

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 公開特許公報(A)

(11) 特許出願公開番号

特開2018-200995

(P2018-200995A)

(43) 公開日 平成30年12月20日(2018.12.20)

(51) Int.Cl.	F 1	テーマコード (参考)
H01L 51/50 (2006.01)	H05B 33/14	B 3K1O7
H01L 27/32 (2006.01)	H01L 27/32	
H05B 33/26 (2006.01)	H05B 33/26	Z

審査請求 未請求 請求項の数 17 O L (全 87 頁)

(21) 出願番号	特願2017-106125 (P2017-106125)	(71) 出願人	516003621 株式会社 Kyu Lux 福岡県福岡市西区九大新町4番地1
(22) 出願日	平成29年5月30日 (2017.5.30)	(74) 代理人	110000109 特許業務法人特許事務所サイクス
		(72) 発明者	岡田 久 福岡県福岡市西区九大新町4番地1 株式会社 Kyu Lux 内
		(72) 発明者	野村 洋子 福岡県福岡市西区九大新町4番地1 株式会社 Kyu Lux 内
		F ターム (参考)	3K1O7 AA01 BB01 CC04 CC21 DD03 DD21 DD22 DD26 DD27 DD44X DD44Y DD66 FF19 FF20

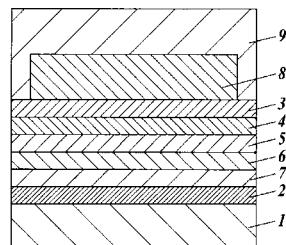
(54) 【発明の名称】トップエミッション方式の有機エレクトロルミネッセンス素子および有機発光ディスプレイ装置

(57) 【要約】

【課題】材料種と素子構造の組み合わせが新規であって、発光効率が高くて寿命が長い有機エレクトロルミネッセンス素子を提供すること。

【解決手段】本発明の有機EL素子は、基板と、基板上に形成された第1電極と、第1電極上に形成された有機発光層と、有機発光層上に形成された透明な第2電極を有するトップエミッション方式の有機EL素子であり、有機発光層が、最低励起一重項エネルギー準位と最低励起三重項エネルギー準位との差 E_{ST} が 0.3 eV 以下である化合物、遅延蛍光を放射しうる化合物およびシアノベンゼンが特定の基で置換された構造を有する化合物の少なくとも 1 種を含有する。

【選択図】図 2



【特許請求の範囲】

【請求項 1】

基板と、前記基板上に形成された第1電極と、前記第1電極上に形成され、最低励起一重項エネルギー準位と最低励起三重項エネルギー準位との差 E_{ST} が 0.3 eV 以下である化合物を含有する有機発光層と、前記有機発光層上に形成された透明な第2電極を有するトップエミッション方式の有機EL素子。

【請求項 2】

基板と、前記基板上に形成された第1電極と、前記第1電極上に形成され、遅延蛍光を放射しうる化合物を含有する有機発光層と、前記有機発光層上に形成された透明な第2電極を有するトップエミッション方式の有機EL素子。

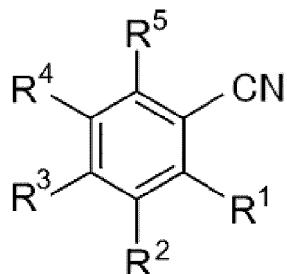
10

【請求項 3】

基板と、前記基板上に形成された第1電極と、前記第1電極上に形成され、下記一般式(1)で表される化合物を含有する有機発光層と、前記有機発光層上に形成された透明な第2電極を有するトップエミッション方式の有機EL素子。

【化 1】

一般式(1)

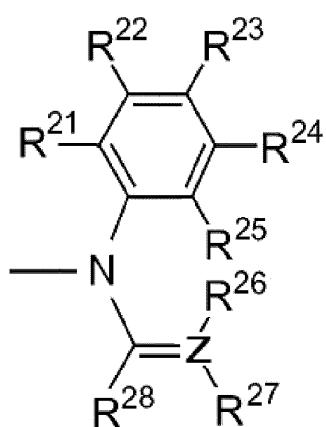


20

[一般式(1)において、R¹～R⁵の少なくとも1つはシアノ基を表し、R¹～R⁵の少なくとも1つは下記一般式(11)で表される基を表し、残りのR¹～R⁵は水素原子または置換基を表す。]

【化 2】

一般式(11)



30

[一般式(11)において、Zは炭素原子または窒素原子を表し、Zが窒素原子であるとき、R²⁷は存在しない。R²¹～R²⁸は、各々独立に水素原子または置換基を表す。ただし、下記<A>かの少なくとも一方を満たす。]

<A> R²⁵およびR²⁶は一緒になって単結合を形成する。

 R²⁷およびR²⁸は一緒になって置換もしくは無置換のベンゼン環を形成するのに必要な原子団を表す。]

【請求項 4】

R¹～R⁵の少なくとも1つが置換もしくは無置換の9-カルバゾリル基、置換もしくは無置換の1,2,3,4-テトラヒドロ-9-カルバゾリル基、置換もしくは無置換の1

40

50

- インドリル基、または置換もしくは無置換のジアリールアミノ基を表すことを特徴とする請求項 3 に記載の有機 E L 素子。

【請求項 5】

R¹ ~ R⁵ の少なくとも 2 つが置換もしくは無置換の 9 - カルバゾリル基、置換もしくは無置換の 1 , 2 , 3 , 4 - テトラヒドロ - 9 - カルバゾリル基、置換もしくは無置換の 1 - インドリル基、または置換もしくは無置換のジアリールアミノ基を表すことを特徴とする請求項 3 に記載の有機 E L 素子。

【請求項 6】

R¹ ~ R⁵ の少なくとも 1 つがシアノ基であり、残りの R¹ ~ R⁵ が、各々独立にヒドロキシ基、ハロゲン原子、置換もしくは無置換の 9 - カルバゾリル基、置換もしくは無置換の 1 , 2 , 3 , 4 - テトラヒドロ - 9 - カルバゾリル基、置換もしくは無置換の 1 - インドリル基、または置換もしくは無置換のジアリールアミノ基のいずれかを表すことを特徴とする請求項 3 に記載の有機 E L 素子。

10

【請求項 7】

R¹ ~ R⁵ の少なくとも 1 つがシアノ基であり、残りの R¹ ~ R⁵ が、各々独立に置換もしくは無置換の 9 - カルバゾリル基、置換もしくは無置換の 1 , 2 , 3 , 4 - テトラヒドロ - 9 - カルバゾリル基、置換もしくは無置換の 1 - インドリル基、または置換もしくは無置換のジアリールアミノ基のいずれかを表すことを特徴とする請求項 3 に記載の有機 E L 素子。

20

【請求項 8】

R¹ ~ R⁵ の少なくとも 1 つがシアノ基であり、残りの R¹ ~ R⁵ が置換もしくは無置換の 9 - カルバゾリル基であることを特徴とする請求項 3 に記載の有機 E L 素子。

【請求項 9】

R¹ ~ R⁵ の少なくとも 1 つがヒドロキシ基であり、R¹ ~ R⁵ の少なくとも 1 つがシアノ基であり、残りの R¹ ~ R⁵ が置換もしくは無置換の 9 - カルバゾリル基であることを特徴とする請求項 3 に記載の有機 E L 素子。

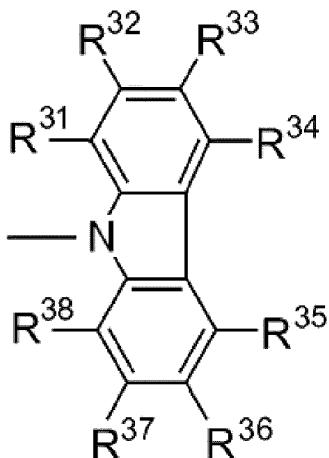
【請求項 10】

R¹ ~ R⁵ の少なくとも 1 つが下記一般式 (12) ~ (15) のいずれかで表される基であることを特徴とする請求項 3 ~ 9 のいずれか 1 項に記載の有機 E L 素子。

30

【化 3】

一般式 (12)

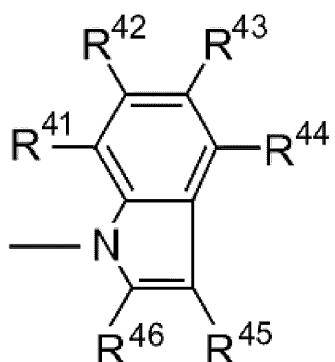


40

[一般式 (12) において、R³¹ ~ R³⁸ は、各々独立に水素原子または置換基を表す。]

【化4】

一般式(13)

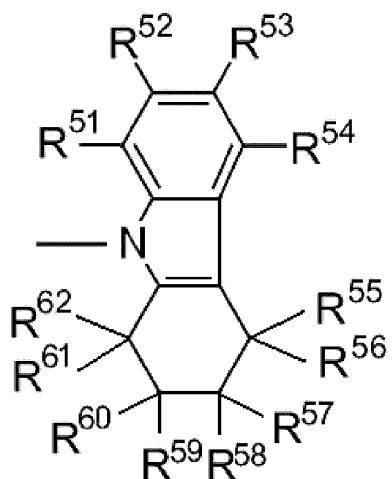


10

[一般式(13)において、R⁴¹～R⁴⁶は、各々独立に水素原子または置換基を表す。]

【化5】

一般式(14)



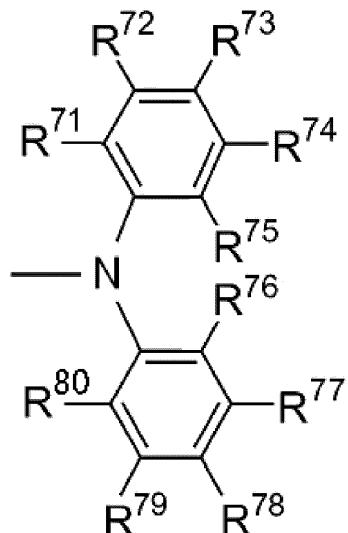
20

[一般式(14)において、R⁵¹～R⁶²は、各々独立に水素原子または置換基を表す。]

30

【化6】

一般式(15)



40

[一般式(15)において、R⁷¹～R⁸⁰は、各々独立に水素原子または置換基を表す。]

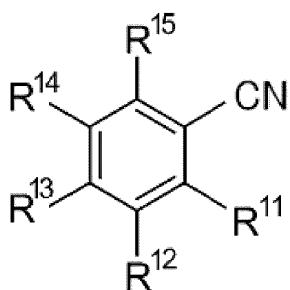
【請求項11】

下記一般式(2)で表される化合物からなる請求項3～10のいずれか1項に記載の有機EL素子。

50

【化7】

一般式(2)



10

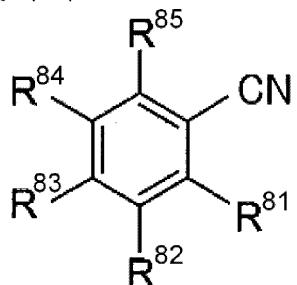
[一般式(2)において、R¹¹、R¹²、R¹⁴およびR¹⁵の少なくとも1つはシアノ基を表し、R¹¹～R¹⁵の少なくとも3つは置換もしくは無置換の9-カルバゾリル基、置換もしくは無置換の1,2,3,4-テトラヒドロ-9-カルバゾリル基、置換もしくは無置換の1-インドリル基、または置換もしくは無置換のジアリールアミノ基を表し、残りのR¹¹～R¹⁵はヒドロキシ基を表す。]

【請求項12】

下記一般式(3)で表される化合物からなる請求項3～10のいずれか1項に記載の有機EL素子。

【化8】

一般式(3)



20

[一般式(3)において、R⁸¹～R⁸⁵の1つはシアノ基であり、R⁸¹～R⁸⁵の2つは置換もしくは無置換の9-カルバゾリル基であり、他の2つは水素原子を表す。]

30

【請求項13】

前記第1電極が金属または合金からなる請求項1～12のいずれか1項に記載の有機EL素子。

【請求項14】

前記第1電極が透明である請求項1～12のいずれか1項に記載の有機EL素子。

【請求項15】

前記第1電極が陽極であり、前記第2電極が陰極である請求項1～14のいずれか1項に記載の有機EL素子。

【請求項16】

前記第1電極が陰極であり、前記第2電極が陽極である請求項1～14のいずれか1項に記載の有機EL素子。

40

【請求項17】

請求項1～16のいずれか1項に記載の有機EL素子を含むことを特徴とする有機発光ディスプレイ装置。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、トップエミッション方式の有機エレクトロルミネッセンス素子およびそれを用いた有機発光ディスプレイ装置に関する。

【背景技術】

50

【0002】

有機エレクトロルミネッセンス素子（有機EL素子）は、自発光であり、バックライトが不要であることから、軽量・フレキシブル化が可能であり、また、応答性が速く、視認性が高いというメリットを有しており、次世代光源として期待されている。

その一方で、有機EL素子には、発光効率や寿命の点で未だ改善の余地があり、さらなる発光効率の向上と長寿命化に向けて、様々な材料種や素子構造が提案されている（例えば、特許文献1～6参照。）。

【先行技術文献】

【特許文献】

【0003】

10

【特許文献1】特開2002-231459号公報

【特許文献2】米国特許9099674号明細書

【特許文献3】米国特許8686420号明細書

【特許文献4】特開2004-013991号公報

【特許文献5】特開2012-160632号公報

【特許文献6】国際公開第2012/111462号パンフレット

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0004】

20

しかしながら、これまでの有機EL素子に関する提案の多くは、材料種に関するものであるか、素子構造に関するものであるかのいずれかであり、その中において、材料種と素子構造の組み合わせについての検討はなされていない。そのため、それらの提案で採用している特定の材料種と素子構造以外の組み合わせで、どのような素子特性が得られるのかは不明であり、例えば、優れた材料種として提案されたものであっても、そこで採用している素子構造以外で用いた場合には、発光素子としての機能が実質的に得られないことがあり、逆に、優れた素子構造として提案されたものであっても、そこへ用いる材料種によっては良好な発光特性を示さないものがある。すなわち、特定の材料種と素子構造を組み合わせて得られる発光効率や寿命は、実際に素子を製造してみない限り予測が付かないものである。したがって、これまでの有機EL素子に関する提案からは、発光効率が高くて寿命が長い、新たな材料種と素子構造の組み合わせを見出すことは困難であるのが実情である。

30

【0005】

そこで、本発明者らは、発光効率が高くて寿命が長い有機エレクトロルミネッセンス素子を提供するために、新たな材料種と素子構造の組み合わせを実現すべく鋭意検討を進めた。

【課題を解決するための手段】

【0006】

40

鋭意検討を進めた結果、本発明者らは、最低励起一重項エネルギー準位と最低励起三重項エネルギー準位との差 E_{ST} が 3 以下である化合物、遅延蛍光を放射しうる化合物、またはシアノベンゼンが特定の基で置換された構造を有する化合物をトップエミッション方式の有機EL素子に適用すると、発光効率が高く、素子寿命が長い有機EL素子が実現することを見出した。

本発明はこうした知見に基づいて提案されたものであり、具体的に、以下の構成を有する。

【0007】

[1] 基板と、前記基板上に形成された第1電極と、前記第1電極上に形成され、最低励起一重項エネルギー準位と最低励起三重項エネルギー準位との差 E_{ST} が 0.3 eV 以下である化合物を含有する有機発光層と、前記有機発光層上に形成された透明な第2電極を有するトップエミッション方式の有機EL素子。

[2] 基板と、前記基板上に形成された第1電極と、前記第1電極上に形成され、遅延

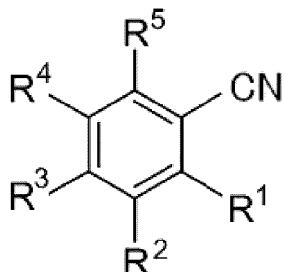
50

蛍光を放射しうる化合物を含有する有機発光層と、前記有機発光層上に形成された透明な第2電極を有するトップエミッション方式の有機EL素子。

[3] 基板と、前記基板上に形成された第1電極と、前記第1電極上に形成され、下記一般式(1)で表される化合物を含有する有機発光層と、前記有機発光層上に形成された透明な第2電極を有するトップエミッション方式の有機EL素子。

【化1】

一般式(1)

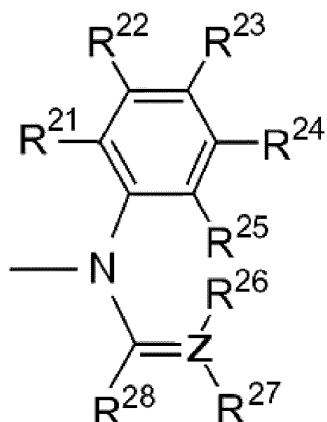


10

[一般式(1)において、R¹～R⁵の少なくとも1つはシアノ基を表し、R¹～R⁵の少なくとも1つは下記一般式(11)で表される基を表し、残りのR¹～R⁵は水素原子または置換基を表す。]

【化2】

一般式(11)



20

30

[一般式(11)において、Zは炭素原子または窒素原子を表し、Zが窒素原子であるとき、R²⁷は存在しない。R²¹～R²⁸は、各々独立に水素原子または置換基を表す。ただし、下記<A>かの少なくとも一方を満たす。]

<A> R²⁵およびR²⁶は一緒になって単結合を形成する。

 R²⁷およびR²⁸は一緒になって置換もしくは無置換のベンゼン環を形成するのに必要な原子団を表す。]

[4] R¹～R⁵の少なくとも1つが置換もしくは無置換の9-カルバゾリル基、置換もしくは無置換の1,2,3,4-テトラヒドロ-9-カルバゾリル基、置換もしくは無置換の1-インドリル基、または置換もしくは無置換のジアリールアミノ基を表すことを特徴とする[3]に記載の有機EL素子。

40

[5] R¹～R⁵の少なくとも2つが置換もしくは無置換の9-カルバゾリル基、置換もしくは無置換の1,2,3,4-テトラヒドロ-9-カルバゾリル基、置換もしくは無置換の1-インドリル基、または置換もしくは無置換のジアリールアミノ基を表すことを特徴とする[3]に記載の有機EL素子。

[6] R¹～R⁵の少なくとも1つがシアノ基であり、残りのR¹～R⁵が、各々独立にヒドロキシ基、ハロゲン原子、置換もしくは無置換の9-カルバゾリル基、置換もしくは無置換の1,2,3,4-テトラヒドロ-9-カルバゾリル基、置換もしくは無置換の1-インドリル基、または置換もしくは無置換のジアリールアミノ基のいずれかを表すことを特徴とする[3]に記載の有機EL素子。

50

[7] $R^1 \sim R^5$ の少なくとも 1 つがシアノ基であり、残りの $R^1 \sim R^5$ が、各々独立に置換もしくは無置換の 9 - カルバゾリル基、置換もしくは無置換の 1 , 2 , 3 , 4 - テトラヒドロ - 9 - カルバゾリル基、置換もしくは無置換の 1 - インドリル基、または置換もしくは無置換のジアリールアミノ基のいずれかを表すことを特徴とする [3] に記載の有機 E L 素子。

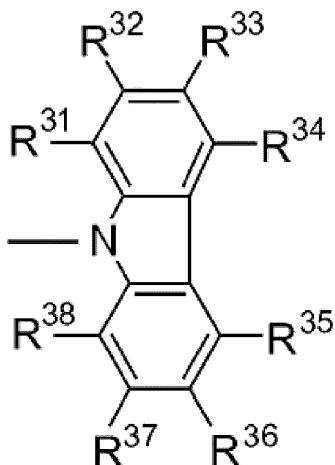
[8] $R^1 \sim R^5$ の少なくとも 1 つがシアノ基であり、残りの $R^1 \sim R^5$ が置換もしくは無置換の 9 - カルバゾリル基であることを特徴とする [3] に記載の有機 E L 素子。

[9] $R^1 \sim R^5$ の少なくとも 1 つがヒドロキシ基であり、 $R^1 \sim R^5$ の少なくとも 1 つがシアノ基であり、残りの $R^1 \sim R^5$ が置換もしくは無置換の 9 - カルバゾリル基であることを特徴とする [3] に記載の有機 E L 素子。 10

[10] $R^1 \sim R^5$ の少なくとも 1 つが下記一般式 (12) ~ (15) のいずれかで表される基であることを特徴とする [3] ~ [9] のいずれか 1 項に記載の有機 E L 素子。

【化 3 】

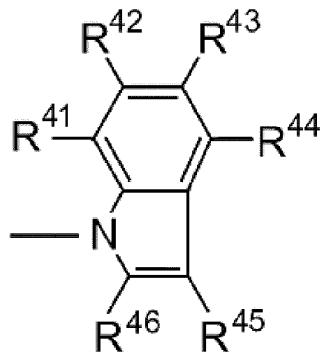
一般式 (12)



[一般式 (12) において、 $R^{31} \sim R^{38}$ は、各々独立に水素原子または置換基を表す。]

【化 4 】

一般式 (13)



[一般式 (13) において、 $R^{41} \sim R^{46}$ は、各々独立に水素原子または置換基を表す。]

10

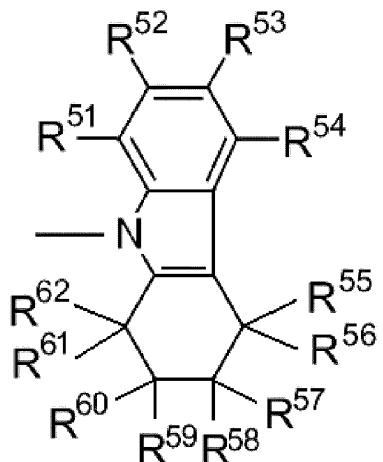
20

30

40

【化5】

一般式(14)

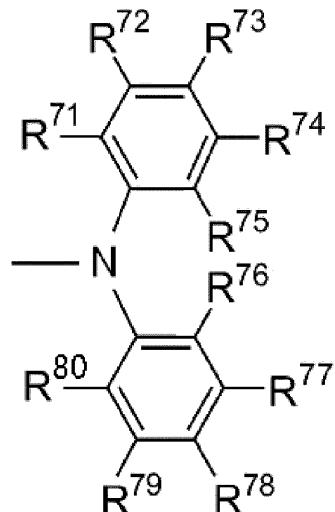


10

[一般式(14)において、R<sup>51</sup>～R<sup>62</sup>は、各々独立に水素原子または置換基を表す。]

【化6】

一般式(15)



20

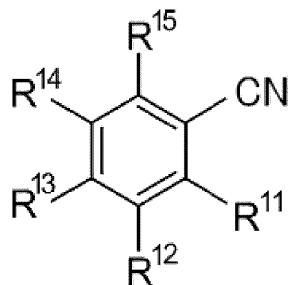
30

[一般式(15)において、R<sup>71</sup>～R<sup>80</sup>は、各々独立に水素原子または置換基を表す。]

[11] 下記一般式(2)で表される化合物からなる[3]～[10]のいずれか1項に記載の有機EL素子。

【化7】

一般式(2)



40

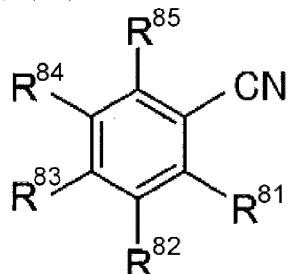
[一般式(2)において、R<sup>11</sup>、R<sup>12</sup>、R<sup>14</sup>およびR<sup>15</sup>の少なくとも1つはシアノ基を表し、R<sup>11</sup>～R<sup>15</sup>の少なくとも3つは置換もしくは無置換の9-カルバゾリル基、置換もしくは無置換の1,2,3,4-テトラヒドロ-9-カルバゾリル基、置換もしくは無置換の1-インドリル基、または置換もしくは無置換のジアリールアミノ基を表し、残りのR<sup>11</sup>～R<sup>15</sup>はヒドロキシ基を表す。]

50

[12] 下記一般式(3)で表される化合物からなる[3]～[10]のいずれか1項に記載の有機EL素子。

【化8】

一般式(3)



10

[一般式(3)において、R⁸¹～R⁸⁵の1つはシアノ基であり、R⁸¹～R⁸⁵の2つは置換もしくは無置換の9-カルバゾリル基であり、その他の2つは水素原子を表す。]

[13] 前記第1電極が金属または合金からなる[1]～[12]のいずれか1項に記載の有機EL素子。

[14] 前記第1電極が透明である[1]～[12]のいずれか1項に記載の有機EL素子。

[15] 前記第1電極が陽極であり、前記第2電極が陰極である[1]～[14]のいずれか1項に記載の有機EL素子。

20

[16] 前記第1電極が陰極であり、前記第2電極が陽極である[1]～[14]のいずれか1項に記載の有機EL素子。

[17] [1]～[16]のいずれか1項に記載の有機EL素子を含むことを特徴とする有機発光ディスプレイ装置。

【発明の効果】

【0008】

本発明のトップエミッション方式の有機EL素子は、高い発光効率と長い素子寿命を有する。

【図面の簡単な説明】

【0009】

30

【図1】第1実施形態の有機EL素子の層構成を示す概略断面図である。

【図2】第2実施形態の有機EL素子の層構成を示す概略断面図である。

【図3】第1実施形態の有機発光ディスプレイ装置を示す概略断面図である。

【図4】図3に示す有機発光ディスプレイ装置の製造工程のうち、第1導電層、第1絶縁層および半導体層形成工程を示す概略断面図である。

【図5】図3に示す有機発光ディスプレイ装置の製造工程のうち、活性層およびキャパシタ下部電極形成工程を示す概略断面図である。

【図6】図3に示す有機発光ディスプレイ装置の製造工程のうち、第2導電層および第3導電層形成工程を示す概略断面図である。

【図7】図3に示す有機発光ディスプレイ装置の製造工程のうち、ゲート電極およびキャパシタ上部電極形成工程を示す概略断面図である。

【図8】図3に示す有機発光ディスプレイ装置の製造工程のうち、第3絶縁層形成工程を示す概略断面図である。

【図9】図3に示す有機発光ディスプレイ装置の製造工程のうち、層間絶縁膜形成工程を示す概略断面図である。

【図10】図3に示す有機発光ディスプレイ装置の製造工程のうち、第4導電層および第5導電層形成工程を示す概略断面図である。

【図11】図3に示す有機発光ディスプレイ装置の製造工程のうち、ソース電極、ドレン電極、コンタクト電極および画素電極形成工程を示す概略断面図である。

【図12】図3に示す有機発光ディスプレイ装置の製造工程のうち、第4絶縁層形成工程

40

50

を示す概略断面図である。

【図13】図3に示す有機発光ディスプレイ装置の製造工程のうち、画素定義膜形成工程を示す概略断面図である

【図14】第2実施形態の有機発光ディスプレイ装置が有する駆動用基板を示す概略断面図である。

【発明を実施するための形態】

【0010】

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。また、本発明に用いられる化合物の分子内に存在する水素原子の同位体種は特に限定されず、例えば分子内の水素原子がすべて¹Hであってもよいし、一部または全部が²H(デューテリウムD)であってもよい。また、本発明における「透明」とは、可視光の透過率が50%以上であることをいう。可視光の透過率は紫外・可視分光光度計により測定することができる。

10

【0011】

本発明の有機EL素子(有機エレクトロルミネッセンス素子)は、基板と、基板上に形成された第1電極と、第1電極上に形成された有機発光層と、有機発光層上に形成された透明な第2電極を有するトップエミッション方式の有機EL素子であって、有機発光層が、最低励起一重項エネルギー準位と最低励起三重項エネルギー準位との差 E_{ST} が0.3eV以下である化合物、遅延蛍光を放射しうる化合物、または下記一般式(1)で表される化合物を含有する。以下の説明では、最低励起一重項エネルギー準位と最低励起三重項エネルギー準位との差 E_{ST} が0.3eV以下である化合物を「第1化合物」といい、遅延蛍光を放射しうる化合物を「第2化合物」といい、下記一般式(1)で表される化合物を「第3化合物」ということがある。ここで、第1化合物に含まれる化合物群、第2化合物に含まれる化合物群、および第3化合物の含まれる化合物群の一部は互いに重複している。すなわち、第1化合物に含まれる化合物が、第2化合物や第3化合物に包含される場合があり、第2化合物に含まれる化合物が、第1化合物や第3化合物に包含される場合があり、第3化合物が、第1化合物や第2化合物に包含される場合がある。また、有機発光層が含有するのは、第1化合物～第3化合物のうちの1種であってもよいし、2種類以上であってもよい。

20

以下において、第1化合物～第3化合物についてそれぞれ説明する。

【0012】

[第1化合物(E_{ST} が0.3eV以下である化合物)]

第1化合物は、最低励起一重項エネルギー準位と最低励起三重項エネルギー準位との差 E_{ST} が0.3eV以下である化合物である。

30

E_{ST} が0.3eV以下である化合物は、励起三重項状態から励起一重項状態への逆項間交差を生じ易い傾向があり、その中には、遅延蛍光を放射しうる化合物(第2化合物)が含まれている。そのため、有機発光層が第1化合物を含むことにより、その第1化合物が発光材料や遅延蛍光材料、アシストドーパントとして効果的に機能して高い発光効率を得ることができる。ここで、遅延蛍光の説明については、下記の[第2化合物]の欄の記載を参照することができ、アシストドーパントの説明については、下記の(有機発光層)の欄の記載等を参照することができる。第1化合物の E_{ST} は0.3eV以下であることが好ましく、0.25eV以下であることがより好ましく、0.2eV以下であることがさらに好ましい。

40

【0013】

本発明において、 E_{ST} は最低励起一重項エネルギー準位(E_{S1})と最低励起三重項エネルギー準位(E_{T1})を以下の方法で算出し、 $E_{ST} = E_{S1} - E_{T1}$ により求める。

(1) 最低励起一重項エネルギー準位 E_{S1}

50

測定対象化合物と m C P とを、測定対象化合物が濃度 6 重量 % となるように共蒸着することで S i 基板上に厚さ 1 0 0 n m の試料を作製する。常温 (3 0 0 K) でこの試料の蛍光スペクトルを測定する。励起光入射直後から入射後 1 0 0 ナノ秒までの発光を積算することで、縦軸を発光強度、横軸を波長の蛍光スペクトルを得る。蛍光スペクトルは、縦軸を発光、横軸を波長とする。この発光スペクトルの短波長側の立ち上がりに対して接線を引き、その接線と横軸との交点の波長値 edge [n m] を求める。この波長値を次に示す換算式でエネルギー値に換算した値を E_{s1} とする。

$$\text{換算式 : } E_{s1} [\text{eV}] = 1239.85 / \text{edge}$$

発光スペクトルの測定には、励起光源として窒素レーザー (Lasertechnik Berlin 社製、 M N L 2 0 0) を用い、検出器としてストリークカメラ (浜松ホトニクス社製、 C 4 3 3 4) を用いる。

10

(2) 最低励起三重項エネルギー準位 E_{T1}

最低励起一重項エネルギー準位 E_{s1} の測定で用いたものと同じ試料を 5 [K] に冷却し、この燐光測定用試料に励起光 (3 3 7 n m) を照射し、ストリークカメラを用いて、燐光強度を測定する。励起光入射後 1 ミリ秒から入射後 1 0 ミリ秒の発光を積算することで、縦軸を発光強度、横軸を波長の燐光スペクトルを得る。この燐光スペクトルの短波長側の立ち上がりに対して接線を引き、その接線と横軸との交点の波長値 edge [n m] を求める。この波長値を次に示す換算式でエネルギー値に換算した値を E_{T1} とする。

$$\text{換算式 : } E_{T1} [\text{eV}] = 1239.85 / \text{edge}$$

燐光スペクトルの短波長側の立ち上がりに対する接線は以下のように引く。燐光スペクトルの短波長側から、スペクトルの極大値のうち、最も短波長側の極大値までスペクトル曲線上を移動する際に、長波長側に向けて曲線上の各点における接線を考える。この接線は、曲線が立ち上がるにつれ (つまり縦軸が増加するにつれ) 、傾きが増加する。この傾きの値が極大値をとる点において引いた接線を、当該燐光スペクトルの短波長側の立ち上がりに対する接線とする。

20

なお、スペクトルの最大ピーク強度の 1 0 % 以下のピーク強度をもつ極大点は、上述の最も短波長側の極大値には含めず、最も短波長側の極大値に最も近い、傾きの値が極大値をとる点において引いた接線を当該燐光スペクトルの短波長側の立ち上がりに対する接線とする。

【 0 0 1 4 】

30

[第 2 化合物 (遅延蛍光を放射しうる化合物)]

第 2 化合物は、遅延蛍光を放射しうる化合物である。遅延蛍光とは、励起状態になった化合物において、励起三重項状態から励起一重項状態への逆項間交差が生じた後、その励起一重項状態から基底状態に戻る際に放射される蛍光であり、基底状態から直接遷移した励起一重項状態からの蛍光 (即時蛍光) よりも遅れて観測される蛍光である。本発明では、対象化合物を含む薄膜について発光の過渡減衰曲線を 3 0 0 K で測定したとき、発光寿命が短い発光成分 (即時蛍光) とは別に、発光寿命が長い発光成分 (遅延蛍光) が観測された場合に、その対象化合物を「遅延蛍光を放射しうる化合物」であるとする。遅延蛍光を放射しうる化合物は、熱エネルギーの吸収により逆項間交差を生じうる熱活性型の遅延蛍光体であってよいし、三重項 - 三重項消滅に起因して逆項間交差を生じうる遅延蛍光体であってもよいが、熱活性型の遅延蛍光体であることが好ましい。熱活性型の遅延蛍光体であることは、発光の過渡減衰曲線の測定により求められる発光寿命が測定温度に依存して長くなることをもって確認することができる。以上のように、第 2 化合物は遅延蛍光を放射しうる化合物であり、遅延蛍光は励起三重項状態から励起一重項状態への逆項間交差を経由して生じる発光である。そのため、有機発光層が第 2 化合物を含有することにより、その第 2 化合物が発光材料や遅延蛍光材料、アシストドーパントとして効果的に機能して高い発光効率を得ることができる。

40

【 0 0 1 5 】

[第 3 化合物 (一般式 (1) で表される化合物)]

第 3 化合物は下記一般式 (1) で表される化合物である。一般式 (1) で表される化合

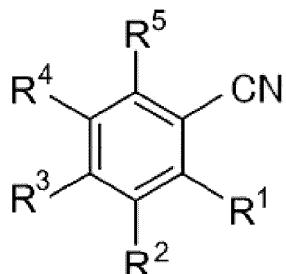
50

物は光を放射しうる化合物であり、その中には、 E_{ST} が0.3 eV以下である化合物（第1化合物）や遅延蛍光を放射しうる化合物（第2化合物）が含まれている。そのため、有機発光層が第3化合物を含むことにより、その第3化合物が発光材料や遅延蛍光材料、アシストドーパントとして効果的に機能して高い発光効率を得ることができる。

以下において、一般式（1）で表される化合物の構造について詳細に説明する。

【化9】

一般式（1）



10

【0016】

一般式（1）において、R¹～R⁵の少なくとも1つはシアノ基を表す。いずれか1つがシアノ基である場合は、R¹～R³のいずれであってもよい。いずれか2つがシアノ基である場合は、R¹とR³の組み合わせや、R²とR⁴の組み合わせを例示することができる。いずれか3つがシアノ基である場合は、R¹とR³とR⁴の組み合わせを例示することができる。

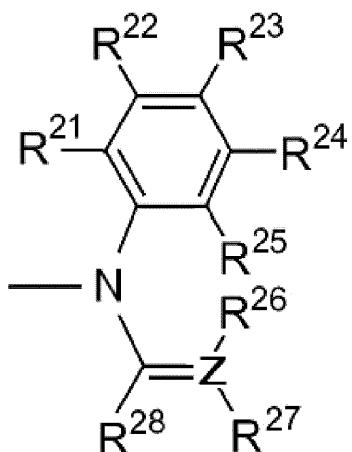
20

【0017】

一般式（1）において、R¹～R⁵の少なくとも1つは下記一般式（11）で表される基を表す。2つ以上が一般式（11）で表される基を表すとき、それらは同一であっても異なっていてもよいが、同一であることがより好ましい。

【化10】

一般式（11）



30

【0018】

一般式（11）において、Zは炭素原子または窒素原子を表し、Zが窒素原子であるとき、R²⁷は存在しない。R²¹～R²⁸は、各々独立に水素原子または置換基を表す。ただし、下記<A>かの少なくとも一方を満たす。両方とも満たしている場合がより好ましい。

40

<A> R²⁵およびR²⁶は一緒にになって単結合を形成する。

 R²⁷およびR²⁸は一緒にになって置換もしくは無置換のベンゼン環を形成するのに必要な原子団を表す。

【0019】

一般式（11）で表される基は、置換もしくは無置換の9-カルバゾリル基、置換もし

50

くは無置換の 1 , 2 , 3 , 4 - テトラヒドロ - 9 - カルバゾリル基、置換もしくは無置換の 1 - インドリル基、置換もしくは無置換のジアリールアミノ基、または置換もしくは無置換の 1 - ベンゾイミダゾリル基であることが好ましい。すなわち、一般式(1)の R¹ ~ R⁵ のいずれか 1 つは、置換もしくは無置換の 9 - カルバゾリル基、置換もしくは無置換の 1 , 2 , 3 , 4 - テトラヒドロ - 9 - カルバゾリル基、置換もしくは無置換の 1 - インドリル基、置換もしくは無置換のジアリールアミノ基、または置換もしくは無置換の 1 - ベンゾイミダゾリル基であることが好ましい。一般式(1)の R¹ ~ R⁵ のいずれか 2 つ以上が、置換もしくは無置換の 9 - カルバゾリル基、置換もしくは無置換の 1 , 2 , 3 , 4 - テトラヒドロ - 9 - カルバゾリル基、置換もしくは無置換の 1 - インドリル基、置換もしくは無置換のジアリールアミノ基、または置換もしくは無置換の 1 - ベンゾイミダゾリル基であることがより好ましい。

