

【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3年12月9日(2021.12.9)

【公表番号】特表2021-501205(P2021-501205A)

【公表日】令和3年1月14日(2021.1.14)

【年通号数】公開・登録公報2021-002

【出願番号】特願2020-543266(P2020-543266)

【国際特許分類】

C 07 C	69/675	(2006.01)
C 07 F	5/04	(2006.01)
C 07 F	5/02	(2006.01)
C 07 C	67/30	(2006.01)
B 01 J	31/22	(2006.01)
B 01 J	31/24	(2006.01)
C 07 B	61/00	(2006.01)
C 12 P	7/62	(2006.01)
C 12 P	41/00	(2006.01)

【F I】

C 07 C	69/675	
C 07 F	5/04	C S P A
C 07 F	5/02	C
C 07 F	5/02	D
C 07 C	67/30	
B 01 J	31/22	Z
B 01 J	31/24	Z
C 07 B	61/00	3 0 0
C 12 P	7/62	
C 12 P	41/00	

【手続補正書】

【提出日】令和3年10月28日(2021.10.28)

【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

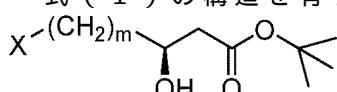
【補正方法】変更

【補正の内容】

【特許請求の範囲】

【請求項1】

式(I)の構造を有する化合物:



(I)

であつて、

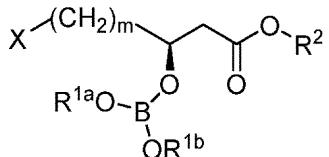
式中、Xは、ハロゲンであり、mは、2～6の整数である、化合物。

【請求項2】

XがC1であり、かつmが2である、請求項1に記載の化合物。

【請求項3】

式 (II) の構造を有する化合物：



(II)

、または、その塩であって、

式中、

Xは、ハロゲンであり、

m は、2～6 の整数であり、

R^1 ^a および R^1 ^b の各々は独立して、置換されていてもよい $C_1 \sim C_{1,2}$ アルキル、置換されていてもよい $C_3 \sim C_8$ シクロアルキル、置換されていてもよい $C_2 \sim C_{1,2}$ アルケニル、置換されていてもよい $C_2 \sim C_{1,2}$ アルキニル、置換されていてもよいアリール、および置換されていてもよいヘテロアリール、からなる群から選択され、または

R^{1-a} および R^{1-b} は、介在する原子とともに 5~7員ボロンエステル環を形成してもよく、

R^2 は、置換されていてもよい $C_1 \sim C_{1,2}$ アルキル、置換されていてもよい $C_3 \sim C_8$ シクロアルキル、置換されていてもよい $C_2 \sim C_{1,2}$ アルケニル、置換されていてもよい $C_2 \sim C_{1,2}$ アルキニル、置換されていてもよいアリール、および置換されていてもよいヘテロアリール、からなる群から選択される。

化合物またはその塩。

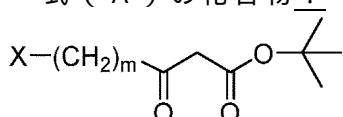
【請求項4】

X が C₁ であり、かつ R^{1-a} および R^{1-b} の各々が プチル基である、請求項 3 に記載の化合物。

【請求項5】

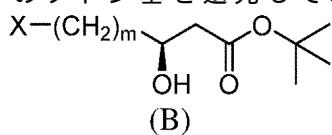
式 (B) の化合物を製造する方法であつて、

式 (A) の化合物：



(A)

のケトン基を還元して、式（B）の化合物：



を形成する工程を含み、

式中、

Xは、ハロゲンであり、

m は、2～6である、

方法。

【請求項 6】

X が C 1 であり、かつ m が 2 である、請求項 5 に記載の方法。

【請求項 7】

前記式(A)の化合物中の前記ケトン基が、ルテニウム系触媒を使用して還元される、請求項5～6のいずれか一項に記載の方法。

【請求項8】

前記ルテニウム系触媒が式（III）の構造：

$R^3Ru(X^1)_2$ (III)

