

【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23年6月16日(2011.6.16)

【公表番号】特表2010-530379(P2010-530379A)

【公表日】平成22年9月9日(2010.9.9)

【年通号数】公開・登録公報2010-036

【出願番号】特願2010-512548(P2010-512548)

【国際特許分類】

C 07 D 413/04 (2006.01)

C 07 D 213/82 (2006.01)

【F I】

C 07 D 413/04 C S P

C 07 D 213/82

【手続補正書】

【提出日】平成23年4月11日(2011.4.11)

【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

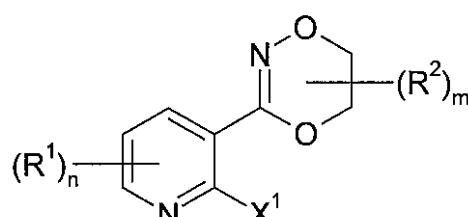
【補正の内容】

【特許請求の範囲】

【請求項1】

式(1)

【化1】



(1)

〔式中、

X¹は、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素、SCN、又はS-R³であり、ここで、

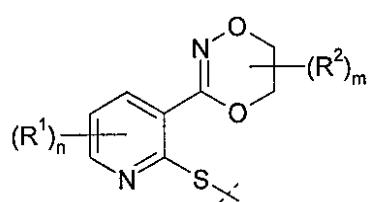
R³は、水素；

場合により置換されたC₁-C₆-アルキル；

場合により置換されたC₃-C₆-シクロアルキル；

- (CH₂)_r-C₆H₅ (ここでr=0~6であり、アルキル基-(CH₂)_r-は場合により置換され得る)；又は

【化2】



(ここで、置換基 R^1 及び R^2 並びに指標 m 及び n は、式(1)におけるのと同一の定義を有する)であり;

R¹は、ハロゲン；シアノ；チオシアナト；又は各場合において場合によりハロゲン置換されたアルキル、アルケニル、アルキニル、アルコキシ、アルキルチオ、アルキルスルフィニル、アルキルスルホニル、アルキルアミノ、アルキルカルボニル、アルコキカルボニル、アルキルアミノカルボニル、アリール、ヘテロアリール、シクロアルキル及びヘテロシクリルであり、ここで、上述の基中のアルキル及びアルキレン基は各々1~6個の炭素原子、アルケニル及びアルキニル基は各々2~6個の炭素原子、シクロアルキル基は各々3~6個の炭素原子、アリール基は各々6又は10個の炭素原子を含有し得；

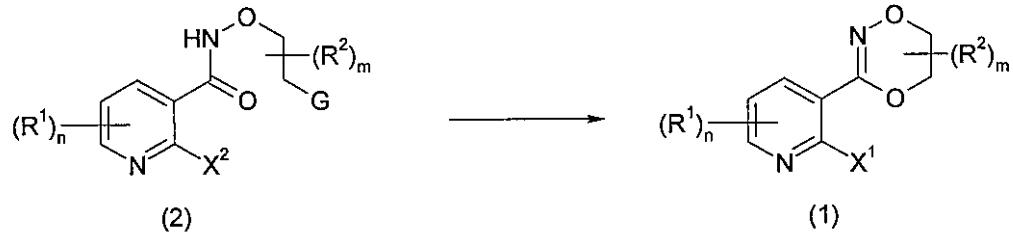
n は、0 ~ 2 の整数であり；

R^2 は、各場合において独立して、場合により、单一又は多数の同一又は異なる基で置換された $C_1 - C_6$ - アルキル、 $C_2 - C_6$ - アルケニル、 $C_2 - C_6$ - アルキニル、 $C_3 - C_6$ - シクロアルキルであり、ここで、置換基は、各々独立して、ハロゲン、シアノ、ニトロ、 $C_1 - C_4$ - アルコキシ、 $C_1 - C_4$ - ハロアルコキシ、 $C_1 - C_4$ - アルキルチオ、 $C_1 - C_4$ - アルキルスルフィニル、 $C_1 - C_4$ - アルキルスルホニル、($C_1 - C_6$ - アルコキシ)カルボニル、($C_1 - C_6$ - アルキル)カルボニル又は $C_3 - C_6$ - トリアルキルシリルより選択され得；

m は、0 ~ 4 の整数である] のジオキサジン誘導体の製造方法であって、該方法が、

式(2)の化合物から閉環処理によって式(1)のジオキサジン誘導体を製造すること(方法工程(1)):

【化 3】



[式中、置換基 R¹、R²及び X¹並びに指標 n 及び m は、各々、上記に定義される通りであり；G は、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素、-OSO₂-CH₃、-O-SO₂CF₃、-O-SO₂-Ph 及び -O-SO₂-C₆H₄-Me からなる群より選択される脱離基であり、X²は、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素、SCN、又は S-R³であり、

