

【公報種別】特許法第17条の2の規定による補正の掲載

【部門区分】第3部門第2区分

【発行日】平成23年1月13日(2011.1.13)

【公表番号】特表2010-512372(P2010-512372A)

【公表日】平成22年4月22日(2010.4.22)

【年通号数】公開・登録公報2010-016

【出願番号】特願2009-540750(P2009-540750)

【国際特許分類】

C 07 F 9/38 (2006.01)

C 11 D 3/36 (2006.01)

C 05 B 15/00 (2006.01)

【F I】

C 07 F 9/38 C S P B

C 07 F 9/38 C

C 07 F 9/38 D

C 11 D 3/36

C 05 B 15/00

【手続補正書】

【提出日】平成22年11月15日(2010.11.15)

【手続補正1】

【補正対象書類名】特許請求の範囲

【補正対象項目名】全文

【補正方法】変更

【補正の内容】

【特許請求の範囲】

【請求項1】

一般式が

T - B

であるホスホナート化合物。

式中、Bは、式：

- X - N (W) (Z P O<sub>3</sub> M<sub>2</sub>)

を有する部分を含むホスホナートであり、ここで、Xは場合によりC<sub>1</sub> - C<sub>12</sub>の直鎖、分枝鎖、環状または芳香族基によって置換されるC<sub>2</sub> - C<sub>50</sub>の直鎖、分枝鎖、環状または芳香族の炭化水素鎖（該鎖および/または該基は、場合によりOH、COOH、F、OR'、およびSR'（ここで、R'は、C<sub>1</sub> - C<sub>12</sub>の直鎖、分枝鎖、環状または芳香族の炭化水素鎖である）部分によって置換される）；および[A - O]<sub>x</sub> - A（Aは、C<sub>2</sub> - C<sub>9</sub>の直鎖、分枝鎖、環状または芳香族の炭化水素鎖であり、xは、1 ~ 200の整数である）から選択され；

Zは、C<sub>1</sub> - C<sub>6</sub>のアルキレン鎖であり；

Mは、HおよびC<sub>1</sub> - C<sub>20</sub>の直鎖、分枝鎖、環状または芳香族の炭化水素鎖から選択され；

Wは、H、Z P O<sub>3</sub> M<sub>2</sub>および[V - N (K)]<sub>n</sub> Kから選択され、ここで、Vは、場合によりC<sub>1</sub> - C<sub>12</sub>の直鎖、分枝鎖、環状または芳香族基によって置換されるC<sub>2</sub> - C<sub>50</sub>の直鎖、分枝鎖、環状または芳香族の炭化水素鎖（該鎖および/または該基は、場合によりOH、COOH、F、OR'またはSR'（ここで、R'は、C<sub>1</sub> - C<sub>12</sub>の直鎖、分枝鎖、環状または芳香族の炭化水素鎖である）部分によって置換される）；および[A - O]<sub>x</sub> - A（ここで、Aは、C<sub>2</sub> - C<sub>9</sub>の直鎖、分枝鎖、環状または芳香族の炭化水素鎖であり、xは、1 ~ 200の整数である）から選択され；

K は、  $Z \text{PO}_3 \text{M}_2$  または H であり、 n は、 0 ~ 200 の整数であり；  
かつここで、 T は以下：

- (i)  $\text{MOOC-X-N(U)-}$  ;
- (ii)  $\text{MOOC-C(X^2)_2-N(U)-}$  ;
- (iii)  $\text{MOOC-X-S-}$  ;
- (IVi)  $[\text{X}(\text{HO})_{n'}(\text{N-U})_{n''}]_{n''-}$  ;
- (Vi)  $\text{U-N(U)-[X-N(U)]}_{n''-}$  ;
- (VIIi)  $\text{D-S-}$  ;
- (VIIIi)  $\text{CN-}$  ;
- (VIIIi)  $\text{MOOC-X-O-}$  ;
- (IXi)  $\text{MOOC-C(X^2)_2-O-}$  ;
- (Xi)  $\text{NHR', -}$  ; および
- (XIi)  $(\text{DCO})_2-\text{N-}$  ;

