

【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 0 7 D 413/04 (2006.01)

C 0 7 D 491/052 (2006.01)

C 0 7 D 417/04 (2006.01)

C 0 7 D 491/16 (2006.01)

C 0 7 H 19/10 (2006.01)

C 1 2 Q 1/6869 (2018.01)

G 0 1 N 33/53 (2006.01)

【 F I 】

C 0 7 D 413/04

C 0 7 D 491/052 C S P

C 0 7 D 417/04

C 0 7 D 491/16

C 0 7 H 19/10

C 1 2 Q 1/6869 Z

G 0 1 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

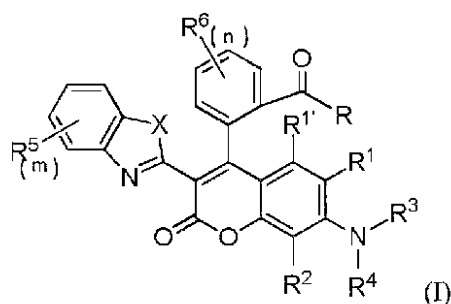
【補正の内容】

【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ー型であって、

【化 1】



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、

R が、-OR⁷ または -NR⁸R⁹ から選択され、

R^7 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 R^8 および R^9 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、

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、

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 R^1 、 $R^{1'}$ 、および R^2 が H であり、各 R^3 および R^4 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 R^1 、 $R^{1'}$ 、および R^2 が H であり、各 R^3 および R^4 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 R^1 、 $R^{1'}$ 、および R^2 が H であり、各 R^3 および R^4 がエチルであり、m が 1 であり、 R^5 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 R^1 、 $R^{1'}$ 、および R^2 が H であり、各 R^3 および R^4 がエチルであり、m が 1 で

あり、 R^5 が $-S(O_2)Et$ であり、 n が 0 であり、 R が $-OH$ または $-OEt$ である場合、 X は S 、 NR^{10} 、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 $-OR^7$ である、または、 R が $-NR^8R^9$ である、請求項 1 または 2 に記載の化合物。

【請求項 4】

R^7 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 $-NR^8R^9$ であるとき、
各 R^8 および R^9 が H である、または
 R^8 が H であり、 R^9 がアルキルもしくは置換型アルキルである、もしくは、 R^8 および R^9 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 R^1 、 $R^{1'}$ 、および R^2 が H である、または、
 R^1 、 $R^{1'}$ 、および R^2 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 R^3 および R^4 がアルキルであり、好ましくは各 R^3 および R^4 がメチルもしくはエチルから選択される、または
 R^3 が H であり、 R^4 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】

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 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 R^4 が H またはアルキルから選択され、かつ、 $R^{1'}$ および R^2 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】

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 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 R^3 が H またはアルキルから選択され、かつ、 $R^{1'}$ および R^1 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】

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 3 ~ 7 員のヘテロシクリルを形成し、 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 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】

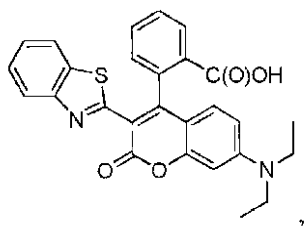
前記ヘテロシクリルが 1 つのヘテロ原子を含み、
好ましくは、前記ヘテロシクリルが 1 以上のアルキルで置換されている、請求項 8 ~ 10 のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項 12】

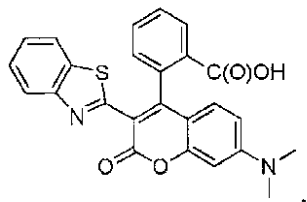
m が 0 であり、もしくは
 m が 1 であり、 R^5 がハロ、スルホ、アミノスルホニル、もしくはスルホニルハライドから選択され、および / または
 n が 0 である、請求項 1 ~ 11 のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項 13】

