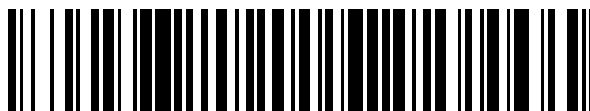


19



OFICINA ESPAÑOLA DE
PATENTES Y MARCAS

ESPAÑA



11 Número de publicación: **2 618 255**

51 Int. Cl.:

C12P 7/64 (2006.01)

C12P 7/62 (2006.01)

C07C 68/06 (2006.01)

C07C 69/96 (2006.01)

12

TRADUCCIÓN DE PATENTE EUROPEA

T3

86 Fecha de presentación y número de la solicitud internacional: **16.02.2009 PCT/JP2009/052586**

87 Fecha y número de publicación internacional: **20.08.2009 WO2009102069**

96 Fecha de presentación y número de la solicitud europea: **16.02.2009 E 09710722 (1)**

97 Fecha y número de publicación de la concesión europea: **07.12.2016 EP 2253710**

54 Título: **Compuesto de carbonato asimétrico y procedimiento para preparar el mismo**

30 Prioridad:

14.02.2008 JP 2008032509
27.03.2008 JP 2008084171

45 Fecha de publicación y mención en BOPI de la traducción de la patente:
21.06.2017

73 Titular/es:

UBE INDUSTRIES, LTD. (100.0%)
1978-96, Oaza Kogushi
Ube-shi, Yamaguchi 755-8633, JP

72 Inventor/es:

YAMAMOTO, YASUHITO;
OKADA, NAKO;
HIROTSU, KENJI;
MIYATA, HIROYUKI y
YAMAMOTO, YASUSHI

74 Agente/Representante:

FÚSTER OLAGUIBEL, Gustavo Nicolás

ES 2 618 255 T3

Aviso: En el plazo de nueve meses a contar desde la fecha de publicación en el Boletín Europeo de Patentes, de la mención de concesión de la patente europea, cualquier persona podrá oponerse ante la Oficina Europea de Patentes a la patente concedida. La oposición deberá formularse por escrito y estar motivada; sólo se considerará como formulada una vez que se haya realizado el pago de la tasa de oposición (art. 99.1 del Convenio sobre Concesión de Patentes Europeas).

DESCRIPCIÓN

Compuesto de carbonato asimétrico y procedimiento para preparar el mismo

5 Campo técnico

La presente invención se refiere a un procedimiento para preparar un compuesto de carbonato asimétrico haciendo reaccionar un compuesto de carbonato simétrico y un compuesto de éster.

10 Técnica anterior

Un compuesto de carbonato asimétrico es útil, por ejemplo, como un perfume, un electrolito orgánico no acuoso, un disolvente y diversos tipos de reactivos de síntesis orgánica, etc. (por ejemplo, véanse los documentos de patente 1 a 5).

15 Como un método para obtener un compuesto de carbonato asimétrico, se ha conocido hasta ahora una reacción de transesterificación-desproporción de dos tipos de compuestos de carbonato simétricos en presencia de un catalizador heterogéneo (por ejemplo, véanse los documentos de patente 4 y 5). Sin embargo, en el documento de patente 4, por ejemplo, la reacción se lleva a cabo a alta temperatura durante un tiempo extremadamente largo, pero su rendimiento es relativamente bajo tal como el 48,8%, de modo que no puede decirse que sea un procedimiento de preparación industrialmente satisfactorio.

25 Además, puede sintetizarse un compuesto de carbonato asimétrico usando un compuesto de éster como material de partida. Por ejemplo, se ha conocido un método en el que se hacen reaccionar un compuesto de éster cíclico y un compuesto de alcohol en presencia de un ácido o una base, y el éster de ácido hidroxialcanoico resultante se hace reaccionar con un cloroformiato en presencia de una amina terciaria para obtener un compuesto de carbonato asimétrico (por ejemplo, véase el documento de patente 1 y el documento no de patente 1). Sin embargo, este método requiere muchas etapas de reacción, e implica problemas en la operación y seguridad puesto que usa un compuesto de haloformiato tal como un cloroformiato, etc., que tiene toxicidad.

30 Por otro lado, entre las lipasas que se han conocido generalmente como una hidrolasa, se ha usado la lipasa B de *Candida Antarctica* para sintetizar un compuesto de β -cetoéster que se ha transesterificado a partir de un compuesto β -cetoéster y un compuesto de alcohol (por ejemplo, véase el documento de patente 6).

35 M. Hacking *et al.*: "Lipase catalyzed reactions of aliphatic and arylaliphatic carbonic acid esters.", Journal of Molecular Catalysis B: Enzymatic, vol. 9, n.º 4-6, 2000, páginas 201-208, enseñan un método para producir un carbonato asimétrico haciendo reaccionar un carbonato simétrico y un alcohol en presencia de una lipasa derivada de *Candida Antarctica*.

40 Sin embargo, la reacción de un éster cíclico o un éster de ácido alifático inferior tal como un compuesto de acetato y un compuesto de carbonato simétrico procede en presencia de un catalizador de hidrolasa. A día de hoy, no hay ningún informe de que el compuesto objetivo de carbonato asimétrico pueda obtenerse mediante un procedimiento según la reivindicación 1.

45 [Documento de patente 1] JP S61-93141A

[Documento de patente 2] JP H10-338663A

[Documento de patente 3] JP 2007-268420A

50 [Documento de patente 4] JP 2000-344718A

[Documento de patente 5] JP 2001-2624A

55 [Documento de patente 6] Patente estadounidense n.º 6.642.035

[Documento no de patente 1] J. Org. Chem., 1988, vol. 53(5), 1064-1071

Divulgación de la invención**60 PROBLEMAS QUE VAN A SOLUCIONARSE MEDIANTE LA INVENCION**

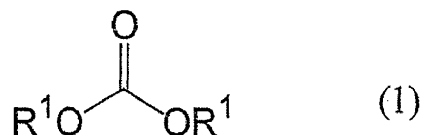
Un objeto de la presente invención es proporcionar un procedimiento para preparar un compuesto de carbonato asimétrico a partir de un compuesto de carbonato simétrico y un compuesto de éster con buen rendimiento, que también sea simple y sencillo, e industrialmente adecuado.

65

MEDIOS PARA SOLUCIONAR LOS PROBLEMAS

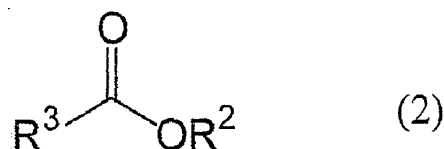
Los presentes inventores han encontrado que puede obtenerse un compuesto objetivo de carbonato asimétrico con buen rendimiento haciendo reaccionar un compuesto de carbonato simétrico y un compuesto de éster en presencia de un catalizador de hidrolasa, que también es simple y sencillo, e industrialmente adecuado, mediante lo cual se ha logrado la presente invención.

La realización 1 de la presente invención se refiere a un procedimiento para preparar un compuesto de carbonato asimétrico que comprende permitir que un compuesto de carbonato simétrico representado por la fórmula (1):



(en la que los R^1 son iguales, y representan grupos hidrocarburos monovalentes que pueden tener un/unos sustituyente(s))

reaccione con un compuesto de éster representado por la fórmula (2):



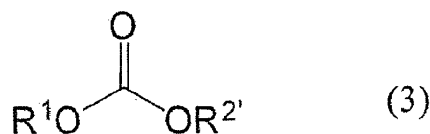
[en la que

R^2 y R^3 son independientes entre sí, y representan un grupo hidrocarburo monovalente que puede tener un/unos sustituyente(s) (en este caso, el grupo hidrocarburo de R^2 y R^3 puede estar interrumpido por un grupo de unión seleccionado del grupo que consiste en un enlace éter, un enlace tioéter, un enlace amida, un enlace carbonilo y un enlace éster), o

R^2 y R^3 se unen entre sí para formar Z, y Z representa un grupo hidrocarburo divalente que puede tener un/unos sustituyente(s) (en este caso, el grupo hidrocarburo de Z puede estar interrumpido por un grupo de unión seleccionado del grupo que consiste en un enlace éter, un enlace tioéter, un enlace amida, un enlace carbonilo y un enlace éster),

siempre que R^2 no sea igual que R^1 de la fórmula (1), y el número de enlaces éster contenidos en la fórmula (2a) sea 2 o menos en total]

en presencia de una hidrolasa, para obtener un compuesto de carbonato asimétrico representado por la fórmula (3):



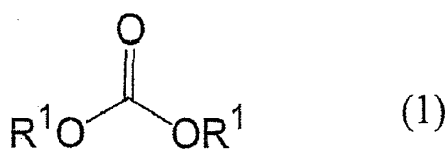
(en la que

R^1 es tal como se definió anteriormente, y

$\text{R}^{2'}$ es R^2 ,

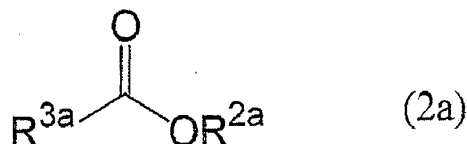
siempre que cuando R^2 y R^3 se unen entre sí para formar Z, $\text{R}^{2'}$ sea $-\text{Z}-\text{C}(=\text{O})-\text{O}-\text{R}^1$).

La realización 2 de la presente invención se refiere al procedimiento para preparar un compuesto de carbonato asimétrico de la realización 1, en el que el compuesto de carbonato simétrico representado por la fórmula (1):



(en la que los R^1 son iguales, y representan grupos hidrocarburos monovalentes que pueden tener un/unos sustituyente(s))

5 y un compuesto de éster representado por la fórmula (2a):

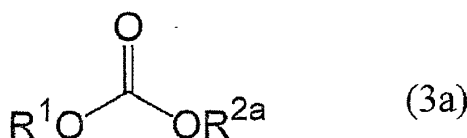


[en la que

10 R^{2a} y R^{3a} son independientes entre sí, y representan un grupo hidrocarburo monovalente que puede tener un/unos sustituyente(s) (en este caso, el grupo hidrocarburo de R^{2a} y R^{3a} puede estar interrumpido por un grupo de unión seleccionado del grupo que consiste en un enlace éter, un enlace tioéter, un enlace amida, un enlace carbonilo y un enlace éster),

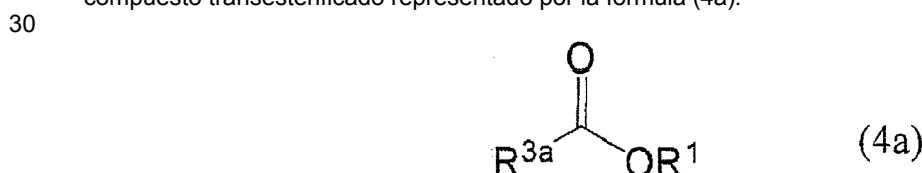
15 siempre que R^{2a} no sea igual que R^1 de la fórmula (1), y el número de enlaces éster contenidos en la fórmula (2a) sea 2 o menos en total]

20 se hacen reaccionar en presencia de una hidrolasa, para obtener un compuesto de carbonato asimétrico representado por la fórmula (3a):



(en la que R^1 y R^{2a} son lo mismo que se definió anteriormente).

25 La realización 3 de la presente invención se refiere al procedimiento para preparar un compuesto de carbonato asimétrico de la realización 2, en el que la reacción del compuesto de carbonato simétrico representado por la fórmula (1) y el compuesto de éster representado por la fórmula (2a) se lleva a cabo mientras que se retira un compuesto transesterificado representado por la fórmula (4a):



(en la que R^1 y R^{3a} son tal como se definen en la presente invención 2)

35 que es un subproducto de la reacción.

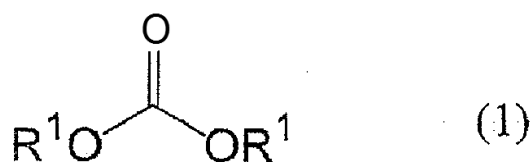
La realización 4 de la presente invención se refiere al procedimiento para preparar un compuesto de carbonato asimétrico de la realización 3, en el que la retirada del compuesto transesterificado se lleva a cabo a una presión de reacción de 0,13 kPa o más y menos de 101,3 kPa.

40 La realización 5 de la presente invención se refiere al procedimiento para preparar un compuesto de carbonato asimétrico según una cualquiera de las realizaciones 2 a 4, en el que R^1 y R^{2a} son diferentes entre sí, y cada uno representa un grupo alquilo lineal que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, un grupo alquilo ramificado que tiene de 3 a 6 átomos de carbono o un grupo cicloalquilo que tiene de 3 a 6 átomos de carbono.

45 La realización 6 de la presente invención se refiere al procedimiento para preparar un compuesto de carbonato asimétrico según una cualquiera de las realizaciones 2 a 5, en el que R^1 es metilo, etilo, n-propilo, isopropilo, n-butilo, s-butilo, isobutilo, t-butilo o bencilo.

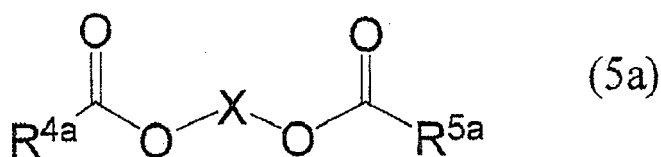
50 La realización 7 de la presente invención se refiere al procedimiento para preparar un compuesto de carbonato asimétrico según una cualquiera de las realizaciones 2 a 6, en el que R^1 es metilo o etilo.

La realización 8 de la presente invención se refiere al procedimiento para preparar un compuesto de carbonato asimétrico de la realización 1, en el que el compuesto de carbonato simétrico representado por la fórmula (1):



5 (en la que los R^1 son iguales, y representan grupos hidrocarburos monovalentes que pueden tener un/unos sustituyente(s))

y un compuesto de éster representado por la fórmula (5a):



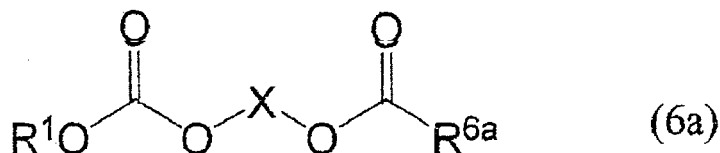
10

[en la que

15 R^{4a} y R^{5a} son independientes entre sí, y representan un grupo hidrocarburo monovalente que puede tener un/unos sustituyente(s),

20 X representa un grupo hidrocarburo divalente que puede tener un/unos sustituyente(s) (en este caso, el grupo hidrocarburo puede estar interrumpido por un grupo de unión seleccionado del grupo que consiste en un enlace éter, un enlace tioéter, un enlace amida y un enlace carbonilo)]

se hacen reaccionar en presencia de una hidrolasa, para obtener un compuesto de carbonato asimétrico representado por la fórmula (6a):



25

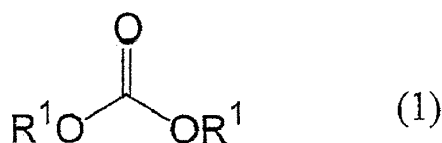
(en la que R^{6a} es R^{4a} o R^{5a} , y

R^1 , X, R^{4a} y R^{5a} son tal como se definieron anteriormente).

