

(12) 特許協力条約に基づいて公開された国際出願

(19) 世界知的所有権機関
国際事務局

(43) 国際公開日
2022年1月20日(20.01.2022)



(10) 国際公開番号

WO 2022/014638 A1

- (51) 国際特許分類:
C07D 487/04 (2006.01) C12N 5/09 (2010.01)
A61K 31/519 (2006.01) C12N 15/12 (2006.01)
A61P 35/00 (2006.01)
- (21) 国際出願番号: PCT/JP2021/026460
- (22) 国際出願日: 2021年7月14日(14.07.2021)
- (25) 国際出願の言語: 日本語
- (26) 国際公開の言語: 日本語
- (30) 優先権データ:
特願 2020-121520 2020年7月15日(15.07.2020) JP
- (71) 出願人: 大鵬薬品工業株式会社
(TAIHO PHARMACEUTICAL CO., LTD.) [JP/
JP]; 〒1018444 東京都千代田区神田錦町
1-27 Tokyo (JP).
- (72) 発明者: 中村 浩之 (NAKAMURA Hiroyuki);
〒3002611 茨城県つくば市大久保3 大鵬
薬品工業株式会社内 Ibaraki (JP). 山中 博
義 (YAMANAKA Hiroyoshi); 〒3002611 茨城県
つくば市大久保3 大鵬薬品工業株式会
社内 Ibaraki (JP). 浅井 隆宏 (ASAI Takahiro);
〒3002611 茨城県つくば市大久保3 大鵬薬
品工業株式会社内 Ibaraki (JP).
- (74) 代理人: 小林 浩, 外 (KOBAYASHI Hiroshi et
al.); 〒1040028 東京都中央区八重洲二丁目

8 番 7 号 福岡ビル 9 階 阿部・井窪・
片山法律事務所 Tokyo (JP).

- (81) 指定国(表示のない限り、全ての種類の国内保
護が可能): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ,
BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH,
CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ,
EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN,
HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, IT, JO, JP, KE, KG, KH,
KN, KP, KR, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY,
MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ,
NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT,
QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL,
ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG,
US, UZ, VC, VN, WS, ZA, ZM, ZW.
- (84) 指定国(表示のない限り、全ての種類の広域保
護が可能): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS,
MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM,
ZW), ユーラシア (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ,
TM), ヨーロッパ (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ,
DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT,
LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS,
SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM,
GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

(54) Title: CRYSTAL OF PYRIMIDINE COMPOUND

(54) 発明の名称: ピリミジン化合物の結晶

(57) Abstract: Provided are: a crystal of 7-((3R,5S)-1-acryloyl-5-methylpyrrolidin-3-yl)-4-amino-6-(cyclopropylethynyl)-N-((R)-1-phenylethyl)-7H-pyrrolo[2,3-d]pyrimidine-5-carboxamide (compound (I)); and a crystal of the compound (I) and an acid (a cocrystal or a crystal of a salt). A form-II crystal that is of the compound (I) and one equivalent of fumaric acid and that has, in a powder X-ray diffraction spectrum, a characteristic peak at three or more diffraction angles ($2\theta \pm 0.2^\circ$) selected from 5.5° , 6.8° , 9.3° , 13.4° , 15.3° , 16.3° , 18.5° , 19.8° , 22.0° , and 24.5° . A (freeform) form-II crystal that is of the compound (I) and that has, in a powder X-ray diffraction spectrum, a characteristic peak at three or more angles selected from 8.3° , 14.8° , 17.3° , 18.0° , 19.1° , 20.3° , 21.0° , 22.5° , 23.0° , and 26.2° . A (freeform) form-I crystal that is of the compound (I) and that has, in a powder X-ray diffraction spectrum, a characteristic peak at three or more angles selected from 9.9° , 11.7° , 13.2° , 17.7° , 18.1° , 18.8° , and 20.8° . A form-V crystal that is of the compound (I) and one equivalent of fumaric acid and that has, in a powder X-ray diffraction spectrum, a characteristic peak at four or more angles selected from 6.9° , 9.4° , 10.2° , 13.7° , 21.1° , 23.6° , and 26.5° . A form-I crystal that is of the compound (I) and one equivalent of fumaric acid and that has, in a powder X-ray diffraction spectrum, a characteristic peak at four or more angles selected from 6.4° , 10.3° , 12.8° , 15.0° , 20.7° , 23.4° , and 26.6° .

[続葉有]

添付公開書類：

- ― 国際調査報告（条約第21条(3)）
- ― 明細書の別個の部分として表した配列リスト（規則5.2(a)）

(57) 要約：7-((3R, 5S)-1-アクリロイル-5-メチルピロリジン-3-イル)-4-アミノ-6-(シクロプロピルエチニル)-N-((R)-1-フェニルエチル)-7H-ピロロ[2,3-d]ピリミジン-5-カルボキサミド（化合物（I））の結晶、その酸との結晶（塩の結晶又は共結晶）を提供する。粉末X線回折スペクトルにおいて、回折角（ $2\theta \pm 0.2^\circ$ ）が、 5.5° 、 6.8° 、 9.3° 、 13.4° 、 15.3° 、 16.3° 、 18.5° 、 19.8° 、 22.0° 及び 24.5° から選択される3つ以上に特徴的なピークを有する、化合物（I）の1当量のフマル酸とのII型結晶。粉末X線回折スペクトルにおいて、 8.3° 、 14.8° 、 17.3° 、 18.0° 、 19.1° 、 20.3° 、 21.0° 、 22.5° 、 23.0° 及び 26.2° から選択される3つ以上に特徴的なピークを有する、化合物（I）の（フリー体）II型結晶。粉末X線回折スペクトルにおいて、 9.9° 、 11.7° 、 13.2° 、 17.7° 、 18.1° 、 18.8° 及び 20.8° から選択される3つ以上に特徴的なピークを有する、化合物（I）の（フリー体）I型結晶。粉末X線回折スペクトルにおいて、 6.9° 、 9.4° 、 10.2° 、 13.7° 、 21.1° 、 23.6° 及び 26.5° から選択される4つ以上に特徴的なピークを有する、化合物（I）の1当量のフマル酸とのV型結晶。粉末X線回折スペクトルにおいて、 6.4° 、 10.3° 、 12.8° 、 15.0° 、 20.7° 、 23.4° 及び 26.6° から選択される4つ以上に特徴的なピークを有する、化合物（I）の1当量のフマル酸とのI型結晶。