

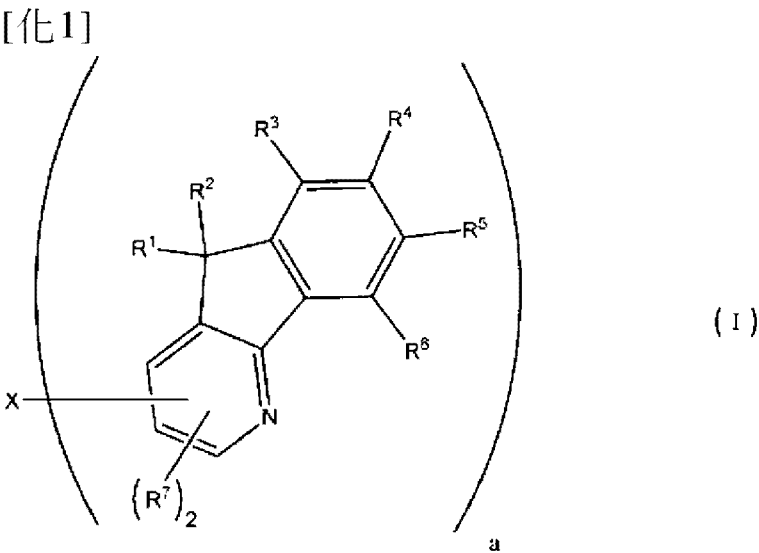


(21)申請案號：112140541 (22)申請日：中華民國 112 (2023) 年 10 月 24 日
(51)Int. Cl. : C07D221/18 (2006.01) G03F7/11 (2006.01)
H01L21/027 (2006.01)
(30)優先權：2022/10/26 日本 2022-171826
(71)申請人：日商艾迪科股份有限公司 (日本) ADEKA CORPORATION (JP)
日本
(72)發明人：村松洋亮 MURAMATSU, YOUSUKE (JP)；金原有希子 KANEHARA, YUKIKO
(JP)；齋藤広真 SAITO, HIROMASA (JP)
(74)代理人：陳長文
申請實體審查：無 申請專利範圍項數：13 項 圖式數：0 共 89 頁

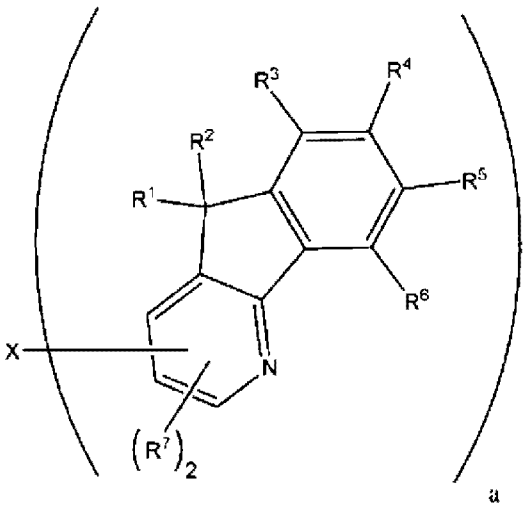
(54)名稱
化合物、組合物、硬化物、硬化物之製造方法及電子零件之製造方法

(57)摘要

本發明係一種由下述通式(I)表示之化合物。



(式中，X 表示氫原子、可經取代之成環碳原子數 2 ~ 20 之環基、可經取代之 C1 ~ 20 之鏈狀烴基等，
R¹ ~ R⁷ 表示氫原子、選自<群 A>之反應性基、可經取代之 C1 ~ 20 之烷基、可經取代之 C6 ~ 20 之芳香族環基等，
<群 A>係碳-碳不飽和鍵結性基、環狀醚基、羥基、巰基、胺基、鹵素原子及氰基，
a 表示 1 ~ 10 之整數，
R¹ 與 R²、R³ 與 R⁴、R⁴ 與 R⁵、R⁵ 與 R⁶ 及存在複數個之 R⁷ 與 R⁷ 有時相互鍵結而形成環，
且
上述化合物於分子內具有 1 個以上之選自上述<群 A>之反應性基；其他定義參照說明書)
特徵化學式：



(1)

【發明摘要】

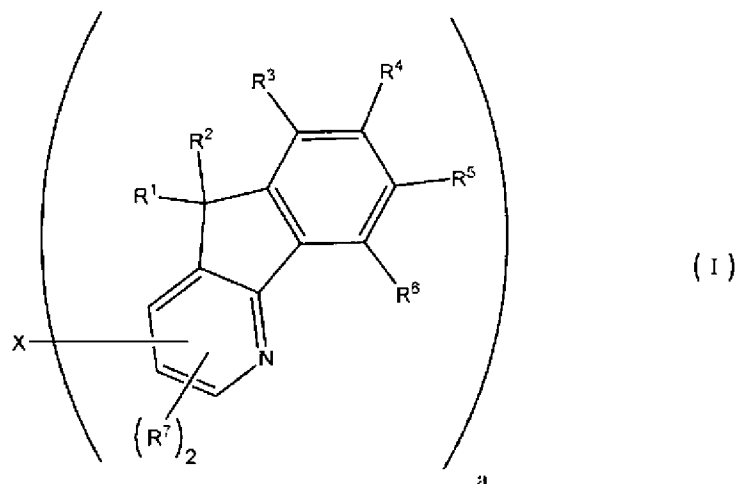
【中文發明名稱】

化合物、組合物、硬化物、硬化物之製造方法及電子零件之製造方法

【中文】

本發明係一種由下述通式(I)表示之化合物。

[化1]



(I)

(式中，X表示氫原子、可經取代之成環碳原子數2～20之環基、可經取代之C1～20之鏈狀烴基等，

R¹～R⁷表示氫原子、選自<群A>之反應性基、可經取代之C1～20之烷基、可經取代之C6～20之芳香族環基等，

<群A>係碳-碳不飽和鍵結性基、環狀醚基、羥基、巰基、胺基、鹵素原子及氰基，

a表示1～10之整數，

R¹與R²、R³與R⁴、R⁴與R⁵、R⁵與R⁶及存在複數個之R⁷與R⁷有時相互鍵結而形成環，且

上述化合物於分子內具有1個以上之選自上述<群A>之反應性基；
其他定義參照說明書)

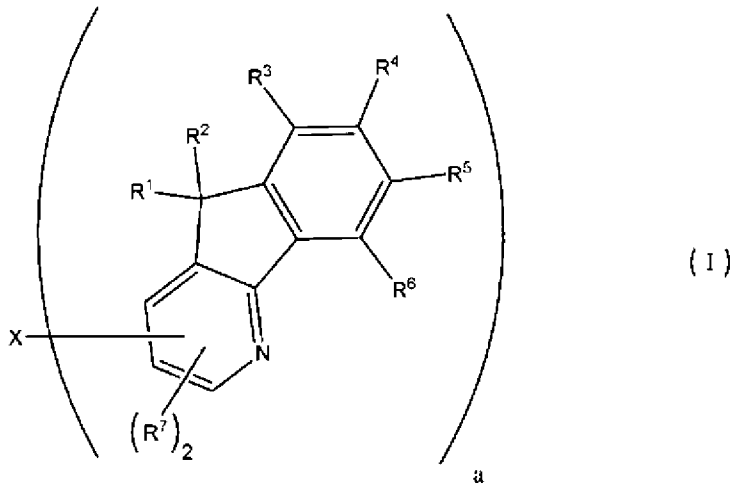
【指定代表圖】

無

【代表圖之符號簡單說明】

無

【特徵化學式】



【發明說明書】

【中文發明名稱】

化合物、組合物、硬化物、硬化物之製造方法及電子零件之製造方法

【技術領域】

【0001】 本發明係關於一種具有特定骨架之化合物。

【先前技術】

【0002】 先前，已知使6員環與5員環縮合而成之骨架結構之化合物具有耐熱性。

非專利文獻1中記載有一種11-烯丙基-10,12-二氫二茛并[1,2-b',2',1'-e]吡啶之結構及其製法。

專利文獻1中記載有一種聚合物，其具有側鏈包含吡啶并咪唑單元之結構，記載有包含該聚合物之聚合物，且記載有藉由包含該聚合物之抗蝕底層膜而不會產生與抗蝕層之互混，具有高耐乾式蝕刻性，具有高耐熱性，且昇華物量較低。

又，專利文獻2中記載有包含2個以上之吡啶結構之規定骨架之化合物之耐熱性及耐溶劑性優異。

先前技術文獻

專利文獻

【0003】 專利文獻1：US2018/0356732A1

專利文獻2：國際公開第2022/131346號

非專利文獻

【0004】 非專利文獻1：J. Chem. Res. (2016), Vol.40, p428-435(Abudullah M. AsrI et al.)

【發明內容】

[發明所欲解決之問題]

【0005】 本發明之目的在於提供一種提供耐熱性及耐溶劑性優異之硬化物之化合物及含有該化合物之組合物。

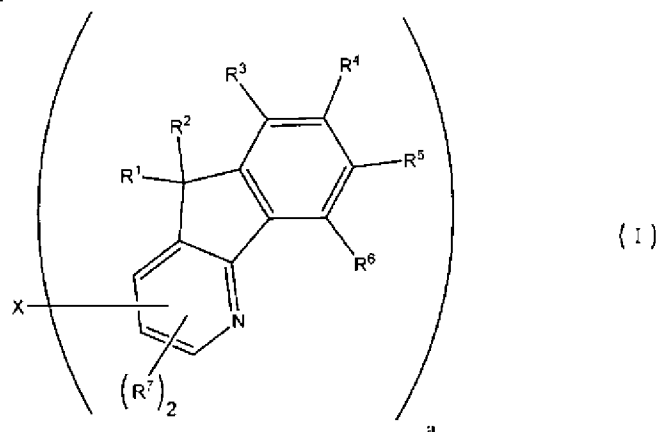
[解決問題之技術手段]

【0006】 本發明人等進行了銳意研究，結果發現具有特定骨架且於分子內具有1個以上之反應性基之化合物及含有該化合物之組合物提供耐熱性及耐溶劑性優異之硬化物，從而完成本發明。

【0007】 即，本發明提供以下之[1]至[13]。

[1]一種化合物，其係由下述通式(I)表示：

[化1]



(式中，X表示氫原子、可經取代之成環碳原子數2～20之環基、可經取代之碳原子數1～20之鏈狀烴基或該鏈狀烴基中之1個以上之亞甲基被取代為選自下述<群B>之二價基而成的基，

R¹、R²、R³、R⁴、R⁵、R⁶及R⁷(以下，亦稱為「R¹～R⁷」)分別獨立地表示氫原子、選自下述<群A>之反應性基、硝基、可經取代之碳原子數1～20之烷基、可經取代之碳原子數6～20之芳香族環基、可經取代之碳原子數2～20之雜環基、上述碳原子數1～20之烷基中之1個以上之亞甲

基被取代為選自下述〈群B〉之二價基而成的基、上述碳原子數6~20之芳香族環基中之1個以上之亞甲基被取代為選自下述〈群B〉之二價基而成的基、或上述碳原子數2~20之雜環基中之1個以上之亞甲基被取代為選自下述〈群B〉之二價基而成的基，

〈群A〉係碳-碳不飽和鍵結性基、環狀醚基、羥基、巰基、胺基、鹵素原子及氰基，

〈群B〉係-O-、-CO-、-COO-、-OCO-、-NR¹¹-、-NR¹¹CO-、及-S-，

R¹¹表示氫原子或烴基，

a表示1~10之整數，於X為氫原子之情形時，a為1，

於a為2以上之情形時，存在複數個之R¹、R²、R³、R⁴、R⁵、R⁶及R⁷可相同亦可不同，

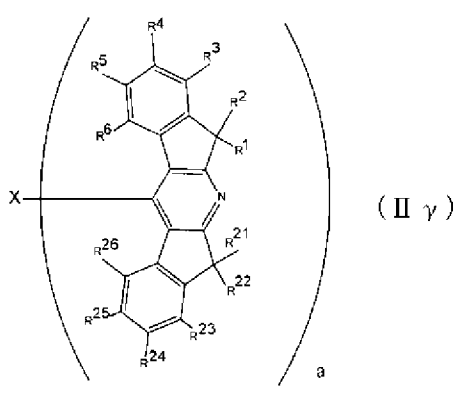
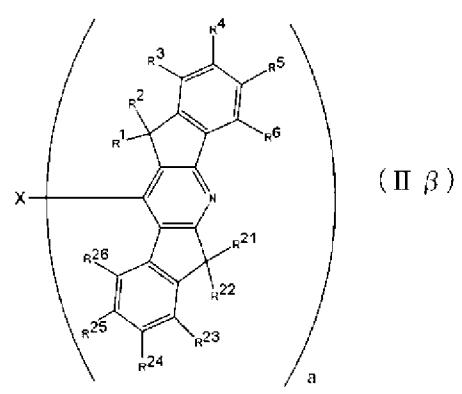
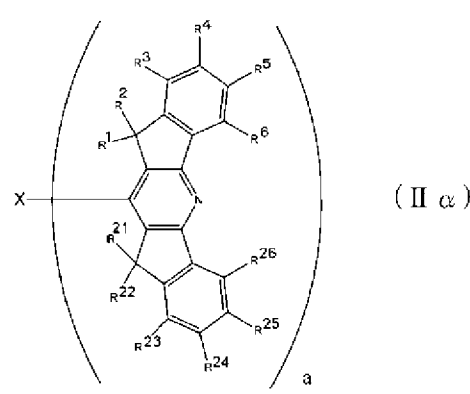
存在2個之相同重複單元中之R⁷可相同亦可不同，

R¹與R²、R³與R⁴、R⁴與R⁵、R⁵與R⁶及存在複數個之R⁷與R⁷有時相互鍵結而形成環，

其中，上述化合物於分子內具有1個以上之選自上述〈群A〉之反應性基)。

【0008】 [2]如請求項1所記載之化合物，其係由下述通式(IIα)、(IIβ)或(IIγ)表示：

[化2]



(式中，X、a、R¹、R²、R³、R⁴、R⁵及R⁶與通式(I)相同，

R²¹、R²²、R²³、R²⁴、R²⁵及R²⁶(以下，亦稱為「R²¹~R²⁶」)分別獨立地表示氫原子、選自上述<群A>之反應性基、硝基、可經取代之碳原子數1~20之烷基、可經取代之碳原子數6~20之芳香族環基、可經取代之碳原子數2~20之雜環基、該碳原子數1~20之烷基中之1個以上之亞甲基被取代為選自上述<群B>的二價基而成之基、該碳原子數6~20之芳香族環基中之1個以上之亞甲基被取代為選自上述<群B>的二價基而成之基、或該碳原子數2~20之雜環基中之1個以上之亞甲基被取代為選自

上述〈群B〉的二價基而成之基，

R^{21} 與 R^{22} 、 R^{23} 與 R^{24} 、 R^{24} 與 R^{25} 及 R^{25} 與 R^{26} 有時相互鍵結而形成環)。

【0009】 [3]如[1]或[2]所記載之化合物，其中X為可經取代之碳原子數6~20之芳香族環基或可經取代之碳原子數2~20之雜環基。

【0010】 [4]如[1]所記載之化合物，其於分子中具有1個以上之碳-碳不飽和鍵結性基作為上述反應性基。

【0011】 [5]如[2]所記載之化合物，其於分子中具有1個以上之碳-碳不飽和鍵結性基作為上述反應性基。

【0012】 [6]如[1]至[5]中任一項所記載之化合物，其中存在於分子內之選自上述〈群A〉之反應性基之數為2個以上。

[7]如[1]至[6]中任一項所記載之化合物，其中X具有可經取代之縮合環，或者存在於分子內之上述反應性基之數為3個以上。

【0013】 [8]一種組合物，其含有如[1]至[7]中任一項所記載之化合物。

【0014】 [9]如[8]所記載之組合物，其用於電子零件。

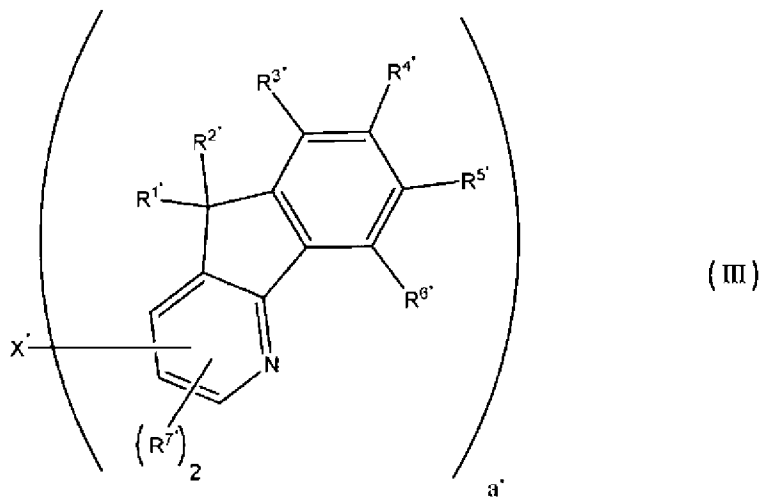
【0015】 [10]一種硬化物，其係由如[8]所記載之組合物獲得。

【0016】 [11]一種硬化物之製造方法，其具有使如[8]所記載之組合物硬化之步驟。

【0017】 [12]一種電子零件之製造方法，其於使如[8]所記載之組合物硬化之步驟之後具有硬化物之去除步驟。

[13]一種化合物，其係由下述通式(III)表示：

[化3]



(式中，X'表示氫原子、可經取代之成環碳原子數2～20之環基、可經取代之碳原子數1～20之鏈狀烴基或該鏈狀烴基中之1個以上之亞甲基被取代為選自下述<群B>之二價基而成的基，

R^{1'}、R^{2'}、R^{3'}、R^{4'}、R^{5'}、R^{6'}及R^{7'}分別獨立地表示氫原子、選自下述<群A>之反應性基、硝基、可經取代之碳原子數1～20之烷基、可經取代之碳原子數6～20之芳香族環基、可經取代之碳原子數2～20之雜環基、該碳原子數1～20之烷基中之1個以上之亞甲基被取代為選自下述<群B>的二價基而成之基、該碳原子數6～20之芳香族環基中之1個以上之亞甲基被取代為選自下述<群B>的二價基而成之基、或該碳原子數2～20之雜環基中之1個以上之亞甲基被取代為選自下述<群B>的二價基而成之基，

<群A>係碳-碳不飽和鍵結性基、環狀醚基、羥基、巰基、胺基、鹵素原子及氰基，

<群B>係-O-、-CO-、-COO-、-OCO-、-NR¹¹-、-NR¹¹CO-、及-S-，

R¹¹表示氫原子或烴基，

a'表示1～10之整數，於X'為氫原子之情形時，a為1，

於 a' 為2以上之情形時，存在複數個之 $R^{1'}$ 、 $R^{2'}$ 、 $R^{3'}$ 、 $R^{4'}$ 、 $R^{5'}$ 、 $R^{6'}$ 及 $R^{7'}$ 可相同亦可不同，

存在2個之相同重複單元中之 $R^{7'}$ 可相同亦可不同，

$R^{1'}$ 與 $R^{2'}$ 、 $R^{3'}$ 與 $R^{4'}$ 、 $R^{4'}$ 與 $R^{5'}$ 、 $R^{5'}$ 與 $R^{6'}$ 及存在複數個之 $R^{7'}$ 與 $R^{7'}$ 有時相互鍵結而形成環，

其中，上述化合物於分子內具有1個以上之酚性羥基)。

[發明之效果]

【0018】 本發明之通式(I)所表示之化合物及包含該化合物之組合物係提供耐熱性及耐溶劑性優異之硬化物者。又，藉由本發明所獲得之硬化物係使用上述組合物，耐熱性及耐溶劑性優異者。進而，本發明之電子零件之製造方法可藉由適於需要高耐熱性及耐溶劑性之電子零件之組合物來製造高品質之電子零件。進而，藉由使用作為本發明之化合物之前驅物之通式(III)所表示的化合物，能夠成功地製造本發明之化合物。

【實施方式】

【0019】 < A.通式(I)所表示之化合物 >

首先，對通式(I)所表示之化合物(以下，亦稱為「化合物I」)進行說明。化合物I係上述通式(I)所表示之具有特定骨架之化合物，其特徵之一在於其具有規定之骨架，且於分子內具有1個以上選自上述<群A>之反應性基(以下，亦僅記載為「反應性基」)。化合物I之較佳例為通式(II α)、(II β)、(II γ)所表示之化合物(以下，亦分別稱為「化合物II α 」、「化合物II β 」、「化合物II γ 」，將3種統稱為「化合物II α ~II γ 」)。

再者，「存在2個之相同重複單元中之 R^7 」係指式(I)中之「 $(R^7)_2$ 」中之2個 R^7 。

【0020】 上述反應性基之中，碳-碳不飽和鍵結性基表示具有碳-碳不飽和鍵之基，較佳可例舉末端具有碳-碳不飽和鍵之基。作為上述末端具有碳-碳不飽和鍵之碳-碳不飽和鍵結性基，較佳可例舉：乙炔基、炔丙基、炔丙氧基、單炔丙基胺基、二炔丙基胺基(二-2-丙炔基胺基)等末端具有碳-碳三鍵之基；乙烯基、烯丙基、丙烯醯基、丙烯醯氧基、甲基丙烯醯基、甲基丙烯醯氧基等末端具有碳-碳雙鍵之基。至於作為反應基之碳-碳不飽和鍵結性基，特佳為末端具有碳-碳三鍵之基，特佳為乙炔基、炔丙基、炔丙氧基或二炔丙基胺基。其原因在於，藉由使碳-碳不飽和鍵結性基為上述所表示之基，容易獲得耐熱性及耐溶劑性優異之硬化物。

【0021】 上述反應性基之中，環狀醚基表示具有環狀醚之基，較佳為末端具有環狀醚之情形，其中，更佳為環氧基、氧雜環丁基，特佳為縮水甘油醚基、 β -縮水甘油醚基、脂環環氧基等環氧基。其原因在於，藉由使環狀醚基為上述所表示之基，能夠獲得耐熱性優異之硬化物。

【0022】 式(I)之 $R^1 \sim R^7$ 及式(II α)~(II γ)之 $R^{21} \sim R^{26}$ 所表示之碳原子數1~20之烷基可為直鏈狀，亦可為支鏈狀，亦可具有脂環，亦可為芳烷基。作為直鏈烷基，可例舉：甲基、乙基、丙基、丁基、異戊基、第三戊基、己基、庚基及辛基。作為支鏈烷基，可例舉：異丙基、第二丁基、第三丁基、異丁基、異戊基、第三戊基、2-己基、3-己基、2-庚基、3-庚基、異庚基、第三庚基、異辛基、第三辛基、2-乙基己基、壬基、異壬基、癸基、十二烷基、十三烷基、十四烷基、十五烷基、十六烷基、十七烷基、十八烷基等。

作為具有脂環者，可例舉：環戊基、環己基等環烷基；環己基甲基等環烷基烷基；基中之氫原子被取代為雜環而成之烷基等。

就耐熱性及耐溶劑性之方面而言，除 $R^1 \sim R^7$ 及 $R^{21} \sim R^{26}$ 所表示之芳烷基以外之烷基之碳原子數較佳為1~15，更佳為1~10，進而較佳為1~5。

【0023】 上述芳烷基意指烷基中之1個以上之氫原子被取代為芳基而成之基。作為上述芳烷基，例如可例舉：苄基、苈基、茛基、9-苈基甲基、 α -甲基苄基、 α,α -二甲基苄基、苯基乙基及萘基丙基等。就耐熱性及耐溶劑性之方面而言， $R^1 \sim R^7$ 及 $R^{21} \sim R^{26}$ 所表示之芳烷基之碳原子數較佳為7~20，更佳為7~15，進而較佳為7~10。

