

【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1年5月9日(2019.5.9)

【公表番号】特表2018-509457(P2018-509457A)

【公表日】平成30年4月5日(2018.4.5)

【年通号数】公開・登録公報2018-013

【出願番号】特願2017-550541(P2017-550541)

【国際特許分類】

C 07 D 487/04 (2006.01)

A 61 K 31/519 (2006.01)

A 61 P 35/00 (2006.01)

A 61 P 35/02 (2006.01)

【F I】

C 07 D 487/04 143

C 07 D 487/04 C S P

A 61 K 31/519

A 61 P 35/00

A 61 P 35/02

【手続補正書】

【提出日】平成31年3月22日(2019.3.22)

【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】

1 - ((R) - 3 - (4 - アミノ - 3 - (4 - フェノキシフェニル) - 1 H - ピラゾロ [3 , 4 - d] ピリミジン - 1 - イル) ピペリジン - 1 - イル) プロブ - 2 - エン - 1 - オンが、アセトフェノン、または、酢酸ベンジルと溶媒和される、1 - ((R) - 3 - (4 - アミノ - 3 - (4 - フェノキシフェニル) - 1 H - ピラゾロ [3 , 4 - d] ピリミジン - 1 - イル) ピペリジン - 1 - イル) プロブ - 2 - エン - 1 - オンの溶媒和物。

【請求項2】

結晶形態である、請求項1に記載の溶媒和物。

【請求項3】

前記溶媒和物は以下の特性のうちの少なくとも1つを有する、アセトフェノン溶媒和物である、請求項2に記載の溶媒和物：

(a) 図9に示す通りの粉末X線回折(XRD)パターン、

(b) 7 . 6 ± 0 . 1 ° 2 - シータ、8 . 8 ± 0 . 1 ° 2 - シータ、15 . 2 ± 0 . 1 ° 2 - シータ、17 . 6 ± 0 . 1 ° 2 - シータ、18 . 9 ± 0 . 1 ° 2 - シータ、19 . 5 ± 0 . 1 ° 2 - シータ、20 . 4 ± 0 . 1 ° 2 - シータ、21 . 0 ± 0 . 1 ° 2 - シータ、21 . 3 ± 0 . 1 ° 2 - シータ、及び24 . 8 ± 0 . 1 ° 2 - シータで少なくとも2つ、少なくとも4つ、少なくとも6つ、少なくとも8つ、少なくとも10、または少なくとも12のピークを含むXRDパターン、

(c) 図10に示す通りの示差走査熱量測定(DSC)サーモグラム、

(d) 吸熱が約96でピークを迎えるDSCサーモグラム、

(e) 図10に示す通りの熱重量分析(TGA)サーモグラム、

(f) 単位格子パラメータは約 100 (2) K の温度にて以下とほぼ等しい:

【表 1】

分子式	C ₃₃ H ₃₂ N ₆ O ₃				
分子量	560.64				
結晶系	三斜晶系				
空間群	P 1	a	11.3552 (5) Å	α	79.657 (3) °
		b	11.7741 (4) Å	β	70.352 (4) °
		c	12.2064 (4) Å	γ	67.080 (4) °
V	1413.38 (11) Å ³				
Z	2				
密度 (計算値)	1.317 Mg/m ³				
吸収係数	0.699 mm ⁻¹				
波長	1.54178 Å				
F (000)	592				
T	100 (2) K				

または

(g) これらの組み合わせ。

【請求項 4】

前記結晶形態が、図 9 に示す通りの X R P D パターンを有する、請求項 3 に記載の溶媒和物。

【請求項 5】

前記結晶形態が、7.6 ± 0.1 ° 2 - シータ、8.8 ± 0.1 ° 2 - シータ、15.2 ± 0.1 ° 2 - シータ、17.6 ± 0.1 ° 2 - シータ、18.9 ± 0.1 ° 2 - シータ、19.5 ± 0.1 ° 2 - シータ、20.4 ± 0.1 ° 2 - シータ、21.0 ± 0.1 ° 2 - シータ、21.3 ± 0.1 ° 2 - シータ、及び 24.8 ± 0.1 ° 2 - シータで少なくとも 2 つのピークを含む X R P D パターンを有する、請求項 3 に記載の溶媒和物。

【請求項 6】

前記 D S C サーモグラムが、約 96 でピークを迎える吸熱を有する、請求項 3 に記載の溶媒和物。

【請求項 7】

前記結晶形態が、図 10 に示す通りの D S C サーモグラムを有する、請求項 3 に記載の溶媒和物。

【請求項 8】

前記結晶形態が、図 10 に示す通りの T G A サーモグラムを有する、請求項 3 に記載の溶媒和物。

【請求項 9】

前記単位格子パラメータが、約 100 (2) K の温度にて以下とほぼ等しい、請求項 3 に記載の溶媒和物：

【表2】

分子式	<chem>C33H32N6O3</chem>				
分子量	560.64				
結晶系	三斜晶系				
空間群	P 1	a	11.3552 (5) Å	α	79.657 (3) °
		b	11.7741 (4) Å	β	70.352 (4) °
		c	12.2064 (4) Å	γ	67.080 (4) °
V	1413.38 (11) Å ³				
Z	2				
密度 (計算値)	1.317 Mg/m ³				
吸収係数	0.699 mm ⁻¹				
波長	1.54178 Å				
F (000)	592				
T	100 (2) K				

