

【公報種別】特許法第17条の2の規定による補正の掲載

【部門区分】第3部門第2区分

【発行日】平成23年2月24日(2011.2.24)

【公表番号】特表2010-515684(P2010-515684A)

【公表日】平成22年5月13日(2010.5.13)

【年通号数】公開・登録公報2010-019

【出願番号】特願2009-544945(P2009-544945)

【国際特許分類】

C 07 D 471/06 (2006.01)

C 07 D 493/06 (2006.01)

C 07 D 493/04 (2006.01)

C 07 D 487/04 (2006.01)

【F I】

C 07 D 471/06

C 07 D 493/06 C S P

C 07 D 493/04 1 0 1 A

C 07 D 487/04 1 3 7

【手続補正書】

【提出日】平成22年12月28日(2010.12.28)

【手続補正1】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0012

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0012】

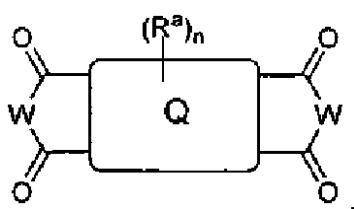
別の態様において、本教示は、式IおよびIIの化合物を調製する方法を提供し、式Iの化合物を式IIの化合物から調製する方法を含む。

本発明は、例えば、以下を提供する。

(項目1)

式Iを有する化合物であって、

【化25】



I

式中、

Wは、各出現において、OまたはNHであり、

Qは、縮合環部分であり、

R^aは、各出現において、a) - CN、b) - NO₂、c) - C(O)R^b、d) - C(O)NHR^b、e) - C(O)OR^b、f) - S(O)R^b、g) - S(O)₂R^b、h)

) - S(O)₂OH、i) - (CF₃)₂R^b、j) - [C(CF₃)₂]_tR^b、k)

オキソ、および1) 1~5個のR^c基で置換された5~14員のヘテロアリール基から選

択され、

R^bは、各出現において、a) H、b) C_{1~20}アルキル基、c) C_{3~10}シクロアルキル基、d) C_{6~14}アリール基、e) C_{7~20}アリールアルキル基、f) 3~12員のシクロヘテロアルキル基、およびg) 5~14員のヘテロアリール基から選択され、前記C_{1~20}アルキル基、C_{3~10}シクロアルキル基、C_{6~14}アリール基、C_{7~20}アリールアルキル基、3~12員のシクロヘテロアルキル基、および5~14員のヘテロアリール基のそれぞれは、任意に、1~5個のR^c基で置換され、

R^cは、各出現において、a) ハロゲン、b) -CN、c) -NO₂、d) -C(O)H、e) -C(O)-C_{1~20}アルキル、f) -C(O)NH₂、g) -C(O)NH-C_{1~20}アルキル、h) -C(O)N(C_{1~20}アルキル)₂、i) -C(O)OH、j) -C(O)-OC_{1~20}アルキル、k) -S(O)H、l) -S(O)-C_{1~20}アルキル、m) -S(O)₂H、n) -S(O)₂-C_{1~20}アルキル、およびo) -S(O)₂OHから選択され、

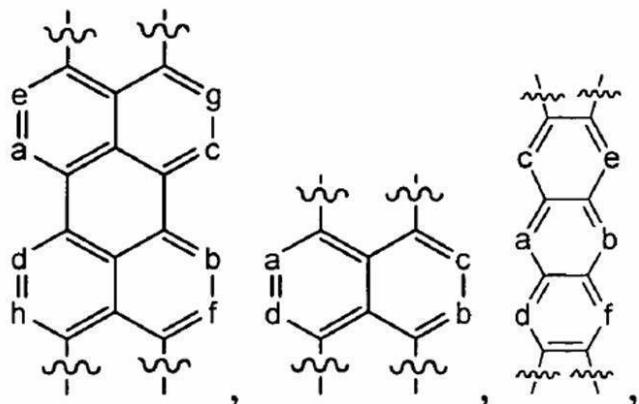
nは、1、2、3、4、5、6、7、または8であり、

tは、各出現において、1、2、3、4、5、6、7、8、9、または10である、化合物。

(項目2)

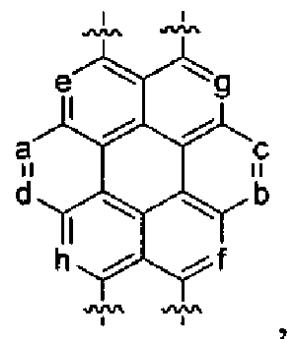
Q-(R^a)_nは、

【化26】



および

【化27】



から選択され、

式中、a、b、c、d、e、f、g、およびhは、各出現において、独立してCH、CR^a、SiH、SiR^a、N、およびPから選択され、R^aおよびnが、項目1に記載のとおりである、項目1に記載の化合物。

(項目3)

R^aが-CN、-NO₂、または-C(O)CH₃である、項目1または2に記載の化合物。

(項目4)

a、b、c、d、e、f、g、およびhが、各出現において、独立してCH、C(CN)、およびC[CC(O)CH₃]から選択される、項目2または項目3に記載の化合物。

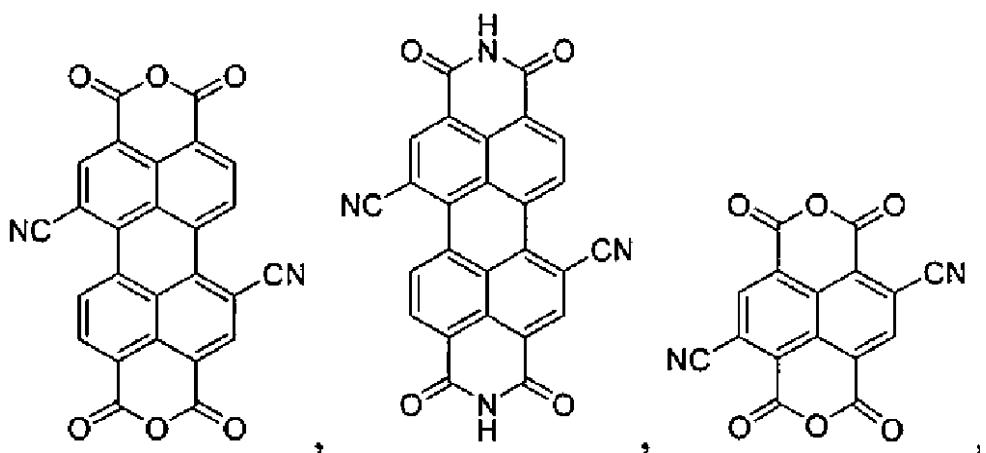
(項目5)

nが2または4である、項目1～4のいずれか1項に記載の化合物。

(項目6)

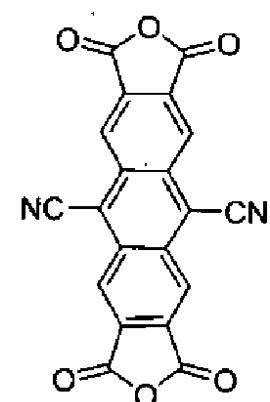
前記化合物が、

【化28】



および

【化29】

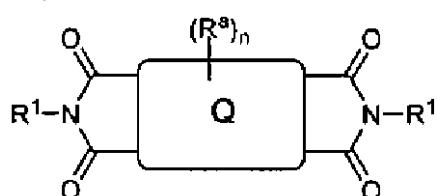


から選択される、項目1～5のいずれか1項に記載の化合物。

(項目7)

