

【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25年12月19日(2013.12.19)

【公表番号】特表2013-510154(P2013-510154A)

【公表日】平成25年3月21日(2013.3.21)

【年通号数】公開・登録公報2013-014

【出願番号】特願2012-537924(P2012-537924)

【国際特許分類】

C 07 F	9/6571	(2006.01)
C 07 C	69/353	(2006.01)
C 07 C	233/47	(2006.01)
C 07 C	231/18	(2006.01)
C 07 C	67/303	(2006.01)
C 07 C	233/51	(2006.01)
C 07 C	233/11	(2006.01)
C 07 C	233/18	(2006.01)
C 07 C	233/13	(2006.01)
C 07 D	295/20	(2006.01)
C 07 F	15/00	(2006.01)
C 07 B	53/00	(2006.01)
C 07 B	61/00	(2006.01)

【F I】

C 07 F	9/6571	C S P
C 07 C	69/353	
C 07 C	233/47	
C 07 C	231/18	
C 07 C	67/303	
C 07 C	233/51	
C 07 C	233/11	
C 07 C	233/18	
C 07 C	233/13	
C 07 D	295/20	Z
C 07 F	15/00	B
C 07 B	53/00	B
C 07 B	61/00	3 0 0

【手続補正書】

【提出日】平成25年10月31日(2013.10.31)

【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

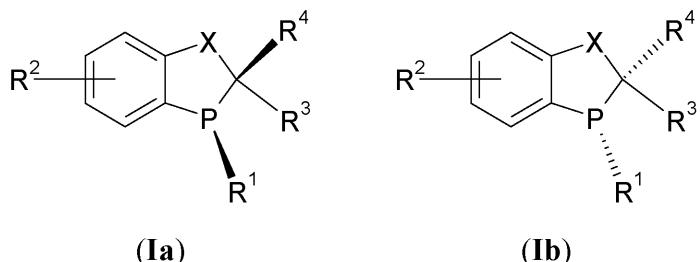
【補正の内容】

【特許請求の範囲】

【請求項1】

式(Ia)、(Ib)：

【化 1 8】



「式中：

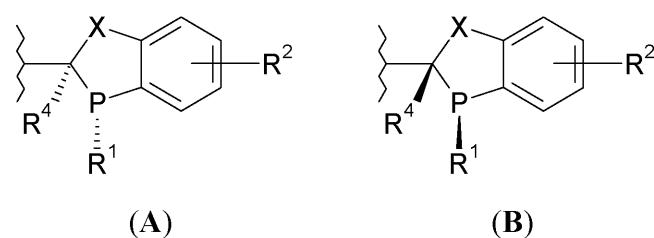
X は、O、S、又は -NR⁵ であり；

R^1 は、 $- (C_1 - C_6)$ アルキル、 $- CF_3$ 、 $- (C_3 - C_{10})$ カルボシクリル、 $- (5 \sim 11\text{員})$ ヘテロカルボシクリル、 $- (C_6 - C_{10})$ アリール、 $- (5 \sim 11\text{員})$ ヘテロアリール、又はフェロセニル（ここで、前記 R^1 の前記 $- (C_3 - C_{10})$ カルボシクリル、 $- (5 \sim 11\text{員})$ ヘテロカルボシクリル、 $- (C_6 - C_{10})$ アリール及び $- (5 \sim 11\text{員})$ ヘテロアリールは、 $- O(C_1 - C_6)$ アルキル、 $- (C_1 - C_6)$ アルキル、及び $- CF_3$ より独立して選択される 1 ~ 3 個の置換基で場合により置換されている）であり；

R^2 は、 H 、 $-O(C_1-C_6)$ アルキル、 $-(C_1-C_6)$ アルキル、 $-(C_3-C_{10})$ カルボシクリル、 $-(5-11\text{員})$ ヘテロカルボシクリル、 $-(C_6-C_{10})$ アリール、 $-(5-11\text{員})$ ヘテロアリール、 $-NR^5R^6$ 、又は $-SR^5$ （ここで、前記 R^2 の前記 $-(C_3-C_{10})$ カルボシクリル、 $-(5-11\text{員})$ ヘテロカルボシクリル、 $-(C_6-C_{10})$ アリール、及び $-(5-11\text{員})$ ヘテロアリールは、 $-O(C_1-C_6)$ アルキル、 $-(C_1-C_6)$ アルキル、及び $-CF_3$ より独立して選択される 1~3 個の置換基で場合により置換されている）であり：

R^3 は、 $-PR^7R^8$ 、 $-CH_2PR^7R^8$ 、 $-CH_2OPR^7R^8$ 、あるいは式(A)又は(B)の基:

