

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 特許公報(B2)

(11) 特許番号

特許第4306805号
(P4306805)

(45) 発行日 平成21年8月5日(2009.8.5)

(24) 登録日 平成21年5月15日(2009.5.15)

(51) Int. Cl. F I
CO7D 413/10 (2006.01) CO7D 413/10
AO1N 43/80 (2006.01) AO1N 43/80 I O I
CO7D 261/04 (2006.01) CO7D 261/04
AO1P 13/00 (2006.01) AO1P 13/00

請求項の数 10 (全 117 頁)

(21) 出願番号 特願平10-533620
 (86) (22) 出願日 平成10年1月8日(1998.1.8)
 (65) 公表番号 特表2001-508458(P2001-508458A)
 (43) 公表日 平成13年6月26日(2001.6.26)
 (86) 国際出願番号 PCT/EP1998/000069
 (87) 国際公開番号 W01998/031681
 (87) 国際公開日 平成10年7月23日(1998.7.23)
 審査請求日 平成16年12月8日(2004.12.8)
 (31) 優先権主張番号 19701446.1
 (32) 優先日 平成9年1月17日(1997.1.17)
 (33) 優先権主張国 ドイツ(DE)

(73) 特許権者
 ビーエーエスエフ ソシエタス・ヨーロピア
 ドイツ国、D-67056、ルートヴィッ
 ヒスハーフェン
 (74) 代理人
 弁理士 江藤 聡明
 (72) 発明者
 フォン ダイン, ヴォルフガング
 ドイツ国、D-67435、ノイシュタッ
 ト、アン、デア、ブライヒェ、24
 (72) 発明者
 ヒル, レジナ, ルイーゼ
 ドイツ国、D-67346、シュパイア、
 ツィーゲルオーフェンヴェーク、40

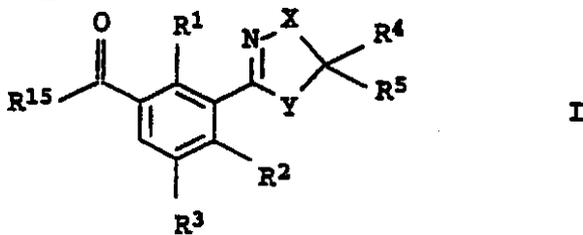
最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 3-ヘテロシクリル-置換ベンゾイル誘導体

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項1】

一般式 I



で表され、式中

R¹がニトロ、C₁-C₆アルキル、C₁-C₆ハロアルキル、C₁-C₆アルコキシ、C₁-C₆アルキルスルホニルまたはC₁-C₆ハロアルキルスルホニル、

R²がニトロ、ハロゲン、C₁-C₆アルキル、C₁-C₆ハロアルキル、C₁-C₆アルキルチオ、C₁-C₆アルキルスルフィニル、C₁-C₆アルキルスルホニルまたはC₁-C₆ハロアルキルスルホニル、

R³が水素、

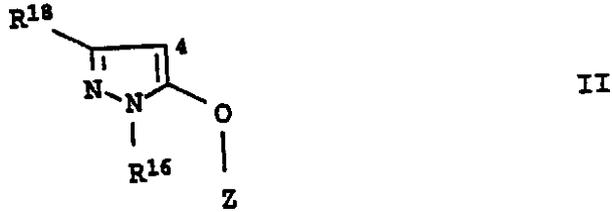
R⁴、R⁵が水素、

XがO、

YがC^{R13}R¹⁴、

R¹³、R¹⁴が水素、C₁-C₄アルキル、C₁-C₄ハロアルキル、C₁-C₄アルコシカル

ボニル、 $C_1 - C_4$ ハロアルコキシカルボニルまたは $CONR^7R^8$ 、
 R^7 が水素または $C_1 - C_4$ アルキル、
 R^8 が $C_1 - C_4$ アルキルを、それぞれ意味し、
 R^{15} が下式 I I



10

で表され、

R^{16} が $C_1 - C_6$ アルキル、

ZがH、

R^{18} が水素を意味する4位で結合するピラゾールを意味する3-ヘテロシクリル置換ベンゾイル誘導体、またはその農業上使用可能な塩。

【請求項2】

4-[2-メチル-3-(4,5-ジヒドロイソキサゾール-3-イル)-4-メチルスルホニルベンゾイル]-1-メチル-5-ヒドロキシ-1H-ピラゾールであることを特徴とする、請求項1に記載の式Iの3-ヘテロシクリル置換ベンゾイル誘導体。

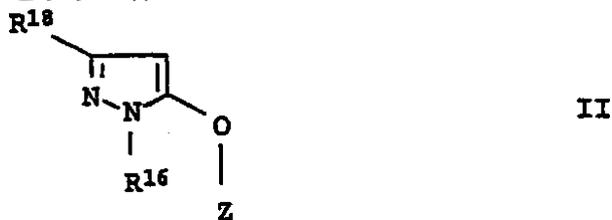
【請求項3】

4-[2-メチル-3-(4,5-ジヒドロイソキサゾール-3-イル)-4-メチルスルホニルベンゾイル]-1-メチル-5-ヒドロキシ-1H-ピラゾールの農業上使用可能な塩であることを特徴とする、請求項1に記載の式Iの3-ヘテロシクリル置換ベンゾイル誘導体。

20

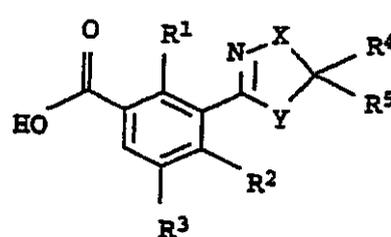
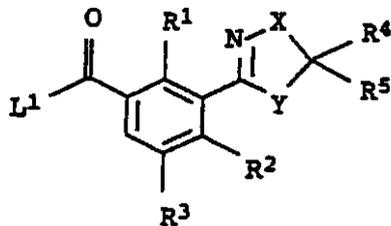
【請求項4】

式IIで表され、式中Z、 R^{16} および R^{18} が請求項1における定義と同様の意味を有するピラゾール



30

を、活性化カルボン酸 IIIa またはカルボン酸 IIIb

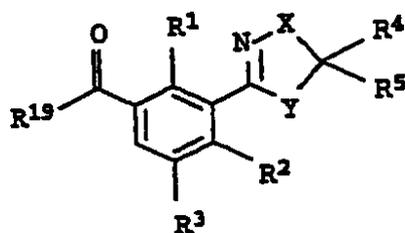


40

(上記式中 $R^1 - R^5$ 、XおよびYは請求項1と同様の意味を有し、 L^1 はハロゲン、ヘテロアリーまたはカルボキシラートを意味する)でアシル化し、得られたアシル化生成物を触媒の存在下または不存在下に転位反応に付し、生成物Iを得ることを特徴とする、請求項1に記載の式Iの3-ヘテロシクリル置換ベンゾイル誘導体の製造法。

【請求項5】

式III



III

で表され、式中 R^{19} がヒドロキシル、アルコキシ、フェノキシ、アルキルチオ、フェニルチオ、ハロゲン化物または窒素を介して結合されるヘテロアリアル、アミノまたはイミノを意味し、 $R^1 \sim R^5$ 、 X および Y が請求項 1 において定義された意味を有する 3 - ヘテロシクリル置換安息香酸誘導体。

10

【請求項 6】

R^{19} がハロゲン、ヒドロキシルまたは $C_1 - C_6$ アルコキシを意味することを特徴とする、請求項 5 に記載の式 III の 3 - ヘテロシクリル置換安息香酸誘導体。

【請求項 7】

除草有効量の、請求項 1 ~ 3 のいずれかに記載の少なくとも 1 種類の式 I の 3 - ヘテロシクリル置換ベンゾイル誘導体または I の農業上有用な塩と、農作物保護剤の調製に慣用の助剤とを含む組成物。

【請求項 8】

除草有効量の、請求項 1 ~ 3 のいずれかに記載の少なくとも 1 種類の式 I の 3 - ヘテロシクリル置換ベンゾイル誘導体または I の農業上有用な塩と、農作物保護剤の調製に慣用の助剤とを混合することを特徴とする、請求項 7 に記載の組成物の製造法。

20

【請求項 9】

除草有効量の、請求項 1 ~ 3 のいずれかに記載の少なくとも 1 種類の式 I の 3 - ヘテロシクリル置換ベンゾイル誘導体または I の農業上有用な塩を、植物、その生息環境、および/または種子に作用させることを特徴とする、望ましくない植生の制御方法。

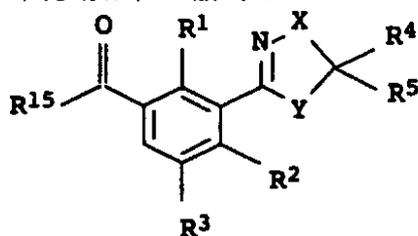
【請求項 10】

請求項 1 ~ 3 のいずれかに記載の 3 - ヘテロシクリル置換ベンゾイル誘導体またはその農業上有用な塩の、除草剤としての使用する方法。

30

【発明の詳細な説明】

本発明は、一般式 I



I

で表され、式中

R^1 、 R^2 が水素、ニトロ、ハロゲン、シアノ、 $C_1 - C_6$ アルキル、 $C_1 - C_6$ ハロアルキル、 $C_1 - C_6$ アルコキシ、 $C_1 - C_6$ ハロアルコキシ、 $C_1 - C_6$ アルキルチオ、 $C_1 - C_6$ ハロアルキルチオ、 $C_1 - C_6$ アルキルスルフィニル、 $C_1 - C_6$ ハロアルキルスルフィニル、 $C_1 - C_6$ アルキルスルホニルまたは $C_1 - C_6$ ハロアルキルスルホニル、

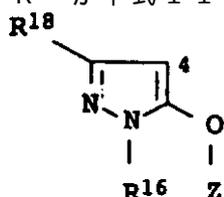
40

R^3 が水素、ハロゲンまたは $C_1 - C_6$ アルキル、

R^4 、 R^5 が水素、ハロゲン、シアノ、ニトロ、 $C_1 - C_4$ アルキル、 $C_1 - C_4$ アルコキシ - $C_1 - C_4$ アルキル、ジ ($C_1 - C_4$ アルコキシ) - $C_1 - C_4$ アルキル、ジ ($C_1 - C_4$ アルキル) - アミノ - $C_1 - C_4$ アルキル、[2, 2 - ジ ($C_1 - C_4$ アルキル) - 1 - ヒドラジノ] - $C_1 - C_4$ アルキル、 $C_1 - C_6$ アルキルイミノオキシ - $C_1 - C_4$ アルキル、 $C_1 - C_4$ アルコキシカルボニル - $C_1 - C_4$ アルキル、 $C_1 - C_4$ アルキルチオ - $C_1 - C_4$ アルキル、 $C_1 - C_4$ ハロアルキル、 $C_1 - C_4$ シアノアルキル、 $C_3 - C_8$ シクロアルキル、 $C_1 - C_4$ アル

50

コキシ、 $C_1 - C_4$ アルコキシ - $C_2 - C_4$ アルコキシ、 $C_1 - C_4$ ハロアルコキシ、ヒドロキシ、 $C_1 - C_4$ アルキルカルボニルオキシ、 $C_1 - C_4$ アルキルチオ、 $C_1 - C_4$ ハロアルキルチオ、ジ($C_1 - C_4$ アルキル)アミノ、 $CO R^6$ 、フェニルまたはベンジル(最後に挙げた2個の基は完全または部分的にハロゲン化されていてもよく、および/または1個~3個以下の基すなわちニトロ、シアノ、 $C_1 - C_4$ アルキル、 $C_1 - C_4$ ハロアルキル、 $C_1 - C_4$ アルコキシまたは $C_1 - C_4$ ハロアルコキシを有してもよい)を意味するか、或いは R^4 および R^5 が共同で、 $C_1 - C_4$ アルキルによりモノ置換ないしテトラ置換されてもよく、および/または酸素により、または $C_1 - C_4$ アルキル置換されていてもよい窒素により中断されてもよい $C_2 - C_6$ アルカンジイル鎖を形成するか、または R^4 および R^5 が対応の炭素原子と共にカルボニルまたはチオカルボニル基を形成し、 R^6 が水素、 $C_1 - C_4$ アルキル、 $C_1 - C_4$ ハロアルキル、 $C_1 - C_4$ アルコキシ、 $C_1 - C_4$ アルコキシ - $C_2 - C_4$ アルコキシ、 $C_1 - C_4$ ハロアルコキシ、 $C_3 - C_6$ アルケニルオキシ、 $C_3 - C_6$ アルキニルオキシまたは $NR^7 R^8$ 、 R^7 が水素、 $C_1 - C_4$ アルキル、 R^8 が $C_1 - C_4$ アルキル、 X が O 、 S 、 NR^9 、 CO または $CR^{10} R^{11}$ 、 Y が O 、 S 、 NR^{12} 、 CO または $CR^{13} R^{14}$ 、 R^9 、 R^{12} が水素または $C_1 - C_4$ アルキル、 R^{10} 、 R^{11} 、 R^{13} 、 R^{14} が水素、 $C_1 - C_4$ アルキル、 $C_1 - C_4$ ハロアルキル、 $C_1 - C_4$ アルコキシカルボニル、 $C_1 - C_4$ ハロアルコキシカルボニルまたは $CONR^7 R^8$ をそれぞれ意味し、或いは R^4 および R^9 、または R^4 および R^{10} 、または R^5 および R^{12} 、または R^5 および R^{13} が共同で、 $C_1 - C_4$ アルキルによりモノ置換ないしテトラ置換されていてもよく、および/または酸素により、または $C_1 - C_4$ アルキル置換されていてもよい窒素原子により中断されてもよい $C_2 - C_6$ アルカンジイル鎖を形成し、 R^{15} が下式 I I



II

で表され、

R^{16} が $C_1 - C_6$ アルキル、

Z が H または $SO_2 R^{17}$ 、

R^{17} が $C_1 - C_4$ アルキル、 $C_1 - C_4$ ハロアルキル、フェニル、または部分的または完全にハロゲン化され、および/またはニトロ、シアノ、 $C_1 - C_4$ アルキル、 $C_1 - C_4$ ハロアルキル、 $C_1 - C_4$ アルコキシもしくは $C_1 - C_4$ ハロアルコキシのうちの1~3個の基を有するフェニル、

R^{18} が水素または $C_1 - C_6$ アルキルを意味し、4位で結合するピラゾールを意味し、

X および Y が同時に酸素または硫黄を意味することはない3-ヘテロシクリル置換ベンゾイル誘導体であって、

4-[2-クロロ-3-(4,5-ジヒドロイソキサゾール-3-イル)-4-メチルスルホニルベンゾイル]-1-エチル-5-ヒドロキシ-1H-ピラゾール、4-[2-クロロ-3-(4,5-ジヒドロイソキサゾール-3-イル)-4-メチルスルホニルベンゾイル]-1,3-ジメチル-5-ヒドロキシ-1H-ピラゾール、4-[2-クロロ-3-(5-シアノ-4,5-ジヒドロイソキサゾール-3-イル)-4-メチルスルホニルベンゾイル]-1,3-ジメチル-5-ヒドロキシ-1H-ピラゾール、4-[2-クロロ-3-(4,5-ジヒドロチアゾール-2-イル)-4-メチルスルホニルベンゾイル]-1,3-ジメチル-5-ヒドロキシ-1H-ピラゾール、および4-[2-クロロ-3-(チアゾリン-4,5-ジオン-2-イル)-4-メチルスルホニルベンゾ

10

20

30

40

50

イル] - 1, 3 - ジメチル - 5 - ヒドロキシ - 1H - ピラゾール以外の 3 - ヘテロシクリル置換ベンゾイル誘導体、またはその農業上使用可能な塩に関する。

更に本発明は、式 I の化合物の製造法および中間体、これらを含む組成物、または有害植物を防除するための前記誘導体およびこれを含む組成物の使用方法に関する。

ピラゾール - 4 - イルベンゾイル誘導体は、WO 96 / 26206 号公報等の文献に開示されている。

しかしながら、今日までに知られている化合物の除草特性および農作物に関する相溶性は、適度に満足なものに過ぎない。

しかるに本発明は、特に除草活性において向上した性質を有する新規化合物を提供することをその目的とする。

本発明者等は、上記目的が式 I で表される 3 - ヘテロシクリル置換ベンゾイル誘導体と、その除草作用により達成されることを見出した。更に本発明者等は、その組成物の製造法、および化合物 I を用いた望ましくない植生の防除方法を見出した。

式 I の化合物は、置換基の形に応じて 1 個以上のキラル中心を有し、エナンチオマーまたはジアステレオマー混合物として存在する。本発明は、純粋なエナンチオマーまたはジアステレオマー、およびこれらの混合物に関する。

式 I の化合物は、農業上有用な塩の形状で存在してもよく、その塩の種類は一般的には重要ではない。通常、適する塩はこれらのカチオンの塩、またはカチオンまたはアニオンが化合物 I の除草作用に悪影響を及ぼさない酸の酸付加塩である。

適するカチオンの例は、特にアルカリ金属、好ましくはリチウム、ナトリウム、カリウム、アルカリ土類金属、好ましくはカルシウムおよびマグネシウム、遷移金属、好ましくはマンガン、銅、亜鉛、鉄の各イオンまたはアンモニウムであり、アンモニウムの場合は、1 ~ 4 個の水素原子が C₁ - C₄ アルキル、ヒドロキシ - C₁ - C₄ アルキル、C₁ - C₄ アルコキシ - C₁ - C₄ アルキル、ヒドロキシ - C₁ - C₄ アルコキシ - C₁ - C₄ アルキル、フェニルまたはベンゾイルにより置換されていてもよい。このうち好ましい具体例はアンモニウム、ジメチルアンモニウム、ジイソプロピルアンモニウム、テトラメチルアンモニウム、テトラブチルアンモニウム、2 - (2 - ヒドロキシエタ - 1 - オキシ) エタ - 1 - イルアンモニウム、ジ(2 - ヒドロキシエタ - 1 - イル) アンモニウム、トリメチルベンジルアンモニウムである。この他にホスホニウムイオン、スルホニウムイオン、好ましくはトリ(C₁ - C₄ アルキル)スルホニウム、スルホキソニウムイオン、更にトリ(C₁ - C₄ アルキル)スルホキソニウムが挙げられる。

有用な酸付加塩のアニオンは、主に、塩素、臭素、弗素、硫酸水素塩、硫酸塩、燐酸二水素塩、燐酸水素塩、硝酸塩、炭酸水素塩、炭酸塩、ヘキサフルオロシリケート、ヘキサフルオロホスファート、安息香酸塩のアニオン、および C₁ - C₄ アルカン酸、好ましくは蟻酸、酢酸、プロピオン酸、酪酸のアニオンである。

置換基 C₁ - C₁₈ に関して、またはフェニル環上の置換基として挙げた有機部分は以下に示す各基を個々に列挙することに相当する集合的用語である。あらゆる炭化水素鎖、すなわち全アルキル、ハロアルキル、シアノアルキル、アルコキシ、ハロアルコキシ、アルキルイミノオキシ、アルキルカルボニルオキシ、アルキルチオ、ハロアルキルチオ、アルキルスルフィニル、ハロアルキルスルフィニル、アルキルスルホニル、ハロアルキルスルホニル、アルコキシカルボニル、ハロアルコキシカルボニル、アルケニルオキシ、アルキニルオキシ、ジアルキルアミノ、ジアルキルヒドラジノ、アルコキシアルキル、ヒドロキシアルコキシアルキル、ジアルコキシアルキル、アルキルチオアルキル、ジアルキルアミノアルキル、ジアルキルヒドラジノアルキル、アルキルイミノオキシアルキル、アルコキシカルボニルアルキルおよびアルコキシアルコキシ部分は、直鎖状であっても分岐状であってもよい。特別に言及しない限り、ハロゲン置換基は 1 個 ~ 5 個の同一の、または異なるハロゲン原子を有しているのが好ましい。ハロゲンの意味は、各場合において弗素、塩素、臭素または沃素を意味するものである。

以下に他の意味の例を示す。

C₁ - C₄ アルキル、およびジ(C₁ - C₄ アルコキシ) - C₁ - C₄ アルキル、[2, 2 - ジ

10

20

30

40

50

(C₁ - C₄アルキル) - 1 - ヒドラジノ] - C₁ - C₄アルキル、C₁ - C₆アルキルイミノオキシ - C₁ - C₄アルキル、ヒドロキシ - C₁ - C₄アルコキシ - C₁ - C₄アルキル、C₁ - C₄アルキルカルボニルオキシのアルキル部分：例えばメチル、エチル、プロピル、1 - メチルエチル、ブチル、1 - メチルプロピル、2 - メチルプロピルおよび1, 1 - ジメチルエチル。

