合物 927	>C=O	>C=O	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=OH-						
化合物 928	>C=O	>C=O	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=OH-	H	H		H	H	H
化合物 929	>C=O	>C=O	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=OH-	-CH=CH-CH=OH-	H				
化合物 930	>C=O	>C=O	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=OH-				-CH=CH-CH=OH-		H
化合物 931	>C=NH	>C=NH	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=OH-	H	H				
化合物 932	>C=NH	>C=NH	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=OH-	-CH=CH-CH=OH-	H				
化合物 933	>C=NH	>C=NH	H	>N-	H	H			-CH=CH-CH=OH-		H	H	H
化合物 934	>C=NH	>C=NH	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=OH-				-CH=CH-CH=OH-		H
化合物 935	>C=NH	>C=NH	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=OH-	-CH=CH-CH=OH-	H				
化合物 936	>NCH ₃	>NCH ₃	H	>N-	H	H			-CH=CH-CH=OH-		H	H	H

化合物 981	>C=NH	H	>C=NH	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H	-CH=CH-CH=CH-	H
化合物 982	>C=NH	H	>C=NH	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H	-CH=CH-CH=CH-	H
化合物 983	>C=NH	H	>C=NH	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H	-CH=CH-CH=CH-	H
化合物 984	>C=NH	H	>C=NH	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H	-CH=CH-CH=CH-	H
化合物 985	>C=NH	H	>C=NH	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H	-CH=CH-CH=CH-	H
化合物 986	>NCH ₃	H	>NCH ₃	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H	-CH=CH-CH=CH-	H
化合物 987	>NCH ₃	H	>NCH ₃	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H	-CH=CH-CH=CH-	H
化合物 988	>NCH ₃	H	>NCH ₃	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H	-CH=CH-CH=CH-	H
化合物 989	>NCH ₃	H	>NCH ₃	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H	-CH=CH-CH=CH-	H
化合物 990	>NCH ₃	H	>NCH ₃	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H	-CH=CH-CH=CH-	H
化合物 991	-O-	H	-O-	>B-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H	-CH=CH-CH=CH-	H
化合物 992	-O-	H	-O-	>B-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H	-CH=CH-CH=CH-	H
化合物 993	-O-	H	-O-	>B-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H	-CH=CH-CH=CH-	H
化合物 994	-O-	H	-O-	>B-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H	-CH=CH-CH=CH-	H
化合物 995	-O-	H	-O-	>B-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H	-CH=CH-CH=CH-	H
化合物 996	-O-	H	-O-	>P(=O)-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H	-CH=CH-CH=CH-	H
化合物 997	-O-	H	-O-	>P(=O)-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H	-CH=CH-CH=CH-	H
化合物 998	-O-	H	-O-	>P(=O)-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H	-CH=CH-CH=CH-	H
化合物 999	-O-	H	-O-	>P(=O)-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H	-CH=CH-CH=CH-	H
化合物 1000	-O-	H	-O-	>P(=O)-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H	-CH=CH-CH=CH-	H

[表 9]

通式 [7]

化合物 編號	X ¹ X ² X ³	L ¹ L ² L ³ L ⁴ L ⁵ L ⁶ L ⁷ L ⁸ L ⁹ L ¹⁰	L ¹⁰ L ¹¹ L ¹² L ¹³ L ¹⁴ L ¹⁵	Y ¹ Y ² Y ³	R ¹ R ² R ³	R ⁴ R ⁵ R ⁶	R ⁷ R ⁸ R ⁹	R ¹⁰ R ¹¹ R ¹²	R ¹³ R ¹⁴ R ¹⁵	R ¹⁶ R ¹⁷ R ¹⁸	R ¹⁹ R ²⁰ R ²¹	R ²² R ²³ R ²⁴
化合物 1001	-O-		H	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 1002	-O-		H	>N-	H	CH ₃ O	CH ₃ O	CH ₃ O	CH ₃ O	CH ₃ O	CH ₃ O	H
化合物 1003	-O-		H	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 1004	-O-		H	>N-	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H
化合物 1005	-O-		H	>N-	H	H	CH ₃ O	C ₆ H ₅ O	C ₆ H ₅ O	C ₆ H ₅ O	H	H
化合物 1006	-O-		H	>N-	H	H	H	C ₆ H ₅	C ₆ H ₅	C ₆ H ₅	H	H
化合物 1007	-O-		H	>N-	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 1008	-O-		H	>N-	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 1009	-O-		H	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 1010	-O-		H	>N-	H	CH ₃ O	CH ₃ O	CH ₃ O	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 1011	-O-		H	>N-	H	CH ₃ O	CH ₃ O	CH ₃ O	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 1012	-O-		H	>N-	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H
化合物 1013	-O-		H	>N-	H	H	C ₆ H ₅ O	C ₆ H ₅ O	C ₆ H ₅ O	C ₆ H ₅ O	H	H
化合物 1014	-O-		H	>N-	H	H	C ₆ H ₅	C ₆ H ₅	C ₆ H ₅	C ₆ H ₅	H	H
化合物 1015	-O-		H	>N-	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 1016	-O-		H	>N-	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 1017	-O-		H	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 1018	-O-		H	>N-	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O
化合物 1019	-O-		H	>N-	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H
化合物 1020	-O-		H	>N-	H	H	H	H	H	H	CH ₃	H
化合物 1021	-O-		H	>N-	H	H	H	H	H	H	C ₆ H ₅ O	C ₆ H ₅ O
化合物 1022	-O-		H	>N-	H	H	H	H	H	H	C ₆ H ₅	C ₆ H ₅
化合物 1023	-O-		H	>N-	H	H	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O
化合物 1024	-O-		H	>N-	H	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H
化合物 1025	-S-		H	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 1026	-S-		H	>N-	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H
化合物 1027	-S-		H	>N-	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H
化合物 1028	-S-		H	>N-	H	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H
化合物 1029	-S-		H	>N-	H	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H
化合物 1030	-SO ₂ -		H	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 1031	-SO ₂ -		H	>N-	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O
化合物 1032	-SO ₂ -		H	>N-	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H

化合物 1033	-SO ₂ -	-SO ₂ -	H	>N-	H	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H	H
化合物 1034	-SO ₂ -	-SO ₂ -	H	>N-	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H	H
化合物 1035	-CH ₂ -	-CH ₂ -	H	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 1036	-CH ₂ -	-CH ₂ -	H	>N-	H	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H	H
化合物 1037	-CH ₂ -	-CH ₂ -	H	>N-	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H	H
化合物 1038	-CH ₂ -	-CH ₂ -	H	>N-	H	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H	H
化合物 1039	-CH ₂ -	-CH ₂ -	H	>N-	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H	H
化合物 1040	>C=O	>C=O	H	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 1041	>C=O	>C=O	H	>N-	H	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H	H
化合物 1042	>C=O	>C=O	H	>N-	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H	H
化合物 1043	>C=O	>C=O	H	>N-	H	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H	H
化合物 1044	>C=O	>C=O	H	>N-	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H	H
化合物 1045	>C=CH ₂	>C=CH ₂	H	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 1046	>C=CH ₂	>C=CH ₂	H	>N-	H	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H	H
化合物 1047	>C=CH ₂	>C=CH ₂	H	>N-	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H	H
化合物 1048	>C=CH ₂	>C=CH ₂	H	>N-	H	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H	H
化合物 1049	>C=CH ₂	>C=CH ₂	H	>N-	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H	H
化合物 1050	>C=NH	>C=NH	H	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 1051	>C=NH	>C=NH	H	>N-	H	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H	H
化合物 1052	>C=NH	>C=NH	H	>N-	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H	H
化合物 1053	>C=NH	>C=NH	H	>N-	H	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H	H
化合物 1054	>C=NH	>C=NH	H	>N-	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H	H
化合物 1055	>NCH ₃	>NCH ₃	H	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 1056	>NCH ₃	>NCH ₃	H	>N-	H	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H	H
化合物 1057	>NCH ₃	>NCH ₃	H	>N-	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H	H
化合物 1058	>NCH ₃	>NCH ₃	H	>N-	H	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H	H
化合物 1059	>NCH ₃	>NCH ₃	H	>N-	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H	H
化合物 1060	-O-	-O-	H	>B-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 1061	-O-	-O-	H	>B-	H	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H	H
化合物 1062	-O-	-O-	H	>B-	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H	H
化合物 1063	-O-	-O-	H	>B-	H	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H	H
化合物 1064	-O-	-O-	H	>B-	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H	H
化合物 1065	-O-	-O-	H	>P(=O)-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 1066	-O-	-O-	H	>P(=O)-	H	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H	H
化合物 1067	-O-	-O-	H	>P(=O)-	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H	H
化合物 1068	-O-	-O-	H	>P(=O)-	H	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H	H
化合物 1069	-O-	-O-	H	>P(=O)-	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H	H
化合物 1070	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 1071	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H	H

化合物 1072	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H	H
化合物 1073	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	CH ₃	H	H	H	H
化合物 1074	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	C ₆ H ₅ O	C ₆ H ₅ O	H	H	H
化合物 1075	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	C ₆ H ₅	C ₆ H ₅	H	H	H
化合物 1076	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H	H
化合物 1077	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H	H
化合物 1078	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 1079	-O-	H	-O-	>N-	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H	H	H	H
化合物 1080	-O-	H	-O-	>N-	H	H	CH ₃ O	H	H	H	H	H	H
化合物 1081	-O-	H	-O-	>N-	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H	H
化合物 1082	-O-	H	-O-	>N-	H	H	C ₆ H ₅ O	C ₆ H ₅ O	H	H	H	H	H
化合物 1083	-O-	H	-O-	>N-	H	H	C ₆ H ₅	C ₆ H ₅	H	H	H	H	H
化合物 1084	-O-	H	-O-	>N-	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H	H	H	H
化合物 1085	-O-	H	-O-	>N-	H	H	CF ₃ O	H	H	H	H	H	H
化合物 1086	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 1087	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H
化合物 1088	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	CH ₃	CH ₃	H
化合物 1089	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	C ₆ H ₅ O	C ₆ H ₅ O	H
化合物 1090	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	C ₆ H ₅	C ₆ H ₅	H
化合物 1091	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H
化合物 1092	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H
化合物 1093	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 1094	-S-	H	-S-	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 1095	-S-	H	-S-	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H	H
化合物 1096	-S-	H	-S-	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H	H
化合物 1097	-S-	H	-S-	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H	H
化合物 1098	-S-	H	-S-	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H	H
化合物 1099	-SO ₂ -	H	-SO ₂ -	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 1100	-SO ₂ -	H	-SO ₂ -	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H	H
化合物 1101	-SO ₂ -	H	-SO ₂ -	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H	H
化合物 1102	-SO ₂ -	H	-SO ₂ -	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H	H
化合物 1103	-SO ₂ -	H	-SO ₂ -	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H	H
化合物 1104	-CH ₂ -	H	-CH ₂ -	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 1105	-CH ₂ -	H	-CH ₂ -	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H	H
化合物 1106	-CH ₂ -	H	-CH ₂ -	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H	H
化合物 1107	-CH ₂ -	H	-CH ₂ -	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H	H
化合物 1108	-CH ₂ -	H	-CH ₂ -	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H	H
化合物 1109	>C=O	H	>C=O	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 1110	>C=O	H	>C=O	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H	H

化合物 1111	>C=O	H	>C=O	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 1112	>C=O	H	>C=O	H	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 1113	>C=O	H	>C=O	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 1114	>C=O	H	>C=O	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 1115	>C=O	H	>C=O	H	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 1116	>C=O	H	>C=O	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 1117	>C=O	H	>C=O	H	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 1118	>C=O	H	>C=O	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 1119	>C=NH	H	>C=NH	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 1120	>C=NH	H	>C=NH	H	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 1121	>C=NH	H	>C=NH	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 1122	>C=NH	H	>C=NH	H	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 1123	>C=NH	H	>C=NH	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 1124	>NCH ₃	H	>NCH ₃	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 1125	>NCH ₃	H	>NCH ₃	H	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 1126	>NCH ₃	H	>NCH ₃	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 1127	>NCH ₃	H	>NCH ₃	H	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 1128	>NCH ₃	H	>NCH ₃	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 1129	-O-	H	-O-	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 1130	-O-	H	-O-	H	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 1131	-O-	H	-O-	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 1132	-O-	H	-O-	H	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 1133	-O-	H	-O-	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 1134	-O-	H	-O-	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 1135	-O-	H	-O-	H	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 1136	-O-	H	-O-	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 1137	-O-	H	-O-	H	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 1138	-O-	H	-O-	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 1139	-O-	-O-	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
化合物 1140	-O-	-O-	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H	H	H
化合物 1141	-O-	-O-	H	H	H	H	H	H	CF ₃	H	H	H
化合物 1142	-O-	-O-	H	H	H	H	H	H	H	CF ₃	H	H
化合物 1143	-O-	-O-	H	H	H	H	H	H	H	H	CF ₃	H
化合物 1144	-O-	-O-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	CF ₃
化合物 1145	-O-	-O-	H	H	CF ₃	CF ₃	H	H	H	H	H	H
化合物 1146	-O-	-O-	H	H	CF ₃	CF ₃	H	H	CF ₃	H	H	H
化合物 1147	-O-	-O-	H	H	CF ₃	CF ₃	H	H	H	CF ₃	H	H
化合物 1148	-O-	-O-	H	H	CF ₃	CF ₃	H	H	H	H	CF ₃	H
化合物 1149	-O-	-O-	H	H	CF ₃	CF ₃	H	H	H	H	H	CF ₃
化合物 1146	-O-	-O-	H	H	CF ₃	CF ₃	H	H	H	H	H	CF ₃

化合物 1150	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	CF ₃	CF ₃	H	H	H	H
化合物 1151	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H
化合物 1152	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	CF ₃	H	H	CF ₃	H	H
化合物 1153	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	CF ₃	H	H	H	CF ₃	H
化合物 1154	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H
化合物 1155	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	CF ₃
化合物 1156	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	H	CF ₃	H	H
化合物 1157	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	CF ₃	CF ₃	H	H
化合物 1158	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	CF ₃	H	CF ₃	H
化合物 1159	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	H	CF ₃	CF ₃	H
化合物 1160	-O-	H	-O-	>N-	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H	H
化合物 1161	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
化合物 1162	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
化合物 1163	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	H	CF ₃	H	H	H
化合物 1164	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	CF ₃	H	H
化合物 1165	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	H	CF ₃	H
化合物 1166	-O-	H	-O-	>N-	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H	H
化合物 1167	-O-	H	-O-	>N-	H	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H
化合物 1168	-O-	H	-O-	>N-	H	H	CF ₃	H	H	CF ₃	H	H	H
化合物 1169	-O-	H	-O-	>N-	H	H	CF ₃	H	H	H	CF ₃	H	H
化合物 1170	-O-	H	-O-	>N-	H	H	CF ₃	H	H	H	H	CF ₃	H
化合物 1171	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	CF ₃	CF ₃	H	H	H	H
化合物 1172	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H
化合物 1173	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	CF ₃	H	H	CF ₃	H	H
化合物 1174	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	CF ₃	H	H	H	CF ₃	H
化合物 1175	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H
化合物 1176	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	CF ₃	H	CF ₃	H	CF ₃	H
化合物 1177	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	CF ₃	H	H	H	CF ₃	H
化合物 1178	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	H	CF ₃	CF ₃	H	CF ₃
化合物 1179	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	H	CF ₃	H	CF ₃	H
化合物 1180	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	CF ₃	CF ₃	H

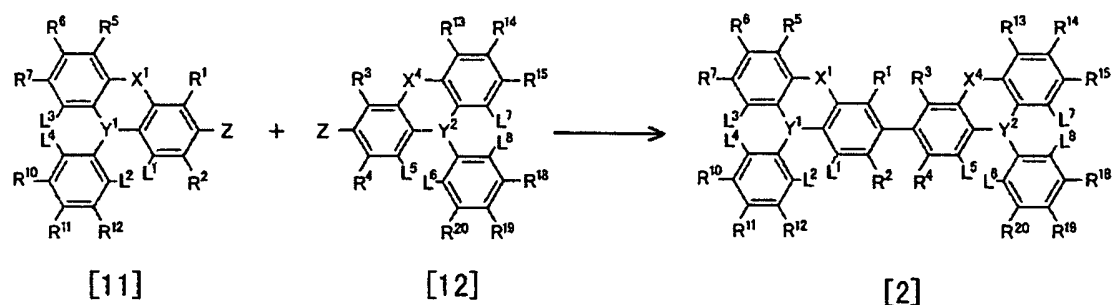
[通式[1]所表示之化合物之合成]

通式[1]所表示之化合物之合成法並無特別限制。通式[1]所表示之化合物之合成可藉由適當組合已知之合成法或條件而進行。

例如，作為較佳之合成法，可列舉下述流程1所表示之合成法。此處記載的是通式[2]所表示之化合物之合成流程。

[化22]

流程1



通式[11]及通式[12]中之 X^1 、 X^4 、 Y^1 、 Y^2 、 $L^1 \sim L^8$ 、 $R^5 \sim R^7$ 、 $R^{10} \sim R^{12}$ 、 $R^{13} \sim R^{15}$ 及 $R^{18} \sim R^{20}$ 之定義與通式[1]及[2]相同。通式[11]及通式[12]中之 $R^1 \sim R^4$ 表示氫原子或取代基，取代基之說明與較佳之範圍與通式[1]之 R^1 及 R^2 之取代基之說明與較佳之範圍相同。通式[11]及通式[12]中之 Z 表示鹵素原子，較佳為氟原子、氯原子、溴原子或碘原子，更佳為氯原子、溴原子或碘原子，進而更佳為溴原子。