を有し、

式中、

X^1 は、ハロゲン、ベンゼン、シメン、またはアセチル(OCAc)基であり、 R^3 は、(S)-BINAP、(R)-BINAP、(R)-H₈-BINAP、(R)-SegPhos、(R)-DM-SegPhos、(S)-SegPhos、(R)-トリル-BINAP、(R)-キシリル-BINAP、(S)-トリル-BINAP、(S)-BINAPHANE、(S)-PhanePhos、Josiphos-2-1、(R)-SolPhos SL-A001-1、(S)-MeOBiPhep、(S)-P-Phos、および(S)-(+)-DTBM-SEGPHOSからなる群から選択される配位子である。

請求項7に記載の方法。

【請求項9】

前記式(A)の化合物中の前記ケトン基を、アルコール脱水素酵素系で還元する工程を含む、請求項5~6のいずれか一項に記載の方法。

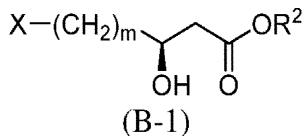
【請求項10】

前記アルコール脱水素酵素系が、還元型ニコチンアミドアデニンジヌクレオチド(NADH)、還元型ニコチンアミドアデニンジヌクレオチドリン酸(NADPH)、およびアルコールを含む、請求項9に記載の方法。

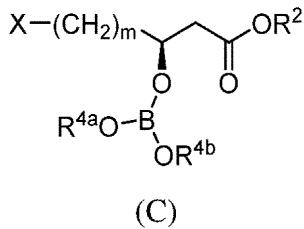
【請求項11】

式(C)の化合物を製造する方法であって、

ボロン酸化合物B(OR^{4a})(OR^{4b})(OR^{4c})を式(B-1)の化合物:



と反応させて、前記式(C)の化合物:



を形成する工程を含み、

式中、

X は、ハロゲンであり、

m は、2~6の整数であり、

R^2 は、H、置換されていてもよいC₁~C₁₂アルキル、置換されていてもよいC₃~C₈シクロアルキル、置換されていてもよいC₂~C₁₂アルケニル、置換されていてもよいC₂~C₁₂アルキニル、置換されていてもよいアリール、および置換されていてもよいヘテロアリール、からなる群から選択され、または

R^{4a} および R^{4b} は独立して、置換されていてもよいC₁~C₁₂アルキル、置換されていてもよいC₃~C₈シクロアルキル、置換されていてもよいC₂~C₁₂アルケニル、置換されていてもよいC₂~C₁₂アルキニル、置換されていてもよいアリール、および置換されていてもよいヘテロアリール、からなる群から選択され、または

R^{4a} および R^{4b} は、介在する原子とともに5~8員ボロンエステル環を形成してもよく、

R^{4c} は、置換されていてもよいC₁~C₁₂アルキル、置換されていてもよいC₃~C₈シクロアルキル、置換されていてもよいC₂~C₁₂アルケニル、置換されていてもよいC₂~C₁₂アルキニル、置換されていてもよいアリール、および置換されていても

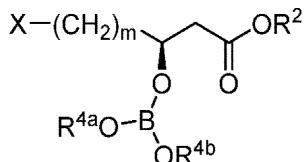
よいへテロアリール、からなる群から選択される、方法。

【請求項 1 2】

XがC1であり、mが2であり、かつR²、R^{4a}およびR^{4b}が各々独立してブチル基である、請求項1_1に記載の方法。

【請求項 1 3】

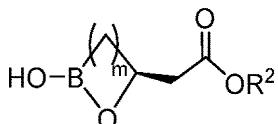
式(D)の化合物を製造する方法であって、マグネシウムを式(C)の化合物：



(C)

