

(19) 日本国特許庁 (JP)

(12) 特 許 公 報 (B2)

(11) 特許番号

特許第5992930号

(P5992930)

(45) 発行日 平成28年9月14日 (2016. 9. 14)

(24) 登録日 平成28年8月26日 (2016. 8. 26)

(51) Int. Cl.

F I

C O 8 G 59/68 (2006. 01)

C O 8 G 59/68

C O 8 L 63/00 (2006. 01)

C O 8 L 63/00

Z

C O 7 C 381/12 (2006. 01)

C O 7 C 381/12

C S P

C O 7 C 305/18 (2006. 01)

C O 7 C 305/18

C O 7 C 305/02 (2006. 01)

C O 7 C 305/02

請求項の数 20 (全 128 頁) 最終頁に続く

(21) 出願番号 特願2013-554881 (P2013-554881)
 (86) (22) 出願日 平成24年2月22日 (2012. 2. 22)
 (65) 公表番号 特表2014-507536 (P2014-507536A)
 (43) 公表日 平成26年3月27日 (2014. 3. 27)
 (86) 国際出願番号 PCT/EP2012/053011
 (87) 国際公開番号 W02012/113829
 (87) 国際公開日 平成24年8月30日 (2012. 8. 30)
 審査請求日 平成27年2月12日 (2015. 2. 12)
 (31) 優先権主張番号 61/445, 569
 (32) 優先日 平成23年2月23日 (2011. 2. 23)
 (33) 優先権主張国 米国 (US)
 (31) 優先権主張番号 11155646.0
 (32) 優先日 平成23年2月23日 (2011. 2. 23)
 (33) 優先権主張国 欧州特許庁 (EP)

(73) 特許権者 508020155
 ビーエーエスエフ ソシエタス・ヨーロピア
 BASF SE
 ドイツ連邦共和国 ルートヴィヒスハーフェン (番地なし)
 D-67056 Ludwigshafen, Germany
 (74) 代理人 100114890
 弁理士 アインゼル・フェリックス＝ラインハルト
 (74) 代理人 100099483
 弁理士 久野 琢也
 (72) 発明者 國本 和彦
 兵庫県川西市けやき坂2-27-12
 最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 スルホニウムサルフェートならびにその製造および使用

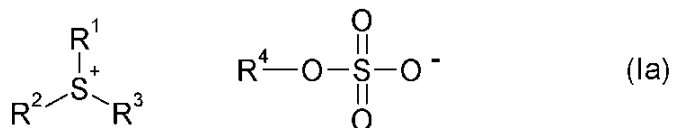
(57) 【特許請求の範囲】

【請求項 1】

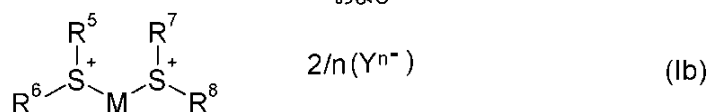
(a) カチオン重合可能な少なくとも1種の化合物；および

(b) 式 I a および I b：

【化 1】

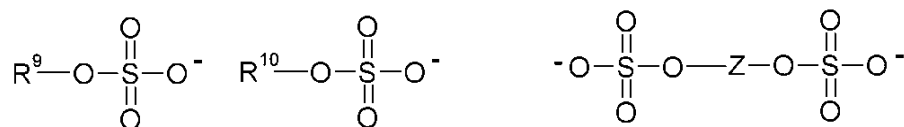


および



[式中、
 Y^{n-} は、

【化 2】



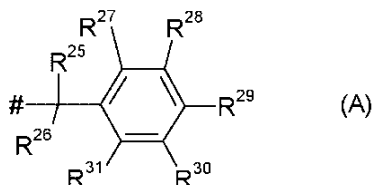
から選択される一価または二価のアニオンであり；

n は、1 または 2 であり；

R¹ は、C₁～C₁₂-アルキル、C₃～C₁₂-シクロアルキル、基 A、または基 B であり、
この場合、式 A の基は、

10

【化 3】



であり、

ここで、

は、スルホニウム原子への結合位置であり、

20

R²⁵ および R²⁶ は、それぞれ互いに独立して、水素、COR²¹、C₁～C₁₂-アルキル、
およびフェニルから選択され；ならびに、

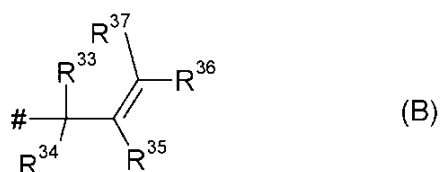
R²⁷、R²⁸、R²⁹、R³⁰、および R³¹ は、それぞれ互いに独立して、水素、F、Cl、Br、
I、NO₂、OR²⁰、COOR²²、CONR²³R²⁴、C₁～C₁₂-アルキル、C₂～C₁₂-
アルケニル、およびフェニルから選択されるか、あるいは、

隣接炭素原子に結合している 2 つの基 R²⁷ および R²⁸、ならびに／あるいは R²⁸ および R²⁹
ならびに／あるいは R²⁹ および R³⁰ ならびに／あるいは R³⁰ および R³¹ は、一緒に、
-CH₂CH₂CH₂-、-CH₂CH₂CH₂CH₂-、および -CH=CH-CH=CH- から
選択される基であってもよく、すなわち、それらが結合している炭素原子と一緒に、5
または 6 員環を形成していてもよく、

30

ならびに、式 B の基は、

【化 4】



であり、

ここで

40

は、スルホニウム原子への結合位置であり、

R³³ および R³⁴ は、それぞれ互いに独立して、水素、C₁～C₁₂-アルキル、およびフェ
ニルから選択され；ならびに

R³⁵、R³⁶、および R³⁷ は、互いに独立して、水素、F、Cl、C₁～C₁₂-アルキル、
C₂～C₁₂-アルケニル、およびフェニルから選択され、

ただし、R² が、C₁～C₁₂-アルキル；1 つ以上の基 R^{2a} で置換されている C₁～C₁₂-
アルキル；C₃～C₁₂-シクロアルキル；1 つ以上の基 R^{2b} で置換されている C₃～C₁₂-
シクロアルキルからなる群より選択され、かつ R³ が、C₁～C₁₂-アルキル；1 つ以上の
基 R^{2a} で置換されている C₁～C₁₂-アルキル；C₃～C₁₂-シクロアルキル；1 つ以上の
基 R^{2b} で置換されている C₃～C₁₂-シクロアルキルからなる群より選択される場合、R¹

50

は、基Aまたは基Bであり；

R^2 および R^3 は、互いに独立して、

— 非置換であるか、あるいはF、Cl、Br、I、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、 $CONR^{23}R^{24}$ 、ヘテロシクロアルキル、 $C_3\sim C_8$ -シクロアルキル、フェニル、およびナフチル（この場合、フェニルおよびナフチルは、非置換であるか、あるいは、F、Cl、Br、I、 NO_2 、 $C_1\sim C_{12}$ -アルキル、 OR^{20} 、 $COOR^{22}$ 、および $CONR^{23}R^{24}$ から選択される1つ、2つ、3つ、4つ、または5つの基で置換されている）から選択される1つ以上の基 R^{2a} で置換されている、 $C_1\sim C_{12}$ -アルキル；

— 非置換であるか、あるいは、F、Cl、Br、I、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、 $CONR^{23}R^{24}$ 、ヘテロシクリル、 $C_3\sim C_8$ -シクロアルキル、フェニル、およびナフチル（この場合、フェニルおよびナフチルは、非置換であるか、あるいは、F、Cl、Br、I、 NO_2 、 $C_1\sim C_{12}$ -アルキル、 OR^{20} 、 $COOR^{22}$ 、および $CONR^{23}R^{24}$ から選択される1つ、2つ、3つ、4つ、または5つの基で置換されている）から選択される1つ以上の基 R^{2b} で置換されている、 $C_3\sim C_{12}$ -シクロアルキル；ならびに

— 非置換であるか、あるいは、F、Cl、Br、I、 $C_1\sim C_{10}$ -アルキル、 SR^{19} 、および OR^{20} から選択される1つ、2つ、3つ、4つ、または5つの基で置換されている、フェニル；

から選択され、

あるいは、式Iaにおける R^1 および R^2 あるいは R^2 および R^3 あるいは R^1 および R^3 は、それらが結合している硫黄原子と一緒に、5または6員環の飽和複素環を形成し、これは、1つのフェニル環に縮合していてもよく、

R^4 は、 $-NR^{11}R^{12}$ 、 $-N=CR^{13}R^{14}$ 、 $C_3\sim C_{12}$ -アルキル、1つ以上の同じかもしくは異なる基 R^{4a} で置換されている $C_1\sim C_{12}$ -アルキル； $C_2\sim C_{12}$ -アルケニル；1つ以上の同じかもしくは異なる基 R^{4a} で置換されている $C_2\sim C_{12}$ -アルケニル； $C_3\sim C_{12}$ -シクロアルキル；1つ以上の同じかもしくは異なる基 R^{4b} で置換されている $C_3\sim C_{12}$ -シクロアルキル；フェニル；または1つ以上の同じかもしくは異なる基 R^{4c} で置換されているフェニルであり、ならびに

さらに、ジェミナルに結合している2つの基 R^{4a} は、一緒に、N-ヒドロキシイミノ基を形成していてもよく、

この場合

R^{4a} は、 SR^{19} 、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、 $CONR^{23}R^{24}$ から選択され、ならびに、ヘテロアリールおよび $C_6\sim C_{10}$ -アリールからなる群からも選択され、この場合、ヘテロアリールおよび $C_6\sim C_{10}$ -アリールは、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{4ac} で置換されていていてもよく、この場合、

R^{4ac} は、 $C_1\sim C_{12}$ -アルキルまたは NO_2 であり、ならびに

さらに、2つの基 R^{4a} がジェミナルに結合している場合、該2つの基 R^{4a} は一緒にN-ヒドロキシイミノ基を形成していてもよく；

R^{4b} は、F、Cl、Br、I、 $C_1\sim C_{12}$ -アルキル、 $C_1\sim C_{12}$ -ハロアルキル、CN、 SR^{19} 、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、 $CONR^{23}R^{24}$ 、 $C_6\sim C_{10}$ -アリール、またはヘテロアリールであり、

R^{4c} は、F、Cl、Br、I、 $C_1\sim C_{12}$ -アルキル、 $C_1\sim C_{12}$ -ハロアルキル、CN、 NO_2 、 SR^{19} 、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、 $CONR^{23}R^{24}$ 、フェニル、 $C_3\sim C_{10}$ -シクロアルキル、またはヘテロシクロアルキルであり、この場合、 $C_3\sim C_{10}$ -シクロアルキルおよびヘテロシクロアルキルは、1つ以上のCO基で中断されていていてもよく；

R^5 、 R^6 、 R^7 、および R^8 は、互いに独立して、

非置換であるか、あるいは、F、Cl、Br、I、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、 $CONR^{23}R^{24}$ 、ヘテロシクロアルキル、 $C_3\sim C_8$ -シクロアルキル、フェニル、およびナフチル（この場合、フェニルおよびナフチルは、非置換であるか、あるいは、F、Cl、Br、I、 NO_2 、 $C_1\sim C_{12}$ -アルキル、 OR^{20} 、 $COOR^{22}$ 、および $CONR^{23}R^{24}$ から選択される1つ、2つ、3つ、4つ、または5つの基で置換されている）から選択される

10

20

30

40

50

1つ以上の基で置換されている $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、
 非置換であるか、あるいは、F、Cl、Br、I、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、 $CONR^{23}R^{24}$ 、ヘテロシクリル、 $C_3 \sim C_8$ -シクロアルキル、フェニル、およびナフチル（
 この場合、フェニルおよびナフチルは、非置換であるか、あるいは、F、Cl、Br、I、
 NO_2 、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、 OR^{20} 、 $COOR^{22}$ 、および $CONR^{23}R^{24}$ から選択され
 る1つ、2つ、3つ、4つ、または5つの基で置換されている）から選択される1つ以上
 の基で置換されている $C_3 \sim C_{12}$ -シクロアルキル、ならびに
 非置換であるか、あるいは、F、Cl、Br、I、 $C_1 \sim C_{10}$ -アルキル、 SR^{19} 、およ
 び OR^{20} から選択される1つ、2つ、3つ、4つ、または5つの基で置換されているフェ
 ニル、

10

から選択されるか、

あるいは、 R^5 および R^6 あるいは R^7 および R^8 が、それらが結合している硫黄原子と一緒に、
 1つのフェニル環に縮合していてもよい5または6員環の飽和複素環を形成し；

Mは、1つのフェニレン基で中断されている $C_2 \sim C_8$ -アルキレン、あるいは、酸素およ
 び-O-フェニレンから選択される1つ、2つ、3つ、または4つの基で中断されている
 $C_2 \sim C_8$ -アルキレンであり、

Zは、 $C_1 \sim C_{10}$ -アルキレン、または1つ、2つ、または3つの非隣接基 R^{Zi} で置換さ
 れており、 R^{Zi} がフェニレンである $C_1 \sim C_{10}$ -アルキレンであり、

R^9 および R^{10} は、互いに独立して、

$NR^{11}R^{12}$ 、 $-N=CR^{13}R^{14}$ 、

20

$C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、 $C_2 \sim C_{12}$ -アルケニル（この場合、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキルおよび
 $C_2 \sim C_{12}$ -アルケニルは、F、Cl、Br、I、 SR^{19} 、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$
 $C_3 \sim C_{20}$ -シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル、フェニル、またはナフチル（こ
 の場合、フェニルまたはナフチルの芳香族環は、1つ以上のF、Cl、Br、I、 $C_1 \sim$
 C_{12} -アルキル、 $C_1 \sim C_{12}$ -ハロアルキル、 NO_2 、 SR^{19} 、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 COO
 R^{22} 、または $CONR^{23}R^{24}$ で置換されていてもよく、ならびにシクロアルキル、および
 ヘテロシクロアルキルは、1つ以上のCO基で中断されていてもよい）から選択される1
 つ以上の同じかまたは異なる基で置換されていてもよい）、

1つ以上の $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、F、Cl、Br、I、 NO_2 、または $COOR^{22}$ で置換
 されていてもよいフェニル、

30

から選択され、

R^{11} および R^{12} は、互いに独立して、ベンゾイルおよびフェニルから選択され、

R^{13} および R^{14} は、互いに独立して、 $C_1 \sim C_8$ -アルキル、 $C_1 \sim C_4$ -アルコキシカルボ
 ニル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル；フェニル；フェニルスルファニル； $C_1 \sim C_4$ -アルコキシカル
 ボニル；ベンゾイル；ベンジルオキシカルボニル；フェニルスルファニルで置換されて
 いるベンゾイル；フェニルスルファニルもしくは $C_1 \sim C_4$ -アルキルスルファニルで置換
 されているフェニルから選択されるか、あるいは、 R^{13} および R^{14} は、それらが結合して
 いる炭素原子と一緒に、 $C_5 \sim C_8$ -シクロアルキル環を形成し、

R^{19} および R^{20} は、互いに独立して、水素、 $C_1 \sim C_{20}$ -アルキル、 $C_3 \sim C_{10}$ -シクロア
 ルキル、-O-および-S-から選択される1つ以上の非隣接基で中断されている $C_1 \sim$
 C_{20} -アルキル、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{19a} で置換されている $C_1 \sim C_8$ -ア
 ルキル、 $-(CH_2CH_2O)_mH$ （ここで、mは1～20である）、 $C_2 \sim C_8$ -アルカノ
 イル、 $C_2 \sim C_8$ -ハロアルカノイル、ベンゾイル、フェニル、およびナフチルから選択さ
 れ、

40

この場合

R^{19a} は、ヘテロシクロアルキルまたはフェニルであり、

R^{21} は、互いに独立して、 $C_1 \sim C_{20}$ -アルキルおよび $C_6 \sim C_{20}$ -アリアルから選択され
 、

R^{22} は、互いに独立して、水素、 $C_1 \sim C_{20}$ -アルキル、 $C_2 \sim C_{12}$ -アルケニル、-O-
 および-S-から選択される1つ以上の非隣接基で中断されている $C_2 \sim C_{20}$ -アルキル

50

、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{22a} で置換されている $C_1 \sim C_8$ -アルキル、 $-(CH_2CH_2O)_qH$ (ここで、 q は1～20である)、フェニルおよびナフチルから選択され、

この場合

R^{22a} は、OH、フェニル、またはナフチルであり、

R^{23} および R^{24} は、互いに独立して、 $C_1 \sim C_{20}$ -アルキルから選択され、

この場合、

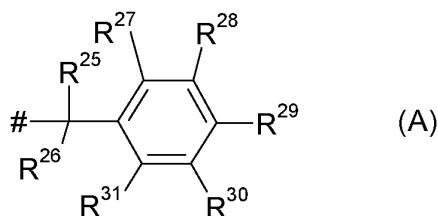
ヘテロシクロアルキルは、環員として、N、O、およびSから選択される1個、または2個のヘテロ原子を含む、5、6、7、または8員環の単環式複素環式の飽和もしくは不飽和の非芳香族基、または8～10員環の二環式複素環式の飽和もしくは不飽和の非芳香族基であり、この場合、環員としてのS原子は、S、SO、またはSO₂として存在し得る、ならびに

ヘテロアリールは、環員としての炭素原子以外に、環員として、N、O、およびSから選択される1個、2個、3個、または4個のヘテロ原子を有する、5または6員環の芳香族単環式複素環式基、または8～10員環の芳香族二環式複素環式基である] の化合物から選択される少なくとも1種のスルホニウムサルフェート、ならびにその互変異性体または立体異性体、を含む熱硬化性組成物。

【請求項2】

式 Ia における R^1 が、式 A :

【化5】



[式中、

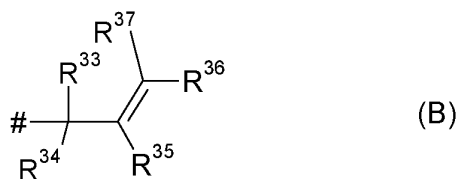
R^{25} および R^{26} は、それぞれ互いに独立して、水素、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、およびフェニルから選択され；ならびに、

R^{27} 、 R^{28} 、 R^{29} 、 R^{30} 、および R^{31} は、それぞれ互いに独立して、水素、F、Cl、Br、I、NO₂、OR²⁰、COOR²²、CONR²³R²⁴、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、 $C_2 \sim C_{12}$ -アルケニル、およびフェニルから選択されるか、あるいは、

隣接炭素原子に結合している2つの基 R^{27} および R^{28} 、ならびに／あるいは R^{28} および R^{29} ならびに／あるいは R^{29} および R^{30} ならびに／あるいは R^{30} および R^{31} は、一緒に、 $-CH_2CH_2CH_2-$ 、 $-CH_2CH_2CH_2CH_2-$ 、および $-CH=CH-CH=CH-$ から選択される基であってもよく、すなわち、それらが結合している炭素原子と一緒に、5または6員環を形成していてもよい] の基から選択され、

ならびに、式 B :

【化6】



[式中、

R^{33} および R^{34} は、それぞれ互いに独立して、水素、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、およびフェニルから選択され；ならびに、

R^{35} 、 R^{36} 、および R^{37} は、互いに独立して、水素、F、Cl、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、

C₂~C₁₂-アルケニル、およびフェニルから選択される]の基からなる群からも選択され、

この場合、R²⁰、R²²、R²³、およびR²⁴は、請求項1において定義される通りである、請求項1に記載の熱硬化性組成物。

【請求項3】

式I aにおけるR¹が、ナフチルメチル；ベンジル；ニトロ、フッ素、塩素、C₁~C₄-アルキル、C₁~C₄-アルコキシ、C₁~C₄-アルコキシカルボニル、C(O)O-(C₁~C₄-アルキル-OH)、およびC(O)N(C₁~C₄-アルキル)₂から選択される1つまたは2つの基で置換されているベンジル；C₁~C₆-アルキル；プロパー-2-エン-1-イル、3-フェニルプロパー-2-エン-1-イル、2-(C₁~C₄-アルキル)-プロパー-2-エン-1-イル；または3-(C₁~C₄-アルキル)-プロパー-2-エン-1-イル、である、請求項1 または2に記載の熱硬化性組成物。

10

【請求項4】

式I aにおけるR²およびR³が、互いに独立して、C₁~C₈-アルキル；フェニル-C₁~C₆-アルキル（この場合、C₁~C₈-アルキルおよびフェニル-C₁~C₆-アルキルのアルキル部分は、ベンゾイルで置換されている）；ナフチル-C₁~C₆-アルキル；（5または6員環飽和ヘテロシクリル）-C₁~C₆-アルキル、フェノキシ-C₁~C₆-アルキル、ベンゾイル-C₁~C₆-アルキル、C₁~C₄-アルコキシ-C(=O)-C₁~C₆-アルキル、C₁~C₄-アルコキシ-C₁~C₄-アルコキシ-C(=O)-C₁~C₆-アルキル、ベンジルオキシカルボニル-C₁~C₆-アルキル、フェニル（この場合、フェニルは、F、Cl、Br、I、C₁~C₁₀-アルキル、C₁~C₄-アルコキシ、またはC₁~C₄-フルオロアルカノイルオキシで置換されている））、およびフェニル-C₁~C₆-アルキル（フェニル-C₁~C₆-アルキルの芳香族環は、F、Cl、Br、I、OH、NO₂、C₁~C₁₀-アルキル、C₁~C₄-アルコキシ、C₁~C₄-フルオロアルカノイルオキシ、ヒドロキシ-C₁~C₄-アルコキシカルボニル、C₁~C₄-アルコキシカルボニル、C₁~C₄-アルコキシ-C₁~C₄-アルコキシカルボニル、ベンジルオキシカルボニル、およびC(=O)N(C₁~C₈-アルキル)₂からなる群から互いに独立して選択される1つ、2つ、3つ、4つ、または5つの基で置換されている））から選択される、請求項1に記載の熱硬化性組成物。

20

【請求項5】

式I aにおけるR¹およびR²あるいはR²およびR³あるいはR¹およびR³が、それらが結合している硫黄原子と一緒に、1つのフェニル環に縮合しているもよい5または6員環の飽和複素環を形成している、請求項1に記載の熱硬化性組成物。

30

【請求項6】

式I aにおけるR⁴が、C₁~C₄-アルコキシ-C₁~C₆-アルキル、C₁~C₄-アルキルスルファニル-C₁~C₆-アルキル、C₁~C₄-アルコキシカルボニル-C₁~C₆-アルキル、(5または6員環ヘテロアリアル)-C₁~C₆-アルキル、ナフチル-C₁~C₆-アルキル、フェノキシ-C₁~C₆-アルキル、フェニル-C₁~C₆-アルキル、(C₁~C₄-アルキル)-フェニル-C₁~C₆-アルキル、ニトロフェニル-C₁~C₆-アルキル、(OH、N-ヒドロキシイミノ、およびベンゾイルから選択される1つ、2つ、3つ、または4つの基で置換されているもよい) C₁~C₆-アルキル、フェニル-C₃~C₆-アルケニルおよびC₃~C₁₂-シクロアルキル（この場合、フェニル-C₃~C₆-アルケニルおよびC₃~C₁₂-シクロアルキルの環状部分は、C₁~C₄-アルキルから選択される1つ、2つ、3つ、4つ、または5つの基で置換されている））、

40

から選択される、請求項1に記載の熱硬化性組成物。

【請求項7】

式I aにおけるR⁴が、-N=C R¹³ R¹⁴（この場合、R¹³およびR¹⁴は、互いに独立して、C₁~C₈-アルキル、フェニル、フェニルスルファニル、C₁~C₄-アルコキシカ

50

ルボニル、 $C_1 \sim C_4$ -アルコキシカルボニル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル、ベンジルオキシカルボニル、ベンゾイル、 $C_1 \sim C_4$ -アルキルスルファニルフェニル、(フェニルスルファニル)フェニルから選択されるか、あるいは R^{13} および R^{14} は、それらが結合している炭素原子と一緒に、 $C_5 \sim C_8$ -シクロアルキル環を形成している)であるか、あるいは、 R^4 が、 $-NR^{11}R^{12}$ (この場合、 R^{11} はフェニルであり、ならびに R^{12} はベンゾイルである)である、請求項1に記載の熱硬化性組成物。

【請求項8】

式I aにおいて、

R^1 が、前記式Aの基または前記式Bの基であり；

R^2 が、 $C_1 \sim C_8$ -アルキル； $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ- $C_1 \sim C_4$ -アルキル； $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ- $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ- $C(=O)-C_1 \sim C_6$ -アルキル；(5または6員環ヘテロシクロアルキル)- $C_1 \sim C_4$ -アルキル；ナフタレン- $C_1 \sim C_4$ -アルキル、フェニル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル；フェニル部分が、ニトロ、塩素、ヒドロキシ、 $C_1 \sim C_{10}$ -アルキル、 $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ、 $C_1 \sim C_4$ -アルコキシカルボニル、 $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ- $C_1 \sim C_4$ -アルコキシカルボニル、ヒドロキシ- $C_1 \sim C_4$ -アルコキシカルボニル、ベンジルオキシカルボニル、および $C(=O)N(C_1 \sim C_8\text{-アルキル})_2$ から選択される1つ、2つ、3つ、4つ、または5つの基で置換されているフェニル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル；ベンゾイル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル；フェノキシ- $C_1 \sim C_4$ -アルキル；ベンジルオキシカルボニル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル；フェニル；OHおよび $C_1 \sim C_{10}$ -アルキルから選択される1つ、2つ、3つ、4つ、または5つの基で置換されているフェニル；であり、

R^3 が、 $C_1 \sim C_8$ -アルキル； $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ- $C_1 \sim C_6$ -アルキル；ベンジルオキシカルボニル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル；フェニル；OH、 $C_1 \sim C_4$ -フルオロアルカノイルオキシ、(5または6員環ヘテロシクロアルキル)- $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ、 $C_1 \sim C_6$ -アルコキシ、および $C_1 \sim C_{10}$ -アルキルから選択される1つ、2つ、3つ、4つ、または5つの基で置換されているフェニル；フェニル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル；フェニル部分が $C_1 \sim C_4$ -アルキルから選択される1つ、2つ、3つ、4つ、または5つの基で置換されているフェニル- $C_1 \sim C_4$ -アルキルであり、

R^4 が、 $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ- $C_1 \sim C_6$ -アルキル； $C_1 \sim C_4$ -アルキルスルファニル- $C_1 \sim C_6$ -アルキル； $C_1 \sim C_4$ -アルコキシカルボニル- $C_1 \sim C_6$ -アルキル；(5または6員環ヘテロアリール)- $C_1 \sim C_6$ -アルキル；ナフチル- $C_1 \sim C_6$ -アルキル；フェノキシ- $C_1 \sim C_6$ -アルキル；フェニル- $C_1 \sim C_6$ -アルキル；($C_1 \sim C_4$ -アルキル)-フェニル- $C_1 \sim C_6$ -アルキル；ニトロフェニル- $C_1 \sim C_6$ -アルキル；OH、N-ヒドロキシイミノ、ベンゾイル、フェニル、およびフェノキシから選択される1つ、2つ、3つ、または4つの基で置換されていてもよい $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル；フェニル- $C_3 \sim C_6$ -アルケニル、 $C_3 \sim C_{12}$ -シクロアルキル (この場合、フェニル- $C_3 \sim C_6$ -アルケニルおよび $C_3 \sim C_{12}$ -シクロアルキルの環状部分は、 $C_1 \sim C_4$ -アルキルから選択される1つ、2つ、3つ、4つ、または5つの基で置換されていてもよい)；

$NR^{11}R^{12}$ ；または $-N=CR^{13}R^{14}$ ；であり、

この場合、基Aおよび基Bは、請求項1において定義される通りであり、ならびに R^{11} 、 R^{12} 、 R^{13} 、および R^{14} は、請求項1において定義される通りである、請求項1に記載の熱硬化性組成物。

【請求項9】

式I bにおける R^5 、 R^6 、 R^7 、および R^8 が、互いに独立して、

非置換であるか、あるいは、F、Cl、Br、I、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、ヘテロシクリル、 $C_3 \sim C_8$ -シクロアルキル、フェニル、およびナフチル (この場合、フェニルおよびナフチルは、非置換であるか、あるいは、F、Cl、Br、I、 NO_2 、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、 OR^{20} 、 $COOR^{22}$ 、および $CONR^{23}R^{24}$ から選択される1つ、2つ、3つ、4つ、または5つの同じまたは異なる基で置換されている) から選択される1つ以

10

20

30

40

50

上の基で置換されている $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、
 非置換であるか、あるいは、F、Cl、Br、I、 $C_1 \sim C_{10}$ -アルキル、 SR^{19} 、および OR^{20} から選択される 1 つ、2 つ、3 つ、4 つ、または 5 つの基で置換されているフェニル、
 から選択され、
 この場合、 R^{19} 、 R^{20} 、 R^{22} 、 R^{23} 、および R^{24} は、請求項 1 において定義される通りである、
 請求項 1 に記載の熱硬化性組成物。

【請求項 10】

カチオン重合可能な前記化合物が、エポキシ基、オキセタン基、およびビニルエーテル基から選択される少なくとも 1 つの基を有する、請求項 1 ～ 9 のいずれか一項に記載の熱硬化性組成物。

10

【請求項 11】

溶媒、反応性希釈剤、光開始剤、顔料、分散剤、エチレン性不飽和化合物、化合物 (a) とは異なりかつエチレン性不飽和化合物とも異なるバインダー、増感剤、式 I a および I b の化合物とは異なる熱硬化促進剤、さらなる添加剤、ならびに混合物から選択される少なくとも 1 種のさらなる構成要素を含む、請求項 1 ～ 10 のいずれか一項に記載の熱硬化性組成物。

【請求項 12】

前記エチレン性不飽和化合物がアクリルモノマーである、請求項 11 に記載の熱硬化性組成物。

20

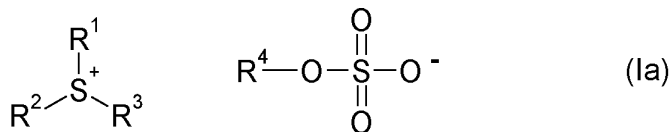
【請求項 13】

カチオン重合可能な前記化合物がエポキシ樹脂である、請求項 1 ～ 12 のいずれか一項に記載の熱硬化性組成物。

【請求項 14】

式 I a :

【化 7】

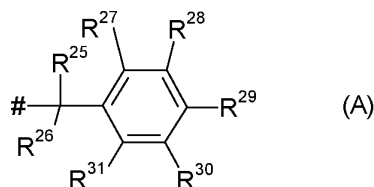


30

[式中、

R^1 は、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、 $C_3 \sim C_{12}$ -シクロアルキル、基 A、または基 B であり、
 この場合、式 A の基は、

【化 8】



40

であり、

ここで、

は、スルホニウム原子への結合位置であり、

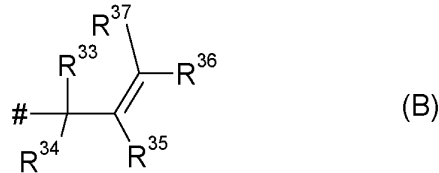
R^{25} および R^{26} は、それぞれ互いに独立して、水素、 COR^{21} 、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、およびフェニルから選択され；ならびに、

R^{27} 、 R^{28} 、 R^{29} 、 R^{30} 、および R^{31} は、それぞれ互いに独立して、水素、F、Cl、Br、I、 NO_2 、 OR^{20} 、 $COOR^{22}$ 、 $CONR^{23}R^{24}$ 、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、 $C_2 \sim C_{12}$ -アルケニル、およびフェニルから選択されるか、あるいは、

50

隣接炭素原子に結合している2つの基 R^{27} および R^{28} 、ならびに／あるいは R^{28} および R^{29} ならびに／あるいは R^{29} および R^{30} ならびに／あるいは R^{30} および R^{31} は、一緒に、 $-CH_2CH_2CH_2-$ 、 $-CH_2CH_2CH_2CH_2-$ 、および $-CH=CH-CH=CH-$ から選択される基であってもよく、すなわち、それらが結合している炭素原子と一緒に、5または6員環を形成していてもよく、
 ならびに、式Bの基は、

【化9】



10

であり、
 ここで

#は、スルホニウム原子への結合位置であり、

R^{33} および R^{34} は、それぞれ互いに独立して、水素、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、およびフェニルから選択され；ならびに

R^{35} 、 R^{36} 、および R^{37} は、互いに独立して、水素、F、Cl、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、 $C_2 \sim C_{12}$ -アルケニル、およびフェニルから選択され、

20

ただし、 R^2 および R^3 が、両者とも、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル；1つ以上の基 R^{2a} で置換されている $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル； $C_3 \sim C_{12}$ -シクロアルキル；1つ以上の基 R^{2b} で置換されている $C_3 \sim C_{12}$ -シクロアルキル、からなる群より選択される場合、 R^1 は、基Aまたは基Bであり；

R^2 および R^3 は、互いに独立して、

— 非置換であるか、あるいはF、Cl、Br、I、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、 $CONR^{23}R^{24}$ 、ヘテロシクロアルキル、 $C_3 \sim C_8$ -シクロアルキル、フェニル、およびナフチル（この場合、フェニルおよびナフチルは、非置換であるか、あるいは、F、Cl、Br、I、 NO_2 、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、 OR^{20} 、 $COOR^{22}$ 、および $CONR^{23}R^{24}$ から選択される1つ、2つ、3つ、4つ、または5つの基で置換されている）から選択される1つ以上の基 R^{2a} で置換されている、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル；

30

— 非置換であるか、あるいは、F、Cl、Br、I、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、 $CONR^{23}R^{24}$ 、ヘテロシクリル、 $C_3 \sim C_8$ -シクロアルキル、フェニル、およびナフチル（この場合、フェニルおよびナフチルは、非置換であるか、あるいは、F、Cl、Br、I、 NO_2 、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、 OR^{20} 、 $COOR^{22}$ 、および $CONR^{23}R^{24}$ から選択される1つ、2つ、3つ、4つ、または5つの基で置換されている）から選択される1つ以上の基 R^{2b} で置換されている、 $C_3 \sim C_{12}$ -シクロアルキル；ならびに

— 非置換であるか、あるいは、F、Cl、Br、I、 $C_1 \sim C_{10}$ -アルキル、 SR^{19} 、および OR^{20} から選択される1つ、2つ、3つ、4つ、もしくは5つの基で置換されている、フェニル；

40

から選択され、

あるいは、式I aにおける R^1 および R^2 あるいは R^2 および R^3 あるいは R^1 および R^3 は、それらが結合している硫黄原子と一緒に、5または6員環の飽和複素環を形成し、これは、1つのフェニル環に縮合していてもよく、

R^4 は、 $-NR^{11}R^{12}$ 、 $-N=CR^{13}R^{14}$ 、 $C_3 \sim C_{12}$ -アルキル、

1つ以上の同じかもしくは異なる基 R^{4a} で置換されている $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル； $C_2 \sim C_{12}$ -アルケニル；1つ以上の同じかもしくは異なる基 R^{4a} で置換されている $C_2 \sim C_{12}$ -アルケニル； $C_3 \sim C_{12}$ -シクロアルキル；1つ以上の同じかもしくは異なる基 R^{4b} で置換されている $C_3 \sim C_{12}$ -シクロアルキル；フェニル；または1つ以上の同じかもしくは異なる基 R^{4c} で置換されているフェニルであり、ならびに

50

さらに、ジェミナルに結合している2つの基 R^{4a} は、一緒に、N-ヒドロキシイミノ基を形成していてもよく、

この場合

R^{4a} は、 SR^{19} 、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、 $CONR^{23}R^{24}$ から選択され、ならびに、ヘテロアリールおよび $C_6 \sim C_{10}$ -アリールからなる群からも選択され、この場合、ヘテロアリールおよび $C_6 \sim C_{10}$ -アリールは、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{4ac} で置換されていてもよく、この場合、

R^{4ac} は、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキルまたは NO_2 であり、ならびに

さらに、2つの基 R^{4a} がジェミナルに結合している場合、該2つの基 R^{4a} は一緒にN-ヒドロキシイミノ基を形成していてもよく；

R^{4b} は、F、Cl、Br、I、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、 $C_1 \sim C_{12}$ -ハロアルキル、CN、 SR^{19} 、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、 $CONR^{23}R^{24}$ 、 $C_6 \sim C_{10}$ -アリール、またはヘテロアリールであり、

R^{4c} は、F、Cl、Br、I、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、 $C_1 \sim C_{12}$ -ハロアルキル、CN、 NO_2 、 SR^{19} 、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、 $CONR^{23}R^{24}$ 、フェニル、 $C_3 \sim C_{10}$ -シクロアルキル、またはヘテロシクロアルキルであり、この場合、 $C_3 \sim C_{10}$ -シクロアルキルおよびヘテロシクロアルキルは、1つ以上のCO基で中断されていてもよく；

R^{11} および R^{12} は、互いに独立して、ベンゾイルおよびフェニルから選択され、

R^{13} および R^{14} は、互いに独立して、 $C_1 \sim C_8$ -アルキル、 $C_1 \sim C_4$ -アルコキシカルボニル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル；フェニル；フェニルスルファニル； $C_1 \sim C_4$ -アルコキシカルボニル；ベンゾイル；ベンジルオキシカルボニル；フェニルスルファニルで置換されているベンゾイル；フェニルスルファニルもしくは $C_1 \sim C_4$ -アルキルスルファニルで置換されているフェニルから選択されるか、あるいは、 R^{13} および R^{14} は、それらが結合している炭素原子と一緒に、 $C_5 \sim C_8$ -シクロアルキル環を形成し、

R^{19} および R^{20} は、互いに独立して、水素、 $C_1 \sim C_{20}$ -アルキル、 $C_3 \sim C_{10}$ -シクロアルキル、-O- および -S- から選択される1つ以上の非隣接基で中断されている $C_1 \sim C_{20}$ -アルキル、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{19a} で置換されている $C_1 \sim C_8$ -アルキル、 $-(CH_2CH_2O)_mH$ (ここで、mは1~20である)、 $C_2 \sim C_8$ -アルカノイル、 $C_2 \sim C_8$ -ハロアルカノイル、ベンゾイル、フェニル、およびナフチルから選択され、

この場合

R^{19a} は、ヘテロシクロアルキルまたはフェニルであり、

R^{21} は、互いに独立して、 $C_1 \sim C_{20}$ -アルキルおよび $C_6 \sim C_{20}$ -アリールから選択される、

R^{22} は、互いに独立して、水素、 $C_1 \sim C_{20}$ -アルキル、 $C_2 \sim C_{12}$ -アルケニル、-O- および -S- から選択される1つ以上の非隣接基で中断されている $C_2 \sim C_{20}$ -アルキル、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{22a} で置換されている $C_1 \sim C_8$ -アルキル、 $-(CH_2CH_2O)_qH$ (ここで、qは1~20である)、フェニルおよびナフチルから選択され、

この場合

R^{22a} は、OH、フェニル、またはナフチルであり、

R^{23} および R^{24} は、互いに独立して、 $C_1 \sim C_{20}$ -アルキルから選択され、

この場合、

ヘテロシクロアルキルは、環員として、N、O、およびSから選択される1個、または2個のヘテロ原子を含む、5、6、7、または8員環の単環式複素環式の飽和もしくは不飽和の非芳香族基、または8~10員環の二環式複素環式の飽和もしくは不飽和の非芳香族基であり、この場合、環員としてのS原子は、S、SO、または SO_2 として存在し得る、ならびに

ヘテロアリールは、環員としての炭素原子以外に、環員として、N、O、およびSから選択される1個、2個、3個、または4個のヘテロ原子を有する、5または6員環の芳香族

10

20

30

40

50

単環式複素環式基、または8～10員環の芳香族二環式複素環式基である]の化合物、ならびにそれらの立体異性体および互変異性体(ただし、 R^1 がメチルであり、 R^2 がベンジルであり、 R^3 が4-ヒドロキシフェニルであり、および R^4 がn-ドデシルである、式I aの化合物を除く)。

【請求項15】

R^1 が、 $C_3 \sim C_{12}$ -シクロアルキル； $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル；前記式Aの基および前記式Bの基(この場合、式Aの基および式Bの基は、請求項14において定義される通りである)；から選択され、

R^2 および R^3 が、互いに独立して、 $C_1 \sim C_8$ -アルキル；フェニルアルキルのアルキル部分がベンゾイルで置換されているフェニル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル；ナフチル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル；(5または6員環飽和ヘテロシクリル)- $C_1 \sim C_4$ -アルキル、フェノキシ- $C_1 \sim C_4$ -アルキル、ベンゾイル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル、 $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ-C(=O)- $C_1 \sim C_4$ -アルキル、 $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ- $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ-C(=O)- $C_1 \sim C_4$ -アルキル、ベンジルオキシカルボニル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル、フェニル、およびフェニル- $C_1 \sim C_6$ -アルキル(この場合、フェニル、およびフェニル- $C_1 \sim C_6$ -アルキルの芳香族環は、F、Cl、Br、I、OH、 $C_1 \sim C_{10}$ -アルキル、 $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ、 $C_1 \sim C_4$ -ハロアルキルカルボニルオキシ、ヒドロキシ- $C_1 \sim C_4$ -アルコキシカルボニル、 $C_1 \sim C_4$ -アルコキシカルボニル、 $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ- $C_1 \sim C_4$ -アルコキシカルボニル、ベンジルオキシカルボニル、およびC(=O)N($C_1 \sim C_8$ -アルキル)₂からなる群より互いに独立して選択される1つ、2つ、3つ、4つ、または5つの基で置換されていてもよい)；から選択され、

あるいは、

R^1 および R^2 あるいは R^2 および R^3 が、それらが結合している硫黄原子と一緒に、1つのフェニル環に縮合していてもよい5または6員環の飽和複素環を形成し；ならびに、

R^4 が、 $NR^{11}R^{12}$ ； $-N=CR^{13}R^{14}$ ；

SR^{19} 、 OR^{20} 、 $COOR^{22}$ 、チエニル、ベンゾイル、N-ヒドロキシイミノ、フェニル、またはナフチル(この場合、フェニルおよびナフチルの芳香族環は、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、および NO_2 から選択される1つ以上の同じかまたは異なる基で置換されていてもよい)から選択される1つ以上の同じかまたは異なる基で置換されている $C_1 \sim C_2$ -アルキル；

$C_3 \sim C_{12}$ -アルキル、 $C_2 \sim C_{12}$ -アルケニル(この場合、 $C_3 \sim C_{12}$ -アルキルおよび $C_2 \sim C_{12}$ -アルケニルは、1つ以上の OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、フェニル、またはナフチル(この場合、フェニルまたはナフチルの芳香族環は、1つ以上の $C_1 \sim C_{12}$ -アルキルまたは NO_2 で置換されていてもよい)で置換されていてもよい)；

1つ以上の $C_1 \sim C_{12}$ -アルキルで置換されていてもよい $C_3 \sim C_{12}$ -シクロアルキル；ならびに

1つ以上の $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、F、Cl、Br、I、 NO_2 、または $COOR^{22}$ で置換されていてもよいフェニル、

から選択され、

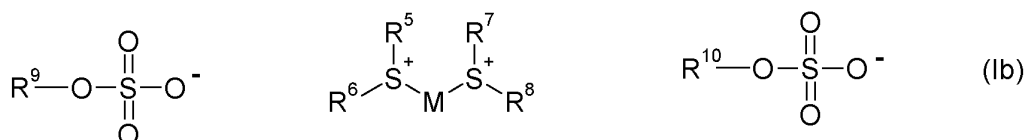
この場合、 R^{11} 、 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{19} 、 R^{20} 、 R^{21} 、および R^{22} は、請求項14において定義される通りである、

請求項14に記載の式I aの化合物。

【請求項16】

式I b：

【化10】



10

20

30

40

[式中、
 R^5 、 R^6 、 R^7 、および R^8 は、互いに独立して、
 非置換であるか、あるいは、F、Cl、Br、I、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、 $CONR^{23}R^{24}$ 、ヘテロシクロアルキル、 $C_3\sim C_8$ -シクロアルキル、フェニル、およびナフチル（この場合、フェニルおよびナフチルは、非置換であるか、あるいは、F、Cl、Br、I、 NO_2 、 $C_1\sim C_{12}$ -アルキル、 OR^{20} 、 $COOR^{22}$ 、および $CONR^{23}R^{24}$ から選択される1つ、2つ、3つ、4つ、または5つの基で置換されている）から選択される1つ以上の基で置換されている $C_1\sim C_{12}$ -アルキル、
 非置換であるか、あるいは、F、Cl、Br、I、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、 $CONR^{23}R^{24}$ 、ヘテロシクロアルキル、 $C_3\sim C_8$ -シクロアルキル、フェニル、およびナフチル（この場合、フェニルおよびナフチルは、非置換であるか、あるいは、F、Cl、Br、I、 NO_2 、 $C_1\sim C_{12}$ -アルキル、 OR^{20} 、 $COOR^{22}$ 、および $CONR^{23}R^{24}$ から選択される1つ、2つ、3つ、4つ、または5つの基で置換されている）から選択される1つ以上の基で置換されている $C_3\sim C_{12}$ -シクロアルキル、ならびに
 非置換であるか、あるいは、F、Cl、Br、I、 $C_1\sim C_{10}$ -アルキル、 SR^{19} 、および OR^{20} から選択される1つ、2つ、3つ、4つ、または5つの基で置換されているフェニル、
 から選択されるか、
 あるいは、 R^5 および R^6 あるいは R^7 および R^8 が、それらが結合している硫黄原子と一緒に、1つのフェニル環に縮合していてもよい5または6員環の飽和複素環を形成し；
 Mは、1つのフェニレン基で中断されている $C_2\sim C_8$ -アルキレン、あるいは、酸素および-O-フェニレンから選択される1つ、2つ、3つ、または4つの基で中断されている $C_2\sim C_8$ -アルキレンであり、
 R^9 および R^{10} は、互いに独立して、
 $NR^{11}R^{12}$ 、 $-N=CR^{13}R^{14}$ 、
 $C_1\sim C_{12}$ -アルキル、 $C_2\sim C_{12}$ -アルケニル（この場合、 $C_1\sim C_{12}$ -アルキルまたは $C_2\sim C_{12}$ -アルケニルは、F、Cl、Br、I、 SR^{19} 、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、 $C_3\sim C_{20}$ -シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル、フェニル、またはナフチル（この場合、フェニルまたはナフチルの芳香族環は、1つ以上のF、Cl、Br、I、 $C_1\sim C_{12}$ -アルキル、 $C_1\sim C_{12}$ -ハロアルキル、 NO_2 、 SR^{19} 、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、または $CONR^{23}R^{24}$ で置換されていてもよく、ならびにシクロアルキル、およびヘテロシクロアルキルは、1つ以上のCO基で中断されていてもよい）から選択される1つ以上の同じかまたは異なる基で置換されていてもよい）、
 1つ以上の $C_1\sim C_{12}$ -アルキル、F、Cl、Br、I、 NO_2 、または $COOR^{22}$ で置換されていてもよいフェニル、
 から選択され、
 R^{11} および R^{12} は、互いに独立して、ベンゾイルおよびフェニルから選択され、
 R^{13} および R^{14} は、互いに独立して、 $C_1\sim C_8$ -アルキル、 $C_1\sim C_4$ -アルコキシカルボニル- $C_1\sim C_4$ -アルキル；フェニル；フェニルスルファニル； $C_1\sim C_4$ -アルコキシカルボニル；ベンゾイル；ベンジルオキシカルボニル；フェニルスルファニルで置換されているベンゾイル；フェニルスルファニルもしくは $C_1\sim C_4$ -アルキルスルファニルで置換されているフェニルから選択されるか、あるいは、 R^{13} および R^{14} は、それらが結合している炭素原子と一緒に、 $C_5\sim C_8$ -シクロアルキル環を形成し、
 R^{19} および R^{20} は、互いに独立して、水素、 $C_1\sim C_{20}$ -アルキル、 $C_3\sim C_{10}$ -シクロアルキル、-O-および-S-から選択される1つ以上の非隣接基で中断されている $C_1\sim C_{20}$ -アルキル、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{19a} で置換されている $C_1\sim C_8$ -アルキル、 $-(CH_2CH_2O)_mH$ （ここで、mは1～20である）、 $C_2\sim C_8$ -アルカノイル、 $C_2\sim C_8$ -ハロアルカノイル、ベンゾイル、フェニル、およびナフチルから選択され、
 この場合

10

20

30

40

50

R^{19a} は、ヘテロシクロアルキルまたはフェニルであり、
 R^{21} は、互いに独立して、 $C_1 \sim C_{20}$ -アルキルおよび $C_6 \sim C_{20}$ -アリールから選択され、
 R^{22} は、互いに独立して、水素、 $C_1 \sim C_{20}$ -アルキル、 $C_2 \sim C_{12}$ -アルケニル、 $-O-$ および $-S-$ から選択される1つ以上の非隣接基で中断されている $C_2 \sim C_{20}$ -アルキル、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{22a} で置換されている $C_1 \sim C_8$ -アルキル、 $-(CH_2CH_2O)_qH$ （ここで、 q は1～20である）、フェニルおよびナフチルから選択され、

この場合

R^{22a} は、OH、フェニル、またはナフチルであり、

R^{23} および R^{24} は、互いに独立して、 $C_1 \sim C_{20}$ -アルキルから選択され、

この場合、

ヘテロシクロアルキルは、環員として、N、O、およびSから選択される1個、または2個のヘテロ原子を含む、5、6、7、または8員環の単環式複素環式の飽和もしくは不飽和の非芳香族基、または8～10員環の二環式複素環式の飽和もしくは不飽和の非芳香族基であり、この場合、環員としてのS原子は、S、SO、またはSO₂として存在し得る、ならびに

ヘテロアリールは、環員としての炭素原子以外に、環員として、N、O、およびSから選択される1個、2個、3個、または4個のヘテロ原子を有する、5または6員環の芳香族単環式複素環式基、または8～10員環の芳香族二環式複素環式基である]の化合物、ならびにそれらの立体異性体および互変異性体（ただし、 R^5 、 R^6 、 R^7 、および R^8 がそれぞれエチルであり、Mが1，4- $CH_2-C_6H_4-CH_2$ であり、ならびに R^9 および R^{10} がそれぞれn-ドデシルである、式I bの化合物を除く）。

【請求項17】

カチオン重合性組成物を硬化する方法であって、

(a) カチオン重合可能な少なくとも1種の化合物と、

(b) 請求項1～9のいずれか一項において定義される式I aおよびI bの化合物から選択される少なくとも1種のスルホニウムサルフェートを含む組成物を、基材に適用する工程および該組成物を熱処理に晒す工程、を含む前記方法。

【請求項18】

液晶ディスプレイの層の製造のための、請求項1～13のいずれか一項において定義される熱硬化性組成物の使用。

【請求項19】

カラーフィルターのオーバーコート層あるいは絶縁層または誘電体層を製造するための、請求項18に記載の使用。

【請求項20】

液晶ディスプレイパネルにおけるカラムスペーサーの製造のための、接着剤、シーラント、絶縁材料、コーティング組成物、含浸性組成物、積層物、成形材料、注型材料、エレクトロニクス用途のための基材としてのもしくはそれらにおける、印刷用インキ、塗料、ラッカー、印刷用の色校正材料、ワニス、注封材料、浸漬用樹脂、マトリックス樹脂、建設材料、レンズ、およびはんだレジスト組成物としてのもしくはそれらにおける、請求項1～13のいずれか一項において定義される熱硬化性組成物の使用。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

発明の背景

本発明は、少なくとも1種のスルホニウムサルフェートを含む熱硬化性組成物、新規のスルホニウムサルフェート、カチオン重合性材料を硬化させるプロセス、および当該プロセスによって得られる硬化材料に関する。

【0002】

関連技術の説明

カチオン重合は、カチオン重合開始剤から生じたカチオンによって開始される。カチオン重合で知られている触媒としては、スルホニウム塩が挙げられる。高い活性を示すスルホニウム塩は、スルホニウム塩のアニオン構成要素が、六フッ化アンチモン (SbF_6^-)、六塩化アンチモン (SbCl_6^-)、および $\text{SbF}_5(\text{OH})^-$ であるものである。しかしながら、アンチモンは、毒性の高い物質であり、実用には望ましくない。スルホニウムホスフェートなどの市販の非毒性のスルホニウム塩は、硬化性能が不十分であるという欠点を有する。

【0003】

10

国際公開第2009/047152号では、光開始剤として一般式 $[\text{R}_1\text{R}_2\text{R}_3\text{S}]^+[\text{Y}]^-$ のスルホニウム塩、および光硬化性組成物においてのそれらの使用について開示されている。 R_1 および R_2 は、場合により、フェニルで置換されていてもよく、 R_3 は、場合により、アルキル、アルケニル、シクロアルキル、シクロアルケニル、またはアリールで置換されていてもよく、ならびに Y は、無機アニオンまたは有機アニオン、例えば、ハロゲンまたは $\text{C}_1\sim\text{C}_2$ -アルキルサルフェートもしくはスルホネートである。スルホニウムサルフェートについての具体的な実施形態は開示されていない。

【0004】

米国特許第2004/0053158号では、(a) 酸の作用において硬化する化合物または酸の作用において溶解度が増加する化合物と、(b) 感光性酸供与体として、少なくとも1種のヨードニウム塩またはスルホニウム塩とを含む、化学的に増幅されたフォトレジスト組成物について開示されている。スルホニウムサルフェートの具体的な実施形態は、トリフェニルスルホニウム4-tert-ブチルフェニルサルフェート、トリフェニルスルホニウムベンジルサルフェート、およびトリフェニルスルホニウム2-イソプロピル-5-メチルシクロヘキサンサルフェートである。

20

【0005】

米国特許第5,374,697号では、カチオン重合性材料の熱硬化のための開始剤として有用であるジフェニルシクロアルキルスルホニウム化合物が開示されている。対イオンは、非求核性アニオン、例えば、ハライド、またはペルクロラート、または構造 $[\text{M}(\text{Hal})_n]^{(m-n)-}$ [式中、Mは、周期表の第3~5主族であり、Halはハロゲンを意味する]の錯体アニオンなど、である。

30

【0006】

米国特許第5,013,814号では、カチオン重合性化合物を含有する硬化性混合物における使用のために、対イオンが SbF_6^- 、 AsF_6^- 、および $\text{SbF}_5(\text{OH})^-$ から選択されるアリール脂肪族スルホニウム化合物が開示されている。

【0007】

欧州特許第1400856号では、感熱性PS版を露光する工程、ならびにカチオン性界面活性剤からなる群より選択される少なくとも1種の化合物と分子中に3つ以上のエチレンオキシド末端基を有する化合物とを含有するアルカリ現像液を使用してPS版を現像する工程を含む、リソグラフ印刷のためのポジ型の感熱性PS版から印刷版を作製する方法が開示されている。当該カチオン性界面活性剤は、アミン塩、アンモニウム塩、ホスホニウム塩、またはスルホニウム塩であり得る。具体的な実施形態は、ベンジルドデシルメチルメチルサルフェートである。

40

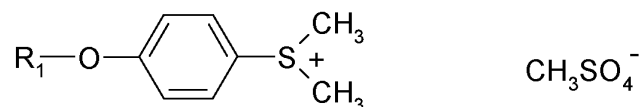
【0008】

欧州特許第0511405号では、カチオン重合触媒、カチオン重合性有機材料、および安定化剤として、ハロゲン化物、過塩素酸塩、アルキルサルフェート、およびp-トルエンスルホネートイオンから選択された求核性対アニオンを有する少なくとも1種のオニウム塩を含有する組成物が開示されている。当該カチオン重合触媒は、スルホニウムもしくはアンモニウムヘキサフルオロホスフェートまたはスルホニウムもしくはアンモニウムヘキサフルオロアンチモネートである。当該カチオン重合性有機材料は、例えば、エポキ

50

シ化合物、ビニル化合物、または環状エーテルなどである。オニウム塩の具体的な実施形態では、3, 5-ジ-tert-ブチル-4-ヒドロキシジメチルスルホニウムメチルサルフェートおよび式：

【化1】



〔式中、R₁は、水素、ベンジルオキシカルボニル、メチルカルボニル、トリデシルカルボニル、9-フルオレニルオキシカルボニル、tert-ブチルオキシカルボニル、または4-メトキシベンジルオキシカルボニルである〕の化合物が開示されている。

【0009】

英国特許出願公開第509, 871号では、スルホニウム塩のアニオン構成要素がサルフェート、例えば、メチルサルフェート、n-ドデシルサルフェート、セチルサルフェート、またはβ-クロロエチルサルフェートなど、であるスルホニウム塩が開示されている。当該スルホニウムサルフェートは、発泡特性、乳化特性、および濡れ特性を有する。特開2006-028132号は、反応容器を腐食しないスルホニウム化合物および腐食抑制の方法に関する。スルホニウム化合物の具体例は、4-アセトキシフェニルジメチルスルホニウムメチルサルフェートおよび4-ヒドロキシフェニルベンジルメチルスルホニウムメチルサルフェートである。特開2007-091702号では、ジメチルアリールスルホニウムサルフェート化合物ならびにカチオン重合性モノマーのための熱重合触媒としてのそれらの使用について開示されている。

【0010】

H. M. Gilowらは、Journal of Organic Chemistry, 1968, 33 (1), 230-233において、銀イオンの存在下におけるジメチルフェニルスルホニウムメチルサルフェートの塩素化および臭素化について検討している。

【0011】

L. Veniardらは、Comptes Rendus des Seances de l'Academie des Sciences, Serie C: Sciences chimiques, 1971, 273 (18), 1190-1193において、プロパルギルスルホニウムメチルサルフェートについて記載している。

【0012】

A. A. Abduvkhlov et al., Khimiko-Farmatsevticheskii Zhurnal, 1988, 22 (8), 966-969では、トリアルキルスルホニウムメチルサルフェートならびに、ヒト赤血球アセチルコリンエステラーゼおよびウマ血清ブチリルコリンエステラーゼとそれらの相互作用が開示されている。

【0013】

A. Piccininiらは、Organic Letters, vol. 12, no. 3, pages 608-611において、アルデヒドへのスルホニウムイリド媒介性メチレン転移のための触媒としてのスルフィドの活性について検討している。好適なメチル化剤は、1-メチルテトラヒドロチオフェニウムメチルサルフェートである。

