

(12) 特許協力条約に基づいて公開された国際出願

(19) 世界知的所有権機関
国際事務局

(43) 国際公開日
2012年9月7日(07.09.2012)



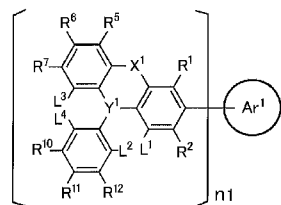
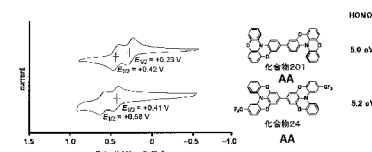
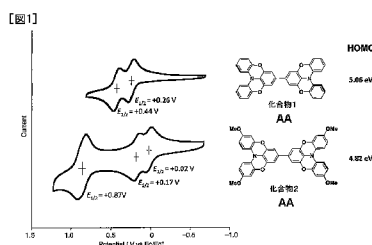
(10) 国際公開番号
WO 2012/118164 A1

- (51) 国際特許分類:
C07D 519/00 (2006.01) H01L 51/42 (2006.01)
C09K 11/06 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)
- (21) 国際出願番号: PCT/JP2012/055287
- (22) 国際出願日: 2012年3月2日(02.03.2012)
- (25) 国際出願の言語: 日本語
- (26) 国際公開の言語: 日本語
- (30) 優先権データ:
特願 2011-046888 2011年3月3日(03.03.2011) JP
特願 2011-193294 2011年9月5日(05.09.2011) JP
- (71) 出願人(米国を除く全ての指定国について): 国立
大学法人九州大学(KYUSHU UNIVERSITY NA-
TIONAL UNIVERSITY CORPORATION) [JP/JP]; 〒
8128581 福岡県福岡市東区箱崎六丁目10番1
号 Fukuoka (JP).
- (72) 発明者; および
- (75) 発明者/出願人(米国についてのみ): 若宮 淳志
(WAKAMIYA Atsushi) [JP/JP]; 〒6110011 京都府宇
治市五ヶ庄 国立大学法人京都大学化学研究所
内 Kyoto (JP). 西村 秀隆(NISHIMURA Hidetaka)
[JP/JP]; 〒6110011 京都府宇治市五ヶ庄 国立大
学法人京都大学化学研究所内 Kyoto (JP). 村田
靖次郎(MURATA Yasujiro) [JP/JP]; 〒6110011 京
都府宇治市五ヶ庄 国立大学法人京都大学化学研
究所内 Kyoto (JP). 福島 達也(FUKUSHIMA Tat-
suya) [JP/JP]; 〒6110011 京都府宇治市五ヶ庄 国
立大学法人京都大学化学研究所内 Kyoto (JP). 梶
弘典(KAJI Hironori) [JP/JP]; 〒6110011 京都府宇
治市五ヶ庄 国立大学法人京都大学化学研究所内
Kyoto (JP).
- (74) 代理人: 特許業務法人特許事務所サイクス(SIKs
& Co.); 〒1040031 東京都中央区京橋一丁目8番
7号 京橋日殖ビル8階 Tokyo (JP).
- (81) 指定国(表示のない限り、全ての種類の国内保
護が可能): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA,

[続葉有]

(54) Title: NOVEL COMPOUND, CHARGE TRANSPORT MATERIAL, AND ORGANIC DEVICE

(54) 発明の名称: 新規化合物、電荷輸送材料および有機デバイス



AA - Compound

(57) Abstract: A compound represented by the general formula below has high thermal stability and has excellent characteristics as a charge transport material. (Ar¹ denotes a single bond, a benzene ring or the like; X¹ denotes a linking group linked via an oxygen atom, a sulfur atom, a carbon atom, a nitrogen atom, a phosphorus atom or a silicon atom; one of L¹ and L² or L³ and L⁴ bond together to form a linking group linked via an oxygen atom, a sulfur atom, a carbon atom, a nitrogen atom, a phosphorus atom or a silicon atom and the other of L¹ and L² or L³ and L⁴ are hydrogen atoms or substituent groups; Y¹ denotes a linking group linked via a nitrogen atom, a boron atom or a phosphorus atom; R¹, R², R⁵ to R⁷ and R¹⁰ to R¹² are hydrogen atoms or substituent groups, and n¹ is an integer of 2 or higher.)

(57) 要約: 下記一般式で表される化合物は熱的な安定性が高く、電荷輸送材料として優れた特性を有する。[Ar¹は単結合、ベンゼン環等; X¹は、酸素原子、硫黄原子、炭素原子、窒素原子、リン原子または珪素原子を介して連結する連結基; L¹とL²、L³とL⁴のいずれか一方は、互いに連結して酸素原子、硫黄原子、炭素原子、窒素原子、リン原子または珪素原子を介して連結する連結基、L¹とL²、L³とL⁴の他方は水素原子または置換基; Y¹は窒素原子、ホウ素原子またはリン原子を介して連結する連結基; R¹、R²、R⁵~R⁷およびR¹⁰~R¹²は水素原子または置換基; n¹は2以上の整数を表す。]

WO 2012/118164 A1

BB, BG, BH, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IS, JP, KE, KG, KM, KN, KP, KR, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LT, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, ZA, ZM, ZW.

MZ, NA, RW, SD, SL, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), ユーラシア (AM, AZ, BY, KG, KZ, MD, RU, TJ, TM), ヨーロッパ (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

添付公開書類:

(84) 指定国 (表示のない限り、全ての種類の広域保護が可能): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW,

— 国際調査報告 (条約第 21 条(3))

明 細 書

発明の名称：新規化合物、電荷輸送材料および有機デバイス

技術分野

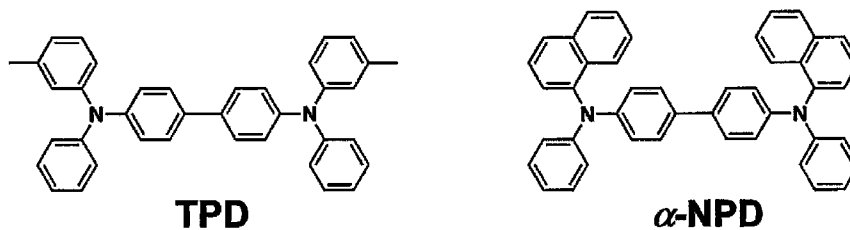
[0001] 本発明は、新規化合物とその新規化合物からなる電荷輸送材料に関する。また本発明は、新規化合物を用いた有機エレクトロルミネッセンス素子や有機薄膜太陽電池などの有機デバイスにも関する。

背景技術

[0002] 有機エレクトロルミネッセンス素子や有機薄膜太陽電池などの有機デバイスには、電荷移動度が大きな電荷輸送材料が必要とされている。そして、これまでに種々の電荷輸送材料が提案されており、特にトリフェニルアミン構造を有する化合物が比較的高い電荷移動度を示すことが知られている。

[0003] トリフェニルアミン構造を有する化合物としては、例えば、以下に示す構造を有するN, N'-ジフェニル-N, N'-ビス(3-メチルフェニル)-1, 1'-ビフェニル-4, 4'-ジアミン [TDP] やN, N'-ジフェニル-N, N'-ビス(1-ナフチル)-1, 1'-ビフェニル-4, 4'-ジアミン [α -NPD] といったトリフェニルアミン二量体が広く知られており実用化されている。

[化1]



[0004] また、トリフェニルアミンを構成する芳香環同士を連結基で連結してトリフェニルアミンの平面性を高めたことを特徴とするトリフェニルアミン誘導体（単量体）も知られている（特許文献1参照）。このトリフェニルアミン誘導体は、TPDよりもホール輸送能に優れていることが示されている。しかしながら、当該文献中にはトリフェニルアミン誘導体の二量体を製造する

ことについてはまったく記載されていない。

先行技術文献

特許文献

[0005] 特許文献1：特開平11-339868号公報

発明の概要

発明が解決しようとする課題

[0006] 有機エレクトロルミネッセンス素子や有機薄膜太陽電池などの有機デバイスに用いられる電荷輸送材料は、アモルファス状態が安定で結晶化しにくい性質を有しているものが好ましい。そのためには、ガラス転移温度（ T_g ）が高く、熱的な安定性に優れている電荷輸送材料を提供することが望ましい。また、従来知られている電荷輸送材料とは別に、高い電荷輸送効率を有する材料をさらに提供することが望ましい。

[0007] そこで本発明者らは、アモルファス状態が安定で結晶化しにくいという、電荷輸送材料として優れた特性を有する新規化合物を提供することを目的として検討を進めた。また本発明者らは、優れた電荷輸送材料を用いた有機エレクトロルミネッセンス素子や有機薄膜太陽電池などの有機デバイスを提供することも目的として検討を進めた。

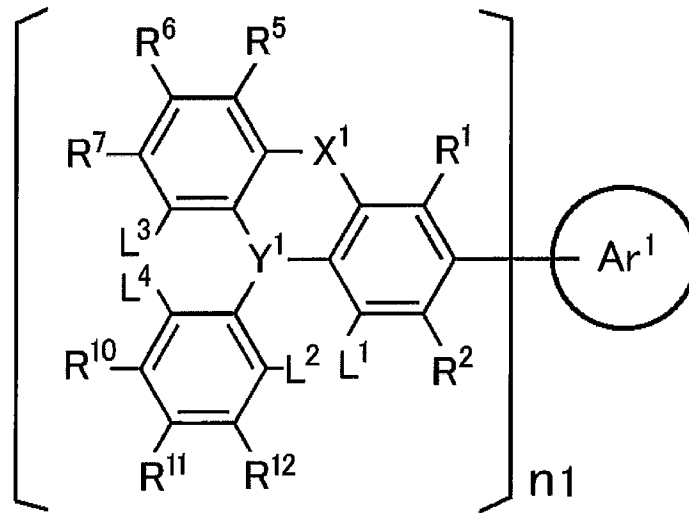
課題を解決するための手段

[0008] 上記の課題を解決するために鋭意検討を進めた結果、本発明者らは、分子内に特定の環状構造を複数有する化合物が熱的に安定で電荷輸送材料として優れた特性を有しており、有機デバイスに効果的に利用できることを見出した。本発明者らは、この知見に基づいて、上記の課題を解決する手段として、以下の本発明を提供するに至った。

[0009] (1) 下記一般式〔1〕で表される化合物。

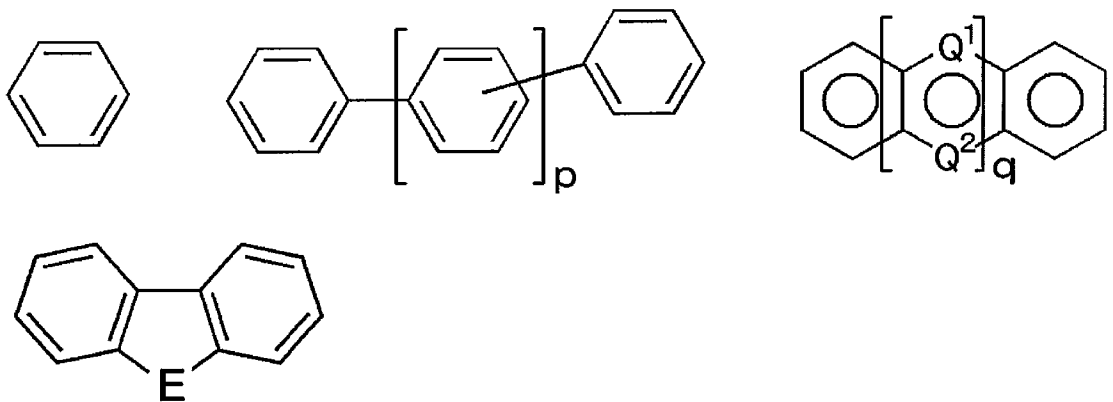
[化2]

一般式 [1]



[一般式 [1] において、Ar¹は単結合または下記のいずれかの構造を表し；

[化3]



Q¹およびQ²は、ともに=CH-であるか、Q¹が単結合でQ²が-CH=CH-であるか、Q¹が-CH=CH-でQ²が単結合であり；pは0～3のいずれかの整数を表し；qは0～3のいずれかの整数を表し；Eは酸素原子、硫黄原子を表すか、または炭素原子、珪素原子、窒素原子、リン原子、ホウ素原子もしくは硫黄原子を介して連結する原子団を表し；

X¹は、酸素原子、硫黄原子、炭素原子、窒素原子、リン原子および珪素原子からなる群より選択される1つの原子を介して連結する連結基を表し；

Y¹は、窒素原子、ホウ素原子およびリン原子からなる群より選択される1つの原子を介して連結する連結基を表し；

L¹とL²、L³とL⁴のいずれか一方は、互いに結合して酸素原子、硫黄原子、炭素原子、窒素原子、リン原子および珪素原子からなる群より選択される1つの原子を介して連結する連結基を表し、L¹とL²、L³とL⁴の他方は、各々独立に、水素原子または置換基を表し；

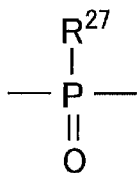
R¹、R²、R⁵～R⁷およびR¹⁰～R¹²は、各々独立に、水素原子または置換基を表し、R⁵とR⁶、R⁶とR⁷、R¹⁰とR¹¹、R¹¹とR¹²は、互いに結合して連結基を形成していてもよく；

n₁は2以上のいずれかの整数を表し、分子内にn₁個存在するX¹、Y¹、R¹、R²、R⁵～R⁷およびR¹⁰～R¹²は、それぞれ互いに同一であっても異なってもよく；

A_rが単結合であるとき、隣接する2つのR¹同士が互いに結合して連結基を形成していてもよく、隣接する2つのR²同士が互いに結合して連結基を形成していてもよい。]

(2) 一般式 [1] におけるL¹とL²、L³とL⁴のいずれか一方が形成する連結基と、X¹が表す連結基が、各々独立に、-O-、-S-、-SO₂-、>CR²¹R²²、>C=O、>C=CR²³R²⁴、>C=NR²⁵、>NR²⁶、

[化4]



または>S i R²⁸R²⁹であり、

Y¹が、>N-、>B-、>P-または>P (=O) -であり、

R¹、R²、R²¹、R²²、R²⁸およびR²⁹が、各々独立に、水素原子、置換もしくは無置換のアルキル基、または置換もしくは無置換のアルコキシ基であり、

R⁵～R⁷およびR¹⁰～R¹²が、各々独立に、水素原子、置換もしくは無置換のアルキル基、置換もしくは無置換のアルコキシ基、置換もしくは無置換のア

リール基、または置換もしくは無置換のアリールオキシ基であるか、 R^5 と R^6 、 R^6 と R^7 、 R^{10} と R^{11} 、 R^{11} と R^{12} が互いに結合して連結基を形成しており、 $R^{23} \sim R^{27}$ が、各々独立に、水素原子、置換もしくは無置換のアルキル基、または置換もしくは無置換のアリール基であることを特徴とする(1)に記載の化合物。

(3) 一般式[1]における L^1 と L^2 、 L^3 と L^4 のいずれか一方が形成する連結基と、 X^1 が表す連結基が $-O-$ であることを特徴とする(1)または(2)に記載の化合物。

(4) 一般式[1]における Y^1 が $>N-$ であることを特徴とする(1)～(3)のいずれか1項に記載の化合物。

(5) 一般式[1]における R^1 および R^2 が水素原子であることを特徴とする(1)～(4)のいずれか1項に記載の化合物。

(6) 一般式[1]における R^5 、 R^7 、 R^{10} および R^{12} が水素原子であり、 R^6 および R^{11} が水素原子またはアルコキシ基であることを特徴とする(1)～(5)のいずれか1項に記載の化合物。

(7) 分子が非対称であることを特徴とする(1)～(6)のいずれか1項に記載の化合物。

(8) (1)～(7)のいずれか1項に記載の化合物からなる電荷輸送材料。

(9) (1)～(7)のいずれか1項に記載の化合物を用いた有機デバイス。

(10) (1)～(7)のいずれか1項に記載の化合物を用いた有機エレクトロルミネッセンス素子。

(11) (1)～(7)のいずれか1項に記載の化合物を用いた光電変換素子。

(12) (1)～(7)のいずれか1項に記載の化合物を用いた有機薄膜太陽電池。

発明の効果

[0010] 本発明の化合物は、アモルファス状態が安定で結晶化しにくいというえ、電荷輸送材料として優れた特性を有する化合物である。また、この化合物を用いた本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子や有機薄膜太陽電池などの有機デバイスは、高効率であり、消費電力や発熱量を抑え、長寿命化も実現しうるものである。

図面の簡単な説明

[0011] [図1]本発明の化合物のサイクリックボルタンメトリーの測定結果を表すグラフである。

[図2]比較化合物A～Cのサイクリックボルタンメトリーの測定結果を表すグラフである。

[図3]HOMOとLUMOの軌道準位を表す図である。

[図4]実施例9におけるTOF法によるホール移動度の測定結果を示すグラフである。

[図5]実施例9におけるTOF法による化合物201の測定結果を示すグラフである。

[図6]実施例10で製造した有機エレクトロルミネッセンス素子の概略断面図である。

[図7]実施例10における有機エレクトロルミネッセンス素子の電流密度と電流効率の関係を示すグラフである。

[図8]実施例11における有機エレクトロルミネッセンス素子の時間と電圧の関係を示すグラフである。

[図9]実施例11における有機エレクトロルミネッセンス素子の時間と輝度の関係を示すグラフである。

[図10]実施例12における有機エレクトロルミネッセンス素子の電流密度と電流効率の関係を示すグラフである。

発明を実施するための形態

[0012] 以下において、本発明の内容について詳細に説明する。以下に記載する構成要件の説明は、本発明の代表的な実施態様や具体例に基づいてなされるこ

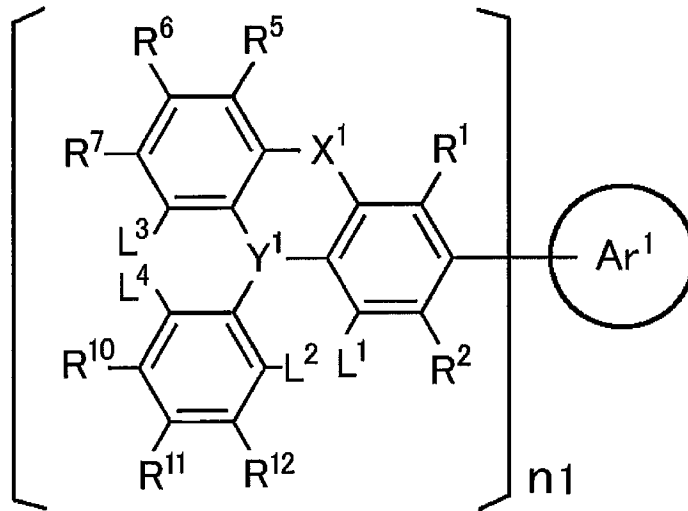
とがあるが、本発明はそのような実施態様や具体例に限定されるものではない。なお、本明細書において「～」を用いて表される数値範囲は、「～」の前後に記載される数値を下限値および上限値として含む範囲を意味する。

[0013] [一般式 [1] で表される化合物]

本発明の化合物は、一般式 [1] で表される構造を有する。

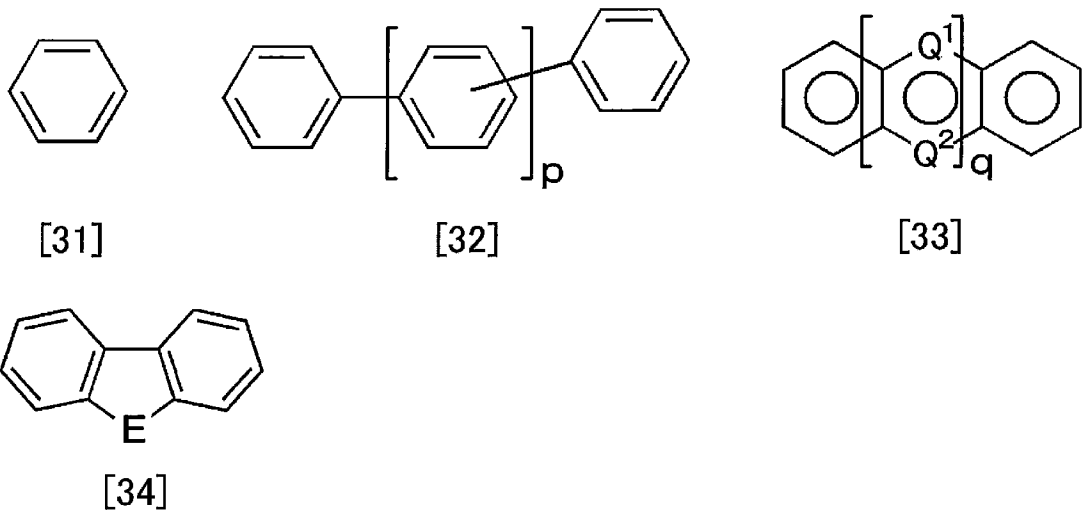
[化5]

一般式 [1]



[0014] 一般式 [1] における Ar^1 は、単結合または下記の [31] ~ [34] のいずれかの構造を表す。

[化6]



[0015] $A r^1$ が式 [3 1] で表されるベンゼン環である場合、 n_1 が2であるときの結合位置として1、3位、1、4位を挙げることができる。 n_1 が3であるときの結合位置として、1、3、5位を挙げることができる。

$A r^1$ が一般式 [3 2] で表されるとき、 p は0~3のいずれかの整数を表す。例えば p が0のビフェニル構造であって n_1 が2であるときの結合位置として、3、3'位、4、4'位を挙げることができる。 p が1~3のいずれかの整数であるとき、 p 個のフェニレン基は各々独立に1、3-フェニレン基か1、4-フェニレン基であることが好ましい。また、 p が2または3であるとき、 p 個のフェニレン基の結合位置は同一であっても異なってもよい。

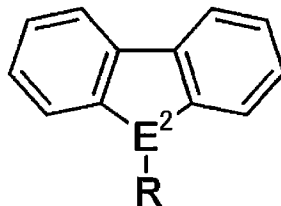
$A r^1$ が一般式 [3 3] で表されるとき、 q は0~3のいずれかの整数を表す。 Q^1 および Q^2 は、ともに $=CH-$ であるか、 Q^1 が単結合で Q^2 が $-CH=C$ であるか、 Q^1 が $-CH=CH-$ で Q^2 が単結合である。例えば q が0のナフタレン構造であって n_1 が2であるときの結合位置として、1、5位、2、6位、2、7位、1、8位を挙げることができる。 q が2または3であるとき、 q 個の Q^1 は同一であっても異なってもよく、 q 個の Q^2 は同一であっても異なってもよい。

$A r^1$ が一般式 [3 4] で表されるとき、 E は酸素原子、硫黄原子を表すか、または炭素原子、珪素原子、窒素原子、リン原子、ホウ素原子もしくは硫黄原子を介して連結する原子団を表す。一般式 [3 4] には、以下の一般式 [4 1]、[4 2] および [4 3] が包含される。

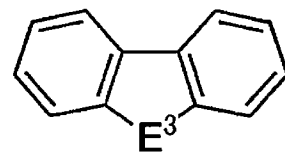
[化7]



[41]



[42]



[43]

一般式 [4 1] における E^1 はCまたはSiを表し、一般式 [4 2] におけ

る E^2 はN、P、P(=O)またはBを表し、一般式[4 3]における E^3 はS、 SO_2 またはOを表す。一般式[4 1]および[4 2]におけるRおよびR'は、各々独立に、水素原子または置換基を表す。好ましい置換基として、例えば置換もしくは無置換のアルキル基、置換もしくは無置換のアリール基を挙げることができ、その説明と好ましい範囲については下記の $R^{21} \sim R^{29}$ がとりうるアルキル基、アリール基の説明と好ましい範囲を参照することができる。

[0016] 一般式[1]における X^1 は、酸素原子、硫黄原子、炭素原子、窒素原子、リン原子および珪素原子からなる群より選択される1つの原子を介して連結する連結基を表す。また、 L^1 と L^2 、 L^3 と L^4 のいずれか一方は、互いに結合して酸素原子、硫黄原子、炭素原子、窒素原子、リン原子および珪素原子からなる群より選択される1つの原子を介して連結する連結基を表す。 X^1 が表す連結基と、 L^1 と L^2 、 L^3 と L^4 のいずれか一方が表す連結基は、同一であっても、異なってもよい。好ましいのは同一である場合である。酸素原子を介して連結する連結基は-O-である。

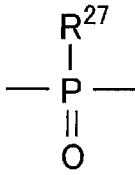
硫黄原子を介して連結する連結基は-S-または-SO₂-であることが好ましく、-S-であることがより好ましい。

炭素原子を介して連結する連結基は $>CR^{21}R^{22}$ 、 $>C=O$ 、 $>C=CR^{23}R^{24}$ または $>C=NR^{25}$ であることが好ましい。 $R^{21} \sim R^{25}$ は、各々独立に、水素原子または置換基を表す。 R^{21} および R^{22} は、各々独立に、水素原子、置換もしくは無置換のアルキル基、置換もしくは無置換のアルコキシ基、置換もしくは無置換のアリール基、または置換もしくは無置換のアリールオキシ基であることが好ましい。また、 $R^{23} \sim R^{25}$ は、各々独立に、水素原子、置換もしくは無置換のアルキル基、または置換もしくは無置換のアリール基であることが好ましい。

窒素原子を介して連結する連結基は $>NR^{26}$ である。 R^{26} は、水素原子、置換もしくは無置換のアルキル基、または置換もしくは無置換のアリール基であることが好ましい。

リン原子を介して連結する連結基は

[化8]



であることが好ましい。R²⁷は、水素原子、置換もしくは無置換のアルキル基、または置換もしくは無置換のアリール基であることが好ましい。

珪素原子を介して連結する連結基は>C R²⁸ R²⁹であることが好ましい。R²⁸およびR²⁹は、各々独立に、水素原子または置換基を表す。R²⁸およびR²⁹は、各々独立に、水素原子、置換もしくは無置換のアルキル基、置換もしくは無置換のアルコキシ基、置換もしくは無置換のアリール基、または置換もしくは無置換のアリールオキシ基であることが好ましい。

[0017] R²¹~R²⁹がとりうるアルキル基は、直鎖状であっても、分枝状であっても、環状であってもよい。好ましいのは直鎖状または分枝状のアルキル基である。アルキル基の炭素数は、1~20であることが好ましく、1~12であることがより好ましく、1~6であることがさらに好ましく、1~3であること（すなわちメチル基、エチル基、n-プロピル基、イソプロピル基）がさらにより好ましい。環状のアルキル基としては、例えばシクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基を挙げることができる。

R²¹、R²²、R²⁸およびR²⁹がとりうるアルコキシ基は、直鎖状であっても、分枝状であっても、環状であってもよい。好ましいのは直鎖状または分枝状のアルコキシ基である。アルコキシ基の炭素数は、1~20であることが好ましく、1~12であることがより好ましく、1~6であることがさらに好ましく、1~3であること（すなわちメトキシ基、エトキシ基、n-プロポキシ基、イソプロポキシ基）がさらにより好ましい。環状のアルコキシ基としては、例えばシクロペンチルオキシ基、シクロヘキシルオキシ基、シクロヘプチルオキシ基を挙げることができる。

R²¹~R²⁹がとりうるアリール基は、1つの芳香環からなるものであっても

よいし、2以上の芳香環が融合した構造を有するものであってもよい。アリアル基の炭素数は、6~22であることが好ましく、6~18であることがより好ましく、6~14であることがさらに好ましく、6~10であること（すなわちフェニル基、1-ナフチル基、2-ナフチル基）がさらに好ましい。

R²¹、R²²、R²⁸およびR²⁹がとりうるアリアルオキシ基は、1つの芳香環からなるものであってもよいし、2以上の芳香環が融合した構造を有するものであってもよい。アリアルオキシ基の炭素数は、6~22であることが好ましく、6~18であることがより好ましく、6~14であることがさらに好ましく、6~10であること（すなわちフェニルオキシ基、1-ナフチルオキシ基、2-ナフチルオキシ基）がさらに好ましい。

[0018] 上記アルキル基と上記アルコキシ基は、さらに置換されていてもよいし、置換されていなくてもよい。置換されている場合の置換基としては、例えばアルコキシ基、アリアル基、アリアルオキシ基を挙げることができ、その説明と好ましい範囲については上記アルコキシ基、上記アリアル基、上記アリアルオキシ基の記載を参照することができる。

また、上記アリアル基と上記アリアルオキシ基は、さらに置換されていてもよいし、置換されていなくてもよい。置換されている場合の置換基としては、例えばアルキル基、アルコキシ基、アリアル基、アリアルオキシ基を挙げることができ、その説明と好ましい範囲については上記アルキル基、上記アルコキシ基、上記アリアル基、上記アリアルオキシ基の記載を参照することができる。

[0019] 一般式 [1] におけるY¹は、窒素原子、ホウ素原子およびリン原子からなる群より選択される1つの原子を介して連結する連結基を表す。窒素原子を介して連結する連結基は>N-である。ホウ素原子を介して連結する連結基は>B-である。リン原子を介して連結する連結基は>P-または>P(=O)-であることが好ましい。

Y¹が>N-または>P-である場合は、一般式 [1] の化合物は電荷輸送

材料として有用な性質を示し、特にホール輸送材料として有用な性質を示す。また、 Y^1 が $>B-$ または $>P(=O)-$ である場合は、一般式[1]の化合物は電荷輸送材料として有用な性質を示し、特に電子輸送材料として有用な性質を示す。さらに、 Y^1 が $>N-$ である場合はバイポーラー材料として有用な性質を示すものも含まれ、特に X^1 が $-O-$ である場合にその傾向がうかがえる。

[0020] 一般式[1]において、 L^1 と L^2 、 L^3 と L^4 のいずれか一方は、互いに結合して酸素原子、硫黄原子、炭素原子、窒素原子、リン原子および珪素原子からなる群より選択される1つの原子を介して連結する連結基を表すが、 L^1 と L^2 、 L^3 と L^4 の他方は、各々独立に、水素原子または置換基を表す。すなわち、 L^1 と L^2 が互いに結合して上記連結基を表すとき、 L^3 と L^4 は、各々独立に、水素原子または置換基を表し、また、 L^3 と L^4 が互いに結合して上記連結基を表すとき、 L^1 と L^2 は、各々独立に、水素原子または置換基を表す。

一般式[1]における R^1 、 R^2 、 $R^5\sim R^7$ および $R^{10}\sim R^{12}$ は、各々独立に、水素原子または置換基を表す。

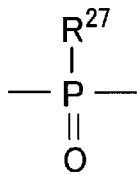
R^1 、 R^2 、 $R^5\sim R^7$ 、 $R^{10}\sim R^{12}$ および $L^1\sim L^4$ がとりうる置換基として、例えば、置換もしくは無置換のアルキル基、置換もしくは無置換のアルコキシ基、置換もしくは無置換のアリール基、置換もしくは無置換のアリールオキシ基を挙げることができる。これらの各置換基の説明と好ましい範囲については、上記アルキル基、上記アルコキシ基、上記アリール基、上記アリールオキシ基の記載を参照することができる。

[0021] 一般式[1]における R^1 および R^2 は、各々独立に、水素原子、置換もしくは無置換のアルキル基、または置換もしくは無置換のアルコキシ基であることが好ましい。また、 A^r が単結合であるときに、隣接する2つの R^1 同士が互いに結合して連結基を形成していることや、隣接する2つの R^2 同士が互いに結合して連結基を形成していることも好ましい。ここでいうアルキル基とアルコキシ基の説明と好ましい範囲についても、上記アルキル基と上記アルコキシ基の記載を参照することができる。 R^1 および R^2 としてより好ましいの

は、水素原子、メチル基またはメトキシ基である。R¹およびR²が両方とも水素原子である場合も好ましい。

隣接する2つのR¹同士が互いに結合して連結基を形成しているとき、酸素原子、硫黄原子、炭素原子、窒素原子およびリン原子からなる群より選択される1つの原子を介して連結する連結基を形成していることが好ましい。具体的には、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-SO_2-$ 、 $>CR^{21}R^{22}$ 、 $>C=O$ 、 $>C=CR^{23}R^{24}$ 、 $>C=NR^{25}$ 、 $>NR^{26}$ または

[化9]



または $>SiR^{28}R^{29}$ で表される連結基を形成していることが好ましい。これらの連結基の説明と好ましい範囲についても、上記X¹およびX²における対応する連結基の記載を参照することができる。隣接する2つのR²同士が互いに結合して連結基を形成している場合の説明と好ましい範囲は、隣接する2つのR¹同士が互いに結合して連結基を形成している場合と同じである。隣接する2つのR¹と隣接する2つのR²は、両方とも互いに結合して連結基を形成していてもよいが、いずれか一方だけが互いに結合して連結基を形成していてもよい。

