

19



OFICINA ESPAÑOLA DE  
PATENTES Y MARCAS

ESPAÑA



11 Número de publicación: **2 723 477**

51 Int. Cl.:

**C07C 45/28** (2006.01)  
**C07C 45/57** (2006.01)  
**C07C 49/385** (2006.01)  
**C07C 49/587** (2006.01)  
**C07B 61/00** (2006.01)  
**C07C 45/64** (2006.01)  
**C07C 45/66** (2006.01)

12

TRADUCCIÓN DE PATENTE EUROPEA

T3

- 86 Fecha de presentación y número de la solicitud internacional: **22.12.2015 PCT/JP2015/085772**
- 87 Fecha y número de publicación internacional: **30.06.2016 WO16104474**
- 96 Fecha de presentación y número de la solicitud europea: **22.12.2015 E 15873042 (4)**
- 97 Fecha y número de publicación de la concesión europea: **27.02.2019 EP 3199514**

54 Título: **Procedimiento para producir compuesto de dicetona cíclica**

30 Prioridad:

**26.12.2014 JP 2014266684**

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

**28.08.2019**

73 Titular/es:

**KAO CORPORATION (100.0%)  
14-10, Nihonbashi Kayabacho 1-chome, Chuo-ku  
Tokyo 103-8210, JP**

72 Inventor/es:

**TANINO, KENJI;  
SAKODA, DAICHI y  
SAKAMOTO, SHU**

74 Agente/Representante:

**MARTÍN BADAJOZ, Irene**

ES 2 723 477 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**

Procedimiento para producir compuesto de dicetona cíclica

**5 [Campo técnico]**

La presente divulgación se refiere a un procedimiento para producir un compuesto representado por la fórmula general (I).

**10 [Técnica anterior]**

El desarrollo de una reacción de escisión de enlaces carbono-carbono es uno de los temas importantes en la química de síntesis orgánica. Particularmente, la reacción de escisión oxidativa de un compuesto de olefina se ha usado frecuentemente de manera extensiva. De manera convencional, los procedimientos usados frecuentemente incluyen un procedimiento en el que se usa peryodato de sodio como un agente oxidante en presencia de un catalizador tal como un compuesto de metal de osmio o un compuesto de metal de rutenio, y un procedimiento en el que se usa ozono como un agente oxidante (documentos no de patente 1 y 2). Sin embargo, estos procedimientos tienen problemas de que, por ejemplo, el compuesto de metal de osmio es altamente tóxico, el compuesto de metal de rutenio y el peryodato de sodio son costosos y producen una gran cantidad de subproductos durante la reacción, el procedimiento en el que se usa el ozono puede potencialmente provocar explosiones, y además, se requiere una gran cantidad de consumo de energía para generar ozono. Por tanto, no puede decirse que estos procedimientos sean industrialmente adecuados desde el punto de vista de la seguridad, el coste y el medio ambiente.

Por tanto, recientemente, se ha prestado atención a un procedimiento para someter un compuesto de olefina a escisión oxidativa en presencia de peróxido de hidrógeno.

El documento de patente 1 divulga un procedimiento para producir ácido carboxílico, incluyendo el procedimiento hacer reaccionar triacilglicerol insaturado con peróxido de hidrógeno en presencia de una sal de hidrógeno de ácido polibásico de amonio cuaternario y al menos uno seleccionado de ácido tungstico, ácido heterotungstico, y sus sales.

Además, el documento de patente 2 y el documento de patente 3 divulgan cada uno un procedimiento para producir ácido carboxílico, caracterizándose los procedimientos del documento de patente 2 y el documento de patente 3 por hacer reaccionar una disolución oleosa de alcohol alicíclico con peróxido de hidrógeno y una disolución oleosa de cetona alicíclica con peróxido de hidrógeno, respectivamente, en un sistema de disolución heterogéneo en presencia de un catalizador que contiene un compuesto de un metal del grupo 6 en la tabla periódica.

El peróxido de hidrógeno es seguro y económico. Además, dado que sólo produce agua como subproducto después de que haya reaccionado, es respetuoso con el medio ambiente. Por tanto, puede decirse que un procedimiento para someter olefina a escisión oxidativa usando el peróxido de hidrógeno es un procedimiento industrialmente ventajoso. Sin embargo, sólo hay algunos ejemplos que se han notificado, en los que se usó peróxido de hidrógeno para someter un compuesto de olefina tetrasustituida a escisión oxidativa.

Por ejemplo, los documentos de patente 5 y 6 divulgan cada uno un procedimiento para producir  $\beta$ -hidroxihidroperóxidos y cetonas, caracterizándose el procedimiento por hacer reaccionar olefina tetrasustituida y peróxido de hidrógeno en presencia de un catalizador particular. El catalizador es al menos un tipo de compuesto metálico seleccionado del grupo que consiste en metal de tungsteno, metal de molibdeno, un compuesto de tungsteno que se compone de tungsteno y un elemento del grupo IIIb, un elemento del grupo IVb, un elemento del grupo Vb, o un elemento del grupo VIb excepto oxígeno, y un compuesto de molibdeno que se compone de molibdeno y un elemento del grupo IIIb, un elemento del grupo IVb, un elemento del grupo Vb, o un elemento del grupo VIb excepto oxígeno. Ambos documentos de patente describen que algunos productos de reacción se escinden en dicetonas.

**55 [Documentos de la técnica anterior]**

[Documentos de patentes]

[Documento de patente 1] JP2010-189317A

60 [Documento de patente 2] JP2004-59451A

[Documento de patente 3] JP2004-59450A

[Documento de patente 4] JP51(1976)-24498A

65 [Documento de patente 5] JP2002-201154A

[Documento de patente 6] JP2002-201147A

5 El documento US 3.778.483 se refiere a un proceso para la preparación de hidrocarburos bicíclicos insaturados de una determinada fórmula, que comprende hidrogenar una cetona bicíclica insaturada correspondiente con níquel Raney como el catalizador y tratar el alcohol bicíclico saturado resultante con un agente ácido que provoca deshidratación e isomerización del doble enlace resultante.

[Documentos no de patentes]

10

[Documento no de patente 1] Tetrahedron, 66(34), 6885-6888, 2010

[Documento no de patente 2] Journal of the American Chemical Society, 130(21), 6737-6739, 2008

15

[Documento no de patente 3] Chem. Lett., 857, 1989

[Documento no de patente 4] Tetrahedron Letters, 33, 1645, 1992

20

[Documento no de patente 5] Eur. J. Org. Chem. 1978, 2006

### [Sumario de la invención]

[Problema que va a resolverse con la invención]

25 La escisión oxidativa de un compuesto de olefina tetrasustituída es industrialmente muy importante como un procedimiento para construir un esqueleto de anillo de miembros de medio a grande que se observa a menudo en, por ejemplo, un compuesto bioactivo específico, un compuesto de perfume, y productos intermedios de los mismos (documento de patente 4, documentos no de patente 4 y 5). Por tanto, se desea desarrollar una reacción de escisión oxidativa de olefina tetrasustituída que es muy versátil, segura e inocua para el medio ambiente.

30

Un objeto de la presente divulgación es proporcionar un procedimiento para producir un compuesto representado por la fórmula general (I) mediante escisión oxidativa de un compuesto de fórmula (II), que es un compuesto de olefina tetrasustituída bicíclica, usando peróxido de hidrógeno.

35

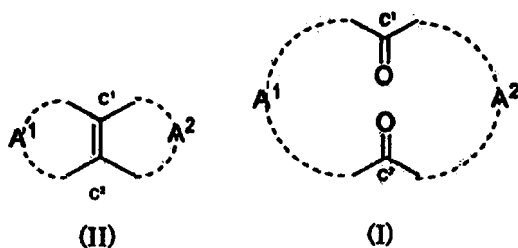
[Medios para resolver el problema]

40 Con el fin de lograr el objeto anterior, los presentes inventores llevaron a cabo estudios intensivos de la escisión oxidativa de un compuesto de olefina tetrasustituída usando peróxido de hidrógeno en presencia de un catalizador de ácido o en presencia de un compuesto de ácido tungstíco. Como resultado, encontraron que sorprendentemente, una reacción de escisión oxidativa avanza específicamente en un compuesto de olefina tetrasustituída bicíclica. Además, en las mismas condiciones, la reacción no avanzó en un compuesto de olefina tetrasustituída lineal o monocíclica.

45 Es decir, la presente divulgación es un procedimiento para producir un compuesto representado por la fórmula general (I), incluyendo el procedimiento una etapa de someter un compuesto representado por la fórmula general (II) a escisión oxidativa usando peróxido de hidrógeno en presencia de un catalizador de ácido, que es un ácido de Bronsted que tiene un pKa en agua de no más de 2,0, o en presencia de un compuesto de ácido tungstíco para obtener el compuesto representado por la fórmula general (I):

50

[Fórmula química 1]



En las fórmulas anteriores,

55 la fórmula -A<sup>1</sup>- (en donde el enlace frontal denota un enlace que se une con un átomo de carbono C<sup>1</sup> mientras que el enlace posterior denota un enlace que se une con un átomo de carbono C<sup>2</sup>) es un grupo alquileo que tiene de 2 a 6 átomos de carbono que puede haberse sustituido y que puede incluir además un enlace éter, un enlace éster, un

grupo amino secundario, un grupo tioéter, o estos, y

5 la fórmula  $-A^2-$  (en donde el enlace frontal denota un enlace que se une con un átomo de carbono  $C^1$  mientras que el enlace posterior denota un enlace que se une con un átomo de carbono  $C^2$ ) es un grupo alquileo que tiene de 4 a 10 átomos de carbono que puede haberse sustituido y que puede incluir además un enlace éter, un enlace éster, un grupo amino secundario, un grupo tioéter, o estos.

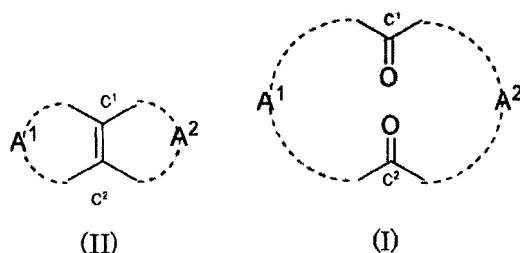
[Efectos de la invención]

10 Según la presente divulgación, puede producirse un compuesto representado por la fórmula general (I) mediante escisión oxidativa de un compuesto de olefina tetrasustituida bicíclica usando peróxido de hidrógeno en presencia de un catalizador de ácido, que es un ácido de Bronsted que tiene un pKa en agua de no más de 2,0, o en presencia de un compuesto de ácido túngstico.

15 [Descripción de realizaciones preferidas]

La presente divulgación se refiere a un procedimiento para producir un compuesto representado por la fórmula general (I), incluyendo el procedimiento una etapa de someter un compuesto representado por la fórmula general (II) (a continuación en el presente documento puede denominarse "compuesto de fórmula (II)") a escisión oxidativa usando peróxido de hidrógeno en presencia de un catalizador de ácido o en presencia de un compuesto de ácido túngstico para obtener el compuesto representado por la fórmula general (I) (a continuación en el presente documento puede denominarse "compuesto de fórmula (I)").

[Fórmula química 2]



En las fórmulas anteriores,

30 la fórmula  $-A^1-$  (en donde el enlace frontal denota un enlace que se une con un átomo de carbono  $C^1$  mientras que el enlace posterior denota un enlace que se une con un átomo de carbono  $C^2$ ) es un grupo alquileo que tiene de 2 a 6 átomos de carbono que puede haberse sustituido y que puede incluir además un enlace éter, un enlace éster, un grupo amino secundario, un grupo tioéter, o estos, y

35 la fórmula  $-A^2-$  (en donde el enlace frontal denota un enlace que se une con un átomo de carbono  $C^1$  mientras que el enlace posterior denota un enlace que se une con un átomo de carbono  $C^2$ ) es un grupo alquileo que tiene de 4 a 10 átomos de carbono que puede haberse sustituido y que puede incluir además un enlace éter, un enlace éster, un grupo amino secundario, un grupo tioéter, o estos.

40 No está claro por qué un compuesto representado por la fórmula general (I) puede producirse por escisión oxidativa de un compuesto de olefina tetrasustituida bicíclica usando peróxido de hidrógeno en presencia de un catalizador de ácido o en presencia de un compuesto de ácido túngstico. Sin embargo, dado que la reacción no avanzó en un compuesto de olefina tetrasustituida acíclica o monocíclica, puede considerarse que las dos estructuras anulares restringen la flexibilidad de los cuatro enlaces formados como dobles enlaces, lo que hizo posible la escisión oxidativa incluso utilizando un agente oxidante relativamente suave, tal como peróxido de hidrógeno.

45 En la fórmula (II) y la fórmula (I) anteriores, "un grupo alquileo que tiene de 2 a 6 átomos de carbono" en la expresión "un grupo alquileo que tiene de 2 a 6 átomos de carbono que puede haberse sustituido y que puede incluir además un enlace éter, un enlace éster, un grupo amino secundario, un grupo tioéter, o estos" en la fórmula  $-A^1-$  se representa, por ejemplo, por la fórmula  $-(CH_2)_2-$ , fórmula  $-(CH_2)_3-$ , fórmula  $-(CH_2)_4-$ , fórmula  $-(CH_2)_5-$ , o la fórmula  $-(CH_2)_6-$ , y es preferiblemente, la fórmula  $-(CH_2)_3-$  o la fórmula  $-(CH_2)_4-$ . Además, el grupo alquileo mencionado anteriormente que tiene de 2 a 6 átomos de carbono que puede haberse sustituido es preferiblemente un grupo alquileo que tiene 3 o 4 átomos de carbono que puede haberse sustituido.