【化 1 9】



(ここで、式(A)又は(B)の基のX、R¹及びR²は上記に定義のとおりであり、そして式(A)の基は式(Ia)の化合物にのみ結合し、式(B)の基は式(Ib)の化合物にのみ結合する)であり；

R^4 は、 H 、 $-(C_1-C_6)$ アルキル、 $-(C_3-C_6)$ シクロアルキル、 $-(3-6$ 員) ヘテロシクロアルキル、フェニル、(5~6員) ヘテロアリール、又は $-SiR_3$ (ここで、前記 R^4 の前記 $-(C_1-C_6)$ アルキルは、 $-O(C_1-C_6)$ アルキル、 $-(C_3-C_6)$ シクロアルキル、フェニル、及び $-(5-6$ 員) ヘテロアリールより独立して選択される1~3個の置換基で場合により置換されており、そして前記 R^4 の前記 $-(C_3-C_6)$ シクロアルキル、 $-(3-6$ 員) ヘテロシクロアルキル、フェニル、及び(5~6員) ヘテロアリールは、 $-O(C_1-C_6)$ アルキル、 $-(C_1-C_6)$ アルキル、及び $-CF_3$ より独立して選択される1~3個の置換基で場合により置換されている) であり；

R^5 及び R^6 は、それぞれ独立して、H、- (C₁ - C₆) アルキル、- CF₃、- (

$C_3 - C_{10}$)カルボシクリル、- (5~11員)ヘテロカルボシクリル、- ($C_6 - C_{10}$)アリール、又は- (5~11員)ヘテロアリール(ここで、前記R⁵及びR⁶の各- ($C_1 - C_6$)アルキル、- CF₃、- ($C_3 - C_{10}$)カルボシクリル、- (5~11員)ヘテロカルボシクリル、- ($C_6 - C_{10}$)アリール、及び- (5~11員)ヘテロアリールは、ハロ、- O($C_1 - C_6$)アルキル、- ($C_1 - C_6$)アルキル、及び- CF₃より独立して選択される1~3個の置換基で場合により独立して置換されている)であり;そして

R⁷及びR⁸は、それぞれ独立して、- ($C_1 - C_6$)アルキル、- CF₃、- ($C_3 - C_{10}$)カルボシクリル、- (5~11員)ヘテロカルボシクリル、- ($C_6 - C_{10}$)アリール、- (5~11員)ヘテロアリール、又はフェロセニル(ここで、前記R⁷及びR⁸の前記- ($C_3 - C_{10}$)カルボシクリル、- (5~11員)ヘテロカルボシクリル、- ($C_6 - C_{10}$)アリール及び- (5~11員)ヘテロアリールは、それぞれ、- O($C_1 - C_6$)アルキル、- ($C_1 - C_6$)アルキル、及び- CF₃より独立して選択される1~3個の置換基で場合により独立して置換されている)である]で示される化合物、又はその混合物。

【請求項2】

XがOである、請求項1に記載の式(Ia)、(Ib)の化合物、又はその混合物。

【請求項3】

R¹が、- CH₃、- CH₂CH₃、- CH(CH₃)₂、- C(CH₃)₃、- C(CH₂CH₃)₃、又は- C(CH₂CH₃)(CH₃)₂より選択される- ($C_1 - C_6$)アルキルである、先行する請求項のいずれかに記載の式(Ia)、(Ib)の化合物、又はその混合物。

【請求項4】

R²が、H、- CH₃又は- OCH₃である、先行する請求項のいずれかに記載の式(Ia)、(Ib)の化合物、又はその混合物。

【請求項5】

R⁴が-Hである、先行する請求項のいずれかに記載の式(Ia)、(Ib)の化合物、又はその混合物。

【請求項6】

R³が、- PR⁷R⁸又は式(A)の基である、先行する請求項のいずれかに記載の式(Ia)、(Ib)の化合物、又はその混合物。

【請求項7】

R¹が- C(CH₃)₃であり、R²が-H、- CH₃、- OCH₃、又はフェニルであり、そしてR³が- PR⁷R⁸である、請求項1に記載の式(Ia)、(Ib)の化合物、又はその混合物。

【請求項8】

R⁷及びR⁸が、それぞれ、- C(CH₃)₃であり、XがOである、請求項1又は7に記載の式(Ia)、(Ib)の化合物、又はその混合物。

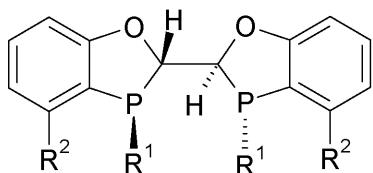
【請求項9】

R¹が- C(CH₃)₃であり、R²が-H、- CH₃、- OCH₃、又はフェニルであり;そしてR³が式(A)の基である、請求項1~6のいずれか一項に記載の式(Ia)の化合物。