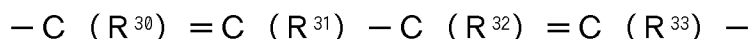
[0022] 一般式 [1] におけるR⁵~R⁷およびR¹⁰~R¹²は、各々独立に、水素原子、置換もしくは無置換のアルキル基、置換もしくは無置換のアルコキシ基、置換もしくは無置換のアリール基、または置換もしくは無置換のアリールオキシ基であることが好ましい。ここでいう各置換基の説明と好ましい範囲についても、上記アルキル基、上記アルコキシ基、上記アリール基、上記アリールオキシ基の記載を参照することができる。

連結基を形成していないL¹~L⁴は、水素原子、炭素数1~3のアルキル基、または炭素数1~3のアルコキシ基であることがより好ましく、水素原子、メチル基またはメトキシ基であることがさらに好ましい。連結基を形成し

ていないL¹~L⁴はすべて水素原子である場合も好ましい。

R⁵~R⁷およびR¹⁰~R¹²はすべてが水素原子であってもよいし、少なくとも1つが置換基であってもよい。少なくとも1つが置換基である場合、R⁶、R⁷、R¹⁰およびR¹¹のうちの少なくとも1つが置換基であることがより好ましい。

一般式 [1] におけるR⁵とR⁶、R⁶とR⁷、R¹⁰とR¹¹、R¹¹とR¹²は、互いに結合して連結基を形成していてもよい。形成する連結基は、連結鎖が炭素原子、酸素原子、硫黄原子、窒素原子およびリン原子からなる群より選択される1種以上の原子から構成されるものであることが好ましく、例えば炭素原子のみから構成されるものを好ましく例示することができる。炭素原子のみから構成される連結鎖は二重結合を含むものであってもよいし、単結合のみからなるものであってもよい。連結鎖の原子数は2~6であることが好ましく、3~5であることがより好ましく、3または4であることがさらに好ましく、4であることが最も好ましい。連結鎖を構成する原子には水素原子または置換基が結合しうる。好ましい連結基は、



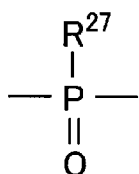
で表される構造を有するものであり、R³⁰~R³³は水素原子または置換基を表し、R³⁰とR³¹、R³¹とR³²、R³²とR³³は、互いに結合してさらに連結基を形成していてもよい。ここでいう置換基としては、例えばアルキル基、アルコキシ基、アリール基、アリールオキシ基を挙げることができ、その説明と好ましい範囲については上記アルキル基、上記アルコキシ基、上記アリール基、上記アリールオキシ基の記載を参照することができる。また、R³⁰とR³¹などが形成する連結基の説明と好ましい範囲については、上記のR⁵とR⁶などが形成する連結基の記載を参照することができる。

[0023] 一般式 [1] におけるn₁は、2以上のいずれかの整数である。n₁は、2~10のいずれかの整数であることが好ましく、2~4のいずれかの整数であることがより好ましい。例えば、2または3とすることができる。

[0024] 一般式 [1] で表される化合物の好ましい範囲として、L¹とL²、L³とL⁴

のいずれか一方と、 X^1 とが、各々独立に、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-SO_2-$ 、 $>C$
 $R^{21}R^{22}$ 、 $>C=O$ 、 $>C=CR^{23}R^{24}$ 、 $>C=NR^{25}$ 、 $>NR^{26}$ 、

[化10]



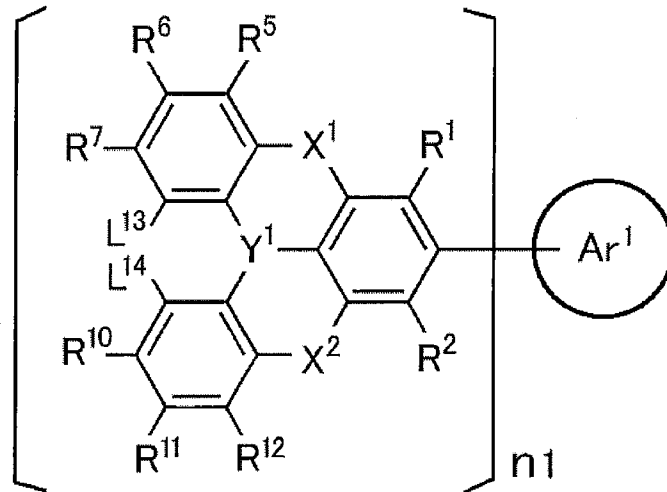
または $>SiR^{28}R^{29}$ から選択される連結基であり； Y^1 が、 $>N-$ 、 $>B-$ 、
 $>P-$ または $>P(=O)-$ であり； R^1 、 R^2 、 R^{21} 、 R^{22} 、 R^{28} および R^{29} が、
各々独立に、水素原子、置換もしくは無置換のアルキル基、または置換もし
しくは無置換のアルコキシ基であるか、 Ar^1 が単結合であるときに隣接する2
つの R^1 同士が互いに結合して連結基を形成しているか、隣接する2つの R^2 同
士が互いに結合して連結基を形成しており；連結基を形成していない $L^1\sim L^4$
と、 $R^5\sim R^7$ および $R^{10}\sim R^{12}$ が、各々独立に、水素原子、置換もしくは無置換
のアルキル基、置換もしくは無置換のアルコキシ基、置換もしくは無置換の
アリール基、または置換もしくは無置換のアリールオキシ基であるか、 R^5 と
 R^6 、 R^6 と R^7 、 R^{10} と R^{11} 、 R^{11} と R^{12} が互いに結合して連結基を形成しており
； $R^{23}\sim R^{27}$ が、各々独立に、水素原子、置換もしくは無置換のアルキル基、
または置換もしくは無置換のアリール基であり； n^1 が2～6のいずれかの
整数である範囲を挙げることができる。

[0025] 一般式 [1] の好ましい構造として、下記の一般式 [1-1] および一般
式 [1-2] を挙げることができる。一般式 [1-1] および [1-2] に
おける Ar^1 、 X^1 、 Y^1 、 R^1 、 R^2 、 $R^5\sim R^7$ 、 $R^{10}\sim R^{12}$ および n^1 の定義と好
ましい範囲については、一般式 [1] における対応する記載を参照すること
ができる。 X^2 と X^3 の定義と好ましい範囲は、一般式 [1] における X^1 の定義
と好ましい範囲と同じである。また、 $X^1\sim X^3$ は、互いに同一であっても異な
っていてもよい。 $L^{11}\sim L^{14}$ は、各々独立に、水素原子または置換基を表す。
 $L^{11}\sim L^{14}$ がとりうる置換基の定義と好ましい範囲については、一般式 [1]

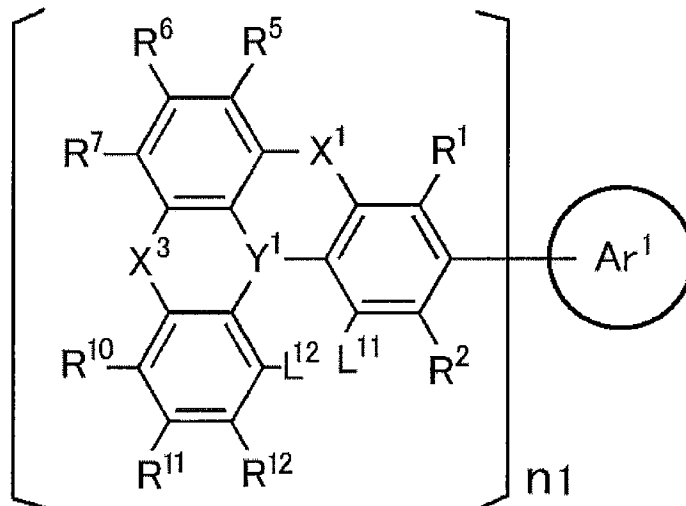
における連結基でないL¹~L⁴がとりうる置換基の記載を参照することができる。

[0026] [化11]

一般式 [1-1]



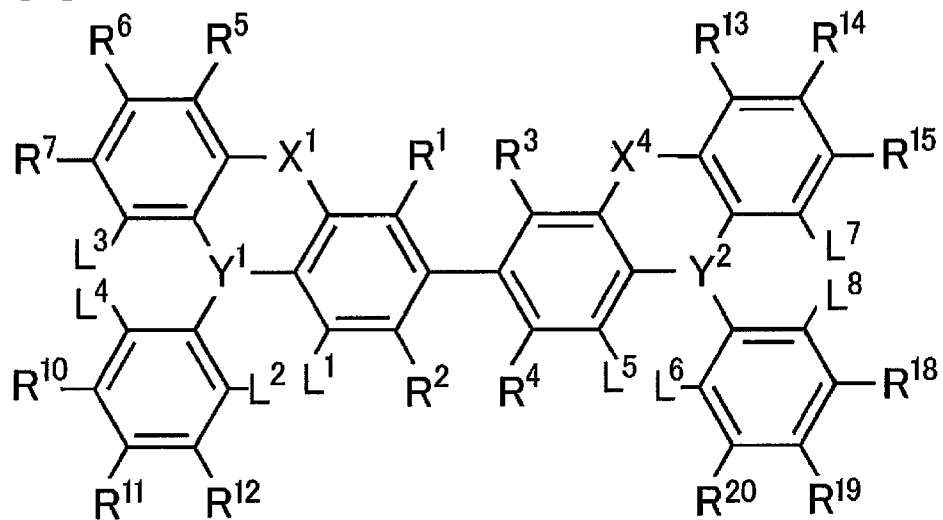
一般式 [1-2]



[0027] 一般式 [1] で表される化合物の別の好ましい範囲として、下記の一般式 [2] で表される化合物を挙げるができる。

[化12]

一般式 [2]



[0028] 一般式 [2] において、X¹およびX⁴は、各々独立に、酸素原子、硫黄原子、炭素原子、窒素原子、リン原子および珪素原子からなる群より選択される1つの原子を介して連結する連結基を表す。X¹およびX⁴の説明と好ましい範囲については、一般式 [1] のX¹の記載を参照することができる。X¹およびX⁴は同一であっても異なってもよいが、同一であることが好ましい。

L¹とL²、L³とL⁴のいずれか一方は、互いに結合して、酸素原子、硫黄原子、炭素原子、窒素原子、リン原子および珪素原子からなる群より選択される1つの原子を介して連結する連結基を表す。また、L⁵とL⁶、L⁷とL⁸のいずれか一方は、互いに結合して、酸素原子、硫黄原子、炭素原子、窒素原子、リン原子および珪素原子からなる群より選択される1つの原子を介して連結する連結基を表す。L¹とL²が互いに結合して連結基を表すとき、L⁵とL⁶が互いに結合して連結基を表すことが好ましい。また、L³とL⁴が互いに結合して連結基を表すとき、L⁷とL⁸が互いに結合して連結基を表すことが好ましい。L¹とL²、L³とL⁴のいずれか一方が表す連結基と、L⁵とL⁶、L⁷とL⁸のいずれか一方が表す連結基は、互いに同一であっても異なってもよいが、同一であることが好ましい。また、L¹とL²、L³とL⁴のいずれか一方が表す連結基と、L⁵とL⁶、L⁷とL⁸のいずれか一方が表す連結基と、X¹およびX⁴が表す連結基は、同一であっても異なってもよいが、同一であることが

好ましい。

Y¹およびY²は、各々独立に、窒素原子、ホウ素原子およびリン原子からなる群より選択される1つの原子を介して連結する連結基を表す。Y¹およびY²の説明と好ましい範囲については、一般式[1]のY¹の記載を参照することができる。Y¹とY²は同一であっても異なってもよいが、同一であることが好ましい。

[0029] 一般式[2]において、L¹とL²、L³とL⁴のいずれか一方は、互いに結合して酸素原子、硫黄原子、炭素原子、窒素原子、リン原子および珪素原子からなる群より選択される1つの原子を介して連結する連結基を表すが、L¹とL²、L³とL⁴の他方は、各々独立に、水素原子または置換基を表す。すなわち、L¹とL²が互いに結合して上記連結基を表すとき、L³とL⁴は、各々独立に、水素原子または置換基を表し、また、L³とL⁴が互いに結合して上記連結基を表すとき、L¹とL²は、各々独立に、水素原子または置換基を表す。

同様に、L⁵とL⁶、L⁷とL⁸のいずれか一方は、互いに結合して酸素原子、硫黄原子、炭素原子、窒素原子、リン原子および珪素原子からなる群より選択される1つの原子を介して連結する連結基を表すが、L⁵とL⁶、L⁷とL⁸の他方は、各々独立に、水素原子または置換基を表す。すなわち、L⁵とL⁶が互いに結合して上記連結基を表すとき、L⁷とL⁸は、各々独立に、水素原子または置換基を表し、また、L⁷とL⁸が互いに結合して上記連結基を表すとき、L⁵とL⁶は、各々独立に、水素原子または置換基を表す。

連結基を形成していないL¹~L⁸と、R¹~R⁴、R⁵~R⁷、R¹⁰~R¹²、R¹³~R¹⁵およびR¹⁸~R²⁰は、各々独立に、水素原子または置換基を表し、R¹とR³、R²とR⁴、R⁵とR⁶、R⁶とR⁷、R¹⁰とR¹¹、R¹¹とR¹²、R¹³とR¹⁴、R¹⁴とR¹⁵、R¹⁸とR¹⁹、R¹⁹とR²⁰は、互いに結合して連結基を形成していてもよい。R¹~R⁴の説明と好ましい範囲については、一般式[1]のR¹およびR²の記載を参照することができる。R⁵~R⁷、R¹⁰~R¹²、R¹³~R¹⁵およびR¹⁸~R²⁰の説明と好ましい範囲については、一般式[1]のR⁵およびR¹²の記載を参照することができる。

連結基を形成していない $L^1 \sim L^8$ は、各々独立に、水素原子、炭素数1～3のアルキル基、または炭素数1～3のアルコキシ基であることがより好ましく、水素原子、メチル基またはメトキシ基であることがさらに好ましい。連結基を形成していない $L^1 \sim L^8$ がすべて水素原子である場合も好ましい。

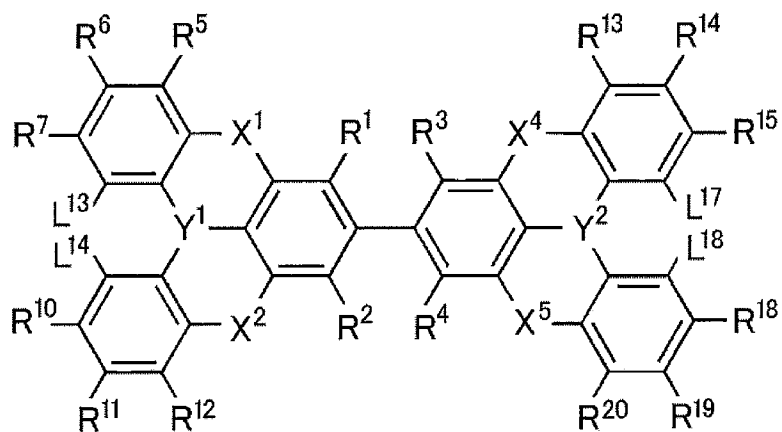
$R^1 \sim R^4$ 、 $R^5 \sim R^7$ 、 $R^{10} \sim R^{12}$ 、 $R^{13} \sim R^{15}$ および $R^{18} \sim R^{20}$ はすべてが水素原子であってもよいし、少なくとも1つが置換基であってもよい。少なくとも1つが置換基である場合、 $R^5 \sim R^7$ 、 $R^{10} \sim R^{12}$ 、 $R^{13} \sim R^{15}$ および $R^{18} \sim R^{20}$ のうちの少なくとも1つが置換基であることが好ましく、 R^6 、 R^{11} 、 R^{14} および R^{19} のうちの少なくとも1つが置換基であることがより好ましい。 R^6 、 R^{11} 、 R^{14} および R^{19} のうちの少なくとも1つが置換基であるときは、 R^6 、 R^{11} 、 R^{14} および R^{19} のうちのいずれか2つが置換基であるか、またはすべてが置換基であることがより好ましい。

[0030] 一般式 [2] の好ましい構造として、下記の一般式 [2-1] および一般式 [2-2] を挙げることができる。一般式 [2-1] および [2-2] における X^1 、 X^4 、 Y^1 、 Y^2 、 $R^1 \sim R^4$ 、 $R^5 \sim R^7$ 、 $R^{10} \sim R^{12}$ 、 $R^{13} \sim R^{15}$ および $R^{18} \sim R^{20}$ の定義と好ましい範囲については、一般式 [2] における対応する記載を参照することができる。 X^2 、 X^3 、 X^5 および X^6 の定義と好ましい範囲は、一般式 [2] における X^1 の定義と好ましい範囲と同じである。また、 $X^1 \sim X^6$ は、互いに同一であっても異なってもよい。 $L^{11} \sim L^{18}$ は、各々独立に、水素原子または置換基を表す。 $L^{11} \sim L^{18}$ がとりうる置換基の定義と好ましい範囲については、一般式 [1] における連結基でない $L^1 \sim L^4$ がとりうる置換基の記載を参照することができる。

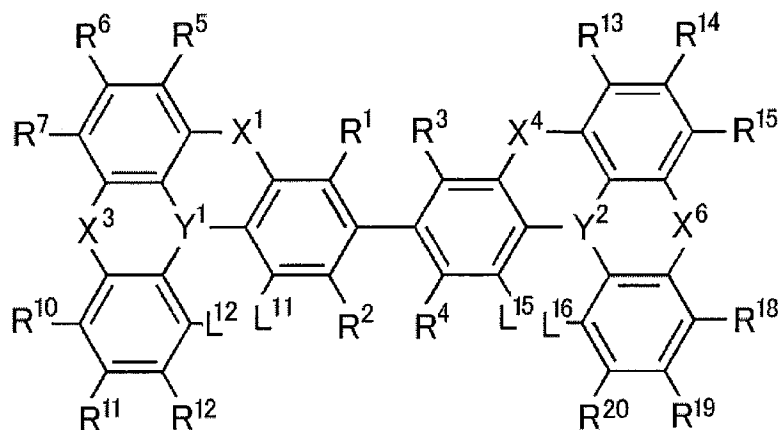
[0031]

[化13]

一般式 [2-1]



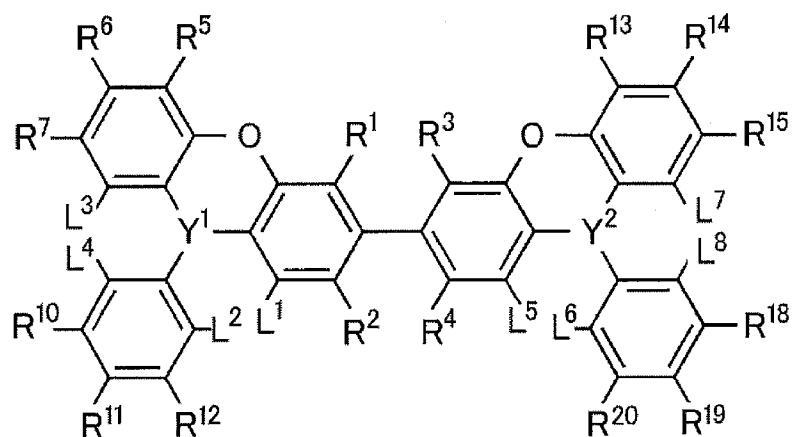
一般式 [2-2]



[0032] 一般式 [1] で表される化合物の別の好ましい範囲として、下記の一般式 [3] で表される化合物を挙げることができる。

[化14]

一般式 [3]



[0033] 一般式 [3] における Y^1 、 Y^2 、 $R^1 \sim R^4$ 、 $R^5 \sim R^7$ 、 $R^{10} \sim R^{12}$ 、 $R^{13} \sim R^{15}$ および $R^{18} \sim R^{20}$ の定義と好ましい範囲については、一般式 [1] および [2] における対応する記載を参照することができる。

一般式 [3] における L^1 と L^2 、 L^3 と L^4 のいずれか一方は、互いに結合して、酸素原子を介して連結する連結基 ($-O-$) を表す。また、 L^5 と L^6 、 L^7 と L^8 のいずれか一方は、互いに結合して、酸素原子を介して連結する連結基 ($-O-$) を表す。 L^1 と L^2 が互いに結合して連結基を表すとき、 L^5 と L^6 が互いに結合して連結基を表すことが好ましい。また、 L^3 と L^4 が互いに結合して連結基を表すとき、 L^7 と L^8 が互いに結合して連結基を表すことが好ましい。

一般式 [3] において、 L^1 と L^2 、 L^3 と L^4 のいずれか一方は、互いに結合して連結基 ($-O-$) を表すが、 L^1 と L^2 、 L^3 と L^4 の他方は、各々独立に、水素原子または置換基を表す。すなわち、 L^1 と L^2 が互いに結合して連結基 ($-O-$) を表すとき、 L^3 と L^4 は、各々独立に、水素原子または置換基を表し、また、 L^3 と L^4 が互いに結合して連結基 ($-O-$) を表すとき、 L^1 と L^2 は、各々独立に、水素原子または置換基を表す。

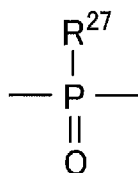
同様に、 L^5 と L^6 、 L^7 と L^8 のいずれか一方は、互いに結合して連結基 ($-O-$) を表すが、 L^5 と L^6 、 L^7 と L^8 の他方は、各々独立に、水素原子または置換基を表す。すなわち、 L^5 と L^6 が互いに結合して連結基 ($-O-$) を表すとき、 L^7 と L^8 は、各々独立に、水素原子または置換基を表し、また、 L^7 と L^8 が互いに結合して連結基 ($-O-$) を表すとき、 L^5 と L^6 は、各々独立に、水素原子または置換基を表す。

一般式 [3] で表される化合物の1つの好ましい範囲として、 $R^1 \sim R^4$ が水素原子、炭素数 1～3 のアルキル基、または炭素数 1～3 のアルコキシ基である範囲を挙げることができる。この範囲は、さらに $R^1 \sim R^4$ が水素原子、メチル基またはメトキシ基であることがより好ましく、 $R^1 \sim R^4$ がすべて水素原子であることがさらに好ましい。

[0034] 一般式 [3] で表される化合物の別の好ましい範囲として、 R^1 と R^3 が互い

に結合して連結基を形成している範囲を挙げることもできる。R¹とR³は互いに結合して酸素原子、硫黄原子、炭素原子、窒素原子およびリン原子からなる群より選択される1つの原子を介して連結する連結基を形成していることがより好ましく、R¹とR³は互いに結合して-O-、-S-、-SO₂-、>C R²¹R²²、>C=O、>C=C R²³R²⁴、>C=N R²⁵、>N R²⁶または

[化15]



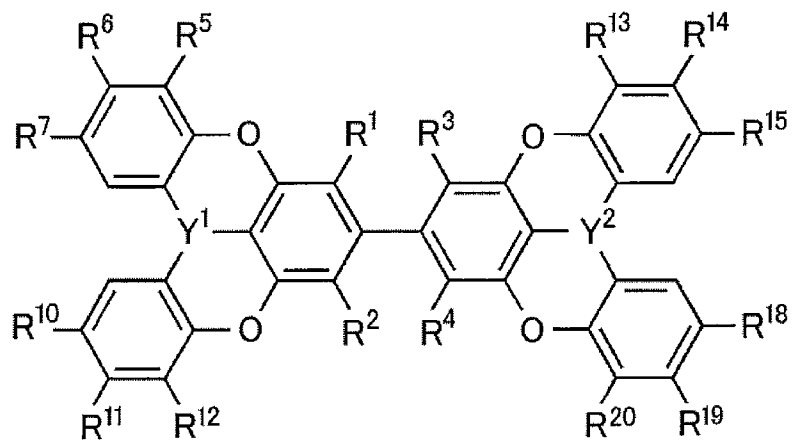
または>S i R²⁸R²⁹で表される連結基を形成していることがさらに好ましい。R²とR⁴はともに水素原子であるか、または互いに結合して連結基を形成していることが好ましい。R²とR⁴が形成する連結基の説明と好ましい範囲は一般式 [3] のR¹とR³が形成する連結基と同じである。具体例として、R¹とR³が互いに結合して-O-を形成し、R²とR⁴がともに水素原子である場合を挙げることができ、他の具体例として、R¹とR³が互いに結合して-O-を形成し、R²とR⁴も互いに結合して-O-を形成している場合を挙げるができる。

[0035] 一般式 [3] の好ましい構造として、下記の一般式 [3-1] および一般式 [3-2] を挙げるができる。一般式 [3-1] および [3-2] におけるY¹、Y²、R¹~R⁴、R⁵~R⁷、R¹⁰~R¹²、R¹³~R¹⁵およびR¹⁸~R²⁰の定義と好ましい範囲については、一般式 [3] における対応する記載を参照することができる。

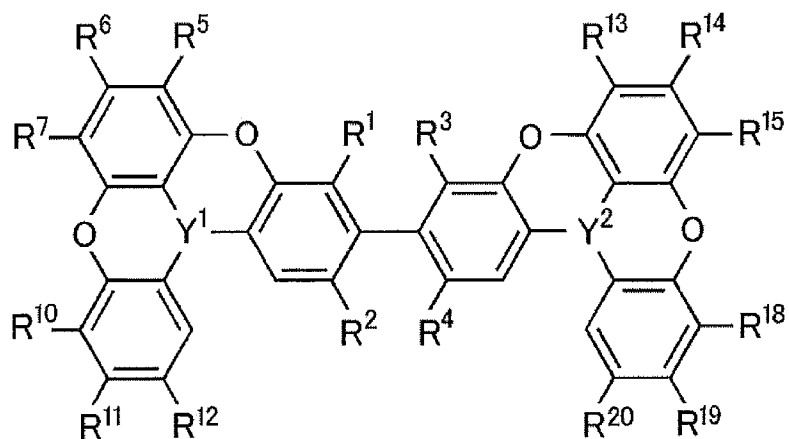
[0036]

[化16]

一般式 [3-1]



一般式 [3-2]

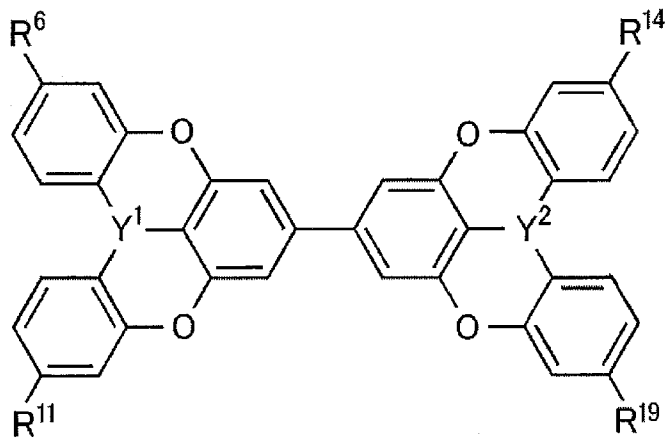


[0037] 一般式 [1] で表される化合物の別の好ましい範囲として、下記の一般式 [4-1]、一般式 [4-2]、一般式 [4-3] および一般式 [4-4] で表される化合物を挙げる事ができる。

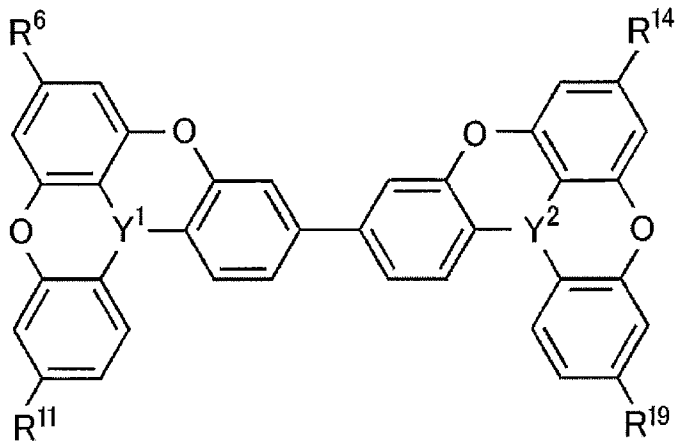
[0038]

[化17]

一般式 [4-1]



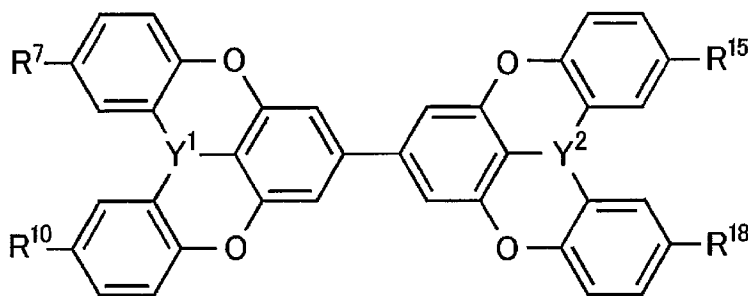
一般式 [4-2]



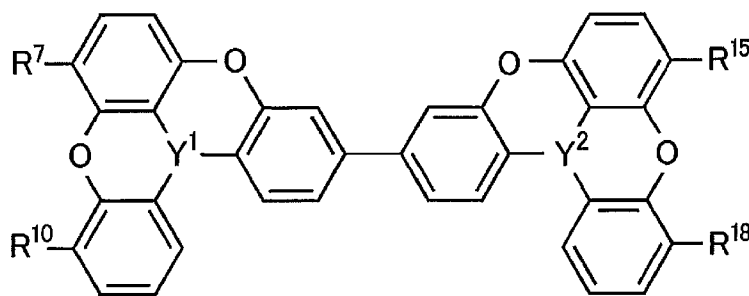
[0039]

[化18]

一般式 [4-3]



一般式 [4-4]



[0040] 一般式 [4] における Y¹、Y²、R⁶、R⁷、R¹⁰、R¹¹、R¹⁴、R¹⁵、R¹⁸ および R¹⁹ の定義と好ましい範囲については、一般式 [1] および [2] における対応する記載を参照することができる。

一般式 [4] で表される化合物の1つの好ましい範囲として、Y¹ および Y² がいずれも窒素原子である場合を挙げることができる。

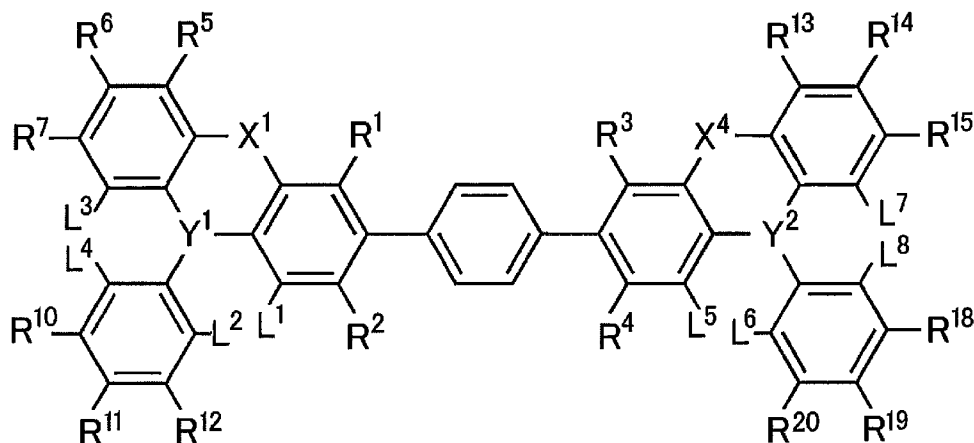
一般式 [4] で表される化合物の別の好ましい範囲として、R⁶、R¹¹、R¹⁴ および R¹⁹ が水素原子または置換基である場合を挙げることができる。R⁶、R¹¹、R¹⁴ および R¹⁹ のすべてが水素原子であるか、いずれか2つが置換基であるか、すべてが置換基であることがより好ましい。また、R⁷、R¹⁰、R¹⁵ および R¹⁸ が水素原子または置換基である場合を挙げることができる。R⁷、R¹⁰、R¹⁵ および R¹⁸ のすべてが水素原子であるか、いずれか2つが置換基であるか、すべてが置換基であることがより好ましい。R⁶、R⁷、R¹⁰、R¹¹、R¹⁴、R¹⁵、R¹⁸ および R¹⁹ がとりうる置換基としては、置換もしくは無置換のアルキル基、置換もしくは無置換のアルコキシ基、置換もしくは無置換のアリール基、または置換もしくは無置換のアリールオキシ基であることが好ましい。ここで

いう各置換基の説明と好ましい範囲については、一般式 [1] の対応する置換基の記載を参照することができる。具体例として、R¹¹およびR¹⁴が水素原子であって、R⁶およびR¹⁹がアルコキシ基である場合や、R⁷およびR¹⁸がトリフルオロメチル基であって、R¹⁰およびR¹⁵が水素原子である場合を挙げることができる。

[0041] 一般式 [1] で表される化合物の別の好ましい範囲として、下記の一般式 [5] で表される化合物を挙げることができる。

[化19]

一般式 [5]