55 En la fórmula (II) y la fórmula (I) anteriores, "un grupo alquileo que tiene de 2 a 6 átomos de carbono que puede incluir además un enlace éter, un enlace éster, un grupo amino secundario, un grupo tioéter, o estos" en la expresión "un grupo alquileo que tiene de 2 a 6 átomos de carbono que puede haberse sustituido y que puede incluir además un enlace éter, un enlace éster, un grupo amino secundario, un grupo tioéter, o estos" en la fórmula  $-A^1-$  es un grupo

- alquileo que tiene de 2 a 6 átomos de carbono que incluye, en combinación, al menos uno seleccionado del grupo que consiste en, por ejemplo, un enlace éter (-O-), un enlace éster (-C(=O)-O- o -O-C(=O)-), un grupo amino secundario (-NH-), y un grupo tioéter (-S-). Sin embargo, el átomo de carbono del enlace éster no se incluye en los 2 a 6 átomos de carbono. Ejemplos del "grupo alquileo que tiene de 2 a 6 átomos de carbono que puede incluir además un enlace éter, un enlace éster, un grupo amino secundario, un grupo tioéter, o estos" incluyen la fórmula -CH<sub>2</sub>-O-CH<sub>2</sub>-, fórmula -CH<sub>2</sub>-C(=O)-O-CH<sub>2</sub>-, fórmula -CH<sub>2</sub>-NH-CH<sub>2</sub>-, fórmula -CH<sub>2</sub>-S-CH<sub>2</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-O-CH<sub>2</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-NH-(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>3</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>5</sub>-, y la fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>6</sub>-, y es preferiblemente la fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>3</sub>- o la fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>-.
- 5
- 10 En la fórmula (II) y la fórmula (I) anteriores, "un grupo alquileo que tiene de 4 a 10 átomos de carbono" en la expresión "un grupo alquileo que tiene de 4 a 10 átomos de carbono que puede haberse sustituido y que puede incluir además un enlace éter, un enlace éster, un grupo amino secundario, un grupo tioéter, o estos" en la fórmula -A<sup>2</sup>- se representa, por ejemplo, por la fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>5</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>6</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>7</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>8</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>9</sub>-, o la fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>10</sub>-, y es preferiblemente la fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>6</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>8</sub>-, o la fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>10</sub>-, más preferiblemente la fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>6</sub>-, o la fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>10</sub>-.
- 15 Además, el grupo alquileo mencionado anteriormente que tiene de 4 a 10 átomos de carbono que puede haberse sustituido es preferiblemente un grupo alquileo que tiene 4, 6, 8 ó 10 átomos de carbono, más preferiblemente un grupo alquileo que tiene 4, 6 ó 10 átomos de carbono, cada uno de los cuales puede haberse sustituido.
- 20 En la fórmula (II) y la fórmula (I) anteriores, "un grupo alquileo que tiene de 4 a 10 átomos de carbono que puede incluir además un enlace éter, un enlace éster, un grupo amino secundario, un grupo tioéter, o estos" en la expresión "un grupo alquileo que tiene de 4 a 10 átomos de carbono que puede haberse sustituido y que puede incluir además un enlace éter, un enlace éster, un grupo amino secundario, un grupo tioéter, o estos" en la fórmula -A<sup>2</sup>- es un grupo alquileo que tiene de 4 a 10 átomos de carbono que incluye, en combinación, al menos uno seleccionado del grupo que consiste en, por ejemplo, un enlace éter (-O-), un enlace éster (-C(=O)-O- o -O-C(=O)-), un grupo amino secundario (-NH-), y un grupo tioéter (-S-). Sin embargo, el átomo de carbono del enlace éster no se incluye en los 4 a 10 átomos de carbono. Ejemplos del "grupo alquileo que tiene de 4 a 10 átomos de carbono que puede incluir además un enlace éter, un enlace éster, un grupo amino secundario, un grupo tioéter, o estos" incluyen la fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-O-(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-NH-(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>5</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>6</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>7</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>8</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>9</sub>-, y la fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>10</sub>-, y es preferiblemente la fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-O-(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>6</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>8</sub>-, o la fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>10</sub>-, más preferiblemente la fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>6</sub>-, o la fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>10</sub>-.
- 25
- 30
- 35 El "grupo alquileo que tiene de 2 a 6 átomos de carbono que puede haberse sustituido y que puede incluir además un enlace éter, un enlace éster, un grupo amino secundario, un grupo tioéter, o estos" en la fórmula -A<sup>1</sup>- y el "grupo alquileo que tiene de 4 a 10 átomos de carbono que puede haberse sustituido y que puede incluir además un enlace éter, un enlace éster, un grupo amino secundario, un grupo tioéter, o estos" en la fórmula -A<sup>2</sup>- son "un grupo alquileo que tiene de 2 a 6 átomos de carbono que puede incluir además un enlace éter, un enlace éster, un grupo amino secundario, un grupo tioéter, o estos" y "un grupo alquileo que tiene de 4 a 10 átomos de carbono que puede incluir además un enlace éter, un enlace éster, un grupo amino secundario, un grupo tioéter, o estos", respectivamente, cada uno de los cuales puede tener al menos un sustituyente, preferiblemente uno o dos sustituyentes. Ejemplos del sustituyente incluyen un grupo alquilo, un grupo alcoxilo, un grupo alquilamino, un grupo alcoxycarbonilo, un grupo alcanóilo, un grupo arilo, un grupo aralquilo, un grupo ariloxilo, un grupo aciloxilo, un grupo carboxilo, un átomo de halógeno, un anillo de carbono, y un anillo heterocíclico, y es preferiblemente un grupo alquilo, un grupo alcoxycarbonilo, o un grupo alcoxilo, más preferiblemente un grupo alquilo.
- 40
- 45
- El grupo alquilo es, por ejemplo, un grupo alquilo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, preferiblemente un grupo alquilo que tiene de 1 a 4 átomos de carbono, y más preferiblemente un grupo alquilo que tiene 1 o 2 átomos de carbono.
- 50
- El grupo alcoxilo es, por ejemplo, un grupo alcoxilo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, preferiblemente un grupo alcoxilo que tiene de 1 a 4 átomos de carbono, y más preferiblemente un grupo alcoxilo que tiene 1 o 2 átomos de carbono.
- 55
- El grupo alquilamino es, por ejemplo, un grupo alquilamino que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, preferiblemente un grupo alquilamino que tiene de 1 a 4 átomos de carbono, y más preferiblemente un grupo alquilamino que tiene 1 o 2 átomos de carbono. El grupo alquilamino puede ser un grupo monoalquilamino o un grupo dialquilamino.
- 60
- El grupo alcoxycarbonilo es, por ejemplo, un grupo alcoxycarbonilo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono en el resto alquilo, preferiblemente un grupo alcoxycarbonilo que tiene de 1 a 4 átomos de carbono en el resto alquilo, y más preferiblemente un grupo alcoxycarbonilo que tiene 1 ó 2 átomos de carbono en el resto alquilo.
- 65
- El grupo alcanóilo es, por ejemplo, un grupo alcanóilo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono en el resto alquilo, preferiblemente un grupo alcanóilo que tiene de 1 a 4 átomos de carbono en el resto alquilo, y más preferiblemente un grupo alcanóilo que tiene 1 ó 2 átomos de carbono en el resto alquilo.

El grupo arilo es, por ejemplo, un grupo arilo que tiene de 6 a 10 átomos de carbono.

El grupo aralquilo, que denota un grupo arilalquilo, es, por ejemplo, un grupo aralquilo que tiene de 6 a 10 átomos de carbono en el resto arilo y de 1 a 6 átomos de carbono en el resto alquilo, preferiblemente un grupo aralquilo que tiene de 6 a 10 átomos de carbono en el resto arilo y de 1 a 4 átomos de carbono en el resto alquilo, y más preferiblemente un grupo aralquilo que tiene de 6 a 10 átomos de carbono en el resto arilo y 1 ó 2 átomos de carbono en el resto alquilo.

El grupo ariloxilo es, por ejemplo, un grupo ariloxilo que tiene de 6 a 10 átomos de carbono.

El grupo aciloxilo es, por ejemplo, un grupo alquilcarboniloxilo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono en el resto alquilo, preferiblemente un grupo alquilcarboniloxilo que tiene de 1 a 4 átomos de carbono en el resto alquilo, y más preferiblemente un grupo alquilcarboniloxilo que tiene 1 ó 2 átomos de carbono en el resto alquilo.

Los ejemplos del átomo de halógeno incluyen flúor, cloro, bromo y yodo.

El anillo de carbono denota hidrocarburo cíclico insaturado o saturado y ejemplos de los mismos incluyen hidrocarburo cíclico saturado que tiene de 3 a 10 átomos de carbono e hidrocarburo cíclico insaturado que tiene de 4 a 10 átomos de carbono.

El anillo heterocíclico denota hidrocarburo cíclico insaturado o saturado incluyendo un heteroátomo (por ejemplo, oxígeno, nitrógeno o azufre). Ejemplos de los mismos incluyen hidrocarburo cíclico saturado que tiene de 3 a 10 átomos de carbono incluyendo un heteroátomo e hidrocarburo cíclico insaturado que tiene de 4 a 10 átomos de carbono incluyendo un heteroátomo.

Dos o más de los sustituyentes pueden unirse entre sí formando un anillo de carbono o un anillo heterocíclico.

Ejemplos del "grupo alquileo que tiene de 2 a 6 átomos de carbono que puede haberse sustituido y que puede incluir además un enlace éter, un enlace éster, un grupo amino secundario, un grupo tioéter, o estos" en la fórmula -A<sup>1</sup>- incluyen la fórmula -CH<sub>2</sub>-O-CH<sub>2</sub>-, fórmula -CH<sub>2</sub>-C(=O)-O-CH<sub>2</sub>-, fórmula -CH<sub>2</sub>-NH-CH<sub>2</sub>-, fórmula -CH<sub>2</sub>-S-CH<sub>2</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-O-CH<sub>2</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-NH-(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>3</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>5</sub>- y la fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>6</sub>-, cada uno de los cuales puede haberse sustituido. Es preferiblemente la fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>3</sub>- o la fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>-, más preferiblemente la fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>3</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>-, o la fórmula -CH<sub>2</sub>-CH(CH<sub>3</sub>)-CH<sub>2</sub>-, cada uno de los cuales puede haberse sustituido.

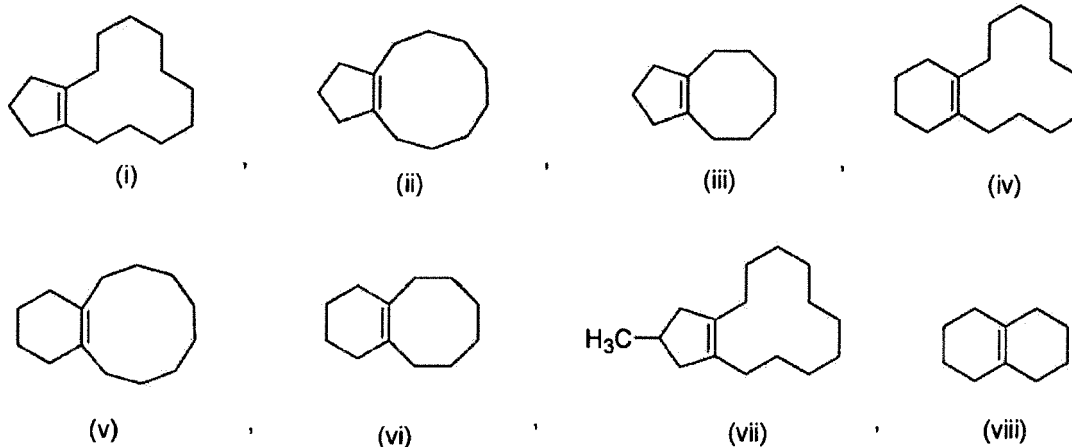
Ejemplos del "grupo alquileo que tiene de 4 a 10 átomos de carbono que puede haberse sustituido y que puede incluir además un enlace éter, un enlace éster, un grupo amino secundario, un grupo tioéter, o estos" en la fórmula -A<sup>2</sup>- incluyen la fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-O-(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-NH-(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>5</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>6</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>7</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>8</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>9</sub>-, y la fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>10</sub>-, cada uno de los cuales puede haberse sustituido. Es preferiblemente la fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-O-(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>6</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>8</sub>-, o la fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>10</sub>-, más preferiblemente la fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-O-(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>6</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>8</sub>-, o la fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>10</sub>-, y además preferiblemente la fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>6</sub>-, o la fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>10</sub>-, cada uno de los cuales puede haberse sustituido.

