

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 公開特許公報(A)

(11) 特許出願公開番号

特開2015-147902

(P2015-147902A)

(43) 公開日 平成27年8月20日(2015.8.20)

(51) Int.Cl.	F I	テーマコード (参考)
C 0 9 B 23/00 (2006.01)	C 0 9 B 23/00 M	4 H 0 4 8
H 0 1 G 9/20 (2006.01)	H 0 1 G 9/20 1 1 3 A	
C 0 7 F 5/02 (2006.01)	H 0 1 G 9/20 1 1 3 D	
	C 0 7 F 5/02 C S P D	

審査請求 未請求 請求項の数 20 O L (全 57 頁)

(21) 出願番号	特願2014-22658 (P2014-22658)	(71) 出願人	305027401
(22) 出願日	平成26年2月7日 (2014.2.7)		公立大学法人首都大学東京
			東京都新宿区西新宿二丁目3番1号
		(71) 出願人	000004086
			日本化薬株式会社
			東京都千代田区丸の内二丁目1番1号
		(74) 代理人	110000855
			特許業務法人浅村特許事務所
		(72) 発明者	久保 由治
			東京都八王子市南大沢1-1 首都大学東京 南大沢キャンパス内
		(72) 発明者	金子 昌敏
			東京都北区志茂3-31-12 日本化薬株式会社 研究企画部内

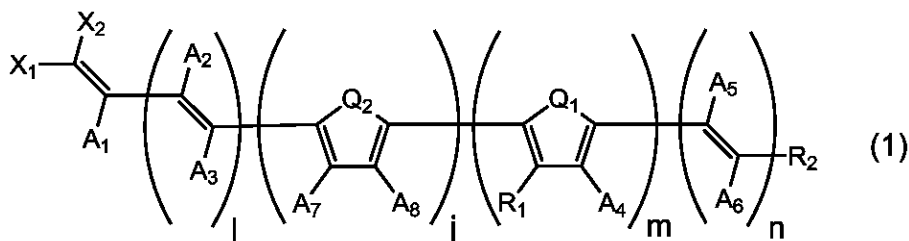
最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 新規化合物及びそれを含む光電変換素子

(57) 【要約】 (修正有)

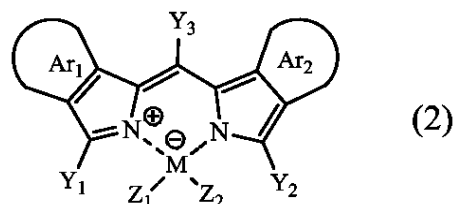
【課題】 特定の構造を有する化合物を用いた安価で変換効率の高い光電変換素子

【解決手段】 下記式(1)で表される化合物



10

[m、l、nは整数；X₁及びX₂はH等；Q₁及びQ₂はO、S等；A₁～A₈はH等；R₂はアミノフェニル基；R₁は下記式で例示される基；



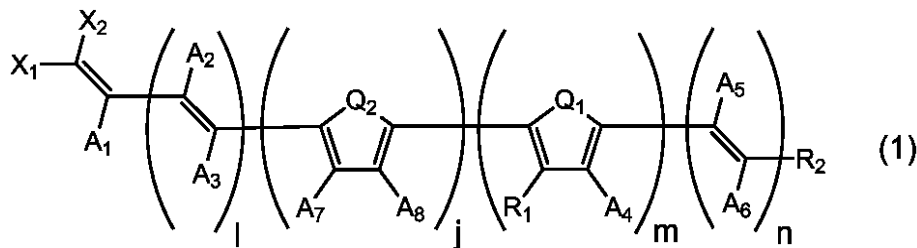
20

【特許請求の範囲】

【請求項 1】

下記式（１）で表される化合物

【化 1】



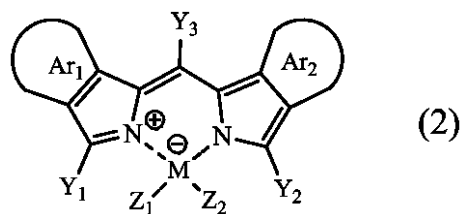
10

（式（１）中、 m は１乃至５の整数を、 l 及び n はそれぞれ独立に０乃至６の整数を、 j は０乃至３の整数を表す。 X_1 及び X_2 はそれぞれ独立に水素原子、カルボキシル基、水酸基、リン酸基、スルホン酸基、シアノ基、アシル基、アミド基、アルコキシカルボニル基又はスルフォニルベンゼン基を表し、 X_1 及び X_2 は互いに連結して環を形成してもよい。 Q_1 及び Q_2 はそれぞれ独立に酸素原子、硫黄原子、セレン原子又は NR_{11} を表す。 R_{11} は水素原子、芳香族残基又は脂肪族炭化水素残基を表す。 m が２以上で Q_1 が複数存在する場合には、それぞれの Q_1 は互いに同じか又は異なってもよく、 j が２以上で Q_2 が複数存在する場合には、それぞれの Q_2 は互いに同じか又は異なってもよい。 A_1 、 A_2 、 A_3 、 A_5 及び A_6 はそれぞれ独立に水素原子、芳香族残基、脂肪族炭化水素残基、シアノ基、ハロゲン原子、カルボンアミド基、アミド基、アルコキシル基、アリールオキシ基、アルコキシカルボニル基、アリールカルボニル基又はアシル基を表す。 l が２以上で A_2 及び A_3 が複数存在する場合には、それぞれの A_2 及び A_3 は互いに同じか又は異なってもよく、 n が２以上で A_5 及び A_6 が複数存在する場合には、それぞれの A_5 及び A_6 は互いに同じか又は異なってもよい。あるいは、 l が０以外の場合には、 A_1 、 A_2 及び A_3 のいずれか複数個で環を形成してもよい。 A_4 は水素原子、脂肪族炭化水素残基、シアノ基、ハロゲン原子、カルボンアミド基、アルコキシル基、アミド基、アルコキシカルボニル基又はアシル基を表す。 m が２以上で A_4 が複数存在する場合には、それぞれの A_4 は互いに同じか又は異なってもよい。 A_7 及び A_8 はそれぞれ独立に水素原子、脂肪族炭化水素残基、シアノ基、ハロゲン原子、カルボンアミド基、アルコキシル基、アルコキシカルボニル基又はアシル基を表す。 j が２以上で A_7 及び A_8 が複数存在する場合には、それぞれの A_7 及び A_8 は互いに同じか又は異なってもよい。 R_1 は下記式（２）

20

30

【化 2】

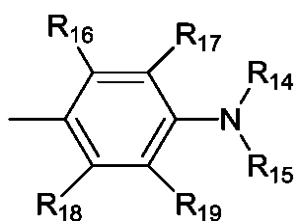


(2)

40

（式（２）中、 M は半金属原子を表す。 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 はそれぞれ独立に水素原子又は芳香族残基を表す。 Z_1 及び Z_2 はそれぞれ独立にハロゲン原子を表す。 Ar_1 及び Ar_2 はそれぞれ独立に芳香環を表す。）で表される化合物の芳香環 Ar_1 上から水素原子１個を除いた残基を表す。 m が２以上で R_1 が複数存在する場合には、それぞれの R_1 は互いに同じか又は異なってもよい。 R_2 は下記式（３００３）

【化 3】



(3003)

10

(式(3003)中、 R_{14} 及び R_{15} は、それぞれ独立に水素原子、芳香族残基又は脂肪族炭化水素残基を表す。 R_{16} 、 R_{17} 、 R_{18} 及び R_{19} は、それぞれ独立に水素原子、芳香族残基、脂肪族炭化水素残基、シアノ基、アシル基、アミド基、アルコキシル基、アルコキシカルボニル基又はスルフォニルベンゼン基を表す。)で表される基である。あるいは、 n が0以外の場合には、 A_5 、 A_6 及び R_2 のいずれか複数個で環を形成してもよい。)

【請求項 2】

式(1)における m が1乃至3である請求項1に記載の化合物。

【請求項 3】

式(1)における m が1である請求項2に記載の化合物。

20

【請求項 4】

式(1)における Q_1 及び Q_2 が硫黄原子である請求項1に記載の化合物。

【請求項 5】

式(1)における l 及び n が0である請求項1に記載の化合物。

【請求項 6】

式(1)における X_1 及び X_2 の一方がカルボキシル基で他方がカルボキシル基、シアノ基又はアシル基である請求項1に記載の化合物。

【請求項 7】

式(1)における X_1 及び X_2 の一方がカルボキシル基で他方がシアノ基である請求項6に記載の化合物。

30

【請求項 8】

式(1)における X_1 と X_2 が結合して環構造を形成する請求項1に記載の化合物。

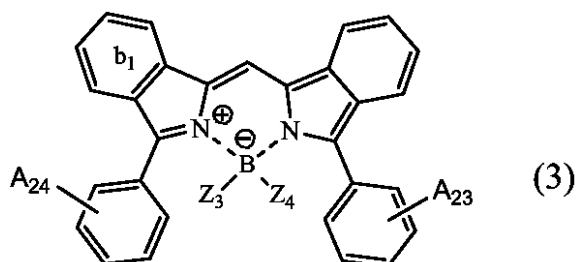
【請求項 9】

式(1)における A_1 乃至 A_8 が水素原子である請求項1に記載の化合物。

【請求項 10】

式(1)における R_1 が、下記式(3)

【化 4】



(3)

40

(式(3)中、 Z_3 及び Z_4 はそれぞれ独立にハロゲン原子を表す。 A_{23} 及び A_{24} はそれぞれ独立に水素原子、ハロゲン原子、脂肪族炭化水素残基又はアルコキシル基を表す。)で表される化合物のベンゼン環 b_1 上から水素原子1個を除いた残基である請求項1に記載の化合物。

【請求項 11】

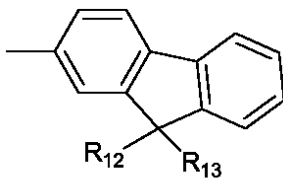
50

式(3)における Z_3 及び Z_4 がフッ素原子であり、かつ A_{23} 及び A_{24} がメトキシ基である請求項10に記載の化合物。

【請求項12】

式(3003)における R_{14} 及び R_{15} が下記式(3001)

【化5】



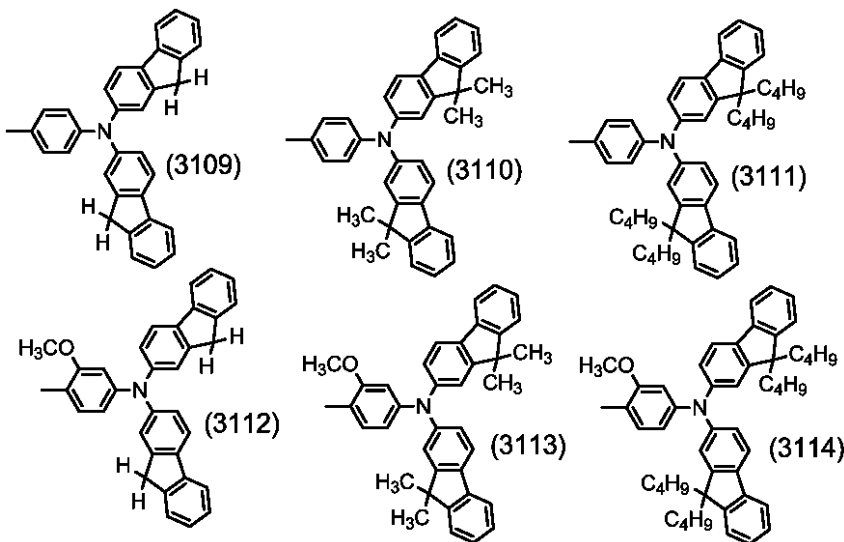
(3001)

(式(3001)中、 R_{12} 及び R_{13} は、それぞれ独立に水素原子または炭素数1乃至8のアルキル基を表す。)で表される基であり、かつ R_{16} 乃至 R_{19} がそれぞれ独立に水素原子または炭素数1乃至4のアルコキシル基である請求項1に記載の化合物。

【請求項13】

式(1)における R_2 が、下記式(3109)乃至(3114)

【化6】



のいずれかで表される基である請求項12に記載の化合物。

【請求項14】

式(1)における R_2 が、式(3110)、(3111)、(3113)又は(3114)で表される基である請求項13に記載の化合物。

【請求項15】

式(1)における R_2 が、式(3111)で表される基である請求項14に記載の化合物。

【請求項16】

下記式(812)

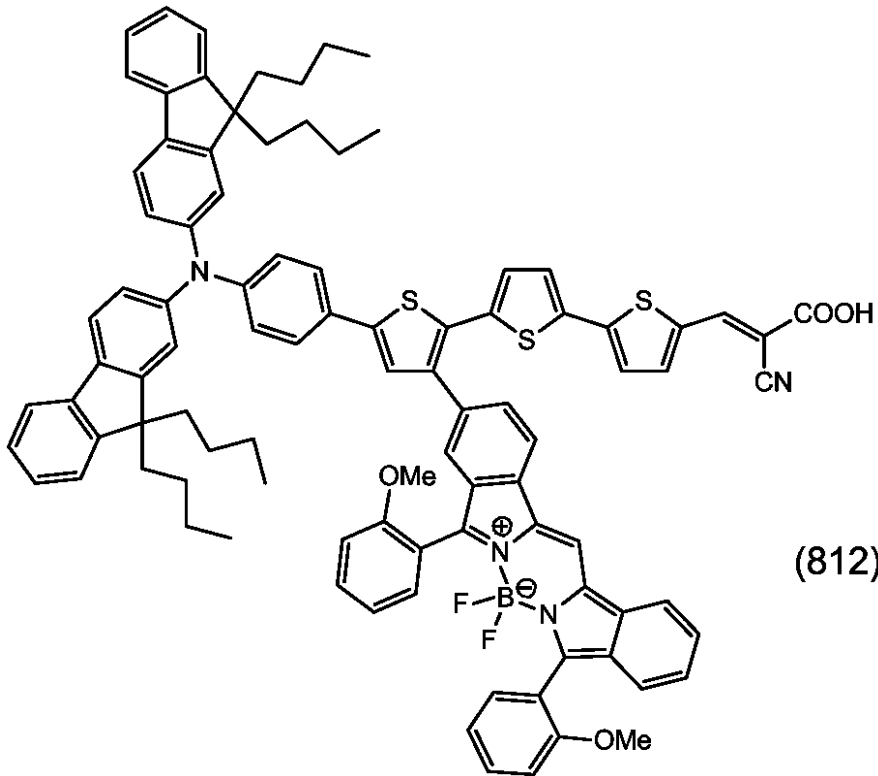
10

20

30

40

【化 7】



10

20

で表される請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 1 7】

基板上に設けられた酸化物半導体微粒子の薄膜に、請求項 1 に記載の式 (1) で表される化合物の一種以上を担持させた光電変換素子。

【請求項 1 8】

基板上に設けられた酸化物半導体微粒子の薄膜に、請求項 1 に記載の式 (1) で表される化合物の一種以上と、式 (1) 以外の構造を有する増感色素化合物を担持させた光電変換素子。

30

【請求項 1 9】

酸化物半導体微粒子が、二酸化チタン、酸化亜鉛又は酸化スズを含有する請求項 1 7 又は 1 8 に記載の光電変換素子。

【請求項 2 0】

請求項 1 7 乃至 1 9 のいずれか一項に記載の光電変換素子を備えてなる太陽電池。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は特定の構造を有する新規有機化合物、該化合物を増感色素として含む光電変換素子及び該光電変換素子を備えてなる太陽電池に関する。

40

【背景技術】

【0002】

石油、石炭等の化石燃料に代わるエネルギー資源として太陽光を利用する太陽電池が注目されている。現在、結晶又はアモルファスのシリコンを用いたシリコン太陽電池、あるいはガリウム、ヒ素等を用いた化合物半導体太陽電池等について、盛んに開発検討がなされている。しかしながら、それらの製造には多大なエネルギーが必要なため、結果として製造コストが未だ割高であるという問題点がある。その一方で、色素で増感した半導体微粒子を用いて作製される光電変換素子、あるいはこれを備える太陽電池が知られており、増感色素、半導体微粒子等の材料、および素子及び電池の製造技術について種々の開示が

50

なされている(特許文献1、非特許文献1、非特許文献2を参照)。この色素増感光電変換素子には、酸化チタン等の比較的安価な酸化物半導体を用いられており、従来のシリコン等を用いた太陽電池に比べてコストの安い光電変換素子が得られる可能性があり、またカラフルな太陽電池が得られることなどから注目を集めている。しかしながら、変換効率の高い素子を得るために増感色素として用いられているルテニウム系の錯体自体のコストが高く、またその安定供給にも問題が残っている。そのため増感色素として有機色素を用いる試みも既に行われているが、変換効率、安定性、耐久性が低いなどの問題が解決されていないことから未だ実用化には至っておらず、更なる変換効率等の諸特性の向上が望まれている(特許文献2を参照)。

これに対して、本発明者らは、光電変換素子の変換効率等を向上することができる有機色素について開示している(特許文献3及び4)

10

【先行技術文献】

【特許文献】

【0003】

【特許文献1】特開平01-220380号公報

【特許文献2】国際公開特許WO2002/011213号公報

【特許文献3】国際公開特許WO2007/100033号公報

【特許文献4】国際公開特許WO2013/147145号公報

【非特許文献】

【0004】

20

【非特許文献1】B.O'Regan and M.Graetzel Nature, 第353巻, 737頁(1991年)

【非特許文献2】M.K.Nazeeruddin, A.Kay, I.Rodicio, R.Humphry-Baker, E.Muller, P.Liska, N.Vlachopoulos, M.Graetzel, J.Am.Chem.Soc., 第115巻, 6382頁(1993年)

【非特許文献3】Yuji Kubo, Kazuki Watanabe, Ryuhei Nishiyabu, Reiko Hata, Akinori Murakami, Takayuki Shoda, and Hitoshi Ota, Org. Lett., Vol. 13, No.17, 2011. 4574頁

【非特許文献4】W.Kubo, K.Murakoshi, T.Kitamura, K.Hanabusa, H.Shirai, and S.Yanagida, Chem.Lett., 1241頁(1998年)

30

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0005】

しかしながら、色素で増感された酸化物半導体微粒子を用いた、より変換効率が高く実用性の高い光電変換素子の開発が求められている。

【課題を解決するための手段】

【0006】

本発明者等は上記の課題を解決すべく鋭意努力した結果、特定の構造を有する新規化合物を用いて半導体微粒子の薄膜を増感し、光電変換素子を作成することにより、より変換効率の高い光電変換素子を得られることを見出し、本発明を完成させるに至った。

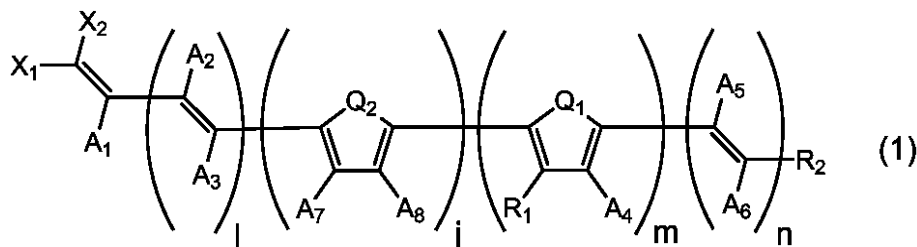
40

すなわち本発明は、

(1) 下記式(1)で表される化合物

【0007】

【化 1】

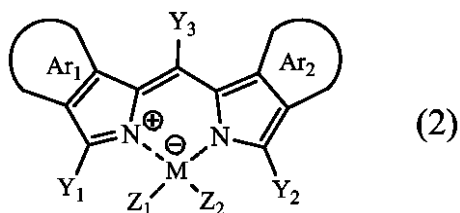


【0008】

(式(1)中、 m は1乃至5の整数を、 l 及び n はそれぞれ独立に0乃至6の整数を、 j は0乃至3の整数を表す。 X_1 及び X_2 はそれぞれ独立に水素原子、カルボキシル基、水酸基、リン酸基、スルホン酸基、シアノ基、アシル基、アミド基、アルコキシカルボニル基又はスルフォニルベンゼン基を表し、 X_1 及び X_2 は互いに連結して環を形成してもよい。 Q_1 及び Q_2 はそれぞれ独立に酸素原子、硫黄原子、セレン原子又は NR_{11} を表す。 R_{11} は水素原子、芳香族残基又は脂肪族炭化水素残基を表す。 m が2以上で Q_1 が複数存在する場合には、それぞれの Q_1 は互いに同じか又は異なってもよく、 j が2以上で Q_2 が複数存在する場合には、それぞれの Q_2 は互いに同じか又は異なってもよい。 A_1 、 A_2 、 A_3 、 A_5 及び A_6 はそれぞれ独立に水素原子、芳香族残基、脂肪族炭化水素残基、シアノ基、ハロゲン原子、カルボンアミド基、アミド基、アルコキシ基、アリールオキシ基、アルコキシカルボニル基、アリールカルボニル基又はアシル基を表す。 l が2以上で A_2 及び A_3 が複数存在する場合には、それぞれの A_2 及び A_3 は互いに同じか又は異なってもよく、 n が2以上で A_5 及び A_6 が複数存在する場合には、それぞれの A_5 及び A_6 は互いに同じか又は異なってもよい。また、 l が0以外の場合には、 A_1 、 A_2 及び A_3 のいずれか複数個で環を形成してもよい。 A_4 は水素原子、脂肪族炭化水素残基、シアノ基、ハロゲン原子、カルボンアミド基、アルコキシ基、アミド基、アルコキシカルボニル基又はアシル基を表す。 m が2以上で A_4 が複数存在する場合には、それぞれの A_4 は互いに同じか又は異なってもよい。 A_7 及び A_8 はそれぞれ独立に水素原子、脂肪族炭化水素残基、シアノ基、ハロゲン原子、カルボンアミド基、アルコキシ基、アルコキシカルボニル基又はアシル基を表す。 j が2以上で A_7 及び A_8 が複数存在する場合には、それぞれの A_7 及び A_8 は互いに同じか又は異なってもよい。 R_1 は下記式(2)

【0009】

【化 2】



【0010】

(式(2)中、 M は半金属原子を表す。 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 はそれぞれ独立に水素原子又は芳香族残基を表す。 Z_1 及び Z_2 はそれぞれ独立にハロゲン原子を表す。 Ar_1 及び Ar_2 はそれぞれ独立に芳香環を表す。)で表される化合物の芳香環 Ar_1 上から水素原子1個を除いた残基を表す。 m が2以上で R_1 が複数存在する場合には、それぞれの R_1 は互いに同じか又は異なってもよい。 R_2 は下記式(3003)

