(12) 特許協力条約に基づいて公開された国際出願

(19) 世界知的所有権機関
国際事務局

(43) 国際公開日
2023年3月23日(23.03.2023)

WIPO | PCT

(10) 国際公開番号
WO 2023/042483 A1

(51) 国際特許分類:
C12N 1/20 (2006.01)
C07D 403/12 (2006.01)
C07D 417/12 (2006.01)
C07D 417/14 (2006.01)
C09B 29/09 (2006.01)
C09B 50/00 (2006.01)
C09B 50/02 (2006.01)
C09B 67/20 (2006.01)
C12N 1/00 (2006.01)
C12Q 1/04 (2006.01)
G01N 21/77 (2006.01)
G01N 21/78 (2006.01)
G01N 21/80 (2006.01)

(21) 国際出願番号： PCT/JP2022/020556

(22) 国際出願日： 2022年5月17日(17.05.2022)

(25) 国際出願の言語： 日本語

(26) 国際公開の言語： 日本語

(30) 優先権データ：
特願 2021-150540 2021年9月15日(15.09.2021) JP
特願 2021-209863 2021年12月23日(23.12.2021) JP

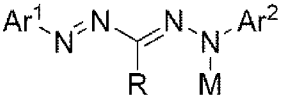
(71) 出願人: 富士フイルム株式会社 (**FUJIFILM CORPORATION**) [JP/JP]; 〒1068620 東京都港区西麻布２丁目２６番３０号 Tokyo (JP).

(72) 発明者: 植田 幹 (**UEDA, Motoki**); 〒4188666 静岡県富士宮市大中里２００番地 富士フイルム株式会社内 Shizuoka (JP). 石綿 靖宏 (**ISHIWATA, Yasuhiro**); 〒4188666 静岡県富士宮市大中里２００番地 富士フイルム株式会社内 Shizuoka (JP). 神保 良弘 (**JIMBO, Yoshihiro**); 〒4188666 静岡県富士宮市大中里２００番地 富士フイルム株式会社内 Shizuoka (JP).

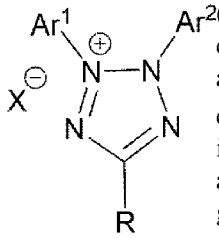
(74) 代理人: 弁理士法人太陽国際特許事務所 (**TAIYO, NAKAJIMA & KATO**); 〒1600022 東京都新宿区新宿４丁目３番１７号 Tokyo (JP).

(54) **Title:** COMPOUND, TAUTOMER THEREOF, SALT THEREOF WITH ALKALI METAL OR ORGANIC BASE, COMPOSITION FOR REVERSIBLE COLOR DEVELOPMENT, DYED MATERIAL, COMPOSITION FOR CULTURE MEDIUM FOR DETECTING ENTEROHEMORRHAGIC ESCHERICHIA COLI, AND METHOD FOR DETECTING ENTEROHEMORRHAGIC ESCHERICHIA COLI IN SPECIMEN

(54) 発明の名称： 化合物、その互変異性体、又はそれらのアルカリ金属若しくは有機塩基との塩、発消色組成物、染色物、腸管出血性大腸菌検出用培地用組成物、及び、検体中の腸管出血性大腸菌の検出方法



(1)



(2)

(57) **Abstract:** A composition for a culture medium for detecting enterohemorrhagic Escherichia coli, said composition containing a compound represented by formula (1) or a compound represented by formula (2) and water. [In formulae (1) and (2): Ar^1 and Ar^2 independently represent a heterocyclic group; and R represents an alkyl group, an aromatic ring group, a heterocyclic group, an acyl group or a carbamoyl group. In formula (1), M represents a hydrogen atom, said hydrogen atom optionally dissociating to form a salt with an alkali metal or an organic base. In formula (2), X^- represents a chloride ion, a bromide ion, an iodide ion, an acetate ion or a phosphate ion.]

(57) 要約：式（１）で表される化合物又は式（２）で表される化合物と、水と、を含む腸管出血性大腸菌検出用培地用組成物〔式（１）及び式（２）中、Ar^1及びAr^2は、それぞれ独立に、ヘテロ環基を表し、Ｒは、アルキル基、芳香環基、ヘテロ環基、アシル基又はカルバモイル基を表す。式（１）中、Ｍは、水素原子を表し、上記水素原子が解離してアルカリ金属又は有機塩基により塩を形成していてもよい。式（２）中、X^-は、塩化物イオン、臭化物イオン、ヨウ化物イオン、酢酸イオン又はリン酸イオンを表す。〕。

WO 2023/042483 A1

［続葉有］

(81) 指定国(表示のない限り、全ての種類の国内保護が可能): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IQ, IR, IS, IT, JM, JO, JP, KE, KG, KH, KN, KP, KR, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, WS, ZA, ZM, ZW.

(84) 指定国(表示のない限り、全ての種類の広域保護が可能): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), ユーラシア (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), ヨーロッパ (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

添付公開書類:

一　国際調査報告（条約第21条(3)）

明　細　書

発明の名称 ：

化合物、その互変異性体、又はそれらのアルカリ金属若しくは有機塩基との塩、発消色組成物、染色物、腸管出血性大腸菌検出用培地用組成物、及び、検体中の腸管出血性大腸菌の検出方法

技術分野

[0001] 本開示は、化合物、その互変異性体又はそれらのアルカリ金属若しくは有機塩基との塩、発消色組成物、染色物、腸管出血性大腸菌検出用培地用組成物、及び、検体中の腸管出血性大腸菌の検出方法に関する。

背景技術

[0002] 従来、ホルマザン色素が知られている。例えば、特開平１１－１９３２６６号公報には、ハロゲン化銀写真感光材料として用いられる、ベンゼン環がアゾ基に直結した構造を有するホルマザン色素化合物が開示されている。

発明の概要

発明が解決しようとする課題

[0003] 一般に、色素化合物には、少量の使用でも良好に発色することが求められる。特開平１１－１９３２６６号公報に記載されたホルマザン色素化合物は、発色性が良好ではないため、色素としての機能を十分に発揮させるためには、多くの使用量を必要とする。

[0004] ところで、腸管出血性大腸菌検出用培地には、検体に含まれる腸管出血性大腸菌の視認性を高めるため、色素化合物が添加されている。通常、腸管出血性大腸菌の存在を確認するための検体には、複数の細菌が混在しているため、腸管出血性大腸菌のみを正確に検出することは容易ではない。そのため、腸管出血性大腸菌以外の細菌の集落（所謂、コロニー）を着色することで、腸管出血性大腸菌の視認性を高めることが行われている。

代表的な腸管出血性大腸菌のひとつであるＯ１５７は、糖の１種であるＤ－ソルビットを分解しない細菌であり、例えば、Ｏ１５７の検出に通常使用

されているＣＴ－ＳＭＡＣ培地を用いて培養すると、中心部が褐色で周辺部が透明又は半透明の集落を作る。一方、Ｄ－ソルビットを分解する細菌（例：大腸菌、腸内細菌、肺炎桿菌等）の集落は、Ｄ－ソルビットの分解により産生される有機酸の影響でｐＨが低下することで、培地に含まれるｐＨ指示薬のニュートラルレッドがピンク色を呈するため、Ｏ１５７の集落との識別が可能となる。しかし、このような方法では、腸管出血性大腸菌以外の細菌が多量に存在する場合には、腸管出血性大腸菌の判別が難しい。このため、近年では、腸管出血性大腸菌検出用培地に酸化還元色素を添加し、腸管出血性大腸菌を着色することで、腸管出血性大腸菌の視認性を高める試みがなされているものの、酸化還元色素を多く添加する必要があるという問題がある。

[0005] 本開示の一実施形態が解決しようとする課題は、色素化合物の使用が少量でも腸管出血性大腸菌を良好に視認させることができる腸管出血性大腸菌検出用培地用組成物を提供することである。

本開示の他の実施形態が解決しようとする課題は、上記腸管出血性大腸菌検出用培地用組成物を用いた、検体中の腸管出血性大腸菌の検出方法を提供することである。

また、本開示の他の実施形態が解決しようとする課題は、新規な化合物、その互変異性体、又はそれらのアルカリ金属若しくは有機塩基との塩を提供することである。

また、本開示の他の実施形態が解決しようとする課題は、上記化合物等を含む発消色組成物及び染色物を提供することである。

課題を解決するための手段

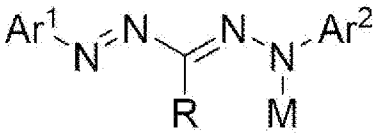
[0006] 上記課題を解決するための手段には、以下の態様が含まれる。

＜１＞ 下記式（１）で表される化合物又は下記式（２）で表される化合物と、

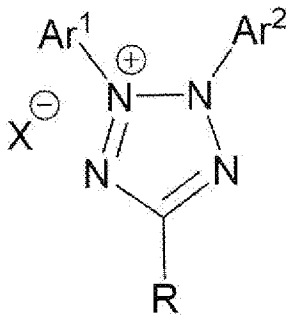
水と、

を含む腸管出血性大腸菌検出用培地用組成物。

[0007] [化1]



(1)



(2)

[0008] 式（１）及び式（２）中、Ａｒ[1]及びＡｒ[2]は、それぞれ独立に、ヘテロ環基を表し、Ｒは、アルキル基、芳香環基、ヘテロ環基、アシル基又はカルバモイル基を表す。式（１）中、Ｍは、水素原子を表し、上記水素原子が解離してアルカリ金属又は有機塩基により塩を形成していてもよい。式（２）中、X^-は、塩化物イオン、臭化物イオン、ヨウ化物イオン、酢酸イオン又はリン酸イオンを表す。

[0009] ＜２＞ 上記式（１）で表される化合物は、橙色、赤色、紫色又は青色のいずれかの色を呈する、＜１＞に記載の腸管出血性大腸菌検出用培地用組成物。

＜３＞ ｐＨ指示薬を更に含む、＜１＞又は＜２＞に記載の腸管出血性大腸菌検出用培地用組成物。

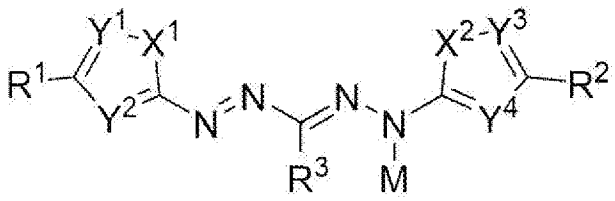
＜４＞ 上記ｐＨ指示薬は、酸性条件において、黄色、橙色、赤色、紫色又は緑色のいずれかの色を呈する、＜３＞に記載の腸管出血性大腸菌検出用培地用組成物。

[0010] ＜５＞ ＜１＞～＜４＞のいずれか１つに記載の腸管出血性大腸菌検出用培地用組成物を含む培地で検体を培養し、腸管出血性大腸菌の有無を検出することを含む、検体中の腸管出血性大腸菌の検出方法。

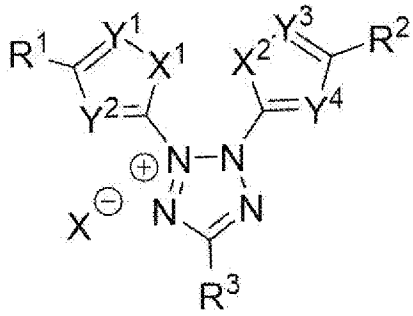
[0011] ＜６＞ 下記式（３）で表される化合物、その互変異性体、それらのアルカリ金属若しくは有機塩基との塩、又は、下記式（４）で表される化合物若

しくはその互変異性体。

[0012] [化2]



(3)



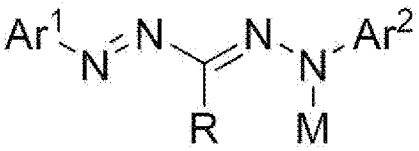
(4)

[0013] 式（３）及び式（４）中、X^1及びX^2は、それぞれ独立に、－Ｓ－、－Ｏ－又は－Ｎ（－Z^1）－を表し、Z^1は、水素原子、アルキル基、芳香環基又はヘテロ環基を表す。Y^1、Y^2、Y^3及びY^4は、それぞれ独立に、＝Ｃ（－Z^2）－又は＝Ｎ－を表し、Z^2は、水素原子、アルキル基、芳香環基、ヘテロ環基、アシル基、カルバモイル基又はアルキルチオ基を表す。R^1及びR^2は、それぞれ独立に、アルキル基、芳香環基、ヘテロ環基、カルバモイル基、アルキルチオ基又はアリールチオ基を表し、Y^2が＝Ｃ（－Z^2）－を表す場合、R^1とZ^2とが結合して環を形成していてもよく、Y^4が＝Ｃ（－Z^2）－を表す場合、R^2とZ^2とが結合して環を形成していてもよい。R^3は、アルキル基、芳香環基、ヘテロ環基、アシル基又はカルバモイル基を表す。式（３）中、Ｍは、水素原子を表し、上記水素原子が解離してアルカリ金属又は有機塩基により塩を形成していてもよい。式（４）中、X^-は、塩化物イオン、臭化物イオン、ヨウ化物イオン、酢酸イオン又はリン酸イオンを表す。

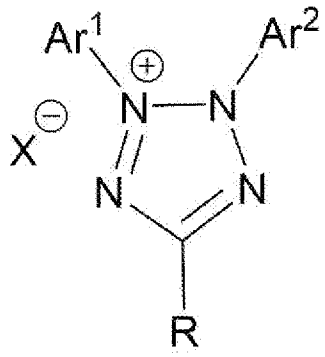
[0014] ＜７＞ 下記式（５）で表される化合物、その互変異性体、それらのアルカリ金属若しくは有機塩基との塩、又は、下記式（６）で表される化合物若しくはその互変異性体。

[0015]

[化3]



(5)

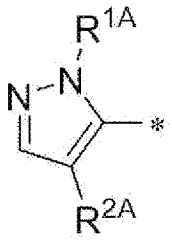


(6)

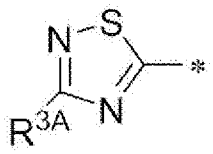
[0016] 式（５）及び式（６）中、Ａｒ[1]及びＡｒ[2]は、それぞれ独立に、下記式（Ａ－１）で表される基、下記式（Ａ－２）で表される基、下記式（Ａ－３）で表される基、下記式（Ａ－４）で表される基又は下記式（Ａ－５）で表される基を表し、Ｒは、アルキル基、芳香環基、ヘテロ環基、アシル基又はカルバモイル基を表す。式（５）中、Ｍは、水素原子を表し、上記水素原子が解離してアルカリ金属又は有機塩基により塩を形成していてもよい。式（６）中、Ｘ[－]は、塩化物イオン、臭化物イオン、ヨウ化物イオン、酢酸イオン又はリン酸イオンを表す。

[0017]

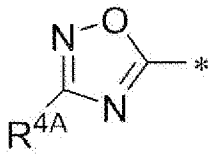
[化4]



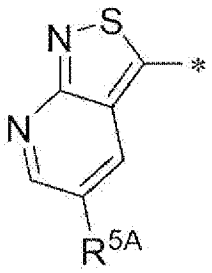
(A-1)



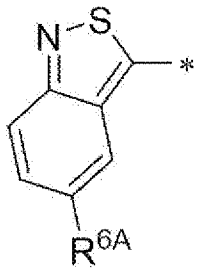
(A-2)



(A-3)



(A-4)



(A-5)

[0018] 式（Ａ－１）中、Ｒ^{1A}は、水素原子、アルキル基、フェニル基、アシル基又はアルコキシカルボニル基を表し、Ｒ^{2A}は、水素原子、シアノ基、カルバモイル基又はアルキルスルホニル基を表す。式（Ａ－２）中、Ｒ^{3A}は、アルキル基、アルコキシ基、アルキルチオ基又は芳香環基を表す。式（Ａ－３）中、Ｒ^{4A}は、アルキル基、アルコキシ基、アルキルチオ基又は芳香環基を表す。式（Ａ－４）中、Ｒ^{5A}は、水素原子、シアノ基、カルバモイル基又はスルファモイル基を表す。式（Ａ－５）中、Ｒ^{6A}は、水素原子、シアノ基、カルバモイル基又はスルファモイル基を表す。式（Ａ－１）、式（Ａ－２）、式（Ａ－３）、式（Ａ－４）及び式（Ａ－５）中、＊は、結合位置を表す。

[0019] ＜８＞ ＜６＞に記載の式（３）で表される化合物、その互変異性体、これらのアルカリ金属若しくは有機塩基との塩、又は、式（４）で表される化合物若しくはその互変異性体と、

水と、

を含む、発消色性組成物。

＜９＞　＜７＞に記載の式（５）で表される化合物、その互変異性体、これらのアルカリ金属若しくは有機塩基との塩、又は、式（６）で表される化合物若しくはその互変異性体と、

水と、

を含む、発消色性組成物。

＜１０＞　＜６＞に記載の上記式（３）で表される化合物、その互変異性体、又は、これらのアルカリ金属若しくは有機塩基との塩を含む、染色物。

＜１１＞　＜７＞に記載の上記式（５）で表される化合物、その互変異性体、又は、これらのアルカリ金属若しくは有機塩基との塩を含む、染色物。

発明の効果

[0020] 本開示の一実施形態によれば、色素化合物の使用が少量でも使用で腸管出血性大腸菌を良好に視認させることができる腸管出血性大腸菌検出用培地用組成物を提供することができる。

本開示の他の実施形態によれば、上記腸管出血性大腸菌検出用培地用組成物を用いた、検体中の腸管出血性大腸菌の検出方法を提供することができる。

また、本開示の他の実施形態によれば、新規な化合物、その互変異性体、又はそれらのアルカリ金属若しくは有機塩基との塩を提供することができる。

また、本開示の他の実施形態によれば、上記化合物等を含む発消色組成物及び染色物を提供することができる。

発明を実施するための形態

[0021] 以下、本開示について詳細に説明する。以下に記載する要件の説明は、本開示の代表的な実施態様に基づいてなされることがあるが、本開示はそのような実施態様に限定されるものではなく、本開示の目的の範囲内において、適宜、変更を加えて実施することができる。

[0022] 本開示において、「～」を用いて示された数値範囲は、「～」の前後に記載される数値をそれぞれ下限値及び上限値として含む範囲を意味する。

本開示に段階的に記載されている数値範囲において、ある数値範囲で記載された上限値又は下限値は、他の段階的な記載の数値範囲の上限値又は下限値に置き換えてもよい。また、本開示に記載されている数値範囲において、ある数値範囲で記載された上限値又は下限値は、実施例に示されている値に置き換えてもよい。

[0023] 本開示において、組成物中の各成分の量について言及する場合、組成物中に各成分に該当する物質が複数存在する場合には、特に断らない限り、組成物中に存在する複数の成分の合計量を意味する。

[0024] 本開示において、２つ以上の好ましい態様の組み合わせは、より好ましい態様である。

[0025] 本開示における基（原子団）の表記において、置換及び無置換を記していない表記は、置換基を有さないものとともに、置換基を有するものをも包含するものである。例えば、「アルキル基」とは、置換基を有さないアルキル基（「無置換アルキル基」ともいう。）のみならず、置換基を有するアルキル基（「置換アルキル基」ともいう。）をも包含するものである。

[0026] 本開示において、「ｎ－」はノルマルを意味し、「ｔ－」はターシャリーを意味する。

[0027] 本開示において「工程」との語は、独立した工程だけでなく、他の工程と明確に区別できない場合であっても、その工程の所期の目的が達成されれば、本用語に含まれる。

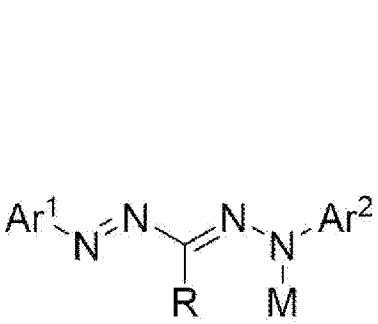
[0028] ［腸管出血性大腸菌検出用培地用組成物］

本開示に係る腸管出血性大腸菌検出用培地用組成物（以下、単に「培地用組成物」ともいう。）は、腸管出血性大腸菌検出用の培地に用いられる組成物であり、下記式（１）で表される化合物又は下記式（２）で表される化合物と、水と、を含む。

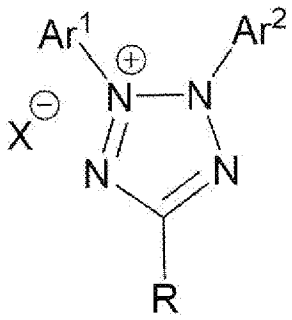
下記式（２）で表される化合物は、下記式（１）で表される化合物の酸化体である。

[0029]

[化5]



(1)



(2)

[0030] 式（１）及び式（２）中、Ａｒ[1]及びＡｒ[2]は、それぞれ独立に、ヘテロ環基を表し、Ｒは、アルキル基、芳香環基、ヘテロ環基、アシル基又はカルバモイル基を表す。式（１）中、Ｍは、水素原子を表し、上記水素原子が解離してアルカリ金属又は有機塩基により塩を形成していてもよい。式（２）中、X^-は、塩化物イオン、臭化物イオン、ヨウ化物イオン、酢酸イオン又はリン酸イオンを表す。

[0031] 本開示に係る培地用組成物は、色素化合物の使用が少量でも腸管出血性大腸菌を良好に視認させることができる。

本開示に係る培地用組成物がこのような効果を奏し得る理由については明らかでないが、本発明者らは以下のように推測している。但し、以下の推測は、本開示に係る培地用組成物を限定的に解釈するものではなく、一例として説明するものである。

[0032] 式（１）で表される化合物及び式（２）で表される化合物は、酸化還元反応により発消色する化合物である。式（２）で表される化合物は、式（１）で表される化合物の酸化体である。式（１）で表される化合物の状態では、色を呈しており、式（１）で表される化合物が酸化され、式（２）で表される化合物の状態になると色が消える。また、式（２）で表される化合物が還元され、式（１）で表される化合物の状態になると色を呈する。

本開示に係る培地用組成物では、腸管出血性大腸菌の還元力を利用して、

式（２）で表される化合物を還元し、腸管出血性大腸菌を着色する。腸管出血性大腸菌は、還元力が強いため、培地用組成物に含まれる式（２）で表される化合物を良好に還元することができると考えられる。なお、本開示に係る培地用組成物が式（１）で表される化合物を含む場合には、式（１）で表される化合物を酸化させた後、腸管出血性大腸菌を含み得る検体を培地に接種することで、腸管出血性大腸菌を着色させることができる。