C₁ - C₆アルキル：上述のC₁ - C₄アルキル、例えばペンチル、1 - メチルブチル、2 - メチルブチル、3 - メチルブチル、2, 2 - ジメチルプロピル、1 - エチルプロピル、ヘキシル、1, 1 - ジメチルプロピル、1, 2 - ジメチルプロピル、1 - メチルペンチル、2 - メチルペンチル、3 - メチルペンチル、4 - メチルペンチル、1, 1 - ジメチルブチル、1, 2 - ジメチルブチル、1, 3 - ジメチルブチル、2, 2 - ジメチルブチル、2, 3 - ジメチルブチル、3, 3 - ジメチルブチル、1 - エチルブチル、2 - エチルブチル、1, 1, 2 - トリメチルプロピル、1 - エチル - 1 - メチルプロピルおよび1 - エチル - 3 - メチルプロピル。

C₁ - C₄ハロアルキル：弗素、塩素、臭素および/または沃素により部分的または完全に置換されている上述のC₁ - C₄アルキル、例えばクロロメチル、ジクロロメチル、トリクロロメチル、フルオロメチル、ジフルオロメチル、トリフルオロメチル、クロロフルオロメチル、ジクロロフルオロメチル、クロロジフルオロメチル、2 - フルオロエチル、2 - クロロエチル、2 - プロモエチル、2 - ヨードエチル、2, 2 - ジフルオロエチル、2, 2, 2 - トリフルオロエチル、2 - クロロ - 2 - フルオロエチル、2 - クロロ - 2, 2 - ジフルオロエチル、2, 2 - ジクロロ - 2 - フルオロエチル、2, 2, 2 - トリクロロエチル、ペンタフルオロエチル、2 - フルオロプロピル、3 - フルオロプロピル、2, 2 - ジフルオロプロピル、2, 3 - ジフルオロプロピル、2 - クロロプロピル、3 - クロロプロピル、2, 3 - ジクロロプロピル、2 - プロモプロピル、3 - プロモプロピル、3, 3, 3 - トリフルオロプロピル、3, 3, 3 - トリクロロプロピル、2, 2, 3, 3, 3 - ペンタフルオロプロピル、ヘプタフルオロプロピル、1 - (フルオロメチル) - 2 - フルオロエチル、1 - (クロロメチル) - 2 - クロロエチル、1 - (プロモメチル) - 2 - プロモエチル、4 - フルオロブチル、4 - クロロブチル、4 - プロモブチルおよびノナフルオロブチル。

C₁ - C₆ハロアルキル：上述のC₁ - C₄ハロアルキル、例えば5 - フルオロペンチル、5 - クロロペンチル、5 - プロモペンチル、5 - ヨードペンチル、ウンデカフルオロペンチル、6 - フルオロヘキシル、6 - クロロヘキシル、6 - プロモヘキシル、6 - ヨードヘキシルおよびドデカフルオロヘキシル。

C₁ - C₄シアノアルキル：例えばシアノメチル、1 - シアノエタ - 1 - イル、2 - シアノエタ - 1 - イル、1 - シアノプロパ - 1 - イル、2 - シアノプロパ - 1 - イル、3 - シアノプロパ - 1 - イル、1 - シアノプロパ - 2 - イル、2 - シアノプロパ - 2 - イル、1 - シアノブタ - 1 - イル、2 - シアノブタ - 1 - イル、3 - シアノブタ - 1 - イル、4 - シアノブタ - 1 - イル、1 - シアノブタ - 2 - イル、2 - シアノブタ - 2 - イル、1 - シアノブタ - 3 - イル、2 - シアノブタ - 3 - イル、1 - シアノ - 2 - メチルプロパ - 3 - イル、2 - シアノ - 2 - メチルプロパ - 3 - イル、3 - シアノ - 2 - メチルプロパ - 3 - イルおよび2 - シアノメチルプロパ - 2 - イル。

C₁ - C₄アルコキシおよびジ(C₁ - C₄アルコキシ) - C₁ - C₄アルキル、ヒドロキシ - C₁ - C₄アルコキシ - C₁ - C₄アルキルのアルコキシ部分：例えばメトキシ、エトキシ、プロポキシ、1 - メチルエトキシ、ブトキシ、1 - メチルプロポキシ、2 - メチルプロポキシおよび1, 1 - ジメチルエトキシ。

C₁ - C₆アルコキシ：上述のC₁ - C₄アルコキシ、および例えばペントキシ、1 - メチルブトキシ、2 - メチルブトキシ、3 - メトキシブトキシ、1, 1 - ジメチルプロポキシ、1, 2 - ジメチルプロポキシ、2, 2 - ジメチルプロポキシ、1 - エチルプロポキシ、ヘキソキシ、1 - メチルペントキシ、2 - メチルペントキシ、3 - メチルペントキシ、4 - メチルペントキシ、1, 1 - ジメチルブトキシ、1, 2 - ジメチルブトキシ、1, 3 - ジメチルブトキシ、2, 2 - ジメチルブトキシ、2, 3 - ジメチルブトキシ、3, 3 - ジメ

10

20

30

40

50

チルプトキシ、1 - エチルプトキシ、2 - エチルプトキシ、1, 1, 2 - トリメチルプロポキシ、1, 2, 2 - トリメチルプロポキシ、1 - エチル - 1 - メチルプロポキシおよび1 - エチル - 2 - メチルプロポキシ。

C₁ - C₄ハロアルコキシ：弗素、塩素、臭素および/または沃素により部分的または完全に置換されている上述のC₁ - C₄アルコキシ基、例えばフルオロメトキシ、ジフルオロメトキシ、トリフルオロメトキシ、クロロジフルオロメトキシ、プロモジフルオロメトキシ、2 - フルオロエトキシ、2 - クロロエトキシ、2 - ブロモメトキシ、2 - ヨードエトキシ、2, 2 - ジフルオロエトキシ、2, 2, 2 - トリフルオロエトキシ、2 - クロロ - 2 - フルオロエトキシ、2 - クロロ - 2, 2 - ジフルオロエトキシ、2, 2 - ジクロロ - 2 - フルオロエトキシ、2, 2, 2 - トリクロロエトキシ、ペンタフルオロエトキシ、2 - フルオロプロポキシ、3 - フルオロプロポキシ、2 - クロロプロポキシ、3 - クロロプロポキシ、2 - ブロモプロポキシ、3 - ブロモプロポキシ、2, 2 - ジフルオロプロポキシ、2, 3 - ジフルオロプロポキシ、2, 3 - ジクロロプロポキシ、3, 3, 3 - トリフルオロプロポキシ、3, 3, 3 - トリクロロプロポキシ、2, 2, 3, 3, 3 - ペンタフルオロプロポキシ、ヘプタフルオロプロポキシ、1 - (フルオロメチル) - 2 - フルオロエトキシ、1 - (クロロメチル) - 2 - クロロエトキシ、1 - (ブロモメチル) - 2 - ブロモエトキシ、4 - フルオロプトキシ、4 - クロロプトキシ、4 - ブロモプトキシおよびノナフルオロプトキシ。

10

C₁ - C₆ハルアルコキシ：上述のC₁ - C₄アルキル、および例えば5 - フルオロペントキシ、5 - クロロペントキシ、5 - ブロモペントキシ、5 - ヨードペントキシ、ウンデカフルオロペントキシ、6 - フルオロヘキソキシ、6 - クロロエトキシ、6 - ブロモヘキソキシ、6 - ヨードヘキソキシおよびドデカウルオロヘキソキシ。

20

C₁ - C₆アルキルイミノオキシ、およびC₁ - C₆アルキルイミノオキシ - C₁ - C₄アルキルのC₁ - C₆アルキルイミノオキシ部分：例えばメチルイミノオキシ、エチルイミノオキシ、1 - プロピルイミノオキシ、2 - プロピルイミノオキシ、1 - ブチルイミノオキシ、2 - ブチルイミノオキシ、2 - メチルプロパ - 1 - イルイミノオキシ、1 - ペンチルイミノオキシ、2 - ペンチルイミノオキシ、3 - ペンチルイミノオキシ、3 - メチルブタ - 2 - イルイミノオキシ、2 - メチルブタ - 1 - イルイミノオキシ、3 - メチルブタ - 1 - イルイミノオキシ、1 - ヘキシルイミノオキシ、2 - ヘキシルイミノオキシ、3 - ヘキシルイミノオキシ、2 - メチルペンタ - 1 - イルイミノオキシ、3 - メチルペンタ - 1 - イルイミノオキシ、4 - メチルペンタ - 1 - イルイミノオキシ、2 - エチルブタ - 1 - イルイミノオキシ、3 - エチルブタ - 1 - イルイミノオキシ、2, 3 - ジメチルブタ - 1 - イルイミノオキシ、3 - メチルペンタ - 2 - イルイミノオキシ、4 - メチルペンタ - 2 - イルイミノオキシおよび3, 3 - ジメチルブタ - 2 - イルイミノオキシ。

30

C₁ - C₄アルキルチオ：例えばメチルチオ、エチルチオ、プロピルチオ、1 - メチルエチルチオ、ブチルチオ、1 - メチルプロピルチオ、2 - メチルプロピルチオおよび1, 1 - ジメチルエチルチオ。

C₁ - C₆アルキルチオ：上述のC₁ - C₄アルキルチオ、および例えばペンチルチオ、1 - メチルブチルチオ、2 - メチルブチルチオ、3 - メチルブチルチオ、2, 2 - ジメチルプロピルチオ、1 - エチルプロピルチオ、ヘキシルチオ、1, 1 - ジメチルプロピルチオ、1, 2 - ジメチルプロピルチオ、1 - メチルペンチルチオ、2 - メチルペンチルチオ、3 - メチルペンチルチオ、4 - メチルペンチルチオ、1, 1 - ジメチルブチルチオ、1, 2 - ジメチルブチルチオ、1, 3 - ジメチルブチルチオ、2, 2 - ジメチルブチルチオ、2, 2, 3 - ジメチルブチルチオ、3, 3 - ジメチルブチルチオ、1 - エチルブチルチオ、2 - エチルブチルチオ、1, 1, 2 - トリメチルプロピルチオ、1, 2, 2 - トリメチルプロピルチオ、1 - エチル - 1 - メチルプロピルチオおよび1 - エチル - 2 - メチルプロピルチオ。

40

C₁ - C₄ハロアルキルチオ：弗素、塩素、臭素および/または沃素により部分的または完全に置換されている上述のC₁ - C₄アルキルチオ基、例えばフルオロメチルチオ、ジフルオロメチルチオ、トリフルオロメチルチオ、クロロジフルオロメチルチオ、プロモジフル

50

オロメチルチオ、2 - フルオロエチルチオ、2 - クロロエチルチオ、2 - ブロモエチルチオ、2 - ヨードエチルチオ、2, 2 - ジフルオロエチルチオ、2, 2, 2 - トリフルオロエチルチオ、2, 2, 2 - トリクロロエチルチオ、2 - クロロ - 2 - フルオロエチルチオ、2 - クロロ - 2 - ジフルオロエチルチオ、2, 2 - ジクロロ - 2 - フルオロエチルチオ、ペンタフルオロエチルチオ、2 - フルオロプロピルチオ、3 - フルオロプロピルチオ、2 - クロロプロピルチオ、3 - クロロプロピルチオ、2 - ブロモプロピルチオ、3 - ブロモプロピルチオ、2, 2 - ジフルオロプロピルチオ、2, 3 - ジフルオロプロピルチオ、2, 3 - ジクロロプロピルチオ、3, 3, 3 - トリフルオロプロピルチオ、3, 3, 3 - トリクロロプロピルチオ、2, 2, 3, 3, 3 - ペンタフルオロプロピルチオ、ヘプタフルオロプロピルチオ、1 - (フルオロメチル) - 2 - フルオロエチルチオ、1 - (クロロメチル) - 2 - クロロエチルチオ、1 - (ブロモメチル) - 2 - ブロモエチルチオ、4 - フルオロブチルチオ、4 - クロロブチルチオ、4 - ブロモブチルチオおよびノナフルオロブチルチオ。

10

C₁ - C₆ハロアルキルチオ：上述のC₁ - C₄ハロアルキルチオ、および例えば5 - フルオロペンチルチオ、5 - クロロペンチルチオ、5 - ブロモペンチルチオ、5 - ヨードペンチルチオ、ウンデカフルオロペンチルチオ、6 - フルオロヘキシルチオ、6 - クロロヘキシルチオ、6 - ブロモヘキシルチオ、6 - ヨードヘキシルチオおよびドデカフルオロヘキシルチオ。

C₁ - C₆アルキルスルフィニル (C₁ - C₆ - アルキル - S (=O) -)：例えばメチルスルフィニル、エチルスルフィニル、プロピルスルフィニル、1 - メチルエチルスルフィニル、ブチルスルフィニル、1 - メチルプロピルスルフィニル、2 - メチルプロピルスルフィニル、1, 1 - ジメチルエチルスルフィニル、ペンチルスルフィニル、1 - メチルブチルスルフィニル、2 - メチルブチルスルフィニル、3 - メチルブチルスルフィニル、2, 2 - ジメチルプロピルスルフィニル、1 - エチルプロピルスルフィニル、1, 1 - ジメチルプロピルスルフィニル、1, 2 - ジメチルプロピルスルフィニル、ヘキシルスルフィニル、1 - メチルペンチルスルフィニル、2 - メチルペンチルスルフィニル、3 - メチルペンチルスルフィニル、4 - メチルペンチルスルフィニル、1, 1 - ジメチルブチルスルフィニル、1, 2 - ジメチルブチルスルフィニル、1, 3 - ジメチルブチルスルフィニル、2, 2 - ジメチルブチルスルフィニル、2, 3 - ジメチルブチルスルフィニル、3, 3 - ジメチルブチルスルフィニル、1 - エチルブチルスルフィニル、2 - エチルブチルスルフィニル、1, 1, 2 - トリメチルプロピルスルフィニル、1, 2, 2 - トリメチルプロピルスルフィニル、1 - エチル - 1 - メチルプロピルスルフィニルおよび1 - エチル - 2 - メチルプロピルスルフィニル。

20

30

C₁ - C₆ハロアルキルスルフィニル：例えば弗素、塩素、臭素および/または沃素により部分的または完全に置換されている上述のC₁ - C₆アルキルスルフィニル基、例えばフルオロメチルスルフィニル、ジフルオロメチルスルフィニル、トリフルオロメチルスルフィニル、クロロジフルオロメチルスルフィニル、ブロモジフルオロメチルスルフィニル、2 - フルオロエチルスルフィニル、2 - クロロエチルスルフィニル、2 - ブロモエチルスルフィニル、2 - ヨードエチルスルフィニル、2, 2 - ジフルオロエチルスルフィニル、2, 2, 2 - トリフルオロエチルスルフィニル、2, 2, 2 - トリクロロエチルスルフィニル、2 - クロロ - 2 - フルオロエチルスルフィニル、2 - クロロ - 2, 2 - ジフルオロエチルスルフィニル、2, 2 - ジクロロ - 2 - フルオロエチルスルフィニル、ペンタフルオロエチルスルフィニル、2 - フルオロプロピルスルフィニル、3 - フルオロプロピルスルフィニル、2 - クロロプロピルスルフィニル、3 - クロロプロピルスルフィニル、2 - ブロモプロピルスルフィニル、3 - ブロモプロピルスルフィニル、2, 2 - ジフルオロプロピルスルフィニル、2, 3 - ジフルオロプロピルスルフィニル、2, 3 - ジクロロプロピルスルフィニル、3, 3, 3 - トリフルオロプロピルスルフィニル、3, 3, 3 - トリクロロプロピルスルフィニル、2, 2, 3, 3, 3 - ペンタフルオロプロピルスルフィニル、ヘプタフルオロプロピルスルフィニル、1 - (フルオロメチル) - 2 - フルオロエチルスルフィニル、1 - (クロロメチル) - 2 - クロロエチルスルフィニル、1 - (ブロモエ

40

50

チル) - 2 - プロモエチルスルフィニル、4 - フルオロブチルスルフィニル、4 - クロロブチルスルフィニル、4 - プロモブチルスルフィニル、ノナフルオロブチルスルフィニル、5 - フルオロペンチルスルフィニル、5 - クロロペンチルスルフィニル、5 - プロモペンチルスルフィニル、5 - ヨードペンチルスルフィニル、ウンデカフルオロペンチルスルフィニル、6 - フルオロヘキシルスルフィニル、6 - クロロヘキシルスルフィニル、6 - プロモヘキシルスルフィニル、6 - ヨードヘキシルスルフィニルおよびドデカフルオロヘキシルスルフィニル。

C₁ - C₆アルキルスルホニル (C₁ - C₆アルキル - S (=O)₂ -) : 例えばメチルスルホニル、エチルスルホニル、プロピルスルホニル、1 - メチルエチルスルホニル、ブチルスルホニル、1 - メチルプロピルスルホニル、2 - メチルプロピルスルホニル、1, 1 - ジメチルエチルスルホニル、ペンチルスルホニル、1 - メチルブチルスルホニル、2 - メチルブチルスルホニル、3 - メチルブチルスルホニル、1, 1 - ジメチルプロピルスルホニル、1, 2 - ジメチルプロピルスルホニル、2, 2 - ジメチルプロピルスルホニル、1 - エチルプロピルスルホニル、ヘキシルスルホニル、1 - メチルペンチルスルホニル、2 - メチルペンチルスルホニル、3 - メチルペンチルスルホニル、4 - メチルペンチルスルホニル、1, 1 - ジメチルブチルスルホニル、1, 2 - ジメチルブチルスルホニル、1, 3 - ジメチルブチルスルホニル、2, 2 - ジメチルブチルスルホニル、2, 3 - ジメチルブチルスルホニル、3, 3 - ジメチルブチルスルホニル、1 - エチルブチルスルホニル、2 - エチルブチルスルホニル、1, 1, 2 - トリメチルプロピルスルホニル、1, 2, 2 - トリメチルプロピルスルホニル、1 - エチル - 1 - メチルプロピルスルホニルおよび 1 - エチル - 2 - メチルプロピルスルホニル。

C₁ - C₆ハロアルキルスルホニル : 弗素、塩素、臭素および/または沃素により部分的または完全に置換されているC₁ - C₆アルキルスルホニル基、例えばフルオロメチルスルホニル、ジフルオロメチルスルホニル、トリフルオロメチルスルホニル、クロロジフルオロメチルスルホニル、プロモジフルオロメチルスルホニル、2 - フルオロエチルスルホニル、2 - クロロエチルスルホニル、2 - プロモエチルスルホニル、2 - ヨードエチルスルホニル、2, 2 - ジフルオロエチルスルホニル、2, 2, 2 - トリフルオロエチルスルホニル、2 - クロロ - 2 - フルオロエチルスルホニル、2 - クロロ - 2, 2 - ジフルオロエチルスルホニル、2, 2 - ジクロロ - 2 - フルオロエチルスルホニル、2, 2, 2 - トリクロロエチルスルホニル、ペンタフルオロエチルスルホニル、2 - フルオロプロピルスルホニル、3 - フルオロプロピルスルホニル、2 - クロロプロピルスルホニル、3 - クロロプロピルスルホニル、2 - プロモプロピルスルホニル、3 - プロモプロピルスルホニル、2, 2 - ジフルオロプロピルスルホニル、2, 3 - ジフルオロプロピルスルホニル、2, 3 - ジクロロプロピルスルホニル、3, 3, 3 - トリフルオロプロピルスルホニル、3, 3, 3 - トリクロロプロピルスルホニル、2, 2, 3, 3, 3 - ペンタフルオロプロピルスルホニル、ヘプタフルオロプロピルスルホニル、1 - (フルオロメチル) - 2 - フルオロエチルスルホニル、1 - (クロロメチル) - 2 - クロロエチルスルホニル、1 - (プロモメチル) - 2 - プロモエチルスルホニル、4 - フルオロブチルスルホニル、4 - クロロブチルスルホニル、4 - プロモブチルスルホニル、ノナフルオロブチルスルホニル、5 - フルオロペンチルスルホニル、5 - クロロペンチルスルホニル、5 - プロモペンチルスルホニル、5 - ヨードペンチルスルホニル、6 - フルオロヘキシルスルホニル、6 - プロモヘキシルスルホニル、6 - ヨードヘキシルスルホニルおよびドデカフルオロヘキシルスルホニル。

C₁ - C₄アルコキシカルボニル : 例えばメトキシカルボニル、エトキシカルボニル、プロポキシカルボニル、1 - メチルエトキシカルボニル、ブトキシカルボニル、1 - メチルプロポキシカルボニル、2 - メチルプロポキシカルボニルおよび 1, 1 - ジメトキシカルボニル。

C₁ - C₄ハロアルコキシカルボニル : 弗素、塩素、臭素および/または沃素により部分的または完全に置換されている上述のC₁ - C₄アルコキシカルボニル、例えばフルオロメトキシカルボニル、ジフルオロメトキシカルボニル、トリフルオロメトキシカルボニル、ク

