

(19) 日本国特許庁 (JP)

(12) 特 許 公 報 (B2)

(11) 特許番号

特許第6278504号
(P6278504)

(45) 発行日 平成30年2月14日 (2018. 2. 14)

(24) 登録日 平成30年1月26日 (2018. 1. 26)

(51) Int. Cl.	F I
C O 9 B 57/10 (2006. 01)	C O 9 B 57/10 C S P
H O 1 M 14/00 (2006. 01)	H O 1 M 14/00 P
H O 1 L 31/04 (2014. 01)	H O 1 L 31/04

請求項の数 26 (全 64 頁)

(21) 出願番号	特願2013-182660 (P2013-182660)	(73) 特許権者	305027401
(22) 出願日	平成25年9月4日 (2013. 9. 4)		公立大学法人首都大学東京
(65) 公開番号	特開2014-196283 (P2014-196283A)		東京都新宿区西新宿二丁目 3 番 1 号
(43) 公開日	平成26年10月16日 (2014. 10. 16)	(73) 特許権者	000004086
審査請求日	平成28年7月20日 (2016. 7. 20)		日本化薬株式会社
(31) 優先権主張番号	特願2013-42865 (P2013-42865)		東京都千代田区丸の内二丁目 1 番 1 号
(32) 優先日	平成25年3月5日 (2013. 3. 5)	(74) 代理人	110000855
(33) 優先権主張国	日本国 (JP)		特許業務法人浅村特許事務所
前置審査		(72) 発明者	久保 由治
			東京都八王子市南大沢 1 - 1 首都大学東京 南大沢キャンパス内
		(72) 発明者	紫垣 晃一郎
			東京都北区志茂 3 - 3 1 - 1 2 日本化薬株式会社 研究企画部内

最終頁に続く

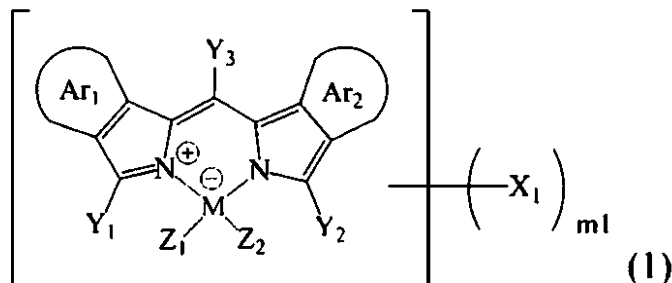
(54) 【発明の名称】 新規化合物及びそれを用いた光電変換素子

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項 1】

下記式 (1) で表される化合物

【化 1】



(式 (1) 中、 m_1 は 1 乃至 4 の整数を表す。M は半金属原子を表す。 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 はそれぞれ独立に水素原子又は芳香族残基を表す。 Z_1 及び Z_2 はそれぞれ独立にハロゲン原子を表す。 Ar_1 及び Ar_2 はそれぞれ独立に芳香環を表す。 X_1 は芳香環 Ar_1 及び / 又は Ar_2 上の置換基であって、下記式 (2)、(3) 及び (4)

【請求項 6】

式 (1) における A_{r1} 及び A_{r2} がベンゼン環である、請求項 5 に記載の化合物。

【請求項 7】

Y_1 、 Y_2 及び Y_3 はそれぞれ独立に水素原子又は炭素数 5 乃至 16 の芳香族炭化水素環、複素芳香環又は縮合型芳香環の残基を表す、請求項 1 乃至 6 のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項 8】

式 (1) における Y_1 及び Y_2 がそれぞれ独立に芳香族残基であり、かつ Y_3 が水素原子である、請求項 1 乃至 7 のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項 9】

式 (1) における M がホウ素原子、ケイ素原子、ゲルマニウム原子、又はアンチモン原子である、請求項 1 乃至 8 のいずれか一項に記載の化合物。

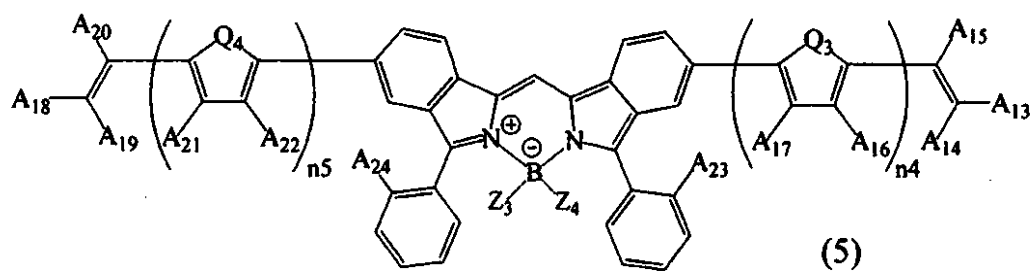
【請求項 10】

式 (1) における M がホウ素原子である、請求項 9 に記載の化合物。

【請求項 11】

下記式 (5) で表される請求項 1 に記載の化合物

【化 3】



(式 (5) 中、 Z_3 及び Z_4 はそれぞれ独立にハロゲン原子を表す。 n_4 は 1 乃至 5 の整数を表す。 Q_3 は酸素原子、硫黄原子又はセレン原子を表し、 n_4 が 2 以上で Q_3 が複数存在する場合、それぞれの Q_3 は互いに同じか又は異なってもよい。 A_{13} 及び A_{14} はそれぞれ独立に水素原子、カルボキシル基、シアノ基、リン酸基又はスルホン酸基を表し、 A_{13} 及び A_{14} は互いに連結して環を形成してもよい。 A_{15} は水素原子、脂肪族炭化水素残基又はアルコキシル基を表す。 A_{16} 及び A_{17} はそれぞれ独立に水素原子、脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子又はアルコキシル基を表し、 n_4 が 2 以上で A_{16} 及び A_{17} がそれぞれ複数存在する場合、それぞれの A_{16} 及びそれぞれの A_{17} は互いに同じか又は異なってもよい。また、 A_{16} 及び A_{17} は互いに連結して環を形成してもよい。 n_5 は 1 乃至 5 の整数を表す。 Q_4 は酸素原子、硫黄原子又はセレン原子を表し、 n_5 が 2 以上で Q_4 が複数存在する場合、それぞれの Q_4 は互いに同じか又は異なってもよい。 A_{18} 及び A_{19} はそれぞれ独立に水素原子、カルボキシル基、シアノ基、リン酸基又はスルホン酸基を表し、 A_{18} 及び A_{19} は互いに連結して環を形成してもよい。 A_{20} は水素原子、脂肪族炭化水素残基又はアルコキシル基を表す。 A_{21} 及び A_{22} はそれぞれ独立に水素原子、脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子又はアルコキシル基を表す。 n_5 が 2 以上で A_{21} 及び A_{22} がそれぞれ複数存在する場合、それぞれの A_{21} 及びそれぞれの A_{22} は互いに同じか又は異なってもよい。また、 A_{21} 及び A_{22} は互いに連結して環を形成してもよい。 A_{23} 及び A_{24} はそれぞれ独立に水素原子、ハロゲン原子、脂肪族炭化水素残基又はアルコキシル基を表す。)

【請求項 12】

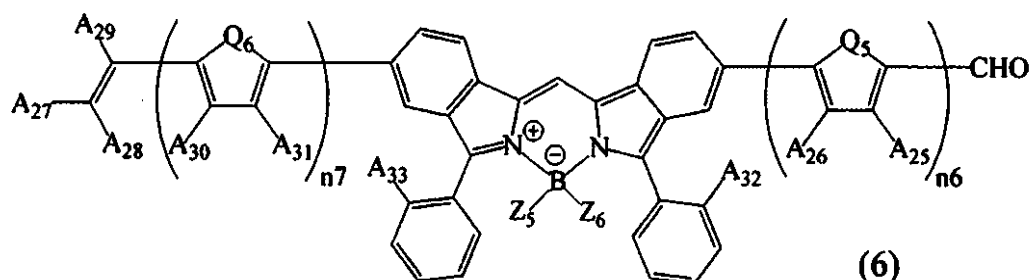
式 (5) における Z_3 及び Z_4 がフッ素原子であり、 n_4 及び n_5 が 1 の整数であり、 Q_3 及び Q_4 が硫黄原子であり、 A_{13} 及び A_{14} のいずれか一方がカルボキシル基で他方がシアノ基であり、 A_{18} 及び A_{19} のいずれか一方がカルボキシル基で他方がシアノ

基であり、 A_{15} 及び A_{20} が水素原子であり、 A_{16} 及び A_{21} が水素原子であり、 A_{17} 及び A_{22} が n -ヘキシル基であり、かつ A_{23} 及び A_{24} がメトキシ基である請求項 11 に記載の化合物。

【請求項 13】

下記式 (6) で表される請求項 1 に記載の化合物

【化 4】



(式 (6) 中、 Z_5 及び Z_6 はそれぞれ独立にハロゲン原子を表す。 n_6 は 0 乃至 5 の整数を表す。 n_7 は 0 乃至 5 の整数を表す。 Q_5 は酸素原子、硫黄原子又はセレン原子を表し、 n_6 が 2 以上で Q_5 が複数存在する場合、それぞれの Q_5 は互いに同じか又は異なっているてもよい。 Q_6 は酸素原子、硫黄原子又はセレン原子を表し、 n_7 が 2 以上で Q_6 が複数存在する場合、それぞれの Q_6 は互いに同じか又は異なっているてもよい。 A_{25} 及び A_{26} はそれぞれ独立に水素原子、脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子又はアルコキシル基を表し、 n_6 が 2 以上で A_{25} 及び A_{26} がそれぞれ複数存在する場合、それぞれの A_{25} 及びそれぞれの A_{26} は互いに同じか又は異なっているてもよい。また、 A_{25} 及び A_{26} は互いに連結して環を形成してもよい。 A_{27} 及び A_{28} はそれぞれ独立に水素原子、カルボキシル基、シアノ基、リン酸基又はスルホン酸基を表し、 A_{27} 及び A_{28} は互いに連結して環を形成してもよい。 A_{29} は水素原子、脂肪族炭化水素残基又はアルコキシル基を表す。 A_{30} 及び A_{31} はそれぞれ独立に水素原子、脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子又はアルコキシル基を表し、 n_7 が 2 以上で A_{30} 及び A_{31} がそれぞれ複数存在する場合、それぞれの A_{30} 及びそれぞれの A_{31} は互いに同じか又は異なっているてもよい。また、 A_{30} 及び A_{31} は互いに連結して環を形成してもよい。 A_{32} 及び A_{33} はそれぞれ独立に水素原子、ハロゲン原子、脂肪族炭化水素残基又はアルコキシル基を表す。)

20

【請求項 14】

式 (6) における n_6 及び n_7 は、それぞれ独立して 1 乃至 5 の整数を表す、請求項 13 に記載の化合物。

【請求項 15】

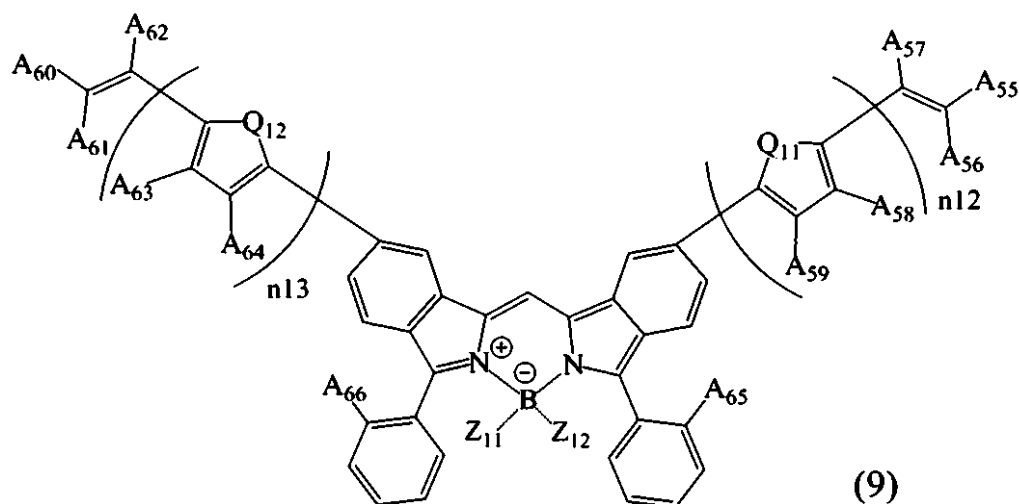
式 (6) における Z_5 及び Z_6 がフッ素原子であり、 n_6 及び n_7 が 1 の整数であり、 Q_5 及び Q_6 が硫黄原子であり、 A_{25} 、 A_{29} 及び A_{30} が水素原子であり、 A_{26} 及び A_{31} が n -ヘキシル基であり、 A_{27} 及び A_{28} のいずれか一方がカルボキシル基で他方がシアノ基であり、かつ A_{32} 及び A_{33} がメトキシ基である請求項 13 又は 14 に記載の化合物。

30

【請求項 16】

下記式 (9) で表される請求項 1 に記載の化合物

【化 5】



(式(9)中、 Z_{11} 及び Z_{12} はそれぞれ独立にハロゲン原子を表す。 n_{12} は1乃至5の整数を表す。 Q_{11} は酸素原子、硫黄原子又はセレン原子を表し、 n_{12} が2以上で Q_{11} が複数存在する場合、それぞれの Q_{11} は互いに同じか又は異なってもよい。 A_{55} 及び A_{56} はそれぞれ独立に水素原子、カルボキシル基、シアノ基、リン酸基又はスルホン酸基を表し、 A_{55} 及び A_{56} は互いに連結して環を形成してもよい。 A_{57} は水素原子、脂肪族炭化水素残基又はアルコキシル基を表す。 A_{58} 及び A_{59} はそれぞれ独立に水素原子、脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子又はアルコキシル基を表し、 n_{12} が2以上で A_{58} 及び A_{59} がそれぞれ複数存在する場合、それぞれの A_{58} 及びそれぞれの A_{59} は互いに同じか又は異なってもよい。また、 A_{58} 及び A_{59} は互いに連結して環を形成してもよい。 n_{13} は1乃至5の整数を表す。 Q_{12} は酸素原子、硫黄原子又はセレン原子を表し、 n_{13} が2以上で Q_{12} が複数存在する場合、それぞれの Q_{12} は互いに同じか又は異なってもよい。 A_{60} 及び A_{61} はそれぞれ独立に水素原子、カルボキシル基、シアノ基、リン酸基又はスルホン酸基を表し、 A_{60} 及び A_{61} は互いに連結して環を形成してもよい。 A_{62} は水素原子、脂肪族炭化水素残基又はアルコキシル基を表す。 A_{63} 及び A_{64} はそれぞれ独立に水素原子、脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子又はアルコキシル基を表す。 n_{13} が2以上で A_{63} 及び A_{64} がそれぞれ複数存在する場合、それぞれの A_{63} 及びそれぞれの A_{64} は互いに同じか又は異なってもよい。また、 A_{63} 及び A_{64} は互いに連結して環を形成してもよい。 A_{65} 及び A_{66} はそれぞれ独立に水素原子、ハロゲン原子、脂肪族炭化水素残基又はアルコキシル基を表す。)

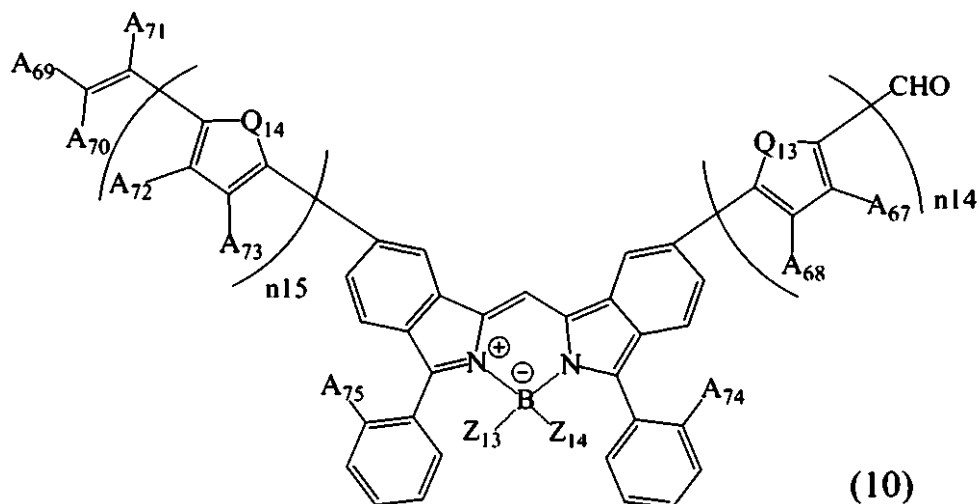
【請求項17】

式(9)における Z_{11} 及び Z_{12} がフッ素原子であり、 n_{12} 及び n_{13} が1の整数であり、 Q_{11} 及び Q_{12} が硫黄原子であり、 A_{55} 及び A_{56} のいずれか一方がカルボキシル基で他方がシアノ基であり、 A_{60} 及び A_{61} のいずれか一方がカルボキシル基で他方がシアノ基であり、 A_{57} 及び A_{62} が水素原子であり、 A_{58} 及び A_{63} が水素原子であり、 A_{59} 及び A_{64} が n -ヘキシル基であり、かつ A_{65} 及び A_{66} がメトキシ基である請求項16に記載の化合物。

【請求項18】

下記式(10)で表される請求項1に記載の化合物

【化 6】



(式(10)中、 Z_{13} 及び Z_{14} はそれぞれ独立にハロゲン原子を表す。 n_{14} は0乃至5の整数を表す。 n_{15} は0乃至5の整数を表す。 Q_{13} は酸素原子、硫黄原子又はセレン原子を表し、 n_{14} が2以上で Q_{13} が複数存在する場合、それぞれの Q_{13} は互いに同じか又は異なってもよい。 Q_{14} は酸素原子、硫黄原子又はセレン原子を表し、 n_{15} が2以上で Q_{14} が複数存在する場合、それぞれの Q_{14} は互いに同じか又は異なってもよい。 A_{67} 及び A_{68} はそれぞれ独立に水素原子、脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子又はアルコキシ基を表し、 n_{14} が2以上で A_{67} 及び A_{68} がそれぞれ複数存在する場合、それぞれの A_{67} 及びそれぞれの A_{68} は互いに同じか又は異なってもよい。また、 A_{67} 及び A_{68} は互いに連結して環を形成してもよい。 A_{69} 及び A_{70} はそれぞれ独立に水素原子、カルボキシ基、シアノ基、リン酸基又はスルホン酸基を表し、 A_{69} 及び A_{70} は互いに連結して環を形成してもよい。 A_{71} は水素原子、脂肪族炭化水素残基又はアルコキシ基を表す。 A_{72} 及び A_{73} はそれぞれ独立に水素原子、脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子又はアルコキシ基を表し、 n_{15} が2以上で A_{72} 及び A_{73} がそれぞれ複数存在する場合、それぞれの A_{72} 及びそれぞれの A_{73} は互いに同じか又は異なってもよい。また、 A_{72} 及び A_{73} は互いに連結して環を形成してもよい。 A_{74} 及び A_{75} はそれぞれ独立に水素原子、ハロゲン原子、脂肪族炭化水素残基又はアルコキシ基を表す。)

【請求項19】

式(10)における n_{14} 及び n_{15} は、それぞれ独立して1乃至5の整数を表す、請求項18に記載の化合物。

【請求項20】

式(10)における Z_{13} 及び Z_{14} がフッ素原子であり、 n_{14} 及び n_{15} が1の整数であり、 Q_{13} 及び Q_{14} が硫黄原子であり、 A_{67} 、 A_{71} 及び A_{72} が水素原子であり、 A_{68} 及び A_{73} が n -ヘキシル基であり、 A_{69} 及び A_{70} のいずれか一方がカルボキシ基で他方がシアノ基であり、かつ A_{74} 及び A_{75} がメトキシ基である請求項18又は19に記載の化合物。

【請求項21】

請求項1に記載の式(1)で表される化合物の製造方法であって、クロスカップリング反応により置換基 X_1 を導入することを含む製造方法。

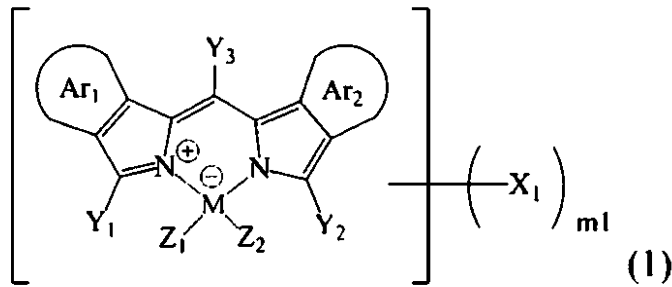
【請求項22】

基板上に設けられた酸化物半導体微粒子の薄膜に、請求項1乃至20のいずれか一項に記載の化合物を担持させた光電変換素子。

【請求項23】

基板上に設けられた酸化物半導体微粒子の薄膜に、下記式（１）で表される化合物を担持させた光電変換素子。

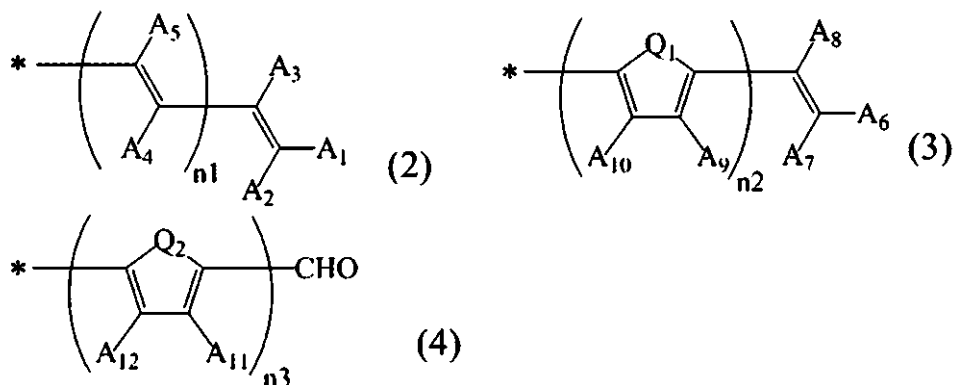
【化 7】



10

（式（１）中、 m_1 は1乃至4の整数を表す。 M は半金属原子を表す。 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 はそれぞれ独立に水素原子又は芳香族残基を表す。 Z_1 及び Z_2 はそれぞれ独立にハロゲン原子を表す。 Ar_1 及び Ar_2 はそれぞれ独立に芳香環を表す。 X_1 は芳香環 Ar_1 及び／又は Ar_2 上の置換基であって、下記式（２）、（３）及び（４）

【化 2】



20

30

（式（２）中、 n_1 は0乃至5の整数を表す。 A_1 及び A_2 はそれぞれ独立に水素原子、カルボキシル基、シアノ基、リン酸基又はスルホン酸基を表し、 A_1 及び A_2 は互いに連結して環を形成してもよい。 A_3 は水素原子、脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子又はアルコキシル基を表す。 A_4 及び A_5 はそれぞれ独立に水素原子、脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子又はアルコキシル基を表し、 n_1 が2以上で A_4 及び A_5 がそれぞれ複数存在する場合、それぞれの A_4 及びそれぞれの A_5 は互いに同じか又は異なってもよく、 A_4 及び A_5 は互いに連結して環を形成してもよい。式（３）中、 n_2 は1乃至5の整数を表す。 A_6 及び A_7 はそれぞれ独立に水素原子、カルボキシル基、シアノ基、リン酸基又はスルホン酸基を表し、 A_6 及び A_7 は互いに連結して環を形成してもよい。 A_8 は水素原子、脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子又はアルコキシル基を表す。 A_9 及び A_{10} はそれぞれ独立に水素原子、脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子又はアルコキシル基を表し、 n_2 が2以上で A_9 及び A_{10} がそれぞれ複数存在する場合、それぞれの A_9 及びそれぞれの A_{10} は互いに同じか又は異なってもよい。また、 A_9 及び A_{10} は互いに連結して環を形成してもよい。 Q_1 は酸素原子、硫黄原子又はセレン原子を表し、 n_2 が2以上で Q_1 が複数存在する場合、それぞれの Q_1 は互いに同じか又は異なってもよい。式（４）中、 n_3 は0乃至5の整数を表す。 A_{11} 及び A_{12} はそれぞれ独立に水素原子、脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子又はアルコキシル基を表し、 n_3 が2以上で A_{11} 及び A_{12} がそれぞれ複数存在する場合、それぞれの A_{11} 及びそれぞれの A_{12} は互いに同じか又は異なってもよい。また、 A_{11} 及び A_{12} は互いに連結して

40

50

環を形成してもよい。 Q_2 は酸素原子、硫黄原子又はセレン原子を表し、 n_3 が2以上で Q_2 が複数存在する場合、それぞれの Q_2 は互いに同じか又は異なってもよい。式(2)乃至(4)中、*印は芳香環 Ar_1 及び／又は Ar_2 との結合部位を表す。)からなる群より選ばれる一種又は二種以上の置換基を表す。)

【請求項24】

前記基板上に設けられた酸化物半導体微粒子の薄膜に、さらに、式(1)以外の構造を有する化合物を担持させた、請求項22又は23に記載の光電変換素子。

【請求項25】

前記酸化物半導体微粒子が、二酸化チタン、酸化亜鉛又は酸化スズを含有する請求項22乃至24のいずれか一項に記載の光電変換素子。

10

【請求項26】

請求項22乃至25のいずれか一項に記載の光電変換素子を備えてなる太陽電池。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は特定の構造を有する新規化合物、該化合物を用いた光電変換素子及び該光電変換素子を備えてなる太陽電池に関する。

【背景技術】

【0002】

20

石油、石炭等の化石燃料に代わるエネルギー資源として太陽光を利用する太陽電池が注目されている。現在、結晶又はアモルファスのシリコンを用いたシリコン太陽電池、あるいはガリウム、ヒ素等を用いた化合物半導体太陽電池等について、盛んに開発検討がなされている。しかしながら、それらの製造には多大なエネルギーが必要なため、結果として製造コストが未だ割高であるという問題点がある。その一方で、色素で増感した半導体微粒子を用いた光電変換素子、あるいはこれを用いた太陽電池が知られており、これを作成する材料、製造技術が開示されている(特許文献1、非特許文献1、非特許文献2を参照)。この色素増感光電変換素子には、酸化チタン等の比較的安価な酸化物半導体を用いられ、従来のシリコン等を用いた太陽電池に比べてコストの安い光電変換素子が得られる可能性があり、またカラフルな太陽電池が得られることなどから注目を集めている。しかしながら、変換効率の高い素子を得るために増感色素として用いられているルテニウム系の錯体自体のコストが高く、またその安定供給にも問題が残っている。そのため増感色素として有機色素を用いる試みも既に行われているが、変換効率、安定性、耐久性が低いなどの問題が解決されていないことから未だ実用化には至っておらず、更なる変換効率等の諸特性の向上が望まれている(特許文献2を参照)。

30

【先行技術文献】

【特許文献】

【0003】

【特許文献1】特開平01-220380号公報

【特許文献2】国際公開特許WO2002/011213号公報

40

【非特許文献】

【0004】

【非特許文献1】B.O'Regan and M.Graetzel Nature, 第353巻, 737頁(1991年)

【非特許文献2】M.K.Nazeeruddin, A.Kay, I.Rodicio, R.Humphry-Baker, E.Muller, P.Liska, N.Vlachopoulos, M.Graetzel, J.Am.Chem.Soc., 第115巻, 6382頁(1993年)

【非特許文献3】Yuji Kubo, Kazuki Watanabe, Ryuhei Nishiyabu, Reiko Hata, Akinori Murakami, Takayuki Shoda, and Hitoshi Ota, Org. Lett., Vol. 13, No.17, 2011.

