

【公報種別】特許法第17条の2の規定による補正の掲載

【部門区分】第3部門第2区分

【発行日】令和2年8月13日(2020.8.13)

【公表番号】特表2019-531255(P2019-531255A)

【公表日】令和1年10月31日(2019.10.31)

【年通号数】公開・登録公報2019-044

【出願番号】特願2018-566882(P2018-566882)

【国際特許分類】

C 07 D 413/04 (2006.01)

C 07 D 491/052 (2006.01)

C 07 D 417/04 (2006.01)

C 07 D 491/16 (2006.01)

C 07 H 19/10 (2006.01)

C 12 Q 1/6869 (2018.01)

G 01 N 33/53 (2006.01)

【F I】

C 07 D 413/04

C 07 D 491/052 C S P

C 07 D 417/04

C 07 D 491/16

C 07 H 19/10

C 12 Q 1/6869 Z

G 01 N 33/53 M

【手続補正書】

【提出日】令和2年6月30日(2020.6.30)

【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

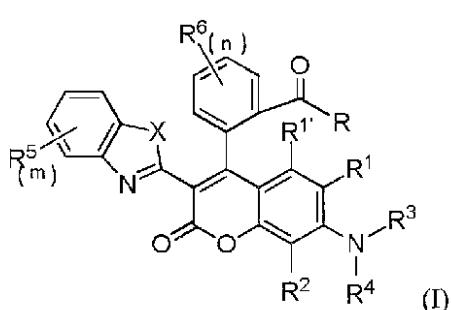
【補正の内容】

【特許請求の範囲】

【請求項1】

式(I)の化合物またはそのメソメリ一型であって、

【化1】



式中、各R¹、R²、およびR³が、独立して、H、アルキル、置換型アルキル、アルコキシ、アルケニル、アルキニル、ハロアルキル、ハロアルコキシ、アルコキシアルキル、アミノ、アミノアルキル、アミノスルホニル、ハロ、シアノ、ヒドロキシ、ヒドロキシアルキル、ヘテロアルキル、C-カルボキシ、O-カルボキシ、C-アミド、N-アミド、ニトロ、スルホニル、スルホ、スルフィノ、スルホネート、スルホニルハライド、S

-スルホンアミド、N-スルホンアミド、置換されていてもよいカルボシクリル、置換されていてもよいアリール、置換されていてもよいヘテロアリール、および置換されていてもよいヘテロシクリルからなる群から選択され、

あるいは、R¹およびR^{1'}が、一緒になって、それらが結合している原子と共に、置換されていてもよいカルボシクリル、置換されていてもよいアリール、置換されていてもよいヘテロアリール、および置換されていてもよいヘテロシクリルからなる群から選択される環または環系を形成し、

各R³およびR⁴が、独立して、H、アルキル、置換型アルキル、アルケニル、アルキニル、アミノアルキル、ハロアルキル、ヘテロアルキル、アルコキシアルキル、スルホニルヒドロキシド、置換されていてもよいアリール、置換されていてもよいヘテロアリール、置換されていてもよいカルボシクリル、および置換されていてもよいヘテロシクリルからなる群から選択され、

あるいは、R¹およびR³が、それらが結合している原子と共に、置換されていてもよい5～10員のヘテロアリール、または置換されていてもよい5～10員のヘテロシクリルからなる群から選択される環または環系を形成し、

あるいは、R²およびR⁴が、それらが結合している原子と共に、置換されていてもよい5～10員のヘテロアリール、および置換されていてもよい5～10員のヘテロシクリルからなる群から選択される環または環系を形成し、

