

(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2018-188564

(P2018-188564A)

(43) 公開日 平成30年11月29日(2018.11.29)

(51) Int.Cl.	F I	テーマコード (参考)
<b>C O 9 B 23/00 (2006.01)</b>	C O 9 B 23/00	C S P L 2 H 1 4 8
<b>G O 2 B 5/20 (2006.01)</b>	G O 2 B 5/20	I O 1

審査請求 未請求 請求項の数 14 O L (全 41 頁)

(21) 出願番号 特願2017-93076 (P2017-93076)  
 (22) 出願日 平成29年5月9日 (2017.5.9)

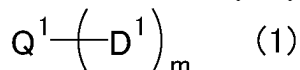
(71) 出願人 000179306  
 山田化学工業株式会社  
 京都府京都市南区上鳥羽上調子町 1 番地 1  
 (74) 代理人 110000914  
 特許業務法人 安富国際特許事務所  
 (72) 発明者 青木 陽  
 京都府京都市南区上鳥羽上調子町 1 番地 1  
 山田化学工業株式会社内  
 Fターム(参考) 2H148 BE12 BE15 BG02 BH05

(54) 【発明の名称】 色素化合物

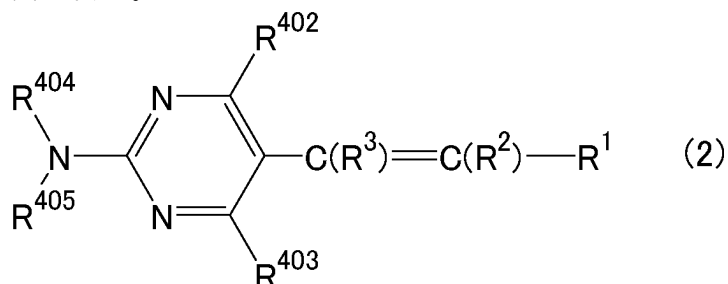
(57) 【要約】 (修正有)

【課題】 400nm付近の吸光度が高い化合物の提供。

【解決手段】 式(1)で表される化合物。



[mは1～6の整数；Q<sup>1</sup>はmが1のときH、mが2～6のとき2～6価の連結基；D<sup>1</sup>は式(2)で表される化合物からHが1つ外れた基、mが2～6のとき、複数のD<sup>1</sup>は、夫々独立。



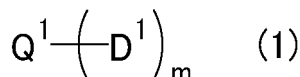
(R<sup>1</sup>はシアノ基等、ニトロ基；R<sup>2</sup>はH、シアノ基等；R<sup>3</sup>はH等；R<sup>402</sup>～R<sup>405</sup>

## 【特許請求の範囲】

## 【請求項 1】

下記一般式 ( 1 ) で表される化合物。

## 【化 1】



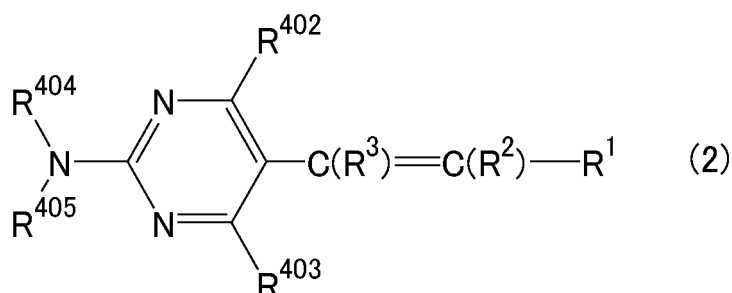
( 一般式 ( 1 ) 中、m は 1 ~ 6 の整数を表し、

$Q^1$  は、m が 1 のとき水素原子を表し、m が 2 ~ 6 のとき 2 ~ 6 個の連結基を表し、

$D^1$  は、下記一般式 ( 2 ) で表される化合物から水素原子が 1 つ外れた基を表し、m が 2 ~ 6 のとき、複数の  $D^1$  は、全て同じであってもよく、異なってもよい。

10

## 【化 2】



20

( 一般式 ( 2 ) 中、 $R^1$  は、シアノ基、ニトロ基、トリフルオロメチル基、複素環含有基、 $-O-C(O)H$ 、 $-C(O)-R^7$  又は  $-SO_2-R^8$  を表し、 $R^2$  は、水素原子、シアノ基、ニトロ基、トリフルオロメチル基、複素環含有基、 $-O-C(O)H$ 、 $-C(O)-R^7$  又は  $-SO_2-R^8$  を表すか、又は、 $R^2$  は  $-C(O)-R^9$  を表し、 $R^1$  と、 $R^2$  と、 $R^1$  及び  $R^2$  が結合している炭素原子とで、置換基を有していてもよい 4 ~ 8 員の複素環を形成している。 $R^7$  は、水素原子、ハロゲン原子、 $-NR^{72}R^{73}$  又は  $-R^{74}$  を表し、 $R^8$  は、ハロゲン原子、ヒドロキシ基、 $-OR^{81}$ 、 $-NR^{82}R^{83}$  又は  $-R^{84}$  を表し、 $R^9$  は、水素原子、ハロゲン原子、ヒドロキシ基、 $-OR^{91}$ 、 $-NR^{92}R^{93}$  又は  $-R^{94}$  を表す。 $R^{72} \sim R^{74}$ 、 $R^{81} \sim R^{84}$  及び  $R^{91} \sim R^{94}$  は、同一又は異なって、水素原子、置換基を有していてもよいアルキル基又は置換基を有していてもよいアリール基を表す。

30

$R^3$  は、水素原子、ハロゲン原子、シアノ基、置換基を有していてもよいアルキル基又は置換基を有していてもよいアリール基を表す。

$R^{402}$  及び  $R^{403}$  は、同一又は異なって、水素原子、ハロゲン原子、置換基を有していてもよいアルキル基、置換基を有していてもよいアリール基、 $-NR^{406}R^{407}$ 、 $-OR^{408}$ 、シアノ基、 $-C(O)R^{409}$ 、 $-O-C(O)R^{410}$  又は  $-C(O)OR^{411}$  を表し、

$R^{404} \sim R^{411}$  は、同一又は異なって、水素原子、置換基を有していてもよいアルキル基又は置換基を有していてもよいアリール基を表す。 $R^{404}$  と、 $R^{405}$  と、 $R^{404}$  及び  $R^{405}$  が結合している窒素原子とで、置換基を有していてもよい 4 ~ 8 員の含窒素複素環を形成してもよい。) )

40

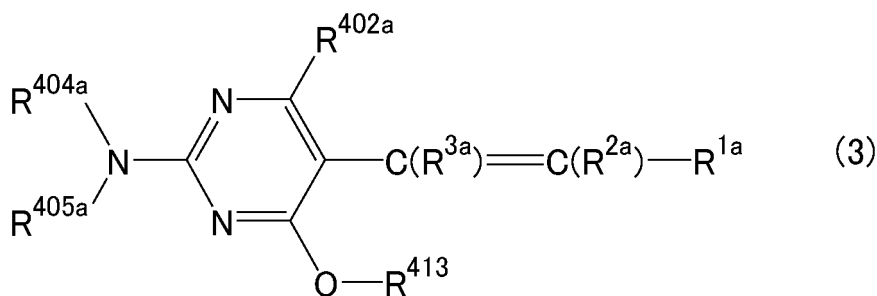
## 【請求項 2】

前記一般式 ( 1 ) における m が 1 又は 2 である請求項 1 に記載の化合物。

## 【請求項 3】

前記一般式 ( 1 ) で表される化合物が、下記一般式 ( 3 ) で表される化合物である請求項 1 又は 2 に記載の化合物。

## 【化 3】



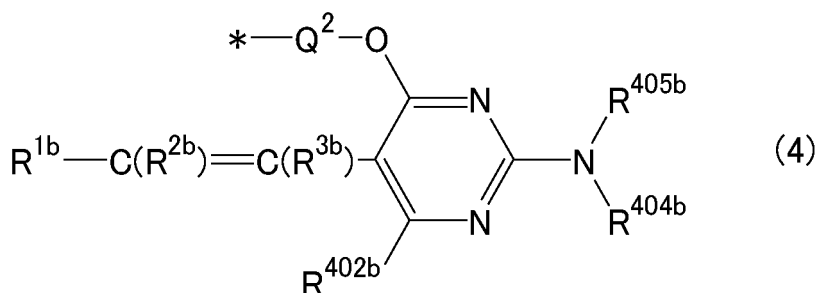
(一般式(3)中、 $\text{R}^{1a}$ は、シアノ基、ニトロ基、トリフルオロメチル基、複素環含有基、 $-\text{O}-\text{C}(\text{O})\text{H}$ 、 $-\text{C}(\text{O})-\text{R}^{7a}$ 又は $-\text{SO}_2-\text{R}^{8a}$ を表し、 $\text{R}^{2a}$ は、水素原子、シアノ基、ニトロ基、トリフルオロメチル基、複素環含有基、 $-\text{O}-\text{C}(\text{O})\text{H}$ 、 $-\text{C}(\text{O})-\text{R}^{7a}$ 又は $-\text{SO}_2-\text{R}^{8a}$ を表すか、又は、 $\text{R}^{2a}$ は $-\text{C}(\text{O})-\text{R}^{9a}$ を表し、 $\text{R}^{1a}$ と、 $\text{R}^{2a}$ と、 $\text{R}^{1a}$ 及び $\text{R}^{2a}$ が結合している炭素原子とで、置換基を有していてもよい4～8員の複素環を形成している。 $\text{R}^{7a}$ は、水素原子、ハロゲン原子、 $-\text{NR}^{72a}\text{R}^{73a}$ 又は $-\text{R}^{74a}$ を表し、 $\text{R}^{8a}$ は、ハロゲン原子、ヒドロキシ基、 $-\text{OR}^{81a}$ 、 $-\text{NR}^{82a}\text{R}^{83a}$ 又は $-\text{R}^{84a}$ を表し、 $\text{R}^{9a}$ は、水素原子、ハロゲン原子、ヒドロキシ基、 $-\text{OR}^{91a}$ 、 $-\text{NR}^{92a}\text{R}^{93a}$ 又は $-\text{R}^{94a}$ を表す。 $\text{R}^{72a} \sim \text{R}^{74a}$ 、 $\text{R}^{81a} \sim \text{R}^{84a}$ 及び $\text{R}^{91a} \sim \text{R}^{94a}$ は、同一又は異なって、水素原子、置換基を有していてもよい炭素数1～20のアルキル基又は置換基を有していてもよい炭素数6～20のアリール基を表す。

$\text{R}^{3a}$ は、水素原子、ハロゲン原子、シアノ基、置換基を有していてもよい炭素数1～20のアルキル基又は置換基を有していてもよい炭素数6～20のアリール基を表す。

$\text{R}^{402a}$ は、水素原子、ハロゲン原子、置換基を有していてもよい炭素数1～20のアルキル基、置換基を有していてもよい炭素数6～20のアリール基、 $-\text{NR}^{406a}\text{R}^{407a}$ 、 $-\text{OR}^{408a}$ 、シアノ基、 $-\text{C}(\text{O})\text{R}^{409a}$ 、 $-\text{O}-\text{C}(\text{O})\text{R}^{410a}$ 又は $-\text{C}(\text{O})\text{OR}^{411a}$ を表し、 $\text{R}^{404a} \sim \text{R}^{411a}$ は、同一又は異なって、水素原子、置換基を有していてもよい炭素数1～20のアルキル基又は置換基を有していてもよい炭素数6～20のアリール基を表す。 $\text{R}^{404a}$ と、 $\text{R}^{405a}$ と、 $\text{R}^{404a}$ 及び $\text{R}^{405a}$ が結合している窒素原子とで、置換基を有していてもよい4～8員の含窒素複素環を形成してもよい。

$\text{R}^{413}$ は、水素原子、置換基を有していてもよい炭素数1～20のアルキル基、置換基を有していてもよい炭素数6～20のアリール基を表すか、又は、下記一般式(4)で表される基を表す。

## 【化 4】



(一般式(4)中、 $\text{Q}^2$ は置換基を有していてもよい炭素数1～20の2価の炭化水素基を表し、\*は一般式(3)との結合部位を表す。

$\text{R}^{1b}$ は、シアノ基、ニトロ基、トリフルオロメチル基、複素環含有基、 $-\text{O}-\text{C}(\text{O})\text{H}$ 、 $-\text{C}(\text{O})-\text{R}^{7b}$ 又は $-\text{SO}_2-\text{R}^{8b}$ を表し、 $\text{R}^{2b}$ は、水素原子、シアノ基、ニトロ基、トリフルオロメチル基、複素環含有基、 $-\text{O}-\text{C}(\text{O})\text{H}$ 、 $-\text{C}(\text{O})-\text{R}^{7b}$ 又は $-\text{SO}_2-\text{R}^{8b}$ を表すか、又は、 $\text{R}^{2b}$ は $-\text{C}(\text{O})-\text{R}^{9b}$ を表し、 $\text{R}^{1b}$ と、 $\text{R}^{2b}$ と、 $\text{R}^{1b}$ 及び $\text{R}^{2b}$ が結合している炭素原子とで、置換基を有していてもよい

R<sup>3b</sup> は、水素原子、ハロゲン原子、シアノ基、置換基を有していてもよい炭素数 1 ~ 20 のアルキル基又は置換基を有していてもよい炭素数 6 ~ 20 のアリール基を表す。

10

前記 R<sup>4</sup>、<sup>1</sup>、<sup>3</sup> が、前記一般式(4)で表される基である、請求項3に記載の化合物。

## 20

【請求項 6】

【化 5】



40

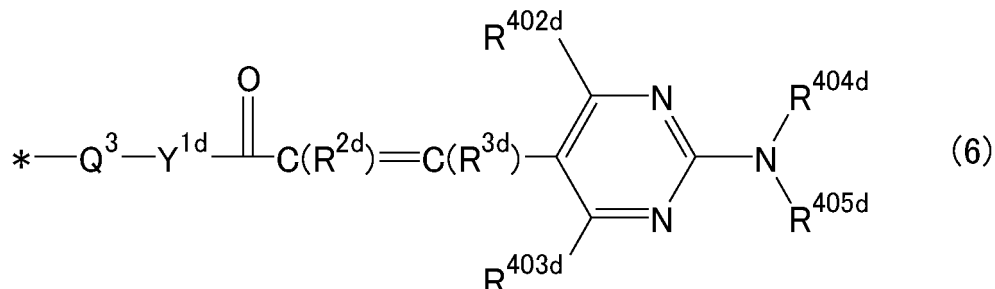
50

$c$  と、 $R^{405c}$  と、 $R^{404c}$  及び  $R^{405c}$  が結合している窒素原子とで、置換基を有していてもよい 4 ~ 8 員の含窒素複素環を形成してもよい。

$R^{501}$  は、水素原子、置換基を有していてもよい炭素数 1 ~ 20 のアルキル基、置換基を有していてもよい炭素数 6 ~ 20 のアリール基、又は、下記一般式 (6) で表される基を表す。

$Y^{1c}$  は、 $-NR^{502c}-$  を表し、 $R^{502c}$  は、水素原子、置換基を有していてもよい炭素数 1 ~ 20 のアルキル基又は置換基を有していてもよい炭素数 6 ~ 20 のアリール基を表す。

【化 6】



10

(一般式 (6) 中、 $Q^3$  は、置換基を有していてもよい炭素数 1 ~ 20 の 2 価の炭化水素基を表し、 $*$  は一般式 (5) との結合部位を表す。

$Y^{1d}$  は、 $-NR^{502d}-$  を表し、 $R^{502d}$  は、水素原子、置換基を有していてもよい炭素数 1 ~ 20 のアルキル基又は置換基を有していてもよい炭素数 6 ~ 20 のアリール基を表す。

20

$R^{2d}$  は、水素原子、シアノ基、ニトロ基、トリフルオロメチル基、複素環含有基、 $-O-C(O)H$ 、 $-C(O)-R^{7d}$  又は  $-SO_2-R^{8d}$  を表す。 $R^{7d}$  は、水素原子、ハロゲン原子、 $-NR^{72d}R^{73d}$  又は  $-R^{74d}$  を表し、 $R^{8d}$  は、ハロゲン原子、ヒドロキシ基、 $-OR^{81d}$ 、 $-NR^{82d}R^{83d}$  又は  $-R^{84d}$  を表す。 $R^{72d} \sim R^{74d}$  及び  $R^{81d} \sim R^{84d}$  は、同一又は異なって、水素原子、置換基を有していてもよい炭素数 1 ~ 20 のアルキル基又は置換基を有していてもよい炭素数 6 ~ 20 のアリール基を表す。

$R^{3d}$  は、水素原子、ハロゲン原子、シアノ基、置換基を有していてもよい炭素数 1 ~ 20 のアルキル基又は置換基を有していてもよい炭素数 6 ~ 20 のアリール基を表す。

30

$R^{402d}$  及び  $R^{403d}$  は、同一又は異なって、水素原子、ハロゲン原子、置換基を有していてもよい炭素数 1 ~ 20 のアルキル基、置換基を有していてもよい炭素数 6 ~ 20 のアリール基、 $-NR^{406d}R^{407d}$ 、 $-OR^{408d}$ 、シアノ基、 $-C(O)R^{409d}$ 、 $-O-C(O)R^{410d}$  又は  $-C(O)OR^{411d}$  を表し、 $R^{404d} \sim R^{411d}$  は、同一又は異なって、水素原子、置換基を有していてもよい炭素数 1 ~ 20 のアルキル基又は置換基を有していてもよい炭素数 6 ~ 20 のアリール基を表す。 $R^{404d}$  と、 $R^{405d}$  と、 $R^{404d}$  及び  $R^{405d}$  が結合している窒素原子とで、置換基を有していてもよい 4 ~ 8 員の含窒素複素環を形成してもよい。))

【請求項 7】

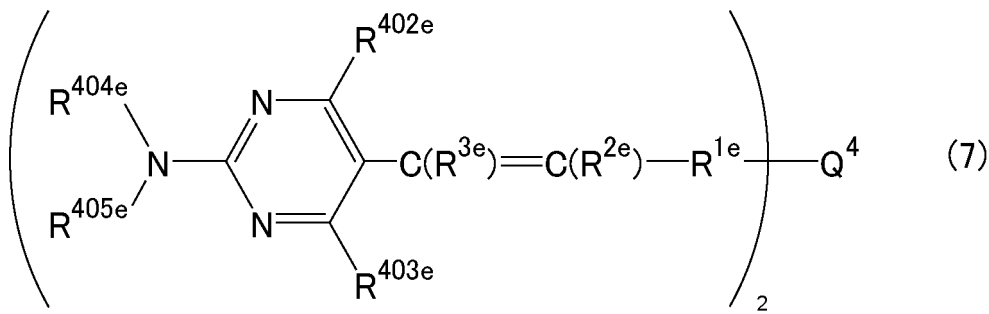
前記  $R^{501}$  が、前記一般式 (6) で表される基である、請求項 6 に記載の化合物。

40

【請求項 8】

前記一般式 (1) で表される化合物が、下記一般式 (7) で表される化合物である請求項 1 又は 2 に記載の化合物。

【化 7】



10

(一般式(7)中、 $Q^4$ は、 $-SO_2-$ 又は置換基を有していてもよい炭素数1~20の2価の炭化水素基を表す。

$R^{1e}$ は、複素環含有基、 $-C(O)-R^{7e}$ 又は $-SO_2-R^{8e}$ を表し、 $R^{2e}$ は、水素原子、シアノ基、ニトロ基、トリフルオロメチル基、複素環含有基、 $-O-C(O)H$ 、 $-C(O)-R^{7e}$ 又は $-SO_2-R^{8e}$ を表す。 $R^{7e}$ は、水素原子、ハロゲン原子、 $-NR^{72e}R^{73e}$ 又は $-R^{74e}$ を表し、 $R^{8e}$ は、ハロゲン原子、ヒドロキシ基、 $-OR^{81e}$ 、 $-NR^{82e}R^{83e}$ 又は $-R^{84e}$ を表す。 $R^{72e} \sim R^{74e}$ 及び $R^{81e} \sim R^{84e}$ は、同一又は異なって、水素原子、置換基を有していてもよい炭素数1~20のアルキル基又は置換基を有していてもよい炭素数6~20のアリール基を表す。

20

$R^{3e}$ は、水素原子、ハロゲン原子、シアノ基、置換基を有していてもよい炭素数1~20のアルキル基又は置換基を有していてもよい炭素数6~20のアリール基を表す。

$R^{402e}$ 及び $R^{403e}$ は、同一又は異なって、水素原子、ハロゲン原子、置換基を有していてもよい炭素数1~20のアルキル基、置換基を有していてもよい炭素数6~20のアリール基、 $-NR^{406e}R^{407e}$ 、 $-OR^{408e}$ 、シアノ基、 $-C(O)R^{409e}$ 、 $-O-C(O)R^{410e}$ 又は $-C(O)OR^{411e}$ を表し、 $R^{404e} \sim R^{411e}$ は、同一又は異なって、水素原子、置換基を有していてもよい炭素数1~20のアルキル基又は置換基を有していてもよい炭素数6~20のアリール基を表す。 $R^{404e}$ と、 $R^{405e}$ と、 $R^{404e}$ 及び $R^{405e}$ が結合している窒素原子とで、置換基を有していてもよい4~8員の含窒素複素環を形成してもよい。) )