[0033] 本開示に係る培地用組成物は、腸管出血性大腸菌の検出に使用する色素化合物として、式（１）で表される化合物又は式（２）で表される化合物を含むことで、色素化合物の使用が少量でも、腸管出血性大腸菌を良好に視認させることができる。ホルマザン色素化合物にヘテロ原子を導入することで、ホルマザン色素化合物の分極が増大し、ホルマザン色素化合物のグラム吸光係数が向上したため、使用量を低減しても腸管出血性大腸菌を良好に視認できると考えられる。なお、本発明者らは、五員ヘテロ環を含むホルマザン色素化合物が、従来のホルマザン色素化合物、すなわち、ベンゼン環を基本としたホルマザン色素化合物と比較して、還元されたときの発色性が高いことを確認している。また、ホルマザン色素化合物にヘテロ原子を導入することで、親水性が向上し、水中での発色性が向上したため、腸管出血性大腸菌の良好な視認が可能となったと考えられる。

[0034] 本開示に係る培地用組成物は、腸管出血性大腸菌の種類を問わず使用することができる。腸管出血性大腸菌は、ベロ毒素と呼ばれる毒素を産生することで病原性を持った大腸菌である。腸管出血性大腸菌の具体例としては、Ｏ１５７、Ｏ２６、Ｏ１１１等が挙げられるが、これらに限定されない。

[0035] 以下、式（１）で表される化合物又は式（２）で表される化合物の詳細を説明する。

[0036] 式（１）及び式（２）中、Ar^1及びAr^2は、それぞれ独立に、ヘテロ環基を表す。

[0037] Ar^1で表されるヘテロ環基は、環内に酸素原子、硫黄原子及び窒素原子からなる群より選ばれるヘテロ原子の一種以上を含むヘテロ環基であることが

好ましい。

Ａｒ^{2}で表されるヘテロ環基は、環内に酸素原子、硫黄原子及び窒素原子からなる群より選ばれるヘテロ原子の一種以上を含むヘテロ環基であることが好ましい。

[0038] Ａｒ^{1}で表されるヘテロ環基のヘテロ原子の数は、１～３であることが好ましく、１又は２であることがより好ましい。

Ａｒ^{2}で表されるヘテロ環基のヘテロ原子の数は、１～３であることが好ましく、１又は２であることがより好ましい。

[0039] Ａｒ^{1}で表されるヘテロ環基は、５員環を含むヘテロ環基であることが好ましく、５員環のヘテロ環基であることがより好ましい。

Ａｒ^{2}で表されるヘテロ環基は、５員環を含むヘテロ環基であることが好ましく、５員環のヘテロ環基であることがより好ましい。

[0040] Ａｒ^{1}で表されるヘテロ環基は、環内に酸素原子、硫黄原子及び窒素原子からなる群より選ばれるヘテロ原子の一種以上を含むヘテロ環基であって、５員複素環を含むヘテロ環基であることが好ましく、環内に少なくとも窒素原子を含むヘテロ環基であって、５員複素環を含むヘテロ環基であることがより好ましい。

Ａｒ^{2}で表されるヘテロ環基は、環内に酸素原子、硫黄原子及び窒素原子からなる群より選ばれるヘテロ原子の一種以上を含むヘテロ環基であって、５員複素環を含むヘテロ環基であることが好ましく、環内に少なくとも窒素原子を含むヘテロ環基であって、５員複素環を含むヘテロ環基であることがより好ましい。

[0041] Ａｒ^{1}で表されるヘテロ環基及びＡｒ^{2}で表されるヘテロ環基は、同じであってもよく、異なっていてもよい。

式（１）で表される化合物では、Ａｒ^{1}で表されるヘテロ環基及びＡｒ^{2}で表されるヘテロ環基の種類及びその組み合わせを変えることで、色相を調整することができる。

[0042] Ａｒ^{1}で表されるヘテロ環基及びＡｒ^{2}で表されるヘテロ環基は、非置換で

あってもよいし、置換基を有していてもよい。

Ａｒ[1]で表されるヘテロ環基及びＡｒ[2]で表されるヘテロ環基は、いずれも一以上の置換基を有することができ、二以上の置換基は同一であってもよいし、異なっていてもよい。

[0043] この置換基としては、例えば、ハロゲン基、ヒドロキシ基、アルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、シクロアルケニル基、アルキニル基、アリール基、ヘテロ環基（複素環基）、アルコキシ基、アリールオキシ基、複素環オキシ基、スルホ基、アシル基、アルコキシカルボニル基、アリールオキシカルボニル基、カルボキシ基、カルバモイル基、アシルオキシ基、カルバモイルオキシ基、アルコキシカルボニルオキシ基、アリールオキシカルボニルオキシ、シアノ基、ニトロ基、アミノ基（アニリノ基を含む）、アシルアミノ基、アルコキシカルボニルアミノ基、カルバモイルアミノ基、アリールオキシカルボニルアミノ基、スルファモイルアミノ基、アルキルスルホニルアミノ基、アリールスルホニルアミノ基、メルカプト基、アルキルチオ基、アリールチオ基、複素環チオ基、スルファモイル基、アルキルスルフィニル基、アリールスルフィニル基、アルキルスルホニル基、アリールスルホニル基、アリールアゾ基、複素環アゾ基、イミド基、ホスフィノ基、ホスフィニル基、ホスフィニルオキシ基、及びホスフィニルアミノ基が挙げられる。

より詳細には、この置換基としては、例えば、ハロゲン基（例えば、フルオロ基、クロロ基、ブロモ基、及びヨード基）、アルキル基（１個～１０個、好ましくは１個～６個の炭素原子を有する直鎖、分岐又は環状アルキル基；例えば、メチル、エチル、ｎ－プロピル、イソプロピル、ｔ－ブチル、ｎ－オクチル、２－クロロエチル、２－シアノエチル、２－エチルヘキシル、シクロプロピル、及びシクロペンチル）、アルケニル基（２個～１０個、好ましくは２個～６個の炭素原子を有する直鎖、分岐又は環状アルケニル基；例えば、ビニル、アリル、プレニル、及びシクロペンテン－１－イル）、アルキニル基（２個～１０個、好ましくは２個～６個の炭素原子を有するアルキニル基；例えば、エチニル、及びプロパルギル）、アリール基（６個～１

２個、好ましくは６個～８個の炭素原子を有するアリール基；例えば、フェニル、ｐ－トリル、ナフチル、３－クロロフェニル、及び２－アミノフェニル）、複素環基（５員環又は６員環の芳香族又は非芳香族の複素環化合物から１個の水素原子を取り除くことによって得られる、１個～１２個、好ましくは２個～６個の炭素原子を有する一価の基；例えば、１－ピラゾリル、１－イミダゾリル、２－フリル、２－チエニル、４－ピリミジニル、及び２－ベンゾチアゾリル）、シアノ基、ヒドロキシ基、ニトロ基、アルコキシ基（１個～１０個、好ましくは１個～６個の炭素原子を有する直鎖、分岐又は環状アルコキシ基；例えば、メトキシ、エトキシ、イソプロポキシ、ｔ－ブトキシ、シクロペンチルオキシ、２－ブテン－１－イルオキシ、及び２－メトキシエトキシ）、アリールオキシ基（６個～１２個、好ましくは６個～８個の炭素原子を有するアリールオキシ基；例えば、フェノキシ、２－メチルフェノキシ、４－ｔ－ブチルフェノキシ、及び３－ニトロフェノキシ）、

[0044] 複素環オキシ基（１個～１２個、好ましくは２個～６個の炭素原子を有する複素環オキシ基；例えば、１－フェニルテトラゾール－５－オキシ－２－テトラヒドロピラニルオキシ）、アシルオキシ基（１個～１２個、好ましくは１個～８個の炭素原子を有するアシルオキシ基；例えば、ホルミルオキシ基、アセチルオキシ、ピバロイルオキシ、ベンゾイルオキシ、及びｐ－メトキシフェニルカルボニルオキシ）、カルバモイルオキシ基（１個～１０個、好ましくは１個～６個の炭素原子を有するカルバモイルオキシ基；例えば、Ｎ，Ｎ－ジメチルカルバモイルオキシ、Ｎ，Ｎ－ジエチルカルバモイルオキシ、モルホリノカルボニルオキシ、及びＮ，Ｎ－オクチルカルバモイルオキシ）、アルコキシカルボニルオキシ基（２個～１０個、好ましくは２個～６個の炭素原子を有するアルコキシカルボニルオキシ基；例えば、メトキシカルボニルオキシ、エトキシカルボニルオキシ、ｔ－ブトキシカルボニルオキシ、及びｎ－オクチルオキシカルボニルオキシ）、アリールオキシカルボニルオキシ基（７個～１２個、好ましくは７個～１０個の炭素原子を有するアリールオキシカルボニルオキシ基；例えば、フェノキシカルボニルオキシ、及

びｐ－メトキシフェノキシカルボニルオキシ）、アミノ基（アミノ基；１個～１０個、好ましくは１個～６個の炭素原子を有するアルキルアミノ基；６個～１２個、好ましくは６個～８個の炭素原子を有するアニリノ基；或いは１個～１２個、好ましくは２個～６個の炭素原子を有する複素環アミノ基；例えば、アミノ、メチルアミノ、ジメチルアミノ、アニリノ、Ｎ－メチル－アニリノ、ジフェニルアミノ、イミダゾール－２－イルアミノ、及びピラゾール－３－イルアミノを含む）、アシルアミノ基（１個～１０個、好ましくは１個～６個の炭素原子を有するアルキルカルボニルアミノ基；６個～１２個、好ましくは６個～８個の炭素原子を有するアリールカルボニルアミノ基；或いは２個～１２個、好ましくは２個～６個の炭素原子を有する複素環カルボニルアミノ基；例えば、ホルミルアミノ、アセチルアミノ、ピバロイルアミノ、ベンゾイルアミノ、ピリジン－４－カルボニルアミノ、及びチオフェン－２－カルボニルアミノを含む）、アミノカルボニルアミノ基（１個～１２個、好ましくは１個～６個の炭素原子を有するアミノカルボニルアミノ；例えば、カルバモイルアミノ、Ｎ，Ｎ－ジメチルアミノカルボニルアミノ、Ｎ，Ｎ－ジエチルアミノカルボニルアミノ、及びモルホリン－４－イルカルボニルアミノ）、アルコキシカルボニルアミノ基（２個～１０個、好ましくは２～６個の炭素原子を有するアルコキシカルボニルアミノ基；例えば、メトキシカルボニルアミノ、エトキシカルボニルアミノ、及びｔ－ブトキシカルボニルアミノ）、

[0045] アリールオキシカルボニルアミノ基（７個～１２個、好ましくは７個～９個の炭素原子を有するアリールオキシカルボニルアミノ基；例えば、フェノキシカルボニルアミノ、ｐ－クロロフェノキシカルボニルアミノ、及び４－メトキシフェノキシカルボニルアミノ）、スルファモイルアミノ基（０個～１０個、好ましくは０個～６個の炭素原子を有するスルファモイルアミノ基；例えば、スルファモイルアミノ、Ｎ，Ｎ－ジメチルアミノスルホニルアミノ、及びＮ－（２－ヒドロキシエチル）スルファモイルアミノ）、アルキルスルホニルアミノ基（１個～１０個、好ましくは１個～６個の炭素原子を有す

るアルキルスルホニルアミノ基；例えば、メチルスルホニルアミノ、及びブチルスルホニルアミノ）、アリールスルホニルアミノ基（６個～１２個、好ましくは６個～８個の炭素原子を有するアリールスルホニルアミノ基；例えば、フェニルスルホニルアミノ、２，３，５－トリクロロフェニルスルホニルアミノ基、及びｐ－メチルフェニルスルホニルアミノ）、メルカプト基、アルキルチオ基（１個～１０個、好ましくは１個～６個の炭素原子を有するアルキルチオ基；例えば、メチルチオ、エチルチオ、及びブチルチオ）、アリールチオ基（６個～１２個、好ましくは６個～８個の炭素原子を有するアリールチオ；例えば、フェニルチオ、ｐ－クロロフェニルチオ、及びｍ－メトキシチオ）、複素環チオ基（２個～１０個、好ましくは１個～６個の炭素原子を有する複素環チオ基；例えば－２－ベンゾチアゾリルチオ、及び１－フェニルテトラゾール－５－イルチオ）、スルファモイル基（０個～１０個、好ましくは０個～６個の炭素原子を有するスルファモイル基；例えば、スルファモイル、Ｎ－エチルスルファモイル、Ｎ，Ｎ－ジメチルスルファモイル、Ｎ－アセチルスルファモイル、及びＮ－ベンゾイルスルファモイル）、アルキルスルフィニル基（１個～１０個、好ましくは１個～６個の炭素原子を有するアルキルスルフィニル基；例えば、メチルスルフィニル、及びエチルスルフィニル）、アリールスルフィニル基（６個～１２個、好ましくは６個～８個の炭素原子を有するアリールスルフィニル基；例えば、フェニルスルフィニル、及びｐ－メチルフェニルスルフィニル）、アルキルスルホニル基（１個～１０個、好ましくは１個～６個の炭素原子を有するアルキルスルホニル基；例えば、メチルスルホニル、及びエチルスルホニル）、アリールスルホニル基（６個～１２個、好ましくは６～８個の炭素原子を有するアリールスルホニル基；例えば、フェニルスルホニル、及びｐ－クロロフェニルスルホニル）、スルホ基、アシル基（ホルミル基；２個～１０個、好ましくは２個～６個の炭素原子を有するアルキルカルボニル基；或いは７個～１２個、好ましくは７個～９個の炭素原子を有するアリールカルボニル基；例えば、アセチル、ピバロイル、２－クロロアセチル、ベンゾイル、及び２，４

－ジクロロベンゾイル）、

[0046] アルコキシカルボニル基（２個～１０個、好ましくは２個～６個の炭素原子を有するアルコキシカルボニル基；例えば、メトキシカルボニル、エトキシカルボニル、ｔ－ブトキシカルボニル、及びイソブチルオキシカルボニル）、アリールオキシカルボニル基（７個～１２個、好ましくは７個～９個の炭素原子を有するアリールオキシカルボニル基；例えば、フェノキシカルボニル－２－クロロフェノキシカルボニル、３－ニトロフェノキシカルボニル、及び４－ｔ－ブチルフェノキシカルボニル）、カルバモイル基（１個～１０個、好ましくは１個～６個の炭素原子を有するカルバモイル基；例えば、カルバモイル、Ｎ－メチルカルバモイル、Ｎ，Ｎ－ジメチルカルバモイル、Ｎ－（２－ヒドロキシエチル）カルバモイル、及びＮ－（メチルスルホニル）カルバモイル）、アリールアゾ基（６個～１２個、好ましくは６個～８個の炭素原子を有するアリールアゾ基；例えば、フェニルアゾ、及びｐ－クロロフェニルアゾ）、複素環アゾ基（１個～１０個、好ましくは１個～６個の炭素原子を有する複素環アゾ基；例えば、ピラゾール－３－イルアゾ、チアゾール－２－イルアゾ、及び５－メチルチオ－１，３，４－チアジアゾール－２－イルアゾ）、イミド基（２個～１０個、好ましくは４個～８個の炭素原子を有するイミド基；例えば、スクシンイミド、及びフタルイミド）、ホスフィノ基（２個～１２個、好ましくは２個～６個の炭素原子を有するホスフィノ基；例えば、ジメチルホスフィノ、ジフェニルホスフィノ、及びメチルフェノキシホスフィノ）、ホスフィニル基（２個～１２個の炭素原子、好ましくは２個～６個の炭素原子を有するホスフィニル基；例えば、ホスフィニル、及びジエトキシホスフィニル）、ホスフィニルオキシ基（２個～１２個、好ましくは２個～６個の炭素原子を有するホスフィニルオキシ基；例えば、ジフェノキシホスフィニルオキシ、及びジブトキシホスフィニルオキシ）、ホスフィニルアミノ基（２個～１２個、好ましくは２個～６個の炭素原子を有するホスフィニルアミノ基；例えば、ジメトキシホスフィニルアミノ、及びジメチルアミノホスフィニルアミノ）が挙げられる。

[0047] これらの基が更に置換され得る基である場合、これらの基は更に置換基を含むことができ、この置換基としては、Ａｒ[1]で表されるヘテロ環基又はＡｒ[2]で表されるヘテロ環基の好ましい置換基として記載したものと同じ意味を有する基が好ましく挙げられる。これらの基が二以上の置換基で置換される場合、これらの置換基は、同一であってもよいし、異なっていてもよい。

[0048] Ａｒ[1]で表されるヘテロ環基の置換基としては、アルキル基、芳香環基、ヘテロ環基、カルバモイル基、アルキルチオ基、及びアリールチオ基からなる群より選ばれる少なくとも１種が好ましく、アルキル基、カルバモイル基、及びアルキルチオ基からなる群より選ばれる少なくとも１種がより好ましい。

Ａｒ[2]で表されるヘテロ環基の置換基としては、アルキル基、芳香環基、ヘテロ環基、カルバモイル基、アルキルチオ基、及びアリールチオ基からなる群より選ばれる少なくとも１種が好ましく、アルキル基、カルバモイル基、及びアルキルチオ基からなる群より選ばれる少なくとも１種がより好ましい。

[0049] 式（１）及び式（２）中、Ｒは、アルキル基、芳香環基、ヘテロ環基、アシル基又はカルバモイル基を表す。Ｒは、アルキル基又はヘテロ環基であることが好ましい。

[0050] Ｒで表されるアルキル基は、直鎖アルキル基であってもよく、分枝を有するアルキル基であってもよく、環状構造を有するアルキル基であってもよい。

Ｒで表されるアルキル基は、炭素数１～１２のアルキル基であることが好ましく、炭素数１～８のアルキル基であることがより好ましい。

Ｒで表されるアルキル基としては、例えば、メチル基、エチル基、ｎ－プロピル基、又はイソプロピル基が好ましい。

[0051] Ｒで表される芳香環基は、置換基を有していてもよく、置換基を有していなくてもよい。Ｒで表される芳香環基が置換基を有している場合の置換基としては、例えば、カルバモイル基又はアセチル基が好ましい。

Ｒで表される芳香環基は、炭素数６～３０の芳香環基であることが好ましく、炭素数６～２０の芳香環基であることがより好ましい。

Ｒで表される芳香環基としては、例えば、アリール基（例：フェニル基、ｐ－トリル基、ナフチル基等）が好ましい。

[0052] Ｒで表されるヘテロ環基は、置換基を有していてもよく、置換基を有していなくてもよい。Ｒで表されるヘテロ環基が置換基を有している場合の置換基としては、例えば、４－ピリジル基又は２－フリル基が好ましい。

Ｒで表されるヘテロ環基は、５員環又は６員環であることが好ましい。

Ｒで表されるヘテロ環基は、環内に酸素原子、硫黄原子及び窒素原子からなる群より選ばれるヘテロ原子の一種以上を含むヘテロ環基であることが好ましい。

Ｒで表されるヘテロ環基のヘテロ原子の数は、１～３であることが好ましく、１又は２であることがより好ましく、１であることが更に好ましい。

[0053] Ｒで表されるアシル基は、炭素数２～３０のアシル基であることが好ましく、炭素数２～１５のアシル基であることがより好ましい。

Ｒで表されるアシル基としては、例えば、アセチル基又はピバロイル基が好ましい。

[0054] Ｒで表されるカルバモイル基は、置換基を有していてもよく、置換基を有していなくてもよい。

Ｒで表されるカルバモイル基は、炭素数１～３０のカルバモイル基であることが好ましく、炭素数１～１５のカルバモイル基であることがより好ましい。

Ｒで表されるカルバモイル基としては、例えば、Ｎ，Ｎ－ジメチルカルバモイル基、Ｎ，Ｎ－ジエチルカルバモイル基、又はモルホリノカルボニル基が好ましい。

[0055] 式（１）中、Ｍは、水素原子を表し、水素原子が解離してアルカリ金属又は有機塩基により塩を形成していてもよい。

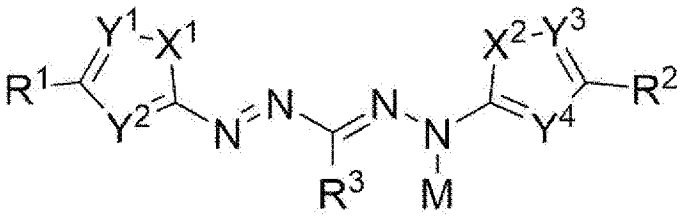
[0056] 式（２）中、X^-は、塩化物イオン、臭化物イオン、ヨウ化物イオン、酢酸

イオン又はリン酸イオンを表す。

式（２）におけるX^-は、塩化物イオン又は酢酸イオンであることが好ましい。

[0057] 式（１）で表される化合物は、下記式（３）で表される化合物、その互変異性体、又は、それらのアルカリ金属若しくは有機塩基との塩であることが好ましい。

[0058] [化6]



(3)

[0059] 式（３）中、X^1及びX^2は、それぞれ独立に、－Ｓ－、－Ｏ－又は－Ｎ（－Z^1）－を表し、Z^1は、水素原子、アルキル基、芳香環基又はヘテロ環基を表す。Y^1、Y^2、Y^3及びY^4は、それぞれ独立に、＝Ｃ（－Z^2）－又は＝Ｎ－を表し、Z^2は、水素原子、アルキル基、芳香環基、ヘテロ環基、アシル基、カルバモイル基又はアルキルチオ基を表す。R^1及びR^2は、それぞれ独立に、アルキル基、芳香環基、ヘテロ環基、カルバモイル基、アルキルチオ基又はアリールチオ基を表し、Y^2が＝Ｃ（－Z^2）－を表す場合、R^1とZ^2とが結合して環を形成していてもよく、Y^4が＝Ｃ（－Z^2）－を表す場合、R^2とZ^2とが結合して環を形成していてもよい。R^3は、アルキル基、芳香環基、ヘテロ環基、アシル基又はカルバモイル基を表す。Ｍは、水素原子を表し、上記水素原子が解離してアルカリ金属又は有機塩基により塩を形成していてもよい。

[0060] 式（３）中、X^1及びX^2は、それぞれ独立に、－Ｓ－、－Ｏ－又は－Ｎ（－Z^1）－を表し、Z^1は、水素原子、アルキル基、芳香環基又はヘテロ環基

を表す。

式（３）中、Ｘ^{1}及びＸ^{2}は、同じであってもよく、異なっていてもよい。

[0061] 式（３）中、Ｘ^{1}及びＸ^{2}は、それぞれ独立に、－Ｓ－又は－Ｎ（－Ｚ^{1}）－であることが好ましい。－Ｎ（－Ｚ^{1}）－におけるＺ^{1}は、アルキル基、芳香環基、又はヘテロ環基であることが好ましい。