【0014】

英国特許第1, 424, 148号には、植物の成長を調整する薬剤としての1, 4-ジチアン塩について記載がある。スルホニウム塩のアニオン構成要素は、ハロゲン化物、特に、塩化物、臭化物、およびヨウ化物、テトラフルオロボレート、あるいはアルキルサルフェート、とりわけメチルサルフェートまたはエチルサルフェート、である。

【0015】

米国特許第2, 972, 571号は、光沢ニッケルの電解析出における光沢剤としてス

10

20

30

40

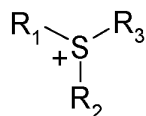
50

ルホニウムスルホネートおよびスルホニウムサルフェートに関するものである。

【0016】

米国特許第4, 167, 618号は、アジリジン化合物、例えば、エチレンイミン（アジリジン）、置換アジリジン、およびアジリジン誘導体（例えば、2-エチレンイミノエタノール、N-ブチル-エチレンイミン、エチレンイミノコハク酸ジメチルエステルなど）など、ならびにアジリジノ末端基を有する他の化合物（例えば、ポリエーテル）の重合プロセスに関するものである。好適な重合開始剤は、式：

【化2】



10

[式中、 A^- は、非求核性アニオン、好ましくは、フルオロボレート、スルホネート、ニトレート、ペルクロレート、メトサルフェート、またはフルオロサルフェートであり、 R_1 は、 $C_1 \sim C_{18}$ -アルキルであり、 R_2 は、 $C_1 \sim C_{18}$ -アルキルまたは7～18個の炭素原子を有するフェニルアルキル基であり、この場合、当該アルキル基は、エステル基および／またはエーテル基を含有していてもよく、ならびに R_3 は、少なくとも1つの水素原子以外に、硫黄原子に対してβ位の炭素原子上に電子求引基を有するアルキル基である]のトリアルキルスルホニウム塩である。具体的な実施形態において、 R_1 はメチルであり、 R_2 はドデシルであり、 R_3 は $-CH_2-CH_2-COOC_2H_5$ であり、ならびに A^- はメトサルフェートであり； R_1 はエチルであり、 R_2 はドデシルであり、 R_3 は $-CH_2-CH_2-COOC_8H_{17}$ であり、ならびに A^- は、ドデシルサルフェート、エチルサルフェート、または2-エチルヘキシルサルフェートであり； R_1 はエチルであり、 R_2 は $CH_2-OC(O)C_{12}H_{25}$ であり、 R_3 は $-CH_2-CH_2-COOC_8H_{17}$ であり、ならびに A^- は2-エチルヘキシルサルフェートであり； R_1 はエチルであり、 R_2 はドデシルであり、 R_3 は2-シアノ-1-メチル-エチルであり、ならびに A^- は、ドデシルサルフェート、エチルサルフェート、または2-エチルヘキシルサルフェートである。

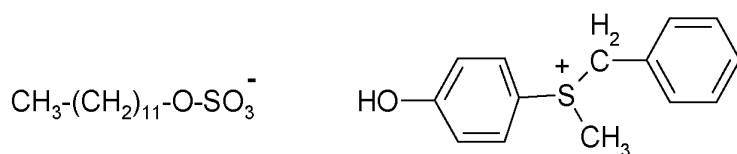
20

【0017】

特開平6-199770号には、オニウム塩および放射線感応性樹脂組成物におけるこれらの使用について記載されている。好適なオニウム塩は、 $CaS \quad No. \quad 160878-60-4$ を有する、

30

【化3】



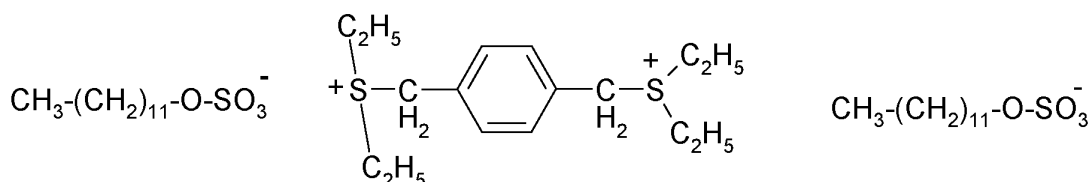
である。

40

【0018】

レジストリ番号126515-92-2を有するスルホニウム塩

【化4】



は、Thin Solid Films, 179 (1989), 191-197により公

50

知である。当該塩は、ポリ（p-フェニレンビニレン）ラングミュアー・ブロッジェット膜の製造のための両親媒性前駆体ポリマーとしての役割を果たす。

【0019】

高い硬化活性など良好な適用特性を有する非毒性熱酸発生剤（TAG）の必要性が非常に高い。驚くべきことに、この目的は、下記に説明するような特定のスルホニウムサルフェートによって解決されることが見出された。

【0020】

したがって、本発明は、良好な硬化性能を有する非毒性の熱酸発生剤を提供するという目的に基づいている。

【0021】

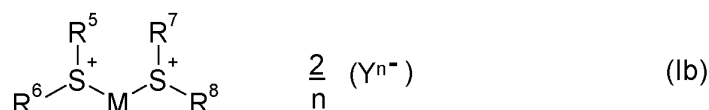
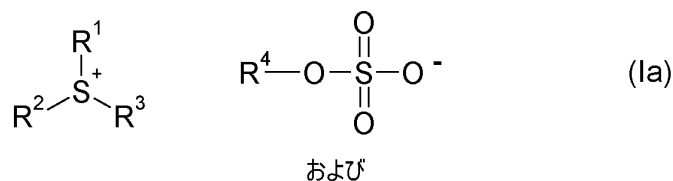
発明の概要

第一の態様において、本発明は、

(a) カチオン重合可能な少なくとも1種の化合物；および

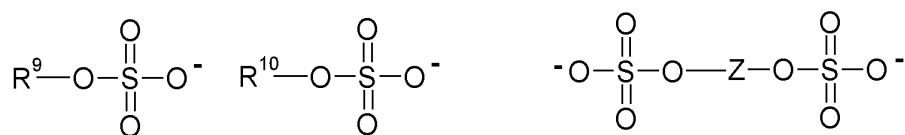
(b) 式IaおよびIb：

【化5】



[式中、
Yⁿ⁻は、

【化6】



から選択される一価または二価のアニオンであり；

nは、1または2であり；

R¹は、C₁～C₂₀-アルキル、C₃～C₂₀-シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル、基A、または基Bであり、

この場合、C₁～C₂₀-アルキルは、1つ以上の同じかまたは異なる基R^{1a}で置換されていてもよく、ならびに／あるいは-O-、-S-、-C(O)-、および-N(R^N)-から選択される1つ以上の非隣接基で中断されていてもよく、

この場合、

R^{1a}は、F、Cl、Br、I、CN、SR¹⁹、OR²⁰、COR²¹、COOR²²、CONR²³R²⁴、C₃～C₂₀-シクロアルキル、またはヘテロシクロアルキルであり、この場合、最後に言及された2つの基は、1つ以上のCO基で中断されていてもよく、ならびに／あるいは1つ以上の同じかまたは異なる基R^{1ab}を有していてもよく、

この場合、

R^{1ab}は、F、Cl、Br、I、C₁～C₁₂-アルキル、C₁～C₁₂-ハロアルキル、CN、SR¹⁹、OR²⁰、COR²¹、COOR²²、またはCONR²³R²⁴であり；

C₃～C₂₀-シクロアルキルおよびヘテロシクロアルキルは、1つ以上のCO基で中断されていてもよく、ならびに／あるいは1つ以上の同じかまたは異なる基R^{1b}で置換されて

10

20

30

40

50

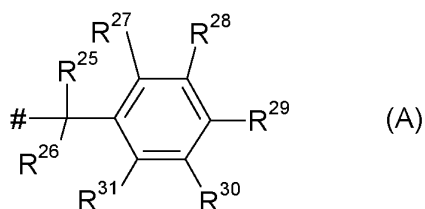
いてもよく、

この場合、

R^{1b} は、F、Cl、Br、I、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、 $C_1 \sim C_{12}$ -ハロアルキル、CN、 SR^{19} 、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、または $CONR^{23}R^{24}$ であり；

この場合、式Aの基は、

【化7】



10

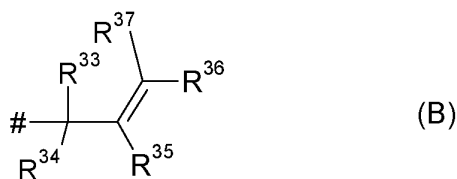
であり、

ここで、

#は、スルホニウム原子への結合位置であり、

ならびに、式Bの基は、

【化8】



20

であり、

ここで、

#は、スルホニウム原子への結合位置であり、

ただし、 R^2 および R^3 が両方とも、 $C_1 \sim C_{20}$ -アルキル；1つ以上の基 R^{2a} で置換されている $C_1 \sim C_{20}$ -アルキル； $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-C(O)-$ 、および $-N(R^N)$ から選択される1つ以上の非隣接基で中断されている $C_1 \sim C_{20}$ -アルキル； $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-C(O)-$ 、および $-N(R^N)$ から選択される1つ以上の非隣接基で中断されており、かつ1つ以上の基 R^{2a} で置換されている $C_1 \sim C_{20}$ -アルキル； $C_3 \sim C_{20}$ -シクロアルキル；1つ以上のCO基で中断されている $C_3 \sim C_{20}$ -シクロアルキル；1つ以上の基 R^{2b} で置換されている $C_3 \sim C_{20}$ -シクロアルキル；ならびに、1つ以上のCO基で中断されており、かつ1つ以上の基 R^{2b} で置換されている $C_3 \sim C_{20}$ -シクロアルキル、からなる群より選択される場合、 R^1 は、基Aまたは基Bであり、

30

R^2 および R^3 は、互いに独立して、 $C_1 \sim C_{20}$ -アルキル、 $C_2 \sim C_{20}$ -アルケニル、 $C_2 \sim C_{20}$ -アルキニル、 $C_3 \sim C_{20}$ -シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル、 $C_6 \sim C_{20}$ -アリール、およびヘテロアリールから選択され、

この場合、 $C_1 \sim C_{20}$ -アルキル、 $C_2 \sim C_{20}$ -アルケニル、および $C_2 \sim C_{20}$ -アルキニルは、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{2a} で置換されていてもよく、ならびに／あるいは $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-C(O)-$ 、および $-N(R^N)$ から選択される1つ以上の非隣接基で中断されていてもよく、

40

$C_3 \sim C_{20}$ -シクロアルキルおよびヘテロシクロアルキルは、1つ以上のCO基で中断されていてもよく、ならびに／あるいは1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{2b} を有していてもよく、

$C_6 \sim C_{20}$ -アリールおよびヘテロアリールは、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{2c} で置換されていてもよく、

この場合、

R^{2a} は、F、Cl、Br、I、CN、 SR^{19} 、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、 $CONR$

50

$^{23}R^{24}$ 、 $C_3 \sim C_{20}$ -シクロアルキル、およびヘテロシクロアルキルから選択され、この場合、最後に言及された2つの基は、1つ以上のCO基で中断されていてもよく、ならびに／あるいは1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{2ab} で置換されていてもよく、ならびにヘテロアリールおよび $C_6 \sim C_{10}$ -アリールからなる群からも選択され、この場合、最後に言及された2つの基は、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{2ac} で置換されていてもよく、

この場合、

R^{2ab} は、 R^{1ab} に対して示される意味のうちの1つを有し、

R^{2ac} は、F、Cl、Br、I、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、 $C_1 \sim C_{12}$ -ハロアルキル、CN、 NO_2 、 SR^{19} 、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、または $CONR^{23}R^{24}$ であり；

R^{2b} は、F、Cl、Br、I、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、 $C_1 \sim C_{12}$ -ハロアルキル、CN、 SR^{19} 、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、 $CONR^{23}R^{24}$ 、 $C_6 \sim C_{10}$ -アリール、またはヘテロアリールであり、この場合、最後に言及された2つの基は、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{2bc} で置換されていてもよく、

この場合、

R^{2bc} は、 R^{2ac} に対して示される意味のうちの1つを有し；

R^{2c} は、F、Cl、Br、I、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、 $C_1 \sim C_{12}$ -ハロアルキル、CN、 NO_2 、 SR^{19} 、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、 $CONR^{23}R^{24}$ 、フェニル、 $C_3 \sim C_{10}$ -シクロアルキル、またはヘテロシクロアルキルであり、この場合、最後に言及された2つの基は、1つ以上のCO基で中断されていてもよく、

あるいは、

R^1 および R^2 あるいは R^1 および R^3 は、一緒に、直鎖 $C_2 \sim C_6$ -アルキレン基、直鎖 $C_2 \sim C_6$ -アルケニレン基、または $-(CH_2)_a-C_6H_4-(CH_2)_b$ 基を形成していてもよく、この場合、aおよびbは0～10の整数であり、かつaおよびbの合計は1～10であり、アルキレン、アルケニレン、および $-(CH_2)_c-C_6H_4-(CH_2)_d$ のアルキレン部分は、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{32} で置換されていてもよく、ならびに／あるいは-O-、-S-、-C(O)-、および-N(R^N)-から選択される1つ以上の非隣接基で中断されていてもよく；

あるいは、

R^2 および R^3 は、一緒に、直鎖 $C_2 \sim C_6$ -アルキレン基、直鎖 $C_2 \sim C_6$ -アルケニレン基、または直鎖 $-(CH_2)_c-C_6H_4-(CH_2)_d$ 基を形成していてもよく、この場合、cおよびdは0～10の整数であり、かつcおよびdの合計は1～10であり、アルキレン、アルケニレン、および $-(CH_2)_a-C_6H_4-(CH_2)_b$ のアルキレン部分は、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{32} で置換されていてもよく、ならびに／あるいは1つまたは2つのフェニル環に縮合していてもよく、ならびに／あるいは-O-、-S-、-C(O)-、および-N(R^N)-から選択される1つ以上の非隣接基で中断されていてもよく；

R^4 は、 $C_1 \sim C_{20}$ -アルキル、 $C_2 \sim C_{20}$ -アルケニル、 $C_2 \sim C_{20}$ -アルキニル、 $C_3 \sim C_{20}$ -シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル、 $C_6 \sim C_{20}$ -アリール、ヘテロアリール、- $NR^{11}R^{12}$ 、または-N=C $R^{13}R^{14}$ であり、

この場合、 $C_1 \sim C_{20}$ -アルキル、 $C_2 \sim C_{20}$ -アルケニル、および $C_2 \sim C_{20}$ -アルキニルは、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{4a} で置換されていてもよく、ならびに／あるいは-O-、-S-、-C(O)-、および-N(R^N)-から選択される1つ以上の非隣接基で中断されていてもよく、

$C_3 \sim C_{20}$ -シクロアルキルおよびヘテロシクロアルキルは、1つ以上のCO基で中断されていてもよく、ならびに／あるいは1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{4b} で置換されていてもよく、ならびに

$C_6 \sim C_{20}$ -アリールおよびヘテロアリールは、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{4c} で置換されていてもよく、この場合、

R^{4a} は、F、Cl、Br、I、CN、 SR^{19} 、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、CONR

10

20

30

40

50

$^{23}R^{24}$ 、 $C_3 \sim C_{20}$ -シクロアルキル、およびヘテロシクロアルキルから選択され、この場合、最後に言及された2つの基は、1つ以上のCO基で中断されていてもよく、ならびに／あるいは1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{4ab} で置換されていてもよく、ならびにヘテロアリールおよび $C_6 \sim C_{10}$ -アリールからなる群からも選択され、この場合、最後に言及された2つの基は、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{4ac} で置換されていてもよく、この場合、

R^{4ab} は、 R^{1ab} に対して示される意味のうちの1つを有し、

R^{4ac} は、 R^{2ac} に対して示される意味のうちの1つを有し、ならびに

さらに、2つの基 R^{4a} がジェミナルに結合している場合、当該2つの基 R^{4a} は一緒にN-ヒドロキシミノ基を形成してもよく；

10

R^{4b} は、F、Cl、Br、I、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、 $C_1 \sim C_{12}$ -ハロアルキル、CN、 SR^{19} 、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、 $CONR^{23}R^{24}$ 、 $C_6 \sim C_{10}$ -アリール、またはヘテロアリールであり、この場合、最後に言及された2つの基は、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{4bc} で置換されていてもよく、この場合、

R^{4bc} は、 R^{2bc} に対して示される意味のうちの1つを有し；

R^{4c} は、F、Cl、Br、I、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、 $C_1 \sim C_{12}$ -ハロアルキル、CN、 NO_2 、 SR^{19} 、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、 $CONR^{23}R^{24}$ 、フェニル、 $C_3 \sim C_{10}$ -シクロアルキル、またはヘテロシクロアルキルであり、この場合、最後に言及された2つの基は、1つ以上のCO基で中断されていてもよく；

R^5 、 R^6 、 R^7 、および R^8 は、互いに独立して、 $C_1 \sim C_{20}$ -アルキル、 $C_2 \sim C_{20}$ -アルケニル、 $C_2 \sim C_{20}$ -アルキニル、 $C_3 \sim C_{20}$ -シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル、 $C_6 \sim C_{20}$ -アリール、およびヘテロアリールから選択され、

20

この場合、 $C_1 \sim C_{20}$ -アルキル、 $C_2 \sim C_{20}$ -アルケニル、および $C_2 \sim C_{20}$ -アルキニルは、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{5a} で置換されていてもよく、ならびに／あるいは-O-、-S-、-C(O)-、および-N(R^N)-から選択される1つ以上の非隣接基で中断されていてもよく、

$C_3 \sim C_{20}$ -シクロアルキルおよびヘテロシクロアルキルは、1つ以上のCO基で中断されていてもよく、ならびに／あるいは1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{5b} で置換されていてもよく、

$C_6 \sim C_{20}$ -アリールおよびヘテロアリールは、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{5c} で置換されていてもよく、この場合、

30

R^{5a} は、 R^{2a} に対して示される意味のうちの1つを有し、

R^{5b} は、 R^{2b} に対して示される意味のうちの1つを有し、

R^{5c} は、 R^{2c} に対して示される意味のうちの1つを有し；

あるいは、

R^5 および R^6 ならびに／あるいは R^7 および R^8 は、一緒に、直鎖 $C_2 \sim C_6$ -アルキレン基、直鎖 $C_2 \sim C_6$ -アルケニレン基、または直鎖 $-(CH_2)_c-C_6H_4-(CH_2)_d$ 基を形成していてもよく、ここで、cおよびdは、0～10の整数であって、cおよびdの合計は1～10であり、

アルキレン、アルケニレン、および $-(CH_2)_c-C_6H_4-(CH_2)_d$ のアルキレン部分は、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{32} で置換されていてもよく、ならびに／あるいは1つまたは2つのフェニル環に縮合していてもよく、ならびに／あるいは-O-、-S-、-C(O)-、および-N(R^N)-から選択される1つ以上の非隣接基で中断されていてもよく；

40

R^9 および R^{10} は、互いに独立して、 $C_1 \sim C_{20}$ -アルキル、 $C_2 \sim C_{20}$ -アルケニル、 $C_2 \sim C_{20}$ -アルキニル、 $C_3 \sim C_{20}$ -シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル、 $C_6 \sim C_{20}$ -アリール、ヘテロアリール、 $-NR^{11}R^{12}$ 、および $-N=CR^{13}R^{14}$ から選択され、

この場合、 $C_1 \sim C_{20}$ -アルキル、 $C_2 \sim C_{20}$ -アルケニル、および $C_2 \sim C_{20}$ -アルキニルは、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{9a} で置換されていてもよく、ならびに／あるいは-O-、-S-、-C(O)-、および-N(R^N)-から選択される1つ以上の非隣

50

接基で中断されていてもよく、

$C_3 \sim C_{20}$ -シクロアルキルおよびヘテロシクロアルキルは、1つ以上のCO基で中断されていてもよく、ならびに／あるいは1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{9b} で置換されていてもよく、

$C_6 \sim C_{20}$ -アリールおよびヘテロアリールは、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{9c} で置換されていてもよく、この場合

R^{9a} は、 R^{4a} に対して示される意味のうちの1つを有し、

R^{9b} は、 R^{4b} に対して示される意味のうちの1つを有し、

R^{9c} は、 R^{4c} に対して示される意味のうちの1つを有し；

R^{11} および R^{12} は、互いに独立して、 $C_1 \sim C_{20}$ -アルキル、 $C_2 \sim C_{20}$ -アルケニル、 $C_2 \sim C_{20}$ -アルキニル、 $C_3 \sim C_{20}$ -シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル、 $C_6 \sim C_{20}$ -アリール、ヘテロアリール、 $C_2 \sim C_{20}$ -アルカノイル、 $C_3 \sim C_{20}$ -アルケノイル、および $C_6 \sim C_{10}$ -アロイルから選択され、

この場合、 $C_1 \sim C_{20}$ -アルキル、 $C_2 \sim C_{20}$ -アルケニル、および $C_2 \sim C_{20}$ -アルキニルは、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{11a} で置換されていてもよく、ならびに／あるいは-O-、-S-、-C(O)-、および-N(R^N)-から選択される1つ以上の非隣接基で中断されていてもよく、

$C_3 \sim C_{20}$ -シクロアルキルおよびヘテロシクロアルキルは、1つ以上のCO基で中断されていてもよく、ならびに／あるいは1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{11b} で置換されていてもよく、

$C_6 \sim C_{20}$ -アリールおよびヘテロアリールは、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{11c} で置換されていてもよく、

$C_2 \sim C_{20}$ -アルカノイルおよび $C_3 \sim C_{20}$ -アルケノイルは、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{11d} で置換されていてもよく、

$C_6 \sim C_{10}$ -アロイルは、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{11e} で置換されていてもよく、

R^{11a} は、 R^{2a} に対して示される意味のうちの1つを有し、

R^{11b} は、 R^{2b} に対して示される意味のうちの1つを有し、

R^{11c} は、 R^{2c} に対して示される意味のうちの1つを有し、

R^{11d} は、F、Cl、Br、I、CN、NO₂、SR¹⁹、OR²⁰、COR²¹、COOR²²、またはCONR²³R²⁴であり；

R^{11e} は、F、Cl、Br、I、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、 $C_1 \sim C_{12}$ -ハロアルキル、CN、NO₂、SR¹⁹、OR²⁰、COR²¹、COOR²²、またはCONR²³R²⁴であり；

あるいは、

R^{11} および R^{12} は、一緒に、直鎖 $C_2 \sim C_5$ -アルキレン鎖または直鎖 $C_2 \sim C_5$ -アルケニレン鎖を形成していてもよく、この場合、アルキレンおよびアルケニレンは、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{11f} で置換されていてもよく、ならびに／あるいは-O-、-S-、-C(O)-、および-N(R^N)-から選択される1つ以上の非隣接基で中断されていてもよく、

あるいは、

R^{11} および R^{12} は、一緒に、o-フェニレンジカルボニル基または1,8-ナフタレンジカルボニル基を形成していてもよく、この場合、最後に言及された2つの基は、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{11f} で置換されていてもよく、

この場合、

R^{11f} は、 R^{11e} に対して示される意味のうちの1つを有し；

R^{13} および R^{14} は、互いに独立して、水素、CN、NO₂、SR¹⁹、OR²⁰、COR²¹、COOR²²、CONR²³R²⁴、 $C_1 \sim C_{20}$ -アルキル、 $C_2 \sim C_{20}$ -アルケニル、 $C_2 \sim C_{20}$ -アルキニル、 $C_3 \sim C_{20}$ -シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル、 $C_6 \sim C_{20}$ -アロイル、 $C_6 \sim C_{20}$ -アリール、およびヘテロアリールから選択され、

この場合、 $C_1 \sim C_{20}$ -アルキル、 $C_2 \sim C_{20}$ -アルケニル、および $C_2 \sim C_{20}$ -アルキニ

10

20

30

40

50

ルは、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{13a} で置換されていてもよく、ならびに／あるいは $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-C(O)-$ 、および $-N(R^N)-$ から選択される1つ以上の非隣接基で中断されていてもよく、

$C_3 \sim C_{20}$ -シクロアルキルおよびヘテロシクロアルキルは、1つ以上の CO 基で中断されていてもよく、ならびに／あるいは1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{13b} で置換されていてもよく、

$C_6 \sim C_{20}$ -アロイル、 $C_6 \sim C_{20}$ -アリール、および $C_5 \sim C_{20}$ -ヘテロアリールは、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{13c} で置換されていてもよく、

この場合、

R^{13a} は、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 CN 、 SR^{19} 、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、 $CONR^{23}R^{24}$ 、 $C_3 \sim C_{20}$ -シクロアルキル、およびヘテロシクロアルキルから選択され、この場合、最後に言及された2つの基は、1つ以上の CO 基で中断されていてもよく、ならびに／あるいは1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{13ab} で置換されていてもよく、

ならびに、フェニルおよび1つもしくは複数の同じかもしくは異なる基 R^{13ac} で置換されているフェニルからなる群からも選択され、

この場合、

R^{13ab} は、 R^{1ab} に対して示される意味のうちの1つを有し、

R^{13ac} は、 R^{2ac} に対して示される意味のうちの1つを有し；

R^{13b} は、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、 $C_1 \sim C_{12}$ -ハロアルキル、 CN 、 SR^{19} 、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、 $CONR^{23}R^{24}$ 、フェニル、あるいは1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{13bc} で置換されているフェニルであり、この場合

R^{13bc} は、 R^{2ac} に対して示される意味のうちの1つを有し；

R^{13c} は、 R^{4c} に対して示される意味のうちの1つを有し；

あるいは、

R^{13} および R^{14} は、一緒に、直鎖 $C_2 \sim C_6$ -アルキレン鎖または直鎖 $C_1 \sim C_6$ -アルケニレン鎖を形成していてもよく、この場合、アルキレンおよびアルケニレンは、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{32} で置換されていてもよく、ならびに／あるいは $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-C(O)-$ 、および $-N(R^N)-$ から選択される1つ以上の非隣接基で中断されていてもよく；

R^{19} および R^{20} は、互いに独立して、水素、 $C_1 \sim C_{20}$ -アルキル、 $C_2 \sim C_{12}$ -アルケニル、

$C_3 \sim C_{10}$ -シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル（この場合、最後に言及された2つの基は、1つ以上の CO 基で中断されていてもよい）、

$-O-$ 、 $-S-$ 、 $-C(O)-$ 、および $-N(R^N)-$ から選択される1つ以上の非隣接基で中断されている $C_1 \sim C_{20}$ -アルキル、

1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{19a} で置換されている $C_1 \sim C_8$ -アルキル、

$-(CH_2CH_2O)_mH$ （ここで、 m は1～20である）、

$-(CH_2CH_2O)_n(CO)-(C_1 \sim C_8\text{-アルキル})$ （ここで、 n は1～20である）、

$C_2 \sim C_8$ -アルカノイル、 $C_2 \sim C_8$ -ハロアルカノイル、 $C_3 \sim C_6$ -アルケノイル、

ベンゾイル（最後に言及された基は、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 $C_1 \sim C_6$ -アルキル、 OH 、および $C_1 \sim C_4$ -アルコキシからなる群から互いに独立して選択される1つ以上の基で置換されていてもよい）、

フェニル、ナフチル（最後に言及された2つの基は、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{19c} で置換されていてもよい）、

あるいは、 SR^{19} または OR^{20} がそれぞれ、単結合、 $C_1 \sim C_4$ -アルキレン、 O 、 S 、 CO 、または NR^{23} を介して結合しているフェニル環を介して5または6員環を形成しているフェニルもしくはナフチル、

から選択され、

この場合、

10

20

30

40

50

R^{19a} は、F、Cl、Br、I、OH、SH、CN、 $C_3 \sim C_{10}$ -シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル、フェニル、 $C_3 \sim C_6$ -アルケノキシ、 $-OCH_2CH_2CN$ 、 $-OCH_2CH_2(CO)O(C_1 \sim C_8\text{-アルキル})$ 、 $-O(CO)-(C_1 \sim C_8\text{-アルキル})$ 、 $-O(CO)$ -フェニル、 $-(CO)OH$ 、または $-(CO)O(C_1 \sim C_6\text{-アルキル})$ であり、

R^{19c} は、F、Cl、Br、I、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、 $C_1 \sim C_{12}$ -ハロアルキル、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルコキシ、フェニル- $C_1 \sim C_3$ -アルキルオキシ、フェノキシ、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキルスルファニル、フェニルスルファニル、 $-(CO)O(C_1 \sim C_8\text{-アルキル})$ 、 $(CO)N(C_1 \sim C_8\text{-アルキル})_2$ 、またはフェニルであり；

R^{21} は、互いに独立して、水素、 $C_1 \sim C_{20}$ -アルキル、 $C_2 \sim C_{12}$ -アルケニル、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-CO-$ 、および $-N(R^N)-$ から選択される1つ以上の非隣接基で中断されている $C_1 \sim C_{20}$ -アルキル、

1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{21a} で置換されている $C_1 \sim C_8$ -アルキル、 $-(CH_2CH_2O)_oH$ （ここで、 o は1～20である）、 $-(CH_2CH_2O)_p(CO)-(C_1 \sim C_8\text{-アルキル})$ （ここで、 p は1～20である）、

$C_3 \sim C_{10}$ -シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル（この場合、最後に言及された2つの基は、1つ以上のCO基で中断されていてもよい）、

$C_6 \sim C_{20}$ -アリールおよびヘテロアリール（この場合、最後に言及された2つの基は、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{21c} で置換されていてもよい）、

から選択され、

この場合

R^{21a} は、F、Cl、Br、I、OH、SH、CN、フェニル、 $C_3 \sim C_6$ -アルケノキシ、 $-OCH_2CH_2CN$ 、 $-OCH_2CH_2(CO)O(C_1 \sim C_8\text{-アルキル})$ 、 $-O(CO)-(C_1 \sim C_8\text{-アルキル})$ 、 $-O(CO)$ -フェニル、 $-(CO)OH$ 、または $-(CO)O(C_1 \sim C_8\text{-アルキル})$ であり、ならびに

R^{21c} は、 R^{19c} に対して示される意味のうちの1つを有し；

R^{22} は、互いに独立して、水素、 $C_1 \sim C_{20}$ -アルキル、 $C_2 \sim C_{12}$ -アルケニル、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-C(O)-$ 、および $-NR^N-$ から選択される1つ以上の非隣接基で中断されている $C_2 \sim C_{20}$ -アルキル、

1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{22a} で置換されている $C_1 \sim C_8$ -アルキル、 $-(CH_2CH_2O)_qH$ （ここで、 q は1～20である）、 $-(CH_2CH_2O)_r(CO)-(C_1 \sim C_8\text{-アルキル})$ （ここで、 r は1～20である）、

$C_3 \sim C_{10}$ -シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル（この場合、最後に言及された2つの基は、1つ以上のCO基で中断されていてもよい）、

フェニルおよびナフチル（この場合、最後に言及された2つの基は、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{22c} で置換されていてもよい）、

から選択され、

この場合、

R^{22a} は、F、Cl、Br、I、OH、SH、CN、 $C_3 \sim C_6$ -アルケノキシ、 $-OCH_2CH_2CN$ 、 $-OCH_2CH_2(CO)O(C_1 \sim C_8\text{-アルキル})$ 、 $-O(CO)-(C_1 \sim C_8\text{-アルキル})$ 、 $-O(CO)$ -フェニル、 $-(CO)OH$ 、 $-(CO)O(C_1 \sim C_8\text{-アルキル})$ 、フェニル、またはナフチルであり、この場合、最後に言及された2つの基は、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{22ac} で置換されていてもよく、この場合、

R^{22ac} は、 R^{19c} に対して示される意味のうちの1つを有し；

R^{22c} は、 R^{19c} に対して示される意味のうちの1つを有し；

R^{23} および R^{24} は、互いに独立して、水素、 OR^{20} 、 $C_1 \sim C_{20}$ -アルキル、 $C_2 \sim C_{12}$ -アルケニル、

$-O-$ 、 $-S-$ 、 $-C(O)-$ 、および $-NR^N-$ から選択される1つ以上の非隣接基で

10

20

30

40

50

中断されている $C_2 \sim C_{20}$ -アルキル、

1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{23a} で置換されている $C_1 \sim C_8$ -アルキル、

— $(CH_2CH_2O)_sH$ (ここで、 s は 1 ~ 20 である)、

— $(CH_2CH_2O)_t(CO) - (C_1 \sim C_8\text{-アルキル})$ (ここで、 t は 1 ~ 20 である)、

$C_2 \sim C_8$ -アルカノイル、 $C_2 \sim C_8$ -ハロアルカノイル、 $C_3 \sim C_6$ -アルケノイル、ベンゾイル (これは、F、Cl、Br、I、 $C_1 \sim C_6$ -アルキル、—OH、および $C_1 \sim C_4$ -アルコキシから選択される 1つ以上の同じかまたは異なる基で置換されていてもよい)、 $C_3 \sim C_{10}$ -シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル (この場合、最後に言及された 2つの基は、1つ以上の CO 基で中断されていてもよい)、

フェニルおよびナフチル (最後に言及された 2つの基は、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{23c} で置換されていてもよい)、

から選択され、

この場合、

R^{23a} は、F、Cl、Br、I、OH、SH、CN、フェニル、 $C_3 \sim C_6$ -アルケノキシ、— OCH_2CH_2CN 、— $OCH_2CH_2(CO)O(C_1 \sim C_8\text{-アルキル})$ 、— $O(CO) - (C_1 \sim C_8\text{-アルキル})$ 、— $O(CO) - \text{フェニル}$ 、— $(CO)OH$ 、または — $(CO)O(C_1 \sim C_8\text{-アルキル})$ であり、

R^{23c} は、 R^{19c} に対して示される意味のうちの 1つを有し；

あるいは、

R^{23} および R^{24} は、一緒に、 $C_2 \sim C_5$ -アルキレン基を形成していてもよく、当該基は、—O—、—S—、—C(O)—、および —N(R^N)— から選択される 1つ以上の隣接基で中断されていてもよく；

R^{25} および R^{26} は、それぞれ互いに独立して、水素、F、Cl、Br、I、CN、 NO_2 、 SR^{19} 、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、 $CONR^{23}R^{24}$ 、 $C_1 \sim C_{20}$ -アルキル、 $C_3 \sim C_{20}$ -シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル、 $C_6 \sim C_{20}$ -アリール、およびヘテロアリールから選択され、

この場合、 $C_1 \sim C_{20}$ -アルキルは、—O—、—S—、—C(O)—、および —N(R^N)— から選択される 1つ以上の非隣接基で中断されていてもよく、ならびに／あるいは 1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{25a} で置換されていてもよく、

$C_3 \sim C_{20}$ -シクロアルキルおよびヘテロシクロアルキルは、1つ以上の CO 基で中断されていてもよく、ならびに／あるいは 1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{25b} で置換されていてもよく、ならびに

$C_6 \sim C_{20}$ -アリールおよびヘテロアリールは、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{25c} で置換されていてもよく、この場合、

R^{25a} は、 R^{13a} に対して示される意味のうちの 1つを有し；

R^{25b} は、 R^{13b} に対して示される意味のうちの 1つを有し；

R^{25c} は、 R^{13c} に対して示される意味のうちの 1つを有し；

R^{27} 、 R^{28} 、 R^{29} 、 R^{30} 、および R^{31} は、それぞれ互いに独立して、水素、F、Cl、Br、I、CN、 NO_2 、 SR^{19} 、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、 $CONR^{23}R^{24}$ 、 $C_1 \sim C_{20}$ -アルキル、 $C_2 \sim C_{20}$ -アルケニル、 $C_2 \sim C_{20}$ -アルキニル、 $C_3 \sim C_{20}$ -シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル、 $C_6 \sim C_{20}$ -アリール、およびヘテロアリールから選択され、

この場合、 $C_1 \sim C_{20}$ -アルキル、 $C_2 \sim C_{20}$ -アルケニル、および $C_2 \sim C_{20}$ -アルキニルは、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{27a} で置換されていてもよく、ならびに／あるいは —O—、—S—、—C(O)—、および —N(R^N)— から選択される 1つ以上の非隣接基で中断されていてもよく、

$C_3 \sim C_{20}$ -シクロアルキルおよびヘテロシクロアルキルは、1つ以上の CO 基で中断されていてもよく、ならびに／あるいは 1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{27b} で置換されていてもよく、

10

20

30

40

50

C₆～C₂₀-アリールおよびヘテロアリールは、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{27c}で置換されていてもよく、

この場合、

R^{27a}は、R^{13a}に対して示される意味のうちの1つを有し；

R^{27b}は、R^{13b}に対して示される意味のうちの1つを有し；

R^{27c}は、R^{13c}に対して示される意味のうちの1つを有し；

あるいは、

2つの基 R²⁷および R²⁸、R²⁸および R²⁹、R²⁹および R³⁰、ならびに／あるいは R³⁰および R³¹は、一緒に、直鎖 C₂～C₆-アルキレン基または直鎖 C₂～C₆-アルケニレン基を形成していてもよく、この場合、当該アルキレン基および当該アルケニレン基は、1つ以上の同じかまたは異なる基 R³²で置換されていてもよく、ならびに／あるいは1つもしくは2つの C₆～C₁₀-アリール環に縮合していてもよく、ならびに／あるいは-O-、-S-、-C(O)-、および-N(R^N)-から選択される1つ以上の非隣接基で中断されていてもよく、

あるいは、

R²⁵および R²⁷は、一緒に、C₂～C₆-アルキレン鎖を形成していてもよく、この場合、アルキレンは、1つ以上の基 R³²で置換されていてもよく、ならびに／あるいは-O-、-S-、-C(O)-、および-N(R^N)-から選択される1つ以上の非隣接基で中断されていてもよく、

あるいは、

R²⁵および R²⁷は、一緒に、1, 2-フェニレン基を形成していてもよく、この場合、1, 2-フェニレンは、1つ以上の同じかまたは異なる基 R³²で置換されていてもよく；R³²は、F、Cl、Br、I、CN、NO₂、SR¹⁹、OR²⁰、COR²¹、COOR²²、CONR²³R²⁴、C₁～C₂₀-アルキル、C₂～C₂₀-アルケニル、C₂～C₂₀-アルキニル、C₃～C₂₀-シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル、C₆～C₂₀-アリール、およびヘテロアリールであり；

この場合、C₁～C₂₀-アルキル、C₂～C₂₀-アルケニル、およびC₂～C₂₀-アルキニルは、-O-、-S-、-C(O)-、および-N(R^N)-から選択される1つ以上の非隣接基で中断されていてもよく、ならびに／あるいは1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{32a}で置換されていてもよく、

C₃～C₂₀-シクロアルキルおよびヘテロシクロアルキルは、1つ以上のCO基で中断されていてもよく、ならびに／あるいは1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{32b}で置換されていてもよく、

C₆～C₂₀-アリールおよびヘテロアリールは、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{32c}で置換されていてもよく、この場合、

R^{32a}は、R^{13a}に対して示される意味のうちの1つを有し；

R^{32b}は、R^{13b}に対して示される意味のうちの1つを有し；および

R^{32c}は、R^{13c}に対して示される意味のうちの1つを有し；

R³³および R³⁴は、それぞれ互いに独立して、水素、F、Cl、Br、I、CN、NO₂、SR¹⁹、OR²⁰、COR²¹、COOR²²、CONR²³R²⁴、C₁～C₂₀-アルキル、C₃～C₂₀-シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル、C₆～C₂₀-アリール、およびヘテロアリールから選択され、

この場合、C₁～C₂₀-アルキルは、1つ以上の基 R^{33a}で置換されていてもよく、ならびに／あるいは-O-、-S-、-C(O)-、および-N(R^N)-から選択される1つ以上の非隣接基で中断されていてもよく、

C₃～C₂₀-シクロアルキルおよびヘテロシクロアルキルは、1つ以上のCO基で中断されていてもよく、ならびに／あるいは1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{33b}で置換されていてもよく、ならびに、

C₆～C₂₀-アリールおよびヘテロアリールは、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{33c}で置換されていてもよく、この場合、

R^{33a} は、 R^{13a} に対して示される意味のうちの1つを有し；
 R^{33b} は、 R^{13b} に対して示される意味のうちの1つを有し；
 R^{33c} は、 R^{13c} に対して示される意味のうちの1つを有し；
 R^{35} 、 R^{36} 、および R^{37} は、それぞれ互いに独立して、水素、F、Cl、Br、I、CN、 NO_2 、 SR^{19} 、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、 $CONR^{23}R^{24}$ 、 $C_1\sim C_{20}$ -アルキル、 $C_2\sim C_{20}$ -アルケニル、 $C_2\sim C_{20}$ -アルキニル、 $C_3\sim C_{20}$ -シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル、 $C_6\sim C_{20}$ -アリール、およびヘテロアリールから選択され、この場合、 $C_1\sim C_{20}$ -アルキル、 $C_2\sim C_{20}$ -アルケニル、および $C_2\sim C_{20}$ -アルキニルは、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{35a} で置換されていてもよく、ならびに／あるいは-O-、-S-、-C(O)-、および-N(R^N)-から選択される1つ以上の非隣接基で中断されていてもよく、
 $C_3\sim C_{20}$ -シクロアルキルおよびヘテロシクロアルキルは、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{35b} で置換されていてもよく、ならびに
 $C_6\sim C_{20}$ -アリールおよびヘテロアリールは、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{35c} で置換されていてもよく、この場合、
 R^{35a} は、 R^{27a} に対して示される意味のうちの1つを有し；
 R^{35b} は、 R^{27b} に対して示される意味のうちの1つを有し；
 R^{35c} は、 R^{27c} に対して示される意味のうちの1つを有し；
あるいは、
 R^{35} および R^{36} は、一緒に、直鎖 $C_2\sim C_6$ -アルキレン基または直鎖 $C_2\sim C_6$ -アルケニレン基を形成していてもよく、この場合、アルキレンおよびアルケニレンは、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{32} で置換されていてもよく、ならびに／あるいは-O-、-S-、-C(O)-、および-N(R^N)-から選択される1つ以上の非隣接基で中断されていてもよく、
あるいは、
2つの基 R^{33} および R^{35} 、 R^{33} および R^{37} 、 R^{34} および R^{35} 、ならびに／あるいは R^{34} および R^{37} は、一緒に、直鎖 $C_2\sim C_6$ -アルキレン基を形成していてもよく、この場合、当該アルキレン基は、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{32} で置換されていてもよく、ならびに／あるいは-O-、-S-、-C(O)-、および-N(R^N)-から選択される1つ以上の非隣接基で中断されていてもよく；
Mは、 $C_1\sim C_{20}$ -アルキレン、 $C_2\sim C_{20}$ -アルケニレン、 $C_2\sim C_{20}$ -アルキニレン、 $C_3\sim C_{20}$ -シクロアルキレン、ヘテロシクロアルキレン、 $C_6\sim C_{20}$ -アリーレン、およびヘテロアリーレンから選択される二価の基であり、
この場合、 $C_1\sim C_{20}$ -アルキレン、 $C_2\sim C_{20}$ -アルケニレン、および $C_2\sim C_{20}$ -アルキニレンは、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{Ma} で置換されていてもよく、ならびに／あるいは1つ以上の非隣接基 R^{Mi} で中断されていてもよく、
 $C_3\sim C_{20}$ -シクロアルキレンおよびヘテロシクロアルキレンは、1つ以上のCO基で中断されていてもよく、ならびに／あるいは1つ以上の基 R^{Mb} で置換されていてもよく；
 $C_6\sim C_{20}$ -アリーレンおよびヘテロアリーレンは、1つ以上の基 R^{Mc} で置換されていてもよく、この場合、
 R^{Mi} は、-O-、-S-、-C(O)-、OC(O)-、-N(R^N)-、 $C_3\sim C_{20}$ -シクロアルキレン、-O- $C_3\sim C_{20}$ -シクロアルキレン、-O- $C_3\sim C_{20}$ -シクロアルキレン-O-、ヘテロシクロアルキレン、 $C_6\sim C_{20}$ -アリーレン、-O- $C_6\sim C_{20}$ -アリーレン、-O- $C_6\sim C_{20}$ -アリーレン-O-、-S- $C_6\sim C_{20}$ -アリーレン、-S- $C_6\sim C_{20}$ -アリーレン-S-、およびヘテロアリーレンから選択され、
この場合、各シクロアルキレンおよび各ヘテロシクロアルキレンは、1つ以上のCO基で中断されていてもよく、ならびに／あるいは1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{Mib} で置換されていてもよく、ならびに
各アリーレンおよび各ヘテロアリーレンは、1つ以上の基 R^{Mic} で置換されていてもよく、

10

20

30

40

50

R^{Ma} は、F、Cl、Br、I、CN、 SR^{19} 、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、 $CONR^{23}R^{24}$ 、 $C_6\sim C_{10}$ -アリール、またはヘテロアリールであり、この場合、最後に言及された2つの基は、 $C_1\sim C_{12}$ -アルキル、 $C_1\sim C_{12}$ -ハロアルキル、F、Cl、Br、I、CN、 NO_2 、 SR^{19} 、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、および $CONR^{23}R^{24}$ から選択される1つ以上の同じかまたは異なる基で置換されていてもよく；

R^{Mib} は、F、Cl、Br、I、 $C_1\sim C_{12}$ -アルキル、 $C_1\sim C_{12}$ -ハロアルキル、CN、 NO_2 、 SR^{19} 、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、 $CONR^{23}R^{24}$ 、またはフェニルであり、

R^{Mic} は、F、Cl、Br、I、 $C_1\sim C_{12}$ -アルキル、 $C_1\sim C_{12}$ -ハロアルキル、CN、 NO_2 、 SR^{19} 、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、 $CONR^{23}R^{24}$ 、またはフェニルであり；

R^{Mb} は、F、Cl、Br、I、 $C_1\sim C_{12}$ -アルキル、 $C_1\sim C_{12}$ -ハロアルキル、CN、 SR^{19} 、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ ； $CONR^{23}R^{24}$ 、 $C_6\sim C_{10}$ -アリール、またはヘテロアリールであり、この場合、最後に言及された2つの基は、 $C_1\sim C_{12}$ -アルキル、 $C_1\sim C_{12}$ -ハロアルキル、F、Cl、Br、I、CN、 NO_2 、 SR^{19} 、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、または $CONR^{23}R^{24}$ から選択される1つ以上の同じかまたは異なる基で置換されていてもよく；

R^{Mc} は、F、Cl、Br、I、 $C_1\sim C_{12}$ -アルキル、 $C_1\sim C_{12}$ -ハロアルキル、CN、 NO_2 、 SR^{19} 、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、 $CONR^{23}R^{24}$ 、フェニル、 $C_3\sim C_{10}$ -シクロアルキル、またはヘテロシクロアルキルであり、この場合、最後に言及された2つの基は、1つ以上のCO基で中断されていてもよく；

Zは、 $C_1\sim C_{20}$ -アルキレン、または $C_6\sim C_{20}$ -アリーレンであり、この場合、 $C_1\sim C_{20}$ -アルキレンは、1つ以上の非隣接基 R^{Zi} で中断されていてもよく、ならびに／あるいは1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{Za} で置換されていてもよく、ならびに

$C_6\sim C_{20}$ -アリーレンは、1つ以上の基 R^{Zc} で置換されていてもよく、この場合、

R^{Zi} は、 R^{Mi} に対して示される意味のうちの1つを有し、

R^{Za} は、 R^{Ma} に対して示される意味のうちの1つを有し、

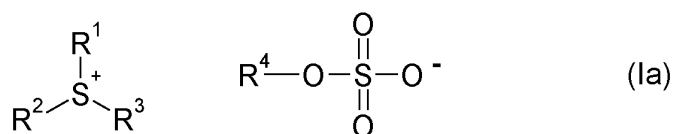
R^{Zc} は、 R^{Mc} に対して示される意味のうちの1つを有し、

R^N は、互いに独立して、水素、 $C_1\sim C_{20}$ -アルキル、 $C_1\sim C_{10}$ -アルカノイル、 $C_6\sim C_{10}$ -アロイル、 $C_1\sim C_{20}$ -アルキルスルホニル、 $C_2\sim C_{20}$ -アルケニルスルホニル、 $C_6\sim C_{10}$ -アリールスルホニル、 $C_3\sim C_{10}$ -シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル、 $C_6\sim C_{10}$ -アリール、およびヘテロアリールから選択され、この場合、 $C_3\sim C_{10}$ -シクロアルキルおよびヘテロシクロアルキルは、1つ以上のCO基で中断されていてもよい]の化合物から選択される少なくとも1種のスルホニウムサルフェートならびにそれらの立体異性体および互変異性体を含む熱硬化性組成物を提供する。

【0022】

第二の態様において、本発明は、式Ia：

【化9】



[式中、

R^1 、 R^2 、および R^3 は、上記において定義される通りであり、ならびに

R^4 は、 $C_1\sim C_2$ -アルキル、 $C_3\sim C_{20}$ -アルキル、 $C_2\sim C_{20}$ -アルケニル、 $C_2\sim C_{20}$ -アルキニル、 $C_3\sim C_{20}$ -シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル、 $C_6\sim C_{20}$ -アリール、ヘテロアリール、 $-NR^{11}R^{12}$ 、および $-N=CR^{13}R^{14}$ から選択され、

この場合、 $C_1 \sim C_2$ -アルキルは、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{4a} で置換されており、

$C_3 \sim C_{20}$ -アルキル、 $C_2 \sim C_{20}$ -アルケニル、および $C_2 \sim C_{20}$ -アルキニルは、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{4a} で置換されていてもよく、ならびに／あるいは-O-、-S-、-C(O)-、および-N(R^N)-から選択される1つ以上の非隣接基で中断されていてもよく、

$C_3 \sim C_{20}$ -シクロアルキルおよびヘテロシクロアルキルは、1つ以上のCO基で中断されていてもよく、ならびに／あるいは1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{4b} で置換されていてもよく、

$C_6 \sim C_{20}$ -アリールおよびヘテロアリールは、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{4c} で置換されていてもよく、この場合、

R^{4a} は、F、Cl、Br、I、CN、 SR^{19} 、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、 $CONR^{23}R^{24}$ 、

$C_3 \sim C_{20}$ -シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル（この場合、最後に言及された2つの基は、1つ以上のCO基で中断されていてもよく、ならびに／あるいは1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{4ab} で置換されていてもよい）、

ヘテロアリールまたは $C_6 \sim C_{10}$ -アリール（この場合、最後に言及された2つの基は、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{4ac} で置換されていてもよい）、

であり、この場合、

R^{4ab} は、上記で定義される通りであり、

R^{4ac} は、上記で定義される通りであり、ならびに

さらに、2つの基 R^{4a} がジェミナルに結合している場合、当該2つの基 R^{4a} は、一緒に、N-ヒドロキシミノ基を形成してもよく；

R^{4b} は、F、Cl、Br、I、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、 $C_1 \sim C_{12}$ -ハロアルキル、CN、 SR^{19} 、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、 $CONR^{23}R^{24}$ 、 $C_6 \sim C_{10}$ -アリール、またはヘテロアリールであり、この場合、最後に言及された2つの基は、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{4bc} で置換されていてもよく、この場合、

R^{4bc} は、上記において定義される通りであり、

R^{4c} は、F、Cl、Br、I、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、 $C_1 \sim C_{12}$ -ハロアルキル、CN、 NO_2 、 SR^{19} 、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、 $CONR^{23}R^{24}$ 、フェニル、 $C_3 \sim C_{10}$ -シクロアルキル、またはヘテロシクロアルキルであり、この場合、最後に言及された2つの基は、1つ以上のCO基で中断されていてもよく；

この場合、 R^N 、 R^{11} 、 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{19} 、 R^{20} 、 R^{21} 、 R^{22} 、 R^{23} 、および R^{24} は、上記において定義される通りである] の新規のスルホニウムサルフェート、ならびにそれらの立体異性体および互変異性体を提供するが、

ただし、

— R^1 がメチルであり、 R^2 がベンジルであり、 R^3 が4-ヒドロキシフェニルであり、ならびに R^4 がn-ドデシルである、

化合物 Ia を除く。

【0023】

さらなる態様において、本発明は、以下：

— R^5 、 R^6 、 R^7 、および R^8 がそれぞれエチルであり、M が1，4- $CH_2-C_6H_4-CH_2$ であり、ならびに R^9 および R^{10} がそれぞれn-ドデシルである、

化合物 Ib を除く、式 Ib の新規のスルホニウムサルフェートを提供する。

【0024】

さらなる態様において、本発明は、カチオン重合性組成物を硬化させる方法であって、

(a) カチオン重合可能な少なくとも1種の化合物、好ましくは、エポキシ基、オキセタン基、およびビニルエーテル基から選択される少なくとも1つの基を有する化合物；および

(b) 上記において定義される式 Ia および Ib の化合物から選択される少なくとも1種

10

20

30

40

50

のスルホニウムサルフェート

を含む組成物を基材に適用する工程、および処理するために当該組成物を熱に晒す工程、を含む方法を提供する。

【0025】

さらなる態様において、本発明は、上記において定義される熱硬化性組成物の使用を提供する。

【0026】

発明の説明

「立体異性体」なる用語は、光学異性体、例えば、エナンチオマーまたはジアステレオマーなど、（後者は、分子中の複数のキラル中心に起因して存在する）、ならびに幾何異性体（シス／トランス異性体）の両方を包含する。置換パターンに応じて、式 I a および I b の化合物は、1つ以上のキラル中心を有し得るが、その場合、それらは、エナンチオマーまたはジアステレオマーの混合物として存在する。本発明は、化合物 I a および I b の純粋なエナンチオマーもしくはジアステレオマーの両方およびそれらの混合物、ならびに純粋なエナンチオマーもしくはジアステレオマーまたはその混合物の、本発明による使用を提供する。式 I a および I b の好適な化合物は、可能性のあるすべての幾何学的立体異性体（シス／トランス異性体）およびそれらの混合物も含む。シス／トランス異性体は、炭素－炭素二重結合に関連して存在し得る。

【0027】

本発明の目的上、ハロゲンなる用語は、フッ素、塩素、臭素、またはヨウ素、特にフッ素または塩素を意味する。

【0028】

「アルキル」なる用語は、本明細書において使用される場合、通常1～4個、1～6個、1～8個、1～12個、1～16個、または1～20個の炭素原子を有する直鎖状または分岐鎖状の飽和炭化水素基を意味する。アルキルは、好ましくは $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、より好ましくは $C_1 \sim C_8$ -アルキルである。アルキル基の例は、とりわけ、メチル、エチル、*n*-プロピル、イソプロピル、*n*-ブチル、イソブチル、*sec*-ブチル、*tert*-ブチル、*n*-ペンチル、ネオペンチル、*n*-ヘキシル、*n*-ヘプチル、*n*-オクチル、*n*-ノニル、*n*-デシル、*n*-ウンデシル、*n*-ドデシル、*n*-トリデシル、*n*-テトラデシル、*n*-ヘキサデシル、*n*-オクタデシル、および*n*-エイコシルである。

【0029】

—O—、—S—、—C(O)—、および—NR^N—から選択される非隣接基で中断されているアルキル基は、1つ以上、例えば、1つ、2つ、3つ、4つ、5つ、6つ、7つ、8つ、または9つ以上の、上記において言及された基で中断されていてもよく、すなわち、当該アルキル基の末端は、炭素原子で形成される。R^Nは、上記において定義される通りである。O、S、およびNR^Nから選択される複数のこれらの中断基がアルキル基に存在する場合、これらのヘテロ原子は、通常、同一である。1つ以上のO原子で中断されているアルキルの例は、—CH₂—O—CH₃、—CH₂CH₂—O—CH₂CH₃、—[CH₂CH₂O]_y—CH₃（この場合、y = 1～9である）、—(CH₂CH₂O)₇CH₂CH₃、—CH₂—CH(CH₃)—O—CH₂—CH₂CH₃、および—CH₂—CH(CH₃)—O—CH₂CH₃である。1つの酸素原子で中断されているアルキルは、アルコキシアルキルと呼ぶこともでき、または2つの酸素原子で中断されているアルキルは、アルコキシアルコキシアルキルと呼ぶこともできることは、当業者は容易に理解するであろう。同様に、1つの硫黄原子で中断されているアルキルは、アルキル—S—アルキル（アルキルスルファニル—アルキル）と呼ぶこともでき、または2つの硫黄原子で中断されているアルキルは、アルキル—S—アルキル—S—アルキル（アルキルスルファニル—アルキルスルファニル—アルキル）と呼ぶこともできる。

【0030】

置換されたアルキル基は、アルキル鎖の長さに応じて、1つ以上（例えば、1つ、2つ、3つ、4つ、5つ、または6つ以上）の同じかまたは異なる置換基を有し得る。ハロゲ

10

20

30

40

50

ン置換アルキルの場合、アルキル基は、部分的に完全ハロゲン化することができ、および／またはさらなる置換基を有していてもよい。

【0031】

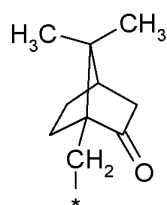
ハロアルキルの例は、 $C_1 \sim C_{20}$ -フルオロアルキル、 $C_1 \sim C_{20}$ クロロアルキル、および $C_1 \sim C_{20}$ -ブロモアルキル、例えば、クロロメチル、トリクロロメチル、フルオロメチル、ジフルオロメチル、トリフルオロメチル、2, 2, 2-トリフルオロエチル、および2-ブロモプロピルである。

【0032】

シクロアルキルで置換されているアルキルであって、シクロアルキルが1つのCO基で置換されており、ならびに1つ以上のアルキル基を有するようなアルキルの例は、カンホリル、とりわけカンファー10-イル

10

【化10】



[式中、*は、分子の残りの部分への結合位置である] である。

20

【0033】

「アルコキシ」なる用語は、本明細書において使用される場合、通常1～4個、1～6個、1～8個、1～12個、1～16個、または1～20個の炭素原子を有し、分子の残りの部分に酸素原子を介して結合している、直鎖状または分岐鎖状の飽和アルキル基を意味する。その例は、メトキシ、エトキシ、プロポキシ、イソプロポキシ、*n*-ブチルオキシ、*sec*-ブチルオキシ、イソブチルオキシ、*tert*-ブチルオキシ、ペンチルオキシ、ヘキシルオキシ、ヘプチルオキシ、2, 4, 4-トリメチルペンチルオキシ、2-エチルヘキシルオキシ、オクチルオキシ、ノニルオキシ、デシルオキシ、ドデシルオキシ、ヘキサデシルオキシ、オクタデシルオキシ、またはイコシルオキシであり、特に、メトキシ、エトキシ、プロポキシ、イソプロポキシ、*n*-ブチルオキシ、*sec*-ブチルオキシ、イソブチルオキシ、*tert*-ブチルオキシであり、とりわけメトキシである。

