

【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 2 月 13 日 (2020.2.13)

【公表番号】特表 2019-504840 (P2019-504840A)

【公表日】平成 31 年 2 月 21 日 (2019.2.21)

【年通号数】公開・登録公報 2019-007

【出願番号】特願 2018-539274 (P2018-539274)

【国際特許分類】

C 0 7 C 49/255 (2006.01)

C 0 7 D 231/14 (2006.01)

C 0 7 D 231/12 (2006.01)

C 0 7 C 221/00 (2006.01)

C 0 7 C 45/72 (2006.01)

C 0 7 C 225/14 (2006.01)

【 F I 】

C 0 7 C 49/255 A

C 0 7 D 231/14 C S P

C 0 7 D 231/12 C

C 0 7 C 221/00

C 0 7 C 45/72

C 0 7 C 225/14

【手続補正書】

【提出日】令和 1 年 12 月 26 日 (2019.12.26)

【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

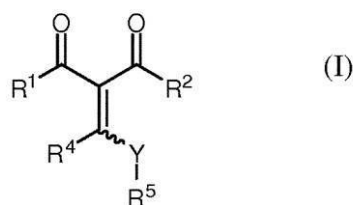
【補正の内容】

【特許請求の範囲】

【請求項 1】

式 (I)

【化 1】



[ 式中、

R<sup>1</sup> は、CF<sub>2</sub>Cl、CF<sub>2</sub>H、CFCl<sub>2</sub>、CFClH、CF<sub>2</sub>Br、CCl<sub>3</sub>、CF<sub>3</sub>、CBr<sub>3</sub>、および CI<sub>3</sub> からなる群から選択され；

R<sup>2</sup> は CHal<sub>3</sub>（ここで、Hal はハロゲンであり、それぞれの Hal は独立して選択される）であり；

ここで、R<sup>2</sup> が CF<sub>3</sub> である場合、R<sup>1</sup> は、2、1 もしくはゼロ個のフッ素原子を含有するか、または

R<sup>2</sup> が CCl<sub>3</sub> である場合、R<sup>1</sup> は、2、1 もしくはゼロ個の塩素原子を含有し、

Y は、S、O および NR<sup>6</sup> からなる群から選択され、ここで、O および NR<sup>6</sup> が好ましく

、  
 $R^4$  は、 $H$ 、 $X'$ 、 $COOR'$ 、 $OR'$ 、 $SR'$ 、 $C(O)NR'_2$ （ここで、 $R'$  は、 $C(O)NR'_2$  において独立して選択され、 $R'$  は、水素または  $C_1 \sim C_{12}$  アルキル基である）、 $CN$ 、それらのそれぞれが任意選択的に置換されている、 $C_1 \sim C_{12}$  アルキル、 $C_2 \sim C_6$  アルケニル、アリール、シクロアルキル、アラルキル、ヘテロアリールからなる群から選択され、そして  $X'$  は、 $F$ 、 $Cl$ 、 $Br$ 、または  $I$  であり；

$R^5$  および  $R^6$  は独立して、それらのそれぞれが任意選択的に置換されている、 $C_1 \sim C_{12}$  アルキル、 $C_2 \sim C_6$  アルケニルまたは  $C_3 \sim C_{10}$  シクロアルキル基からなる群から選択されるか；

または、 $Y = NR^6$  である場合、 $R^5$  は、 $R^6$  および 2 つのラジカルが結合している窒素原子と一緒に、窒素原子に加えて、環員として  $O$ 、 $N$  および  $S$  からなる群から選択されるさらなる 1、2 または 3 個のヘテロ原子を含有してもよい、任意選択的に置換された 5 ~ 10 員ヘテロ環ラジカルである]

の化合物。

【請求項 2】

$R^2$  が、 $CCl_3$ 、 $CF_3$ 、 $CBr_3$ 、および  $CI_3$  からなる群から選択される、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 3】

$R^1$  が  $CF_2Cl$  であり、 $Y$  が  $O$  であり、 $R^2$  が  $CCl_3$  であり、 $R^4$  が  $H$  であり、 $R^5$  がエチルであるか、または

$R^1$  が  $CF_2Cl$  であり、 $Y$  が  $O$  であり、 $R^2$  が  $CF_3$  であり、 $R^4$  が  $H$  であり、 $R^5$  がエチルであるか、または

