

【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30年4月12日 (2018.4.12)

【公表番号】特表2017-508796(P2017-508796A)

【公表日】平成29年3月30日 (2017.3.30)

【年通号数】公開・登録公報2017-013

【出願番号】特願2016-573684(P2016-573684)

【国際特許分類】

C 0 7 C 29/14 (2006.01)

C 0 7 C 211/19 (2006.01)

C 0 7 C 271/22 (2006.01)

C 0 7 C 229/28 (2006.01)

C 0 7 C 209/28 (2006.01)

C 0 7 C 269/04 (2006.01)

C 0 7 C 227/20 (2006.01)

C 0 7 C 253/00 (2006.01)

C 0 7 C 255/47 (2006.01)

C 0 7 C 45/44 (2006.01)

C 0 7 C 47/347 (2006.01)

C 0 7 C 33/05 (2006.01)

C 0 7 C 253/30 (2006.01)

C 0 7 C 255/31 (2006.01)

C 0 7 C 249/12 (2006.01)

C 0 7 C 251/40 (2006.01)

C 0 7 C 247/14 (2006.01)

C 0 7 C 211/38 (2006.01)

C 0 7 C 209/42 (2006.01)

C 0 7 D 249/06 (2006.01)

【 F I 】

C 0 7 C 29/14

C 0 7 C 211/19 C S P

C 0 7 C 271/22

C 0 7 C 229/28

C 0 7 C 209/28

C 0 7 C 269/04

C 0 7 C 227/20

C 0 7 C 253/00

C 0 7 C 255/47

C 0 7 C 45/44

C 0 7 C 47/347

C 0 7 C 33/05 C

C 0 7 C 253/30

C 0 7 C 255/31

C 0 7 C 249/12

C 0 7 C 251/40

C 0 7 C 247/14

C 0 7 C 211/38

C 0 7 C 209/42

C 0 7 D 249/06 5 0 2

【手続補正書】

【提出日】平成30年3月5日(2018.3.5)

【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】

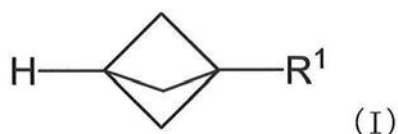
置換型ビシクロ[1.1.1]ペンタン化合物の製造方法であって、

[1.1.1]プロペラン、第8族遷移金属化合物、水素化物源、および、ビシクロ[1.1.1]ペンタンが置換基で置換されるように前記置換基の全部または一部を与え得る試薬、を混合することを含む前記方法。

【請求項 2】

前記置換型ビシクロ[1.1.1]ペンタン化合物が、式(I)の構造：

【化 1】



を有し、

式中、

R^1 は、 $-N_3$ 、ハロゲン、 $-CN$ 、 $-CF_3$ 、 $-OH$ 、 $-SCN$ 、 $-NCO$ 、 $-NO$ 、 $-C(=NOR^2)(CN)$ 、 $-CH(=NOR^2)$ 、 $-COH$ 、置換されていてもよい C_{1-30} アルキル、置換されていてもよい C_{2-30} アルケニル、置換されていてもよい C_{2-30} アルキニル、置換されていてもよいシクロアルキル、置換されていてもよいシクロアルケニル、置換されていてもよいシクロアルキニル、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ヘテロシクリル、置換されていてもよいアリール(C_{1-6} アルキル)、置換されていてもよいヘテロアリール(C_{1-6} アルキル)、置換されていてもよいヘテロシクリル(C_{1-6} アルキル)、置換されていてもよいアルコキシ、置換されていてもよいアシル、置換されていてもよいアミノ、置換されていてもよいアルコキシアルキル、置換されていてもよいアシルアルキル、置換されていてもよいアミノアルキル、置換されていてもよいヒドロキシアルキル、置換されていてもよいハロアルキル、置換されていてもよいハロアルコキシ、置換されていてもよいアリールチオ、または置換されていてもよいアルキルチオであり、

R^2 は、(C_{1-10})アルコキシ、置換されていてもよい C_{1-30} アルキル、置換されていてもよいアルケニル、置換されていてもよいアルキニル、置換されていてもよいシクロアルキル、置換されていてもよいシクロアルケニル、置換されていてもよいシクロアルキニル、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ヘテロシクリル、置換されていてもよいアリール(アルキル)、置換されていてもよいヘテロアリール(アルキル)、置換されていてもよいヘテロシクリル(アルキル)、置換されていてもよいアミノアルキル、または置換されていてもよいアルキルアミノである、請求項 1 に記載の方法。