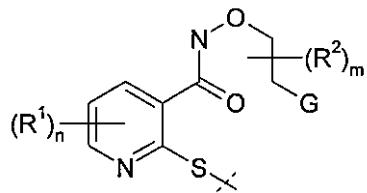
ここで、 R^3 は、水素；

場合により置換された C₁ - C₆ - アルキル；

場合により置換された C_3 - C_6 - シクロアルキル；

- (CH₂)_r - C₆H₅ (ここで r = 0 ~ 6 であり、アルキル基 - (CH₂)_r - は場合により置換され得る) であるか; 又は基

【化 4】



(ここで、該基中の置換基 R^1 及び R^2 並びに指標 m 及び n は、式(1)におけるのと同一の定義を有する)である]

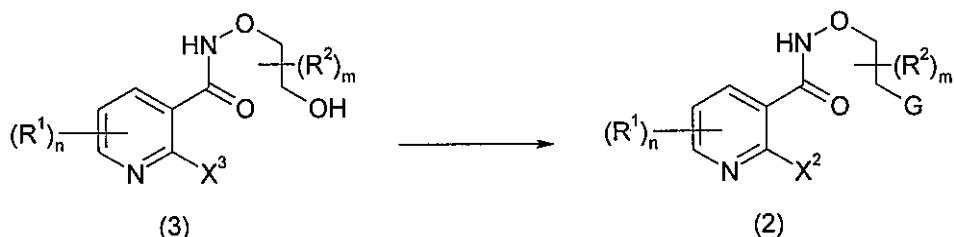
を含む、方法。

【請求項 2】

式(2)の化合物が、式(3)の化合物のヒドロキシル官能基を、フッ素、塩素、臭素

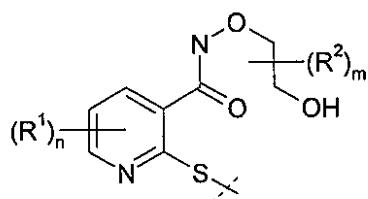
、ヨウ素、-OSO₂-CH₃、-O-SO₂CF₃、-O-SO₂-Ph及びO-SO₂-C₆H₄-Meからなる群より選択される脱離基へ変換することによって得られる（方法工程（2））：

【化 5】



[式中、 X^3 は、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素、SCN、又は $S - R^3$ であり、ここで、 R^3 は、水素；場合により置換された $C_1 - C_6$ -アルキル；場合により置換された $C_3 - C_6$ -シクロアルキル； $-(CH_2)_r - C_6H_5$ （ここで $r = 0 \sim 6$ であり、アルキル基 $-(CH_2)_r$ は場合により置換され得る）であるか；又は基

【化 6 】



(ここで、該基中の置換基 R^1 及び R^2 並びに指標 m 及び n は、各々、式(1)におけるのと同一の定義を有する)である]

請求項 1 に記載の方法。

【請求項3】

方法工程(1)における環化を塩基の存在下で行う、請求項1又は2に記載の方法。

【請求項4】

方法工程(1)における反応を20~100の温度で行う、請求項1~3のいずれか1項に記載の方法。

【請求項5】

脱離基が塩素であり、方法工程(2)において、塩化チオニル(SOC1_2)、塩化ホスホリル(POC1_3)、ホスゲン、ジホスゲン及び塩化オキサリル($(\text{COCl})_2$)からなる群より選択される塩素化剤によって塩素化を行う、請求項2又は3に記載の方法。

【請求項 6】

方法工程(2)における反応を10~100の温度で行う、請求項2~5のいずれか1項に記載の方法。

【請求項7】

式(2)の化合物を単離することなく、方法工程(1)及び(2)をワンポット反応として行う、請求項2～6のいずれか1項に記載の方法。

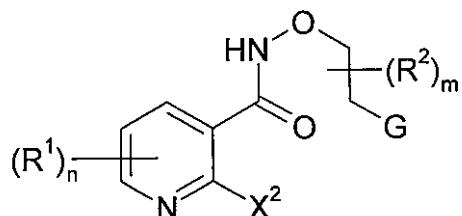
【請求項 8】

塩基を添加することなく、ワンポット反応を行う、請求項 7 に記載の方法。

【請求項9】

式 (2)

【化7】



(2)

[式中、

Gは、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素、-OSO₂-CH₃、-O-SO₂CF₃、-O-SO₂-Ph及び-O-SO₂-C₆H₄-Meであり；

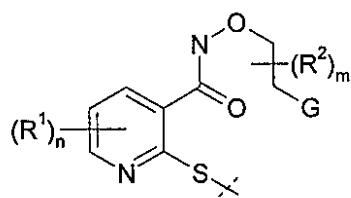
X²は、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素、SCN、又はS-R³であり、ここで、R³は、水素；