$R^1$  が  $CF_2H$  であり、 $Y$  が  $O$  であり、 $R^2$  が  $CCl_3$  であり、 $R^4$  が  $H$  であり、 $R^5$  がエチルであるか、または

$R^1$  が  $CF_2H$  であり、 $Y$  が  $O$  であり、 $R^2$  が  $CF_3$  であり、 $R^4$  が  $H$  であり、 $R^5$  がエチルであるか、または

$R^1$  が  $CF_2H$  であり、 $Y$  が  $O$  であり、 $R^2$  が  $CBr_3$  であり、 $R^4$  が  $H$  であり、 $R^5$  がエチルであるか、または

$R^1$  が  $CF_2Cl$  であり、 $Y$  が  $O$  であり、 $R^2$  が  $CF_3$  であり、 $R^4$  が  $H$  であり、 $R^5$  がエチルであるか、または

$R^1$  が  $CF_2Cl$  であり、 $Y$  が  $NR^6$  であり、 $R^2$  が  $CCl_3$  であり、 $R^4$  が  $H$  であり、 $R^5$  および  $R^6$  が  $CH_3$  であるか、または

$R^1$  が  $CF_2Cl$  であり、 $Y$  が  $NR^6$  であり、 $R^2$  が  $CF_3$  であり、 $R^4$  が  $H$  であり、 $R^5$  および  $R^6$  が  $CH_3$  であるか、または

$R^1$  が  $CF_2H$  であり、 $Y$  が  $NR^6$  であり、 $R^2$  が  $CCl_3$  であり、 $R^4$  が  $H$  であり、 $R^5$  および  $R^6$  が  $CH_3$  であるか、または

$R^1$  が  $CF_2H$  であり、 $Y$  が  $NR^6$  であり、 $R^2$  が  $CF_3$  であり、 $R^4$  が  $H$  であり、 $R^5$  および  $R^6$  が  $CH_3$  であるか、または

$R^1$  が  $CF_2H$  であり、 $Y$  が  $NR^6$  であり、 $R^2$  が  $CBr_3$  であり、 $R^4$  が  $H$  であり、 $R^5$  および  $R^6$  が  $CH_3$  であるか、または

$R^1$  が  $CF_3$  であり、 $Y$  が  $O$  であり、 $R^2$  が  $CCl_3$  であり、 $R^4$  が  $H$  であり、 $R^5$  がエチルであるか、または

$R^1$  が  $CF_3$  であり、 $Y$  が  $NR^6$  であり、 $R^2$  が  $CCl_3$  であり、 $R^4$  が  $H$  であり、 $R^5$  および  $R^6$  が  $CH_3$  であるか、または

$R^1$  が  $CF_2Cl$  であり、 $Y$  が  $NR^6$  であり、 $R^2$  が  $CF_3$  であり、 $R^4$  が  $H$  であり、 $R^5$  および  $R^6$  が  $CH_3$  である、

請求項 1 または 2 に記載の化合物。

【請求項 4】

式 (II)

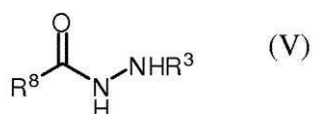
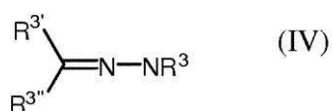
## 【化 2】



の化合物の製造方法であって、

式 (I) の化合物を式 (III)、(VII) または (V)

## 【化 3】



の化合物と反応させるステップを含み、

ここで、(III) および (V) 中の  $\text{R}^3$ 、または (VII) 中の互いに独立した  $\text{R}^3$ 、 $\text{R}^{3'}$  および  $\text{R}^{3''}$  が、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_{12}$  アルキル、 $\text{C}_2 \sim \text{C}_6$  アルケニル、シクロアルキル、アリール、ヘテロアリール、アラルキルからなる群から選択され、そして  $\text{R}^{3'}$  および  $\text{R}^{3''}$  H については、それらのそれぞれが任意選択的に置換されており、