R⁵およびR⁶が、独立して、アルキル、置換型アルキル、アルコキシ、アルケニル、アルキニル、ハロアルキル、ハロアルコキシ、アルコキシアルキル、アミノ、アミノアルキル、アミノスルホニル、ハロ、シアノ、ヒドロキシ、ヒドロキシアルキル、ヘテロアルキル、C-カルボキシ、O-カルボキシ、C-アミド、N-アミド、ニトロ、スルホニル、スルホ、スルフィノ、スルホネート、スルホニルハライド、S-スルホンアミド、N-スルホンアミド、置換されていてもよいカルボシクリル、置換されていてもよいアリール、置換されていてもよいヘテロアリール、および置換されていてもよいヘテロシクリルからなる群から選択され、

Rが、-OR⁷または-NR⁸R⁹から選択され、

R⁷が、H、アルキル、置換型アルキル、置換されていてもよいアリール、置換されていてもよいヘテロアリール、置換されていてもよいカルボシクリル、および置換されていてもよいヘテロシクリルからなる群から選択され、

各R⁸およびR⁹が、独立して、H、アルキル、置換型アルキル、アルケニル、アルキニル、アミノアルキル、カルボキシアルキル、スルホナトアルキル、ハロアルキル、ヘテロアルキル、アルコキシアルキル、スルホ、置換されていてもよいアリール、置換されていてもよいヘテロアリール、置換されていてもよいカルボシクリル、および置換されていてもよいヘテロシクリルからなる群から選択され、

Xが、O、S、NR¹⁰、およびSeからなる群から選択され、

R¹⁰が、H、アルキル、置換型アルキル、置換されていてもよいアリール、置換されていてもよいヘテロアリール、置換されていてもよいカルボシクリル、および置換されていてもよいヘテロシクリルからなる群から選択され、

mが、0～4から選択される整数であり、

nが、0～4から選択される整数であり、ただし、

各R¹、R^{1'}、およびR²がHであり、各R³およびR⁴がエチルであり、各mおよびnが0であり、Rが-NHCH(CH₃)CH₂OHである場合、XはO、S、またはSeから選択され、

各R¹、R^{1'}、およびR²がHであり、各R³およびR⁴がエチルであり、各mおよびnが0であり、Rが-OHである場合、XはSまたはSeから選択され、

各R¹、R^{1'}、およびR²がHであり、各R³およびR⁴がエチルであり、mが1であり、R⁵がメチルであり、nが0であり、Rが-OHまたは-OEtである場合、XはS、NR¹⁰、またはSeから選択され、

各R¹、R^{1'}、およびR²がHであり、各R³およびR⁴がエチルであり、mが1で

あり、R⁵が-S(O₂)Etであり、nが0であり、Rが-OHまたは-OEtである場合、XはS、NR¹、またはSeから選択される、化合物。

【請求項2】

XがSまたはOである、請求項1に記載の化合物。

【請求項3】

Rが-OR⁷である、または、Rが-NR⁸R⁹である、請求項1または2に記載の化合物。

【請求項4】

R⁷がHまたはアルキルである、請求項1～3のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項5】

Rが-NR⁸R⁹であるとき、

各R⁸およびR⁹がHである、または

R⁸がHであり、R⁹がアルキルもしくは置換型アルキルである、もしくは、R⁸およびR⁹の両方がアルキルもしくは置換型アルキルであり、好ましくは、前記置換型アルキルが、カルボキシルもしくはスルホニルヒドロキシドで置換されているアルキルから選択される、

請求項3に記載の化合物。

【請求項6】

各R¹、R¹、およびR²がHである、または、

R¹、R¹、およびR²の少なくとも1つがアルキルである、

請求項1～5のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項7】

各R³およびR⁴がアルキルであり、好ましくは各R³およびR⁴がメチルもしくはエチルから選択される、または

R³がHであり、R⁴がアルキルである、

請求項1～6のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項8】

R¹およびR³が、それらが結合している原子と共に、置換されていてもよい3～7員のヘテロシクリル、好ましくは置換されていてもよい6員のヘテロシクリル、を形成し、

好ましくはR⁴がHまたはアルキルから選択され、かつ、R¹およびR²のうちの少なくとも一方がHである、請求項1～5のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項9】

