

【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5年5月23日(2023.5.23)

【国際公開番号】WO2020/232545  
 【公表番号】特表2022-533484(P2022-533484A)  
 【公表日】令和4年7月22日(2022.7.22)  
 【年通号数】公開公報(特許)2022-133  
 【出願番号】特願2022-516247(P2022-516247)  
 【国際特許分類】

10

C 0 7 C 3 0 9 / 6 5 ( 2 0 0 6 . 0 1 )

C 0 7 D 3 1 1 / 7 8 ( 2 0 0 6 . 0 1 )

A 6 1 P 2 9 / 0 0 ( 2 0 0 6 . 0 1 )

A 6 1 P 3 1 / 1 8 ( 2 0 0 6 . 0 1 )

A 6 1 P 2 5 / 2 8 ( 2 0 0 6 . 0 1 )

A 6 1 P 2 1 / 0 4 ( 2 0 0 6 . 0 1 )

A 6 1 P 1 / 1 4 ( 2 0 0 6 . 0 1 )

A 6 1 P 2 5 / 2 2 ( 2 0 0 6 . 0 1 )

A 6 1 P 2 5 / 0 6 ( 2 0 0 6 . 0 1 )

A 6 1 P 1 9 / 0 2 ( 2 0 0 6 . 0 1 )

20

A 6 1 P 1 1 / 0 6 ( 2 0 0 6 . 0 1 )

A 6 1 P 3 5 / 0 0 ( 2 0 0 6 . 0 1 )

A 6 1 P 2 5 / 2 4 ( 2 0 0 6 . 0 1 )

A 6 1 P 3 / 1 0 ( 2 0 0 6 . 0 1 )

A 6 1 P 2 5 / 0 8 ( 2 0 0 6 . 0 1 )

A 6 1 P 2 7 / 0 6 ( 2 0 0 6 . 0 1 )

A 6 1 P 1 / 0 8 ( 2 0 0 6 . 0 1 )

A 6 1 P 2 5 / 0 2 ( 2 0 0 6 . 0 1 )

A 6 1 P 2 5 / 1 6 ( 2 0 0 6 . 0 1 )

A 6 1 K 3 1 / 3 5 2 ( 2 0 0 6 . 0 1 )

30

A 6 1 K 3 1 / 0 5 ( 2 0 0 6 . 0 1 )

C 0 7 C 2 9 / 0 9 ( 2 0 0 6 . 0 1 )

C 0 7 C 3 9 / 2 3 ( 2 0 0 6 . 0 1 )

C 0 7 F 7 / 1 8 ( 2 0 0 6 . 0 1 )

C 0 7 C 3 0 9 / 7 3 ( 2 0 0 6 . 0 1 )

C 0 7 B 6 1 / 0 0 ( 2 0 0 6 . 0 1 )

【 F I 】

C 0 7 C 3 0 9 / 6 5

C 0 7 D 3 1 1 / 7 8 C S P

A 6 1 P 2 9 / 0 0

40

A 6 1 P 3 1 / 1 8

A 6 1 P 2 5 / 2 8

A 6 1 P 2 1 / 0 4

A 6 1 P 1 / 1 4

A 6 1 P 2 5 / 2 2

A 6 1 P 2 5 / 0 6

A 6 1 P 1 9 / 0 2

A 6 1 P 1 1 / 0 6

A 6 1 P 3 5 / 0 0

A 6 1 P 2 5 / 2 4

50

A 6 1 P 3 / 1 0  
 A 6 1 P 2 5 / 0 8  
 A 6 1 P 2 7 / 0 6  
 A 6 1 P 1 / 0 8  
 A 6 1 P 2 5 / 0 2 1 0 1  
 A 6 1 P 2 5 / 1 6  
 A 6 1 K 3 1 / 3 5 2  
 A 6 1 K 3 1 / 0 5  
 C 0 7 C 2 9 / 0 9  
 C 0 7 C 3 9 / 2 3  
 C 0 7 F 7 / 1 8 W  
 C 0 7 C 3 0 9 / 7 3  
 C 0 7 B 6 1 / 0 0 3 0 0