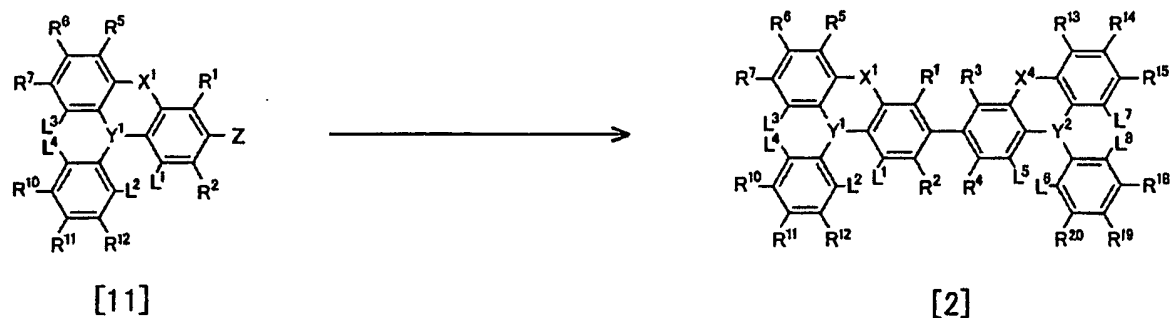
流程1之反應為偶合反應，通常使用偶合劑進行。即，將通式[12]之 Z 金屬化，藉由使用鈰(0)或鎳(0)之已知之交叉偶合反應，而可合成通式[1]所表示之化合物。反應條件

可參考已知之條件而最佳化。

於合成具有左右對稱之分子結構之化合物作為通式 [1] 之化合物之情形時，可藉由下述流程 2 合成通式 [1] 之化合物。根據流程 2，可合成通式 [1] 之 X^1 、 Y^1 、 $L^1 \sim L^4$ 、 R^1 、 R^2 、 $R^5 \sim R^7$ 、 $R^{10} \sim R^{12}$ 依次與 X^4 、 Y^2 、 $L^5 \sim L^8$ 、 R^3 、 R^4 、 $R^{13} \sim R^{15}$ 、 $R^{18} \sim R^{20}$ 相同之化合物。

[化 23]

流程 2

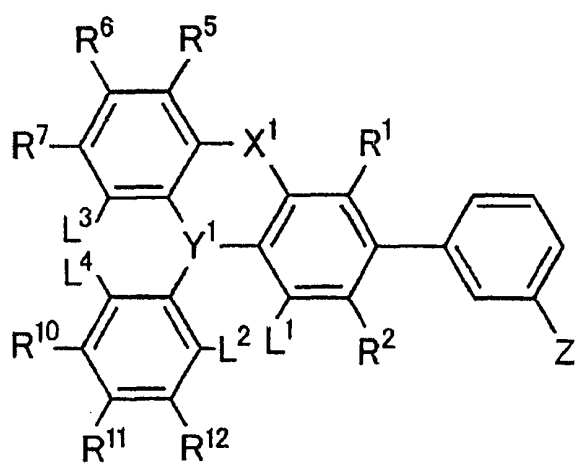


流程 2 之反應為偶合反應，通常使用偶合劑進行。例如可於雙(1,5-環辛二烯)鎳 $[\text{Ni}(\text{COD})_2]$ 、2,2'-聯吡啶 [bpy]、1,5-環辛二烯 [COD] 之存在下進行反應。使用該等試劑之偶合反應本身為已知，可根據已知之反應條件將流程 2 之反應條件最佳化。

流程 1 及流程 2 之反應可於溶解通式 [11] 之化合物與通式 [12] 之化合物之溶劑中進行，例如可於四氫呋喃 [THF, Tetrahydrofuran] 中進行。反應溫度並無特別限制，較佳為一面於溶劑沸點以下之溫度下加熱一面進行。例如於使用 THF 作為溶劑之情形時，可較佳為於 $40 \sim 66^\circ\text{C}$ ，更佳為於 $55 \sim 66^\circ\text{C}$ 下進行反應。

流程1之合成法亦可應用於通式[1]之Ar¹不為單鍵之化合物之合成。例如，於合成通式[1]之Ar¹為1,3-伸苯基之通式[6]之化合物時，只要使用下述通式[13]所表示之化合物代替流程1之通式[11]所表示之化合物即可。其他通式[1]之化合物亦可以相同之方式進行合成。

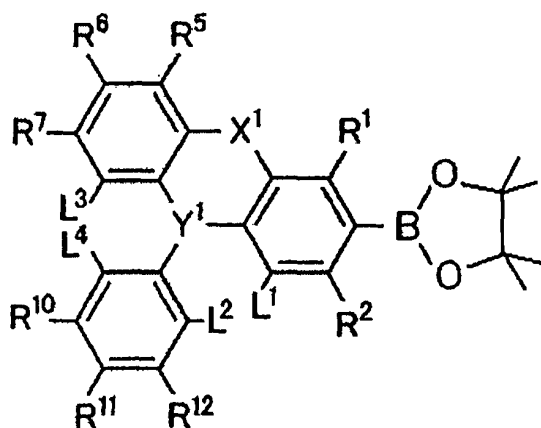
[化24]



[13]

又，通式[5]~[7]之化合物亦可藉由以下方式合成：將上述通式[11]之化合物製成下述通式[14]所表示之二氧雜硼烷體，使與1,4-二溴苯、1,3-二溴苯或1,3,5-三溴苯進行反應。通式[14]之二氧雜硼烷體可藉由以下方式合成：使通式[11]之化合物與例如正丁基鋰進行反應後，再與2-異丙氧基-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧雜硼烷進行反應。於將二氧雜硼烷體轉換成通式[5]~[7]之化合物時，較佳為一面使用例如三(二亞苺基丙酮)二鈹-氯仿加成物[Pd₂(dba)₃·CHCl₃]或2-雙環己基膦-2',6'-二甲氧基聯苯[SPhos]一面進行反應。關於該等反應之詳細內容，可參考後述合成例。

[化 25]

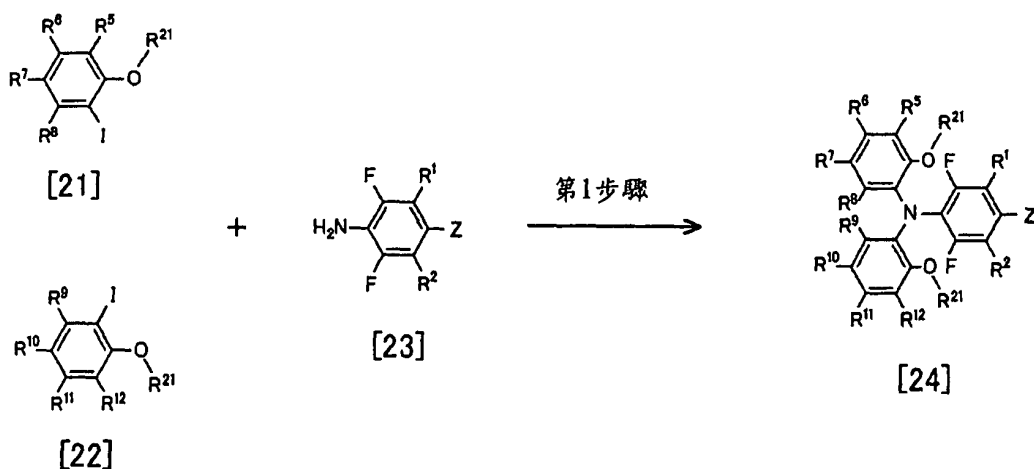


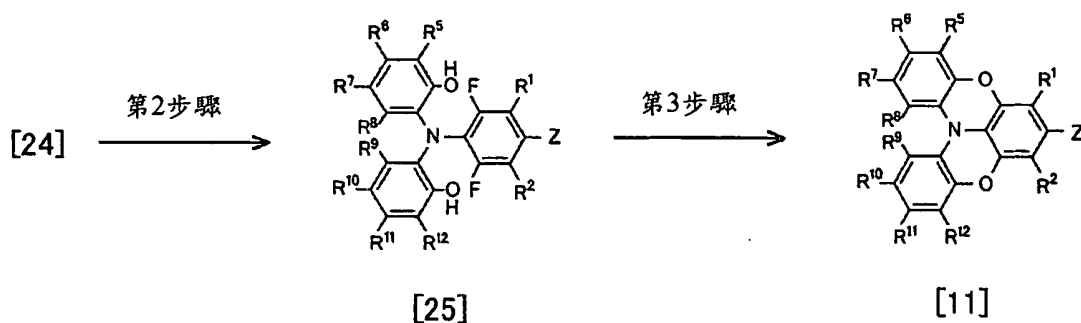
[14]

作為流程1及流程2之起始物質之通式[11]及[12]所表示之化合物、或上述通式[13]所表示之化合物例如可藉由以下流程3而合成。於流程3中，以通式[11]之 X^1 為 $-O-$ 、 L^1 與 L^2 相互鍵結形成 $-O-$ 、 Y^1 為 $>N-$ 之化合物的合成法為例進行說明。Z較佳為溴原子。

[化 26]

流程 3





通式 [21]~[25] 中之 R^1 、 R^2 、 $R^5\sim R^7$ 及 $R^{10}\sim R^{12}$ 之定義與通式 [11] 相同。 R^8 及 R^9 各自獨立表示氫原子或取代基。通式 [21]、[22] 及 [24] 中之 R^{21} 表示烷基，較佳為碳數 1~3 之烷基，更佳為甲基。

於流程 3 之第 1 步驟中，首先使作為鄰烷氧基碘化苯之通式 [21] 與 [22] 之各化合物與作為 2,6-二氟苯胺之通式 [23] 之化合物進行反應。於第 1 步驟中所欲合成之通式 [24] 之 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^8 依次與 R^{12} 、 R^{11} 、 R^{10} 、 R^9 相同之情形時，只要使單一種鄰烷氧基碘化苯與通式 [23] 之化合物進行反應即可。反應較佳為於促進通式 [21] 及 [22] 之化合物與通式 [23] 之化合物的偶合反應之進行之環境下進行。例如，於碳酸鉀等之存在下可較佳地使用 Cu。使用該等試劑之反應條件可參考類似之偶合反應之條件而最佳化。再者，第 1 步驟之反應亦可藉由以下的 2 階段步驟而進行：首先使通式 [21] 之化合物 1 分子與通式 [23] 之化合物 1 分子進行偶合反應後，進而使與通式 [22] 之化合物 1 分子偶合。藉由選擇最初之偶合反應所使用之觸媒，可防止通式 [21] 之化合物 2 分子與通式 [23] 之化合物 1 分子偶合。作為此種觸媒，例如可列

舉 CuI。

第1步驟之反應可於溶解通式[21]~[23]之化合物之溶劑中進行，例如可於鄰二氯苯[ODCB]中進行。反應溫度並無特別限制，較佳為一面於溶劑沸點以下之溫度下加熱一面進行。例如於使用ODCB作為溶劑之情形時，可一面於較佳為150~180°C、更佳為沸點下進行回流一面進行反應。

於流程3之第2步驟中，將第1步驟中所獲得之通式[24]所表示之化合物之烷氧基轉換成羥基，製成通式[25]所表示之化合物。第2步驟可藉由適當組合將烷氧基轉換成羥基之已知之轉換反應條件而進行。例如可藉由於二氯甲烷溶劑中首先與三溴化硼進行反應，繼而使鹽酸作用而進行。第2步驟中所獲得之產物可於不進行純化或單離之情況下用於其次之第3步驟中。

於流程3之第3步驟中，使第2步驟中所獲得之通式[25]所表示之化合物之羥基與氟原子進行分子內環化反應，製成通式[11]所表示之化合物。該反應係藉由於例如碳酸鉀等鹼之存在下進行加熱而進行。加熱溫度較佳為於70~130°C左右下進行。溶劑可較佳地採用例如二甲基甲醯胺[DMF]等。

作為流程1之起始物質之通式[12]或通式[13]所表示之化合物亦可同樣地藉由流程3而合成。又，其他類似之化合物亦可以相同之方式而合成。

流程3之合成途徑為新穎之合成途徑，與先前所知之氧

交聯三芳基胺或硫交聯三芳基胺之合成法(M. Kuratsu et. al., Chem. Lett., Vol. 33, No.9(2004))相比，具有產率良好、易於大量合成之優點。又，可使具有相互不同之結構之通式[21]之化合物與通式[22]之化合物分別與通式[23]之化合物偶合，因此亦具有易於合成經交聯之芳基為非對稱之化合物之優點。又，藉由使用溴化物(例如Z為溴原子之化合物)作為通式[23]之化合物，而可合成交聯型三芳基胺之溴化物，從而亦具有亦易於合成包含複數個本骨架之化合物之優點。

流程3之合成途徑例如可一般化地記作以下之合成法。

(2,2':6,2''-二氧雜三苯基胺化合物之合成方法)

該2,2':6,2''-二氧雜三苯基胺化合物之合成方法之特徵在於：使2,6-二氟苯胺化合物1分子與2-烷氧基碘化苯化合物2分子進行偶合，製備N,N-雙(2-烷氧基苯基)-2,6-二氟苯胺化合物，

將所獲得之N,N-雙(2-烷氧基苯基)-2,6-二氟苯胺化合物之烷氧基轉換成羥基，製成N,N-雙(2-羥基苯基)-2,6-二氟苯胺化合物，進而進行分子內環化反應，藉此合成2,2':6,2''-二氧雜三苯基胺化合物。

進而將相當於Z之取代基導入至作為起始物質之2,6-二氟苯胺化合物或2-烷氧基碘化苯化合物之苯環上，藉此可將Z導入至最終所獲得之2,2':6,2''-二氧雜三苯基胺化合物所對應之苯環上。又，使進行偶合之2-烷氧基碘化苯化合物2分子可為相同分子亦可為不同2分子。於使用不同2分

子之情形時，較佳為使用取代基不同之2分子。於該情形時，可採用使每1分子階段性地偶合之逐次反應。若使用Pd，則可僅使1分子效率良好地偶合。

(2,2':6,2''-二硫雜三苯基胺化合物之合成方法)

該2,2':6,2''-二硫雜三苯基胺化合物之合成方法之特徵在於：使2,6-二氟苯胺化合物1分子與2-烷硫基碘化苯化合物2分子進行偶合，製備N,N-雙(2-烷硫基苯基)-2,6-二氟苯胺化合物，

將所獲得之N,N-雙(2-烷硫基苯基)-2,6-二氟苯胺化合物之烷硫基轉換成硫醇基，製成N,N-雙(2-巰基苯基)-2,6-二氟苯胺化合物，繼而進行分子內環化反應，藉此合成2,2':6,2''-二硫雜三苯基胺化合物。

進而將相當於Z之取代基導入至作為起始物質之2,6-二氟苯胺化合物或2-烷硫基碘化苯化合物之苯環上，藉此可將Z導入至最終所獲得之2,2':6,2''-二硫雜三苯基胺化合物所對應之苯環上。又，使進行偶合之2-烷硫基碘化苯化合物2分子可為相同分子，亦可為取代基不同之2分子。又，關於使不同2分子偶合之情形之逐次反應可參照上述說明。

利用流程1~3等所合成之通式[1]所表示之化合物可於進行純化、單離後供於特定之用途，根據用途亦可於不進行單離之情況下使用。本發明係亦包含同時含有通式[1]所表示之化合物與不以通式[1]表示之化合物之組合物者。又，本發明係亦包含含有複數種通式[1]所表示之化合物之組合

物者。再者，所合成之通式[1]所表示之化合物之純化可適當選擇管柱層析法等已知之純化法而進行。

[通式[1]所表示之化合物之物性]

通式[1]所表示之化合物由於具有準平面結構，故而可於抑制結晶化之同時使分子彼此緊密堆積。本發明者等人藉由計算化學確認：通式[1]所表示之化合物為再排列能量較小且分子間傳遞積分較大之材料。又，通式[1]所表示之化合物具有充分之分子尺寸。由於具有以上特徵，因此通式[1]所表示之化合物之玻璃轉移溫度較高，可以非晶狀態穩定地存在。進而，通式[1]所表示之化合物之HOMO(Highest Occupied Molecular Orbital，最高佔據分子軌道)與LUMO(Lowest Unoccupied Molecular Orbital，最低非佔據分子軌道)之軌道能階處於適合用作電荷輸送材料之水平。其中，於通式[1]之 Y^1 及 Y^2 為>N-或>P-之情形時，通式[1]所表示之化合物尤其會表現出作為電洞輸送材料之有用性質。又，於 Y^1 及 Y^2 為>B-或>P(=O)-之情形時，通式[1]所表示之化合物尤其會表現出作為電子輸送材料之有用性質。本發明中之所謂電荷輸送材料之術語，係包括上述電洞輸送材料與電子輸送材料之概念。

通式[1]所表示之化合物為優異之電荷輸送材料，因此可有效地用於各種有機裝置、尤其是有機電子裝置中。例如，可有效地用於有機電致發光元件或電子照相用感光體中。又，亦可有效地用於光電轉換元件中，因此亦可有效地用於有機薄膜太陽電池中。進而，亦可有效地用作有機

電晶體。以下以代表性之有機裝置之形式對有機電致發光元件與有機薄膜太陽電池進行說明。

[有機電致發光元件]

典型之有機電致發光元件具有於玻璃等透明基板上積層ITO(Indium Tin Oxides, 氧化銻錫)等陽極、電洞注入層、電洞輸送層、發光層、電子輸送層、電子注入層、陰極而成之結構。通式[1]所表示之本發明之化合物根據其物性可用作電洞注入層、電洞輸送層、發光層、電子輸送層、電子注入層之材料。例如, 若將作為電子輸送材料而有用之通式[1]所表示之化合物(尤其是 Y^1 及 Y^2 為 $>B-$ 或 $>P(=O)-$ 之化合物)用於電子輸送層中, 則可將自陰極經由電子注入層而注入至電子輸送層之電子效率良好地輸送至發光層。因此, 可提高發光層中之電子與電洞之再結合效率, 於抑制耗費電力與發熱量之同時實現高發光效率。又, 藉此亦可實現有機電致發光元件之長壽命化。作為另一例, 若將作為電洞輸送材料有用之通式[1]所表示之化合物(尤其是 Y^1 及 Y^2 為 $>N-$ 或 $>P-$ 之化合物)用於電洞輸送層中, 則可將自陽極經由電洞注入層注入至電洞輸送層之電洞效率良好地輸送至發光層。因此, 可提高發光層中之電子與電洞之再結合效率, 於抑制耗費電力與發熱量之同時實現高發光效率。又, 藉此亦可實現有機電致發光元件之長壽命化。

