

【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 3 区分

【発行日】平成28年7月21日(2016.7.21)

【公開番号】特開2016-104871(P2016-104871A)

【公開日】平成28年6月9日(2016.6.9)

【年通号数】公開・登録公報2016-035

【出願番号】特願2015-252631(P2015-252631)

【国際特許分類】

C 0 8 L 101/00 (2006.01)

C 0 8 K 5/3465 (2006.01)

C 0 8 K 3/00 (2006.01)

C 0 8 K 5/3495 (2006.01)

C 0 8 K 5/23 (2006.01)

C 0 9 K 11/06 (2006.01)

C 0 7 F 5/02 (2006.01)

【F I】

C 0 8 L 101/00

C 0 8 K 5/3465

C 0 8 K 3/00

C 0 8 K 5/3495

C 0 8 K 5/23

C 0 9 K 11/06

C 0 7 F 5/02 D

【手続補正書】

【提出日】平成28年4月15日(2016.4.15)

【手続補正 1】

【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

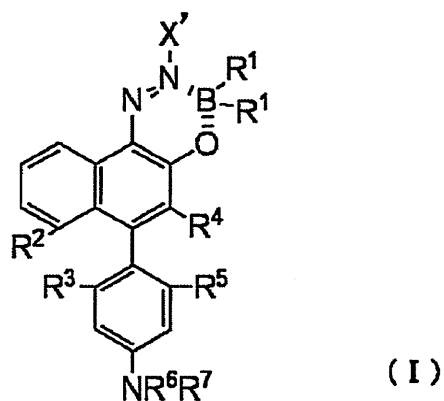
【補正の内容】

【特許請求の範囲】

【請求項 1】

近赤外蛍光材料、放射線不透過性物質、及び樹脂を含有し、
前記近赤外蛍光材料が、下記一般式（I）：

【化 1】



〔式（I）中、

X' は、置換基を有していてもよいアリール基、又は置換基を有していてもよいヘテロ

アリール基を示し；

R^1 は、 C_{1-12} アルキル基、アリール基、アリールエテニル基、アリールエチニル基、 C_{1-12} アルコキシ基、アリールオキシ基又はハロゲン原子を示すか、或いは、一方の R^1 は、上記 X' と結合している $-O-C(=O)-$ 基を示し、6 員環を形成するものであり、且つ他方の R^1 は、独立して C_{1-12} アルキル基、アリール基、アリールエテニル基、アリールエチニル基、 C_{1-12} アルコキシ基、アリールオキシ基又はハロゲン原子を示し；

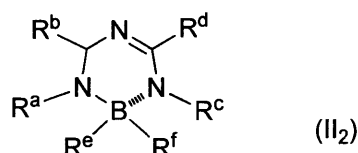
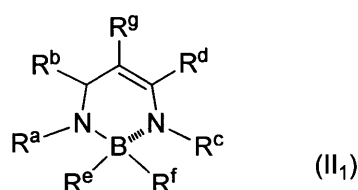
R^2 と R^3 は、一体となって $-O-$ 基、 $-S-$ 基もしくは $-N(R^8)-$ 基（ここで、 R^8 は水素原子又は C_{1-12} アルキル基を示す）を形成し、且つ R^4 と R^5 は水素原子基を示すか、或いは、 R^4 と R^5 は、一体となって $-O-$ 基、 $-S-$ 基、もしくは $-N(R^8)-$ 基（ R^8 は上記と同義を示す）を形成し、且つ R^2 と R^3 は水素原子基を示し；

R^6 と R^7 は、独立して水素原子基、 C_{1-12} アルキル基、置換基を有していてもよいアリール基、又は置換基を有していてもよいヘテロアリール基を示し；

上記アリール基又はヘテロアリール基の置換基は、 C_{1-12} アルキル基、モノ（ C_{1-12} アルキル）アミノ基、ジ（ C_{1-12} アルキル）アミノ基、水酸基及び C_{1-12} アルコキシ基からなる群より選択される 1 種以上の基を示す。]

で表される化合物、下記一般式（ II_1 ）及び一般式（ II_2 ）：

【化 2】



[式（ II_1 ）及び（ II_2 ）中、

R^a 及び R^b は、 R^a が結合する窒素原子及び R^b が結合する炭素原子と共に、芳香族 5 員環、芳香族 6 員環、又は 2～3 個の 5 員環若しくは 6 員環が縮合してなる縮合芳香環を形成し；

R^c 及び R^d は、 R^c が結合する窒素原子及び R^d が結合する炭素原子と共に、芳香族 5 員環、芳香族 6 員環、又は 2～3 個の 5 員環若しくは 6 員環が縮合してなる縮合芳香環を形成し；

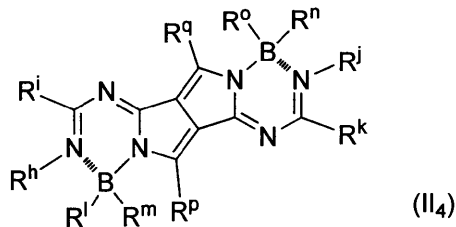
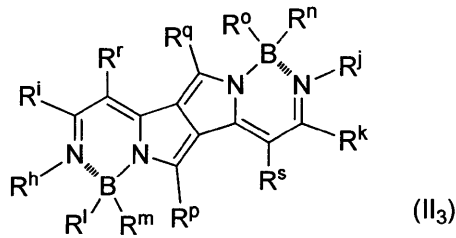
R^e 及び R^f は、ハロゲン原子又は酸素原子を表し；

R^g は、水素原子、又は電子求引性基を表す。

ただし、 R^e 及び R^f が酸素原子の場合には、 R^e 、 R^e と結合するホウ素原子、 R^a 、及び R^a が結合する窒素原子が共に環を形成してもよく、 R^f 、 R^f と結合するホウ素原子、 R^c 、及び R^c が結合する窒素原子が共に環を形成してもよい。 R^e が酸素原子であり、かつ環を形成していない場合には、 R^e は置換基を有する酸素原子であり、 R^f が酸素原子であり、かつ環を形成していない場合には、 R^f は置換基を有する酸素原子である。]

のいずれかで表される化合物、並びに下記一般式（ II_3 ）及び一般式（ II_4 ）：

【化 3】



〔式 (II₃) 及び (II₄) 中、

R^h 及び R^i は、 R^h が結合する窒素原子及び R^i が結合する炭素原子と共に、芳香族 5 員環、芳香族 6 員環、又は 2～3 個の 5 員環若しくは 6 員環が縮合してなる縮合芳香環を形成し；

R^j 及び R^k は、 R^j が結合する窒素原子及び R^k が結合する炭素原子と共に、芳香族 5 員環、芳香族 6 員環、又は 2～3 個の 5 員環若しくは 6 員環が縮合してなる縮合芳香環を形成し；

R^l 、 R^m 、 R^n 、及び R^o は、互いに独立して、ハロゲン原子、 C_{1-20} アルキル基、 C_{1-20} アルコキシ基、アリール基、又はヘテロアリール基を表し；

R^p 及び R^q は、互いに独立して、水素原子、ハロゲン原子、 C_{1-20} アルキル基、 C_{1-20} アルコキシ基、アリール基、又はヘテロアリール基を表し；

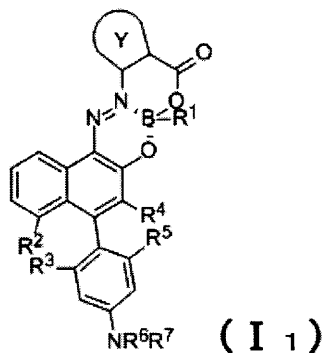
R^r 及び R^s は、互いに独立して、水素原子、又は電子求引性基を表す。〕

のいずれかで表される化合物からなる群より選択される 1 種又は 2 種以上の化合物である樹脂組成物。

【請求項 2】

前記近赤外蛍光材料が、下記一般式 (I₁)：

【化 4】



〔式 (I₁) 中、

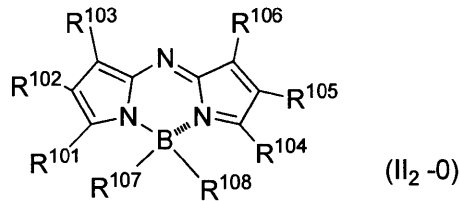
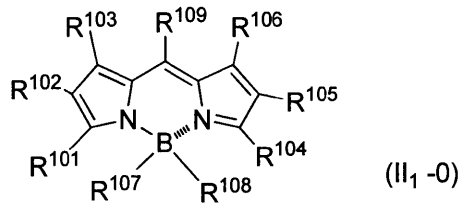
Y は置換基を有していてもよいアリール基、又は置換基を有していてもよいヘテロアリール基を示し、 $R^1 \sim R^7$ は前記式 (I) 中の $R^1 \sim R^7$ と同義を示す。〕

で表される化合物を含有する、請求項 1 に記載の樹脂組成物。

【請求項 3】

前記近赤外蛍光材料が、下記一般式 (II₁₋₀) 及び一般式 (II₂₋₀)：

【化 5】



[式 (II₁-0) 及び (II₂-0) 中、

R¹⁰¹、R¹⁰²、及び R¹⁰³ は、

(p1) 互いに独立して、水素原子、ハロゲン原子、C₁₋₂₀ アルキル基、C₁₋₂₀ アルコキシ基、アリール基、又はヘテロアリール基を表す、

(p2) R¹⁰¹ 及び R¹⁰² は共に、芳香族 5 員環又は芳香族 6 員環を形成し、R¹⁰³ は水素原子、ハロゲン原子、C₁₋₂₀ アルキル基、C₁₋₂₀ アルコキシ基、アリール基、又はヘテロアリール基を表す、又は