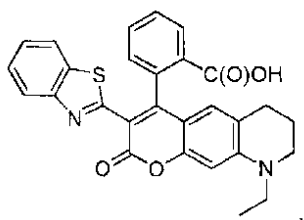
【化 2】



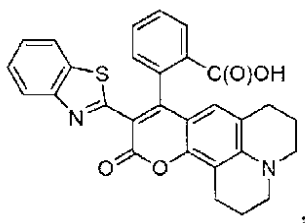
【化 3】



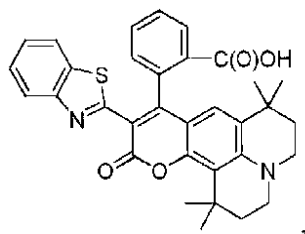
【化 4】



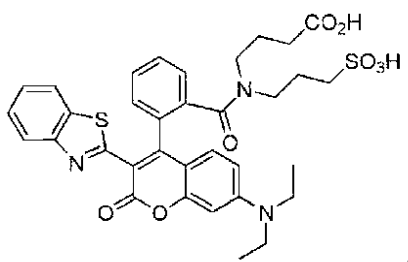
【化 5】



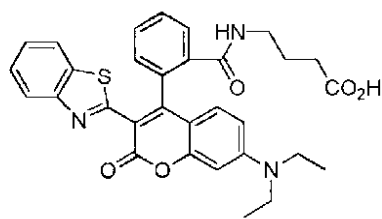
【化 6】



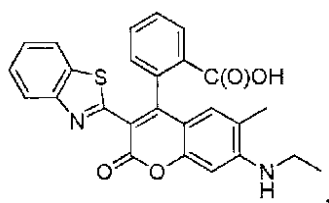
【化 7】



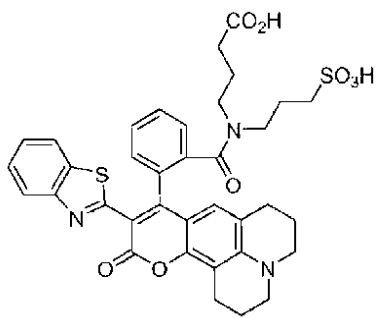
【化 8】



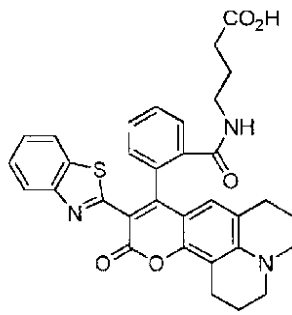
【化 9】



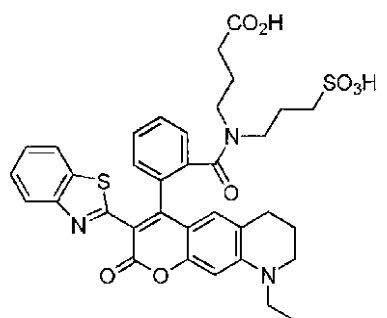
【化 10】



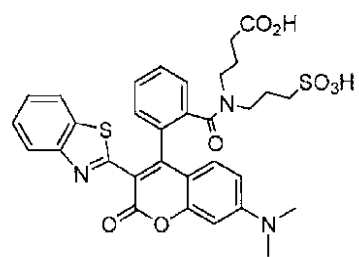
【化 11】



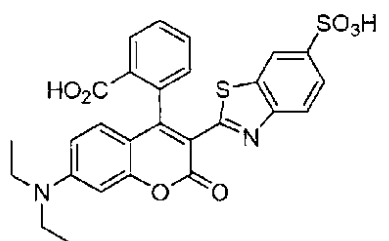
【化 1 2】



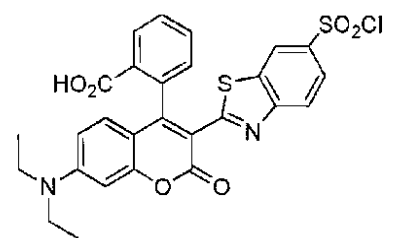
【化 1 3】



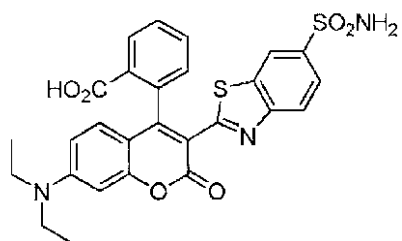
【化 1 4】



【化 1 5】

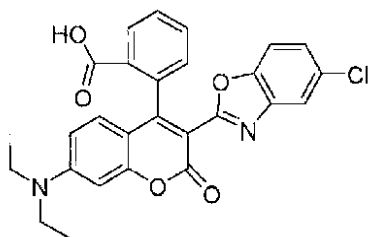


【化 1 6】



, および

【化 17】



またはそれらのメソメリー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】

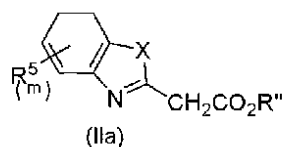
前記化合物が、 $C(=O)R$ を介してヌクレオチドまたはオリゴヌクレオチドに共有結合しており、 R が $-OR^7$ であり、 R^7 が置換型アルキルである、または、
前記化合物が、 $C(=O)R$ を介してヌクレオチドまたはオリゴヌクレオチドに共有結合しており、 R が $-NR^8R^9$ であり、 R^8 または R^9 の少なくとも一方が置換型アルキルである、請求項 1 または 2 に記載の化合物。

【請求項 15】

式 (Ia) の化合物を製造する方法であって、

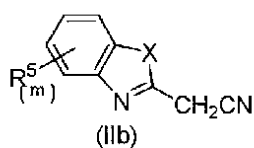
式 (IIa)

【化 18】



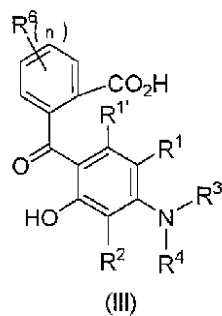
または (IIb)

【化 19】



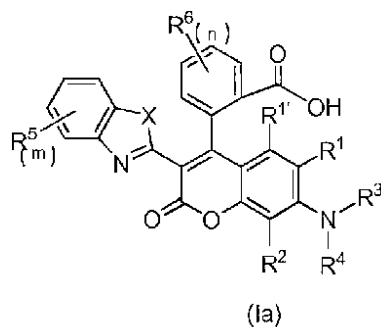
の化合物と式 (III)

【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、 NR^{10} 、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

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。