於使用本發明之化合物之有機電致發光元件中, 可適當選擇用於有機電致發光元件中之已知材料而加以組合使用。於使用本發明之化合物之有機電致發光元件中, 視需

要亦可施加公知之技術或可由公知之技術易於想到之各種改變。

[有機薄膜太陽電池]

典型之有機薄膜太陽電池具有於玻璃等透明基板上積層ITO等陽極、電洞輸送層、光電轉換層、電子輸送層、陰極而成之結構。光電轉換層於陽極側具有p型半導體層，於陰極側具有n型半導體層。通式[1]所表示之本發明之化合物根據其物性可用作電洞輸送層、p型半導體層、n型半導體層、電子輸送層之材料。通式[1]所表示之本發明之化合物可於有機薄膜太陽電池中發揮作為電洞輸送材料或電子輸送材料之功能。又，亦較為有用的是：利用通式[1]所表示之本發明之化合物，製造包含通式[1]所表示之骨架作為重複單元之聚合物，而將該聚合物用於有機薄膜太陽電池中。

使用本發明之化合物之有機薄膜太陽電池除上述以外亦可適當具備電洞阻擋層、電子阻擋層、電子注入層、電洞注入層、平滑化層等。於使用本發明之化合物之有機薄膜太陽電池中，可適當選擇有機薄膜太陽電池中所使用之已知材料加以組合使用。於使用本發明之化合物之有機薄膜太陽電池中，視需要亦可施加公知之技術或可由公知之技術易於想到之各種改變。

[實施例]

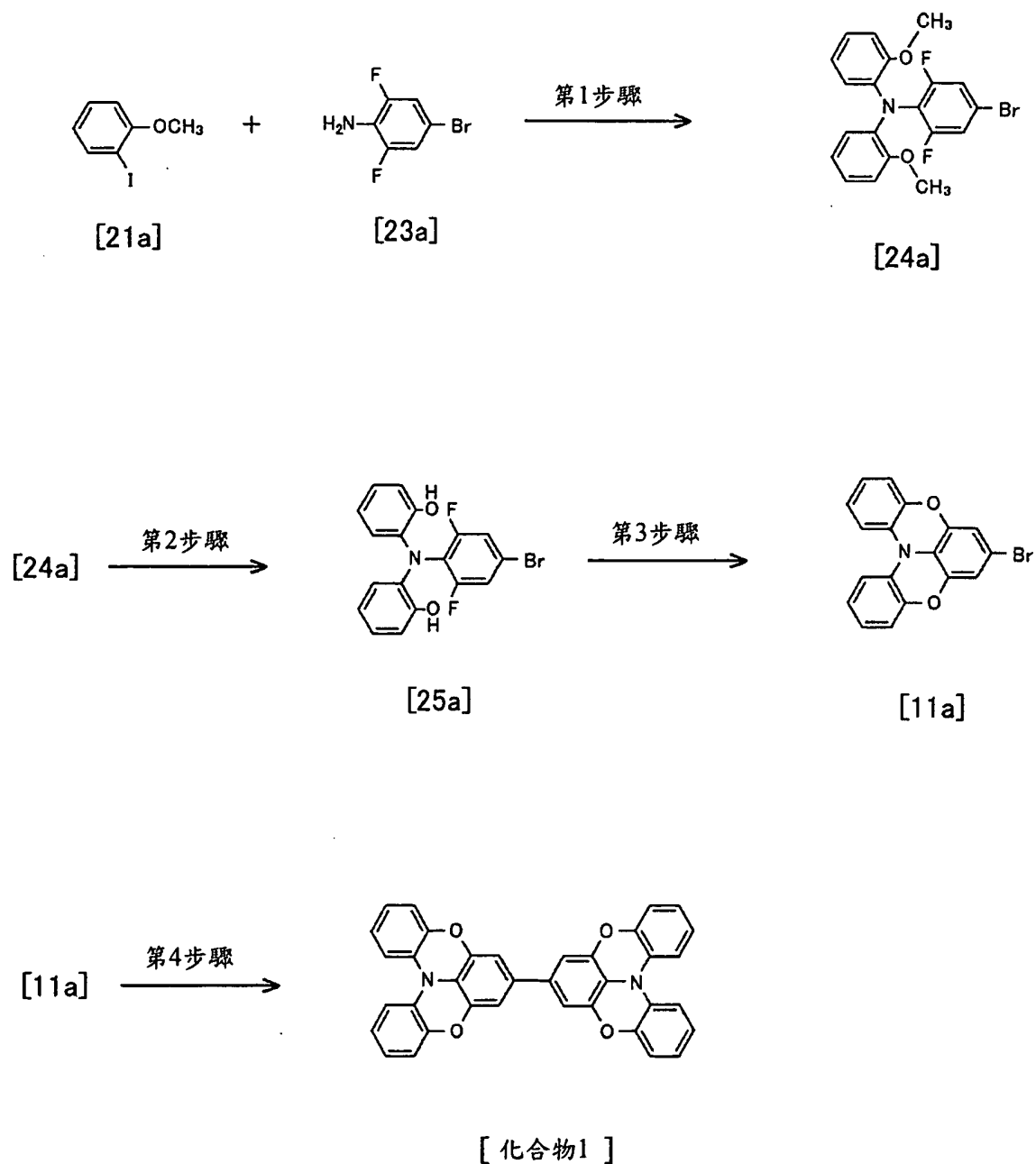
以下列舉實施例更具體地說明本發明之特徵。以下實施例中所示之材料、處理內容、處理順序等只要不脫離本發

明之宗旨則可適當變更。因此，本發明之範圍不應由以下所示之具體例來限定性地解釋。

(實施例1)

根據以下流程合成化合物1。

[化27]



於鄰二氯苯[ODCB](100 ml)中溶解化合物21a(19.8 g，

84.6 mmol)、化合物23a(7.74 g, 37.2 mmol)、 K_2CO_3 (21.5 g, 156 mmol)、及Cu(7.82 g, 123 mmol)，於180°C下加熱110小時。過濾反應混合物，利用氯仿(100 ml)清洗不溶物3次。利用水清洗濾液後，利用 $MgSO_4$ 加以乾燥，過濾後，於減壓下進行濃縮。繼而利用己烷清洗所獲得之黑色固體，藉此獲得產率68%之白色粉末之化合物24a(10.6 g, 25.4 mmol)。

Mp: 157.5~158.5°C。

1H NMR (300 MHz, $CDCl_3$, ppm) δ 7.10-6.94 (m, 4H), 6.94-6.81 (m, 6H), 3.60 (s, 6H)。

^{13}C NMR (75 MHz, $CDCl_3$, ppm): δ 158.24 (dd, 1J (C, F)=252.4, 3J (C, F)=6.9 Hz), 153.25, 136.12, 124.61, 121.10, 115.29 (dd, 2J (C, F)=17.8, 4J (C, F)=9.2 Hz), 114.70 (t, 3J (C, F)=12.0 Hz), 113.00, 56.03。

HRMS(FAB)(High Resolution Mass Spectrum(Fast Atom Bombardment)，高分辨快原子轟擊質譜): m/z 419.0325(M^+)； $C_{20}H_{16}BrF_2NO$ 之計算值：479.0332。

元素分析(%)： $C_{20}H_{16}BrF_2NO_2$ 之計算值：C57.16, H3.84, N3.33，實測值：C57.15, H3.90, N3.40。

將化合物24a(9.75 g, 23.3 mmol)之脫水 CH_2Cl_2 (450 ml)溶液冷卻至-78°C，添加 BBr_3 (4.50 ml, 47.5 mmol)，其後緩慢地升溫至室溫，攪拌3小時。其後，將溶液添加入水(100 ml)中，利用 CH_2Cl_2 (100 ml)萃取3次。利用 Na_2SO_4 乾燥所獲得之有機層，過濾後，於減壓下進行濃縮，藉此獲

得產率92%之白色粉末之化合物25a(8.38 g, 21.4 mmol)。

^1H NMR (300 MHz, CDCl_3) δ 7.12-7.03 (m, 6H), 6.87 (td, ^3J (H, H)=7.8 Hz, ^4J (H, H)=1.5 Hz, 4H)。

將化合物25a(6.68 g, 17.1 mmol)與無水 K_2CO_3 (7.15 g, 51.8 mmol)放入二甲基甲醯胺[DMF](150 ml)中，加熱至 100°C ，加熱22小時。恢復至室溫時析出白色固體。過濾所析出之固體，利用水進行清洗，其後於減壓下加以乾燥，藉此獲得產率79%之作為白色結晶之化合物11a(4.73 g, 13.5 mmol)。又，於減壓下濃縮濾液，使用 CH_2Cl_2 作為展開溶劑，藉由矽膠層析($R_f=0.78$)進行純化，獲得作為白色結晶之化合物11a(0.931 g, 2.65 mmol)。總計獲得產率94%之化合物11a(5.66 g, 16.1 mmol)。

Mp: $215.5\sim 216.3^\circ\text{C}$ 。

^1H NMR (300 MHz, CDCl_3 , ppm) δ 7.31 (dd, ^3J (H, H)=7.5, ^4J (H, H)=1.8 Hz, 2H), 6.99-6.85 (m, 6H), 6.66 (s, 2H)。

^{13}C NMR (75 MHz, CDCl_3 , ppm) δ 146.67, 145.72, 128.70, 123.91, 123.63, 120.39, 117.53, 115.21, 114.68, 114.48。

HRMS(FAB)= m/z 350.9895(M^+) ; $\text{C}_{18}\text{H}_{10}\text{BrNO}_2$ 之計算值 : 350.9908。

元素分析(%) : $\text{C}_{18}\text{H}_{10}\text{BrNO}_2$ 之計算值 : C61.39, H2.86, N3.98 ; 實測值 C61.01, H3.00, N4.02。

於四氫呋喃[THF](360 ml)中溶解化合物11a(4.20 g, 12.0 mmol)、雙(1,5-環辛二烯)鎳[$\text{Ni}(\text{cod})_2$](3.96 g, 44.4 mmol)、1,5-環辛二烯[COD](1.77 g, 16.4 mmol)、2,2'-聯

吡啶[bpy](2.25 g, 14.4 mmol), 於60°C下加熱24小時。將混合物溶於二硫化碳中, 使其吸附於矽膠, 使用二硫化碳(1000 ml)作為展開溶劑進行萃取。於減壓下自所獲得之溶液中蒸餾去除溶劑, 獲得產率49%之作為黃色固體之化合物1(1.60 g, 2.94 mmol)。對於利用二硫化碳進行萃取後之矽膠, 進而使用索氏萃取器利用甲苯進行萃取, 獲得作為黃色固體之化合物1(0.510 g, 0.940 mmol)。總計獲得產率65%之化合物1(2.11 g, 3.88 mmol)。繼而, 對所獲得之化合物1進行昇華純化(320~350°C, 1 mmHg), 藉此獲得黃色結晶, 並用於各種測定。

Mp: 375.2~376.1°C。

^1H NMR (300 MHz, CD_2Cl_2 , ppm) δ 7.36 (d, $^3\text{J}(\text{H}, \text{H})=6.9$ Hz, 4H), 7.05-6.90 (m, 12H), 6.69 (s, 4H)。

^{13}C NMR (150 MHz, $\text{CD}_2\text{Cl}_2/\text{CS}_2$, ppm): δ 147.15, 145.76, 136.04, 129.12, 124.16, 124.03, 120.50, 117.93, 115.00, 109.47。

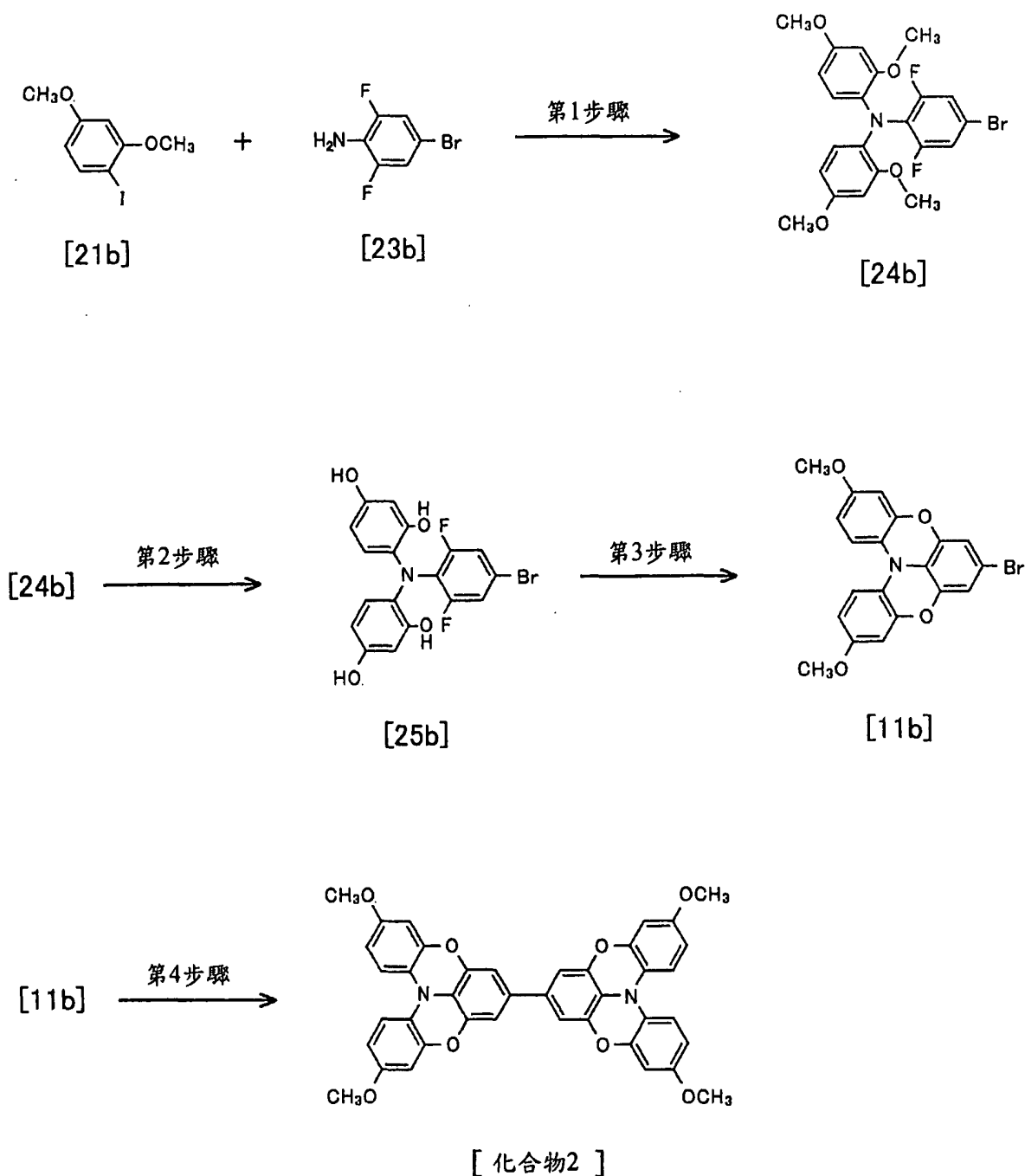
HRMS(FAB): m/z 544.1429(M^+); $\text{C}_{36}\text{H}_{20}\text{N}_2\text{O}_4$ 之計算值: 544.1423。

元素分析(%): $\text{C}_{36}\text{H}_{20}\text{N}_2\text{O}_4$ 之計算值: C79.40, H3.70, N5.14; 實測值 C79.57, H3.88, N5.13。

(實施例2)

根據以下流程合成化合物2。

[化 28]



於鄰二氯苯 [ODCB] (90 ml) 中溶解化合物 21b (20.4 g, 77.2 mmol)、化合物 23b (6.86 g, 33.0 mmol)、 K_2CO_3 (18.2 g, 132 mmol)、及 Cu (6.80 g, 107 mmol)，於 $180^\circ C$ 下加熱 150 小時。藉由過濾去除不溶物，利用 CH_2Cl_2 (100 ml) 清洗 3

次，利用水清洗濾液。利用 MgSO_4 乾燥所獲得之有機相，過濾後，於減壓下進行濃縮。進而藉由矽膠管柱層析(展開溶劑：己烷/ CH_2Cl_2 (1/3)， $R_f=0.56$)進行純化，獲得產率 61% 之作為白色固體之化合物 24b(9.63 g, 20.1 mmol)。

Mp: 96.4~97.3°C。

^1H NMR (300 MHz, CDCl_3 , ppm) δ 7.05-6.90 (m, 2H), 6.83 (d, ^3J (H, H)=8.4 Hz, 2H), 6.46 (d, ^4J (H, H)=2.7 Hz, 2H), 6.38 (dd, ^3J (H, H)=8.7, ^4J (H, H)=2.7 Hz, 2H), 3.78 (s, 6H), 3.60 (s, 6H)。

^{13}C NMR (75 MHz, CDCl_3 , ppm) δ 158.16 (dd, ^1J (C, F)=251.9, ^3J (C, F)=7.4 Hz), 156.98, 154.34, 130.03, 125.30, 115.21 (dd, ^2J (C, F)=17.8, ^4J (C, F)=9.2 Hz), 113.51 (t, ^3J (C, F)=12.1 Hz), 104.49, 100.30, 56.00, 55.34。

HRMS(FAB): m/z 479.0544(M^+); $\text{C}_{22}\text{H}_{20}\text{F}_2\text{NO}_2$ 之計算值: 479.0544。

元素分析(%): $\text{C}_{22}\text{H}_{20}\text{BrF}_2\text{NO}_2$ 之計算值: C55.01, H4.20, N2.92; 實測值: C54.99, H4.78, N2.99。

