

【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】 令和 4 年 1 月 21 日 (2022.1.21)

【国際公開番号】 WO2019/172200

【出願番号】 特願 2020-505023 (P2020-505023)

【国際特許分類】

C 07 D 487/04 (2006.01)

C 07 D 487/06 (2006.01)

C 08 G 2/26 (2006.01)

10

【F I】

C 07 D 487/04 1 3 7

C 07 D 487/06 C S P

C 08 G 2/26

【手続補正書】

【提出日】 令和 4 年 1 月 13 日 (2022.1.13)

【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

20

【補正方法】 変更

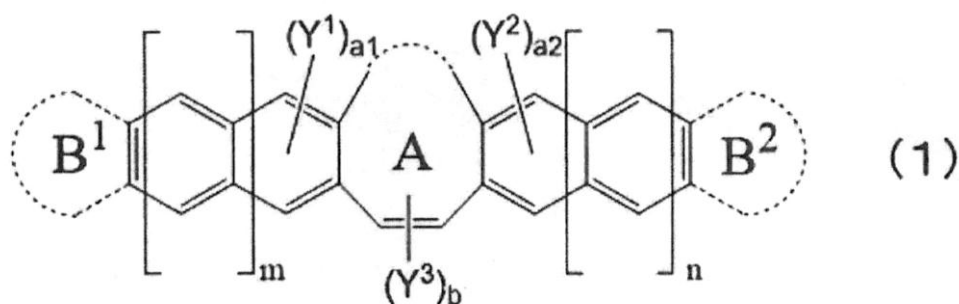
【補正の内容】

【特許請求の範囲】

【請求項 1】

下記一般式 (1) で表される化合物であって、

【化 1】



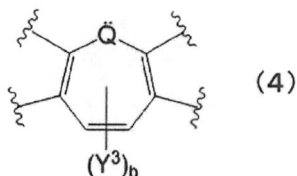
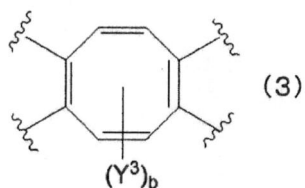
30

「一般式 (1) 中の記号は以下のとおりである。

A は、下記一般式 (3) 又は (4) で表され、A と結合するベンゼン環と共役系を形成する。

40

【化 2】



一般式 (4) において、Q は、O 原子、S 原子、Se 原子、又はアルキル基を置換基と

50

して有する N 原子、P 原子を表す。

Y 1 および Y 2 は、それぞれ独立に、ハロゲン原子、置換基を有していてもよい炭素数 1 ～ 20 の脂肪族炭化水素基、置換基を有していてもよい炭素数 6 ～ 20 のアリール基、置換基を有していてもよい炭素数 1 ～ 10 のアルコキシ基、シアノ基、環を形成する原子数が 5 ～ 8 の複素環式化合物基から選ばれる置換基を表す。置換基 Y 1、Y 2 を複数有する場合は、各置換基は互いに同じでも異なってもよい。

a 1 は前記置換基 Y 1 の数を表し、a 2 は前記置換基 Y 2 の数を表す。

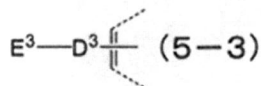
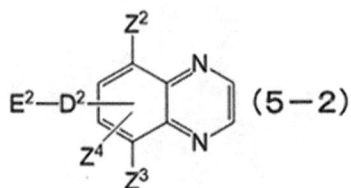
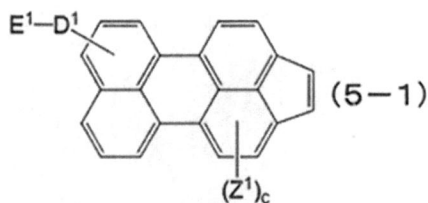
Y 3 は、ハロゲン原子、置換基を有していてもよい炭素数 1 ～ 20 のアルキル基、置換基を有していてもよい炭素数 2 ～ 20 のアルキニル基、置換基を有していてもよい炭素数 6 ～ 20 のアリール基、置換基を有していてもよい炭素数 1 ～ 10 のアルコキシ基、置換基を有していてもよい炭素数 2 ～ 20 のカルボン酸エステル基、カルボキシ基、水酸基、シアノ基から選ばれる置換基を表す。置換基 Y 3 を複数有する場合は、各置換基は互いに同一でも異なってもよい。