場合により置換されたC₁-C₆-アルキル；

場合により置換されたC₃-C₆-シクロアルキル；

- (CH₂)_r-C₆H₅（ここでr=0~6であり、アルキル基-(CH₂)_r-は場合により置換され得る）であるか；又は基

【化8】



（ここで、該基中の置換基R¹及びR²並びに指標m及びnは、各々、式(1)におけるのと同一の定義を有する）であり、

R¹は、ハロゲン；シアノ；チオシアナト；又は各場合において場合によりハロゲン置換されたアルキル、アルケニル、アルキニル、アルコキシ、アルキルチオ、アルキルスルフィニル、アルキルスルホニル、アルキルアミノ、アルキルカルボニル、アルコキシカルボニル、アルキルアミノカルボニル、アリール、ヘテロアリール、シクロアルキル及びヘテロシクリルであり、ここで、上述の基中のアルキル及びアルキレン基は各々1~6個の炭素原子、アルケニル及びアルキニル基は各々2~6個の炭素原子、シクロアルキル基は各々3~6個の炭素原子、アリール基は各々6又は10個の炭素原子を含有し得；

nは、0~2の整数であり；

R²は、各場合において独立して、場合により、单一又は多数の同一又は異なる基で置換されたC₁-C₆-アルキル、C₂-C₆-アルケニル、C₂-C₆-アルキニル、C₃-C₆-シクロアルキルであり、ここで、置換基は、各々独立して、ハロゲン、シアノ、ニトロ、C₁-C₄-アルコキシ、C₁-C₄-ハロアルコキシ、C₁-C₄-アルキルチオ、C₁-C₄-アルキルスルフィニル、C₁-C₄-アルキルスルホニル、(C₁-C₆-アルコキシ)カルボニル、(C₁-C₆-アルキル)カルボニル又はC₃-C₆-トリアルキルシリルより選択され得；

mは、0~4の整数である]

の化合物。

【請求項10】

Gは、フッ素、塩素、臭素及びヨウ素であり、

X²は、S-R³であり、ここで、

R³は、場合により置換されたC₁-C₆-アルキル；

場合により置換された $C_3 - C_6$ - シクロアルキル；

- $(CH_2)_r - C_6H_5$ (ここで $r = 0 \sim 4$ であり、アルキル基 - $(CH_2)_r -$ は場合により置換され得る) であり；

R^1 は、ハロゲン；シアノ；チオシアナト；又は各場合において場合によりハロゲン置換されたアルキル、アルケニル、アルキニル、アルコキシ、アルキルチオ、アルキルスルフィニル、アルキルスルホニル、アルキルアミノ、アルキルカルボニル、アルコキシカルボニル、アルキルアミノカルボニル、アリール、ヘテロアリール、シクロアルキル及びヘテロシクリルであり、ここで、上述の基中のアルキル及びアルキレン基は各々 1 ~ 6 個の炭素原子、アルケニル及びアルキニル基は各々 2 ~ 6 個の炭素原子、シクロアルキル基は各々 3 ~ 6 個の炭素原子、アリール基は各々 6 又は 10 個の炭素原子を含有し得；

n は、0 又は 1 であり；

R^2 は、各場合において独立して、場合により、单一又は多数の同一又は異なる基で置換された $C_1 - C_4$ - アルキル、 $C_3 - C_6$ - シクロアルキルであり、ここで、置換基は、各々独立して、ハロゲン、シアノ、ニトロ、ヒドロキシル、 $C_1 - C_4$ - アルコキシ、 $C_1 - C_4$ - ハロアルコキシ、 $C_1 - C_4$ - アルキルチオ、 $C_1 - C_4$ - アルキルスルフィニル及び $C_1 - C_4$ - アルキルスルホニルより選択され得；

m は、0 ~ 2 の整数である、請求項 9 に記載の式 (2) の化合物：。

【請求項 1 1】

G は、塩素であり；

X^2 は、 $S - R^3$ であり、ここで、

R^3 は、場合により置換された $C_1 - C_6$ - アルキル；

場合により置換された $C_3 - C_6$ - シクロアルキル；

- $(CH_2)_r - C_6H_5$ (ここで $r = 0 \sim 6$ であり、アルキル基 - $(CH_2)_r -$ は場合により置換され得る) であり；

R^1 は、ハロゲン；シアノ；チオシアナト；又は各場合において場合によりハロゲン置換されたアルキル、アルケニル、アルキニル、アルコキシ、アルキルチオ、アルキルスルフィニル、アルキルスルホニル、アルキルアミノ、アルキルカルボニル、アルコキシカルボニル、アルキルアミノカルボニル、アリール、ヘテロアリール、シクロアルキル及びヘテロシクリルであり、ここで、上述の基中のアルキル及びアルキレン基は各々 1 ~ 6 個の炭素原子、アルケニル及びアルキニル基は各々 2 ~ 6 個の炭素原子、シクロアルキル基は各々 3 ~ 6 個の炭素原子、アリール基は各々 6 又は 10 個の炭素原子を含有し得；

n は、0 又は 1 であり；

R^2 は、場合により、单一又は多数の同一又は異なる基で置換された $C_1 - C_4$ - アルキルであり、ここで、置換基は、各々独立して、ハロゲン、シアノ、ニトロ、 $C_1 - C_4$ - アルコキシ、 $C_1 - C_4$ - ハロアルコキシより選択され得；

m は、0 又は 1 である、請求項 9 又は 10 に記載の式 (2) の化合物。

【請求項 1 2】

G は、塩素であり；

X^2 は、 $S - CH_2 - C_6H_5$ であり；

n は、0 であり；

m は、0 である、請求項 9 ~ 11 のいずれか 1 項に記載の式 (2) の化合物。