(p3) R¹⁰² 及び R¹⁰³ は共に、芳香族 5 員環又は芳香族 6 員環を形成し、R¹⁰¹ は水素原子、ハロゲン原子、C₁₋₂₀ アルキル基、C₁₋₂₀ アルコキシ基、アリール基、又はヘテロアリール基を表す。

R¹⁰⁴、R¹⁰⁵、及び R¹⁰⁶ は、

(q1) 互いに独立して、水素原子、ハロゲン原子、C₁₋₂₀ アルキル基、C₁₋₂₀ アルコキシ基、アリール基、又はヘテロアリール基を表す、

(q2) R¹⁰⁴ 及び R¹⁰⁵ は共に、芳香族 5 員環又は芳香族 6 員環を形成し、R¹⁰⁶ は水素原子、ハロゲン原子、C₁₋₂₀ アルキル基、C₁₋₂₀ アルコキシ基、アリール基、又はヘテロアリール基を表す、又は

(q3) R¹⁰⁵ 及び R¹⁰⁶ は共に、芳香族 5 員環又は芳香族 6 員環を形成し、R¹⁰⁴ は水素原子、ハロゲン原子、C₁₋₂₀ アルキル基、C₁₋₂₀ アルコキシ基、アリール基、又はヘテロアリール基を表す。

R¹⁰⁷ 及び R¹⁰⁸ は、ハロゲン原子又は酸素原子を表し；

R¹⁰⁹ は、水素原子、又は電子求引性基を表す。

ただし、R¹⁰⁷ 及び R¹⁰⁸ が酸素原子の場合には、R¹⁰⁷、R¹⁰⁷ と結合するホウ素原子、ホウ素原子が結合する窒素原子、R¹⁰¹、及び R¹⁰¹ と結合する炭素原子が共に環を形成してもよく、R¹⁰⁸、R¹⁰⁸ と結合するホウ素原子、ホウ素原子が結合する窒素原子、R¹⁰⁴、及び R¹⁰⁴ と結合する炭素原子が共に環を形成してもよい。R¹⁰⁷ が酸素原子であり、かつ環を形成していない場合には、R¹⁰⁷ は置換基を有する酸素原子であり、R¹⁰⁸ が酸素原子であり、かつ環を形成していない場合には、R¹⁰⁸ は置換基を有する酸素原子である。]

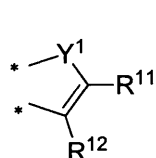
のいずれかで表される化合物からなる群より選択される 1 種又は 2 種以上の化合物を含有する、請求項 1 に記載の樹脂組成物。

【請求項 4】

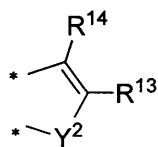
前記一般式 (II₁-0) 又は前記一般式 (II₂-0) において、R¹⁰¹ 及び R¹⁰² が環を形成し、R¹⁰⁴ 及び R¹⁰⁵ が環を形成している、又は、R¹⁰² 及び R¹⁰³ が環を形成し、R¹⁰⁵ 及び R¹⁰⁶ が環を形成しており、

前記環が、下記一般式 (C-1) ~ (C-9) ；

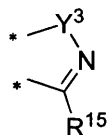
【化 6】



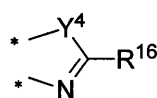
(C-1)



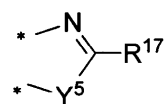
(C-2)



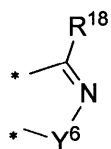
(C-3)



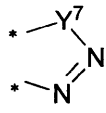
(C-4)



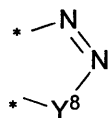
(C-5)



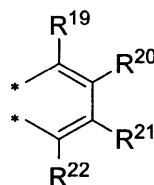
(C-6)



(C-7)



(C-8)



(C-9)

[式 (C-1) ~ (C-9) 中、

$Y^1 \sim Y^8$ は、互いに独立して硫黄原子、酸素原子、窒素原子、又はリン原子を表し、

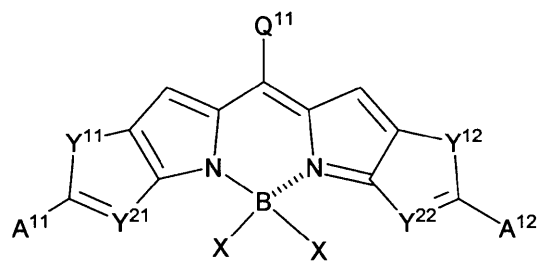
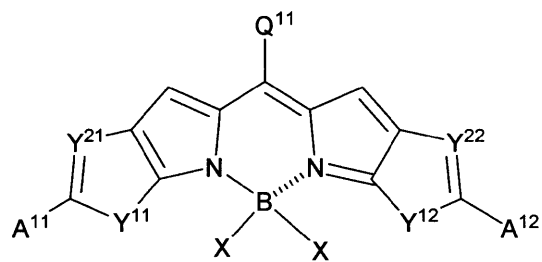
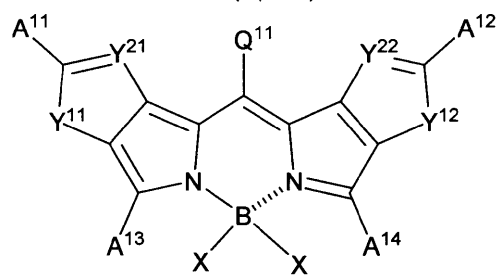
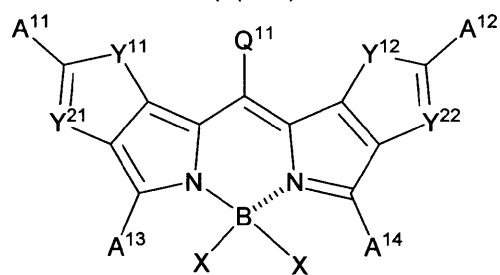
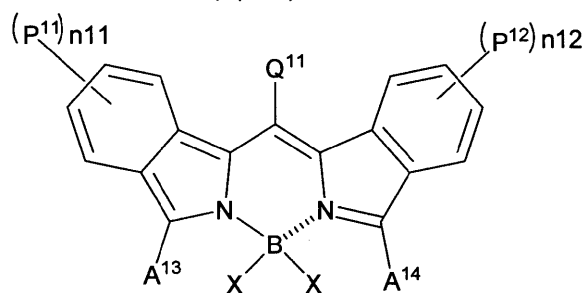
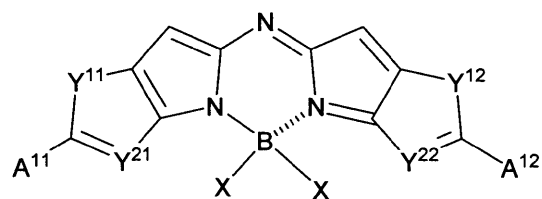
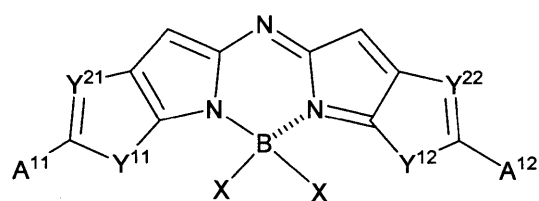
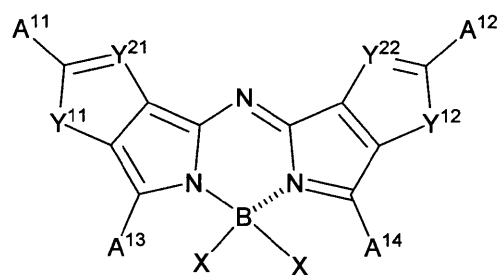
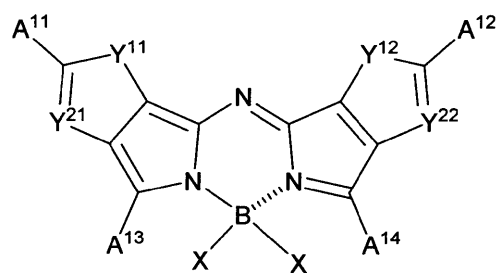
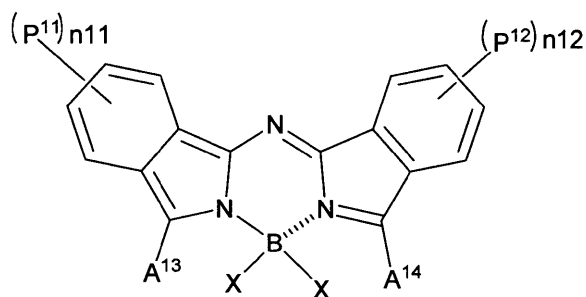
$R^{11} \sim R^{22}$ は、互いに独立して水素原子、無置換のアリール基、置換基を有するアリール基、無置換のヘテロアリール基、又は置換基を有するヘテロアリール基を表す。]

のいずれかで表される、請求項 3 に記載の樹脂組成物。

【請求項 5】

前記近赤外蛍光色素が、下記一般式 (I I₁-1-1)、(I I₁-1-2)、(I I₁-2-1)、(I I₁-2-2)、(I I₁-2-6)、(I I₂-1-1)、(I I₂-1-2)、(I I₂-2-1)、(I I₂-2-2)、及び (I I₂-2-6) :

