

【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 24 年 1 月 26 日 (2012.1.26)

【公開番号】特開 2009-221187 (P2009-221187A)

【公開日】平成 21 年 10 月 1 日 (2009.10.1)

【年通号数】公開・登録公報 2009-039

【出願番号】特願 2008-306627 (P2008-306627)

【国際特許分類】

C 0 7 D 405/14 (2006.01)

C 0 7 B 53/00 (2006.01)

A 6 1 K 49/00 (2006.01)

C 0 7 B 61/00 (2006.01)

C 0 7 F 5/00 (2006.01)

【 F I 】

C 0 7 D 405/14 C S P

C 0 7 B 53/00 B

A 6 1 K 49/00 C

C 0 7 B 61/00 3 0 0

C 0 7 F 5/00 D

【手続補正書】

【提出日】平成 23 年 12 月 1 日 (2011.12.1)

【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

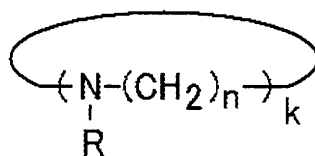
【補正の内容】

【特許請求の範囲】

【請求項 1】

下記式 (A) :

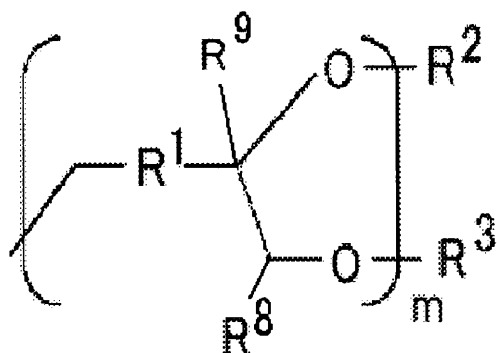
【化 1】



(A)

[式 (A) 中、n は 1 以上の整数であり、k は 3 以上、8 以下の整数であり、R は下記式 (1) :

【化 2】



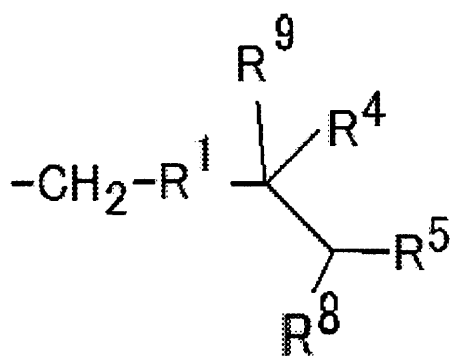
(1)

(式(1)中、 R^1 は置換基を有していても良いアリーレン基、置換基を有していても良いアルキレン基、置換基を有していても良いアリーレン基と置換基を有していても良いアルキレン基とが結合した基、のいずれかであり、 R^8 はH、アルキル基、ハロゲン化アルキル基、アルコキシ基、アリール基、アリーロキシ基、シリル基、シリロキシ基、 COOR^{10} (R^{10} はH、アリール基もしくはアルキル基)のいずれかであり、 R^9 はH、アルキル基、ハロゲン化アルキル基、アルコキシ基、アリール基、アリーロキシ基、シリル基、シリロキシ基、 COOR^{10} (R^{10} はH、アリール基もしくはアルキル基)のいずれかであり、

m は1以上の整数を表し、

R^2 及び R^3 は、下記式(2-1)：

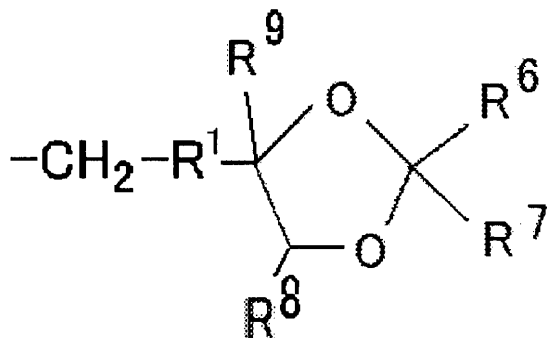
【化 3】



(2-1)