將化合物 24b(4.68 g, 9.77 mmol) 之 CH_2Cl_2 (190 ml) 溶液冷卻至 -78°C ，添加 BBr_3 (10.0 g, 40.1 mmol)，其後緩慢地升溫至室溫，攪拌一晚。其後，添加 1.0 M 鹽酸(100 ml)，利用乙酸乙酯(50 ml)萃取 3 次。利用 Na_2SO_4 乾燥所獲得之有機層，過濾後，於減壓下進行濃縮，藉此獲得產率 98% 之作為藍黑色固體之化合物 25b(4.08 g, 9.61 mmol)。

^1H NMR (300 MHz, CDCl_3 , ppm) δ 7.05-7.00 (m, 2H), 6.98 (d, ^3J (H, H)=9.0 Hz, 2H), 6.39 (d, ^4J (H, H)=2.7 Hz, 2H),

6.33 (dd, 3J (H, H)=9.0 Hz, 4J (H, H)=3.0 Hz, 2H), 5.57 (br, 2H), 4.70 (br, 2H)。

將化合物 25b(3.50 g, 8.26 mmol)與無水 K_2CO_3 (6.85 g, 49.6 mmol)溶解於二甲基甲醯胺 [DMF](200 ml)中，加熱至 $100^\circ C$ ，攪拌 14 小時。其後，於混合物中添加 CH_3I (2.00 ml, 32.1 mmol)，於 $60^\circ C$ 下加熱 3 小時。將混合物添加入 1 M 鹽酸(200 ml)中後，利用乙酸乙酯(100 ml)萃取水層 3 次，利用 Na_2SO_4 進行乾燥，過濾後，於減壓下進行濃縮。繼而使用 CH_2Cl_2 作為展開溶劑，進行矽膠管柱層析 ($R_f=0.85$)，藉此進行純化，獲得產率 67% 之作為白色固體之化合物 11b(2.29 g, 5.56 mmol)。

Mp: $175.5-177.4^\circ C$ 。

1H NMR (300 MHz, C_6D_6 , ppm) δ 6.89 (d, 3J (H, H)=9.7 Hz, 2H), 6.56 (s, 2H), 6.46 (d, 4J (H, H)=2.7 Hz, 2H), 6.28 (dd, 3J (H, H)=9.7 Hz, 4J (H, H)=2.7 Hz, 2H), 3.21 ppm (s, 6H; OMe)。

^{13}C NMR (75 MHz, $CDCl_3$, ppm) δ 156.73, 148.10, 146.03, 122.90, 121.63, 115.38, 115.13, 109.27, 104.61, 55.34 ppm。

HRMS(FAB)=m/z 411.0087(M^+) ; $C_{20}H_{14}BrNO_4$ 之計算值 : 411.0106。

元素分析(%)= $C_{20}H_{14}BrNO_4$ 之計算值 : C58.27, H3.42, N3.40 ; 實測值 : C58.35, H3.44, N3.39。

於四氫呋喃 [THF](130 ml)中溶解化合物 11b(1.85 g, 4.50 mmol)、雙(1,5-環辛二烯)鎳 [$Ni(cod)_2$](1.49 g, 5.41 mmol)、1,5-環辛二烯 [COD](0.586 g, 5.42 mmol)、2,2'-聯

吡啶[bpy](0.843 g, 5.40 mmol)，於60°C下加熱12小時。於減壓下濃縮混合溶液，添加甲苯(100 ml)後，使其吸附於矽膠，使用索氏萃取器利用甲苯進行萃取，於減壓下濃縮，利用己烷進行過濾，藉此獲得產率54%之作為黃色固體之化合物2(0.810 g, 1.22 mmol)。繼而，進行昇華純化(285~310°C, 0.06~0.08 mmHg)，並用於各種測定。

Mp(分解溫度)：351.8~353.8°C。

^1H NMR (300 MHz, CD_2Cl_2 , ppm) δ 6.99 (d, ^3J (H, H)=8.7 Hz, 4H), 6.44 (s, 4H), 6.34 (d, ^4J (H, H)=2.7 Hz, 4H), 6.27 (dd, ^3J (H, H)=8.7, ^4J (H, H)=2.7 Hz, 4H), 3.52 ppm (s, 12H)。

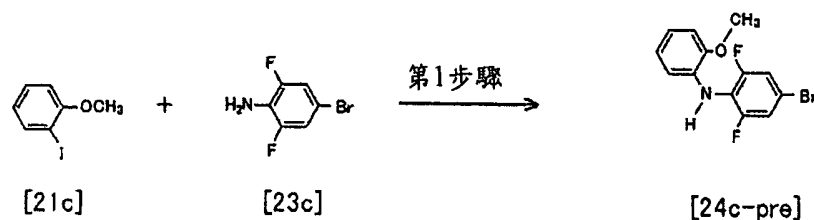
HRMS(FAB)：m/z 664.1818(M^+)； $\text{C}_{40}\text{H}_{28}\text{N}_2\text{O}_8$ 之計算值：664.1846。

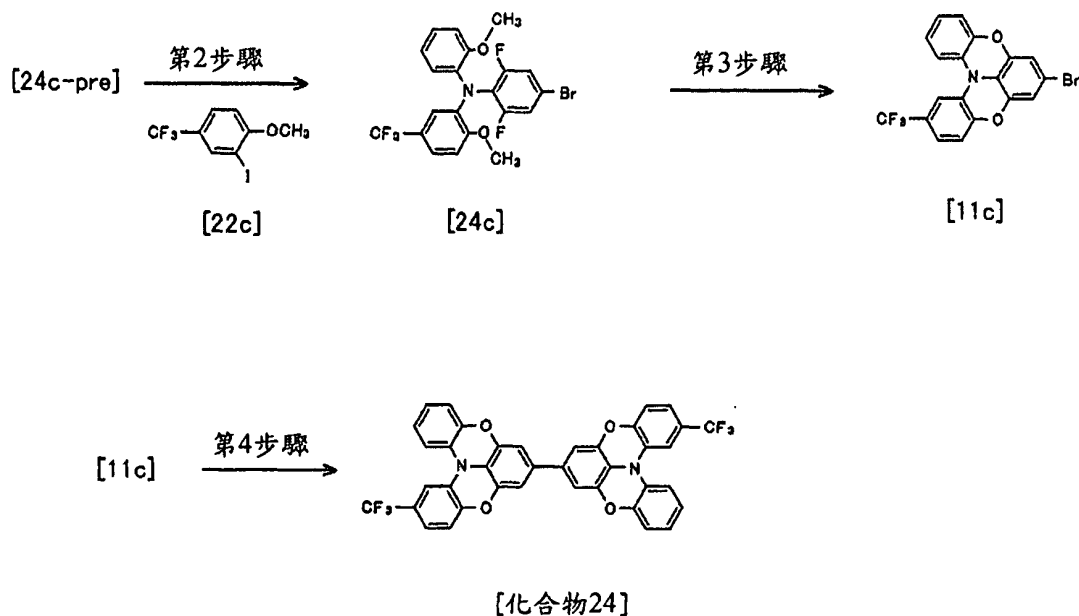
元素分析(%)： $\text{C}_{40}\text{H}_{28}\text{N}_2\text{O}_8$ 之計算值：C72.28, H4.25, N4.21；實測值：C72.33, H4.28, N4.25。

(實施例3)

根據以下流程合成化合物24。

[化29]





於乾燥甲苯 (100 ml) 中溶解化合物 21c (11.7 g, 49.9 mmol)、化合物 23c (9.19 g, 44.2 mmol)、 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3 \cdot \text{CHCl}_3$ (0.799 g, 0.765 mmol)、第三丁氧化鈉 (4.38 g, 45.6 mmol)、三第三丁基膦 (0.920 g, 4.55 mmol)，於 100°C 下攪拌 26 小時。過濾不溶物，利用甲苯進行清洗 (60 ml)。其後，於濾液中添加水，利用甲苯進行萃取 (50 ml \times 3)。利用 Na_2SO_4 乾燥有機層，過濾後，於減壓下濃縮濾液。利用矽膠管柱層析 (CH_2Cl_2 : 己烷 = 1:5, $R_f = 0.30$) 純化所獲得之固體，獲得產率 50% 之作為白色固體之化合物 24c-pre (7.73 g, 24.6 mmol)。

Mp : $71.2 \sim 72.2^\circ\text{C}$ 。

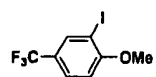
^1H NMR (300 MHz, CDCl_3 , ppm) δ 7.20-7.11 (m, 2H), 6.91-6.80 ppm (m, 3H), 6.57 (td, $^3\text{J}(\text{H}, \text{H}) = 8.7 \text{ Hz}$, $^4\text{J}(\text{H}, \text{H}) = 2.7 \text{ Hz}$, 1H), 5.83 (s, 1H), 3.93 (s, 3H)。

^{13}C NMR (75 MHz, CDCl_3 , ppm) δ 156.67 (dd, $^1\text{J}(\text{C}, \text{F}) = 250.1$

Hz, 3J (C, F)=6.3 Hz), 147.74, 132.54, 120.70, 120.24, 118.67 (t, 3J (C, F)=14.9 Hz), 115.79 (dd, 2J (C, F)=18.3 Hz, 4J (C, F)=8.6 Hz), 114.62 (t, 3J (C, F)=11.7 Hz), 113.17 (t, 4J (C, F)=2.9 Hz), 110.11, 55.58 ppm。

HRMS(FAB) : m/z 312.9923(M⁺), C₁₃H₁₀BrF₂NO 之計算值 : 312.9914。

元素分析 (%) : C₁₃H₁₀BrF₂NO 之計算值 : C49.71, H3.21, N4.46 ; 實測值 : C49.79, H3.17, N4.52。



於乙腈(160 ml)中溶解2-甲氧基-5-三氟甲基苯胺(10.1 g, 53.1 mmol), 添加12 M HCl水溶液(11.0 ml)冷卻至0°C。歷時10分鐘於該溶液中滴加溶解於30 ml水中之亞硝酸鈉(4.76 g, 71.0 mmol), 攪拌20分鐘。繼而歷時15分鐘滴加溶解於60 ml水中之碘化鉀(26.6 g, 160 mmol)後, 攪拌2小時, 恢復至室溫, 繼而攪拌20小時。添加Na₂SO₃水溶液(50 ml), 利用醚進行萃取(60 ml×3)。利用Na₂SO₄乾燥有機層, 過濾後, 於減壓下濃縮濾液。利用矽膠短管柱層析(己烷, R_f=0.40)純化所獲得之油, 獲得產率92%之作為無色油之化合物22c(14.8 g, 49.0 mmol)。

¹H NMR (300 MHz, CDCl₃, ppm) δ 8.01 (d, 4J (H, H)=2.1 Hz, 1H), 7.59 (dd, 3J (H, H)=9.0 Hz, 4J (H, H)=2.1 Hz, 1H), 6.51 (d, 3J (H, H)=9.0 Hz, 1H), 3.94 (s, 3H)。

於乾燥ODCB(20 ml)中添加化合物24c-pre(0.862 g, 2.75 mmol)、化合物22c(0.990 g, 3.28 mmol)、K₂CO₃(0.857 g, 6.20 mmol)、銅粉末(0.317 g, 4.99 mmol), 加熱至180°C,

攪拌 65 小時。過濾不溶物，利用乾燥 CH_2Cl_2 進行清洗 (50 ml)。其後，於濾液中添加水 (20 ml)，利用 CH_2Cl_2 進行萃取 (10 ml \times 3)。利用 Na_2SO_4 乾燥有機層，過濾後，於減壓下濃縮濾液。利用矽膠管柱層析 (CH_2Cl_2 : 己烷 = 1:3， $R_f=0.31$) 純化所獲得之固體，獲得產率 75% 之作為白色固體之化合物 24c (1.00 g, 2.05 mmol)。

Mp : 98.4~99.4 $^\circ\text{C}$ 。

^1H NMR (300 MHz, CDCl_3 , ppm) δ 7.29 (d, ^3J (H, H)=9.0 Hz, 1H), 7.12 (ddd, ^3J (H, H)=7.2 Hz, ^3J (H, H)=6.9 Hz, ^4J (H, H)=2.1 Hz, 1H), 7.07 (d, ^4J (H, H)=1.8 Hz, 1H), 7.02 (d, ^3J (H, H)=8.1 Hz, 2H), 6.95-6.88 (m, 4H), 3.64 (s, 3H), 3.59 (s, 3H)。

^{13}C NMR (75 MHz, CDCl_3 , ppm) δ 158.49 (dd, ^1J (C, F)=253 Hz, ^3J (C, F)=6.9 Hz), 155.04, 153.44, 136.35, 135.07, 125.60, 125.11, 124.18 (q, ^1J (C, F)=270 Hz), 124.16, 123.99, 123.17 (q, ^2J (C, F)=32.6 Hz), 121.25, 120.98, 120.54, 120.49, 115.79, 115.477, 115.474 (dd, ^2J (C, F)=18.1, ^4J (C, F)=8.9 Hz), 113.00, 112.05, 56.03, 55.89 ppm。

HRMS(FAB) : m/z 487.0206(M^+)， $\text{C}_{21}\text{H}_{15}\text{BrF}_5\text{NO}_2$ 之計算值：487.0206。

元素分析 (%) : $\text{C}_{21}\text{H}_{15}\text{BrF}_5\text{NO}_2$ 之計算值：C51.66, H3.10, N2.87；實測值：C51.89, H3.09, N2.92。

於乾燥 CH_2Cl_2 (200 ml) 中溶解化合物 24c (3.113 g, 6.38 mmol)，冷卻至 -78°C 。於其中添加 BBr_3 (1.25 ml, 13.20 mmol) 後，緩慢地升溫至室溫，攪拌 3 小時。將溶液添加入

水 (100 ml) 中，利用 CH_2Cl_2 (50 ml \times 3) 進行萃取。利用 Na_2SO_4 進行乾燥，過濾後，於減壓下濃縮濾液，獲得包含 CH_2Cl_2 之 3.063 g 之固體 (化合物 25c)。將所獲得之固體溶解於 DMF (130 ml) 中，添加 K_2CO_3 (2.642 g, 19.1 mmol)，於 100°C 下攪拌 12 小時。於該反應混合物中添加 1 M NH_4Cl 水溶液 (100 ml)，利用 CH_2Cl_2 萃取水層 (80 ml \times 3)。利用 Na_2SO_4 乾燥有機層，過濾後，於減壓下濃縮濾液。利用矽膠管柱層析 (CH_2Cl_2) 對所獲得之固體進行原點除去後，利用矽膠管柱層析 (CH_2Cl_2 : 己烷 = 1:5, R_f = 0.66) 進行純化，獲得產率 65% 之作為白色固體之化合物 11c (1.741 g, 4.14 mmol)。

Mp : $146.1\sim 147.0^\circ\text{C}$ 。

^1H NMR (300 MHz, CDCl_3 , ppm) δ 7.53 (d, 1H), 7.28 (dd, ^4J (H, H) = 2.1 Hz, ^3J (H, H) = 6.6 Hz, ^4J (H, H) = 1.2 Hz, 1H), 7.16 (d, ^3J (H, H) = 8.4 Hz, 1H), 7.04-6.88 (m, 4H), 6.74 (d, ^3J (H, H) = 8.4 Hz, 1H), 6.69 ppm (dd, ^3J (H, H) = 7.8 Hz, ^4J (H, H) = 2.1 Hz, 2H)。

^{13}C NMR (75 MHz, CDCl_3 , ppm) δ 149.22, 146.64, 145.63, 145.19, 129.52, 127.83, 126.50 (q, ^2J (C, F) = 33.2 Hz), 124.48, 123.67 (q, ^1J (C, F) = 270 Hz), 120.67 (q, ^3J (C, F) = 4.0 Hz), 119.71, 117.92, 117.72, 115.89, 115.18, 114.62, 114.42, 111.59 ppm (q, ^3J (C, F) = 4.1 Hz)。

HRMS(FAB) : m/z 418.9783 (M^+), $\text{C}_{19}\text{H}_9\text{BrF}_3\text{NO}_2$ 之計算值 : 418.9769。

元素分析 (%) : $\text{C}_{19}\text{H}_9\text{BrF}_3\text{NO}_2$ 之計算值 : C 54.31, H 2.16,

N3.33 ; 實測值 : C54.43, H2.42, N3.53 。

於乾燥 THF(60 ml) 中溶解化合物 11c(0.964 g, 2.29 mmol)、Ni(cod)₂(0.379 g, 1.38 mmol)、1,5-環辛二烯(0.35 ml, 2.85 mmol)、2,2'-聯吡啶(0.432 g, 2.77 mmol)，於 60°C 下加熱 14.5 小時。於減壓下濃縮溶液，使用甲苯使其吸附於矽膠，使用索氏萃取器利用甲苯進行萃取(R_f=0.96)後，於減壓下進行濃縮。利用己烷清洗固體，獲得產率 71%之作為黃色固體之化合物 24(553.3 mg, 0.813 mmol)。
Mp : 363.2~364.2°C 。

¹H NMR (300 MHz, CD₂Cl₂, ppm) δ 7.60 (d, ⁴J (H, H)=1.2 Hz, 2H), 7.34 (dd, ³J (H, H)=7.8 Hz, ⁴J (H, H)=2.1 Hz, 2H), 7.20 (d, ³J (H, H)=9.0 Hz, 2H), 7.07-6.95 (m, 8H), 6.73 ppm (dd, ³J (H, H)=6.3 Hz, ⁴J (H, H)=1.8 Hz, 2H) 。