式I-Iを有する化合物を調製するための方法であって、

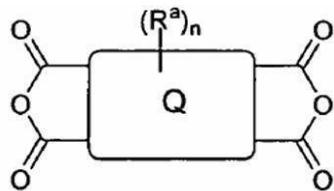
【化30】



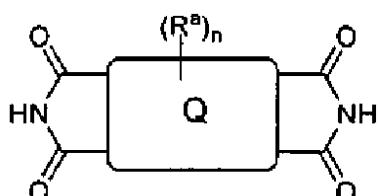
II,

式 I a

【化 3 1】

**Ia**を有する化合物を、式 R¹ NH₂ のアミンと反応させるステップ、または式 I b

【化 3 2】

**Ib**を有する化合物を、式 R¹ - L G の化合物と反応させるステップを含み、式中、Q は、縮合環部分であり、

R^a は、各出現において、a) - CN、b) - NO₂、c) - C(O)R^b、d) - C(O)NHR^b、e) - C(O)OR^b、f) - S(O)R^b、g) - S(O)₂R^b、h) - S(O)₂OH、i) - (CF₃)_tR^b、j) - [C(CF₃)₂]_tR^b、k) オキソ、および 1) 1 ~ 5 個の R^c 基で置換された 5 ~ 14 員のヘテロアリール基から選択され、

R^b は、各出現において、a) H、b) C_{1~20} アルキル基、c) C_{3~10} シクロアルキル基、d) C_{6~14} アリール基、e) C_{7~20} アリールアルキル基、f) 3 ~ 12 員のシクロヘテロアルキル基、および g) 5 ~ 14 員のヘテロアリール基から選択され、前記 C_{1~20} アルキル基、C_{3~10} シクロアルキル基、C_{6~14} アリール基、C_{7~20} アリールアルキル基、3 ~ 12 員のシクロヘテロアルキル基、および 5 ~ 14 員のヘテロアリール基のそれぞれは、任意に、1 ~ 5 個の R^c 基で置換され、

R^c は、各出現において、a) ハロゲン、b) - CN、c) - NO₂、d) - C(O)H、e) - C(O) - C_{1~20} アルキル、f) - C(O)NH₂、g) - C(O)NH - C_{1~20} アルキル、h) - C(O)N(C_{1~20} アルキル)₂、i) - C(O)OH、j) - C(O) - OC_{1~20} アルキル、k) - S(O)H、l) - S(O) - C_{1~20} アルキル、m) - S(O)₂H、n) - S(O)₂ - C_{1~20} アルキル、および o) - S(O)₂OH から選択され、

n は、1、2、3、4、5、6、7、または 8 であり、t は、各出現において、1、2、3、4、5、6、7、8、9、または 10 であり、R¹ は、各出現において、-L - R² または -L - Ar¹ - R² であり、L は、各出現において、Y または (CH₂CH₂O)_p であり、

Yは、各出現において、二価C₁₋₂₀アルキル基、二価C₁₋₂₀ハロアルキル基または共有結合であり、

A r¹は、C₆₋₁₄アリール基または5~14員のヘテロアリール基であり、それぞれ、ハロゲン、-CN、C₁₋₂₀アルキル基、C₂₋₂₀アルケニル基、C₁₋₂₀アルコキシ基、およびC₁₋₂₀ハロアルキル基から独立して選択される1~5個の置換基で任意に置換され、

R²は、各出現において、a) -OR^d、b) -C(O)OR^d、c) -C(O)R^e、d) -C(O)NR^eR^f、e) -C(S)OR^d、f) -C(S)R^e、g) -C(S)NR^eR^f、h) -SR^d、i) -S(O)₂OR^d、j) -S(O)₂R^e、k) -S(O)₂NR^eR^f、l) C₁₋₂₀アルキル基、m) C₂₋₂₀アルケニル基、n) C₂₋₂₀アルキニル基、o) C₃₋₁₀シクロアルキル基、p) C₆₋₁₄アリール基、q) 3~12員のシクロヘテロアルキル基、およびr) 5~14員のヘテロアリール基から選択され、前記C₁₋₂₀アルキル基、C₂₋₂₀アルケニル基、C₂₋₂₀アルキニル基、C₃₋₁₀シクロアルキル基、C₆₋₁₄アリール基、3~12員のシクロヘテロアルキル基、および5~14員のヘテロアリール基のそれぞれは、任意に、1~5個の-L-R³または-L-Ar²-R³基で置換され、

R^dは、各出現において、a) H、b) -C(O)R^e、c) -C(O)NR^eR^f、d) -C(S)R^e、e) -C(S)NR^eR^f、f) C₁₋₂₀アルキル基、g) C₂₋₂₀アルケニル基、h) C₂₋₂₀アルキニル基、i) -Y-C₃₋₁₀シクロアルキル基、j) -Y-C₆₋₁₄アリール基、k) -Y-3~12員のシクロヘテロアルキル基、およびl) -Y-5~14員のヘテロアリール基から選択され、前記C₁₋₂₀アルキル基、C₂₋₂₀アルケニル基、C₂₋₂₀アルキニル基、C₃₋₁₀シクロアルキル基、C₆₋₁₄アリール基、3~12員のシクロヘテロアルキル基、および5~14員のヘテロアリール基のそれぞれは、任意に、1~5個の-L-R³基で置換され、

R^eおよびR^fは、各出現において、独立して、a) H、b) -OH、c) -SH、d) -S(O)₂OH、e) -C(O)OH、f) -C(O)NH₂、g) -C(S)NH₂、h) -OC₁₋₂₀アルキル、i) -O-Y-C₆₋₁₄アリール、j) -C(O)-C₁₋₂₀アルキル、k) -C(O)-OC₁₋₂₀アルキル、l) -C(S)N(C₁₋₂₀アルキル)₂、m) -C(S)NH-C₁₋₂₀アルキル、n) -C(O)NH-C₁₋₂₀アルキル、o) -C(O)N(C₁₋₂₀アルキル)₂、p) -S(O)_m-C₁₋₂₀アルキル、q) -S(O)_m-OC₁₋₂₀アルキル、r) -C(O)-Y-C₆₋₁₄アリール、s) -C(O)-O-Y-C₆₋₁₄アリール、t) -C(S)N(-Y-C₆₋₁₄アリール)₂、u) -C(S)N(C₁₋₂₀アルキル)-Y-C₆₋₁₄アリール、v) -C(S)NH-Y-C₆₋₁₄アリール、w) -C(O)NH-Y-C₆₋₁₄アリール、x) -C(O)N(C₁₋₂₀アルキル)-Y-C₆₋₁₄アリール、y) -C(O)N(Y-C₆₋₁₄アリール)₂、z) -S(O)_m-Y-C₆₋₁₄アリール、aa) -S(O)_m-O-Y-C₆₋₁₄アリール、ab) C₁₋₂₀アルキル基、ac) C₂₋₂₀アルケニル基、ad) C₂₋₂₀アルキニル基、ae) -Y-C₃₋₁₀シクロアルキル基、af) -Y-C₆₋₁₄アリール基、ag) -Y-3~12員のシクロヘテロアルキル基、およびah) -Y-5~14員のヘテロアリール基から選択され、前記C₁₋₂₀アルキル基、C₂₋₂₀アルケニル基、C₂₋₂₀アルキニル基、C₃₋₁₀シクロアルキル基、C₆₋₁₄アリール基、3~12員のシクロヘテロアルキル基、および5~14員のヘテロアリール基のそれぞれは、任意に、1~5個の-L-R³基で置換され、