30

【請求項 9】

前記 $Q^4$ が、 $-SO_2-$ である、請求項 8 に記載の化合物。

【請求項 10】

請求項 1 ~ 9 のいずれかに記載の化合物を含むことを特徴とする色素組成物。

【請求項 11】

請求項 1 ~ 9 のいずれかに記載の化合物を含むことを特徴とする光学フィルタ。

【請求項 12】

カラーフィルタである、請求項 11 に記載の光学フィルタ。

【請求項 13】

請求項 1 ~ 9 のいずれかに記載の化合物を含むことを特徴とするブルーライト遮蔽材料。

40

【請求項 14】

請求項 1 ~ 9 のいずれかに記載の化合物を含むことを特徴とする紫外線吸収剤。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、色素として使用可能な化合物等に関する。

【背景技術】

【0002】

紫外線やブルーライトは、強いエネルギーをもち、網膜にダメージを与えて眼疾患の原因となる場合がある。このため、紫外線吸収剤やブルーライトカット用色材等として

50

使用可能な化合物が求められている。紫外線吸収剤として、例えば、ベンゾフェノン系やベンゾトリアゾール系紫外線吸収剤に替わってメチン系化合物を使用することが提案されている（特許文献１及び２）。

【先行技術文献】

【特許文献】

【０００３】

【特許文献１】特開２００９－０６７９７３号公報

【特許文献２】特開２０１１－１８４４１４号公報

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

10

【０００４】

従来のメチン系化合物は、可視光領域付近の吸光度が低いため、ブルーライトを低減するためには、添加量を多くする必要があった。このため、吸収スペクトル形状や吸光度に改良が求められていた。

【０００５】

本発明は、４００ｎｍ付近の吸光度が高い化合物を提供することを主な目的とする。

【課題を解決するための手段】

【０００６】

本発明者は、上記課題を解決するために鋭意研究したところ、下記一般式（１）で表される含窒素芳香環及び電子求引性基を有する、メチン構造を有する化合物が、４００ｎｍ付近に吸収極大を有すること、４００ｎｍ付近の吸光度が高いことを見出した。本発明者は、この知見に基づきさらに研究を重ねて本発明を完成させた。

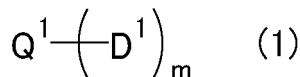
20

【０００７】

すなわち、本発明の化合物は、下記一般式（１）で表されることを特徴とする。

【０００８】

【化１】



【０００９】

30

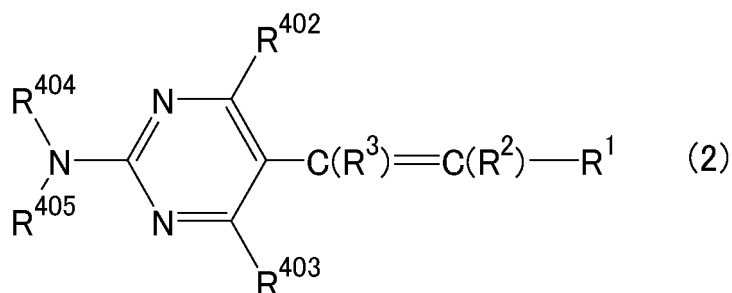
（一般式（１）中、 $m$ は１～６の整数を表し、

$Q^1$ は、 $m$ が１のとき水素原子を表し、 $m$ が２～６のとき２～６価の連結基を表し、

$D^1$ は、下記一般式（２）で表される化合物から水素原子が１つ外れた基を表し、 $m$ が２～６のとき、複数の $D^1$ は、全て同じであってもよく、異なってもよい。

【００１０】

【化２】



40

【００１１】

（一般式（２）中、 $R^1$ は、シアノ基、ニトロ基、トリフルオロメチル基、複素環含有基、 $-O-C(O)H$ 、 $-C(O)-R^7$ 又は $-SO_2-R^8$ を表し、 $R^2$ は、水素原子、シアノ基、ニトロ基、トリフルオロメチル基、複素環含有基、 $-O-C(O)H$ 、 $-C(O)-R^7$ 又は $-SO_2-R^8$ を表すか、又は、 $R^2$ は $-C(O)-R^9$ を表し、 $R^1$ と、 $R^2$ と、 $R^1$ 及び $R^2$ が結合している炭素原子とで、置換基を有していてもよい４～８

50

員の複素環を形成している。R<sup>7</sup>は、水素原子、ハロゲン原子、-NR<sup>7 2</sup>R<sup>7 3</sup>又は-R<sup>7 4</sup>を表し、R<sup>8</sup>は、ハロゲン原子、ヒドロキシ基、-OR<sup>8 1</sup>、-NR<sup>8 2</sup>R<sup>8 3</sup>又は-R<sup>8 4</sup>を表し、R<sup>9</sup>は、水素原子、ハロゲン原子、ヒドロキシ基、-OR<sup>9 1</sup>、-NR<sup>9 2</sup>R<sup>9 3</sup>又は-R<sup>9 4</sup>を表す。R<sup>7 2</sup>~R<sup>7 4</sup>、R<sup>8 1</sup>~R<sup>8 4</sup>及びR<sup>9 1</sup>~R<sup>9 4</sup>は、同一又は異なって、水素原子、置換基を有していてもよいアルキル基又は置換基を有していてもよいアリール基を表す。

R<sup>3</sup>は、水素原子、ハロゲン原子、シアノ基、置換基を有していてもよいアルキル基又は置換基を有していてもよいアリール基を表す。

R<sup>4 0 2</sup>及びR<sup>4 0 3</sup>は、同一又は異なって、水素原子、ハロゲン原子、置換基を有していてもよいアルキル基、置換基を有していてもよいアリール基、-NR<sup>4 0 6</sup>R<sup>4 0 7</sup>、  
-OR<sup>4 0 8</sup>、シアノ基、-C(O)R<sup>4 0 9</sup>、-O-C(O)R<sup>4 1 0</sup>又は-C(O)OR<sup>4 1 1</sup>を表し、

R<sup>4 0 4</sup>~R<sup>4 1 1</sup>は、同一又は異なって、水素原子、置換基を有していてもよいアルキル基又は置換基を有していてもよいアリール基を表す。R<sup>4 0 4</sup>と、R<sup>4 0 5</sup>と、R<sup>4 0 4</sup>及びR<sup>4 0 5</sup>が結合している窒素原子とで、置換基を有していてもよい4~8員の含窒素複素環を形成してもよい。) )

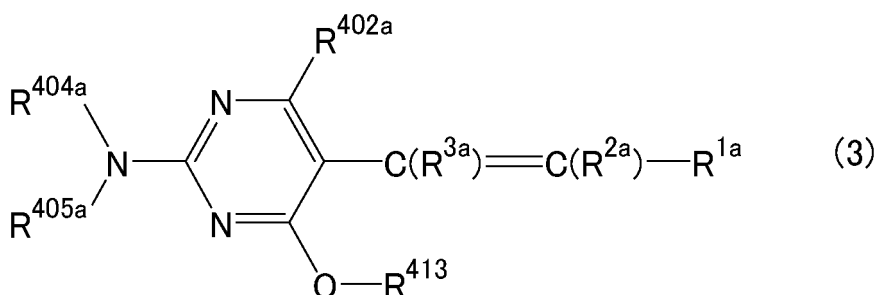
#### 【0012】

本発明においては、上記一般式(1)におけるmが1又は2であることが好ましい。

上記一般式(1)で表される化合物は、下記一般式(3)で表される化合物であることが好ましい。

#### 【0013】

#### 【化3】



#### 【0014】

(一般式(3)中、R<sup>1 a</sup>は、シアノ基、ニトロ基、トリフルオロメチル基、複素環含有基、-O-C(O)H、-C(O)-R<sup>7 a</sup>又は-SO<sub>2</sub>-R<sup>8 a</sup>を表し、R<sup>2 a</sup>は、水素原子、シアノ基、ニトロ基、トリフルオロメチル基、複素環含有基、-O-C(O)H、-C(O)-R<sup>7 a</sup>又は-SO<sub>2</sub>-R<sup>8 a</sup>を表すか、又は、R<sup>2 a</sup>は-C(O)-R<sup>9 a</sup>を表し、R<sup>1 a</sup>と、R<sup>2 a</sup>と、R<sup>1 a</sup>及びR<sup>2 a</sup>が結合している炭素原子とで、置換基を有していてもよい4~8員の複素環を形成している。R<sup>7 a</sup>は、水素原子、ハロゲン原子、-NR<sup>7 2 a</sup>R<sup>7 3 a</sup>又は-R<sup>7 4 a</sup>を表し、R<sup>8 a</sup>は、ハロゲン原子、ヒドロキシ基、-OR<sup>8 1 a</sup>、-NR<sup>8 2 a</sup>R<sup>8 3 a</sup>又は-R<sup>8 4 a</sup>を表し、R<sup>9 a</sup>は、水素原子、ハロゲン原子、ヒドロキシ基、-OR<sup>9 1 a</sup>、-NR<sup>9 2 a</sup>R<sup>9 3 a</sup>又は-R<sup>9 4 a</sup>を表す。R<sup>7 2 a</sup>~R<sup>7 4 a</sup>、R<sup>8 1 a</sup>~R<sup>8 4 a</sup>及びR<sup>9 1 a</sup>~R<sup>9 4 a</sup>は、同一又は異なって、水素原子、置換基を有していてもよい炭素数1~20のアルキル基又は置換基を有していてもよい炭素数6~20のアリール基を表す。

R<sup>3 a</sup>は、水素原子、ハロゲン原子、シアノ基、置換基を有していてもよい炭素数1~20のアルキル基又は置換基を有していてもよい炭素数6~20のアリール基を表す。

R<sup>4 0 2 a</sup>は、水素原子、ハロゲン原子、置換基を有していてもよい炭素数1~20のアルキル基、置換基を有していてもよい炭素数6~20のアリール基、-NR<sup>4 0 6 a</sup>R<sup>4 0 7 a</sup>、-OR<sup>4 0 8 a</sup>、シアノ基、-C(O)R<sup>4 0 9 a</sup>、-O-C(O)R<sup>4 1 0 a</sup>又は-C(O)OR<sup>4 1 1 a</sup>を表し、R<sup>4 0 4 a</sup>~R<sup>4 1 1 a</sup>は、同一又は異なって、水素原子、置換基を有していてもよい炭素数1~20のアルキル基又は置換基を有していて

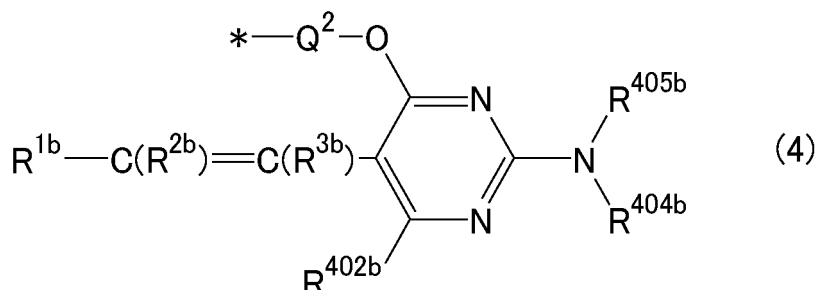


もよい炭素数 6 ~ 20 のアリール基を表す。R<sup>404a</sup> と、R<sup>405a</sup> と、R<sup>404a</sup> 及び R<sup>405a</sup> が結合している窒素原子とで、置換基を有していてもよい 4 ~ 8 員の含窒素複素環を形成してもよい。

R<sup>413</sup> は、水素原子、置換基を有していてもよい炭素数 1 ~ 20 のアルキル基、置換基を有していてもよい炭素数 6 ~ 20 のアリール基を表すか、又は、下記一般式 (4) で表される基を表す。

【0015】

【化 4】



10

【0016】

(一般式 (4) 中、Q<sup>2</sup> は置換基を有していてもよい炭素数 1 ~ 20 の 2 価の炭化水素基を表し、\* は一般式 (3) との結合部位を表す。

R<sup>1b</sup> は、シアノ基、ニトロ基、トリフルオロメチル基、複素環含有基、-O-C(O)H、-C(O)-R<sup>7b</sup> 又は -SO<sub>2</sub>-R<sup>8b</sup> を表し、R<sup>2b</sup> は、水素原子、シアノ基、ニトロ基、トリフルオロメチル基、複素環含有基、-O-C(O)H、-C(O)-R<sup>7b</sup> 又は -SO<sub>2</sub>-R<sup>8b</sup> を表すか、又は、R<sup>2b</sup> は -C(O)-R<sup>9b</sup> を表し、R<sup>1b</sup> と、R<sup>2b</sup> と、R<sup>1b</sup> 及び R<sup>2b</sup> が結合している炭素原子とで、置換基を有していてもよい 4 ~ 8 員の複素環を形成している。R<sup>7b</sup> は、水素原子、ハロゲン原子、-NR<sup>72b</sup>R<sup>73b</sup> 又は -R<sup>74b</sup> を表し、R<sup>8b</sup> は、ハロゲン原子、ヒドロキシ基、-OR<sup>81b</sup>、-NR<sup>82b</sup>R<sup>83b</sup> 又は -R<sup>84b</sup> を表し、R<sup>9b</sup> は、水素原子、ハロゲン原子、ヒドロキシ基、-OR<sup>91b</sup>、-NR<sup>92b</sup>R<sup>93b</sup> 又は -R<sup>94b</sup> を表す。R<sup>72b</sup> ~ R<sup>74b</sup>、R<sup>81b</sup> ~ R<sup>84b</sup> 及び R<sup>91b</sup> ~ R<sup>94b</sup> は、同一又は異なって、水素原子、置換基を有していてもよい炭素数 1 ~ 20 のアルキル基又は置換基を有していてもよい炭素数 6 ~ 20 のアリール基を表す。

20

30

R<sup>3b</sup> は、水素原子、ハロゲン原子、シアノ基、置換基を有していてもよい炭素数 1 ~ 20 のアルキル基又は置換基を有していてもよい炭素数 6 ~ 20 のアリール基を表す。

R<sup>402b</sup> は、水素原子、ハロゲン原子、置換基を有していてもよい炭素数 1 ~ 20 のアルキル基、置換基を有していてもよい炭素数 6 ~ 20 のアリール基、-NR<sup>406b</sup>R<sup>407b</sup>、-OR<sup>408b</sup>、シアノ基、-C(O)R<sup>409b</sup>、-O-C(O)R<sup>410b</sup> 又は -C(O)OR<sup>411b</sup> を表し、R<sup>404b</sup> ~ R<sup>411b</sup> は、同一又は異なって、水素原子、置換基を有していてもよい炭素数 1 ~ 20 のアルキル基又は置換基を有していてもよい炭素数 6 ~ 20 のアリール基を表す。R<sup>404b</sup> と、R<sup>405b</sup> と、R<sup>404b</sup> 及び R<sup>405b</sup> が結合している窒素原子とで、置換基を有していてもよい 4 ~ 8 員の含窒素複素環を形成してもよい。))

40

【0017】

本発明の一態様においては、上記 R<sup>413</sup> が、上記一般式 (4) で表される基であることが好ましい。

また、本発明の一態様においては、上記 R<sup>2a</sup> が -C(O)-R<sup>9a</sup> であり、R<sup>1a</sup> と、R<sup>2a</sup> と、R<sup>1a</sup> 及び R<sup>2a</sup> が結合している炭素原子とで、置換基を有していてもよい 4 ~ 8 員の複素環を形成していることが好ましい。

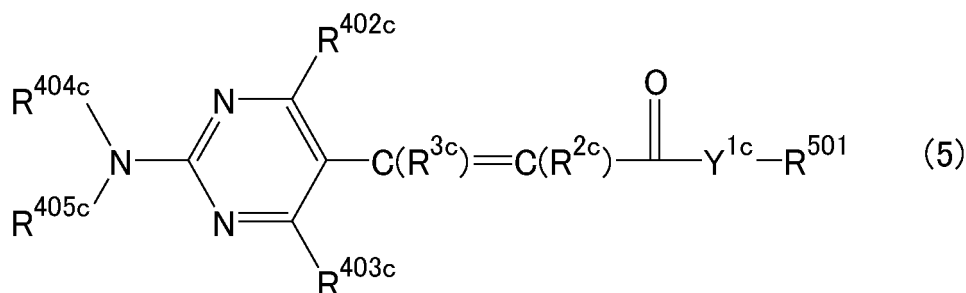
【0018】

上記一般式 (1) で表される化合物が、下記一般式 (5) で表される化合物であることも好ましい。

50

【 0 0 1 9 】

【 化 5 】



10

【 0 0 2 0 】

(一般式(5)中、 $R^{2c}$ は、水素原子、シアノ基、ニトロ基、トリフルオロメチル基、複素環含有基、 $-\text{O}-\text{C}(\text{O})\text{H}$ 、 $-\text{C}(\text{O})-R^{7c}$ 又は $-\text{SO}_2-R^{8c}$ を表す。 $R^{7c}$ は、水素原子、ハロゲン原子、 $-\text{NR}^{72c}R^{73c}$ 又は $-\text{R}^{74c}$ を表し、 $R^{8c}$ は、ハロゲン原子、ヒドロキシ基、 $-\text{OR}^{81c}$ 、 $-\text{NR}^{82c}R^{83c}$ 又は $-\text{R}^{84c}$ を表す。 $R^{72c} \sim R^{74c}$ 及び $R^{81c} \sim R^{84c}$ は、同一又は異なって、水素原子、置換基を有していてもよい炭素数1~20のアルキル基又は置換基を有していてもよい炭素数6~20のアリール基を表す。

$R^{3c}$ は、水素原子、ハロゲン原子、シアノ基、置換基を有していてもよい炭素数1~20のアルキル基又は置換基を有していてもよい炭素数6~20のアリール基を表す。

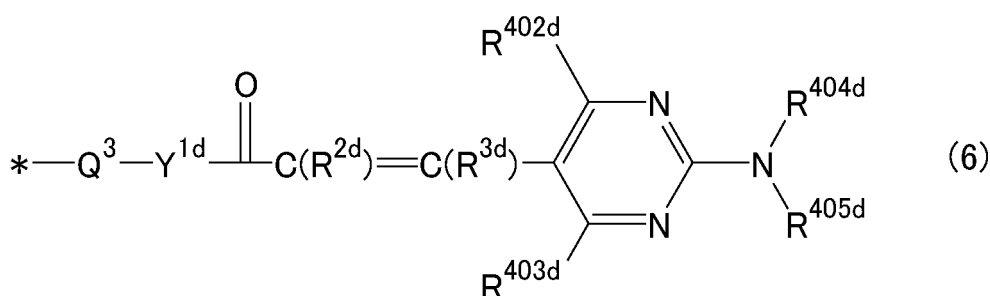
$R^{402c}$ 及び $R^{403c}$ は、同一又は異なって、水素原子、ハロゲン原子、置換基を有していてもよい炭素数1~20のアルキル基、置換基を有していてもよい炭素数6~20のアリール基、 $-\text{NR}^{406c}R^{407c}$ 、 $-\text{OR}^{408c}$ 、シアノ基、 $-\text{C}(\text{O})R^{409c}$ 、 $-\text{O}-\text{C}(\text{O})R^{410c}$ 又は $-\text{C}(\text{O})\text{OR}^{411c}$ を表し、 $R^{404c} \sim R^{411c}$ は、同一又は異なって、水素原子、置換基を有していてもよい炭素数1~20のアルキル基又は置換基を有していてもよい炭素数6~20のアリール基を表す。 $R^{404c}$ と、 $R^{405c}$ と、 $R^{404c}$ 及び $R^{405c}$ が結合している窒素原子とで、置換基を有していてもよい4~8員の含窒素複素環を形成してもよい。

$R^{501}$ は、水素原子、置換基を有していてもよい炭素数1~20のアルキル基、置換基を有していてもよい炭素数6~20のアリール基、又は、下記一般式(6)で表される基を表す。

$\text{Y}^{1c}$ は、 $-\text{NR}^{502c}-$ を表し、 $R^{502c}$ は、水素原子、置換基を有していてもよい炭素数1~20のアルキル基又は置換基を有していてもよい炭素数6~20のアリール基を表す。

【 0 0 2 1 】

【 化 6 】



40

【 0 0 2 2 】

(一般式(6)中、 $\text{Q}^3$ は、置換基を有していてもよい炭素数1~20の2価の炭化水素基を表し、 $^*$ は一般式(5)との結合部位を表す。

$\text{Y}^{1d}$ は、 $-\text{NR}^{502d}-$ を表し、 $R^{502d}$ は、水素原子、置換基を有していてもよい炭素数1~20のアルキル基又は置換基を有していてもよい炭素数6~20のアリール基を表す。