【0024】 $R^1 \sim R^7$ 及 $R^{21} \sim R^{26}$ 所表示之碳原子數6~20之芳香族環基係包含芳香族烴環且於芳香族烴環上存在鍵結鍵之烴基，亦可具有脂肪族烴基或雜環，但較佳為不含雜環。於含有脂肪族烴基或雜環之情形時，包含脂肪族烴基或雜環之碳原子數在內，碳原子數之上限為20以下。

作為芳香族環基，可例舉碳原子數6~20之芳基。

【0025】 作為碳原子數6~20之芳基，可例舉單環結構、縮合環結構、或2個以上之芳香族烴環連結而成之結構之芳基。

作為碳原子數6~20之單環結構之芳基，例如可例舉：苯基、甲苯基、二甲苯基、乙基苯基、2,4,6-三甲基苯基等。

作為碳原子數6~20之縮合環結構之芳基，例如可例舉：萘基、蒽基、菲基、芘基及茛并苈基等。

作為於2個以上之芳香族烴環連結而成之芳基中，將芳香族烴環彼此連結之連結基，可例舉：單鍵、硫基(-S-)、羰基等。

例如作為2個以上之芳香族烴環連結而成之芳基，例如可例舉：聯苯、二苯硫醚、苯甲醯基苯基、或者藉由上述連結基單環與縮合環、或縮

合環彼此鍵結而成之基等。

就耐熱性及耐溶劑性之方面而言， $R^1 \sim R^7$ 及 $R^{21} \sim R^{26}$ 所表示之芳香族環基之碳原子數更佳為6~15，尤其較佳為6~10。

【0026】作為 $R^1 \sim R^7$ 及 $R^{21} \sim R^{26}$ 所表示之碳原子數2~20之雜環基，可例舉自「雜環式化合物」去除1個氫原子所得之基(以下，亦稱為「雜環基I」)、及雜環基I中之氫原子經烴基取代而成之基(以下，亦稱為「雜環基II」)。再者，由於環氧基包括在反應性基中，因此不包括在雜環基中。雜環基可為單環結構，亦可為縮合環結構。作為碳原子數2~20之縮合環結構之雜環基，可例舉雜環與雜環或烴環縮合而成之結構即碳原子數3~20之含雜環之縮合環基等。作為具體之雜環基I，例如可例舉：吡啶基、喹啉基、噻唑基、四氫呋喃基、二氧戊環基、四氫吡喃基、甲硫基、苯基、己硫基、苯基、苯并噻吩基、吡咯基、吡咯啉基、咪唑基、咪唑啉基、咪唑噻吩基、吡唑基、吡唑啉基、哌啶基、哌嗪基、嘧啶基、呋喃基、噻吩基、苯并噻吩-2-基、噻唑基、異噻唑基、噁唑基、異噁唑基、咪唑基等。

作為於雜環基II中取代雜環基I中之氫原子之烴基，可例舉與下述 R^{11} 所表示之烴基中所例舉者相同者。於雜環基II中，鍵結鍵存在於雜環基I上。於雜環基II之情形時，包含烴基之碳原子數在內，滿足「碳原子數2~20」。

就耐熱性及耐溶劑性之方面而言， $R^1 \sim R^7$ 及 $R^{21} \sim R^{26}$ 所表示之雜環基之碳原子數更佳為2~15，尤其較佳為2~10，尤其較佳為2~5。

【0027】於本說明書中，以下，「碳原子數1~20之烷基中之1個以上之亞甲基被取代為選擇<群B>之二價基而成之基」亦稱為「碳原子數

1~20之亞甲基取代烷基」。

同樣地，「碳原子數6~20之芳香族環基中之1個以上之亞甲基被取代為選擇<群B>之二價基而成之基」亦稱為「碳原子數6~20之亞甲基取代芳香族環基」。

同樣地，「碳原子數2~20之雜環基中之1個以上之亞甲基被取代為選擇<群B>之二價基而成之基」亦稱為「碳原子數2~20之亞甲基取代雜環基」。

於本說明書中，亞甲基取代烷基、亞甲基取代芳香族環基及亞甲基取代雜環基、以及下述亞甲基取代鏈狀烴基之碳原子數處於亞甲基取代前之規定之碳原子數之基經亞甲基取代之範圍內。例如，於本說明書中，碳原子數20之烷基中之亞甲基(-CH₂-)之1個被取代為作為二價基之「-O-」而成之基(例如烷氧基)之碳原子數為19。又，亞甲基取代烷基、亞甲基取代芳香族環基、亞甲基取代雜環基之碳原子數於採用群B之任一基之情形時，亦分別處於1~20、6~20、2~20之範圍內，碳原子數較佳為15以下，更佳為10以下，進而較佳為5以下。

進而，上述各種經亞甲基取代之基不具有複數個上述二價基相鄰之結構。

【0028】 作為式(I)之R¹與R²、R³與R⁴、R⁴與R⁵、R⁵與R⁶及存在複數個之R⁷與R⁷相互鍵結而形成環之情形時所形成之環、及式(IIα)~(IIγ)中之R²¹與R²²、R²³與R²⁴、R²⁴與R²⁵及R²⁵與R²⁶彼此形成環之情形時之環，可例舉烴環及雜環。作為烴環，可例舉：環戊烷環、環己烷環、環戊烯環、苯環等單環；茛滿環、茛環、萘環及蒽環等縮合環。

又，作為雜環，可例舉：吡咯啉環、吡咯環、哌啶環、咪啉環、硫

代咪啉環、四氫吡啶環、內酯環及內醯胺環等單環；呋啞環、吡啞環等縮合環等。

【0029】 作為上述 R^1 與 R^2 、 R^3 與 R^4 、 R^4 與 R^5 、 R^5 與 R^6 及存在複數個之 R^7 與 R^7 彼此鍵結而形成之環，例如要想使耐熱性及耐溶劑性良好，較佳為烴環，其中較佳為構成環之至少一個為芳香族環之芳香族烴環，最佳為茛滿環。

式(II α)～(II γ)係式(I)中 R^7 與 R^7 鍵結而形成了與式(I)所記載之吡啞環縮合之茛滿環者。

【0030】 作為 R^{11} 所表示之烴基，可例舉烷基、烯基或芳香族環基。

【0031】 作為烷基，可例舉 R^1 等例中所例舉之各種烷基等。

作為烯基，例如作為鏈狀烯基，可例舉：乙烯基、伸乙基、2-丙烯基、3-丁烯基、2-丁烯基、4-戊烯基、3-戊烯基、2-己烯基、3-己烯基、5-己烯基、2-庚烯基、3-庚烯基、4-庚烯基及4,8,12-十四碳三烯基烯丙基；作為環狀烯基，可例舉環戊二烯基等。

【0032】 作為芳香族環基，可例舉 R^1 等說明中所例舉之基。

【0033】 上述 $R^1 \sim R^7$ 及 $R^{21} \sim R^{26}$ 所表示之碳原子數1～20之烷基、碳原子數6～20之芳香族環基、碳原子數2～20之雜環基、碳原子數1～20之亞甲基取代烷基、碳原子數6～20之亞甲基取代芳香族環基、碳原子數2～20之亞甲基取代雜環基中之氫原子可經取代基取代，至於此情形時之取代基之例，除了可例舉選自上述〈群A〉之反應性基以外，亦可例舉鹵素原子、硝基等。

於本說明書中，除非指定「成環」等，否則於規定之碳原子數之基

具有取代基之情形時，包含該取代基之碳原子數在內，應滿足規定之碳原子數。

【0034】 例如，關於被取代為反應性基而成之基，可例舉以下式(f)所表示之基。



(此處， L_f 為自碳原子數1～20之烷基去除t個氫原子所得之基、碳原子數6～20之芳香族環基、碳原子數2～20之雜環基、自碳原子數1～20之亞甲基取代烷基去除t個氫原子所得之基、碳原子數6～20之亞甲基取代芳香族環基、或碳原子數2～20之亞甲基取代雜環基， R_f 為反應性基，t為1～10之數)

【0035】 t較佳為1～8，更佳為1～5，特佳為1～3。 L_f 較佳為自烷基去除t個氫原子所得之基、芳香族環基、亞甲基取代烷基或亞甲基取代芳香族環基，更佳為芳香族環基或亞甲基取代芳香族環基，最佳為芳香族環基。其原因在於上述化合物I能夠形成耐熱性及耐溶劑性更優異之化合物。

式(f)所表示之基之碳原子數較佳為10以下，亦可為5以下，亦可為3以下。其原因在於上述化合物I能夠形成耐熱性及耐溶劑性更優異之化合物。

以下，亦將式(f)所表示之基與反應性基一併稱為「含反應性基之基」。

作為含反應性基之基，特佳為反應性基。其原因在於上述化合物I能夠形成耐熱性及耐溶劑性更優異之化合物。

【0036】 式(I)中之X所表示之成環碳原子數為2～20之環基係具有

成環碳原子數為2～20之環，且於該環上具有鍵結於式(I)之吡啶環之鍵結鍵之基。作為成環碳原子數為2～20之環，可例舉成環碳原子數6～20之芳香族環、及成環碳原子數2～20之雜環。作為成環碳原子數6～20之芳香族環，可例舉包含碳及氫之烴環。成環碳原子數2～20之環可為單環，亦可為縮合環。

作為成環碳原子數6～20之芳香族環，作為單環，可例舉苯環等包含碳原子及氫原子之烴系單環，作為縮合環，可例舉萘環、蒽環、菲環、蔥環、茛滿環、芘環及苯并芘環等烴系縮合環，亦可例舉利用連結基將其等連結而成之環結構。如下所述，作為X，較佳為烴系縮合環，特佳為萘。

作為成環碳原子數2～20之雜環，作為單環，可例舉：呋喃環、吡啶環、嘧啶環、噻吩環、吡咯環、咪唑環、噻唑環、噁二唑環、吡啶環、吡咩環等包含雜原子之雜系單環，作為縮合環，可例舉：呋唑環、吡咩環、二苯并呋喃環、二苯并噻吩環等。成環碳原子數2～20之環基中，亦可例舉利用連結基將複數個環連結而成之環結構，只要於任一環上具有鍵結於式(I)之吡啶環之鍵結鍵即可。

作為X中之上述連結基，可例舉：硫原子、氮原子、羰基、碳原子、單鍵等。

所謂「成環碳原子數2～20，係指於X為2個以上之環連結而成之結構之情形時，構成該等2個以上之環之碳原子數之合計值。

【0037】 作為式(I)中之X所表示之碳原子數1～20之鏈狀烴基，可例舉於R¹¹中所例舉之基中之鏈狀烷基、鏈狀烯基等中去除a-1個氫原子所得之基。但是，*-C=C-*等碳-碳不飽和鍵不位於脂肪族烴基之末端，除非其兩端鍵結於碳原子。

又，關於X，於本說明書中，「碳原子數2~20之鏈狀烴基中之1個以上之亞甲基被取代為選自<群B>的二價基而成之基」亦稱為「碳原子數2~20之亞甲基取代鏈狀烴基」。

X所表示之鏈狀烴基及亞甲基取代鏈狀烴基之碳原子數處於1~20之範圍內，較佳為1~15，更佳為1~10，特佳為1~5。

【0038】 X所表示之碳原子數2~20之環可經取代基取代，作為此情形時之取代基之例，除了可例舉選自上述<群A>之反應性基或式(f)所表示之基以外，亦可例舉硝基等。

【0039】 碳原子數1~20之鏈狀烴基中之氫原子可經取代基取代，至於此情形時之取代基之例，除了可例舉選自上述<群A>之反應性基以外，亦可例舉硝基。

【0040】 以下，將進一步對化合物I之較佳者進行說明。再者，以下所有之「含反應性基之基」之詞可分別獨立地替換為「反應性基」，進而可替換為「碳-碳不飽和鍵結性基」或「炔丙基或含炔丙基之基(例如炔丙基或炔丙氧基)」。

【0041】 作為化合物I之反應性基，較佳為碳-碳不飽和鍵結性基、環狀醚基、羥基或胺基，特佳為碳-碳不飽和鍵結性基。其原因在於，藉由使反應性基為上述基，能夠獲得耐熱性及耐溶劑性優異之硬化物。

化合物I較佳為於分子中具有1個以上之碳-碳不飽和鍵結性基，於此情形時，可具有除碳-碳不飽和鍵結性基以外之反應性基，亦可不具有除碳-碳不飽和鍵結性基以外之反應性基。再者，作為胺基，可例舉一級胺基(-NH₂基)、經碳原子數1~3之低級烷基或乙醯基取代之二級胺基等，較佳為一級胺基或經低級烷基取代之二級胺基。

【0042】 於化合物I中，存在於分子內之反應性基之數為1個以上，其中較佳為2個以上，特佳為3個以上。其原因在於，藉由使存在於分子內之反應性基之數為上述範圍，能夠獲得耐熱性及耐溶劑性優異之硬化物。至於存在於分子內之反應性基之數，就容易合成且保存穩定性良好之方面而言，較佳為10個以下，就該觀點而言，更佳為9個以下，進而較佳為8個以下。再者，關於此處提及之反應性基之數，例如若為二炔丙基胺基，則計為2個。

尤其是於化合物I中，就化合物I之硬化物之耐熱性較高之方面而言，較佳為(a)存在於分子內之反應性基之數為3個以上，或者(b)X具有可經取代之縮合環，最佳為滿足(a)及(b)兩者之條件。

【0043】 作為式(I)中之 $R^1 \sim R^6$ 所表示之基，較佳為氫原子、選自上述<群A>之反應性基、或分別可經反應性基取代之碳原子數1~20之烷基、碳原子數6~20之芳香族環基、碳原子數1~20之亞甲基取代烷基或碳原子數6~20之亞甲基取代芳香族環基，其中較佳為氫原子、反應性基、或分別可經反應性基取代之碳原子數1~20之烷基、碳原子數6~20之芳香族環基或碳原子數1~20之亞甲基取代烷基，尤其較佳為氫原子、反應性基、或分別可經反應性基取代之碳原子數1~10之烷基、碳原子數6~10之芳香族環基或碳原子數1~10之亞甲基取代烷基，尤其較佳為氫原子、反應性基、分別可經反應性基取代之碳原子數1~5之烷基或碳原子數1~5之亞甲基取代烷基，最佳為氫原子、反應性基、碳原子數1~2之烷基或碳原子數1~2之亞甲基取代烷基。

其原因在於，藉由使通式(I)中之 $R^1 \sim R^6$ 所表示之基為上述所表示之基，能夠獲得耐熱性及耐溶劑性優異之硬化物。

【0044】 尤其較佳為 $R^1 \sim R^6$ 所表示之基之1個以上為含反應性基之基。其原因在於，藉由使通式(II)中之 $R^1 \sim R^6$ 所表示之基為上述基，能夠獲得耐熱性及耐溶劑性優異之硬化物。

【0045】 於式(I)中之 $R^1 \sim R^6$ 中，反應性基之合計數較佳為1~4，其中較佳為1~3，特佳為2~3。其原因在於，藉由使通式(I)中之 $R^1 \sim R^6$ 中之反應性基數為上述所表示之範圍，能夠獲得耐熱性及耐溶劑性優異之硬化物。

【0046】 於式(I)中之 $R^1 \sim R^6$ 中，較佳為 R^1 、 R^2 、 R^4 及 R^5 中之任一個或兩個以上為含反應性基之基，更佳為 R^1 、 R^2 及 R^5 中之任一個或兩個以上為含反應性基之基，特佳為 R^1 及 R^2 中之任一者或兩者為含反應性基之基。於 R^1 及 R^2 中之任一者或兩者為含反應性基之基之情形時，特佳為 R^4 及 R^5 中之任一者或兩者為含反應性基之基，進而較佳為 R^4 及 R^5 中之任一者為含反應性基之基。進而，於上述之情形時，較佳為 R^1 及 R^2 兩者為含反應性基之基。其原因在於，藉由使式(I)中含反應性基之基之位置為上述，能夠獲得耐熱性及耐溶劑性優異之硬化物。又，其原因在於成膜性亦優異。

【0047】 於 R^1 或 R^2 均並非含反應性基之基之情形時，就耐熱性之方面而言，較佳為 R^4 及 R^5 之至少一者為含反應性基之基。

作為上述所例舉之含反應性基之基之位於較佳位置以外的位置之基可為含反應性基之基，亦可並非含反應性基之基。

【0048】 式(I)中之 $R^1 \sim R^6$ 所表示之基之中，較佳為氫原子、碳原子數1~20之烷基、碳原子數6~20之芳香族環基、碳原子數1~20之亞甲基取代烷基或碳原子數6~20之亞甲基取代芳香族環基並非含反應性基之

基，其中較佳為氫原子、碳原子數1~20之烷基或碳原子數1~20之亞甲基取代烷基，尤其較佳為氫原子、碳原子數1~5之烷基、碳原子數1~5之亞甲基取代烷基，其中較佳為氫原子、碳原子數1~2之烷基或碳原子數1~2之亞甲基取代烷基。就能夠獲得容易合成且保存穩定性優異之化合物之方面而言，亦較佳為式(I)中之 $R^1 \sim R^6$ 所表示之基中之1個或2個以上為氫原子。

【0049】 式(I)中之 a 較佳為1~5，其中更佳為1~3，特佳為1~2。其原因在於，藉由使式(I)中之 a 為上述數，能夠獲得容易合成且保存穩定性優異之化合物。

【0050】 例如，要想使耐熱性良好，上述 R^7 與 R^7 彼此鍵結而形成之環較佳為僅包含碳原子及氫原子之烴環，其中較佳為芳香族烴環，特佳為形成與式(I)之吡啶環縮合之茚滿環。因此，化合物I較佳為化合物II $\alpha \sim II\gamma$ 中之任一者。

【0051】 尤其是化合物I更佳為化合物II α 或化合物II γ ，尤其較佳為化合物II α 。其原因在於，藉由使本發明之化合物為上述所表示之結構，能夠獲得耐熱性及耐溶劑性優異之硬化物。

【0052】 關於 R^{21} 、 R^{22} 、 R^{23} 、 R^{24} 、 R^{25} 及 R^{26} 各者之較佳之基與上述 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 及 R^6 各者之較佳之基相同。

又，較佳為 $R^{21} \sim R^{26}$ 所表示之基之1個以上為含反應性基之基。其原因在於能夠獲得耐熱性優異之硬化物。 $R^{21} \sim R^{26}$ 中之較佳之反應性基之合計數與 $R^1 \sim R^6$ 之較佳之反應性基之合計數相同。

【0053】 $R^{21} \sim R^{26}$ 中，較佳為 R^{21} 、 R^{22} 、 R^{24} 及 R^{25} 中之任一個或兩個以上為含反應性基之基，更佳為 R^{21} 、 R^{22} 及 R^{25} 中之任一個或兩個以上

為含反應性基之基，特佳為 R^{21} 及 R^{22} 中之任一者或兩者為含反應性基之基。於 R^{21} 及 R^{22} 中之任一者或兩者為含反應性基之基之情形時，特佳為 R^{24} 及 R^{25} 中之任一者或兩者為含反應性基之基，進而較佳為 R^{24} 及 R^{25} 中之任一者為含反應性基之基。進而，於上述之情形時，較佳為 R^{21} 及 R^{22} 兩者為含反應性基之基。其原因在於能夠獲得耐熱性及耐溶劑性優異之硬化物。又，其原因在於成膜性亦優異。

【0054】 其中， $R^{21} \sim R^{26}$ 中，於 R^{21} 或 R^{22} 均並非含反應性基之基之情形時，就耐熱性及耐溶劑性之方面而言，較佳為 R^{24} 及 R^{25} 之至少一者為含反應性基之基。作為上述所例舉之反應性基之位於較佳位置以外之位置的基可為含反應性基之基，亦可並非含反應性基之基。

式(I)中之 $R^{21} \sim R^{26}$ 所表示之基中，並非含反應性基之基之情形時之基與上文中關於 $R^1 \sim R^6$ 所述者相同。

【0055】 上述X較佳為成環碳原子數2~20之環基。其原因在於上述化合物I能夠形成耐熱性及耐溶劑性更優異之化合物。

【0056】 於X為成環碳原子數2~20之環基之情形時，構成環之碳原子之數較佳為3~18，更佳為4~15，進而較佳為6~16。其原因在於上述化合物I能夠形成耐熱性及耐溶劑性更優異之化合物。

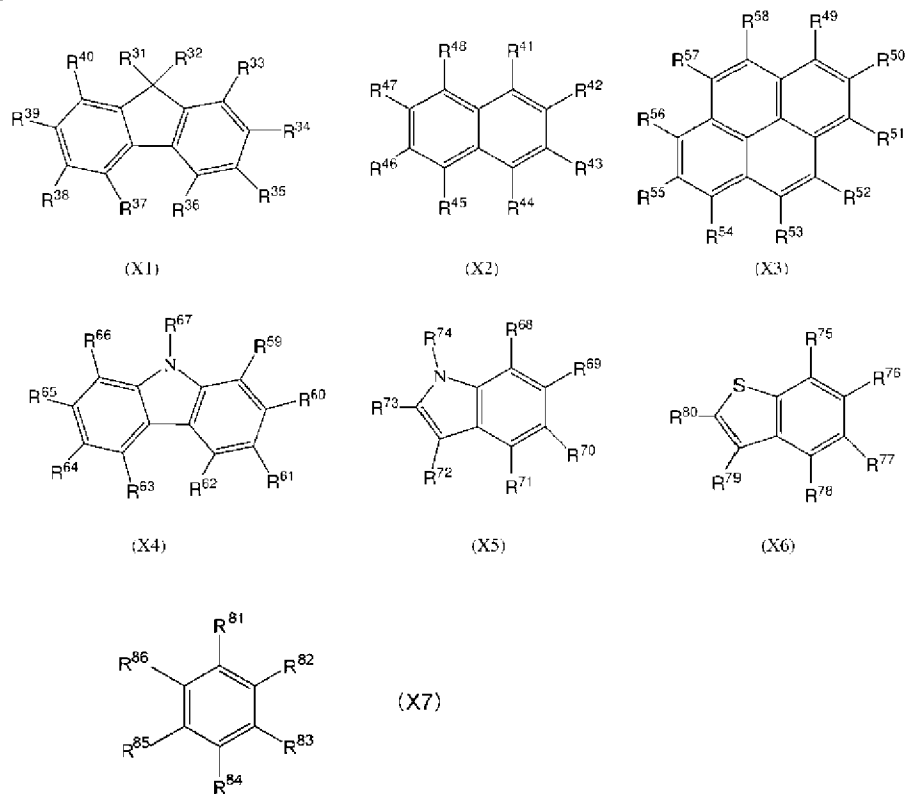
【0057】 其中，X較佳為烴系芳香族環基或芳香族雜環基，特佳為烴系芳香族環基。其原因在於上述化合物之硬化物之耐熱性及耐溶劑性優異。

【0058】 式(I)中之X所表示之環基中之環較佳為可經取代之縮合環。就化合物I之硬化物之耐熱性尤其高之方面而言，較佳為X具有可經取代之縮合環，或者X具有2個反應性基鍵結而成之胺基，特佳為具有可經

取代之縮合環。作為2個反應性基鍵結而成之胺基，可例舉二炔丙基胺基等。作為該縮合環，較佳為包含2～6個環之縮合環，特佳為包含2～4個環之縮合環。其原因在於，藉由使式(I)中之X所表示之基為上述縮合環，能夠獲得尤其耐熱性優異之硬化物。例如，萘包含3個環，蔡包含2個環，芘包含4個環。