R²およびR⁴が、それらが結合している原子と共に、置換されていてもよい3～7員のヘテロシクリル、好ましくは置換されていてもよい6員のヘテロシクリル、を形成し、

好ましくはR³がHまたはアルキルから選択され、かつ、R¹およびR¹のうちの少なくとも一方がHである、請求項1～5のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項10】

R¹およびR³が、それらが結合している原子と共に、置換されていてもよい3～7員のヘテロシクリルを形成し、R²およびR⁴が、それらが結合している原子と共に、置換されていてもよい3～7員のヘテロシクリル、好ましくは置換されていてもよい6員のヘテロシクリル、を形成する、請求項1～5のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項11】

前記ヘテロシクリルが1つのヘテロ原子を含み、

好ましくは、前記ヘテロシクリルが1以上のアルキルで置換されている、請求項8～10のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項12】

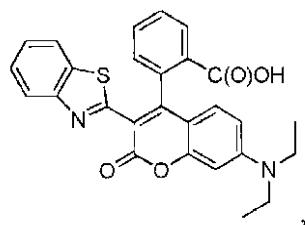
mが0であり、もしくは

mが1であり、R⁵がハロ、スルホ、アミノスルホニル、もしくはスルホニルハライドから選択され、および/または

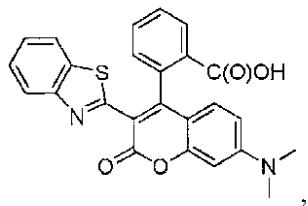
nが0である、請求項1～11のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項 13】