10

## 【手続補正書】

【提出日】令和5年5月15日(2023.5.15)

## 【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

20

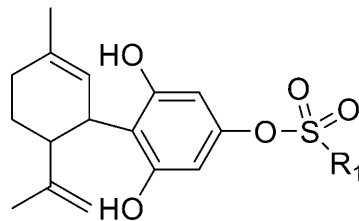
【補正の内容】

【特許請求の範囲】

【請求項1】

式(I)：

【化1】



(I)

30

の化合物であって、式中、

R<sub>1</sub>は、水素原子、-OR<sup>c</sup>、-NR<sup>c</sup><sub>2</sub>、フルオロ置換(C<sub>1</sub>~C<sub>20</sub>)アルキル、(C<sub>1</sub>~C<sub>20</sub>)アルキル基、(C<sub>2</sub>~C<sub>20</sub>)アルケニル基、(C<sub>2</sub>~C<sub>20</sub>)アルキニル基、(C<sub>3</sub>~C<sub>20</sub>)シクロアルキル基、(C<sub>6</sub>~C<sub>14</sub>)アリール基、または(C<sub>5</sub>~C<sub>14</sub>)ヘテロアリール基を表し、後者6つの基はそれぞれ、1つ以上のハロゲン原子、-(C<sub>1</sub>~C<sub>20</sub>)アルキル、(C<sub>2</sub>~C<sub>20</sub>)アルケニル基、(C<sub>2</sub>~C<sub>20</sub>)アルキニル基、-OR<sup>d</sup>、または-NR<sup>d</sup><sub>2</sub>で置換されていてもよく、R<sup>c</sup>およびR<sup>d</sup>は、独立的に、または同時に、水素、(C<sub>1</sub>~C<sub>20</sub>)アルキル、(C<sub>2</sub>~C<sub>20</sub>)アルケニル、または(C<sub>2</sub>~C<sub>20</sub>)アルキニルである、

40

化合物、およびその任意の立体異性体または許容される塩。

【請求項2】

R<sub>1</sub>は、水素原子、フルオロ置換(C<sub>1</sub>~C<sub>20</sub>)アルキル、(C<sub>1</sub>~C<sub>20</sub>)アルキル基、(C<sub>2</sub>~C<sub>20</sub>)アルケニル基、(C<sub>2</sub>~C<sub>20</sub>)アルキニル基、(C<sub>3</sub>~C<sub>20</sub>)シクロアルキル基、(C<sub>6</sub>~C<sub>14</sub>)アリール基、(C<sub>5</sub>~C<sub>14</sub>)ヘテロアリール基を表し、後者6つの基はそれぞれ、1つ以上のハロゲン原子、-(C<sub>1</sub>~C<sub>20</sub>)アルキル

50

基、(C<sub>2</sub>~C<sub>20</sub>)アルケニル基、(C<sub>2</sub>~C<sub>20</sub>)アルキニル基、-OR<sup>d</sup>、または-NR<sup>d</sup><sub>2</sub>で置換されていてもよく、R<sup>c</sup>およびR<sup>d</sup>は、独立的に、または同時に、水素、(C<sub>1</sub>~C<sub>20</sub>)アルキル、(C<sub>2</sub>~C<sub>20</sub>)アルケニル、または(C<sub>2</sub>~C<sub>20</sub>)アルキニルである、請求項1に記載の式(I)の化合物。