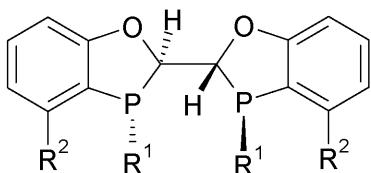
【請求項10】

式(IIa)、(IIb)：

【化20】



(IIa)



(IIb)

[式中、

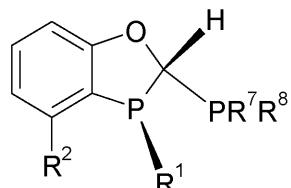
R^1 は、 $-CH(CH_3)_2$ 、 $-C(CH_3)_3$ 、 $-C(CH_2CH_3)(CH_3)_2$ 、シクロヘキシリル、1-アダマンチル、フェニル、オルト-トリル、3,5-キシリル、オルト-アニシリル、又はフェロセニルであり；そして

R^2 は、H、 $-OCH_3$ 、 $-CH_3$ 、 $-CF_3$ 、フェニル、又は $-N(CH_3)_2$ である]を有する、請求項1に記載の化合物、又はその混合物。

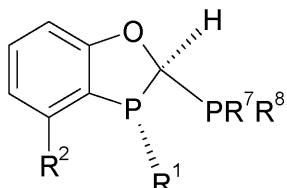
【請求項11】

式(IIIa)、(IIIb)：

【化21】



(IIIa)



(IIIb)

[式中、

R^1 は、 $-CH(CH_3)_2$ 、 $-C(CH_3)_3$ 、 $-C(CH_2CH_3)(CH_3)_2$ 、シクロヘキシリル、又は1-アダマンチルであり；

R^2 は、H、 $-OCH_3$ 、 $-CH_3$ 、 $-CF_3$ 、フェニル、又は $-N(CH_3)_2$ であり；そして

R^7 及び R^8 は、それぞれ、 $-C(CH_3)_3$ である]を有する、請求項1に記載の化合物、又はその混合物。

【請求項12】

以下：

(2S, 2'S, 3S, 3'S)-3, 3'-ジ-tert-ブチル-2, 2', 3, 3' -テトラヒドロ-2, 2' -ビベンゾ[d][1, 3]オキサホスホール、

(2S, 2'S, 3S, 3'S)-3, 3'-ジ-tert-ブチル-4, 4' -ジメトキシ-2, 2', 3, 3' -テトラヒドロ-2, 2' -ビベンゾ[d][1, 3]オキサホスホール、

(2S, 2'S, 3S, 3'S)-3, 3'-ジ-tert-ブチル-4, 4' -ジフェニル-2, 2', 3, 3' -テトラヒドロ-2, 2' -ビベンゾ[d][1, 3]オキサホスホール、

(2S, 2'S, 3S, 3'S)-3, 3'-ジ-tert-ブチル-4, 4' -ジメチル-2, 2', 3, 3' -テトラヒドロ-2, 2' -ビベンゾ[d][1, 3]オキサホスホール、