Desde el punto de vista de uso de un compuesto resultante de fórmula general (I) como precursor de un compuesto de perfume, la fórmula -A<sup>1</sup>- (en donde el enlace frontal denota un enlace que se une con un átomo de carbono C<sup>1</sup> mientras que el enlace posterior denota un enlace que se une con un átomo de carbono C<sup>2</sup>) es preferiblemente un grupo alquileo que tiene 3 ó 4 átomos de carbono, más preferiblemente la fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>3</sub>-, fórmula -CH<sub>2</sub>-CH(CH<sub>3</sub>)-CH<sub>2</sub>-, o la fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>-, y además preferiblemente la fórmula -CH<sub>2</sub>-CH(CH<sub>3</sub>)-CH<sub>2</sub>-, cada uno de los cuales puede haberse sustituido.

Desde el punto de vista de uso de un compuesto resultante de fórmula general (I) como precursor de un compuesto de perfume, la fórmula -A<sup>2</sup>- (en donde el enlace frontal denota un enlace que se une con un átomo de carbono C<sup>1</sup> mientras que el enlace posterior denota un enlace que se une con un átomo de carbono C<sup>2</sup>) es preferiblemente un grupo alquileo que tiene 4, 6, 8 ó 10 átomos de carbono, más preferiblemente la fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>-, fórmula -CH<sub>2</sub>-CH(CH<sub>3</sub>)-CH<sub>2</sub>-CH<sub>2</sub>-, fórmula -CH<sub>2</sub>-CH<sub>2</sub>-CH(CH<sub>3</sub>)-CH<sub>2</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>6</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>8</sub>-, o la fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>10</sub>-, además preferiblemente la fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>6</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>8</sub>-, o la fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>10</sub>-, todavía además preferiblemente la fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>6</sub>-, o la fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>10</sub>-, y aún además preferiblemente la fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>10</sub>-, cada uno de los cuales puede haberse sustituido.

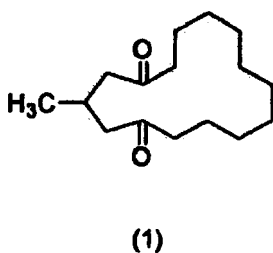
El compuesto representado por la fórmula general (II) se representa, por ejemplo, por las siguientes fórmulas. Desde el punto de vista de uso de un compuesto resultante de fórmula general (I) como precursor de un compuesto de perfume, es preferiblemente un compuesto representado por la fórmula (i), un compuesto representado por la fórmula (iii), un compuesto representado por la fórmula (vii), o un compuesto representado por la fórmula (viii), más preferiblemente un compuesto representado por la fórmula (vii). El compuesto representado por la fórmula (vii) es 14-metilbicyclo[10.3.0]pentadeceno[1(12)].

[Fórmula química 3]



- 5 El compuesto representado por la fórmula general (I) es, por ejemplo, 3-metil-1,5-ciclopentadecanodiona representado por la siguiente fórmula (1).

[Fórmula química 4]



- 10 Según la invención, el catalizador de ácido es un ácido de Bronsted que tiene un pKa en agua de no más de 2,0.
- 15 Puesto que el ácido de Bronsted que tiene un pKa (en agua) de no más de 2,0, por ejemplo, puede usarse ácido sulfúrico (pKa=1,96), ácido fosfórico (pKa=1,83), ácido trifluoroacético (pKa=-0,3), o ácido p-toluenosulfónico (pKa=-2,8).
- 20 En la presente divulgación, el compuesto de ácido tungstico es más preferiblemente de un tipo de ácido que genera sustancialmente protón (H<sup>+</sup>) cuando reacciona con peróxido de hidrógeno formando peróxido de metal.
- Ejemplos del compuesto de ácido tungstico incluyen ácido tungstico, ácido isopolítungstico y ácido heteropolítungstico, y es preferiblemente ácido tungstico.
- 25 Ejemplos del ácido tungstico incluyen ácido ortotungstico (H<sub>2</sub>WO<sub>4</sub>), ácido metatungstico (H<sub>6</sub>[H<sub>2</sub>W<sub>12</sub>O<sub>40</sub>]), ácido paratungstico (H<sub>6</sub>[H<sub>10</sub>W<sub>12</sub>O<sub>46</sub>]) y ácido fosfotungstico (H<sub>3</sub>PW<sub>12</sub>O<sub>40</sub>(nH<sub>2</sub>O)). Particularmente, se usa preferiblemente ácido ortotungstico (H<sub>2</sub>WO<sub>4</sub>). Los ácidos tungsticos pueden usarse solos o dos o más de ellos pueden usarse en combinación.
- 30 La estructura de hidratación del ácido ortotungstico no está particularmente limitada y pueden usarse monohidrato (H<sub>2</sub>WO<sub>4</sub>) o dehidrato (H<sub>4</sub>WO<sub>5</sub>) pero se usa preferiblemente monohidrato. El ácido ortotungstico puede usarse solo o pueden combinarse juntos dos o más de ellos.
- 35 Según la invención, se usan un ácido de Bronsted que tiene un pKa de no más de 2,0 y un compuesto de ácido tungstico, se usa más preferiblemente ácido tungstico, y se usa además preferiblemente ácido ortotungstico. En la presente divulgación, el catalizador de ácido y el compuesto de ácido tungstico pueden usarse simultáneamente o puede usarse sólo uno de ellos.
- 40 Desde el punto de vista de mejorar el rendimiento de la reacción, la cantidad del catalizador de ácido que va a usarse es preferiblemente de 1:0,001 a 1:0,7, más preferiblemente de 1:0,005 a 10,5, y además preferiblemente de 1:0,01 a 1:0,3, en cuanto a razón molar del compuesto de fórmula (II) con respecto al catalizador de ácido (el

compuesto de fórmula (II):el catalizador de ácido).

Desde el punto de vista de mejorar el rendimiento de la reacción, la cantidad del compuesto de ácido tungstico que va a usarse es preferiblemente de 1:0,001 a 1:0,7, más preferiblemente de 1:0,005 a 1:0,5, y además preferiblemente de 1:0,01 a 1:0,3, en cuanto a razón molar del compuesto de fórmula (II) con respecto al compuesto de ácido tungstico (el compuesto de fórmula (II): el compuesto de ácido tungstico).

Desde los puntos de vista de coste de producción y eficacia de producción, la cantidad del peróxido de hidrógeno que va a usarse es preferiblemente de 1:10 a 1:2, más preferiblemente de 1:7 a 1:2, y además preferiblemente de 1:5 a 1:2,5, en cuanto a razón molar del compuesto de fórmula (II) con respecto al peróxido de hidrógeno (el compuesto de fórmula (II):el peróxido de hidrógeno).

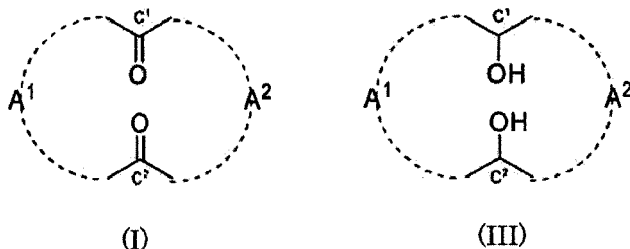
La concentración del peróxido de hidrógeno que va a usarse en la presente divulgación no está particularmente limitada pero en general, es del 1 al 80% en masa. Desde los puntos de vista de seguridad y rendimiento de la reacción, se selecciona preferiblemente del intervalo del 30 al 60% en masa.

La temperatura de reacción empleada en el procedimiento de la presente divulgación es generalmente de 0°C a 100°C. Desde el punto de vista de mejorar el rendimiento de la reacción con seguridad, es preferiblemente al menos de 20°C pero es preferiblemente no mayor de 80°C, más preferiblemente no mayor de 50°C.

En el procedimiento de la presente divulgación, la reacción puede llevarse a cabo en presencia de un disolvente orgánico. El disolvente orgánico no está particularmente limitado siempre que sea un disolvente que permita que la disolución de reacción sea homogénea. Ejemplos del disolvente orgánico incluyen éteres y alcoholes. Particularmente, desde el punto de vista del rendimiento de la reacción, el disolvente orgánico que va a usarse es preferiblemente alcohol, más preferiblemente alcohol alifático saturado, y además preferiblemente alcohol t-butílico.

La presente divulgación se refiere además a un procedimiento para producir un compuesto representado por la fórmula general (III) (a continuación en el presente documento puede denominarse "compuesto de fórmula (III)"), incluyendo el procedimiento reducir un compuesto representado por la fórmula general (I) para obtener el compuesto representado por la fórmula general (III).

[Fórmula química 5]



En las fórmulas anteriores,

la fórmula  $-A^1-$  (en donde el enlace frontal denota un enlace que se une con un átomo de carbono  $C^1$  mientras que el enlace posterior denota un enlace que se une con un átomo de carbono  $C^2$ ) es un grupo alquileo que tiene de 2 a 6 átomos de carbono que puede haberse sustituido y que puede incluir además un enlace éter, un enlace éster, un grupo amino secundario, un grupo tioéter, o estos, y

la fórmula  $-A^2-$  (en donde el enlace frontal denota un enlace que se une con un átomo de carbono  $C^1$  mientras que el enlace posterior denota un enlace que se une con un átomo de carbono  $C^2$ ) es un grupo alquileo que tiene de 4 a 10 átomos de carbono que puede haberse sustituido y que puede incluir además un enlace éter, un enlace éster, un grupo amino secundario, un grupo tioéter, o estos.

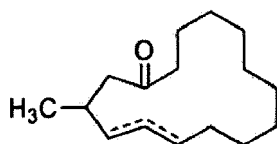
La definición de la fórmula  $-A^1-$ , "un grupo alquileo que tiene de 2 a 6 átomos de carbono que puede haberse sustituido y que puede incluir además un enlace éter, un enlace éster, un grupo amino secundario, un grupo tioéter, o estos," y la definición de la fórmula  $-A^2-$ , "un grupo alquileo que tiene de 4 a 10 átomos de carbono que puede haberse sustituido y que puede incluir además un enlace éter, un enlace éster, un grupo amino secundario, un grupo tioéter, o estos," en la fórmula (III) son iguales que la definición de la fórmula  $-A^1-$ , "un grupo alquileo que tiene de 2 a 6 átomos de carbono que puede haberse sustituido y que puede incluir además un enlace éter, un enlace éster, un grupo amino secundario, un grupo tioéter, o estos," y la definición de la fórmula  $-A^2-$ , "un grupo alquileo que tiene de 4 a 10 átomos de carbono que puede haberse sustituido y que puede incluir además un enlace éter, un grupo amino secundario, un grupo tioéter, o estos," en la fórmula (I) y la fórmula (II), respectivamente.

La presente divulgación proporciona además un procedimiento para producir un compuesto de cetona cíclica



representado por la fórmula (3). El compuesto de cetona cíclica representado por la fórmula (3) es una mezcla de 3-metil-4-ciclopentadecen-1-ona y 3-metil-5-ciclopentadecen-1-ona y se conoce como Muscenone (fabricado por Firmenich). El compuesto de cetona cíclica representado por la fórmula (3), que es un material de fragancia a almizcle, es un compuesto cíclico que tiene excelente biodegradabilidad y retención de fragancia y tiene una sensación elegante. Existe la necesidad de desarrollar un procedimiento de producción que cumple las necesidades crecientes recientes de fragancias de almizcle sintético, tiene alta seguridad de producción, y tiene excelente eficacia de producción. El procedimiento para producir un compuesto de cetona cíclica representado por la fórmula (3), que usa 3-metil-1,5-ciclopentadecanodiona (1) que se obtiene mediante el procedimiento de la presente divulgación, incluye o bien una de la siguiente etapa (a) o bien la etapa (b).

[Fórmula química 6]

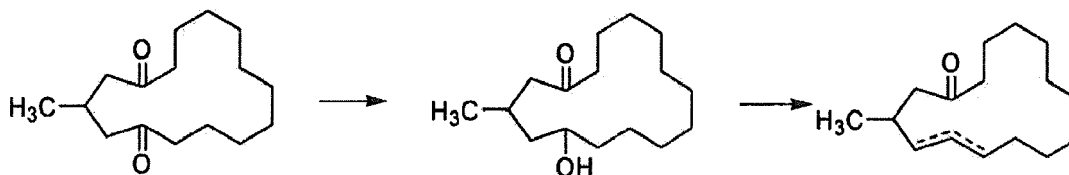


(3)

Una etapa (a) de reducir parcialmente la 3-metil-1,5-ciclopentadecanodiona y después deshidratarla para obtener el compuesto de cetona cíclica representado por la fórmula (3), o una etapa (b) de reducir la 3-metil-1,5-ciclopentadecanodiona, después enoleterificarla, y posteriormente, desciclarla para obtener Muscenone.

La etapa (a) incluye: por ejemplo, una etapa (a-1) de reducir parcialmente la 3-metil-1,5-ciclopentadecanodiona (1) para obtener 3-metilciclopentadecanol-5-ona (2); y una etapa (a-2) de deshidratar la 3-metilciclopentadecanol-5-ona (2) para obtener el compuesto de cetona cíclica representado por la fórmula (3).