[0042] 一般式 [5] におけるX¹、X⁴、Y¹、Y²、R⁵~R⁷、R¹⁰~R¹²、R¹³~R¹⁵およびR¹⁸~R²⁰の定義と好ましい範囲については、一般式 [1] ~ [3] における対応する記載を参照することができる。一般式 [5] におけるL¹~L⁸の定義と好ましい範囲については、一般式 [2] における対応する記載を参照することができる。一般式 [5] におけるR¹~R⁴は、各々独立に、水素原子または置換基を表す。置換基の説明と好ましい範囲については、一般式 [1] のR¹およびR²がとりうる置換基の説明と好ましい範囲を参照することができる。

[0043] 一般式 [5] で表される化合物の好ましい範囲として、例えば、X¹およびX⁴が酸素原子であり；L¹とL²、L⁵とL⁶が、いずれも互いに連結して酸素原子を介して連結する連結基（-O-）であり；Y¹およびY²が窒素原子であり；L³、L⁴、L⁷、L⁸、R¹~R⁵、R⁷~R¹⁰、R¹²、R¹³、R¹⁵~R¹⁸およびR²⁰が

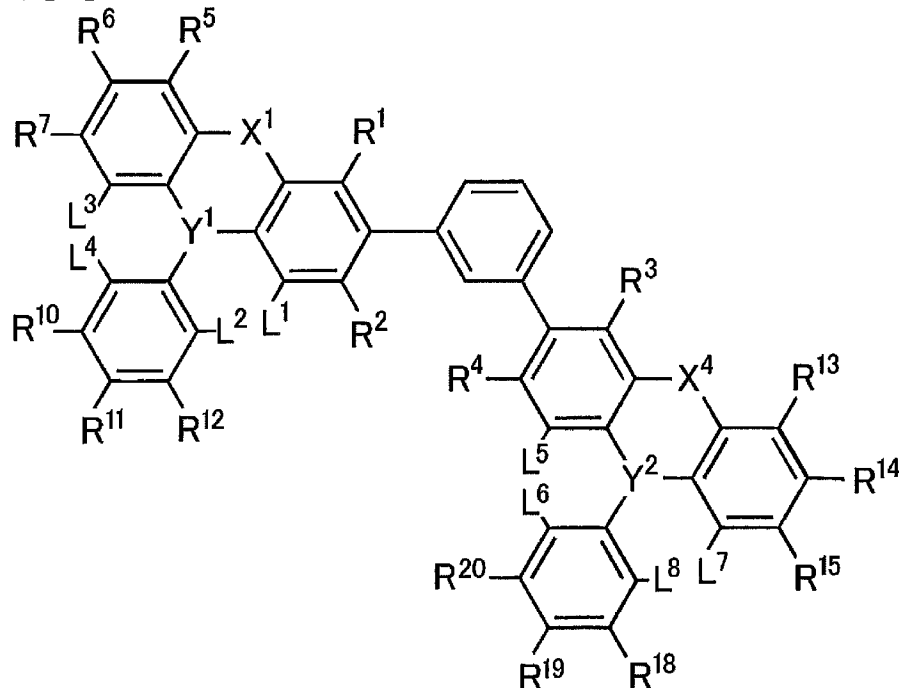
水素原子であり； R^6 、 R^{11} 、 R^{14} および R^{19} が、各々独立に、水素原子、置換もしくは無置換のアルキル基、置換もしくは無置換のアルコキシ基、置換もしくは無置換のアリール基、または置換もしくは無置換のアリールオキシ基である範囲を挙げることができる。

一般式 [5] で表される化合物の別の好ましい範囲として、例えば、 X^1 および X^4 が酸素原子であり； L^3 と L^4 、 L^7 と L^8 が、いずれも互いに連結して酸素原子を介して連結する連結基（ $-O-$ ）であり； Y^1 および Y^2 が窒素原子であり； L^1 、 L^2 、 L^5 、 L^6 、 $R^1 \sim R^5$ 、 $R^7 \sim R^{10}$ 、 R^{12} 、 R^{13} 、 $R^{15} \sim R^{18}$ および R^{20} が水素原子であり； R^6 、 R^{11} 、 R^{14} および R^{19} が、各々独立に、水素原子、置換もしくは無置換のアルキル基、置換もしくは無置換のアルコキシ基、置換もしくは無置換のアリール基、または置換もしくは無置換のアリールオキシ基である範囲を挙げることができる。

[0044] 一般式 [1] で表される化合物の別の好ましい範囲として、下記の一般式 [6] で表される化合物を挙げることができる。

[0045] [化20]

一般式 [6]



[0046] 一般式 [6] における X^1 、 X^4 、 Y^1 、 Y^2 、 $L^1 \sim L^8$ 、 $R^1 \sim R^4$ 、 $R^5 \sim R^7$ 、 R

$R^{10} \sim R^{12}$ 、 $R^{13} \sim R^{15}$ および $R^{18} \sim R^{20}$ の定義と好ましい範囲については、一般式 [5] における対応する記載を参照することができる。

一般式 [6] で表される化合物の好ましい範囲として、例えば、 X^1 および X^4 が酸素原子であり； L^1 と L^2 、 L^5 と L^6 が、いずれも互いに連結して酸素原子を介して連結する連結基（-O-）であり； Y^1 および Y^2 が窒素原子であり； L^3 、 L^4 、 L^7 、 L^8 、 $R^1 \sim R^5$ 、 $R^7 \sim R^{10}$ 、 R^{12} 、 R^{13} 、 $R^{15} \sim R^{18}$ および R^{20} が水素原子であり； R^6 、 R^{11} 、 R^{14} および R^{19} が、各々独立に、水素原子、置換もしくは無置換のアルキル基、置換もしくは無置換のアルコキシ基、置換もしくは無置換のアリール基、または置換もしくは無置換のアリールオキシ基である範囲を挙げるることができる。

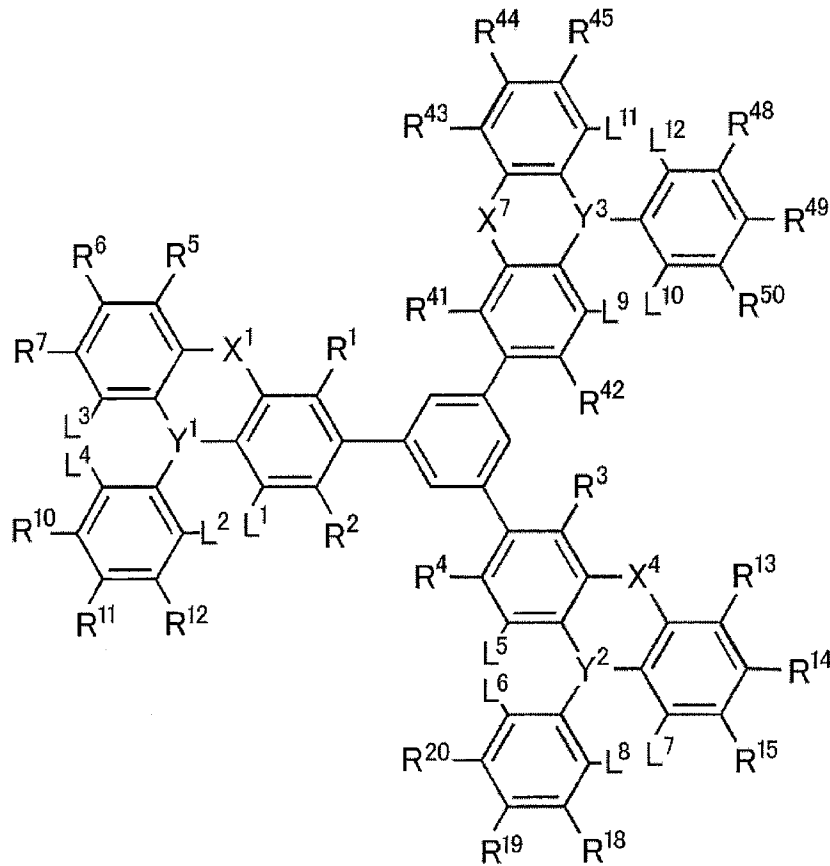
一般式 [6] で表される化合物の別の好ましい範囲として、例えば、 X^1 および X^4 が酸素原子であり； L^3 と L^4 、 L^7 と L^8 が、いずれも互いに連結して酸素原子を介して連結する連結基（-O-）であり； Y^1 および Y^2 が窒素原子であり； L^1 、 L^2 、 L^5 、 L^6 、 $R^1 \sim R^5$ 、 $R^7 \sim R^{10}$ 、 R^{12} 、 R^{13} 、 $R^{15} \sim R^{18}$ および R^{20} が水素原子であり； R^6 、 R^{11} 、 R^{14} および R^{19} が、各々独立に、水素原子、置換もしくは無置換のアルキル基、置換もしくは無置換のアルコキシ基、置換もしくは無置換のアリール基、または置換もしくは無置換のアリールオキシ基である範囲を挙げるることができる。

[0047] 一般式 [1] で表される化合物の別の好ましい範囲として、下記の一般式 [7] で表される化合物を挙げるることができる。

[0048]

[化21]

一般式 [7]



[0049] 一般式 [7] における X^1 、 X^4 、 X^7 の定義と好ましい範囲については、一般式 [1] の X^1 の記載を参照することができる。一般式 [7] における $Y^1 \sim Y^3$ の定義と好ましい範囲については、一般式 [1] の Y^1 の記載を参照することができる。一般式 [7] における $R^5 \sim R^7$ 、 $R^{10} \sim R^{12}$ 、 $R^{13} \sim R^{15}$ 、 $R^{18} \sim R^{20}$ 、 $R^{43} \sim R^{45}$ および $R^{48} \sim R^{50}$ の定義と好ましい範囲については、一般式 [1] における $R^5 \sim R^7$ および $R^{10} \sim R^{12}$ の記載を参照することができる。一般式 [7] における $R^1 \sim R^4$ 、 R^{41} および R^{42} の定義と好ましい範囲については、一般式 [1] の R^1 および R^2 の記載を参照することができる。一般式 [7] における $L^1 \sim L^8$ の定義と好ましい範囲については、一般式 [2] の対応する記載を参照することができる。

一般式 [7] における L^9 と L^{10} 、 L^{11} と L^{12} のいずれか一方は、互いに結合して、酸素原子、硫黄原子、炭素原子、窒素原子、リン原子および珪素原子

からなる群より選択される1つの原子を介して連結する連結基を表す。L⁹とL¹⁰、L¹¹とL¹²の他方は、各々独立に、水素原子または置換基を表す。すなわち、L⁹とL¹⁰が互いに結合して上記連結基を表すとき、L¹¹とL¹²は、各々独立に、水素原子または置換基を表し、また、L¹¹とL¹²が互いに結合して上記連結基を表すとき、L⁹とL¹⁰は、各々独立に、水素原子または置換基を表す。L¹とL²が互いに結合して連結基を表すとき、L⁵とL⁶が互いに結合して連結基を表し、L⁹とL¹⁰が互いに結合して連結基を表すことが好ましい。また、L³とL⁴が互いに結合して連結基を表すとき、L⁷とL⁸が互いに結合して連結基を表し、L¹¹とL¹²が互いに結合して連結基を表すことが好ましい。L¹とL²、L³とL⁴のいずれか一方が表す連結基と、L⁵とL⁶、L⁷とL⁸のいずれか一方が表す連結基と、L⁹とL¹⁰、L¹¹とL¹²のいずれか一方が表す連結基は、互いに同一であっても異なってもよいが、同一であることが好ましい。また、L¹とL²、L³とL⁴のいずれか一方が表す連結基と、L⁵とL⁶、L⁷とL⁸のいずれか一方が表す連結基と、L⁹とL¹⁰、L¹¹とL¹²のいずれか一方が表す連結基と、X¹、X⁴およびX⁷が表す連結基は、同一であっても異なってもよいが、同一であることが好ましい。

[0050] 一般式 [7] で表される化合物の好ましい範囲として、例えば、X¹、X⁴、X⁷が酸素原子であり；Y¹~Y³が窒素原子であり；R¹~R⁵、R⁷、R¹⁰、R¹²、R¹³、R¹⁵、R¹⁸、R²⁰、R⁴¹~R⁴³、R⁴⁵、R⁴⁸およびR⁵⁰が水素原子であり；R⁶、R¹¹、R¹⁴、R¹⁹、R⁴⁴およびR⁴⁹が、各々独立に、水素原子、置換もしくは無置換のアルキル基、置換もしくは無置換のアルコキシ基、置換もしくは無置換のアリール基、または置換もしくは無置換のアリールオキシ基である範囲を挙げることができる。

一般式 [7] で表される化合物の別の好ましい範囲として、例えば、X¹、X⁴、X⁷が酸素原子であり；Y¹~Y³が窒素原子であり；R¹~R⁶、R¹¹~R¹⁴、R¹⁹、R²⁰、R⁴¹~R⁴³、R⁴⁴、R⁴⁹およびR⁵⁰が水素原子であり；R⁷、R¹⁰、R¹⁵、R¹⁸、R⁴⁵およびR⁴⁸が、各々独立に、水素原子、置換もしくは無置換のアルキル基、置換もしくは無置換のアルコキシ基、置換もしくは無置換のアリー

ル基、または置換もしくは無置換のアリールオキシ基である範囲を挙げることができる。

[0051] 一般式 [1] ~ [7] で表される化合物は、分子が対称な構造を有するものであっても、非対称な構造を有するものであってもよい。ここでいう対称とは、線対称または点対称であることを意味する。

[0052] 以下に一般式 [1] で表される化合物の具体例を例示する。なお、本発明の一般式 [1] で表される化合物の範囲は、以下の具体例によって限定的に解釈されるべきものではない。以下の表 1 および 2 は一般式 [2-1] で表される化合物の具体例であり、以下の表 3 および 4 は一般式 [2-2] で表される化合物の具体例であり、以下の表 5 および 6 は一般式 [5] で表される化合物の具体例であり、以下の表 7 および 8 は一般式 [6] で表される化合物の具体例であり、以下の表 9 および 10 は一般式 [7] で表される化合物の具体例である。

[0053]

[表1-1]

化合物 番号	一般式[2-1]											
	X ¹ ,X ² ,X ⁴ ,X ⁵	Y ¹ ,Y ²	R ¹ ,R ³	R ² ,R ⁴	R ⁵ ,R ²⁰	R ¹² ,R ¹³	R ⁶ ,R ⁹	R ¹¹ ,R ¹⁴	R ⁷ ,R ¹⁹	R ¹⁰ ,R ¹⁵	L ¹³ ,L ¹⁴ ,L ¹⁷ ,L ¹⁸	
化合物 1	-O-	>N-	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	H	H	H	
化合物 3	-O-	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H	H	
化合物 4	-O-	>N-	H	H	H	H	CH ₃	H	H	H	H	
化合物 5	-O-	>N-	H	H	H	H	C ₆ H ₅ O	C ₆ H ₅ O	H	H	H	
化合物 6	-O-	>N-	H	H	H	H	C ₆ H ₅	C ₆ H ₅	H	H	H	
化合物 7	-O-	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H	H	
化合物 8	-O-	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H	H	
化合物 9	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	
化合物 10	-O-	>N-	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H	H	H	H	
化合物 11	-O-	>N-	H	H	CH ₃ O	H	H	H	H	H	H	
化合物 12	-O-	>N-	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H	
化合物 13	-O-	>N-	H	H	C ₆ H ₅ O	C ₆ H ₅ O	H	H	H	H	H	
化合物 14	-O-	>N-	H	H	C ₆ H ₅	C ₆ H ₅	H	H	H	H	H	
化合物 15	-O-	>N-	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H	H	H	H	
化合物 16	-O-	>N-	H	H	CF ₃ O	H	H	H	H	H	H	
化合物 17	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	
化合物 18	-O-	>N-	H	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H	
化合物 19	-O-	>N-	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H	
化合物 20	-O-	>N-	H	H	H	H	H	CH ₃	H	H	H	
化合物 21	-O-	>N-	H	H	H	H	H	C ₆ H ₅ O	C ₆ H ₅ O	H	H	
化合物 22	-O-	>N-	H	H	H	H	H	C ₆ H ₅	C ₆ H ₅	H	H	
化合物 23	-O-	>N-	H	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H	
化合物 24	-O-	>N-	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H	
化合物 25	-S-	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	
化合物 26	-S-	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H	H	
化合物 27	-S-	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H	H	
化合物 28	-S-	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H	H	
化合物 29	-S-	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H	H	
化合物 30	-SO ₂ -	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	
化合物 31	-SO ₂ -	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H	H	
化合物 32	-SO ₂ -	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H	H	
化合物 33	-SO ₂ -	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H	H	
化合物 34	-SO ₂ -	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H	H	
化合物 35	-CH ₂ -	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	
化合物 36	-CH ₂ -	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H	H	
化合物 37	-CH ₂ -	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H	H	
化合物 38	-CH ₂ -	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H	H	
化合物 39	-CH ₂ -	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H	H	
化合物 40	>C=O	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	
化合物 41	>C=O	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H	H	
化合物 42	>C=O	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H	H	
化合物 43	>C=O	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H	H	
化合物 44	>C=O	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H	H	
化合物 45	>C=CH ₂	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	
化合物 46	>C=CH ₂	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H	H	
化合物 47	>C=CH ₂	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H	H	
化合物 48	>C=CH ₂	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H	H	
化合物 49	>C=CH ₂	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H	H	
化合物 50	>C=NH	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	
化合物 51	>C=NH	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H	H	
化合物 52	>C=NH	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H	H	
化合物 53	>C=NH	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H	H	
化合物 54	>C=NH	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H	H	
化合物 55	>NCH ₃	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	
化合物 56	>NCH ₃	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H	H	
化合物 57	>NCH ₃	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H	H	
化合物 58	>NCH ₃	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H	H	
化合物 59	>NCH ₃	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H	H	
化合物 60	-O-	>B-	H	H	H	H	H	H	H	H	H	
化合物 61	-O-	>B-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H	H	
化合物 62	-O-	>B-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H	H	
化合物 63	-O-	>B-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H	H	
化合物 64	-O-	>B-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H	H	
化合物 65	-O-	>P (=O) -	H	H	H	H	H	H	H	H	H	
化合物 66	-O-	>P (=O) -	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H	H	
化合物 67	-O-	>P (=O) -	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H	H	
化合物 68	-O-	>P (=O) -	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H	H	
化合物 69	-O-	>P (=O) -	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H	H	
化合物 70	-O-	>N-	-O-	H	H	H	H	H	H	H	H	
化合物 71	-O-	>N-	-O-	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H	H	
化合物 72	-O-	>N-	-O-	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H	H	
化合物 73	-O-	>N-	-O-	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	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	

[表1-2]

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	H	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	CF ₃	CF ₃	H	H	H	H
化合物92	-O-	>N-	H	H	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H
化合物93	-O-	>N-	H	H	H	CF ₃	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, R³欄の-O-はR¹とR³が一緒になって-O-を形成していることを意味する。

(注) R², R⁴欄の-O-はR²とR⁴が一緒になって-O-を形成していることを意味する。

[0054]

[表2]

化合物 番号	一般式[2-1]										
	X^1, X^2, X^4, X^5	Y^1, Y^2	R^1, R^3	R^2, R^4	R^5, R^6, R^8, R^{14}	$R^{11}, R^{12}, R^{19}, R^{20}$	$R^7, L^{13}, L^{14}, R^{10}, R^{16}, L^{17}, L^{18}, R^{15}$	R^9, R^7, R^{14}, R^{15}	$R^{10}, R^{11}, R^{18}, R^{19}$	$R^5, L^{13}, L^{14}, R^{12}, R^{18}, L^{17}, L^{18}, R^{20}$	$R^7, L^{13}, L^{14}, R^{12}, R^{15}, L^{17}, L^{18}, R^{20}$
化合物 101	- O -	>N -	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	H				
化合物 102	- O -	>N -	H	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H				
化合物 103	- O -	>N -	H	H				-CH=CH-CH=CH-	H		
化合物 104	- O -	>N -	H	H				-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H	
化合物 105	- O -	>N -	H	H	-CH=CH-CH=CH-						H
化合物 106	- S -	>N -	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	H				
化合物 107	- S -	>N -	H	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H				
化合物 108	- S -	>N -	H	H				-CH=CH-CH=CH-	H		H
化合物 109	- S -	>N -	H	H				-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H	H
化合物 110	- S -	>N -	H	H				-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-		H
化合物 111	- SO ₂ -	>N -	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	H				
化合物 112	- SO ₂ -	>N -	H	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H				
化合物 113	- SO ₂ -	>N -	H	H				-CH=CH-CH=CH-	H		H
化合物 114	- SO ₂ -	>N -	H	H				-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H	H
化合物 115	- SO ₂ -	>N -	H	H	-CH=CH-CH=CH-				-CH=CH-CH=CH-		H
化合物 116	- CH ₂ -	>N -	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	H				
化合物 117	- CH ₂ -	>N -	H	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H				
化合物 118	- CH ₂ -	>N -	H	H				-CH=CH-CH=CH-	H		H
化合物 119	- CH ₂ -	>N -	H	H				-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H	H
化合物 120	- CH ₂ -	>N -	H	H	-CH=CH-CH=CH-				-CH=CH-CH=CH-		H
化合物 121	>C=O	>N -	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	H				
化合物 122	>C=O	>N -	H	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H				
化合物 123	>C=O	>N -	H	H				-CH=CH-CH=CH-	H		H
化合物 124	>C=O	>N -	H	H				-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H	H
化合物 125	>C=O	>N -	H	H	-CH=CH-CH=CH-				-CH=CH-CH=CH-		H
化合物 126	>C=CH ₂	>N -	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	H				
化合物 127	>C=CH ₂	>N -	H	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H				
化合物 128	>C=CH ₂	>N -	H	H				-CH=CH-CH=CH-	H		H
化合物 129	>C=CH ₂	>N -	H	H				-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H	H
化合物 130	>C=CH ₂	>N -	H	H	-CH=CH-CH=CH-				-CH=CH-CH=CH-		H
化合物 131	>C=NH	>N -	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	H				
化合物 132	>C=NH	>N -	H	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H				
化合物 133	>C=NH	>N -	H	H				-CH=CH-CH=CH-	H		H
化合物 134	>C=NH	>N -	H	H				-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H	H
化合物 135	>C=NH	>N -	H	H	-CH=CH-CH=CH-				-CH=CH-CH=CH-		H
化合物 136	>NCH ₃	>N -	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	H				
化合物 137	>NCH ₃	>N -	H	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H				
化合物 138	>NCH ₃	>N -	H	H				-CH=CH-CH=CH-	H		H
化合物 139	>NCH ₃	>N -	H	H				-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H	H
化合物 140	>NCH ₃	>N -	H	H	-CH=CH-CH=CH-				-CH=CH-CH=CH-		H
化合物 141	- O -	>B -	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	H				
化合物 142	- O -	>B -	H	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H				
化合物 143	- O -	>B -	H	H				-CH=CH-CH=CH-	H		H
化合物 144	- O -	>B -	H	H				-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H	H
化合物 145	- O -	>B -	H	H	-CH=CH-CH=CH-				-CH=CH-CH=CH-		H
化合物 146	- O -	>P(=O) -	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	H				
化合物 147	- O -	>P(=O) -	H	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H				
化合物 148	- O -	>P(=O) -	H	H				-CH=CH-CH=CH-	H		H
化合物 149	- O -	>P(=O) -	H	H				-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H	H
化合物 150	- O -	>P(=O) -	H	H	-CH=CH-CH=CH-				-CH=CH-CH=CH-		H
化合物 151	- O -	>N -	- O -	H	-CH=CH-CH=CH-	H	H				
化合物 152	- O -	>N -	- O -	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H				
化合物 153	- O -	>N -	- O -	H				-CH=CH-CH=CH-	H		H
化合物 154	- O -	>N -	- O -	H				-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H	H
化合物 155	- O -	>N -	- O -	H	-CH=CH-CH=CH-				-CH=CH-CH=CH-		H
化合物 156	- O -	>N -	- O -	- O -	-CH=CH-CH=CH-	H	H				
化合物 157	- O -	>N -	- O -	- O -	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H				
化合物 158	- O -	>N -	- O -	- O -				-CH=CH-CH=CH-	H		H
化合物 159	- O -	>N -	- O -	- O -				-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H	H
化合物 160	- O -	>N -	- O -	- O -	-CH=CH-CH=CH-				-CH=CH-CH=CH-		H

(注) R¹, R²欄の-OはR¹とR²が一緒になって-Oを形成していることを意味する。
 (注) R², R³欄の-OはR²とR³が一緒になって-Oを形成していることを意味する。

[0055]

[表3-1]

化合物 番号	一般式[2-2]										
	X ¹ ,X ³ ,X ⁴ ,X ⁴	Y ¹ ,Y ²	R ¹ ,R ³	R ² ,R ⁴	R ⁵ ,R ¹³	R ⁶ ,R ¹⁴	R ⁷ ,R ¹⁵	R ¹⁰ ,R ¹⁸	R ¹¹ ,R ¹⁹	R ¹² ,R ²⁰	L ¹¹ ,L ¹² ,L ¹⁵ ,L ¹⁶
化合物 201	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 202	-O-	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H	H
化合物 203	-O-	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H	H
化合物 204	-O-	>N-	H	H	H	H	CH ₃	H	H	H	H
化合物 205	-O-	>N-	H	H	H	H	C ₆ H ₅ O	C ₆ H ₅ O	H	H	H
化合物 206	-O-	>N-	H	H	H	H	C ₆ H ₅	C ₆ H ₅	H	H	H
化合物 207	-O-	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H	H
化合物 208	-O-	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H	H
化合物 209	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 210	-O-	>N-	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H	H	H	H
化合物 211	-O-	>N-	H	H	CH ₃ O	H	H	H	H	H	H
化合物 212	-O-	>N-	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H
化合物 213	-O-	>N-	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	C ₆ H ₅	C ₆ H ₅	H	H	H	H	H
化合物 215	-O-	>N-	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H	H	H	H
化合物 216	-O-	>N-	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
化合物 218	-O-	>N-	H	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 219	-O-	>N-	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 220	-O-	>N-	H	H	H	H	H	CH ₃	H	H	H
化合物 221	-O-	>N-	H	H	H	H	H	C ₆ H ₅ O	C ₆ H ₅ O	H	H
化合物 222	-O-	>N-	H	H	H	H	H	C ₆ H ₅	C ₆ H ₅	H	H
化合物 223	-O-	>N-	H	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 224	-O-	>N-	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 225	-S-	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 226	-S-	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H	H
化合物 227	-S-	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H	H
化合物 228	-S-	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H	H
化合物 229	-S-	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H	H
化合物 230	-SO ₂ -	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 231	-SO ₂ -	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H	H
化合物 232	-SO ₂ -	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H	H
化合物 233	-SO ₂ -	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H	H
化合物 234	-SO ₂ -	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H	H
化合物 235	-CH ₂ -	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 236	-CH ₂ -	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H	H
化合物 237	-CH ₂ -	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H	H
化合物 238	-CH ₂ -	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H	H
化合物 239	-CH ₂ -	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H	H
化合物 240	>C=O	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 241	>C=O	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H	H
化合物 242	>C=O	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H	H
化合物 243	>C=O	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H	H
化合物 244	>C=O	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H	H
化合物 245	>C=CH ₂	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 246	>C=CH ₂	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H	H
化合物 247	>C=CH ₂	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H	H
化合物 248	>C=CH ₂	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H	H
化合物 249	>C=CH ₂	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H	H
化合物 250	>C=NH	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 251	>C=NH	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H	H
化合物 252	>C=NH	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H	H
化合物 253	>C=NH	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H	H
化合物 254	>C=NH	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H	H
化合物 255	>NCH ₃	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 256	>NCH ₃	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H	H
化合物 257	>NCH ₃	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H	H
化合物 258	>NCH ₃	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H	H
化合物 259	>NCH ₃	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H	H
化合物 260	-O-	>B-	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 261	-O-	>B-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H	H
化合物 262	-O-	>B-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H	H
化合物 263	-O-	>B-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H	H
化合物 264	-O-	>B-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H	H
化合物 265	-O-	>P(=O)-	H	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 266	-O-	>P(=O)-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H	H
化合物 267	-O-	>P(=O)-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H	H
化合物 268	-O-	>P(=O)-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H	H
化合物 269	-O-	>P(=O)-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H	H
化合物 270	-O-	>N-	-O-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 271	-O-	>N-	-O-	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H	H
化合物 272	-O-	>N-	-O-	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H	H
化合物 273	-O-	>N-	-O-	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H	H
化合物 274	-O-	>N-	-O-	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H	H
化合物 275	-O-	>N-	-O-	-O-	H	H	H	H	H	H	H
化合物 276	-O-	>N-	-O-	-O-	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H	H
化合物 277	-O-	>N-	-O-	-O-	H	H	CH ₃ O	H	H	H	H
化合物 278	-O-	>N-	-O-	-O-	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H	H
化合物 279	-O-	>N-	-O-	-O-	H	H	CF ₃ O	H	H	H	H

[表3-2]

化合物 280	-O-	>N-	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H	H
化合物 281	-O-	>N-	H	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
化合物 282	-O-	>N-	H	H	H	H	CF ₃	H	H	H	H
化合物 283	-O-	>N-	H	H	H	H	H	CF ₃	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	H	CF ₃	CF ₃	H	H	H	H	H
化合物 287	-O-	>N-	H	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H	H
化合物 288	-O-	>N-	H	H	CF ₃	H	H	CF ₃	H	H	H
化合物 289	-O-	>N-	H	H	CF ₃	H	H	H	CF ₃	H	H
化合物 290	-O-	>N-	H	H	CF ₃	H	H	H	H	CF ₃	H
化合物 291	-O-	>N-	H	H	H	CF ₃	CF ₃	H	H	H	H
化合物 292	-O-	>N-	H	H	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H
化合物 293	-O-	>N-	H	H	H	CF ₃	H	H	CF ₃	H	H
化合物 294	-O-	>N-	H	H	H	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

(注) R¹,R³欄の-O-はR¹とR³が一緒になって-O-を形成していることを意味する。

(注) R²,R⁴欄の-O-はR²とR⁴が一緒になって-O-を形成していることを意味する。

[0056]

[表4]

化合物 番号	一般式[2-2]										
	X ¹ ,X ² ,X ³ ,X ⁴	Y ¹ ,Y ²	R ¹ ,R ²	R ² ,R ⁴	R ³ ,R ⁵ ,R ¹³ ,R ¹⁴	R ¹¹ ,R ¹² ,R ¹⁹ ,R ²⁰	L ¹¹ ,L ¹² ,R ² ,R ¹⁰ L ¹⁵ ,L ¹⁶ ,R ¹³ ,R ¹⁸	R ⁶ ,R ⁷ ,R ¹⁴ ,R ¹⁵	R ¹⁶ ,R ¹⁷ ,R ¹⁸ ,R ¹⁹	L ¹¹ ,L ¹² ,R ⁵ ,R ¹² L ¹⁶ ,L ¹⁶ ,R ¹³ ,R ²⁰	L ¹¹ ,L ¹² ,R ⁷ ,R ¹² L ¹⁶ ,L ¹⁶ ,R ¹³ ,R ²⁰
化合物 301	-O-	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	H				
化合物 302	-O-	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H				
化合物 303	-O-	>N-	H	H				-CH=CH-CH=CH-	H	H	
化合物 304	-O-	>N-	H	H				-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H	
化合物 305	-O-	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-						H
化合物 306	-S-	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	H				
化合物 307	-S-	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H				
化合物 308	-S-	>N-	H	H				-CH=CH-CH=CH-	H	H	
化合物 309	-S-	>N-	H	H				-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H
化合物 310	-S-	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-						H
化合物 311	-SO ₂ -	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	H				
化合物 312	-SO ₂ -	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H				
化合物 313	-SO ₂ -	>N-	H	H				-CH=CH-CH=CH-	H	H	
化合物 314	-SO ₂ -	>N-	H	H				-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H
化合物 315	-SO ₂ -	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-						H
化合物 316	-CH ₂ -	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	H				
化合物 317	-CH ₂ -	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H				
化合物 318	-CH ₂ -	>N-	H	H				-CH=CH-CH=CH-	H	H	
化合物 319	-CH ₂ -	>N-	H	H				-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H
化合物 320	-CH ₂ -	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-						H
化合物 321	>C=O	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	H				
化合物 322	>C=O	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H				
化合物 323	>C=O	>N-	H	H				-CH=CH-CH=CH-	H	H	
化合物 324	>C=O	>N-	H	H				-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H
化合物 325	>C=O	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-						H
化合物 326	>C=CH ₂	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	H				
化合物 327	>C=CH ₂	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H				
化合物 328	>C=CH ₂	>N-	H	H				-CH=CH-CH=CH-	H	H	
化合物 329	>C=CH ₂	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H
化合物 330	>C=CH ₂	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-						H
化合物 331	>C=NH	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	H				
化合物 332	>C=NH	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H				
化合物 333	>C=NH	>N-	H	H				-CH=CH-CH=CH-	H	H	
化合物 334	>C=NH	>N-	H	H				-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H
化合物 335	>C=NH	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-						H
化合物 336	>NCH ₃	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	H				
化合物 337	>NCH ₃	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H				
化合物 338	>NCH ₃	>N-	H	H				-CH=CH-CH=CH-	H	H	
化合物 339	>NCH ₃	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H
化合物 340	>NCH ₃	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-						H
化合物 341	-O-	>B-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	H				
化合物 342	-O-	>B-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H				
化合物 343	-O-	>B-	H	H				-CH=CH-CH=CH-	H	H	
化合物 344	-O-	>B-	H	H				-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H
化合物 345	-O-	>B-	H	H	-CH=CH-CH=CH-						H
化合物 346	-O-	>P(=O)-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	H				
化合物 347	-O-	>P(=O)-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H				
化合物 348	-O-	>P(=O)-	H	H				-CH=CH-CH=CH-	H	H	
化合物 349	-O-	>P(=O)-	H	H				-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H
化合物 350	-O-	>P(=O)-	H	H	-CH=CH-CH=CH-						H
化合物 351	-O-	>N-	-O-	-O-	-CH=CH-CH=CH-	H	H				
化合物 352	-O-	>N-	-O-	-O-	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H				
化合物 353	-O-	>N-	-O-	-O-				-CH=CH-CH=CH-	H	H	
化合物 354	-O-	>N-	-O-	-O-				-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H
化合物 355	-O-	>N-	-O-	-O-	-CH=CH-CH=CH-						H
化合物 356	-O-	>N-	-O-	-O-	-CH=CH-CH=CH-	H	H				
化合物 357	-O-	>N-	-O-	-O-	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H				
化合物 358	-O-	>N-	-O-	-O-				-CH=CH-CH=CH-	H	H	
化合物 359	-O-	>N-	-O-	-O-				-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H
化合物 360	-O-	>N-	-O-	-O-	-CH=CH-CH=CH-						H

