

發明專利說明書

200531976

(本說明書格式、順序及粗體字，請勿任意更動，※記號部分請勿填寫)

※申請案號：94104187

※申請日期：94.2.14

※IPC 分類：C07D 493/00

一、發明名稱：(中文/英文)

雜多環化合物及色素

二、申請人：(共 1 人)

姓名或名稱：(中文/英文)

國立大學法人高知大學 / KOCHI UNIVERSITY

代表人：(中文/英文)

相良祐輔 / SAGARA, YUSUKE

住居所或營業所地址：(中文/英文)

日本國高知縣高知市曙町 2-5-1

2-5-1, AKEBONO-CHO, KOCHI-SHI, KOCHI-KEN, JAPAN

國 籍：(中文/英文)

日本 / JAPAN

三、發明人：(共 2 人)

姓 名：(中文/英文)

1. 吉田勝平 / YOSHIDA, KATSUHIRA

2. 大山陽介 / OYAMA, YOUSUKE

國 籍：(中文/英文)

日本 / JAPAN

四、聲明事項：

主張專利法第二十二條第二項 第一款或 第二款規定之事實，其事實發生日期為： 年 月 日。

申請前已向下列國家（地區）申請專利：

【格式請依：受理國家（地區）、申請日、申請案號 順序註記】

有主張專利法第二十七條第一項國際優先權：

1. 日本； 2004.02.13； 特願 2004-036803

2.

無主張專利法第二十七條第一項國際優先權：

主張專利法第二十九條第一項國內優先權：

【格式請依：申請日、申請案號 順序註記】

主張專利法第三十條生物材料：

須寄存生物材料者

國內生物材料 【格式請依：寄存機構、日期、號碼 順序註記】

國外生物材料 【格式請依：寄存國家、機構、日期、號碼 順序註記】

不須寄存生物材料者：

所屬技術領域中具有通常知識者易於獲得時，不須寄存。

九、發明說明：

【發明所屬之技術領域】

本發明是有關於雜多環化合物及色素。

【先前技術】

5 目前為止，色素係作為染料或顏料來加以利用，而隨著電子技術的進步，也使用在電子照相材料、磁性記錄材料、光記錄材料等各種領域中。因此，對色素所要求的性能變得多樣化，亟待開發出具備有適合於各種用途之物性及機能之色素。

 在螢光色素中最好能具有發光強度高、適當之光吸收波長
10 及發光波長。又，螢光色素必須不僅在溶液狀態，即使是在固體狀態也可發光（以下稱該性質為「固體發光性」）、且必須在耐熱性、耐光性、溶解性、對光阻材料之分散性等諸多性能上表現優異。

【發明內容】

15 發明欲解決之課題

 本發明之課題在於提供一種新穎性化合物，且該新穎性化合物具有適當之光吸收波長及發光波長，且在高發光強度、耐熱性、耐光性、溶解性、對光阻材料之分散性、及固體發光性等諸多性能上表現優異，而適宜作為螢光色素來使用。

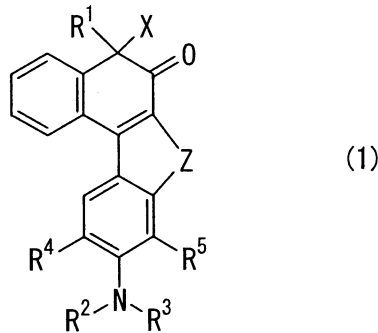
20 解決課題之方法

 本發明人為了解決上述課題而反覆精心研究，結果成功合成了下述一般式（1）及一般式（2）所表示之雜多環化合物。接著，發現該等雜多環化合物具有適當之光吸收波長及發光波長，且發光強度高、在耐熱性、耐光性、溶解性、對光阻材料

之分散性、固體發光性等各種性能上表現優異，可成為所期望之螢光色素，本發明即是依據該發現而完成者。

本發明即是提供下述 1~8 所示之雜多環化合物、色素及顏料到染料。

- 5 1. 一種雜多環化合物，係以下述一般式 (1) 表示者：



[式中， R^1 表示直鏈或支鏈狀之 $C_1\sim C_{10}$ 烷基、取代或無取代之 $C_5\sim C_{10}$ 環烷基、或取代或無取代之苯基。

R^2 及 R^3 為相同或相異，且表示直鏈或支鏈狀之 $C_1\sim C_{10}$ 烷基、取代或無取代之 $C_5\sim C_{10}$ 環烷基、或取代或無取代之苯基，又，該 R^2 及 R^3 亦可與其結合之氮原子一起相互結合而形成雜環。

R^4 及 R^5 表示氫原子。

又， R^2 與 R^4 及 R^3 與 R^5 可各自結合形成直鏈或支鏈狀之 $C_2\sim C_7$ 烯基。

X 表示氫原子、直鏈或支鏈狀之 $C_1\sim C_{10}$ 烷基、取代或無取代之 $C_5\sim C_{10}$ 環烷基、取代或無取代之苯基、鹵素原子、 $-\text{OCOR}^6$ 基、 $-\text{OR}^6$ 基、 $-\text{SR}^6$ 基或 $-\text{NR}^6\text{R}^7$ 基。

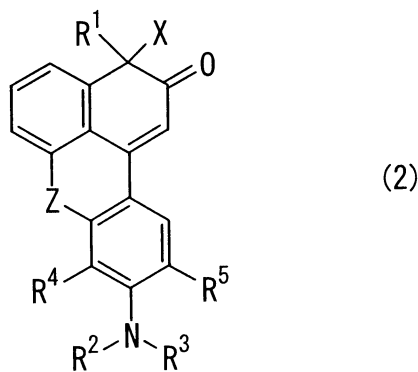
R^6 及 R^7 為相同或相異，且表示氫原子、直鏈或支鏈狀之 $C_1\sim C_6$ 烷基、或取代或無取代之 $C_5\sim C_{10}$ 環烷基。

Z 表示二價基。]

2.如第 1 項之雜多環化合物，其中一般式 (1) 中之 R^1 為直鏈或支鏈狀之 $C_1\sim C_{10}$ 烷基、或取代或無取代之苯基， R^2 及 R^3 為直鏈或支鏈狀之 $C_1\sim C_{10}$ 烷基， R^4 及 R^5 為氫原子，X 為氫原子、直鏈或支鏈狀之 $C_1\sim C_{10}$ 烷基、羥基或 $-OCOR^6$ 基 (R^6 為氫原子、或直鏈或支鏈狀之 $C_1\sim C_6$ 烷基)、Z 為 $-O-$ 、 $-S-$ 或 $-NR^6-$ (R^6 為氫原子、或直鏈或支鏈狀之 $C_1\sim C_6$ 烷基)。

3.如第 1 項之雜多環化合物，其中一般式 (1) 中之 R^1 為直鏈或支鏈狀之 $C_1\sim C_6$ 烷基或無取代之苯基， R^2 及 R^3 為直鏈或支鏈狀之 $C_1\sim C_6$ 烷基， R^4 及 R^5 為氫原子，X 為氫原子、直鏈或支鏈狀之 $C_1\sim C_6$ 烷基、羥基或 $-OCOR^6$ 基 (R^6 為直鏈或支鏈狀之 $C_1\sim C_6$ 烷基)、Z 為 $-O-$ 、 $-S-$ 或 $-NH-$ 。

4.一種雜多環化合物，係以下述一般式 (2) 表示者：



15 [式中， R^1 表示直鏈或支鏈狀之 $C_1\sim C_{10}$ 烷基、取代或無取代之 $C_5\sim C_{10}$ 環烷基、或取代或無取代之苯基。

R^2 及 R^3 為相同或相異，且表示直鏈或支鏈狀之 $C_1\sim C_{10}$ 烷基、取代或無取代之 $C_5\sim C_{10}$ 環烷基、或取代或無取代之苯基，又，該 R^2 及 R^3 亦可與其結合之氮原子一起相互結合而形成雜

20 環。

R^4 及 R^5 表示氫原子。

又， R^2 與 R^4 及 R^3 與 R^5 可各自結合形成直鏈或支鏈狀之 $C_2\sim C_7$ 烯基。

X 表示氫原子、直鏈或支鏈狀之 $C_1\sim C_{10}$ 烷基、取代或無取代之 $C_5\sim C_{10}$ 環烷基、取代或無取代之苯基、鹵素原子、 $-OR^6$ 基、 $-OCOR^6$ 基、 $-SR^6$ 基或 $-NR^6R^7$ 基。

R^6 及 R^7 為相同或相異，且表示氫原子、直鏈或支鏈狀之 $C_1\sim C_6$ 烷基、或取代或無取代之 $C_5\sim C_{10}$ 環烷基。

Z 表示二價基。]

10 5.如第 4 項之雜多環化合物，其中一般式 (2) 中之 R^1 為直鏈或支鏈狀之 $C_1\sim C_{10}$ 烷基、或取代或無取代之苯基， R^2 及 R^3 為直鏈或支鏈狀之 $C_1\sim C_{10}$ 烷基， R^4 及 R^5 為氫原子， X 為氫原子、直鏈或支鏈狀之 $C_1\sim C_{10}$ 烷基、羥基或 $-OCOR^6$ 基 (R^6 為氫原子、或直鏈或支鏈狀之 $C_1\sim C_6$ 烷基)、 Z 為 $-O-$ 、 $-S-$ 或 $-NR^6-$ (R^6 為氫原子、或直鏈或支鏈狀之 $C_1\sim C_6$ 烷基)。