[0062] Ｚ^{1}で表されるアルキル基は、直鎖アルキル基であってもよく、分枝を有するアルキル基であってもよく、環状構造を有するアルキル基であってもよい。

Ｚ^{1}で表されるアルキル基は、炭素数１～１２のアルキル基であることが好ましく、炭素数１～８のアルキル基であることがより好ましい。

Ｚ^{1}で表されるアルキル基としては、例えば、メチル基、エチル基、又はｔ－ブチル基が好ましい。

[0063] Ｚ^{1}で表される芳香環基は、置換基を有していてもよく、置換基を有していなくてもよい。Ｚ^{1}で表される芳香環基が置換基を有している場合の置換基としては、例えば、カルバモイル基又はアセチル基が好ましい。

Ｚ^{1}で表される芳香環基は、炭素数６～３０の芳香環基であることが好ましく、炭素数６～２０の芳香環基であることがより好ましい。

Ｚ^{1}で表される芳香環基としては、例えば、アリール基（例：フェニル基、ｐ－トリル基、ナフチル基等）が好ましい。

[0064] Ｚ^{1}で表されるヘテロ環基は、置換基を有していてもよく、置換基を有していなくてもよい。Ｚ^{1}で表されるヘテロ環基が置換基を有している場合の置換基としては、例えば、２－ピリジル基又は２－ピリミジル基が好ましい。

Ｚ^{1}で表されるヘテロ環基は、５員環又は６員環であることが好ましい。

Ｚ^{1}で表されるヘテロ環基は、環内に酸素原子、硫黄原子及び窒素原子からなる群より選ばれるヘテロ原子の一種以上を含むヘテロ環基であることが好ましい。

Ｚ^{1}で表されるヘテロ環基のヘテロ原子の数は、１～３であることが好ましく、１又は２であることがより好ましく、１であることが更に好ましい。

[0065] 式（３）中、Ｙ^{1}、Ｙ^{2}、Ｙ^{3}及びＹ^{4}は、それぞれ独立に、＝Ｃ（－Ｚ^{2}）－又は＝Ｎ－を表し、Ｚ^{2}は、水素原子、アルキル基、芳香環基、ヘテロ環基、アシル基、カルバモイル基又はアルキルチオ基を表す。

式（３）中、Ｙ^{1}、Ｙ^{2}、Ｙ^{3}及びＹ^{4}は、同じであってもよく、異なっていてもよい。

＝Ｃ（－Ｚ^{2}）－におけるＺ^{2}は、水素原子であることが好ましい。

[0066] Ｚ^{2}で表されるアルキル基は、直鎖アルキル基であってもよく、分枝を有するアルキル基であってもよく、環状構造を有するアルキル基であってもよい。

Ｚ^{2}で表されるアルキル基は、炭素数１～１２のアルキル基であることが好ましく、炭素数１～８のアルキル基であることがより好ましい。

Ｚ^{2}で表されるアルキル基としては、例えば、メチル基、エチル基、又はｔ－ブチル基が好ましい。

[0067] Ｚ^{2}で表される芳香環基は、置換基を有していてもよく、置換基を有していなくてもよい。Ｚ^{2}で表される芳香環基が置換基を有している場合の置換基としては、例えば、カルバモイル基又はアセチル基が好ましい。

Ｚ^{2}で表される芳香環基は、炭素数６～３０の芳香環基であることが好ましく、炭素数６～２０の芳香環基であることがより好ましい。

Ｚ^{2}で表される芳香環基としては、例えば、アリール基（例：フェニル基、ｐ－トリル基、ナフチル基等）が好ましい。

[0068] Ｚ^{2}で表されるヘテロ環基は、置換基を有していてもよく、置換基を有していなくてもよい。Ｚ^{2}で表されるヘテロ環基が置換基を有している場合の置換基としては、例えば、アルキル基、アルキルチオ基、又はアルコキシ基が好ましい。

Ｚ^{2}で表されるヘテロ環基は、５員環又は６員環であることが好ましい。

Ｚ^{2}で表されるヘテロ環基は、環内に酸素原子、硫黄原子及び窒素原子からなる群より選ばれるヘテロ原子の一種以上を含むヘテロ環基であることが好ましい。

Z^2で表されるヘテロ環基のヘテロ原子の数は、１～３であることが好ましく、１又は２であることがより好ましく、１であることが更に好ましい。

[0069] Z^2で表されるアシル基は、炭素数２～３０のアシル基であることが好ましく、炭素数２～１５のアシル基であることがより好ましい。

Z^2で表されるアシル基としては、例えば、アセチル基又はピバロイル基が好ましい。

[0070] Z^2で表されるカルバモイル基は、置換基を有していてもよく、置換基を有していなくてもよい。

Z^2で表されるカルバモイル基は、炭素数１～３０のカルバモイル基であることが好ましく、炭素数１～１５のカルバモイル基であることがより好ましい。

Z^2で表されるカルバモイル基としては、例えば、Ｎ，Ｎ－ジメチルカルバモイル基、Ｎ，Ｎ－ジエチルカルバモイル基、又はモルホリノカルボニル基が好ましい。

[0071] Z^2で表されるアルキルチオ基は、アルキル部位の炭素数が１～１２のアルキルチオ基であることが好ましい。

Z^2で表されるアルキルチオ基としては、例えば、メチルチオ基又はエチルチオ基が好ましい。

[0072] 式（３）中、R^1及びR^2は、それぞれ独立に、アルキル基、芳香環基、ヘテロ環基、カルバモイル基、アルキルチオ基又はアリールチオ基を表す。

式（３）中、R^1及びR^2は、同じであってもよく、異なっていてもよい。

式（３）中、R^1及びR^2は、それぞれ独立に、アルキル基であることが好ましい。

[0073] R^1及びR^2におけるアルキル基は、直鎖アルキル基であってもよく、分枝を有するアルキル基であってもよく、環状構造を有するアルキル基であってもよい。

R^1及びR^2におけるアルキル基は、炭素数１～１２のアルキル基であることが好ましく、炭素数１～８のアルキル基であることがより好ましい。

R^1及びR^2におけるアルキル基としては、例えば、メチル基、エチル基、又はｔ－ブチル基が好ましい。

[0074] R^1及びR^2における芳香環基は、置換基を有していてもよく、置換基を有していなくてもよい。R^1及びR^2における芳香環基が置換基を有している場合の置換基としては、例えば、カルバモイル基又はアセチル基が好ましい。

R^1及びR^2における芳香環基は、炭素数６～３０の芳香環基であることが好ましく、炭素数６～２０の芳香環基であることがより好ましい。

R^1及びR^2における芳香環基としては、例えば、アリール基（例：フェニル基、ｐ－トリル基、ナフチル基等）が好ましい。

[0075] R^1及びR^2におけるヘテロ環基は、置換基を有していてもよく、置換基を有していなくてもよい。Z^2で表されるヘテロ環基が置換基を有している場合の置換基としては、例えば、メトキシ基又はジメチルアミノ基が好ましい。

R^1及びR^2におけるヘテロ環基は、５員環又は６員環であることが好ましい。

R^1及びR^2におけるヘテロ環基は、環内に酸素原子、硫黄原子及び窒素原子からなる群より選ばれるヘテロ原子の一種以上を含むヘテロ環基であることが好ましい。

R^1及びR^2におけるヘテロ環基のヘテロ原子の数は、１～３であることが好ましく、１又は２であることがより好ましく、１であることが更に好ましい。

[0076] R^1及びR^2におけるカルバモイル基は、置換基を有していてもよく、置換基を有していなくてもよい。

R^1及びR^2におけるカルバモイル基は、炭素数１～３０のカルバモイル基であることが好ましく、炭素数１～１５のカルバモイル基であることがより好ましい。

R^1及びR^2におけるカルバモイル基としては、例えば、Ｎ，Ｎ－ジメチルカルバモイル基、Ｎ，Ｎ－ジエチルカルバモイル基、又はモルホリノカルボニル基が好ましい。

[0077] R^1及びR^2におけるアルキルチオ基は、アルキル部位の炭素数が１～１２のアルキルチオ基であることが好ましい。

R^1及びR^2におけるアルキルチオ基としては、例えば、メチルチオ基又はエチルチオ基が好ましい。

[0078] R^1及びR^2におけるアリールチオ基は、アリール部位の炭素数が６～３０のアリールチオ基であることが好ましい。

R^1及びR^2におけるアリールチオ基としては、例えば、フェニルチオ基が好ましい。

[0079] Y^2が＝Ｃ（－Z^2）－を表す場合、R^1とZ^2とが結合して環を形成していてもよい。形成される環は、飽和の環であってもよく、不飽和の環であってもよい。

形成される環としては、例えば、ベンゼン環又はナフタレン環であることが好ましい。

[0080] Y^4が＝Ｃ（－Z^2）－を表す場合、R^2とZ^2とが結合して環を形成していてもよい。形成される環は、飽和の環であってもよく、不飽和の環であってもよい。

形成される環としては、例えば、ベンゼン環又はナフタレン環であることが好ましい。

[0081] 式（３）中、R^3は、アルキル基、芳香環基、ヘテロ環基、アシル基又はカルバモイル基を表す。R^3は、アルキル基又はヘテロ環基であることが好ましい。

[0082] R^3で表されるアルキル基は、直鎖アルキル基であってもよく、分枝を有するアルキル基であってもよく、環状構造を有するアルキル基であってもよい。

R^3で表されるアルキル基は、炭素数１～１２のアルキル基であることが好ましく、炭素数１～８のアルキル基であることがより好ましい。

R^3で表されるアルキル基としては、例えば、メチル基、エチル基、又はｔ－ブチル基が好ましい。

[0083] R^3で表される芳香環基は、置換基を有していてもよく、置換基を有していなくてもよい。R^3で表される芳香環基が置換基を有している場合の置換基としては、例えば、カルバモイル基又はアセチル基が好ましい。

R^3で表される芳香環基は、炭素数６～３０の芳香環基であることが好ましく、炭素数６～２０の芳香環基であることがより好ましい。

R^3で表される芳香環基としては、例えば、アリール基（例：フェニル基、ｐ－トリル基、ナフチル基等）が好ましい。

[0084] R^3で表されるヘテロ環基は、置換基を有していてもよく、置換基を有していなくてもよい。R^3で表されるヘテロ環基が置換基を有している場合の置換基としては、例えば、アルキル基、アルキルチオ基、又はアルコキシ基が好ましい。

R^3で表されるヘテロ環基は、５員環又は６員環であることが好ましい。

R^3で表されるヘテロ環基は、環内に酸素原子、硫黄原子及び窒素原子からなる群より選ばれるヘテロ原子の一種以上を含むヘテロ環基であることが好ましい。

R^3で表されるヘテロ環基のヘテロ原子の数は、１～３であることが好ましく、１又は２であることがより好ましく、１であることが更に好ましい。

[0085] R^3で表されるアシル基は、炭素数２～３０のアシル基であることが好ましく、炭素数２～１５のアシル基であることがより好ましい。

R^3で表されるアシル基としては、例えば、アセチル基又はピバロイル基が好ましい。

[0086] R^3で表されるカルバモイル基は、置換基を有していてもよく、置換基を有していなくてもよい。

R^3で表されるカルバモイル基は、炭素数１～３０のカルバモイル基であることが好ましく、炭素数１～１５のカルバモイル基であることがより好ましい。

R^3で表されるカルバモイル基としては、例えば、Ｎ，Ｎ－ジメチルカルバモイル基、Ｎ，Ｎ－ジエチルカルバモイル基、又はモルホリノカルボニル基

が好ましい。

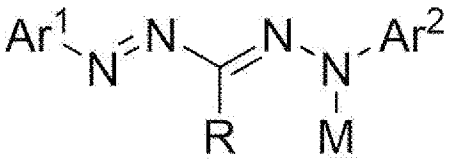
[0087] 式（３）中、Ｍは、水素原子を表し、水素原子が解離してアルカリ金属又は有機塩基により塩を形成していてもよい。

アルカリ金属としては、リチウム、ナトリウム、カリウム等が挙げられる。

有機塩基としては、トリエチルアミン、ジイソプロピルエチルアミン、モルホリン等が挙げられる。

[0088] 式（１）で表される化合物は、下記式（５）で表される化合物、その互変異性体、又は、それらのアルカリ金属若しくは有機塩基との塩であることが好ましい。

[0089] [化7]



(5)

[0090] 式（５）中、Ａｒ[1]及びＡｒ[2]は、それぞれ独立に、下記式（Ａ－１）で表される基、下記式（Ａ－２）で表される基、下記式（Ａ－３）で表される基、下記式（Ａ－４）で表される基又は下記式（Ａ－５）で表される基を表し、Ｒは、アルキル基、芳香環基、ヘテロ環基、アシル基又はカルバモイル基を表す。Ｍは、水素原子を表し、上記水素原子が解離してアルカリ金属又は有機塩基により塩を形成していてもよい。

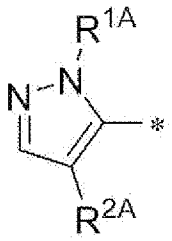
[0091] 式（５）中、Ａｒ[1]及びＡｒ[2]は、それぞれ独立に、下記式（Ａ－１）で表される基、下記式（Ａ－２）で表される基、下記式（Ａ－３）で表される基、下記式（Ａ－４）で表される基又は下記式（Ａ－５）で表される基を表す。

式（５）におけるＡｒ[1]及びＡｒ[2]は、同じであってもよく、異なっていて

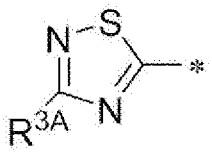
もよい。

式（５）中、Ａｒ[1]及びＡｒ[2]は、それぞれ独立に、下記式（Ａ－１）で表される基、下記式（Ａ－２）で表される基、又は下記式（Ａ－５）で表される基であることが好ましい。また、式（５）中、Ａｒ[1]は、式（Ａ－１）で表される基又は式（Ａ－５）で表される基であることがより好ましく、Ａｒ[2]は、式（Ａ－２）で表される基であることがより好ましい。

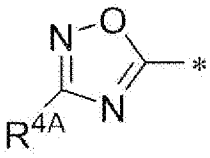
[0092] [化8]



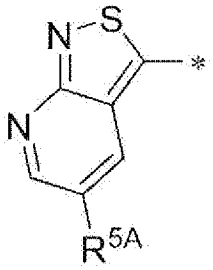
(A-1)



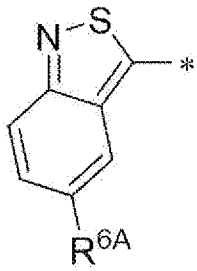
(A-2)



(A-3)



(A-4)



(A-5)

[0093] 式（Ａ－１）中、Ｒ[1A]は、水素原子、アルキル基、フェニル基、アシル基又はアルコキシカルボニル基を表し、Ｒ[2A]は、水素原子、シアノ基、カルバモイル基又はアルキルスルホニル基を表す。式（Ａ－２）中、Ｒ[3A]は、アルキル基、アルコキシ基、アルキルチオ基又は芳香環基を表す。式（Ａ－３）中、Ｒ[4A]は、アルキル基、アルコキシ基、アルキルチオ基又は芳香環基を表す。式（Ａ－４）中、Ｒ[5A]は、水素原子、シアノ基、カルバモイル基又はスルファモイル基を表す。式（Ａ－５）中、Ｒ[6A]は、水素原子、シアノ基、カルバモイル基又はスルファモイル基を表す。式（Ａ－１）、式（Ａ－２）、

式（Ａ－３）、式（Ａ－４）及び式（Ａ－５）中、＊は、結合位置を表す。

[0094] 式（Ａ－１）中、R^{1A}は、水素原子、アルキル基、フェニル基、アシル基又はアルコキシカルボニル基を表す。R^{1A}は、水素原子又はアルキル基であることが好ましい。

[0095] R^{1A}で表されるアルキル基は、直鎖アルキル基であってもよく、分枝を有するアルキル基であってもよく、環状構造を有するアルキル基であってもよい。

R^{1A}で表されるアルキル基は、炭素数１～１２のアルキル基であることが好ましく、炭素数１～８のアルキル基であることがより好ましい。

R^{1A}で表されるアルキル基としては、例えば、メチル基が好ましい。

[0096] R^{1A}で表されるアシル基は、炭素数２～３０のアシル基であることが好ましく、炭素数２～１５のアシル基であることがより好ましい。

R^{1A}で表されるアシル基としては、例えば、アセチル基又はピバロイル基が好ましい。

[0097] R^{1A}で表されるアルコキシカルボニル基は、アルコキシ部位の炭素数が１～３０のアルコキシカルボニル基が好ましい。

R^{1A}で表されるアルコキシカルボニル基としては、メトキシカルボニル基又はエトキシカルボニル基が好ましい。

[0098] 式（Ａ－１）中、R^{2A}は、水素原子、シアノ基、カルバモイル基又はアルキルスルホニル基を表す。R^{2A}は、水素原子であることが好ましい。

[0099] R^{2A}で表されるカルバモイル基は、置換基を有していてもよく、置換基を有していなくてもよい。

R^{2A}で表されるカルバモイル基は、炭素数１～３０のカルバモイル基であることが好ましく、炭素数１～１５のカルバモイル基であることがより好ましい。

R^{2A}で表されるカルバモイル基としては、例えば、Ｎ，Ｎ－ジメチルカルバモイル基、Ｎ，Ｎ－ジエチルカルバモイル基、又はモルホリノカルボニル基が好ましい。

[0100] R^{2A}で表されるアルキルスルホニル基は、アルキル部位の炭素数が１～１２のアルキルスルホニル基であることが好ましい。

R^{2A}で表されるアルキルスルホニル基としては、例えば、メチルスルホニル基又はエチルスルホニル基が好ましい。

[0101] 式（Ａ－２）中、R^{3A}は、アルキル基、アルコキシ基、アルキルチオ基又は芳香環基を表す。R^{3A}は、アルキル基、アルキルチオ基又は芳香環基であることが好ましく、アルキル基であることがより好ましい。

[0102] R^{3A}で表されるアルキル基は、直鎖アルキル基であってもよく、分枝を有するアルキル基であってもよく、環状構造を有するアルキル基であってもよい。

R^{3A}で表されるアルキル基は、炭素数１～１２のアルキル基であることが好ましく、炭素数１～８のアルキル基であることがより好ましい。

R^{3A}で表されるアルキル基としては、例えば、メチル基が好ましい。

[0103] R^{3A}で表されるアルコキシ基は、直鎖アルコキシ基であってもよく、分枝を有するアルコキシ基であってもよく、環状構造を有するアルコキシ基であってもよい。

R^{3A}で表されるアルコキシ基は、炭素数１～３０のアルコキシ基であることが好ましい。

R^{3A}で表されるアルコキシ基としては、例えば、メトキシ基、エトキシ基、ｎ－プロポキシ基、又はイソプロポキシ基が好ましい。

[0104] R^{3A}で表されるアルキルチオ基は、アルキル部位の炭素数が１～１２のアルキルチオ基であることが好ましい。

R^{3A}で表されるアルキルチオ基としては、例えば、メチルチオ基又はエチルチオ基が好ましい。

[0105] R^{3A}で表される芳香環基は、置換基を有していてもよく、置換基を有していなくてもよい。R^{3A}で表される芳香環基が置換基を有している場合の置換基としては、例えば、カルバモイル基又はアセチル基が好ましい。

R^{3A}で表される芳香環基は、炭素数６～３０の芳香環基であることが好ま

しく、炭素数６～２０の芳香環基であることがより好ましい。

R^{3A}で表される芳香環基としては、例えば、アリール基（例：フェニル基、ｐ－トリル基、ナフチル基等）が好ましい。

[0106] 式（Ａ－３）中、R^{4A}は、アルキル基、アルコキシ基、アルキルチオ基又は芳香環基を表す。R^{4A}は、アルキル基又はアルキルチオ基であることが好ましい。

[0107] R^{4A}で表されるアルキル基は、直鎖アルキル基であってもよく、分枝を有するアルキル基であってもよく、環状構造を有するアルキル基であってもよい。

R^{4A}で表されるアルキル基は、炭素数１～１２のアルキル基であることが好ましく、炭素数１～８のアルキル基であることがより好ましい。

R^{4A}で表されるアルキル基としては、例えば、メチル基が好ましい。

[0108] R^{4A}で表されるアルコキシ基は、直鎖アルコキシ基であってもよく、分枝を有するアルコキシ基であってもよく、環状構造を有するアルコキシ基であってもよい。

R^{4A}で表されるアルコキシ基は、炭素数１～３０のアルコキシ基であることが好ましい。

R^{4A}で表されるアルコキシ基としては、例えば、メトキシ基、エトキシ基、ｎ－プロポキシ基、又はイソプロポキシ基が好ましい。

[0109] R^{4A}で表されるアルキルチオ基は、アルキル部位の炭素数が１～１２のアルキルチオ基であることが好ましい。

R^{4A}で表されるアルキルチオ基としては、例えば、メチルチオ基又はエチルチオ基が好ましい。

[0110] R^{4A}で表される芳香環基は、置換基を有していてもよく、置換基を有していなくてもよい。R^{4A}で表される芳香環基が置換基を有している場合の置換基としては、例えば、カルバモイル基又はアセチル基が好ましい。

R^{4A}で表される芳香環基は、炭素数６～３０の芳香環基であることが好ましく、炭素数６～２０の芳香環基であることがより好ましい。

R^{4A}で表される芳香環基としては、例えば、アリール基（例：フェニル基、ｐ－トリル基、ナフチル基等）が好ましい。

[0111] 式（Ａ－４）中、R^{5A}は、水素原子、シアノ基、カルバモイル基又はスルファモイル基を表す。R^{5A}は、水素原子又はスルファモイル基であることが好ましい。

[0112] R^{5A}で表されるカルバモイル基は、置換基を有していてもよく、置換基を有していなくてもよい。

R^{5A}で表されるカルバモイル基は、炭素数１～３０のカルバモイル基であることが好ましく、炭素数１～１５のカルバモイル基であることがより好ましい。

R^{5A}で表されるカルバモイル基としては、例えば、Ｎ，Ｎ－ジメチルカルバモイル基、Ｎ，Ｎ－ジエチルカルバモイル基、又はモルホリノカルボニル基が好ましい。

[0113] R^{5A}で表されるスルファモイル基は、置換基を有していてもよく、置換基を有していなくてもよい。R^{5A}で表されるスルファモイル基が置換基を有している場合の置換基としては、例えば、アルキル基が好ましい。

R^{5A}で表されるスルファモイル基としては、例えば、無置換のスルファモイル基、メチルスルファモイル基、又はジメチルスルファモイル基が好ましい。

[0114] 式（Ａ－５）中、R^{6A}は、水素原子、シアノ基、カルバモイル基又はスルファモイル基を表す。R^{6A}は、スルファモイル基であることが好ましい。