b は、前記置換基 Y 3 の数を表す。

m および n は、それぞれ独立に、0 以上 3 以下の整数を表す。なお、m が 1 以上 3 以下の整数の場合、Y 1 は m で規定される構造部分に置換されてもよい。同様に、n が 1 以上 3 以下の整数の場合、Y 2 は n で規定される構造部分に置換されてもよい。

B 1 および B 2 は、それぞれ独立に、下記一般式 (5-1) ～ (5-3) で表されるいずれかの構造を表す。

【化 3】



一般式 (5-1) ～ (5-3) 中の記号は以下のとおりである。

D 1、D 2 および D 3 は、凝集を阻害する部分構造を表し、以下の構造のいずれかを有する。

10

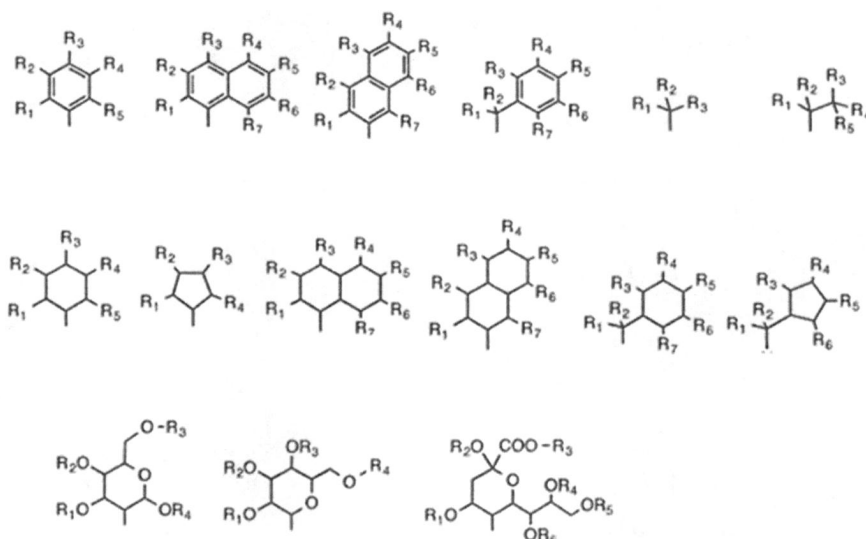
20

30

40

50

【化 4】



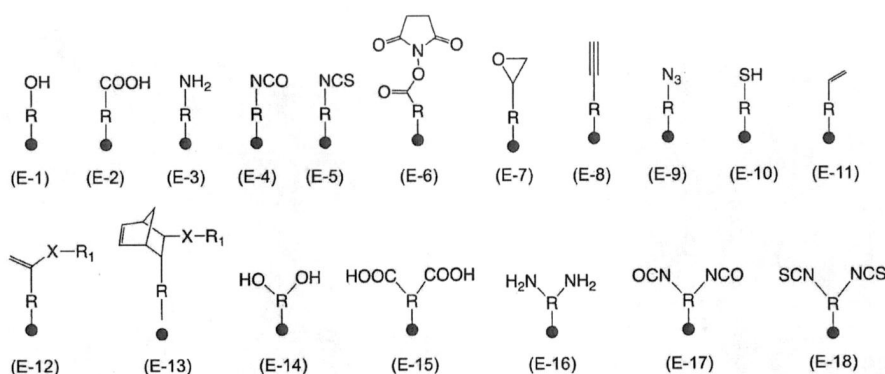
10

20

($R_1 \sim R_7$ は、H、炭素数 1 ～ 20 の直鎖状、分岐状あるいは環状アルキル基、炭素数 6 ～ 20 のアリール基、F、Cl、Br、I、 CF_3 、 CCl_3 、CN、 OCH_3 を表す。 $R_1 \sim R_7$ は同じであっても異なってもよい。)