15 6.如第 4 項之雜多環化合物，其中一般式 (2) 中之 R^1 為直鏈或支鏈狀之 $C_1\sim C_6$ 烷基或無取代之苯基， R^2 及 R^3 為直鏈或支鏈狀之 $C_1\sim C_6$ 烷基， R^4 及 R^5 為氫原子， X 為氫原子、直鏈或支鏈狀之 $C_1\sim C_6$ 烷基、羥基或 $-OCOR^6$ 基 (R^6 為直鏈或支鏈狀之 $C_1\sim C_6$ 烷基)、 Z 為 $-O-$ 、 $-S-$ 或 $-NH-$ 。

7.一種色素，係由第 1~6 項中任一項之雜多環化合物所形成者。

8.一種顏料或染料，係含有第 1~6 項中任一項之雜多環化合物者。

雜多環化合物

本說明書中，上述一般式(1)及一般式(2)中所示之各基更具體而言分別如下所述。

R^1 、 R^2 、 R^3 及X所示之直鏈或支鏈之 $C_1\sim C_{10}$ 烷基，可舉
5 例如甲基、乙基、正丙基、異丙基、正丁基、異丁基、第二丁基、第三丁基、正戊基、新戊基、正己基、正辛基、2-乙基己基、正癸基等。該烷基以直鏈或支鏈狀之 $C_1\sim C_6$ 烷基為佳，直鏈或支鏈之 $C_1\sim C_4$ 烷基更佳。

R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^6 、 R^7 及X所示之 $C_5\sim C_{10}$ 環烷基之取代基，
10 可舉例如直鏈或支鏈狀之 $C_1\sim C_6$ 烷基等。在此，直鏈或支鏈狀之 $C_1\sim C_6$ 烷基可舉例如：甲基、乙基、正丙基、異丙基、正丁基、異丁基、第二丁基、第三丁基、正戊基、新戊基、正己基等。上述取代基係在環烷基環上至少取代1個、又以取代1~2個為佳。又，環烷基環上之取代位置為2位、3位及4位任一
15 者皆可。

R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^6 、 R^7 及X所示之取代或無取代之 $C_5\sim C_{10}$ 環烷基之具體例，可舉例如環戊基、甲基環戊基、二甲基環戊基、乙基環戊基、正丁基環戊基、環己基、甲基環己基、二甲基環己基、乙基環己基、正丁基環己基、環辛基、環癸基等。
20 該等各基包含了位置異構體及立體異構體。

R^1 、 R^2 、 R^3 及X所示之苯基之取代基，可舉例如直鏈或支鏈狀之 $C_1\sim C_6$ 烷基、二($C_1\sim C_6$ 烷基)胺基等。在此，直鏈或支鏈狀之 $C_1\sim C_6$ 烷基，可舉例如甲基、乙基、正丙基、異丙基、正丁基、異丁基、第二丁基、第三丁基、正戊基、新戊基、正

己基等。二(C₁~C₆烷基)胺基可舉例如二甲胺基、二乙胺基、二(正丙基)胺基、二(異丙基)胺基、二(正丁基)胺基、二(異丁基)胺基、二(正戊基)胺基、二(正己基)胺基、甲基乙基胺基、甲基正丙基胺基、甲基正丁基胺基、乙基正丙基胺基、乙基正丁基胺基等。這些取代基係在苯環上至少取代1個、又以取代1~2個為佳。又，苯環上之取代位置可為2位、3位及4位任一者，又以4位為佳。

以 X 所示之取代或無取代之苯基之具體例，可舉例如苯基、甲苯基、二甲苯基、萘基、茴香基、乙苯基、正丙苯基、正丁苯基、正己苯基、正辛苯基、二甲基胺苯基、二乙基胺苯基、二(正丙基)胺苯基、二(異丙基)胺苯基、二(正丁基)胺苯基、二(異丁基)胺苯基、二(正戊基)胺苯基、二(正己基)胺苯基等。該等各基包含了位置異構體及立體異構體。

R² 及 R³ 與該等所鍵結之氮原子一起相互鍵結所形成之雜環，可舉例如六氫吡啶環、咪啉環、吡咯啶環、哌啶環等。

R² 與 R⁴、或 R³ 及與 R⁵ 相互結合所形成之直鏈或支鏈狀之 C₂~C₇ 烯基，可舉例如亞甲基、甲基乙烯、丙烯、四亞甲基、甲基丙烯、二甲基乙烯、五亞甲基、六亞甲基、七亞甲基等。

X 所示之鹵素原子為氟原子、氯原子、溴原子、或碘原子。

R⁶ 及 R⁷ 所示之直鏈或支鏈狀之 C₁~C₆ 烷基，可舉例如甲基、乙基、正丙基、異丙基、正丁基、異丁基、第二丁基、第三丁基、正戊基、新戊基、正己基等。

X 所示之 -OCOR⁶ 基，可舉例如甲醯氧基、乙醯氧基、乙羧氧基、正丙羧氧基、異丙羧氧基、正丁羧氧基、異丁羧氧基、

第二丁羰氧基、第三丁羰氧基、正戊羰氧基、新戊羰氧基、正己羰氧基等。

以 X 所示之 $-OR^6$ 基，可舉例如甲氧基、乙氧基、正丙氧基、異丙氧基、正丁氧基、異丁氧基、第二丁氧基、第三丁氧基、正戊氧基、新戊氧基、正己氧基、環戊氧基、環己氧基等。

以 X 所示之 $-SR^6$ 基，可舉例如：巰基、甲硫基、乙硫基、正丙硫基、異丙硫基、正丁硫基、異丁硫基、第二丁硫基、第三丁硫基、正戊硫基、新戊硫基、正己硫基、環戊硫基、環己硫基等。

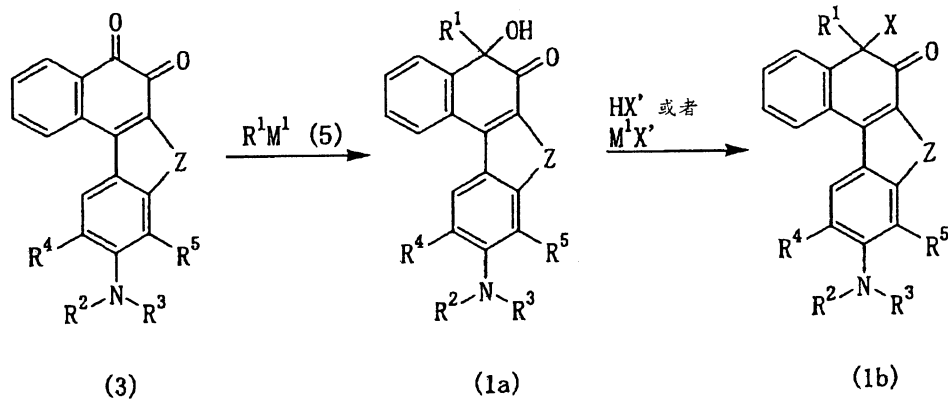
10 以 X 所示之 NR^6R^7 基，可舉例如：胺基、甲胺基、乙胺基、正丙胺基、異丙胺基、正丁胺基、異丁胺基、第三丁胺基、正戊胺基、正己胺基、二甲胺基、二乙胺基、甲基乙胺基、二（正丙基）胺基、二（異丙基）胺基、二（正丁基）胺基、二（異丁基）胺基、二（第三丁基）胺基、二（正戊基）胺基、二（正己基）胺基、環戊胺基、環己胺基、二環戊胺基、二環己胺基、（甲基）（環己基）胺基等。

以 Z 所示之二價基，可舉例如： $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-Se-$ 、 $-NR^6-$ （ R^6 同前述）等。 $-NR^6-$ 之具體例，可舉 $-NH-$ 、 $-N(CH_3)-$ 、 $-N(C_2H_5)-$ 等。

20 本發明之一般式（1）所表示之雜多環化合物係以例如下述反應式-1 所示地來製造。亦即，於一般式（3）所表示之雜多環化合物使一般式（5）所表示之化合物反應，藉此可製造出 X 代表羥基之一般式（1）所表示之雜多環化合物（以下稱該化合物為「化合物（1a）」）。又，藉由將化合物（1a）之羥基

以各種取代基取代，可製造出 X 代表羥基以外之取代基之一般式 (1) 所表示之雜多環化合物 (以下稱該化合物為「化合物 (1b)」)。

反應式-1



5

[式中， R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 及 Z 與前述相同， X' 與羥基以外之前述 X 相同。 M^1 表示鹼金屬原子、鹼土類金屬原子等金屬原子。]

一般式 (3) 所表示之雜多環化合物為新穎性化合物，可
 10 依據例如前述反應式-5 所示之方法來製造。另一方面，一般式 (5) 所表示之化合物為可輕易獲得之習知化合物。一般式 (5) 中之 M^1 可舉例如鋰、鉀、鈉等鹼金屬原子。

一般式 (3) 所表示之雜多環化合物與一般式 (5) 所表示之化合物之反應，在例如適當溶劑中進行。溶劑可廣泛使用對
 15 反應不會造成不良影響之習知溶劑，例如四氫呋喃 (THF)、二乙醚等醚系溶劑。一般式 (3) 所表示之雜多環化合物與一般式 (5) 所表示之化合物之使用比例，通常為相對於前者 1 莫耳而後者使用 1~2 莫耳，又以使用 1.2~1.5 莫耳為佳。該反應可在室溫下或冷卻下任一情況進行。