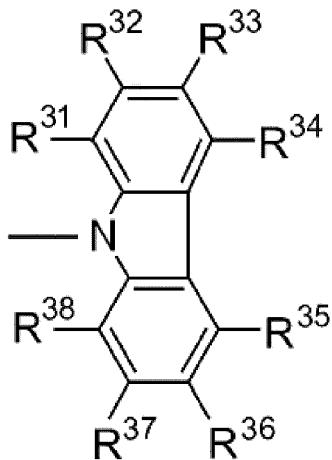
10

【0020】

一般式(11)で表される基は、例えば下記一般式(12)~(15)のいずれかで表される構造を有するものであることが好ましい。特に下記一般式(12)で表される構造を有するものであることが好ましい。

【化11】

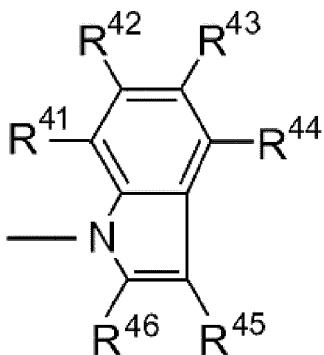
一般式(12)



20

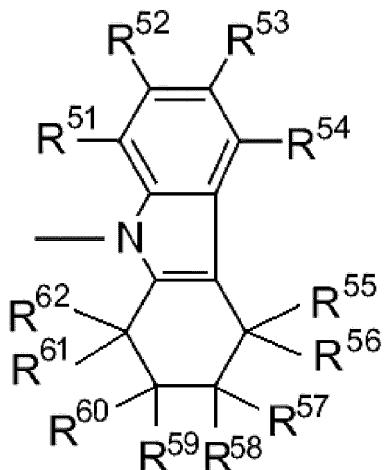
30

一般式(13)



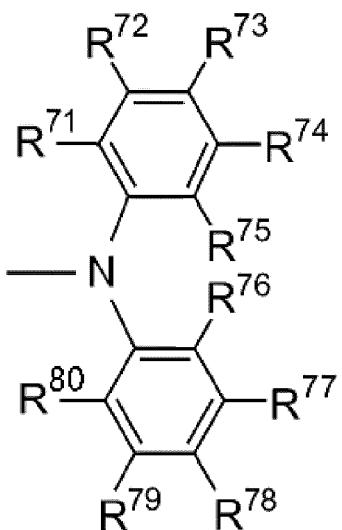
40

一般式(14)



10

一般式(15)



20

30

【0021】

一般式(12)～(15)において、R³¹～R³⁸、R⁴¹～R⁴⁶、R⁵¹～R⁶²およびR⁷¹～R⁸⁰は、各々独立に水素原子または置換基を表す。一般式(12)～(15)で表される基が置換基を有するときの置換位置や置換数は特に制限されない。各基の置換数は、0～6個が好ましく、0～4個がより好ましく、例えば0～2個とすることも好ましい。複数の置換基を有するとき、それらは互いに同一であっても異なっていてもよいが、同一であることがより好ましい。

一般式(12)で表される基が置換基を有する場合は、R³²～R³⁷のいずれかが置換基であることが好ましい。例えば、R³²とR³⁷が置換基である場合、R³³とR³⁶が置換基である場合、R³⁴とR³⁵が置換基である場合を好ましく例示することができる。

一般式(13)で表される基が置換基を有する場合は、R⁴²～R⁴⁶のいずれかが置換基であることが好ましい。例えば、R⁴²が置換基である場合と、R⁴³が置換基である場合を好ましく例示することができる。

一般式(14)で表される基が置換基を有する場合は、R⁵²～R⁶⁰のいずれかが置換基であることが好ましい。例えば、R⁵²～R⁵⁴のいずれかが置換基である場合、R⁵⁵～R⁶⁰のいずれかが置換基である場合を好ましく例示することができる。

一般式(15)で表される基が置換基を有する場合は、R⁷²～R⁷⁴およびR⁷⁷～R⁷⁹のいずれかが置換基であることが好ましい。例えば、R⁷²とR⁷⁹が置換基である場合、R⁷³とR⁷⁸が置換基である場合、R⁷⁴とR⁷⁷が置換基である場合、R⁷²、R⁷⁴、R⁷⁷およびR⁷⁹が置換基である場合を好ましく例示することができる。特に、R⁷⁴とR⁷⁷が置換基であ

40

50

る場合、R⁷²、R⁷⁴、R⁷⁷およびR⁷⁹が置換基である場合をより好ましく例示することができる。このときの置換基は、各々独立に炭素数1～20の置換もしくは無置換のアルキル基、または炭素数6～40の置換もしくは無置換のアリール基であることが特に好ましく、炭素数1～6の無置換のアルキル基、炭素数6～10の無置換のアリール基、または炭素数6～10のアリール基で置換された炭素数6～10のアリール基であることがさらにより好ましい。

【0022】

一般式(11)のR²¹～R²⁸、一般式(12)のR³¹～R³⁸、一般式(13)のR⁴¹～R⁴⁶、一般式(14)のR⁵¹～R⁶²および、一般式(15)のR⁷¹～R⁸⁰がとりうる置換基として、例えばヒドロキシ基、ハロゲン原子、シアノ基、炭素数1～20のアルキル基、炭素数1～20のアルコキシ基、炭素数1～20のアルキルチオ基、炭素数1～20のアルキル置換アミノ基、炭素数2～20のアシル基、炭素数6～40のアリール基、炭素数3～40のヘテロアリール基、炭素数12～40のジアリールアミノ基、炭素数12～40の置換もしくは無置換のカルバゾリル基、炭素数2～10のアルケニル基、炭素数2～10のアルキニル基、炭素数2～10のアルコキシカルボニル基、炭素数1～10のアルキルスルホニル基、炭素数2～10のアルキルアミド基、炭素数7～41のアリールアミド基、炭素数3～20のトリアルキルシリル基、炭素数4～20のトリアルキルシリルアルキル基、炭素数5～20のトリアルキルシリルアルケニル基、炭素数5～20のトリアルキルシリルアルキニル基およびニトロ基等が挙げられる。これらの具体例のうち、さらに置換基により置換可能なものは置換されていてもよい。より好ましい置換基は、ハロゲン原子、シアノ基、炭素数1～20の置換もしくは無置換のアルキル基、炭素数1～20のアルコキシ基、炭素数6～40の置換もしくは無置換のアリール基、炭素数3～40の置換もしくは無置換のヘテロアリール基、炭素数12～40の置換もしくは無置換のカルバゾリル基である。さらに好ましい置換基は、フッ素原子、塩素原子、シアノ基、炭素数1～10の置換もしくは無置換のアルキル基、炭素数1～10の置換もしくは無置換のアルコキシ基、炭素数1～10の置換もしくは無置換のジアルキルアミノ基、炭素数6～15の置換もしくは無置換のアリール基、炭素数3～12の置換もしくは無置換のヘテロアリール基である。

【0023】

本明細書でいうアルキル基は、直鎖状、分枝状、環状のいずれであってもよい。また、直鎖部分と環状部分と分枝部分のうちの2種以上が混在していてもよい。アルキル基の炭素数は、例えば1以上、2以上、4以上、6以上とすることができる。また、炭素数は30以下、20以下、10以下、6以下、4以下とすることができる。アルキル基の具体例として、メチル基、エチル基、n-プロピル基、イソプロピル基、n-ブチル基、イソブチル基、tert-ブチル基、n-ペンチル基、イソペンチル基、n-ヘキシル基、イソヘキシル基、2-エチルヘキシル基、n-ヘプチル基、イソヘプチル基、n-オクチル基、イソオクチル基、n-ノニル基、イソノニル基、n-デカニル基、イソデカニル基、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。

【0024】

本明細書でいうアリール基は、芳香族炭化水素環1つだけからなる基であってもよいし、芳香族炭化水素環に1つ以上の環が縮合した基であってもよい。芳香族炭化水素環に1つ以上の環が縮合した基である場合は、芳香族炭化水素環、脂肪族炭化水素環および非芳香族複素環のうちの1以上が芳香族炭化水素環に縮合した基を採用することができる。アリール基の炭素数は、例えば6以上、10以上、14以上、18以上とすることができる。また、炭素数は30以下、18以下、14以下、10以下とすることができる。アリール基の具体例として、フェニル基、1-ナフチル基、2-ナフチル基、1-アントラセニル基、2-アントラセニル基、9-アントラセニル基、1-カルバゾリル基、2-カルバゾリル基、3-カルバゾリル基、4-カルバゾリル基を挙げることができる。

【0025】

本明細書でいうヘテロアリール基は、複素芳香環1つだけからなる基であってもよいし

10

20

30

40

50

、複素芳香環に1つ以上の環が縮合した基であってもよい。複素芳香環に1つ以上の環が縮合した基である場合は、芳香族炭化水素環、複素芳香環、脂肪族炭化水素環および非芳香族複素環のうちの1以上が芳香族炭化水素環に縮合した基を採用することができる。ヘテロアリール基の環骨格構成原子数は、例えば5以上、6以上、10以上、14以上、18以上とすることができます。また、炭素数は30以下、18以下、14以下、10以下とすることができます。ヘテロアリール基は、ヘテロ原子を介して結合する基であっても複素芳香環を構成する炭素原子を介して結合する基であってもよい。ヘテロアリール基の複素芳香環の環骨格を構成するヘテロ原子として、例えば窒素原子、酸素原子、硫黄原子を挙げることができます。ヘテロアリール基の具体例として、2-ピリジル基、3-ピリジル基、4-ピリジル基、2-ピリミジル基、4-ピリミジル基、5-ピリミジル基、トリアジニル基、9-カルバゾリル基、10-フェノキサジル基、10-フェノチアジル基を挙げることができます。

10

【0026】

本明細書でいうハロゲン原子として、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子を挙げることができます。

【0027】

本明細書でいうアルケニル基は、直鎖状、分枝状、環状のいずれであってもよい。また、直鎖部分と環状部分と分枝部分のうちの2種以上が混在していてもよい。アルケニル基の炭素数は、例えば2以上、4以上、6以上とすることができます。また、炭素数は30以下、20以下、10以下、6以下、4以下とすることができます。アルケニル基の具体例として、エテニル基、n-プロペニル基、イソプロペニル基、n-ブテニル基、イソブテニル基、tert-ブテニル基、n-ペンテニル基、イソペンテニル基、n-ヘキセニル基、イソヘキセニル基、2-エチルヘキセニル基、n-ヘプテニル基、イソヘプテニル基、n-オクテニル基、イソオクテニル基、n-ノネル基、イソノネル基、n-デケニル基、イソデケニル基、シクロペンテニル基、シクロヘキセニル基、シクロヘプテニル基を挙げることができます。

20

【0028】

本明細書でいうアルキニル基は、直鎖状、分枝状、環状のいずれであってもよい。また、直鎖部分と環状部分と分枝部分のうちの2種以上が混在していてもよい。アルキニル基の炭素数は、例えば2以上、4以上、6以上とすることができます。また、炭素数は30以下、20以下、10以下、6以下、4以下とすることができます。アルケニル基の具体例として、エチニル基、n-プロピニル基、イソプロピニル基、n-ブチニル基、イソブチニル基、tert-ブチニル基、n-ペンチニル基、イソペンチニル基、n-ヘキシニル基、イソヘキシニル基、2-エチルヘキシニル基、n-ヘプチニル基、イソヘプチニル基、n-オクチニル基、イソオクチニル基、n-ノニル基、イソノニル基、n-デキニル基、イソデキニル基、シクロヘキシニル基、シクロヘプチニル基を挙げることができます。

30

【0029】

本明細書でいうアルコキシ基のアルキル部分の説明と具体例、アルキルチオ基のアルキル部分の説明と具体例、本明細書でいうアルキル置換アミノ基のアルキル部分の説明と具体例、本明細書でいうアシリル基のアルキル部分（アシリル基からカルボニル基を除いた部分）の説明と具体例、本明細書でいうアルコキシカルボニル基のアルキル部分の説明と具体例、本明細書でいうアルキルスルホニル基のアルキル部分の説明と具体例、本明細書でいうアルキルアミド基のアルキル部分の説明と具体例、本明細書でいうトリアルキルシリル基のアルキル部分の説明と具体例、本明細書でいうトリアルキルシリルアルキル基の各アルキル部分の説明と具体例、本明細書でいうトリアルキルシリルアルケニル基のアルキル部分の説明と具体例、本明細書でいうトリアルキルシリルアルキニル基のアルキル部分の説明と具体例については、上記のアルキル基の説明と具体例を参照することができます。

40

本明細書でいうジアリールアミノ基のアリール部分の説明と具体例、本明細書でいうアリールアミド基のアリール部分の説明と具体例については、上記のアリール基の説明と具体例を参照することができます。

50

本明細書でいうトリアルキルシリルアルケニル基のアルケニル部分の説明と具体例については、上記のアルケニル基の説明と具体例を参照することができる。

本明細書でいうトリアルキルシリルアルキニル基のアルキニル部分の説明と具体例については、上記のアルキニル基の説明と具体例を参照することができる。

【0030】

一般式(1)において、R¹～R⁵のいずれか1つが一般式(11)で表される基である場合は、R¹～R³のいずれであってもよい。いずれか2つが一般式(11)で表される基である場合は、R¹とR³の組み合わせや、R²とR⁴の組み合わせを例示することができる。いずれか3つが一般式(11)で表される基である場合は、R¹とR³とR⁴の組み合わせを例示することができる。

10

【0031】

一般式(11)で表される基が結合しているベンゼン環の2つのオルト位のうちのいずれか一方はシアノ基であることが好ましい。2つのオルト位の両方がシアノ基であってもよい。また、ベンゼン環に一般式(11)で表される基が2つ以上結合している場合は、それらのうちの少なくとも2つが、一般式(11)で表される基が結合しているベンゼン環の2つのオルト位のうちのいずれか一方はシアノ基であるという条件を満たしていることが好ましい。

【0032】

一般式(1)において、R¹～R⁵の少なくとも1つはシアノ基を表し、R¹～R⁵の少なくとも1つは上記一般式(11)で表される基を表すが、残りのR¹～R⁵は水素原子または置換基を表す。

20

【0033】

R¹～R⁵がとりうる好ましい置換基として、例えばヒドロキシ基、ハロゲン原子、炭素数1～20のアルキル基、炭素数1～20のアルコキシ基、炭素数1～20のアルキルチオ基、炭素数1～20のアルキル置換アミノ基、炭素数2～20のアシル基、炭素数6～40のアリール基、炭素数3～40のヘテロアリール基、炭素数2～10のアルケニル基、炭素数2～10のアルキニル基、炭素数2～10のアルコキシカルボニル基、炭素数1～10のアルキルスルホニル基、アミド基、炭素数2～10のアルキルアミド基、炭素数3～20のトリアルキルシリル基、炭素数4～20のトリアルキルシリルアルキル基、炭素数5～20のトリアルキルシリルアルケニル基、炭素数5～20のトリアルキルシリルアルキニル基およびニトロ基等が挙げられる。これらの具体例のうち、さらに置換基により置換可能なものは置換されていてもよい。より好ましい置換基は、ヒドロキシ基、ハロゲン原子、炭素数1～20の置換もしくは無置換のアルキル基、炭素数1～20の置換もしくは無置換のアルコキシ基、炭素数1～20の置換もしくは無置換のジアルキルアミノ基、炭素数6～40の置換もしくは無置換のアリール基、炭素数3～40の置換もしくは無置換のヘテロアリール基である。さらに好ましい置換基は、ヒドロキシ基、フッ素原子、塩素原子、炭素数1～10の置換もしくは無置換のアルキル基、炭素数1～10の置換もしくは無置換のアルコキシ基、炭素数1～10の置換もしくは無置換のジアルキルアミノ基、炭素数6～15の置換もしくは無置換のアリール基、炭素数3～12の置換もしくは無置換のヘテロアリール基である。さらにお好ましくは、ヒドロキシ基、フッ素原子、塩素原子である。

30

【0034】

一般式(1)において、R¹～R⁵のうち水素原子であるものは3つ以下であることが好ましく、2つ以下であることがより好ましく、1つ以下であることがさらに好ましく、0であることも好ましい。

40

【0035】

好ましい組み合わせとして、例えば、一般式(1)のR¹～R⁵の少なくとも1つがシアノ基であり、残りのR¹～R⁵が、各々独立にヒドロキシ基、ハロゲン原子、置換もしくは無置換の9-カルバゾリル基、置換もしくは無置換の1,2,3,4-テトラヒドロ-9-カルバゾリル基、置換もしくは無置換の1-インドリル基、または置換もしくは無置換

50

のジアリールアミノ基のいずれかである場合を挙げることができる。別の好ましい組み合わせとして、R¹～R⁵の少なくとも1つがシアノ基であり、残りのR¹～R⁵が、各々独立に置換もしくは無置換の9-カルバゾリル基、置換もしくは無置換の1，2，3，4-テトラヒドロ-9-カルバゾリル基、置換もしくは無置換の1-インドリル基、または置換もしくは無置換のジアリールアミノ基のいずれかである場合を挙げることもできる。別の好ましい組み合わせとして、一般式(1)のR¹～R⁵の少なくとも1つがシアノ基であり、残りのR¹～R⁵が、各々独立にヒドロキシ基、ハロゲン原子、置換もしくは無置換の9-カルバゾリル基のいずれかである場合を挙げることもできる。別の好ましい組み合わせとして、一般式(1)のR¹～R⁵の少なくとも1つがシアノ基であり、残りのR¹～R⁵が置換もしくは無置換の9-カルバゾリル基である場合を挙げることもできる。別の好ましい組み合わせとして、一般式(1)のR¹～R⁵の少なくとも1つがシアノ基であり、R¹～R⁵の少なくとも1つがヒドロキシ基であり、残りのR¹～R⁵が置換もしくは無置換の9-カルバゾリル基である場合を挙げることもできる。別の好ましい組み合わせとして、一般式(1)のR¹～R⁵の少なくとも1つがシアノ基であり、R¹～R⁵の少なくとも1つがハロゲン原子であり、残りのR¹～R⁵が置換もしくは無置換の9-カルバゾリル基である場合を挙げることもできる。

【0036】

以下において、一般式(1)で表される化合物の具体例を例示するが、本発明において用いることができる一般式(1)で表される化合物はこれら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。なお、以下の表1～7に示す例示化合物において、一般式(12)～(15)のいずれかで表される基が分子内に2つ以上存在している場合、それらの基はすべて同一の構造を有する。例えば、表1の化合物1では、一般式(1)のR¹、R²、R⁴およびR⁵が一般式(12)で表される基であるが、それらの基はいずれも無置換の9-カルバゾリル基である。

【0037】

【表1-1】

化合物番号	一般式(1)					一般式(12)			
	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	R ³¹ ,R ³⁸	R ³² ,R ³⁷	R ³³ ,R ³⁶	R ³⁴ ,R ³⁵
1	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	H
2	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	H	CH ₃	H	H
3	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	H	CH ₃ O	H	H
4	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
5	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
6	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
7	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	H	H	Cl	H
8	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	H	H	F	H
9	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	CH ₃
10	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	CH ₃ O
11	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	H	H	H	H	H
12	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	H	H	CH ₃	H	H
13	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H	H
14	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	H	H	H	CH ₃	H
15	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	H	H	H	CH ₃ O	H
16	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	H	H	H	t-C ₄ H ₉	H
17	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	H	H	H	Cl	H
18	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	H	H	H	F	H
19	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	H	H	H	H	CH ₃
20	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	H	H	H	H	CH ₃ O
21	一般式(12)	一般式(12)	CN	H	H	H	H	H	H
22	一般式(12)	一般式(12)	CN	H	H	H	CH ₃	H	H
23	一般式(12)	一般式(12)	CN	H	H	H	CH ₃ O	H	H
24	一般式(12)	一般式(12)	CN	H	H	H	H	CH ₃	H
25	一般式(12)	一般式(12)	CN	H	H	H	H	CH ₃ O	H
26	一般式(12)	一般式(12)	CN	H	H	H	H	t-C ₄ H ₉	H
27	一般式(12)	一般式(12)	CN	H	H	H	H	Cl	H
28	一般式(12)	一般式(12)	CN	H	H	H	H	F	H
29	一般式(12)	一般式(12)	CN	H	H	H	H	H	CH ₃
30	一般式(12)	一般式(12)	CN	H	H	H	H	H	CH ₃ O
31	一般式(12)	H	CN	一般式(12)	H	H	H	H	H
32	一般式(12)	H	CN	一般式(12)	H	H	CH ₃	H	H
33	一般式(12)	H	CN	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H	H
34	一般式(12)	H	CN	一般式(12)	H	H	H	CH ₃	H
35	一般式(12)	H	CN	一般式(12)	H	H	H	CH ₃ O	H
36	一般式(12)	H	CN	一般式(12)	H	H	H	t-C ₄ H ₉	H
37	一般式(12)	H	CN	一般式(12)	H	H	H	Cl	H
38	一般式(12)	H	CN	一般式(12)	H	H	H	F	H
39	一般式(12)	H	CN	一般式(12)	H	H	H	H	CH ₃
40	一般式(12)	H	CN	一般式(12)	H	H	H	H	CH ₃ O
41	一般式(12)	H	CN	H	一般式(12)	H	H	H	H
42	一般式(12)	H	CN	H	一般式(12)	H	CH ₃	H	H
43	一般式(12)	H	CN	H	一般式(12)	H	CH ₃ O	H	H
44	一般式(12)	H	CN	H	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
45	一般式(12)	H	CN	H	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
46	一般式(12)	H	CN	H	一般式(12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
47	一般式(12)	H	CN	H	一般式(12)	H	H	Cl	H
48	一般式(12)	H	CN	H	一般式(12)	H	H	F	H
49	一般式(12)	H	CN	H	一般式(12)	H	H	H	CH ₃
50	一般式(12)	H	CN	H	一般式(12)	H	H	H	CH ₃ O
51	一般式(12)	H	CN	H	H	H	H	H	H
52	一般式(12)	H	CN	H	H	H	CH ₃	H	H
53	一般式(12)	H	CN	H	H	H	CH ₃ O	H	H
54	一般式(12)	H	CN	H	H	H	H	CH ₃	H
55	一般式(12)	H	CN	H	H	H	H	CH ₃ O	H
56	一般式(12)	H	CN	H	H	H	H	t-C ₄ H ₉	H
57	一般式(12)	H	CN	H	H	H	H	Cl	H
58	一般式(12)	H	CN	H	H	H	H	F	H
59	一般式(12)	H	CN	H	H	H	H	H	CH ₃
60	一般式(12)	H	CN	H	H	H	H	H	CH ₃ O
61	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	H	H	H	H
62	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	H	CH ₃	H	H
63	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	H	CH ₃ O	H	H
64	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	H	H	CH ₃	H
65	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	H	H	CH ₃ O	H
66	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	H	H	t-C ₄ H ₉	H
67	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	H	H	Cl	H
68	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	H	H	F	H
69	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	H	H	H	CH ₃
70	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	H	H	H	CH ₃ O

10
20
30
40

【表1 - 2】

71	一般式(12)	一般式(12)	CN	F	F	H	H	H
72	一般式(12)	一般式(12)	CN	F	F	H	CH ₃	H
73	一般式(12)	一般式(12)	CN	F	F	H	CH ₃ O	H
74	一般式(12)	一般式(12)	CN	F	F	H	H	CH ₃
75	一般式(12)	一般式(12)	CN	F	F	H	H	CH ₃ O
76	一般式(12)	一般式(12)	CN	F	F	H	H	t-C ₄ H ₉
77	一般式(12)	一般式(12)	CN	F	F	H	H	Cl
78	一般式(12)	一般式(12)	CN	F	F	H	H	F
79	一般式(12)	一般式(12)	CN	F	F	H	H	CH ₃
80	一般式(12)	一般式(12)	CN	F	F	H	H	CH ₃ O
81	一般式(12)	F	CN	一般式(12)	F	H	H	H
82	一般式(12)	F	CN	一般式(12)	F	H	CH ₃	H
83	一般式(12)	F	CN	一般式(12)	F	H	CH ₃ O	H
84	一般式(12)	F	CN	一般式(12)	F	H	H	CH ₃
85	一般式(12)	F	CN	一般式(12)	F	H	H	CH ₃ O
86	一般式(12)	F	CN	一般式(12)	F	H	H	t-C ₄ H ₉
87	一般式(12)	F	CN	一般式(12)	F	H	H	Cl
88	一般式(12)	F	CN	一般式(12)	F	H	H	F
89	一般式(12)	F	CN	一般式(12)	F	H	H	CH ₃
90	一般式(12)	F	CN	一般式(12)	F	H	H	CH ₃ O
91	一般式(12)	F	CN	F	一般式(12)	H	H	H
92	一般式(12)	F	CN	F	一般式(12)	H	CH ₃	H
93	一般式(12)	F	CN	F	一般式(12)	H	CH ₃ O	H
94	一般式(12)	F	CN	F	一般式(12)	H	H	CH ₃
95	一般式(12)	F	CN	F	一般式(12)	H	H	CH ₃ O
96	一般式(12)	F	CN	F	一般式(12)	H	H	t-C ₄ H ₉
97	一般式(12)	F	CN	F	一般式(12)	H	H	Cl
98	一般式(12)	F	CN	F	一般式(12)	H	H	F
99	一般式(12)	F	CN	F	一般式(12)	H	H	CH ₃
100	一般式(12)	F	CN	F	一般式(12)	H	H	CH ₃ O
101	一般式(12)	F	CN	F	F	H	H	H
102	一般式(12)	F	CN	F	F	H	CH ₃	H
103	一般式(12)	F	CN	F	F	H	CH ₃ O	H
104	一般式(12)	F	CN	F	F	H	H	CH ₃
105	一般式(12)	F	CN	F	F	H	H	CH ₃ O
106	一般式(12)	F	CN	F	F	H	H	t-C ₄ H ₉
107	一般式(12)	F	CN	F	F	H	H	Cl
108	一般式(12)	F	CN	F	F	H	H	F
109	一般式(12)	F	CN	F	F	H	H	CH ₃
110	一般式(12)	F	CN	F	F	H	H	CH ₃ O
111	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	OH	H	H	H
112	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	OH	H	CH ₃	H
113	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	OH	H	CH ₃ O	H
114	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	OH	H	OH ₃	H
115	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	OH	H	CH ₃ O	H
116	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	OH	H	H	t-C ₄ H ₉
117	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	OH	H	H	Cl
118	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	OH	H	H	F
119	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	OH	H	H	CH ₃
120	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	OH	H	H	CH ₃ O
121	一般式(12)	一般式(12)	CN	OH	OH	H	H	H
122	一般式(12)	一般式(12)	CN	OH	OH	H	CH ₃	H
123	一般式(12)	一般式(12)	CN	OH	OH	H	CH ₃ O	H
124	一般式(12)	一般式(12)	CN	OH	OH	H	H	CH ₃
125	一般式(12)	一般式(12)	CN	OH	OH	H	H	CH ₃ O
126	一般式(12)	一般式(12)	CN	OH	OH	H	H	t-C ₄ H ₉
127	一般式(12)	一般式(12)	CN	OH	OH	H	H	Cl
128	一般式(12)	一般式(12)	CN	OH	OH	H	H	F
129	一般式(12)	一般式(12)	CN	OH	OH	H	H	CH ₃
130	一般式(12)	一般式(12)	CN	OH	OH	H	H	CH ₃ O
131	一般式(12)	OH	CN	一般式(12)	OH	H	H	H
132	一般式(12)	OH	CN	一般式(12)	OH	H	CH ₃	H
133	一般式(12)	OH	CN	一般式(12)	OH	H	CH ₃ O	H
134	一般式(12)	OH	CN	一般式(12)	OH	H	H	CH ₃
135	一般式(12)	OH	CN	一般式(12)	OH	H	H	CH ₃ O
136	一般式(12)	OH	CN	一般式(12)	OH	H	H	t-C ₄ H ₉
137	一般式(12)	OH	CN	一般式(12)	OH	H	H	Cl
138	一般式(12)	OH	CN	一般式(12)	OH	H	H	F
139	一般式(12)	OH	CN	一般式(12)	OH	H	H	CH ₃
140	一般式(12)	OH	CN	一般式(12)	OH	H	H	CH ₃ O

10

20

30

40

【表1 - 3】

141	一般式(12)	OH	CN	OH	一般式(12)	H	H	H	H
142	一般式(12)	OH	CN	OH	一般式(12)	H	CH ₃	H	H
143	一般式(12)	OH	CN	OH	一般式(12)	H	CH ₃ O	H	H
144	一般式(12)	OH	CN	OH	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
145	一般式(12)	OH	CN	OH	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
146	一般式(12)	OH	CN	OH	一般式(12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
147	一般式(12)	OH	CN	OH	一般式(12)	H	H	Cl	H
148	一般式(12)	OH	CN	OH	一般式(12)	H	H	F	H
149	一般式(12)	OH	CN	OH	一般式(12)	H	H	H	CH ₃
150	一般式(12)	OH	CN	OH	一般式(12)	H	H	H	CH ₃ O
151	一般式(12)	OH	CN	OH	OH	H	H	H	H
152	一般式(12)	OH	CN	OH	OH	H	CH ₃	H	H
153	一般式(12)	OH	CN	OH	OH	H	CH ₃ O	H	H
154	一般式(12)	OH	CN	OH	OH	H	H	CH ₃	H
155	一般式(12)	OH	CN	OH	OH	H	H	CH ₃ O	H
156	一般式(12)	OH	CN	OH	OH	H	H	t-C ₄ H ₉	H
157	一般式(12)	OH	CN	OH	OH	H	H	Cl	H
158	一般式(12)	OH	CN	OH	OH	H	H	F	H
159	一般式(12)	OH	CN	OH	OH	H	H	H	CH ₃
160	一般式(12)	OH	CN	OH	OH	H	H	H	CH ₃ O
161	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	Cl	H	H	H	H
162	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	Cl	H	CH ₃	H	H
163	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	Cl	H	CH ₃ O	H	H
164	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	Cl	H	H	CH ₃	H
165	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	Cl	H	H	CH ₃ O	H
166	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	Cl	H	H	t-C ₄ H ₉	H
167	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	Cl	H	H	Cl	H
168	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	Cl	H	H	F	H
169	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	Cl	H	H	H	CH ₃
170	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	Cl	H	H	H	CH ₃ O
171	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	H	H	H	H
172	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	H	CH ₃	H	H
173	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	H	CH ₃ O	H	H
174	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	H	H	CH ₃	H
175	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	H	H	CH ₃ O	H
176	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	H	H	t-C ₄ H ₉	H
177	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	H	H	Cl	H
178	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	H	H	F	H
179	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	H	H	H	CH ₃
180	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	H	H	H	CH ₃ O
181	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	CH ₃ O	H	H	H	H
182	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	CH ₃ O	H	CH ₃	H	H
183	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	CH ₃ O	H	CH ₃ O	H	H
184	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	CH ₃ O	H	H	CH ₃	H
185	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	CH ₃ O	H	H	CH ₃ O	H
186	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	CH ₃ O	H	H	t-C ₄ H ₉	H
187	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	CH ₃ O	H	H	Cl	H
188	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	CH ₃ O	H	H	F	H
189	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₂ H ₅ O	H	H	H	CH ₃
190	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₂ H ₅ O	H	H	H	CH ₃ O
191	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₂ H ₅ O	H	H	H	H
192	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₂ H ₅ O	H	CH ₃	H	H
193	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₂ H ₅ O	H	CH ₃ O	H	H
194	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₂ H ₅ O	H	H	CH ₃	H
195	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₂ H ₅ O	H	H	CH ₃ O	H
196	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₂ H ₅ O	H	H	t-C ₄ H ₉	H
197	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₂ H ₅ O	H	H	Cl	H
198	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₂ H ₅ O	H	H	F	H
199	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₂ H ₅ O	H	H	H	CH ₃
200	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₂ H ₅ O	H	H	H	CH ₃ O
201	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₃ H ₅ O	H	H	H	H
202	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₃ H ₅ O	H	CH ₃	H	H
203	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₃ H ₅ O	H	CH ₃ O	H	H
204	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₃ H ₅ O	H	H	CH ₃	H
205	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₃ H ₅ O	H	H	CH ₃ O	H
206	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₃ H ₅ O	H	H	t-C ₄ H ₉	H
207	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₃ H ₅ O	H	H	Cl	H
208	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₃ H ₅ O	H	H	F	H
209	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₃ H ₅ O	H	H	H	CH ₃
210	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₃ H ₅ O	H	H	H	CH ₃ O

10
20
30
40

【表1 - 4】

211	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(21)	H	H	H	H
212	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(21)	H	CH ₃	H	H
213	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(21)	H	CH ₃ O	H	H
214	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(21)	H	H	CH ₃	H
215	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(21)	H	H	CH ₃ O	H
216	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(21)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
217	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(21)	H	H	Cl	H
218	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(21)	H	H	F	H
219	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(21)	H	H	H	CH ₃
220	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(21)	H	H	H	CH ₃ O
221	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(22)	H	H	H	H
222	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(22)	H	CH ₃	H	H
223	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(22)	H	CH ₃ O	H	H
224	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(22)	H	H	CH ₃	H
225	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(22)	H	H	CH ₃ O	H
226	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(22)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
227	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(22)	H	H	Cl	H
228	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(22)	H	H	F	H
229	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(22)	H	H	H	CH ₃
230	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(22)	H	H	H	CH ₃ O
231	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(23)	H	H	H	H
232	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(23)	H	CH ₃	H	H
233	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(23)	H	CH ₃ O	H	H
234	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(23)	H	H	CH ₃	H
235	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(23)	H	H	CH ₃ O	H
236	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(23)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
237	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(23)	H	H	Cl	H
238	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(23)	H	H	F	H
239	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(23)	H	H	H	CH ₃
240	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(23)	H	H	H	CH ₃ O
241	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(24)	H	H	H	H
242	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(24)	H	CH ₃	H	H
243	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(24)	H	CH ₃ O	H	H
244	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(24)	H	H	CH ₃	H
245	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(24)	H	H	CH ₃ O	H
246	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(24)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
247	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(24)	H	H	Cl	H
248	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(24)	H	H	F	H
249	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(24)	H	H	H	CH ₃
250	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(24)	H	H	H	CH ₃ O
251	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	H	C ₆ H ₅	H	H
252	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
253	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H	H
254	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H	H
255	一般式(12)	一般式(12)	CN	H	H	H	C ₆ H ₅	H	H
256	一般式(12)	一般式(12)	CN	H	H	H	C ₆ H ₅	H	H
257	一般式(12)	H	CN	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H	H
258	一般式(12)	H	CN	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H	H
259	一般式(12)	H	CN	H	一般式(12)	H	C ₆ H ₅	H	H
260	一般式(12)	H	CN	H	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
261	一般式(12)	H	CN	H	H	H	C ₆ H ₅	H	H
262	一般式(12)	H	CN	H	H	H	C ₆ H ₅	H	H
263	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	H	C ₆ H ₅	H	H
264	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	H	H	C ₆ H ₅	H
265	一般式(12)	一般式(12)	CN	F	F	H	C ₆ H ₅	H	H
266	一般式(12)	一般式(12)	CN	F	F	H	H	C ₆ H ₅	H
267	一般式(12)	F	CN	一般式(12)	F	H	C ₆ H ₅	H	H
268	一般式(12)	F	CN	一般式(12)	F	H	H	C ₆ H ₅	H
269	一般式(12)	F	CN	F	一般式(12)	H	C ₆ H ₅	H	H
270	一般式(12)	F	CN	F	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
271	一般式(12)	F	CN	F	F	H	C ₆ H ₅	H	H
272	一般式(12)	F	CN	F	F	H	H	C ₆ H ₅	H
273	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	OH	H	C ₆ H ₅	H	H
274	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	OH	H	H	C ₆ H ₅	H
275	一般式(12)	一般式(12)	CN	OH	OH	H	C ₆ H ₅	H	H
276	一般式(12)	一般式(12)	CN	OH	OH	H	H	C ₆ H ₅	H
277	一般式(12)	OH	CN	一般式(12)	OH	H	C ₆ H ₅	H	H
278	一般式(12)	OH	CN	一般式(12)	OH	H	H	C ₆ H ₅	H
279	一般式(12)	OH	CN	OH	一般式(12)	H	C ₆ H ₅	H	H
280	一般式(12)	OH	CN	OH	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H

10
2030
40

【表1 - 5】

281	一般式(12)	OH	CN	OH	OH	H	C ₆ H ₅	H	H
282	一般式(12)	OH	CN	OH	OH	H	H	C ₆ H ₅	H
283	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	Cl	H	C ₆ H ₅	H	H
284	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	Cl	H	H	C ₆ H ₅	H
285	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	H	C ₆ H ₅	H	H
286	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	H	H	C ₆ H ₅	H
287	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(t2)	CH ₃ O	H	C ₆ H ₅	H	H
288	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	CH ₃ O	H	H	C ₆ H ₅	H
289	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₂ H ₅ O	H	C ₆ H ₅	H	H
290	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₂ H ₅ O	H	H	C ₆ H ₅	H
291	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₆ H ₅ O	H	C ₆ H ₅	H	H
292	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₆ H ₅ O	H	H	C ₆ H ₅	H
293	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(21)	H	C ₆ H ₅	H	H
294	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(21)	H	H	C ₆ H ₅	H
295	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(22)	H	C ₆ H ₅	H	H
296	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(22)	H	H	C ₆ H ₅	H
297	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(23)	H	C ₆ H ₅	H	H
298	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(23)	H	H	C ₆ H ₅	H
299	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(24)	H	C ₆ H ₅	H	H
300	一般式(12)	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(24)	H	H	C ₆ H ₅	H