(注) R¹,R²欄の-OはR¹とR²が一緒になって-Oを形成していることを意味する。
(注) R³,R⁴欄の-OはR³とR⁴が一緒になって-Oを形成していることを意味する。

[0057]

[表5-1]

化合物 番号	一般式[5]											
	X ¹ ,X ¹	L ¹ とL ² , L ⁵ とL ⁶	L ³ とL ⁴ , L ⁷ とL ⁸	Y ¹ ,Y ²	R ¹ ,R ¹	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-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 402	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 403	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 404	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	CH ₃	H	H	H
化合物 405	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	C ₆ H ₅ O	C ₆ H ₅ O	H	H
化合物 406	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	C ₆ H ₅	C ₆ H ₅	H	H
化合物 407	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 408	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 409	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 410	-O-	-O-	H	>N-	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H	H	H
化合物 411	-O-	-O-	H	>N-	H	H	CH ₃ O	H	H	H	H	H
化合物 412	-O-	-O-	H	>N-	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H
化合物 413	-O-	-O-	H	>N-	H	H	C ₆ H ₅ O	C ₆ H ₅ O	H	H	H	H
化合物 414	-O-	-O-	H	>N-	H	H	C ₆ H ₅	C ₆ H ₅	H	H	H	H
化合物 415	-O-	-O-	H	>N-	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H	H	H
化合物 416	-O-	-O-	H	>N-	H	H	CF ₃ O	H	H	H	H	H
化合物 417	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 418	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O
化合物 419	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H
化合物 420	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	H	CH ₃	H
化合物 421	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	H	C ₆ H ₅ O	C ₆ H ₅ O
化合物 422	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	H	C ₆ H ₅	C ₆ H ₅
化合物 423	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O
化合物 424	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H
化合物 425	-S-	-S-	H	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 426	-S-	-S-	H	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 427	-S-	-S-	H	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 428	-S-	-S-	H	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 429	-S-	-S-	H	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 430	-SO ₂ -	-SO ₂ -	H	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 431	-SO ₂ -	-SO ₂ -	H	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 432	-SO ₂ -	-SO ₂ -	H	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 433	-SO ₂ -	-SO ₂ -	H	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 434	-SO ₂ -	-SO ₂ -	H	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 435	-CH ₂ -	-CH ₂ -	H	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 436	-CH ₂ -	-CH ₂ -	H	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 437	-CH ₂ -	-CH ₂ -	H	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 438	-CH ₂ -	-CH ₂ -	H	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 439	-CH ₂ -	-CH ₂ -	H	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 440	>C=O	>C=O	H	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 441	>C=O	>C=O	H	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 442	>C=O	>C=O	H	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 443	>C=O	>C=O	H	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 444	>C=O	>C=O	H	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 445	>C=CH ₂	>C=CH ₂	H	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 446	>C=CH ₂	>C=CH ₂	H	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 447	>C=CH ₂	>C=CH ₂	H	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 448	>C=CH ₂	>C=CH ₂	H	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 449	>C=CH ₂	>C=CH ₂	H	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 450	>C=NH	>C=NH	H	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 451	>C=NH	>C=NH	H	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 452	>C=NH	>C=NH	H	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 453	>C=NH	>C=NH	H	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 454	>C=NH	>C=NH	H	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 455	>NCH ₃	>NCH ₃	H	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 456	>NCH ₃	>NCH ₃	H	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 457	>NCH ₃	>NCH ₃	H	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 458	>NCH ₃	>NCH ₃	H	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 459	>NCH ₃	>NCH ₃	H	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 460	-O-	-O-	H	>B-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 461	-O-	-O-	H	>B-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 462	-O-	-O-	H	>B-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 463	-O-	-O-	H	>B-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 464	-O-	-O-	H	>B-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 465	-O-	-O-	H	>P(=O)-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 466	-O-	-O-	H	>P(=O)-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 467	-O-	-O-	H	>P(=O)-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 468	-O-	-O-	H	>P(=O)-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 469	-O-	-O-	H	>P(=O)-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H

[表5-2]

化合物 470	- O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 471	- O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 472	- O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 473	- O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	CH ₃	H	H	H
化合物 474	- O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	C ₆ H ₅ O	C ₆ H ₅ O	H	H
化合物 475	- O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	C ₆ H ₅	C ₆ H ₅	H	H
化合物 476	- O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 477	- O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 478	- O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 479	- O-	H	-O-	>N-	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H	H	H
化合物 480	- O-	H	-O-	>N-	H	H	CH ₃ O	H	H	H	H	H
化合物 481	- O-	H	-O-	>N-	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H
化合物 482	- O-	H	-O-	>N-	H	H	C ₆ H ₅ O	C ₆ H ₅ O	H	H	H	H
化合物 483	- O-	H	-O-	>N-	H	H	C ₆ H ₅	C ₆ H ₅	H	H	H	H
化合物 484	- O-	H	-O-	>N-	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H	H	H
化合物 485	- O-	H	-O-	>N-	H	H	CF ₃ O	H	H	H	H	H
化合物 486	- O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 487	- O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O
化合物 488	- O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H
化合物 489	- O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	CH ₃	H
化合物 490	- O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	C ₆ H ₅ O	C ₆ H ₅ O
化合物 491	- O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	C ₆ H ₅	C ₆ H ₅
化合物 492	- O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O
化合物 493	- O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H
化合物 494	- S-	H	-S-	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 495	- S-	H	-S-	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 496	- S-	H	-S-	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 497	- S-	H	-S-	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 498	- S-	H	-S-	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 499	- SO ₂ -	H	-SO ₂ -	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 500	- SO ₂ -	H	-SO ₂ -	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 501	- SO ₂ -	H	-SO ₂ -	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 502	- SO ₂ -	H	-SO ₂ -	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 503	- SO ₂ -	H	-SO ₂ -	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 504	- CH ₂ -	H	-CH ₂ -	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 505	- CH ₂ -	H	-CH ₂ -	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 506	- CH ₂ -	H	-CH ₂ -	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 507	- CH ₂ -	H	-CH ₂ -	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 508	- CH ₂ -	H	-CH ₂ -	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 509	>C=O	H	>C=O	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 510	>C=O	H	>C=O	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 511	>C=O	H	>C=O	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 512	>C=O	H	>C=O	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 513	>C=O	H	>C=O	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 514	>C=CH ₂	H	>C=CH ₂	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 515	>C=CH ₂	H	>C=CH ₂	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 516	>C=CH ₂	H	>C=CH ₂	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 517	>C=CH ₂	H	>C=CH ₂	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 518	>C=CH ₂	H	>C=CH ₂	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 519	>C=NH	H	>C=NH	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 510	>C=NH	H	>C=NH	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 521	>C=NH	H	>C=NH	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 522	>C=NH	H	>C=NH	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 523	>C=NH	H	>C=NH	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 524	>NCH ₃	H	>NCH ₃	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 525	>NCH ₃	H	>NCH ₃	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 526	>NCH ₃	H	>NCH ₃	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 527	>NCH ₃	H	>NCH ₃	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 528	>NCH ₃	H	>NCH ₃	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 529	- O-	H	- O-	>B-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 530	- O-	H	- O-	>B-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 531	- O-	H	- O-	>B-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 532	- O-	H	- O-	>B-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 533	- O-	H	- O-	>B-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 534	- O-	H	- O-	>P (=O)-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 535	- O-	H	- O-	>P (=O)-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 536	- O-	H	- O-	>P (=O)-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 537	- O-	H	- O-	>P (=O)-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 538	- O-	H	- O-	>P (=O)-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H

[表5-3]

化合物 539	-O-	-O-	H	>N-	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
化合物 540	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	CF ₃	H	H	H	H
化合物 541	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	CF ₃	H	H	H
化合物 542	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	CF ₃	H	H
化合物 543	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	H	CF ₃	H
化合物 544	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	H	H	CF ₃
化合物 545	-O-	-O-	H	>N-	H	H	CF ₃	CF ₃	H	H	H	H
化合物 546	-O-	-O-	H	>N-	H	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H
化合物 547	-O-	-O-	H	>N-	H	H	CF ₃	H	H	CF ₃	H	H
化合物 548	-O-	-O-	H	>N-	H	H	CF ₃	H	H	H	CF ₃	H
化合物 549	-O-	-O-	H	>N-	H	H	CF ₃	H	H	H	H	CF ₃
化合物 550	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	CF ₃	CF ₃	H	H	H
化合物 551	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	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 ₃	CF ₃	H	H
化合物 555	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	CF ₃	H	CF ₃	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 ₃	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 ₃	H	H	H
化合物 568	-O-	H	-O-	>N-	H	H	CF ₃	H	H	CF ₃	H	H
化合物 569	-O-	H	-O-	>N-	H	H	CF ₃	H	H	H	CF ₃	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 ₃	H	CF ₃	H
化合物 577	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	CF ₃	H	H	CF ₃
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

[0058]

[表6-1]

化合物 番号	一般式[5]												
	X ¹ ,X ²	L ¹ とL ² L ³ ,L ⁴	L ³ とL ⁴ L ⁵ ,L ⁶	Y ¹ ,Y ²	R ¹ ,R ⁴	R ² ,R ³	R ⁵ ,R ⁶ とR ¹³ ,R ¹⁴	R ¹¹ ,R ¹² とR ¹⁹ ,R ²⁰	R ⁷ ,R ⁸ R ¹⁵ ,R ¹⁶	R ⁹ ,R ⁷ とR ¹⁴ ,R ¹⁵	R ¹⁰ ,R ¹¹ とR ¹⁸ ,R ¹⁹	R ⁹ ,R ¹² R ¹³ ,R ²⁰	R ⁷ ,R ¹² R ¹⁵ ,R ²⁰
化合物 601	-O-	-O-	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	H				
化合物 602	-O-	-O-	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH-CH-CH=CH-	H				
化合物 603	-O-	-O-	H	>N-	H	H			-CH=CH-CH=CH-	H			
化合物 604	-O-	-O-	H	>N-	H	H			-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H		
化合物 605	-O-	-O-	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-						H
化合物 606	-S-	-S-	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	H				
化合物 607	-S-	-S-	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH-CH-CH=CH-	H				
化合物 608	-S-	-S-	H	>N-	H	H				-CH=CH-CH=CH-	H		
化合物 609	-S-	-S-	H	>N-	H	H				-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H	
化合物 610	-S-	-S-	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-						H
化合物 611	-SO ₂ -	-SO ₂ -	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	H				
化合物 612	-SO ₂ -	-SO ₂ -	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH-CH-CH=CH-	H				
化合物 613	-SO ₂ -	-SO ₂ -	H	>N-	H	H				-CH=CH-CH=CH-	H		H
化合物 614	-SO ₂ -	-SO ₂ -	H	>N-	H	H				-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H	
化合物 615	-SO ₂ -	-SO ₂ -	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-						H
化合物 616	-CH ₂ -	-CH ₂ -	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	H				
化合物 617	-CH ₂ -	-CH ₂ -	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH-CH-CH=CH-	H				
化合物 618	-CH ₂ -	-CH ₂ -	H	>N-	H	H				-CH=CH-CH=CH-	H		
化合物 619	-CH ₂ -	-CH ₂ -	H	>N-	H	H				-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H	
化合物 620	-CH ₂ -	-CH ₂ -	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-						H
化合物 621	>C=O	>C=O	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	H				
化合物 622	>C=O	>C=O	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH-CH-CH=CH-	H				
化合物 623	>C=O	>C=O	H	>N-	H	H				-CH=CH-CH=CH-	H		H
化合物 624	>C=O	>C=O	H	>N-	H	H				-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H	
化合物 625	>C=O	>C=O	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-						H
化合物 626	>C=CH ₂	>C=CH ₂	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	H				
化合物 627	>C=CH ₂	>C=CH ₂	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH-CH-CH=CH-	H				
化合物 628	>C=CH ₂	>C=CH ₂	H	>N-	H	H				-CH=CH-CH=CH-	H		H
化合物 629	>C=CH ₂	>C=CH ₂	H	>N-	H	H				-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H	
化合物 630	>C=CH ₂	>C=CH ₂	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-						H
化合物 631	>C=NH	>C=NH	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	H				
化合物 632	>C=NH	>C=NH	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH-CH-CH=CH-	H				
化合物 633	>C=NH	>C=NH	H	>N-	H	H				-CH=CH-CH=CH-	H		H
化合物 634	>C=NH	>C=NH	H	>N-	H	H				-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H	
化合物 635	>C=NH	>C=NH	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-						H
化合物 636	>NCH ₃	>NCH ₃	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	H				
化合物 637	>NCH ₃	>NCH ₃	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH-CH-CH=CH-	H				
化合物 638	>NCH ₃	>NCH ₃	H	>N-	H	H				-CH=CH-CH=CH-	H		H
化合物 639	>NCH ₃	>NCH ₃	H	>N-	H	H				-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H	
化合物 640	>NCH ₃	>NCH ₃	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-						H
化合物 641	-O-	-O-	H	>B-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	H				
化合物 642	-O-	-O-	H	>B-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH-CH-CH=CH-	H				
化合物 643	-O-	-O-	H	>B-	H	H				-CH=CH-CH=CH-	H		H
化合物 644	-O-	-O-	H	>B-	H	H				-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H	
化合物 645	-O-	-O-	H	>B-	H	H	-CH=CH-CH=CH-						H
化合物 646	-O-	-O-	H	>P(=O)-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	H				
化合物 647	-O-	-O-	H	>P(=O)-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH-CH-CH=CH-	H				
化合物 648	-O-	-O-	H	>P(=O)-	H	H				-CH=CH-CH=CH-	H		H
化合物 649	-O-	-O-	H	>P(=O)-	H	H				-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H	
化合物 650	-O-	-O-	H	>P(=O)-	H	H	-CH=CH-CH=CH-						H

[表7-1]

化合物 番号	一般式[6]											
	X ¹ ,X ⁴	L ¹ とL ² , L ⁵ とL ⁶	L ³ とL ⁴ , L ⁷ とL ⁸	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 701	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 702	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 703	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 704	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	CH ₃	H	H	H
化合物 705	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	C ₆ H ₅ O	C ₆ H ₅ O	H	H
化合物 706	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	C ₆ H ₅	C ₆ H ₅	H	H
化合物 707	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 708	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 709	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 710	-O-	-O-	H	>N-	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H	H	H
化合物 711	-O-	-O-	H	>N-	H	H	CH ₃ O	H	H	H	H	H
化合物 712	-O-	-O-	H	>N-	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H
化合物 713	-O-	-O-	H	>N-	H	H	C ₆ H ₅ O	C ₆ H ₅ O	H	H	H	H
化合物 714	-O-	-O-	H	>N-	H	H	C ₆ H ₅	C ₆ H ₅	H	H	H	H
化合物 715	-O-	-O-	H	>N-	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H	H	H
化合物 716	-O-	-O-	H	>N-	H	H	CF ₃ O	H	H	H	H	H
化合物 717	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 718	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O
化合物 719	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H
化合物 720	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	H	CH ₃	H
化合物 721	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	H	C ₆ H ₅ O	C ₆ H ₅ O
化合物 722	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	H	C ₆ H ₅	C ₆ H ₅
化合物 723	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O
化合物 724	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H
化合物 725	-S-	-S-	H	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 726	-S-	-S-	H	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 727	-S-	-S-	H	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 728	-S-	-S-	H	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 729	-S-	-S-	H	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 730	-SO ₂ -	-SO ₂ -	H	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 731	-SO ₂ -	-SO ₂ -	H	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 732	-SO ₂ -	-SO ₂ -	H	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 733	-SO ₂ -	-SO ₂ -	H	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 734	-SO ₂ -	-SO ₂ -	H	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 735	-CH ₂ -	-CH ₂ -	H	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 736	-CH ₂ -	-CH ₂ -	H	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 737	-CH ₂ -	-CH ₂ -	H	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 738	-CH ₂ -	-CH ₂ -	H	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 739	-CH ₂ -	-CH ₂ -	H	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 740	>C=O	>C=O	H	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 741	>C=O	>C=O	H	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 742	>C=O	>C=O	H	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 743	>C=O	>C=O	H	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 744	>C=O	>C=O	H	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 745	>C=CH ₂	>C=CH ₂	H	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 746	>C=CH ₂	>C=CH ₂	H	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 747	>C=CH ₂	>C=CH ₂	H	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 748	>C=CH ₂	>C=CH ₂	H	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 749	>C=CH ₂	>C=CH ₂	H	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 750	>C=NH	>C=NH	H	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 751	>C=NH	>C=NH	H	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 752	>C=NH	>C=NH	H	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 753	>C=NH	>C=NH	H	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 754	>C=NH	>C=NH	H	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 755	>NCH ₃	>NCH ₃	H	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 756	>NCH ₃	>NCH ₃	H	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 757	>NCH ₃	>NCH ₃	H	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 758	>NCH ₃	>NCH ₃	H	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 759	>NCH ₃	>NCH ₃	H	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 760	-O-	-O-	H	>B-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 761	-O-	-O-	H	>B-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 762	-O-	-O-	H	>B-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 763	-O-	-O-	H	>B-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 764	-O-	-O-	H	>B-	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
化合物 766	-O-	-O-	H	>P(=O)-	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	CH ₃ O	H	H	H
化合物 768	-O-	-O-	H	>P(=O)-	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	CF ₃ O	H	H	H

[表7-2]

化合物 770	- O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 771	- O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 772	- O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 773	- O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	CH ₃	H	H	H
化合物 774	- O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	C ₆ H ₅ O	C ₆ H ₅ O	H	H
化合物 775	- O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	C ₆ H ₅	C ₆ H ₅	H	H
化合物 776	- O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 777	- O-	H	-O-	>N-	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
化合物 779	- O-	H	-O-	>N-	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H	H	H
化合物 780	- O-	H	-O-	>N-	H	H	CH ₃ O	H	H	H	H	H
化合物 781	- O-	H	-O-	>N-	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H
化合物 782	- O-	H	-O-	>N-	H	H	C ₆ H ₅ O	C ₆ H ₅ O	H	H	H	H
化合物 783	- O-	H	-O-	>N-	H	H	C ₆ H ₅	C ₆ H ₅	H	H	H	H
化合物 784	- O-	H	-O-	>N-	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H	H	H
化合物 785	- O-	H	-O-	>N-	H	H	CF ₃ O	H	H	H	H	H
化合物 786	- O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 787	- O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O
化合物 788	- O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H
化合物 789	- O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	CH ₃	H
化合物 790	- O-	H	-O-	>N-	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	C ₆ H ₅	C ₆ H ₅
化合物 792	- O-	H	-O-	>N-	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	CF ₃ O	H
化合物 794	- S-	H	-S-	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 795	- S-	H	-S-	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 796	- S-	H	-S-	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 797	- S-	H	-S-	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 798	- S-	H	-S-	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 799	- SO ₂ -	H	-SO ₂ -	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 800	- SO ₂ -	H	-SO ₂ -	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 801	- SO ₂ -	H	-SO ₂ -	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 802	- SO ₂ -	H	-SO ₂ -	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 803	- SO ₂ -	H	-SO ₂ -	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 804	- CH ₂ -	H	-CH ₂ -	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 805	- CH ₂ -	H	-CH ₂ -	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 806	- CH ₂ -	H	-CH ₂ -	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 807	- CH ₂ -	H	-CH ₂ -	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 808	- CH ₂ -	H	-CH ₂ -	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 809	>C=O	H	>C=O	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 810	>C=O	H	>C=O	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 811	>C=O	H	>C=O	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 812	>C=O	H	>C=O	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 813	>C=O	H	>C=O	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 814	>C=CH ₂	H	>C=CH ₂	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 815	>C=CH ₂	H	>C=CH ₂	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 816	>C=CH ₂	H	>C=CH ₂	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 817	>C=CH ₂	H	>C=CH ₂	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 818	>C=CH ₂	H	>C=CH ₂	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 819	>C=NH	H	>C=NH	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 820	>C=NH	H	>C=NH	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 821	>C=NH	H	>C=NH	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 822	>C=NH	H	>C=NH	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 823	>C=NH	H	>C=NH	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 824	>NCH ₃	H	>NCH ₃	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 825	>NCH ₃	H	>NCH ₃	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 826	>NCH ₃	H	>NCH ₃	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 827	>NCH ₃	H	>NCH ₃	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 828	>NCH ₃	H	>NCH ₃	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 829	- O-	H	-O-	>B-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 830	- O-	H	-O-	>B-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 831	- O-	H	-O-	>B-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 832	- O-	H	-O-	>B-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 833	- O-	H	-O-	>B-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 834	- O-	H	-O-	>P (=O)-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 835	- O-	H	-O-	>P (=O)-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 836	- O-	H	-O-	>P (=O)-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 837	- O-	H	-O-	>P (=O)-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 838	- O-	H	-O-	>P (=O)-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H

[表7-3]

化合物 839	-O-	-O-	H	>N-	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
化合物 840	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	CF ₃	H	H	H	H
化合物 841	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	CF ₃	H	H	H
化合物 842	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	CF ₃	H	H
化合物 843	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	H	CF ₃	H
化合物 844	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	H	H	CF ₃
化合物 845	-O-	-O-	H	>N-	H	H	CF ₃	CF ₃	H	H	H	H
化合物 846	-O-	-O-	H	>N-	H	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H
化合物 847	-O-	-O-	H	>N-	H	H	CF ₃	H	H	CF ₃	H	H
化合物 848	-O-	-O-	H	>N-	H	H	CF ₃	H	H	H	CF ₃	H
化合物 849	-O-	-O-	H	>N-	H	H	CF ₃	H	H	H	H	CF ₃
化合物 850	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	CF ₃	CF ₃	H	H	H
化合物 851	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H
化合物 852	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	CF ₃	H	H	CF ₃	H
化合物 853	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	CF ₃	H	H	H	CF ₃
化合物 854	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	CF ₃	CF ₃	H	H
化合物 855	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	CF ₃	H	CF ₃	H
化合物 856	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	CF ₃	H	H	CF ₃
化合物 857	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	CF ₃	CF ₃	H
化合物 858	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	CF ₃	H	CF ₃
化合物 859	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	H	CF ₃	CF ₃
化合物 860	-O-	H	-O-	>N-	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
化合物 862	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	CF ₃	H	H	H
化合物 863	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	H	CF ₃	H	H
化合物 864	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	CF ₃	H
化合物 865	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	H	CF ₃
化合物 866	-O-	H	-O-	>N-	H	H	CF ₃	CF ₃	H	H	H	H
化合物 867	-O-	H	-O-	>N-	H	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H
化合物 868	-O-	H	-O-	>N-	H	H	CF ₃	H	H	CF ₃	H	H
化合物 869	-O-	H	-O-	>N-	H	H	CF ₃	H	H	H	CF ₃	H
化合物 870	-O-	H	-O-	>N-	H	H	CF ₃	H	H	H	H	CF ₃
化合物 871	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	CF ₃	CF ₃	H	H	H
化合物 872	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H
化合物 873	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	CF ₃	H	H	CF ₃	H
化合物 874	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	CF ₃	H	H	H	CF ₃
化合物 875	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	CF ₃	CF ₃	H	H
化合物 876	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	CF ₃	H	CF ₃	H
化合物 877	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	CF ₃	H	H	CF ₃
化合物 878	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	H	CF ₃	CF ₃	H
化合物 879	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	H	CF ₃	H	CF ₃
化合物 880	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	CF ₃	CF ₃

[0060]

[表8-1]

化合物 番号	一般式[6]												
	X ¹ ,X ⁴	L ¹ L ² L ³ L ⁶	L ³ L ⁴ L ⁷ L ⁸	Y ¹ ,Y ²	R ¹ ,R ⁴	R ² ,R ³	R ⁵ ,R ⁶ とR ¹³ ,R ¹⁴	R ¹¹ ,R ¹² とR ¹⁸ ,R ²⁰	R ⁷ ,R ¹⁰ R ¹⁵ ,R ¹⁶	R ⁹ ,R ⁷ とR ¹⁴ ,R ¹⁵	R ¹⁰ ,R ¹¹ とR ¹⁸ ,R ¹⁹	R ⁵ ,R ¹² R ¹³ ,R ²⁰	R ⁷ ,R ¹² R ¹⁵ ,R ²⁰
化合物 901	-O-	-O-	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	H				
化合物 902	-O-	-O-	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H				
化合物 903	-O-	-O-	H	>N-	H	H			-CH=CH-CH=CH-	H	H		
化合物 904	-O-	-O-	H	>N-	H	H			-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H	H	
化合物 905	-O-	-O-	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-			-CH=CH-CH=CH-			H
化合物 906	-S-	-S-	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	H				
化合物 907	-S-	-S-	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H				
化合物 908	-S-	-S-	H	>N-	H	H			-CH=CH-CH=CH-	H	H		
化合物 909	-S-	-S-	H	>N-	H	H			-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H	H
化合物 910	-S-	-S-	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-			-CH=CH-CH=CH-			H
化合物 911	-SO ₂ -	-SO ₂ -	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	H				
化合物 912	-SO ₂ -	-SO ₂ -	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H				
化合物 913	-SO ₂ -	-SO ₂ -	H	>N-	H	H			-CH=CH-CH=CH-	H	H		
化合物 914	-SO ₂ -	-SO ₂ -	H	>N-	H	H			-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H	H
化合物 915	-SO ₂ -	-SO ₂ -	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-			-CH=CH-CH=CH-			H
化合物 916	-CH ₂ -	-CH ₂ -	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	H				
化合物 917	-CH ₂ -	-CH ₂ -	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H				
化合物 918	-CH ₂ -	-CH ₂ -	H	>N-	H	H			-CH=CH-CH=CH-	H	H		
化合物 919	-CH ₂ -	-CH ₂ -	H	>N-	H	H			-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H	H
化合物 920	-CH ₂ -	-CH ₂ -	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-			-CH=CH-CH=CH-			H
化合物 921	>C=O	>C=O	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	H				
化合物 922	>C=O	>C=O	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H				
化合物 923	>C=O	>C=O	H	>N-	H	H			-CH=CH-CH=CH-	H	H		
化合物 924	>C=O	>C=O	H	>N-	H	H			-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H	H
化合物 925	>C=O	>C=O	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-			-CH=CH-CH=CH-			H
化合物 926	>C=CH ₂	>C=CH ₂	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	H				
化合物 927	>C=CH ₂	>C=CH ₂	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H				
化合物 928	>C=CH ₂	>C=CH ₂	H	>N-	H	H			-CH=CH-CH=CH-	H	H		
化合物 929	>C=CH ₂	>C=CH ₂	H	>N-	H	H			-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H	H
化合物 930	>C=CH ₂	>C=CH ₂	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-			-CH=CH-CH=CH-			H
化合物 931	>C=NH	>C=NH	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	H				
化合物 932	>C=NH	>C=NH	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H				
化合物 933	>C=NH	>C=NH	H	>N-	H	H			-CH=CH-CH=CH-	H	H		
化合物 934	>C=NH	>C=NH	H	>N-	H	H			-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H	H
化合物 935	>C=NH	>C=NH	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-			-CH=CH-CH=CH-			H
化合物 936	>NCH ₃	>NCH ₃	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	H				
化合物 937	>NCH ₃	>NCH ₃	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H				
化合物 938	>NCH ₃	>NCH ₃	H	>N-	H	H			-CH=CH-CH=CH-	H	H		
化合物 939	>NCH ₃	>NCH ₃	H	>N-	H	H			-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H	H
化合物 940	>NCH ₃	>NCH ₃	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-			-CH=CH-CH=CH-			H
化合物 941	-O-	-O-	H	>B-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	H				
化合物 942	-O-	-O-	H	>B-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H				
化合物 943	-O-	-O-	H	>B-	H	H			-CH=CH-CH=CH-	H	H		
化合物 944	-O-	-O-	H	>B-	H	H			-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H	H
化合物 945	-O-	-O-	H	>B-	H	H	-CH=CH-CH=CH-			-CH=CH-CH=CH-			H
化合物 946	-O-	-O-	H	>P(=O)-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	H				
化合物 947	-O-	-O-	H	>P(=O)-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H				
化合物 948	-O-	-O-	H	>P(=O)-	H	H			-CH=CH-CH=CH-	H	H		
化合物 949	-O-	-O-	H	>P(=O)-	H	H			-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H	H
化合物 950	-O-	-O-	H	>P(=O)-	H	H	-CH=CH-CH=CH-			-CH=CH-CH=CH-			H

[表9-1]

化合物 番号	一般式[7]											
	X ¹ ,X ⁴ ,X ⁷	L ¹ とL ² , L ⁵ とL ⁶ , L ⁸ とL ¹⁰	L ³ とL ⁴ , L ⁷ とL ⁸ , L ¹¹ とL ¹²	Y ¹ ,Y ² , Y ³	R ¹ ,R ⁴ , R ⁴²	R ² ,R ³ , R ⁴¹	R ⁵ ,R ¹³ , R ⁴³	R ⁶ ,R ¹⁴ , R ⁴⁴	R ⁷ ,R ¹⁵ , R ⁴⁵	R ¹⁰ ,R ¹⁸ , R ⁴⁸	R ¹¹ ,R ¹⁹ , R ⁴⁷	R ¹² ,R ²⁰ , R ⁴⁶
化合物 1001	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 1002	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 1003	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 1004	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	CH ₃	H	H	H
化合物 1005	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	C ₆ H ₅ O	C ₆ H ₅ O	H	H
化合物 1006	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	C ₆ H ₅	C ₆ H ₅	H	H
化合物 1007	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 1008	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 1009	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 1010	-O-	-O-	H	>N-	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H	H	H
化合物 1011	-O-	-O-	H	>N-	H	H	CH ₃ O	H	H	H	H	H
化合物 1012	-O-	-O-	H	>N-	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H
化合物 1013	-O-	-O-	H	>N-	H	H	C ₆ H ₅ O	C ₆ H ₅ O	H	H	H	H
化合物 1014	-O-	-O-	H	>N-	H	H	C ₆ H ₅	C ₆ H ₅	H	H	H	H
化合物 1015	-O-	-O-	H	>N-	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H	H	H
化合物 1016	-O-	-O-	H	>N-	H	H	CF ₃ O	H	H	H	H	H
化合物 1017	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 1018	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H
化合物 1019	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H
化合物 1020	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	CH ₃	H	H
化合物 1021	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	C ₆ H ₅ O	C ₆ H ₅ O	H
化合物 1022	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	C ₆ H ₅	C ₆ H ₅	H
化合物 1023	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H
化合物 1024	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H
化合物 1025	-S-	-S-	H	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 1026	-S-	-S-	H	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 1027	-S-	-S-	H	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 1028	-S-	-S-	H	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 1029	-S-	-S-	H	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 1030	-SO ₂ -	-SO ₂ -	H	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 1031	-SO ₂ -	-SO ₂ -	H	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 1032	-SO ₂ -	-SO ₂ -	H	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 1033	-SO ₂ -	-SO ₂ -	H	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 1034	-SO ₂ -	-SO ₂ -	H	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 1035	-CH ₂ -	-CH ₂ -	H	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 1036	-CH ₂ -	-CH ₂ -	H	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 1037	-CH ₂ -	-CH ₂ -	H	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 1038	-CH ₂ -	-CH ₂ -	H	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 1039	-CH ₂ -	-CH ₂ -	H	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 1040	>C=O	>C=O	H	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 1041	>C=O	>C=O	H	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 1042	>C=O	>C=O	H	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 1043	>C=O	>C=O	H	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 1044	>C=O	>C=O	H	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 1045	>C=CH ₂	>C=CH ₂	H	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 1046	>C=CH ₂	>C=CH ₂	H	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 1047	>C=CH ₂	>C=CH ₂	H	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 1048	>C=CH ₂	>C=CH ₂	H	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 1049	>C=CH ₂	>C=CH ₂	H	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 1050	>C=NH	>C=NH	H	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 1051	>C=NH	>C=NH	H	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 1052	>C=NH	>C=NH	H	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 1053	>C=NH	>C=NH	H	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 1054	>C=NH	>C=NH	H	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 1055	>NCH ₃	>NCH ₃	H	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 1056	>NCH ₃	>NCH ₃	H	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 1057	>NCH ₃	>NCH ₃	H	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 1058	>NCH ₃	>NCH ₃	H	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 1059	>NCH ₃	>NCH ₃	H	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 1060	-O-	-O-	H	>B-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 1061	-O-	-O-	H	>B-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 1062	-O-	-O-	H	>B-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 1063	-O-	-O-	H	>B-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 1064	-O-	-O-	H	>B-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 1065	-O-	-O-	H	>P(=O)-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 1066	-O-	-O-	H	>P(=O)-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 1067	-O-	-O-	H	>P(=O)-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 1068	-O-	-O-	H	>P(=O)-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 1069	-O-	-O-	H	>P(=O)-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H