(式(2-1)中、 R^1 は置換基を有していても良いアリーレン基、置換基を有していても良いアルキレン基、置換基を有していても良いアリーレン基と置換基を有していても良いアルキレン基とが結合した基、のいずれかであり、 R^8 はH、アルキル基、ハロゲン化アルキル基、アルコキシ基、アリール基、アリーロキシ基、シリル基、シリロキシ基、 COOR^{10} (R^{10} はH、アリール基もしくはアルキル基)のいずれかであり、 R^9 はH、アルキル基、ハロゲン化アルキル基、アルコキシ基、アリール基、アリーロキシ基、シリル基、シリロキシ基、 COOR^{10} (R^{10} はH、アリール基もしくはアルキル基)のいずれかであり、 R^4 及び R^5 は、互いに独立にH、OH、 COOH 、 NH_2 、置換基を有していても良いアルキル基、置換基を有していても良いアルコキシ基のいずれかである。)で表される末端基、あるいは、下記式(2-2)：

【化 4】



(2-2)

(式(2-2)中、 R^1 は置換基を有していても良いアリーレン基、置換基を有していても良いアルキレン基、置換基を有していても良いアリーレン基と置換基を有していても良いアルキレン基とが結合した基、のいずれかであり、 R^8 はH、アルキル基、ハロゲン化アルキル基、アルコキシ基、アリール基、アリーロキシ基、シリル基、シリロキシ基、 $COOR^{10}$ (R^{10} はH、アリール基もしくはアルキル基)のいずれかであり、 R^9 はH、アルキル基、ハロゲン化アルキル基、アルコキシ基、アリール基、アリーロキシ基、シリル基、シリロキシ基、 $COOR^{10}$ (R^{10} はH、アリール基もしくはアルキル基)のいずれかであり、 R^6 及び R^7 は、互いに独立に水素、置換基を有していても良いアルキル基、置換基を有していても良いアルコキシ基のいずれかである。)で表される5員環構造を有する末端基であり、

m が2以上の整数の場合は、最初の R^1 を含む繰り返し単位の有する R^2 側及び R^3 側の少なくとも一方に、次の R^1 を含む繰り返し単位のメチレン基側が結合し、結合が m の数に応じて繰り返される。)

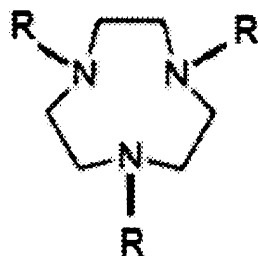
で示される基を表す。]により表される

ことを特徴とする化合物(但し、式(2-1)で表される基における R^4 及び R^5 の全てがCOOHであるものを除く。)

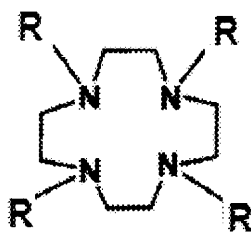
【請求項2】

前記式(A)が下記式(i)、(ii)のいずれかで表されることを特徴とする請求項1に記載の化合物。

【化 5】



(i)

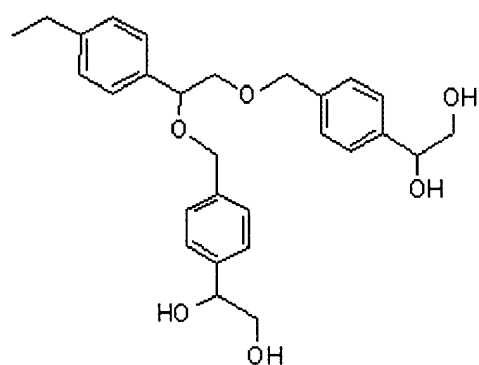


(ii)

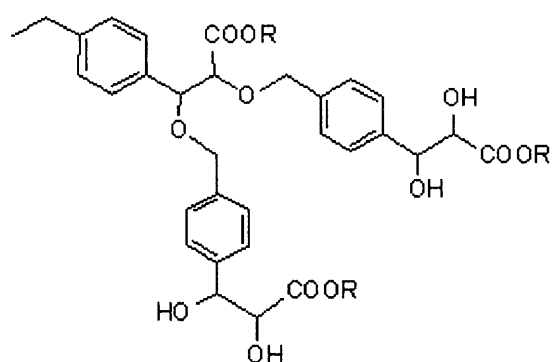
【請求項3】

前記式(1)が、下記式(1-1)、(1-2)、(1-3)、(1-4)、(1-5)、(1-6)、(1-7)、(1-8)のいずれかで表されることを特徴とする請求項1または2に記載の化合物。