からなる群から選択される部分であり、ここで、 M、Z、W および X は、上に定義されるとおりであり； U は、直鎖、分枝鎖、環状または芳香族の  $C_1 - C_{12}$  炭化水素鎖、 H および  $X - N(W)$  ( $Z \text{PO}_3 \text{M}_2$ ) から選択され；  $X^2$  は、独立して H、場合により  $C_1 - C_{12}$  の直鎖、分枝鎖、環状または芳香族炭化水素基によって置換される直鎖、分枝鎖、環状または芳香族の  $C_1 - C_{20}$  の炭化水素鎖から選択され、場合により OH、COOH、R' O、R' S および / または NH<sub>2</sub> 部分によって置換され； n'、n'' および n''' は独立して 1 ~ 100 の整数から選択され； D および R' は独立して場合により  $C_1 - C_{12}$  の直鎖、分枝鎖、環状または芳香族基によって置換される  $C_1 - C_{50}$  の直鎖、分枝鎖、環状または芳香族の炭化水素鎖（該鎖および / または該基は、場合により OH、COOH、F、OR' および SR'（ここで、 R' は、  $C_1 - C_{12}$  の直鎖、分枝鎖、環状または芳香族の炭化水素鎖である）部分によって置換されてもよい）； および  $A' \text{O} - [\text{A-O}]_x - \text{A}$ （ここで、 A は、  $C_2 - C_9$  の直鎖、分枝鎖、環状または芳香族の炭化水素鎖であり、 x は、 1 ~ 200 の整数であり、 A' は場合により  $C_1 - C_{12}$  の直鎖、分枝鎖、環状または芳香族基によって置換される  $C_1 - C_{50}$  の直鎖、分枝鎖、環状または芳香族の炭化水素鎖（該鎖および / または該基は、場合により OH、COOH、F、OR' および SR'（ここで、 R' は、上記の意味を有する）部分によって置換されてもよい）から選択される）から選択され； そして D もまた H と表わされることができるが；

ただし、以下の化合物は除外される：

エチレンジアミン - N - ホスホノメチル - N' - モノコハク酸、  
1,6 - ヘキサメチレンジアミン - N - ホスホノメチル - N' - モノコハク酸、  
2 - ヒドロキシプロピレン - 1,3 - ジアミノ - N - ホスホノメチル - N' - モノコハク酸、  
1,2 - プロピレンジアミン - N - ホスホノメチル - N' - モノコハク酸、  
1,3 - プロピレンジアミン - N - ホスホノメチル - N' モノコハク酸、 および  
エチレン - ビス (オキシエチレンニトリロ) - N - ホスホノメチル - N' - モノコハク酸。

### 【請求項 2】

ホスホナート B の個々の部分が以下の種：

X は  $C_2 - C_{30}$  または  $[\text{A-O}]_x - \text{A}$ ；

V は  $C_2 - C_{30}$  または  $[\text{A-O}]_x - \text{A}$

（ここで、 X および V の両方は独立して、 A は  $C_2 - C_6$  および x は 1 - 100）；

Z は  $C_1 - C_3$ ；

M は H または  $C_1 - C_6$ ； ならびに

n は 1 - 100、

から選択される、請求項 1 に記載のホスホナート化合物。

### 【請求項 3】

T 部分の構造要素が以下：

$X^2$  は H または  $C_{1-}C_{12}$  ;  
 $n'$  および  $n''$  は独立して 1 - 5 0 ;  
 $n'''$  は 1 - 1 0 0 ;  
 $R''$  は  $C_{1-}C_{30}$  または  $A' O - [A - O]_x - A$  ;  
 $D$  は H、 $C_{1-}C_{30}$  または  $A' O - [A - O]_x - A$  ,  
(ここで、 $R''$  および D の両方は独立して、A は  $C_{2-}C_6$ 、 $x$  は 1 - 1 0 0 、および A' は  $C_{1-}C_{30}$  ) ;  
W は  $Z P O_3 M_2$  ; および  
U は H、 $C_{1-}C_8$ 、または  $-X-N-(Z P O_3 M_2)_2$ 、  
から選択される、請求項 1 または 2 に記載のホスホナート化合物。

【請求項 4】

ホスホナート B の個々の部分が以下の種：  
X は  $C_{2-}C_{12}$  または  $[A - O]_x - A$  ;  
V は  $C_{2-}C_{12}$  または  $[A - O]_x - A$   
(ここで、X および V の両方は独立して、A は  $C_{2-}C_4$  および  $x$  は 1 - 1 0 0 ) ;  
M は H または  $C_{1-}C_4$  ; ならびに  
n は 1 - 2 5

から選択される、請求項 1 ~ 3 のいずれか 1 項に記載のホスホナート化合物。

【請求項 5】

T の構造要素が以下：  
 $X^2$  は H または  $C_{1-}C_{10}$  ;  
 $n'$ 、 $n''$  は独立して 1 - 2 5 ;  
 $n'''$  は 1 - 5 0 ;  
 $R''$  は  $C_{1-}C_{16}$  または  $A' O - [A - O]_x - A$  ;  
D は H、 $C_{1-}C_{16}$ 、または  $A' O - [A - O]_x - A$   
(ここで、 $R''$  および D の両方は独立して、A は  $C_{2-}C_4$  および  $x$  は 1 - 1 0 0 ) ;  
X は  $C_{2-}C_{12}$  ; ならびに  
Z は  $C_{1-}C_3$ 、  
から選択される、請求項 1 ~ 4 のいずれか 1 項に記載のホスホナート化合物。