Ar²は、各出現において、C₆₋₁₄アリール基または5~14員のヘテロアリール基であり、それぞれ、独立して、ハロゲン、-CN、C₁₋₂₀アルキル基、C₂₋₂₀アルケニル基、C₁₋₂₀ハロアルキル基、およびC₁₋₂₀アルコキシ基から選択される、1~5個の置換基で任意に置換され、

R³は、各出現において、a) ハロゲン、b) -CN、c) -NO₂、d) オキソ、e) -OR^g、f) -SR^g、g) -NR^gR^h、h) -N(O)R^gR^h、i) -S(O)

m R^g、j) - S(O)mOR^g、k) - S(O)mNR^gR^h、1) - C(O)R^g、m) - C(O)OR^g、n) - C(O)NR^gR^h、o) - C(S)NR^gR^h、p) - SiH₃、q) - SiH(C₁₋₂アルキル)₂、r) - SiH₂(C₁₋₂アルキル)、s) - Si(C₁₋₂アルキル)₃、t) C₁₋₂アルキル基、u) C₂₋₂アルケニル基、v) C₂₋₂アルキニル基、w) C₃₋₁シクロアルキル基、x) C₆₋₁₄アリール基、y) 3~12員のシクロヘテロアルキル基、またはz) 5~14員のヘテロアリール基から選択され、前記C₁₋₂アルキル基、C₂₋₂アルケニル基、C₂₋₂アルキニル基、C₃₋₁シクロアルキル基、C₆₋₁₄アリール基、3~12員のシクロヘテロアルキル基、および5~14員のヘテロアリール基のそれぞれは、任意に、1~5個の-L-R⁴基で置換され、

R^gおよびR^hは、各出現において、独立して、a) H、b) -OH、c) -SH、d) -S(O)₂OH、e) -C(O)OH、f) -C(O)NH₂、g) -C(S)NH₂、h) -OC₁₋₂アルキル、i) -O-Y-C₆₋₁₄アリール、j) -C(O)-C₁₋₂アルキル、k) -C(O)-OC₁₋₂アルキル、l) -C(S)N(C₁₋₂アルキル)₂、m) -C(S)NH-C₁₋₂アルキル、n) -C(O)NH-C₁₋₂アルキル、o) -C(O)N(C₁₋₂アルキル)₂、p) -S(O)m-C₁₋₂アルキル、r) -C(O)-Y-C₆₋₁₄アリール、s) -C(O)-O-Y-C₆₋₁₄アリール、t) -C(S)N(-Y-C₆₋₁₄アリール)₂、u) -C(S)N(C₁₋₂アルキル)-Y-C₆₋₁₄アリール、v) -C(S)NH-Y-C₆₋₁₄アリール、w) -C(O)NH-Y-C₆₋₁₄アリール、x) -C(O)N(Y-C₆₋₁₄アリール)₂、z) -S(O)m-Y-C₆₋₁₄アリール、aa) -S(O)m-O-Y-C₆₋₁₄アリール、ab) C₁₋₂アルキル基、ac) C₂₋₂アルケニル基、ad) C₂₋₂アルキニル基、ae) -Y-C₃₋₁シクロアルキル基、af) -Y-C₆₋₁₄アリール基、ag) -Y-3~12員のシクロヘテロアルキル基、およびah) -Y-5~14員のヘテロアリール基から選択され、前記C₁₋₂アルキル基、C₂₋₂アルケニル基、C₂₋₂アルキニル基、C₃₋₁シクロアルキル基、C₆₋₁₄アリール基、3~12員のシクロヘテロアルキル基、および5~14員のヘテロアリール基のそれぞれは、任意に、1~5個の-L-R⁴基で置換され、

R⁴は、各出現において、a) ハロゲン、b) -CN、c) -NO₂、d) オキソ、e) -OH、f) -NH₂、g) -NH(C₁₋₂アルキル)、h) -N(C₁₋₂アルキル)₂、i) -N(C₁₋₂アルキル)-Y-C₆₋₁₄アリール、j) -N(-Y-C₆₋₁₄アリール)₂、k) -S(O)mH、l) -S(O)mC₁₋₂アルキル、m) -S(O)₂OH、n) -S(O)m-OC₁₋₂アルキル、o) -S(O)m-O-Y-C₆₋₁₄アリール、p) -CHO、q) -C(O)-C₁₋₂アルキル、r) -C(O)-C₆₋₁₄アリール、s) -C(O)OH、t) -C(O)-OC₁₋₂アルキル、u) -C(O)-O-Y-C₆₋₁₄アリール、v) -C(O)NH₂、w) -C(O)NH-C₁₋₂アルキル、x) -C(O)N(C₁₋₂アルキル)₂、y) -C(O)NH-Y-C₆₋₁₄アリール、z) -C(O)N(C₁₋₂アルキル)-Y-C₆₋₁₄アリール、aa) -C(O)N(-Y-C₆₋₁₄アリール)₂、ab) -C(S)NH₂、ac) -C(S)NH-C₁₋₂アルキル、ad) -C(S)N(C₁₋₂アルキル)₂、ae) -C(S)N(-Y-C₆₋₁₄アリール)₂、af) -C(S)N(C₁₋₂アルキル)-Y-C₆₋₁₄アリール、ag) -C(S)NH-Y-C₆₋₁₄アリール、ah) -S(O)mNH₂、ai) -S(O)mNH(C₁₋₂アルキル)、aj) -S(O)mN(C₁₋₂アルキル)₂、ak) -S(O)mNH(-Y-C₆₋₁₄アリール)、al) -S(O)mN(-Y-C₆₋₁₄アリール)₂、an) -SiH₃、ao) -SiH(C₁₋₂アルキル)₂、ap) -SiH₂(C₁₋₂アルキル)、ar) -Si(C₁₋₂アルキル)₃、as) C₁₋₂アルキ

ル基、a t) C₂ ~ 20 アルケニル基、a u) C₂ ~ 20 アルキニル基、a v) C₁ ~ 20
アルコキシ基、a w) C₁ ~ 20 ハロアルキル基、a x) C₃ ~ 10 シクロアルキル基
、a y) C₆ ~ 14 アリール基、a z) 3 ~ 12 員のシクロヘテロアルキル基、およびb a) 5 ~ 14 員のヘテロアリール基から選択され、

m は、各出現において、0、1、または2であり、

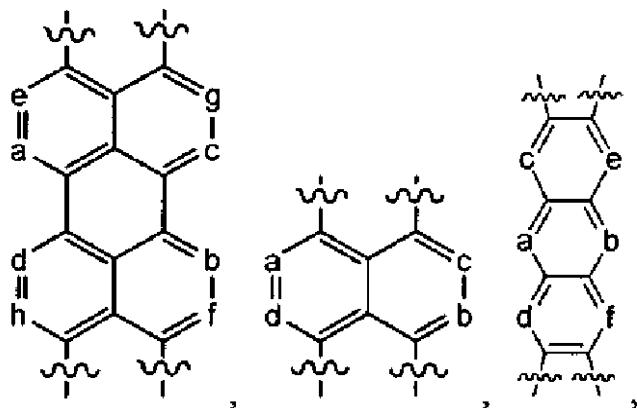
p は、各出現において、0、1、2、3、4、5、6、7、8、9、10、11、12、
 13、14、15、16、17、18、19、または20であり、