【化 7】

(II₁-1-1)(II₁-1-2)(II₁-2-1)(II₁-2-2)(II₁-2-6)(II₂-1-1)(II₂-1-2)(II₂-2-1)(II₂-2-2)(II₂-2-6)

[上記式中、

Y¹¹及びY¹²は、互いに独立して、酸素原子又は硫黄原子を表し；Y²¹及びY²²は、互いに独立して、炭素原子又は窒素原子を表し；Q¹¹は、水素原子又は電子求引性基を表し；Xは、互いに独立して、ハロゲン原子、C₁ - C₂₀アルコキシ基、アリールオキシ基、又はアシルオキシ基を表し；

$P^{11} \sim P^{12}$ は、互いに独立して、ハロゲン原子、 C_{1-20} アルキル基、 C_{1-20} アルコキシ基、アミノ基、モノアルキルアミノ基、ジアルキルアミノ基を表し；

$A^{11} \sim A^{14}$ は、互いに独立して、ハロゲン原子、 C_{1-20} アルキル基、 C_{1-20} アルコキシ基、アミノ基、モノアルキルアミノ基、及びジアルキルアミノ基からなる群より選択される 1～3 個の置換基を有していてもよいフェニル基、又はハロゲン原子、 C_{1-20} アルキル基、 C_{1-20} アルコキシ基、アミノ基、モノアルキルアミノ基、及びジアルキルアミノ基からなる群より選択される 1～3 個の置換基を有していてもよいヘテロアリール基を表し；

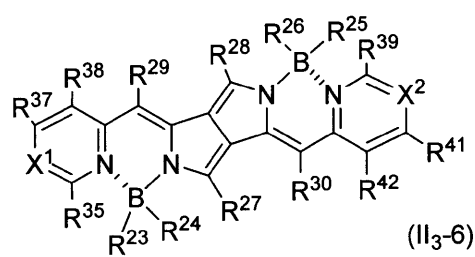
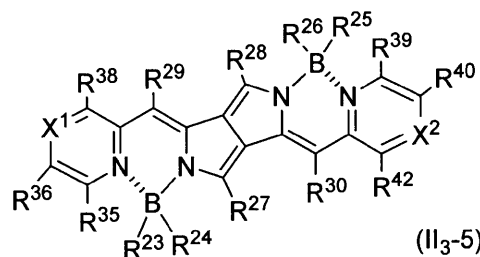
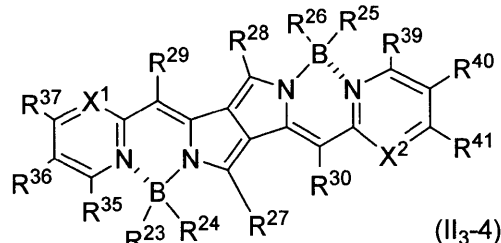
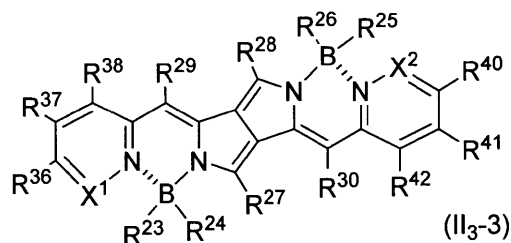
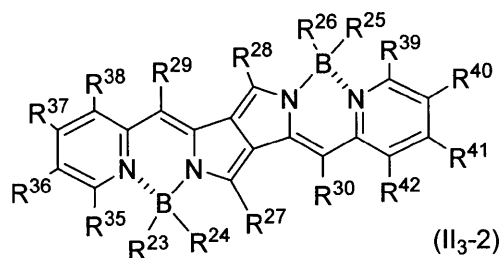
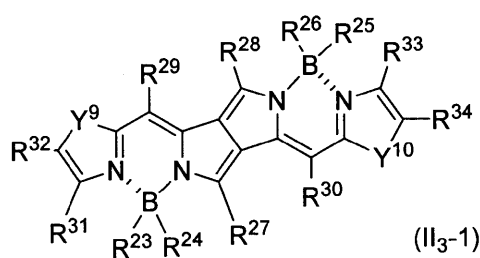
$n_{11} \sim n_{12}$ は、互いに独立して、0～3 の整数を表す。]

のいずれかで表される化合物からなる群より選択される少なくとも 1 種又は 2 種以上の化合物を含有する、請求項 4 に記載の樹脂組成物。

【請求項 6】

前記近赤外蛍光材料が、下記一般式 (II₃-1) ～ (II₃-6)：

【化 8】



[式 (II₃-1) ～ (II₃-6) 中、

X^1 及び X^2 は、互いに独立して窒素原子又はリン原子を表し；

Y^9 及び Y^{10} は、互いに独立して硫黄原子、酸素原子、窒素原子、又はリン原子を表し；

R^{23} 、 R^{24} 、 R^{25} 、及び R^{26} は、互いに独立して、ハロゲン原子、 C_{1-20} アルキル基、 C_{1-20} アルコキシ基、アリール基、又はヘテロアリール基を表し；

R^{27} 及び R^{28} は、互いに独立して、水素原子、ハロゲン原子、 C_{1-20} アルキル基、 C_{1-20} アルコキシ基、アリール基、又はヘテロアリール基を表し；

R^{29} 及び R^{30} は、互いに独立して、水素原子、又は電子求引性基を表し；

R^{31} 及び R^{32} は、

(p4) 互いに独立して、水素原子、ハロゲン原子、 C_{1-20} アルキル基、 C_{1-20} アルコキシ基、アリール基、又はヘテロアリール基を表す、又は

(p5) R^{31} 及び R^{32} は共に、置換基を有していてもよい芳香族 5 員環又は置換基を有していてもよい芳香族 6 員環を形成する；

R^{33} 及び R^{34} は、

(q4) 互いに独立して、水素原子、ハロゲン原子、 C_{1-20} アルキル基、 C_{1-20} アルコキシ基、アリール基、又はヘテロアリール基を表す、又は

(q5) R^{33} 及び R^{34} は共に、置換基を有していてもよい芳香族5員環又は置換基を有していてもよい芳香族6員環を形成する；

R^{35} 、 R^{36} 、 R^{37} 、及び R^{38} は、

(p6) 互いに独立して、水素原子、ハロゲン原子、 C_{1-20} アルキル基、 C_{1-20} アルコキシ基、アリール基、又はヘテロアリール基を表す、

(p7) R^{35} 及び R^{36} は共に、置換基を有していてもよい芳香族5員環又は置換基を有していてもよい芳香族6員環を形成し、 R^{37} 及び R^{38} は互いに独立して、水素原子、ハロゲン原子、 C_{1-20} アルキル基、 C_{1-20} アルコキシ基、アリール基、又はヘテロアリール基を表す、

(p8) R^{36} 及び R^{37} は共に、置換基を有していてもよい芳香族5員環又は置換基を有していてもよい芳香族6員環を形成し、 R^{35} 及び R^{38} は互いに独立して、水素原子、ハロゲン原子、 C_{1-20} アルキル基、 C_{1-20} アルコキシ基、アリール基、又はヘテロアリール基を表す、又は

(p9) R^{37} 及び R^{38} は共に、置換基を有していてもよい芳香族5員環又は置換基を有していてもよい芳香族6員環を形成し、 R^{35} 及び R^{36} は互いに独立して、水素原子、ハロゲン原子、 C_{1-20} アルキル基、 C_{1-20} アルコキシ基、アリール基、又はヘテロアリール基を表す；

R^{39} 、 R^{40} 、 R^{41} 、及び R^{42} は、

(q6) 互いに独立して、水素原子、ハロゲン原子、 C_{1-20} アルキル基、 C_{1-20} アルコキシ基、アリール基、又はヘテロアリール基を表す、

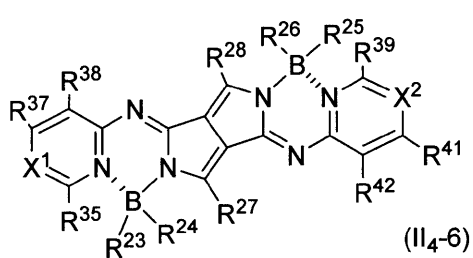
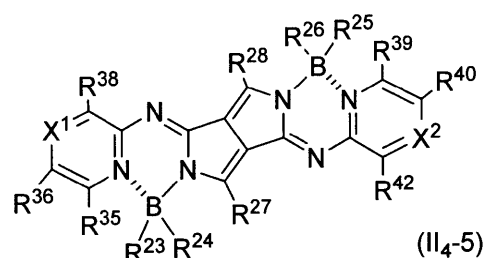
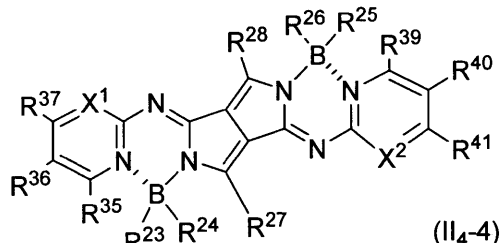
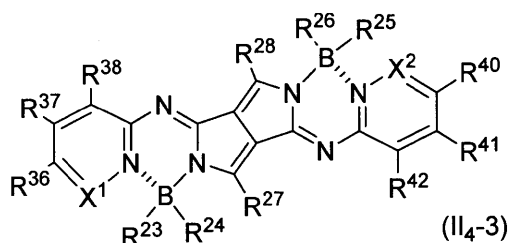
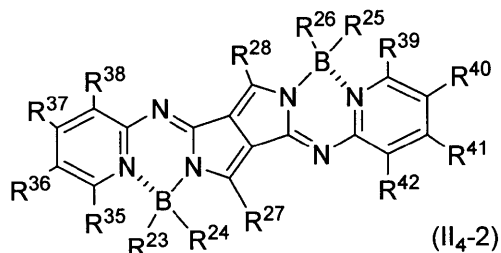
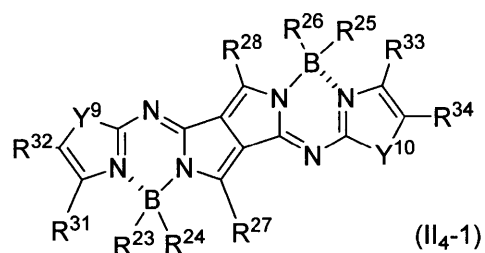
(q7) R^{39} 及び R^{40} は共に、置換基を有していてもよい芳香族5員環又は置換基を有していてもよい芳香族6員環を形成し、 R^{41} 及び R^{42} は互いに独立して、水素原子、ハロゲン原子、 C_{1-20} アルキル基、 C_{1-20} アルコキシ基、アリール基、又はヘテロアリール基を表す、