【0059】 作為上述X之具體例，可例舉下式(X1)～(X7)。尤其是就耐熱性優異之方面而言，特佳為X為式(X1)～(X6)之任一者所表示之縮合環。

[化4]



(式中，R³¹、R³²、R³³、R³⁴、R³⁵、R³⁶、R³⁷、R³⁸、R³⁹、R⁴⁰、R⁴¹、R⁴²、R⁴³、R⁴⁴、R⁴⁵、R⁴⁶、R⁴⁷、R⁴⁸、R⁴⁹、R⁵⁰、R⁵¹、R⁵²、R⁵³、R⁵⁴、R⁵⁵、R⁵⁶、R⁵⁷、R⁵⁸、R⁵⁹、R⁶⁰、R⁶¹、R⁶²、R⁶³、R⁶⁴、R⁶⁵、R⁶⁶、R⁶⁷、R⁶⁸、R⁶⁹、R⁷⁰、R⁷¹、R⁷²、R⁷³、R⁷⁴、R⁷⁵、R⁷⁶、R⁷⁷、R⁷⁸、R⁷⁹、

R^{80} 、 R^{81} 、 R^{82} 、 R^{83} 、 R^{84} 、 R^{85} 及 R^{86} (以下，亦記載為「 $R^{31} \sim R^{86}$ 」)分別獨立地表示氫原子、選自上述<群A>之反應性基、鍵結鍵、硝基、或可經取代之碳原子數1~20之烷基、可經取代之碳原子數6~20之芳香族環基、可經取代之碳原子數2~20之雜環基、可經取代之碳原子數1~20之亞甲基取代烷基、可經取代之碳原子數6~20之亞甲基取代芳香族環基或可經取代之碳原子數2~20之亞甲基取代雜環基。

其中， R^{31} 、 R^{32} 、 R^{33} 、 R^{34} 、 R^{35} 、 R^{36} 、 R^{37} 、 R^{38} 、 R^{39} 及 R^{40} 中之一個為鍵結鍵， R^{41} 、 R^{42} 、 R^{43} 、 R^{44} 、 R^{45} 、 R^{46} 、 R^{47} 及 R^{48} 中之一個為鍵結鍵， R^{49} 、 R^{50} 、 R^{51} 、 R^{52} 、 R^{53} 、 R^{54} 、 R^{55} 、 R^{56} 、 R^{57} 及 R^{58} 中之一個為鍵結鍵， R^{59} 、 R^{60} 、 R^{61} 、 R^{62} 、 R^{63} 、 R^{64} 、 R^{65} 、 R^{66} 及 R^{67} 中之一個為鍵結鍵， R^{68} 、 R^{69} 、 R^{70} 、 R^{71} 、 R^{72} 、 R^{73} 及 R^{74} 中之一個為鍵結鍵， R^{75} 、 R^{76} 、 R^{77} 、 R^{78} 、 R^{79} 及 R^{80} 中之一個為鍵結鍵， R^{81} 、 R^{82} 、 R^{83} 、 R^{84} 、 R^{85} 及 R^{86} 中之一個為鍵結鍵。

【0060】 式(X1)~(X7)中，作為上述烷基、上述芳香族環基、上述雜環基、上述亞甲基取代烷基、亞甲基取代芳香族環基及亞甲基取代雜環基，可例舉 R^1 等中說明之基，亦可經反應性基、鹵素原子、硝基等取代。

【0061】 於 $R^{31} \sim R^{86}$ 所表示之基並非含反應性基之基或鍵結鍵之情形時， $R^{31} \sim R^{86}$ 所表示之基較佳為氫原子、碳原子數1~20之烷基、碳原子數6~20之芳香族環基、碳原子數1~20之亞甲基取代烷基或碳原子數6~20之亞甲基取代芳香族環基，其中較佳為氫原子、碳原子數1~20之烷基或碳原子數1~20之亞甲基取代烷基，尤其進而較佳為氫原子、碳原子數1~5之烷基或碳原子數1~5之亞甲基取代烷基，其中進而較佳為氫原子或碳原子數1~2之烷基。又，式(X1)~(X7)各者之環中，氫原子、鍵結

鍵及含反應性基之基以外之取代基之數較佳為0~2，更佳為0~1個，亦可為0。其原因在於上述化合物I能夠形成耐熱性及耐溶劑性更優異之化合物，又，其原因在於容易合成且保存穩定性優異。

【0062】 以下，對關於式(X1)~(X7)各者之較佳構成進行說明。

式(X1)中，要想獲得容易合成、保存穩定性優異且耐熱性優異之硬化物，較佳為 R^{34} 或 R^{39} 為鍵結鍵之化合物。

【0063】 作為式(X1)中之反應性基之數，較佳為1~8個，更佳為1~6個，特佳為2~4個。其原因在於，具有處於上述範圍內之數之反應性基之化合物能夠獲得容易合成、保存穩定性優異且耐熱性及耐溶劑性優異之硬化物。

【0064】 式(X1)中，較佳為選自 R^{31} 、 R^{32} 、 R^{37} ~ R^{40} 之1個以上為含反應性基之基，其中較佳為 R^{31} 、 R^{32} 中之一者或兩者為含反應性基之基，特佳為 R^{31} 、 R^{32} 兩者為含反應性基之基。

其原因在於，式(X1)中之含反應性基之基之位置為上述位置之化合物能夠獲得對溶劑之溶解性優異且耐熱性優異之硬化物。

【0065】 式(X2)中，要想獲得容易合成、保存穩定性優異且耐熱性優異之硬化物，較佳為 R^{45} 為鍵結鍵之化合物。

【0066】 較佳為式(X2)中具有1~6個反應性基之化合物，更佳為具有1~4個之化合物，特佳為1~2個。其原因在於，具有上述範圍內之數之反應性基之化合物能夠獲得容易合成、保存穩定性優異且耐熱性優異之硬化物。

【0067】 式(X2)中，較佳為 R^{46} 、 R^{47} 或 R^{48} 為含反應性基之基，其中，要想獲得對溶劑之溶解性優異且耐熱性優異之硬化物，較佳為 R^{46} 為

含反應性基之基。

【0068】 式(X3)中，要想獲得容易合成、保存穩定性優異且耐熱性優異之硬化物，較佳為 R^{54} 為鍵結鍵之化合物。 R^{49} 、 R^{50} 、 R^{51} 、 R^{52} 、 R^{53} 、 R^{54} 、 R^{55} 、 R^{56} 、 R^{57} 及 R^{58} 分別獨立地可為含反應性基之基，亦可並非含反應性基之基。

【0069】 式(X4)中，要想獲得容易合成、保存穩定性優異且耐熱性優異之硬化物，較佳為 R^{61} 或 R^{64} 為鍵結鍵之化合物。

【0070】 式(X5)中，要想獲得容易合成、保存穩定性優異且耐熱性優異之硬化物，較佳為 R^{72} 為鍵結鍵之化合物。

【0071】 式(X5)中，要想獲得對溶劑之溶解性優異且耐熱性優異之硬化物，較佳為 R^{74} 為含反應性基之基之化合物。

【0072】 式(X6)中，要想獲得容易合成、保存穩定性優異且耐熱性優異之硬化物，較佳為 R^{80} 為鍵結鍵之化合物。

【0073】 式(X7)中，反應性基之數較佳為1~3，更佳為1~2。其原因在於能夠獲得耐熱性及耐溶劑性優異之硬化物。

【0074】 X中，作為上述所例舉之含反應性基之基或鍵結鍵之位於較佳位置以外的位置之基可為含反應性基之基，亦可並非含反應性基之基。

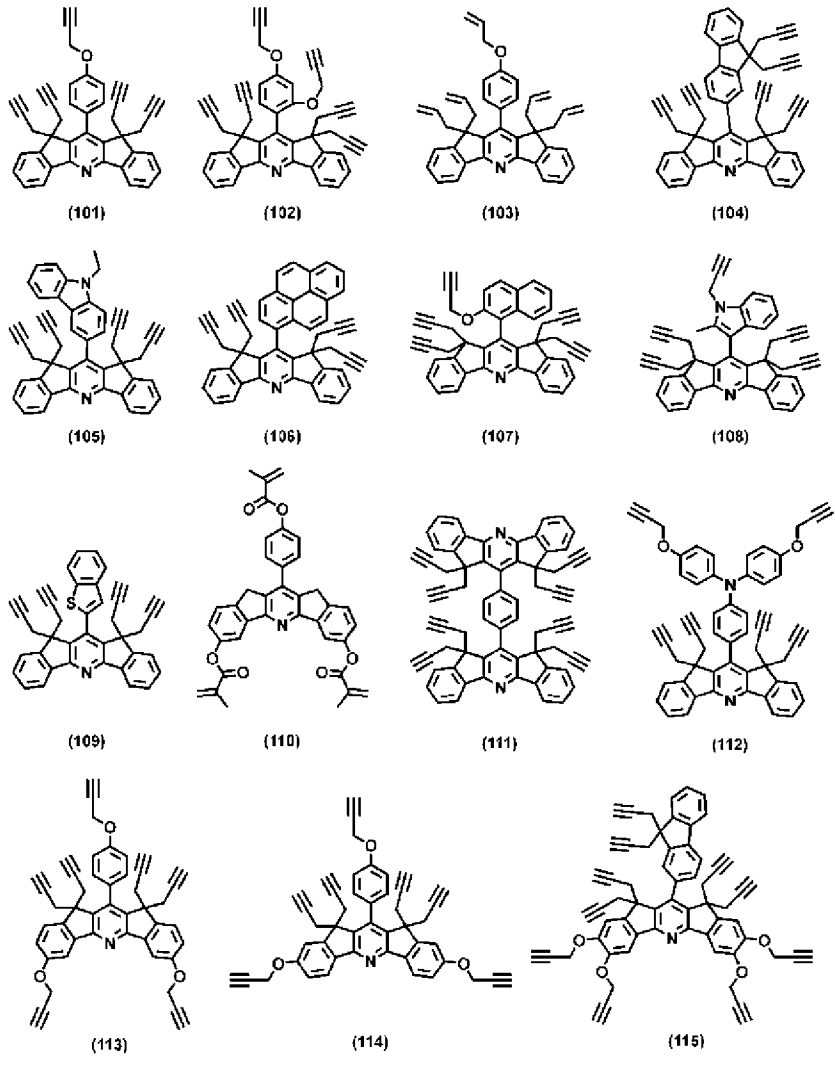
【0075】 式(I)中之X所表示之環基較佳為選自茈環、苯環、萘環、呋喃環及茚環之至少一種，就耐熱性之方面而言，特佳為選自茈環、苯環、萘環及茚環之至少一種，尤其較佳為選自茈環、萘環及茚環之至少一種，特佳為茈環。

【0076】 就容易合成且保存穩定性優異之方面而言，較佳為式(I)中

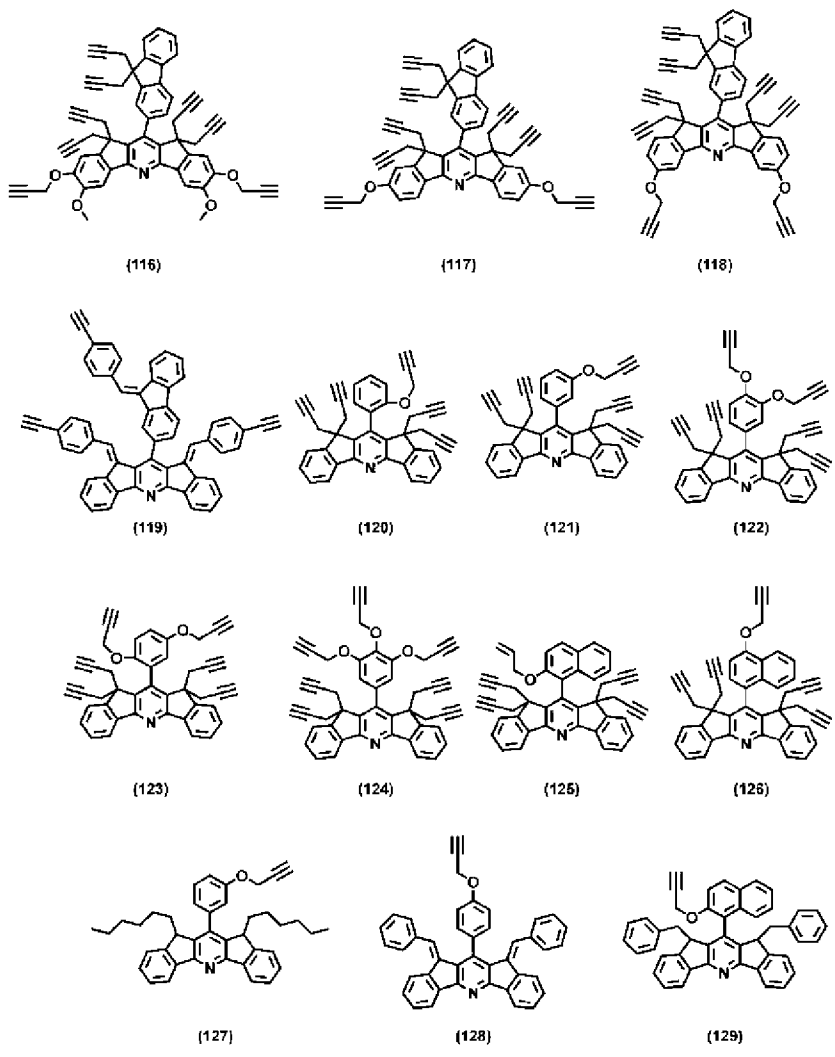
之X所表示之基之鍵結位置相對於吡啶環中之氮原子為對位。

【0077】 作為化合物I，例如作為具有炔丙基、炔丙氧基、乙炔基或乙炔基作為反應性基者，可例舉下述化合物(101)~(179)，但不限於此。

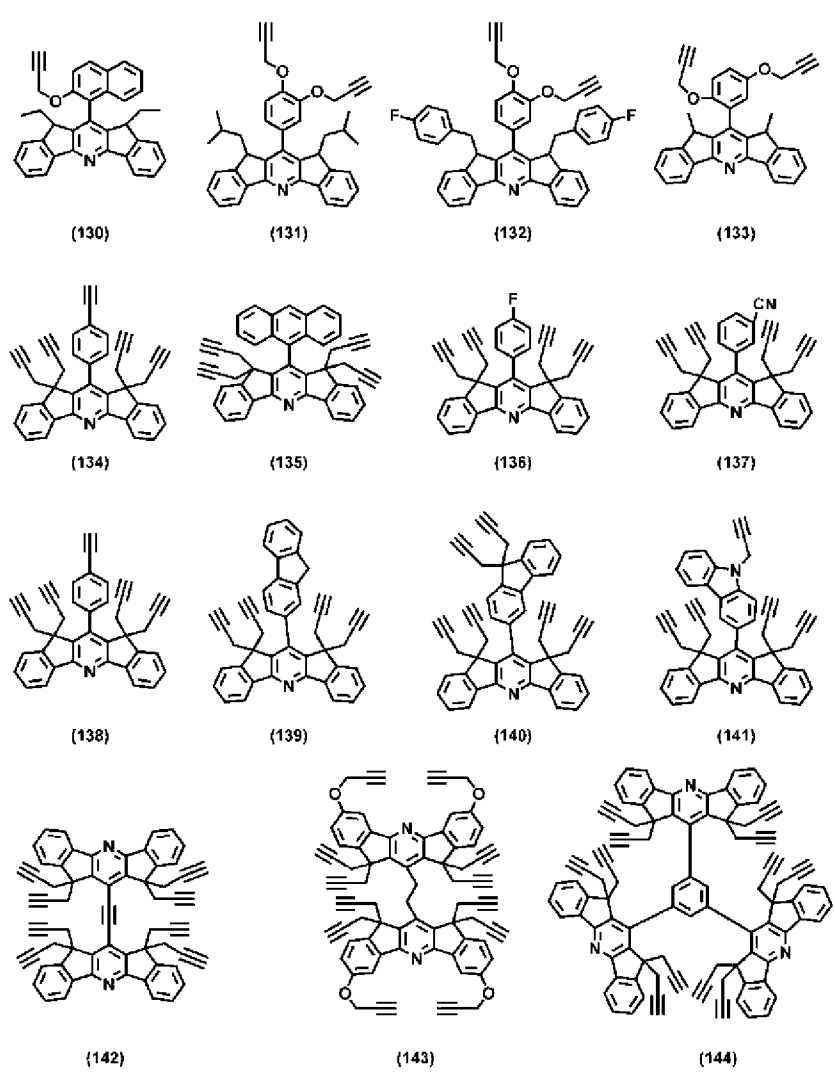
【0078】 [化5]



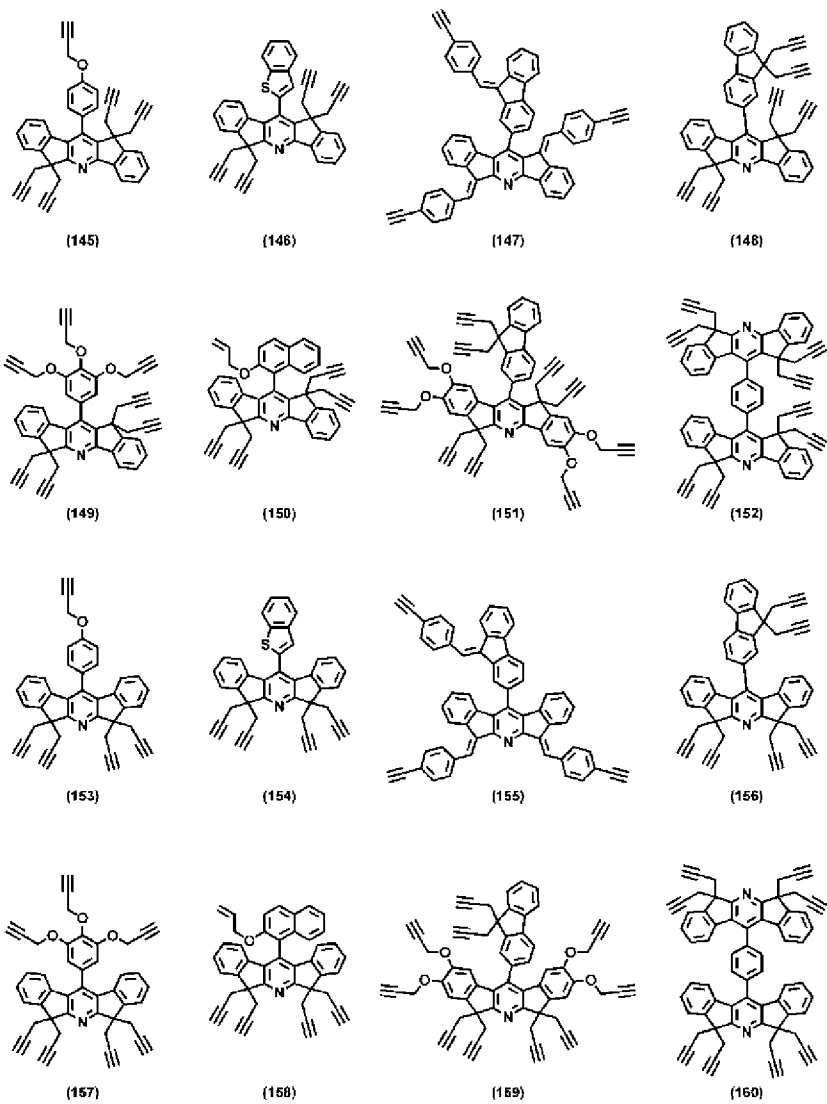
【0079】 [化6]



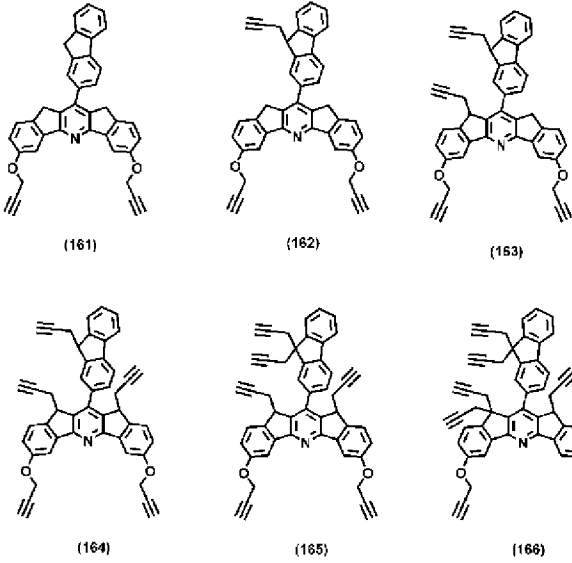
【0080】 [化7]



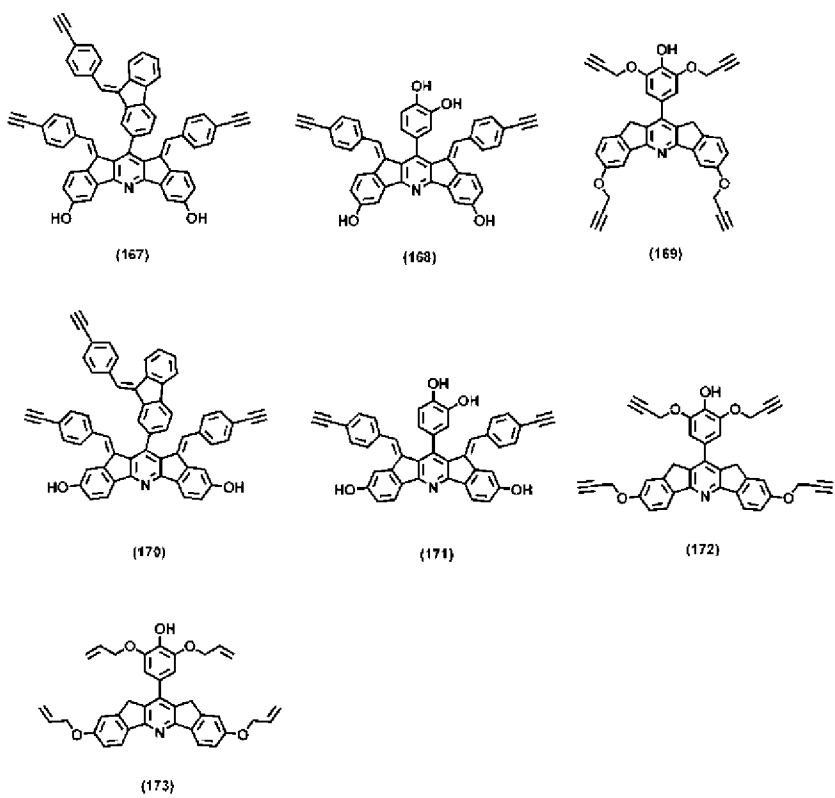
【0081】 [化8]