L G は、C 1、B r、I、N₃、O T s、O M s、N O₂、S C N、およびC N から選択される、方法。

(項目8)

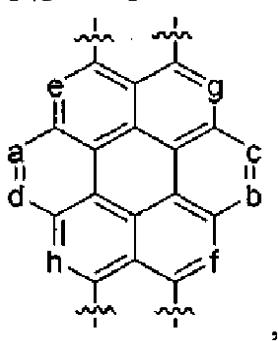
Q - (R^a)_n は、

【化33】



および

【化34】



から選択され、

式中、a、b、c、d、e、f、g、およびh は、各出現において、独立して、C H、C R^a、S i H、S i R^a、N、およびP から選択され、R^a および n は、項目7に定義されるとおりである、項目7に記載の方法。

(項目9)

R^a が、-C N、-N O₂、または-C(O)CH₃ である、項目7または項目8に記載の方法。

(項目10)

a、b、c、d、e、f、g、およびh が、各出現において、独立して、C H、C(C N)、およびC[C(O)CH₃] から選択される、項目8または9に記載の方法。

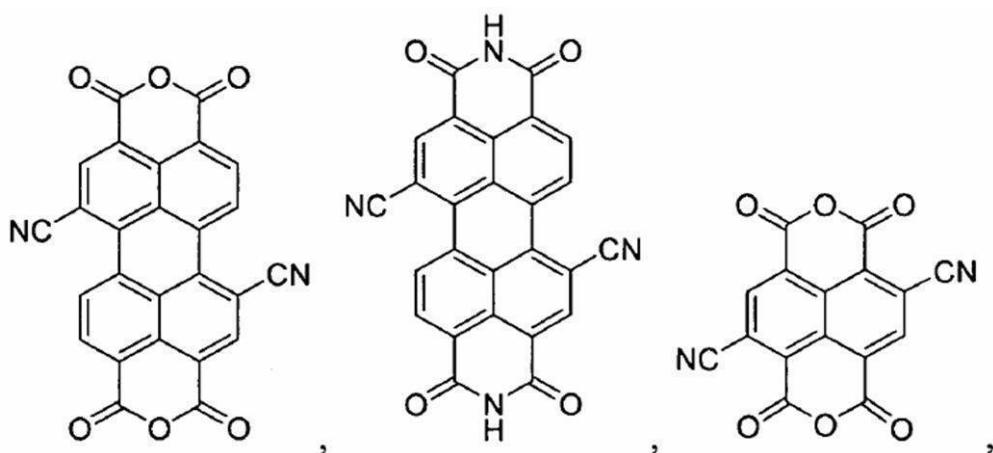
(項目11)

n が2または4である、項目7～10のいずれか1項に記載の方法。

(項目12)

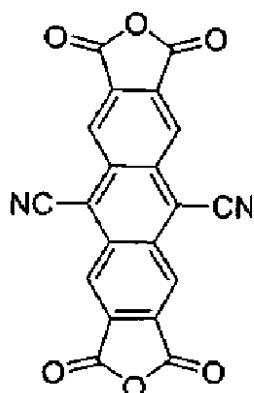
式IaまたはIbを有する前記化合物が、

【化35】



および

【化36】

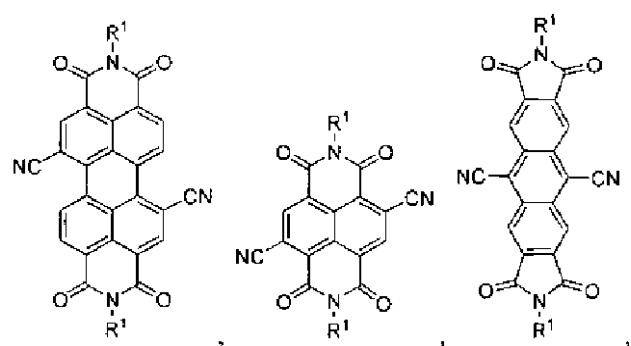


から選択される、項目7～11のいずれか1項に記載の方法。

(項目13)

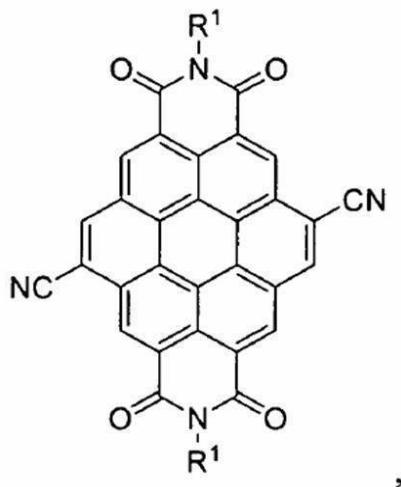
式IIを有する前記化合物は、

【化37】



および

【化38】

から選択され、式中、R¹が、項目7に定義されるとおりである、項目7～12のいずれか1項に記載の方法。(項目14)

R¹が、直鎖C_{1～20}アルキル基、分岐C_{1～20}アルキル基、分岐C_{2～20}アルケニル基、-Y-C_{3～10}シクロアルキル基、-Y-C_{6～14}アリール基、-Y-3～12員のシクロヘテロアルキル基、-Y-5～14員のヘテロアリール基から選択され、前記C_{1～20}アルキル基、C_{2～20}アルケニル基、C_{3～10}シクロアルキル基、C_{6～14}アリール基、3～12員のシクロヘテロアルキル基、および5～14員のヘテロアリール基のそれぞれは、任意に、1～5個の-L-R³基で置換され、LおよびR³は、項目7に定義されるとおりである、項目7～13のいずれか1項に記載の方法。

(項目15)

R¹は、n-オクチル基、(3S)-3,7-ジメチル-6-オクテニル基、(3S)-3,7-ジメチルオクチル基、4-n-ヘキシリルフェニル基、4-ピコリル基、6-te-rt-ブチルオキシカルボニルアミノヘキシリル基、9-アントラセニル基、アントラセン-9-イルメチル基、および2-(アントラセン-9-イル)-エチル基から選択される、項目7～14のいずれか1項に記載の方法。