10

20

30

40

50

ロロジフルオロメトキシカルボニル、プロモジフルオロメトキシカルボニル、2 - フルオロエトキシカルボニル、2 - クロロエトキシカルボニル、2 - プロモエトキシカルボニル、2 - クロロエトキシカルボニル、2 - プロモエトキシカルボニル、2 - ヨードエトキシカルボニル、2, 2 - ジフルオロエトキシカルボニル、2, 2, 2 - トリフルオロエトキシカルボニル、2 - クロロ - 2 - フルオロエトキシカルボニル、2 - クロロ - 2, 2 - ジフルオロエトキシカルボニル、2, 2 - ジクロロ - 2 - フルオロエトキシカルボニル、2, 2, 2 - トリクロロエトキシカルボニル、ペンタフルオロエトキシカルボニル、2 - フルオロプロポキシカルボニル、3 - フルオロプロポキシカルボニル、2 - クロロプロポキシカルボニル、3 - クロロプロポキシカルボニル、2 - プロモプロポキシカルボニル、3 - プロモプロポキシカルボニル、2, 2 - ジフルオロプロポキシカルボニル、2, 3 - ジフルオロプロポキシカルボニル、2, 3 - ジクロロプロポキシカルボニル、3, 3, 3 - トリフルオロプロポキシカルボニル、3, 3, 3 - トリクロロプロポキシカルボニル、2, 2, 3, 3, 3 - ペンタフルオロプロポキシカルボニル、ヘプタフルオロプロポキシカルボニル、1 - (フルオロメチル) - 2 - フルオロエトキシカルボニル、1 - (クロロメチル) - 2 - クロロエトキシカルボニル、1 - (プロモメチル) - 2 - プロモエトキシカルボニル、4 - フルオロプトキシカルボニル、4 - クロロプトキシカルボニル、4 - プロモプトキシカルボニルおよび4 - ヨードプトキシカルボニル。

C₃ - C₆アルケニルオキシ：例えばプロパ - 1 - エン - 1 - イルオキシ、プロパ - 2 - エン - 1 - イルオキシ、1 - メチルエテニルオキシ、ブテン - 1 - イルオキシ、ブテン - 2 - イルオキシ、ブテン - 3 - イルオキシ、1 - メチルプロパ - 1 - エン - 1 - イルオキシ、2 - メチルプロパ - 1 - エン - 1 - イルオキシ、1 - メチルプロパ - 2 - エン - 1 - イルオキシ、2 - メチルプロパ - 2 - エン - 1 - イルオキシ、ペンテン - 1 - イルオキシ、ペンテン - 2 - イルオキシ、ペンテン - 3 - イルオキシ、ペンテン - 4 - イルオキシ、1 - メチルブタ - 1 - エン - 1 - イルオキシ、2 - メチルブタ - 1 - エン - 1 - イルオキシ、3 - メチルブタ - 1 - エン - 1 - イルオキシ、1 - メチルブタ - 2 - エン - 1 - イルオキシ、2 - メチルブタ - 2 - エン - 1 - イルオキシ、3 - メチルブタ - 2 - エン - 1 - イルオキシ、1 - メチルブタ - 3 - エン - 1 - イルオキシ、2 - メチルブタ - 3 - エン - 1 - イルオキシ、3 - メチルブタ - 3 - エン - 1 - イルオキシ、1, 1 - ジメチルプロパ - 2 - エン - 1 - イルオキシ、1, 2 - ジメチルプロパ - 1 - エン - 1 - イルオキシ、1, 2 - ジメチルプロパ - 2 - エン - 1 - イルオキシ、1 - エチルプロパ - 1 - エン - 2 - イルオキシ、1 - エチルプロパ - 2 - エン - 1 - イルオキシ、ヘキサ - 1 - エン - 1 - イルオキシ、ヘキサ - 2 - エン - 1 - イルオキシ、ヘキサ - 3 - エン - 1 - イルオキシ、ヘキサ - 4 - エン - 1 - イルオキシ、ヘキサ - 5 - エン - 1 - イルオキシ、1 - メチルペンタ - 1 - エン - 1 - イルオキシ、2 - メチルペンタ - 1 - エン - 1 - イルオキシ、3 - メチルペンタ - 1 - エン - 1 - イルオキシ、4 - メチルペンタ - 1 - エン - 1 - イルオキシ、1 - メチルペンタ - 2 - エン - 1 - イルオキシ、2 - メチルペンタ - 2 - エン - 1 - イルオキシ、3 - メチルペンタ - 2 - エン - 1 - イルオキシ、4 - メチルペンタ - 2 - エン - 1 - イルオキシ、1 - メチルペンタ - 3 - エン - 1 - イルオキシ、2 - メチルペンタ - 3 - エン - 1 - イルオキシ、3 - メチルペンタ - 3 - エン - 1 - イルオキシ、4 - メチルペンタ - 3 - エン - 1 - イルオキシ、1 - メチルペンタ - 4 - エン - 1 - イルオキシ、2 - メチルペンタ - 4 - エン - 1 - イルオキシ、3 - メチルペンタ - 4 - エン - 1 - イルオキシ、4 - メチルペンタ - 4 - エン - 1 - イルオキシ、1, 1 - ジメチルブタ - 2 - エン - 1 - イルオキシ、1, 1 - ジメチルブタ - 3 - エン - 1 - イルオキシ、1, 2 - ジメチルブタ - 1 - エン - 1 - イルオキシ、1, 2 - ジメチルブタ - 2 - エン - 1 - イルオキシ、1, 2 - ジメチルブタ - 3 - エン - 1 - イルオキシ、1, 3 - ジメチルブタ - 1 - エン - 1 - イルオキシ、1, 3 - ジメチルブタ - 2 - エン - 1 - イルオキシ、1, 3 - ジメチルブタ - 3 - エン - 1 - イルオキシ、2, 2 - ジメチルブタ - 3 - エン - 1 - イルオキシ、2, 3 - ジメチルブタ - 1 - エン - 1 - イルオキシ、2, 3 - ジメチルブタ - 2 - エン - 1 - イルオキシ、2, 3 - ジメチルブタ - 3 - エン - 1 - イルオキシ、3, 3 - ジメチルブタ - 1 - エン - 1 - イルオキシ、3, 3 - ジメチルブタ - 2 - エン - 1 - イルオキシ、

10

20

30

40

50

1 - エチルブタ - 1 - エン - 1 - イルオキシ、1 - エチルブタ - 2 - エン - 1 - イルオキシ、1 - エチルブタ - 3 - エン - 1 - イルオキシ、2 - エチルブタ - 1 - エン - 1 - イルオキシ、2 - エチルブタ - 2 - エン - 1 - イルオキシ、2 - エチルブタ - 3 - エン - 1 - イルオキシ、1, 1, 2 - トリメチルプロパ - 2 - エン - 1 - イルオキシ、1 - エチル - 1 - メチルプロパ - 2 - エン - 1 - イルオキシ、1 - エチル - 2 - メチルプロパ - 1 - エン - 1 - イルオキシおよび 1 - エチル - 2 - メチルプロパ - 2 - エン - 1 - イルオキシ。

C₃ - C₆アルキニルオキシ：例えばプロパ - 1 - イン - 1 - イルオキシ、プロパ - 2 - イン - 1 - イルオキシ、ブタ - 1 - イン - 1 - イルオキシ、ブタ - 1 - イン - 3 - イルオキシ、ブタ - 1 - イン - 4 - イルオキシ、ブタ - 2 - イン - 1 - イルオキシ、ペンタ - 1 - イン - 1 - イルオキシ、ペンタ - 1 - イン - 3 - イルオキシ、ペンタ - 1 - イン - 4 - イルオキシ、ペンタ - 1 - イン - 5 - イルオキシ、ペンタ - 2 - イン - 1 - イルオキシ、ペンタ - 2 - イン - 4 - イルオキシ、ペンタ - 2 - イン - 5 - イルオキシ、3 - メチルブタ - 1 - イン - 3 - イルオキシ、3 - メチルブタ - 1 - イン - 4 - イルオキシ、ヘキサ - 1 - イン - 1 - イルオキシ、ヘキサ - 1 - イン - 3 - イルオキシ、ヘキサ - 1 - イン - 4 - イルオキシ、ヘキサ - 1 - イン - 5 - イルオキシ、ヘキサ - 1 - イン - 6 - イルオキシ、ヘキサ - 2 - イン - 1 - イルオキシ、ヘキサ - 2 - イン - 4 - イルオキシ、ヘキサ - 2 - イン - 5 - イルオキシ、ヘキサ - 2 - イン - 6 - イルオキシ、ヘキサ - 3 - イン - 1 - イルオキシ、ヘキサ - 3 - イン - 2 - イルオキシ、3 - メチルペンタ - 1 - イン - 1 - イルオキシ、3 - メチルペンタ - 1 - イン - 3 - イルオキシ、3 - メチルペンタ - 1 - イン - 4 - イルオキシ、3 - メチルペンタ - 1 - イン - 5 - イルオキシ、4 - メチルペンタ - 1 - イン - 1 - イルオキシ、4 - メチルペンタ - 2 - イン - 4 - イルオキシおよび 4 - メチルペンタ - 2 - イン - 5 - イルオキシ。

ジ (C₁ - C₄アルキル) アミノ：例えば N, N - ジメチルアミノ、N, N - ジエチルアミノ、N, N - ジプロピルアミノ、N, N - ジ (1 - メチルエチル) アミノ、N, N - ジブチルアミノ、N, N - ジ (1 - メチルプロピル) アミノ、N, N - ジ (2 - メチルプロピル) アミノ、N, N - ジ (1, 1 - ジメチルエチル) アミノ、N - エチル - N - メチルアミノ、N - エチル - N - プロピルアミノ、N - メチル - N - (1 - メチルエチル) アミノ、N - ブチル - N - メチルアミノ、N - メチル - N - (1 - メチルプロピル) アミノ、N - メチル - N - (2 - メチルプロピル) アミノ、N - (1, 1 - ジメチルエチル) - N - メチルアミノ、N - エチル - N - プロピルアミノ、N - エチル - N - (1 - メチルエチル) アミノ、N - ブチル - N - エチルアミノ、N - エチル - N - (1 - メチルプロピル) アミノ、N - エチル - N - (2 - メチルプロピル) アミノ、N - エチル - N - (1, 1 - ジメチルエチル) アミノ、N - (1 - メチルエチル) - N - プロピルアミノ、N - ブチル - N - プロピルアミノ、N - (1 - メチルプロピル) - N - プロピルアミノ、N - (2 - メチルプロピル) - N - プロピルアミノ、N - (1, 1 - ジメチルエチル) - N - プロピルアミノ、N - ブチル - N - (1 - メチルエチル) アミノ、N - (1 - メチルエチル) - N - (1 - メチルプロピル) アミノ、N - (1 - メチルエチル) - N - (2 - メチルプロピル) アミノ、N - (1, 1 - ジメチルエチル) - N - (1 - メチルエチル) アミノ、N - ブチル - N - (1 - メチルプロピル) アミノ、N - ブチル - N - (2 - メチルプロピル) アミノ、N - ブチル - N - (1, 1 - ジメチルエチル) アミノ、N - (1 - メチルプロピル) - N - (2 - メチルプロピル) アミノ、N - (1, 1 - ジメチルエチル) - N - (1 - メチルプロピル) アミノおよび N - (1, 1 - ジメチルエチル) - N - (2 - メチルプロピル) アミノ。

[2, 2 - ジ (C₁ - C₄アルキル) - 1 - ヒドラジノ]、および [2, 2 - ジ (C₁ - C₄アルキル) - 1 - ヒドラジノ] - C₁ - C₄アルキルのジアルキルヒドラジノ部分：例えば 2, 2 - ジメチルヒドラジノ - 1, 2, 2 - ジエチルヒドラジノ - 1, 2, 2 - ジプロピルヒドラジノ - 1, 2, 2 - ジ (1 - メチルエチル) - 1 - ヒドラジノ、2, 2 - ジブチルヒドラジノ - 1, 2, 2 - ジ (1 - メチルプロピル) - 1 - ヒドラジノ、2, 2 - ジ (2 - メチルプロピル) - 1 - ヒドラジノ、2, 2 - ジ (1, 1 - ジメチルエチル) - 1 - ヒドラジノ、2 - エチル - 2 - メチル - 1 - ヒドラジノ、2 - メチル - 2 - プロピル - 1

10

20

30

40

50

- ヒドラジノ、2 - メチル - 2 - (1 - メチルエチル) - 1 - ヒドラジノ、2 - ブチル - 2 - メチル - 1 - ヒドラジノ、2 - メチル - 2 - (1 - メチルプロピル) - 1 - ヒドラジノ、2 - メチル - 2 - (2 - メチルプロピル) - 1 - ヒドラジノ、2 - (1, 1 - ジメチルエチル) - 2 - メチル - 1 - ヒドラジノ、2 - エチル - 2 - プロピル - 1 - ヒドラジノ、2 - エチル - 2 - (1 - メチルエチル) - 1 - ヒドラジノ、2 - ブチル - 2 - エチル - 1 - ヒドラジノ、2 - エチル - 2 - (1 - メチルプロピル) - 1 - ヒドラジノ、2 - エチル - 2 - (2 - メチルプロピル) - 1 - ヒドラジノ、2 - エチル - 2 - (1, 1 - ジメチルエチル) - 1 - ヒドラジノ、2 - (1 - メチルエチル) - 2 - プロピル - 1 - ヒドラジノ、2 - ブチル - 2 - プロピル - 1 - ヒドラジノ、2 - (1 - メチルプロピル) - 2 - プロピル - 1 - ヒドラジノ、2 - (2 - メチルプロピル) - 2 - プロピル - 1 - ヒドラジノ、2 - (1, 1 - ジメチルエチル) - 2 - プロピル - 1 - ヒドラジノ、2 - ブチル - 2 - (1 - メチルエチル) - 1 - ヒドラジノ、2 - (1 - メチルエチル) - 2 - (1 - メチルプロピル) - 1 - ヒドラジノ、2 - (1 - メチルエチル) - 2 - (2 - メチルプロピル) - 1 - ヒドラジノ、2 - (1, 1 - ジメチルエチル) - 2 - (1 - メチルエチル) - 1 - ヒドラジノ、2 - ブチル - 2 - (1 - メチルプロピル) - 1 - ヒドラジノ、2 - ブチル - 2 - (2 - メチルプロピル) - 1 - ヒドラジノ、2 - ブチル - 2 - (1, 1 - ジメチルエチル) - 1 - ヒドラジノ、2 - (1 - メチルプロピル) - 2 - (2 - メチルプロピル) - 1 - ヒドラジノ、2 - (1, 1 - ジメチルエチル) - 2 - (1 - メチルプロピル) - 1 - ヒドラジノおよび 2 - (1, 1 - ジメチルエチル) - 2 - (2 - メチルプロピル) - 1 - ヒドラジノ。

10

20

ジ(C₁ - C₄アルキル)アミノ - C₁ - C₄アルキル: 上述のジ(C₁ - C₄アルキル)アミノにより置換されているC₁ - C₄アルキル、例えばN, N - ジメチルアミノメチル、N, N - ジエチルアミノメチル、N, N - ジプロピルアミノメチル、N, N - ジ(1 - メチルエチル)アミノメチル、N, N - ジブチルアミノメチル、N, N - ジ(1 - メチルプロピル)アミノメチル、N, N - ジ(2 - メチルプロピル)アミノメチル、N, N - ジ(1, 1 - ジメチルエチル)アミノメチル、N - エチル - N - メチルアミノメチル、N - メチル - N - プロピルアミノメチル、N - メチル - N - (1 - メチルエチル)アミノメチル、N - ブチル - N - メチルアミノメチル、N - メチル - N - (1 - メチルプロピル)アミノメチル、N - メチル - N - (2 - メチルプロピル)アミノメチル、N - (1, 1 - ジメチルエチル) - N - メチルアミノメチル、N - エチル - N - プロピルアミノメチル、N - エチル - N - (1 - メチルエチル)アミノメチル、N - ブチル - N - エチルアミノメチル、N - エチル - N - (1 - メチルプロピル)アミノメチル、N - エチル - N - (2 - メチルプロピル)アミノメチル、N - エチル - N - (1, 1 - ジメチルエチル)アミノメチル、N - (1 - メチルエチル) - N - プロピルアミノメチル、N - ブチル - N - プロピルアミノメチル、N - (1 - メチルプロピル) - N - プロピルアミノメチル、N - (2 - メチルプロピル) - N - プロピルアミノメチル、N - (1, 1 - ジメチルエチル) - N - プロピルアミノメチル、N - ブチル - N - (1 - メチルエチル)アミノメチル、N - (1 - メチルエチル) - N - (1 - メチルプロピル)アミノメチル、N - (1 - メチルエチル) - N - (2 - メチルプロピル)アミノメチル、N - (1, 1 - ジメチルエチル) - N - (1 - メチルエチル)アミノメチル、N - ブチル - N - (1 - メチルプロピル)アミノメチル、N - ブチル - N - (2 - メチルプロピル)アミノメチル、N - ブチル - N - (1, 1 - ジメチルエチル)アミノメチル、N - (1 - メチルプロピル) - N - (2 - メチルプロピル)アミノメチル、N - (1, 1 - ジメチルエチル) - N - (1 - メチルプロピル)アミノメチル、N - (1, 1 - ジメチルエチル) - N - (2 - メチルプロピル)アミノメチル、2 - (N, N - ジメチルアミノ)エチル、2 - (N, N - ジエチルアミノ)エチル、2 - (N, N - ジプロピルアミノ)エチル、2 - [N, N - ジ(1 - メチルエチル)アミノ]エチル、2 - [N, N - ジブチルアミノ]エチル、2 - [N, N - ジ(1 - メチルプロピル)アミノ]エチル、2 - [N, N - ジ(2 - メチルプロピル)アミノ]エチル、2 - [N, N - ジ(1, 1 - ジメチルエチル)アミノ]エチル、2 - [N - エチル - N - メチルアミノ]エチル、2 - [N - メチル - N - プロピルアミノ]エチル、2 - [N - メチル - N

30

40

50

- (1 - メチルエチル) アミノ] エチル、2 - [N - ブチル - N - メチルアミノ] エチル、2 - [N - メチル - N - (1 - メチルプロピル) アミノ] エチル、2 - [N - メチル - N - (2 - メチルプロピル) アミノ] エチル、2 - [N - (1, 1 - ジメチルエチル) - N - メチルアミノ] エチル、2 - [N - エチル - N - プロピルアミノ] エチル、2 - [N - エチル - N - (1 - メチルエチル) アミノ] エチル、2 - [N - ブチル - N - エチルアミノ] エチル、2 - [N - エチル - N - (1 - メチルプロピル) アミノ] エチル、2 - [N - エチル - N - (2 - メチルプロピル) アミノ] エチル、2 - [N - エチル - N - (1, 1 - ジメチルエチルアミノ] エチル、2 - [N - (1 - メチルエチル) - N - プロピルアミノ] エチル、2 - [N - ブチル - N - プロピルアミノ] エチル、2 - [N - (1 - メチルプロピル) - N - プロピルアミノ] エチル、2 - [N - (2 - メチルプロピル) - N - プロピルアミノ] エチル、2 - [N - (1, 1 - ジメチルエチル) - N - プロピルアミノ] エチル、2 - [N - ブチル - N - (1 - メチルエチル) アミノ] エチル、2 - [N - (1 - メチルエチル) - N - (1 - メチルプロピル) アミノ] エチル、2 - [N - (1 - メチルエチル) - N - (2 - メチルプロピル) アミノ] エチル、2 - [N - (1, 1 - ジメチルエチル) - N - (1 - メチルエチル) アミノ] エチル、2 - [N - ブチル - N - (1 - メチルプロピル) アミノ] エチル、2 - [N - ブチル - N - (2 - メチルプロピル) アミノ] エチル、2 - [N - (1, 1 - ジメチルエチル) アミノ] エチル、2 - [N - (1 - メチルプロピル) - N - (2 - メチルプロピル) アミノ] エチル、2 - [N - (1, 1 - ジメチルエチル) - N - (1 - メチルプロピル) アミノ] エチル、2 - [N - (1, 1 - ジメチルエチル) - N - (2 - メチルプロピル) アミノ] エチル、3 - (N, N - ジメチルアミノ) プロピル、3 - (N, N - ジメチルアミノ) プロピル、4 - (N, N - ジメチルアミノ) ブチルおよび4 - (N, N - ジメチルアミノ) ブチル。