【0 0 3 8】

【表2 - 1】

化合物番号	一般式(1)					一般式(12)			
	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	R ³¹ ,R ³⁸	R ³² ,R ³⁷	R ³³ ,R ³⁶	R ³⁴ ,R ³⁵
301	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	H
302	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	CH ₃	H	H
303	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	CH ₃ O	H	H
304	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
305	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
306	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
307	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	Cl	H
308	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	F	H
309	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	CH ₃
310	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	CH ₃ O
311	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	H	H
312	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	CH ₃	H
313	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	CH ₃ O	H
314	一般式(12)	CN	一般式(12)	H	一般式(12)	H	H	H	H
315	一般式(12)	CN	一般式(12)	H	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
316	一般式(12)	CN	一般式(12)	H	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
317	一般式(12)	CN	H	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	H
318	一般式(12)	CN	H	一般式(12)	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
319	一般式(12)	CN	H	一般式(12)	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
320	H	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	H
321	H	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
322	H	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
323	一般式(12)	CN	一般式(12)	H	H	H	H	H	H
324	一般式(12)	CN	一般式(12)	H	H	H	H	CH ₃	H
325	一般式(12)	CN	一般式(12)	H	H	H	H	CH ₃ O	H
326	一般式(12)	CN	H	一般式(12)	H	H	H	H	H
327	一般式(12)	CN	H	一般式(12)	H	H	H	CH ₃	H
328	一般式(12)	CN	H	一般式(12)	H	H	H	CH ₃ O	H
329	H	CN	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	H	H
330	H	CN	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	CH ₃	H
331	H	CN	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	CH ₃ O	H
332	一般式(12)	CN	H	H	一般式(12)	H	H	H	H
333	一般式(12)	CN	H	H	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
334	一般式(12)	CN	H	H	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
335	H	CN	一般式(12)	H	一般式(12)	H	H	H	H
336	H	CN	一般式(12)	H	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
337	H	CN	一般式(12)	H	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
338	H	CN	H	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	H
339	H	CN	H	一般式(12)	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
340	H	CN	H	一般式(12)	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
341	一般式(12)	CN	H	H	H	H	H	H	H
342	一般式(12)	CN	H	H	H	H	H	CH ₃	H
343	一般式(12)	CN	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H
344	H	CN	一般式(12)	H	H	H	H	H	H
345	H	CN	一般式(12)	H	H	H	H	CH ₃	H
346	H	CN	一般式(12)	H	H	H	H	CH ₃ O	H
347	H	CN	H	一般式(12)	H	H	H	H	H
348	H	CN	H	一般式(12)	H	H	H	CH ₃	H
349	H	CN	H	一般式(12)	H	H	H	CH ₃ O	H
350	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	F	H	H	H	H
351	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	F	H	H	CH ₃	H
352	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	F	H	H	CH ₃ O	H
353	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	一般式(12)	H	H	H	H
354	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
355	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
356	一般式(12)	CN	F	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	H
357	一般式(12)	CN	F	一般式(12)	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
358	一般式(12)	CN	F	一般式(12)	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
359	F	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	H
360	F	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
361	F	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
362	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	F	H	H	H	H
363	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	F	H	H	CH ₃	H
364	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	F	H	H	CH ₃ O	H
365	一般式(12)	CN	F	一般式(12)	F	H	H	H	H
366	一般式(12)	CN	F	一般式(12)	F	H	H	CH ₃	H
367	一般式(12)	CN	F	一般式(12)	F	H	H	CH ₃ O	H
368	F	CN	一般式(12)	一般式(12)	F	H	H	H	H
369	F	CN	一般式(12)	一般式(12)	F	H	H	CH ₃	H
370	F	CN	一般式(12)	一般式(12)	F	H	H	CH ₃ O	H

10

20

30

40

【表2-2】

371	一般式(12)	CN	F	F	一般式(12)	H	H	H	H
372	一般式(12)	CN	F	F	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
373	一般式(12)	CN	F	F	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
374	F	CN	一般式(12)	F	一般式(12)	H	H	H	H
375	F	CN	一般式(12)	F	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
376	F	CN	一般式(12)	F	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
377	F	CN	F	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	H
378	F	CN	F	一般式(12)	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
379	F	CN	F	一般式(12)	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
380	一般式(12)	CN	F	F	一般式(12)	H	H	H	H
381	一般式(12)	CN	F	F	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
382	一般式(12)	CN	F	F	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
383	F	CN	一般式(12)	F	一般式(12)	H	H	H	H
384	F	CN	一般式(12)	F	一般式(12)	H	H	OH ₃	H
385	F	CN	一般式(12)	F	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
386	F	CN	F	一般式(12)	F	H	H	H	H
387	F	CN	F	一般式(12)	F	H	H	CH ₃	H
388	F	CN	F	一般式(12)	F	H	H	CH ₃ O	H
389	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	OH	H	H	H	H
390	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	OH	H	H	CH ₃	H
391	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	OH	H	H	CH ₃ O	H
392	一般式(12)	CN	一般式(12)	OH	一般式(12)	H	H	H	H
393	一般式(12)	CN	一般式(12)	OH	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
394	一般式(12)	CN	一般式(12)	OH	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
395	一般式(12)	CN	一般式(12)	OH	一般式(12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
396	一般式(12)	CN	一般式(12)	OH	一般式(12)	H	H	Cl	H
397	一般式(12)	CN	一般式(12)	OH	一般式(12)	H	H	F	H
398	一般式(12)	CN	OH	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	H
399	一般式(12)	CN	OH	一般式(12)	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
400	一般式(12)	CN	OH	一般式(12)	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
401	OH	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	H
402	OH	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
403	OH	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
404	一般式(12)	CN	一般式(12)	OH	OH	H	H	H	H
405	一般式(12)	CN	一般式(12)	OH	OH	H	H	CH ₃	H
406	一般式(12)	CN	一般式(12)	OH	OH	H	H	CH ₃ O	H
407	一般式(12)	CN	OH	一般式(12)	OH	H	H	H	H
408	一般式(12)	CN	OH	一般式(12)	OH	H	H	CH ₃	H
409	一般式(12)	CN	OH	一般式(12)	OH	H	H	CH ₃ O	H
410	OH	CN	一般式(12)	一般式(12)	OH	H	H	H	H
411	OH	CN	一般式(12)	一般式(12)	OH	H	H	CH ₃	H
412	OH	CN	一般式(12)	一般式(12)	OH	H	H	CH ₃ O	H
413	一般式(12)	CN	OH	OH	一般式(12)	H	H	H	H
414	一般式(12)	CN	OH	OH	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
415	一般式(12)	CN	OH	OH	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
416	OH	CN	一般式(12)	OH	一般式(12)	H	H	H	H
417	OH	CN	一般式(12)	OH	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
418	OH	CN	一般式(12)	OH	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
419	OH	CN	OH	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	H
420	OH	CN	OH	一般式(12)	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
421	OH	CN	OH	一般式(12)	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
422	一般式(12)	CN	OH	OH	OH	H	H	H	H
423	一般式(12)	CN	OH	OH	OH	H	H	CH ₃	H
424	一般式(12)	CN	OH	OH	OH	H	H	CH ₃ O	H
425	OH	CN	一般式(12)	OH	OH	H	H	H	H
426	OH	CN	一般式(12)	OH	OH	H	H	CH ₃	H
427	OH	CN	一般式(12)	OH	OH	H	H	CH ₃ O	H
428	OH	CN	OH	一般式(12)	OH	H	H	H	H
429	OH	CN	OH	一般式(12)	OH	H	H	CH ₃	H
430	OH	CN	OH	一般式(12)	OH	H	H	CH ₃ O	H
431	OH	CN	OH	OH	一般式(12)	H	H	H	H
432	OH	CN	OH	OH	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
433	OH	CN	OH	OH	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
434	一般式(12)	CN	一般式(12)	Cl	一般式(12)	H	H	H	H
435	一般式(12)	CN	一般式(12)	Cl	一般式(12)	H	H	OH ₃	H
436	一般式(12)	CN	一般式(12)	Cl	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
437	一般式(12)	CN	一般式(12)	Cl	一般式(12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
438	一般式(12)	CN	一般式(12)	Cl	一般式(12)	H	H	Cl	H
439	一般式(12)	CN	一般式(12)	Cl	一般式(12)	H	H	F	H
440	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	一般式(12)	H	H	H	H

10

20

30

40

【表 2 - 3】

441	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
442	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
443	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	一般式(12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
444	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	一般式(12)	H	H	Cl	H
445	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	一般式(12)	H	H	F	H
446	一般式(12)	CN	一般式(12)	CH ₃ O	一般式(12)	H	H	H	H
447	一般式(12)	CN	一般式(12)	CH ₃ O	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
448	一般式(12)	CN	一般式(12)	CH ₃ O	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
449	一般式(12)	CN	一般式(12)	CH ₃ O	一般式(12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
450	一般式(12)	CN	一般式(12)	CH ₃ O	一般式(12)	H	H	Cl	H
451	一般式(12)	CN	一般式(12)	CH ₃ O	一般式(12)	H	H	F	H
452	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₂ H ₅ O	一般式(12)	H	H	H	H
453	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₂ H ₅ O	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
454	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₂ H ₅ O	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
455	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₂ H ₅ O	一般式(12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
456	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₂ H ₅ O	一般式(12)	H	H	Cl	H
457	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₂ H ₅ O	一般式(12)	H	H	F	H
458	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₂ H ₅ O	一般式(12)	H	H	H	H
459	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₂ H ₅ O	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
460	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₂ H ₅ O	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
461	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₂ H ₅ O	一般式(12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
462	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₂ H ₅ O	一般式(12)	H	H	Cl	H
463	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₂ H ₅ O	一般式(12)	H	H	F	H
464	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(21)	一般式(12)	H	H	H	H
465	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(21)	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
466	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(21)	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
467	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(21)	一般式(12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
468	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(21)	一般式(12)	H	H	Cl	H
469	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(21)	一般式(12)	H	H	F	H
470	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(22)	一般式(12)	H	H	H	H
471	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(22)	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
472	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(22)	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
473	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(22)	一般式(12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
474	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(22)	一般式(12)	H	H	Cl	H
475	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(22)	一般式(12)	H	H	F	H
476	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(23)	一般式(12)	H	H	H	H
477	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(23)	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
478	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(23)	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
479	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(23)	一般式(12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
480	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(23)	一般式(12)	H	H	Cl	H
481	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(23)	一般式(12)	H	H	F	H
482	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(24)	一般式(12)	H	H	H	H
483	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(24)	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
484	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(24)	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
485	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(24)	一般式(12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
486	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(24)	一般式(12)	H	H	Cl	H
487	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(24)	一般式(12)	H	H	F	H
488	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	C ₆ H ₅	H	H
489	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
490	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	C ₆ H ₅	H	H
491	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	C ₆ H ₅	H	H
492	一般式(12)	CN	一般式(12)	H	一般式(12)	H	C ₆ H ₅	H	H
493	一般式(12)	CN	一般式(12)	H	一般式(12)	H	C ₆ H ₅	H	H
494	一般式(12)	CN	H	一般式(12)	一般式(12)	H	C ₆ H ₅	H	H
495	一般式(12)	CN	H	一般式(12)	一般式(12)	H	C ₆ H ₅	H	H
496	H	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	C ₆ H ₅	H	H
497	H	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	C ₆ H ₅	H	H
498	一般式(12)	CN	一般式(12)	H	一般式(12)	H	C ₆ H ₅	H	H
499	一般式(12)	CN	一般式(12)	H	一般式(12)	H	C ₆ H ₅	H	H
500-1	一般式(12)	CN	H	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H	H
500-2	一般式(12)	CN	H	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H	H
500-3	H	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	C ₆ H ₅	H	H
500-4	H	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	C ₆ H ₅	H	H
500-5	一般式(12)	CN	H	H	一般式(12)	H	C ₆ H ₅	H	H
500-6	一般式(12)	CN	H	H	一般式(12)	H	C ₆ H ₅	H	H
500-7	H	CN	一般式(12)	H	一般式(12)	H	C ₆ H ₅	H	H
500-8	H	CN	一般式(12)	H	一般式(12)	H	C ₆ H ₅	H	H
500-9	H	CN	H	一般式(12)	一般式(12)	H	C ₆ H ₅	H	H
500-10	H	CN	H	一般式(12)	一般式(12)	H	C ₆ H ₅	H	H

10
20
30
40

【表2-4】

500-11	一般式(12)	CN	H	H	H	H	C ₆ H ₅	H	H
500-12	一般式(12)	CN	H	H	H	H	C ₆ H ₅	H	H
500-13	H	CN	一般式(12)	H	H	H	C ₆ H ₅	H	H
500-14	H	CN	一般式(12)	H	H	H	C ₆ H ₅	H	H
500-15	H	CN	H	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H	H
500-16	H	CN	H	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H	H
500-17	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	F	H	H	C ₆ H ₅	H
500-18	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
500-19	一般式(12)	CN	F	一般式(12)	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
500-20	F	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
500-21	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	F	H	H	C ₆ H ₅	H
500-22	一般式(12)	CN	F	一般式(12)	F	H	H	C ₆ H ₅	H
500-23	F	CN	一般式(12)	一般式(12)	F	H	H	C ₆ H ₅	H
500-24	一般式(12)	CN	F	F	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
500-25	F	CN	一般式(12)	F	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
500-26	F	CN	F	一般式(12)	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
500-27	一般式(12)	CN	F	F	F	H	H	C ₆ H ₅	H
500-28	F	CN	一般式(12)	F	F	H	H	C ₆ H ₅	H
500-29	F	CN	F	一般式(12)	F	H	H	C ₆ H ₅	H
500-30	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	OH	H	H	C ₆ H ₅	H
500-31	一般式(12)	CN	一般式(12)	OH	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
500-32	一般式(12)	CN	OH	一般式(12)	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
500-33	OH	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
500-34	一般式(12)	CN	一般式(12)	OH	OH	H	H	C ₆ H ₅	H
500-35	一般式(12)	CN	OH	一般式(12)	OH	H	H	C ₆ H ₅	H
500-36	OH	CN	一般式(12)	一般式(12)	OH	H	H	C ₆ H ₅	H
500-37	一般式(12)	CN	OH	OH	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
500-38	OH	CN	一般式(12)	OH	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
500-39	OH	CN	OH	一般式(12)	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
500-40	一般式(12)	CN	OH	OH	OH	H	H	C ₆ H ₅	H
500-41	OH	CN	一般式(12)	OH	OH	H	H	C ₆ H ₅	H
500-42	OH	CN	OH	一般式(12)	OH	H	H	C ₆ H ₅	H
500-43	OH	CN	OH	OH	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
500-44	一般式(12)	CN	一般式(12)	Cl	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
500-45	一般式(12)	CN	一般式(12)	F	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
500-46	一般式(12)	CN	一般式(12)	CH ₃ O	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
500-47	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₂ H ₅ O	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
500-48	一般式(12)	CN	一般式(12)	C ₆ H ₅ O	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
500-49	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(21)	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
500-50	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(22)	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
500-51	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(23)	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
500-52	一般式(12)	CN	一般式(12)	式(24)	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H

10

20

30

【0039】

【表3 - 1】

化合物番号	一般式(1)					一般式(12)			
	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	R ³¹ ,R ³⁸	R ³² ,R ³⁷	R ³³ ,R ³⁶	R ³⁴ ,R ³⁵
501	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	H
502	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	CH ₃	H	H
503	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	CH ₃ O	H	H
504	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
505	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
506	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
507	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	Cl	H
508	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	F	H
509	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	CH ₃
510	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	CH ₃ O
511	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	H	H
512	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	CH ₃	H
513	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	CH ₃ O	H
514	CN	一般式(12)	一般式(12)	H	一般式(12)	H	H	H	H
515	CN	一般式(12)	一般式(12)	H	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
516	CN	一般式(12)	一般式(12)	H	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
517	CN	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	H	H	H
518	CN	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	H	CH ₃	H
519	CN	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	H	CH ₃ O	H
520	CN	一般式(12)	H	一般式(12)	H	H	H	H	H
521	CN	一般式(12)	H	一般式(12)	H	H	H	CH ₃	H
522	CN	一般式(12)	H	一般式(12)	H	H	H	CH ₃ O	H
523	CN	H	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	H	H
524	CN	H	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	CH ₃	H
525	CN	H	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	CH ₃ O	H
526	CN	一般式(12)	H	H	一般式(12)	H	H	H	H
527	CN	一般式(12)	H	H	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
528	CN	一般式(12)	H	H	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
529	CN	一般式(12)	H	H	H	H	H	H	H
530	CN	一般式(12)	H	H	H	H	H	CH ₃	H
531	CN	一般式(12)	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H
532	CN	H	一般式(12)	H	H	H	H	H	H
533	CN	H	一般式(12)	H	H	H	H	CH ₃	H
534	CN	H	一般式(12)	H	H	H	H	CH ₃ O	H
535	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	F	H	H	H	H
536	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	F	H	H	CH ₃	H
537	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	F	H	H	CH ₃ O	H
538	CN	一般式(12)	一般式(12)	F	一般式(12)	H	H	H	H
539	CN	一般式(12)	一般式(12)	F	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
540	CN	一般式(12)	一般式(12)	F	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
541	CN	一般式(12)	一般式(12)	F	F	H	H	H	H
542	CN	一般式(12)	一般式(12)	F	F	H	H	CH ₃	H
543	CN	一般式(12)	一般式(12)	F	F	H	H	CH ₃ O	H
544	CN	一般式(12)	F	一般式(12)	F	H	H	H	H
545	CN	一般式(12)	F	一般式(12)	F	H	H	CH ₃	H
546	CN	一般式(12)	F	一般式(12)	F	H	H	CH ₃ O	H
547	CN	F	一般式(12)	一般式(12)	F	H	H	H	H
548	CN	F	一般式(12)	一般式(12)	F	H	H	CH ₃	H
549	CN	F	一般式(12)	一般式(12)	F	H	H	CH ₃ O	H
550	CN	一般式(12)	F	F	一般式(12)	H	H	H	H
551	CN	一般式(12)	F	F	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
552	CN	一般式(12)	F	F	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
553	CN	一般式(12)	F	F	F	H	H	H	H
554	CN	一般式(12)	F	F	F	H	H	CH ₃	H
555	CN	一般式(12)	F	F	F	H	H	CH ₃ O	H
556	CN	F	一般式(12)	F	F	H	H	H	H
557	CN	F	一般式(12)	F	F	H	H	CH ₃	H
558	CN	F	一般式(12)	F	F	H	H	CH ₃ O	H
559	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	OH	H	H	H	H
560	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	OH	H	H	CH ₃	H
561	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	OH	H	H	CH ₃ O	H
562	CN	一般式(12)	一般式(12)	OH	一般式(12)	H	H	H	H
563	CN	一般式(12)	一般式(12)	OH	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
564	CN	--般式(12)	一般式(12)	OH	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
565	CN	一般式(12)	一般式(12)	OH	一般式(12)	H	H	Cl	H
566	CN	一般式(12)	一般式(12)	OH	一般式(12)	H	H	F	H
567	CN	一般式(12)	一般式(12)	OH	OH	H	H	H	H
568	CN	一般式(12)	一般式(12)	OH	OH	H	H	CH ₃	H
569	CN	一般式(12)	一般式(12)	OH	OH	H	H	CH ₃ O	H
570	CN	一般式(12)	OH	一般式(12)	OH	H	H	H	H

10
20
30
40

【表3 - 2】

571	CN	一般式(12)	OH	一般式(12)	OH	H	H	CH ₃	H
572	CN	一般式(12)	OH	一般式(12)	OH	H	H	CH ₃ O	H
573	CN	OH	一般式(12)	一般式(12)	OH	H	H	H	H
574	CN	OH	一般式(12)	一般式(12)	OH	H	H	CH ₃	H
575	CN	OH	一般式(12)	一般式(12)	OH	H	H	CH ₃ O	H
576	CN	一般式(12)	OH	OH	一般式(12)	H	H	H	H
577	CN	一般式(12)	OH	OH	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
578	CN	一般式(12)	OH	OH	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
579	CN	一般式(12)	OH	OH	OH	H	H	H	H
580	CN	一般式(12)	OH	OH	OH	H	H	CH ₃	H
581	CN	一般式(12)	OH	OH	OH	H	H	CH ₃ O	H
582	CN	OH	一般式(12)	OH	OH	H	H	H	H
583	CN	OH	一般式(12)	OH	OH	H	H	CH ₃	H
584	CN	OH	一般式(12)	OH	OH	H	H	CH ₃ O	H
585	CN	一般式(12)	Cl	一般式(12)	H	H	H	H	H
586	CN	一般式(12)	Cl	一般式(12)	H	H	CH ₃	H	H
587	CN	一般式(12)	Cl	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H	H
588	CN	一般式(12)	Cl	一般式(12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H	H
589	CN	一般式(12)	Cl	一般式(12)	H	H	Cl	H	H
590	CN	一般式(12)	Cl	一般式(12)	H	H	F	H	H
591	CN	一般式(12)	F	一般式(12)	H	H	H	H	H
592	CN	一般式(12)	F	一般式(12)	H	H	CH ₃	H	H
593	CN	一般式(12)	F	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H	H
594	CN	一般式(12)	F	一般式(12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H	H
595	CN	一般式(12)	F	一般式(12)	H	H	Cl	H	H
596	CN	一般式(12)	F	一般式(12)	H	H	F	H	H
597	CN	一般式(12)	CH ₃ O	一般式(12)	H	H	H	H	H
598	CN	一般式(12)	CH ₃ O	一般式(12)	H	H	OH ₃	H	H
599	CN	一般式(12)	CH ₃ O	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H	H
600	CN	一般式(12)	CH ₃ O	一般式(12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H	H
601	CN	一般式(12)	CH ₃ O	一般式(12)	H	H	Cl	H	H
602	CN	一般式(12)	CH ₃ O	一般式(12)	H	H	F	H	H
603	CN	一般式(12)	C ₂ H ₅ O	一般式(12)	H	H	H	H	H
604	CN	一般式(12)	C ₂ H ₅ O	一般式(12)	H	H	CH ₃	H	H
605	CN	一般式(12)	C ₂ H ₅ O	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H	H
606	CN	一般式(12)	C ₂ H ₅ O	一般式(12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H	H
607	CN	一般式(12)	C ₂ H ₅ O	一般式(12)	H	H	Cl	H	H
608	CN	一般式(12)	C ₂ H ₅ O	一般式(12)	H	H	F	H	H
609	CN	一般式(12)	C ₆ H ₅ O	一般式(12)	H	H	H	H	H
610	CN	一般式(12)	C ₆ H ₅ O	一般式(12)	H	H	OH ₃	H	H
611	CN	一般式(12)	C ₆ H ₅ O	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H	H
612	CN	一般式(12)	C ₆ H ₅ O	一般式(12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H	H
613	CN	一般式(12)	C ₆ H ₅ O	一般式(12)	H	H	Cl	H	H
614	CN	一般式(12)	C ₆ H ₅ O	一般式(12)	H	H	F	H	H
615	CN	一般式(12)	式(21)	式(21)	一般式(12)	H	H	H	H
616	CN	一般式(12)	式(21)	式(21)	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
617	CN	一般式(12)	式(21)	式(21)	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
618	CN	一般式(12)	式(21)	式(21)	一般式(12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
619	CN	一般式(12)	式(21)	式(21)	一般式(12)	H	H	Cl	H
620	CN	一般式(12)	式(21)	式(21)	一般式(12)	H	H	F	H
621	CN	一般式(12)	式(21)	式(22)	一般式(12)	H	H	H	H
622	CN	一般式(12)	式(21)	式(22)	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
623	CN	一般式(12)	式(21)	式(22)	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
624	CN	一般式(12)	式(21)	式(22)	一般式(12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
625	CN	一般式(12)	式(21)	式(22)	一般式(12)	H	H	Cl	H
626	CN	一般式(12)	式(21)	式(22)	一般式(12)	H	H	F	H
627	CN	一般式(12)	式(21)	式(23)	一般式(12)	H	H	H	H
628	CN	一般式(12)	式(21)	式(23)	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
629	CN	一般式(12)	式(21)	式(23)	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
630	CN	一般式(12)	式(21)	式(23)	一般式(12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
631	CN	一般式(12)	式(21)	式(23)	一般式(12)	H	H	Cl	H
632	CN	一般式(12)	式(21)	式(23)	一般式(12)	H	H	F	H
633	CN	一般式(12)	式(21)	式(24)	一般式(12)	H	H	H	H
634	CN	一般式(12)	式(21)	式(24)	一般式(12)	H	H	CH ₃	H
635	CN	一般式(12)	式(21)	式(24)	一般式(12)	H	H	CH ₃ O	H
636	CN	一般式(12)	式(21)	式(24)	一般式(12)	H	H	t-C ₄ H ₉	H
637	CN	一般式(12)	式(21)	式(24)	一般式(12)	H	H	Cl	H
638	CN	一般式(12)	式(21)	式(24)	一般式(12)	H	H	F	H
639	CN	一般式(12)	式(21)	式(24)	一般式(12)	H	C ₆ H ₅	H	H
640	CN	一般式(12)	式(21)	式(24)	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H

10
20
30
40

【表3-3】

641	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H	H
642	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	C ₆ H ₅	H
643	CN	一般式(12)	一般式(12)	H	一般式(12)	H	C ₆ H ₅	H	H
644	CN	一般式(12)	一般式(12)	H	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
645	CN	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	C ₆ H ₅	H	H
646	CN	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	C ₆ H ₅	H	H
647	CN	一般式(12)	H	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H	H
648	CN	一般式(12)	H	一般式(12)	H	H	H	C ₆ H ₅	H
649	CN	H	一般式(12)	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H	H
650	CN	H	一般式(12)	一般式(12)	H	H	H	C ₆ H ₅	H
651	CN	H	H	一般式(12)	一般式(12)	H	C ₆ H ₅	H	H
652	CN	H	H	一般式(12)	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
653	CN	一般式(12)	H	H	H	H	C ₆ H ₅	H	H
654	CN	一般式(12)	H	H	H	H	H	C ₆ H ₅	H
655	CN	H	一般式(12)	H	H	H	C ₆ H ₅	H	H
656	CN	H	一般式(12)	H	H	H	H	C ₆ H ₅	H
657	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	F	H	H	C ₆ H ₅	H
658	CN	一般式(12)	一般式(12)	F	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
659	CN	一般式(12)	一般式(12)	F	F	H	H	C ₆ H ₅	H
660	CN	一般式(12)	F	一般式(12)	F	H	H	C ₆ H ₅	H
661	CN	F	一般式(12)	一般式(12)	F	H	H	C ₆ H ₅	H
662	CN	F	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
663	CN	一般式(12)	F	F	F	H	H	C ₆ H ₅	H
664	CN	F	一般式(12)	F	F	H	H	C ₆ H ₅	H
665	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	OH	H	H	C ₆ H ₅	H
666	CN	一般式(12)	一般式(12)	OH	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
667	CN	一般式(12)	一般式(12)	OH	OH	H	H	C ₆ H ₅	H
668	CN	一般式(12)	OH	一般式(12)	OH	H	H	C ₆ H ₅	H
669	CN	OH	一般式(12)	OH	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
670	CN	OH	OH	一般式(12)	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
671	CN	一般式(12)	OH	OH	OH	H	H	C ₆ H ₅	H
672	CN	OH	一般式(12)	OH	OH	H	H	C ₆ H ₅	H
673	CN	一般式(12)	一般式(12)	Cl	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
674	CN	一般式(12)	一般式(12)	F	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
675	CN	一般式(12)	一般式(12)	CH ₃ O	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
676	CN	一般式(12)	一般式(12)	C ₂ H ₅ O	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
677	CN	一般式(12)	一般式(12)	C ₆ H ₅ O	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
678	CN	一般式(12)	一般式(12)	式(21)	式(21)	H	H	C ₆ H ₅	H
679	CN	一般式(12)	一般式(12)	式(22)	式(22)	H	H	C ₆ H ₅	H
680	CN	一般式(12)	一般式(12)	式(23)	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H
681	CN	一般式(12)	一般式(12)	式(24)	一般式(12)	H	H	C ₆ H ₅	H

【0040】

10

20

30

【表4 - 1】

化合物 番号	一般式(1)					一般式(13)					
	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	R ⁴¹	R ⁴²	R ⁴³	R ⁴⁴	R ⁴⁵	R ⁴⁶
701	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	一般式(13)	H	H	H	H	H	H
702	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	一般式(13)	H	CH ₃	H	H	H	H
703	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	一般式(13)	H	CH ₃ O	H	H	H	H
704	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	一般式(13)	H	H	CH ₃	H	H	H
705	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	一般式(13)	H	H	CH ₃ O	H	H	H
706	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	一般式(13)	H	H	t-C ₄ H ₉	H	H	H
707	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	一般式(13)	H	H	Cl	H	H	H
708	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	一般式(13)	H	H	F	H	H	H
709	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	一般式(13)	H	H	H	CH ₃	H	H
710	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	一般式(13)	H	H	H	CH ₃ O	H	H
711	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	一般式(13)	H	H	H	CH ₃	H	H
712	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	一般式(13)	H	H	H	CH ₃ O	H	H
713	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	一般式(13)	H	H	H	t-C ₄ H ₉	H	H
714	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	一般式(13)	H	H	H	Cl	H	H
715	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	一般式(13)	H	H	H	F	H	H
716	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	一般式(13)	H	H	H	C ₆ H ₅	H	H
717	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	一般式(13)	H	H	H	p-CH ₃ C ₆ H ₄	H	H
718	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	一般式(13)	H	H	H	2,4,6-(OH) ₃ C ₆ H ₂	H	H
719	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	一般式(13)	H	H	H	p-CH ₃ OC ₆ H ₄	H	H
720	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	一般式(13)	H	H	H	p-(CH ₃) ₂ NC ₆ H ₄	H	H
721	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	一般式(13)	H	H	H	p-FC ₆ H ₄	H	H
722	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	一般式(13)	H	H	H	p-CNC ₆ H ₄	H	H
723	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	一般式(13)	H	H	H	H	CH ₃	
724	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	一般式(13)	H	H	H	H	CH ₃ O	
725	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	一般式(13)	H	H	H	H	t-C ₄ H ₉	
726	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	一般式(13)	H	H	H	H	Cl	
727	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	一般式(13)	H	H	H	H	F	
728	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	一般式(13)	H	H	H	H	C ₆ H ₅	
729	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	一般式(13)	H	H	H	H	p-CH ₃ C ₆ H ₄	
730	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	一般式(13)	H	H	H	H	2,4,6-(CH ₃) ₃ C ₆ H ₂	
731	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	一般式(13)	H	H	H	H	p-CH ₃ OC ₆ H ₄	
732	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	一般式(13)	H	H	H	H	p-(CH ₃) ₂ NC ₆ H ₄	
733	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	一般式(13)	H	H	H	H	p-FC ₆ H ₄	
734	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	一般式(13)	H	H	H	H	p-CNC ₆ H ₄	
735	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	H	H	H	H	H	H	
736	一般式(13)	一般式(13)	CN	H	一般式(13)	H	H	H	H	H	
737	一般式(13)	一般式(13)	CN	H	H	H	H	H	H	H	
738	一般式(13)	H	CN	一般式(13)	H	H	H	H	H	H	
739	H	一般式(13)	CN	一般式(13)	H	H	H	H	H	H	
740	一般式(13)	H	CN	H	H	H	H	H	H	H	
741	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	F	H	H	H	H	H	
742	一般式(13)	一般式(13)	CN	F	一般式(13)	H	H	H	H	H	
743	一般式(13)	一般式(13)	CN	F	F	H	H	H	H	H	
744	一般式(13)	F	CN	一般式(13)	F	H	H	H	H	H	
745	F	一般式(13)	CN	一般式(13)	F	H	H	H	H	H	
746	一般式(13)	F	CN	F	F	H	H	H	H	H	
747	一般式(13)	一般式(13)	CN	一般式(13)	OH	H	H	H	H	H	
748	一般式(13)	一般式(13)	CN	OH	一般式(13)	H	H	H	H	H	
749	一般式(13)	一般式(13)	CN	OH	OH	H	H	H	H	H	
750	一般式(13)	OH	CN	一般式(13)	OH	H	H	H	H	H	

10

20

30

【表4-2】

751	OH	一般式(13)	CN	一般式(13)	OH	H	H	H	H	H
752	一般式(13)	OH	CN	OH	OH	H	H	H	H	H
753	一般式(13)	一般式(13)	CN	Cl	一般式(13)	H	H	H	H	H
754	一般式(13)	一般式(13)	CN	Cl	一般式(13)	H	H	CH ₃	H	H
755	一般式(13)	一般式(13)	CN	Cl	一般式(13)	H	H	CH ₃ O	H	H
756	一般式(13)	一般式(13)	CN	Cl	一般式(13)	H	H	t-C ₄ H ₉	H	H
757	一般式(13)	一般式(13)	CN	Cl	一般式(13)	H	H	Cl	H	H
758	一般式(13)	一般式(13)	CN	Cl	一般式(13)	H	H	F	H	H
759	一般式(13)	一般式(13)	CN	F	一般式(13)	H	H	H	H	H
760	一般式(13)	一般式(13)	CN	F	一般式(13)	H	H	CH ₃	H	H
761	一般式(13)	一般式(13)	CN	F	一般式(13)	H	H	CH ₃ O	H	H
762	一般式(13)	一般式(13)	CN	F	一般式(13)	H	H	t-C ₄ H ₉	H	H
763	一般式(13)	一般式(13)	CN	F	一般式(13)	H	H	Cl	H	H
764	一般式(13)	一般式(13)	CN	F	一般式(13)	H	H	F	H	H
765	一般式(13)	一般式(13)	CN	CH ₃ O	一般式(13)	H	H	H	H	H
766	一般式(13)	一般式(13)	CN	CH ₃ O	一般式(13)	H	H	CH ₃	H	H
767	一般式(13)	一般式(13)	CN	CH ₃ O	一般式(13)	H	H	CH ₃ O	H	H
768	一般式(13)	一般式(13)	CN	CH ₃ O	一般式(13)	H	H	t-C ₄ H ₉	H	H
769	一般式(13)	一般式(13)	CN	CH ₃ O	一般式(13)	H	H	Cl	H	H
770	一般式(13)	一般式(13)	CN	CH ₃ O	一般式(13)	H	H	F	H	H
771	一般式(13)	一般式(13)	CN	C ₂ H ₅ O	一般式(13)	H	H	H	H	H
772	一般式(13)	一般式(13)	CN	C ₂ H ₅ O	一般式(13)	H	H	CH ₃	H	H
773	一般式(13)	一般式(13)	CN	C ₂ H ₅ O	一般式(13)	H	H	CH ₃ O	H	H
774	一般式(13)	一般式(13)	CN	C ₂ H ₅ O	一般式(13)	H	H	t-C ₄ H ₉	H	H
775	一般式(13)	一般式(13)	CN	C ₂ H ₅ O	一般式(13)	H	H	Cl	H	H
776	一般式(13)	一般式(13)	CN	C ₂ H ₅ O	一般式(13)	H	H	F	H	H
777	一般式(13)	一般式(13)	CN	C ₆ H ₅ O	一般式(13)	H	H	H	H	H
778	一般式(13)	一般式(13)	CN	C ₆ H ₅ O	一般式(13)	H	H	CH ₃	H	H
779	一般式(13)	一般式(13)	CN	C ₆ H ₅ O	一般式(13)	H	H	CH ₃ O	H	H
780	一般式(13)	一般式(13)	CN	C ₆ H ₅ O	一般式(13)	H	H	t-C ₄ H ₉	H	H
781	一般式(13)	一般式(13)	CN	C ₆ H ₅ O	一般式(13)	H	H	Cl	H	H
782	一般式(13)	一般式(13)	CN	C ₆ H ₅ O	一般式(13)	H	H	F	H	H
783	一般式(13)	一般式(13)	CN	式(21)	一般式(13)	H	H	H	H	H
784	一般式(13)	一般式(13)	CN	式(21)	一般式(13)	H	H	CH ₃	H	H
785	一般式(13)	一般式(13)	CN	式(21)	一般式(13)	H	H	CH ₃ O	H	H
786	一般式(13)	一般式(13)	CN	式(21)	一般式(13)	H	H	t-C ₄ H ₉	H	H
787	一般式(13)	一般式(13)	CN	式(21)	一般式(13)	H	H	Cl	H	H
788	一般式(13)	一般式(13)	CN	式(21)	一般式(13)	H	H	F	H	H
789	一般式(13)	一般式(13)	CN	式(22)	一般式(13)	H	H	H	H	H
790	一般式(13)	一般式(13)	CN	式(22)	一般式(13)	H	H	CH ₃	H	H
791	一般式(13)	一般式(13)	CN	式(22)	一般式(13)	H	H	CH ₃ O	H	H
792	一般式(13)	一般式(13)	CN	式(22)	一般式(13)	H	H	t-C ₄ H ₉	H	H
793	一般式(13)	一般式(13)	CN	式(22)	一般式(13)	H	H	Cl	H	H
794	一般式(13)	一般式(13)	CN	式(22)	一般式(13)	H	H	F	H	H
795	一般式(13)	一般式(13)	CN	式(23)	一般式(13)	H	H	H	H	H
796	一般式(13)	一般式(13)	CN	式(23)	一般式(13)	H	H	CH ₃	H	H
797	一般式(13)	一般式(13)	CN	式(23)	一般式(13)	H	H	CH ₃ O	H	H
798	一般式(13)	一般式(13)	CN	式(23)	一般式(13)	H	H	t-C ₄ H ₉	H	H
799	一般式(13)	一般式(13)	CN	式(23)	一般式(13)	H	H	Cl	H	H
800	一般式(13)	一般式(13)	CN	式(23)	一般式(13)	H	H	F	H	H
801	一般式(13)	一般式(13)	CN	式(24)	一般式(13)	H	H	H	H	H
802	一般式(13)	一般式(13)	CN	式(24)	一般式(13)	H	H	CH ₃	H	H
803	一般式(13)	一般式(13)	CN	式(24)	一般式(13)	H	H	CH ₃ O	H	H
804	一般式(13)	一般式(13)	CN	式(24)	一般式(13)	H	H	t-C ₄ H ₉	H	H
805	一般式(13)	一般式(13)	CN	式(24)	一般式(13)	H	H	Cl	H	H
806	一般式(13)	一般式(13)	CN	式(24)	一般式(13)	H	H	F	H	H