(項目16)式IIの前記化合物が、

N,N'-ビス[n-オクチル]-1,7-ジシアノペリレン-3,4:9,10-ビス(ジカルボキシイミド)、

N,N'-ビス[n-オクチル]-1,6-ジシアノペリレン-3,4:9,10-ビス(ジカルボキシイミド)、

N,N'-ビス[(3S)-3,7-ジメチル-6-オクテニル]-1,7-ジシアノペリレン-3,4:9,10-ビス(ジカルボキシイミド)、

N,N'-ビス[(3S)-3,7-ジメチル-6-オクテニル]-1,6-ジシアノペリレン-3,4:9,10-ビス(ジカルボキシイミド)、

N,N'-ビス[(3S)-3,7-ジメチルオクチル]-1,7-ジシアノペリレン-3,4:9,10-ビス(ジカルボキシイミド)、

N,N'-ビス[(3S)-3,7-ジメチルオクチル]-1,6-ジシアノペリレン-3,4:9,10-ビス(ジカルボキシイミド)、

N,N'-ビス(2-エチルヘキシリル)-1,7-ジシアノペリレン-3,4:9,10-ビス(ジカルボキシイミド)、

N,N'-ビス(2-エチルヘキシリル)-1,6-ジシアノペリレン-3,4:9,10-

- ビス(ジカルボキシイミド)、

N, N' - ビス(4-n-ヘキシリフェニル)-1,7-ジシアノペリレン-3,4:9,10-ビス(ジカルボキシイミド)、

N, N' - ビス(4-n-ヘキシリフェニル)-1,6-ジシアノペリレン-3,4:9,10-ビス(ジカルボキシイミド)、

N, N' - ビス(4-ピコリル)-1,7-ジシアノペリレン-3,4:9,10-ビス(ジカルボキシイミド)、

N, N' - ビス(4-ピコリル)-1,6-ジシアノペリレン-3,4:9,10-ビス(ジカルボキシイミド)、

N, N' - ビス(6-tert-ブチルオキシカルボニルアミノヘキシリル)-1,7-ジシアノペリレン-3,4:9,10-ビス(ジカルボキシイミド)、

N, N' - ビス(6-tert-ブチルオキシカルボニルアミノヘキシリル)-1,6-ジシアノペリレン-3,4:9,10-ビス(ジカルボキシイミド)、

N, N' - ビス(9-アントラセニル)-1,7-ジシアノペリレン-3,4:9,10-ビス(ジカルボキシイミド)、

N, N' - ビス(9-アントラセニル)-1,6-ジシアノペリレン-3,4:9,10-ビス(ジカルボキシイミド)、

N, N' - ビス(アントラセン-9-イルメチル)-1,7-ジシアノペリレン-3,4:9,10-ビス(ジカルボキシイミド)、

N, N' - ビス(アントラセン-9-イルメチル)-1,6-ジシアノペリレン-3,4:9,10-ビス(ジカルボキシイミド)、

N, N' - ビス(2-(アントラセン-9-イル)-エチル)-1,7-ジシアノペリレン-3,4:9,10-ビス(ジカルボキシイミド)、

N, N' - ビス(2-(アントラセン-9-イル)-エチル)-1,6-ジシアノペリレン-3,4:9,10-ビス(ジカルボキシイミド)、

N, N' - デオクチル-2,6-ジシアノナフタレン-1,4:5,8-ビス(ジカルボキシイミド)、

N, N' - {4-[(3S)-3,7-ジメチル-6-オクテニル]フェニル}-2,6-ジシアノナフタレン-1,4:5,8-ビス(ジカルボキシイミド)、および

N, N' - デオクチル-9,10-ジシアノアントラセン-2,3:6,7-ビス(ジカルボキシイミド)から選択される、項目7~15のいずれか1項に記載の方法。

(項目17)

R¹が、任意に置換されたアリール基、任意に置換されたビアリール基、任意に置換されたアリールアルキル基、および任意に置換されたビアリールアルキル基から選択される、項目7~14のいずれか1項に記載の方法。

(項目18)

前記反応ステップが、共溶媒系で実施される、項目7~17のいずれか1項に記載の方法

。

(項目19)

前記共溶媒系が、極性プロトン性溶媒、および非極性または低極性溶媒を含む、項目18に記載の方法。

(項目20)

前記反応ステップが、キシレンおよびプロパン酸中で実施される、項目7~19のいずれか1項に記載の方法。

(項目21)

式IIの前記化合物を使用して、半導体材料を作製する、項目7~20のいずれか1項に記載の方法。

【手続補正2】

【補正対象書類名】特許請求の範囲

【補正対象項目名】全文

【補正方法】変更

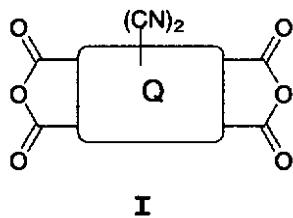
【補正の内容】

【特許請求の範囲】

【請求項1】

式Iの化合物であって、

【化39】



式中、

Qは、ペリレン部分、ナフタレン部分、アントラセン部分、およびコロネン部分から選択される、化合物。

【請求項2】

Qがペリレン部分である、請求項1に記載の化合物。

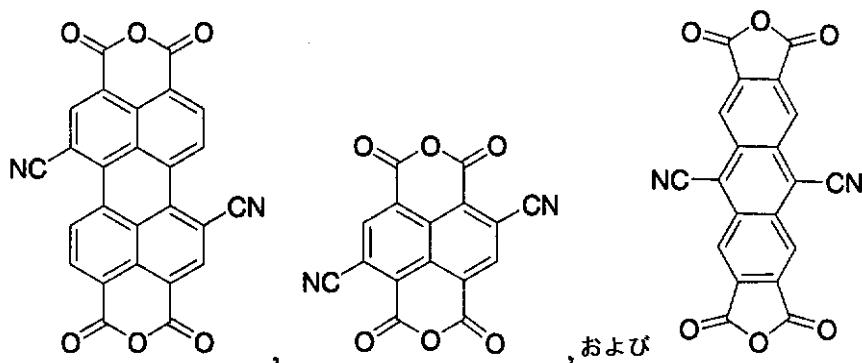
【請求項3】

Qがナフタレン部分である、請求項1に記載の化合物。

【請求項4】

以下：

【化40】

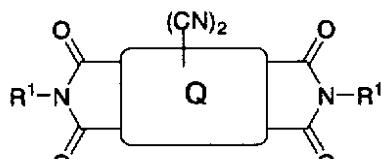


から選択される、請求項1に記載の化合物。

【請求項5】

式IIの化合物を調製するために請求項1に記載の化合物を使用する方法であって、

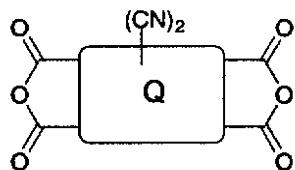
【化41】



II

該方法は、共溶媒系において、式Iの化合物

【化42】



と式 $R^1 NH_2$ のアミンとを反応させる工程を包含し、ここで、

Q が、ペリレン部分、ナフタレン部分、アントラセン部分、およびコロネン部分から選択され；そして

R¹ が、各存在において、-L-R² または -L-Ar¹-R² であり、ここで、

L は、各存在において、Y または (CH₂CH₂O)_p であり；

Y は、各存在において、二価 C_{1~20} アルキル基、二価 C_{1~20} ハロアルキル基または共有結合であり；

Ar¹ は、C_{6~14} アリール基または 5~14 員のヘテロアリール基であり、それぞれ、ハロゲン、-CN、C_{1~20} アルキル基、C_{2~20} アルケニル基、C_{1~20} アルコキシ基、および C_{1~20} ハロアルキル基から独立して選択される 1~5 個の置換基で任意に置換され；

R² は、各存在において、a) -OR^d、b) -C(O)OR^d、c) -C(O)R^e、d) -C(O)NR^eR^f、e) -C(S)OR^d、f) -C(S)R^e、g) -C(S)NR^eR^f、h) -SR^d、i) -S(O)₂OR^d、j) -S(O)₂R^e、k) -S(O)₂NR^eR^f、l) C_{1~20} アルキル基、m) C_{2~20} アルケニル基、n) C_{2~20} アルキニル基、o) C_{3~10} シクロアルキル基、p) C_{6~14} アリール基、q) 3~12 員のシクロヘテロアルキル基、および r) 5~14 員のヘテロアリール基から選択され、該 C_{1~20} アルキル基、C_{2~20} アルケニル基、C_{2~20} アルキニル基、C_{3~10} シクロアルキル基、C_{6~14} アリール基、3~12 員のシクロヘテロアルキル基、および 5~14 員のヘテロアリール基のそれぞれは、任意に、1~5 個の -L-R³ または -L-Ar²-R³ 基で置換され；