[Fórmula química 7]



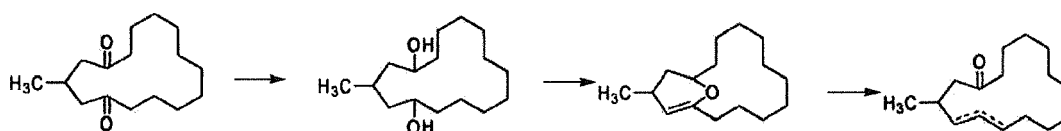
(1)

(2)

(3)

La etapa (b) incluye: por ejemplo, una etapa (b-1) de reducir la 3-metil-1,5-ciclopentadecanodiona (1) para obtener 3-metilciclopentadecano-1,5-diol (4); una etapa (b-2) de oxidar y enoleterificar parcialmente el 3-metilciclopentadecano-1,5-diol (4) para obtener 16-oxa-3-metilbicyclo[10.3.1]pentadec-1-eno (5); y una etapa (b-3) de desciclar el 16-oxa-3-metilbicyclo[10.3.1]pentadec-1-eno (5) para obtener el compuesto de cetona cíclica representado por la fórmula (3).

[Fórmula química 8]



(1)

(4)

(5)

(3)

La 3-metil-1,5-ciclopentadecanodiona (1) puede obtenerse mediante un procedimiento para producir un compuesto representado por la fórmula (1) de la presente divulgación.

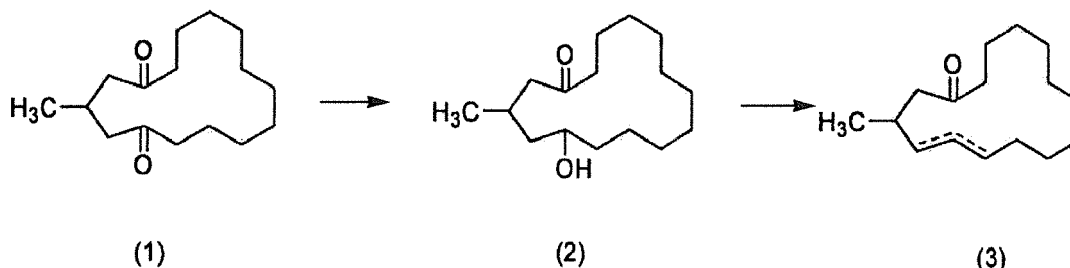
En primer lugar, se describe un procedimiento para producir un compuesto de cetona cíclica representado por la fórmula (3), que incluye la etapa (a).

La etapa (a) incluye: una etapa (a-1) de reducir parcialmente la 3-metil-1,5-ciclopentadecanodiona (1) para obtener

3-metilciclopentadecanol-5-ona (2), y una etapa (a-2) de deshidratar la 3-metilciclopentadecanol-5-ona (2) para obtener el compuesto de cetona cíclica representado por la fórmula (3).

[Fórmula química 9]

5



Ejemplos del procedimiento para reducir parcialmente la 3-metil-1,5-ciclopentadecanodiona (1) en la etapa (a-1) incluyen un procedimiento en el que se usa hidruro de metal, por ejemplo, borohidruro de sodio o hidruro de sodio, y un procedimiento en el que se lleva a cabo hidrogenación en presencia de un catalizador de metal. Desde los puntos de vista de seguridad y rendimiento de la reacción, se prefiere el procedimiento en el que se lleva a cabo hidrogenación en presencia de un catalizador de metal.

10

El catalizador de metal que va usarse en el procedimiento en el que se lleva a cabo hidrogenación puede ser, por ejemplo, paladio/carbono o níquel Raney. Desde el punto de vista de que pueda llevarse a cabo hidrogenación en condiciones de reacción suaves, el catalizador de metal que va a usarse en el procedimiento en el que se lleva a cabo hidrogenación es preferiblemente níquel Raney.

15

En la etapa (a-1), desde los puntos de vista de rendimiento de la reacción y coste, la cantidad del catalizador de metal que va a usarse con respecto a la 3-metil-1,5-ciclopentadecanodiona (1) es preferiblemente de 1:0,01 a 1:1, más preferiblemente de 1:0,1 a 1:0,5, en cuanto a razón molar de la 3-metil-1,5-ciclopentadecanodiona (1) con respecto al catalizador de metal [la 3-metil-1,5-ciclopentadecanodiona (1):el catalizador de metal].

20

La temperatura de reacción en la etapa (a-1) es preferiblemente de al menos 0°C desde el punto de vista de mejorar el rendimiento de la reacción pero es preferiblemente no mayor de 100°C, más preferiblemente no mayor de 50°C, y además preferiblemente no mayor de 30°C desde el punto de vista de evitar reacciones secundarias.

25

Desde el punto de vista de mejorar el rendimiento de la reacción, el tiempo de reacción en la etapa (a-1) es preferiblemente de al menos 0,1 horas, más preferiblemente de al menos 0,5 horas, pero es preferiblemente no más de diez horas, más preferiblemente no más de tres horas, y además preferiblemente no más de una hora.

30

Desde los puntos de vista de seguridad y selectividad de la reacción, la presión de hidrógeno para la hidrogenación es preferiblemente de al menos 0,1 MPa pero es preferiblemente no mayor de 2,0 MPa, más preferiblemente no mayor de 1,0 MPa.

35

En la etapa (a-1), la reacción puede llevarse a cabo en presencia de un disolvente orgánico. El disolvente orgánico no está limitado particularmente siempre que sea un disolvente que disuelve un reactivo. Ejemplos del disolvente orgánico incluyen alcoholes. Particularmente, desde los puntos de vista de eficacia de producción y coste, se usa más preferiblemente un alcohol inferior que tiene de 1 a 3 átomos de carbono.

40

Ejemplos del procedimiento para deshidratar la 3-metilciclopentadecanol-5-ona (2) en la etapa (a-2) incluyen un procedimiento para deshidratarla en presencia de ácido.

Ejemplos del ácido que va a usarse en la etapa (a-2) incluyen ácido sulfúrico, ácido fosfórico y ácido bencenosulfónico. Desde los puntos de vista de carga de equipos y rendimiento de la reacción, se prefiere ácido bencenosulfónico.

45

En la etapa (a-2), desde los puntos de vista de coste de producción y rendimiento de la reacción, la cantidad del ácido que va a usarse con respecto a la 3-metilciclopentadecanol-5-ona (2) es preferiblemente de 1:0,01 a 1:1, más preferiblemente de 1:0,05 a 1:0,3, en cuanto a razón molar de la 3-metilciclopentadecanol-5-ona (2) con respecto al ácido (la 3-metilciclopentadecanol-5-ona (2):el ácido).

50

La temperatura de reacción en la etapa (a-2) es preferiblemente de al menos 20°C, más preferiblemente al menos 50°C, y además preferiblemente al menos 70°C desde el punto de vista de mejorar el rendimiento de la reacción, pero es preferiblemente no mayor de 200°C, más preferiblemente no mayor de 150°C, y además preferiblemente no mayor de 130°C desde el punto de vista de la seguridad.

55

Desde el punto de vista de mejorar el rendimiento de la reacción, el tiempo de reacción en la etapa (a-2) es preferiblemente de al menos 0,25 horas, más preferiblemente de al menos 0,5 horas, pero es preferiblemente no más de 20 horas, más preferiblemente no más de diez horas, y además preferiblemente no más de tres horas.

5 En la etapa (a-2), la reacción puede llevarse a cabo en presencia de un disolvente orgánico. El disolvente orgánico no está limitado particularmente siempre que sea un disolvente que forme un azeotropo con agua. Ejemplos del disolvente orgánico incluyen hidrocarburos, pero desde el punto de vista de eficacia de deshidratación, se usa más preferiblemente tolueno.

10 Además, se describe un procedimiento para producir un compuesto de cetona cíclica representado por la fórmula (3), que incluye la etapa (b).

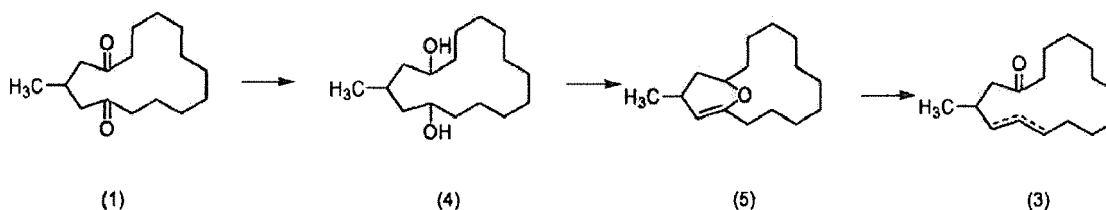
La etapa (b) incluye:

15 una etapa (b-1) de reducir la 3-metil-1,5-ciclopentadecanodiona (1) para obtener 3-metilciclopentadecano-1,5-diol (4);

una etapa (b-2) de oxidar y enoleterificar parcialmente el 3-metilciclopentadecano-1,5-diol (4) para obtener 16-oxa-3-metilbicyclo[10.3.1]pentadec-1-eno (5); y

20 una etapa (b-3) de desciclar el 16-oxa-3-metilbicyclo[10.3.1]pentadec-1-eno (5) para obtener el compuesto de cetona cíclica representado por la fórmula (3).

[Fórmula química 10]



25 Ejemplos del procedimiento para reducir parcialmente la 3-metil-1,5-ciclopentadecanodiona (1) en la etapa (b-1) incluyen un procedimiento en el que se usa hidruro de metal, por ejemplo, borohidruro de sodio o hidruro de sodio, y un procedimiento en el que se lleva a cabo hidrogenación en presencia de un catalizador de metal. Desde los puntos de vista de seguridad y rendimiento de la reacción, se prefiere el procedimiento en el que se lleva a cabo hidrogenación en presencia de un catalizador de metal.

30 El catalizador de metal que va a usarse en el procedimiento en el que se lleva a cabo hidrogenación puede ser, por ejemplo, paladio/carbono o níquel Raney. Desde el punto de vista de que pueda llevarse a cabo hidrogenación en condiciones de reacción suaves, se usa preferiblemente níquel Raney.

35 En la etapa (b-1), desde los puntos de vista de rendimiento de la reacción y coste, la cantidad del catalizador de metal que va a usarse con respecto a la 3-metil-1,5-ciclopentadecanodiona (1) es preferiblemente de 1:0,01 a 1:1, más preferiblemente de 1:0,1 a 1:0,5, en cuanto a razón molar de la 3-metil-1,5-ciclopentadecanodiona (1) con respecto al catalizador de metal (la 3-metil-1,5-ciclopentadecanodiona (1):el catalizador de metal).

40 La temperatura de reacción en la etapa (b-1) es preferiblemente de al menos 0°C desde el punto de vista de mejorar el rendimiento de la reacción pero es preferiblemente no mayor de 100°C, más preferiblemente no mayor de 50°C, y además preferiblemente no mayor de 30°C desde el punto de vista de evitar reacciones secundarias.

45 Desde el punto de vista de mejorar el rendimiento de la reacción, el tiempo de reacción en la etapa (b-1) es preferiblemente de al menos una hora, más preferiblemente al menos cinco horas, y además preferiblemente al menos diez horas, pero es preferiblemente no más de 30 horas, más preferiblemente no más de 25 horas.

50 Desde los puntos de vista de seguridad y selectividad de la reacción, la presión de hidrógeno para la hidrogenación es preferiblemente de al menos 0,1 MPa pero es preferiblemente no mayor de 2,0 MPa, más preferiblemente no mayor de 1,0 MPa.

55 En la etapa (b-1), la reacción puede llevarse a cabo en presencia de un disolvente orgánico. El disolvente orgánico no está limitado particularmente siempre que sea un disolvente que disuelva un reactivo. Ejemplos del disolvente orgánico incluyen alcoholes. Particularmente, desde los puntos de vista de eficacia de producción y coste, se usa más preferiblemente un alcohol inferior que tiene de 1 a 3 átomos de carbono.

Ejemplos del procedimiento para oxidar y enoleterificar parcialmente el 3-metilciclopentadecano-1,5-diol (4) en la

etapa (b-2) incluyen un procedimiento para oxidar y enoleterificarlo parcialmente en presencia de un catalizador de metal.

5 El catalizador de metal que va a usarse en la etapa (b-2) puede ser un catalizador de metal que tiene oxidabilidad, por ejemplo, óxido de aluminio, óxido de hierro o cobre Raney. Sin embargo, desde el punto de vista de mejorar el rendimiento de la reacción, se usa preferiblemente cobre Raney.

10 En la etapa (b-2), la cantidad del catalizador de metal que va a usarse con respecto al 3-metilciclopentadecano-1,5-diol (4) es preferiblemente de 1:0,01 a 1:1 desde los puntos de vista de rendimiento de la reacción y coste y es más preferiblemente de 1:0,05 a 1:0,3 desde los puntos de vista de reducir el tiempo de reacción y pérdida, en cuanto a razón molar del 3-metilciclopentadecano-1,5-diol (4) con respecto al catalizador de metal (el 3-metilciclopentadecano-1,5-diol (4):el catalizador de metal).

15 La temperatura de reacción en la etapa (b-2) es preferiblemente de al menos 100°C, más preferiblemente de al menos 120°C desde el punto de vista de mejorar el rendimiento de la reacción, pero es preferiblemente no mayor de 300°C, más preferiblemente no mayor de 200°C, y además preferiblemente no mayor de 180°C desde el punto de vista de evitar reacciones secundarias.

20 El tiempo de reacción en la etapa (b-2) es preferiblemente de al menos una hora, más preferiblemente al menos dos horas desde el punto de vista de mejorar el rendimiento de la reacción, pero es preferiblemente no más de 20 horas, más preferiblemente no más de diez horas, y además preferiblemente no más de cinco horas desde el punto de vista de mejorar la productividad.