10

20

30

【0041】

【表 5 - 1】

化合物番号	一般式(1)					一般式(14)							
	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	R ⁵²	R ⁵³	R ⁵⁴	R ⁵⁵	R ⁵⁷	R ⁵⁹	R ⁶¹	R ⁵¹ , R ⁵⁹ , R ⁶⁸ , R ⁶⁰ , R ⁶²
901	一般式(14)	一般式(14)	CN	一般式(14)	一般式(14)	H	H	H	H	H	H	H	H
902	一般式(14)	一般式(14)	CN	一般式(14)	一般式(14)	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H
903	一般式(14)	一般式(14)	CN	一般式(14)	一般式(14)	CH ₃ O	H	H	H	H	H	H	H
904	一般式(14)	一般式(14)	CN	一般式(14)	一般式(14)	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H
905	一般式(14)	一般式(14)	CN	一般式(14)	一般式(14)	H	CH ₃ O	H	H	H	H	H	H
906	一般式(14)	一般式(14)	CN	一般式(14)	一般式(14)	H	t-C ₄ H ₉	H	H	H	H	H	H
907	一般式(14)	一般式(14)	CN	一般式(14)	一般式(14)	H	Cl	H	H	H	H	H	H
908	一般式(14)	一般式(14)	CN	一般式(14)	一般式(14)	H	F	H	H	H	H	H	H
909	一般式(14)	一般式(14)	CN	一般式(14)	一般式(14)	H	H	CH ₃	H	H	H	H	H
910	一般式(14)	一般式(14)	CN	一般式(14)	一般式(14)	H	H	CH ₃ O	H	H	H	H	H
911	一般式(14)	一般式(14)	CN	一般式(14)	一般式(14)	H	H	H	CH ₃	H	H	H	H
912	一般式(14)	一般式(14)	CN	一般式(14)	一般式(14)	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H	H
913	一般式(14)	一般式(14)	CN	一般式(14)	一般式(14)	H	H	H	H	CH ₃	H	H	H
914	一般式(14)	一般式(14)	CN	一般式(14)	一般式(14)	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
915	一般式(14)	一般式(14)	CN	一般式(14)	一般式(14)	H	H	H	H	CH ₃	H	H	H
916	一般式(14)	一般式(14)	CN	一般式(14)	一般式(14)	H	H	H	H	CH ₃ O	H	H	H
917	一般式(14)	一般式(14)	CN	一般式(14)	一般式(14)	H	H	H	H	H	CH ₃	H	H
918	一般式(14)	一般式(14)	CN	一般式(14)	一般式(14)	H	H	H	H	H	H	CH ₃ O	H
919	一般式(14)	一般式(14)	CN	一般式(14)	H	H	H	H	H	H	H	H	H
920	一般式(14)	一般式(14)	CN	H	一般式(14)	H	H	H	H	H	H	H	H
921	一般式(14)	一般式(14)	CN	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
922	一般式(14)	H	CN	一般式(14)	H	H	H	H	H	H	H	H	H
923	H	一般式(14)	CN	一般式(14)	H	H	H	H	H	H	H	H	H
924	一般式(14)	H	CN	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
925	一般式(14)	一般式(14)	CN	一般式(14)	F	H	H	H	H	H	H	H	H
926	一般式(14)	一般式(14)	CN	F	一般式(14)	H	H	H	H	H	H	H	H
927	一般式(14)	一般式(14)	CN	F	F	H	H	H	H	H	H	H	H
928	一般式(14)	F	CN	一般式(14)	F	H	H	H	H	H	H	H	H
929	F	一般式(14)	CN	一般式(14)	F	H	H	H	H	H	H	H	H
930	一般式(14)	F	CN	F	F	H	H	H	H	H	H	H	H
931	一般式(14)	一般式(14)	CN	一般式(14)	OH	H	H	H	H	H	H	H	H
932	一般式(14)	一般式(14)	CN	OH	一般式(14)	H	H	H	H	H	H	H	H
933	一般式(14)	一般式(14)	CN	OH	OH	H	H	H	H	H	H	H	H
934	一般式(14)	OH	CN	一般式(14)	OH	H	H	H	H	H	H	H	H
935	OH	一般式(14)	CN	一般式(14)	OH	H	H	H	H	H	H	H	H
936	一般式(14)	OH	CN	OH	OH	H	H	H	H	H	H	H	H
937	一般式(14)	一般式(14)	CN	Cl	一般式(14)	H	H	H	H	H	H	H	H
938	一般式(14)	一般式(14)	CN	Cl	一般式(14)	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H
939	一般式(14)	一般式(14)	CN	Cl	一般式(14)	H	CH ₃ O	H	H	H	H	H	H
940	一般式(14)	一般式(14)	CN	Cl	一般式(14)	H	t-C ₄ H ₉	H	H	H	H	H	H
941	一般式(14)	一般式(14)	CN	Cl	一般式(14)	H	Cl	H	H	H	H	H	H
942	一般式(14)	一般式(14)	CN	Cl	一般式(14)	H	F	H	H	H	H	H	H
943	一般式(14)	一般式(14)	CN	F	一般式(14)	H	H	H	H	H	H	H	H
944	一般式(14)	一般式(14)	CN	F	一般式(14)	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H
945	一般式(14)	一般式(14)	CN	F	一般式(14)	H	CH ₃ O	H	H	H	H	H	H
946	一般式(14)	一般式(14)	CN	F	一般式(14)	H	t-C ₄ H ₉	H	H	H	H	H	H
947	一般式(14)	一般式(14)	CN	F	一般式(14)	H	Cl	H	H	H	H	H	H
948	一般式(14)	一般式(14)	CN	F	一般式(14)	H	F	H	H	H	H	H	H
949	一般式(14)	一般式(14)	CN	CH ₃ O	一般式(14)	H	H	H	H	H	H	H	H

10

20

30

【表 5 - 2】

950	一般式(14)	一般式(14)	CN	CH ₃ O	一般式(14)	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H
951	一般式(14)	一般式(14)	CN	CH ₃ O	一般式(14)	H	CH ₃ O	H	H	H	H	H	H	H
952	一般式(14)	一般式(14)	CN	CH ₃ O	一般式(14)	H	t-C ₄ H ₉	H	H	H	H	H	H	H
953	一般式(14)	一般式(14)	CN	CH ₃ O	一般式(14)	H	Cl	H	H	H	H	H	H	H
954	一般式(14)	一般式(14)	CN	CH ₃ O	一般式(14)	H	F	H	H	H	H	H	H	H
955	一般式(14)	一般式(14)	CN	C ₂ H ₅ O	一般式(14)	H	H	H	H	H	H	H	H	H
956	一般式(14)	一般式(14)	CN	C ₂ H ₅ O	一般式(14)	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H
957	一般式(14)	一般式(14)	CN	C ₂ H ₅ O	一般式(14)	H	CH ₃ O	H	H	H	H	H	H	H
958	一般式(14)	一般式(14)	CN	C ₂ H ₅ O	一般式(14)	H	t-C ₄ H ₉	H	H	H	H	H	H	H
959	一般式(14)	一般式(14)	CN	C ₂ H ₅ O	一般式(14)	H	Cl	H	H	H	H	H	H	H
960	一般式(14)	一般式(14)	CN	C ₂ H ₅ O	一般式(14)	H	F	H	H	H	H	H	H	H
961	一般式(14)	一般式(14)	CN	C ₆ H ₅ O	一般式(14)	H	H	H	H	H	H	H	H	H
962	一般式(14)	一般式(14)	CN	C ₆ H ₅ O	一般式(14)	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H
963	一般式(14)	一般式(14)	CN	C ₆ H ₅ O	一般式(14)	H	CH ₃ O	H	H	H	H	H	H	H
964	一般式(14)	一般式(14)	CN	C ₆ H ₅ O	一般式(14)	H	t-C ₄ H ₉	H	H	H	H	H	H	H
965	一般式(14)	一般式(14)	CN	C ₆ H ₅ O	一般式(14)	H	Cl	H	H	H	H	H	H	H
966	一般式(14)	一般式(14)	CN	C ₆ H ₅ O	一般式(14)	H	F	H	H	H	H	H	H	H
967	一般式(14)	一般式(14)	CN	式(21)	一般式(14)	H	H	H	H	H	H	H	H	H
968	一般式(14)	一般式(14)	CN	式(21)	一般式(14)	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H
969	一般式(14)	一般式(14)	CN	式(21)	一般式(14)	H	CH ₃ O	H	H	H	H	H	H	H
970	一般式(14)	一般式(14)	CN	式(21)	一般式(14)	H	t-C ₄ H ₉	H	H	H	H	H	H	H
971	一般式(14)	一般式(14)	CN	式(21)	一般式(14)	H	Cl	H	H	H	H	H	H	H
972	一般式(14)	一般式(14)	CN	式(21)	一般式(14)	H	F	H	H	H	H	H	H	H
973	一般式(14)	一般式(14)	CN	式(22)	一般式(14)	H	H	H	H	H	H	H	H	H
974	一般式(14)	一般式(14)	CN	式(22)	一般式(14)	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H
975	一般式(14)	一般式(14)	CN	式(22)	一般式(14)	H	CH ₃ O	H	H	H	H	H	H	H
976	一般式(14)	一般式(14)	CN	式(22)	一般式(14)	H	t-C ₄ H ₉	H	H	H	H	H	H	H
977	一般式(14)	一般式(14)	CN	式(22)	一般式(14)	H	Cl	H	H	H	H	H	H	H
978	一般式(14)	一般式(14)	CN	式(22)	一般式(14)	H	F	H	H	H	H	H	H	H
979	一般式(14)	一般式(14)	CN	式(23)	一般式(14)	H	H	H	H	H	H	H	H	H
980	一般式(14)	一般式(14)	CN	式(23)	一般式(14)	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H
981	一般式(14)	一般式(14)	CN	式(23)	一般式(14)	H	CH ₃ O	H	H	H	H	H	H	H
982	一般式(14)	一般式(14)	CN	式(23)	一般式(14)	H	t-C ₄ H ₉	H	H	H	H	H	H	H
983	一般式(14)	一般式(14)	CN	式(23)	一般式(14)	H	Cl	H	H	H	H	H	H	H
984	一般式(14)	一般式(14)	CN	式(23)	一般式(14)	H	F	H	H	H	H	H	H	H
985	一般式(14)	一般式(14)	CN	式(24)	一般式(14)	H	H	H	H	H	H	H	H	H
986	一般式(14)	一般式(14)	CN	式(24)	一般式(14)	H	CH ₃	H	H	H	H	H	H	H
987	一般式(14)	一般式(14)	CN	式(24)	一般式(14)	H	CH ₃ O	H	H	H	H	H	H	H
988	一般式(14)	一般式(14)	CN	式(24)	一般式(14)	H	t-C ₄ H ₉	H	H	H	H	H	H	H
989	一般式(14)	一般式(14)	CN	式(24)	一般式(14)	H	Cl	H	H	H	H	H	H	H
990	一般式(14)	一般式(14)	CN	式(24)	一般式(14)	H	F	H	H	H	H	H	H	H

【0042】

10

20

【表 6 - 1】

化合物 番号	一般式(1)					一般式(15)				
	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	R ⁷¹ ,R ⁸⁰	R ⁷² ,R ⁷⁸	R ⁷³ ,R ⁷⁸	R ⁷⁴ ,R ⁷⁷	R ⁷⁵ ,R ⁷⁶
1001	一般式(15)	一般式(15)	CN	一般式(15)	一般式(15)	H	H	H	H	H
1002	一般式(15)	一般式(15)	CN	一般式(15)	一般式(15)	H	CH ₃	H	H	H
1003	一般式(15)	一般式(15)	CN	一般式(15)	一般式(15)	H	CH ₃ O	H	H	H
1004	一般式(15)	一般式(15)	CN	一般式(15)	一般式(15)	H	C ₆ H ₅	H	H	H
1005	一般式(15)	一般式(15)	CN	一般式(15)	一般式(15)	H	CH ₃	H	CH ₃	H
1006	一般式(15)	一般式(15)	CN	一般式(15)	一般式(15)	H	CH ₃ O	H	CH ₃ O	H
1007	一般式(15)	一般式(15)	CN	一般式(15)	一般式(15)	H	C ₆ H ₅	H	C ₆ H ₅	H
1008	一般式(15)	一般式(15)	CN	一般式(15)	一般式(15)	H	H	OH ₃	H	H
1009	一般式(15)	一般式(15)	CN	一般式(15)	一般式(15)	H	H	CH ₃ O	H	H
1010	一般式(15)	一般式(15)	CN	一般式(15)	一般式(15)	H	H	t-C ₄ H ₉	H	H
1011	一般式(15)	一般式(15)	CN	一般式(15)	一般式(15)	H	H	Cl	H	H
1012	一般式(15)	一般式(15)	CN	一般式(15)	一般式(15)	H	H	F	H	H
1013	一般式(15)	一般式(15)	CN	一般式(15)	一般式(15)	H	H	C ₆ H ₅	H	H
1014	一般式(15)	一般式(15)	CN	一般式(15)	一般式(15)	H	H	p-C ₆ H ₅ -C ₆ H ₄	H	H
1015	一般式(15)	一般式(15)	CN	一般式(15)	H	H	H	H	H	H
1016	一般式(15)	一般式(15)	CN	H	一般式(15)	H	H	H	H	H
1017	一般式(15)	一般式(15)	CN	H	H	H	H	H	H	H
1018	一般式(15)	H	CN	一般式(15)	H	H	H	H	H	H
1019	H	一般式(15)	CN	一般式(15)	H	H	H	H	H	H
1020	一般式(15)	H	CN	H	H	H	H	H	H	H
1021	一般式(15)	一般式(15)	CN	一般式(15)	F	H	H	H	H	H
1022	一般式(15)	一般式(15)	CN	F	一般式(15)	H	H	H	H	H
1023	一般式(15)	一般式(15)	CN	F	F	H	H	H	H	H
1024	一般式(15)	F	CN	一般式(15)	F	H	H	H	H	H
1025	F	一般式(15)	CN	一般式(15)	F	H	H	H	H	H
1026	一般式(15)	F	CN	F	F	H	H	H	H	H
1027	一般式(15)	一般式(15)	CN	一般式(15)	OH	H	H	H	H	H
1028	一般式(15)	一般式(15)	CN	OH	一般式(15)	H	H	H	H	H
1029	一般式(15)	一般式(15)	CN	OH	OH	H	H	H	H	H
1030	一般式(15)	OH	CN	一般式(15)	OH	H	H	H	H	H
1031	OH	一般式(15)	CN	一般式(15)	OH	H	H	H	H	H
1032	一般式(15)	OH	CN	OH	OH	H	H	H	H	H
1033	一般式(15)	一般式(15)	CN	Cl	一般式(15)	H	H	H	H	H
1034	一般式(15)	一般式(15)	CN	Cl	一般式(15)	H	H	CH ₃	H	H
1035	一般式(15)	一般式(15)	CN	Cl	一般式(15)	H	H	CH ₃ O	H	H
1036	一般式(15)	一般式(15)	CN	Cl	一般式(15)	H	H	t-C ₄ H ₉	H	H
1037	一般式(15)	一般式(15)	CN	Cl	一般式(15)	H	H	Cl	H	H
1038	一般式(15)	一般式(15)	CN	Cl	一般式(15)	H	H	F	H	H
1039	一般式(15)	一般式(15)	CN	F	一般式(15)	H	H	H	H	H
1040	一般式(15)	一般式(15)	CN	F	一般式(15)	H	H	CH ₃	H	H
1041	一般式(15)	一般式(15)	CN	F	一般式(15)	H	H	CH ₃ O	H	H
1042	一般式(15)	一般式(15)	CN	F	一般式(15)	H	H	t-C ₄ H ₉	H	H
1043	一般式(15)	一般式(15)	CN	F	一般式(15)	H	H	Cl	H	H
1044	一般式(15)	一般式(15)	CN	F	一般式(15)	H	H	F	H	H
1045	一般式(15)	一般式(15)	CN	CH ₃ O	一般式(15)	H	H	H	H	H

10

20

30

【表6-2】

1046	一般式(15)	一般式(15)	CN	CH ₃ O	一般式(15)	H	H	CH ₃	H	H
1047	一般式(15)	一般式(15)	CN	CH ₃ O	一般式(15)	H	H	CH ₃ O	H	H
1048	一般式(15)	一般式(15)	CN	CH ₃ O	一般式(15)	H	H	t-C ₄ H ₉	H	H
1049	一般式(15)	一般式(15)	CN	CH ₃ O	一般式(15)	H	H	Cl	H	H
1050	一般式(15)	一般式(15)	CN	CH ₃ O	一般式(15)	H	H	F	H	H
1051	一般式(15)	一般式(15)	CN	C ₂ H ₅ O	一般式(15)	H	H	H	H	H
1052	一般式(15)	一般式(15)	CN	C ₂ H ₅ O	一般式(15)	H	H	CH ₃	H	H
1053	一般式(15)	一般式(15)	CN	C ₂ H ₅ O	一般式(15)	H	H	CH ₃ O	H	H
1054	一般式(15)	一般式(15)	CN	C ₂ H ₅ O	一般式(15)	H	H	t-C ₄ H ₉	H	H
1055	一般式(15)	一般式(15)	CN	C ₂ H ₅ O	一般式(15)	H	H	Cl	H	H
1056	一般式(15)	一般式(15)	CN	C ₂ H ₅ O	一般式(15)	H	H	F	H	H
1057	一般式(15)	一般式(15)	CN	C ₂ H ₅ O	一般式(15)	H	H	H	H	H
1058	一般式(15)	一般式(15)	CN	C ₂ H ₅ O	一般式(15)	H	H	CH ₃	H	H
1059	一般式(15)	一般式(15)	CN	C ₂ H ₅ O	一般式(15)	H	H	CH ₃ O	H	H
1060	一般式(15)	一般式(15)	CN	C ₂ H ₅ O	一般式(15)	H	H	t-C ₄ H ₉	H	H
1061	一般式(15)	一般式(15)	CN	C ₂ H ₅ O	一般式(15)	H	H	Cl	H	H
1062	一般式(15)	一般式(15)	CN	C ₂ H ₅ O	一般式(15)	H	H	F	H	H
1063	一般式(15)	一般式(15)	CN	式(21)	一般式(15)	H	H	H	H	H
1064	一般式(15)	一般式(15)	CN	式(21)	一般式(15)	H	H	CH ₃	H	H
1065	一般式(15)	一般式(15)	CN	式(21)	一般式(15)	H	H	CH ₃ O	H	H
1066	一般式(15)	一般式(15)	CN	式(21)	一般式(15)	H	H	t-C ₄ H ₉	H	H
1067	一般式(15)	一般式(15)	CN	式(21)	一般式(15)	H	H	Cl	H	H
1068	一般式(15)	一般式(15)	CN	式(21)	一般式(15)	H	H	F	H	H
1069	一般式(15)	一般式(15)	CN	式(22)	一般式(15)	H	H	H	H	H
1070	一般式(15)	一般式(15)	CN	式(22)	一般式(15)	H	H	CH ₃	H	H
1071	一般式(15)	一般式(15)	CN	式(22)	一般式(15)	H	H	CH ₃ O	H	H
1072	一般式(15)	一般式(15)	CN	式(22)	一般式(15)	H	H	t-C ₄ H ₉	H	H
1073	一般式(15)	一般式(15)	CN	式(22)	一般式(15)	H	H	Cl	H	H
1074	一般式(15)	一般式(15)	CN	式(22)	一般式(15)	H	H	F	H	H
1075	一般式(15)	一般式(15)	CN	式(23)	一般式(15)	H	H	H	H	H
1076	一般式(15)	一般式(15)	CN	式(23)	一般式(15)	H	H	CH ₃	H	H
1077	一般式(15)	一般式(15)	CN	式(23)	一般式(15)	H	H	CH ₃ O	H	H
1078	一般式(15)	一般式(15)	CN	式(23)	一般式(15)	H	H	t-C ₄ H ₉	H	H
1079	一般式(15)	一般式(15)	CN	式(23)	一般式(15)	H	H	Cl	H	H
1080	一般式(15)	一般式(15)	CN	式(23)	一般式(15)	H	H	F	H	H
1081	一般式(15)	一般式(15)	CN	式(24)	一般式(15)	H	H	H	H	H
1082	一般式(15)	一般式(15)	CN	式(24)	一般式(15)	H	H	CH ₃	H	H
1083	一般式(15)	一般式(15)	CN	式(24)	一般式(15)	H	H	CH ₃ O	H	H
1084	一般式(15)	一般式(15)	CN	式(24)	一般式(15)	H	H	t-C ₄ H ₉	H	H
1085	一般式(15)	一般式(15)	CN	式(24)	一般式(15)	H	H	Cl	H	H
1086	一般式(15)	一般式(15)	CN	式(24)	一般式(15)	H	H	F	H	H

【0043】

【表7】

化合物番号	一般式(1)					一般式(12)			
	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	R ³¹ ,R ³⁸	R ³² ,R ³⁷	R ³³ ,R ³⁶	R ³⁴ ,R ³⁵
1101	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	n-Butyl	H
1102	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	iso-Butyl	H
1103	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	n-Pentyl	H
1104	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	iso-Pentyl	H
1105	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	tert-Pentyl	H
1106	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	neo-Pentyl	H
1107	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	n-Hexyl	H
1108	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	2-Ethylhexyl	H
1109	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	n-Octyl	H
1110	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	n-Decyl	H
1111	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	n-Undecyl	H
1112	一般式(12)	CN	一般式(12)	一般式(12)	一般式(12)	H	H	n-Dodecyl	H

【0044】

以下において、一般式(1)で表される化合物のさらに別の具体例を表8~10に例示する。表8および表9における一般式(12a)と一般式(12b)は下記の通りである。また、表8および表9における「*1」は、一般式(1)のベンゼン環に結合する位置を示す。

10

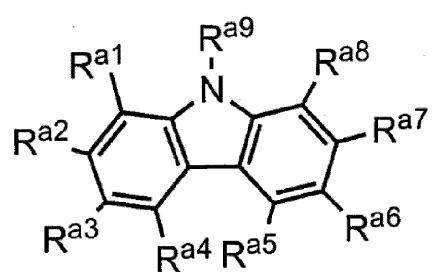
20

30

40

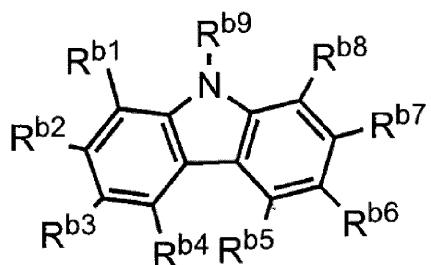
【化12】

一般式(12a)



【0 0 4 5】

一般式(12b)



【表8】

化合物番号	一般式(1)												一般式(12a)												一般式(12b)											
	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	R ^{a1}	R ^{a2}	R ^{a3}	R ^{a4}	R ^{a5}	R ^{a6}	R ^{a7}	R ^{a8}	R ^{b1}	R ^{b2}	R ^{b3}	R ^{b4}	R ^{b5}	R ^{b6}	R ^{b7}	R ^{b8}															
1233	一般式(2a)	CN	一般式(2b)	CN	一般式(2a)	H	H	H	H	H	H	*	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	H	H	*	1												
1234	一般式(2a)	CN	一般式(2b)	CN	一般式(2a)	H	H	H	H	H	H	*	H	H	tert-C ₄ H ₉	H	H	tert-C ₄ H ₉	H	H	H	H	*	1												
1235	一般式(2a)	CN	一般式(2b)	CN	一般式(2a)	H	H	H	H	H	H	*	H	H	Phenyl	H	H	Phenyl	H	H	H	H	*	1												
1236	一般式(2a)	CN	一般式(2b)	CN	一般式(2a)	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	H	Phenyl	H	H	Phenyl	H	H	H	H	*	1												
1237	Phenyl	一般式(2a)	一般式(2b)	一般式(2a)	Phenyl	H	H	H	H	H	H	*	H	H	Phenyl	H	H	Phenyl	H	H	H	H	*	1												
1238	Phenyl	一般式(2a)	一般式(2b)	一般式(2a)	Phenyl	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	H	Phenyl	H	H	Phenyl	H	H	H	H	*	1												
1239	Phenyl	一般式(2a)	一般式(2b)	一般式(2a)	Phenyl	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	*	H	H	Phenyl	H	H	Phenyl	H	H	H	*	1											
1240	Phenyl	一般式(2a)	一般式(2b)	一般式(2a)	Phenyl	H	H	tert-C ₄ H ₉	H	H	tert-C ₄ H ₉	H	H	*	H	H	H	H	H	H	H	H	H	*	1											
1241	Phenyl	一般式(2a)	一般式(2b)	一般式(2a)	Phenyl	H	H	tert-C ₄ H ₉	H	H	tert-C ₄ H ₉	H	H	*	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	H	H	*	1										
1242	Phenyl	一般式(2a)	一般式(2b)	一般式(2a)	Phenyl	H	H	tert-C ₄ H ₉	H	H	tert-C ₄ H ₉	H	H	*	H	H	Phenyl	H	H	Phenyl	H	H	H	H	*	1										
1243	Phenyl	一般式(2a)	一般式(2b)	一般式(2a)	Phenyl	H	H	Phenyl	H	H	Phenyl	H	H	*	H	H	H	H	H	H	H	H	H	*	1											
1244	Phenyl	一般式(2a)	一般式(2b)	一般式(2a)	Phenyl	H	H	Phenyl	H	H	Phenyl	H	H	*	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	H	H	*	1										
1245	一般式(2a)	Phenyl	一般式(2b)	一般式(2a)	Phenyl	H	H	H	H	H	H	*	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	H	*	1										
1246	一般式(2a)	Phenyl	一般式(2b)	一般式(2a)	Phenyl	H	H	H	H	H	H	*	H	H	tert-C ₄ H ₉	H	H	tert-C ₄ H ₉	H	H	tert-C ₄ H ₉	H	H	H	*	1										
1247	一般式(2a)	Phenyl	一般式(2b)	一般式(2a)	Phenyl	H	H	H	H	H	H	*	H	H	Phenyl	H	H	Phenyl	H	H	Phenyl	H	H	H	*	1										
1248	一般式(2a)	Phenyl	一般式(2b)	一般式(2a)	Phenyl	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	*	H	H	H	H	H	H	H	H	H	*	1											
1249	一般式(2a)	Phenyl	一般式(2b)	一般式(2a)	Phenyl	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	*	H	H	H	H	H	H	H	H	*	1												
1250	一般式(2a)	Phenyl	一般式(2b)	一般式(2a)	Phenyl	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	*	H	H	tert-C ₄ H ₉	H	H	tert-C ₄ H ₉	H	H	tert-C ₄ H ₉	H	H	*	1									
1251	一般式(2a)	Phenyl	一般式(2b)	一般式(2a)	Phenyl	H	H	tert-C ₄ H ₉	H	H	tert-C ₄ H ₉	H	H	*	H	H	H	H	H	H	H	H	H	*	1											
1252	一般式(2a)	Phenyl	一般式(2b)	一般式(2a)	Phenyl	H	H	tert-C ₄ H ₉	H	H	tert-C ₄ H ₉	H	H	*	H	H	H	H	H	H	H	H	H	*	1											
1253	一般式(2a)	Phenyl	一般式(2b)	一般式(2a)	Phenyl	H	H	tert-C ₄ H ₉	H	H	tert-C ₄ H ₉	H	H	*	H	H	Phenyl	H	H	Phenyl	H	H	H	H	*	1										
1254	一般式(2a)	Phenyl	一般式(2b)	一般式(2a)	Phenyl	H	H	Phenyl	H	H	Phenyl	H	H	*	H	H	H	H	H	H	H	H	H	*	1											
1255	一般式(2a)	Phenyl	一般式(2b)	一般式(2a)	Phenyl	H	H	Phenyl	H	H	Phenyl	H	H	*	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	H	*	1											
1256	一般式(2a)	Phenyl	一般式(2b)	一般式(2a)	Phenyl	H	H	Phenyl	H	H	Phenyl	H	H	*	H	H	H	H	H	H	H	H	H	*	1											
1257	一般式(2a)	一般式(2b)	一般式(2b)	一般式(2a)	H	H	H	H	H	H	*	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	*	1											
1258	一般式(2a)	一般式(2b)	一般式(2b)	一般式(2a)	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	*	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	*	1											
1259	一般式(2a)	一般式(2b)	一般式(2b)	一般式(2a)	H	H	tert-C ₄ H ₉	H	H	tert-C ₄ H ₉	H	H	*	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	*	1											
1260	一般式(2a)	一般式(2b)	一般式(2b)	一般式(2a)	H	H	Phenyl	H	H	Phenyl	H	H	*	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H	*	1											
1261	一般式(2a)	一般式(2b)	一般式(2b)	一般式(2a)	H	H	Phenyl	H	H	tert-C ₄ H ₉	H	H	*	H	H	H	H	H	H	H	H	H	*	1												
1262	一般式(2a)	A1	一般式(2b)	A1	一般式(2a)	H	H	H	H	H	H	*	H	H	H	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	*	1											
1263	一般式(2a)	A1	一般式(2b)	A1	一般式(2a)	H	H	H	H	H	H	*	H	H	H	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	*	1											
1264	一般式(2a)	A2	一般式(2b)	A2	一般式(2a)	H	H	H	H	H	H	*	H	H	H	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	*	1											
1265	一般式(2a)	A2	一般式(2b)	A2	一般式(2a)	H	H	H	H	H	H	*	H	H	H	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	*	1											
1266	一般式(2a)	A3	一般式(2b)	A3	一般式(2a)	H	H	H	H	H	H	*	H	H	H	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	*	1											
1267	一般式(2a)	A3	一般式(2b)	A3	一般式(2a)	H	H	H	H	H	H	*	H	H	H	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	*	1											
1268	一般式(2a)	A4	一般式(2b)	A4	一般式(2a)	H	H	H	H	H	H	*	H	H	H	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	*	1											
1269	一般式(2a)	A4	一般式(2b)	A4	一般式(2a)	H	H	H	H	H	H	*	H	H	H	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	*	1											
1270	一般式(2a)	A5	一般式(2b)	A5	一般式(2a)	H	H	H	H	H	H	*	H	H	H	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	*	1											
1271	一般式(2a)	A5	一般式(2b)	A5	一般式(2a)	H	H	H	H	H	H	*	H	H	H	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	*	1											
1272	一般式(2a)	A6	一般式(2b)	A6	一般式(2a)	H	H	H	H	H	H	*	H	H	H	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	*	1											
1273	一般式(2a)	A6	一般式(2b)	A6	一般式(2a)	H	H	H	H	H	H	*	H	H	H	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	*	1											

化合物番号	一般式(1)												一般式(12a)												一般式(12b)											
	R	R'	R''	R ³	R ⁴	R ⁵	R ⁶	R ⁷	R ⁸	R ⁹	R ¹⁰	R ¹¹	R ¹²	R ¹³	R ¹⁴	R ¹⁵	R ¹⁶	R ¹⁷	R ¹⁸	R ¹⁹	R ²⁰	R ²¹	R ²²	R ²³	R ²⁴	R ²⁵	R ²⁶	R ²⁷	R ²⁸	R ²⁹						
1274	一般式(2a)	一般式(2b)	A7	一般式(2b)	一般式(2a)	H	H	H	H	H	H	H	H	H	CH ₃	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	CH ₃	H	* 1											
1275	一般式(2a)	一般式(2b)	A7	一般式(2a)	一般式(2b)	H	H	H	H	H	H	H	H	H	CH ₃	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	CH ₃	H	* 1											
1276	一般式(2a)	一般式(2b)	A8	一般式(2b)	一般式(2a)	H	H	H	H	H	H	H	H	H	CH ₃	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	CH ₃	H	* 1											
1277	一般式(2a)	一般式(2b)	A8	一般式(2a)	一般式(2b)	H	H	H	H	H	H	H	H	H	CH ₃	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	CH ₃	H	* 1											
1278	一般式(2a)	一般式(2b)	A9	一般式(2b)	一般式(2a)	H	H	H	H	H	H	H	H	H	CH ₃	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	CH ₃	H	* 1											
1279	一般式(2a)	一般式(2b)	A9	一般式(2a)	一般式(2b)	H	H	H	H	H	H	H	H	H	CH ₃	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	CH ₃	H	* 1											
1280	一般式(2a)	一般式(2b)	A10	一般式(2b)	一般式(2a)	H	H	H	H	H	H	H	H	H	CH ₃	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	CH ₃	H	* 1											
1281	一般式(2a)	一般式(2b)	A10	一般式(2a)	一般式(2b)	H	H	H	H	H	H	H	H	H	CH ₃	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	CH ₃	H	* 1											
1282	一般式(2a)	一般式(2b)	A11	一般式(2b)	一般式(2a)	H	H	H	H	H	H	H	H	H	CH ₃	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	CH ₃	H	* 1											
1283	一般式(2a)	一般式(2b)	A11	一般式(2a)	一般式(2b)	H	H	H	H	H	H	H	H	H	CH ₃	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	CH ₃	H	* 1											
1284	一般式(2a)	一般式(2b)	A12	一般式(2b)	一般式(2a)	H	H	H	H	H	H	H	H	H	CH ₃	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	CH ₃	H	* 1											
1285	一般式(2a)	一般式(2b)	A12	一般式(2a)	一般式(2b)	H	H	H	H	H	H	H	H	H	CH ₃	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	CH ₃	H	* 1											
1286	一般式(2a)	一般式(2b)	A13	一般式(2a)	一般式(2b)	H	H	H	H	H	H	H	H	H	CH ₃	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	CH ₃	H	* 1											
1287	一般式(2a)	一般式(2b)	A13	一般式(2a)	一般式(2b)	H	H	H	H	H	H	H	H	H	CH ₃	H	CH ₃	H	CH ₃	H	H	H	CH ₃	H	* 1											

【 0 0 4 6 】

50

30

10

【表9】

化合物番号	一般式(1)					一般式(12a)								
	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	R ^{a1}	R ^{a2}	R ^{a3}	R ^{a4}	R ^{a5}	R ^{a6}	R ^{a7}	R ^{a8}	R ^{a9}
1288	一般式(2a)	D1	CN	一般式(2a)	D1	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	* 1
1289	一般式(2a)	D2	CN	一般式(2a)	D2	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	* 1
1290	一般式(2a)	D3	CN	一般式(2a)	D3	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	* 1
1291	一般式(2a)	D4	CN	一般式(2a)	D4	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	* 1
1292	一般式(2a)	D5	CN	一般式(2a)	D5	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	* 1
1293	一般式(2a)	D6	CN	一般式(2a)	D6	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	* 1
1294	一般式(2a)	D7	CN	一般式(2a)	D7	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	* 1
1295	一般式(2a)	D8	CN	一般式(2a)	D8	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	* 1
1296	一般式(2a)	D9	CN	一般式(2a)	D9	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	* 1
1297	一般式(2a)	D10	CN	一般式(2a)	D10	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	* 1
1298	一般式(2a)	D11	CN	一般式(2a)	D11	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	* 1
1299	一般式(2a)	D12	CN	一般式(2a)	D12	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	* 1
1300	一般式(2a)	D13	CN	一般式(2a)	D13	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	* 1
1301	一般式(2a)	D14	CN	一般式(2a)	D14	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	* 1
1302	一般式(2a)	D15	CN	一般式(2a)	D15	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	* 1
1303	一般式(2a)	D16	CN	一般式(2a)	D16	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	* 1
1304	一般式(2a)	D17	CN	一般式(2a)	D17	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	* 1
1305	一般式(2a)	D18	CN	一般式(2a)	D18	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	* 1
1306	一般式(2a)	D19	CN	一般式(2a)	D19	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	* 1
1307	一般式(2a)	D20	CN	一般式(2a)	D20	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	* 1
1308	一般式(2a)	D21	CN	一般式(2a)	D21	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	* 1
1309	一般式(2a)	D22	CN	一般式(2a)	D22	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	* 1
1310	一般式(2a)	D23	CN	一般式(2a)	D23	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	* 1
1311	一般式(2a)	D24	CN	一般式(2a)	D24	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	* 1
1312	一般式(2a)	D25	CN	一般式(2a)	D25	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	* 1
1313	一般式(2a)	D26	CN	一般式(2a)	D26	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	* 1
1314	一般式(2a)	D27	CN	一般式(2a)	D27	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	* 1
1315	一般式(2a)	D28	CN	一般式(2a)	D28	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	* 1
1316	一般式(2a)	D29	CN	一般式(2a)	D29	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	* 1
1317	一般式(2a)	D30	CN	一般式(2a)	D30	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	* 1
1318	一般式(2a)	D31	CN	一般式(2a)	D31	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	* 1
1319	一般式(2a)	D32	CN	一般式(2a)	D32	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	* 1
1320	一般式(2a)	D33	CN	一般式(2a)	D33	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	* 1
1321	一般式(2a)	D34	CN	一般式(2a)	D34	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	* 1
1322	一般式(2a)	D35	CN	一般式(2a)	D35	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	* 1
1323	一般式(2a)	D36	CN	一般式(2a)	D36	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	* 1
1324	一般式(2a)	D37	CN	一般式(2a)	D37	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	* 1
1325	一般式(2a)	D38	CN	一般式(2a)	D38	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	* 1
1326	一般式(2a)	D39	CN	一般式(2a)	D39	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	* 1
1327	一般式(2a)	D40	CN	一般式(2a)	D40	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	* 1
1328	一般式(2a)	D41	CN	一般式(2a)	D41	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	* 1
1329	一般式(2a)	D42	CN	一般式(2a)	D42	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	* 1