【請求項3】

R<sub>1</sub>は、水素原子、フルオロ置換(C<sub>1</sub>~C<sub>10</sub>)アルキル、(C<sub>1</sub>~C<sub>10</sub>)アルキル基、(C<sub>2</sub>~C<sub>10</sub>)アルケニル基、(C<sub>2</sub>~C<sub>10</sub>)アルキニル基、(C<sub>3</sub>~C<sub>10</sub>)シクロアルキル基、(C<sub>6</sub>~C<sub>10</sub>)アリール基、(C<sub>5</sub>~C<sub>10</sub>)ヘテロアリール基を表し、後者6つの基はそれぞれ、1つ以上のハロゲン原子(F、Cl、BrまたはI)、-(C<sub>1</sub>~C<sub>20</sub>)アルキル、(C<sub>2</sub>~C<sub>20</sub>)アルケニル基、または(C<sub>2</sub>~C<sub>20</sub>)アルキニル基で置換されていてもよい、請求項1または2に記載の式(I)の化合物。 10

【請求項4】

R<sub>1</sub>は、水素原子、フルオロ置換(C<sub>1</sub>~C<sub>6</sub>)アルキル、(C<sub>1</sub>~C<sub>6</sub>)アルキル基、(C<sub>2</sub>~C<sub>6</sub>)アルケニル基、(C<sub>2</sub>~C<sub>6</sub>)アルキニル基、(C<sub>3</sub>~C<sub>6</sub>)シクロアルキル基、(C<sub>6</sub>)アリール基、(C<sub>5</sub>~C<sub>6</sub>)ヘテロアリール基を表し、後者6つの基はそれぞれ、1つ以上のハロゲン原子、または-(C<sub>1</sub>~C<sub>20</sub>)アルキルで置換されていてもよい、請求項1~3のいずれか1項に記載の式(I)の化合物。

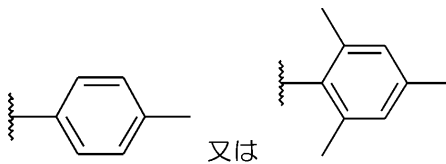
【請求項5】

R<sub>1</sub>は、水素原子、フルオロ置換(C<sub>1</sub>~C<sub>6</sub>)アルキル、(C<sub>1</sub>~C<sub>6</sub>)アルキル基、またはフェニル基を表し、後者2つの基はそれぞれ、1つ以上のハロゲン原子(F、Cl、BrまたはI)、または-(C<sub>1</sub>~C<sub>10</sub>)アルキルで置換されていてもよい、請求項1~4のいずれか1項に記載の式(I)の化合物。 20

【請求項6】

R<sub>1</sub>は、水素原子、-CF<sub>3</sub>、

【化2】

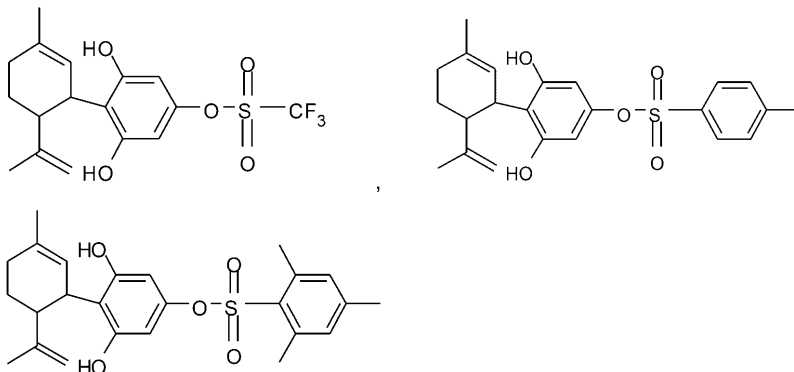


30

を表す、請求項1~5のいずれか1項に記載の式(I)の化合物。

【請求項7】

【化3】



40

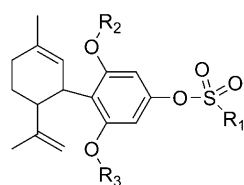
である、請求項1~6のいずれか1項に記載の式(I)の化合物。

【請求項8】

式(II)：

50

## 【化 4】



(II)