(q8) R^{40} 及び R^{41} は共に、置換基を有していてもよい芳香族5員環又は置換基を有していてもよい芳香族6員環を形成し、 R^{39} 及び R^{42} は互いに独立して、水素原子、ハロゲン原子、 C_{1-20} アルキル基、 C_{1-20} アルコキシ基、アリール基、又はヘテロアリール基を表す、又は

(q9) R^{41} 及び R^{42} は共に、置換基を有していてもよい芳香族5員環又は置換基を有していてもよい芳香族6員環を形成し、 R^{39} 及び R^{40} は互いに独立して、水素原子、ハロゲン原子、 C_{1-20} アルキル基、 C_{1-20} アルコキシ基、アリール基、又はヘテロアリール基を表す。]

のいずれかで表される化合物、及び下記一般式 (II₄-1) ~ (II₄-6)：

【化 9】



[式 (II₄-1) ~ (II₄-6) 中、

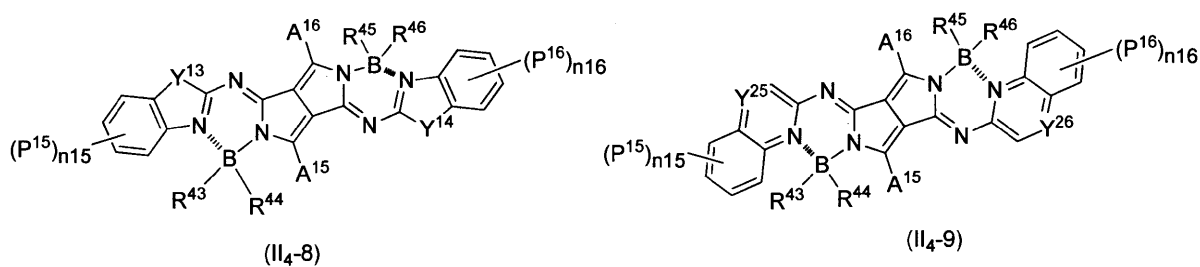
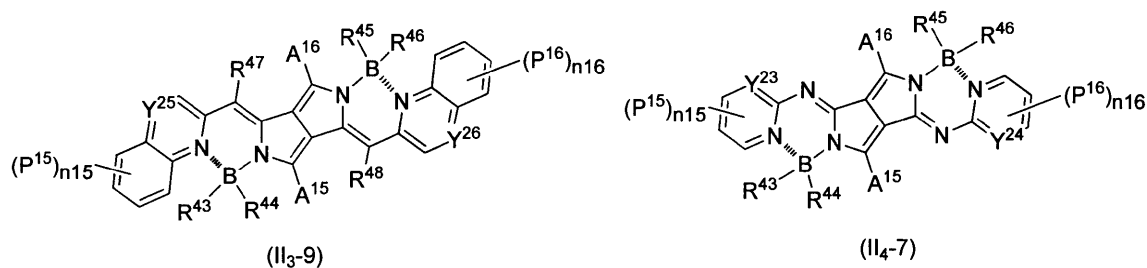
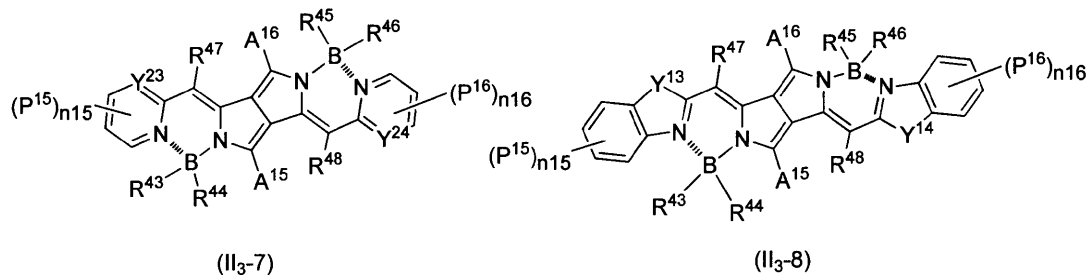
X¹ 及び X²、Y⁹ 及び Y¹⁰、R²³ ~ R²⁸、R³¹ ~ R⁴² は、上記式 (II₃-1) ~ (II₃-6) と同じである。]

のいずれかで表される化合物からなる群より選択される 1 種又は 2 種以上の化合物を含有する、請求項 1 に記載の樹脂組成物。

【請求項 7】

前記近赤外蛍光材料が、下記一般式 (II₃-7) ~ (II₃-9) 及び一般式 (II₄-7) ~ (II₄-9) :

【化 10】



[式中、 Y^{13} 及び Y^{14} は、互いに独立して、酸素原子又は硫黄原子を表し；

Y^{23} 及び Y^{24} は、互いに独立して、炭素原子又は窒素原子を表し；

Y^{25} 及び Y^{26} は、互いに独立して、炭素原子又は窒素原子を表し；

R^{47} 及び R^{48} は、互いに独立して、水素原子又は電子求引性基を表し；

R^{43} 、 R^{44} 、 R^{45} 、及び R^{46} は、ハロゲン原子又は置換基を有していてもよいアリール基を表し；

A^{15} 及び A^{16} は、互いに独立して、水素原子、ハロゲン原子、 C_{1-20} アルキル基、 C_{1-20} アルコキシ基、アミノ基、モノアルキルアミノ基、及びジアルキルアミノ基からなる群より選択される 1～3 個の置換基を有していてもよいフェニル基を表し；

P^{15} 及び P^{16} は、互いに独立して、ハロゲン原子、 C_{1-20} アルキル基、 C_{1-20} アルコキシ基、アミノ基、モノアルキルアミノ基、ジアルキルアミノ基を表し；

$n15$ 及び $n16$ は、互いに独立して、0～3 の整数を表す。]

で表される化合物からなる群より選択される 1 種又は 2 種以上の化合物を含有する、請求項 6 に記載の樹脂組成物。

【請求項 8】

前記放射線不透過性物質が硫酸バリウム、酸化ビスマス、次炭酸ビスマス、炭酸カルシウム、水酸化アルミニウム、タングステン、酸化亜鉛、酸化ジルコニウム、ジルコニウム、チタン、白金、次硝酸ビスマス、及びビスマスからなる群より選択される 1 種以上である、請求項 1～7 のいずれか一項に記載の樹脂組成物。

【請求項 9】

前記近赤外蛍光材料の含有量が 0.001～0.5 質量%である、請求項 1～8 のいずれか一項に記載の樹脂組成物。

【請求項 10】

前記樹脂が熱可塑性樹脂である、請求項 1～9 のいずれか一項に記載の樹脂組成物。

【請求項 11】

前記樹脂が、ウレタン系樹脂、オレフィン系樹脂、ポリスチレン系樹脂、ポリエステル系樹脂、及び塩化ビニル系樹脂からなる群より選択される１種以上である、請求項１～１０のいずれか一項に記載の樹脂組成物。

【請求項１２】

前記近赤外蛍光材料及び前記放射線不透過性物質が前記樹脂に分散されてなる、請求項１～１１のいずれか一項に記載の樹脂組成物。

【請求項１３】

医療用材料として用いられる、請求項１～１２のいずれか一項に記載の樹脂組成物。

【請求項１４】

請求項１～１３のいずれか一項に記載の樹脂組成物を加工して得られる成形体。

【請求項１５】

少なくとも一部が、患者の体内で使用される医療用具である、請求項１４に記載の成形体。

【請求項１６】

請求項１～１３のいずれか一項に記載の樹脂組成物の製造方法であって、

前記樹脂に前記近赤外蛍光材料及び前記放射線不透過性物質を溶融混練する工程を含む、製造方法。

【手続補正２】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】００１８

【補正方法】変更

【補正の内容】

【００１８】

本発明に係る樹脂組成物、成形体、及び樹脂組成物の製造方法は、下記〔１〕～〔１６〕である。

〔１〕 近赤外蛍光材料、放射線不透過性物質、及び樹脂を含有し、
前記近赤外蛍光材料が、下記一般式（Ｉ）：

【手続補正３】

【補正対象書類名】明細書

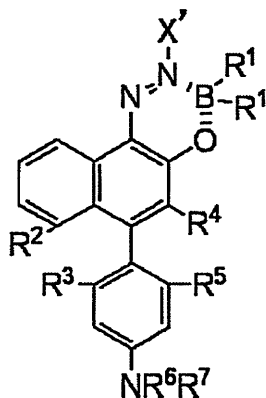
【補正対象項目名】００１９

【補正方法】変更

【補正の内容】

【００１９】

【化１】



(I)

