

【公報種別】特許法第17条の2の規定による補正の掲載

【部門区分】第7部門第2区分

【発行日】令和7年6月30日(2025.6.30)

【国際公開番号】WO2024/071143

【出願番号】特願2024-550358(P2024-550358)

【国際特許分類】

H 1 0 K 30/60(2023.01)

H 1 0 K 30/30(2023.01)

H 1 0 K 30/40(2023.01)

H 1 0 K 85/60(2023.01)

H 1 0 K 85/20(2023.01)

C 0 7 D 209/86(2006.01)

C 0 7 D 403/14(2006.01)

C 0 7 D 239/62(2006.01)

C 0 7 D 405/14(2006.01)

C 0 7 D 409/14(2006.01)

C 0 7 D 421/14(2006.01)

C 0 7 D 307/83(2006.01)

C 0 7 D 231/36(2006.01)

C 0 7 F 7/10(2006.01)

H 1 0 K 39/32(2023.01)

10

20

【F I】

H 1 0 K 30/60

H 1 0 K 30/30

H 1 0 K 30/40

H 1 0 K 85/60

H 1 0 K 85/20

C 0 7 D 209/86 C S P

C 0 7 D 403/14

C 0 7 D 239/62

C 0 7 D 405/14

C 0 7 D 409/14

C 0 7 D 421/14

C 0 7 D 307/83

C 0 7 D 231/36

C 0 7 F 7/10 S

H 1 0 K 39/32

30

【手続補正書】

40

【提出日】令和7年3月14日(2025.3.14)

【手続補正1】

【補正対象書類名】特許請求の範囲

【補正対象項目名】全文

【補正方法】変更

【補正の内容】

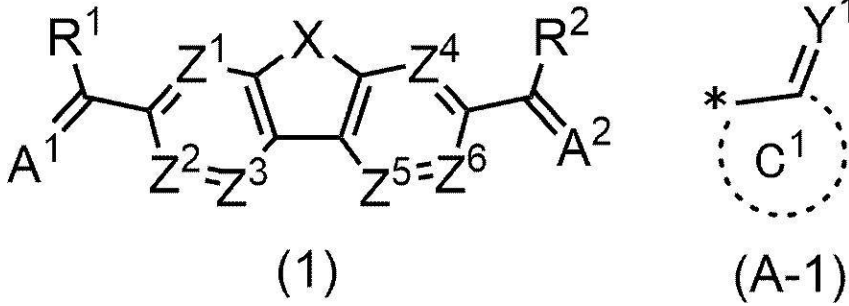
【特許請求の範囲】

【請求項1】

導電性膜、光電変換膜、及び透明導電性膜をこの順で有する光電変換素子であって、前記光電変換膜が、式(1)で表される化合物を含む、光電変換素子。

50

【化1】



10

式(1)中、

Xは、 $>NR^N$ 、 $>CR^C1R^C2$ 、 $>C=CR^C3R^C4$ 、 $>SiR^C5R^C6$ 、 $>GeR^C7R^C8$ 、 $-OC(R^C9)(R^C10)-$ 、硫黄原子、酸素原子、又はセレン原子を表す。

R^N は、置換基群Sから選択される置換基を表す。

$R^C1 \sim R^C10$ は、各々独立に、水素原子又は前記置換基群Sから選択される置換基を表す。但し、 R^C1 及び R^C2 の少なくとも一方は、前記置換基群Sから選択される置換基を表し、 R^C3 及び R^C4 の少なくとも一方は、前記置換基群Sから選択される置換基を表し、 R^C5 及び R^C6 の少なくとも一方は、前記置換基群Sから選択される置換基を表し、 R^C7 及び R^C8 の少なくとも一方は、前記置換基群Sから選択される置換基を表し、 R^C9 及び R^C10 の少なくとも一方は、前記置換基群Sから選択される置換基を表す。 R^C1 と R^C2 、 R^C3 と R^C4 、 R^C5 と R^C6 、 R^C7 と R^C8 、及び、 R^C9 と R^C10 は、各々独立に、直接又は連結基を介して結合して環を形成してもよい。

20

$Z1 \sim Z6$ は、各々独立に、 $-CR^{X1}=$ 又は窒素原子を表す。 $Z1 \sim Z6$ のうち隣接する2つが $-CR^{X1}=$ である場合、2つの R^{X1} は互いに結合して環を形成してもよい。

R^{X1} は、水素原子又は置換基を表す。

R^1 及び R^2 は、各々独立に、水素原子又は置換基を表す。

A^1 及び A^2 は、各々独立に、式(A-1)で表される基を表す。

式(A-1)中、

*は結合位置を表す。

C^1 は、2以上の炭素原子を含み、置換基を有していてもよい環を表す。

Y^1 は、硫黄原子、酸素原子、 $=NR^{X2}$ 、又は $=CR^{X3}R^{X4}$ を表す。

R^{X2} は、水素原子又は置換基を表す。

R^{X3} 及び R^{X4} は、各々独立に、シアノ基、 $-SO_2R^{X5}$ 、 $-COOR^{X6}$ 、又は $-COR^{X7}$ を表す。

30

$R^{X5} \sim R^{X7}$ は、各々独立に、置換基を有していてもよい脂肪族炭化水素基、置換基を有していてもよい芳香環基、又は置換基を有していてもよい脂肪族ヘテロ環基を表す。

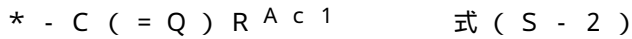
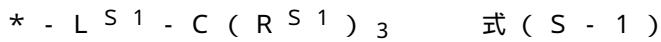
置換基群S：炭素数1～3の直鎖状の脂肪族炭化水素基、置換基を有していてもよい炭素数3～8の環状の脂肪族炭化水素基、炭素数3～8の環状の脂肪族炭化水素基を有する炭素数1～3の直鎖状の脂肪族炭化水素基、置換基を有していてもよい芳香環基を有する炭素数1～3の直鎖状の脂肪族炭化水素基、炭素数3～8の環状の脂肪族炭化水素基を有する炭素数3の分岐鎖状の脂肪族炭化水素基、置換基を有していてもよい芳香環基を有する炭素数3の分岐鎖状の脂肪族炭化水素基、置換基を有していてもよい芳香環基、式(S-1)で表される基、及び式(S-2)で表される基。