50

$R^{2d}$  は、水素原子、シアノ基、ニトロ基、トリフルオロメチル基、複素環含有基、 $-O-C(O)H$ 、 $-C(O)-R^{7d}$  又は  $-SO_2-R^{8d}$  を表す。 $R^{7d}$  は、水素原子、ハロゲン原子、 $-NR^{72d}R^{73d}$  又は  $-R^{74d}$  を表し、 $R^{8d}$  は、ハロゲン原子、ヒドロキシ基、 $-OR^{81d}$ 、 $-NR^{82d}R^{83d}$  又は  $-R^{84d}$  を表す。 $R^{72d} \sim R^{74d}$  及び  $R^{81d} \sim R^{84d}$  は、同一又は異なって、水素原子、置換基を有していてもよい炭素数 1 ~ 20 のアルキル基又は置換基を有していてもよい炭素数 6 ~ 20 のアリール基を表す。

$R^{3d}$  は、水素原子、ハロゲン原子、シアノ基、置換基を有していてもよい炭素数 1 ~ 20 のアルキル基又は置換基を有していてもよい炭素数 6 ~ 20 のアリール基を表す。

$R^{402d}$  及び  $R^{403d}$  は、同一又は異なって、水素原子、ハロゲン原子、置換基を有していてもよい炭素数 1 ~ 20 のアルキル基、置換基を有していてもよい炭素数 6 ~ 20 のアリール基、 $-NR^{406d}R^{407d}$ 、 $-OR^{408d}$ 、シアノ基、 $-C(O)R^{409d}$ 、 $-O-C(O)R^{410d}$  又は  $-C(O)OR^{411d}$  を表し、 $R^{404d} \sim R^{411d}$  は、同一又は異なって、水素原子、置換基を有していてもよい炭素数 1 ~ 20 のアルキル基又は置換基を有していてもよい炭素数 6 ~ 20 のアリール基を表す。 $R^{404d}$  と、 $R^{405d}$  と、 $R^{404d}$  及び  $R^{405d}$  が結合している窒素原子とで、置換基を有していてもよい 4 ~ 8 員の含窒素複素環を形成してもよい。))

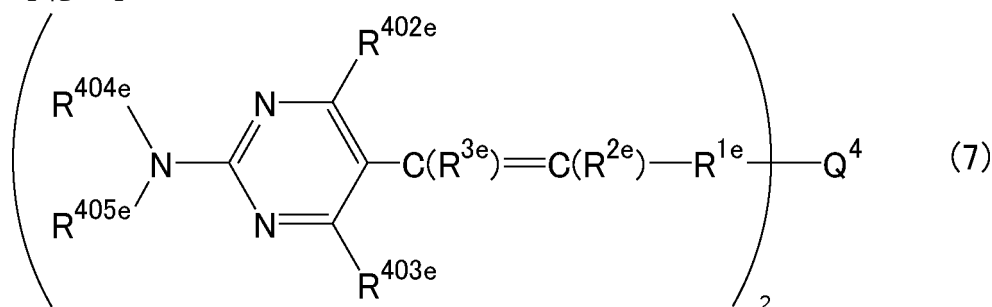
本発明の一態様においては、上記  $R^{501}$  は、上記一般式 (6) で表される基であることが好ましい。

【0023】

上記一般式 (1) で表される化合物が、下記一般式 (7) で表される化合物であることも好ましい。

【0024】

【化 7】



【0025】

(一般式 (7) 中、 $Q^4$  は、 $-SO_2-$  又は置換基を有していてもよい炭素数 1 ~ 20 の 2 価の炭化水素基を表す。

$R^{1e}$  は、複素環含有基、 $-C(O)-R^{7e}$  又は  $-SO_2-R^{8e}$  を表し、 $R^{2e}$  は、水素原子、シアノ基、ニトロ基、トリフルオロメチル基、複素環含有基、 $-O-C(O)H$ 、 $-C(O)-R^{7e}$  又は  $-SO_2-R^{8e}$  を表す。 $R^{7e}$  は、水素原子、ハロゲン原子、 $-NR^{72e}R^{73e}$  又は  $-R^{74e}$  を表し、 $R^{8e}$  は、ハロゲン原子、ヒドロキシ基、 $-OR^{81e}$ 、 $-NR^{82e}R^{83e}$  又は  $-R^{84e}$  を表す。 $R^{72e} \sim R^{74e}$  及び  $R^{81e} \sim R^{84e}$  は、同一又は異なって、水素原子、置換基を有していてもよい炭素数 1 ~ 20 のアルキル基又は置換基を有していてもよい炭素数 6 ~ 20 のアリール基を表す。

$R^{3e}$  は、水素原子、ハロゲン原子、シアノ基、置換基を有していてもよい炭素数 1 ~ 20 のアルキル基又は置換基を有していてもよい炭素数 6 ~ 20 のアリール基を表す。

$R^{402e}$  及び  $R^{403e}$  は、同一又は異なって、水素原子、ハロゲン原子、置換基を有していてもよい炭素数 1 ~ 20 のアルキル基、置換基を有していてもよい炭素数 6 ~ 20 のアリール基、 $-NR^{406e}R^{407e}$ 、 $-OR^{408e}$ 、シアノ基、 $-C(O)R^{409e}$ 、 $-O-C(O)R^{410e}$  又は  $-C(O)OR^{411e}$  を表し、 $R^{404e} \sim R^{411e}$  は、同一又は異なって、水素原子、置換基を有していてもよい炭素数 1 ~ 20 の

アルキル基又は置換基を有していてもよい炭素数 6 ~ 20 のアリール基を表す。R<sup>404</sup> と、R<sup>405</sup> と、R<sup>404</sup> 及び R<sup>405</sup> が結合している窒素原子とで、置換基を有していてもよい 4 ~ 8 員の含窒素複素環を形成してもよい。)

本発明の一態様においては、上記 Q<sup>4</sup> は、-SO<sub>2</sub>- であることが好ましい。

#### 【0026】

本発明の色素組成物は、本発明の化合物を含むことを特徴とする。

本発明の光学フィルタは、本発明の化合物を含むことを特徴とする。

上記光学フィルタとして、カラーフィルタが好ましい。

本発明のブルーライト遮蔽材料は、本発明の化合物を含むことを特徴とする。

本発明の紫外線吸収剤は、本発明の化合物を含むことを特徴とする。

10

#### 【発明の効果】

#### 【0027】

本発明によれば、400nm 付近の吸光度が高い化合物を提供することができる。本発明の化合物は、液晶ディスプレイのカラーフィルタ等の光学フィルタ用の色素等として好適に使用することができる。

#### 【発明を実施するための形態】

#### 【0028】

本発明の化合物は、上記一般式(1)で表される化合物である。上記一般式(1)で表される化合物を、本明細書中、化合物(1)ともいう。他の式番号の化合物についても同様であり、例えば一般式(2)で表される化合物を、化合物(2)ともいう。

20

#### 【0029】

本発明の化合物(1)において幾何学異性が存在する場合、本発明はその幾何学異性体のいずれも包含する。また、本発明の化合物(1)において1つ以上の不斉炭素原子が存在する場合、本発明は各々の不斉炭素原子がR配置の化合物、S配置の化合物及びそれらの任意の組み合わせの化合物のいずれも包含する。またそれらのラセミ化合物、ラセミ混合物、単一のエナンチオマー、ジアステレオマー混合物のいずれも本発明に包含される。

#### 【0030】

上記一般式(1)中、mは1~6の整数を表す。mが2~6であると、化合物(1)の耐熱性が向上するため好ましい。本発明の一態様においては、mは、好ましくは1又は2であり、より好ましくは2である。

30

#### 【0031】

Q<sup>1</sup>は、mが1のとき水素原子を表し、mが2~6のとき2~6価の連結基を表す。

2~6価の連結基として、例えば、置換基を有していてもよい炭素数1~20の2~6価の炭化水素基、-SO<sub>2</sub>-等が挙げられる。

置換基を有していてもよい炭素数1~20の2~6価の炭化水素基として、置換基を有していてもよい炭素数1~20の直鎖、分岐又は環状の2~6価のアルキル基、置換基を有していてもよい炭素数6~20の2~6価のアリーレン基が挙げられる。Q<sup>1</sup>は、好ましくは水素原子又は2価の連結基である。

#### 【0032】

2価の連結基として、置換基を有していてもよい炭素数1~20の2価の炭化水素基、-SO<sub>2</sub>-等が好ましい。置換基を有していてもよい炭素数1~20の2価の炭化水素基は、好ましくは、置換基を有していてもよい炭素数1~20の直鎖、分岐又は環状の2価のアルキル基、置換基を有していてもよい炭素数6~20の2価のアリーレン基である。

40

炭素数1~20の直鎖、分岐又は環状の2価のアルキル基は、炭素-炭素間に酸素原子、硫黄原子又は置換基を有していてもよいアリーレン基が挿入された2価のアルキル基であってもよく、好ましくは、-(CH<sub>2</sub>)<sub>k1</sub>-(k1は、1~20の整数を表す)で表される炭素数1~20の直鎖状の2価のアルキル基であり、例えば、メチレン基、エチレン基、プロピレン基、ブチレン基、ペンチレン基、ヘキシレン基、ヘプチレン基、オクチレン基、デシレン基等が挙げられる。また、1個以上のハロゲン原子で置換された2価のアルキル基であることも好ましく、例えば、ビストリフルオロメチルメチレン基等が挙げら

50

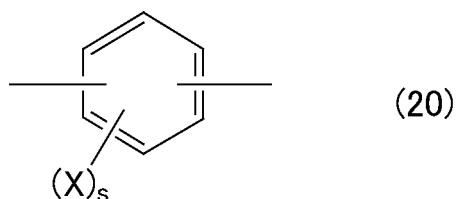
れる。直鎖状の2価のアルキル基の炭素数は2～10（上記式中の $k_1$ が2～10）がより好ましく、4～8（上記式中の $k_1$ が4～8）がさらに好ましい。

【0033】

置換基を有していてもよい炭素数6～20の2価のアリーレン基として、例えば、下記一般式（20）で表される基が好ましい。

【0034】

【化8】



10

【0035】

上記一般式（20）中、 $X$ は、互いに独立に、ハロゲン原子、ニトロ基、ヒドロキシ基、スルホ基、炭素数1～3のアルキル基又は炭素数1～3のアルコキシ基を表し、 $s$ は0～4の整数を表す。ベンゼン環の2カ所の結合手は、 $o$ -、 $m$ -、 $p$ -配向のいずれでもよい。また、ベンゼン環が置換基を有していない（ $s = 0$ である）ことが好ましい。

【0036】

一般式（1）中、 $D^1$ は、化合物（2）から水素原子が1つ外れた基を表す。化合物（2）から水素原子が1つ外れた基は、化合物（2）から水素原子を1つ除いた基ということもできる。化合物（2）は、含窒素芳香環及び電子求引性基を含み、色素となり得るメチン構造を含む。化合物（1）は、このようなメチン構造を含むことから、色素化合物として使用され得る。 $m$ が2～6のとき、複数の $D^1$ は、全て同じであってもよく、異なってもよい。一態様においては、複数の $D^1$ は、全て同じであることが好ましい。

20

一般式（1）において、 $m$ が1である化合物（1）は、化合物（2）である。 $m$ が1である化合物（1）を単量体化合物ともいう。 $m$ が2～6である化合物（1）は、連結基（ $Q^1$ ）により、化合物（2）から水素原子が外れた基が2～6連結した2～6量体構造を有する化合物である。 $m$ が2～6である化合物（1）を、2～6量体化合物ということもできる。

30

$D^1$ は、化合物（2）の、 $R^1$ 、 $R^{403}$ 又は $R^{404}$ から水素原子が1つ外れた基であることが好ましく、 $R^1$ 又は $R^{403}$ から水素原子が1つ外れた基であることがより好ましい。換言すると、一般式（1）において、 $Q^1$ は、一般式（2）中の $R^1$ 、 $R^{403}$ 又は $R^{404}$ の部分に結合していることが好ましく、 $R^1$ 又は $R^{403}$ の部分に結合していることがより好ましい。

【0037】

一般式（2）中、 $R^1$ は、シアノ基、ニトロ基、トリフルオロメチル基（ $CF_3$ 基）、複素環含有基、 $-O-C(O)H$ 、 $-C(O)-R^7$ 又は $-SO_2-R^8$ を表す。シアノ基、ニトロ基、トリフルオロメチル基、複素環含有基、 $-O-C(O)H$ 、 $-C(O)-R^7$ 及び $-SO_2-R^8$ は、いずれも電子求引性基である。

40

$R^2$ は、水素原子、シアノ基、ニトロ基、トリフルオロメチル基、複素環含有基、 $-O-C(O)H$ 、 $-C(O)-R^7$ 又は $-SO_2-R^8$ を表すか、又は、 $R^2$ は $-C(O)-R^9$ を表す。一般式（2）において、 $R^2$ が $-C(O)-R^9$ を表す場合には、 $R^1$ と、 $R^2$ と、 $R^1$ 及び $R^2$ が結合している炭素原子とで、置換基を有していてもよい4～8員の複素環を形成している。 $-C(O)-R^9$ は、電子求引性基である。

$R^7$ は、水素原子、ハロゲン原子、 $-NR^{72}R^{73}$ 又は $-R^{74}$ を表し、 $R^8$ は、ハロゲン原子、ヒドロキシ基、 $-OR^{81}$ 、 $-NR^{82}R^{83}$ 又は $-R^{84}$ を表し、 $R^9$ は、水素原子、ハロゲン原子、ヒドロキシ基、 $-OR^{91}$ 、 $-NR^{92}R^{93}$ 又は $-R^{94}$ を表す。 $R^{72} \sim R^{74}$ 、 $R^{81} \sim R^{84}$ 及び $R^{91} \sim R^{94}$ は、同一又は異なって、水素原子、置換基を有していてもよいアルキル基又は置換基を有していてもよいアリール基を

50

表す。

$R^1$  及び  $R^2$  は同じであってもよく、異なってもよい。

【0038】

$R^1$  及び  $R^2$  における複素環含有基として、ピロール環、ピリジン環、キノリン環、ピリミジン環、ピリダジン環、ピラジン環、イミダゾール環、ベンゾイミダゾール環、トリアジン環、トリアゾール環、テトラゾール環等の含窒素複素環；フラン環、ベンゾフラン環等の含酸素複素環；チオフェン環、ベンゾチオフェン環等の含硫黄複素環；オキサゾール環、ベンゾオキサゾール環等の酸素原子及び窒素原子を含む複素環；チアゾール環、ベンゾチアゾール環、チアジアゾール環等の含硫黄複素環等が挙げられ、これらの環は更に他の炭素環（例えば、ベンゼン環）や複素環（例えば、ピリジン環）と縮合環を形成していてもよく、オキサゾール環、ベンゾオキサゾール環が好ましい。

10

【0039】

本発明の一態様においては、 $R^1$  及び  $R^2$  における複素環含有基として、ベンゾオキサゾール環又はオキサゾール環の窒素と酸素の間の炭素（2位）から水素原子が外れた基（水素原子を除いた基ということもできる）が好ましく、より好ましくは、ベンゾオキサゾール環の窒素と酸素の間の炭素（2位）から水素原子が外れた基である。

また、例えば、一般式（1）において、 $m$  が 2 ～ 6 であり、 $R^1$  がベンゾオキサゾール環又はオキサゾール環から水素原子が外れた基であり、 $Q^1$  と  $D^1$  とが、化合物（2）の  $R^1$  の部位で結合している場合、 $R^1$  は、ベンゾオキサゾール環又はオキサゾール環の窒素と酸素の間の炭素（2位）以外の炭素原子で  $Q^1$  と結合していることが好ましい。

20

$R^1$  は、好ましくはシアノ基、複素環含有基、 $-O-C(O)H$ 、又は、 $-C(O)-R^7$  である。 $R^2$  は、好ましくはシアノ基、複素環含有基、 $-O-C(O)H$  又は  $-C(O)-R^7$  であるか、又は、 $R^2$  は、 $-C(O)-R^9$  である。

【0040】

$R^{72}$ 、 $R^{73}$  及び  $R^{74}$ 、 $R^{81}$ 、 $R^{82}$ 、 $R^{83}$  及び  $R^{84}$ 、並びに、 $R^{91}$ 、 $R^{92}$ 、 $R^{93}$  及び  $R^{94}$  における置換基を有していてもよいアルキル基として、置換基を有していてもよい炭素数 1 ～ 20 のアルキル基が挙げられる。置換基を有していてもよい炭素数 1 ～ 20 のアルキル基として、後述する置換基を有していてもよい炭素数 1 ～ 20 の直鎖、分岐又は環状のアルキル基が挙げられる。本発明の一態様において、置換基を有していてもよい炭素数 1 ～ 20 のアルキル基は、好ましくは炭素数 4 ～ 20 の直鎖、分岐又は環状のアルキル基であり、炭素数が 4 以上の分岐又は環状の立体的に嵩高いアルキル基が好ましく、より好ましくは、炭素数 6 ～ 20 の環状のアルキル基であり、特に好ましくは、直鎖または分岐アルキル基を置換基として有していてもよい環状のアルキル基である。 $R^{72} \sim R^{74}$ 、 $R^{81} \sim R^{84}$ 、及び、 $R^{91} \sim R^{94}$  における炭素数 1 ～ 20 のアルキル基として、例えば、メチル基、エチル基、 $n$ -プロピル基、 $i$ -プロピル基、 $n$ -ブチル基、 $i$ -ブチル基、 $t$ -ブチル基、 $n$ -ヘキシル基、シクロヘキシル基、 $n$ -オクチル基、2-エチルヘキシル基、4- $t$ -ブチルシクロヘキシル基、2, 6-ジ- $t$ -ブチル-4-メチルシクロヘキシル等が好ましく、 $t$ -ブチル基、シクロヘキシル基、4- $t$ -ブチルシクロヘキシル基、2, 6-ジ- $t$ -ブチル-4-メチルシクロヘキシル基等がより好ましく、4- $t$ -ブチルシクロヘキシル基、2, 6-ジ- $t$ -ブチル-4-メチルシクロヘキシル基等がさらに好ましい。

30

40

$R^{72}$ 、 $R^{73}$  及び  $R^{74}$ 、 $R^{81}$ 、 $R^{82}$ 、 $R^{83}$  及び  $R^{84}$ 、並びに、 $R^{91}$ 、 $R^{92}$ 、 $R^{93}$  及び  $R^{94}$  における置換基を有していてもよいアリール基として、置換基を有していてもよい炭素数 6 ～ 20 のアリール基が挙げられる。置換基を有していてもよい炭素数 6 ～ 20 のアリール基として、後述する置換基を有していてもよい炭素数 6 ～ 20 のアリール基が挙げられ、例えば、アルキル基で置換されていてもよいフェニル基（例えば、フェニル基、3-メチルフェニル基、2, 6-ジメチルフェニル基等）等が好ましい。

$R^{81}$  及び  $R^{91}$  は、同一又は異なって、例えば、メチル基、エチル基、 $n$ -プロピル基、 $i$ -プロピル基、 $n$ -ブチル基、 $s$ -ブチル基、 $i$ -ブチル基、 $t$ -ブチル基、 $n$ -ペンチル基、 $n$ -ヘキシル基、シクロヘキシル基、 $n$ -オクチル基、2-エチルヘキシル基

50

、4 - t - ブチルシクロヘキシル基、2, 6 - ジ - t - ブチル - 4 - メチルシクロヘキシル基等が好ましく、4 - t - ブチルシクロヘキシル基、2, 6 - ジ - t - ブチル - 4 - メチルシクロヘキシル基等がより好ましい。R<sup>7 2</sup>、R<sup>8 2</sup>及びR<sup>9 2</sup>は、同一又は異なって、好ましくは、水素原子である。R<sup>7 3</sup>、R<sup>8 3</sup>及びR<sup>9 3</sup>は、同一又は異なって、好ましくは、水素原子、フェニル基、3 - メチルフェニル基又は2, 6 - ジメチルフェニル基である。R<sup>7 4</sup>、R<sup>8 4</sup>及びR<sup>9 4</sup>は、同一又は異なって、好ましくは、メチル基、エチル基、t - ブチル基、シクロヘキシル基、フェニル基、ナフチル基等である。

#### 【0041】

R<sup>2</sup>が - C(O) - R<sup>9</sup>の場合には、R<sup>1</sup>と、R<sup>2</sup>と、R<sup>1</sup>及びR<sup>2</sup>が結合している炭素原子とで、置換基を有していてもよい4 ~ 8員の複素環を形成している。

10

R<sup>1</sup>と、R<sup>2</sup>と、R<sup>1</sup>及びR<sup>2</sup>が結合している炭素原子とで形成される、4 ~ 8員の複素環としては、窒素原子、酸素原子及び硫黄原子から選ばれる少なくとも1個のヘテロ原子を含む4 ~ 8員の複素環が挙げられる。複素環は、芳香族性複素環であってもよく、非芳香族性複素環であってもよい。4 ~ 8員の複素環としては、例えば、ピラゾロン環、イソオキサゾロン環、オキシインドール環、バルビツール環、チオバルビツール環、ローダニン環、ピリドン環、2, 4 - オキサゾリジンジオン環、2 - チオ - 2, 4 - オキサゾリジンジオン環、2, 5 - チアゾリジンジオン環、2 - チオ - 2, 5 - チアゾリジンジオン環、チアゾリドン環、4 - チアゾロン環、2, 4 - イミダゾリジンジオン環(ヒダントイン環)、2 - チオヒダントイン環、5 - イミダゾロン環、スクシンイミド環、1, 3 - ジオキサン - 4, 6 - ジオン環等が挙げられる。好ましくは5又は6員の窒素原子、酸素原子及び硫黄原子から選ばれる少なくとも1個のヘテロ原子を含む複素環であり、より好ましくは、5又は6員の窒素原子及び酸素原子を含む複素環であり、ピラゾロン環、バルビツール環、2, 4 - オキサゾリジンジオン環等が挙げられる。