[0115] R^{6A}で表されるカルバモイル基は、置換基を有していてもよく、置換基を有していなくてもよい。

R^{6A}で表されるカルバモイル基は、炭素数１～３０のカルバモイル基であることが好ましく、炭素数１～１５のカルバモイル基であることがより好ましい。

R^{6A}で表されるカルバモイル基としては、例えば、Ｎ，Ｎ－ジメチルカルバモイル基、Ｎ，Ｎ－ジエチルカルバモイル基、又はモルホリノカルボニル

基が好ましい。

[0116] R^{6A}で表されるスルファモイル基は、置換基を有していてもよく、置換基を有していなくてもよい。R^{6A}で表されるスルファモイル基が置換基を有している場合の置換基としては、例えば、アルキル基が好ましい。

R^{6A}で表されるスルファモイル基としては、例えば、無置換のスルファモイル基、メチルスルファモイル基、又はジメチルスルファモイル基が好ましい。

[0117] 式（５）中、Ｒは、アルキル基、芳香環基、ヘテロ環基、アシル基又はカルバモイル基を表す。Ｒは、アルキル基又はヘテロ環基であることが好ましい。

Ｒで表されるアルキル基は、直鎖アルキル基であってもよく、分枝を有するアルキル基であってもよく、環状構造を有するアルキル基であってもよい。

Ｒで表されるアルキル基は、炭素数１～１２のアルキル基であることが好ましく、炭素数１～８のアルキル基であることがより好ましい。

Ｒで表されるアルキル基としては、例えば、メチル基、エチル基、ｎ－プロピル基、又はｔ－ブチル基が好ましい。

[0118] Ｒで表される芳香環基は、置換基を有していてもよく、置換基を有していなくてもよい。Ｒで表される芳香環基が置換基を有している場合の置換基としては、例えば、カルバモイル基又はアセチル基が好ましい。

Ｒで表される芳香環基は、炭素数６～３０の芳香環基であることが好ましく、炭素数６～２０の芳香環基であることがより好ましい。

Ｒで表される芳香環基としては、例えば、アリール基（例：フェニル基、ｐ－トリル基、ナフチル基等）が好ましい。

[0119] Ｒで表されるヘテロ環基は、置換基を有していてもよく、置換基を有していなくてもよい。Ｒで表されるヘテロ環基が置換基を有している場合の置換基としては、例えば、メトキシ基又はジメチルアミノ基が好ましい。

Ｒで表されるヘテロ環基は、５員環又は６員環であることが好ましい。

Ｒで表されるヘテロ環基は、環内に酸素原子、硫黄原子及び窒素原子からなる群より選ばれるヘテロ原子の一種以上を含むヘテロ環基であることが好ましい。

Ｒで表されるヘテロ環基のヘテロ原子の数は、１～３であることが好ましく、１又は２であることがより好ましく、１であることが更に好ましい。

[0120] Ｒで表されるアシル基は、炭素数２～３０のアシル基であることが好ましく、炭素数２～１５のアシル基であることがより好ましい。

Ｒで表されるアシル基としては、例えば、アセチル基又はピバロイル基が好ましい。

[0121] Ｒで表されるカルバモイル基は、置換基を有していてもよく、置換基を有していなくてもよい。

Ｒで表されるカルバモイル基は、炭素数１～３０のカルバモイル基であることが好ましく、炭素数１～１５のカルバモイル基であることがより好ましい。

Ｒで表されるカルバモイル基としては、例えば、Ｎ，Ｎ－ジメチルカルバモイル基、Ｎ，Ｎ－ジエチルカルバモイル基、又はモルホリノカルボニル基が好ましい。

[0122] 式（５）中、Ｍは、水素原子を表し、水素原子が解離してアルカリ金属又は有機塩基により塩を形成していてもよい。

アルカリ金属としては、リチウム、ナトリウム、カリウム等が挙げられる。

有機塩基としては、トリエチルアミン、ジイソプロピルエチルアミン、モルホリン等が挙げられる。

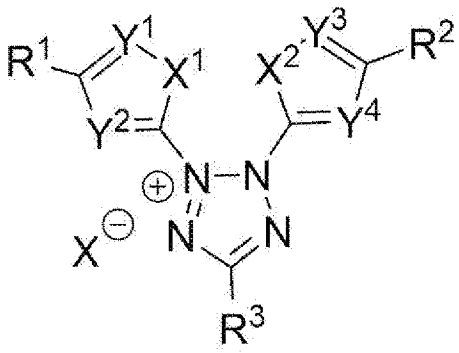
[0123] 式（Ａ－１）、式（Ａ－２）、式（Ａ－３）、式（Ａ－４）及び式（Ａ－５）中、＊は、結合位置を表す。

[0124] 式（５）で表される化合物の好ましい態様としては、$Ａｒ^{1}$が式（Ａ－１）で表される基又は式（Ａ－５）で表される基であり、$Ａｒ^{2}$が式（Ａ－２）で表される基であり、Ｒがアルキル基又はヘテロ環基であり、$Ｘ^{-}$が塩化物イオ

ン又は酢酸イオンである態様が好ましい。

[0125] 式（２）で表される化合物は、下記式（４）で表される化合物又はその互変異性体であることが好ましい。

[0126] [化9]



(4)

[0127] 式（４）中、X^1及びX^2は、それぞれ独立に、－Ｓ－、－Ｏ－又は－Ｎ（－Z^1）－を表し、Z^1は、水素原子、アルキル基、芳香環基又はヘテロ環基を表す。Y^1、Y^2、Y^3及びY^4は、それぞれ独立に、＝Ｃ（－Z^2）－又は＝Ｎ－を表し、Z^2は、水素原子、アルキル基、芳香環基、ヘテロ環基、アシル基、カルバモイル基又はアルキルチオ基を表す。R^1及びR^2は、それぞれ独立に、アルキル基、芳香環基、ヘテロ環基、カルバモイル基、アルキルチオ基又はアリールチオ基を表し、Y^2が＝Ｃ（－Z^2）－を表す場合、R^1とZ^2とが結合して環を形成していてもよく、Y^4が＝Ｃ（－Z^2）－を表す場合、R^2とZ^2とが結合して環を形成していてもよい。R^3は、アルキル基、芳香環基、ヘテロ環基、アシル基又はカルバモイル基を表す。X^-は、塩化物イオン、臭化物イオン、ヨウ化物イオン、酢酸イオン又はリン酸イオンを表す。

[0128] 式（４）におけるX^1及びX^2は、式（３）におけるX^1及びX^2と同義であり、好ましい態様も同様であるため、ここでは説明を省略する。

[0129] 式（４）におけるY^1、Y^2、Y^3及びY^4は、式（３）におけるY^1、Y^2、Y^3及びY^4と同義であり、好ましい態様も同様であるため、ここでは説明を

省略する。

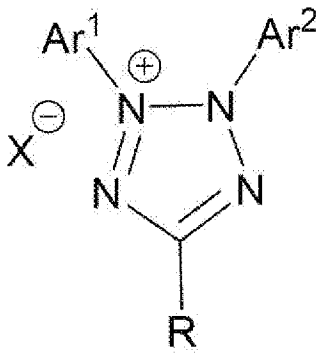
[0130] 式（４）におけるR^1及びR^2は、式（３）におけるR^1及びR^2と同義であり、好ましい態様も同様であるため、ここでは説明を省略する。

[0131] 式（４）におけるR^3は、式（３）におけるR^3と同義であり、好ましい態様も同様であるため、ここでは説明を省略する。

[0132] 式（４）中、X^-は、塩化物イオン、臭化物イオン、ヨウ化物イオン、酢酸イオン又はリン酸イオンを表す。X^-は、塩化物イオン又は酢酸イオンであることが好ましい。

[0133] 式（２）で表される化合物は、下記式（６）で表される化合物又はその互変異性体であることが好ましい。

[0134] [化10]



(6)

[0135] 式（６）中、Ar^1及びAr^2は、それぞれ独立に、式（Ａ－１）で表される基、式（Ａ－２）で表される基、式（Ａ－３）で表される基、式（Ａ－４）で表される基又は式（Ａ－５）で表される基を表し、Ｒは、アルキル基、芳香環基、ヘテロ環基、アシル基又はカルバモイル基を表す。X^-は、塩化物イオン、臭化物イオン、ヨウ化物イオン、酢酸イオン又はリン酸イオンを表す。

[0136] 式（６）中、Ar^1及びAr^2は、それぞれ独立に、既述の、式（Ａ－１）で表される基、式（Ａ－２）で表される基、式（Ａ－３）で表される基、式（Ａ－４）で表される基又は式（Ａ－５）で表される基を表す。

式（６）中、Ａｒ[1]及びＡｒ[2]で表される式（Ａ－１）で表される基、式（Ａ－２）で表される基、式（Ａ－３）で表される基、式（Ａ－４）で表される基及び式（Ａ－５）で表される基における好ましい態様は、式（５）中、Ａｒ[1]及びＡｒ[2]で表される式（Ａ－１）で表される基、式（Ａ－２）で表される基、式（Ａ－３）で表される基、式（Ａ－４）で表される基及び式（Ａ－５）で表される基における好ましい態様と同様である。

[0137] 式（６）におけるＡｒ[1]及びＡｒ[2]は、同じであってもよく、異なっていてもよい。

式（６）中、Ａｒ[1]は、式（Ａ－１）で表される基又は式（Ａ－５）で表される基であることが好ましい。

式（６）中、Ａｒ[2]は、式（Ａ－２）で表される基であることが好ましい。

[0138] 式（６）中、Ｒは、アルキル基、芳香環基、ヘテロ環基、アシル基又はカルバモイル基を表す。Ｒは、アルキル基又はヘテロ環基であることが好ましい。

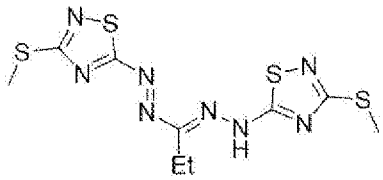
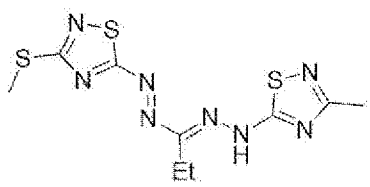
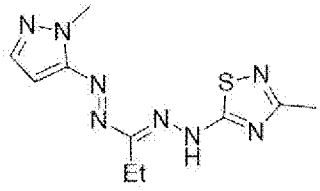
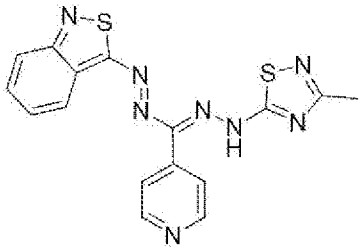
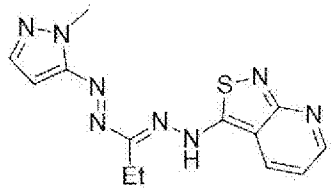
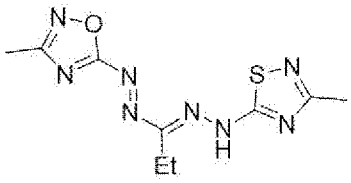
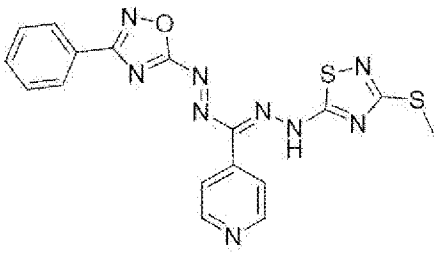
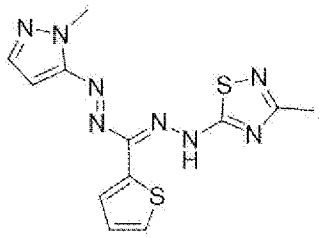
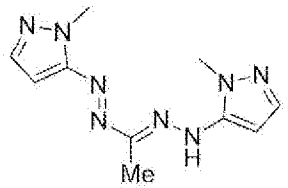
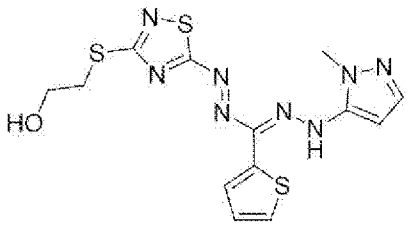
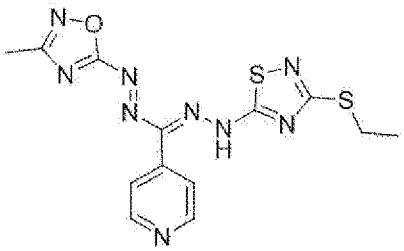
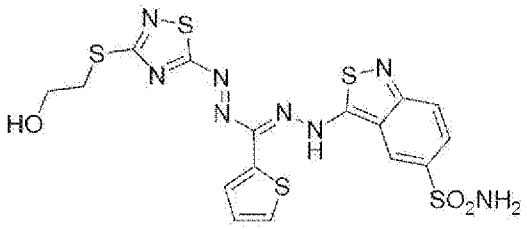
式（６）中、Ｒで表されるアルキル基、芳香環基、ヘテロ環基、アシル基及びカルバモイル基の具体例は、式（５）中、Ｒで表されるアルキル基、芳香環基、ヘテロ環基、アシル基及びカルバモイル基の具体例と同様であり、好ましい態様も同様である。

[0139] 式（６）中、Ｘ[－]は、塩化物イオン、臭化物イオン、ヨウ化物イオン、酢酸イオン又はリン酸イオンを表す。Ｘ[－]は、塩化物イオン又は酢酸イオンであることが好ましい。

[0140] 式（６）で表される化合物の好ましい態様としては、Ａｒ[1]が式（Ａ－１）で表される基又は式（Ａ－５）で表される基であり、Ａｒ[2]が式（Ａ－２）で表される基であり、Ｒがアルキル基又はヘテロ環基であり、Ｘ[－]が塩化物イオン又は酢酸イオンである態様が好ましい。

[0141] 以下に、式（１）で表される化合物の具体例を記載するが、本開示は、これらの例によって限定されるものではない。なお、「Ｍｅ」は、メチル基を表し、「Ｅｔ」は、エチル基を表す（以降において同様）。

[0142] [化11]

[0143] 本開示に係る培地用組成物における式（１）で表される化合物及び式（２

）で表される化合物の合計含有量は、培地用組成物に含まれる水１０００ｍＬに対して、５ｍｇ～４０ｍｇであることが好ましく、５ｍｇ～２０ｍｇであることがより好ましく、１０ｍｇ～２０ｍｇであることが更に好ましい。

[0144] 式（１）で表される化合物は、橙色、赤色、紫色又は青色のいずれかの色を呈することが好ましい。

本開示において「橙色」とは、色相角（ｈ）が４５°～７０°の範囲にある色を指す。また、本開示において「赤色」とは、色相角（ｈ）が２０°～３５°の範囲にある色を指す。また、本開示において「紫色」とは、色相角（ｈ）が３００°～３３０°の範囲にある色を指す。また、本開示において「青色」とは、色相角（ｈ）が２２０°～２７０°の範囲にある色を指す。

[0145] 本開示に係る培地用組成物は、ｐＨ指示薬を更に含むことが好ましい。

ｐＨ指示薬は、特に限定されず、公知の指示薬の中から適宜選択して使用できる。

ｐＨ指示薬の選択に際しては、例えば、糖分解菌との識別をより良好にする観点から、酸性条件においてｐＨ指示薬が呈する色と、式（１）で表される化合物が呈する色とが異なるようにすることが好ましい。

[0146] ｐＨ指示薬の具体例については、例えば、特開２０１０－７５１７９号公報の段落［００２８］に記載がある。これらの記載は、参照により本明細書に取り込まれる。

ｐＨ指示薬としては、フェノールレッド、フェノールフタレイン、ブロモチモールブルー（ＢＴＢ）、メチルイエロー、メチルオレンジ、メチルレッド、ニュートラルレッド、マラカイトグリーン、又はコンゴレッドが好ましい。

[0147] ｐＨ指示薬は、酸性条件において、黄色、橙色、赤色、紫色又は緑色のいずれかの色を呈することが好ましい。

ｐＨ指示薬は、式（１）で表される化合物が呈する色に応じて、選択することが好ましい。例えば、ｐＨ指示薬は、培地上の腸管出血性大腸菌の識別がより容易となる観点から、酸性条件下で、式（１）で表される化合物が呈

する色とのコントラストが高い色を呈するものが好ましい。

[0148] 本開示において「黄色」とは、色相角（ｈ）が８５°～９５°の範囲である色を指す。また、本開示において「緑色」とは、色相角（ｈ）が１３５°～１８０°の範囲である色を指す。「橙色」、「赤色」及び「紫色」については、既述のとおりである。

[0149] ｐＨ指示薬が酸性条件で呈する色と、式（１）で表される化合物が呈する色との好ましい組み合わせを以下に示す。

（ａ）ｐＨ指示薬が酸性条件で呈する色が黄色であり、式（１）で表される化合物が呈する色が赤色、紫色又は青色である。

（ｂ）ｐＨ指示薬が酸性条件で呈する色が橙色であり、式（１）で表される化合物が呈する色が赤色、紫色又は青色である。

（ｃ）ｐＨ指示薬が酸性条件で呈する色が赤色であり、式（１）で表される化合物が呈する色が紫色又は青色である。

（ｄ）ｐＨ指示薬が酸性条件で呈する色が紫色であり、式（１）で表される化合物が呈する色が橙色、赤色又は青色である。

（ｅ）ｐＨ指示薬が酸性条件で呈する色が緑色であり、式（１）で表される化合物が呈する色が橙色、赤色、紫色又は青色である。

[0150] 本開示に係る培地用組成物は、腸管出血性大腸菌以外の検体中の細菌の増殖を抑制する選択剤を更に含むことが好ましい。

このような選択剤としては、胆汁酸塩、亜テルル酸塩（例：亜テルル酸カリウム）等が挙げられる。また、上記選択剤としては、抗生物質が挙げられる。抗生物質としては、セフェム系抗生物質、ペニシリン系抗生物質等が挙げられる。

本開示に係る培地用組成物が少なくとも１種の選択剤を含むことで、Ｏ１５７を含む腸管出血性大腸菌の判別に影響し得る最近の増殖を抑制できる。例えば、セフェム系抗生物質とペニシリン系抗生物質とを併用すると、腸管出血性大腸菌（例えば、Ｏ１５７）と類似の集落色を示す糖（例えば、Ｄ－ソルビット）非分解菌のうち偽陽性として多く捕らえられる菌（例：Morgane

lla、Proteus、Providencia等）の発育が阻止されるため、偽陽性を抑制することができ、２次試験に供される釣菌数の減少が可能となる。

[0151] ペニシリン系抗生物質の具体例としては、ベンジルペニシリン、ベンジルペニシリンベンザチン、フェネチシリン、アスポキシシリン、シクラシリン、レナイイピシリン、スルベニシリン、メチシリン、オキサシリン、ペニシリンＮ、ペニシリンＯ、ペニシリンＶ、ペニシリンＧ、クロキサシリン、ジクロキサシリン、テモシリン、ピペラシリン、アゾシリン、アンピシリン、アモキシシリン、バカンピシリン、タランピシリン、カルベニシリン、チカルシリン、メズロシリン、アバラシリン、スルタミシリン、ピブメシリナム等が挙げられる。

セフェム系抗生物質の具体例としては、セフィキシム、セファロチン、セファゾリン、セフテゾール、セファロリジン、セファレキシン、セファトリジンプロピレングリコール、セファドロキシル、セフラジン、セフロキサジン、セファクロル、セファマンドール、セフォチアム、セフォチアムヘキセチル、セフロキシム、セフロキシムアキセチル、セフメタゾール、セフィミノクス、セフォタキシム、セフチゾキシム、セフメノキシム、セフォペラゾン、セフトリアキソン、セフタジジム、セフピラミド、セフスロジン、セフォジジム、セフピロム、セフォゾプラン、セフェピム、セフォセラス、セフテラムピボキシム、セフェタメトピボキシル、セフジニル、セフポドキシムプロキセチル、セフチブテン、セフジトレンピボキシル、セフカペンピボキシル、セフペラゾン、セフォテタン、ラタモキセフ、フロモキセフ等が挙げられる。

[0152] 本開示に係る培地用組成物は、選択剤を含む場合、選択剤を１種のみ含んでいてもよく、２種以上含んでいてもよい。

本開示に係る培地用組成物が選択剤を含む場合、選択剤の含有率は、目的に応じて適宜設定される。

[0153] 本開示に係る培地用組成物は、腸管出血性大腸菌の検出に通常使用されている培地に含まれる成分を含むことができる。このような成分としては、糖

、ペプトン、エキス、寒天等が挙げられる。これら成分の含有率は、目的に応じて適宜設定される。

[0154] 糖の具体例としては、Ｄ－ソルビット（Ｄ－ソルビトール）、イノシトール、アドニトール、ラフィノース、ラムノース、サリシン、ソルボース等が挙げられる。

ペプトンの具体例としては、カゼインペプトン、大豆ペプトン等が挙げられる。

エキスの具体例としては、酵母エキス等が挙げられる。

[0155] 本開示に係る培地用組成物は、培地用組成物中の寒天の含有率を調整することで、培地を液状培地、半流動培地又は固形培地にすることができる。液状培地は、マイクロプレート等を用いた微量液体希釈法に有用である。半流動培地は、穿刺培養に適しており、菌の保存、検体の輸送等に用いられる培地として有用である。固形培地は、一般的な細菌培養に用いられる培地として、また、平板希釈法に用いられる培地として有用である。

[0156] ［検体中の腸管出血性大腸菌の検出方法］

本開示に係る検体中の腸管出血性大腸菌の検出方法（以下、単に「検出方法」ともいう。）は、既述の本開示に係る腸管出血性大腸菌検出用培地用組成物を含む培地で検体を培養し、腸管出血性大腸菌の有無を検出することを含む。

本開示に係る検出方法は、色素化合物の使用が少量でも腸管出血性大腸菌を良好に視認させることができる腸管出血性大腸菌検出用培地用組成物を含む培地で検体を培養するため、腸管出血性大腸菌の検出感度が高い。

[0157] 本開示に係る検出方法の好ましい例としては、以下の方法が挙げられる。

式（１）で表される化合物及び水を含む本開示に係る培地用組成物に、例えば、過酸化水素水等の酸化剤を添加する。この酸化剤の添加により、培地用組成物中の式（１）で表される化合物は、その酸化体である式（２）で表される化合物に変化し、式（１）で表される化合物が呈していた色が消える。酸化剤の添加量は、酸化剤が過酸化水素水である場合には、本開示に係る

培地用組成物に含まれる式（１）で表される化合物の量と等モル量であることが好ましい。次いで、式（２）で表される化合物及び水を含む本開示に係る培地用組成物に、好ましくはｐＨ指示薬を添加した後、既述の選択剤、糖、エキス等の添加剤を添加し、撹拌する。次いで、寒天を添加し、加熱撹拌した後、冷却することにより、固形状の培地を得る。寒天の添加量によって、液状又は半流動状の培地を得ることもできる。次いで、得られた培地に検体を接種し、培養する。培養条件としては、例えば、３５℃～３７℃の温度で１２時間～４８時間培養する条件が挙げられる。