40

前記置換基群S中の、前記炭素数1～3の直鎖状の脂肪族炭化水素基、前記置換基を有していてもよい炭素数3～8の環状の脂肪族炭化水素基、前記炭素数3～8の環状の脂肪族炭化水素基を有する炭素数1～3の直鎖状の脂肪族炭化水素基、前記置換基を有していてもよい芳香環基を有する炭素数1～3の直鎖状の脂肪族炭化水素基、前記炭素数3～8の環状の脂肪族炭化水素基を有する炭素数3の分岐鎖状の脂肪族炭化水素基、及び前記置

50

換基を有していてもよい芳香環基を有する炭素数3の分岐鎖状の脂肪族炭化水素基は、エーテル性酸素原子を有していてもよく、ハロゲン原子が置換していてもよい。



式(S-1)中、

* は、結合位置を表す。

L^{S1} は、単結合又は炭素数1~3の直鎖状のアルキレン基を表す。

R^{S1} は、各々独立に、水素原子、炭素数1~3の直鎖状の脂肪族炭化水素基、炭素数3~4の分岐鎖状の脂肪族炭化水素基、又は炭素数3の環状のアルキル基を表す。

複数の R^{S1} は、互いに同一であっても異なってもよい。但し、3つの R^{S1} のうち、2つ以上が水素原子以外である。

10

前記アルキレン基、前記炭素数1~3の直鎖状の脂肪族炭化水素基、前記炭素数3~4の分岐鎖状の脂肪族炭化水素基、及び前記炭素数3の環状のアルキル基は、エーテル性酸素原子を有していてもよく、ハロゲン原子が置換していてもよい。

式(S-2)中、

* は、結合位置を表す。

Q は、酸素原子又は硫黄原子を表す。

R^{Ac1} は、置換基を有していてもよい脂肪族炭化水素基、置換基を有していてもよい芳香環基、又は置換基を有していてもよい脂肪族ヘテロ環基を表す。

【請求項2】

20

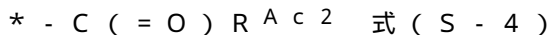
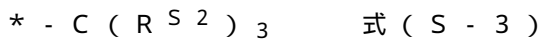
前記置換基群Sから選択される置換基が、炭素数1~2の直鎖状の脂肪族炭化水素基、炭素数3~6の環状の脂肪族炭化水素基、炭素数3~6の環状の脂肪族炭化水素基を有する炭素数1の脂肪族炭化水素基、置換基群 R^{Ar1} から選択される置換基を有していてもよい芳香環基、式(S-3)で表される基、又は式(S-4)で表される基を表す、請求項1に記載の光電変換素子。

置換基群 R^{Ar1} ：炭素数1~3の直鎖状の脂肪族炭化水素基、炭素数3~5の分岐鎖状の脂肪族炭化水素基、炭素数3~8の環状の脂肪族炭化水素基、芳香環基、ハロゲン原子、及び $* - Si(R^{Si})_3$ 。* は、結合位置を表す。

R^{Si} は、炭素数1~3の直鎖状の脂肪族炭化水素基、炭素数3~5の分岐鎖状の脂肪族炭化水素基、炭素数3~8の環状の脂肪族炭化水素基、又は芳香環基を表す。複数の R^{Si} は、互いに同一であっても異なってもよい。

30

前記置換基群 R^{Ar1} 中の、前記炭素数1~3の直鎖状の脂肪族炭化水素基、前記炭素数3~5の分岐鎖状の脂肪族炭化水素基、及び前記炭素数3~8の環状の脂肪族炭化水素基は、エーテル性酸素原子を有していてもよく、ハロゲン原子が置換していてもよい。



式(S-3)中、

* は、結合位置を表す。

R^{S2} は、各々独立に、水素原子、メチル基、イソプロピル基、又はt-ブチル基を表す。

40

複数の R^{S2} は、互いに同一であっても異なってもよい。但し、前記式(S-3)で表される基の炭素数は、3~9であり、3つの R^{S2} のうち、2つ以上が水素原子以外である。

式(S-4)中、

* は、結合位置を表す。

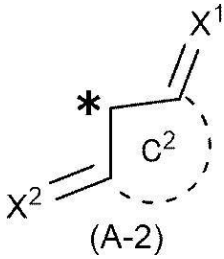
R^{Ac2} は、ハロゲン原子を有していてもよい炭素数1~3の直鎖状の脂肪族炭化水素基、ハロゲン原子を有していてもよい炭素数3~5の分岐鎖状の脂肪族炭化水素基、ハロゲン原子を有していてもよい炭素数3~6の環状の脂肪族炭化水素基、又は前記置換基群 R^{Ar1} から選択される置換基を有していてもよい芳香環基を表す。

【請求項3】

50

前記式 (A - 1) で表される基が、式 (A - 2) で表される基である、請求項 1 に記載の光電変換素子。

【化 2】



10

式 (A - 2) 中、

* は、結合位置を表す。

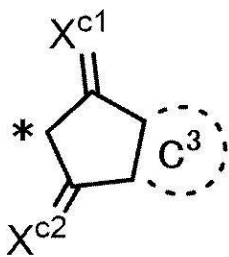
C^2 は、3 以上の炭素原子を含む環を表す。

X^1 及び X^2 は、各々独立に、酸素原子又は硫黄原子を表す。

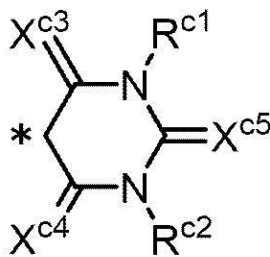
【請求項 4】

前記式 (A - 2) で表される基が、式 (C - 1) で表される基、又は式 (C - 2) で表される基である、請求項 3 に記載の光電変換素子。

【化 3】



(C-1)