30

【0034】

「フェニルアルコキシ」なる用語は、本明細書において使用される場合、好ましくは1～4個の炭素原子、特に1個または2個の炭素原子を有するアルコキシ基を介して分子の残りの部分に結合しているフェニルを意味し、例としては、フェノキシメチル、1-フェノキシエチル、2-フェノキシエチルなどが挙げられる。

【0035】

「アルキルスルファニル」なる用語は、本明細書において使用される場合、分子の残りの部分に硫黄原子を介して結合している、上記において定義されるような1～4個、1～6個、1～8個、1～12個、1～16個、または1～20個の炭素原子を有する直鎖状または分岐鎖状の飽和アルキル基を意味する。その例は、メチルスルファニル、エチルスルファニル、プロピルスルファニル、イソプロピルスルファニル、*n*-ブチルスルファニル、*sec*-ブチルスルファニル、イソブチルスルファニル、および*tert*-ブチルスルファニルである。

40

【0036】

「 $C_2 \sim C_8$ -アルカノイル」($C_1 \sim C_7$ -アルキル-C(=O)-)なる用語は、本明細書において使用される場合、カルボニル基の炭素原子を介してアルキル基の任意の位置に結合された1～7個の炭素原子を有する、直鎖状または分岐鎖状の飽和アルキル基、例えば、アセチル、プロパノイル、2-メチルプロパノイル、ブタノイル、ペンタノイル、ヘキサノイルなど、を意味する。

50

【0037】

「 C_m-C_n -アルコキシカルボニル」(C_m-C_n -アルキル-O-C(O)-)なる用語は、本明細書において使用される場合、カルボニル基の炭素原子を介して分子の残りの部分に結合している、上記において定義されるような $m \sim n$ 個の炭素原子を有する、直鎖状または分岐鎖状の飽和アルコキシ基を意味する。その例は、メトキシカルボニル、エトキシカルボニル、プロポキシカルボニル、ブトキシカルボニル、イソブトキシカルボニル、またはペントキシカルボニルである。

【0038】

「アルケニル」なる用語は、本明細書において使用される場合、通常2～20個、好ましくは2～16個、より好ましくは2～10個の炭素原子を有し、1つ以上、例えば、1つ、2つ、3つ、または3つ以上、の二重結合を有する直鎖状または分岐鎖状の一価不飽和もしくは多価不飽和炭化水素基、例えば、1つの二重結合を有する $C_2 \sim C_6$ -アルケニル、例えば、エテニル、1-プロペニル、2-プロペニル、1-メチルエテニル、1-ブテニル、2-ブテニル、3-ブテニル、1-メチル-1-プロペニル、2-メチル-1-プロペニル、1-メチル-2-プロペニル、2-メチル-2-プロペニルなど、あるいは、通常4～10個の炭素原子を有しかつ任意の位置に2つの二重結合を有するアルカジエニル、例えば、1,3-ブタジエニル、1,3-ペンタジエニル、ヘキサ-1,4-ジエン-1-イル、ヘキサ-1,4-ジエン-3-イル、ヘキサ-1,4-ジエン-6-イル、ヘプタ-1,4-ジエン-7-イル、ヘプタ-1,5-ジエン-1-イルなど、を意味する。

【0039】

-O-、-S-、-C(O)-、および-NR^N-から選択される非隣接基で中断されているアルケニル基は、1つ以上、例えば、1つ、2つ、3つ、4つ、5つ、6つ、7つ、または8つの上記において言及された基で中断されていてもよく、すなわち、当該アルケニル基の末端は、炭素原子で形成される。R^Nは、上記において定義される通りである。O、S、およびNR^Nから選択される複数のこれらの中断ヘテロ原子もしくはヘテロ原子団が存在する場合、これらは、通常、同一である。

【0040】

置換アルケニル基は、アルケニル鎖の長さに応じて、1つ以上（例えば、1つ、2つ、3つ、4つ、5つ、または6つ以上）の同じかまたは異なる置換基を有し得る。ハロゲン置換アルケニルの場合、アルケニル基は、部分的に完全ハロゲン化することができ、および／またはさらなる置換基を有していてもよい。

【0041】

本明細書において使用される場合、「ハロアルケニル」なる用語は、「ハロゲンで置換されていてもよいアルケニル」とも表現され、(上記において言及されたような)1つ以上の二重結合を有する直鎖状または分岐鎖状の不飽和炭化水素基を意味し、この場合、これらの基における水素原子のいくつかまたはすべては、上記において言及されたようなハロゲン原子、特に、フッ素、塩素、および臭素で置換されている。ハロアルケニルの例は、 $C_2 \sim C_{20}$ -フルオロアルケニル、 $C_2 \sim C_{20}$ -クロロアルケニル、および $C_2 \sim C_{20}$ -ブロモアルケニルである。

【0042】

「 $C_3 \sim C_6$ -アルケノキシ」なる用語は、本明細書において使用される場合、酸素原子を介して分子の残りの部分に連結されている、上記において定義されるような3～6個の炭素原子を有する直鎖状または分岐鎖状の一価不飽和もしくは二価不飽和のアルケニル基を意味する。その例は、ビニルオキシ、1-プロペニルオキシ、2-プロペニルオキシ、1-メチルエテニルオキシ、1-ブテニルオキシ、2-ブテニルオキシ、3-ブテニルオキシ、1-メチル-1-プロペニルオキシ、2-メチル-1-プロペニルオキシ、1-メチル-2-プロペニルオキシ、2-メチル-2-プロペニルオキシ、1-ペンテニルオキシ、2-ペンテニルオキシ、3-ペンテニルオキシ、4-ペンテニルオキシ、1-メチル-1-ブテニルオキシ、2-メチル-1-ブテニルオキシ、3-メチル-1-ブテニルオ

キシ、1-メチル-2-ブテニルオキシ、2-メチル-2-ブテニルオキシ、3-メチル-2-ブテニルオキシ、1-メチル-3-ブテニルオキシ、2-メチル-3-ブテニルオキシ、3-メチル-3-ブテニル、1, 1-ジメチル-2-プロペニルオキシ、1, 2-ジメチル-1-プロペニルオキシ、1, 2-ジメチル-2-プロペニルオキシ、1-エチル-1-プロペニルオキシ、1-エチル-2-プロペニルオキシ、1-ヘキセニルオキシ、2-ヘキセニルオキシ、3-ヘキセニルオキシ、4-ヘキセニルオキシ、および5-ヘキセニルオキシである。

【0043】

「 $C_3 \sim C_6$ -アルケノイル ($C_2 \sim C_5$ -アルケニル-C(O)-)」なる用語は、本明細書において使用される場合、カルボニル基の炭素原子を介してアルケニル基の任意の位置に結合している、上記において定義されるような2~5個の炭素原子を有する、直鎖状または分岐鎖状の一価不飽和または二価不飽和アルケニル基、例えば、プロペノイル、2-メチルプロペノイル、ブテノイル、ペンテノイル、1, 3-ペンタジエノイル、5-ヘキセノイル、を意味する。

10

【0044】

「 $C_2 \sim C_{20}$ -アルキニル」なる用語は、本明細書において使用される場合、2~20個、好ましくは2~10個の炭素原子と任意の位置における1つまたは2つの三重結合とを有する直鎖状または分岐鎖状の不飽和炭化水素基、例えば、エチニル、プロパルギル(2-プロピン-1-イル)、1-プロピン-1-イル、1-メチルプロパー2-イン-1-イル)、2-ブチン-1-イル、3-ブチン-1-イル、1-ペンチン-1-イル、3-ペンチン-1-イル、4-ペンチン-1-イル、1-メチルブター2-イン-1-イル、1-エチルプロパー2-イン-1-イルなど、を意味する。

20

【0045】

-O-、-S-、-C(O)-、および-NR^N-から選択される非隣接基で中断されているアルキニル基は、1つ以上、例えば、1つ、2つ、3つ、4つ、5つ、6つ、7つ、8つ、または9つ以上のこれらの基で中断されていてもよく、すなわち、当該アルキニル基の末端は、炭素原子で形成される。R^Nは、上記において定義される通りである。複数のこれらの中断ヘテロ原子もしくはヘテロ原子団がアルキニル基に存在する場合、これらは、通常、同一である。

【0046】

置換アルキニル基は、アルキニル鎖の長さに応じて、1つ以上（例えば、1つ、2つ、3つ、4つ、5つ、または6つ以上）の同じかまたは異なる置換基を有し得る。

30

【0047】

ハロゲン置換アルキニルの場合、アルキニル基は、部分的に完全ハロゲン化することができ、および/またはさらなる置換基を有していてもよい。

【0048】

本明細書において使用される場合、「ハロアルキニル」なる用語は、「ハロゲンで置換されていてもよいアルキニル」とも表現され、(上記において言及されるような)1つ以上の三重結合を有する直鎖状または分岐鎖状の不飽和炭化水素基を意味し、この場合、これらの基における水素原子のいくつかまたはすべては、上記において言及されたようなハロゲン原子、特に、フッ素、塩素、および臭素で置換されている。ハロアルキニルの例は、 $C_2 \sim C_{20}$ -フルオロアルキニル、 $C_2 \sim C_{20}$ -クロロアルキニル、および $C_1 \sim C_{20}$ -ブロモアルキニルである。

40

【0049】

「アルキニルオキシ」なる用語は、本明細書において使用される場合、酸素原子を介して分子の残りの部分に結合している、上記において定義されるような3~6個の炭素原子を有する直鎖状または分岐鎖状の一価不飽和もしくは二価不飽和のアルキニル基、例えば、2-プロピニルオキシ、2-ブチニルオキシ、3-ブチニルオキシ、1-メチル-2-プロピニルオキシ、2-ペンチニルオキシ、3-ペンチニルオキシ、4-ペンチニルオキシ、1-メチル-2-ブチニルオキシ、1-メチル-3-ブチニルオキシ、2-メチル-

50

3-ブチニルオキシ、1-エチル-2-プロピニルオキシ、2-ヘキシニルオキシ、3-ヘキシニルオキシ、4-ヘキシニルオキシ、5-ヘキシニルオキシ、1-メチル-2-ペンチニルオキシ、および1-メチル-3-ペンチニルオキシ、を意味する。

【0050】

「シクロアルキル」なる用語は、本明細書において使用される場合、通常3～30個、好ましくは3～20個、より好ましくは3～16個、または3～12個の炭素原子、特に3～8個の炭素原子を有する、単環式または多環式、例えば、二環式または三環式など、の脂肪族基を意味する。単環式環の例は、シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル、シクロヘプチル、またはシクロオクチル、とりわけ、シクロペンチルおよびシクロヘキシルである。多環式環の例は、ペルヒドロアントラシル、ペルヒドロナフチル、ペルヒドロフルオレニル、ペルヒドロクリセニル、ペルヒドロピセニル、アダマンチル、ビスクロ[1. 1. 1]ペンチル、ビスクロ[2. 2. 1]ヘプチル、ビスクロ[4. 2. 2]デシル、ビスクロ[2. 2. 2]オクチル、ビスクロ[3. 3. 0]オクチルビスクロ[3. 3. 2]デシル、ビスクロ[4. 4. 0]デシル、ビスクロ[4. 3. 2]ウンデシル、ビスクロ[4. 3. 3]ドデシル、ビスクロ[3. 3. 3]ウンデシル、ビスクロ[4. 3. 1]デシル、ビスクロ[4. 2. 1]ノニル、ビスクロ[3. 3. 1]ノニル、ビスクロ[3. 2. 1]オクチルなどである。シクロアルキルは、1つ以上のCO基、通常は1つまたは2つの基、で中断されていてもよい。シクロアルキルが1つ以上のCO基で中断されている場合、1つ以上のメチレン基が、COで置き換えられている。1つのCO基で中断されているシクロアルキルの例は、3-オキシビスクロ[2. 2. 1]ヘプチルである。シクロアルキルが1つ以上の同じかまたは異なる基で置換されている場合、それは、例えばC₁～C₄-アルキルで、例えば、一置換、二置換、三置換、四置換、または五置換されている。シクロアルキルが、1つ以上の置換基で置換されている場合、それは、例えば、一置換、二置換、三置換、四置換、または五置換されているか、あるいは六置換以上されている。

【0051】

「ヘテロシクリル」（ヘテロシクロアルキルとも呼ばれる）なる用語は、本明細書において使用される場合、概して、3、4、5、6、7、または8員環、特に5、6、7、または8員環の単環式複素環式非芳香族基と、8～10員環の二環式複素環式非芳香族基を意味し、当該単環式および二環式非芳香族基は、飽和または不飽和であり得る。当該単環式および二環式複素環式非芳香族基は、通常、環員として、N、O、およびSから選択される1個、2個、3個、または4個のヘテロ原子、特に、1個または2個のヘテロ原子を含み、この場合、環員としてのS原子は、S、SO、またはSO₂として存在し得る。ヘテロシクロアルキルが、1つ以上、例えば1つまたは2つ、のCO基で中断されている場合、1つ以上のメチレン基がCOで置き換えられている。飽和または不飽和の3、4、5、6、7、または8員環の複素環式基は、飽和または不飽和の非芳香族複素環、例えば、オキシラニル、オキセタニル、チエタニル、チエタニル-S-オキシド（S-オキシチエタニル）、チエタニル-S-ジオキシド（S-ジオキシチエタニル）、ピロリジニル、ピラゾリニル、イミダゾリニル、ピロリニル、ピラゾリニル、イミダゾリニル、テトラヒドロフラニル、ジヒドロフラニル、1, 3-ジオキシソラニル、ジオキシレニル、チオラニル、S-オキシチオラニル、S-ジオキシチオラニル、ジヒドロチエニル、S-オキシジヒドロチエニル、S-ジオキシジヒドロチエニル、オキサゾリジニル、イソキサゾリジニル、オキサゾリニル、イソキサゾリニル、チアゾリニル、イソチアゾリニル、チアゾリジニル、イソチアゾリジニル、オキサチオラニル、ピペリジニル、ピペラジニル、ピラニル、ジヒドロピラニル、テトラヒドロピラニル、1, 3-および1, 4-ジオキサニル、チオピラニル、S-オキシチオピラニル、S-ジオキシチオピラニル、ジヒドロチオピラニル、S-オキシジヒドロチオピラニル、S-ジオキシジヒドロチオピラニル、テトラヒドロチオピラニル、S-オキシテトラヒドロチオピラニル、S-ジオキシテトラヒドロチオピラニル、モルホリニル、チオモルホリニル、S-オキシチオモルホリニル、S-ジオキシチオモルホリニル、チアジニルなど、を含む。環員として1つまたは2つのカルボニル基

も有する複素環の例は、ピロリジン-2-オニル、ピロリジン-2, 5-ジオニル、イミダゾリジン-2-オニル、オキサゾリジン-2-オニル、チアゾリジン-2-オニルなどを含む。

【0052】

ヘテロシクリルが1つ以上の置換基で置換されている場合、それは、例えば、一置換、二置換、三置換、四置換、または五置換されているか、あるいは六置換以上されている。

【0053】

「 $C_6 \sim C_{20}$ -アリール」なる用語は、本明細書において使用される場合、一価の芳香族基（これは、単環式、例えばフェニルなど、または縮合した多環式、例えば、ナフチル、フェナントリル、またはアントラセニルなど、である）を意味する。アリールの好ましい例は、フェニルおよびナフチルである。

【0054】

「 $C_6 \sim C_{10}$ -アリール」なる用語は、本明細書において使用される場合、フェニルおよびナフチルを意味する。

【0055】

「ヘテロアリール」（「ヘタリールとも呼ばれる）なる用語は、概して、5または6員環の不飽和単環式複素環式基および8~10員環の不飽和二環式複素環式基（これは、芳香族であり、すなわち、それらは、ヒュッケル則（ $4n+2$ 則）に従う）を包含する。ヘタリールは、通常、環員としての炭素原子以外に、環員として、N、O、およびSから選択される1個、2個、3個、または4個のヘテロ原子を有する。5または6員環のヘテロ芳香族基の例としては、2-フリル、3-フリル、2-チエニル、3-チエニル、1-ピロリル、2-ピロリル、3-ピロリル、1-ピラゾリル、3-ピラゾリル、4-ピラゾリル、5-ピラゾリル、2-オキサゾリル、4-オキサゾリル、5-オキサゾリル、2-チアゾリル、4-チアゾリル、5-チアゾリル、3-イソオキサゾリル、4-イソオキサゾリルまたは5-イソオキサゾリル、3-イソチアゾリル、4-イソチアゾリルまたは5-イソチアゾリル、1-イミダゾリル、2-イミダゾリル、4-イミダゾリル、2-または5-[1, 3, 4]オキサジアゾリル、4-または5-(1, 2, 3-オキサジアゾール)イル、3-または5-(1, 2, 4-オキサジアゾール)イル、2-または5-(1, 3, 4-チアジアゾール)イル、2-または5-(1, 3, 4-チアジアゾール)イル、4-または5-(1, 2, 3-チアジアゾール)イル、3-または5-(1, 2, 4-チアジアゾール)イル、1H-、2H-、または3H-1, 2, 3-トリアゾール-4-イル、1, 3, 4-トリアゾール-2-イル、2H-トリアゾール-3-イル、1H-、2H-、または4H-1, 2, 4-トリアゾリル、1H-または2H-テトラゾリル2-ピリジニル、3-ピリジニル、4-ピリジニル、3-ピリダジニル、4-ピリダジニル、2-ピリミジニル、4-ピリミジニル、5-ピリミジニル、ならびに2-ピラジニルが挙げられる。

【0056】

「ヘテロアリール」は、環員として、N、O、およびSから選択される1個、2個、または3個のヘテロ原子を有する、二環式の8~10員環ヘテロ芳香族基も包含し、この場合、5または6員環ヘテロ芳香環は、フェニル環あるいは5または6員環ヘテロ芳香族基に縮合されている。フェニル環に、あるいは5または6員環ヘテロ芳香族基に縮合している5または6員環ヘテロ芳香環の例としては、ベンゾフラニル、ベンゾチエニル、インドリル、インダゾリル、ベンズイミダゾリル、ベンゾオキサチアゾリル、ベンズオキサジアゾリル、ベンズチアジアゾリル、ベンズオキサジニル、キノリニル、イソキノリニル、プリニル、1, 8-ナフチリジル、プテリジル、ピリド[3, 2-d]ピリミジル、またはピリドイミダゾリルなどが挙げられる。これらの縮合ヘタリール基は、5または6員環ヘテロ芳香族環の任意の環原子を介して、または縮合したフェニル部分の炭素原子を介して、分子の残りの部分に結合し得る。

【0057】

ヘテロアリールが1つ以上の同じかまたは異なる基で置換されている場合、それは、例

10

20

30

40

50

えば、一置換、二置換、三置換、四置換、または五置換されている。

【0058】

「 $C_1 \sim C_{20}$ -アルキレン」(または $C_1 \sim C_{20}$ -アルカンジイル)なる用語は、本明細書において使用される場合、各場合において、上記において定義されるような1~20個の炭素原子を有するアルキル基を表し、この場合、当該アルキル基の任意の位置の水素原子は、1つのさらなる結合部位で置き換えられており、したがって、二価部分、例えば、 $-CH_2-$ 、 $-CH_2CH_2-$ 、 $-CH(CH_3)-$ 、 $-CH_2CH_2CH_2-$ 、 $-CH(CH_3)CH_2-$ 、 $-CH_2CH_2CH_2CH_2-$ 、 $-CH_2CH(CH_3)CH_2-$ 、 $-CH(CH_3)CH(CH_3)-$ 、 $-CH_2CH_2CH_2CH_2CH_2-$ 、 $-CH_2(CH_2)_2CH(CH_3)-$ 、 $-CH_2C(CH_3)_2CH_2-$ 、などを形成する。

10

【0059】

「 $C_1 \sim C_{20}$ -アルキレンは、1つ以上の同じかまたは異なる非隣接基で中断されていてもよい」なる用語は、当該アルキレン鎖の少なくとも1つの内部メチレン基が中断基で置き換えられている、上記において定義されるような1~20個の炭素原子を有するアルキレン鎖を表す。当該アルキレンは、例えば、1回、2回、3回、4回、または5回以上、中断され得る。

【0060】

アルキレンが1つ以上の置換基で置換されている場合、それは、例えば、一置換、二置換、三置換、四置換、または五置換されているか、あるいは六置換以上されている。

【0061】

20

「 $C_2 \sim C_{20}$ -アルケニレン」(または $C_1 \sim C_{20}$ -アルケンジイル)なる用語は、本明細書において使用される場合、各場合において、上記において定義されるような直鎖状または分岐鎖状の $C_2 \sim C_{20}$ -アルケニル基を表し、この場合、当該アルケニル基の任意の位置の1つの水素原子は、1つのさらなる結合部位で置き換えられており、したがって、二価部分、例えば、 $-CH=CH-$ 、 $-CH=CHCH_2-$ 、 $-CH=C(CH_3)CH_2-$ 、 $-CH_2CH=CHCH_2-$ 、 $-CH=CH-CH=CH-$ 、 $-CH_2CH=CHCH_2CH_2-$ などを形成する。

【0062】

「 $C_1 \sim C_{20}$ -アルケニレンは、1つ以上の同じかまたは異なる非隣接基で中断されていてもよい」なる用語は、アルケニレン鎖の少なくとも1つの内部メチレン基が基 R^{Mi} で置き換えられている、上記において定義されるような2~20個の炭素原子を有するアルケニレン鎖を表す。当該アルケニレンは、1回、2回、3回、4回、または5回以上中断されていてもよい。

30

【0063】

アルケニレンが1つ以上の置換基で置換されている場合、それは、例えば、一置換、二置換、三置換、四置換、または五置換されているか、あるいは六置換以上されている。

【0064】

「アルキニレン」(またはアルキンジイル)なる用語は、本明細書において使用される場合、各場合において、上記において定義されるような直鎖状または分岐鎖状アルキニル基を表し、この場合、当該アルキニル基の任意の位置の1つの水素原子は、1つのさらなる結合部位で置き換えられており、したがって、二価部分を形成する。したがって、 $C_2 \sim C_{20}$ -アルキニレンは、2~20個の炭素原子を有する、二価の直鎖状または分岐鎖状脂肪族鎖である。

40

【0065】

「 $C_2 \sim C_{20}$ -アルキニレンは、1つ以上の同じかまたは異なる非隣接基で中断されていてもよい」なる用語は、当該アルキニレン鎖の少なくとも1つの内部メチレン基がある基で置き換えられている、上記において定義されるような2~20個の炭素原子を有するアルキニレン鎖を表す。当該アルキニレンは、例えば、1回、2回、3回、4回、または5回以上、中断され得る。

【0066】

50

「 $C_3 \sim C_{20}$ -シクロアルキレン」(シクロアルカンジイルとも呼ばれる)は、上記において定義されるような3~20個の炭素原子を有するシクロアルキル基を意味し、この場合、当該シクロアルキルの任意の位置の1つの水素原子は、1つのさらなる結合部位で置き換えられており、したがって、二価の基を形成する。多環式シクロアルカンジイルの場合、当該結合部位は、同じ環または異なる環のいずれかに位置されている。単環式環の例は、シクロプロピレン、シクロブチレン、シクロペンチレン、シクロヘキシレン、またはシクロヘプチレン、とりわけシクロヘキシレンである。多環式環の例は、ペルヒドロアントラシレン、ペルヒドロナフチレン、ペルヒドロフルオレニレン、ペルヒドロクリセニレン、ペルヒドロピセニレン、アダマンチレン、ビスクロ[1. 1. 1]ペンチレン、ビスクロ[2. 2. 1]ヘプチレン、ビスクロ[4. 2. 2]デシレン、ビスクロ[2. 2. 2]オクチレン、ビスクロ[3. 3. 2]デシレン、ビスクロ[4. 3. 2]ウンデシレン、ビスクロ[4. 3. 3]ドデシレン、ビスクロ[3. 3. 3]ウンデシレン、ビスクロ[4. 3. 1]デシレン、ビスクロ[4. 2. 1]ノニレン、ビスクロ[3. 3. 1]ノニレン、ビスクロ[3. 2. 1]オクチレンなどである。シクロアルカンジイルが1つ以上の置換基で置換されている場合、それは、例えば、 $C_1 \sim C_4$ -アルキルによって、例えば、一置換、二置換、三置換、四置換、または五置換されているか、あるいは六置換以上されている。

【0067】

「 $C_6 \sim C_{20}$ -アリーレン」(アリーレンジイルとも呼ばれる)なる用語は、本明細書において使用される場合、上記において定義されるようなアリール基を意味し、この場合、当該アリール基の任意の位置の1つの水素原子は、1つのさらなる結合部位で置き換えられており、したがって、二価の基を形成する。多環式アリーレンの場合、当該結合部位は、同じ環または異なる環のいずれかに位置されている。アリーレンの例は、フェニレン、ナフチレン、例えば、1, 5-ナフタレンジイル、および1, 8-ナフタレンジイル、アントラセンジイル、またはフェナントレンジイルである。アリーレンが1つ以上の置換基で置換されている場合、それは、例えば、一置換、二置換、三置換、四置換、または五置換されているか、あるいは六置換以上されている。

【0068】

「フェニレン」なる用語は、1, 2-フェニレン(o-フェニレンまたは1, 2-ベンゼンジイル)、1, 3-フェニレン(m-フェニレン、1, 3-ベンゼンジイル)、および1, 4-フェニレン(p-フェニレンまたは1, 4-ベンゼンジイル)を意味する。「ナフチレン」なる用語は、1, 2-ナフチレン、1, 3-ナフチレン、1, 4-ナフチレン、1, 5-ナフチレン、1, 8-ナフチレン、2, 3-ナフチレン、および2, 7-ナフチレンを意味する。

【0069】

「キシリレン」なる用語は、1, 2-キシリレン(1, 2-メチレンフェニレンメチレン、1, 2- $CH_2-C_6H_4-CH_2$)、1, 3-キシリレン(1, 3-メチレンフェニレンメチレン、1, 3- $CH_2-C_6H_4-CH_2$)、および1, 4-キシリレン(1, 4-メチレンフェニレンメチレン、1, 4- $CH_2-C_6H_4-CH_2$)を意味する。

【0070】

「ヘテロアリーレン」(ヘテロアリーレンジイルとも呼ばれる)なる用語は、上記において定義されるようなヘテロアリール基を意味し、この場合、当該ヘテロアリール基の任意の位置の1つの水素原子は、1つのさらなる結合部位で置き換えられており、したがって、二価の基を形成する。多環式ヘテロアリーレンジイルの場合、当該結合部位は、同じ環または異なる環のいずれかに位置されている。ヘテロアリーレンジイルは、それが可能である場所にC-結合またはN-結合することができる。例えば、ピロールジイル、イミダゾールジイル、またはピラゾールジイルは、N-結合またはC-結合することができる。ヘテロアリーレンジイルの例は、ピリジンジイル、ピリミジンジイル、ピリダジンジイル、1, 2, 3-トリアジンジイル、1, 2, 4-トリアジンジイル、1, 2, 3, 4-テトラジンジイル、フランジイル、チオフェンジイル、ピロールジイル、チアゾールジイル、チア

ジアゾールジイル、ピラゾールジイル、イミダゾールジイル、トリアゾールジイル、オキサゾールジイル、イソオキサゾールジイル、イソチアゾールジイル、オキサジアゾールジイルなどである。ヘテロアレーンジイルが1つ以上の置換基で置換されている場合、それは、例えば、一置換、二置換、三置換、四置換、または五置換されているか、あるいは六置換以上されている。

【0071】

「 $C_n \sim C_m$ -アルコキシ- $C_o \sim C_p$ -アルキル」は、本明細書において使用される場合、 $o \sim p$ 個の炭素原子を有する上記において定義されるようなアルキレン基を介して分子の残りの部分に結合されている、 $n \sim m$ 個の炭素原子を有する上記において定義されるようなアルコキシ基を意味する。その例は、 CH_2-OCH_3 、 $CH_2-OC_2H_5$ 、 n -プロ

10

【0072】

「 $C_k \sim C_l$ -アルコキシ- $C_n \sim C_m$ -アルコキシ- $C_o \sim C_p$ -アルキル」なる用語は、本明細書において使用される場合、上記において定義されるような $C_n \sim C_m$ -アルコキシ- $C_o \sim C_p$ -アルキル基を介して分子の残りの部分に結合されている、 $k \sim l$ 個の炭素原子を有する上記において定義されるようなアルコキシ基を意味する。

【0073】

「ヒドロキシ- $C_n \sim C_m$ -アルコキシ-カルボニル」なる用語は、本明細書において使用される場合、カルボニル基を介して分子の残りの部分に結合されている、通常1つのヒドロキシ基と $n \sim m$ 個の炭素原子とを有するアルコキシ基を意味する。

20

【0074】

「アリーラルアルキル」（アリール-アルキレンとも呼ばれる）なる用語は、本明細書において使用される場合、アルキレン基を介して、特にメチレン、1, 1-エチレン、または1, 2-エチレン基を介して連結されている、下記において定義されるようなアリール基、例えば、ベンジル、1-フェニルエチル、および2-フェニルエチルなど、を意味する。

【0075】

「 $C_n \sim C_m$ -シクロアルキル- $C_o \sim C_p$ -アルキル」（シクロアルキル-アルキレンとも呼ばれる）は、本明細書において使用される場合、 $o \sim p$ 個の炭素原子を有する上記において定義されるようなアルキレン基を介して分子の残りの部分に結合されている、 $n \sim m$ 個の炭素原子を有する上記において定義されるようなシクロアルキル基を意味する。その例は、シクロプロピルメチル、シクロプロピルエチル、シクロプロピルプロピル、シクロブチルメチル、シクロブチルエチル、シクロブチルプロピル、シクロペンチルメチル、シクロペンチルエチル、シクロペンチルプロピル、シクロヘキシルメチル、シクロヘキシルエチル、シクロヘキシルプロピル、などである。

30

【0076】

「ヘテロシクロアルキル- $C_o \sim C_p$ -アルキル」（ヘテロシクロアルキル-アルキレンとも呼ばれる）は、本明細書において使用される場合、 $o \sim p$ 個の炭素原子を有する上記において定義されるようなアルキレン基を介して分子の残りの部分に結合されている、上記において定義されるようなヘテロシクロアルキル基を意味する。その例は、ヘテロアリールメチル、1-ヘテロアリールエチル、または2-ヘテロアリールエチルである。

40

【0077】

「および／または」または「または／および」なる用語は、定義された代替物（置換物）の1つが存在するだけでなく、定義された代替物（置換物）のいくつかも一緒に、すなわち、様々な代替物（置換基）の混合物も存在し得ることを表現することが意図される。

【0078】

「少なくとも」なる用語は、1つまたは2つ、例えば、1つ、2つ、3つ、好ましくは1～2つを定義することが意図される。

【0079】

「1つ以上の同じかまたは異なる基」なる用語は、1つ、2つ、3つ、4つ、5つ、6

50

つ、7つ、8つ、または9つ以上の同じかまたは異なる基を定義することが意図される。

【0080】

式 I a または I b の化合物の可変部（置換基）の好ましい実施形態に関して以下において為される注釈は、それ自体並びに好ましくは互いの組み合わせにおいて有効である。

【0081】

可変部の好ましい実施形態に関して以下において為される注釈は、さらに、式 I a または I b の化合物に関して、ならびに本発明による使用および方法、ならびに本発明による組成物に関して有効である。

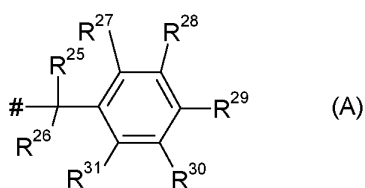
【0082】

熱硬化性発生剤としての本発明による式 I a および I b の化合物の活性を前提として、置換基（可変部）M、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^9 、および R^{10} は、互いに独立して、ならびに好ましくは組み合わせにおいて、以下の意味を有する。

【0083】

本発明の好ましい実施形態は、式 I a における R^1 が、式 A：

【化 11】



[式中、

は、スルホニウム原子への結合位置であり、ならびに R^{25} 、 R^{26} 、 R^{27} 、 R^{28} 、 R^{29} 、 R^{30} 、および R^{31} は、上記において定義される通りである] の基である、組成物、化合物、方法、および使用に関する。

【0084】

より好ましくは、 R^1 は、

R^{25} は、水素、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、またはフェニルであり；

R^{26} は、水素、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、またはフェニルであり；

R^{27} は、水素、フッ素、塩素、 NO_2 、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、 $CONR^{23}R^{24}$ 、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、 $C_2 \sim C_{12}$ -アルケニル、またはフェニルであり、特に、水素、フッ素、塩素、 NO_2 、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、 $CONR^{23}R^{24}$ 、または $C_1 \sim C_{12}$ -アルキルであり；

R^{28} は、水素、フッ素、塩素、 NO_2 、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、 $CONR^{23}R^{24}$ 、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、 $C_2 \sim C_{12}$ -アルケニル、またはフェニルであり、特に、水素、フッ素、塩素、 NO_2 、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、 $CONR^{23}R^{24}$ 、または $C_1 \sim C_{12}$ -アルキルであり；

R^{29} は、水素、フッ素、塩素、 NO_2 、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、 $CONR^{23}R^{24}$ 、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、 $C_2 \sim C_{12}$ -アルケニル、またはフェニルであり、特に、水素、フッ素、塩素、 NO_2 、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、 $CONR^{23}R^{24}$ 、または $C_1 \sim C_{12}$ -アルキルであり；

R^{30} は、水素、フッ素、塩素、 NO_2 、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、 $CONR^{23}R^{24}$ 、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、 $C_2 \sim C_{12}$ -アルケニル、またはフェニルであり、特に、水素、フッ素、塩素、 NO_2 、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、 $CONR^{23}R^{24}$ 、または $C_1 \sim C_{12}$ -アルキルであり；ならびに

R^{31} は、水素、フッ素、塩素、 NO_2 、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、 $CONR^{23}R^{24}$ 、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、 $C_2 \sim C_{12}$ -アルケニル、またはフェニルであり、特に、水素、フッ素、塩素、 NO_2 、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、 $CONR^{23}R^{24}$ 、または $C_1 \sim C_{12}$ -アルキルであり；

あるいは、

10

20

30

40

50

R^{27} および R^{28} 、 R^{28} および R^{29} 、 R^{29} および R^{30} 、ならびに／あるいは R^{30} および R^{31} は、それらが結合している炭素原子と共に、 $-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2-$ 、 $-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2-$ 、および $-\text{CH}=\text{CH}-\text{CH}=\text{CH}-$ から選択される基であってもよく、したがって、それらが結合している炭素原子と一緒に、5または6員環の環、特にベンゼン環を形成する、

式Aの基であり、

この場合、 R^{20} 、 R^{21} 、 R^{23} 、および R^{24} は、上記において定義される通りであり、好ましくは、好ましい意味のうちの1つを有する。特に、 R^1 はベンジルであり、すなわち R^2 、 R^{25} 、 R^{26} 、 R^{27} 、 R^{28} 、 R^{29} 、 R^{30} 、 R^{31} は、それぞれ水素である。同様に、特に、 R^{25} および R^{26} は、両方とも水素であり、基 R^{27} 、 R^{28} 、 R^{29} 、 R^{30} 、および R^{31} のうちの1つまたは2つは、ニトロ、フッ素、塩素、 $\text{C}_1\sim\text{C}_4$ -アルキル、 OR^{20} 、 COOR^{22} 、および $\text{CONR}^{23}\text{R}^{24}$ から選択され、残りの基 R^{27} 、 R^{28} 、 R^{29} 、 R^{30} 、および R^{31} は、水素である。同様に、特に R^{25} 、 R^{26} 、 R^{29} 、 R^{30} 、および R^{31} は、それぞれ水素であり、ならびに R^{27} および R^{28} は、一緒に $-\text{CH}=\text{CH}-\text{CH}=\text{CH}-$ であり、したがって、それらが結合している炭素原子と共にベンゼン環を形成する。

10

【0085】

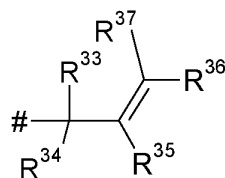
この実施形態の特定の態様により、 R^1 は、ナフチルメチル；ベンジル、あるいはニトロ、フッ素、塩素、 $\text{C}_1\sim\text{C}_4$ -アルキル、 $\text{C}_1\sim\text{C}_4$ -アルコキシ、 $\text{C}_1\sim\text{C}_4$ -アルコシカルボニル、 $\text{C}(\text{O})\text{O}-$ ($\text{C}_1\sim\text{C}_4$ -アルキル- OH)、および $\text{C}(\text{O})\text{N}$ ($\text{C}_1\sim\text{C}_4$ -アルキル) $_2$ から選択される1つまたは2つの基で置換されているベンジル、である。

20

【0086】

本発明のさらに好ましい実施形態は、 R^1 が、式B：

【化12】



(B)

[式中、

30

#は、スルホニウム原子への結合位置であり、ならびに R^{33} 、 R^{34} 、 R^{35} 、 R^{36} 、および R^{37} は、上記において定義される通りである]の基である、組成物、化合物、方法、および使用に関する。

【0087】

この実施形態の特定の態様により、 R^1 は、
 R^{33} が、水素、 $\text{C}_1\sim\text{C}_{12}$ -アルキル、またはフェニルであり；
 R^{34} が、水素、 $\text{C}_1\sim\text{C}_{12}$ -アルキル、またはフェニルであり；
 R^{35} 、 R^{36} 、および R^{37} が、互いに独立して、水素、F、Cl、 $\text{C}_1\sim\text{C}_{12}$ -アルキル、 $\text{C}_2\sim\text{C}_{12}$ -アルケニル、およびフェニルから選択される、
 式Bの基である。

40

【0088】

この実施形態のより特定の態様により、 R^1 は、
 R^{33} が、水素、 $\text{C}_1\sim\text{C}_{12}$ -アルキル、またはフェニルであり；
 R^{34} が、水素、 $\text{C}_1\sim\text{C}_{12}$ -アルキル、またはフェニルであり；
 R^{35} が、水素、 $\text{C}_1\sim\text{C}_{12}$ -アルキル、フェニル、または $\text{C}_2\sim\text{C}_{12}$ -アルケニルであり；
 R^{36} が、水素、 $\text{C}_1\sim\text{C}_{12}$ -アルキル、フェニル、または $\text{C}_2\sim\text{C}_{12}$ -アルケニルであり；
 および
 R^{37} が、水素、フッ素、塩素、 $\text{C}_1\sim\text{C}_{12}$ -アルキル、フェニル、または $\text{C}_2\sim\text{C}_{12}$ -アルケニルである、
 式Bの基である。

50

【0089】

特に、 R^{33} および R^{34} は、両方とも水素であり、ならびに基 R^{35} 、 R^{36} 、および R^{37} のうちの1つまたは2つは、 $C_1 \sim C_4$ -アルキルまたはフェニルであり、かつ残りの基 R^{35} 、 R^{36} 、および R^{37} は、水素である。

【0090】

この実施形態のさらにより特定の態様により、 R^1 は、プロパー2-エン-1-イル、3-フェニル-プロパー2-エン-1-イル、2-($C_1 \sim C_4$ -アルキル)-プロパー2-エン-1-イル、または3-($C_1 \sim C_4$ -アルキル)-プロパー2-エン-1-イルである。

【0091】

本発明のさらなる好ましい実施形態は、 R^1 が、 $C_3 \sim C_{12}$ -シクロアルキル、特に $C_3 \sim C_8$ -シクロアルキルである、組成物、化合物、方法、および使用に関する。その例は、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル、シクロヘプチル、およびシクロオクチル、特に、シクロペンチルまたはシクロヘキシルである。

【0092】

本発明のさらなる好ましい実施形態は、 R^1 が、F、Cl、Br、I、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、および $CONR^{23}R^{24}$ から選択される1つ以上、例えば、1つ、2つ、または3つの、同じか異なる基で置換されている $C_3 \sim C_{12}$ -シクロアルキルであり、ここで、 R^{20} 、 R^{21} 、 R^{22} 、 R^{23} 、および R^{24} は、上記において定義される通りであり、好ましくは、好ましい意味のうちの1つを有する、組成物、化合物、方法、及び使用に関する。より好ましくは、 R^1 は、F、Cl、Br、I、 $C_1 \sim C_8$ -アルキル、 OR^{20} 、 $COOR^{22}$ 、および $CONR^{23}R^{24}$ から選択される、1つ、2つ、または3つの同じかまたは異なる基で置換されている $C_3 \sim C_8$ -シクロアルキルである。特に、 R^1 は、F、Cl、Br、I、 $C_1 \sim C_8$ -アルキル、 $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ、ヒドロキシ、 $C_1 \sim C_4$ -フルオロアルキルカルボニルオキシ、 $C_1 \sim C_4$ -クロロアルキルカルボニルオキシ、 $C(O)O-(C_1 \sim C_4$ -アルキル-OH)、および $C(O)N(C_1 \sim C_4$ -アルキル)₂から選択される1つ、2つ、または3つの同じかまたは異なる基で置換されている、 $C_3 \sim C_8$ -シクロアルキルである。

【0093】

本発明のさらなる好ましい実施形態は、 R^1 が、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキルである、組成物、化合物、方法、及び使用に関する。特に、 R^1 は、 $C_1 \sim C_6$ -アルキル、例えば、メチル、エチル、*n*-プロピル、イソプロピル、*n*-ブチル、ペンチル、またはヘキシルなど、特にメチルである。

【0094】

本発明のさらなる好ましい実施形態は、 R^1 が、F、Cl、Br、I、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、 $CONR^{23}R^{24}$ 、 $C_3 \sim C_{12}$ -シクロアルキル、およびヘテロシクリル、例えば5～6員環ヘテロシクリル、から選択される1つ以上の、例えば1つまたは2つの、同じかまたは異なる基で置換されている、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキルであり、ここで、 R^{20} 、 R^{21} 、 R^{23} 、および R^{24} は、上記において定義される通りであり、好ましくは、好ましい意味のうちの1つを有する、組成物、化合物、方法、および使用に関する。その例は、 $C_1 \sim C_{12}$ -フルオロアルキル、 $C_1 \sim C_{12}$ -クロロアルキル、 $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ- $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、フェノキシ- $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、フェニルカルボニル- $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、 $C_1 \sim C_4$ -アルコキシカルボニル- $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、 $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ- $C_1 \sim C_4$ -アルコキシカルボニル- $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、 $C_3 \sim C_{12}$ -シクロアルキル- $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、および5もしくは6員環ヘテロシクリル- $C_1 \sim C_{12}$ -アルキルであり、この場合、ヘテロシクリル部分は、炭素原子以外に、O、S、またはNから選択される1つまたは2つのヘテロ原子を有する5～6員環の飽和複素環である。

【0095】

R^1 の例は、フェノキシ- $C_1 \sim C_6$ -アルキル、とりわけフェノキシメチルまたは2-フェノキシエチル； $C_1 \sim C_4$ -アルコキシカルボニル- $C_1 \sim C_6$ -アルキル、とりわけメ

10

20

30

40

50

トキシカルボニルメチル、エトキシカルボニルメチル、2-メトキシカルボニルエチル、2-エトキシカルボニルエチル、3-メトキシカルボニルプロピル、3-エトキシカルボニルプロピル、4-メトキシカルボニルブチル、または4-エトキシカルボニルブチル；フェニルカルボニル- $C_1 \sim C_6$ -アルキル、とりわけベンゾイルメチル； $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ- $C_1 \sim C_6$ -アルキル、とりわけ2-メトキシエチルまたは3-メトキシプロピル； $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ- $C_1 \sim C_4$ -アルコキシカルボニル- $C_1 \sim C_6$ -アルキル、とりわけ3-メトキシブトキシカルボニル、2-メトキシプロポキシカルボニル、3-エトキシブトキシカルボニル、または2-エトキシプロポキシカルボニル； $C_3 \sim C_{12}$ -シクロアルキル- $C_1 \sim C_6$ -アルキル、とりわけシクロヘキシルメチル、2-シクロヘキシルエチル、シクロペンチルメチル、または2-シクロペンチルエチルであり；ヘテロシクロアルキル- $C_1 \sim C_{62}$ -アルキルは、好ましくはテトラヒドロフラン-2-イル-メチル、テトラヒドロフラン-3-イル-メチル、テトラヒドロチオフェン-2-イルメチル、テトラヒドロチオフェン-3-イルメチル、2-（テトラヒドロフラン-2-イル）エチル、2-（テトラヒドロフラン-3-イル）エチル、2-（テトラヒドロチオフェン-2-イル）エチル、または2-（テトラヒドロチオフェン-3-イル）エチルである。

10

【0096】

特定の実施形態により、式 I a における R^1 は、ナフチルメチル；ベンジル；ニトロ、フッ素、塩素、 $C_1 \sim C_4$ -アルキル、 $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ、 $C_1 \sim C_4$ -アルコキシカルボニル、 $C(O)O-(C_1 \sim C_4\text{-アルキル-OH})$ 、および $C(O)N(C_1 \sim C_4\text{-アルキル})_2$ から選択される1つまたは2つの基で置換されているベンジル； $C_3 \sim C_8$ -シクロアルキル； $C_1 \sim C_6$ -アルキル； $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ- $(CO)-C_1 \sim C_4$ -アルキル；（5または6員環飽和ヘテロシクロアルキル）- $C_1 \sim C_4$ -アルキル；フェノキシ- $C_1 \sim C_4$ -アルキル；プロパー-2-エン-1-イル、3-フェニルプロパー-2-エン-1-イル、2-（ $C_1 \sim C_4$ -アルキル）-プロパー-2-エン-1-イル；または3-（ $C_1 \sim C_4$ -アルキル）-プロパー-2-エン-1-イルである。

20

【0097】

この実施形態のさらにより特定の態様において、 R^1 は、 $C_1 \sim C_6$ -アルキル、 $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ- $(CO)-C_1 \sim C_4$ -アルキル、テトラヒドロフラン- $C_1 \sim C_4$ -アルキル、テトラヒドロチオフェン- $C_1 \sim C_4$ -アルキル、またはフェノキシ- $C_1 \sim C_4$ -アルキルである。

30

【0098】

基 R^1 の例は、1-ナフチルメチル、ベンジル、4-メチルベンジル、4-エトキシカルボニルベンジル、4-クロロベンジル、2,4-ジクロロベンジル、3,4-ジクロロベンジル、4-ニトロベンジル、4-ジイソプロピルカルバモイルベンジル、4-（2-ヒドロキシエトキシカルボニル）ベンジル、4-（2-メトキシ-1-メチルエトキシカルボニル）ベンジル、4-エトキシカルボニルベンジル、3-メトキシベンジル、3-メチルベンジル、2-メチルベンジル、2-クロロベンジル、2-メチルプロパー-2-エニル、3-メチルブター-2-エニル、アリル、（E）-3-フェニルプロパー-2-エニル、（Z）-3-フェニルプロパー-2-エニル、3-フェニルプロパー-2-エニル、シクロヘキシル、メチル、エチル、 n -ブチル、 n -オクチル、2-メトキシカルボニルエチル、2-フェノキシエチル、3-メトキシブトキシカルボニルメチル、テトラヒドロフラン-2-イルメチル、テトラヒドロチオフェン-2-イルメチル、およびエトキシカルボニルメチルである。

40

【0099】

本発明のさらなる好ましい実施形態は、式 I a において R^2 および R^3 が、互いに独立して、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル；1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{2a} （この場合、 R^{2a} は上記において定義される通りである）で置換されている $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル； $C_3 \sim C_{12}$ -シクロアルキル；1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{2b} （この場合、 R^{2b} は上記において定義される通りである）で置換されている $C_3 \sim C_{12}$ -シクロアルキル；フェニル；なら

50

びに、1つ、2つ、3つ、4つ、または5つの基 R^{2c} （この場合、 R^{2c} は上記において定義される通りである）で置換されているフェニル、から選択される、組成物、化合物、方法、および使用に関する。

【0100】

この実施形態の特定の態様により、式Iaにおける R^2 および R^3 は、互いに独立して、非置換であるか、あるいは、F、Cl、Br、I、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、 $CONR^{23}R^{24}$ 、ヘテロシクロアルキル、 $C_3\sim C_8$ -シクロアルキル、フェニル、およびナフチル（ここで、最後に言及された2つの基は、非置換であるか、あるいは、F、Cl、Br、I、 NO_2 、 $C_1\sim C_{12}$ -アルキル、 OR^{20} 、 $COOR^{22}$ 、および $CONR^{23}R^{24}$ から選択される1つ、2つ、3つ、4つ、または5つの基で置換されている）から選択される1つ以上の基で置換されている、 $C_1\sim C_{12}$ -アルキル；

非置換であるか、あるいは、F、Cl、Br、I、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、 $CONR^{23}R^{24}$ 、ヘテロシクリル、 $C_3\sim C_8$ -シクロアルキル、フェニル、およびナフチル（ここで、最後に言及された2つの基は、非置換であるか、あるいは、F、Cl、Br、I、 NO_2 、 $C_1\sim C_{12}$ -アルキル、 OR^{20} 、 $COOR^{22}$ 、および $CONR^{23}R^{24}$ から選択される1つ、2つ、3つ、4つ、または5つの基で置換されている）から選択される1つ以上の基で置換されている、 $C_3\sim C_{12}$ -シクロアルキル；ならびに

非置換であるか、あるいは、F、Cl、Br、I、 $C_1\sim C_{10}$ -アルキル、 SR^{19} 、および OR^{20} から選択される1つ、2つ、3つ、4つ、または5つの基で置換されている、フェニル；

から選択され、

この場合、 R^{19} 、 R^{20} 、 R^{22} 、 R^{23} 、および R^{24} は、上記において定義される通りである。

【0101】

この実施形態のより特定の態様により、式Iaにおける R^2 および R^3 は、互いに独立して、 $C_1\sim C_8$ -アルキル；アルキル部分がベンゾイルで置換されているフェニル- $C_1\sim C_6$ -アルキル；ナフチル- $C_1\sim C_6$ -アルキル；（5または6員環飽和ヘテロシクリル）- $C_1\sim C_6$ -アルキル、フェノキシ- $C_1\sim C_6$ -アルキル、ベンゾイル- $C_1\sim C_6$ -アルキル、 $C_1\sim C_4$ -アルコキシ-C(=O)- $C_1\sim C_6$ -アルキル、 $C_1\sim C_4$ -アルコキシ- $C_1\sim C_4$ -アルコキシ-C(=O)- $C_1\sim C_6$ -アルキル、ベンジルオキシカルボニル- $C_1\sim C_6$ -アルキル、フェニル、およびフェニル- $C_1\sim C_6$ -アルキル（最後に言及された2つの基の芳香族基は、F、Cl、Br、I、OH、 NO_2 、 $C_1\sim C_{10}$ -アルキル、 $C_1\sim C_4$ -アルコキシ、（5または6員環飽和ヘテロシクロアルキル）- $C_1\sim C_4$ -アルコキシ、 $C_1\sim C_4$ -フルオロアルカノイルオキシ、ヒドロキシ- $C_1\sim C_4$ -アルコキシカルボニル、 $C_1\sim C_4$ -アルコキシカルボニル、 $C_1\sim C_4$ -アルコキシ- $C_1\sim C_4$ -アルコキシカルボニル、ベンジルオキシカルボニル、およびC(=O)N($C_1\sim C_8$ -アルキル)₂からなる群より互いに独立して選択される1、2、3、4または5つの基で置換されていてもよい）から選択される。

【0102】

ある特定の態様により、 R^2 および/または R^3 は、 $C_1\sim C_{12}$ -アルキル、とりわけ $C_1\sim C_8$ -アルキルであり、これは、非置換であるか、または部分的にもしくは完全にハロゲン化されているか、あるいは/ならびに、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、 $CONR^{23}R^{24}$ 、ヘテロシクロアルキル、 $C_3\sim C_8$ -シクロアルキル、フェニル、およびナフチル（この場合、最後に言及された2つの基は、非置換であるか、あるいは、 $C_1\sim C_{12}$ -アルキル、F、Cl、Br、I、 NO_2 、 OR^{20} 、 $COOR^{22}$ 、および $CONR^{23}R^{24}$ から選択される1つ、2つ、3つ、4つ、または5つの同じかまたは異なる基で置換されている）から選択される1つ、2つ、3つの同じかまたは異なる基 R^{2a} を有する。 R^{20} 、 R^{22} 、 R^{23} 、および R^{24} は、上記において定義される通りであり、好ましくは、好ましい意味のうちの1つを有する。

【0103】

この実施形態のさらにより特定の態様により、 R^2 および／または R^3 は、 $C_1 \sim C_8$ -アルキル、例えば、メチル、エチル、 n -プロピル、イソプロピル、 n -ブチル、sec-ブチル、tert-ブチル、 n -ペンチル、またはヘキシルもしくは n -オクチルなど、特に、メチル、エチル、 n -プロピル、 n -ブチル、または n -オクチルである。

【0104】

この実施形態のさらなるより特定の態様により、 R^2 および／または R^3 は、 $C_1 \sim C_6$ -フルオロアルキル、 $C_1 \sim C_6$ -クロロアルキル、 $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ- $C_1 \sim C_6$ -アルキル、フェノキシ- $C_1 \sim C_6$ -アルキル、ベンゾイル- $C_1 \sim C_6$ -アルキル、ベンジルオキシカルボニル- $C_1 \sim C_6$ -アルキル、またはフェニル- $C_1 \sim C_6$ -アルキルであり、この場合、最後に言及された基のアルキル部分は、ベンゾイルで置換されている。この実施形態のより特定の態様により、 R^2 および／または R^3 の例は、 $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ- $C_1 \sim C_2$ -アルキル、とりわけ、2-メトキシエチルまたは3-メトキシプロピル；フェノキシ- $C_1 \sim C_4$ -アルキル、とりわけフェノキシメチル、2-フェノキシエチル、または3-フェノキシプロピル；ベンゾイル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル、とりわけ2-オキソ-2-フェニルエチル、3-オキソ-3-フェニルプロピル、または4-オキソ-4-フェニルブチル；ベンジルオキシカルボニル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル、とりわけ2-ベンジルオキシカルボニルエチルまたは2-メチル-2-ベンジルオキシカルボニルエチル；フェニルアルキルのアルキル部分が、ベンゾイル、とりわけ2-オキソ-1, 2-ジフェニルエチル、3-オキソ-1, 3-ジフェニルプロピル、または4-オキソ-1, 4-ジフェニルブチルで置換されているフェニル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル、である。

【0105】

この実施形態のさらなるより特定の態様により、 R^2 および／または R^3 は、 $C_1 \sim C_4$ -アルコキシカルボニル- $C_1 \sim C_6$ -アルキル、 $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ- $C_1 \sim C_4$ -アルコキシカルボニル- $C_1 \sim C_6$ -アルキル、 $C_3 \sim C_8$ -シクロアルキル- $C_1 \sim C_6$ -アルキル、ナフチル- $C_1 \sim C_6$ -アルキル、またはヘテロシクリル- $C_1 \sim C_6$ -アルキルであり、この場合、ヘテロシクリルは、炭素原子以外に、OおよびSから選択される1つまたは2つのヘテロ原子を有する、5または6員環の飽和複素環である。 R^2 および／または R^3 の例は、 $C_1 \sim C_4$ -アルコキシカルボニル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル、とりわけメトキシカルボニルメチル、エトキシカルボニルメチル、2-メトキシカルボニルエチル、2-エトキシカルボニルエチル、3-メトキシカルボニルプロピル、3-エトキシカルボニルプロピル、4-メトキシカルボニルブチル、または4-エトキシカルボニルブチル； $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ- $C_1 \sim C_4$ -アルコキシカルボニル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル、とりわけ3-メトキシブトキシカルボニルメチル、3-メトキシブトキシカルボニルエチル、3-エトキシブトキシカルボニルメチル、または3-エトキシブトキシカルボニルエチル； $C_3 \sim C_8$ -シクロアルキル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル、とりわけシクロヘキシルメチル、2-シクロヘキシルエチル、シクロペンチルメチル、または2-シクロペンチルエチル；ナフチル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル、とりわけ1-ナフチルメチル、2-ナフチルメチル、1-(ナフトレン-1-イル)エチル、1-(ナフトレン-2-イル)エチル、2-(ナフトレン-1-イル)エチル、または2-(ナフトレン-2-イル)エチルであり、ヘテロシクリル- $C_1 \sim C_4$ -アルキルは、テトラヒドロフラン-2-イルメチル、テトラヒドロフラン-3-イルメチル、2-(テトラヒドロフラン-2-イル)エチル、2-(テトラヒドロフラン-3-イル)エチル、3-(テトラヒドロフラン-2-イル)プロピル、3-(テトラヒドロフラン-3-イル)プロピル、テトラヒドロチオフェン-2-イルメチル、テトラヒドロチオフェン-3-イルメチル、2-(テトラヒドロチオフェン-2-イル)エチル、2-(テトラヒドロチオフェン-3-イル)エチル、3-(テトラヒドロチオフェン-2-イル)プロピル、または3-(テトラヒドロチオフェン-3-イル)プロピルである。

【0106】

同様に、好ましい実施形態において、 R^2 および／または R^3 は、フェニル- $C_1 \sim C_6$ -アルキルであり、この場合、フェニルアルキルのフェニル部分は、非置換であるか、あるいは、F、Cl、Br、I、OH、NO₂、 $C_1 \sim C_{10}$ -アルキル、 $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ

、ヘテロシクリル- $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ、 $C_1 \sim C_4$ -フルオロアルカノイルオキシ、ヒドロキシ- $C_1 \sim C_4$ -アルコキシカルボニル、 $C_1 \sim C_4$ -アルコキシカルボニル、 $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ- $C_1 \sim C_4$ -アルコキシカルボニル、ベンジルオキシカルボニル、および $C(=O)N(C_1 \sim C_8\text{-アルキル})_2$ から選択される1つ、2つ、3つ、4つ、または5つの同じかまたは異なる基で置換されている。特に、 R^2 および/または R^3 は、フェニル- $C_1 \sim C_2$ -アルキルであり、この場合、フェニルアルキルのフェニル部分は、非置換であるか、あるいは、フッ素、塩素、 $C_1 \sim C_4$ -アルキル、 $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ、($C_1 \sim C_4$ -アルコキシ)カルボニル、 $C(O)O-(C_1 \sim C_4\text{-アルキル-OH})$ 、および $C(O)N(C_1 \sim C_8\text{-アルキル})_2$ から選択される1つまたは2つの同じかまたは異なる基で置換されている。