【請求項10】

前記結晶形態が特性 (a)、(b)、(c)、(d)、(e)、及び(f)を有することを特徴とする、請求項3に記載の溶媒和物。

【請求項11】

前記溶媒和物は、以下の特性のうちの少なくとも1つを有する、アセトフェノン溶媒和物である、請求項2に記載の溶媒和物：

(a) 図13に示す通りのXRDパターン、

(b) 6.5±0.1°2-シータ、13.0±0.1°2-シータ、17.6±0.1°2-シータ、18.4±0.1°2-シータ、19.9±0.1°2-シータ、21.0±0.1°2-シータ、21.5±0.1°2-シータ、22.1±0.1°2-シータ、及び23.9±0.1°2-シータで少なくとも2つ、少なくとも4つ、少なくとも6つ、少なくとも8つ、または9つのピークを含むXRDパターン、

(c) 図14に示す通りのDSCサーモグラム、

(d) 吸熱が約127でピークを迎えるDSCサーモグラム、

(e) 図14に示す通りのTGAサーモグラム、

または

(f) これらの組み合わせ。

【請求項12】

前記結晶形態が、図13に示す通りのXRDパターンを有する、請求項11に記載の溶媒和物。

【請求項13】

前記結晶形態が、6.5±0.1°2-シータ、13.0±0.1°2-シータ、17.6±0.1°2-シータ、18.4±0.1°2-シータ、19.9±0.1°2-シータ、21.0±0.1°2-シータ、21.5±0.1°2-シータ、及び23.9±0.1°2-シータで少なくとも2つのピークを含むXRDパターンを有する、請求項11に記載の溶媒和物。

【請求項14】

前記DSCサーモグラムが、約127でピークを迎える吸熱を有する、請求項11に記載の溶媒和物。

【請求項15】

前記結晶形態が、図14に示す通りのDSCサーモグラムを有する、請求項11に記載の溶媒和物。

【請求項16】

前記結晶形態が、図14に示す通りのTGAサーモグラムを有する、請求項11に記載の溶媒和物。

【請求項17】

前記結晶形態が特性(a)、(b)、(c)、(d)、及び(e)を有することを特徴とする、請求項11に記載の溶媒和物。

【請求項18】

前記溶媒和物は、以下の特性の酢酸ベンジル溶媒和物である、請求項2に記載の溶媒和物：

(a)図17に示す通りのXRPDパターン、

(b)12.8±0.1°2-シータ、17.8±0.1°2-シータ、18.7±0.1°2-シータ、19.2±0.1°2-シータ、20.1±0.1°2-シータ、22.1±0.1°2-シータ、及び22.9±0.1°2-シータで少なくとも2つ、少なくとも4つ、少なくとも6つ、または8つのピークを含むXRPDパターン、

(c)図18に示す通りのDSCサーモグラム、

(d)約108でピークを迎える吸熱、及び約158でピークを迎える吸熱を有するDSCサーモグラム、

(e)図18に示す通りのTGAサーモグラム、

または

(f)これらの組み合わせ。

【請求項19】

前記結晶形態が、図17に示す通りのXRPDパターンを有する、請求項18に記載の溶媒和物。

【請求項20】

前記結晶形態が、12.8±0.1°2-シータ、17.8±0.1°2-シータ、18.7±0.1°2-シータ、19.2±0.1°2-シータ、20.1±0.1°2-シータ、22.1±0.1°2-シータ、及び22.9±0.1°2-シータで少なくとも2つのピークを含むXRPDパターンを有する、請求項18に記載の溶媒和物。

【請求項21】

前記DSCサーモグラムが、約108でピークを迎える吸熱、及び、約158でピークを迎える吸熱を有する、請求項18に記載の溶媒和物。

【請求項22】

前記結晶形態が、図18に示す通りのDSCサーモグラムを有する、請求項18に記載の溶媒和物。

【請求項23】

前記結晶形態が、図18に示す通りのTGAサーモグラムを有する、請求項18に記載の溶媒和物。

【請求項24】

前記結晶形態が、特性(a)、(b)、(c)、(d)、及び(e)を有することを特徴とする、請求項18に記載の溶媒和物。

【請求項25】

請求項1～24のいずれか一項に記載の結晶形態、及び薬学的に許容される賦形剤を含む、医薬組成物。