【非特許文献4】W.Kubo, K.Murakoshi, T.Kitamura, K.Hanabusa, H.Shirai, and S.Yan

50

agida, Chem.Lett., 1241頁(1998年)

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0005】

色素で増感された酸化物半導体微粒子を用いた、安定かつ変換効率が高く実用性の高い光電変換素子の開発が求められている。

【課題を解決するための手段】

【0006】

本発明者等は上記の課題を解決すべく鋭意努力した結果、特定の構造を有する新規化合物を用いて半導体微粒子の薄膜を増感し、光電変換素子を作成することにより、安定かつ

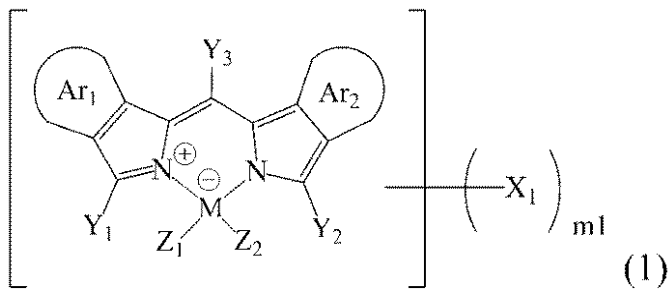
10

すなわち本発明は、

(1) 下記式(1)で表される化合物

【0007】

【化1】



20

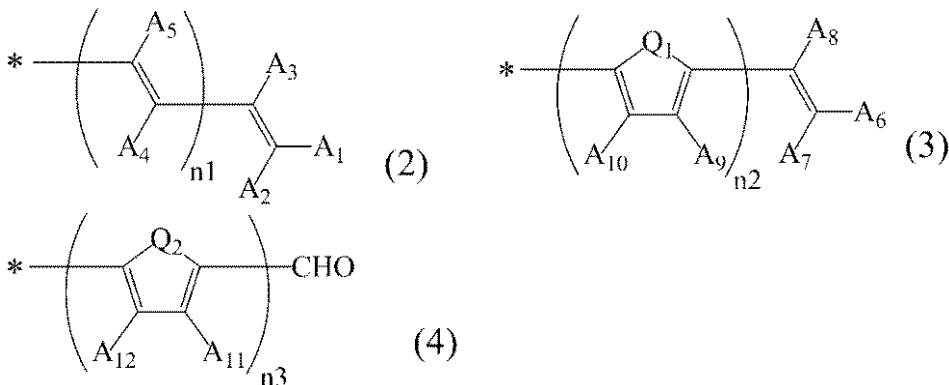
【0008】

(式(1)中、 m_1 は1乃至4の整数を表す。Mは半金属原子を表す。 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 はそれぞれ独立に水素原子又は芳香族残基を表す。 Z_1 及び Z_2 はそれぞれ独立にハロゲン原子を表す。 Ar_1 及び Ar_2 はそれぞれ独立に芳香環を表す。 X_1 は芳香環 Ar_1 及び／又は Ar_2 上の置換基であって、下記式(2)、(3)及び(4)

30

【0009】

【化2】



40

【0010】

(式(2)中、 n_1 は0乃至5の整数を表す。 A_1 及び A_2 はそれぞれ独立に水素原子、カルボキシル基、シアノ基、リン酸基又はスルホン酸基を表し、 A_1 及び A_2 は互いに連結して環を形成してもよい。 A_3 は水素原子、脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子又はアルコキシル基を表す。 A_4 及び A_5 はそれぞれ独立に水素原子、脂肪族炭化水素残基、ハ

50

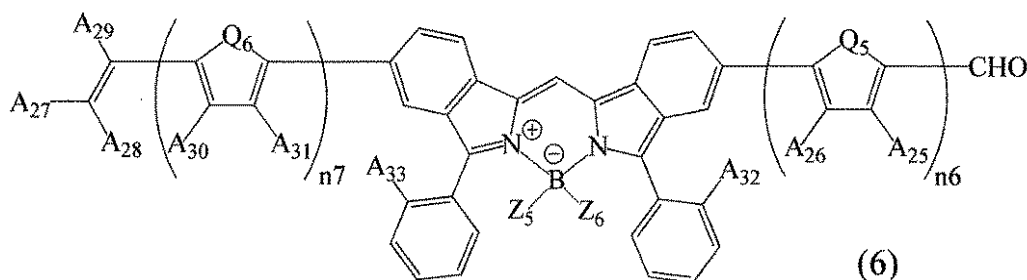
てもよい。 A_{18} 及び A_{19} はそれぞれ独立に水素原子、カルボキシル基、シアノ基、リン酸基又はスルホン酸基を表し、 A_{18} 及び A_{19} は互いに連結して環を形成してもよい。 A_{20} は水素原子、脂肪族炭化水素残基又はアルコキシル基を表す。 A_{21} 及び A_{22} はそれぞれ独立に水素原子、脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子又はアルコキシル基を表す。 n_5 が 2 以上で A_{21} 及び A_{22} がそれぞれ複数存在する場合、それぞれの A_{21} 及びそれぞれの A_{22} は互いに同じか又は異なってもよい。また、 A_{21} 及び A_{22} は互いに連結して環を形成してもよい。 A_{23} 及び A_{24} はそれぞれ独立に水素原子、ハロゲン原子、脂肪族炭化水素残基又はアルコキシル基を表す。)、

(6) 式 (5) における Z_3 及び Z_4 がフッ素原子であり、 n_4 及び n_5 が 1 の整数であり、 Q_3 及び Q_4 が硫黄原子であり、 A_{13} 及び A_{14} のいずれか一方がカルボキシル基で他方がシアノ基であり、 A_{18} 及び A_{19} のいずれか一方がカルボキシル基で他方がシアノ基であり、 A_{15} 及び A_{20} が水素原子であり、 A_{16} 及び A_{21} が水素原子であり、 A_{17} 及び A_{22} が n -ヘキシル基であり、かつ A_{23} 及び A_{24} がメトキシ基である前項 (5) に記載の化合物、

(7) 下記式 (6) で表される前項 (1) に記載の化合物

【0013】

【化4】



(6)

【0014】

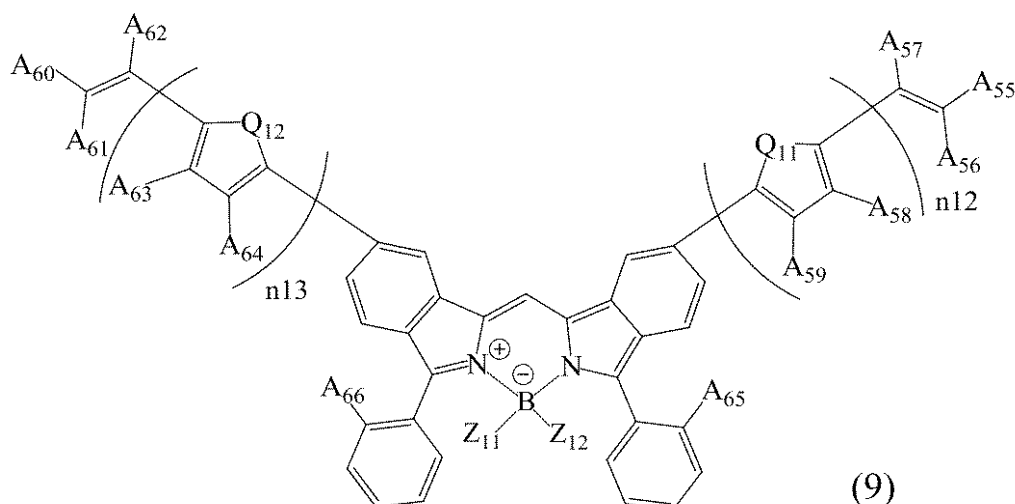
(式 (6) 中、 Z_5 及び Z_6 はそれぞれ独立にハロゲン原子を表す。 n_6 は 0 乃至 5 の整数を表す。 n_7 は 0 乃至 5 の整数を表す。 Q_5 は酸素原子、硫黄原子又はセレン原子を表し、 n_6 が 2 以上で Q_5 が複数存在する場合、それぞれの Q_5 は互いに同じか又は異なってもよい。 Q_6 は酸素原子、硫黄原子又はセレン原子を表し、 n_7 が 2 以上で Q_6 が複数存在する場合、それぞれの Q_6 は互いに同じか又は異なってもよい。 A_{25} 及び A_{26} はそれぞれ独立に水素原子、脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子又はアルコキシル基を表し、 n_6 が 2 以上で A_{25} 及び A_{26} がそれぞれ複数存在する場合、それぞれの A_{25} 及びそれぞれの A_{26} は互いに同じか又は異なってもよい。また、 A_{25} 及び A_{26} は互いに連結して環を形成してもよい。 A_{27} 及び A_{28} はそれぞれ独立に水素原子、カルボキシル基、シアノ基、リン酸基又はスルホン酸基を表し、 A_{27} 及び A_{28} は互いに連結して環を形成してもよい。 A_{29} は水素原子、脂肪族炭化水素残基又はアルコキシル基を表す。 A_{30} 及び A_{31} はそれぞれ独立に水素原子、脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子又はアルコキシル基を表し、 n_7 が 2 以上で A_{30} 及び A_{31} がそれぞれ複数存在する場合、それぞれの A_{30} 及びそれぞれの A_{31} は互いに同じか又は異なってもよい。また、 A_{30} 及び A_{31} は互いに連結して環を形成してもよい。 A_{32} 及び A_{33} はそれぞれ独立に水素原子、ハロゲン原子、脂肪族炭化水素残基又はアルコキシル基を表す。)、

(8) 式 (6) における Z_5 及び Z_6 がフッ素原子であり、 n_6 及び n_7 が 1 の整数であり、 Q_5 及び Q_6 が硫黄原子であり、 A_{25} 、 A_{29} 及び A_{30} が水素原子であり、 A_{26} 及び A_{31} が n -ヘキシル基であり、 A_{27} 及び A_{28} のいずれか一方がカルボキシル基で他方がシアノ基であり、かつ A_{32} 及び A_{33} がメトキシ基である前項 (7) に記載の化合物、

(9) 下記式 (9) で表される前項 (1) に記載の化合物

【0015】

【化5】



【0016】

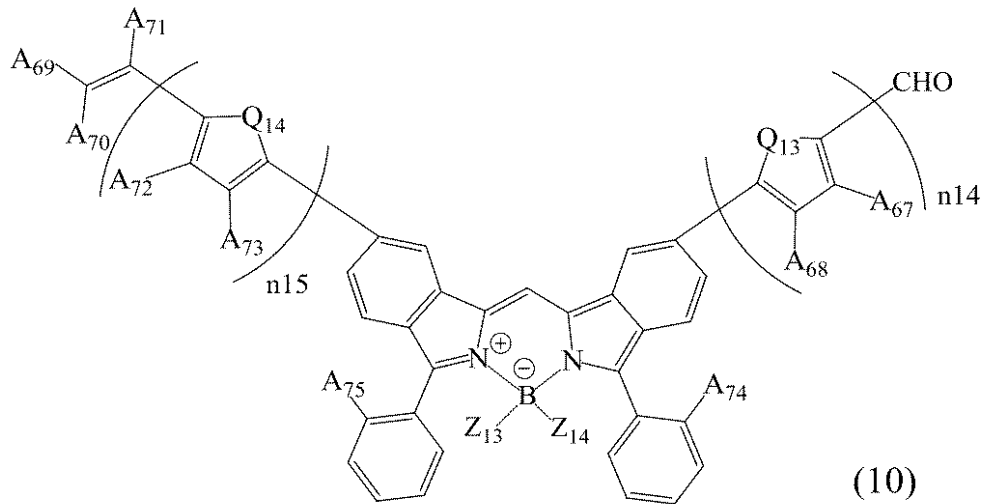
(式(9)中、 Z_{11} 及び Z_{12} はそれぞれ独立にハロゲン原子を表す。 n_{12} は0乃至5の整数を表す。 Q_{11} は酸素原子、硫黄原子又はセレン原子を表し、 n_{12} が2以上で Q_{11} が複数存在する場合、それぞれの Q_{11} は互いに同じか又は異なってもよい。 A_{55} 及び A_{56} はそれぞれ独立に水素原子、カルボキシル基、シアノ基、リン酸基又はスルホン酸基を表し、 A_{55} 及び A_{56} は互いに連結して環を形成してもよい。 A_{57} は水素原子、脂肪族炭化水素残基又はアルコキシル基を表す。 A_{58} 及び A_{59} はそれぞれ独立に水素原子、脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子又はアルコキシル基を表し、 n_{12} が2以上で A_{58} 及び A_{59} がそれぞれ複数存在する場合、それぞれの A_{58} 及びそれぞれの A_{59} は互いに同じか又は異なってもよい。また、 A_{58} 及び A_{59} は互いに連結して環を形成してもよい。 n_{13} は0乃至5の整数を表す。 Q_{12} は酸素原子、硫黄原子又はセレン原子を表し、 n_{13} が2以上で Q_{12} が複数存在する場合、それぞれの Q_{12} は互いに同じか又は異なってもよい。 A_{60} 及び A_{61} はそれぞれ独立に水素原子、カルボキシル基、シアノ基、リン酸基又はスルホン酸基を表し、 A_{60} 及び A_{61} は互いに連結して環を形成してもよい。 A_{62} は水素原子、脂肪族炭化水素残基又はアルコキシル基を表す。 A_{63} 及び A_{64} はそれぞれ独立に水素原子、脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子又はアルコキシル基を表す。 n_{13} が2以上で A_{63} 及び A_{64} がそれぞれ複数存在する場合、それぞれの A_{63} 及びそれぞれの A_{64} は互いに同じか又は異なってもよい。また、 A_{63} 及び A_{64} は互いに連結して環を形成してもよい。 A_{65} 及び A_{66} はそれぞれ独立に水素原子、ハロゲン原子、脂肪族炭化水素残基又はアルコキシル基を表す。)

(10) 式(9)における Z_{11} 及び Z_{12} がフッ素原子であり、 n_{12} 及び n_{13} が1の整数であり、 Q_{11} 及び Q_{12} が硫黄原子であり、 A_{55} 及び A_{56} のいずれか一方がカルボキシル基で他方がシアノ基であり、 A_{60} 及び A_{61} のいずれか一方がカルボキシル基で他方がシアノ基であり、 A_{57} 及び A_{62} が水素原子であり、 A_{58} 及び A_{63} が水素原子であり、 A_{59} 及び A_{64} が n -ヘキシル基であり、かつ A_{65} 及び A_{66} がメトキシ基である前項(9)に記載の化合物、

(11) 下記式(10)で表される前項(1)に記載の化合物

【0017】

【化 6】



【0018】

(式(10)中、 Z_{13} 及び Z_{14} はそれぞれ独立にハロゲン原子を表す。 n_{14} は0乃至5の整数を表す。 n_{15} は0乃至5の整数を表す。 Q_{13} は酸素原子、硫黄原子又はセレン原子を表し、 n_{14} が2以上で Q_{13} が複数存在する場合、それぞれの Q_{13} は互いに同じか又は異なってもよい。 Q_{14} は酸素原子、硫黄原子又はセレン原子を表し、 n_{15} が2以上で Q_{14} が複数存在する場合、それぞれの Q_{14} は互いに同じか又は異なってもよい。 A_{67} 及び A_{68} はそれぞれ独立に水素原子、脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子又はアルコキシル基を表し、 n_{14} が2以上で A_{67} 及び A_{68} がそれぞれ複数存在する場合、それぞれの A_{67} 及びそれぞれの A_{68} は互いに同じか又は異なってもよい。また、 A_{67} 及び A_{68} は互いに連結して環を形成してもよい。 A_{69} 及び A_{70} はそれぞれ独立に水素原子、カルボキシル基、シアノ基、リン酸基又はスルホン酸基を表し、 A_{69} 及び A_{70} は互いに連結して環を形成してもよい。 A_{71} は水素原子、脂肪族炭化水素残基又はアルコキシル基を表す。 A_{72} 及び A_{73} はそれぞれ独立に水素原子、脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子又はアルコキシル基を表し、 n_{15} が2以上で A_{72} 及び A_{73} がそれぞれ複数存在する場合、それぞれの A_{72} 及びそれぞれの A_{73} は互いに同じか又は異なってもよい。また、 A_{72} 及び A_{73} は互いに連結して環を形成してもよい。 A_{74} 及び A_{75} はそれぞれ独立に水素原子、ハロゲン原子、脂肪族炭化水素残基又はアルコキシル基を表す。)、

(12) 式(10)における Z_{13} 及び Z_{14} がフッ素原子であり、 n_{14} 及び n_{15} が1の整数であり、 Q_{13} 及び Q_{14} が硫黄原子であり、 A_{67} 、 A_{71} 及び A_{72} が水素原子であり、 A_{68} 及び A_{73} が n -ヘキシル基であり、 A_{69} 及び A_{70} のいずれか一方がカルボキシル基で他方がシアノ基であり、かつ A_{74} 及び A_{75} がメトキシ基である前項(11)に記載の化合物、

(13) 前項(1)に記載の式(1)で表される化合物の製造方法であって、クロスカップリング反応により置換基 X_1 を導入することを含む製造方法、

(14) 基板上に設けられた酸化物半導体微粒子の薄膜に、前項(1)に記載の式(1)で表される化合物を担持させた光電変換素子、

(15) 基板上に設けられた酸化物半導体微粒子の薄膜に、前項(1)に記載の式(1)で表される化合物の一種以上と、式(1)以外の構造を有する化合物を担持させた光電変換素子、

(16) 酸化物半導体微粒子が、二酸化チタン、酸化亜鉛又は酸化スズを含有する前項(14)又は(15)に記載の光電変換素子、

(17) 前項(14)乃至(16)のいずれか一項に記載の光電変換素子を備えてなる太

10

20

30

40

50

陽電池、
に関する。

【発明の効果】

【0019】

式（１）で表される特定の構造を有する本発明の化合物（本明細書においては、単に「本発明の化合物」とも表記する。）を増感色素として用いることにより、変換効率が高く安定性の高い色素増感太陽電池を提供することが出来た。

【発明を実施するための形態】

【0020】

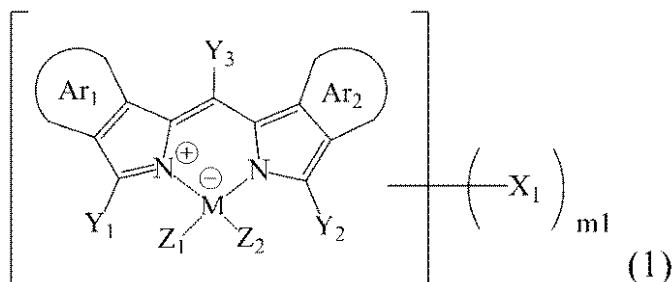
以下に本発明を詳細に説明する。

10

本発明の化合物は、下記式（１）で表される構造を有する。

【0021】

【化 7】



20

【0022】

式（１）中、 m_1 は 1 乃至 4 の整数を表し、1 乃至 2 であることが好ましく、2 であることがより好ましい。M は半金属を表す。本発明における半金属とは、金属と非金属の中間の性質を示す物質を示し、ホウ素原子、ケイ素原子、ゲルマニウム原子、及びアンチモン原子が挙げられ、ホウ素原子であることが好ましい。 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 はそれぞれ独立に水素原子又は芳香族残基を表し、該芳香族残基は置換基を有していてもよい。

【0023】

30

Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基とは芳香環から水素原子 1 個を除いた基を意味し、該芳香環の具体例としては、ベンゼン環、ナフタレン環、アントラセン環、フェナンスレン環、ピレン環、ペリレン環及びテリレン環等の芳香族炭化水素環；インデン環、アズレン環、ピリジン環、ピラジン環、ピリミジン環、ピラゾール環、ピラゾリジン環、チアゾリジン環、オキサゾリジン環、ピラン環、クロメン環、ピロール環、ピロリジン環、ベンゾイミダゾール環、イミダゾリン環、イミダゾリジン環、イミダゾール環、ピラゾール環、トリアゾール環、トリアジン環、ジアゾール環、インドリン環、チオフェン環、チエノチオフェン環、フラン環、オキサゾール環、オキサジアゾール環、チアジン環、チアゾール環、インドール環、ベンゾチアゾール環、ベンゾチアジアゾール環、ナフトチアゾール環、ベンゾオキサゾール環、ナフトオキサゾール環、インドレニン環、ベンゾインドレニン環、ピラジン環、キノリン環及びキナゾリン環等の複素芳香環；並びにフルオレン環及びカルバゾール環等の縮合型芳香環等が挙げられ、炭素数 5 乃至 16 の芳香環（芳香環及び芳香環を含む縮合環）を有する芳香族残基であることが好ましい。

40

【0024】

式（１）における Y_1 及び Y_2 としては、それぞれ独立に芳香族残基であることが好ましく、それぞれ独立にベンゼン環、ナフタレン環又はチオフェン環であることがより好ましく、ベンゼン環であることが更に好ましい。また、式（１）における Y_3 としては、水素原子であることが好ましい。

【0025】

Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基が有していてもよい置換基は特に限定されないが

50

、例えば、スルホン酸基、スルファモイル基、シアノ基、イソシアノ基、チオシアナト基、イソチオシアナト基、ニトロ基、ニトロシル基、ハロゲン原子、ヒドロキシル基、リン酸基、リン酸エステル基、アミノ基、メルカプト基、アミド基、アルコキシル基、アリーロキシ基、カルボキシル基、カルバモイル基、アシル基、アルデヒド基、カルボニル基、芳香族残基及び脂肪族炭化水素残基等が挙げられる。

【0026】

Y₁、Y₂ 及び Y₃ が表す芳香族残基が有していてもよい置換基としてのハロゲン原子としては、フッ素原子、塩素原子、臭素原子及びヨウ素原子が挙げられ、フッ素原子、臭素原子又は塩素原子であることが好ましい。

【0027】

Y₁、Y₂ 及び Y₃ が表す芳香族残基が有していてもよい置換基としてのリン酸エステル基としては、リン酸(炭素数1乃至4)アルキルエステル基等が挙げられる。その具体例としては、リン酸メチル基、リン酸エチル基、リン酸(n-プロピル)基及びリン酸(n-ブチル)基である。

【0028】

Y₁、Y₂ 及び Y₃ が表す芳香族残基が有していてもよい置換基としてのアミノ基としては、アミノ基；モノ又はジメチルアミノ基、モノ又はジエチルアミノ基並びにモノ又はジ(n-プロピル)アミノ基等のアルキル置換アミノ基；モノ又はジフェニルアミノ基並びにモノ又はジナフチルアミノ基等の芳香環置換アミノ基；モノアルキルモノフェニルアミノ基等のアルキル基と芳香族残基が一つずつ置換したアミノ基；ベンジルアミノ基、アセチルアミノ基、フェニルアセチルアミノ基等が挙げられる。ここで芳香環及び芳香族残基とは、前述と同じ意味を表す。

【0029】

Y₁、Y₂ 及び Y₃ が表す芳香族残基が有していてもよい置換基としてのメルカプト基としては、メルカプト基；メチルメルカプト基、エチルメルカプト基、n-プロピルメルカプト基、イソプロピルメルカプト基、n-ブチルメルカプト基、イソブチルメルカプト基、sec-ブチルメルカプト基、及びt-ブチルメルカプト基等の炭素数1乃至4のアルキルメルカプト基；並びにフェニルメルカプト基等が挙げられる。

【0030】

Y₁、Y₂ 及び Y₃ が表す芳香族残基が有していてもよい置換基としてのアミド基としては、アミド基、アセトアミド基、N-メチルアミド基、N-エチルアミド基、N-(n-プロピル)アミド基、N-(n-ブチル)アミド基、N-イソブチルアミド基、N-(sec-ブチルアミド)基、N-(t-ブチル)アミド基、N,N-ジメチルアミド基、N,N-ジエチルアミド基、N,N-ジ(n-プロピル)アミド基、N,N-ジ(n-ブチル)アミド基、N,N-ジイソブチルアミド基、N-メチルアセトアミド基、N-エチルアセトアミド基、N-(n-プロピル)アセトアミド基、N-(n-ブチル)アセトアミド基、N-イソブチルアセトアミド基、N-(sec-ブチル)アセトアミド基、N-(t-ブチル)アセトアミド基、N,N-ジメチルアセトアミド基、N,N-ジエチルアセトアミド基、N,N-ジ(n-プロピル)アセトアミド基、N,N-ジ(n-ブチル)アセトアミド基、N,N-ジイソブチルアセトアミド基、フェニルアミド基、ナフチルアミド基、フェニルアセトアミド基及びナフチルアセトアミド基等が挙げられる。

【0031】

Y₁、Y₂ 及び Y₃ が表す芳香族残基が有していてもよい置換基としてのアルコキシル基としては、メトキシ基、エトキシ基、n-プロポキシ基、イソプロポキシ基、n-ブトキシ基、イソブトキシ基、sec-ブトキシ基及びt-ブトキシ基等が挙げられる。

【0032】

Y₁、Y₂ 及び Y₃ が表す芳香族残基が有していてもよい置換基としてのアリーロキシ基としては、フェノキシ基及びナフトキシ基等が挙げられ、これらはフェニル基又はメチル基を置換基として有していてもよい。

【0033】

Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基が有していてもよい置換基としてのアシル基としては、炭素数 1 乃至 10 のアルキルカルボニル基やアリールカルボニル基等が挙げられ、好ましくは炭素数 1 乃至 4 のアルキルカルボニル基であり、具体的にはアセチル基、プロピオニル基、トリフルオロメチルカルボニル基、ペンタフルオロエチルカルボニル基、ベンゾイル基及びナフトイル基等が挙げられる。

【0034】

Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基が有していてもよい置換基としてのカルボニル基としては、メトキシカルボニル基、エトキシカルボニル基、 n -プロポキシカルボニル基、イソプロポキシカルボニル基、 n -ブトキシカルボニル基、イソブトキシカルボニル基、 sec -ブトキシカルボニル基、 $tert$ -ブトキシカルボニル基、 n -ペントキシカルボニル基、 n -ヘキシルオキシカルボニル基、 n -ヘプチルオキシカルボニル基、 n -ノニルオキシカルボニル基及び n -デシルオキシカルボニル基等が挙げられる。

10

【0035】

Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基が有していてもよい置換基としての芳香族残基の具体例としては、 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基と同様のものが挙げられる。また、該芳香族残基は置換基を有していてもよく、該置換基としては、 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基が有していてもよい置換基と同様のものが挙げられる。

【0036】

Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基が有していてもよい置換基としての脂肪族炭化水素残基としては、飽和又は不飽和の、直鎖、分岐鎖又は環状のアルキル基が挙げられ、直鎖又は分岐鎖のアルキル基の炭素数は 1 乃至 36 が好ましく、炭素数が 3 乃至 18 であることがより好ましい。また、環状のアルキル基としては、例えば炭素数 3 乃至 8 のシクロアルキルなどが挙げられる。これら脂肪族炭化水素残基の具体例としては、メチル基、エチル基、 n -プロピル基、イソプロピル基、 n -ブチル基、 iso -ブチル基、 sec -ブチル基、 $tert$ -ブチル基、 n -ペンチル基、 n -ヘキシル基、 n -ヘプチル基、 n -オクタチル基、 n -ノニル基、 n -デシル基、 n -ウンデシル基、 n -ドデシル基、 n -トリデシル基、 n -テトラデシル基、 n -ペンタデシル基、 n -ヘキサデシル基、 n -ヘプタデシル基、 n -オクタデシル基、シクロヘキシル基、ビニル基、プロペニル基、ペンチニル基、ブテニル基、ヘキセニル基、ヘキサジエニル基、イソプロペニル基、イソヘキセニル基、シクロヘキセニル基、シクロペンタジエニル基、エチニル基、プロピニル基、ペンチニル基、ヘキシニル基、イソヘキシニル基及びシクロヘキシニル基等が挙げられる。特に好ましくは上記炭素数が 3 乃至 18 の直鎖のアルキル基である。

20

30

【0037】

これらの脂肪族炭化水素残基は置換基を有していてもよく、該置換基としては、 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基が有していてもよい置換基と同様のものが挙げられる。

【0038】

式 (1) 中、 Z_1 及び Z_2 はそれぞれ独立にハロゲン原子を表す。該ハロゲン原子としては、 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基が有していてもよい置換基としてのハロゲン原子と同様のものが挙げられ、フッ素原子であることが好ましい。

また、式 (1) 中の Z_1 及び Y_1 、並びに Z_2 及び Y_2 は、互いに連結して環を形成してもよく、また、 Y_1 及び Y_2 が芳香族残基の場合、 Z_1 及び Y_1 が表す芳香族残基上の置換基は、並びに Z_2 及び Y_2 が表す芳香族残基上の置換基は、互いに連結して環を形成してもよい。

40

【0039】

式 (1) 中、 Ar_1 及び Ar_2 はそれぞれ独立に芳香環を表す。該芳香環の具体例としては、 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基の説明部分に具体例として記載した芳香環と同様のものが挙げられ、それぞれ独立にベンゼン環、ナフタレン環又はチオフェン環であることが好ましく、ベンゼン環であることがより好ましい。

【0040】

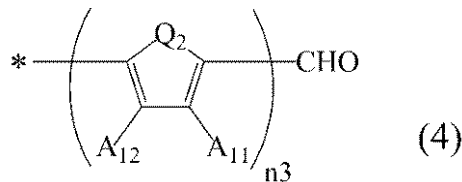
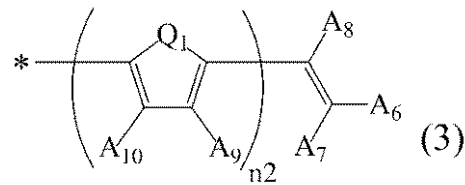
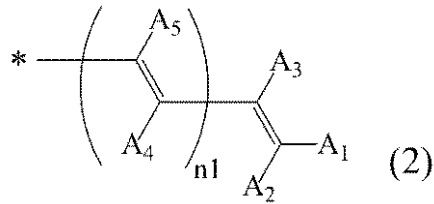
式 (1) 中、 X_1 は芳香環 Ar_1 及び／又は Ar_2 上の置換基であって、下記式 (2)