10

【0107】

R^2 および/または R^3 の例は、フェニルアルキルのフェニル部分が1つまたは2つの塩素で置換されているフェニル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル、とりわけ、2-クロロベンジル、3-クロロベンジル、4-クロロベンジル、2, 4-ジクロロベンジル、3, 4-ジクロロベンジル、3, 5-ジクロロベンジル、2-(2-クロロフェニル)エチル、2-(3-クロロフェニル)エチル、2-(4-クロロフェニル)エチル、2-(2, 4-ジクロロフェニル)エチル、2-(3, 5-ジクロロフェニル)エチル、または2-(3, 4-ジクロロフェニル)エチル；フェニルアルキルのフェニル部分がヒドロキシで置換されているフェニル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル、とりわけ、2-ヒドロキシベンジル、3-ヒドロキシベンジル、4-ヒドロキシベンジル、2-(2-ヒドロキシフェニル)エチル、2-(3-ヒドロキシフェニル)エチル、または2-(4-ヒドロキシフェニル)；フェニルアルキルのフェニル部分が1つまたは2つの $C_1 \sim C_{10}$ -アルキル基で置換されているフェニル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル、とりわけ、2-, 3-, または4-メチルベンジル、2-, 3-, 4-エチルベンジル、2-, 3-, または4-プロピルベンジル、2-, 3-, または4-ブチルベンジル、2, 4-ジメチルベンジル、あるいは3, 5-ジメチルベンジル；フェニルアルキルのフェニル部分が1つまたは2つの $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ基で置換されているフェニル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル、とりわけ、2-, 3-, または4-メトキシベンジル、2-, 3-, 4-エトキシベンジル、2-, 3-, または4-プロポキシベンジル、2-, 3-, または4-ブトキシベンジル、2, 4-ジメトキシベンジル、あるいは3, 5-ジメトキシベンジル；フェニルアルキルのフェニル部分が $C_1 \sim C_4$ -アルコキシカルボニルで置換されているフェニル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル、とりわけ、2-エトキシカルボニルベンジル、3-エトキシカルボニルベンジル、4-エトキシカルボニルベンジル、2-(2-エトキシカルボニルフェニル)エチル、2-(3-エトキシカルボニルフェニル)エチル、または4-(3-エトキシカルボニルフェニル)エチル；フェニルアルキルのフェニル部分がヒドロキシ- $C_1 \sim C_4$ -アルコキシカルボニルで置換されているフェニル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル、とりわけ、4-(2-ヒドロキシエトキシカルボニル)ベンジル、2-(4-(2-ヒドロキシエトキシカルボニルフェニル)エチル)；フェニルアルキルのフェニル部分が $C(=O)N(C_1 \sim C_8\text{-アルキル})_2$ で置換されているフェニル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル、とりわけ、4-ジメチルカルバモイルベンジル、4-ジエチルカルバモイルベンジル、4-ジイソプロピルカルバモイルベンジル、2-(4-ジメチルカルバモイルフェニル)エチル、2-(4-ジエチルカルバモイルフェニル)エチル、または2-(4-ジイソプロピルカルバモイルフェニル)エチルである。

20

30

40

【0108】

同様に、好ましい実施形態において、 R^2 および/または R^3 は、 $C_3 \sim C_{12}$ -シクロアルキルであり、これは、非置換であるか、あるいは、F、Cl、Br、I、 OR^{20} 、 $COOR^{21}$ 、 $COOR^{22}$ 、 $CONR^{23}R^{24}$ 、ヘテロシクリル、 $C_3 \sim C_8$ -シクロアルキル、フェニル、およびナフチル（この場合、最後に言及された2つの基は、F、Cl、Br、I、 NO_2 、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、 OR^{20} 、 $COOR^{22}$ 、および $CONR^{23}R^{24}$ から選択される1つ、2つ、3つ、4つ、または5つの異なるかまたは同じ基で置換されていてもよい）から選択される1つ、2つ、または3つの同じかまたは異なる基 R^{2b} を有する。 R^{20} 、

50

R^{22} 、 R^{23} 、および R^{24} は、上記において定義される通りであり、ならびに、好ましくは、好ましい意味のうちの1つを有する。特に好ましい実施形態において、 R^2 および／または R^3 は、 $C_3 \sim C_8$ -シクロアルキル、例えば、シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル、またはシクロヘプチルである。同様に、特に好ましい実施形態において、 R^2 および／または R^3 は、F、Cl、Br、I、 $C_1 \sim C_8$ -アルキル、 OR^{20} 、 $COOR^{22}$ 、および $CONR^{23}R^{24}$ （この場合、 R^{20} 、 R^{22} 、 R^{23} および R^{24} は、上記において定義される通りである）から選択される1つ、2つ、または3つの同じかまたは異なる基で置換されている $C_3 \sim C_8$ -シクロアルキルである。

【0109】

同様に、好ましい実施形態において、 R^2 および／または R^3 は、非置換の、あるいは、F、Cl、Br、I、 $C_1 \sim C_{10}$ -アルキル、 SR^{19} 、および OR^{20} から選択される1つ、2つ、3つ、4つ、または5つの同じかまたは異なる基 R^{2c} を有する、フェニルである。 R^{19} および R^{20} は、上記において定義される通りであり、好ましくは、好ましい意味のうちの1つを有する。より好ましくは、 R^2 および／または R^3 は、非置換の、あるいは、F、Cl、Br、I、OH、 NO_2 、 $C_1 \sim C_{10}$ -アルキル、 $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ、ヘテロシクリル- $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ、 $C_1 \sim C_4$ -フルオロアルカノイルオキシ、ヒドロキシ- $C_1 \sim C_4$ -アルコキシカルボニル、 $C_1 \sim C_4$ -アルコキシカルボニル、 $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ- $C_1 \sim C_4$ -アルコキシカルボニル、ベンジルオキシカルボニル、およびC(=O)N($C_1 \sim C_8$ -アルキル)₂からなる群より選択される1つ、2つ、3つ、4つ、または5つの同じかまたは異なる基で置換されている、フェニルである。特に、 R^2 および／または R^3 は、非置換の、あるいは、フッ素、塩素、ヒドロキシ、ニトロ、 $C_1 \sim C_{10}$ -アルキル、 $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ、 $C_1 \sim C_4$ -フルオロアルキルカルボニルオキシ、および（ヘテロシクリル）- $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ（この場合、ヘテロシクリル部分は、炭素原子以外に、OまたはSから選択される1つまたは2つのヘテロ原子を有する5または6員環の飽和複素環である）から選択される1つまたは2つの同じかまたは異なる基で置換されている、フェニルである。

【0110】

この実施形態において、 R^2 および／または R^3 の例は、フェニル；1つ、2つ、3つ、または4つの $C_1 \sim C_{10}$ アルキル基で置換されているフェニル、とりわけ、2-メチルフェニル、3-メチルフェニル、4-メチルフェニル、2-エチルフェニル、3-エチルフェニル、4-エチルフェニル、2-、3-、4-n-プロピルフェニル、2-、3-、4-イソプロピルフェニル、2-、3-、4-ブチルフェニル、2-(1, 1, 3, 3-テトラメチルブチル)フェニル、3-(1, 1, 3, 3-テトラメチルブチル)フェニル、4-(1, 1, 3, 3-テトラメチルブチル)フェニル、2, 4-ジメチルフェニル、3, 5-ジメチルフェニル、3, 5-ジイソプロピルフェニル；OHで置換されているフェニル、とりわけ、2-ヒドロキシフェニル、3-ヒドロキシフェニル、および4-ヒドロキシフェニル；OHおよび $C_1 \sim C_{10}$ -アルキルから選択される1つ、2つ、3つ、または4つの基で置換されているフェニル、とりわけ、2-ヒドロキシ-5-(1, 1, 3, 3-テトラメチルブチル)フェニル、3, 5-ジイソプロピル-4-ヒドロキシフェニル、5-tert-ブチル-4-ヒドロキシ-2-メチルフェニル、または3, 5-ジ-tert-ブチル-4-ヒドロキシフェニル；ヘテロシクリル- $C_1 \sim C_4$ -アルコキシで置換されているフェニル、とりわけ、2-(テトラヒドロフラン-2-イルメトキシ)フェニル、3-(テトラヒドロフラン-2-イルメトキシ)フェニル、4-(テトラヒドロフラン-2-イルメトキシ)フェニル、2-(テトラヒドロフラン-3-イルメトキシ)フェニル、3-(テトラヒドロフラン-3-イルメトキシ)フェニル、4-(テトラヒドロフラン-3-イルメトキシ)フェニル、2-(テトラヒドロチオフェン-2-イルメトキシ)フェニル、3-(テトラヒドロチオフェン-2-イルメトキシ)フェニル、4-(テトラヒドロチオフェン-2-イルメトキシ)フェニル、2-(テトラヒドロチオフェン-3-イルメトキシ)フェニル、3-(テトラヒドロチオフェン-3-イルメトキシ)フェニル、または4-(テトラヒドロチオフェン-3-イルメトキシ)フェニル； $C_1 \sim C_4$ -

フルオロアルカノイルオキシで置換されているフェニル、とりわけ-2, 2, 2-トリフルオロアセトキシフェニル、または3, 3, 3-トリフルオロプロピオニルオキシフェニル、である。

【0111】

基 R^2 および R^3 の例は、ベンジル、4-メトキシベンジル、4-メチルベンジル、4-エトキシカルボニルベンジル、4-クロロベンジル、2, 4-ジクロロベンジル、3, 4-ジクロロベンジル、4-ニトロベンジル、4-ジイソプロピルカルバモイルベンジル、4-(2-ヒドロキシエトキシカルボニル)ベンジル、4-(2-メトキシ-1-メチルエトキシカルボニル)ベンジル、4-エトキシカルボニルベンジル、4-ベンジルオキシカルボニルベンジル、3-メトキシベンジル、3-メチルベンジル、3-クロロベンジル、2-メチルベンジル、2-クロロベンジル、1-ナフチルメチル、2-ナフチルメチル、2-メトキシカルボニルエチル、2-フェノキシエチル、2-オキソ-1, 2-ジフェニルエチル、2-オキソ-2-フェニルエチル、2-ベンジルオキシカルボニル-エチル、2-ベンジルオキシカルボニルプロピル、メチル、エチル、n-ブチル、1-フェニルエチル、2-フェニルエチル、3-メトキシブトキシカルボニルメチル、テトラヒドロフラン-2-イルメチル、テトラヒドロチオフェン-2-イルメチル、エトキシカルボニルメチル、2-ヒドロキシ-5-(1, 1, 3, 3-テトラメチルブチル)フェニル、4-ヒドロキシフェニル、4-メチルフェニル、4-イソプロポキシフェニル、4-(テトラヒドロフラン-2-イルメトキシ)フェニル、2, 2, 2-トリフルオロアセトキシフェニル、3, 5-ジイソプロピル-4-ヒドロキシフェニル、3, 5-ジ-tert-ブチル-4-ヒドロキシフェニル、3-メチル-4-ヒドロキシフェニル、2-メチル-4-ヒドロキシフェニル、5-tert-ブチル-4-ヒドロキシ-2-メチルフェニル、4-(テトラヒドロフラン-2-イルメトキシ)フェニル、4-(テトラヒドロフラン-3-イルメトキシ)フェニル、4-(テトラヒドロチオフェン-2-イルメトキシ)フェニル、または4-(テトラヒドロチオフェン-3-イルメトキシ)フェニルである。

【0112】

R^2 の具体例は、

- $C_1 \sim C_8$ -アルキル、例えば、メチル、n-ブチル、n-オクチルなど；
- $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ- $C_1 \sim C_4$ -アルキル、例えば、エトキシカルボニルメチル、メトキシカルボニルエチル、メトキシカルボニルメチルなど；
- $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ- $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ-C(=O)- $C_1 \sim C_6$ -アルキル、例えば、3-メトキシブトキシカルボニルメチルなど；
- (5または6員環ヘテロシクロアルキル)- $C_1 \sim C_4$ -アルキル、例えば、テトラヒドロフラン-2-イルメチルなど；
- ナフタレン- $C_1 \sim C_4$ -アルキル、例えば、ナフタレン-1-イルメチルなど；
- フェニル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル、例えば、ベンジル、1-フェニルエチル、フェニエチルなど；
- アルキル部分がベンゾイルで置換されているフェニル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル、例えば、2-オキソ-1, 2-ジフェニルエチルなど；
- フェニル部分がニトロ、塩素、ヒドロキシ、 $C_1 \sim C_{10}$ -アルキル、 $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ、 $C_1 \sim C_4$ -アルコキシカルボニル、 $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ- $C_1 \sim C_4$ -アルコキシカルボニル、ヒドロキシ- $C_1 \sim C_4$ -アルコキシカルボニル、ベンジルオキシカルボニル、C(=O)N($C_1 \sim C_8$ -アルキル)₂から選択される1つ、2つ、3つ、4つ、または5つの基で置換されているフェニル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル、例えば、2-クロロベンジル、2-メチルベンジル、3-メチルベンジル、3, 4-ジクロロベンジル、3, 5-ジクロロベンジル、3-ヒドロキシベンジル、3-メトキシベンジル、3-メトキシベンジル、4-メチルベンジル、4-ニトロベンジル、4-(ジイソプロピルアミノカルボニル)ベンジル、2-メトキシ-1-メチル-エトキシカルボニルベンジル、4-(2-エトキシカルボニル)ベンジル、4-(2-ヒドロキシエトキシカルボニル)ベンジル、4-(2-メトキシ-1-メチルエトキシカルボニル)ベンジル、4-ベンジルオキシカ

ルボニルベンジル、4-クロロベンジルなど；

－ベンゾイル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル、例えば、2-オキソ-2-フェニルエチルなど；

－フェノキシ- $C_1 \sim C_4$ -アルキル、例えば、2-フェノキシエチルなど；

－ベンジルオキシカルボニル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル、例えば、2-ベンジルオキシカルボニルプロピルなど；

－フェニル；

－OHおよび $C_1 \sim C_{10}$ -アルキルから選択される1つ、2つ、3つ、4つ、または5つの基で置換されているフェニル、例えば、4-ヒドロキシフェニル、4-イソプロポキシフェニル、4-ヒドロキシ-2-メチル-5-tert-ブチルフェニル、4-ヒドロキシ-3-メチルフェニル、または2-ヒドロキシ-5-(1, 1, 3, 3-テトラメチルブチル)フェニルなど、

である。

【0113】

R^3 の具体例は、

－ $C_1 \sim C_8$ -アルキル、例えば、メチル、n-ブチル、n-オクチルなど；

－ $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ- $C_1 \sim C_6$ -アルキル、例えば、メトキシカルボニルエチルなど；

－ベンジルオキシカルボニル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル、例えば、2-ベンジルオキシカルボニルプロピルなど；

－フェニル；

－OH、 $C_1 \sim C_4$ -フルオロアルカノイルオキシ、(5-、または6-員環ヘテロシクロアルキル)- $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ、 $C_1 \sim C_6$ -アルコキシ、および $C_1 \sim C_{10}$ -アルキルから選択される1つ、2つ、3つ、4つ、または5つの基で置換されているフェニル、例えば、2-ヒドロキシ-5-(1, 1, 3, 3-テトラメチルブチル)フェニル、4-(2, 2, 2-トリフルオロアセトキシ)フェニル、3, 5-ジイソプロピル-4-ヒドロキシフェニル、3-メトキシフェニル、4-(テトラヒドロフラン-2-イルメトキシ)フェニル、4-ヒドロキシフェニル、4-ヒドロキシ-2-メチル-5-tert-ブチルフェニル、4-ヒドロキシ-2-メチルフェニル、4-ヒドロキシ-3-メチルフェニル、4-ヒドロキシフェニル、4-イソプロポキシフェニルなど；

－フェニル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル、例えば、ベンジルなど；

－フェニル部分が $C_1 \sim C_4$ -アルキルから選択される1つ、2つ、3つ、4つ、または5つの基で置換されているフェニル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル、例えば、4-メチルベンジルなど

である。

【0114】

本発明のさらなる好ましい実施形態は、 R^2 および R^3 が同一である、組成物、化合物、方法、及び使用に関する。本発明のさらなる好ましい実施形態は、 R^2 が R^3 とは異なる、組成物、化合物、方法、および使用に関する。

【0115】

本発明のさらなる好ましい実施形態は、 R^1 および R^2 あるいは R^2 および R^3 あるいは R^1 および R^3 が、一緒に、直鎖状の $C_4 \sim C_5$ アルキレン鎖を形成している、したがって、それらが結合している硫黄原子と一緒に、1つのフェニル環に縮合していてもよい5または6員環の飽和複素環を形成している、組成物、化合物、方法、及び使用に関する。特に、 R^1 および R^2 は、それらが結合している硫黄原子と一緒に、テトラヒドロチオフェン-1-イルまたは1, 3-ジヒドロベンゾ[c]チオフェン-2-イル基を形成する。

【0116】

本発明のさらなる好ましい実施形態は、 R^4 が $C_3 \sim C_{12}$ -アルキルである、化合物に関する。本発明のさらなる好ましい実施形態は、 R^4 が $C_1 \sim C_{12}$ -アルキルである、組成物、方法、及び使用に関する。

【0117】

本発明のさらなる好ましい実施形態は、 R^4 が、 $-NR^{11}R^{12}$ 、 $-N=CR^{13}R^{14}$ 、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{4a} で置換されている $C_1\sim C_{12}$ -アルキル； $C_2\sim C_{12}$ -アルケニル；1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{4a} で置換されている $C_2\sim C_{12}$ -アルケニル； $C_3\sim C_{12}$ -シクロアルキル；1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{4b} で置換されている $C_3\sim C_{12}$ -シクロアルキル；ヘテロシクリル；1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{4b} で置換されているヘテロシクリル；フェニル；あるいは1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{4c} で置換されているフェニルであり、この場合、 R^{11} 、 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{4a} 、 R^{4b} 、および R^{4c} は、定義される通りであり、ならびに好ましくは、好ましい意味を有し、シクロアルキルおよびヘテロシクリルは、1つ以上のCO基で中断されていてもよく、さらに、ジェミナルに結合している2つの基 R^{4a} は一緒に、N-ヒドロキシミノ基を形成していてもよい、組成物、化合物、方法、及び使用に関する。

10

【0118】

この実施形態の特定の態様により、式Iaにおける R^4 は、 $NR^{11}R^{12}$ ； $N=CR^{13}R^{14}$ ； $C_2\sim C_{12}$ -アルケニル； $C_1\sim C_{12}$ -アルキル、 $C_2\sim C_{12}$ -アルケニル（この場合、最後に言及された2つの基は、F、Cl、Br、I、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、 $C_3\sim C_{20}$ -シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル、フェニル、およびナフチルから選択される1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{4a} で置換されており、最後に言及された2つの基の芳香族環は、F、Cl、Br、I、 $C_1\sim C_{12}$ -アルキル、 $C_1\sim C_{12}$ -ハロアルキル、 NO_2 、 SR^{19} 、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、および $CONR^{23}R^{24}$ から選択される1つ以上の同じかまたは異なる基で置換されていてもよく；シクロアルキルおよびヘテロシクロアルキルは、1つ以上のCO基で中断されていてもよく、さらにジェミナルに結合された2つの基 R^{4a} は、一緒に、N-ヒドロキシミノ基を形成していてもよい）；ならびに、1つ以上の $C_1\sim C_{12}$ -アルキル、F、Cl、Br、I、 NO_2 、または $COOR^{22}$ で置換されていてもよいフェニル、から選択され、この場合、 R^{11} 、 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{19} 、 R^{20} 、 R^{21} 、 R^{22} 、 R^{23} 、および R^{24} は、請求項1において定義される通りである。

20

【0119】

この実施形態の特定の態様により、 R^4 は、好ましくは、

- $NR^{11}R^{12}$ ；
- $-N=CR^{13}R^{14}$ ；
- $C_2\sim C_{12}$ -アルケニル；
- 1つ以上、例えば、1つ、2つ、3つ、4つ、5つ、または6つ以上のF、Cl、Br、I、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、ヘテロシクリル、フェニル、またはナフチル（この場合、最後に言及された2つの基の芳香族環は、1つ以上のF、Cl、Br、I、 $C_1\sim C_{12}$ -アルキル、 $C_1\sim C_{12}$ -ハロアルキル、 NO_2 、 SR^{19} 、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、または $CONR^{23}R^{24}$ で置換されていてもよい）で置換されている $C_1\sim C_{12}$ -アルキル；
- 1つ以上、例えば、1つ、2つ、3つ、4つ、5つ、または6つ以上のF、Cl、Br、I、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、ヘテロシクリル、フェニル、またはナフチル（最後に言及された2つの基の芳香族環は、1つ以上のF、Cl、Br、I、 $C_1\sim C_{12}$ -アルキル、 $C_1\sim C_{12}$ -ハロアルキル、 NO_2 、 SR^{19} 、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、または $CONR^{23}R^{24}$ で置換されていてもよい）で置換されている $C_2\sim C_{12}$ -アルケニル；
- フェニル；ならびに
- 1つ以上、例えば、1つ、2つ、3つ、4つ、または5つの $C_1\sim C_{12}$ -アルキル、F、Cl、Br、I、 NO_2 、または $COOR^{22}$ で置換されているフェニル；

から選択され、この場合、 R^{11} 、 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{19} 、 R^{20} 、 R^{21} 、 R^{22} 、 R^{23} 、および R^{24} は、上

30

40

50

記において定義される通りであり、好ましくは、好ましい意味のうちの1つを有する。

【0120】

この実施形態の特定の態様により、 R^4 は、 $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ- $C_1 \sim C_6$ -アルキル； $C_1 \sim C_4$ -アルキルスルファニル- $C_1 \sim C_6$ -アルキル； $C_1 \sim C_4$ -アルコキシカルボニル- $C_1 \sim C_6$ -アルキル； $C_1 \sim C_6$ -フルオロアルキル；（5または6員環ヘテロアリール）- $C_1 \sim C_6$ -アルキル；ナフチル- $C_1 \sim C_6$ -アルキル；フェニル- $C_1 \sim C_6$ -アルキル；フェノキシ- $C_1 \sim C_6$ -アルキル；（ $C_1 \sim C_4$ -アルキル）-フェニル- $C_1 \sim C_6$ -アルキル；ニトロフェニル- $C_1 \sim C_6$ -アルキル；ヒドロキシ、N-ヒドロキシイミノ、およびベンゾイルから選択される1つ、2つ、3つ、または4つの基で置換されている $C_1 \sim C_6$ -アルキル； $C_3 \sim C_{12}$ -シクロアルキル； $C_1 \sim C_4$ -アルキルから選択される1つ、2つ、3つ、4つ、または5つの基で置換されている $C_3 \sim C_{12}$ -シクロアルキル、とりわけ、1つまたは2つの $C_1 \sim C_6$ -アルキル基で置換されている $C_3 \sim C_8$ -シクロアルキル；フェニル- $C_3 \sim C_6$ -アルケニル；ならびに、フェニル部分が $C_1 \sim C_4$ -アルキルから選択される1つ、2つ、3つ、4つ、または5つの基で置換されているフェニル- $C_3 \sim C_6$ -アルケニル、から選択される。

10

【0121】

この実施形態の特定の態様により、 R^4 は、式 $NR^{11}R^{12}$ である基であり、この場合、 R^{11} および R^{12} は、互いに独立して、水素、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、 $C_3 \sim C_{12}$ -シクロアルキル、ヘテロシクリル、ベンゾイル、およびフェニルから選択され、この場合、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキルは、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{11a} で置換されていてもよく、ならびに／あるいは、OおよびSから選択される1つ以上の非隣接ヘテロ原子で中断されていてもよく、 $C_3 \sim C_{12}$ -シクロアルキルおよびヘテロシクリルは、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{11b} で置換されていてもよく、ならびに、フェニルは、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{11c} で置換されていてもよく、 R^{11a} 、 R^{11b} 、 R^{11c} は、上記において定義される通りである。この実施形態のさらに特定の態様により、 R^{11} はフェニルであり、 R^{12} はベンゾイルである。

20

【0122】

この実施形態のさらなる特定の態様により、 R^4 は、式 $NR^{11}R^{12}$ の基であり、この場合、 R^{11} および R^{12} は、一緒に、直鎖状 $C_4 \sim C_5$ -アルキレン鎖または直鎖状 $C_4 \sim C_5$ -アルケニレン鎖を形成し、この場合、アルキレンおよびアルケニレンは、1つ以上の基 R^{11f} で置換されていてもよく、ならびに／あるいは、-O-および-S-から選択される1つ以上の非隣接ヘテロ原子で中断されていてもよく、ならびに／さらに、アルキレンまたはアルケニレンの1つ以上の CH_2 基は、C=O基で置き換えられていてもよく、あるいは、 R^{11} および R^{12} が、一緒に、o-フェニレンジカルボニル基または1,8-ナフタレンジカルボニル基を形成していてもよく、この場合、最後に言及された2つの基は、1つ以上の基 R^{11f} で置換されていてもよく、ここで、 R^{11f} は、上記において定義される通りである。

30

【0123】

この実施形態のさらなる特定の態様により、 R^4 は、式 $-N=CR^{13}R^{14}$ の基であり、この場合、 R^{13} および R^{14} は、互いに独立して、水素、CN、 NO_2 、 SR^{19} 、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、 $CONR^{23}R^{24}$ 、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、 $C_2 \sim C_{12}$ -アルケニル、 $C_2 \sim C_{12}$ -アルキニル、 $C_3 \sim C_{12}$ -シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル、およびフェニルから選択され、この場合、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、 $C_2 \sim C_{12}$ -アルケニル、および $C_2 \sim C_{12}$ -アルキニルは、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{13a} で置換されていてもよく、ここで、 R^{13a} は、上記において定義される通りであり、 $C_3 \sim C_{12}$ -シクロアルキルおよびヘテロシクロアルキルは、1つ以上の基 R^{13b} で置換さ

40

50

れていてもよく、ここで、 R^{13b} は、上記において定義される通りであり、フェニルは、1つ以上の基 R^{13c} で置換されていてもよく、ここで、 R^{13c} は上記において定義される通りであり、

あるいは、

R^{13} および R^{14} は、一緒に、直鎖状 $C_2 \sim C_6$ -アルキレン鎖または直鎖状 $C_2 \sim C_6$ -アルケニレン鎖を形成していてもよく、この場合、アルキレンおよびアルケニレンは、1つ以上の基 R^{32} で置換されていてもよく、ならびに／あるいは、-O-から選択される1つ以上の非隣接ヘテロ原子で中断されていてもよく、さらに、アルキレンまたはアルケニレンの1つ以上の CH_2 基は、 $C=O$ 基で置き換えられていてもよく、この場合、 R^{19} 、 R^{20} 、 R^{21} 、 R^{22} 、 R^{23} 、 R^{24} 、および R^{32} は、上記において定義される通りであり、ならびに好ましくは、好ましい意味のうちの1つを有する。

10

【0124】

より好ましくは、 R^{13} および R^{14} は、互いに独立して、

- $C_1 \sim C_8$ -アルキル、例えば、メチル、エチル、*n*-プロピル、イソプロピル、*n*-ブチル、*n*-ペンチル、または*n*-ヘキシルなど；
- $C_1 \sim C_4$ -アルコキシカルボニル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル、例えば、メトキシカルボニルメチルまたはエトキシカルボニルカルボニルメチルなど；
- フェニル；
- フェニルスルファニル；
- $C_1 \sim C_4$ -アルコキシカルボニル、例えば、メトキシカルボニルまたはエトキシカルボニルなど；
- ベンゾイル；
- ベンジルオキシカルボニル；
- フェニルスルファニルで置換されているベンゾイル、例えば、4-(フェニルスルファニル)-ベンゾイルなど；
- フェニルスルファニルまたは $C_1 \sim C_4$ -アルキルスルファニルで置換されているフェニル、例えば、4-メチルチオフェニルなど；

20

から選択されるか、あるいは

R^{13} および R^{14} は、それらが結合している炭素原子と一緒に、 $C_5 \sim C_8$ -シクロアルキル環、例えば、シクロヘキシル環など、を形成している。

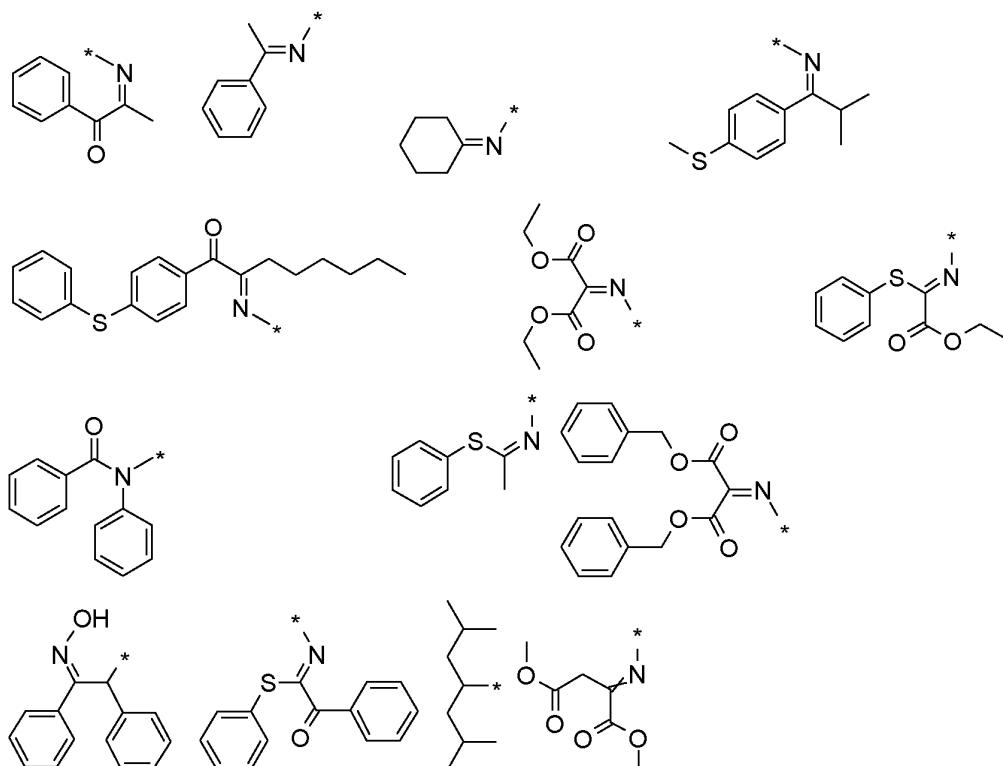
30

【0125】

R^4 の例は、ベンジル、4-ニトロベンジル、ナフタレン-1-イルメチル、1, 1-ジフェニルメチル、チオフェン-2-イルメチル、1-フェニルエチル、2-オキソ-1, 2-ジフェニルエチル、2-ヒドロキシ-1, 2-ジフェニルエチル、1, 1-ジメチル-2-オキソ-2-フェニル-エチル、2-ヒドロキシイミノ-1, 2-ジフェニルエチル、1-メトキシカルボニル-1-メチル-エチル、2, 2, 2-トリフルオロエチル、2-メトキシエチル、2-メトキシ-1-メチル-エチル、2-フェノキシエチル、3-フェニルアリル、4-tert-ブチルフェニル、4-イソプロピルフェニル、シクロヘキシル、シクロドデシル、2-イソプロピル-5-メチル-シクロヘキシル、4-tert-ブチルシクロヘキシル、(R)-4-tert-ブチルシクロヘキシル、(S)-4-tert-ブチルシクロヘキシル、2, 2, 3, 3-テトラフルオロプロピル、

40

【化 1 3】



10

20

[式中、*は、サルフェート基の酸素原子への結合位置を表す]である。

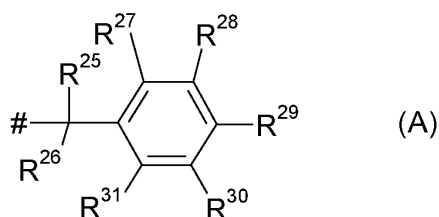
【0 1 2 6】

式 I a の化合物の意図される使用に関して、置換基 R^1 、 R^2 、 R^3 、および R^4 は、互いに独立して、および好ましくは組み合わせにおいて、以下の意味を有する：

R^1 は、

— 式 A の基、好ましくは基 A：

【化 1 4】



30

[式中、

R^{25} および R^{26} は、それぞれ互いに独立して、水素、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、およびフェニルから選択され；ならびに

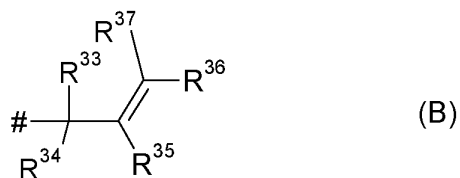
R^{27} 、 R^{28} 、 R^{29} 、 R^{30} 、および R^{31} は、それぞれ互いに独立して、水素、F、Cl、Br、I、 NO_2 、 OR^{20} 、 $COOR^{22}$ 、 $CONR^{23}R^{24}$ 、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、 $C_2 \sim C_{12}$ -アルケニル、およびフェニルから選択されるか、あるいは、

隣接炭素原子に結合している 2 つの基 R^{27} および R^{28} ならびに／あるいは R^{28} および R^{29} ならびに／あるいは R^{29} および R^{30} ならびに／あるいは R^{30} および R^{31} は、一緒に、 $-CH_2CH_2CH_2-$ 、 $-CH_2CH_2CH_2CH_2-$ 、および $-CH=CH-CH=CH-$ から選択される基であってもよく、すなわち、それらが結合している炭素原子と一緒に、5 または 6 員環を形成していてもよい]；

— 式 B の基、好ましくは基 B：

40

【化 1 5】



[式中、

R^{33} および R^{34} は、それぞれ互いに独立して、水素、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、およびフェニルから選択され；ならびに

R^{35} 、 R^{36} 、および R^{37} は、互いに独立して、水素、F、Cl、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、 $C_2 \sim C_{12}$ -アルケニル、およびフェニルから選択される]；

— F、Cl、Br、I、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、および $CONR^{23}R^{24}$ から選択される 1 つ以上の基で置換されている $C_3 \sim C_{12}$ -シクロアルキル、好ましくは $C_3 \sim C_8$ -シクロアルキル；

— F、Cl、Br、I、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、 $CONR^{23}R^{24}$ 、 $C_3 \sim C_{12}$ -シクロアルキル、およびヘテロシクリルから選択される 1 つ以上の基で置換されている $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、好ましくは $C_1 \sim C_6$ -アルキル、 $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ- $(CO)-C_1 \sim C_4$ -アルキル；(5 または 6 員環飽和ヘテロシクロアルキル)- $C_1 \sim C_4$ -アルキル、またはフェノキシ- $C_1 \sim C_4$ -アルキル；

から選択され、

R^2 および R^3 は、互いに独立して、

— 非置換であるか、あるいは F、Cl、Br、I、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、 $CONR^{23}R^{24}$ 、ヘテロシクロアルキル、 $C_3 \sim C_8$ -シクロアルキル、フェニル、およびナフチル（この場合、最後に言及された 2 つの基は、非置換であるか、あるいは、F、Cl、Br、I、 NO_2 、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、 OR^{20} 、 $COOR^{22}$ 、および $CONR^{23}R^{24}$ から選択される 1 つ、2 つ、3 つ、4 つ、または 5 つの基で置換されている）から選択される 1 つ以上の基で置換されている、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル；

— 非置換であるか、あるいは、F、Cl、Br、I、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、 $CONR^{23}R^{24}$ 、ヘテロシクリル、 $C_3 \sim C_8$ -シクロアルキル、フェニル、およびナフチル（この場合、最後に言及された 2 つの基は、非置換であるか、あるいは、F、Cl、Br、I、 NO_2 、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、 OR^{20} 、 $COOR^{22}$ 、および $CONR^{23}R^{24}$ から選択される 1 つ、2 つ、3 つ、4 つ、または 5 つの基で置換されている）から選択される 1 つ以上の基で置換されている、 $C_3 \sim C_{12}$ -シクロアルキル；ならびに

— 非置換であるか、あるいは、F、Cl、Br、I、 $C_1 \sim C_{10}$ -アルキル、 SR^{19} 、および OR^{20} から選択される 1 つ、2 つ、3 つ、4 つ、5 つの基で置換されている、フェニル；

から選択されるか、

あるいは、式 Ia における R^1 および R^2 あるいは R^2 および R^3 あるいは R^1 および R^3 は、それらが結合している硫黄原子と一緒に、5 または 6 員環の飽和複素環を形成し、これは、1 つのフェニル環に縮合していてもよく、

R^4 は、

— $NR^{11}R^{12}$ ；

— $-N=CR^{13}R^{14}$ （この場合、 R^{13} および R^{14} は、互いに独立して、 $C_1 \sim C_8$ -アルキル、フェニル、フェニルスルファニル、 $C_1 \sim C_4$ -アルコキシカルボニル、 $C_1 \sim C_4$ -アルコキシカルボニル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル、ベンジルオキシカルボニル、ベンゾイル、 $C_1 \sim C_4$ -アルキルスルファニルフェニル、フェニルスルファニル-ベンゾイルから選択されるか、あるいは、 R^{13} および R^{14} は、それらが結合している炭素原子と一緒に、 $C_5 \sim C_8$ -シクロアルキル環を形成する）；

— $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、 $C_2 \sim C_{12}$ -アルケニル（この場合、最後に言及された 2 つ

10

20

30

40

50

の基は、F、Cl、Br、I、OR²⁰、COR²¹、COOR²²、C₃～C₂₀-シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル、フェニル、およびナフチルから選択される1つ以上の同じかまたは異なる基R^{4a}で置換されていてもよく、最後に言及された2つの基の芳香族環は、F、Cl、Br、I、C₁～C₁₂-アルキル、C₁～C₁₂-ハロアルキル、NO₂、SR¹⁹、OR²⁰、COR²¹、COOR²²、およびCONR²³R²⁴から選択される1つ以上の同じかまたは異なる基で置換されていてもよく、ならびに、シクロアルキルおよびヘテロシクロアルキルは、1つ以上のCO基で中断されていてもよく、さらに、ジェミナルに結合している2つの基R^{4a}は、一緒に、N-ヒドロキシイミノ基を形成していてもよい)；

— 1つ以上のC₁～C₁₂-アルキル、F、Cl、Br、I、NO₂、またはCOOR²²で置換されていてもよいフェニル；

10

であり、

この場合、R¹¹、R¹²、R¹⁹、R²⁰、R²²、R²³、およびR²⁴は、上記において定義される通りであり、

ただし、R²およびR³が、C₁～C₁₂-アルキル（これは、非置換であるか、あるいは、F、Cl、Br、I、OR²⁰、COR²¹、COOR²²、CONR²³R²⁴、ヘテロシクロアルキル、C₃～C₈-シクロアルキル、フェニル、およびナフチル（ここで、最後に言及された2つの基は、非置換であるか、あるいは、F、Cl、Br、I、NO₂、C₁～C₁₂-アルキル、OR²⁰、COOR²²、およびCONR²³R²⁴から選択される1つ、2つ、3つ、4つ、または5つの基で置換されている）から選択される1つ以上の基で置換されている）；およびC₃～C₁₂-シクロアルキル（これは、非置換であるか、あるいは、F、Cl、Br、I、OR²⁰、COR²¹、COOR²²、CONR²³R²⁴、ヘテロシクロアルキル、C₃～C₈-シクロアルキル、フェニル、およびナフチル（ここで、最後に言及された2つの基は、非置換であるか、あるいは、F、Cl、Br、I、NO₂、C₁～C₁₂-アルキル、OR²⁰、COOR²²、およびCONR²³R²⁴から選択される1つ、2つ、3つ、4つ、または5つの基で置換されている）から選択される1つ以上の基で置換されている）；からなる群より選択される場合、R¹は、基Aまたは基Bである。

20

【0127】

この実施形態の特定の態様により、

R¹は、上記において定義される通りの式Aの基；上記において定義される通りの式Bの基；C₃～C₈-シクロアルキル；C₁～C₆-アルキル；C₁～C₄-アルコキシ-（CO）-C₁～C₄-アルキル；（5または6員環飽和ヘテロシクロアルキル）-C₁～C₄-アルキル；またはフェノキシ-C₁～C₄-アルキル；であり、

30

R²は、C₁～C₈-アルキル；C₁～C₄-アルコキシ-C₁～C₄-アルキル；C₁～C₄-アルコキシ-C₁～C₄-アルコキシ-C（=O）-C₁～C₆-アルキル；（5または6員環ヘテロシクロアルキル）-C₁～C₄-アルキル；ナフタレン-C₁～C₄-アルキル、フェニル-C₁～C₄-アルキル；フェニル-C₁～C₄-アルキル（ここで、フェニル部分は、ニトロ、塩素、ヒドロキシ、C₁～C₁₀-アルキル、C₁～C₄-アルコキシ、C₁～C₄-アルコシカルボニル、C₁～C₄-アルコキシ-C₁～C₄-アルコシカルボニル、ヒドロキシ-C₁～C₄-アルコシカルボニル、ベンジルオキシカルボニル、およびC（=O）N（C₁～C₈-アルキル）₂から選択される1つ、2つ、3つ、4つ、または5つの基で置換されている）；ベンゾイル-C₁～C₄-アルキル；フェノキシ-C₁～C₄-アルキル；ベンジルオキシカルボニル-C₁～C₄-アルキル；フェニル；OHおよびC₁～C₁₀-アルキルから選択される1つ、2つ、3つ、4つ、または5つの基で置換されているフェニル；であり、

40

R³は、C₁～C₈-アルキル；C₁～C₄-アルコキシ-C₁～C₆-アルキル；ベンジルオキシカルボニル-C₁～C₄-アルキル；フェニル；OH、C₁～C₄-フルオロアルカノイルオキシ、（5または6員環ヘテロシクロアルキル）-C₁～C₄-アルコキシ、C₁～C₆-アルコキシ、およびC₁～C₁₀-アルキルから選択される1つ、2つ、3つ、4つ、または5つの基で置換されているフェニル；フェニル-C₁～C₄-アルキル；フェニル部分がC₁～C₄-アルキルから選択される1つ、2つ、3つ、4つ、または5つの基で置換さ

50

れているフェニル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル、例えば、4-メチルベンジルなど；であり、 R^4 は、 $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ- $C_1 \sim C_6$ -アルキル； $C_1 \sim C_4$ -アルキルスルファニル- $C_1 \sim C_6$ -アルキル； $C_1 \sim C_4$ -アルコキシカルボニル- $C_1 \sim C_6$ -アルキル； $C_1 \sim C_6$ -フルオロアルキル；（5または6員環ヘテロアリール）- $C_1 \sim C_6$ -アルキル；ナフチル- $C_1 \sim C_6$ -アルキル；フェノキシ- $C_1 \sim C_6$ -アルキル；フェニル- $C_1 \sim C_6$ -アルキル；（ $C_1 \sim C_4$ -アルキル）-フェニル- $C_1 \sim C_6$ -アルキル；ニトロ-フェニル- $C_1 \sim C_6$ -アルキル；OH、N-ヒドロキシイミノ、ベンゾイル、フェニル、およびフェノキシから選択される1つ、2つ、3つ、または4つの基で置換されていてもよい $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル；

フェニル- $C_3 \sim C_6$ -アルケニル、 $C_3 \sim C_{12}$ -シクロアルキル（この場合、最後に言及された2つの基の環状部分は、 $C_1 \sim C_4$ -アルキルから選択される1つ、2つ、3つ、4つ、または5つの基で置換されていてもよい）；

$NR^{11}R^{12}$ （この場合、 R^{11} および R^{12} は、上記において定義される通りである）；
-N=C $R^{13}R^{14}$ （この場合、 R^{13} および R^{14} は、上記において定義される通りである）；
；であり、

ただし、

- R^2 が、 $C_1 \sim C_8$ -アルキル； $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ- $C_1 \sim C_4$ -アルキル； $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ- $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ-C(=O)- $C_1 \sim C_6$ -アルキル；（5または6員環ヘテロシクロアルキル）- $C_1 \sim C_4$ -アルキル；ナフタレン- $C_1 \sim C_4$ -アルキル、フェニル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル；フェニル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル；フェニル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル（この場合、当該フェニル部分は、ニトロ、塩素、ヒドロキシ、 $C_1 \sim C_{10}$ -アルキル、 $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ、 $C_1 \sim C_4$ -アルコキシカルボニル、 $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ- $C_1 \sim C_4$ -アルコキシカルボニル、ヒドロキシ- $C_1 \sim C_4$ -アルコキシカルボニル、ベンジルオキシカルボニル、およびC(=O)N($C_1 \sim C_8$ -アルキル)₂から選択される1つ、2つ、3つ、4つ、または5つの基で置換されている）；ベンゾイル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル；フェノキシ- $C_1 \sim C_4$ -アルキル；ベンジルオキシカルボニル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル；から選択され、

ならびに、

- R^3 が、 $C_1 \sim C_8$ -アルキル； $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ- $C_1 \sim C_6$ -アルキル；ベンジルオキシカルボニル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル；フェニル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル；フェニル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル（この場合、当該フェニル部分は、 $C_1 \sim C_4$ -アルキルから選択される1つ、2つ、3つ、4つ、または5つの基で置換されており、例えば、4-メチルベンジルなど）；

から選択される場合、 R^1 は、基Aまたは基Bである。

【0128】

この実施形態のさらに特定の態様により、

R^1 は、ナフチルメチル；ベンジル；ニトロ、フッ素、塩素、 $C_1 \sim C_4$ -アルキル、 $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ、 $C_1 \sim C_4$ -アルコキシカルボニル、C(O)O- ($C_1 \sim C_4$ -アルキル-OH)、およびC(O)N($C_1 \sim C_4$ -アルキル)₂から選択される1つまたは2つの基で置換されているベンジル； $C_3 \sim C_8$ -シクロアルキル； $C_1 \sim C_6$ -アルキル； $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ-C(O)- $C_1 \sim C_4$ -アルキル；（5または6員環飽和ヘテロシクロアルキル）- $C_1 \sim C_4$ -アルキル；フェノキシ- $C_1 \sim C_4$ -アルキル；プロパー-2-エン-1-イル、3フェニル-プロパー-2-エン-1-イル、2-($C_1 \sim C_4$ -アルキル)-プロパー-2-エン-1-イル；または3-($C_1 \sim C_4$ -アルキル)-プロパー-2-エン-1-イル；であり、

R^2 は、 $C_1 \sim C_8$ -アルキル； $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ- $C_1 \sim C_4$ -アルキル； $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ- $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ-C(=O)- $C_1 \sim C_6$ -アルキル；（5または6員環ヘテロシクロアルキル）- $C_1 \sim C_4$ -アルキル；ナフタレン- $C_1 \sim C_4$ -アルキル、フェニル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル；フェニル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル；フェニル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル（この場合、当該フェニル部分は、ニトロ、塩素、ヒドロキシ、 $C_1 \sim C_{10}$ -アル

10

20

30

40

50

キル、 $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ、 $C_1 \sim C_4$ -アルコキシカルボニル、 $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ- $C_1 \sim C_4$ -アルコキシカルボニル、ヒドロキシ- $C_1 \sim C_4$ -アルコキシカルボニル、ベンジルオキシカルボニル、および $C(=O)N(C_1 \sim C_8\text{-アルキル})_2$ から選択される 1 つ、2 つ、3 つ、4 つ、または 5 つの基で置換されている)；ベンゾイル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル；フェノキシ- $C_1 \sim C_4$ -アルキル；ベンジルオキシカルボニル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル；フェニル；OH および $C_1 \sim C_{10}$ -アルキルから選択される 1 つ、2 つ、3 つ、4 つ、または 5 つの基で置換されているフェニル；であり、

R^3 は、 $C_1 \sim C_8$ -アルキル； $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ- $C_1 \sim C_6$ -アルキル；ベンジルオキシカルボニル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル；フェニル；OH、 $C_1 \sim C_4$ -フルオロアルカノイルオキシ、(5 または 6 員環ヘテロシクロアルキル)- $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ、 $C_1 \sim C_6$ -アルコキシ、および $C_1 \sim C_{10}$ -アルキルから選択される 1、2、3、4、または 5 基で置換されているフェニル、例えば、2-ヒドロキシ-5-(1, 1, 3, 3-テトラメチルブチル)-フェニル、4-(2, 2, 2-トリフルオロアセトキシ)フェニル、3, 5-ジイソプロピル-4-ヒドロキシフェニル、3-メトキシフェニル、4-(テトラヒドロフラン-2-イルメトキシ)フェニル、4-ヒドロキシフェニル、4-ヒドロキシ-2-メチル-5-tert-ブチル-フェニル、4-ヒドロキシ-2-メチル-フェニル、4-ヒドロキシ-3-メチル-フェニル、4-ヒドロキシフェニル、および 4-イソプロポキシフェニルなど；フェニル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル；フェニル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル(この場合、当該フェニル部分は、 $C_1 \sim C_4$ -アルキルから選択される 1 つ、2 つ、3 つ、4 つ、または 5 つの基で置換されている)、例えば、4-メチルベンジルなど；であり、

R^4 は、 $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ- $C_1 \sim C_6$ -アルキル； $C_1 \sim C_4$ -アルキルスルファニル- $C_1 \sim C_6$ -アルキル； $C_1 \sim C_4$ -アルコキシカルボニル- $C_1 \sim C_6$ -アルキル； $C_1 \sim C_6$ -フルオロアルキル；(5 または 6 員環ヘテロアリール)- $C_1 \sim C_6$ -アルキル；ナフチル- $C_1 \sim C_6$ -アルキル；フェノキシ- $C_1 \sim C_6$ -アルキル；フェニル- $C_1 \sim C_6$ -アルキル；($C_1 \sim C_4$ -アルキル)-フェニル- $C_1 \sim C_6$ -アルキル；ニトロ-フェニル- $C_1 \sim C_6$ -アルキル；OH、N-ヒドロキシイミノ、ベンゾイル、フェニル、およびフェノキシから選択される 1 つ、2 つ、3 つ、または 4 つの基で置換されていてもよい $C_1 \sim C_6$ -アルキル；フェニル- $C_3 \sim C_6$ -アルケニル、 $C_3 \sim C_{12}$ -シクロアルキル(この場合、最後に言及された 2 つの基における環状部分は、 $C_1 \sim C_4$ -アルキルから選択される 1 つ、2 つ、3 つ、4 つ、または 5 つの基で置換されていてもよい)；

$NR^{11}R^{12}$ (この場合、 R^{11} および R^{12} は、上記において定義された通りである)； $-N=CR^{13}R^{14}$ (この場合、 R^{13} および R^{14} は、互いに独立して、 $C_1 \sim C_8$ -アルキル、フェニル、フェニルスルファニル、 $C_1 \sim C_4$ -アルコキシカルボニル、 $C_1 \sim C_4$ -アルコキシカルボニル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル、ベンジルオキシカルボニル、ベンゾイル、 $C_1 \sim C_4$ -アルキルスルファニルフェニル、フェニルスルファニル-ベンゾイルから選択されるか、あるいは R^{13} および R^{14} は、それらが結合している炭素原子と一緒に、 $C_5 \sim C_8$ -シクロアルキル環を形成している)、である。

【0129】

この実施形態のさらなる特定の態様により、

R^1 は、式 A の基または式 B の基であり、この場合、式 A の基および式 B の基は、上記において定義される通りであり、好ましくは、好ましい意味のうちの 1 つを有し；

R^2 は、 $C_1 \sim C_8$ -アルキル； $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ- $C_1 \sim C_4$ -アルキル； $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ- $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ- $C(=O)$ - $C_1 \sim C_6$ -アルキル；(5 または 6 員環ヘテロシクロアルキル)- $C_1 \sim C_4$ -アルキル；ナフタレン- $C_1 \sim C_4$ -アルキル、フェニル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル；フェニル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル(この場合、当該フェニル部分は、ニトロ、塩素、ヒドロキシ、 $C_1 \sim C_{10}$ -アルキル、 $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ、 $C_1 \sim C_4$ -アルコキシカルボニル、 $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ- $C_1 \sim C_4$ -アルコキシカルボニル、ヒドロキシ- $C_1 \sim C_4$ -アルコキシカルボニル、ベンジルオキシカルボニル、および $C(=O)N(C_1 \sim C_8\text{-アルキル})_2$ から選択される 1 つ、2 つ、3 つ、4 つ、または

5つの基で置換されている) ; ベンゾイル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル ; フェノキシ- $C_1 \sim C_4$ -アルキル ; ベンジルオキシカルボニル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル ; フェニル ; OHおよび $C_1 \sim C_{10}$ -アルキルから選択される1つ、2つ、3つ、4つ、または5つの基で置換されているフェニル ; であり、

R^3 は、 $C_1 \sim C_8$ -アルキル ; $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ- $C_1 \sim C_6$ -アルキル ; ベンジルオキシカルボニル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル ; フェニル ; OH、 $C_1 \sim C_4$ -フルオロアルカノイルオキシ、(5または6員環ヘテロシクロアルキル)- $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ、 $C_1 \sim C_6$ -アルコキシ、および $C_1 \sim C_{10}$ -アルキルから選択される1つ、2つ、3つ、4つ、または5つの基で置換されているフェニル ; フェニル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル ; フェニル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル (この場合、当該フェニル部分は、 $C_1 \sim C_4$ -アルキルから選択される1つ、2つ、3つ、4つ、または5つの基で置換されている)、例えば、4-メチルベンジルなど ; であり、

R^4 は、 $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ- $C_1 \sim C_6$ -アルキル ; $C_1 \sim C_4$ -アルキルスルファニル- $C_1 \sim C_6$ -アルキル ; $C_1 \sim C_4$ -アルコキシカルボニル- $C_1 \sim C_6$ -アルキル ; $C_1 \sim C_6$ -フルオロアルキル ; (5または6員環ヘテロアリール)- $C_1 \sim C_6$ -アルキル ; ナフチル- $C_1 \sim C_6$ -アルキル ; フェノキシ- $C_1 \sim C_6$ -アルキル ; フェニル- $C_1 \sim C_6$ -アルキル ; ($C_1 \sim C_4$ -アルキル)-フェニル- $C_1 \sim C_6$ -アルキル ; ニトロフェニル- $C_1 \sim C_6$ -アルキル ; OH、N-ヒドロキシイミノ、ベンゾイル、フェニル、およびフェノキシから選択される1つ、2つ、3つ、または4つの基で置換されていてもよい $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル ;

フェニル- $C_3 \sim C_6$ -アルケニル、 $C_3 \sim C_{12}$ -シクロアルキル (この場合、最後に言及された2つの基の環状部分は、 $C_1 \sim C_4$ -アルキルから選択される1つ、2つ、3つ、4つ、または5つの基で置換されていてもよい) ;

$NR^{11}R^{12}$ (この場合、 R^{11} および R^{12} は、上記において定義される通りであり、好ましくは、好ましい意味のうちの1つを有している) ; または
 $-N=CR^{13}R^{14}$ (この場合、 R^{13} および R^{14} は、上記において定義される通りであり、好ましくは、好ましい意味のうちの1つを有する) ; である。

【0130】

この実施形態のさらにより特定の態様により、

R^1 は、ベンジル、 $C_1 \sim C_4$ -アルキル、 $C_5 \sim C_8$ -シクロアルキル、3-メチルブター2-エニル、またはテトラヒドロフラン-2-イルメチルであり ;

R^2 は、ベンジルであり ;

R^3 は、ベンジルであり ;

R^4 は、ベンジルである。

【0131】

この実施形態のさらなるより特定の態様により、

R^1 は、ベンジル、 $C_1 \sim C_4$ -アルキル、 $C_5 \sim C_8$ -シクロアルキル、3-メチルブター2-エニル、またはテトラヒドロフラン-2-イルメチルであり ;

R^2 は、ベンジルであり ;

R^3 は、ベンジルであり ;

R^4 は、1-フェニルエチルである。

【0132】

この実施形態のさらなるより特定の態様により、

R^1 は、ベンジル、 $C_1 \sim C_4$ -アルキル、 $C_3 \sim C_8$ -シクロアルキル、3-メチルブター2-エニル、またはテトラヒドロフラン-2-イルメチルであり ;

R^2 は、ベンジルであり ;

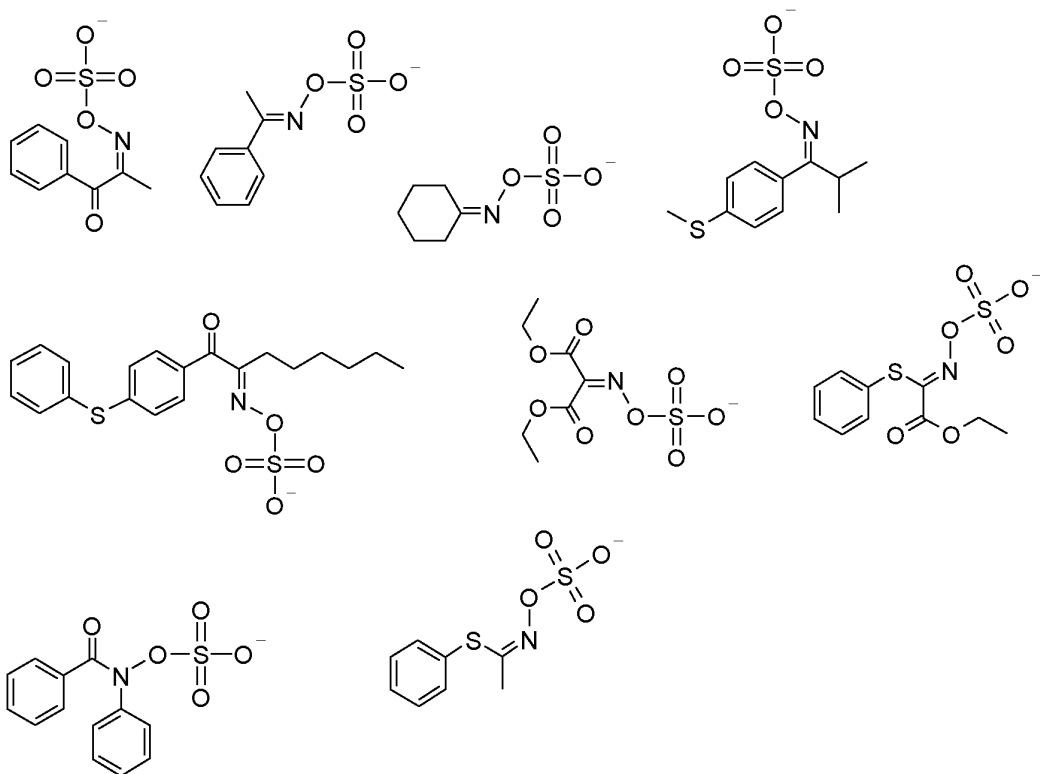
R^3 は、ベンジルであり ;