30 La realización 9 de la presente invención se refiere al procedimiento para preparar un compuesto de carbonato asimétrico de la realización 8, en el que R^{4a} y R^{5a} representa cada uno independientemente un grupo alquilo lineal que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, un grupo alquilo ramificado que tiene de 3 a 6 átomos de carbono o un grupo cicloalquilo que tiene de 3 a 6 átomos de carbono, y

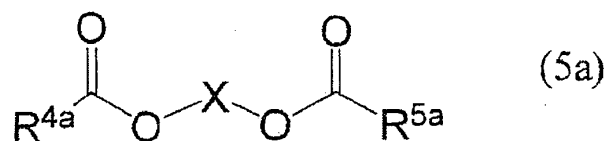
35 X es un grupo alquilenilo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono o un grupo alquenileno que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, o un grupo alquilenilo lineal que tiene de 2 a 6 átomos de carbono que está interrumpido por un enlace éter.

40 La realización 10 de la presente invención se refiere al procedimiento para preparar un compuesto de carbonato asimétrico de la realización 1, en el que el compuesto de carbonato simétrico representado por la fórmula (1):



45 (en la que los R^1 son iguales, y representan grupos hidrocarburos monovalentes que pueden tener un/unos sustituyente(s))

y un compuesto de éster representado por la fórmula (5a):

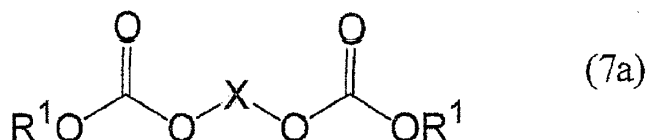


[en la que

5 R^{4a} y R^{5a} son independientes entre sí, y representan un grupo hidrocarburo monovalente que puede tener un/unos sustituyente(s),

10 X representa un grupo hidrocarburo divalente que puede tener un/unos sustituyente(s) (en este caso, el grupo hidrocarburo puede estar interrumpido por un grupo de unión seleccionado del grupo que consiste en un enlace éter, un enlace tioéter, un enlace amida y un enlace carbonilo)]

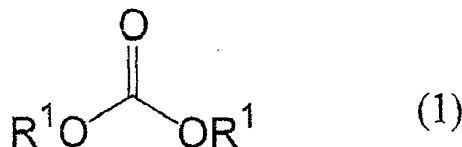
se hacen reaccionar en presencia de una hidrolasa, para obtener un compuesto de carbonato asimétrico representado por la fórmula (7a):



15

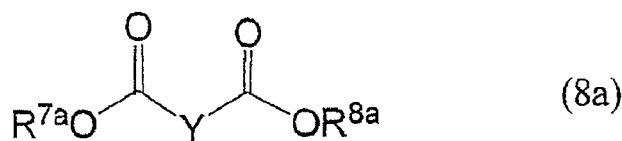
(en la que R^1 y X son lo mismo que se definió anteriormente).

20 La realización 11 de la presente invención se refiere al procedimiento para preparar un compuesto de carbonato asimétrico de la realización 1, en el que el compuesto de carbonato simétrico representado por la fórmula (1):



25 (en la que los R^1 son iguales, y representan grupos hidrocarburos monovalentes que pueden tener un/unos sustituyente(s))

y un compuesto de éster representado por la fórmula (8a):



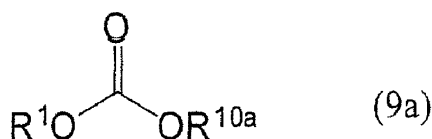
30

[en la que

35 R^{7a} y R^{8a} son independientes entre sí, y representan un grupo hidrocarburo monovalente que puede tener un/unos sustituyente(s),

Y representa un grupo hidrocarburo divalente que puede tener un/unos sustituyente(s) (en este caso, un grupo hidrocarburo puede estar interrumpido por un grupo de unión seleccionado del grupo que consiste en un enlace éter, un enlace tioéter, un enlace amida y un enlace carbonilo)]

40 se hacen reaccionar en presencia de una hidrolasa, para obtener un compuesto de carbonato asimétrico representado por la fórmula (9a):

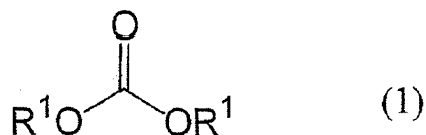


45 (en la que

R^{10a} es R^{7a} o R^{8a} , y

R^1 , R^{7a} y R^{8a} son tal como se definieron anteriormente).

- 5 La realización 12 de la presente invención se refiere al procedimiento para preparar un compuesto de carbonato asimétrico de la realización 1, en el que el compuesto de carbonato simétrico representado por la fórmula (1):



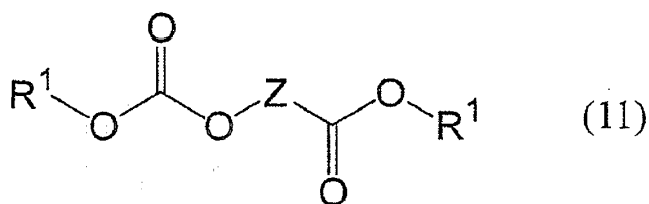
- 10 (en la que los R^1 son iguales, y representan grupos hidrocarburos monovalentes que pueden tener un/unos sustituyente(s))

y un compuesto de éster cíclico representado por la fórmula (10):



- 15 [en la que Z representa un grupo hidrocarburo divalente que puede tener un/unos sustituyente(s) (en este caso, un grupo hidrocarburo puede estar interrumpido por un grupo de unión seleccionado del grupo que consiste en un enlace éter, un enlace tioéter, un enlace amida, un enlace carbonilo y un enlace éster), siempre que el número de enlaces éster contenidos en la fórmula (10) sea 2 o menos en total]
- 20

se hacen reaccionar en presencia de una hidrolasa, para obtener un compuesto de carbonato asimétrico representado por la fórmula (11):



- 25 (en la que R^1 y Z son tal como se definieron anteriormente, los R^1 en la fórmula (11) son iguales entre sí).

- 30 La realización 13 de la presente invención se refiere al procedimiento para preparar un compuesto de carbonato asimétrico de la realización 12, en el que el compuesto de éster cíclico representado por la fórmula (10) es δ -valerolactona, β -propiolactona o ϵ -caprolactona.

- 35 La realización 14 de la presente invención se refiere al procedimiento para preparar un compuesto de carbonato asimétrico según una cualquiera de las realizaciones 1 a 13, en el que la hidrolasa es al menos una hidrolasa seleccionada del grupo que consiste en una proteasa, una esterasa y una lipasa.

La realización 15 de la presente invención se refiere al procedimiento para preparar un compuesto de carbonato asimétrico de la realización 14, en el que la hidrolasa es una lipasa.

- 40 La realización 16 de la presente invención se refiere al procedimiento para preparar un compuesto de carbonato asimétrico de la realización 15, en el que la hidrolasa es una lipasa originada a partir de *Candida Antarctica*.

La realización 17 de la presente invención se refiere al procedimiento para preparar un compuesto de carbonato asimétrico según una cualquiera de las realizaciones 1 a 16, en el que se usa un disolvente orgánico.

- 45 La realización 18 de la presente invención se refiere al procedimiento para preparar un compuesto de carbonato asimétrico de la realización 17, en el que el disolvente orgánico es al menos un disolvente orgánico seleccionado del grupo que consiste en ciclohexano, tolueno y t-butilmetiléter.

- 50 La realización 19 de la presente invención se refiere al procedimiento para preparar un compuesto de carbonato asimétrico según una cualquiera de las realizaciones 1 a 18, en el que una cantidad del compuesto de carbonato simétrico representado por la fórmula (1) es de 0,1 a 100 moles basándose en 1 mol del compuesto de éster

representado por la fórmula (2).

La realización 20 de la presente invención se refiere al procedimiento para preparar un compuesto de carbonato asimétrico según una cualquiera de las realizaciones 1 a 19, en el que la temperatura de reacción es de 0 a 130°C.

EFFECTOS DE LA INVENCION

Según la presente invención, puede prepararse un compuesto de carbonato asimétrico a partir de un compuesto de carbonato simétrico representado por la fórmula (1) y un compuesto de éster representado por la fórmula (2) con buen rendimiento, mediante el procedimiento simple y sencillo e industrialmente adecuado.

Además, en el procedimiento de preparación del compuesto de carbonato asimétrico de la presente invención, hay un caso en el que el compuesto transesterificado representado por la fórmula (4a), que es el subproducto cuando se usa el compuesto de éster representado por la fórmula (2a) como un material de partida, tiene un punto de ebullición menor que el del compuesto de carbonato simétrico y compuesto de éster que son materiales de partida, y el compuesto de carbonato asimétrico que es un producto. Por tanto, en la presente invención, también se ha descubierto un procedimiento para preparar un producto a la vez que se retira el compuesto transesterificado de subproducto representado por la fórmula (4a) del sistema de reacción. En el procedimiento adicional que comprende la etapa de retirada del compuesto transesterificado representado por la fórmula (4a), la reacción procede rápidamente, de modo que el compuesto objetivo de carbonato asimétrico puede obtenerse dentro de un tiempo de reacción más corto.

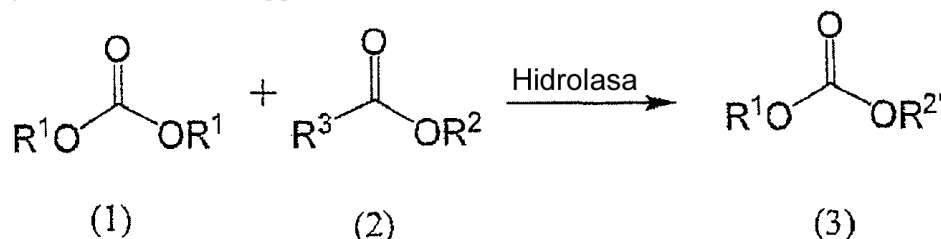
Según la presente invención, el compuesto de carbonato asimétrico se produce usando una hidrolasa, puede proporcionarse un producto químicamente más seguro que reduce cualquier migración de impurezas tales como un haluro o una sal de metal, etc., que podría producirse en el producto obtenido mediante el método de preparación convencional usando un compuesto de carbonato asimétrico. Es decir, cuando se usa el compuesto de carbonato asimétrico obtenido mediante el procedimiento de preparación de la presente invención, por ejemplo, para un electrolito orgánico no acuoso o un disolvente para producir materiales eléctricos y electrónicos, puede restringirse la disminución en las características eléctricas que va acompañada por un ión de halógeno o un ión de metal que se genera a partir del producto, de modo que el procedimiento de preparación de la presente invención es extremadamente excelente.

MEJOR MODO PARA LLEVAR A CABO LA INVENCION

Esquema de reacción [I]

En la presente invención, según la reacción del compuesto de carbonato representado por la fórmula (1) y el compuesto de éster representado por la fórmula (2) en presencia de una hidrolasa, se forma un compuesto de carbonato asimétrico representado por la fórmula (3) (esquema de reacción [I]).

Esquema de reacción [I]



(en el que R¹, R², R^{2'} y R³ son lo mismo que se definió anteriormente).

En el esquema de reacción [I], R¹ representa un grupo hidrocarburo monovalente que puede tener un/unos sustituyente(s). En el compuesto de carbonato simétrico representado por la fórmula (1), los R¹ son iguales.

Del grupo hidrocarburo de R¹ pueden mencionarse, por ejemplo, un grupo alquilo lineal que tiene de 1 a 20 átomos de carbono, tal como un grupo metilo, grupo etilo, grupo propilo, grupo butilo, grupo pentilo, grupo hexilo, etc.; un grupo alquilo ramificado que tiene de 3 a 20 átomos de carbono tal como grupo isopropilo, grupo isobutilo, etc.; un grupo cicloalquilo que tiene de 3 a 20 átomos de carbono tal como grupo ciclopropilo, grupo ciclobutilo, ciclohexilo, etc.; un grupo alqueno que tiene de 2 a 12 átomos de carbono tal como grupo vinilo, grupo alilo, grupo isopropanilo, etc.; un grupo alquino que tiene de 2 a 20 átomos de carbono tal como grupo etinilo, grupo propargilo, etc.; un grupo aralquilo que tiene de 7 a 20 átomos de carbono tal como grupo bencilo, grupo fenetilo, etc.; o un grupo arilo que tiene de 6 a 20 átomos de carbono tal como grupo fenilo, grupo naftilo y grupo bifenilo, etc. Adicionalmente, estos grupos contienen diversos tipos de isómeros.

Como grupo hidrocarburo de R^1 , pueden mencionarse preferiblemente un grupo alquilo lineal que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, un grupo alquilo ramificado que tiene de 3 a 6 átomos de carbono, un grupo cicloalquilo que tiene de 3 a 6 átomos de carbono, un grupo aralquilo que tiene de 7 a 20 átomos de carbono y grupo fenilo; más preferiblemente un grupo alquilo lineal que tiene de 1 a 4 átomos de carbono, un grupo alquilo ramificado que tiene de 3 a 6 átomos de carbono, un grupo cicloalquilo que tiene de 3 a 6 átomos de carbono, grupo bencilo y grupo fenilo; de manera particularmente preferible un grupo metilo, grupo etilo, grupo n-propilo, grupo isopropilo, grupo n-butilo, grupo t-butilo, grupo bencilo, grupo fenilo. Adicionalmente, estos grupos contienen diversos tipos de isómeros.

El grupo hidrocarburo de R^1 puede tener un/unos sustituyente(s), y como sustituyente(s) pueden mencionarse, por ejemplo, un átomo de halógeno (átomo de flúor, átomo de cloro, átomo de bromo, átomo de yodo), un grupo alcoxilo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono tal como grupo metoxilo, grupo etoxilo, grupo propoxilo, grupo butoxilo, etc., un grupo alquiltio que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, grupo alcoxilo, un grupo dialquilamino que está disustituido con grupos alquilo que tienen de 1 a 6 átomos de carbono tales como grupo dimetilamino, grupo dietilamino, grupo dipropilamino, etc., grupo ciano, grupo nitro y grupo acetilo tal como grupo acilo, etc. El/los sustituyente(s) puede(n) ser o bien 1 o bien un número plural.

R^1 es preferiblemente un grupo alquilo lineal que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, un grupo alquilo ramificado que tiene de 3 a 6 átomos de carbono, un grupo cicloalquilo que tiene de 3 a 6 átomos de carbono, un grupo aralquilo que tiene de 7 a 20 átomos de carbono, grupo fenilo; un grupo alquilo lineal que tiene de 1 a 6 átomos de carbono o un grupo alquilo ramificado que tiene de 3 a 6 átomos de carbono cada uno de los cuales está sustituido con un átomo de halógeno, grupo ciano, grupo nitro, un grupo alcoxilo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono o un grupo alquiltio que tiene de 1 a 6 átomos de carbono incluyendo grupo fluorometilo, grupo difluorometilo, grupo trifluorometilo, grupo clorometilo, grupo diclorometilo, grupo triclorometilo, grupo cianometilo, grupo nitrometilo, grupo fluoroetilo, grupo difluoroetilo, grupo trifluoroetilo, grupo perfluoroetilo, grupo cloroetilo, grupo dicloroetilo, grupo tricloroetilo, grupo cianoetilo, grupo nitroetilo, grupo metoxietilo, grupo etoxietilo, grupo t-butoxietilo, grupo metiltioetilo, grupo etiltioetilo, etc.; un grupo fenilo que está sustituido con un átomo de halógeno, grupo ciano, grupo nitro, un grupo alcoxilo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono o un grupo dialquilamino que está disustituido con grupos alquilo que tienen de 1 a 6 átomos de carbono incluyendo grupo fluorofenilo, grupo clorofenilo, grupo bromofenilo, grupo yodofenilo, grupo metoxifenilo, grupo dimetoxifenilo, grupo etoxifenilo, grupo t-butoxifenilo, grupo (dimetilamino)fenilo, grupo (dietilamino)fenilo, grupo nitrofenilo, grupo dinitrofenilo, grupo cianofenilo, etc.; un grupo aralquilo que tiene de 7 a 20 átomos de carbono que está sustituido con un átomo de halógeno, grupo ciano, grupo nitro o un grupo alcoxilo que tiene de 1 a 4 átomos de carbono incluyendo grupo fluorobencilo, grupo clorobencilo, grupo bromobencilo, grupo yodobencilo, grupo metoxibencilo, grupo dimetoxibencilo, grupo nitrobencilo, grupo dinitrobencilo y grupo cianobencilo, etc.