C₁ - C₄アルコキシ - C₁ - C₄アルキル：上述のC₁ - C₄アルコキシにより置換されているC₁ - C₄アルキル、例えばメトキシメチル、エトキシメチル、プロポキシメチル、(1 - メチルエトキシ)メチル、ブトキシメチル、(1 - メチルプロポキシ)メチル、(2 - メチルプロポキシ)メチル、(1, 1 - ジメチルエトキシ)メチル、2 - (メトキシ)エチル、2 - (エトキシ)エチル、2 - (プロポキシ)エチル、2 - (1 - メチルエトキシ)エチル、2 - (ブトキシ)エチル、2 - (1 - メチルプロポキシ)エチル、2 - (2 - メチルプロポキシ)エチル、2 - (1, 1 - ジメチルエトキシ)エチル、2 - (メトキシ)プロピル、2 - (エトキシ)プロピル、2 - (プロポキシ)プロピル、2 - (1 - メチルエトキシ)プロピル、2 - (ブトキシ)プロピル、2 - (1 - メチルプロポキシ)プロピル、2 - (2 - メチルプロポキシ)プロピル、2 - (1, 1 - ジメチルエトキシ)プロピル、3 - (メトキシ)プロピル、3 - (エトキシ)プロピル、3 - (プロポキシ)プロピル、3 - (1 - メチルエトキシ)プロピル、3 - (ブトキシ)プロピル、3 - (1 - メチルプロポキシ)プロピル、3 - (2 - メチルプロポキシ)プロピル、3 - (1, 1 - ジメチルエトキシ)プロピル、2 - (メトキシ)ブチル、2 - (エトキシ)ブチル、2 - (プロポキシ)ブチル、2 - (1 - メチルエトキシ)ブチル、2 - (ブトキシ)ブチル、2 - (1 - メチルプロポキシ)ブチル、2 - (2 - メチルプロポキシ)ブチル、2 - (1, 1 - ジメチルエトキシ)ブチル、3 - (メトキシ)ブチル、3 - (エトキシ)ブチル、3 - (プロポキシ)ブチル、3 - (1 - メチルエトキシ)ブチル、3 - (ブトキシ)ブチル、3 - (1 - メチルプロポキシ)ブチル、3 - (2 - メチルプロポキシ)ブチル、3 - (1, 1 - ジメチルエトキシ)ブチル、4 - (メトキシ)ブチル、4 - (エトキシ)ブチル、4 - (プロポキシ)ブチル、4 - (1 - メチルエトキシ)ブチル、4 - (ブトキシ)ブチル、4 - (1 - メチルプロポキシ)ブチル、4 - (2 - メチルプロポキシ)ブチルおよび4 - (1, 1 - ジメチルエトキシ)ブチル。

C₁ - C₄アルキルチオ - C₁ - C₄アルキル：上述のC₁ - C₄アルキルチオにより置換されているC₁ - C₄アルキル、例えばメチルチオメチル、エチルチオメチル、プロピルチオメチル、(1 - メチルエチルチオ)メチル、ブチルチオメチル、(1 - メチルプロピルチオ)メチル、(2 - メチルプロピルチオ)メチル、(1, 1 - ジメチルエチルチオ)メチル、2 - メチルチオエチル、2 - エチルチオエチル、2 - (プロピルチオ)エチル、2 - (

10

20

30

40

50

1 - メチルエチルチオ)エチル、2 - (ブチルチオ)エチル、2 - (1 - メチルプロピルチオ)エチル、2 - (2 - メチルプロピルチオ)エチル、2 - (1, 1 - ジメチルエチルチオ)エチル、2 - (メチルチオ)プロピル、3 - (メチルチオ)プロピル、2 - (エチルチオ)プロピル、3 - (エチルチオ)プロピル、3 - (プロピルチオ)プロピル、3 - (ブチルチオ)プロピル、4 - (メチルチオ)ブチル、4 - (エチルチオ)ブチル、4 - (プロピルチオ)ブチルおよび4 - (ブチルチオ)ブチル。

C₁ - C₄アルコキシカルボニル - C₁ - C₄アルキル：上述C₁ - C₄アルコキシカルボニルにより置換されているC₁ - C₄アルキル、例えばメトキシカルボニルメチル、エトキシカルボニルメチル、プロポキシカルボニルメチル、(1 - メチルエトキシカルボニル)メチル、ブトキシカルボニルメチル、(1 - メチルプロポキシカルボニル)メチル、(2 - メチルプロポキシカルボニル)メチル、(1, 1 - ジメチルエトキシカルボニル)メチル、2 - (メトキシカルボニル)エチル、2 - (エトキシカルボニル)エチル、2 - (プロポキシカルボニル)エチル、2 - (1 - メチルエトキシカルボニル)エチル、2 - (ブトキシカルボニル)エチル、2 - (1 - メチルプロポキシカルボニル)エチル、2 - (2 - メチルプロポキシカルボニル)エチル、2 - (1, 1 - ジメチルエトキシカルボニル)エチル、2 - (メトキシカルボニル)プロピル、2 - (エトキシカルボニル)プロピル、2 - (プロポキシカルボニル)プロピル、2 - (1 - メチルエトキシカルボニル)プロピル、2 - (ブトキシカルボニル)プロピル、2 - (1 - メチルプロポキシカルボニル)プロピル、2 - (2 - メチルプロポキシカルボニル)プロピル、2 - (1, 1 - ジメチルエトキシカルボニル)プロピル、3 - (メトキシカルボニル)プロピル、3 - (エトキシカルボニル)プロピル、3 - (プロポキシカルボニル)プロピル、3 - (1 - メチルエトキシカルボニル)プロピル、3 - (ブトキシカルボニル)プロピル、3 - (1 - メチルプロポキシカルボニル)プロピル、3 - (2 - メチルプロポキシカルボニル)プロピル、3 - (1, 1 - ジメチルエトキシカルボニル)プロピル、2 - (メトキシカルボニル)ブチル、2 - (エトキシカルボニル)ブチル、2 - (プロポキシカルボニル)ブチル、2 - (1 - メチルエトキシカルボニル)ブチル、2 - (ブトキシカルボニル)ブチル、2 - (1 - メチルプロポキシカルボニル)ブチル、2 - (2 - メチルプロポキシカルボニル)ブチル、2 - (1, 1 - ジメチルエトキシカルボニル)ブチル、3 - (メトキシカルボニル)ブチル、3 - (エトキシカルボニル)ブチル、3 - (プロポキシカルボニル)ブチル、3 - (1 - メチルエトキシカルボニル)ブチル、3 - (ブトキシカルボニル)ブチル、3 - (1 - メチルプロポキシカルボニル)ブチル、3 - (2 - メチルプロポキシカルボニル)ブチル、3 - (1, 1 - ジメチルエトキシカルボニル)ブチル、4 - (メトキシカルボニル)ブチル、4 - (エトキシカルボニル)ブチル、4 - (プロポキシカルボニル)ブチル、4 - (1 - メチルエトキシカルボニル)ブチル、4 - (ブトキシカルボニル)ブチル、4 - (1 - メチルプロポキシ)ブトキシ、4 - (2 - メチルプロポキシ)ブトキシおよび4 - (1, 1 - ジメチルエトキシカルボニル)ブチル。

C₁ - C₄アルコキシ - C₂ - C₄アルコキシ：上述のC₁ - C₄アルコキシにより置換されているC₂ - C₄アルコキシ、例えば2 - (メトキシ)エトキシ、2 - (エトキシ)エトキシ、2 - (プロポキシ)エトキシ、2 - (1 - メチルエトキシ)エトキシ、2 - (ブトキシ)エトキシ、2 - (1 - メチルプロポキシ)エトキシ、2 - (2 - メチルプロポキシ)エトキシ、2 - (1, 1 - ジメチルエトキシ)エトキシ、2 - (メトキシ)プロポキシ、2 - (エトキシ)プロポキシ、2 - (プロポキシ)プロポキシ、2 - (1 - メチルエトキシ)プロポキシ、2 - (ブトキシ)プロポキシ、2 - (1 - メチルプロポキシ)プロポキシ、2 - (2 - メチルプロポキシ)プロポキシ、2 - (1, 1 - ジメチルエトキシ)プロポキシ、3 - (メトキシ)プロポキシ、3 - (エトキシ)プロポキシ、3 - (プロポキシ)プロポキシ、3 - (1 - メチルエトキシ)プロポキシ、3 - (ブトキシ)プロポキシ、3 - (1 - メチルプロポキシ)プロポキシ、3 - (2 - メチルプロポキシ)プロポキシ、3 - (1, 1 - ジメチルエトキシ)プロポキシ、2 - (メトキシ)ブトキシ、2 - (エトキシ)ブトキシ、2 - (プロポキシ)ブトキシ、2 - (1 - メチルエトキシ)ブトキシ、2 - (ブトキシ)ブトキシ、2 - (1 - メチルプロポキシ)ブトキシ、2 - (2 - メチルブ

10

20

30

40

50

ロポキシ)プトキシ、2-(1,1-ジメチルエトキシ)プトキシ、3-(メトキシ)プトキシ、3-(エトキシ)プトキシ、3-(プロポキシ)プトキシ、3-(1-メチルエトキシ)プトキシ、3-(プトキシ)プトキシ、3-(1-メチルプロポキシ)プトキシ、3-(2-メチルプロポキシ)プトキシ、3-(1,1-ジメチルエトキシ)プトキシ、4-(メトキシ)プトキシ、4-(プロポキシ)プトキシ、4-(1-メチルエトキシ)プトキシ、4-(プトキシ)プトキシ、4-(1-メチルプロポキシ)プトキシ、4-(2-メチルプロポキシ)プトキシおよび4-(1,1-ジメチルエトキシ)プトキシ。
 $C_2 - C_6$ アルカンジイル：たとえばエタン-1,2-ジイル、プロパン-1,3-ジイル、ブタン-1,4-ジイル、ペンタン-1,5-ジイルおよびヘキサン-1,6-ジイル。

10

$C_3 - C_8$ シクロアルキル：例えばシクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル、シクロヘプチルまたはシクロオクチル。

全てのフェニル環は無置換であるか、1~3個のハロゲン原子、および/またはニトロ基、シアノ基、および/または1個または2個のメチル、トリフルオロメチル、メトキシまたはトリフルオロメトキシ置換基を有するのが好ましい。

好ましい式Iの3-ヘテロシクリル置換ベンゾイル誘導体は、置換基が以下の意味を有するもの、すなわち

R^1 、 R^2 が水素、ニトロ、ハロゲン、シアノ、 $C_1 - C_6$ アルキル、 $C_1 - C_6$ ハロアルキル、 $C_1 - C_6$ アルコキシ、 $C_1 - C_6$ ハロアルコキシ、 $C_1 - C_6$ アルキルチオ、 $C_1 - C_6$ ハロアルキルチオ、 $C_1 - C_6$ アルキルスルフィニル、 $C_1 - C_6$ ハロアルキルスルフィニル、 $C_1 - C_6$ アルキルスルホニルまたは $C_1 - C_6$ ハロアルキルスルホニル、

20

R^3 が水素、ハロゲンまたは $C_1 - C_6$ アルキル、

R^4 、 R^5 が水素、ハロゲン、シアノ、ニトロ、 $C_1 - C_4$ アルキル、 $C_1 - C_4$ アルコキシ- $C_1 - C_4$ アルキル、ジ($C_1 - C_4$ アルコキシ)- $C_1 - C_4$ アルキル、ジ($C_1 - C_4$ アルキル)-アミノ- $C_1 - C_4$ アルキル、[2,2-ジ($C_1 - C_4$ アルキル)-1-ヒドラジノ]- $C_1 - C_4$ アルキル、 $C_1 - C_6$ アルキルイミノオキシ- $C_1 - C_4$ アルキル、 $C_1 - C_4$ アルコキシカルボニル- $C_1 - C_4$ アルキル、 $C_1 - C_4$ アルキルチオ- $C_1 - C_4$ アルキル、 $C_1 - C_4$ ハロアルキル、 $C_1 - C_4$ シアノアルキル、 $C_3 - C_8$ シクロアルキル、 $C_1 - C_4$ アルコキシ、 $C_1 - C_4$ アルコキシ- $C_2 - C_4$ アルコキシ、 $C_1 - C_4$ ハロアルコキシ、 $C_1 - C_4$ アルキルチオ、 $C_1 - C_4$ ハロアルキルチオ、ジ($C_1 - C_4$ アルキル)アミノ、 $CO R^6$ 、フェニルまたはベンジル(最後に挙げた2個の基は完全または部分的にハロゲン化されていてもよく、および/または1個~3個の以下の基、すなわちニトロ、シアノ、 $C_1 - C_4$ アルキル、 $C_1 - C_4$ ハロアルキル、 $C_1 - C_4$ アルコキシまたは $C_1 - C_4$ ハロアルコキシを有してもよい)を意味するか、或いは

30

R^4 および R^5 が共同で、 $C_1 - C_4$ アルキルによりモノ置換ないしテトラ置換されてもよく、および/または酸素により、または $C_1 - C_4$ アルキル置換されていてもよい窒素により中断されてもよい $C_2 - C_6$ アルカンジイル鎖を形成するか、または

R^4 および R^5 が対応の炭素原子と共にカルボニルまたはチオカルボニル基を形成し、

R^6 が水素、 $C_1 - C_4$ アルキル、 $C_1 - C_4$ ハロアルキル、 $C_1 - C_4$ アルコキシ、 $C_1 - C_4$ アルコキシ- $C_2 - C_4$ アルコキシ、 $C_1 - C_4$ ハロアルコキシ、 $C_3 - C_6$ アルケニルオキシ、 $C_3 - C_6$ アルキニルオキシまたは NR^7R^8 、

40

R^7 が水素または $C_1 - C_4$ アルキル、

R^8 が $C_1 - C_4$ アルキル、

XがO、S、 NR^9 、COまたは $CR^{10}R^{11}$ 、

YがO、S、 NR^{12} 、COまたは $CR^{13}R^{14}$ 、

R^9 、 R^{12} が水素または $C_1 - C_4$ アルキル、

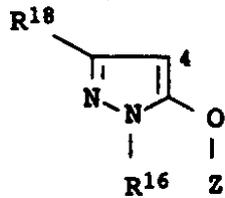
R^{10} 、 R^{11} 、 R^{13} 、 R^{14} が水素、 $C_1 - C_4$ アルキル、 $C_1 - C_4$ ハロアルキル、 $C_1 - C_4$ アルコキシカルボニル、 $C_1 - C_4$ ハロアルコキシカルボニルまたは $CONR^7R^8$ を意味するか、或いは

R^4 と R^9 、または R^4 と R^{10} 、または R^5 と R^{12} 、または R^5 と R^{13} が共同で $C_1 - C_4$ アル

50

キルによりモノ置換ないしテトラ置換されていてもよく、および/または酸素により、またはC₁-C₄アルキル置換されていてもよい窒素により中断されてもよい、C₂-C₆アルカンジイル鎖を形成し、

R¹⁵が、4位に結合し、式 I I



II

で示され、式中

R¹⁶がC₁-C₆アルキル、

ZがHまたはSO₂R¹⁷、

R¹⁷がC₁-C₄アルキル、C₁-C₄ハロアルキル、フェニル、または部分的または完全にハロゲン化され、および/または1個~3個の以下の基、すなわちニトロ、シアノ、C₁-C₄アルキル、C₁-C₄ハロアルキル、C₁-C₄アルコキシまたはC₁-C₄ハロアルコキシを有するフェニル、

R¹⁸が水素またはC₁-C₆アルキルをそれぞれ意味し、

XおよびYが同時に酸素または硫黄を意味することはない3-ヘテロシクリル置換ベンゾイル誘導体であって、

4-[2-クロロ-3-(4,5-ジヒドロイソキサゾール-3-イル)-4-メチルスルホニルベンゾイル]-1-エチル-5-ヒドロキシ-1H-ピラゾール、4-[2-クロロ-3-(4,5-ジヒドロイソキサゾール-3-イル)-4-メチルスルホニルベンゾイル]-1,3-ジメチル-5-ヒドロキシ-1H-ピラゾール、4-[2-クロロ-3-(5-シアノ-4,5-ジヒドロイソキサゾール-3-イル)-4-メチルスルホニルベンゾイル]-1,3-ジメチル-5-ヒドロキシ-1H-ピラゾール、4-[2-クロロ-3-(4,5-ジヒドロチアゾール-2-イル)-4-メチルスルホニルベンゾイル]-1,3-ジメチル-5-ヒドロキシ-1H-ピラゾールおよび4-[2-クロロ-3-(チアゾリン-4,5-ジオン-2-イル)-4-メチルスルホニルベンゾイル]-1,3-ジメチル-5-ヒドロキシ-1H-ピラゾール以外の、3-ヘテロシクリル置換ベンゾイル誘導体、またはその農業上使用可能な塩である。

本発明の式 I の化合物の除草剤としての使用に鑑み、各置換基が以下の意味を有するのが好ましく、これらの化合物は単独で、または組み合わせて用いられる。すなわち、

R¹、R²がニトロ、ハロゲン、シアノ、C₁-C₆アルキル、C₁-C₆ハロアルキル、C₁-C₆アルコキシ、C₁-C₆ハロアルコキシ、C₁-C₆アルキルチオ、C₁-C₆ハロアルキルチオ、C₁-C₆アルキルスルフィニル、C₁-C₆ハロアルキルスルフィニル、C₁-C₆アルキルスルホニルまたはC₁-C₆ハロアルキルスルホニル、特に好ましくはニトロ、ハロゲン、例えば塩素、臭素、C₁-C₆アルコキシ、例えばメトキシ、エトキシ、C₁-C₆ハロアルキル、例えばジフルオロメチル、トリフルオロメチル、C₁-C₆アルキルチオ、例えばメチルチオ、エチルチオ、C₁-C₆アルキルスルフィニル、例えばメチルスルフィニル、エチルスルフィニル、C₁-C₆アルキルスルホニル、例えばメチルスルホニル、エチルスルホニル、プロピルスルホニル、またはC₁-C₆ハロアルキルスルホニル、例えばトリフルオロメチルスルホニル、ペンタフルオロエチルスルホニル、

R³が水素、

R⁴、R⁵が水素、ハロゲン、シアノ、ニトロ、C₁-C₄アルキル、C₁-C₄アルコキシ-C₁-C₄アルキル、ジ(C₁-C₄アルコキシ)-C₁-C₄アルキル、ジ(C₁-C₄アルキル)アミノ-C₁-C₄アルキル、[2,2-ジ(C₁-C₄アルキル)ヒドラジノ-1]-C₁-C₄アルキル、C₁-C₆アルキルイミノオキシ-C₁-C₄アルキル、C₁-C₄アルコキシカルボニル-C₁-C₄アルキル、C₁-C₄アルキルチオ-C₁-C₄アルキル、C₁-C₄ハロアルキル、C₁-C₄シアノアルキル、C₃-C₈シクロアルキル、C₁-C₄アルコキシ、C₁-C₄アルコキシ-C₂-C₄アルコキシ、C₁-C₄ハロアルコキシ、C₁-C₄ア

10

20

30

40

50

ルキルチオ、 $C_1 - C_4$ ハロアルキルチオ、ジ($C_1 - C_4$ アルキル)アミノ、 $CO R^6$ 、フェニルまたはベンジル(最後に挙げた2個の基は、部分的または完全にハロゲン化されていてもよく、および/または1個~3個以下の基、すなわちニトロ、シアノ、 $C_1 - C_4$ アルキル、 $C_1 - C_4$ ハロアルキル、 $C_1 - C_4$ アルコキシまたは $C_1 - C_4$ ハロアルコキシを有してもよい)をそれぞれ意味するか、または

R^4 と R^5 が共同で、 $C_1 - C_4$ アルキルによりモノ置換ないしテトラ置換されてもよく、および/または酸素により、または $C_1 - C_4$ アルキル置換されていてもよい窒素により中断されてもよい $C_2 - C_6$ アルカンジイル鎖を形成し、

R^4 が特に好ましくは水素、 $C_1 - C_4$ アルキル、 $C_1 - C_4$ ハロアルキル、 $C_1 - C_4$ アルコキシカルボニルまたは $CONR^7R^8$ を意味し、

R^5 が特に好ましくは水素または $C_1 - C_4$ アルキルを意味するか、或いは

R^4 および R^5 が特に好ましくは共同で、 $C_1 - C_4$ アルキルによりモノ置換ないしテトラ置換されてもよく、および/または酸素により、または $C_1 - C_4$ アルキル置換されていてもよい窒素により中断されてもよい $C_2 - C_6$ アルカンジイル鎖を形成し、

R^6 が $C_1 - C_4$ アルキル、 $C_1 - C_4$ アルコキシまたは NR^7R^8 、

R^7 が水素または $C_1 - C_4$ アルキル、

R^8 が $C_1 - C_4$ アルキル、

XがO、S、 NR^9 、 CO または $CR^{10}R^{11}$ 、

YがO、S、 NR^{12} または $CR^{13}R^{14}$ 、

R^9 、 R^{12} が水素または $C_1 - C_4$ アルキル、

R^{10} 、 R^{11} 、 R^{13} 、 R^{14} が水素、 $C_1 - C_4$ アルキル、 $C_1 - C_4$ ハロアルキル、 $C_1 - C_4$ アルコキシカルボニル、 $C_1 - C_4$ ハロアルコキシカルボニルまたは $CONR^7R^8$ を意味するか、或いは

R^4 および R^9 、または R^4 および R^{10} 、または R^5 および R^{12} 、または R^5 および R^{13} が共同で $C_1 - C_4$ アルキルによりモノ置換ないしテトラ置換されてもよく、および/または酸素により、または $C_1 - C_4$ アルキル置換されていてもよい窒素により中断されてもよい $C_2 - C_6$ アルカンジイル鎖を形成し、

R^{16} が $C_1 - C_6$ アルキル、特に好ましくはメチル、エチル、プロピル、2-メチルプロピルまたはブチル、

ZがHまたは SO_2R^{17} 、

R^{17} が $C_1 - C_4$ アルキル、フェニル、または部分的または完全にハロゲン化され、および/または1~3個の以下の基、すなわちニトロ、シアノ、 $C_1 - C_4$ アルキル、 $C_1 - C_4$ ハロアルキル、 $C_1 - C_4$ アルコキシまたは $C_1 - C_4$ ハロアルコキシを有するフェニル、