上記の検出方法では、腸管出血性大腸菌の還元力によって、式（１）で表される化合物の酸化体である式（２）で表される化合物が還元され、式（１）で表される化合物に変化し、腸管出血性大腸菌が存在する集落（コロニー）が着色する。検体中に肺炎桿菌（K. pneumoniae）等の糖分解菌が存在する場合には、糖分解菌が糖を分解することで培地のｐＨが下がり、糖分解菌が存在する集落（コロニー）がｐＨ指示薬によって着色する。上記の検出方法によれば、式（１）で表される化合物を少量使用することで、腸管出血性大腸菌と糖分解菌とを肉眼で容易に識別することが可能となる。

[0158] 本開示に係る検出方法における検体としては、食中毒が疑われる食品（例：弁当、給食、寿司等）、水（例：河川、湖、井戸、上水道等の水、地下水など）、糞便（例：検便検体）等が挙げられる。

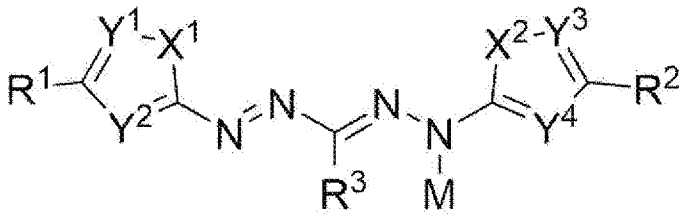
[0159] ［式（３）で表される化合物、その互変異性体、又は、それらのアルカリ金属若しくは有機塩基との塩］

本開示に係る化合物、その互変異性体、又は、それらのアルカリ金属若しくは有機塩基との塩は、式（３）で表される化合物、その互変異性体、又は、それらのアルカリ金属若しくは有機塩基との塩である。

本開示に係る式（３）で表される化合物、その互変異性体、又は、それらのアルカリ金属若しくは有機塩基との塩は、ホルマザン色素として、好適に用いることができる。

[0160]

[化12]



(3)

[0161] 式（３）中、Ｘ[1]及びＸ[2]は、それぞれ独立に、－Ｓ－、－Ｏ－又は－Ｎ（－Ｚ[1]）－を表し、Ｚ[1]は、水素原子、アルキル基、芳香環基又はヘテロ環基を表す。Ｙ[1]、Ｙ[2]、Ｙ[3]及びＹ[4]は、それぞれ独立に、＝Ｃ（－Ｚ[2]）－又は＝Ｎ－を表し、Ｚ[2]は、水素原子、アルキル基、芳香環基、ヘテロ環基、アシル基、カルバモイル基又はアルキルチオ基を表す。Ｒ[1]及びＲ[2]は、それぞれ独立に、アルキル基、芳香環基、ヘテロ環基、カルバモイル基、アルキルチオ基又はアリールチオ基を表し、Ｙ[2]が＝Ｃ（－Ｚ[2]）－を表す場合、Ｒ[1]とＺ[2]とが結合して環を形成していてもよく、Ｙ[4]が＝Ｃ（－Ｚ[2]）－を表す場合、Ｒ[2]とＺ[2]とが結合して環を形成していてもよい。Ｒ[3]は、アルキル基、芳香環基、ヘテロ環基、アシル基又はカルバモイル基を表す。Ｍは、水素原子を表し、上記水素原子が解離してアルカリ金属又は有機塩基により塩を形成していてもよい。

[0162] 本開示に係る式（３）で表される化合物、その互変異性体、又は、それらのアルカリ金属若しくは有機塩基との塩は、本開示に係る培地用組成物の項において説明した式（３）で表される化合物、その互変異性体、又は、それらのアルカリ金属若しくは有機塩基との塩と同義であり、好ましい態様も同様であるため、ここでは説明を省略する。

[0163] 本開示に係る式（３）で表される化合物の製造方法は、特に限定されない。本開示に係る式（３）で表される化合物は、公知の方法により又公知の方法を参照することにより製造することができる。本開示に係る式（３）で表

される化合物は、例えば、国際公開第２０１８／０５１６８６号に記載の方法に準拠して合成することができる。

具体的には、原料である芳香族ヒドラジンとアルデヒドとを縮合し、ヒドラゾン化合物を得る。次いで、得られたヒドラゾン化合物に、別途調製したジアゾニウム塩を滴下することで合成することができる。

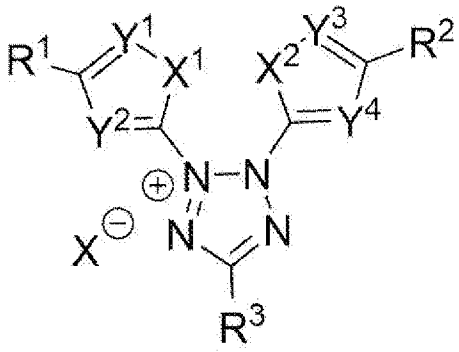
本開示に係る式（３）で表される化合物は、後述の実施例に記載の方法により、好適に製造することができる。

[0164] ［式（４）で表される化合物又はその互変異性体］

本開示に係る化合物又はその互変異性体は、式（４）で表される化合物又はその互変異性体である。

本開示に係る式（４）で表される化合物は、本開示に係る式（３）で表される化合物の酸化体である。

[0165] [化13]



(4)

[0166] 式（４）中、X^1及びX^2は、それぞれ独立に、－Ｓ－、－Ｏ－又は－Ｎ（－Z^1）－を表し、Z^1は、水素原子、アルキル基、芳香環基又はヘテロ環基を表す。Y^1、Y^2、Y^3及びY^4は、それぞれ独立に、＝Ｃ（－Z^2）－又は＝Ｎ－を表し、Z^2は、水素原子、アルキル基、芳香環基、ヘテロ環基、アシル基、カルバモイル基又はアルキルチオ基を表す。R^1及びR^2は、それぞれ独立に、アルキル基、芳香環基、ヘテロ環基、カルバモイル基、アルキルチオ

基又はアリールチオ基を表し、Y^2が＝Ｃ（－Z^2）－を表す場合、R^1とZ^2とが結合して環を形成していてもよく、Y^4が＝Ｃ（－Z^2）－を表す場合、R^2とZ^2とが結合して環を形成していてもよい。R^3は、アルキル基、芳香環基、ヘテロ環基、アシル基又はカルバモイル基を表す。X^-は、塩化物イオン、臭化物イオン、ヨウ化物イオン、酢酸イオン又はリン酸イオンを表す。

[0167] 本開示に係る式（４）で表される化合物又はその互変異性体は、本開示に係る培地用組成物の項において説明した式（４）で表される化合物又はその互変異性体と同義であり、好ましい態様も同様であるため、ここでは説明を省略する。

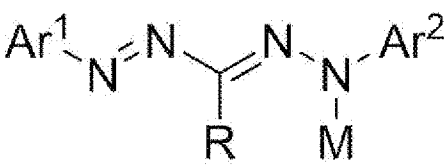
[0168] 本開示に係る式（４）で表される化合物の製造方法は、特に限定されない。本開示に係る式（４）で表される化合物は、公知の方法により又公知の方法を参照することにより製造することができる。本開示に係る式（４）で表される化合物は、本開示に係る式（３）で表される化合物を用いて製造することができる。具体的には、本開示に係る式（３）で表される化合物を、過酸化水素等の酸化剤を用いて酸化することにより製造することができる。

[0169] ［式（５）で表される化合物、その互変異性体、又は、それらのアルカリ金属若しくは有機塩基との塩］

本開示に係る化合物、その互変異性体、又は、それらのアルカリ金属若しくは有機塩基との塩は、式（５）で表される化合物、その互変異性体、又は、それらのアルカリ金属若しくは有機塩基との塩である。

本開示に係る式（５）で表される化合物、その互変異性体、又は、それらのアルカリ金属若しくは有機塩基との塩は、ホルマザン色素として、好適に用いることができる。

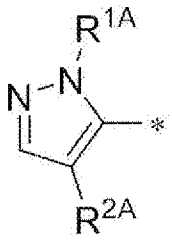
[0170] [化14]



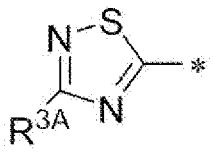
(5)

[0171] 式（５）中、Ａｒ[1]及びＡｒ[2]は、それぞれ独立に、下記式（Ａ－１）で表される基、下記式（Ａ－２）で表される基、下記式（Ａ－３）で表される基、下記式（Ａ－４）で表される基又は下記式（Ａ－５）で表される基を表し、Ｒは、アルキル基、芳香環基、ヘテロ環基、アシル基又はカルバモイル基を表す。Ｍは、水素原子を表し、上記水素原子が解離してアルカリ金属又は有機塩基により塩を形成していてもよい。

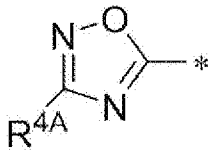
[0172] [化15]



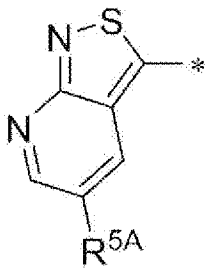
(A-1)



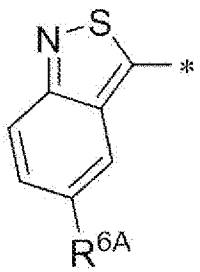
(A-2)



(A-3)



(A-4)



(A-5)

[0173] 式（Ａ－１）中、Ｒ[1A]は、水素原子、アルキル基、フェニル基、アシル基又はアルコキシカルボニル基を表し、Ｒ[2A]は、水素原子、シアノ基、カルバモイル基又はアルキルスルホニル基を表す。式（Ａ－２）中、Ｒ[3A]は、アルキル基、アルコキシ基、アルキルチオ基又は芳香環基を表す。式（Ａ－３）中、Ｒ[4A]は、アルキル基、アルコキシ基、アルキルチオ基又は芳香環基を表す。式（Ａ－４）中、Ｒ[5A]は、水素原子、シアノ基、カルバモイル基又はスルファモイル基を表す。式（Ａ－５）中、Ｒ[6A]は、水素原子、シアノ基、カ

ルバモイル基又はスルファモイル基を表す。式（Ａ－１）、式（Ａ－２）、式（Ａ－３）、式（Ａ－４）及び式（Ａ－５）中、＊は、結合位置を表す。

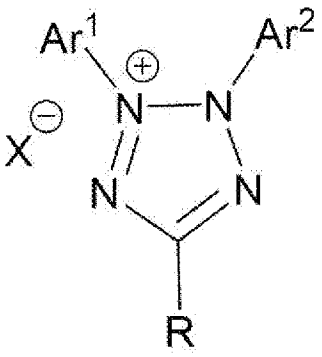
[0174] 本開示に係る式（５）で表される化合物、その互変異性体、又は、それらのアルカリ金属若しくは有機塩基との塩は、本開示に係る培地用組成物の項において説明した式（５）で表される化合物、その互変異性体、又は、それらのアルカリ金属若しくは有機塩基との塩と同義であり、好ましい態様も同様であるため、ここでは説明を省略する。

[0175] ［式（６）で表される化合物又はその互変異性体］

本開示に係る化合物又はその互変異性体は、式（６）で表される化合物又はその互変異性体である。

本開示に係る式（６）で表される化合物は、本開示に係る式（５）で表される化合物の酸化体である。

[0176] [化16]



(6)

[0177] 式（６）中、Ａｒ[1]及びＡｒ[2]は、それぞれ独立に、式（Ａ－１）で表される基、式（Ａ－２）で表される基、式（Ａ－３）で表される基、式（Ａ－４）で表される基又は式（Ａ－５）で表される基を表し、Ｒは、アルキル基、芳香環基、ヘテロ環基、アシル基又はカルバモイル基を表す。Ｘ[－]は、塩化物イオン、臭化物イオン、ヨウ化物イオン、酢酸イオン又はリン酸イオンを表す。

[0178] 式（６）における式（Ａ－１）で表される基、式（Ａ－２）で表される基

、式（Ａ－３）で表される基、式（Ａ－４）で表される基及び式（Ａ－５）で表される基は、式（５）における式（Ａ－１）で表される基、式（Ａ－２）で表される基、式（Ａ－３）で表される基、式（Ａ－４）で表される基及び式（Ａ－５）で表される基と同義である。

[0179] 本開示に係る式（６）で表される化合物又はその互変異性体は、本開示に係る培地用組成物の項において説明した式（６）で表される化合物又はその互変異性体と同義であり、好ましい態様も同様であるため、ここでは説明を省略する。

[0180] ［発消色性組成物］

本開示は、第一の発消色性組成物と第二の発消色性組成物とを開示する。

本開示において、第一の発消色性組成物と第二の発消色性組成物とに共通する事項については、「本開示に係る発消色性組成物」と記載して説明する。

本開示において、「発消色性」とは、酸化還元により極大吸収波長が変化することで発色したり、消色したりする性質を意味する。

[0181] 第一の発消色性組成物は、式（３）で表される化合物、その互変異性体、これらのアルカリ金属若しくは有機塩基との塩、又は、式（４）で表される化合物若しくはその互変異性体と、水と、を含む。

以下では、「式（３）で表される化合物、その互変異性体、及び、これらのアルカリ金属又は有機塩基との塩」を「式（３）で表される化合物等」ともいう。また、「式（４）で表される化合物又はその互変異性体」を「式（４）で表される化合物等」ともいう。

[0182] 第一の発消色性組成物に含まれる式（３）で表される化合物等及び式（４）で表される化合物等は、酸化還元により発色又は消色する化合物である。

式（４）で表される化合物等は、式（３）で表される化合物等の酸化体であり、式（３）で表される化合物等が酸化されて式（４）で表される化合物等に変化することで、式（３）で表される化合物等が呈していた色が消える。また、式（４）で表される化合物等が還元されて式（３）で表される化合

物等に変化することで発色する。

[0183] 第二の発消色性組成物は、式（５）で表される化合物、その互変異性体、これらのアルカリ金属若しくは有機塩基との塩、又は、式（６）で表される化合物若しくはその互変異性体と、水と、を含む。

以下では、「式（５）で表される化合物、その互変異性体、並びに、これらのアルカリ金属及び有機塩基との塩」を「式（５）で表される化合物等」ともいう。また、「式（６）で表される化合物及びその互変異性体」を「式（６）で表される化合物等」ともいう。

[0184] 第二の発消色性組成物に含まれる式（５）で表される化合物等及び式（６）で表される化合物等は、酸化還元により発色又は消色する化合物である。

式（６）で表される化合物等は、式（５）で表される化合物等の酸化体であり、式（５）で表される化合物等が酸化されて式（６）で表される化合物等に変化することで、式（５）で表される化合物等が呈していた色が消える。また、式（６）で表される化合物等が還元されて式（５）で表される化合物等に変化することで発色する。

[0185] 以下では、「式（３）で表される化合物、その互変異性体、これらのアルカリ金属及び有機塩基との塩、並びに、式（４）で表される化合物及びその互変異性体」を「第一の特定化合物」と総称する場合がある。また、「式（５）で表される化合物、その互変異性体、これらのアルカリ金属及び有機塩基との塩、並びに、式（６）で表される化合物及びその互変異性体」を「第二の特定化合物」と総称する場合がある。また、「第一の特定化合物及び第二の特定化合物」を「特定化合物」と総称する場合がある。

[0186] 第一の発消色性組成物は、第一の特定化合物を１種のみ含んでいてもよく、２種以上含んでいてもよい。

第一の発消色性組成物における第一の特定化合物の含有率は、例えば、第一の特定化合物における置換基の種類により決められる。

第一の発消色性組成物における第一の特定化合物の含有率は、発消色性組成物の全質量に対して、１０質量％～５０質量％であることが好ましく、１

０質量％～３０質量％であることがより好ましく、１０質量％～２０質量％であることが更に好ましい。

第一の発消色性組成物における第一の特定化合物の含有率が、発消色性組成物の全質量に対して１０質量％以上であると、被着色媒体上における色素の着色濃度を確保することができる。

第一の発消色性組成物における第一の特定化合物の含有率が、発消色性組成物の全質量に対して５０質量％以下であると、低粘度の発消色性組成物を調製することができるため、発消色性組成物の取り扱いが容易となる。

[0187] 第二の発消色性組成物は、第二の特定化合物を１種のみ含んでいてもよく、２種以上含んでいてもよい。

第二の発消色性組成物における第二の特定化合物の含有率は、例えば、第二の特定化合物の種類、詳細には、第二の特定化合物における置換基の種類により決められる。

第二の発消色性組成物における第二の特定化合物の含有率は、発消色性組成物の全質量に対して、１０質量％～５０質量％であることが好ましく、１０質量％～３０質量％であることがより好ましく、１０質量％～２０質量％であることが更に好ましい。

第二の発消色性組成物における第二の特定化合物の含有率が、発消色性組成物の全質量に対して１０質量％以上であると、被着色媒体上における色素の着色濃度を確保することができる。

第二の発消色性組成物における第二の特定化合物の含有率が、発消色性組成物の全質量に対して５０質量％以下であると、低粘度の発消色性組成物を調製することができるため、発消色性組成物の取り扱いが容易となる。

[0188] 本開示に係る発消色性組成物は、水を含む。

本開示に係る発消色性組成物は、媒体として水を用い、その水の中に、特定化合物を溶解させることによって作製することができる。

水としては、特に限定されないが、例えば、不純物が少ないとの観点から、蒸留水、イオン交換水、純水等が好ましく用いられる。

本開示に係る発消色性組成物における水の含有率は、発消色性組成物の全質量に対して、５０質量％～９０質量％であることが好ましく、７０質量％～９０質量％であることがより好ましく、８０質量％～９０質量％であることが更に好ましい。

[0189] 本開示に係る発消色性組成物には、水に加えて、水以外の水性媒体を含有させることができる。また、本開示に係る発消色性組成物は、本開示の効果を損なわない範囲内において、必要に応じて、親油性媒体を含有させてもよい。

水以外の水性溶媒としては、例えば、水に可溶（好ましくは２５℃において可溶）な有機溶媒が挙げられる。このような有機溶媒としては、メタノール、エタノール、イソプロパノール、ｎ－プロパノール、ブタノール、ｎ－ペンタノール、プロピレングリコール、エチレングリコールモノエチルエーテル、１，２－ヘキサンジオール、ブトキシエタノール、フェノキシエタノール、ベンジルアルコール、プロピレンカーボネート、１，２－プロパンジオール、１，３－プロパンジオール、１－メトキシ－２－プロパノール、１－エトキシ－２－プロパノール、１，３－ブタンジオール、１，４－ブタンジオール、ジエチレングリコール、ジエチレングリコールのモノメチルエーテル、ジエチレングリコールのモノエチルエーテル、ジプロピレングリコール、ジプロピレングリコールのモノメチルエーテル、ジプロピレングリコールのモノエチルエーテル等が挙げられる。

[0190] 本開示に係る発消色性組成物のｐＨは、特に限定されず、目的に応じて適宜設定される。本開示に係る発消色性組成物のｐＨは、例えば、特定化合物の安定性の観点から、５～１１であることが好ましく、６～１１であることがより好ましく、７～１０であることが更に好ましい。本開示におけるｐＨの値は、２５℃における値である。

[0191] 本開示に係る発消色性組成物は、ｐＨ調整剤を含んでいてもよい。

ｐＨ調整剤としては、水酸化ナトリウム、水酸化カリウム、炭酸ナトリウム、炭酸カリウム、炭酸水素ナトリウム、炭酸水素カリウム、アンモニア、

モノエタノールアミン、ジエタノールアミン、グアニジン等が挙げられる。

[0192] 本開示に係る発消色性組成物は、界面活性剤を含むことができる。

本開示に係る発消色性組成物は、界面活性剤を含む場合、界面活性剤を１種のみ含んでいてもよく、２種以上含んでいてもよい。

界面活性剤としては、アニオン性界面活性剤、ノニオン性界面活性剤、カチオン性界面活性剤、両性又は双イオン性界面活性剤等が挙げられる。

[0193] アニオン性界面活性剤としては、モノアルキル硫酸又はその塩、アルキルベンゼンスルホン酸又はその塩、α－オレフィンスルホネート又はその塩等が挙げられ、特に、ドデシルベンゼンスルホン酸ナトリウム、ドデシル硫酸ナトリウム、スルホコハク酸ハーフエステルのアルカリ塩（例えば、モノオクチルスルホコハク酸二ナトリウム塩）、鎖モノアルキルエトキシスルホコハク酸アルカリ塩等が挙げられる。

[0194] ノニオン性界面活性剤としては、アルキルポリグリコシド化合物、ソルビタンエステル化合物、アセチレングリコール化合物等が挙げられる。

[0195] カチオン性界面活性剤としては、第四級アンモニウム化合物が好ましく、長鎖アルキル基を有する第四級アンモニウム化合物がより好ましい。長鎖アルキル基としては、例えば、炭素数１０以上のアルキル基が挙げられ、炭素数１０～２４のアルキル基が好ましい。

カチオン性界面活性剤の具体例としては、セチルトリメチルアンモニウムクロリド、ジメチルステアリルアンモニウムクロリド、トリメチルアセチルアンモニウムブロミド、ステアリルトリメチルアンモニウムクロリド、ジメチルステアリルベンジルアンモニウムクロリド、ベンジルテトラデシルジメチルアンモニウムクロリド、ジメチルジ－水素化－牛脂アンモニウムクロリド、ラウリルジメチルベンジルアンモニウムクロリド、ベヘニルトリメチルアンモニウムクロリド、ラウリルトリメチルアンモニウムクロリド、トリス（オリゴオキシ－エチル）アルキルアンモニウムホスフェート、セチルピリジニウムクロリド等が挙げられる。

[0196] 両性又は双イオン性界面活性剤としては、脂肪酸－アミドアルキルベタイ

ン、スルホベタイン等のベタイン化合物が挙げられる。ベタイン化合物の具体例としては、ラウリルヒドロキシスルホベタイン等が挙げられる。

[0197] 本開示に係る発消色性組成物は、増粘剤を含むことができる。

増粘剤としては、オレイン酸、セチルアルコール、オレイルアルコール、塩化ナトリウム、セテアリルアルコール、ステアリルアルコール等が挙げられる。

[0198] 本開示に係る発消色性組成物における増粘剤の含有率は、発消色性組成物の全質量に対して、０．０５質量％～２０質量％であることが好ましく、０．１質量％～１０質量％であることがより好ましく、０．５質量％～５質量％であることが更に好ましい。

[0199] 本開示に係る発消色性組成物は、本開示の効果を損なわない範囲において、必要に応じて、特定化合物以外の着色化合物（例：顔料、染料等）を含んでいてもよい。