(C-2)

20

式 (C - 1) 及び式 (C - 2) 中、

* は、結合位置を表す。

式 (C - 1) 中、

X^{c1} 及び X^{c2} は、各々独立に、硫黄原子又は酸素原子を表す。

C^3 は、置換基を有していてもよい芳香環を表す。

式 (C - 2) 中、

$X^{c3} \sim X^{c5}$ は、各々独立に、硫黄原子又は酸素原子を表す。

R^{c1} 及び R^{c2} は、各々独立に、水素原子又は置換基を表す。

30

【請求項 5】

X が、 $>NR^N$ 、 $>CR^{c1}R^{c2}$ 、 $>C=CR^{c3}R^{c4}$ 、 $>SiR^{c5}R^{c6}$ 、 $>GeR^{c7}R^{c8}$ 、又は $-OC(R^{c9})(R^{c10})-$ を表す、請求項 1 ~ 4 のいずれか 1 項に記載の光電変換素子。

R^N 及び $R^{c1} \sim R^{c10}$ は、それぞれ前記式 (1) 中の R^N 、及び $R^{c1} \sim R^{c10}$ と同義である。

40

【請求項 6】

X が、 $>NR^N$ 、 $>CR^{c1}R^{c2}$ 、又は $>C=CR^{c3}R^{c4}$ を表す、請求項 1 ~ 4 のいずれか 1 項に記載の光電変換素子。

R^N 及び $R^{c1} \sim R^{c4}$ は、それぞれ前記式 (1) 中の R^N 、及び $R^{c1} \sim R^{c4}$ と同義である。

【請求項 7】

X が、 $>NR^N$ を表す、請求項 1 ~ 4 のいずれか 1 項に記載の光電変換素子。

R^N は、前記式 (1) 中の R^N と同義である。

50

【請求項 8】

前記光電変換膜が、更に n 型有機半導体を含み、

前記光電変換膜が、前記式 (1) で表される化合物と、前記 n 型有機半導体とが混合された状態で形成するバルクヘテロ構造を有する、請求項 1 ~ 4 のいずれか 1 項に記載の光電変換素子。

【請求項 9】

前記 n 型有機半導体が、フラレン及びその誘導体からなる群から選択されるフラレン類を含む、請求項 8 に記載の光電変換素子。

【請求項 10】

前記光電変換膜が、更に色素を含む、請求項 1 ~ 4 のいずれか 1 項に記載の光電変換素子。

10

【請求項 11】

前記光電変換膜が、更に p 型有機半導体を含む、請求項 1 ~ 4 のいずれか 1 項に記載の光電変換素子。

【請求項 12】

前記導電性膜と前記透明導電性膜の間に、前記光電変換膜の他に 1 種以上の中間層を有する、請求項 1 ~ 4 のいずれか 1 項に記載の光電変換素子。

【請求項 13】

請求項 1 ~ 4 のいずれか 1 項に記載の光電変換素子を有する、撮像素子。

【請求項 14】

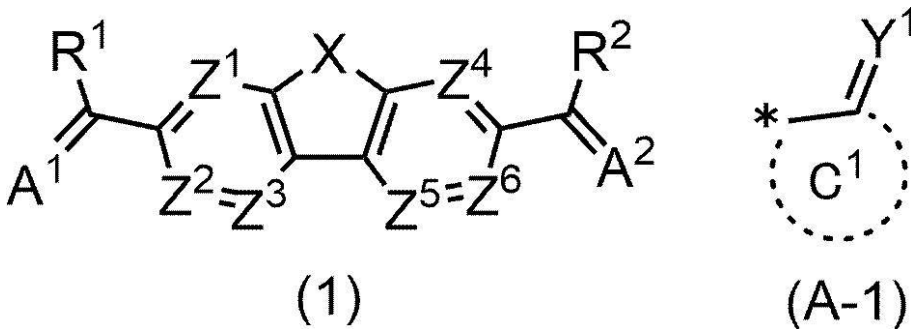
請求項 1 ~ 4 のいずれか 1 項に記載の光電変換素子を有する、光センサ。

20

【請求項 15】

式 (1) で表される化合物。

【化 4】



30

式 (1) 中、

X は、 $>NR^N$ 、 $>CR^C1R^C2$ 、 $>C=CR^C3R^C4$ 、 $>SiR^C5R^C6$ 、 $>GeR^C7R^C8$ 、 $-OC(R^C9)(R^C10)-$ 、硫黄原子、酸素原子、又はセレン原子を表す。

R^N は、置換基群 S から選択される置換基を表す。

$R^C1 \sim R^C10$ は、各々独立に、水素原子又は前記置換基群 S から選択される置換基を表す。但し、 R^C1 及び R^C2 の少なくとも一方は、前記置換基群 S から選択される置換基を表し、 R^C3 及び R^C4 の少なくとも一方は、前記置換基群 S から選択される置換基を表し、 R^C5 及び R^C6 の少なくとも一方は、前記置換基群 S から選択される置換基を表し、 R^C7 及び R^C8 の少なくとも一方は、前記置換基群 S から選択される置換基を表し、 R^C9 及び R^C10 の少なくとも一方は、前記置換基群 S から選択される置換基を表す。 R^C1 と R^C2 、 R^C3 と R^C4 、 R^C5 と R^C6 、 R^C7 と R^C8 、及び、 R^C9 と R^C10 は、各々独立に、直接又は連結基を介して結合して環を形成してもよい。

40

$Z1 \sim Z6$ は、各々独立に、 $-CR^X1=$ 又は窒素原子を表す。 $Z1 \sim Z6$ のうち隣接する 2 つが $-CR^X1=$ である場合、2 つの R^X1 は互いに結合して環を形成してもよい。