10

の化合物であって、式中、

$R_1$  は、請求項 1 ~ 7 のいずれか 1 項で定義される通りであり、

$R_2$  および  $R_3$  は、独立的に、または同時に、(  $C_1 \sim C_{20}$  ) アルキル基、(  $C_2 \sim C_{20}$  ) アルケニル基、(  $C_2 \sim C_{20}$  ) アルキニル基、(  $C_3 \sim C_{20}$  ) シクロアルキル基、- Si [ (  $C_1 \sim C_{20}$  ) アルキル ]<sub>3</sub> 基、(  $C_6 \sim C_{14}$  ) アリール基、または (  $C_5 \sim C_{14}$  ) ヘテロアリール基、またはアシル基 - C ( = O ) -  $R'$  を表し、 $R'$  は (  $C_1 \sim C_{20}$  ) アルキル基であり、各基はそれぞれ、1 つ以上のハロゲン原子 ( F、Cl、Br または I )、- (  $C_1 \sim C_{20}$  ) アルキル基、(  $C_2 \sim C_{20}$  ) アルケニル基、(  $C_2 \sim C_{20}$  ) アルキニル基、- OR<sup>d</sup>、または - NR<sup>d</sup><sub>2</sub> で置換されていてもよく、 $R^d$  は、独立的に、または同時に、水素、(  $C_1 \sim C_{20}$  ) アルキル、(  $C_2 \sim C_{20}$  ) アルケニル、または (  $C_2 \sim C_{20}$  ) アルキニルであり、

20

$R_2$  および / または  $R_3$  のアルキル基、アルケニル基、アルキニル基、シクロアルキル基、アリール基、ヘテロアリール基またはアシル基における炭素原子のうちの 1 つ以上は、可能な場合には 1 つ以上のハロゲン ( F、Cl、Br または I )、または - (  $C_1 \sim C_{20}$  ) アルキル基で置換されていてもよい、O、S、N、P および Si からなる群より選択されるヘテロ原子で置き換えられていてもよい、化合物、およびその任意の立体異性体または許容される塩。

## 【請求項 9】

$R_2$  および  $R_3$  は、独立的に、または同時に、(  $C_1 \sim C_{10}$  ) アルキル基、(  $C_2 \sim C_{10}$  ) アルケニル基、(  $C_2 \sim C_{10}$  ) アルキニル基、(  $C_3 \sim C_{10}$  ) シクロアルキル基、- Si [ (  $C_1 \sim C_{10}$  ) アルキル ]<sub>3</sub> 基、(  $C_6 \sim C_{10}$  ) アリール基、または (  $C_5 \sim C_{10}$  ) ヘテロアリール基、またはアシル基 - C ( = O ) -  $R'$  を表し、 $R'$  は (  $C_1 \sim C_{10}$  ) アルキル基であり、各基はそれぞれ、1 つ以上のハロゲン原子 ( F、Cl、Br または I )、- (  $C_1 \sim C_{10}$  ) アルキル基、(  $C_2 \sim C_{10}$  ) アルケニル基、(  $C_2 \sim C_{10}$  ) アルキニル基、- OR<sup>d</sup>、または - NR<sup>d</sup><sub>2</sub> で置換されていてもよく、 $R^d$  は、独立的に、または同時に、水素、(  $C_1 \sim C_{10}$  ) アルキル、(  $C_2 \sim C_{10}$  ) アルケニル、または (  $C_2 \sim C_{10}$  ) アルキニルであり、

30

$R_2$  および / または  $R_3$  のアルキル基、アルケニル基、アルキニル基、シクロアルキル基、アリール基、ヘテロアリール基またはアシル基における炭素原子のうちの 1 つ以上は、可能な場合には 1 つ以上のハロゲン ( F、Cl、Br または I )、または - (  $C_1 \sim C_{10}$  ) アルキル基で置換されていてもよい、O、S、N、P および Si からなる群より選択されるヘテロ原子で置き換えられていてもよい、請求項 8 に記載の式 ( I I ) の化合物。