【請求項 3】

R^1 が、 $-N_3$ 、ハロゲン、 $-CN$ 、 $-OH$ 、 $-SCN$ 、 $-NCO$ 、 $-NO$ 、 $-C(=NOR^2)(CN)$ 、 $-CH(=NOR^2)$ 、または $-COH$ である、請求項 2 に記載の方法。

【請求項 4】

R^1 が、置換されていてもよい $C_{1 \sim 30}$ アルキル、置換されていてもよい $C_{2 \sim 30}$ アルケニル、置換されていてもよい $C_{2 \sim 30}$ アルキニル、置換されていてもよいシクロアルキル、置換されていてもよいシクロアルケニル、置換されていてもよいシクロアルキニル、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ヘテロシクリル、置換されていてもよいアリール ($C_{1 \sim 6}$ アルキル)、置換されていてもよいヘテロアリール ($C_{1 \sim 6}$ アルキル)、置換されていてもよいヘテロシクリル ($C_{1 \sim 6}$ アルキル)、置換されていてもよいアルコキシ、置換されていてもよいアシル、置換されていてもよいアミノ、置換されていてもよいアルコキシアルキル、置換されていてもよいアシルアルキル、置換されていてもよいアミノアルキル、置換されていてもよいヒドロキシアルキル、置換されていてもよいハロアルキル、置換されていてもよいハロアルコキシ、置換されていてもよいアリールチオ、または置換されていてもよいアルキルチオである、請求項 2 に記載の方法。

【請求項 5】

R^1 が、非置換型アミノ、 $-CH(CO_2H)(NHBoc)$ または置換されていてもよいヘテロアリールである、請求項 4 に記載の方法。

【請求項 6】

R^1 が、非置換型アミノアルキル、置換型アミノアルキルまたは置換されていてもよいヒドロキシアルキルである、請求項 4 に記載の方法。

【請求項 7】

R^1 が、置換型 $C_{1 \sim 4}$ アルキルまたは置換されていてもよいベンジルである、請求項 4 に記載の方法。

【請求項 8】

OR^2 が、カルビミドイル (carbimidoyl) シアニド、カルバルデヒドオキシム、(ベンジルオキシ)カルビミドイル (carbimidoyl) シアニド、またはカルバルデヒド O - ベンジルオキシムである、請求項 2 ~ 3 のいずれか 1 項に記載の方法。

【請求項 9】

前記第 8 族遷移金属化合物が鉄系化合物である、請求項 1 ~ 8 のいずれか 1 項に記載の方法。

【請求項 10】

前記鉄化合物が、 $Fe(II)$ 化合物または $Fe(III)$ 化合物である、請求項 9 に記載の方法。

【請求項 11】

前記鉄化合物が、シュウ酸鉄 (III)、硫酸鉄 (III)、硝酸鉄 (III)、鉄 (III) アセチルアセトネート、塩化鉄 (III)、過塩素酸鉄 (II)、鉄 (II) フタロシアニン、酢酸鉄 (II)、塩化鉄 (II)、およびテトラフルオロホウ酸鉄 (II) から成る群から選択される、請求項 9 に記載の方法。

【請求項 12】

前記鉄化合物が、 $Fe_2(ox)_3 \cdot 6H_2O$ または $Fe(acac)_3$ である、請求項 9 に記載の方法。

【請求項 13】

前記水素化物源が金属系水素化物源である、請求項 1 ~ 12 のいずれか 1 項に記載の方法。

【請求項 14】

前記水素化物源が非金属系水素化物源である、請求項 1 ~ 12 のいずれか 1 項に記載の方法。

【請求項 15】

前記水素化物源が、アルカリ金属系水素化物源またはシランである、請求項 14 に記載の方法。

【請求項 16】

前記水素化物源が、 $NaBH_4$ または $PhSiH_3$ である、請求項 15 に記載の方法。

【請求項 17】

前記置換基の全部または一部を与え得る試薬が、 $LG^1 - R^1$ の構造を有し、式中、 R^1 が、 $[1.1.1]$ プロペランの炭素と結合し、 LG^1 が、脱離基である、または、
 前記置換基の全部または一部を与え得る試薬が、 $R^{1A} - R^{1B}$ の構造を有し、式中、 R^{1B} が、 $[1.1.1]$ プロペランの炭素と結合し、さらなる変換を経て R^1 を形成し、 R^{1A} が、副産物を形成する、または、