從化合物 (1a) 導向化合物 (1b) 之反應可藉由適當使用習知之取代反應來輕易進行。

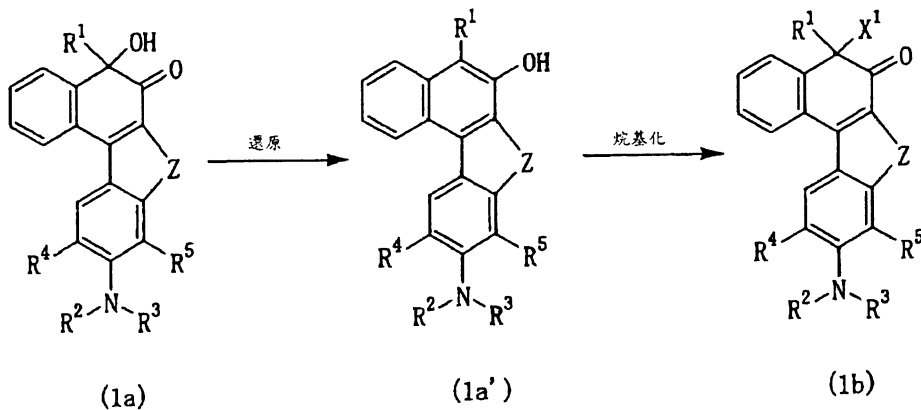
例如，X' 代表鹵素原子之化合物 (1b)，可藉由在 THF 等溶劑中，於適當溫度下使化合物 (1a) 與鹵化氫酸反應而獲得。

5 X' 代表直鏈或支鏈狀之 $C_1 \sim C_{10}$ 烷基之化合物 (1b)，係藉由在 THF 等溶劑中，於適當溫度下，使化合物 (1a) 與三氟化硼醚錯體反應，接著於所得到之反應生成物中使 N,N-二烷基苯胺或烷基鋰試劑反應而獲得。

10 X' 代表 $-OCOR^6$ 基 (R^6 同於前述) 之化合物，係藉由在脫氯化氫劑 (例如碳酸鈉等) 之存在下，於 THF 等溶劑中，於化合物 (1a) 使以一般式 R^6COOCl (R^6 同於前述) 表示之化合物反應而獲得。

又，X' 代表直鏈或支鏈狀之 $C_1 \sim C_{10}$ 烷基之化合物 (1b)，係如下述反應式-2 所示地，將化合物 (1a) 還原，接著將所得化合物 (1a') 烷基化來製造。

反應式-2

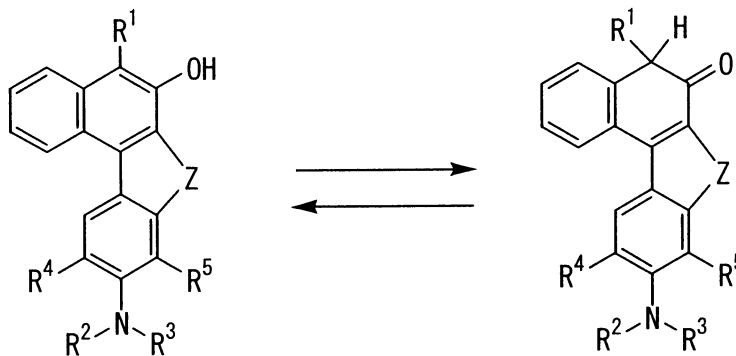


[式中， R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 及 Z 與前述相同， X^1 表示直鏈或支鏈狀之 $C_1 \sim C_{10}$ 烷基。]

化合物 (1a) 之還原，可廣泛使用利用還原劑之習知還原反應之反應條件。還原劑可舉鈹一碳等。反應溶劑可使用例如乙醇等醇類。

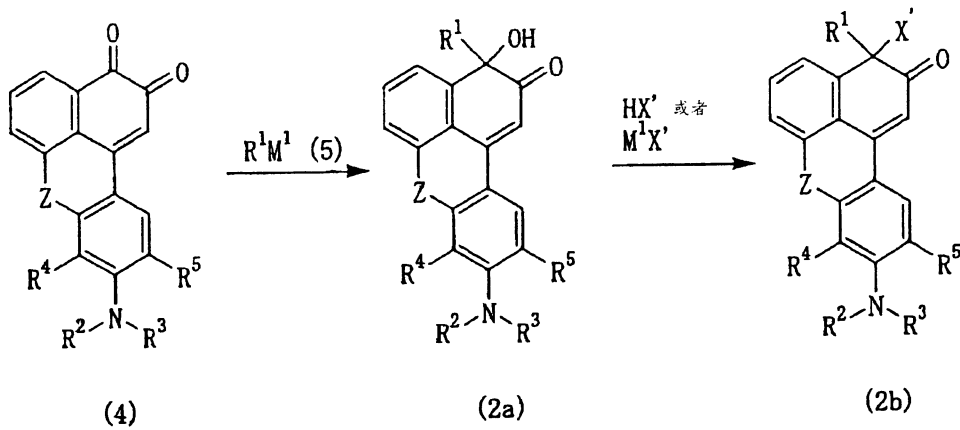
接著進行之化合物 (1a') 之烷基化，係在強鹼之存在下，藉由於化合物 (1a') 使烷基化劑反應來進行，強鹼可舉例如第三丁氧鋰、第三丁氧鈉等。又，烷基化劑可使用氯甲烷、氯乙烷、氯正丙烷、氯異丙烷、氯正丁烷、氯第二丁烷、氯第三丁烷、溴甲烷、溴乙烷、溴正丙烷、溴異丙烷、溴正丁烷、溴第二丁烷、溴第三丁烷等鹵化烷。

10 化合物 (1a') 可如下所示地採取互變異構性。



本發明之一般式 (2) 所表示之雜多環化合物係以例如下述反應式-3 所示地來製造。亦即，於一般式 (4) 所表示之雜多環化合物使一般式 (5) 所表示之化合物反應，藉此可製造出 X 代表羥基之一般式 (2) 所表示之雜多環化合物 (以下稱該化合物為「化合物 (2a)」)。又，藉由將化合物 (2a) 之羥基以各種取代基取代，可製造出 X 代表羥基以外之取代基之一般式 (2) 所表示之雜多環化合物 (以下稱該化合物為「化合物 (2b)」)。

20 反應式-3



[式中， R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 X' 、 Z 及 M^1 與前述相同。]

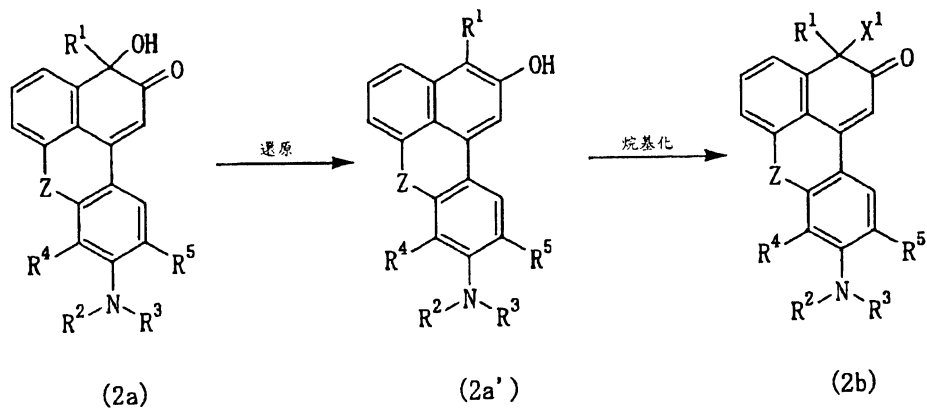
一般式 (4) 所表示之雜多環化合物為新穎性化合物，可依據例如後述反應式—6 所示之方法來製造。

- 5 從一般式 (4) 所表示之雜多環化合物得到化合物 (2a) 及化合物 (2b) 之反應，可藉由同於上述從一般式 (3) 所表示之雜多環化合物得到化合物 (1a) 及化合物 (1b) 之反應來進行。

又， X' 代表直鏈或支鏈狀之 $C_1 \sim C_{10}$ 烷基之化合物 (2b)，

- 10 係如下述反應式—4 所示地，將化合物 (2a) 還原，接著將所得化合物 (2a') 烷基化來製造。

反應式—4

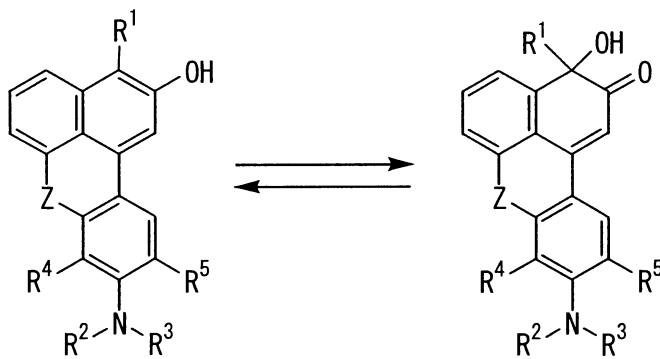


[式中， R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 X^1 及 Z 與前述相同。]