R^X1 は、水素原子又は置換基を表す。

50

R^1 及び R^2 は、各々独立に、水素原子又は置換基を表す。

A^1 及び A^2 は、各々独立に、式 (A - 1) で表される基を表す。

式 (A - 1) 中、

* は結合位置を表す。

C^1 は、2 以上の炭素原子を含み、置換基を有していてもよい環を表す。

Y^1 は、硫黄原子、酸素原子、 $=NR^{X2}$ 、又は $=CR^{X3}R^{X4}$ を表す。

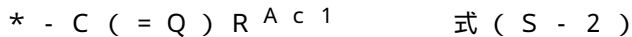
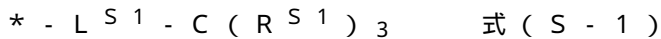
R^{X2} は、水素原子又は置換基を表す。

R^{X3} 及び R^{X4} は、各々独立に、シアノ基、 $-SO_2R^{X5}$ 、 $-COOR^{X6}$ 、又は $-COR^{X7}$ を表す。

$R^{X5} \sim R^{X7}$ は、各々独立に、置換基を有していてもよい脂肪族炭化水素基、置換基を有していてもよい芳香環基、又は置換基を有していてもよい脂肪族ヘテロ環基を表す。

置換基群 S : 炭素数 1 ~ 3 の直鎖状の脂肪族炭化水素基、置換基を有していてもよい炭素数 3 ~ 8 の環状の脂肪族炭化水素基、炭素数 3 ~ 8 の環状の脂肪族炭化水素基を有する炭素数 1 ~ 3 の直鎖状の脂肪族炭化水素基、置換基を有していてもよい芳香環基を有する炭素数 1 ~ 3 の直鎖状の脂肪族炭化水素基、炭素数 3 ~ 8 の環状の脂肪族炭化水素基を有する炭素数 3 の分岐鎖状の脂肪族炭化水素基、置換基を有していてもよい芳香環基を有する炭素数 3 の分岐鎖状の脂肪族炭化水素基、置換基を有していてもよい芳香環基、式 (S - 1) で表される基、及び式 (S - 2) で表される基。

前記置換基群 S 中の、前記炭素数 1 ~ 3 の直鎖状の脂肪族炭化水素基、前記置換基を有していてもよい炭素数 3 ~ 8 の環状の脂肪族炭化水素基、前記炭素数 3 ~ 8 の環状の脂肪族炭化水素基を有する炭素数 1 ~ 3 の直鎖状の脂肪族炭化水素基、前記置換基を有していてもよい芳香環基を有する炭素数 1 ~ 3 の直鎖状の脂肪族炭化水素基、前記炭素数 3 ~ 8 の環状の脂肪族炭化水素基を有する炭素数 3 の分岐鎖状の脂肪族炭化水素基、及び前記置換基を有していてもよい芳香環基を有する炭素数 3 の分岐鎖状の脂肪族炭化水素基は、エーテル性酸素原子を有していてもよく、ハロゲン原子が置換していてもよい。



式 (S - 1) 中、

* は、結合位置を表す。

L^{S1} は、単結合又は炭素数 1 ~ 3 の直鎖状のアルキレン基を表す。

R^{S1} は、各々独立に、水素原子、炭素数 1 ~ 3 の直鎖状の脂肪族炭化水素基、炭素数 3 ~ 4 の分岐鎖状の脂肪族炭化水素基、又は炭素数 3 の環状のアルキル基を表す。

複数の R^{S1} は、互いに同一であっても異なっていてもよい。但し、3 つの R^{S1} のうち、2 つ以上が水素原子以外である。

前記アルキレン基、前記炭素数 1 ~ 3 の直鎖状の脂肪族炭化水素基、前記炭素数 3 ~ 4 の分岐鎖状の脂肪族炭化水素基、及び前記炭素数 3 の環状のアルキル基は、エーテル性酸素原子を有していてもよく、ハロゲン原子が置換していてもよい。

式 (S - 2) 中、

* は、結合位置を表す。

Q は、酸素原子又は硫黄原子を表す。

R^{Ac1} は、置換基を有していてもよい脂肪族炭化水素基、置換基を有していてもよい芳香環基、又は置換基を有していてもよい脂肪族ヘテロ環基を表す。

【請求項 16】

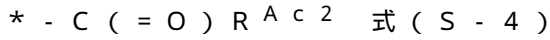
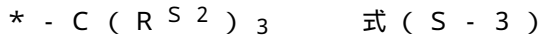
前記置換基群 S から選択される置換基が、炭素数 1 ~ 2 の直鎖状の脂肪族炭化水素基、炭素数 3 ~ 6 の環状の脂肪族炭化水素基、炭素数 3 ~ 6 の環状の脂肪族炭化水素基を有する炭素数 1 の脂肪族炭化水素基、置換基群 R^{Ar1} から選択される置換基を有していてもよい芳香環基、式 (S - 3) で表される基、又は式 (S - 4) で表される基を表す、請求項 15 に記載の化合物。

置換基群 R^{Ar1} : 炭素数 1 ~ 3 の直鎖状の脂肪族炭化水素基、炭素数 3 ~ 5 の分岐鎖状の脂肪族炭化水素基、炭素数 3 ~ 8 の環状の脂肪族炭化水素基、芳香環基、ハロゲン原

子、及び $* - Si(R^{Si})_3$ 。* は、結合位置を表す。

R^{Si} は、炭素数 1 ~ 3 の直鎖状の脂肪族炭化水素基、炭素数 3 ~ 5 の分岐鎖状の脂肪族炭化水素基、炭素数 3 ~ 8 の環状の脂肪族炭化水素基、又は芳香環基を表す。複数の R^{Si} は、互いに同一であっても異なってもよい。

前記置換基群 R^{Ar1} 中の、前記炭素数 1 ~ 3 の直鎖状の脂肪族炭化水素基、前記炭素数 3 ~ 5 の分岐鎖状の脂肪族炭化水素基、及び前記炭素数 3 ~ 8 の環状の脂肪族炭化水素基は、エーテル性酸素原子を有していてもよく、ハロゲン原子が置換していてもよい。