R^{18} が水素または $C_1 - C_6$ アルキル、特に好ましくは水素またはメチルを意味する場合は好ましい。

式Iで表される3-ヘテロシクリル置換ベンゾイル誘導体のうち、以下の実施の形態が特に重要である。

1. 式Iの3-ヘテロシクリル置換ベンゾイル誘導体の好ましい実施の形態において、Zは SO_2R^{17} を意味する。

特に好ましくは、 R^{18} が水素を意味する式Iの3-ヘテロシクリル置換ベンゾイル誘導体が用いられる。

また、特に好ましくは R^{18} がメチルを意味する式Iの3-ヘテロシクリル置換ベンゾイル誘導体が用いられる。

* R^{17} が $C_1 - C_4$ アルキルを意味する場合の、式Iの3-ヘテロシクリル置換ベンゾイル誘導体が極めて好ましい。

2. 式Iの3-ヘテロシクリル置換ベンゾイル誘導体の好ましい実施の形態において、Zは水素を表す。

特に好ましくは、Xが酸素を、Yが $CR^{13}R^{14}$ を意味する式Iの3-ヘテロシクリル置換ベンゾイル誘導体が用いられる。

*式Iで表され、式中

10

20

30

40

50

R^4 がハロゲン、ニトロ、 $C_1 - C_4$ アルキル、 $C_1 - C_4$ アルコキシ- $C_1 - C_4$ アルキル、 $C_1 - C_4$ アルコキシカルボニル- $C_1 - C_4$ アルキル、 $C_1 - C_4$ アルキルチオ- $C_1 - C_4$ アルキル、 $C_1 - C_4$ ハロアルキル、 $C_1 - C_4$ シアノアルキル、 $C_3 - C_8$ シクロアルキル、 $C_1 - C_4$ アルコキシ、 $C_1 - C_4$ アルコキシ- $C_2 - C_4$ アルコキシ、 $C_1 - C_4$ ハロアルコキシ、 $C_1 - C_4$ アルキルチオ、 $C_1 - C_4$ ハロアルキルチオ、ジ($C_1 - C_4$ アルキル)アミノ、 $CO R^6$ 、フェニルまたはベンジル(最後に挙げた2個の基が部分的または完全に置換されていてもよく、および/または1~3個の以下の基、すなわちニトロ、シアノ、 $C_1 - C_4$ アルキル、 $C_1 - C_4$ ハロアルキル、 $C_1 - C_4$ アルコキシまたは $C_1 - C_4$ ハロアルコキシを有してもよい)、

R^5 が水素または $C_1 - C_4$ アルキルを意味するか、或いは
 R^4 および R^5 が共同で、 $C_1 - C_4$ アルキルによりモノ置換ないしテトラ置換されてもよく、および/または酸素により、または $C_1 - C_4$ アルキル置換されていてもよい窒素により中断されてもよい $C_2 - C_6$ アルカンジイル鎖を形成するか、または
 R^5 と R^{13} が共同で、 $C_1 - C_4$ アルキルによりモノ置換ないしテトラ置換されてもよく、および/または酸素により、または $C_1 - C_4$ アルキル置換されていてもよい窒素により中断されてもよい $C_2 - C_6$ アルカンジイル鎖を形成する、3-ヘテロシクリル置換ベンゾル誘導体が特に好ましい。

非常に好ましくは、式Iで表され式中

R^4 が $C_1 - C_4$ アルキル、 $C_1 - C_4$ ハロアルキル、 $C_1 - C_4$ アルコキシカルボニル、 $CONR^7R^8$ 、

R^5 が水素または $C_1 - C_4$ アルキルを意味するか、或いは
 R^4 および R^5 が共同で、 $C_1 - C_4$ アルキルによりモノ置換ないしテトラ置換されてもよく、および/または酸素により、または $C_1 - C_4$ アルキル置換されていてもよい窒素により中断されてもよい $C_2 - C_6$ アルカンジイル鎖を形成するか、または
 R^5 と R^{13} が共同で、 $C_1 - C_4$ アルキルによりモノ置換ないしテトラ置換されてもよく、および/または酸素により、または $C_1 - C_4$ アルキル置換されていてもよい窒素により中断されてもよい $C_2 - C_6$ アルカンジイル鎖を形成する3-ヘテロシクリル置換ベンゾイル誘導体が挙げられる。

特に極めて好ましくは、 R^{18} が水素を意味する式Iの3-ヘテロシクリル置換ベンゾイル誘導体が挙げられる。

*更に、式Iで表され、 R^4 および R^5 が水素を意味する3-ヘテロシクリル置換ベンゾイル誘導体が特に好ましい。

極めて好ましくは、 R^{18} が水素を意味する式Iの3-ヘテロシクリル置換ベンゾイル誘導体が用いられる。

特に極めて好ましくは、

R^1 がニトロ、 $C_1 - C_6$ アルキル、例えばメチルおよびエチル、 $C_1 - C_6$ アルコキシ、例えばメトキシ、エトキシ、 $C_1 - C_6$ ハロアルキル、例えばジフルオロメチルおよびトリフルオロメチル、 $C_1 - C_6$ アルキルスルホニル、例えばメチルスルホニル、エチルスルホニルおよびプロピルスルホニル、または $C_1 - C_6$ ハロアルキルスルホニル、例えばトリフルオロメチルスルホニルおよびペンタフルオロエチルスルホニルを意味する、式Iの3-ヘテロシクリル置換ベンゾイル誘導体が挙げられる。

また、特に極めて好ましくは、

R^2 がニトロ、ハロゲン、例えば塩素、臭素、 $C_1 - C_6$ アルキル、例えばメチルおよびエチル、 $C_1 - C_6$ ハロアルキル、例えばジフルオロメチルおよびトリフルオロメチル、 $C_1 - C_6$ アルキルチオ、例えばメチルチオおよびエチルチオ、 $C_1 - C_6$ アルキルスルフィニル、例えばメチルスルフィニルおよびエチルスルフィニル、 $C_1 - C_6$ アルキルスルホニル、例えばメチルスルホニル、エチルスルホニルおよびプロピルスルホニル、または $C_1 - C_6$ ハロアルキルスルホニル、例えばトリフルオロメチルスルホニルおよびペンタフルオロエチルスルホニルを意味する、式Iの3-ヘテロシクリル置換ベンゾイル誘導体が挙げられる。

10

20

30

40

50

更に、特に極めて好ましい例は、4 - [2 - クロロ - 3 - (4 , 5 - ジヒドロイソオキサゾール - 3 - イル) - 4 - メチルスルホニルベンゾイル] - 1 - メチル - 5 - ヒドロキシ - 1 H - ピラゾールである。

更に、極めて好ましい例として、4 - [2 - クロロ - 3 - (4 , 5 - ジヒドロイソオキサゾール - 3 - イル) - 4 - メチルスルホニルベンゾイル] - 1 - メチル - 5 - ヒドロキシ - 1 H - ピラゾールの農業上使用可能な塩、特にアルカリ金属塩、例えばリチウム、ナトリウム、カリウム、およびアンモニウム塩が挙げられ、アンモニウム塩の場合は、必要に応じて1 ~ 4個の水素原子がC₁ - C₄アルキル、ヒドロキシ - C₁ - C₄アルキル、C₁ - C₄アルコキシ - C₁ - C₄アルキル、ヒドロキシ - C₁ - C₄アルコキシ - C₁ - C₄アルキル、フェニルまたはベンジルを有してもよく、好ましくはアンモニウム、ジメチルアンモニウム、ジイソプロピルアンモニウム、テトラメチルアンモニウム、テトラブチルアンモニウム、2 - (2 - ヒドロキシエタ - 1 - オキシ) エタ - 1 - イルアンモニウム、ジ (2 - ヒドロキシエタ - 1 - イル) アンモニウム、トリメチルベンジルアンモニウムの各塩が挙げられる。

10

また、非常に好ましい例には、R¹⁸がメチルを意味する場合の式Iの3 - ヘテロシクリル置換ベンゾイル誘導体がある。

特に極めて好ましい例は、

R¹がニトロ、C₁ - C₆アルキル、例えばメチルおよびエチル、C₁ - C₆アルコキシ、例えばメトキシおよびエトキシ、C₁ - C₆ハロアルキル、例えばジフルオロメチルおよびトリフルオロメチル、C₁ - C₆アルキルスルホニル、例えばメチルスルホニル、エチルスルホニルおよびプロピルスルホニル、またはC₁ - C₆ハロアルキルスルホニル、例えばトリフルオロメチルスルホニルおよびペンタフルオロエチルスルホニルを意味する、式Iの3 - ヘテロシクリル置換ベンゾイル誘導体が挙げられる。

20

更に、特に極めて好ましい例としては、

R²がニトロ、ハロゲン、例えば塩素および臭素、C₁ - C₆アルキル、例えばメチルおよびエチル、C₁ - C₆ハロアルキル、例えばジフルオロメチルおよびトリフルオロメチル、C₁ - C₆アルキルチオ、例えばメチルチオおよびエチルチオ、C₁ - C₆アルキルスルフィニル、例えばメチルスルフィニルおよびエチルスルフィニル、C₁ - C₆アルキルスルホニル、例えばメチルスルホニル、エチルスルホニルおよびプロピルスルホニル、またはC₁ - C₆ハロアルキルスルホニル、例えばトリフルオロメチルスルホニルおよびペンタフルオロエチルスルホニルを意味する式Iの3 - ヘテロシクリル置換ベンゾイル誘導体が挙げられる。

30

更に、特に好ましくは、式Iで表され、式中

XがS、NR⁹、COまたはCR¹⁰R¹¹を、または

YがO、S、NR¹²またはCOを意味する3 - ヘテロシクリル置換ベンゾイル誘導体が挙げられる。

*極めて好ましくは、R¹⁸が水素を意味する式Iの3 - ヘテロシクリル置換ベンゾイル誘導体が挙げられる。

*更に、極めて好ましくは、R¹⁸がC₁ - C₆アルキルを意味する3 - ヘテロシクリル置換ベンゾイル誘導体がある。

40

極めて好ましい式Iの3 - ヘテロシクリル置換ベンゾイル誘導体は、

R⁴がハロゲン、シアノ、ニトロ、C₁ - C₄アルキル、C₁ - C₄アルコキシ - C₁ - C₄アルキル、C₁ - C₄アルコキシカルボニル - C₁ - C₄アルキル、C₁ - C₄アルキルチオ - C₁ - C₄アルキル、C₁ - C₄ハロアルキル、C₁ - C₄シアノアルキル、C₃ - C₈シクロアルキル、C₁ - C₄アルコキシ、C₁ - C₄アルコキシ - C₁ - C₄アルコキシ、C₁ - C₄ハロアルコキシ、C₁ - C₄アルキルチオ、C₁ - C₄ハロアルキルチオ、ジ (C₁ - C₄アルキル) アミノ、COR⁶、フェニルまたはベンジルを意味し、このうちの最後の2個の基が部分的または完全にハロゲン化されていてもよくおよび/または1 ~ 3個の以下の基、すなわちニトロ、シアノC₁ - C₄アルキル、C₁ - C₄ハロアルキル、C₁ - C₄アルコキシまたはC₁ - C₄ハロアルコキシを有してもよく、

50

R^5 が水素または $C_1 - C_4$ アルキルを意味するか、或いは
 R^4 および R^5 が共同で、 $C_1 - C_4$ アルキルによりモノ置換ないしテトラ置換されてもよく、
 および/または酸素により、または $C_1 - C_4$ アルキル置換されていてもよい窒素により
 中断されてもよい $C_2 - C_6$ アルカンジイル鎖を形成するか、
 または R^4 および R^9 、または R^4 および R^{10} 、 R^5 および R^{12} 、または R^5 および R^{13} が共
 同で、 $C_1 - C_4$ アルキルによりモノ置換ないしテトラ置換されていてもよく、および/ま
 たは酸素により、または $C_1 - C_4$ アルキル置換されていてもよい窒素原子により中断され
 てもよい $C_2 - C_6$ アルカンジイル鎖を形成するものである。

*更に特に好ましい式 I の 3 - ヘテロシクリル置換ベンゾイル誘導体は、

XがS、 NR^9 またはCOを意味し、または

YがO、 NR^{12} またはCOを意味するものである。

10

極めて好ましい式 I の 3 - ヘテロシクリル置換ベンゾイル誘導体は、

R^4 がハロゲン、シアノ、ニトロ、 $C_1 - C_4$ アルキル、 $C_1 - C_4$ アルコキシ - $C_1 - C_4$ ア
 ルキル、 $C_1 - C_4$ アルコキシカルボニル - $C_1 - C_4$ アルキル、 $C_1 - C_4$ アルキルチオ - $C_1 - C_4$ ア
 ルキル、 $C_1 - C_4$ ハロアルキル、 $C_1 - C_4$ シアノアルキル、 $C_3 - C_8$ シクロアル
 キル、 $C_1 - C_4$ アルコキシ、 $C_1 - C_4$ アルコキシ、 $C_1 - C_4$ アルコキシ - $C_1 - C_4$ アルコ
 キシ、 $C_1 - C_4$ ハロアルコキシ、 $C_1 - C_4$ アルキルチオ、 $C_1 - C_4$ ハロアルキルチオ、ジ
 ($C_1 - C_4$ アルキル)アミノ、 COR^6 、フェニルまたはベンジルを意味し、このうちの
 最後の2個の基が部分的または完全にハロゲン化されていてもよくおよび/または1~3
 個の以下の基、すなわちニトロ、シアノ、 $C_1 - C_4$ アルキル、 $C_1 - C_4$ ハロアルキル、 $C_1 - C_4$ アル
 コキシまたは $C_1 - C_4$ ハロアルコキシを有してもよく、

20

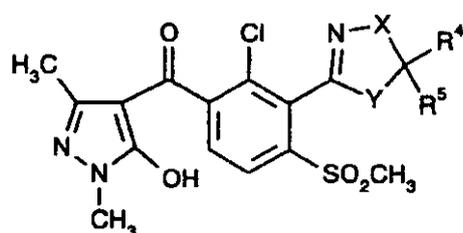
R^5 が水素または $C_1 - C_4$ アルキルを意味するか、或いは

R^4 および R^5 が共同で、 $C_1 - C_4$ アルキルによりモノ置換ないしテトラ置換されてもよく、
 および/または酸素により、または $C_1 - C_4$ アルキル置換されていてもよい窒素により
 中断されてもよい $C_2 - C_6$ アルカンジイル鎖を形成するか、

または R^4 および R^9 、または R^4 および R^{10} 、 R^5 および R^{12} 、または R^5 および R^{13} が共
 同で、 $C_1 - C_4$ アルキルによりモノ置換ないしテトラ置換されていてもよく、および/ま
 たは酸素により、または $C_1 - C_4$ アルキルにより置換されていてもよい窒素原子により中
 断されてもよい $C_2 - C_6$ アルカンジイル鎖を形成するものである。

特に極めて好ましい化合物は式 I a 1 ($R^1 = Cl$ 、 $R^2 = SO_2CH_3$ 、 $R^3 = H$ 、 R^{16} 、
 $R^{18} = CH_3$ 、 $Z = H$ の場合の化合物 I に対応)で表され、このうち特に好ましいものを
 表 1 に示す。

30



1a1

表 1

No.	X	R ⁴	R ⁵	Y
1a1.1	CH ₂	H	CH ₃	O
1a1.2	CH ₂	H	H	O
1a1.3	C(CH ₃) ₂	H	H	O
1a1.4	CH ₂	H	C ₂ H ₅	O
1a1.5	CH ₂	CH ₃	CH ₃	O
1a1.6	CH(CH ₃)	H	CH ₃	O
1a1.7	CH(C ₂ H ₅)	H	CH ₃	O
1a1.8	CH[CH(CH ₃) ₂]	H	H	O
1a1.9	CH ₂	H	CH(CH ₃) ₂	O
1a1.10	CH(C ₂ H ₅)	H	C ₂ H ₅	O
1a1.11	-CH-(CH ₂) ₄ -		H	O
1a1.12	C=O	CH ₃	CH ₃	O
1a1.13	C=O	H	C ₂ H ₅	O
1a1.14	C=O	C ₂ H ₅	C ₂ H ₅	O
1a1.15	C=O	H	H	O
1a1.16	C=O	H	CH ₃	O
1a1.17	CH ₂	H	CH ₃	S
1a1.18	C(CH ₃) ₂	H	H	S
1a1.19	CH ₂	H	C ₂ H ₅	S
1a1.20	CH ₂	CH ₃	CH ₃	S
1a1.21	CH(CH ₃)	H	CH ₃	S
1a1.22	CH(C ₂ H ₅)	H	CH ₃	S
1a1.23	CH(C ₂ H ₅)	H	C ₂ H ₅	S
1a1.24	-CH-(CH ₂) ₄ -		H	S
1a1.25	CH[CH(CH ₃) ₂]	H	H	S
1a1.26	CH ₂	H	CH(CH ₃) ₂	S
1a1.27	CH ₂	H	CH ₃	NH
1a1.28	CH ₂	H	H	NH
1a1.29	C(CH ₃) ₂	H	H	NH
1a1.30	CH ₂	H	C ₂ H ₅	NH
1a1.31	CH ₂	CH ₃	CH ₃	NH

10

20

30

No.	X	R ⁴	R ⁵	Y
1a1.32	CH(CH ₃)	H	CH ₃	NH
1a1.33	CH(C ₂ H ₅)	H	CH ₃	NH
1a1.34	CH(C ₂ H ₅)	H	C ₂ H ₅	NH
1a1.35	-CH-(CH ₂) ₄ -		H	NH
1a1.36	CH[CH(CH ₃) ₂]	H	H	NH
1a1.37	CH ₂	H	CH(CH ₃) ₂	NH
1a1.38	CH ₂	H	CH ₃	NCH ₃
1a1.39	CH ₂	H	H	NCH ₃
1a1.40	C(CH ₃) ₂	H	H	NCH ₃
1a1.41	CH ₂	H	C ₂ H ₅	NCH ₃
1a1.42	CH ₂	CH ₃	CH ₃	NCH ₃
1a1.43	CH(CH ₃)	H	CH ₃	NCH ₃
1a1.44	CH(C ₂ H ₅)	H	CH ₃	NCH ₃
1a1.45	CH[CH(CH ₃) ₂]	H	H	NCH ₃
1a1.46	CH ₂	H	CH(CH ₃) ₂	NCH ₃
1a1.47	CH(C ₂ H ₅)	H	C ₂ H ₅	NCH ₃
1a1.48	-CH-(CH ₂) ₄ -		H	NCH ₃
1a1.49	CH ₂	H	CH ₃	NC ₂ H ₅
1a1.50	CH ₂	H	H	NC ₂ H ₅
1a1.51	C(CH ₃) ₂	H	H	NC ₂ H ₅
1a1.52	CH ₂	H	C ₂ H ₅	NC ₂ H ₅
1a1.53	CH ₂	CH ₃	CH ₃	NC ₂ H ₅
1a1.54	CH(CH ₃)	H	CH ₃	NC ₂ H ₅
1a1.55	CH(C ₂ H ₅)	H	CH ₃	NC ₂ H ₅
1a1.56	CH[CH(CH ₃) ₂]	H	H	NC ₂ H ₅
1a1.57	CH ₂	H	CH(CH ₃) ₂	NC ₂ H ₅
1a1.58	CH(C ₂ H ₅)	H	C ₂ H ₅	NC ₂ H ₅
1a1.59	-CH-(CH ₂) ₄ -		H	NC ₂ H ₅
1a1.60	CH ₂		=O	S
1a1.61	CH(CH ₃)		=O	S
1a1.62	CH(C ₂ H ₅)		=O	S
1a1.63	CH[CH(CH ₃) ₂]		=O	S
1a1.64	C(CH ₃) ₂		=O	S
1a1.65	CCH ₃ (C ₂ H ₅)		=O	S
1a1.66	CCH ₃ [CH(CH ₃) ₂]		=O	S
1a1.67	CH ₂		=O	NH
1a1.68	CH(CH ₃)		=O	NH
1a1.69	CH(C ₂ H ₅)		=O	NH
1a1.70	CH[CH(CH ₃) ₂]		=O	NH
1a1.71	C(CH ₃) ₂		=O	NH
1a1.72	CCH ₃ (C ₂ H ₅)		=O	NH
1a1.73	CCH ₃ [CH(CH ₃) ₂]		=O	NH
1a1.74	CH ₂		=O	NCH ₃
1a1.75	CH(CH ₃)		=O	NCH ₃
1a1.76	CH(C ₂ H ₅)		=O	NCH ₃
1a1.77	CH[CH(CH ₃) ₂]		=O	NCH ₃