【0011】

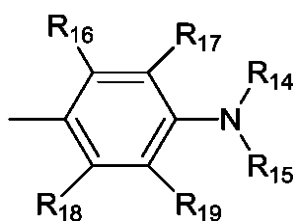
10

20

30

40

【化 3】



(3003)

10

【0012】

(式(3003)中、 R_{14} 及び R_{15} は、それぞれ独立に水素原子、芳香族残基又は脂肪族炭化水素残基を表す。 R_{16} 、 R_{17} 、 R_{18} 及び R_{19} は、それぞれ独立に水素原子、芳香族残基、脂肪族炭化水素残基、シアノ基、アシル基、アミド基、アルコキシル基、アルコキシカルボニル基又はスルフォニルベンゼン基を表す。)で表される基である。又、 n が0以外の場合には、 A_5 、 A_6 及び R_2 のいずれか複数個で環を形成してもよい。)、

(2) 式(1)における m が1乃至3である前項(1)に記載の化合物、

(3) 式(1)における m が1である前項(2)に記載の化合物、

(4) 式(1)における Q_1 及び Q_2 が硫黄原子である前項(1)に記載の化合物、

(5) 式(1)における l 及び n が0である前項(1)に記載の化合物、

20

(6) 式(1)における X_1 及び X_2 の一方がカルボキシル基で他方がカルボキシル基、シアノ基又はアシル基である前項(1)に記載の化合物、

(7) 式(1)における X_1 及び X_2 の一方がカルボキシル基で他方がシアノ基である前項(6)に記載の化合物、

(8) 式(1)における X_1 と X_2 が結合して環構造を形成する前項(1)に記載の化合物、

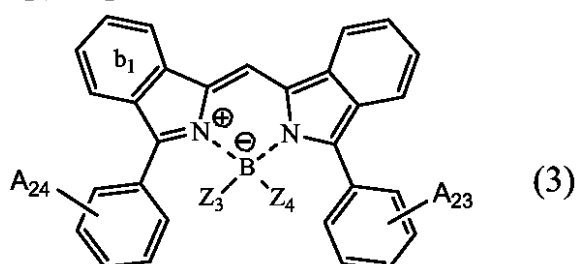
(9) 式(1)における A_1 乃至 A_8 が水素原子である前項(1)に記載の化合物、

(10) 式(1)における R_1 が、下記式(3)

【0013】

【化 4】

30



【0014】

(式(3)中、 Z_3 及び Z_4 はそれぞれ独立にハロゲン原子を表す。 A_{23} 及び A_{24} はそれぞれ独立に水素原子、ハロゲン原子、脂肪族炭化水素残基又はアルコキシル基を表す。)で表される化合物のベンゼン環 b_1 上から水素原子1個を除いた残基である前項(1)に記載の化合物、

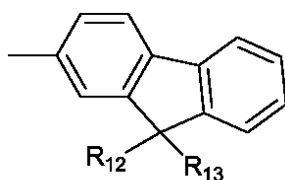
40

(11) 式(3)における Z_3 及び Z_4 がフッ素原子であり、かつ A_{23} 及び A_{24} がメトキシ基である前項(10)に記載の化合物、

(12) 式(3003)における R_{14} 及び R_{15} が下記式(3001)

【0015】

【化 5】



(3001)

【0016】

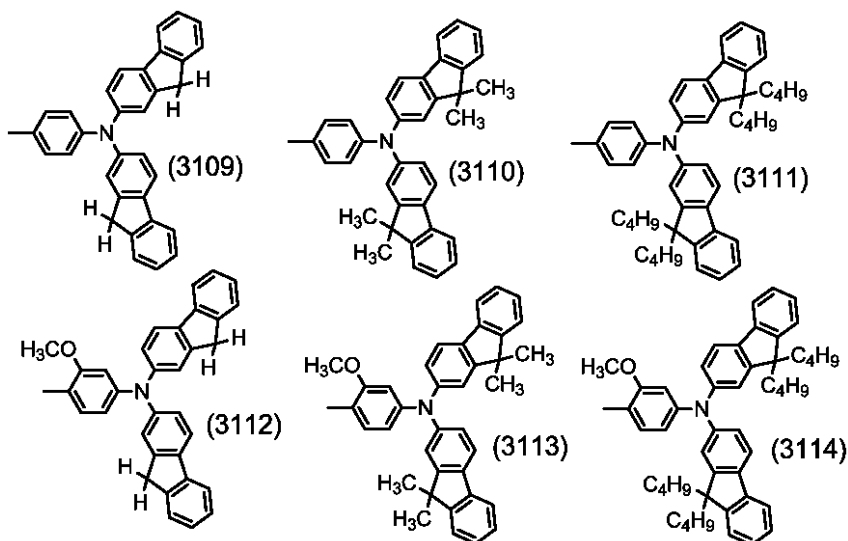
10

(式(3001)中、 R_{12} 及び R_{13} は、それぞれ独立に水素原子または炭素数1乃至8のアルキル基を表す。)で表される基であり、かつ R_{16} 乃至 R_{19} がそれぞれ独立に水素原子または炭素数1乃至4のアルコキシル基である前項(1)に記載の化合物、

(13)式(1)における R_2 が、下記式(3109)乃至(3114)

【0017】

【化 6】



20

30

【0018】

のいずれかで表される基である前項(12)に記載の化合物、

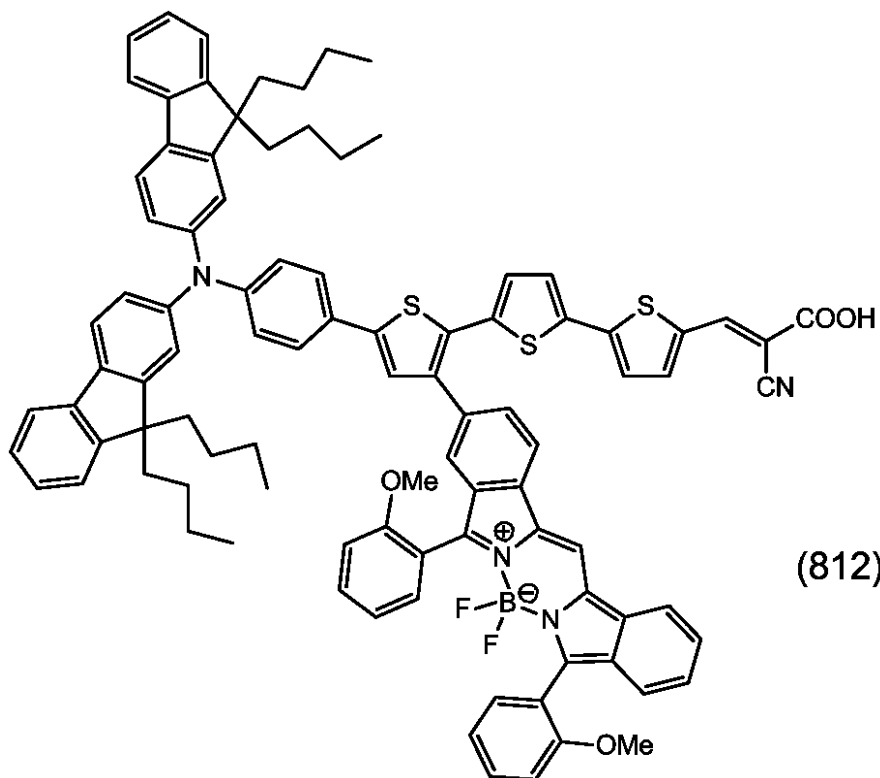
(14)式(1)における R_2 が、式(3110)、(3111)、(3113)又は(3114)で表される基である前項(13)に記載の化合物、

(15)式(1)における R_2 が、式(3111)で表される基である前項(14)に記載の化合物、

(16)下記式(812)

【0019】

【化 7】



10

20

【0020】

で表される前項（１）に記載の化合物、

（１７）基板上に設けられた酸化物半導体微粒子の薄膜に、前項（１）に記載の式（１）で表される化合物の一種以上を担持させた光電変換素子、

（１８）基板上に設けられた酸化物半導体微粒子の薄膜に、前項（１）に記載の式（１）で表される化合物の一種以上と、式（１）以外の構造を有する増感色素化合物を担持させた光電変換素子、

（１９）酸化物半導体微粒子が、二酸化チタン、酸化亜鉛又は酸化スズを含有する前項（１７）又は（１８）に記載の光電変換素子、

（２０）前項（１７）乃至（１９）のいずれか一項に記載の光電変換素子を備えてなる太陽電池、
に関する。

30

【発明の効果】

【0021】

式（１）で表される特定の構造を有する本発明の化合物（本明細書においては、単に「本発明の化合物」とも表記する。）を増感色素として用いることにより、より変換効率が高く実用性の高い色素増感太陽電池を提供することが出来た。

【図面の簡単な説明】

40

【0022】

【図 1】実施例 2 及び比較例 1 で得られた太陽電池の I P C E スペクトルである。

【発明を実施するための形態】

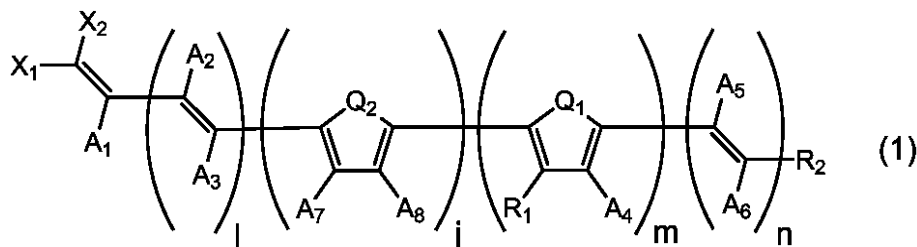
【0023】

以下に本発明を詳細に説明する。

本発明の化合物は、下記式（１）で表される構造を有する。

【0024】

【化 8】



【0025】

式(1)におけるmは、1乃至5の整数を表し、1乃至3であることが好ましく、1乃至2であることがより好ましく、1であることが更に好ましい。

式(1)におけるlは、0乃至6の整数を表し、0であることが好ましい。

式(1)におけるnは、0乃至6の整数を表し、0であることが好ましい。

式(1)におけるjは、0乃至3の整数を表し、1乃至3であることが好ましく、1乃至2であることがより好ましく、2であることが更に好ましい。

【0026】

式(1)における X_1 及び X_2 は、それぞれ独立に水素原子、カルボキシ基、水酸基、リン酸基、スルホン酸基、シアノ基、アシル基、アミド基、アルコキシカルボニル基、又はスルフォニルベンゼン基等の芳香族残基を表し、あるいは X_1 と X_2 とで互いに結合して環を形成してもよい。

式(1)の X_1 及び X_2 が表すアシル基としては、例えば炭素数1乃至10のアルキルカルボニル基、アリールカルボニル基(通常、単環式、二環式もしくは三環式アリールを有する)等が挙げられ、好ましくは炭素数1乃至4のアルキルカルボニル基及び単環式もしくは二環式アリールカルボニル基である。炭素数1乃至4のアルキルカルボニル基としては、例えばアセチル基、プロピオニル基、トリフルオロメチルカルボニル基、ペンタフルオロエチルカルボニル基が挙げられ、単環式もしくは二環式アリールカルボニル基としては、例えばベンゾイル基、ナフトイル基等が挙げられる。

【0027】

式(1)の X_1 及び X_2 が表すアシル基は置換基を有していてもよく、該有していてもよい置換基としては、例えば、スルホン酸基、スルファモイル基、シアノ基、イソシアノ基、チオシアナト基、イソチオシアナト基、ニトロ基、ニトロシル基、ハロゲン原子、ヒドロキシ基、リン酸基、リン酸エステル基、置換もしくは非置換アミノ基、置換もしくは非置換メルカプト基、アミド基、アルコキシ基、アリールオキシ基、カルボキシ基、カルバモイル基、アシル基、アルデヒド基、並びにアルコキシカルボニル基及びアリールカルボニル基等の置換カルボニル基の他に芳香族残基、脂肪族炭化水素残基等が挙げられる。

式(1)の X_1 及び X_2 が表すアシル基が有していてもよい置換基としてのハロゲン原子としては、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素等の原子が挙げられ、臭素原子及び塩素原子が好ましい。

【0028】

式(1)の X_1 及び X_2 が表すアシル基が有していてもよい置換基としてのリン酸エステル基としては、リン酸(炭素数1乃至4)アルキルエステル基等が挙げられ、好ましい具体例としては、リン酸メチル基、リン酸エチル基、リン酸(n-プロピル)基及びリン酸(n-ブチル)基である。

式(1)の X_1 及び X_2 が表すアシル基が有していてもよい置換基としての置換もしくは非置換アミノ基としては、非置換アミノ基、モノ又はジメチルアミノ基、モノ又はジエチルアミノ基、モノ又はジ(n-プロピル)アミノ基等の炭素数1乃至4のアルキル置換アミノ基、モノ又はジフェニルアミノ基、モノ又はジナフチルアミノ基等の単環式、二環式もしくは三環式の芳香族置換アミノ基、モノ炭素数1乃至4のアルキルモノフェニルアミノ基等のアルキル基と単環式、二環式もしくは三環式の芳香族残基が一つずつ置換したア

ミノ基、並びにベンジルアミノ基、アセチルアミノ基、及びフェニルアセチルアミノ基等が挙げられる。

【0029】

式(1)の X_1 及び X_2 が表すアシル基が有していてもよい置換基としての置換もしくは非置換メルカプト基としては、非置換メルカプト基、アルキルメルカプト基、具体的にはメチルメルカプト基、エチルメルカプト基、 n -プロピルメルカプト基、イソプロピルメルカプト基、 n -ブチルメルカプト基、イソブチルメルカプト基、 sec -ブチルメルカプト基、 t -ブチルメルカプト基などの炭素数1乃至4のアルキルメルカプト基、又は単環式、二環式もしくは三環式の芳香族置換メルカプト基、具体的にはフェニルメルカプト基等が挙げられる。

10

式(1)の X_1 及び X_2 が表すアシル基が有していてもよい置換基としてのアミド基としては、狭義のアミド基($NH_2(CO)H$)；アセトアミド基；アルキルアミド基、アルキルアセトアミド基、アリールアミド基、アリールアセトアミド基が挙げられ、好ましいものとして、アミド基($NH_2(CO)H$)、アセトアミド基、 N -メチルアミド基、 N -エチルアミド基、 N -(n -プロピル)アミド基、 N -(n -ブチル)アミド基、 N -イソブチルアミド基、 N -(sec -ブチルアミド)基、 N -(t -ブチル)アミド基、 N , N -ジメチルアミド基、 N , N -ジエチルアミド基、 N , N -ジ(n -プロピル)アミド基、 N , N -ジ(n -ブチル)アミド基、 N , N -ジイソブチルアミド基等の炭素数1乃至4のモノもしくはジアルキルアミド基； N -メチルアセトアミド基、 N -エチルアセトアミド基、 N -(n -プロピル)アセトアミド基、 N -(n -ブチル)アセトアミド基、 N -イソブチルアセトアミド基、 N -(sec -ブチル)アセトアミド基、 N -(t -ブチル)アセトアミド基、 N , N -ジメチルアセトアミド基、 N , N -ジエチルアセトアミド基、 N , N -ジ(n -プロピル)アセトアミド基、 N , N -ジ(n -ブチル)アセトアミド基、 N , N -ジイソブチルアセトアミド基等の炭素数1乃至4のモノもしくはジアルキルアセトアミド基；フェニルアミド基、ナフチルアミド基等の単環式、二環式もしくは三環式のアリールアミド基；またはフェニルアセトアミド基、ナフチルアセトアミド基等の単環式、二環式もしくは三環式のアリールアセトアミド基が挙げられる。

20

【0030】

式(1)の X_1 及び X_2 が表すアシル基が有していてもよい置換基としてのアルコキシ基としては、メトキシ基、エトキシ基、 n -プロポキシ基、イソプロポキシ基、 n -ブトキシ基、イソブトキシ基、 sec -ブトキシ基、 t -ブトキシ基等の炭素数1乃至4のアルコキシ基が挙げられる。

30

式(1)の X_1 及び X_2 が表すアシル基が有していてもよい置換基としてのアリールオキシ基としては、フェノキシ基、ナフトキシ基等の単環式、二環式もしくは三環式のアリールオキシ基が挙げられる。

式(1)の X_1 及び X_2 が表すアシル基が有していてもよい置換基としてのアシル基としては、式(1)の X_1 及び X_2 が表すアシル基の項で述べたものと同じものが挙げられる。

【0031】

式(1)の X_1 及び X_2 が表すアシル基が有していてもよい置換基としてのアルコキシカルボニル基としては、例えば炭素数1乃至10のアルコキシカルボニル基等が挙げられ、その具体例はメトキシカルボニル基、エトキシカルボニル基、 n -プロポキシカルボニル基、イソプロポキシカルボニル基、 n -ブトキシカルボニル基、イソブトキシカルボニル基、 sec -ブトキシカルボニル基、 t -ブトキシカルボニル基、 n -ペントキシカルボニル基、 n -ヘキシルオキシカルボニル基、 n -ヘプチルオキシカルボニル基、 n -ノニルオキシカルボニル基、 n -デシルオキシカルボニル基である。

40

式(1)の X_1 及び X_2 が表すアシル基が有していてもよい置換基としてのアリールカルボニル基としては、例えばベンゾフェノン、ナフトフェノン等の単環式、二環式もしくは三環式のアリール基とカルボニルが連結した基を表す。

【0032】

式(1)の X_1 及び X_2 が表すアシル基が有していてもよい置換基としての芳香族残基と

50

は、芳香環（芳香環及び芳香環を含む縮合環）から水素原子 1 個を除いた基を意味し、該芳香族残基は置換基を有していてもよい。芳香環の具体例としては、ベンゼン環、ナフタレン環、アントラセン環、フェナンスレン環、ピレン環、ペリレン環及びテリレン環等の単環式、二環式もしくは三環式の芳香族炭化水素環；インデン環、アズレン環、ピリジン環、ピラジン環、ピリミジン環、ピラゾール環、ピラゾリジン環、チアゾリジン環、オキサゾリジン環、ピラン環、クロメン環、ピロール環、ピロリジン環、ベンゾイミダゾール環、イミダゾリン環、イミダゾリジン環、イミダゾール環、トリアゾール環、トリアジン環、ジアゾール環、インドリン環、フラン環、オキサゾール環、オキサジアゾール環、チアジン環、チアゾール環、インドール環、ベンゾチアゾール環、ベンゾチアジアゾール環、ナフトチアゾール環、ベンゾオキサゾール環、ナフトオキサゾール環、インドレニン環、ベンゾインドレニン環、キノリン環及びキナゾリン環等の N、O 及び S 等のヘテロ元素を含有し、4～7 員の単環または二環式縮合型の複素芳香環；並びにフルオレン環及びカルバゾール環等の N、O 及び S 等のヘテロ元素を含有し、4～7 員の三環式縮合型の縮合型複素芳香環等が挙げられ、炭素数 4 乃至 20 の芳香環が好ましい。

10

【0033】

式（1）の X_1 及び X_2 が表すアシル基が有していてもよい置換基としての脂肪族炭化水素残基としては、飽和又は不飽和の直鎖又は分岐鎖のアルキル基、または環状のアルキル基が挙げられ、該脂肪族炭化水素残基は置換基を有していてもよい。脂肪族炭化水素残基としては、飽和のアルキル基であることが好ましく、飽和の直鎖アルキル基であることがより好ましい。また、脂肪族炭化水素残基の有する炭素数は 1 乃至 36 であることが好ましく、1 乃至 18 であることがより好ましく、1 乃至 8 であることが更に好ましい。これら脂肪族炭化水素残基の具体例としては、メチル基、エチル基、*n*-プロピル基、イソプロピル基、*n*-ブチル基、*i*so-ブチル基、*sec*-ブチル基、*t*-ブチル基、*n*-ペンチル基、*n*-ヘキシル基、*n*-ヘプチル基、*n*-オクチル基、*n*-ノニル基、*n*-デシル基、*n*-ウンデシル基、*n*-ドデシル基、*n*-トリデシル基、*n*-テトラデシル基、*n*-ペンタデシル基、*n*-ヘキサデシル基、*n*-ヘプタデシル基、*n*-オクタデシル基、シクロヘキシル基、ビニル基、プロペニル基、ペンチニル基、ブテニル基、ヘキセニル基、ヘキサジエニル基、イソプロペニル基、イソヘキセニル基、シクロヘキセニル基、シクロペンタジエニル基、エチニル基、プロピニル基、ペンチニル基、ヘキシニル基、イソヘキシニル基、シクロヘキシニル基等が挙げられる。また、環状のアルキル基としては、例えば炭素数 3 乃至 8 のシクロアルキル基などが挙げられる。

20

30

特に好ましいのは、炭素数が 1 乃至 8 の直鎖のアルキル基である。

【0034】

式（1）の X_1 及び X_2 が表すアミド基としては、式（1）の X_1 及び X_2 が表すアシル基が有していてもよい置換基としてのアミド基の項で述べたものと同じものが挙げられる。式（1）の X_1 及び X_2 が表すアミド基は置換基を有していてもよく、該有していてもよい置換基としては、式（1）の X_1 及び X_2 が表すアシル基が有していてもよい置換基の項で述べたものと同じものが挙げられる。

式（1）の X_1 及び X_2 が表すアルコキシカルボニル基としては、式（1）の X_1 及び X_2 が表すアシル基が有していてもよい置換基としてのアルコキシカルボニル基の項で述べたものと同じものが挙げられる。式（1）の X_1 及び X_2 が表すアルコキシカルボニル基は置換基を有していてもよく、該有していてもよい置換基としては、式（1）の X_1 及び X_2 が表すアシル基が有していてもよい置換基の項で述べたものと同じものが挙げられる。

40

【0035】

式（1）の X_1 及び X_2 が表すアシル基、アミド基及びアルコキシカルボニル基が有していてもよい置換基としての芳香族残基、脂肪族炭化水素残基、アミド基、アシル基、アルコキシル基、アリールオキシ基、アリールカルボニル基及びアルコキシカルボニル基は置換基を有していてもよく、該有していてもよい置換基としては式（1）の X_1 及び X_2 が表すアシル基が有していてもよい置換基の項で述べたものと同じものが挙げられる。