と反応させて、第1の反応中間体を形成する工程と、

前記第1の反応中間体を加水分解して、前記式(D)の化合物：



(D)

を形成する工程と

を含み、

式中、

Xは、ハロゲンであり、

mは、2～6の整数であり、

R²は、H、置換されていてもよいC₁～C₁₂アルキル、置換されていてもよいC₃～C₈シクロアルキル、置換されていてもよいC₂～C₁₂アルケニル、置換されていてもよいC₂～C₁₂アルキニル、置換されていてもよいアリール、および置換されていてもよいへテロアリール、からなる群から選択され、

R^{4a}およびR^{4b}の各々は独立して、置換されていてもよいC₁～C₁₂アルキル、置換されていてもよいC₃～C₈シクロアルキル、置換されていてもよいC₂～C₁₂アルケニル、置換されていてもよいC₂～C₁₂アルキニル、置換されていてもよいアリール、および置換されていてもよいへテロアリール、からなる群から選択され、または

R^{4a}およびR^{4b}は、介在する原子とともに5～8員ボロンエステル環を形成してもよい、

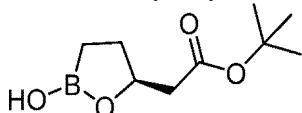
方法。

【請求項 1 4】

XがC1であり、mが2であり、かつR²、R^{4a}およびR^{4b}が独立してブチル基である、請求項1_3に記載の方法。

【請求項 1 5】

前記式(D)の化合物が

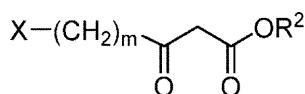


である、請求項1_3に記載の方法。

【請求項 1 6】

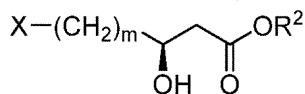
式(E)の化合物を製造する方法であって、

式(A-1)のケト-エステル化合物：



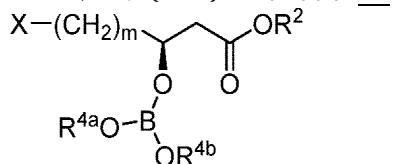
(A-1)

のケトン基を還元して、式(B-1)の化合物：



(B-1)

を形成する工程と、

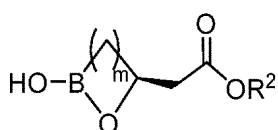
ボロン酸化合物B(OR^{4a}) (OR^{4b}) (OR^{4c})を式(B)の化合物と反応させて、式(C)の化合物：

(C)

を形成する工程と、

マグネシウムを前記式(C)の化合物と反応させて、第1の反応中間体を形成する工程と、

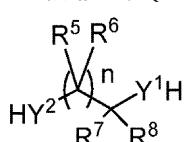
前記第1の反応中間体を加水分解して、式(D)の化合物：



(D)

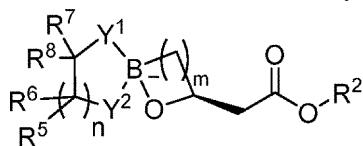
を形成する工程と、

前記式(D)の化合物を式(CL)の錯化剤：



(CL)

と反応させて、前記式(E)の化合物：



(E)

を形成する工程と

を含み、

式中、

 X は、ハロゲンであり、 m は、2~6の整数であり、 n は、0~6の整数であり、 Y^1 は、Oまたは $\text{N}^+ \text{R}^9 \text{R}^{10}$ であり、 Y^2 は、Oまたは $\text{N} \text{R}^{11}$ であり、 R^2 は、H、置換されていてもよい $\text{C}_{1~2}$ アルキル、置換されていてもよい C_3

～C₈シクロアルキル、置換されていてもよいC₂～C₁₂アルケニル、置換されていてもよいC₂～C₁₂アルキニル、置換されていてもよいアリール、および置換されていてもよいヘテロアリール、からなる群から選択され、