R^4 は、2-オキソ-2-フェニルエチルである。

【0133】

この実施形態のさらなるより特定の態様により、

R¹は、ベンジルであり；
 R²は、C₁～C₄-アルキルであり；
 R³は、C₁～C₄-アルキルであり；
 R⁴は、ベンジル、
 【化16】



10

20

である。

【0134】

本発明のさらなる好ましい実施形態は、式Ibの化合物において、R⁵、R⁶、R⁷、およびR⁸が、同じかまたは異なり得る、組成物、化合物、方法、および使用に関する。好ましくは、R⁵およびR⁷は同一であり、ならびにR⁶およびR⁸は同一である。

30

【0135】

本発明のさらなる好ましい実施形態は、R⁵、R⁶、R⁷、およびR⁸が、互いに独立して、C₁～C₁₂-アルキル；1つ以上の同じかまたは異なる基R^{5a}で置換されているC₁～C₁₂-アルキル（この場合、R^{5a}は、上記において定義される通りである）；C₃～C₁₂-シクロアルキル；1つ以上の同じかまたは異なる基R^{5b}で置換されているC₃～C₁₂-シクロアルキル（この場合、R^{5b}は、上記において定義される通りである）；フェニル；1つ、2つ、3つ、4つ、または5つの基R^{5c}で置換されているフェニル（この場合、R^{5c}は、上記において定義される通りである）、から選択される、組成物、化合物、方法、および使用に関する。

40

【0136】

この実施形態の好ましい態様により、式IbにおけるR⁵、R⁶、R⁷、およびR⁸は、互いに独立して、非置換であるか、あるいは、F、Cl、Br、I、OR²⁰、COR²¹、COOR²²、CONR²³R²⁴、ヘテロシクリル、C₃～C₈-シクロアルキル、フェニル、およびナフチル（この場合、最後に言及された2つの基は、非置換であるか、あるいは、F、Cl、Br、I、NO₂、C₁～C₁₂-アルキル、OR²⁰、COOR²²、およびCONR²³R²⁴から選択される1つ、2つ、3つ、4つ、または5つの同じまたは異なる基で置換されている）から選択される1つ以上の基で置換されている、C₁～C₁₂-アルキル、非置換であるか、あるいは、F、Cl、Br、I、OR²⁰、COR²¹、COOR²²、CO

50

$\text{NR}^{23}\text{R}^{24}$ 、ヘテロシクリル、 $\text{C}_3\sim\text{C}_8$ -シクロアルキル、フェニル、およびナフチル（ここで、最後に言及された2つの基は、非置換であるか、あるいは、F、Cl、Br、I、 NO_2 、 $\text{C}_1\sim\text{C}_{12}$ -アルキル、 OR^{20} 、 COOR^{22} 、および $\text{CONR}^{23}\text{R}^{24}$ から選択される1つ、2つ、3つ、4つ、または5つの基で置換されている）から選択される1つ以上の基で置換されている、 $\text{C}_3\sim\text{C}_{12}$ -シクロアルキル、ならびに

非置換であるか、あるいは、F、Cl、Br、I、 $\text{C}_1\sim\text{C}_{10}$ -アルキル、 SR^{19} 、および OR^{20} から選択される1つ、2つ、3つ、4つ、または5つの基で置換されている、フェニル、

から選択され、

この場合、 R^{19} 、 R^{20} 、 R^{22} 、 R^{23} 、および R^{24} は、上記において定義される通りである。

10

【0137】

この実施形態のさらにより好ましい態様により、 R^5 および／または R^6 および／または R^7 、および／または R^8 は、 $\text{C}_1\sim\text{C}_{12}$ -アルキル（これは、非置換であるか、あるいは、部分的にもしくは完全にハロゲン化され、および／または、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 COOR^{22} 、 $\text{CONR}^{23}\text{R}^{24}$ 、ヘテロシクリル、 $\text{C}_3\sim\text{C}_8$ -シクロアルキル、フェニル、およびナフチル（最後に言及された2つの基は、非置換であるか、あるいは、 $\text{C}_1\sim\text{C}_{12}$ -アルキル、F、Cl、Br、I、 NO_2 、 OR^{20} 、 COOR^{22} 、および $\text{CONR}^{23}\text{R}^{24}$ から選択される1つ、2つ、3つ、4つ、または5つの同じかまたは異なる基で置換されている）から選択される1つ、2つ、または3つの同じかまたは異なる基 R^{5a} を有する）である。 R^{20} 、 R^{22} 、 R^{23} 、および R^{24} は、上記において定義される通りであり、ならびに、好ましくは、好ましい意味のうちの1つを有する。その例は、 $\text{C}_1\sim\text{C}_6$ -アルキル、例えば、メチル、エチル、*n*-プロピル、イソプロピル、*n*-ブチル、*sec*-ブチル、*tert*-ブチル、*n*-ペンチル、またはヘキシル、特に、メチル、エチル、*n*-プロピル、または*n*-ブチルなど、である。

20

【0138】

この実施形態のさらなるより好ましい態様により、 R^5 および／または R^6 および／または R^7 、および／または R^8 は、 $\text{C}_1\sim\text{C}_6$ -フルオロアルキル； $\text{C}_1\sim\text{C}_6$ -クロロアルキル； $\text{C}_1\sim\text{C}_4$ -アルコキシ- $\text{C}_1\sim\text{C}_6$ -アルキル；フェノキシ- $\text{C}_1\sim\text{C}_6$ -アルキル；ベンゾイル- $\text{C}_1\sim\text{C}_6$ -アルキル；フェニルアルキルのアルキル部分がベンゾイルで置換されているフェニル- $\text{C}_1\sim\text{C}_6$ -アルキル； $\text{C}_1\sim\text{C}_4$ -アルコキシカルボニル- $\text{C}_1\sim\text{C}_6$ -アルキル； $\text{C}_1\sim\text{C}_4$ -アルコキシ- $\text{C}_1\sim\text{C}_4$ -アルコキシカルボニル- $\text{C}_1\sim\text{C}_6$ -アルキル； $\text{C}_3\sim\text{C}_8$ -シクロアルキル- $\text{C}_1\sim\text{C}_6$ -アルキル；ナフチル- $\text{C}_1\sim\text{C}_6$ -アルキル；ヘテロシクリル- $\text{C}_1\sim\text{C}_6$ -アルキル（この場合、ヘテロシクリルは、炭素原子以外に、OおよびSから選択される1つまたは2つのヘテロ原子を有する5または6員環飽和複素環である）；フェニル- $\text{C}_1\sim\text{C}_6$ -アルキル（ここで、フェニルアルキルのフェニル部分は、非置換であるか、あるいは、F、Cl、Br、I、OH、 NO_2 、 $\text{C}_1\sim\text{C}_{10}$ -アルキル、 $\text{C}_1\sim\text{C}_4$ -アルコキシ、ヘテロシクリル- $\text{C}_1\sim\text{C}_4$ -アルコキシ、 $\text{C}_1\sim\text{C}_4$ -フルオロアルカノイルオキシ、ヒドロキシ- $\text{C}_1\sim\text{C}_4$ -アルコキシカルボニル、 $\text{C}_1\sim\text{C}_4$ -アルコキシカルボニル、 $\text{C}_1\sim\text{C}_4$ -アルコキシ- $\text{C}_1\sim\text{C}_4$ -アルコキシカルボニル、ベンジルオキシカルボニル、および $\text{C}(=\text{O})\text{N}(\text{C}_1\sim\text{C}_8\text{-アルキル})_2$ から選択される1つ、2つ、3つ、4つ、または5つの同じかまたは異なる基で置換されている）、である。その例は、 $\text{C}_1\sim\text{C}_4$ -フルオロアルキル； $\text{C}_1\sim\text{C}_4$ -クロロアルキル； $\text{C}_1\sim\text{C}_4$ -アルコキシ- $\text{C}_1\sim\text{C}_8$ -アルキル、例えば、2-メトキシ-エチル、または3-メトキシプロピルなど；フェノキシ- $\text{C}_1\sim\text{C}_4$ -アルキル、例えば、フェノキシメチル、2-フェノキシエチル、または3-フェノキシプロピルなど；ベンゾイル- $\text{C}_1\sim\text{C}_4$ -アルキル、例えば、2-オキソ-2-フェニルエチル、3-オキソ-3-フェニルプロピル、または4-オキソ-4-フェニルブチルなど；フェニルアルキルのアルキル部分がベンゾイルで置換されているフェニル- $\text{C}_1\sim\text{C}_4$ -アルキル、例えば、2-オキソ-1, 2-ジフェニルエチル、3-オキソ-1, 3-ジフェニルプロピル、または4-オキソ-1, 4-ジフェニルブチ

30

40

50

ルなど； $C_1 \sim C_4$ -アルコキシカルボニル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル、例えば、メトキシカルボニルメチル、エトキシカルボニルメチル、2-メトキシカルボニルエチル、2-エトキシカルボニルエチル、3-メトキシカルボニルプロピル、3-エトキシカルボニルプロピル、4-メトキシカルボニルブチル、または4-エトキシカルボニルブチルなど； $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ- $C_1 \sim C_4$ -アルコキシカルボニル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル、例えば、3-メトキシブトキシカルボニルメチル、3-メトキシブトキシカルボニルエチル、3-エトキシブトキシカルボニルメチル、または3-エトキシブトキシカルボニルエチルなど； $C_3 \sim C_8$ -シクロアルキル- $C_1 \sim C_6$ -アルキル、例えば、シクロヘキシルメチル、2-シクロヘキシルエチル、シクロペンチルメチル、または2-シクロペンチルエチルなど；ナフチル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル、例えば、1-ナフチルメチル、2-ナフチルメチル、1-（ナフタレン-1-イル）エチル、1-（ナフタレン-2-イル）エチル、2-（ナフタレン-1-イル）エチル、または2-（ナフタレン-2-イル）エチルなど；ヘテロシクリル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル、例えば、テトラヒドロフラン-2-イルメチル、テトラヒドロフラン-3-イルメチル、2-（テトラヒドロフラン-2-イル）エチル、2-（テトラヒドロフラン-3-イル）エチル、3-（テトラヒドロフラン-2-イル）プロピル、3-（テトラヒドロフラン-3-イル）プロピル、テトラヒドロチオフェン-2-イルメチル、テトラヒドロチオフェン-3-イルメチル、2-（テトラヒドロチオフェン-2-イル）エチル、2-（テトラヒドロチオフェン-3-イル）エチル、3-（テトラヒドロチオフェン-2-イル）プロピル、または3-（テトラヒドロチオフェン-3-イル）プロピルなど；フェニル- $C_1 \sim C_2$ -アルキル（ここで、フェニルアルキルのフェニル部分は、非置換であるか、あるいは、フッ素、塩素、 $C_1 \sim C_4$ -アルキル、 $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ、（ $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ）カルボニル、 $C(O)O$ （ $C_1 \sim C_4$ -アルキル-OH）、および $C(O)N$ （ $C_1 \sim C_8$ -アルキル）₂から選択される1つまたは2つの同じかまたは異なる基で置換されている）；フェニルアルキルのフェニル部分が1つまたは2つ塩素で置換されているフェニル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル、例えば、2-クロロベンジル、3-クロロベンジル、4-クロロベンジル、2, 4-ジクロロベンジル、3, 4-ジクロロベンジル、3, 5-ジクロロベンジル、2-（2-クロロフェニル）エチル、2-（3-クロロフェニル）エチル、2-（4-クロロフェニル）エチル、2-（2, 4-ジクロロフェニル）エチル、2-（3, 5-ジクロロフェニル）エチル、または2-（3, 4-ジクロロフェニル）エチルなど；フェニルアルキルのフェニル部分がヒドロキシで置換されているフェニル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル、例えば、2-ヒドロキシベンジル、3-ヒドロキシベンジル、4-ヒドロキシベンジル、2-（2-ヒドロキシフェニル）エチル、2-（3-ヒドロキシフェニル）エチル、または2-（4-ヒドロキシフェニル）など；フェニルアルキルのフェニル部分が1つまたは2つの $C_1 \sim C_{10}$ -アルキル基で置換されているフェニル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル、例えば、2-, 3-, もしくは4-メチルベンジル、2-, 3-, 4-エチルベンジル、2-, 3-, もしくは4-プロピルベンジル、2-, 3-, もしくは4-ブチルベンジル、2, 4-ジメチルベンジル、または3, 5-ジメチルベンジルなど；フェニルアルキルのフェニル部分が1つまたは2つの $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ基で置換されているフェニル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル、例えば、2-, 3-, もしくは4-メトキシベンジル、2-, 3-, 4-エトキシベンジル、2-, 3-, もしくは4-プロポキシベンジル、2-, 3-, もしくは4-ブトキシベンジル、2, 4-ジメトキシベンジル、または3, 5-ジメトキシベンジルなど；フェニルアルキルのフェニル部分が $C_1 \sim C_4$ -アルコキシカルボニルで置換されているフェニル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル、例えば、2-エトキシカルボニルベンジル、3-エトキシカルボニルベンジル、4-エトキシカルボニルベンジル、2-（2-エトキシカルボニルフェニル）エチル、2-（3-エトキシカルボニルフェニル）エチル、または4-（3-エトキシカルボニルフェニル）エチルなど、フェニルアルキルのフェニル部分がヒドロキシ- $C_1 \sim C_4$ -アルコキシカルボニルで置換されているフェニル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル、例えば、4-（2-ヒドロキシエトキシカルボニル）ベンジル、2-（4-（2-ヒドロキシエトキシカルボニルフェニル）エチルなど；フェニルアルキルのフェニル部分が $C(=O)N$ （ $C_1 \sim C_8$ -アルキル）₂で

10

20

30

40

50

置換されているフェニル-C₁~C₄-アルキル、例えば、4-ジメチルカルバモイルベンジル、4-ジエチルカルバモイルベンジル、4-ジイソプロピルカルバモイルベンジル、2-(4-ジメチルカルバモイルフェニル)エチル、2-(4-ジエチルカルバモイルフェニル)エチル、または2-(4-ジイソプロピルカルバモイルフェニル)エチルなど、である。

【0139】

この実施形態のさらにより好ましい態様により、R⁵および／またはR⁶および／またはR⁷、および／またはR⁸は、C₃~C₁₂-シクロアルキル（これは、非置換であるか、あるいは、F、Cl、Br、I、OR²⁰、COR²¹、COOR²²、CONR²³R²⁴、ヘテロシクリル、C₃~C₈-シクロアルキル、フェニル、およびナフチル（最後に言及された2つの基は、F、Cl、Br、I、NO₂、C₁~C₁₂-アルキル、OR²⁰、COOR²²、およびCONR²³R²⁴から選択される1つ、2つ、3つ、4つ、または5つの異なるかまたは同じ基で置換されていてもよい）から選択される1つ、2つ、または3つの同じかまたは異なる基R^{5b}を有し、この場合、R²⁰、R²²、R²³、およびR²⁴は、上記において定義される通りであり、ならびに、好ましくは、好ましい意味のうちの1つを有する。その例は、C₃~C₈-シクロアルキル、例えば、シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル、またはシクロヘプチルなど；F、Cl、Br、I、C₁~C₈-アルキル、OR²⁰、COOR²²、およびCONR²³R²⁴から選択される同じかまたは異なる基のうちの1つ、2つ、または3つで置換されているC₃~C₈-シクロアルキル、であり、この場合、R²⁰、R²²、R²³、およびR²⁴は、上記において定義される通りである。

【0140】

この実施形態のさらにより好ましい態様により、R⁵および／またはR⁶および／またはR⁷、および／またはR⁸は、（非置換であるか、あるいは、F、Cl、Br、I、C₁~C₁₀-アルキル、SR¹⁹、およびOR²⁰から選択される1つ、2つ、3つ、4つ、5つの同じかまたは異なる基R^{5c}を有する）フェニルである。R¹⁹およびR²⁰は、上記において定義される通り、ならびに好ましくは、好ましい意味のうちの1つを有する。より好ましくは、R⁵および／またはR⁶および／またはR⁷、および／またはR⁸は、（非置換であるか、あるいは、F、Cl、Br、I、OH、NO₂、C₁~C₁₀-アルキル、C₁~C₄-アルコキシ、ヘテロシクリル-C₁~C₄-アルコキシ、C₁~C₄-フルオロアルカノイルオキシ、ヒドロキシ-C₁~C₄-アルコキシカルボニル、C₁~C₄-アルコキシカルボニル、C₁~C₄-アルコキシ-C₁~C₄-アルコキシカルボニル、ベンジルオキシカルボニル、およびC(=O)N(C₁~C₈-アルキル)₂からなる群より選択される1つ、2つ、3つ、4つ、5つの同じかまたは異なる基で置換されている）フェニルである。その例は、（非置換であるか、あるいは、フッ素、塩素、ヒドロキシ、ニトロ、C₁~C₁₀-アルキル、C₁~C₄-アルコキシ、C₁~C₄-フルオロアルキルカルボニルオキシ、および（ヘテロシクリル）-C₁~C₄-アルコキシ（この場合、ヘテロシクリル部分は、炭素原子以外に、OまたはSから選択される1つまたは2つのヘテロ原子を有する、5または6員環飽和複素環である）から選択される1つまたは2つの同じかまたは異なる基で置換されている）フェニルである。その例は、1つ、2つ、3つ、または4つのC₁~C₁₀アルキル基で置換されているフェニル、例えば、2-メチルフェニル、3-メチルフェニル、4-メチルフェニル、2-エチルフェニル、3-エチルフェニル、4-エチルフェニル、2-、3-、4-n-プロピルフェニル、2-、3-、4-イソプロピルフェニル、2-、3-、4-ブチルフェニル、2-(1, 1, 3, 3-テトラメチルブチル)フェニル、3-(1, 1, 3, 3-テトラメチルブチル)フェニル、4-(1, 1, 3, 3-テトラメチルブチル)フェニル、2, 4-ジメチルフェニル、3, 5-ジメチルフェニル、または3, 5-ジイソプロピルフェニルなど；OHで置換されているフェニル、例えば、2-ヒドロキシフェニル、3-ヒドロキシフェニル、または4-ヒドロキシフェニルなど；OHおよびC₁~C₁₀-アルキルから選択される1つ、2つ、3つ、または4つの基で置換されているフェニル、例えば、2-ヒドロキシ-5-(1, 1, 3, 3-テトラメチルブチル)フェニル、3, 5-ジイソプロピル-4-ヒドロキシフェニル、5-tert-ブチ

ル-4-ヒドロキシ-2-メチルフェニル、および3, 5-ジ-tert-ブチル-4-ヒドロキシフェニルなど；ヘテロシクリル- $C_1 \sim C_2$ -アルコキシで置換されているフェニル、例えば、2-(テトラヒドロフラン-2-イルメトキシ)フェニル、3-(テトラヒドロフラン-2-イルメトキシ)フェニル、4-(テトラヒドロフラン-2-イルメトキシ)フェニル、2-(テトラヒドロフラン-3-イルメトキシ)フェニル、3-(テトラヒドロフラン-3-イルメトキシ)フェニル、4-(テトラヒドロフラン-3-イルメトキシ)フェニル、2-(テトラヒドロチオフェン-2-イルメトキシ)フェニル、3-(テトラヒドロチオフェン-2-イルメトキシ)フェニル、4-(テトラヒドロチオフェン-2-イルメトキシ)フェニル、2-(テトラヒドロチオフェン-3-イルメトキシ)フェニル、3-(テトラヒドロチオフェン-3-イルメトキシ)フェニル、または4-(テトラヒドロチオフェン-3-イルメトキシ)フェニルなど； $C_1 \sim C_4$ -フルオロアルカノイルオキシで置換されているフェニル、例えば、2, 2, 2-トリフルオロアセトキシフェニルまたは3, 3, 3-トリフルオロプロピオニルオキシフェニルなど、である。

10

【0141】

特に、 R^5 、 R^6 、 R^7 、および R^8 は、互いに独立して、 $C_1 \sim C_4$ -アルキル、フェニル、ならびにOHおよび $C_1 \sim C_4$ -アルキルから選択される1つ以上の基で置換されているフェニル、特に、メチル、エチル、n-ブチル、フェニル、および4-ヒドロキシフェニル、から選択される。

【0142】

さらなる好ましい実施形態は、 R^9 および R^{10} が、互いに独立して、 $-NR^{11}R^{12}$ 、 $-N=CR^{13}R^{14}$ 、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{9a} で置換されている $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{9a} で置換されている $C_2 \sim C_{12}$ -アルケニル、 $C_3 \sim C_{12}$ -シクロアルキル、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{9b} で置換されている $C_3 \sim C_{12}$ -シクロアルキル、ヘテロシクリル、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{9b} で置換されているヘテロシクリル、フェニル、あるいは、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{9c} で置換されているフェニルであり、この場合、 R^{11} 、 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{9a} 、 R^{9b} 、および R^{9c} は、定義される通りであり、ならびに好ましくは、好ましい意味を有する、組成物、化合物、方法、および使用に関する。

20

【0143】

この実施形態の特定の態様により、 R^9 および R^{10} は、互いに独立して、
 - $NR^{11}R^{12}$ ；
 - $-N=CR^{13}R^{14}$ ；
 - $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、特に $C_3 \sim C_{12}$ -アルキル；
 - $C_2 \sim C_{12}$ -アルケニル；
 - 1つ以上、例えば、1つ、2つ、または3つの同じかまたは異なるF、Cl、Br、I、 SR^{19} 、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、 $C_3 \sim C_{20}$ -シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル、フェニル、またはナフチル（最後に言及された2つの基の芳香族環は、1つ以上のF、Cl、Br、I、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、 $C_1 \sim C_{12}$ -ハロアルキル、 NO_2 、 SR^{19} 、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、または $CONR^{23}R^{24}$ で置換されていてもよく、シクロアルキルおよびヘテロシクロアルキルは、1つ以上のCO基で中断されていて

30

40

もよい)で置換されている $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル；
 - 1つ以上、例えば、1つ、2つ、または3つの同じかまたは異なるF、Cl、Br、I、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、 $C_3 \sim C_{20}$ -シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル、フェニル、またはナフチル（最後に言及された2つの基の芳香族環は、1つ以上のF、Cl、Br、I、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、 $C_1 \sim C_{12}$ -ハロアルキル、 NO_2 、 SR^{19} 、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、または $CONR^{23}R^{24}$ で置換されていてもよく、シクロアルキルおよびヘテロシクロアルキルは、1つ以上のCO基で中断されていて

もよい)で置換されている $C_2 \sim C_{12}$ -アルケニル；
 - フェニル；および

- 1つ以上、例えば、1つ、2つ、3つ、4つ、または5つの同じかまたは異なる、

50

$C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、F、Cl、Br、I、 NO_2 、または $COOR^{22}$ で置換されているフェニル；

から選択され、

この場合、 R^{11} 、 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{19} 、 R^{20} 、 R^{21} 、 R^{22} 、 R^{23} 、および R^{24} は、上記において定義される通りであり、ならびに好ましくは、好ましい意味を有する。

【0144】

好ましい態様により、 R^9 および R^{10} は同一である。

【0145】

この実施形態の特定の態様により、 R^9 および R^{10} は、互いに独立して、 $C_1 \sim C_6$ -アルキル、 $C_1 \sim C_6$ -フルオロアルキル、フェニル- $C_1 \sim C_6$ -アルキル、フェノキシ- $C_1 \sim C_6$ -アルキル、ナフチル- $C_1 \sim C_6$ -アルキル、($C_1 \sim C_4$ -アルキル)-フェニル- $C_1 \sim C_6$ -アルキル、(5または6員環ヘテロアリール)- $C_1 \sim C_6$ -アルキル、 $C_1 \sim C_4$ -アルコキシ- $C_1 \sim C_6$ -アルキル、 $C_1 \sim C_4$ -アルキルスルファニル- $C_1 \sim C_5$ -アルキル、 $C_1 \sim C_4$ -アルコキシカルボニル- $C_1 \sim C_6$ -アルキル、ならびに、ヒドロキシ、N-ヒドロキシイミノ、フェニル、ベンゾイル、ニトロフェニル、および($C_1 \sim C_4$ -アルキル)-フェニルから選択される1つ、2つ、3つ、4つの基で置換されている $C_1 \sim C_6$ -アルキルから選択される。

【0146】

この実施形態のさらなる特定の態様により、 R^9 および R^{10} は、

- $C_3 \sim C_{12}$ -シクロアルキル；
- 1つまたは2つの $C_1 \sim C_6$ -アルキル基で置換されている $C_3 \sim C_8$ -シクロアルキル；

- フェニルで置換されている $C_2 \sim C_{12}$ -アルケニル；あるいは

- $C_1 \sim C_4$ -アルキルで置換されているフェニル

である。

【0147】

この実施形態のさらなる特定の態様により、 R^9 および R^{10} は、式 $NR^{11}R^{12}$ の基であり、ここで、 R^{11} および R^{12} は、互いに独立して、水素、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、 $C_3 \sim C_{12}$ -シクロアルキル、ヘテロシクリル、およびフェニルから選択され、

この場合、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキルは、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{11a} で置換されていてもよく、ならびに／あるいは、OおよびSから選択される1つ以上のヘテロ原子で中断されていてもよく、

$C_3 \sim C_{12}$ -シクロアルキルおよびヘテロシクリルは、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{11b} で置換されていてもよく、ならびに

フェニルは、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{11c} で置換されていてもよく、ならびに、 R^{11a} 、 R^{11b} 、 R^{11c} は、上記において定義される通りである。

【0148】

さらなる特定の態様により、 R^9 および／または R^{10} は、式 $NR^{11}R^{12}$ の基であり、ここで、 R^{11} および R^{12} は、一緒に、直鎖状 $C_4 \sim C_5$ -アルキレン鎖または直鎖状 $C_4 \sim C_5$ -アルケニレン鎖を形成し、この場合、アルキレンおよびアルケニレンは、1つ以上の基 R^{11f} で置換されていてもよく、ならびに／あるいは、-O-および-S-から選択される1つ以上のヘテロ原子で中断されていてもよく、ならびに／さらに、アルキレンまたはアルケニレンの1つ以上の CH_2 基は、C=O基で置き換えられていてもよく、あるいは

、 R^{11} および R^{12} は、一緒に、o-フェニレンジカルボニル基または1,8-ナフタレンジカルボニル基を形成していてもよく、この場合、最後に言及された2つの基は、1つ以上の基 R^{11f} で置換されていてもよく、この場合、 R^{11f} は上記において定義される通りである。

【0149】

特に、 R^{11} および R^{12} は、互いに独立して、ベンゾイルおよびフェニルから選択される

。

【0150】

さらなる特定の態様により、 R^9 および／または R^{10} は、式 $-N=CR^{13}R^{14}$ の基であり、ここで、

R^{13} および R^{14} は、互いに独立して、水素、 CN 、 NO_2 、 SR^{19} 、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、 $CONR^{23}R^{24}$ 、 $C_1\sim C_{12}$ -アルキル、 $C_2\sim C_{12}$ -アルケニル、 $C_2\sim C_{12}$ -アルキニル、 $C_3\sim C_{12}$ -シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル、およびフェニルから選択され、

この場合、 $C_1\sim C_{12}$ -アルキル、 $C_2\sim C_{12}$ -アルケニル、および $C_2\sim C_{12}$ -アルキニルは、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{13a} で置換されていてもよく、この場合、 R^{13a} は上記において定義される通りであり、

$C_3\sim C_{12}$ -シクロアルキルおよびヘテロシクロアルキルは、1つ以上の基 R^{13b} で置換されていてもよく、この場合、 R^{13b} は上記において定義される通りあり、

フェニルは、1つ以上の基 R^{13c} で置換されていてもよく、この場合、 R^{13c} は上記において定義される通りであり、

あるいは、

R^{13} および R^{14} は、一緒に、直鎖状 $C_2\sim C_6$ -アルキレン鎖または直鎖状 $C_2\sim C_6$ -アルケニレン鎖を形成していてもよく、この場合、アルキレンおよびアルケニレンは、1つ以上の基 R^{32} で置換されていてもよく、ならびに／あるいは、 $-O-$ から選択される1つ以上のヘテロ原子で中断されていてもよく、さらに、アルキレンまたはアルケニレンの1つ以上の CH_2 基は、 $C=O$ 基で置き換えられていてもよく、

この場合、 R^{19} 、 R^{20} 、 R^{21} 、 R^{22} 、 R^{23} 、 R^{24} 、および R^{32} は、上記において定義される通りであり、ならびに好ましくは、好ましい意味のうちの1つを有する。

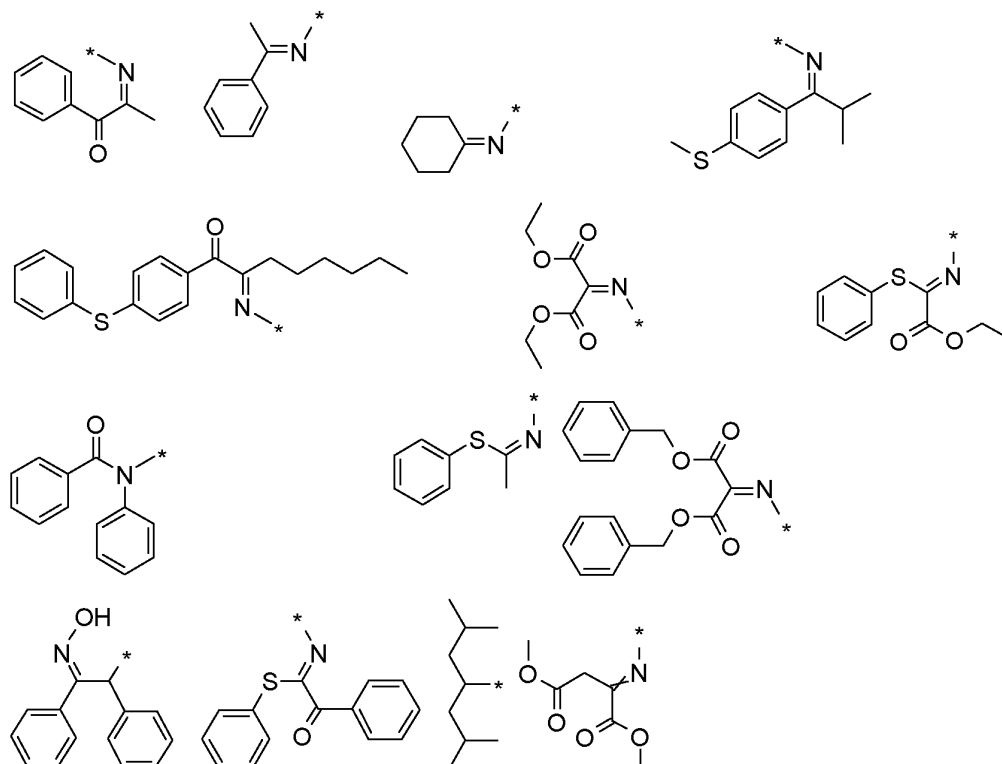
【0151】

より好ましくは、 R^{13} および R^{14} は、互いに独立して、 $C_1\sim C_8$ -アルキル、フェニル、フェニルスルファニル、 $C_1\sim C_4$ -アルコキシカルボニル、 $C_1\sim C_4$ -アルコキシカルボニル- $C_1\sim C_4$ -アルキル、ベンジルオキシカルボニル、ベンゾイル、ならびに、フェニルスルファニルまたは $C_1\sim C_4$ -アルキルスルファニルで置換されているフェニルから選択されるか、あるいは、 R^{13} および R^{14} は、それらが結合している炭素原子と一緒に、シクロヘキシル環を形成する。

【0152】

R^9 および R^{10} の例は、ベンジル、4-ニトロベンジル、ナフタレン-1-イルメチル、1, 1-ジフェニルメチル、チオフエン-2-イルメチル、1-フェニルエチル、2-オキソ-1, 2-ジフェニルエチル、2-ヒドロキシ-1, 2-ジフェニルエチル、1, 1-ジメチル-2-オキソ-2-フェニル-エチル、2-ヒドロキシイミノ-1, 2-ジフェニルエチル、1-メトキシカルボニル-1-メチル-エチル、2, 2, 2-トリフルオロエチル、2-メトキシエチル、2-メトキシ-1-メチル-エチル、2-フェノキシエチル、3-フェニルアリル、4-tert-ブチルフェニル、4-イソプロピルフェニル、シクロヘキシル、シクロドデシル、2-イソプロピル-5-メチル-シクロヘキシル、4-tert-ブチルシクロヘキシル、(R) 4-tert-ブチルシクロヘキシル、(S) 4-tert-ブチルシクロヘキシル、2, 2, 3, 3-テトラフルオロプロピル、

【化 17】



10

20

である。

【0153】

さらなる好ましい実施形態は、式 I b の M が、

— 1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{Ma} で置換されていてもよく、ならびに／あるいは、1つ以上の非隣接基 R^{Mi} で中断されていてもよい、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキレン、あるいは、

— 1つ以上の基 R^{Mc} で置換されていてもよいフェニレン
であり、

30

この場合、 R^{Ma} および R^{Mc} は、上記において定義される通りである、
組成物、化合物、方法、および使用に関する。

【0154】

特に、Mは、

— $C_1 \sim C_{12}$ -アルキレン；

— F、Cl、Br、I、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、 $C_1 \sim C_{12}$ -ハロアルキル、CN、 SR^{19} 、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、 $CONR^{23}R^{24}$ 、 $C_6 \sim C_{10}$ -アリール、ヘテロアリール、または、(F、Cl、Br、I、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、 $C_1 \sim C_{12}$ -ハロアルキル、CN、 NO_2 、 SR^{19} 、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、および $CONR^{23}R^{24}$ から選択される1つ以上の同じかまたは異なる基で置換されている) $C_6 \sim C_{10}$ -アリールから選択される1つ以上、例えば、1つ、2つ、または3つの同じかまたは異なる基で置換されている $C_1 \sim C_{12}$ -アルキレン；

40

— -O-、-S-、-O-フェニレン、またはフェニレン（この場合、最後に言及された2つの基は、F、Cl、Br、I、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、 $C_1 \sim C_{12}$ -ハロアルキル、 SR^{19} 、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、 $CONR^{23}R^{24}$ 、およびフェニルから選択される1つ以上の基で置換されていてもよい）から選択される1つ以上、例えば、1つ、2つ、または3つの同じかまたは異なる非隣接基で中断されている、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキレン；

— F、Cl、Br、I、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、 $C_1 \sim C_{12}$ -ハロアルキル、CN、 SR^{19} 、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、 $CONR^{23}R^{24}$ 、 $C_6 \sim C_{10}$ -アリール、ヘテロ

50

アリール、または、(F、Cl、Br、I、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、 $C_1 \sim C_{12}$ -ハロアルキル、CN、 NO_2 、 SR^{19} 、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、および $CONR^{23}R^{24}$ から選択される1つ以上の同じかまたは異なる基で置換されている) $C_6 \sim C_{10}$ -アリールから選択される1つ以上、例えば、1つ、2つ、または3つの同じかまたは異なる基で置換され、ならびに、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-O-$ フェニレン、またはフェニレン(この場合、最後に言及された2つの基は、F、Cl、Br、I、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、 $C_1 \sim C_{12}$ -ハロアルキル、 SR^{19} 、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、 $CONR^{23}R^{24}$ 、およびフェニルから選択される1つ以上の基で置換されていてもよい)から選択される1つ以上の非隣接基で中断されている、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキレン、あるいは

$-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、 $C_1 \sim C_{12}$ -ハロアルキル、 SR^{19} 、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、 $CONR^{23}R^{24}$ 、およびフェニルから選択される1つ以上、例えば、1つ、2つ、または3つの同じかまたは異なる基で置換されていてもよい、フェニレン；

であり、

この場合、 R^{19} 、 R^{20} 、 R^{22} 、 R^{23} 、および R^{24} は、上記において定義される通りであり、ならびに好ましくは、好ましい意味のうちの1つを有する。

【0155】

より好ましくは、Mは、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-O-$ フェニレン、およびフェニレン(この場合、最後に言及された基は、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、 $C_1 \sim C_{12}$ -ハロアルキル、CN、 NO_2 、 SR^{19} 、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、 $CONR^{23}R^{24}$ 、およびフェニルから選択される1つ、2つ、3つ、または4つの基で置換されていてもよい)から選択される1つ、2つ、3つ、4つ、5つ、または6つの非隣接基で中断されている $C_2 \sim C_8$ -アルキレンである。特に、Mは、1つのフェニレン基で中断されている $C_2 \sim C_8$ -アルキレン、あるいは、酸素および $-O-$ フェニレンから選択される1つ、2つ、3つ、または4つの基で中断されている $C_2 \sim C_8$ -アルキレンである。さらにより好ましくは、Mは、 $-CH_2-C_6H_4-O-CH_2CH_2CH_2O-C_6H_4-CH_2-$ 、または $-CH_2-C_6H_4-CH_2-$ である。

【0156】

さらなる好ましい実施形態は、Zが、 $C_1 \sim C_{10}$ -アルキレンまたは(O、S、フェニレン、 $-O-$ フェニレン、および $-O-$ フェニレン-Oから選択される1つ以上、例えば、1つ、2つ、または3つの非隣接基 R^{Zi} で置換されている、特に R^{Zi} がフェニレンである) $C_1 \sim C_{10}$ -アルキレンである、組成物、化合物、方法、および使用に関する。

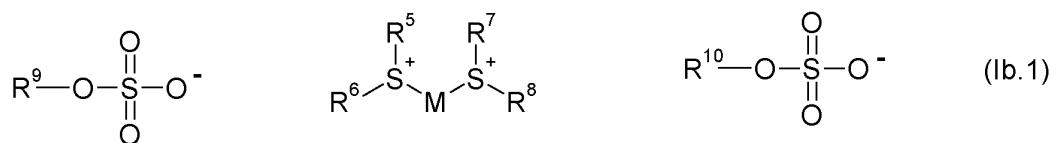
【0157】

さらなる好ましい実施形態は、Zがフェニレンまたはナフチレンである、組成物、化合物、方法、および使用に関する。

【0158】

さらなる好ましい実施形態は、式Ibの化合物において、 Y^{n-} が、一価のアニオンである、組成物、化合物、方法、および使用に関する。このスルホニウムサルフェートは、式Ib. 1:

【化18】



の化合物とも見なされ、この場合、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^9 、 R^{10} 、およびMは、上記において定義される通りである。

【0159】

好ましくは式Ibの化合物に関連する R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^9 、 R^{10} 、およびMが、式Ib. 1に対しても適用されることは、当業者は容易に理解するであろう。

【0160】

式I b. 1の化合物の意図される使用に関して、特に好ましいのは、置換基 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^9 、 R^{10} 、およびMにおける以下の意味である：

R^5 、 R^6 、 R^7 、および R^8 は、互いに独立して、

— 非置換であるか、あるいは、F、Cl、Br、I、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、 $CONR^{23}R^{24}$ 、ヘテロシクロアルキル、 $C_3\sim C_8$ -シクロアルキル、フェニル、およびナフチル（この場合、最後に言及された2つの基は、非置換であるか、あるいは、F、Cl、Br、I、 NO_2 、 $C_1\sim C_{12}$ -アルキル、 OR^{20} 、 $COOR^{22}$ 、および $CONR^{23}R^{24}$ から選択される1つ、2つ、3つ、4つ、または5つの基で置換されている）から選択される1つ以上の基で置換されている、 $C_1\sim C_{12}$ -アルキル；

10

— 非置換であるか、あるいは、F、Cl、Br、I、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、 $CONR^{23}R^{24}$ 、ヘテロシクリル、 $C_3\sim C_8$ -シクロアルキル、フェニル、およびナフチル（この場合、最後に言及された2つの基は、非置換であるか、あるいは、F、Cl、Br、I、 NO_2 、 $C_1\sim C_{12}$ -アルキル、 OR^{20} 、 $COOR^{22}$ 、および $CONR^{23}R^{24}$ から選択される1つ、2つ、3つ、4つ、または5つの基で置換されている）から選択される1つ以上の基で置換されている、 $C_3\sim C_{12}$ -シクロアルキル；

— 非置換であるか、あるいは、F、Cl、Br、I、 $C_1\sim C_{10}$ -アルキル、 SR^{19} 、および OR^{20} から選択される1つ、2つ、3つ、4つ、5つの基で置換されている、フェニル；

から選択されるか、

20

あるいは、 R^5 および R^6 あるいは R^7 および R^8 が、それらが結合している硫黄原子と一緒に、5または6員環の飽和複素環を形成し、これは、1つのフェニル環に縮合していてもよく；

R^9 、 R^{10} は、

— $NR^{11}R^{12}$ ；

— $-N=CR^{13}R^{14}$ （この場合、 R^{13} および R^{14} は、互いに独立して、 $C_1\sim C_8$ -アルキル、フェニル、フェニルスルファニル、 $C_1\sim C_4$ -アルコキシカルボニル、 $C_1\sim C_4$ -アルコキシカルボニル- $C_1\sim C_4$ -アルキル、ベンジルオキシカルボニル、ベンゾイル、 $C_1\sim C_4$ -アルキルスルファニルフェニル、フェニルスルファニル-ベンゾイルから選択されるか、あるいは R^{13} および R^{14} は、それらが結合している炭素原子と一緒に、 $C_5\sim C_8$ -シクロアルキル環を形成している）；

30

— $C_1\sim C_{12}$ -アルキル、 $C_2\sim C_{12}$ -アルケニル（この場合、最後に言及された2つの基は、F、Cl、Br、I、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、 $C_3\sim C_{20}$ -シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル、フェニル、およびナフチルから（この場合、最後に言及された2つの基の芳香族環は、F、Cl、Br、I、 $C_1\sim C_{12}$ -アルキル、 $C_1\sim C_{12}$ -ハロアルキル、 NO_2 、 SR^{19} 、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、および $CONR^{23}R^{24}$ から選択される1つ以上の同じかまたは異なる基で置換されていてもよく、ならびに、シクロアルキルおよびヘテロシクロアルキルは、1つ以上のCO基で中断されていてもよく、さらに、ジェミナルに結合している2つの基 R^{4a} は、一緒に、N-ヒドロキシイミノ基を形成していてもよい）選択される1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{4a} で置換されていてもよい）、

40

— 1つ以上の $C_1\sim C_{12}$ -アルキル、F、Cl、Br、I、 NO_2 、または $COOR^{22}$ で置換されていてもよいフェニル；

であり、

Mは、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-O-$ フェニレン、およびフェニレン（この場合、最後に言及された基は、 $C_1\sim C_{12}$ -アルキル、 $C_1\sim C_{12}$ -ハロアルキル、CN、 NO_2 、 SR^{19} 、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、 $CONR^{23}R^{24}$ 、およびフェニルから選択される1つ、2つ、3つ、または4つの基で置換されていてもよい）から選択される1つ、2つ、3つ、4つ、5つ、または6つの非隣接基で中断されている $C_2\sim C_8$ -アルキレンである。特に、Mは、1つのフェニレン基で中断されている $C_2\sim C_8$ -アルキレン、あるいは、酸素およ

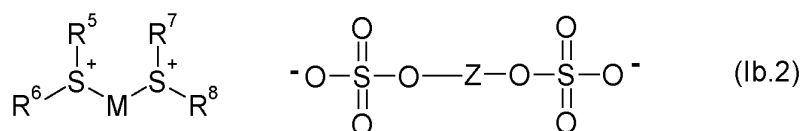
50

びーオーフェニレンから選択される1つ、2つ、3つ、または4つの基で中断されている
 $C_2 \sim C_8$ -アルキレンであり、
 この場合、 R^{11} 、 R^{12} 、 R^{19} 、 R^{20} 、 R^{22} 、 R^{23} 、および R^{24} は、上記において定義され
 る通りである。

【0161】

さらなる好ましい実施形態は、式I bにおいて、 Y^{n-} が、二価のアニオンである、組成
 物、化合物、方法、および使用に関する。このスルホニウムサルフェートは、式I b. 2
 :

【化19】



10

の化合物とも見なされ、この場合、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、Z、およびMは、上記において
 定義される通りである。

【0162】

好ましくは式I bの化合物に関連する R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、Z、およびMが、式I b.
 2に対しても適用されることは、当業者は容易に理解するであろう。

【0163】

20

この実施形態の特定の態様により、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、Z、およびMは、以下の意味
 を有する：

R^5 、 R^6 、 R^7 、および R^8 は、互いに独立して、

— 非置換であるか、あるいは、F、Cl、Br、I、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$
 $CONR^{23}R^{24}$ 、ヘテロシクロアルキル、 $C_3 \sim C_8$ -シクロアルキル、フェニル、およ
 びナフチル（この場合、最後に言及された2つの基は、非置換であるか、あるいは、F、
 Cl、Br、I、 NO_2 、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、 OR^{20} 、 $COOR^{22}$ 、および $CONR^{23}R^{24}$
 R^{24} から選択される1つ、2つ、3つ、4つ、または5つの基で置換されている）から選
 択される1つ以上の基で置換されている、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル；

— 非置換であるか、あるいは、F、Cl、Br、I、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$
 $CONR^{23}R^{24}$ 、ヘテロシクリル、 $C_3 \sim C_8$ -シクロアルキル、フェニル、およびナフ
 チル（この場合、最後に言及された2つの基は、非置換であるか、あるいは、F、Cl、
 Br、I、 NO_2 、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、 OR^{20} 、 $COOR^{22}$ 、および $CONR^{23}R^{24}$ から
 選択される1つ、2つ、3つ、4つ、または5つの基で置換されている）から選択され
 る1つ以上の基で置換されている、 $C_3 \sim C_{12}$ -シクロアルキル；ならびに、

30

— 非置換であるか、あるいは、F、Cl、Br、I、 $C_1 \sim C_{10}$ -アルキル、 SR^{19}
 、および OR^{20} から選択される1つ、2つ、3つ、4つ、5つの基で置換されている、フ
 ェニル；

から選択されるか、

あるいは、 R^5 および R^6 あるいは R^7 および R^8 が、それらが結合している硫黄原子と一緒
 に、5または6員環の飽和複素環を形成し、これは、1つのフェニル環に縮合していても
 よく；

40

Mは、—O—、—S—、—O—フェニレン、およびフェニレン（この場合、最後に言及さ
 れた基は、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、 $C_1 \sim C_{12}$ -ハロアルキル、CN、 NO_2 、 SR^{19} 、O
 R^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、 $CONR^{23}R^{24}$ 、およびフェニルから選択される1つ、2
 つ、3つ、または4つの基で置換されていてもよい）から選択される1つ、2つ、3つ、
 4つ、5つ、または6つの非隣接基で中断されている $C_2 \sim C_8$ -アルキレンである。特に
 、Mは、1つのフェニレン基で中断されている $C_2 \sim C_8$ -アルキレン、あるいは、酸素お
 よび—O—フェニレンから選択される1つ、2つ、3つ、または4つの基で中断されてい
 る $C_2 \sim C_8$ -アルキレンであり、

50

この場合、Zは、 $C_1 \sim C_{10}$ -アルキレンまたは（O、S、フェニレン、-O-フェニレン、および-O-フェニレン-Oから選択される1つ以上、例えば、1つ、2つ、または3つの非隣接基 R^{Zi} で置換されている、特に R^{Zi} がフェニレンである） $C_1 \sim C_{10}$ -アルキレンである。

【0164】

それとは別に、可変部 R^N 、 R^{19} 、 R^{20} 、 R^{21} 、 R^{22} 、 R^{23} 、 R^{24} 、および R^{32} は、互いに独立して、好ましくは以下の意味のうちの1つを有する：

R^{19} は、水素； $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル；1つまたは2つのCO基で中断されていてもよい $C_3 \sim C_{10}$ -シクロアルキル；フェニル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル；フェニル；1つ以上、例えば、1つ、2つ、または3つの非隣接Oで中断されている $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル；1つまたは2つのCO基で中断されていてもよいヘテロシクロアルキル； $C_3 \sim C_{10}$ -シクロアルキル- $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル； $C_2 \sim C_8$ -アルカノイル、 $C_2 \sim C_4$ -ハロアルカノイル、またはベンゾイル（これは、場合により、1つ以上の $C_1 \sim C_6$ -アルキル、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素、または $C_1 \sim C_4$ -アルコキシで置換されている）；であり、

R^{20} は、水素； $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル；1つまたは2つのCO基で中断されていてもよい $C_3 \sim C_{10}$ -シクロアルキル；フェニル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル；フェニル；1つ以上、例えば、1つ、2つ、または3つの非隣接Oで中断されている $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル；1つまたは2つのCO基で中断されていてもよいヘテロシクロアルキル； $C_3 \sim C_{10}$ -シクロアルキル- $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル； $C_2 \sim C_8$ -アルカノイル、 $C_2 \sim C_4$ -ハロアルカノイル、またはベンゾイル（これは、場合により、1つ以上の $C_1 \sim C_6$ -アルキル、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素、または $C_1 \sim C_4$ -アルコキシで置換されている）；であり、

R^{21} は、水素； $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル；ベンジル；フェニル（この場合、最後に言及された2つの基は、1つ以上の同じかまたは異なる、ハロゲン、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、 $C_1 \sim C_4$ -ハロアルキル、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルコキシ、フェニル- $C_1 \sim C_3$ -アルコキシ、フェノキシ、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキルスルファニル、フェニルスルファニル、-（CO）O（ $C_1 \sim C_8$ -アルキル）、または（CO）N（ $C_1 \sim C_8$ -アルキル）₂で置換されていてもよい）；であり、

R^{22} は、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル； $C_1 \sim C_4$ -ハロアルキル；フェニル- $C_1 \sim C_4$ -アルキル；ヘテロシクリル、 $C_3 \sim C_{10}$ -シクロアルキル（この場合、最後に言及された2つの基は、1つまたは2つのCOで中断されていてもよい）；1つ以上、例えば、1つまたは2つのOHで置換されている $C_1 \sim C_8$ -アルキル；あるいは、非置換であるか、あるいは1つ以上の同じかまたは異なる、ハロゲン、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、 $C_1 \sim C_4$ -ハロアルキル、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルコキシ、または-（CO）O（ $C_1 \sim C_8$ -アルキル）で置換されている、フェニル；であり、

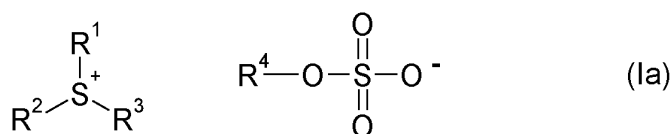
R^{23} および R^{24} は、互いに独立して、水素、 $C_1 \sim C_{12}$ -アルキル、 $C_3 \sim C_{10}$ -シクロアルキル、ベンジル、またはフェニルから選択され；

R^N は、水素、 $C_1 \sim C_{10}$ -アルキル、 $C_2 \sim C_6$ -アルカノイル、ベンゾイル、 $C_1 \sim C_{10}$ -アルキルスルホニル、またはフェニルスルホニルである。

【0165】

式Ia：

【化20】



[式中、

R^1 は上記において定義される通りであり、

R^2 および R^3 は定義される通りであり、

R^4 は、 $C_1 \sim C_2$ -アルキル、 $C_3 \sim C_{20}$ -アルキル、 $C_2 \sim C_{20}$ -アルケニル、 $C_2 \sim C_{20}$

10

20

30

40

50

ーアルキニル、 $C_3 \sim C_{20}$ ーシクロアルキル、ヘテロシクロアルキル、 $C_6 \sim C_{20}$ ーアリアル、ヘテロアリアル、 $-NR^{11}R^{12}$ 、および $-N=CR^{13}R^{14}$ から選択され、この場合、 $C_1 \sim C_2$ ーアルキルは、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{4a} で置換されており、

$C_3 \sim C_{20}$ ーアルキル、 $C_2 \sim C_{20}$ ーアルケニル、および $C_2 \sim C_{20}$ ーアルキニルは、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{4a} で置換されていてもよく、ならびに／あるいは、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-C(O)-$ 、および $-N(R^N)-$ から選択される1つ以上の非隣接基で中断されていてもよく、

$C_3 \sim C_{20}$ ーシクロアルキルおよびヘテロシクロアルキルは、1つ以上の CO 基で中断されていてもよく、ならびに／あるいは、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{4b} で置換されていてもよく、

10

$C_6 \sim C_{20}$ ーアリアルおよびヘテロアリアルは、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{4c} で置換されていてもよく、この場合、

R^{4a} は、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 CN 、 SR^{19} 、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、 $CONR^{23}R^{24}$ 、

$C_3 \sim C_{20}$ ーシクロアルキルおよびヘテロシクロアルキル（ここで、最後に言及された2つの基は、1つ以上の CO 基で中断されていてもよく、ならびに／あるいは、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{4ab} で置換されていてもよい）、

ヘテロアリアルまたは $C_6 \sim C_{10}$ ーアリアル（この場合、最後に言及された2つの基は、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{4ac} で置換されていてもよい）、であり、この場合、 R^{4ab} は、上記において定義される通りであり、

20

R^{4ac} は、上記において定義される通りであり、ならびに

さらに、2つの基 R^{4a} がジェミナルに結合している場合、当該2つの基 R^{4a} が一緒に、 N ーヒドロキシイミノ基を形成していてもよく；

R^{4b} は、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 $C_1 \sim C_{12}$ ーアルキル、 $C_1 \sim C_{12}$ ーハロアルキル、 CN 、 SR^{19} 、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、 $CONR^{23}R^{24}$ 、 $C_6 \sim C_{10}$ ーアリアル、またはヘテロアリアルであり、この場合、最後に言及された2つの基は、1つ以上の同じかまたは異なる基 R^{4bc} で置換されていてもよく、この場合、

R^{4bc} は、上記において定義される通りであり、

R^{4c} は、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 $C_1 \sim C_{12}$ ーアルキル、 $C_1 \sim C_{12}$ ーハロアルキル、 CN 、 NO_2 、 SR^{19} 、 OR^{20} 、 COR^{21} 、 $COOR^{22}$ 、 $CONR^{23}R^{24}$ 、フェニル、 $C_3 \sim C_{10}$ ーシクロアルキル、またはヘテロシクロアルキルであり、この場合、最後に言及された2つの基は、1つ以上の CO 基で中断されていてもよく；

30

この場合、 R^N 、 R^{11} 、 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{19} 、 R^{20} 、 R^{21} 、 R^{22} 、 R^{23} 、および R^{24} は、上記において定義される通りである」の化合物は新規であり、したがって、本発明の一部も形成するが、ただし、

ー R^1 がメチルであり、 R^2 がベンジルであり、 R^3 が4ーヒドロキシフェニルであり、ならびに R^4 が n ードデシルである、

式I aの化合物を除く。

【0166】

40

式I aの R^1 、 R^2 、および R^3 は、好ましくは、上記において言及した好ましい意味のうちの1つを有し、ならびに

R^4 は、好ましくは、 $C_1 \sim C_4$ ーアルコキシー $C_1 \sim C_6$ ーアルキル； $C_1 \sim C_4$ ーアルキルスルファニルー $C_1 \sim C_6$ ーアルキル； $C_1 \sim C_4$ ーアルコシカルボニルー $C_1 \sim C_6$ ーアルキル； $C_1 \sim C_6$ ーフルオロアルキル；（5または6員環ヘテロアリアル）ー $C_1 \sim C_6$ ーアルキル；ナフチルー $C_1 \sim C_6$ ーアルキル；フェノキシー $C_1 \sim C_6$ ーアルキル；フェニルー $C_1 \sim C_6$ ーアルキル；（ $C_1 \sim C_4$ ーアルキル）ーフェニルー $C_1 \sim C_6$ ーアルキル；ニトローフェニルー $C_1 \sim C_6$ ーアルキル； OH 、 N ーヒドロキシイミノ、ベンゾイル、フェニル、およびフェノキシから選択される1つ、2つ、3つ、または4つの基で置換されていてもよい $C_1 \sim C_6$ ーアルキル；

50

フェニル-C₃~C₆-アルケニル、C₃~C₁₂-シクロアルキル（この場合、最後に言及された2つの基の環状部分は、C₁~C₄-アルキルから選択される1つ、2つ、3つ、4つ、または5つの基で置換されていてよい）；

NR¹¹R¹²（この場合、R¹¹およびR¹²は、上記において定義される通りである）；

-N=C R¹³R¹⁴（この場合、R¹³およびR¹⁴は、互いに独立して、C₁~C₈-アルキル、フェニル、フェニルスルファニル、C₁~C₄-アルコキシカルボニル、C₁~C₄-アルコキシカルボニル-C₁~C₄-アルキル、ベンジルオキシカルボニル、ベンゾイル、C₁~C₄-アルキルスルファニルフェニル、フェニルスルファニル-ベンゾイルから選択されるか、あるいは、R¹³およびR¹⁴は、それらが結合している炭素原子と一緒に、C₅~C₈-シクロアルキル環を形成する）

である。

【0167】

式I b. 1の化合物は新規であり、したがって、本発明の一部も形成するが、ただし、

- R⁵、R⁶、R⁷、およびR⁸は、それぞれエチルであり、Mは、1, 4-CH₂-C₆H₄-CH₂であり、ならびにR⁹およびR¹⁰は、それぞれn-ドデシルである、式I bの化合物を除く。

【0168】

M、R⁵、R⁶、R⁷、R⁸、R⁹、およびR¹⁰の好ましい実施形態に関して、上記において述べられていることを参照する。

【0169】

式I b. 2の化合物も新規であり、したがって、本発明の一部を形成する。M、Z、R⁵、R⁶、R⁷、およびR⁸の好ましい実施形態に関して、上記において述べられていることを参照する。