【0036】

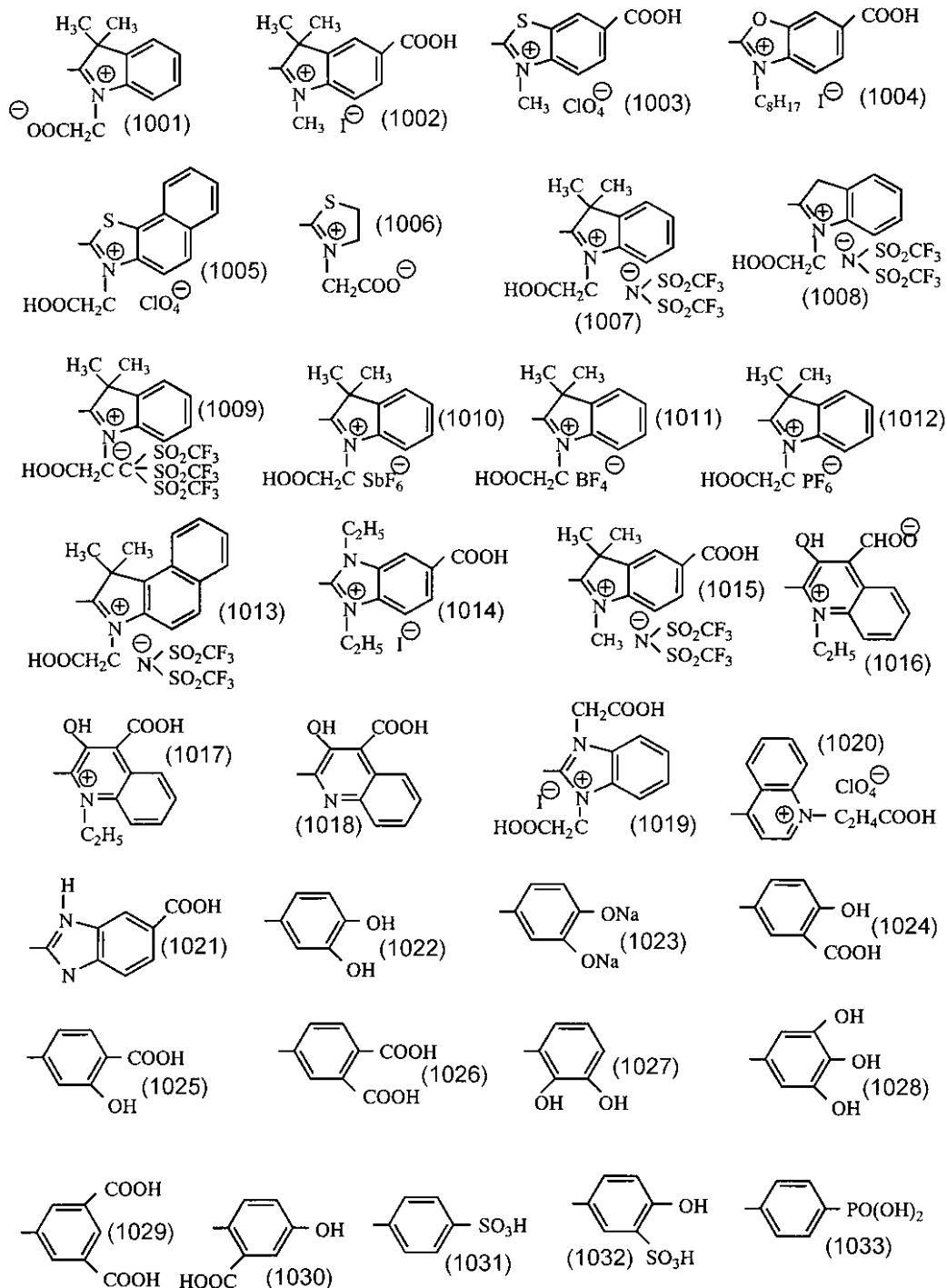
50

式(1)の X_1 及び X_2 が表す芳香族残基の具体例としては、式(1)の X_1 及び X_2 が表すアシル基が有していてもよい置換基としての芳香族残基の項で述べたものと同じものが挙げられる。該芳香族残基は置換基を有していてもよく、該置換基としては、式(1)の X_1 及び X_2 が表すアシル基が有していてもよい置換基の項で述べたものと同じものが挙げられる。

X_1 及び X_2 が表す芳香族残基としては、カルボキシル基、水酸基、リン酸基、スルホン酸基、およびこれらの酸性基の塩からなる群より選択される基を少なくとも1つ以上置換基として有する芳香族残基であることが好ましく、下記式(1001)乃至(1033)のいずれかで表される基であることがより好ましい。

【0037】

【化9】



10

20

30

40

50

【0038】

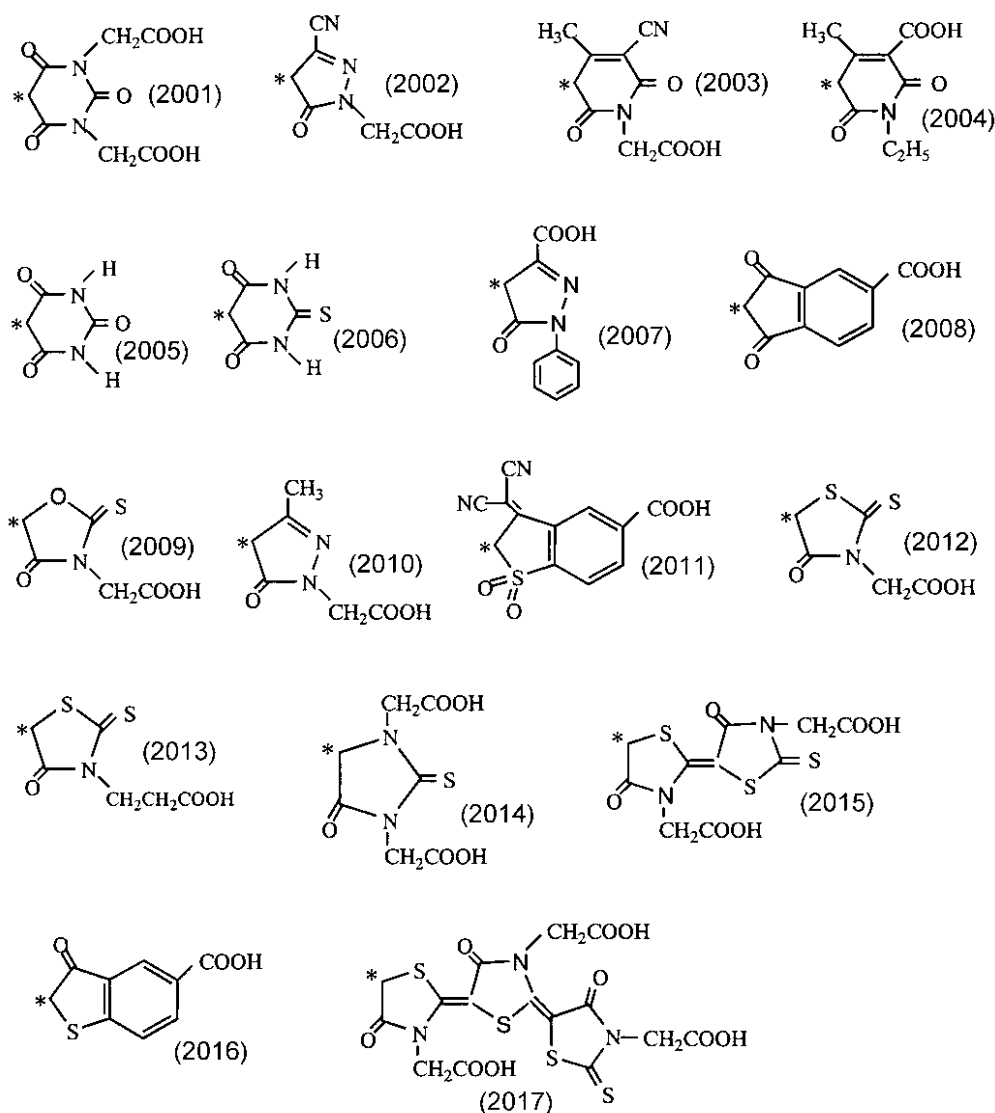
X_1 と X_2 とで互いに結合して形成する環としては、芳香環、複素環などが挙げられ、これらの環は置換基を有していてもよい。

X_1 と X_2 とで互いに結合して形成する芳香環の具体例としては、 X_1 及び X_2 が表すアシル基が有していてもよい置換基としての芳香族残基の説明部分に具体例として記載した芳香環と同様のものが挙げられる。また、 X_1 と X_2 とで互いに結合して形成する環が有していてもよい置換基としては、式(1)の X_1 及び X_2 が表すアシル基が有していてもよい置換基の項で述べたものと同じものが挙げられる。

X_1 と X_2 とで互いに結合して形成する複素環としては、例えば4乃至7員環のS、O及びN等のヘテロ原子を含む複素環であり、下記式(2001)乃至(2017)のいずれかで表される環であることが好ましく、式(2007)または式(2012)で表される環であることがより好ましく、式(2007)で表される環であることが更に好ましい。

【0039】

【化10】



尚、上記式(2001)乃至(2017)中の*印は、式(1)において X_1 及び X_2 の両者が結合している炭素原子を表す。

【0040】

式(1)における X_1 及び X_2 としては、それぞれ独立にカルボキシル基、リン酸基、シアノ基又はアシル基であることが好ましく、それぞれ独立にカルボキシル基、シアノ基又はアシル基であることがより好ましく、一方がカルボキシル基でかつ他方がカルボキシル基、シアノ基又はアシル基であることが更に好ましく、一方がカルボキシル基でかつ他方がシアノ基であることが特に好ましい。

【0041】

式(1)における Q_1 及び Q_2 は、それぞれ独立に酸素原子、硫黄原子、セレン原子又は NR_{11} を表し、 R_{11} は水素原子、芳香族残基又は脂肪族炭化水素残基を表す。

R_{11} が表す芳香族残基としては、式(1)の X_1 及び X_2 が表すアシル基が有していてもよい置換基としての芳香族残基の項で述べたものと同じものが挙げられる。

R_{11} が表す脂肪族炭化水素残基としては、式(1)の X_1 及び X_2 が表すアシル基が有していてもよい置換基としての脂肪族炭化水素残基の項で述べたものと同じものが挙げられる。

R_{11} が表す芳香族残基及び脂肪族炭化水素残基は置換基を有していてもよく、該有していてもよい置換基としては、式(1)の X_1 及び X_2 が表すアシル基が有していてもよい置換基の項で述べたものと同じものが挙げられる。

【0042】

式(1)における m が2以上で Q_1 が複数存在する場合には、それぞれの Q_1 は互いに同じか又は異なってもよく、 j が2以上で Q_2 が複数存在する場合には、それぞれの Q_2 は互いに同じか又は異なってもよい。

式(1)における Q_1 及び Q_2 としては、それぞれ独立に酸素原子、硫黄原子又はセレン原子であることが好ましく、硫黄原子であることがより好ましい。

【0043】

式(1)における A_1 、 A_2 、 A_3 、 A_5 及び A_6 は、それぞれ独立に水素原子、芳香族残基、脂肪族炭化水素残基、シアノ基、ハロゲン原子、カルボンアミド基、アミド基、アルコキシル基、アリアルオキシ基、アルコキシカルボニル基、アリアルカルボニル基又はアシル基を表す。

A_1 、 A_2 、 A_3 、 A_5 及び A_6 が表す芳香族残基、脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子、アミド基、アルコキシル基、アリアルオキシ基、アルコキシカルボニル基及びアリアルカルボニル基としては、式(1)の X_1 及び X_2 が表すアシル基が有していてもよい置換基としての芳香族残基、脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子、アミド基、アルコキシル基、アリアルオキシ基、アルコキシカルボニル基及びアリアルカルボニル基の項で述べたものと同じものが挙げられる。

A_1 、 A_2 、 A_3 、 A_5 及び A_6 が表すアシル基としては、式(1)の X_1 及び X_2 が表すアシル基の項で述べたものと同じものが挙げられる。

A_1 、 A_2 、 A_3 、 A_5 及び A_6 が表す芳香族残基、脂肪族炭化水素残基、アミド基、アルコキシル基、アリアルオキシ基、アルコキシカルボニル基、アリアルカルボニル基及びアシル基は置換基を有していてもよく、該有していてもよい置換基としては、式(1)の X_1 及び X_2 が表すアシル基が有していてもよい置換基の項で述べたものと同じものが挙げられる。

【0044】

式(1)における l が2以上で A_2 及び A_3 が複数存在する場合には、それぞれの A_2 及び A_3 は互いに同じか又は異なってもよく、 n が2以上で A_5 及び A_6 が複数存在する場合には、それぞれの A_5 及び A_6 は互いに同じか又は異なってもよい。又、 l が0以外の場合には、 A_1 、 A_2 及び A_3 のいずれか複数個で環を形成してもよい。

A_1 、 A_2 及び A_3 のいずれか複数個で形成する環としては、不飽和炭化水素環又は複素環等が挙げられる。

A_1 、 A_2 及び A_3 のいずれか複数個で形成する不飽和炭化水素環の例としては、ベンゼン環、ナフタレン環、アントラセン環、フェナンスレン環、ピレン環、インデン環、アズレン環、フルオレン環、シクロブテン環、シクロヘキセン環、シクロペンテン環、シクロ

10

20

30

40

50

ヘキサジエン環、シクロペンタジエン環等が挙げられ、複素環の例としては、ピラン環、ピリジン環、ピラジン環、ピペリジン環、インドリン環、オキサゾール環、チアゾール環、チアジアゾール環、オキサジアゾール環、インドール環、ベンゾチアゾール環、ベンゾオキサゾール環、キノリン環、カルバゾール環、ベンゾピラン環等が挙げられる。これらのうちベンゼン環、シクロブテン環、シクロペンテン環、シクロヘキセン環であることが好ましい。

これら不飽和炭化水素環及び複素環等は置換基を有していてもよく、該有していてもよい置換基としては、式(1)の X_1 及び X_2 が表すアシル基が有していてもよい置換基の項で述べたものと同じものが挙げられる。

【0045】

A_1 、 A_2 及び A_3 のいずれか複数個で形成する複素環が、カルボニル基、チオカルボニル基等の置換基を有する場合には、環状ケトン又は環状チオケトンなどを形成してもよく、これらの環は更に置換基を有していてもよい。該有していてもよい置換基としては、式(1)の X_1 及び X_2 が表すアシル基が有していてもよい置換基の項で述べたものと同じものが挙げられる。

式(1)における A_1 、 A_2 、 A_3 、 A_5 及び A_6 としては、それぞれ独立に水素原子又は脂肪族炭化水素残基であることが好ましく、それぞれ独立に水素原子又は炭素数1乃至8の直鎖アルキル基であることがより好ましく、水素原子であることが更に好ましい。

【0046】

式(1)における A_4 は、水素原子、脂肪族炭化水素残基、シアノ基、ハロゲン原子、カルボンアミド基、アルコキシル基、アミド基、アルコキシカルボニル基又はアシル基を表す。

A_4 が表す脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子、アルコキシル基、アミド基及びアルコキシカルボニル基としては、式(1)の X_1 及び X_2 が表すアシル基が有していてもよい置換基としての脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子、アルコキシル基、アミド基及びアルコキシカルボニル基の項で述べたものと同じものが挙げられる。

A_4 が表すアシル基としては、式(1)の X_1 及び X_2 が表すアシル基の項で述べたものと同じものが挙げられる。

【0047】

A_4 が表す脂肪族炭化水素残基、アルコキシル基、アミド基、アルコキシカルボニル基及びアシル基は置換基を有していてもよく、該有していてもよい置換基としては、式(1)の X_1 及び X_2 が表すアシル基が有していてもよい置換基の項で述べたものと同じものが挙げられる。

m が2以上で A_4 が複数存在する場合には、それぞれの A_4 は互いに同じか又は異なってもよい。

式(1)における A_4 としては、水素原子又は脂肪族炭化水素残基であることが好ましく、水素原子又は炭素数1乃至8の直鎖アルキル基であることがより好ましく、水素原子であることが更に好ましい。

【0048】

式(1)における A_7 及び A_8 は、それぞれ独立に水素原子、脂肪族炭化水素残基、シアノ基、ハロゲン原子、カルボンアミド基、アルコキシル基、アルコキシカルボニル基又はアシル基を表す。

A_7 及び A_8 が表す脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子、アルコキシル基及びアルコキシカルボニル基としては、式(1)の X_1 及び X_2 が表すアシル基が有していてもよい置換基としての脂肪族炭化水素残基、ハロゲン原子、アルコキシル基及びアルコキシカルボニル基の項で述べたものと同じものが挙げられる。

A_7 及び A_8 が表すアシル基としては、式(1)の X_1 及び X_2 が表すアシル基の項で述べたものと同じものが挙げられる。

A_7 及び A_8 が表す脂肪族炭化水素残基、アルコキシル基、アルコキシカルボニル基及びアシル基は置換基を有していてもよく、該有していてもよい置換基としては、式(1)の

10

20

30

40

50

X_1 及び X_2 が表すアシル基が有していてもよい置換基の項で述べたものと同じものが挙げられる。

j が 2 以上で A_7 及び A_8 が複数存在する場合には、それぞれの A_7 及び A_8 は互いに同じか又は異なってもよい。

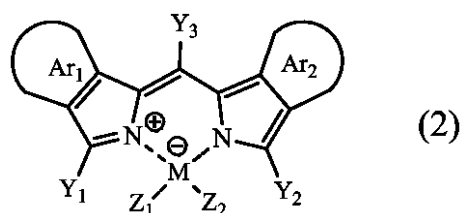
式 (1) における A_7 及び A_8 としては、それぞれ独立に水素原子又は脂肪族炭化水素残基であることが好ましく、それぞれ独立に水素原子又は炭素数 1 乃至 8 の直鎖アルキル基であることがより好ましく、水素原子であることが更に好ましい。従って、本発明の好ましい実施形態では、 A_1 乃至 A_8 の総てが水素である。

【0049】

式 (1) における R_1 は、下記式 (2) で表される化合物の芳香環 Ar_1 上から水素原子 1 個を除いた残基を表す。尚、芳香環 Ar_1 上の水素原子 1 個が除かれる位置は特に限定されない。

【0050】

【化 11】



【0051】

式 (2) 中、 M は半金属原子を表す。本発明における半金属とは、金属と非金属の中間の性質を示す物質を示し、具体的にはホウ素原子、ケイ素原子、ゲルマニウム原子及びアンチモン原子が挙げられ、ホウ素原子であることが好ましい。

式 (2) 中、 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 はそれぞれ独立に水素原子又は芳香族残基を表し、 Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基としては、式 (1) の X_1 及び X_2 が表すアシル基が有していてもよい置換基としての芳香族残基の項で述べたものと同じものが挙げられる。

Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基は置換基を有していてもよく、該有していてもよい置換基としては、式 (1) の X_1 及び X_2 が表すアシル基が有していてもよい置換基の項で述べたものと同じものが挙げられる。

Y_1 、 Y_2 及び Y_3 が表す芳香族残基が有していてもよい置換基としては、アルコキシル基が好ましい。

式 (2) における Y_1 及び Y_2 としては、それぞれ独立に芳香族残基であることが好ましく、それぞれ独立にフェニル基又はナフチル基であることがより好ましく、フェニル基であることが更に好ましい。また、式 (1) における Y_3 としては、水素原子であることが好ましい。

【0052】

式 (2) 中、 Z_1 及び Z_2 はそれぞれ独立にハロゲン原子を表す。 Z_1 及び Z_2 が表すハロゲン原子としては、式 (1) の X_1 及び X_2 が表すアシル基が有していてもよい置換基の項で述べたものと同じものが挙げられ、フッ素原子であることが好ましい。

【0053】

式 (2) 中、 Ar_1 及び Ar_2 はそれぞれ独立に芳香環を表す。 Z_1 及び Z_2 が表す芳香環の具体例としては、式 (1) の X_1 及び X_2 が表すアシル基が有していてもよい置換基としての芳香族残基の説明部分に具体例として記載した芳香環と同様のものが挙げられ、それぞれ独立にベンゼン環又はナフタレン環であることが好ましく、ベンゼン環であることがより好ましい。

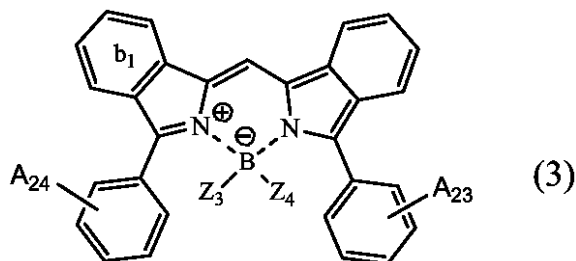
【0054】

即ち、式 (1) における R_1 としては、下記式 (3) で表される化合物のベンゼン環 b_1 上から水素原子 1 個を除いた残基であることが好ましい。尚、ベンゼン環 b_1 上の水素原子 1 個が除かれる位置は特に限定されないが、式 (3) 中のベンゼン環 b_1 を含んでなる

インドール環の 6 位であることが好ましい。

【0055】

【化12】



10

【0056】

式(3)中、 Z_3 及び Z_4 はそれぞれ独立にハロゲン原子を表す。 Z_3 及び Z_4 が表すハロゲン原子としては、式(1)の X_1 及び X_2 が表すアシル基が有していてもよい置換基としてのハロゲン原子の項で述べたものと同じものが挙げられ、フッ素原子であることが好ましい。

式(3)中、 A_{23} 及び A_{24} はそれぞれ独立に水素原子、ハロゲン原子、脂肪族炭化水素残基又はアルコキシル基を表す。

A_{23} 及び A_{24} が表すハロゲン原子、脂肪族炭化水素残基及びアルコキシル基としては、式(1)の X_1 及び X_2 が表すアシル基が有していてもよい置換基としてのハロゲン原子、脂肪族炭化水素残基及びアルコキシル基の項で述べたものと同じものが挙げられる。

20

m が2以上で R_1 が複数存在する場合には、それぞれの R_1 は互いに同じか又は異なってもよい。

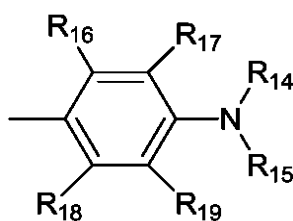
式(1)における A_{23} 及び A_{24} としては、アルコキシル基であることが好ましく、炭素数1乃至4のアルコキシル基であることがより好ましく、メトキシ基であることが更に好ましい。

【0057】

式(1)における R_2 は、下記式(3003)で表される基である。

【0058】

【化13】



30

(3003)

【0059】

式(3003)中、 R_{14} 及び R_{15} はそれぞれ独立に水素原子、芳香族残基又は脂肪族炭化水素残基を表す。

40

R_{14} 及び R_{15} が表す芳香族残基及び脂肪族炭化水素残基としては、式(1)の X_1 及び X_2 が表すアシル基が有していてもよい置換基としての芳香族残基及び脂肪族炭化水素残基の項で述べたものと同じものが挙げられる。