20

置換基を有していてもよい4 ~ 8員の複素環における置換基は特に限定されず、例えば、後記の炭素数1 ~ 20の直鎖、分岐又は環状のアルキル基、置換基を有していてもよい炭素数6 ~ 20のアリール基、カルボキシ基、アルコキシカルボニル基等が挙げられる。置換基を有するアリール基として、ニトロフェニル基、シアノフェニル基、ヒドロキシフェニル基、メチルフェニル基、ジメチルフェニル基、トリメチルフェニル基、フルオロフェニル基、クロロフェニル基、ジクロロフェニル基、プロモフェニル基、メトキシフェニル基、エトキシフェニル基、トリフルオロメチルフェニル基、N, N - ジメチルアミノフェニル基等の置換基を有するフェニル基等が挙げられる。好ましくは、置換基は、無置換アルキル基、ハロゲン化アルキル基、カルボキシ基置換アルキル基、アラルキル基、置換基を有していてもよいアリール基(好ましくは、フェニル基、メチルフェニル基、ジメチルフェニル基、トリメチルフェニル基等)である。

30

#### 【0042】

一般式(2)中、R<sup>3</sup>は、水素原子、ハロゲン原子、シアノ基、置換基を有していてもよいアルキル基又は置換基を有していてもよいアリール基を表す。

R<sup>4 0 2</sup>及びR<sup>4 0 3</sup>は、同一又は異なって、水素原子、ハロゲン原子、置換基を有していてもよいアルキル基、置換基を有していてもよいアリール基、- NR<sup>4 0 6</sup>R<sup>4 0 7</sup>、- OR<sup>4 0 8</sup>、シアノ基、- C(O)R<sup>4 0 9</sup>、- O - C(O)R<sup>4 1 0</sup>又は- C(O)OR<sup>4 1 1</sup>を表す。

40

R<sup>4 0 4</sup> ~ R<sup>4 1 1</sup>は、同一又は異なって、水素原子、置換基を有していてもよいアルキル基又は置換基を有していてもよいアリール基を表す。R<sup>4 0 4</sup>と、R<sup>4 0 5</sup>と、R<sup>4 0 4</sup>及びR<sup>4 0 5</sup>が結合している窒素原子とで、置換基を有していてもよい4 ~ 8員の含窒素複素環を形成してもよい。

#### 【0043】

R<sup>3</sup>、R<sup>4 0 2</sup>及びR<sup>4 0 3</sup>におけるアルキル基としては、例えば、炭素数1 ~ 20の直鎖、分岐又は環状のアルキル基が挙げられる。炭素数1 ~ 20の直鎖、分岐又は環状のアルキル基として、具体的には、メチル基、エチル基、n - プロピル基、iso - プロピル基、n - ブチル基、iso - ブチル基、sec - ブチル基、t - ブチル基、n - ペンチル

50

基、2 - メチルブチル基、1 - メチルブチル基、neo - ペンチル基、1、2 - ジメチルプロピル基、1、1 - ジメチルプロピル基、シクロペンチル基、n - ヘキシル基、4 - メチルペンチル基、3 - メチルペンチル基、2 - メチルペンチル基、1 - メチルペンチル基、3、3 - ジメチルブチル基、2、3 - ジメチルブチル基、1、3 - ジメチルブチル基、2、2 - ジメチルブチル基、1、2 - ジメチルブチル基、1、1 - ジメチルブチル基、2 - エチルブチル基、1 - エチルブチル基、1、1、2 - トリメチルブチル基、1 - エチル - 2 - メチルプロピル基、シクロヘキシル基、n - ヘプチル基、2 - メチルヘキシル基、3 - メチルヘキシル基、4 - メチルヘキシル基、5 - メチルヘキシル基、2、4 - ジメチルペンチル基、n - オクチル基、2 - エチルヘキシル基、2、5 - ジメチルヘキシル基、2、4 - ジメチルヘキシル基、2、2、4 - トリメチルペンチル基、t - オクチル基、n - ノニル基、3、5、5 - トリメチルヘキシル基、n - デシル基、4 - エチルオクチル基、4 - エチル - 4、5 - ジメチルヘキシル基、4 - t - ブチルシクロヘキシル基、n - ウンデシル基、n - ドデシル基、1、3、5、7 - テトラメチルオクチル基、4 - ブチルオクチル基、6、6 - ジエチルオクチル基、n - トリデシル基、6 - メチル - 4 - ブチルオクチル基、n - テトラデシル基、n - ペンタデシル基、3、5 - ジメチルヘプタデシル基、2、6 - ジメチルヘプタデシル基、2、4 - ジメチルヘプタデシル基、2、2、5、5 - テトラメチルヘキシル基、1 - シクロペンチル - 2、2 - ジメチルプロピル基、1 - シクロヘキシル - 2、2 - ジメチルプロピル基、2、6 - ジ - t - ブチル - 4 - メチルシクロヘキシル基、n - オクタデシル基等が挙げられる。

10

20

#### 【0044】

置換基を有していてもよいアルキル基における置換基は特に限定されず、炭素数 6 ~ 10 の単環又は多環の芳香環基（フェニル基、ナフチル基等）、炭素数 1 ~ 8 の直鎖、分岐又は環状のアルコキシ基、アミノ基、モノ - 又はジ - アルキルアミノ基（アルキルの炭素数は 1 ~ 8）、ハロゲン原子、シアノ基、ヒドロキシ基、ニトロ基、カルボキシ基、炭素数 1 ~ 8 のアルコキシカルボニル基、炭素数 2 ~ 10 のアシル基（例えば、アセチル基、プロピオニル基、ブチリル基、バレリル基、ピバロイル基、アクリロイル基、メタクリロイル基、ベンゾイル基、トルオイル基、シンナモイル基、アニソイル基、ナフトイル基等）、炭素数 2 ~ 10 のアシルオキシ基等が挙げられる。

#### 【0045】

$R^3$ 、 $R^{402}$  及び  $R^{403}$  におけるアリール基として、炭素数 6 ~ 20 の単環又は多環の芳香環基が挙げられる。炭素数 6 ~ 20 の単環又は多環の芳香環基として、具体的には、フェニル基等の単環の芳香族炭化水素基；ナフチル基、アントラセニル基、ナフタセニル基、ペンタセニル基、フェナントレニル基、ピレニル基等の多環の芳香族炭化水素基が挙げられる。

30

置換基を有していてもよいアリール基における置換基は特に限定されず、例えば、炭素数 1 ~ 8 の直鎖、分岐又は環状のアルキル基、炭素数 1 ~ 8 のアルコキシ基、アミノ基、モノ - 又はジ - アルキルアミノ基（アルキルの炭素数は 1 ~ 8）、ハロゲン原子、シアノ基、ヒドロキシ基、ニトロ基、炭素数 1 ~ 8 のハロゲン化炭化水素基、カルボキシ基、炭素数 1 ~ 8 のアルコキシカルボニル基等が挙げられる。好ましくは、炭素数 1 ~ 8 の直鎖、分岐又は環状のアルキル基である。例えば、置換基を有するフェニル基及びナフチル基の一例を挙げると、ニトロフェニル基、シアノフェニル基、ヒドロキシフェニル基、メチルフェニル基、ジメチルフェニル基、トリメチルフェニル基、フルオロフェニル基、クロロフェニル基、ジクロロフェニル基、プロモフェニル基、メトキシフェニル基、エトキシフェニル基、トリフルオロメチルフェニル基、N、N - ジメチルアミノフェニル基、ニトロナフチル基、シアノナフチル基、ヒドロキシナフチル基、メチルナフチル基、フルオロナフチル基、クロロナフチル基、プロモナフチル基、トリフルオロメチルナフチル基等が挙げられる。

40

#### 【0046】

一般式 (2) において、 $R^{404}$  と、 $R^{405}$  と、 $R^{404}$  及び  $R^{405}$  が結合している窒素原子とで形成される、4 ~ 8 員の含窒素複素環は、酸素原子を含む含窒素複素環であ

50



ってもよい。含窒素複素環としては、非芳香族性含窒素複素環が挙げられる。4～8員の含窒素複素環として、例えば、ピロリジン環、ピペリジン環、ピペラジン環、モルホリン環等の非芳香族性含窒素複素環が挙げられる。

置換基を有していてもよい4～8員の含窒素複素環における置換基は特に限定されず、例えば、炭素数1～8の直鎖、分岐又は環状のアルキル基、炭素数1～8のアルコキシ基、アミノ基、モノ-又はジ-アルキルアミノ基（アルキルの炭素数は1～8）、ハロゲン原子、シアノ基、ヒドロキシ基、ニトロ基、炭素数1～8のハロゲン化炭化水素基、カルボキシ基、炭素数1～8のアルコキシカルボニル基等が挙げられる。好ましくは、炭素数1～8の直鎖、分岐又は環状のアルキル基である。

【0047】

アルキル基、アリール基、含窒素複素環、複素環等の環が置換基を有する場合において、置換基が2以上ある場合には、それぞれの置換基は同一であっても異なってもよい。

【0048】

一般式(2)中の各基の好ましい態様について説明する。

$R^3$ は、好ましくは水素原子、置換基を有していてもよい炭素数1～20のアルキル基又はシアノ基であり、より好ましくは水素原子又は置換基を有していてもよい炭素数1～5のアルキル基であり、さらに好ましくは水素原子又は炭素数1～3のアルキル基であり、特に好ましくは水素原子である。

【0049】

$R^{402}$ は、好ましくは水素原子、置換基を有していてもよい炭素数1～20のアルキル基、置換基を有していてもよい炭素数6～20のアリール基又はアルコキシ基であり、より好ましくは、水素原子又は置換基を有していてもよい炭素数1～5のアルキル基であり、さらに好ましくは、水素原子又は炭素数1～3のアルキル基であり、特に好ましくはメチル基である。

【0050】

$R^{403}$ は、好ましくは $-OR^{408}$ である。 $R^{408}$ は、好ましくは水素原子、置換基を有していてもよい炭素数1～20のアルキル基又は置換基を有していてもよい炭素数6～20のアリール基であり、置換基を有していてもよい炭素数1～20のアルキル基がより好ましい。 $R^{408}$ は、より好ましくは、水素原子又は置換基を有していてもよい炭素数1～5のアルキル基であり、さらに好ましくは炭素数1～3のアルキル基であり、特に好ましくはエチル基である。

本発明の一態様において、 $R^{402}$ 及び $R^{403}$ は、少なくともどちらか一方が水素原子以外の置換基であることが好ましく、 $R^{402}$ 及び $R^{403}$ は、同一又は異なって、水素原子以外の置換基であることがより好ましい。

【0051】

$R^{404}$ 及び $R^{405}$ は、同一又は異なって、好ましくは置換基を有していてもよい炭素数1～20のアルキル基又は置換基を有していてもよい炭素数6～20のアリール基であり、より好ましくは炭素数1～10のアルキル基又は炭素数6～10のアリール基であり、さらに好ましくは炭素数1～10のアルキル基であり、特に好ましくはメチル基、エチル基、*n*-プロピル基、*n*-ブチル基である。

$R^{406}$ 、 $R^{407}$ 、 $R^{408}$ 、 $R^{409}$ 、 $R^{410}$ 及び $R^{411}$ は、同一又は異なって、好ましくは置換基を有していてもよい炭素数1～20のアルキル基又は置換基を有していてもよい炭素数6～20のアリール基である。

【0052】

一般式(1)においてmが1又は2である化合物として、上記一般式(3)で表される化合物(化合物(3))、一般式(5)で表される化合物(化合物(5))、一般式(7)で表される化合物(化合物(7))等が好ましい。

【0053】

本発明の一態様においては、化合物(1)として化合物(3)が好ましい。化合物(3)は、耐光性に優れるため好ましい。

10

20

30

40

50

一般式(3)中、 $R^{1a}$ は、シアノ基、ニトロ基、トリフルオロメチル基、複素環含有基、 $-O-C(O)H$ 、 $-C(O)-R^{7a}$ 又は $-SO_2-R^{8a}$ を表す。

$R^{2a}$ は、水素原子、シアノ基、ニトロ基、トリフルオロメチル基、複素環含有基、 $-O-C(O)H$ 、 $-C(O)-R^{7a}$ 又は $-SO_2-R^{8a}$ を表すか、又は、 $R^{2a}$ は $-C(O)-R^{9a}$ を表す。 $R^{2a}$ が $-C(O)-R^{9a}$ を表す場合には、 $R^{1a}$ と、 $R^{2a}$ と、 $R^{1a}$ 及び $R^{2a}$ が結合している炭素原子とで、置換基を有していてもよい4~8員の複素環を形成している。

$R^{7a}$ は、水素原子、ハロゲン原子、 $-NR^{72a}R^{73a}$ 又は $-R^{74a}$ を表し、 $R^{8a}$ は、ハロゲン原子、ヒドロキシ基、 $-OR^{81a}$ 、 $-NR^{82a}R^{83a}$ 又は $-R^{84a}$ を表し、 $R^{9a}$ は、水素原子、ハロゲン原子、ヒドロキシ基、 $-OR^{91a}$ 、 $-NR^{92a}R^{93a}$ 又は $-R^{94a}$ を表す。 $R^{72a} \sim R^{74a}$ 、 $R^{81a} \sim R^{84a}$ 及び $R^{91a} \sim R^{94a}$ は、同一又は異なって、水素原子、置換基を有していてもよい炭素数1~20のアルキル基又は置換基を有していてもよい炭素数6~20のアリール基を表す。 $R^{1a}$ 及び $R^{2a}$ は同じであってもよく、異なってもよい。

$R^{1a}$ は、好ましくはシアノ基、複素環含有基、 $-O-C(O)H$ 、又は、 $-C(O)-R^{7a}$ である。 $R^{2a}$ は、好ましくはシアノ基、複素環含有基、 $-O-C(O)H$ 又は $-C(O)-R^{7a}$ であるか、又は、 $R^{2a}$ は、 $-C(O)-R^{9a}$ である。 $R^{1a}$ 及び $R^{2a}$ における置換基を有していてもよい4~8員の複素環の好ましい態様は、一般式(1)における $R^1$ と、 $R^2$ と、 $R^1$ 及び $R^2$ が結合している炭素原子とで形成される4~8員の複素環の好ましい態様と同じである。

$R^{72a}$ 、 $R^{73a}$ 及び $R^{74a}$ 、 $R^{81a}$ 、 $R^{82a}$ 、 $R^{83a}$ 及び $R^{84a}$ 、並びに、 $R^{91a}$ 、 $R^{92a}$ 、 $R^{93a}$ 及び $R^{94a}$ の好ましい態様は、上述した $R^{72}$ 、 $R^{73}$ 及び $R^{74}$ 、 $R^{81}$ 、 $R^{82}$ 、 $R^{83}$ 及び $R^{84}$ 、並びに、 $R^{91}$ 、 $R^{92}$ 、 $R^{93}$ 及び $R^{94}$ の好ましい態様とそれぞれ同じである。

#### 【0054】

一般式(3)中、 $R^{3a}$ は、水素原子、ハロゲン原子、シアノ基、置換基を有していてもよい炭素数1~20のアルキル基又は置換基を有していてもよい炭素数6~20のアリール基を表す。

$R^{402a}$ は、水素原子、ハロゲン原子、置換基を有していてもよい炭素数1~20のアルキル基、置換基を有していてもよい炭素数6~20のアリール基、 $-NR^{406a}R^{407a}$ 、 $-OR^{408a}$ 、シアノ基、 $-C(O)R^{409a}$ 、 $-O-C(O)R^{410a}$ 又は $-C(O)OR^{411a}$ を表し、 $R^{404a} \sim R^{411a}$ は、同一又は異なって、水素原子、置換基を有していてもよい炭素数1~20のアルキル基又は置換基を有していてもよい炭素数6~20のアリール基を表す。 $R^{404a}$ と、 $R^{405a}$ と、 $R^{404a}$ 及び $R^{405a}$ が結合している窒素原子とで、置換基を有していてもよい4~8員の含窒素複素環を形成してもよい。

$R^{3a}$ 、 $R^{402a}$ 、 $R^{404a}$ 、 $R^{405a}$ 、 $R^{406a}$ 、 $R^{407a}$ 、 $R^{408a}$ 、 $R^{409a}$ 、 $R^{410a}$ 及び $R^{411a}$ の好ましい態様は、上述した $R^3$ 、 $R^{402}$ 、 $R^{404}$ 、 $R^{405}$ 、 $R^{406}$ 、 $R^{407}$ 、 $R^{408}$ 、 $R^{409}$ 、 $R^{410}$ 及び $R^{411}$ の好ましい態様とそれぞれ同じである。

#### 【0055】

一般式(3)中、 $R^{413}$ は、水素原子、置換基を有していてもよい炭素数1~20のアルキル基、置換基を有していてもよい炭素数6~20のアリール基を表すか、又は、上記一般式(4)で表される基を表す。 $R^{413}$ は、好ましくは、置換基を有していてもよい炭素数1~5のアルキル基又は一般式(4)で表される基であり、より好ましくは炭素数1~3のアルキル基又は一般式(4)で表される基であり、さらに好ましくはエチル基又は上記一般式(4)で表される基である。本発明の一態様においては、 $R^{413}$ は、一般式(4)で表される基であることが好ましい。

#### 【0056】

一般式(4)中、 $Q^2$ は置換基を有していてもよい炭素数1~20の2価の炭化水素基を

表し、\*は一般式(3)との結合部位を表す。一般式(4)において、 $Q^2$ が一般式(3)に結合している。 $Q^2$ における置換基を有していてもよい炭素数1~20の2価の炭化水素基及びその好ましい態様は、上述した $Q^1$ における置換基を有していてもよい炭素数1~20の2価の炭化水素基及びその好ましい態様と同じである。

#### 【0057】

一般式(4)中、 $R^{1b}$ は、シアノ基、ニトロ基、トリフルオロメチル基、複素環含有基、 $-O-C(O)H$ 、 $-C(O)-R^{7b}$ 又は $-SO_2-R^{8b}$ を表す。

$R^{2b}$ は、水素原子、シアノ基、ニトロ基、トリフルオロメチル基、複素環含有基、 $-O-C(O)H$ 、 $-C(O)-R^{7b}$ 又は $-SO_2-R^{8b}$ を表すか、又は、 $R^{2b}$ は $-C(O)-R^{9b}$ を表す。 $R^{2b}$ が $-C(O)-R^{9b}$ を表す場合には、 $R^{1b}$ と、 $R^{2b}$ と、 $R^{1b}$ 及び $R^{2b}$ が結合している炭素原子とで、置換基を有していてもよい4~8員の複素環を形成している。

$R^{7b}$ は、水素原子、ハロゲン原子、 $-NR^{72b}R^{73b}$ 又は $-R^{74b}$ を表し、 $R^{8b}$ は、ハロゲン原子、ヒドロキシ基、 $-OR^{81b}$ 、 $-NR^{82b}R^{83b}$ 又は $-R^{84b}$ を表し、 $R^{9b}$ は、水素原子、ハロゲン原子、ヒドロキシ基、 $-OR^{91b}$ 、 $-NR^{92b}R^{93b}$ 又は $-R^{94b}$ を表す。 $R^{72b} \sim R^{74b}$ 、 $R^{81b} \sim R^{84b}$ 及び $R^{91b} \sim R^{94b}$ は、同一又は異なって、水素原子、置換基を有していてもよい炭素数1~20のアルキル基又は置換基を有していてもよい炭素数6~20のアリール基を表す。

$R^{1b}$ は、好ましくはシアノ基、複素環含有基、 $-O-C(O)H$ 、又は、 $-C(O)-R^{7b}$ である。 $R^{2b}$ は、好ましくはシアノ基、複素環含有基、 $-O-C(O)H$ 又は $-C(O)-R^{7b}$ であるか、又は、 $R^{2b}$ は、 $-C(O)-R^{9b}$ である。 $R^{1b}$ 及び $R^{2b}$ における置換基を有していてもよい4~8員の複素環の好ましい態様は、一般式(1)における $R^1$ と、 $R^2$ と、 $R^1$ 及び $R^2$ が結合している炭素原子とで形成される4~8員の複素環の好ましい態様と同じである。 $R^{1b}$ 及び $R^{2b}$ は同じであってもよく、異なってもよい。

$R^{72b}$ 、 $R^{73b}$ 及び $R^{74b}$ 、 $R^{81b}$ 、 $R^{82b}$ 、 $R^{83b}$ 及び $R^{84b}$ 、並びに、 $R^{91b}$ 、 $R^{92b}$ 、 $R^{93b}$ 及び $R^{94b}$ の好ましい態様は、上述した $R^{72}$ 、 $R^{73}$ 及び $R^{74}$ 、 $R^{81}$ 、 $R^{82}$ 、 $R^{83}$ 及び $R^{84}$ 、並びに、 $R^{91}$ 、 $R^{92}$ 、 $R^{93}$ 及び $R^{94}$ の好ましい態様とそれぞれ同じである。