$\text{R}^{10}$  が、H、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_{12}$  アルキル、 $\text{C}_2 \sim \text{C}_6$  アルケニルまたは  $\text{C}_3 \sim \text{C}_8$  シクロアルキル基からなる群から選択され、それらのそれぞれが、任意選択的に置換されており、 $\text{R}^8$  が、 $\text{R}^9 = \text{C}_1 \sim \text{C}_{12}$  アルキル、 $\text{OR}^9$  および  $\text{NR}^{11}\text{R}^{11'}$ 、N,N-ジイソプロピルエチルアミンからなる群から選択され、ここで、 $\text{R}^{11}$  および  $\text{R}^{11'}$  が独立して、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_{12}$  アルキルおよび H からなる群から選択され、

そして (I) が、請求項 1 ~ 3 のいずれか一項に定義されたとおりである方法。

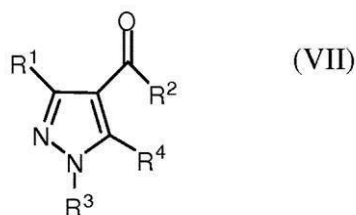
## 【請求項 5】

請求項 4 に記載の方法であって、少なくとも 1 種の塩基の存在下で行われる方法。

## 【請求項 6】

式 (VII)

## 【化 4】



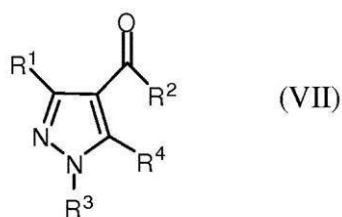
(式中、 $\text{R}^1$ 、 $\text{R}^2$ 、 $\text{R}^3$  および  $\text{R}^4$  は、請求項 1 ~ 4 のいずれか一項に定義されたとおりである)

の化合物。

## 【請求項 7】

式 ( V I I )

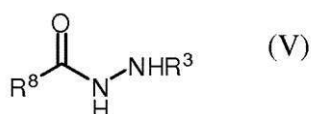
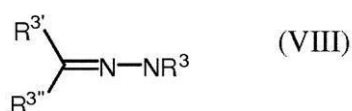
【化 5】



の化合物の製造方法であって、

式 ( I ) の化合物を式 ( I I I )、( V I I I ) または ( V )

【化 6】



の化合物と反応させるステップを含み、

ここで、( I I I ) および ( V ) 中の  $\text{R}^3$ 、または ( V I I I ) 中の互いに独立した  $\text{R}^3$ 、 $\text{R}^{3'}$  および  $\text{R}^{3''}$  が、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_{12}$  アルキル、 $\text{C}_2 \sim \text{C}_6$  アルケニル、シクロアルキル、アリール、ヘテロアリール、アラルキルからなる群から選択され、そして  $\text{R}^{3'}$  および  $\text{R}^{3''}$  H については、それらのそれぞれが任意選択的に置換されており、

$\text{R}^{10}$  が、H、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_{12}$  アルキル、 $\text{C}_2 \sim \text{C}_6$  アルケニルまたは  $\text{C}_3 \sim \text{C}_8$  シクロアルキル基からなる群から選択され、それらのそれぞれが任意選択的に置換されており；

$\text{R}^8$  が、 $\text{R}^9 = \text{C}_1 \sim \text{C}_{12}$  アルキル、 $\text{OR}^9$  および  $\text{NR}^{11}\text{R}^{11'}$  からなる群から選択され、ここで、 $\text{R}^{11}$  および  $\text{R}^{11'}$  が独立して、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_{12}$  アルキルおよび H からなる群から選択され、

そして ( I ) が、請求項 1 ~ 3 のいずれか一項に定義されたとおりである方法。

【請求項 8】

式 ( V I I ) の化合物を塩基と接触させるステップを含む、式 ( I I ) の化合物の製造方法であって、前記化合物 ( I I ) が請求項 4 に定義されており、式 ( V I I ) の前記化合物が請求項 5 に定義されている方法。

【請求項 9】

請求項 4、5 または 8 のいずれか一項に記載の方法であって、式 ( I I ) の前記化合物がカルボキシレ - ト ( X I I I ) の形態で存在し、そして式 ( X I I I ) の前記化合物を含む反応混合物が、 $\text{R}^{10} = \text{H}$  の遊離カルボン酸 ( I I ) を得るために酸性化にかけられる方法。

