

【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22年7月15日(2010.7.15)

【公表番号】特表2009-537607(P2009-537607A)
 【公表日】平成21年10月29日(2009.10.29)
 【年通号数】公開・登録公報2009-043
 【出願番号】特願2009-511523(P2009-511523)
 【国際特許分類】

C 0 7 F 9/53 (2006.01)
 C 0 7 F 17/02 (2006.01)
 C 0 7 F 19/00 (2006.01)
 C 0 7 B 61/00 (2006.01)

【F I】

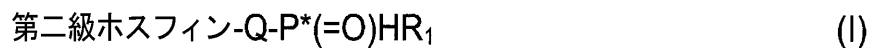
C 0 7 F 9/53 C S P
 C 0 7 F 17/02
 C 0 7 F 19/00
 C 0 7 B 61/00 3 0 0

【手続補正書】
 【提出日】平成22年5月21日(2010.5.21)
 【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】

少なくとも2個のキラル中心を有する、ジアステレオマー又は純粋なジアステレオマーの混合物の形態での、式I：

【化29】



〔式中、

第二級ホスフィンとは、置換基として炭化水素基又はヘテロ炭化水素基を有する第二級ホスフィン基であり；

Qは、ビスアリール又はビスヘテロアリール架橋結合に対して2個のリン原子がオルト位に結合している、軸性キラル中心を有する二価ビスアリール又はビスヘテロアリール基であるか、或いはQは、面性キラル中心を有する二価フェロセニル基であるか、又はQは、面性キラル中心を有さない二価フェロセニル基であり、それらにおいて、第二級ホスフィンのリン原子がシクロペンタジエニル環に直接又はC₁～C₄炭素結合を介して結合しており、

- P*(=O)HR₁基は、同じシクロペンタジエニル環でそこに結合した第二級ホスフィンに対してオルト位に結合しているか又は他のシクロペンタジエニル環に結合しており、

P*は、キラルなリン原子であり、そして

R₁は、炭化水素基、ヘテロ炭化水素基又はフェロセニル基であり、ここでR₁は、Qが二価フェロセニル基として面性キラル中心を有さない場合、面性キラル中心を有するフェロセニル基である〕

で示される化合物。

【請求項2】

R_1 が、直鎖又は分岐鎖 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル；非置換又は $C_1 \sim C_6$ アルキル - 若しくは $C_1 \sim C_6$ アルコキシ置換の $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルキル又は $C_5 \sim C_{12}$ シクロアルキル - $CH_2 -$ ；フェニル、ナフチル、フリル若しくはベンジル；又はハロゲン -、 $C_1 \sim C_6$ アルキル -、トリフルオロメチル -、 $C_1 \sim C_6$ アルコキシ -、トリフルオロメトキシ -、 $(C_6H_5)_3Si -$ 、 $(C_1 \sim C_{12} \text{ アルキル})_3Si -$ 若しくは第二級アミノ置換のフェニル、ナフチル、フリル若しくはベンジルの群から選択される炭化水素基であるか、或いは R_1 が、非置換又は一置換若しくは多置換のフェロセニル基であることを特徴とする、請求項1記載の化合物。

【請求項3】

第二級ホスフィンが、式： $-PR_2R_3$ に対応し、式中 R_2 及び R_3 が、それぞれ独立して、1～18個の炭素原子を有し、かつ、非置換であるか、又は $C_1 \sim C_6$ アルキル、トリフルオロメチル、 $C_1 \sim C_6$ アルコキシ、トリフルオロメトキシ、 $(C_1 \sim C_4 \text{ アルキル})_2$ アミノ、 $(C_6H_5)_3Si$ 、 $(C_1 \sim C_{12} \text{ アルキル})_3Si$ 、ハロゲン及び/若しくはヘテロ原子Oで置換されている炭化水素基であることを特徴とする、請求項1記載の化合物。