E 1、E 2 および E 3 は、重合可能な置換基で、下記 (E-1) ～ (E-18) のいずれかである。

【化 5】



30

40

(上記式 (E-12) および (E-13) 中、X はアミド又はエステルを表すが、含まなくてもよい。上記式 (E-12) および (E-13) 中の R_1 は、D 1、D 2 又は D 3 の R_1 と同じである。また、式 (E-1) ～ (E-18) 中の R は、炭素数 1 ～ 20 の直鎖状、分岐状あるいは環状アルキル基、炭素数 6 ～ 20 のアリール基を表すが、式 (E-1) ～ (E-11) の R は含まなくてもよい。●は D 1、D 2 又は D 3 を表す。)

Z 1 は、それぞれ独立に、水素原子、ハロゲン原子、置換基を有してもよい炭素数 1 ～ 20 のアルキル基、置換基を有してもよい炭素数 2 ～ 20 のアルキニル基、置換基を有してもよい炭素数 6 ～ 20 のアリール基、置換基を有してもよい炭素数 1 ～ 10 のアルコキシ基、シアノ基から選ばれる置換基を表す。置換基 Z 1 を複数有する場合は、各置換基は互いに同じでも異なってもよい。

c は置換基 Z 1 の数を表す。

Z 2 および Z 3 は、それぞれ独立に、水素原子、ハロゲン原子、置換基を有してもよい炭素数 1 ～ 20 のアルキル基、置換基を有してもよい炭素数 2 ～ 20 のアルキニル

50

基、置換基を有していてもよい炭素数 6 ～ 20 のアリール基、置換基を有していてもよい炭素数 1 ～ 10 のアルコキシ基、シアノ基から選ばれる置換基を表す。

一般式 (5-2) 中の Z⁴ は、上記 Z² および Z³ と同じである。]

前記一般式 (1) において、

(i) 前記 B¹ および B² が、前記一般式 (5-1) および (5-2) のいずれかの構造を有する、

または、

(ii) 前記 A が前記一般式 (4) である、

化合物。

【請求項 2】

10

前記 (i) または (ii) から、前記 (ii) が選択される、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 3】

前記 (i) または (ii) から、前記 (i) が選択される、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 4】

前記一般式 (1) において、

前記 a¹ は、

m が 0 の場合、0 ～ 3 の整数を表し、

m が 1 以上 3 以下の整数の場合、0 ～ m の数に応じて Y¹ が置換可能である整数を表し、

前記 a² は、

20

n が 0 の場合、0 ～ 3 の整数を表し、

n が 1 以上 3 以下の整数の場合、0 ～ n の数に応じて Y² が置換可能である整数を表し、

前記 b は、0 以上 4 以下の整数を表す、

請求項 1 ～ 3 の何れか一項に記載の化合物。

【請求項 5】

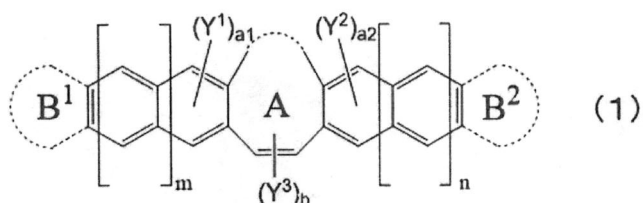
前記一般式 (1) において、前記 b が 1 以上 4 以下の整数である、請求項 1 ～ 4 の何れか一項に記載の化合物。

【請求項 6】

(iii) 請求項 1 ～ 5 のいずれか 1 項に記載の化合物、および、(iv) 下記一般式 (1) で表される化合物、
からなる群から選択した化合物を重合させてなる、高分子化合物。

30

【化 6】



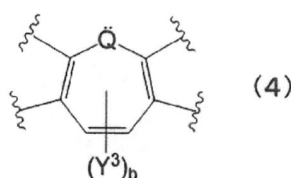
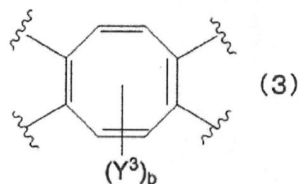
40