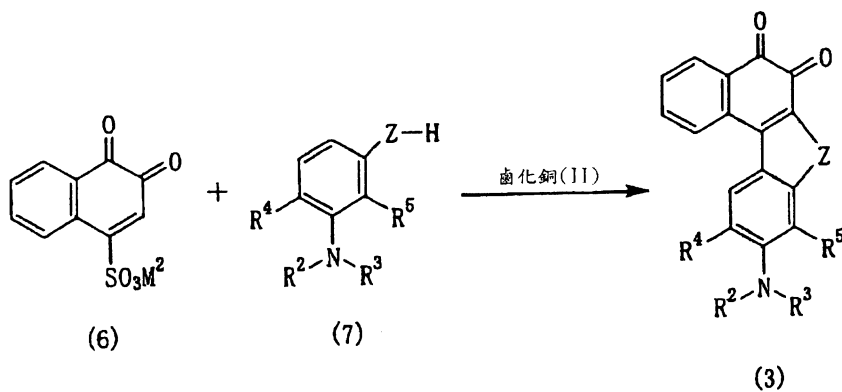
化合物(2a)之還原，可廣泛使用利用還原劑之習知還原反應之反應條件。還原劑可舉例如鈀-碳等。反應溶劑可使用例如乙醇等醇類。

接著進行之化合物(2a')之烷基化，係在強鹼之存在下，藉由於化合物(2a')使烷基化劑反應來進行，強鹼可舉例如第三丁氧鋰、第三丁氧鈉等。又，烷基化劑可使用氯甲烷、氯乙烷、氯正丙烷、氯異丙烷、氯正丁烷、氯第二丁烷、氯第三丁烷、溴甲烷、溴乙烷、溴正丙烷、溴異丙烷、溴正丁烷、溴第二丁烷、溴第三丁烷等鹵化烷。

10 化合物(2a')可如下所示地採取互變異構性。



反應式-5



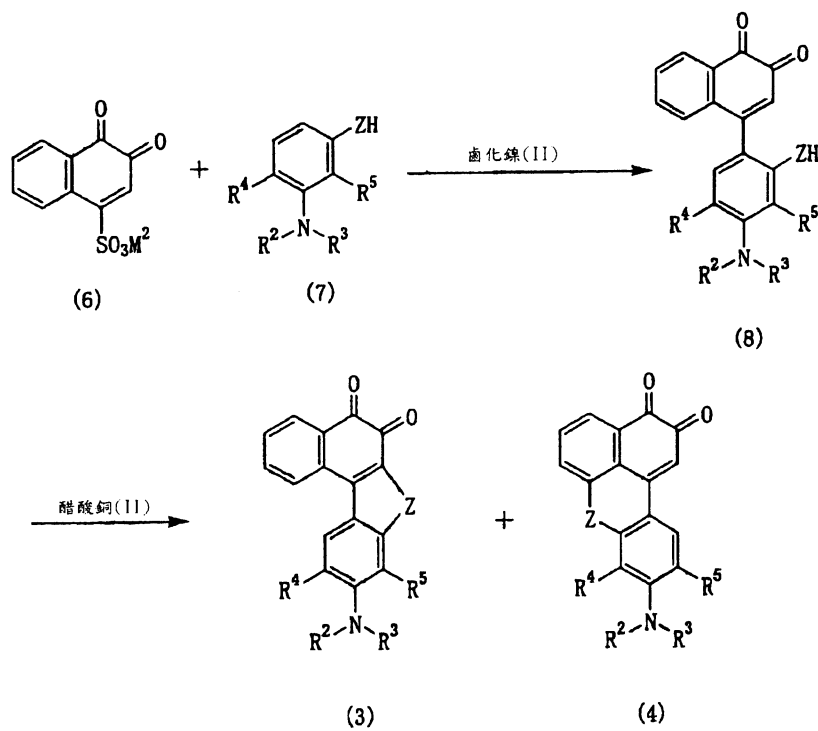
[式中， R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 及Z與前述相同， M^2 表示鹼金屬

15 原子。]

一般式 (3) 所表示之雜多環化合物係藉由使習知之一般式 (6) 所表示之磺酸鹽與習知之一般式 (7) 所表示之苯胺反應來製造。

一般式 (6) 所表示之磺酸鹽與一般式 (7) 所表示之苯胺之反應，在例如鹵化銅 (II) 之存在下，在適當溶劑中進行。溶劑可廣泛使用對反應不會造成不良影響之習知溶劑，可舉例如醋酸等有機酸、或有機酸與水之混合溶劑。一般式 (6) 所表示之磺酸鹽與一般式 (7) 所表示之苯胺之使用比例並無特別限定，通常為相對於前者 1 莫耳而後者使用 1~2 莫耳，又以使用 1.2~1.5 莫耳為佳。該反應可在室溫下及加溫下任一情況進行，而以在室溫下進行為佳。

反應式 - 6



[式中， R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 及 M^2 與前述相同。]

一般式 (4) 所表示之雜多環化合物係藉由使習知之一般式 (6) 所表示之磺酸鹽與習知之一般式 (7) 所表示之苯胺反應，接著使所得到之一般式 (8) 之化合物環化來製造。

又，在將一般式 (8) 之化合物環化之際，會附帶生成一般式 (3) 所表示之雜多環化合物。

一般式 (6) 所表示之磺酸鹽與一般式 (7) 所表示之苯胺之反應，在例如鹵化鎳 (II) 之存在下，在適當溶劑中進行。溶劑可廣泛使用對反應不會造成不良影響之習知溶劑，可舉例如二甲基甲醯胺 (DMF) 等。一般式 (6) 所表示之磺酸鹽與一般式 (7) 所表示之苯胺之使用比例並無特別限定，通常為相對於前者 1 莫耳而後者使用 1~2 莫耳，又以使用 1.2~1.5 莫耳為佳。通常相對於一般式 (6) 所表示之磺酸鹽 1 莫耳，鹵化鎳係使用 0.9~1.1 莫耳。該反應可在室溫下及加溫下任一情況進行，而以在 40~60°C 之加溫下進行為佳。

從一般式 (8) 之化合物導向化合物 (4) 之反應，在例如醋酸銅 (II) 之存在下，在適當溶劑中進行。溶劑可廣泛使用對反應不會造成不良影響之習知溶劑，可舉例如二亞甲砜 (DMSO) 等。

醋酸銅 (II) 相對於一般式 (8) 所表示之化合物 1 莫耳，通常係使用 0.9~1.1 莫耳。該反應可在室溫下及加溫下任一情況進行，而以在 90~110°C 之加溫下進行為佳。

上述各反應式中所生成之各種化合物，可依據該領域中習知之離析及精製方法，從反應混合物中單獨離析、精製。這種離析及精製方法，例如萃取、濃縮、過濾、管柱色譜層析等。

色素

本發明以一般式 (1) 所表示之雜多環化合物及以一般式 (2) 所表示之雜多環化合物，具備以下所示之優異特性。

(1) 本發明化合物具有適當之光吸收波長及發光波長。

5 (2) 本發明化合物可從廉價且容易取得之化合物簡便地製造。

(3) 本發明化合物對各種溶劑之溶解性良好，例如醇系溶劑、酮系溶劑、酯系溶劑、鹵化烴系溶劑、脂肪族烴系溶劑、芳香族烴系溶劑等有機溶劑。

10 (4) 本發明化合物發光效率高、耐熱性、耐光性及光阻材料之分散性優異。

(5) 本發明化合物不僅是溶液狀態，即使是固體狀態也具有強烈發光性 (螢光性)。

15 (6) 藉由改變取代基 X 之種類，可調整本發明化合物之固體狀態中之螢光色 (藍、綠及紅)，調整對溶劑之溶解性。

因此，本發明係提供選自於由以一般式 (1) 所表示之雜多環化合物及以一般式 (2) 所表示之雜多環化合物所構成之群之至少 1 種之雜多環化合物所形成之色素。

20 本發明之以一般式 (1) 所表示之雜多環化合物及以一般式 (2) 所表示之雜多環化合物色變換效率優異，可適當使用於色變換過濾器之製造。

又，本發明之以一般式 (1) 所表示之雜多環化合物及以一般式 (2) 所表示之雜多環化合物，可作為用以製造色增感型太陽電池之色素；熱轉印色素、噴墨用色素等之複製圖材

料；電子照相用調色劑等之帶電性色素、光學調變元件等非線性光學材料；有機太陽電池等光電變換色素；電致發光、色素雷射等螢光性色素（色變換色素）、農園藝用過濾用色素等波長變換材料來使用。

5 更詳細來說，本發明之以一般式（1）所表示之雜多環化合物及以一般式（2）所表示之雜多環化合物，可單獨變成以固體狀態發光之螢光性有機色素，作為分散染料、熱轉印用色素等著色材料、或作為有機電致發光元件之發光材料等來使用。

10 本發明之以一般式（1）所表示之雜多環化合物及以一般式（2）所表示之雜多環化合物中，其中有具有形成包接能力者，藉由在該化合物之空洞中置入各種有機客體分子，可使之形成包接錯合物。藉由形成包接錯合物，可進一步提高作為上述螢光性有機色素之諸機能（固體狀態下之發光性等）。

15 顏料乃至染料

本發明之以一般式（1）所表示之雜多環化合物及以一般式（2）所表示之雜多環化合物以及該等之包接錯合物，使之分散或溶解於適當溶劑中，可作成顏料或染料。

20 溶劑可廣泛使用在顏料及染料之領域中所使用之習知溶劑。

顏料用溶劑，具體可例示正戊烷、正己烷、正庚烷等脂肪族烴系溶劑、苯、甲苯、二甲苯、乙苯等芳香族烴系溶劑、甲基異丁酮、環己酮等酮系溶劑、丙二醇單甲醚、賽璐索芙、乙基甲醇等二醇醚系溶劑、丙二醇單甲醚乙基乙酸酯、丁基賽璐