【化 6】



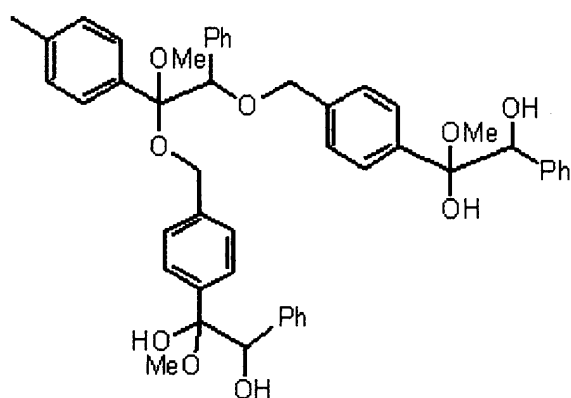
(1-1)



(1-2)

(式(1-2)中、Rはそれぞれ独立して、H、アルキル基又はアリール基を示す。)

【化 7】



(1-3)

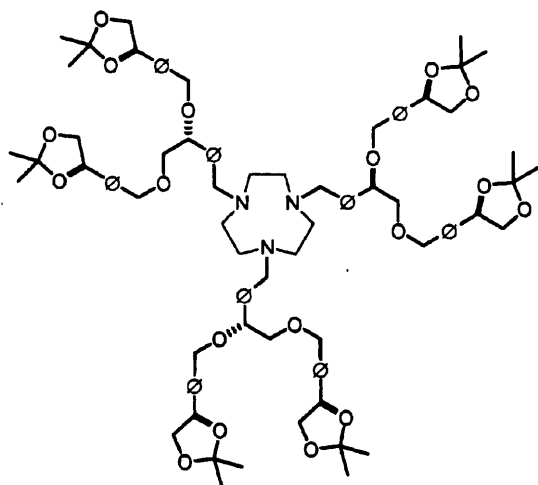
(式(1-3)中、Meはメチル基、Phはフェニル基を示す。)

CCCCC(COCCO)OCCOCC1=CC=C(OC2COC(OC2COC3=CC=C(OC3CO)CO)CO)C=C1CCOC(C)(O)C(=O)OCC(O)C(Cl)(Cl)Cl[illegible]


The chemical structure shows a central carbon atom bonded to two ethyl groups and two ether linkages. Each ether linkage connects to a 1,3-dioxolane ring, which is substituted with a methyl group and a phenyl group. The phenyl groups are further substituted with a methyl group and a phenyl group, forming a dendritic structure.

式（Ａ）の化合物が、下記式（６）乃至（８）のいずれかで表されることを特徴とする請求項１乃至３のいずれか１項に記載の化合物。

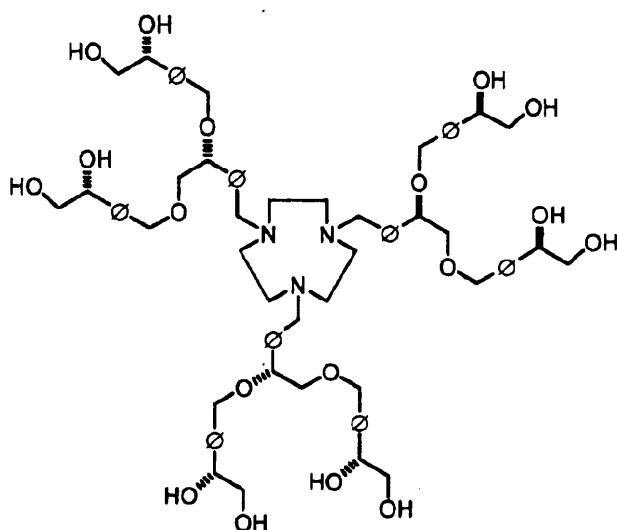
【化 1 0】




(6)

(式(6)中、はフェニレン基を示す。)

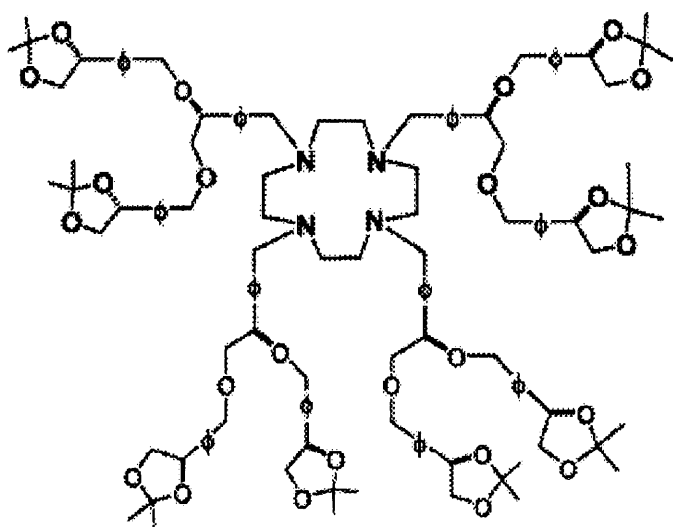
【化 1 1】




(7)