25 Ejemplos del procedimiento para desciclar el 16-oxa-3-metilbicyclo[10.3.1]pentadec-1-eno (5) en la etapa (b-3) incluyen un procedimiento para desciclarlo en presencia de ácido.

30 Ejemplos del ácido que va a usarse en la etapa (b-3) incluyen ácido sulfúrico, ácido fosfórico y ácido benzenosulfónico. Desde los puntos de vista de manejabilidad y rendimiento de la reacción, se prefiere ácido fosfórico.

35 En la etapa (b-3), desde los puntos de vista de eficacia de producción y rendimiento de la reacción, la cantidad del ácido que va a usarse con respecto al 16-oxa-3-metilbicyclo[10.3.1]pentadec-1-eno (5) es preferiblemente de 1:0,01 a 1:1, más preferiblemente de 1:0,1 a 1:0,5, en cuanto a razón molar del 16-oxa-3-metilbicyclo[10.3.1]pentadec-1-eno (5) con respecto al ácido (el 16-oxa-3-metilbicyclo[10.3.1]pentadec-1-eno (5):el ácido).

40 La temperatura de reacción en la etapa (b-3) es preferiblemente de al menos 20°C, más preferiblemente de al menos 50°C, y además preferiblemente de al menos 70°C desde el punto de vista de mejorar el rendimiento de la reacción, pero es preferiblemente no mayor de 200°C, más preferiblemente no mayor de 150°C, y además preferiblemente no mayor de 130°C desde el punto de vista de evitar reacciones secundarias.

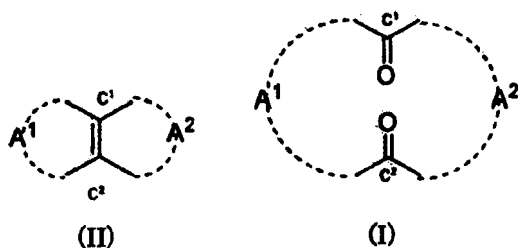
Desde el punto de vista de mejorar el rendimiento de la reacción, el tiempo de reacción en la etapa (b-3) es preferiblemente de al menos 0,5 horas, más preferiblemente de al menos una hora, pero es preferiblemente no más de 20 horas, más preferiblemente no más de diez horas, y además preferiblemente no más de cinco horas.

45 En la etapa (b-3), la reacción puede llevarse a cabo en presencia de un disolvente orgánico. El disolvente orgánico no está limitado particularmente siempre que sea un disolvente que forme un azeotropo con agua. Ejemplos del disolvente orgánico incluyen hidrocarburos, pero desde el punto de vista de eficacia de deshidratación, se usa más preferiblemente tolueno.

50 Con respecto a las realizaciones descritas anteriormente, la presente divulgación divulga además un procedimiento para producir un compuesto representado por la fórmula general (I) y un procedimiento para producir un compuesto de cetona cíclica representado por la fórmula (3).

55 <1> Un procedimiento para producir un compuesto representado por la fórmula general (I), comprendiendo el procedimiento una etapa de someter un compuesto representado por la fórmula general (II) a escisión oxidativa usando peróxido de hidrógeno en presencia de un catalizador de ácido, que es un ácido de Bronsted que tiene un pKa en agua de no más de 2,0, o en presencia de un compuesto de ácido túngstico para obtener el compuesto representado por la fórmula general (I):

60 [Fórmula química 11]



En las fórmulas anteriores,

- 5 la fórmula -A<sup>1</sup>- (en donde el enlace frontal denota un enlace que se une con un átomo de carbono C<sup>1</sup> mientras que el enlace posterior denota un enlace que se une con un átomo de carbono C<sup>2</sup>) es un grupo alquileo que tiene de 2 a 6 átomos de carbono que puede haberse sustituido y que puede incluir además un enlace éter, un enlace éster, un grupo amino secundario, un grupo tioéter, o estos, y
- 10 la fórmula -A<sup>2</sup>- (en donde el enlace frontal denota un enlace que se une con un átomo de carbono C<sup>1</sup> mientras que el enlace posterior denota un enlace que se une con un átomo de carbono C<sup>2</sup>) es un grupo alquileo que tiene de 4 a 10 átomos de carbono que puede haberse sustituido y que puede incluir además un enlace éter, un enlace éster, un grupo amino secundario, un grupo tioéter, o estos.
- 15 <2> El procedimiento para producir un compuesto representado por la fórmula general (I) según el punto <1>, en el que el grupo alquileo que tiene de 2 a 6 átomos de carbono en la fórmula -A<sup>1</sup>- es preferiblemente la fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>3</sub>- o la fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>-.
- 20 <3> El procedimiento para producir un compuesto representado por la fórmula general (I) según el punto <1> o <2>, en el que el grupo alquileo que tiene de 2 a 6 átomos de carbono que puede haberse sustituido en la fórmula -A<sup>1</sup>- es preferiblemente un grupo alquileo que tiene 3 ó 4 átomos de carbono que puede haberse sustituido.
- 25 <4> El procedimiento para producir un compuesto representado por la fórmula general (I) según uno cualquiera de los puntos <1> a <3>, en el que el grupo alquileo que tiene de 2 a 6 átomos de carbono que puede incluir además un enlace éter, un enlace éster, un grupo amino secundario, un grupo tioéter, o estos en la fórmula -A<sup>1</sup>- es uno cualquiera de la fórmula -CH<sub>2</sub>-OCH<sub>2</sub>-, fórmula -CH<sub>2</sub>-C(=O)-O-CH<sub>2</sub>-, fórmula -CH<sub>2</sub>-NH-CH<sub>2</sub>-, fórmula -CH<sub>2</sub>-S-CH<sub>2</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>O<sub>2</sub>-O-CH<sub>2</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-NH-(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>3</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>5</sub>-, y la fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>6</sub>-, y es preferiblemente la fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>3</sub>- o la fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>-.
- 30 <5> El procedimiento para producir un compuesto representado por la fórmula general (I) según uno cualquiera de los puntos <1> a <4>, en el que el grupo alquileo que tiene de 4 a 10 átomos de carbono en la fórmula -A<sup>2</sup>- es preferiblemente la fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>6</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>8</sub>-, o la fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>10</sub>-, más preferiblemente la fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>6</sub>-, o la fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>10</sub>-.
- 35 <6> El procedimiento para producir un compuesto representado por la fórmula general (I) según uno cualquiera de los puntos <1> a <5>, en el que el grupo alquileo que tiene de 4 a 10 átomos de carbono que puede haberse sustituido en la fórmula -A<sup>2</sup>- es preferiblemente un grupo alquileo que tiene 4, 6, 8 ó 10 átomos de carbono, más preferiblemente un grupo alquileo que tiene 4, 6 ó 10 átomos de carbono, cada uno de los cuales puede haberse sustituido.
- 40 <7> El procedimiento para producir un compuesto representado por la fórmula general (I) según uno cualquiera de los puntos <1> a <6>, en el que el grupo alquileo que tiene de 4 a 10 átomos de carbono que puede incluir además un enlace éter, un enlace éster, un grupo amino secundario, un grupo tioéter, o estos en la fórmula -A<sup>2</sup>- es uno cualquiera de la fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-O-(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-NH-(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>5</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>6</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>7</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>8</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>9</sub>-, y la fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>10</sub>-, y es preferiblemente la fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-O-(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>6</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>8</sub>-, o la fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>10</sub>-, más preferiblemente la fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>6</sub>-, o la fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>10</sub>-.
- 50 <8> El procedimiento para producir un compuesto representado por la fórmula general (I) según uno cualquiera de los puntos <1> a <7>, en el que la fórmula -A<sup>1</sup>- y la fórmula -A<sup>2</sup>- puede tener cada una al menos un sustituyente, preferiblemente uno o dos sustituyentes.
- 55 <9> El procedimiento para producir un compuesto representado por la fórmula general (I) según uno cualquiera de los puntos <1> a <8>, en el que el sustituyente es al menos uno seleccionado de un grupo alquilo, un grupo alcoxilo, un grupo alquilamino, un grupo alcocarbonilo, un grupo alcanóilo, un grupo arilo, un grupo aralquilo, un grupo ariloxilo, un grupo aciloxilo, un grupo carboxilo, un átomo de halógeno, un anillo de carbono, y un anillo heterocíclico, y es preferiblemente un grupo alquilo, un grupo alcocarbonilo, o un grupo alcoxilo, más preferiblemente un grupo

alquilo.

<10> El procedimiento para producir un compuesto representado por la fórmula general (I) según el punto <9>, en el que el grupo alquilo es un grupo alquilo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, preferiblemente un grupo alquilo que tiene de 1 a 4 átomos de carbono, y más preferiblemente un grupo alquilo que tiene 1 ó 2 átomos de carbono.

<11> El procedimiento para producir un compuesto representado por la fórmula general (I) según el punto <9>, en el que el grupo alcoxilo es un grupo alcoxilo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, preferiblemente un grupo alcoxilo que tiene de 1 a 4 átomos de carbono, y más preferiblemente un grupo alcoxilo que tiene 1 ó 2 átomos de carbono.

<12> El procedimiento para producir un compuesto representado por la fórmula general (I) según el punto <9>, en el que el grupo alquilamino es un grupo alquilamino que tiene de 1 a 6 átomos de carbono, preferiblemente un grupo alquilamino que tiene de 1 a 4 átomos de carbono, y más preferiblemente un grupo alquilamino que tiene 1 ó 2 átomos de carbono.

<13> El procedimiento para producir un compuesto representado por la fórmula general (I) según el punto <9>, en el que el grupo alcoxycarbonilo es un grupo alcoxycarbonilo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono en el resto alquilo, preferiblemente un grupo alcoxycarbonilo que tiene de 1 a 4 átomos de carbono en el resto alquilo, y más preferiblemente un grupo alcoxycarbonilo que tiene 1 ó 2 átomos de carbono en el resto alquilo.

<14> El procedimiento para producir un compuesto representado por la fórmula general (I) según el punto <9>, en el que el grupo alcanilo es un grupo alcanilo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono en el resto alquilo, preferiblemente un grupo alcanilo que tiene de 1 a 4 átomos de carbono en el resto alquilo, y más preferiblemente un grupo alcanilo que tiene 1 ó 2 átomos de carbono en el resto alquilo.

<15> El procedimiento para producir un compuesto representado por la fórmula general (I) según el punto <9>, en el que el grupo arilo es un grupo arilo que tiene de 6 a 10 átomos de carbono.

<16> El procedimiento para producir un compuesto representado por la fórmula general (I) según el punto <9>, en el que el grupo aralquilo es un grupo aralquilo que tiene de 6 a 10 átomos de carbono en el resto arilo y de 1 a 6 átomos de carbono en el resto alquilo, preferiblemente un grupo aralquilo que tiene de 6 a 10 átomos de carbono en el resto arilo y de 1 a 4 átomos de carbono en el resto alquilo, y más preferiblemente un grupo aralquilo que tiene de 6 a 10 átomos de carbono en el resto arilo y 1 ó 2 átomos de carbono en el resto alquilo.

<17> El procedimiento para producir un compuesto representado por la fórmula general (I) según el punto <9>, en el que el grupo ariloxilo es un grupo ariloxilo que tiene de 6 a 10 átomos de carbono.

<18> El procedimiento para producir un compuesto representado por la fórmula general (I) según el punto <9>, en el que el grupo aciloxilo es un grupo alquilcarboniloxilo que tiene de 1 a 6 átomos de carbono en el resto alquilo, preferiblemente un grupo alquilcarboniloxilo que tiene de 1 a 4 átomos de carbono en el resto alquilo, y más preferiblemente un grupo alquilcarboniloxilo que tiene 1 ó 2 átomos de carbono en el resto alquilo.

<19> El procedimiento para producir un compuesto representado por la fórmula general (I) según el punto <9>, en el que el átomo de halógeno es flúor, cloro, bromo o yodo.

<20> El procedimiento para producir un compuesto representado por la fórmula general (I) según el punto <9>, en el que el anillo de carbono es hidrocarburo cíclico saturado que tiene de 3 a 10 átomos de carbono o hidrocarburo cíclico insaturado que tiene de 4 a 10 átomos de carbono.

<21> El procedimiento para producir un compuesto representado por la fórmula general (I) según el punto <9>, en el que el anillo heterocíclico es hidrocarburo cíclico saturado que tiene de 3 a 10 átomos de carbono incluyendo un heteroátomo o hidrocarburo cíclico insaturado que tiene de 4 a 10 átomos de carbono incluyendo un heteroátomo.

<22> El procedimiento para producir un compuesto representado por la fórmula general (I) según uno cualquiera de los puntos <1> a <21>, en el que la fórmula -A<sup>1</sup>- es uno cualquiera de la fórmula -CH<sub>2</sub>-O-CH<sub>2</sub>-, fórmula -CH<sub>2</sub>-C(=O)-O-CH<sub>2</sub>-, fórmula -CH<sub>2</sub>-NHCH<sub>2</sub>-, fórmula -CH<sub>2</sub>-S-CH<sub>2</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-O-CH<sub>2</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-NH-(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>3</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>5</sub>-, y la fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>6</sub>-, cada uno de los cuales puede haberse sustituido, preferiblemente fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>3</sub>- o la fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>-, y más preferiblemente la fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>3</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>-, o la fórmula -CH<sub>2</sub>-CH(CH<sub>3</sub>)-CH<sub>2</sub>-, cada uno de los cuales puede haberse sustituido.