[一般式 (1) 中の記号は以下のとおりである。

A は、下記一般式 (3) 又は (4) で表され、A と結合するベンゼン環と共役系を形成する。

50

【化 7】



一般式 (4) において、Q は、O 原子、S 原子、Se 原子、又はアルキル基を置換基として有する N 原子、P 原子を表す。 10

Y 1 および Y 2 は、それぞれ独立に、ハロゲン原子、置換基を有していてもよい炭素数 1～20 の脂肪族炭化水素基、置換基を有していてもよい炭素数 6～20 のアリール基、置換基を有していてもよい炭素数 1～10 のアルコキシ基、シアノ基、環を形成する原子数が 5～8 の複素環式化合物基から選ばれる置換基を表す。置換基 Y 1、Y 2 を複数有する場合は、各置換基は互いに同じでも異なってもよい。

a 1 は前記置換基 Y 1 の数を表し、a 2 は前記置換基 Y 2 の数を表す。

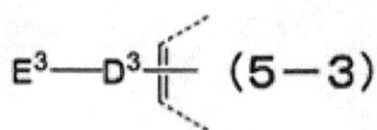
Y 3 は、ハロゲン原子、置換基を有していてもよい炭素数 1～20 のアルキル基、置換基を有していてもよい炭素数 2～20 のアルキニル基、置換基を有していてもよい炭素数 6～20 のアリール基、置換基を有していてもよい炭素数 1～10 のアルコキシ基、置換基を有していてもよい炭素数 2～20 のカルボン酸エステル基、カルボキシ基、水酸基、シアノ基から選ばれる置換基を表す。置換基 Y 3 を複数有する場合は、各置換基は互いに同一でも異なってもよい。 20

b は、前記置換基 Y 3 の数を表す。

m および n は、それぞれ独立に、0 又は 3 である。なお、m が 3 の場合、Y 1 は m で規定される構造部分に置換されてもよい。同様に、n が 3 の場合、Y 2 は n で規定される構造部分に置換されてもよい。