50

、(3) 及び (4) からなる群より選ばれる一種又は二種以上の置換基を表す。

【0041】

【化8】



10

【0042】

式(2)中、 $n1$ は0乃至5の整数を表し、0乃至4であることが好ましく、0であることがより好ましい。

【0043】

式(2)中、 A_1 及び A_2 はそれぞれ独立に水素原子、カルボキシル基、シアノ基、リン酸基、スルホン酸基又は芳香族残基を表し、また、 A_1 と A_2 とで互いに結合して環を形成してもよい。

A_1 及び A_2 が表す芳香族残基の具体例としては、 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基と同様のものが挙げられる。該芳香族残基は置換基を有していてもよく、該置換基としては、 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基が有していてもよい置換基と同様のものが挙げられる。

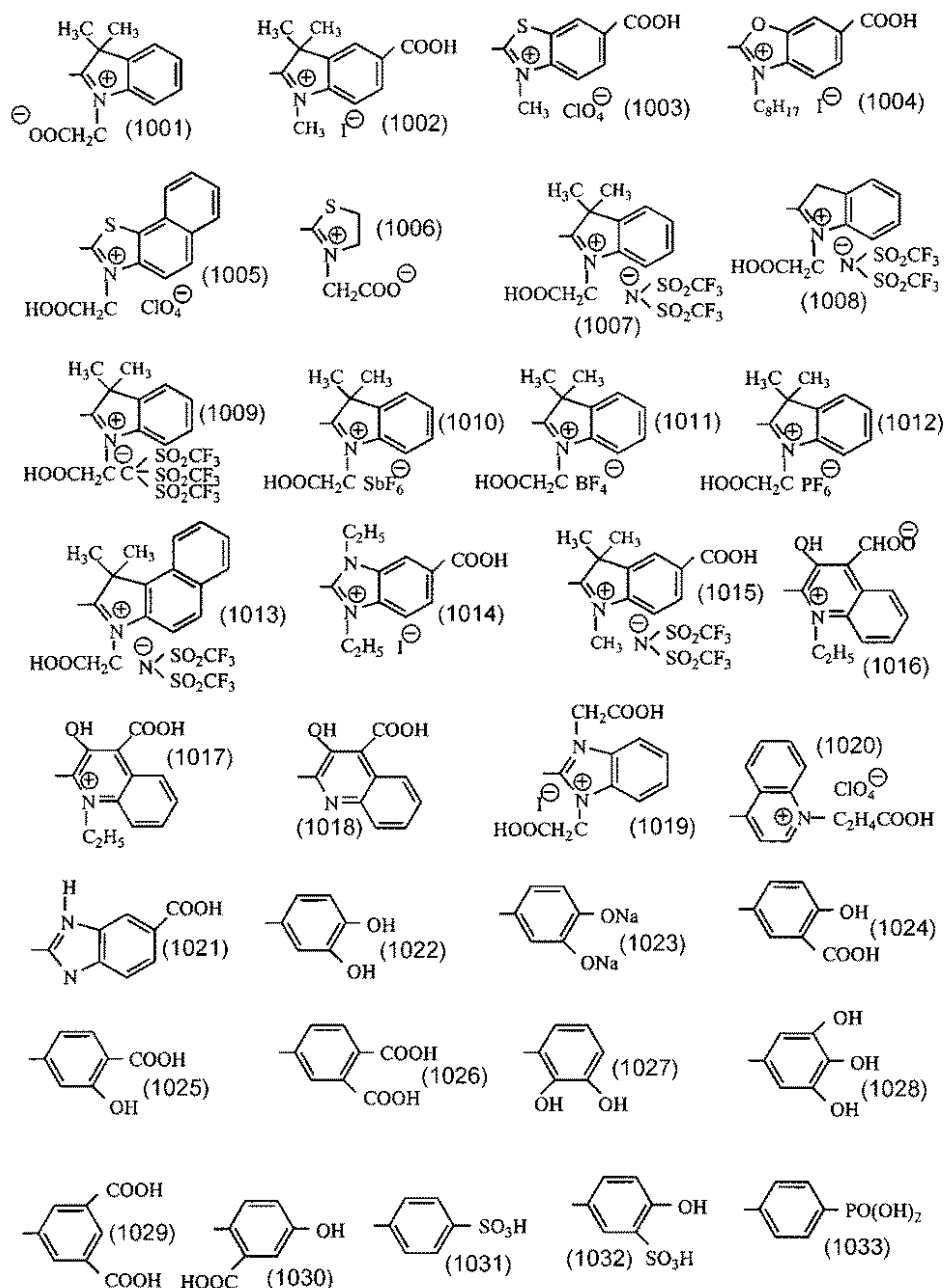
A_1 及び A_2 が表す芳香族残基としては、カルボキシル基、水酸基、リン酸基、スルホン酸基、およびこれらの酸性基の塩からなる群より選択される基を少なくとも1つ以上置換基として有する芳香族残基であることが好ましく、下記式(1001)乃至(1033)のいずれかで表される基であることがより好ましい。

【0044】

20

30

【化 9】



10

20

30

【0045】

A₁とA₂とで互いに結合して形成する環としては、芳香環、複素環などが挙げられ、これら環は置換基を有していてもよい。

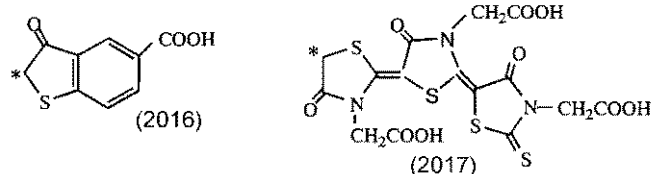
40

A₁とA₂とで互いに結合して形成する芳香環の具体例としては、Y₁、Y₂及びY₃が表す芳香族残基の説明部分に具体例として記載した芳香環と同様のものが挙げられる。A₁とA₂とで互いに結合して形成する複素環としては、例えば、4乃至7員環のヘテロ原子を含む複素環であり、下記式(2001)乃至(2017)のいずれかで表される環であることが好ましく、式(2007)又は(2012)で表される環であることがより好ましく、式(2007)で表される環であることが更に好ましい。

A₁とA₂とで互いに結合して形成する環が有していてもよい置換基としては、Y₁、Y₂及びY₃が表す芳香族残基が有していてもよい置換基と同様のものが挙げられる。尚、下記式(2001)乃至(2017)中の*印は、式(2)においてA₁及びA₂の

50

【化 1 0】



式(2)中、 A_4 及び A_5 はそれぞれ独立に水素原子、脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子又はアルコキシ基を表し、 n_1 が2以上で A_4 及び A_5 がそれぞれ複数存在する場合、それぞれの A_4 及びそれぞれの A_5 は互いに同じか又は異なってもよい。 A_4 及び A_5 が表す脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子及びアルコキシ基としては、 Y_1 、 Y

Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基が有していてもよい置換基としての脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子及びアルコキシル基と同様のものが挙げられる。

また、隣接する A_4 同士、 A_5 同士若しくは A_4 と A_5 とで互いに結合して環を形成してもよい。該形成する環としては、 A_1 と A_2 とで互いに結合して形成する環と同様のものが挙げられ、該形成する環は置換基を有していてもよい。該置換基としては、 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基が有していてもよい置換基と同様のものが挙げられる。

式(2)における A_4 及び A_5 としては、それぞれ独立に水素原子又は脂肪族炭化水素残基であることが好ましく、水素原子であることがより好ましい。

【0050】

式(3)中、 n_2 は1乃至5の整数を表し、1乃至4であることが好ましく、1であることが更に好ましい。

10

【0051】

式(3)中、 A_6 及び A_7 はそれぞれ独立に水素原子、カルボキシル基、シアノ基、リン酸基、スルホン酸基又は芳香族残基を表し、また、 A_6 と A_7 とで互いに結合して環を形成してもよい。

A_6 及び A_7 が表す芳香族残基の具体例としては、 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基と同様のものが挙げられる。該芳香族残基は置換基を有していてもよく、該置換基としては、 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基が有していてもよい置換基と同様のものが挙げられる。

A_6 及び A_7 が表す芳香族残基としては、カルボキシル基、水酸基、リン酸基、スルホン酸基、およびこれらの酸性基の塩からなる群より選択される基を少なくとも1つ以上置換基として有する芳香族残基であることが好ましく、上記式(1001)乃至(1033)のいずれかで表される基であることがより好ましい。

20

【0052】

A_6 と A_7 とで互いに結合して形成する環としては、芳香環、複素環などが挙げられ、これらの環は置換基を有していてもよい。

A_6 と A_7 とで互いに結合して形成する芳香環の具体例としては、 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基の説明部分に具体例として記載した芳香環と同様のものが挙げられる。

A_6 と A_7 とで互いに結合して形成する複素環としては、例えば、4乃至7員環のヘテロ原子を含む複素環であり、上記式(2001)乃至(2017)のいずれかで表される環であることが好ましく、式(2007)又は(2012)で表される環であることがより好ましく、式(2007)で表される環であることが更に好ましい。

30

A_6 と A_7 とで互いに結合して形成する環が有していてもよい置換基としては、 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基が有していてもよい置換基と同様のものが挙げられる。

尚、 A_6 と A_7 とで互いに結合して形成する複素環が上記式(2001)乃至(2017)のいずれかで表される環の場合、式(2001)乃至(2017)中の*印は、式(3)において A_6 及び A_7 の両者が結合している炭素原子を表す。

【0053】

式(3)における A_6 と A_7 としては、それぞれ独立にカルボキシル基又はシアノ基であることが好ましく、 A_6 及び A_7 のいずれか一方がカルボキシル基で他方がカルボキシル基又はシアノ基であることがより好ましく、 A_6 及び A_7 のいずれか一方がカルボキシル基で他方がシアノ基であることが更に好ましい。

40

【0054】

式(3)中、 A_8 は水素原子、脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子又はアルコキシル基を表す。 A_8 が表す脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子及びアルコキシル基としては、 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基が有していてもよい置換基としての脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子及びアルコキシル基と同様のものが挙げられる。

式(3)における A_8 としては、それぞれ独立に水素原子又は脂肪族炭化水素残基であることが好ましく、水素原子であることがより好ましい。

【0055】

50

式(3)中、 A_9 及び A_{10} はそれぞれ独立に水素原子、脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子又はアルコキシル基を表し、 n_2 が2以上で A_9 及び A_{10} がそれぞれ複数存在する場合、それぞれの A_9 及びそれぞれの A_{10} は互いに同じか又は異なってもよい。 A_9 及び A_{10} が表す脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子及びアルコキシル基としては、 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基が有していてもよい置換基としての脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子及びアルコキシル基と同様のものが挙げられる。

また、 A_9 と A_{10} とで互いに結合して環を形成してもよい。該形成する環としては、 A_1 と A_2 とで互いに結合して形成する環と同様のものが挙げられ、該形成する環は置換基を有していてもよい。該置換基としては、 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基が有していてもよい置換基と同様のものが挙げられる。

10

式(3)における A_9 及び A_{10} としては、それぞれ独立に水素原子又は脂肪族炭化水素残基であることが好ましく、 A_9 が水素原子であり A_{10} が脂肪族炭化水素残基であることがより好ましく、 A_9 が水素原子であり A_{10} が n -ヘキシル基であることが更に好ましい。

【0056】

式(3)中、 Q_1 は酸素原子、硫黄原子又はセレン原子を表し、 n_2 が2以上で Q_1 が複数存在する場合、それぞれの Q_1 は互いに同じか又は異なってもよい。

式(3)における Q_1 としては、酸素原子又は硫黄原子であることが好ましく、硫黄原子であることがより好ましい。

【0057】

20

式(4)中、 n_3 は0乃至5の整数を表し、1乃至4であることが好ましく、1であることが更に好ましい。

【0058】

式(4)中、 A_{11} 及び A_{12} はそれぞれ独立に水素原子、脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子又はアルコキシル基を表し、 n_3 が2以上で A_{11} 及び A_{12} がそれぞれ複数存在する場合、それぞれの A_{11} 及びそれぞれの A_{12} は互いに同じか又は異なってもよい。 A_{11} 及び A_{12} が表す脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子及びアルコキシル基としては、 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基が有していてもよい置換基としての脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子及びアルコキシル基と同様のものが挙げられる。

また、 A_{11} と A_{12} とで互いに結合して環を形成してもよい。該形成する環としては、 A_1 と A_2 とで互いに結合して形成する環と同様のものが挙げられ、該形成する環は置換基を有していてもよい。該置換基としては、 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基が有していてもよい置換基と同様のものが挙げられる。

30

式(4)における A_{11} 及び A_{12} としては、それぞれ独立に水素原子又は脂肪族炭化水素残基であることが好ましく、 A_{11} が水素原子であり A_{12} が脂肪族炭化水素残基であることがより好ましく、 A_{11} が水素原子であり A_{12} が n -ヘキシル基であることが更に好ましい。

【0059】

式(4)中、 Q_2 は酸素原子、硫黄原子又はセレン原子を表し、 n_3 が2以上で Q_2 が複数存在する場合、それぞれの Q_2 は互いに同じか又は異なってもよい。

式(4)における Q_2 としては、酸素原子又は硫黄原子であることが好ましく、硫黄原子であることがより好ましい。

40

【0060】

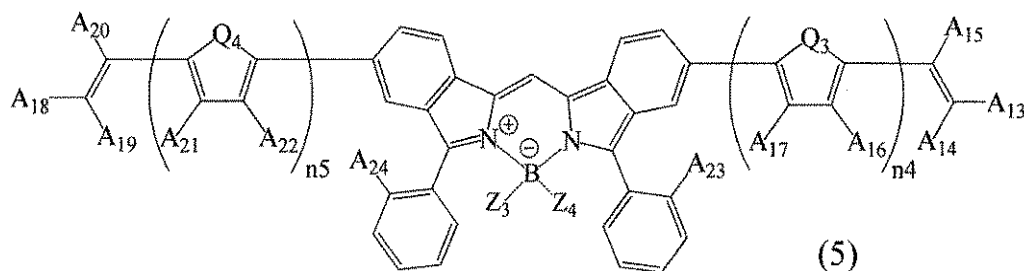
式(2)乃至(4)中、*印は芳香環 A_{r1} 及び/又は A_{r2} との結合部位を表す。

【0061】

本発明の化合物としては、下記式(5)で表される構造を有するものが好ましい。

【0062】

【化 1 1】



10

【0063】

式(5)中、 Z_3 及び Z_4 はそれぞれ独立にハロゲン原子を表し、該ハロゲン原子としては、 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基が有していてもよい置換基としてのハロゲン原子と同様のものが挙げられる。

式(5)における Z_3 及び Z_4 としては、フッ素原子であることが好ましい。

【0064】

式(5)中、 n_4 は0乃至5の整数を表し、1乃至4であることが好ましく、1であることが更に好ましい。

【0065】

20

式(5)中、 Q_3 は酸素原子、硫黄原子又はセレン原子を表し、 n_4 が2以上で Q_3 が複数存在する場合、それぞれの Q_3 は互いに同じか又は異なってもよい。

式(5)における Q_3 としては、酸素原子又は硫黄原子であることが好ましく、硫黄原子であることがより好ましい。

【0066】

式(5)中、 A_{13} 及び A_{14} はそれぞれ独立に水素原子、カルボキシル基、シアノ基、リン酸基、スルホン酸基又は芳香族残基を表し、また、 A_{13} と A_{14} とで互いに結合して環を形成してもよい。

A_{13} 及び A_{14} が表す芳香族残基の具体例としては、 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基と同様のものが挙げられる。該芳香族残基は置換基を有していてもよく、該置換基としては、 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基が有していてもよい置換基と同様のものが挙げられる。

30

A_{13} 及び A_{14} が表す芳香族残基としては、カルボキシル基、水酸基、リン酸基、スルホン酸基、およびこれらの酸性基の塩からなる群より選択される基を少なくとも1つ以上置換基として有する芳香族残基であることが好ましく、上記式(1001)乃至(1033)のいずれかで表される基であることがより好ましい。

【0067】

A_{13} と A_{14} とで互いに結合して形成する環としては、芳香環、複素環などが挙げられ、これらの環は置換基を有していてもよい。

A_{13} と A_{14} が互いに結合して形成する芳香環の具体例としては、 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基の説明部分に具体例として記載した芳香環と同様のものが挙げられる。

40

A_{13} と A_{14} とで互いに結合して形成する複素環としては、例えば、4乃至7員環のヘテロ原子を含む複素環であり、上記式(2001)乃至(2017)のいずれかで表される環であることが好ましく、式(2007)又は(2012)で表される環であることがより好ましく、式(2007)で表される環であることが更に好ましい。

A_{13} と A_{14} とで互いに結合して形成する環が有していてもよい置換基としては、 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基が有していてもよい置換基と同様のものが挙げられる。

尚、 A_{13} と A_{14} とで互いに結合して形成する複素環が上記式(2001)乃至(2017)のいずれかで表される環の場合、式(2001)乃至(2017)中の*印は、式

50

(5)において A_{13} 及び A_{14} の両者が結合している炭素原子を表す。

【0068】

式(5)における A_{13} と A_{14} としては、それぞれ独立にカルボキシル基又はシアノ基であることが好ましく、 A_{13} 及び A_{14} のいずれか一方がカルボキシル基で他方がカルボキシル基又はシアノ基であることがより好ましく、 A_{13} 及び A_{14} のいずれか一方がカルボキシル基で他方がシアノ基であることが更に好ましい。

【0069】

式(5)中、 A_{15} は水素原子、脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子又はアルコキシル基を表す。 A_{15} が表す脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子及びアルコキシル基としては、 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基が有していてもよい置換基としての脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子及びアルコキシル基と同様のものが挙げられる。

式(5)における A_{15} としては、水素原子又は脂肪族炭化水素残基であることが好ましく、水素原子であることがより好ましい。

【0070】

式(5)中、 A_{16} 及び A_{17} はそれぞれ独立に水素原子、脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子又はアルコキシル基を表し、 n_4 が2以上で A_{16} 及び A_{17} がそれぞれ複数存在する場合、それぞれの A_{16} 及びそれぞれの A_{17} は互いに同じか又は異なってもよい。 A_{16} 及び A_{17} が表す脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子及びアルコキシル基としては、 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基が有していてもよい置換基としての脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子及びアルコキシル基と同様のものが挙げられる。

また、 A_{16} と A_{17} とで互いに結合して環を形成してもよい。該形成する環としては、 A_1 と A_2 とで互いに結合して形成する環と同様のものが挙げられ、該形成する環は置換基を有していてもよい。該置換基としては、 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基が有していてもよい置換基と同様のものが挙げられる。

式(5)における A_{16} 及び A_{17} としては、それぞれ独立に水素原子又は脂肪族炭化水素残基であることが好ましく、 A_{16} が水素原子であり A_{17} が脂肪族炭化水素残基であることがより好ましく、 A_{16} が水素原子であり A_{17} が n -ヘキシル基であることが更に好ましい。

【0071】

式(5)中、 n_5 は0乃至5の整数を表し、1乃至4であることが好ましく、1であることが更に好ましい。

【0072】

式(5)中、 Q_4 は酸素原子、硫黄原子又はセレン原子を表し、 n_5 が2以上で Q_4 が複数存在する場合、それぞれの Q_4 は互いに同じか又は異なってもよい。

式(5)における Q_4 としては、酸素原子又は硫黄原子であることが好ましく、硫黄原子であることがより好ましい。

【0073】

式(5)中、 A_{18} 及び A_{19} はそれぞれ独立に水素原子、カルボキシル基、シアノ基、リン酸基、スルホン酸基又は芳香族残基を表し、また、 A_{18} と A_{19} とで互いに結合して環を形成してもよい。

A_{18} 及び A_{19} が表す芳香族残基の具体例としては、 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基と同様のものが挙げられる。該芳香族残基は置換基を有していてもよく、該置換基としては、 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基が有していてもよい置換基と同様のものが挙げられる。

A_{18} 及び A_{19} が表す芳香族残基としては、カルボキシル基、水酸基、リン酸基、スルホン酸基、およびこれらの酸性基の塩からなる群より選択される基を少なくとも1つ以上置換基として有する芳香族残基であることが好ましく、上記式(1001)乃至(1033)のいずれかで表される基であることがより好ましい。

【0074】

A_{18} と A_{19} とで互いに結合して形成する環としては、芳香環、複素環などが挙げら

10

20

30

40

50

れ、これらの環は置換基を有していてもよい。

A_{18} と A_{19} とで互いに結合して形成する芳香環の具体例としては、 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基の説明部分に具体例として記載した芳香環と同様のものが挙げられる。

A_{18} と A_{19} とで互いに結合して形成する複素環としては、例えば、4乃至7員環のヘテロ原子を含む複素環であり、上記式(2001)乃至(2017)のいずれかで表される環であることが好ましく、式(2007)又は(2012)で表される環であることがより好ましく、式(2007)で表される環であることが更に好ましい。

A_{18} と A_{19} とで互いに結合して形成する環が有していてもよい置換基としては、 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基が有していてもよい置換基と同様のものが挙げられる。

10

尚、 A_{18} と A_{19} とで互いに結合して形成する複素環が上記式(2001)乃至(2017)のいずれかで表される環の場合、式(2001)乃至(2017)中の「*」は、式(5)において A_{18} 及び A_{19} の両者が結合している炭素原子を表す。

【0075】

式(5)における A_{18} と A_{19} としては、それぞれ独立にカルボキシル基又はシアノ基であることが好ましく、 A_{18} 及び A_{19} のいずれか一方がカルボキシル基で他方がカルボキシル基又はシアノ基であることがより好ましく、 A_{18} 及び A_{19} のいずれか一方がカルボキシル基で他方がシアノ基であることが更に好ましい。

【0076】

20

式(5)中、 A_{20} は水素原子、脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子又はアルコキシル基を表す。 A_{20} が表す脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子及びアルコキシル基としては、 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基が有していてもよい置換基としての脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子及びアルコキシル基と同様のものが挙げられる。

式(5)における A_{20} としては、水素原子又は脂肪族炭化水素残基であることが好ましく、水素原子であることがより好ましい。

【0077】

式(5)中、 A_{21} 及び A_{22} はそれぞれ独立に水素原子、脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子又はアルコキシル基を表し、 n_5 が2以上で A_{21} 及び A_{22} がそれぞれ複数存在する場合、それぞれの A_{21} 及びそれぞれの A_{22} は互いに同じか又は異なってもよい。 A_{21} 及び A_{22} が表す脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子及びアルコキシル基としては、 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基が有していてもよい置換基としての脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子及びアルコキシル基と同様のものが挙げられる。

30

また、 A_{21} と A_{22} とで互いに結合して環を形成してもよい。該形成する環としては、 A_1 と A_2 とで互いに結合して形成する環と同様のものが挙げられ、該形成する環は置換基を有していてもよい。該置換基としては、 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基が有していてもよい置換基と同様のものが挙げられる。

式(5)における A_{21} 及び A_{22} としては、それぞれ独立に水素原子又は脂肪族炭化水素残基であることが好ましく、 A_{21} が水素原子であり A_{22} が脂肪族炭化水素残基であることがより好ましく、 A_{21} が水素原子であり A_{22} が n -ヘキシル基であることが更に好ましい。

40

【0078】

式(5)中、 A_{23} 及び A_{24} はそれぞれ独立に水素原子、ハロゲン原子、脂肪族炭化水素残基又はアルコキシル基を表す。 A_{23} 及び A_{24} が表すハロゲン原子、脂肪族炭化水素残基及びアルコキシル基としては、 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基が有していてもよい置換基としての脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子及びアルコキシル基と同様のものが挙げられる。

式(5)における A_{23} 及び A_{24} としては、それぞれ独立に水素原子、脂肪族炭化水素残基又はアルコキシル基であることが好ましく、アルコキシル基であることがより好ましく、炭素数1乃至4のアルコキシル基であることが更に好ましく、メトキシ基であるこ

50

とが特に好ましい。

【0079】

式(5)で表される化合物としては、 Z_3 及び Z_4 がフッ素原子であり、 n_4 及び n_5 が1の整数であり、 Q_3 及び Q_4 が硫黄原子であり、 A_{13} 及び A_{14} のいずれか一方がカルボキシル基で他方がシアノ基であり、 A_{18} 及び A_{19} のいずれか一方がカルボキシル基で他方がシアノ基であり、 A_{15} 及び A_{20} が水素原子であり、 A_{16} 及び A_{21} が水素原子であり、 A_{17} 及び A_{22} が n -ヘキシル基であり、かつ A_{23} 及び A_{24} がメトキシ基であるものが好ましい。

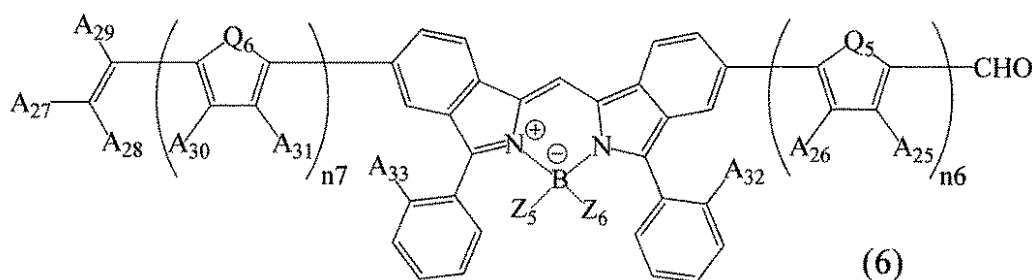
尚、式(5)で表される化合物は、式(5)中に2ヶ所存在するインドール環の部分構造における5位に、それぞれ式(3)で表される置換基を有するものであるが、本発明の化合物としては、該インドール環の6位に、それぞれ式(3)で表される置換基を有する化合物も好ましい。

【0080】

本発明の化合物としては、下記式(6)で表される構造を有するものも好ましい。

【0081】

【化12】



【0082】

式(6)中、 Z_5 及び Z_6 はそれぞれ独立にハロゲン原子を表し、該ハロゲン原子としては、 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基が有していてもよい置換基としてのハロゲン原子と同様のものが挙げられる。

式(6)における Z_5 及び Z_6 としては、フッ素原子であることが好ましい。

【0083】

式(6)中、 n_6 は0乃至5の整数を表し、1乃至4であることが好ましく、1であることが更に好ましい。

【0084】

式(6)中、 Q_5 は酸素原子、硫黄原子又はセレン原子を表し、 n_6 が2以上で Q_5 が複数存在する場合、それぞれの Q_5 は互いに同じか又は異なってもよい。

式(6)における Q_5 としては、酸素原子又は硫黄原子であることが好ましく、硫黄原子であることがより好ましい。

【0085】

式(6)中、 A_{25} 及び A_{26} はそれぞれ独立に水素原子、脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子又はアルコキシル基を表し、 n_6 が2以上で A_{25} 及び A_{26} がそれぞれ複数存在する場合、それぞれの A_{25} 及びそれぞれの A_{26} は互いに同じか又は異なってもよい。 A_{25} 及び A_{26} が表す脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子及びアルコキシル基としては、 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基が有していてもよい置換基としての脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子及びアルコキシル基と同様のものが挙げられる。

また、 A_{25} と A_{26} とで互いに結合して環を形成してもよい。該形成する環としては、 A_1 と A_2 とで互いに結合して形成する環と同様のものが挙げられ、該形成する環は置換基を有していてもよい。該置換基としては、 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基が有していてもよい置換基と同様のものが挙げられる。

式(6)における A_{25} 及び A_{26} としては、それぞれ独立に水素原子又は脂肪族炭化水素残基であることが好ましく、 A_{25} が水素原子であり A_{26} が脂肪族炭化水素残基であることがより好ましく、 A_{25} が水素原子であり A_{26} が n -ヘキシル基であることが更に好ましい。

【0086】

式(6)中、 n_7 は0乃至5の整数を表し、1乃至4であることが好ましく、1であることが更に好ましい。

【0087】

式(6)中、 Q_6 は酸素原子、硫黄原子又はセレン原子を表し、 n_7 が2以上で Q_6 が複数存在する場合、それぞれの Q_6 は互いに同じか又は異なってもよい。