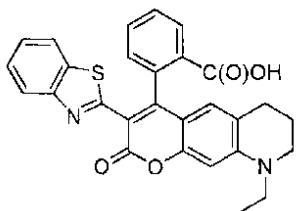
【化 2】



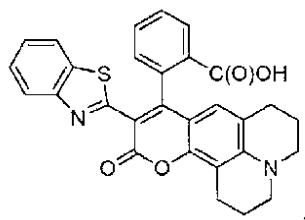
【化 3】



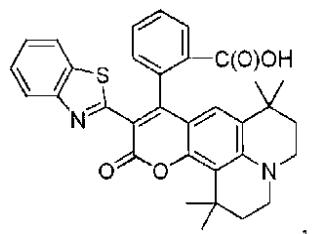
【化4】



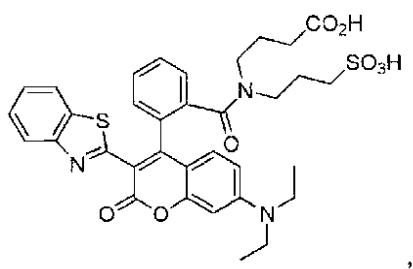
【化 5】



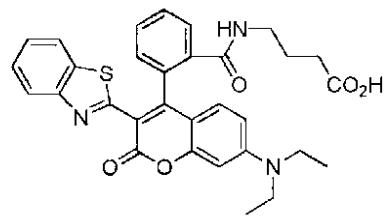
【化 6】



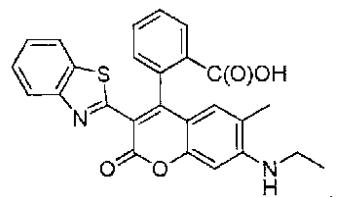
【化 7】



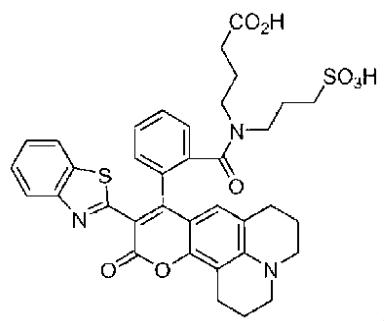
【化 8】



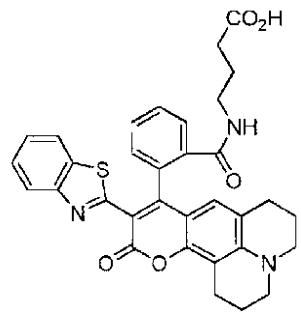
【化 9】



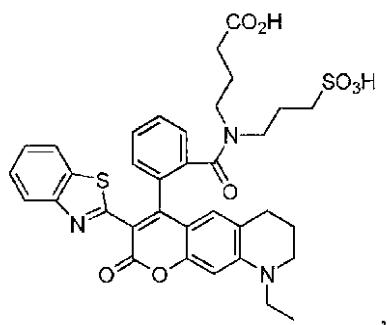
【化 1 0 】



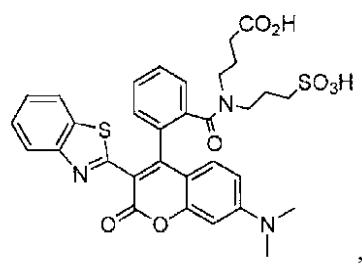
【化 1 1】



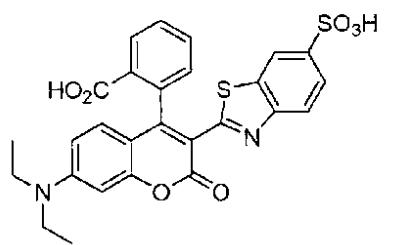
【化 1 2】



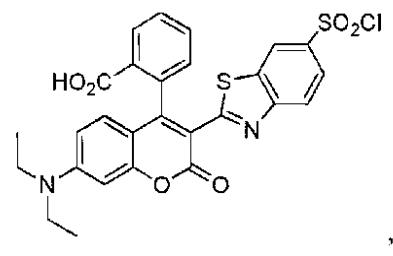
【化 1 3】



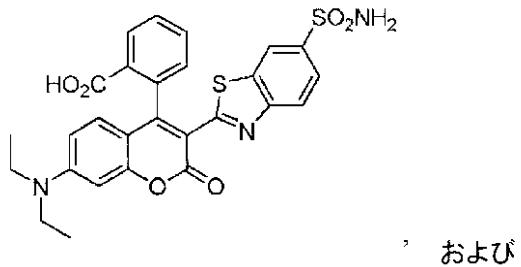
【化 1 4】



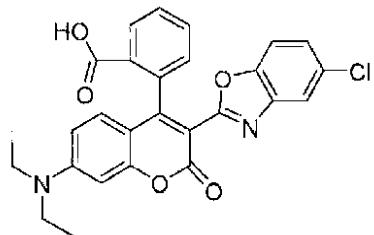
【化 1 5】



【化 1 6 】



【化17】



またはそれらのメソメリ一異性体からなる群から選択される、請求項1または2に記載の化合物。

【請求項14】

前記化合物が、C(=O)Rを介してヌクレオチドまたはオリゴヌクレオチドに共有結合しており、Rが-OR⁷であり、R⁷が置換型アルキルである、または、

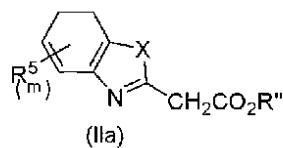
、前記化合物が、C(=O)Rを介してヌクレオチドまたはオリゴヌクレオチドに共有結合しており、Rが-NR⁸R⁹であり、R⁸またはR⁹の少なくとも一方が置換型アルキルである、請求項1または2に記載の化合物。

【請求項15】

式(Ia)の化合物を製造する方法であって、

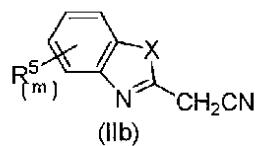
式(IIa)

【化18】



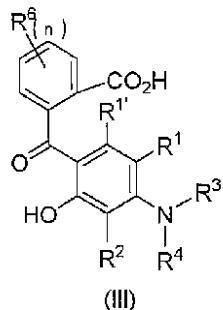
または(IIb)