B 1 および B 2 は、それぞれ独立に、下記一般式 (5-3) で表される構造を表す。

【化 8】



一般式 (5-3) 中の記号は以下のとおりである。

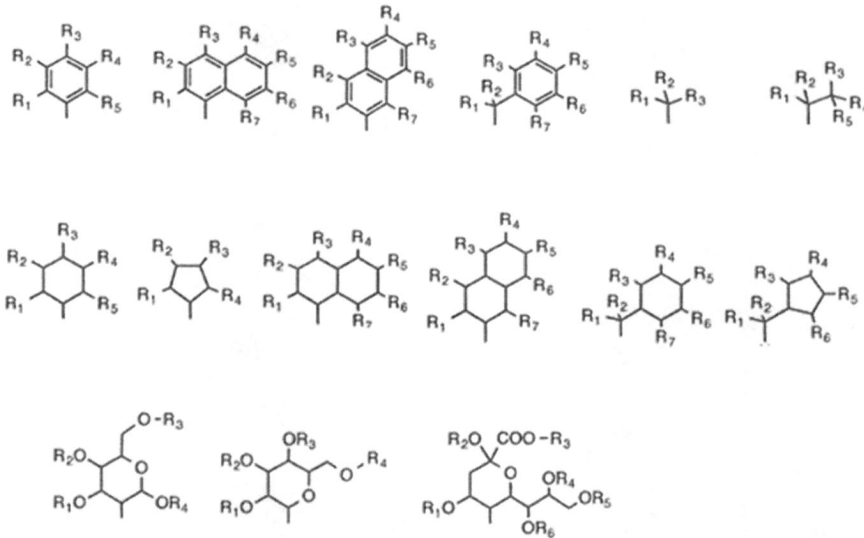
D 3 は、凝集を阻害する部分構造を表し、以下の構造のいずれかを有する。

30

40

50

【化 9】



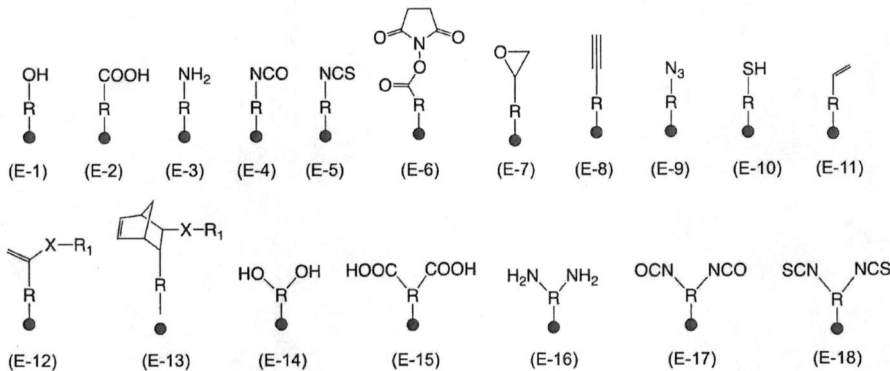
10

($R_1 \sim R_7$ は、H、炭素数 1 ～ 20 の直鎖状、分岐状あるいは環状アルキル基、炭素数 6 ～ 20 のアリール基、F、Cl、Br、I、 CF_3 、 CCl_3 、CN、 OCH_3 を表す。 $R_1 \sim R_7$ は同じであっても異なってもよい。)

20

E_3 は、重合可能な置換基で、下記 (E-1) ～ (E-18) のいずれかである。

【化 10】



30

(上記式 (E-12) および (E-13) 中、X はアミド又はエステルを表すが、含まなくてもよい。上記式 (E-12) および (E-13) 中の R_1 は、D³ の R_1 と同じである。また、式 (E-1) ～ (E-18) 中の R は、炭素数 1 ～ 20 の直鎖状、分岐状あるいは環状アルキル基、炭素数 6 ～ 20 のアリール基を表すが、式 (E-1) ～ (E-11) の R は含まなくてもよい。●は D³ を表す。)

40

【請求項 7】

請求項 2 に記載の化合物を重合させてなる、請求項 6 に記載の高分子化合物。

【請求項 8】

請求項 3 に記載の化合物を重合させてなる、請求項 6 に記載の高分子化合物。

【請求項 9】

前記 (iv) の化合物を重合させてなる、請求項 6 に記載の高分子化合物。

【請求項 10】

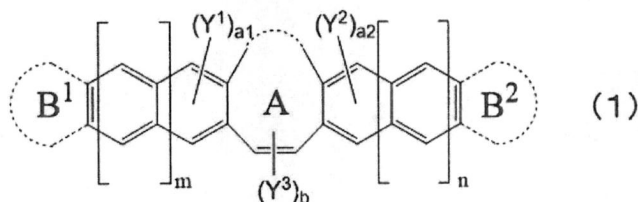
前記高分子化合物において、前記化合物がウレタン結合を介して前記高分子化合物中に結合してなる、請求項 6 ～ 9 の何れか一項に記載の高分子化合物。

50

【請求項 1 1】

(i i i) 請求項 1 ～ 5 の何れか一項に記載の化合物、および、(v) 下記一般式 (1) で表される化合物、
 からなる群から選択した化合物を重合させることで、前記化合物が有する化学構造を主鎖中に含む高分子化合物。

【化 1 1】

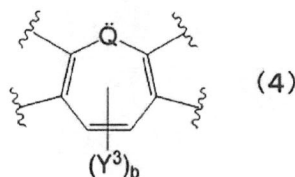
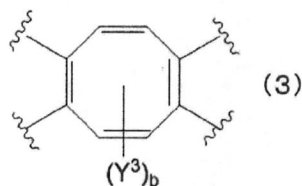


10

[一般式 (1) 中の記号は以下のとおりである。]