【0170】

一般式I a、I b、I b. 1、およびI b. 2のスルホニウムサルフェートは、概して、例えば、所望の塩化スルホニウム、臭化スルホニウム、ヨウ化スルホニウム、硫酸水素スルホニウム、硫酸スルホニウム、テトラフルオロホウ酸スルホニウム、トリフルオロ酢酸スルホニウム、トシル酸スルホニウム、メタンスルホン酸スルホニウム、またはメチル硫酸スルホニウムと、カチオンとして、アンモニウム、テトラメチルアンモニウム、ピリジニウム、ナトリウム、リチウム、カリウム、または銀を有する所望の硫酸塩とのイオン交換反応によって製造することができる。これらの反応は、通常、不活性溶媒、例えば、水、アルカノール、例えば、メタノールまたはエタノールなど、ハロゲン化炭化水素、例えば、ジクロロメタン、トリクロロメタン、またはクロロベンゼンなど、脂肪族炭化水素、例えば、ペンタン、ヘキサン、シクロヘキサン、および石油エーテルなど、芳香族炭化水素、例えば、トルエン、o-、m-、およびp-キシレンなど、エーテル、例えば、ジエチルエーテル、メチルエチルケトン、ジイソプロピルエーテル、tert-ブチルメチルエーテル、ジオキサン、アニソール、およびテトラヒドロフランなど、ニトリル、例えば、アセトニトリルおよびプロピオニトリルなど、ケトン、例えば、アセトン、メチルエチルケトン、ジエチルケトン、およびtert-ブチルメチルケトンなど、ならびに酢酸エチルまたはジメチルホルムアミド（DMF）、あるいはそのような溶媒の混合物、中に

【0171】

出発物質として必要なスルホニウム塩は、例えば、George Andrew OlahによってOnium ions, p. 167に、またはJ. V. CrivelloによってAdvances in Polymer Science 62, 1-48, (1984)に記載されるような、様々な方法によって得られる。トリアルキル（アリール）スルホニウムを製造するための一般的な方法は、それぞれアルキル化剤（アリール化剤

10

20

30

40

50

）としての、ハロゲン化アルキルによる、またはハロゲン化アルキル／テトラフルオロホウ酸銀、ハロゲン化アルキル／HCl、ジアルキルサルフェート、スルホン酸エステル、強プロトン酸の存在下におけるアルコール、エステル／トリフルオロメタンスルホン酸、ハロゲン化ベンジル／ルイス酸、もしくはトリアルキル（アリアル）オキシニウム塩による、ジアルキルスルフィド、ジアリアルスルフィド、およびアルキルアリアルスルフィドのアルキル化またはアリアル化を伴う。

【0172】

所望のスルホニウム塩は、例えば、使用される強酸のスルホニウム塩が形成されるように、強酸、例えば、硫酸、ポリリン酸、メタンスルホン酸など、の存在下においてスルホキシドとアリアル化合物とを縮合させることによって製造することができる。

10

【0173】

出発物質として必要なサルフェートは、標準的な化学のテキストブック（例えば、Comprehensive Organic Chemistry, Vol. 3, Pergamon, 1979）に記載されている様々な方法、例えば、アルケンおよびアルコールの硫酸化など、によって得られる。硫酸、三酸化硫黄ならびにそのアミンおよびエーテル付加体、クロロ硫酸、およびスルファミン酸は、一般的な硫酸化剤である。最も便利な方法の1つは、例えば、DMF、THF、塩化メチレン、アセトン、メチルエチルケトン、クロロホルム、クロロベンゼン、tert-ブチルメチルエーテル、ジイソプロピルエーテル、酢酸エチル、ヘキサン、トルエン、またはそのような溶媒の混合物などの不活性溶媒中でのアルコールと三酸化硫黄／アミン錯体との反応である。これらの反応は、一般的に、0～120℃、好ましくは20～80℃の温度において実施される。

20

【0174】

スルホニウムサルフェートは、ジアルキルサルフェートによる対応するスルフィドのアルキル化によって、またはGreen Chemistry, 8(10), 887-894; 2006に記載されているメタンスルホン酸のような酸触媒の存在下での、所望の不揮発アルコールによるスルホニウムアルキルサルフェートのエステル交換反応によっても製造することができる。

【0175】

化合物(a)

エポキシ基、オキセタン基、およびビニルエーテル基から選択される少なくとも1つの基を有する化合物；および、

30

好適な化合物(a)は、

- ・ 酸素含有または硫黄含有飽和複素環を有する化合物、
- ・ カチオン性メカニズムによって重合可能なエチレン性不飽和化合物、
- ・ フェノールホルムアルデヒド樹脂、アクリル樹脂、アルキド樹脂、または熱硬化性官能基を有するポリエステル樹脂、のプレポリマー、
- ・ 熱硬化性化合物と、異なるメカニズム、例えば、フリーラジカルまたはUV照射、によって重合可能な化合物との混合物、
- ・ それらの混合物

である。

40

【0176】

酸素含有または硫黄含有飽和複素環を有する化合物(a)は、好ましくは、3個、4個、5個、または6個の環員を有する少なくとも1つの複素環を有する。

【0177】

酸素含有または硫黄含有飽和複素環を有する好ましい化合物(a)は、少なくとも1つのエポキシ基、オキセタン、オキシラン、環状アセタール、環状ラクトン、チイラン、チエタン、およびそれらの混合物を有する化合物から選択される。

【0178】

1つのエポキシ基を有する好適な化合物(a)は、酸化エチレン、酸化プロピレン、酸化スチレン、フェニルグリシジルエーテル、ブチルグリシジルエーテル、などである。

50

【0179】

本発明の好ましい実施形態において、化合物(a)は、エポキシ樹脂から選択される。「エポキシ樹脂」なる用語は、本発明の硬化性組成物の説明において用いられる場合、広い意味において理解され、複数(2つ、3つ、4つ、5つ、6つ、または7つ以上)のエポキシ基を有する、任意のモノマー性、ダイマー性、オリゴマー性、またはポリマー性エポキシ材料を包含する。「エポキシ樹脂」なる用語は、2つ以上のエポキシド基を有するプレポリマーも包含し、この場合、当該エポキシド基(オキシラン環)のいくつかは、ヒドロキシル基へと開環されていてもよい。当該用語は、部分的硬化エポキシ樹脂、すなわち、好適な硬化剤によって架橋されているエポキシ樹脂、も同一に扱う。構成要素(a)が部分的硬化エポキシ樹脂の場合、それは、依然としてカチオン重合可能な熱硬化性エポキシ基を依然として有している。「エポキシ樹脂」なる用語は、例えばカルボン酸またはアルコールとの反応によって得られる、エステル化またはエーテル化されたエポキシ樹脂などの修飾エポキシ樹脂も包含する。同様に、本発明による組成物において用いられる修飾エポキシ樹脂は、依然としてカチオン重合可能な熱硬化性エポキシ基を依然として有する。「エポキシ樹脂」なる用語の完全な説明は、例えば、Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry, 5th edition, on CD-ROM, 1997, Wiley-VCHの「Epoxy Resins」の章に見出せる。

10

【0180】

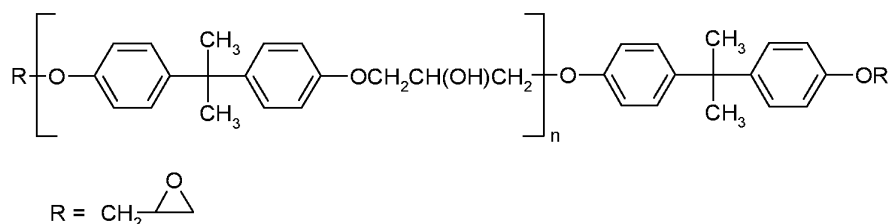
市販のエポキシ樹脂の大部分は、少なくとも2つの反応性水素原子を有する化合物、例えば、ポリフェノール、モノアミンおよびジアミン、アミノフェノール、複素環式イミドおよびアミド、脂肪族ジオールまたはポリオール、あるいは二量化脂肪酸など、にエピクロロヒドリンをカップリングさせることによって製造される。エピクロロヒドリンから誘導されるエポキシ樹脂は、グリシジル系樹脂と呼ばれる。

20

【0181】

現時点で市販されているエポキシ樹脂の大部分は、ビスフェノールAのジグリシジルエーテル(DGEBA樹脂)から誘導され、一般式：

【化21】



30

[式中、nは、0～約40を表す]を有する。

【0182】

他の重要なエポキシ樹脂は、フェノール系およびクレソール系エポキシノボラックであり、その例は、ビスフェノールFのジグリシジルエーテルから誘導されるエポキシ樹脂である。ノボラックは、ホルムアルデヒドとフェノールまたはクレゾールとの酸触媒縮合反応によって製造される。ノボラックをエポキシ化することによってエポキシノボラックが得られる。

40

【0183】

グリシジル系エポキシ樹脂の他のクラスは、例えば、脂肪族ジオール、例えば、ブタン-1,4-ジオール、ヘキサン-1,6-ジオール、ペンタエリトリール、または水素化ビスフェノールAなど、のグリシジルエーテル；芳香族グリシジルアミン、例えば、p-アミノフェノールのトリグリシジル付加体またはメチレンジアニリドのテトラグリシジルアミンなど；複素環式グリシジルイミドおよびアミド、例えば、トリグリシジルイソシアヌレートなど；ならびにグリシジルエステル、例えば、二量化リノール酸のジグリシジルエステルなど、から誘導される。

50

【0184】

エポキシ樹脂は、他のエポキシド（非グリシジルエーテルエポキシ樹脂）から誘導してもよい。その例は、脂環式ジエンのジエポキシド、例えば、3, 4-エポキシシクロヘキシルメチル 3, 4-エポキシシクロヘキサノカルボキシレート、および 4-エポキシエチル-1, 2-エポキシシクロヘキサンである。

【0185】

市販のエポキシ樹脂の例は、ビスフェノール A タイプのエポキシ樹脂、例えば、Dainippon Ink & Chemicals Inc. 製の Epiculon N-3050、N-7050、N-9050、および、XAC-5005、GT-7004、6484T、6099 など；ビスフェノール S タイプのエポキシ樹脂、例えば、Nippon Kayaku Co., Ltd. 製の BPS200、ACR Co. 製の EPX-30、Dainippon Ink & Chemicals Inc. 製の Epiculon EXA-1514 など；ビスフェノール F タイプのエポキシ樹脂、例えば、Tohto Kasei Co. 製の YDF-2004、YDF2007 など；ビスフェノールフルオレンタイプのエポキシ樹脂、例えば、Osaka Gas Chemicals 製の OGSOL PG、PG-100、EG、EG-210 など；ジグリシジルフタレート樹脂、例えば、Nippon Oil and Fats Co., Ltd. 製の Blemmer DGT など；複素環式エポキシ樹脂、例えば、Nissan Chemical Industries, Ltd. 製の TEPI C、Huntsman 製の Araldite PT810 など；ビシレノールタイプのエポキシ樹脂、例えば、Yuka Shell Co. 製の YX-4000 など；ビスフェノールタイプのエポキシ樹脂、例えば、Yuka Shell Co. 製の YL-6056 など；テトラグリシジルキシレノイルエタン樹脂、例えば、Tohto Kasei Co. 製の ZX-1063；ノボラックタイプのエポキシ樹脂、例えば、Nippon Kayaku Co., Ltd. 製の EPPN-201、EOCN-103、EOCN-1020、EOCN-1025、および BRRN、Asahi Chemical Industry Co., Ltd. 製の ECN-278、ECN-292、および ECN-299、Ciba Specialty Chemicals Inc. 製の GY-1180、ECN-1273、および ECN-1299、Tohto Kasei Co. 製の YDCN-220L、YDCN-220HH、YDCN-702、YDCN-704、YDPN-601、および YDPN-602、Dainippon Ink & Chemicals Inc. 製の Epiculon-673、N-680、N-695、N-770、および N-775 など；ビスフェノール A のノボラックタイプのエポキシ樹脂、例えば、Asahi Chemical Industry Co., Ltd. 製の EPX-8001、EPX-8002、EPPX-8060、および EPPX-8061、Dainippon Ink & Chemicals Inc. 製の Epiculon N-880 など；キレートタイプのエポキシ樹脂、例えば、Adeka 製の EPX-49-69 および EPX-49-30 など；グリオキサールタイプのエポキシ樹脂、例えば、Tohto Kasei Co. 製の YDG-414 など；アミノ基含有エポキシ樹脂、例えば、Tohto Kasei Co. 製の YH-1402、および ST-110、Yuka Shell Co. 製の YL-931 および YL-933 など；ゴム変性エポキシ樹脂、例えば、Dainippon Ink & Chemicals Inc. 製の Epiculon TSR-601、Adeka 製の EPX-84-2 および EPX-4061 など；ジシクロペンタジエンフェノール性タイプのエポキシ樹脂、例えば、Sanyo-Kokusaku Pulp Co., Ltd. 製の DCE-400 など；シリコーン変性エポキシ樹脂、例えば、Adeka 製の X-1359 など；ε-カプロラクトン変性エポキシ樹脂、例えば、Dicel Chemical Industries, Ltd. 製の Plaque G-402 および G-710 などである。

【0186】

他の重要なエポキシ樹脂は、分子中に少なくとも 1 つのエポキシド基を有するエチレン

10

20

30

40

50

性不飽和化合物、例えば、グリシジルアクリレート、グリシジルメタクリレート、3, 4-エポキシブチルアクリレート、3, 4-エポキシブチルメタクリレート、ビニルベンジルグリシジルエーテル、およびアリルグリシジルエーテルなど、と、分子中にエポキシド基を有さないエチレン性不飽和化合物とのコポリマーである。

【0187】

分子中にエポキシド基を有さないエチレン性不飽和化合物の例は、アルキル基中に1~20個の炭素原子を有するアクリル酸およびメタクリル酸の非置換および置換アルキルエステル、とりわけ、メチルアクリレート、メチルメタクリレート、エチルアクリレート、エチルメタクリレート、ブチルアクリレート、ブチルメタクリレート、2-エチルヘキシルアクリレート、2-エチルヘキシルメタクリレート、2-ヒドロキシエチルアクリレート、2-ヒドロキシエチルメタクリレート、2-ヒドロキシプロピルアクリレート、2-ヒドロキシプロピルメタクリレート、4-ヒドロキシブチルアクリレート、4-ヒドロキシブチルメタクリレート、1, 2-ジヒドロキシエチルアクリレート、および1, 2-ジヒドロキシエチルメタクリレートである。

10

【0188】

分子中にエポキシド基を有さないエチレン性不飽和化合物のさらなる例は、不飽和酸、例えば、アクリル酸およびメタクリル酸など、酸アミド、例えば、アクリルアミドおよびメタクリルアミドなど、ビニル芳香族化合物、例えば、スチレン、メチルスチレン、ヒドロキシスチレン、およびビニルトルエンなど、ニトリル、例えば、アクリロニトリルおよびメタクリロニトリルなど、ハロゲン化ビニルおよびハロゲン化ビニリデン、例えば、塩化ビニルおよびフッ化ビニリデンなど、ビニルエステル、例えば、酢酸ビニルなど、ならびにヒドロキシル含有モノマー、例えば、ヒドロキシエチルアクリレートおよびヒドロキシエチルメタクリレートなど、である。

20

【0189】

分子中にエポキシド基を有さないエチレン性不飽和化合物のさらなる例は、N-フェニルマレイミド、N-シクロヘキシルマレイミド、およびN-ベンジルマレイミドである。

【0190】

好適なオキセタン(a)は、トリメチレンオキシド、3, 3-ジメチルオキセタン、3, 3-ジ(クロロメチル)オキセタン、3-エチル-3-ヒドロキシメチルオキセタン、2-エチルヘキシルオキセタン、キシレンビスオキセタン、3-エチル-3-[[(3-エチルオキセタン-3-イル) メトキシ] メチル] オキセタンなどである。

30

【0191】

市販のオキセタンの例は、例えば、Toagosei Co., Ltd. 製のArn Oxetane OXT-101、OXT-212、OXT-121、OXT-221である。

【0192】

他の重要なオキセタン樹脂は、分子中に少なくとも1つのオキセタン基を有するエチレン性不飽和化合物、例えば、3-メチル-3-アクリロイルオキシメチルオキセタン、3-メチル-3-メタクリロイルオキシメチルオキセタン、3-エチル-3-アクリロイルオキシメチルオキセタン、および3-エチル-3-メタクリロイルオキシメチルオキセタンなど、と、上記において言及されるような分子中にエポキシド基を有さないエチレン性不飽和化合物とのコポリマーである。

40

【0193】

好適なオキサラン(a)は、テトラヒドロフラン、2, 3-ジメチルテトラヒドロフランなどである。

【0194】

好適な環状アセタール(a)は、トリオキサン、1, 3-ジオキサラン、1, 3, 6-トリオキサシクロオクタンなどである。

【0195】

好適な環状ラクトン(a)は、β-プロピオラクトン、ε-カプロラクトン、β-プロ

50

ピオラクトンおよびε-カプロラクトンのアルキル誘導体などである。

【0196】

好適なチイラン(a)は、エチレンスルフィド、1,2-プロピレンスルフィド、チオエピクロロヒドリンなどである。

【0197】

好適なチエタン(a)は、1,3-プロピレンスルフィド、3,3-ジメチルチエタンなどである。

【0198】

さらなる好適な化合物(a)は、モノオレフィンおよびジオレフィン、スチレン、アリルベンゼン、ビニルシクロヘキサン、ビニルエーテル、ビニルエステル、ジヒドロピラン誘導体、ならびにそれらの混合物から選択される、カチオンメカニズムによって重合可能なエチレン性不飽和化合物である。

10

【0199】

好適なモノオレフィン(a)およびジオレフィン(a)は、イソブテン、1-オクテン、ブタジエン、イソプレンなどである。

【0200】

好適なビニルエーテル(a)は、ビニルメチルエーテル、ビニルイソブチルエーテル、エチレングリコールジビニルエーテルなどである。

【0201】

好適なビニルエステル(a)は、酢酸ビニル、ビニルステアレートなどである。

20

【0202】

好適なジヒドロピラン誘導体(a)は、3,4-ジヒドロ-2H-ピラン-2-カルボン酸エステル、2-ヒドロキシメチル-3,4-ジヒドロ-2H-ピランなどである。

【0203】

さらなる好適な化合物(a)は、熱硬化性化合物と、異なるメカニズム、例えば、フリーラジカルまたはUV照射、によって重合可能な化合物との混合物である。好適なのは、例えば、エポキシ樹脂と、モノマー性もしくはオリゴマー性のアクリル酸エステルもしくはメタクリル酸エステルとの混合物である。この場合、重合は、カチオンメカニズムと、異なるメカニズム、例えば、フリーラジカル重合またはUV硬化、とによって生じる。

【0204】

30

本発明による熱硬化性組成物は、

- 溶媒
- 反応性希釈剤
- 反応性希釈剤とは異なる、エチレン性不飽和化合物
- 化合物(a)、反応性希釈剤、およびエチレン性不飽和化合物とは異なるバインダー樹脂

— 光開始剤

— フリーラジカル開始剤

— 増感剤

— 顔料

40

— 充填剤

— 分散剤

— 式I aおよびI bの化合物とは異なる熱硬化促進剤

— さらなる添加剤、ならびに

— それらの混合物

から選択される少なくとも1つのさらなる構成要素を含んでもよい。

【0205】

以下において、アクリル酸およびメタクリル酸から誘導され得る化合物は、場合によって、アクリル酸から誘導される化合物に「(メタ)」なる音節を付け加えることによって簡略化される。

50

【0206】

溶媒

本発明の熱硬化性組成物は、溶媒系または水性系のいずれかであり得る。溶媒系は、この文脈において、コーティング組成物の揮発性成分が、実質的に、すなわち、揮発成分全体に対して少なくとも51質量%、好ましくは少なくとも60質量%程度まで、有機溶媒（反応性希釈剤が存在する場合には、それを含む）を含むことを意味する。水系は、この文脈において、コーティング組成物の揮発性成分が、実質的に、すなわち、揮発性成分全体に対して少なくとも51質量%、好ましくは少なくとも60質量%、より好ましくは少なくとも80質量%程度まで、水を含むことを意味する。コーティング組成物は、原則として、揮発成分および非揮発成分で構成される。コーティング組成物の非揮発分は、以下の試験条件：（1±0.1）gの初期質量、23℃で24時間乾燥、その後（DIN EN ISO 3251付録B1に従って）105℃で1時間乾燥、において、DIN EN ISO 3251に従って測定することができる。揮発分は、総量と非揮発分との差から得られる。

10

【0207】

溶媒系のコーティング組成物とは対照的に、水性コーティング組成物は、実質的にそれらの溶媒として水を有しており、有機溶媒は、わずかかまたは全く含まない。水性コーティング組成物において、有機溶媒の含有率は、当該コーティング組成物に含まれる揮発成分の総質量に対して、好ましくは30質量%以下、より好ましくは20質量%以下、とりわけ10質量%以下である。

20

【0208】

溶媒系のコーティング組成物にとって好適な溶媒は、脂肪族炭化水素、脂環式炭化水素、複素環式炭化水素、芳香族炭化水素およびヘテロ芳香族炭化水素、脂肪族カルボン酸とC₂~C₁₀アルカノールもしくはポリアルキレングリコールとのエステル、ケトン、ラクトン、ラクタム、エーテル、一価もしくは多価アルコール、ならびにそれらの混合物である。当該溶媒は、好ましくは、トルエン、キシレン、ソルベントナフサ、ホワイトスピリット、リグロイン、酢酸エチル、酢酸プロピル、酢酸ブチル、酢酸アミル、酢酸メトキシエチル、酢酸メトキシプロピル、酢酸エトキシエチル、酢酸エトキシプロピル、エトキシプロピオン酸エチル、アセトン、メチルエチルケトン、メチルイソブチルケトン、シクロペンタノン、シクロヘキサノン、N-メチルピロリドン、ジプロピレングリコール、ジブチルグリコール、メタノール、エタノール、n-プロパノール、イソプロパノール、ブタノール、プロピレングリコールモノメチルエーテルアセテート、プロピレングリコールモノメチルエーテル、γ-ブチロラクトン、エチルラクテート、およびそれらの混合物から選択される。

30

【0209】

好ましくは、当該溶媒の沸点は、熱硬化性組成物の硬化中に当該溶媒が樹脂組成物から蒸発するような沸点である。

【0210】

代替の実施形態において、当該重合は、無溶媒（溶融状態）においても実施可能である。

40

【0211】

反応性希釈剤

場合により、溶媒の使用は、得られる樹脂の体積に（収縮）、または細孔の形成に、望ましくない減少を生じ、これらは、硬化された材料の機械特性、例えば、破壊抵抗性または表面特性など、に対して悪い影響を与え得る。

【0212】

通常の溶媒の欠点は、反応性希釈剤の使用により回避することができる。溶媒と同様、反応性希釈剤は低分子量の物質であるが、用いられた構成要素（a）における相補的な官能基および／または追加の硬化剤の官能基と反応して、共有結合を形成することができる官能基を有している点において、通常の溶媒と異なっている。溶媒と同様、反応性希釈剤

50

は、樹脂の粘度を下げる。反応性希釈剤は、硬化中に蒸発せず、したがって、硬化中に、樹脂マトリックスが形成されるときにその中に共有結合によって組み入れられる。好適な反応性希釈剤は、好ましくは250ダルトン以下、例えば、100～250ダルトン、の分子量を有する、低分子量の化合物である。当該反応性希釈剤は、好ましくはオキシラン基、より好ましくはグリシジル基を、例えば、グリシジルエーテル基、グリシジルエステル基、またはグリシジリアミド基などの形態において有する。エポキシド価、すなわち、1分子あたりのエポキシド基の数は、当該反応性希釈剤の場合、典型的には1～4、とりわけ1.1～3、特に1.2～2.5である。これらの中で好ましいのは、特に、好ましくは1つ、2つ、3つ、または4つのOH基ならびに2～20個または4～20個のC原子を有する脂肪族アルコールもしくは脂環式アルコールのグリシジルエーテル、ならびに、4～20個のC原子を有する脂肪族ポリエーテルオール

10

のグリシジルエーテルである。その例は、以下の通り：

- － 2～20個のC原子を有する飽和アルカノールのグリシジルエーテル、例えば、 $C_2 \sim C_{20}$ -アルキルグリシジルエーテル、例えば、2-エチルヘキシルグリシジルエーテルなど；

- － 2～20個のC原子を有する飽和アルカンポリオールのグリシジルエーテル、その例は、1,4-ブタンジオール、1,6-ヘキサンジオール、トリメチロールプロパン、またはペンタエリトリールのグリシジルエーテルであり、前述のグリシジルエーテル化合物は、概して、1～3.0、好ましくは1.2～2.5のエポキシド価を有する；

- － 4～20個のC原子を有するポリエーテルオールのグリシジルエーテル、その例は、ジエチレングリコール、トリエチレングリコール、テトラエチレングリコール、ジプロピレングリコール、およびトリプロピレングリコールのグリシジルエーテルである；

20

- － 5～20個のC原子を有する脂環式アルコールのグリシジルエーテル、例えば、シクロヘキサン-1,4-ジールのビスグリシジルエーテル、環-水素化ビスフェノールAもしくは環-水素化ビスフェノールFのビスグリシジルエーテルなど；

- － 2～4個のC原子を有するポリアルキレンオキシドのグリシジルエーテル、例えば、ポリエチレンオキシドまたはポリプロピレンオキシドなど；

ならびに上記の物質の混合物、である。

【0213】

反応性希釈剤に対する概説は、P. K. T. Oldring (Editor), Chemistry & Technology of UV & EB Formulations for Coatings, Inks & Paints, Vol. II, Chapter III: Reactive Diluents for UV & EB Curable Formulations, Wiley and SITA Technology, London 1997に見出すことができる。なお、この文献の開示内容は参考として本明細書で援用される。

30

【0214】

エチレン性不飽和化合物

本発明による熱硬化性組成物は、少なくとも1種のエチレン性不飽和化合物を含んでいてもよい。結果として得られる組成物は、熱だけでなく、異なる硬化メカニズム、特にUV照射、によっても硬化可能である。UV硬化性かつ熱硬化性である組成物は、二元硬化性組成物とも呼ばれる。

40

【0215】

好適なエチレン性不飽和化合物は、さらに、少なくとも1つの熱硬化性官能基を有していてもよい。好ましいのは、分子中に、少なくとも1つのエポキシド基を、とりわけグリシジルエーテル基の形態において有するようなエチレン性不飽和化合物である。分子中にエポキシド基を全く有していないエチレン性不飽和化合物も好適であり得る。好ましいのは、アクリル酸またはメタクリル酸のエステルである。

【0216】

分子中に少なくとも1つのエポキシド基を有するようなエチレン性不飽和モノマーの例

50

は、グリシジルアクリレート、グリシジルメタクリレート、およびアリルグリシジルエーテルである。

【0217】

分子中にエポキシド基を全く有していないエチレン性不飽和モノマー物の例は、アルキル基中に1～20個の炭素原子を有するアクリル酸およびメタクリル酸のアルキルエステル、とりわけ、メチルアクリレート、メチルメタクリレート、エチルアクリレート、エチルメタクリレート、ブチルアクリレート、ブチルメタクリレート、2-エチルヘキシルアクリレート、および2-エチルヘキシルメタクリレートである。

【0218】

分子中にエポキシド基を全く有していないエチレン性不飽和モノマーのさらなる例は、不飽和酸、例えば、アクリル酸およびメタクリル酸など、酸アミド、例えば、アクリルアミドおよびメタクリルアミドなど、ビニル芳香族化合物、例えば、スチレン、メチルスチレン、およびビニルトルエンなど、ニトリル、例えば、アクリロニトリルおよびメタクリロニトリルなど、ハロゲン化ビニルおよびハロゲン化ビニリデン、例えば、塩化ビニルおよびフッ化ビニリデンなど、ビニルエステル、例えば、酢酸ビニルなど、ならびにヒドロキシル含有モノマー、例えば、ヒドロキシエチルアクリレートおよびヒドロキシエチルメタクリレートなど、である。

【0219】

少なくとも2つのエチレン性不飽和二重結合を有しかつ分子中にエポキシド基を全く有していないモノマーの例は、ジオールまたはポリオール、好ましくは脂肪族多価ポリアルコールおよびそれらのアルコキシル化生成物、から誘導されるアクリル酸のエステルである。好ましくは、ヘキサンジオールジアクリレート、ヘキサンジオールジメタクリレート、オクタンジオールジアクリレート、オクタンジオールジメタクリレート、ノナンジオールジアクリレート、ノナンジオールジメタクリレート、デカンジオールジアクリレート、デカンジオールジメタクリレート、シクロヘキサンジオールジ(メタ)アクリレート、ビス(ヒドロキシメチルエチル)シクロヘキサンジ(メタ)アクリレート、トリメチロールエタントリ(メタ)アクリレート、トリメチロールプロパントリ(メタ)アクリレート、ペンタエリトリールテトラ(メタ)アクリレート、ジペンタエリトリールペンタ(メタ)アクリレート、ジペンタエリトリールヘキサ(メタ)アクリレート、およびそれらの混合物から選択される。

【0220】

バインダー樹脂

本発明による熱硬化性組成物は、前述の化合物(a)、反応性希釈剤、およびエチレン性不飽和化合物とは異なる、少なくとも1種のバインダー樹脂を含んでいてもよい。

【0221】

当該追加のバインダー樹脂は、物理的に乾燥させたポリマー組成物、自己架橋性ポリマー組成物、UV硬化性ポリマー組成物、熱硬化性ポリマー組成物、架橋剤を添加することにより架橋可能であるポリマー組成物(二成分分散液)、または二元硬化系であり得る。

【0222】

自己架橋性または架橋可能なポリマーは、互いと反応して、または含まれる架橋剤物質と反応して結合を形成する反応性基を有する。自己架橋性ポリマーは、エチレン性不飽和モノマーをベースとし得る。さらに、好適なのは、対応するモノマーの組み入れによって、および/またはポリウレタン形成性モノマーの化学量論的選択によって所望の官能基を持たせた、ポリウレタンベースのポリマーである。

【0223】

熱硬化性ポリマー組成物の場合、当該組成物は、ポリウレタンをベースとし得、またはエチレン性不飽和モノマーのポリマーをベースとし得、当該ポリマー構成要素は、ヒドロキシル基、ケト基、尿素基、エポキシド基、および/またはカルボキシル基を有しており、ならびに、少なくとも1種の低分子量またはポリマー性の架橋剤は、上記において指定されるような、少なくとも2つの反応性基を有している。

【0224】

バインダー樹脂の例は、アクリレートおよびメタクリレートのホモポリマーおよびコポリマー、例えば、メチルメタクリレート／エチルアクリレート／メタクリル酸のコポリマー、ポリ（メタクリル酸アルキルエステル）、ポリ（アクリル酸アルキルエステル）など；フェノール樹脂、セルロース誘導体、例えば、セルロースエステルおよびエーテル、例えば、セルロースアセテート、セルロースアセテートブチレート、メチルセルロース、エチルセルロースなど；ポリビニルブチラール、ポリビニルホルマール、ポリオレフィン、環化ゴム、ポリエーテル、例えば、ポリエチレンオキシド、ポリプロピレンオキシド、ポリテトラヒドロフランなど；ポリスチレン、ポリカーボネート、ポリウレタン、塩素化ポリオレフィン、ポリ塩化ビニル、塩化ビニル／塩化ビニリデンのコポリマー、塩化ビニリデンとアクリロニトリル、メチルメタクリレート、および酢酸ビニルとのコポリマー、ポリ酢酸ビニル、コポリ（エチレン／酢酸ビニル）、ポリカプロラクタムおよびポリ（ヘキサメチレンアジパミド）などのポリマー、ポリ（エチレングリコールテレフタレート）およびポリ（ヘキサメチレングリコールスクシネート）などのポリエステル；ならびにポリアミド、である。

10

【0225】

光開始剤

光開始剤は、本発明による熱硬化性組成物の総質量に対して、好ましくは0.001質量％～15質量％、より好ましくは0.01質量％～10質量％の量において使用される。

20

【0226】

本発明による熱硬化性組成物にとって好適な光開始剤は、光の作用下で反応性カチオン（例えば、ルイス酸またはブレンステッド酸）を生成するため、カチオン性重合を開始するのに好適である、いわゆるカチオン性光開始剤である。好適なカチオン性光開始剤は、特に、カチオンの中心原子として窒素、リン、酸素、硫黄、セレンウム、またはヨウ素を有する、安定な有機オニウム塩から誘導される。好ましいのは、錯体アニオンを有する芳香族スルホニウムおよびヨードニウム塩、フェニアシルスルホニウム塩、ヒドロキシルフェニルスルホニウム塩、およびスルホキソニウム塩である。アルミナ有機化合物の存在下でのUV照射においてシラノールを放出する有機シリコン化合物を用いることもできる。

30

【0227】

この種類の開始剤は、例えば、BASF SEからIrgacure（登録商標）250の商標名で、Union CarbideからCYRACURE（登録商標）UVI-6990、CYRACURE（登録商標）UVI-6974の商標名で、DegussaからDEGACURE（登録商標）K185の商標名で、AdekaからSP-55、SP-150、SP-170の商標名で、General ElectricからGE UVE 1014の商標名で、SartomerからSarCat（登録商標）CD1012、SarCat（登録商標）KI-85、SarCat（登録商標）CD1010、SarCat（登録商標）CD1011の商標名で市販されている製品である。

40

【0228】

増感剤によって励起されるオニウム塩も、好適なカチオン性光開始剤である。好適な増感剤については、下記において言及する。

【0229】

UV硬化性組成物は、一般的に、エチレン性不飽和二重結合の重合を開始することができる少なくとも1種の光開始剤（ラジカル光開始剤）を含む。例えば、ベンゾフェノンおよびその誘導体、例えば、4-フェニルベンゾフェノンおよび4-クロロベンゾフェノンなど、ミヒラーケトン、アントロン、アセトフェノン誘導体、例えば、1-ベンゾイルシクロヘキサン-1-オール、2-ヒドロキシ-2, 2-ジメチルアセトフェノンなど、ベンゾインおよびベンゾインエーテル、例えば、メチル、エチル、およびブチルベンゾインエーテルなど、ベンジルケタール、例えば、ベンジルジメチルケタール、2-メチル-1

50

ー（４－メチルチオフェニル）－２－モルホリノプロパン－１－オン、（４－モルホリノベンゾイル）－１－ベンジル－１－ジメチルアミノプロパン、（４－モルホリノベンゾイル）－１－（４－メチルベンジル）－１－ジメチルアミノプロパンなど、アントラキノンおよびその誘導体、例えば、β－メチルアントラキノンおよびtert－ブチルアントラキノンなど、オキシムエステル、例えば、１，２－オクタンジオン１－〔４－（フェニルチオ）フェニル〕－２－（Ｏ－ベンゾイルオキシム）およびエタノン－１－〔９－エチル－６－（２－メチルベンゾイル）－９H－カルバゾール－３－イル〕－１－（Ｏ－アセチルオキシム）など、アシルホスフィンオキシド、例えば、２，４，６－トリメチルベンゾイルジフェニルホスフィンオキシド、エチル－２，４，６－トリメチルベンゾイルフェニルホスフィネートなど、ならびにビスアシルホスフィンオキシド、例えば、ビス（２，４，６－トリメチルベンゾイル）フェニルホスフィンオキシドなど、が挙げられる。この種類の開始剤は、例えば、BASF SEからIrgacure（登録商標） 184、Darocur（登録商標） 1173、Irgacure（登録商標） 127、Irgacure（登録商標） 2959、Irgacure（登録商標） 651、Irgacure（登録商標） 907、Irgacure（登録商標） 369、Irgacure（登録商標） 379、Irgacure（登録商標） OXE01、Irgacure（登録商標） OXE02、Lucirin（登録商標） TPO、Irgacure（登録商標） 819、Irgacure（登録商標） 784、Irgacure（登録商標） 754の商標名で、AdekaからAdeka Optomer N－シリーズ N－1414、N－1717、N－1919の商標名で、またはRahnからGenocure（登録商標）の商標名で市販されている製品である。

【0230】

フリーラジカル開始剤

本発明による熱硬化性組成物に好適なフリーラジカル開始剤は、当該目的のために慣例的であるペルオキシおよび／またはアゾ化合物であり、その例は、アルカリ金属ペルオキシジスルフェートまたはアンモニウムペルオキシジスルフェート、ジアセチルペルオキシド、ジベンゾイルペルオキシド、スクシニルペルオキシド、ジ－tert－ブチルペルオキシド、tert－ブチルペルベンゾエート、tert－ブチルペルピバレート、tert－ブチルペルオキシ－２－エチルヘキサノエート、tert－ブチルペルマレエート、クメンヒドロペルオキシド、ジイソプロピルペルオキシジカルバメート、ビス（オートルオイル）ペルオキシド、ジデカノイルペルオキシド、ジオクタノイルペルオキシド、ジラウロイルペルオキシド、tert－ブチルペルイソブチレート、tert－ブチルペルアセテート、ジ－tert－アミルペルオキシド、tert－ブチルヒドロペルオキシド、アゾビスイソブチロニトリル、２，２’－アゾビス（２－アミジノプロパン）ジヒドロクロリド、または２，２’－アゾビス（２－メチルブチロニトリル）である。これらの開始剤の混合物も好適である。

【0231】

エチレン性不飽和二重結合を有する化合物をベースとする本発明による組成物は、高温への曝露において、これらの基の重合を生じる、したがってフリーラジカル架橋を生じる、少なくとも１つを含み得る。熱不安定性フリーラジカル開始剤、例えば、有機過酸化物、有機アゾ化合物など、またはC－C開裂開始剤、例えば、ジアルキルペルオキシド、ペルオキシカルボン酸、ペルオキシジカーボネート、ペルオキシドエステル、ヒドロペルオキシド、ケトンペルオキシド、アゾジニトリル、またはベンズピナコールシリルエーテルなど、が挙げられる。

【0232】

フリーラジカル開始剤は、本発明の熱硬化性組成物の総質量に対して、好ましくは０．００１質量％～１５質量％、より好ましくは０．０１質量％～１０質量％の量において使用される。

【0233】

増感剤

増感剤は、本発明による熱硬化性組成物の総質量に対して、好ましくは0.001質量%～15質量%、より好ましくは0.01質量%～10質量%の量において使用される。

【0234】

好適な増感剤は、通常、前述のカチオン性光開始剤またはラジカル光開始剤のうちの少なくとも1つと組み合わせて用いられる。カチオン性光開始剤にとって好ましい増感剤は、多環式芳香族化合物、例えば、アントラセン、ナフタレン、およびそれらの誘導体など、である（米国特許6,313,188号、欧州特許第0927726号、国際公開第2006/073021号、米国特許第4,997,717号、米国特許第6,593,388号、および国際公開第03/076491号も参照のこと）。好ましい組み合わせは、多環式芳香族化合物から選択される少なくとも1種の増感剤と、少なくとも1種のヨードニウム光開始剤とを含む。ラジカル光開始剤にとって好ましい増感剤は、芳香族化合物、例えば、チオキサントン、ベンゾフェノン、クマリン、およびそれらの誘導体など、である。

10

【0235】

顔料

本発明の熱硬化性組成物は、少なくとも1種の顔料を含んでもよい。原則として、好ましいのは、無機顔料、有機顔料、およびそれらの混合物である。当該顔料は、着色顔料、効果顔料、透明顔料、またはそれらの混合物であり得る。

【0236】

好適な無機顔料の例としては、白色顔料、例えば、二酸化チタン（好ましくはルチル形態において）、硫酸バリウム、酸化亜鉛、硫化亜鉛、塩基性炭酸鉛、三酸化アンチモン、リトポン（硫化亜鉛＋硫酸バリウム）など、あるいは有色顔料、例えば、酸化鉄、カーボンブラック、グラファイト、亜鉛黄、亜鉛緑、ウルトラマリン、マンガン黒、アンチモン黒、マンガンバイオレット、パリブルー、またはシュヴァインフルトグリーンなど、が挙げられる。好適な有機着色顔料は、様々な発色を有する多種多様な染料のクラスから用いることができ、その例は、アントラキノン染料、モノアゾ染料およびジアゾ染料、インディゴ染料およびインディゴイド染料、キノフタロン、メチン染料およびアザメチン染料、ナフタルイミド染料、ナフトキノン染料、ニトロ染料、キナクリドン顔料、フタロシアニン顔料、イソインドリノン顔料、および金属錯体顔料など、である。好適な有機着色顔料の例は、インダンスレンブルー、クロモフタルレッド、Irgazine orange、およびHelio greenである。

20

30

【0237】

使用される効果顔料は、例えば、金属フレーク顔料、例えば、独国特許出願公開第3636183号による市販のアルミニウム青銅、クロメート処理されたアルミニウム青銅、および市販のステンレス鋼青銅など、ならびに非金属効果顔料、例えば、真珠光沢顔料および干渉顔料など、であり得る。さらに好適なのは、光散乱を増加させるための空気含有物を有する合成白色顔料、例えば、Rhopaque（登録商標）分散液など、である。好適な効果顔料の他の例は、Roempp-Lexikon, Lacke und Druckfarben, Georg Thieme Verlag, 1998, page 176より明らかである。

40

【0238】

熱硬化性組成物の一部としての顔料の含有率は、非常に幅広く変わり得る。有利には、当該含有率は、各場合において本発明の当該熱硬化性組成物の総質量に対して、1質量%～95質量%、好ましくは2質量%～90質量%、より好ましくは3質量%～85質量%、およびとりわけ4質量%～80質量%である。

【0239】

充填剤

好適な充填剤は、有機充填剤および無機充填剤であり、その例は、アルミノケイ酸塩、例えば、長石など、ケイ酸塩、例えば、カオリン、タルク、マイカ、マグネサイトなど、アルカリ土類金属炭酸塩、例えば、炭酸カルシウム（例えば、カルサイトまたはチョーク

50

の形態のもの)、炭酸マグネシウム、ドロマイトなど、アルカリ土類金属硫酸塩、例えば、硫酸カルシウム、二酸化ケイ素などである。好適な有機充填剤は、例えば、織物繊維、セルロース繊維、ポリエチレン繊維、または木粉である。コーティング材料においては、当然のことながら、微粉化された充填剤が好ましい。当該充填剤は、個々の構成要素として使用してもよい。実際には、充填剤の混合物が特に適切であることが判明しており、その例は、炭酸カルシウム／カオリン、炭酸カルシウム／タルクである。さらなる詳細は、Roempp-Lexikon, Lacke und Druckfarben, Georg Thieme Verlag, 1998, pages 250 ff., "fillers"を参照されたい。

【0240】

コーティング組成物の一部としての充填剤の含有率は、各場合において本発明のコーティング組成物の総質量に対して、好ましくは0質量%～95質量%、より好ましくは0.5質量%～90質量%、特段に1質量%～75質量%、とりわけ4質量%～80質量%である。

【0241】

分散剤

本発明の熱硬化性組成物は、少なくとも1種の分散剤も含んでいてもよい。好適な分散剤は、原則として、既知の乳化剤および保護コロイド（界面活性物質）である。

【0242】

好適な乳化剤は、アニオン性、非イオン性、およびカチオン性乳化剤である。分散剤は、特に熱硬化性組成物が水性媒体を含む場合に使用される。「水性媒体」なる用語は、水ならびに、水と少なくとも1種の水混和性有機溶媒との混合物を表す。特定の実施形態において、当該熱硬化性組成物は、水性コーティング組成物として配合される。

【0243】

好ましいのは、保護コロイドとは対照的に、相対分子量が典型的には2000未満の乳化剤である。それらは、アニオン性、カチオン性、または非イオン性であってもよく、好ましいのは、アニオン性乳化剤、および非イオン性乳化剤とアニオン性乳化剤の組み合わせである。アニオン性乳化剤としては、例えば、米国特許第4,269,749号に記載されている、アルキルサルフェート（アルキル基： $C_8 \sim C_{12}$ ）、エトキシ化アルカノール（EO価：2～50、アルキル基： $C_{12} \sim C_{18}$ ）の硫酸モノエステルおよびエトキシ化アルキルフェノール（EO価：3～50、アルキル基： $C_4 \sim C_9$ ）の硫酸モノエステル、アルキルスルホン酸（アルキル基： $C_{12} \sim C_{18}$ ）、アルキルアリールスルホン酸（アルキル基： $C_9 \sim C_{18}$ ）、ならびにモノーおよびジアルキルジフェニルエーテルスルホネート、のアルカリ金属塩およびアンモニウム塩が挙げられる。好適な非イオン性乳化剤は、芳香脂肪族または脂肪族非イオン性乳化剤であり、その例は、エトキシ化モノー、ジー、およびトリアルキルフェノール（EO価：3～50、アルキル基： $C_4 \sim C_9$ ）、長鎖アルコールのエトキシレート（EO価：3～50、アルキル基： $C_8 \sim C_{36}$ ）、およびポリエチレンオキシド／ポリプロピレンオキシドブロックコポリマーである。好ましいのは、長鎖アルカノールのエトキシレート（アルキル基： $C_{10} \sim C_{22}$ 、平均エトキシ価：3～50）、およびこれらのエトキシレート、特に好ましいのは、直鎖状または分岐鎖状の $C_{12} \sim C_{18}$ アルキル基と8～50のエトキシ価とを有する、オキシプロセスアルコールおよび天然アルコールをベースとするものである。

【0244】

好適な保護コロイドは、例えば、ポリビニルアルコール、デンプン誘導体、およびセルロース誘導体、あるいはビニルピロリドンを含むコポリマーである。さらなる好適な保護コロイドについての包括的な説明は、Houben-Weyl, Methoden der organischen Chemie, volume XIV/1, Makromolekulare Stoffe, Georg-Thieme-Verlag, Stuttgart 1961, pp. 411-420に記載されている。

【0245】

10

20

30

40

50

好適な分散剤の他の例は、ポリマー性分散剤である。

【0246】

ポリマー性分散剤としては、顔料親和性基を有する高分子量ポリマーが挙げられる。その例は、例えばスチレン誘導体、(メタ)アクリレート、および(メタ)アクリルアミドなどから構成されるランダムコポリマー、ならびに後修飾によって修飾されたそのようなランダムコポリマー；例えばスチレン誘導体、(メタ)アクリレート、および(メタ)アクリルアミドなどから構成されるブロックコポリマーおよび／または楕形ポリマー、ならびに後修飾によって修飾されたそのようなブロックコポリマーおよび／または楕形ポリマー；例えばポリエステルでクラフト化されているポリエチルエンイミン；例えばポリエステルでクラフト化されているポリアミン；ならびに多くの種類の(修飾)ポリウレタン、

10

【0247】

ポリマー性分散剤を用いてもよい。好適なポリマー性分散剤は、例えば、BYK製のDISPERBYK(登録商標) 101、115、130、140、160、161、162、163、164、166、168、169、170、171、180、182、2000、2001、2009、2020、2025、2050、2090、2091、2095、2096、2150、Ciba製のCiba(登録商標) EFKA(登録商標) 4008、4009、4010、4015、4046、4047、4050、4055、4060、4080、4300、4310、4330、4340、4400、4401、4402、4403、4406、4500、4510、4520、4530、4540、4550、4560、Ajinomoto Fine Techno製のPB(登録商標) 711、821、822、823、824、827、Lubrizol製のSOLSPERSE(登録商標) 1320、13940、17000、20000、21000、24000、26000、27000、28000、31845、32500、32550、32600、33500、34750、36000、36600、37500、39000、41090、44000、53095、およびそれらの組み合わせである。

20

【0248】

分散剤として、Ciba(登録商標) EFKA(登録商標) 4046、4047、4060、4300、4310、4330、4340、DISPERBYK(登録商標) 161、162、163、164、165、166、168、169、170、2000、2001、2020、2050、2090、2091、2095、2096、2105、2150、PB(登録商標) 711、821、822、823、824、827、SOLSPERSE(登録商標) 24000、31845、32500、32550、32600、33500、34750、36000、36600、37500、39000、41090、44000、53095、およびそれらの組み合わせを使用することが好ましい。

30

【0249】

好適な質感向上剤は、例えば、脂肪酸(例えば、ステアリン酸またはベヘン酸)、ならびに脂肪族アミン(例えば、ラウリルアミンおよびステアリルアミン)である。さらに、脂肪アルコールまたはエトキシ化脂肪アルコール、ポリオール、例えば、脂肪族1, 2-ジオールなど、またはエポキシ化大豆油、ワックス、樹脂酸、および樹脂酸塩を、この目的のために使用してもよい。

40

【0250】

好適な顔料誘導体は、例えば、銅フタロシアニン誘導体、例えば、Ciba製のCiba(登録商標) EFKA(登録商標) 6745、Lubrizol製のSOLSPERSE(登録商標) 5000、12000、BYK製のSYNERGIST 2100など、ならびにアゾ誘導体、例えば、Ciba(登録商標) EFKA(登録商標) 6750、SOLSPERSE(登録商標) 22000、およびSYNERGIST 2105など、である。

50

【0251】

上記において言及された、顔料のための分散剤および界面活性剤は、例えば、レジスト配合物として使用される本発明の組成物において、特にカラーフィルター配合物において、用いられる。

【0252】

本発明の熱硬化性組成物が少なくとも1種の界面活性物質を含む場合、その含有率は、当該組成物の総質量に対して、典型的には0.01質量%～10質量%、好ましくは0.1質量%～5質量%である。

【0253】

式I aおよびI bの化合物とは異なる熱硬化促進剤

10

本発明による熱硬化性組成物は、1種以上のさらなる熱硬化促進剤を含んでいてもよく、それらは、既知の方式において、バインダーの反応性官能基の性質に依存する。

【0254】

好適な熱硬化促進剤触媒は、有機酸または無機酸のスルホニウム塩およびホスホニウム塩、イミダゾールおよびイミダゾール誘導体、第四級アンモニウム化合物、ならびにアミンである。

【0255】

市販の熱硬化促進剤の例は、Sanshin Chemical製のSan-Aid SIシリーズ、SI-60L、SI-80L、SI-100L、SI-110L、SI-145、SI-150、SI-160、SI-180Lである。

20

【0256】

所望の場合、当該熱硬化促進剤は、好ましくは、本発明の熱硬化性組成物の総質量に対して、0.001質量%～約10質量%の量において使用される。

【0257】

好ましい実施形態では、式I aおよびI bの化合物と異なる熱硬化促進剤を必要としない。

【0258】

さらなる添加剤

所望の用途を考慮して特定の適用特性を変更するために、下記のような様々な既知の添加剤を本発明の熱硬化性組成物に加えることができる。

30

【0259】

好適なさらなる添加剤は、硬化剤、架橋剤、強化材料、染料、流動調整補助剤、UV安定化剤、熱安定化剤、耐候性向上剤、レオロジー調整剤、難燃化剤、酸化防止剤、変色防止剤、殺生物剤、帯電防止剤、可塑剤、潤滑剤、滑剤、湿潤剤、皮膜形成補助剤、接着促進剤、腐食防腐剤、不凍剤、消泡剤、離型剤、光潜在性酸など、ならびにそれらの混合物から選択される。

【0260】

これらは、それぞれ、そのような添加剤にとって典型的な量において含まれる。

【0261】

硬化剤

40

本発明による組成物は、少なくとも1種の硬化剤を含有していてもよい。

【0262】

硬化剤は、特に、当該化合物(a)がエポキシ樹脂を含む場合に使用される。

【0263】

好適な硬化剤としては、脂肪族および芳香族ポリアミン、ポリアミドアミン、ウロン、アミド、グアニジン、アミノプラストおよびフェノプラスト、ポリカルボン酸ポリエステル、ポリカルボン酸、およびポリカルボン酸無水物、ジヒドロキシおよびポリヒドロキシ化合物、チオール、イミダゾール、イミダゾリン、および特定のイソシアネート、ならびに潜在性多官能性硬化剤が挙げられる。

【0264】

50

ポリアミン硬化剤は、ポリアミンの第一級または第二級アミノ官能基とエポキシ樹脂の末端エポキシド基との反応によってエポキシ樹脂を架橋する。好適なポリアミンは、例えば、脂肪族ポリアミン、例えば、エチレンジアミン、1, 2-および1, 3-プロピレンジアミン、ネオペンタレンジアミン、ヘキサメチレンジアミン、オクタメチレンジアミン、1, 10-ジアミノデカン、1, 12-ジアミノドデカン、ジエチレントリアミン、トリエチレントトラミン、テトラエチレンペンタミン、など；脂環式ジアミン、例えば、1, 2-ジアミノシクロヘキサン、1, 3-ビス（アミノメチル）シクロヘキサン、1-メチル-2, 4-ジアミノシクロヘキサン、4-（2-アミノプロパン-2-イル）-1-メチルシクロヘキサン-1-アミン、イソホロンジアミン、4, 4'-ジアミノジシクロヘキシルメタン、3, 3'-ジメチル-4, 4'-ジアミノジシクロヘキシルメタン、ノルボルナレンジアミン、メンタレンジアミン、メンテンジアミンなど；芳香族ジアミン、例えば、トリレンジアミン、キシリレンジアミン、とりわけメタ-キシリレンジアミン、ビス（4-アミノフェニル）メタン（MDAまたはメチレンジアニリン）、ビス（4-アミノフェニル）スルホン（DADS、DDS、またはダブソンとしても知られる）など；環状ポリアミン、例えば、ピペラジン、N-アミノエチルピペラジンなど；ポリエーテルジアミン、例えば、ポリプロピレンオキシドまたはポリエチレンオキシドまたはブチレンオキシドまたはペンチレンオキシドまたはポリ（1, 4-ブタンジオール）またはポリテトラヒドロフランまたは最後に言及された5つのアルキレンオキシドとプロピレンオキシドとの混合物と、アンモニアとの反応生成物、例えば、4, 7, 10-トリオキサトリデカン-1, 3-ジアミン、4, 7, 10-トリオキサトリデカン-1, 13-ジアミン、XTJ-500、XTJ-501、XTJ-511、XTJ-542、XTJ-559、XTJ-566、XTJ-568（Huntzman）、1, 8-ジアミノ-3, 6-ジオキサオクタン（Huntzman製のXTJ-504）、1, 10-ジアミノ-4, 7-ジオキサデカン（Huntzman製のXTJ-590）、1, 12-ジアミノ-4, 9-ジオキサドデカン（BASF）、1, 3-ジアミノ-4, 7, 10-トリオキサトリデカン（BASF）、ポリエーテルアミンT5000、ジェファーマミンなど；ならびに、二量化脂肪酸（例えば、二量化リノール酸）と、低分子量ポリアミン、例えば、ジエチレントリアミンまたはトリエチレントトラミンとの反応によって得られる、ポリアミドジアミン（アミドポリアミン）である。

【0265】

好適な硬化剤のさらなるクラスは、ウロン（尿素誘導体）として知られるもの、例えば、3-（4-クロロフェニル）-1, 1-ジメチル尿素（モニュロン）、3-（3, 4-ジクロロフェニル）-1, 1-ジメチル尿素（ジウロン）、3-フェニル-1, 1-ジメチル尿素（フェヌロン）、3-（3-クロロ-4-メチルフェニル）-1, 1-ジメチル尿素（クロトルロン）など、である。

【0266】

カルバミド、例えば、トリル-2, 4-ビス（N, N-ジメチルカルバミド）など、およびテトラアルキルグアニジン、例えば、N, N, N', N'-テトラメチルグアニジンなど、も好適な硬化剤である。

【0267】

アミノプラストまたはフェノプラストとも呼ばれるメラミン-、尿素-、およびフェノール-ホルムアルデヒド付加体は、それぞれ、好適な硬化剤のさらなるクラスを形成する。

【0268】

粉末コーティングにおいて、ポリカルボン酸ポリエステルが、硬化剤として益々用いられている。架橋は、遊離カルボキシル基と、例えばエポキシ樹脂のエポキシド基との反応によって生じる。

【0269】

さらなる多官能性硬化剤は、2つ以上のヒドロキシル基を有する芳香族化合物を含む。そのようなものの例は、フェノールまたはアルキル化フェノール、例えば、クレソールな

ど、と、ホルムアルデヒドとの反応によって得られる樹脂、例えば、フェノールノボラック、クレゾールノボラック、およびジシクロペンタジエンノボラックなど；さらに、窒素含有ヘテロ芳香族の樹脂、例えば、ベンゾグアナミン-フェノール-ホルムアルデヒド樹脂もしくはベンゾグアナミン-クレゾール-ホルムアルデヒド樹脂、アセトグアナミン-フェノール-ホルムアルデヒド樹脂もしくはアセトグアナミン-クレゾール-ホルムアルデヒド樹脂、およびメラミン-フェノール-ホルムアルデヒド樹脂もしくはメラミン-クレゾール-ホルムアルデヒド樹脂、ならびに、ヒドロキシル化アレーン、例えば、ヒドロキノン、レゾルシノール、1, 3, 5-トリヒドロキシベンゼン、1, 2, 3-トリヒドロキシベンゼン（ピロガロール）、1, 2, 4-トリヒドロキシベンゼン（ヒドロキシヒドロキノン）、3, 4, 5-トリヒドロキシ安息香酸（没食子酸）、またはそれらの誘導体、1, 8, 9-トリヒドロキシアントラセン、（ジトラノールまたは1, 8, 9-アントラセントリオール）、1, 2, 10-トリヒドロキシアントラセン（アントラロビン）、および2, 4, 5-トリヒドロキシピリミジンなど；さらに、ヒドロキシル化アレーンで置換されているアルカン、例えば、トリフェノールメタン、トリフェノールエタン、およびテトラフェノールエタンなど、である。さらなる例は、例えば、国際公開第2006/034445号に記載されている、ヒドロキノンおよびナフトキノンから誘導されるホスフィネートおよびホスホネートであり、なお、当該文献は、その開示内容全体が参考として本明細書で援用される。

10

【0270】

さらなる多官能性硬化剤は、チオール、イミダゾール、例えば、イミダゾール、1-メチルイミダゾール、2-メチルイミダゾール、2-エチル-4-メチルイミダゾール、1-シアノエチルイミダゾール、および2-フェニルイミダゾールなど、およびイミダゾリン、例えば、2-フェニルイミダゾリンなど、を含む。