【手続補正４】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】００２０

【補正方法】変更

【補正の内容】

【 0 0 2 0 】

〔式 (I) 中、

X' は、置換基を有していてもよいアリール基、又は置換基を有していてもよいヘテロアリール基を示し；

R^1 は、 C_{1-12} アルキル基、アリール基、アリールエテニル基、アリールエチニル基、 C_{1-12} アルコキシ基、アリールオキシ基又はハロゲン原子を示すか、或いは、一方の R^1 は、上記 X' と結合している $-O-C(=O)-$ 基を示し、6員環を形成するものであり、且つ他方の R^1 は、独立して C_{1-12} アルキル基、アリール基、アリールエテニル基、アリールエチニル基、 C_{1-12} アルコキシ基、アリールオキシ基又はハロゲン原子を示し；

R^2 と R^3 は、一体となって $-O-$ 基、 $-S-$ 基もしくは $-N(R^8)-$ 基（ここで、 R^8 は水素原子又は C_{1-12} アルキル基を示す）を形成し、且つ R^4 と R^5 は水素原子基を示すか、或いは、 R^4 と R^5 は、一体となって $-O-$ 基、 $-S-$ 基、もしくは $-N(R^8)-$ 基（ R^8 は上記と同義を示す）を形成し、且つ R^2 と R^3 は水素原子基を示し；

R^6 と R^7 は、独立して水素原子基、 C_{1-12} アルキル基、置換基を有していてもよいアリール基、又は置換基を有していてもよいヘテロアリール基を示し；

上記アリール基又はヘテロアリール基の置換基は、 C_{1-12} アルキル基、モノ（ C_{1-12} アルキル）アミノ基、ジ（ C_{1-12} アルキル）アミノ基、水酸基及び C_{1-12} アルコキシ基からなる群より選択される 1 種以上の基を示す。〕

で表される化合物、下記一般式 (I I ₁) 及び一般式 (I I ₂) ；

【 手 続 補 正 5 】

【 補 正 対 象 書 類 名 】 明 細 書

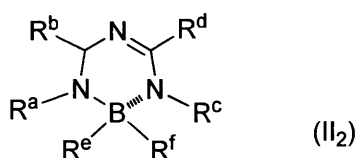
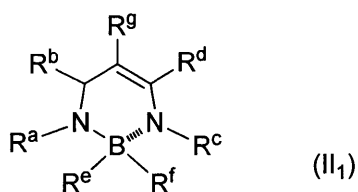
【 補 正 対 象 項 目 名 】 0 0 2 1

【 補 正 方 法 】 変 更

【 補 正 の 内 容 】

【 0 0 2 1 】

【 化 2 】



【 手 続 補 正 6 】

【 補 正 対 象 書 類 名 】 明 細 書

【 補 正 対 象 項 目 名 】 0 0 2 2

【 補 正 方 法 】 変 更

【 補 正 の 内 容 】

【 0 0 2 2 】

〔式 (I I ₁) 及び (I I ₂) 中、

R^a 及び R^b は、 R^a が結合する窒素原子及び R^b が結合する炭素原子と共に、芳香族 5 員環、芳香族 6 員環、又は 2 ～ 3 個の 5 員環若しくは 6 員環が縮合してなる縮合芳香環を形成し；

R^c 及び R^d は、 R^c が結合する窒素原子及び R^d が結合する炭素原子と共に、芳香族 5 員環、芳香族 6 員環、又は 2 ～ 3 個の 5 員環若しくは 6 員環が縮合してなる縮合芳香環を形成し；

R^e 及び R^f は、ハロゲン原子又は酸素原子を表し；

R^g は、水素原子、又は電子求引性基を表す。

ただし、 R^e 及び R^f が酸素原子の場合には、 R^e 、 R^e と結合するホウ素原子、 R^a 、及び R^a が結合する窒素原子が共に環を形成してもよく、 R^f 、 R^f と結合するホウ素原子、 R^c 、及び R^c が結合する窒素原子が共に環を形成してもよい。 R^e が酸素原子であり、かつ環を形成していない場合には、 R^e は置換基を有する酸素原子であり、 R^f が酸素原子であり、かつ環を形成していない場合には、 R^f は置換基を有する酸素原子である。]

のいずれかで表される化合物、並びに下記一般式 (II₃) 及び一般式 (II₄)：

【手続補正 7】

【補正対象書類名】明細書

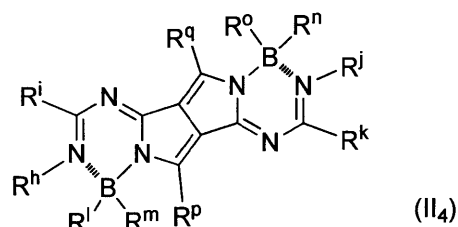
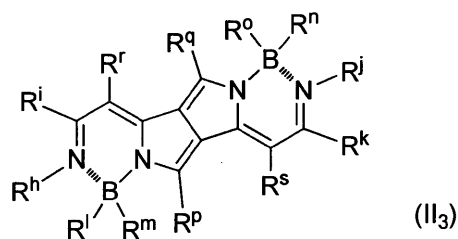
【補正対象項目名】0023

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0023】

【化 3】



【手続補正 8】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0024

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0024】

[式 (II₃) 及び (II₄) 中、

R^h 及び R^i は、 R^h が結合する窒素原子及び R^i が結合する炭素原子と共に、芳香族 5 員環、芳香族 6 員環、又は 2～3 個の 5 員環若しくは 6 員環が縮合してなる縮合芳香環を形成し；

R^j 及び R^k は、 R^j が結合する窒素原子及び R^k が結合する炭素原子と共に、芳香族 5 員環、芳香族 6 員環、又は 2～3 個の 5 員環若しくは 6 員環が縮合してなる縮合芳香環を形成し；

R^l 、 R^m 、 R^n 、及び R^o は、互いに独立して、ハロゲン原子、C₁₋₂₀ アルキル基、C₁₋₂₀ アルコキシ基、アリール基、又はヘテロアリール基を表し；

R^p 及び R^q は、互いに独立して、水素原子、ハロゲン原子、C₁₋₂₀ アルキル基、C₁₋₂₀ アルコキシ基、アリール基、又はヘテロアリール基を表し；

R^r 及び R^s は、互いに独立して、水素原子、又は電子求引性基を表す。]

のいずれかで表される化合物からなる群より選択される 1 種又は 2 種以上の化合物である、樹脂組成物。

[2] 前記近赤外蛍光材料が、下記一般式 (I₁) :

【手続補正 9】

【補正対象書類名】明細書

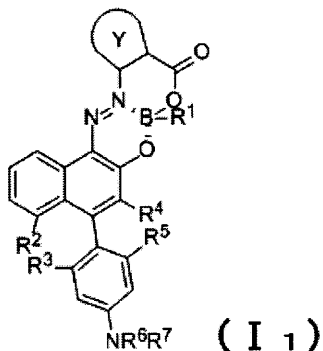
【補正対象項目名】0025

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0025】

【化 4】



【手続補正 10】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0026

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0026】

[式 (I₁) 中、

Yは置換基を有していてもよいアリール基、又は置換基を有していてもよいヘテロアリール基を示し、R¹～R⁷は前記式 (I) 中のR¹～R⁷と同義を示す。]

で表される化合物を含有する、前記 [1] の樹脂組成物。

[3] 前記近赤外蛍光材料が、下記一般式 (I I₁-0) 及び一般式 (I I₂-0) :

【手続補正 11】

【補正対象書類名】明細書

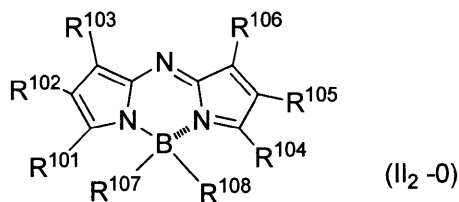
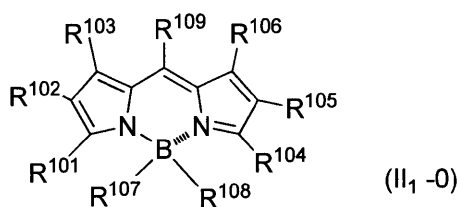
【補正対象項目名】0027

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0027】

【化 5】



【手続補正 12】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】 0028

【補正方法】 変更

【補正の内容】

【0028】

[式 (I I₁ - 0) 及び (I I₂ - 0) 中、

R¹⁰¹、R¹⁰²、及び R¹⁰³ は、

(p1) 互いに独立して、水素原子、ハロゲン原子、C₁₋₂₀ アルキル基、C₁₋₂₀ アルコキシ基、アリール基、又はヘテロアリール基を表す、

(p2) R¹⁰¹ 及び R¹⁰² は共に、芳香族 5 員環又は芳香族 6 員環を形成し、R¹⁰³ は水素原子、ハロゲン原子、C₁₋₂₀ アルキル基、C₁₋₂₀ アルコキシ基、アリール基、又はヘテロアリール基を表す、又は

(p3) R¹⁰² 及び R¹⁰³ は共に、芳香族 5 員環又は芳香族 6 員環を形成し、R¹⁰¹ は水素原子、ハロゲン原子、C₁₋₂₀ アルキル基、C₁₋₂₀ アルコキシ基、アリール基、又はヘテロアリール基を表す。