A は、下記一般式 (3) 又は (4) で表され、A と結合するベンゼン環と共役系を形成する。

【化 1 2】



20

一般式 (4) において、Q は、O 原子、S 原子、Se 原子、又はアルキル基を置換基として有する N 原子、P 原子を表す。

Y 1 および Y 2 は、それぞれ独立に、ハロゲン原子、置換基を有していてもよい炭素数 1 ～ 20 の脂肪族炭化水素基、置換基を有していてもよい炭素数 6 ～ 20 のアリール基、置換基を有していてもよい炭素数 1 ～ 10 のアルコキシ基、シアノ基、環を形成する原子数が 5 ～ 8 の複素環式化合物基から選ばれる置換基を表す。置換基 Y 1、Y 2 を複数有する場合は、各置換基は互いに同じでも異なってもよい。

30

a 1 は前記置換基 Y 1 の数を表し、a 2 は前記置換基 Y 2 の数を表す。

Y 3 は、ハロゲン原子、置換基を有していてもよい炭素数 1 ～ 20 のアルキル基、置換基を有していてもよい炭素数 2 ～ 20 のアルキニル基、置換基を有していてもよい炭素数 6 ～ 20 のアリール基、置換基を有していてもよい炭素数 1 ～ 10 のアルコキシ基、置換基を有していてもよい炭素数 2 ～ 20 のカルボン酸エステル基、カルボキシ基、水酸基、シアノ基から選ばれる置換基を表す。置換基 Y 3 を複数有する場合は、各置換基は互いに同一でも異なってもよい。

40

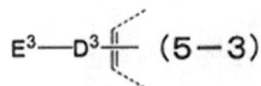
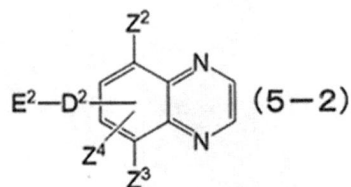
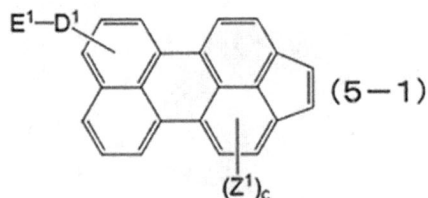
b は、前記置換基 Y 3 の数を表す。

m および n は、それぞれ独立に、0 以上 3 以下の整数を表す。なお、m が 1 以上 3 以下の整数の場合、Y 1 は m で規定される構造部分に置換されてもよい。同様に、n が 1 以上 3 以下の整数の場合、Y 2 は n で規定される構造部分に置換されてもよい。

B 1 および B 2 は、それぞれ独立に、下記一般式 (5-1) ～ (5-3) で表されるいずれかの構造を表す。

50

【化 1 3】



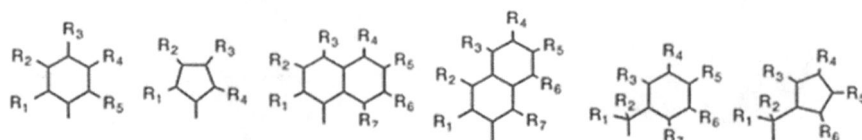
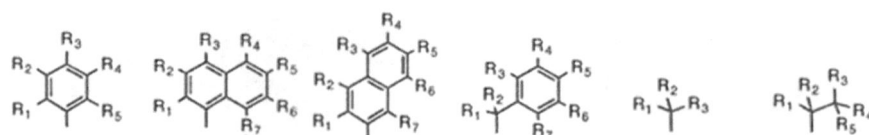
10

一般式 (5-1) ~ (5-3) 中の記号は以下のとおりである。

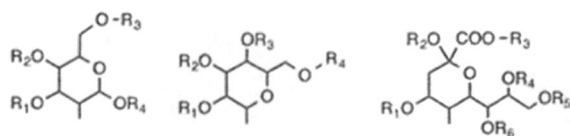
D 1、D 2 および D 3 は、凝集を阻害する部分構造を表し、以下の構造のいずれかを有する。