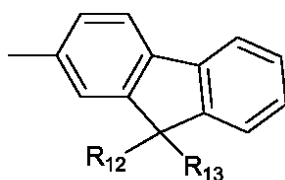
R_{14} 及び R_{15} が表す芳香族残基及び脂肪族炭化水素残基は置換基を有していてもよく、該有していてもよい置換基としては、式(1)の X_1 及び X_2 が表すアシル基が有していてもよい置換基の項で述べたものと同じものが挙げられる。

式(3003)における R_{14} 及び R_{15} としては、それぞれ独立に芳香族残基であることが好ましく、それぞれ独立に下記式(3001)で表される基であることがより好ましく、両者が同一の下記式(3001)で表される基であることが更に好ましい。

50

【0060】

【化14】



(3001)

10

【0061】

式(3001)中、 R_{12} 及び R_{13} は、それぞれ独立に水素原子または炭素数1乃至8のアルキル基を表す。

式(3001)における R_{12} 及び R_{13} としては、それぞれ独立に炭素数1乃至8のアルキル基であることが好ましく、それぞれ独立に炭素数1乃至8の直鎖アルキル基であることがより好ましく、両者が同一の炭素数1乃至8の直鎖アルキル基であることが更に好ましく、両者がn-ブチル基であることが特に好ましい。

【0062】

式(3003)中、 R_{16} 、 R_{17} 、 R_{18} 及び R_{19} はそれぞれ独立に水素原子、芳香族残基、脂肪族炭化水素残基、シアノ基、アシル基、アミド基、アルコキシル基、アルコキシカルボニル基又はスルフォニルベンゼン基を表す。

20

R_{16} 、 R_{17} 、 R_{18} 及び R_{19} が表す芳香族残基、脂肪族炭化水素残基、アミド基、アルコキシル基及びアルコキシカルボニル基としては、式(1)の X_1 及び X_2 が表すアシル基が有していてもよい置換基としての芳香族残基、脂肪族炭化水素残基、アミド基、アルコキシル基及びアルコキシカルボニル基の項で述べたものと同じものが挙げられる。

R_{16} 、 R_{17} 、 R_{18} 及び R_{19} が表すアシル基としては、式(1)の X_1 及び X_2 が表すアシル基の項で述べたものと同じものが挙げられる。

【0063】

式(3003)における R_{16} 、 R_{17} 、 R_{18} 及び R_{19} としては、それぞれ独立に水素原子又はアルコキシル基であることが好ましく、それぞれ独立に水素原子又は炭素数1乃至4のアルコキシル基であることがより好ましく、全て水素原子であることが更に好ましい。

30

【0064】

式(1)におけるnが0以外の場合には、 A_5 、 A_6 及び R_2 のいずれか複数個で環を形成してもよい。

A_5 、 A_6 及び R_2 のいずれか複数個で形成する環は置換基を有していてもよく、該有していてもよい置換基としては、式(1)の X_1 及び X_2 が表すアシル基が有していてもよい置換基の項で述べたものと同じものが挙げられる。

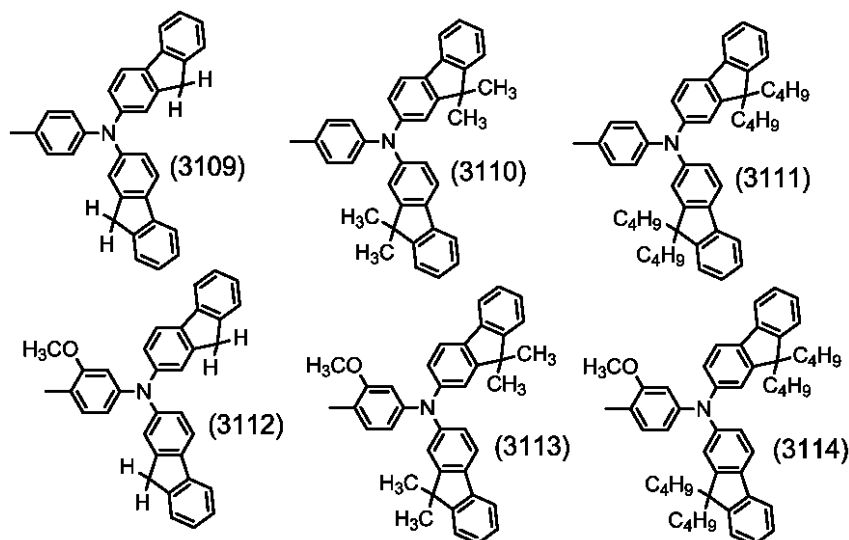
【0065】

即ち、式(1)における R_2 としては、下記式(3109)乃至(3114)のいずれかで表される基であることが特に好ましい

40

【0066】

【化 15】



10

【0067】

これらの基の中でも、式(1)における R_2 としては、式(3110)、(3111)、(3113)又は(3114)のいずれかで表される基であることが好ましく、式(3111)で表される基であることが最も好ましい。

20

【0068】

式(1)で表される化合物がカルボキシル基、リン酸基、ヒドロキシル基及びスルホン酸基等の酸性基を置換基として有する場合は、それぞれ塩を形成してもよく、塩としては例えばリチウム、ナトリウム、カリウムなどのアルカリ金属、又はマグネシウム、カルシウムなどのアルカリ土類金属などとの塩、又は有機塩基、例えばテトラメチルアンモニウム、テトラブチルアンモニウム、ピリジニウム、イミダゾリウム、ピペラジニウム、ピペリジニウムなどの4級アンモニウム塩のような塩を挙げることができる。

【0069】

式(1)で表される化合物は、シス体、トランス体、ラセミ体等の構造異性体を取り得るが、特に限定されず、いずれの異性体も本発明における光増感用色素として良好に使用

30

【0070】

式(1)における m 、 l 、 n 、 j 、 X_1 乃至 X_2 、 Q_1 乃至 Q_2 、 A_1 乃至 A_8 及び R_1 乃至 R_2 の好ましい組合せは、上記した m 、 l 、 n 、 j 、 X_1 乃至 X_2 、 Q_1 乃至 Q_2 、 A_1 乃至 A_8 及び R_1 乃至 R_2 のそれぞれにおいて好ましいとされるもの同士の組み合わせであり、より好ましい組み合わせは以下の通りである。

即ち、好ましくは l 及び n が0であり、 m 及び j が1乃至3であり（更に好ましくは m が1であり j が1乃至3である）、 X_1 と X_2 がそれぞれ独立にカルボキシル基、リン酸基、シアノ基又はアシル基であり、 Q_1 及び Q_2 がそれぞれ独立に酸素原子、硫黄原子又はセレン原子であり、 A_1 乃至 A_8 がそれぞれ独立に水素原子または脂肪族炭化水素残基であり、 R_1 が式(2)で表される化合物の芳香環 Ar_1 上から水素原子1個を除いた残基であって、 Y_1 及び Y_2 がそれぞれ独立にフェニル基又はナフチル基であり、 Y_3 が水素原子であり、 Ar_1 及び Ar_2 がそれぞれ独立にベンゼン環又はナフタレン環であり、かつ R_2 が上記式(3109)乃至(3114)のいずれかで表される基である組み合わせである。

40

【0071】

より好ましくは、 l 及び n が0であり、 m 及び j が1乃至2であり（更に好ましくは m が1であり j が1乃至2である）、 X_1 と X_2 がそれぞれ独立にカルボキシル基、シアノ基又はアシル基であり、 Q_1 及び Q_2 がそれぞれ独立に酸素原子、硫黄原子又はセレン原子であり、 A_1 乃至 A_8 がそれぞれ独立に水素原子または炭素数1乃至8の直鎖アルキル基であり、 R_1 が式(3)で表される化合物の芳香環 Ar_1 上から水素原子1個を除いた残基であ

50

り、かつ R_2 が上記式 (3 1 1 0)、(3 1 1 1)、(3 1 1 3) 又は (3 1 1 4) のいずれかで表される基である組み合わせである。

特に好ましくは、 l 及び n が 0 であり、 m 及び j が 1 乃至 2 であり（更に好ましくは m が 1 であり j が 1 乃至 2 である）、 X_1 と X_2 の一方がカルボキシル基でかつ他方がカルボキシル基、シアノ基又はアシル基であり、 Q_1 及び Q_2 が硫黄原子であり、 A_1 乃至 A_8 が水素原子であり、 R_1 が式 (3) で表される化合物の芳香環 Ar_1 上から水素原子 1 個を除いた残基であって、 Z_3 及び Z_4 がフッ素原子であり、 A_{23} 及び A_{24} がそれぞれ独立に炭素数 1 乃至 4 のアルコキシル基であり、 R_2 が式 (3 1 1 1) で表される基である組み合わせである。

【0072】

10

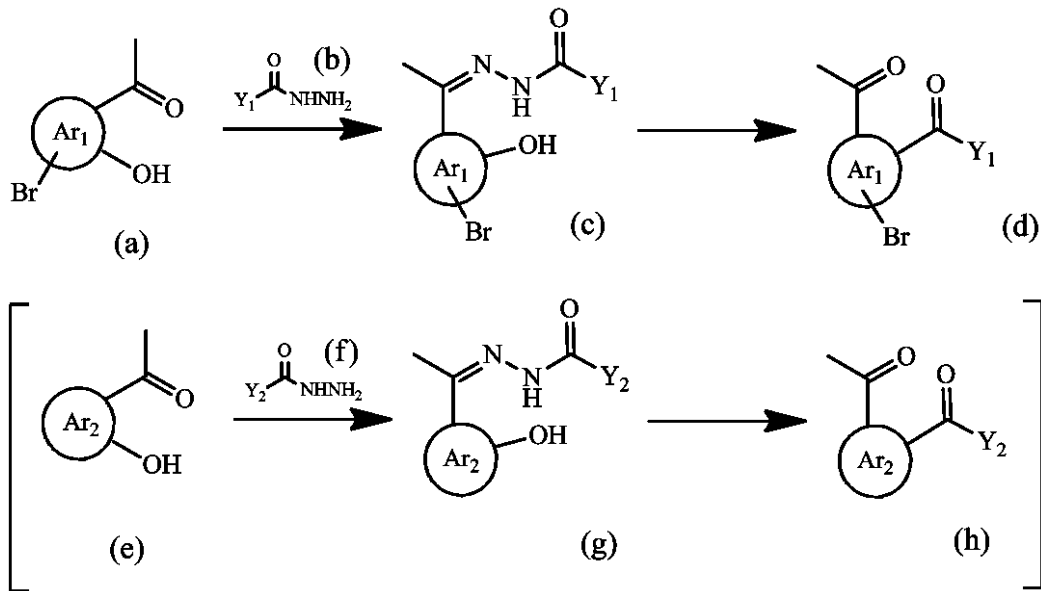
前記式 (1) で表される化合物は、例えば、以下に示す反応式によって製造できるが、本発明はこれらの合成法に限定されるものではない。

先ず中間原料である式 (m) で表される化合物の合成方法について説明する。原料である式 (a) で表される化合物と式 (b) で表される化合物とを、例えばアルコール等の適当な溶媒中で反応させ、式 (c) で表される化合物を得る。次に式 (c) で表される化合物を、例えばテトラヒドロフラン等の適当な溶媒中で、四酢酸鉛で処理し、式 (d) で表される化合物を得る。他方、前記と同様の手順で、原料である式 (e) で表される化合物と式 (f) で表される化合物との反応により得た式 (g) で表される化合物から、式 (h) で表される化合物を得る。次に式 (d) で表される化合物と式 (h) で表される化合物とを、例えば適当なアルコールと酢酸混合溶媒中、アンモニア水を加えて室温で反応させた後、分離、精製することで、式 (i) で表される化合物を得る。次いで、式 (i) で表される化合物を半金属 M のハロゲン化物（三ハロゲン化ホウ素又はアンチモン、若しくは四ハロゲン化ケイ素又はゲルマニウム等）類と反応させて、式 (j) で表される化合物を得る。更に、この (j) で表される化合物と、式 (k) で表される化合物をクロスカップリング等により結合させることにより式 (m) で表される化合物を得る。尚、 Y_3 は、必要に応じてグリニャール反応などにより水素原子以外の置換基を置換させることも可能である。

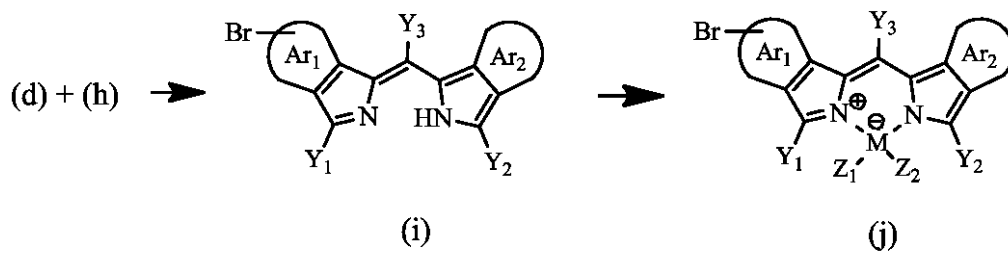
20

【0073】

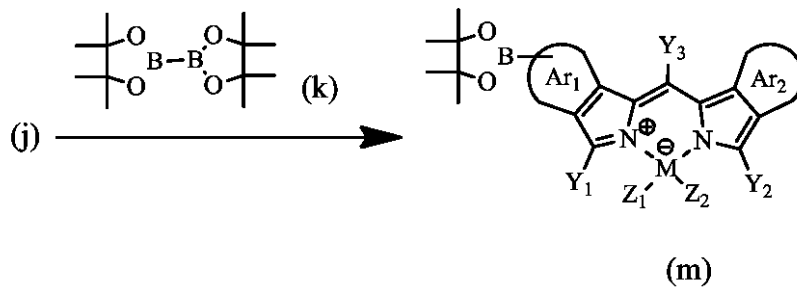
【化 1 6】



10



20



30

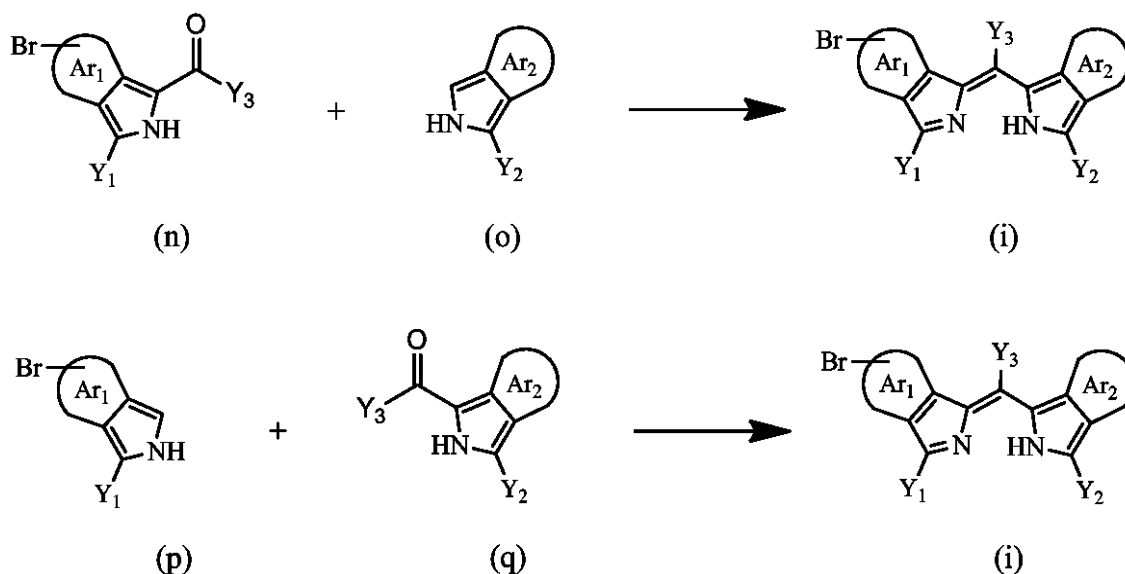
【0074】

また、予め公知の方法で合成した式 (n) で表される化合物と式 (o) で表される化合物とを、若しくは予め公知の方法で合成した式 (p) で表される化合物と式 (q) で表される化合物とを、臭化水素酸や塩化水素等の酸触媒の存在下、エタノールやテトラヒドロフラン等の溶媒中で反応させて得られた式 (i) で表される化合物に、上記と同様の処理を施すことにより式 (m) で表される化合物を得ることもできる。

40

【0075】

【化 1 7】



10

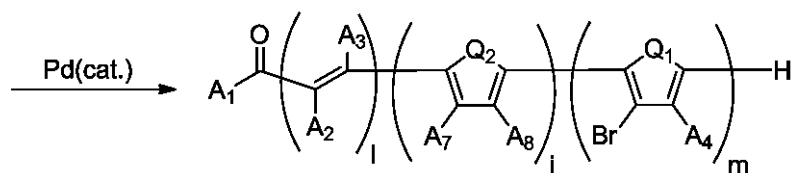
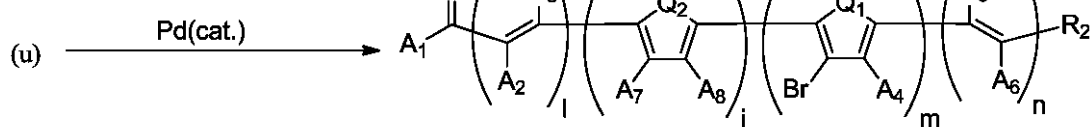
【0076】

式 (r) で表される化合物と式 (s) で表されるボロン酸類との反応により式 (t) で表される化合物を得る。この式 (t) で表される化合物を N-ヨードこはく酸イミドで処理して式 (u) で表される化合物を得る。これに式 (v) で表されるボロン酸類を反応させて式 (w) で表される化合物に誘導し、次いで上記で得られた式 (m) で表される化合物との反応により式 (x) で表されるカルボニル化合物を得る。この式 (x) で表される化合物と式 (y) で表される活性メチレンを有する化合物を、必要であれば苛性ソーダ、ナトリウムメチラート、酢酸ナトリウム、ジエチルアミン、トリエチルアミン、ピペリジン、ピペラジン、ジアザビスクロウンデセンなどの塩基性触媒の存在下、メタノール、エタノール、イソプロパノール、ブタノールなどのアルコール類やジメチルホルムアミド、N-メチルピロリドンなどの非プロトン性極性溶媒やトルエン、無水酢酸、アセトニトリルなどの溶媒中、通常 20℃乃至 180℃、好ましくは 50℃乃至 150℃で縮合することにより、本発明の式 (1) で表される化合物 (色素) が得られる。上記反応において、式 (y) で表される活性メチレンを有する化合物がエステル基を有する場合、縮合反応後、加水分解等を行うことによりカルボン酸体を得ることも可能である。

20

30

【0077】

$$\text{Br}-\left(\text{Q}_2\text{A}_7\text{A}_8\right)_j-\left(\text{Q}_1\text{BrA}_4\right)_m-\text{H} + \text{A}_1\text{C}(=\text{A}_2)\text{A}_3\text{B}(\text{O}-\text{C}(\text{CH}_3)_2\text{O})_2\text{C}(\text{CH}_3)_2$$

$$(t) \xrightarrow{\text{NIS}} A_1-C(=O)-C(A_2)=C(A_3)-[C_1(A_7)-C_2(Q_2)-C_3(A_8)-C_4(Q_2)]_i-[C_1(Br)-C_2(Q_1)-C_3(A_4)-C_4(Q_1)]_m$$
$$\text{Boc}-(\text{A}_5=\text{A}_6)_n-\text{R}_2 \quad (\text{v})$$

$$(w) \xrightarrow[\text{Pd(cat.)}]{(m)} A_1-C(=O)-C(A_2)=C(A_3)-[C(A_7)=C(A_8)-Q_2]_i-[C(R_1)=C(A_4)-Q_1]_m-C(A_5)=C(A_6)-R_2$$
$$\begin{array}{c} \text{X} \\ \diagup \\ \text{H}_2\text{C} \\ \diagdown \\ \text{Y} \end{array}$$
$$(X) \longrightarrow (1)$$

また、特に式（１）における l が 0 の化合物の場合には、式（ r ）で表される化合物と式（ s ）で表されるボロン酸類との反応を行わず、式（ t ）で表される化合物の代わりに式（ t' ）で表される化合物を使用することで同様に合成できる。

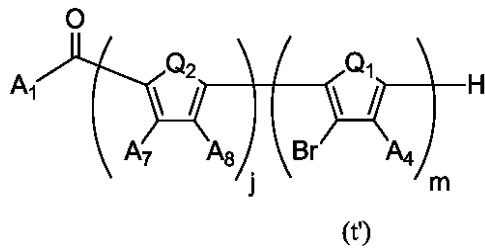
10

20

30

40

【化 1 9】

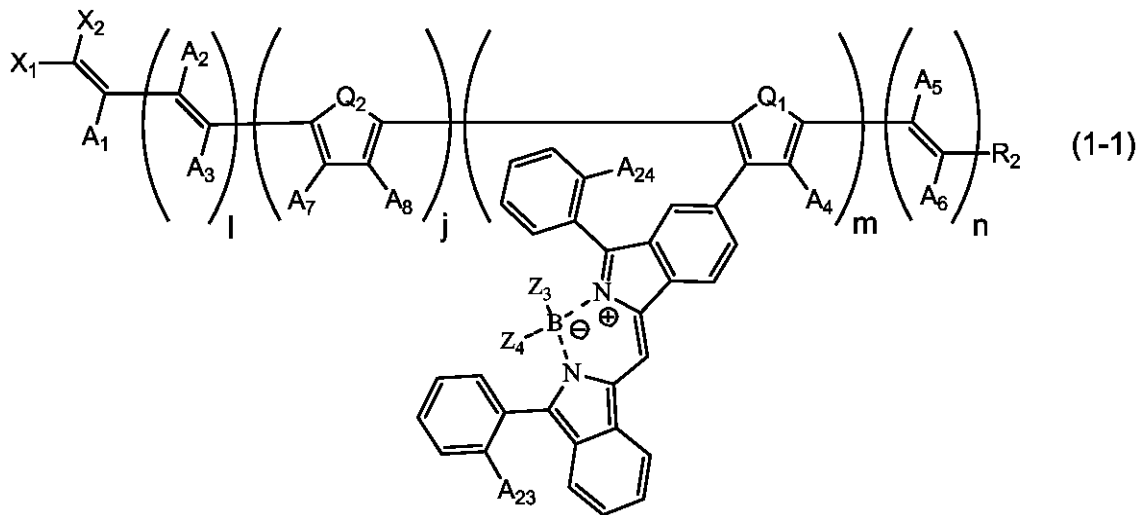


【 0 0 8 0】

下記式（1-1）で表される化合物（式（1）における R_1 が式（3）で表される化合物の残基である化合物）の具体例を、表1乃至表19に示す。各表において、Phはフェニル基を意味する。（2001）～（2017）と表記したものは、 X_1 と X_2 が結合して形成する環を表したものであり、上記式（2001）～（2017）に対応する。（3109）乃至（3114）との表記は、上記式（3109）乃至（3114）に対応する。