#### 【0058】

一般式(4)中、 $R^{3b}$ は、水素原子、ハロゲン原子、シアノ基、置換基を有していてもよい炭素数1~20のアルキル基又は置換基を有していてもよい炭素数6~20のアリール基を表す。

$R^{402b}$ は、水素原子、ハロゲン原子、置換基を有していてもよい炭素数1~20のアルキル基、置換基を有していてもよい炭素数6~20のアリール基、 $-NR^{406b}R^{407b}$ 、 $-OR^{408b}$ 、シアノ基、 $-C(O)R^{409b}$ 、 $-O-C(O)R^{410b}$ 又は $-C(O)OR^{411b}$ を表し、 $R^{404b} \sim R^{411b}$ は、同一又は異なって、水素原子、置換基を有していてもよい炭素数1~20のアルキル基又は置換基を有していてもよい炭素数6~20のアリール基を表す。 $R^{404b}$ と、 $R^{405b}$ と、 $R^{404b}$ 及び $R^{405b}$ が結合している窒素原子とで、置換基を有していてもよい4~8員の含窒素複素環を形成してもよい。

$R^{3b}$ 、 $R^{402b}$ 、 $R^{404b}$ 、 $R^{405a}$ 、 $R^{406b}$ 、 $R^{407b}$ 、 $R^{408b}$ 、 $R^{409b}$ 、 $R^{410b}$ 及び $R^{411b}$ の好ましい態様は、上述した $R^3$ 、 $R^{402}$ 、 $R^{404}$ 、 $R^{405}$ 、 $R^{406}$ 、 $R^{407}$ 、 $R^{408}$ 、 $R^{409}$ 、 $R^{410}$ 及び $R^{411}$ の好ましい態様とそれぞれ同じである。

#### 【0059】

一般式(3)は、一態様においては、 $R^{2a}$ が、 $-C(O)-R^{9a}$ を表し、 $R^{1a}$ と、 $R^{2a}$ と、 $R^{1a}$ 及び $R^{2a}$ が結合している炭素原子とで、置換基を有していてもよい4~8員の複素環を形成していることも好ましい。4~8員の複素環は、窒素原子、酸素原子及び硫黄原子から選ばれる少なくとも1個のヘテロ原子を含む4~8員の複素環が挙げ

10

20

30

40

50

られ、置換基を有していてもよい4～8員の複素環の好ましい態様は、 $R^1$ と、 $R^2$ と、 $R^1$ 及び $R^2$ が結合している炭素原子とで形成される、4～8員の複素環の好ましい態様と同じである。

#### 【0060】

化合物(1)として、化合物(5)も好ましい。

一般式(5)中、 $R^{2c}$ は、水素原子、シアノ基、ニトロ基、トリフルオロメチル基、複素環含有基、 $-O-C(O)H$ 、 $-C(O)-R^{7c}$ 又は $-SO_2-R^{8c}$ を表す。 $R^{7c}$ は、水素原子、ハロゲン原子、 $-NR^{72c}R^{73c}$ 又は $-R^{74c}$ を表し、 $R^{8c}$ は、ハロゲン原子、ヒドロキシ基、 $-OR^{81c}$ 、 $-NR^{82c}R^{83c}$ 又は $-R^{84c}$ を表す。 $R^{72c} \sim R^{74c}$ 及び $R^{81c} \sim R^{84c}$ は、同一又は異なって、水素原子、置換基を有していてもよい炭素数1～20のアルキル基又は置換基を有していてもよい炭素数6～20のアリール基を表す。 $R^{2c}$ は、好ましくはシアノ基、複素環含有基又は $-C(O)-R^{7c}$ であり、シアノ基、 $-C(O)-NR^{72c}R^{73c}$ がより好ましい。 $R^{72c}$ 、 $R^{73c}$ 及び $R^{74c}$ 、並びに、 $R^{81c}$ 、 $R^{82c}$ 、 $R^{83c}$ 及び $R^{84c}$ の好ましい態様は、上述した $R^{72}$ 、 $R^{73}$ 及び $R^{74}$ 、並びに、 $R^{81}$ 、 $R^{82}$ 、 $R^{83}$ 及び $R^{84}$ の好ましい態様とそれぞれ同じである。

10

#### 【0061】

一般式(5)中、 $R^{3c}$ は、水素原子、ハロゲン原子、シアノ基、置換基を有していてもよい炭素数1～20のアルキル基又は置換基を有していてもよい炭素数6～20のアリール基を表す。

20

$R^{402c}$ 及び $R^{403c}$ は、同一又は異なって、水素原子、ハロゲン原子、置換基を有していてもよい炭素数1～20のアルキル基、置換基を有していてもよい炭素数6～20のアリール基、 $-NR^{406c}R^{407c}$ 、 $-OR^{408c}$ 、シアノ基、 $-C(O)R^{409c}$ 、 $-O-C(O)R^{410c}$ 又は $-C(O)OR^{411c}$ を表し、 $R^{404c} \sim R^{411c}$ は、同一又は異なって、水素原子、置換基を有していてもよい炭素数1～20のアルキル基又は置換基を有していてもよい炭素数6～20のアリール基を表す。 $R^{404c}$ と、 $R^{405c}$ と、 $R^{404c}$ 及び $R^{405c}$ が結合している窒素原子とで、置換基を有していてもよい4～8員の含窒素複素環を形成してもよい。

$R^{3c}$ 、 $R^{402c}$ 、 $R^{403c}$ 、 $R^{404c}$ 、 $R^{405c}$ 、 $R^{406c}$ 、 $R^{407c}$ 、 $R^{408c}$ 、 $R^{409c}$ 、 $R^{410c}$ 及び $R^{411c}$ の好ましい態様は、上述した $R^3$ 、 $R^{402}$ 、 $R^{403}$ 、 $R^{404}$ 、 $R^{405}$ 、 $R^{406}$ 、 $R^{407}$ 、 $R^{408}$ 、 $R^{409}$ 、 $R^{410}$ 及び $R^{411}$ の好ましい態様とそれぞれ同じである。

30

#### 【0062】

一般式(5)中、 $R^{501}$ は、水素原子、置換基を有していてもよい炭素数1～20のアルキル基、置換基を有していてもよい炭素数6～20のアリール基、又は、上記一般式(6)で表される基を表す。 $R^{501}$ は、好ましくは置換基を有していてもよい炭素数1～20のアルキル基(例えば、メチル基、エチル基、*t*-ブチル基、シクロヘキシル基、4-*t*-ブチルシクロヘキシル基、2,6-ジ-*t*-ブチル-4-メチルシクロヘキシル基等)、置換基を有していてもよい炭素数6～20のアリール基(例えば、フェニル基、メチルフェニル基、ジメチルフェニル基、トリメチルフェニル基等)、又は、上記一般式(6)で表される基である。本発明の一態様においては、 $R^{501}$ は、上記一般式(6)で表される基であることが好ましい。

40

#### 【0063】

一般式(5)中、 $Y^{1c}$ は、 $-NR^{502c}-$ を表し、 $R^{502c}$ は、水素原子、置換基を有していてもよい炭素数1～20のアルキル基又は置換基を有していてもよい炭素数6～20のアリール基を表す。 $Y^{1c}$ は、好ましくは $-NH-$ である。

#### 【0064】

一般式(6)中、 $Q^3$ は、置換基を有していてもよい炭素数1～20の2価の炭化水素基を表し、\*は一般式(5)との結合部位を表す。一般式(6)において、 $Q^3$ が一般式(5)に結合している。 $Q^3$ における置換基を有していてもよい炭素数1～20の2価の炭

50

化水素基及びその好ましい態様は、上述した  $Q^1$  における置換基を有していてもよい炭素数 1 ~ 20 の 2 価の炭化水素基及びその好ましい態様と同じである。一態様においては、 $Q^3$  は、より好ましくは、上記一般式 (20) で表され、 $s$  が 0 である 2 価のアリール基である。

#### 【0065】

一般式 (6) 中、 $Y^{1d}$  は、 $-NR^{502d}-$  を表し、 $R^{502d}$  は、水素原子、置換基を有していてもよい炭素数 1 ~ 20 のアルキル基又は置換基を有していてもよい炭素数 6 ~ 20 のアリール基を表す。 $Y^{1d}$  の好ましい態様は、上述した  $Y^{1c}$  の好ましい態様と同じである。

#### 【0066】

一般式 (6) 中、 $R^{2d}$  は、水素原子、シアノ基、ニトロ基、トリフルオロメチル基、複素環含有基、 $-O-C(O)H$ 、 $-C(O)-R^{7d}$  又は  $-SO_2-R^{8d}$  を表す。 $R^{7d}$  は、水素原子、ハロゲン原子、 $-NR^{72d}R^{73d}$  又は  $-R^{74d}$  を表し、 $R^{8d}$  は、ハロゲン原子、ヒドロキシ基、 $-OR^{81d}$ 、 $-NR^{82d}R^{83d}$  又は  $-R^{84d}$  を表す。 $R^{72d} \sim R^{74d}$  及び  $R^{81d} \sim R^{84d}$  は、同一又は異なって、水素原子、置換基を有していてもよい炭素数 1 ~ 20 のアルキル基又は置換基を有していてもよい炭素数 6 ~ 20 のアリール基を表す。

$R^{2d}$  は、好ましくはシアノ基、複素環含有基、 $-O-C(O)H$  又は  $-C(O)-R^{7d}$  であり、シアノ基、 $-C(O)-NR^{72d}R^{73d}$  がより好ましい。 $R^{72d}$ 、 $R^{73d}$  及び  $R^{74d}$ 、並びに、 $R^{81d}$ 、 $R^{82d}$ 、 $R^{83d}$  及び  $R^{84d}$  の好ましい態様は、上述した  $R^{72}$ 、 $R^{73}$  及び  $R^{74}$ 、並びに、 $R^{81}$ 、 $R^{82}$ 、 $R^{83}$  及び  $R^{84}$  の好ましい態様とそれぞれ同じである。

#### 【0067】

$R^{3d}$  は、水素原子、ハロゲン原子、シアノ基、置換基を有していてもよい炭素数 1 ~ 20 のアルキル基又は置換基を有していてもよい炭素数 6 ~ 20 のアリール基を表す。

$R^{402d}$  及び  $R^{403d}$  は、同一又は異なって、水素原子、ハロゲン原子、置換基を有していてもよい炭素数 1 ~ 20 のアルキル基、置換基を有していてもよい炭素数 6 ~ 20 のアリール基、 $-NR^{406d}R^{407d}$ 、 $-OR^{408d}$ 、シアノ基、 $-C(O)R^{409d}$ 、 $-O-C(O)R^{410d}$  又は  $-C(O)OR^{411d}$  を表し、 $R^{404d} \sim R^{411d}$  は、同一又は異なって、水素原子、置換基を有していてもよい炭素数 1 ~ 20 のアルキル基又は置換基を有していてもよい炭素数 6 ~ 20 のアリール基を表す。 $R^{404d}$  と、 $R^{405d}$  と、 $R^{404d}$  及び  $R^{405d}$  が結合している窒素原子とで、置換基を有していてもよい 4 ~ 8 員の含窒素複素環を形成してもよい。

$R^{3d}$ 、 $R^{402d}$ 、 $R^{403d}$ 、 $R^{404d}$ 、 $R^{405d}$ 、 $R^{406d}$ 、 $R^{407d}$ 、 $R^{408d}$ 、 $R^{409d}$ 、 $R^{410d}$  及び  $R^{411d}$  の好ましい態様は、上述した  $R^3$ 、 $R^{402}$ 、 $R^{403}$ 、 $R^{404}$ 、 $R^{405}$ 、 $R^{406}$ 、 $R^{407}$ 、 $R^{408}$ 、 $R^{409}$ 、 $R^{410}$  及び  $R^{411}$  の好ましい態様とそれぞれ同じである。

#### 【0068】

本発明の一態様においては、化合物 (1) が、化合物 (7) であることも好ましい。

一般式 (7) 中、 $Q^4$  は、 $-SO_2-$  又は置換基を有していてもよい炭素数 1 ~ 20 の 2 価の炭化水素基を表す。 $Q^4$  における置換基を有していてもよい炭素数 1 ~ 20 の 2 価の炭化水素基及びその好ましい態様は、上述した  $Q^1$  における置換基を有していてもよい炭素数 1 ~ 20 の 2 価の炭化水素基及びその好ましい態様と同じである。本発明の一態様においては、上記  $Q^4$  は、ビストリフルオロメチルメチレン基又は  $-SO_2-$  であることが好ましく、 $-SO_2-$  であることがより好ましい。

#### 【0069】

一般式 (7) 中、 $R^{1e}$  は、複素環含有基、 $-C(O)-R^{7e}$  又は  $-SO_2-R^{8e}$  を表し、 $R^{2e}$  は、水素原子、シアノ基、ニトロ基、トリフルオロメチル基、複素環含有基、 $-O-C(O)H$ 、 $-C(O)-R^{7e}$  又は  $-SO_2-R^{8e}$  を表す。 $R^{7e}$  は、水素原子、ハロゲン原子、 $-NR^{72e}R^{73e}$  又は  $-R^{74e}$  を表し、 $R^{8e}$  は、ハロゲン

10

20

30

40

50

原子、ヒドロキシ基、 $-OR^{81e}$ 、 $-NR^{82e}R^{83e}$ 又は $-R^{84e}$ を表す。 $R^{72e} \sim R^{74e}$ 及び $R^{81e} \sim R^{84e}$ は、同一又は異なって、水素原子、置換基を有していてもよい炭素数1～20のアルキル基又は置換基を有していてもよい炭素数6～20のアリール基を表す。 $R^{1e}$ 及び $R^{2e}$ は同じであってもよく、異なってもよい。 $R^{1e}$ 及び $R^{2e}$ は、好ましくは、同一又は異なって、シアノ基、複素環含有基、 $-O-C(O)H$ 、又は、 $-C(O)-R^{7e}$ である。 $R^{72e}$ 、 $R^{73e}$ 及び $R^{74e}$ 並びに、 $R^{81e}$ 、 $R^{82e}$ 、 $R^{83e}$ 及び $R^{84e}$ の好ましい態様は、上述した $R^{72}$ 、 $R^{73}$ 及び $R^{74}$ 、並びに、 $R^{81}$ 、 $R^{82}$ 、 $R^{83}$ 及び $R^{84}$ の好ましい態様とそれぞれ同じである。

# 【0070】

10

一般式(7)中、 $R^{3e}$ は、水素原子、ハロゲン原子、シアノ基、置換基を有していてもよい炭素数1～20のアルキル基又は置換基を有していてもよい炭素数6～20のアリール基を表す。 $R^{402e}$ 及び $R^{403e}$ は、同一又は異なって、水素原子、ハロゲン原子、置換基を有していてもよい炭素数1～20のアルキル基、置換基を有していてもよい炭素数6～20のアリール基、 $-NR^{406e}R^{407e}$ 、 $-OR^{408e}$ 、シアノ基、 $-C(O)R^{409e}$ 、 $-O-C(O)R^{410e}$ 又は $-C(O)OR^{411e}$ を表し、 $R^{404e} \sim R^{411e}$ は、同一又は異なって、水素原子、置換基を有していてもよい炭素数1～20のアルキル基又は置換基を有していてもよい炭素数6～20のアリール基を表す。 $R^{404e}$ と、 $R^{405e}$ と、 $R^{404e}$ 及び $R^{405e}$ が結合している窒素原子とで、置換基を有していてもよい4～8員の含窒素複素環を形成してもよい。

20

$R^{3e}$ 、 $R^{402e}$ 、 $R^{403e}$ 、 $R^{404e}$ 、 $R^{405e}$ 、 $R^{406e}$ 、 $R^{407e}$ 、 $R^{408e}$ 、 $R^{409e}$ 、 $R^{410e}$ 及び $R^{411e}$ の好ましい態様は、上述した $R^3$ 、 $R^{402}$ 、 $R^{403}$ 、 $R^{404}$ 、 $R^{405}$ 、 $R^{406}$ 、 $R^{407}$ 、 $R^{408}$ 、 $R^{409}$ 、 $R^{410}$ 及び $R^{411}$ の好ましい態様とそれぞれ同じである。

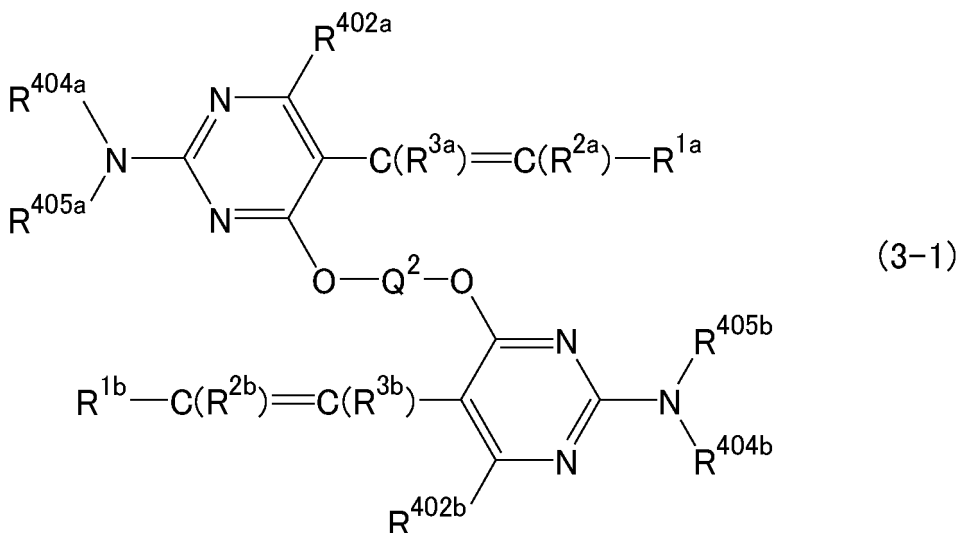
# 【0071】

化合物(3)は、 $R^{413}$ が一般式(4)で表される基である場合は、一般式(1)において $Q^1$ が $Q^2$ (置換基を有していてもよい炭素数1～20の2価の炭化水素基)であり、該 $Q^2$ により、一般式(3)で表される基及び一般式(4)で表される基が両側に連結した2量体構造を有する化合物である。一般式(3)で表される基及び一般式(4)で表される基は、メチン構造を含み、いずれも色素となる構造である。このような色素となる構造が2量体構造となっていることにより分子量が増大するため、化合物が昇華しにくくなって、耐熱性に優れた色素化合物となる。 $R^{413}$ が一般式(4)で表される基である化合物(3)は、下記一般式(3-1)で表される化合物である。

30

# 【0072】

## 【化9】



40

# 【0073】

50

上記式(3-1)中、 $R^{1a}$ 、 $R^{2a}$ 、 $R^{3a}$ 、 $R^{402a}$ 、 $R^{404a}$ 及び $R^{405a}$ 、並びに、 $Q^2$ 、 $R^{1b}$ 、 $R^{2b}$ 、 $R^{3b}$ 、 $R^{402b}$ 、 $R^{404b}$ 及び $R^{405b}$ は、それぞれ上記と同義である。

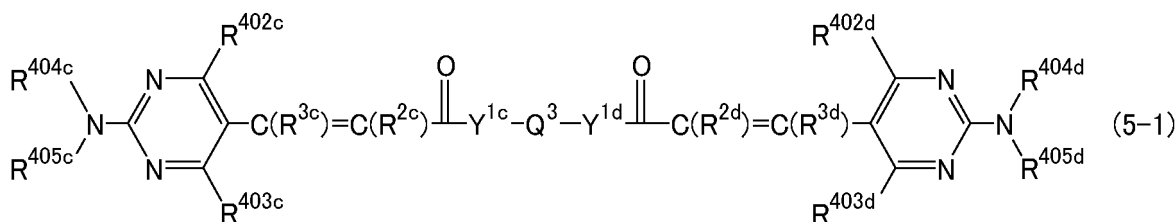
#### 【0074】

化合物(5)は、 $R^{501}$ が一般式(6)で表される基である場合は、一般式(1)において $Q^1$ が $Q^3$ (置換基を有していてもよい炭素数1~20の2価の炭化水素基)であり、該 $Q^3$ により、一般式(5)で表される基及び一般式(6)で表される基が両側に連結した2量体構造を有する化合物である。一般式(5)で表される基及び一般式(6)で表される構造は、メチン構造を含み、色素となる構造である。このような色素となる構造が2量体構造となっていることにより分子量が増大するため、化合物が昇華しにくくなって、耐熱性に優れた色素化合物となる。

$R^{501}$ が一般式(6)で表される基である化合物(5)は、下記一般式(5-1)で表される化合物である。

#### 【0075】

##### 【化10】



#### 【0076】

上記一般式(5-1)中、 $R^{2c}$ 、 $R^{3c}$ 、 $R^{402c}$ 、 $R^{403c}$ 、 $R^{404c}$ 、 $R^{405c}$ 及び $Y^{1c}$ 、並びに、 $Q^3$ 、 $R^{2d}$ 、 $R^{3d}$ 、 $R^{402d}$ 、 $R^{403d}$ 、 $R^{404d}$ 、 $R^{405d}$ 及び $Y^{1d}$ は、上記と同義である。