R^1 es más preferiblemente un grupo alquilo lineal que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, un grupo alquilo ramificado que tiene de 3 a 6 átomos de carbono, un grupo cicloalquilo que tiene de 3 a 6 átomos de carbono, grupo bencilo y grupo fenilo, grupo fluorometilo, grupo difluorometilo, grupo trifluorometilo, grupo cianometilo, grupo nitrometilo; grupo fluoroetilo, grupo trifluoroetilo, grupo tricloroetilo, grupo cianoetilo, grupo nitroetilo, grupo metoxietilo, grupo etoxietilo, grupo t-butoxietilo, grupo fluorofenilo, grupo clorofenilo, grupo bromofenilo, grupo yodofenilo, grupo metoxifenilo, grupo dimetoxifenilo, grupo etoxifenilo, grupo t-butoxifenilo, grupo nitrofenilo, grupo dinitrofenilo, grupo cianofenilo, grupo fluorobencilo, grupo clorobencilo, grupo bromobencilo, grupo yodobencilo, grupo metoxibencilo, grupo dimetoxibencilo, grupo nitrobencilo, grupo dinitrobencilo y grupo cianobencilo; de manera particularmente preferible grupo metilo, grupo etilo, grupo n-propilo, grupo isopropilo, grupo n-butilo, grupo s-butilo, grupo isobutilo, grupo t-butilo y grupo bencilo.

En el esquema de reacción [I], R^2 y R^3 son independientes entre sí, y representan un grupo hidrocarburo monovalente que puede tener un/unos sustituyente(s) (en este caso, un grupo hidrocarburo de R^2 y R^3 puede estar interrumpido por un grupo de unión seleccionado del grupo que consiste en un enlace éter, un enlace tioéter, un enlace amida, un enlace carbonilo y un enlace éster), o R^2 y R^3 se unen entre sí para formar Z, y Z es un grupo hidrocarburo divalente (en este caso, un grupo hidrocarburo de Z puede estar interrumpido por un grupo de unión seleccionado del grupo que consiste en un enlace éter, un enlace tioéter, un enlace amida, un enlace carbonilo y un enlace éster) que puede tener un/unos sustituyente(s), siempre que R^2 no sea igual que R^1 de la fórmula (1), y un/unos enlace(s) éster(s) contenido(s) en la fórmula (2) sea(n) 2 o menos.

Ejemplos específicos y ejemplos preferidos del grupo hidrocarburo de R^2 y R^3 son los mismos que los ejemplos específicos y ejemplos preferidos del grupo hidrocarburo de R^1 .

El grupo hidrocarburo de R^2 y R^3 puede tener un/unos sustituyente(s), y los ejemplos específicos y ejemplos preferidos del/de los sustituyente(s) son los mismos que los ejemplos específicos y ejemplos preferidos del/de los sustituyente(s) de R^1 .

Ejemplos específicos y ejemplos preferidos del grupo hidrocarburo que tiene un/unos sustituyente(s) de R^2 y R^3 son los mismos que los ejemplos específicos y ejemplos preferidos del grupo hidrocarburo que tiene un/unos sustituyente(s) de R^1 .

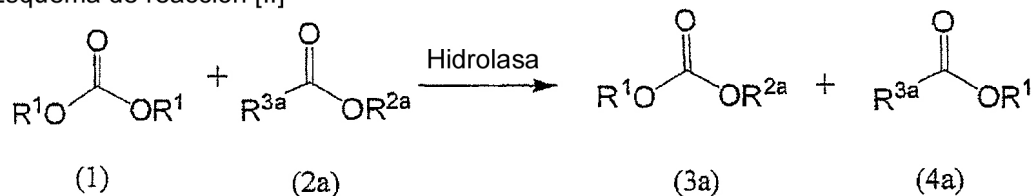
El grupo hidrocarburo de R^2 y R^3 puede estar interrumpido por un grupo de unión seleccionado del grupo que consiste en un enlace éter (-O-), un enlace tioéter (-S-), un enlace amida (-CONH-), un enlace carbonilo (-C(=O)-) y un enlace éster (-C(=O)-O-). En este caso, la expresión que puede estar interrumpido por un grupo de unión seleccionado del grupo que consiste en el grupo de unión significa que el/los grupo(s) de unión existe(n) de forma que interrumpe(n) el grupo hidrocarburo. El grupo hidrocarburo interrumpido por el grupo de unión puede tener además un/unos sustituyente(s). El grupo de unión puede ser 1 o un número plural. Dado que el/los enlace(s) éster contenido(s) en la fórmula (2) es/son 2 o menos, R^2 y R^3 nunca están interrumpidos por 2 o más enlaces éster, y cuando R^2 está interrumpido por el enlace éster, R^3 nunca está interrumpido por el enlace éster. Adicionalmente, estos grupos contienen diversos tipos de isómeros.

Cuando está interrumpido por un número plural de los grupos de unión, puede mencionarse un grupo hidrocarburo interrumpido por un enlace éster, y un enlace éter, un enlace tioéter, un enlace amida o un enlace carbonilo y, por ejemplo, un grupo alquilo lineal que tiene de 2 a 10 átomos de carbono o un grupo alquilo ramificado que tiene de 3 a 10 átomos de carbono interrumpido por enlace éster, y un enlace éter, un enlace tioéter, un enlace amida o un enlace carbonilo, y similares.

Esquema de reacción [II]

El compuesto de éster de fórmula (2) incluye el compuesto de éster de fórmula (2a). Según la reacción del compuesto de carbonato representado por la fórmula (1) y el compuesto de éster representado por la fórmula (2a) en presencia de una hidrolasa, se forman un compuesto de carbonato asimétrico representado por la fórmula (3a) y un compuesto transesterificado representado por la fórmula (4a) (esquema de reacción [II]).

Esquema de reacción [III]



(en el que R^1 , R^{2a} , R^{3a} son lo mismo que se definió anteriormente).

En el esquema de reacción [II], R^{2a} y R^{3a} son independientes entre sí, y representan un grupo hidrocarburo monovalente que puede tener un/unos sustituyente(s) (en este caso, un grupo hidrocarburo de R^2 y R^3 puede estar interrumpido por un grupo de unión seleccionado del grupo que consiste en un enlace éter, un enlace tioéter, un enlace amida, un enlace carbonilo y un enlace éster), siempre que R^{2a} no sea igual que R^1 de la fórmula (1), y el/los enlace(s) éster contenido(s) en la fórmula (2a) sea(n) 2 o menos en total.

El grupo hidrocarburo, el/los sustituyente(s) y el grupo hidrocarburo que tiene un/unos sustituyente(s) de R^{2a} son iguales que los ejemplos específicos y ejemplos preferidos de R^1 . El grupo hidrocarburo interrumpido por el grupo de unión de R^{2a} es igual que los ejemplos específicos y ejemplos preferidos mencionados en R^2 . El grupo hidrocarburo interrumpido por el grupo de unión puede tener además un/unos sustituyente(s).

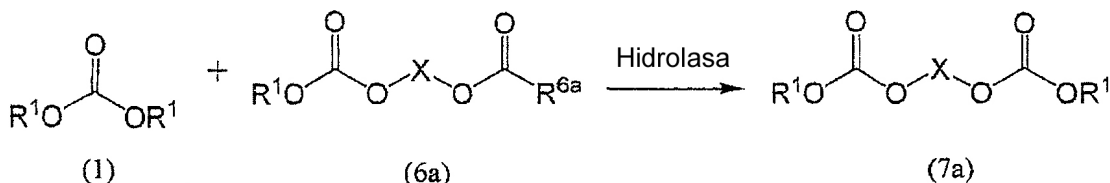
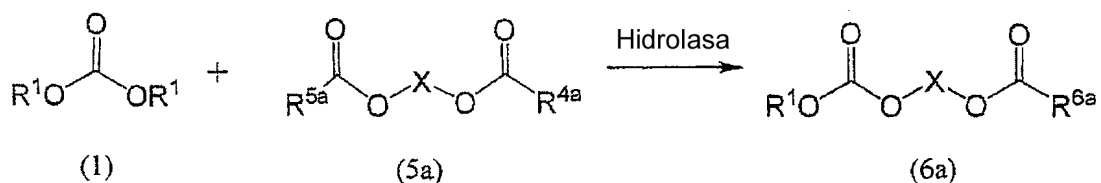
El grupo hidrocarburo, el/los sustituyente(s) y el grupo hidrocarburo que tiene un/unos sustituyente(s) de R^{3a} son iguales que los ejemplos específicos y ejemplos preferidos de R^1 . El grupo hidrocarburo interrumpido por el grupo de unión de R^{3a} es igual que los ejemplos específicos y ejemplos preferidos mencionados en R^3 . El grupo hidrocarburo interrumpido por el grupo de unión puede tener además un/unos sustituyente(s). En este caso, R^{3a} puede ser igual o diferente que R^1 de la fórmula (1).

Esquema de reacción [III] y [IV]

La fórmula (2) incluye la fórmula (5a). Según la reacción del compuesto de carbonato representado por la fórmula (1) y el compuesto de éster representado por la fórmula (5a) en presencia de una hidrolasa, se forma un compuesto de carbonato asimétrico representado por la fórmula (6a) (esquema de reacción [III]).

Adicionalmente, el compuesto de carbonato asimétrico formado representado por la fórmula (6a) se hace reaccionar adicionalmente con el compuesto representado por la fórmula (1) en presencia de una hidrolasa, también puede obtenerse un compuesto de carbonato asimétrico representado por la fórmula (7a). También se incluye el compuesto de carbonato asimétrico representado por la fórmula (6a) en la fórmula (2). Además, el compuesto de carbonato asimétrico formado representado por la fórmula (6a) puede hacerse reaccionar de manera continua sin aislamiento ni purificación, etc., con el compuesto de carbonato representado por la fórmula (1) y el compuesto de éster representado por la fórmula (5a) mediante lo cual puede obtenerse directamente el compuesto de carbonato asimétrico representado por la fórmula (7a).

Esquema de reacción [III]



(en el que R¹, R^{4a}, R^{5a}, X y R^{6a} son lo mismo que se definió anteriormente).

- 5 En el esquema de reacción [III], R^{4a} y R^{5a} son independientes entre sí, y representan un grupo hidrocarburo monovalente que puede tener un/unos sustituyente(s). R^{4a} y R^{5a} son preferiblemente iguales.

10 El grupo hidrocarburo, el/los sustituyente(s) y el grupo hidrocarburo que tiene un/unos sustituyente(s) de R^{4a} son iguales que los ejemplos específicos y ejemplos preferidos mencionados en R¹. Adicionalmente, R^{4a} puede ser igual o diferente que R¹ de la fórmula (1).

15 El grupo hidrocarburo, el/los sustituyente(s) y el grupo hidrocarburo que tiene un/unos sustituyente(s) de R^{5a} son iguales que los ejemplos específicos y ejemplos preferidos mencionados en R¹. Adicionalmente, R^{5a} puede ser igual o diferente que R¹ de la fórmula (1).

20 Como grupo hidrocarburo de X puede mencionarse, por ejemplo, un grupo alquileo lineal que tiene de 1 a 20 átomos de carbono tal como un grupo metileno, grupo etileno, grupo propileno, grupo butileno, grupo pentametileno, grupo hexametileno, etc.; un grupo alquileo ramificado que tiene de 3 a 20 átomos de carbono tal como un grupo tetrametileno, etc.; un grupo cicloalquileo que tiene de 3 a 20 átomos de carbono tal como un grupo ciclopropileno, grupo ciclobutileno, grupo ciclopentametileno, grupo ciclohexametileno, etc.; un grupo hidrocarburo que tiene de 5 a 24 átomos de carbono que contiene 1 o más grupos cicloalquileo (por ejemplo, grupo alquileo-cicloalquileo-alquileo, etc.); un grupo hidrocarburo insaturado que tiene de 2 a 20 átomos de carbono que contiene 1 o más enlaces insaturados de tipo etileno (por ejemplo, un grupo alquienileno que tiene de 2 a 20 átomos de carbono (por ejemplo, grupo vinileno), un grupo alcadienileno que tiene de 4 a 20 átomos de carbono (por ejemplo, grupo butadienileno)); un grupo hidrocarburo que tiene de 7 a 20 átomos de carbono que contiene un esqueleto aromático (por ejemplo, alquileo-arileno (por ejemplo, alquilen C₁ a C₁₄-fenileno), alquileo-arileno-alquileo (por ejemplo, alquilen C₁ a C₆-fenileno-alquileo C₁ a C₆ (por ejemplo, grupo xilileno)), y similares. Adicionalmente, estos grupos contienen diversos tipos de isómeros.

30 X es preferiblemente un grupo alquileo lineal que tiene de 1 a 20 átomos de carbono; un grupo alquileo ramificado que tiene de 3 a 6 átomos de carbono; un grupo cicloalquileo que tiene de 3 a 6 átomos de carbono; un grupo hidrocarburo insaturado que tiene de 2 a 12 átomos de carbono que contiene 1 o más enlaces insaturados de tipo etileno (por ejemplo, un grupo alquienileno que tiene de 2 a 6 átomos de carbono (por ejemplo, grupo vinileno), un grupo alcadienileno que tiene de 4 a 12 átomos de carbono (por ejemplo, grupo butadienileno)); un grupo hidrocarburo que tiene de 7 a 12 átomos de carbono que contiene un esqueleto aromático (por ejemplo, alquilenarileno (por ejemplo, alquilen C₁ a C₆-fenileno), alquileo-arileno-alquileo (por ejemplo, alquilen C₁ a C₃-fenileno-alquileo C₁ a C₃ (por ejemplo, grupo xilileno))).

40 Como sustituyente(s) para el grupo hidrocarburo de X, pueden mencionarse los mismos grupos del/los sustituyente(s) para el grupo hidrocarburo mencionado en R¹.