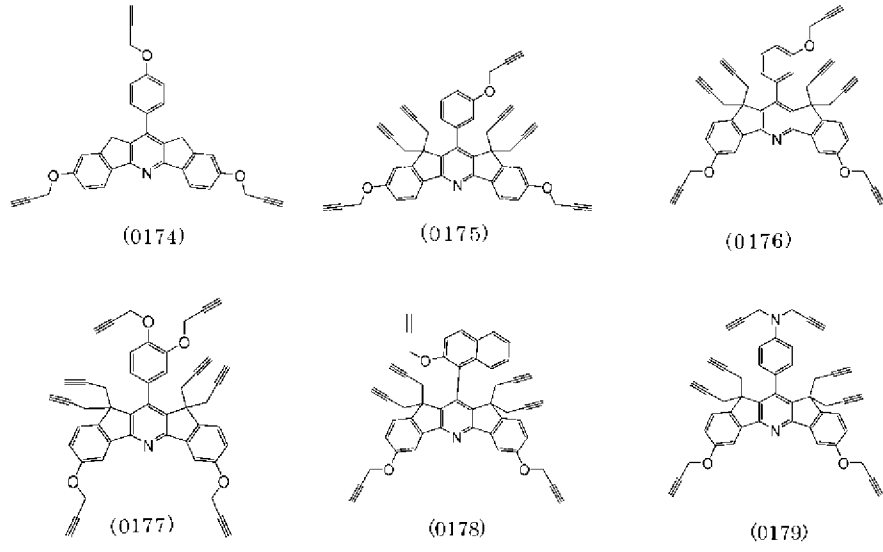
【0082】 [化9]



【0083】 [化10]



[化10A]



【0084】 繼而，對上述通式(III)所表示之化合物(以下，亦稱為「化合物III」)進行說明。化合物III可用作化合物I之前驅物。

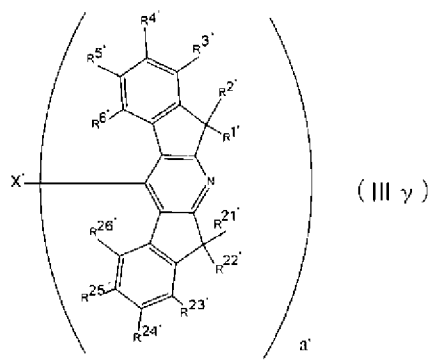
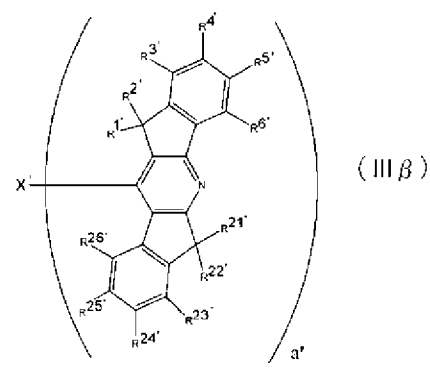
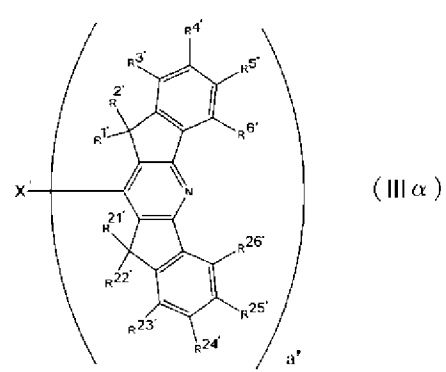
【0085】 化合物III中，X'、R^{1'}、R^{2'}、R^{3'}、R^{4'}、R^{5'}、R^{6'}、R^{7'}、R^{11'}、a'與化合物I之X、R¹、R²、R³、R⁴、R⁵、R⁶、R⁷、R¹¹、a之各者之含義相同，關於化合物I之X、R¹、R²、R³、R⁴、R⁵、R⁶、R⁷、R¹¹、a(以下，亦稱為「X~a」)之上述所有說明，除了較佳之反應性基之種類或數

之方面以外，均可分別相當於 X' 、 $R^{1'}$ 、 $R^{2'}$ 、 $R^{3'}$ 、 $R^{4'}$ 、 $R^{5'}$ 、 $R^{6'}$ 、 $R^{7'}$ 、 $R^{11'}$ 、 a' (以下，亦稱為「 $X' \sim a'$ 」)。例如， X' 與 X 同樣地較佳為可經取代之碳原子數6~20之芳香族環基或碳原子數2~20之雜環基，又，較佳為可經取代之縮合環基，或者具有一級胺基，更佳為可經取代之縮合環基。以下，進一步對化合物III進行說明，但於上述 $X \sim a$ 之說明與下述化合物III之 $X' \sim a'$ 之說明出現不同之處之情形時，關於 $X' \sim a'$ ，下述說明優先。化合物III與化合物I之不同之處在於化合物III必須具有至少一個酚性羥基。

再者，所謂酚性羥基係指直接鍵結於芳香族環上之羥基，較佳為直接鍵結於構成縮合環之苯環或作為單環之苯環之羥基。

作為化合物III之較佳者，可例舉以下通式(III α)~(III γ)。

【0086】 [化11]



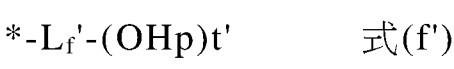
(式中，X'、a'、R^{1'}、R^{2'}、R^{3'}、R^{4'}、R^{5'}及R^{6'}與通式(III)相同，

R^{21'}、R^{22'}、R^{23'}、R^{24'}、R^{25'}及R^{26'}(以下，亦稱為「R^{21'}~R^{26'}」)分別獨立地表示氫原子、選自上述<群A>之反應性基、硝基、可經取代之碳原子數1~20之烷基、可經取代之碳原子數6~20之芳香族環基、可經取代之碳原子數2~20之雜環基、該碳原子數1~20之烷基中之1個以上之亞甲基被取代為選自上述<群B>的二價基而成之基、該碳原子數6~20之芳香族環基中之1個以上之亞甲基被取代為選自上述<群B>的二價基而成之基或該碳原子數2~20之雜環基中之1個以上之亞甲基被取代為選自上述<群B>的二價基而成之基，

$R^{21'}$ 與 $R^{22'}$ 有時相互鍵結而形成環， $R^{23'}$ 與 $R^{24'}$ 有時相互鍵結而形成環、 $R^{24'}$ 與 $R^{25'}$ 有時相互鍵結而形成環， $R^{25'}$ 與 $R^{26'}$ 有時相互鍵結而形成環；其中，化合物III於分子內具有1個以上之酚性羥基)。

$R^{21'} \sim R^{26'}$ 之基之說明及較佳者分別與 $R^{21} \sim R^{26}$ 相同。

【0087】 以下，將進一步對化合物III之較佳者進行說明。以下說明之含酚性羥基之基係酚性羥基與下述(f')所表示之基之總稱。下述「含酚性羥基之基」之詞均可分別替換為其下位概念「酚性羥基」。



(此處， L_f' 係碳原子數6～20之含芳香族環之基，OHp係酚性羥基， t' 係1～10之數)

所謂碳原子數6～20之含芳香族環之基，係自碳原子數7～20之芳烷基去除 t' 個氫原子所得之基、碳原子數8～20之含芳香族烴環之雜環基或自碳原子數6～20之芳基去除 t' 個氫原子所得之基，較佳為碳原子數6～10，較適宜為可經烷基或烷氧基取代之碳原子數6～10之伸苯基。作為碳原子數8～20之含芳香族烴環之雜環基，可例舉吡啶、呋喃等苯環與雜環縮合而成之環等。

t' 較佳為1～8，進而較佳為1～5，特佳為1～3，進而較佳為1～2，亦可為1。

【0088】 化合物III之反應性基係具有酚性羥基者，可具有除酚性羥基以外之反應性基，亦可不具有除酚性羥基以外之反應性基。於化合物III具有除酚性羥基以外之反應性基之情形時，作為該反應性基，可例舉胺基。

其原因在於，藉由使反應性基為上述所表示之基，該反應性基會成

為能夠成功地製造化合物I之前驅物。

【0089】 於化合物III中，存在於分子內之酚性羥基之數為1個以上，其中較佳為2個以上。使存在於分子內之酚性羥基之數成為上述範圍有利於提供耐熱性及耐溶劑性優異之硬化物，包括作為前驅物之用途。至於存在於分子內之酚性羥基之數，就容易合成且保存穩定性良好之方面而言，較佳為10個以下，就該觀點而言，更佳為8個以下，進而較佳為6個以下。

【0090】 作為式(III)中之 $R^{1'}$ ～ $R^{6'}$ 所表示之基，較佳為氫原子、酚性羥基、或者分別可具有酚性羥基之碳原子數1～20之烷基、碳原子數6～20之芳香族環基、碳原子數1～20之亞甲基取代烷基、或碳原子數6～20之亞甲基取代芳香族環基，其中較佳為氫原子、酚性羥基、或者分別可具有酚性羥基之碳原子數1～10之烷基、碳原子數6～10之芳香族環基或碳原子數1～10之亞甲基取代烷基，特佳為氫原子、酚性羥基、碳原子數1～5之烷基或碳原子數1～5之亞甲基取代烷基，最佳為氫原子、酚性羥基、碳原子數1～2之烷基或碳原子數1～2之烷氧基。

【0091】 $R^{3'}$ 、 $R^{4'}$ 、 $R^{5'}$ 、 $R^{6'}$ 、 $R^{23'}$ 、 $R^{24'}$ 、 $R^{25'}$ 及 $R^{26'}$ 中，較佳為至少1個為含酚性羥基之基，特佳為至少2個為含酚性羥基之基。尤其是 $R^{3'}$ 、 $R^{4'}$ 、 $R^{5'}$ 、 $R^{6'}$ 中之至少1個為含酚性羥基之基，較佳為 $R^{23'}$ 、 $R^{24'}$ 、 $R^{25'}$ 及 $R^{26'}$ 中之至少1個為含酚性羥基之基。特佳為上述各含酚性羥基之基為酚性羥基。

其中，較佳為 $R^{4'}$ 、 $R^{5'}$ 、 $R^{24'}$ 、及 $R^{25'}$ 中之至少2個為含酚性羥基之基，特佳為該等含酚性羥基之基為酚性羥基。

【0092】 特佳為 $R^{1'}$ ～ $R^{6'}$ 所表示之基之1個以上為含酚性羥基之基。

其原因在於，使 $R^{1'} \sim R^{6'}$ 所表示之基為上述基有利於提供耐熱性及耐溶劑性優異之硬化物，包括作為前驅物之用途。

【0093】 於式(III)中之 $R^{1'} \sim R^{6'}$ 中，酚性羥基之合計數較佳為3以下，其中較佳為2以下，亦可為1。其原因在於，使式(III)中之 $R^{1'} \sim R^{6'}$ 中之酚性羥基數為上述所表示之範圍有利於提供耐熱性及耐溶劑性優異之硬化物，包括作為前驅物之用途。

【0094】 於式(III)中之 $R^{1'} \sim R^{6'}$ 中之任一者具有酚性羥基之情形時，較佳為 $R^{4'}$ 及 $R^{5'}$ 中之任一者或兩者為含酚性羥基之基，特佳為 $R^{4'}$ 及 $R^{5'}$ 中之任一者為含酚性羥基之基。較佳為該等含酚性羥基之基為酚性羥基。其原因在於，藉由於式(III)中使酚性羥基之位置為上述位置，就提供耐熱性及耐溶劑性優異之硬化物之方面而言，較為有利。

【0095】 式(III)中之 $R^{1'} \sim R^{6'}$ 所表示之基之中，作為並非含酚性羥基之基者之較佳者，可例舉作為 $R^{1'} \sim R^{6'}$ 所表示之基中之並非含反應性基之基者之較佳者而於上文所例舉者，特佳為氫原子、碳原子數1~2之烷基或碳原子數1~2之烷氧基。

【0096】 $R^{21'}$ 、 $R^{22'}$ 、 $R^{23'}$ 、 $R^{24'}$ 、 $R^{25'}$ 及 $R^{26'}$ 各者之較佳之基分別與上述 $R^{1'}$ 、 $R^{2'}$ 、 $R^{3'}$ 、 $R^{4'}$ 、 $R^{5'}$ 及 $R^{6'}$ 之較佳之基相同，可使用上述說明。

又， $R^{21'} \sim R^{26'}$ 所表示之基之1個以上較佳為含酚性羥基之基。其原因在於，有利於提供耐熱性及耐溶劑性優異之硬化物，包括作為前驅物之用途。 $R^{21'} \sim R^{26'}$ 中之較佳之酚性羥基之合計數與 $R^{1'} \sim R^{6'}$ 之較佳之酚性羥基之合計數相同。

【0097】 於式(III)中之 $R^{21'} \sim R^{26'}$ 具有酚性羥基之情形時，較佳為 $R^{24'}$ 及 $R^{25'}$ 中之任一者或兩者為含酚性羥基之基，尤其更佳為 $R^{24'}$ 及 $R^{25'}$ 中

之任一者為含酚性羥基之基。尤其較佳為含酚性羥基之基為酚性羥基。其原因在於，藉由於式(III)中使酚性羥基之位置為上述位置，容易合成且保存穩定性優異。

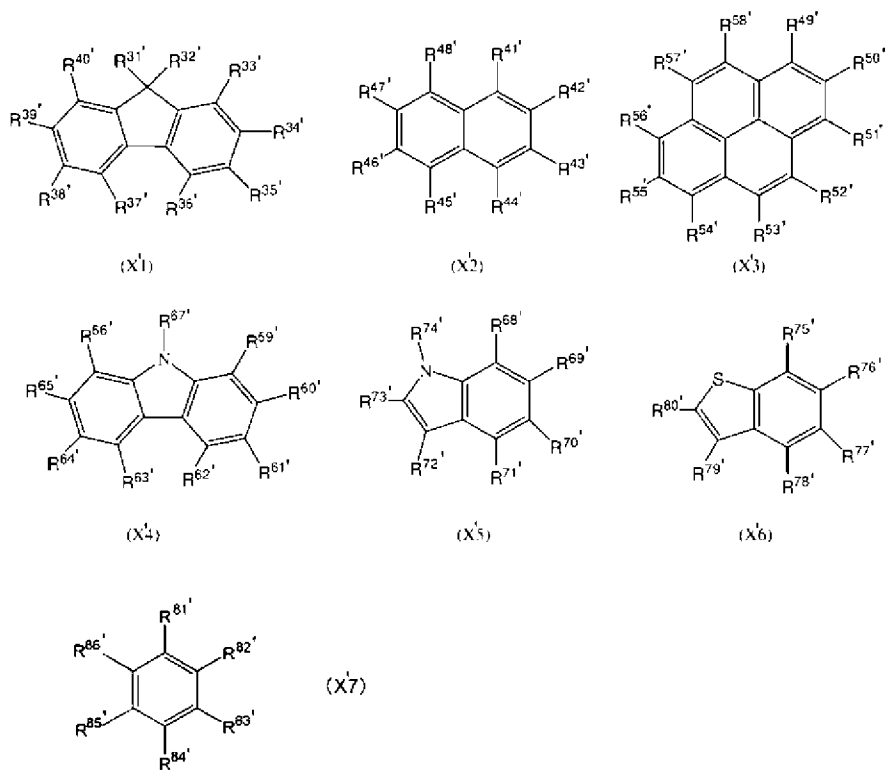
式(I)中之 $R^{21'} \sim R^{26'}$ 所表示之基中，作為並非含反應性基之基之情形時之較佳之基，與上文中關於 $R^{1'} \sim R^{6'}$ 所述者相同。

【0098】 X' 有時具有酚性羥基，有時不具有酚性羥基。 X' 中之酚性羥基之數較佳為0～6，更佳為0～4，特佳為0～2。其原因在於，有利於提供耐熱性及耐溶劑性優異之硬化物，包括作為前驅物之用途。

X' 亦可含有胺基來代替酚性羥基，於具有胺基之情形時，較佳為胺基之活性氫與酚性羥基之合計數為與上述 X' 中之酚性羥基之數相同之數(以下，關於 $X'1 \sim X'7$ 所記載之酚性羥基數，同樣地可替換為胺基之活性氫與酚性羥基之合計數)。

【0099】 作為上述 X' 之具體例，可例舉下式($X'1$)～($X'7$)所表示之基。藉由使式(III)中之 X' 所表示之基為式($X'1$)～($X'6$)中之任一者所表示之環，能夠獲得耐熱性更優異之硬化物，包括作為前驅物之用途。

[化12]



(式中， $R^{31'}$ 、 $R^{32'}$ 、 $R^{33'}$ 、 $R^{34'}$ 、 $R^{35'}$ 、 $R^{36'}$ 、 $R^{37'}$ 、 $R^{38'}$ 、 $R^{39'}$ 、 $R^{40'}$ 、 $R^{41'}$ 、 $R^{42'}$ 、 $R^{43'}$ 、 $R^{44'}$ 、 $R^{45'}$ 、 $R^{46'}$ 、 $R^{47'}$ 、 $R^{48'}$ 、 $R^{49'}$ 、 $R^{50'}$ 、 $R^{51'}$ 、 $R^{52'}$ 、 $R^{53'}$ 、 $R^{54'}$ 、 $R^{55'}$ 、 $R^{56'}$ 、 $R^{57'}$ 、 $R^{58'}$ 、 $R^{59'}$ 、 $R^{60'}$ 、 $R^{61'}$ 、 $R^{62'}$ 、 $R^{63'}$ 、 $R^{64'}$ 、 $R^{65'}$ 、 $R^{66'}$ 、 $R^{67'}$ 、 $R^{68'}$ 、 $R^{69'}$ 、 $R^{70'}$ 、 $R^{71'}$ 、 $R^{72'}$ 、 $R^{73'}$ 、 $R^{74'}$ 、 $R^{75'}$ 、 $R^{76'}$ 、 $R^{77'}$ 、 $R^{78'}$ 、 $R^{79'}$ 、 $R^{80'}$ 、 $R^{81'}$ 、 $R^{82'}$ 、 $R^{83'}$ 、 $R^{84'}$ 、 $R^{85'}$ 及 $R^{86'}$ (以下，亦記載為「 $R^{31'}\sim R^{86'}$ 」)分別獨立地表示氫原子、酚性羥基、胺基、鍵結鍵、硝基、或可經取代之碳原子數1~20之烷基、可經取代之碳原子數6~20之芳香族環基、可經取代之碳原子數2~20之雜環基、可經取代之碳原子數1~20之亞甲基取代烷基、可經取代之碳原子數6~20之亞甲基取代芳香族環基或可經取代之碳原子數2~20之亞甲基取代雜環基。

其中， $R^{31'}$ 、 $R^{32'}$ 、 $R^{33'}$ 、 $R^{34'}$ 、 $R^{35'}$ 、 $R^{36'}$ 、 $R^{37'}$ 、 $R^{38'}$ 、 $R^{39'}$ 及 $R^{40'}$ 中之一個為鍵結鍵， $R^{41'}$ 、 $R^{42'}$ 、 $R^{43'}$ 、 $R^{44'}$ 、 $R^{45'}$ 、 $R^{46'}$ 、 $R^{47'}$ 及 $R^{48'}$ 中之一個為鍵結鍵， $R^{49'}$ 、 $R^{50'}$ 、 $R^{51'}$ 、 $R^{52'}$ 、 $R^{53'}$ 、 $R^{54'}$ 、 $R^{55'}$ 、 $R^{56'}$ 、 $R^{57'}$ 及 $R^{58'}$ 中之一個為鍵結鍵， $R^{59'}$ 、 $R^{60'}$ 、 $R^{61'}$ 、 $R^{62'}$ 、 $R^{63'}$ 、 $R^{64'}$ 、 $R^{65'}$ 、 $R^{66'}$ 及 $R^{67'}$

中之一個為鍵結鍵， $R^{68'}$ 、 $R^{69'}$ 、 $R^{70'}$ 、 $R^{71'}$ 、 $R^{72'}$ 、 $R^{73'}$ 及 $R^{74'}$ 中之一個為鍵結鍵， $R^{75'}$ 、 $R^{76'}$ 、 $R^{77'}$ 、 $R^{78'}$ 、 $R^{79'}$ 及 $R^{80'}$ 中之一個為鍵結鍵， $R^{81'}$ 、 $R^{82'}$ 、 $R^{83'}$ 、 $R^{84'}$ 、 $R^{85'}$ 及 $R^{86'}$ 中之一個為鍵結鍵。

【0100】式(X'1)～(X'7)中，作為上述烷基、上述芳香族環基、上述雜環基、上述亞甲基取代烷基、亞甲基取代芳香族環基、亞甲基取代雜環基，可例舉 R^1 等中說明之基，亦可經酚性羥基、鹵素原子、硝基、胺基等取代。

【0101】 X' 可具有酚性羥基，亦可不具有酚性羥基。於前者之情形時， $R^{31'} \sim R^{86'}$ 中分別相當於 $X'1 \sim X'7$ 之基中之任一個或兩個以上較佳為含酚性羥基之基，尤其較佳為酚性羥基。例如，作為相當於 $X'7$ 之基之 $R^{81'} \sim R^{86'}$ 所表示之基中的任一個或兩個以上較佳為含酚性羥基之基，更佳為酚性羥基。

【0102】 $R^{31'} \sim R^{86'}$ 之各者分別對應於上述 $R^{31} \sim R^{86}$ 。

作為 $R^{31'} \sim R^{86'}$ 所表示之基並非酚性羥基或鍵結鍵之情形時之較佳之基，適宜使用 $R^{31} \sim R^{86}$ 所表示之基並非含反應性基之基或鍵結鍵之情形時的較佳之基之說明。於式(X'1)～(X'7)各者之環中，氫原子、鍵結鍵、含酚性羥基之基及胺基以外之取代基之較佳的數與式(X1)～(X7)各者之環中之氫原子、鍵結鍵及含反應性基之基以外之取代基之較佳之數相同。

又，關於 $X'1 \sim X'7$ ，與鍵結鍵之位置相關之較佳者之說明可適當使用 $X1 \sim X7$ 之說明。

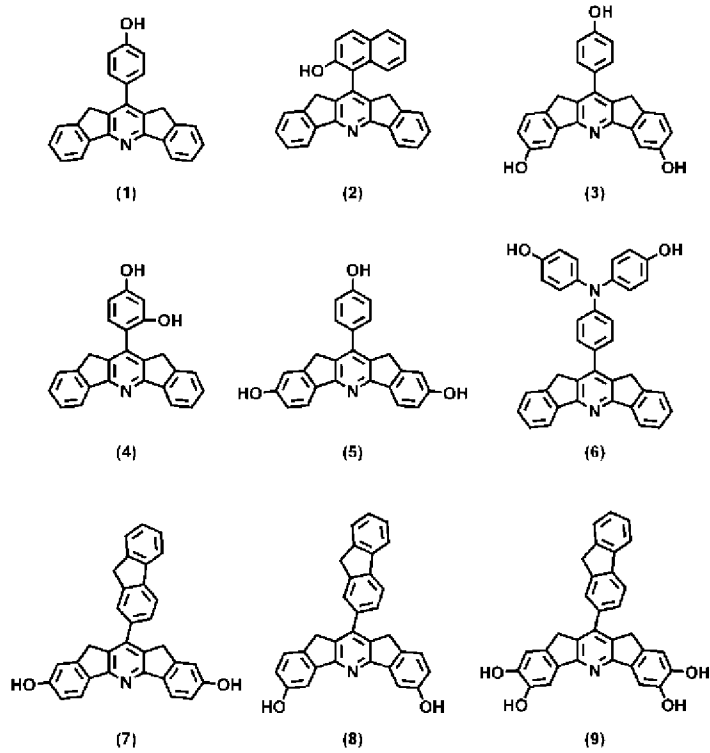
【0103】尤其是於式(X'2)及式(X'7)各者中，反應性基例如酚性羥基之數較佳為1～3，更佳為1～2。其原因在於能夠獲得耐熱性及耐溶劑性優異之硬化物。