R^d は、各存在において、a) H、b) -C(O)R^e、c) -C(O)NR^eR^f、d) -C(S)R^e、e) -C(S)NR^eR^f、f) C_{1~20} アルキル基、g) C_{2~20} アルケニル基、h) C_{2~20} アルキニル基、i) -Y-C_{3~10} シクロアルキル基、j) -Y-C_{6~14} アリール基、k) -Y-3~12 員のシクロヘテロアルキル基、および l) -Y-5~14 員のヘテロアリール基から選択され、該 C_{1~20} アルキル基、C_{2~20} アルケニル基、C_{2~20} アルキニル基、C_{3~10} シクロアルキル基、C_{6~14} アリール基、3~12 員のシクロヘテロアルキル基、および 5~14 員のヘテロアリール基のそれぞれは、任意に、1~5 個の -L-R³ 基で置換され；

R^e および R^f は、各存在において、独立して、a) H、b) -OH、c) -SH、d) -S(O)₂OH、e) -C(O)OH、f) -C(O)NH₂、g) -C(S)NH₂、h) -OC_{1~20} アルキル、i) -O-Y-C_{6~14} アリール、j) -C(O)-C_{1~20} アルキル、k) -C(O)-OC_{1~20} アルキル、l) -C(S)N(C_{1~20} アルキル)₂、m) -C(S)NH-C_{1~20} アルキル、n) -C(O)NH-C_{1~20} アルキル、o) -C(O)N(C_{1~20} アルキル)₂、p) -S(O)_m-C_{1~20} アルキル、r) -C(O)-Y-C_{6~14} アリール、s) -C(O)-O-Y-C_{6~14} アリール、t) -C(S)N(-Y-C_{6~14} アリール)₂、u) -C(S)N(C_{1~20} アルキル)-Y-C_{6~14} アリール、v) -C(S)NH-Y-C_{6~14} アリール、w) -C(O)NH-Y-C_{6~14} アリール、x) -C(O)N(C_{1~20} アルキル)-Y-C_{6~14} アリール、y) -C(O)N(Y-C_{6~14} アリール)₂、z) -S(O)_m-Y-C_{6~14} アリール、aa) -S(O)_m-O-Y-C_{6~14} アリール、ab) C_{1~2}

C_3 ～ C_{12} 員のシクロアルキル基、 C_6 ～ C_{14} アリール基、 C_2 ～ C_{12} 員のヘテロアリール基から選択され、該 C_1 ～ C_2 アルキル基、 C_2 ～ C_{12} アルケニル基、 C_2 ～ C_{12} アルキニル基、 C_3 ～ C_{10} シクロアルキル基、 C_6 ～ C_{14} アリール基、 C_2 ～ C_{12} 員のシクロヘテロアルキル基、および C_1 ～ C_{14} 員のヘテロアリール基のそれぞれは、任意に、1～5個の-L-R³基で置換され；

Ar^2 は、各存在において、 C_6 ～ C_{14} アリール基または5～14員のヘテロアリール基であり、それぞれ、独立して、ハロゲン、-CN、 C_1 ～ C_{20} アルキル基、 C_2 ～ C_{20} アルケニル基、 C_1 ～ C_{20} ハロアルキル基、および C_1 ～ C_{20} アルコキシ基から選択される、1～5個の置換基で任意に置換され；

R^3 は、各存在において、a)ハロゲン、b)-CN、c)-NO₂、d)オキソ、e)-OR^g、f)-SR^g、g)-NR^gR^h、h)-N(O)R^gR^h、i)-S(O)mR^g、j)-S(O)_mOR^g、k)-S(O)_mNR^gR^h、l)-C(O)R^g、m)-C(O)OR^g、n)-C(O)NR^gR^h、o)-C(S)NR^gR^h、p)-SiH₃、q)-SiH(C₁～₂₀アルキル)₂、r)-SiH₂(C₁～₂₀アルキル)、s)-Si(C₁～₂₀アルキル)₃、t)-C₁～₂₀アルキル基、u)-C₂～₂₀アルケニル基、v)-C₂～₂₀アルキニル基、w)-C₃～₁₀シクロアルキル基、x)-C₆～₁₄アリール基、y)-3～12員のシクロヘテロアルキル基、またはz)-5～14員のヘテロアリール基から選択され、該 C_1 ～ C_2 アルキル基、 C_2 ～ C_{20} アルケニル基、 C_2 ～ C_{20} アルキニル基、 C_3 ～ C_{10} シクロアルキル基、 C_6 ～ C_{14} アリール基、 C_2 ～ C_{12} 員のシクロヘテロアルキル基、および5～14員のヘテロアリール基のそれぞれは、任意に、1～5個の-L-R⁴基で置換され、

R^g および R^h は、各存在において、独立して、a)H、b)-OH、c)-SH、d)-S(O)₂OH、e)-C(O)OH、f)-C(O)NH₂、g)-C(S)NH₂、h)-OC₁～₂₀アルキル、i)-O-Y-C₆～₁₄アリール、j)-C(O)-C₁～₂₀アルキル、k)-C(O)-OC₁～₂₀アルキル、l)-C(S)N(C₁～₂₀アルキル)₂、m)-C(S)NH-C₁～₂₀アルキル、n)-C(O)NH-C₁～₂₀アルキル、o)-C(O)N(C₁～₂₀アルキル)₂、p)-S(O)_m-OC₁～₂₀アルキル、r)-C(O)-Y-C₆～₁₄アリール、s)-C(O)-O-Y-C₆～₁₄アリール、t)-C(S)N(-Y-C₆～₁₄アリール)₂、u)-C(S)N(C₁～₂₀アルキル)-Y-C₆～₁₄アリール、v)-C(S)NH-Y-C₆～₁₄アリール、w)-C(O)NH-Y-C₆～₁₄アリール、x)-C(O)N(C₁～₂₀アルキル)-Y-C₆～₁₄アリール、y)-C(O)N(Y-C₆～₁₄アリール)₂、z)-S(O)_m-Y-C₆～₁₄アリール、aa)-S(O)_m-O-Y-C₆～₁₄アリール、ab)-C₁～₂₀アルキル基、ac)-C₂～₂₀アルケニル基、ad)-C₂～₂₀アルキニル基、ae)-Y-C₃～₁₀シクロアルキル基、af)-Y-C₆～₁₄アリール基、ag)-Y-3～12員のシクロヘテロアルキル基、およびah)-Y-5～14員のヘテロアリール基から選択され、該 C_1 ～ C_2 アルキル基、 C_2 ～ C_{20} アルケニル基、 C_2 ～ C_{20} アルキニル基、 C_3 ～ C_{10} シクロアルキル基、 C_6 ～ C_{14} アリール基、3～12員のシクロヘテロアルキル基、および5～14員のヘテロアリール基のそれぞれは、任意に、1～5個の-L-R⁴基で置換され、

