

【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4年7月28日(2022.7.28)

【国際公開番号】WO2021/085636

【出願番号】特願2021-553744(P2021-553744)

【国際特許分類】

C 0 7 F 7/10(2006.01)

C 0 7 C 233/22(2006.01)

C 0 7 C 231/02(2006.01)

C 0 7 C 233/05(2006.01)

C 0 7 C 237/20(2006.01)

C 0 7 C 237/12(2006.01)

C 0 7 C 233/18(2006.01)

C 0 7 K 1/08(2006.01)

C 0 7 F 7/04(2006.01)

C 0 7 C 221/00(2006.01)

C 0 7 B 61/00(2006.01)

10

【F I】

C 0 7 F 7/10 S

C 0 7 C 233/22

C 0 7 C 231/02

C 0 7 C 233/05

C 0 7 C 237/20

C 0 7 C 237/12

C 0 7 C 233/18

C 0 7 K 1/08

C 0 7 F 7/04 H

C 0 7 C 221/00

C 0 7 B 61/00 3 0 0

20

30

【手続補正書】

【提出日】令和4年4月27日(2022.4.27)

【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】

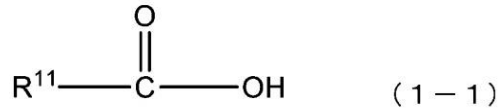
【特許請求の範囲】

【請求項1】

40

一般式(1-1)により示される化合物と、一般式(1-2)により示される化合物とから、一般式(1-3)により示されるアミド化合物を製造する方法であって、一般式(A)により示される1種又は2種以上のシラン化合物の存在下、一般式(1-1)により示される化合物と、一般式(1-2)により示される化合物とを反応させる工程を含む、製造方法。

## 【化 1】

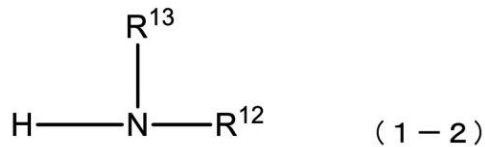


(上記一般式(1-1)において、

R<sup>11</sup>は、1若しくは2以上の置換基を有していてもよい一価の炭化水素基若しくは複素環式基、又は、1若しくは2以上の置換基を有していてもよい多価の炭化水素基若しくは複素環式基が複数、任意により連結基を介して、連結されてなる一価の基を表す。)

10

## 【化 2】



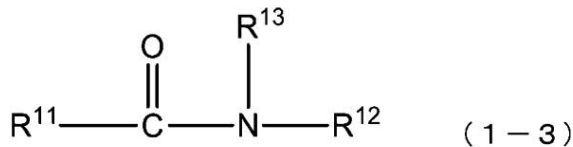
(上記一般式(1-2)において、

R<sup>12</sup>は、1若しくは2以上の置換基を有していてもよい一価の炭化水素基若しくは複素環式基、又は、1若しくは2以上の置換基を有していてもよい多価の炭化水素基若しくは複素環式基が複数、任意により連結基を介して、連結されてなる一価の基を表し、

20

R<sup>13</sup>は、水素原子、カルボキシル基、水酸基、又は、1若しくは2以上の置換基を有していてもよい一価の炭化水素基若しくは複素環式基を表し、ここで、一価の炭化水素基又は複素環式基の場合は、連結基を介して窒素原子に結合していてもよく、ここで、R<sup>12</sup>とR<sup>13</sup>とが互いに結合して、R<sup>12</sup>及びR<sup>13</sup>が結合する窒素原子と共に、1又は2以上の置換基を有していてもよい複素環を形成していてもよい。)

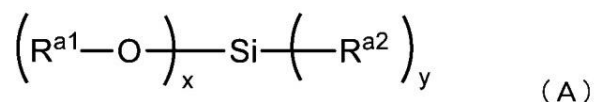
## 【化 3】



30

(上記一般式(1-3)において、各符号はそれぞれ、上記一般式(1-1)及び(1-2)における定義と同様の定義を表す。)