索芙乙基乙酸酯、丁基甲醇乙基乙酸酯等乙酸酯系溶劑。染料用溶劑可例示低分子量之一般有機溶劑、二醇、二醇醚系溶劑等。

顏料及染料中之本發明雜多環化合物之含有比例並無特別限定，通常在顏料或染料中為 5~30 重量%，又以 5~30 重量% 為佳。

本發明之顏料乃至染料，係依據在該領域中通常所知之方法來製造。

【發明效果】

10 本發明之以一般式 (1) 所表示之雜多環化合物及以一般式 (2) 所表示之雜多環化合物以及該等之包接錯合物，當然可作為染料或顏料來使用，亦可作為螢光性有機色素，使用在各種用途，例如各種顯示機器中之螢光變換膜用、色素雷射用、調光用、能源變換用、高密度光記錄用、顯示用、作為分
15 子識別之螢光探測器用等。

上述螢光變換膜之具體用途，可舉 PDP (電漿顯示器)、ELD (電致發光顯示器)、LED (發光二極管)、VFD (螢光顯示管) 等。

本發明之以一般式 (3) 所表示之雜多環化合物及以一般式 (4) 所表示之雜多環化合物，係與以一般式 (1) 及 (2) 所表示之雜多環化合物相同地，可作為用以製造色增感型太陽電池之色素；熱轉印色素、噴墨用色素等之複製圖材料；電子照相用調色劑等之帶電性色素、光學調變元件等非線性光學材料等。

【實施方式】

以下舉參考例及實施例，更進一步揭示本發明。

參考例 1

一般式 (3) 之雜 5 員環化合物 [$Z=O, R^2=R^3=$ 正丁基, $R^4=R^5=H$]

5 之合成

研鉢中加入 1,2-萘醌-4-磺酸鈉 ($1.0g, 3.84 \times 10^{-3}$ 莫耳) 及 $CuCl_2$ ($0.26g, 1.92 \times 10^{-3}$ 莫耳)，使之溶解於少量的醋酸水溶液。接著，將間-(二丁胺基)酚 ($0.85g, 3.84 \times 10^{-3}$ 莫耳) 溶解於少量的醋酸水溶液中添加於其中，在研鉢中相互研磨。放置
10 數天使其反應後，加水過濾析出物，並減壓乾燥。

以四氯甲烷萃取該析出物後，將萃取液中之二氯甲烷濃縮，將殘液交付於二氧化矽凝膠管柱 (顯像劑：二氯甲烷/醋酸乙酯=6/1) 進行分離精製，藉此得到一般式 (3) 之雜 5 員環化合物 [$Z=O, R^2=R^3=$ 正丁基, $R^4=R^5=H$] 之紫色粉末狀結晶 $0.586g$
15 (產率 40.9%)。

熔點：149~153°C

1H -NMR 光譜 ($CDCl_3$) δ ppm :

1.00 (6H,t)、1.37-1.50 (4H,m)、1.62-1.74 (4H,m)、
3.34 (4H,t)、6.65 (1H,s)、6.80 (1H,dd)、7.43 (1H,dt)、7.65
20 (1H,dt)、7.88 (1H,d)、7.93 (1H,d)、8.11 (1H,d)

IR 光譜 (KBr) : $1618cm^{-1}$

光吸收特性 λ_{max}/nm ($\epsilon_{max}/dm^3mol^{-1}cm^{-1}$) :

410 (7800)、533 (10800)

參考例 2

一般式(3)之雜 5 員環化合物[Z=NH, R²=R³=正丁基, R⁴=R⁵=H]之合成

使 1,2-萘醌-4-磺酸鈉鹽 (2.60g, 1.00×10⁻² 莫耳)、N,N-二丁基-3-胺基苯胺 (2.20g, 1.00×10⁻² 莫耳) 及醋酸鎳四水合物 (2.49g, 1.00×10⁻² 莫耳) 溶解於醋酸水溶液 40ml (醋酸: 水=4:1), 在室溫下 (25°C) 攪拌 44 小時。並以二氧化矽凝膠薄層色層分析 (顯像劑: 二氯甲烷/醋酸乙酯=10/1) 確認反應之進行, 確認在二氧化矽凝膠薄層色層分析圖上 N,N-二丁基-3-胺基苯胺之斑點消失後, 使反應停止。

10 反應停止後, 於反應溶液中加水過濾, 並以二氯甲烷從過濾物中萃取生成物。將二氯甲烷萃取液濃縮, 將殘液交付於二氧化矽凝膠管柱 (顯像劑: 正己烷/醋酸乙酯=2/1) 進行分離精製, 藉此得到一般式(3)之雜 5 員環化合物[Z=NH, R²=R³=正丁基, R⁴=R⁵=H]之綠色結晶 0.295g (產率 7.9%)。

15 ¹H-NMR 光譜 (DMSO-d₆) δ ppm:

0.92 (6H,t)、1.31–1.36 (4H,m)、1.53–1.56 (4H,m)、3.35 (4H,t)、6.39 (1H,d)、6.81 (1H,dd)、7.30 (1H,t)、7.61 (1H,t)、7.81 (1H,t)、8.01 (2H,m)

IR 光譜 (KBr): 3229、1604cm⁻¹

20 光吸收特性 λ_{max}/nm (ε_{max}/dm³mol⁻¹cm⁻¹):

582 (6200)、433 (11100)、282 (36500)、271 (35700)

參考例 3

一般式(4)之雜 6 員環化合物[Z=O, R²=R³=正丁基, R⁴=R⁵=H]之合成

(1) 一般式 (8) 之化合物 [$Z=O$, $R^2=R^3$ =正丁基, $R^4=R^5=H$]
之製造

使 1,2-萘醌-4-磺酸鈉 (1.0g, 3.84×10^{-3} 莫耳)、N,N-
丁基-3-胺基酚 (1.28g, 4.01×10^{-3} 莫耳) 及 $NiCl_2$ (0.5g, 3.84
5 $\times 10^{-3}$ 莫耳) 溶解於 DMF, 在 $50^\circ C$ 加熱攪拌 3 小時。反應結束
後注入 300ml 之離子交換水, 濾取析出物。以二氯甲烷從過濾
物中萃取生成物, 減壓濃縮, 並將殘液交付於二氧化矽凝膠管
柱 (顯像劑: 二氯甲烷/醋酸乙酯=20/1) 進行分離精製, 藉此
得到一般式 (8) 之化合物 [$Z=O$, $R^2=R^3$ =正丁基, $R^4=R^5=H$]
10 藍色粉末狀結晶 0.77g (產率 53.1%)。

熔點: $142 \sim 144^\circ C$

1H -NMR 光譜 ($CDCl_3$) δ ppm:

0.98 (6H,t)、1.24-1.43 (4H,m)、1.58-1.66 (4H,m)、
3.31 (4H,t)、5.37 (1H,s)、6.23 (1H,d)、6.33 (1H,dd)、6.51
15 (1H,s)、7.07(1H,d)、7.45(1H,dd)、7.49(1H,td)、7.59(1H,td)、
8.15 (1H,dd)

IR 光譜 (KBr): 1605 、 1694 、 $3374cm^{-1}$

光吸收特性 λ_{max}/nm ($\epsilon_{max}/dm^3mol^{-1}cm^{-1}$):

504 (3860)、409 (4080)

20 (2) 一般式 (4) 之雜 6 員環化合物 [$Z=O$, $R^2=R^3$ =正丁基,
 $R^4=R^5=H$]之製造

將上述所得到之一般式 (8) 之化合物 [$Z=O$, $R^2=R^3$ =正丁
基, $R^4=R^5=H$] 及無水醋酸銅 (995mg, 5.49 毫莫耳) 溶解於
DMSO60ml, 在 $100^\circ C$ 加熱攪拌 11 小時。反應結束後, 將反應

物注入蒸餾水 400ml，濾取析出物，並交付於二氧化矽凝膠管柱（顯像劑：二氯甲烷/醋酸乙酯=10/1）進行分離精製，藉此得到一般式（4）之雜 6 員環化合物[Z=O， $R^2=R^3$ =正丁基， $R^4=R^5$ =H]之藍色粉末結晶 1.27g（產率 61.7%）。又，這時，也

5 一併獲得一般式（3）之雜 5 員環化合物[Z=O， $R^2=R^3$ =正丁基， $R^4=R^5$ =H]之紫色粉末狀結晶 0.22g（產率 10.4%）。

一般式（4）之雜 6 員環化合物[Z=O， $R^2=R^3$ =正丁基， $R^4=R^5$ =H]之物性

熔點：132~133°C

10 $^1\text{H-NMR}$ 光譜（ CDCl_3 ） δ ppm：

0.97（6H,t）、1.34—1.43（4H,m）、1.57—1.65（4H,m）、
3.34（4H,t）、6.20（1H,d）、6.50（1H,s）、6.58（1H,dd）、7.39
（1H,dd）、7.49（1H,dd）、7.56（1H,d）、7.89（1H,d）

IR 光譜（KBr）：1221、1594、1689 cm^{-1}

15 光吸收特性 $\lambda_{\text{max}}/\text{nm}$ （ $\epsilon_{\text{max}}/\text{dm}^3\text{mol}^{-1}\text{cm}^{-1}$ ）：

530（12000）、437（7900）

實施例 1

一般式（1）之雜 5 員環化合物[Z=O， R^1 =甲基，X=OH， $R^2=R^3$ =正丁基， $R^4=R^5$ =H]之製造

20 在氬氣氣體環境下，使參考例 1 中獲得之一般式（3）之雜 5 員環化合物[Z=O， $R^2=R^3$ =正丁基， $R^4=R^5$ =H]（2.0g， 5.36×10^{-3} 莫耳）溶解於無水 THF200ml，冷卻至 -108°C 後，以注射器注入 2.0M 之甲基鋰—二乙醚溶液（3.1ml， 6.97×10^{-3} 莫耳），在溶劑中 15 分鐘、之後在室溫下攪拌 15 分鐘。反應結束後，