10

20

30

化合物番号	一般式(1)					一般式(12a)								
	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	R ^{a1}	R ^{a2}	R ^{a3}	R ^{a4}	R ^{a5}	R ^{a6}	R ^{a7}	R ^{a8}	R ^{a9}
1330	一般式(2a)	D43	CN	一般式(2a)	D43	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	* 1
1331	一般式(2a)	D44	CN	一般式(2a)	D44	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	* 1
1332	一般式(2a)	D45	CN	一般式(2a)	D45	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	* 1
1333	一般式(2a)	D46	CN	一般式(2a)	D46	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	* 1
1334	一般式(2a)	D47	CN	一般式(2a)	D47	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	* 1
1335	一般式(2a)	D48	CN	一般式(2a)	D48	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	* 1
1336	一般式(2a)	D49	CN	一般式(2a)	D49	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	* 1
1337	一般式(2a)	D50	CN	一般式(2a)	D50	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	* 1
1338	一般式(2a)	D51	CN	一般式(2a)	D51	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	* 1
1339	一般式(2a)	D52	CN	一般式(2a)	D52	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	* 1
1340	一般式(2a)	D53	CN	一般式(2a)	D53	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	* 1
1341	一般式(2a)	D54	CN	一般式(2a)	D54	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	* 1
1342	一般式(2a)	D55	CN	一般式(2a)	D55	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	* 1
1343	一般式(2a)	D56	CN	一般式(2a)	D56	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	* 1
1344	一般式(2a)	D57	CN	一般式(2a)	D57	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	* 1
1345	一般式(2a)	D58	CN	一般式(2a)	D58	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	* 1
1346	一般式(2a)	D59	CN	一般式(2a)	D59	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	* 1
1347	一般式(2a)	D60	CN	一般式(2a)	D60	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	* 1
1348	一般式(2a)	D24	Phenyl	D24	一般式(2a)	H	H	H	H	H	H	H	H	* 1
1349	一般式(2a)	D24	Phenyl	D24	一般式(2a)	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	* 1
1350	一般式(2a)	D24	Phenyl	D24	一般式(2a)	H	H	tert-C ₄ H ₉	H	H	tert-C ₄ H ₉	H	H	* 1
1351	一般式(2a)	D24	Phenyl	D24	一般式(2a)	H	H	Phenyl	H	H	Phenyl	H	H	* 1
1352	一般式(2a)	Phenyl	D11	Phenyl	一般式(2a)	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	* 1
1353	一般式(2a)	Phenyl	D11	Phenyl	一般式(2a)	H	H	tert-C ₄ H ₉	H	H	tert-C ₄ H ₉	H	H	* 1
1354	一般式(2a)	Phenyl	D11	Phenyl	一般式(2a)	H	H	Phenyl	H	H	Phenyl	H	H	* 1
1355	CN	D24	一般式(2a)	一般式(2a)	D24	H	H	H	H	H	H	H	H	* 1
1356	CN	D24	一般式(2a)	一般式(2a)	D24	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	* 1
1357	CN	D24	一般式(2a)	一般式(2a)	D24	H	H	tert-C ₄ H ₉	H	H	tert-C ₄ H ₉	H	H	* 1
1358	CN	D24	一般式(2a)	一般式(2a)	D24	H	H	Phenyl	H	H	Phenyl	H	H	* 1
1359	CN	一般式(2a)	D24	D24	一般式(2a)	H	H	H	H	H	H	H	H	* 1
1360	一般式(2a)	CN	D24	一般式(2a)	D24	H	H	tert-C ₄ H ₉	H	H	tert-C ₄ H ₉	H	H	* 1
1361	D24	CN	一般式(2a)	D24	一般式(2a)	H	H	tert-C ₄ H ₉	H	H	tert-C ₄ H ₉	H	H	* 1
1362	D24	一般式(2a)	CN	D24	一般式(2a)	H	H	H	H	H	H	H	H	* 1
1363	D24	一般式(2a)	CN	D24	一般式(2a)	H	H	CH ₃	H	H	CH ₃	H	H	* 1
1364	D24	一般式(2a)	CN	D24	一般式(2a)	H	H	tert-C ₄ H ₉	H	H	tert-C ₄ H ₉	H	H	* 1
1365	D24	一般式(2a)	CN	D24	一般式(2a)	H	H	Phenyl	H	H	Phenyl	H	H	* 1

【 0 0 4 7 】

【 表 1 0 】

化合物番号	一般式(1)				
	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵
1366	D11	CN	D24	D11	D24
1367	D11	D24	A7	D11	D24

【 0 0 4 8 】

表 8 ~ 1 0 中における D 1 ~ D 6 0 および A 1 ~ A 1 3 の構造を以下に示す。

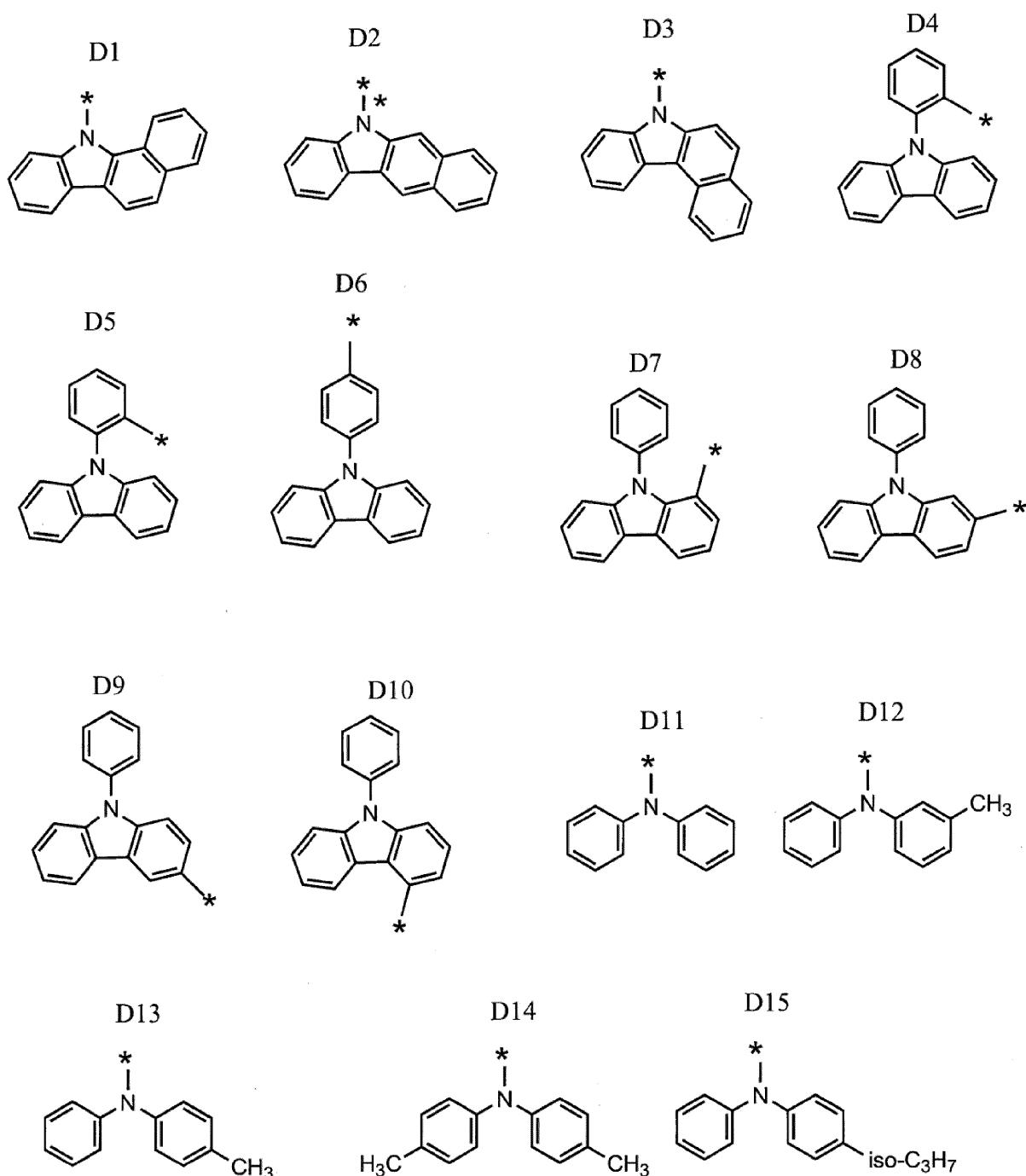
10

20

30

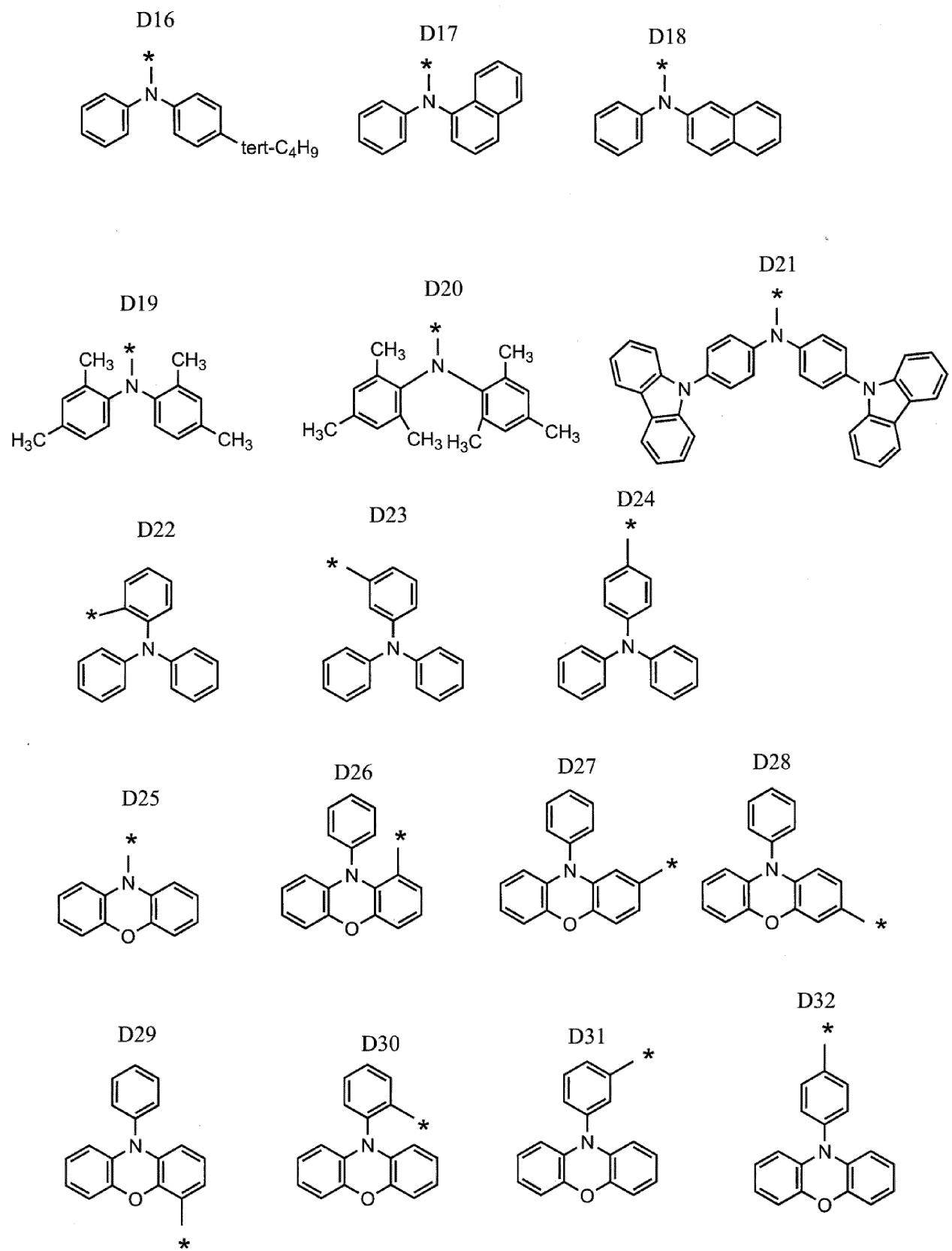
40

【化13】



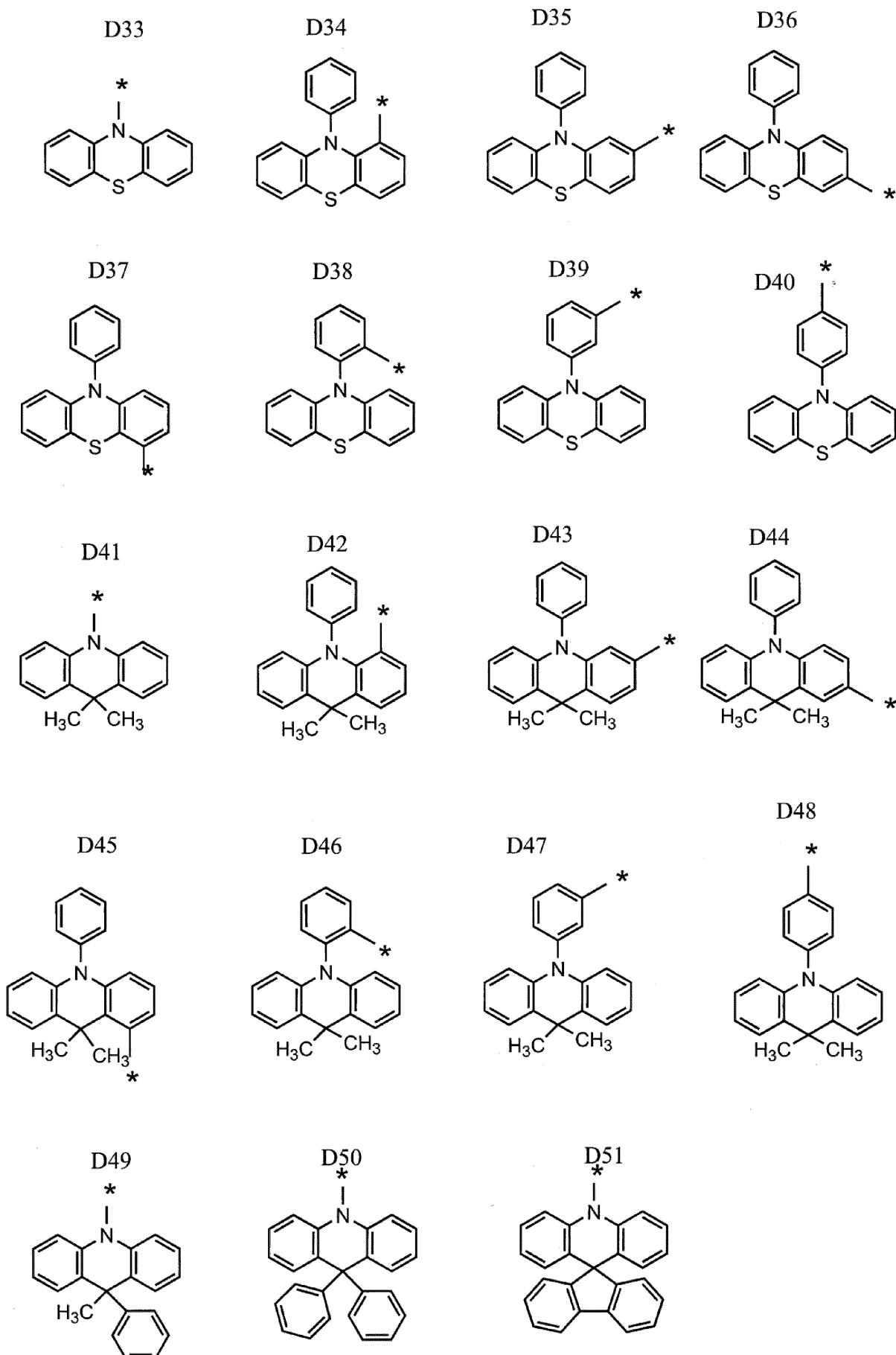
【0049】

【化14】



【0050】

【化15】

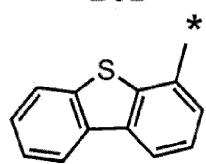


【0051】

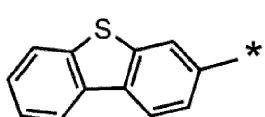
50

【化16】

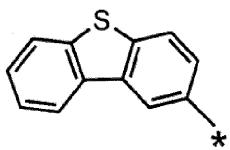
D52



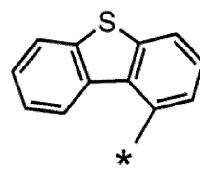
D53



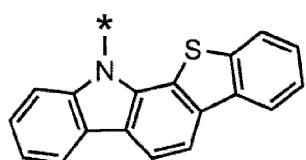
D54



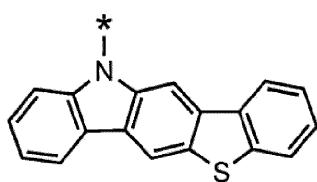
D55



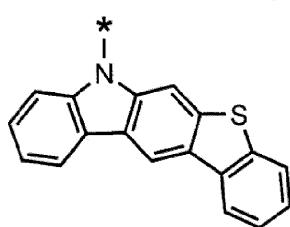
D56



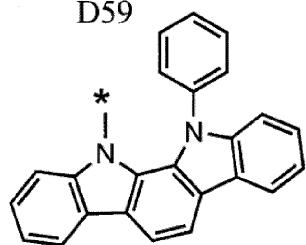
D57



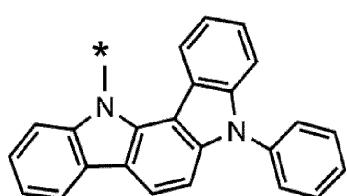
D58



D59



D60

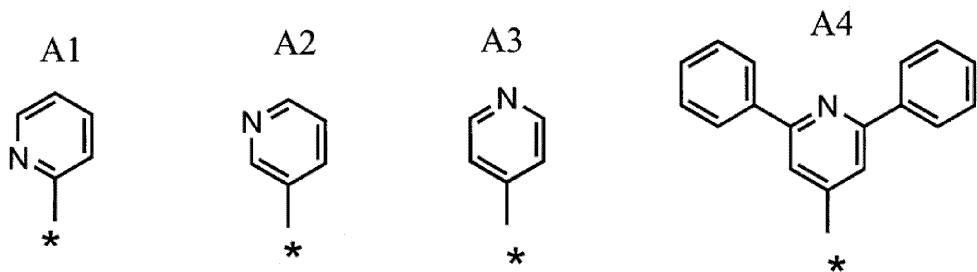


10

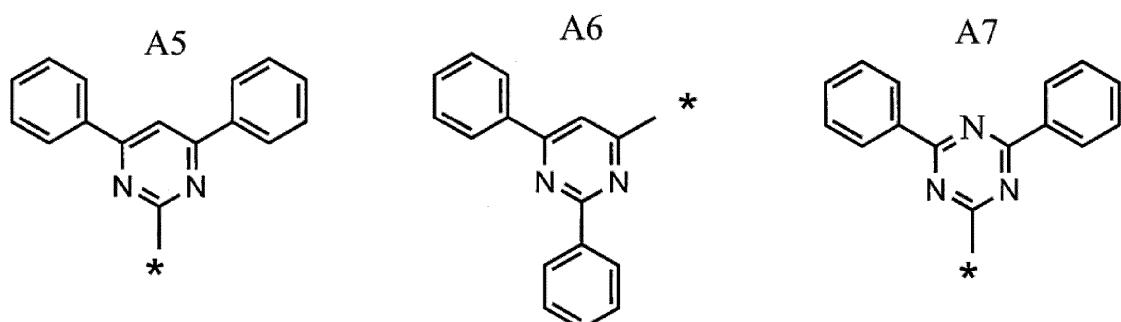
20

【0052】

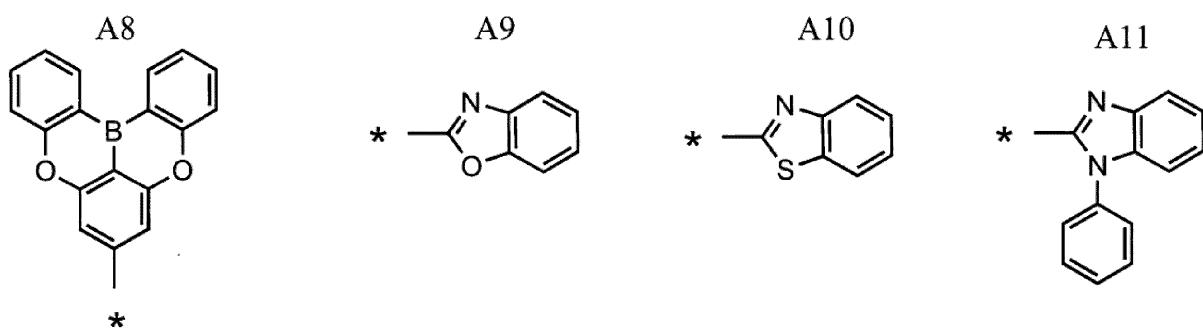
【化 1 7】



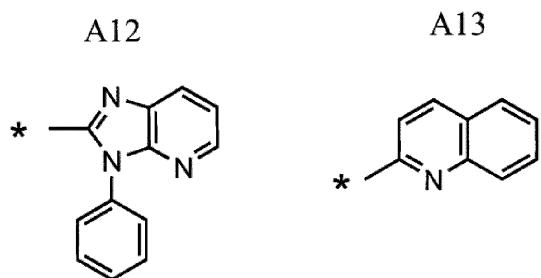
10



20



30



40

【 0 0 5 3 】

本発明で用いる E_{ST} が 0.3 eV 以下である化合物（第1化合物）、遅延蛍光を放射しうる化合物（第2化合物）、一般式（1）で表される化合物（第3化合物）を有機発光層に含むトップエミッション方式の有機EL素子では、これらの化合物が発光材料やアシストドーパントとして効果的に機能することにより、良好な発光特性を示す。特に、遅延蛍光を放射しうる第2化合物（第2化合物に包含される第1化合物および第3化合物も含む）を発光材料として用いたトップエミッション方式の有機EL素子は、以下の原理により高い発光効率を有する。

【 0 0 5 4 】

有機エレクトロルミネッセンス素子においては、正負の両電極より発光材料にキャリア

50

を注入し、励起状態の発光材料を生成し、発光させる。通常、キャリア注入型の有機エレクトロルミネッセンス素子の場合、生成した励起子のうち、励起一重項状態に励起されるのは 25 % であり、残り 75 % は励起三重項状態に励起される。従って、励起三重項状態からの発光であるリン光を利用するほうが、エネルギーの利用効率が高い。しかしながら、励起三重項状態は寿命が長いため、励起状態の飽和や励起三重項状態の励起子との相互作用によるエネルギーの失活が起こり、一般にリン光の量子収率が高くないことが多い。一方、遅延蛍光材料は、項間交差等により励起三重項状態へとエネルギーが遷移した後、三重項 - 三重項消滅あるいは熱エネルギーの吸収により、励起一重項状態に逆項間交差され蛍光を放射する。有機エレクトロルミネッセンス素子においては、なかでも熱エネルギーの吸収による熱活性化型の遅延蛍光材料が特に有用であると考えられる。有機エレクトロルミネッセンス素子に遅延蛍光材料を利用した場合、励起一重項状態の励起子は通常通り蛍光を放射する。一方、励起三重項状態の励起子は、デバイスが発する熱を吸収して励起一重項へ項間交差され蛍光を放射する。このとき、励起一重項からの発光であるため蛍光と同波長での発光でありながら、励起三重項状態から励起一重項状態への逆項間交差により、生じる光の寿命（発光寿命）は通常の蛍光やりん光よりも長くなるため、これらよりも遅延した蛍光として観察される。これを遅延蛍光として定義できる。このような熱活性化型の励起子移動機構を用いれば、キャリア注入後に熱エネルギーの吸収を経ることにより、通常は 25 % しか生成しなかった励起一重項状態の化合物の比率を 25 % 以上に引き上げることが可能となる。100 未満の低い温度でも強い蛍光および遅延蛍光を発する化合物を用いれば、デバイスの熱で充分に励起三重項状態から励起一重項状態への項間交差が生じて遅延蛍光を放射するため、発光効率を飛躍的に向上させることができる。

10

20

30

40

50

【0055】

また、アシストドーパントは、有機発光層が含む化合物のうち、アシストドーパントである化合物とは別の化合物（発光材料）の発光をアシストして、素子の発光効率を高くするように作用するものであり、本発明で用いる第 1 化合物～第 3 化合物は、こうしたアシストドーパントとしても効果的に機能する。中でも、励起三重項状態から励起一重項状態への逆項間交差を生じうる化合物であって、有機発光層に含まれるホスト材料の最低励起一重項エネルギー準位と発光材料の最低励起一重項エネルギー準位の間の最低励起一重項エネルギー準位を有するものは、その基底状態から直接遷移した励起一重項状態のエネルギーとともに逆項間交差による励起一重項エネルギーを発光材料へ効率よく移動させることができ、発光材料の発光を効果的にアシストすることができる。

【0056】

<トップエミッション方式の有機 EL 素子の層構成>

次に、本発明の有機 EL 素子の層構成について説明する。

本発明の有機 EL 素子は、少なくとも基板、第 1 電極、有機発光層および第 2 電極がこの順に積層されて構成されており、基板と反対側（第 2 電極側）の面から光を放出するトップエミッション方式の有機 EL 素子である。トップエミッション方式は「膜面発光タイプ」とも称されており、その構成については、例えばアプライド・フィジカル・レターの第 65 巻、2636 - 2638 頁（1994）（Appl. Phys. Lett., 65, 2636-2638 (1994)）も参照することができる。なお、以下の説明では、[/] を層同士の境界を示す記号として、層構成を表すこととする。例えば、基板、第 1 電極、有機発光層および第 2 電極がこの順に積層された構成の場合には、基板 / 第 1 電極 / 有機発光層 / 第 2 電極と表示する。ここで、第 2 電極は透明であり、第 1 電極は透明、不透明のいずれであってもよい。第 1 電極および第 2 電極は、いずれか一方が陽極として機能し、他方が陰極として機能する。ここで、第 1 電極および第 2 電極の両方が透明で、基板も透明である場合、有機 EL 素子は基板側の面と基板と反対側の面の両方から光を放出する。本発明のトップエミッション方式の有機 EL 素子は、基板と反対側の面からのみ光を放出する片面発光タイプの有機 EL 素子の他に、こうした両面発光タイプの有機 EL 素子も含むこととする。両面発光タイプの有機 EL 素子は、外光が厚さ方向に通過してもよい。この場合、有機 EL 素子の基板と反対側にいる観察者は、有機 EL 素子を通して基板側の景色を視認することができる。

。

有機発光層は、 E_{ST} が0.3eV以下である化合物（第1化合物）、遅延蛍光を放射しうる化合物（第2化合物）、一般式(1)で表される化合物（第3化合物）の少なくとも1種を含有する。第1電極と第2電極の間には、有機発光層の他に、1層以上の機能層が設けられていてもよい。そのような他の機能層として、正孔注入層、正孔輸送層、電子阻止層、正孔阻止層、電子輸送層、電子注入層等を挙げることができる。

以下において、具体的な有機EL素子の構造例について説明する。なお、以下の説明では、第1電極と第2電極の間の層を「中間層」という。

【0057】

[有機EL素子の第1実施形態]

第1実施形態の有機EL素子は、第1電極が陽極、第2電極が陰極として機能するものである。この有機EL素子の好ましい具体例(a-i)~(a-viii)を以下に挙げる。以下の具体例における各層は、陽極が基板側になり、陰極が最上層になるように、陽極から順に基板上に形成されている。ここで、正孔輸送層は電子阻止層の機能を兼ねていてもよい。また、正孔輸送層とは別に、正孔輸送層と有機発光層の間に電子阻止層が形成されていてもよい。

【0058】

- (a-i) 陽極 / 有機発光層 / 電子輸送層 / 電子注入層 / 陰極
- (a-ii) 陽極 / 正孔輸送層 / 有機発光層 / 電子輸送層 / 電子注入層 / 陰極
- (a-iii) 陽極 / 正孔輸送層 / 有機発光層 / 正孔阻止層 / 電子輸送層 / 電子注入層 / 陰極
- (a-iv) 陽極 / 正孔注入層 / 正孔輸送層 / 有機発光層 / 電子輸送層 / 電子注入層 / 陰極
- (a-v) 陽極 / 有機発光層 / 電子輸送層 / 電子注入層 / 透明保護層 / 陰極
- (a-vi) 陽極 / 正孔輸送層 / 有機発光層 / 電子輸送層 / 電子注入層 / 透明保護層 / 陰極
- (a-vii) 陽極 / 正孔輸送層 / 有機発光層 / 正孔阻止層 / 電子輸送層 / 電子注入層 / 透明保護層 / 陰極
- (a-viii) 陽極 / 正孔注入層 / 正孔輸送層 / 有機発光層 / 電子輸送層 / 電子注入層 / 透明保護層 / 陰極

代表例として、(a-vii)の層構成を有する有機EL素子を図1に示す。図1において、1は基板、2aは陽極、3は正孔注入層、4は正孔輸送層、5は有機発光層、6は電子輸送層、7は電子注入層、8は透明保護層、9は透明導電層(陰極)を表す。

以下、有機EL素子を構成する各層について説明する。

【0059】

(陰極)

陰極の材料には、インジウム錫酸化物(ITO)、インジウム亜鉛酸化物(IZO)、 SnO_2 、 ZnO 、 In_2O_3 等の透明導電性材料が用いられる。また、 IDIXO (In_2O_3 - ZnO)等の非晶質透明導電膜を形成しうる材料を用いてもよい。陰極に用いる透明導電性層のシート抵抗は数百/ Ω 以下であることが好ましい。陰極の厚さは、材料によっても異なるが、通常10~1000nm、好ましくは50~200nm、特に好ましくは100nmである。

【0060】

(陽極)

陽極の材料には、例えはAg、Mg、Al、Pt、Pd、Au、Ni、Nd、Ir、Cr、Li、Ca、LiF/Ca、LiF/Al等の金属またはその合金が用いられる。陽極は、これらの金属または合金を薄く蒸着することにより形成することができる。また、陰極の欄で例示した透明導電性材料を陽極の材料に用いてもよい。陽極の厚さは、材料によっても異なるが、通常10~1000nm、好ましくは10~200nmである。

【0061】

(有機発光層)

有機発光層は、陽極および陰極のそれぞれから注入された正孔および電子が再結合することにより励起子が生成した後、発光する層であり、 E_{ST} が0.3eV以下である化合

10

20

30

40

50

物（第1化合物）に包含される化合物群、遅延蛍光を放射しうる化合物（第2化合物）に包含される化合物群、および一般式（1）で表される化合物に包含される化合物群のうちの1種または2種以上を含有する。これらの化合物は、発光材料として有機発光層に含有されていてもよいし、アシストドーパントとして有機発光層に含有されていてもよい。また、有機発光層が、これらの化合物のうちの2種以上を含有する場合、その2種以上の化合物は、全てが第1化合物に包含される化合物であってもよいし、全てが第2化合物に包含される化合物であってもよいし、全てが第3化合物に包含される化合物であってもよい。また、有機発光層は、第1化合物～第3化合物のうちの2種以上の組み合わせを含んでいてもよい。

【0062】

10

第1化合物～第3化合物を発光材料として用いる場合、本発明の有機EL素子が高い発光効率を発現するためには、その発光材料に生成した一重項励起子および三重項励起子を、発光材料中に閉じ込めることが重要である。従って、発光層中に発光材料に加えてホスト材料を用いることが好ましい。ホスト材料としては、励起一重項エネルギー、励起三重項エネルギーの少なくとも何れか一方が本発明の発光材料よりも高い値を有する有機化合物を用いることができる。その結果、本発明の発光材料に生成した一重項励起子および三重項励起子を、発光材料の分子中に閉じ込めることが可能となり、その発光効率を十分に引き出すことが可能となる。もっとも、一重項励起子および三重項励起子を十分に閉じ込めることができなくとも、高い発光効率を得ることが可能な場合もあるため、高い発光効率を実現しうるホスト材料であれば特に制約なく本発明に用いることができる。本発明の有機EL素子において、発光は発光層に含まれる発光材料から生じる。この発光は蛍光発光および遅延蛍光発光の両方を含む。但し、発光の一部或いは部分的にホスト材料からの発光があってもかまわない。

20

ホスト材料を用いる場合、発光材料である第1化合物～第3化合物が発光層中に含有される量は0.1重量%以上であることが好ましく、1重量%以上であることがより好ましく、また、50重量%以下であることが好ましく、20重量%以下であることがより好ましく、10重量%以下であることがさらに好ましい。ここで、第1化合物～第3化合物のうちの2種以上を併用する場合には、それらの合計量を上記の含有量の範囲とすることが好ましい。

【0063】

30

また、第1化合物～第3化合物をアシストドーパントとして用いる場合、有機発光層は、ホスト材料、アシストドーパントおよび発光材料により構成する。ここで、ホスト材料にはアシストドーパントよりも最低励起一重項エネルギー準位が高いものを用い、発光材料にはアシストドーパントよりも最低励起一重項エネルギー準位が低いものを用いることが好ましい。さらに、発光材料は、励起一重項状態からの放射失活により発光するもの、すなわち、蛍光材料や遅延蛍光材料であることが好ましい。これにより、アシストドーパントにおいて、基底状態から直接遷移することで生成した励起一重項状態のエネルギーおよび逆項間交差による励起一重項エネルギーが発光材料へ効率よく移動して、発光材料の発光を効果的にアシストすることができる。

40

ホスト材料、アシストドーパントおよび発光材料で発光層を構成する場合、アシストドーパントである第1化合物～第3化合物の含有量はホスト材料の含有量よりも小さいことが好ましい。具体的には、ホスト材料の含有量W1とアシストドーパントの含有量W2と発光材料の含有量W3の合計重量を100重量%としたとき、ホスト材料の含有量W1は15重量%以上、99.9重量%以下であることが好ましく、アシストドーパントの含有量W2は5.0重量%以上、50重量%以下であることが好ましく、発光材料の含有量W3は0.5重量%以上、5.0重量%以下であることが好ましい。ここで、第1化合物～第3化合物のうちの2種以上を併用する場合、それらの合計量を上記の含有量の範囲にすることが好ましい。

【0064】

ここで、第1化合物～第3化合物を発光材料として用いる場合およびアシストドーパン

50

トとして用いる場合のいずれにおいても、有機発光層に用いるホスト材料は、正孔輸送能、電子輸送能を有し、かつ発光の長波長化を防ぎ、なおかつ高いガラス転移温度を有する有機化合物であることが好ましい。

【0065】

(電子注入層)

電子注入層は、陰極と中間層の間のキャリア注入障壁を低くして、素子の駆動電圧を低下させる機能を有する。

電子注入層には、LiFやLi₂Oを0.3~1.0nm、好ましくは0.5nmの厚さに形成した薄膜、またはLi、Ca、Mg、Srなどのアルカリ金属またはアルカリ土類金属を10~50nm、好ましくは20nmの厚さに形成した薄膜等を用いることができる。10

また、電子注入層は多層構成であってもよい。多層構成の電子注入層として、例えば、Alからなる第1電子注入層と、Ti、In、Sn、Zn若しくはその合金からなる第2電子注入層の2層よりなり、第1電子注入層が有機発光層側、第2電子注入層が陰極側に配されたものを挙げることができる。この電子注入層は、第1電子注入層の窒化物のバンドギャップに対して、第2電子注入層の窒化物のバンドギャップが狭いという特徴を有し、製造工程で電子注入層が窒素雰囲気に晒されても、電子注入層の機能が劣化せず、駆動電圧を低く抑えることができる。

【0066】

(正孔注入層)

正孔注入層は、陽極と中間層の間のキャリア注入障壁を低くして、素子の駆動電圧を低下させる機能を有する。

正孔注入層の材料には、銅フタロシアニン(CuPc: copper phthalocyanine)等を用いることができる。正孔注入層の厚さは、特に制限されないが、好ましくは10~30nmである。20

【0067】

(電子輸送層)

電子輸送層は、電子を輸送する機能を有する電子輸送材料からなる。

電子輸送材料としては、トリス-8-ヒドロキシキノリンアルミニウム(Alq3)等を挙げることができる。電子輸送層の厚さは、特に制限されないが、好ましくは30~60nmである。また、電子輸送層は多層構成とすることも好ましい。30

【0068】

(正孔輸送層)

正孔輸送層は、正孔を輸送する機能を有する正孔輸送材料からなり、単層であっても多層構成であってもよい。

正孔輸送材料としては、N,N'-ジフェニル-N,N'-ビス(3-メチルフェニル)- (1-1'-ビフェニル)4-4'-ジアミン(TPD:N,N'-diphenyl-N,N'-bis(3-methylphenyl)- (1-1'-biphenyl)4,4'-diamine)、4-4'-ビス[N-(1-ナフチル)]-N-フェニル-アミノ]ビフェニル(NPD:4,4'-bis[N-(1-naphthyl)-N-phenyl-amino]biphenyl)、N,N-ジ(ナフタレン-1-イル)-N,N'-ジフェニル-ベンジジン(NPB)等を挙げることができる。また、正孔輸送材料として、ポリエチレンジヒドロキシチオフェン(PEDOT:poly-(2,4)-ethylene-dihydroxythiophene)、ポリアニリン(PANI)、ポリフェニレンビニレン(PPV:Poly-Phenylenevinylene)系高分子、ポリフルオレン系高分子等の高分子有機化合物も用いることができる。これらの高分子化合物は、インクジェットプリントティング法、スピンドーティング法、レーザーを利用した熱転写法等により陽極上に成膜することができる。正孔輸送層の厚さは、特に制限されないが、好ましくは30~60nmである。正孔輸送層は多層構成とすることも好ましい。4050