【 0 0 8 1】

【化 2 0】



【 0 0 8 2】

10

20

30

【表 1】

表1 式(1-1)で表される化合物の具体例

化合物	m	1	n	j	X ₁	X ₂	Q ₁	Q ₂	A ₁	A ₂	A ₃	A ₄	A ₅	A ₆	A ₇	A ₈	Z ₃	Z ₄	A ₂₃	A ₂₄	R ₂
1	1	0	0	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
2	1	0	0	2	COOLi	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
3	1	0	0	2	COONa	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
4	1	0	0	2	COOK	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
5	1	0	0	2	COOH	COOH	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
6	1	0	0	2	COOH	COCH ₃	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
7	1	0	0	2	PO(OH) ₂	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
8	1	0	0	2	(2001)		S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
9	1	0	0	2	(2002)		S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
10	1	0	0	2	(2003)		S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
11	1	0	0	2	(2004)		S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
12	1	0	0	2	(2005)		S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
13	1	0	0	2	(2006)		S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
14	1	0	0	2	(2007)		S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
15	1	0	0	2	(2008)		S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
16	1	0	0	2	(2009)		S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
17	1	0	0	2	(2010)		S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
18	1	0	0	2	(2011)		S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
19	1	0	0	2	(2012)		S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
20	1	0	0	2	(2013)		S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
21	1	0	0	2	(2014)		S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
22	1	0	0	2	(2015)		S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
23	1	0	0	2	(2016)		S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
24	1	0	0	2	(2017)		S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
25	1	0	0	2	COOH	CN	O	O	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
26	1	0	0	2	COOH	CN	Se	Se	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
27	1	0	0	2	COOH	CN	NH	NH	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
28	1	0	0	2	COOH	CN	NCH ₃	NCH ₃	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
29	1	0	0	2	COOH	CN	NC ₄ H ₉	NC ₄ H ₉	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
30	1	0	0	2	COOH	CN	NPh	NPh	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
31	1	0	0	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	CH ₃	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
32	1	0	0	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	C ₄ H ₉	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
33	1	0	0	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	C ₆ H ₁₃	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
34	1	0	0	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	C ₈ H ₁₇	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
35	1	0	0	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	Cl	Cl	OCH ₃	OCH ₃	(311)
36	1	0	0	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	Br	Br	OCH ₃	OCH ₃	(311)
37	1	0	0	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	I	I	OCH ₃	OCH ₃	(311)
38	1	0	0	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OC ₂ H ₅	OC ₂ H ₅	(311)

【 0 0 8 3 】

10

20

30

40

【表 2】

表2 式(1-1)で表される化合物の具体例

化合物	m	1	n	j	X ₁	X ₂	Q ₁	Q ₂	A ₁	A ₂	A ₃	A ₄	A ₅	A ₆	A ₇	A ₈	Z ₃	Z ₄	A ₂₃	A ₂₄	R ₂
39	1	0	0	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OC ₃ H ₇	OC ₃ H ₇	(311)
40	1	0	0	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OC ₄ H ₉	OC ₄ H ₉	(311)
41	1	0	0	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3109)
42	1	0	0	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3110)
43	1	0	0	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3112)
44	1	0	0	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3113)
45	1	0	0	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3114)
46	2	0	0	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
47	2	0	0	2	COOLi	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
48	2	0	0	2	COONa	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
49	2	0	0	2	COOK	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
50	2	0	0	2	COOH	COOH	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
51	2	0	0	2	COOH	COCH ₃	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
52	2	0	0	2	PO(OH) ₂	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
53	2	0	0	2	(2001)		S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
54	2	0	0	2	(2002)		S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
55	2	0	0	2	(2003)		S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
56	2	0	0	2	(2004)		S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
57	2	0	0	2	(2005)		S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
58	2	0	0	2	(2006)		S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
59	2	0	0	2	(2007)		S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
60	2	0	0	2	(2008)		S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
61	2	0	0	2	(2009)		S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
62	2	0	0	2	(2010)		S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
63	2	0	0	2	(2011)		S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
64	2	0	0	2	(2012)		S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
65	2	0	0	2	(2013)		S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
66	2	0	0	2	(2014)		S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
67	2	0	0	2	(2015)		S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
68	2	0	0	2	(2016)		S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
69	2	0	0	2	(2017)		S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
70	2	0	0	2	COOH	CN	O	O	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
71	2	0	0	2	COOH	CN	Se	Se	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
72	2	0	0	2	COOH	CN	NH	NH	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
73	2	0	0	2	COOH	CN	NCH ₃	NCH ₃	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
74	2	0	0	2	COOH	CN	NC ₄ H ₉	NC ₄ H ₉	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
75	2	0	0	2	COOH	CN	NPh	NPh	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
76	2	0	0	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	CH ₃	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)

【 0 0 8 4 】

10

20

30

40

【表 3】

表3 式(1-1)で表される化合物の具体例

化合物	m	l	n	j	X ₁	X ₂	Q ₁	Q ₂	A ₁	A ₂	A ₃	A ₄	A ₅	A ₆	A ₇	A ₈	Z ₃	Z ₄	A ₂₃	A ₂₄	R ₂	
77	2	0	0	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	C ₄ H ₉	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)	
78	2	0	0	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	C ₆ H ₁₃	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)	
79	2	0	0	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	C ₈ H ₁₇	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)	
80	2	0	0	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	-	H	H	Cl	Cl	OCH ₃	OCH ₃	(311)
81	2	0	0	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	-	H	H	Br	Br	OCH ₃	OCH ₃	(311)
82	2	0	0	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	-	H	H	I	I	OCH ₃	OCH ₃	(311)
83	2	0	0	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	-	H	H	F	F	OC ₂ H ₅	OC ₂ H ₅	(311)
84	2	0	0	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	-	H	H	F	F	OC ₃ H ₇	OC ₃ H ₇	(311)
85	2	0	0	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	-	H	H	F	F	OC ₄ H ₉	OC ₄ H ₉	(311)
86	2	0	0	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3109)
87	2	0	0	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3110)
88	2	0	0	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3112)
89	2	0	0	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3113)
90	2	0	0	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3114)
91	3	0	0	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
92	3	0	0	2	COOLi	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
93	3	0	0	2	COONa	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
94	3	0	0	2	COOK	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
95	3	0	0	2	COOH	COOH	S	S	H	-	-	H	-	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
96	3	0	0	2	COOH	COCH ₃	S	S	H	-	-	H	-	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
97	3	0	0	2	PO(OH) ₂	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
98	3	0	0	2	(2001)		S	S	H	-	-	H	-	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
99	3	0	0	2	(2002)		S	S	H	-	-	H	-	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
100	3	0	0	2	(2003)		S	S	H	-	-	H	-	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
101	3	0	0	2	(2004)		S	S	H	-	-	H	-	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
102	3	0	0	2	(2005)		S	S	H	-	-	H	-	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
103	3	0	0	2	(2006)		S	S	H	-	-	H	-	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
104	3	0	0	2	(2007)		S	S	H	-	-	H	-	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
105	3	0	0	2	(2008)		S	S	H	-	-	H	-	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
106	3	0	0	2	(2009)		S	S	H	-	-	H	-	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
107	3	0	0	2	(2010)		S	S	H	-	-	H	-	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
108	3	0	0	2	(2011)		S	S	H	-	-	H	-	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
109	3	0	0	2	(2012)		S	S	H	-	-	H	-	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
110	3	0	0	2	(2013)		S	S	H	-	-	H	-	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
111	3	0	0	2	(2014)		S	S	H	-	-	H	-	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
112	3	0	0	2	(2015)		S	S	H	-	-	H	-	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
113	3	0	0	2	(2016)		S	S	H	-	-	H	-	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
114	3	0	0	2	(2017)		S	S	H	-	-	H	-	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)

【0085】

10

20

30

40

【表 4】

表4 式(1-1)で表される化合物の具体例

化合物	m	1	n	j	X ₁	X ₂	Q ₁	Q ₂	A ₁	A ₂	A ₃	A ₄	A ₅	A ₆	A ₇	A ₈	Z ₃	Z ₄	A ₂₃	A ₂₄	R ₂
115	3	0	0	2	COOH	CN	O	O	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
116	3	0	0	2	COOH	CN	Se	Se	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
117	3	0	0	2	COOH	CN	NH	NH	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
118	3	0	0	2	COOH	CN	NCH ₃	NCH ₃	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
119	3	0	0	2	COOH	CN	NC ₄ H ₉	NC ₄ H ₉	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
120	3	0	0	2	COOH	CN	NPh	NPh	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
121	3	0	0	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	CH ₃	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
122	3	0	0	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	C ₄ H ₉	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
123	3	0	0	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	C ₆ H ₁₃	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
124	3	0	0	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	C ₈ H ₁₇	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
125	3	0	0	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	Cl	Cl	OCH ₃	OCH ₃	(311)
126	3	0	0	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	Br	Br	OCH ₃	OCH ₃	(311)
127	3	0	0	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	I	I	OCH ₃	OCH ₃	(311)
128	3	0	0	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OC ₂ H ₅	OC ₂ H ₅	(311)
129	3	0	0	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OC ₃ H ₇	OC ₃ H ₇	(311)
130	3	0	0	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OC ₄ H ₉	OC ₄ H ₉	(311)
131	3	0	0	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3109)
132	3	0	0	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3110)
133	3	0	0	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3112)
134	3	0	0	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3113)
135	3	0	0	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3114)
136	1	0	0	0	COOH	CN	S	-	H	-	-	H	-	-	-	-	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
137	1	0	0	0	COOLi	CN	S	-	H	-	-	H	-	-	-	-	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
138	1	0	0	0	COONa	CN	S	-	H	-	-	H	-	-	-	-	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
139	1	0	0	0	COOK	CN	S	-	H	-	-	H	-	-	-	-	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
140	1	0	0	0	COOH	COOH	S	-	H	-	-	H	-	-	-	-	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
141	1	0	0	0	COOH	COCH ₃	S	-	H	-	-	H	-	-	-	-	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
142	1	0	0	0	P(OH) ₂	CN	S	-	H	-	-	H	-	-	-	-	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
143	1	0	0	0	(2001)		S	-	H	-	-	H	-	-	-	-	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
144	1	0	0	0	(2002)		S	-	H	-	-	H	-	-	-	-	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
145	1	0	0	0	(2003)		S	-	H	-	-	H	-	-	-	-	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
146	1	0	0	0	(2004)		S	-	H	-	-	H	-	-	-	-	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
147	1	0	0	0	(2005)		S	-	H	-	-	H	-	-	-	-	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
148	1	0	0	0	(2006)		S	-	H	-	-	H	-	-	-	-	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
149	1	0	0	0	(2007)		S	-	H	-	-	H	-	-	-	-	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
150	1	0	0	0	(2008)		S	-	H	-	-	H	-	-	-	-	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
151	1	0	0	0	(2009)		S	-	H	-	-	H	-	-	-	-	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
152	1	0	0	0	(2010)		S	-	H	-	-	H	-	-	-	-	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)

【 0 0 8 6 】

10

20

30

40

【表 5】

表5 式(1-1)で表される化合物の具体例

化合物	m	1	n	j	X ₁	X ₂	Q ₁	Q ₂	A ₁	A ₂	A ₃	A ₄	A ₅	A ₆	A ₇	A ₈	Z ₃	Z ₄	A ₂₃	A ₂₄	R ₂
153	1	0	0	0		(2011)	S	-	H	-	-	H	-	-	-	-	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
154	1	0	0	0		(2012)	S	-	H	-	-	H	-	-	-	-	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
155	1	0	0	0		(2013)	S	-	H	-	-	H	-	-	-	-	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
156	1	0	0	0		(2014)	S	-	H	-	-	H	-	-	-	-	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
157	1	0	0	0		(2015)	S	-	H	-	-	H	-	-	-	-	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
158	1	0	0	0		(2016)	S	-	H	-	-	H	-	-	-	-	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
159	1	0	0	0		(2017)	S	-	H	-	-	H	-	-	-	-	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
160	1	0	0	0	COOH	CN	O	-	H	-	-	H	-	-	-	-	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
161	1	0	0	0	COOH	CN	Se	-	H	-	-	H	-	-	-	-	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
162	1	0	0	0	COOH	CN	NH	-	H	-	-	H	-	-	-	-	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
163	1	0	0	0	COOH	CN	NCH ₃	-	H	-	-	H	-	-	-	-	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
164	1	0	0	0	COOH	CN	NC ₄ H ₉	-	H	-	-	H	-	-	-	-	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
165	1	0	0	0	COOH	CN	NPh	-	H	-	-	H	-	-	-	-	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
166	1	0	0	0	COOH	CN	S	-	H	-	-	H	-	-	-	-	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
167	1	0	0	0	COOH	CN	S	-	H	-	-	H	-	-	-	-	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
168	1	0	0	0	COOH	CN	S	-	H	-	-	H	-	-	-	-	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
169	1	0	0	0	COOH	CN	S	-	H	-	-	H	-	-	-	-	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
170	1	0	0	0	COOH	CN	S	-	H	-	-	H	-	-	-	-	Cl	Cl	OCH ₃	OCH ₃	(311)
171	1	0	0	0	COOH	CN	S	-	H	-	-	H	-	-	-	-	Br	Br	OCH ₃	OCH ₃	(311)
172	1	0	0	0	COOH	CN	S	-	H	-	-	H	-	-	-	-	I	I	OCH ₃	OCH ₃	(311)
173	1	0	0	0	COOH	CN	S	-	H	-	-	H	-	-	-	-	F	F	OC ₂ H ₅	OC ₂ H ₅	(311)
174	1	0	0	0	COOH	CN	S	-	H	-	-	H	-	-	-	-	F	F	OC ₃ H ₇	OC ₃ H ₇	(311)
175	1	0	0	0	COOH	CN	S	-	H	-	-	H	-	-	-	-	F	F	OC ₄ H ₉	OC ₄ H ₉	(311)
176	1	0	0	0	COOH	CN	S	-	H	-	-	H	-	-	-	-	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3109)
177	1	0	0	0	COOH	CN	S	-	H	-	-	H	-	-	-	-	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3110)
178	1	0	0	0	COOH	CN	S	-	H	-	-	H	-	-	-	-	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3112)
179	1	0	0	0	COOH	CN	S	-	H	-	-	H	-	-	-	-	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3113)
180	1	0	0	0	COOH	CN	S	-	H	-	-	H	-	-	-	-	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3114)
181	1	0	0	1	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
182	1	0	0	1	COOLi	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
183	1	0	0	1	COONa	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
184	1	0	0	1	COOK	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
185	1	0	0	1	COOH	COOH	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
186	1	0	0	1	COOH	COCH ₃	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
187	1	0	0	1	PO(OH) ₂	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
188	1	0	0	1	(2001)		S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
189	1	0	0	1	(2002)		S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
190	1	0	0	1	(2003)		S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)

【 0 0 8 7 】

【表 6】

表6 式(1-1)で表される化合物の具体例

化合物	m	l	n	j	X ₁	X ₂	Q ₁	Q ₂	A ₁	A ₂	A ₃	A ₄	A ₅	A ₆	A ₇	A ₈	Z ₃	Z ₄	A ₂₃	A ₂₄	R ₂
191	1	0	0	1	(2004)		S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
192	1	0	0	1	(2005)		S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
193	1	0	0	1	(2006)		S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
194	1	0	0	1	(2007)		S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
195	1	0	0	1	(2008)		S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
196	1	0	0	1	(2009)		S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
197	1	0	0	1	(2010)		S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
198	1	0	0	1	(2011)		S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
199	1	0	0	1	(2012)		S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
200	1	0	0	1	(2013)		S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
201	1	0	0	1	(2014)		S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
202	1	0	0	1	(2015)		S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
203	1	0	0	1	(2016)		S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
204	1	0	0	1	(2017)		S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
205	1	0	0	1	COOH	CN	O	O	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
206	1	0	0	1	COOH	CN	Se	Se	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
207	1	0	0	1	COOH	CN	NH	NH	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
208	1	0	0	1	COOH	CN	NCH ₃	NCH ₃	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
209	1	0	0	1	COOH	CN	NC ₄ H ₉	NC ₄ H ₉	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
210	1	0	0	1	COOH	CN	NPh	NPh	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
211	1	0	0	1	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	CH ₃	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
212	1	0	0	1	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	C ₄ H ₉	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
213	1	0	0	1	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	C ₆ H ₁₃	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
214	1	0	0	1	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	C ₆ H ₁₇	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
215	1	0	0	1	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	Cl	Cl	OCH ₃	OCH ₃	(311)
216	1	0	0	1	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	Br	Br	OCH ₃	OCH ₃	(311)
217	1	0	0	1	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	I	I	OCH ₃	OCH ₃	(311)
218	1	0	0	1	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OC ₂ H ₅	OC ₂ H ₅	(311)
219	1	0	0	1	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OC ₃ H ₇	OC ₃ H ₇	(311)
220	1	0	0	1	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OC ₄ H ₉	OC ₄ H ₉	(311)
221	1	0	0	1	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3109)
222	1	0	0	1	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3110)
223	1	0	0	1	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3112)
224	1	0	0	1	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3113)
225	1	0	0	1	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3114)
226	1	0	0	3	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
227	1	0	0	3	COOLi	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
228	1	0	0	3	COONa	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)

【 0 0 8 8 】

【表 7】

表7 式(1-1)で表される化合物の具体例

化合物	m	l	n	j	X ₁	X ₂	Q ₁	Q ₂	A ₁	A ₂	A ₃	A ₄	A ₅	A ₆	A ₇	A ₈	Z ₃	Z ₄	A ₂₃	A ₂₄	R ₂
229	1	0	0	3	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
230	1	0	0	3	COOH	COOH	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
231	1	0	0	3	COOH	COCH ₃	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
232	1	0	0	3	PO(OH) ₂	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
233	1	0	0	3	(2001)		S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
234	1	0	0	3	(2002)		S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
235	1	0	0	3	(2003)		S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
236	1	0	0	3	(2004)		S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
237	1	0	0	3	(2005)		S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
238	1	0	0	3	(2006)		S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
239	1	0	0	3	(2007)		S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
240	1	0	0	3	(2008)		S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
241	1	0	0	3	(2009)		S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
242	1	0	0	3	(2010)		S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
243	1	0	0	3	(2011)		S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
244	1	0	0	3	(2012)		S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
245	1	0	0	3	(2013)		S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
246	1	0	0	3	(2014)		S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
247	1	0	0	3	(2015)		S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
248	1	0	0	3	(2016)		S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
249	1	0	0	3	(2017)		S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
250	1	0	0	3	COOH	CN	O	O	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
251	1	0	0	3	COOH	CN	Se	Se	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
252	1	0	0	3	COOH	CN	NH	NH	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
253	1	0	0	3	COOH	CN	NCH ₃	NCH ₃	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
254	1	0	0	3	COOH	CN	NC ₄ H ₉	NC ₄ H ₉	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
255	1	0	0	3	COOH	CN	NPh	NPh	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
256	1	0	0	3	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	CH ₃	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
257	1	0	0	3	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	C ₄ H ₉	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
258	1	0	0	3	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	C ₆ H ₁₃	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
259	1	0	0	3	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	C ₆ H ₁₇	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
260	1	0	0	3	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	Cl	Cl	OCH ₃	OCH ₃	(311)
261	1	0	0	3	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	Br	Br	OCH ₃	OCH ₃	(311)
262	1	0	0	3	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	I	I	OCH ₃	OCH ₃	(311)
263	1	0	0	3	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OC ₂ H ₅	OC ₂ H ₅	(311)
264	1	0	0	3	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OC ₃ H ₇	OC ₃ H ₇	(311)
265	1	0	0	3	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OC ₄ H ₉	OC ₄ H ₉	(311)
266	1	0	0	3	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3109)

【0089】

10

20

30

40

【表 8】

表8 式(1-1)で表される化合物の具体例

化合物	m	l	n	j	X ₁	X ₂	Q ₁	Q ₂	A ₁	A ₂	A ₃	A ₄	A ₅	A ₆	A ₇	A ₈	Z ₃	Z ₄	A ₂₃	A ₂₄	R ₂
267	1	0	0	3	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3110)
268	1	0	0	3	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3112)
269	1	0	0	3	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3113)
270	1	0	0	3	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3114)
271	1	1	0	2	COOH	CN	S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
272	1	1	0	2	COOLi	CN	S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
273	1	1	0	2	COONa	CN	S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
274	1	1	0	2	COOK	CN	S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
275	1	1	0	2	COOH	COOH	S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
276	1	1	0	2	COOH	COCH ₃	S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
277	1	1	0	2	PO(OH) ₂	CN	S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
278	1	1	0	2	(2001)		S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
279	1	1	0	2	(2002)		S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
280	1	1	0	2	(2003)		S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
281	1	1	0	2	(2004)		S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
282	1	1	0	2	(2005)		S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
283	1	1	0	2	(2006)		S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
284	1	1	0	2	(2007)		S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
285	1	1	0	2	(2008)		S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
286	1	1	0	2	(2009)		S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
287	1	1	0	2	(2010)		S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
288	1	1	0	2	(2011)		S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
289	1	1	0	2	(2012)		S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
290	1	1	0	2	(2013)		S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
291	1	1	0	2	(2014)		S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
292	1	1	0	2	(2015)		S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
293	1	1	0	2	(2016)		S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
294	1	1	0	2	(2017)		S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
295	1	1	0	2	COOH	CN	O	O	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
296	1	1	0	2	COOH	CN	Se	Se	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
297	1	1	0	2	COOH	CN	NH	NH	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
298	1	1	0	2	COOH	CN	NCH ₃	NCH ₃	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
299	1	1	0	2	COOH	CN	NC ₄ H ₉	NC ₄ H ₉	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
300	1	1	0	2	COOH	CN	NPh	NPh	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
301	1	1	0	2	COOH	CN	S	S	H	H	H	H	-	-	CH ₃	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
302	1	1	0	2	COOH	CN	S	S	H	H	H	H	-	-	C ₄ H ₉	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
303	1	1	0	2	COOH	CN	S	S	H	H	H	H	-	-	C ₆ H ₁₃	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
304	1	1	0	2	COOH	CN	S	S	H	H	H	H	-	-	C ₆ H ₁₇	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)