<23> El procedimiento para producir un compuesto representado por la fórmula general (I) según uno cualquiera de los puntos <1> a <22>, en el que la fórmula -A<sup>2</sup>- es uno cualquiera de la fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-O-(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-NH-(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>5</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>6</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>7</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>8</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>9</sub>-, y la fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>10</sub>-, cada uno de los cuales puede haberse sustituido, preferiblemente fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-O-(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>6</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>8</sub>-, o la fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>10</sub>-, más preferiblemente la fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-O-(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>6</sub>-, fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>8</sub>-, o la fórmula -(CH<sub>2</sub>)<sub>10</sub>-, y además preferiblemente la

fórmula  $-(\text{CH}_2)_4-$ , fórmula  $-(\text{CH}_2)_6-$ , o la fórmula  $-(\text{CH}_2)_{10}-$ , cada uno de los cuales puede haberse sustituido.

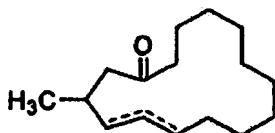
- 5 <24> El procedimiento para producir un compuesto representado por la fórmula general (I) según uno cualquiera de los puntos <1> a <23>, en el que la fórmula  $-A^1-$  (en donde el enlace frontal denota un enlace que se une con un átomo de carbono  $C^1$  mientras que el enlace posterior denota un enlace que se une con un átomo de carbono  $C^2$ ) es preferiblemente un grupo alquileo que tiene 3 o 4 átomos de carbono, más preferiblemente la fórmula  $-(\text{CH}_2)_3-$ , fórmula  $-\text{CH}_2-\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2-$ , o la fórmula  $-(\text{CH}_2)_4-$ , y además preferiblemente la fórmula  $-\text{CH}_2-\text{CH}(\text{CH}_3)-\text{CH}_2-$ , cada uno de los cuales puede haberse sustituido.
- 10 <25> El procedimiento para producir un compuesto representado por la fórmula general (I) según uno cualquiera de los puntos <1> a <24>, en el que la fórmula  $-A^2-$  (en donde el enlace frontal denota un enlace que se une con un átomo de carbono  $C^1$  mientras que el enlace posterior denota un enlace que se une con un átomo de carbono  $C^2$ ) es preferiblemente un grupo alquileo que tiene 4, 6, 8 ó 10 átomos de carbono, más preferiblemente la fórmula  $-(\text{CH}_2)_4-$ , fórmula  $-\text{CH}_2-\text{CH}(\text{CH}_3)-\text{CH}_2-\text{CH}_2-$ , fórmula  $-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}(\text{CH}_3)-\text{CH}_2-$ , fórmula  $-(\text{CH}_2)_6-$ , fórmula  $-(\text{CH}_2)_8-$ , o la fórmula  $-(\text{CH}_2)_{10}-$ , además preferiblemente la fórmula  $-(\text{CH}_2)_4-$ , fórmula  $-(\text{CH}_2)_6-$ , fórmula  $-(\text{CH}_2)_8-$ , o la fórmula  $-(\text{CH}_2)_{10}-$ , todavía además preferiblemente la fórmula  $-(\text{CH}_2)_4-$ , fórmula  $-(\text{CH}_2)_6-$ , o la fórmula  $-(\text{CH}_2)_{10}-$ , y aún además preferiblemente la fórmula  $-(\text{CH}_2)_{10}-$ , cada uno de los cuales puede haberse sustituido.
- 15 <26> El procedimiento para producir un compuesto representado por la fórmula general (I) según uno cualquiera de los puntos <1> a <25>, en el que el compuesto representado por la fórmula general (II) es preferiblemente un compuesto representado por la fórmula (i), un compuesto representado por la fórmula (iii), un compuesto representado por la fórmula (vii), o un compuesto representado por la fórmula (viii), más preferiblemente un compuesto representado por la fórmula (vii).
- 20 <27> El procedimiento para producir un compuesto representado por la fórmula general (I) según uno cualquiera de los puntos <1> a <26>, en el que el ácido de Bronsted es ácido sulfúrico ( $\text{pKa}=1,96$ ), ácido fosfórico ( $\text{pKa}=1,83$ ), ácido trifluoroacético ( $\text{pKa}=-0,3$ ) o ácido p-toluenosulfónico ( $\text{pKa}=-2,8$ ).
- 25 <28> El procedimiento para producir un compuesto representado por la fórmula general (I) según uno cualquiera de los puntos <1> a <27>, en el que el compuesto de ácido túngstico es uno cualquiera de ácido túngstico, ácido isopolitúngstico y ácido heteropolitúngstico, preferiblemente ácido túngstico.
- 30 <29> El procedimiento para producir un compuesto representado por la fórmula general (I) según el punto <28>, en el que el ácido túngstico es uno cualquiera de ácido ortotúngstico ( $\text{H}_2\text{WO}_4$ ), ácido metatúngstico [ $\text{H}_6[\text{H}_2\text{W}_{12}\text{O}_{40}]$ ], ácido paratúngstico ( $\text{H}_6[\text{H}_{10}\text{W}_{12}\text{O}_{46}]$ ) y ácido fosfotúngstico ( $\text{H}_3\text{PW}_{12}\text{O}_{40}(\text{nH}_2\text{O})$ ), preferiblemente ácido ortotúngstico ( $\text{H}_2\text{WO}_4$ ).
- 35 <30> El procedimiento para producir un compuesto representado por la fórmula general (I) según uno cualquiera de los puntos <1> a <29>, en el que el catalizador de ácido y el compuesto de ácido túngstico son preferiblemente al menos uno de un ácido de Bronsted que tiene un  $\text{pKa}$  de no más de 2,0 y un compuesto de ácido túngstico, más preferiblemente ácido túngstico, y además preferiblemente ácido ortotúngstico.
- 40 <31> El procedimiento para producir un compuesto representado por la fórmula general (I) según uno cualquiera de los puntos <1> a <30>, en el que la razón molar del compuesto de fórmula (II) con respecto al catalizador de ácido (el compuesto de fórmula (II):el catalizador de ácido) es preferiblemente de 1:0,001 a 1:0,7, más preferiblemente de 1:0,005 a 1:0,5, y además preferiblemente de 1:0,01 a 1:0,3.
- 45 <32> El procedimiento para producir un compuesto representado por la fórmula general (I) según uno cualquiera de los puntos <1> a <31>, en el que la razón molar del compuesto de fórmula (II) con respecto al compuesto de ácido túngstico (el compuesto de fórmula (II):el compuesto de ácido túngstico) es preferiblemente de 1:0,001 a 1:0,7, más preferiblemente de 1:0,005 a 1:0,5, y además preferiblemente de 1:0,01 a 1:0,3.
- 50 <33> El procedimiento para producir un compuesto representado por la fórmula general (I) según uno cualquiera de los puntos <1> a <32>, en el que la razón molar del compuesto de fórmula (II) con respecto al peróxido de hidrógeno (el compuesto de fórmula (II):el peróxido de hidrógeno) es preferiblemente de 1:10 a 1:2, más preferiblemente de 1:7 a 1:2, y además preferiblemente de 1:5 a 1:2,5.
- 55 <34> El procedimiento para producir un compuesto representado por la fórmula general (I) según uno cualquiera de los puntos <1> a <33>, en el que la escisión oxidativa se lleva a cabo a una temperatura preferiblemente entre  $0^\circ\text{C}$  y  $100^\circ\text{C}$ , más preferiblemente a  $20^\circ\text{C}$  o más, además preferiblemente a  $80^\circ\text{C}$  o menos, y todavía además preferiblemente a  $50^\circ\text{C}$  o menos.
- 60 <35> El procedimiento para producir un compuesto representado por la fórmula general (I) según uno cualquiera de los puntos <1> a <34>, en el que el compuesto representado por la fórmula general (II) es 14-metilbicio[10.3.0]pentadeceno[1(12)], y el compuesto representado por la fórmula general (I) es 3-metil-1,5-ciclopentadecanodiona.
- 65

<36> Un procedimiento para producir un compuesto de cetona cíclica representado por la fórmula (3), incluyendo el procedimiento:

5 obtener 3-metil-1,5-ciclopentadecanodiona mediante un procedimiento según el punto <35>; y

una etapa (a) de reducir parcialmente la 3-metil-1,5-ciclopentadecanodiona y después deshidratarla para obtener el compuesto de cetona cíclica representado por la fórmula (3) o una etapa (b) de reducir la 3-metil-1,5-ciclopentadecanodiona, después enoleterificarla, y posteriormente desciclarla para obtener el compuesto de cetona cíclica representado por la fórmula (3).

[Fórmula química 12]



(3)

15 <37> El procedimiento para producir un compuesto de cetona cíclica representado por la fórmula (3) según el punto <36>, en el que la etapa (a) incluye:

una etapa (a-1) de reducir parcialmente la 3-metil-1,5-ciclopentadecanodiona (1) para obtener 3-metilciclopentadecanol-5-ona (2); y una etapa (a-2) de deshidratar la 3-metilciclopentadecanol-5-ona (2) para obtener el compuesto de cetona cíclica representado por la fórmula (3).

25 <38> El procedimiento para producir un compuesto de cetona cíclica representado por la fórmula (3) según el punto <37>, en el que el procedimiento para reducir parcialmente la 3-metil-1,5-ciclopentadecanodiona (1) en la etapa (a-1) es preferiblemente un procedimiento en el que se usa hidruro de metal (por ejemplo, borohidruro de sodio o hidruro de sodio) o un procedimiento en el que se lleva a cabo hidrogenación en presencia de un catalizador de metal (por ejemplo, paladio/carbono o níquel Raney, preferiblemente níquel Raney), más preferiblemente el procedimiento en el que se lleva a cabo hidrogenación en presencia de un catalizador de metal.

30 <39> El procedimiento para producir un compuesto de cetona cíclica representado por la fórmula (3) según el punto <38>, en el que el procedimiento para reducir parcialmente la 3-metil-1,5-ciclopentadecanodiona (1) en la etapa (a-1) es el procedimiento en el que se lleva a cabo hidrogenación en presencia de un catalizador de metal, y la cantidad del catalizador de metal que va a usarse con respecto a la 3-metil-1,5-ciclopentadecanodiona (1) es preferiblemente de 1:0,01 a 1:1, más preferiblemente de 1:0,1 a 1:0,5, en cuanto a razón molar de la 3-metil-1,5-ciclopentadecanodiona (1) con respecto al catalizador de metal (la 3-metil-1,5-ciclopentadecanodiona (1):el catalizador de metal).

40 <40> El procedimiento para producir un compuesto de cetona cíclica representado por la fórmula (3) según el punto <38> o <39>, en el que el procedimiento para reducir parcialmente la 3-metil-1,5-ciclopentadecanodiona (1) en la etapa (a-1) es el procedimiento en el que se lleva a cabo hidrogenación en presencia de un catalizador de metal, y la presión de hidrógeno para la hidrogenación es preferiblemente de al menos 0,1 MPa pero es preferiblemente no mayor de 2,0 MPa, más preferiblemente no mayor de 1,0 MPa.

45 <41> El procedimiento para producir un compuesto de cetona cíclica representado por la fórmula (3) según uno cualquiera de los puntos <37> a <40>, en el que el procedimiento para deshidratar la 3-metilciclopentadecanol-5-ona (2) en la etapa (a-2) es un procedimiento para deshidratarla en presencia de ácido (por ejemplo, ácido sulfúrico, ácido fosfórico o ácido bencenosulfónico, preferiblemente ácido bencenosulfónico).

50 <42> El procedimiento para producir un compuesto de cetona cíclica representado por la fórmula (3) según el punto <36>, en el que la etapa (b) incluye:

una etapa (b-1) de reducir la 3-metil-1,5-ciclopentadecanodiona (1) para obtener 3-metilciclopentadecano-1,5-diol (4);

55 una etapa (b-2) de oxidar y enoleterificar parcialmente el 3-metilciclopentadecano-1,5-diol (4) para obtener 16-oxa-3-metilbicio[10.3.1]pentadec-1-eno (5); y

una etapa (b-3) de desciclar el 16-oxa-3-metilbicio[10.3.1]pentadec-1-eno (5) para obtener el compuesto de cetona cíclica representado por la fórmula (3).



5 <43> El procedimiento para producir un compuesto de cetona cíclica representado por la fórmula (3) según el punto <42>, en el que el procedimiento para reducir parcialmente la 3-metil-1,5-ciclopentadecanodiona (1) en la etapa (b-1) se lleva a cabo preferiblemente mediante un procedimiento en el que se usa hidruro de metal (por ejemplo, borohidruro de sodio o hidruro de sodio) o un procedimiento en el que se lleva a cabo hidrogenación en presencia de un catalizador de metal (por ejemplo, paladio/carbono o níquel Raney, preferiblemente níquel Raney), más preferiblemente mediante el procedimiento en el que se lleva a cabo hidrogenación en presencia de un catalizador de metal.

10 <44> El procedimiento para producir un compuesto de cetona cíclica representado por la fórmula (3) según el punto <43>, en el que el procedimiento para reducir parcialmente la 3-metil-1,5-ciclopentadecanodiona (1) en la etapa (b-1) es el procedimiento en el que se lleva a cabo hidrogenación en presencia de un catalizador de metal, y la presión de hidrógeno para la hidrogenación es preferiblemente de al menos 0,1 MPa pero es preferiblemente no mayor de 2,0 MPa, más preferiblemente no mayor de 1,0 MPa.