式(6)における Q_6 としては、酸素原子又は硫黄原子であることが好ましく、硫黄原子であることがより好ましい。

【0088】

式(6)中、 A_{27} 及び A_{28} はそれぞれ独立に水素原子、カルボキシル基、シアノ基、リン酸基、スルホン酸基又は芳香族残基を表し、また、 A_{27} と A_{28} とで互いに結合して環を形成してもよい。

A_{27} 及び A_{28} が表す芳香族残基の具体例としては、 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基と同様のものが挙げられる。該芳香族残基は置換基を有していてもよく、該置換基としては、 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基が有していてもよい置換基と同様のものが挙げられる。

A_{27} 及び A_{28} が表す芳香族残基としては、カルボキシル基、水酸基、リン酸基、スルホン酸基、およびこれらの酸性基の塩からなる群より選択される基を少なくとも1つ以上置換基として有する芳香族残基であることが好ましく、上記式(1001)乃至(1033)のいずれかで表される基であることがより好ましい。

【0089】

A_{27} と A_{28} とで互いに結合して形成する環としては、芳香環、複素環などが挙げられ、これらの環は置換基を有していてもよい。

A_{27} と A_{28} とで互いに結合して形成する芳香環の具体例としては、 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基の説明部分に具体例として記載した芳香環と同様のものが挙げられる。

A_{27} と A_{28} とで互いに結合して形成する複素環としては、例えば、4乃至7員環のヘテロ原子を含む複素環であり、上記式(2001)乃至(2017)のいずれかで表される環であることが好ましく、式(2007)又は(2012)で表される環であることがより好ましく、式(2007)で表される環であることが更に好ましい。

A_{27} と A_{28} とで互いに結合して形成する環が有していてもよい置換基としては、 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基が有していてもよい置換基と同様のものが挙げられる。

尚、 A_{27} と A_{28} とで互いに結合して形成する複素環が上記式(2001)乃至(2017)のいずれかで表される環の場合、式(2001)乃至(2017)中の「*」は、式(6)において A_{27} 及び A_{28} の両者が結合している炭素原子を表す。

【0090】

式(6)における A_{27} と A_{28} としては、それぞれ独立にカルボキシル基又はシアノ基であることが好ましく、 A_{27} 及び A_{28} のいずれか一方がカルボキシル基で他方がカルボキシル基又はシアノ基であることがより好ましく、 A_{27} 及び A_{28} のいずれか一方がカルボキシル基で他方がシアノ基であることが更に好ましい。

【0091】

式(6)中、 A_{29} は水素原子、脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子又はアルコキシル基を表す。 A_{29} が表す脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子及びアルコキシル基としては、 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基が有していてもよい置換基としての脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子及びアルコキシル基と同様のものが挙げられる。

式(6)における A_{29} としては、水素原子又は脂肪族炭化水素残基であることが好ましく、水素原子であることがより好ましい。

【0092】

式(6)中、 A_{30} 及び A_{31} はそれぞれ独立に水素原子、脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子又はアルコキシル基を表し、 $n7$ が2以上で A_{30} 及び A_{31} がそれぞれ複数存在する場合、それぞれの A_{30} 及びそれぞれの A_{31} は互いに同じか又は異なってもよい。 A_{30} 及び A_{31} が表す脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子及びアルコキシル基としては、 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基が有していてもよい置換基としての脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子及びアルコキシル基と同様のものが挙げられる。

また、 A_{30} と A_{31} とで互いに結合して環を形成してもよい。該形成する環としては、 A_1 と A_2 とで互いに結合して形成する環と同様のものが挙げられ、該形成する環は置換基を有していてもよい。該置換基としては、 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基が有していてもよい置換基と同様のものが挙げられる。

10

式(6)における A_{30} 及び A_{31} としては、それぞれ独立に水素原子又は脂肪族炭化水素残基であることが好ましく、 A_{30} が水素原子であり A_{31} が脂肪族炭化水素残基であることがより好ましく、 A_{30} が水素原子であり A_{31} が n -ヘキシル基であることが更に好ましい。

【0093】

式(6)中、 A_{32} 及び A_{33} はそれぞれ独立に水素原子、ハロゲン原子、脂肪族炭化水素残基又はアルコキシル基を表す。 A_{32} 及び A_{33} が表すハロゲン原子、脂肪族炭化水素残基及びアルコキシル基としては、 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基が有していてもよい置換基としての脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子及びアルコキシル基と同様のものが挙げられる。

20

式(6)における A_{32} 及び A_{33} としては、それぞれ独立に水素原子、脂肪族炭化水素残基又はアルコキシル基であることが好ましく、アルコキシル基であることがより好ましく、炭素数1乃至4のアルコキシル基であることがより好ましく、メトキシ基であることが特に好ましい。

【0094】

式(6)で表される化合物としては、 Z_5 及び Z_6 がフッ素原子であり、 $n6$ 及び $n7$ が1の整数であり、 Q_5 及び Q_6 が硫黄原子であり、 A_{25} 、 A_{29} 及び A_{30} が水素原子であり、 A_{26} 及び A_{31} が n -ヘキシル基であり、 A_{27} 及び A_{28} のいずれか一方がカルボキシル基で他方がシアノ基であり、かつ A_{32} 及び A_{33} がメトキシ基であるものが好ましい。

30

尚、式(6)で表される化合物は、式(6)中に2ヶ所存在するインドール環の部分構造における5位に、それぞれ式(3)及び(4)で表される置換基を有するものであるが、本発明の化合物としては、該インドール環の6位に、それぞれ式(3)及び(4)で表される置換基を有する化合物も好ましい。

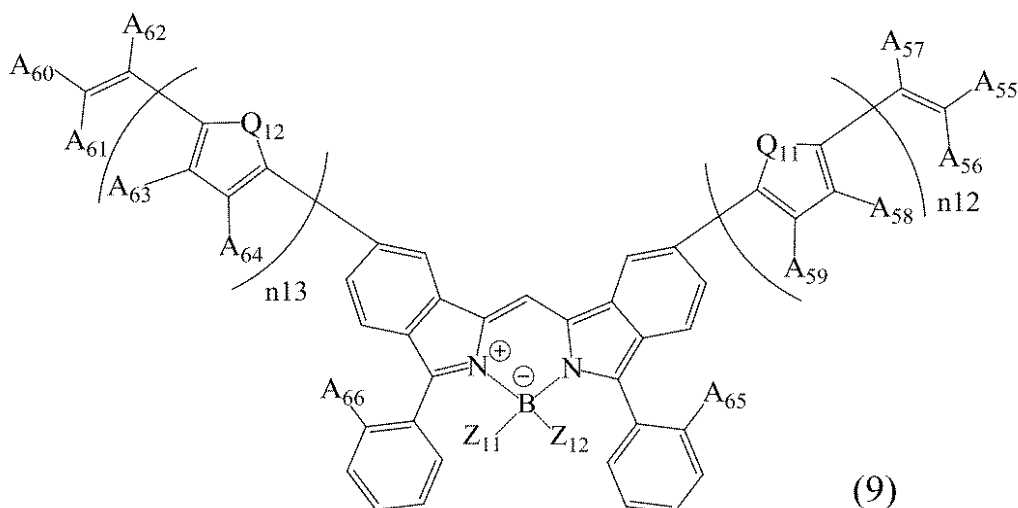
【0095】

本発明の化合物としては、下記式(9)で表される構造を有するものも好ましい。

【0096】

40

【化 1 3】



10

20

【0097】

式(9)中、 Z_{11} 及び Z_{12} はそれぞれ独立にハロゲン原子を表し、該ハロゲン原子としては、 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基が有していてもよい置換基としてのハロゲン原子と同様のものが挙げられる。

式(9)における Z_{11} 及び Z_{12} としては、フッ素原子であることが好ましい。

【0098】

式(9)中、 n_{12} は0乃至5の整数を表し、1乃至4であることが好ましく、1であることが更に好ましい。

【0099】

式(9)中、 Q_{11} は酸素原子、硫黄原子又はセレン原子を表し、 n_{12} が2以上で Q_{11} が複数存在する場合、それぞれの Q_{11} は互いに同じか又は異なってもよい。

式(9)における Q_{11} としては、酸素原子又は硫黄原子であることが好ましく、硫黄原子であることがより好ましい。

【0100】

式(9)中、 A_{55} 及び A_{56} はそれぞれ独立に水素原子、カルボキシル基、シアノ基、リン酸基、スルホン酸基又は芳香族残基を表し、また、 A_{55} と A_{56} とで互いに結合して環を形成してもよい。

A_{55} 及び A_{56} が表す芳香族残基の具体例としては、 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基と同様のものが挙げられる。該芳香族残基は置換基を有していてもよく、該置換基としては、 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基が有していてもよい置換基と同様のものが挙げられる。

A_{55} 及び A_{56} が表す芳香族残基としては、カルボキシル基、水酸基、リン酸基、スルホン酸基、およびこれらの酸性基の塩からなる群より選択される基を少なくとも1つ以上置換基として有する芳香族残基であることが好ましく、上記式(1001)乃至(1033)のいずれかで表される基であることがより好ましい。

【0101】

A_{55} と A_{56} とで互いに結合して形成する環としては、芳香環、複素環などが挙げられ、これらの環は置換基を有していてもよい。

A_{55} と A_{56} が互いに結合して形成する芳香環の具体例としては、 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基の説明部分に具体例として記載した芳香環と同様のものが挙げられる

30

40

50

。

A_{55} と A_{56} とで互いに結合して形成する複素環としては、例えば、4乃至7員環のヘテロ原子を含む複素環であり、上記式(2001)乃至(2017)のいずれかで表される環であることが好ましく、式(2007)又は(2012)で表される環であることがより好ましく、式(2007)で表される環であることが更に好ましい。

A_{55} と A_{56} とで互いに結合して形成する環が有していてもよい置換基としては、 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基が有していてもよい置換基と同様のものが挙げられる。

尚、 A_{55} と A_{56} とで互いに結合して形成する複素環が上記式(2001)乃至(2017)のいずれかで表される環の場合、式(2001)乃至(2017)中の*印は、式(9)において A_{55} 及び A_{56} の両者が結合している炭素原子を表す。

【0102】

式(9)における A_{55} と A_{56} としては、それぞれ独立にカルボキシル基又はシアノ基であることが好ましく、 A_{55} 及び A_{56} のいずれか一方がカルボキシル基で他方がカルボキシル基又はシアノ基であることがより好ましく、 A_{55} 及び A_{56} のいずれか一方がカルボキシル基で他方がシアノ基であることが更に好ましい。

【0103】

式(9)中、 A_{57} は水素原子、脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子又はアルコキシル基を表す。 A_{57} が表す脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子及びアルコキシル基としては、 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基が有していてもよい置換基としての脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子及びアルコキシル基と同様のものが挙げられる。

式(9)における A_{57} としては、水素原子又は脂肪族炭化水素残基であることが好ましく、水素原子であることがより好ましい。

【0104】

式(9)中、 A_{58} 及び A_{59} はそれぞれ独立に水素原子、脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子又はアルコキシル基を表し、 n_{12} が2以上で A_{58} 及び A_{59} がそれぞれ複数存在する場合、それぞれの A_{58} 及びそれぞれの A_{59} は互いに同じか又は異なってもよい。 A_{58} 及び A_{59} が表す脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子及びアルコキシル基としては、 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基が有していてもよい置換基としての脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子及びアルコキシル基と同様のものが挙げられる。

また、 A_{58} と A_{59} とで互いに結合して環を形成してもよい。該形成する環としては、 A_1 と A_2 とで互いに結合して形成する環と同様のものが挙げられ、該形成する環は置換基を有していてもよい。該置換基としては、 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基が有していてもよい置換基と同様のものが挙げられる。

式(9)における A_{58} 及び A_{59} としては、それぞれ独立に水素原子又は脂肪族炭化水素残基であることが好ましく、 A_{58} が水素原子であり A_{59} が脂肪族炭化水素残基であることがより好ましく、 A_{58} が水素原子であり A_{59} が n -ヘキシル基であることが更に好ましい。

【0105】

式(9)中、 n_{13} は0乃至5の整数を表し、1乃至4であることが好ましく、1であることが更に好ましい。

【0106】

式(9)中、 Q_{12} は酸素原子、硫黄原子又はセレン原子を表し、 n_{13} が2以上で Q_{12} が複数存在する場合、それぞれの Q_{12} は互いに同じか又は異なってもよい。式(9)における Q_{12} としては、酸素原子又は硫黄原子であることが好ましく、硫黄原子であることがより好ましい。

【0107】

式(9)中、 A_{60} 及び A_{61} はそれぞれ独立に水素原子、カルボキシル基、シアノ基、リン酸基、スルホン酸基又は芳香族残基を表し、また、 A_{60} と A_{61} とで互いに結合して環を形成してもよい。

A₆₀ 及び A₆₁ が表す芳香族残基の具体例としては、Y₁、Y₂ 及び Y₃ が表す芳香族残基と同様のものが挙げられる。該芳香族残基は置換基を有していてもよく、該置換基としては、Y₁、Y₂ 及び Y₃ が表す芳香族残基が有していてもよい置換基と同様のものが挙げられる。

A₆₀ 及び A₆₁ が表す芳香族残基としては、カルボキシル基、水酸基、リン酸基、スルホン酸基、およびこれらの酸性基の塩からなる群より選択される基を少なくとも1つ以上置換基として有する芳香族残基であることが好ましく、上記式(1001)乃至(1033)のいずれかで表される基であることがより好ましい。

【0108】

A₆₀ と A₆₁ とで互いに結合して形成する環としては、芳香環、複素環などが挙げられ、これらの環は置換基を有していてもよい。

A₆₀ と A₆₁ とで互いに結合して形成する芳香環の具体例としては、Y₁、Y₂ 及び Y₃ が表す芳香族残基の説明部分に具体例として記載した芳香環と同様のものが挙げられる。

A₆₀ と A₆₁ とで互いに結合して形成する複素環としては、例えば、4乃至7員環のヘテロ原子を含む複素環であり、上記式(2001)乃至(2017)のいずれかで表される環であることが好ましく、式(2007)又は(2012)で表される環であることがより好ましく、式(2007)で表される環であることが更に好ましい。

A₆₀ と A₆₁ とで互いに結合して形成する環が有していてもよい置換基としては、Y₁、Y₂ 及び Y₃ が表す芳香族残基が有していてもよい置換基と同様のものが挙げられる。

尚、A₆₀ と A₆₁ とで互いに結合して形成する複素環が上記式(2001)乃至(2017)のいずれかで表される環の場合、式(2001)乃至(2017)中の「*」は、式(9)において A₆₀ 及び A₆₁ の両者が結合している炭素原子を表す。

【0109】

式(9)における A₆₀ と A₆₁ としては、それぞれ独立にカルボキシル基又はシアノ基であることが好ましく、A₆₀ 及び A₆₁ のいずれか一方がカルボキシル基で他方がカルボキシル基又はシアノ基であることがより好ましく、A₆₀ 及び A₆₁ のいずれか一方がカルボキシル基で他方がシアノ基であることが更に好ましい。

【0110】

式(9)中、A₆₂ は水素原子、脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子又はアルコキシル基を表す。A₆₂ が表す脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子及びアルコキシル基としては、Y₁、Y₂ 及び Y₃ が表す芳香族残基が有していてもよい置換基としての脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子及びアルコキシル基と同様のものが挙げられる。

式(9)における A₆₂ としては、水素原子又は脂肪族炭化水素残基であることが好ましく、水素原子であることがより好ましい。

【0111】

式(9)中、A₆₃ 及び A₆₄ はそれぞれ独立に水素原子、脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子又はアルコキシル基を表し、n13が2以上で A₆₃ 及び A₆₄ がそれぞれ複数存在する場合、それぞれの A₆₃ 及びそれぞれの A₆₄ は互いに同じか又は異なっているもよい。A₆₃ 及び A₆₄ が表す脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子及びアルコキシル基としては、Y₁、Y₂ 及び Y₃ が表す芳香族残基が有していてもよい置換基としての脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子及びアルコキシル基と同様のものが挙げられる。

また、A₆₃ と A₆₄ とで互いに結合して環を形成してもよい。該形成する環としては、A₁ と A₂ とで互いに結合して形成する環と同様のものが挙げられ、該形成する環は置換基を有していてもよい。該置換基としては、Y₁、Y₂ 及び Y₃ が表す芳香族残基が有していてもよい置換基と同様のものが挙げられる。

式(9)における A₆₃ 及び A₆₄ としては、それぞれ独立に水素原子又は脂肪族炭化水素残基であることが好ましく、A₆₃ が水素原子であり A₆₄ が脂肪族炭化水素残基であることがより好ましく、A₆₃ が水素原子であり A₆₄ が n-ヘキシル基であることが

更に好ましい。

【0112】

式(9)中、 A_{65} 及び A_{66} はそれぞれ独立に水素原子、ハロゲン原子、脂肪族炭化水素残基又はアルコキシル基を表す。 A_{65} 及び A_{66} が表すハロゲン原子、脂肪族炭化水素残基及びアルコキシル基としては、 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基が有していてもよい置換基としての脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子及びアルコキシル基と同様のものが挙げられる。

式(9)における A_{65} 及び A_{66} としては、それぞれ独立に水素原子、脂肪族炭化水素残基又はアルコキシル基であることが好ましく、アルコキシル基であることがより好ましく、炭素数1乃至4のアルコキシル基であることが更に好ましく、メトキシ基であることが特に好ましい。

10

【0113】

式(9)で表される化合物としては、 Z_{11} 及び Z_{12} がフッ素原子であり、 n_{12} 及び n_{13} が1の整数であり、 Q_{11} 及び Q_{12} が硫黄原子であり、 A_{55} 及び A_{56} のいずれか一方がカルボキシル基で他方がシアノ基であり、 A_{60} 及び A_{61} のいずれか一方がカルボキシル基で他方がシアノ基であり、 A_{57} 及び A_{62} が水素原子であり、 A_{58} 及び A_{63} が水素原子であり、 A_{59} 及び A_{64} が n -ヘキシル基であり、かつ A_{65} 及び A_{66} がメトキシ基であるものが好ましい。

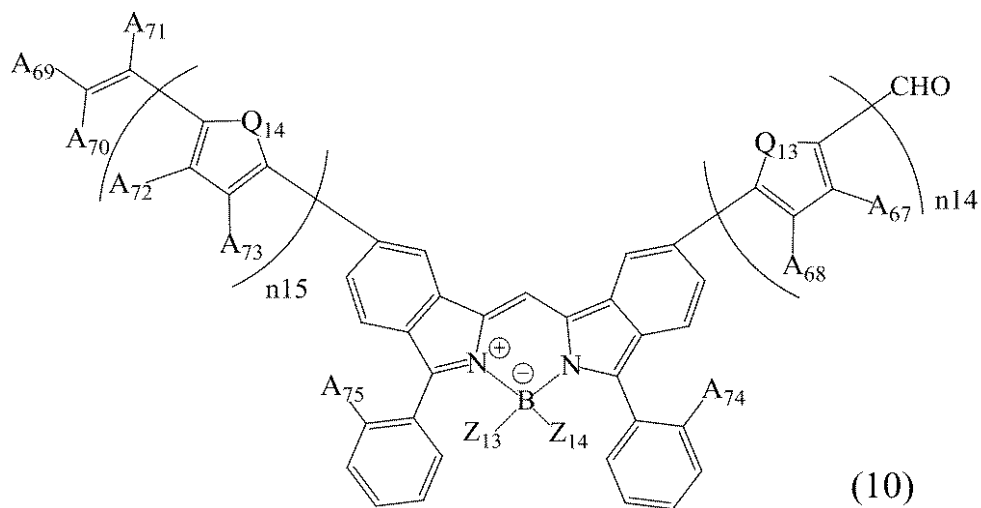
【0114】

本発明の化合物としては、下記式(10)で表される構造を有するものも好ましい。

20

【0115】

【化14】



30

【0116】

式(10)中、 Z_{13} 及び Z_{14} はそれぞれ独立にハロゲン原子を表し、該ハロゲン原子としては、 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基が有していてもよい置換基としてのハロゲン原子と同様のものが挙げられる。

40

式(6)における Z_{13} 及び Z_{14} としては、フッ素原子であることが好ましい。

【0117】

式(10)中、 n_{14} は0乃至5の整数を表し、1乃至4であることが好ましく、1であることが更に好ましい。

【0118】

式(10)中、 Q_{13} は酸素原子、硫黄原子又はセレン原子を表し、 n_{14} が2以上で Q_{13} が複数存在する場合、それぞれの Q_{13} は互いに同じか又は異なってもよい。

50

式(10)における Q_{13} としては、酸素原子又は硫黄原子であることが好ましく、硫黄原子であることがより好ましい。

【0119】

式(10)中、 A_{67} 及び A_{68} はそれぞれ独立に水素原子、脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子又はアルコキシル基を表し、 n_{14} が2以上で A_{67} 及び A_{68} がそれぞれ複数存在する場合、それぞれの A_{67} 及びそれぞれの A_{68} は互いに同じか又は異なってもよい。 A_{67} 及び A_{68} が表す脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子及びアルコキシル基としては、 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基が有していてもよい置換基としての脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子及びアルコキシル基と同様のものが挙げられる。

また、 A_{67} と A_{68} とで互いに結合して環を形成してもよい。該形成する環としては、 A_1 と A_2 とで互いに結合して形成する環と同様のものが挙げられ、該形成する環は置換基を有していてもよい。該置換基としては、 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基が有していてもよい置換基と同様のものが挙げられる。

式(10)における A_{67} 及び A_{68} としては、それぞれ独立に水素原子又は脂肪族炭化水素残基であることが好ましく、 A_{67} が水素原子であり A_{68} が脂肪族炭化水素残基であることがより好ましく、 A_{67} が水素原子であり A_{68} が n -ヘキシル基であることが更に好ましい。

【0120】

式(10)中、 n_{15} は0乃至5の整数を表し、1乃至4であることが好ましく、1であることが更に好ましい。

【0121】

式(10)中、 Q_{14} は酸素原子、硫黄原子又はセレン原子を表し、 n_{15} が2以上で Q_{14} が複数存在する場合、それぞれの Q_{14} は互いに同じか又は異なってもよい。式(10)における Q_{14} としては、酸素原子又は硫黄原子であることが好ましく、硫黄原子であることがより好ましい。

【0122】

式(10)中、 A_{69} 及び A_{70} はそれぞれ独立に水素原子、カルボキシル基、シアノ基、リン酸基、スルホン酸基又は芳香族残基を表し、また、 A_{69} と A_{70} とで互いに結合して環を形成してもよい。

A_{69} 及び A_{70} が表す芳香族残基の具体例としては、 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基と同様のものが挙げられる。該芳香族残基は置換基を有していてもよく、該置換基としては、 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基が有していてもよい置換基と同様のものが挙げられる。

A_{69} 及び A_{70} が表す芳香族残基としては、カルボキシル基、水酸基、リン酸基、スルホン酸基、およびこれらの酸性基の塩からなる群より選択される基を少なくとも1つ以上置換基として有する芳香族残基であることが好ましく、上記式(1001)乃至(1033)のいずれかで表される基であることがより好ましい。

【0123】

A_{69} と A_{70} とで互いに結合して形成する環としては、芳香環、複素環などが挙げられ、これらの環は置換基を有していてもよい。

A_{69} と A_{70} とで互いに結合して形成する芳香環の具体例としては、 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基の説明部分に具体例として記載した芳香環と同様のものが挙げられる。

A_{69} と A_{70} とで互いに結合して形成する複素環としては、例えば、4乃至7員環のヘテロ原子を含む複素環であり、上記式(2001)乃至(2017)のいずれかで表される環であることが好ましく、式(2007)又は(2012)で表される環であることがより好ましく、式(2007)で表される環であることが更に好ましい。

A_{69} と A_{70} とで互いに結合して形成する環が有していてもよい置換基としては、 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基が有していてもよい置換基と同様のものが挙げられる。

10

20

30

40

50

尚、 A_{69} と A_{70} とで互いに結合して形成する複素環が上記式(2001)乃至(2017)のいずれかで表される環の場合、式(2001)乃至(2017)中の「*」は、式(10)において A_{69} 及び A_{70} の両者が結合している炭素原子を表す。

【0124】

式(10)における A_{69} と A_{70} としては、それぞれ独立にカルボキシル基又はシアノ基であることが好ましく、 A_{69} 及び A_{70} のいずれか一方がカルボキシル基で他方がカルボキシル基又はシアノ基であることがより好ましく、 A_{69} 及び A_{70} のいずれか一方がカルボキシル基で他方がシアノ基であることが更に好ましい。

【0125】

式(10)中、 A_{71} は水素原子、脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子又はアルコキシル基を表す。 A_{71} が表す脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子及びアルコキシル基としては、 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基が有していてもよい置換基としての脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子及びアルコキシル基と同様のものが挙げられる。

式(10)における A_{71} としては、水素原子又は脂肪族炭化水素残基であることが好ましく、水素原子であることがより好ましい。

【0126】

式(10)中、 A_{72} 及び A_{73} はそれぞれ独立に水素原子、脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子又はアルコキシル基を表し、 $n15$ が2以上で A_{72} 及び A_{73} がそれぞれ複数存在する場合、それぞれの A_{72} 及びそれぞれの A_{73} は互いに同じか又は異なってもよい。 A_{72} 及び A_{73} が表す脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子及びアルコキシル基としては、 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基が有していてもよい置換基としての脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子及びアルコキシル基と同様のものが挙げられる。

また、 A_{72} と A_{73} とで互いに結合して環を形成してもよい。該形成する環としては、 A_1 と A_2 とで互いに結合して形成する環と同様のものが挙げられ、該形成する環は置換基を有していてもよい。該置換基としては、 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基が有していてもよい置換基と同様のものが挙げられる。

式(10)における A_{72} 及び A_{73} としては、それぞれ独立に水素原子又は脂肪族炭化水素残基であることが好ましく、 A_{72} が水素原子であり A_{73} が脂肪族炭化水素残基であることがより好ましく、 A_{72} が水素原子であり A_{73} が n -ヘキシル基であることが更に好ましい。

【0127】

式(10)中、 A_{74} 及び A_{75} はそれぞれ独立に水素原子、ハロゲン原子、脂肪族炭化水素残基又はアルコキシル基を表す。 A_{74} 及び A_{75} が表すハロゲン原子、脂肪族炭化水素残基及びアルコキシル基としては、 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基が有していてもよい置換基としての脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子及びアルコキシル基と同様のものが挙げられる。

式(10)における A_{74} 及び A_{75} としては、それぞれ独立に水素原子、脂肪族炭化水素残基又はアルコキシル基であることが好ましく、アルコキシル基であることがより好ましく、炭素数1乃至4のアルコキシル基であることがより好ましく、メトキシ基であることが特に好ましい。

【0128】

式(10)で表される化合物としては、 Z_{13} 及び Z_{14} がフッ素原子であり、 $n14$ 及び $n15$ が1の整数であり、 Q_{13} 及び Q_{14} が硫黄原子であり、 A_{67} 、 A_{71} 及び A_{72} が水素原子であり、 A_{68} 及び A_{73} が n -ヘキシル基であり、 A_{69} 及び A_{70} のいずれか一方がカルボキシル基で他方がシアノ基であり、かつ A_{74} 及び A_{75} がメトキシ基であるものが好ましい。

【0129】

本発明の式(1)で表される化合物は、例えば、非特許文献3記載のScheme 1における化合物番号2の合成方法に準じて中間体となる化合物を合成し、該中間体となる化合物に、ホルミル化やクロスカップリングなどにより置換基 X_1 を導入することにより得