## 【化 4】



40

(上記一般式(A)において、

R<sup>a1</sup>は、1又は2以上のハロゲン原子で置換された一価の炭化水素基を表し、

R<sup>a2</sup>は、水素、又は、1若しくは2以上の置換基を有していてもよい、環構成原子として1個以上の窒素原子を含む5~7員の複素環式基を表し、

xは、3を表し、ここで、x個のR<sup>a1</sup>は、互いに同一であってもよく、異なってもよく、

yは、1を表す。)

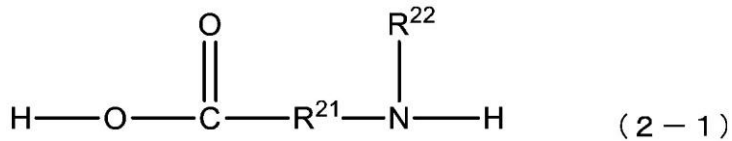
50

## 【請求項2】

一般式(2-1)により示される化合物から、一般式(2-2)により示されるアミド化合物を製造する方法であって、

一般式(A)により示される1種又は2種以上のシラン化合物の存在下、一般式(2-1)により示される化合物を分子内反応させる工程を含む、製造方法。

## 【化5】



10

(上記一般式(2-1)において、

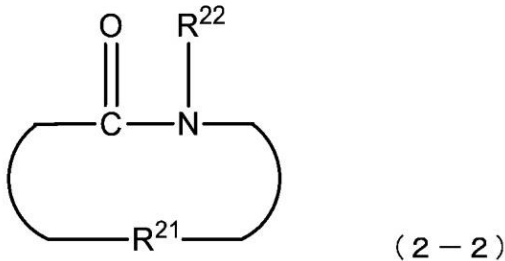
R<sup>21</sup>は、1若しくは2以上の置換基を有していてもよい二価の炭化水素基若しくは複素環式基、又は、1若しくは2以上の置換基を有していてもよい多価の炭化水素基若しくは複素環式基が複数、任意により連結基を介して、連結されてなる二価の基を表し、

R<sup>22</sup>は、水素原子、カルボキシル基、水酸基、又は、1若しくは2以上の置換基を有していてもよい一価の炭化水素基若しくは複素環式基を表し、ここで、一価の炭化水素基又は複素環式基の場合は、連結基を介して窒素原子に結合していてもよく、

ここで、R<sup>21</sup>とR<sup>22</sup>とが互いに結合して、R<sup>21</sup>及びR<sup>22</sup>が結合する窒素原子と共に、1又は2以上の置換基を有していてもよい複素環を形成していてもよい。)

20

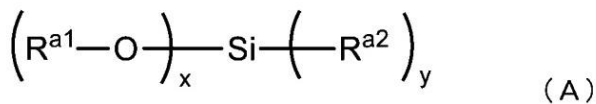
## 【化6】



30

(上記一般式(2-2)において、各符号はそれぞれ、上記一般式(2-1)における定義と同様の定義を表す。)

## 【化7】



40

(上記一般式(A)において、

R<sup>a1</sup>は、1又は2以上のハロゲン原子で置換された一価の炭化水素基を表し、

R<sup>a2</sup>は、水素、又は、1若しくは2以上の置換基を有していてもよい、環構成原子として1個以上の窒素原子を含む5~7員の複素環式基を表し、

xは、3を表し、ここで、x個のR<sup>a1</sup>は、互いに同一であってもよく、異なってもよく、

yは、1を表す。)

## 【請求項3】

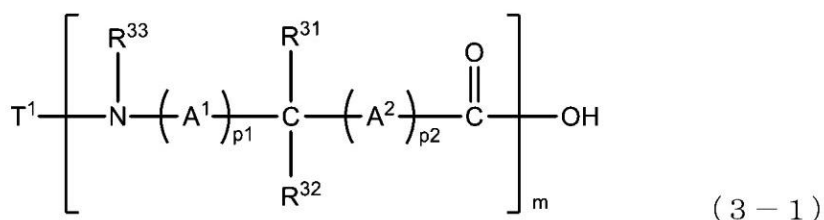
一般式(3-1)により示される化合物と、一般式(3-2)により示される化合物とから、一般式(3-3)により示されるアミド化合物を製造する方法であって、