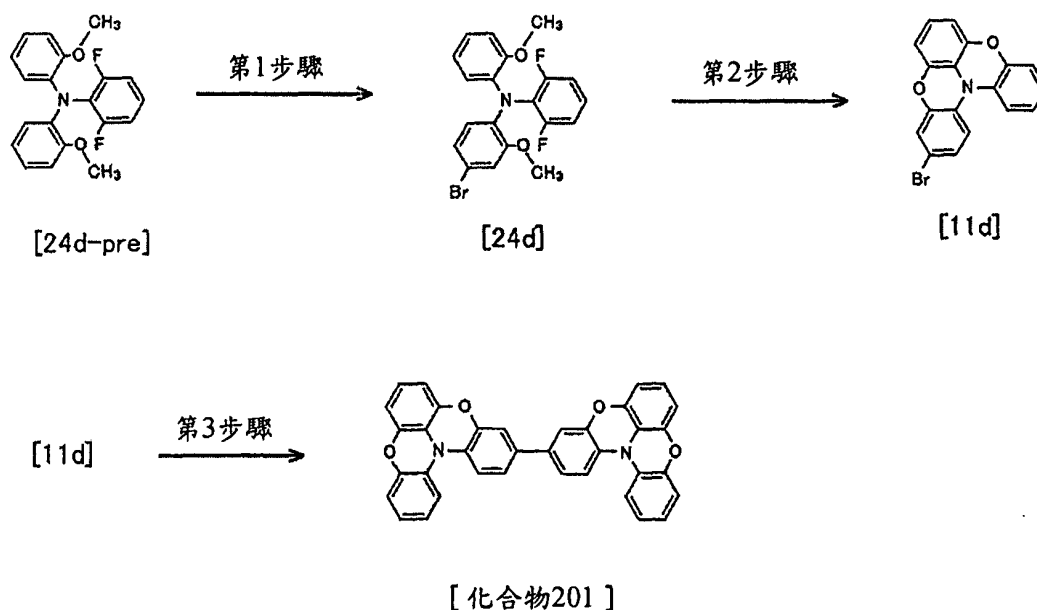
HRMS(FAB)=m/z 680.1169(M⁺)，C₃₈H₁₈F₆N₂O₄ 之計算值：680.1171 。

元素分析(%)：C₃₈H₁₈F₆N₂O₄之計算值：C67.06, H2.67, N4.12；
實測值：C67.20, H2.61, N4.25 。

(實施例 4)

根據以下流程合成化合物 201 。

[化 30]



於 CHCl_3 (200 ml) 與 乙酸 (200 ml) 中溶解化合物 24d-pre (8.34 g, 24.5 mmol)、N-溴代丁二醯亞胺 (4.35 g, 24.4 mmol)，於室溫下攪拌 18 小時。利用飽和 NaHCO_3 水溶液進行中和，利用 CHCl_3 進行萃取 (100 ml \times 3)。利用 Na_2SO_4 乾燥有機層，過濾後，於減壓下濃縮濾液。利用矽膠管柱層析 (CH_2Cl_2 : 己烷 = 1:2, R_f = 0.45) 純化所獲得之固體，獲得產率 79% 之作為白色固體之化合物 24d (8.11 g, 19.3 mmol)。

Mp : 119.1~120.1 $^\circ\text{C}$ 。

^1H NMR (300 MHz, CDCl_3 , ppm) δ 7.11-6.97 (m, 3H), 6.95 (dd, $^3\text{J}(\text{H}, \text{H})=8.4$ Hz, $^4\text{J}(\text{H}, \text{H})=2.1$ Hz, 1H), 6.93-6.76 (m, 5H), 6.74 (d, $^3\text{J}(\text{H}, \text{H})=8.4$ Hz, 1H), 3.59 (s, 3H), 3.56 ppm (s, 3H)。

^{13}C NMR (75 MHz, CDCl_3 , ppm) δ 158.96 (dd, $^1\text{J}(\text{C}, \text{F})=249.5$ Hz, $^3\text{J}(\text{C}, \text{F})=5.7$ Hz), 153.46, 153.28, 136.06, 124.96, 124.77, 124.67, 124.40 (t, $^3\text{J}(\text{C}, \text{F})=6.9$ Hz), 124.26, 124.13, 123.92,

121.13, 116.28, 116.05, 113.15, 111.54 (dd, 2J (C, F)=16.0 Hz, 4J (C, F)=6.8 Hz), 56.24, 56.05 ppm。

HRMS(FAB) : m/z 419.0332(M^+) , $C_{20}H_{16}BrF_2NO_2$ 之計算值 =419.0332。

元素分析 (%) : $C_{20}H_{16}BrF_2NO_2$ 之計算值 : C57.16, H3.84, N3.33 ; 實測值 : C57.26, H3.88, N3.38。

於乾燥 CH_2Cl_2 (90 ml) 中溶解化合物 24d (1.82 g, 4.33 mmol)。將該溶液冷卻至 $-78^\circ C$, 添加 BBr_3 (1.00 ml, 10.6 mmol) 後, 緩慢地升溫至室溫, 攪拌 4 小時。將溶液添加入水中, 利用 CH_2Cl_2 萃取水層 (50 ml \times 3)。利用 Na_2SO_4 進行乾燥, 過濾後, 於減壓下濃縮濾液, 獲得包含 CH_2Cl_2 之 1.74 g 之白色固體 (化合物 25d)。將所獲得之固體溶解於 DMF (60 ml) 中, 添加 K_2CO_3 (1.84 g, 13.3 mmol), 於 $100^\circ C$ 下攪拌 15.5 小時。於減壓下濃縮溶液, 添加水, 利用 CH_2Cl_2 進行萃取 (50 ml \times 3)。利用 Na_2SO_4 乾燥有機層, 過濾後, 於減壓下濃縮濾液。利用矽膠短管柱層析 (CH_2Cl_2 , $R_f=0.95$) 純化所獲得之固體, 獲得產率 99% 之作為白色固體之化合物 11d (1.51 g, 4.28 mmol)。

Mp : $145.3\sim 146.3^\circ C$ 。

1H NMR (300 MHz, $CDCl_3$, ppm) δ 7.25 (d, 3J (H, H)=6.9 Hz, 1H), 7.19 (dd, 3J (H, H)=6.9 Hz, 4J (H, H)=2.4 Hz, 1H), 7.07-7.02 (m, 2H), 6.98-6.88 (m, 3H), 6.76 (t, 3J (H, H)=8.4 Hz, 1H), 6.51 (dd, 3J (H, H)=8.4 Hz, 4J (H, H)=1.2 Hz, 1H), 6.49 ppm (dd, 3J (H, H)=7.5 Hz, 4J (H, H)=1.2 Hz, 1H)。

^{13}C NMR (75 MHz, CDCl_3 , ppm) δ 147.63, 146.88, 145.25, 144.93, 128.57, 128.44, 126.34, 123.88, 123.73, 123.65, 120.58, 117.58, 115.47, 114.47, 111.46, 111.13 ppm。

HRMS(FAB)= m/z 350.9897(M^+), $\text{C}_{18}\text{H}_{10}\text{BrNO}_2$ 之計算值 : 350.9895。

元素分析(%) : $\text{C}_{18}\text{H}_{10}\text{BrNO}_2$ 之計算值 : C61.39, H2.86, N3.98 ; 實測值 : C61.53, H2.79, N4.00。

於乾燥 THF(30 ml) 中溶解化合物 11d(0.351 g, 1.00 mmol)、 $\text{Ni}(\text{cod})_2$ (0.329 g, 1.20 mmol)、1,5-環辛二烯(0.14 ml, 1.14 mmol)、2,2'-聯吡啶(0.189 g, 1.21 mmol), 於 60°C 下加熱 18 小時。於減壓下濃縮溶液, 使用甲苯使其吸附於矽膠, 使用索氏萃取器利用甲苯進行萃取 ($R_f=0.95$) 後, 於減壓下濃縮。利用己烷清洗固體, 藉此獲得產率 98% 之作為黃色固體之化合物 201(0.268 g, 0.491 mmol)。
Mp : $337.6\sim 338.6^\circ\text{C}$ 。

^1H NMR (300 MHz, $1/1\text{CD}_2\text{Cl}_2/\text{CS}_2$, ppm) δ 7.38 (d, $^3\text{J}(\text{H}, \text{H})=8.4$ Hz, 2H), 7.36 (dd, $^3\text{J}(\text{H}, \text{H})=8.1$ Hz, $^4\text{J}(\text{H}, \text{H})=1.5$ Hz, 2H), 7.16 (dd, $^3\text{J}(\text{H}, \text{H})=8.4$ Hz, $^4\text{J}(\text{H}, \text{H})=2.1$ Hz, 2H), 7.10 (d, $^4\text{J}(\text{H}, \text{H})=2.1$ Hz, 2H), 7.02-6.88 (m, 6H), 6.79 (t, $^3\text{J}(\text{H}, \text{H})=8.1$ Hz, 2H), 6.53 (dd, $^3\text{J}(\text{H}, \text{H})=8.4$ Hz, $^4\text{J}(\text{H}, \text{H})=1.2$ Hz, 2H), 6.51 ppm (dd, $^3\text{J}(\text{H}, \text{H})=8.4$ Hz, $^4\text{J}(\text{H}, \text{H})=1.2$ Hz, 2H)。

HRMS(FAB) : m/z 544.1426(M^+), $\text{C}_{36}\text{H}_{20}\text{N}_2\text{O}_4$ 之計算值 : 544.1423。

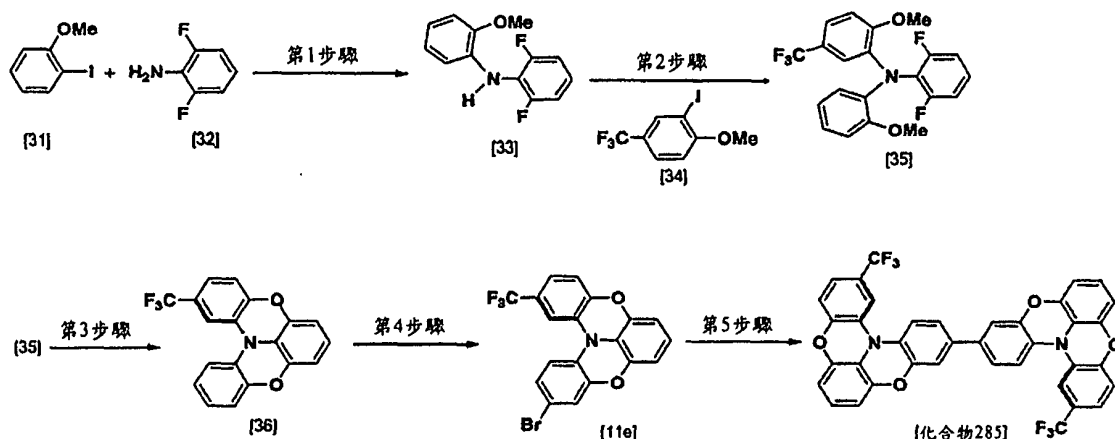
元素分析(%) : $\text{C}_{36}\text{H}_{20}\text{N}_2\text{O}_4$ 之計算值 : C79.40, H3.70, N5.14 ; 實

測值：C79.22, H3.59, N5.17。

(實施例5)

根據以下流程合成化合物285。

[化31]



於乾燥甲苯 (200 ml) 中溶解化合物 31 (21.7 g, 92.5 mmol)、化合物 32 (10.7 g, 82.7 mmol)、 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3 \cdot \text{CHCl}_3$ (1.60 g, 1.59 mmol)、第三丁氧基鈉 (9.22 g, 95.9 mmol)、三第三丁基膦 (2.58 g, 12.7 mmol)，於 100°C 下攪拌 16 小時。過濾不溶物，利用甲苯進行清洗 (150 ml)。其後，於濾液中添加水 (50 ml)，利用甲苯進行萃取 (50 ml \times 3)。利用 Na_2SO_4 乾燥有機層，過濾後，於減壓下濃縮濾液。對所獲得之固體進行矽膠短管柱層析 (CH_2Cl_2 : 己烷 = 1:2, $R_f=0.45$) 後，進而利用矽膠短管柱層析 (CH_2Cl_2 : 己烷 = 1:4, $R_f=0.25$) 進行純化，獲得產率 96% 之作為橙色液體之化合物 33 (18.7 g, 79.4 mmol)。

^1H NMR (300 MHz, CDCl_3 , ppm) δ 7.10-6.93 (m, 3H), 6.92-6.80 (m, 3H), 6.60 (m, 1H), 5.88 (s, 1H), 3.93 (s, 3H)。

^{13}C NMR (75 MHz, CDCl_3 , ppm) δ 157.05 (dd, ^1J (C, F)=246.1 Hz, ^3J (C, F)=5.7 Hz), 147.59, 133.18, 123.56 (t, ^3J (C, F)=9.8 Hz), 120.65, 119.72, 118.95 (t, ^2J (C, F)=15.5 Hz), 112.91 (t, ^4J (C, F)=2.3 Hz), 111.77 (dd, ^2J (C, F)=16.6 Hz, ^4J (C, F)=6.8 Hz), 109.96, 55.47。

HRMS(FAB) : m/z 235.0811(M^+) , $\text{C}_{13}\text{H}_{11}\text{F}_2\text{NO}$ 之計算值 : 235.0809。

元素分析(%) : $\text{C}_{13}\text{H}_{11}\text{F}_2\text{NO}$ 之計算值 : C66.38, H4.71, N5.95 ; 實測值 : C66.27, H4.53, N6.06。

於乾燥鄰二氯苯[ODCB](45 ml)中添加化合物33(3.60 g, 15.3 mmol)、化合物34(5.18 g, 17.2 mmol)、 K_2CO_3 (4.18 g, 30.2 mmol)、銅粉末(1.53 g, 24.1 mmol)，加熱至 180°C ，攪拌50小時。過濾不溶物，利用 CH_2Cl_2 進行清洗(50 ml)。其後，於濾液中添加水，利用 CH_2Cl_2 進行萃取(35 ml \times 3)。利用 Na_2SO_4 乾燥有機層，過濾後，於減壓下濃縮濾液。利用矽膠管柱層析(CH_2Cl_2 : 己烷=1:3, $R_f=0.22$)純化所獲得之固體，獲得產率87%之作為白色固體之化合物35(5.43 g, 13.3 mmol)。

Mp : $57.1\sim 58.1^\circ\text{C}$ 。

^1H NMR (300 MHz, CDCl_3 , ppm) δ 7.28 (d, ^3J (H, H)=9.0 Hz, 1H), 7.14-6.99 (m, 3H), 6.95-6.80 (m, 6H), 3.61 (s, 3H), 3.58 (s, 3H)。

^{13}C NMR (75 MHz, CDCl_3 , ppm) δ 159.00 (dd, $^1\text{J}(\text{C}, \text{F})=249$ Hz, $^3\text{J}(\text{C}, \text{F})=5.7$ Hz), 154.95, 153.28, 136.88, 135.61, 125.15, 124.82, 124.62 (t, $^4\text{J}(\text{C}, \text{F})=9.8$ Hz), 124.28 (t, $^2\text{J}(\text{C}, \text{F})=20.6$ Hz), 124.27 (q, $^1\text{J}(\text{C}, \text{F})=270$ Hz), 123.1 (q, $^2\text{J}(\text{C}, \text{F})=32.1$ Hz), 121.19, 120.84 (q, $^3\text{J}(\text{C}, \text{F})=4.0$ Hz), 120.24 (q, $^3\text{J}(\text{C}, \text{F})=3.5$ Hz), 113.09, 112.11, 111.60 (dd, $^2\text{J}(\text{C}, \text{F})=16.6$ Hz, $^4\text{J}(\text{C}, \text{F})=6.8$ Hz), 56.01, 55.91。

HRMS(FAB) : m/z 409.1097(M^+) , $\text{C}_{21}\text{H}_{16}\text{F}_5\text{NO}_2$ 之計算值 : 409.1101。

元素分析(%) : $\text{C}_{21}\text{H}_{16}\text{F}_5\text{NO}_2$ 之計算值 : C61.62, H3.94, N3.42 ; 實測值 : C61.76, H3.91, N3.4。

於乾燥 CH_2Cl_2 (300 ml) 中溶解化合物 35 (4.09 g, 10.0 mmol), 冷卻至 -78°C 。於其中添加 BBr_3 (2.00 ml, 21.1 mmol) 後, 緩慢地升溫至室溫, 攪拌 3 小時。將溶液添加入水 (100 ml) 中, 利用 CH_2Cl_2 (50 ml \times 3) 進行萃取。利用 Na_2SO_4 進行乾燥, 過濾後, 於減壓下濃縮濾液, 獲得包含 CH_2Cl_2 之 3.75 g 之固體。將所獲得之固體溶解於 DMF (200 ml) 中, 添加 K_2CO_3 (4.15 g, 30.0 mmol), 於 100°C 下攪拌 20 小時。過濾不溶物後, 於減壓下濃縮溶液。將固體溶解於 CH_2Cl_2 (100 ml) 中, 添加 1 M NH_4Cl 水溶液 (100 ml), 利用 CH_2Cl_2 進行萃取 (70 ml \times 3)。利用 Na_2SO_4 乾燥有機層, 過濾後, 於減壓下濃縮濾液。利用矽膠管柱層析 (CH_2Cl_2) 對所獲得之固體進行原點除去後, 利用矽膠管柱層析 (CH_2Cl_2 : 己烷 = 1:4, $R_f=0.58$) 進行純化, 藉此獲得產率

64%之作為白色固體之化合物 36(2.20 g, 6.44 mmol)。

Mp : 129.3~130.2°C。

^1H NMR (300 MHz, CD_2Cl_2 , ppm) δ 7.56 (d, ^4J (H, H)=1.8 Hz, 1H), 7.31 (dd, ^3J (H, H)=7.5 Hz, ^4J (H, H)=2.1 Hz, 1H), 7.76 (dq, ^3J (H, H)=8.4 Hz, ^4J (H, H)=0.9 Hz, 1H), 7.04-6.90 (m, 4H), 6.80 (t, ^3J (H, H)=8.1 Hz, 1H), 6.69 (dd, ^3J (H, H)=8.4 Hz, ^4J (H, H)=0.9 Hz, 1H), 6.53 (dd, ^3J (H, H)=8.1 Hz, ^4J (H, H)=1.2 Hz, 1H)。

元素分析(%) : $\text{C}_{19}\text{H}_{10}\text{F}_5\text{NO}_2$ 之計算值 : C66.87, H2.95, N4.10 ;
實測值 : C66.72, H2.80, N4.07。