【0104】 於X'中，作為上述所例舉之含酚性羥基之基及鍵結鍵之位於較佳位置以外的位置之基可為含反應性基之基，亦可並非含反應性基之基。

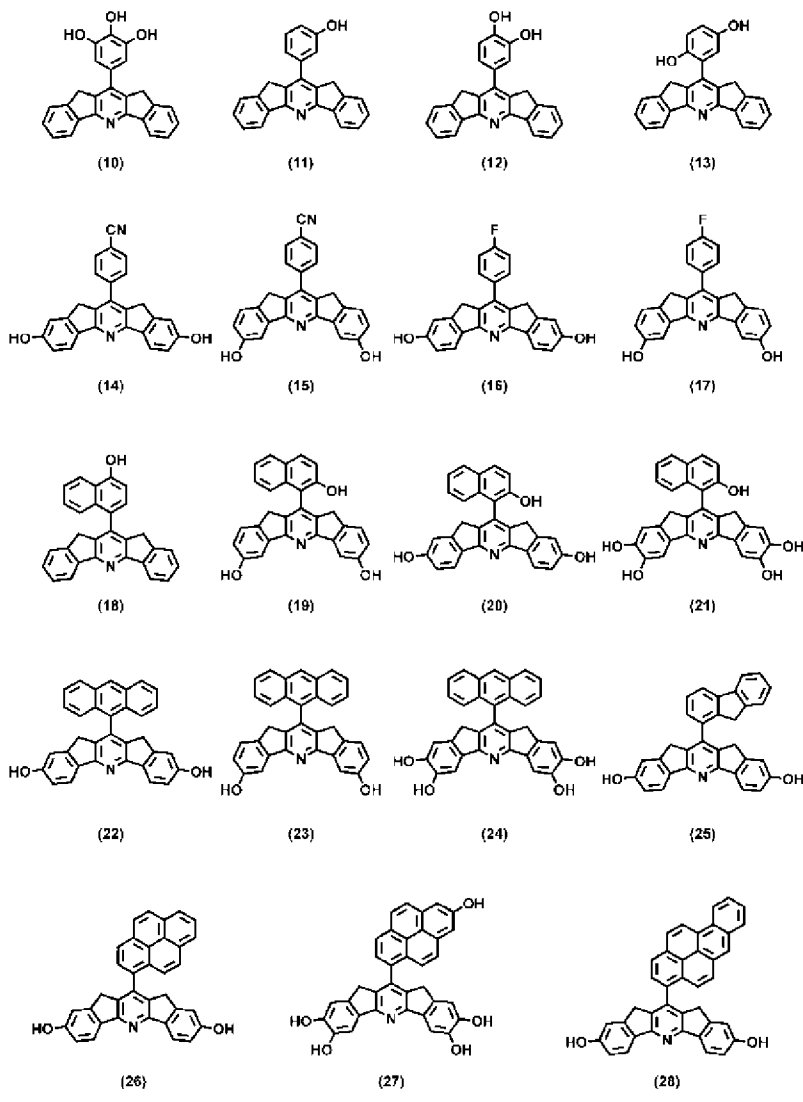
【0105】 作為以化合物III作為前驅物而製造之化合物I，較佳為具有炔丙氧基、烯丙醚基或縮水甘油基作為反應性基者。

【0106】 至於化合物III，作為具有酚性羥基者，除了可例舉上述(168)(169)(171)～(173)以外，亦可例舉下述化合物(1)～(65)。此種化合物III亦可用作製造具有炔丙氧基等反應性基之化合物I之中間物。

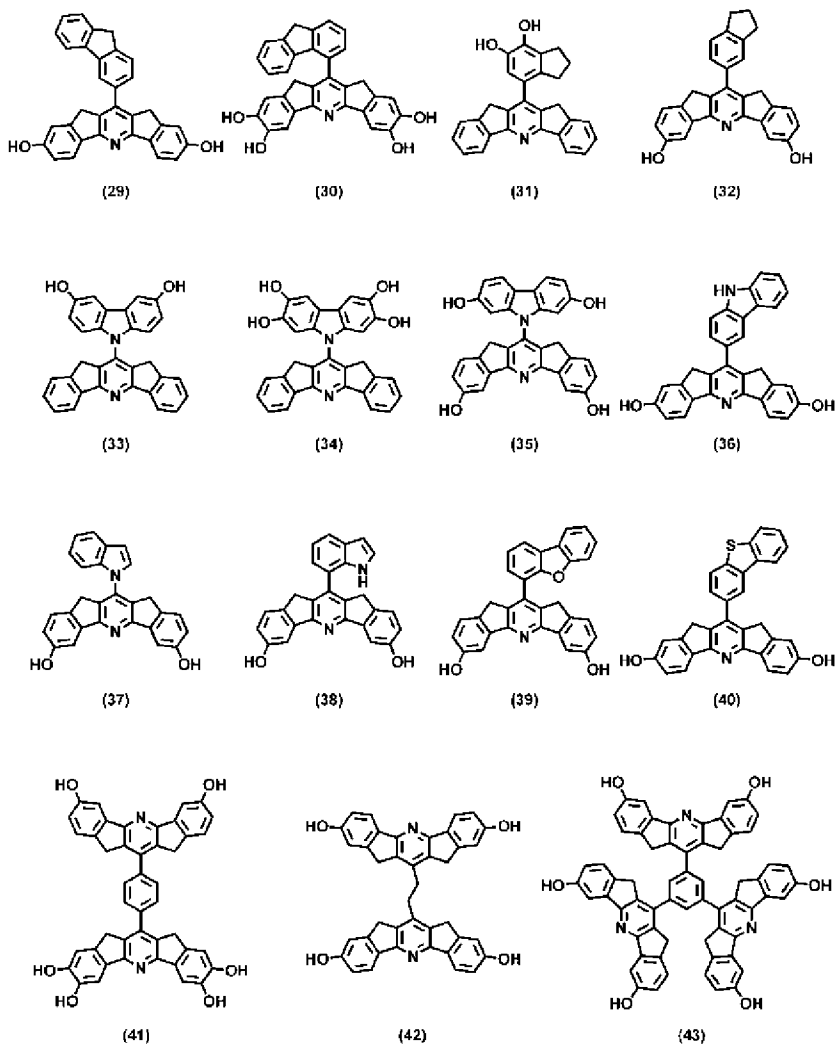
【0107】 [化13]



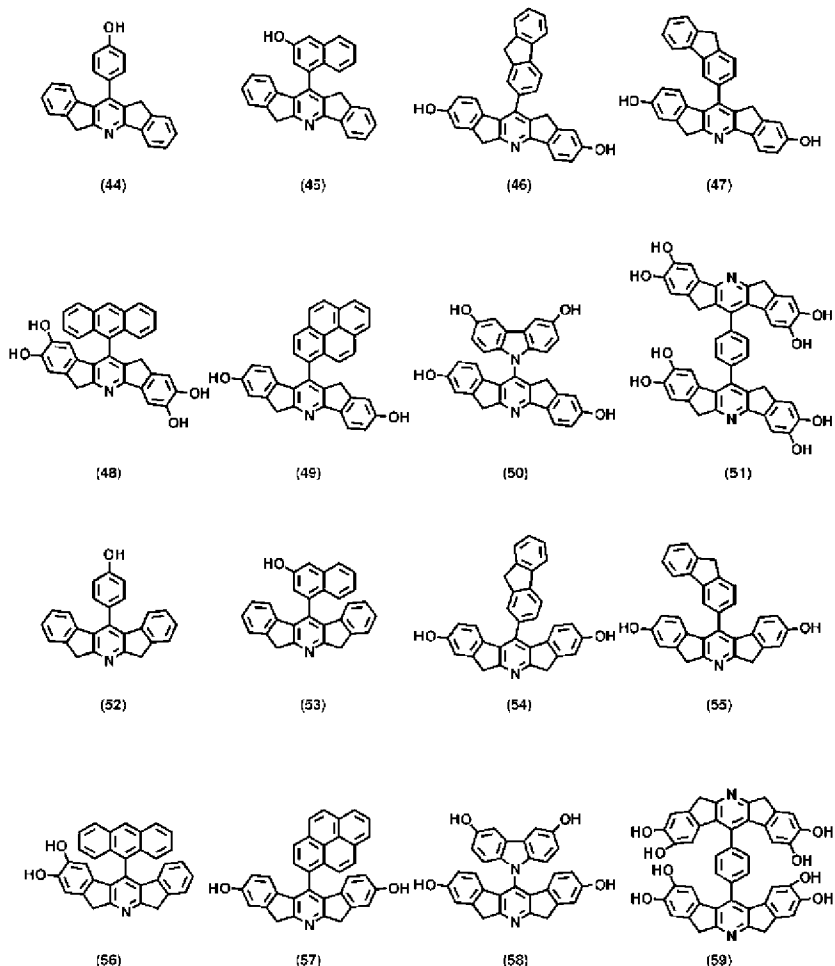
【0108】 [化14]



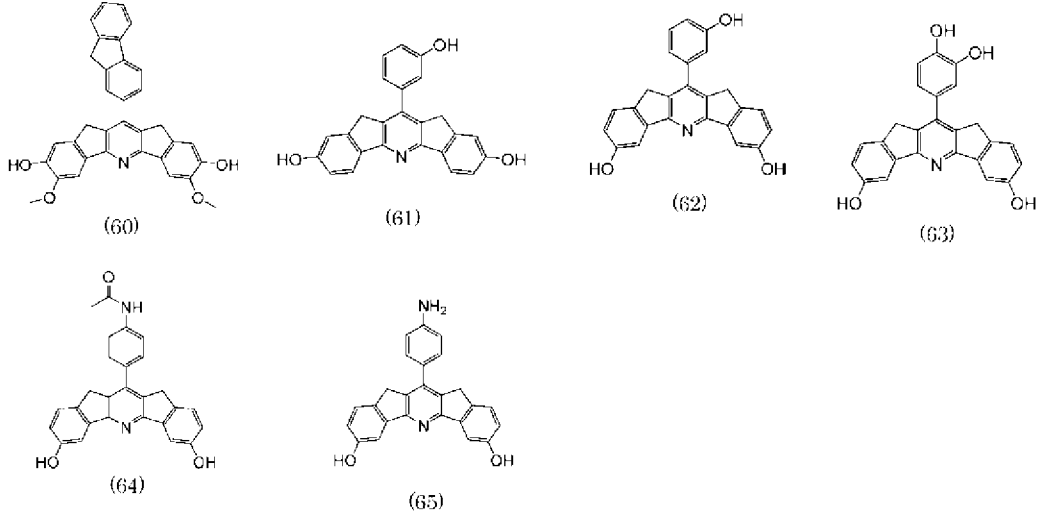
【0109】 [化14A]



【0110】 [化15]



[化15A]



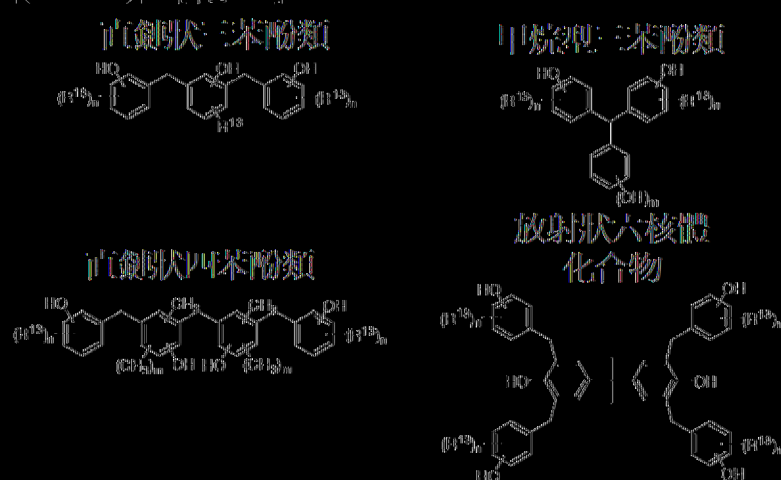
【0111】 上述化合物I及化合物III可依據公知之方法來製造。具體而言，藉由使用乙酸鉍使二氫茚酮化合物與醛化合物縮合，可製造具有二茚并吡啶骨架結構之化合物。進而，藉由於該骨架結構中導入反應性基，可製造上述化合物I。例如於使用具有羥基之化合物作為醛化合物或二氫

之同形物成分係指自組合物中去除下述溶劑所得之成分。

〔0116〕 本發明之組合物亦可含有交聯劑。所謂交聯劑，意指與化合物I進行反應，藉由化學鍵連結複數個分子，被納入聚合反應後之聚合物中，而改變物理性質、化學性質之化合物。藉由含有交聯劑，能夠獲得耐熱性更優異之硬化物。作為交聯劑，例如可例舉：酚化合物、環氧化合物、氰酸酯化合物、胺化合物、苯并噁啡化合物、三聚氰胺化合物、胍胺化合物、甘脲化合物、脲化合物、異氰酸酯化合物、疊氮化合物等。

〔0117〕 作為酚化合物，例如可例舉：苯酚、甲酚類、二甲苯酚類等烷基酚類；雙酚A、雙酚B、雙(3-甲基-4-羥基苯基)丙烷、雙(4-羥基苯基)-1,3-苯乙烷等雙酚類； α,α,α' -三(4-羥基苯基)-1,3-乙基-4-異丙基苯等三苯酚類；酚系酚醛清漆樹脂、苯酚芳烷基樹脂等酚系樹脂類；下述通式所表示之直鏈狀三苯酚類、甲烷型三苯酚類、直鏈狀四苯酚類及放射狀六核體化合物等樹脂狀酚衍生物等。

〔0118〕 〔化18〕



式中， R^{13} 表示碳原子數1~4之烷基， m 表示0~2之整數， n 表示0~1之整數。

〔0119〕 作為環氧化合物，例如可例舉：上述酚化合物之縮水甘油

醚、異氰尿酸三(2,3-環氧丙基)酯、三羥甲基甲烷三縮水甘油醚、三羥甲基丙烷三縮水甘油醚等。

【0120】 作為氰酸酯樹脂，例如可例舉上述酚化合物之羥基被取代為氰酸基而成之化合物等。

【0121】 作為胺化合物，可例舉：間苯二胺、對苯二胺、4,4'-二胺基二苯甲烷、4,4'-二胺基二苯丙烷、4,4'-二胺基二苯醚、1,3-雙(4-胺基苯氧基)苯等芳香族胺類；二胺基環己烷、二胺二環己甲烷、二胺二環己丙烷、二胺基雙環[2.2.1]庚烷、異佛爾酮二胺等脂環式胺類；乙二胺、六亞甲基二胺、八亞甲基二胺、十亞甲基二胺、二伸乙基三胺、三乙四胺等脂肪族胺類等。

【0122】 作為苯并噁吡化合物，可例舉：由二胺化合物及單官能酚化合物獲得之P-d型苯并噁吡、由胺化合物及二官能酚化合物獲得之F-a型苯并噁吡等。

【0123】 作為三聚氰胺化合物，例如可例舉：六羥甲基三聚氰胺、六甲氧基甲基三聚氰胺、六羥甲基三聚氰胺之1~6個羥甲基經甲氧基甲基化而成之化合物或其混合物、六甲氧基乙基三聚氰胺、六醯氧基甲基三聚氰胺、六羥甲基三聚氰胺之羥甲基之1~6個經醯氧基甲基化而成之化合物或其混合物等。

【0124】 作為胍胺化合物，例如可例舉：四羥甲基胍胺、四甲氧基甲基胍胺、四羥甲基胍胺之1~4個羥甲基經甲氧基甲基化而成之化合物或其混合物、四甲氧基乙基胍胺、四醯氧基胍胺、四羥甲基胍胺之1~4個羥甲基經醯氧基甲基化而成之化合物或其混合物等。

【0125】 作為甘脲化合物，例如可例舉：四羥甲基甘脲、四甲氧基

甘脲、四甲氧基甲基甘脲、四羥甲基甘脲之羥甲基之1~4個經甲氧基甲基化而成之化合物或其混合物、四羥甲基甘脲之羥甲基之1~4個經醯氧基甲基化而成之化合物或其混合物等。

【0126】 作為脲化合物，例如可例舉：四羥甲基脲、四甲氧基甲基脲、四羥甲基脲之1~4個羥甲基經甲氧基甲基化而成之化合物或其混合物、四甲氧基乙基脲等。

【0127】 作為異氰酸酯化合物，可例舉：甲苯二異氰酸酯、二苯基甲烷二異氰酸酯、六亞甲基二異氰酸酯、環己烷二異氰酸酯等。作為疊氮化物，可例舉：1,1'-聯苯-4,4'-雙疊氮化物、4,4'-亞甲基雙疊氮化物、4,4'-氧基雙疊氮化物等。

【0128】 作為上述交聯劑，就能夠獲得耐熱性優異之硬化物之方面而言，較佳為酚化合物及甘脲化合物。

【0129】 相對於化合物I之100質量份，上述交聯劑之含量較佳為0.1~20質量份，較佳為1~10質量份。

【0130】 本發明之組合物亦可含有溶劑。作為溶劑，通常可例舉可視需要使上述各成分溶解或分散之溶劑，例如甲基乙基酮、甲基戊基酮、二乙基酮、丙酮、甲基異丙基酮、甲基異丁基酮、環己酮、2-庚酮等酮類；乙醚、二噁烷、四氫呋喃、1,2-二甲氧基乙烷、1,2-二乙氧基乙烷、二丙二醇二甲醚等醚系溶劑；乙酸甲酯、乙酸乙酯、乙酸正丙酯、乙酸異丙酯、乙酸正丁酯、乙酸環己酯、乳酸乙酯、琥珀酸二甲酯、TEXANOL等酯系溶劑；乙二醇單甲醚、乙二醇單乙醚等溶纖劑系溶劑；甲醇、乙醇、異丙醇或正丙醇、異丁醇或正丁醇、戊醇等醇系溶劑；乙二醇單甲醚乙酸酯、乙二醇單乙醚乙酸酯、丙二醇單甲醚乙酸酯、二丙二醇單甲醚乙

酸酯、乙酸3-甲氧基丁酯、丙酸乙氧基乙酯等醚酯系溶劑；苯、甲苯、二甲苯等BTX(Benzene-Toluene-Xylene，苯-甲苯-二甲苯)系溶劑；己烷、庚烷、辛烷、環己烷等脂肪族烴系溶劑；松節油、D-檸檬烯、蒎烯等萜烯系烴油；礦油精、Swazol # 310(科斯莫松山石油公司)、Solvesso # 100(埃克森化學公司)等石蠟系溶劑；四氯化碳、氯仿、三氯乙烯、二氯甲烷、1,2-二氯乙烷等鹵化脂肪族烴系溶劑；氯苯等鹵化芳香族烴系溶劑；卡必醇系溶劑；苯胺；三乙胺；吡啶；乙酸；乙腈；二硫化碳；N,N-二甲基甲醯胺；N,N-二甲基乙醯胺(DMAc)；N-甲基吡咯啉酮；二甲基亞砷；水等，該等溶劑可使用1種，或者以2種以上之混合溶劑之形式使用。

【0131】 其中，酮類、醚酯系溶劑等、尤其是丙二醇單甲醚乙酸酯、環己酮等會使化合物I及交聯劑之溶解性變得良好，故而較佳。

【0132】 於上述組合物100質量份中，溶劑之含量較佳為50質量份以上99質量份以下，更佳為70質量份以上95質量份以下。

【0133】 聚合起始劑可分成如下類型：藉由活性能量線之照射而產生活性種之光聚合起始劑、及藉由加熱而產生活性種之熱聚合起始劑。作為光聚合起始劑，可例舉：光自由基聚合起始劑、光酸產生劑、光鹼產生劑，作為熱聚合起始劑，可例舉：熱自由基聚合起始劑及熱酸產生劑、熱鹼產生劑。

【0134】 本發明之組合物可含有酸產生劑作為聚合起始劑，以促進上述交聯劑之硬化反應。酸產生劑可為任意之酸產生劑，只要為可藉由規定條件而產生酸之化合物即可，例如可例舉：銻鹽、鏷鹽及鉍鹽之類的銻鹽。

【0135】 作為具體之酸產生劑，可例舉：三氟甲磺酸四甲基銨、九氟丁磺酸四甲基銨、九氟丁磺酸三乙基銨、九氟丁磺酸吡啶鎘、樟腦磺酸三乙基銨、樟腦磺酸吡啶鎘、九氟丁磺酸四正丁基銨、九氟丁磺酸四苯基銨、對甲苯磺酸四甲基銨、三氟甲磺酸二苯基鎢、三氟甲磺酸(對第三丁氧基苯基)苯基鎢、對甲苯磺酸二苯基鎢、對甲苯磺酸(對第三丁氧基苯基)苯基鎢、三氟甲磺酸三苯基鎢、三氟甲磺酸(對第三丁氧基苯基)二苯基鎢、三氟甲磺酸雙(對第三丁氧基苯基)苯基鎢、三氟甲磺酸三(對第三丁氧基苯基)鎢、對甲苯磺酸三苯基鎢、對甲苯磺酸(對第三丁氧基苯基)二苯基鎢、對甲苯磺酸雙(對第三丁氧基苯基)苯基鎢、對甲苯磺酸三(對第三丁氧基苯基)鎢、九氟丁磺酸三苯基鎢、丁磺酸三苯基鎢、三氟甲磺酸三甲基鎢、對甲苯磺酸三甲基鎢、三氟甲磺酸環己基甲基(2-氧代環己基)鎢、對甲苯磺酸環己基甲基(2-氧代環己基)鎢、三氟甲磺酸二甲基苯基鎢、對甲苯磺酸二甲基苯基鎢、三氟甲磺酸二環己基苯基鎢、對甲苯磺酸二環己基苯基鎢、三氟甲磺酸三萘基鎢、三氟甲磺酸環己基甲基(2-氧代環己基)鎢、三氟甲磺酸(2-降萘基)甲基(2-氧代環己基)鎢、仲乙基雙[甲基(2-氧代環戊基)鎢三氟甲磺酸鹽]、1,2'-萘基羰基甲基四氫噻吩鎢三氟甲磺酸鹽等鎢鹽。

【0136】 就硬化性較好之方面而言，特佳為藉由熱而產生酸之熱酸產生劑。

【0137】 相對於交聯劑100質量份，酸產生劑之含量較佳為50～150質量份，較佳為80～120質量份。於含量處於上述範圍內之情形時，能夠獲得硬化性優異之組合物。