[0200] 本開示に係る発消色性組成物は、バインダーポリマー、重合性化合物、重合開始剤等を含んでいてもよい。バインダーポリマー、重合性化合物、及び重合開始剤としては、公知のものを用いることができる。

[0201] 本開示に係る発消色性組成物が含んでいてもよいその他の添加剤としては、シリコーンオイル、炭化水素オイル、ポリオレフィン、脂肪酸エステル等が挙げられる。

本開示に係る発消色性組成物は、本開示における効果を害しない範囲内において、必要に応じて、その他の添加剤を更に含むことができる。各用途における添加剤の例を後述する。

[0202] ＜カラートナー＞

本開示に係る発消色性組成物は、カラートナー用発消色性組成物として用いてもよい。

本開示に係る発消色性組成物をカラートナー用途として用いる場合、カラートナー用発消色性組成物における特定化合物の含有率は、カラートナー用発消色性組成物の全質量に対して、０．１質量％以上であることが好ましく

、１質量％～２０質量％であることがより好ましく、２質量％～１０質量％であることが更に好ましい。

[0203] 本開示に係る発消色性組成物をカラートナー用途として用いる場合、カラートナー用発消色性組成物は、バインダー樹脂を含むことが好ましい。

バインダー樹脂としては、一般に使用される全てのバインダーを使用することができる。バインダー樹脂としては、例えば、スチレン系樹脂、アクリル系樹脂、スチレン／アクリル系樹脂、ポリエステル樹脂等の樹脂が挙げられる。

[0204] 本開示に係る発消色性組成物をカラートナー用途として用いる場合、カラートナー用発消色性組成物は、例えば、流動性を高める観点及び帯電を制御する観点から、無機粒子及び／又は有機粒子を含むことができる。

カラートナー用発消色性組成物は、例えば、表面をアルキル基含有のカップリング剤等で処理したシリカ粒子又はチタニア粒子（所謂、二酸化チタン）を含むことが好ましく、これら粒子の数平均一次粒子径は、１０ｎｍ～５００ｎｍであることが好ましい。また、カラートナー用発消色性組成物におけるこれら粒子の含有率は、カラートナー用発消色性組成物の全質量に対して０．１質量％～２０質量％であることが好ましい。

[0205] 本開示に係る発消色性組成物をカラートナー用途として用いる場合、カラートナー用発消色性組成物は、離型剤を含むことが好ましい。

離型剤としては、従来使用されている離型剤については全て使用することができる。離型剤としては、具体的には、低分子量ポリプロピレン、低分子量ポリエチレン、エチレン－プロピレン共重合体等のポリオレフィン、マイクロクリスタリンワックス、カルナウバロウワックス、サゾールワックス、パラフィンワックスなどが挙げられる。

カラートナー用発消色性組成物における離型剤の含有率は、カラートナー用発消色性組成物の全質量に対して、１質量％～５質量％であることが好ましい。

[0206] 本開示に係る発消色性組成物をカラートナー用途として用いる場合、カラ

ートナー用発消色性組成物は、荷電制御剤を含むことが好ましい。

荷電制御剤としては、第四級アンモニウム塩化合物、カリックスアレン化合物等が挙げられる。

[0207] 本開示に係る発消色性組成物をカラートナー用途として用いる場合、カラートナー用発消色性組成物は、キャリアを含むことができる。

キャリアとしては、鉄、フェライト等の磁性材料粒子のみで構成される非被覆キャリアであってもよく、磁性材料粒子の表面を樹脂等によって被覆した樹脂被覆キャリアであってもよい。

キャリアの体積平均粒子径は、３０μｍ～１５０μｍであることが好ましい。

キャリアの体積平均粒子径は、動的光散乱法を採用した粒度分布測定装置を用いて測定される値である。

[0208] ＜インクジェット記録用インク＞

本開示に係る発消色性組成物は、インクジェット記録用インクとして用いてもよい。

本開示に係る発消色性組成物をインクジェット記録用インク用途として用いる場合、インクジェット記録用インクは、例えば、媒体として水を含む水性媒体を用い、その水性溶媒の中に、特定化合物の少なくとも１種を溶解させることによって得られるインクであることが好ましい。

[0209] 本開示に係る発消色性組成物をインクジェット記録用インク用途として用いる場合、インクジェット記録用インクにおける特定化合物の含有率は、インクジェット記録用インクの全質量に対して、０．２質量％～１０質量％であることが好ましく、１質量％～６質量％であることがより好ましい。

[0210] 本開示に係る発消色性組成物をインクジェット記録用インク用途として用いる場合、インクジェット記録用インクは、他の色素を含んでいてもよい。２種類以上の色素を含む場合には、色素の合計含有率が、上記範囲内であることが好ましい。

[0211] 水を含む水性媒体は、水を主成分として含むものであることがより好まし

い。「水を主成分として含む」とは、水性媒体に占める水の割合が５０質量％以上であることを意味し、６０質量％以上であることが好ましく、７０質量％以上であることがより好ましく、８０質量％以上であることが更に好ましい。水性媒体に占める水の割合は、１００質量％であってもよい。

水としては、特に限定されないが、例えば、不純物が少ないとの観点から、蒸留水、イオン交換水、純水等が好ましく用いられる。

[0212] 水性媒体に含まれる水以外の媒体としては、水混和性有機溶剤が挙げられる。

水混和性有機溶剤としては、一価アルコール（例：メタノール、エタノール、プロパノール、イソプロパノール、ブタノール、イソブタノール、ｓｅｃ－ブタノール、ｔ－ブタノール、ペンタノール、ヘキサノール、シクロヘキサノール、ベンジルアルコール等）、多価アルコール（例：エチレングリコール、ジエチレングリコール、トリエチレングリコール、ポリエチレングリコール、プロピレングリコール、ジプロピレングリコール、ポリプロピレングリコール、ブチレングリコール、ヘキサンジオール、ペンタンジオール、グリセリン、ヘキサントリオール、チオジグリコール等）、グリコール誘導体（例：エチレングリコールモノメチルエーテル、エチレングリコールモノエチルエーテル、エチレングリコールモノブチルエーテル、ジエチレングリコールモノメチルエーテル、ジエチレングリコールモノブチルエーテル、プロピレングリコールモノメチルエーテル、プロピレングリコールモノブチルエーテル、ジプロピレングリコールモノメチルエーテル、トリエチレングリコールモノメチルエーテル、エチレングリコールジアセテート、エチレングリコールモノメチルエーテルアセテート、トリエチレングリコールモノメチルエーテル、トリエチレングリコールモノエチルエーテル、エチレングリコールモノフェニルエーテル等）、アミン（例：エタノールアミン、ジエタノールアミン、トリエタノールアミン、Ｎ－メチルジエタノールアミン、Ｎ－エチルジエタノールアミン、モルホリン、Ｎ－エチルモルホリン、エチレンジアミン、ジエチレントリアミン、トリエチレンテトラミン、ポリエチレ

ンイミン、テトラメチルプロピレンジアミン等）、その他の極性溶媒（例：ホルムアミド、Ｎ，Ｎ－ジメチルホルムアミド、Ｎ，Ｎ－ジメチルアセトアミド、ジメチルスルホキシド、スルホラン、２－ピロリドン、Ｎ－メチル－２－ピロリドン、Ｎ－ビニル－２－ピロリドン、２－オキサゾリドン、１，３－ジメチル－２－イミダゾリジノン、アセトニトリル、アセトン等）などが挙げられる。水混和性有機溶剤は、２種以上を併用してもよい。

[0213] 本開示に係る発消色性組成物をインクジェット記録用インク用途として用いる場合、インクジェット記録用インクは、必要に応じて、乾燥防止剤（「湿潤剤」ともいう。）、褪色防止剤、乳化安定剤、浸透促進剤、紫外線吸収剤、防腐剤、防黴剤、ｐＨ調整剤、表面張力調整剤、消泡剤、粘度調整剤、分散剤、分散安定剤、防錆剤、キレート剤等の公知の添加剤を含んでいてもよい。

[0214] 乾燥防止剤は、インクジェット記録方式に用いるノズルのインク噴射口において、インクジェット記録用インクが乾燥することによる目詰まりを防止する目的で使用される。

乾燥防止剤としては、水より蒸気圧の低い水溶性有機溶剤が好ましい。

乾燥防止剤の具体例としては、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、ポリエチレングリコール、チオジグリコール、ジチオジグリコール、２－メチル－１，３－プロパンジオール、１，２，６－ヘキサントリオール、アセチレングリコール誘導体、グリセリン、トリメチロールプロパン等に代表される多価アルコール化合物；エチレングリコールモノメチルエーテル、エチレングリコールモノエチルエーテル、ジエチレングリコールモノメチルエーテル、ジエチレングリコールモノエチルエーテル、トリエチレングリコールモノエチルエーテル、トリエチレングリコールモノブチルエーテル等の多価アルコールの低級アルキルエーテル化合物；２－ピロリドン、Ｎ－メチル－２－ピロリドン、１，３－ジメチル－２－イミダゾリジノン、Ｎ－エチルモルホリン等の複素環化合物；スルホラン、ジメチルスルホキシド、３－スルホレン等の含硫黄化合物；ジアセトンアルコー

ル、ジエタノールアミン等の多官能化合物；尿素誘導体；などが挙げられる。これらの中でも、乾燥防止剤としては、グリセリン、ジエチレングリコール等の多価アルコール化合物が好ましい。

インクジェット記録用インクは、乾燥防止剤を含む場合、乾燥防止剤を１種のみ含んでいてもよく、２種以上含んでいてもよい。

インクジェット記録用インクが乾燥防止剤を含む場合、乾燥防止剤の含有率は、インクジェット記録用インクの全質量に対して１０質量％～５０質量％であることが好ましい。

[0215] 紫外線吸収剤は、画像の保存性を向上させる目的で使用される。

紫外線吸収剤としては、特開昭５８－１８５６７７号公報、特開昭６１－１９０５３７号公報、特開平２－７８２号公報、特開平５－１９７０７５号公報、特開平９－３４０５７号公報等に記載のベンゾトリアゾール系化合物；特開昭４６－２７８４号公報、特開平５－１９４４８３号公報、米国特許第３２１４４６３号明細書等に記載のベンゾフェノン系化合物；特公昭４８－３０４９２号公報、特公昭５６－２１１４１号公報、特開平１０－８８１０６号公報等に記載の桂皮酸系化合物；特開平４－２９８５０３号公報、特開平８－５３４２７号公報、特開平８－２３９３６８号公報、特開平１０－１８２６２１号公報、特表平８－５０１２９１号公報等に記載のトリアジン系化合物；リサーチ・ディスクロージャーＮｏ．２４２３９号に記載の化合物；スチルベン系化合物、ベンズオキサゾール系化合物等に代表される紫外線を吸収して蛍光を発する化合物（所謂、蛍光増白剤）；等が挙げられる。

インクジェット記録用インクは、紫外線吸収剤を含む場合、紫外線吸収剤を１種のみ含んでいてもよく、２種以上含んでいてもよい。

インクジェット記録用インクが紫外線吸収剤を含む場合、紫外線吸収剤の含有率は、目的に応じて、適宜設定される。

[0216] 褪色防止剤は、画像の保存性を向上させる目的で使用される。

褪色防止剤としては、各種の有機系の褪色防止剤及び金属錯体系の褪色防止剤を使用することができる。

有機系の褪色防止剤としてはハイドロキノン化合物、アルコキシフェノール化合物、ジアルコキシフェノール化合物、フェノール化合物、アニリン化合物、アミン化合物、インダン化合物、クロマン化合物、アルコキシアニリン化合物、ヘテロ環化合物等が挙げられる。

金属錯体系の褪色防止剤としては、ニッケル錯体、亜鉛錯体等が挙げられる。金属錯体系の褪色防止剤の具体例としては、リサーチ・ディスクロージャーＮｏ．１７６４３の第ＶＩＩのＩ項乃至Ｊ項、リサーチ・ディスクロージャーＮｏ．１５１６２、リサーチ・ディスクロージャーＮｏ．１８７１６の６５０頁左欄、リサーチ・ディスクロージャーＮｏ．３６５４４の５２７頁、リサーチ・ディスクロージャーＮｏ．３０７１０５の８７２頁、リサーチ・ディスクロージャーＮｏ．１５１６２等に引用された特許に記載の化合物、特開昭６２－２１５２７２号公報の１２７頁～１３７頁に記載の代表的化合物の一般式及び化合物例に含まれる化合物などが挙げられる。

インクジェット記録用インクは、褪色防止剤を含む場合、褪色防止剤を１種のみ含んでいてもよく、２種以上含んでいてもよい。

インクジェット記録用インクが褪色防止剤を含む場合、褪色防止剤の含有率は、目的に応じて、適宜設定される。

[0217] 防黴剤としては、デヒドロ酢酸ナトリウム、安息香酸ナトリウム、ナトリウムピリジンチオン－１－オキシド、ｐ－ヒドロキシ安息香酸エチルエステル、１，２－ベンズイソチアゾリン－３－オン及びその塩等が挙げられる。

インクジェット記録用インクは、防黴剤を含む場合、防黴剤を１種のみ含んでいてもよく、２種以上含んでいてもよい。

インクジェット記録用インクが防黴剤を含む場合、防黴剤の含有率は、インクジェット記録用インクの全質量に対して０．０２質量％～１質量％であることが好ましい。

[0218] ｐＨ調整剤は、例えば、インクジェット記録用インクの保存安定性を向上させる目的で使用される。

ｐＨ調整剤としては、中和剤（例：有機塩基、無機アルカリ等）が挙げら

れる。

ｐＨ調整剤は、インクジェット記録用インクがｐＨ６～１０となるように添加されることが好ましく、ｐＨ７～９となるように添加されることがより好ましい。

[0219] 表面張力調整剤としては、ノニオン性界面活性剤、カチオン性界面活性剤、アニオン性界面活性剤、両性界面活性剤等が挙げられる。なお、インクジェット記録用インクの表面張力は、２５℃において、２５ｍＮ／ｍ～７０ｍＮ／ｍであることが好ましく、２５ｍＮ／ｍ～６０ｍＮ／ｍであることがより好ましい。また、インクジェット記録用インクの粘度は、２５℃において、３０ｍＰａ・ｓ以下であることが好ましく、２０ｍＰａ・ｓ以下であることがより好ましい。

表面張力調整剤としては、脂肪酸塩、アルキル硫酸エステル塩、アルキルベンゼンスルホン酸塩、アルキルナフタレンスルホン酸塩、ジアルキルスルホコハク酸塩、アルキルリン酸エステル塩、ナフタレンスルホン酸ホルマリン縮合物、ポリオキシエチレンアルキル硫酸エステル塩等のアニオン性界面活性剤；ポリオキシエチレンアルキルエーテル、ポリオキシエチレンアルキルアリルエーテル、ポリオキシエチレン脂肪酸エステル、ソルビタン脂肪酸エステル、ポリオキシエチレンソルビタン脂肪酸エステル、ポリオキシエチレンアルキルアミン、グリセリン脂肪酸エステル、オキシエチレンオキシプロピレンブロックコポリマー等のノニオン性界面活性剤；などの界面活性剤が好ましい。また、アセチレン系ポリオキシエチレンオキシド界面活性剤であるＳＵＲＦＹＮＯＬＳ（ＡｉｒＰｒｏｄｕｃｔｓ＆Ｃｈｅｍｉｃａｌｓ社製）も表面張力調整剤として好適に使用することができる。また、Ｎ，Ｎ－ジメチル－Ｎ－アルキルアミンオキシドのようなアミンオキシド型の両性界面活性剤も表面張力調整剤として好適に使用することができる。また、特開昭５９－１５７，６３６号公報の第（３７）～（３８）頁、リサーチ・ディスクロージャーＮｏ．３０８１１９（１９８９年）記載の界面活性剤も表面張力調整剤として使用することができる。

インクジェット記録用インクは、表面張力調整剤を含む場合、表面張力調整剤を１種のみ含んでいてもよく、２種以上含んでいてもよい。

インクジェット記録用インクが表面張力調整剤を含む場合、表面張力調整剤の含有率は、目的に応じて、適宜設定される。

[0220] 消泡剤としては、フッ素系化合物、シリコーン系化合物等が挙げられる。また、消泡剤としては、例えば、エチレンジアミン四酢酸（ＥＤＴＡ）に代表されるキレート剤も使用することができる。

インクジェット記録用インクは、消泡剤を含む場合、消泡剤を１種のみ含んでいてもよく、２種以上含んでいてもよい。

インクジェット記録用インクが消泡剤を含む場合、消泡剤の含有率は、目的に応じて、適宜設定される。

[0221] ［染色物］

本開示は、第一の染色物と第二の染色物とを開示する。

本開示において、第一の染色物と第二の染色物とに共通する事項については、「本開示に係る染色物」と記載して説明する。

[0222] 第一の染色物は、式（３）で表される化合物、その互変異性体、又は、これらのアルカリ金属若しくは有機塩基との塩を含む。

第二の染色物は、式（５）で表される化合物、その互変異性体、又は、これらのアルカリ金属若しくは有機塩基との塩を含む。

以下では、「式（３）で表される化合物、その互変異性体、又は、これらのアルカリ金属若しくは有機塩基との塩」を「第一の特定化合物Ｂ」と総称する場合がある。また、「式（５）で表される化合物、その互変異性体、又は、これらのアルカリ金属若しくは有機塩基との塩」を「第二の特定化合物Ｂ」と総称する場合がある。また、「第一の特定化合物Ｂ及び第二の特定化合物Ｂ」を「特定化合物Ｂ」と総称する場合がある。

[0223] 第一の染色物は、本開示の効果を損なわない範囲において、必要に応じて、第一の特定化合物Ｂ以外の色素化合物（例：顔料、染料等）を含んでいてもよい。

第一の染色物における第一の特定化合物Ｂを含む染色部分は、染色物の一部であってもよいし、染色物の全体であってもよい。

[0224] 第二の染色物は、本開示の効果を損なわない範囲において、必要に応じて、第二の特定化合物Ｂ以外の色素化合物（例：顔料、染料等）を含んでいてもよい。

第二の染色物における第二の特定化合物Ｂを含む染色部分は、染色物の一部であってもよいし、染色物の全体であってもよい。

[0225] 本開示に係る染色物における被染色物としては、絹、木綿、麻等の天然繊維；ナイロン、ポリエステル、アクリル、ポリウレタン等の合成繊維；ガラス、金属、陶器等の無機物；普通紙、樹脂コート紙、インクジェット専用記録紙等の紙；などが挙げられる。

[0226] 本開示に係る染色物は、特定化合物Ｂを用いた染色方法、より具体的には、特定化合物Ｂの少なくとも１種を含む本開示に係る発消色性組成物を用いた染色方法により製造することができる。

特定化合物Ｂを用いた染色方法は、特定化合物Ｂを染料として使用した方法であればよい。本開示に係る染色物を得るための染色方法としては、特定化合物Ｂを用いること以外は、公知の染色方法を用いることができる。

特定化合物Ｂを用いた染色方法には、例えば、浸漬、混練、塗布、印刷、インクジェット印画等の方法を採用することができる。

実施例

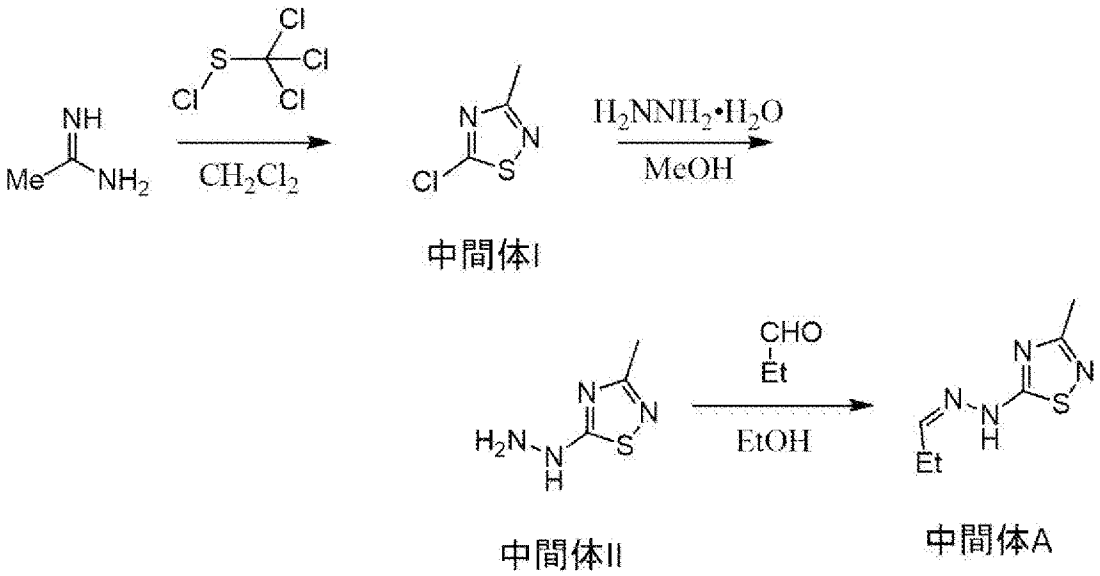
[0227] 以下、実施例により本開示を詳細に説明する。但し、本開示は、以下の実施例に限定されるものではない。

[0228] （中間体Ａの合成）

中間体Ａを以下のようにして合成した。

[0229]

[化17]



[0230] ３００ｍＬの三口フラスコに、アセトアミジン５ｇ及び塩化メチレン１００ｍＬを添加し、撹拌下で内温が－１５℃以下になるまで冷却した。ここへパークロロメチルメルカプタン１５ｇを、内温を０℃以下に保ちながら滴下した。滴下後、室温（２５℃）まで放冷し、１時間撹拌した。得られた反応液に３質量％炭酸水素ナトリウム水溶液１００ｍＬを滴下し、発泡がなくなるまで撹拌した。撹拌後の反応液に対し、塩化メチレン１００ｍＬを用いた分液操作を３回行い、有機層を取り出した。取り出した有機層を硫酸マグネシウム上で乾燥させ、溶媒を留去し、中間体Ｉを９．０ｇ得た（収率：７８％）。