式 (S - 3) 中、

* は、結合位置を表す。

R^{S2} は、各々独立に、水素原子、メチル基、イソプロピル基、又は *t*-ブチル基を表す。

複数の R^{S2} は、互いに同一であっても異なってもよい。但し、前記式 (S - 3) で表される基の炭素数は、3 ~ 9 であり、3 つの R^{S2} のうち、2 つ以上が水素原子以外である。

式 (S - 4) 中、

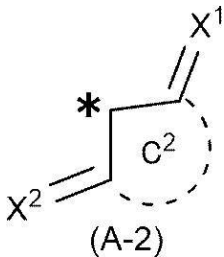
* は、結合位置を表す。

R^{Ac2} は、ハロゲン原子を有していてもよい炭素数 1 ~ 3 の直鎖状の脂肪族炭化水素基、ハロゲン原子を有していてもよい炭素数 3 ~ 5 の分岐鎖状の脂肪族炭化水素基、ハロゲン原子を有していてもよい炭素数 3 ~ 6 の環状の脂肪族炭化水素基、又は前記置換基群 R^{Ar1} から選択される置換基を有していてもよい芳香環基を表す。

【請求項 17】

前記式 (A - 1) で表される基が、式 (A - 2) で表される基である、請求項 15 に記載の化合物。

【化 5】



式 (A - 2) 中、

* は、結合位置を表す。

C^2 は、3 以上の炭素原子を含む環を表す。

X^1 及び X^2 は、各々独立に、酸素原子又は硫黄原子を表す。

【請求項 18】

前記式 (A - 2) で表される基が、式 (C - 1) で表される基、又は式 (C - 2) で表される基である、請求項 17 に記載の化合物。

10

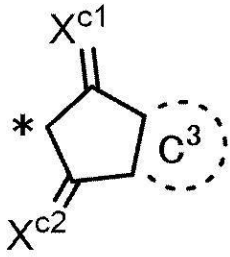
20

30

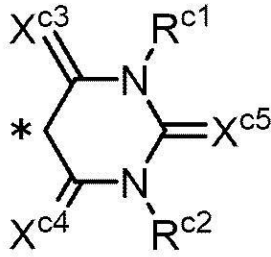
40

50

【化 6】



(C-1)



(C-2)

10

式 (C-1) 及び式 (C-2) 中、
* は、結合位置を表す。

式 (C-1) 中、
X^{c1} 及び X^{c2} は、各々独立に、硫黄原子又は酸素原子を表す。
C³ は、置換基を有していてもよい芳香環を表す。

式 (C-2) 中、
X^{c3} ~ X^{c5} は、各々独立に、硫黄原子又は酸素原子を表す。
R^{c1} 及び R^{c2} は、各々独立に、水素原子又は置換基を表す。

【請求項 19】

X が、>N R^N、>C R^{c1} R^{c2}、>C = C R^{c3} R^{c4}、>Si R^{c5} R^{c6}、>Ge R^{c7} R^{c8}、又は -OC(R^{c9})(R^{c10})- を表す、請求項 15 ~ 18 のいずれか 1 項に記載の化合物。

20

R^N 及び R^{c1} ~ R^{c10} は、それぞれ前記式 (1) 中の R^N、及び R^{c1} ~ R^{c10} と同義である。

【請求項 20】

X が、>N R^N、>C R^{c1} R^{c2}、又は >C = C R^{c3} R^{c4} を表す、請求項 15 ~ 18 のいずれか 1 項に記載の化合物。

R^N 及び R^{c1} ~ R^{c4} は、それぞれ前記式 (1) 中の R^N、及び R^{c1} ~ R^{c4} と同義である。

30

【請求項 21】

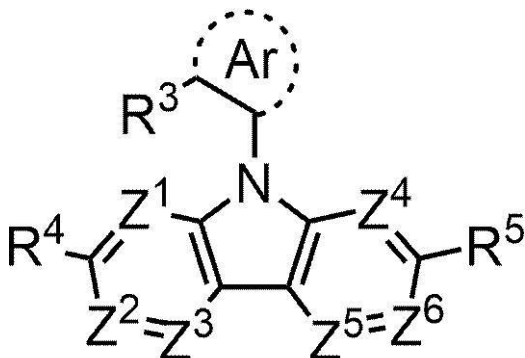
X が、>N R^N を表す、請求項 15 ~ 18 のいずれか 1 項に記載の化合物。

R^N は、前記式 (1) 中の R^N と同義である。

【請求項 22】

式 (2) で表される化合物。

【化 7】



(2)

40

式 (2) 中、
Z¹ ~ Z⁶ は、各々独立に、-C R^{x1}= 又は窒素原子を表す。R^{x1} は、水素原子又

50

は置換基を表す。

$Z^1 \sim Z^6$ のうち隣接する2つが $-CR^{X^1} =$ である場合、2つの R^{X^1} は互いに結合して環を形成してもよい。

R^3 は、置換基群 T から選択される置換基を表す。

置換基群 T：直鎖状の脂肪族炭化水素基、分岐鎖状の脂肪族炭化水素基、環状の脂肪族炭化水素基、及び置換基群 R^{Ar^3} から選択される置換基を有していてもよい窒素原子を含まない芳香環基。

前記置換基群 T 中の、前記直鎖状の脂肪族炭化水素基、前記分岐鎖状の脂肪族炭化水素基、及び前記環状の脂肪族炭化水素基は、エーテル性酸素原子を有していてもよい。

置換基群 R^{Ar^3} ：直鎖状の脂肪族炭化水素基、分岐鎖状の脂肪族炭化水素基、環状の脂肪族炭化水素基、ハロゲン原子、及び窒素原子を含まない芳香環基。

前記置換基群 R^{Ar^3} 中の、前記直鎖状の脂肪族炭化水素基、前記分岐鎖状の脂肪族炭化水素基、及び前記環状の脂肪族炭化水素基は、エーテル性酸素原子を有していてもよく、ハロゲン原子が置換していてもよい。

