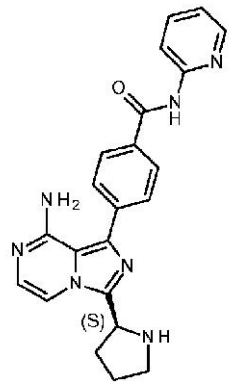
【公報種別】特許法第１７条の２の規定による補正の掲載
【部門区分】第３部門第２区分
【発行日】令和6年3月27日(2024.3.27)

【公開番号】特開2024-37935(P2024-37935A)
【公開日】令和6年3月19日(2024.3.19)
【年通号数】公開公報(特許)2024-051
【出願番号】特願2023-212753(P2023-212753)
【国際特許分類】
Ｃ０７Ｄ４８７/０４(２００６.０１)
【ＦＩ】
Ｃ０７Ｄ４８７/０４ １４４
Ｃ０７Ｄ４８７/０４ ＣＳＰ

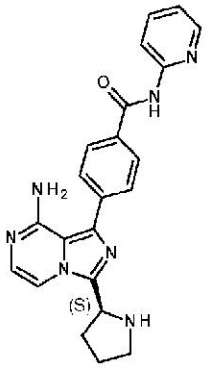
【手続補正書】
【提出日】令和6年2月20日(2024.2.20)
【手続補正１】
【補正対象書類名】特許請求の範囲
【補正対象項目名】全文
【補正方法】変更
【補正の内容】
【特許請求の範囲】
【請求項１】
式（ＶＩＩ）の構造を有する化合物：
【化１】



(VII)

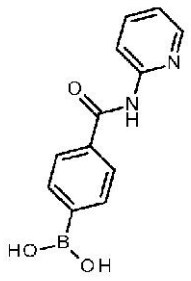
の結晶形態であって、
前記結晶形態が、
９．９±０．２°２θ、１１．１±０．２°２θ、１２．８±０．２°２θ、１４．１±０．２°２θ、及び１９．０±０．２°２θからなる群から選択される少なくとも３つのピークを含む反射Ｘ線粉末回折パターン、並びに
７．４±０．２°２θ、１１．７±０．２°２θ、１２．５±０．２°２θ、２２．３±０．２°２θ、及び２１．６±０．２°２θからなる群から選択される少なくとも３つのピークを含む反射Ｘ線粉末回折パターンから選択される反射Ｘ線粉末回折パターンによって特徴付けられる、結晶形態。
【請求項２】
前記結晶形態が、９．９±０．２°２θ、１１．１±０．２°２θ、１２．８±０．２°２θ、１４．１±０．２°２θ、及び１９．０±０．２°２θからなる群から選択される少なくとも３つのピークを含む反射Ｘ線粉末回折パターンによって特徴付けられる、請

求項１に記載の結晶形態。
【請求項３】
式（ＶＩＩ）の構造を有する化合物：
【化２】



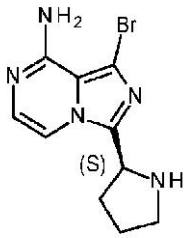
(VII)

又はその塩を調製するためのプロセスであって、前記プロセスが、
式（Ｖ）の構造を有する化合物：
【化３】



(V)

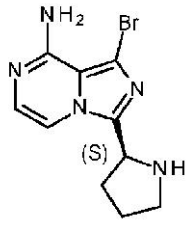
又はその塩を、式（ＶＩ）の構造を有する化合物：
【化４】



(VI)

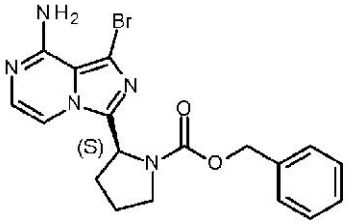
又はその塩と、有機溶媒を含む水性反応媒体中において塩基及びパラジウム触媒の存在下で接触させて、式（ＶＩＩ）の前記化合物、又はその塩を含む反応混合物を形成すること；
前記反応混合物中に存在する水の量を減少させて、式（ＶＩＩ）の前記化合物、又はその塩を含む実質的に無水の混合物を形成すること；並びに
前記実質的に無水の混合物から式（ＶＩＩ）の前記化合物、又はその塩を単離することを含む、プロセス。
【請求項４】
前記単離工程が、前記実質的に無水の混合物を濾過することを含む、請求項３に記載のプロセス。
【請求項５】
前記水性反応媒体が、アルカリ金属ハロゲン化物をさらに含む、請求項３又は４に記載のプロセス。