各R⁵およびR⁶は独立して、H、置換されていてもよいフェニル、および置換されていてもよいC₁～C₄アルキル、からなる群から選択され、または、R⁵およびR⁶は、それらが結合している原子とともに=Oを形成し、

各R⁷およびR⁸は独立して、H、置換されていてもよいフェニル、および置換されていてもよいC₁～C₄アルキル、からなる群から選択され、または、R⁵およびR⁷は、それらが結合している原子とともにアリールもしくはヘテロアリール環を形成し、あるいは、R⁷およびR⁸は、それらが結合している原子とともに=Oを形成し、

各R⁹、R¹⁰、およびR¹¹は独立して、H、置換されていてもよいフェニル、および置換されていてもよいC₁～C₄アルキル、からなる群から選択される、方法。

【請求項17】

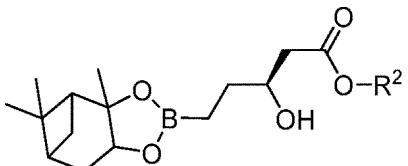
XがC1であり、mが2であり、かつR²がブチル基である、請求項16に記載の方法。

【請求項18】

前記式(CL)の錯化剤がNH₂(CH₂)₂OHである、請求項16～17のいずれか一項に記載の方法。

【請求項19】

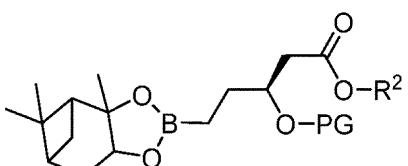
前記式(E)の化合物をピナンジオールと反応させて、式(F)の化合物：



(F)

を形成する工程と、

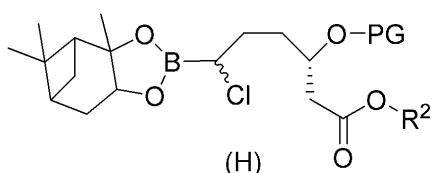
前記式(F)の化合物のヒドロキシ基をPG基で保護して、式(G)の化合物：



(G)

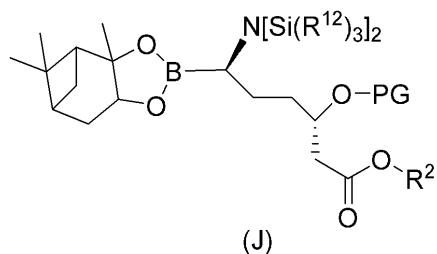
を形成する工程と、

前記式(G)の化合物をn-ブチルリチウムおよびジクロロメタンと反応させて、式(H)の化合物：



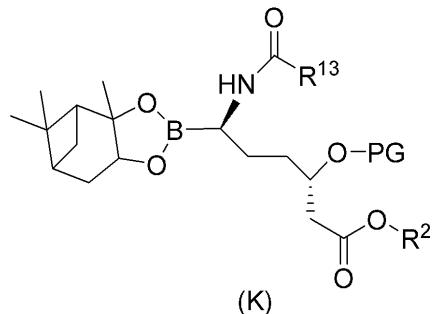
を形成する工程と、

前記式(H)の化合物をLiN[Si(R¹～R⁴)₃]₂と反応させて、式(J)の化合物：



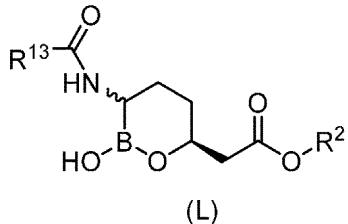
を形成する工程と、

前記式 (J) の化合物を R^{1~3}-COCl と反応させて、式 (K) の化合物：



を形成する工程と、

前記式 (K) の化合物上の前記 PG 基を除去して、式 (L) の化合物：



を形成する工程と

をさらに含み、

式中、

PG は、ヒドロキシ保護基であり、

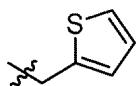
R^{1~2} は、置換されていてもよいフェニル、または置換されていてもよい C_{1~8} アルキルであり、