前記置換基の全部または一部を与え得る試薬が R^1 の構造を有する、または、
 前記置換基の全部または一部を与え得る試薬が、置換されていてもよい $R^1 - C_{2-10}$ アルケニルの構造を有する、

請求項 1 ~ 16 のいずれか 1 項に記載の方法。

【請求項 18】

前記 LG^1 が、置換されていてもよいスルホニル、置換されていてもよいホスホネート、アルカリ金属、または遷移金属である、請求項 17 に記載の方法。

【請求項 19】

前記置換されていてもよいスルホニルが置換されていてもよいトシルである、請求項 18 に記載の方法。

【請求項 20】

前記試薬が、トシルアジド、スルホニルアジド、アジ化リチウム、アジ化ナトリウム、アジ化カリウム、アジ化セシウム、アジ化亜鉛、シアニ化トシル、塩化トシル、チオシアン酸カリウム、シアン酸カリウム、亜硝酸ナトリウム、(E) - (フェニルスルホニル) メタナル O - ベンジルオキシム、(E) - N - (ベンジルオキシ) - 1 - (フェニルスルホニル) メタンイミドイルシアニド、シアノリン酸ジエチル、tert - ブチルイソシアネート、および置換されていてもよいスルホニルオキシムから成る群から選択される、請求項 17 に記載の方法。

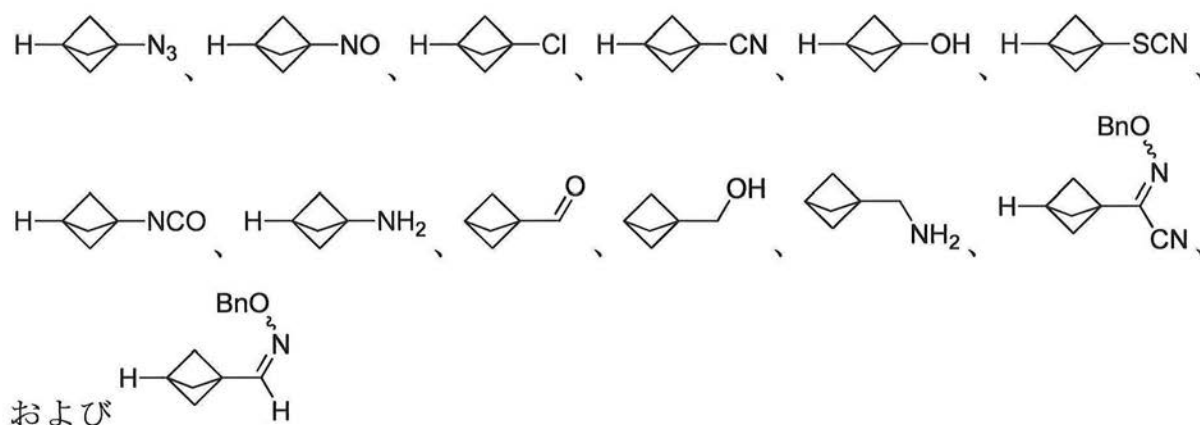
【請求項 21】

前記試薬が、酸素分子、または置換されていてもよいオキサジリジン、または 2, 2, 6, 6 - テトラメチル - 1 - ピペリジニルオキシ (TEMPO) である、請求項 17 に記載の方法。