【化 1 4】

20



30



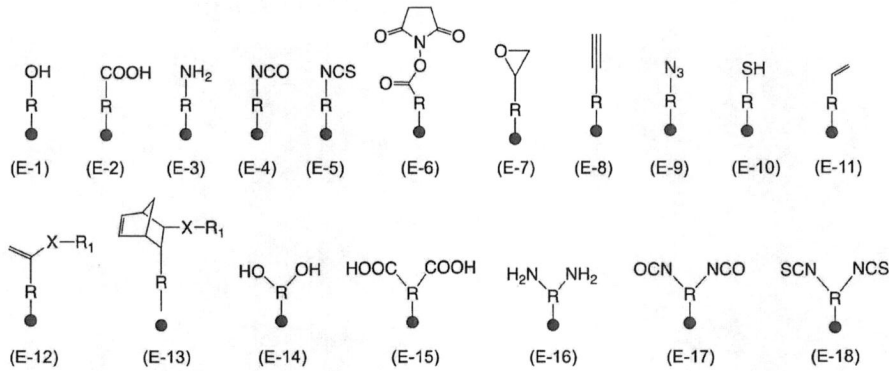
(R 1 ~ R 7 は、H、炭素数 1 ~ 20 の直鎖状、分岐状あるいは環状アルキル基、炭素数 6 ~ 20 のアリール基、F、Cl、Br、I、CF 3、CCl 3、CN、OCH 3 を表す。R 1 ~ R 7 は同じであっても異なってもよい。)

E 1、E 2 および E 3 は、重合可能な置換基で、下記 (E - 1) ~ (E - 18) のいずれかである。

40

50

【化 15】



10

20

30

40

50

(上記式 (E-12) および (E-13) 中、X はアミド又はエステルを表すが、含まれてもよい。上記式 (E-12) および (E-13) 中の R₁ は、D₁、D₂ 又は D₃ の R₁ と同じである。また、式 (E-1) ~ (E-18) 中の R は、炭素数 1 ~ 20 の直鎖状、分岐状あるいは環状アルキル基、炭素数 6 ~ 20 のアリール基を表すが、式 (E-1) ~ (E-11) の R は含まれてもよい。●は D₁、D₂ 又は D₃ を表す。)

Z₁ は、それぞれ独立に、水素原子、ハロゲン原子、置換基を有していてもよい炭素数 1 ~ 20 のアルキル基、置換基を有していてもよい炭素数 2 ~ 20 のアルキニル基、置換基を有していてもよい炭素数 6 ~ 20 のアリール基、置換基を有していてもよい炭素数 1 ~ 10 のアルコキシ基、シアノ基から選ばれる置換基を表す。置換基 Z₁ を複数有する場合は、各置換基は互いに同じでも異なってもよい。

c は置換基 Z₁ の数を表す。

Z₂ および Z₃ は、それぞれ独立に、水素原子、ハロゲン原子、置換基を有していてもよい炭素数 1 ~ 20 のアルキル基、置換基を有していてもよい炭素数 2 ~ 20 のアルキニル基、置換基を有していてもよい炭素数 6 ~ 20 のアリール基、置換基を有していてもよい炭素数 1 ~ 10 のアルコキシ基、シアノ基から選ばれる置換基を表す。

一般式 (5-2) 中の Z₄ は、上記 Z₂ および Z₃ と同じである。]

【請求項 12】

前記 (v) の一般式 (1) において、

前記 a 1 は、

m が 0 の場合、0 ~ 3 の整数を表し、

m が 1 以上 3 以下の整数の場合、0 ~ m の数に応じて Y₁ が置換可能である整数を表し、

前記 a 2 は、

n が 0 の場合、0 ~ 3 の整数を表し、

n が 1 以上 3 以下の整数の場合、0 ~ n の数に応じて Y₂ が置換可能である整数を表し、

前記 b は、0 以上 4 以下の整数を表す、

請求項 11 に記載の高分子化合物。

【請求項 13】

前記 (v) の一般式 (1) において、前記 b が 1 以上 4 以下の整数である、請求項 11 または 12 に記載の高分子化合物。

【請求項 14】

前記高分子化合物において、前記化合物がウレタン結合を介して前記高分子化合物中に結合してなる、請求項 11 ~ 13 の何れか一項に記載の高分子化合物。

【請求項 15】

前記化合物が有する化学構造からなる架橋部位を有する、請求項 6 ~ 10 の何れか一項に

記載の高分子化合物。

10

20

30

40

50