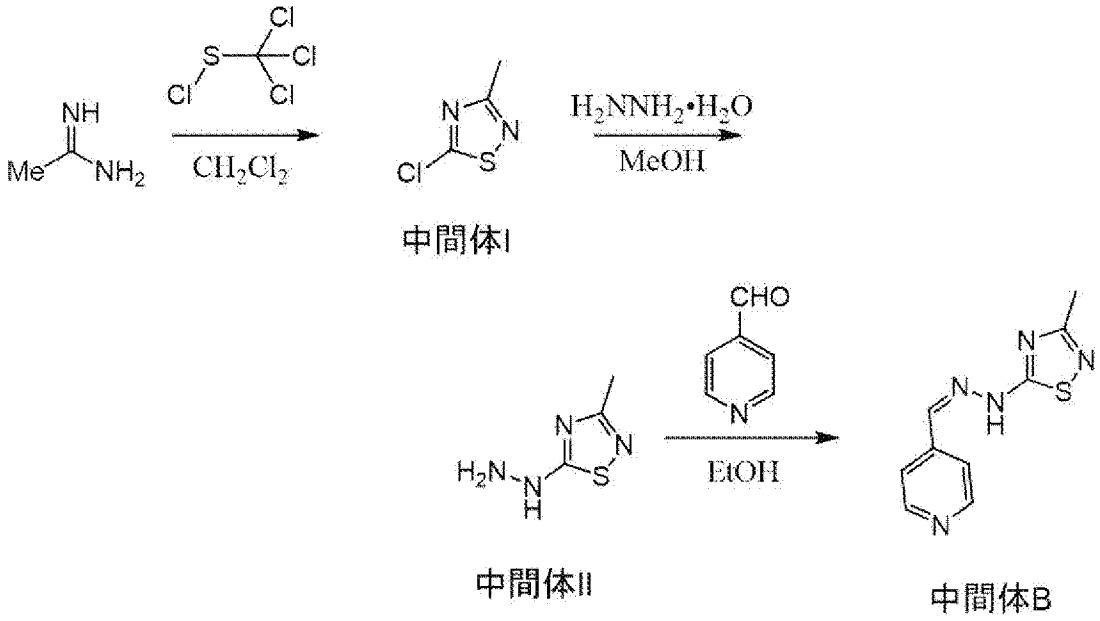
別の３００ｍＬの三口フラスコに、抱水ヒドラジン５ｇ及びメタノール５０ｍＬを添加し、撹拌下で内温が５℃以下になるまで冷却した。ここへメタノール３０ｍＬに５ｇの中間体Ｉを溶解させた液を、内温を１５℃以下に保ちながら滴下した。滴下後、室温まで放冷した後、１時間撹拌した。得られた反応液に対し、イオン交換水１００ｍＬを添加した後、酢酸エチル１００ｍＬを用いた分液操作を３回行い、有機層を取り出した。取り出した有機層を硫酸マグネシウム上で乾燥させ、溶媒を留去し、中間体ＩＩを８．１ｇ得た（収率：９３％）。

別の３００ｍＬの三口フラスコに、プロピオンアルデヒドを３ｇ、中間体ＩＩを３ｇ、エタノールを１００ｍＬ添加し、加熱還流下で３時間撹拌した。得られた反応液に対し、イオン交換水１００ｍＬを添加した後、酢酸エチル１００ｍＬを用いた分液操作を３回行い、有機層を取り出した。取り出した有機層を硫酸マグネシウム上で乾燥させ、溶媒を留去し、中間体Ａを３．４ｇ得た（収率：８７％）。

[0231] （中間体Ｂの合成）

中間体Ｂを以下のようにして合成した。

[0232] [化18]



[0233] ３００ｍＬの三口フラスコに、アセトアミジン５ｇ及び塩化メチレン１００ｍＬを添加し、撹拌下で内温が－１５℃以下になるまで冷却した。ここへパークロロメチルメルカプタン１５ｇを、内温を０℃以下に保ちながら滴下した。滴下後、室温（２５℃）まで放冷し、１時間撹拌した。得られた反応液に３質量％炭酸水素ナトリウム水溶液１００ｍＬを滴下し、発泡がなくなるまで撹拌した。撹拌後の反応液に対し、塩化メチレン１００ｍＬを用いた分液操作を３回行い、有機層を取り出した。取り出した有機層を硫酸マグネシウム上で乾燥させ、溶媒を留去し、中間体Ｉを９．０ｇ得た（収率：７８

％）。

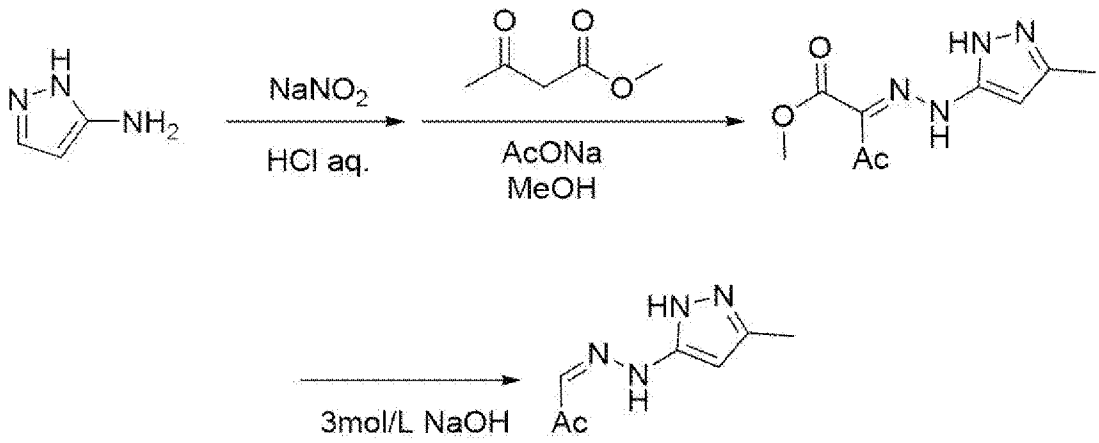
別の３００ｍＬの三口フラスコに、抱水ヒドラジン５ｇ及びメタノール５０ｍＬを添加し、撹拌下で内温が５℃以下になるまで冷却した。ここへメタノール３０ｍＬに５ｇの中間体Ｉを溶解させた液を、内温を１５℃以下に保ちながら滴下した。滴下後、室温まで放冷した後、１時間撹拌した。得られた反応液に対し、イオン交換水１００ｍＬを添加した後、酢酸エチル１００ｍＬを用いた分液操作を３回行い、有機層を取り出した。取り出した有機層を硫酸マグネシウム上で乾燥させ、溶媒を留去し、中間体ＩＩを８．１ｇ得た（収率：９３％）。

別の３００ｍＬの三口フラスコに、４－ホルミルピリジンを３ｇ、中間体ＩＩを３ｇ、エタノールを１００ｍＬ添加し、加熱還流下で３時間撹拌した。得られた反応液に対し、イオン交換水１００ｍＬを添加した後、酢酸エチル１００ｍＬを用いた分液操作を３回行い、有機層を取り出した。取り出した有機層を硫酸マグネシウム上で乾燥させ、溶媒を留去し、中間体Ｂを４．５ｇ得た（収率：８５％）。

[0234] （中間体Ｃの合成）

中間体Ｃを以下のようにして合成した。

[0235] [化19]



中間体Ｃ

[0236] １００ｍＬの三口フラスコに、３－アミノピラゾール２ｇ、濃塩酸１３ｍ

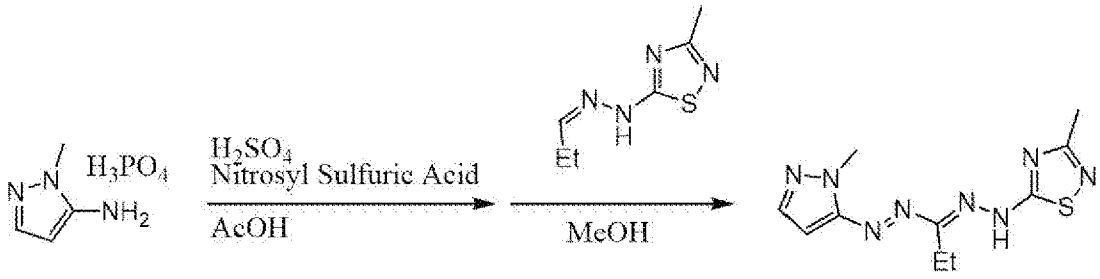
Ｌを添加し、撹拌した。ここへ亜硝酸ナトリウム１．７ｇを水３．５ｍＬに溶解させた溶液を、内温を５℃以下に保ちながら滴下した。滴下後、内温を５℃以下に保ちながら１時間撹拌することで、ジアゾニウム塩溶液を得た。

２００ｍＬの三口フラスコに、アセト酢酸メチルを２．５ｇ、酢酸ナトリウムを１５．０ｇ、メタノールを３０ｍＬ添加し、撹拌下で内温が５℃以下になるまで冷却した。ここへジアゾニウム塩溶液を、内温を１０℃以下に保ちながら滴下した。滴下後、内温を１０℃以下に保ちながら１時間撹拌した。その後、室温（２５℃）まで放冷し、更に１時間撹拌した。ここへイオン交換水１００ｍＬを添加し、析出した固体（所謂、粗体）を濾取した。得られた粗体を１００ｍＬの三ツ口フラスコ中で、３ｍｏｌ／Ｌの水酸化ナトリウム水溶液３０ｍＬに溶解させ、５０℃で１時間撹拌した。ここへ３ｍｏｌ／Ｌの塩酸３０ｍＬを滴下し、その後室温まで放冷した。析出した固体を濾取し、メタノール－水系で再結晶させることにより、中間体Ｃを２．８ｇ得た（収率：７８％）。

[0237] ＜実施例１：化合物Ｄ－１の合成＞

化合物Ｄ－１を以下のようにして合成した。

[0238] [化20]



(D-1)

[0239] １００ｍＬの三口フラスコに、酢酸１５ｇ及び硫酸１ｇを添加し、撹拌下で内温が１５℃以下になるまで冷却した。ここへニトロシル硫酸８ｇを、内温を１５℃以下に保ちながら滴下した。内温が５℃以下になるまで冷却した後、ここへ１－メチル－５－アミノピラゾールのリン酸塩８ｇを、内温を１

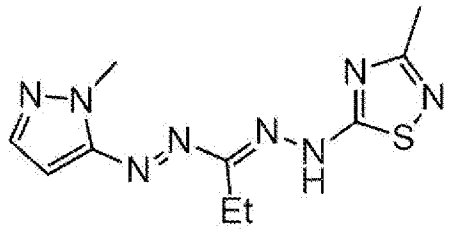
０℃以下に保ちながら４回に分けて添加した。添加後、内温を１０℃以下に保ちながら１時間撹拌することで、ジアゾニウム塩溶液を得た。

２００ｍＬの三口フラスコに、中間体Ａを３ｇ、メタノールを３０ｍＬ添加し、撹拌下で内温が５℃以下になるまで冷却した。ここへジアゾニウム塩溶液を、内温を１０℃以下に保ちながら滴下した。滴下後、内温を１０℃以下に保ちながら１時間撹拌した。その後、室温（２５℃）まで放冷し、更に１時間撹拌した。ここへイオン交換水１００ｍＬを添加し、析出した固体（所謂、粗体）を濾取した。得られた粗体をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製し、化合物Ｄ－１を３．５ｇ得た（収率：６５％）。

[0240] 化合物Ｄ－１の分子量は、２７８．３であった。

^{1}Ｈ－ＮＭＲにより、化合物Ｄ－１が下記構造であることを確認した。

[0241] [化21]



(D-1)

[0242] 化合物Ｄ－１のＮＭＲデータを以下に示す。

[0243] （化合物Ｄ－１）

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（DMSO-d6） δ = 7.23 (d, 1H, J = 2.4 Hz), 6.67 (d, 1H, J = 2.4 Hz), 4.05 (s, 3H), 2.40 (s, 3H), 2.05 (q, 2H, J = 7.3 Hz), 0.95 (t, 3H, J = 7.2Hz)

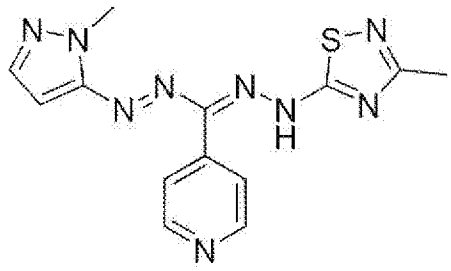
[0244] ＜実施例２：化合物Ｄ－２の合成＞

化合物Ｄ－１の合成過程において、中間体Ａを中間体Ｂに代替した以外は、化合物Ｄ－１と同様にして、化合物Ｄ－２を４．２ｇ得た（収率：７２％）。

[0245] 化合物Ｄ－２の分子量は、３２７．４であった。

^{1}Ｈ－ＮＭＲにより、化合物Ｄ－２が下記構造であることを確認した。

[0246] [化22]



(D-2)

[0247] 化合物Ｄ－２のＮＭＲデータを以下に示す。

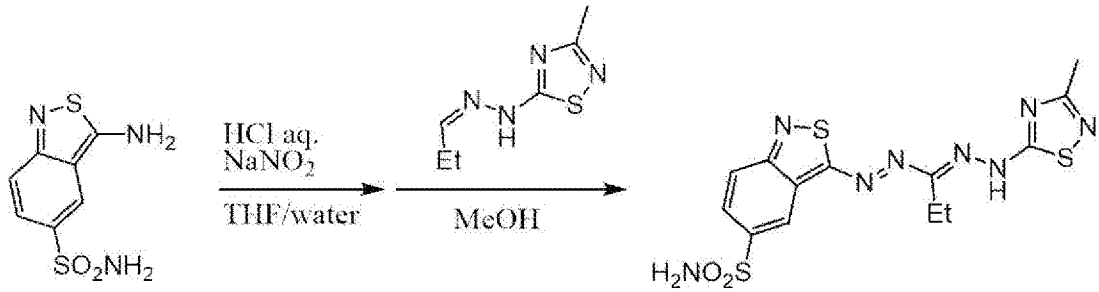
[0248] （化合物Ｄ－２）

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（DMSO-d6） δ = 8.66（d, 2H, J = 7.2 Hz), 8.02（d, 2H, J = 7.2 Hz), 7.25（d, 1H, J = 2.4 Hz), 6.65（d, 1H, J = 2.4 Hz), 4.05（s, 3H), 2.40（s, 3H)

[0249] ＜実施例３：化合物Ｄ－３の合成＞

化合物Ｄ－３を以下のようにして合成した。

[0250] [化23]



(D-3)

[0251] １００ｍＬの三口フラスコに、７－アミノ－５－スルファモイルイソチアゾール３ｇ、テトラヒドロフラン１０ｍＬ、イオン交換水１０ｍＬを添加し、撹拌した。ここへ濃塩酸５ｍＬを添加した後、撹拌下で内温が５℃以下になるまで冷却した。ここへ亜硝酸ナトリウム２ｇをイオン交換水５ｍＬに溶解させた液を、内温を５℃以下に保ちながら滴下した。滴下後、内温を５℃

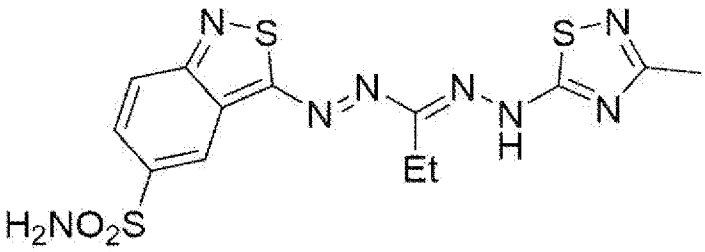
以下に保ちながら１時間撹拌することで、ジアゾニウム塩溶液を得た。

２００ｍＬの三口フラスコに、中間体Ａを３ｇ、メタノールを３０ｍＬ添加し、撹拌下で内温が５℃以下になるまで冷却した。ここへジアゾニウム塩溶液を、内温を１０℃以下に保ちながら滴下した。滴下後、内温を１０℃以下に保ちながら１時間撹拌した。その後、室温（２５℃）まで放冷し、更に１時間撹拌した。ここへイオン交換水１００ｍＬを添加し、析出した固体（所謂、粗体）を濾取した。得られた粗体をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製し、化合物Ｄ－３を４．２ｇ得た（収率：５８％）。

[0252] 化合物Ｄ－３の分子量は、４１０．５であった。

^{1}Ｈ－ＮＭＲにより、化合物Ｄ－３が下記構造であることを確認した。

[0253] [化24]



(D-3)

[0254] 化合物Ｄ－３のＮＭＲデータを以下に示す。

[0255] （化合物Ｄ－３）

^{1}Ｈ－ＮＭＲ (DMSO-d6) δ = 7.92 (s, 1H), 7.85-7.80 (m, 2H), 7.24 (s, 2H), 7.14 (d, 1H, J = 2.4 Hz), 6.65 (d, 1H, J = 2.4 Hz), 2.35 (s, 3H), 2.17 (q, 2H,J = 7.1 Hz), 0.98 (t, 3H, J = 7.1 Hz)

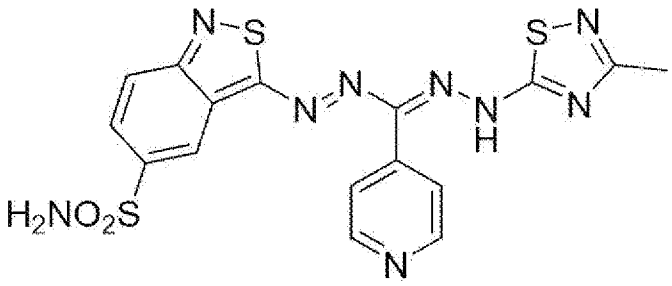
[0256] ＜実施例４：化合物Ｄ－４の合成＞

化合物Ｄ－１の合成過程において、中間体Ａを中間体Ｂに代替した以外は、化合物Ｄ－１と同様にして、化合物Ｄ－４を３．９ｇ得た（収率：６２％）。

[0257] 化合物Ｄ－４の分子量は、４５９．５であった。

^{1}Ｈ－ＮＭＲにより、化合物Ｄ－４が下記構造であることを確認した。

[0258] [化25]



(D-4)

[0259] 化合物Ｄ－４のＮＭＲデータを以下に示す。

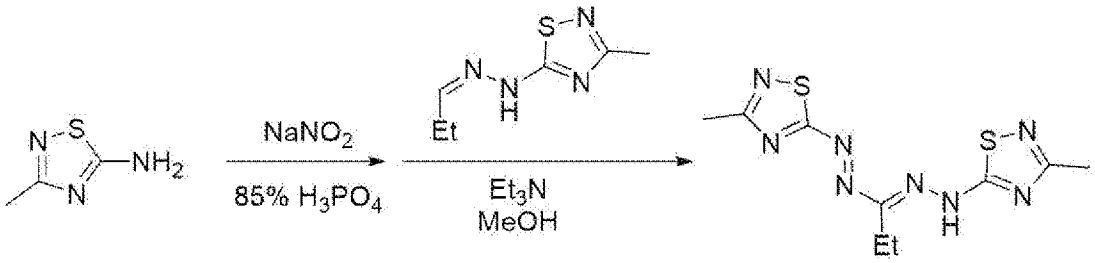
[0260] （化合物Ｄ－４）

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（DMSO-d6） δ = 8.64 (d, 2H, J = 7.2 Hz), 8.01 (d, 2H, J = 7.2Hz), 7.94 (s, 1H), 7.85-7.80 (m, 2H), 7.25 (s, 2H), 7.17 (d, 1H, J = 2.4 Hz), 6.81 (d, 1H, J = 2.4 Hz), 2.38 (s, 3H)

[0261] ＜実施例５：化合物Ｄ－５の合成＞

化合物Ｄ－５を以下のようにして合成した。

[0262] [化26]



(D-5)

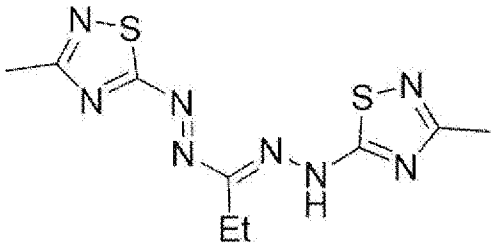
[0263] １００ｍＬの三口フラスコに、３－メチル－５－アミノ－１，２，４－チアジアゾール３ｇ、８５質量％リン酸水溶液３０ｍＬを添加し、撹拌した。ここへ亜硝酸ナトリウム２ｇを、内温を５℃以下に保ちながら分割添加した。添加後、内温を５℃以下に保ちながら１時間撹拌することで、ジアゾニウム塩溶液を得た。

５００ｍＬの三口フラスコに、中間体Ａを４．４ｇ、トリエチルアミンを５ｍＬ、メタノールを４５ｍＬ添加し、撹拌下で内温が５℃以下になるまで冷却した。ここへジアゾニウム塩溶液を、内温を１０℃以下に保ちながら滴下した。滴下中、反応液のｐＨが７以下となった場合には、ジアゾニウム塩溶液の滴下を中断し、トリエチルアミン５ｍＬをメタノール３０ｍＬに溶解させた液（以下、「トリエチルアミン溶液」ともいう。）を、内温１０℃以下を保ったまま滴下した。そして、トリエチルアミン溶液の滴下が終わったところで、再度ジアゾニウム塩溶液の滴下を再開した。ジアゾニウム塩溶液の全量滴下後、内温を１０℃以下に保ちながら１時間撹拌した。その後、室温（２５℃）まで放冷し、更に１時間撹拌した。ここへイオン交換水１００ｍＬを添加し、析出した固体（所謂、粗体）を濾取した。得られた粗体をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製し、化合物Ｄ－５を１．２ｇ得た（収率：１５％）。

[0264] 化合物Ｄ－５の分子量は、２９６．４であった。

^{1}Ｈ－ＮＭＲにより、化合物Ｄ－５が下記構造であることを確認した。

[0265] [化27]



(D-5)

[0266] 化合物Ｄ－５のＮＭＲデータを以下に示す。

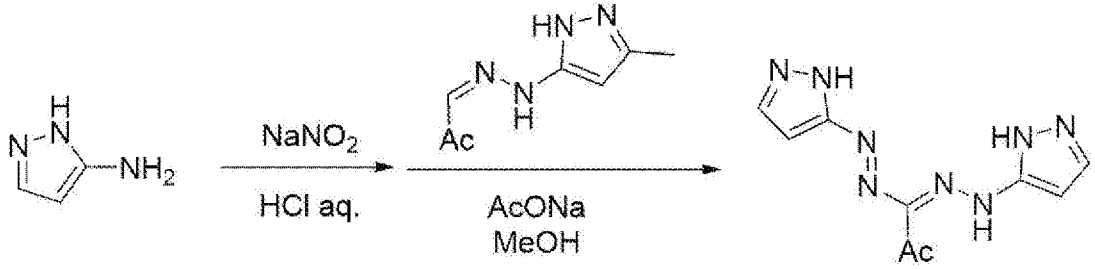
[0267] （化合物Ｄ－５）

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（DMSO-d6） δ = 2.36（s, 6H), 2.17（q, 2H, J= 7.2 Hz), 0.83（t, 3H, J = 7.2 Hz)

[0268] ＜実施例６：化合物Ｄ－６の合成＞

化合物Ｄ－６を以下のようにして合成した。

[0269] [化28]