【請求項 22】

前記置換型ビスクロ[1.1.1]ペンタン化合物が、

【化 2】

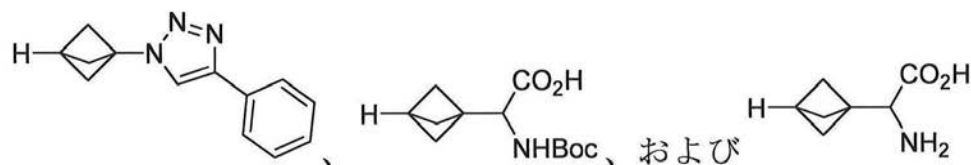


から成る群から選択される、請求項 1 ~ 21 のいずれか 1 項に記載の方法。

【請求項 23】

前記置換型ビスクロ[1.1.1]ペンタン化合物が、

【化 3】

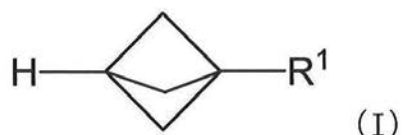


から成る群から選択される、請求項 1 ~ 2 1 のいずれか 1 項に記載の方法。

【請求項 2 4】

式 (I) の構造を有する化合物であって、

【化 4】



式中、

R^1 は、 $-\text{N}_3$ 、 $-\text{SCN}$ 、 $-\text{NCO}$ 、 $-\text{NO}$ 、 $-\text{C}(=\text{NOR}^2)(\text{CN})$ 、 $-\text{CH}(=\text{NOR}^2)$ 、 $-\text{CH}(\text{CO}_2\text{H})(\text{NHBoc})$ 、置換されていてもよい C_{2-30} アルキニル、置換されていてもよいシクロアルキル、置換されていてもよいシクロアルケニル、置換されていてもよいシクロアルキニル、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ヘテロシクリル、置換されていてもよいアリール (C_{1-6} アルキル)、置換されていてもよいヘテロアリール (C_{1-6} アルキル)、置換されていてもよいヘテロシクリル (C_{1-6} アルキル)、置換されていてもよいアルコキシ、置換されていてもよいアミノ、置換されていてもよいアルコキシアルキル、置換されていてもよいアシルアルキル、置換されていてもよいアミノアルキル、置換されていてもよいヒドロキシアルキル、置換されていてもよいハロアルコキシ、または置換されていてもよいアルキルチオであり、

R^2 は、(C_{1-10}) アルコキシ、置換されていてもよい C_{1-30} アルキル、置換されていてもよいアルケニル、置換されていてもよいアルキニル、置換されていてもよいシクロアルキル、置換されていてもよいシクロアルケニル、置換されていてもよいシクロアルキニル、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ヘテロシクリル、置換されていてもよいアリール(アルキル)、置換されていてもよいヘテロアリール(アルキル)、置換されていてもよいヘテロシクリル(アルキル)、置換されていてもよいアミノアルキル、または置換されていてもよいアルキルアミノである、前記化合物。

【請求項 2 5】

R^1 が、置換されていてもよい C_{2-30} アルキニル、置換されていてもよいシクロアルキル、置換されていてもよいシクロアルケニル、置換されていてもよいシクロアルキニル、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ヘテロシクリル、置換されていてもよいアリール (C_{1-6} アルキル)、置換されていてもよいヘテロアリール (C_{1-6} アルキル)、置換されていてもよいヘテロシクリル (C_{1-6} アルキル)、置換されていてもよいアルコキシ、置換されていてもよいアミノ、置換されていてもよいアルコキシアルキル、置換されていてもよいアシルアルキル、置換されていてもよいアミノアルキル、置換されていてもよいヒドロキシアルキル、置換されていてもよいハロアルコキシ、または置換されていてもよいアルキルチオである、請求項 2 4 に記載の化合物。

【請求項 2 6】

R^1 が、 $-\text{N}_3$ 、 $-\text{SCN}$ 、 $-\text{NCO}$ 、 $-\text{NO}$ 、 $-\text{C}(=\text{NOR}^2)(\text{CN})$ 、または $-\text{CH}(=\text{NOR}^2)$ である、請求項 2 4 に記載の化合物。

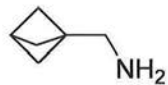
【請求項 27】

R¹ が、ヒドロキシアルキル、非置換型アミノアルキルまたは置換型アミノアルキルである、請求項 24 に記載の化合物。

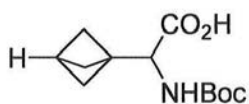
【請求項 28】

前記化合物が、

【化 5】

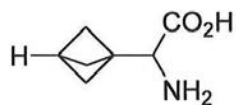


【化 6】



または、

【化 7】



である、請求項 24 に記載の化合物。