10

20

30

40

50

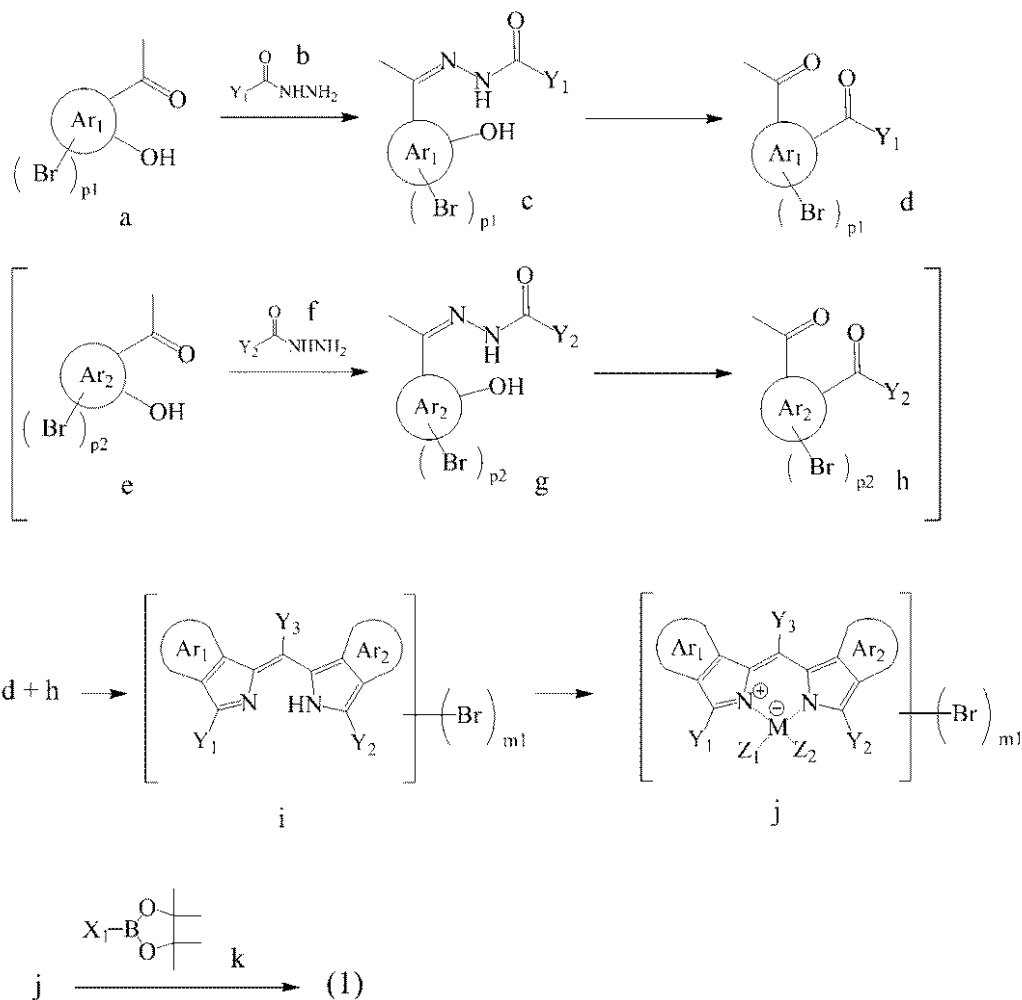
ることが可能である。

【0130】

具体的な反応機構を下記する。原料である化合物aと化合物bを、例えばアルコール等の適当な溶媒中で反応させ、化合物cを得ることができる。次に化合物cを、例えばテトラヒドロフラン等の適当な溶媒中で、四酢酸鉛で処理し、化合物dを得ることが出来る（芳香環Ar₁とAr₂が環成分として異なる場合は、上記と同様に、原料である化合物eと化合物fの反応により化合物gを、更に化合物hを得ることができる）。次に化合物dを、例えば適当なアルコールと酢酸混合溶媒中、アンモニア水を加えて室温で反応させることで、化合物iを得ることができる。このとき、芳香環Ar₁とAr₂の環成分が異なる場合は、化合物dと化合物hとを反応させる。次いで、化合物iを三フッ化ホウ素類と反応させて、化合物jを得ることができる。更に、この化合物jと、化合物kをクロスカップリング等により結合させることで一般式(1)の化合物を得ることができる。なお、Y₃は、必要に応じてグリニャール反応などにより水素原子以外の置換基を置換させることも可能である。

【0131】

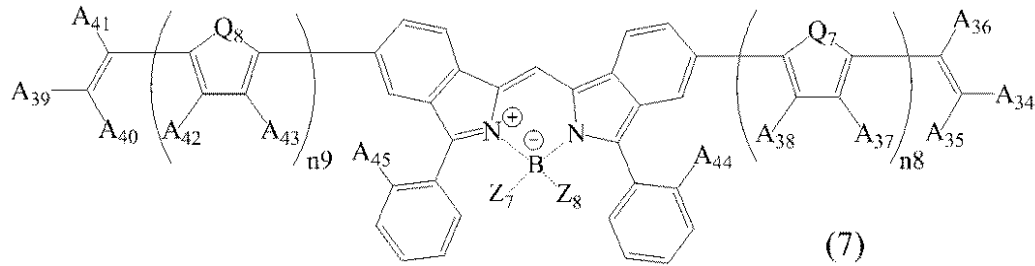
【化15】



【0132】

以下に、式(7)で表される化合物の具体例を挙げる。

【化 1 6】



10

【0 1 3 3】

【表 1】

化合物	n8	n9	Z ₇	Z ₈	Q ₈	Q ₉	A ₃₄	A ₃₅	A ₃₆	A ₃₇	A ₃₈	A ₃₉	A ₄₀	A ₄₁	A ₄₂	A ₄₃	A ₄₄	A ₄₅
1	0	0	F	F	—	—	COOH	CN	H	—	—	COOH	CN	H	—	—	H	H
2	0	0	Cl	Cl	—	—	COOH	COOH	H	—	—	COOH	COOH	H	—	—	H	H
3	0	0	Br	Br	—	—	COOH	CN	CH ₃	—	—	COOH	CN	CH ₃	—	—	H	H
4	0	0	I	I	—	—	COOH	CN	H	—	—	COOH	CN	H	—	—	OCH ₃	OCH ₃
5	0	0	F	F	—	—	COOH	CN	H	—	—	COOH	CN	H	—	—	OC ₂ H ₅	OC ₂ H ₅
6	0	0	F	F	—	—	COOH	COOH	H	—	—	COOH	COOH	H	—	—	OCH ₃	OCH ₃
7	0	0	F	F	—	—	COOH	CN	H	—	—	COOH	CN	H	—	—	OCH ₃	OCH ₃
8	0	0	F	F	—	—	COOH	CN	H	—	—	COOH	CN	H	—	—	OCH ₃	OCH ₃
9	1	1	F	F	O	O	COOH	CN	H	H	C ₆ H ₁₃	COOH	CN	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
10	1	1	F	F	O	O	COOH	COOH	H	H	C ₆ H ₁₃	COOH	COOH	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
11	1	1	Cl	Cl	O	O	COOH	CN	H	H	C ₆ H ₁₃	COOH	CN	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
12	1	1	I	I	O	O	COOH	CN	H	H	C ₆ H ₁₃	COOH	CN	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
13	1	1	F	F	S	S	COOH	CN	H	H	C ₆ H ₁₃	COOH	CN	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
14	1	1	F	F	Se	Se	COOH	CN	H	H	C ₆ H ₁₃	COOH	CN	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
15	2	2	F	F	S	S	COOH	CN	H	H	C ₆ H ₁₃	COOH	CN	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
16	3	3	F	F	S	S	COOH	CN	H	H	C ₆ H ₁₃	COOH	CN	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
17	4	4	F	F	S	S	COOH	CN	H	H	C ₆ H ₁₃	COOH	CN	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
18	5	5	F	F	S	S	COOH	CN	H	H	C ₆ H ₁₃	COOH	CN	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
19	1	1	F	F	S	S	COOH	CN	H	H	C ₆ H ₁₃	PO(OH) ₂	CN	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
20	1	1	F	F	S	S	COOH	CN	H	C ₆ H ₁₃	H	COOH	CN	H	C ₆ H ₁₃	H	OCH ₃	OCH ₃
21	1	1	F	F	S	S	COOH	CN	H	C ₆ H ₁₃	C ₆ H ₁₃	COOH	CN	H	C ₆ H ₁₃	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
22	1	1	F	F	S	S	COOH	CN	H	H	C ₆ H ₁₇	COOH	CN	H	H	C ₆ H ₁₇	OCH ₃	OCH ₃
23	1	1	F	F	S	S	COOH	CN	H	H	C ₁₈ H ₃₇	COOH	CN	H	H	C ₁₈ H ₃₇	OCH ₃	OCH ₃
24	1	1	F	F	S	S	COOH	CN	H	H	OCH ₃	COOH	CN	H	H	OCH ₃	OCH ₃	OCH ₃
25	1	1	F	F	S	S	COOH	CN	H	H	OCH ₃	COOH	CN	H	H	OCH ₃	OCH ₃	OCH ₃
26	1	1	F	F	S	S	COONa	CN	H	H	C ₆ H ₁₃	COONa	CN	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
27	1	1	F	F	S	S	COOH	CN	H	H	Cl	COOH	CN	H	H	Cl	OCH ₃	OCH ₃
28	1	1	F	F	S	S	COOH	CN	CH ₃	CH ₃	CH ₃	COOH	CN	CH ₃	CH ₃	CH ₃	OCH ₃	OCH ₃
29	1	1	F	F	S	S	COOH	CN	H	H	C ₆ H ₁₃	COOH	CN	H	H	C ₆ H ₁₃	OC ₂ H ₅	OC ₂ H ₅
30	1	1	F	F	S	S	COOH	CN	Cl	Cl	C ₆ H ₁₃	COOH	CN	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
31	1	1	F	F	S	S	COOH	CN	OCH ₃	OCH ₃	C ₆ H ₁₃	COOH	CN	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃

20

30

40

【0 1 3 4】

【表 2】

化合物	n8	n9	Z ₇	Z ₈	Q ₈	Q ₉	A ₃₄	A ₃₅	A ₃₆	A ₃₇	A ₃₈	A ₃₉	A ₄₀	A ₄₁	A ₄₂	A ₄₃	A ₄₄	A ₄₅
32	1	1	F	F	S	S	芳香環 (1001)	H	OCH ₃	OCH ₃	C ₆ H ₁₃	芳香環 (1001)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
33	1	1	F	F	S	S	芳香環 (1002)	H	OCH ₃	OCH ₃	C ₆ H ₁₃	芳香環 (1002)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
34	1	1	F	F	S	S	芳香環 (1003)	H	OCH ₃	OCH ₃	C ₆ H ₁₃	芳香環 (1003)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
35	1	1	F	F	S	S	芳香環 (1004)	H	OCH ₃	OCH ₃	C ₆ H ₁₃	芳香環 (1004)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
36	1	1	F	F	S	S	芳香環 (1005)	H	OCH ₃	OCH ₃	C ₆ H ₁₃	芳香環 (1005)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
37	1	1	F	F	S	S	芳香環 (1006)	H	OCH ₃	OCH ₃	C ₆ H ₁₃	芳香環 (1006)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
38	1	1	F	F	S	S	芳香環 (1007)	H	OCH ₃	OCH ₃	C ₆ H ₁₃	芳香環 (1007)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
39	1	1	F	F	S	S	芳香環 (1008)	H	OCH ₃	OCH ₃	C ₆ H ₁₃	芳香環 (1008)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
40	1	1	F	F	S	S	芳香環 (1009)	H	OCH ₃	OCH ₃	C ₆ H ₁₃	芳香環 (1009)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
41	1	1	F	F	S	S	芳香環 (1010)	H	OCH ₃	OCH ₃	C ₆ H ₁₃	芳香環 (1010)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
42	1	1	F	F	S	S	芳香環 (1011)	H	OCH ₃	OCH ₃	C ₆ H ₁₃	芳香環 (1011)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
43	1	1	F	F	S	S	芳香環 (1012)	H	OCH ₃	OCH ₃	C ₆ H ₁₃	芳香環 (1012)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
44	1	1	F	F	S	S	芳香環 (1013)	H	OCH ₃	OCH ₃	C ₆ H ₁₃	芳香環 (1013)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
45	1	1	F	F	S	S	芳香環 (1014)	H	OCH ₃	OCH ₃	C ₆ H ₁₃	芳香環 (1014)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
46	1	1	F	F	S	S	芳香環 (1015)	H	OCH ₃	OCH ₃	C ₆ H ₁₃	芳香環 (1015)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
47	1	1	F	F	S	S	芳香環 (1016)	H	OCH ₃	OCH ₃	C ₆ H ₁₃	芳香環 (1016)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
48	1	1	F	F	S	S	芳香環 (1017)	H	OCH ₃	OCH ₃	C ₆ H ₁₃	芳香環 (1017)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
49	1	1	F	F	S	S	芳香環 (1018)	H	OCH ₃	OCH ₃	C ₆ H ₁₃	芳香環 (1018)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
50	1	1	F	F	S	S	芳香環 (1019)	H	OCH ₃	OCH ₃	C ₆ H ₁₃	芳香環 (1019)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
51	1	1	F	F	S	S	芳香環 (1020)	H	OCH ₃	OCH ₃	C ₆ H ₁₃	芳香環 (1020)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
52	1	1	F	F	S	S	芳香環 (1021)	H	OCH ₃	OCH ₃	C ₆ H ₁₃	芳香環 (1021)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
53	1	1	F	F	S	S	芳香環 (1022)	H	OCH ₃	OCH ₃	C ₆ H ₁₃	芳香環 (1022)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
54	1	1	F	F	S	S	芳香環 (1023)	H	OCH ₃	OCH ₃	C ₆ H ₁₃	芳香環 (1023)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
55	1	1	F	F	S	S	芳香環 (1024)	H	OCH ₃	OCH ₃	C ₆ H ₁₃	芳香環 (1024)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
56	1	1	F	F	S	S	芳香環 (1025)	H	OCH ₃	OCH ₃	C ₆ H ₁₃	芳香環 (1025)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
57	1	1	F	F	S	S	芳香環 (1026)	H	OCH ₃	OCH ₃	C ₆ H ₁₃	芳香環 (1026)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
58	1	1	F	F	S	S	芳香環 (1027)	H	OCH ₃	OCH ₃	C ₆ H ₁₃	芳香環 (1027)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
59	1	1	F	F	S	S	芳香環 (1028)	H	OCH ₃	OCH ₃	C ₆ H ₁₃	芳香環 (1028)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
60	1	1	F	F	S	S	芳香環 (1029)	H	OCH ₃	OCH ₃	C ₆ H ₁₃	芳香環 (1029)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
61	1	1	F	F	S	S	芳香環 (1030)	H	OCH ₃	OCH ₃	C ₆ H ₁₃	芳香環 (1030)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
62	1	1	F	F	S	S	芳香環 (1031)	H	OCH ₃	OCH ₃	C ₆ H ₁₃	芳香環 (1031)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
63	1	1	F	F	S	S	芳香環 (1032)	H	OCH ₃	OCH ₃	C ₆ H ₁₃	芳香環 (1032)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
64	1	1	F	F	S	S	芳香環 (1033)	H	OCH ₃	OCH ₃	C ₆ H ₁₃	芳香環 (1033)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃

【0 1 3 5】

10

20

30

40

【表 3】

化合物	n8	n9	Z ₇	Z ₈	Q ₈	Q ₉	A ₃₄	A ₃₅	A ₃₆	A ₃₇	A ₃₈	A ₃₉	A ₄₀	A ₄₁	A ₄₂	A ₄₃	A ₄₄	A ₄₅
65	1	1	F	F	S	S	A ₃₄ とA ₃₅ で芳香環(2001)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	A ₃₉ とA ₄₀ で芳香環(2001)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
66	1	1	F	F	S	S	A ₃₄ とA ₃₅ で芳香環(2002)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	A ₃₉ とA ₄₀ で芳香環(2002)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
67	1	1	F	F	S	S	A ₃₄ とA ₃₅ で芳香環(2003)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	A ₃₉ とA ₄₀ で芳香環(2003)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
68	1	1	F	F	S	S	A ₃₄ とA ₃₅ で芳香環(2004)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	A ₃₉ とA ₄₀ で芳香環(2004)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
69	1	1	F	F	S	S	A ₃₄ とA ₃₅ で芳香環(2005)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	A ₃₉ とA ₄₀ で芳香環(2005)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
70	1	1	F	F	S	S	A ₃₄ とA ₃₅ で芳香環(2006)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	A ₃₉ とA ₄₀ で芳香環(2006)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
71	1	1	F	F	S	S	A ₃₄ とA ₃₅ で芳香環(2007)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	A ₃₉ とA ₄₀ で芳香環(2007)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
72	1	1	F	F	S	S	A ₃₄ とA ₃₅ で芳香環(2008)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	A ₃₉ とA ₄₀ で芳香環(2008)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
73	1	1	F	F	S	S	A ₃₄ とA ₃₅ で芳香環(2009)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	A ₃₉ とA ₄₀ で芳香環(2009)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
74	1	1	F	F	S	S	A ₃₄ とA ₃₅ で芳香環(2010)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	A ₃₉ とA ₄₀ で芳香環(2010)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
75	1	1	F	F	S	S	A ₃₄ とA ₃₅ で芳香環(2011)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	A ₃₉ とA ₄₀ で芳香環(2011)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
76	1	1	F	F	S	S	A ₃₄ とA ₃₅ で芳香環(2012)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	A ₃₉ とA ₄₀ で芳香環(2012)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
77	1	1	F	F	S	S	A ₃₄ とA ₃₅ で芳香環(2013)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	A ₃₉ とA ₄₀ で芳香環(2013)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
78	1	1	F	F	S	S	A ₃₄ とA ₃₅ で芳香環(2014)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	A ₃₉ とA ₄₀ で芳香環(2014)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
79	1	1	F	F	S	S	A ₃₄ とA ₃₅ で芳香環(2015)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	A ₃₉ とA ₄₀ で芳香環(2015)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
80	1	1	F	F	S	S	A ₃₄ とA ₃₅ で芳香環(2016)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	A ₃₉ とA ₄₀ で芳香環(2016)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
81	1	1	F	F	S	S	A ₃₄ とA ₃₅ で芳香環(2017)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	A ₃₉ とA ₄₀ で芳香環(2017)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
82	2	2	F	F	S	S	A ₃₄ とA ₃₅ で芳香環(2007)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	A ₃₉ とA ₄₀ で芳香環(2007)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
83	3	3	F	F	S	S	A ₃₄ とA ₃₅ で芳香環(2007)を形成		H	H	H	A ₃₉ とA ₄₀ で芳香環(2007)を形成		H	H	H	OCH ₃	OCH ₃
84	1	1	F	F	S	S	A ₃₄ とA ₃₅ で芳香環(2007)を形成		H	H	H	A ₃₉ とA ₄₀ で芳香環(2004)を形成		H	H	H	OCH ₃	OCH ₃

10

20

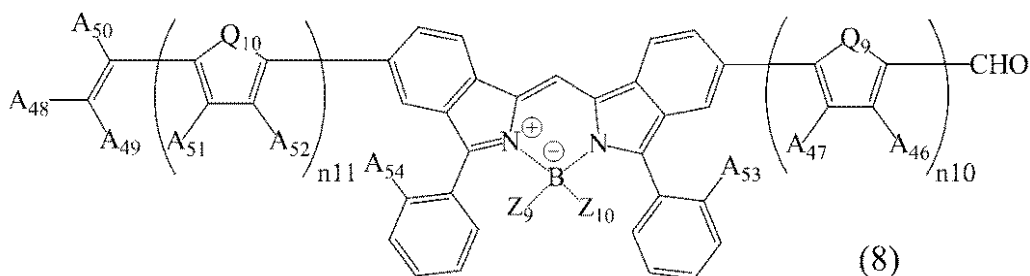
30

【0136】

以下に式(8)で表される化合物の具体例を挙げる。

【0137】

【化17】



40

50

【0138】

【表4】

化合物	n10	n11	Z ₉	Z ₁₀	Q ₉	Q ₁₀	A ₄₆	A ₄₇	A ₄₈	A ₄₉	A ₅₀	A ₅₁	A ₅₂	A ₅₃	A ₅₄
85	0	0	F	F	—	—	—	—	COOH	CN	H	—	—	H	H
86	0	0	Cl	Cl	—	—	—	—	COOH	CN	H	—	—	H	H
87	0	0	Br	Br	—	—	—	—	COOH	CN	H	—	—	H	H
88	0	0	I	I	—	—	—	—	COOH	CN	H	—	—	OCH ₃	OCH ₃
89	0	0	F	F	—	—	—	—	COOH	CN	H	—	—	OC ₂ H ₅	OC ₂ H ₅
90	0	0	F	F	—	—	—	—	COOH	COOH	H	—	—	OCH ₃	OCH ₃
91	1	1	F	F	O	O	H	H	COOH	CN	H	H	H	OCH ₃	OCH ₃
92	1	1	F	F	O	O	H	C ₆ H ₁₃	COOH	CN	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
93	1	1	F	F	O	O	C ₆ H ₁₃	H	COOH	CN	H	C ₆ H ₁₃	H	OCH ₃	OCH ₃
94	1	1	F	F	O	O	C ₆ H ₁₃	H	COOH	CN	H	C ₆ H ₁₃	H	H	H
95	1	1	F	F	O	O	H	H	COOH	CN	H	H	H	H	H
96	1	1	F	F	S	S	H	H	COOH	CN	H	H	H	OCH ₃	OCH ₃
97	1	1	F	F	Se	Se	H	H	COOH	CN	H	H	H	OCH ₃	OCH ₃
98	1	1	F	F	S	S	H	C ₆ H ₁₃	COOH	CN	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
99	2	2	F	F	S	S	H	C ₆ H ₁₃	COOH	CN	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
100	3	3	F	F	S	S	H	C ₆ H ₁₃	COOH	CN	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
101	4	4	F	F	S	S	H	C ₆ H ₁₃	COOH	CN	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
102	5	5	F	F	S	S	H	C ₆ H ₁₃	COOH	CN	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
103	1	1	F	F	S	S	H	C ₂ H ₅	COOH	CN	H	H	C ₂ H ₅	OCH ₃	OCH ₃
104	1	1	F	F	S	S	H	C ₈ H ₁₇	COOH	CN	H	H	C ₈ H ₁₇	OCH ₃	OCH ₃
105	1	1	F	F	S	S	H	C ₁₈ H ₃₇	COOH	CN	H	H	C ₁₈ H ₃₇	OCH ₃	OCH ₃
106	1	1	F	F	S	S	H	C(CH ₃) ₃	COOH	CN	H	H	O(CH ₃) ₃	OCH ₃	OCH ₃
107	1	1	F	F	S	S	H	CH(CH ₃) ₂	COOH	CN	H	H	OH(CH ₃) ₂	OCH ₃	OCH ₃
108	1	1	F	F	S	S	H	OCH ₃	COOH	CN	H	H	OCH ₃	OCH ₃	OCH ₃
109	1	1	F	F	S	S	OCH ₃	OCH ₃	COOH	CN	H	OCH ₃	OCH ₃	OCH ₃	OCH ₃
110	1	1	F	F	S	S	Cl	Cl	COOH	CN	H	Cl	Cl	OCH ₃	OCH ₃
111	1	1	F	F	S	S	CH ₃	CH ₃	COOH	CN	H	CH ₃	CH ₃	OCH ₃	OCH ₃
112	1	1	F	F	S	S	H	C ₆ H ₁₃	COOH	CN	CH ₃	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
113	1	1	F	F	S	S	H	H	COOH	CN	H	H	H	C ₆ H ₁₃	C ₆ H ₁₃
114	1	1	F	F	S	S	H	H	COOH	CN	H	H	H	C ₂ H ₅	C ₂ H ₅
115	1	1	F	F	S	S	H	C ₆ H ₁₃	COONa	CN	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃

10

20

30

【0139】

【表 5】

化合物	n10	n11	Z ₉	Z ₁₀	Q ₉	Q ₁₀	A ₄₆	A ₄₇	A ₄₈	A ₄₉	A ₅₀	A ₅₁	A ₅₂	A ₅₃	A ₅₄
116	1	1	F	F	S	S	OCH ₃	OCH ₃	芳香環 (1001)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
117	1	1	F	F	S	S	OCH ₃	OCH ₃	芳香環 (1002)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
118	1	1	F	F	S	S	OCH ₃	OCH ₃	芳香環 (1003)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
119	1	1	F	F	S	S	OCH ₃	OCH ₃	芳香環 (1004)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
120	1	1	F	F	S	S	OCH ₃	OCH ₃	芳香環 (1005)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
121	1	1	F	F	S	S	OCH ₃	OCH ₃	芳香環 (1006)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
122	1	1	F	F	S	S	OCH ₃	OCH ₃	芳香環 (1007)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
123	1	1	F	F	S	S	OCH ₃	OCH ₃	芳香環 (1008)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
124	1	1	F	F	S	S	OCH ₃	OCH ₃	芳香環 (1009)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
125	1	1	F	F	S	S	OCH ₃	OCH ₃	芳香環 (1010)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
126	1	1	F	F	S	S	OCH ₃	OCH ₃	芳香環 (1011)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
127	1	1	F	F	S	S	OCH ₃	OCH ₃	芳香環 (1012)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
128	1	1	F	F	S	S	OCH ₃	OCH ₃	芳香環 (1013)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
129	1	1	F	F	S	S	OCH ₃	OCH ₃	芳香環 (1014)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
130	1	1	F	F	S	S	OCH ₃	OCH ₃	芳香環 (1015)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
131	1	1	F	F	S	S	OCH ₃	OCH ₃	芳香環 (1016)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
132	1	1	F	F	S	S	OCH ₃	OCH ₃	芳香環 (1017)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
133	1	1	F	F	S	S	OCH ₃	OCH ₃	芳香環 (1018)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
134	1	1	F	F	S	S	OCH ₃	OCH ₃	芳香環 (1019)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
135	1	1	F	F	S	S	OCH ₃	OCH ₃	芳香環 (1020)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
136	1	1	F	F	S	S	OCH ₃	OCH ₃	芳香環 (1021)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
137	1	1	F	F	S	S	OCH ₃	OCH ₃	芳香環 (1022)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
138	1	1	F	F	S	S	OCH ₃	OCH ₃	芳香環 (1023)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
139	1	1	F	F	S	S	OCH ₃	OCH ₃	芳香環 (1024)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
140	1	1	F	F	S	S	OCH ₃	OCH ₃	芳香環 (1025)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
141	1	1	F	F	S	S	OCH ₃	OCH ₃	芳香環 (1026)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
142	1	1	F	F	S	S	OCH ₃	OCH ₃	芳香環 (1027)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
143	1	1	F	F	S	S	OCH ₃	OCH ₃	芳香環 (1028)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
144	1	1	F	F	S	S	OCH ₃	OCH ₃	芳香環 (1029)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
145	1	1	F	F	S	S	OCH ₃	OCH ₃	芳香環 (1030)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
146	1	1	F	F	S	S	OCH ₃	OCH ₃	芳香環 (1031)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
147	1	1	F	F	S	S	OCH ₃	OCH ₃	芳香環 (1032)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
148	1	1	F	F	S	S	OCH ₃	OCH ₃	芳香環 (1033)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃

10

20

30

40

【表 6】

化合物	n10	n11	Z ₀	Z ₁₀	Q ₀	Q ₁₀	A ₄₆	A ₄₇	A ₄₈	A ₄₉	A ₅₀	A ₅₁	A ₅₂	A ₅₃	A ₅₄
149	1	1	F	F	S	S	H	C ₆ H ₁₃	A ₄₈ とA ₄₉ で芳香環(2001)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
150	1	1	F	F	S	S	H	C ₆ H ₁₃	A ₄₈ とA ₄₉ で芳香環(2002)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
151	1	1	F	F	S	S	H	C ₆ H ₁₃	A ₄₈ とA ₄₉ で芳香環(2003)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
152	1	1	F	F	S	S	H	C ₆ H ₁₃	A ₄₈ とA ₄₉ で芳香環(2004)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
153	1	1	F	F	S	S	H	C ₆ H ₁₃	A ₄₈ とA ₄₉ で芳香環(2005)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
154	1	1	F	F	S	S	H	C ₆ H ₁₃	A ₄₈ とA ₄₉ で芳香環(2006)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
155	1	1	F	F	S	S	H	C ₆ H ₁₃	A ₄₈ とA ₄₉ で芳香環(2007)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
156	1	1	F	F	S	S	H	C ₆ H ₁₃	A ₄₈ とA ₄₉ で芳香環(2008)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
157	1	1	F	F	S	S	H	C ₆ H ₁₃	A ₄₈ とA ₄₉ で芳香環(2009)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
158	1	1	F	F	S	S	H	C ₆ H ₁₃	A ₄₈ とA ₄₉ で芳香環(2010)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
159	1	1	F	F	S	S	H	C ₆ H ₁₃	A ₄₈ とA ₄₉ で芳香環(2011)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
160	1	1	F	F	S	S	H	C ₆ H ₁₃	A ₄₈ とA ₄₉ で芳香環(2012)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
161	1	1	F	F	S	S	H	C ₆ H ₁₃	A ₄₈ とA ₄₉ で芳香環(2013)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
162	1	1	F	F	S	S	H	C ₆ H ₁₃	A ₄₈ とA ₄₉ で芳香環(2014)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
163	1	1	F	F	S	S	H	C ₆ H ₁₃	A ₄₈ とA ₄₉ で芳香環(2015)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
164	1	1	F	F	S	S	H	C ₆ H ₁₃	A ₄₈ とA ₄₉ で芳香環(2016)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
165	1	1	F	F	S	S	H	C ₆ H ₁₃	A ₄₈ とA ₄₉ で芳香環(2017)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
166	2	2	F	F	S	S	H	C ₆ H ₁₃	A ₄₈ とA ₄₉ で芳香環(2007)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃

10

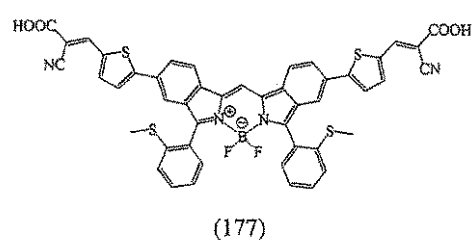
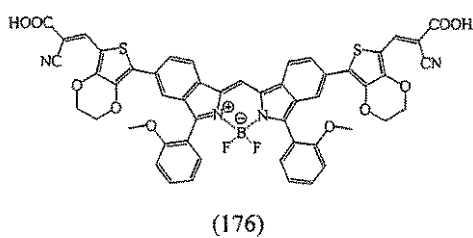
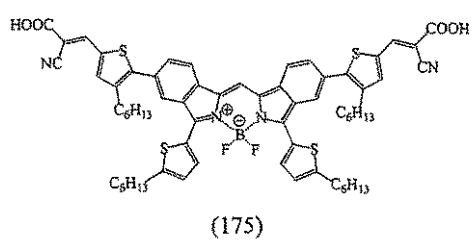
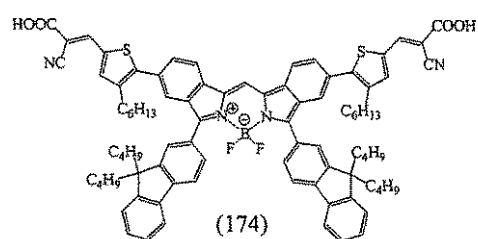
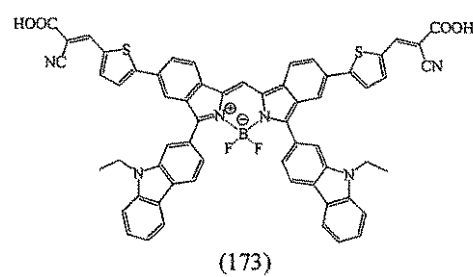
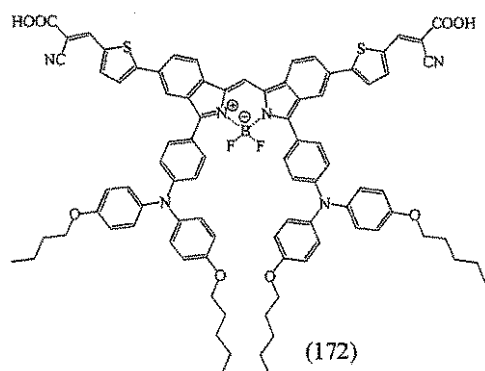
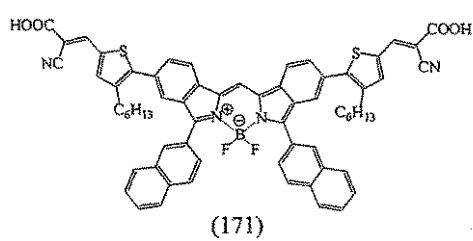
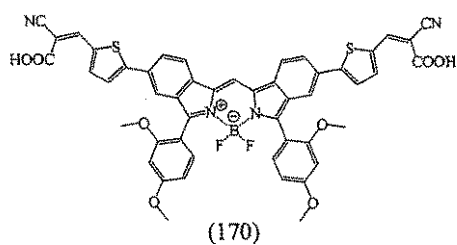
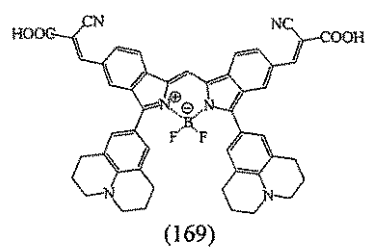
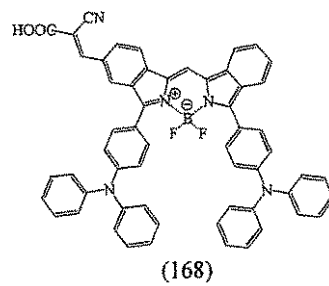
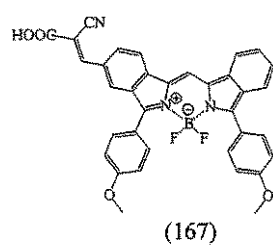
20

30

【0141】

上記式(7)、式(8)で表させない、式(1)の化合物の具体例を下記する。

【化 1 8】



【 0 1 4 2 】

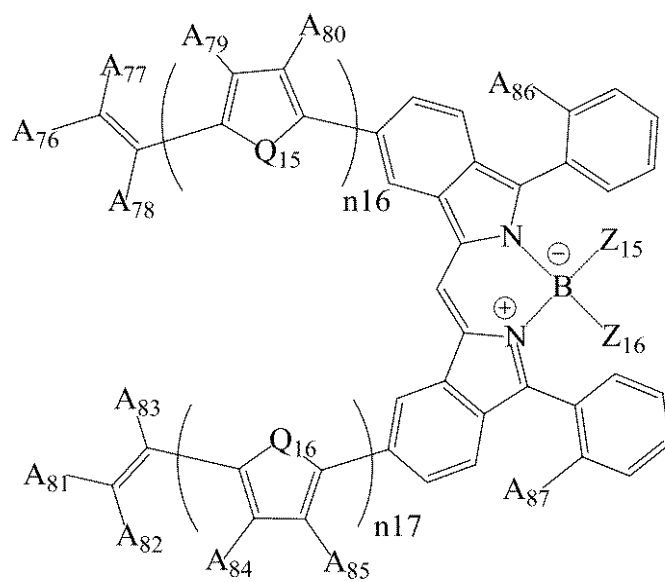
10



20

30

(11)



40

【表 7】

化合物	n16	n17	Z ₁₅	Z ₁₆	Q ₁₅	Q ₁₆	A ₇₆	A ₇₇	A ₇₈	A ₇₉	A ₈₀	A ₈₁	A ₈₂	A ₈₃	A ₈₄	A ₈₅	A ₈₆	A ₈₇
182	0	0	F	F	—	—	COOH	CN	H	—	—	COOH	CN	H	—	—	H	H
183	0	0	Cl	Cl	—	—	COOH	COOH	H	—	—	COOH	COOH	H	—	—	H	H
184	0	0	Br	Br	—	—	COOH	CN	CH ₃	—	—	COOH	CN	CH ₃	—	—	H	H
185	0	0	I	I	—	—	COOH	CN	H	—	—	COOH	CN	H	—	—	OCH ₃	OCH ₃
186	0	0	F	F	—	—	COOH	CN	H	—	—	COOH	CN	H	—	—	OC ₂ H ₅	OC ₂ H ₅
187	0	0	F	F	—	—	COOH	COOH	H	—	—	COOH	COOH	H	—	—	OCH ₃	OCH ₃
188	0	0	F	F	—	—	COOH	CN	H	—	—	COOH	CN	H	—	—	OCH ₃	OCH ₃
189	0	0	F	F	—	—	COOH	CN	H	—	—	COOH	CN	H	—	—	OCH ₃	OCH ₃
190	1	1	F	F	O	O	COOH	CN	H	H	C ₆ H ₁₃	COOH	CN	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
191	1	1	F	F	O	O	COOH	COOH	H	H	C ₆ H ₁₃	COOH	COOH	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
192	1	1	Cl	Cl	O	O	COOH	CN	H	H	C ₆ H ₁₃	COOH	CN	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
193	1	1	I	I	O	O	COOH	CN	H	H	C ₆ H ₁₃	COOH	CN	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
194	1	1	F	F	S	S	COOH	CN	H	H	C ₆ H ₁₃	COOH	CN	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
195	1	1	F	F	Se	Se	COOH	CN	H	H	C ₆ H ₁₃	COOH	CN	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
196	2	2	F	F	S	S	COOH	CN	H	H	C ₆ H ₁₃	COOH	CN	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
197	3	3	F	F	S	S	COOH	CN	H	H	C ₆ H ₁₃	COOH	CN	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
198	4	4	F	F	S	S	COOH	CN	H	H	C ₆ H ₁₃	COOH	CN	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
199	5	5	F	F	S	S	COOH	CN	H	H	C ₆ H ₁₃	COOH	CN	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
200	1	1	F	F	S	S	COOH	CN	H	H	C ₆ H ₁₃	PO(OH) ₂	CN	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
201	1	1	F	F	S	S	COOH	CN	H	C ₆ H ₁₃	H	COOH	CN	H	C ₆ H ₁₃	H	OCH ₃	OCH ₃
202	1	1	F	F	S	S	COOH	CN	H	C ₆ H ₁₃	C ₆ H ₁₃	COOH	CN	H	C ₆ H ₁₃	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
203	1	1	F	F	S	S	COOH	CN	H	H	C ₈ H ₁₇	COOH	CN	H	H	C ₈ H ₁₇	OCH ₃	OCH ₃
204	1	1	F	F	S	S	COOH	CN	H	H	C ₁₈ H ₃₇	COOH	CN	H	H	C ₁₈ H ₃₇	OCH ₃	OCH ₃
205	1	1	F	F	S	S	COOH	CN	H	H	C(CH ₃) ₃	COOH	CN	H	H	C(CH ₃) ₃	OCH ₃	OCH ₃
206	1	1	F	F	S	S	COOH	CN	H	H	CH(CH ₃) ₂	COOH	CN	H	H	CH(CH ₃) ₂	OCH ₃	OCH ₃
207	1	1	F	F	S	S	COONa	CN	H	H	C ₆ H ₁₃	COONa	CN	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
208	1	1	F	F	S	S	COOH	CN	H	H	Cl	COOH	CN	H	H	Cl	OCH ₃	OCH ₃
209	1	1	F	F	S	S	COOH	CN	CH ₃	CH ₃	CH ₃	COOH	CN	CH ₃	CH ₃	CH ₃	OCH ₃	OCH ₃
210	1	1	F	F	S	S	COOH	CN	H	H	C ₆ H ₁₃	COOH	CN	H	H	C ₆ H ₁₃	OC ₂ H ₅	OC ₂ H ₅
211	1	1	F	F	S	S	COOH	CN	Cl	Cl	C ₆ H ₁₃	COOH	CN	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
212	1	1	F	F	S	S	COOH	CN	OCH ₃	OCH ₃	C ₆ H ₁₃	COOH	CN	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃

10

20

30

【 0 1 4 5 】

【表 8】

化合物	n16	n17	Z15	Z16	Q15	Q16	A76	A77	A78	A79	A80	A81	A82	A83	A84	A85	A86	A87
213	1	1	F	F	S	S	芳香環 (1001)	H	OCH ₃	OCH ₃	C ₆ H ₁₃	芳香環 (1001)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
214	1	1	F	F	S	S	芳香環 (1002)	H	OCH ₃	OCH ₃	C ₆ H ₁₃	芳香環 (1002)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
215	1	1	F	F	S	S	芳香環 (1003)	H	OCH ₃	OCH ₃	C ₆ H ₁₃	芳香環 (1003)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
216	1	1	F	F	S	S	芳香環 (1004)	H	OCH ₃	OCH ₃	C ₆ H ₁₃	芳香環 (1004)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
217	1	1	F	F	S	S	芳香環 (1005)	H	OCH ₃	OCH ₃	C ₆ H ₁₃	芳香環 (1005)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
218	1	1	F	F	S	S	芳香環 (1006)	H	OCH ₃	OCH ₃	C ₆ H ₁₃	芳香環 (1006)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
219	1	1	F	F	S	S	芳香環 (1007)	H	OCH ₃	OCH ₃	C ₆ H ₁₃	芳香環 (1007)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
220	1	1	F	F	S	S	芳香環 (1008)	H	OCH ₃	OCH ₃	C ₆ H ₁₃	芳香環 (1008)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
221	1	1	F	F	S	S	芳香環 (1009)	H	OCH ₃	OCH ₃	C ₆ H ₁₃	芳香環 (1009)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
222	1	1	F	F	S	S	芳香環 (1010)	H	OCH ₃	OCH ₃	C ₆ H ₁₃	芳香環 (1010)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
223	1	1	F	F	S	S	芳香環 (1011)	H	OCH ₃	OCH ₃	C ₆ H ₁₃	芳香環 (1011)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
224	1	1	F	F	S	S	芳香環 (1012)	H	OCH ₃	OCH ₃	C ₆ H ₁₃	芳香環 (1012)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
225	1	1	F	F	S	S	芳香環 (1013)	H	OCH ₃	OCH ₃	C ₆ H ₁₃	芳香環 (1013)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
226	1	1	F	F	S	S	芳香環 (1014)	H	OCH ₃	OCH ₃	C ₆ H ₁₃	芳香環 (1014)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
227	1	1	F	F	S	S	芳香環 (1015)	H	OCH ₃	OCH ₃	C ₆ H ₁₃	芳香環 (1015)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
228	1	1	F	F	S	S	芳香環 (1016)	H	OCH ₃	OCH ₃	C ₆ H ₁₃	芳香環 (1016)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
229	1	1	F	F	S	S	芳香環 (1017)	H	OCH ₃	OCH ₃	C ₆ H ₁₃	芳香環 (1017)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
230	1	1	F	F	S	S	芳香環 (1018)	H	OCH ₃	OCH ₃	C ₆ H ₁₃	芳香環 (1018)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
231	1	1	F	F	S	S	芳香環 (1019)	H	OCH ₃	OCH ₃	C ₆ H ₁₃	芳香環 (1019)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
232	1	1	F	F	S	S	芳香環 (1020)	H	OCH ₃	OCH ₃	C ₆ H ₁₃	芳香環 (1020)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
233	1	1	F	F	S	S	芳香環 (1021)	H	OCH ₃	OCH ₃	C ₆ H ₁₃	芳香環 (1021)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
234	1	1	F	F	S	S	芳香環 (1022)	H	OCH ₃	OCH ₃	C ₆ H ₁₃	芳香環 (1022)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
235	1	1	F	F	S	S	芳香環 (1023)	H	OCH ₃	OCH ₃	C ₆ H ₁₃	芳香環 (1023)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
236	1	1	F	F	S	S	芳香環 (1024)	H	OCH ₃	OCH ₃	C ₆ H ₁₃	芳香環 (1024)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
237	1	1	F	F	S	S	芳香環 (1025)	H	OCH ₃	OCH ₃	C ₆ H ₁₃	芳香環 (1025)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
238	1	1	F	F	S	S	芳香環 (1026)	H	OCH ₃	OCH ₃	C ₆ H ₁₃	芳香環 (1026)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
239	1	1	F	F	S	S	芳香環 (1027)	H	OCH ₃	OCH ₃	C ₆ H ₁₃	芳香環 (1027)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
240	1	1	F	F	S	S	芳香環 (1028)	H	OCH ₃	OCH ₃	C ₆ H ₁₃	芳香環 (1028)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
241	1	1	F	F	S	S	芳香環 (1029)	H	OCH ₃	OCH ₃	C ₆ H ₁₃	芳香環 (1029)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
242	1	1	F	F	S	S	芳香環 (1030)	H	OCH ₃	OCH ₃	C ₆ H ₁₃	芳香環 (1030)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
243	1	1	F	F	S	S	芳香環 (1031)	H	OCH ₃	OCH ₃	C ₆ H ₁₃	芳香環 (1031)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
244	1	1	F	F	S	S	芳香環 (1032)	H	OCH ₃	OCH ₃	C ₆ H ₁₃	芳香環 (1032)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
245	1	1	F	F	S	S	芳香環 (1033)	H	OCH ₃	OCH ₃	C ₆ H ₁₃	芳香環 (1033)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃

【表 9】

化合物	n16	n17	Z15	Z16	Q15	Q16	A76	A77	A78	A79	A80	A81	A82	A83	A84	A85	A86	A87
246	1	1	F	F	S	S	A76とA77で芳香環(2001)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	A81とA82で芳香環(2001)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
247	1	1	F	F	S	S	A76とA77で芳香環(2002)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	A81とA82で芳香環(2002)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
248	1	1	F	F	S	S	A76とA77で芳香環(2003)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	A81とA82で芳香環(2003)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
249	1	1	F	F	S	S	A76とA77で芳香環(2004)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	A81とA82で芳香環(2004)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
250	1	1	F	F	S	S	A76とA77で芳香環(2005)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	A81とA82で芳香環(2005)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
251	1	1	F	F	S	S	A76とA77で芳香環(2006)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	A81とA82で芳香環(2006)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
252	1	1	F	F	S	S	A76とA77で芳香環(2007)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	A81とA82で芳香環(2007)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
253	1	1	F	F	S	S	A76とA77で芳香環(2008)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	A81とA82で芳香環(2008)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
254	1	1	F	F	S	S	A76とA77で芳香環(2009)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	A81とA82で芳香環(2009)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
255	1	1	F	F	S	S	A76とA77で芳香環(2010)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	A81とA82で芳香環(2010)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
256	1	1	F	F	S	S	A76とA77で芳香環(2011)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	A81とA82で芳香環(2011)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
257	1	1	F	F	S	S	A76とA77で芳香環(2012)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	A81とA82で芳香環(2012)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
258	1	1	F	F	S	S	A76とA77で芳香環(2013)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	A81とA82で芳香環(2013)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
259	1	1	F	F	S	S	A76とA77で芳香環(2014)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	A81とA82で芳香環(2014)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
260	1	1	F	F	S	S	A76とA77で芳香環(2015)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	A81とA82で芳香環(2015)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
261	1	1	F	F	S	S	A76とA77で芳香環(2016)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	A81とA82で芳香環(2016)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
262	1	1	F	F	S	S	A76とA77で芳香環(2017)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	A81とA82で芳香環(2017)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
263	2	2	F	F	S	S	A76とA77で芳香環(2018)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	A81とA82で芳香環(2018)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
264	3	3	F	F	S	S	A76とA77で芳香環(2019)を形成		H	H	H	A81とA82で芳香環(2019)を形成		H	H	H	OCH ₃	OCH ₃
265	1	1	F	F	S	S	A76とA77で芳香環(2020)を形成		H	H	H	A81とA82で芳香環(2020)を形成		H	H	H	OCH ₃	OCH ₃

10

20

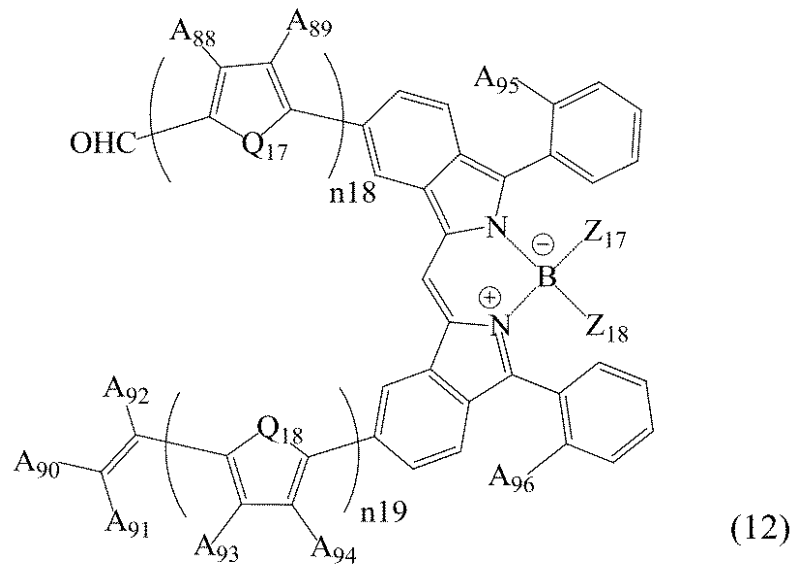
30

40

【0147】

以下に、式(12)で表される化合物の具体例を挙げる。

【化 2 1】



10

(12)

【 0 1 4 8 】

20

【表 10】

化合物	n18	n19	Z ₁₇	Z ₁₈	Q ₁₇	Q ₁₈	A ₈₈	A ₈₉	A ₉₀	A ₉₁	A ₉₂	A ₉₃	A ₉₄	A ₉₅	A ₉₆
266	0	0	F	F	—	—	—	—	COOH	CN	H	—	—	H	H
267	0	0	Cl	Cl	—	—	—	—	COOH	CN	H	—	—	H	H
268	0	0	Br	Br	—	—	—	—	COOH	CN	H	—	—	H	H
269	0	0	I	I	—	—	—	—	COOH	CN	H	—	—	OCH ₃	OCH ₃
270	0	0	F	F	—	—	—	—	COOH	CN	H	—	—	OC ₂ H ₅	OC ₂ H ₅
271	0	0	F	F	—	—	—	—	COOH	COOH	H	—	—	OCH ₃	OCH ₃
272	1	1	F	F	O	O	H	H	COOH	CN	H	H	H	OCH ₃	OCH ₃
273	1	1	F	F	O	O	H	C ₆ H ₁₃	COOH	CN	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
274	1	1	F	F	O	O	C ₆ H ₁₃	H	COOH	CN	H	C ₆ H ₁₃	H	OCH ₃	OCH ₃
275	1	1	F	F	O	O	C ₆ H ₁₃	H	COOH	CN	H	C ₆ H ₁₃	H	H	H
276	1	1	F	F	O	O	H	H	COOH	CN	H	H	H	H	H
277	1	1	F	F	S	S	H	H	COOH	CN	H	H	H	OCH ₃	OCH ₃
278	1	1	F	F	Se	Se	H	H	COOH	CN	H	H	H	OCH ₃	OCH ₃
279	1	1	F	F	S	S	H	C ₆ H ₁₃	COOH	CN	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
280	2	2	F	F	S	S	H	C ₆ H ₁₃	COOH	CN	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
281	3	3	F	F	S	S	H	C ₆ H ₁₃	COOH	CN	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
282	4	4	F	F	S	S	H	C ₆ H ₁₃	COOH	CN	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
283	5	5	F	F	S	S	H	C ₆ H ₁₃	COOH	CN	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
284	1	1	F	F	S	S	H	C ₂ H ₅	COOH	CN	H	H	C ₂ H ₅	OCH ₃	OCH ₃
285	1	1	F	F	S	S	H	C ₈ H ₁₇	COOH	CN	H	H	C ₈ H ₁₇	OCH ₃	OCH ₃
286	1	1	F	F	S	S	H	C ₁₈ H ₃₇	COOH	CN	H	H	C ₁₈ H ₃₇	OCH ₃	OCH ₃
287	1	1	F	F	S	S	H	O(CH ₂) ₆	COOH	CN	H	H	C(CH ₂) ₅	OCH ₃	OCH ₃
288	1	1	F	F	S	S	H	CH(CH ₂) ₁₂	COOH	CN	H	H	CH(CH ₂) ₁₁	OCH ₃	OCH ₃
289	1	1	F	F	S	S	H	OCH ₃	COOH	CN	H	H	OCH ₃	OCH ₃	OCH ₃
290	1	1	F	F	S	S	OCH ₃	OCH ₃	COOH	CN	H	OCH ₃	OCH ₃	OCH ₃	OCH ₃
291	1	1	F	F	S	S	Cl	Cl	COOH	CN	H	Cl	Cl	OCH ₃	OCH ₃
292	1	1	F	F	S	S	CH ₃	CH ₃	COOH	CN	H	CH ₃	CH ₃	OCH ₃	OCH ₃
293	1	1	F	F	S	S	H	C ₆ H ₁₃	COOH	CN	CH ₃	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
294	1	1	F	F	S	S	H	H	COOH	CN	H	H	H	C ₆ H ₁₃	C ₆ H ₁₃
295	1	1	F	F	S	S	H	H	COOH	CN	H	H	H	C ₂ H ₅	C ₂ H ₅
296	1	1	F	F	S	S	H	C ₆ H ₁₃	COONa	CN	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃

10

20

30

【0149】

【表 1 1】

化合物	n18	n19	Z ₁₇	Z ₁₈	Q ₁₇	Q ₁₈	A ₈₈	A ₈₉	A ₉₀	A ₉₁	A ₉₂	A ₉₃	A ₉₄	A ₉₅	A ₉₆
297	1	1	F	F	S	S	OCH ₃	OCH ₃	芳香環 (1001)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
298	1	1	F	F	S	S	OCH ₃	OCH ₃	芳香環 (1002)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
299	1	1	F	F	S	S	OCH ₃	OCH ₃	芳香環 (1003)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
300	1	1	F	F	S	S	OCH ₃	OCH ₃	芳香環 (1004)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
301	1	1	F	F	S	S	OCH ₃	OCH ₃	芳香環 (1005)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
302	1	1	F	F	S	S	OCH ₃	OCH ₃	芳香環 (1006)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
303	1	1	F	F	S	S	OCH ₃	OCH ₃	芳香環 (1007)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
304	1	1	F	F	S	S	OCH ₃	OCH ₃	芳香環 (1008)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
305	1	1	F	F	S	S	OCH ₃	OCH ₃	芳香環 (1009)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
306	1	1	F	F	S	S	OCH ₃	OCH ₃	芳香環 (1010)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
307	1	1	F	F	S	S	OCH ₃	OCH ₃	芳香環 (1011)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
308	1	1	F	F	S	S	OCH ₃	OCH ₃	芳香環 (1012)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
309	1	1	F	F	S	S	OCH ₃	OCH ₃	芳香環 (1013)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
310	1	1	F	F	S	S	OCH ₃	OCH ₃	芳香環 (1014)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
311	1	1	F	F	S	S	OCH ₃	OCH ₃	芳香環 (1015)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
312	1	1	F	F	S	S	OCH ₃	OCH ₃	芳香環 (1016)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
313	1	1	F	F	S	S	OCH ₃	OCH ₃	芳香環 (1017)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
314	1	1	F	F	S	S	OCH ₃	OCH ₃	芳香環 (1018)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
315	1	1	F	F	S	S	OCH ₃	OCH ₃	芳香環 (1019)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
316	1	1	F	F	S	S	OCH ₃	OCH ₃	芳香環 (1020)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
317	1	1	F	F	S	S	OCH ₃	OCH ₃	芳香環 (1021)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
318	1	1	F	F	S	S	OCH ₃	OCH ₃	芳香環 (1022)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
319	1	1	F	F	S	S	OCH ₃	OCH ₃	芳香環 (1023)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
320	1	1	F	F	S	S	OCH ₃	OCH ₃	芳香環 (1024)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
321	1	1	F	F	S	S	OCH ₃	OCH ₃	芳香環 (1025)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
322	1	1	F	F	S	S	OCH ₃	OCH ₃	芳香環 (1026)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
323	1	1	F	F	S	S	OCH ₃	OCH ₃	芳香環 (1027)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
324	1	1	F	F	S	S	OCH ₃	OCH ₃	芳香環 (1028)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
325	1	1	F	F	S	S	OCH ₃	OCH ₃	芳香環 (1029)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
326	1	1	F	F	S	S	OCH ₃	OCH ₃	芳香環 (1030)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
327	1	1	F	F	S	S	OCH ₃	OCH ₃	芳香環 (1031)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
328	1	1	F	F	S	S	OCH ₃	OCH ₃	芳香環 (1032)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
329	1	1	F	F	S	S	OCH ₃	OCH ₃	芳香環 (1033)	H	H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃

【表 1 2】

化合物	n18	n19	Z ₁₇	Z ₁₈	Q ₁₇	Q ₁₈	A ₈₈	A ₈₉	A ₉₀	A ₉₁	A ₉₂	A ₉₃	A ₉₄	A ₉₅	A ₉₆
330	1	1	F	F	S	S	H	C ₆ H ₁₃	A ₉₀ とA ₉₁ で芳香環 (2001)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
331	1	1	F	F	S	S	H	C ₆ H ₁₃	A ₉₀ とA ₉₁ で芳香環 (2002)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
332	1	1	F	F	S	S	H	C ₆ H ₁₃	A ₉₀ とA ₉₁ で芳香環 (2003)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
333	1	1	F	F	S	S	H	C ₆ H ₁₃	A ₉₀ とA ₉₁ で芳香環 (2004)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
334	1	1	F	F	S	S	H	C ₆ H ₁₃	A ₉₀ とA ₉₁ で芳香環 (2005)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
335	1	1	F	F	S	S	H	C ₆ H ₁₃	A ₉₀ とA ₉₁ で芳香環 (2006)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
336	1	1	F	F	S	S	H	C ₆ H ₁₃	A ₉₀ とA ₉₁ で芳香環 (2007)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
337	1	1	F	F	S	S	H	C ₆ H ₁₃	A ₉₀ とA ₉₁ で芳香環 (2008)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
338	1	1	F	F	S	S	H	C ₆ H ₁₃	A ₉₀ とA ₉₁ で芳香環 (2009)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
339	1	1	F	F	S	S	H	C ₆ H ₁₃	A ₉₀ とA ₉₁ で芳香環 (2010)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
340	1	1	F	F	S	S	H	C ₆ H ₁₃	A ₉₀ とA ₉₁ で芳香環 (2011)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
341	1	1	F	F	S	S	H	C ₆ H ₁₃	A ₉₀ とA ₉₁ で芳香環 (2012)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
342	1	1	F	F	S	S	H	C ₆ H ₁₃	A ₉₀ とA ₉₁ で芳香環 (2013)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
343	1	1	F	F	S	S	H	C ₆ H ₁₃	A ₉₀ とA ₉₁ で芳香環 (2014)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
344	1	1	F	F	S	S	H	C ₆ H ₁₃	A ₉₀ とA ₉₁ で芳香環 (2015)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
345	1	1	F	F	S	S	H	C ₆ H ₁₃	A ₉₀ とA ₉₁ で芳香環 (2016)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
346	1	1	F	F	S	S	H	C ₆ H ₁₃	A ₉₀ とA ₉₁ で芳香環 (2017)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃
347	2	2	F	F	S	S	H	C ₆ H ₁₃	A ₉₀ とA ₉₁ で芳香環 (2007)を形成		H	H	C ₆ H ₁₃	OCH ₃	OCH ₃