[表9-2]

化合物 1070	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 1071	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 1072	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 1073	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	CH ₃	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
化合物 1075	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	C ₆ H ₅	C ₆ H ₅	H	H
化合物 1076	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 1077	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 1078	-O-	H	-O-	>N-	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
化合物 1080	-O-	H	-O-	>N-	H	H	CH ₃ O	H	H	H	H	H
化合物 1081	-O-	H	-O-	>N-	H	H	CH ₃	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
化合物 1083	-O-	H	-O-	>N-	H	H	C ₆ H ₅	C ₆ H ₅	H	H	H	H
化合物 1084	-O-	H	-O-	>N-	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H	H	H
化合物 1085	-O-	H	-O-	>N-	H	H	CF ₃ O	H	H	H	H	H
化合物 1086	-O-	H	-O-	>N-	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
化合物 1088	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H
化合物 1089	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	CH ₃	H
化合物 1090	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	C ₆ H ₅ O	C ₆ H ₅ O
化合物 1091	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	C ₆ H ₅	C ₆ H ₅
化合物 1092	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O
化合物 1093	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	CF ₃ O	H
化合物 1094	-S-	H	-S-	>N-	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
化合物 1096	-S-	H	-S-	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 1097	-S-	H	-S-	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 1098	-S-	H	-S-	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 1099	-SO ₂ -	H	-SO ₂ -	>N-	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
化合物 1101	-SO ₂ -	H	-SO ₂ -	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	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
化合物 1103	-SO ₂ -	H	-SO ₂ -	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 1104	-CH ₂ -	H	-CH ₂ -	>N-	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
化合物 1106	-CH ₂ -	H	-CH ₂ -	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	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
化合物 1108	-CH ₂ -	H	-CH ₂ -	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 1109	>C=O	H	>C=O	>N-	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
化合物 1111	>C=O	H	>C=O	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 1112	>C=O	H	>C=O	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 1113	>C=O	H	>C=O	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 1114	>C=CH ₂	H	>C=CH ₂	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 1115	>C=CH ₂	H	>C=CH ₂	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 1116	>C=CH ₂	H	>C=CH ₂	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 1117	>C=CH ₂	H	>C=CH ₂	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 1118	>C=CH ₂	H	>C=CH ₂	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 1119	>C=NH	H	>C=NH	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 1120	>C=NH	H	>C=NH	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 1121	>C=NH	H	>C=NH	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 1122	>C=NH	H	>C=NH	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 1123	>C=NH	H	>C=NH	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 1124	>NCH ₃	H	>NCH ₃	>N-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 1125	>NCH ₃	H	>NCH ₃	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 1126	>NCH ₃	H	>NCH ₃	>N-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 1127	>NCH ₃	H	>NCH ₃	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 1128	>NCH ₃	H	>NCH ₃	>N-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 1129	-O-	H	-O-	>B-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 1130	-O-	H	-O-	>B-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 1131	-O-	H	-O-	>B-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 1132	-O-	H	-O-	>B-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 1133	-O-	H	-O-	>B-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H
化合物 1134	-O-	H	-O-	>P(=O)-	H	H	H	H	H	H	H	H
化合物 1135	-O-	H	-O-	>P(=O)-	H	H	H	H	CH ₃ O	CH ₃ O	H	H
化合物 1136	-O-	H	-O-	>P(=O)-	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
化合物 1137	-O-	H	-O-	>P(=O)-	H	H	H	H	CF ₃ O	CF ₃ O	H	H
化合物 1138	-O-	H	-O-	>P(=O)-	H	H	H	H	CF ₃ O	H	H	H

[表9-3]

化合物 1139	-O-	-O-	H	>N-	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
化合物 1140	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	CF ₃	H	H	H	H
化合物 1141	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	CF ₃	H	H	H
化合物 1142	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	CF ₃	H	H
化合物 1143	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	H	CF ₃	H
化合物 1144	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	H	H	CF ₃
化合物 1145	-O-	-O-	H	>N-	H	H	CF ₃	CF ₃	H	H	H	H
化合物 1146	-O-	-O-	H	>N-	H	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H
化合物 1147	-O-	-O-	H	>N-	H	H	CF ₃	H	H	CF ₃	H	H
化合物 1148	-O-	-O-	H	>N-	H	H	CF ₃	H	H	H	CF ₃	H
化合物 1149	-O-	-O-	H	>N-	H	H	CF ₃	H	H	H	H	CF ₃
化合物 1150	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	CF ₃	CF ₃	H	H	H
化合物 1151	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	CF ₃	H	H
化合物 1152	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	CF ₃	H	H	CF ₃	H
化合物 1153	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	CF ₃	H	H	H	CF ₃
化合物 1154	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	CF ₃	CF ₃	H	H
化合物 1155	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	CF ₃	H	CF ₃	H
化合物 1156	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	CF ₃	H	H	CF ₃
化合物 1157	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	CF ₃	CF ₃	H
化合物 1158	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	CF ₃	H	CF ₃
化合物 1159	-O-	-O-	H	>N-	H	H	H	H	H	H	CF ₃	CF ₃
化合物 1160	-O-	H	-O-	>N-	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
化合物 1161	-O-	H	-O-	>N-	H	H	CF ₃	H	H	H	H	H
化合物 1162	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	CF ₃	H	H	H
化合物 1163	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	H	CF ₃	H	H
化合物 1164	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	CF ₃	H
化合物 1165	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	H	CF ₃
化合物 1166	-O-	H	-O-	>N-	H	H	CF ₃	CF ₃	H	H	H	H
化合物 1167	-O-	H	-O-	>N-	H	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H	H
化合物 1168	-O-	H	-O-	>N-	H	H	CF ₃	H	H	CF ₃	H	H
化合物 1169	-O-	H	-O-	>N-	H	H	CF ₃	H	H	H	CF ₃	H
化合物 1170	-O-	H	-O-	>N-	H	H	CF ₃	H	H	H	H	CF ₃
化合物 1171	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	CF ₃	CF ₃	H	H	H
化合物 1172	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	CF ₃	H	CF ₃	H	H
化合物 1173	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	CF ₃	H	H	CF ₃	H
化合物 1174	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	CF ₃	H	H	H	CF ₃
化合物 1175	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	CF ₃	CF ₃	H	H
化合物 1176	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	CF ₃	H	CF ₃	H
化合物 1177	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	CF ₃	H	H	CF ₃
化合物 1178	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	H	CF ₃	CF ₃	H
化合物 1179	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	H	CF ₃	H	CF ₃
化合物 1180	-O-	H	-O-	>N-	H	H	H	H	H	H	CF ₃	CF ₃

[0062]

[表10-1]

化合物 番号	一般式[7]												
	X^1, X^4, X^7	$L^1, L^2, L^3, L^4, L^5, L^6, L^7, L^8, L^9, L^{10}$	$L^2, L^4, L^5, L^6, L^7, L^8, L^9, L^{10}$	Y^1, Y^2, Y^3	R^1, R^4, R^{12}	R^2, R^3, R^{11}	$R^5, R^6, R^7, R^8, R^9, R^{10}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, R^{18}, R^{19}, R^{20}$	$R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, R^{18}, R^{19}, R^{20}$	$R^7, R^{10}, R^{13}, R^{16}, R^{19}, R^{20}$	$R^5, R^7, R^8, R^9, R^{10}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, R^{18}, R^{19}, R^{20}$	$R^{10}, R^{11}, R^{14}, R^{15}, R^{18}, R^{19}, R^{20}$	$R^1, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, R^{18}, R^{19}, R^{20}$	$R^1, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, R^{16}, R^{17}, R^{18}, R^{19}, R^{20}$
化合物 1201	-O-	-O-	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	H				
化合物 1202	-O-	-O-	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H				
化合物 1203	-O-	-O-	H	>N-	H	H				-CH=CH-CH=CH-	H	H	
化合物 1204	-O-	-O-	H	>N-	H	H				-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H	
化合物 1205	-O-	-O-	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-						H
化合物 1206	-S-	-S-	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	H				
化合物 1207	-S-	-S-	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H				
化合物 1208	-S-	-S-	H	>N-	H	H				-CH=CH-CH=CH-	H	H	
化合物 1209	-S-	-S-	H	>N-	H	H				-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H	
化合物 1210	-S-	-S-	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-						H
化合物 1211	-SO ₂ -	-SO ₂ -	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	H				
化合物 1212	-SO ₂ -	-SO ₂ -	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H				
化合物 1213	-SO ₂ -	-SO ₂ -	H	>N-	H	H				-CH=CH-CH=CH-	H	H	
化合物 1214	-SO ₂ -	-SO ₂ -	H	>N-	H	H				-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H	
化合物 1215	-SO ₂ -	-SO ₂ -	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-						H
化合物 1216	-CH ₂ -	-CH ₂ -	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-						H
化合物 1217	-CH ₂ -	-CH ₂ -	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H				
化合物 1218	-CH ₂ -	-CH ₂ -	H	>N-	H	H				-CH=CH-CH=CH-	H	H	
化合物 1219	-CH ₂ -	-CH ₂ -	H	>N-	H	H				-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H	
化合物 1220	-CH ₂ -	-CH ₂ -	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-						H
化合物 1221	>C=O	>C=O	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	H				
化合物 1222	>C=O	>C=O	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H				
化合物 1223	>C=O	>C=O	H	>N-	H	H				-CH=CH-CH=CH-	H	H	
化合物 1224	>C=O	>C=O	H	>N-	H	H				-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H	
化合物 1225	>C=O	>C=O	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-						H
化合物 1226	>O=CH ₂	>O=CH ₂	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	H				
化合物 1227	>O=CH ₂	>O=CH ₂	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H				
化合物 1228	>O=CH ₂	>O=CH ₂	H	>N-	H	H				-CH=CH-CH=CH-	H	H	
化合物 1229	>O=CH ₂	>O=CH ₂	H	>N-	H	H				-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H	
化合物 1230	>O=CH ₂	>O=CH ₂	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-						H
化合物 1231	>C=NH	>C=NH	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	H				
化合物 1232	>C=NH	>C=NH	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H				
化合物 1233	>C=NH	>C=NH	H	>N-	H	H				-CH=CH-CH=CH-	H	H	
化合物 1234	>C=NH	>C=NH	H	>N-	H	H				-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H	
化合物 1235	>C=NH	>C=NH	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-						H
化合物 1236	>NCH ₃	>NCH ₃	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	H				
化合物 1237	>NCH ₃	>NCH ₃	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H				
化合物 1238	>NCH ₃	>NCH ₃	H	>N-	H	H				-CH=CH-CH=CH-	H	H	
化合物 1239	>NCH ₃	>NCH ₃	H	>N-	H	H				-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H	
化合物 1240	>NCH ₃	>NCH ₃	H	>N-	H	H	-CH=CH-CH=CH-						H
化合物 1241	-O-	-O-	H	>B-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	H				
化合物 1242	-O-	-O-	H	>B-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H				
化合物 1243	-O-	-O-	H	>B-	H	H				-CH=CH-CH=CH-	H	H	
化合物 1244	-O-	-O-	H	>B-	H	H	-CH=CH-CH=CH-			-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H	
化合物 1245	-O-	-O-	H	>B-	H	H	-CH=CH-CH=CH-						H
化合物 1246	-O-	-O-	H	>P(=O)-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	H	H				
化合物 1247	-O-	-O-	H	>P(=O)-	H	H	-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H				
化合物 1248	-O-	-O-	H	>P(=O)-	H	H				-CH=CH-CH=CH-	H	H	
化合物 1249	-O-	-O-	H	>P(=O)-	H	H				-CH=CH-CH=CH-	-CH=CH-CH=CH-	H	
化合物 1250	-O-	-O-	H	>P(=O)-	H	H	-CH=CH-CH=CH-						H

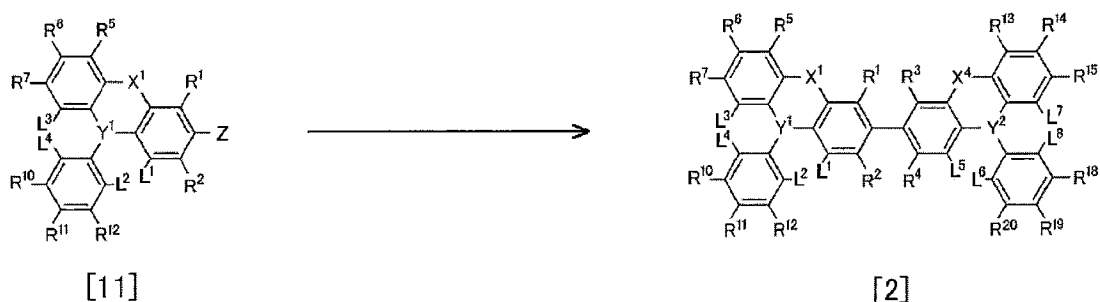
[0066] 一般式 [11] および一般式 [12] における X^1 、 X^4 、 Y^1 、 Y^2 、 $L^1 \sim L^8$ 、 $R^5 \sim R^7$ 、 $R^{10} \sim R^{12}$ 、 $R^{13} \sim R^{15}$ および $R^{18} \sim R^{20}$ の定義は、一般式 [1] および [2] と同じである。一般式 [11] および一般式 [12] における $R^1 \sim R^4$ は水素原子または置換基を表し、置換基の説明と好ましい範囲は一般式 [1] の R^1 および R^2 の置換基の説明と好ましい範囲と同じである。一般式 [11] および一般式 [12] における Z はハロゲン原子を表し、フッ素原子、塩素原子、臭素原子またはヨウ素原子であることが好ましく、塩素原子、臭素原子またはヨウ素原子であることがより好ましく、臭素原子であることがさらに好ましい。

スキーム 1 の反応はカップリング反応であり、通常はカップリング剤を用いて行う。すなわち、一般式 [12] の Z をメタル化し、パラジウム (0) やニッケル (0) を用いた既知のクロスカップリング反応により一般式 [1] で表される化合物を合成することができる。反応条件は、既知の条件を参考にして最適化することができる。

[0067] 一般式 [1] の化合物として左右対称な分子構造を有する化合物を合成する場合には、下記スキーム 2 により一般式 [1] の化合物を合成することが可能である。スキーム 2 に従えば、一般式 [1] の X^1 、 Y^1 、 $L^1 \sim L^4$ 、 R^1 、 R^2 、 $R^5 \sim R^7$ 、 $R^{10} \sim R^{12}$ が、順に X^4 、 Y^2 、 $L^5 \sim L^8$ 、 R^3 、 R^4 、 $R^{13} \sim R^{15}$ 、 $R^{18} \sim R^{20}$ と同じである化合物を合成することができる。

[0068] [化23]

スキーム 2



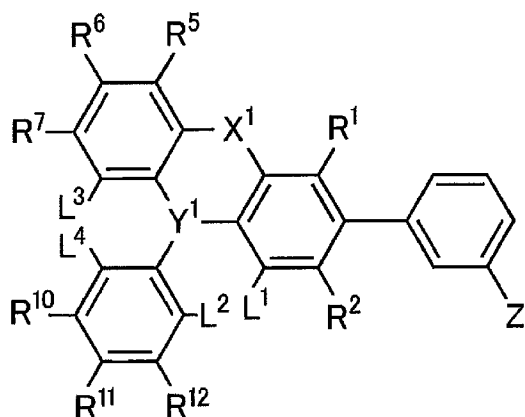
[0069] スキーム 2 の反応はカップリング反応であり、通常はカップリング剤を用いて行う。例えば、ビス (1, 5-シクロオクタジエン) ニッケル [Ni (

COD)₂]、2, 2'-ビピリジル [bpy]、1, 5-シクロオクタジエン [COD] の存在下で反応を行うことができる。これらの試薬を用いたカップリング反応自体は既に知られており、既知の反応条件に基づいてスキーム2の反応条件を最適化することができる。

スキーム1およびスキーム2の反応は、一般式[11]の化合物と一般式[12]の化合物を溶解する溶媒中で行うことができ、例えばテトラヒドロフラン [THF] 中に行うことができる。反応温度は特に制限されないが、溶媒の沸点以下の温度で加熱しながら行うことが好ましい。例えばTHFを溶媒として用いる場合は、好ましくは40~66℃、より好ましくは55~66℃で反応を行うことができる。

[0070] スキーム1の合成法は、一般式[1]のAr¹が単結合でない化合物の合成にも適用することができる。例えば、一般式[1]のAr¹が1, 3-フェニレン基である一般式[6]の化合物を合成するときは、スキーム1の一般式[11]で表される化合物の代わりに、下記の一般式[13]で表される化合物を用いればよい。他の一般式[1]の化合物も同様にして合成することができる。

[0071] [化24]

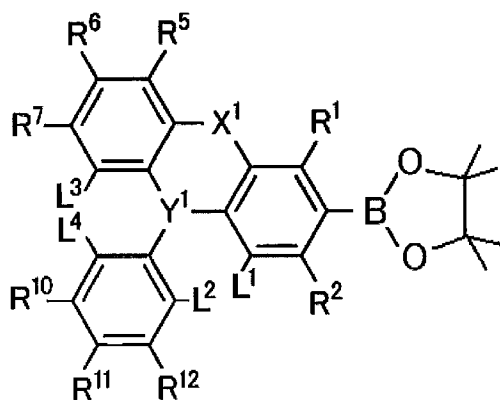


[13]

[0072] また、一般式[5]~[7]の化合物は、上記の一般式[11]の化合物を下記の一般式[14]で表されるジオキサボラン体にして、1, 4-ジブromoベンゼン、1, 3-ジブromoベンゼンまたは1, 3, 5-トリブromoベ

ンゼンと反応させることにより合成することもできる。一般式 [14] のジオキサボラン体は、一般式 [11] の化合物を例えば *n*-ブチルリチウムと反応させた後に 2-イソプロポキシ-4,4,5,5-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロランと反応させることにより合成することができる。ジオキサボラン体を一般式 [5] ~ [7] の化合物へ変換する際には、例えばトリス(ジベンジリデンアセトン)ジパラジウム・クロロホルム付加体 [Pd₂(dba)₃·CHCl₃] や 2-ジシクロヘキシルホスフィノ-2',6'-ジメトキシビフェニル [SPhos] を用いながら反応を進めることが好ましい。これらの反応の詳細については、後述の合成例を参考にすることができる。

[化25]



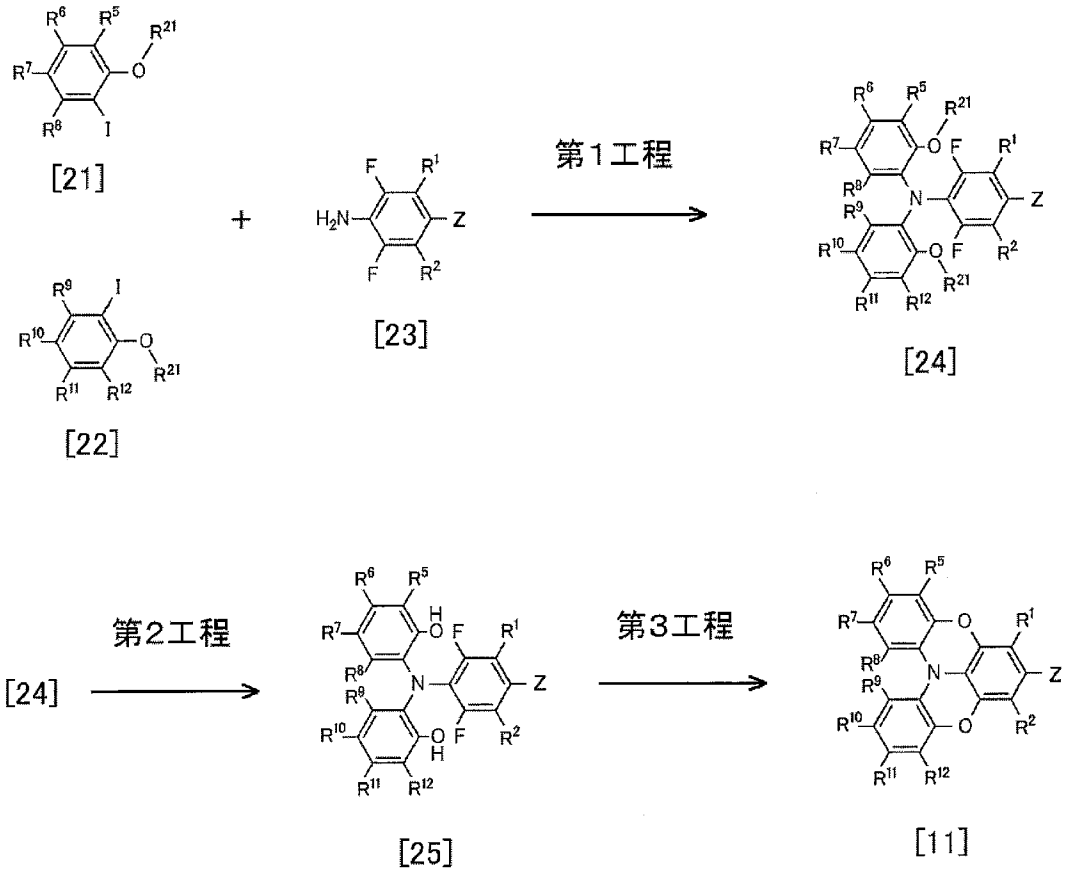
[14]

[0073] スキーム 1 およびスキーム 2 の出発物質である一般式 [11] および [12] で表される化合物や、上記の一般式 [13] で表される化合物は、例えば以下のスキーム 3 により合成することができる。スキーム 3 では、一般式 [11] の X¹ が -O- であり、L¹ と L² が互いに結合して -O- を形成し、Y¹ が >N- である化合物の合成法を例にとって説明する。Z は臭素原子であることが好ましい。

[0074]

[化26]

スキーム3



[0075] 一般式 [21] ~ [25] における R¹、R²、R⁵~R⁷ および R¹⁰~R¹² の定義は、一般式 [11] と同じである。R⁸ および R⁹ は、各々独立に水素原子または置換基を表す。一般式 [21]、[22] および [24] における R²¹ はアルキル基を表し、好ましくは炭素数 1~3 のアルキル基であり、より好ましくはメチル基である。

[0076] スキーム3の第1工程では、まず *o*-アルコキシヨウ化ベンゼンである一般式 [21] と [22] の各化合物を、2, 6-ジフッ化アニリンである一般式 [23] の化合物と反応させる。第1工程で合成しようとしている一般式 [24] の R⁵、R⁶、R⁷、R⁸ が、順に R¹²、R¹¹、R¹⁰、R⁹ と同一である場合は、単一種の *o*-アルコキシヨウ化ベンゼンを一般式 [23] の化合物と反応させればよい。反応は、一般式 [21] および [22] の化合物と一般式 [23] の化合物とのカップリング反応の進行を促進する環境下で行うこ

とが好ましい。例えば、炭酸カリウムなどの存在下でCuを好ましく用いることができる。これらの試薬を用いた反応条件は類似のカップリング反応の条件を参考にして最適化することができる。なお、第1工程の反応は、まず一般式〔21〕の化合物1分子と一般式〔23〕の化合物1分子をカップリング反応させた後に、一般式〔22〕の化合物1分子とさらにカップリングさせる2段階ステップにより行うことも可能である。最初のカップリング反応に用いる触媒を選択することにより、一般式〔21〕の化合物2分子が一般式〔23〕の化合物1分子とカップリングするのを妨げることが可能である。そのような触媒として、例えばCuIを挙げることができる。

第1工程の反応は、一般式〔21〕～〔23〕の化合物を溶解する溶媒中で行うことができ、例えばo-ジクロロベンゼン〔ODCB〕中に行うことができる。反応温度は特に制限されないが、溶媒の沸点以下の温度で加熱しながら行うことが好ましい。例えばODCBを溶媒として用いる場合は、好ましくは150～180℃、より好ましくは沸点で還流しながら反応を行うことができる。

[0077] スキーム3の第2工程では、第1工程で得られた一般式〔24〕で表される化合物のアルコキシ基をヒドロキシル基に変換して、一般式〔25〕で表される化合物とする。第2工程は、アルコキシ基からヒドロキシル基への既知の変換反応条件を適宜組み合わせることにより行うことができる。例えば塩化メチレン溶媒中でまず三臭化ホウ素と反応させ、次いで塩酸を作用させることにより行うことができる。第2工程で得られた生成物は、精製や単離をすることなく次の第3工程に用いることができる。

[0078] スキーム3の第3工程では、第2工程で得られた一般式〔25〕で表される化合物のヒドロキシル基とフッ素原子を分子内環化反応させて、一般式〔11〕で表される化合物とする。この反応は、例えば炭酸カリウムなどのアルカリ存在下で加熱することにより進行する。加熱温度は70～130℃程度で行うことが好ましい。溶媒は、例えばジメチルホルムアミド〔DMF〕などを好ましく採用することができる。

[0079] スキーム 1 の出発物質である一般式 [1 2] や一般式 [1 3] で表される化合物も、同様にしてスキーム 3 により合成することが可能である。また、その他の類似化合物も同様にして合成することが可能である。

スキーム 3 の合成ルートは新規な合成ルートであり、従来知られている酸素架橋トリアリールアミンや硫黄架橋トリアリールアミンの合成法 (M. Kuratsu et. al., Chem. Lett., Vol. 33, No. 9 (2004)) に比べて収率が良く、大量合成が容易であるという利点がある。また、互いに異なる構造を有する一般式 [2 1] の化合物と一般式 [2 2] の化合物を、一般式 [2 3] の化合物とそれぞれカップリングさせることができるため、架橋されるアリール基が非対称な化合物を合成しやすいという利点もある。また、一般式 [2 3] の化合物として臭素化物 (例えば Z が臭素原子である化合物) を用いることで、架橋型トリアリールアミンの臭素化物を合成することができ、本骨格を複数含む化合物の合成も容易になるという利点もある。

[0080] スキーム 3 の合成ルートは、例えば以下の合成法として一般化して記載することができる。

(2, 2' : 6, 2'' - ジオキサトリフェニルアミン化合物の合成方法)

2, 6 - ジフルオロアニリン化合物 1 分子と 2 - アルコキシヨウ化ベンゼン化合物 2 分子をカップリングさせて N, N - ビス (2 - アルコキシフェニル) - 2, 6 - ジフルオロアニリン化合物を調製し、

得られた N, N - ビス (2 - アルコキシフェニル) - 2, 6 - ジフルオロアニリン化合物のアルコキシ基をヒドロキシル基に変換して N, N - ビス (2 - ヒドロキシフェニル) - 2, 6 - ジフルオロアニリン化合物とし、さらに分子内環化反応を行うことにより 2, 2' : 6, 2'' - ジオキサトリフェニルアミン化合物を合成することを特徴とする、2, 2' : 6, 2'' - ジオキサトリフェニルアミン化合物の合成方法。

[0081] 出発物質である 2, 6 - ジフルオロアニリン化合物または 2 - アルコキシヨウ化ベンゼン化合物のベンゼン環にさらに Z に相当する置換基を導入しておくことにより、最終的に得られる 2, 2' : 6, 2'' - ジオキサトリフェ

ニルアミン化合物の対応するベンゼン環にZを導入することができる。また、カップリングさせる2-アルコキシヨウ化ベンゼン化合物2分子は、同一分子であってもよいし、異なる2分子であってもよい。異なる2分子を用いる場合は、置換基が異なる2分子を用いることが好ましい。その場合、1分子ずつ段階的にカップリングさせる逐次反応を採用することが可能である。Pdを用いれば、1分子のみを効率良くカップリングさせることができる。

[0082] (2, 2' : 6, 2'' - ジチアトリフェニルアミン化合物の合成方法)

2, 6-ジフルオロアニリン化合物1分子と2-アルキルチオヨウ化ベンゼン化合物2分子をカップリングさせてN, N-ビス(2-アルキルチオフェニル)-2, 6-ジフルオロアニリン化合物を調製し、

得られたN, N-ビス(2-アルキルチオフェニル)-2, 6-ジフルオロアニリン化合物のアルキルチオ基をチオール基に変換してN, N-ビス(2-メルカプトフェニル)-2, 6-ジフルオロアニリン化合物とし、さらに分子内環化反応を行うことにより2, 2' : 6, 2'' - ジチアトリフェニルアミン化合物を合成することを特徴とする、2, 2' : 6, 2'' - ジチアトリフェニルアミン化合物の合成方法。

[0083] 出発物質である2, 6-ジフルオロアニリン化合物または2-アルコキルチオヨウ化ベンゼン化合物のベンゼン環にさらにZに相当する置換基を導入しておくことにより、最終的に得られる2, 2' : 6, 2'' - ジオキサトリフェニルアミン化合物の対応するベンゼン環にZを導入することができる。また、カップリングさせる2-アルコキルチオヨウ化ベンゼン化合物2分子は、同一分子であってもよいし、置換基が異なる2分子であってもよい。また、異なる2分子をカップリングさせる場合の逐次反応については、上の説明を参照することができる。

[0084] スキーム1~3を利用するなどして合成した一般式[1]で表される化合物は、精製し単離してから特定の用途に供してもよいが、用途によっては単離することなく用いてもよい。本発明は、一般式[1]で表される化合物と一般式[1]では表されない化合物をともに含む組成物も包含するものであ

る。また、本発明は、一般式〔1〕で表される化合物を複数種含む組成物も包含するものである。なお、合成した一般式〔1〕で表される化合物の精製は、カラムクロマトグラフィー法などの既知の精製法を適宜選択して行うことができる。

[0085] 〔一般式〔1〕で表される化合物の物性〕

一般式〔1〕で表される化合物は、準平面構造を持っているため、結晶化を抑制しながら分子同士を密にパッキングさせることが可能である。計算化学により、一般式〔1〕で表される化合物は再配列エネルギーが小さくて、分子間トランスファー積分が大きい材料であることが本発明者らにより確認されている。また、一般式〔1〕で表される化合物は十分な分子サイズを有している。以上の特徴を有することから、一般式〔1〕で表される化合物はガラス転移温度が高くてアモルファス状態が安定に存在しうる。さらに、一般式〔1〕で表される化合物は、HOMO (Highest Occupied Molecular Orbital) とLUMO (Lowest Unoccupied Molecular Orbital) の軌道準位が電荷輸送材料として適したレベルにある。なかでも、一般式〔1〕の Y^1 および Y^2 が $>N-$ または $>P-$ である場合は、一般式〔1〕で表される化合物は特にホール輸送材料として有用な性質を示す。また、 Y^1 および Y^2 が $>B-$ または $>P(=O)-$ である場合は、一般式〔1〕で表される化合物は特に電子輸送材料として有用な性質を示す。本発明における電荷輸送材料という用語は、このようなホール輸送材料と電子輸送材料を包含する概念である。

一般式〔1〕で表される化合物は電荷輸送材料として優れているため、様々な有機デバイス、特に有機電子デバイスに効果的に用いることができる。例えば、有機エレクトロルミネッセンス素子や電子写真用感光体に有効に用いることができる。また、光電変換素子にも効果的に用いることができるため、有機薄膜太陽電池にも有効に用いることができる。さらに有機トランジスタとしても有効に用いることができる。以下において、代表的な有機デバイスとして、有機エレクトロルミネッセンス素子と有機薄膜太陽電池について説明する。

[0086] [有機エレクトロルミネッセンス素子]