45 Como X que tiene un/unos sustituyente(s), puede mencionarse preferiblemente un grupo alquileo lineal que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, un grupo alquileo ramificado que tiene de 3 a 6 átomos de carbono, un grupo cicloalquileo que tiene de 3 a 6 átomos de carbono o un grupo alquienileno que tiene de 2 a 6 átomos de carbono cada uno de los cuales está sustituido con un/unos átomo(s) de halógeno; un grupo hidrocarburo insaturado que tiene de 2 a 12 átomos de carbono que contiene 1 o más enlaces insaturados de tipo etileno y sustituido con un/unos átomo(s) de halógeno; un grupo hidrocarburo que tiene de 7 a 12 átomos de carbono que contiene un esqueleto aromático; un grupo hidrocarburo que tiene de 7 a 12 átomos de carbono que contiene un esqueleto

aromático y sustituido por un/unos átomo(s) de halógeno.

El grupo hidrocarburo de X puede estar interrumpido por un grupo de unión seleccionado del grupo que consiste en un enlace éter, un enlace tioéter, un enlace amida y un enlace carbonilo. El grupo de unión puede ser 1 o un número plural.

Como X interrumpido por el grupo de unión, puede mencionarse preferiblemente lo siguiente:

un grupo hidrocarburo que comprende un grupo alquileo lineal que tiene de 2 a 6 átomos de carbono o un grupo alquileo ramificado que tiene de 3 a 6 átomos de carbono, o interrumpido por un enlace éter, grupo fenileno, grupo naftileno o grupo bifenileno y un grupo alquileo lineal que tiene de 1 a 6 átomos de carbono o un grupo alquileo ramificado que tiene de 3 a 6 átomos de carbono cada uno de los cuales está interrumpido por un enlace éter (por ejemplo, alquileo-O-arileno (por ejemplo, alquilen C₁ a C₆-O-fenileno));

un grupo alquileo lineal que tiene de 2 a 6 átomos de carbono o un grupo alquileo ramificado que tiene de 3 a 6 átomos de carbono, cada uno de los cuales está interrumpido por un enlace tioéter, o un grupo hidrocarburo que comprende a grupo fenileno, grupo naftileno o grupo bifenileno y un grupo alquileo lineal que tiene de 1 a 6 átomos de carbono o un grupo alquileo ramificado que tiene de 3 a 6 átomos de carbono, cada uno de los cuales está interrumpido por un enlace tioéter (por ejemplo, alquileo-S-arileno (por ejemplo, alquilen C₁ a C₆-S-fenileno));

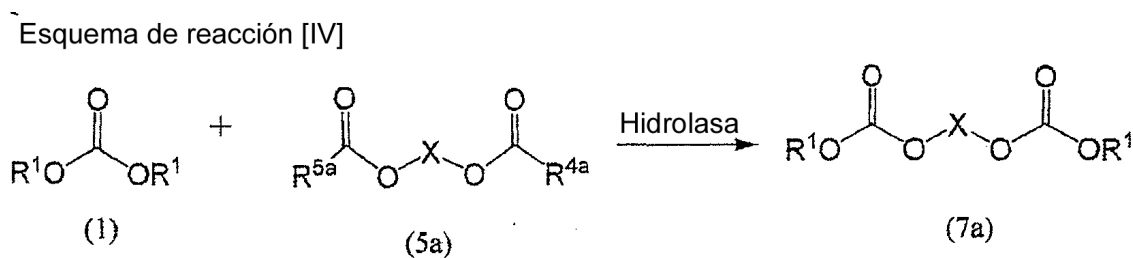
un grupo alquileo lineal que tiene de 2 a 6 átomos de carbono o un grupo alquileo ramificado que tiene de 3 a 6 átomos de carbono, cada uno de los cuales está interrumpido por un enlace amida, o un grupo hidrocarburo que comprende a grupo fenileno, grupo naftileno o grupo bifenileno y un grupo alquileo lineal que tiene de 1 a 6 átomos de carbono o un grupo alquileo ramificado que tiene de 3 a 6 átomos de carbono, cada uno de los cuales está interrumpido por un enlace amida (por ejemplo, alquileo-CONH-arileno, arileno-CONH-alquileo C₁ a C₆ (por ejemplo, alquilen C₁ a C₆-CONH-fenileno, fenileno-CONH-alquileo C₁ a C₆));

un grupo alquileo lineal que tiene de 2 a 6 átomos de carbono o un grupo alquileo ramificado que tiene de 3 a 6 átomos de carbono, cada uno de los cuales está interrumpido por un enlace carbonilo, o un grupo hidrocarburo que comprende un grupo fenileno, grupo naftileno o grupo bifenileno y un grupo alquileo lineal que tiene de 1 a 6 átomos de carbono o un grupo alquileo ramificado que tiene de 3 a 6 átomos de carbono, cada uno de los cuales está interrumpido por un enlace carbonilo (por ejemplo, alquileo-CO-arileno, arileno-CO-alquileo (por ejemplo, alquilen C₁ a C₆-CO-fenileno, fenileno-CO-alquileo C₁ a C₆)). Adicionalmente, estos grupos contienen diversos tipos de isómeros.

Como X se menciona más preferiblemente un grupo alquileo lineal que tiene de 1 a 20 átomos de carbono; un grupo alquileo ramificado que tiene de 3 a 6 átomos de carbono; un grupo cicloalquileo que tiene de 3 a 6 átomos de carbono; un grupo alquenoileno que tiene de 2 a 6 átomos de carbono o un grupo alquileo lineal que tiene de 1 a 6 átomos de carbono o un grupo alquileo ramificado que tiene de 3 a 6 átomos de carbono, cada uno de los cuales está interrumpido por un enlace éter, de manera particularmente preferible, un grupo alquileo lineal que tiene de 1 a 20 átomos de carbono; un grupo alquileo ramificado que tiene de 3 a 6 átomos de carbono; un grupo alquenoileno que tiene de 2 a 6 átomos de carbono o un grupo alquileo lineal que tiene de 2 a 6 átomos de carbono que está interrumpido por un enlace éter. Adicionalmente, estos grupos contienen diversos tipos de isómeros.

Esquema de reacción [IV]

Según la reacción del compuesto de carbonato representado por la fórmula (1) y el compuesto de éster representado por la fórmula (5a) en presencia de una hidrolasa, se forma un compuesto de carbonato asimétrico representado por la fórmula (7a) (esquema de reacción [IV]).



(en el que R¹, R^{4a}, R^{5a} y X son lo mismo que se definió anteriormente).

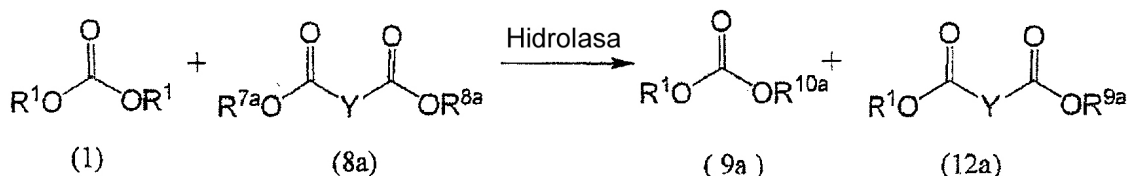
El compuesto de éster representado por la fórmula (5a) es igual que en el esquema de reacción [III].

Esquema de reacción [V]

El compuesto de fórmula (2) incluye el compuesto de fórmula (8a). Según la reacción del compuesto de carbonato representado por la fórmula (1) y el compuesto de éster representado por la fórmula (8a) en presencia de una hidrolasa, se forman un compuesto de carbonato asimétrico representado por la fórmula (9a) y un compuesto transesterificado representado por la fórmula (12a) (esquema de reacción [V]).

5

Esquema de reacción [V]



(en el que R^{9a} es R^{7a} o R^{8a}, y R¹, R^{7a}, R^{8a}, Y y R^{10a} son lo mismo que se definió anteriormente).

10 En el esquema de reacción [V], R^{7a} y R^{8a} son independientes entre sí, y representan un grupo hidrocarburo monovalente que puede tener un/unos sustituyente(s). R^{7a} y R^{8a} son preferiblemente lo mismo.

15 El grupo hidrocarburo, el/los sustituyente(s) y el grupo hidrocarburo que tiene un/unos sustituyente(s) de R^{7a} son iguales que los ejemplos específicos y ejemplos preferidos mencionados en R¹. Adicionalmente, R^{7a} puede ser igual o diferente que R¹ de la fórmula (1).

20 El grupo hidrocarburo, el/los sustituyente(s) y el grupo hidrocarburo que tiene un/unos sustituyente(s) de R^{8a} son iguales que los ejemplos específicos y ejemplos preferidos mencionados en R¹. Adicionalmente, R^{8a} puede ser igual o diferente que R¹ de la fórmula (1).

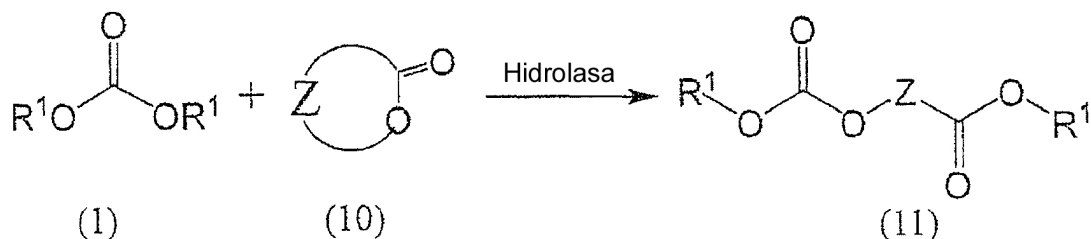
20

Con respecto a Y, se aplican los ejemplos específicos y ejemplos preferidos de X.

Esquema de reacción [VI]

25 El compuesto de fórmula (2) incluye el compuesto de fórmula (10). Según la reacción del compuesto de carbonato representado por la fórmula (1) y el compuesto de éster cíclico representado por la fórmula (10) en presencia de una hidrolasa, se forma un compuesto de carbonato asimétrico representado por la fórmula (11) (esquema de reacción [VI]).

Esquema de reacción [VI]



30

[en el que R¹ y Z son lo mismo que se definió anteriormente].

35 En el esquema de reacción [VI], como grupo hidrocarburo de Z puede mencionarse, por ejemplo, un grupo alquileo lineal que tiene de 1 a 12 átomos de carbono tal como un grupo metileno, grupo etileno, grupo propileno, grupo butileno, grupo pentametileno, grupo hexametileno, etc.; un grupo alquileo ramificado que tiene de 3 a 12 átomos de carbono tal como un grupo tetrametiletileno, etc.; un grupo cicloalquileo que tiene de 3 a 12 átomos de carbono tal como un grupo ciclopropileno, grupo ciclobutileno, grupo ciclopentametileno, grupo ciclohexametileno, etc.; un grupo alquilenilo que tiene de 2 a 12 átomos de carbono tal como un grupo vinileno, etc.; un grupo hidrocarburo insaturado que tiene de 2 a 12 átomos de carbono que da un compuesto tal como 2-pirrona como fórmula (10) (por ejemplo, un grupo alquilenilo que tiene de 2 a 6 átomos de carbono (por ejemplo, grupo vinileno), un grupo alcadienileno que tiene de 4 a 12 átomos de carbono (por ejemplo, grupo butadienileno); un grupo hidrocarburo que tiene de 7 a 12 átomos de carbono y que contiene un esqueleto aromático que da un compuesto tal como 3-isocromanona como fórmula (10) (por ejemplo, alquileo-arileno (por ejemplo, alquilen C₁ a C₆-fenileno), alquileo-arileno-alquileo (por ejemplo, alquilen C₁ a C₃-fenileno-alquileo C₁ a C₃ (por ejemplo, xilileno)). Adicionalmente, estos grupos contienen diversos tipos de isómeros.

45

El grupo hidrocarburo de Z puede estar interrumpido por un grupo de unión seleccionado del grupo que consiste en un enlace éter, un enlace tioéter, un enlace amida, un enlace carbonilo y un enlace éster. Además, el grupo

hidrocarburo de Z puede tener un/unos sustituyente(s). Como sustituyente(s) puede(n) mencionarse los mismos grupos que el/los sustituyente(s) en R¹.

5 Como compuesto de éster cíclico representado por la fórmula (10), pueden mencionarse lactonas tales como β -propiolactona, γ -butirolactona, δ -valerolactona, γ -valerolactona, ε -caprolactona, α,α -dimetil- β -propiolactona, β -etil- δ -valerolactona, α -metil-caprolactona, β -metil- ε -caprolactona, γ -metil- ε -caprolactona y enantolactona, etc.; glicólidos tales como 1,4-dioxan-2,5-diona y 3,6-dimetil-1,4-dioxan-2,5-diona, lactidas, etc., un dímero cíclico de ácido hidroxicarboxílico, etc.

10 Como compuesto de éster cíclico representado por la fórmula (10), puede mencionarse preferiblemente δ -valerolactona, ε -caprolactona, γ -butirolactona, β -propiolactona y 1,4-dioxan-2,5-diona, más preferiblemente δ -valerolactona, β -propiolactona y ε -caprolactona.

15 La cantidad del compuesto de carbonato simétrico representado por la fórmula (1) que va a usarse en la presente invención puede ser de 0,1 a 100 moles basándose en 1 mol del compuesto de éster representado por la fórmula (2), por ejemplo, puede ser de 0,5 a 70 moles, sobre todo, puede ser de 1 a 50 moles.

20 En el caso del esquema de reacción [II], la cantidad del compuesto de carbonato simétrico representado por la fórmula (1) es preferiblemente de 0,1 a 100 moles basándose en 1 mol del compuesto de éster representado por la fórmula (2a), además preferiblemente de 0,5 a 50 moles, de manera particularmente preferible de 1 a 10 moles.

25 En el caso de los esquemas de reacción [III] y [IV], la cantidad del compuesto de carbonato simétrico representado por la fórmula (1) es preferiblemente de 0,1 a 100 moles basándose en 1 mol del compuesto de éster representado por la fórmula (5a), además preferiblemente de 1 a 70 moles, de manera particularmente preferible de 5 a 50 moles.

En el caso del esquema de reacción [V], la cantidad del compuesto de carbonato simétrico representado por la fórmula (1) es preferiblemente de 0,1 a 100 moles basándose en 1 mol del compuesto de éster representado por la fórmula (8a), además preferiblemente de 0,5 a 50 moles, de manera particularmente preferible de 1 a 10 moles.

30 En el caso del esquema de reacción [VI], la cantidad del compuesto de carbonato simétrico representado por la fórmula (1) es preferiblemente de 0,1 a 100 moles basándose en 1 mol del compuesto de éster cíclico representado por la fórmula (7), además preferiblemente de 0,3 a 50 moles, de manera particularmente preferible de 0,5 a 30 moles, lo más preferiblemente de 0,5 a 10 moles.

35 Como hidrolasa que va usarse en la presente invención, puede mencionarse, por ejemplo, una proteasa, esterasa, lipasa, etc., preferiblemente una esterasa de hígado de cerdo (PLE), una lipasa de páncreas de cerdo (PPL), una lipasa de microorganismos que pueden aislarse de levaduras o bacterias, además preferiblemente una lipasa (por ejemplo, Amano PS (disponible de Amano enzima Co.) etc.) originada a partir de *Burkholderia cepacia* (*Pseudomonas cepacia*), una lipasa (por ejemplo, (Novozym 435 (disponible de NOVOZYMES)), etc.) originada a partir de *Candida Antarctica*, una lipasa (por ejemplo, Lipozyme RM IM (disponible de NOVOZYMES), etc.) originada a partir de *Rhizomucor Miehei*, una lipasa (Lipase TL) originada a partir de *Thermomyces Lanuginosus*, una lipasa (Lipase MM) originada a partir de *Mucor Miehei*, de manera particularmente preferible puede usarse una lipasa originada a partir de *Candida Antarctica*. Adicionalmente, estas hidrolasas pueden usarse como producto disponible comercialmente como forma natural o una enzima inmovilizada como tal, y pueden usarse solas o en la mezcla de dos o más.