於 CHCl_3 (45 ml)、乙酸(45 ml)中溶解化合物 36(1.72 g, 5.03 mmol)、N-溴代丁二醯亞胺(0.993 g, 5.58 mmol)，於室溫下攪拌 18.5 小時。利用飽和 NaHCO_3 水溶液進行中和，利用 CHCl_3 進行萃取(50 ml \times 3)。利用 Na_2SO_4 乾燥有機層，過濾後，於減壓下濃縮濾液。利用矽膠管柱層析(CH_2Cl_2)對所獲得之固體進行原點除去後，進而利用矽膠管柱層析(CH_2Cl_2 : 己烷=1:2, R_f =0.78)進行純化，獲得產率 90%之作為白色固體之化合物 11e(1.90 g, 4.51 mmol)。

Mp : 128.6~130.3°C。

^1H NMR (300 MHz, CDCl_3 , ppm) δ 7.48 (s, 1H), 7.19-7.06 (m, 4H), 6.96 (d, ^3J (H, H)=8.4 Hz, 1H), 6.80 (t, ^3J (H, H)=8.1 Hz, 1H), 6.53 (d, ^3J (H, H)=8.4 Hz, 2H)。

HRMS(FAB) : m/z 418.9770(M^+) ; $\text{C}_{19}\text{H}_9\text{BrF}_3\text{NO}_2$ 之計算值 : 418.9769。

元素分析(%)：C₁₉H₉BrF₃NO₂之計算值：C54.31, H2.16, N3.33；實測值：C54.41, H2.05, N3.43。

於乾燥四氫呋喃[THF](30 ml)中溶解化合物11e(603 mg, 1.44 mmol)、Ni(cod)₂(236 mg, 0.858 mmol)、1,5-環辛二烯(0.23 ml, 1.87 mmol)、2,2'-聯吡啶(270 mg, 1.73 mmol)，於60°C下加熱25小時。於減壓下濃縮溶液，使用鄰二氯苯使其吸附於矽膠，利用熱鄰二氯苯進行萃取後，於減壓下濃縮。利用己烷清洗固體，獲得產率92%之作為黃色固體之化合物285(449 mg, 0.660 mmol)。

Mp：287.5~289.2°C。

¹H NMR (600 MHz, CD₂Cl₂, ppm) δ 7.60 (d, ⁴J (H, H)=1.2 Hz, 2H), 7.37 (d, ³J (H, H)=8.4 Hz, 2H), 7.23 (dd, ³J (H, H)=8.4 Hz, ⁴J (H, H)=1.8 Hz, 2H), 7.19 (dq, ³J (H, H)=8.4 Hz, ⁴J (H, F)=0.6 Hz, 2H), 7.17 (d, ⁴J (H, H)=2.4 Hz, 2H), 7.00 (dd, ³J (H, H)=8.4 Hz, ⁴J (H, H)=1.8 Hz, 2H), 6.84 (t, ³J (H, H)=7.8 Hz, 2H), 6.59 (dd, ³J (H, H)=8.4 Hz, ⁴J (H, H)=1.2 Hz, 2H), 6.56 (dd, ³J (H, H)=8.4 Hz, ⁴J (H, H)=1.2 Hz, 2H)。

¹³C NMR (150 MHz, CD₂Cl₂, ppm) δ 149.96, 147.56, 145.36, 145.21, 135.80, 130.14, 127.71, 126.24 (q, ²J (C, F)=33.0 Hz), 124.76, 124.27 (q, ¹J (C, F)=270 Hz), 122.02, 120.90 (q, ³J (C, F)=4.5 Hz), 120.36, 117.98, 115.62, 115.10, 112.09, 111.84 (q, ³J (C, F)=3.0 Hz), 111.60。

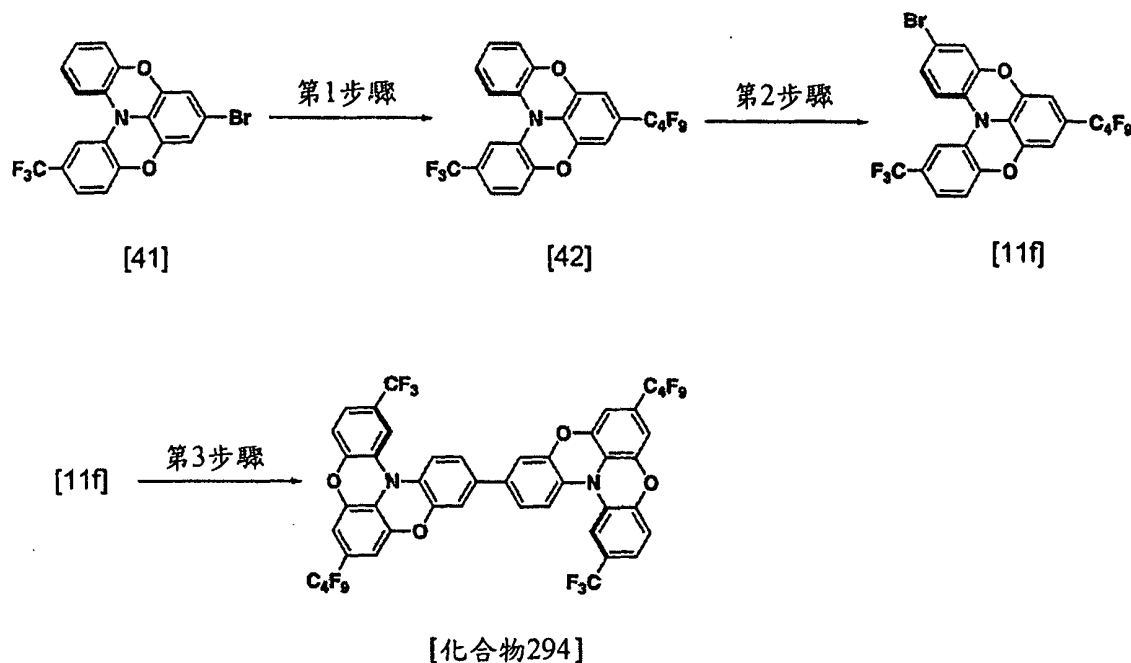
HRMS(FAB)：m/z 680.1164(M⁺)；C₃₈H₁₈F₆N₂O₄之計算值：680.1171。

元素分析(%)：C₃₈H₁₈F₆N₂O₄之計算值：C67.06, H2.67, N4.12；
實測值：C67.30, H2.59, N4.19。

(實施例6)

根據以下流程合成化合物294。

[化32]



於預先藉由氫氣起泡(2小時)而脫氣之乾燥二甲亞碸[DMSO](5 ml)中溶解化合物41(121 mg, 0.288 mmol)、銅粉末(56.3 mg, 0.886 mmol)，添加全氟丁基碘化物(114 mg, 0.329 mmol)，於110°C下加熱、攪拌49小時。過濾不溶物，添加水(5 ml)，利用CH₂Cl₂進行萃取(20 ml×3)，利用水加以清洗。利用Na₂SO₄乾燥有機層，過濾後，於減壓下濃縮濾液。利用矽膠管柱層析(CH₂Cl₂：己烷=1:5，R_f=0.80)純化所獲得之固體，獲得產率69%之作為黃色液體之化合物42(112 mg, 0.200 mmol)。

^1H NMR (300 MHz, CDCl_3 , ppm) δ 7.55 (s, 1H), 7.29 (d, ^3J (H, H)=8.1 Hz, 1H), 7.20 (d, ^3J (H, H)=8.4 Hz, 7H), 7.08-6.90 (m, 4H), 6.75 ppm (d, ^3J (H, H)=6.9 Hz, 2H)。

HRMS(FAB) : m/z 559.0449(M^+) ; $\text{C}_{23}\text{H}_9\text{F}_{12}\text{NO}_2$ 之計算值 : 559.0442。

於 CHCl_3 (5 ml)、乙酸 (5 ml) 中溶解化合物 42 (106 mg, 0.190 mmol)、N-溴代丁二醯亞胺 (36.4 mg, 0.204 mmol)，於室溫下攪拌 14 小時。其後，加熱至 60°C ，攪拌 6.5 小時。利用飽和 NaHCO_3 水溶液將反應溶液中和，利用 CHCl_3 對水層進行萃取 (15 ml \times 3)。利用 Na_2SO_4 乾燥有機層，過濾後，於減壓下濃縮濾液。利用矽膠管柱層析 (己烷， $R_f=0.40$) 純化所獲得之固體，獲得產率 97% 之作為白色固體之化合物 11f (117.3 mg, 0.184 mmol)。

Mp : $121.6\sim 122.8^\circ\text{C}$ 。

^1H NMR (300 MHz, CDCl_3 , ppm) δ 7.48 (s, 1H), 7.23 (d, ^3J (H, H)=8.7 Hz, 1H), 7.16 (s, 2H), 7.10 (s, 1H), 6.99 (d, ^3J (H, H)=8.4 Hz, 1H), 6.76 ppm (s, 2H)。

HRMS(FAB) : m/z 638.9537(M^+) ; $\text{C}_{23}\text{H}_8\text{BrF}_{12}\text{NO}_2$ 之計算值 : 638.9529。

於乾燥四氫呋喃 [THF] (2.5 ml) 中溶解化合物 11f (64.9 mg, 0.102 mmol)、 $\text{Ni}(\text{cod})_2$ (17.4 mg, 0.0633 mmol)、1,5-環辛二烯 (15 ml, 0.722 mmol)、2,2'-聯吡啶 (19.0 mg, 0.123 mmol)，於 60°C 下加熱 72 小時。於減壓下濃縮溶液，使用鄰二氯苯使其吸附於矽膠，利用熱鄰二氯苯進行萃取

後，於減壓下濃縮。利用己烷清洗固體，獲得產率61%之作為黃色固體之化合物294(34.8 mg, 0.0312 mmol)。

Mp : 246.5~248.3°C。

^1H NMR (300 MHz, CD_2Cl_2 , ppm) δ 7.61 (d, ^4J (H, H)=1.5 Hz, 2H), 7.39 (d, ^3J (H, H)=8.4 Hz, 2H), 7.27 (dd, ^3J (H, H)=8.4 Hz, ^4J (H, H)=2.1 Hz, 2H), 7.25 (dq, ^3J (H, H)=8.1 Hz, ^4J (H, F)=2.1 Hz, 2H), 7.19 (d, ^4J (H, H)=2.4 Hz, 2H), 7.03 (dd, ^3J (H, H)=8.4 Hz, ^4J (H, H)=1.8 Hz, 2H), 6.80 ppm (dd, ^3J (H, H)=10.2 Hz, ^4J (H, H)=1.8 Hz, 4H)。

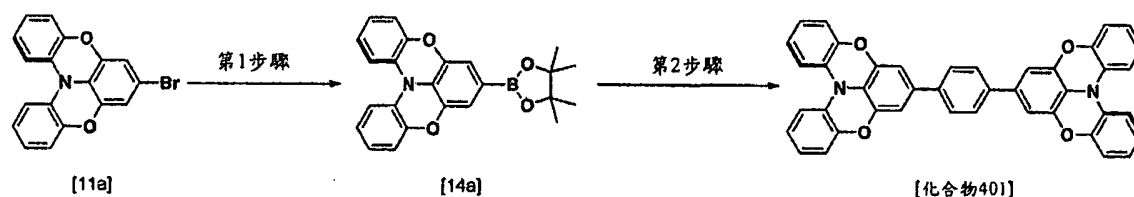
HRMS(FAB) : m/z 1116.0756(M^+) ; $\text{C}_{46}\text{H}_{16}\text{F}_{24}\text{N}_2\text{O}_4$ 之計算值 : 1116.0727。

元素分析 (%) : $\text{C}_{46}\text{H}_{16}\text{F}_{24}\text{N}_2\text{O}_4$ 之計算值 : C49.48, H1.44, N2.51 ; 實測值 : C49.58, H1.45, N2.74。

(實施例7)

根據以下流程合成化合物401。

[化33]



於乾燥四氫呋喃[THF](100 ml)中溶解化合物11a(1.06 g, 3.01 mmol)，冷卻至 -78°C 。滴加正丁基鋰(己烷中，1.58 M, 2.0 ml, 3.16 mmol)，攪拌1小時。其後添加2-異丙氧基

-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧雜硼烷(0.65 ml, 3.19 mmol), 於室溫下攪拌 5 小時。於減壓下濃縮溶液, 將其溶解於 CH_2Cl_2 (50 ml) 中。添加水, 利用 CH_2Cl_2 對水層進行萃取 (25 ml \times 3)。利用 Na_2SO_4 乾燥有機層, 過濾後, 於減壓下濃縮濾液。利用凝膠排除層析法(甲苯)純化所獲得之固體, 獲得產率 87% 之作為白色固體之化合物 14a(1.04 g, 2.61 mmol)。

^1H NMR (300 MHz, CDCl_3 , ppm) δ 7.32 (dd, $^3\text{J}(\text{H}, \text{H})=6.6$ Hz, $^4\text{J}(\text{H}, \text{H})=2.4$ Hz, 2H), 6.96-6.85 ppm (m, 8H)。

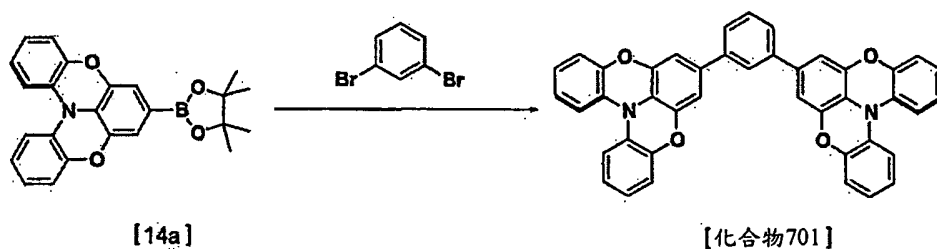
將甲苯與蒸餾水分別藉由氫氣起泡而脫氣 4 小時。將 1,4-二溴苯(34.5 mg, 0.146 mmol)、化合物 14a(126 mg, 0.315 mmol)、 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3\cdot\text{CHCl}_3$ (4.92 mg, 0.00475 mmol)、2-雙環己基膦-2',6'-二甲氧基聯苯 [SPhos](7.76 mg, 0.0189 mmol)、 K_3PO_4 (92.6 mg, 0.436 mmol) 添加入舒倫克管中, 進行氫氣置換。添加藉由氣氫起泡(4 小時)經脫氣之甲苯(5 ml)、蒸餾水(0.5 ml), 於 110°C 下攪拌 39 小時。於減壓下濃縮溶液, 使用鄰二氯苯使其吸附於矽膠, 利用熱鄰二氯苯進行萃取後, 於減壓下濃縮。利用己烷清洗固體, 獲得產率 42% 之作為黃色固體之化合物 401(38.4 mg, 0.0619 mmol)。

^1H NMR (300 MHz, 1/1 $\text{CD}_2\text{Cl}_2/\text{CS}_2$, ppm) δ 7.55 (s, 4H), 7.37 (dd, $^3\text{J}(\text{H}, \text{H})=7.5$ Hz, $^4\text{J}(\text{H}, \text{H})=1.8$ Hz, 4H), 7.02-6.90 (m, 12H), 6.79 ppm (s, 4H)。

(實施例 8)

根據以下流程合成化合物 701。

[化 34]



將 1,3-二溴苯 (18 μ l, 0.150 mmol)、化合物 14a(125 mg, 0.312 mmol)、 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3\text{-CHCl}_3$ (4.90 mg, 0.00473 mmol)、2-雙環己基膦-2',6'-二甲氧基聯苯 [SPhos](7.53 mg, 0.0183 mmol)、 K_3PO_4 (96.0 mg, 0.452 mmol) 添加入舒倫克管中，進行氫氣置換。添加藉由氫氣起泡(2.5小時)經脫氣之甲苯(6 mL)及蒸餾水(0.6 mL)，於 110°C 下攪拌 42 小時。於減壓下濃縮反應溶液，使用鄰二氯苯使其吸附於矽膠，利用熱鄰二氯苯進行萃取後，於減壓下濃縮。利用己烷清洗所獲得之固體，獲得產率 90% 之作為淡黃色固體之化合物 701(83.9 mg, 0.135 mmol)。

^1H NMR (300 MHz, 1/1 $\text{CD}_2\text{Cl}_2/\text{CS}_2$, ppm) δ 7.62 (s, 1H), 7.46 (d, $^3\text{J}(\text{H}, \text{H})=1.2$ Hz, 2H), 7.37 (dd, $^3\text{J}(\text{H}, \text{H})=6.6$ Hz, $^4\text{J}(\text{H}, \text{H})=1.2$ Hz, 4H), 7.35 (t, $^3\text{J}(\text{H}, \text{H})=1.2$ Hz, 1H), 7.02-6.91 (m, 12H)。

(試驗例 1)

對實施例 1~4 中所獲得之化合物 1、化合物 2、化合物 24、化合物 201(二聚物)與作為比較化合物之化合物 A~C(單體)進行循環伏安法測定，將結果示於圖 1 及圖 2。

再者，循環伏安法係使用正Bu⁴N⁺PF⁶⁻(0.1 mol/l)作為支持電解質，使用Ag/Ag⁺作為參照電極，使用玻璃石墨作為作用極，使用Pt作為對極，於CH₂Cl₂溶液中進行。根據循環伏安法之結果確認，化合物1、化合物24、化合物201顯示兩階段之可逆氧化波，於此測定條件下，穩定地生成對應之自由基陽離子及雙陽離子，暗示表現出作為電洞輸送材料之優異特性。並且確認，化合物2除了兩階段之可逆氧化波，亦可逆地觀測到對應於第3、4階段之二電子氧化之氧化波，於此測定條件下，亦穩定地生成對應之四陽離子種類，暗示為優異之電洞輸送材料。並且確認，化合物1、化合物2、化合物24、化合物201根據循環伏安法之測定結果與光吸收光譜所估算出之HOMO均較高，因此電洞注入性亦優異(參照圖3)。再者，圖3中之 α -NPD與TPD之資料係基於Appl. Phys. Lett., 2007, 90, 183503者。

(實施例9)