R^{1~3} は、置換されていてもよい C_{1~8} アルキル、置換されていてもよい C_{0~4} アルキル - C_{6~10} アリール、置換されていてもよい C_{0~4} アルキル - 5~10 員ヘテロアリール、置換されていてもよい C_{0~4} アルキル - C_{3~10} カルボシクリル、および C_{0~4} アルキル - 4~10 員ヘテロシクリルから選択される、

請求項 16 に記載の方法。

【請求項 20】

R^{1~3} が



である、請求項 19 に記載の方法。

【手続補正 2】

【補正対象書類名】明細書

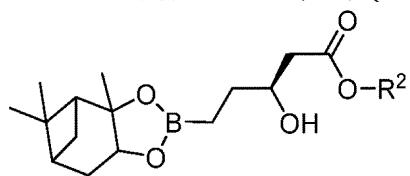
【補正対象項目名】0115

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0115】

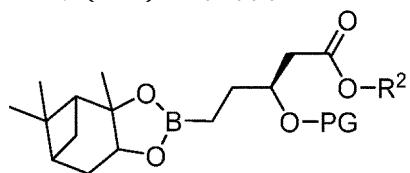
一部の実施形態では、本明細書に記載の方法は、さらに、式（E）の化合物をピナンジオールと反応させて、式（F）の化合物



(F)

を形成する工程と、

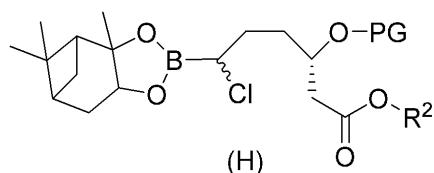
式（F）の化合物のヒドロキシ基をPG基で保護して、式（G）の化合物



(G)

を形成する工程と、

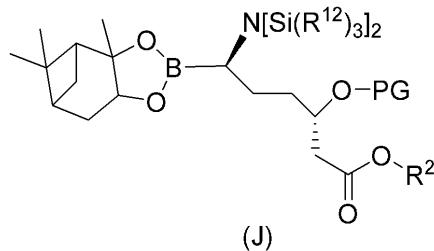
式（G）の化合物をn-ブチルリチウムおよびジクロロメタンと反応させて、式（H）の化合物



(H)

を形成する工程と、

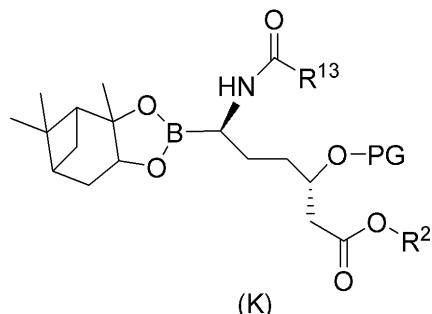
式（H）の化合物をLiN[Si(R¹²)₃]₂と反応させて、式（J）の化合物



(J)

を形成する工程と、

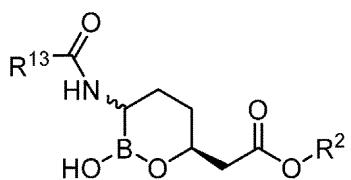
式（J）の化合物をR¹³-COClと反応させて、式（K）の化合物



(K)

を形成する工程と、

式（K）の化合物のPG基を除去して、式（L）の化合物



(L)

を形成する工程と

を含み、

式中、

PGは、ヒドロキシ保護基であり、

R^{1~2}は、置換されていてもよいフェニル、または置換されていてもよいC_{1~8}アルキルであり、R^{1~3}は、置換されていてもよいC_{1~8}アルキル、置換されていてもよいC_{0~4}アルキル-C_{6~10}アリール、置換されていてもよいC_{0~4}アルキル-C_{3~10}カルボシクリル、およびC_{0~4}アルキル-C_{4~10}ヘテロシクリルから選択される。