【0138】 於上述化合物I具有碳-碳雙鍵之情形時，本發明之組合物

可包含自由基聚合起始劑作為聚合起始劑。作為自由基聚合起始劑，可使用光自由基聚合起始劑及熱自由基聚合起始劑中之任一者。

【0139】 作為光自由基聚合起始劑，例如可例舉：安息香、安息香甲醚及安息香丙醚、安息香丁醚等安息香類；苯偶醯二甲基縮酮等苯偶醯縮酮類；苯乙酮、2,2-二甲氧基-2-苯基苯乙酮、2,2-二乙氧基-2-苯基苯乙酮、1-苄基-1-二甲胺基-1-(4'-咪啉基苯甲醯基)丙烷、2-咪啉基-2-(4'-甲基巯基)苯甲醯基丙烷、2-甲基-1-[4-(甲硫基)苯基]-2-咪啉基-丙烷-1-酮、1-羥基環己基苯基酮、1-羥基-1-苯甲醯基環己烷、2-羥基-2-苯甲醯基丙烷、2-羥基-2-(4'-異丙基)苯甲醯基丙烷、N,N-二甲胺基苯乙酮、1,1-二氯苯乙酮、4-丁基苯甲醯基三氯甲烷、4-苯氧基苯甲醯基二氯甲烷等苯乙酮類；2-甲基蒽醌、1-氯蒽醌及2-戊基蒽醌等蒽醌類；2,4-二甲基-9-氧硫吡啶、2,4-二乙基-9-氧硫吡啶、2-氯-9-氧硫吡啶及2,4-二異丙基-9-氧硫吡啶等9-氧硫吡啶類；苯乙酮二甲基縮酮、苯偶醯二甲基縮酮等縮酮類；二苯甲酮、甲基二苯甲酮、4,4'-二氯二苯甲酮、4,4'-雙二乙基胺基二苯甲酮、米其勒酮及4-苯甲醯基-4'-甲基二苯硫醚等二苯甲酮類；2,4,6-三甲基苯甲醯基二苯基氧化膦、雙(2,4,6-三甲基苯甲醯基)-苯基氧化膦等氧化物類；3-(2-甲基-2-咪啉基丙醯基)-9-甲基呋唑等呋唑類；苯偶醯、苯甲醯甲酸甲酯等 α -二羰基化合物類；日本專利特開2000-80068號公報、日本專利特開2001-233842號公報、日本專利特開2005-97141號公報、日本專利特表2006-516246號公報、日本專利第3860170號公報、日本專利第3798008號公報、WO2006/018973號公報、日本專利特開2011-132215號公報、WO2015/152153號公報中記載之化合物等呋酯類；對甲氧基苯基-2,4-雙(三氯甲基)對稱三吡、2-甲基-4,6-雙(三氯甲基)對稱三吡、2-苯基-

4,6-雙(三氯甲基)對稱三吡啶、2-萘基-4,6-雙(三氯甲基)對稱三吡啶、2-(對丁氧基苯乙烯基)稱三吡啶等三吡啶類；過氧化苯甲醯、2,2'-偶氮二異丁腈、乙基蒽醌、1,7-雙(9'-吡啶基)庚烷、9-氧硫吡啶、1-氯-4-丙氧基-9-氧硫吡啶、異丙基-9-氧硫吡啶、二乙基-9-氧硫吡啶、二苯甲酮、苯基聯苯基酮、4-苯甲醯基-4'-甲基二苯硫醚、2-(對丁氧基苯乙烯基)-5-三氯甲基-1,3,4-嘔二唑、9-苯基吡啶、9,10-二甲基苯并吡啶、二苯甲酮/米其勒酮、六芳基聯咪唑/巯基苯并咪唑、9-氧硫吡啶/胺等。

【0140】 作為熱自由基聚合起始劑，例如可例舉：過氧化苯甲醯、過氧化2,4-二氯苯甲醯、1,1-二(第三丁基過氧基)-3,3,5-三甲基環己烷、4,4-二(第三丁基過氧基)戊酸丁酯、二異丙苯基過氧化物等過氧化物類；2,2'-偶氮二異丁腈等偶氮化合物類；二硫化四甲基秋蘭姆等。

【0141】 作為光鹼產生劑，可例舉：胺基甲酸酯化合物、 α -胺基酮化合物、四級銨化合物、O-醯基脲化合物、胺基環丙酮化合物等。

【0142】 作為胺基甲酸酯化合物，例如可例舉：1-(2-蒽醌基)乙基1-六氫吡啶羧酸酯、1-(2-蒽醌基)乙基1H-2-乙基咪唑-1-羧酸酯、9-蒽基甲基1-六氫吡啶羧酸酯、9-蒽基甲基N,N-二乙基胺基甲酸酯、9-蒽基甲基N-丙基胺基甲酸酯、9-蒽基甲基N-環己基胺基甲酸酯、9-蒽基甲基1H-咪唑-1-羧酸酯、9-蒽基甲基N,N-二辛基胺基甲酸酯、9-蒽基甲基1-(4-羥基哌啶)羧酸酯、1-苊基甲基1-哌啶羧酸酯、雙[1-(2-蒽基)乙基]1,6-己二基雙胺基甲酸酯、雙(9-蒽基甲基)1,6-己二基雙胺基甲酸酯等。

作為 α -胺基酮化合物，例如可例舉：1-苯基-2-(4-嗎啉基苯甲醯基)-2-二甲基胺基丁烷、2-(4-甲硫基苯甲醯基)-2-咪啉基丙烷等。

【0143】 作為成為光鹼產生劑之四級銨化合物，例如可例舉：1-(4-

苯基硫基苯甲醯甲基)-1-氮鎗雜-4-氮雜雙環[2,2,2]辛烷四苯基硼酸酯、5-(4-苯基硫基苯甲醯甲基)-1-氮雜-5-氮鎗雜雙環[4,3,0]-5-壬烯四苯基硼酸酯、8-(4-苯基硫基苯甲醯甲基)-1-氮雜-8-氮鎗雜雙環[5,4,0]-7-十一烯四苯基硼酸酯等。

作為成為光鹼產生劑之胺基環丙酮化合物，例如可例舉：2-二乙基胺基-3-苯基環丙酮、2-二乙基胺基-3-(1-萘基)環丙酮、2-吡咯啉基-3-苯基環丙酮、2-咪唑基-3-苯基環丙酮、2-異丙基胺基-3-苯基環丙酮等。

【0144】 作為熱鹼產生劑，可例舉：2-(4-聯苯)-2-丙基胺基甲酸酯、及1,1-二甲基-2-氰基乙基胺基甲酸酯等胺基甲酸酯衍生物、脲或N,N,N'-三甲基脲等脲衍生物、1,4-二氫菸醯胺等二氫吡啶衍生物、雙氰胺、有機鹽或無機鹽等包含酸及鹼之鹽等。

【0145】 本發明之化合物及組合物由於耐熱性優異，故而適宜用於半導體密封材料、電路基板、增層膜、增層基板、半導體抗蝕劑、半導體硬罩及多層可撓性膜等電子零件用途中。作為電子零件之例，可例舉：諸如電晶體或二極體之類之1個元件具有單獨功能之分立零件(分離式半導體)；將具有複數個功能之元件置於1個晶片之IC(積體電路)；記憶體或微處理機(MPU)、邏輯IC等CPU(Central Processing Unit，中央處理單元)等。使用了本發明之組合物之電子零件適宜用於各種用途，例如可例舉：產業用機械零件、普通機械零件、汽車/鐵路/車輛等之零件、航天/航空相關零件、電子/電氣零件、建築材料、容器/包裝構件、生活用品、運動/娛樂用品、風力發電用殼體構件等用途，但並不限定於該等用途。

【0146】 如下述實施例所示，本發明之組合物之耐熱性、耐溶劑性優異，適宜作為電子零件用材料，結果，尤其如下述實施例所述，嵌入

性、平坦性優異，適宜作為半導體用膜形成材料。所謂半導體用膜形成材料係形成半導體用膜所需之材料，包含形成半導體用構件所需之半導體用構件形成材料及形成半導體製程用構件所需之半導體製程用構件形成材料。

【0147】 上述半導體用構件形成材料包含適於各者之用途之材料。例如可例舉：絕緣膜形成材料、障壁膜形成材料、密封材形成材料、間隙填充材形成材料等。

【0148】 上述半導體製程用構件形成材料包含適於各者之用途之材料。例如可例舉：底層膜形成材料、光阻形成材料、抗反射膜形成材料、中間膜形成材料等。

【0149】 上述半導體用膜係製造半導體時所使用之膜。具體而言，上述半導體用膜係塗佈半導體用膜形成材料後，蒸餾去除溶劑所得之固體層或藉由聚合反應等使該固體層硬化而得之硬化物之總稱。

【0150】 上述半導體用膜包含半導體用構件及半導體製程用構件。所謂半導體用構件，意指作為永久膜而殘存於半導體器件之構件，所謂半導體製程用構件，意指於半導體之製造步驟中用作犧牲膜，但不會殘存於半導體器件之構件。

【0151】 作為上述半導體用構件，例如可例舉：絕緣膜、障壁膜、密封材料、間隙填充材料等。

【0152】 作為上述半導體製程用構件，例如可例舉：光阻、中間膜、底層膜、抗反射膜等。

光阻、中間膜、底層膜係為了獲得良好之圖案而使用之半導體製程用構件，並可用作多層抗蝕劑，該多層抗蝕劑係藉由於矽晶圓等被加工基

板上依序積層底層膜、中間物膜、光阻而成。

【0153】 本發明之電子零件用組合物包含本發明之硬化物中所包含者，亦包含於用於製造步驟中後，被用作犧牲膜，其後被去除而不包含於硬化物者。

【0154】 作為本發明之電子零件用組合物之一例，可例舉多層抗蝕材料中之底層膜。

示出使用多層抗蝕材料之半導體製造步驟概要之一例。

作為多層抗蝕材料之常見之例，有於光阻層之下側具有兩層之三層抗蝕法。具體如下所述。

首先，將底層膜形成材料塗佈於矽晶圓等被加工基板，藉由加熱形成底層膜。於底層膜上形成中間膜後，塗佈光阻劑，藉由曝光、顯影形成圖案。將所形成之圖案作為遮罩，於適當之乾式蝕刻條件下依序對中間膜、底層膜進行蝕刻處理。將所獲得之底層膜圖案作為遮罩，於適當之乾式蝕刻條件下對被加工基板進行蝕刻，對殘存之遮罩進行灰化處理，藉此獲得目標構造之基板。

【0155】 底層膜形成材料需要不會因中間膜或光阻層成膜時之熱或溶劑而變形之耐熱性、耐溶劑性，又，需要耐蝕刻性，以準確地利用蝕刻進行轉印。又，由於亦需要對基板之凹凸之嵌入性、以及平坦地進行成膜之平坦特性，故而尤其適於本發明之組合物之用途。

【0156】 此外，本發明之化合物及組合物由於對凹凸不平之基板之嵌入性優異，故而亦可用作供填充至形成於基板之凹部中之間隙填充材料(嵌入平坦化膜)，亦可用於形成供填充至形成於基板之凹部中之絕緣材料(嵌入絕緣膜)、障壁材料、除上述底層膜以外之半導體抗蝕材料及矽貫通

孔用絕緣膜等。

【0157】 <C.硬化物>

本發明之硬化物係使上述組合物硬化而成之硬化物。就耐熱性及耐溶劑性優異之方面而言，硬化物較佳為熱硬化物。

【0158】 <D.硬化物之製造方法>

本製造方法具有使組合物硬化之步驟。

於熱硬化之情形時，可藉由利用加熱板等熱板、或大氣烘箱、惰性氣體烘箱、真空烘箱、熱風循環式烘箱等進行加熱而使組合物硬化。

【0159】 至於熱硬化時之加熱溫度，上述加熱溫度較佳為150～500℃，其中較佳為200～450℃，特佳為250～400℃。其原因在於，藉由使加熱溫度處於上述所表示之範圍內，能夠獲得耐熱性優異之硬化物。

又，硬化時間並無特別限定，就提高生產性之方面而言，較佳為30秒～60分鐘，特佳為1～30分鐘。

【0160】 <E.電子零件之製造方法>

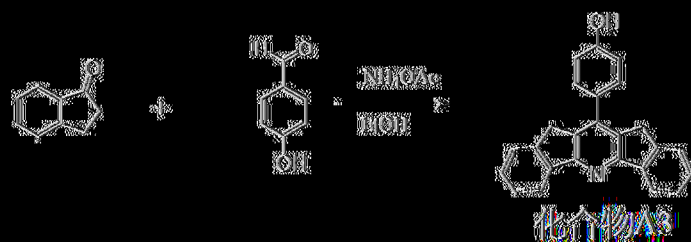
本製造方法於使上述組合物硬化之步驟之後，具有硬化物之去除步驟。例如具有以下步驟：於在基板上形成本發明之組合物之層，使其硬化而形成硬化膜後，對該硬化膜進行蝕刻而使其圖案化。於以本發明作為半導體形成用底層膜之情形時，本步驟之具體例例如可例舉以下。

一種電子零件之製造方法，其包括：

於將本發明之組合物之層塗佈於被加工基板之表面上後，使其硬化而形成底層膜之步驟；

將光阻之層塗佈於上述底層膜上之步驟；

於上述光阻層上配置遮罩，經由該遮罩用能量線對上述光阻層進行



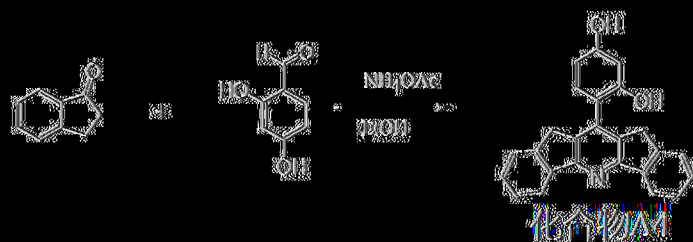
[0169] <實施例1-4>

向附回流管之反應燒瓶中加入1,3-二氫萘酮30.0 g(227 mmol)、2,4-二羟基苯甲醛15.7 g(114 mmol)、乙酸鉍70.0 g(908 mmol)、乙醇197 g，一面攪拌一面回流。於4.5小時後，恢復至室溫，過濾出析出物。利用乙醇/離子交換水洗淨，利用甲苯/DMF洗淨，於60℃下對過濾物進行減壓乾燥，藉此以淺紅色粉體之形式獲得化合物A4。

產量5.4 g(產率14%)

$^1\text{H-NMR}$ ($\text{DMSO}-d_6$) δ/ppm : 3.83 (d, 4H), 6.42 (d, 1H), 6.54 (d, 1H), 7.27 (d, 1H), 7.41-7.51 (m, 4H), 7.62 (d, 2H), 8.09 (d, 2H), 9.55 (s, 1H), 9.64 (s, 1H)

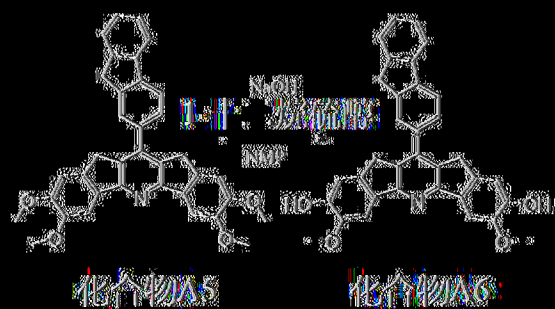
[0170] [化22]



[0171] <實施例1-5>

(步驟1)

向附回流管之反應燒瓶中加入5,6-二甲氧基-2,4-二羟基萘19.8 g(103 mmol)、2-萘甲醛10.0 g(52 mmol)、乙酸鉍15.9 g(206 mmol)、乙醇139 g，一面攪拌一面回流。於3小時後，恢復至室溫，過濾出析出物。利用乙醇/丙酮洗淨，利用NMIP洗淨，於100℃下對過濾物進行減壓乾燥，藉此



[0174] <實施例1.6>

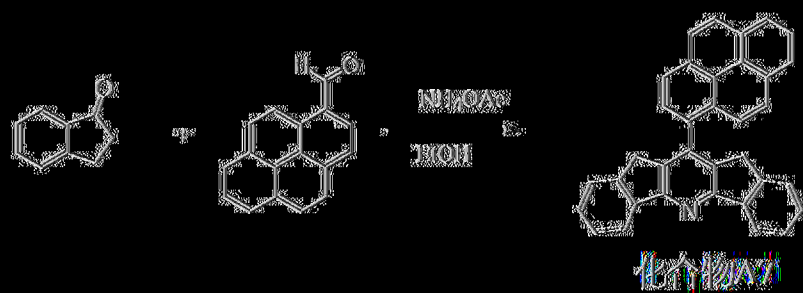
(步驟1)

向附回流管之反應燒瓶中加入1,3-二氯蒽醌8.1 g(61 mmol)、1,3-萘甲醛7.0 g(30 mmol)、乙酸銨9.8 g(127 mmol)、乙醇70 g，一面攪拌一面回流。於7小時後，恢復至室溫，過濾出析出物。利用THF/丙酮洗淨，於40℃下對過濾物進行減壓乾燥，藉此以黃色粉體之形式獲得化合物A7。

產量3.0 g(產率22%)

$^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)$ δ /ppm: 3.65 (q, 4H), 7.36-7.42 (m, 4H), 7.53 (t, 2H), 7.72 (d, 1H), 7.98 (d, 1H), 8.05 (t, 2H), 8.19 (d, 3H), 8.29 (d, 1H), 8.34-8.39 (m, 3H)

[0175] [化25]



[0176] (步驟2)

向附回流管之反應燒瓶中加入化合物A7 2.8 g(6.1 mmol)、DMF 20 g，於氮氣氣流下，在室溫下進行攪拌。加入48%氫氧化鈉水溶液6.5 g(78 mmol)後，滴加3-溴-1-丙炔9.3 g(79 mmol)，於60℃下攪拌12小時。向燒杯內加入離子交換水50 g，亦加入反應液。亦加入甲醇，過濾出析出物。

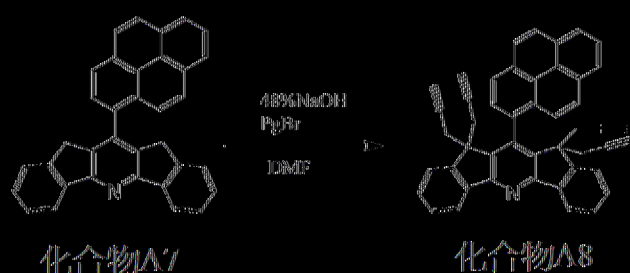
第 57 頁(發明說明書)

利用離子交換水/甲醇洗淨，於40℃下對過濾物進行減壓乾燥，藉此以黃色粉體之形式獲得化合物A8。

產量0.6 g(產率16%)

$^1\text{H-NMR}$ ($\text{DMSO}-d_6$) δ/ppm : 1.80 (d, 2H), 1.92 (d, 2H), 2.41~2.47 (m, 6H), 2.72 (d, 2H), 7.45~7.60 (m, 6H), 8.06~8.20 (m, 5H), 8.36~8.48 (m, 5H), 8.55 (d, 1H)

[0177] [化26]



[0178] <實施例17>

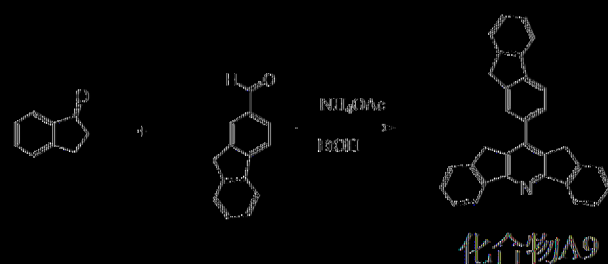
(步驟1)

向附回流管之反應燒瓶中加入1,3-二氯萘酚7.6 g(58 mmol)、2-萘甲醛6.0 g(31 mmol)、乙酸鉍8.6 g(111 mmol)、乙醇60 g，一面攪拌一面回流。於8小時後，恢復至室溫，過濾出析出物。利用離子交換水/乙醇洗淨，利用DMF/丙酮洗淨，於40℃下對過濾物進行減壓乾燥，藉此以淡黃色粉體之形式獲得化合物A9。

產量3.9 g(產率30%)

$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3) δ/ppm : 3.88 (s, 4H), 4.04 (s, 2H), 7.35~7.63 (m, 10H), 7.73 (s, 1H), 7.88 (d, 1H), 7.96 (d, 1H), 8.30 (d, 2H)

[0179] [化27]



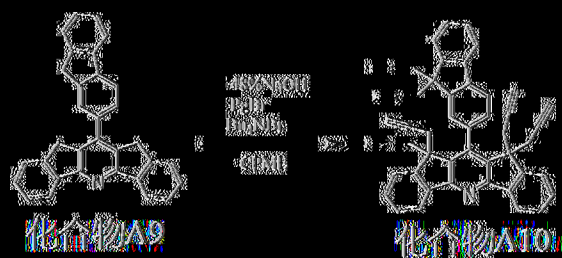
[0180] (步驟2)

向附回流管之反應燒瓶中加入化合物A9 3.4 g(8.1 mmol)、四丁基溴化鉍0.8 g(2.4 mmol)、環戊基甲醚15 g，於氮氣氣流下，在室溫下進行攪拌。加入48%氫氧化鈉水溶液11.9 g(143 mmol)、離子交換水10 g後，滴加3-溴-1-丙炔13.4 g(113 mmol)，於70℃下攪拌13小時。向燒杯中加入己烷50 g，加入反應液，過濾析出物。將過濾物溶解於二氯甲烷60 g中，進行3次水洗後，蒸餾去除溶劑。利用甲基第三丁基醚使其結晶化後，進行過濾。於40℃下對過濾物進行減壓乾燥，藉此以黃色粉體之形式獲得化合物A10。

產品1.5 g(產率28%)

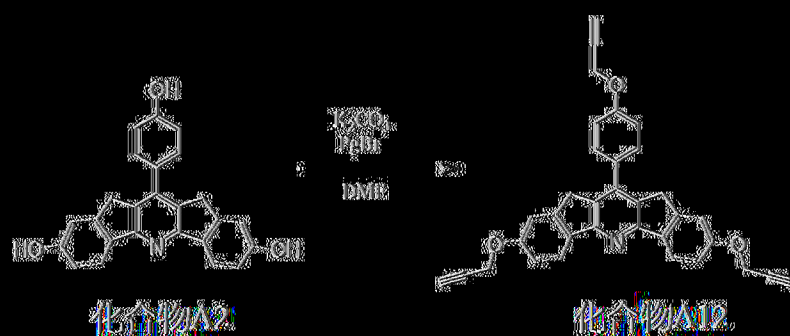
$^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)$ δ/ppm : 1.62 (q, 4H), 1.92 (s, 2H), 2.42 (dd, 4H), 2.82 (d, 4H), 2.96 (s, 4H), 7.43-7.54 (m, 6H), 7.60 (d, 2H), 7.70 (dd, 2H), 7.85 (d, 1H), 7.93 (d, 1H), 8.02 (s, 1H), 8.25 (d, 2H)

[0181] [化28]



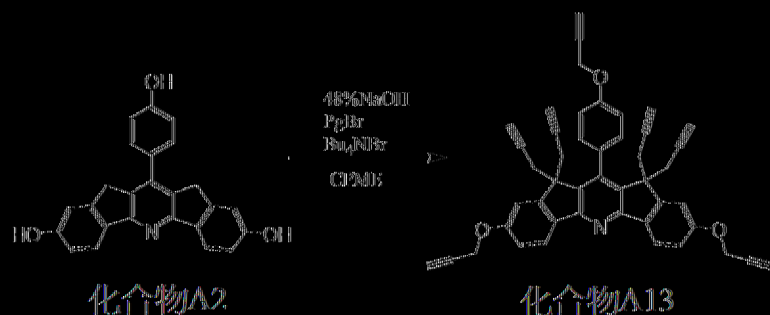
[0182] <實施例1-8>

向附回流管之反應燒瓶中加入化合物A1 1.7 g(3.7 mmol)、DMF 31 g，於氮氣氣流下，在室溫下進行攪拌。加入48%氫氧化鈉水溶液7.9 g(94 mmol)，攪拌13小時。向燒杯中加入己烷50 g，加入反應液，過濾析出物。將過濾物溶解於二氯甲烷60 g中，進行3次水洗後，蒸餾去除溶劑。利用甲基第三丁基醚使其結晶化後，進行過濾。於40℃下對過濾物進行減壓乾燥，藉此以黃色粉體之形式獲得化合物A10。



|(0186)| < 实施例 1.10 >

產量 3.1 g (產率 61%)