【化19】



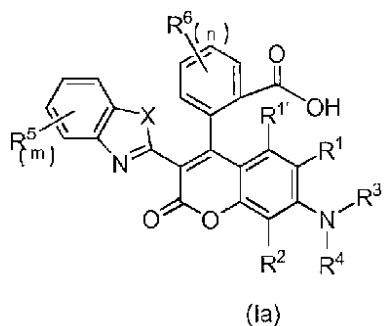
の化合物と式(III)

【化20】



の化合物を反応させて、

【化 2 1】



を形成することを含んでなり、

式中、各 R^1 、 R^2 、および $R^{1'}$ が、独立して、H、アルキル、置換型アルキル、アルコキシ、アルケニル、アルキニル、ハロアルキル、ハロアルコキシ、アルコキシアルキル、アミノ、アミノアルキル、アミノスルホニル、ハロ、シアノ、ヒドロキシ、ヒドロキシアルキル、ヘテロアルキル、C-カルボキシ、O-カルボキシ、C-アミド、N-アミド、ニトロ、スルホニル、スルホ、スルフィノ、スルホネート、スルホニルハライド、S-スルホンアミド、N-スルホンアミド、置換されていてもよいカルボシクリル、置換されていてもよいアリール、置換されていてもよいヘテロアリール、および置換されていてもよいヘテロシクリルからなる群から選択され、

あるいは、 R^1 および $R^{1'}$ が、一緒にになって、それらが結合している原子と共に、置換されていてもよいカルボシクリル、置換されていてもよいアリール、置換されていてもよいヘテロアリール、および置換されていてもよいヘテロシクリルからなる群から選択される環または環系を形成し、

各 R^3 および R^4 が、独立して、H、アルキル、置換型アルキル、アルケニル、アルキニル、アミノアルキル、ハロアルキル、ヘテロアルキル、アルコキシアルキル、スルホニルヒドロキシド、置換されていてもよいアリール、置換されていてもよいヘテロアリール、置換されていてもよいカルボシクリル、および置換されていてもよいヘテロシクリルからなる群から選択され、

あるいは、 R^1 および R^3 が、それらが結合している原子と共に、置換されていてもよい5～10員のヘテロアリール、または置換されていてもよい5～10員のヘテロシクリルからなる群から選択される環または環系を形成し、

あるいは、 R^2 および R^4 が、それらが結合している原子と共に、置換されていてもよい5～10員のヘテロアリール、および置換されていてもよい5～10員のヘテロシクリルからなる群から選択される環または環系を形成し、

R^5 および R^6 が、独立して、アルキル、置換型アルキル、アルコキシ、アルケニル、アルキニル、ハロアルキル、ハロアルコキシ、アルコキシアルキル、アミノ、アミノアルキル、アミノスルホニル、ハロ、シアノ、ヒドロキシ、ヒドロキシアルキル、ヘテロアルキル、C-カルボキシ、O-カルボキシ、C-アミド、N-アミド、ニトロ、スルホニル、スルホ、スルフィノ、スルホネート、スルホニルハライド、S-スルホンアミド、N-スルホンアミド、置換されていてもよいカルボシクリル、置換されていてもよいアリール、置換されていてもよいヘテロアリール、および置換されていてもよいヘテロシクリルからなる群から選択され、

X が、O、S、NR¹⁰、およびSeからなる群から選択され、

R^{10} が、H、アルキル、置換型アルキル、置換されていてもよいアリール、置換されていてもよいヘテロアリール、置換されていてもよいカルボシクリル、および置換されていてもよいヘテロシクリルからなる群から選択され、

R'' が、H、置換されていてもよいアルキル、アルケニル、アルキニル、アミノアルキル、ハロアルキル、ヘテロアルキル、アルコキシアルキル、スルホ、置換されていてもよいアリール、置換されていてもよいヘテロアリール、置換されていてもよいカルボシクリ

ル、および置換されていてもよいヘテロシクリルからなる群から選択され、
 m が、0～4から選択される整数であり、
 n が、0～4から選択される整数である、方法。