45 La hidrolasa puede usarse como la forma natural disponible comercialmente o enzima inmovilizada tras someterla a tratamiento químico o tratamiento físico.

50 Como método de tratamiento químico o de tratamiento físico, puede mencionarse un método en el que, por ejemplo, se disuelve una hidrolasa en un tampón (puede estar presente un disolvente orgánico, si fuera necesario), y puede usarse como tal o tras agitación, liofilización, etc. Adicionalmente, la liofilización mencionada en el presente documento significa un método en el que, por ejemplo, se congela rápidamente una disolución acuosa o una sustancia que contiene un componente de agua a una temperatura del punto de congelación o menos, y se reduce la presión hasta una presión de vapor de agua del material congelado o menos para retirar el agua mediante sublimación de la misma mediante lo cual se seca la sustancia tal como se divulga en J. Am. Chem. Soc., 122(8), 1565-1571 (2000). Según el tratamiento, puede mejorarse una actividad de catalizador (reactividad o selectividad, etc.).

60 La cantidad de la hidrolasa que va a usarse en la presente invención puede ser del 1 al 90% en peso basándose en 1 g del compuesto de éster representado por la fórmula (2), por ejemplo, puede ser del 1 al 70% en peso, sobre todo, puede ser del 1 al 50% en peso.

65 En el caso del esquema de reacción [II], la cantidad de la hidrolasa es preferiblemente del 1 al 50% en peso cuando la cantidad del compuesto de éster representado por la fórmula (2a) es del 100% en peso, además preferiblemente

del 1 al 30% en peso, de manera particularmente preferible del 1 al 10% en peso.

En el caso del esquema de reacción [III], la cantidad de la hidrolasa es preferiblemente del 1 al 50% en peso cuando la cantidad del compuesto de éster representado por la fórmula (5a) es del 100% en peso, además preferiblemente del 1 al 30% en peso, de manera particularmente preferible del 1 al 10% en peso.

En el caso del esquema de reacción [IV], la cantidad de la hidrolasa es preferiblemente del 1 al 110% en peso cuando la cantidad del compuesto de éster representado por la fórmula (5a) es del 100% en peso, además preferiblemente del 5 al 70% en peso, de manera particularmente preferible del 10 al 60% en peso.

En el caso del esquema de reacción [V], la cantidad de la hidrolasa es preferiblemente del 1 al 50% en peso cuando la cantidad del compuesto de éster representado por la fórmula (8a) es del 100% en peso, además preferiblemente del 1 al 30% en peso, de manera particularmente preferible del 1 al 10% en peso.

En el caso del esquema de reacción [VI], la cantidad de la hidrolasa es preferiblemente del 1 al 60% en peso cuando la cantidad del compuesto de éster representado por la fórmula (7) es del 100% en peso, además preferiblemente del 1 al 30% en peso, de manera particularmente preferible del 1 al 25% en peso.

La reacción de la presente invención puede llevarse a cabo en ausencia de un disolvente, y puede llevarse a cabo en un disolvente orgánico. El disolvente orgánico que va a usarse en la reacción de la presente invención no está particularmente limitado siempre que no desactive la enzima, y se usa deseablemente un disolvente deshidratado.

Como disolvente orgánico que va a usarse en la reacción de la presente invención, puede mencionarse al menos uno o más seleccionados de, por ejemplo, hidrocarburos alifáticos tales como n-pentano, n-hexano, n-heptano, n-octano, ciclopentano, ciclohexano y cicloheptano, etc.; hidrocarburos aromáticos tales como benceno, tolueno y xileno, etc.; éteres tales como dietiléter, t-butilmetiléter, diisopropiléter, ciclopentilmetiléter, tetrahidrofurano y 1,4-dioxano, etc.; cetonas tales como acetona y metil etil cetona, etc.; nitrilos tales como acetonitrilo, propionitrilo, etc.

El disolvente orgánico es preferiblemente n-hexano, n-heptano, ciclopentano, ciclohexano, tolueno, diisopropiléter, t-butilmetiléter, ciclopentilmetiléter, tetrahidrofurano o acetonitrilo, más preferiblemente n-hexano, ciclohexano, tolueno, diisopropiléter, t-butilmetiléter, ciclopentilmetiléter o acetonitrilo, de manera particularmente preferible ciclohexano, tolueno o t-butilmetiléter. Adicionalmente, estos disolventes orgánicos pueden usarse solos o en la mezcla de dos o más tipos.

La cantidad del disolvente orgánico que va a usarse es preferiblemente de 200 ml o menos basándose en 1 g del compuesto de carbonato simétrico representado por la fórmula (1), además preferiblemente de 0,1 a 50 ml, de manera particularmente preferible de 0,3 a 30 ml, lo más preferiblemente de 0,5 a 15 ml.

La reacción de la presente invención puede llevarse a cabo mediante el método, por ejemplo, en presencia o ausencia de un disolvente orgánico, el compuesto de carbonato simétrico representado por la fórmula (1), el compuesto de éster representado por la fórmula (2), y una hidrolasa se mezclan y se hacen reaccionar bajo agitación, etc.

La temperatura de reacción en la reacción de la presente invención es preferiblemente de 0 a 130°C, además preferiblemente de 5 a 100°C, de manera particularmente preferible de 10 a 80°C. Además, la presión de reacción no está particularmente limitada, y se lleva a cabo preferiblemente a presión ambiental o a presión reducida.

La reacción de la presente invención es una denominada reacción reversible. En el caso del esquema de reacción [II], hay un caso en el que el compuesto transesterificado que se obtiene como subproducto representado por la fórmula (4a) tiene un punto de ebullición menor que los del compuesto de carbonato simétrico representado por la fórmula (1) y el compuesto de éster representado por la fórmula (2a) como materiales de partida, y el compuesto de carbonato asimétrico representado por la fórmula (3a) como producto de reacción. Por tanto, al llevar a cabo la reacción a la vez que se retira el compuesto transesterificado que se obtiene como subproducto representado por la fórmula (4a) fuera del sistema de reacción, la reacción procede rápidamente desplazando el equilibrio químico al lado del producto, mediante lo cual puede obtenerse más eficazmente el compuesto objetivo de carbonato asimétrico representado por la fórmula (3a), de manera que esto se menciona como una de las realizaciones preferidas de la presente invención.

Este método puede lograrse, por ejemplo, seleccionando opcionalmente los sustituyentes R^3 , R^{2a} y R^{3a} de manera que se obtiene el compuesto transesterificado como subproducto representado por la fórmula (4a) que tiene un punto de ebullición menor que los del compuesto de carbonato simétrico representado por la fórmula (1) y el compuesto de éster representado por la fórmula (2a) como materiales de partida, y que el del compuesto de carbonato asimétrico representado por la fórmula (3a) como un producto.

Más específicamente, en el esquema de reacción [II], cuando R^1 y R^{3a} son ambos grupos metilo, y R^{2a} es diferente de un grupo metilo, se espera que el compuesto transesterificado representado por la fórmula (4a) (acetato de

metilo, punto de ebullición; 57-58°C) formado por la reacción tenga un punto de ebullición menor que los del compuesto de carbonato simétrico de partida representado por la fórmula (1) y el compuesto de éster representado por la fórmula (2a). Por tanto, en el momento de la reacción, regulando opcionalmente una temperatura de reacción, y/o el grado reducido de presión (0,13 kPa o más y menos de 101,3 kPa (1,0 mmHg o más y menos de 760 mmHg), preferiblemente el grado de reducción de la presión (que excede 1,3 kPa, y menos de 101,3 kPa (que excede 10 mmHg y menos de 760 mmHg), es posible producir el compuesto objetivo mientras se retira selectivamente el compuesto transesterificado representado por la fórmula (4) al exterior del sistema de reacción. Como resultado, el equilibrio de la reacción se desplaza al lado del producto y la presente reacción puede proceder rápidamente, mediante lo cual puede obtenerse el compuesto de carbonato asimétrico representado por la fórmula (3a) que es el producto objetivo dentro de un tiempo de reacción más corto.

El/los aparato(s) de producción no está(n) particularmente limitado(s) y, por ejemplo, puede llevarse a cabo la reacción mediante un/unos aparato(s) de producción convencional(es) tal(es) como un vaso de reacción, aparato de calentamiento (enfriamiento), etc. Además, cuando el compuesto transesterificado representado por la fórmula (4a) va a retirarse del vaso de reacción, puede mencionarse preferiblemente, por ejemplo, un aparato de producción equipado con un dispositivo de destilación que tiene un dispositivo de rectificación, etc., y un dispositivo de recuperación del destilado, etc., más preferiblemente, además del dispositivo de destilación y dispositivo de recuperación anteriormente mencionados, etc., un aparato de producción equipado con un dispositivo que puede ajustar la presión de reacción.

Además, entro los destilados recuperados por el dispositivo de recuperación, pueden usarse de nuevo el compuesto transesterificado representado por la fórmula (4a) y compuestos de partida sin reaccionar para la reacción de la presente invención.

Además, el compuesto de carbonato asimétrico obtenido puede además purificarse mediante los métodos convencionales tales como destilación, separación de líquidos, extracción, cristalización, recristalización y cromatografía en columna, etc.

El compuesto de carbonato asimétrico obtenido mediante el procedimiento de preparación de la presente invención usando una hidrolasa es un producto químicamente más seguro, porque el producto está extremadamente menos contaminado por impurezas, tales como una sal de metal o a un haluro, etc. que lo que podría ocurrir en el método de preparación convencional.

Ejemplos

A continuación, se explica la presente invención más específicamente en referencia a los ejemplos, pero el alcance de la presente invención no está limitado por los mismos.

Con respecto al compuesto objetivo obtenido, se llevó a cabo la medición de pureza usando análisis de espectro de RMN, IR, etc., y otra cromatografía de gases. Adicionalmente, las condiciones analíticas de la cromatografía de gases son las siguientes.

Condiciones analíticas de cromatografía de gases;

Dispositivo analítico: GC-17A (fabricado por SHIMADZU)

Columna usada: DB-WAX (fabricada por J&W); 0,53 mm D.I. *30m, Espesor de la capa 1 µm

Temperatura analítica: Temperatura de partida: 40°C (mantenida durante 10 minutos),

Temperatura final 230°C (mantenida durante 31 minutos)

Velocidad de elevación de la temperatura: 10°C/min

Gas portador: helio, 11,13 ml/min

Puerto de inyección: sin fraccionamiento, 230°C

Detector: FID, 230°C

Ejemplo 1 (Esquema de reacción [II]): Síntesis de carbonato de n-butilmetilo)

En un aparato hecho de vidrio que tiene un volumen interior de 100 ml y equipado con un dispositivo de agitación, un termómetro y un condensador se cargaron 20,0 g (172 moles) de acetato de n-butilo, 72,5 ml (860 moles) de carbonato de dimetilo y 1,00 g de lipasa derivada de *Candida Antarctica* (Novozym 435 (nombre comercial); disponible de NOVOZYMES) y se mezclaron, y se hizo reaccionar la mezcla bajo agitación a 50°C durante 63 horas.

Tras completarse la reacción, se filtró la disolución de reacción, y se lavó el filtrado con 50 ml de carbonato de dimetilo. Tras condensar el filtrado, se purificó el condensado mediante destilación a presión reducida, para obtener 7,45 g de carbonato de n-butilmetilo (pureza (porcentaje de área mediante cromatografía de gases); 96,8%, rendimiento de aislamiento basado en acetato de n-butilo; 33%) como un líquido incoloro.

- 5 Las propiedades físicas del carbonato de n-butilmetilo obtenido fueron las siguientes.
- CI-EM (m/z); 13 3[M+1].
- 10 RMN ¹H (CDCl₃, δ (ppm)); 0,94 (3H, t, J=7,32Hz), 1,40 (2H, tc, J=7,32Hz), 1,66 (2H, tt, J=6,59Hz), 3,78 (3H, s), 4,14 (2H, t, J=6,59Hz).
- RMN ¹³C (CDCl₃, δ (ppm)); 13,7, 189, 30,7, 54,6, 68,0, 155,9.
- 15 EA; Calculado: C, 54,53%; H, 9,15%; O, 36,32%
- Hallado: C, 53,69%; H, 8,96%.

20 Ejemplo 2 (Esquema de reacción [II]: Síntesis de carbonato de n-butilmetilo)

- En un aparato hecho de vidrio que tiene un volumen interior de 20 ml y equipado con un dispositivo de agitación y un termómetro, se cargaron 1,00 g (8,61 mmoles) de acetato de n-butilo, 3,63 ml (43,1 mmoles) de carbonato de dimetilo y 50,7 mg de una lipasa derivada de *Candida Antarctica* (Novozym 435 (nombre comercial); disponible de NOVOZYMES) y se mezclaron, y se hizo reaccionar la mezcla bajo agitación a 30°C durante 33 horas. Tras completarse la reacción, se filtró la disolución de reacción obtenida, y se lavó el filtrado con 6 ml de dimetilsulfóxido. Cuando se analizó el filtrado obtenido mediante cromatografía de gases (método convencional interno), entonces se encontró que se formaron 0,836 g de carbonato de n-butilmetilo (rendimiento de reacción basado en acetato de n-butilo; 73%).
- 25

- 30 Ejemplo 3 (Esquema de reacción [II]: Síntesis de carbonato de n-butilmetilo)

- De la misma manera que en el ejemplo 2 excepto por el cambio de la cantidad de carbonato de dimetilo usado a 0,784 g (8,70 moles) y la adición de 3 ml de ciclohexano, se llevó a cabo el mismo procedimiento y se llevó a cabo la reacción a 30°C durante 24 horas. Tras completarse la reacción, se filtró la disolución de reacción obtenida, y se obtuvo el filtrado. Cuando se analizó el filtrado obtenido mediante cromatografía de gases (método convencional interno), entonces se encontró que se formaron 0,394 g de carbonato de n-butilmetilo (rendimiento de reacción basado en acetato de n-butilo; 35%).
- 35

40 Ejemplo 4 (Esquema de reacción [II]: Síntesis de carbonato de n-butilmetilo)

- De la misma manera que en el ejemplo 3 excepto por el uso de t-butilmetiléter en lugar de ciclohexano, se llevó a cabo el mismo procedimiento y se llevó a cabo la reacción a 30°C durante 24 horas. Tras completarse la reacción, se filtró la disolución de reacción obtenida. Cuando se analizó el filtrado obtenido mediante cromatografía de gases (método convencional interno), se encontró que se formaron 0,378 g de carbonato de n-butilmetilo (rendimiento de reacción; 33%).
- 45

Ejemplo 5 (Esquema de reacción [II]: Síntesis de carbonato de etilmetilo)

- En un aparato hecho de vidrio que tiene un volumen interior de 20 ml y equipado con un dispositivo de agitación y un termómetro, se cargaron 0,504 g (5,72 mmoles) de acetato de etilo, 4,78 ml (56,7 mmoles) de carbonato de dimetilo, y 25,0 mg de una lipasa derivada de *Candida Antarctica* ((Novozym 435 (nombre comercial); disponible de NOVOZYMES) y se mezclaron, y se hizo reaccionar la mezcla bajo agitación a 30°C durante 80 horas. Tras completarse la reacción, cuando se analizó la mezcla de reacción obtenida mediante cromatografía de gases (método convencional interno), entonces se encontró que se formaron 0,417 g de carbonato de etilmetilo (rendimiento de reacción basado en acetato de etilo; 70%).
- 50
- 55

Ejemplo 6 (Esquema de reacción [II]: Síntesis de carbonato de ciclohexilmetilo)

- En un aparato hecho de vidrio que tiene un volumen interior de 20 ml y equipado con un dispositivo de agitación y un termómetro, se cargaron 1,01 g (7,10 moles) de acetato de ciclohexilo, 2,96 ml (35,1 mmoles) de carbonato de dimetilo y 50,2 mg de una lipasa derivada de *Candida Antarctica* (Novozym 435 (nombre comercial); disponible de NOVOZYMES) y se mezclaron, y se hizo reaccionar la mezcla bajo agitación a 30°C durante 98 horas, añadiendo además 49,7 mg de la misma lipasa a la misma temperatura durante 98 horas, después de eso, añadiendo adicionalmente 49,9 mg de la misma a la mezcla y se hizo reaccionar la mezcla durante 160 horas. Tras completarse la reacción, se filtró la disolución de reacción obtenida y se lavó el filtrado con 40 ml de t-butilmetiléter. Se lavó el filtrado obtenido dos veces con 5 ml de disolución acuosa saturada de NaCl, se extrajo la fase orgánica y
- 60
- 65

se secó usando sulfato de magnesio anhidro. Cuando se condensó la fase orgánica obtenida, se obtuvieron 0,686 g de carbonato de ciclohexilmetilo (pureza (porcentaje de área mediante cromatografía de gases); 85,6%, rendimiento de aislamiento basado en acetato de ciclohexilo; 52%) como un líquido incoloro.