R^4 は、各存在において、a)ハロゲン、b)-CN、c)-NO₂、d)オキソ、e)-OH、f)-NH₂、g)-NH(C₁～₂₀アルキル)、h)-N(C₁～₂₀アルキル)₂、i)-N(C₁～₂₀アルキル)-Y-C₆～₁₄アリール、j)-N(-Y-C₆～₁₄アリール)₂、k)-S(O)_mH、l)-S(O)_mC₁～₂₀アルキル、m)-S(O)₂OH、n)-S(O)_m-OC₁～₂₀アルキル、o)-S(O)_m-O-Y-C₆～₁₄アリール、p)-CHO、q)-C(O)-C₁～₂₀アルキル、r)-C(O)-C₆～₁₄アリール、s)-C(O)OH、t)-C(O)-OC₁～₂₀アルキル、u)-C(O)N(C₁～₂₀アルキル)-Y-C₆～₁₄アリール、v)-C(O)NH-Y-C₆～₁₄アリール、w)-C(O)N(C₁～₂₀アルキル)-Y-C₆～₁₄アリール、x)-C(O)N(Y-C₆～₁₄アリール)₂、z)-S(O)_m-Y-C₆～₁₄アリール、aa)-S(O)_m-O-Y-C₆～₁₄アリール、ab)-C₁～₂₀アルキル基、ac)-C₂～₂₀アルケニル基、ad)-C₂～₂₀アルキニル基、ae)-Y-C₃～₁₀シクロアルキル基、af)-Y-C₆～₁₄アリール基、ag)-Y-3～12員のシクロヘテロアルキル基、およびah)-Y-5～14員のヘテロアリール基から選択され、該 C_1 ～ C_2 アルキル基、 C_2 ～ C_{20} アルケニル基、 C_2 ～ C_{20} アルキニル基、 C_3 ～ C_{10} シクロアルキル基、 C_6 ～ C_{14} アリール基、3～12員のシクロヘテロアルキル基、および5～14員のヘテロアリール基のそれぞれは、任意に、1～5個の-L-R⁴基で置換され、

-₂₀ アルキル、 u) - C (O) - O - Y - C₆-₁₄ アリール、 v) - C (O) NH₂ 、 w) - C (O) NH - C₁-₂₀ アルキル、 x) - C (O) N (C₁-₂₀ アルキル)₂ 、 y) - C (O) NH - Y - C₆-₁₄ アリール、 z) - C (O) N (C₁-₂₀ アルキル) - Y - C₆-₁₄ アリール、 a a) - C (O) N (- Y - C₆-₁₄ アリール)₂ 、 a b) - C (S) NH₂ 、 a c) - C (S) NH - C₁-₂₀ アルキル、 a d) - C (S) N (C₁-₂₀ アルキル)₂ 、 a e) - C (S) N (- Y - C₆-₁₄ アリール)₂ 、 a f) - C (S) N (C₁-₂₀ アルキル) - Y - C₆-₁₄ アリール、 a g) - C (S) NH - Y - C₆-₁₄ アリール、 a h) - S (O)_m NH₂ 、 a i) - S (O)_m NH (C₁-₂₀ アルキル) 、 a j) - S (O)_m N (C₁-₂₀ アルキル)₂ 、 a k) - S (O)_m NH (- Y - C₆-₁₄ アリール) 、 a l) - S (O)_m N (C₁-₂₀ アルキル) - Y - C₆-₁₄ アリール、 a m) - S (O)_m N (- Y - C₆-₁₄ アリール)₂ 、 a n) - SiH₃ 、 a o) - SiH (C₁-₂₀ アルキル)₂ 、 a p) - SiH₂ (C₁-₂₀ アルキル) 、 a r) - Si (C₁-₂₀ アルキル)₃ 、 a s) C₁-₂₀ アルキル基、 a t) C₂-₂₀ アルケニル基、 a u) C₂-₂₀ アルキニル基、 a v) C₁-₂₀ アルコキシ基、 a w) C₁-₂₀ ハロアルキル基、 a x) C₃-₁₀ シクロアルキル基、 a y) C₆-₁₄ アリール基、 a z) 3~12員のシクロヘテロアルキル基、および b a) 5~14員のヘテロアリール基から選択され；

mは、各存在において、0、1、または2であり、

pは、各存在において、0、1、2、3、4、5、6、7、8、9、10、11、12、13、14、15、16、17、18、19、または20である、

方法。

【請求項6】

Qがペリレン部分である、請求項5に記載の方法。

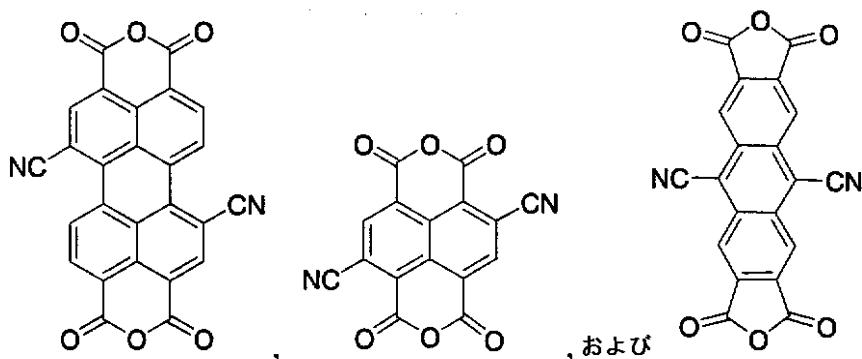
【請求項7】

Qがナフタレン部分である、請求項5に記載の方法。

【請求項8】

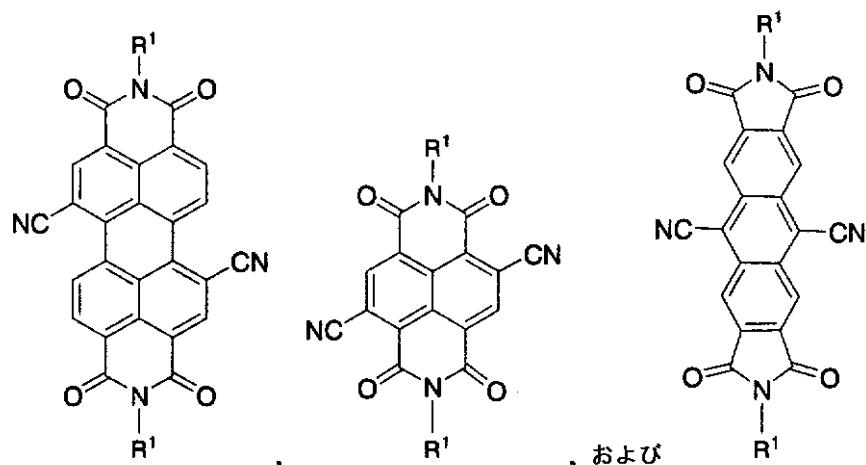
請求項5に記載の方法であって、式Iの前記化合物が、以下：

【化43】



から選択され、前記式IIの化合物が、以下：

【化44】



から選択され、ここで、R¹が請求項5に定義されるとおりである、方法。

【請求項9】

R¹が直鎖C₁~₂₀アルキル基、分岐C₁~₂₀アルキル基、分岐C₂~₂₀アルケニル基、-Y-C₃~₁₀シクロアルキル基、-Y-C₆~₁₄アリール基、-Y-3~12員のシクロヘテロアルキル基、-Y-5~14員のヘテロアリール基から選択され、該C₁~₂₀アルキル基、C₂~₂₀アルケニル基、C₃~₁₀シクロアルキル基、C₆~₁₄アリール基、3~12員のシクロヘテロアルキル基、および5~14員のヘテロアリール基のそれぞれは、任意に、1~5個の-L-R³基で置換され、LおよびR³は、請求項5に定義されるとおりである、請求項5に記載の方法。