10

20

30

40

No.	X	R ⁴	R ⁵	Y
Ia1.78	C(CH ₃) ₂		=O	NCH ₃
Ia1.79	CCH ₃ (C ₂ H ₅)		=O	NCH ₃
Ia1.80	CCH ₃ [CH(CH ₃) ₂]		=O	NCH ₃
Ia1.81	O	COOCH ₃	H	CH ₂
Ia1.82	O	COOC ₂ H ₅	H	CH ₂
Ia1.83	O	CONHCH ₃	H	CH ₂
Ia1.84	O	CON(CH ₃) ₂	H	CH ₂
Ia1.85	O	CONHC ₂ H ₅	H	CH ₂
Ia1.86	O	CON(C ₂ H ₅) ₂	H	CH ₂
Ia1.87	O	CH ₃	H	CH ₂
Ia1.88	O	C ₂ H ₅	H	CH ₂
Ia1.89	O	CH(CH ₃) ₂	H	CH ₂
Ia1.90	O	COC ₂ H ₅	H	CH ₂
Ia1.91	O	CH ₂ CN	H	CH ₂
Ia1.92	O	CH ₂ N(CH ₃) ₂	H	CH ₂
Ia1.93	O	CH ₂ ON=C(CH ₃) ₂	H	CH ₂
Ia1.94	O	CH(OC ₂ H ₅) ₂	H	CH ₂
Ia1.95	O	CH(OCH ₃) ₂	H	CH ₂
Ia1.96	O	CH ₃	CH ₃	CH ₂
Ia1.97	O	CH ₃	C ₂ H ₅	CH ₂
Ia1.98	O	C ₂ H ₅	C ₂ H ₅	CH ₂
Ia1.99	O		-(CH ₂) ₄ -	CH ₂
Ia1.100	O		-(CH ₂) ₂ -O-(CH ₂) ₂ -	CH ₂
Ia1.101	O	H		-(CH ₂) ₃ -CH-
Ia1.102	O	H		-(CH ₂) ₄ -CH-
Ia1.103	O	CH ₃	H	CHCH ₃
Ia1.104	S		=O	O
Ia1.105	CH ₂		=S	S
Ia1.106	CH(CH ₃)		=S	S
Ia1.107	CH(C ₂ H ₅)		=S	S
Ia1.108	C(CH ₃) ₂		=S	S
Ia1.109	O		=O	NH
Ia1.110	O		=O	NCH ₃
Ia1.111	O	CH ₃	H	NH
Ia1.112	O	C ₂ H ₅	H	NH
Ia1.113	O	CH ₃	CH ₃	NH
Ia1.114	O	C ₂ H ₅	C ₂ H ₅	NH
Ia1.115	O	CH ₃	H	NCH ₃
Ia1.116	O	C ₂ H ₅	H	NCH ₃
Ia1.117	O	CH ₃	CH ₃	NCH ₃
Ia1.118	O	C ₂ H ₅	C ₂ H ₅	NCH ₃
Ia1.119	NH		=O	NH
Ia1.120	NH		=O	NCH ₃
Ia1.121	NCH ₃		=O	NH
Ia1.122	NCH ₃		=O	NCH ₃

No.	X	R ⁴	R ⁵	Y
Ia1.123	NC ₂ H ₅		=O	NH
Ia1.124	NC ₂ H ₅		=O	NC ₂ H ₅

更に、式 I で示されるベンゾイル誘導体が、特に極めて好ましい。

化合物 Ia 2 . 1 - Ia 2 . 1 2 4。R¹⁶がエチル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物

10

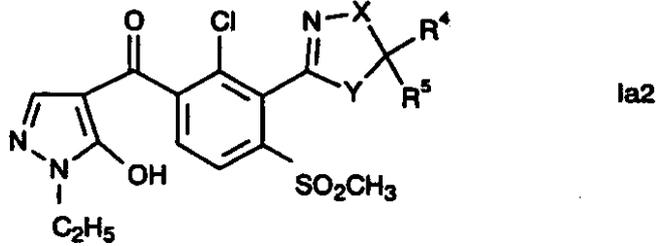
20

30

40

50

I a 1 . 1 - I a 1 . 1 2 4 と異なる。



更に、特に極めて好ましい化合物は、式 I b 1 (R^1 、 $R^2 = Cl$ 、 $R^3 = H$ 、 R^{16} 、 $R^{18} = CH_3$ 、 $Z = H$ の場合の化合物 I に対応) で表され、このうち特に好ましいものを表 2 に示す。

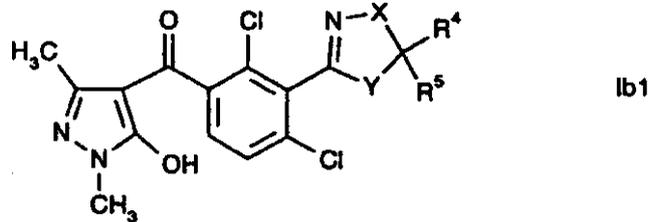


表 2

No.	X	R ⁴	R ⁵	Y
Ib1.1	CH ₂	H	CH ₃	O
Ib1.2	CH ₂	H	H	O
Ib1.3	C(CH ₃) ₂	H	H	O
Ib1.4	CH ₂	H	C ₂ H ₅	O
Ib1.5	CH ₂	CH ₃	CH ₃	O
Ib1.6	CH(CH ₃)	H	CH ₃	O
Ib1.7	CH(C ₂ H ₅)	H	CH ₃	O
Ib1.8	CH[CH(CH ₃) ₂]	H	H	O
Ib1.9	CH ₂	H	CH(CH ₃) ₂	O
Ib1.10	CH(C ₂ H ₅)	H	C ₂ H ₅	O

20

30

No.	X	R ⁴	R ⁵	Y
1b1.11	-CH-(CH ₂) ₄ -		H	O
1b1.12	C=O	CH ₃	CH ₃	O
1b1.13	C=O	H	C ₂ H ₅	O
1b1.14	C=O	C ₂ H ₅	C ₂ H ₅	O
1b1.15	C=O	H	H	O
1b1.16	C=O	H	CH ₃	O
1b1.17	CH ₂	H	CH ₃	S
1b1.18	CH ₂	H	H	S
1b1.19	C(CH ₃) ₂	H	H	S
1b1.20	CH ₂	H	C ₂ H ₅	S
1b1.21	CH ₂	CH ₃	CH ₃	S
1b1.22	CH(CH ₃)	H	CH ₃	S
1b1.23	CH(C ₂ H ₅)	H	CH ₃	S
1b1.24	CH(C ₂ H ₅)	H	C ₂ H ₅	S
1b1.25	-CH-(CH ₂) ₄ -		H	S
1b1.26	CH[CH(CH ₃) ₂]	H	H	S
1b1.27	CH ₂	H	CH(CH ₃) ₂	S
1b1.28	CH ₂	H	CH ₃	NH
1b1.29	CH ₂	H	H	NH
1b1.30	C(CH ₃) ₂	H	H	NH
1b1.31	CH ₂	H	C ₂ H ₅	NH
1b1.32	CH ₂	CH ₃	CH ₃	NH
1b1.33	CH(CH ₃)	H	CH ₃	NH
1b1.34	CH(C ₂ H ₅)	H	CH ₃	NH
1b1.35	CH(C ₂ H ₅)	H	C ₂ H ₅	NH
1b1.36	-CH-(CH ₂) ₄ -		H	NH
1b1.37	CH[CH(CH ₃) ₂]	H	H	NH
1b1.38	CH ₂	H	CH(CH ₃) ₂	NH
1b1.39	CH ₂	H	CH ₃	NCH ₃
1b1.40	CH ₂	H	H	NCH ₃
1b1.41	C(CH ₃) ₂	H	H	NCH ₃
1b1.42	CH ₂	H	C ₂ H ₅	NCH ₃
1b1.43	CH ₂	CH ₃	CH ₃	NCH ₃
1b1.44	CH(CH ₃)	H	CH ₃	NCH ₃
1b1.45	CH(C ₂ H ₅)	H	CH ₃	NCH ₃
1b1.46	CH[CH(CH ₃) ₂]	H	H	NCH ₃
1b1.47	CH ₂	H	CH(CH ₃) ₂	NCH ₃
1b1.48	CH(C ₂ H ₅)	H	C ₂ H ₅	NCH ₃
1b1.49	-CH-(CH ₂) ₄ -		H	NCH ₃
1b1.50	CH ₂	H	CH ₃	NC ₂ H ₅
1b1.51	CH ₂	H	H	NC ₂ H ₅
1b1.52	C(CH ₃) ₂	H	H	NC ₂ H ₅
1b1.53	CH ₂	H	C ₂ H ₅	NC ₂ H ₅
1b1.54	CH ₂	CH ₃	CH ₃	NC ₂ H ₅
1b1.55	CH(CH ₃)	H	CH ₃	NC ₂ H ₅
1b1.56	CH(C ₂ H ₅)	H	CH ₃	NC ₂ H ₅

10

20

30

40

No.	X	R ⁴	R ⁵	Y
1b1.57	CH[CH(CH ₃) ₂]	H	H	NC ₂ H ₅
1b1.58	CH ₂	H	CH(CH ₃) ₂	NC ₂ H ₅
1b1.59	CH(C ₂ H ₅)	H	C ₂ H ₅	NC ₂ H ₅
1b1.60		-CH-(CH ₂) ₄ -	H	NC ₂ H ₅
1b1.61	CH ₂		=O	S
1b1.62	CH(CH ₃)		=O	S
1b1.63	CH(C ₂ H ₅)		=O	S
1b1.64	CH[CH(CH ₃) ₂]		=O	S
1b1.65	C(CH ₃) ₂		=O	S
1b1.66	CCH ₃ (C ₂ H ₅)		=O	S
1b1.67	CCH ₃ [CH(CH ₃) ₂]		=O	S
1b1.68	CH ₂		=O	NH
1b1.69	CH(CH ₃)		=O	NH
1b1.70	CH(C ₂ H ₅)		=O	NH
1b1.71	CH[CH(CH ₃) ₂]		=O	NH
1b1.72	C(CH ₃) ₂		=O	NH
1b1.73	CCH ₃ (C ₂ H ₅)		=O	NH
1b1.74	CCH ₃ [CH(CH ₃) ₂]		=O	NH
1b1.75	CH ₂		=O	NCH ₃
1b1.76	CH(CH ₃)		=O	NCH ₃
1b1.77	CH(C ₂ H ₅)		=O	NCH ₃
1b1.78	CH[CH(CH ₃) ₂]		=O	NCH ₃
1b1.79	C(CH ₃) ₂		=O	NCH ₃
1b1.80	CCH ₃ (C ₂ H ₅)		=O	NCH ₃
1b1.81	CCH ₃ [CH(CH ₃) ₂]		=O	NCH ₃
1b1.82	O	COOCH ₃	H	CH ₂
1b1.83	O	COOC ₂ H ₅	H	CH ₂
1b1.84	O	CONHCH ₃	H	CH ₂
1b1.85	O	CON(CH ₃) ₂	H	CH ₂
1b1.86	O	CONHC ₂ H ₅	H	CH ₂
1b1.87	O	CON(C ₂ H ₅) ₂	H	CH ₂
1b1.88	O	CH ₃	H	CH ₂
1b1.89	O	C ₂ H ₅	H	CH ₂
1b1.90	O	CH(CH ₃) ₂	H	CH ₂
1b1.91	O	COC ₂ H ₅	H	CH ₂
1b1.92	O	CH ₂ CN	H	CH ₂
1b1.93	O	CH ₂ N(CH ₃) ₂	H	CH ₂
1b1.94	O	CH ₂ ON=C(CH ₃) ₂	H	CH ₂
1b1.95	O	CH(OC ₂ H ₅) ₂	H	CH ₂
1b1.96	O	CH(OCH ₃) ₂	H	CH ₂
1b1.97	O	CH ₃	CH ₃	CH ₂
1b1.98	O	CH ₃	C ₂ H ₅	CH ₂
1b1.99	O	C ₂ H ₅	C ₂ H ₅	CH ₂
1b1.100	O		-(CH ₂) ₄ -	CH ₂
1b1.101	O		-(CH ₂) ₂ -O-(CH ₂) ₂ -	CH ₂
1b1.102	O	H	-(CH ₂) ₃ -CH-	

10

20

30

40

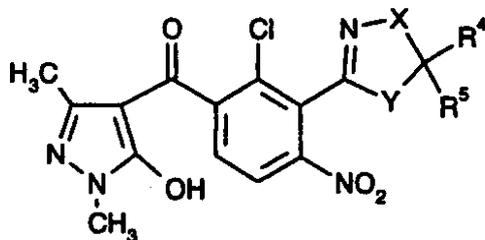
No.	X	R ⁴	R ⁵	Y
1b1.103	O	H	-(CH ₂) ₄ -CH-	
1b1.104	O	CH ₃	H	CHCH ₃
1b1.105	O	H	H	CH ₂
1b1.106	S		=O	O
1b1.107	CH ₂		=S	S
1b1.108	CH(CH ₃)		=S	S
1b1.109	CH(C ₂ H ₅)		=S	S
1b1.110	C(CH ₃) ₂		=S	S
1b1.111	O		=O	NH
1b1.112	O		=O	NCH ₃
1b1.113	O	CH ₃	H	NH
1b1.114	O	C ₂ H ₅	H	NH
1b1.115	O	CH ₃	CH ₃	NH
1b1.116	O	C ₂ H ₅	C ₂ H ₅	NH
1b1.117	O	CH ₃	H	NCH ₃
1b1.118	O	C ₂ H ₅	H	NCH ₃
1b1.119	O	CH ₃	CH ₃	NCH ₃
1b1.120	O	C ₂ H ₅	C ₂ H ₅	NCH ₃
1b1.121	NH		=O	NH
1b1.122	NH		=O	NCH ₃
1b1.123	NCH ₃		=O	NH
1b1.124	NCH ₃		=O	NCH ₃
1b1.125	NC ₂ H ₅		=O	NH
1b1.126	NC ₂ H ₅		=O	NC ₂ H ₅

10

20

更に、以下に示す式 I の 3 - ヘテロシクリル置換ベンゾイル誘導体が特に極めて好ましい。

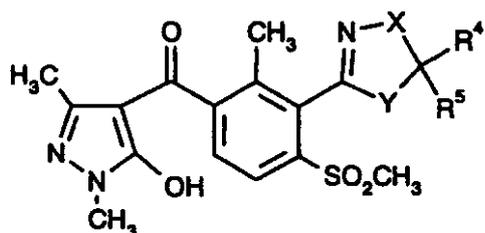
化合物 1b2.1 - 1b2.126。R²がニトロである点に対応の化合物 1b1.1 - 1b1.126と異なる。



1b2

30

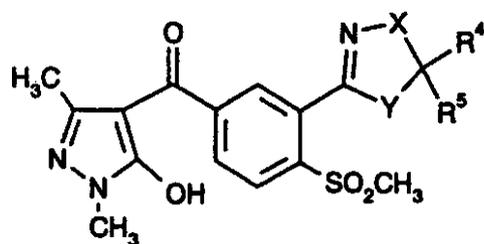
化合物 1b3.1 - 1b3.126。R¹がメチル、R²がメチルスルホニルである点に対応の化合物 1b1.1 - 1b1.126と異なる。



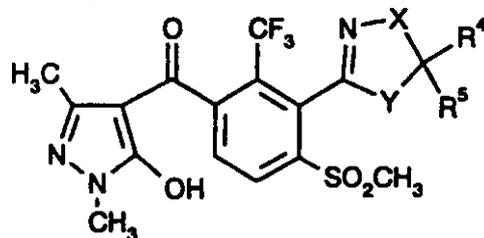
1b3

40

化合物 1b4.1 - 1b4.126。R¹が水素、R²がメチルスルホニルである点に対応の化合物 1b1.1 - 1b1.126と異なる。

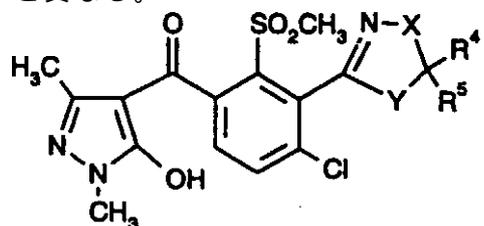
**Ib4**

化合物Ib5.1 - Ib5.126。R¹がトリフルオロメチル、R²がメチルスルホニルである点に対応の化合物Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib5**

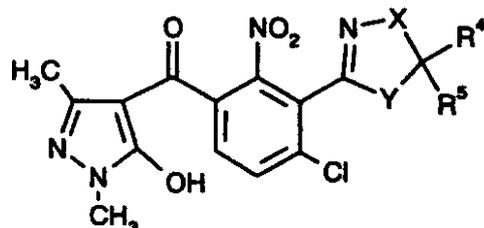
10

化合物Ib6.1 - Ib6.126。R¹がメチルスルホニルである点に対応の化合物Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib6**

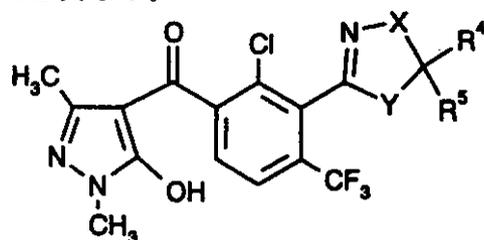
20

化合物Ib7.1 - Ib7.126。R¹がニトロである点に対応の化合物Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib7**

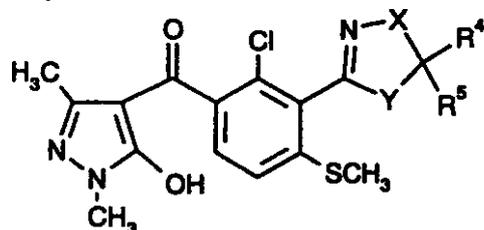
30

化合物Ib8.1 - Ib8.126。R²がトリフルオロメチルである点に対応の化合物Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib8**

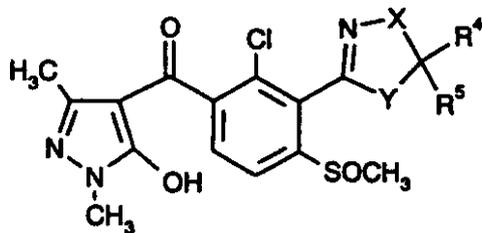
40

化合物Ib9.1 - Ib9.126。R²がメチルチオである点に対応の化合物Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

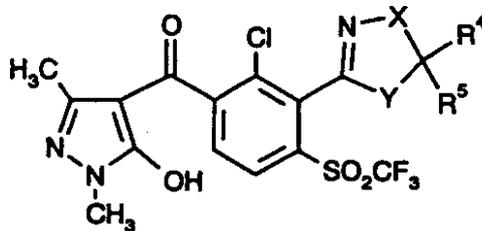
**Ib9**

化合物Ib10.1 - Ib10.126。R²がメチルスルフィニルである点に対応の化合物Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

50

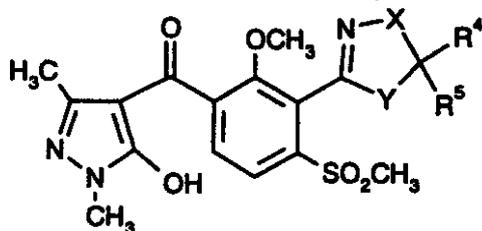
**Ib10**

化合物Ib11.1 - Ib11.126。R²がトリフルオロメチルスルホニルである点に対応の化合物Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib11**

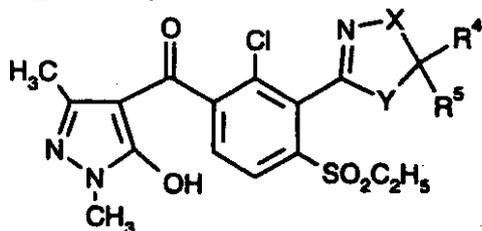
10

化合物Ib12.1 - Ib12.126。R¹がメトキシ、R²がメチルスルホニルである点に対応の化合物Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib12**

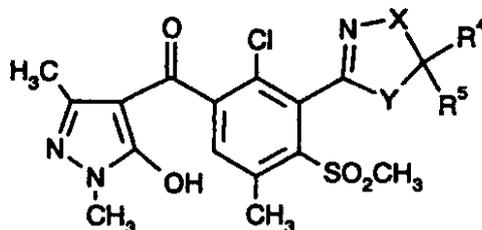
20

化合物Ib13.1 - Ib13.126。R²がエチルスルホニルである点に対応の化合物Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

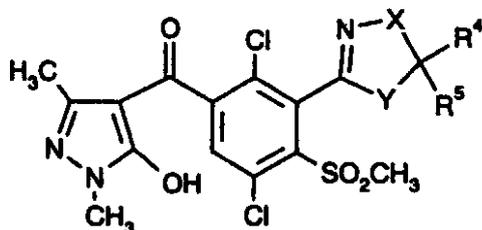
**Ib13**

30

化合物Ib14.1 - Ib14.126。R²がメチルスルホニル、R³がメチルである点に対応の化合物Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