5 Las propiedades físicas del carbonato de ciclohexilmetilo obtenido son las siguientes.

CI-EM (m/z); 159 [M+1].

10 RMN ¹H (CDCl₃, δ (ppm)); 1,18-1,59 (6H, m), 1,70-1,80 (2H, m), 1,87-1,97 (2H, m), 3,77 (3H, s), 4,62 (1H, tt, J=3,91, 9,16Hz).

RMN ¹³C (CDCl₃, δ (ppm)); 23,6, 25,3, 31,6, 54,4, 76,8, 155,3.

15 IR (Nujol, cm⁻¹); 793, 951, 1013, 1035, 1259, 1277, 1320, 1444, 1746, 2861, 2940.

Ejemplo 7 (Esquema de reacción [II]): Síntesis de carbonato de etilmetilo)

20 En un aparato hecho de vidrio para aparato de síntesis continua, se cargaron 6,47 g (54,7 mmoles) de carbonato de dietilo, 1,01 g (13,6 mmoles) de acetato de metilo y 50,6 mg de una lipasa derivada de *Candida Antarctica* (Novozym 435 (nombre comercial); disponible de NOVOZYMES) y se mezclaron, y se hizo reaccionar la mezcla bajo agitación a 40°C durante 22 horas. Tras completarse la reacción, se filtró la disolución de reacción obtenida y se obtuvo el filtrado. Cuando se analizó el filtrado obtenido mediante cromatografía de gases (método convencional interno), entonces se encontró que se formaron 0,57 g de carbonato de etilmetilo (rendimiento de reacción; 40,2%).

25 Ejemplo comparativo 1 (Esquema de reacción [II]): Síntesis de carbonato de n-butilmetilo; sin enzima)

30 En un aparato hecho de vidrio que tiene un volumen interior de 20 ml y equipado con un dispositivo de agitación, un condensador y un termómetro, se cargaron 1,00 g (8,61 mmoles) de acetato de n-butilo y 3,63 ml (43,1 moles) de carbonato de dimetilo y se mezclaron, y se hizo reaccionar la mezcla bajo agitación a 100°C durante 24 horas. Tras completarse la reacción, se filtró la disolución de reacción obtenida, y cuando se analizó el filtrado obtenido mediante cromatografía de gases, no se encontró que se formara carbonato de n-butilmetilo.

Ejemplo 8 (Esquema de reacción [V]): Síntesis de carbonato de etilmetilo)

35 En un aparato hecho de vidrio que tiene un volumen interior de 10 ml y equipado con un dispositivo de agitación, un termómetro y un condensador, se cargaron 0,70 g (4,0 mmoles) de adipato de dimetilo, 4,75 g (40,0 mmoles) de carbonato de dietilo y 0,035 g de una lipasa derivada de *Candida Antarctica* (Novozym 435 (nombre comercial); disponible de NOVOZYMES) y se mezclaron, y se hizo reaccionar la mezcla bajo agitación a 40°C durante 24 horas. Tras completarse la reacción, se filtró la disolución de reacción obtenida, y se obtuvo el filtrado. Cuando se analizó el filtrado obtenido mediante cromatografía de gases (método convencional interno), entonces se encontró que se formaron 0,47 g de carbonato de etilmetilo (rendimiento de reacción basado en adipato de dimetilo; 56,2%).

Ejemplo 9 (Esquema de reacción [IV]): Síntesis de 1,2-dimetoxicarboniloxietano)

45 En un aparato hecho de vidrio que tiene un volumen interior de 50 ml y equipado con un dispositivo de agitación, un termómetro y un condensador, se cargaron 1,00 g (6,84 mmoles) de diacetato de etilenglicol, 28,8 ml (342 mmoles) de carbonato de dimetilo y 500 mg de una lipasa derivada de *Candida Antarctica* (Novozym 435 (nombre comercial); disponible de NOVOZYMES) y se mezclaron, y se hizo reaccionar la mezcla bajo agitación a temperatura ambiente durante 15 horas. Tras completarse la reacción, se filtró la disolución de reacción y se lavó adicionalmente el filtrado con 5 ml de carbonato de dimetilo para obtener un filtrado. Cuando se condensó el filtrado obtenido, se obtuvieron 1,10 g de 1,2-dimetoxicarboniloxietano (pureza (porcentaje de área mediante cromatografía de gases); 84,4%, rendimiento de aislamiento basado en diacetato de etilenglicol; 76%) como un líquido incoloro.

Las propiedades físicas del 1,2-dimetoxicarboniloxietano obtenido son las siguientes.

55

CI-EM (m/z): 179 [M+1].

RMN ¹H (CDCl₃, 1320, (ppm)); 3,80 (6H, s), 4,37 (4H, s).

60 RMN ¹³C (CDCl₃, δ (ppm)); 55,0, 18,6 5,4, 155,6.

IR (Nujol, cm⁻¹); 791, 866, 947, 1032, 1254, 1299, 1346, 1376, 1405, 1445, 1754, 2963, 3008.

EA; Calculado: C, 40,45%; H, 5,66%

65

Hallado: C, 40,64%; H, 5,40%.

Ejemplo 10 (Esquema de reacción [IV]: Síntesis de 1,2-dietoxicarboniloxietano)

5 En un aparato hecho de vidrio que tiene un volumen interior de 50 ml y equipado con un dispositivo de agitación, un termómetro y un condensador, se cargaron 400 mg (2,74 moles) de diacetato de etilenglicol, 16,6 ml (137 mmoles) de carbonato de dietilo y 200 mg de una lipasa derivada de *Candida Antarctica* (Novozym 435 (nombre comercial); disponible de NOVOZYMES) y se mezclaron, y se hizo reaccionar la mezcla bajo agitación a temperatura ambiente durante 15 horas. Además, se mezclaron 200 mg de una lipasa derivada de *Candida Antarctica* (Novozym 435 (nombre comercial); disponible de NOVOZYMES) con la mezcla de reacción, se hizo reaccionar la mezcla bajo agitación a temperatura ambiente durante 24 horas.

15 Tras completarse la reacción, se filtró la disolución de reacción, y se lavó el filtrado con 5 ml de acetonitrilo para obtener un filtrado. Cuando se condensó el filtrado obtenido, entonces se obtuvieron 522 mg de 1,2-dietoxicarboniloxietano (pureza (porcentaje de área mediante cromatografía de gases); 86,5%, rendimiento de aislamiento basado en diacetato de etilenglicol; 80%) como un líquido incoloro.

Las propiedades físicas del 1,2-dietoxicarboniloxietano obtenido son las siguientes.

20 CI-EM (m/z); 207 [M+1].

RMN ¹H (CDCl₃, δ (ppm)); 1,31 (4H, t, J=7,08Hz), 4,21 (6H, c, J=7,08Hz), 4,36 (4H, s).

RMN ¹³C (CDCl₃, δ (ppm)); 64,3, 65,2, 154,9.

25 IR (Nujol, cm⁻¹); 474, 790, 858, 882, 1008, 1033, 1092, 1115, 1177, 1243, 1287, 1341, 1380, 1402, 1448, 1583, 1749. 2914, 2987.

EA; Calculado: C, 46,60%; H, 6,84%

30 Hallado: C, 46,93%; H, 6,70%.

Ejemplo 11 (Esquema de reacción [IV]: Síntesis de 1,3-dimetoxicarboniloxipropano)

35 En un aparato hecho de vidrio que tiene un volumen interior de 50 ml y equipado con un dispositivo de agitación, un termómetro y un condensador, se cargaron 1,00 g (6,24 moles) de diacetato de 1,3-propanodiol, 26,0 ml (309 mmoles) de carbonato de dimetilo y 500 mg de una lipasa derivada de *Candida Antarctica* (Novozym 435 (nombre comercial); disponible de NOVOZYMES) y se mezclaron, y se hizo reaccionar la mezcla bajo agitación a temperatura ambiente durante 48 horas. Tras completarse la reacción, se filtró la disolución de reacción, y se lavó el filtrado con 5 ml de carbonato de dimetilo para obtener un filtrado. Cuando se condensó el filtrado obtenido, entonces se obtuvieron 1,13 g de 1,3-dimetoxicarbonil-oxipropano (pureza (porcentaje de área mediante cromatografía de gases); 87,7%, rendimiento de aislamiento basado en diacetato de 1,3-propanodiol; 83%) como un líquido incoloro.

45 Las propiedades físicas del 1,3-dimetoxicarboniloxipropano obtenido son las siguientes.

CI-EM (m/z), 193 [M+1].

RMN ¹H (CDCl₃, δ (ppm)); 2,05 (2H, tt, J=6,35, 6,35Hz), 3,79 (6H, s), 4,29 (4H, t, J=6,35Hz).

50 RMN ¹³C (CDCl₃, δ (ppm)); 28,2, 54,8, 64,3, 155,7.

IR (Nujol, cm⁻¹); 457, 793, 907, 941, 976, 1028, 1114, 1259, 1332, 1363, 1389, 1445, 1750, 2911, 2963.

55 EA; Calculado: C, 43,75%; H, 6,29%

Hallado: C, 44,20%; H, 6,17%.

Ejemplo 12 (Esquema de reacción [IV]: Síntesis de 1,4-dimetoxicarboniloxibutano)

60 En un aparato hecho de vidrio que tiene un volumen interior de 50 ml y equipado con un dispositivo de agitación, un termómetro y un condensador, se cargaron 1,00 g (5,74 mmoles) de diacetato de 1,4-butanodiol, 24,0 ml (285 mmoles) de carbonato de dimetilo y 500 mg de una lipasa derivada de *Candida Antarctica* (Novozym 435 (nombre comercial); disponible de NOVOZYMES) y se mezclaron, y se hizo reaccionar la mezcla bajo agitación a temperatura ambiente durante 48 horas. Tras completarse la reacción, se filtró la disolución de reacción, y se lavó el filtrado con 5 ml de acetonitrilo para obtener un filtrado. Cuando se condensó el filtrado obtenido, entonces se obtuvieron 1,12 g de 1,4-dimetoxicarboniloxibutano (pureza (porcentaje de área mediante cromatografía de gases);

94,3%, rendimiento de aislamiento basado en diacetato de 1,4-butanodiol; 89%) como un sólido blanco.

Las propiedades físicas del 1,4-dimetoxicarboniloxibutano obtenido son las siguientes.

5 CI-EM (m/z); 207 [M+1].

RMN ¹H (CDCl₃, δ (ppm)); 1,78 (4H, m), 3,78 (6H, s), 4,18 (4H, m).

10 RMN ¹³C (CDCl₃, δ (ppm)); 25,2, 54,7, 67,4, 155,8.

IR (método de KBr, cm⁻¹); 558, 721, 743, 795, 934, 959, 1055, 1111, 1249, 1292, 1405, 1446, 1484, 1753, 2864, 2886, 2910, 2983, 3022, 3467.

15 EA; Calculado: C, 46,60%; H, 6,84%

Hallado: C, 47,13%; H, 6,70%.

Ejemplo 13 (Esquema de reacción [IV]: Síntesis de 1,6-dimetoxicarboniloxihexano)

20 En un aparato hecho de vidrio que tiene un volumen interior de 50 ml y equipado con un dispositivo de agitación, un termómetro y un condensador, se cargaron 1,00 g (4,94 mmoles) de diacetato de 1,6-hexanodiol, 21,0 ml (249 mmoles) de carbonato de dimetilo y 500 mg de una lipasa derivada de *Candida Antarctica* (Novozym 435 (nombre comercial); disponible de NOVOZYMES) y se mezclaron, y se hizo reaccionar la mezcla bajo agitación a temperatura ambiente durante 48 horas. Tras completarse la reacción, se filtró la disolución de reacción, y se lavó el
25 filtrado con 5 ml de acetonitrilo para obtener un filtrado. Cuando se condensó el filtrado obtenido, entonces se obtuvieron 1,09 g de 1,6-dimetoxicarboniloxihexano (pureza (porcentaje de área mediante cromatografía de gases); 91,1%, rendimiento de aislamiento basado en diacetato de 1,6-hexanodiol; 86%) como un sólido blanco.

Las propiedades físicas del 1,6-dimetoxicarboniloxihexano obtenido son las siguientes.

30 CI-EM (m/z); 235 [M+1].

RMN ¹H (CDCl₃, δ (ppm)); 1,42 (4H, m), 1,68 (4H, m), 3,77 (6H, s), 4,14 (4H, t, J=6,59Hz).

35 RMN ¹³C (CDCl₃, δ (ppm)); 25,4, 28,6, 54,6, 68,0, 155,9.

IR (método de KBr, cm⁻¹); 422, 572, 721, 791, 803, 932, 957, 1027, 1076, 1112, 1291, 1348, 1403, 11445, 1485, 1702, 1755, 2875, 2924, 2943, 2969, 3020,3467.

40 EA; Calculado: C, 51,27%; H, 7,75%

Hallado: C, 51,23%; H, 7,56%.