【請求項 10】

$\text{R}^1$  が、 $\text{CF}_2\text{Cl}$ 、 $\text{CF}_2\text{H}$ 、 $\text{CFCl}_2$ 、 $\text{CFClH}$ 、 $\text{CF}_3$  および  $\text{CF}_2\text{Br}$  からなる群から選択される、請求項 4、5、7、8 または 9 に記載の方法。

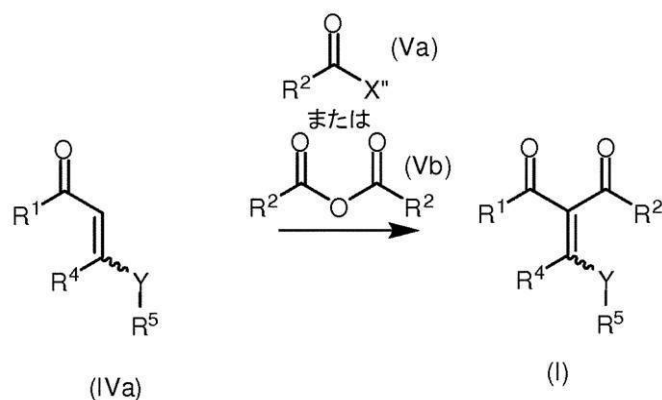
【請求項 11】

$\text{R}^2$  が、 $\text{CCl}_3$ 、 $\text{CF}_3$  および  $\text{CBr}_3$  からなる群から選択される、請求項 10 に記載の方法。

【請求項 12】

化合物 (I) を得るために式 (I V a) の化合物を式 (V a) または (V b) の化合物と反応させるステップ

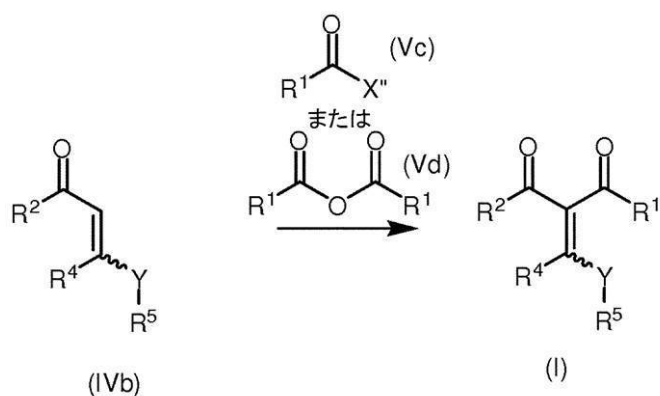
【化 7】



を含む、

または化合物 (I) を得るために式 (I V b) の化合物を式 (V c) または (V d) の化合物と反応させるステップ

【化 8】



を含む、請求項 4、5 または 7 ~ 11 のいずれか一項に記載の方法であって、 $R^1$ 、 $R^2$ 、 $R^4$  および  $R^5$  が、請求項 1 ~ 11 のいずれか一項におけるように定義される方法。

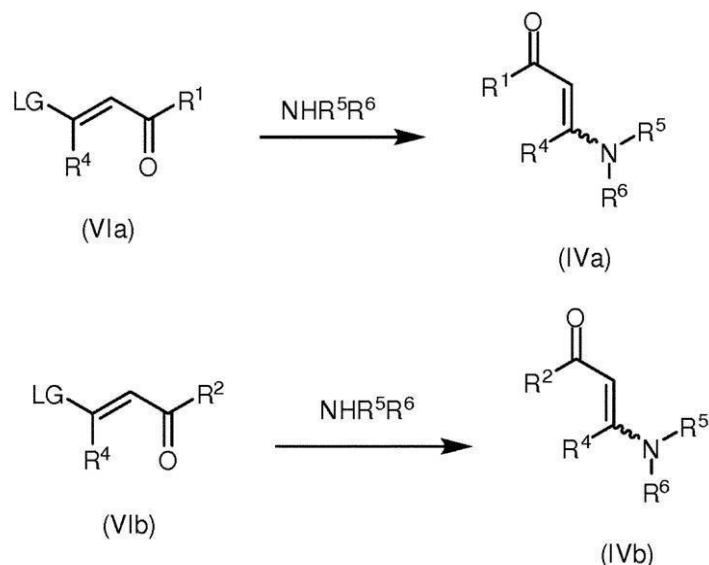
【請求項 13】

式 (I V a) の化合物を式 (V a) または (V b) の化合物と反応させるステップ、または式 (I V b) の化合物を式 (V c) または (V d) の化合物と反応させるステップが、少なくとも 1 種の塩基の存在下で行われる、請求項 12 に記載の方法。