20

【0271】

より最近では、水系コーティング剤のための潜在性硬化剤として、ブロック化イソシアネートが使用されている。

【0272】

ジシアンジアミド（ダイサイ）、 $\text{HN}=\text{C}(\text{NH}_2)(\text{NHCN})$ 、は、粉末コーティング剤および電気用積層板において頻繁に用いられる潜在性多官能硬化剤である。

【0273】

さらに好適なのは、ビスグアニジンとして知られる、ダイサイとアミンとの反応生成物、例えば、Vantico製のHAT 2844など、である。

30

【0274】

さらなる好適な潜在性多官能硬化剤は、三フッ化ホウ素-アミン付加体、例えば、 BF_3 -モノエチルアミンなど、および第四級ホスホニウム化合物である。

【0275】

架橋剤

本発明による組成物は、少なくとも1種の架橋剤を含有していてもよい。

【0276】

さらに、好適な硬化剤としては、メラミン化合物、例えば、メラミン、モノメチロールメラミン、ジメチロールメラミン、トリメチロールメラミン、テトラメチロールメラミン、ペンタメチロールメラミン、ヘキサメチロールメラミン、モノブチロールメラミン、ジブチロールメラミン、トリブチロールメラミン、テトラブチロールメラミン、ペンタブチロールメラミン、ヘキサブチロールメラミン、モノメトキシメチルメラミン、ジメトキシメチルメラミン、トリメトキシメチルメラミン、テトラメトキシメチルメラミン、ペンタメトキシメチルメラミン、ヘキサメトキシメチルメラミン、モノブトキシメチルメラミン、ジブトキシメチルメラミン、トリブトキシメチルメラミン、テトラブトキシメチルメラミン、ペンタブトキシメチルメラミン、ヘキサブトキシメチルメラミン、およびグアナミン化合物、例えば、アセトグアナミン、ベンゾグアナミン、モノメチロールベンゾグアナミン、ジメチロールベンゾグアナミン、トリメチロールベンゾグアナミン、テトラメチロ

40

50

ールベンゾグアナミン、およびアルキル化メチロールベンゾグアナミンである。

【0277】

染料

本発明の熱硬化性組成物は、添加剤として少なくとも1種の染料も含んでいてもよい。対象の染料は、例えば、そのような組成物にとって典型的である分子分散的に可溶な染料、または溶剤染料であり得る。

【0278】

流動調整補助剤

好適な流動調整補助剤は、例えば、変性シリコン油、例えば、Altana-BykのByk（登録商標）製品、または高分子量ポリアクリレート、例えば、WorleeのResiflow（登録商標）製品など、である。

10

【0279】

UV安定化剤

添加剤として好適なUV安定化剤（光安定化剤）は、例えば、4,4-ジアリールブタジエン、桂皮酸エステル、トリアゾール、トリアジン、ベンゾフェノン、ジフェニルシアノアクリレート、オキサミド（オキサラムイド）、オキサニリドなど、である。好適な立体障害アミンは、例えば、2,2,6,6-テトラメチルピペリジン、2,6-ジ-tert-ブチルピペリジン、またはそれらの誘導体であり、その例は、ビス（2,2,6,6-テトラメチルー4-ピペリジル）セバケートである。UV安定化剤は、通常、熱硬化性組成物の総質量に対して、0.1質量%～5.0質量%、好ましくは0.5質量%～3.5質量%の量において使用される。

20

【0280】

湿潤剤

好適な湿潤剤は、例えば、シロキサン、フッ素含有化合物、カルボン酸モノエステル、リン酸エステル、ポリアクリル酸およびそれらのコポリマー、あるいはポリウレタンである。

【0281】

皮膜形成補助剤

好適な皮膜形成補助剤の例は、セルロース誘導体である。

【0282】

レオロジー調整添加剤

本発明のコーティング組成物は、添加剤として、少なくとも1種のレオロジー調整添加剤も含んでいてもよい。好適なレオロジー調整添加剤は、例えば、国際公開第94/22968号、欧州特許出願公開第0276501号、欧州特許出願公開第0249201号、または国際公開第97/12945号に記載されている。さらに好適なのは、例えば、欧州特許出願公開第0008127号に開示されている種類の架橋ポリマー性マイクロ粒子；無機フィロケイ酸塩、好ましくはスメクタイト、とりわけモンモリロナイトおよびヘクトライト、例えば、モンモリロナイトタイプの、ケイ酸マグネシウムアルミニウム、フィロケイ酸ナトリウムマグネシウム、およびフィロケイ酸ナトリウムマグネシウムフッ素リチウムなど、あるいは無機フィロケイ酸塩、例えば、モンモリロナイトタイプの、ケイ酸マグネシウムアルミニウム、フィロケイ酸ナトリウムマグネシウム、およびフィロケイ酸ナトリウムマグネシウムフッ素リチウムなど、シリカ、例えば、アエロジルなど、あるいは、イオン性基および／または会合性基を有する合成ポリマー、例えば、ポリビニルアルコール、ポリ（メタ）アクリルアミド、架橋ポリ（メタ）アクリル酸、ポリビニルピロリドン、スチレン-マレイン酸無水物またはエチレン-マレイン酸無水物コポリマー、およびそれらの誘導体など、あるいは、疎水性に改質されたポリアクリレート、あるいは、Roempp-Lexikon, Lacke und Druckfarben, Georg Thieme Verlag, Stuttgart, New York, 1998, "thickeners", pp. 599-600、およびtextbook "Lack additive" by Johan Bieleman, Wiley-VCH, Wei

30

40

50

nheim, New York, 1998, pp. 51-59 and 65に記載されている種類のポリウレタンベースの会合性粘度付与剤、である。

【0283】

光潜在性酸

好適な光潜在性酸の例は、キノンジアジド化合物、例えば、ポリヒドロキシ化合物の1, 2-キノンジアジドスルホン酸エステル化合物である。好ましいのは、1, 2-キノンジアジドスルホニル基、例えば、1, 2-ベンゾキノンジアジド-4-スルホニル基、1, 2-ナフトキノンジアジド-4-スルホニル基、1, 2-ナフトキノンジアジド-5-スルホニル基、1, 2-ナフトキノンジアジド-6-スルホニル基など、を有する化合物である。特に好ましいのは、1, 2-ナフトキノンジアジド-4-スルホニル基または1, 2-ナフトキノンジアジド-5-スルホニル基を有する化合物である。特に好ましいのは、(ポリ)ヒドロキシフェニルアリールケトン、例えば、2, 3, 4-トリヒドロキシベンゾフェノン、2, 4, 6-トリヒドロキシベンゾフェノン、2, 3, 4, 4'-テトラヒドロキシベンゾフェノン、2, 2', 3, 4-テトラヒドロキシベンゾフェノン、2, 3, 4, 4'-テトラヒドロキシベンゾフェノン、2, 2', 4, 4'-テトラヒドロキシベンゾフェノン-2, 2', 3, 4, 4'-ペンタヒドロキシベンゾフェノン、2, 2', 3, 2, 6'-ペンタヒドロキシベンゾフェノン、2, 3, 3', 4, 4', 5'-ヘキサヒドロキシベンゾフェノン、2, 3', 4, 4', 5', 6-ヘキサヒドロキシベンゾフェノンなど、の1, 2-キノンジアジドスルホン酸エステル；ビス-[(ポリ)ヒドロキシフェニル]アルカン、例えば、ビス(4-ヒドロキシフェニル)エタン、ビス(2, 4-ジヒドロキシフェニル)エタン、2, 2-ビス(4-ヒドロキシフェニル)プロパン、2, 2-ビス(2, 4-ジヒドロキシフェニル)プロパン、2, 2-ビス(2, 3, 4-トリヒドロキシフェニル)プロパンなど、の1, 2-キノンジアジドスルホン酸エステル；(ポリ)ヒドロキシフェニルアルカン、例えば、4, 4'-ジヒドロキシトリフェニルメタン、4, 4', 4''-トリヒドロキシトリフェニルメタン、4, 4', 5, 5'-テトラメチル-2, 2', 2''-トリヒドロキシトリフェニルメタン、2, 2, 5, 5'-テトラメチル-4, 4', 4''-トリヒドロキシトリフェニルメタン、1, 1, 1-トリス(4-ヒドロキシフェニル)エタン、1, 1-ビス(4-ヒドロキシフェニル)-1-フェニルエタン、1, 1-ビス(4-ヒドロキシフェニル)-1-(4-[1-(ヒドロキシフェニル)-1-メチルエチル]フェニル)エタンなど、の1, 2-キノンジアジドスルホン酸エステル；(ポリ)ヒドロキシフェニルフラバン、例えば、2, 4, 4-トリメチル-2', 4', 7-トリヒドロキシ-2-フェニルフラバン、2, 4, 4-トリメチル-2', 4', 5', 6, 7-ペンタヒドロキシ-2-フェニルフラバンなど、の1, 2-キノンジアジドスルホン酸エステル、である。

【0284】

好適なコーティング添加剤のさらなる例は、textbook "Lack additive" by Johan Bieleman, Wiley-VCH, Weinheim, New York, 1998に記載されている。

【0285】

本発明による組成物は、この目的のため慣習的である装置において構成要素を混合することによって製造される。

【0286】

本発明による熱硬化性組成物は、任意のタイプの基材のためのコーティング剤として非常に好適である。

【0287】

好適な基材は、金属（好ましくは周期表の8、9、10、または11族の金属、例えば、Au、Ag、Cu）、酸化材料（ガラス、石英、セラミック、SiO₂など）、絶縁性材料（例えば、Si₃N₄）、半導体（例えば、ドーパされたSi、ドーパされたGe、およびGaAs）、金属合金（例えば、Au、Ag、Cu系など）、半導体合金、ポリマー（例えば、ポリ塩化ビニル、ポリオレフィン、例えば、ポリエチレンおよびポリプロピレ

ンなど、ポリエステル、フルオロポリマー、ポリアミド、ポリウレタン、ポリアルキル（メタ）アクリレート、ポリスチレン、ゴム、ならびにそれらの混合物および複合材料）、セラミック、ガラス、紙、木材、布、コンクリート、セラミックなど、である。

【0288】

当該基材は、所望の用途の要件に応じて、湾曲もしくは平面幾何学構造を有する、柔軟性または非柔軟性の固体材料であり得る。

【0289】

コーティングされた基材は、例えば、本発明による熱硬化性組成物を溶液または懸濁液の形態において製造することにより、作成することができる。溶媒および濃度の選択は、主に、組成物のタイプおよびコーティングプロセスによって変わる。

10

【0290】

当該溶液または懸濁液は、当業者に既知の方法によって、基材に様に塗工することができる。好適なのは、例えば、展着、噴霧、浸漬、ロール塗工、刷毛塗り、ナイフコーティング、ワラーコーティング、カーテンコーティング法、リバースロールコーティング、静電法など、による塗工である。

【0291】

本発明の熱硬化性組成物は、プライマー、サーフェーサー、着色トップコートもしくはベースコート、またはクリアコートとして使用してもよい。単独のコーティング組成物として、または1つ以上の層の多層コーティングにおいて、使用することができる。コーティング前処理された基材、例えば、従来のプライマーを用いた金属など、にとりわけ好適でもある。当該コーティング組成物は、1段階において、あるいは2段階以上、例えば、1段階、2段階、または3段階において、塗工することができる。さらなる可能性は、マルチコート、例えば、2ー、3ー、4ー、または5ーコートーコーティング系など、を得るために、2種以上のコーティング組成物、例えば、1つ以上のトップコートと組み合わせた1つ以上のプライマーなど、を順次塗工することである。個々の塗工工程の間に、乾燥および／または硬化工程を実施することもできる。コーティング組成物の性質および所望のコーティングの性質に応じて、当該コーティング組成物は、ウェットオンウェットで塗工することもできる。

20

【0292】

塗工される組成物の量は、従来法において、処理される表面における所望の特性に依存し、典型的には、当該コーティング組成物の不揮発性成分として計算された1～500 g/m²になる。マルチコート系の場合、コーティング組成物の量は、典型的には、1コートあたり1～200 g/m²である。

30

【0293】

エポキシ樹脂の硬化は、好ましくは、当該組成物を、好ましくは5～300℃、より好ましくは20～250℃、さらにより好ましくは50～230℃、とりわけ80～230℃の温度に加熱することによって熱的に達成される。どの温度が好適であるかは、当該組成物における特定の化合物（a）、化合物（b）、および任意選択の化合物、ならびに所望の硬化速度に依存する。好適な温度範囲は、それぞれの個々の場合において、例えば簡単な予備試験に基づいて、熟練者が決定することができる。

40

【0294】

あるいは、当該硬化は、マイクロ波誘導によって実施される。

【0295】

UV硬化系は、化学線、例えば、UV光または電子線など、の適用によって硬化される。二元硬化系の場合、一般的な手法は、最初にUV硬化、次いで熱硬化の実施であろう。

【0296】

既知のように、不飽和化合物の光重合は、とりわけ薄層において、大気酸素により阻害され得る。この影響は、既知の従来法、例えばポリビニルアルコールの一時的被覆層の適用、によって、あるいは不活性ガス下での（事前）露光または（事前）調整によって、低減することができる。好適な不活性ガスは、窒素、ヘリウム、アルゴンなどである。多く

50

の場合、不活性ガスを流して酸素濃度を低下させれば十分である。

【0297】

本発明による組成物の露光は、多くの多様な光源のほとんどによって実施することができる。点光源および二次元発光体（ランプカーペット）の両方が好適である。その例は、炭素アークランプ、キセノンアークランプ、水銀ランプ、適切であればハロゲン化金属でドーピングされた水銀ランプ（メタルハライドランプ）、蛍光ランプ、白熱アルゴンランプ、エレクトロニックフラッシュライト、および写真用投光器である。400～480nmのスペクトル領域に比較的高い放射線強度を有するこれらのランプは、特に好適である。ランプと本発明の画像材料との距離は、ランプの適用方法およびタイプもしくは強度に応じて変わり得、例えば、2cm～150cmであり得る。

10

【0298】

本発明による組成物は、液晶ディスプレイの層の製造に特に有用である。したがって、本発明による組成物は、例えば、液晶ディスプレイのカラーフィルターのオーバーコート層または絶縁層もしくは誘電体層の製造などに用いることができる。

【0299】

特定の実施形態において、本発明による組成物は、カラーフィルターのオーバーコート層を形成するために使用される。カラーフィルターは、液晶ディスプレイパネルの重要な部品であり、様々な要件を満たさなければならない。重要なのは、例えば、カラーフィルターの耐熱性および耐化学薬品性である。エレクトロニックディスプレイは、通常、緑色フィルター層を有する緑カラーフィルター；青フィルター層を有する青カラーフィルター；赤フィルター層を有する赤カラーフィルター（RGBカラーフィルター）、を含むカラーフィルターのセットを有している。液晶ディスプレイパネルを形成するために、透明層（オーバーコート層）がカラーフィルター上に形成され、さらに透明電極へと加工される。当該透明電極層が、RGBカラーフィルター要素および黒マトリックスを適用した後で被着される場合、当該電極層を被着する前に、保護層として、さらなるオーバーコートフィルムを当該カラーフィルター層上に適用することができる。LCD用のカラーフィルターの製造は、例えば、米国特許第5650263号に記載されており、なお、当該文献は、参考として本明細書で援用される。

20

【0300】

カラーフィルターのオーバーコート層を形成するために、通常、熱硬化性組成物が用いられる。本発明による組成物は、そのようなオーバーコート層を形成するために、熱硬化性組成物として使用することもできる。

30

【0301】

本発明の組成物による硬化フィルムは、以下の有利な特性：

- 素晴らしい平坦性
- 良好な硬度
- 良好な耐化学薬品性および／または耐熱性
- 良好な透明性、とりわけ可視領域において
- 様々な基材への良好な付着性
- 透明導電性フィルム、例えばITOフィルム、を形成するための適合性

40

のうちの少なくとも1つを有する。

【0302】

例えば、基材を切断するためのスクラビングライン上および固体画像センサーのボンディングパッド上など、保護層の不要な部分を容易に基材から除去可能であるべきであることが、保護層には求められる（例えば、特開昭57-042009号、特開平01-130103号、および特開平01-134306号を参照のこと）。熱により硬化するだけの樹脂は、通常、この用途には最適ではない。ここで、驚くべきことに、光重合性成分を含む本発明による熱硬化性組成物（二元硬化組成物）は、フォトリソグラフィによって保護層の不要な部分を容易に除去可能なことが見出された。

【0303】

50

本発明による感光性構成要素を含む熱硬化性組成物は、スイッチングデバイスとして薄膜トランジスタ（TFT）を有するアクティブマトリックスタイプおよびスイッチングデバイスを有さないパッシブマトリックスタイプのディスプレイを具備する液晶ディスプレイにおける中間層絶縁層または誘電体層の製造にとっても好適である。

【0304】

近年、液晶ディスプレイは、その薄さと軽さから、例えば、ポケットタイプのTVセットおよび通信用端末装置に幅広く使用されている。バックライトを使用する必要のない反射タイプの液晶ディスプレイが、非常に薄くかつ非常に軽いこと、ならびに電力消費をかなり低減可能なことから、特に必要とされている。しかしながら、現在入手可能なトランスミッシンタイプのカラ液晶ディスプレイからバックライトを取り除き、光反射プレートをディスプレイの下面に加えても、光利用効率が低いために問題が生じるであろうし、実用的な明るさを有することはできない。この問題の解決策として、光利用効率を高めるための様々な反射タイプの液晶ディスプレイが提案されている。例えば、特定の反射タイプの液晶ディスプレイは、反射機能を有するピクセル電極を具備するように設計されている。

10

【0305】

当該反射タイプの液晶ディスプレイは、絶縁基板および当該絶縁基板から離間された対向する基板を具備する。基板間の空間は、液晶で満たされている。ゲート電極は、当該絶縁基板上に形成されており、ゲート電極と絶縁基板の両方が、ゲート絶縁膜で覆われている。次いで、半導体層が、ゲート電極を覆っているゲート絶縁膜上に形成されている。ソース電極およびドレイン電極も、当該半導体層と接触した状態で当該ゲート絶縁膜上に形成されている。ソース電極、ドレイン電極、半導体層、およびゲート電極は、互いに協働し、スイッチングデバイスとしてのボトムゲートタイプのTFTを構成する。中間層絶縁膜が、ソース電極、ドレイン電極、半導体層、およびゲート絶縁膜を覆うように形成される。コンタクトホールが、ドレイン電極上の中間層絶縁膜を貫通して形成されている。アルミニウムで作られたピクセル電極が、中間層絶縁膜上およびコンタクトホールの内部側壁上の両方に形成されている。TFTのドレイン電極は、最終的に、中間層絶縁膜を通してピクセル電極と接触している。中間層絶縁膜は、一般的に、ピクセル電極が、視覚のためのより広い角度（視野角）を得るために光を拡散させる反射プレートとして機能する粗面を有するように設計される。反射タイプの液晶ディスプレイでは、ピクセル電極が光反射プレートとして機能することにより、光利用効率が著しく高められる。

20

30

【0306】

上記において言及された反射タイプの液晶ディスプレイにおいて、中間層絶縁膜は、フォトリソグラフィによる凸部および凹部を有するように設計される。表面粗度に対してマイクロメーターオーダーでの凸部および凹部の微細形状を形成および制御するために、ならびにコンタクトホールを形成するために、ポジ型およびネガ型のフォトレジストを使用するフォトリソグラフィ法が用いられる。これらのレジストのために、本発明による組成物は、とりわけ好適である。

【0307】

中間層絶縁膜は、透過型の液晶ディスプレイにも使用することができる。

40

【0308】

本発明による熱硬化性組成物は、さらに、液晶ディスプレイパネルにおけるカラムスペーサーを製造するために使用することができる。液晶ディスプレイ装置において、画像を表示することができる液晶層は、一般的に、所定方向の対の基板の間に配置される。基板間の一定の距離を維持すること、すなわち、液晶層の均一な厚さを維持することは、画像品質を決定する要因の1つである。このために、スペーサーが、液晶層の厚さを一定に維持するために配置される。基板間の距離は、一般的に、「セル厚」と呼ばれる。当該セル厚は、通常、液晶層の厚さ、すなわち、表示領域において液晶に電界を適用するための2つの電極の間の距離を表す。

【0309】

50

当該スペーサーは、ビーズを散乱させることによって形成されてきた。しかしながら、近年、スペーサーは、感光性組成物を使用したフォトリソグラフィにより高い位置精度において形成されている。感光性組成物を使用して形成されたそのようなスペーサーは、フォトスペーサーと呼ばれる。

【0310】

液晶ディスプレイにおける液晶層を通して透過または反射される光の特性は、セルギャップに依存しているので、ピクセル配列の上の厚さ精度および均一性は、液晶ディスプレイユニットの性能にとって重要なパラメータである。スペーサーとしてセルギャップにコラムを形成する方法が開発されている。この方法では、規定されたセルギャップを形成するために、樹脂のコラムが、ピクセル配列領域と対電極との間の領域にスペーサーとして形成される。接着特性を有する感光性材料が、フォトリソグラフィにより、例えばカラーフィルターの製造プロセスなどにおいて一般的に使用される。この方法は、スペーサーの位置、数、および高さを自由に制御することができるという点において、スペーサービーズを使用する従来法と比べて有利である。カラー液晶ディスプレイパネルにおいて、そのようなスペーサーは、カラーフィルター要素の黒マトリックスの下に非結像エリアに形成される。したがって、感光性組成物を使用して形成されるスペーサーは、明るさおよび光学開口部を減少させない。カラーフィルターのためのスペーサーを伴う保護層を製造するための感光性組成物は、特開2000-81701号に開示されており、ならびにスペーサー材料のためのドライフィルムタイプのフォトレジストも、特開平11-174459号および特開平11-174464号に開示されている。当該文献に記載されているように、感光性組成物、液体フォトレジスト、およびドライフィルムフォトレジストは、少なくともアルカリ可溶性もしくは酸可溶性バインダーポリマー、ラジカル重合性モノマー、およびラジカル開始剤を含んでいる。エポキシドおよびオキセタンなどの熱架橋性成分が、追加的に含まれる。

【0311】

感光性組成物を使用してスペーサーを形成する工程は、以下の通りである：感光性組成物が、基材、例えばカラーフィルターパネル、の上に適用され、当該基材を予備ベーク処理した後、マスクを通して露光させる。次いで、当該基材を、現像液によって現像し、所望のスペーサーを形成するためにパターン形成させる。当該組成物を熱硬化させるために、後ベーク処理が行われる。

【0312】

本発明による光硬化性熱硬化性組成物は、（上記において説明するように）液晶ディスプレイのスペーサーの製造にとって、特に好適であり、素晴らしい適用特性、例えば、優れた硬度、耐化学薬品性および／または耐熱性、ならびに良好な変形復元性など、を有する硬化フィルムが得られる。

【0313】

本発明による感光性化合物を含む熱硬化性組成物は、スイッチングデバイスとしてTFTを有するアクティブマトリックスタイプおよびスイッチングデバイスを有さないパッシブマトリックスタイプのディスプレイを具備する液晶ディスプレイ、ならびに他のデバイス、例えば、画像センサーなど、のためのカラーフィルターの製造にとっても好適である。カラーフィルターは、通常、赤、緑、および青のピクセルならびに黒マトリックスをガラス基板上に形成することによって製造される。特に好ましい使用法は、赤色、緑色、および青色の色素、染料、および／または顔料を本発明の感光性樹脂組成物に添加する工程、基板を当該組成物でコーティングする工程、当該コーティングを短時間の熱処理で乾燥させる工程、当該コーティングを化学線パターン露光する工程、続いて水性アルカリ現像溶液においてパターンを現像する工程、ならびに熱処理する工程を含む。したがって、続いて、このプロセスにより任意の所望の順序で互いの上に赤、緑、および青の顔料で着色されたコーティングを適用することによって、赤色、緑色、及び青色のカラーピクセルを有するカラーフィルター層を製造することができる。

【0314】

カラーフィルターを製造するためのネガ型またはポジ型レジストは、特開１９９５－２８１４４０号、特開１９９６－３３４８９３号、特開１９９７－３２５４８３号、特開１９９７－１９７６６０号、特開１９９５－２６１０１５号、および国際公開第９４１８２７４号に開示されている。

【０３１５】

他の可能性のある用途／使用

本発明による組成物は、以下の用途にも有利に使用することができる：

接着剤

電子デバイス、例えば、半導体ＩＣ、半導体デバイス、プリント回路基板、ＬＣＤパネル、ＰＤＰ、ＥＬ、ＦＥＤなど、における電子材料または光学材料用；

10

ディスプレイパネルと柔軟なプリント回路基板（ＦＰＣ）との接着、またはＦＰＣ（ＣＯＦ）上のチップとテープキャリアパッケージ（ＴＣＰ）との接着用；

半導体ＩＣと回路基板とのマイクロ接着用：光学部品の固定用；

電子部品、例えば、半導体要素など、と、支持部材、例えば、リードフレームおよび絶縁性支持基板などとの接着のためのダイ接着材料；例えば、ダイシング／ダイボンディングテープ、リードフレーム固定用テープ、ＬＯＣ固定用テープ；

回路相互接続ホットメルト接着フィルムによる電子部品のホットプレスボンディング用；

異方性導電接着剤；

感圧性接着剤および接着シート。

20

【０３１６】

シーラント

液晶パネル、プラズマディスプレイパネル、およびエレクトロルミネッセンスデバイスなどのディスプレイ要素用；

ＬＥＤまたはＣＣＤなどオプトエレクトロニック半導体用；

ダイオード、トランジスタ、ＩＣ、ＶＬＳＩなどの半導体の電子部品用；

光磁気ディスクなどの高密度記録媒体用；

太陽電池、および光学導波路用。

【０３１７】

絶縁材料

30

回路とプリント回路基板の絶縁体との間の絶縁層などの電気部品または電子部品用；

絶縁コイル用；

電線絶縁材用。

【０３１８】

コーティング組成物

保護コーティング、装飾的コーティング、絶縁性コーティング、粉末コーティング、表面コーティング、織物コーティング用；

自動車のトップコート塗料として使用される従来の有機溶媒タイプの塗料のコーティング膜。

【０３１９】

40

含浸性組成物

金属、木材、セメントなどのための接着剤の製造において；

強化複合材料製品、例えば、積層製品、フィラメントワインディング、シート成形化合物（ＳＭＣ）、電気用積層板、成形粉末、流動層粉末、注封材料などの製造において；

高電圧もしくは低電圧部品または電子部品用；

液体もしくは固体コーティング剤、典型的には、塗料、ラッカー、または粉末コーティング剤用；

含浸性樹脂または含浸テープ、例えば、ガラス繊維含浸テープなど。

【０３２０】

積層物

50

例えば、電子部品のための積層樹脂、および銅で裏打ちされた積層板。

【0321】

成形材料

例えば、低圧成形化合物としてもしくは低圧成形化合物において。

【0322】

注型材料

とりわけコイル、例えば、自動車点火コイル用など、の変圧器の製造のための注型樹脂としてもしくは注型樹脂において。

【0323】

基材：

例えば、配線盤のための半導体要素または半導体集積回路の取り付けに使用される半導体接続のための基材（すなわち、インターポーザー）、例えば、TABタイプのパターン加工テープおよびBGAパッケージのためのインターポーザーなど；

ディスプレイのためのプラスチック基板。

【0324】

他の使用：

印刷用インキ、塗料、印刷用の色校正材料、ラッカー、光沢ワニスなどのワニス；

注封材料、

浸漬用樹脂、とりわけ、蓄電器用、

マトリックス樹脂、とりわけ、対象物の封入または含浸用、

建築材料、

レンズ

はんだレジスト組成物。

【0325】

合成例：

合成例1：カリウムベンジルサルフェートの調製

71.4 gのベンジルアルコールを、87.0 mLのテトラヒドロフラン中における95.5 gのピリジン-三酸化硫黄錯体の懸濁液に、30分かけて滴加した。当該反応混合物を室温で2時間攪拌した後、75.0 mLの8 mol/L KOH水溶液を15分かけて滴加した。当該反応混合物を氷浴で冷却し、当該反応混合物に400 mLのアセトンを加えた。結果として得られた白色固体をろ別し、アセトンで2回洗浄した。当該固体を真空において50℃で乾燥させ、白色固体として122.5 gのカリウムベンジルサルフェートを得た。¹H-NMR (DMSO/TMS, δ ppm), 4.74 (s, 2H), 7.20-7.35 (m, 5H)

KOH水溶液の代わりにテトラメチル水酸化アンモニウムを使用したところ、白色固体としてテトラメチルアンモニウムベンジルサルフェートが得られた。

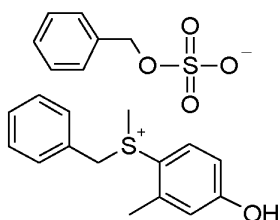
【0326】

他のサルフェートは、対応するアルコールから前述の手順に従って調製した。

【0327】

合成例100：

【化22】



10

20

30

40

50

の調製

5. 12 g の 4-（メチルチオ）-m-クレゾールおよび 5.68 g の臭化ベンジルを混合し、室温で 16 時間攪拌した。結果として得られたベージュ色固体をろ別し、アセトンで洗浄した。7.63 g の白色固体が得られた。

【0328】

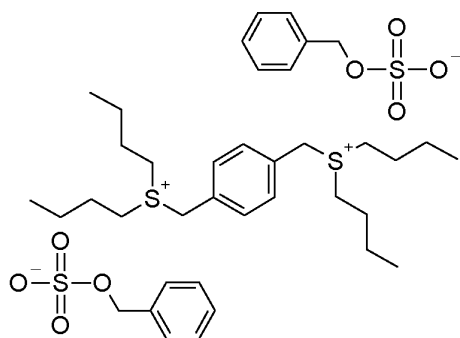
この固体 325 mg を、3 mL の H_2O に懸濁し、室温で 290 mg のテトラメチルアンモニウムベンジルサルフェートを加えた。結果として得られたスルホニウムベンジルサルフェートを、酢酸エチルおよび 2-ブタノンで抽出した。有機層を水で洗浄し、真空中で濃縮した。結果として得られた固体を t-ブチルメチルエーテルで洗浄して、209 mg の白色固体を得た。

10

【0329】

合成例 154：

【化23】



20

の調製

0.35 g の p-キシレングリコールおよび 1.10 g の硫化ブチルを室温において 0.97 g のメタンスルホン酸に懸濁させ、6 日間攪拌した。当該反応混合物を $NaHCO_3$ 水溶液で中和し、次いで水層を t-ブチルメチルエーテルで洗浄した。当該水層に、室温において 1.70 g のカリウムベンジルサルフェートを加え、当該反応混合物を 30 分間攪拌した。結果として得られるスルホニウムベンジルサルフェートを酢酸エチルおよび 2-ブタノンで抽出した。当該有機層を水で洗浄し、次いで、真空中で濃縮した。結果として得られた樹脂を t-ブチルメチルエーテルで洗浄し、1.50 g の白色樹脂を得た。

30

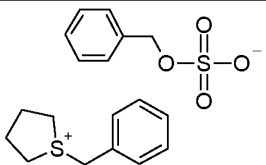
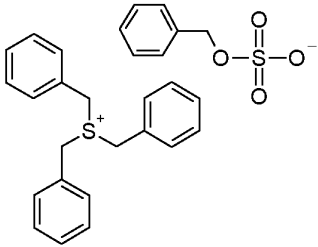
【0330】

同様の方法で、下記の第 1 表に一覧された式 I a および I b の化合物を調製した。

【0331】

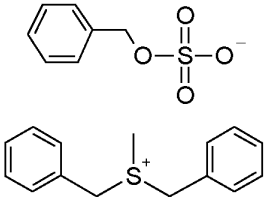
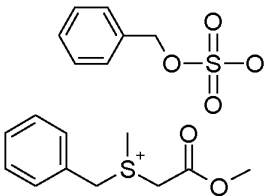
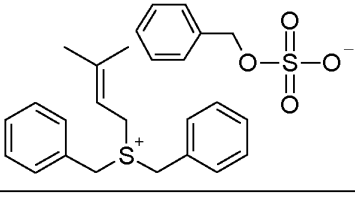
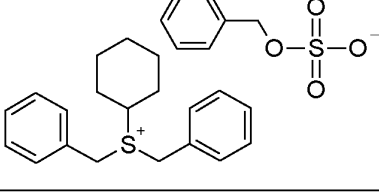
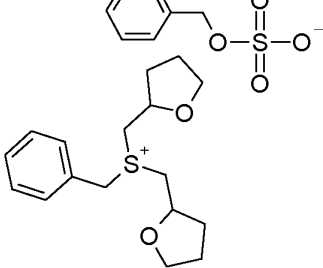
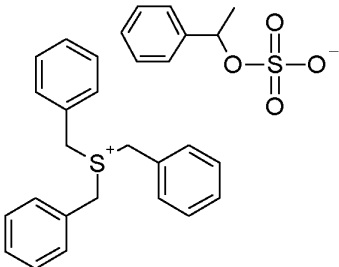
第 1 表

【表 1】

スルホニウムサルフェート		¹ H NMR 溶媒 / δ (ppm, TMS)
S1		DMSO-d6 / 2.03-2.30 (m), 3.32-3.51 (m), 4.53 (s), 4.74 (s), 4.93 (d), 7.21-7.35 (m), 7.40-7.51 (m), 7.51-7.58 (m)
S2		DMSO-d6 / 4.74 (s), 4.76 (s), 7.21-7.36 (m)

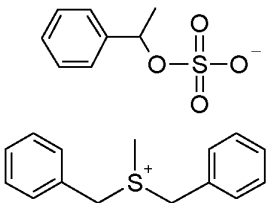
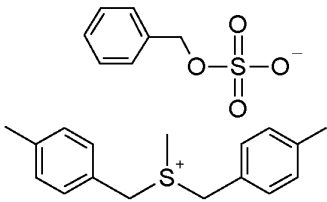
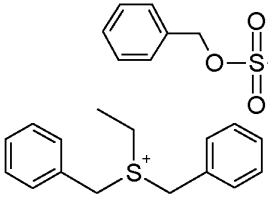
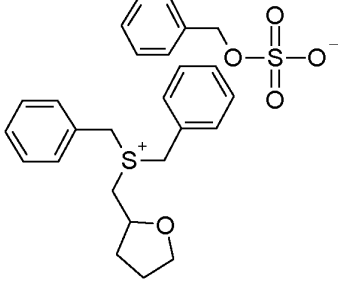
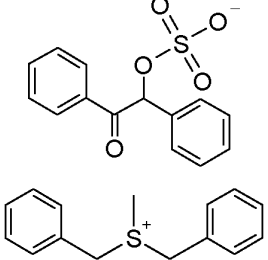
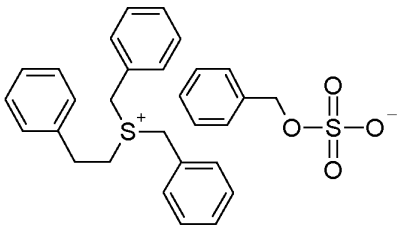
【 0 3 3 2 】

【表 2】

スルホニウムサルフェート		¹ H NMR 溶媒 / δ (ppm, TMS)
S3		DMSO-d6 / 2.67 (s), 4.59 (d), 4.74 (s), 4.76 (d), 7.21-7.35 (m), 7.44 (br s)
S4		DMSO-d6 / 2.89 (s), 3.60 (s), 4.45 (d), 4.51 (d), 4.72 (d), 4.75 (s), 4.77 (d), 7.21-7.35 (m), 7.40-7.50 (m)
S5		DMSO-d6 / 1.59 (s), 1.65 (s), 4.04 (d), 4.70 (s), 4.73 (s), 5.08 (br t), 7.21-7.35 (m), 7.39 (br s)
S6		DMSO-d6 / 1.12-1.40 (m), 1.50-1.66 (m), 1.71-1.85 (br d), 2.00-2.14 (br d), 3.68 (tt), 4.71 (d), 4.76 (s), 4.88 (d), 7.21-7.35 (m), 7.37 (br s)
S7		DMSO-d6 / 1.50-1.68 (m), 1.75-1.94 (m), 1.97-2.12 (m), 3.32-3.88 (m), 4.06-4.18 (m), 4.18-4.32 (m), 4.76 (s), 4.77-4.88 (m), 7.21-7.36 (m), 7.44-7.55 (m)
S8		DMSO-d6 / 1.40 (d), 4.76 (s), 5.17 (q), 7.16-7.37 (m)

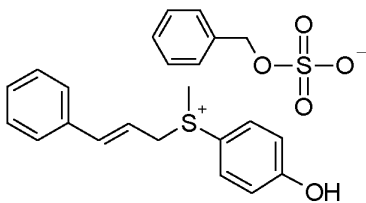
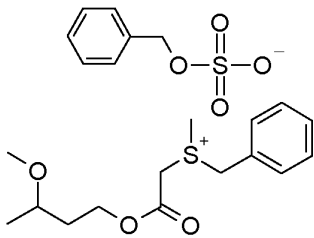
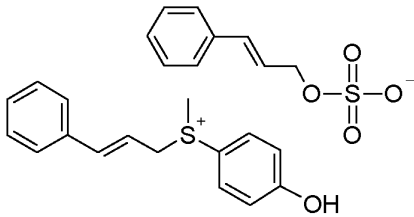
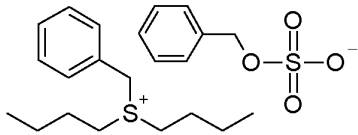
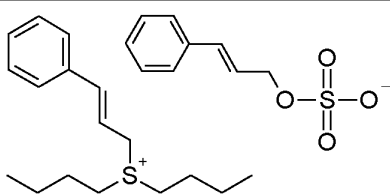
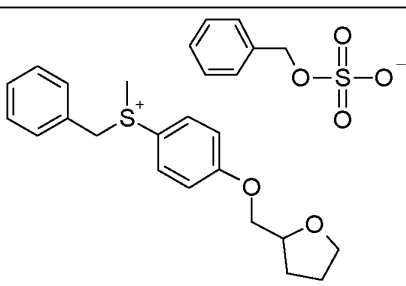
【 0 3 3 3 】

【表 3】

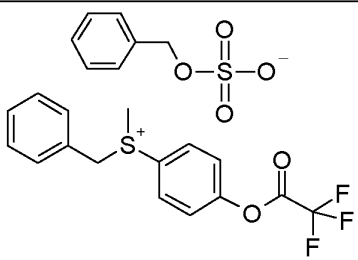
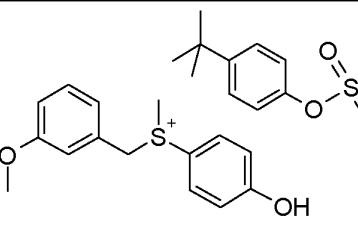
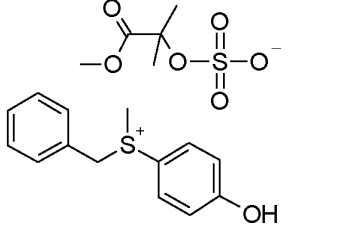
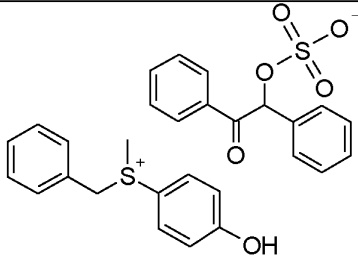
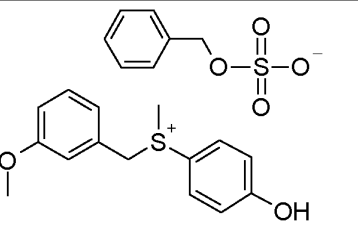
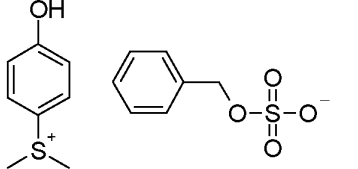
	スルホニウムサルフェート	¹ H NMR 溶媒 / δ (ppm, TMS)
S9		DMSO-d6 / 1.41 (d), 4.59 (d), 4.76 (d), 5.19 (q), 7.16-7.36 (m), 7.44 (br s)
S10		DMSO-d6 / 2.31 (s), 2.50 (s), 4.51 (d), 4.69 (d), 4.74 (s), 7.21-7.37 (m)
S11		DMSO-d6 / 1.15 (t), 3.25 (q), 4.70 (d), 4.75 (d), 4.76 (s), 7.20-7.54 (m)
S12		DMSO-d6 / 1.42-1.53 (m), 1.68-1.84 (m), 1.86-1.98 (m), 3.35 (dd), 3.50-3.61 (m), 3.61-3.68 (m), 3.93-4.03 (m), 4.74 (d), 4.75 (s), 4.79 (d), 7.21-7.33 (m), 7.35-7.48 (m)
S13		DMSO-d6 / 2.68 (s), 4.59 (d), 4.76 (d), 6.30 (s), 7.22-7.34 (m), 7.37-7.47 (m), 7.55 (t), 7.98 (d)
S14		DMSO-d6 / 2.72 (dd), 3.52 (dd), 4.75 (s), 4.77 (d), 4.83 (d), 7.00 (d), 7.18-7.29 (m), 7.30 (d), 7.40-7.50 (m)

【 0 3 3 4 】

【表 4】

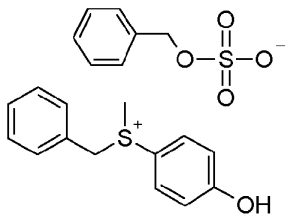
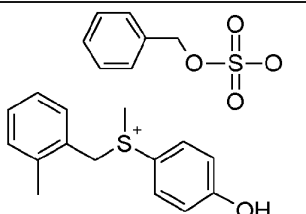
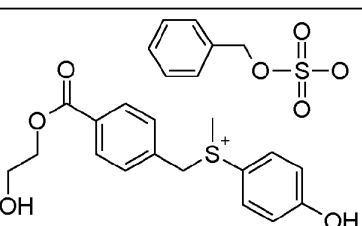
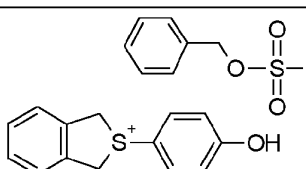
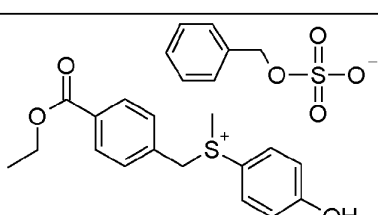
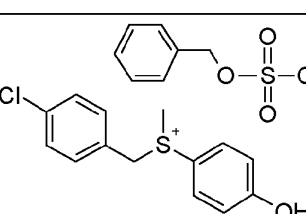
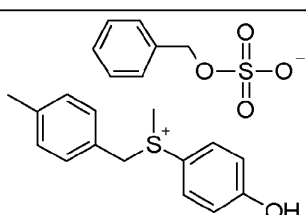
スルホニウムサルフェート		¹ H NMR 溶媒 / δ (ppm, TMS)
S15		CD3OD / 3.23 (s), 4.35 (dd), 4.46 (dd), 5.01 (s), 6.14 (dt), 6.66 (d), 7.05 (d), 7.25-7.42 (m), 7.76 (d)
S16		DMSO-d6 / 1.06 (d), 1.60-1.70 (m), 2.89 (s), 3.18 (s), 3.27-3.37 (m), 3.98-4.14 (m), 4.41-4.54 (m), 4.41-4.54 (m), 4.74 (s), 7.22-7.35 (m), 7.39-7.49 (m)
S17		CD3OD / 3.23 (s), 4.36 (dd), 4.47 (dd), 4.66 (d), 6.14 (dt), 6.37 (dt), 6.67 (d), 7.05 (d), 7.16-7.44 (m), 7.76 (d)
S18		DMSO-d6 / 0.83 (t), 1.25-1.37 (m), 1.46-1.68 (m), 3.19-3.32 (m), 4.75 (s), 7.23-7.34 (m), 7.43-7.54 (m)
S19		DMSO-d6 / 0.89 (t), 1.34-1.46 (m), 1.66-1.76 (m), 3.21-3.35 (m), 4.30 (d), 4.38 (d), 6.28-6.40 (m), 6.56 (d), 6.94 (d), 7.22 (t), 7.27-7.43 (m), 7.53 (d)
S20		DMSO-d6 / 1.60-1.71 (m), 1.77-2.06 (m), 3.28 (s), 3.64-3.80 (m), 3.97-4.20 (m), 4.75 (s), 4.87 (d), 5.05 (d), 7.17-7.42 (m), 7.82 (d)

【表 5】

スルホニウムサルフェート		¹ H NMR 溶媒 / δ (ppm, TMS)
S21		DMSO-d6 / 3.24 (s), 4.74 (s), 4.81 (d), 4.98 (d), 6.95 (d), 7.13-7.43 (m), 7.69 (d)
S22		CD3OD / 1.30 (s), 3.22 (s), 3.71 (s), 4.68 (d), 4.86 (d), 6.71 (br s), 6.78 (d), 6.95 (dd), 6.99 (d), 7.21 (d), 7.26 (t), 7.34 (d), 7.61 (d)
S23		DMSO-d6 / 1.38 (s), 3.24 (s), 3.53 (s), 4.81 (d), 4.98 (d), 6.95 (d), 7.17 (d), 7.30-7.41 (m), 7.69 (d)
S24		DMSO-d6 / 3.25 (s), 4.83 (d), 4.99 (d), 6.28 (s), 6.97 (d), 7.18 (d), 7.24-7.43 (m), 7.46 (t), 7.57 (t), 7.71 (d), 7.99 (d), 10.78 (s)
S25		DMSO-d6 / 3.22 (s), 3.65 (s), 4.73 (s), 4.77 (d), 4.93 (d), 6.72 (d), 6.74 (d), 6.92 (dd), 6.96 (d), 7.21-7.35 (m), 7.70 (d)
S26		CD3OD / 3.17 (s), 5.00 (s), 7.05 (d), 7.25-7.46 (m), 7.82 (d)

【 0 3 3 6 】

【表 6】

	スルホニウムサルフェート	¹ H NMR 溶媒 / δ (ppm, TMS)
S27		DMSO-d6 / 3.23 (s), 4.73 (s), 4.80 (d), 4.97 (d), 6.94 (d), 7.16 (d), 7.21-7.40 (m), 7.68 (d)
S28		DMSO-d6 / 2.21 (s), 3.33 (s), 4.73 (s), 4.84 (d), 5.00 (d), 6.92 (d), 7.00 (d), 7.09 (t), 7.17-7.35 (m), 7.67 (d)
S29		DMSO-d6 / 3.26 (s), 3.66 (br s), 4.24 (t), 4.73 (s), 4.88 (d), 5.05 (d), 6.95 (d), 7.20-7.35 (m), 7.69 (d), 7.93 (d)
S30		DMSO-d6 / 4.73 (s), 4.90 (d), 5.25 (d), 6.88 (d), 7.21-7.35 (m), 7.38-7.46 (m), 7.47-7.54 (m)
S31		DMSO-d6 / 1.28 (t), 3.26 (s), 4.73 (s), 4.88 (d), 5.05 (d), 6.94 (d), 7.20-7.35 (m), 7.69 (d), 7.89 (d)
S32		DMSO-d6 / 3.23 (s), 4.73 (s), 4.80 (d), 4.96 (d), 6.95 (d), 7.18 (d), 7.21-7.35 (m), 7.42 (d), 7.69 (d)
S33		DMSO-d6 / 2.25 (s), 3.21 (s), 4.73 (s), 4.77 (d), 4.92 (d), 6.95 (d), 7.05 (d), 7.14 (d), 7.21-7.35 (m), 7.69 (d)

【 0 3 3 7 】

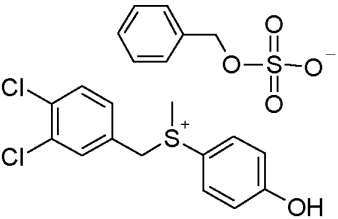
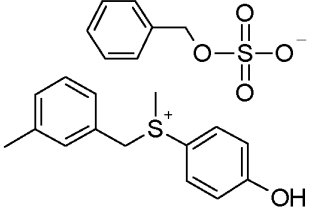
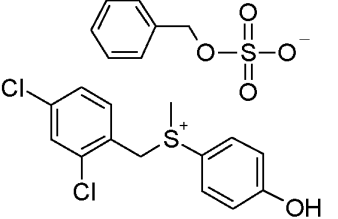
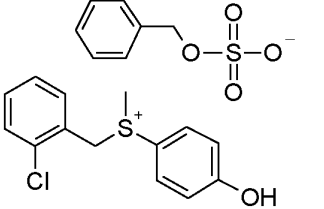
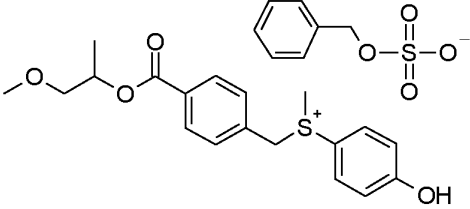
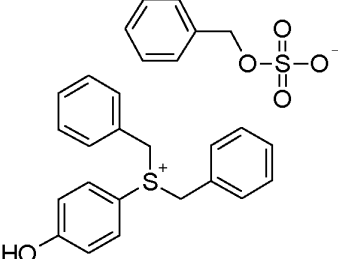
10

20

30

40

【表 7】

スルホニウムサルフェート		¹ H NMR 溶媒 / δ (ppm, TMS)
S34		DMSO-d6 / 3.23 (s), 4.73 (s), 4.78 (d), 4.93 (d), 6.96 (d), 7.15 (dd), 7.20-7.34 (m), 7.45 (d), 7.64 (d), 7.70 (d)
S35		DMSO-d6 / 2.22 (s), 3.21 (s), 4.73 (s), 4.76 (d), 4.92 (d), 6.91-7.00 (m), 7.15-7.35 (m), 7.68 (d)
S36		DMSO-d6 / 3.39 (s), 4.74 (s), 4.95 (d), 5.07 (d), 6.94 (d), 7.22-7.35 (m), 7.42 (dd), 7.70 (d), 7.71 (s)
S37		DMSO-d6 / 3.37 (s), 4.72 (s), 4.94 (d), 5.08 (d), 6.90 (d), 7.21-7.34 (m), 7.38 (dt), 7.48 (d), 7.67 (d)
S38		DMSO-d6 / 1.24 (d), 3.27 (s), 3.42-3.55 (m), 4.74 (s), 4.90 (d), 5.06 (d), 5.14-5.24 (m), 6.96 (d), 7.22-7.38 (m), 7.71 (d), 7.90 (d)
S39		アセトン -d6 / 5.07 (s), 5.24 (d), 5.43 (d), 7.09 (d), 7.20-7.46 (m), 7.78 (d)

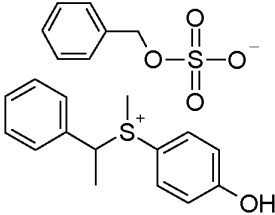
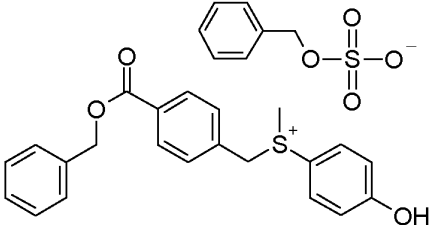
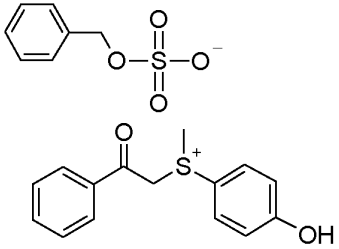
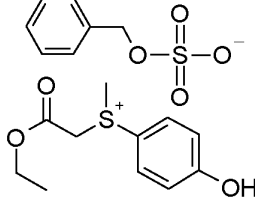
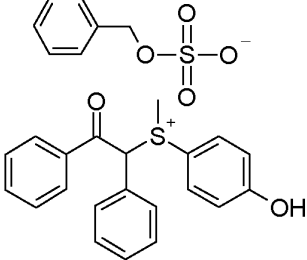
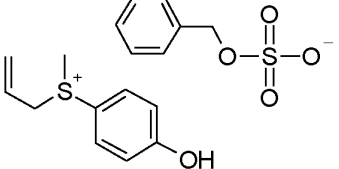
【 0 3 3 8 】

【表 8】

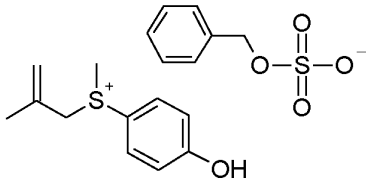
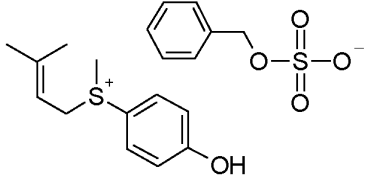
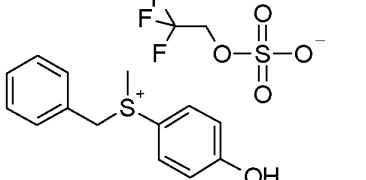
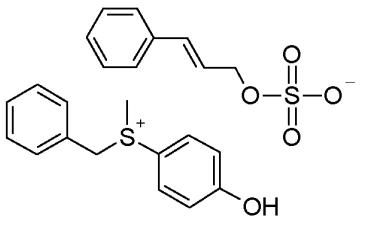
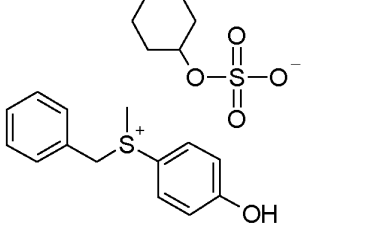
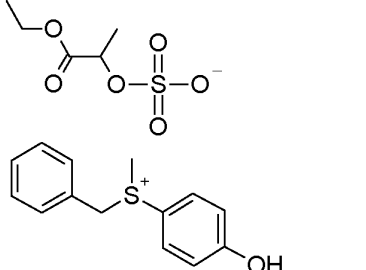
スルホニウムサルフェート		¹ H NMR 溶媒 / δ (ppm, TMS)
S40		DMSO-d6 / 1.04 (br s), 1.38 (br s), 3.27 (s), 3.49 (br s), 4.74 (s), 4.82 (d), 5.02 (d), 6.94 (d), 7.16-7.34 (m), 7.68 (d), 10.78 (s)
S41		DMSO-d6 / 3.38 (s), 4.74 (s), 5.26 (d), 5.52 (d), 6.87 (d), 7.19-7.41 (m), 7.56-7.69 (m), 7.95 (d), 7.98 (d), 8.32 (d)
S42		DMSO-d6 / 3.28 (s), 4.73 (s), 4.96 (d), 5.10 (d), 6.96 (d), 7.22-7.36 (m), 7.47 (d), 7.71 (d), 8.21 (d)
S43		DMSO-d6 / 3.24 (s), 4.81 (d), 4.90 (s), 4.98 (d), 6.96 (d), 7.17 (d), 7.29-7.40 (m), 7.60 (d), 7.70 (d), 8.19 (d), 10.8 (br s)
S44		DMSO-d6 / 3.29 (s), 3.95-4.05 (m), 4.05-4.16 (m), 4.35-4.43 (m), 4.72 (s), 6.83 (d), 6.94 (t), 6.98 (d), 7.20-7.34 (m), 7.84 (d)
S45		DMSO-d6 / 3.96-4.10 (m), 4.21 (t), 4.40-4.49 (m), 4.72 (s), 5.02 (d), 5.16 (d), 6.80 (d), 6.89-6.97 (m), 7.18-7.37 (m), 7.75 (d)

【 0 3 3 9 】

【表 9】

スルホニウムサルフェート		¹ H NMR 溶媒 / δ (ppm, TMS)
S46		DMSO-d6 / 1.53 (d), 1.81 (d), 3.03 (s), 3.28 (s), 4.73 (s), 5.08-5.19 (m), 6.86 (d), 7.05 (d), 7.11 (d), 7.20-7.39 (m), 7.43 (d), 7.47 (br s), 7.74 (d), 10.78 (br s), 10.88 (br s) * 立体異性体の混合物
S47		DMSO-d6 / 3.25 (s), 4.73 (s), 4.88 (d), 5.05 (d), 5.31 (s), 6.94 (d), 7.21-7.48 (m), 7.69 (d), 7.93 (d)
S48		DMSO-d6 / 3.25 (s), 4.73 (s), 5.76 (s), 7.02 (d), 7.21-7.36 (m), 7.59 (t), 7.75 (t), 7.92 (d), 7.99 (d), 10.78 (s)
S49		DMSO-d6 / 1.12 (t), 3.25 (s), 4.05-4.18 (m), 4.73 (s), 4.80 (d), 4.89 (d), 7.02 (d), 7.21-7.35 (m), 7.88 (d), 10.83 (br s)
S50		DMSO-d6 / 1.53 (d), 1.81 (d), 3.03 (s), 3.28 (s), 4.73 (s), 5.08-5.19 (m), 6.86 (d), 7.05 (d), 7.11 (d), 7.20-7.39 (m), 7.43 (d), 7.47 (br s), 7.74 (d), 10.78 (br s), 10.88 (br s) * 立体異性体の混合物
S51		DMSO-d6 / 3.20 (s), 4.24 (dd), 4.34 (dd), 4.73 (s), 5.33 (d), 5.42 (d), 5.65-5.79 (m), 7.02 (d), 7.20-7.36 (m), 7.81 (d)

【表 10】

スルホニウムサルフェート		¹ H NMR 溶媒 / δ (ppm, TMS)
S52		DMSO-d6 / 1.73 (s), 3.22 (s), 4.27 (d), 4.36 (d), 4.73 (s), 4.89 (s), 5.06 (s), 7.01 (d), 7.21-7.35 (m), 7.86 (d), 10.80 (br s)
S53		CD3OD / 1.19 (s), 3.18 (s), 4.16-4.28 (m), 5.00 (s), 5.18 (br t), 7.05 (d), 7.26-7.42 (m), 7.73 (d)
S54		DMSO-d6 / 3.24 (s), 4.17 (q), 4.81 (d), 4.98 (d), 6.96 (d), 7.17 (d), 7.31-7.40 (m), 7.69 (d)
S55		DMSO-d6 / 3.25 (s), 4.38 (d), 4.82 (d), 4.99 (d), 6.34 (dt), 6.58 (d), 6.97 (d), 7.18 (d), 7.24 (t), 7.29-7.41 (m), 7.43 (d), 7.70 (d)
S56		DMSO-d6 / 1.05-1.32 (m), 1.35-1.46 (m), 1.54-1.66 (m), 1.74-1.85 (m), 3.91-4.06 (m), 4.81 (d), 4.98 (d), 6.94 (d), 7.17 (d), 7.28-7.40 (m), 7.68 (d)
S57		DMSO-d6 / 1.15 (t), 1.25 (d), 3.22 (s), 4.04 (q), 4.47 (q), 4.80 (d), 4.97 (d), 6.94 (d), 7.16 (d), 7.28-7.40 (m), 7.68 (d)