15 <45> El procedimiento para producir un compuesto de cetona cíclica representado por la fórmula (3) según uno cualquiera de los puntos <42> a <44>, en el que el procedimiento para oxidar y enoleterificar parcialmente el 3-metilciclopentadecano-1,5-diol (4) en la etapa (b-2) es un procedimiento para oxidar y enoleterificarlo parcialmente en presencia de un catalizador de metal (por ejemplo, un catalizador de metal que tiene oxidabilidad, preferiblemente óxido de aluminio, óxido de hierro, cobre Raney, etc., más preferiblemente cobre Raney).

20 <46> El procedimiento para producir un compuesto de cetona cíclica representado por la fórmula (3) según el punto <45>, en el que la razón molar del 3-metilciclopentadecano-1,5-diol (4) con respecto al catalizador de metal (el 3-metilciclopentadecano-1,5-diol (4):el catalizador de metal) es preferiblemente de 1:0,01 a 1:1, más preferiblemente de 1:0,05 a 1:0,3.

25 <47> El procedimiento para producir un compuesto de cetona cíclica representado por la fórmula (3) según uno cualquiera de los puntos <42> a <46>, en el que el procedimiento para desciclar el 16-oxa-3-metilbicio[10.3.1]pentadec-1-eno (5) en la etapa (b-3) es un procedimiento para desciclarlo en presencia de ácido (por ejemplo, ácido sulfúrico, ácido fosfórico o ácido bencenosulfónico, preferiblemente ácido fosfórico).

30 <48> El procedimiento para producir un compuesto de cetona cíclica representado por la fórmula (3) según el punto <47>, en el que la razón molar del 16-oxa-3-metilbicio[10.3.1]pentadec-1-eno (5) con respecto al ácido (el 16-oxa-3-metilbicio[10.3.1]pentadec-1-eno (5):el ácido) es preferiblemente de 1:0,01 a 1:1, más preferiblemente de 1:0,1 a 1:0,5.

### 35 [Ejemplos]

#### [Rendimiento del compuesto]

40 Se calculó el rendimiento de cada compuesto obtenido en los ejemplos midiendo la masa del compuesto contenido en un producto bruto mediante análisis cuantitativo de patrón interno de cromatografía de gases, y dividiendo el número de moles de dicho compuesto entre el número de moles de materias primas.

#### 45 <Aparato y condiciones analíticas para la cromatografía de gases>

Aparato de CG: fabricado por HEWLETT PACKARD, tipo: HP6850

Columna: fabricada por J&W, DB-1 (diámetro interno: 0,25 mm, longitud: 30 m y grosor de película: 0,25  $\mu\text{m}$ )

50 Gas portador: He, 1,5 ml/min

Condición de inyección: 300°C, razón de división: 1/100

Condición de detección: sistema FID, 300°C

55 Condición de temperatura de columna: 80°C → elevar la temperatura a 10°C/min → 300°C mantenida durante 10 minutos

Compuesto de patrón interno: n-tridecano

#### 60 [Identificación del compuesto]

65 Cada compuesto obtenido en los siguientes ejemplos y ejemplos comparativos se identificó mediante análisis de espectro usando un espectrómetro de masas con cromatografía de gases (CG-EM, fabricado por Shimadzu Corporation, tipo: GC-2010).

<Aparato y condiciones analíticas para CG-EM>

Aparato de CG: fabricado por Shimadzu Corporation, tipo: GC-2010

5 Aparato de EM: fabricado por Shimadzu Corporation, tipo: GCMS-QP2010 column Plus: fabricada por J&W, DB-1 (diámetro interno: 0,25 mm, longitud: 30 m y grosor de película: 0,25  $\mu\text{m}$ )

Gas portador: He, 1,8 ml/min

10 Condición de inyección: 300°C, razón de división: 1/50

Condición de detección: sistema FID, 250°C

15 Condición de temperatura de columna: 90°C → elevar la temperatura a 5°C/min → 150°C → elevar la temperatura a 10°C/min → 250°C mantenida durante 28 minutos

Temperatura de la fuente de iones: 200°C

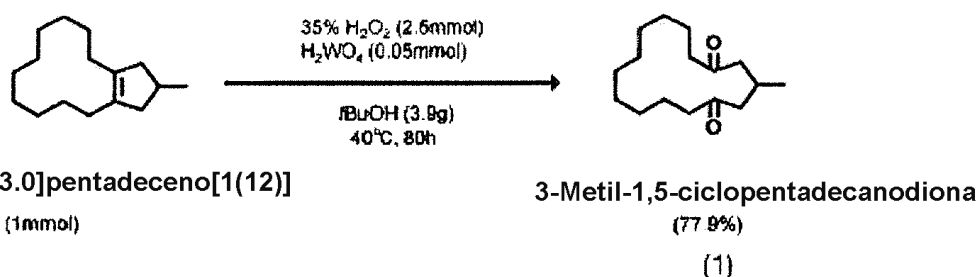
<Ejemplo 1>

20 Se añadieron 0,2425 g (2,5 mmol) de disolución de peróxido de hidrógeno al 35% en masa a 0,0124 g (0,05 mmol) de ácido ortotúngstico ( $\text{H}_2\text{WO}_4$ ). Esto se agitó a 20°C durante 20 minutos. Entonces se añadieron 3,9 g de alcohol t-butílico y 0,22 g (1,0 mmol) de 14-metilbiciclo[10.3.0]pentadeceno[1(12)] a la mezcla. Esto se agitó a una temperatura de reacción de 40°C durante 80 horas. Tras la finalización de la reacción, se añadieron 10 ml de disolución acuosa de sulfito de sodio al 10% en masa a la mezcla en un baño de hielo y, por tanto, se extinguió. Después de eso, se extrajo una fase orgánica de la mezcla usando 30 ml de dietil éter. Tras secarse con sulfato de magnesio, se filtró la fase orgánica. Después de eso, se eliminó el disolvente del filtrado a presión reducida, y por tanto, se obtuvieron 0,3 g de producto bruto. La 3-metil-1,5-ciclopentadecanodiona (el compuesto de fórmula (1)) contenida en el producto bruto tuvo un rendimiento del 77,9%. La fórmula de reacción se muestra a continuación.

30 Además se indican a continuación los resultados de la medición de la 3-metil-1,5-ciclopentadecanodiona (el compuesto de fórmula (1)) mediante espectrometría de masas con cromatografía de gases (CG-EM). A continuación, los valores numéricos entre paréntesis indican cada uno la intensidad relativa de cada espectro.

35 EM: 252 (22,  $\text{M}^+$ ), 209 (12), 195 (28), 142 (22), 139 (16), 97 (60), 85 (62), 69 (100), 55 (62)

[Fórmula química 13]



40 <Ejemplos 2 a 13>

45 Para producir la 3-metil-1,5-ciclopentadecanodiona (el compuesto de fórmula (1)), se llevó a cabo la reacción de la misma manera que en el ejemplo 1 excepto que las condiciones se cambiaron tal como se indica en la tabla 1. Los resultados se indican en la tabla 1.

[Tabla 1]

Ejemplo	Disolución de peróxido de hidrógeno al 35% en masa	Compuesto de ácido túngstico o catalizador de ácido	Disolvente de reacción	Temperatura de reacción	Tiempo de reacción	Rendimiento del compuesto de fórmula (1)
Ej. 2	$\text{H}_2\text{O}_2$ al 35% en	$\text{H}_3\text{PW}_{12}\text{O}_{40}(\text{NH}_2\text{O})$	$t\text{BuOH}$	100°C	18 horas	13,6%

	peso (4 mmol)	(0,2 mmol)	(3,9 g)			
Ej. 3	H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> al 35% en peso (4,5 mmol)	Na <sub>2</sub> WO <sub>4</sub> (0,1 mmol)	<i>t</i> BuOH (3,9 g)	90°C	21 horas	6,8%
Ej. 4	H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> al 35% en peso (5 mmol)	H <sub>2</sub> WO <sub>4</sub> (0,2 mmol)	<i>t</i> BuOH (3,9 g)	20°C	165 horas	43,6%
Ej. 5	H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> al 35% en peso (7 mmol)	H <sub>2</sub> WO <sub>4</sub> (0,5 mmol)	<i>t</i> BuOH (3,9 g)	20°C	284 horas	53,4%
Ej. 6	H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> al 35% en peso (2,5 mmol)	H <sub>2</sub> WO <sub>4</sub> (0,2 mmol)	<i>t</i> BuOH (3,9 g)	40°C	56 horas	70,2%
Ej. 7	H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> al 35% en peso (2,5 mmol)	H <sub>2</sub> WO <sub>4</sub> (0,1 mmol)	<i>t</i> BuOH (3,9 g)	40°C	95 horas	78,6%
Ej. 8	H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> al 35% en peso (2,5 mmol)	H <sub>2</sub> WO <sub>4</sub> (0,01 mmol)	<i>t</i> BuOH (3,9 g)	40°C	64 horas	69,9%
Ej. 9	H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> al 35% en peso (2,5 mmol)	CF <sub>3</sub> COOH (0,2 mmol)	<i>t</i> BuOH (0,78 g)	40°C	46 horas	20,0%
Ej. 10	H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> al 35% en peso (2,5 mmol)	H <sub>3</sub> PO <sub>4</sub> (0,2 mmol)	<i>t</i> BuOH (0,78 g)	40°C	46 horas	15,0%
Ej. 11	H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> al 35% en peso (2,5 mmol)	CF <sub>3</sub> SO <sub>3</sub> H (0,05 mmol)	<i>t</i> BuOH (0,78 g)	20°C	8 horas	10,0%
Ej. 12	H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> al 35% en peso (2,5 mmol)	H <sub>2</sub> WO <sub>4</sub> (0,05 mmol)	EtOH (0,78 g)	40°C	17 horas	16,3%
Ej. 13	H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> al 35% en peso (2,5 mmol)	H <sub>2</sub> WO <sub>4</sub> (0,05 mmol)	<i>i</i> PrOH (0,78 g)	40°C	15 horas	18,6%

Basándose en los resultados indicados en la tabla 1, se confirmó que según el procedimiento de la presente divulgación, el compuesto de fórmula (I) puede producirse usando peróxido de hidrógeno en presencia de un catalizador de ácido o en presencia de un compuesto de ácido tungstico.

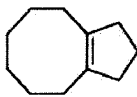
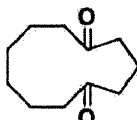
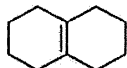
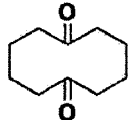
5

<Ejemplos 14 y 15>

Se llevó a cabo la reacción de la misma manera que en el ejemplo 1 excepto que se usó cada compuesto de fórmula (II) indicado en la tabla 2 en lugar del 14-metilbicyclo[10.3.0]pentadeceno[1(12)]. Los resultados se indican en la tabla 2.

10

[Tabla 2]

Ejemplo	Compuesto de fórmula (II)	Tiempo de reacción	Objetivo	Rendimiento del objetivo
Ej. 14		100 horas		5,0%
Ej. 15		28 horas		12,0%

Basándose en los resultados indicados en la tabla 2, se confirmó que según el procedimiento de la presente divulgación, el compuesto de fórmula (I) puede producirse usando peróxido de hidrógeno en presencia de un compuesto de ácido tungstico.

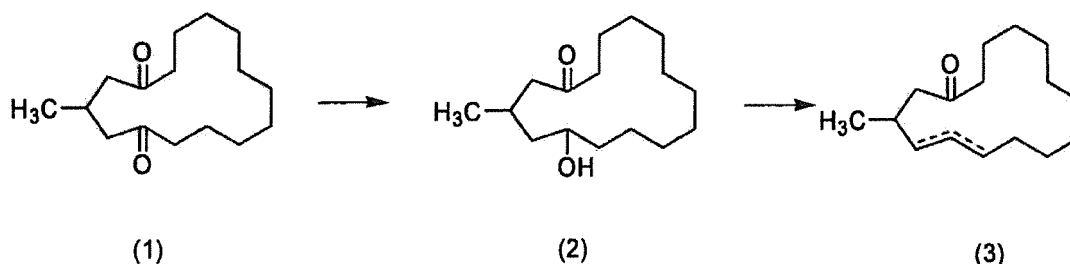
15

<Producción de compuesto de cetona cíclica representado por la fórmula (3)>

20

<Ejemplo 16>

[Fórmula química 14]

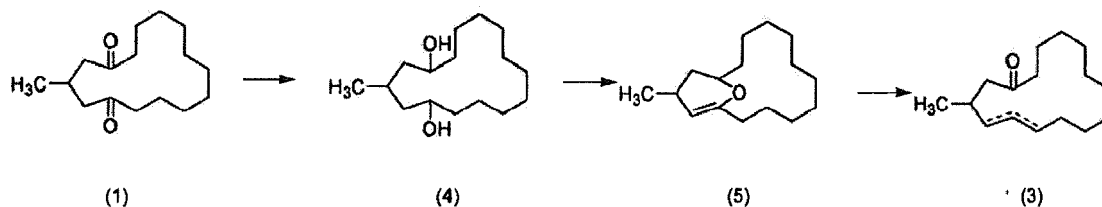


Se añadieron 3 ml de metanol, 0,06 g (0,1 mmol) de catalizador de níquel Raney, que era una suspensión alcohólica al 10% en masa y 0,03 ml de disolución de hidróxido de sodio acuosa al 10% en masa a 0,15 g (0,594 mmol) de 3-metil-1,5-ciclopentadecanodiona (el compuesto de fórmula (1)) obtenido en el ejemplo 1. Después de eso, se agitó en hidrógeno a temperatura ambiente (25°C) y presión normal (0,1 MPa) durante 45 minutos, y entonces del filtrado obtenido mediante filtración del mismo, se eliminó el disolvente a presión reducida. Se diluyó el residuo con dietil éter y después se lavó con disolución de bicarbonato de sodio acuosa al 10% en masa y agua. Después se extrajo la fase orgánica, se secó con sulfato de magnesio y entonces se filtró. Después de eso, se eliminó el disolvente del filtrado a presión reducida, y por tanto, se obtuvieron 0,2 g de producto bruto. Se analizó el producto bruto mediante cromatografía de gases y la 3-metilciclopentadecanol-5-ona resultante (el compuesto de fórmula (2)) tuvo un rendimiento del 50,0%.