(式(7)中、はフェニレン基を示す。)

【化 1 2】



(8)

(式(8)中、はフェニレン基を示す。)

【請求項 5】

請求項 1 に記載の化合物と、T 1 短縮効果を有する金属イオンとが、配位結合によって結合していることを特徴とする金属錯体化合物。

【請求項 6】

前記金属イオンが、ランタノイドイオン、マンガンイオン、クロムイオン及び鉄イオンのいずれかである請求項 5 に記載の金属錯体化合物。

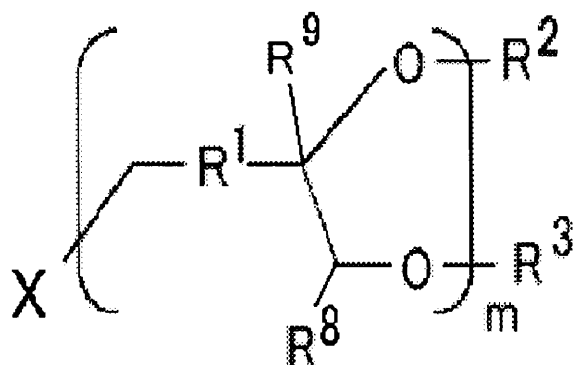
【請求項 7】

請求項 5 又は 6 に記載の金属錯体化合物の少なくとも 1 種を造影成分として含有する MRI 造影剤。

【請求項 8】

下記式 (3) :

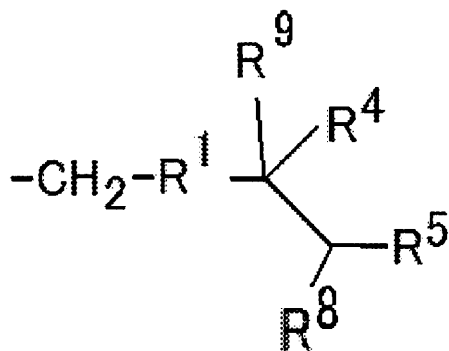
【化 1 3】



(3)

〔式 (3) 中、X はハロゲンを、 R^1 は置換基を有していても良いアリーレン基、置換基を有していても良いアルキレン基、置換基を有していても良いアリーレン基と置換基を有していても良いアルキレン基とが結合した基、のいずれかであり、 R^8 は H、アルキル基、ハロゲン化アルキル基、アルコキシ基、アリール基、アリールオキシ基、シリル基、シリルオキシ基、 COOR^{10} (R^{10} は H、アリール基もしくはアルキル基) のいずれかであり、 R^9 は H、アルキル基、ハロゲン化アルキル基、アルコキシ基、アリール基、アリールオキシ基、シリル基、シリルオキシ基、 COOR^{10} (R^{10} は H、アリール基もしくはアルキル基) のいずれかであり、m は 1 以上の整数を表し、 R^2 及び R^3 は、下記式 (2 - 1) :

【化 1 4】



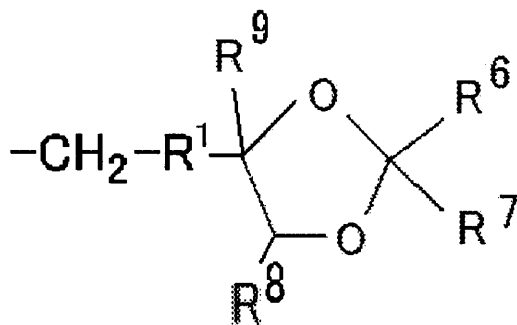
(2-1)

〔式 (2 - 1) 中、 R^1 は置換基を有していても良いアリーレン基、置換基を有していても良いアルキレン基、置換基を有していても良いアリーレン基と置換基を有していても良いアルキレン基とが結合した基、のいずれかであり、 R^8 は H、アルキル基、ハロゲン化アルキル基、アルコキシ基、アリール基、アリールオキシ基、シリル基、シリルオキシ基、 COOR^{10} (R^{10} は H、アリール基もしくはアルキル基) のいずれかであり、 R^9 は H、アルキル基、ハロゲン化アルキル基、アルコキシ基、アリール基、アリールオキシ基、シリル基、シリルオキシ基、 COOR^{10} (R^{10} は H、アリール基もしくはアルキル基)