R¹⁰⁴、R¹⁰⁵、及び R¹⁰⁶ は、

(q1) 互いに独立して、水素原子、ハロゲン原子、C₁₋₂₀ アルキル基、C₁₋₂₀ アルコキシ基、アリール基、又はヘテロアリール基を表す、

(q2) R¹⁰⁴ 及び R¹⁰⁵ は共に、芳香族 5 員環又は芳香族 6 員環を形成し、R¹⁰⁶ は水素原子、ハロゲン原子、C₁₋₂₀ アルキル基、C₁₋₂₀ アルコキシ基、アリール基、又はヘテロアリール基を表す、又は

(q3) R¹⁰⁵ 及び R¹⁰⁶ は共に、芳香族 5 員環又は芳香族 6 員環を形成し、R¹⁰⁴ は水素原子、ハロゲン原子、C₁₋₂₀ アルキル基、C₁₋₂₀ アルコキシ基、アリール基、又はヘテロアリール基を表す。

R¹⁰⁷ 及び R¹⁰⁸ は、ハロゲン原子又は酸素原子を表し；

R¹⁰⁹ は、水素原子、又は電子求引性基を表す。

ただし、R¹⁰⁷ 及び R¹⁰⁸ が酸素原子の場合には、R¹⁰⁷、R¹⁰⁷ と結合するホウ素原子、ホウ素原子が結合する窒素原子、R¹⁰¹、及び R¹⁰¹ と結合する炭素原子が共に環を形成してもよく、R¹⁰⁸、R¹⁰⁸ と結合するホウ素原子、ホウ素原子が結合する窒素原子、R¹⁰⁴、及び R¹⁰⁴ と結合する炭素原子が共に環を形成してもよい。R¹⁰⁷ が酸素原子であり、かつ環を形成していない場合には、R¹⁰⁷ は置換基を有する酸素原子であり、R¹⁰⁸ が酸素原子であり、かつ環を形成していない場合には、R¹⁰⁸ は置換基を有する酸素原子である。]

のいずれかで表される化合物からなる群より選択される 1 種又は 2 種以上の化合物を含有する、前記 [1] の樹脂組成物。

【手続補正 13】

【補正対象書類名】 明細書

【補正対象項目名】 0029

【補正方法】 変更

【補正の内容】

【0029】

[4] 前記一般式 (I I₁ - 0) 又は前記一般式 (I I₂ - 0) において、R¹⁰¹ 及び R¹⁰² が環を形成し、R¹⁰⁴ 及び R¹⁰⁵ が環を形成している、又は、R¹⁰² 及び R¹⁰³ が環を形成し、R¹⁰⁵ 及び R¹⁰⁶ が環を形成しており、

前記環が、下記一般式 (C-1) ~ (C-9) :

【手続補正 14】

【補正対象書類名】 明細書

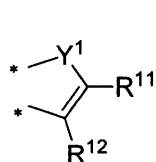
【補正対象項目名】 0030

【補正方法】 変更

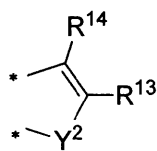
【補正の内容】

【0030】

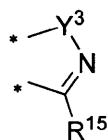
【化 6】



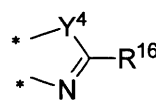
(C-1)



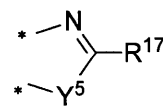
(C-2)



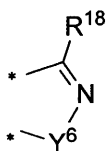
(C-3)



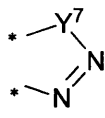
(C-4)



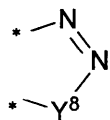
(C-5)



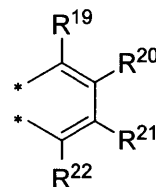
(C-6)



(C-7)



(C-8)



(C-9)

【手続補正 15】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0031

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0031】

〔式 (C-1) ~ (C-9) 中、

Y¹ ~ Y⁸ は、互いに独立して硫黄原子、酸素原子、窒素原子、又はリン原子を表し、R¹¹ ~ R²² は、互いに独立して水素原子、無置換のアリール基、置換基を有するアリール基、無置換のヘテロアリール基、又は置換基を有するヘテロアリール基を表す。〕

のいずれかで表される、前記〔3〕の樹脂組成物。

【手続補正 16】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0032

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0032】

〔5〕 前記近赤外蛍光色素が、下記一般式 (I I₁-1-1)、(I I₁-1-2)、(I I₁-2-1)、(I I₁-2-2)、(I I₁-2-6)、(I I₂-1-1)、(I I₂-1-2)、(I I₂-2-1)、(I I₂-2-2)、及び (I I₂-2-6) :

【手続補正 17】

【補正対象書類名】明細書

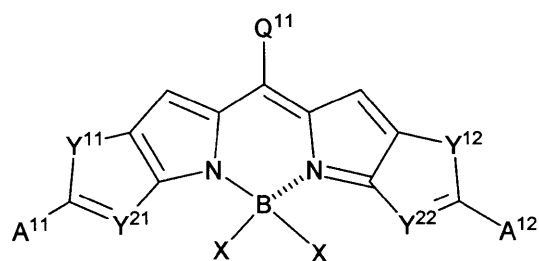
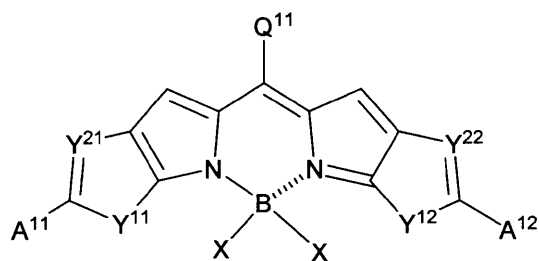
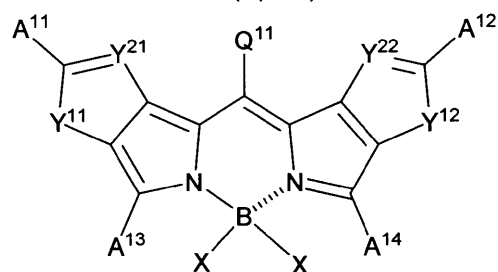
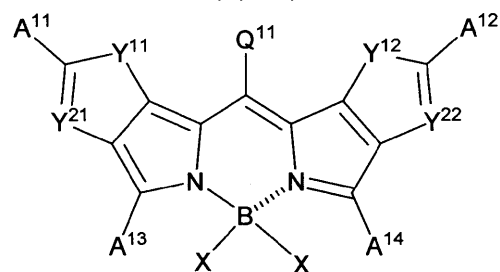
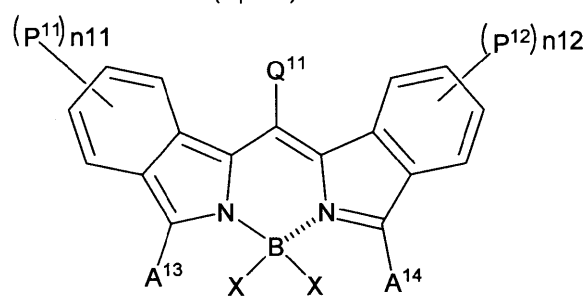
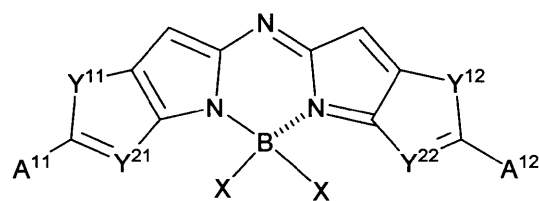
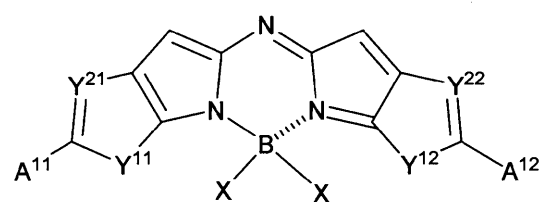
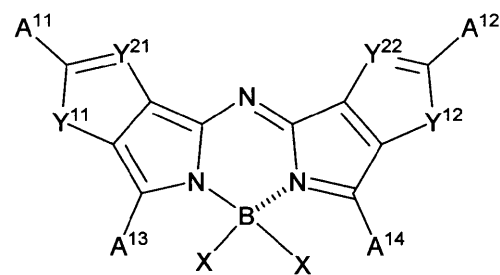
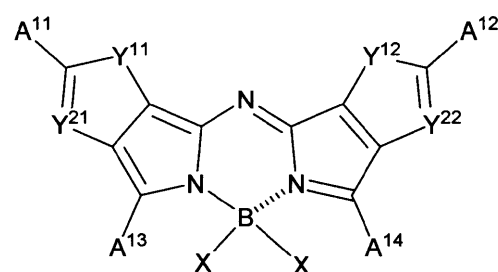
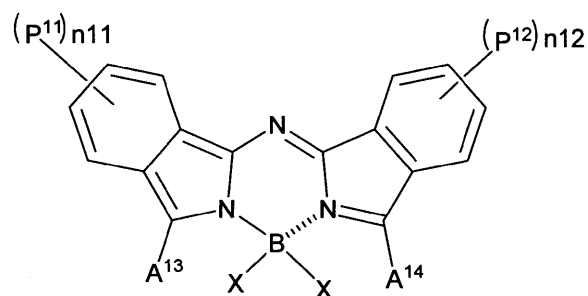
【補正対象項目名】0033

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0033】

【化 7】

(II₁-1-1)(II₁-1-2)(II₁-2-1)(II₁-2-2)(II₁-2-6)(II₂-1-1)(II₂-1-2)(II₂-2-1)(II₂-2-2)(II₂-2-6)