 $|(018')| \quad [4; 31]$ 

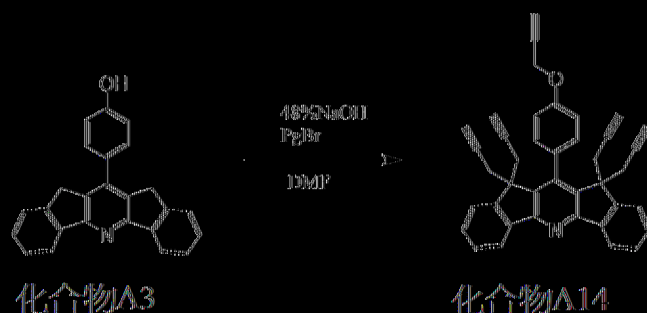
|(0188)| < 实施例 1.11 >

mmol)後，滴加3-溴-1-丙炔1.8 g(15 mmol)，攪拌3小時。向燒杯中加入離子交換水62 g，加入反應液。過濾出析出物，利用離子交換水/甲醇洗淨，於60℃下對過濾物進行減壓乾燥，藉此以淺橙色粉體之形式獲得化合物A14。

產量1.3 g(產率86%)

¹H-NMR (DMSO-d₆) δ/ppm: 2.23 (d, 2H), 2.27 (d, 2H), 2.35 (t, 4H), 2.85 (d, 2H), 2.89 (d, 2H), 3.67 (t, 1H), 4.96 (d, 2H), 7.28 (d, 2H), 7.46-7.57 (m, 6H), 7.68 (d, 2H), 8.02 (d, 2H)

[0189] [化32]



[0190] <實施例1.12>

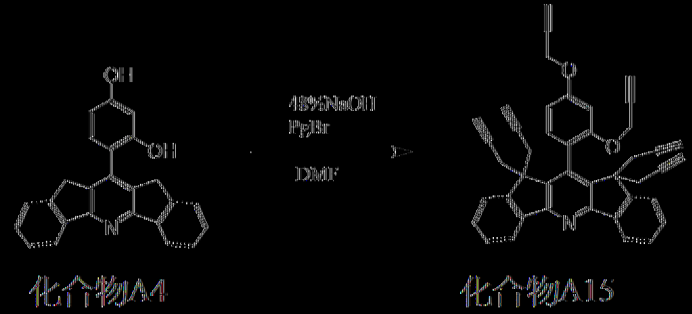
向附回流管之反應燒瓶中加入化合物A4 5.0 g(14 mmol)、DMF 33 g，於氮氣氣流下，在室溫下進行攪拌。加入48%氫氧化鈉水溶液7.2 g(87 mmol)後，滴加3-溴-1-丙炔10.3 g(87 mmol)，於60~80℃下攪拌4小時。藉由過濾去除系統內之鹽後，向燒杯中加入離子交換水160 g，加入反應液。過濾出析出物，利用離子交換水/甲醇洗淨，於60℃下對過濾物進行減壓乾燥，藉此以淺橙色粉體之形式獲得化合物A15。

產量1.3 g(產率86%)

¹H-NMR (DMSO-d₆) δ/ppm: 2.23 (d, 2H), 2.27 (d, 2H), 2.35 (t, 4H), 2.85 (d, 2H), 2.89 (d, 2H), 3.53 (t, 1H), 3.68 (t, 1H), 4.84 (d, 2H), 4.93

(d, 2H), 6.84 (d, 1H), 6.96 (d, 2H), 7.42-7.54 (m, 5H), 7.62 (d, 2H), 8.12 (d, 2H)

[0191] [化33]



[0192] <實施例1-13>

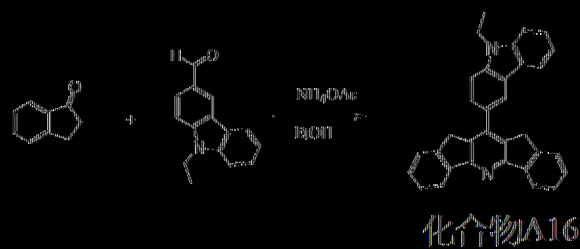
(步驟1)

向附回流管之反應燒瓶中加入1,3-二氯蒽酮29.0 g(219 mmol)、3-甲酰基-N-乙基吡嗪24.5 g(110 mmol)、乙酸鉍67.7 g(878 mmol)、乙醇246.1 g，一面攪拌一面回流。於1小時後，恢復至室溫，過濾出析出物。利用丙酮洗淨，利用THF洗淨，於60℃下對過濾物進行減壓乾燥，藉此以淺紅色粉體之形式獲得化合物A16。

產量9.8 g(產率20%)

¹H-NMR (DMSO-d₆) δ/ppm: 1.41 (t, 3H), 4.05 (s, 4H), 4.55 (q, 2H), 7.25 (t, 1H), 7.43-7.54 (m, 5H), 7.62 (d, 2H), 7.68 (d, 1H), 7.79 (d, 1H), 7.89 (d, 1H), 8.14 (d, 2H), 8.31 (d, 1H), 8.66 (d, 1H)

[0193] [化34]



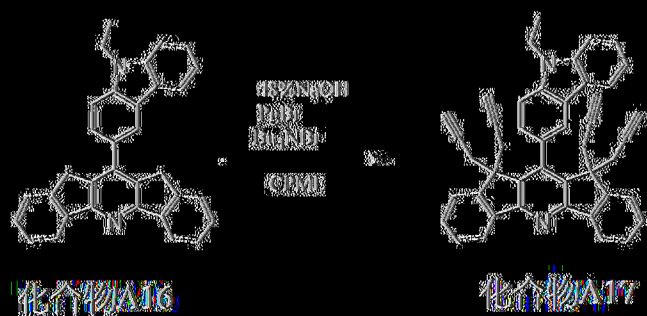
[0194] (步驟2)

向附回流管之反應燒瓶中加入化合物A16 4.0 g(8.9 mmol)、四丁基溴化銨0.9 g(2.7 mmol)、環戊基甲醚21 g，於氮氣氣流下，在室溫下進行攪拌。加入48%氫氧化鈉水溶液8.9 g(107 mmol)、離子交換水4 g後，升溫至70℃。滴加3-溴-1-丙炔6.4 g(54 mmol)，於85℃下攪拌2小時。冷卻至30℃，加入離子交換水48 g，過濾出析出物。利用甲醇/離子交換水洗淨，於60℃下對過濾物進行減壓乾燥，藉此以淺黃色粉體之形式獲得化合物A17。

產量2.8 g(產率52%)

$^1\text{H-NMR}$ ($\text{DMSO}-d_6$) δ/ppm : 1.46 (t, 3H), 2.24 (dd, 4H), 2.38 (t, 2H), 2.44 (t, 2H), 2.80 (dd, 2H), 2.84 (dd, 2H), 4.59 (q, 2H), 7.27 (t, 1H), 7.45-7.58 (m, 5H), 7.65 (d, 2H), 7.70-7.76 (m, 4H), 7.93 (d, 1H), 8.02 (d, 1H), 8.05 (d, 2H), 8.36 (d, 1H)

[0195] [化35]



[0196] <實施例1-14>

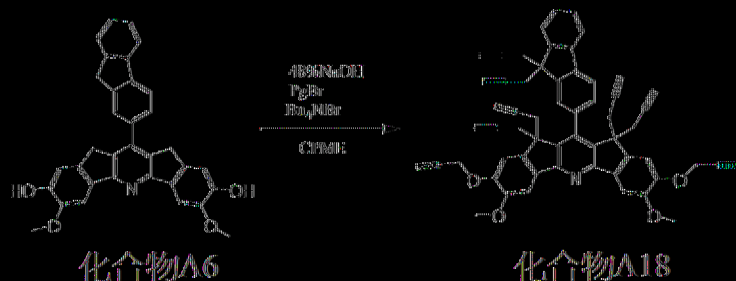
向附回流管之反應燒瓶中加入化合物A6 2.5 g(4.9 mmol)、四丁基溴化銨0.5 g(1.5 mmol)、環戊基甲醚25 g，於氮氣氣流下，在室溫下進行攪拌。加入48%氫氧化鈉水溶液8.2 g(98 mmol)、離子交換水3 g後，升溫至50℃。滴加3-溴-1-丙炔7.3 g(61 mmol)，於60℃下攪拌3小時。冷卻至30℃，去除系統中之不溶物，蒸餾去除溶劑後，加入環戊基甲醚5 g、離子

交換水5 g、甲醇15 g，過濾出析出物。利用甲醇/離子交換水洗淨，於50℃下對過濾物進行減壓乾燥，藉此以黃色粉體之形式獲得化合物A18。

產量0.5 g(產率13%)

$^1\text{H-NMR}$ ($\text{DMSO}-d_6$) δ/ppm : 2.24 (t, 1H), 2.29 (t, 1H), 2.34 (d, 2H), 2.36 (t, 2H), 2.39 (d, 2H), 2.48 (t, 2H), 2.73-2.81 (m, 4H), 2.90-3.00 (m, 4H), 3.58 (t, 2H), 3.97 (s, 6H), 4.84 (d, 4H), 7.35-7.64 (m, 7H), 7.76 (d, 1H), 7.97 (d, 2H), 8.10 (d, 1H)

[0197] [化36]



[0198] <實施例1-15>

(步驟1)

除了將<實施例1-1>之6-羥基-1-丙炔茚酮變更為5-羥基-1-丙炔茚酮，且將4-羥基苯甲醛變更為3-羥基苯甲醛以外，藉由相同之方法進行合成，而以淡黃色粉體之形式獲得化合物A29。

(步驟2)

向附回流管之反應燒瓶中加入化合物A29 9.0 g(23.7 mmol)、四丁基溴化銨2.3 g(7.1 mmol)、環戊基甲醚18.0 g，於氮氣氣流下，在室溫下進行攪拌。加入48%氫氧化鈉水溶液35.6 g(42.7 mmol)後，升溫至60℃。滴加3-溴-1-丙炔21.7 g(183 mmol)，於60℃下攪拌2小時。冷卻至30℃，自有機相蒸餾去除溶劑後，加入甲醇95 g，過濾出析出物。利用甲醇/離子交換水洗淨，於40℃下對過濾物進行減壓乾燥，藉此以淡黃色粉體之形式

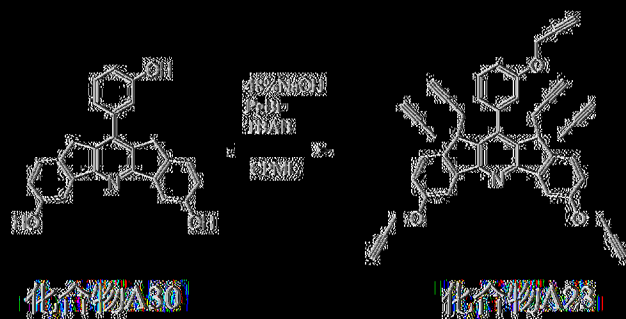
第 65 頁(發明說明書)

交換水洗淨，於40℃下對過濾物進行減壓乾燥，藉此以淡黃色粉體之形式獲得化合物A23。

產量6.9 g(產率45.0%)

$^1\text{H-NMR}$ ($\text{DMSO}-d_6$) δ/ppm : 2.22~2.24 (m, 2H), 2.26~2.28 (m, 2H), 2.35~2.38 (m, 4H), 2.81~2.82 (m, 2H), 2.85~2.87 (m, 2H), 3.58 (t, 1H), 3.65 (t, 2H), 4.87 (d, 2H), 4.97 (d, 4H), 7.07~7.10 (m, 2H), 7.22~7.29 (m, 3H), 7.58~7.63 (m, 5H)

[(0201)| [化38]



[(0202)| <實施例1-17>

(步驟1)

除了將<實施例1-7>之1-(2-氯萘-1-基)-2-氯萘-1-醇變更為5-羥基-1-(2-氯萘-1-基)-2-氯萘-1-醇以外，藉由相同之方法進行合成，而以淡黃色粉體之形式獲得化合物A31。

$^1\text{H-NMR}$ ($\text{DMSO}-d_6$) δ/ppm : 3.85 (s, 4H), 4.06 (s, 2H), 6.90 (dd, 2H), 7.00 (d, 2H), 7.38 (t, 1H), 7.45 (t, 1H), 7.66 (d, 1H), 7.74 (d, 1H), 7.87 (d, 2H), 7.96 (s, 1H), 8.01 (d, 1H), 8.09 (d, 1H), 9.67 (s, 2H)

(步驟2)

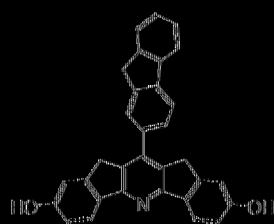
向附回流管之反應燒瓶中加入化合物A31 14 g(31.0 mmol)、4-丁基溴化鉍3.00 g(9.3 mmol)、環戊基甲醚56 g，於氮氣氣流下，在室溫下進行攪拌。加入48%氫氧化鈉水溶液62.0 g(744 mmol)後，升溫至60℃。滴

加3-溴-1-丙炔31.0 g(261 mmol)，於60℃下攪拌5小時。冷卻至30℃，去除系統中之不溶物，蒸餾去除溶劑後，加入環戊基甲醚60 g、離子交換水120 g、甲醇60 g，過濾出析出物。利用甲醇/離子交換水洗淨，於50℃下對過濾物進行減壓乾燥，藉此以黃色粉體之形式獲得化合物A24。

產量15.2 g(產率64.9%)

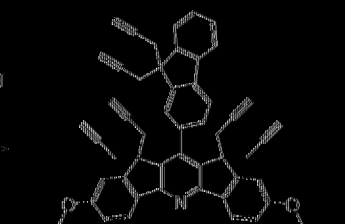
$^1\text{H-NMR}$ ($\text{DMSO}-d_6$) δ/ppm : 2.48 (dd, 2H), 2.76-2.84 (m, 4H), 2.90-3.00 (m, 4H), 3.62 (dd, 2H), 4.88-4.90 (m, 4H), 7.12 (dd, 2H), 7.31 (d, 2H), 7.41-7.50 (m, 2H), 7.62 (d, 1H), 7.76 (d, 1H), 7.92 (d, 2H), 7.97-7.99 (m, 2H), 8.11 (d, 1H)

[0203] [化39]



化合物A31

48%NaOH
Pyr
TBAH
CH₂OH



化合物A24

[0204] <實施例1-18>

(步驟1)

除了將<實施例1-7>之1-二氯萘酮變更為6-羥基-1-二氯萘酮以外，藉由相同之方法進行合成，而以淡黃色粉體之形式獲得化合物A32。

$^1\text{H-NMR}$ ($\text{DMSO}-d_6$) δ/ppm : 3.80 (s, 4H), 4.00 (s, 2H), 6.84 (dd, 2H), 7.35-7.39 (m, 3H), 7.44 (t, 1H), 7.48 (d, 2H), 7.66 (d, 1H), 7.74 (d, 1H), 7.99 (d, 2H), 8.06 (d, 1H), 9.53 (s, 2H)

(步驟2)

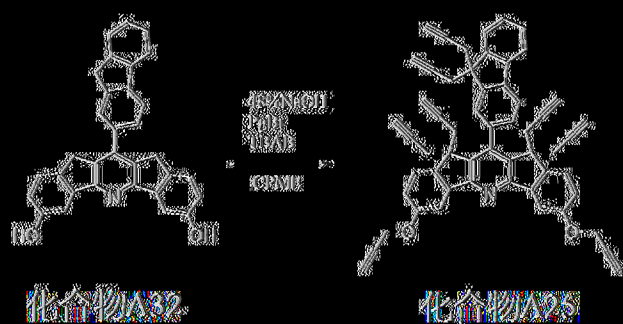
向附回流管之反應燒瓶中加入化合物A32 60 g(132.9 mmol)、4-丁基溴化銨12.85 g(39.9 mmol)、環戊基甲醚360 g，於氮氣氣流下，在室溫下

進行攪拌。加入48%氫氧化鈉水溶液265.7 g(3189 mmol)後，升溫至60℃。滴加3-溴-1-丙炔139.1 g(1169 mmol)，於60℃下攪拌3小時。冷卻至30℃，去除系統中之不溶物，蒸餾去除溶劑後，加入環戊基甲醚60 g、離子交換水120 g、甲醇60 g，過濾出析出物。利用甲醇/離子交換水洗淨，於50℃下對過濾物進行減壓乾燥，藉此以黃色粉體之形式獲得化合物A25。

產量19.55 g(產率19.5%)

$^1\text{H-NMR}$ (DMSO-d_6) δ/ppm : 2.28 (dd, 2H), 2.35-2.45 (m, 6H), 2.45 (t, 2H), 2.80 (td, 4H), 2.95 (d, 4H), 3.66 (t, 2H), 4.98 (d, 4H), 7.08 (dd, 2H), 7.42-7.50 (m, 2H), 7.56-7.64 (m, 5H), 7.76 (d, 1H), 7.98 (d, 2H), 8.12 (d, 1H)

[(0205)] [化40]



[(0206)] <實施例1-19>

(步驟1)

除了將<實施例1-1>之4-羥基苯甲醛變更為3,4-二羥基苯甲醛以外，藉由相同之方法進行合成，而以淡黃色粉體之形式獲得化合物A33。

$^1\text{H-NMR}$ (DMSO-d_6) δ/ppm : 3.91 (s, 4H), 6.96 (d, 4H), 7.09 (s, 1H), 7.16 (s, 1H), 7.48 (d, 2H), 7.79 (d, 2H), 9.78 (s, 4H)

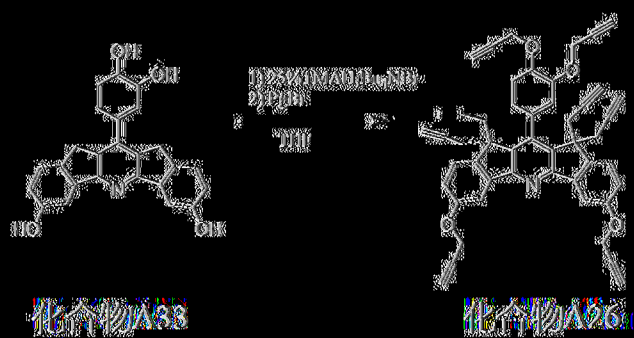
(步驟2)

向附回流管之反應燒瓶中加入化合物A33 22.7 g(57.3 mmol)、四正基溴化鉍5.4 g(16.8 mmol)、四氫呋喃310 g，於氮氣氣流下，在室溫下進行攪拌。加入25%氫氧化四正基鉍水溶液361 g(988 mmol)後，升溫至45℃。滴加3-溴-1-丙炔12.3 g(60.8 mmol)，於45℃下攪拌2小時。冷卻至30℃，自有機相蒸餾去除溶劑後，加入甲醇95 g，過濾出析出物。利用甲醇/離子交換水洗淨，於40℃下對過濾物進行減壓乾燥，藉此以黃色粉體之形式獲得化合物A26。

產量15.1 g(產率37.3%)

$^1\text{H-NMR}$ ($\text{DMSO}-d_6$) δ /ppm: 2.36 (s, 8H), 2.83 (s, 4H), 3.46 (s, 1H), 3.65 (s, 3H), 4.78 (s, 2H), 4.50 (s, 6H), 7.06 (d, 2H), 7.16 (d, 1H), 7.32 (d, 2H), 7.57 (s, 3H), 7.59 (d, 1H)

[(0207)] [(化41)]



[(0208)] <實施例1.20>

(步驟1)

除了將<實施例1.1>之4-羥基苯甲醛變更為2-羥基-1-萘甲醛以外，藉由相同之方法進行合成，而以淡黃色粉體之形式獲得化合物A34。

$^1\text{H-NMR}$ ($\text{DMSO}-d_6$) δ /ppm: 3.32 (s, 4H), 6.82 (dd, 2H), 7.14-7.17 (m, 1H), 7.30-7.35 (m, 4H), 7.39 (d, 1H), 7.51 (d, 2H), 7.91-7.97 (m, 2H), 9.54 (s, 2H), 9.86 (s, 1H)

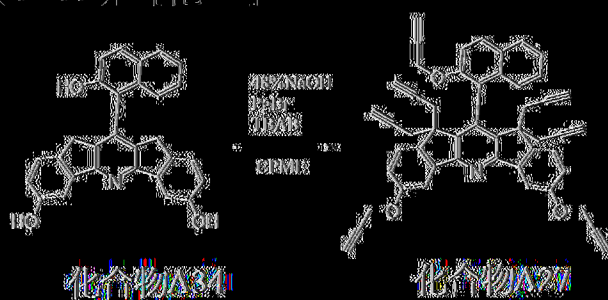
(步驟2)

向附回流管之反應燒瓶中加入化合物A34 8.0 g(18.6 mmol)、四丁基溴化銨1.8 g(5.6 mmol)、環戊基甲醚48.0 g，於氮氣氣流下，在室溫下進行攪拌。加入48%氫氧化鈉水溶液32.6 g(391 mmol)後，升溫至60℃。滴加3-溴-1-丙炔17.1 g(143 mmol)，於60℃下攪拌5小時。冷卻至30℃，自有機相蒸餾去除溶劑後，加入甲醇95 g，過濾出析出物。利用甲醇/離子交換水洗淨，於40℃下對過濾物進行減壓乾燥，藉此以淡黃色粉體之形式獲得化合物A27。

產量2.8 g(產率21.6%)

$^1\text{H-NMR}$ ($\text{DMSO}-d_6$) δ/ppm : 2.22~2.24 (m, 2H), 2.26~2.28 (m, 2H), 2.35~2.38 (m, 4H), 2.81~2.82 (m, 2H), 2.85~2.87 (m, 2H), 3.58 (t, 1H), 3.65 (t, 2H), 4.87 (d, 2H), 4.97 (d, 4H), 7.07~7.10 (m, 2H), 7.22~7.29 (m, 3H), 7.58~7.63 (m, 5H)

[(0209)| [4142]



[(0210)| <實施例1.21>

(步驟1)

除了將<實施例1.1>之4-羥基苯甲醛變更為4-乙醯胺苯甲醛以外，藉由相同之方法進行合成，而以淡黃色粉體之形式獲得化合物A35。

$^1\text{H-NMR}$ ($\text{DMSO}-d_6$) δ/ppm : 2.10 (s, 3H), 3.79 (s, 4H), 6.84 (dd, 2H), 7.37 (d, 2H), 7.45 (d, 2H), 7.67~7.71 (m, 2H), 7.76 (d, 2H), 9.52 (s, 2H),

第 71 頁(發明說明書)

10.13 (s, 1H)

(步驟2)

向附回流管之反應燒瓶中加入化合物A35 60.0 g(143 mmol)、N-甲基-1-吡咯啉酮240 g、乙醇240 g，於氮氣氣流下，在室溫下進行攪拌。加入48%氫氧化鈉水溶液179 g(2140 mmol)後，於90℃下攪拌10小時。冷卻至30℃，加入乙酸乙酯108 g，過濾出析出物。利用乙酸乙酯將過濾物洗淨，其後，利用甲醇/離子交換水洗淨，於40℃下對過濾物進行減壓乾燥，藉此以淡黃色粉體之形式獲得化合物A36。

$^1\text{H-NMR}$ (DMSO- d_6) δ /ppm: 3.74 (s, 4H), 5.36 (s, 2H), 6.70 (d, 2H), 6.75 (d, 2H), 7.29 (d, 2H), 7.41 (d, 2H), 7.45 (d, 2H)

(步驟3)