添加飽和氯化銨水溶液使之驟冷，並減壓除去溶劑。於殘留物中加水過濾，並以二氯甲烷從過濾物中萃取生成物。將二氯甲烷萃取液水洗後，減壓濃縮，再將殘液交付於二氧化矽凝膠管柱（顯像劑：二氯甲烷/醋酸乙酯=10/1）進行分離精製，藉此
5 得到一般式（1）之雜 5 員環化合物[Z=O，R¹=甲基，X=OH，R²=R³=正丁基，R⁴=R⁵=H]之黃色結晶 1.37g（產率 65%）。

熔點：150~153°C

¹H-NMR 光譜（CDCl₃）δ ppm：

0.99（6H,t）、1.35—1.45（4H,m）、1.59—1.70（4H,m）、
10 1.66（3H,s）、3.36—3.40（4H,t）、3.71（1H,s）、6.73（1H,d）、
6.83（1H,dd）、7.44（2H,td）、7.80（1H,dd）、7.96（1H,d）、8.03
（1H,dd）

IR 光譜（KBr）：1644、3432cm⁻¹

光吸收特性 λ_{max}/nm（ε_{max}/dm³mol⁻¹cm⁻¹）：
15 334（8200）、421（21300）

螢光特性 λ_{em}：478nm

實施例 2

一般式（1）之雜 5 員環化合物[Z=O，R¹=正丁基，X=OH，R²=R³=正丁基，R⁴=R⁵=H]之製造

20 在氬氣氣體環境下，使參考例 1 中獲得之一般式（3）之雜 5 員環化合物[Z=O，R²=R³=正丁基，R⁴=R⁵=H]（2.0g，5.36×10⁻³ 莫耳）溶解於無水 THF200ml，冷卻至 -108°C 後，以注射器注入 1.6M 之丁基鋰—二乙醚溶液（4.4ml，6.97×10⁻³ 莫耳），在溶劑中 15 分鐘、之後在室溫下攪拌 15 分鐘。反應結束後，

添加飽和氯化銨水溶液使之驟冷，並減壓除去溶劑。於殘留物中加水過濾，並以二氯甲烷從過濾物中萃取生成物。將二氯甲烷萃取液水洗後，減壓濃縮，再將殘液交付於二氧化矽凝膠管柱（顯像劑：己烷/醋酸乙酯=5/2）進行分離精製，藉此得到一般式(1)之雜5員環化合物[Z=O, R¹=正丁基, X=OH, R²=R³=正丁基, R⁴=R⁵=H]之黃色結晶 0.960g (產率 41%)。

熔點：128~131°C

¹H-NMR 光譜 (CDCl₃) δ ppm :

0.74 (3H,t)、0.99 (6H,t)、1.08—1.18 (2H,m)、1.35—1.54 (4H,m)、1.60—1.68(6H,m)、1.81—2.00(2H,m)、3.38(4H,t)、3.74 (1H,s)、6.73 (1H,d)、6.83 (1H,dd)、7.40—7.45 (2H,m)、7.74 (1H,dd)、7.96 (1H,d)、8.02 (1H,dd)

IR 光譜 (KBr) : 1645、3406cm⁻¹

光吸收特性 λ_{max}/nm (ε_{max}/dm³mol⁻¹cm⁻¹) :
337 (6800)、423 (17800)

螢光特性 λ_{em} : 477nm

實施例 3

一般式(1)之雜5員環化合物[Z=O, R¹=苯基, X=OH, R²=R³=正丁基, R⁴=R⁵=H]之製造

在氫氣氣體環境下，使參考例 1 中獲得之一般式(3)之雜5員環化合物[Z=O, R²=R³=正丁基, R⁴=R⁵=H] (1.0g, 2.68×10⁻³ 莫耳) 溶解於無水 THF200ml，冷卻至 -108°C 後，以注射器注入 1.8M 之苯基鋰—二乙醚溶液 (1.5ml, 2.68×10⁻³ 莫耳)，在溶劑中 15 分鐘、之後在室溫下攪拌 15 分鐘。反應結束後，

添加飽和氯化銨水溶液使之驟冷，並減壓除去溶劑。於殘留物中加水過濾，並以二氯甲烷從過濾物中萃取生成物。將二氯甲烷萃取液水洗後，減壓濃縮，再將殘液交付於二氧化矽凝膠管柱（顯像劑：苯/丙酮=10/1）進行分離精製，得到一般式（1）之雜 5 員環化合物[Z=O，R¹=苯基，X=OH，R²=R³=正丁基，R⁴=R⁵=H]之橙黃色結晶 0.216g（產率 18%）。

熔點：164~168°C

¹H-NMR 光譜（CDCl₃）δ ppm：

0.98(6H,t)、1.30—1.60(8H,m)、3.37(4H,t)、4.53(1H,s)、
10 6.68(1H,d)、6.86(1H,s)、7.17—7.22(3H,m)、7.34—7.38
(2H,m)、7.39—7.47(2H,m)、7.61(1H,d)、8.00(1H,d)、
8.08(1H,d)

IR 光譜（KBr）：1652、3449cm⁻¹

光吸收特性 λ_{max}/nm（ε_{max}/dm³mol⁻¹cm⁻¹）：
15 341(7700)、430(21600)

螢光特性 λ_{em}：486nm

實施例 4

一般式（2）之雜 6 員環化合物[Z=O，R¹=甲基，X=OH，R²=R³=正丁基，R⁴=R⁵=H]之製造

20 在氬氣氣體環境下，使參考例 3 中獲得之一般式（4）之雜 6 員環化合物[Z=O，R²=R³=正丁基，R⁴=R⁵=H]（1.0g，2.66×10⁻³莫耳）溶解於無水 THF200ml，冷卻至 -108°C 後，以注射器注入 1.0M 之甲基鋰—二乙醚溶液（3.1ml，3.19×10⁻³莫耳），在溶劑中 15 分鐘、之後在室溫下攪拌 15 分鐘。反應結束後，

添加飽和氯化銨水溶液使之驟冷，並減壓除去溶劑。於殘留物中加水過濾，並以二氯甲烷從過濾物中萃取生成物。將二氯甲烷萃取液水洗後，減壓濃縮，再將殘液交付於二氧化矽凝膠管柱（顯像劑：己烷/醋酸乙酯=1/1）進行分離精製，藉此得到一般式（2）之雜 6 員環化合物[Z=O，R¹=甲基，X=OH，R²=R³=正丁基，R⁴=R⁵=H]之黃色結晶 0.53g（產率 50.8%）。

熔點：113~116°C

¹H-NMR 光譜（丙酮-d₆）δ ppm：

0.98 (6H,t)、1.38—1.44 (4H,m)、1.47 (3H,s)、1.63—1.71 (4H,m)、3.50 (4H,t)、4.86 (1H,s)、6.07 (1H,d)、6.24 (1H,s)、6.82 (1H,dd)、7.22 (1H,dd)、7.53 (1H,dd)、7.59 (1H,dd)、7.87 (1H,dd)

IR 光譜 (KBr)：1254、1643、3432cm⁻¹

光吸收特性 λ_{max}/nm (ε_{max}/dm³mol⁻¹cm⁻¹)：
418 (31600)、438 (31500)

螢光特性 λ_{em}：462nm

實施例 5

一般式(2)之雜 6 員環化合物[Z=O，R¹=正丁基，X=OH，R²=R³=正丁基，R⁴=R⁵=H]之製造

在氫氣氣體環境下，使參考例 3 中獲得之一般式（4）之雜 6 員環化合物[Z=O，R²=R³=正丁基，R⁴=R⁵=H]（2.0g，5.32×10⁻³ 莫耳）溶解於無水 THF200ml，冷卻至 -108°C 後，以注射器注入 1.6M 之丁基鋰—二乙醚溶液（4.4ml，6.97×10⁻³ 莫耳），在溶劑中 15 分鐘、之後在室溫下攪拌 15 分鐘。反應結束後，

添加飽和氯化銨水溶液，將反應溶液減壓濃縮。接著加水過濾，並於過濾物中添加二氯甲烷以萃取出生成物。水洗後，將二氯甲烷層減壓乾涸，後交付於二氧化矽凝膠管柱（顯像劑：二氯甲烷/醋酸乙酯=10/1）進行分離精製，藉此得到一般式（2）

5 之雜 6 員環化合物[Z=O, R¹=正丁基, X=OH, R²=R³=正丁基, R⁴=R⁵=H]之黃色結晶 0.960g（產率 41.5%）。

熔點：125~127°C

¹H-NMR 光譜（丙酮-d₆）δ ppm：

0.77 (3H,t)、0.98 (6H,t)、1.08—1.29 (4H,m)、1.38—1.48
 10 (4H,m)、1.63—1.80 (6H,m)、3.49 (4H,t)、4.44 (1H,s)、6.24
 (1H,s)、6.51(1H,d)、6.82(1H,dd)、7.22(1H,dd)、7.49(1H,dd)、
 7.58 (1H,t)、7.87 (1H,d)

IR 光譜 (KBr)：1224、1643、3432cm⁻¹

光吸收特性 λ_{max}/nm (ε_{max}/dm³mol⁻¹cm⁻¹)：

15 420 (29700)、438 (29300)