【 0 0 9 0 】

10

20

30

40

【表 9】

表9 式(1-1)で表される化合物の具体例

化合物	m	l	n	j	X ₁	X ₂	Q ₁	Q ₂	A ₁	A ₂	A ₃	A ₄	A ₅	A ₆	A ₇	A ₈	Z ₃	Z ₄	A ₂₃	A ₂₄	R ₂
305	1	1	0	2	COOH	CN	S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	Cl	Cl	OCH ₃	OCH ₃	(311)
306	1	1	0	2	COOH	CN	S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	Br	Br	OCH ₃	OCH ₃	(311)
307	1	1	0	2	COOH	CN	S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	I	I	OCH ₃	OCH ₃	(311)
308	1	1	0	2	COOH	CN	S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OC ₂ H ₅	OC ₂ H ₅	(311)
309	1	1	0	2	COOH	CN	S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OC ₃ H ₇	OC ₃ H ₇	(311)
310	1	1	0	2	COOH	CN	S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OC ₄ H ₉	OC ₄ H ₉	(311)
311	1	1	0	2	COOH	CN	S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3109)
312	1	1	0	2	COOH	CN	S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3110)
313	1	1	0	2	COOH	CN	S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3112)
314	1	1	0	2	COOH	CN	S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3113)
315	1	1	0	2	COOH	CN	S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3114)
316	1	1	0	2	COOH	CN	S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
317	1	1	0	2	COOLi	CN	S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
318	1	1	0	2	COONa	CN	S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
319	1	1	0	2	COOK	CN	S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
320	1	1	0	2	COOH	COOH	S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
321	1	1	0	2	COOH	COCH ₃	S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
322	1	1	0	2	PO(OH) ₂	CN	S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
323	1	1	0	2	(2001)		S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
324	1	1	0	2	(2002)		S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
325	1	1	0	2	(2003)		S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
326	1	1	0	2	(2004)		S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
327	1	1	0	2	(2005)		S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
328	1	1	0	2	(2006)		S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
329	1	1	0	2	(2007)		S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
330	1	1	0	2	(2008)		S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
331	1	1	0	2	(2009)		S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
332	1	1	0	2	(2010)		S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
333	1	1	0	2	(2011)		S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
334	1	1	0	2	(2012)		S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
335	1	1	0	2	(2013)		S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
336	1	1	0	2	(2014)		S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
337	1	1	0	2	(2015)		S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
338	1	1	0	2	(2016)		S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
339	1	1	0	2	(2017)		S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
340	1	1	0	2	COOH	CN	O	O	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
341	1	1	0	2	COOH	CN	Se	Se	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
342	1	1	0	2	COOH	CN	NH	NH	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)

【0091】

10

20

30

40

【表 10】

表10 式(1-1)で表される化合物の具体例

化合物	m	1	n	j	X ₁	X ₂	Q ₁	Q ₂	A ₁	A ₂	A ₃	A ₄	A ₅	A ₆	A ₇	A ₈	Z ₃	Z ₄	A ₂₃	A ₂₄	R ₂
343	1	1	0	2	COOH	CN	NCH ₃	NCH ₃	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
344	1	1	0	2	COOH	CN	NC ₄ H ₉	NC ₄ H ₉	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
345	1	1	0	2	COOH	CN	NPh	NPh	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
346	1	1	0	2	COOH	CN	S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	CH ₃	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
347	1	1	0	2	COOH	CN	S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	C ₄ H ₉	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
348	1	1	0	2	COOH	CN	S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	C ₆ H ₁₃	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
349	1	1	0	2	COOH	CN	S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	C ₈ H ₁₇	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
350	1	1	0	2	COOH	CN	S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	Cl	Cl	OCH ₃	OCH ₃	(311)
351	1	1	0	2	COOH	CN	S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	Br	Br	OCH ₃	OCH ₃	(311)
352	1	1	0	2	COOH	CN	S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	I	I	OCH ₃	OCH ₃	(311)
353	1	1	0	2	COOH	CN	S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OC ₂ H ₅	OC ₂ H ₅	(311)
354	1	1	0	2	COOH	CN	S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OC ₃ H ₇	OC ₃ H ₇	(311)
355	1	1	0	2	COOH	CN	S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OC ₄ H ₉	OC ₄ H ₉	(311)
356	1	1	0	2	COOH	CN	S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3109)
357	1	1	0	2	COOH	CN	S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3110)
358	1	1	0	2	COOH	CN	S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3112)
359	1	1	0	2	COOH	CN	S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3113)
360	1	1	0	2	COOH	CN	S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3114)
361	1	2	0	2	COOH	CN	S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
362	1	2	0	2	COOLi	CN	S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
363	1	2	0	2	COONa	CN	S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
364	1	2	0	2	COOK	CN	S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
365	1	2	0	2	COOH	COOH	S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
366	1	2	0	2	COOH	COCH ₃	S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
367	1	2	0	2	PO(OH) ₂	CN	S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
368	1	2	0	2	(2001)		S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
369	1	2	0	2	(2002)		S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
370	1	2	0	2	(2003)		S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
371	1	2	0	2	(2004)		S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
372	1	2	0	2	(2005)		S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
373	1	2	0	2	(2006)		S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
374	1	2	0	2	(2007)		S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
375	1	2	0	2	(2008)		S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
376	1	2	0	2	(2009)		S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
377	1	2	0	2	(2010)		S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
378	1	2	0	2	(2011)		S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
379	1	2	0	2	(2012)		S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
380	1	2	0	2	(2013)		S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)

【 0 0 9 2 】

10

20

30

40

【表 1 1】

表11 式(1-1)で表される化合物の具体例

化合物	m	l	n	j	X ₁	X ₂	Q ₁	Q ₂	A ₁	A ₂	A ₃	A ₄	A ₅	A ₆	A ₇	A ₈	Z ₃	Z ₄	A ₂₃	A ₂₄	R ₂
381	1	2	0	2	(2014)		S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
382	1	2	0	2	(2015)		S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
383	1	2	0	2	(2016)		S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
384	1	2	0	2	(2017)		S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
385	1	2	0	2	COOH	CN	O	O	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
386	1	2	0	2	COOH	CN	Se	Se	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
387	1	2	0	2	COOH	CN	NH	NH	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
388	1	2	0	2	COOH	CN	NCH ₃	NCH ₃	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
389	1	2	0	2	COOH	CN	NC ₄ H ₉	NC ₄ H ₉	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
390	1	2	0	2	COOH	CN	NPh	NPh	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
391	1	2	0	2	COOH	CN	S	S	H	H	H	H	-	-	CH ₃	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
392	1	2	0	2	COOH	CN	S	S	H	H	H	H	-	-	C ₄ H ₉	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
393	1	2	0	2	COOH	CN	S	S	H	H	H	H	-	-	C ₆ H ₁₃	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
394	1	2	0	2	COOH	CN	S	S	H	H	H	H	-	-	C ₈ H ₁₇	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
395	1	2	0	2	COOH	CN	S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	Cl	Cl	OCH ₃	OCH ₃	(311)
396	1	2	0	2	COOH	CN	S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	Br	Br	OCH ₃	OCH ₃	(311)
397	1	2	0	2	COOH	CN	S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	I	I	OCH ₃	OCH ₃	(311)
398	1	2	0	2	COOH	CN	S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OC ₂ H ₅	OC ₂ H ₅	(311)
399	1	2	0	2	COOH	CN	S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OC ₃ H ₇	OC ₃ H ₇	(311)
400	1	2	0	2	COOH	CN	S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OC ₄ H ₉	OC ₄ H ₉	(311)
401	1	2	0	2	COOH	CN	S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3109)
402	1	2	0	2	COOH	CN	S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3110)
403	1	2	0	2	COOH	CN	S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3112)
404	1	2	0	2	COOH	CN	S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3113)
405	1	2	0	2	COOH	CN	S	S	H	H	H	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3114)
406	1	2	0	2	COOH	CN	S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
407	1	2	0	2	COOLi	CN	S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
408	1	2	0	2	COONa	CN	S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
409	1	2	0	2	COOK	CN	S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
410	1	2	0	2	COOH	COOH	S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
411	1	2	0	2	COOH	COCH ₃	S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
412	1	2	0	2	PO(OH) ₂	CN	S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
413	1	2	0	2	(2001)		S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
414	1	2	0	2	(2002)		S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
415	1	2	0	2	(2003)		S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
416	1	2	0	2	(2004)		S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
417	1	2	0	2	(2005)		S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
418	1	2	0	2	(2006)		S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)

【表 1 2】

表12 式(1-1)で表される化合物の具体例

化合物	m	1	n	j	X ₁	X ₂	Q ₁	Q ₂	A ₁	A ₂	A ₃	A ₄	A ₅	A ₆	A ₇	A ₈	Z ₃	Z ₄	A ₂₃	A ₂₄	R ₂
419	1	2	0	2	(2007)		S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
420	1	2	0	2	(2008)		S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
421	1	2	0	2	(2009)		S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
422	1	2	0	2	(2010)		S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
423	1	2	0	2	(2011)		S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
424	1	2	0	2	(2012)		S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
425	1	2	0	2	(2013)		S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
426	1	2	0	2	(2014)		S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
427	1	2	0	2	(2015)		S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
428	1	2	0	2	(2016)		S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
429	1	2	0	2	(2017)		S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
430	1	2	0	2	COOH	CN	O	O	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
431	1	2	0	2	COOH	CN	Se	Se	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
432	1	2	0	2	COOH	CN	NH	NH	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
433	1	2	0	2	COOH	CN	NCH ₃	NCH ₃	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
434	1	2	0	2	COOH	CN	NC ₄ H ₉	NC ₄ H ₉	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
435	1	2	0	2	COOH	CN	NPh	NPh	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
436	1	2	0	2	COOH	CN	S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	CH ₃	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
437	1	2	0	2	COOH	CN	S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	C ₄ H ₉	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
438	1	2	0	2	COOH	CN	S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	C ₆ H ₁₃	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
439	1	2	0	2	COOH	CN	S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	C ₈ H ₁₇	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
440	1	2	0	2	COOH	CN	S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	Cl	Cl	OCH ₃	OCH ₃	(311)
441	1	2	0	2	COOH	CN	S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	Br	Br	OCH ₃	OCH ₃	(311)
442	1	2	0	2	COOH	CN	S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	I	I	OCH ₃	OCH ₃	(311)
443	1	2	0	2	COOH	CN	S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OC ₂ H ₅	OC ₂ H ₅	(311)
444	1	2	0	2	COOH	CN	S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OC ₃ H ₇	OC ₃ H ₇	(311)
445	1	2	0	2	COOH	CN	S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OC ₄ H ₉	OC ₄ H ₉	(311)
446	1	2	0	2	COOH	CN	S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3109)
447	1	2	0	2	COOH	CN	S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3110)
448	1	2	0	2	COOH	CN	S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3112)
449	1	2	0	2	COOH	CN	S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3113)
450	1	2	0	2	COOH	CN	S	S	H	CH ₃	CH ₃	H	-	-	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3114)
451	1	0	1	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
452	1	0	1	2	COOLi	CN	S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
453	1	0	1	2	COONa	CN	S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
454	1	0	1	2	COOK	CN	S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
455	1	0	1	2	COOH	COOH	S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
456	1	0	1	2	COOH	COCH ₃	S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)

【表 1 3】

表13 式(1-1)で表される化合物の具体例

化合物	m	1	n	j	X ₁	X ₂	Q ₁	Q ₂	A ₁	A ₂	A ₃	A ₄	A ₅	A ₆	A ₇	A ₈	Z ₃	Z ₄	A ₂₃	A ₂₄	R ₂
457	1	0	1	2	PO(OH) ₂	CN	S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
458	1	0	1	2	(2001)		S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
459	1	0	1	2	(2002)		S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
460	1	0	1	2	(2003)		S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
461	1	0	1	2	(2004)		S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
462	1	0	1	2	(2005)		S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
463	1	0	1	2	(2006)		S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
464	1	0	1	2	(2007)		S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
465	1	0	1	2	(2008)		S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
466	1	0	1	2	(2009)		S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
467	1	0	1	2	(2010)		S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
468	1	0	1	2	(2011)		S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
469	1	0	1	2	(2012)		S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
470	1	0	1	2	(2013)		S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
471	1	0	1	2	(2014)		S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
472	1	0	1	2	(2015)		S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
473	1	0	1	2	(2016)		S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
474	1	0	1	2	(2017)		S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
475	1	0	1	2	COOH	CN	O	O	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
476	1	0	1	2	COOH	CN	Se	Se	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
477	1	0	1	2	COOH	CN	NH	NH	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
478	1	0	1	2	COOH	CN	NCH ₃	NCH ₃	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
479	1	0	1	2	COOH	CN	NC ₄ H ₉	NC ₄ H ₉	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
480	1	0	1	2	COOH	CN	NPh	NPh	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
481	1	0	1	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	H	H	H	CH ₃	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
482	1	0	1	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	H	H	H	C ₄ H ₉	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
483	1	0	1	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	H	H	H	C ₆ H ₁₃	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
484	1	0	1	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	H	H	H	C ₈ H ₁₇	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
485	1	0	1	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	Cl	Cl	OCH ₃	OCH ₃	(311)
486	1	0	1	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	Br	Br	OCH ₃	OCH ₃	(311)
487	1	0	1	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	I	I	OCH ₃	OCH ₃	(311)
488	1	0	1	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OC ₂ H ₅	OC ₂ H ₅	(311)
489	1	0	1	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OC ₃ H ₇	OC ₃ H ₇	(311)
490	1	0	1	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OC ₄ H ₉	OC ₄ H ₉	(311)
491	1	0	1	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3109)
492	1	0	1	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3110)
493	1	0	1	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3112)
494	1	0	1	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3113)

【表 1 4】

表14 式(1-1)で表される化合物の具体例

化合物	m	l	n	j	X ₁	X ₂	Q ₁	Q ₂	A ₁	A ₂	A ₃	A ₄	A ₅	A ₆	A ₇	A ₈	Z ₃	Z ₄	A ₂₃	A ₂₄	R ₂
495	1	0	1	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3114)
496	1	0	1	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
497	1	0	1	2	COOLi	CN	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
498	1	0	1	2	COONa	CN	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
499	1	0	1	2	COOK	CN	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
500	1	0	1	2	COOH	COOH	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
501	1	0	1	2	COOH	COCH ₃	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
502	1	0	1	2	PO(OH) ₂	CN	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
503	1	0	1	2	(2001)		S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
504	1	0	1	2	(2002)		S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
505	1	0	1	2	(2003)		S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
506	1	0	1	2	(2004)		S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
507	1	0	1	2	(2005)		S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
508	1	0	1	2	(2006)		S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
509	1	0	1	2	(2007)		S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
510	1	0	1	2	(2008)		S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
511	1	0	1	2	(2009)		S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
512	1	0	1	2	(2010)		S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
513	1	0	1	2	(2011)		S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
514	1	0	1	2	(2012)		S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
515	1	0	1	2	(2013)		S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
516	1	0	1	2	(2014)		S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
517	1	0	1	2	(2015)		S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
518	1	0	1	2	(2016)		S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
519	1	0	1	2	(2017)		S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
520	1	0	1	2	COOH	CN	O	O	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
521	1	0	1	2	COOH	CN	Se	Se	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
522	1	0	1	2	COOH	CN	NH	NH	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
523	1	0	1	2	COOH	CN	NCH ₃	NCH ₃	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
524	1	0	1	2	COOH	CN	NC ₄ H ₉	NC ₄ H ₉	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
525	1	0	1	2	COOH	CN	NPh	NPh	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
526	1	0	1	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
527	1	0	1	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	C ₄ H ₉	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
528	1	0	1	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	C ₆ H ₁₃	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
529	1	0	1	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	C ₈ H ₁₇	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
530	1	0	1	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	Cl	Cl	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
531	1	0	1	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	Br	Br	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
532	1	0	1	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	I	I	OCH ₃	OCH ₃	(3111)

【0096】

10

20

30

40

【表 15】

表15 式(1-1)で表される化合物の具体例

化合物	m	l	n	j	X ₁	X ₂	Q ₁	Q ₂	A ₁	A ₂	A ₃	A ₄	A ₅	A ₆	A ₇	A ₈	Z ₃	Z ₄	A ₂₃	A ₂₄	R ₂
533	1	0	1	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OC ₂ H ₅	OC ₂ H ₅	(311)
534	1	0	1	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OC ₃ H ₇	OC ₃ H ₇	(311)
535	1	0	1	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OC ₄ H ₉	OC ₄ H ₉	(311)
536	1	0	1	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OC ₂ H ₅	OC ₂ H ₅	(3109)
537	1	0	1	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OC ₂ H ₅	OC ₂ H ₅	(3110)
538	1	0	1	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OC ₂ H ₅	OC ₂ H ₅	(3112)
539	1	0	1	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OC ₂ H ₅	OC ₂ H ₅	(3113)
540	1	0	1	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OC ₂ H ₅	OC ₂ H ₅	(3114)
541	1	0	2	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OC ₂ H ₅	OC ₂ H ₅	(311)
542	1	0	2	2	COOLi	CN	S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OC ₂ H ₅	OC ₂ H ₅	(311)
543	1	0	2	2	COONa	CN	S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OC ₂ H ₅	OC ₂ H ₅	(311)
544	1	0	2	2	COOK	CN	S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OC ₂ H ₅	OC ₂ H ₅	(311)
545	1	0	2	2	COOH	COOH	S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OC ₂ H ₅	OC ₂ H ₅	(311)
546	1	0	2	2	COOH	COCH ₃	S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OC ₂ H ₅	OC ₂ H ₅	(311)
547	1	0	2	2	POOH ₂	CN	S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OC ₂ H ₅	OC ₂ H ₅	(311)
548	1	0	2	2	(2001)		S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OC ₂ H ₅	OC ₂ H ₅	(311)
549	1	0	2	2	(2002)		S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OC ₂ H ₅	OC ₂ H ₅	(311)
550	1	0	2	2	(2003)		S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OC ₂ H ₅	OC ₂ H ₅	(311)
551	1	0	2	2	(2004)		S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OC ₂ H ₅	OC ₂ H ₅	(311)
552	1	0	2	2	(2005)		S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OC ₂ H ₅	OC ₂ H ₅	(311)
553	1	0	2	2	(2006)		S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OC ₂ H ₅	OC ₂ H ₅	(311)
554	1	0	2	2	(2007)		S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OC ₂ H ₅	OC ₂ H ₅	(311)
555	1	0	2	2	(2008)		S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OC ₂ H ₅	OC ₂ H ₅	(311)
556	1	0	2	2	(2009)		S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OC ₂ H ₅	OC ₂ H ₅	(311)
557	1	0	2	2	(2010)		S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OC ₂ H ₅	OC ₂ H ₅	(311)
558	1	0	2	2	(2011)		S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OC ₂ H ₅	OC ₂ H ₅	(311)
559	1	0	2	2	(2012)		S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OC ₂ H ₅	OC ₂ H ₅	(311)
560	1	0	2	2	(2013)		S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OC ₂ H ₅	OC ₂ H ₅	(311)
561	1	0	2	2	(2014)		S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OC ₂ H ₅	OC ₂ H ₅	(311)
562	1	0	2	2	(2015)		S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OC ₂ H ₅	OC ₂ H ₅	(311)
563	1	0	2	2	(2016)		S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OC ₂ H ₅	OC ₂ H ₅	(311)
564	1	0	2	2	(2017)		S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OC ₂ H ₅	OC ₂ H ₅	(311)
565	1	0	2	2	COOH	CN	O	O	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OC ₂ H ₅	OC ₂ H ₅	(311)
566	1	0	2	2	COOH	CN	Se	Se	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OC ₂ H ₅	OC ₂ H ₅	(311)
567	1	0	2	2	COOH	CN	NH	NH	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OC ₂ H ₅	OC ₂ H ₅	(311)
568	1	0	2	2	COOH	CN	NCH ₃	NCH ₃	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OC ₂ H ₅	OC ₂ H ₅	(311)
569	1	0	2	2	COOH	CN	NC ₄ H ₉	NC ₄ H ₉	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OC ₂ H ₅	OC ₂ H ₅	(311)
570	1	0	2	2	COOH	CN	NPh	NPh	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OC ₂ H ₅	OC ₂ H ₅	(311)

【表 16】

表16 式(1-1)で表される化合物の具体例

化合物	m	1	n	j	X ₁	X ₂	Q ₁	Q ₂	A ₁	A ₂	A ₃	A ₄	A ₅	A ₆	A ₇	A ₈	Z ₃	Z ₄	A ₂₃	A ₂₄	R ₂
571	1	0	2	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	H	H	CH ₃	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
572	1	0	2	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	H	H	C ₄ H ₉	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
573	1	0	2	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	H	H	C ₆ H ₁₃	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
574	1	0	2	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	H	H	C ₈ H ₁₇	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
575	1	0	2	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	Cl	Cl	OCH ₃	OCH ₃	(311)
576	1	0	2	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	Br	Br	OCH ₃	OCH ₃	(311)
577	1	0	2	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	I	I	OCH ₃	OCH ₃	(311)
578	1	0	2	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OC ₂ H ₅	OC ₂ H ₅	(311)
579	1	0	2	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OC ₃ H ₇	OC ₃ H ₇	(311)
580	1	0	2	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OC ₄ H ₉	OC ₄ H ₉	(311)
581	1	0	2	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3109)
582	1	0	2	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3110)
583	1	0	2	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3112)
584	1	0	2	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3113)
585	1	0	2	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3114)
586	1	0	2	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
587	1	0	2	2	COOLi	CN	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
588	1	0	2	2	COONa	CN	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
589	1	0	2	2	COOK	CN	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
590	1	0	2	2	COOH	COOH	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
591	1	0	2	2	COOH	COCH ₃	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
592	1	0	2	2	PO(OH) ₂	CN	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
593	1	0	2	2	(2001)		S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
594	1	0	2	2	(2002)		S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
595	1	0	2	2	(2003)		S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
596	1	0	2	2	(2004)		S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
597	1	0	2	2	(2005)		S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
598	1	0	2	2	(2006)		S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
599	1	0	2	2	(2007)		S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
600	1	0	2	2	(2008)		S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
601	1	0	2	2	(2009)		S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
602	1	0	2	2	(2010)		S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
603	1	0	2	2	(2011)		S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
604	1	0	2	2	(2012)		S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
605	1	0	2	2	(2013)		S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
606	1	0	2	2	(2014)		S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
607	1	0	2	2	(2015)		S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
608	1	0	2	2	(2016)		S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)