向附回流管之反應燒瓶中加入化合物A36 16.0 g(42.3 mmol)、四丁基溴化銨4.1 g(12.7 mmol)、環戊基甲醚160 g，於氮氣氣流下，在室溫下進行攪拌。加入48%氫氧化鈉水溶液52.9 g(634 mmol)後，升溫至65℃。滴加3-溴-1-丙炔44.3 g(372 mmol)，於75℃下攪拌7小時。冷卻至30℃，過濾出析出物後，對濾液之有機層水洗5次，於40℃下進行減壓乾燥。利用甲基異丁基酮將所獲得之固體洗淨，於40℃下對過濾物進行減壓乾燥，藉此以淡黃色粉體之形式獲得化合物A28。

產量19.5g(產率67.5%)

$^1\text{H-NMR}$ (DMSO- d_6) δ /ppm: 1.70 (dd, 2H), 2.25 (dd, 4H), 2.37 (t, 2H), 2.54-2.67 (m, 4H), 3.53 (t, 1H), 3.67 (t, 2H), 4.84 (d, 2H), 4.98 (d, 4H), 7.06 (dd, 2H), 7.30 (t, 1H), 7.47 (t, 1H), 7.59-7.65 (m, 5H), 7.72 (d, 1H), 8.02 (d, 1H), 8.27 (d, 1H)

化合物A27：實施例1-20中製造之化合物

化合物A28：實施例1-21中製造之化合物

化合物A20：不具有下述結構、反應性基之化合物

化合物A21：除具有下述結構、反應性基之化合物I以外之化合物

化合物B1 下述結構、交聯劑(甘脲化合物)

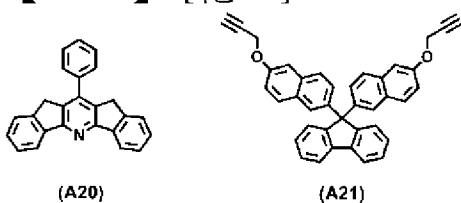
化合物B2 下述結構、交聯劑(酚化合物)

化合物C1 雙(4-第三丁基苯基)銦九氟丁磺酸鹽(聚合起始劑：熱酸產生劑)

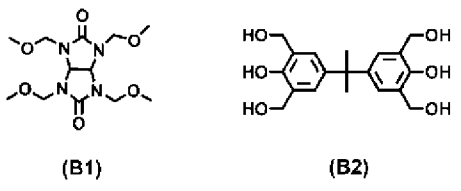
化合物D1：丙二醇單甲醚乙酸酯(PGMEA)溶劑

化合物D2：環己酮溶劑

【0214】 [化44]



【0215】 [化45]



【0216】 (評估用基板之製作)

使用旋轉塗佈機，以加熱後之膜厚成為200 nm之方式將所製備之評估用組合物塗佈於矽晶圓基板。藉由設定為170℃之加熱板將塗佈後之基板加熱60秒後，進而藉由設定為300℃之加熱板加熱60秒，而製成評估用基板。

使用該評估用基板，以如下方式進行各種評估。將評估結果彙總示於表1～4中。

【0217】（成膜性）

將利用上述評估用基板之製作中之設定為 170°C 之加熱板加熱60秒後之膜厚 $W1$ 與進而利用設定為 300°C 之加熱板加熱60秒後之膜厚 $W2$ 之膜厚變化之比率 $((W1 - W2)/W1)$ 未達5%，且以目視觀察評估用基板上之膜表面，無變色且表面均勻之情形記為A+；將膜厚變化之比率為5%以上且未達10%，且以目視觀察評估用基板上之膜表面，無變色且表面均勻之情形記為A；將表面均勻但存在黃變或黑變等變色之情形記為B；將有變色且因析出或揮發等而導致表面不均勻之情形記為C。

於膜厚變化之比率較小，表面均勻且無變色之情形時，可謂成膜性優異。

【0218】（耐熱性評估）

使用SEMILAB公司製造之SE-2000分光式橢圓偏光儀測定評估用基板上之5個點之膜厚，將其平均值作為試驗前膜厚。

將評估用基板於 300°C 下加熱60秒，以同樣之方式測定加熱後之膜厚，作為試驗後膜厚 W_a 。

將相對於試驗前之膜厚 W_b ，試驗前後之膜厚變化之比率 $(W_b - W_a)$ 未達3%者評為A，將3%以上且未達5%者評為B，將5%以上且未達10%者評為C，將10%以上者評為D。

再者，資料中雖未示出，但於相同之B評估之中，與實施例2-4相比，實施例2-3、2-5、2-6、2-7、2-13、2-14、2-18、2-19、2-22之膜厚變化之比率得到進一步抑制。

【0219】（耐溶劑性評估）

使用SEMILAB公司製造之SE-2000分光式橢圓偏光儀測定評估用基

板上之5個點之膜厚，將其平均值作為試驗前膜厚。

於25℃下使評估用基板浸漬於PGMEA中60秒後，於170℃下加熱60秒，以同樣之方式測定使PGMEA蒸發後之膜厚，作為試驗後膜厚 $W_{a'}$ 。

將相對於試驗前之膜厚 $W_{b'}$ ，試驗前後之膜厚變化之比率 $(W_{b'} - W_{a'})$ 未達1%者評為A，將1%以上且未達3%者評為B，將3%以上者評為C。

【0220】(嵌入性、平坦性)

藉由旋轉塗佈機將組合物塗佈於附SiO₂階差之基板(寬500 nm、高100 nm之壁、寬500 nm之溝槽)上。於170℃下加熱60秒，於300℃下加熱60秒而製作膜。至於膜厚，以距離溝槽之膜厚成為200 nm之方式調整旋轉塗佈條件。

嵌入性評估：製作基板之切片，藉由SEM(日立高新技術公司製造之S-4800)進行觀察，將無空隙嵌入至階差者評為A，將有空隙者評為B。

平坦性評估：根據基板上之壁上所製作之膜之最厚處與溝槽上所製作之膜之最薄處的差(膜厚差)，對平坦性進行評估。將膜厚差未達10 nm評為A，將10 nm以上且未達30 nm評為B，將30 nm以上評為C。

膜厚差越小，則平坦性越高，越可較佳地用作電子零件用材料，尤其是半導體用膜形成材料。

【0221】 [表1]

		實施例								
組合物	化合物	2-1	2-2	2-3	2-4	2-5	2-6	2-7	2-8	2-9
	A8	5								
	A10		5							
	A11			5						
	A12				5					
	A13					5				
	A14						5			
	A15							5		
	A17								5	
	A18									5
	A20									
	A21									
	A22									
	A23									
	A24									
	A25									
	A26									
	A27									
	A28									
	B1									
	B2									
	C1									
	D1	47.5	47.5	47.5	47.5	47.5	47.5	47.5	47.5	47.5
	D2	47.5	47.5	47.5	47.5	47.5	47.5	47.5	47.5	47.5
評估	成膜性	A	A	A+	A	A+	A	A	A	A+
	耐熱性	A	A	B	B	B	B	B	A	A
	耐溶劑性	A	A	A	A	A	A	A	A	A
	嵌入性	A	A	A	A	A	A	A	A	A
	平坦性	A	A	A	A	A	A	A	A	A

【0222】 [表2]

		實施例							
組合物	化合物	2-10	2-11	2-12	2-13	2-14	2-15	2-16	2-17
	A8								
	A10	2.5	3.5	4					
	A11	2.5			4				
	A12								
	A13					4			
	A14								
	A15								
	A17								
	A18						4	4	4.5
	A20								
	A21		1.5						
	A22								
	A23								
	A24								
	A25								
	A26								
	A27								
	A28								
	B1			0.5	0.5	0.5	0.5		
	B2							0.5	
	C1			0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5
	D1	47.5	47.5	47.5	47.5	47.5	47.5	47.5	47.5
	D2	47.5	47.5	47.5	47.5	47.5	47.5	47.5	47.5
評估	成膜性	A	A	A	A	A	A	A	A
	耐熱性	A	A	A	B	B	A	A	A
	耐溶劑性	A	A	A	A	A	A	A	A
	嵌入性	A	A	A	A	A	A	A	A
	平坦性	A	A	A	A	A	A	A	A

【0223】 [表3]

		實施例						
組合物	化合物	2-18	2-19	2-20	2-21	2-22	2-23	2-24
	A8							
	A10							
	A11							
	A12							
	A13							
	A14							
	A15							
	A17							
	A18							
	A20							
	A21							
	A22	5						
	A23		5					
	A24			5				
	A25				5			
	A26					5		
	A27						5	
	A28							5
	B1							
	B2							
	C1							
	D1	47.5	47.5	47.5	47.5	47.5	47.5	47.5
	D2	47.5	47.5	47.5	47.5	47.5	47.5	47.5
評估								
	成膜性	A+	A+	A+	A+	A+	A+	A+
	耐熱性	B	B	A	A	B	A	A
	耐溶劑性	A	A	A	A	A	A	A
	嵌入性	A	A	A	A	A	A	A
	平坦性	A	A	A	A	A	A	A

【0224】 [表4]

		比較例			
	化合物	1	2	3	4
組合物	A8				
	A10				
	A11				
	A12				
	A13				
	A14				
	A15				
	A17				
	A18				
	A20	5	4		
	A21			5	4
	A22				
	A23				
	A24				
	A25				
	A26				
	A27				
	A28				
	B1		0.5		0.5
	B2				
	C1		0.5		0.5
	D1	47.5	47.5	47.5	47.5
	D2	47.5	47.5	47.5	47.5
評估	成膜性	C	C	B	B
	耐熱性	D	D	C	C
	耐溶劑性	C	C	B	B
	嵌入性	B	B	B	B
	平坦性	B	B	B	B

【0225】 如表1～3所示，藉由使用本發明之化合物I，能夠獲得耐熱性及耐溶劑性優異之膜。又，本發明之化合物之成膜性優異，成膜時之嵌入性及平坦性亦良好。

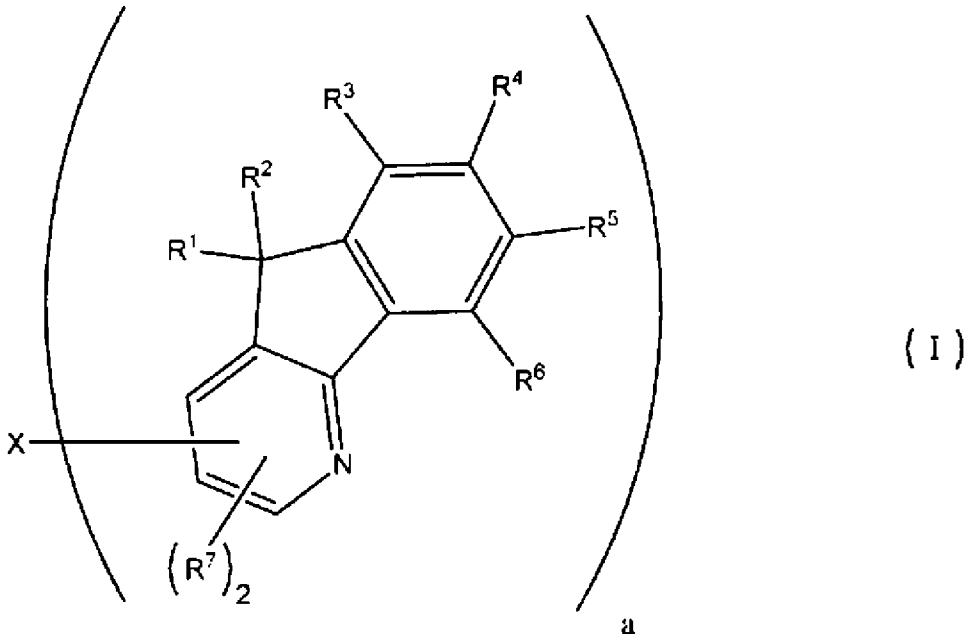
【0226】 與此相對，如表4所示，於使用不符合式(I)之化合物之情形時，判斷耐熱性或耐溶劑性較差。

【發明申請專利範圍】

【請求項1】

一種化合物，其係由下述通式(I)表示：

[化1]



(式中，X表示氫原子、可經取代之成環碳原子數2～20之環基、可經取代之碳原子數1～20之鏈狀烴基或該鏈狀烴基中之1個以上之亞甲基被取代為選自下述〈群B〉之二價基而成的基，

R¹、R²、R³、R⁴、R⁵、R⁶及R⁷分別獨立地表示氫原子、選自下述〈群A〉之反應性基、硝基、可經取代之碳原子數1～20之烷基、可經取代之碳原子數6～20之芳香族環基、可經取代之碳原子數2～20之雜環基、該碳原子數1～20之烷基中之1個以上之亞甲基被取代為選自下述〈群B〉的二價基而成之基、該碳原子數6～20之芳香族環基中之1個以上之亞甲基被取代為選自下述〈群B〉的二價基而成之基、或該碳原子數2～20之雜環基中之1個以上之亞甲基被取代為選自下述〈群B〉的二價基而成之基，

<群A>係碳-碳不飽和鍵結性基、環狀醚基、羥基、巯基、胺基、鹵素原子及氰基，

<群B>係-O-、-CO-、-COO-、-OCO-、-NR¹¹-、-NR¹¹CO-、及-S-，

R¹¹表示氫原子或烴基，

存在2個之相同重複單元中之R⁷可相同亦可不同，

R¹與R²有時相互鍵結而形成環，

R³與R⁴有時相互鍵結而形成環，

R⁴與R⁵有時相互鍵結而形成環，

R⁵與R⁶有時相互鍵結而形成環，

存在複數個之R⁷與R⁷有時相互鍵結而形成環，

a表示1~10之整數，

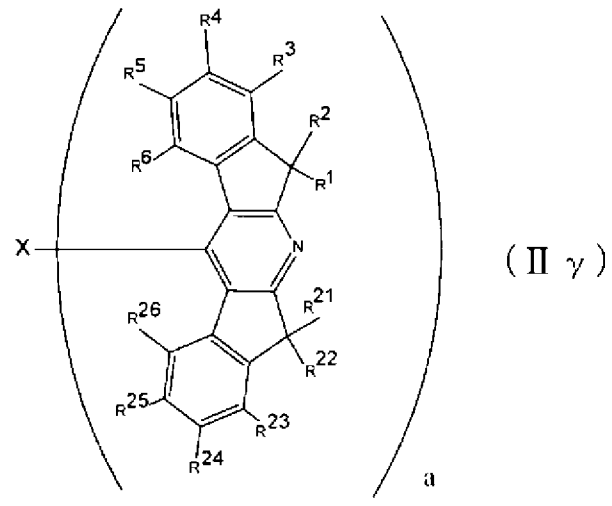
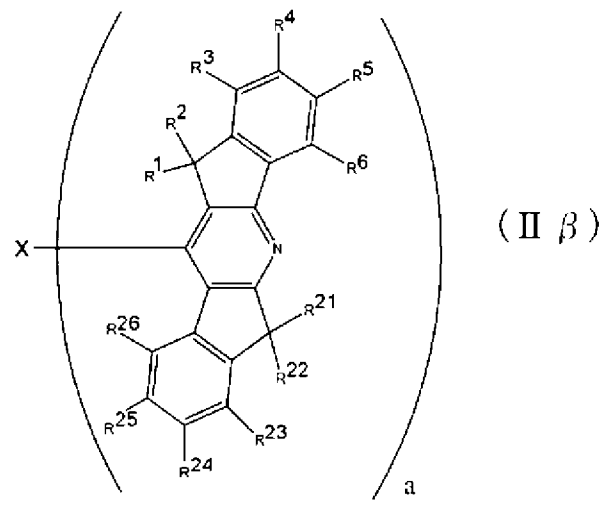
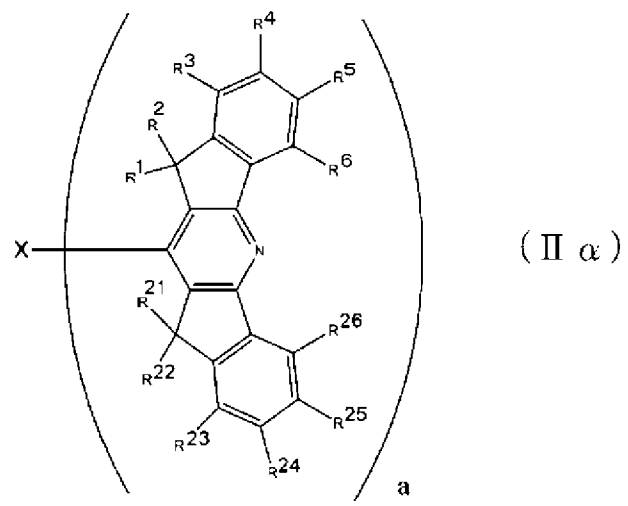
於a為2以上之情形時，複數個重複單元間之複數個R¹彼此可相互相同亦可互不相同，複數個R²彼此可相互相同亦可互不相同，複數個R³彼此可相互相同亦可互不相同，複數個R⁴彼此可相互相同亦可互不相同，複數個R⁵彼此可相互相同亦可互不相同，複數個R⁶彼此可相互相同亦可互不相同，複數個R⁷彼此可相互相同亦可互不相同，

其中，上述化合物於分子內具有1個以上之選自上述<群A>之反應性基)。

【請求項2】

如請求項1之化合物，其係由下述通式(IIα)、(IIβ)或(IIγ)表示：

[化2]



(式中，X、a、R¹、R²、R³、R⁴、R⁵、R⁶與通式(I)相同，

R²¹、R²²、R²³、R²⁴、R²⁵及R²⁶分別獨立地表示氫原子、選自上述＜群A＞之反應性基、硝基、可經取代之碳原子數1～20之烷基、可經取代

之碳原子數6~20之芳香族環基、可經取代之碳原子數2~20之雜環基、該碳原子數1~20之烷基中之1個以上之亞甲基被取代為選自上述〈群B〉的二價基而成之基、該碳原子數6~20之芳香族環基中之1個以上之亞甲基被取代為選自上述〈群B〉的二價基而成之基或該碳原子數2~20之雜環基中之1個以上之亞甲基被取代為選自上述〈群B〉的二價基而成之基，

R^{21} 與 R^{22} 有時相互鍵結而形成環，

R^{23} 與 R^{24} 有時相互鍵結而形成環，

R^{24} 與 R^{25} 有時相互鍵結而形成環，

R^{25} 與 R^{26} 有時相互鍵結而形成環)。

【請求項3】

如請求項1或2之化合物，其中X係可經取代之成環碳原子數6~20之芳香族環基或可經取代之成環碳原子數2~20之雜環基。

【請求項4】

如請求項1之化合物，其於分子內具有1個以上之碳-碳不飽和鍵結性基作為上述反應性基。

【請求項5】

如請求項2之化合物，其於分子內具有1個以上之碳-碳不飽和鍵結性基作為上述反應性基。

【請求項6】

如請求項1或2之化合物，其中存在於分子內之上述反應性基之數為2個以上。

【請求項7】

如請求項1或2之化合物，其中X具有可經取代之縮合環，或者存在於分子內之上述反應性基之數為3個以上。

【請求項8】

一種組合物，其含有如請求項1或2之化合物。

【請求項9】

如請求項8之組合物，其用於電子零件。

【請求項10】

一種硬化物，其係由如請求項8之組合物獲得。

【請求項11】

一種硬化物之製造方法，其具有使如請求項8之組合物硬化之步驟。

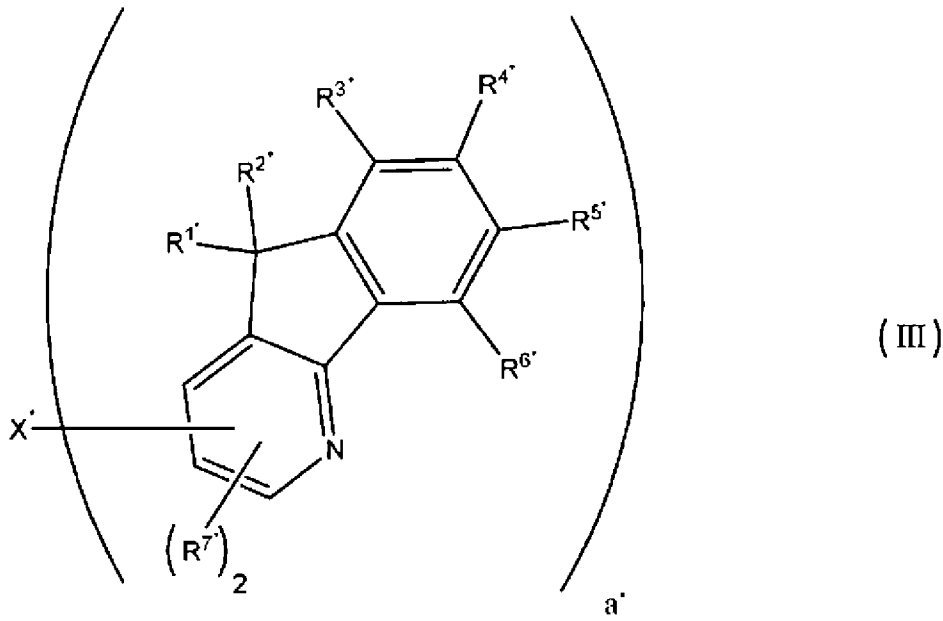
【請求項12】

一種電子零件之製造方法，其於使如請求項8之組合物硬化之步驟之後具有硬化物之去除步驟。

【請求項13】

一種化合物，其係由下述通式(III)表示：

[化3]



(III)

(式中，X'表示氫原子、可經取代之成環碳原子數2~20之環基、可經取代之碳原子數1~20之鏈狀烴基或該鏈狀烴基中之1個以上之亞甲基被取代為選自下述〈群B〉之二價基而成的基，

R^{1'}、R^{2'}、R^{3'}、R^{4'}、R^{5'}、R^{6'}及R^{7'}分別獨立地表示氫原子、選自下述〈群A〉之反應性基、硝基、可經取代之碳原子數1~20之烷基、可經取代之碳原子數6~20之芳香族環基、可經取代之碳原子數2~20之雜環基、該碳原子數1~20之烷基中之1個以上之亞甲基被取代為選自下述〈群B〉的二價基而成之基、該碳原子數6~20之芳香族環基中之1個以上之亞甲基被取代為選自下述〈群B〉的二價基而成之基、或該碳原子數2~20之雜環基中之1個以上之亞甲基被取代為選自下述〈群B〉的二價基而成之基，

〈群A〉係碳-碳不飽和鍵結性基、環狀醚基、羥基、巰基、胺基、鹵素原子及氰基，

〈群B〉係-O-、-CO-、-COO-、-OCO-、-NR^{11'}-、-NR^{11'}CO-、及-S-，

R^{11'}表示氫原子或烴基，
存在2個之相同重複單元中之R^{7'}可相同亦可不同，
R^{1'}與R^{2'}有時相互鍵結而形成環，
R^{3'}與R^{4'}有時相互鍵結而形成環，
R^{4'}與R^{5'}有時相互鍵結而形成環，
R^{5'}與R^{6'}有時相互鍵結而形成環，
存在複數個之R^{7'}與R^{7'}有時相互鍵結而形成環，
a'表示1~10之整數，於X'為氫原子之情形時，a'為1，

於a'為2以上之情形時，複數個重複單元間之複數個R^{1'}彼此可相互相同亦可互不相同，複數個R^{2'}彼此可相互相同亦可互不相同，複數個R^{3'}彼此可相互相同亦可互不相同，複數個R^{4'}彼此可相互相同亦可互不相同，複數個R^{5'}彼此可相互相同亦可互不相同，複數個R^{6'}彼此可相互相同亦可互不相同，複數個R^{7'}彼此可相互相同亦可互不相同，

其中，上述化合物於分子內具有1個以上之酚性羟基)。