）のいずれかであり、 R^4 及び R^5 は、互いに独立にH、OH、COOH、 NH_2 、置換基を有していても良いアルキル基、置換基を有していても良いアルコキシ基のいずれかである。）で表される末端基、

あるいは、下記式（2 - 2）：

【化15】



(2-2)

（式（2 - 2）中、 R^1 は置換基を有していても良いアリーレン基、置換基を有していても良いアルキレン基、置換基を有していても良いアリーレン基と置換基を有していても良いアルキレン基とが結合した基、のいずれかであり、 R^8 はH、アルキル基、ハロゲン化アルキル基、アルコキシ基、アリール基、アリールオキシ基、シリル基、シリルオキシ基、 $COOR^{10}$ （ R^{10} はH、アリール基もしくはアルキル基）のいずれかであり、 R^9 はH、アルキル基、ハロゲン化アルキル基、アルコキシ基、アリール基、アリールオキシ基、シリル基、シリルオキシ基、 $COOR^{10}$ （ R^{10} はH、アリール基もしくはアルキル基）のいずれかであり、 R^6 及び R^7 は、互いに独立に水素、置換基を有していても良いアルキル基、置換基を有していても良いアルコキシ基のいずれかである。）で表される5員環構造を有する末端基であり、

m が2以上の整数の場合は、最初の R^1 を含む繰り返し単位の有する R^2 側及び R^3 側の少なくとも一方に、次の R^1 を含む繰り返し単位のメチレン基側が結合し、結合が m の数に応じて繰り返される。）で示される基を表す。]

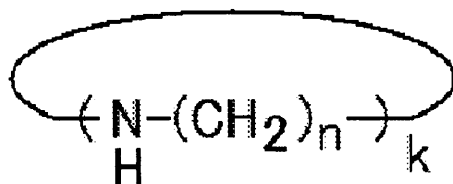
により表されることを特徴とする化合物。

【請求項9】

請求項1に記載の化合物を製造する方法であって、

下記式（B）：

【化16】



(B)

（式（B）中、 n は1以上の整数であり、 k は3～8の整数である。）

で表される環状構造化合物と、請求項8に記載の式（3）で表される化合物とを、反応させる工程を少なくとも有することを特徴とする化合物の製造方法。

【請求項10】

前記式（3）で表される化合物を合成する工程を更に有する請求項9に記載の製造方法。

【請求項11】

前記式（3）で表される化合物を合成する工程において、不斉ジヒドロキシル化反応を用いる請求項10に記載の製造方法。

【請求項12】

前記式（3）の化合物が、前記5員環構造を有する末端基を有する化合物であり、該化合物を前記環状構造化合物と反応させた後に、該5員環構造を加水分解する工程を

さらに有する請求項 9 乃至 11 のいずれか 1 項に記載の化合物の製造方法。

【請求項 13】

請求項 5 又は 6 に記載の金属錯体化合物を製造する方法であって、

請求項 1 に記載の化合物に、T1 短縮効果を有する金属イオンに配位させる工程を少なくとも有する金属錯体化合物の製造方法。

【請求項 14】

請求項 9 に記載の製造方法で請求項 1 に記載の化合物を製造する工程と、製造された前記化合物と、T1 短縮効果を有する金属イオンとの間に配位結合を形成する工程とを有する金属錯体化合物の製造方法。

【請求項 15】

前記金属イオンが、ランタノイドイオン、マンガンイオン、クロムイオン及び鉄イオンのいずれかである請求項 14 に記載の金属錯体化合物の製造方法。

【請求項 16】

前記式(3)で表される化合物を合成する工程を更に有する請求項 14 又は 15 に記載の製造方法。

【請求項 17】

前記式(3)で表される化合物を合成する工程において、不斉ジヒドロキシル化反応を用いる請求項 16 に記載の製造方法。

【請求項 18】

前記式(3)の化合物が、前記 5 員環構造を有する末端基を有する化合物であり、該化合物を前記環状構造化合物と反応させた後に、該 5 員環構造を加水分解させる工程をさらに有する請求項 14 乃至 17 のいずれか 1 項に記載の化合物の製造方法。