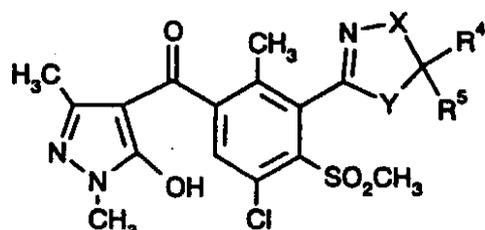
**Ib14**

化合物Ib15.1 - Ib15.126。R²がメチルスルホニル、R³が塩素である点に対応の化合物Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

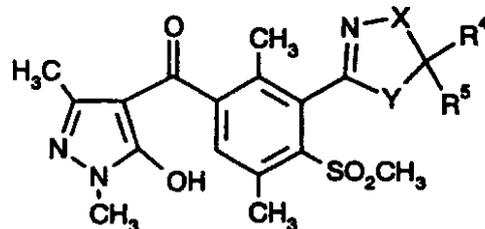
**Ib15**

40

化合物Ib16.1 - Ib16.126。R¹がメチル、R²がメチルスルホニル、R³が塩素である点に対応の化合物Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

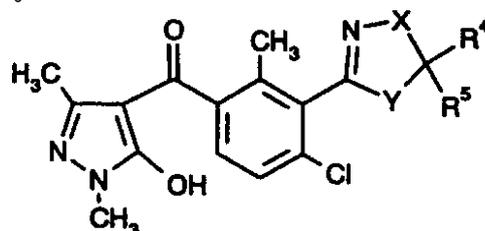
**Ib16**

化合物 Ib17.1 - Ib17.126。R¹がメチル、R²がメチルスルホニル、R³がメチルである点
が対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib17**

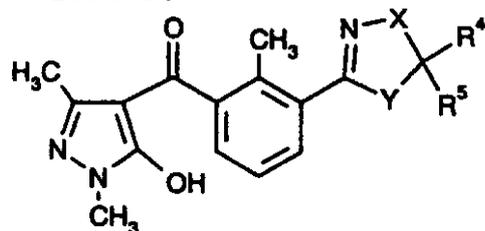
10

化合物 Ib18.1 - Ib18.126。R¹がメチルである点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる
。

**Ib18**

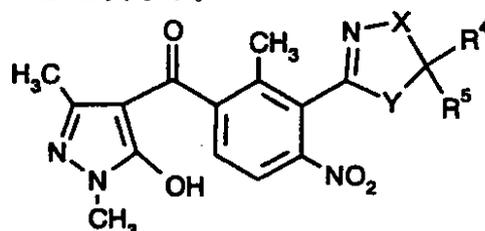
20

化合物 Ib19.1 - Ib19.126。R¹がメチル、R²が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.1
26と異なる。

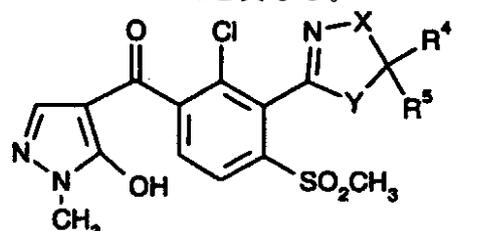
**Ib19**

30

化合物 Ib20.1 - Ib20.126。R¹がメチル、R²がニトロである点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1
.126と異なる。

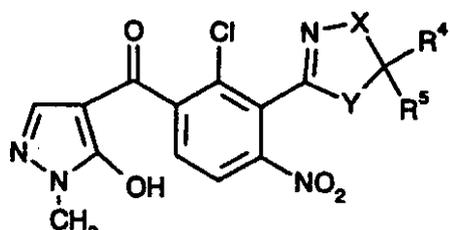
**Ib20**

化合物 Ib21.1 - Ib21.126。R²がメチルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 I
b1.1 - Ib1.126と異なる。

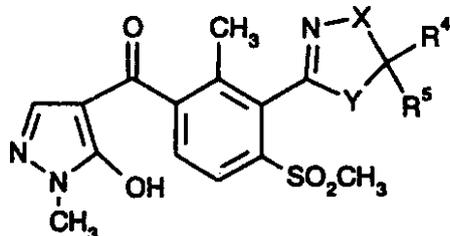
**Ib21**

40

化合物 Ib22.1 - Ib22.126。R²がニトロ、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.
126と異なる。

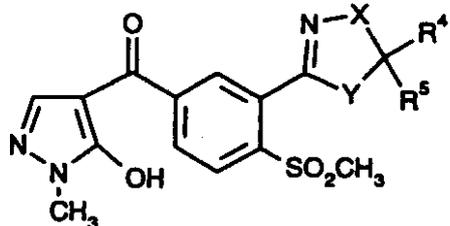
**Ib22**

化合物 Ib23.1 - Ib23.126。R¹がメチル、R²がメチルスルホニル、R¹⁸が水素である点が対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib23**

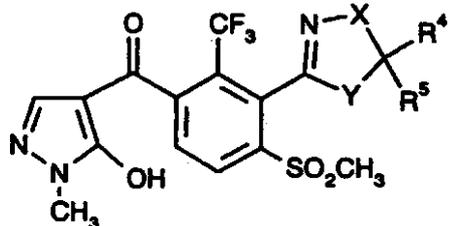
10

化合物 Ib24.1 - Ib24.126。R¹が水素、R²がメチルスルホニル、R¹⁸が水素である点が対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib24**

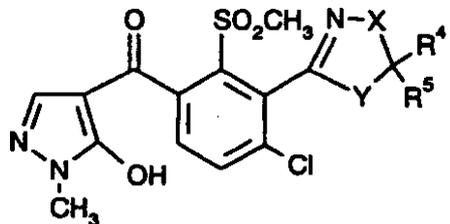
20

化合物 Ib25.1 - Ib25.126。R¹がトリフルオロメチル、R²がメチルスルホニル、R¹⁸が水素である点が対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

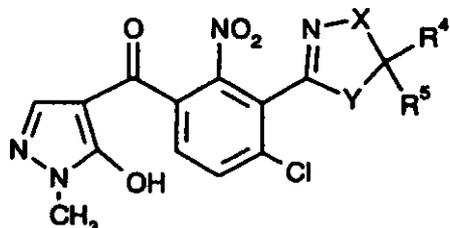
**Ib25**

30

化合物 Ib26.1 - Ib26.126。R¹がメチルスルホニル、R¹⁸が水素である点が対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

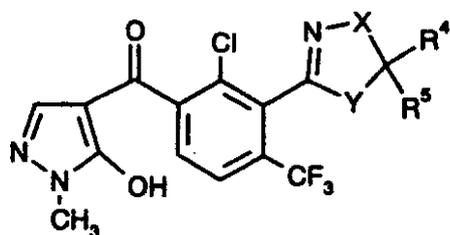
**Ib26**

化合物 Ib27.1 - Ib27.126。R¹がニトロ、R¹⁸が水素である点が対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

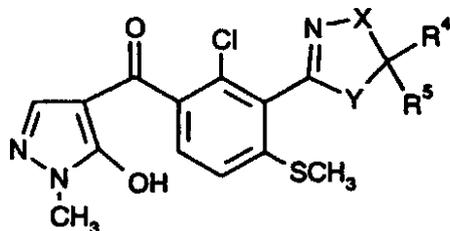
**Ib27**

40

化合物 Ib28.1 - Ib28.126。R²がトリフルオロメチル、R¹⁸が水素である点が対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

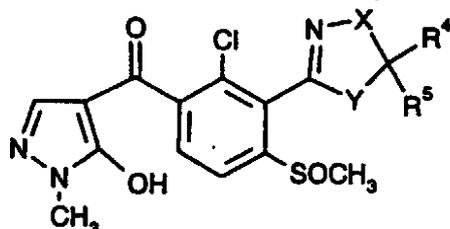
**Ib28**

化合物 Ib29.1 - Ib29.126。R²がメチルチオ、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib29**

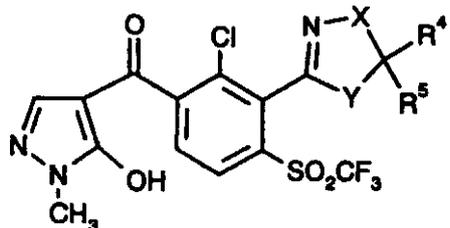
10

化合物 Ib30.1 - Ib30.126。R²がメチルスルフィニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib30**

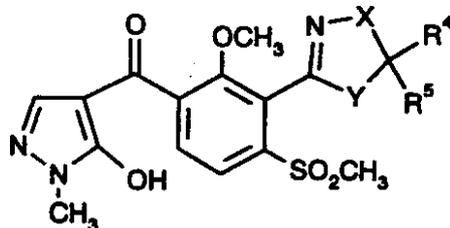
20

化合物 Ib31.1 - Ib31.126。R²がトリフルオロメチルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

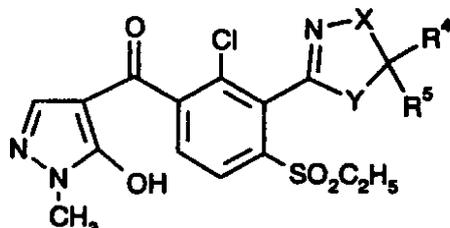
**Ib31**

30

化合物 Ib32.1 - Ib32.126。R¹がメトキシ、R²がメチルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

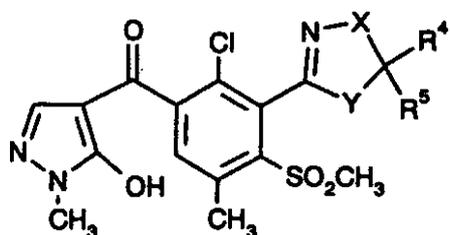
**Ib32**

化合物 Ib33.1 - Ib33.126。R²がエチルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

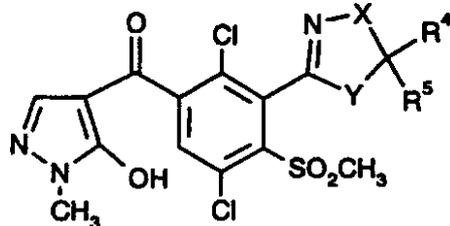
**Ib33**

40

化合物 Ib34.1 - Ib34.126。R²がメチルスルホニル、R³がメチル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

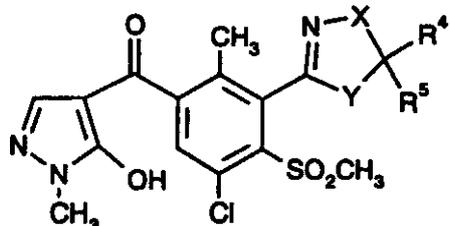
**Ib34**

化合物 Ib35.1 - Ib35.126。R²がメチルスルホニル、R³が塩素、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

**Ib35**

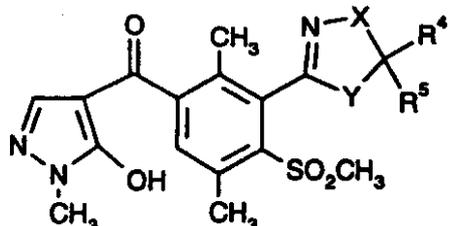
10

化合物 Ib36.1 - Ib36.126。R¹がメチル、R²がメチルスルホニル、R³が塩素、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

**Ib36**

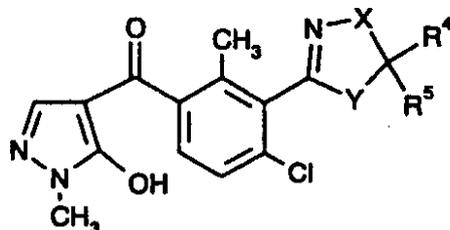
20

化合物 Ib37.1 - Ib37.126。R¹がメチル、R²がメチルスルホニル、R³がメチル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

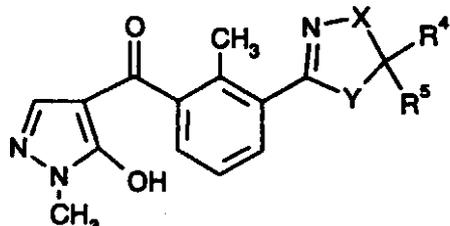
**Ib37**

30

化合物 Ib38.1 - Ib38.126。R¹がメチル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

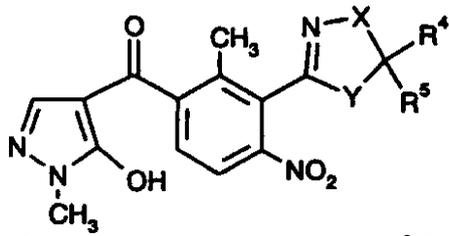
**Ib38**

化合物 Ib39.1 - Ib39.126。R¹がメチル、R²が水素、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

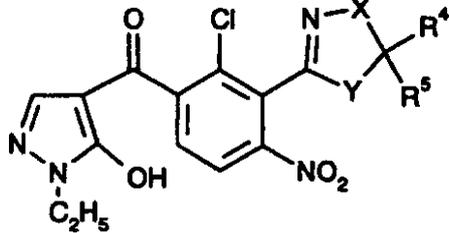
**Ib39**

40

化合物 Ib40.1 - Ib40.126。R¹がメチル、R²がニトロ、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

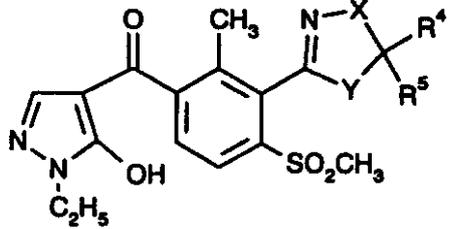
**Ib40**

化合物 Ib41.1 - Ib41.126。R²がニトロ、R¹⁶がエチル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

**Ib41**

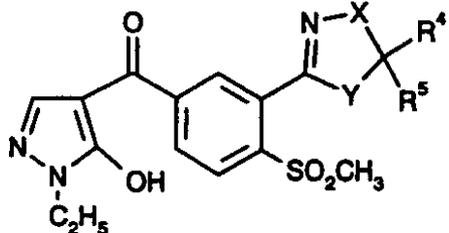
10

化合物 Ib42.1 - Ib42.126。R¹がメチル、R²がメチルスルホニル、R¹⁶がエチル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

**Ib42**

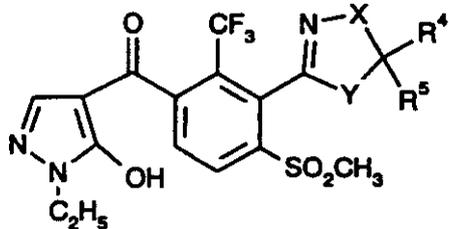
20

化合物 Ib43.1 - Ib43.126。R¹が水素、R²がメチルスルホニル、R¹⁶がエチル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

**Ib43**

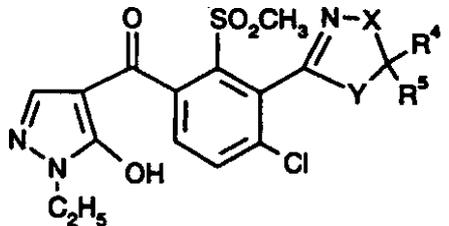
30

化合物 Ib44.1 - Ib44.126。R¹がトリフルオロメチル、R²がメチルスルホニル、R¹⁶がエチル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

**Ib44**

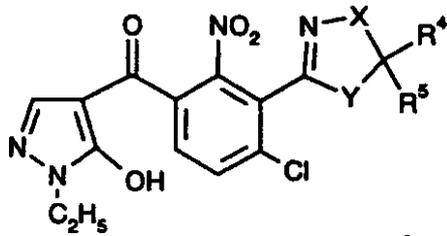
40

化合物 Ib45.1 - Ib45.126。R¹がメチルスルホニル、R¹⁶がエチル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

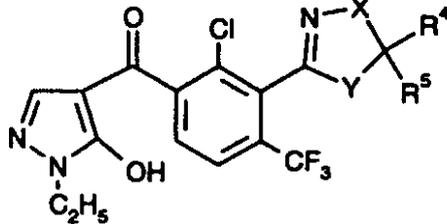
**Ib45**

化合物 Ib46.1 - Ib46.126。R¹がニトロ、R¹⁶がエチル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

50

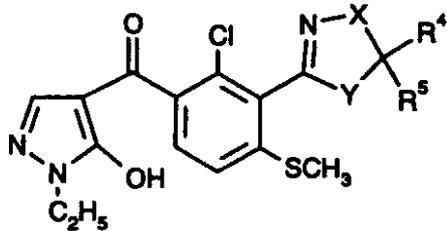
**Ib46**

化合物 Ib47.1 - Ib47.126。R²がトリフルオロメチル、R¹⁶がエチル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

**Ib47**

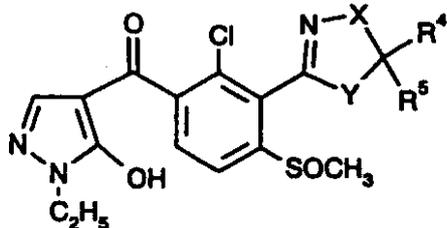
10

化合物 Ib48.1 - Ib48.126。R²がメチルチオ、R¹⁶がエチル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

**Ib48**

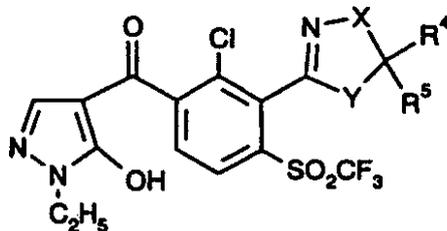
20

化合物 Ib49.1 - Ib49.126。R²がメチルスルフィニル、R¹⁶がエチル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

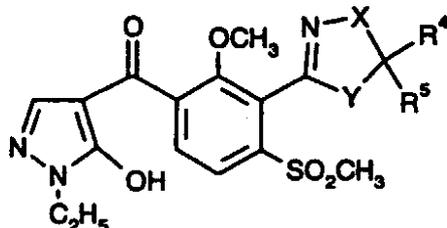
**Ib49**

30

化合物 Ib50.1 - Ib50.126。R²がトリフルオロメチルスルホニル、R¹⁶がエチル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

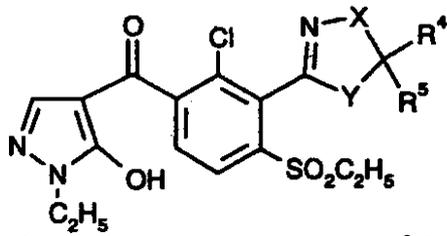
**Ib50**

化合物 Ib51.1 - Ib51.126。R¹がメトキシ、R²がメチルスルホニル、R¹⁶がエチル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

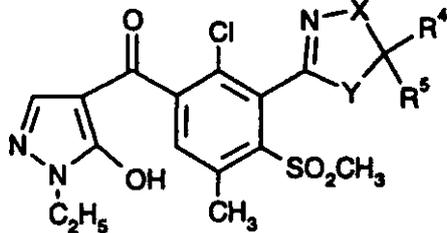
**Ib51**

40

化合物 Ib52.1 - Ib52.126。R²がエチルスルホニル、R¹⁶がエチル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

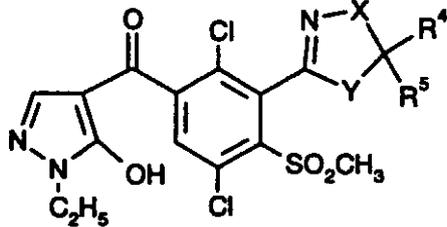
**Ib52**

化合物 Ib53.1 - Ib53.126。R²がメチルスルホニル、R³がメチル、R¹⁶がエチル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

**Ib53**

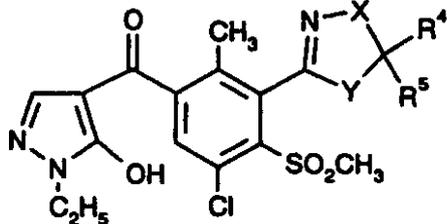
10

化合物 Ib54.1 - Ib54.126。R²がメチルスルホニル、R³が塩素、R¹⁶がエチル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

**Ib54**

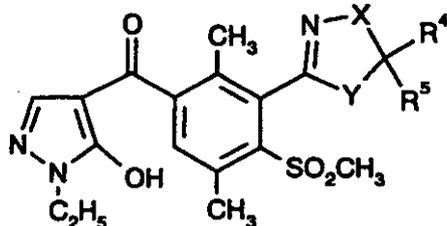
20

化合物 Ib55.1 - Ib55.126。R¹がメチル、R²がメチルスルホニル、R³が塩素、R¹⁶がエチル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

**Ib55**

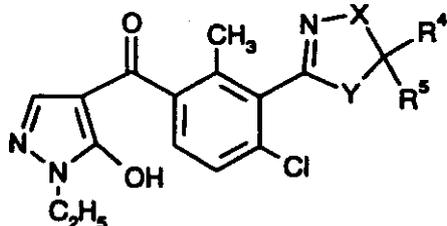
30

化合物 Ib56.1 - Ib56.126。R¹がメチル、R²がメチルスルホニル、R³がメチル、R¹⁶がエチル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