10

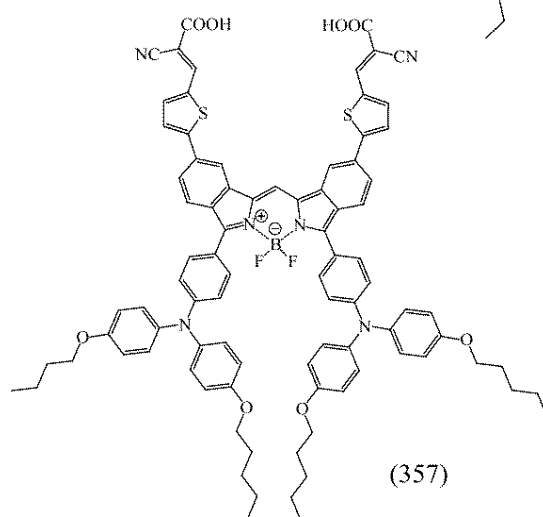
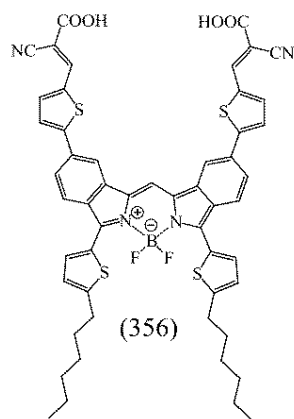
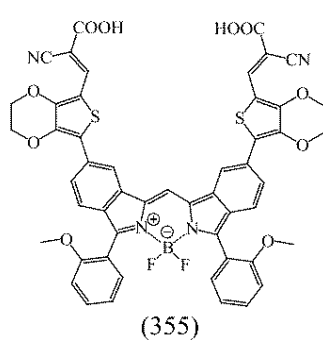
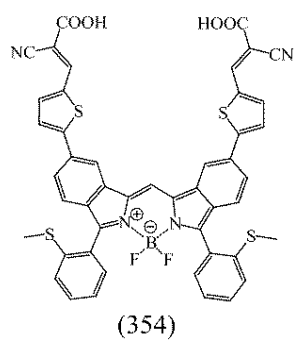
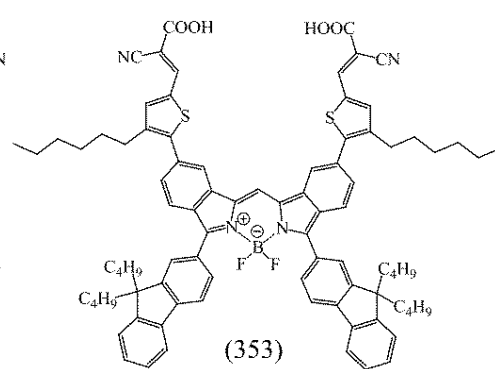
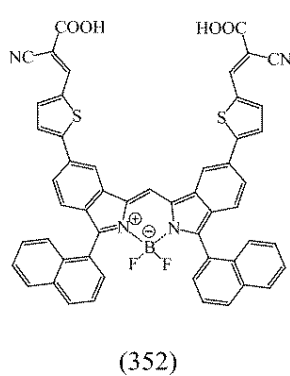
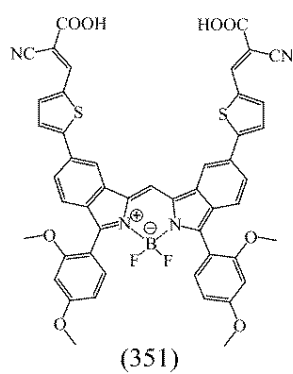
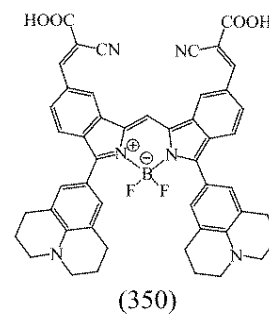
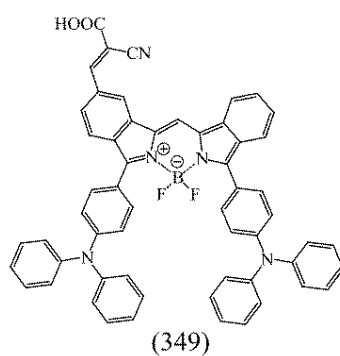
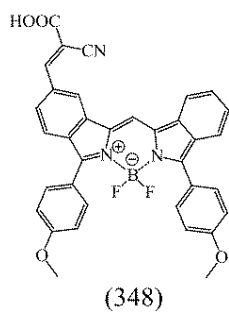
20

30

【0151】

上記式(11)、式(12)で表させない、式(1)の化合物の具体例を下記する。

【化 2 2】



【 0 1 5 2 】

10

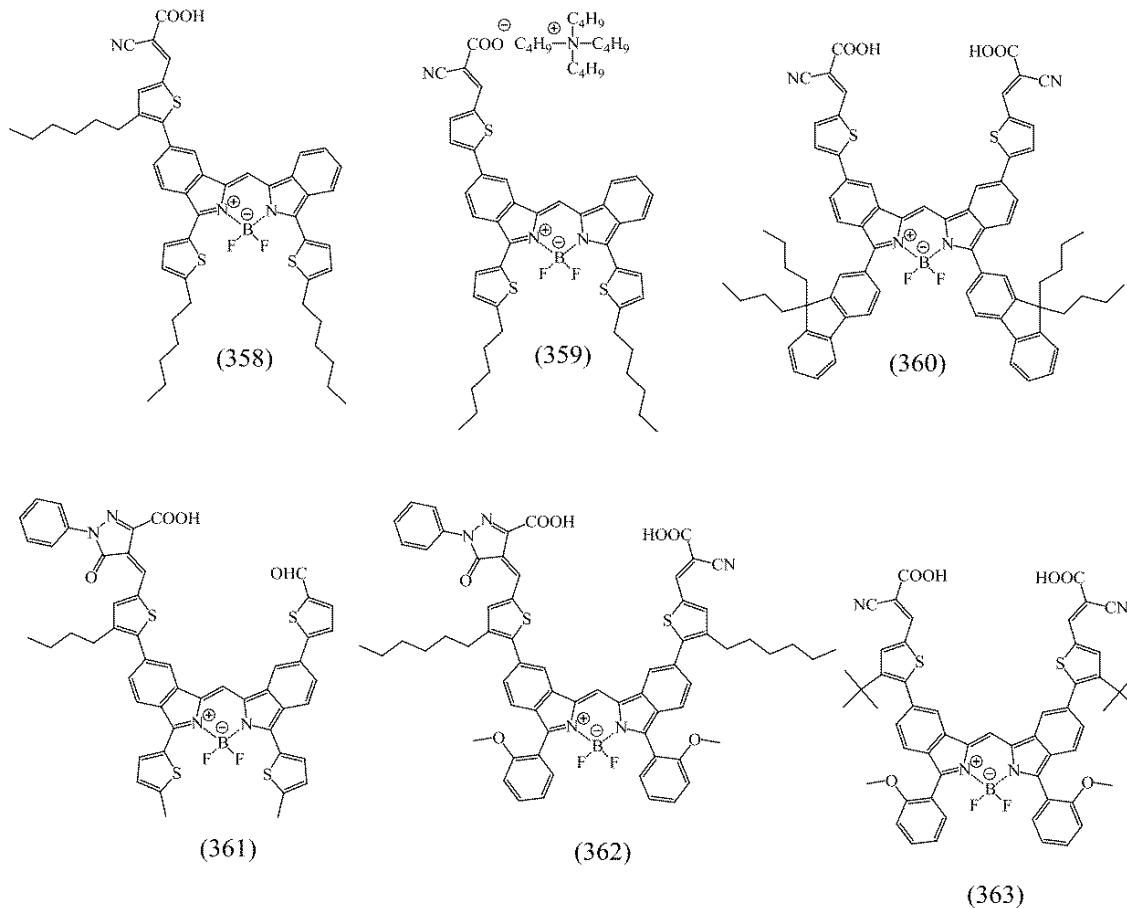
20

30

40

50

【化 2 3】



10

20

【0153】

本発明の式(1)で表される化合物を、基板上に設けられた酸化物半導体微粒子の薄膜に担持させることで、光電変換素子とすることが出来る。

30

【0154】

本発明で酸化物半導体微粒子の薄膜を設ける基板としてはその表面が導電性であるものが好ましいが、そのような基板は市場にて容易に入手可能である。例えば、ガラス又はポリエチレンテレフタレート若しくはポリエーテルスルホン等の透明性のある高分子材料等の表面にインジウム、フッ素、アンチモンをドーピングした酸化スズなどの導電性金属酸化物や銅、銀、金等の金属の薄膜を設けたものを基板として用いることが出来る。その導電性としては通常1000Ω以下であれば良く、特に100Ω以下のものが好ましい。

また、酸化物半導体の微粒子としては金属酸化物が好ましく、その具体例としてはチタン、スズ、亜鉛、タングステン、ジルコニウム、ガリウム、インジウム、イットリウム、ニオブ、タンタル、バナジウムなどの酸化物が挙げられる。これらのうちチタン、スズ、亜鉛、ニオブ、インジウム等の酸化物が好ましく、これらのうち酸化チタン、酸化亜鉛、酸化スズが最も好ましい。これらの酸化物半導体は単一で使用することも出来るが、混合したり、半導体の表面にコーティングさせて使用することも出来る。また酸化物半導体の微粒子の粒径は平均粒径として、通常1～500nmで、好ましくは1～100nmである。またこの酸化物半導体の微粒子は大きな粒径のものと小さな粒径のものを混合したり、多層にして用いることも出来る。

40

【0155】

酸化物半導体微粒子の薄膜は酸化物半導体微粒子をスプレー噴霧などで直接前記基板上に半導体微粒子の薄膜として形成する方法、基板を電極として電氣的に半導体微粒子を薄

50

膜状に析出させる方法、半導体微粒子のスラリー又は半導体アルコキサイド等の半導体微粒子の前駆体を加水分解することにより得られた微粒子を含有するペーストを基板上に塗布した後、乾燥、硬化もしくは焼成する等によって製造することが出来る。酸化物半導体を用いる電極の性能上、スラリーを用いる方法が好ましい。この方法の場合、スラリーは2次凝集している酸化物半導体微粒子を常法により分散媒中に平均1次粒子径が1～200nmになるように分散させることにより得られる。

【0156】

スラリーを分散させる分散媒としては半導体微粒子を分散させ得るものであれば何でも良く、水；エタノール等のアルコール；アセトン及びアセチルアセトン等のケトン；ヘキサン等の炭化水素等が用いられ、これらは混合して用いても良く、また水を用いることはスラリーの粘度変化を少なくするという点で好ましい。また酸化物半導体微粒子の分散状態を安定化させる目的で分散安定剤を用いることが出来る。用いる分散安定剤の例としては例えば酢酸、塩酸、硝酸等の酸、又はアセチルアセトン、アクリル酸、ポリエチレングリコール、ポリビニルアルコール等の有機溶媒等が挙げられる。

【0157】

スラリーを塗布した基板は焼成してもよく、その焼成温度は通常100℃以上、好ましくは200℃以上で、かつ上限は概ね基材の融点（軟化点）以下であり、通常上限は900℃であり、好ましくは600℃以下である。また焼成時間には特に限定はないが概ね4時間以内が好ましい。基板上の薄膜の厚みは通常1～200μmで、好ましくは1～50μmである。

【0158】

酸化物半導体微粒子の薄膜に2次処理を施してもよい。例えば、半導体と同一の金属のアルコキサイド、塩化物、硝化物、硫化物等の溶液に直接、基板ごと薄膜を浸漬させて乾燥もしくは再焼成することにより半導体微粒子の薄膜の性能を向上させることもできる。金属アルコキサイドとしてはチタンエトキサイド、チタンイソプロポキサイド、チタンtertブトキサイド、n-ジブチル-ジアセチルスズ等が挙げられ、それらのアルコール溶液が用いられる。塩化物としては例えば四塩化チタン、四塩化スズ、塩化亜鉛等が挙げられ、その水溶液が用いられる。このようにして得られた酸化物半導体薄膜は酸化物半導体の微粒子から成っている。

【0159】

次に酸化物半導体微粒子の薄膜に、本発明の化合物を担持させる方法について説明する。担持方法としては、該化合物を溶解しうる溶媒に溶解して得た溶液、又は溶解性の低い場合は、該化合物を分散せしめて得た分散液に、上記酸化物半導体微粒子の薄膜の設けられた基板を浸漬する方法が挙げられる。溶液又は分散液中の濃度は担持する本発明の化合物によって適宜決める。その溶液中に基板上に作製した半導体微粒子の薄膜を浸す。浸漬温度は概ね常温から溶媒の沸点迄であり、また浸漬時間は1分から48時間程度である。本発明の化合物を溶解又は分散させる際に使用し得る溶媒の具体例として、メタノール、エタノール、イソプロパノール、テトラヒドロフラン（THF）、アセトニトリル、ジメチルスルホキシド（DMSO）、ジメチルホルムアミド（DMF）、アセトン、n-プロパノール、n-ブタノール、tert-ブタノール、水、n-ヘキサン、クロロホルム、ジクロロメタン、及びトルエン等が挙げられ、本発明の化合物の溶解度等に合わせて、単独または複数を混合して用いることができる。溶液中の化合物濃度は通常 $1 \times 10^{-6} \text{ M} \sim 1 \text{ M}$ が良く、好ましくは $1 \times 10^{-5} \text{ M} \sim 1 \times 10^{-1} \text{ M}$ である。浸漬が終わったあと、風乾又は必要により加熱して溶媒を除去する。この様にして本発明の化合物で増感された酸化物半導体微粒子の薄膜を有した本発明の光電変換素子が得られる。

【0160】

担持する本発明化合物は1種類でもよいし、数種類混合してもよい。また、混合する場合は本発明の化合物同士でも良いし、本発明の化合物に本発明の化合物以外の化合物（色素）を混合しても良い。特に吸収波長の異なる色素と混合することにより、幅広い吸収波長を利用することが出来、変換効率の高い太陽電池が得られる。混合し得る本発明の化合

物以外の色素には特に制限は無いが、非特許文献2に示されているルテニウム錯体やその4級アンモニウム塩化合物、フタロシアニン、ポルフィリン、無金属のフタロシアニン、ポルフィリン、シアニン、メロシアニン、オキソノール、トリフェニルメタン系、特許文献2に示されるアクリル酸系色素、キサンテン系、アゾ系、アンスラキノン系、ペリレン系等の色素が挙げられ、ルテニウム錯体、メロシアニン、アクリル酸系色素等であることが好ましく、ルテニウム錯体、アクリル酸系色素であることが更に好ましく、シアノ酢酸系色素であることが特に好ましい。本発明の化合物を含む複数の化合物を用いる場合は、それぞれを半導体微粒子の薄膜に順次担持させても、混合溶解して担持させても良い。

【0161】

本発明の化合物を含む複数の化合物を混合して用いる場合の比率に特に限定は無く、最適化条件が適宜選択されるが、一般には等モルずつの混合から、1つの化合物又は色素につき、10%モル程度以上使用するのが好ましい。2種以上の化合物を溶解又は分散した溶液を用いて、酸化半導体微粒子の薄膜に吸着させる場合、溶液中の化合物の合計の濃度は1種類のみ担持する場合と同様でよい。複数の化合物を混合して使用する場合にも前記の溶媒が使用可能であり、単一の溶媒を用いてもよいし、化合物毎に異なった溶媒を用いてもよい。

【0162】

酸化半導体微粒子の薄膜に本発明の化合物を担持する際、化合物同士の会合を防ぐために、包摂化合物の共存下、担持することが効果的である。ここで包摂化合物としてはコール酸等のステロイド系化合物、クラウンエーテル、シクロデキストリン、カリックスアレ、ポリエチレンオキサイドなどが挙げられるが、好ましいものの具体例としてはデオキシコール酸、デヒドロデオキシコール酸、ケノデオキシコール酸、ウルソデオキシコール酸、リトコール酸、ヒオデオキシコール酸、コール酸メチルエステル、コール酸ナトリウム等のコール酸類、ポリエチレンオキサイド等が挙げられる。又、化合物及び色素を担持させた後、4-tert-ブチルピリジン等のアミン化合物、酢酸、プロピオン酸等の酸で半導体微粒子の薄膜を処理しても良い。処理の方法は例えば、アミン化合物又は酸を添加したエタノール溶液に化合物及び色素を担持した半導体微粒子の薄膜の設けられた基板を浸す方法等が採られる。

【0163】

上記酸化半導体微粒子の薄膜に、本発明の化合物を担持させた光電変換素子を一方の電極とし、対極、レドックス電解質又は正孔輸送材料又はp型半導体等を用いて太陽電池を製造することができる。レドックス電解質、正孔輸送材料、p型半導体等の形態としては、液体、凝固体（ゲル及びゲル状）、固体などそれ自体公知のものが使用出来る。液状のものとしてはレドックス電解質、溶融塩、正孔輸送材料、p型半導体等をそれぞれ溶媒に溶解させたものや常温溶融塩などが、凝固体（ゲル及びゲル状）の場合は、これらをポリマーマトリックスや低分子ゲル化剤等に含ませたもの等がそれぞれ挙げられる。固体のものとしてはレドックス電解質、溶融塩、正孔輸送材料、p型半導体等を用いることができる。正孔輸送材料としてはアミン誘導体やポリアセチレン、ポリアニリン、ポリチオフェンなどの導電性高分子、トリフェニレン系化合物などが挙げられる。また、p型半導体としてはCuI、CuSCN等が挙げられる。対極としては導電性を持っており、レドックス電解質の還元反応を触媒的に作用するものが好ましい。例えばガラス又は高分子フィルムに白金、カーボン、ロジウム、ルテニウム等を蒸着したり、導電性微粒子を塗り付けたものが用い得る。

【0164】

上記太陽電池に用いるレドックス電解質としてはハロゲンイオンを対イオンとするハロゲン化合物及びハロゲン分子からなるハロゲン酸化還元系電解質、フェロシアン酸塩-フェリシアン酸塩やフェロセナーフェリシニウムイオン、コバルト錯体などの金属錯体等の金属酸化還元系電解質、アルキルチオール-アルキルジスルフィド、ビオロゲン色素、ヒドロキノーン-キノン等の有機酸化還元系電解質等をあげることができるが、ハロゲン酸化還元系電解質が好ましい。ハロゲン化合物-ハロゲン分子からなるハロゲン酸化還元系電

解質におけるハロゲン分子としては、例えばヨウ素分子や臭素分子等があげられ、ヨウ素分子が好ましい。又、ハロゲンイオンを対イオンとするハロゲン化合物としては、例えば LiBr 、 NaBr 、 KBr 、 LiI 、 NaI 、 KI 、 CsI 、 CaI_2 、 MgI_2 、 CuI 等のハロゲン化金属塩あるいはテトラアルキルアンモニウムヨーダイド、イミダゾリウムヨーダイド、ピリジニウムヨーダイドなどのハロゲンの有機4級アンモニウム塩等があげられるが、ヨウ素イオンを対イオンとする塩類が好ましい。また、上記ヨウ素イオンの他にビス(トリフルオロメタンスルホニル)イミドイオン、ジシアノイミドイオン等のイミドイオンを対イオンとする電解質を用いることも好ましい。

【0165】

また、レドックス電解質はそれを含む溶液の形で構成されている場合、その溶媒には電気化学的に不活性なものが用いられる。例えばアセトニトリル、プロピレンカーボネート、エチレンカーボネート、3-メトキシプロピオニトリル、メトキシアセトニトリル、エチレングリコール、プロピレングリコール、ジエチレングリコール、トリエチレングリコール、 γ -ブチロラクトン、ジメトキシエタン、ジエチルカーボネート、ジエチルエーテル、ジエチルカーボネート、ジメチルカーボネート、1,2-ジメトキシエタン、ジメチルホルムアミド、ジメチルスルホキサイド、1,3-ジオキサラン、メチルフォルメート、2-メチルテトラヒドロフラン、3-メチルーオキサゾリジン-2-オン、スルフォラン、テトラヒドロフラン、水等が挙げられ、これらの中でも、特に、アセトニトリル、プロピレンカーボネート、エチレンカーボネート、3-メトキシプロピオニトリル、メトキシアセトニトリル、エチレングリコール、3-メチルーオキサゾリジン-2-オン、 γ -ブチロラクトン等が好ましい。これらは単独もしくは2種以上組み合わせて用いても良い。ゲル状電解質の場合は、オリゴマー及びポリマー等のマトリックスに電解質あるいは電解質溶液を含有させたものや、非特許文献4に記載の低分子ゲル化剤等と同じく電解質あるいは電解質溶液を含有させたもの等が挙げられる。レドックス電解質の濃度は通常0.01~99質量%で、好ましくは0.1~90質量%程度である。

【0166】

上記太陽電池は、基板上の酸化物半導体微粒子の薄膜に化合物を担持した光電変換素子の電極に、それを挟むように対極を配置する。その間にレドックス電解質を含んだ溶液を充填することにより得られる。

【実施例】

【0167】

以下に実施例に基づき、本発明を更に詳細に説明するが、本発明がこれらの実施例に限定されるものではない。実施例中、部は特に指定しない限り質量部を表す。溶液の濃度を表すMは、 mol/L を表す。又、化合物番号は前記の具体例における化合物番号である。最大吸収波長はUV-3100PC型分光光度計(島津製作所製)により、核磁気共鳴はBruker Avance 500型核磁気共鳴装置(500MHz)を用い、内部標準としてテトラメチルシランを用い測定した。また、質量分析はJEOL JMS-700型質量分析計(日本電子株式会社製)を、元素分析はCE-440F分析計(Exeter Analytical, Inc. 製)をそれぞれ用いて測定した。

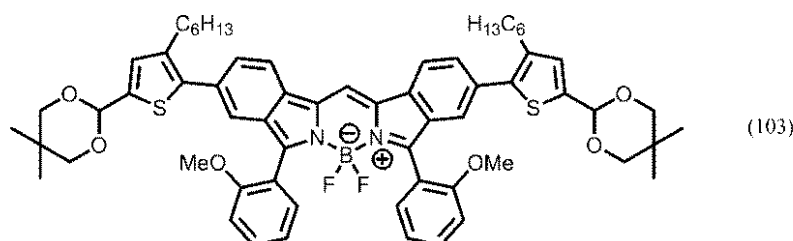
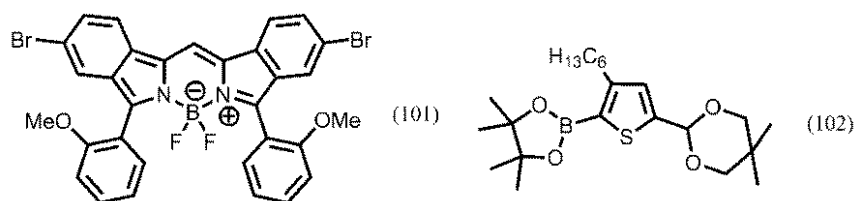
【0168】

実施例1(式(5a)で表される化合物の合成)
(工程1)

THF 75mlと水10mlの混合溶媒に、下記式(101)で表される化合物を1.5023g(2.2689mmol)、下記式(102)で表される化合物を2.7828g(6.8139mmol)及び K_2CO_3 を6.2805g(45.4351mmol)溶解させた。得られた溶液に $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ を0.80g(0.69mmol)加えて、 N_2 雰囲気下で一晩還流させた。反応終了後、THFを減圧留去し、150mlの CH_2Cl_2 で抽出した。得られた有機相を150mlの水で洗浄した後、 Na_2SO_4 で乾燥させた。溶媒を減圧留去後、得られた残渣をカラムクロマトグラフィー(順相 SiO_2 、 CH_2Cl_2 /ヘキサン=1/1(体積比))で精製し、下記式(103)で表される化合物0.9843g(収率41%)を濃青色固体として得た。

【0169】

【化24】



10

【0170】

20

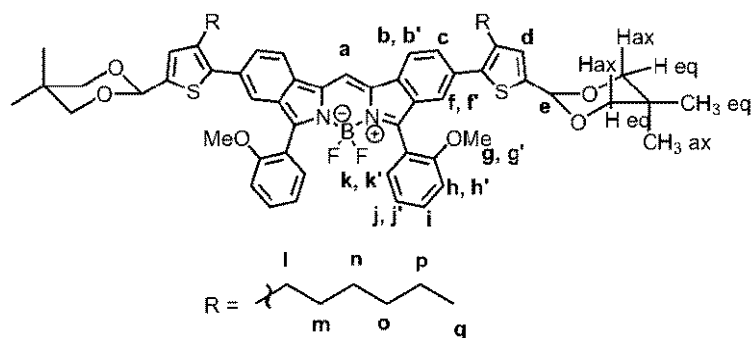
式(103)で表される化合物の核磁気共鳴及び質量分析の測定値は以下のとおりであった。

^1H NMR (500 MHz, CDCl_3) δ (ppm): 0.79 (s, 6H, CH_3_{ax}), 0.83 (t, 6H, $J = 6.92$ Hz, H_q), 1.18-1.22 (m, 12H, $\text{H}_{\text{n-p}}$), 1.28 (s, 6H, CH_3_{eq}), 1.47-1.53 (m, 4H, H_m), 2.56 (t, 4H, $J = 7.82$ Hz, H_l), 3.64 (d, 4H, $J = 10.95$ Hz, H_{ax}), 3.69 (s, 3H, H_g), 3.75 (d, 4H, $J = 9.75$ Hz, H_{eq}), 3.76 (s, 3H, $\text{H}_{g'}$), 5.59 (s, 2H, H_e), 6.95 (d, 1H, $J = 8.35$ Hz, H_h), 6.99 (s, 2H, H_d), 6.99-7.01 (m, 2H, $\text{H}_{k'}$, H_j), 7.06 (t, 1H, $J = 7.33$ Hz, H_j), 7.36 (s, 1H, H_f), 7.37 (s, 1H, $\text{H}_{f'}$), 7.38 - 7.42 (m, 2H, H_i), 7.49 (d, 2H, $J = 8.35$ Hz, H_c), 7.54 (d, 1H, $J = 7.55$ Hz, H_k), 7.66 (d, 1H, $J = 7.30$ Hz, H_k), 7.81 and 7.82 (s, 1H, H_a), 7.89 (d, 2H, $J = 8.45$ Hz, H_b), 7.90 (d, 1H, $J = 8.55$ Hz, H_b).