使用化合物1製作薄膜，根據SCLC(Space Charge Limited Current, 空間電荷限制電流)法(Appl. Phys. Lett. 2007, 90, 203512)測定電洞移動率，結果為 $1.2\sim 2.0\times 10^{-4}$ cm²/Vs。又，使用化合物1、化合物24、化合物201、 α -NPD，根據TOF法(Time-of-flight法)測定電洞移動率，將其結果示於圖4。該等結果表明，本發明之化合物具有與有機電致發光元件中之作為代表性電洞輸送材料之 α -NPD同等程度之電洞移動率。又，根據TOF法測定化合物201之電子移動率，將其結果與電洞移動率之測定結果一併示

於圖5。該結果顯示，化合物201之電子移動率比電洞移動率更高，本發明之化合物中包含優異之雙極材料。

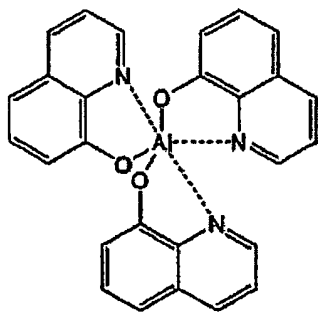
(實施例10)

於本實施例中，製造圖6所示之本發明之有機電致發光元件(a)與比較用之有機電致發光元件(b)。

於附有ITO電極之玻璃基板之ITO電極上依序蒸鍍10 nm之化合物1、50 nm之 α -NPD、50 nm之具有下述結構之Alq₃、LiF及Al，藉此製造有機電致發光元件(a)(參照圖6(a))。

不形成包含化合物1之電洞注入層，除此以外以與上述有機電致發光元件(a)相同之步驟製造有機電致發光元件(b)(參照圖6(b))。

[化35]



Alq₃

所製造之有機電致發光元件(a)與有機電致發光元件(b)之結構如下所示。

元件(a)：ITO/化合物1(10 nm)/ α -NPD(50 nm)/Alq₃(50 nm)/LiF/Al

元件(b)：ITO/ α -NPD(50 nm)/Alq₃(50 nm)/LiF/Al

對於所製造之有機電致發光元件(a)與有機電致發光元件

(b)，測定電流密度與電流效率之關係，結果獲得圖7所示之結果。由此確認，藉由使用本發明之通式[1]所表示之化合物1，電流效率提高。

(實施例11)

以與實施例10相同之方式製造具有以下結構之有機電致發光元件(c)及(d)。該等有機電致發光元件之電洞輸送材料不同。

元件(c)：ITO/化合物1(60 nm)/Alq₃(50 nm)/LiF/Al

元件(d)：ITO/ α -NPD(60 nm)/Alq₃(50 nm)/LiF/Al

對於所製造之有機電致發光元件(c)及(d)，將電流值固定為2 mA，經過2000小時或其以上後測定電壓與亮度之變化。將電壓變化之測定結果示於圖8，將亮度變化之測定結果示於圖9。根據圖8確認，於使用本發明之通式[1]所表示之化合物1之情形時，將電壓之增加抑制在較小水平。此結果表明，若使用化合物1，則可抑制由元件劣化引起之電阻上升。又，根據圖9確認，於使用化合物1之情形時，將元件之亮度下降抑制在較小水平。該等結果表明，化合物1對於元件之長壽命化有效果。

(實施例12)

使用化合物201代替實施例10中所使用之化合物1，以與實施例10相同之方式製造具有以下結構之有機電致發光元件(e)及(f)。又，作為比較，亦製造具有以下結構之有機電致發光元件(g)。於該等有機電致發光元件中，化合物201膜與 α -NPD膜之合計膜厚設為固定為60 nm，而改變化

合物 201 膜之膜厚。

元件(e)：ITO/化合物201(30 nm)/ α -NPD(30 nm)/Alq₃(50 nm)/LiF/Al

元件(f)：ITO/化合物201(10 nm)/ α -NPD(50 nm)/Alq₃(50 nm)/LiF/Al

元件(g)：ITO/ α -NPD(60 nm)/Alq₃(50 nm)/LiF/Al

對於所製造之有機電致發光元件(e)~(g)，測定電流密度與電流效率之關係，結果獲得圖10所示之結果。確認藉由形成化合物201膜作為針對 α -NPD之電洞注入層，確認到單位電流之亮度提高，電流效率提高。又，確認藉由增加化合物201膜之膜厚，而單位電流之亮度進一步提高，電流效率進一步提高。該結果表明，化合物201作為電洞輸送性材料亦優異。

[產業上之可利用性]

根據以上說明得知，通式[1]所表示之化合物之非晶狀態穩定而不易結晶化，並且具有作為電荷輸送材料之優異特性。因此，藉由使用通式[1]所表示之化合物，可提供一種高效率、抑制耗費電力或發熱量、亦可實現長壽命化之有機電致發光元件或有機薄膜太陽電池等有機裝置。因此，本發明於產業上之可利用性較高。

【圖式簡單說明】

圖1係表示本發明之化合物之循環伏安法之測定結果之圖表。

圖2係表示比較化合物A~C之循環伏安法之測定結果之圖表。

圖3係表示HOMO(Highest Occupied Molecular Orbital，

最高佔據分子軌道)與LUMO(Lowest Unoccupied Molecular Orbital，最低非佔據分子軌道)之軌道能階之圖。

圖4係表示實施例9中之藉由TOF(Time Of Flight，飛行時間)法之電洞移動率之測定結果之圖表。

圖5係表示實施例9中之藉由TOF法之化合物201之測定結果之圖表。

圖6(a)、(b)係表示實施例10中所製造之有機電致發光元件之概略剖面圖。

圖7係表示實施例10中之有機電致發光元件之電流密度與電流效率之關係之圖表。

圖8係表示實施例11中之有機電致發光元件之時間與電壓之關係之圖表。

圖9係表示實施例11中之有機電致發光元件之時間與亮度之關係之圖表。

圖10係表示實施例12中之有機電致發光元件之電流密度與電流效率之關係之圖表。

【主要元件符號說明】

- | | |
|---|------------------|
| 1 | 附有ITO電極之玻璃基板 |
| 2 | 化合物1 |
| 3 | α -NPD |
| 4 | Alq ₃ |
| 5 | LiF |
| 6 | Al |

發明專利說明書

(本說明書格式、順序及粗體字，請勿任意更動，※記號部分請勿填寫)

※申請案號： 101107229

※申請日： 2012.08.31

※IPC 分類：C07D 493/04 (2006.01)

H01L 51/50 (2006.01)

H05B 33/14 (2006.01)

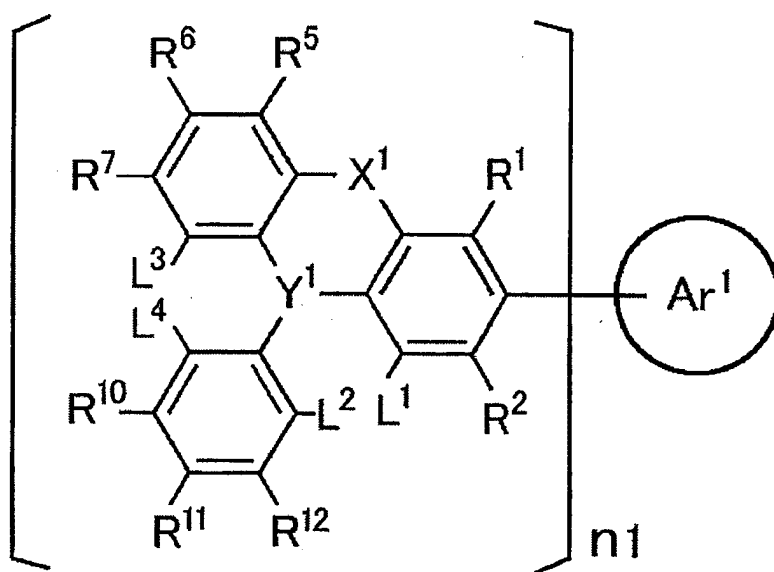
H01M 14/00 (2006.01)

一、發明名稱：(中文/英文)

新穎化合物、電荷輸送材料及有機裝置

二、中文發明摘要：

○ 下述通式所表示之化合物之熱穩定性較高，具有作為電荷輸送材料之優異特性。



[Ar¹表示單鍵、苯環等；X¹表示經由氧原子、硫原子、碳原子、氮原子、磷原子或矽原子而連結之連結基；L¹與L²、L³與L⁴中之任一者相互連結，表示經由氧原子、硫原子、碳原子、氮原子、磷原子或矽原子而連結之連結基，L¹與L²、L³與L⁴中之另一者表示氫原子或取代基；Y¹表示

經由氮原子、硼原子或磷原子而連結之連結基； R^1 、 R^2 、 $R^5 \sim R^7$ 及 $R^{10} \sim R^{12}$ 表示氮原子或取代基； $n1$ 表示2以上之整數]。

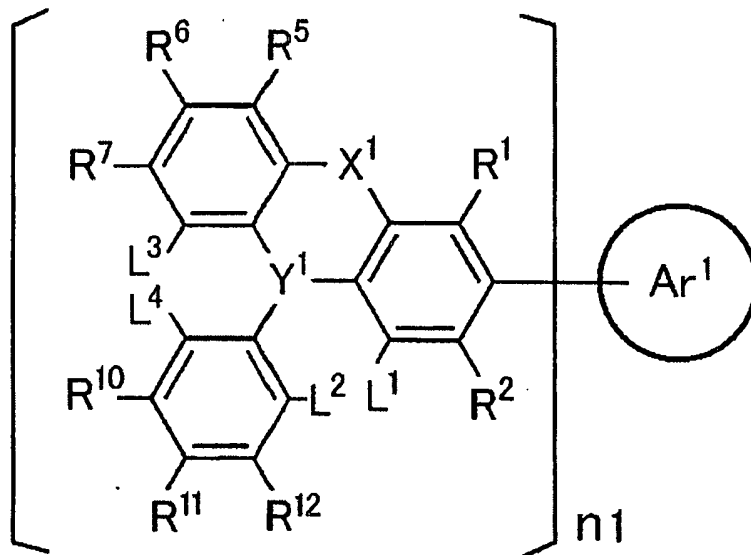
三、英文發明摘要：

七、申請專利範圍：

1. 一種以下述通式[1]表示之化合物，

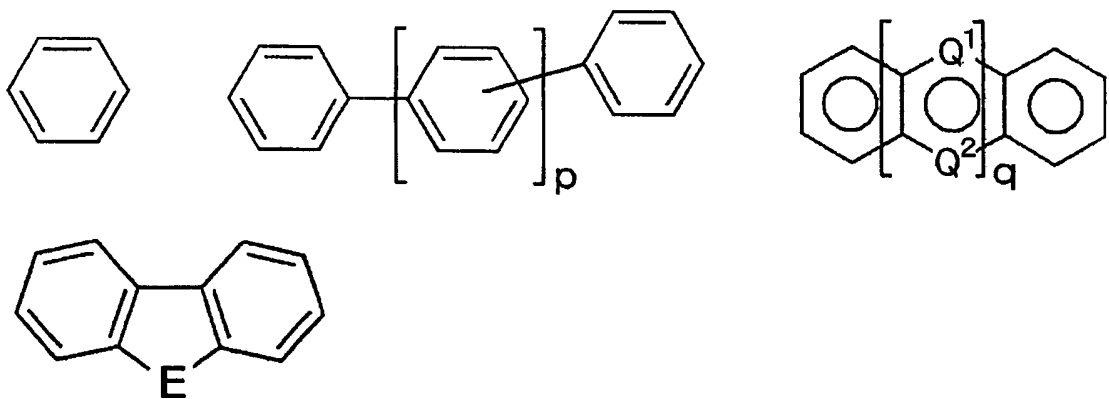
[化1]

通式[1]



[於通式[1]中，Ar¹表示單鍵或下述任一之結構；

[化2]



Q¹及Q²均為=CH-，或者Q¹為單鍵、Q²為-CH=CH-，或者Q¹為-CH=CH-、Q²為單鍵；p表示0~3中任一整數；q表

示0~3中任一整數；E表示氧原子、硫原子，或者表示經由碳原子、矽原子、氮原子、磷原子、硼原子或硫原子而連結之原子團；

X^1 表示經由選自由氧原子、硫原子、碳原子、氮原子、磷原子及矽原子所組成群中之1種原子而連結之連結基；

Y^1 表示經由選自由氮原子、硼原子及磷原子所組成群中之1種原子而連結之連結基；

L^1 與 L^2 、 L^3 與 L^4 中之任一者相互鍵結，表示經由選自由氧原子、硫原子、碳原子、氮原子、磷原子及矽原子所組成群中之1種原子而連結之連結基， L^1 與 L^2 、 L^3 與 L^4 中之另一者各自獨立，表示氫原子或取代基；

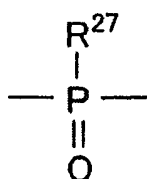
R^1 、 R^2 、 $R^5\sim R^7$ 及 $R^{10}\sim R^{12}$ 各自獨立，表示氫原子或取代基， R^5 與 R^6 、 R^6 與 R^7 、 R^{10} 與 R^{11} 、 R^{11} 與 R^{12} 亦可相互鍵結而形成連結基；

$n1$ 表示2以上之任一整數，分子內所存在之 $n1$ 個之 X^1 、 Y^1 、 R^1 、 R^2 、 $R^5\sim R^7$ 及 $R^{10}\sim R^{12}$ 分別相互可相同亦可不同；

於Ar為單鍵時，鄰接之2個 R^1 彼此可相互鍵結而形成連結基，鄰接之2個 R^2 彼此可相互鍵結而形成連結基]。

2. 如請求項1之化合物，其中通式[1]中之 L^1 與 L^2 、 L^3 與 L^4 中之任一者所形成之連結基、與 X^1 所表示之連結基各自獨立，為 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-SO_2-$ 、 $>CR^{21}R^{22}$ 、 $>C=O$ 、 $>C=CR^{23}R^{24}$ 、 $>C=NR^{25}$ 、 $>NR^{26}$ 、

[化3]



或 $>\text{SiR}^{28}\text{R}^{29}$,

Y^1 為 $>\text{N-}$ 、 $>\text{B-}$ 、 $>\text{P-}$ 或 $>\text{P(=O)-}$,

R^1 、 R^2 、 R^{21} 、 R^{22} 、 R^{28} 及 R^{29} 各自獨立，為氫原子、經取代或未經取代之烷基、或經取代或未經取代之烷氧基，

$\text{R}^5 \sim \text{R}^7$ 及 $\text{R}^{10} \sim \text{R}^{12}$ 各自獨立，為氫原子、經取代或未經取代之烷基、經取代或未經取代之烷氧基、經取代或未經取代之芳基、或者經取代或未經取代之芳氧基，或者 R^5 與 R^6 、 R^6 與 R^7 、 R^{10} 與 R^{11} 、 R^{11} 與 R^{12} 相互鍵結而形成連結基，

$\text{R}^{23} \sim \text{R}^{27}$ 各自獨立，為氫原子、經取代或未經取代之烷基、或經取代或未經取代之芳基。

3. 如請求項1之化合物，其中通式[1]中之 L^1 與 L^2 、 L^3 與 L^4 中之任一者所形成之連結基、與 X^1 所表示之連結基為 $-\text{O}-$ 。
4. 如請求項1至3中任一項之化合物，其中通式[1]中之 Y^1 為 $>\text{N-}$ 。
5. 如請求項1至3中任一項之化合物，其中通式[1]中之 R^1 及 R^2 為氫原子。

6. 如請求項1至3中任一項之化合物，其中通式[1]中之 R^5 、 R^7 、 R^{10} 及 R^{12} 為氫原子， R^6 及 R^{11} 為氫原子或烷氧基。
7. 如請求項1至3中任一項之化合物，其中分子為非對稱。
8. 一種電荷輸送材料，其包含如請求項1至7中任一項之化合物。
9. 一種有機裝置，其使用如請求項1至7中任一項之化合物。
10. 一種有機電致發光元件，其使用如請求項1至7中任一項之化合物。
11. 一種光電轉換元件，其使用如請求項1至7中任一項之化合物。
12. 一種有機薄膜太陽電池，其使用如請求項1至7中任一項之化合物。