典型的な有機エレクトロルミネッセンス素子は、ガラスなどの透明基板上にITOなどの陽極、ホール注入層、ホール輸送層、発光層、電子輸送層、電子注入層、陰極が積層された構造を有する。一般式〔1〕で表される本発明の化合物は、その物性に依じて、ホール注入層、ホール輸送層、発光層、電子輸送層、電子注入層の材料として用いることが可能である。例えば、電子輸送材料として有用な一般式〔1〕で表される化合物（特に Y^1 および Y^2 が $>B-$ または $>P(=O)-$ である化合物）を電子輸送層に使用すれば、陰極から電子注入層を経由して電子輸送層に注入される電子を効率良く発光層へ輸送することができる。このため、発光層における電子とホールの再結合効率を上げて、消費電力と発熱量を抑えながら高い発光効率を実現することができる。また、それによって有機エレクトロルミネッセンス素子の長寿命化も実現することができる。別の例として、ホール輸送材料として有用な一般式〔1〕で表される化合物（特に Y^1 および Y^2 が $>N-$ または $>P-$ である化合物）をホール輸送層に使用すれば、陽極からホール注入層を経由してホール輸送層に注入されるホールを効率良く発光層へ輸送することができる。このため、発光層における電子とホールの再結合効率を上げて、消費電力と発熱量を抑えながら高い発光効率を実現することができる。また、それによって有機エレクトロルミネッセンス素子の長寿命化も実現することができる。

本発明の化合物を用いる有機エレクトロルミネッセンス素子には、有機エレクトロルミネッセンス素子に用いられる既知の材料を適宜選択して組み合わせて用いることができる。本発明の化合物を用いる有機エレクトロルミネッセンス素子には、公知の技術や公知の技術から容易に想到しうる様々な改変を必要に応じて加えることができる。

[0087] [有機薄膜太陽電池]

典型的な有機薄膜太陽電池は、ガラスなどの透明基板上にITOなどの陽極、ホール輸送層、光電変換層、電子輸送層、陰極が積層された構造を有す

る。光電変換層は陽極側に p 型半導体層を有し、陰極側に n 型半導体層を有している。一般式 [1] で表される本発明の化合物は、その物性に応じて、ホール輸送層、 p 型半導体層、 n 型半導体層、電子輸送層の材料として用いることが可能である。一般式 [1] で表される本発明の化合物は、有機薄膜太陽電池においてホール輸送材料や電子輸送材料として機能しうる。また、一般式 [1] で表される本発明の化合物を利用して、一般式 [1] で表される骨格を繰り返し単位として含む重合体を製造し、それを有機薄膜太陽電池に用いることも有用である。

本発明の化合物を用いる有機薄膜太陽電池は、上記の他にホールブロック層、電子ブロック層、電子注入層、ホール注入層、平滑化層などを適宜備えていてもよい。本発明の化合物を用いる有機薄膜太陽電池には、有機薄膜太陽電池に用いられる既知の材料を適宜選択して組み合わせて用いることができる。また、本発明の化合物を用いる有機薄膜太陽電池には、公知の技術や公知の技術から容易に想到しうる様々な改変を必要に応じて加えることができる。

実施例

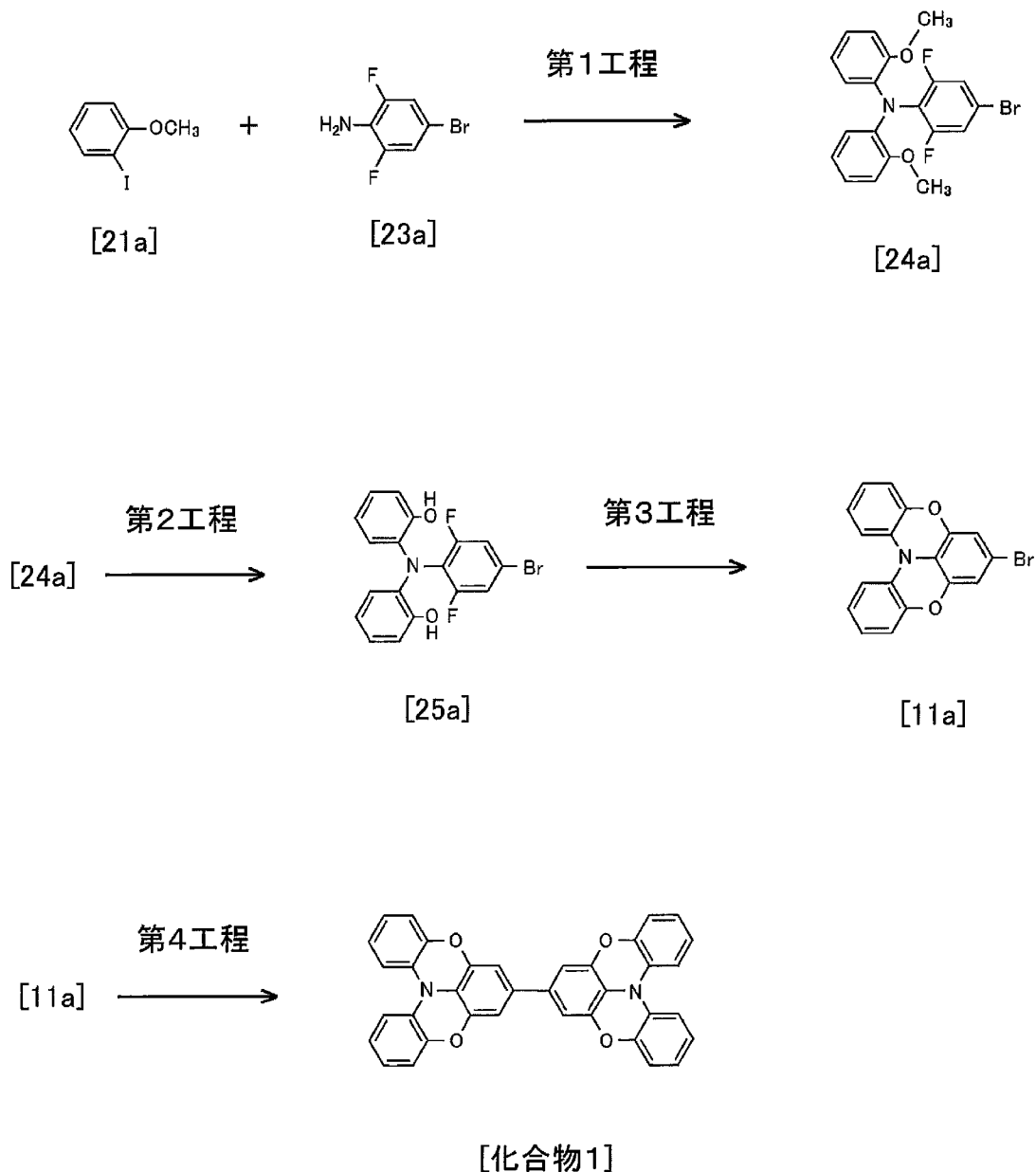
[0088] 以下に実施例を挙げて本発明の特徴をさらに具体的に説明する。以下の実施例に示す材料、処理内容、処理手順等は、本発明の趣旨を逸脱しない限り適宜変更することができる。したがって、本発明の範囲は以下に示す具体例により限定的に解釈されるべきものではない。

[0089] (実施例 1)

以下のスキームにしたがって化合物 1 を合成した。

[0090]

[化27]



[0091] 化合物21a (19.8g、84.6mmol)、化合物23a (7.74g、37.2mmol)、 K_2CO_3 (21.5g、156mmol)、およびCu (7.82g、123mmol)を、*o*-ジクロロベンゼン [ODCB] (100ml)に溶解して180℃で110時間加熱した。反応混合物をろ過し、不溶物をクロロホルム (100ml)で3回洗浄した。ろ液を水で洗浄した後に $MgSO_4$ で乾燥し、濾過した後、減圧下で濃縮した。さらに得られた黒色の固体をヘキサンで洗浄することにより、白色粉末の化合物2

4 a (10.6 g, 25.4 mmol) を収率68%で得た。

Mp : 157.5 – 158.5 °C.

$^1\text{H NMR}$ (300 MHz, CDCl_3 , ppm) δ 7.10 – 6.94 (m, 4H), 6.94 – 6.81 (m, 6H), 3.60 (s, 6H).

$^{13}\text{C NMR}$ (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) : m/z 419.0325 (M^+) ; $\text{C}_{20}\text{H}_{16}\text{BrF}_2\text{NO}$ の計算値 : 419.0332.

元素分析 (%) : $\text{C}_{20}\text{H}_{16}\text{BrF}_2\text{NO}_2$ の計算値 : C 57.16, H 3.84, N 3.33, 実測値 : C 57.15, H 3.90, N 3.40.

[0092] 化合物24 a (9.75 g, 23.3 mmol) の脱水の CH_2Cl_2 (450 ml) 溶液を -78°C に冷却して、 BBr_3 (4.50 ml, 47.5 mmol) を加えて、その後ゆっくりと室温まで昇温し、3時間攪拌した。その後、溶液を水 (100 ml) に加えて、 CH_2Cl_2 (100 ml) で3回抽出した。得られた有機層を Na_2SO_4 で乾燥し、ろ過後、減圧下で濃縮することにより、白色粉末の化合物25 a (8.38 g, 21.4 mmol) を収率92%で得た。

$^1\text{H NMR}$ (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).

化合物25 a (6.68 g, 17.1 mmol) と無水 K_2CO_3 (7.15 g, 51.8 mmol) をジメチルホルムアミド [DMF] (150 ml) に入れ、 100°C に加熱して22時間加熱した。室温に戻すと白色の固体が析出した。析出した固体をろ過し、水で洗浄し、その後減圧下で乾燥することにより、白色の結晶として化合物11 a (4.73 g, 13.5 mmol)

）を収率79%で得た。また、ろ液を減圧下で濃縮し、 CH_2Cl_2 を展開溶媒に用いてシリカゲルクロマトグラフィー ($R_f = 0.78$) により精製し、白色の結晶として化合物11a (0.931g、2.65mmol) を得た。あわせて化合物11a (5.66g、16.1mmol) を収率94%で得た。

Mp : 215.5–216.3°C.

^1H NMR (300MHz, CDCl_3 , ppm) δ 7.31 (dd, $^3\text{J}(\text{H}, \text{H}) = 7.5$, $^4\text{J}(\text{H}, \text{H}) = 1.8\text{Hz}$, 2H), 6.99–6.85 (m, 6H), 6.66 (s, 2H).

^{13}C NMR (75MHz, 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^+), $\text{C}_{18}\text{H}_{10}\text{BrNO}_2$ の計算値 : 350.9908.

元素分析 (%) : $\text{C}_{18}\text{H}_{10}\text{BrNO}_2$ の計算値 : C 61.39, H 2.86, N 3.98 ; 実測値 C 61.01, H 3.00, N 4.02.

[0093] 化合物11a (4.20g、12.0mmol)、ビス(1,5-シクロオクタジエン)ニッケル [$\text{Ni}(\text{cod})_2$] (3.96g、14.4mmol)、1,5-シクロオクタジエン [COD] (1.77g、16.4mmol)、2,2'-ビピリジル [bpy] (2.25g、14.4mmol) を、テトラヒドロフラン [THF] (360ml) に溶解して60°Cで24時間加熱した。混合物を二硫化炭素に溶かしてシリカゲルに吸着させ、展開溶媒として二硫化炭素 (1000ml) を用いて抽出した。得られた溶液から減圧下で溶媒を留去し、黄色の固体として化合物1 (1.60g、2.94mmol) を収率49%で得た。二硫化炭素で抽出した後のシリカゲルに対して、さらに、ソックスレー抽出器を用いてトルエンで抽出し、黄色の固体として化合物1 (0.510g、0.940mmol) を得た。あわせて、化合物1 (2.11g、3.88mmol) を収率65%で得た。さら

に、得られた化合物1は、昇華精製（320～350℃、1mmHg）することにより黄色の結晶とし、各種測定に用いた。

Mp : 375.2–376.1℃.

^1H NMR (300MHz, CD_2Cl_2 , ppm) δ 7.36 (d, ^3J (H, H) = 6.9 Hz, 4H), 7.05–6.90 (m, 12H), 6.69 (s, 4H).

^{13}C NMR (150MHz, $\text{CD}_2\text{Cl}_2/\text{CS}_2$, 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^+) ; $\text{C}_{36}\text{H}_{20}\text{N}_2\text{O}_4$ の計算値 : 544.1423.

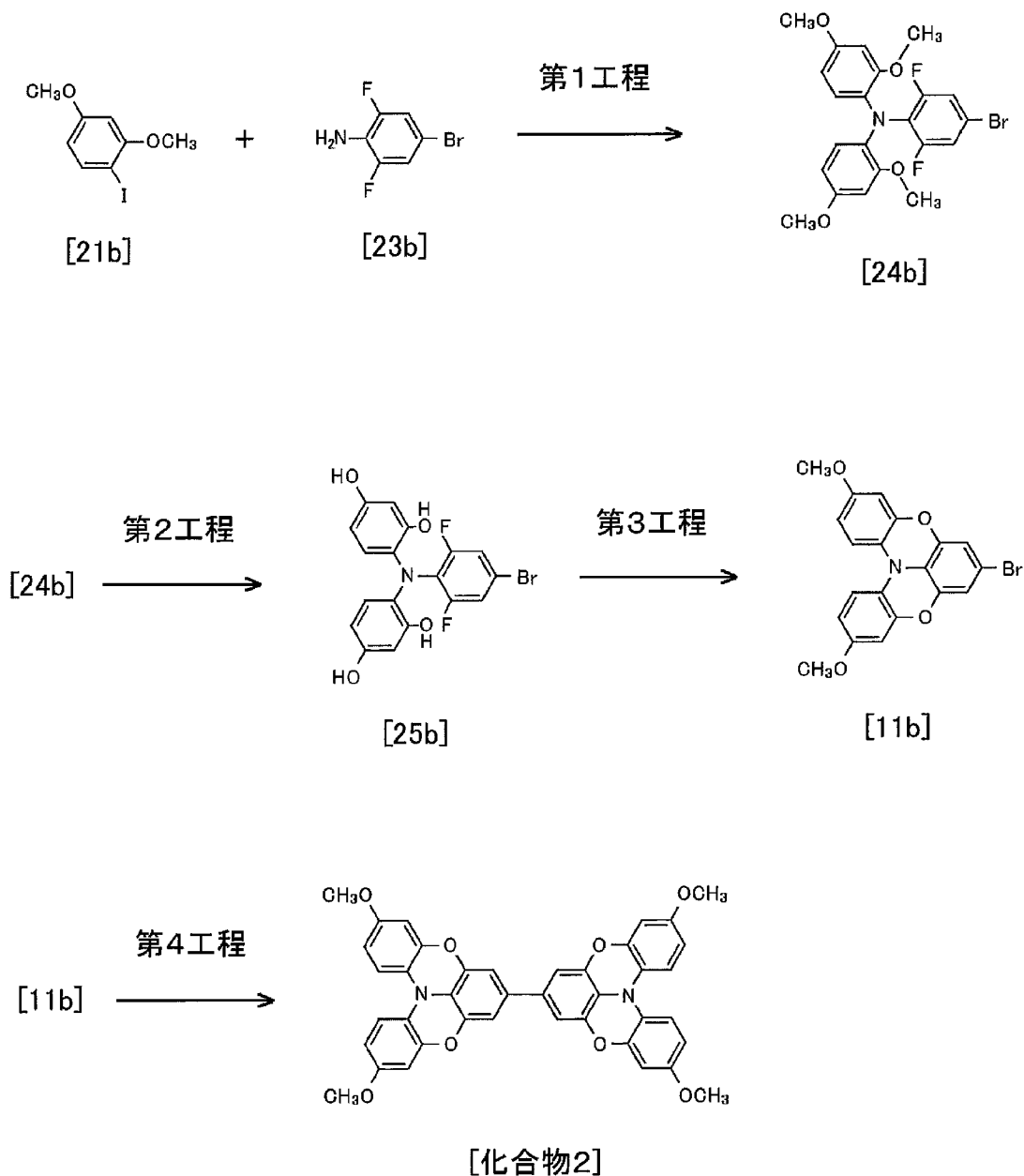
元素分析 (%) : $\text{C}_{36}\text{H}_{20}\text{N}_2\text{O}_4$ の計算値 : C 79.40, H 3.70, N 5.14 ; 実測値 C 79.57, H 3.88, N 5.13.

[0094] (実施例2)

以下のスキームにしたがって化合物2を合成した。

[0095]

[化28]



[0096] 化合物21b (20.4g、77.2mmol)、化合物23b (6.86g、33.0mmol)、 K_2CO_3 (18.2g、132mmol)、およびCu (6.80g、107mmol)を、*o*-ジクロロベンゼン [ODCB] (90ml)に溶解して180℃で150時間加熱した。不溶物をろ過により取り除き、 CH_2Cl_2 (100ml)で3回洗浄し、ろ液を水で洗浄した。得られた有機相を $MgSO_4$ で乾燥し、濾過した後、減圧下で濃縮した。

さらにシリカゲルカラムクロマトグラフィー（展開溶媒：ヘキサン／ CH_2Cl_2 （1／3）， $R_f = 0.56$ ）により精製して、白色の固体として化合物 24b（9.63g、20.1mmol）を収率61%で得た。

M_p : 96.4–97.3°C.

$^1\text{H NMR}$ (300MHz, CDCl_3 , ppm) δ 7.05–6.90 (m, 2H), 6.83 (d, $^3J(\text{H}, \text{H}) = 8.4\text{ Hz}$, 2H), 6.46 (d, $^4J(\text{H}, \text{H}) = 2.7\text{ Hz}$, 2H), 6.38 (dd, $^3J(\text{H}, \text{H}) = 8.7$, $^4J(\text{H}, \text{H}) = 2.7\text{ Hz}$, 2H), 3.78 (s, 6H), 3.60 (s, 6H).

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

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

元素分析 (%) : $\text{C}_{22}\text{H}_{20}\text{BrF}_2\text{NO}_2$ の計算値 : C 55.01, H 4.20, N 2.92 ; 実測値 : C 54.99, H 4.18, N 2.99.

[0097] 化合物 24b（4.68g、9.77mmol）の CH_2Cl_2 （190ml）溶液を -78°C に冷却し、 BBr_3 （10.0g、40.1mmol）を加えて、その後ゆっくり室温まで昇温し、一晚攪拌した。その後、1.0M塩酸（100ml）を加えて、酢酸エチル（50ml）で3回抽出した。得られた有機層を Na_2SO_4 で乾燥し、ろ過した後、減圧下で濃縮することにより青黒い固体として化合物 25b（4.08g、9.61mmol）を収率98%で得た。

$^1\text{H NMR}$ (300MHz, CDCl_3 , ppm) δ 7.05–7.00 (m, 2H), 6.98 (d, $^3J(\text{H}, \text{H}) = 9.0\text{ Hz}$, 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).

化合物25b (3.50 g, 8.26 mmol) と無水 K_2CO_3 (6.85 g, 49.6 mmol) をジメチルホルムアミド [DMF] (200 ml) に溶解し、100°Cに加熱して14時間攪拌した。その後、混合物に CH_3I (2.00 ml, 32.1 mmol) を加え、60°Cで3時間加熱した。混合物を1M塩酸 (200 ml) に入れた後、水層を酢酸エチル (100 ml) で3回抽出し、 Na_2SO_4 で乾燥し、濾過した後、減圧下で濃縮した。さらに CH_2Cl_2 を展開溶媒に用いてシリカゲルカラムクロマトグラフィー ($R_f = 0.85$) を行うことにより精製して、白色の固体として化合物11b (2.29 g, 5.56 mmol) を収率67%で得た。

Mp: 175.5–177.4°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^+); $C_{20}H_{14}BrNO_4$ の計算値: 411.0106.

元素分析 (%): $C_{20}H_{14}BrNO_4$ の計算値: C 58.27, H 3.42, N 3.40; 実測値: C 58.35, H 3.44, N 3.39.

[0098] 化合物11b (1.85 g, 4.50 mmol)、ビス(1,5-シクロオクタジエン)ニッケル [$Ni(cod)_2$] (1.49 g, 5.41 mmol)、1,5-シクロオクタジエン [COD] (0.586 g, 5.42 mmol)、2,2'-ビピリジル [bpy] (0.843 g, 5.40 mmol)

o l) を、テトラヒドロフラン [THF] (130 ml) に溶解して60°Cで12時間加熱した。混合溶液を減圧下で濃縮し、トルエン (100 ml) を加えた後、シリカゲルに吸着させ、ソックスレー抽出器を用いてトルエンで抽出し、減圧下で濃縮し、ヘキサンでろ過することにより、黄色の固体として化合物2 (0.810 g、1.22 mmol) を収率54%で得た。さらに、昇華精製 (285~310°C, 0.06~0.08 mmHg) し、各種測定に用いた。

Mp (分解温度) : 351.8–353.8°C.

¹H NMR (300 MHz, CD₂Cl₂, 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⁺) ; C₄₀H₂₈N₂O₈の計算値 : 664.1846.

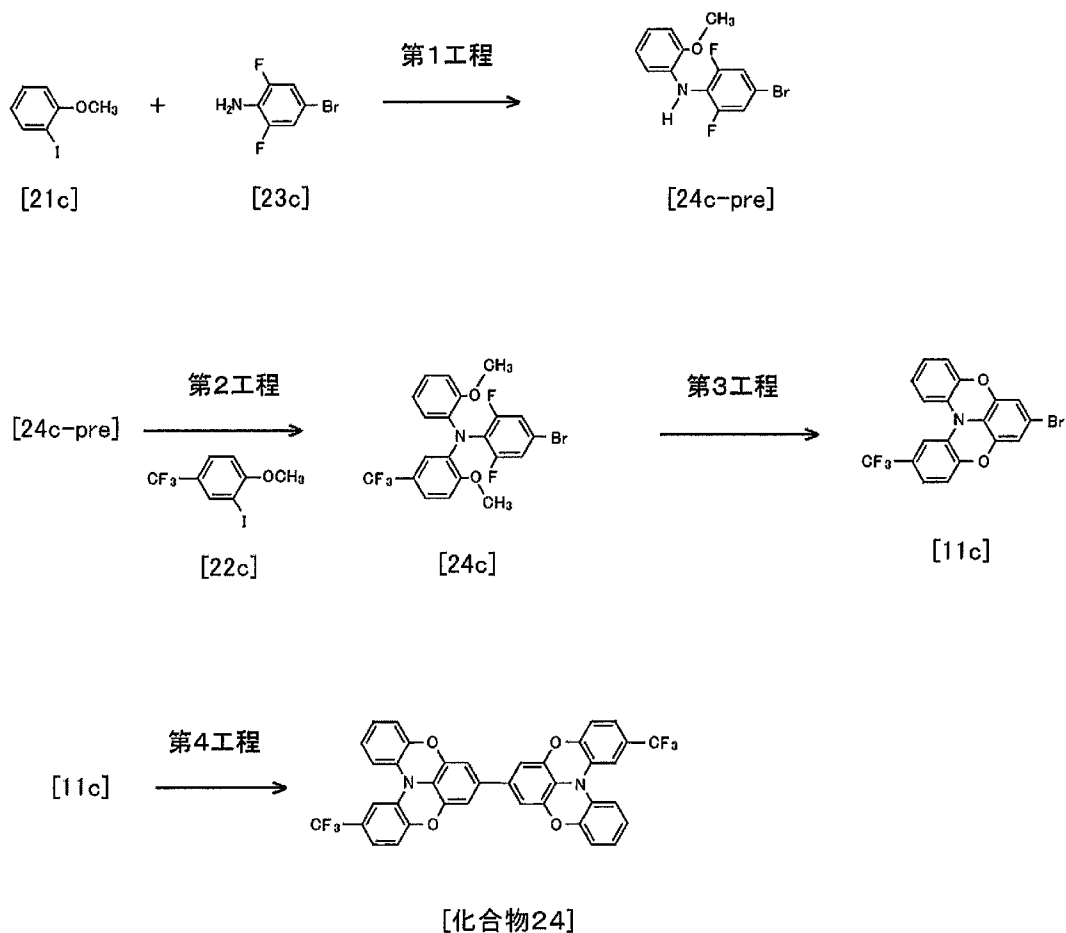
元素分析 (%) : C₄₀H₂₈N₂O₈の計算値 : C 72.28, H 4.25, N 4.21 ; 実測値 : C 72.33, H 4.28, N 4.25.

[0099] (実施例3)

以下のスキームにしたがって化合物24を合成した。

[0100]

[化29]



[0101] 化合物21c (11.7g, 49.9mmol)、化合物23c (9.19g, 44.2mmol)、 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3 \cdot \text{CHCl}_3$ (0.799g, 0.765mmol)、ナトリウムtert-ブトキシド (4.38g, 45.6mmol)、トリ-tert-ブチルホスフィン (0.920g, 4.55mmol) を乾燥トルエン (100ml) に溶解し、 100°C で26時間攪拌した。不溶物を濾過し、トルエンで洗浄 (60ml) した。その後、ろ液に水を加え、トルエンで抽出 (50ml \times 3) した。有機層を Na_2SO_4 で乾燥し、濾過した後、ろ液を減圧下で濃縮した。得られた固体をシリカゲルカラムクロマトグラフィー (CH_2Cl_2 : ヘキサン = 1 : 5, $R_f = 0.30$) で精製し、白色の固体として化合物24c-pre (7.73g, 24.6mmol) を収率50%で得た。

Mp : $71.2 - 72.2^\circ\text{C}$.

^1H NMR (300 MHz, CDCl_3 , ppm) δ 7.20–7.11 (m, 2H), 6.91–6.80 ppm (m, 3H), 6.57 (td, ^3J (H, H) = 8.7 Hz, ^4J (H, H) = 2.7 Hz, 1H), 5.83 (s, 1H), 3.93 (s, 3H).

^{13}C NMR (75 MHz, CDCl_3 , ppm) δ 156.67 (dd, ^1J (C, 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^+), $\text{C}_{13}\text{H}_{10}\text{BrF}_2\text{NO}$ の計算値 : 312.9914.

元素分析 (%) : $\text{C}_{13}\text{H}_{10}\text{BrF}_2\text{NO}$ の計算値 : C 49.71, H 3.21, N 4.46 ; 実測値 : C 49.79, H 3.17, N 4.52.

[0102] 2-メトキシ-5-トリフロオロメチルアニリン (10.1 g, 53.1 mmol) をアセトニトリル (160 ml) に溶解し、12M HCl 水溶液 (11.0 ml) を加えて0°Cに冷却した。その溶液に30 mlの水に溶解した亜硝酸ナトリウム (4.76 g, 71.0 mmol) を10分かけて滴下して20分間攪拌した。さらに60 mlの水に溶解したヨウ化カリウム (26.6 g, 160 mmol) を15分かけて滴下した後、2時間攪拌し、室温に戻してさらに20時間攪拌した。 Na_2SO_3 水溶液 (50 ml) を加え、エーテルで抽出 (60 ml \times 3) した。有機層を Na_2SO_4 で乾燥し、濾過した後、ろ液を減圧下で濃縮した。得られたオイルをシリカゲルショートコラムクロマトグラフィー (ヘキサン, $R_f = 0.40$) で精製し、無色のオイルとして化合物22c (14.8 g, 49.0 mmol) を収率92%で得た。

^1H NMR (300 MHz, CDCl_3 , 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).

[0103] 化合物 24c-pre (0.862 g, 2.75 mmol)、化合物 22c (0.990 g, 3.28 mmol)、 K_2CO_3 (0.857 g, 6.20 mmol)、銅粉末 (0.317 g, 4.99 mmol) を乾燥 ODCB (20 ml) に加え 180°C に加熱し、65 時間攪拌した。不溶物を濾過し、乾燥 CH_2Cl_2 で洗浄 (50 ml) した。その後ろ液に水 (20 ml) を加え、 CH_2Cl_2 で抽出 (10 ml \times 3) した。有機層を Na_2SO_4 で乾燥し、濾過した後、ろ液を減圧下で濃縮した。得られた固体をシリカゲルカラムクロマトグラフィー (CH_2Cl_2 :ヘキサン=1:3, $R_f=0.31$) で精製し、白色の固体として化合物 24c (1.00 g, 2.05 mmol) を収率 75% で得た。

Mp: 98.4–99.4°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^+), $C_{21}H_{15}BrF_5NO_2$ の計算値 : 487.0206.

元素分析 (%) for $C_{21}H_{15}BrF_5NO_2$ の計算値 : C 51.66, H 3.10, N 2.87 ; 実測値 : C 51.89, H 3.09, N 2.92.

[0104] 化合物 24c (3.113 g, 6.38 mmol) を乾燥 CH_2Cl_2 (200 ml) に溶解し $-78^\circ C$ に冷却した。そこに BBr_3 (1.25 ml, 13.20 mmol) を加えた後、徐々に室温まで昇温し、3時間攪拌した。溶液を水 (100 ml) に入れ CH_2Cl_2 (50 ml \times 3) で抽出した。 Na_2SO_4 で乾燥し、濾過した後、ろ液を減圧下で濃縮し、 CH_2Cl_2 を含む 3.063 g の固体 (化合物 25c) を得た。得られた固体を DMF (130 ml) に溶解し、 K_2CO_3 (2.642 g, 19.1 mmol) を加え、 $100^\circ C$ で 12時間攪拌した。この反応混合物に 1M NH_4Cl 水溶液 (100 ml) を加えて、水層を CH_2Cl_2 で抽出 (80 ml \times 3) した。有機層を Na_2SO_4 で乾燥し、濾過した後、ろ液を減圧下で濃縮した。得られた固体をシリカゲルカラムクロマトグラフィー (CH_2Cl_2) で原点除去を行った後、シリカゲルカラムクロマトグラフィー (CH_2Cl_2 : ヘキサン = 1 : 5, $R_f = 0.66$) で精製し、白色の固体として化合物 11c (1.741 g, 4.14 mmol) を収率 65% で得た。

Mp : $146.1 - 147.0^\circ C$.

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 (

$q, {}^1J(C, F) = 270 \text{ Hz}$), 120.67 ($q, {}^3J(C, F) = 4.0 \text{ Hz}$), 119.71 , 117.92 , 117.72 , 115.89 , 115.18 , 114.62 , 114.42 , 111.59 ppm ($q, {}^3J(C, F) = 4.1 \text{ Hz}$).

HRMS (FAB) : m/z 418.9783 (M^+) ; $C_{19}H_9BrF_3NO_2$ の計算値 : 418.9769 .

元素分析 (%) : $C_{19}H_9BrF_3NO_2$ の計算値 : C 54.31 , H 2.16 , N 3.33 ; 実測値 : C 54.43 , H 2.42 , N 3.53 .

[0105] 化合物 11c (0.964 g , 2.29 mmol)、Ni(cod)₂ (0.379 g , 1.38 mmol)、1,5-シクロオクタジエン (0.35 ml , 2.85 mmol)、2,2'-ビピリジル (0.432 g , 2.77 mmol) を乾燥 THF (60 ml) に溶解し、 60°C で 14.5 時間加熱した。溶液を減圧下で濃縮し、トルエンを用いてシリカゲルに吸着させ、ソックスレー抽出器を用いてトルエンで抽出 ($R_f = 0.96$) した後、減圧下で濃縮した。固体をヘキサンで洗浄し、黄色の固体として化合物 24 (553.3 mg , 0.813 mmol) を収率 71% で得た。

Mp : $363.2 - 364.2^\circ\text{C}$.

${}^1\text{H NMR}$ (300 MHz , CD_2Cl_2 , ppm) δ 7.60 (d, ${}^4J(\text{H}, \text{H}) = 1.2 \text{ Hz}$, 2H), 7.34 (dd, ${}^3J(\text{H}, \text{H}) = 7.8 \text{ Hz}$, ${}^4J(\text{H}, \text{H}) = 2.1 \text{ Hz}$, 2H), 7.20 (d, ${}^3J(\text{H}, \text{H}) = 9.0 \text{ Hz}$, 2H), $7.07 - 6.95$ (m, 8H), 6.73 ppm (dd, ${}^3J(\text{H}, \text{H}) = 6.3 \text{ Hz}$, ${}^4J(\text{H}, \text{H}) = 1.8 \text{ Hz}$, 2H).

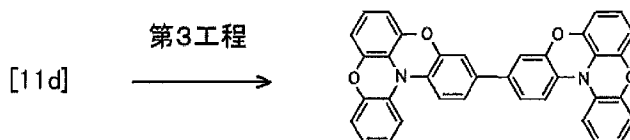
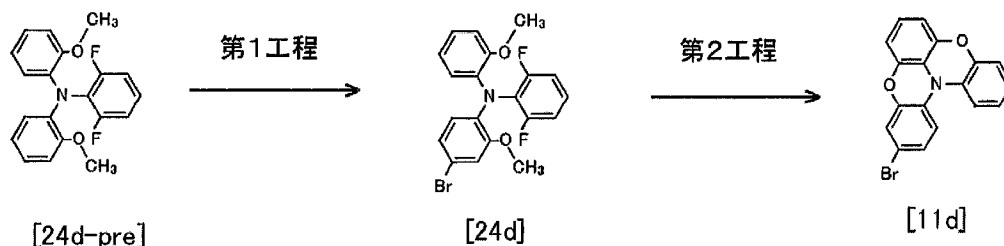
HRMS (FAB) : m/z 680.1169 (M^+), $C_{38}H_{18}F_6N_2O_4$ の計算値 : 680.1171 .