#### 【0077】

本発明の化合物(1)の好ましい態様の一例として、例えば、実施例で製造した化合物A1~A6、化合物B1~B4、化合物D1、化合物E1等が挙げられる。中でも、耐光性が高いことから、化合物A1~A6が好ましい。耐熱性が高い点から、化合物A1~A5、化合物B2及びB4、化合物D1が好ましい。有機溶媒への溶解度が高い点では、化合物A2~A4、A6、化合物B4が好ましい。

化合物A1~A6及び化合物E1は、化合物(3)の一例であり、化合物B1~B4は、化合物(5)の一例であり、化合物D1は、化合物(7)の一例である。化合物B4は、化合物(3)の一例ともいえる。

#### 【0078】

本発明の化合物(1)の製造方法は特に限定されず、例えば、以下の方法により製造することができる。本発明の化合物の製造方法について、以下に合成方法の一例を挙げて説明するが、本発明の化合物(1)の製造方法は下記方法に限定されるものではない。また、後述の反応を行う際に、当該部位以外の官能基については、必要に応じてあらかじめ適当な保護基により保護しておき、適当な段階においてこれを脱保護してもよい。

#### 【0079】

本発明の一態様として、一般式(1)で表される化合物が下記一般式(11)で表される化合物(化合物(11))である場合、例えば、次のような方法により合成することができる。化合物(11)は、本発明の化合物(1)の一例であり、一般式(1)においてmが2である化合物(二量体化合物)である。化合物(11)は、化合物(3)において、 $R^{413}$ が一般式(4)で表される基である化合物の一例ともいえる。下記では、化合物(M4)に化合物(M21)を脱水縮合反応させることにより化合物(11)が得られる。

#### 【0080】

10

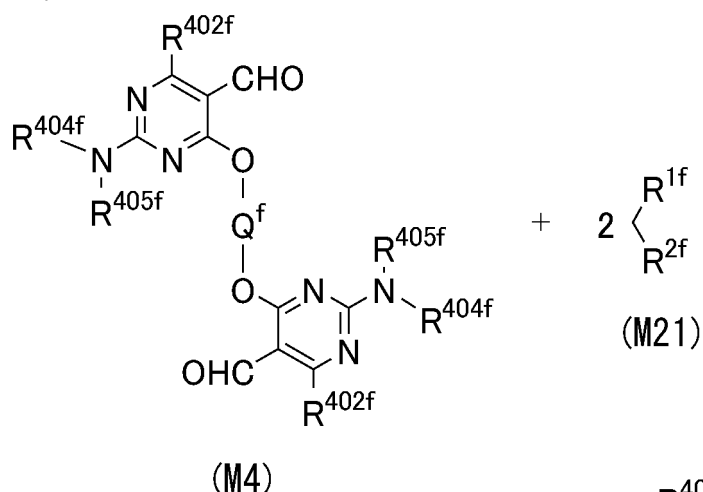
20

30

40

50

## 【化 1 1】



10

20

## 【0081】

上記反応式中、 $Q^f$  は、2 価の連結基を表す。 $R^{402f}$ 、 $R^{404f}$  及び  $R^{405f}$  並びにこれらの好ましい態様は、上述した  $R^{402}$ 、 $R^{404}$  及び  $R^{405}$  並びにこれらの好ましい態様とそれぞれ同じである。 $Q^f$  における 2 価の連結基は、 $Q^1$  における 2 価の連結基と同じである。 $Q^f$  は、好ましくは置換基を有していてもよい炭素数 1 ~ 20 の 2 価の炭化水素基である。 $R^{1f}$ 、 $R^{2f}$  及びこれらの好ましい態様は、上述した  $R^1$ 、 $R^2$  及びこれらの好ましい態様とそれぞれ同じである。