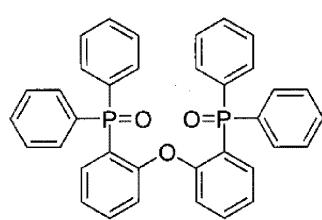
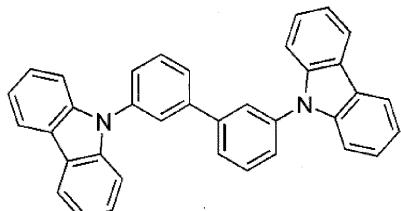
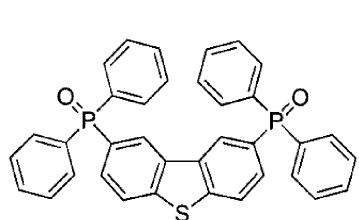
【0069】

以下において、ホスト材料、正孔注入材料、正孔輸送材料、電子阻止材料、正孔阻止材料、電子輸送材料、電子注入材料として採用することができる材料の構造を例示する。

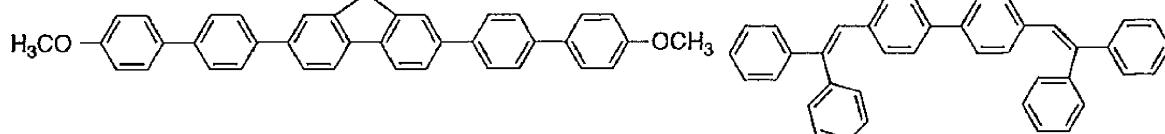
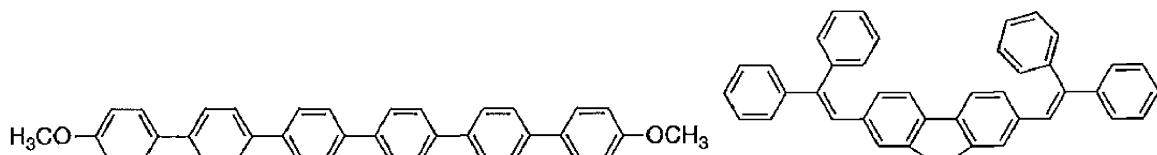
【0070】

まず、発光層のホスト材料として用いることができる化合物例を挙げる。

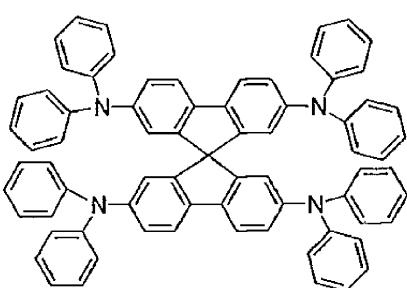
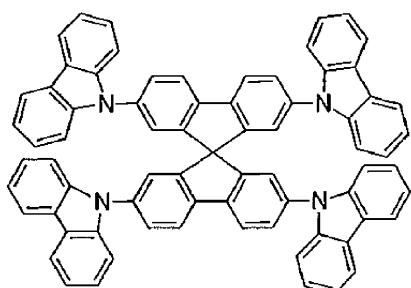
【化18】



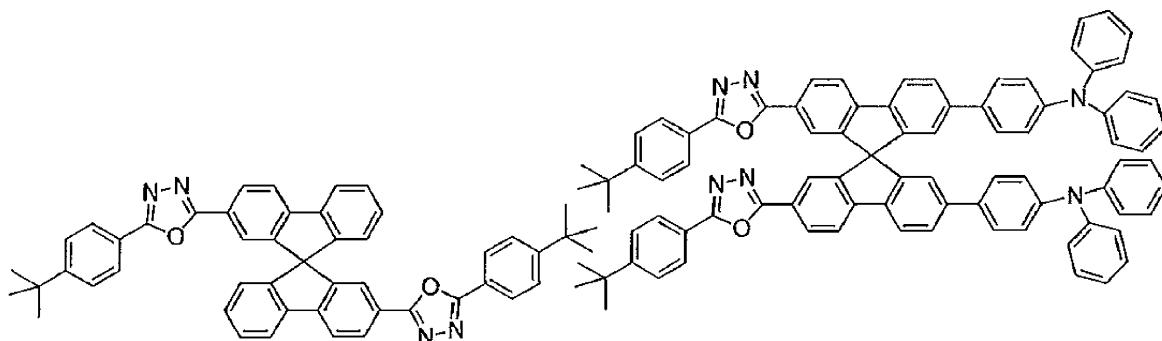
10



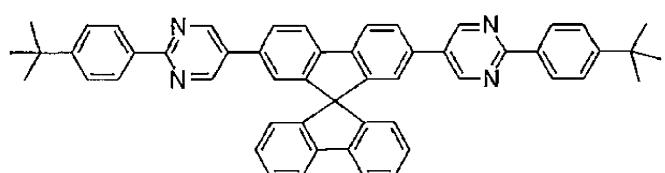
20



30



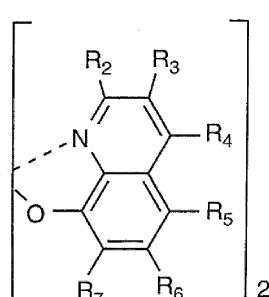
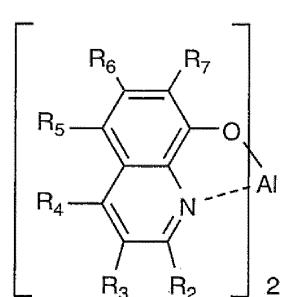
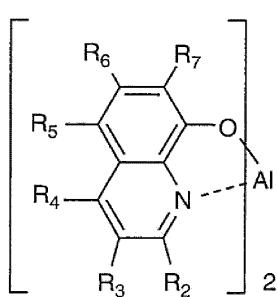
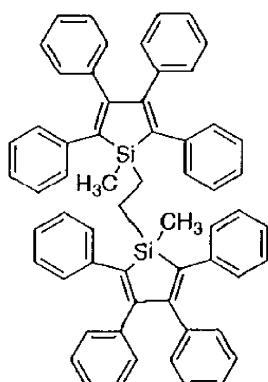
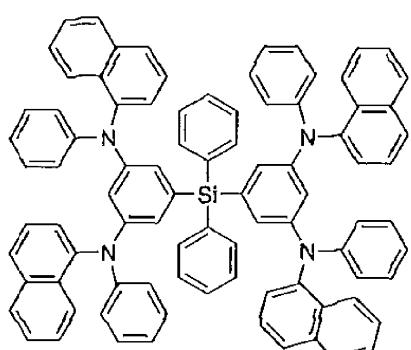
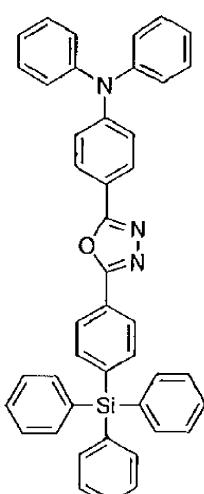
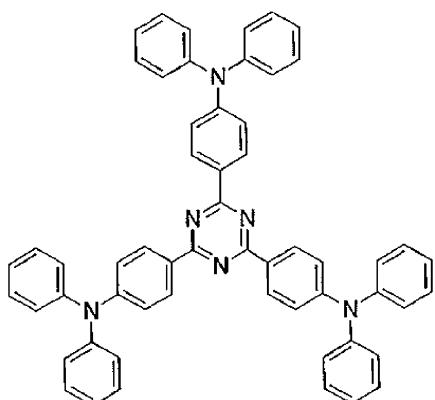
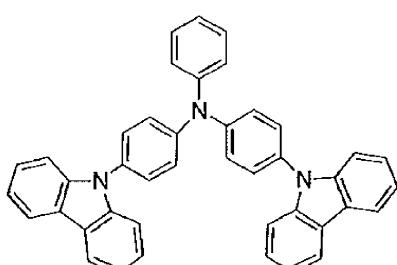
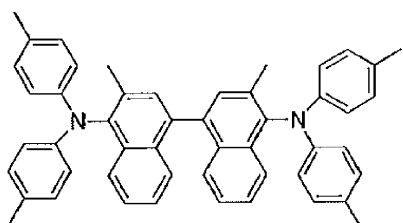
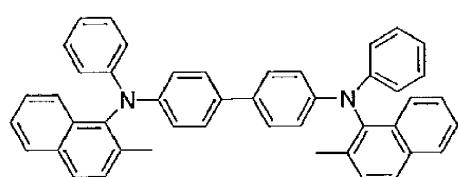
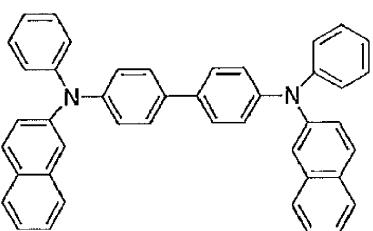
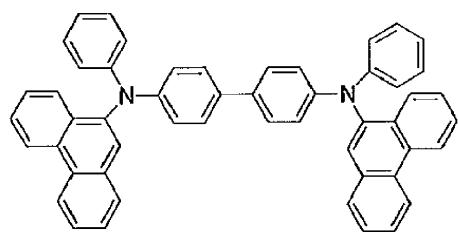
40



50

【0 0 7 1】

【化 19】



$R_2 - R_7 = H$ or substituent
 $L = \text{ligand}$

10

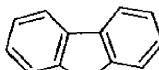
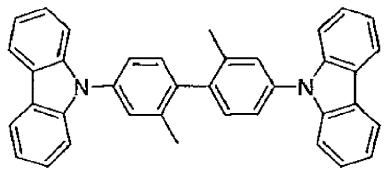
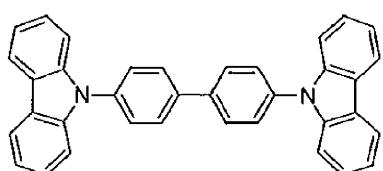
20

30

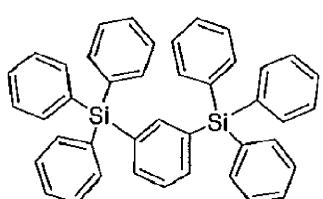
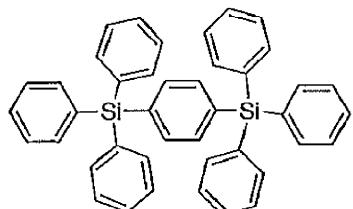
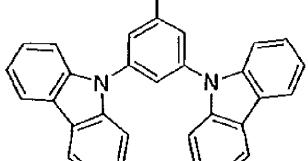
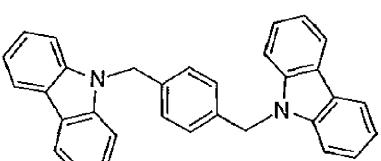
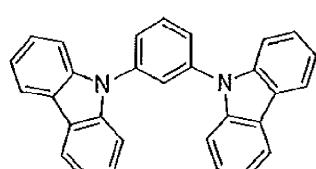
40

50

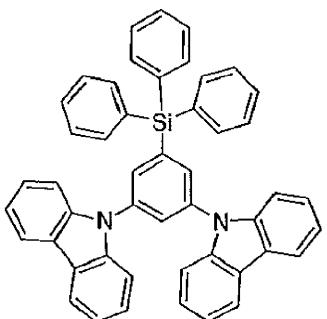
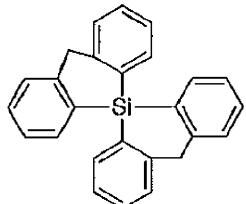
【 0 0 7 2 】
【 化 2 0 】



10



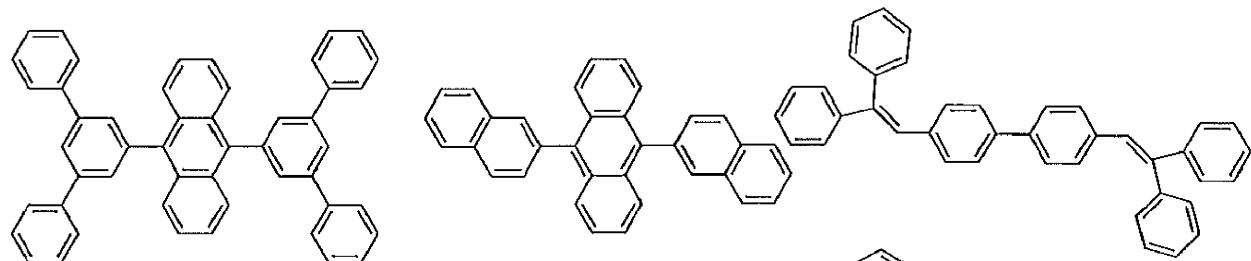
20



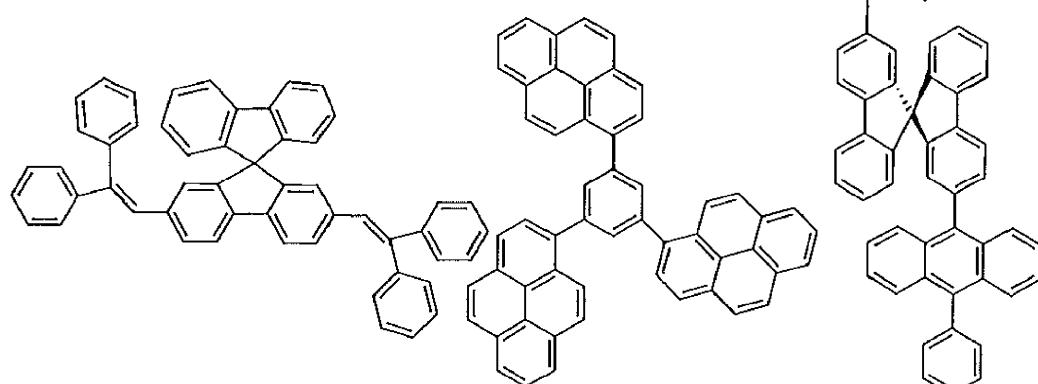
30

【 0 0 7 3 】

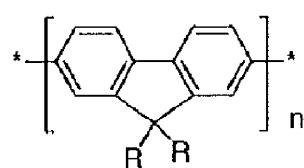
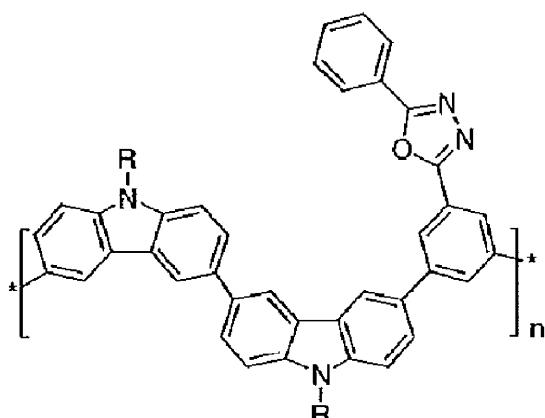
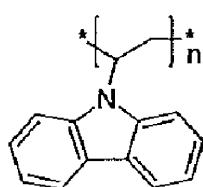
【化 2 1】



10

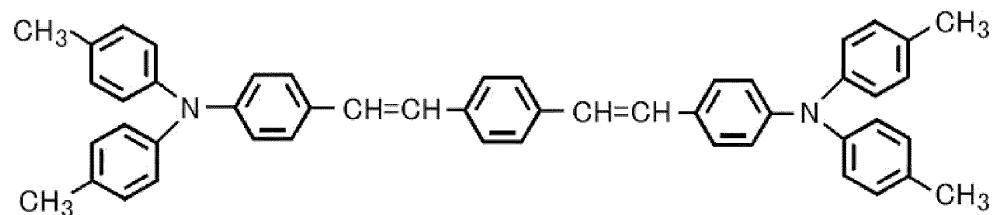
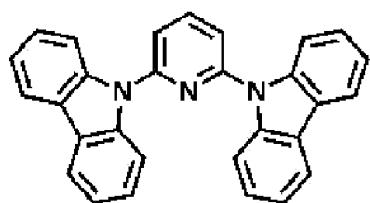
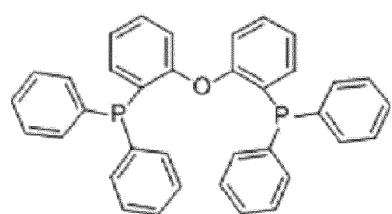


20

 $R = \text{alkyl, aryl}$  $R = \text{alkyl, aryl}$

【 0 0 7 4 】

【化22】



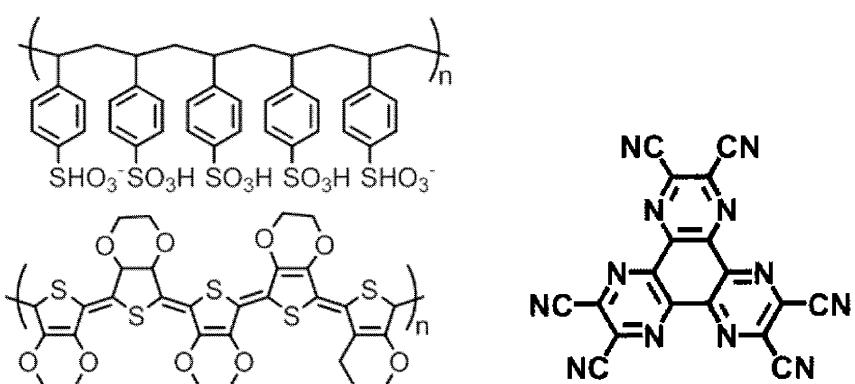
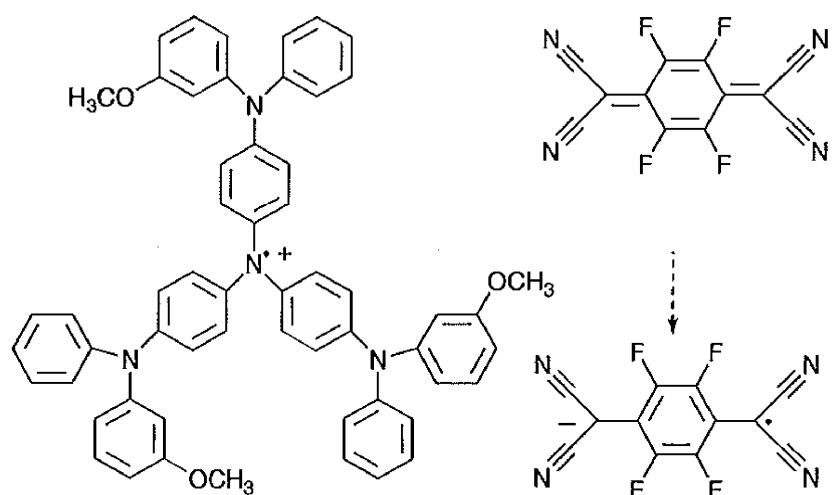
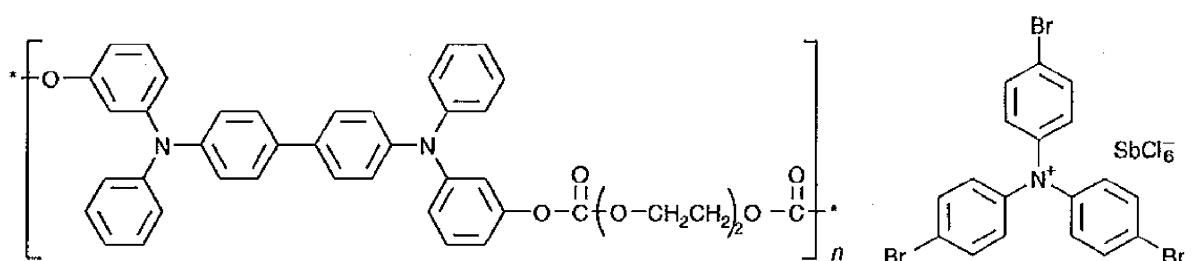
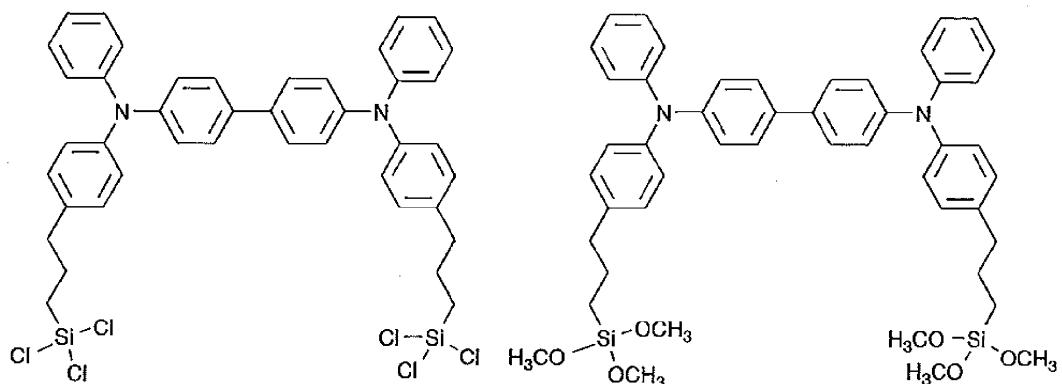
10

【0075】

次に、正孔注入材料として用いることができる化合物例を挙げる。

【0076】

【化23】

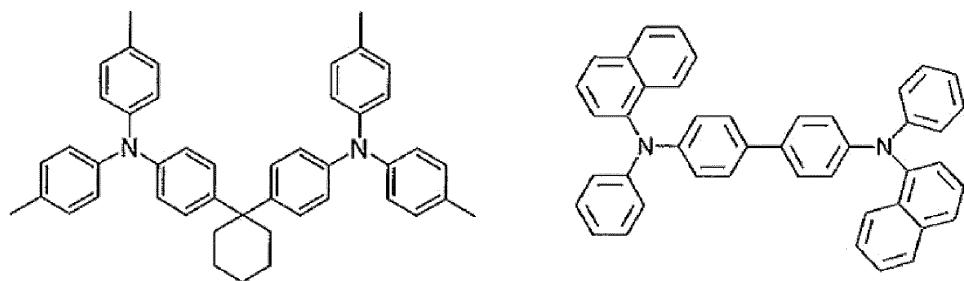


【0077】

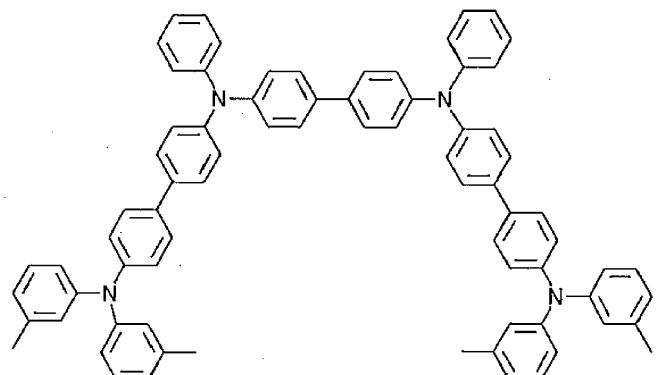
次に、正孔輸送材料として用いることができる化合物例を挙げる。

【0078】

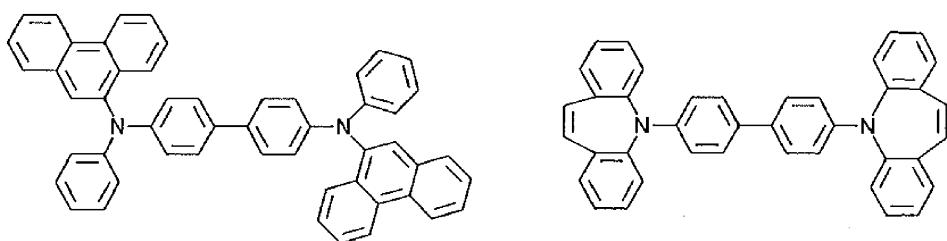
【化 2 4】



10



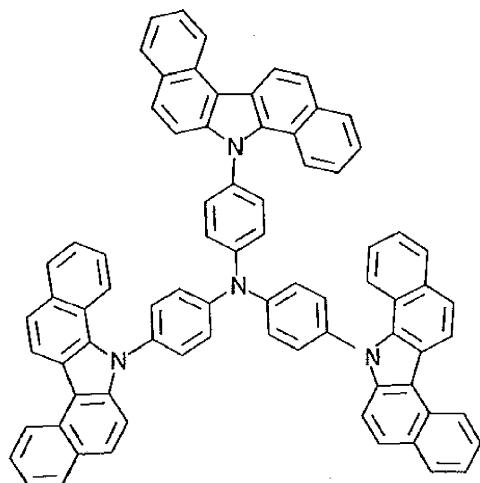
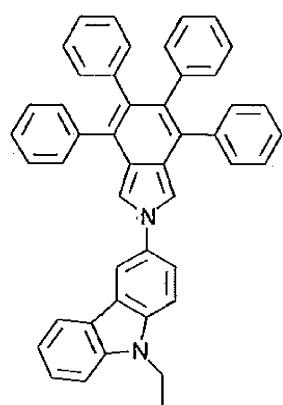
20



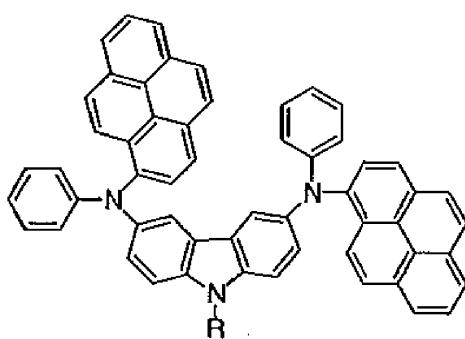
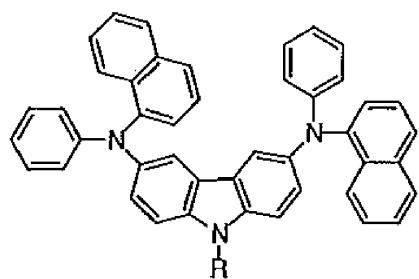
【0 0 7 9】

30

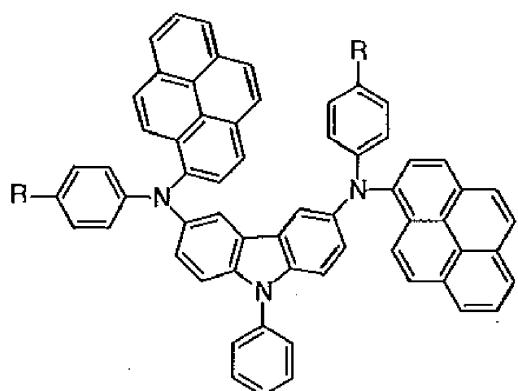
【化 2 5】



10

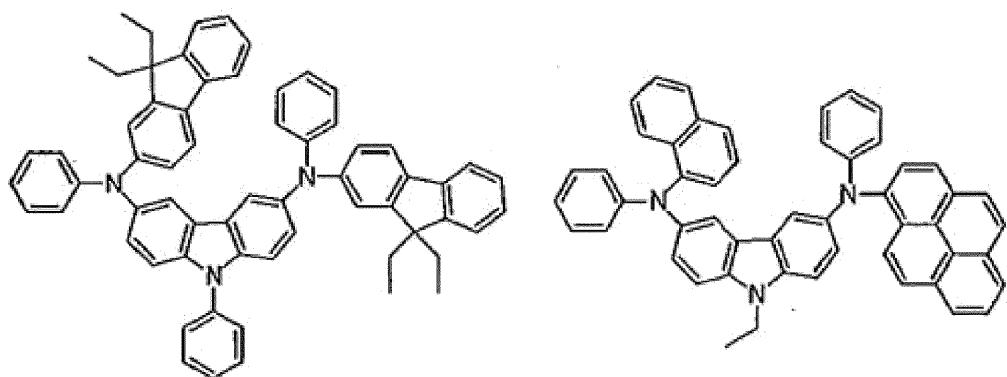


20

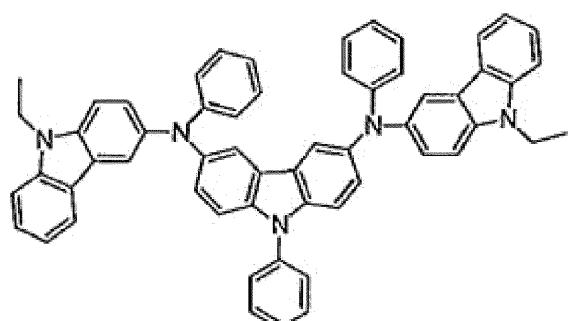


R = alkyl, aryl, alkoxy, aryloxy,
9,9'-dialkylfluorene

30



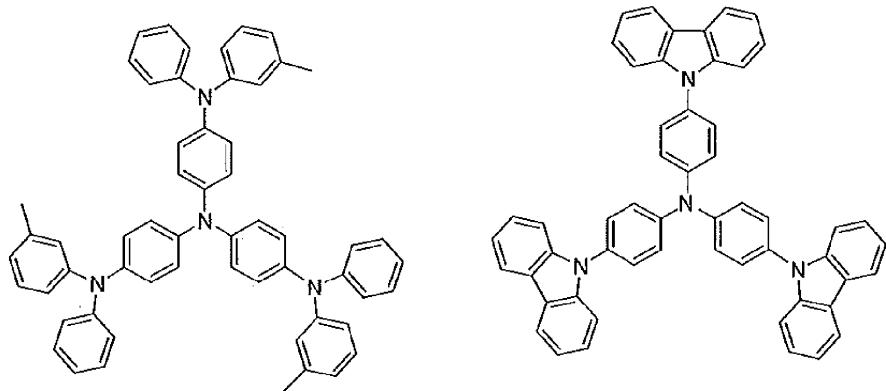
10



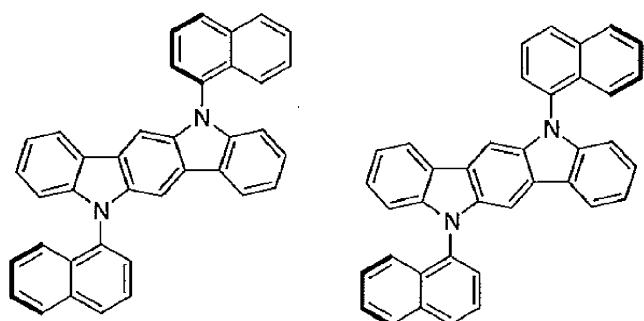
20

【 0 0 8 0 】

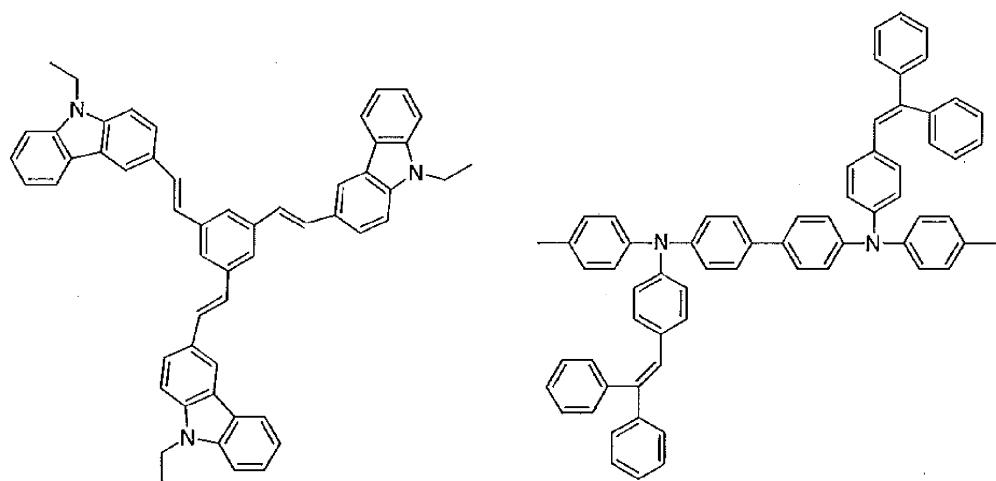
【化 2 6】



10



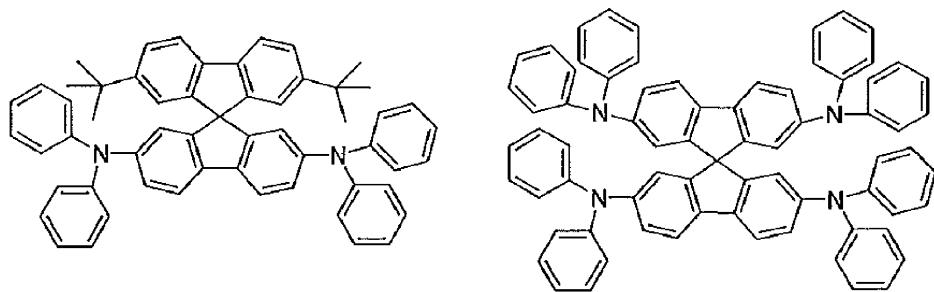
20



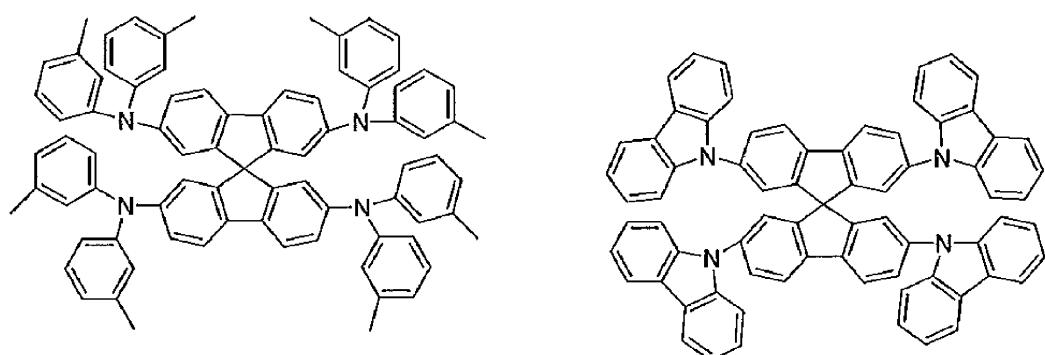
30

【 0 0 8 1 】

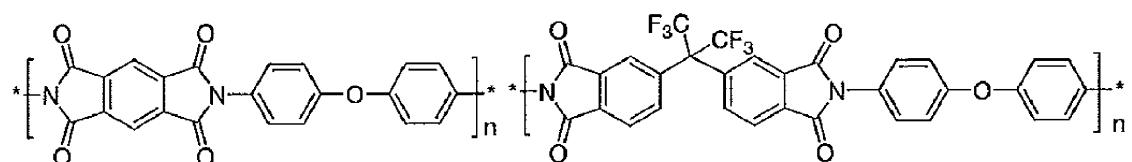
【化 2 7】



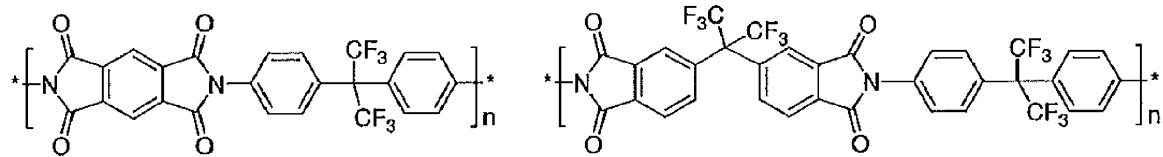
10



20

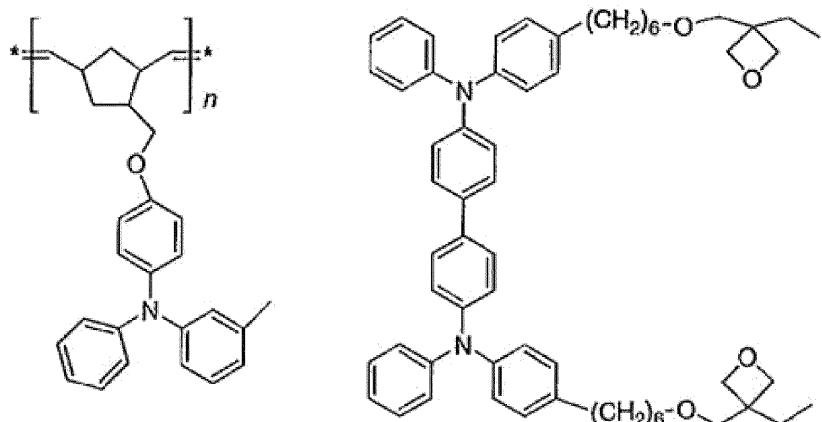


30

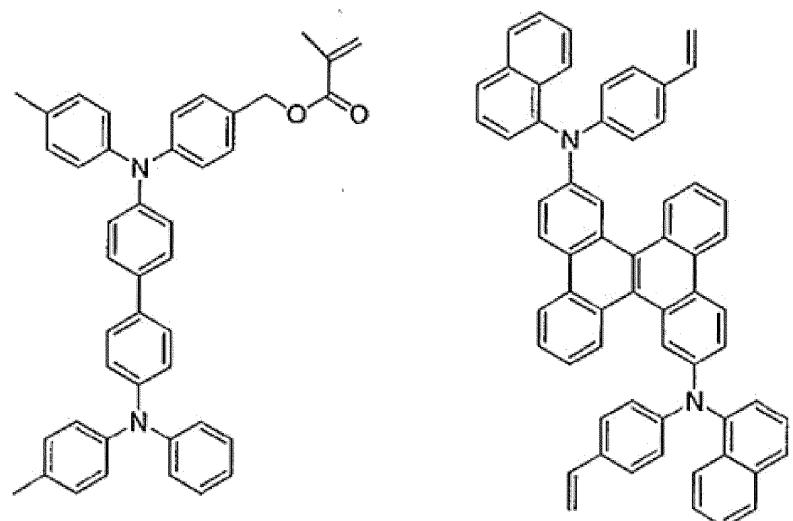


【 0 0 8 2 】

【化 2 8】



10

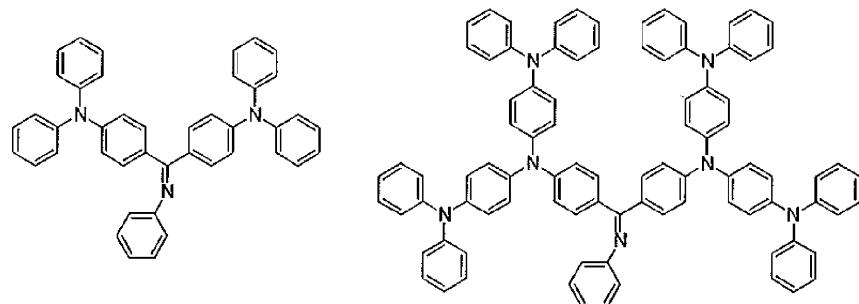


20

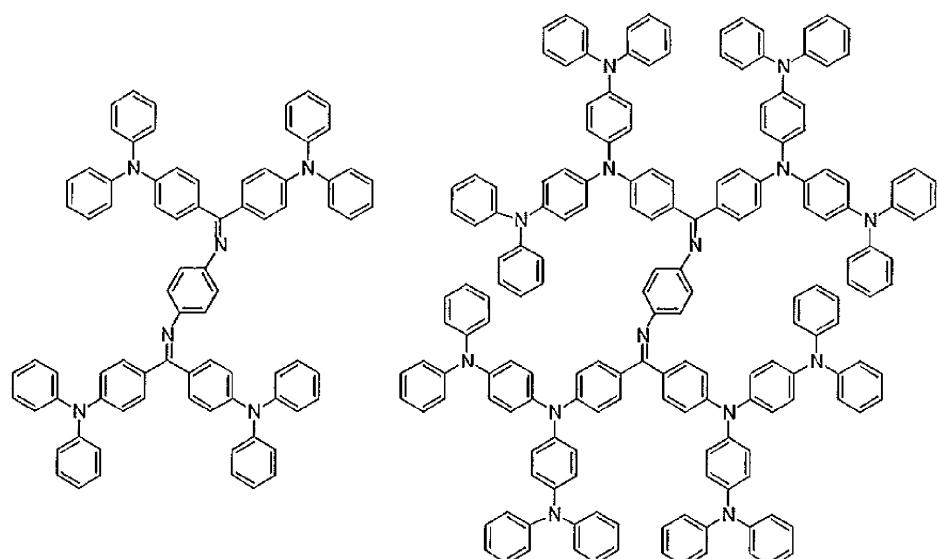
【0 0 8 3】

30

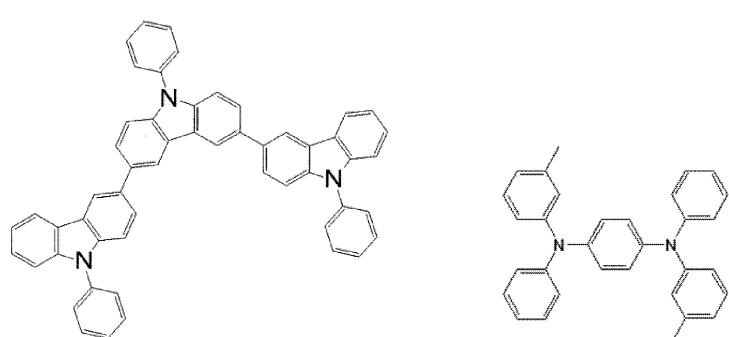
【化29】



10



20



30

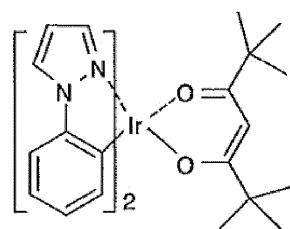
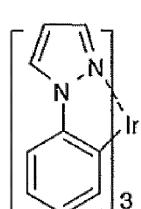
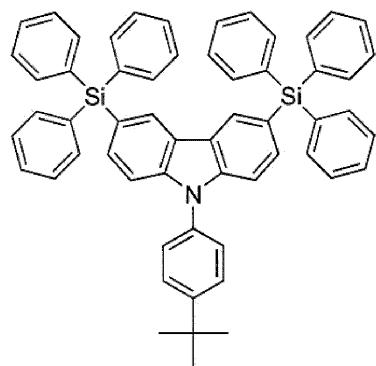
【0084】