(D-6)

[0270] ５０ｍＬの三口フラスコに、３－アミノピラゾール１．５ｇ、濃塩酸１０ｍＬを添加し、撹拌した。ここへ亜硝酸ナトリウム１．２ｇを水２．５ｍＬに溶解させた溶液を、内温を５℃以下に保ちながら滴下した。滴下後、内温を５℃以下に保ちながら１時間撹拌することで、ジアゾニウム塩溶液を得た。

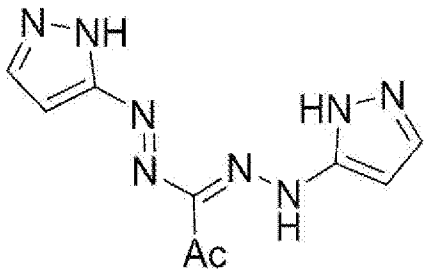
１００ｍＬの三ツ口フラスコに、中間体Ｃを２．６ｇ、酢酸ナトリウムを１１．５ｇ、メタノールを２５ｍＬ添加し、撹拌下で内温が５℃以下になるまで冷却した。ここへジアゾニウム塩溶液を、内温を１０℃以下に保ちながら滴下した。滴下後、内温を１０℃以下に保ちながら１時間撹拌した。その後、室温（２５℃）まで放冷し、更に１時間撹拌した。ここへイオン交換水１００ｍＬを添加し、析出した固体（所謂、粗体）を濾取した。得られた固体をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製することで化合物Ｄ－６を３．１ｇ得た（収率：６９％）。

[0271] 化合物Ｄ－６の分子量は、２４６．２であった。

^{1}Ｈ－ＮＭＲにより、化合物Ｄ－６が下記構造であることを確認した。

[0272]

[化29]



（D-6）

[0273] 化合物Ｄ－６のＮＭＲデータを以下に示す。

[0274] （化合物Ｄ－６）

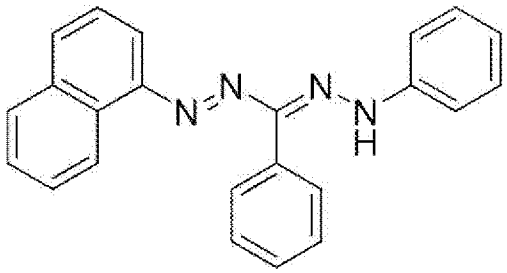
^{1}Ｈ－ＮＭＲ（DMSO-d6） δ = 13.77（br, 2H), 7.33-7.25（m, 2H), 6.82-6.75（m, 2H), 2.17（s, 3H）

[0275] ＜比較例１＞

下記構造を有する比較化合物１を用いた。

比較化合物１の分子量は、３５０．４である。

[0276] [化30]



比較化合物1

[0277] ［評価］

１．光学特性及び色価

実施例及び比較例の各化合物の分光特性及び色価を以下の手順に従って測定した。

溶剤としてＤＭＦ（Ｎ，Ｎ－ジメチルホルムアミド）を用い、ＤＭＦ中の

濃度が１０ｍｇ／Ｌ（リットル；以下、同じ）になるように、化合物（即ち、実施例及び比較例の各化合物）を溶解させた溶液をそれぞれ調製した。調製した各溶液を１ｃｍセルに入れ、測定装置として、分光光度計〔商品名：ＵＶ－３６００、（株）島津製作所製〕を用い、モル吸光係数及び極大吸収波長（λmax）を測定した。また、モル吸光係数及び分子量に基づき、下記の式に従い、色価を求めた。結果を表１に示す。

色価＝モル吸光係数／分子量

[0278] [表1]

	化合物	λmax	色価
実施例１	化合物D-1	525nm	90
実施例２	化合物D-2	527nm	103
実施例３	化合物D-3	664nm	88
実施例４	化合物D-4	665nm	100
実施例５	化合物D-5	565nm	120
実施例６	化合物D-6	495nm	91
比較例１	比較化合物１	508nm	40

[0279] ２．腸管出血性大腸菌の視認性

上記にて合成した化合物Ｄ－１～Ｄ－６及び比較化合物１を用いて、腸管出血性大腸菌の視認性の評価を行った。

水１０００ｍＬに、塩化ナトリウム５ｇ及び化合物（表２に記載の種類及び量）を添加した。ここへ上記化合物と等モル量の過酸化水素水を添加した後、３０分間撹拌した。次いで、ｐＨ指示薬であるフェノールレッド（ＰＲ）３０ｍｇを添加した。次いで、ペプトン２０ｇ、Ｄ－ソルビット１０ｇ、セフィキシム０．０５ｍｇ、亜テルル酸カリウム２．５ｍｇ、及び胆汁酸塩Ｎｏ．２を１．５ｇ添加し、３０分間撹拌した。次いで、寒天１４ｇを添加し、腸管出血性大腸菌検出用培地用組成物を得た。得られた腸管出血性大腸

菌検出用培地用組成物を加熱撹拌した後、冷却することにより、腸管出血性大腸菌検出用培地を得た。

上記にて得られた腸管出血性大腸菌検出用培地を用い、腸管出血性大腸菌（種類：Ｏ１５７）及び肺炎桿菌（K. pneumoniae）を培養（培養温度：３７℃、培養時間：２０時間）し、培養後の培地を目視にて観察した。そして、腸管出血性大腸菌（Ｏ１５７）と肺炎桿菌（K. pneumoniae）とを肉眼で明瞭に識別することができるか否かに基づき、腸管出血性大腸菌（Ｏ１５７）の視認性を評価した。結果を表２に示す。

[0280] [表2]

	化合物		pH指示薬	色		視認性
	種類	含有量		K.pneumoniae	O157	
実施例１	化合物D-1	20mg	PR	黄色	赤色	明瞭
実施例２	化合物D-2	20mg	PR	黄色	赤色	明瞭
実施例３A	化合物D-3	20mg	PR	黄色	青色	明瞭
実施例３B	化合物D-3	10mg	PR	黄色	青色	明瞭
実施例４	化合物D-4	20mg	PR	黄色	青色	明瞭
実施例５	化合物D-5	20mg	PR	黄色	紫色	明瞭
実施例６	化合物D-6	20mg	PR	黄色	橙色	明瞭
比較例１	比較化合物１	20mg	PR	黄色	薄い赤色	不明瞭

[0281] 表２に示すように、実施例の腸管出血性大腸菌検出用培地用組成物は、色素化合物の使用が少量でも腸管出血性大腸菌（Ｏ１５７）を良好に視認させることができ、肺炎桿菌（K. pneumoniae）と明瞭に識別することができた。

[0282] ２０２１年９月１５日に出願された日本国特許出願２０２１－１５０５４０号の開示及び２０２１年１２月２３日に出願された日本国特許出願２０２１－２０９８６３号の開示は、その全体が参照により本明細書に取り込まれる。

本明細書に記載された全ての文献、特許出願、及び技術規格は、個々の文献、特許出願、及び技術規格が参照により取り込まれることが具体的に、かつ、個々に記された場合と同程度に、本明細書中に参照により取り込まれる。

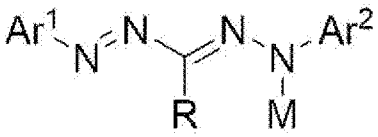
請求の範囲

[請求項1] 下記式（１）で表される化合物又は下記式（２）で表される化合物と、

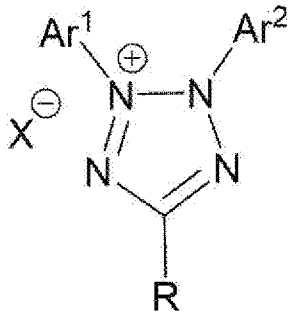
水と、

を含む腸管出血性大腸菌検出用培地用組成物。

[化1]



(1)



(2)

式（１）及び式（２）中、Ａｒ[1]及びＡｒ[2]は、それぞれ独立に、ヘテロ環基を表し、Ｒは、アルキル基、芳香環基、ヘテロ環基、アシル基又はカルバモイル基を表す。式（１）中、Ｍは、水素原子を表し、前記水素原子が解離してアルカリ金属又は有機塩基により塩を形成していてもよい。式（２）中、Ｘ[－]は、塩化物イオン、臭化物イオン、ヨウ化物イオン、酢酸イオン又はリン酸イオンを表す。

[請求項2] 前記式（１）で表される化合物は、橙色、赤色、紫色又は青色のいずれかの色を呈する、請求項１に記載の腸管出血性大腸菌検出用培地用組成物。

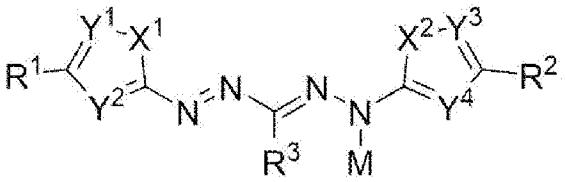
[請求項3] ｐＨ指示薬を更に含む、請求項１に記載の腸管出血性大腸菌検出用培地用組成物。

[請求項4] 前記ｐＨ指示薬は、酸性条件において、黄色、橙色、赤色、紫色又は緑色のいずれかの色を呈する、請求項３に記載の腸管出血性大腸菌検出用培地用組成物。

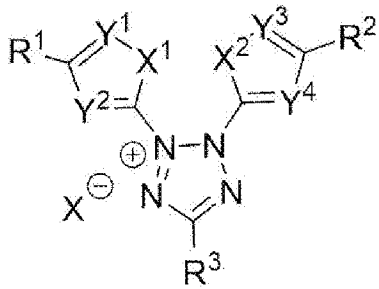
[請求項5] 請求項１～請求項４のいずれか１項に記載の腸管出血性大腸菌検出用培地用組成物を含む培地で検体を培養し、腸管出血性大腸菌の有無を検出することを含む、検体中の腸管出血性大腸菌の検出方法。

[請求項6] 下記式（３）で表される化合物、その互変異性体、それらのアルカリ金属若しくは有機塩基との塩、又は、下記式（４）で表される化合物若しくはその互変異性体。

[化2]



(3)



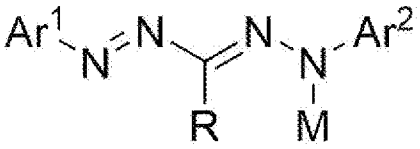
(4)

式（３）及び式（４）中、X^1及びX^2は、それぞれ独立に、－Ｓ－、－Ｏ－又は－Ｎ（－Z^1）－を表し、Z^1は、水素原子、アルキル基、芳香環基又はヘテロ環基を表す。Y^1、Y^2、Y^3及びY^4は、それぞれ独立に、＝Ｃ（－Z^2）－又は＝Ｎ－を表し、Z^2は、水素原子、アルキル基、芳香環基、ヘテロ環基、アシル基、カルバモイル基又はアルキルチオ基を表す。R^1及びR^2は、それぞれ独立に、アルキル基、芳香環基、ヘテロ環基、カルバモイル基、アルキルチオ基又はアリールチオ基を表し、Y^2が＝Ｃ（－Z^2）－を表す場合、R^1とZ^2とが結合して環を形成していてもよく、Y^4が＝Ｃ（－Z^2）－を表す場合、R^2とZ^2とが結合して環を形成していてもよい。R^3は、アルキル基、芳香環基、ヘテロ環基、アシル基又はカルバモイル基を表す。式（３）中、Ｍは、水素原子を表し、前記水素原子が解離してアルカリ金属又は有機塩基により塩を形成していてもよい。式（４

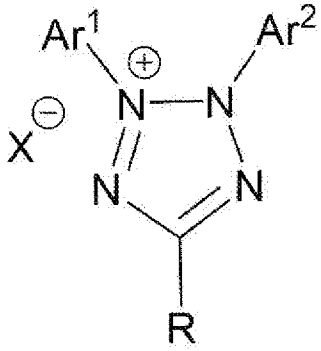
）中、X^-は、塩化物イオン、臭化物イオン、ヨウ化物イオン、酢酸イオン又はリン酸イオンを表す。

[請求項7] 下記式（５）で表される化合物、その互変異性体、それらのアルカリ金属若しくは有機塩基との塩、又は、下記式（６）で表される化合物若しくはその互変異性体。

[化3]



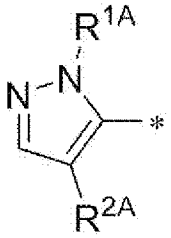
(5)



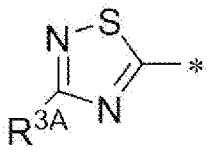
(6)

式（５）及び式（６）中、Ar^1及びAr^2は、それぞれ独立に、下記式（Ａ－１）で表される基、下記式（Ａ－２）で表される基、下記式（Ａ－３）で表される基、下記式（Ａ－４）で表される基又は下記式（Ａ－５）で表される基を表し、Ｒは、アルキル基、芳香環基、ヘテロ環基、アシル基又はカルバモイル基を表す。式（５）中、Ｍは、水素原子を表し、前記水素原子が解離してアルカリ金属又は有機塩基により塩を形成していてもよい。式（６）中、X^-は、塩化物イオン、臭化物イオン、ヨウ化物イオン、酢酸イオン又はリン酸イオンを表す。

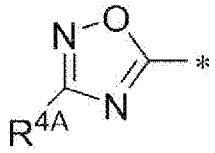
[化4]



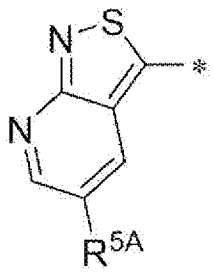
(A-1)



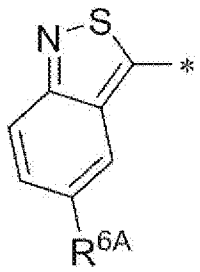
(A-2)



(A-3)



(A-4)



(A-5)

式（Ａ－１）中、Ｒ^{1A}は、水素原子、アルキル基、フェニル基、アシル基又はアルコキシカルボニル基を表し、Ｒ^{2A}は、水素原子、シアノ基、カルバモイル基又はアルキルスルホニル基を表す。式（Ａ－２）中、Ｒ^{3A}は、アルキル基、アルコキシ基、アルキルチオ基又は芳香環基を表す。式（Ａ－３）中、Ｒ^{4A}は、アルキル基、アルコキシ基、アルキルチオ基又は芳香環基を表す。式（Ａ－４）中、Ｒ^{5A}は、水素原子、シアノ基、カルバモイル基又はスルファモイル基を表す。式（Ａ－５）中、Ｒ^{6A}は、水素原子、シアノ基、カルバモイル基又はスルファモイル基を表す。式（Ａ－１）、式（Ａ－２）、式（Ａ－３）、式（Ａ－４）及び式（Ａ－５）中、＊は、結合位置を表す。

[請求項8] 請求項６に記載の式（３）で表される化合物、その互変異性体、これらのアルカリ金属若しくは有機塩基との塩、又は、式（４）で表される化合物若しくはその互変異性体と、

水と、

を含む、発消色性組成物。

[請求項9] 請求項７に記載の式（５）で表される化合物、その互変異性体、これらのアルカリ金属若しくは有機塩基との塩、又は、式（６）で表される化合物若しくはその互変異性体と、

水と、

を含む、発消色性組成物。

[請求項10] 請求項６に記載の式（３）で表される化合物、その互変異性体、又は、これらのアルカリ金属若しくは有機塩基との塩を含む、染色物。

[請求項11] 請求項７に記載の式（５）で表される化合物、その互変異性体、又は、これらのアルカリ金属若しくは有機塩基との塩を含む、染色物。

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.
PCT/JP2022/020556

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

C12N 1/20(2006.01)i; ***C07D 403/12***(2006.01)i; ***C07D 417/12***(2006.01)i; ***C07D 417/14***(2006.01)i; ***C09B 29/09***(2006.01)i; ***C09B 50/00***(2006.01)i; ***C09B 50/02***(2006.01)i; ***C09B 67/20***(2006.01)i; ***C12N 1/00***(2006.01)i; ***C12Q 1/04***(2006.01)i; ***G01N 21/77***(2006.01)i; ***G01N 21/78***(2006.01)i; ***G01N 21/80***(2006.01)i

FI: C12N1/20 A; C09B50/00; C07D417/12; G01N21/77 D; G01N21/78 Z; G01N21/80; C09B29/09 C; C09B67/20 K; C12N1/00 G; C12Q1/04; C07D417/14; C07D403/12; C09B50/02 CSP; C09B29/09 B CSP; C12N1/00 F

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

C12N1/00-7/08; C12Q1/00-3/00; G01N21/75-21/83

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Published examined utility model applications of Japan 1922-1996
Published unexamined utility model applications of Japan 1971-2022
Registered utility model specifications of Japan 1996-2022
Published registered utility model applications of Japan 1994-2022

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)

JSTPlus/JMEDPlus/JST7580 (JDreamIII); CAplus/REGISTRY/MEDLINE/EMBASE/BIOSIS (STN)

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	ZIGANSHIN AU et al., Synthesis and Purine P2X Receptor Antagonist Activity of Thiazole Derivatives, Pharmaceutical Chemistry Journal, 2005, 39, pp. 303-307 in particular, fig. 1. table 1	6, 8
A		1-5, 7, 9-11
Y	JP 2010-75179 A (EIKEN CHEM CO., LTD.) 08 April 2010 (2010-04-08) claims, paragraph [0026]	1–5
A		6-11
Y	KALINA M et al., Nonosmiophilic tetrazolium salts that yield osmiophilic, lipophobic formazans for ultrastructural localization of dehydrogenase activity, J. Histochem. Cytochem., 1972, 20(9), pp. 685-695 in particular, abstract, fig. 1	1–5
A		6-11

☑ Further documents are listed in the continuation of Box C. ☑ See patent family annex.

* Special categories of cited documents:
"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance
"E" earlier application or patent but published on or after the international filing date
"L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)
"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means
"P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed
"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention
"X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone
"Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art
"&" document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search	Date of mailing of the international search report
13 July 2022	**26 July 2022**
Name and mailing address of the ISA/JP **Japan Patent Office (ISA/JP)** **3-4-3 Kasumigaseki, Chiyoda-ku, Tokyo 100-8915** **Japan**	Authorized officer Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.
PCT/JP2022/020556

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
Y	JACKMAN DE, Structure and synthesis of the metribuzin blue dye. Synthesis and reactions of 2,5-dihydrazino-1,3,4-thiadiazole and its derivatives, J. Heterocycl. Chem., 1990, 27(4), pp. 1053-1057 in particular, abstract, p. 1054, left column, paragraph 1, Scheme 2	1–5
A		6-11

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.
PCT/JP2022/020556

Patent document cited in search report	Publication date (day/month/year)	Patent family member(s)	Publication date (day/month/year)
JP 2010-75179 A	08 April 2010	JP 2014-121338 A	

国際調査報告

国際出願番号
PCT/JP2022/020556

A. 発明の属する分野の分類（国際特許分類（ＩＰＣ））

C12N 1/20(2006.01)i; C07D 403/12(2006.01)i; C07D 417/12(2006.01)i; C07D 417/14(2006.01)i; C09B 29/09(2006.01)i; C09B 50/00(2006.01)i; C09B 50/02(2006.01)i; C09B 67/20(2006.01)i; C12N 1/00(2006.01)i; C12Q 1/04(2006.01)i; G01N 21/77(2006.01)i; G01N 21/78(2006.01)i; G01N 21/80(2006.01)i

FI: C12N1/20 A; C09B50/00; C07D417/12; G01N21/77 D; G01N21/78 Z; G01N21/80; C09B29/09 C; C09B67/20 K; C12N1/00 G; C12Q1/04; C07D417/14; C07D403/12; C09B50/02 CSP; C09B29/09 B CSP; C12N1/00 F

B. 調査を行った分野

調査を行った最小限資料（国際特許分類（ＩＰＣ））

C12N1/00-7/08; C12Q1/00-3/00; G01N21/75-21/83

最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの

日本国実用新案公報	１９２２－１９９６年
日本国公開実用新案公報	１９７１－２０２２年
日本国実用新案登録公報	１９９６－２０２２年
日本国登録実用新案公報	１９９４－２０２２年

国際調査で使用した電子データベース（データベースの名称、調査に使用した用語）

JSTPlus/JMEDPlus/JST7580 (JDreamIII); CAplus/REGISTRY/MEDLINE/EMBASE/BIOSIS (STN)

C. 関連すると認められる文献

引用文献のカテゴリー*	引用文献名　及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する請求項の番号
X	ZIGANSHIN AU et al., Synthesis and Purine P2X Receptor Antagonist Activity of Thiazole Derivatives, Pharmaceutical Chemistry Journal, 2005, 39, pp.303-307 特に、Ｆｉｇ．１、ＴＡＢＬＥ　１	6, 8
A		1-5, 7, 9-11
Y	JP 2010-75179 A (栄研化学株式会社) 08.04.2010 (2010-04-08) 特許請求の範囲、［００２６］	1-5
A		6-11
Y	KALINA M et al., Nonosmiophilic tetrazolium salts that yield osmiophilic, lipophobic formazans for ultrastructural localization of dehydrogenase activity, J. Histochem. Cytochem., 1972, 20(9), pp.685-695 特に、要約、ＦＩＧ．１	1-5
A		6-11

☑ Ｃ欄の続きにも文献が列挙されている。

☑ パテントファミリーに関する別紙を参照。

* 引用文献のカテゴリー
“A” 特に関連のある文献ではなく、一般的技術水準を示すもの
“E” 国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの
“L” 優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献（理由を付す）
“O” 口頭による開示、使用、展示等に言及する文献
“P” 国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願の日の後に公表された文献
“T” 国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と抵触するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの
“X” 特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの
“Y” 特に関連のある文献であって、当該文献と他の１以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの
“&” 同一パテントファミリー文献

国際調査を完了した日	国際調査報告の発送日
13.07.2022	26.07.2022

名称及びあて先
日本国特許庁(ISA/JP)
〒100-8915
日本国
東京都千代田区霞が関三丁目４番３号

権限のある職員（特許庁審査官）
竹内　祐樹 4N 5082
電話番号 03-3581-1101 内線 3448

C.　関連すると認められる文献

引用文献のカテゴリー*	引用文献名　及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する請求項の番号
Y	JACKMAN DE, Structure and synthesis of the metribuzin blue dye. Synthesis and reactions of 2,5-dihydrazino-1,3,4-thiadiazole and its derivatives, J. Heterocycl. Chem., 1990, 27(4), pp.1053-1057 特に、要約、１０５４頁左欄第１段落、Ｓｃｈｅｍｅ　２	1-5
A		6-11

国際調査報告
パテントファミリーに関する情報

国際出願番号
PCT/JP2022/020556

引用文献	公表日	パテントファミリー文献	公表日
JP 2010-75179 A	08.04.2010	JP 2014-121338 A	