30

波線

## 【0082】

## 【化 1 2】

~~~~~

## 【0083】

は、単結合であって、それが結合している二重結合についての立体配置が、それぞれ独立して、E 配置若しくは Z 配置又はそれらの混合であることを示す。以下も同様である。

40

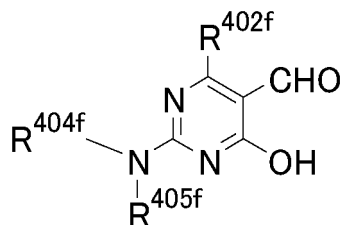
## 【0084】

化合物 (M4) は、例えば、下記一般式 (M1) で表される化合物 (M1) にジハロゲン化アルキル化合物を反応させて化合物 (M1) のヒドロキシ基をアルコキシ化することにより得ることができる。化合物 (M1) は、Journal of the Chemical Society 1957, 4845 に記載の方法に従って得ることができる。

## 【0085】



## 【化 1 3】



(M1)

10

## 【0086】

上記一般式 (M1) 中、 $R^{402f}$ 、 $R^{404f}$  及び  $R^{405f}$  は、上記と同義である。また、化合物 (11) は、化合物 (M1) と化合物 (M21) とを脱水縮合させた後、アルコキシ化により二量化して得ることも可能である。

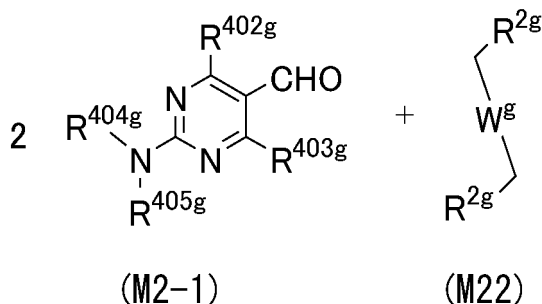
## 【0087】

一般式 (1) で表される化合物が下記一般式 (12) で表される化合物 (化合物 (12)) である場合は、例えば、次のような方法により合成することができる。化合物 (12) は、本発明の化合物 (1) の一例であり、二量体化合物である。化合物 (12) は、化合物 (5) において、 $R^{501}$  が一般式 (6) で表される基である化合物の一例ともいえる。下記では、化合物 (M2-1) に化合物 (M22) を脱水縮合反応させることにより化合物 (12) が得られる。

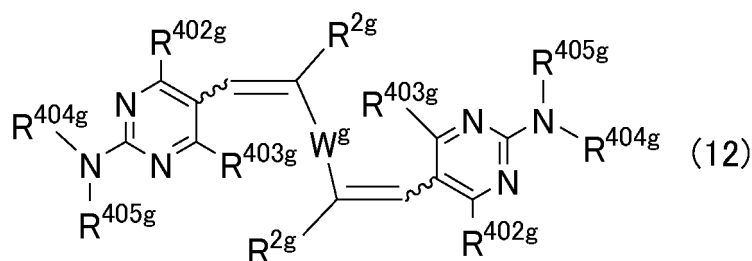
20

## 【0088】

## 【化 1 4】



30



## 【0089】

上記反応式中、 $R^{2g}$  は、水素原子、シアノ基、ニトロ基、トリフルオロメチル基、複素環含有基、 $-O-C(O)H$ 、 $-C(O)-R^{7g}$  又は  $-SO_2-R^{8g}$  を表す。 $R^{7g}$  は、水素原子、ハロゲン原子、 $-NR^{72g}R^{73g}$  又は  $-R^{74g}$  を表し、 $R^{8g}$  は、ハロゲン原子、ヒドロキシ基、 $-OR^{81g}$ 、 $-NR^{82g}R^{83g}$  又は  $-R^{84g}$  を表す。 $R^{2g}$  は、好ましくは、上述したシアノ基、複素環含有基、又は、 $-C(O)-R^{7g}$  である。 $R^{71g}$ 、 $R^{81g}$ 、 $R^{82g}$ 、 $R^{83g}$  及び  $R^{84g}$  並びにこれらの好ましい態様は、上述した  $R^{71}$ 、 $R^{81}$ 、 $R^{82}$ 、 $R^{83}$  及び  $R^{84}$  並びにこれらの好ましい態様とそれぞれ同じである。 $W^g$  は、 $-C(O)-NH-Q^g-NH-C(O)-$  を表し、 $Q^g$  における 2 価の連結基は、 $Q^1$  における 2 価の連結基と同じである。 $Q^g$  は、2 価の連結基を表す。 $Q^g$  は、好ましくは置換基を有していてもよい炭素数 1 ~ 20 の 2 価の

40

50

炭化水素基である。R<sup>402g</sup>、R<sup>403g</sup>、R<sup>404g</sup>及びR<sup>405g</sup>並びにこれらの好ましい態様は、上述したR<sup>402</sup>、R<sup>403</sup>、R<sup>404</sup>及びR<sup>405</sup>並びにこれらの好ましい態様とそれぞれ同じである。

化合物(M2-1)及び後記の化合物(M2-2)は、例えば、上記化合物(M1)のヒドロキシ基をアルコキシ化することにより得ることができる。

また、化合物(12)は、上記の化合物(M2-1)と化合物(M2-1)とを脱水縮合させた後、R<sup>1f</sup>で連結させてW<sup>g</sup>として二量化して得ることも可能である。

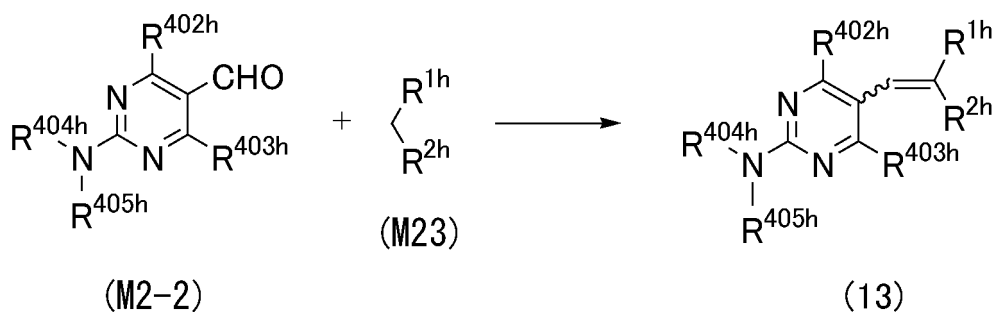
#### 【0090】

一般式(1)で表される化合物が下記一般式(13)で表される化合物(化合物(13))である場合は、例えば、次のような方法により合成することができる。化合物(13)は、本発明の化合物(1)の一例であり、単量体化合物(一般式(1)中のmが1)である。化合物(13)は、化合物(3)において、R<sup>413</sup>が水素原子、置換基を有していてもよい炭素数1~20のアルキル基又は置換基を有していてもよい炭素数6~20のアリール基を表す化合物の一例でもある。下記では、化合物(M2-2)に化合物(M23)を脱水縮合反応させることにより化合物(13)が得られる。

10

#### 【0091】

#### 【化15】



20

#### 【0092】

上記反応式中、R<sup>402h</sup>、R<sup>403h</sup>、R<sup>404h</sup>及びR<sup>405h</sup>並びにこれらの好ましい態様は、上述したR<sup>402</sup>、R<sup>403</sup>、R<sup>404</sup>及びR<sup>405</sup>並びにこれらの好ましい態様とそれぞれ同じである。R<sup>1h</sup>、R<sup>2h</sup>及びこれらの好ましい態様は、上述したR<sup>1</sup>、R<sup>2</sup>及びこれらの好ましい態様とそれぞれ同じである。

30

#### 【0093】

上記の製造方法における各生成物の単離や精製は、通常の有機合成で用いられる方法、例えば濾過、抽出、洗浄、乾燥、濃縮、結晶化、各種クロマトグラフィー等を適宜組み合わせることができる。また、中間体においては、特に精製せずに次の反応に供することも可能である。

#### 【0094】

本発明の化合物(1)は、通常360~430nmに吸収極大波長を有するものである。360~430nmに吸収極大波長を有すると、紫外線、青色の光を選択的に吸収することができる。本発明の化合物(1)は、370~430nmに吸収極大波長を有することが好ましい。また、本発明の化合物(1)は、400nmのグラム吸光係数が30以上であることも好ましい。吸収極大波長及びグラム吸光係数は、実施例に記載の方法で測定することができる。

40

#### 【0095】

本発明の化合物(1)は、以下の有機溶媒に溶解する化合物であることが好ましい。有機溶媒としては、例えば、芳香族炭化水素類(例えば、トルエン、キシレン等)、ケトン類(メチルエチルケトン、アセトン、シクロヘキサノン、2-ヘプタノン、3-ヘプタノン等)、エーテル類(例えば、プロピレングリコールモノメチルエーテルアセテート、メチルセロソルブアセテート、エチルセロソルブアセテート、プロピレングリコールモノメチルエーテル等)、エステル類(例えば、3-エトキシプロピオン酸メチル、3-エト

50

キシプロピオン酸エチル、乳酸エチル、酢酸エチル、酢酸ブチル、3-メトキシプロピオン酸メチル等)及びこれらの2種以上の混合溶媒が挙げられる。

化合物(1)は、上記有機溶媒の少なくとも1種に対し、0.1質量%以上溶解することが好ましく、例えば、0.1質量%以上50質量%以下溶解することが好ましく、1質量%以上40質量%以下溶解することがより好ましく、3質量%以上30質量%以下溶解することが更に好ましい。より好ましくは、20における有機溶媒に対する溶解性がこのような範囲にあることである。有機溶媒に対する溶解性がこのような範囲にあると、本発明の化合物(1)を、例えば、カラーフィルタ等の光学フィルタの製造に使用する際に、製造性が良好であるため好ましい。

【0096】

本発明の化合物(1)は、その熱分解温度が200以上であることが好ましく、210以上がより好ましく、例えば、250~400であることが好ましい。熱分解温度は、熱重量測定装置により測定することができる。

【0097】

本発明の化合物(1)は、通常、360~430nmに吸収極大波長を持ち、この波長の光を効果的に吸収することができる。本発明の化合物(1)は400nm付近の光を効果的に吸収することができる。一態様として、本発明の化合物(1)は、2~6量体化合物(一般式(1)においてmが2~6)であると、耐熱性を向上させることができる。また、本発明の好ましい態様において、本発明の化合物(1)は、有機溶媒への溶解性に優れるものである。このため本発明の化合物(1)は、例えば、カラーフィルタ、色変換フィルタ、光吸収フィルタ等の光学フィルタ用色素等として好適に用いられる。また、本発明の化合物(1)は、ブルーライト遮蔽材料、紫外線吸収剤、記録媒体の記録材料等にも好適に使用される。

【0098】

本発明の化合物(1)は、例えば樹脂等と混合することにより、色素組成物とすることができる。色素組成物は、着色組成物として好適に用いられる。

上記樹脂は特に限定されず、熱可塑性樹脂、光硬化性樹脂、熱硬化性樹脂等を、着色組成物の用途等に応じて適宜選択すればよい。例えば、アクリル樹脂、ポリカーボネート樹脂、ポリスチレン樹脂、低密度ポリエチレン樹脂、ポリプロピレン樹脂、ポリウレタン樹脂、ポリアミド樹脂、ポリアセタール樹脂、ポリフェニレンスルフィド樹脂、ポリエチレンテレフタレート樹脂、ポリブチレンテレフタレート樹脂、ポリシクロオレフィン樹脂、ポリスルホン樹脂、ポリエーテルスルホン樹脂、フッ素樹脂、シリコーン樹脂、ポリエステル樹脂、エポキシ樹脂、フェノール樹脂、メラミン樹脂等の樹脂が挙げられる。これらは1種のみ使用してもよく、2種以上を組み合わせ使用してもよい。

【0099】

色素組成物における化合物(1)の配合量は、例えば、色素組成物の総固形分に対して化合物(1)が0.001~50質量%であることが好ましく、0.01~40質量%であることがより好ましい。

【0100】

色素組成物は、その用途等に応じて、本発明の化合物(1)及び樹脂以外の任意成分を含んでもよい。任意成分として、例えば、酸化防止剤、消泡剤、他の色素(染料、顔料等)、赤外線吸収剤、重合性単量体、重合開始剤、増感剤等が挙げられる。また、化合物(1)以外の紫外線吸収剤を含んでもよい。

色素組成物の製造方法は特に限定されず、例えば、本発明の化合物(1)及び樹脂、並びに、所望により配合される任意成分を混合すればよい。

【0101】

本発明の化合物(1)、並びに、本発明の化合物(1)を含む光学フィルタ用色素及び色素組成物は、例えば、光学フィルタの製造に好適に用いられる。

【0102】

光学フィルタは、本発明の化合物(1)を含むものであればよく、光学フィルタの構成は

10

20

30

40

50

特に限定されない。例えば、従来のものと同様に、少なくとも支持体を有し、必要に応じて、粘着層、光学機能層、反射防止層、ハードコート層等の各種機能層を有することができる。光学フィルタにおいて、本発明の化合物(1)は、支持体及び各種機能層のいずれかに含まれていればよく、例えば、支持体又は光学機能層に含有されていることが好ましい。また、光学フィルタの大きさ及び形状は、特に限定されず、用途等に応じて適宜選択すればよい。

#### 【0103】

支持体及び各種機能層の構成も特に限定されない。例えば支持体は、通常、透明樹脂を用いて形成される。透明樹脂としては、例えば、環状オレフィン系樹脂、芳香族ポリエーテル系樹脂、ポリイミド系樹脂、フルオレンポリカーボネート系樹脂、フルオレンポリエス

10

#### 【0104】

光学フィルタの製造方法は特に限定されない。例えば、支持体上に本発明の化合物(1)を含む光学機能層を形成する方法として、溶媒中に本発明の化合物(1)及びバインダー樹脂等を溶解又は分散させた後、ディップコート法、エアナイフコート法、カーテンコート法、ローラーコート法、ワイヤーバーコート法、グラビアコート法、スピンコート法、エクストルージョンコート法等の塗工方法によって支持体上に塗膜形成する方法が挙げ

20

#### 【0105】

また、本発明の化合物(1)を含む光学機能層又は支持体の製造方法として、本発明の化合物(1)と、光硬化性樹脂及び/又は熱硬化性樹脂並びに光重合開始剤及び/又は熱重合開始剤とを混合した後、光照射及び/又は加熱処理により硬化膜を形成し、これを光学機能層又は支持体とすることもできる。

#### 【0106】

光学フィルタは、例えば、カラーフィルタ、色変換フィルタ、光吸収フィルタ等の光学フィルタとして、液晶ディスプレイ、有機ELディスプレイ、撮像装置、照明用具や窓ガラス等の防虫(走光性を持つ飛翔昆虫の飛来抑制)材料等に好適に使用することができる。

30

#### 【0107】

本発明の化合物(1)、並びに、本発明の化合物(1)を含む色素組成物は、例えば、ブルーライト遮蔽材料、紫外線吸収剤、記録材料、化粧品の製造にも好適に用いられる。

本発明の化合物(1)を含むブルーライト遮蔽材料、紫外線吸収剤、記録材料、化粧品も、本発明に包含される。ブルーライト遮蔽材料、紫外線吸収剤、記録材料、化粧品は、化合物(1)を含むものであればよく、その構成は特に限定されない。

ブルーライト遮蔽材料は特に限定されず、例えば、ブルーライトカットフィルム;ブルーライトカット用眼鏡のレンズ又はコンタクトレンズ等のブルーライト遮断レンズ等が挙げられる。ブルーライト遮蔽材料の一例であるレンズを製造する方法としては、例えば、透明樹脂に本発明の化合物(1)を混練し、射出成形法、圧縮成形法、押出成形法等により成形する方法や、後述の支持体上に本発明の化合物(1)を含む光学機能層を形成する方法等の各種の方法を採ることができる。紫外線吸収剤は、ガラス、プラスチック、繊維、紙、塗料、インク、化粧品等の様々な材料に使用することができる。紫外線吸収剤は、種々の材料に混合して用いることができ、該材料中に分散していてもよく、溶解していてもよい。また、紫外線吸収剤は、種々の材料に化学的又は物理的に担持されていてもよい。本発明の化合物(1)を含む記録材料としては、光学ディスク等が挙げられる。

40

#### 【実施例】

#### 【0108】

以下に本発明をより具体的に説明する実施例を示すが、本発明はこれらの実施例に限定されるものではない。

50

## 【 0 1 0 9 】

以下で、得られた化合物の物性を測定する際に使用した機器及び測定条件は次の通りである。

( G C - M S )

( 株 ) 島津製作所製 ガスクロマトグラフ質量分析計 G C M S - Q P 2 0 1 0 P l u s ( E I 法 )

( L C / M S )

( 株 ) 島津製作所製 高速液体クロマトグラフ質量分析計 L C M S - 2 0 1 0 E V ( E S I 法 )

## 【 0 1 1 0 】

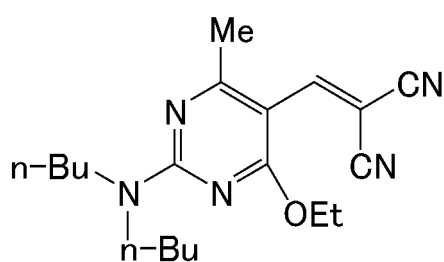
10

< 製造例 1 >

下記式で表される化合物 A 6 を合成した。反応式を以下に示す。

## 【 0 1 1 1 】

## 【 化 1 6 】

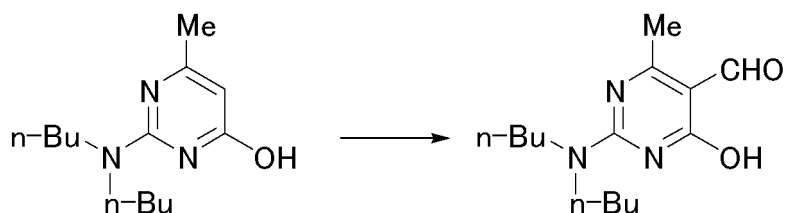


A6

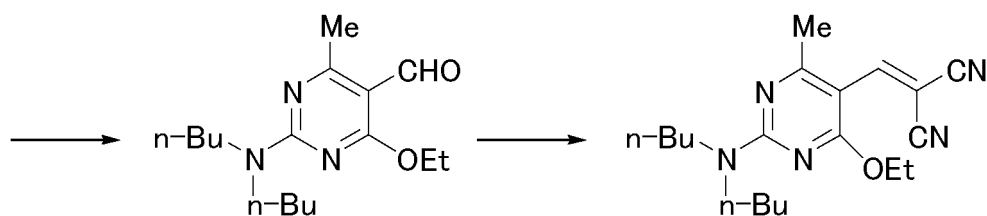
20

## 【 0 1 1 2 】

## 【 化 1 7 】

IM1IM2

30

IM3

A6

40

## 【 0 1 1 3 】

( 化合物 I M 2 の合成 )

冷却管及び温度計を付した 1 L 四つ口フラスコに、J o u r n a l o f A m e r i c a n C h e m i c a l S o c i e t y 1 9 5 4 , 7 6 , 1 8 7 9 に記載の 2 - ジメチルアミノ - 4 - ヒドロキシ - 6 - メチルピリミジンの合成において、N , N - ジメチルグアニジン硫酸塩を、B E 6 3 9 3 8 6 に記載の方法と同様にして得た 1 , 1 - ジブチルグアニジン塩酸塩に代えた以外は同様にして、化合物 I M 1 を得た。化合物 I M 1 を用い、J o u r n a l o f t h e C h e m i c a l S o c i e t y 1 9 5 7 , 4 8

50

45 に記載の方法と同様の手順で、ライマー・チーマン (Reimer-Tiemann) 反応によってホルミル化し、化合物 IM2 (18.4 g, 収率 69%) を得た。

GC-MS:  $m/z = 265$  ( $[M]^+$ )

【0114】

(化合物 IM3 の合成)

冷却管及び温度計を付した 100 mL 四つ口フラスコ中で、化合物 IM2 (15.8 g)、ヨウ化エチル (東京化成工業株式会社製) (14 g)、炭酸カリウム (14 g)、ジメチルホルムアミド (DMF) (60 mL) の混合液を 70 で 3 時間撹拌した後、室温まで放冷させた。反応液を水 (300 mL) に排出し、トルエン (300 mL) で抽出した。有機層を減圧濃縮することで化合物 IM3 (17.3 g, 収率 99%) を得た。

10

GC-MS:  $m/z = 293$  ( $[M]^+$ )

【0115】

(化合物 A6 の合成)

冷却管及び温度計を付した 25 mL 四つ口フラスコ中で、化合物 IM3 (2.2 g)、マロニトリル (東京化成工業株式会社製) (0.5 g)、ピペリジン (0.03 g)、エタノール (6 mL) の混合液を 75 で 1 時間撹拌した。室温まで放冷し、析出している結晶を濾過して取り出した。得られた結晶をエタノールで洗浄し、化合物 A6 (1.4 g, 収率 67%) を得た。

LC-MS:  $m/z = 342$  ( $[M+H]^+$ )

【0116】

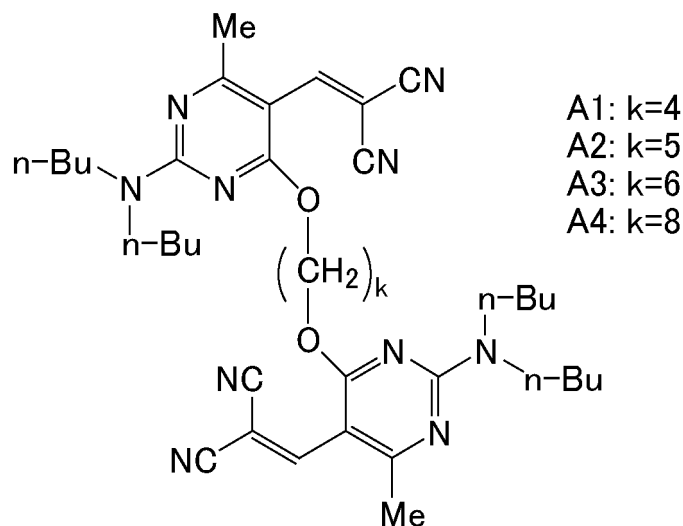
20

< 製造例 2 >

下記式で表される化合物 A1 ~ A4 を合成した。化合物 A1 は、下記中の k が 4 の化合物である。化合物 A2 は、下記式中の k が 5 の化合物である。化合物 A3 は、下記式中の k が 6 の化合物である。化合物 A4 は、下記式中の k が 8 の化合物である。

【0117】

【化18】



30

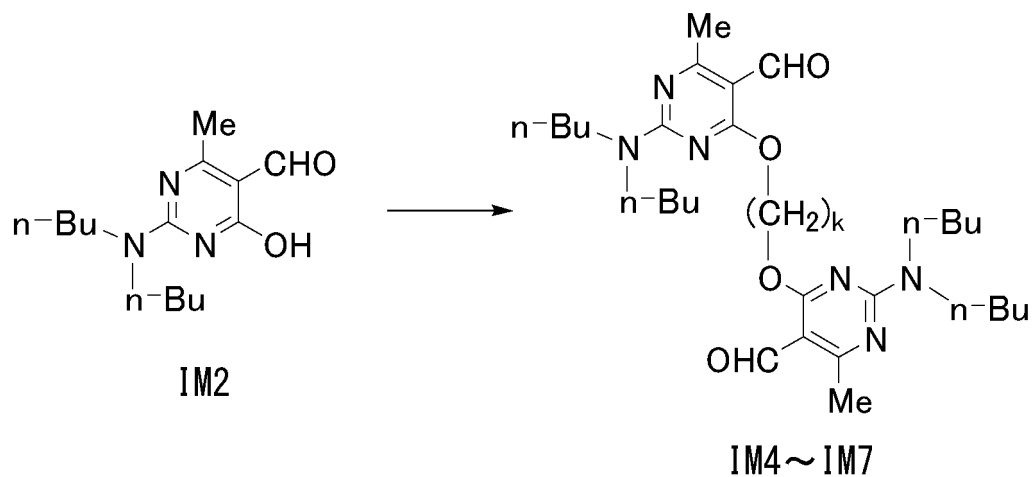
40

【0118】

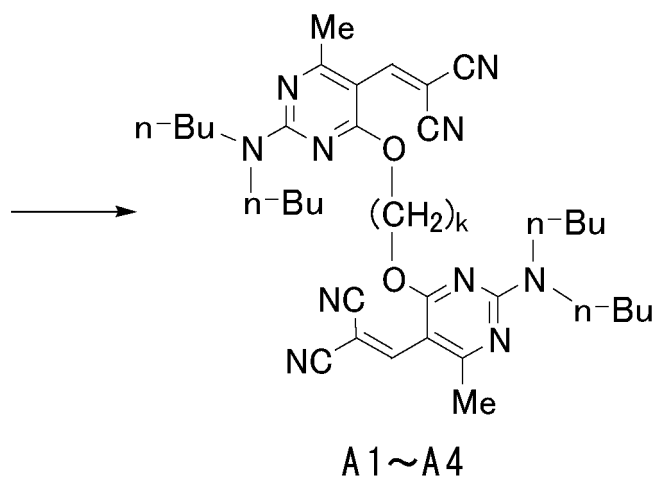
反応式を以下に示す。式中の k 及び対応する化合物を、表 1 に示す。

【0119】

## 【化 19】



10



20

## 【0120】

## 【表 1】

| k | IM4~IM7 | A1~A4 |
|---|---------|-------|
| 4 | 化合物IM4  | 化合物A1 |
| 5 | 化合物IM5  | 化合物A2 |
| 6 | 化合物IM6  | 化合物A3 |
| 8 | 化合物IM7  | 化合物A4 |

30

## 【0121】

## (化合物IM4の合成)

冷却管及び温度計を付した50mL四つ口フラスコ中に、化合物IM2(2.7g)、1,4-ジヨードブタン(東京化成工業株式会社製)(1.5g)、炭酸カリウム(1.7g)、DMF(20mL)を仕込み、80℃で2.5時間撹拌した。反応液を水に排出し、析出した結晶を濾過して取り出した。この結晶をメタノールで洗浄し、化合物IM4(2.6g, 収率89%)を得た。

40

## 【0122】

## (化合物A1の合成)

冷却管及び温度計を付した25mL四つ口フラスコ中に、化合物IM4(2.3g)、マロノニトリル(0.64g)、ピペリジン(0.17g)、エタノール(10mL)を仕込み、70℃で2.5時間撹拌した。反応液を室温まで放冷してから結晶を濾過して取り

50

出した。この結晶をイソプロピルアルコール（IPA）で洗浄し、化合物 A 1（1.4 g，収率 56%）を得た。

LC-MS：m/z = 681（[M+H]<sup>+</sup>）

【0123】

（化合物 IM 5 の合成）

化合物 IM 4 の合成における 1, 4 - ジョードブタンを 1, 5 - ジブromoペンタン（東京化成工業株式会社製）に代えた以外は同様の手順で、化合物 IM 5 を得た（収率 71%）。