FAB MS : m/z 1064 $[\text{M}+\text{H}]^+$

【0171】

【化25】



40

【0172】

(工程2)

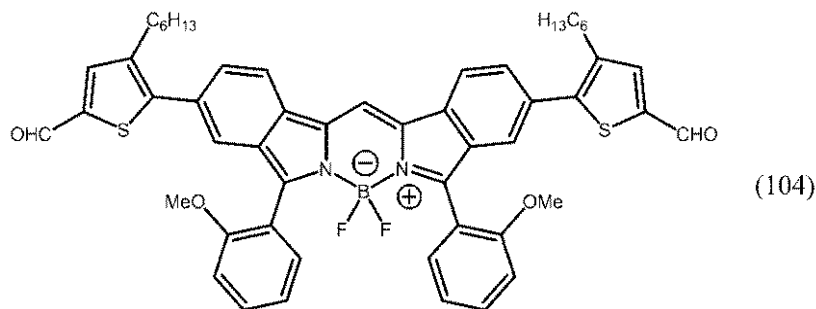
THF 120 ml に、工程1で得られた式(103)で表される化合物を 980.0 mg (0.9200 mmol) 溶解させた。得られた溶液に、水 20 ml にパラトルエンスルホン酸を 270.4 mg (1.4215 mmol) 溶解させた溶液を加え、遮光下 4

50

0℃で一晩撹拌した。反応終了後、THFを減圧留去し、100mlのCH₂Cl₂で抽出した。得られた有機相を100mlの水で2回洗浄した後、Na₂SO₄で乾燥させた。溶媒を減圧留去後、再沈殿（CH₂Cl₂：ヘキサン＝10ml：80ml）を施し、下記式（104）で表される化合物723.0mgを濃青色固体として得た。

【0173】

【化26】



10

【0174】

式（104）で表される化合物の核磁気共鳴、質量分析、元素分析及び紫外可視吸収スペクトルの測定値は以下のとおりであった。

¹H NMR (500 MHz, CDCl₃) δ (ppm) 0.84 (t, 6H, J = 6.95 Hz H_q), 1.21-1.25 (m, 12H, H_{n-p}), 1.57-1.64 (m, 4H, H_m), 2.66 (t, 4H, J = 7.80 Hz, H_l), 3.72 (s, 3H, H_g), 3.80 (s, 3H, H_{g'}), 6.99 (d, 1H, J = 8.65 Hz, H_h), 7.03 (t, 1H, J = 8.00 Hz, H_j), 7.08 (t, 1H, J = 7.15 Hz, H_{j'}), 7.41 - 7.43 (m, 3H, H_{h'}, H_i), 7.45 (s, 1H, H_f), 7.46 (s, 1H, H_{f'}), 7.52 - 7.54 (m, 2H, H_c), 7.56 (d, 1H, J = 7.65 Hz, H_k), 7.63 (s, 2H, H_d), 7.69 (d, 1H, J = 7.55 Hz, H_{k'}), 7.88 and 7.89 (s, 1H, H_a), 7.96 (d, 1H, J = 8.45 Hz, H_b), 7.97 (d, 1H, J = 8.05 Hz, H_{b'}), 9.84 (s, 2H, H_e).

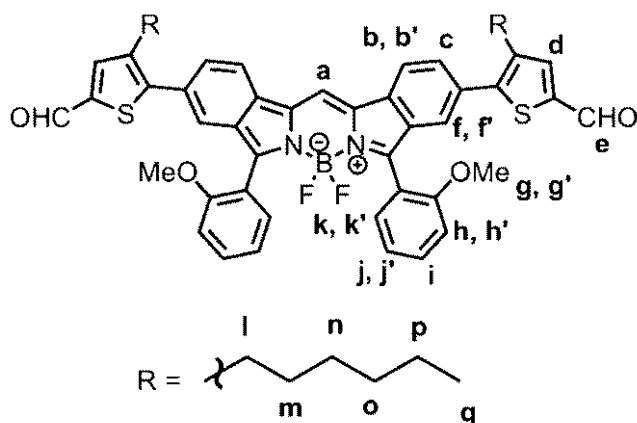
FAB MS: m/z 892 [M⁺]

Elemental analysis: Calc. For C₅₃H₅₁BF₂N₄O₆S₂: C, 71.29; H, 5.76; N, 3.14, Found: C, 71.39; H, 6.12; N, 2.98

UV/Vis; λ_{max} = 641 nm (ε = 1.38 × 10⁵ M⁻¹ cm⁻¹)

【0175】

【化27】



40

【0176】

(工程3)

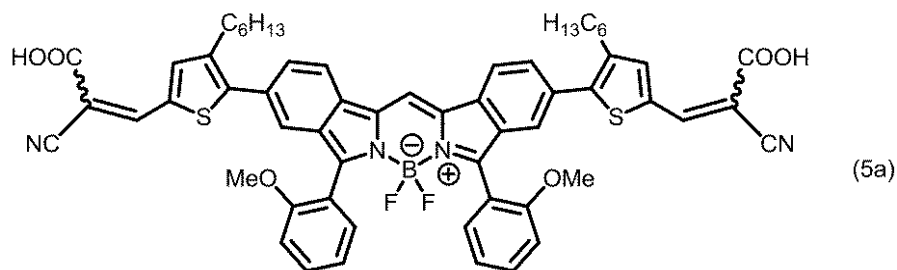
N₂ 雰囲気下、THF 14ml に、工程2で得られた式（104）で表される化合物を

50

500.9 mg (0.5610 mmol) 溶解させた。得られた溶液にピペリジンを0.28 ml (2.83 mmol) 加えて1時間還流させ、室温に戻した後、THF 14 ml にシアノ酢酸を241.5 mg (2.8392 mmol) とピペリジンを0.28 ml (2.83 mmol) 溶解後1時間還流させて得られた溶液を加え、混合液を5時間還流させた。反応終了後、100 ml の水でクエンチし、100 ml の CH_2Cl_2 で分液処理を行った。得られた有機相Aを100 ml の飽和食塩水及び100 ml の水で洗浄した。析出した緑色固体を濾別し、分液処理 (1% 塩酸水 : CH_2Cl_2 = 100 ml : 400 ml) を行った後、 CH_2Cl_2 相を減圧留去して下記式 (5a) で表される本発明の化合物13を246.2 mg (収率43%) 得た。

【0177】

【化28】



【0178】

化合物13の核磁気共鳴、質量分析、元素分析及び紫外可視吸収スペクトルの測定値は以下のとおりであった。

FAB MS: m/z 1026 [M^+]

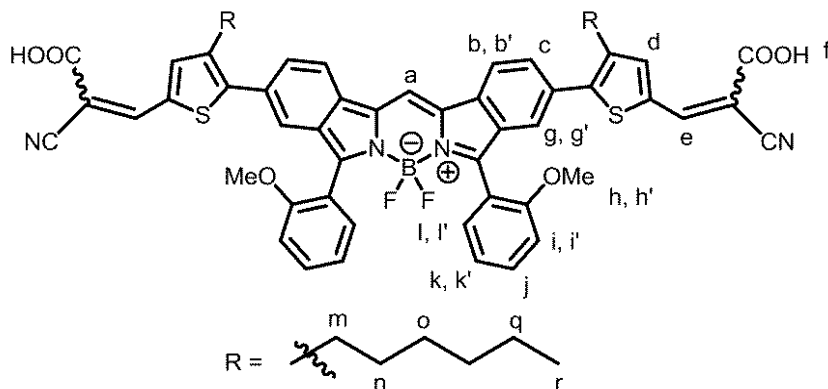
^1H NMR (500MHz, DMSO-d_6) δ (ppm): 0.79 (t, 6H, $J = 6.77$ Hz, H_r), 1.14 - 1.18 (m, 12H, H_{o-q}), 1.50-1.58 (m, 4H, H_n), 2.61 - 2.65 (m, 4H, H_m), 3.69 (s, 3H, H_h), 3.76 (s, 3H, H_h), 7.03 (t, 1H, $J = 7.53$ Hz, H_k), 7.10 (t, 1H, $J = 7.47$ Hz, H_k), 7.20 (d, 1H, $J = 8.30$ Hz, H_i), 7.24 (d, 1H, $J = 8.45$ Hz, H_i), 7.37 (s, 1H, H_g), 7.39 (s, 1H, H_g), 7.45 (d, 1H, $J = 7.50$ Hz, H_l), 7.51 (t, 3H, $J = 8.18$ Hz, H_{j-l}), 7.71 (d, 2H, $J = 8.45$ Hz, H_c), 7.94 (s, 2H, H_d), 8.30 (d, 1H, $J = 8.30$ Hz, H_b), 8.31 (d, 1H, $J = 8.20$ Hz, H_b), 8.43 (s, 2H, H_e), 8.84 and 8.85 (s, 1H, H_a), 13.75 (broad signal, 2H, H_f)

Elemental analysis: Calc. For $\text{C}_{59}\text{H}_{53}\text{BF}_2\text{N}_4\text{O}_6\text{S}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$: C, 67.81; H, 5.30; N, 5.36, Found: C, 67.70; H, 5.15; N, 5.34

UV/Vis; $\lambda_{\text{max}} = 647$ nm ($\epsilon = 1.58 \times 10^5 \text{ M}^{-1} \text{ cm}^{-1}$)

【0179】

【化29】



【0180】

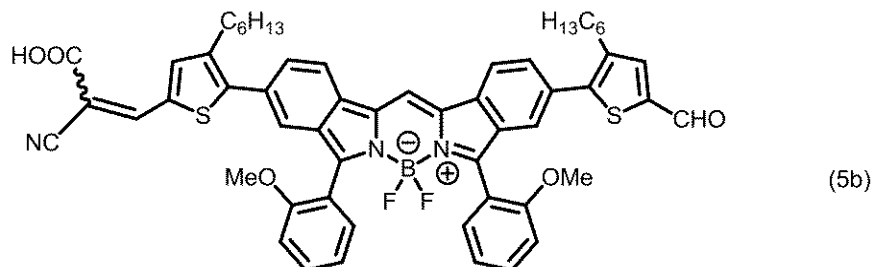
実施例 2 (式 (5b) で表される化合物 98 の合成)

(工程 4)

工程 3 の途中で得られた有機相 A を Na_2SO_4 で乾燥させて溶媒を留去した後、カラムクロマトグラフィー (順相 SiO_2 、 $\text{CH}_2\text{Cl}_2 \rightarrow \text{CH}_2\text{Cl}_2 / \text{EtOH} = 9 / 1$ (体積比)) で精製をおこない下記式 (5b) で表される本発明の化合物 98 を 213.0 mg (収率 40%) 緑色固体として得た。

【0181】

【化 30】



10

【0182】

化合物 98 の核磁気共鳴、質量分析、元素分析及び紫外可視吸収スペクトルの測定値は以下のとおりであった。

20

^1H NMR (500MHz, DMSO-d_6) δ (ppm) : 0.79 (t, 6H, $J = 6.90\text{Hz}$, H_{r} , H_{h}), 1.14 - 1.19 (m, 12H, $\text{H}_{\text{o-q}}$, E-G), 1.48 - 1.58 (m, 4H, H_{n} , D), 2.61 - 2.65 (m, 4H, H_{m} , C), 3.69 (s, 3H, $\text{H}_{\text{h,x}}$), 3.75 and 3.76 (s, 3H, H_{h} , x), 7.03 (t, 1H, $J = 7.45\text{ Hz}$, H_{k} , A), 7.10 (t, 1H, $J = 7.53\text{ Hz}$, H_{k} , A), 7.19 (dd, 1H, $J = 2.73$ and 8.47 Hz , H_{i} , y), 7.23 (dd, 1H, $J = 2.25$ and 8.55 Hz , H_{i} , y), 7.35 - 7.38 (m, 2H, H_{g} , w), 7.44 (t, 1H, $J = 6.05\text{ Hz}$, H_{j} , z), 7.51 (t, 3H, $J = 8.15\text{ Hz}$, H_{j} , z , B , l), 7.68 - 7.72 (m, 2H, H_{c} , t), 7.90 (s, 1H, H_{u}), 7.97 and 7.98 (d, 1H, H_{d}), 8.29 (d, 1H, $J = 8.35\text{ Hz}$, $\text{H}_{\text{b,s}}$), 8.30 (d, 1H, $J = 8.45\text{ Hz}$, H_{b} , s), 8.38 (s, 1H, H_{e}), 8.83 and 8.84 (s, 1H, H_{a}), 9.87 (s, 1H, H_{v}), 13.77 (broad signal, 1H, H_{f})

FAB MS: m/z 959 [M^+]

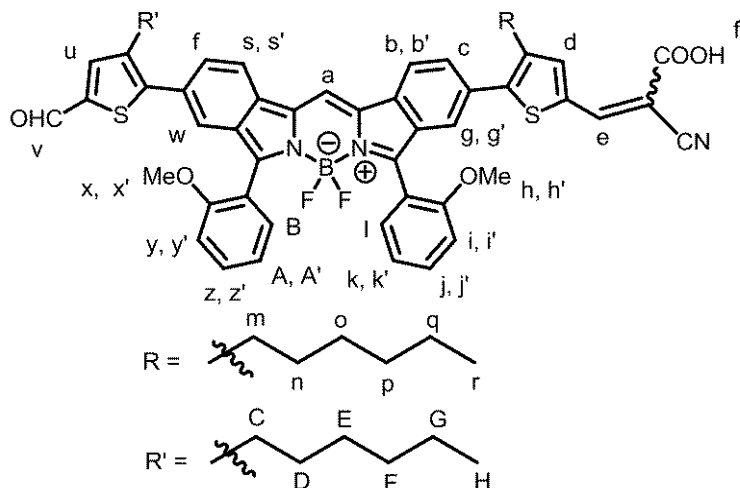
30

Elemental analysis: Calc. For $\text{C}_{56}\text{H}_{52}\text{BF}_2\text{N}_3\text{O}_5\text{S}_2 \cdot 0.5\text{H}_2\text{O}$: C, 69.41; H, 5.51; N, 4.34, Found : C, 69.08; H, 5.43; N, 4.33

UV/Vis; $\lambda_{\text{max}} = 644\text{ nm}$ ($\epsilon = 1.44 \times 10^5\text{ M}^{-1}\text{ cm}^{-1}$)

【0183】

【化 31】



【0184】

50

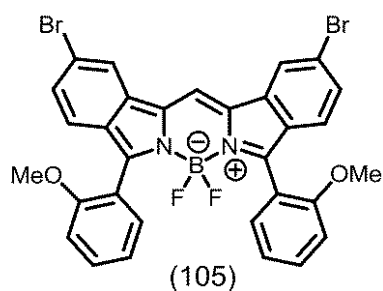
実施例 3 (式 (5c) で表される化合物 194 の合成)
(工程 5)

5-ブロモ-2-ヒドロキシアセトフェノン原料として、非特許文献 3 に記載の方法に準じて合成した下記式 (105) で表される化合物を 424.5 mg (0.4267 mmol) と前記式 (102) で表される化合物を 655.1 mg (1.604 mmol) を THF 32.7 ml に溶解させ、これに 2 M の K_2CO_3 水溶液を 6.5 ml 加えた後、凍結脱気を行った。再度凍結させて $Pd(PPh_3)_4$ を 0.16 g (0.1385 mmol) 加えた後に N_2 置換を行い、溶液を室温に戻して N_2 雰囲気下、70℃で一晩還流させた。反応終了後、20 ml の水でクエンチし、100 ml の酢酸エチルで分液処理をした。有機層を 230 ml の水で洗浄し、 Na_2SO_4 で乾燥させた。溶媒を減圧留去後、得られた残渣をカラムクロマトグラフィー (順相 SiO_2 、 CH_2Cl_2 /ヘキサン = 3/2 (体積比)) で精製することにより、下記式 (106) で表される化合物 445.5 mg (収率 65%) を深緑色固体として得た。

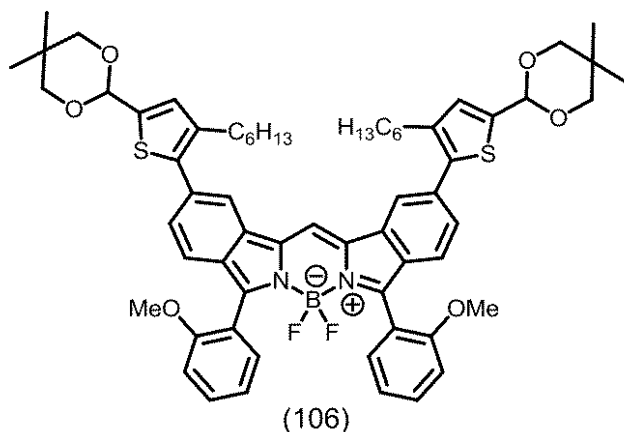
10

【0185】

【化 3 2】



20



30

【0186】

式 (106) で表される化合物の核磁気共鳴の測定値は以下のとおりであった。

^1H NMR (500 MHz, $DMSO-d_6$) δ (ppm) 0.76 (t, 6H, $J = 6.93$ Hz, H_p), 1.19 (s, 12H, H_s), 1.20-1.25 (m, 12H, H_{m-o}), 1.57 (quint, 4H, $J = 7.32$ Hz, H_l), 2.70 (t, 4H, $J = 7.70$ Hz, H_k), 3.67 (s, 8H, H_r), 3.69 (s, 3H, H_i), 3.75 (s, 3H, H_i), 5.70 (s, 2H, H_q), 7.02 (td, 1H, $J = 7.50, 0.63$ Hz, H_f), 7.08 (td, 1H, $J = 7.58, 0.73$ Hz, H_f), 7.10 (s, 2H, H_j), 7.19 (d, 1H, $J = 8.35$ Hz, H_h), 7.22 (d, 1H, $J = 8.10$ Hz, H_h), 7.31 (d, 1H, $J = 8.50$ Hz, H_d), 7.31 (d, 1H, $J = 8.35$ Hz, H_d), 7.37 (d, 2H, $J = 8.45$ Hz, H_c), 7.41 (d, 1H, $J = 7.50$ Hz, H_e), 7.48 (dd, 1H, $J = 1.73$ and 7.90 Hz, H_e), 7.50 (td, 2H, $J = 7.98, 1.42$ Hz, H_g), 8.20 (s, 2H, H_b), 8.78 (s, 1H, H_a)

40

【0187】

10

THF 54 ml に、工程 5 で得られた式 (106) で表される化合物を 445.4 mg (0.4261 mmol) 溶解させた。得られた溶液に、水 8.5 ml にパラトルエンスルホン酸一水和物を 121.6 mg (0.6392 mmol) 溶解させた溶液を加え、40℃に加熱した。反応終了後、50 ml の酢酸エチルで分液処理をした。有機層を 150 ml の水で洗浄し、Na₂SO₄ で乾燥させた。溶媒を減圧留去後、得られた残渣をカラムクロマトグラフィー (順相 SiO₂、CH₂Cl₂／ヘキサン＝2／1 (体積比)) で精製することにより、下記式 (107) で表される化合物 282.5 mg (収率 61%) を深緑色固体として得た。

20

(107)

30

40

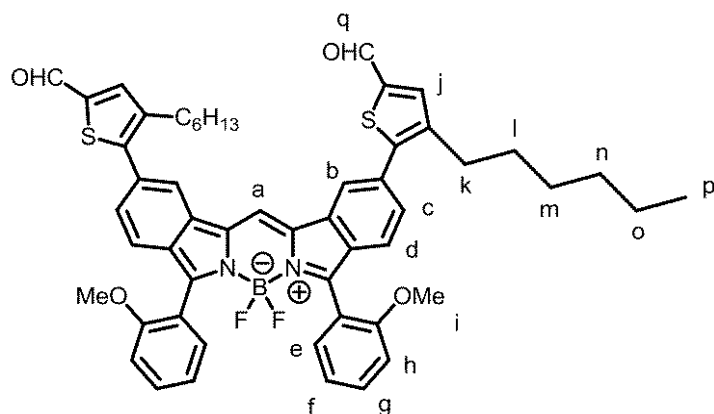
式 (107) で表される化合物の核磁気共鳴の測定値は以下のとおりであった。

¹H NMR (500MHz, DMSO-d₆) δ (ppm) : 0.76 (t, 6H, J = 7.00 Hz, H_p), 1.19-1.27 (m, 12H, H_{m-o}), 1.62 (quint, 4H, J = 7.37 Hz, H_l), 2.78 (t, 4H, J = 7.67 Hz, H_k), 3.70 (s, 3H, H_i), 3.75 (s, 3H, H_i), 7.03 (t, 1H, J = 7.78 Hz, H_f), 7.09 (t, 1H, J = 7.47 Hz, H_f), 7.20 (d, 1H, J = 8.20 Hz, H_h), 7.23 (1H, J = 8.05 Hz, H_h), 7.38-7.45 (m, 5H, H_{c,d,e}), 7.49 (d, 1H, J = 8.25 Hz, H_e), 7.51 (app. t, 2H, J = 8.00 Hz, H_g), 8.06 (s, 2H, H_j), 8.29 and 8.30 (s, 1H, H_{b,b}), 8.84 (s, 1H, H_a), 8.85 (s, 1H, H_a), 9.93 (s, 2H, H_q)

50

【0191】

【化35】



10

【0192】

(工程7)

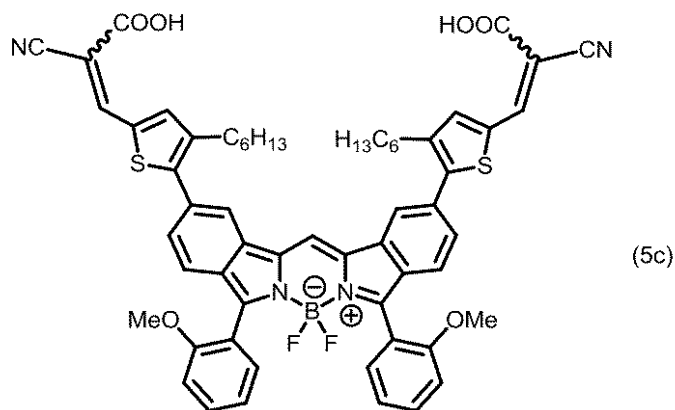
工程6で得られた式(107)で表される化合物265 (8 mg (0.2976 mmol)) を30 mlの二口ナス型フラスコに入れ、凍結乾燥を3回施した後、THF 7.84 mlを加えて溶解させ、更にピペリジン0.2 ml (2.025 mmol)を加えて1時間還流させた。シアノ酢酸158.9 mg (1.868 mmol)を別の二口ナス型フラスコに入れ、凍結脱気を3回施した後、THF 7.84 mlを加えて溶解させ、更にピペリジン0.2 ml (2.025 mmol)を加えて1時間還流させた。両方の二口ナス型フラスコを室温に戻した後、シアノ酢酸とピペリジンを溶解させたTHF溶液を、式(107)で表される化合物とピペリジンを溶解させたTHF溶液に加え、二日間還流させた。反応終了後、CH₂Cl₂を30 ml加えて析出した固体を桐山ろ過により回収した。回収した固体に、100 mlの1 N塩酸と100 mlのCH₂Cl₂で分液処理を行った後、有機相をNa₂SO₄で乾燥させた。溶媒を減圧留去後、再沈殿(CH₂Cl₂:ヘキサン=10 ml:100 ml)を施し、下記式(5c)で表される本発明の化合物194を209.2 mg (収率65%) 深緑色固体として得た。

20

30

【0193】

【化36】



(5c)

40

【0194】

化合物194の核磁気共鳴、質量分析、元素分析及び紫外可視吸収スペクトルの測定値は以下のとおりであった。

¹H NMR (500 MHz, DMSO-d₆) δ (ppm) 0.76 (t, 6H, J = 6.95 Hz, H_p), 1.19-1.26 (m,

50

12H, H_{m-o}), 1.60 (quint, 4H, $J = 7.28$ Hz, H_l), 2.78 (t, 6H, $J = 7.50$ Hz, H_k), 3.70 (s, 3H, H_i), 3.76 (s, 3H, H_i), 7.03 (t, 1H, $J = 7.80$ Hz, H_f), 7.10 (t, 1H, $J = 7.53$ Hz, H_f), 7.20 (d, 1H, $J = 8.35$ Hz, H_h), 7.24 (d, 1H, $J = 8.30$ Hz, H_h), 7.38-7.46 (m, 5H, $H_{c,e,d}$), 7.49 (app. d, 1H, $J = 7.25$ Hz, H_e), 7.51 (t, 1H, $J = 8.00$ Hz, H_g), 8.03 (s, 2H, H_j), 8.32 (s, 1H, H_b) and 8.33 (s, 1H, H_b), 8.51 (s, 2H, H_q), 8.91 (s, 1H, H_a), 13.8 (s, 2H, H_r)

FAB MASS: m/z 1026 $[M]^+$

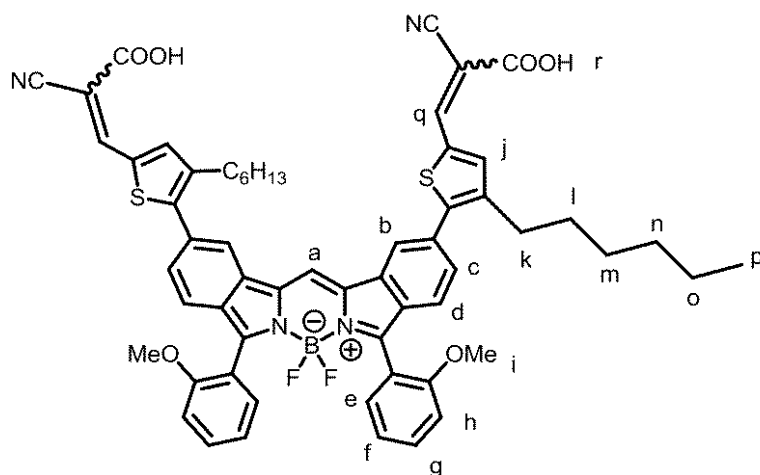
Elemental Analysis: Calc. For $C_{59}H_{53}BF_2N_4O_6S_2 \cdot 0.5H_2O$: C, 68.40; H, 5.25; N, 5.41, Found: C, 68.24; H, 5.08; N, 5.33.

UV/Vis (THF); $\lambda_{max} = 660$ nm ($\epsilon = 1.09 \times 10^5$ M $^{-1}$ cm $^{-1}$)

10

【0195】

【化37】



20

【0196】

実施例4～10 実施例1及び2で得られた化合物5a、5b及び5cを、それぞれ 1.6×10^{-4} Mになるようにアセトンに溶解した。なお、各々の化合物溶液に包摂化合物としてデオキシコール酸を10 mM添加し、担持溶液とした。これらの担持溶液中に多孔質基板（透明導電性ガラス電極上に多孔質酸化チタンを500℃にて1時間焼結した半導体の薄膜）を室温（20℃）で12時間浸漬し、浸漬終了後、多孔質基板を担持液から取り出し、アセトンで洗浄、乾燥させ、化合物担持した半導体微粒子の薄膜からなる本発明の光電変換素子を得た。このようにして得られた、化合物担持の半導体微粒子の薄膜を設けた基板の薄膜側と、白金でスパッタした導電性ガラスのスパッタ面とを対峙させて、20 μ mの空隙を設けて固定し、その空隙に電解質を含む溶液（電解液）を注入し、空隙を満たした。電解液としては、電解液A（ヨウ素0.1 M、ヨウ化リチウム0.1 M、ジメチルプロピルイミダゾリウムアイオダイド0.1 M、 α -ブチルピリジン1 Mをメトキシプロピオニトリルに溶解）、電解液B（ヨウ素0.05 M、テトラプロピルアンモニウムアイオダイド0.5 Mをアセトニトリル：エチレンカーボネート＝4：6の比率で作製した混合溶媒に溶解）、電解液C（ヨウ素0.1 M、ヨウ化リチウム0.1 M、ジメチルプロピルイミダゾリウムアイオダイド0.6 Mをメトキシプロピオニトリルに溶解）の3種を用いた。

30

40

【0197】

測定する電池の大きさは実効部分を0.25 cm ^{2} とした。光源は500 Wキセノンランプを用いて、AM（大気圏通過空気量）1.5フィルターを通して100 mW/cm ^{2} とした。短絡電流、開放電圧、変換効率はソーラシュミレータWXS-155S-10、AM1.5G（株）ワコム電創製）を用いて測定した。

【0198】

発電性能評価結果を下記表7に示す。

50

【0199】

【表13】

実施例	化合物番号	電解液	開放電圧(V)	短絡電流(mA/cm ²)	変換効率(%)
4	13	A	0.60	7.8	2.9
5	13	B	0.59	14.5	4.6
6	13	C	0.53	19.2	5.2
7	98	A	0.62	4.7	2.1
8	98	B	0.58	13.0	4.4
9	98	C	0.53	17.2	5.4
10	194	C	0.54	19.0	6

10

【0200】

表13の結果より、本発明の化合物によって増感された光電変換素子を用いることにより、異なる種類の電解質を用いても、疑似太陽光を効果的に電気に変換できることがわかった。

【産業上の利用可能性】

【0201】

特定の構造を有する本発明の化合物を増感色素として用いることにより、変換効率が高く安定性の高い色素増感太陽電池を提供することが出来る。

20

フロントページの続き

(72)発明者 金子 昌厳

東京都北区志茂3-31-12 日本化薬株式会社 研究企画部内

審査官 高橋 直子

(56)参考文献 特開2010-184880 (JP, A)

特開2012-199541 (JP, A)

国際公開第2002/011213 (WO, A1)

特開平11-255774 (JP, A)

米国特許第06005113 (US, A)

ORGANIC LETTERS, 2011年, Vol.13, No.17, 4574-4577

PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS:PCCP, 2007年, VOL.9, NO.38, 5199-5201

(58)調査した分野(Int.Cl., DB名)

C09B 57/10

H01L 31/04

H01M 14/00

CAPLUS/REGISTRY (STN)