【手続補正 1 8】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0034

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0034】

[上記式中、

$Y^{1\ 1}$ 及び $Y^{1\ 2}$ は、互いに独立して、酸素原子又は硫黄原子を表し；

$Y^{2\ 1}$ 及び $Y^{2\ 2}$ は、互いに独立して、炭素原子又は窒素原子を表し；

$Q^{1\ 1}$ は、水素原子又は電子求引性基を表し；

X は、互いに独立して、ハロゲン原子、 C_{1-20} アルコキシ基、アリールオキシ基、又はアシルオキシ基を表し；

$P^{1\ 1} \sim P^{1\ 2}$ は、互いに独立して、ハロゲン原子、 C_{1-20} アルキル基、 C_{1-20} アルコキシ基、アミノ基、モノアルキルアミノ基、ジアルキルアミノ基を表し；

$A^{1\ 1} \sim A^{1\ 4}$ は、互いに独立して、ハロゲン原子、 C_{1-20} アルキル基、 C_{1-20} アルコキシ基、アミノ基、モノアルキルアミノ基、及びジアルキルアミノ基からなる群より選択される 1～3 個の置換基を有していてもよいフェニル基、又はハロゲン原子、 C_{1-20} アルキル基、 C_{1-20} アルコキシ基、アミノ基、モノアルキルアミノ基、及びジアルキルアミノ基からなる群より選択される 1～3 個の置換基を有していてもよいヘテロアリール基を表し；

$n_{1\ 1} \sim n_{1\ 2}$ は、互いに独立して、0～3 の整数を表す。]

のいずれかで表される化合物からなる群より選択される少なくとも 1 種又は 2 種以上の化合物を含有する、前記 [4] の樹脂組成物。

【手続補正 19】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0035

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0035】

[6] 前記近赤外蛍光材料が、下記一般式 ($II_3 - 1$) ～ ($II_3 - 6$) :

【手続補正 20】

【補正対象書類名】明細書

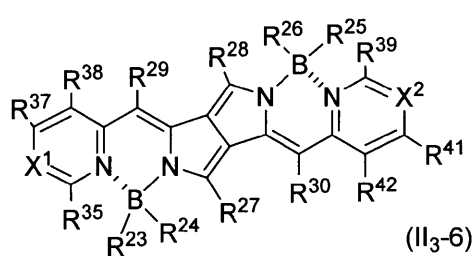
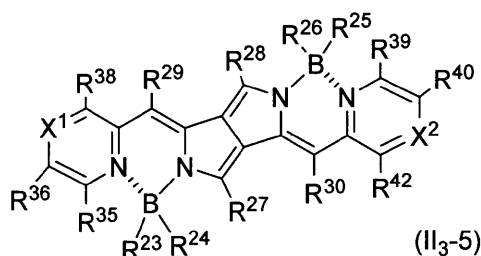
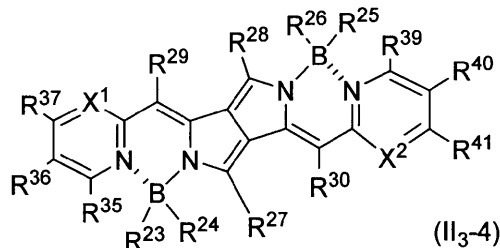
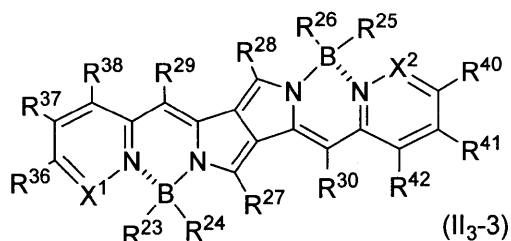
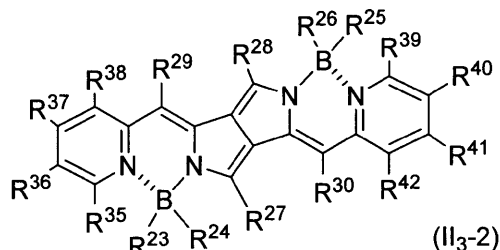
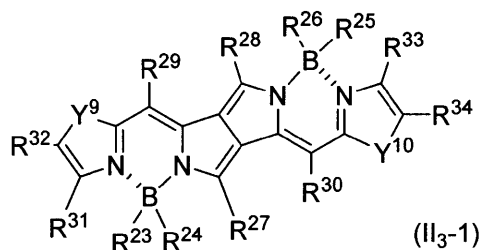
【補正対象項目名】0036

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0036】

【化 8】



【手続補正 2 1】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0 0 3 7

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0 0 3 7】

〔式 (I I₃-1) ~ (I I₃-6) 中、X¹ 及び X² は、互いに独立して窒素原子又はリン原子を表し；Y⁹ 及び Y¹⁰ は、互いに独立して硫黄原子、酸素原子、窒素原子、又はリン原子を表し；R²³、R²⁴、R²⁵、及び R²⁶ は、互いに独立して、ハロゲン原子、C₁₋₂₀ アルキル基、C₁₋₂₀ アルコキシ基、アリール基、又はヘテロアリール基を表し；R²⁷ 及び R²⁸ は、互いに独立して、水素原子、ハロゲン原子、C₁₋₂₀ アルキル基、C₁₋₂₀ アルコキシ基、アリール基、又はヘテロアリール基を表し；R²⁹ 及び R³⁰ は、互いに独立して、水素原子、又は電子求引性基を表し；R³¹ 及び R³² は、(p 4) 互いに独立して、水素原子、ハロゲン原子、C₁₋₂₀ アルキル基、C₁₋₂₀ アルコキシ基、アリール基、又はヘテロアリール基を表す、又は(p 5) R³¹ 及び R³² は共に、置換基を有していてもよい芳香族 5 員環又は置換基を有していてもよい芳香族 6 員環を形成する；R³³ 及び R³⁴ は、(q 4) 互いに独立して、水素原子、ハロゲン原子、C₁₋₂₀ アルキル基、C₁₋₂₀ アルコキシ基、アリール基、又はヘテロアリール基を表す、又は(q 5) R³³ 及び R³⁴ は共に、置換基を有していてもよい芳香族 5 員環又は置換基を有していてもよい芳香族 6 員環を形成する；R³⁵、R³⁶、R³⁷、及び R³⁸ は、(p 6) 互いに独立して、水素原子、ハロゲン原子、C₁₋₂₀ アルキル基、C₁₋₂₀

アルコキシ基、アリール基、又はヘテロアリール基を表す、

(p 7) $R^{3\ 5}$ 及び $R^{3\ 6}$ は共に、置換基を有していてもよい芳香族 5 員環又は置換基を有していてもよい芳香族 6 員環を形成し、 $R^{3\ 7}$ 及び $R^{3\ 8}$ は互いに独立して、水素原子、ハロゲン原子、 C_{1-20} アルキル基、 C_{1-20} アルコキシ基、アリール基、又はヘテロアリール基を表す、

(p 8) $R^{3\ 6}$ 及び $R^{3\ 7}$ は共に、置換基を有していてもよい芳香族 5 員環又は置換基を有していてもよい芳香族 6 員環を形成し、 $R^{3\ 5}$ 及び $R^{3\ 8}$ は互いに独立して、水素原子、ハロゲン原子、 C_{1-20} アルキル基、 C_{1-20} アルコキシ基、アリール基、又はヘテロアリール基を表す、又は

(p 9) $R^{3\ 7}$ 及び $R^{3\ 8}$ は共に、置換基を有していてもよい芳香族 5 員環又は置換基を有していてもよい芳香族 6 員環を形成し、 $R^{3\ 5}$ 及び $R^{3\ 6}$ は互いに独立して、水素原子、ハロゲン原子、 C_{1-20} アルキル基、 C_{1-20} アルコキシ基、アリール基、又はヘテロアリール基を表し；

$R^{3\ 9}$ 、 $R^{4\ 0}$ 、 $R^{4\ 1}$ 、及び $R^{4\ 2}$ は、

(q 6) 互いに独立して、水素原子、ハロゲン原子、 C_{1-20} アルキル基、 C_{1-20} アルコキシ基、アリール基、又はヘテロアリール基を表す、

(q 7) $R^{3\ 9}$ 及び $R^{4\ 0}$ は共に、置換基を有していてもよい芳香族 5 員環又は置換基を有していてもよい芳香族 6 員環を形成し、 $R^{4\ 1}$ 及び $R^{4\ 2}$ は互いに独立して、水素原子、ハロゲン原子、 C_{1-20} アルキル基、 C_{1-20} アルコキシ基、アリール基、又はヘテロアリール基を表す、

(q 8) $R^{4\ 0}$ 及び $R^{4\ 1}$ は共に、置換基を有していてもよい芳香族 5 員環又は置換基を有していてもよい芳香族 6 員環を形成し、 $R^{3\ 9}$ 及び $R^{4\ 2}$ は互いに独立して、水素原子、ハロゲン原子、 C_{1-20} アルキル基、 C_{1-20} アルコキシ基、アリール基、又はヘテロアリール基を表す、又は

(q 9) $R^{4\ 1}$ 及び $R^{4\ 2}$ は共に、置換基を有していてもよい芳香族 5 員環又は置換基を有していてもよい芳香族 6 員環を形成し、 $R^{3\ 9}$ 及び $R^{4\ 0}$ は互いに独立して、水素原子、ハロゲン原子、 C_{1-20} アルキル基、 C_{1-20} アルコキシ基、アリール基、又はヘテロアリール基を表す。]