次に、電子阻止材料として用いることができる化合物例を挙げる。

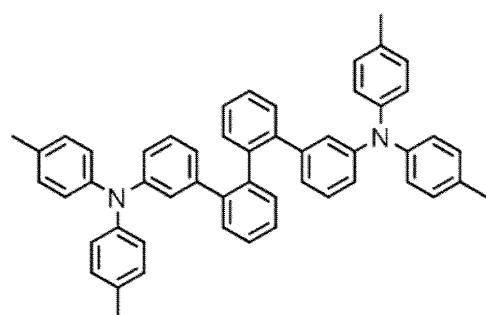
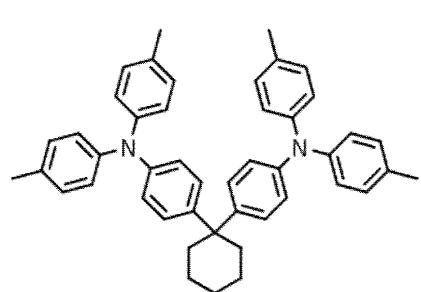
【0085】

40

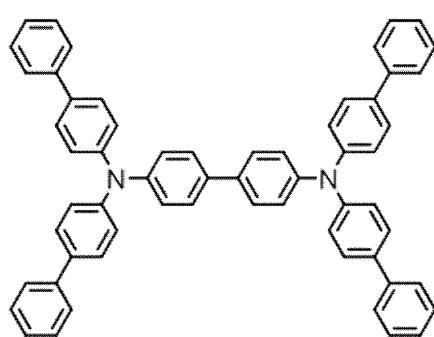
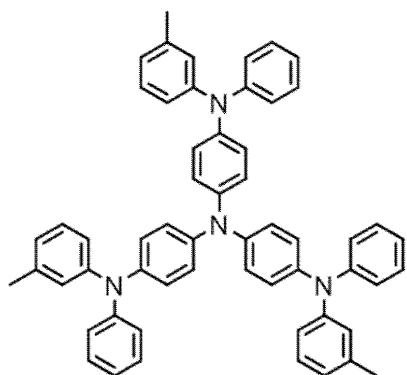
【化 3 0】



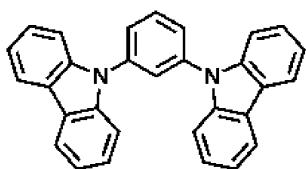
10



20



30



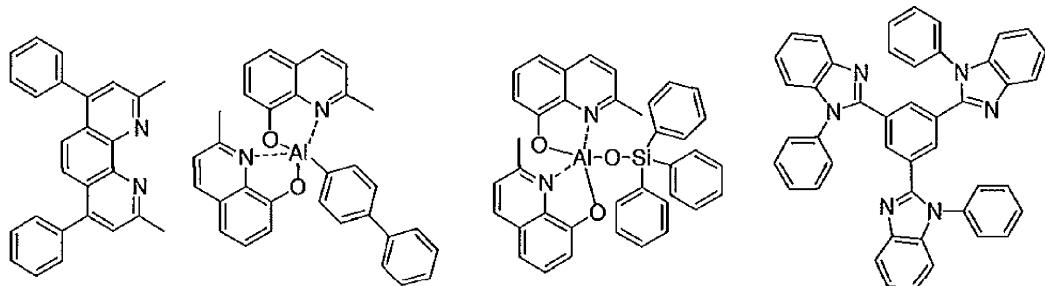
【0086】

40

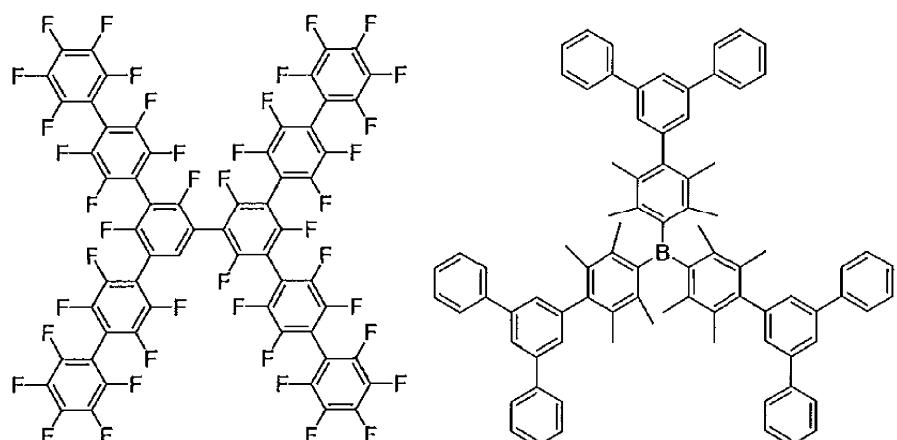
次に、正孔阻止材料として用いることができる化合物例を挙げる。

【0087】

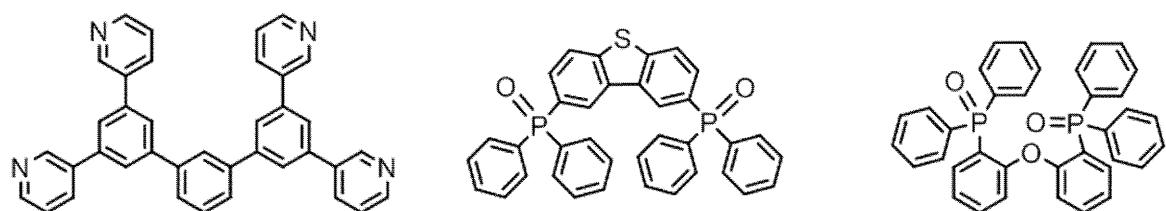
【化 3 1】



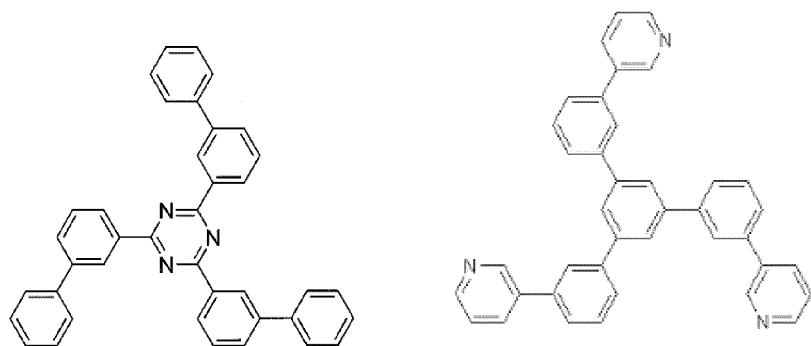
10



20



30



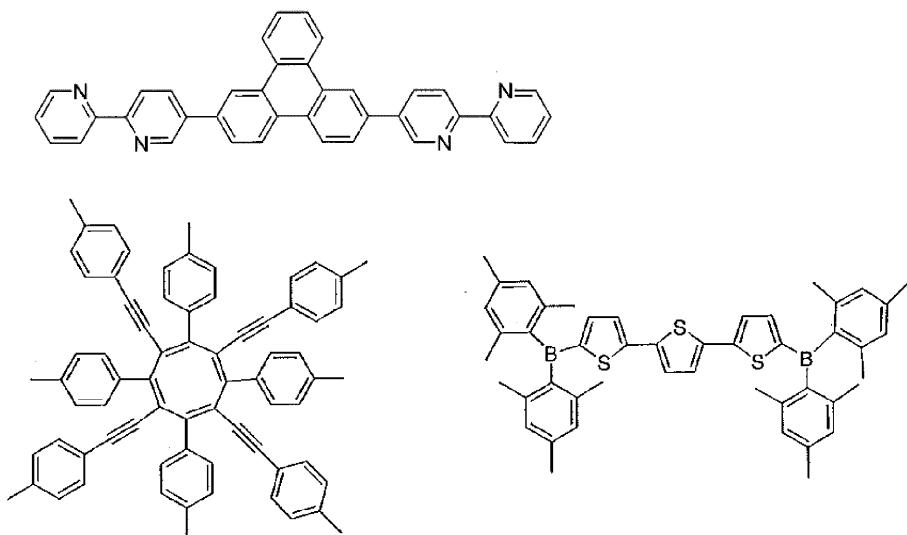
40

【0088】

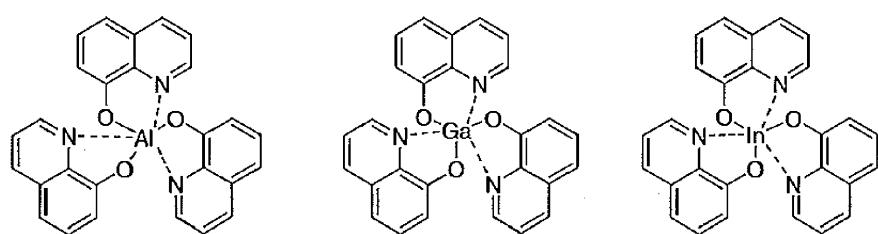
次に、電子輸送材料として用いることができる化合物例を挙げる。

【0089】

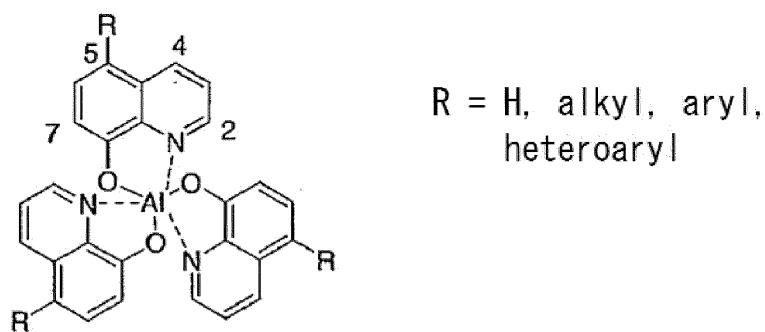
【化 3 2】



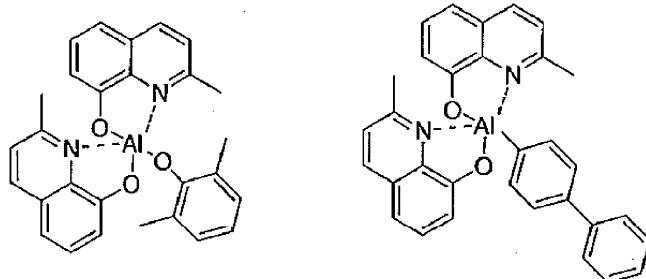
10



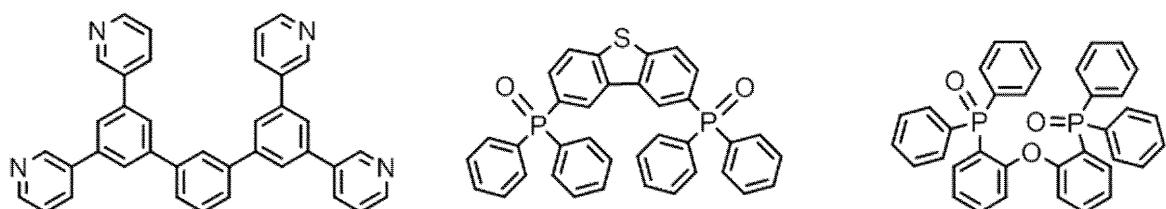
20



30



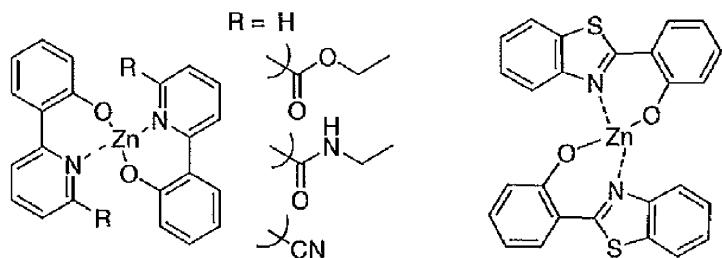
40



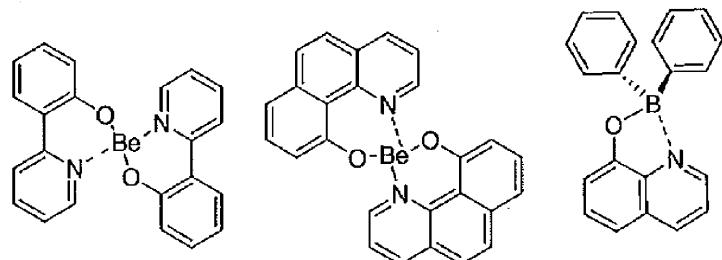
50

【0090】

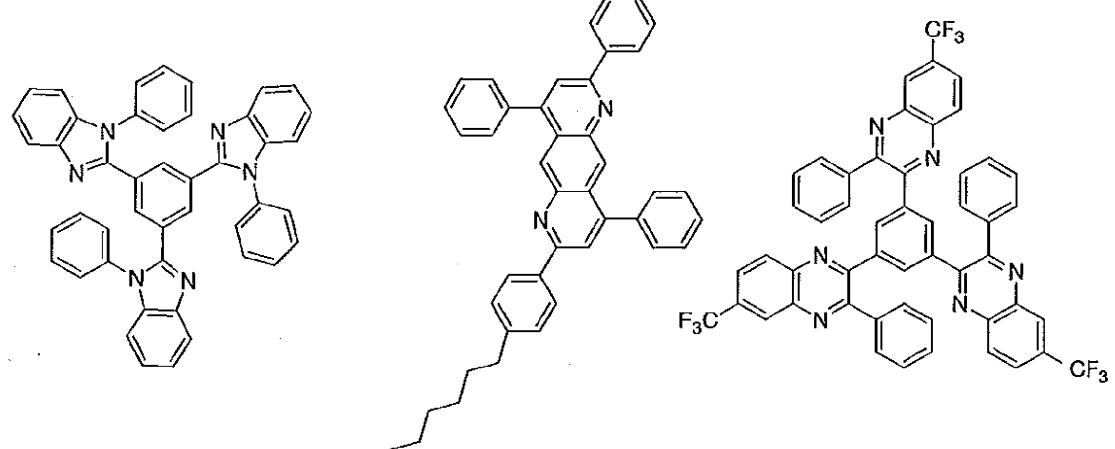
【化 3 3】



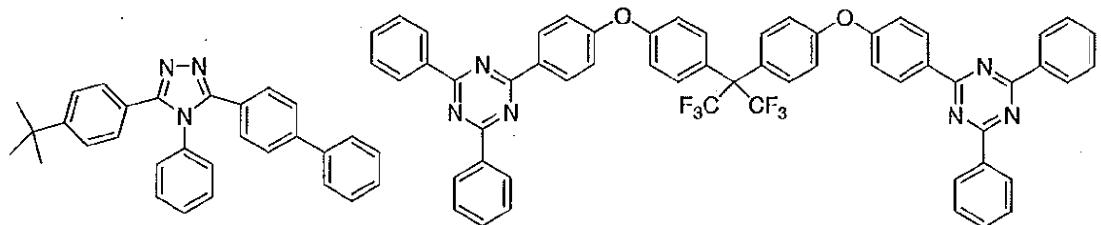
10



20



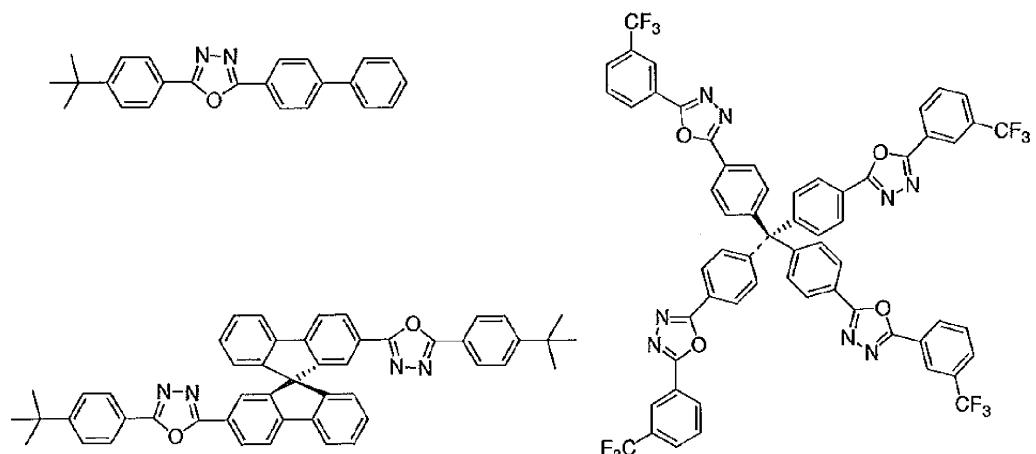
30



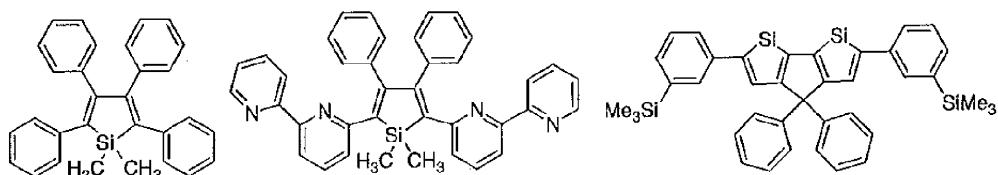
40

【0091】

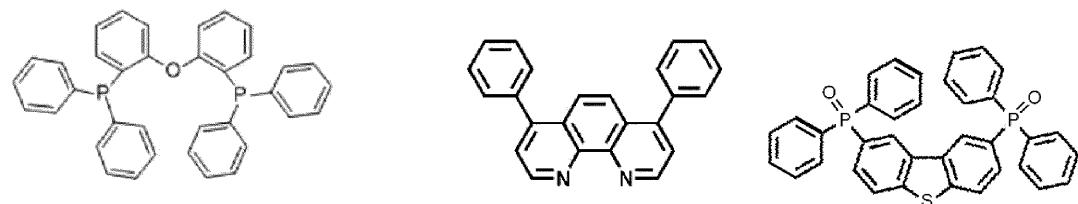
【化 3 4】



10



20



30

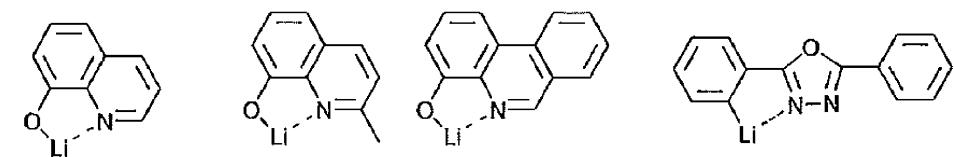
〔 0 0 9 2 〕

次に、電子注入材料として用いることができる化合物例を挙げる。

[0 0 9 3]

【化 3 5】

L i F. C s F



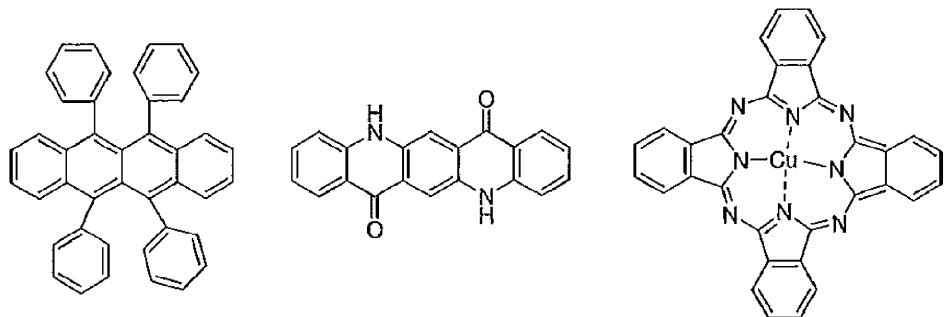
40

【 0 0 9 4 】

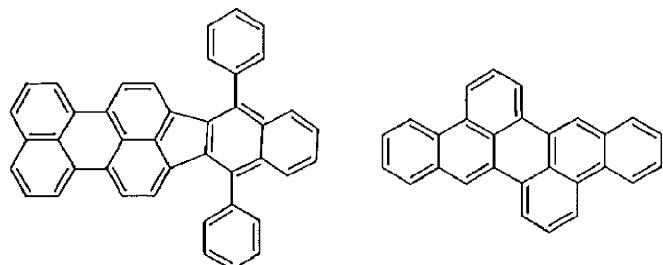
さらに有機層に添加可能な材料の化合物例を挙げる。例えば、安定化材料として添加すること等が考えられる。

〔 0 0 9 5 〕

【化36】



10



20

【0096】

(透明保護層)

第1実施形態の有機EL素子には、陰極と有機発光層の間に透明保護層を設けてよい。透明保護層は、例えば陰極と電子注入層の間に設けられる。これにより、透明保護層を形成した以降は、発光層や電子注入層が透明保護層により保護されるため、その後のプロセスで、発光層や電子注入層が劣化するのを抑制することができる。また、透明保護層はパターニングされていても良い。これにより、陰極と電子注入層とを電気的に接触させることができ、素子の駆動電圧を低くすることができる。透明保護層のパターンとして、ストライプ状や格子状等を挙げることができ、そのライン同士の間隔は500～5000μmであることが好ましい。透明保護層のパターニング方法としては、シャドーマスク方法、レーザー熱転写法、レーザー蒸着法、レーザーアブレーション法、インクジェット法、印刷法等が挙げられる。

30

透明保護層の材料としては、例えばトリス(8-キノリノラト)アルミニウム等の金属錯体、酸化モリブデン、酸化バナジウム等の金属酸化物を挙げることができる。透明保護層の厚さは、特に制限されないが、好ましくは50～200nmである。

【0097】

(補助電極)

第1実施形態の有機EL素子には、陰極の上に補助電極を設けてよい。これにより、素子の電気抵抗が低下して駆動電圧を低くすることができる。

補助電極の材料には、Au、Pt、Ag、Cu、Al等の低抵抗金属を用いることができる。補助電極は、線幅が1～50μmであることが好ましい。これにより、発光面の開口率を確保しつつ補助電極として十分な機能を得ることができる。なお、有機EL素子が上記の透明保護層を有する場合、補助電極は透明保護層が形成されていない領域に形成することが好ましい。

40

【0098】

以上のように構成された第1実施形態の有機EL素子では、陽極と陰極の間に電界を印加すると、各電極から注入された正孔と電子が有機発光層で再結合して発光材料が励起状態になる。こうして励起状態になった発光材料からの放射光が外部に放出されることで有機EL素子が発光する。ここで、この第1実施形態の有機EL素子では、基板と反対側に配された陰極が透明であることにより、発光材料が放射した光が陰極側(基板と反対側)から放出される。このとき、陰極側は、基板に形成されるような配線や駆動素子を有していないため開口率が高く、高い光取出し効率を実現することができる。

50

【0099】

[有機EL素子の第2実施形態]

第2実施形態の有機EL素子は、第1電極が陰極、第2電極が陽極として機能するものである。この有機EL素子の好ましい具体例(b-i)~(b-viii)を以下に挙げる。以下の具体例における各層は、陰極が基板側になり、陽極が最上層になるように、陰極から順に基板上に形成されている。ここで、正孔輸送層は電子阻止層の機能を兼ねていてもよい。また、正孔輸送層とは別に、正孔輸送層と有機発光層の間に電子阻止層が形成されてもよい。

【0100】

- (b-i) 陽極 / 有機発光層 / 電子輸送層 / 電子注入層 / 陰極
- (b-ii) 陽極 / 正孔輸送層 / 有機発光層 / 電子輸送層 / 電子注入層 / 陰極
- (b-iii) 陽極 / 正孔輸送層 / 有機発光層 / 正孔阻止層 / 電子輸送層 / 電子注入層 / 陰極
- (b-iv) 陽極 / 正孔注入層 / 正孔輸送層 / 有機発光層 / 電子輸送層 / 電子注入層 / 陰極
- (b-v) 陽極 / 透明保護層 / 有機発光層 / 電子輸送層 / 電子注入層 / 陰極
- (b-vi) 陽極 / 透明保護層 / 正孔輸送層 / 有機発光層 / 電子輸送層 / 電子注入層 / 陰極
- (b-vii) 陽極 / 透明保護層 / 正孔輸送層 / 有機発光層 / 正孔阻止層 / 電子輸送層 / 電子注入層 / 陰極

(b-viii) 陽極 / 透明保護層 / 正孔注入層 / 正孔輸送層 / 有機発光層 / 電子輸送層 / 電子注入層 / 陰極

代表例として、(b-viii)の層構成を有する有機EL素子を図2に示す。図2において、1は基板、2 bは陰極、3は正孔注入層、4は正孔輸送層、5は有機発光層、6は電子輸送層、7は電子注入層、8は透明保護層、9は透明導電層(陽極)を表す。

陰極、有機発光層、電子注入層、正孔注入層、電子輸送層および正孔輸送層の説明と好ましい範囲、具体例については、[有機EL素子の第1実施形態]の欄を参照することができる。また、陰極の材料には、第1実施形態で使用する透明導電性材料の他、アルミニウム等の比較的仕事関数が小さい金属または合金を用いることができる。

【0101】

一方、陽極は透明な材料で構成する。陽極に用いられる透明導電性材料として、インジウム錫酸化物(ITO)、インジウム亜鉛酸化物(IZO)、ZnO、In₂O₃、DIXO(In₂O₃-ZnO)等を挙げることができる。また、陽極は、有機発光層側から順に、補助層、導電層および絶縁層が積層された3層構成としてもよい。

補助層は、陽極から中間層への正孔の注入を補助する機能を有する。補助層には、導電層と中間層とのエネルギー障壁を調節しうる材料、例えば、中間層の補助層と接する層(例えば正孔注入層)よりもHOMO(Highest Occupied Molecular Orbital)準位が低い材料や双極子を有する材料を用いることができる。また、補助層は、中間層の補助層と接する層よりもHOMO準位が低い材料からなる材料層と双極子を有する材料からなる材料層の2層により構成してもよい。補助層の材料の具体例として、酸化タンゲステン、フラー・レン、銅フタロシアニン、テトラシアノキノジメタン(TCNQ)、トリフェニルテラゾリウムクロリド(TTC)、ナフタレンテトラカルボン酸二無水物(NTCDA)、ペリレンテトラカルボン酸二無水物(PTCDA)、銅ヘキサデカフルオロフタロシアニン(F16CuPc)等を挙げることができる。

導電層には、銀、アルミニウム、クロム、サマリウム、またはそれらの合金等の良導体を用いることができる。これにより、陽極の電気抵抗を下げることができる。

絶縁層は、有機EL素子から放出される光の透過率を調節する機能を有する。絶縁層には、例えば、酸化シリコン、窒化シリコン、酸化モリブデン、酸化タンゲステン等の無機材料、トリス(8-キノリノラト)アルミニウム(A1q3)等の有機材料を用いることができる。これらのうち、特に、酸化タンゲステンは光透過率が高いため、これを用いることにより、陽極の透明度を上げることができる。

ここで、補助層の厚さは5~40nmであることが好ましく、5~10nmであることがより好ましい。導電層の厚さは8~24nmであることが好ましく、16~24nmで

10

20

30

40

50

あることがより好ましい。ただし、光透過率を重視する場合には、導電層の厚さは、8~16 nmであることがより好ましい。絶縁層の厚さは、30~80 nmであることが好ましい。

【0102】

また、第2実施形態の有機EL素子には、陽極と有機発光層の間に透明保護層を設けてよい。透明保護層は、例えば陽極と正孔注入層または正孔輸送層の間に設けられる。これにより、透明保護層を形成した以降は、有機発光層等が透明保護層により保護されるため、その後のプロセスの影響で、有機発光層等が劣化するのを抑制することができる。透明保護層の材料には、金属酸化物を用いることができ、モリブデン酸化物(6価)、レニウム酸化物(6価)、ニッケル酸化物(2価)等の酸素欠陥状態の金属酸化物を用いることが好ましい。また、透明保護層はパターニングされていても良い。透明保護層をパターニングする場合のパターンや寸法、パターニング方法については、第1実施形態の有機EL素子における(透明保護層)の欄を参照することができる。

さらに、第2実施形態の有機EL素子には、陽極の上に補助電極を設けてよい。これにより、素子の電気抵抗が低下して駆動電圧を低くすることができる。補助電極についての説明と好ましい範囲、材料の具体例については、第2実施形態の有機EL素子における(補助電極)の欄を参照することができる。

第2実施形態の有機EL素子では、陽極と陰極の間に電界を印加すると、各電極から注入された正孔と電子が有機発光層で再結合して発光材料が励起状態になる。こうして励起状態になった発光材料の放射光が外部に放出されることで有機EL素子が発光する。ここで、この第2実施形態の有機EL素子では、基板と反対側に配された陽極が透明であることにより、発光材料が放射した光が陽極側(基板と反対側)から放出される。このとき、陽極側は、基板に形成されるような配線や駆動素子を有していないため開口率が高く、高い光取出し効率を実現することができる。

【0103】

以上の第1実施形態および第2実施形態の有機EL素子を構成する各層は、その材料を成膜することにより形成することができる。成膜方法は特に限定されず、ドライプロセス、ウェットプロセスのいずれであってもよい。具体例として、蒸着法、スパッタリング法、スピンドル法、印刷法、インクジェット法、エアロゾルジェット法等を挙げることができる。

【0104】

<有機発光ディスプレイ装置>

本発明の有機EL素子を例えれば有機発光ディスプレイ装置の発光素子として用いる場合、駆動素子となる複数の薄膜トランジスタが設けられた基板上に複数の有機EL素子を設け、各駆動素子の動作により各有機EL素子の発光を制御するように構成する。以下において、本発明の有機EL素子を発光素子とする有機発光ディスプレイ装置について説明する。

【0105】

[有機発光ディスプレイ装置の第1実施形態]

図3は、第1実施形態の有機発光ディスプレイ装置を概略的に示す断面図である。

【0106】

図3に示すように、第1実施形態の有機発光ディスプレイ装置は、基板10、薄膜トランジスタ(TFT)、ストレージキャパシタCst及び有機EL素子(EL)を含む。

【0107】

基板10上には補助電極11が形成され、補助電極11の上にはバッファ層などの第1絶縁層12が形成されている。そして、第1絶縁層12の上には、半導体層をパターニングすることで形成されたTFTの活性層213およびストレージキャパシタCstのキャパシタ下部電極313が所定間隔を開けて形成されている。

【0108】

活性層213およびキャパシタ下部電極313の上には第2絶縁層14が形成され、第

10

20

30

40

50

2 絶縁層 1 4 の上には、第 2 導電層および第 3 導電層をパターニングすることで形成された TFT のゲート電極 2 1 g と、ストレージキャパシタ C s t のキャパシタ上部電極 3 1 5 とが所定間隔を開けて形成されている。ここでゲート電極 2 1 g は、ゲート下部電極 2 1 5 とゲート上部電極 2 1 6 とにより構成されている。また、ゲート電極 2 1 g の両側に対応する活性層 2 1 3 のエッジにはソース領域 2 1 3 a およびドレイン領域 2 1 3 b が形成され、これらの間にチャンネル領域が形成されている。

【 0 1 0 9 】

ゲート電極 2 1 g およびキャパシタ上部電極 3 1 5 の上には層間絶縁膜 2 1 7 が形成され、層間絶縁膜 2 1 7 の上には、第 4 導電層および第 5 導電層をパターニングすることで形成されたソース電極 2 1 s 、ドレイン電極 2 1 d 及びコンタクト電極 2 1 c が所定間隔を開けて形成されている。ここで、ソース電極 2 1 s は、ソース下部電極 2 1 8 s とソース上部電極 2 1 9 s とにより構成され、ドレイン電極 2 1 d は、ドレイン下部電極 2 1 8 d とドレイン上部電極 2 1 9 d とにより構成され、コンタクト電極 2 1 c は、コンタクト下部電極 2 1 8 c とコンタクト上部電極 2 1 9 c とにより構成されている。一方、ソース電極 2 1 s の一端部は画素領域方向に長く延長形成されており、この延長形成された部分が画素電極 4 1 p になっている。ここで、画素電極 4 1 p は、画素下部電極 4 1 8 と画素上部電極 4 1 9 とにより構成されている。

【 0 1 1 0 】

また、ソース電極 2 1 s およびドレイン電極 2 1 d は、コンタクトホールを通じて活性層 2 1 3 のソース領域 2 1 3 a およびドレイン領域 2 1 3 b とそれぞれ電気的に接続されており、コンタクト電極 2 1 c は、コンタクトホールを通じて補助電極 1 1 と電気的に接続されている。

【 0 1 1 1 】

ソース電極 2 1 s 、ドレイン電極 2 1 d 、コンタクト電極 2 1 c および画素電極 4 1 p の上には、画素定義膜 4 2 0 が形成されている。画素定義膜 4 2 0 は有機 EL 素子 1 の中間層形成領域を規制するものであり、この画素定義膜 4 2 0 で囲まれた空間内の画素電極 4 1 p 上に有機 EL 素子の中間層 4 2 2 が形成され、その中間層の上に、対向電極 4 2 3 が形成されている。ここで、画素電極 4 1 p は、有機 EL 素子の第 1 電極に相当し、対向電極 4 2 3 は第 2 電極に相当する。そして、この対向電極 4 2 3 は、コンタクトホールを通じてコンタクト電極 2 1 c と電気的に接続されている。

【 0 1 1 2 】

次に、図 3 に示す有機発光ディスプレイ装置の製造方法について説明する。

まず、図 4 に示すように、基板 1 0 上に第 1 導電層 1 1 、第 1 絶縁層 1 2 及び半導体層 1 3 を順次形成する。

【 0 1 1 3 】

基板 1 0 は、 SiO_2 を主成分とする透明材質のガラス材で形成することができる。ただし、基板 1 0 は必ずしもこれに限定されるものではなく、透明なプラスチック材または金属材など、多様な材質の基板を用いることができる。