螢光特性 λ_{em}：463nm

實施例 6

一般式（2）之雜 6 員環化合物[Z=O, R¹=苯基, X=OH, R²=R³=正丁基, R⁴=R⁵=H]之製造

20 在氬氣氣體環境下，使參考例 3 中獲得之一般式（4）之雜 6 員環化合物[Z=O, R²=R³=正丁基, R⁴=R⁵=H]（2.0g, 5.32 ×10⁻³ 莫耳）溶解於無水 THF200ml，冷卻至 -108°C。在氬氣氣體環境下，以注射器注入 0.94M 之苯基鋰—二乙醚溶液（6.8ml, 6.4×10⁻³ 莫耳），在溶劑中 15 分鐘、之後在室溫下攪

拌 15 分鐘。反應結束後，添加飽和氯化銨水溶液使之驟冷，並減壓除去溶劑。於殘留物中加水過濾，並以二氯甲烷從過濾物中萃取生成物。將二氯甲烷萃取液水洗後，減壓濃縮，再將殘液交付於二氧化矽凝膠管柱（顯像劑：二氯甲烷/醋酸乙酯 =10/1）進行分離精製，藉此得到一般式（2）之雜 6 員環化合物[Z=O, R¹=苯基, X=OH, R²=R³=正丁基, R⁴=R⁵=H]之紅褐色結晶 0.33g（產率 13.7%）。

熔點：175~177°C

¹H-NMR 光譜（丙酮-d₆）δ ppm：

10 0.99（6H,t）、1.40—1.49（4H,m）、1.65—1.73（4H,m）、3.52（4H,t）、5.33（1H,s）、6.24（1H,s）、6.56（1H,d）、6.85（1H,dd）、7.15—7.23（3H,m）、7.29（1H,dd）、7.34—7.37（2H,m）、7.42（1H,dd）、7.57（1H,dd）、7.89（1H,d）

IR 光譜（KBr）：1222、1639、3429cm⁻¹

15 光吸收特性 λ_{max}/nm（ε_{max}/dm³mol⁻¹cm⁻¹）：
426（28500）、446（31200）

螢光特性 λ_{em}：470nm

實施例 7

一般式（1）之雜 5 員環化合物[Z=NH, R¹=甲基, X=OH, R²=R³=正丁基, R⁴=R⁵=H]之製造

在氫氣氣體環境下，使參考例 2 中獲得之一般式（3）之雜 5 員環化合物[Z=NH, R²=R³=正丁基, R⁴=R⁵=H]（1.0g, 2.68×10⁻³ 莫耳）溶解於無水 THF200ml，冷卻至 -108°C 後，以注射器注入 1.0M 之甲基鋰—二乙醚溶液（6.4ml, 6.40×10⁻³ 莫耳），

在溶劑中 15 分鐘、之後在室溫下攪拌 15 分鐘。反應結束後，添加飽和氯化銨水溶液使之驟冷，並減壓除去溶劑。於殘留物中加水過濾，並以二氯甲烷從過濾物中萃取生成物。將二氯甲烷萃取液水洗後濃縮，再將殘液交付於二氧化矽凝膠管柱（顯像劑：二氯甲烷/醋酸乙酯=2/1）進行分離精製，藉此得到一般式 (1) 之雜 5 員環化合物 [$Z=NH$, $R^1=$ 甲基, $X=OH$, $R^2=R^3=$ 正丁基, $R^4=R^5=H$] 之黃色結晶 0.362g (產率 34.6%)。

熔點：137~140°C

1H -NMR 光譜 (丙酮- d_6) δ ppm :

10 0.98 (6H,t)、1.37—1.47 (4H,m)、1.56 (3H,s)、1.60—1.70 (4H,m)、3.44 (4H,t)、4.52 (1H,s)、6.72 (1H,dd)、6.90 (1H,dd)、7.32 (1H,td)、7.40 (1H,td)、7.76 (1H,dd)、8.12 (1H,d)、8.17 (1H,d)、10.55 (1H,s)

IR 光譜 (KBr) : 1601、3251、3399 cm^{-1}

15 光吸收特性 λ_{max}/nm ($\epsilon_{max}/dm^3mol^{-1}cm^{-1}$) :
426 (14000)、376 (13200)

螢光特性 λ_{em} : 477nm

實施例 8

一般式 (1) 之雜 5 員環化合物 [$Z=O$, $R^1=$ 正丁基, $X=$ 正丁基, 20 $R^2=R^3=$ 正丁基, $R^4=R^5=H$] 之製造

在氫氣氣體環境下，使實施例 2 中獲得之一般式 (1) 之雜 5 員環化合物 [$Z=O$, $R^1=$ 正丁基, $X=OH$, $R^2=R^3=$ 正丁基, $R^4=R^5=H$] (0.14g, 3.23×10^{-4} 莫耳) 及 10% 鈮/碳 (20mg) 溶解於 THF—乙醇混合溶劑 (1:1) 10ml, 在室溫攪拌 10 小時。

反應結束後，過濾反應溶液，在減壓下從濾液中除去溶劑，藉此得到一般式(1a')之雜 5 員環化合物[Z=O, R¹=正丁基, R²=R³=正丁基, R⁴=R⁵=H]130mg (產率 97%)。

¹H-NMR 光譜 (丙酮-d₆) δ ppm :

5 0.87 – 1.00 (9H,m)、1.29 – 1.53 (12H,m)、3.15 – 3.43
 (6H,m)、6.92 – 7.09 (3H,m)、7.21 – 7.29 (2H,m)、7.35 – 7.44
 (1H,m)、7.58 – 7.64 (1H,m)

使上述得到之一般式 (1a') 之雜 5 員環化合物[Z=O, R¹=正丁基, R²=R³=正丁基, R⁴=R⁵=H] (0.10g, 2.39×10⁻⁴ 莫耳)
 10 溶解於碘代丁烷 10ml 中，接著於該溶液中添加第三丁基鋰
 (0.06g, 7.50×10⁻⁴ 莫耳)，在 130°C 攪拌 5 小時。反應結束後，
 於反應溶液中添加二氯甲烷 20ml，接著將該混合物水洗、濃
 縮，再將殘液交付於二氧化矽凝膠管柱 (顯像劑：二氯甲烷)
 進行分離精製，藉此得到一般式 (1) 之雜 5 員環化合物[Z=O,
 15 R¹=正丁基, X=正丁基, R²=R³=正丁基, R⁴=R⁵=H]之黃色結晶
 0.028g (產率 24.8%)。

¹H-NMR 光譜 (丙酮-d₆) δ ppm :

 0.66 (6H,t)、0.80 – 0.94 (4H,m)、0.99 (6H,t)、1.03 – 1.12
 (4H,m)、1.33 – 1.49 (4H,m)、1.62 – 1.72 (4H,m)、1.91 – 1.99
 20 (2H,m)、2.18 – 2.26 (2H,m)、3.50 (4H,t)、6.83 (1H,d)、7.00
 (1H,dd)、7.46 – 7.51 (2H,m)、7.64 (1H,dd)、8.19 (1H,t)、
 8.25 – 8.27 (1H,m)

IR 光譜 (KBr) : 1725cm⁻¹

光吸收特性 λ_{max}/nm (ε_{max}/dm³mol⁻¹cm⁻¹) :

335 (19100)、410 (12500)

螢光特性 λ_{em} : 452nm

實施例 9

一般式 (2) 之雜 6 員環化合物 [$Z=O$, $R^1=$ 正丁基, $X=$ 正丁基, $R^2=R^3=$ 正丁基, $R^4=R^5=H$] 之製造

在氫氣氣體環境下, 使實施例 5 中獲得之一般式 (2) 之雜 6 員環化合物 [$Z=O$, $R^1=$ 正丁基, $X=OH$, $R^2=R^3=$ 正丁基, $R^4=R^5=H$] (0.20g, 4.61×10^{-4} 莫耳) 及 10% 鈮/碳 (60mg) 溶解於 THF-乙醇混合溶劑 (1:1) 20ml, 在室溫攪拌 10 小時。
10 反應結束後, 過濾反應溶液, 在減壓下從濾液中除去溶劑, 藉此得到一般式 (2a') 之雜 6 員環化合物 [$Z=O$, $R^1=$ 正丁基, $R^2=R^3=$ 正丁基, $R^4=R^5=H$] 180mg (產率 92%)。

1H -NMR 光譜 (丙酮- d_6) δ ppm:

0.95 (3H,t)、1.12 (6H,t)、1.08-1.29 (6H,m)、1.38-1.48
15 (6H,m)、2.63-2.94 (2H,m)、3.32 (4H,t)、6.41 (1H,d)、6.48
(1H,dd)、6.92 (1H,dd)、7.08 (1H,dd)、7.18-7.24 (2H,m)、
7.35 (1H,dd)

使上述得到之一般式 (2a') 之雜 6 員環化合物 [$Z=O$, $R^1=$ 正丁基, $R^2=R^3=$ 正丁基, $R^4=R^5=H$] (0.10g, 2.39×10^{-4} 莫耳)
20 溶解於碘代丁烷 10ml 中, 接著於該溶液中添加第三丁基鋰 (0.06g, 7.50×10^{-4} 莫耳), 在 130°C 攪拌 5 小時。反應結束後, 於反應溶液中添加二氯甲烷 20ml, 接著將該混合物水洗、濃縮, 再將殘液交付於二氧化矽凝膠管柱 (顯像劑: 二氯甲烷) 進行分離精製, 藉此得到一般式 (2) 之雜 6 員環化合物 [$Z=O$,