【請求項 6】

反応パートナー T が (i)、(ii)、(IVi)、(Vi)、(Xi) および (XIi) からなる群から選択される、請求項 1 ~ 5 のいずれか 1 項に記載のホスホナート化合物。

【請求項 7】

反応パートナー T が (iii)、(Vli)、(VIIIi) および (IXi) からなる群から選択される、請求項 1 ~ 5 のいずれか 1 項に記載のホスホナート化合物。

【請求項 8】

反応パートナー T が、以下：

(i) カブロラクタムまたは 6 - アミノヘキサン酸；2 - ピロリドンまたは 4 - アミノブタン酸；およびラウリルラクタムまたは 12 - アミノドデカン酸；

(ii) グルタミン酸；メチオニン；リジン；アスパラギン酸；フェニルアラニン；グリシン；およびスレオニン；

(IVi) 2 - エタノールアミン；6 - アミノヘキサノール；4 - アミノブタノール；ジ - (2 - エタノールアミン)；ジプロパノールアミン；2 - (2 - アミノエトキシ) エタノール；および 3 - プロパノールアミン；

(Vi) ジアミノトルエン；1,6 - ヘキサメチレンジアミン；1,4 - ブタンジアミン；1,2 - エチレンジアミン；直鎖または分枝鎖のポリエチレンイミン；およびポリアリルアミン；

(Xi) メチルアミン；エチルアミン；プロピルアミン；ブチルアミン；ヘキシリルアミン；ヘプチルアミン；オクチルアミン；ノニルアミン；デシルアミン；ドデシルアミン；アニリン；および直鎖種または分枝鎖種を含む  $C_{12-}C_{22}$  脂肪アミン；および

(XI i) フタルイミド；スクシンイミド；およびマレイミドから選択される、請求項 6 に記載のホスホナート化合物。

【請求項 9】

反応パートナー T が、以下：

(iii) チオグリコール酸；およびシステイン；

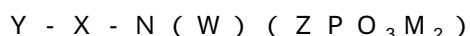
(VI i) メチルチオール；エチルチオール；プロピルチオール；ペンチルチオール；ヘキシリチオール；オクチルチオール；チオフェノール；チオナフトール；デシルチオール；およびドデシルチオール；

(VIII i) 3 - ヒドロキシプロパン酸；4 - ヒドロキシブタン酸；5 - ヒドロキシペンタン酸；および 2 - ヒドロキシ酢酸；および

(IX i) 酒石酸；ヒドロキシコハク酸；および - ヒドロキシイソ酪酸から選択される、請求項 7 に記載のホスホナート化合物。

【請求項 10】

以下の式：



を有するホスホナートを、0 から 200 の範囲の温度にて 7 またはそれよりも高い pH を有する水性媒体中において、請求項 1 ~ 9 のいずれか 1 項において定義されるよう (i) ~ (XI i) から選択される反応パートナー T と反応させることによって請求項 1 ~ 9 のいずれか 1 項に記載のホスホナート化合物を製造するための方法であって、

Y は、pKa が 4 と等しいかまたは 4 より小さい共役酸である置換基であり、

X、W、Z および M は、請求項 1 ~ 9 のいずれか 1 項において定義される意味を有する方法。

【請求項 11】

温度が 50 から 140 の範囲内であり、pH が 8 から 14 の範囲内であり、pKa が 1 と等しいかまたは 1 より小さい、請求項 10 に記載の方法。

【請求項 12】

Y が、Cl、Br、I、H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>、NO<sub>3</sub>、CH<sub>3</sub>SO<sub>3</sub>、p - トルエンスルホナートおよびそれらの混合物からなる群から選択される、請求項 10 または 11 に記載の方法。

【請求項 13】

反応が、ヨウジドに対する T 反応物のモル比が 5000 : 1 から 1 : 1 のアルカリ金属ヨウジドの存在下で行われる、請求項 10 ~ 12 のいずれか 1 項に記載の方法。

【請求項 14】

請求項 1 ~ 9 のいずれか 1 項に記載のホスホナート化合物を含む、分散剤、水処理剤、スケール防止剤、医薬品、医薬品中間体、洗剤、二次石油採収剤、肥料または微量栄養素。