元素分析 (%) : $C_{38}H_{18}F_6N_2O_4$ の計算値 : C 67.06 , H 2.67 , N 4.12 ; 実測値 : C 67.20 , H 2.61 , N 4.25 .

[0106] (実施例 4)

以下のスキームにしたがって化合物 201 を合成した。

[0107] [化30]



[化合物201]

[0108] 化合物24d-pre (8.34 g, 24.5 mmol)、N-ブロモスクシンイミド (4.35 g, 24.4 mmol) をCHCl₃ (200 ml) と酢酸 (200 ml) に溶解し、室温で18時間攪拌した。飽和NaHCO₃水溶液で中和し、CHCl₃で抽出 (100 ml × 3) した。有機層をNa₂SO₄で乾燥し、濾過した後、ろ液を減圧下で濃縮した。得られた固体をシリカゲルカラムクロマトグラフィー (CH₂Cl₂:ヘキサン=1:2, R_f=0.45) で精製し、白色の固体として化合物24d (8.11 g, 19.3 mmol) を収率79%で得た。

Mp: 119.1–120.1 °C.

¹H NMR (300 MHz, CDCl₃, ppm) δ 7.11–6.97 (m, 3H), 6.95 (dd, ³J (H, H) = 8.4 Hz, ⁴J (H, H) = 2.1 Hz, 1H), 6.93–6.76 (m, 5H), 6.74 (d, ³J (H, H) = 8.4 Hz, 1H), 3.59 (s, 3H), 3.56 ppm (s, 3H).

¹³C NMR (75 MHz, CDCl₃, ppm) δ 158.96 (dd, ¹J (C, F) = 249.5 Hz, ³J (C, F) = 5.7 Hz), 153.46, 153.28, 136.06, 124.96, 124.77, 124.67

, 124.40 (t, 3J (C, 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⁺), C₂₀H₁₆BrF₂NO₂の計算値 : 419.0332.

元素分析 (%) : C₂₀H₁₆BrF₂NO₂の計算値 : C 57.16, H 3.84, N 3.33 ; 実測値 : C 57.26, H 3.88, N 3.38.

[0109] 化合物24d (1.82 g, 4.33 mmol) を乾燥CH₂Cl₂ (90 ml) に溶解した。その溶液を-78°Cに冷却し、BBr₃ (1.00 ml, 10.6 mmol) を加えた後、徐々に室温まで昇温し4時間攪拌した。溶液を水に入れ水層をCH₂Cl₂ (50 ml × 3) で抽出した。Na₂SO₄で乾燥し、濾過した後、ろ液を減圧下で濃縮し、CH₂Cl₂を含む1.74 gの白色の固体 (化合物25d) を得た。得られた固体をDMF (60 ml) に溶解し、K₂CO₃ (1.84 g, 13.3 mmol) を加え、100°Cで15.5時間攪拌した。溶液を減圧下で濃縮し、水を加え、CH₂Cl₂で抽出 (50 ml × 3) した。有機層をNa₂SO₄で乾燥し、濾過した後、ろ液を減圧下で濃縮した。得られた固体をシリカゲルショートカラムクロマトグラフィー (CH₂Cl₂, R_f = 0.95) で精製し、白色の固体として化合物11d (1.51 g, 4.28 mmol) を収率99%で得た。

Mp : 145.3–146.3°C.

¹H NMR (300 MHz, CDCl₃, 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^+), $\text{C}_{18}\text{H}_{10}\text{BrNO}_2$ の計算値 : 350.9895.

元素分析 (%) : $\text{C}_{18}\text{H}_{10}\text{BrNO}_2$ の計算値 : C 61.39, H 2.86, N 3.98 ; 実測値 : C 61.53, H 2.79, N 4.00.

[0110] 化合物 11d (0.351 g, 1.00 mmol)、 $\text{Ni}(\text{cod})_2$ (0.329 g, 1.20 mmol)、1,5-シクロオクタジエン (0.14 ml, 1.14 mmol)、2,2'-ビピリジル (0.189 g, 1.21 mmol) を乾燥 THF (30 ml) に溶解し、60°C で 18 時間加熱した。溶液を減圧下で濃縮し、トルエンを用いてシリカゲルに吸着させ、ソックスレー抽出器を用いてトルエンで抽出 ($R_f=0.95$) した後、減圧下で濃縮した。固体をヘキサンで洗浄することにより、黄色の固体として化合物 201 (0.268 g, 0.491 mmol) 収率 98% で得た。

Mp : 337.6–338.6°C.

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

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

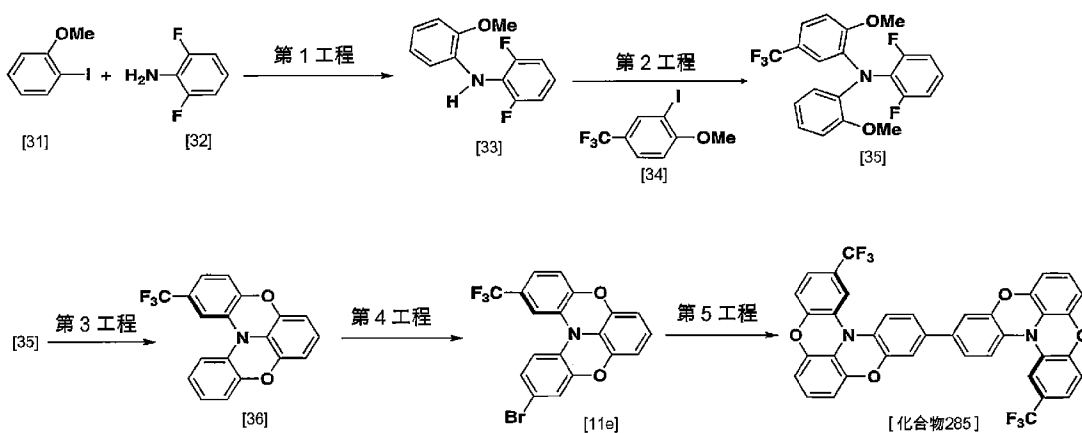
HRMS (FAB) : m/z 544.1426 (M^+), $C_{36}H_{20}N_2O_4$ の計算値 : 544.1423.

元素分析 (%) : $C_{36}H_{20}N_2O_4$ の計算値 : C 79.40, H 3.70, N 5.14 ; 実測値 C 79.22, H 3.59, N 5.17.

[0111] (実施例5)

以下のスキームにしたがって化合物285を合成した。

[0112] [化31]



[0113] 化合物31 (21.7 g, 92.5 mmol)、化合物32 (10.7 g, 82.7 mmol)、 $Pd_2(dba)_3 \cdot CHCl_3$ (1.60 g, 1.59 mmol)、ナトリウムtert-ブトキシド (9.22 g, 95.9 mmol)、トリtert-ブチルホスフィン (2.58 g, 12.7 mmol) を乾燥トルエン (200 ml) に溶解し、 $100^\circ C$ で16時間攪拌した。不溶物を濾過し、トルエンで洗浄 (150 ml) した。その後、ろ液に水 (50 ml) を加え、トルエンで抽出 (50 ml \times 3) した。有機層を Na_2SO_4 で乾燥し、濾過した後、ろ液を減圧下で濃縮した。得られた固体をシリカゲルショートカラムクロマトグラフィー (CH_2Cl_2 : ヘキサン = 1 : 2, $R_f = 0.45$) を行った後、さらにシリカゲルショートカラムクロマトグラフィー (CH_2Cl_2 : ヘキサン = 1 : 4, $R_f = 0.25$) で精製し、橙色の液体として化合物33 (18.7 g, 79.4 mmol) を収率96%で得た。

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, $^1\text{J}(\text{C}, \text{F}) = 246.1 \text{ Hz}$, $^3\text{J}(\text{C}, \text{F}) = 5.7 \text{ Hz}$), 147.59, 133.18, 123.56 (t, $^3\text{J}(\text{C}, \text{F}) = 9.8 \text{ Hz}$), 120.65, 119.72, 118.95 (t, $^2\text{J}(\text{C}, \text{F}) = 15.5 \text{ Hz}$), 112.91 (t, $^4\text{J}(\text{C}, \text{F}) = 2.3 \text{ Hz}$), 111.77 (dd, $^2\text{J}(\text{C}, \text{F}) = 16.6 \text{ Hz}$, $^4\text{J}(\text{C}, \text{F}) = 6.8 \text{ Hz}$), 109.96, 55.47.

HRMS (FAB) : m/z 235.0811 (M^+) ; $\text{C}_{13}\text{H}_{11}\text{F}_2\text{NO}$ の計算値 : 235.0809.

元素分析 (%) : $\text{C}_{13}\text{H}_{11}\text{F}_2\text{NO}$ の計算値 : C 66.38, H 4.71, N 5.95 ; 実測値 : C 66.27, H 4.53, N 6.06.

[0114] 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) を乾燥オージクロロベンゼン [ODCB] (45 ml) に加え180°Cに加熱し、50時間攪拌した。不溶物を濾過し、 CH_2Cl_2 で洗浄 (50 ml) した。その後、ろ液に水を加え、 CH_2Cl_2 で抽出 (35 ml \times 3) した。有機層を Na_2SO_4 で乾燥し、濾過した後、ろ液を減圧下で濃縮した。得られた固体をシリカゲルカラムクロマトグラフィー (CH_2Cl_2 : ヘキサン = 1 : 3, $R_f = 0.22$) で精製し、白色の固体として化合物35 (5.43 g, 13.3 mmol) を収率87%で得た。
Mp : 57.1–58.1°C.

^1H NMR (300 MHz, CDCl_3 , ppm) δ 7.28 (d, $^3\text{J}(\text{H}, \text{H}) = 9.0 \text{ Hz}$, 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, $^1\text{J}(\text{C}, \text{F}) = 249 \text{ Hz}$, $^3\text{J}(\text{C}, \text{F}) = 5.7 \text{ Hz}$), 154.95, 15

3. 28, 136. 88, 135. 61, 125. 15, 124. 82, 124. 62 (t, 4J (C, F) = 9. 8 Hz), 124. 28 (t, 2J (C, F) = 20. 6 Hz), 124. 27 (q, 1J (C, F) = 270 Hz), 123. 1 (q, 2J (C, F) = 32. 1 Hz), 121. 19, 120. 84 (q, 3J (C, F) = 4. 0 Hz), 120. 24 (q, 3J (C, F) = 3. 5 Hz), 113. 09, 112. 11, 111. 60 (dd, 2J (C, F) = 16. 6 Hz, 4J (C, F) = 6. 8 Hz), 56. 01, 55. 91.

HRMS (FAB) : m/z 409. 1097 (M⁺) ; C₂₁H₁₆F₅NO₂の計算値 : 409. 1101.

元素分析 (%) : C₂₁H₁₆F₅NO₂の計算値 : C 61. 62, H 3. 94, N 3. 42 ; 実測値 : C 61. 76, H 3. 91, N 3. 4.

[0115] 化合物35 (4. 09 g, 10. 0 mmol) を乾燥CH₂Cl₂ (300 ml) に溶解し-78℃に冷却した。そこにBBr₃ (2. 00 ml, 21. 1 mmol) を加えた後、徐々に室温まで昇温し、3時間攪拌した。溶液を水 (100 ml) に入れ、CH₂Cl₂ (50 ml × 3) で抽出した。Na₂SO₄で乾燥し、濾過した後、ろ液を減圧下で濃縮し、CH₂Cl₂を含む3. 75 gの固体を得た。得られた固体をDMF (200 ml) に溶解し、K₂CO₃ (4. 15 g, 30. 0 mmol) を加え、100℃で20時間攪拌した。不溶物を濾過した後、溶液を減圧下で濃縮した。固体をCH₂Cl₂ (100 ml) に溶解し、1M NH₄Cl水溶液 (100 ml) を加え、CH₂Cl₂で抽出 (70 ml × 3) した。有機層をNa₂SO₄で乾燥し、濾過した後、ろ液を減圧下で濃縮した。得られた固体をシリカゲルカラムクロマトグラフィー (CH₂Cl₂) で原点除去を行った後、シリカゲルカラムクロマトグラフィー (CH₂Cl₂ : ヘキサン = 1 : 4, R_f = 0. 58) で精製することで、白色の固体として化合物36 (2. 20 g, 6. 44 mmol) を収率64%で得た。

Mp : 129. 3-130. 2℃.

¹H NMR (300 MHz, CD₂Cl₂, 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), 7.16 (dq, 3J (H, H) = 8.4 Hz, 4J (H, F) = 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 (%) : $C_{19}H_{10}F_3NO_2$ の計算値 : C 66.87, H 2.95, N 4.10 ; 実測値 : C 66.72, H 2.80, N 4.07.

[0116] 化合物 36 (1.72 g, 5.03 mmol)、N-ブロモスクシンイミド (0.993 g, 5.58 mmol) を $CHCl_3$ (45 ml)、酢酸 (45 ml) に溶解し、室温で 18.5 時間攪拌した。飽和 $NaHCO_3$ 水溶液で中和し、 $CHCl_3$ で抽出 (50 ml \times 3) した。有機層を Na_2SO_4 で乾燥し、濾過した後、ろ液を減圧下で濃縮した。得られた固体をシリカゲルカラムクロマトグラフィー (CH_2Cl_2) で原点除去を行った後、さらにシリカゲルカラムクロマトグラフィー (CH_2Cl_2 : ヘキサン = 1 : 2, $R_f = 0.78$) で精製し、白色の固体として化合物 11e (1.90 g, 4.51 mmol) を収率 90% で得た。

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^+) ; $C_{19}H_9BrF_3NO_2$ の計算値 : 418.9769.

元素分析 (%) : $C_{19}H_9BrF_3NO_2$ の計算値 : C 54.31, H 2.16, N 3.33 ; 実測値 : C 54.41, H 2.05, N 3.43.

[0117] 化合物 11e (603 mg, 1.44 mmol)、 $Ni(cod)_2$ (23

6 mg, 0.858 mmol)、1,5-シクロオクタジエン (0.23 ml, 1.87 mmol)、2,2'-ビピリジル (270 mg, 1.73 mmol) を乾燥テトラヒドロフラン [THF] (30 ml) に溶解し、60°C で25時間加熱した。溶液を減圧下で濃縮し、*o*-ジクロロベンゼンを用いてシリカゲルに吸着させ、熱 *o*-ジクロロベンゼンで抽出した後、減圧下で濃縮した。固体をヘキサンで洗浄し、黄色の固体として化合物 285 (449 mg, 0.660 mmol) を収率92%で得た。

Mp: 287.5–289.2°C.

$^1\text{H NMR}$ (600 MHz, CD_2Cl_2 , ppm) δ 7.60 (d, $^4\text{J}(\text{H}, \text{H}) = 1.2 \text{ Hz}$, 2H), 7.37 (d, $^3\text{J}(\text{H}, \text{H}) = 8.4 \text{ Hz}$, 2H), 7.23 (dd, $^3\text{J}(\text{H}, \text{H}) = 8.4 \text{ Hz}$, $^4\text{J}(\text{H}, \text{H}) = 1.8 \text{ Hz}$, 2H), 7.19 (dq, $^3\text{J}(\text{H}, \text{H}) = 8.4 \text{ Hz}$, $^4\text{J}(\text{H}, \text{F}) = 0.6 \text{ Hz}$, 2H), 7.17 (d, $^4\text{J}(\text{H}, \text{H}) = 2.4 \text{ Hz}$, 2H), 7.00 (dd, $^3\text{J}(\text{H}, \text{H}) = 8.4 \text{ Hz}$, $^4\text{J}(\text{H}, \text{H}) = 1.8 \text{ Hz}$, 2H), 6.84 (t, $^3\text{J}(\text{H}, \text{H}) = 7.8 \text{ Hz}$, 2H), 6.59 (dd, $^3\text{J}(\text{H}, \text{H}) = 8.4 \text{ Hz}$, $^4\text{J}(\text{H}, \text{H}) = 1.2 \text{ Hz}$, 2H), 6.56 (dd, $^3\text{J}(\text{H}, \text{H}) = 8.4 \text{ Hz}$, $^4\text{J}(\text{H}, \text{H}) = 1.2 \text{ Hz}$, 2H).

$^{13}\text{C NMR}$ (150 MHz, CD_2Cl_2 , ppm) δ 149.96, 147.56, 145.36, 145.21, 135.80, 130.14, 127.71, 126.24 (q, $^2\text{J}(\text{C}, \text{F}) = 33.0 \text{ Hz}$), 124.76, 124.27 (q, $^1\text{J}(\text{C}, \text{F}) = 270 \text{ Hz}$), 122.02, 120.90 (q, $^3\text{J}(\text{C}, \text{F}) = 4.5 \text{ Hz}$), 120.36, 117.98, 115.62, 115.10, 112.09, 111.84 (q, $^3\text{J}(\text{C}, \text{F}) = 3.0 \text{ Hz}$), 111.60.

HRMS (FAB): m/z 680.1164 (M^+); $\text{C}_{38}\text{H}_{18}\text{F}_6\text{N}_2\text{O}_4$ の計算値: 680.1171.

元素分析 (%): $\text{C}_{38}\text{H}_{18}\text{F}_6\text{N}_2\text{O}_4$ の計算値: C 67.06, H 2.67, N

ppm (d, 3J (H, H) = 6.9 Hz, 2H).

HRMS (FAB) : m/z 559.0449 (M^+) ; $C_{23}H_9F_{12}NO_2$ の計算値 : 559.0442.

[0121] 化合物42 (106 mg, 0.190 mmol)、N-ブロモスクシンイミド (36.4 mg, 0.204 mmol) を $CHCl_3$ (5 ml)、酢酸 (5 ml) に溶解し、室温で14時間攪拌した。その後、60°Cに加熱し、6.5時間攪拌した。反応溶液を、飽和 $NaHCO_3$ 水溶液で中和し、水層を $CHCl_3$ で抽出 (15 ml \times 3) した。有機層を Na_2SO_4 で乾燥し、濾過した後、ろ液を減圧下で濃縮した。得られた固体をシリカゲルカラムクロマトグラフィー (ヘキサン, $R_f = 0.40$) で精製し、白色の固体として化合物11f (117.3 mg, 0.184 mmol) を収率97%で得た。

Mp : 121.6 – 122.8°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^+) ; $C_{23}H_8BrF_{12}NO_2$ の計算値 : 638.9529.

[0122] 化合物11f (64.9 mg, 0.102 mmol)、 $Ni(cod)_2$ (17.4 mg, 0.0633 mmol)、1,5-シクロオクタジエン (15 ml, 0.122 mmol)、2,2'-ビピリジル (19.0 mg, 0.123 mmol) を乾燥テトラヒドロフラン [THF] (2.5 ml) に溶解し、60°Cで72時間加熱した。溶液を減圧下で濃縮し、 o -ジクロロベンゼンを用いてシリカゲルに吸着させ、熱 o -ジクロロベンゼンで抽出した後、減圧下で濃縮した。固体をヘキサンで洗浄し、黄色の固体として化合物294 (34.8 mg, 0.0312 mmol) を収率61%で得た。

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).

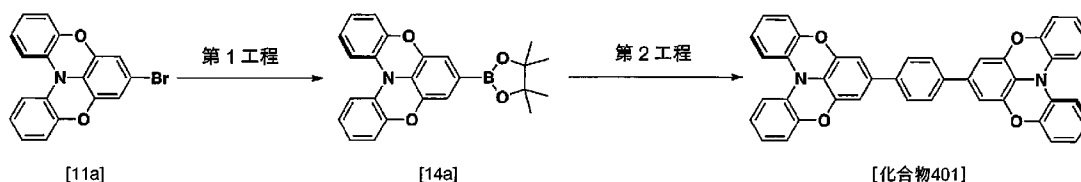
HRMS (FAB) : m/z 1116.0756 (M⁺) ; C₄₆H₁₆F₂₄N₂O₄ の計算値 : 1116.0727.

元素分析 (%) : C₄₆H₁₆F₂₄N₂O₄ の計算値 : C 49.48, H 1.44, N 2.51 ; 実測値 : C 49.58, H 1.45, N 2.74.

[0123] (実施例7)

以下のスキームにしたがって化合物401を合成した。

[0124] [化33]



[0125] 化合物11a (1.06g, 3.01mmol) を乾燥テトラヒドロフラン [THF] (100ml) に溶解し、 -78°C に冷却した。n-ブチルリチウム (ヘキサン中, 1.58M, 2.0ml, 3.16mmol) を滴下して1時間攪拌した。その後2-イソプロポキシ-4,4,5,5-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロラン (0.65ml, 3.19mmol) を加え、室温で5時間攪拌した。溶液を減圧下で濃縮し、 CH_2Cl_2 (50ml) に溶解した。水を加え、水層を CH_2Cl_2 で抽出 (25ml \times 3) した。有機層を Na_2SO_4 で乾燥し、濾過した後、ろ液を減圧下で濃縮した。得られた固体をゲル排除クロマトグラフィー (トルエン) で精製し、白色の固体として化合物14a (1.04g, 2.61mmol) を収率87%で得た。

。

^1H NMR (300MHz, CDCl_3 , ppm) δ 7.32 (dd, ^3J (H, H) = 6.6 Hz, ^4J (H, H) = 2.4 Hz, 2H), 6.96–6.85 ppm (m, 8H).

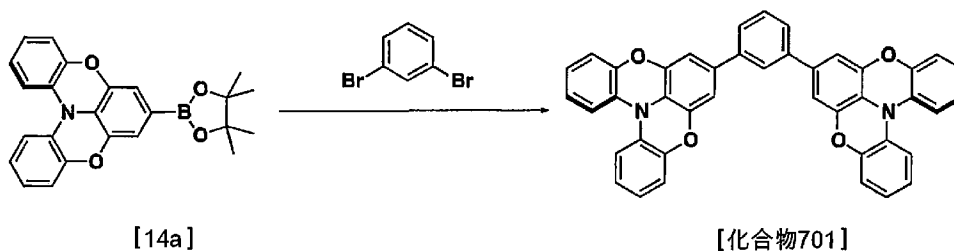
[0126] トルエンと蒸留水をそれぞれアルゴンバブリングにより4時間脱気した。1,4-ジブロモベンゼン (34.5 mg, 0.146 mmol)、化合物 14a (126 mg, 0.315 mmol)、 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3 \cdot \text{CHCl}_3$ (4.92 mg, 0.00475 mmol)、2-ジシクロヘキシルホスフィノ-2',6'-ジメトキシビフェニル [SPhos] (7.76 mg, 0.0189 mmol)、 K_3PO_4 (92.6 mg, 0.436 mmol) をシュレンクに入れ、アルゴン置換を行った。アルゴンバブリング (4時間) により脱気したトルエン (5 ml)、蒸留水 (0.5 ml) を加え、110°C で39時間攪拌した。溶液を減圧化で濃縮し、*o*-ジクロロベンゼンを用いてシリカゲルに吸着させ、熱*o*-ジクロロベンゼンで抽出した後、減圧下で濃縮した。固体をヘキサンで洗浄し、黄色の固体として化合物 401 (38.4 mg, 0.0619 mmol) を収率42%で得た。

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

[0127] (実施例8)

以下のスキームにしたがって化合物 701 を合成した。

[0128] [化34]



[0129] 1, 3-ジブロモベンゼン (18 μ l, 0.150 mmol)、化合物14a (125 mg, 0.312 mmol)、Pd₂(dba)₃·CHCl₃ (4.90 mg, 0.00473 mmol)、2-ジシクロヘキシルホスフィン-2'、6'-ジメトキシビフェニル [SPhos] (7.53 mg, 0.0183 mmol)、K₃PO₄ (96.0 mg, 0.452 mmol) をシュレンクに入れ、アルゴン置換を行った。アルゴンバブリング (2.5時間) により脱気したトルエン (6 mL) および蒸留水 (0.6 mL) を加え、110°C で42時間攪拌した。反応溶液を減圧化で濃縮し、*o*-ジクロロベンゼンを用いてシリカゲルに吸着させ、熱*o*-ジクロロベンゼンで抽出した後、減圧下で濃縮した。得られた固体をヘキサンで洗浄し、薄黄色の固体として化合物701 (83.9 mg, 0.135 mmol) を収率90%で得た。

¹H NMR (300 MHz, 1/1 CD₂Cl₂/CS₂, ppm) δ 7.62 (s, 1H), 7.46 (d, ³J (H, H) = 1.2 Hz, 2H), 7.37 (dd, ³J (H, H) = 6.6 Hz, ⁴J (H, H) = 1.2 Hz, 4H), 7.35 (t, ³J (H, H) = 1.2 Hz, 1H), 7.02–6.91 (m, 12H).

[0130] (試験例1)

実施例1~4で得られた化合物1、化合物2、化合物24、化合物201 (二量体) と比較化合物である化合物A~C (単量体) についてサイクリックボルタンメトリーを行った結果を図1および図2に示す。なお、サイクリックボルタンメトリーは、n-Bu₄N⁺PF₆⁻ (0.1 mol/l) を支持電解質に用い、参照電極としてAg/Ag⁺、作用極としてグラッシーカーボン、対極としてPtを用いて、CH₂Cl₂溶液中で行った。サイクリックボルタンメトリーの結果より、化合物1、化合物24、化合物201は二段階の可逆な酸化波を示し、この測定条件下において、対応するラジカルカチオンおよびジカチオンが安定に生成することが確認され、ホール輸送材料として優れた特性を示すことが示唆された。化合物2は、二段階の可逆な酸化波に加

えて、3、4段階目の二電子酸化に対応する酸化波も可逆に観測され、この測定条件下では、対応するテトラカチオン種までもが安定に生成することが確認され、優れたホール輸送材料であることが示唆された。化合物1、化合物2、化合物24、化合物201は、サイクリックボルタンメトリーの測定結果と光吸収スペクトルから見積もられるHOMOがいずれも高いためホール注入性にも優れていることが確認された（図3参照）。なお、図3における α -NPDとTPDのデータは、Appl. Phys. Lett., 2007, 90, 183503に基づくものである。

[0131]（実施例9）

化合物1を用いて薄膜を作成し、SCLC法（Appl. Phys. Lett. 2007, 90, 203512）にしたがってホール移動度を測定したところ、 $1.2 \sim 2.0 \times 10^{-4} \text{ cm}^2/\text{Vs}$ であった。また、化合物1、化合物24、化合物201、 α -NPDを用いてTOF法（Time-of-flight法）にしたがってホール移動度を測定した結果を図4に示す。これらの結果は、有機エレクトロルミネッセンス素子における代表的なホール輸送材料である α -NPDと同程度のホール移動度を本発明の化合物が有していることを示している。また、化合物201についてTOF法にしたがって電子移動度を測定した結果をホール移動度の測定結果とともに図5に示す。この結果は、化合物201の電子移動度がホール移動度よりもさらに高いことを示しており、本発明の化合物の中には優れたバイポーラー材料が含まれていることを示している。

[0132]（実施例10）

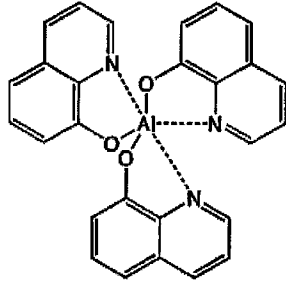
本実施例において、図6に示す本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子（a）と比較用の有機エレクトロルミネッセンス素子（b）を製造した。

有機エレクトロルミネッセンス素子（a）は、ITO電極付きガラス基板のITO電極上に化合物1を10nm、 α -NPDを50nm、下記の構造を有するAlq₃を50nm、LiFおよびAlを順に蒸着することにより製造した（図6（a）参照）。

有機エレクトロルミネッセンス素子（b）は、化合物1を含むホール注入

層を形成しなかった点を変更して、上記の有機エレクトロルミネッセンス素子 (a) と同じ工程にしたがって製造した (図 6 (b) 参照)。

[0133] [化35]



Alq_3

[0134] 製造した有機エレクトロルミネッセンス素子 (a) と有機エレクトロルミネッセンス素子 (b) の構造は以下の通りである。

素子 (a) IT0 / 化合物 1 (10nm) / α -NPD (50nm) / Alq_3 (50nm) / LiF / Al

素子 (b) IT0 / α -NPD (50nm) / Alq_3 (50nm) / LiF / Al

[0135] 製造した有機エレクトロルミネッセンス素子 (a) と有機エレクトロルミネッセンス素子 (b) について、電流密度と電流効率の関係を測定したところ図 7 に示す結果が得られた。このことから、本発明の一般式 [1] で表される化合物 1 を用いることにより電流効率が向上することが確認された。

[0136] (実施例 1 1)

実施例 1 0 と同様にして以下の構造を有する有機エレクトロルミネッセンス素子 (c) および (d) を製造した。これらの有機エレクトロルミネッセンス素子は、ホール輸送材料が異なっている。

素子 (c) IT0 / 化合物 1 (60nm) / Alq_3 (50nm) / LiF / Al

素子 (d) IT0 / α -NPD (60nm) / Alq_3 (50nm) / LiF / Al

[0137] 製造した有機エレクトロルミネッセンス素子 (c) および (d) について、2 mA に電流値を固定して 2000 時間あるいはそれ以上にわたって電圧と輝度の変化を測定した。電圧変化の測定結果を図 8 に示し、輝度変化の測定結果を図 9 に示す。図 8 より、本発明の一般式 [1] で表される化合物 1

を用いた場合は、電圧の増加が小さく抑えられることが確認された。このことは、化合物 1 を用いれば素子の劣化に基づく電気抵抗の上昇を抑制しうることを示すものである。また、図 9 より、化合物 1 を用いた場合は、素子の輝度低下が小さく抑えられることが確認された。これらの結果は、化合物 1 が素子の長寿命化に効果があることを示すものである。

[0138] (実施例 1 2)

実施例 1 0 で用いた化合物 1 のかわりに化合物 2 0 1 を用いて、実施例 1 0 と同様にして以下の構造を有する有機エレクトロルミネッセンス素子 (e) および (f) を製造した。また、比較用として以下の構造を有する有機エレクトロルミネッセンス素子 (g) も製造した。これらの有機エレクトロルミネッセンス素子は、化合物 2 0 1 膜と α -NPD 膜の合計膜厚を 6 0 n m で一定にして、化合物 2 0 1 膜の膜厚を変化させたものである。

素子 (e) IT0/化合物201(30nm)/ α -NPD(30nm)/Alq₃(50nm)/LiF/Al

素子 (f) IT0/化合物201(10nm)/ α -NPD(50nm)/Alq₃(50nm)/LiF/Al

素子 (g) IT0/ α -NPD(60nm)/Alq₃(50nm)/LiF/Al

[0139] 製造した有機エレクトロルミネッセンス素子 (e) ~ (g) について、電流密度と電流効率の関係を測定したところ図 1 0 に示す結果が得られた。 α -NPD に対するホール注入層として化合物 2 0 1 膜を形成することにより、電流あたりの輝度の向上が認められ、電流効率が向上することが確認された。また、化合物 2 0 1 膜の膜厚を厚くすることにより、電流あたりの輝度がさらに高まり、電流効率がさらに向上することが確認された。このことは、化合物 2 0 1 がホール輸送性材料としても優れていることを示している。

産業上の利用可能性

[0140] 以上から明らかなように、一般式 [1] で表される化合物は、アモルファス状態が安定で結晶化しにくいというえ、電荷輸送材料として優れた特性を有している。このため、一般式 [1] で表される化合物を用いることにより、高効率で、消費電力や発熱量を抑え、長寿命化も実現しうる有機エレクトロルミネッセンス素子や有機薄膜太陽電池などの有機デバイスを提供することが

可能である。このため、本発明は産業上の利用可能性が高い。

符号の説明

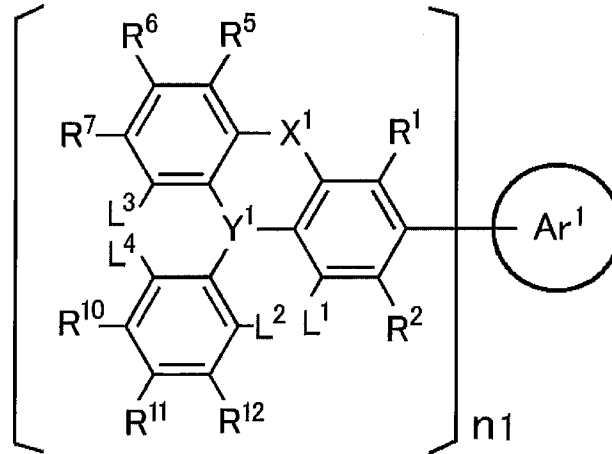
- [0141] 1 I T O電極付きガラス基板
 2 化合物 1
 3 α -N P D
 4 A l q₃
 5 L i F
 6 A l