40

## 【請求項 10】

$R_2$  および  $R_3$  は、独立的に、または同時に、(  $C_1 \sim C_6$  ) アルキル基、(  $C_2 \sim C_6$  ) アルケニル基、(  $C_2 \sim C_6$  ) アルキニル基、(  $C_3 \sim C_6$  ) シクロアルキル基、- Si [ (  $C_1 \sim C_6$  ) アルキル ]<sub>3</sub> 基、フェニル基、または (  $C_5 \sim C_6$  ) ヘテロアリール基、またはアシル基 - C ( = O ) -  $R'$  を表し、 $R'$  は (  $C_1 \sim C_6$  ) アルキル基であり、各基はそれぞれ、1 つ以上のハロゲン原子 ( F、Cl、Br または I )、- (  $C_1 \sim$

50

C<sub>6</sub>) アルキル基、(C<sub>2</sub>~C<sub>6</sub>) アルケニル基、(C<sub>2</sub>~C<sub>6</sub>) アルキニル基、-OR<sup>d</sup>、または-NR<sup>d</sup><sub>2</sub>で置換されていてもよく、R<sup>d</sup>は、独立的に、または同時に、水素、(C<sub>1</sub>~C<sub>6</sub>) アルキル、(C<sub>2</sub>~C<sub>6</sub>) アルケニル、または(C<sub>2</sub>~C<sub>6</sub>) アルキニルであり、

R<sub>2</sub> および / または R<sub>3</sub> のアルキル基、アルケニル基、アルキニル基、シクロアルキル基、アリール基、ヘテロアリール基またはアシル基における炭素原子のうちの一つ以上は、可能な場合には一つ以上のハロゲン(F、Cl、BrまたはI)、または-(C<sub>1</sub>~C<sub>6</sub>) アルキル基で置換されていてもよい、O、S、N、PおよびSiからなる群より選択されるヘテロ原子で置き換えられていてもよい、  
請求項8または9に記載の式(II)の化合物。 10

【請求項11】

R<sub>2</sub> および R<sub>3</sub> は、独立的に、または同時に、(C<sub>1</sub>~C<sub>6</sub>) アルキル基、-Si[(C<sub>1</sub>~C<sub>6</sub>) アルキル]<sub>3</sub>基、またはフェニル基を表す、請求項8~10のいずれか1項に記載の式(II)の化合物。

【請求項12】

R<sub>2</sub> および R<sub>3</sub> は、独立的に、または同時に、-Si[(C<sub>1</sub>~C<sub>6</sub>) アルキル]<sub>3</sub>基を表す、請求項8~11のいずれか1項に記載の式(II)の化合物。

【請求項13】

R<sub>2</sub> および R<sub>3</sub> は、独立的に、または同時に、-Si[(C<sub>1</sub>~C<sub>3</sub>) アルキル]<sub>3</sub>基を表す、請求項8~12のいずれか1項に記載の式(II)の化合物。 20

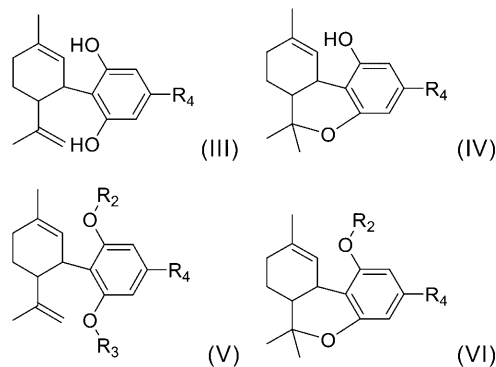
【請求項14】

R<sub>2</sub> および R<sub>3</sub> は、-Si(CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>基を表す、請求項8~13のいずれか1項に記載の式(II)の化合物。

【請求項15】

式(III)、式(IV)、式(V)または式(VI)：

【化5】



30

の化合物の調製のためのプロセスであって、

式中、R<sub>2</sub> および R<sub>3</sub> は、請求項1~14のいずれか1項で定義される通りであり、  
前記プロセスは、式(I)または式(II)の化合物を 40