【請求項 14】

次の反応スキーム

## 【化 9】



に従って、式 (IVa) または (IVb) の化合物を得るために式 (VIa) または (VIb) の化合物を反応させるステップをさらに含む、請求項 12 または 13 に記載の方法であって、(IVa) および (IVb) 中、Y = NR<sup>6</sup> であり、LG が好適な脱離基であり、R<sup>4</sup>、R<sup>1</sup>、R<sup>5</sup> および R<sup>6</sup> が請求項 1 ~ 3 のいずれか一項に従って定義されたとおりである方法。

## 【請求項 15】

請求項 1、2、3 もしくは 6 のいずれか一項に記載の化合物の使用を含むか、または請求項 4、5 もしくは 7 ~ 14 のいずれか一項に記載の方法を含む、農薬または医薬化合物の製造方法。

## 【請求項 16】

請求項 6 に記載の前記化合物 (VII) が、式 (VI) NR<sup>12</sup>HQ (式中、R<sup>12</sup> は、H、C<sub>1</sub> ~ C<sub>12</sub> アルキル、C<sub>2</sub> ~ C<sub>6</sub> アルケニルまたは C<sub>3</sub> ~ C<sub>8</sub> シクロアルキル基からなる群から選択され、ここで、H および C<sub>1</sub> ~ C<sub>4</sub> アルキルが好ましく、そして式中、Q は、任意選択的に置換されたアリールまたはヘテロアリール基である) の少なくとも 1 種のアミンと反応させられる、農薬または医薬化合物の製造方法。

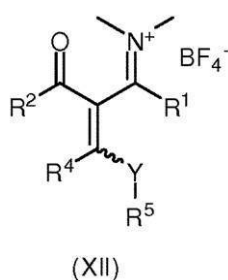
## 【請求項 17】

R<sup>1</sup> が、CF<sub>2</sub>H、CF<sub>3</sub> および CCl<sub>2</sub>H からなる群から選択される、請求項 15 または 16 に記載の方法。

## 【請求項 18】

式 (XII)

## 【化 10】



(式中、R<sup>1</sup>、R<sup>2</sup>、R<sup>4</sup>、Y、R<sup>5</sup> および R<sup>6</sup> は、上記のように定義される) の化合物。

## 【請求項 19】

式 ( I I )、( V I I ) または ( X I I I ) の化合物の製造のための式 ( X I I ) の化合物の使用。

【請求項 20】

式 ( I I )、( V I I ) または ( X I I I ) の化合物の製造方法であって、式 ( X I I ) の化合物を式 ( I I I )、( V I I I ) または ( V ) の化合物と反応させるステップを含み、塩基の存在下で任意選択的に行われ、そして式 ( X I I I ) の化合物を含む反応混合物の酸性化のステップを任意選択的に含む方法。

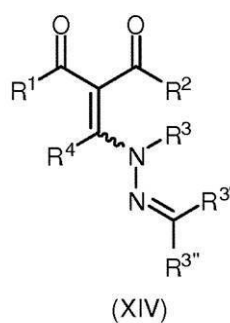
【請求項 21】

農薬または医薬化合物の製造方法であって、請求項 18 に記載の化合物の使用を含む、または請求項 20 に記載の方法を含む方法。

【請求項 22】

式 ( X I V )

【化 11】



(式中、 $R^1$ 、 $R^2$ 、 $R^4$ 、 $R^3$ 、 $R^{3'}$  および  $R^{3''}$  は、上記のように定義される) の化合物。

【請求項 23】

式 ( I I )、( V I I ) または ( X I I I ) の化合物の製造のための式 ( X I V ) の化合物の使用。

【請求項 24】

式 ( I I ) または ( V I I ) の化合物の製造のための請求項 1 ~ 3 のいずれか一項に記載の式 ( I ) の化合物の使用。