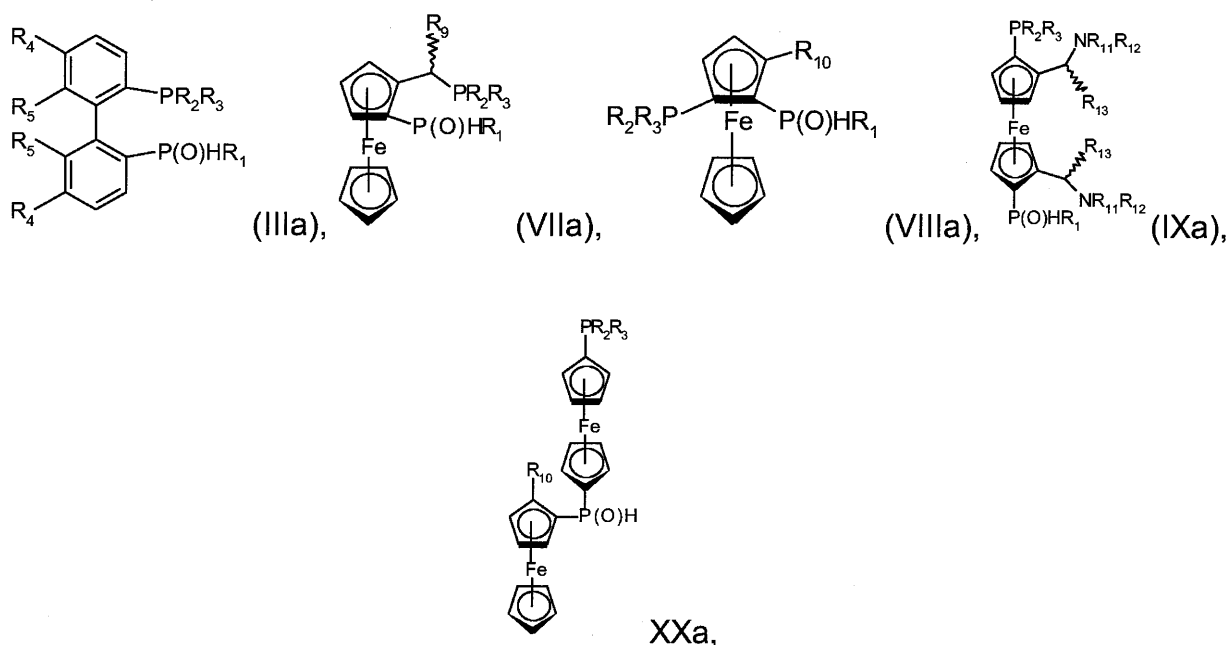
【請求項4】

式IのQが、2つの炭化水素芳香族化合物、2つの複素環式芳香族化合物又は1つの炭化水素芳香族化合物及び1つの複素環式芳香族化合物が互いに結合している基を表すことを特徴とする、請求項1記載の化合物。

【請求項5】

式IIIIa、VIIIIa、VIIIIa、IXa及びXXa：

【化30】



〔式中、

式IIIIaの3, 3 及び/又は4, 4 位は、 $C_1 \sim C_4$ アルキル、 $C_1 \sim C_4$ アルコキシ、トリフルオロメチル又はトリメチルシリルで置換されていてもよく；

R_1 は、 $C_1 \sim C_8$ アルキル、非置換シクロペンチル若しくはシクロヘキシル、又は1～3個の $C_1 \sim C_4$ アルキル若しくは $C_1 \sim C_4$ アルコキシで置換されているシクロペンチル若しくはシクロヘキシル、又は非置換若しくは1～3個の $C_1 \sim C_4$ アルキル、 $C_1 \sim C_4$ アルコキシ、 $C_1 \sim C_4$ フルオロアルキル若しくは $C_1 \sim C_4$ フルオロアルコキシ