(i) R<sub>4</sub>-B(OH)<sub>2</sub>、R<sub>4</sub>-B(OR)<sub>2</sub>またはR<sub>4</sub>-BF<sub>3</sub>K(ここで、Rは、H、(C<sub>1</sub>~C<sub>20</sub>) アルキル基、(C<sub>2</sub>~C<sub>20</sub>) アルケニル基、(C<sub>2</sub>~C<sub>20</sub>) アルキニル基、(C<sub>3</sub>~C<sub>20</sub>) シクロアルキル基、または(C<sub>6</sub>~C<sub>14</sub>) アリール基である)などのホウ素含有化合物；

(ii) R<sub>4</sub>-MgXなどのグリニャール化合物；または

(iii) R<sub>4</sub>-ZnXなどの亜鉛化合物；

と反応させることを含み、

Xはハロゲン原子であり、

R<sub>4</sub>は、水素原子、(C<sub>1</sub>~C<sub>20</sub>) アルキル基、(C<sub>2</sub>~C<sub>20</sub>) アルケニル基、(C 50

2 ~ C<sub>20</sub>) アルキニル基、(C<sub>3</sub> ~ C<sub>20</sub>) シクロアルキル基、(C<sub>6</sub> ~ C<sub>14</sub>) アリール基を表し、後者5つの基はそれぞれ、1つ以上のハロゲン原子(F、Cl、BrまたはI)、-(C<sub>1</sub> ~ C<sub>20</sub>) アルキル、(C<sub>2</sub> ~ C<sub>20</sub>) アルケニル基、(C<sub>2</sub> ~ C<sub>20</sub>) アルキニル基、(C<sub>6</sub> ~ C<sub>14</sub>) アリール基、-OR<sup>d</sup>、または-NR<sup>d</sup><sub>2</sub>で置換されていてもよく、R<sup>d</sup>は、独立的に、または同時に、水素、(C<sub>1</sub> ~ C<sub>20</sub>) アルキル、(C<sub>2</sub> ~ C<sub>20</sub>) アルケニル、または(C<sub>2</sub> ~ C<sub>20</sub>) アルキニルである、プロセス。

【請求項16】

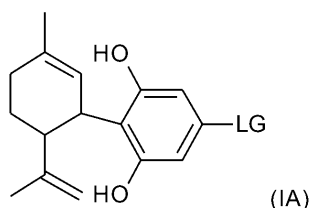
式(III)、式(IV)、式(V)または式(VI)の化合物が、純粋な異性体であるか、異性体の混合物である、請求項15に記載のプロセス。

10

【請求項17】

式(IA)：

【化6】



20

の化合物であって、式中、LGは脱離基である、化合物。

【請求項18】

前記脱離基は、スルホネート基、ハライド基、またはボロネート基である、請求項17に記載の化合物。

【請求項19】

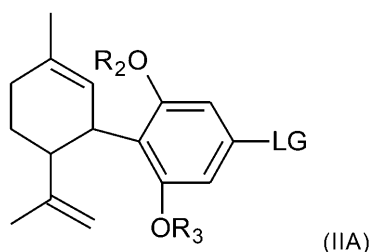
前記脱離基は、トリフレート基、トシレート基またはメシレート基である、請求項17に記載の化合物。

【請求項20】

式(IIA)：

30

【化7】



の化合物であって、式中、LGは脱離基であり、R<sub>2</sub>およびR<sub>3</sub>は、請求項8 ~ 15のいずれか1項で定義される通りである、化合物。

40

【請求項21】

LGが、

(i) スルホネート、ハライド、またはボロネートなどのアニオン性基；

(ii) MがLi、Mg、Zn、Sn、B、またはSiであり、Xがハロ、OH、-OR、アルキル、アリールであり、nが0 ~ 3である、MX<sub>n</sub>；