八、圖式：

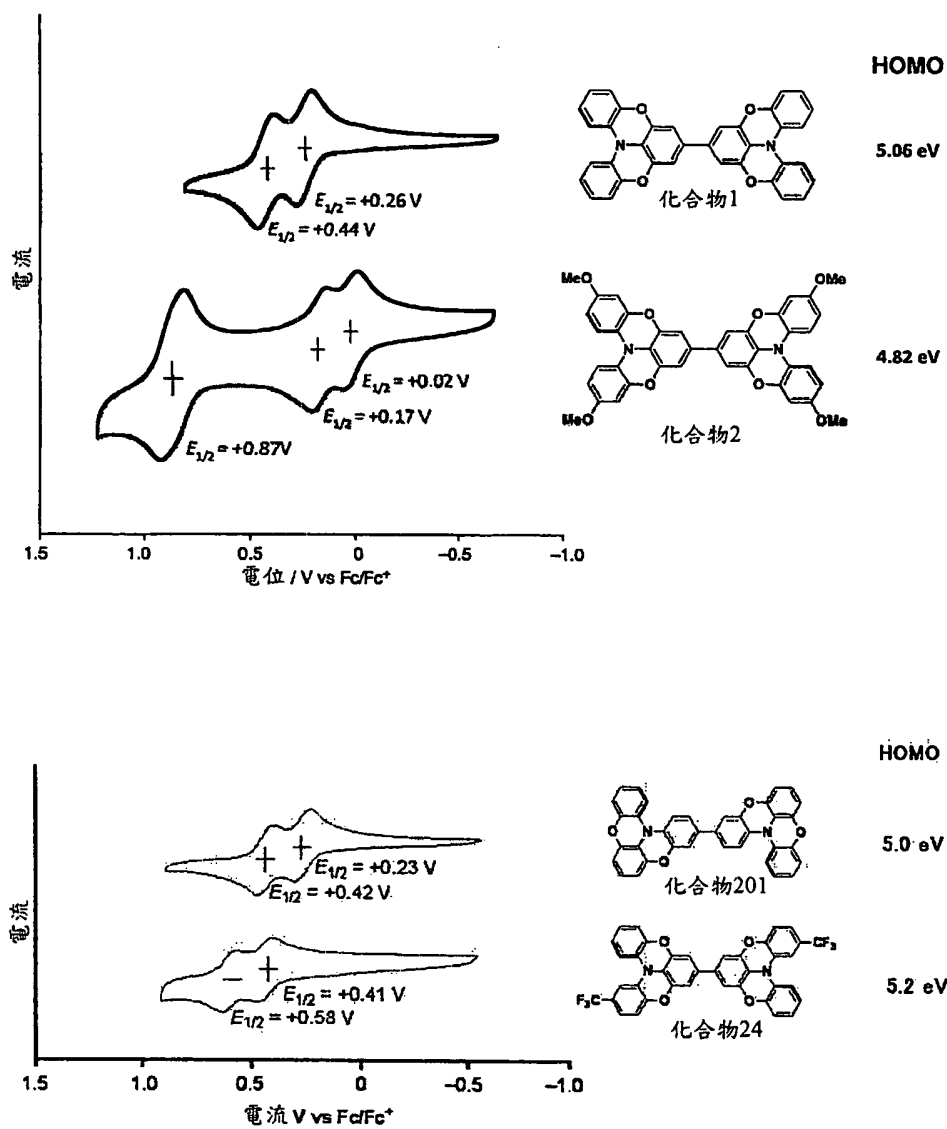


圖 1

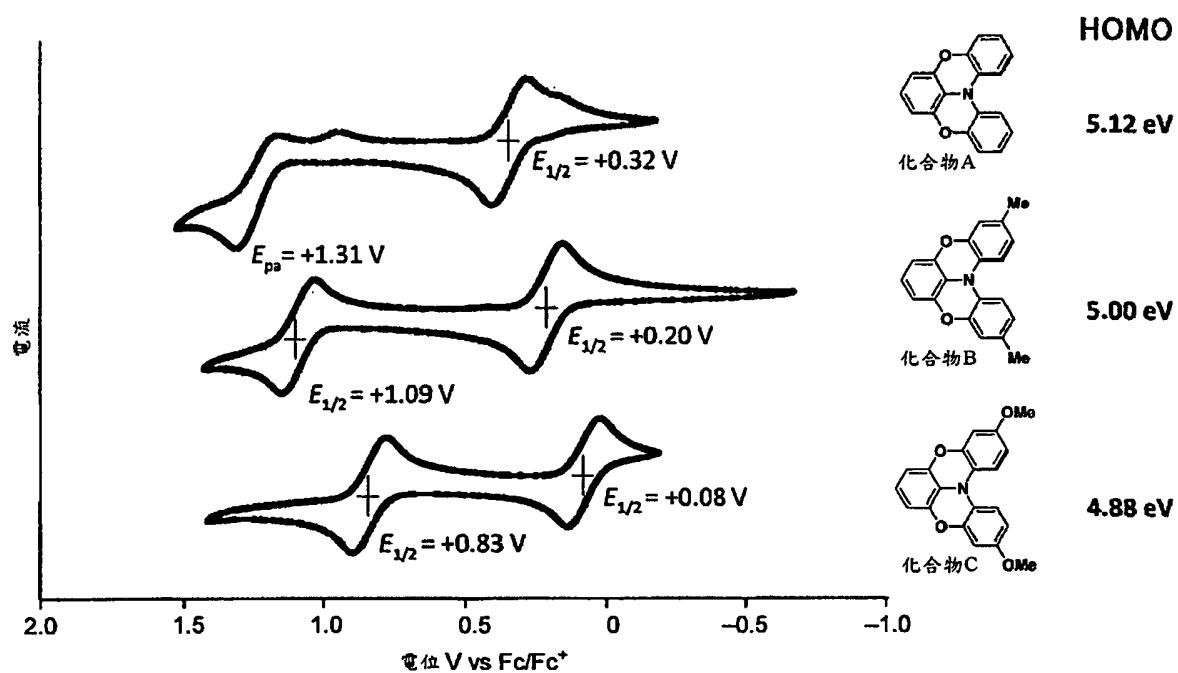


圖2

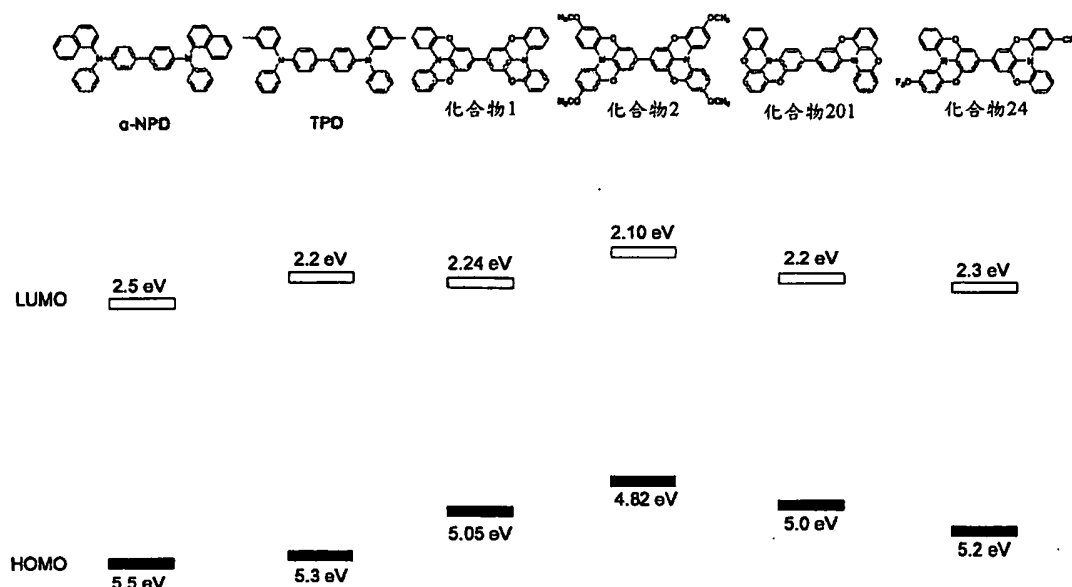


圖3

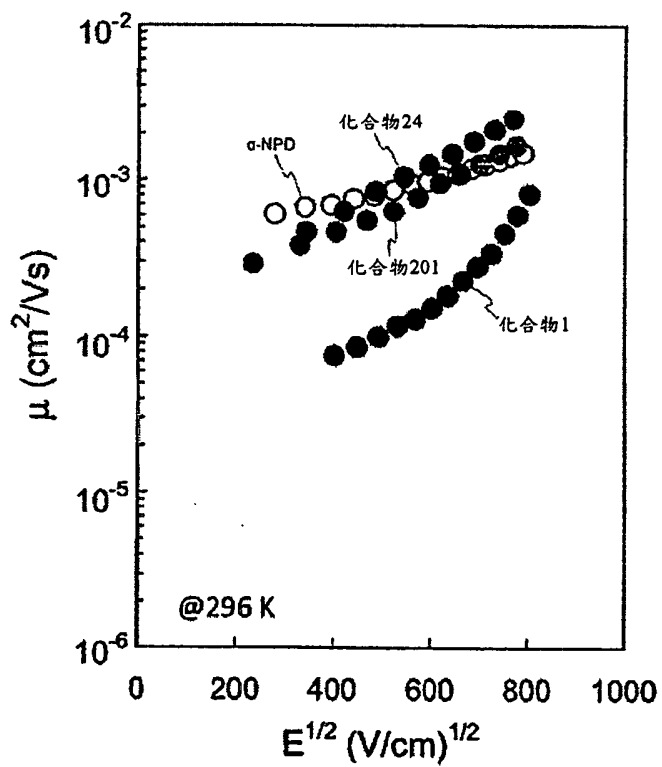


圖4

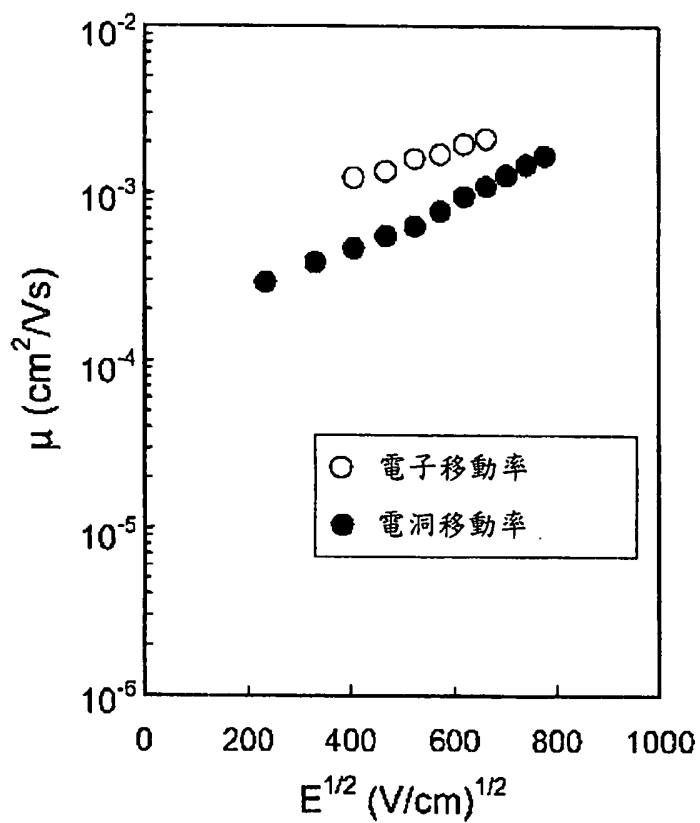


圖5

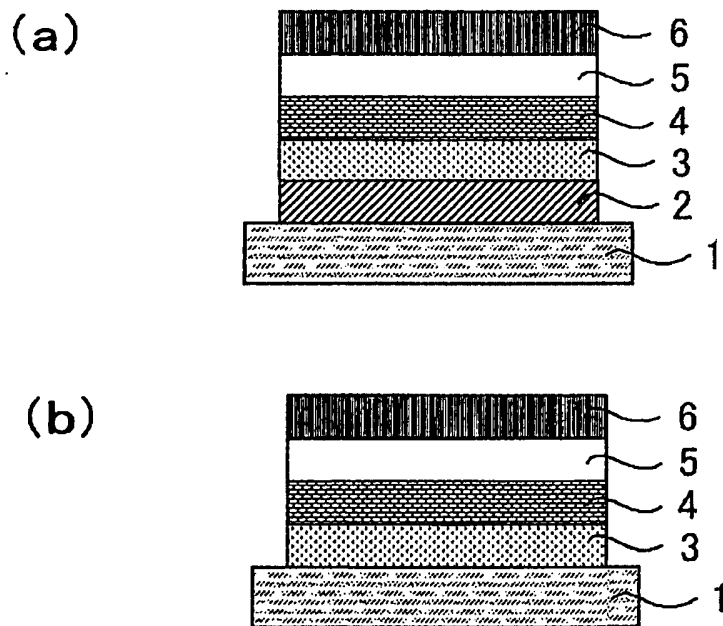


圖6

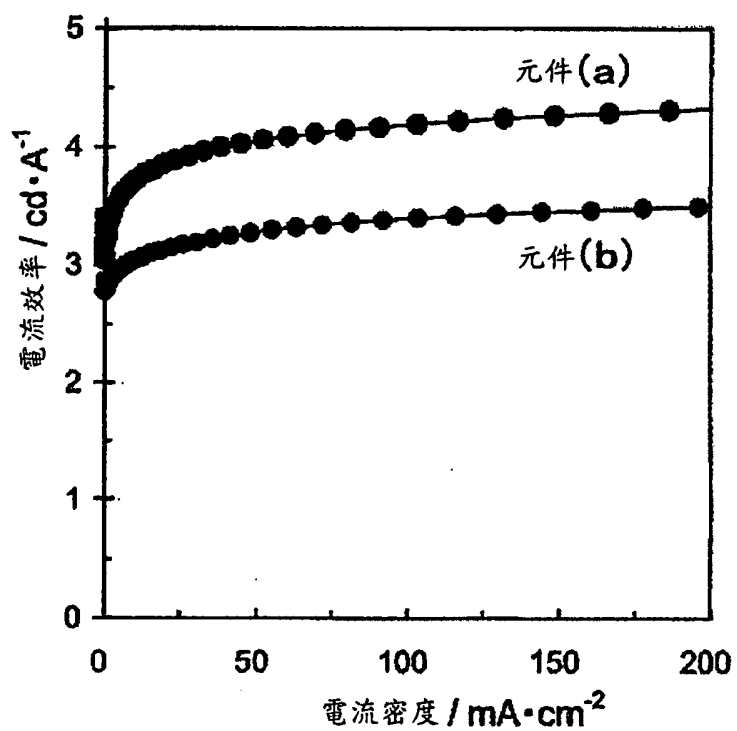


圖7

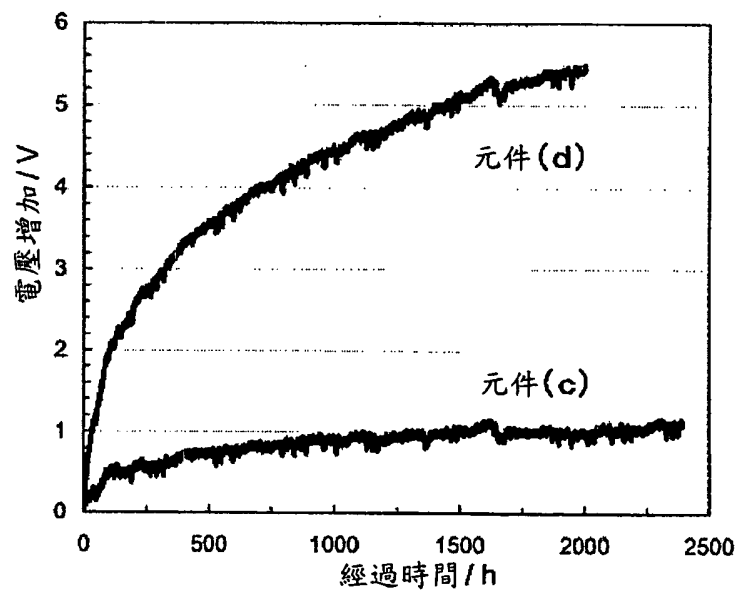


圖8

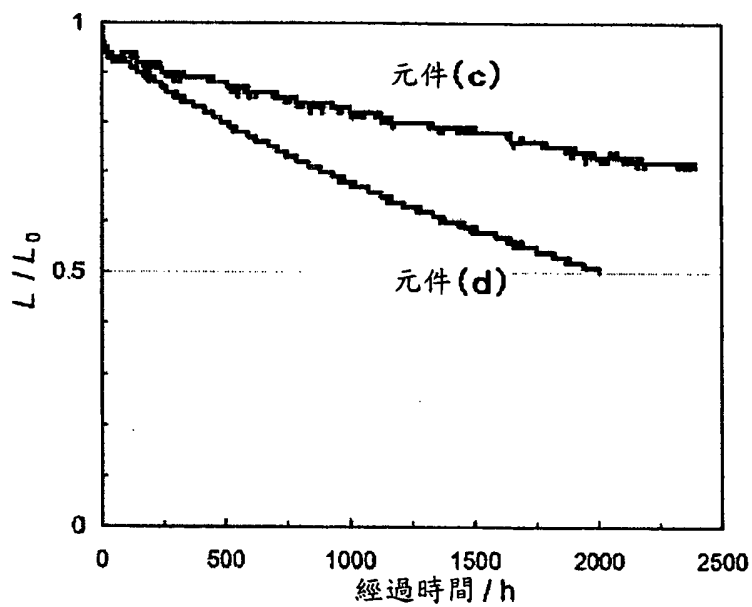


圖9

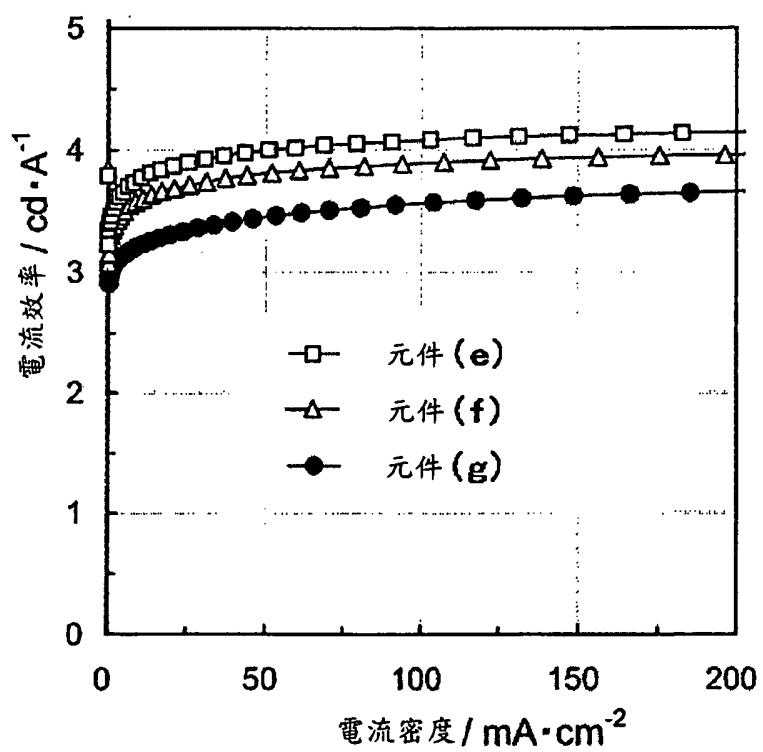


圖 10

四、指定代表圖：

(一)本案指定代表圖為：第(1)圖。

(二)本代表圖之元件符號簡單說明：

(無元件符號說明)

五、本案若有化學式時，請揭示最能顯示發明特徵的化學式：