R^4 及び R^5 は、各々独立に、ヨウ素原子、 $*-O-S(=O)_2R^f$ 、臭素原子、塩素原子、フッ素原子、ホルミル基、 $*-Sn(R^{Sn})_3$ 、 $*-B(R^{B^1})_2$ 、又は、 $*-B-(R^{B^2})_3M^+$ を表す。

R^f は、炭素数 1 ~ 6 のパーフルオロアルキル基を表す。 R^{Sn} 、 R^{B^1} 及び R^{B^2} は、各々独立に、置換基を表し、複数の R^{Sn} 、 R^{B^1} 及び R^{B^2} は、それぞれ、互いに同一であっても異なってもよい。 R^{B^1} 同士、及び R^{B^2} 同士は、互いに結合して環構造を形成していてもよい。 M^+ は、1価の金属カチオンを表す。 $*$ は、結合位置を表す。

Ar は、環員原子として 2 以上の炭素原子を含み、環員原子として窒素原子を含まない芳香環を表す。 Ar で表される前記芳香環には、前記置換基群 T から選択される置換基、又はハロゲン原子が置換していてもよい。

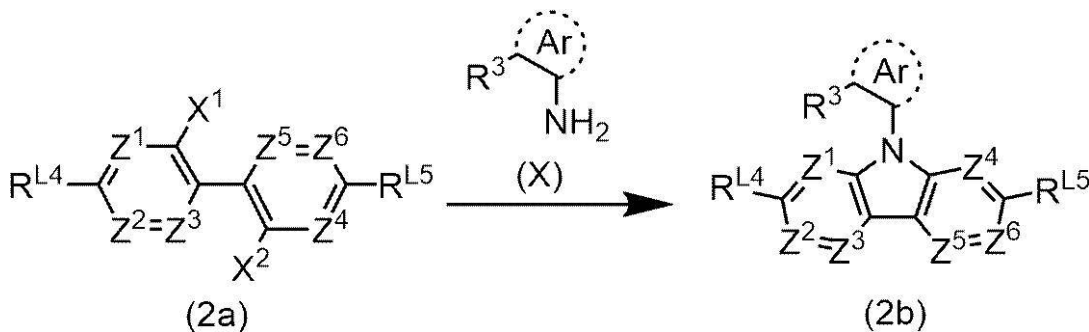
Ar で表される前記芳香環が前記置換基群 T から選択される置換基を有する場合、 R^3 で表される前記置換基群 T から選択される置換基と、 Ar で表される芳香環が有する前記置換基群 T から選択される置換基とが、互いに結合して非芳香環を形成してもよい。

Ar で表される前記芳香環に複数の前記置換基群 T から選択される置換基が置換される場合、複数の前記置換基同士が互いに結合して非芳香環を形成していてもよい。

【請求項 23】

式 (2a) で表される化合物と、式 (X) で表される化合物とを反応させて、式 (2b) で表される化合物を製造する工程を含む、化合物の製造方法。

【化 8】



式 (2a) 中、

$Z^1 \sim Z^6$ は、各々独立に、 $-CR^{X^1} =$ 又は窒素原子を表す。 R^{X^1} は、水素原子又は置換基を表す。

$Z^1 \sim Z^6$ のうち隣接する2つが $-CR^{X^1} =$ である場合、2つの R^{X^1} は互いに結合して環を形成してもよい。

R^{L4} 及び R^{L5} は、各々独立に、 $*-O-S(=O)_2R^f$ 、臭素原子、塩素原子、又はフッ素原子を表す。

X^1 及び X^2 は、各々独立に、ヨウ素原子、 $*-O-S(=O)_2R^f$ 、臭素原子、又

10

20

30

40

50

は塩素原子を表す。R^fは、炭素数1～6のパーフルオロアルキル基を表す。

但し、R^{L4}、R^{L5}、X¹及びX²は、以下の要件を満たす。

要件：ヨウ素原子を第1位、* - O - S(=O)₂R^fを第2位、臭素原子を第3位、塩素原子を第4位、フッ素原子を第5位として順位付けし、前記第1位から前記第5位に向かって順位が高くなるとした際に、R^{L4}で表される基の順位、及び、R^{L5}で表される基の順位の両方が、X¹で表される基の順位よりも高く、且つ、X²で表される基の順位よりも高い。

式(X)中、

R³は、置換基群Tから選択される置換基を表す。

置換基群T：直鎖状の脂肪族炭化水素基、分岐鎖状の脂肪族炭化水素基、環状の脂肪族炭化水素基、及び置換基群R^{A r 3}から選択される置換基を有していてもよい窒素原子を含まない芳香環基。

前記置換基群T中の、前記直鎖状の脂肪族炭化水素基、前記分岐鎖状の脂肪族炭化水素基、及び前記環状の脂肪族炭化水素基は、エーテル性酸素原子を有していてもよい。

置換基群R^{A r 3}：直鎖状の脂肪族炭化水素基、分岐鎖状の脂肪族炭化水素基、環状の脂肪族炭化水素基、ハロゲン原子、及び窒素原子を含まない芳香環基。

前記置換基群R^{A r 3}中の、前記直鎖状の脂肪族炭化水素基、前記分岐鎖状の脂肪族炭化水素基、及び前記環状の脂肪族炭化水素基は、エーテル性酸素原子を有していてもよく、ハロゲン原子が置換していてもよい。

A rは、環員原子として2以上の炭素原子を含み、環員原子として窒素原子を含まない芳香環を表す。A rで表される前記芳香環には、前記置換基群Tから選択される置換基、又はハロゲン原子が置換していてもよい。

A rで表される前記芳香環が前記置換基群Tから選択される置換基を有する場合、R³で表される前記置換基群Tから選択される置換基と、A rで表される芳香環が有する前記置換基群Tから選択される置換基とが、互いに結合して非芳香環を形成してもよい。