【0124】

（化合物 A 2 の合成）

化合物 A 1 の合成における化合物 IM 4 を化合物 IM 5 に代えた以外は同様の手順で、化合物 A 2 を得た（収率 67%）。

LC-MS：m/z = 695（[M+H]<sup>+</sup>）

【0125】

（化合物 IM 6 の合成）

化合物 IM 4 の合成における 1, 4 - ジョードブタンを 1, 6 - ジブromoヘキサン（東京化成工業株式会社製）に代えた以外は同様の手順で、化合物 IM 6 を得た（収率 82%）。

【0126】

（化合物 A 3 の合成）

化合物 A 1 の合成における化合物 IM 4 を化合物 IM 6 に代えた以外は同様の手順で、化合物 A 3 を得た（収率 90%）。

LC-MS：m/z = 709（[M+H]<sup>+</sup>）

【0127】

（化合物 IM 7 の合成）

化合物 IM 4 の合成における 1, 4 - ジョードブタンを 1, 8 - ジョードオクタン（東京化成工業株式会社製）に代えた以外は同様の手順で、化合物 IM 7 を得た（収率 84%）。

【0128】

（化合物 A 4 の合成）

化合物 A 1 の合成における化合物 IM 4 を化合物 IM 7 に代えた以外は同様の手順で、化合物 A 4 を得た（収率 40%）。

LC-MS：m/z = 737（[M+H]<sup>+</sup>）

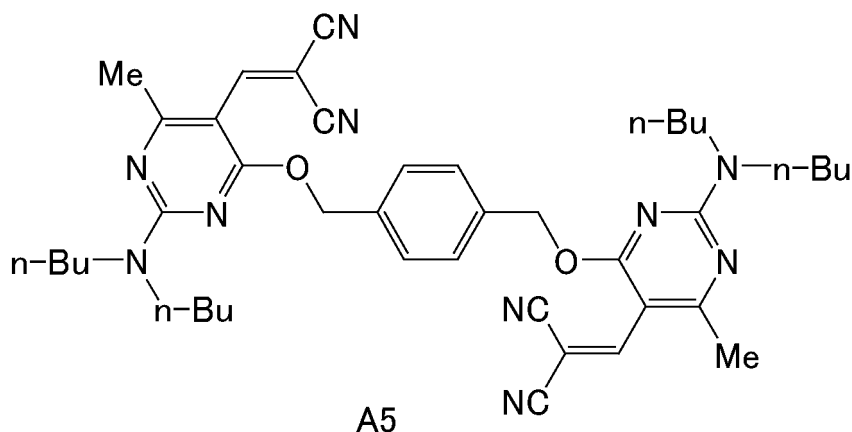
【0129】

< 製造例 3 >

下記式で表される化合物 A 5 を合成した。反応式を以下に示す。

【0130】

【化 20】



10

20

30

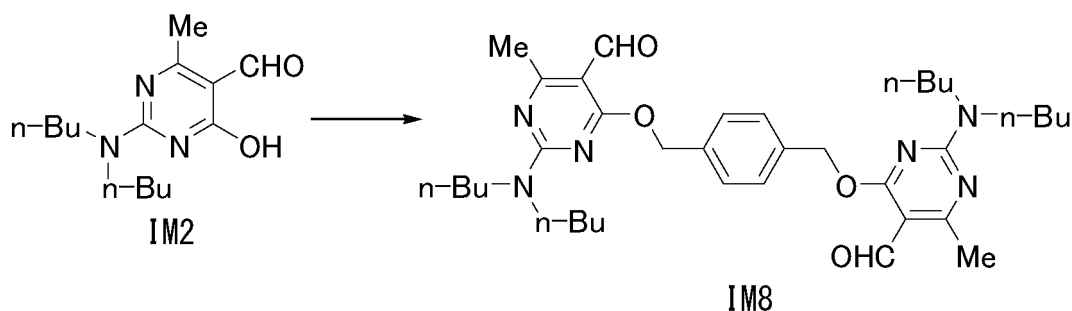
40

50

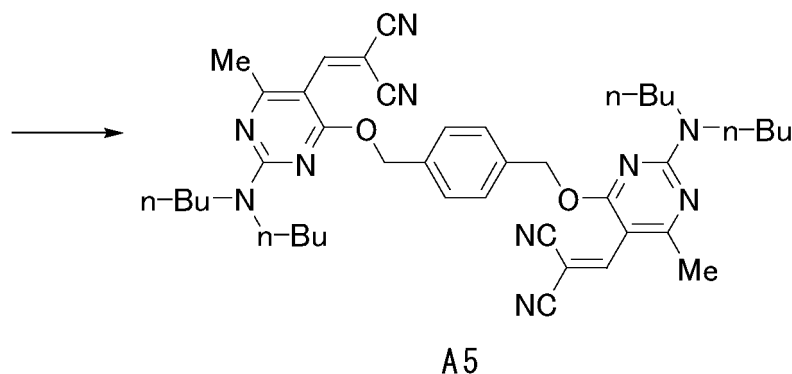


【 0 1 3 1 】

【 化 2 1 】



10



20

【 0 1 3 2 】

(化合物IM8の合成)

冷却管及び温度計を付した50mL四つ口フラスコ中に、化合物IM2(2.7g)、  
, ' - ジブロモ - p - キシレン(東京化成工業株式会社製)(1.3g)、炭酸カリウ  
ム(1.5g)、DMF(20mL)を仕込み、60 で90分撹拌した。水(60mL  
)へ排出し、析出した結晶を濾過して取り出し、水洗した。得られた粗結晶をメタノール  
で洗浄し、化合物IM8(2.8g, 収率89%)を得た。

LC-MS:  $m/z = 633$  ( $[M+H]^+$ )

30

【 0 1 3 3 】

(化合物A5の合成)

冷却管及び温度計を付した50mL四つ口フラスコ中に化合物IM8(2.7g)、マロ  
ノニトリル(0.62g)、ピペリジン(0.08g)、エタノール(18mL)、DM  
F(4mL)を仕込み、60 で4時間撹拌した。反応液を室温まで放冷してから、析出  
した結晶を濾過して取り出した。この結晶をメタノールで洗浄し化合物A5(2.57g  
, 収率82%)を得た。

【 0 1 3 4 】

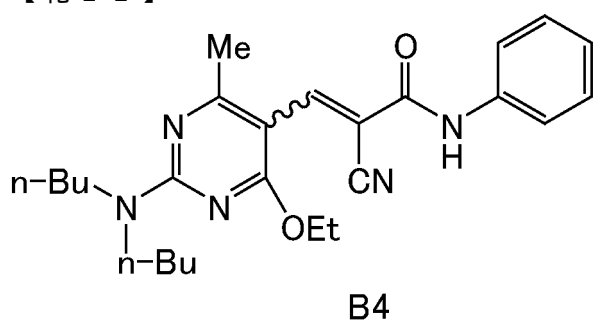
&lt; 製造例 4 &gt;

下記式で表される化合物B4を合成した。反応式を以下に示す。

【 0 1 3 5 】

40

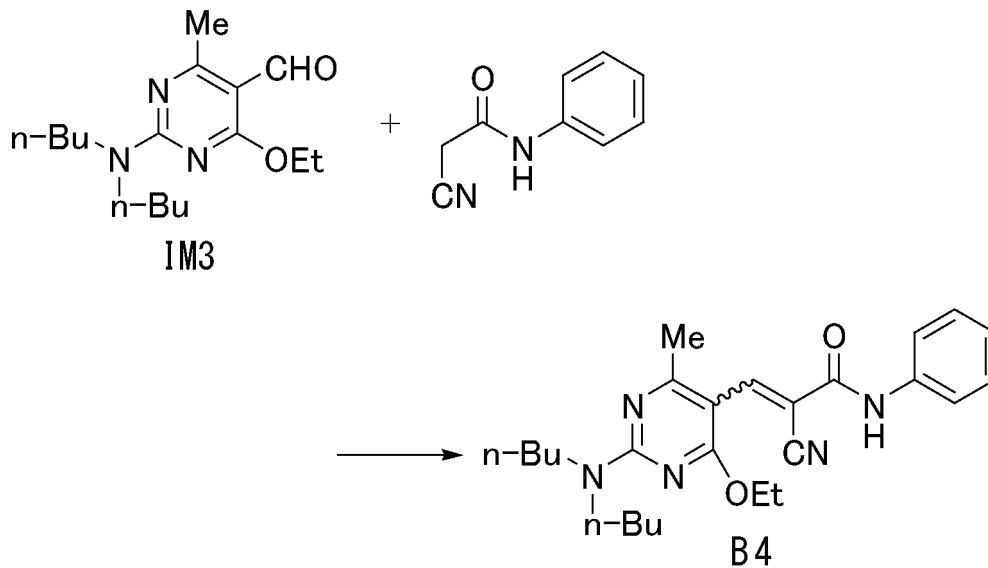
【 化 2 2 】



50

【 0 1 3 6 】

【 化 2 3 】



10

【 0 1 3 7 】

(化合物 B 4 の合成)

冷却管及び温度計を付した 25 mL 四つ口フラスコ中に、化合物 IM3 (1.5 g)、2-シアノアセトアニリド (東京化成工業株式会社製) (0.82 g)、ピリミジン (0.05 g)、トルエン (5 mL)、n-ブタノール (5 mL) を投入し、95 で 4.5 時間撹拌した。反応液を室温まで放冷後、減圧濃縮して得られた粗生成物をエタノールで洗浄し、化合物 B4 (1.1 g, 収率 49%) を得た。

20

LC-MS:  $m/z = 436$  ( $[M+H]^+$ )

【 0 1 3 8 】

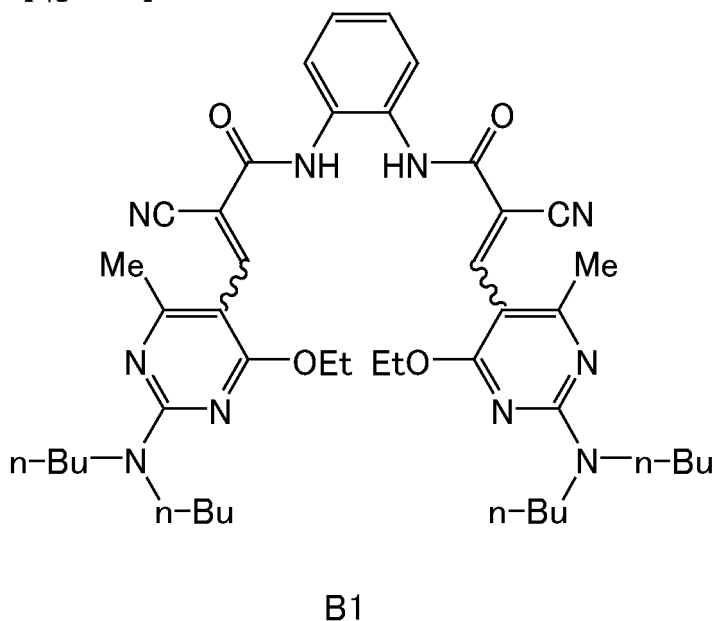
&lt; 製造例 5 &gt;

下記式で表される化合物 B1 ~ 化合物 B3 を合成した。

【 0 1 3 9 】

【 化 2 4 】

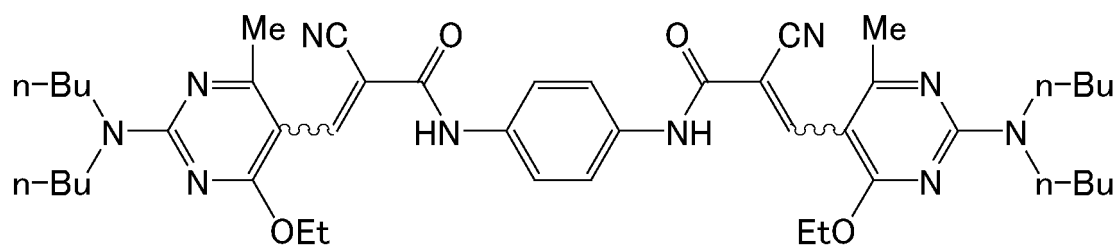
30



40

【 0 1 4 0 】

【化 2 5】

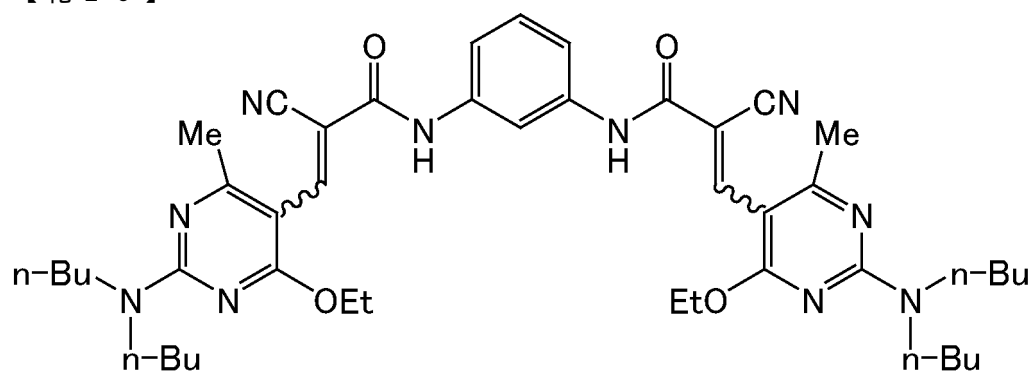


B2

10

【 0 1 4 1】

【化 2 6】



B3

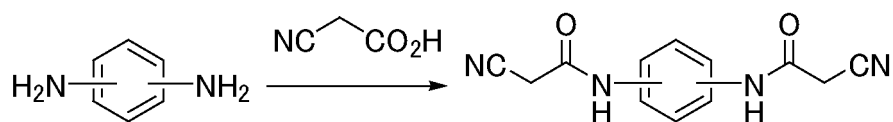
20

【 0 1 4 2】

反応式を以下に示す。式中のベンゼン環の置換基の位置と対応する化合物を表 2 に示す。

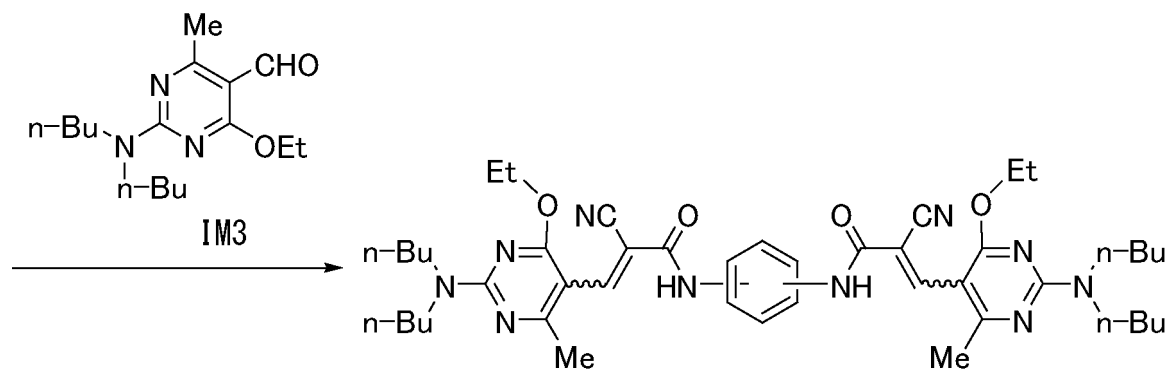
【 0 1 4 3】

【化 2 7】



30

IM9~IM11



40

B1~B3

【 0 1 4 4】

【表 2】

| 置換基の位置 | IM9～IM11 | B1～B3  |
|--------|----------|--------|
| オルト    | 化合物 IM9  | 化合物 B1 |
| パラ     | 化合物 IM10 | 化合物 B2 |
| メタ     | 化合物 IM11 | 化合物 B3 |

## 【0145】

10

(化合物 IM9 の合成)

冷却管及び温度計を付した 500 mL の四つ口フラスコに、シアノ酢酸（東京化成工業株式会社製）（10.2 g）、o-フェニレンジアミン（東京化成工業株式会社製）（6.5 g）、4-ジメチルアミノピリジン（東京化成工業株式会社製）（4.9 g）、しょうのうスルホン酸（東京化成工業株式会社製）（3.1 g）、クロロホルム（160 mL）を混合し、1-エチル-3-（3-ジメチルアミノプロピル）カルボジイミド（EDC）（東京化成工業株式会社製）（25.3 g）とクロロホルム（80 mL）の混合液を滴下した。室温下 2 時間撹拌した後、反応液を濃縮し、得られた粗生成物をメタノールで洗浄し、化合物 IM9（5.9 g，収率 41%）を得た。

## 【0146】

20

(化合物 B1 の合成)

冷却管及び温度計を付した 25 mL 四つ口フラスコ中に、化合物 IM3（1.2 g）、化合物 IM9（0.49 g）、ピペリジン（0.04 g）、トルエン（5 mL）、n-ブタノール（5 mL）を仕込み、95 で 16.5 時間撹拌した。反応液を減圧濃縮後、シリカゲルカラムクロマトグラフィーを行い、化合物 B1（0.25 g，収率 16%）を得た。

LC-MS:  $m/z = 793$  ( $[M+H]^+$ )

## 【0147】

(化合物 IM10 の合成)

化合物 IM9 の合成における o-フェニレンジアミンを p-フェニレンジアミン（東京化成工業株式会社製）に代えた以外は同様の手順で、化合物 IM10 を得た（収率 59%）。

30

## 【0148】

(化合物 B2 の合成)

化合物 B1 の合成における化合物 IM9 を化合物 IM10 に代えた以外は同様の手順で、化合物 B2 を得た（収率 61%）。

LC-MS:  $m/z = 793$  ( $[M+H]^+$ )

## 【0149】

(化合物 IM11 の合成)

化合物 IM9 の合成における o-フェニレンジアミンを m-フェニレンジアミン（東京化成工業株式会社製）に代えた以外は同様の手順で、化合物 IM11 を得た（収率 41%）。

40

## 【0150】

(化合物 B3 の合成)

化合物 B1 の合成における化合物 IM9 を化合物 IM11 に代えた以外は同様の手順で、化合物 B3 を得た（収率 38%）。

LC-MS:  $m/z = 793$  ( $[M+H]^+$ )

## 【0151】

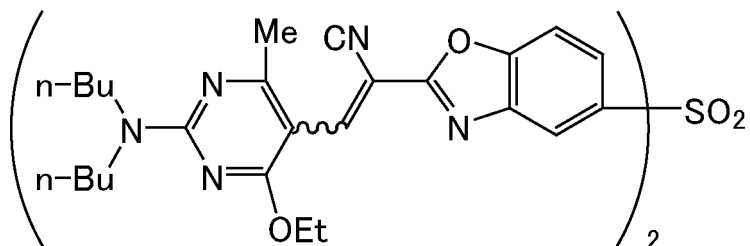
&lt;製造例 6&gt;

下記式で表される化合物 D1 を合成した。反応式を以下に示す。

50

【 0 1 5 2 】

【 化 2 8 】

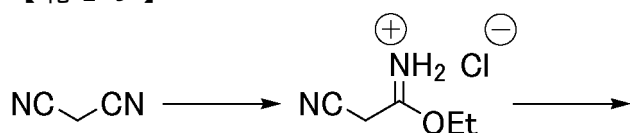


D1

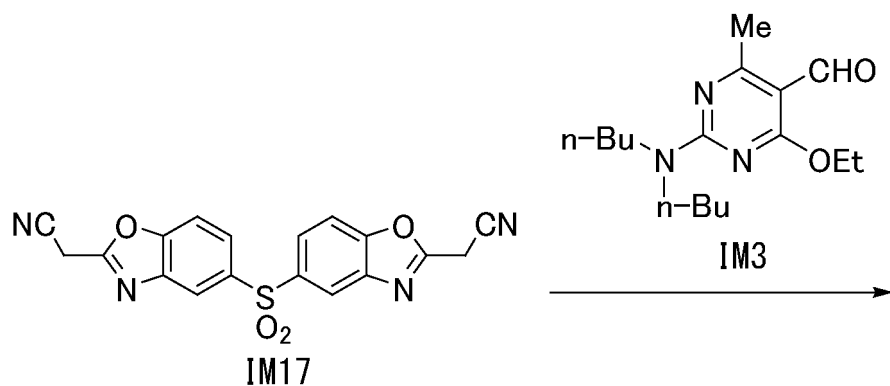
10

【 0 1 5 3 】

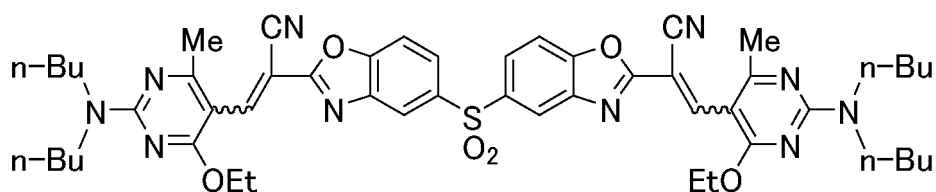
【 化 2 9 】



IM16



20



D1

30

【 0 1 5 4 】

(化合物IM16の合成)

冷却管及び温度計を付した50mL四つ口フラスコ中に、マロノニトリル(3.3g)、エタノール(5g)、酢酸エチル(15mL)を混合し、8で塩化チオニル(6g)を滴下した。反応液を室温下で20時間攪拌後、析出している結晶を濾過して取り出した。酢酸エチルで洗浄し、化合物IM16(6.4g, 収率86%)を得た。

40

【 0 1 5 5 】

(化合物IM17の合成)

冷却管及び温度計を付した100mL四つ口フラスコ中に、ビス(3-アミノ-4-ヒドロキシフェニル)スルホン(東京化成工業株式会社製)(4.2g)、メタノール(30mL)を混合し、5以下で化合物IM16(5g)を加えて徐々に升温し、60で19時間攪拌後、室温まで放冷した。析出している結晶を濾過して取り出し、メタノールと温水で洗浄し、化合物IM17(4.4g, 収率77%)を得た。

【 0 1 5 6 】

50

(化合物 D 1 の合成)

化合物 B 1 の合成における化合物 I M 9 を化合物 I M 1 7 に代えた以外は同様の手順で、化合物 D 1 を得た (収率 7 4 % )。

L C - M S :  $m/z = 929$  (  $[M + H]^+$  )

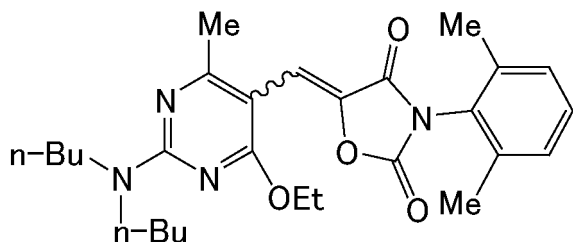
【 0 1 5 7 】

< 製造例 7 >

下記式で表される化合物 E 1 を合成した。反応式を以下に示す。

【 0 1 5 8 】

【 化 3 0 】

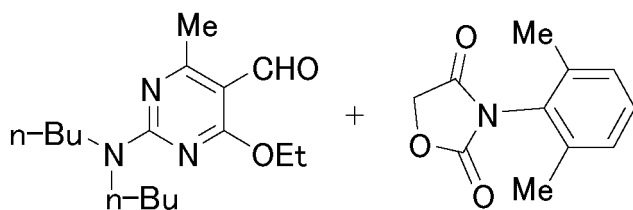


E1

10

【 0 1 5 9 】

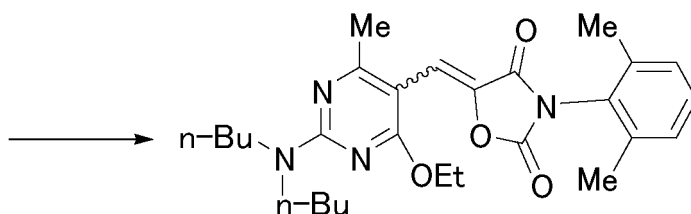
【 化 3 1 】



IM3

IM15

20



E1

30

【 0 1 6 0 】

(化合物 E 1 の合成)

化合物 A 6 の合成におけるマロノニトリルを、Tetrahedron 1999, 55 (1), 193 - 200 に記載の方法と同様にして得た化合物 I M 1 5 に代えた以外は化合物 A 6 の合成と同様の手順で、化合物 E 1 を得た (収率 1 4 % )。

40

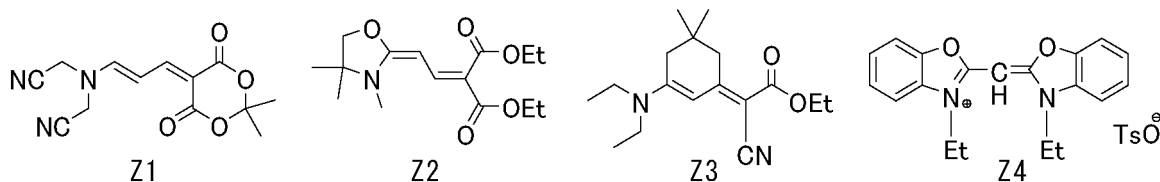
L C - M S :  $m/z = 481$  (  $[M + H]^+$  )

【 0 1 6 1 】

< 比較製造例 ( 比較例化合物 ) >

【 0 1 6 2 】

【 化 3 2 】



50

## 【 0 1 6 3 】

( 比較例化合物 Z 1 の合成 )

特開 2 0 1 1 - 1 8 4 4 1 4 号公報に記載の方法と同様にして、比較例化合物 Z 1 を得た。

( 比較例化合物 Z 2 の合成 )

特開 2 0 1 4 - 1 9 4 5 0 8 号公報に記載の方法と同様にして、比較例化合物 Z 2 を得た。

## 【 0 1 6 4 】

( 比較例化合物 Z 3 の合成 )

特開 2 0 0 9 - 0 6 7 9 7 3 号公報に記載の方法と同様にして、比較例化合物 Z 3 を得た。

10

( 比較例化合物 Z 4 の合成 )

US 2 9 8 6 5 2 8 号公報に記載の方法と同様にして、比較例化合物 Z 4 を得た。

## 【 0 1 6 5 】

各製造例で得られた化合物について、以下の評価を行った。結果を表 3 に示す。

< 分光特性試験 >

各化合物のクロロホルム中での吸収スペクトルを測定し、吸収極大波長 ( max ) 及び 4 0 0 n m におけるグラム吸光係数を測定し下記基準により評価した。

測定機器：日本分光社製紫外可視分光光度計 V - 5 6 0

A：グラム吸光係数が 3 0 以上

20

B：グラム吸光係数が 2 0 以上、3 0 未満

C：グラム吸光係数が 1 0 以上、2 0 未満

D：グラム吸光係数が 1 0 未満

## 【 0 1 6 6 】

< 耐光性試験 >

製造例及び比較製造例で得た一部の化合物について、耐光性試験を行った。各化合物 1 0 m g を、ポリメタクリレート 8 重量 % トルエン溶液 5 m L に溶解し、ガラス基板上にスピコート法により塗布し、乾燥させることで膜厚 1 . 5 μ m の薄膜を作製した。

作製した薄膜にキセノンランプ ( 1 4 2 k l u x ) の光を連続的に 9 6 時間照射し、照射前 ( 0 時間 )、照射後の薄膜の透過率を分光光度計で測定し、下記式 ( 1 ) に従って色素残存率を測定した。

30

色素残存率 ( % ) = { ( 1 - T<sub>1</sub> ) / ( 1 - T<sub>0</sub> ) } × 1 0 0 ( 1 )

[ ただし、T<sub>0</sub> はキセノンランプ照射前の透過率、T<sub>1</sub> はキセノンランプ照射後の透過率であり、T<sub>0</sub> 及び T<sub>1</sub> は 0 ~ 1 である。 ]

なお、「透過率」とは、各化合物の吸収極大波長における透過率を表しており、色素残存率が高い程、化合物が光によって分解されにくく、耐光性が高いことを示す。

耐光性は、下記基準により評価した。

A：色素残存率が 6 5 % 以上

B：色素残存率が 4 0 % 以上、6 5 % 未満

C：色素残存率が 1 0 % 以上、4 0 % 未満

D：色素残存率が 1 0 % 未満

40

## 【 0 1 6 7 】

< 耐熱性 >

製造例及び比較製造例で得た一部の化合物について、( 株 ) 島津製作所製の熱重量測定装置 T G A - 5 0 を使用して下記の測定条件で熱分解による重量減少を測定し、初期重量から 1 % 減量した温度を分解開始温度として測定した。

( 測定条件 )

試料量 5 m g、昇温速度 1 0 / 分 ( 最高到達温度 4 0 0 )、窒素雰囲気中、流量 1 0 m L / 分の条件で測定した。

耐熱性は、分解開始温度から下記基準により評価した。

50

A : 2 5 0 以上  
 B : 2 1 0 以上 2 5 0 未満  
 C : 2 1 0 未満

【 0 1 6 8 】

< 溶解度試験 >

製造例及び比較製造例で得た一部の化合物について、それぞれ 2 0 におけるトルエン、メチルエチルケトン ( M E K ) 及びプロピレングリコールモノメチルエーテルアセテート ( P G M E A ) に対する溶解度 ( 重量 % ) を、以下の方法により測定した。  
 各化合物をガラス製試験管に秤り取り、溶媒を混合し 2 0 で攪拌して溶解させ、その溶液の状態を目視観察し、溶解可能な重量濃度を評価した。

10

A : 3 w t % 以上溶解する  
 B : 1 w t % 以上 3 w t % 未満溶解する  
 C : 1 w t % 未満しか溶解しない

【 0 1 6 9 】

【 表 3 】

| 化合物名 | 吸収極大波長<br>(nm) | 400nm<br>グラム<br>吸光係数 | 耐光性 | 耐熱性 | 溶解度  |     |       |
|------|----------------|----------------------|-----|-----|------|-----|-------|
|      |                |                      |     |     | トルエン | MEK | PGMEA |
| A1   | 401            | A                    | A   | A   | —    | —   | —     |
| A2   | 401            | A                    | A   | A   | A    | A   | A     |
| A3   | 402            | A                    | A   | A   | A    | A   | A     |
| A4   | 401            | A                    | A   | A   | A    | A   | A     |
| A5   | 401            | A                    | A   | A   | —    | —   | —     |
| A6   | 402            | A                    | A   | B   | A    | A   | A     |
| B1   | 388            | A                    | —   | —   | —    | —   | —     |
| B2   | 411            | A                    | —   | A   | —    | —   | —     |
| B3   | 407            | A                    | —   | —   | —    | —   | —     |
| B4   | 400            | A                    | —   | A   | A    | A   | A     |
| D1   | 427            | A                    | —   | A   | —    | —   | —     |
| E1   | 379            | A                    | —   | B   | —    | —   | —     |
| Z1   | 363            | D                    | C   | B   | C    | C   | C     |
| Z2   | 372            | D                    | D   | B   | —    | —   | —     |
| Z3   | 402            | A                    | D   | —   | —    | —   | —     |
| Z4   | 382            | D                    | D   | A   | —    | —   | —     |

20

30

【 0 1 7 0 】

上記結果から、各製造例で製造した化合物 A 1 ~ A 6 、 B 1 ~ B 4 、 D 1 及び E 1 は、4 0 0 n m 付近に吸収極大波長を持ち、4 0 0 n m において高いグラム吸光係数を持つことが分かった。これらの化合物は、4 0 0 n m 付近の光を効果的に吸収できるものである。また、これらの化合物は、耐久性も良好であった。例えば、製造例 2 で製造した化合物 A 2 ~ A 4 は、耐光性、溶解度、耐熱性にともに優れており、例えばブルーライト遮蔽材料用、光学フィルタ用の色素としても好適に適用し得る化合物であることが分かった。比較例化合物 Z 1 ~ Z 2 及び Z 4 は、3 6 3 ~ 3 8 2 n m に吸収極大波長を持つが、4 0 0 n m でのグラム吸光係数が低かった。各製造例で製造した本発明の化合物は、比較例化合物 Z 1 ~ Z 2 及び Z 4 よりも、4 0 0 n m 近傍の光を効果的に吸収することができる。比較例化合物 Z 3 は、耐久性が不十分であった。

40



---

フロントページの続き

【要約の続き】

<sup>5</sup> は、同一又は異なって、H、アルキル基等) ]

【選択図】なし