【表 17】

表17 式(1-1)で表される化合物の具体例

化合物	m	1	n	j	X ₁	X ₂	Q ₁	Q ₂	A ₁	A ₂	A ₃	A ₄	A ₅	A ₆	A ₇	A ₈	Z ₃	Z ₄	A ₂₃	A ₂₄	R ₂
609	1	0	2	2	(2017)		S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
610	1	0	2	2	COOH	CN	O	O	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
611	1	0	2	2	COOH	CN	Se	Se	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
612	1	0	2	2	COOH	CN	NH	NH	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
613	1	0	2	2	COOH	CN	NCH ₃	NCH ₃	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
614	1	0	2	2	COOH	CN	NC ₄ H ₉	NC ₄ H ₉	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
615	1	0	2	2	COOH	CN	NPh	NPh	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
616	1	0	2	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
617	1	0	2	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	C ₆ H ₉	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
618	1	0	2	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	C ₆ H ₁₃	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
619	1	0	2	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	C ₈ H ₁₇	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
620	1	0	2	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	Cl	Cl	OCH ₃	OCH ₃	(311)
621	1	0	2	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	Br	Br	OCH ₃	OCH ₃	(311)
622	1	0	2	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	I	I	OCH ₃	OCH ₃	(311)
623	1	0	2	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OC ₂ H ₅	OC ₂ H ₅	(311)
624	1	0	2	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OC ₃ H ₇	OC ₃ H ₇	(311)
625	1	0	2	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OC ₄ H ₉	OC ₄ H ₉	(311)
626	1	0	2	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3109)
627	1	0	2	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3110)
628	1	0	2	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3112)
629	1	0	2	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3113)
630	1	0	2	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3114)
631	1	1	1	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
632	1	1	1	2	COOLi	CN	S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
633	1	1	1	2	COONa	CN	S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
634	1	1	1	2	COOK	CN	S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
635	1	1	1	2	COOH	COOH	S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
636	1	1	1	2	COOH	COCH ₃	S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
637	1	1	1	2	PO(OH) ₂	CN	S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
638	1	1	1	2	(2001)		S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
639	1	1	1	2	(2002)		S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
640	1	1	1	2	(2003)		S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
641	1	1	1	2	(2004)		S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
642	1	1	1	2	(2005)		S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
643	1	1	1	2	(2006)		S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
644	1	1	1	2	(2007)		S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
645	1	1	1	2	(2008)		S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
646	1	1	1	2	(2009)		S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)

【0099】

10

20

30

40

【表 18】

表18 式(1-1)で表される化合物の具体例

化合物	m	l	n	j	X ₁	X ₂	Q ₁	Q ₂	A ₁	A ₂	A ₃	A ₄	A ₅	A ₆	A ₇	A ₈	Z ₃	Z ₄	A ₂₃	A ₂₄	R ₂
647	1	1	1	2	(2010)		S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
648	1	1	1	2	(2011)		S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
649	1	1	1	2	(2012)		S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
650	1	1	1	2	(2013)		S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
651	1	1	1	2	(2014)		S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
652	1	1	1	2	(2015)		S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
653	1	1	1	2	(2016)		S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
654	1	1	1	2	(2017)		S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
655	1	1	1	2	COOH	CN	O	O	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
656	1	1	1	2	COOH	CN	Se	Se	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
657	1	1	1	2	COOH	CN	NH	NH	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
658	1	1	1	2	COOH	CN	NCH ₃	NCH ₃	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
659	1	1	1	2	COOH	CN	NC ₄ H ₉	NC ₄ H ₉	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
660	1	1	1	2	COOH	CN	NPh	NPh	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
661	1	1	1	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	H	H	CH ₃	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
662	1	1	1	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	H	H	C ₄ H ₉	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
663	1	1	1	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	H	H	C ₆ H ₁₃	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
664	1	1	1	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	H	H	C ₈ H ₁₇	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
665	1	1	1	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	Cl	Cl	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
666	1	1	1	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	Br	Br	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
667	1	1	1	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	I	I	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
668	1	1	1	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OC ₂ H ₅	OC ₂ H ₅	(3111)
669	1	1	1	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OC ₃ H ₇	OC ₃ H ₇	(3111)
670	1	1	1	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OC ₄ H ₉	OC ₄ H ₉	(3111)
671	1	1	1	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3109)
672	1	1	1	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3110)
673	1	1	1	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3112)
674	1	1	1	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3113)
675	1	1	1	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	H	H	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3114)
676	1	1	1	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
677	1	1	1	2	COOLi	CN	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
678	1	1	1	2	COONa	CN	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
679	1	1	1	2	COOK	CN	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
680	1	1	1	2	COOH	COOH	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
681	1	1	1	2	COOH	COCH ₃	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
682	1	1	1	2	PO(OH) ₂	CN	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
683	1	1	1	2	(2001)		S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)
684	1	1	1	2	(2002)		S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3111)

【0100】

【表 19】

表19 式(1-1)で表される化合物の具体例

化合物	m	l	n	j	X ₁	X ₂	Q ₁	Q ₂	A ₁	A ₂	A ₃	A ₄	A ₅	A ₆	A ₇	A ₈	Z ₃	Z ₄	A ₂₃	A ₂₄	R ₂
685	1	1	1	2		(2003)	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
686	1	1	1	2		(2004)	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
687	1	1	1	2		(2005)	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
688	1	1	1	2		(2006)	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
689	1	1	1	2		(2007)	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
690	1	1	1	2		(2008)	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
691	1	1	1	2		(2009)	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
692	1	1	1	2		(2010)	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
693	1	1	1	2		(2011)	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
694	1	1	1	2		(2012)	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
695	1	1	1	2		(2013)	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
696	1	1	1	2		(2014)	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
697	1	1	1	2		(2015)	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
698	1	1	1	2		(2016)	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
699	1	1	1	2		(2017)	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
700	1	1	1	2	COOH	CN	O	O	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
701	1	1	1	2	COOH	CN	Se	Se	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
702	1	1	1	2	COOH	CN	NH	NH	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
703	1	1	1	2	COOH	CN	NCH ₃	NCH ₃	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
704	1	1	1	2	COOH	CN	NC ₄ H ₉	NC ₄ H ₉	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
705	1	1	1	2	COOH	CN	NPh	NPh	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
706	1	1	1	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	CH ₃	CH ₃	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
707	1	1	1	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	C ₄ H ₉	C ₄ H ₉	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
708	1	1	1	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	C ₆ H ₁₃	C ₆ H ₁₃	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
709	1	1	1	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	C ₈ H ₁₇	C ₈ H ₁₇	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(311)
710	1	1	1	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	Cl	Cl	OCH ₃	OCH ₃	(311)
711	1	1	1	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	Br	Br	OCH ₃	OCH ₃	(311)
712	1	1	1	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	I	I	OCH ₃	OCH ₃	(311)
713	1	1	1	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OC ₂ H ₅	OC ₂ H ₅	(311)
714	1	1	1	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OC ₃ H ₇	OC ₃ H ₇	(311)
715	1	1	1	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OC ₄ H ₉	OC ₄ H ₉	(311)
716	1	1	1	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3109)
717	1	1	1	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3110)
718	1	1	1	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3112)
719	1	1	1	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3113)
720	1	1	1	2	COOH	CN	S	S	H	-	-	H	CH ₃	CH ₃	H	H	F	F	OCH ₃	OCH ₃	(3114)

【0101】

本発明の光電変換素子は、例えば、酸化物半導体微粒子を用いて基板上に酸化物半導体微粒子の薄膜を設け、次いでこの薄膜に式(1)で表される化合物(色素)を担持させたものである。

酸化物半導体微粒子の薄膜を設ける基板としては、その表面が導電性であるものが好ま

しいが、そのような基板は市場にて容易に入手可能である。例えば、ガラス又はポリエチレンテレフタレート若しくはポリエーテルスルホン等の透明性のある高分子材料等の表面にインジウム、フッ素、アンチモンをドーブした酸化スズなどの導電性金属酸化物や銅、銀、金等の金属の薄膜を設けたものを基板として用いることが出来る。その導電性としては通常1000Ω以下であれば良く、特に100Ω以下のものが好ましい。

また、酸化物半導体の微粒子としては金属酸化物が好ましく、その具体例としてはチタン、スズ、亜鉛、タングステン、ジルコニウム、ガリウム、インジウム、イットリウム、ニオブ、タンタル、バナジウムなどの酸化物が挙げられる。これらのうちチタン、スズ、亜鉛、ニオブ、インジウム等の酸化物が好ましく、酸化チタン、酸化亜鉛、酸化スズが最も好ましい。これらの酸化物半導体は単一で使用する事も出来るが、混合して使用してもよく、また半導体の表面にコーティングさせて使用してもよい。酸化物半導体の微粒子の粒径は、平均粒径として通常1乃至500nm、好ましくは1乃至100nmである。またこの酸化物半導体の微粒子は大きな粒径のものと小さな粒径のものを混合して用いてもよく、多層にして用いてもよい。

【0102】

酸化物半導体微粒子の薄膜は酸化物半導体微粒子をスプレー噴霧などで直接前記基板上に半導体微粒子の薄膜として形成する方法、基板を電極として電氣的に半導体微粒子を薄膜状に析出させる方法、半導体微粒子のスラリー又は半導体アルコキサイド等の半導体微粒子の前駆体を加水分解することにより得られた微粒子を含有するペーストを基板上に塗布した後、乾燥、硬化もしくは焼成する等によって製造することが出来る。酸化物半導体を用いる電極の性能上、スラリーを用いる方法が好ましい。この方法の場合、スラリーは2次凝集している酸化物半導体微粒子を常法により分散媒中に平均1次粒子径が1乃至200nmになるように分散させることにより得られる。

【0103】

スラリーを分散させる分散媒としては、半導体微粒子を分散させ得るものであれば何でも良く、水、エタノール等のアルコール、アセトン及びアセチルアセトン等のケトン、ヘキサン等の炭化水素等が用いられ、これらは混合して用いても良く、また水を用いることはスラリーの粘度変化を少なくするという点で好ましい。また酸化物半導体微粒子の分散状態を安定化させる目的で分散安定剤を用いることが出来る。用いる分散安定剤の例としては例えば酢酸、塩酸、硝酸等の酸、又はアセチルアセトン、アクリル酸、ポリエチレングリコール、ポリビニルアルコール等の有機溶媒等が挙げられる。

【0104】

スラリーを塗布した基板は焼成してもよく、その焼成温度は通常100℃以上、好ましくは200℃以上で、かつ上限はおおむね基板材料の融点（軟化点）以下であり、通常上限は900℃であり、好ましくは600℃以下である。また焼成時間には特に限定はないが、概ね4時間以内が好ましい。基板上の薄膜の厚みは通常1乃至200μm、好ましくは1乃至50μmである。

【0105】

酸化物半導体微粒子の薄膜に2次処理を施してもよい。すなわち、例えば半導体と同一の金属のアルコキサイド、塩化物、硝化物、硫化物等の溶液に直接、基板ごと薄膜を浸漬させて乾燥もしくは再焼成することにより半導体微粒子の薄膜の性能を向上させることもできる。金属アルコキサイドとしてはチタンエトキサイド、チタンイソプロポキサイド、チタンｔ-ブトキサイド、n-ジブチル-ジ-アセチルスズ等が挙げられ、それらのアルコール溶液が用いられる。塩化物としては例えば四塩化チタン、四塩化スズ、塩化亜鉛等が挙げられ、その水溶液が用いられる。このようにして得られた酸化物半導体薄膜は酸化物半導体の微粒子から成っている。

【0106】

次に、酸化物半導体微粒子の薄膜に、本発明の前記式(1)で表される化合物を担持させる方法について説明する。

前記式(1)で表される化合物を担持させる方法としては、該化合物を溶解しうる溶媒

にて化合物を溶解して得た溶液、又は溶解性の低い化合物にあっては化合物を分散せしめて得た分散液に上記酸化物半導体微粒子の薄膜の設けられた基板を浸漬する方法が挙げられる。溶液又は分散液中の濃度は化合物によって適宜決める。その溶液中に基板上に作成した半導体微粒子の薄膜を浸す。浸漬温度はおおむね常温から溶媒の沸点迄であり、また浸漬時間は1分間から48時間程度である。化合物を溶解させるのに使用しうる溶媒の具体例として、例えば、メタノール、エタノール、イソプロパノール、テトラヒドロフラン（THF）、アセトニトリル、ジメチルスルホキシド（DMSO）、ジメチルホルムアミド（DMF）、アセトン、*n*-ブタノール、*t*-ブタノール、水、*n*-ヘキサン、クロロホルム、ジクロロメタン、トルエン等が挙げられ、化合物の溶解度等に合わせて、単独または複数を混合して用いることができる。溶液の化合物濃度は通常 1×10^{-6} M乃至1 Mであり、好ましくは 1×10^{-5} M乃至 1×10^{-1} Mである。

10

浸漬が終わったあと、風乾又は必要により加熱して溶媒を除去する。この様にして式（1）で表される化合物（色素）で増感された酸化物半導体微粒子の薄膜を有した本発明の光電変換素子が得られる。

【0107】

担持する前記式（1）で表される化合物は1種類でも良いし、数種類混合しても良い。又、混合する場合は本発明の式（1）で表される化合物（色素）同士でも良いし、他の色素や金属錯体色素を混合しても良い。特に吸収波長の異なる色素同士を混合することにより、幅広い吸収波長を利用することが出来、変換効率の高い太陽電池が得られる。混合しうる金属錯体色素の例としては特に制限は無いが、非特許文献2に示されているルテニウム錯体やその4級アンモニウム塩化合物、フタロシアニン、ポルフィリンなどが好ましく、混合利用する有機色素としては無金属のフタロシアニン、ポルフィリンやシアニン、メロシアニン、オキソノール、トリフェニルメタン系、特許文献2に示されるアクリル酸系色素などのメチン系色素や、キサンテン系、アゾ系、アンスラキノン系、ペリレン系等の色素が挙げられる。好ましくはルテニウム錯体やメロシアニン、アクリル酸系等のメチン系色素が挙げられる。色素を2種以上用いる場合は色素を半導体微粒子の薄膜に順次吸着させても、混合溶解して吸着させても良い。

20

【0108】

混合する色素の比率に特に限定は無く、それぞれの色素について最適化条件が適宜選択されるが、一般的に等モルずつの混合から、1つの色素につき、10%モル程度以上使用するのが好ましい。2種以上の色素を溶解又は分散した溶液を用いて、酸化物半導体微粒子の薄膜に色素を吸着する場合、溶液中の色素合計の濃度は1種類のみ担持する場合と同様でよい。色素を混合して使用する場合は溶媒としては前記したような溶媒が使用可能であり、使用する各色素用の溶媒は同一でも異なってもよい。

30

【0109】

酸化物半導体微粒子の薄膜に色素を担持する際、色素同士の会合を防ぐために包摂化合物の共存下、色素を担持することが有利である。ここで包摂化合物としてはコール酸等のステロイド系化合物、クラウンエーテル、シクロデキストリン、カリックスアレン、ポリエチレンオキサイドなどが挙げられるが、好ましいものの具体例としてはデオキシコール酸、デヒドロデオキシコール酸、ケノデオキシコール酸、コール酸メチルエステル、コール酸ナトリウム等のコール酸類、ポリエチレンオキサイド等が挙げられる。また、色素を担持させた後、4-*t*-ブチルピリジン等のアミン化合物で半導体微粒子の薄膜を処理しても良い。処理の方法は例えばアミンのエタノール溶液に色素を担持した半導体微粒子の薄膜の設けられた基板を浸す方法等が採られる。

40

【0110】

本発明の太陽電池は上記酸化物半導体微粒子の薄膜に本発明の化合物（色素）を担持させた光電変換素子を一方の電極とし、対極、レドックス電解質又は正孔輸送材料又はp型半導体等から構成される。レドックス電解質、正孔輸送材料、p型半導体等の形態としては、液体、凝固体（ゲル及びゲル状）、固体などそれ自体公知のものが使用出来る。液状のものとしてはレドックス電解質、溶融塩、正孔輸送材料、p型半導体等をそれぞれ溶媒

50

に溶解させたものや常温溶融塩などが、凝固体（ゲル及びゲル状）の場合は、これらをポリマーマトリックスや低分子ゲル化剤等に含ませたもの等がそれぞれ挙げられる。固体のものとしてはレドックス電解質、溶融塩、正孔輸送材料、p型半導体等を用いることができる。正孔輸送材料としてはアミン誘導体やポリアセチレン、ポリアニリン、ポリチオフェンなどの導電性高分子、トリフェニレン系化合物などが挙げられる。又、p型半導体としてはCuI、CuSCN等が挙げられる。対極としては導電性を持っており、レドックス電解質の還元反応を触媒的に作用するものが好ましい。例えばガラス又は高分子フィルムに白金、カーボン、ロジウム、ルテニウム等を蒸着したものや、導電性微粒子を塗り付けたものが用いうる。

【0111】

本発明の太陽電池に用いるレドックス電解質としてはハロゲンイオンを対イオンとするハロゲン化合物及びハロゲン分子からなるハロゲン酸化還元系電解質、フェロシアン酸塩－フェリシアン酸塩やフェロセナーフェリシニウムイオン、コバルト錯体などの金属錯体等の金属酸化還元系電解質、アルキルチオール－アルキルジスルフィド、ビオロゲン色素、ヒドロキノン－キノン等の有機酸化還元系電解質等をあげることができるが、ハロゲン酸化還元系電解質が好ましい。ハロゲン化合物－ハロゲン分子からなるハロゲン酸化還元系電解質におけるハロゲン分子としては、例えばヨウ素分子や臭素分子等があげられ、ヨウ素分子が好ましい。また、ハロゲンイオンを対イオンとするハロゲン化合物としては、例えばLiBr、NaBr、KBr、LiI、NaI、KI、CsI、CaI₂、MgI₂、CuI等のハロゲン化金属塩あるいはテトラアルキルアンモニウムヨーダイド、イミダゾリウムヨーダイド、ピリジニウムヨーダイドなどのハロゲンの有機4級アンモニウム塩等があげられるが、ヨウ素イオンを対イオンとする塩類が好ましい。また、上記ヨウ素イオンの他にビス（トリフルオロメタンスルホニル）イミドイオン、ジシアノイミドイオン等のイミドイオンを対イオンとする電解質を用いることも好ましい。

【0112】

また、レドックス電解質はそれを含む溶液の形で構成されている場合、その溶媒には電気化学的に不活性なものが用いられる。例えばアセトニトリル、プロピレンカーボネート、エチレンカーボネート、3－メトキシプロピオニトリル、メトキシアセトニトリル、エチレングリコール、プロピレングリコール、ジエチレングリコール、トリエチレングリコール、γ－ブチロラクトン、ジメトキシエタン、ジエチルカーボネート、ジエチルエーテル、ジエチルカーボネート、ジメチルカーボネート、1，2－ジメトキシエタン、ジメチルホルムアミド、ジメチルスルホキサイド、1，3－ジオキサラン、メチルフォルメート、2－メチルテトラヒドロフラン、3－メチル－オキサゾリジン－2－オン、スルフォラン、テトラヒドロフラン、水等が挙げられ、これらの中でも、特に、アセトニトリル、プロピレンカーボネート、エチレンカーボネート、3－メトキシプロピオニトリル、メトキシアセトニトリル、エチレングリコール、3－メチル－オキサゾリジン－2－オン、γ－ブチロラクトン等が好ましい。これらは単独もしくは2種以上組み合わせ用いても良い。ゲル状電解質の場合は、オリゴマー及びポリマー等のマトリックスに電解質あるいは電解質溶液を含有させたものや、低分子ゲル化剤等に同じく電解質あるいは電解質溶液を含有させたもの等が挙げられる。レドックス電解質の濃度は通常0.01乃至99質量%で、好ましくは0.1乃至90質量%程度である。

【0113】

本発明の太陽電池は、基板上の酸化物半導体微粒子の薄膜に、本発明の式（1）で表される化合物（色素）を担持した光電変換素子の電極に、それを挟むように対極を配置する。その間にレドックス電解質を含んだ溶液を充填することにより得られる。

【実施例】

【0114】

以下に実施例に基づき、本発明を更に詳細に説明するが、本発明はこれらの実施例に限定されるものではない。実施例中、部は特に指定しない限り質量部をあらわす。溶液の濃度を表すMは、mol/Lを表す。極大吸収波長は紫外可視分光光度計（UV－3100

10

20

30

40

50

PC、島津製作所製）により測定した。核磁気共鳴は、JNM-ECS400（日本電子社製）により測定した。

【0115】

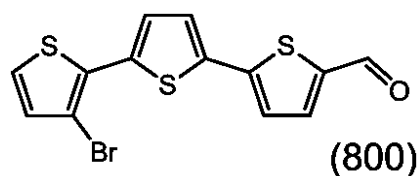
合成例 1

2,3-ジブロモチオフェン 5 部、5'-ホルミル-2,2'-ビチオフェン-5-ボロン酸 5.5 部、ビス(トリ-tert-ブチルホスフィン)パラジウム(0) 0.22 部、フッ化セシウム 6.4 部、水 28 部を 1,4-ジオキサン 126 部に加え、80℃で 3 時間反応させた。反応混合物を、クロロホルム-水で抽出、クロロホルム相を濃縮後、カラムクロマト(クロロホルム-ヘキサン)で分離、精製し、下記式(800)で表される化合物 2.8 部を黄色固体として得た。

10

【0116】

【化 2 1】



【0117】

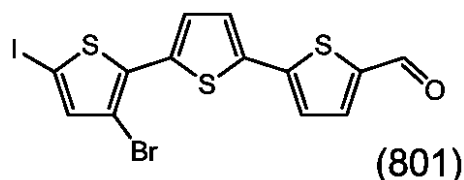
合成例 2

合成例 1 で得られた式(800)で表される化合物 2.5 部を酢酸 250 部とクロロホルム 375 部の混合液に溶解した溶液に、N-ヨードこはく酸イミド 1.6 部を加え、遮光下常温で 5 時間攪拌した。N-ヨードこはく酸イミド 0.8 部を加え、さらに遮光下常温で 19 時間攪拌した。反応後、析出物を濾過及びヘキサン洗浄し、下記式(801)で表される化合物 2.9 部を薄橙色固体として得た。