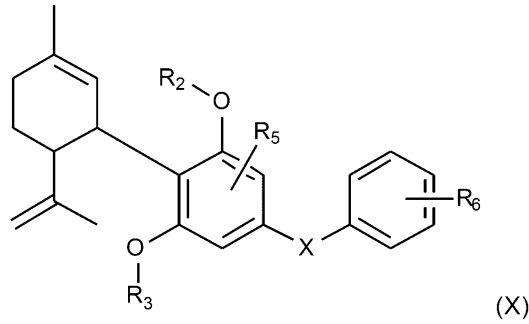
である、請求項20に記載の化合物。

【請求項22】

式(X)：

50

## 【化 8】



10

の化合物であって、式中、

$R_2$  および  $R_3$  は、独立的に、または同時に、 $(C_1 \sim C_{20})$  アルキル基、 $(C_2 \sim C_{20})$  アルケニル基、 $(C_2 \sim C_{20})$  アルキニル基、 $(C_3 \sim C_{20})$  シクロアルキル基、 $-Si[(C_1 \sim C_{20}) \text{アルキル}]_3$  基、 $(C_6 \sim C_{14})$  アリール基、または $(C_5 \sim C_{14})$  ヘテロアリール基、またはアシル基  $-C(=O)-R'$  を表し、 $R'$  は $(C_1 \sim C_{20})$  アルキル基であり、各基はそれぞれ、1つ以上のハロゲン原子 (F、Cl、Br または I)、 $-(C_1 \sim C_{20})$  アルキル基、 $(C_2 \sim C_{20})$  アルケニル基、 $(C_2 \sim C_{20})$  アルキニル基、 $-OR^d$ 、または  $-NR^d_2$  で置換されていてもよく、 $R^c$  および  $R^d$  は、独立的に、または同時に、水素、 $(C_1 \sim C_{20})$  アルキル、 $(C_2 \sim C_{20})$  アルケニル、または $(C_2 \sim C_{20})$  アルキニルであり、

20

$R_2$  および / または  $R_3$  のアルキル基、アルケニル基、アルキニル基、シクロアルキル基、アリール基、ヘテロアリール基またはアシル基における炭素原子のうち1つ以上は、可能な場合には1つ以上のハロゲン (F、Cl、Br または I)、または  $-(C_1 \sim C_{20})$  アルキル基で置換されていてもよい、O、S、N、P および Si からなる群より選択されるヘテロ原子で置き換えられていてもよく；

$R_5$  および  $R_6$  は、水素、ハロ、 $-OR^c$ 、 $-NR^c_2$ 、カルボキシレート ( $-COOR$ ；ここで R は H または  $(C_1 \sim C_6)$  アルキルである)、ホスフェート、サルフェート、 $(C_1 \sim C_{20})$  アルキル基、 $(C_2 \sim C_{20})$  アルケニル基、 $(C_2 \sim C_{20})$  アルキニル基、 $(C_3 \sim C_{20})$  シクロアルキル基、 $(C_6 \sim C_{14})$  アリール基、または $(C_5 \sim C_{14})$  ヘテロアリール基である1つ以上の置換基であり、ここで、 $R^c$  および  $R^d$  は、独立的に、または同時に、水素、 $(C_1 \sim C_{20})$  アルキル、 $(C_2 \sim C_{20})$  アルケニル、または $(C_2 \sim C_{20})$  アルキニルであり；

30

X は、 $(C_1 \sim C_{10})$  アルキレン) または  $(C_2 \sim C_{10})$  アルケニレン) である、化合物、ならびにその全ての立体異性体および塩。

## 【手続補正 2】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0043

【補正方法】変更

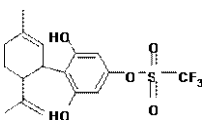
【補正の内容】

40

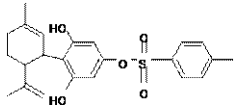
【0043】

一実施形態において、式 (I) の化合物は、

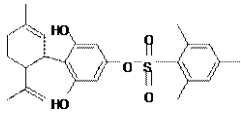
## 【化 1】



50



又は



である。

10

20

30

40

50