【 0 3 4 1 】

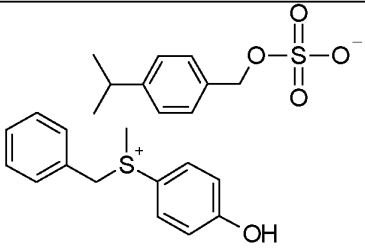
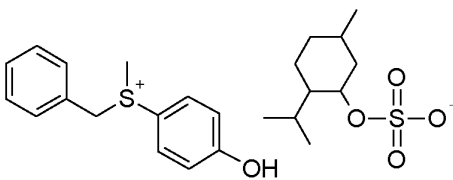
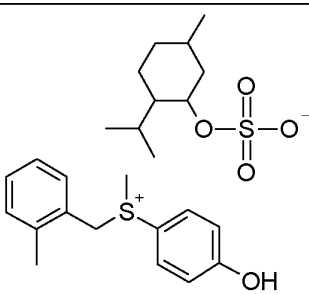
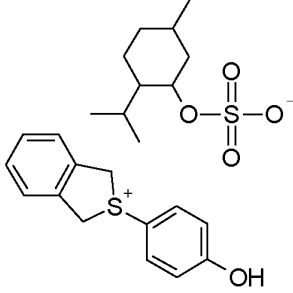
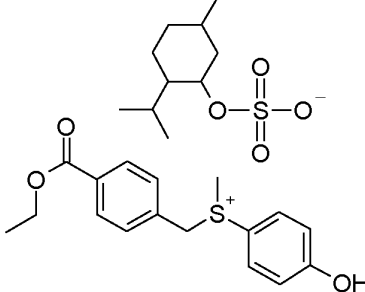
10

20

30

40

【表 1 1】

スルホニウムサルフェート		¹ H NMR 溶媒 / δ (ppm, TMS)
S58		DMSO-d6 / 1.17 (d), 2.85 (m), 3.23 (s), 4.69 (s), 4.81 (d), 4.98 (d), 6.95 (d), 7.14-7.24 (m), 7.30-7.40 (m), 7.69 (d)
S59		DMSO-d6 / 0.66-1.10 (m), 1.22-1.36 (m), 1.54 (br t), 2.04-2.19 (m), 2.28 (br d), 3.22 (s), 3.77 (dt), 4.79 (d), 4.96 (d), 6.92 (d), 7.16 (d), 7.29-7.40 (m), 7.66 (d)
S60		DMSO-d6 / 0.66-1.10 (m), 1.22-1.36 (m), 1.54 (br t), 2.08-2.17 (m), 2.21 (s), 2.28 (br d), 3.33 (s), 3.77 (dt), 4.83 (d), 4.99 (d), 6.90 (d), 7.01 (d), 7.09 (t), 7.19 (d), 7.24 (t), 7.66 (d)
S61		DMSO-d6 / 0.67-1.10 (m), 1.22-1.36 (m), 1.54 (br t), 2.06-2.18 (m), 2.28 (br d), 3.77 (dt), 4.90 (d), 5.25 (d), 6.88 (d), 7.38-7.54 (m)
S62		DMSO-d6 / 0.67-1.10 (m), 1.22-1.36 (m), 1.54 (br t), 2.08-2.17 (m), 2.28 (br d), 3.33 (s), 3.77 (dt), 4.28 (d), 4.88 (d), 5.04 (d), 6.93 (d), 7.31 (d), 7.68 (d), 7.90 (d)

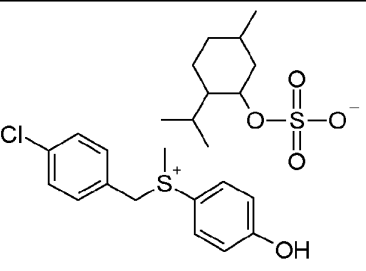
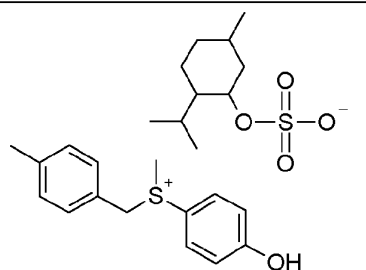
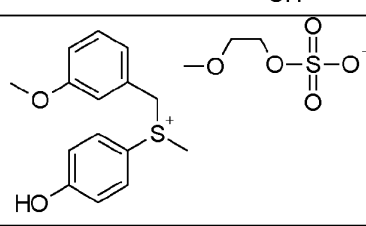
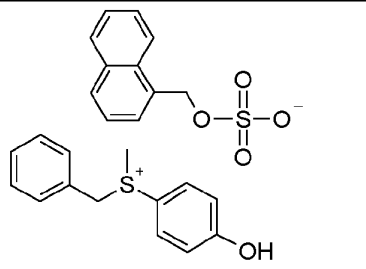
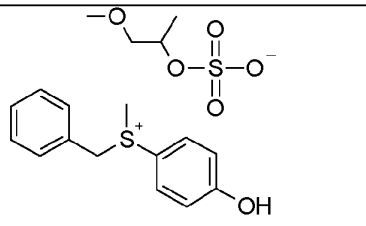
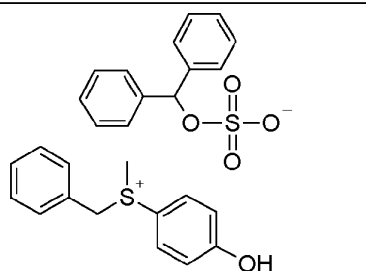
10

20

30

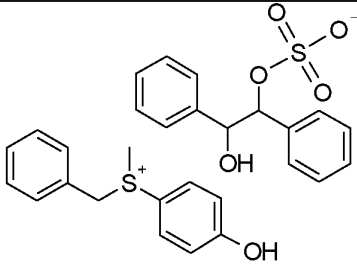
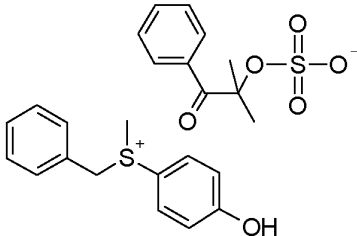
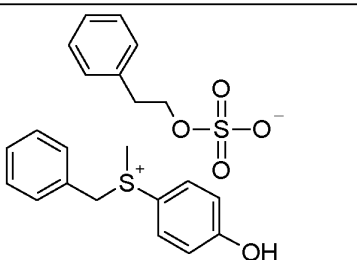
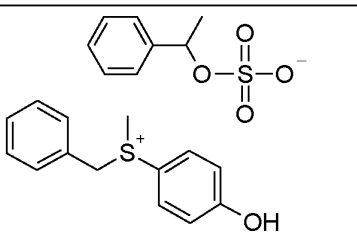
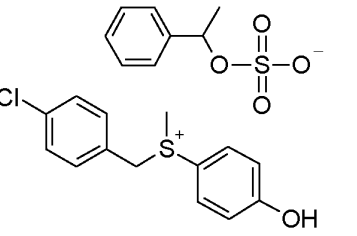
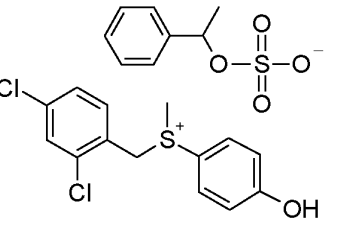
40

【表 1 2】

スルホニウムサルフェート		¹ H NMR 溶媒 / δ (ppm, TMS)
S63		DMSO-d6 / 0.67-1.10 (m), 1.22-1.36 (m), 1.54 (br t), 2.08-2.17 (m), 2.28 (br d), 3.23 (s), 3.78 (dt), 4.80 (d), 4.96 (d), 6.95 (d), 7.18 (d), 7.42 (d), 7.69 (d)
S64		DMSO-d6 / 0.67-1.10 (m), 1.22-1.36 (m), 1.54 (br t), 2.08-2.17 (m), 2.24 (s), 2.28 (br d), 3.22 (s), 3.77 (dt), 4.77 (d), 4.92 (d), 6.94 (d), 7.04 (d), 7.14 (d), 7.68 (d)
S65		DMSO-d6 / 3.21 (s), 3.22 (s), 3.42 (t), 3.65 (s), 3.76 (t), 4.76 (d), 4.92 (d), 6.69-6.77(m), 6.90-6.99 (m), 7.25 (t), 7.70 (d)
S66		DMSO-d6 / 3.22 (s), 4.79 (d), 4.96 (d), 5.15 (s), 6.93 (d), 7.15 (d), 7.28-7.38 (m), 7.43 (t), 7.47-7.56 (m), 7.68 (d), 7.86 (d), 7.90 (d), 8.16 (d)
S67		DMSO-d6 / 1.10 (d), 3.22 (s), 3.24 (s), 3.19 (dd), 3.38 (dd), 4.16-4.27 (m), 4.81 (d), 4.98 (d), 6.95 (d), 7.17 (d), 7.30-7.41 (m), 7.69 (d)
S68		DMSO-d6 / 3.23 (s), 4.81 (d), 4.98 (d), 6.14 (s), 6.95 (d), 7.16-7.40 (m), 7.69 (d)

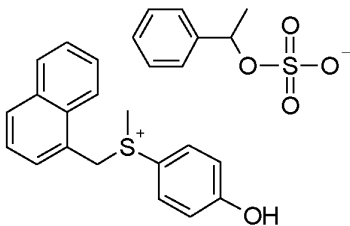
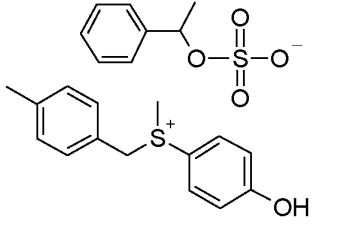
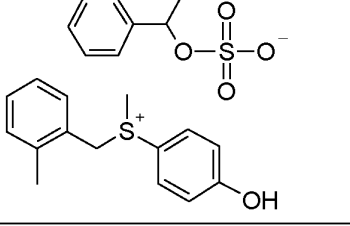
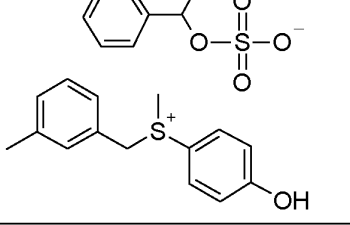
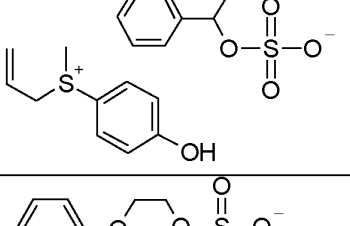
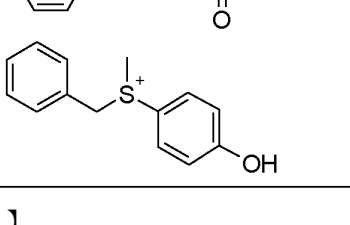
【 0 3 4 3 】

【表 1 3】

スルホニウムサルフェート		¹ H NMR 溶媒 / δ (ppm, TMS)
S69		DMSO-d6 / 3.25 (s), 4.82 (d), 4.99 (d), 5.06 (br s), 5.31 (d), 5.55 (d), 6.91-7.04 (m), 7.08-7.23 (m), 7.31-7.41 (m), 7.70 (d)
S70		DMSO-d6 / 1.48 (s), 3.23 (s), 4.81 (d), 4.98 (d), 6.96 (d), 7.17 (d), 7.30-7.38 (m), 7.40 (t), 7.48 (tH), 7.70 (d), 8.19 (d), 10.8 (br s)
S71		DMSO-d6 / 2.81 (t), 3.23 (s), 3.89 (t), 4.81 (d), 4.97 (d), 6.93 (d), 7.11-7.40 (m), 7.68 (d)
S72		DMSO-d6 / 1.41 (d), 3.24 (s), 4.82 (d), 4.98 (d), 5.18 (q), 6.96 (d), 7.15-7.40 (m), 7.70 (d), 10.8 (br s)
S73		DMSO-d6 / 1.40 (d), 3.23 (s), 4.81 (d), 4.96 (d), 5.17 (q), 6.96 (d), 7.16-7.33 (m), 7.43 (d), 7.70 (d)
S74		DMSO-d6 / 1.40 (d), 3.38 (s), 4.95 (d), 5.06 (d), 5.17 (q), 6.93 (d), 7.16-7.36 (m), 7.43 (d), 7.70 (d), 7.71 (s)

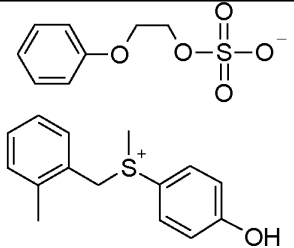
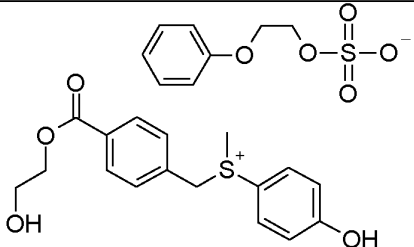
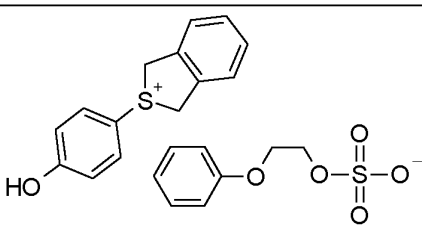
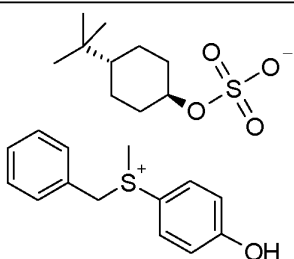
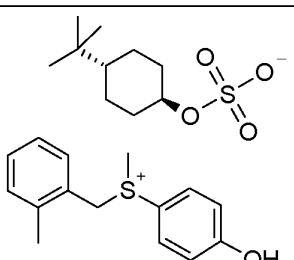
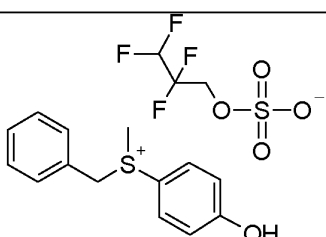
【 0 3 4 4 】

【表 1 4】

スルホニウムサルフェート		¹ H NMR 溶媒 / δ (ppm, TMS)
S75		DMSO-d6 / 1.40 (d), 3.38 (s), 5.18 (q), 5.27 (d), 5.52 (d), 6.87 (d), 7.16-7.35 (m), 7.37 (t), 7.55-7.70 (m), 7.95 (d), 7.98 (d), 8.32 (d)
S76		DMSO-d6 / 1.40 (d), 2.25 (s), 3.21 (s), 4.77 (d), 4.92 (d), 5.17 (q), 6.96 (d), 7.04 (d), 7.14 (d), 7.17-7.34 (m), 7.70 (d), 10.77 (s)
S77		DMSO-d6 / 1.40 (d), 2.21 (s), 3.32 (s), 4.84 (d), 5.00 (d), 5.17 (q), 6.93 (d), 7.00 (d), 7.09 (t), 7.17-7.33 (m), 7.67 (d), 10.77 (s)
S78		DMSO-d6 / 1.40 (d), 2.22 (s), 3.21 (s), 4.76 (d), 4.92 (d), 5.17 (q), 6.96 (d), 7.14-7.33 (m), 7.69 (d), 10.77 (s)
S79		DMSO-d6 / 1.40 (d), 3.20 (s), 4.24 (dd), 4.35 (dd), 5.17 (q), 5.33 (d), 5.42 (d), 7.02 (d), 7.17-7.33 (m), 7.81 (d), 10.78 (s)
S80		DMSO-d6 / 3.23 (s), 3.95-4.12 (m), 4.80 (d), 4.97 (d), 6.86-6.99 (m), 7.16 (d), 7.25 (t), 7.29-7.40 (m), 7.68 (d)

【 0 3 4 5 】

【表 1 5】

スルホニウムサルフェート		¹ H NMR 溶媒 / δ (ppm, TMS)
S81		DMSO-d6 / 2.21 (s), 3.33 (s), 3.99 (t), 4.08 (t), 4.84 (d), 5.00 (d), 6.86-6.96 (m), 7.00 (d), 7.08 (t), 7.16-7.30 (m), 7.67 (d)
S82		DMSO-d6 / 3.27 (s), 3.66 (br s), 3.99 (t), 4.24 (t), 4.88 (d), 5.05 (d), 6.85-7.00 (m), 7.25 (t), 7.32 (d), 7.69 (d), 7.93 (d)
S83		DMSO-d6 / 3.95-4.11 (m), 4.91 (d), 5.25 (d), 6.85-6.94 (m), 7.26 (t), 7.38-7.54 (m)
S84		DMSO-d6 / 0.81 (s), 0.86-1.19 (m), 1.69 (br d), 2.03 (br d), 3.24 (s), 3.77-3.92 (m), 4.82 (d), 4.98 (d), 6.95 (d), 7.18 (d), 7.30-7.42 (m), 7.69 (d)
S85		DMSO-d6 / 0.81 (s), 0.85-1.18 (m), 1.69 (br d), 2.03 (br d), 2.22 (s), 3.35 (s), 3.77-3.92 (m), 4.85 (d), 5.01 (d), 6.93 (d), 7.02 (d), 7.10 (t), 7.20 (d), 7.25 (t), 7.68 (d)
S86		DMSO-d6 / 3.25 (s), 4.10 (tt), 4.82 (d), 4.99 (d), 6.47 (tt), 6.97 (d), 7.18 (d), 7.31-7.41 (m), 7.71 (d), 10.78 (s)

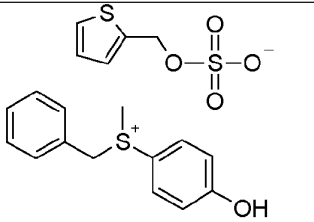
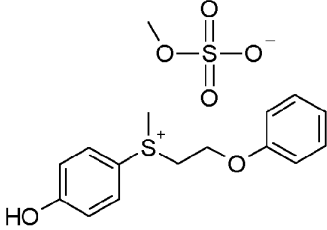
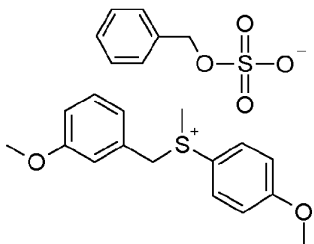
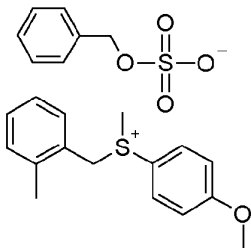
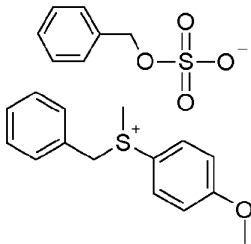
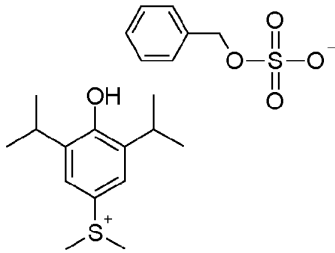
10

20

30

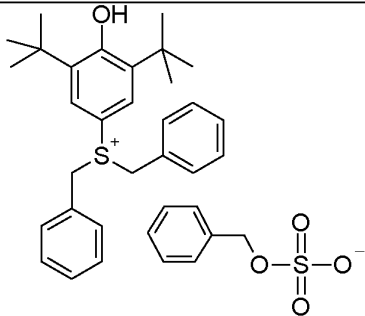
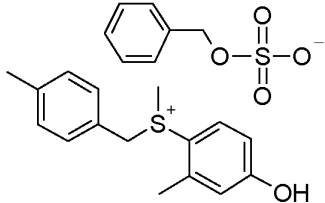
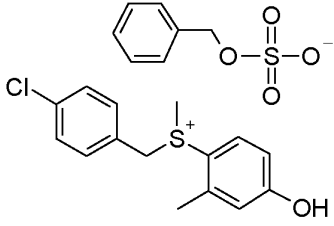
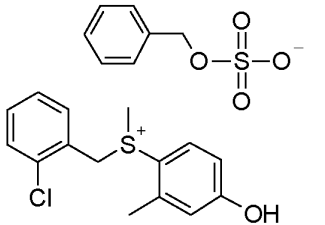
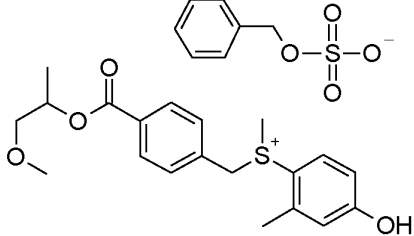
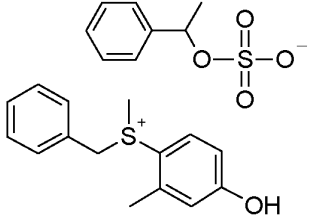
40

【表 1 6】

スルホニウムサルフェート		¹ H NMR 溶媒 / δ (ppm, TMS)
S87		DMSO-d6 / 3.24 (s), 4.81 (d), 4.87 (s), 4.98 (d), 6.92-7.00 (m), 7.04 (d), 7.17 (d), 7.29-7.40 (m), 7.47 (d), 7.69 (d), 10.78 (s)
S88		CD3OD / 3.32 (s), 3.68 (s), 3.93-4.03 (m), 4.07-4.17 (m), 4.39-4.50 (m), 6.86 (d), 6.99 (t), 7.04 (d), 7.25 (t), 7.81 (d)
S89		DMSO-d6 / 3.25 (s), 3.65 (s), 3.84 (s), 4.74 (s), 4.82 (d), 4.96 (d), 6.72-6.77 (m), 6.93 (d), 7.17-7.36 (m), 7.85 (d)
S90		DMSO-d6 / 2.22 (s), 3.37 (s), 3.82 (s), 4.73 (s), 4.90 (d), 5.03 (d), 7.01 (d), 7.09 (t), 7.13 (d), 7.18-7.36 (m), 7.82 (d)
S91		DMSO-d6 / 3.26 (s), 3.83 (s), 4.73 (s), 4.86 (d), 5.01 (d), 7.15-7.40 (m), 7.83 (d)
S92		DMSO-d6 / 1.18 (d), 3.18 (s), 3.33 (m), 4.73 (s), 7.22-7.35 (m), 7.63 (s), 9.40 (br s)

【 0 3 4 7 】

【表 1 7】

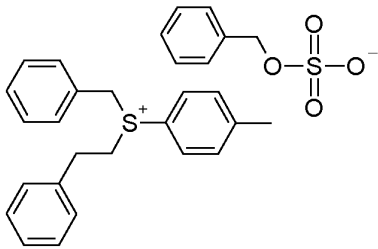
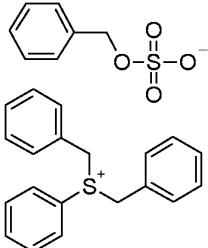
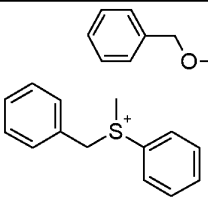
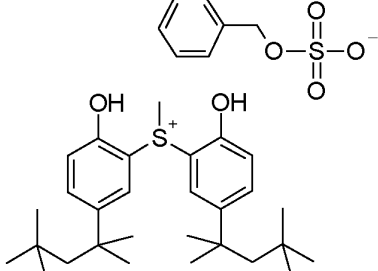
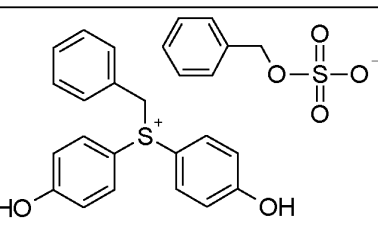
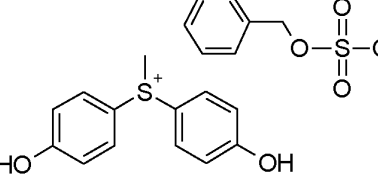
スルホニウムサルフェート		¹ H NMR 溶媒 / δ (ppm, TMS)
S93		DMSO-d6 / 1.29 (s), 4.76 (s), 5.08 (d), 5.19 (d), 7.22-7.41 (m), 8.21 (s)
S94		DMSO-d6 / 1.99 (s), 2.25 (s), 3.22 (s), 4.65 (d), 4.72 (s), 4.95 (d), 6.68 (d), 6.91 (dd), 7.02 (d), 7.13 (d), 7.20-7.35 (m), 7.90 (d)
S95		DMSO-d6 / 2.05 (s), 3.25 (s), 4.72 (d), 4.74 (s), 4.99 (d), 6.71 (d), 6.93 (dd), 7.19 (d), 7.22-7.36 (m), 7.43 (d), 7.89 (d)
S96		DMSO-d6 / 2.01 (s), 3.39 (s), 4.73 (s), 4.87 (d), 5.10 (d), 6.51 (s), 6.91 (d), 7.18-7.36 (m), 7.42 (t), 7.52 (d), 7.97 (d)
S97		DMSO-d6 / 1.24 (d), 2.05 (s), 3.27 (s), 3.28 (s), 3.4-3.6 (m), 4.74 (s), 4.81 (d), 5.08 (d), 5.14-5.24 (m), 6.70 (s), 6.93 (d), 7.22-7.40 (m), 7.90 (d), 7.94 (d)
S98		DMSO-d6 / 1.41 (d), 1.97 (s), 3.26 (s), 4.69 (d), 5.01 (d), 5.18 (q), 6.68 (d), 6.93 (dd), 7.15 (d), 7.18-7.42 (m), 7.93 (d)

【 0 3 4 8 】

【表 1 8】

スルホニウムサルフェート		¹ H NMR 溶媒 / δ (ppm, TMS)
S99		DMSO-d6 / 0.81 (s), 0.86-1.18 (m), 1.69 (br d), 1.97 (s), 2.03 (br d), 3.79-3.89 (m), 4.70 (d), 5.02 (d), 6.68 (d), 6.93 (dd), 7.15 (d), 7.29-7.46 (m), 7.93 (d)
S100		DMSO-d6 / 1.94 (s), 3.23 (s), 4.66 (d), 4.71 (s), 4.98 (d), 6.51 (s), 6.90 (d), 7.12 (d), 7.18-7.41 (m), 7.90 (d), 10.6 (br s)
S101		DMSO-d6 / 2.38 (s), 3.27 (s), 4.73 (s), 4.88 (d), 5.03 (d), 7.18 (d), 7.22-7.40 (m), 7.46 (d), 7.77 (d)
S102		DMSO-d6 / 2.35 (s), 4.73 (s), 5.11 (d), 5.22 (d), 7.21-7.36 (m), 7.40 (d), 7.76 (d)
S103		DMSO-d6 / 2.39 (s), 2.68-2.85 (m), 3.56 (s), 3.96 (m), 4.75 (s), 5.07 (d), 5.24 (d), 7.21-7.39 (m), 7.49 (d), 7.85 (d)
S104		DMSO-d6 / 1.63-2.11 (m), 2.39 (s), 2.40 (s), 3.55-3.66 (m), 3.72-4.00 (m), 4.14 (dd), 4.16 (dd), 4.21-4.27 (m), 5.00 (d), 5.01 (d), 5.14 (d), 5.17 (d), 7.18-7.39 (m), 7.46 (d), 7.48 (d), 7.81-7.85 (d x2) * 立体異性体の混合物

【表 19】

スルホニウムサルフェート		¹ H NMR 溶媒 / δ (ppm, TMS)
S105		DMSO-d6 / 2.39 (s), 2.76-3.00 (m), 4.02-4.16 (m), 4.74 (s), 5.02 (d), 5.17 (d), 7.16 (d), 7.19-7.38 (m), 7.48 (d), 7.82 (d)
S106		アセトン-d6 / 5.04 (s), 5.35 (d), 5.57 (d), 7.21-7.38 (m), 7.43 (d), 7.62 (t), 7.77 (t), 8.03 (d)
S107		DMSO-d6 / 3.30 (s), 4.75 (s), 4.91 (d), 5.07 (d), 7.16 (d), 7.21-7.39 (m), 7.64 (t), 7.75 (t), 7.88 (d)
S108		アセトン-d6 / 0.71 (s), 1.33 (s), 1.71 (d), 1.76 (d), 3.74 (s), 4.97 (s), 7.25 (t), 7.28-7.35 (m), 7.40 (d), 7.53 (d), 7.67 (dd)
S109		CD3OD / 5.00 (s), 5.31 (s), 7.02 (d), 7.24-7.43 (m), 7.73 (d)
S110		CD3OD / 3.54 (s), 5.00 (s), 7.04 (d), 7.24-7.42 (m), 7.75 (d)

10

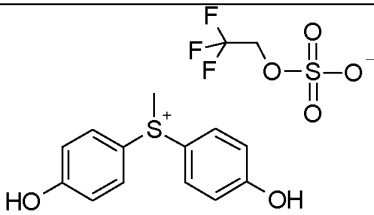
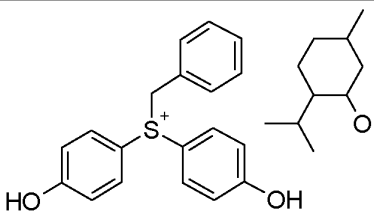
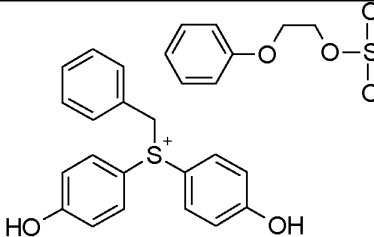
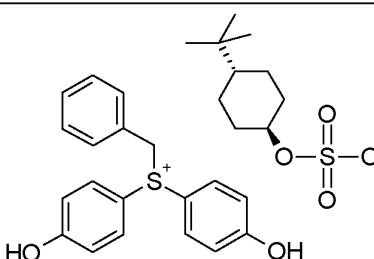
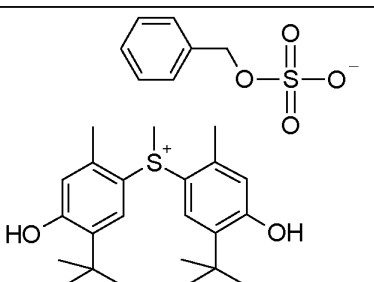
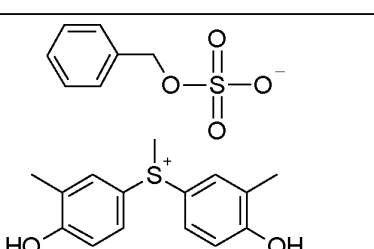
20

30

40

【 0 3 5 0 】

【表 2 0】

スルホニウムサルフェート		¹ H NMR 溶媒 / δ (ppm, TMS)
S111		DMSO-d6 / 3.62 (s), 4.17 (q), 7.00 (d), 7.81 (d)
S112		DMSO-d6 / 0.67-1.10 (m), 1.22-1.36 (m), 1.54 (br t), 2.06-2.17 (m), 2.28 (br d), 3.77 (dt), 5.48 (s), 6.98 (d), 7.33 (br s), 7.84 (d), 10.93 (br s)
S113		アセトン -d6 / 4.17-4.26 (m), 5.56 (s), 6.89 (t), 6.94 (d), 7.17 (d), 7.25 (t), 7.33-7.49 (m), 7.90 (d)
S114		CD3OD / 0.86 (s), 0.94-1.40 (m), 1.82 (br d), 2.23 (br d), 3.99-4.24 (m), 5.31 (s), 7.02 (d), 7.26-7.42 (m), 7.73 (d)
S115		DMSO-d6 / 1.30 (s), 2.39 (s), 3.60 (s), 4.73 (s), 6.81 (s), 7.21-7.34 (m), 7.40 (s)
S116		DMSO-d6 / 2.14 (s), 3.58 (s), 4.73 (s), 6.97 (d), 7.20-7.34 (m), 7.62 (dd), 7.73 (d)

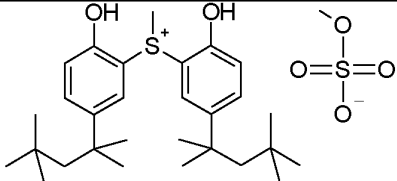
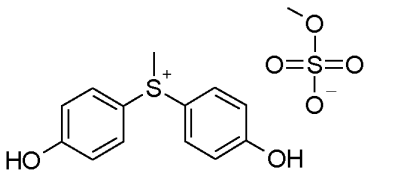
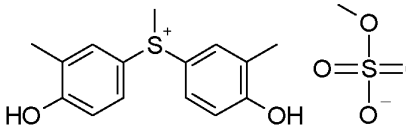
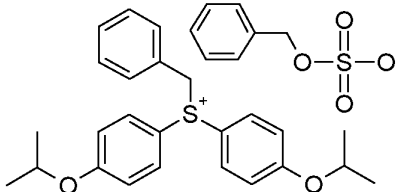
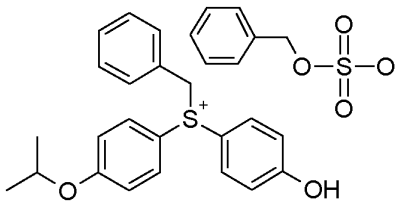
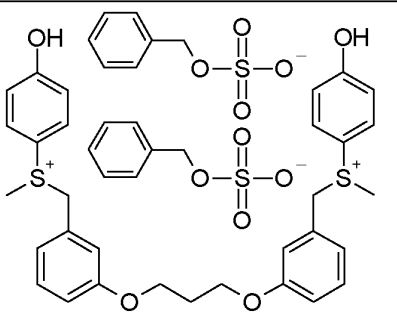
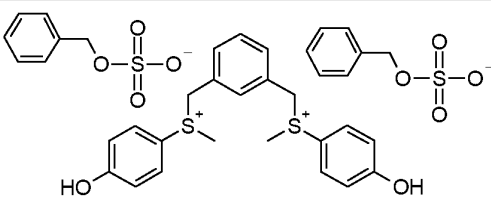
10

20

30

40

【表 2 1】

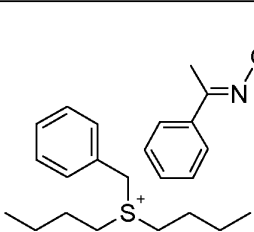
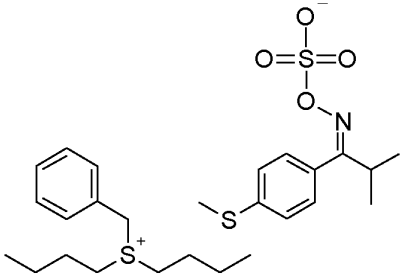
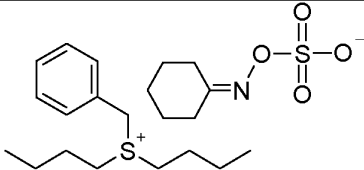
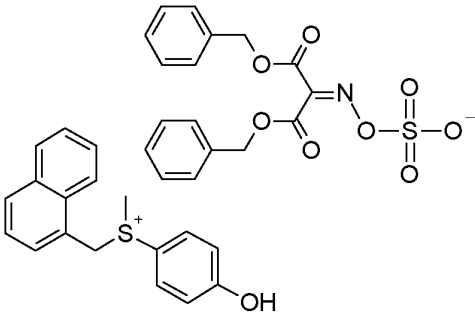
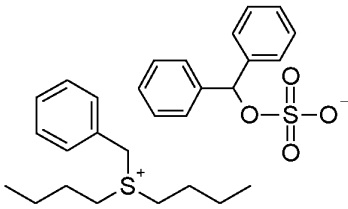
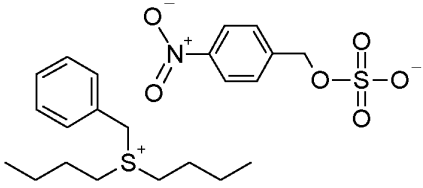
スルホニウムサルフェート		¹ H NMR 溶媒 / δ (ppm, TMS)
S117		DMSO-d6 / 0.63 (s), 1.24 (s), 1.59 (d), 1.66 (d), 3.34 (s), 3.55 (s), 7.01 (d), 7.30 (s), 7.59 (d)
S118		CD3OD / 3.56 (s), 3.68 (s), 7.05 (d), 7.76 (d)
S119		DMSO-d6 / 2.15 (s), 3.35 (s), 3.59 (s), 6.98 (d), 7.63 (dd), 7.74 (d), 10.66 (s)
S120		CD3OD / 1.33 (d), 4.72 (m), 5.00 (s), 5.36 (s), 7.15 (d), 7.26-7.40 (m), 7.83 (d)
S121		CD3OD / 1.33 (d), 4.72 (m), 5.00 (s), 5.34 (s), 7.03 (d), 7.16 (d), 7.24-7.40 (m), 7.75 (d), 7.80 (d)
S122		DMSO-d6 / 2.03-2.13 (m), 3.22 (s), 3.92-4.08 (m), 4.74 (s), 4.77 (d), 4.92 (d), 6.74 (d), 6.80 (br s), 6.91-7.00 (m), 7.21-7.34 (m), 7.71 (d), 10.8 (br s)
S123		DMSO-d6 / 3.16 (s), 4.72 (s), 4.76 (d), 4.93 (d), 6.95 (d), 7.02-7.35 (m), 7.62 (d)

【 0 3 5 2 】

【表 2 2】

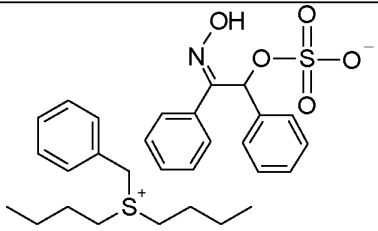
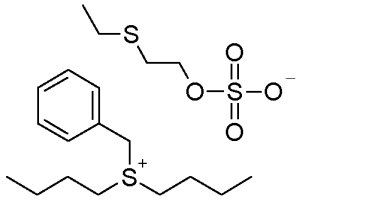
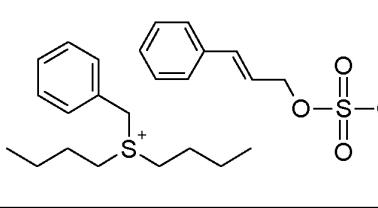
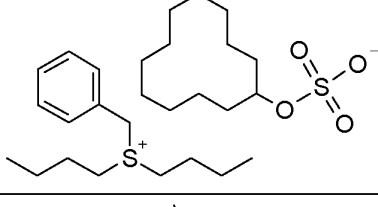
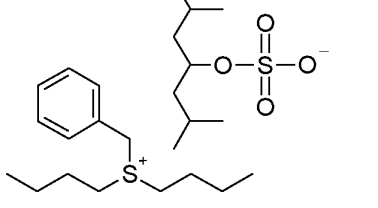
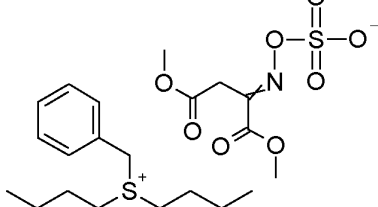
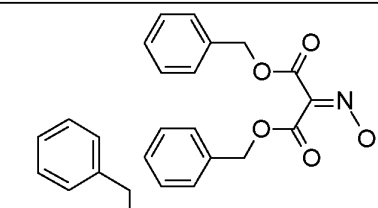
スルホニウムサルフェート		¹ H NMR 溶媒 / δ (ppm, TMS)
S124		DMSO-d6 / 0.83 (t), 1.25-1.38 (m), 1.46-1.68 (m), 3.17-3.30 (m), 4.73 (s), 7.16 (t), 7.27-7.53 (m), 7.55 (d), 7.66 (d)
S125		DMSO-d6 / 0.83 (t), 0.86 (t), 1.26-1.38 (m), 1.46-1.69 (m), 3.18-3.31 (m), 3.78 (q), 4.74 (s), 7.37-7.54 (m)
S126		DMSO-d6 / 0.83 (t), 1.25-1.38 (m), 1.45-1.69 (m), 1.68 (s), 3.18-3.32 (m), 4.74 (s), 7.41-7.53 (m), 7.58 (d)
S127		DMSO-d6 / 0.83 (t), 1.18-1.38 (m), 1.46-1.69 (m), 3.17-3.31 (m), 4.28 (q), 4.74 (s), 7.43-7.55 (m)
S128		DMSO-d6 / 0.83 (t), 1.26-1.38 (m), 1.45-1.68 (m), 2.02 (s), 3.17-3.31 (m), 4.73 (s), 7.42-7.54 (m), 7.63 (t), 7.97 (d)
S129		DMSO-d6 / 0.76-0.88 (m), 1.13-1.69 (m), 2.52 (t), 3.17-3.31 (m), 4.74 (s), 7.19 (d), 7.40-7.59 (m), 7.89 (d)

【表 2 3】

スルホニウムサルフェート		¹ H NMR 溶媒 / δ (ppm, TMS)
S130		DMSO-d6 / 0.83 (t), 1.25-1.37 (m), 1.45-1.68 (m), 2.15 (s), 3.18-3.32 (m), 4.74 (s), 7.36-7.42 (m), 7.42-7.53 (m), 7.62-7.69 (m)
S131		DMSO-d6 / 0.83 (t), 1.01 (d), 1.25-1.38 (m), 1.45-1.68 (m), 2.47 (s), 2.76-2.89 (m), 3.18-3.32 (m), 4.74 (s), 7.15 (d), 7.26 (d), 7.42-7.54 (m)
S132		DMSO-d6 / 0.83 (t), 1.26-1.38 (m), 1.44-1.69 (m), 2.14 (t), 2.31 (t), 3.18-3.32 (m), 4.74 (s), 7.42-7.55 (m)
S133		DMSO-d6 / 3.38 (s), 5.27 (d), 5.31 (s), 5.34 (s), 5.53 (d), 6.88 (d), 7.22 (d), 7.28-7.43 (m), 7.56-7.69 (m), 7.95 (d), 7.98 (d), 8.32 (d), 10.74 (s)
S134		DMSO-d6 / 0.83 (t), 1.25-1.38 (m), 1.45-1.68 (m), 3.17-3.31 (m), 4.74 (s), 6.14 (s), 7.15-7.21 (m), 7.23-7.32 (m), 7.42-7.53 (m)
S135		DMSO-d6 / 0.83 (t), 1.25-1.39 (m), 1.46-1.69 (m), 3.17-3.33 (m), 4.74 (s), 4.90 (s), 7.42-7.54 (m), 7.60 (d), 8.18 (d)

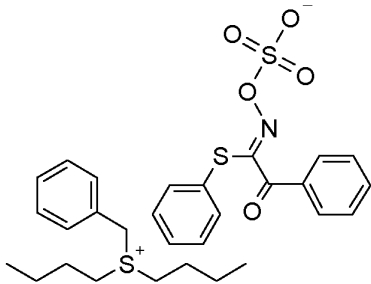
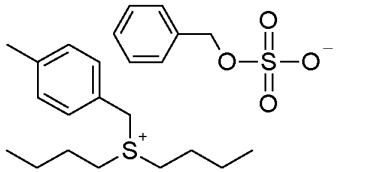
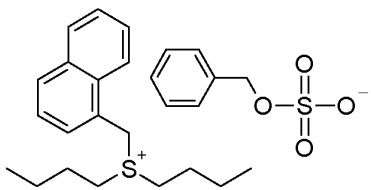
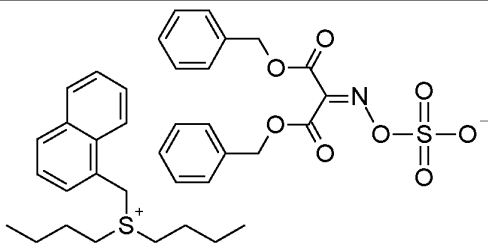
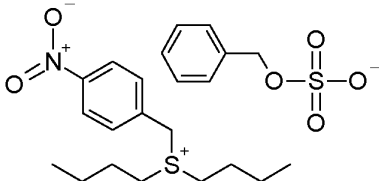
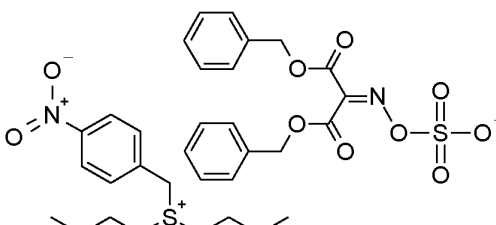
【 0 3 5 4 】

【表 2 4】

スルホニウムサルフェート		¹ H NMR 溶媒 / δ (ppm, TMS)
S136		DMSO-d6 / 0.83 (t), 1.25-1.39 (m), 1.46-1.69 (m), 3.17-3.33 (m), 4.74 (s), 5.96 (s), 7.07-7.30 (m), 7.41-7.54 (m), 10.87 (br s)
S137		DMSO-d6 / 0.84 (t), 1.15 (t), 1.25-1.39 (m), 1.46-1.69 (m), 2.50 (q), 2.65 (t), 3.17-3.33 (m), 3.79 (t), 4.74 (s), 7.42-7.54 (m)
S138		DMSO-d6 / 0.83 (t), 1.15 (t), 1.25-1.39 (m), 1.46-1.69 (m), 3.17-3.33 (m), 4.38 (d), 6.33 (dt), 6.56 (d), 7.22 (t), 7.31 (t), 7.41 (d), 7.43-7.55 (m)
S139		DMSO-d6 / 0.83 (t), 1.14-1.43 (m), 1.43-1.69 (m), 3.17-3.33 (m), 4.13-4.22 (m), 4.74 (s), 7.42-7.55 (m)
S140		DMSO-d6 / 0.76-0.88 (m), 1.10-1.20 (m), 1.26-1.38 (m), 1.39-1.75 (m), 3.17-3.33 (m), 4.09-4.18 (m), 4.74 (s), 7.42-7.55 (m)
S141		DMSO-d6 / 0.83 (t), 1.26-1.38 (m), 1.45-1.69 (m), 3.17-3.32 (m), 3.55 (s), 3.59 (s), 3.76 (s), 4.74 (s), 7.41-7.55 (m)
S142		DMSO-d6 / 0.83 (t), 1.25-1.37 (m), 1.45-1.68 (m), 3.17-3.31 (m), 4.73 (s), 5.30 (s), 5.32 (s), 7.29-7.40 (m), 7.43-7.53 (m)

【 0 3 5 5 】

【表 2 5】

スルホニウムサルフェート		¹ H NMR 溶媒 / δ (ppm, TMS)
S143		DMSO-d6 / 0.83 (t), 1.25-1.37 (m), 1.45-1.68 (m), 3.17-3.31 (m), 4.73 (s), 7.19 (t), 7.27 (t), 7.34 (d), 7.43-7.53 (m), 7.65 (t), 7.76 (d)
S144		DMSO-d6 / 0.84 (t), 1.25-1.38 (m), 1.47-1.70 (m), 2.31 (s), 3.13-3.28 (m), 4.69 (s), 4.73 (s), 7.21-7.35 (m), 7.38 (d)
S145		DMSO-d6 / 0.75 (t), 1.16-1.31 (m), 1.31-1.61 (m), 3.28-3.44 (m), 4.74 (s), 5.24 (s), 7.20-7.35 (m), 7.57 (dd), 7.63 (t), 7.70 (t), 7.79 (d), 8.04 (d), 8.07 (d), 8.30 (d)
S146		DMSO-d6 / 0.77 (t), 1.19-1.32 (m), 1.32-1.63 (m), 3.28-3.44 (m), 5.24 (s), 5.31 (s), 5.34 (s), 7.38-7.42 (m), 7.59 (dd), 7.65 (t), 7.72 (t), 7.79 (d), 8.05 (d), 8.08 (d), 8.31 (d)
S147		DMSO-d6 / 0.85 (t), 1.27-1.39 (m), 1.50-1.72 (m), 3.22-3.39 (m), 4.74 (s), 4.88 (s), 7.20-7.34 (m), 7.80 (d), 8.32 (d)
S148		DMSO-d6 / 0.85 (t), 1.27-1.39 (m), 1.50-1.72 (m), 3.21-3.38 (m), 4.87 (s), 5.30 (s), 5.32 (s), 7.45-7.56 (m), 7.80 (d), 8.32 (d)

10

20

30

40

【表 2 6】

スルホニウムサルフェート		¹ H NMR 溶媒 / δ (ppm, TMS)
S149		DMSO-d6 / 0.84 (t), 1.12-1.34 (m), 1.47-1.69 (m), 3.18-3.32 (m), 4.73 (s), 7.20-7.34 (m), 7.37-7.53 (m)
S150		DMSO-d6 / 2.06-2.29 (m), 3.30-3.51 (m), 4.52 (s), 5.31 (s), 5.34 (s), 7.29-7.42 (m), 7.43-7.58 (m)
S151		DMSO-d6 / 2.11-2.47 (m), 3.31-3.51 (m), 4.98 (s), 5.31 (s), 5.33 (s), 7.29-7.42 (m), 7.57 (dd), 7.65 (t), 7.71 (t), 7.78 (d), 8.05 (d), 8.07 (d), 8.43 (d)
S152		DMSO-d6 / 2.88 (t), 3.38-3.62 (m), 3.61 (s), 4.73 (s), 4.82 (s), 7.21-7.35 (m), 7.44-7.54 (m)
S153		DMSO-d6 / 1.11-1.20 (m), 2.84-3.80 (m), 4.78-4.94 (m), 5.04-5.16 (m), 7.21-7.40 (m), 7.40-7.50 (m)

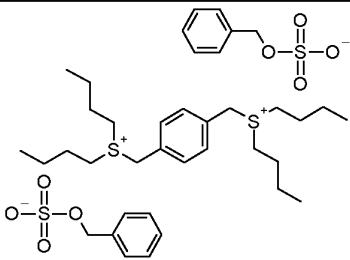
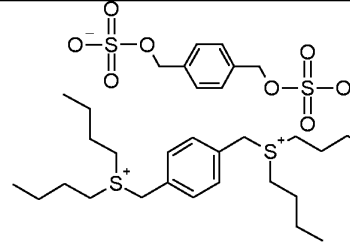
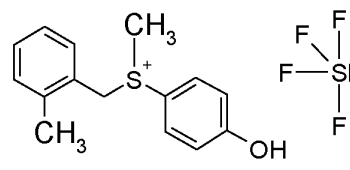
10

20

30

40

【表 27】

スルホニウムサルフェート		¹ H NMR 溶媒 / δ (ppm, TMS)
S154		DMSO-d6 / 0.84 (t), 1.25-1.38 (m), 1.47-1.70 (m), 3.19-3.35 (m), 4.74 (s), 4.78 (s), 7.21-7.35 (m), 7.62 (s)
S155		DMSO-d6 / 0.84 (t), 1.25-1.38 (m), 1.47-1.70 (m), 3.19-3.35 (m), 4.73 (s), 4.77 (s), 7.26 (s), 7.59 (s)
C1**		

** S a n - A i d S I - 8 0 (登録番号: 141651-31-2)、CAインデックス名: スルホニウム、(4-ヒドロキシフェニル)メチル[(2-メチルフェニル)メチル]ー、(OC-6-11)ーヘキサフルオロアンチモネート(1ー)(1:1)、S a n s h i n C h e m i c a l I n d u s t r y C o . , L t d . から入手可能【0358】

使用例

エポキシ配合物の熱硬化試験

実施例1:

エポキシ配合物:

100質量部のSU-8(固体含有量: 30%、Micro Chemの製品、シクロヘキサノン)

0.15質量部の式I aまたはI bのスルホニウムサルフェート

エポキシ組成物の熱硬化試験

合成例1のスルホニウムサルフェートを、SU-8の溶液に加え、混合した。当該混合物を、スピンコーター(1H-DX2、M I K A S A)を使用してシリコンウェハに塗工した。対流式オーブンにおいて80℃で2分間加熱することにより、溶媒を除去した。乾燥膜の厚さは、およそ1.5μmであった。当該コーティングをさらに、230℃で30分間および60分間ベーク処理した。ベーク処理におけるエポキシ基の変換率は、ベーク処理の前後に910cm⁻¹でのIR吸収をFT-IR分光計(FT-720、H O R I B A)によって測定することにより特定した。変換率が高いほど、試験したスルホニウムサルフェートは活性である。試験の結果を第2表に示す。

【0359】

実施例2~132は、第1表のスルホニウムサルフェートを使用して同じ方法において実施した。

【0360】

比較例1:

比較例 1 は、開始剤として第 1 表の C 1 を使用していること以外、実施例 1 と同じ方法で実施した。

【 0 3 6 1 】

第 2 表

【表 2 8】

以下の合成例の化合物	エポキシ変換率（％）	
	230℃で30分間	230℃で60分間
S1	84.1	100
S2	89.1	100
S3	82.6	100
S4	96.3	100
S5	88.3	100
S6	83.0	100
S7	78.9	100
S8	90.5	100
S9	82.9	100
S10	81.2	100
S11	78.7	100
S20	72.3	100
S21	98.7	100
S22	97.4	100
S23	93.1	100
S24	80.9	100
S25	87.7	100
S26	92.5	100
S27	100	100
S28	93.1	100

【 0 3 6 2 】

10

20

30

【表 2 9】

以下の合成例の化合物	エポキシ変換率（％）	
	230℃で30分間	230℃で60分間
S29	91.5	100
S30	99.5	100
S31	96.1	100
S32	88.4	100
S33	90.1	100
S34	93.6	100
S35	91.8	100
S36	99.4	100
S37	96.3	100
S38	90.0	100
S39	94.5	100
S40	84.0	100
S41	95.4	100
S42	92.9	100
S43	90.6	100
S44	82.2	100
S45	91.7	100
S46	97.7	100
S47	89.5	100
S48	85.7	100
S49	78.3	99.8
S50	78.5	100
S51	92.0	100
S52	89.0	100
S53	76.8	100
S54	89.2	100
S55	93.5	100
S56	69.1	99.6
S57	97.7	100
S58	88.3	100
S59	85.8	100
S60	86.9	100
S61	94.8	100
S62	88.8	100
S63	78.5	100
S64	83.5	100

【表 3 0】

以下の合成例の化合物	エポキシ変換率（％）	
	230℃で30分間	230℃で60分間
S65	70.1	100
S66	98.3	100
S67	70.7	95.4
S68	97.7	100
S69	75.6	99.4
S70	97.2	100
S71	84.6	100
S72	99.3	100
S73	97.6	100
S74	93.8	100
S75	90.1	100
S76	99.6	100
S77	98.3	100
S78	100	100
S79	98.3	100
S80	97.8	100
S81	98.1	100
S82	88.5	100
S83	95.0	100
S84	79.6	99
S85	90.3	100
S86	77.5	100
S87	91.2	100
S88	59.6	89.5
S89	98.7	100
S90	97.0	100
S91	96.4	100
S92	73.8	98.6
S93	71.2	100
S94	99.3	100
S95	94.4	100
S96	94.6	100
S97	93.1	100
S98	99.2	100
S99	73.5	98.5
S100	48.8	100

10

20

30

40

【表 3 1】

以下の合成例の化合物	エポキシ変換率 (%)	
	230℃で30分間	230℃で60分間
S101	91.5	100
S102	81.7	100
S103	74.8	100
S104	77.2	100
S105	72.1	100
S106	88.8	100
S107	91.9	100
S108	70.2	96.0
S109	86.1	100
S110	71.0	98.2
S111	83.8	99.2
S112	84.0	100
S113	92.0	100
S114	90.8	100
S115	65.3	91.1
S116	73.8	96.9
S117	74.2	98.4
S118	72.0	100
S119	68.6	93.3
S120	66.8	100
S121	71.9	100
S122	72.0	100
S123	100	100
S124	55.5	93.3
S125	62.4	95.5
S126	66.6	100
S127	62.9	97.9
S128	66.7	97.0
S129	57.9	92.2
S130	68.1	99.0
S131	68.2	99.7
S132	68.7	99.8
S133	62.4	95.3
S134	69.1	100
S135	63.6	97.3
S136	61.9	96.2
S137	61.7	95.7

【 0 3 6 5 】

【表 3 2】

以下の合成例の化合物	エポキシ変換率（％）	
	230℃で30分間	230℃で60分間
S138	63.9	99
S139	70.5	100
S140	62	97.6
S141	63.2	96.8
S142	62.9	93.1
S143	64.3	100
S144	77.7	100
S145	61.3	97.3
S146	63.7	97.9
S147	63.5	96.8
S148	58.2	91.6
S149	62.8	96
S150	67.7	96.3
S151	72.2	99.5
S152	69.7	100
S153	56.9	92.5
S154	77.8	100
S155	72.6	100
C1	84.6	88.6

10

20

フロントページの続き

(51)Int.Cl.		F I
C 0 7 C 305/24	(2006.01)	C 0 7 C 305/24
C 0 7 C 305/20	(2006.01)	C 0 7 C 305/20
C 0 7 C 305/04	(2006.01)	C 0 7 C 305/04
C 0 7 C 305/10	(2006.01)	C 0 7 C 305/10
C 0 7 C 305/06	(2006.01)	C 0 7 C 305/06
C 0 7 C 307/02	(2006.01)	C 0 7 C 307/02
C 0 7 C 323/47	(2006.01)	C 0 7 C 323/47

(72)発明者 倉 久稔
兵庫県宝塚市宝梅1-15-3

審査官 久保 道弘

(56)参考文献 特開平08-027150 (JP, A)
特開平07-092675 (JP, A)
特開平06-199770 (JP, A)
特開平05-005006 (JP, A)
特開平06-041215 (JP, A)
特開平02-001470 (JP, A)
特開昭50-035329 (JP, A)
特開2007-091702 (JP, A)
特開2006-028132 (JP, A)
米国特許第04167618 (US, A)
米国特許第02972571 (US, A)
米国特許第04088781 (US, A)
英国特許第00509871 (GB, B)
特表2005-536781 (JP, A)
特表2004-526984 (JP, A)

(58)調査した分野(Int.Cl., DB名)
C 0 8 G 59/00-59/72
C 0 8 L 63/00-63/10
C 0 7 C 305/00-305/26
CAplus/REGISTRY (STN)