【請求項10】

R¹は、n-オクチル基、(3S)-3,7-ジメチル-6-オクテニル基、(3S)-3,7-ジメチルオクチル基、4-n-ヘキシリルフェニル基、4-ピコリル基、6-tert-ブチルオキシカルボニルアミノヘキシリル基、9-アントラセニル基、アントラセン-9-イルメチル基、および2-(アントラセン-9-イル)-エチル基から選択される、請求項5に記載の方法。

【請求項11】

式IIの前記化合物が、

N,N'-ビス[n-オクチル]-1,7-ジシアノペリレン-3,4:9,10-ビス(ジカルボキシイミド)、

N,N'-ビス[n-オクチル]-1,6-ジシアノペリレン-3,4:9,10-ビス(ジカルボキシイミド)、

N,N'-ビス[(3S)-3,7-ジメチル-6-オクテニル]-1,7-ジシアノペリレン-3,4:9,10-ビス(ジカルボキシイミド)、

N,N'-ビス[(3S)-3,7-ジメチル-6-オクテニル]-1,6-ジシアノペリレン-3,4:9,10-ビス(ジカルボキシイミド)、

N,N'-ビス[(3S)-3,7-ジメチルオクチル]-1,7-ジシアノペリレン-3,4:9,10-ビス(ジカルボキシイミド)、

N,N'-ビス[(3S)-3,7-ジメチルオクチル]-1,6-ジシアノペリレン-3,4:9,10-ビス(ジカルボキシイミド)、

N,N'-ビス(2-エチルヘキシリル)-1,7-ジシアノペリレン-3,4:9,10-ビス(ジカルボキシイミド)、

N,N'-ビス(2-エチルヘキシリル)-1,6-ジシアノペリレン-3,4:9,10-ビス(ジカルボキシイミド)、

N,N'-ビス(4-n-ヘキシリルフェニル)-1,7-ジシアノペリレン-3,4:9,10-ビス(ジカルボキシイミド)、

N,N'-ビス(4-n-ヘキシリルフェニル)-1,6-ジシアノペリレン-3,4:

9 , 1 0 - ビス (ジカルボキシイミド)、
 N , N' - ビス (4 - ピコリル) - 1 , 7 - ジシアノペリレン - 3 , 4 : 9 , 1 0 - ビス (ジカルボキシイミド)、
 N , N' - ビス (4 - ピコリル) - 1 , 6 - ジシアノペリレン - 3 , 4 : 9 , 1 0 - ビス (ジカルボキシイミド)、
 N , N' - ビス (6 - tert - ブチルオキシカルボニルアミノヘキシル) - 1 , 7 - ジシアノペリレン - 3 , 4 : 9 , 1 0 - ビス (ジカルボキシイミド)、
 N , N' - ビス (6 - tert - ブチルオキシカルボニルアミノヘキシル) - 1 , 6 - ジシアノペリレン - 3 , 4 : 9 , 1 0 - ビス (ジカルボキシイミド)、
 N , N' - ビス (9 - アントラセニル) - 1 , 7 - ジシアノペリレン - 3 , 4 : 9 , 1 0 - ビス (ジカルボキシイミド)、
 N , N' - ビス (9 - アントラセニル) - 1 , 6 - ジシアノペリレン - 3 , 4 : 9 , 1 0 - ビス (ジカルボキシイミド)、
 N , N' - ビス (アントラセン - 9 - イルメチル) - 1 , 7 - ジシアノペリレン - 3 , 4 : 9 , 1 0 - ビス (ジカルボキシイミド)、
 N , N' - ビス (アントラセン - 9 - イルメチル) - 1 , 6 - ジシアノペリレン - 3 , 4 : 9 , 1 0 - ビス (ジカルボキシイミド)、
 N , N' - ビス (2 - (アントラセン - 9 - イル) - エチル) - 1 , 7 - ジシアノペリレン - 3 , 4 : 9 , 1 0 - ビス (ジカルボキシイミド)、
 N , N' - ビス (2 - (アントラセン - 9 - イル) - エチル) - 1 , 6 - ジシアノペリレン - 3 , 4 : 9 , 1 0 - ビス (ジカルボキシイミド)、
 N , N' - ジオクチル - 2 , 6 - ジシアノナフタレン - 1 , 4 : 5 , 8 - ビス (ジカルボキシイミド)、
 N , N' - { 4 - [(3 S) - 3 , 7 - ジメチル - 6 - オクテニル] フェニル } - 2 , 6 - ジシアノナフタレン - 1 , 4 : 5 , 8 - ビス (ジカルボキシイミド)、および
 N , N' - ジオクチル - 9 , 1 0 - ジシアノアントラセン - 2 , 3 : 6 , 7 - ビス (ジカルボキシイミド)から選択される、請求項5に記載の方法。

【請求項 1 2】

R¹が、任意に置換されたアリール基、任意に置換されたビアリール基、任意に置換されたアリールアルキル基、および任意に置換されたビアリールアルキル基から選択される、請求項5に記載の方法。

【請求項 1 3】

前記共溶媒系が、第1の溶媒および第2の溶媒を含み、該第1の溶媒が、極性プロトン性溶媒であり、該第2の溶媒が、非極性溶媒または非プロトン性溶媒である、請求項5に記載の方法。

【請求項 1 4】

前記共溶媒系が、キシレンおよびプロパン酸を含む、請求項5に記載の方法。

【請求項 1 5】

前記第1の溶媒が、プロパン酸である、請求項1 3に記載の方法。

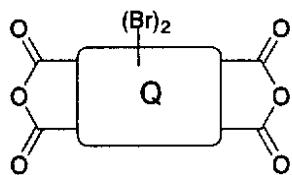
【請求項 1 6】

前記第2の溶媒が、キシレンである、請求項1 3に記載の方法。

【請求項 1 7】

請求項5に記載の方法であって、前記式Iの化合物が、シアン化物と、式IIIの化合物

【化45】

**III**

とを反応させることによって得られ、ここで、Qが請求項5に定義されるとおりである、方法。

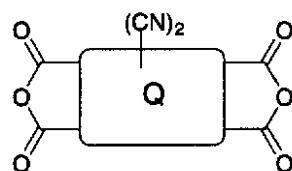
【請求項18】

前記シアノ化物が、LiCN、NaCN、KCN、CuCN、AgCN、またはシアノ化トリメチルシリルから選択される、請求項17に記載の方法。

【請求項19】

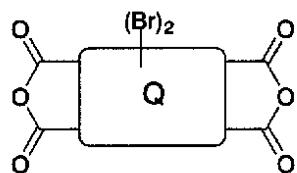
請求項1に記載の式Iの化合物を調製するための方法であって、

【化46】

**I**

該方法が、シアノ化物と式IIIの化合物

【化47】

**III**

とを反応させる工程を包含し、Qがペリレン部分、ナフタレン部分、アントラセン部分、およびコロネン部分から選択される、方法。