一般式(A)により示されるシラン化合物及び一般式(B)により示されるシラン化合物

50

からなる群より選択される 1 種又は 2 種以上のシラン化合物の存在下、一般式 (3 - 1) により示される化合物と、一般式 (3 - 2) により示される化合物とを反応させる工程を含む、製造方法。

【化 8】



10

(上記一般式 (3 - 1) において、

R<sup>31</sup> 及び R<sup>32</sup> は、それぞれ独立に、水素原子、ハロゲン原子、水酸基、カルボキシル基、ニトロ基、シアノ基、チオール基、又は、1 若しくは 2 以上の置換基を有していてもよい一価の炭化水素基若しくは複素環式基を表し、ここで、一価の炭化水素基又は複素環式基の場合は、連結基を介して炭素原子に結合していてもよく、

R<sup>33</sup> は、水素原子、カルボキシル基、水酸基、又は、1 若しくは 2 以上の置換基を有していてもよい一価の炭化水素基若しくは複素環式基を表し、ここで、一価の炭化水素基又は複素環式基の場合は、連結基を介して窒素原子に結合していてもよく、

20

ここで、R<sup>31</sup> と R<sup>33</sup> とが互いに結合して、R<sup>31</sup> が結合する炭素原子及び R<sup>33</sup> が結合する窒素原子と共に、1 又は 2 以上の置換基を有していてもよい複素環を形成していてもよく、

A<sup>1</sup> 及び A<sup>2</sup> は、それぞれ独立に、1 又は 2 以上の置換基を有していてもよい炭素数 1 ~ 3 の二価の脂肪族炭化水素基を表し、

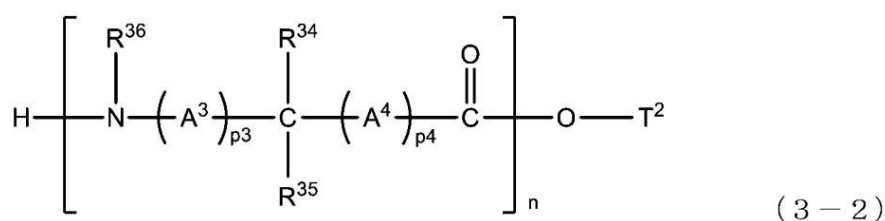
T<sup>1</sup> は、水素原子又は一価の置換基を表し、

p<sub>1</sub> 及び p<sub>2</sub> は、それぞれ独立に、0 又は 1 を表し、

m は、1 以上の整数であり、かつ、[ ] 内の構造で表される構成単位の数を表す。但し、m が 2 以上である場合は、[ ] 内の構造で表される複数の構成単位は各々同一でもよく、異なってもよい。) )

30

【化 9】



(上記一般式 (3 - 2) において、

R<sup>34</sup> 及び R<sup>35</sup> は、それぞれ独立に、水素原子、ハロゲン原子、水酸基、カルボキシル基、ニトロ基、シアノ基、チオール基、又は、1 若しくは 2 以上の置換基を有していてもよい一価の炭化水素基若しくは複素環式基を表し、ここで、一価の炭化水素基又は複素環式基の場合は、連結基を介して炭素原子に結合していてもよく、

R<sup>36</sup> は、水素原子、カルボキシル基、水酸基、又は、1 若しくは 2 以上の置換基を有していてもよい一価の炭化水素基若しくは複素環式基を表し、ここで、一価の炭化水素基又は複素環式基の場合は、連結基を介して窒素原子に結合していてもよく、

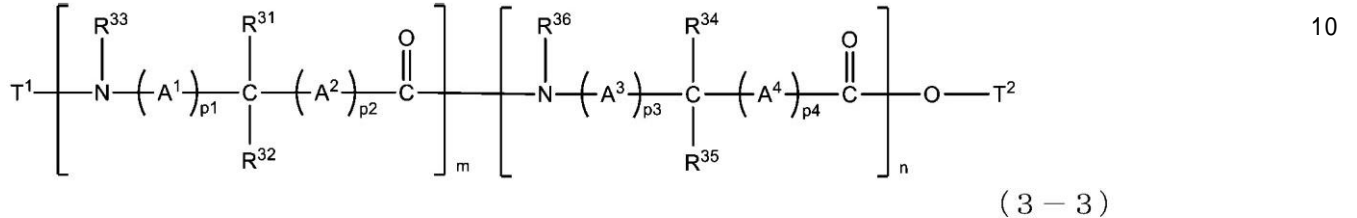
ここで、R<sup>34</sup> と R<sup>36</sup> とが互いに結合して、R<sup>34</sup> が結合する炭素原子及び R<sup>36</sup> が結合する窒素原子と共に、1 又は 2 以上の置換基を有していてもよい複素環を形成していてもよく、