【請求項６】
前記減少させる工程が、
前記反応混合物を、水性の廃棄する相及び式（ＶＩＩ）の前記化合物を含む有機相に分離すること；
前記有機相を水で洗浄すること；
前記有機相をシリカ捕捉剤で処理すること；
前記シリカ捕捉剤を前記有機相から除去すること；
前記有機相を水性塩水溶液で洗浄すること；及び
前記有機相中に存在する水の量を減少させるのに十分な条件下で前記有機相を蒸留することを含む、請求項３～５のいずれか１項に記載のプロセス。
【請求項７】
前記実質的に無水の混合物が、約５重量％未満の水を含む、請求項３～６のいずれか１項に記載のプロセス。
【請求項８】
式（ＶＩ）の構造を有する化合物：
【化５】



(VI)

又はその塩を調製するためのプロセスであって、前記プロセスが、
式（ＩＶ）の化合物：
【化６】



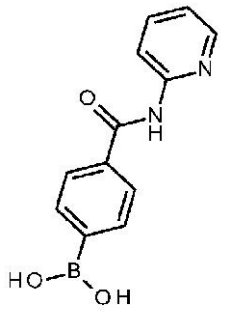
(IV)

又はその塩を、式（ＩＶ）の前記化合物を脱保護し且つ式（ＶＩ）の前記化合物、又はその塩、及びハロゲン化ベンジル副生成物を含む反応混合物を形成するのに十分な条件下で、酸性媒体と接触させること；
前記反応混合物から前記ハロゲン化ベンジル副生成物の少なくとも一部を除去すること；並びに
アミナール不純物の形成を実質的に回避するのに十分な条件下で前記反応混合物から式（ＶＩ）の前記化合物、又はその塩を単離することを含む、プロセス。
【請求項９】
前記単離工程が、
前記反応混合物から前記ハロゲン化ベンジル副生成物の少なくとも一部を除去すること；
得られた前記反応混合物のｐＨを塩基性ｐＨまで上げて、式（ＶＩ）の前記化合物、又はその塩を含む塩基性反応媒体を形成すること；及び
式（ＶＩ）の前記化合物、又はその塩を前記塩基性反応混合物から単離することを含む、請求項８に記載のプロセス。
【請求項１０】

前記単離工程が、
前記ハロゲン化ベンジル副生成物の少なくとも一部を前記反応混合物から廃棄する有機相に抽出すること；
得られた前記反応混合物のｐＨを塩基性ｐＨまで上げて、式（ＶＩ）の前記化合物、又はその塩を含む塩基性反応媒体を形成すること；
式（ＶＩ）の前記化合物、又はその塩を前記塩基性反応媒体から生成物有機相に抽出すること；及び
式（ＶＩ）の前記化合物、又はその塩を前記生成物有機相から単離することを含む、請求項８に記載のプロセス。

【請求項１１】
前記単離工程が、
前記ハロゲン化ベンジル副生成物の少なくとも一部を、前記反応混合物から式（ＶＩ）の前記化合物に対して廃棄する有機相に選択的に抽出すること；
得られた前記反応混合物のｐＨを、約７．０を超えるｐＨに上げて、塩基性反応混合物を形成すること；
前の式（ＶＩ）の前記化合物の少なくとも一部を、前記塩基性反応混合物から生成物有機相に選択的に抽出すること；及び
前記生成物有機相中に存在する水の量を減少させるのに十分な条件下で前記生成物有機相を蒸留して、式（ＶＩ）の前記化合物を含む蒸留された有機相を形成することを含む、請求項８に記載のプロセス。

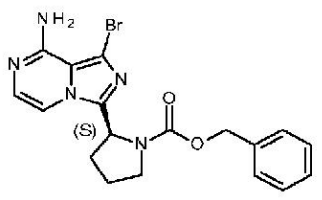
【請求項１２】
式（Ｖ）の構造を有する化合物：
【化７】



(V)

又はその塩を調製するためのプロセスであって、前記プロセスが、４－カルボキシフェニルボロン酸、又はその塩を、有機溶媒を含む反応媒体中において塩化チオニル及び触媒と接触させて、塩化アシル中間体を形成し、続いて、２－アミノピリジンとインサイチュで接触させて、式（Ｖ）の前記化合物、又はその塩を含む反応混合物を形成することを含む、プロセス。

【請求項１３】
式（ＩＶ）の構造を有する化合物：
【化８】



(IV)