A rで表される前記芳香環に複数の前記置換基群Tから選択される置換基が置換される場合、複数の前記置換基同士が互いに結合して非芳香環を形成していてもよい。

式(2b)中、

Z¹～Z⁶、R^{L4}及びR^{L5}は、前記式(2a)中のZ¹～Z⁶、R^{L4}及びR^{L5}と同義である。

R³及びA rは、前記式(X)中のR³及びA rと同義である。

【請求項24】

式(2a)で表される化合物と、式(X)で表される化合物とを反応させて、式(2b)で表される化合物を製造する工程と、

前記式(2b)で表される化合物中、R^{L4}で表される基及びR^{L5}で表される基を、ホルミル基、* - Sⁿ(R^{S n})₃、* - B(R^{B 1})₂、又は* - B⁻(R^{B 2})₃M⁺に変換する工程と、を含む、化合物の製造方法。

R^{S n}、R^{B 1}及びR^{B 2}は、各々独立に、置換基を表し、複数のR^{S n}、R^{B 1}及びR^{B 2}は、それぞれ、互いに同一であっても異なってもよい。R^{B 1}同士、及びR^{B 2}同士は、互いに結合して環構造を形成していてもよい。M⁺は、1価の金属カチオンを表す。
*は、結合位置を表す。

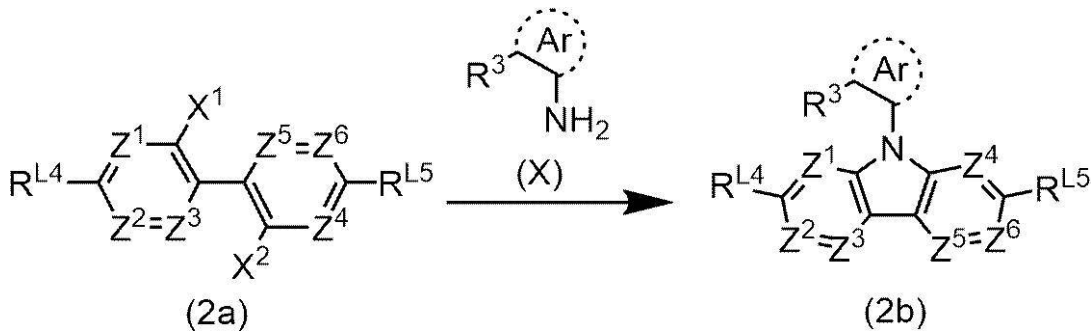
10

20

30

40

【化9】



10

式(2a)中、

$Z^1 \sim Z^6$ は、各々独立に、 $-CR^{X^1} =$ 又は窒素原子を表す。 R^{X^1} は、水素原子又は置換基を表す。

$Z^1 \sim Z^6$ のうち隣接する2つが $-CR^{X^1} =$ である場合、2つの R^{X^1} は互いに結合して環を形成してもよい。

R^{L^4} 及び R^{L^5} は、各々独立に、 $*-O-S(=O)_2R^f$ 、臭素原子、塩素原子、又はフッ素原子を表す。

X^1 及び X^2 は、各々独立に、ヨウ素原子、 $*-O-S(=O)_2R^f$ 、臭素原子、又は塩素原子を表す。 R^f は、炭素数1~6のパーフルオロアルキル基を表す。

20

但し、 R^{L^4} 、 R^{L^5} 、 X^1 及び X^2 は、以下の要件を満たす。

要件：ヨウ素原子を第1位、 $*-O-S(=O)_2R^f$ を第2位、臭素原子を第3位、塩素原子を第4位、フッ素原子を第5位として順位付けし、前記第1位から前記第5位に向かって順位が高くなるとした際に、 R^{L^4} で表される基の順位、及び、 R^{L^5} で表される基の順位の両方が、 X^1 で表される基の順位よりも高く、且つ、 X^2 で表される基の順位よりも高い。

式(X)中、

R^3 は、置換基群Tから選択される置換基を表す。

置換基群T：直鎖状の脂肪族炭化水素基、分岐鎖状の脂肪族炭化水素基、環状の脂肪族炭化水素基、及び置換基群 R^{Ar^3} から選択される置換基を有していてもよい窒素原子を含まない芳香環基。

30

前記置換基群T中の、前記直鎖状の脂肪族炭化水素基、前記分岐鎖状の脂肪族炭化水素基、及び前記環状の脂肪族炭化水素基は、エーテル性酸素原子を有していてもよい。

置換基群 R^{Ar^3} ：直鎖状の脂肪族炭化水素基、分岐鎖状の脂肪族炭化水素基、環状の脂肪族炭化水素基、ハロゲン原子、及び窒素原子を含まない芳香環基。

前記置換基群 R^{Ar^3} 中の、前記直鎖状の脂肪族炭化水素基、前記分岐鎖状の脂肪族炭化水素基、及び前記環状の脂肪族炭化水素基は、エーテル性酸素原子を有していてもよく、ハロゲン原子が置換していてもよい。

Arは、環員原子として2以上の炭素原子を含み、環員原子として窒素原子を含まない芳香環を表す。Arで表される前記芳香環には、前記置換基群Tから選択される置換基、又はハロゲン原子が置換していてもよい。

40

Arで表される前記芳香環が前記置換基群Tから選択される置換基を有する場合、 R^3 で表される前記置換基群Tから選択される置換基と、Arで表される芳香環が有する前記置換基群Tから選択される置換基とが、互いに結合して非芳香環を形成してもよい。

Arで表される前記芳香環に複数の前記置換基群Tから選択される置換基が置換される場合、複数の前記置換基同士が互いに結合して非芳香環を形成していてもよい。

式(2b)中、

$Z^1 \sim Z^6$ 、 R^{L^4} 及び R^{L^5} は、前記式(2a)中の $Z^1 \sim Z^6$ 、 R^{L^4} 及び R^{L^5} と同義である。