20

【0118】

【化 2 2】



30

【0119】

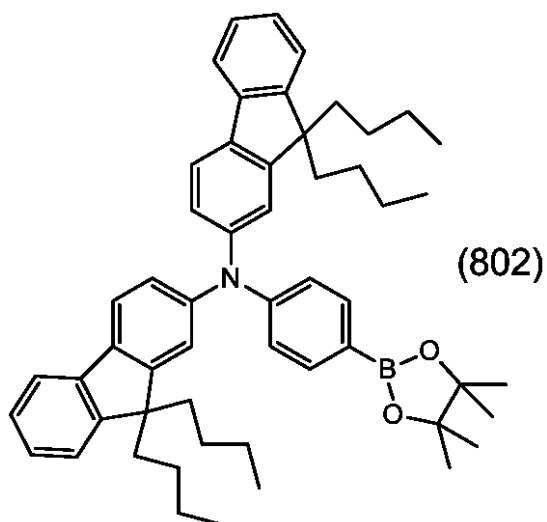
合成例 3

[1,1'-ビス(ジフェニルホスフィノ)フェロセン]ジクロロパラジウム(II)ジクロロメタン付加物 1.6 部、酢酸カリウム 2 部及びビス(ピナコラート)ジボロン 2 部をジメチルスルホキシド 22 部に加え、窒素雰囲気下攪拌した。9,9-ジブチル-N-(9,9-ジブチルフルオレン-2-イル)-N-(4-ヨードフェニル)フルオレン-2-アミン 5 部をジメチルスルホキシド 66 部に溶解させた溶液を加え、80℃で 5 時間攪拌した。反応混合物を、トルエン-水で抽出、トルエン相を濃縮後、カラムクロマト(クロロホルム-ヘキサン)で分離、精製し、下記式(802)で表される化合物 3.5 部を白色固体として得た。

40

【0120】

【化 2 3】



10

【0 1 2 1】

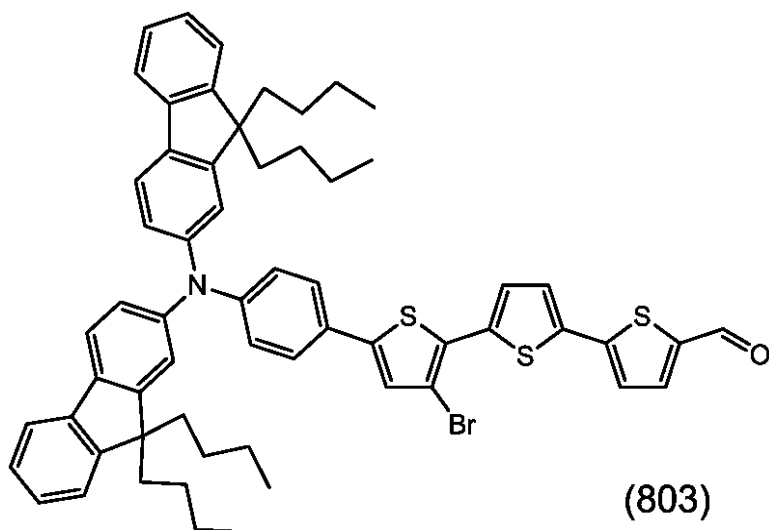
合成例 4

合成例 2 で得られた式 (801) で表される化合物 2. 1 部、合成例 3 で得られた式 (802) で表される化合物 4. 1 部、テトラキス (トリフェニルホスフィン) パラジウム (0) 0. 15 部及び 20% 炭酸ナトリウム水溶液 16 部を 1, 2-ジメトキシエタン 300 部に加え、還流下 4 時間反応させた。式 (802) で表される化合物 2. 0 部、テトラキス (トリフェニルホスフィン) パラジウム (0) 0. 08 部を追加し、さらに還流下 3 時間反応させた。反応混合物を、クロロホルム-水で抽出、クロロホルム相を濃縮後、カラムクロマト (クロロホルム-ヘキサン、およびトルエン-ヘキサン) で分離、精製し、下記式 (803) で表される化合物 1. 2 部を濃橙色固体として得た。

20

【0 1 2 2】

【化 2 4】



30

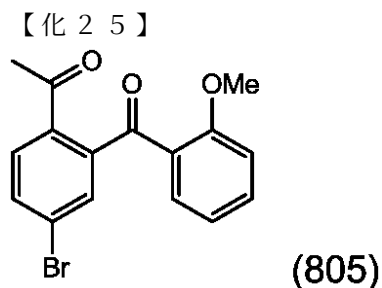
40

【0 1 2 3】

合成例 5

4-ブロモ-2-ヒドロキシアセトフェノン及び 2-メトキシベンゾイルヒドラジンをを用いて、非特許文献 3 に記載の合成方法に準じて、下記式 (805) で表される化合物を得た。

【0 1 2 4】



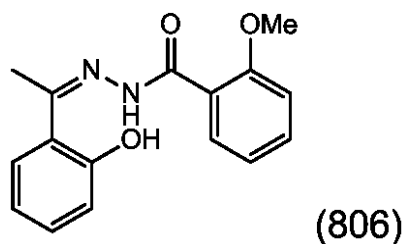
【0 1 2 5】

合成例 6

2-ヒドロキシアセトフェノン 2.3 部、2-メトキシベンゾイルヒドラジン 2.4 部を無水エタノール 24 部に加え、窒素雰囲気下 85℃で 2 日間反応させた。反応終了後、析出した固体を少量のエタノールで洗浄し、減圧乾燥させて下記式 (806) で表される化合物 4.1 部を淡黄色固体として得た。

【0 1 2 6】

【化 2 6】



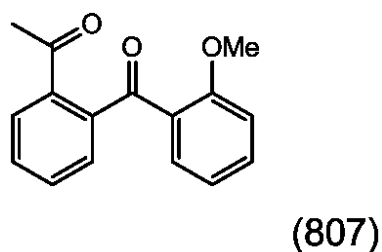
【0 1 2 7】

合成例 7

テトラヒドロフラン 230 部に合成例 6 で得られた式 (806) で表される化合物 4.1 部を溶解させて氷冷した。四酢酸鉛 8.0 部を少量ずつ加えた後、室温で約 5 時間攪拌した。反応終了後、シリカゲルを入れた桐山ロートでろ過し、ろ液を減圧留去して下記式 (807) で表される化合物 4.4 部を黄土色固体として得た。

【0 1 2 8】

【化 2 7】



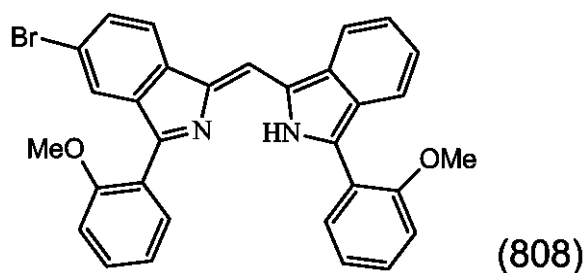
【0 1 2 9】

合成例 8

メタノール 37 部と酢酸 28 部の混合液に、合成例 5 で得られた式 (805) で表される化合物 1.6 部及び合成例 7 で得られた式 (807) で表される化合物 1.2 部を攪拌しながら溶解させ、均一な溶液を得た。この溶液を氷冷し、アンモニア水 19 部を加えた後、45℃で一晩攪拌した。飽和炭酸水素ナトリウム水溶液でクエンチし、析出した固体をろ別した。得られた固体をカラムクロマト（ヘキサン-ベンゼン）で分離、精製し、下記式 (808) で表される化合物 0.31 部を濃青色固体として得た。

【0 1 3 0】

【化 2 8】



【0131】

10

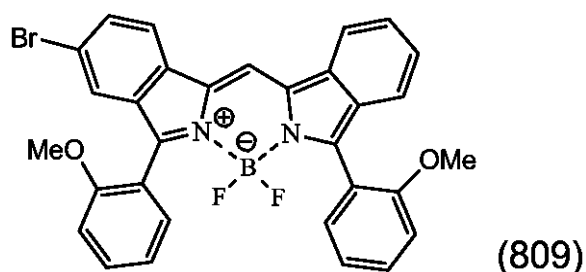
合成例 9

合成例 8 で得られた式 (808) で表される化合物 1. 2 部を、窒素雰囲気下で無水トルエン 72 部に溶解させた後、トリエチルアミン 0.58 部を加えて 80℃ に加熱した。トリフルオロホウ素のジエチルエーテル錯体 3.4 部をゆっくり滴下した後、100℃で一晩攪拌した。水 40 部を加えてクエンチし、酢酸エチル 110 部で抽出、水 300 部で洗浄した後、有機層に硫酸ナトリウムを加えて乾燥させた。硫酸ナトリウムをろ別し、濃縮した。得られた固体をカラムクロマト (ヘキサン-ベンゼン) で分離、精製し、下記式 (809) で表される化合物 1. 1 部を濃青色固体として得た。

【0132】

20

【化 2 9】



【0133】

30

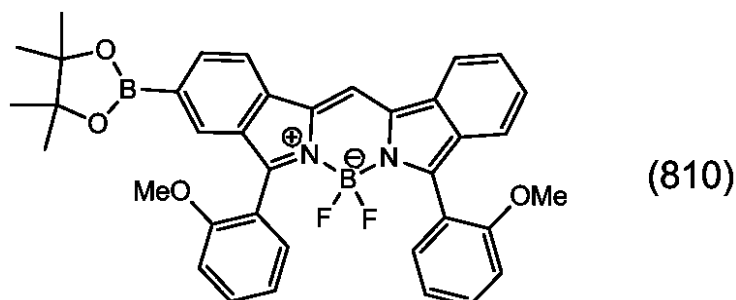
合成例 10

窒素雰囲気下、合成例 9 で得られた式 (809) で表される化合物 1. 1 部と酢酸カリウム 1.9 部を無水ジメトキシエタン 29 部に溶解させ、凍結脱気を 3 回行った。グローブボックス内でその溶液にビス (ピナコラート) ジボロン 1.3 部を加えた。別の容器に無水ジメトキシエタン 29 部を入れ凍結脱気を 3 回行った後、グローブボックス内で [1, 1'-ビス (ジフェニルホスフィノ) フェロセン] ジクロロパラジウム (II) 0.38 部を加えた。この溶液を先の溶液に加え、窒素雰囲気下 80℃ で 10 時間攪拌した。反応混合物を水 10 部でクエンチし、酢酸エチル 90 部で抽出、水 200 部で洗浄した後、有機層に硫酸ナトリウムを加えて乾燥させた。硫酸ナトリウムをろ別し、濃縮した。得られた固体をカラムクロマト (ヘキサン-ジクロロメタン) で分離、精製し、下記式 (810) で表される化合物 1. 0 部を濃青色固体として得た。

40

【0134】

【化 3 0】



50

【0135】

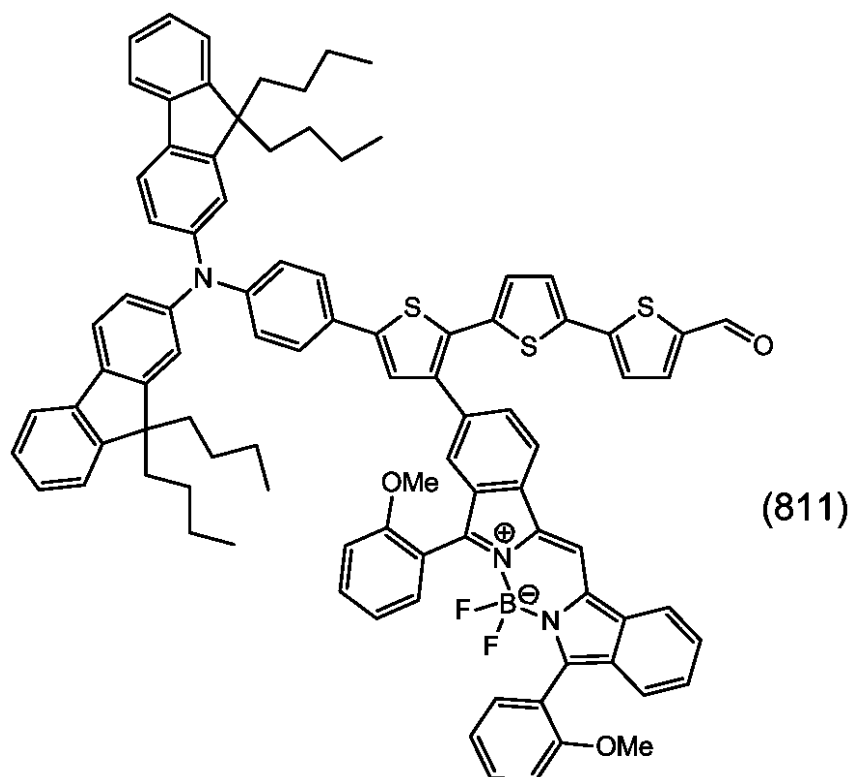
合成例 11

合成例 4 で得られた式 (803) で表される化合物 0.084 部、合成例 10 で得られた式 (810) で表される化合物 0.19 部、ビス(トリ-tert-ブチルホスフィン)パラジウム(0) 0.013 部、フッ化セシウム 0.026 部、水 0.23 部を 1,4-ジオキサン 2.7 部に加え、3.5 時間還流させた。反応混合物を、クロロホルム-水で抽出、クロロホルム相を濃縮後、カラムクロマト(クロロホルム-ヘキサン)で分離、精製し、下記式 (811) で表される化合物 0.11 部を黒緑色固体として得た。

【0136】

【化 31】

10



20

30

【0137】

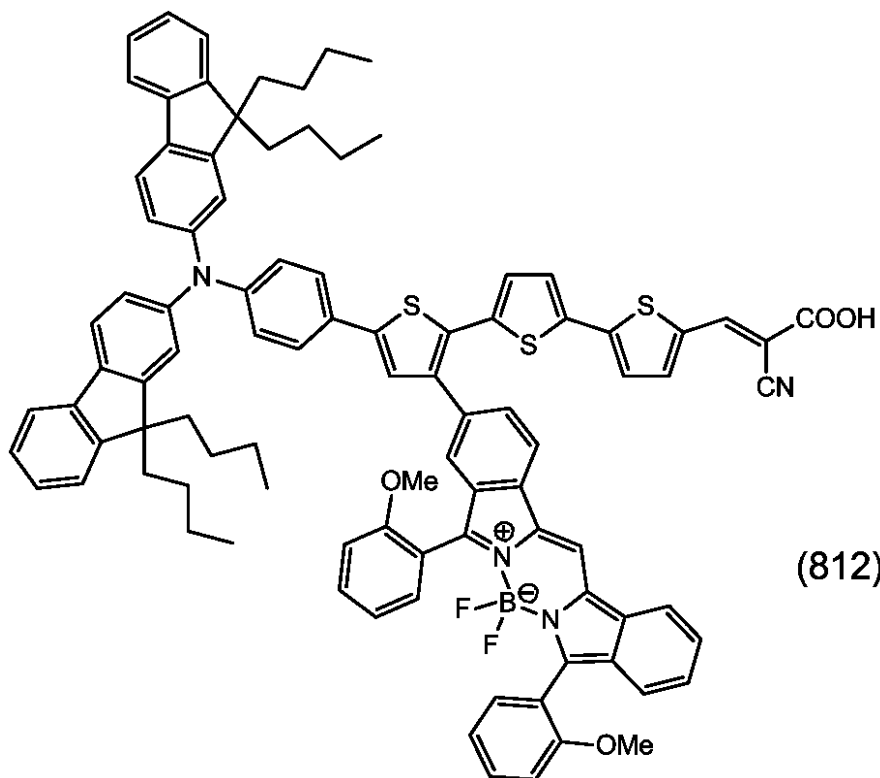
実施例 1

合成例 11 で得られた式 (811) で表される化合物 0.13 部とシアノ酢酸 0.047 部をエタノール-トルエン (2:1) 混合液 18 部に溶解させ、無水ピペラジン 0.005 部を加え、還流下 1 時間反応させた。シアノ酢酸 0.047 部を加え、還流下さらに 3 時間反応させた。さらにシアノ酢酸 0.047 部、無水ピペラジン 0.005 部を加え、還流下 3 時間反応させた。反応混合物を、クロロホルム-水で抽出、クロロホルム相を濃縮後、カラムクロマト(クロロホルム-メタノール)で分離、精製し、下記式 (812) で表される本発明の化合物(表 1 の化合物 1) 0.051 部を黒緑色固体として得た。

40

【0138】

【化 3 2】



10

20

【0139】

この式（812）で表される化合物の極大吸収波長及び核磁気共鳴装置における測定値は次のとおりである。

極大吸収波長； $\lambda_{\max} = 634 \text{ nm}$ （ $1.6 \times 10^{-5} \text{ M}$ 、テトラヒドロフラン溶液）

核磁気共鳴の測定値； $^1\text{H-NMR}$ (PPM: DMSO- d_6): 0.53 (m, 8H), 0.61 (m, 12H), 0.98 (m, 8H), 1.85 (m, 8H), 3.07 (d, 6H), 6.90 (m, 1H), 6.95 (m, 1H), 7.01 (m, 5H), 7.06 (m, 1H), 7.14 (d, 2H), 7.16 (m, 1H), 7.28 (m, 9H), 7.37 (m, 4H), 7.45 (m, 2H), 7.56 (m, 5H), 7.72 (m, 5H), 7.95 (s, 1H), 8.14 (d, 1H), 8.18 (d, 1H), 8.63 (s, 1H)

30

【0140】

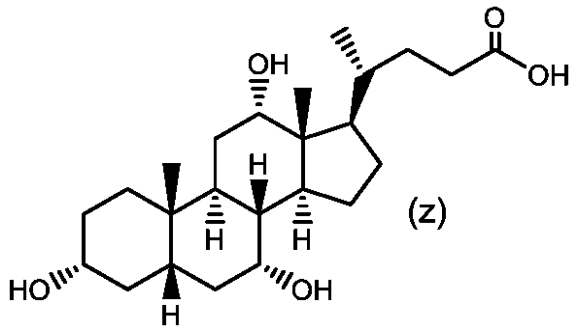
実施例 2

実施例 1 で得られた式（812）で表される本発明の化合物（表 1 の化合物 1）及び下記式（2）で表されるコール酸を、それぞれ $3.2 \times 10^{-4} \text{ M}$ 及び $4 \times 10^{-2} \text{ M}$ となるようにエタノールに溶解した。この溶液に多孔質基板（透明導電性ガラス電極上に多孔質酸化チタンを 450°C で 30 分間焼結した半導体薄膜電極）を室温で一晩浸漬した後、溶剤で洗浄し乾燥することにより本発明の光電変換素子を得た。前記で得られた光電変換素子の半導体薄膜層と、表面に白金がスパッタされた導電性ガラスの白金層を対向配置して固定し、その空隙に電解質を含む溶液を注入、封止して本発明の太陽電池を得た。電解液は、アセトニトリル：エチレンカーボネート（2：3）にヨウ素／テトラプロピルアンモニウムヨードをそれぞれ $0.05 \text{ M} / 0.5 \text{ M}$ になるように溶解したものを使用した。

40

【0141】

【化 3 3】



10

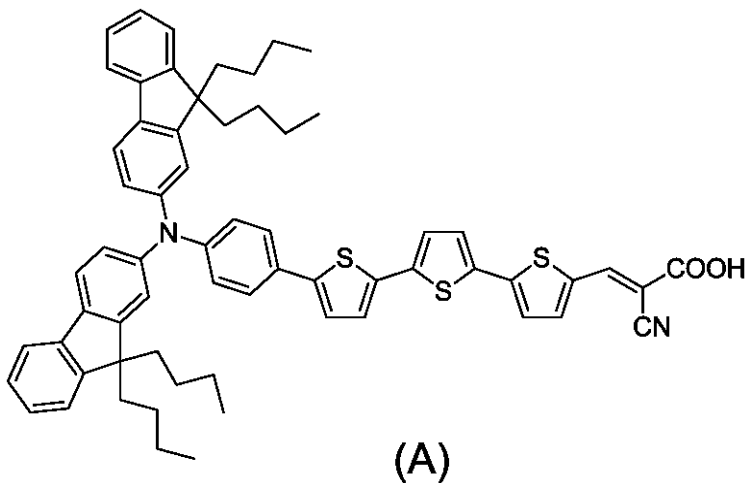
【0 1 4 2】

比較例 1

実施例 1 で得られた式 (8 1 2) で表される本発明の化合物を、下記式 (A) で表される比較用化合物 (特許文献 3 記載の化合物 (1 6 0)) に変更したこと以外は実施例 2 に準じて、比較用の太陽電池を得た。

【0 1 4 3】

【化 3 4】



20

30

【0 1 4 4】

(太陽電池の I P C E 測定)

実施例 2 及び比較例 1 で得られた太陽電池の 3 0 0 乃至 8 0 0 n m における I P C E を分光計器株式会社製 S M - 2 5 Y D を用いて D C 法で測定し、得られた I P C E スペクトルを図 1 に示した。図 1 中、「1」は実施例 2 で得られた本発明の太陽電池の測定結果を、「A」は上記式 (A) で表される化合物を用いて得られた比較用太陽電池の測定結果をそれぞれ表す。

【0 1 4 5】

(太陽電池の光電変換特性評価)

実施例 2 及び比較例 1 で得られた太陽電池の光電変換特性を評価した、測定する電池の大きさは実効部分を 0 . 2 5 c m ² とした。光源は 5 0 0 W キセノンランプを用いて、A M (大気圏通過空気量) 1 . 5 フィルターを通して 1 0 0 m W / c m ² とした。ポテンシオ・ガルバナスタットを用いて測定した。結果を表 1 3 に示した。

40

【0 1 4 6】

【表 2 0】

表 1 3 太陽電池の光電変換特性の評価結果

	化合物番号	短絡電流	開放電圧	変換効率
		(mA/cm ²)	(V)	(%)
実施例 2	1	11.65	0.58	3.38
比較例 1	A	8.73	0.53	2.45

【0 1 4 7】

10

図 1 の結果より、本発明の化合物を増感色素に用いた太陽電池は、比較用の太陽電池に比べて長波長領域の可視光を効果的に電気に変換できることは明らかである。

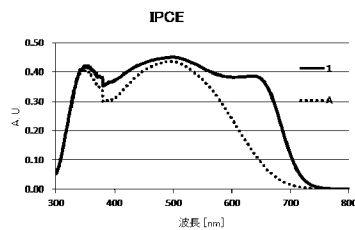
また、表 1 3 の結果より、本発明の化合物を増感色素に用いた太陽電池は、比較用の太陽電池に比べて光電変換特性に優れていることは明らかである。

【産業上の利用可能性】

【0 1 4 8】

特定の部分構造を有する本発明の化合物を増感色素に用いることにより、広範囲の可視光を効果的に電気に変換可能な、高い変換効率を発現する光電変換素子及び太陽電池を提供することが出来た。

【図 1】



フロントページの続き

(72)発明者 薬師寺 秀典

東京都北区志茂 3-3 1-1 2 日本化薬株式会社 研究企画部内

(72)発明者 紫垣 晃一郎

東京都北区志茂 3-3 1-1 2 日本化薬株式会社 研究企画部内

Fターム(参考) 4H048 AA01 AB91 VA77 VB10

【要約の続き】

(Mは半金属原子； $Y_1 \sim Y_3$ はH等； Z_1 及び Z_2 はハロゲン)]

【選択図】 なし