請求の範囲

[請求項1] 下記一般式 [1] で表される化合物。

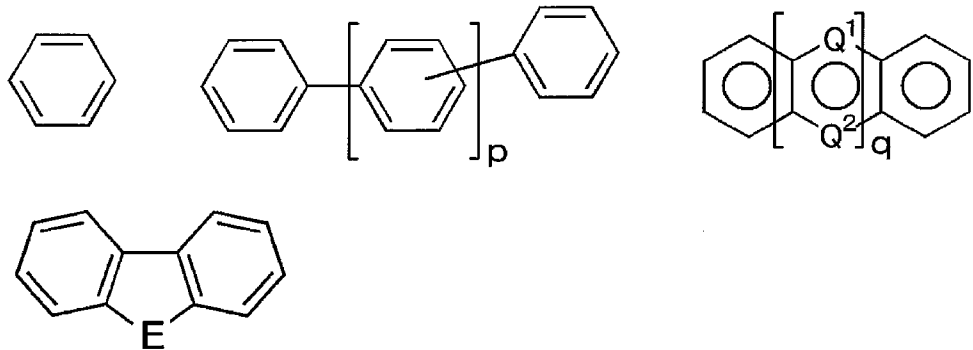
[化1]

一般式 [1]



[一般式 [1] において、A r¹は単結合または下記のいずれかの構造を表し；

[化2]



Q¹およびQ²は、ともに=CH-であるか、Q¹が単結合でQ²が-CH=CH-であるか、Q¹が-CH=CH-でQ²が単結合であり；pは0～3のいずれかの整数を表し；qは0～3のいずれかの整数を表し；Eは酸素原子、硫黄原子を表すか、または炭素原子、珪素原子、窒素原子、リン原子、ホウ素原子もしくは硫黄原子を介して連結する原子団を表し；

X¹は、酸素原子、硫黄原子、炭素原子、窒素原子、リン原子およ

び珪素原子からなる群より選択される1つの原子を介して連結する連結基を表し；

Y¹は、窒素原子、ホウ素原子およびリン原子からなる群より選択される1つの原子を介して連結する連結基を表し；

L¹とL²、L³とL⁴のいずれか一方は、互いに結合して酸素原子、硫黄原子、炭素原子、窒素原子、リン原子および珪素原子からなる群より選択される1つの原子を介して連結する連結基を表し、L¹とL²、L³とL⁴の他方は、各々独立に、水素原子または置換基を表し；

R¹、R²、R⁵～R⁷およびR¹⁰～R¹²は、各々独立に、水素原子または置換基を表し、R⁵とR⁶、R⁶とR⁷、R¹⁰とR¹¹、R¹¹とR¹²は、互いに結合して連結基を形成していてもよく；

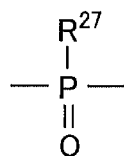
n₁は2以上のいずれかの整数を表し、分子内にn₁個存在するX¹、Y¹、R¹、R²、R⁵～R⁷およびR¹⁰～R¹²は、それぞれ互いに同一であっても異なってもよく；

A_rが単結合であるとき、隣接する2つのR¹同士が互いに結合して連結基を形成していてもよく、隣接する2つのR²同士が互いに結合して連結基を形成していてもよい。]

[請求項2]

一般式 [1] におけるL¹とL²、L³とL⁴のいずれか一方が形成する連結基と、X¹が表す連結基が、各々独立に、-O-、-S-、-SO₂-、>C R²¹ R²²、>C=O、>C=C R²³ R²⁴、>C=N R²⁵、>N R²⁶、

[化3]



または>S i R²⁸ R²⁹であり、

Y¹が、>N-、>B-、>P-または>P (=O) -であり、

R¹、R²、R²¹、R²²、R²⁸およびR²⁹が、各々独立に、水素原子、置

換もしくは無置換のアルキル基、または置換もしくは無置換のアルコキシ基であり、

$R^5 \sim R^7$ および $R^{10} \sim R^{12}$ が、各々独立に、水素原子、置換もしくは無置換のアルキル基、置換もしくは無置換のアルコキシ基、置換もしくは無置換のアリール基、または置換もしくは無置換のアリールオキシ基であるか、 R^5 と R^6 、 R^6 と R^7 、 R^{10} と R^{11} 、 R^{11} と R^{12} が互いに結合して連結基を形成しており、

$R^{23} \sim R^{27}$ が、各々独立に、水素原子、置換もしくは無置換のアルキル基、または置換もしくは無置換のアリール基であることを特徴とする請求項1に記載の化合物。

[請求項3] 一般式 [1] における L^1 と L^2 、 L^3 と L^4 のいずれか一方が形成する連結基と、 X^1 が表す連結基が $-O-$ であることを特徴とする請求項1または2に記載の化合物。

[請求項4] 一般式 [1] における Y^1 が $>N-$ であることを特徴とする請求項1～3のいずれか1項に記載の化合物。

[請求項5] 一般式 [1] における R^1 および R^2 が水素原子であることを特徴とする請求項1～4のいずれか1項に記載の化合物。

[請求項6] 一般式 [1] における R^5 、 R^7 、 R^{10} および R^{12} が水素原子であり、 R^6 および R^{11} が水素原子またはアルコキシ基であることを特徴とする請求項1～5のいずれか1項に記載の化合物。

[請求項7] 分子が非対称であることを特徴とする請求項1～6のいずれか1項に記載の化合物。

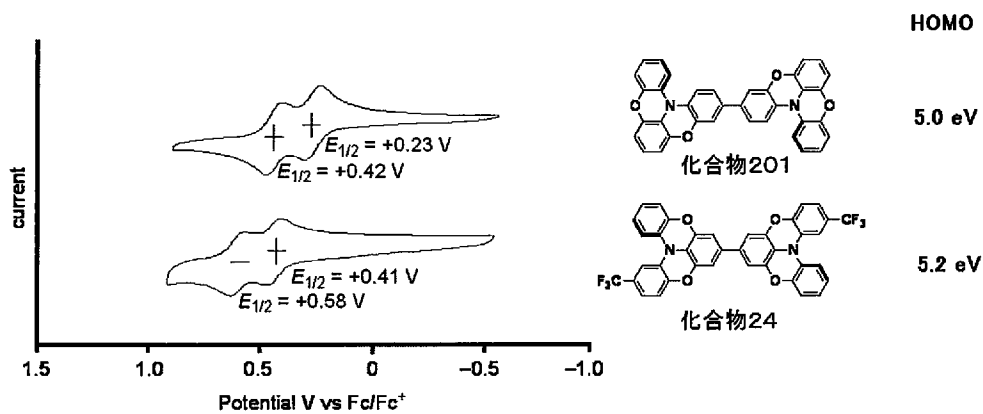
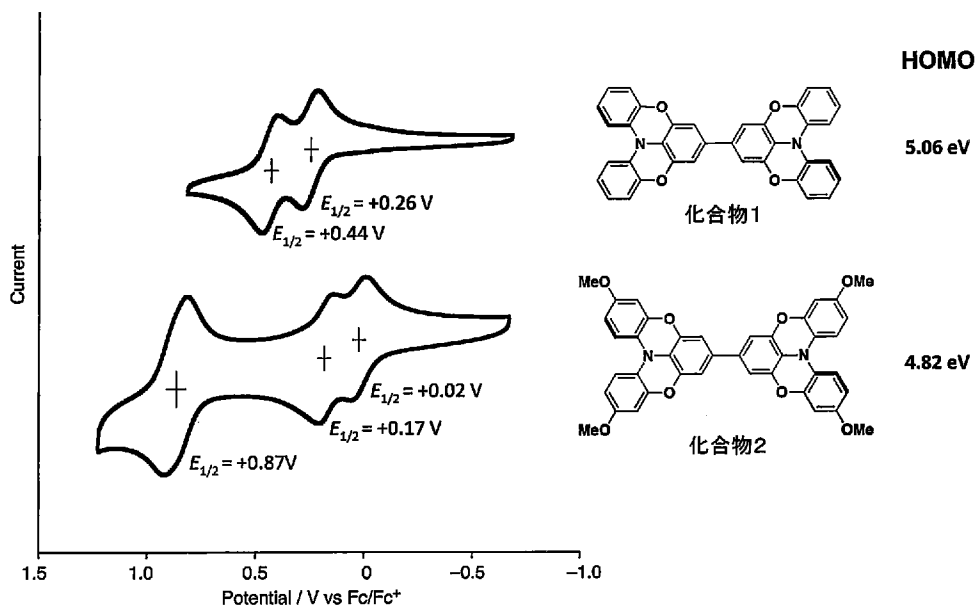
[請求項8] 請求項1～7のいずれか1項に記載の化合物からなる電荷輸送材料。

[請求項9] 請求項1～7のいずれか1項に記載の化合物を用いた有機デバイス。

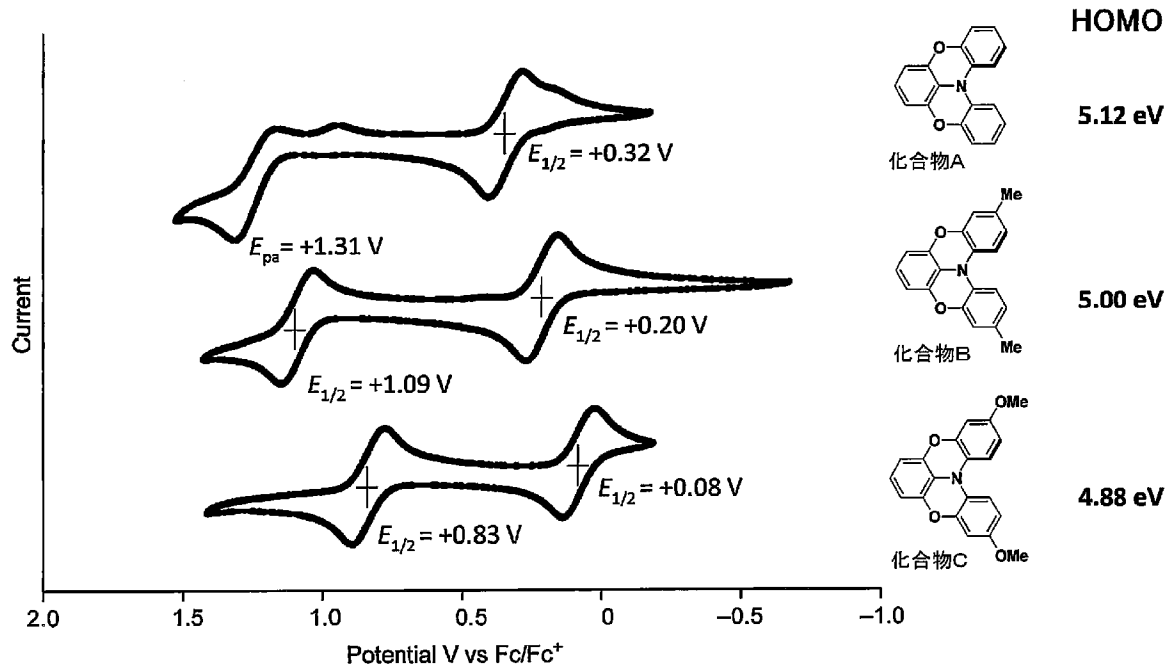
[請求項10] 請求項1～7のいずれか1項に記載の化合物を用いた有機エレクトロルミネッセンス素子。

- [請求項11] 請求項1～7のいずれか1項に記載の化合物を用いた光電変換素子
。
- [請求項12] 請求項1～7のいずれか1項に記載の化合物を用いた有機薄膜太陽電池。

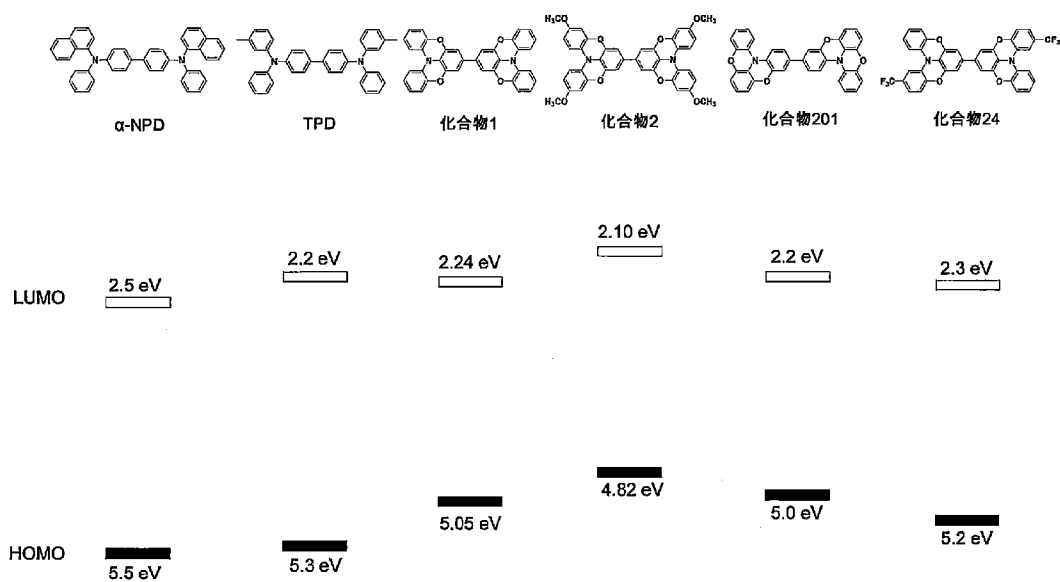
[1]



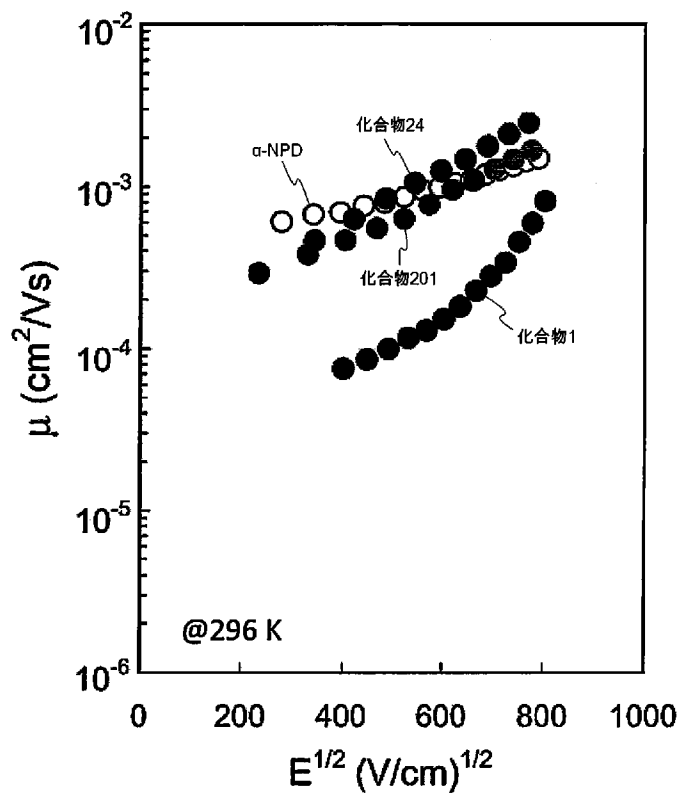
[図2]



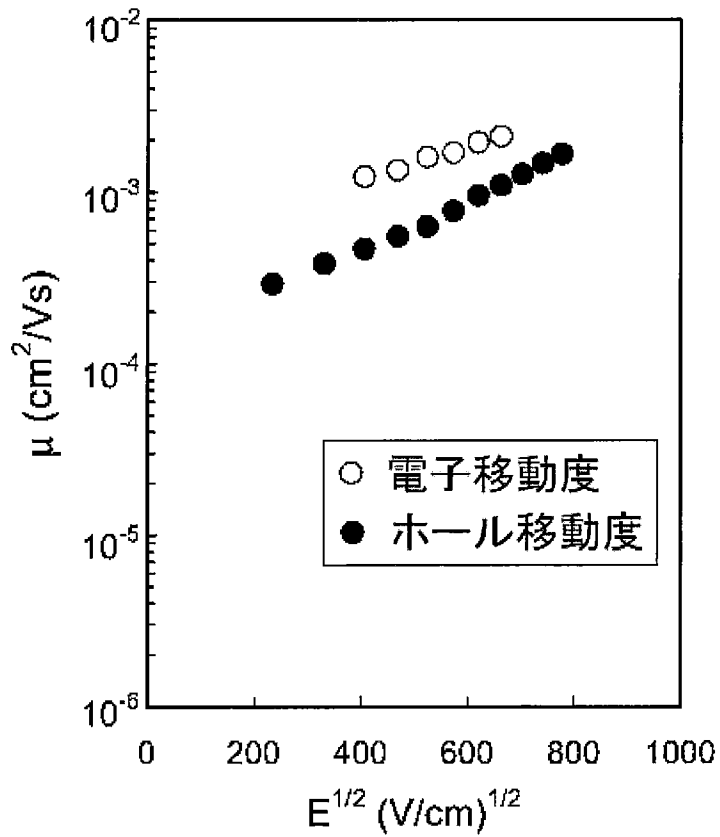
[図3]



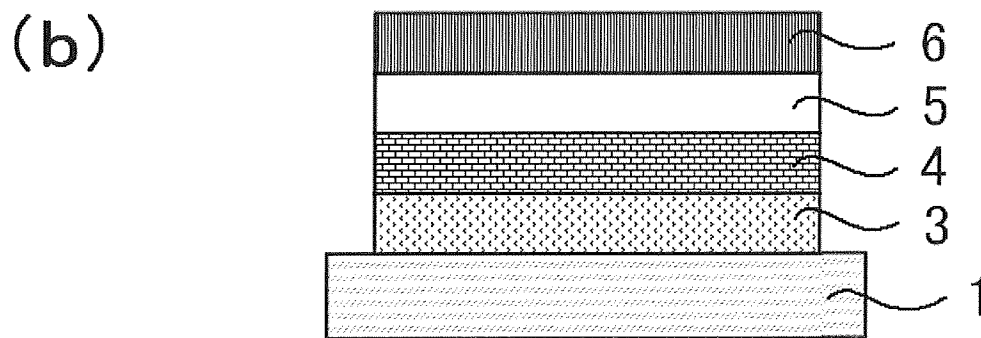
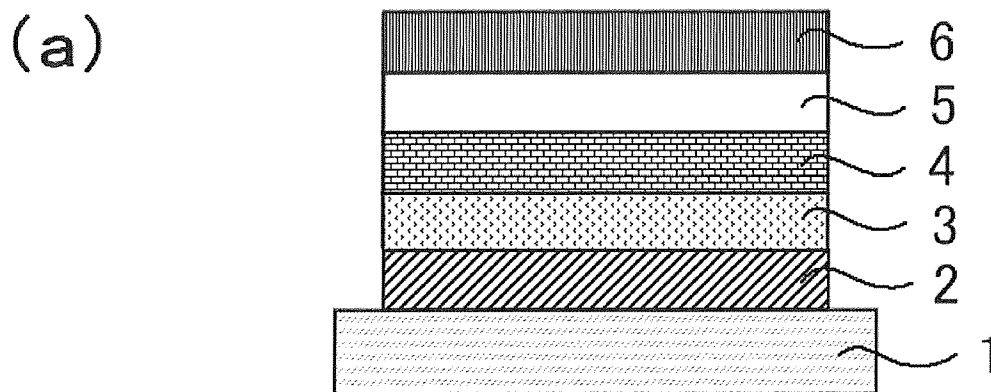
[図4]



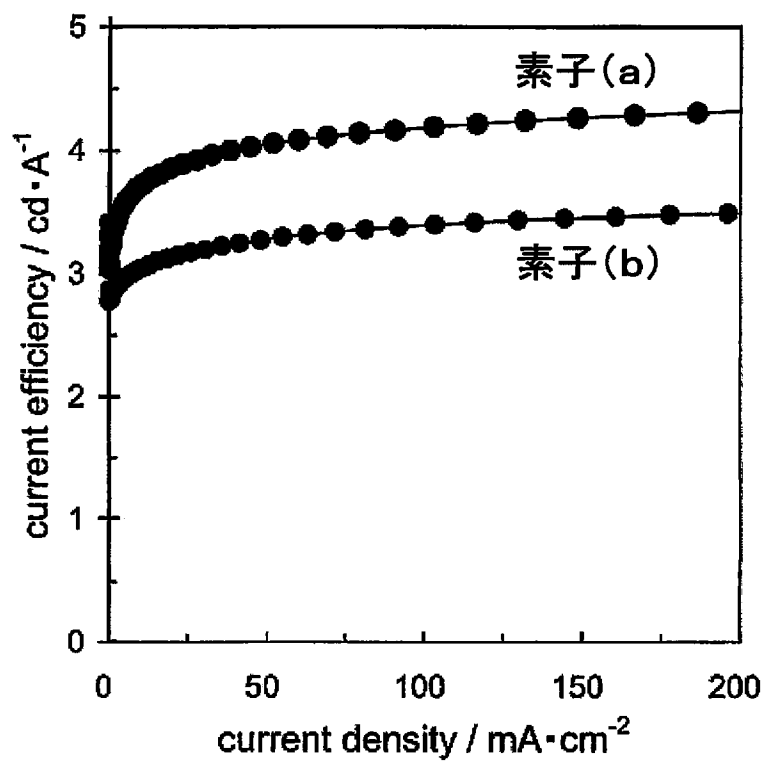
[図5]



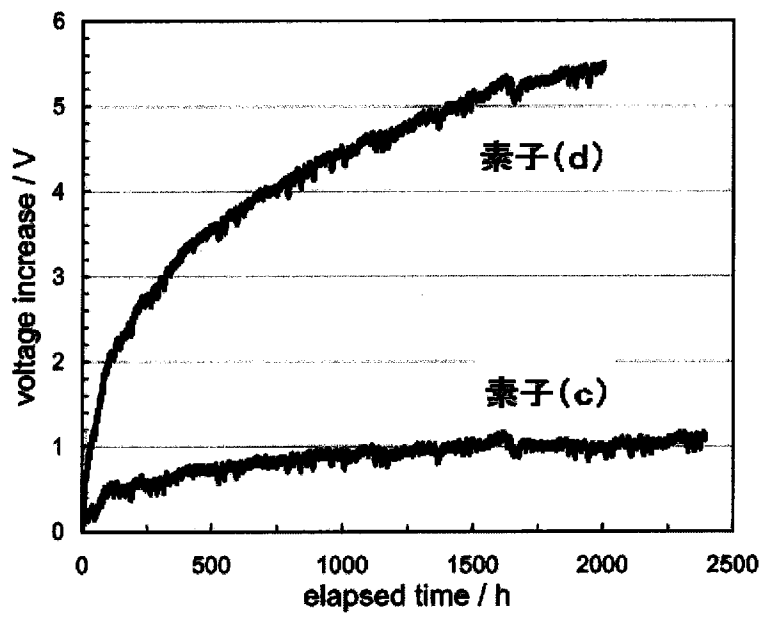
[図6]



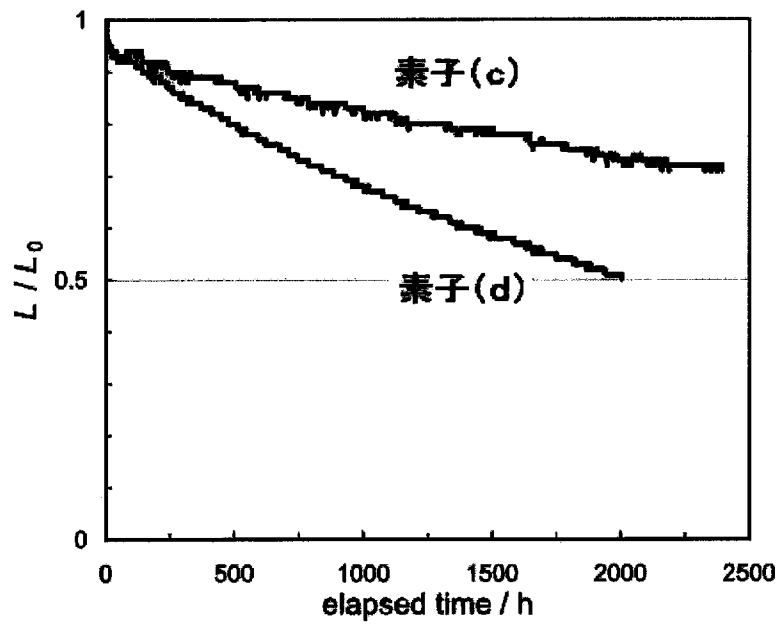
[図7]



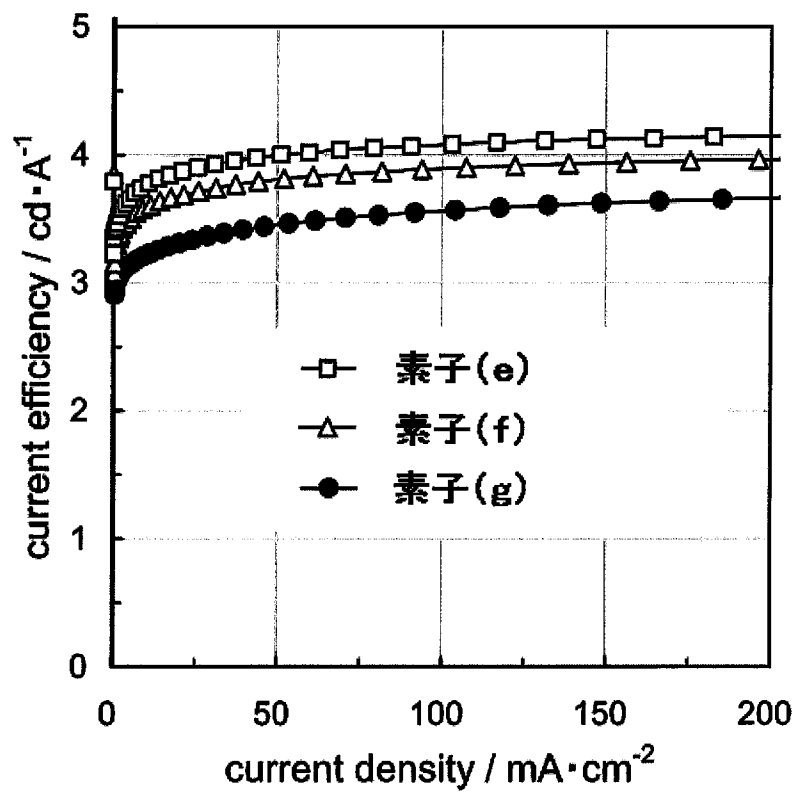
[図8]



[図9]



[図10]



INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2012/055287

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

C07D519/00(2006.01)i, C09K11/06(2006.01)i, H01L51/42(2006.01)i, H01L51/50(2006.01)i

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

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

C07D519/00, C09K11/06, H01L51/42, H01L51/50

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Jitsuyo Shinan Koho	1922-1996	Jitsuyo Shinan Toroku Koho	1996-2012
Kokai Jitsuyo Shinan Koho	1971-2012	Toroku Jitsuyo Shinan Koho	1994-2012

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

CAPLUS/REGISTRY (STN), JSTPLUS/JMEDPLUS/JST7580 (JDREAMII)

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
Y	JP 2009-512628 A (Merck Patent GmbH), 26 March 2009 (26.03.2009), entire text; particularly, claim 1; paragraphs [0019], [0030]; examples 2 to 4 & DE 10200504316 A1 & EP 1924670 A2 & EP 2248869 A2 & EP 2248869 A3 & US 2009/295275 A1 & WO 2007/031165 A2	1-12
Y	KURATSU, Masato et al., Synthesis, structure, and electron-donating ability of 2,2':6',2''- dioxatriphenylamine and its sulfur analogue, Chemistry Letters, 2004, vol.33, no.9, p.1174- 1175, see Scheme 1.	1-12

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

* Special categories of cited documents:

"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance

"E" earlier application or patent but published on or after the international filing date

"L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)

"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means

"P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed

"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention

"X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone

"Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art

"&" document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search
26 March, 2012 (26.03.12)Date of mailing of the international search report
03 April, 2012 (03.04.12)Name and mailing address of the ISA/
Japanese Patent Office

Authorized officer

Facsimile No.

Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2012/055287

C (Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
Y	JP 2008-247887 A (Tsinghua University), 16 October 2008 (16.10.2008), entire text; particularly, paragraph [0112], compound C39 & CN 101143830 A & CN 101279969 A & CN 101279969 B & US 2008/0220286 A1	1-12
Y	JP 11-339868 A (Fuji Photo Film Co., Ltd.), 10 December 1999 (10.12.1999), entire text; particularly, paragraphs [0015] to [0018] (Family: none)	1-12
Y	JP 05-107784 A (Kao Corp.), 30 April 1993 (30.04.1993), entire text; particularly, examples 5, 6, 13, 14 (Family: none)	1-12
A	KIM, Soo-Kang et al., Synthesis and electroluminescent properties of new phenothiazyl derivatives, Thin Solid Films, 2005.11.29, vol.509, no.1-2, p.132-136	1-12
A	VEZZU, Dileep A. K. et al., Acridinone/Amine (carbazole)-Based Bipolar Molecules: Efficient Hosts for Fluorescent and Phosphorescent Emitters, Organic Letters, 2009.08.27, vol.11, no.19, p.4310-4313	1-12
P,A	DE 102010014933 A1 (MERCK PATENT GMBH), 20 October 2011 (20.10.2011), & WO 2011/128017 A1	1-12
P,A	DE 102010005697 A1 (MERCK PATENT GMBH), 28 July 2011 (28.07.2011), & WO 2011/088877 A1	1-12

A. 発明の属する分野の分類 (国際特許分類 (IPC))
 Int.Cl. C07D519/00(2006.01)i, C09K11/06(2006.01)i, H01L51/42(2006.01)i, H01L51/50(2006.01)i

B. 調査を行った分野
 調査を行った最小限資料 (国際特許分類 (IPC))
 Int.Cl. C07D519/00, C09K11/06, H01L51/42, H01L51/50

最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの
 日本国実用新案公報 1922-1996年
 日本国公開実用新案公報 1971-2012年
 日本国実用新案登録公報 1996-2012年
 日本国登録実用新案公報 1994-2012年

国際調査で使用した電子データベース (データベースの名称、調査に使用した用語)
 CAplus/REGISTRY (STN), JSTPlus/JMEDPlus/JST7580 (JDreamII)

C. 関連すると認められる文献

引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号
Y	JP 2009-512628 A (メルク パテント ゲーエムベーハー) 2009.03.26, 文献全体、特に、請求項1、【0019】、【0030】 及び実施例2-4参照 & DE 10200504316 A1 & EP 1924670 A2 & EP 2248869 A2 & EP 2248869 A3 & US 2009/295275 A1 & WO 2007/031165 A2	1-12

C欄の続きにも文献が列挙されている。 パテントファミリーに関する別紙を参照。

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

国際調査を完了した日 26.03.2012	国際調査報告の発送日 03.04.2012
--------------------------	--------------------------

国際調査機関の名称及びあて先 日本国特許庁 (ISA/J P) 郵便番号100-8915 東京都千代田区霞が関三丁目4番3号	特許庁審査官 (権限のある職員) 谷尾 忍	4 P	9550
	電話番号 03-3581-1101 内線 3492		

C (続き) . 関連すると認められる文献		
引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号
Y	KURATSU, Masato et al., Synthesis, structure, and electron-donating ability of 2,2':6',2''-dioxatriphenylamine and its sulfur analogue, Chemistry Letters, 2004, vol.33, no.9, p.1174-1175, see Scheme 1.	1 - 1 2
Y	JP 2008-247887 A (ツインファ ユニバーシティ) 2008.10.16, 文献全体、特に、【0 1 1 2】の化合物C 3 9 参照 & CN 101143830 A & CN 101279969 A & CN 101279969 B & US 2008/0220286 A1	1 - 1 2
Y	JP 11-339868 A (富士写真フイルム株式会社) 1999.12.10, 文献全体、特に、【0 0 1 5】 - 【0 0 1 8】参照 (ファミリーなし)	1 - 1 2
Y	JP 05-107784 A (花王株式会社) 1993.04.30, 文献全体、特に、実施例5、6、13及び14参照 (ファミリーなし)	1 - 1 2
A	KIM, Soo-Kang et al., Synthesis and electroluminescent properties of new phenothiazyl derivatives, Thin Solid Films, 2005.11.29, vol.509, no.1-2, p.132-136	1 - 1 2
A	VEZZU, Dileep A. K. et al., Acridinone/Amine(carbazole)-Based Bipolar Molecules: Efficient Hosts for Fluorescent and Phosphorescent Emitters, Organic Letters, 2009.08.27, vol.11, no.19, p.4310-4313	1 - 1 2
P A	DE 102010014933 A1 (MERCK PATENT GMBH) 2011.10.20, & WO 2011/128017 A1	1 - 1 2
P A	DE 102010005697 A1 (MERCK PATENT GMBH) 2011.07.28, & WO 2011/088877 A1	1 - 1 2