、 F 及び C l で置換されているベンジル及びフェニルであり；

R₂ 及び R₃ は、それぞれ独立して、1～18個の炭素原子を有し、かつ、非置換であるか、又は C₁～C₆ アルキル、トリフルオロメチル、C₁～C₆ アルコキシ、トリフルオロメトキシ、(C₁～C₄ アルキル)₂ アミノ、(C₆H₅)₃ Si、(C₁～C₁₂ アルキル)₃ Si、ハロゲン及び/若しくはヘテロ原子 O で置換されている炭化水素基であり；

R₄ は、水素か、又は独立して R₅ で定義されるとおりであり；

R₅ は、C₁～C₄ アルキル、C₁～C₄ アルコキシ、C₁～C₄ ヒドロキシアルキル、C₂～C₄ ヒドロキシアルコキシ、C₁～C₄ アルコキシ-C₁～C₂ アルキル、C₁～C₄ アルコキシ-C₁～C₂ アルコキシ、トリフルオロメチル又はトリメチルシリルであるか、或いは R₄ 及び R₅ は、合わさって、-CH=CH-CH=CH-、トリメチレン、テトラメチレン、-O-CH₂-O-、-O-CF₂-O-、-O-CH₂-CH₂-O-、-N(メチル)-CH₂-CH₂-O- であり；

R₅ の基は、合わさって、C₂～C₆ アルキレン、-O-(C₁～C₄ アルキレン)-O- 又は -O-CF₂-O- であり；

R₉ は、C₁～C₄ アルキル、シクロペンチル、シクロヘキシル、フェニル、メチルフェニル、メチルベンジル又はベンジルであり；

R₁₀ は、-CH₂-NR₁₁R₁₂、-CHR₉-NR₁₁R₁₂、ビニル、メチル又はエチルであり；

R₁₁ 及び R₁₂ は、同一の基であり、R₁₁ 及び R₁₂ は、それぞれ、C₁～C₄ アルキル、シクロペンチル、シクロヘキシル、フェニル、メチルフェニル、メチルベンジル又はベンジルであるか、或いは R₁₁ 及び R₁₂ は、合わさって、テトラメチレン又は 3-オキサペンタン-1,5-ジイルであり；そして

R₁₃ は、それぞれ、C₁～C₄ アルキル、シクロペンチル、シクロヘキシル、フェニル、メチルフェニル、メチルベンジル又はベンジルである]

に対応することを特徴とする、請求項 1 記載の化合物。

【請求項 6】

式 I の化合物を製造する方法であって、式 X：

【化 3 1】

第二級ホスフィン-Q-Hal

(X)

〔式中、第二級ホスフィン及び Q は、それぞれ上記で定義されたとおりであり、そして Hal は、Cl、Br 又は I である〕で示される化合物を、金属化試薬と反応させ、その後、式 XI：

【化 3 2】

Hal-PX₂R₁

(XI)

〔式中、

R₁ は、その選択肢を含んで式 I で定義されたとおりであり、

Hal は、Cl、Br 又は I であり；そして

X₂ は、Cl、Br、I、C₁～C₄ アルコキシ又は (C₁～C₄ アルキル)₂ アミノである〕で示されるハロホスフィンと反応させて、

形成された式 XII：

【化 3 3】

第二級ホスフィン-Q-PX₂R₁

(XII)

で示される化合物を水で加水分解して、式 I の化合物を得ることを特徴とする

方法。

【請求項 7】

元素周期表の遷移族の遷移金属と、リガンドとしての式 I の化合物との金属錯体。

【請求項 8】

触媒の存在下で、プロキラルな有機化合物における炭素又は炭素 - ヘテロ原子二重結合に水素を不斉付加することにより、キラル有機化合物を製造する方法であって、付加が、請求項 7 記載の少なくとも 1 種の金属錯体の触媒量の存在下で実施されることを特徴とする方法。

【請求項 9】

プロキラルな有機化合物における炭素又は炭素 - ヘテロ原子二重結合に水素を不斉付加するキラル有機化合物の製造のための、均一触媒としての、請求項 7 記載の金属錯体の使用。