Se añadieron 3 ml de tolueno y 0,004 g (0,027 mmol) de ácido bencenosulfónico a 0,07 g (0,275 mmol) de 3-metilciclopentadecanol-5-ona (el compuesto de fórmula (2)). Esto se agitó con calentamiento y a reflujo (110°C) durante una hora. Después de eso, se añadió disolución de bicarbonato de sodio acuosa al 10% en masa a lo mismo a temperatura ambiente (25°C). Después se extrajo la fase orgánica, se secó con sulfato de magnesio y entonces se filtró. Después de eso, se eliminó el disolvente del filtrado a presión reducida, y por tanto, se obtuvieron 0,06 g de producto bruto. Se analizó el producto bruto mediante cromatografía de gases y el compuesto de cetona cíclica resultante representado por la fórmula (3) tuvo un rendimiento del 80,0%.

<Ejemplo 17>

[Fórmula química 15]



Se añadieron 3 ml de metanol, 0,06 g (0,1 mmol) de catalizador de níquel Raney, que era una suspensión alcohólica al 10% en masa y 0,03 ml de disolución de hidróxido de sodio acuosa al 10% en masa a 0,15 g (0,594 mmol) de 3-metil-1,5-ciclopentadecanodiona (el compuesto de fórmula (1)) obtenido en el ejemplo 1. Después de eso, se agitó en hidrógeno a temperatura ambiente (25°C) y presión normal (0,1 MPa) durante 24 horas, y después del filtrado obtenido mediante filtración del mismo, se eliminó el disolvente a presión reducida. Se diluyó el residuo con dietil éter y luego se lavó con disolución de bicarbonato de sodio acuosa al 10% en masa y agua. Después se extrajo la fase orgánica, se secó con sulfato de magnesio y entonces se filtró. Después de eso, se eliminó el disolvente del filtrado a presión reducida, y por tanto, se obtuvieron 0,2 g de producto bruto. Se analizó el producto bruto mediante cromatografía de gases y el 3-metilciclopentadecano-1,5-diol resultante (el compuesto de fórmula (4)) tuvo un rendimiento del 80,0%.

Se añadieron 0,06 g (0,09 mmol) de cobre Raney, que era una suspensión acuosa al 10% en masa, a 0,12 g (0,46 mmol) de 3-metilciclopentadecano-1,5-diol (el compuesto de fórmula (4)). Esto se agitó a presión reducida de 310 kPa (45 mmHg) a 165°C durante tres horas. Después de eso, se destiló a presión reducida de 14 kPa (2 mmHg) y como resultado, se obtuvieron 0,06 g de fracción destilada. Se analizó la fracción destilada mediante cromatografía de gases. El 16-oxa-3-metilbicyclo[10.3.1]pentadec-1-eno resultante (el compuesto de fórmula (5)) tuvo un rendimiento del 50,0%.

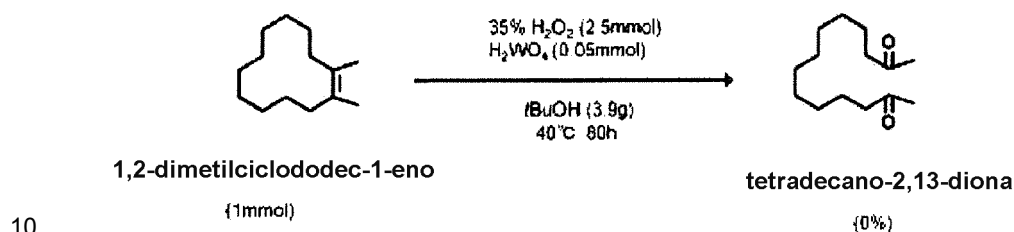
Se añadieron 1 ml de tolueno y 0,01 g (0,08 mmol) de disolución de ácido fosfórico acuosa al 80% en masa a 0,05 g (0,21 mmol) de 16-oxa-3-metilbicyclo[10.3.1]pentadec-1-eno (el compuesto de fórmula (5)). Esto se agitó con calentamiento y a reflujo (110°C) durante tres horas mientras que se retira continuamente agua que se había producido como subproducto. Tras enfriarse, se lavó con agua y disolución de carbonato de sodio acuosa al 10% en masa. Se extrajo la fase orgánica y entonces se eliminó el disolvente a presión reducida. Por tanto, se obtuvieron 0,05 g de producto bruto. Se analizó el producto bruto mediante cromatografía de gases, y el compuesto de cetona

cíclica resultante representado por la fórmula (3) tuvo un rendimiento del 85,0%.

<Ejemplo comparativo>

- 5 Se llevó a cabo la reacción de la misma manera que en el ejemplo 1 excepto que se usó 1,2-dimetilciclododec-1-eno en lugar del 14-metilbicyclo[10.3.0]pentadeceno[1(12)]. Como resultado, no se obtuvo tetradecano-2,13-diona, que se obtiene mediante escisión oxidativa de 1,2-dimetilciclododec-1-eno.

[Fórmula química 16]



15 Basándose en el resultado del ejemplo comparativo, se confirmó que el compuesto de olefina tetrasustituida monocíclica no puede someterse a escisión oxidativa usando peróxido de hidrógeno en presencia de un compuesto de ácido tungstíco.

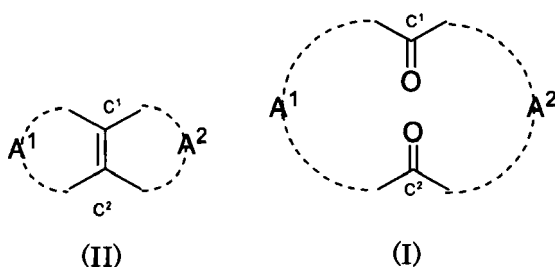
#### Aplicabilidad industrial

- 20 Según el procedimiento de producción de la presente divulgación, un compuesto representado por la fórmula general (I) puede producirse mediante escisión oxidativa de un compuesto de fórmula (II), que es un compuesto de olefina tetrasustituida bicíclica, usando peróxido de hidrógeno en presencia de un catalizador de ácido o en presencia de un compuesto de ácido tungstíco. El procedimiento de producción de la presente divulgación usa peróxido de hidrógeno y proporciona de ese modo los efectos de ser altamente versátil, seguro e inocuo para el medio ambiente.

## REIVINDICACIONES

1. Un procedimiento para producir un compuesto representado por la fórmula general (I), comprendiendo el procedimiento una etapa de someter un compuesto representado por la fórmula general (II) a escisión oxidativa usando peróxido de hidrógeno en presencia de un catalizador de ácido, que es un ácido de Bronsted que tiene un pKa en agua de no más de 2,0, o en presencia de un compuesto de ácido tungstico para obtener el compuesto representado por la fórmula general (I):

[Fórmula química 17]



en el que

la fórmula  $-A^1-$  (en donde el enlace frontal denota un enlace que se une con un átomo de carbono  $C^1$  mientras que el enlace posterior denota un enlace que se une con un átomo de carbono  $C^2$ ) es un grupo alquileo que tiene de 2 a 6 átomos de carbono que puede haberse sustituido y que puede incluir además un enlace éter, un enlace éster, un grupo amino secundario, un grupo tioéter, o estos, y

la fórmula  $-A^2-$  (en donde el enlace frontal denota un enlace que se une con un átomo de carbono  $C^1$  mientras que el enlace posterior denota un enlace que se une con un átomo de carbono  $C^2$ ) es un grupo alquileo que tiene de 4 a 10 átomos de carbono que puede haberse sustituido y que puede incluir además un enlace éter, un enlace éster, un grupo amino secundario, un grupo tioéter, o estos.

2. El procedimiento para producir un compuesto representado por la fórmula general (I) según la reivindicación 1, en el que

la fórmula  $-A^1-$  es un grupo alquileo que tiene 3 o 4 átomos de carbono que puede haberse sustituido, y

la fórmula  $-A^2-$  es un grupo alquileo que tiene 4, 6, 8 ó 10 átomos de carbono que puede haberse sustituido.

3. El procedimiento para producir un compuesto representado por la fórmula general (I) según la reivindicación 1, en el que el ácido de Bronsted es ácido sulfúrico, ácido fosfórico, ácido trifluoroacético o ácido p-toluenosulfónico.

4. El procedimiento para producir un compuesto representado por la fórmula general (I) según una cualquiera de las reivindicaciones 1 a 3, en el que el compuesto de ácido tungstico es ácido tungstico, ácido isopolítungstico, o ácido heteropolítungstico.

5. El procedimiento para producir un compuesto representado por la fórmula general (I) según la reivindicación 4, en el que el ácido tungstico es ácido ortotungstico ( $H_2WO_4$ ), ácido metatungstico ( $H_6[H_2W_{12}O_{40}]$ ), ácido paratungstico ( $H_6[H_{10}W_{12}O_{46}]$ ) o ácido fosfotungstico ( $H_3PW_{12}O_{40}(nH_2O)$ ).

6. El procedimiento para producir un compuesto representado por la fórmula general (I) según la reivindicación 5, en el que el compuesto de ácido tungstico es ácido ortotungstico ( $H_2WO_4$ ).

7. El procedimiento para producir un compuesto representado por la fórmula general (I) según una cualquiera de las reivindicaciones 1 a 6, en el que la razón molar del compuesto de fórmula (II) con respecto al catalizador de ácido (el compuesto de fórmula (I)): el catalizador de ácido es de 1:0,001 a 1:0,7.

8. El procedimiento para producir un compuesto representado por la fórmula general (I) según una cualquiera de las reivindicaciones 1 a 6, en el que la razón molar del compuesto de fórmula (II) con respecto al compuesto de ácido tungstico (el compuesto de fórmula (I)): el compuesto de ácido tungstico es de 1:0,001 a 1:0,7.

9. El procedimiento para producir un compuesto representado por la fórmula general (I) según una cualquiera de las reivindicaciones 1 a 8, en el que la razón molar del compuesto de fórmula (II) con respecto al

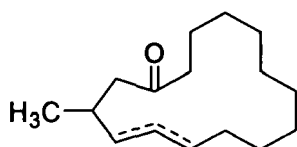
peróxido de hidrógeno (el compuesto de fórmula (II): el peróxido de hidrógeno) es de 1:10 a 1:2.

10. El procedimiento para producir un compuesto representado por la fórmula general (I) según una cualquiera de las reivindicaciones 1 a 9, en el que el compuesto representado por la fórmula general (II) es 14-metilbicyclo[10.3.0]pentadeceno[1(12)], y el compuesto representado por la fórmula general (I) es 3-metil-1,5-ciclopentadecanodiona.

11. El procedimiento para producir un compuesto representado por la fórmula general (I) según una cualquiera de las reivindicaciones 1 a 10, en el que la razón molar del compuesto de fórmula (II) con respecto al compuesto de ácido túngstico (el compuesto de fórmula (II): el compuesto de ácido túngstico) es de 1:0,005 a 1:0,5.

12. Un procedimiento para producir un compuesto de cetona cíclica representado por la fórmula (3):

[Fórmula química 18]



(3)

comprendiendo el procedimiento:

obtener 3-metil-1,5-ciclopentadecanodiona mediante un procedimiento según la reivindicación 10; y

una etapa (a) de reducir parcialmente la 3-metil-1,5-ciclopentadecanodiona y después deshidratarla para obtener el compuesto de cetona cíclica representado por la fórmula (3) o

una etapa (b) de reducir la 3-metil-1,5-ciclopentadecanodiona, después enoleterificarla, y posteriormente desciclarla para obtener el compuesto de cetona cíclica representado por la fórmula (3).

13. El procedimiento para producir un compuesto de cetona cíclica representado por la fórmula (3) según la reivindicación 12, en el que la etapa (b) incluye:

una etapa (b-1) de reducir la 3-metil-1,5-ciclopentadecanodiona (1) para obtener 3-metilciclopentadecano-1,5-diol (4);

una etapa (b-2) de oxidar y enoleterificar parcialmente el 3-metilciclopentadecano-1,5-diol (4) para obtener 16-oxa-3-metilbicyclo[10.3.1]pentadec-1-eno (5); y una etapa (b-3) de desciclar el 16-oxa-3-metilbicyclo[10.3.1]pentadec-1-eno (5) para obtener el compuesto de cetona cíclica representado por la fórmula (3).