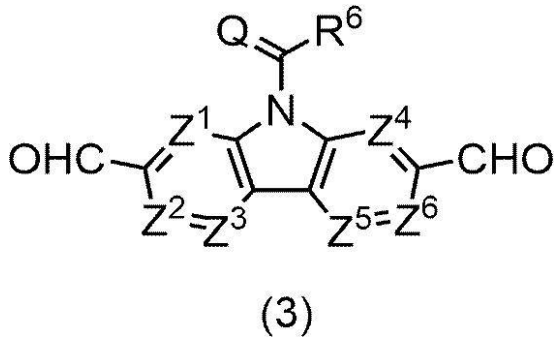
R^3 及びArは、前記式(X)中の R^3 及びArと同義である。

50

【請求項 25】

式(3)で表される化合物。

【化10】



10

式(3)中、

Z¹ ~ Z⁶は、各々独立に、-C R^{X1}=又は窒素原子を表す。R^{X1}は、水素原子又は置換基を表す。

Z¹ ~ Z⁶のうち隣接する2つが-C R^{X1}=である場合、2つのR^{X1}は互いに結合して環を形成してもよい。

Qは、酸素原子又は硫黄原子を表す。

R⁶は、置換基群Uから選択される置換基を表す。

20

置換基群U：置換基を有していてもよい脂肪族炭化水素基、置換基を有していてもよい芳香環基、及び置換基を有していてもよい脂肪族ヘテロ環基。

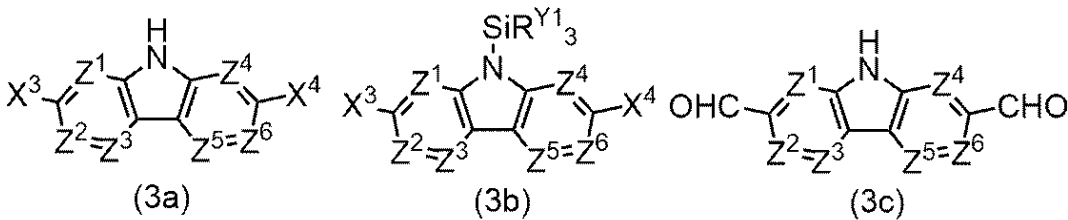
【請求項 26】

式(3a)で表される化合物と、式(A)で表される化合物とを反応させて、Si R^{Y1}₃で表される保護基を有する式(3b)で表される化合物を得る工程1と、

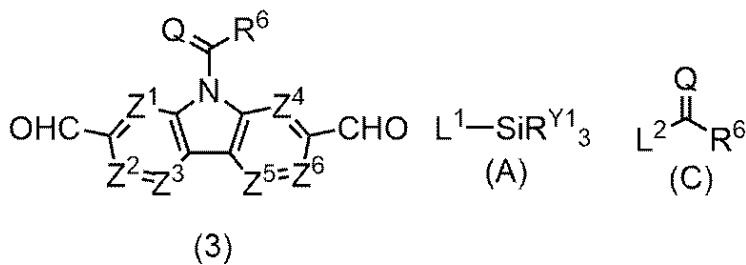
前記式(3b)で表される化合物と、金属化試薬とを反応させた後、ホルミル化剤を反応させ、更に、前記保護基を脱保護して、式(3c)で表される化合物を得る工程2と、

前記式(3c)で表される化合物と式(C)で表される化合物とを反応させて、式(3)で表される化合物を得る工程3と、を有する、化合物の製造方法。

【化11】



30



40

式(3a) ~ 式(3c)中、

Z¹ ~ Z⁶は、各々独立に、-C R^{X1}=又は窒素原子を表す。R^{X1}は、水素原子又は置換基を表す。

Z¹ ~ Z⁶のうち隣接する2つが-C R^{X1}=である場合、2つのR^{X1}は互いに結合して環を形成してもよい。

50

X^3 及び X^4 は、各々独立に、ヨウ素原子、 $* - O - S(=O)_2 R^f$ 、臭素原子、又は塩素原子を表す。 R^f は、炭素数 1 ~ 6 のパーフルオロアルキル基を表す。

式 (3) 中、

$Z^1 \sim Z^6$ は、前記式 (3 a) ~ 前記式 (3 c) 中の $Z^1 \sim Z^6$ と同義である。

Q は、酸素原子又は硫黄原子を表す。

R^6 は、置換基群 U から選択される置換基を表す。

置換基群 U：置換基を有していてもよい脂肪族炭化水素基、置換基を有していてもよい芳香環基、及び置換基を有していてもよい脂肪族ヘテロ環基。

式 (A) 中、

L^1 は、脱離基を表す。

10

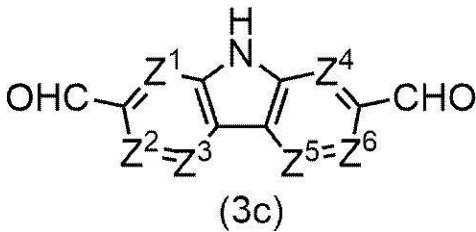
式 (3 b) 及び式 (A) 中、

R^{Y1} は、置換基を有していてもよい脂肪族炭化水素基、置換基を有していてもよい芳香環基、又は、置換基を有していてもよい脂肪族ヘテロ環基を表す。

【請求項 27】

式 (3 c) で表される化合物。

【化 12】



20

式 (3 c) 中、

$Z^1 \sim Z^6$ は、各々独立に、 $- C R^{X1} =$ 又は窒素原子を表す。 R^{X1} は、水素原子又は置換基を表す。

$Z^1 \sim Z^6$ のうち隣接する 2 つが $- C R^{X1} =$ である場合、2 つの R^{X1} は互いに結合して環を形成してもよい。

式 (C) 中、

Q 及び R^6 は、前記式 (3) 中の Q 及び R^6 と同義である。

30

L^2 は、脱離基を表す。

40

50