Ejemplo 14 (Esquema de reacción [IV]: Síntesis de 1,4-dimetoxicarboniloxi-cis-2-buteno)

45 En un aparato hecho de vidrio que tiene un volumen interior de 200 ml y equipado con un dispositivo de agitación, se cargaron 5,14 g (30 mmoles) de diacetato de cis-2-buteno-1,4-diol, 26,00 g (288 mmoles) de carbonato de dimetilo y 0,5 g de una lipasa derivada de *Candida Antarctica* (Novozym 435 (nombre comercial); disponible de NOVOZYMES) y se mezclaron, y se hizo reaccionar la mezcla bajo agitación a 70°C durante 69 horas, se agitó adicionalmente
50 añadiendo 2 g de carbonato de dimetilo a 70°C durante 7 horas, y entonces, se hizo reaccionar en las condiciones de presión reducida (750 hPa), a 70°C durante 5 horas. Tras completarse la reacción, se filtró la mezcla de reacción mientras se lavaba con carbonato de dimetilo para obtener un filtrado. Se condensó el filtrado obtenido, se rectificó una parte (3,08 g) mediante destilación en aparato de Kugelrohr, y cuando se confirmó una cantidad del producto,
55 entonces se encontraron 2,54 g de 1,4-dimetoxicarboniloxi-cis-2-buteno (rendimiento basado en diacetato cis-2-buteno-1,4-diol; 42%) contenidos en todo el filtrado.

Las propiedades físicas del 1,4-dimetoxicarboniloxi-cis-2-buteno obtenido son las siguientes.

60 CI-EM (m/z); 129 [M-OC(O)OMe]

RMN ¹H (CDCl₃, δ (ppm)); 5,81 (2H, m, J=1,22Hz), 4,74-4,76 (4H, dd, J=1,46, 4,15Hz), 3,79 (6H, s).

Ejemplo 15 (Esquema de reacción [IV]: Síntesis de 1-metoxicarboniloxi-2-(metoxi-carboniloxietoxi)etano)

65 En un aparato hecho de vidrio que tiene un volumen interior de 200 ml y equipado con un dispositivo de agitación, se

cargaron 25,27 g (132 mmoles) de diacetato de dietilenglicol, 59,2 g (657 mmoles) de carbonato de dimetilo y 7,56 g de una lipasa derivada de *Candida Antarctica* (Novozym 435 (nombre comercial); disponible de NOVOZYMES) y se mezclaron, y se hizo reaccionar la mezcla bajo agitación a 70°C durante 68 horas. Se condensó la mezcla de reacción en presencia de la enzima, y se añadieron adicionalmente 38,85 g de carbonato de dimetilo a la misma y se agitó la mezcla a 70°C durante 24 horas. Tras agitar, se condensó la mezcla de reacción en presencia de la enzima, se añadieron adicionalmente 30,1 g de carbonato de dimetilo, y se agitó la mezcla a 70°C durante 24 horas. Tras completarse la reacción, se filtró la mezcla de reacción mientras se lavaba con carbonato de dimetilo para obtener un filtrado. Se condensó el filtrado obtenido, y se purificó una parte (3,79 g) del mismo mediante destilación en aparato de Kugelrohr. Cuando se confirmó una cantidad del producto, entonces se encontraron 14,66 g de 1-metoxicarboniloxi-2-(metoxicarboniloxi)etano (rendimiento de aislamiento basado en diacetato de dietilenglicol; 53%) contenidos en todo el filtrado.

Las propiedades físicas del 1-metoxicarboniloxi-2-(metoxi-carboniloxi)etano obtenido son las siguientes.

CI-EM (m/z); 223 [M+1]

RMN ¹H (CDCl₃, δ (ppm)); 4,27-4,30 (4H, t, J=4,63Hz), 3,79 (6H, s), 3,71-3,74 (4H, t, J=4,63Hz).

Ejemplo 16 (Esquema de reacción [IV]: Síntesis de 1,12-dimetoxicarboniloxidodecano)

En un aparato hecho de vidrio que tiene un volumen interior de 200 ml y equipado con un dispositivo de agitación, se cargaron 20,42 g (71 moles) de diacetato de 1,12-dodecanodiol, 31,35 g (348 mmoles) de carbonato de dimetilo y 3,77 g de una lipasa derivada de *Candida Antarctica* (Novozym 435 (nombre comercial); disponible de NOVOZYMES) y se mezclaron, y se hizo reaccionar la mezcla bajo agitación a 70°C durante 48 horas. Se condensó la mezcla de reacción en presencia de la enzima, se añadieron adicionalmente 30,24 g de carbonato de dimetilo al condensado y se agitó la mezcla a 70°C durante 24 horas. Tras agitar, se condensó la mezcla de reacción en presencia de la enzima, se añadieron adicionalmente 30,22 g de carbonato de dimetilo al condensado y se agitó la mezcla a 70°C durante 25 horas. Se condensó la mezcla de reacción en presencia de la enzima, se añadieron adicionalmente 30,23 g de carbonato de dimetilo al condensado y se agitó la mezcla a 70°C durante 20 horas. Tras completarse la reacción, se filtró la mezcla de reacción mientras se lavaba con carbonato de dimetilo y tetrahidrofurano para obtener un filtrado. Se condensó el filtrado obtenido, y cuando se purificó una parte del condensado (1,17 g) mediante destilación en aparato Kugelrohr y se confirmó una cantidad del producto formado, finalmente, se encontraron 14,38 g de 1,12-dimetoxicarboniloxidodecano (rendimiento basado en diacetato de 1,12-dodecanodiol; 63%) contenidos en todo el filtrado.

Las propiedades físicas del 1,12-dimetoxicarboniloxidodecano obtenido son las siguientes.

CI-EM (m/z), 319 [M+1]

RMN ¹H (CDCl₃, δ (ppm)); 4,10-4,15 (4H, t, J=6,83Hz), 3,77 (6H, s), 1,61-1,70 (4H, m, J=6,59Hz), 1,26-1,38 (16H, m).

Ejemplo 17 (Esquema de reacción [VI]: Síntesis de 6-metoxicarbonilohexanoato de metilo)

En un aparato hecho de vidrio que tiene un volumen interior de 20 ml y equipado con un dispositivo de agitación y un termómetro, se cargaron 1,01 g (8,85 moles) de ε-caprolactona, 3,94 g (43,7 mmoles) de carbonato de dimetilo y 51,1 mg de una lipasa derivada de *Candida Antarctica* (Novozym 435 (nombre comercial); disponible de NOVOZYMES) y se mezclaron, y se hizo reaccionar la mezcla bajo agitación a 30°C durante 186 horas. Tras completarse la reacción, se filtró la disolución de reacción obtenida y se lavó el filtrado con 30 ml de carbonato de dimetilo para obtener un filtrado. Cuando se condensó el filtrado obtenido, finalmente se obtuvieron 1,68 g de 6-metoxicarbonilohexanoato de metilo (pureza (porcentaje de área mediante cromatografía de gases); 84,0%, rendimiento de aislamiento basado en ε-caprolactona; 78%) como un líquido incoloro.

Las propiedades físicas del 6-metoxicarbonilohexanoato de metilo obtenido son las siguientes.

CI-EM (m/z); 205 [M+1].

RMN ¹H (CDCl₃, δ (ppm)); 1,35 a 1,47 (2H, m), 1,61 a 1,74 (4H, m), 2,33 (2H, t, J=7,45Hz), 3,67 (3H, s), 3,78 (3H, s), 4,14 (2H, t, J=6,59Hz).

RMN ¹³C (CDCl₃, δ (ppm)); 24,5,25,3, 28,4, 33,9, 51,5, 54,7, 67,9, 155,9,173,9

IR (Nujol, cm⁻¹); 794, 957, 1013, 1103, 1168, 1200, 1269, 1363, 1388. 1443, 1747, 2866, 2956.

Ejemplo 18 (Esquema de reacción [VI]: Síntesis de 6-metoxicarbonilohexanoato de metilo)

En un aparato hecho de vidrio que tiene un volumen interior de 500 ml y equipado con un dispositivo de agitación, un termómetro y un condensador de reflujo, se cargaron 22,8 g (0,200 moles) de ϵ -caprolactona, 90,1 g (1,00 moles) de carbonato de dimetilo y 2,28 g de una lipasa derivada de *Candida Antarctica* (Novozym 435 (nombre comercial); disponible de NOVOZYMES) y se mezclaron, y se hizo reaccionar la mezcla bajo agitación a 60°C durante 31 horas. Además se añadieron 45,1 g (0,501 moles) de carbonato de dimetilo a la mezcla, y se hizo reaccionar la mezcla a la misma temperatura durante 7 horas. Tras completarse la reacción, se enfrió la mezcla de reacción obtenida hasta temperatura ambiente, y entonces se filtró. Cuando se purificó el filtrado obtenido mediante destilación a presión reducida, finalmente, se obtuvieron 17,8 g de 6-metoxicarbonilohexanoato de metilo (pureza (porcentaje de área mediante cromatografía de gases); 98,0%, rendimiento de aislamiento basado en ϵ -caprolactona; 43%) como un líquido incoloro (de 138 a 139°C/de 1,6 a 1,7 kPa).

Ejemplo 19 (Esquema de reacción [VI]: Síntesis de 6-metoxicarbonilohexanoato de metilo)

En un aparato hecho de vidrio que tiene un volumen interior de 500 ml y equipado con un dispositivo de agitación, un termómetro y un condensador de reflujo, se cargaron 45,6 g (0,400 moles) de ϵ -caprolactona, 180 g (2,00 moles) de carbonato de dimetilo y 9,12 g de una lipasa derivada de *Candida Antarctica* (Novozym 435 (nombre comercial); disponible de NOVOZYMES) y se mezclaron, y se hizo reaccionar la mezcla bajo agitación a 80°C durante 23 horas. Tras completarse la reacción, se enfrió la mezcla de reacción obtenida hasta temperatura ambiente, y se añadieron 90,1 g (1,00 moles) de carbonato de dimetilo a la mezcla y se filtró la mezcla. Cuando se analizó el filtrado obtenido mediante cromatografía de gases (método convencional interno), finalmente, se encontró que se formaron 66,9 g de 6-metoxicarbonilohexanoato de metilo (rendimiento de reacción basado en ϵ -caprolactona; 82%).

Ejemplo 20 (Esquema de reacción [VI]: Síntesis de 6-metoxicarbonilohexanoato de metilo)

Se llevó a cabo el mismo procedimiento de la misma manera que en el ejemplo 19 excepto por el cambio de la cantidad de carbonato de dimetilo que va a usarse a 360 g (4,00 moles), y se hizo reaccionar a 80°C durante 48 horas. Tras completarse la reacción, se enfrió la mezcla de reacción obtenida hasta temperatura ambiente, y entonces se filtró. Cuando se analizó de manera cuantitativa el filtrado obtenido mediante cromatografía de gases (método convencional interno), finalmente, se encontró que se formaron 71,3 g de 6-metoxicarbonilohexanoato de metilo (rendimiento de reacción basado en ϵ -caprolactona; 87%).

Ejemplo 21 (Esquema de reacción [VI]: 5-metoxicarbonilopentanoato de metilo)

En un aparato hecho de vidrio que tiene un volumen interior de 200 ml y equipado con un dispositivo de agitación, un termómetro y un condensador de reflujo, se cargaron 25,0 g (0,25 moles) de δ -valerolactona, 112,5 g (1,25 moles) de carbonato de dimetilo y 5,00 g de una lipasa derivada de *Candida Antarctica* (Novozym 435 (nombre comercial); disponible de NOVOZYMES) y se mezclaron, y se hizo reaccionar la mezcla bajo agitación a 60°C durante 35 horas. Tras completarse la reacción, se enfrió la mezcla de reacción obtenida hasta temperatura ambiente, y entonces se filtró. Se condensó el filtrado obtenido a presión reducida para obtener 52,3 g de un condensado. Cuando se analizó de manera cuantitativa el condensado mediante el método convencional interno usando cromatografía de gases, se encontró que se formaron 36,6 g de 5-metoxicarbonilopentanoato de metilo (rendimiento de reacción basado en δ -valerolactona; 77,0%). Cuando se purificó el condensado mediante destilación a presión reducida, finalmente, se obtuvieron 27,0 g de 5-metoxicarbonilopentanoato de metilo (pureza (porcentaje de área mediante cromatografía de gases); 98,8%, rendimiento de aislamiento basado en δ -valerolactona; 56,1%) como un líquido incoloro (de 106 a 107°C/de 0,9 a 1,1 kPa).

Las propiedades físicas del 5-metoxicarbonilopentanoato de metilo obtenido son las siguientes.

CI-EM (m/z); 191 [M+1]

RMN ^1H (CDCl_3 , δ (ppm)); 1,70 a 1,75 (4H, m), 2,34 a 2,39 (2H, m), 3,67 (3H, s), 3,78 (3H, s), 4,13 a 4,18 (2H, m).

Ejemplo 22 (Esquema de reacción [VI]: 3-metoxicarbonilopropionato de metilo)

En un aparato hecho de vidrio que tiene un volumen interior de 300 ml y equipado con un dispositivo de agitación, un termómetro y un condensador de reflujo, se cargaron 28,6 g (0,38 moles) de β -propiolactona con una pureza del 95%, 178,7 g (1,98 moles) de carbonato de dimetilo y 5,72 g de una lipasa derivada de *Candida Antarctica* (Novozym 435 (nombre comercial); disponible de NOVOZYMES) y se mezclaron, y se hizo reaccionar la mezcla bajo agitación a 60°C durante 14,5 horas. Después de eso, se añadieron adicionalmente 5,72 g de una lipasa derivada de *Candida Antarctica* (Novozym 435 (nombre comercial); disponible de NOVOZYMES) a la mezcla, y se hizo reaccionar la mezcla a 60°C durante 40 horas. Tras completarse la reacción, se enfrió la mezcla de reacción obtenida hasta temperatura ambiente, y entonces se filtró. Se condensó el filtrado obtenido a presión reducida, para obtener 70,5 g de un condensado. Cuando se determinó el condensado (método convencional interno) mediante cromatografía de gases, se encontró que se formaron 42,8 g de 3-metoxicarbonilopropionato de metilo

(rendimiento de reacción basado en β -propiolactona; 69,5%).

5 Finalmente, cuando se purificó el condensado mediante destilación a presión reducida, se obtuvieron 32,6 g de 3-metoxicarboniloxipropionato de metilo (pureza (porcentaje de área mediante cromatografía de gases); 97,3%, rendimiento de aislamiento basado en β -propiolactona; 51,5%) como un líquido incoloro (de 81 a 83°C/de 0,7 a 0,8 kPa).

Las propiedades físicas del 3-metoxicarboniloxipropionato de metilo obtenido son las siguientes.

10 CI-EM (m/z); 163 [M+1]

RMN ^1H (CDCl_3 , δ (ppm)); 2,68 a 2,73 (2H, t, J=6,35Hz), 3,71 (3H, s), 3,79 (3H, s), 4,36 a 4,44 (2H, t, J=6,35Hz).