40

50

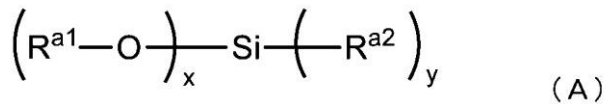
A<sup>3</sup>及びA<sup>4</sup>は、それぞれ独立に、1又は2以上の置換基を有していてもよい炭素数1～3の二価の脂肪族炭化水素基を表し、  
 T<sup>2</sup>は、水素原子又は一価の置換基を表し、  
 p<sup>3</sup>及びp<sup>4</sup>は、それぞれ独立に、0又は1を表し、  
 nは、1以上の整数であり、かつ、[ ]内の構造で表される構成単位の数を表す。但し、nが2以上である場合は、[ ]内の構造で表される複数の構成単位は各々同一でもよく、異なってもよい。)

【化10】



(上記一般式(3-3)において、各符号はそれぞれ、上記一般式(3-1)及び(3-2)における定義と同様の定義を表す。)

【化11】



(上記一般式(A)において、

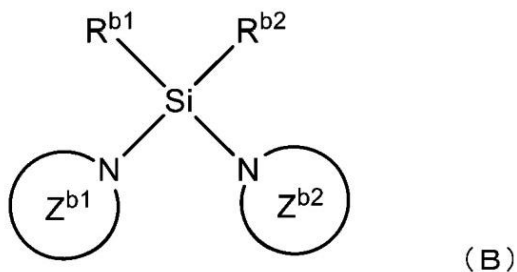
R<sup>a1</sup>は、1又は2以上のハロゲン原子で置換された一価の炭化水素基を表し、

R<sup>a2</sup>は、水素、又は、1若しくは2以上の置換基を有していてもよい、環構成原子として1個以上の窒素原子を含む5～7員の複素環式基を表し、

xは、3を表し、ここで、x個のR<sup>a1</sup>は、互いに同一であってもよく、異なってもよく、

yは、1を表す。)

【化12】



(上記一般式(B)において、

R<sup>b1</sup>及びR<sup>b2</sup>は、それぞれ独立に、水素原子、又は、1若しくは2以上の置換基を有していてもよい、炭素数1～10のアルキル基若しくはアルコキシ基、若しくは、炭素数6～12のアリール基、アラルキル基、アルキルアリール基、アリーロキシ基、アラルキロキシ基、若しくはアルキルアリーロキシ基を表し、

Z<sup>b1</sup>及びZ<sup>b2</sup>は、それぞれ独立に、1又は2以上の置換基を有していてもよい、環構成原子として1以上の窒素原子を含む5～7員の複素環式基を表す。)

10

20

30

40

50

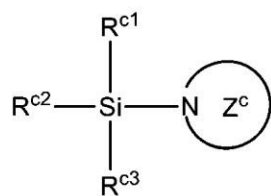
## 【請求項 4】

前記反応が、一般式 (A) により示されるシラン化合物に加えて、当該シラン化合物とは異なる第 2 のシラン化合物の共存下で行われる、請求項 1 ~ 3 の何れか一項に記載の製造方法。

## 【請求項 5】

前記第 2 のシラン化合物が、一般式 (C 1) ~ (C 4) により示される化合物からなる群より選択される 1 種以上のシラン化合物である、請求項 4 に記載の製造方法。

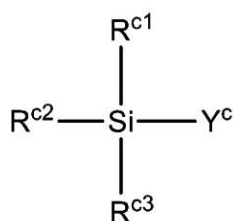
## 【化 1 3】



(C 1)