(2S, 3R)-3-tert-ブチル-2-(ジ-tert-ブチルホスフィノ-4-メトキシ)-2, 3-ジヒドロベンゾ[d][1, 3]オキサホスホール、及び

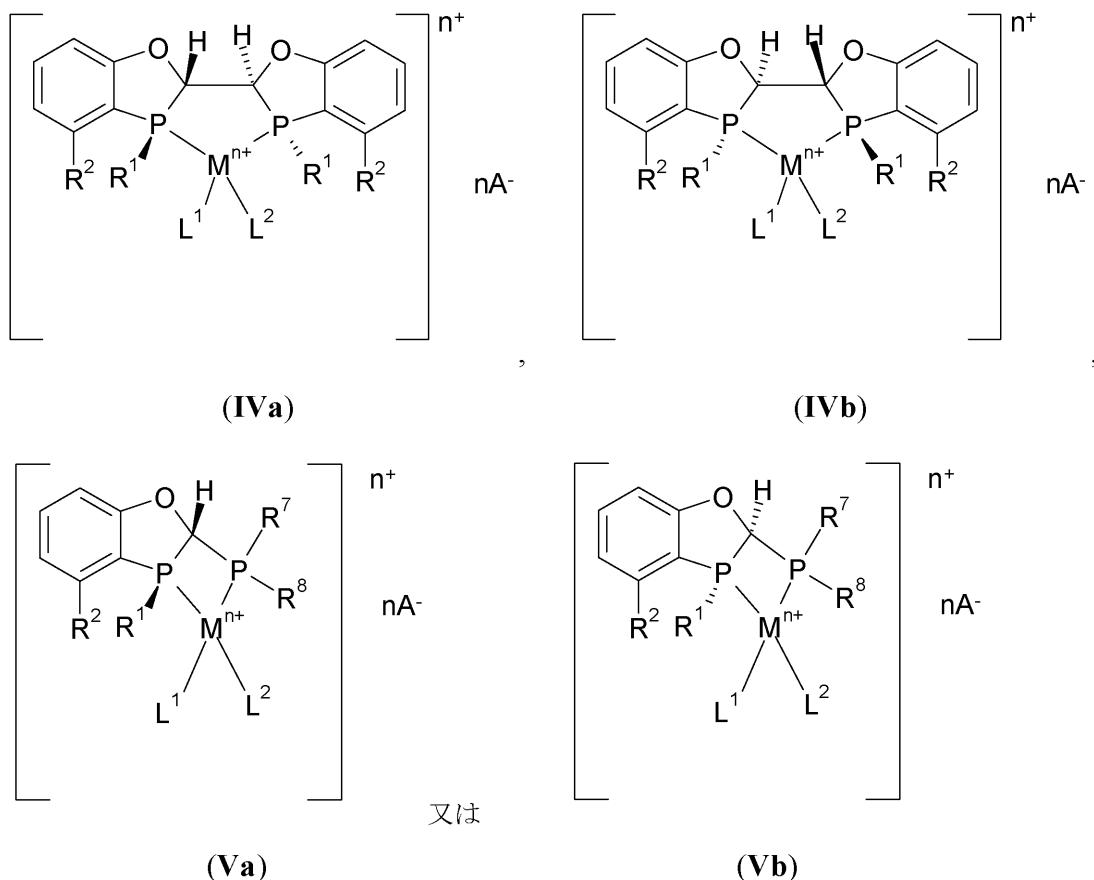
(2S, 3R)-3-tert-ブチル-2-(ジ-tert-ブチルホスフィノ)-2, 3-ジ

ヒドロベンゾ[*d*][1,3]オキサホスホール
より選択される、請求項1に記載の化合物。

【請求項13】

式(IVa)、(IVb)、(Va)又は(Vb)：

【化22】



[式中、

M は、Co、Ni、Pd、Pt、Cu、Ag、Au、Ru、Fe、Rh及びIrより選択される遷移金属であり；

A^- は対アニオンであり；

n は、遷移金属 M の酸化状態であり；

L^1 及び L^2 はそれぞれオレフィンであるか、あるいは L^1 及び L^2 は一緒になってジオレフィンを表し；そして

X、 R^1 、 R^2 、 R^7 、及び R^8 は、請求項1に定義のとおりである]で示される金属錯体。

【請求項14】

M がRhであり、 A^- が BF_4^- であり、そして n が1である、請求項13に記載の金属錯体。

【請求項15】

以下：

Rh[(2S,2'S,3S,3'S)-3,3'-ジ-tert-ブチル-2,2',3,3'-テトラヒドロ-2,2'-ビベンゾ[*d*][1,3]オキサホスホール(nbd)] BF_4 、

Rh[(2S,2'S,3S,3'S)-3,3'-ジ-tert-ブチル-4,4'-ジメトキシ-2,2',3,3'-テトラヒドロ-2,2'-ビベンゾ[*d*][1,3]オキサホスホール(nbd)] BF_4 、

R h [(2 S , 2 ' S , 3 S , 3 ' S) - 3 , 3 ' - ジ - tert - プチル - 4 , 4 ' - ジフエニル - 2 , 2 ' , 3 , 3 ' - テトラヒドロ - 2 , 2 ' - ビベンゾ [d] [1 , 3] オキサホスホール (n b d)] B F₄ 、

R h [(2 S , 2 ' S , 3 S , 3 ' S) - 3 , 3 ' - ジ - tert - プチル - 4 , 4 ' - ジメチル - 2 , 2 ' , 3 , 3 ' - テトラヒドロ - 2 , 2 ' - ビベンゾ [d] [1 , 3] オキサホスホール (n b d)] B F₄ 、

R h [(2 S , 3 R) - 3 - tert - プチル - 2 - (ジ - tert - プチルホスフィノ) - 4 - メトキシ - 2 , 3 - ジヒドロベンゾ [d] [1 , 3] オキサホスホール (n b d)] B F₄ 及び

R h [(2 S , 3 R) - 3 - tert - プチル - 2 - (ジ - tert - プチルホスフィノ) - 2 , 3 - ジヒドロベンゾ [d] [1 , 3] - オキサホスホール (n b d)] B F₄

より選択される、請求項13に記載の金属錯体。

【請求項 16】

炭素 - 炭素又は炭素 - ヘテロ原子二重結合を有する化合物の不斉水素化の実施方法であつて、前記炭素 - 炭素又は炭素 - ヘテロ原子二重結合を有する化合物を、請求項13 ~ 15 のいずれか一項に記載の触媒量の金属錯体の存在下で、水素と反応させることを含む方法。