15 Ejemplo 23 (Esquema de reacción [III]: acetato de 4-metoxicarboniloxibutilo)

En un aparato hecho de vidrio que tiene un volumen interior de 200 ml y equipado con un dispositivo de agitación, un termómetro y un condensador de reflujo, se cargaron 174,2 g (1,00 moles) de diacetato de 1,4-butanodiol, 180,0 g (2,00 moles) de carbonato de dimetilo y 8,70 g de una lipasa derivada de *Candida Antarctica* (Novozym 435 (nombre comercial); disponible de NOVOZYMES) y se mezclaron, y se hizo reaccionar la mezcla bajo agitación a 70°C durante 32 horas. Tras completarse la reacción, se enfrió la mezcla de reacción obtenida hasta temperatura ambiente, y entonces se filtró. Se condensó el filtrado obtenido a presión reducida para obtener 196,0 g de un condensado. Cuando se purificó el condensado mediante destilación a presión reducida, finalmente, se obtuvieron 10,6 g de acetato de 4-metoxicarboniloxibutilo (pureza: (porcentaje de área mediante cromatografía de gases); 79,2%) como un líquido incoloro (de 99 a 103°C/de 0,6 a 0,8 kPa).

25

Las propiedades físicas del acetato de 4-metoxicarboniloxibutilo obtenido son las siguientes.

CI-EM (m/z); 191[M+1]

30 RMN ^1H (CDCl_3 , δ (ppm)); 1,71 a 1,79(4H,m), 2,05(3H,s), 3,78(3H,s), 4,07 a 4,12(2H,t,J=6,23Hz), 4,15 a 4,20(2H,t,J=6,23Hz).

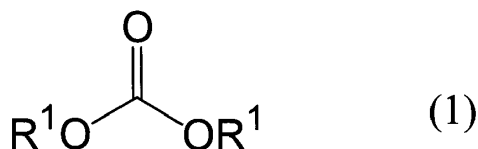
Utilidad en la industria

35 La presente invención se refiere a un procedimiento para obtener un compuesto de carbonato asimétrico a partir de un compuesto de carbonato y un compuesto de éster. El compuesto de carbonato asimétrico obtenido mediante la presente invención es un compuesto útil para un disolvente, diversos tipos de reactivo de síntesis orgánica, perfume y materiales funcionales. Por ejemplo, es útil para un electrolito o un disolvente de una batería electroquímica alcalina que es recargable tal como una batería secundaria de litio, etc.

40

REIVINDICACIONES

1. Un procedimiento para preparar un compuesto de carbonato asimétrico que comprende permitir que un compuesto de carbonato simétrico representado por la fórmula (1):



en la que los R^1 son iguales, y representan grupos hidrocarburos monovalentes que pueden tener un/unos sustituyente(s),

reaccione con un compuesto de éster representado por la fórmula (2):

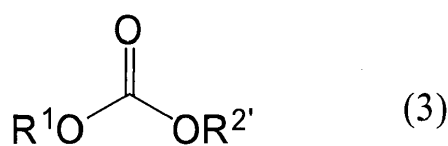


en la que

R^2 y R^3 son independientes entre sí, y representan un grupo hidrocarburo monovalente que puede tener un/unos sustituyente(s), en donde el grupo hidrocarburo de R^2 y R^3 puede estar interrumpido por un grupo de unión seleccionado del grupo que consiste en un enlace éter, un enlace tioéter, un enlace amida, un enlace carbonilo y un enlace éster, o

R^2 y R^3 se unen entre sí para formar Z, y Z representa un grupo hidrocarburo divalente que puede tener un/unos sustituyente(s), en donde el grupo hidrocarburo de Z puede estar interrumpido por un grupo de unión seleccionado del grupo que consiste en un enlace éter, un enlace tioéter, un enlace amida, un enlace carbonilo y un enlace éster, siempre que R^2 no sea igual que R^1 de la fórmula (1), y el número de enlaces éster contenidos en la fórmula (2) sea 2 o menos en total,

en presencia de una hidrolasa, para obtener un compuesto de carbonato asimétrico representado por la fórmula (3):



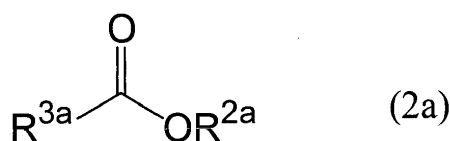
en la que

R^1 es tal como se definió anteriormente, y

$\text{R}^{2'}$ es R^2 ,

siempre que cuando R^2 y R^3 formen Z uniéndose entre sí, entonces $\text{R}^{2'}$ sea $-\text{Z}-\text{C}(=\text{O})-\text{O}-\text{R}^1$.

2. El procedimiento para preparar un compuesto de carbonato asimétrico según la reivindicación 1, en el que el compuesto de carbonato simétrico representado por la fórmula (1) y un compuesto de éster representado por la fórmula (2a):

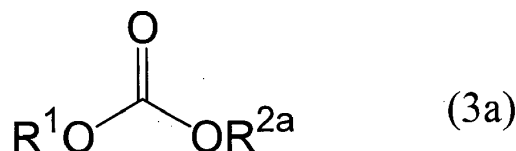


en la que

5 R^{2a} y R^{3a} son independientes entre sí, y representan un grupo hidrocarburo monovalente que puede tener un/unos sustituyente(s), en donde el grupo hidrocarburo de R^{2a} y R^{3a} puede estar interrumpido por un grupo de unión seleccionado del grupo que consiste en un enlace éter, un enlace tioéter, un enlace amida, un enlace carbonilo y un enlace éster,

siempre que R^{2a} no sea igual que R^1 de la fórmula (1), y el número de enlaces éster contenidos en la fórmula (2a) sea 2 o menos en total,

10 se hacen reaccionar en presencia de una hidrolasa, para obtener un compuesto de carbonato asimétrico representado por la fórmula (3a):



15 en la que R^1 es tal como se definió en la reivindicación 1 y R^{2a} es igual que lo definido anteriormente.

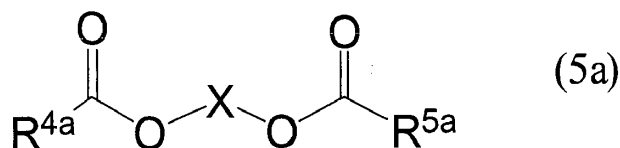
3. El procedimiento para preparar un compuesto de carbonato asimétrico según la reivindicación 2, en el que la reacción del compuesto de carbonato simétrico representado por la fórmula (1) y el compuesto de éster representado por la fórmula (2a) se lleva a cabo mientras que se retira un compuesto transesterificado representado por la fórmula (4a):



25 en la que R^1 y R^{3a} son tal como se definieron en la reivindicación 2,

que es un subproducto de la reacción.

4. El procedimiento para preparar un compuesto de carbonato asimétrico según la reivindicación 3, en el que la destilación del compuesto transesterificado se lleva a cabo a una presión de reacción de 0,13 kPa o más y menos de 101,3 kPa.
5. El procedimiento para preparar un compuesto de carbonato asimétrico según una cualquiera de las reivindicaciones 2 a 4, en el que R^1 y R^{2a} son diferentes entre sí, y cada uno representa un grupo alquilo lineal que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, un grupo alquilo ramificado que tiene de 3 a 6 átomos de carbono o un grupo cicloalquilo que tiene de 3 a 6 átomos de carbono.
6. El procedimiento para preparar un compuesto de carbonato asimétrico según una cualquiera de las reivindicaciones 2 a 5, en el que R^1 es metilo, etilo, n-propilo, isopropilo, n-butilo, s-butilo, isobutilo, t-butilo o bencilo.
7. El procedimiento para preparar un compuesto de carbonato asimétrico según una cualquiera de las reivindicaciones 2 a 6, en el que R^1 es metilo o etilo.
8. El procedimiento para preparar un compuesto de carbonato asimétrico según la reivindicación 1, en el que el compuesto de carbonato simétrico representado por la fórmula (1) y un compuesto de éster representado por la fórmula (5a):

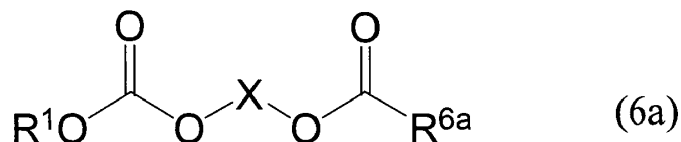


50 en la que

R^{4a} y R^{5a} son independientes entre sí, y representan un grupo hidrocarburo monovalente que puede tener un/unos sustituyente(s),

X representa un grupo hidrocarburo divalente que puede tener un/unos sustituyente(s) en donde el grupo hidrocarburo puede estar interrumpido por un grupo de unión seleccionado del grupo que consiste en un enlace éter, un enlace tioéter, un enlace amida y un enlace carbonilo,

5 se hacen reaccionar en presencia de una hidrolasa, para obtener un compuesto de carbonato asimétrico representado por la fórmula (6a):



10 en la que

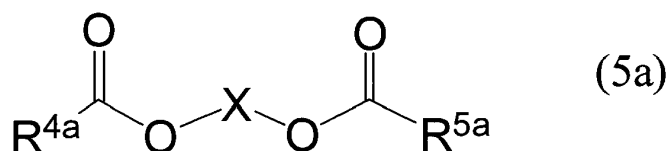
R^{6a} es R^{4a} o R^{5a} y

15 R^1 es tal como se definió en la reivindicación 1, y X, R^{4a} y R^{5a} son tal como se definieron anteriormente.

9. El procedimiento para preparar un compuesto de carbonato asimétrico según la reivindicación 8, en el que R^{4a} y R^{5a} son independientes entre sí, y representan un grupo alquilo lineal que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, un grupo alquilo ramificado que tiene de 3 a 6 átomos de carbono o un grupo cicloalquilo que tiene de 3 a 6 átomos de carbono, y

25 X es un grupo alquilenos que tiene de 1 a 6 átomos de carbono o un grupo alquilenos que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, o un grupo alquilenos lineal que tiene de 2 a 6 átomos de carbono que está interrumpido por un enlace éter.

10. El procedimiento para preparar un compuesto de carbonato asimétrico según la reivindicación 1, en el que el compuesto de carbonato simétrico representado por la fórmula (1) y un compuesto de éster representado por la fórmula (5a):

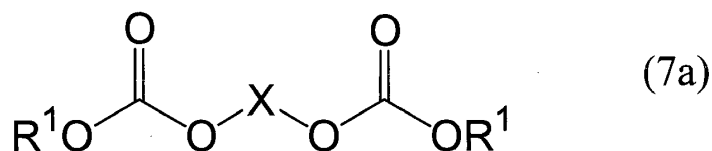


30 en la que

35 R^{4a} y R^{5a} son independientes entre sí, y representan un grupo hidrocarburo monovalente que puede tener un/unos sustituyente(s),

40 X representa un grupo hidrocarburo divalente que puede tener un/unos sustituyente(s), en donde el grupo hidrocarburo puede estar interrumpido por un grupo de unión seleccionado del grupo que consiste en un enlace éter, un enlace tioéter, un enlace amida y un enlace carbonilo,

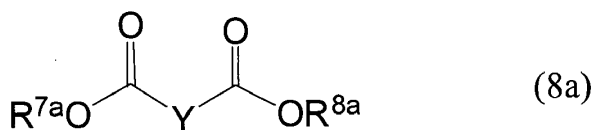
se hacen reaccionar en presencia de una hidrolasa, para obtener un compuesto de carbonato asimétrico representado por la fórmula (7a):



45 en la que R^1 y X son lo mismo que se definió anteriormente.

11. El procedimiento para preparar un compuesto de carbonato asimétrico según la reivindicación 1, en el que el compuesto de carbonato simétrico representado por la fórmula (1) y un compuesto de éster representado por la fórmula (8a):

50



en la que

5 R^{7a} y R^{8a} son independientes entre sí, y representan un grupo hidrocarburo monovalente que puede tener un/unos sustituyente(s), siempre que cada R^{7a} y R^{8a} no sean iguales que R^1 en la fórmula (1),

10 Y representa un grupo hidrocarburo divalente que puede tener un/unos sustituyente(s) en donde el grupo hidrocarburo puede estar interrumpido por un grupo de unión seleccionado del grupo que consiste en un enlace éter, un enlace tioéter, un enlace amida y un enlace carbonilo,

se hacen reaccionar en presencia de una hidrolasa, para obtener un compuesto de carbonato asimétrico representado por la fórmula (9a):



en la que

20 R^{10a} es R^{7a} o R^{8a} , y

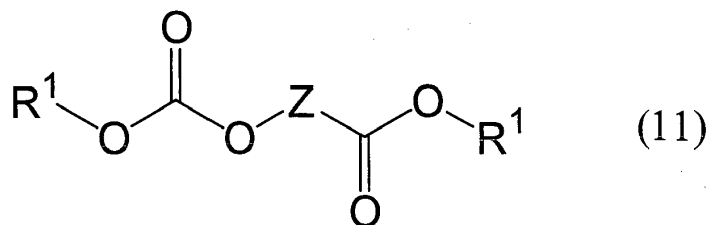
R^1 es tal como se definió en la reivindicación 1 y R^{7a} y R^{8a} son tal como se definieron anteriormente.

12. El procedimiento para preparar un compuesto de carbonato asimétrico según la reivindicación 1, en el que el compuesto de carbonato simétrico representado por la fórmula (1) y un compuesto de éster cíclico representado por la fórmula (10):



30 en la que Z representa un grupo hidrocarburo divalente que puede tener un/unos sustituyente(s) en donde el grupo hidrocarburo puede estar interrumpido por un grupo de unión seleccionado del grupo que consiste en un enlace éter, un enlace tioéter, un enlace amida, un enlace carbonilo y un enlace éster, siempre que el número de enlaces éster contenidos en la fórmula (10) sea 2 o menos en total,

35 se hacen reaccionar en presencia de una hidrolasa, para obtener un compuesto de carbonato asimétrico representado por la fórmula (11):



40 en la que Z es tal como se definió anteriormente, y los R^1 son iguales y tal como se definieron en la reivindicación 1.

13. El procedimiento para preparar un compuesto de carbonato asimétrico según la reivindicación 12, en el que el compuesto de éster cíclico representado por la fórmula (10) es δ -valerolactona, β -propiolactona o ϵ -caprolactona.

45 14. El procedimiento para preparar un compuesto de carbonato asimétrico según una cualquiera de las reivindicaciones 1 a 13, en el que la hidrolasa es al menos una hidrolasa seleccionada del grupo que consiste en una proteasa, esterasa y lipasa.

15. El procedimiento para preparar un compuesto de carbonato asimétrico según la reivindicación 14, en el que la hidrolasa es una lipasa.
- 5 16. El procedimiento para preparar un compuesto de carbonato asimétrico según la reivindicación 15, en el que la hidrolasa es una lipasa originada a partir de *Candida Antarctica*.
17. El procedimiento para preparar un compuesto de carbonato asimétrico según una cualquiera de las reivindicaciones 1 a 16, en el que se usa un disolvente orgánico.
- 10 18. El procedimiento para preparar un compuesto de carbonato asimétrico según la reivindicación 17, en el que el disolvente orgánico es al menos un disolvente orgánico seleccionado del grupo que consiste en ciclohexano, tolueno y t-butilmetiléter.
- 15 19. El procedimiento para preparar un compuesto de carbonato asimétrico según una cualquiera de las reivindicaciones 1 a 18, en el que la cantidad del compuesto de carbonato simétrico representado por la fórmula (1) es de 0,1 a 100 moles basándose en 1 mol del compuesto de éster representado por la fórmula (2).
- 20 20. El procedimiento para preparar un compuesto de carbonato asimétrico según una cualquiera de las reivindicaciones 1 a 19, en el que la temperatura de reacción es de 0 a 130°C.