R^1 =正丁基， X =正丁基， $R^2=R^3$ =正丁基， $R^4=R^5=H$]之黃色結晶
0.022g (產率 19.5%)。

1H -NMR 光譜 (丙酮- d_6) δ ppm :

0.56 (6H,t)、0.60–0.67 (4H,m)、0.85 (6H,t)、0.91–1.02
5 (4H,m)、1.25–1.32 (4H,m)、1.49–1.55 (4H,m)、1.63–1.69
(2H,m)、2.00–2.08 (2H,m)、3.35 (4H,t)、6.20 (1H,d)、6.34
(1H,dd)、6.65 (1H,dd)、7.03 (1H,d)、7.22 (1H,d)、7.42–
7.56 (1H,m)、7.71 (1H,d)

IR 光譜 (KBr): 1593cm^{-1}

10 光吸收特性 $\lambda_{\text{max}}/\text{nm}$ ($\epsilon_{\text{max}}/\text{dm}^3\text{mol}^{-1}\text{cm}^{-1}$):

407 (28800)、427 (26800)

螢光特性 λ_{em} : 448nm

實施例 10

一般式 (1) 之雜 5 員環化合物 [$Z=O$ ， R^1 =甲基， X =乙醯氧基，
15 $R^2=R^3$ =正丁基， $R^4=R^5=H$]之製造

使實施例 1 中獲得之一般式 (1) 之雜 5 員環化合物 [$Z=O$ ，
 R^1 =正丁基， $X=OH$ ， $R^2=R^3$ =正丁基， $R^4=R^5=H$] (0.1g， 2.55×10^{-4} 莫耳)及乙醯氯(0.06g， 7.65×10^{-4} 莫耳)溶解於無水 THF10ml
後，添加碳酸鈉 (0.081g， 7.65×10^{-4} 莫耳)，在 50°C 攪拌 2 天。

20 反應結束後，於反應溶液中添加二氯甲烷 20ml，接著將該
混合物水洗、濃縮，再將殘液交付於二氧化矽凝膠管柱 (顯像
劑：二氯甲烷) 進行分離精製，藉此得到一般式 (1) 之雜 5
員環化合物 [$Z=O$ ， R^1 =甲基， X =乙醯氧基， $R^2=R^3$ =正丁基，
 $R^4=R^5=H$]之黃色結晶 0.077g (產率 70%)。

$^1\text{H-NMR}$ 光譜 (CDCl_3) δ ppm :

0.98 (6H,t)、1.34–1.44 (4H,m)、1.57 (3H,s)、1.59–1.67
(4H,m)、3.37 (4H,m)、6.74 (1H,d)、6.82 (1H,dd)、7.37–
7.50 (3H,m)、7.96 (1H,d)、8.07 (1H,dd)

5 IR 光譜 (KBr) : 1742、1619 cm^{-1}

光吸收特性 $\lambda_{\text{max}}/\text{nm}$ ($\epsilon_{\text{max}}/\text{dm}^3\text{mol}^{-1}\text{cm}^{-1}$) :

419 (17000)、332 (7600)

螢光特性 λ_{em} : 480nm

【圖式簡單說明】

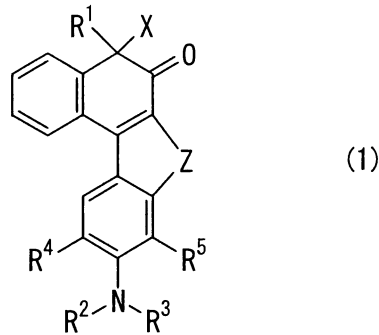
10 無

【主要元件符號說明】

無

十、申請專利範圍：

1. 一種雜多環化合物，係以下述一般式（1）表示者：



[式中， R^1 表示直鏈或支鏈狀之 $C_1\sim C_{10}$ 烷基、取代或無
5 取代之 $C_5\sim C_{10}$ 環烷基、或取代或無取代之苯基，

R^2 及 R^3 為相同或相異，且表示直鏈或支鏈狀之 $C_1\sim C_{10}$
烷基、取代或無取代之 $C_5\sim C_{10}$ 環烷基、或取代或無取代之
苯基，又，該 R^2 及 R^3 亦可與其結合之氮原子一起相互結合
而形成雜環，

10 R^4 及 R^5 表示氫原子，

又， R^2 與 R^4 及 R^3 與 R^5 可各自結合形成直鏈或支鏈狀之
 $C_2\sim C_7$ 烯基，

X 表示氫原子、直鏈或支鏈狀之 $C_1\sim C_{10}$ 烷基、取代或無
取代之 $C_5\sim C_{10}$ 環烷基、取代或無取代之苯基、鹵素原子、
15 $-OCOR^6$ 基、 $-OR^6$ 基、 $-SR^6$ 基或 $-NR^6R^7$ 基，

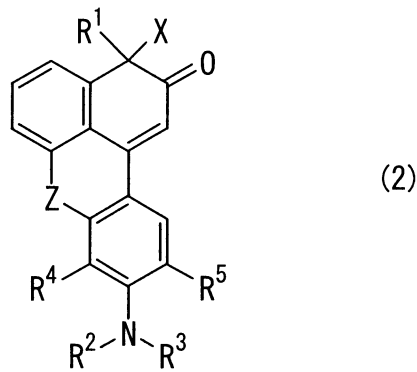
R^6 及 R^7 為相同或相異，且表示氫原子、直鏈或支鏈狀
之 $C_1\sim C_6$ 烷基、或取代或無取代之 $C_5\sim C_{10}$ 環烷基，

Z 表示二價基]。

2. 如申請專利範圍第1項之雜多環化合物，其中一般式（1）
20 中之 R^1 為直鏈或支鏈狀之 $C_1\sim C_{10}$ 烷基、或取代或無取代之

苯基， R^2 及 R^3 為直鏈或支鏈狀之 $C_1\sim C_{10}$ 烷基， R^4 及 R^5 為氫原子， X 為氫原子、直鏈或支鏈狀之 $C_1\sim C_{10}$ 烷基、羥基或一 $OCOR^6$ 基（ R^6 為氫原子、或直鏈或支鏈狀之 $C_1\sim C_6$ 烷基）、 Z 為 $-O-$ 、 $-S-$ 或 $-NR^6-$ （ R^6 為氫原子、或直鏈或支鏈狀之 $C_1\sim C_6$ 烷基）。

3. 一種雜多環化合物，係以下述一般式（2）表示者：



[式中， R^1 表示直鏈或支鏈狀之 $C_1\sim C_{10}$ 烷基、取代或無取代之 $C_5\sim C_{10}$ 環烷基、或取代或無取代之苯基，

10 R^2 及 R^3 為相同或相異，且表示直鏈或支鏈狀之 $C_1\sim C_{10}$ 烷基、取代或無取代之 $C_5\sim C_{10}$ 環烷基、或取代或無取代之苯基，又，該 R^2 及 R^3 亦可與其結合之氮原子一起相互結合而形成雜環，

R^4 及 R^5 表示氫原子，

15 又， R^2 與 R^4 及 R^3 與 R^5 可各自結合形成直鏈或支鏈狀之 $C_2\sim C_7$ 烯基，

X 表示氫原子、直鏈或支鏈狀之 $C_1\sim C_{10}$ 烷基、取代或無取代之 $C_5\sim C_{10}$ 環烷基、取代或無取代之苯基、鹵素原子、 $-OCOR^6$ 基、 $-OR^6$ 基、 $-SR^6$ 基或 $-NR^6R^7$ 基，

20 R^6 及 R^7 為相同或相異，且表示氫原子、直鏈或支鏈狀

之 $C_1\sim C_6$ 烷基、或取代或無取代之 $C_5\sim C_{10}$ 環烷基，

Z表示二價基]。

4. 如申請專利範圍第3項之雜多環化合物，其中一般式(2)中之 R^1 為直鏈或支鏈狀之 $C_1\sim C_{10}$ 烷基、或取代或無取代之苯基， R^2 及 R^3 為直鏈或支鏈狀之 $C_1\sim C_{10}$ 烷基， R^4 及 R^5 為氫原子，X為氫原子、直鏈或支鏈狀之 $C_1\sim C_{10}$ 烷基、羥基或 $-OCOR^6$ 基(R^6 為氫原子、或直鏈或支鏈狀之 $C_1\sim C_6$ 烷基)、Z為 $-O-$ 、 $-S-$ 或 $-NR^6-$ (R^6 為氫原子、或直鏈或支鏈狀之 $C_1\sim C_6$ 烷基)。
5. 一種色素，係由申請專利範圍第1~4項中任一項之雜多環化合物所形成者。
6. 一種顏料或染料，係含有申請專利範圍第1~4項中任一項之雜多環化合物者。

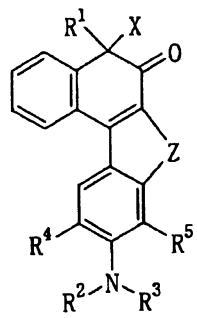
七、指定代表圖：

(一)本案指定代表圖為：第（ 無 ）圖。

(二)本代表圖之元件代表符號簡單說明：

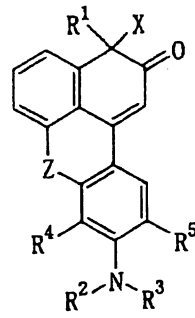
無

八、本案若有化學式時，請揭示最能顯示發明特徵的化學式：



(1)

或者



(2)