【 0 1 1 4 】

この基板 1 0 の上面に、補助電極として機能する第 1 導電層 1 1 を蒸着法により形成する。第 1 導電層 1 1 は、Ag 、 Mg 、 Al 、 Pt 、 Pd 、 Au 、 Ni 、 Nd 、 Ir 、 Cr 、 Li 、 Ca 、 Mo 、 Ti 、 W 、 MoW 、 Al / Cu から選択される 1 つ以上の材料を用いて形成することができる。この有機発光ディスプレイ装置では、このように補助電極として機能する第 1 導電層 1 1 を形成し、コンタクト電極 2 1 c を通じて、対向電極 4 2 3 と第 1 導電層 1 1 とを電気的に接続することにより、有機 EL 素子 1 の電気抵抗を低減することができる。

【 0 1 1 5 】

次に、第 1 導電層 1 1 の上面に第 1 絶縁層 1 2 を形成する。第 1 絶縁層 1 2 は、不純物イオンの拡散や水分・外気の浸透を防止するバリア層および表面を平坦化するためのバッファ層として機能する。第 1 絶縁層 1 2 は、 SiO_2 や SiN_x 等を気相プロセスにより成

10

20

30

40

50

膜することで形成することができる。気相プロセスとしては、P E C V D (plasma enhanced chemical vapor deposition)法、A P C V D (atmospheric pressure CVD)法、L P C V D (low pressure CVD)法等を挙げることができる。

【0116】

次に、第1絶縁層12の上面に、半導体層13を形成し、パターニングすることでTFTの活性層213およびストレージキャパシタCstのキャパシタ下部電極313を形成する。具体的には、まず、第1絶縁層12の上に非晶質シリコンを蒸着した後、これを結晶化することで、多結晶シリコン層を含む半導体層を形成する。非晶質シリコンは、R T A (rapid thermal annealing)法、S P C (solid phase crystallization)法、E L A (excimer laser annealing)法、M I C (metal induced crystallization)法、M I L C (metal induced lateral crystallization)法、S L S (sequential lateral solidification)法等により結晶化することができる。続いて、図5に示すように、フォトリソグラフィ法等を用いて、半導体層を、TFTの活性層213およびストレージキャパシタCstのキャパシタ下部電極313の平面形状にパターニングする。なお、図5では、活性層213とキャパシタ下部電極313は分離して形成されているが、両者を一体として形成してもよい。

10

【0117】

次いで、図6に示すように、第1絶縁層12の上に、活性層213およびキャパシタ下部電極313を覆うように、第2絶縁層14、第2導電層15および第3導電層16を順次形成する。

20

【0118】

第2絶縁層14は、SiN_xまたはSiO_xなどの無機絶縁材料を、P E C V D法、A P C V D法、L P C V D法等を用いて成膜することにより形成できる。第2絶縁層14は、TFTの活性層213とゲート電極21gの間に介在してゲート絶縁膜として機能するとともに、キャパシタ上部電極315と下部電極313との間に介在してストレージキャパシタCstとして機能する。

30

【0119】

第2導電層15および第3導電層16は、Ag、Mg、Al、Pt、Pd、Au、Ni、Nd、Ir、Cr、Li、Ca、Mo、Ti、W、MoW、Al/Cuから選択される1つ以上の材料を蒸着することにより形成することができる。また、第2導電層15および第3導電層16は、ITO、IZO、ZnOまたはIn₂O₃などの透明材料から選択される1つ以上の材料を用いて形成してもよい。続いて、図7に示すように、フォトリソグラフィ法等を用いて、第2導電層15および第3導電層16をゲート電極21gおよびキャパシタ上部電極315の平面形状にパターニングする。これにより、第2導電層15に由来する下部ゲート電極215、および、第3導電層16に由来する上部ゲート電極216からなるゲート電極21gと、第2導電層15に由来するキャパシタ上部電極315が形成される。なお、キャパシタ上部電極315も、第2導電層15に由来する層と第3導電層16に由来する層の2層構成としてもよい。

30

【0120】

次に、ゲート電極21gをマスクとして、活性層213のゲート電極21gの両側に対応する領域(エッジ)にn型またはp型の不純物をドーピングする。これにより、活性層213の各エッジにソース領域213aおよびドレイン領域213bがそれぞれ形成され、これら間にチャンネル領域が形成される。

40

【0121】

次に、図8に示すように、第2絶縁層14の上に、ゲート電極21gおよびキャパシタ上部電極315を覆うように第3絶縁層17を形成する。

第3絶縁層17は、スピノコーティング法等の塗布法を用い、ポリイミド、ポリアミド、アクリル樹脂、ベンゾシクロブテンおよびフェノール樹脂から選択される1つ以上の有機絶縁材料を塗布、乾燥することにより形成することができる。第3絶縁層17は、第2絶縁層14よりも厚く形成されて、TFTのゲート電極21gとソース電極21s、およ

50

び、ゲート電極 21g とドレイン電極 21dとの間を絶縁する層間絶縁膜として機能する。ここで、第3絶縁層 17は、有機絶縁材料の代わりに無機絶縁材料を用いて形成してもよいし、有機絶縁材料と無機絶縁材料を交互に成膜することで形成してもよい。

【0122】

次に、図9に示すように、フォトリソグラフィ法等を用いて第3絶縁層 17をパターニングし、補助電極 11、ソース領域 213a およびドレイン領域 213b の一部が露出する開口 17a、17b、17c を有する層間絶縁膜 217を形成する。

【0123】

次に、図10に示すように、層間絶縁膜 217を覆うように第4導電層 18および第5導電層 19を蒸着法により形成する。第4導電層 18および第5導電層 19に用いる材料については、第2導電層 15および第3導電層 16に用いる材料についての記載を参照することができる。ここで、第4導電層 18は、層間絶縁膜 217の開口 17a、17b、17cを埋めるように厚く形成する。これにより、開口 17a、17b、17c 内の導電層を通じて、第4導電層 18および第5導電層 19が補助電極 11、ソース領域 213a およびドレイン領域 213b と電気的に接触する。

10

【0124】

次に、図11に示すように、フォトリソグラフィ法等を用いて第4導電層 18および第5導電層 19をパターニングし、ソース電極 21s、ドレイン電極 21d、コンタクト電極 21c および画素電極 41p をそれぞれ形成する。

20

【0125】

次に、図12および図13に示すように、層間絶縁膜 217の上に画素定義膜 420を形成する。

まず、図12に示すように、層間絶縁膜 217の上に、ソース電極 21s、ドレイン電極 21d、コンタクト電極 21c および画素電極 41p を覆うように第4絶縁層 20を形成する。第4絶縁層 20は、スピンドルコーティング法等の塗布法を用い、ポリイミド、ポリアミド、アクリル樹脂、ベンゾシクロブテン及びフェノール樹脂から選択される1つ以上の有機絶縁材料を塗布、乾燥することにより形成することができる。第4絶縁層 20の材料には、 SiO_2 、 SiN_x 、 Al_2O_3 、 CuO_x 、 Tb_4O_7 、 Y_2O_3 、 Nb_2O_5 、 Pr_2O_3 等から選択される無機絶縁材料を用いてもよい。また、第4絶縁層 20は、有機絶縁材料と無機絶縁材料を交互に成膜した複数層構造で形成してもよい。

30

【0126】

次に、図13に示すように、フォトリソグラフィ法等を用いて第4絶縁層 20をパターニングし、コンタクト電極 21c および画素電極 41p の一部が露出する開口 20a、20b を有する画素定義膜 420を形成する。ここで、画素定義膜 420が所定の厚さを持つことにより、画素電極 41p のエッジと対向電極 423との間に一定の間隔を確保される。これにより、画素電極 41p のエッジに電界が集中する現象が抑制され、画素電極 41p と対向電極 423との短絡を防止することができる。

【0127】

そして、画素定義膜 420の開口 20b に、有機EL素子の中間層 422を形成した後、画素定義膜の上面、開口 20a、20b の内面および中間層の上面に亘って対向電極 423を形成することにより図1に示す有機発光ディスプレイ装置が完成する。

40

【0128】

[有機発光ディスプレイ装置の第2実施形態]

図14は、第2実施形態の有機発光ディスプレイ装置が有する駆動用基板を示す概略断面図である。第2実施形態の有機発光ディスプレイ装置は、この駆動用基板の光発生領域に有機ELの中間層が形成され、その上に第2電極が形成されて構成されている。以下、この駆動用基板について説明する。

図14に示すように、第2実施形態の有機発光ディスプレイ装置が有する駆動用基板は、金属材料からなる基板 100を有し、この基板 100の上に、光発生領域と、ゲートパッド部（第1パッド部）およびデータパッド部（第2パッド部）が形成されている。

50

【0129】

光発生領域には、少なくとも一つの薄膜トランジスタ(TFT)が形成されている。TFTは、ゲート電極102と、ゲート電極102を覆うゲート絶縁膜110と、ゲート電極102と対応してゲート絶縁膜110上に配置された半導体パターン104と、半導体パターン104上の一定領域に配置されたソース電極106およびドレイン電極108から構成されている。ここで、半導体パターン104は、不純物がドーピングされた非晶質シリコンパターンからなる活性層104aと、不純物がドーピングされた非晶質シリコンパターンからなるオーミックコンタクト層104bとを有している。このうちオーミックコンタクト層104bは、活性層104aとソース電極106との間、および、活性層104aとドレイン電極108との間に各々配置されている。

10

【0130】

基板100の上には、TFTを覆うように保護層120が形成されている。保護層120は、シリコン酸化物、シリコン窒化物等の無機絶縁材料から構成されている。保護層120上面のTFTに対応する領域には、第1導電パターン122および第2導電パターン124が形成されている。また、保護層120には、ドレイン電極108の一部を露出させる第2コンタクトホール(H2)が形成されている。これにより、第1導電パターン122は、第2コンタクトホール(H2)を経由してドレイン電極108と電気的に接続されている。

20

【0131】

ゲートパッド部は、ゲート電極102と同一金属で形成されたゲートパッド下部電極102aと、ゲートパッド下部電極102a上に形成されたゲート絶縁膜110と、ゲート絶縁膜110上に形成された保護層120と、ゲートパッド下部電極102aと対応するように保護層120上に形成された第1ゲートパッド上部電極122aおよび第2ゲートパッド上部電極124aとを有している。ゲートパッド部の保護層120及びゲート絶縁膜110には、ゲートパッド下部電極102aの一部を露出させる第1コンタクトホール(H1)が形成されている。第1ゲートパッド上部電極122aは、第1コンタクトホール(H1)を経由してゲートパッド下部電極102aと電気的に接続されている。

20

【0132】

データパッド部は、基板100上に形成されたゲート絶縁膜110と、ゲート絶縁膜110上に、TFTのソース電極106およびドレイン電極108と同一金属で形成されたデータパッド下部電極106aと、データパッド下部電極106a上に形成された保護層120と、データパッド下部電極106aと対応するように保護層120上に形成された第1データパッド上部電極122bおよび第2データパッド上部電極124bとを有している。データパッド部の保護層120には、データパッド下部電極106aの一部を露出させる第3コンタクトホール(H3)が形成されている。データパッド上部電極122bは、第3コンタクトホール(H3)を経由してデータパッド下部電極106aと電気的に接続されている。第1ゲートパッド上部電極122a、第1データパッド上部電極122b及び第1導電パターン122は、互いに同一の材質から形成されている。第2ゲートパッド上部電極124a、第2データパッド上部電極124b及び第2導電パターン124は、互いに同一の材質から形成されている。

30

【0133】

TFTとゲートパッド部及びデータパッド部が形成された基板100の全面には、平坦化層130が形成されている。平坦化層130は、ポリイミド、ポリアクリルのような有機物質から形成されている。平坦化層130は、平坦な上面を有し、TFTとゲート及びデータパッド部とによって形成された段差を解消するバッファ層として機能する。

40

【0134】

平坦化層130が形成されて光発生領域と対応した基板100上に、第2導電パターン124と電気的に接続された陰極140が形成され、陰極140が形成された基板100上に、陰極140の一部を露出させるバンクパターン150が形成される。バンクパターン150は、ポリイミド等の感光性絶縁物質を蒸着する工程、フォトグラフィーによって

50

絶縁物質をパターニングする工程を経て、カソード電極 140 を取り囲むように形成される。

この駆動用基板は、陰極 140 の上に、有機 EL 素子の中間層が形成され、その上に陽極が形成されることで有機発光ディスプレイ装置を構成する。ここで陰極 140 は、有機 EL 素子の第 1 電極に相当し、陽極は有機 EL 素子の第 2 電極に相当する。また、陰極 140 を陽極に変更し、陽極を陰極に変更して、有機発光ディスプレイ装置を構成してもよい。

【実施例】

【0135】

以下に合成例および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。なお、発光特性の評価は、ソースメータ（ケースレー社製：2400シリーズ）、半導体パラメータ・アナライザ（アジレント・テクノロジー社製：E5273A）、光パワーメータ測定装置（ニューポート社製：1930C）、光学分光器（オーシャンオプティクス社製：USB2000）、分光放射計（トプコン社製：SR-3）およびストリーカカメラ（浜松ホトニクス（株）製 C4334 型）を用いて行った。

10

【0136】

（実施例 1） 有機 EL 素子 1 の作製

有機 EL 素子 1 を以下の手順で作製する。ここで、ITO からなる陽極の成膜はスパッタ法により行い、その他の各薄膜の成膜は真空蒸着法により行う。また、真空蒸着装置の真空度は 4×10^{-4} Pa とする。

20

まず、基板上に、メタルマスクを介して、アルミニウムを 150 nm の厚さに蒸着して陽極を形成する。次に、HAT-CN を 10 nm の厚さに蒸着して正孔注入層を形成する。続いて、Tris-PCz を 25 nm の厚さに蒸着して第 1 のホール輸送層を形成し、その上に、mCBP を 5 nm の厚さに蒸着して第 2 のホール輸送層を形成する。次に、mCBP と 4CzIPN を異なる蒸着源から共蒸着し、30 nm の厚さの発光層を形成する。ここで、mCBP はホスト、4CzIPN はドーパントであり、mCBP : 4CzIPN (重量比) は 80 : 20 である。次に、T2T を 10 nm の厚さに蒸着して第 1 の電子輸送層を形成し、その上に、BPYTP2 を 40 nm の厚さに蒸着して第 2 の電子輸送層を形成する。次に、Liq を 1 nm の厚さに蒸着して電子注入層を形成し、その上に、メタルマスクを介して、マグネシウムと銀を共蒸着し、10 nm の厚さの電子注入電極を形成する。このとき、電子注入電極におけるマグネシウム : 銀 (重量比) は 10 : 1 とする。さらに、インジウムスズ酸化物 (ITO) をスパッタ法により 100 nm の厚さに形成して陰極を得る。最後に、陰極の上に、紫外線硬化型接着剤を用いて透光性ガラス基板を貼り付けて封止し、トップエミッション型の有機 EL 素子 1 を作製する。

30

【0137】

（実施例 2） 有機 EL 素子 2 の作製

発光層を形成する際、4CzIPN の代わりに 4CzIPN-Me をドーパントとして用いること以外は、実施例 1 と同様にしてトップエミッション型の有機 EL 素子を作製する。

40

【0138】

（実施例 3） 有機 EL 素子 3 の作製

発光層を形成する際、4CzIPN の代わりに 4CzTPN をドーパントとして用いること以外は、実施例 1 と同様にしてトップエミッション型の有機 EL 素子を作製する。

【0139】

（実施例 4） 有機 EL 紴子 4 の作製

発光層を形成する際、4CzIPN の代わりに 2CzPN をドーパントとして用いること以外は、実施例 1 と同様にしてトップエミッション型の有機 EL 素子を作製する。

50

【0140】

(実施例 5) 有機 E L 素子 5 の作製

発光層を形成する際、mCBPと4CzIPNを共蒸着する代わりに、mCBPと4CzIPN-MeとDBPを共蒸着して発光層を形成すること以外は、実施例1と同様にしてトップエミッション型の有機EL素子を作製する。ここで、mCBPはホスト、4CzIPN-Meはアシストドーパント、DBPはドーパントであり、mCBP : 4CzIPN-Me : DBP(重量比)は79 : 20 : 1である。

【0141】

(実施例 6) 有機 E L 素子 6 の作製

発光層を形成する際、mCBPと4CzIPNを共蒸着する代わりに、mCBPと4CzTPNとDBPを共蒸着して発光層を形成すること以外は、実施例1と同様にしてトップエミッション型の有機EL素子を作製する。ここで、mCBPはホスト、4CzTPNはアシストドーパント、DBPはドーパントであり、mCBP : 4CzTPN : DBP(重量比)は79 : 20 : 1である。

【0142】

有機EL素子1～6の発光層の組成、並びに、1000cd/m²で測定される外部量子効率および発光寿命を表7に示す。発光寿命は、初期輝度1000cd/m²で連続駆動したときに、輝度が初期輝度の95%(950cd/m²)になるまでの時間で評価する。

【0143】

【表 11】

10

20

実施例No	素子No	発光層の組成	外部量子効率(1000cd/m ²)(%)	LT95(1000cd/m ²)(時間)
実施例1	有機EL素子1	mCBP:4CzIPN(80:20)	14.0	210
実施例2	有機EL素子2	mCBP:4CzIPN-Me(80:20)	4.9	25
実施例3	有機EL素子3	mCBP:4CzTPN(80:20)	9.3	100
実施例4	有機EL素子4	mCBP:2CzPN(80:20)	7.2	39
実施例5	有機EL素子5	mCBP:4CzIPN-Me:DBP(79:20:1)	8.3	59
実施例6	有機EL素子6	mCBP:4CzTPN:DBP(79:20:1)	5.2	306

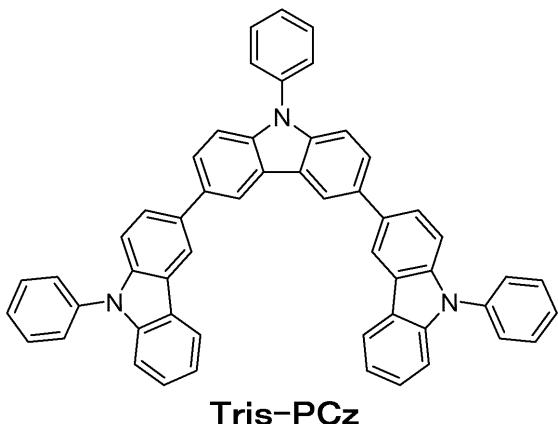
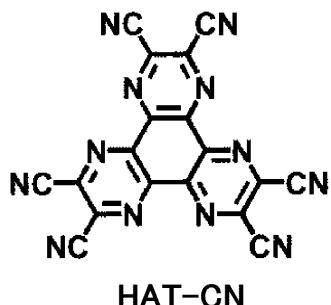
【0144】

実施例1～6で作製する各有機EL素子は、いずれも高い発光効率と長い発光寿命を有している。

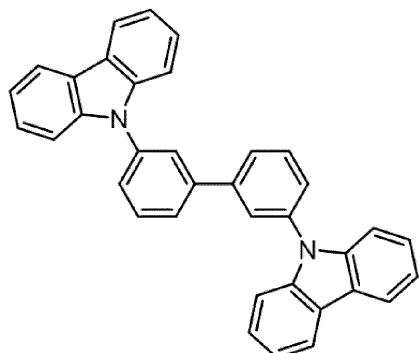
30

【0145】

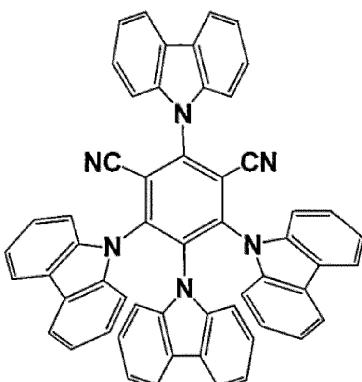
【化 3 7】



10

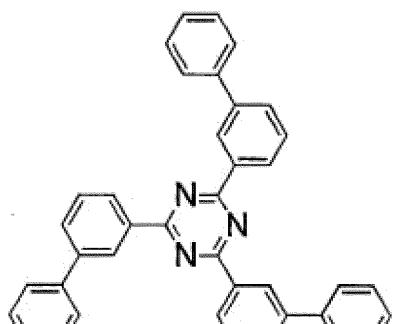


mCBP

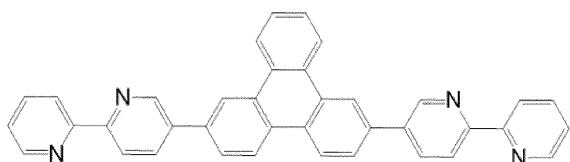


4CzIPN

20



T2T



BPYTP2

30

【0 1 4 6】

40

上記実施例 1において用いた 4 C z I P N の代わりに、上記一般式 (1) で表される化合物 2 ~ 3 0 0 、 3 0 2 ~ 3 0 5 、 3 0 7 ~ 5 2 2 、 5 2 4 ~ 1 1 1 2 をそれぞれ用いて、実施例 1と同じ方法により製造した有機エレクトロルミネッセンス素子を、素子 2 A ~ 3 0 0 A 、 3 0 2 A ~ 3 0 5 A 、 3 0 7 A ~ 5 2 2 A 、 5 2 4 A ~ 1 1 1 2 A としてここに開示する。

上記実施例 1において用いた H A T - C N の代わりに、正孔注入材料として用いることができるものとして上記した H A T - C N を除く 8 個の化合物をそれぞれ用いて、実施例 1と同じ方法により製造した有機エレクトロルミネッセンス素子を、素子 1 B ~ 8 B としてここに開示する。

上記実施例 1において用いた T r i s - P C z の代わりに、正孔輸送材料として用いる

50

ことができるものとして上記した Tris - PCz を除く 36 個の化合物をそれぞれ用いて、実施例 1 と同じ方法により製造した有機エレクトロルミネッセンス素子を、素子 1C ~ 36C としてここに開示する。

上記実施例 1 において用いた第 2 のホール輸送層として用いた mCBP の代わりに、電子阻止材料として用いることができるものとして上記した mCBP を除く 5 個の化合物をそれぞれ用いて、実施例 1 と同じ方法により製造した有機エレクトロルミネッセンス素子を、素子 1D ~ 5D としてここに開示する。

上記実施例 1 において用いた発光層の mCBP の代わりに、ホスト材料として用いることができるものとして上記した mCBP を除く 41 個の化合物をそれぞれ用いて、実施例 1 と同じ方法により製造した有機エレクトロルミネッセンス素子を、素子 1E ~ 41E としてここに開示する。 10

上記実施例 1 において用いた T2T の代わりに、正孔阻止材料として用いることができるものとして上記した T2T 以外の 10 個の化合物をそれぞれ用いて、実施例 1 と同じ方法により製造した有機エレクトロルミネッセンス素子を、素子 1F ~ 10F としてここに開示する。

上記実施例 1 において用いた BPyTP2 の代わりに、電子輸送材料として用いることができるものとして上記した BPyTP2 を除く 33 個の化合物をそれぞれ用いて、実施例 1 と同じ方法により製造した有機エレクトロルミネッセンス素子を、素子 1G ~ 33G としてここに開示する。

上記実施例 1 において用いた Liq の代わりに、電子注入材料として用いることができるものとして上記した Liq を除く 5 個の化合物をそれぞれ用いて、実施例 1 と同じ方法により製造した有機エレクトロルミネッセンス素子を、素子 1H ~ 5H としてここに開示する。 20

【 0147 】

上記実施例 6 において用いた 4CzIPN の代わりに、上記一般式(1)で表される化合物 2 ~ 300、302 ~ 305、307 ~ 522、524 ~ 1112 をそれぞれ用いて、実施例 1 と同じ方法により製造した有機エレクトロルミネッセンス素子を、素子 2a ~ 300a、302a ~ 305a、307a ~ 522a、524a ~ 1112a としてここに開示する。

上記実施例 6 において用いた HAT-CN の代わりに、正孔注入材料として用いることができるものとして上記した HAT-CN を除く 8 個の化合物をそれぞれ用いて、実施例 1 と同じ方法により製造した有機エレクトロルミネッセンス素子を、素子 1b ~ 8b としてここに開示する。 30

上記実施例 6 において用いた Tris - PCz の代わりに、正孔輸送材料として用いることができるものとして上記した Tris - PCz を除く 36 個の化合物をそれぞれ用いて、実施例 1 と同じ方法により製造した有機エレクトロルミネッセンス素子を、素子 1c ~ 36c としてここに開示する。

上記実施例 6 において用いた第 2 のホール輸送層として用いた mCBP の代わりに、電子阻止材料として用いることができるものとして上記した mCBP を除く 5 個の化合物をそれぞれ用いて、実施例 1 と同じ方法により製造した有機エレクトロルミネッセンス素子を、素子 1d ~ 5d としてここに開示する。 40

上記実施例 6 において用いた発光層の mCBP の代わりに、ホスト材料として用いることができるものとして上記した mCBP を除く 41 個の化合物をそれぞれ用いて、実施例 1 と同じ方法により製造した有機エレクトロルミネッセンス素子を、素子 1e ~ 41e としてここに開示する。

上記実施例 6 において用いた T2T の代わりに、正孔阻止材料として用いることができるものとして上記した T2T 以外の 10 個の化合物をそれぞれ用いて、実施例 1 と同じ方法により製造した有機エレクトロルミネッセンス素子を、素子 1f ~ 10f としてここに開示する。

上記実施例 6 において用いた BPyTP2 の代わりに、電子輸送材料として用いること

10

20

30

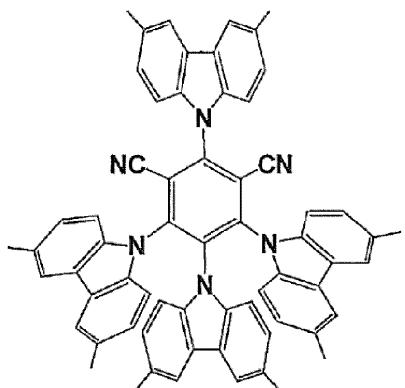
40

50

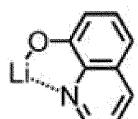
ができるものとして上記した BPyTP2 を除く 33 個の化合物をそれぞれ用いて、実施例 1 と同じ方法により製造した有機エレクトロルミネッセンス素子を、素子 1 g ~ 33 g としてここに開示する。

上記実施例 6において用いた Liq の代わりに、電子注入材料として用いることができるものとして上記した Liq を除く 5 個の化合物をそれぞれ用いて、実施例 1 と同じ方法により製造した有機エレクトロルミネッセンス素子を、素子 1 h ~ 5 h としてここに開示する。

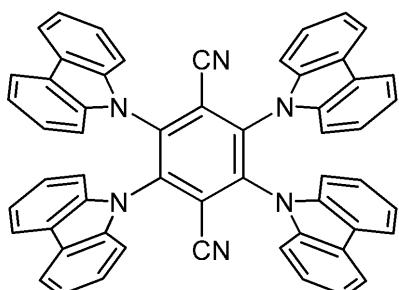
【化 38】



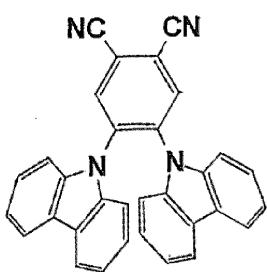
4CzIPN-Me



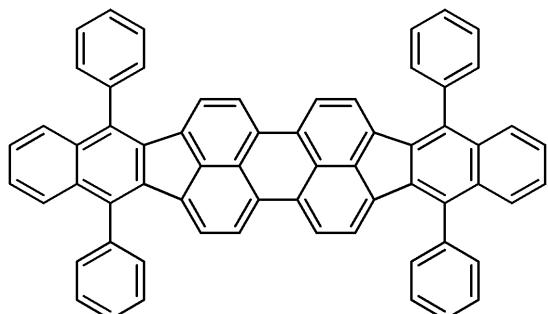
Liq



4CzTPN



2CzPN



DBP

10

20

30

40

【産業上の利用可能性】

【0148】

本発明のトップエミッション方式の有機 EL 素子は、発光効率が高く、素子寿命が長いため、高い実用性を有する。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】

【0149】

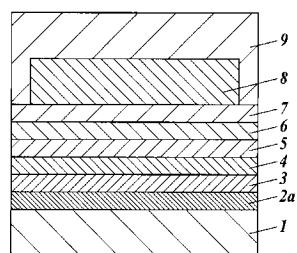
1 基板

2 a 陽極（第 1 電極）

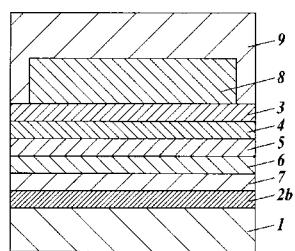
50

2 b	陰極（第1電極）	
3	正孔注入層	
4	正孔輸送層	
5	有機発光層	
6	電子輸送層	
7	電子注入層	
8	透明保護層	
9	透明導電層（第2電極）	
1 0	基板	10
1 1	補助電極	
1 2	第1絶縁層	
2 1 g	ゲート電極	
2 1 s	ソース電極	
2 1 d	ドレイン電極	
2 1 c	コンタクト電極	
2 1 7	層間絶縁膜	
4 2 0	画素定義膜	
4 1 p	画素電極	
4 2 2	中間層	
4 2 3	対向電極	20
1 0 0	基板	
1 0 2	ゲート電極	
1 0 2 a	ゲートパッド下部電極	
1 0 4	半導体パターン	
1 0 4 a	活性層	
1 0 4 b	オーミックコンタクト層	
1 0 6	ソース電極	
1 0 8	ドレーン電極	
1 1 0	ゲート絶縁膜	
1 2 0	保護層	30
1 2 2	第1導電パターン	
1 2 2 a	第1ゲートパッド上部電極	
1 2 4	第2導電パターン	
1 2 4 a	第2ゲートパッド上部電極	
1 2 4 b	第2データパッド上部電極	
1 3 0	平坦化層	
1 4 0	陰極	

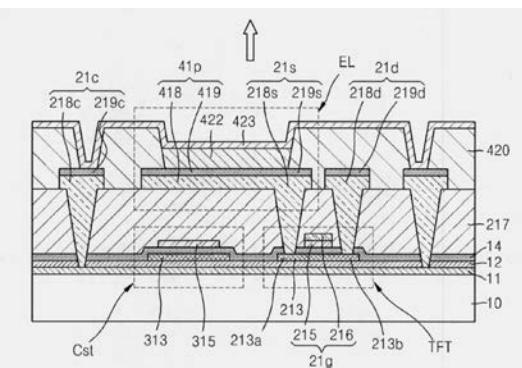
【図1】



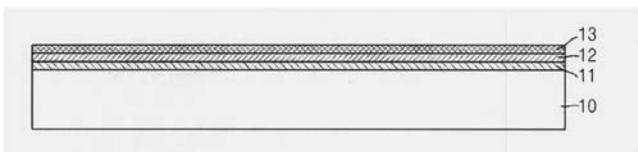
【図2】



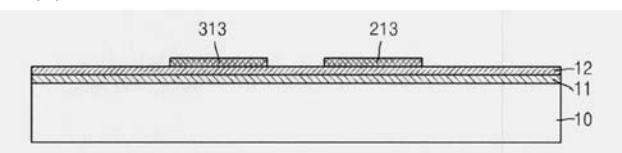
【図3】



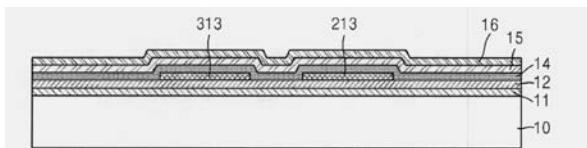
【図4】



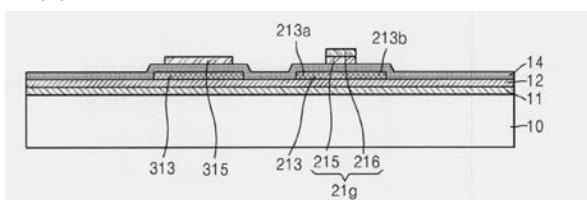
【図5】



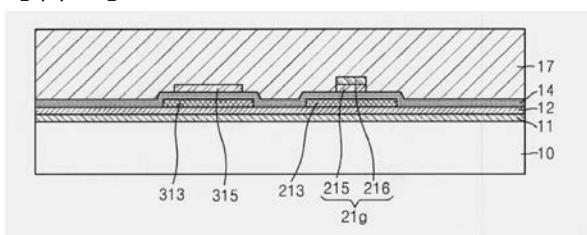
【図6】



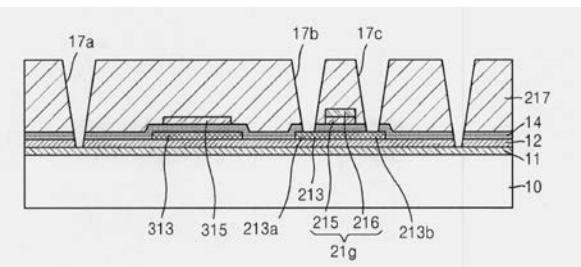
【図7】



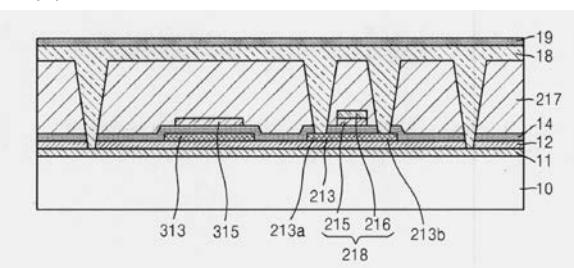
【図8】



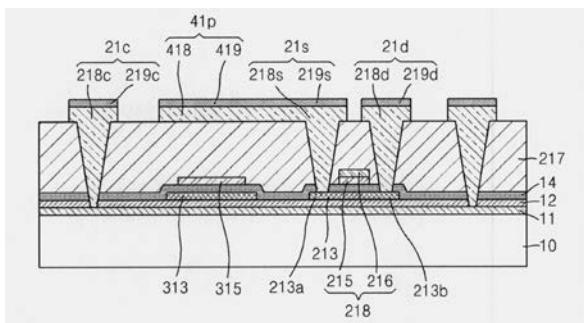
【図9】



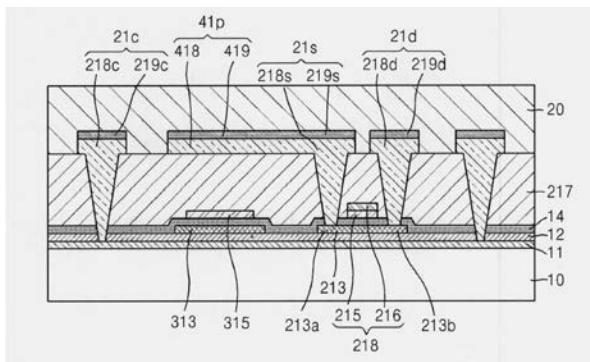
【図10】



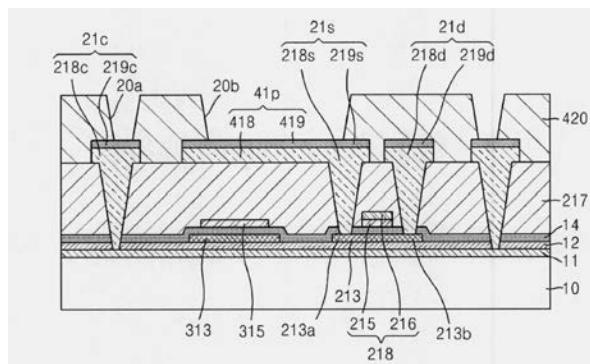
【図11】



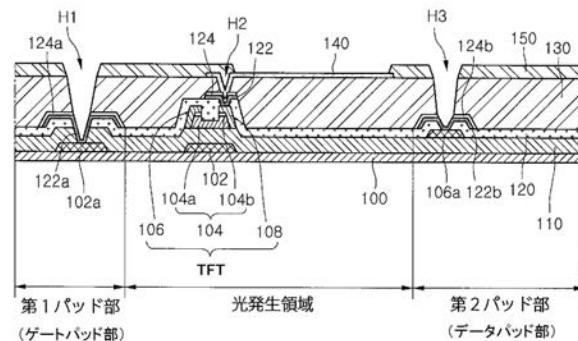
【図12】



【図13】



【図14】



专利名称(译)	顶部发光型有机电致发光器件和有机发光显示器件		
公开(公告)号	JP2018200995A	公开(公告)日	2018-12-20
申请号	JP2017106125	申请日	2017-05-30
[标]申请(专利权)人(译)	株式会社KYULUX		
申请(专利权)人(译)	株式会社KYULUX		
[标]发明人	岡田 久 野村 洋子		
发明人	岡田 久 野村 洋子		
IPC分类号	H01L51/50 H01L27/32 H05B33/26		
FI分类号	H05B33/14.B H01L27/32 H05B33/26.Z		
F-TERM分类号	3K107/AA01 3K107/BB01 3K107/CC04 3K107/CC21 3K107/DD03 3K107/DD21 3K107/DD22 3K107/DD26 3K107/DD27 3K107/DD44X 3K107/DD44Y 3K107/DD66 3K107/FF19 3K107/FF20		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

种类代码 : A1 提供一种有机电致发光元件 , 其具有材料类型和元件结构的新颖组合 , 高发光效率和长寿命。 解决方案 : 本发明的有机EL器件包括基板 , 形成在基板上的第一电极 , 形成在第一电极上的有机发光层 , 形成在有机发光层上的透明第一电极一种具有两个电极的顶部发光型有机EL器件 , 其中有机发光层包括在最低激发单线态能级和最低激发三线态能级之间具有差 ΔE_{ST} 的化合物 , 0.3eV 或更低 , 化合物并且具有其中氰基苯被特定基团取代的结构的化合物。 .The