のいずれかで表される化合物、及び下記一般式 ($II_4 - 1$) $\sim$ ($II_4 - 6$) :

【手続補正 2 2】

【補正対象書類名】明細書

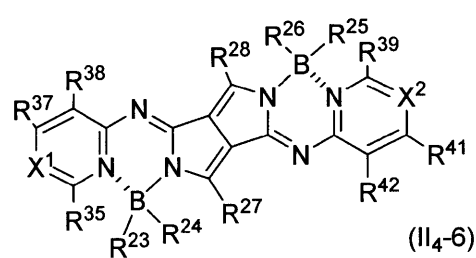
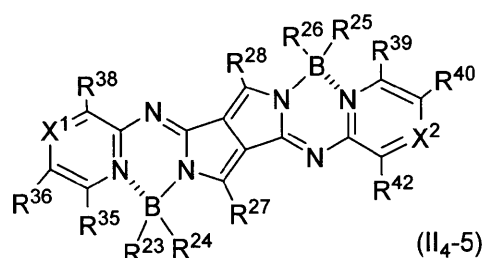
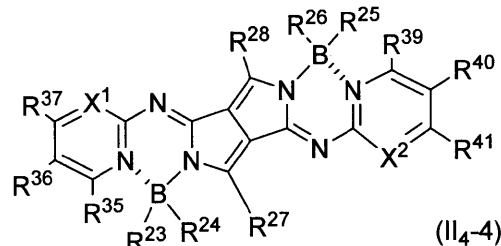
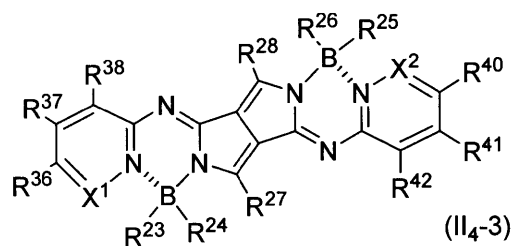
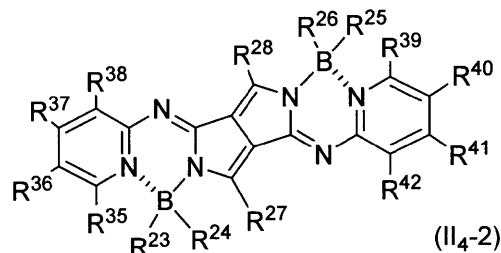
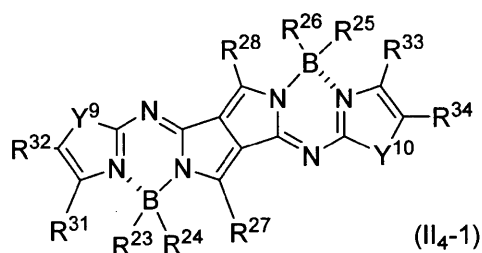
【補正対象項目名】0038

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0038】

【化 9】



【手続補正 2 3】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0039

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0039】

〔式 (II4-1) ~ (II4-6) 中、

X^1 及び X^2 、 Y^9 及び Y^{10} 、 $R^{23} \sim R^{28}$ 、 $R^{31} \sim R^{42}$ は、上記式 (II3-1) ~ (II3-6) と同じである。〕

のいずれかで表される化合物からなる群より選択される 1 種又は 2 種以上の化合物を含有する、前記 [1] の樹脂組成物。

【手続補正 2 4】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0040

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0040】

〔7〕 前記近赤外蛍光材料が、下記一般式 (II3-7) ~ (II3-9) 及び一般式 (II4-7) ~ (II4-9)：

【手続補正 2 5】

【補正対象書類名】明細書

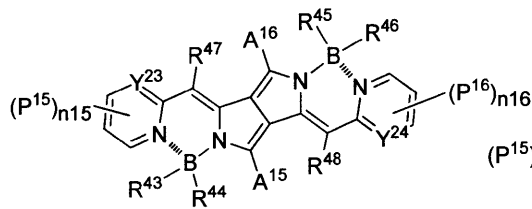
【補正対象項目名】0041

【補正方法】変更

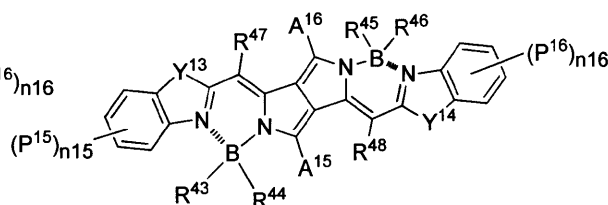
【補正の内容】

【0041】

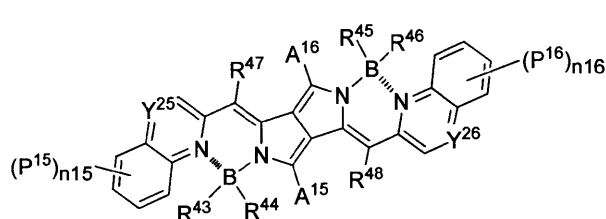
【化 10】



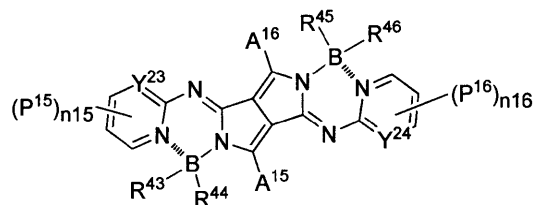
(II3-7)



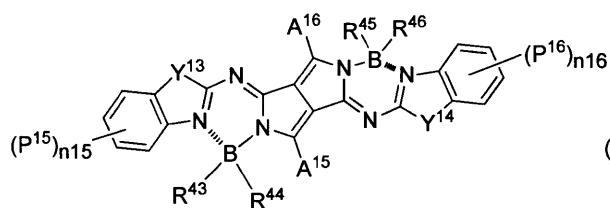
(II3-8)



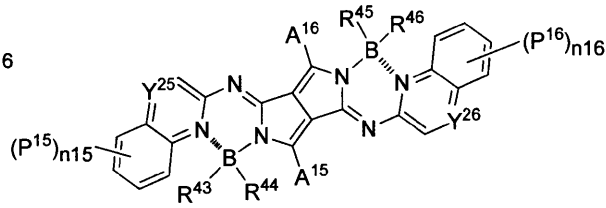
(II3-9)



(II4-7)



(II4-8)



(II4-9)

【手続補正 26】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0042

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0042】

〔式中、 Y^{13} 及び Y^{14} は、互いに独立して、酸素原子又は硫黄原子を表し；

Y^{23} 及び Y^{24} は、互いに独立して、炭素原子又は窒素原子を表し；

Y^{25} 及び Y^{26} は、互いに独立して、炭素原子又は窒素原子を表し；

R^{47} 及び R^{48} は、互いに独立して、水素原子又は電子求引性基を表し；

R^{43} 、 R^{44} 、 R^{45} 、及び R^{46} は、ハロゲン原子又は置換基を有していてもよいアリール基を表し；

A^{15} 及び A^{16} は、互いに独立して、水素原子、ハロゲン原子、 C_{1-20} アルキル基、 C_{1-20} アルコキシ基、アミノ基、モノアルキルアミノ基、及びジアルキルアミノ基からなる群より選択される 1～3 個の置換基を有していてもよいフェニル基を表し；

P^{15} 及び P^{16} は、互いに独立して、ハロゲン原子、 C_{1-20} アルキル基、 C_{1-20} アルコキシ基、アミノ基、モノアルキルアミノ基、ジアルキルアミノ基を表し；

$n15$ 及び $n16$ は、互いに独立して、0～3 の整数を表す。〕

で表される化合物からなる群より選択される 1 種又は 2 種以上の化合物を含有する、前記〔6〕の樹脂組成物。

【手続補正 27】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0043

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0043】

〔8〕 前記放射線不透過性物質が硫酸バリウム、酸化ビスマス、次炭酸ビスマス、炭酸カルシウム、水酸化アルミニウム、タングステン、酸化亜鉛、酸化ジルコニウム、ジルコニウム、チタン、白金、次硝酸ビスマス、及びビスマスからなる群より選択される1種以上である、前記〔1〕～〔7〕のいずれかの樹脂組成物。

〔9〕 前記近赤外蛍光材料の含有量が0.001～0.5質量%である、前記〔1〕～〔8〕のいずれかの樹脂組成物。

〔10〕 前記樹脂が熱可塑性樹脂である、前記〔1〕～〔9〕のいずれかの樹脂組成物。

〔11〕 前記樹脂が、ウレタン系樹脂、オレフィン系樹脂、ポリスチレン系樹脂、ポリエステル系樹脂、及び塩化ビニル系樹脂からなる群より選択される1種以上である、前記〔1〕～〔10〕のいずれかの樹脂組成物。

〔12〕 前記近赤外蛍光材料および前記放射線不透過性物質が前記樹脂に分散されてなる、前記〔1〕～〔11〕のいずれかの樹脂組成物。

〔13〕 医療用材料として用いられる、前記〔1〕～〔12〕のいずれかの樹脂組成物。

〔14〕 前記〔1〕～〔13〕のいずれかの樹脂組成物を加工して得られる成形体。

〔15〕 少なくとも一部が、患者の体内で使用される医療用具である、前記〔14〕の成形体。

〔16〕 前記〔1〕～〔13〕のいずれかの樹脂組成物の製造方法であって、

前記樹脂に前記近赤外蛍光材料および前記放射線不透過性物質を溶融混練する工程を含む、製造方法。