の結晶性硫酸塩。

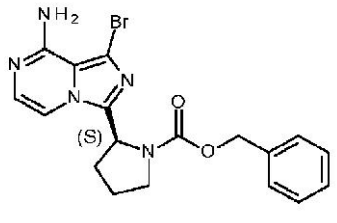
【請求項１４】

前記結晶性硫酸塩が、７．７±０．２°２θ、１０．６±０．２°２θ、１１．１±０．２°２θ、１２．６±０．２°２θ、及び１３．５±０．２°２θからなる群から選択される少なくとも３つのピークを含む反射Ｘ線粉末回折パターンによって特徴付けられる、請求項１３に記載の結晶性硫酸塩。

【請求項１５】

式（ＩＶ）の構造を有する化合物：

【化９】

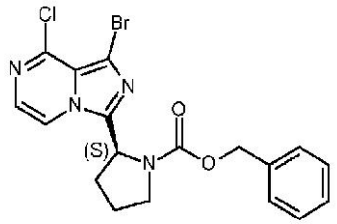


(IV)

の硫酸塩を調製するためのプロセスであって、前記プロセスが、

式（ＩＩＩ）の構造を有する化合物：

【化１０】



(III)

又はその塩を、反応媒体中においてアミノ化剤と接触させて、式（ＩＶ）の化合物を含む反応混合物を形成すること；

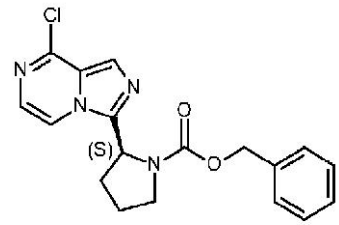
式（ＩＶ）の前記化合物の硫酸塩を形成すること；及び

前記硫酸塩を単離することを含む、プロセス。

【請求項１６】

式（ＩＩ）の構造を有する化合物：

【化１１】

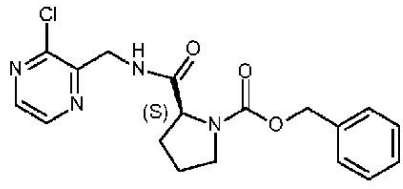


(II)

又はその塩を調製するためのプロセスであって、前記プロセスが、

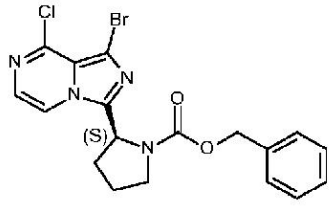
式（Ｉ）の構造を有する化合物：

【化１２】



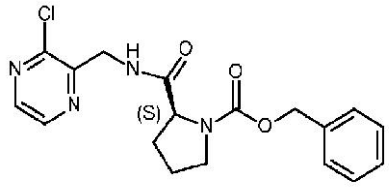
(I)

又はその塩を、反応媒体中において触媒の存在下で環化剤と接触させて、式（ＩＩ）の前記化合物、又はその塩を形成することを含み；
前記反応媒体の温度が、式（ＩＩ）の前記化合物、又はその塩に関して少なくとも約８０％のキラル純度を維持するのに十分な様式で前記接触工程の間制御される、プロセス。
【請求項１７】
式（ＩＩＩ）の構造を有する化合物：
【化１３】



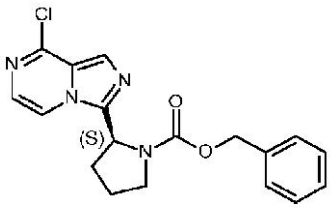
(III)

又はその塩を調製するためのプロセスであって、前記プロセスが、
式（Ｉ）の構造を有する化合物：
【化１４】



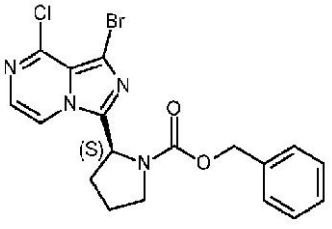
(I)

又はその塩を、反応媒体中において触媒の存在下で環化剤と接触させて、式（ＩＩ）の化合物：
【化１５】



(II)

又はその塩を形成すること；及び
式（ＩＩ）の前記化合物、又はその塩を、臭素化剤により臭素化して、式（ＩＩＩ）の構造を有する化合物：
【化１６】



(III)

又はその塩をもたらすことを含み、
前記反応媒体の温度が、式（ＩＩ）の前記化合物、又はその塩に関して少なくとも約８０％のキラル純度を維持するのに十分な様式で前記接触工程の間制御される、プロセス。