10

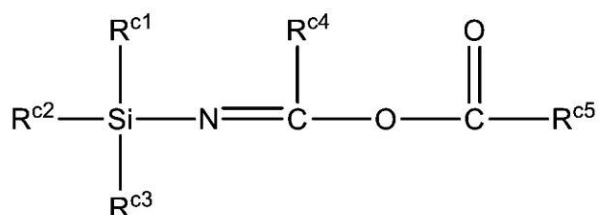
## 【化 1 4】



(C 2)

20

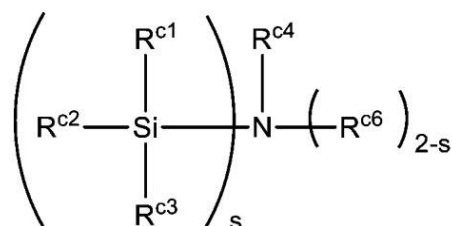
## 【化 1 5】



(C 3)

30

## 【化 1 6】



(C 4)

40

(上記一般式 (C 1) ~ (C 4) において、  
R<sup>c1</sup> ~ R<sup>c3</sup> は、それぞれ独立に、水素原子、又は、1 若しくは 2 以上の置換基を有していてもよい、炭素数 1 ~ 10 の直鎖若しくは分枝鎖状のアルキル基若しくはアルコキシ基を表し、但し R<sup>c1</sup> ~ R<sup>c3</sup> のうち水素原子は 0 個又は 1 個であり、

50

R<sup>c4</sup>及びR<sup>c5</sup>は、それぞれ独立に、1又は2以上の置換基を有していてもよい、炭素数1～10の直鎖又は分枝鎖状のアルキル基又はアルコキシ基を表し、  
 Z<sup>c</sup>は、1又は2以上の置換基を有していてもよい、環構成原子として1以上の窒素原子を含む5～10員の複素環式基を表し、  
 Y<sup>c</sup>は、水素原子又はハロゲン基を表し、  
 R<sup>c6</sup>は、1又は2以上の置換基を有していてもよい、炭素数1～10の直鎖又は分枝鎖状のアルキル基、アルコキシ基、又はアルキルカルボニル基を表し、  
 sは、1又は2を表す。但しsが2の場合、R<sup>c6</sup>は存在しない。)

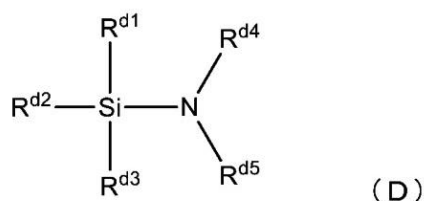
【請求項6】

前記反応が、アミノシラン触媒の存在下で行われる、請求項1～5の何れか一項に記載の製造方法。 10

【請求項7】

前記アミノシラン触媒が、一般式(D)により示される化合物からなる群より選択される1種以上のアミノシラン化合物である、請求項6に記載の製造方法。

【化17】



20

(上記一般式(D)において、

R<sup>d1</sup>～R<sup>d3</sup>は、それぞれ独立に、水素原子、又は、置換基を有していてもよい直鎖若しくは分枝鎖状のアルキル基若しくはアルコキシ基を表す。但し、R<sup>c1</sup>～R<sup>c3</sup>のうち水素原子の数は0個又は1個である。

R<sup>d4</sup>及びR<sup>d5</sup>は、それぞれ独立に、水素原子、又は、置換基を有していてもよい、アルキル基、アリール基、アルキルアリール基、若しくはアリールアルキル基を表す。但し、R<sup>d4</sup>及びR<sup>d5</sup>のうち水素原子の数は0個又は1個である。)

【請求項8】

前記反応が、ルイス酸触媒の存在下で行われる、請求項1～7の何れか一項に記載の製造方法。 30

【請求項9】

前記ルイス酸触媒が、チタン、ジルコニウム、ハフニウム、タンタル、及びニオブからなる群より選択される1種以上の金属を含む金属化合物である、請求項8に記載の製造方法。

【請求項10】

前記反応が、リン化合物の存在下で行われる、請求項1～9の何れか一項に記載の製造方法。

【請求項11】

前記リン化合物が、ホスフィン化合物又はホスフェート化合物である、請求項10に記載の製造方法。 40

【請求項12】

前記反応が、バッチ反応又はフロー反応である、請求項1～11の何れか一項に記載の製造方法。

50