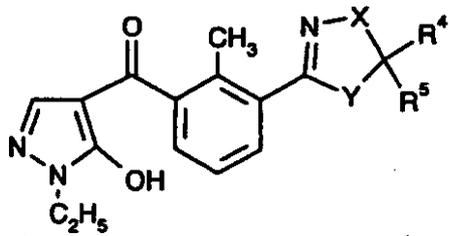
**Ib56**

40

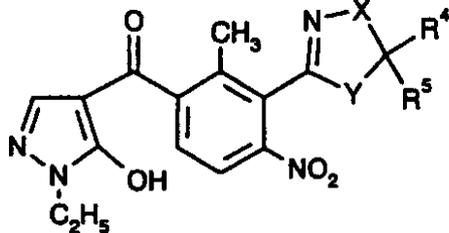
化合物 Ib57.1 - Ib57.126。R¹がメチル、R¹⁶がエチル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

**Ib57**

化合物 Ib58.1 - Ib58.126。R¹がメチル、R²が水素、R¹⁶がエチル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

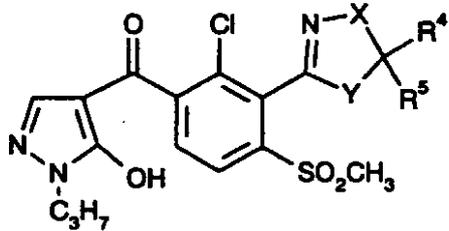
**Ib58**

化合物 Ib59.1 - Ib59.126。R¹がメチル、R²がニトロ、R¹⁶がエチル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

**Ib59**

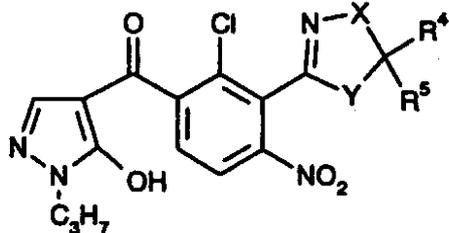
10

化合物 Ib60.1 - Ib60.126。R²がメチルスルホニル、R¹⁶がn-プロピル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

**Ib60**

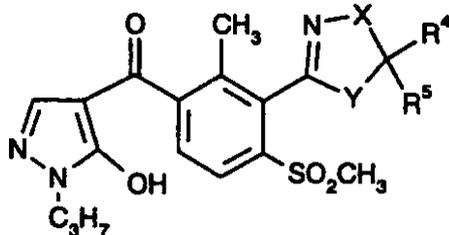
20

化合物 Ib61.1 - Ib61.126。R²がニトロ、R¹⁶がn-プロピル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

**Ib61**

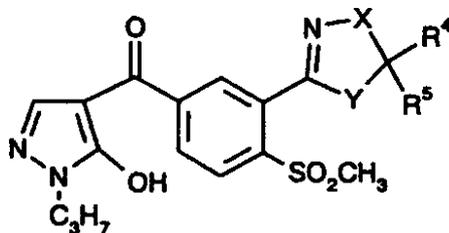
30

化合物 Ib62.1 - Ib62.126。R¹がメチル、R²がメチルスルホニル、R¹⁶がn-プロピル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

**Ib62**

40

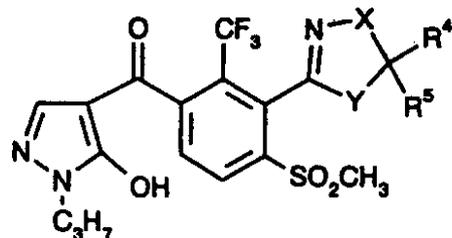
化合物 Ib63.1 - Ib63.126。R¹が水素、R²がメチルスルホニル、R¹⁶がn-プロピル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

**Ib63**

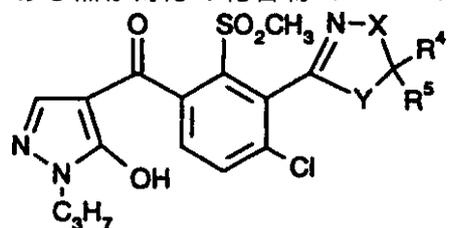
化合物 Ib64.1 - Ib64.126。R¹がトリフルオロメチル、R²がメチルスルホニル、R¹⁶がn

50

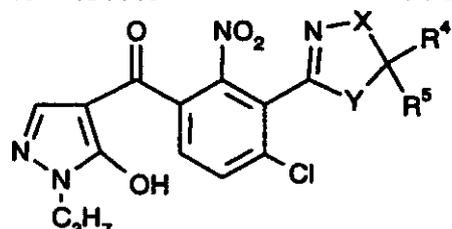
- プロピル、 R^{18} が水素である点に対応の化合物Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib64**

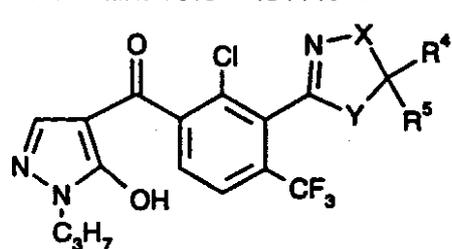
化合物Ib65.1 - Ib65.126。 R^1 がメチルスルホニル、 R^{16} がn - プロピル、 R^{18} が水素である点に対応の化合物Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib65**

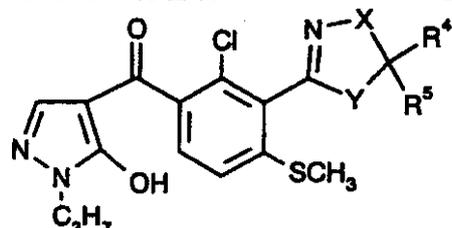
化合物Ib66.1 - Ib66.126。 R^1 がニトロ、 R^{16} がn - プロピル、 R^{18} が水素である点に対応の化合物Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib66**

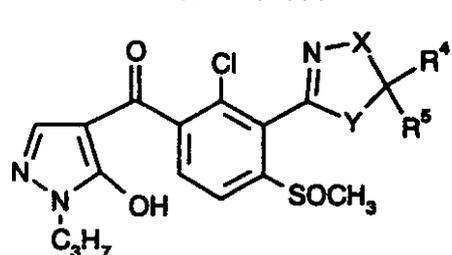
化合物Ib67.1 - Ib67.126。 R^2 がトリフルオロメチル、 R^{16} がn - プロピル、 R^{18} が水素である点に対応の化合物Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib67**

化合物Ib68.1 - Ib68.126。 R^2 がメチルチオ、 R^{16} がn - プロピル、 R^{18} が水素である点に対応の化合物Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib68**

化合物Ib69.1 - Ib69.126。 R^2 がメチルスルフィニル、 R^{16} がn - プロピル、 R^{18} が水素である点に対応の化合物Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib69**

10

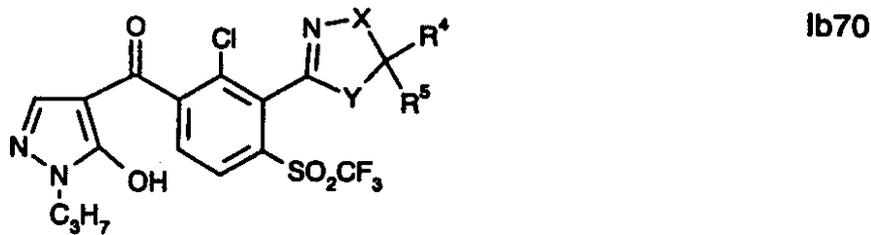
20

30

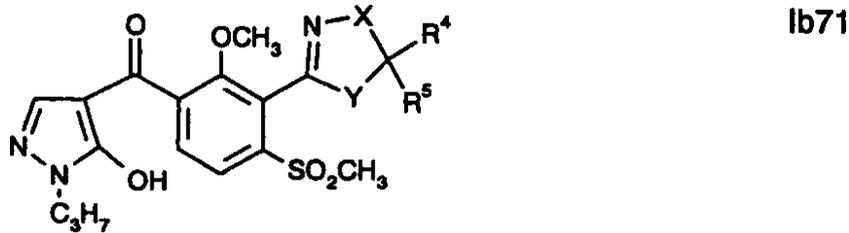
40

50

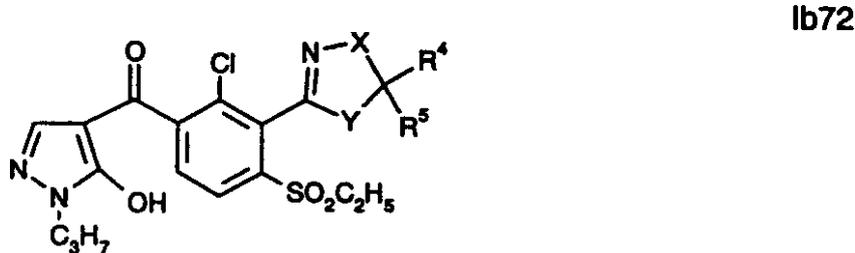
化合物 Ib70.1 - Ib70.126。R²がトリフルオロメチルスルホニル、R¹⁶がn-プロピル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。



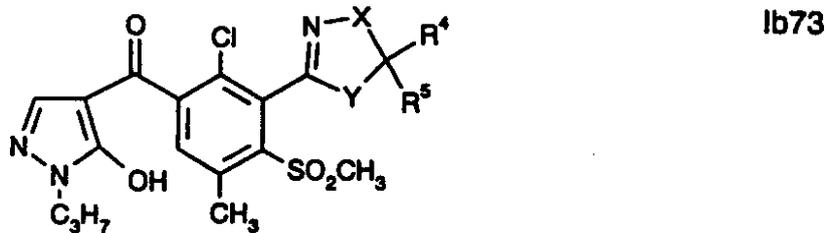
化合物 Ib71.1 - Ib71.126。R¹がメトキシ、R²がメチルスルホニル、R¹⁶がn-プロピル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。



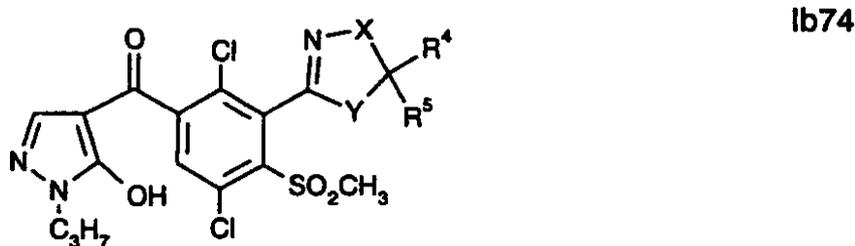
化合物 Ib72.1 - Ib72.126。R²がエチルスルホニル、R¹⁶がn-プロピル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。



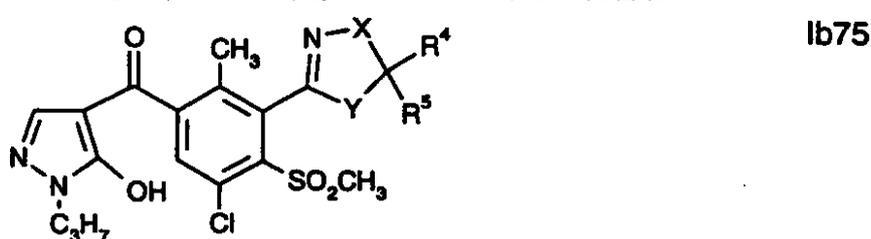
化合物 Ib73.1 - Ib73.126。R²がメチルスルホニル、R³がメチル、R¹⁶がn-プロピル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。



化合物 Ib74.1 - Ib74.126。R²がメチルスルホニル、R³が塩素、R¹⁶がn-プロピル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。



化合物 Ib75.1 - Ib75.126。R¹がメチル、R²がメチルスルホニル、R³が塩素、R¹⁶がn-プロピル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。



10

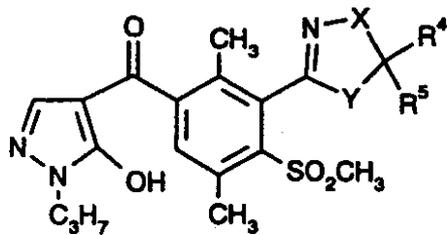
20

30

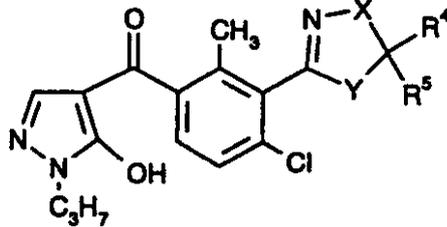
40

50

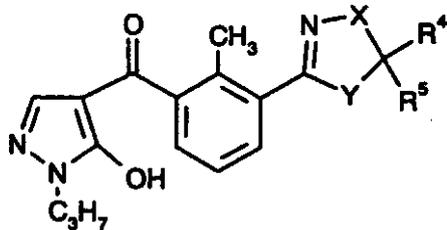
化合物 Ib76.1 - Ib76.126。R¹がメチル、R²がメチルスルホニル、R³がメチル、R¹⁶が n - プロピル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

**Ib76**

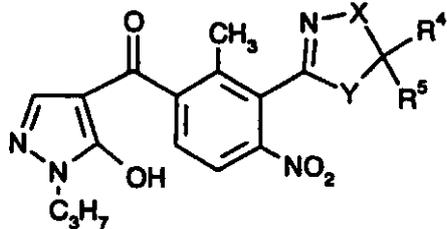
化合物 Ib77.1 - Ib77.126。R¹がメチル、R¹⁶が n - プロピル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

**Ib77**

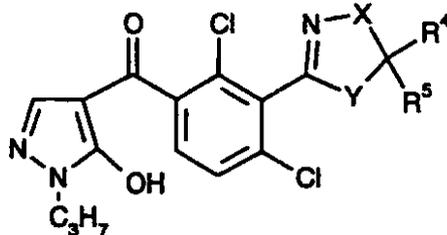
化合物 Ib78.1 - Ib78.126。R¹がメチル、R²が水素、R¹⁶が n - プロピル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

**Ib78**

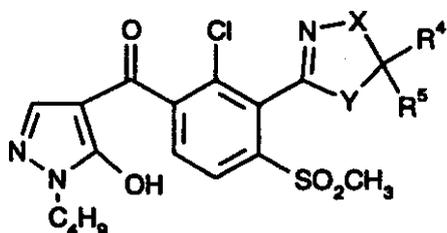
化合物 Ib79.1 - Ib79.126。R¹がメチル、R²がニトロ、R¹⁶が n - プロピル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

**Ib79**

化合物 Ib80.1 - Ib80.126。R¹⁶が n - プロピル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

**Ib80**

化合物 Ib81.1 - Ib81.126。R²がメチルスルホニル、R¹⁶が n - ブチル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

**Ib81**

10

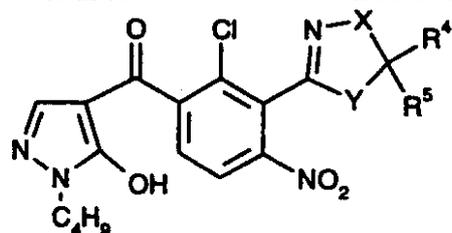
20

30

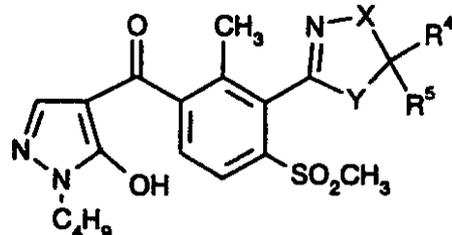
40

50

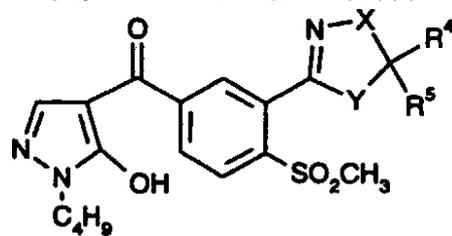
化合物 Ib82.1 - Ib82.126。R²がニトロ、R¹⁶がn - ブチル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

**Ib82**

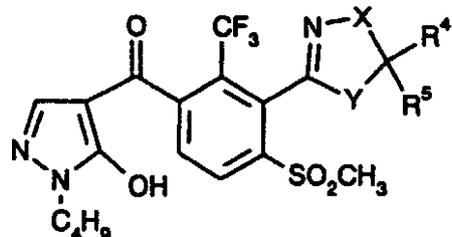
化合物 Ib83.1 - Ib83.126。R¹がメチル、R²がメチルスルホニル、R¹⁶がn - ブチル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

**Ib83**

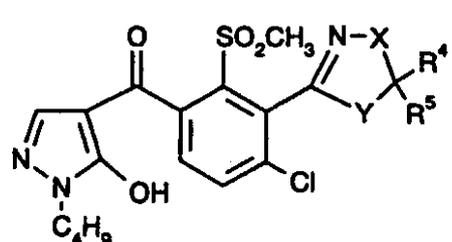
化合物 Ib84.1 - Ib84.126。R¹が水素、R²がメチルスルホニル、R¹⁶がn - ブチル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

**Ib84**

化合物 Ib85.1 - Ib85.126。R¹がトリフルオロメチル、R²がメチルスルホニル、R¹⁶がn - ブチル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

**Ib85**

化合物 Ib86.1 - Ib86.126。R¹がメチルスルホニル、R¹⁶がn - ブチル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

**Ib86**

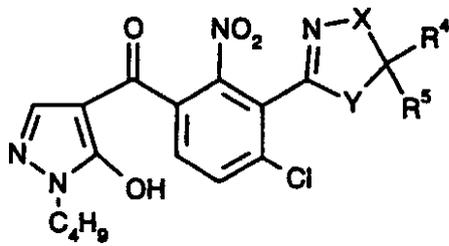
化合物 Ib87.1 - Ib87.126。R¹がニトロ、R¹⁶がn - ブチル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

10

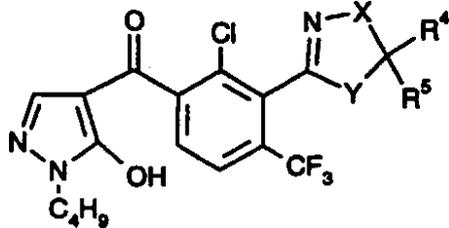
20

30

40

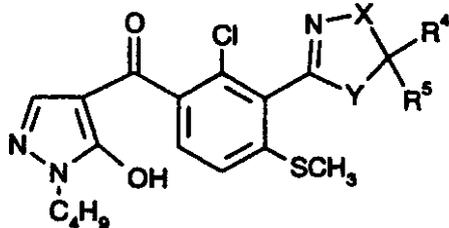
**Ib87**

化合物 Ib88.1 - Ib88.126。R²がトリフルオロメチル、R¹⁶がn - ブチル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib88**

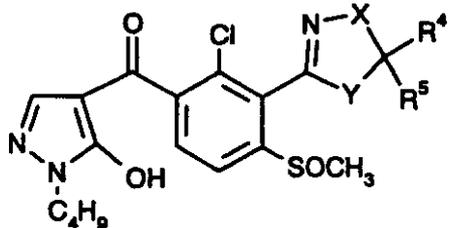
10

化合物 Ib89.1 - Ib89.126。R²がメチルチオ、R¹⁶がn - ブチル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib89**

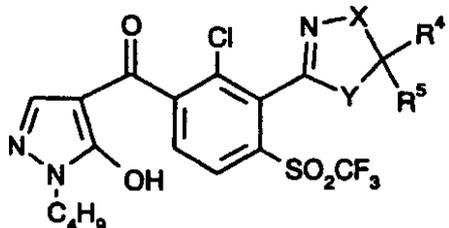
20

化合物 Ib90.1 - Ib90.126。R²がメチルスルフィニル、R¹⁶がn - ブチル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

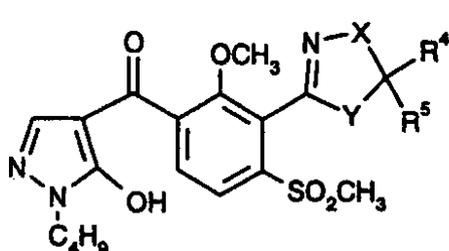
**Ib90**

30

化合物 Ib91.1 - Ib91.126。R²がトリフルオロメチルスルホニル、R¹⁶がn - ブチル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib91**

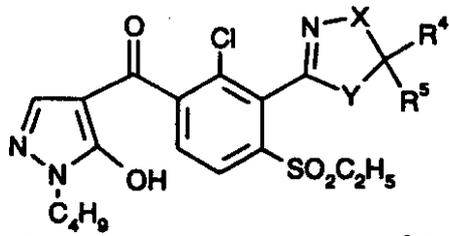
化合物 Ib92.1 - Ib92.126。R¹がメトキシ、R²がメチルスルホニル、R¹⁶がn - ブチル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib92**

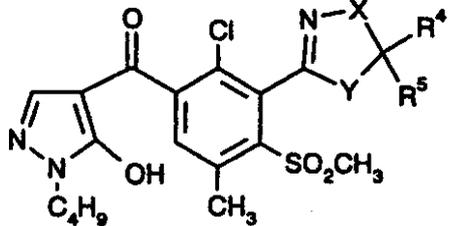
40

化合物 Ib93.1 - Ib93.126。R²がエチルスルホニル、R¹⁶がn - ブチル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

50

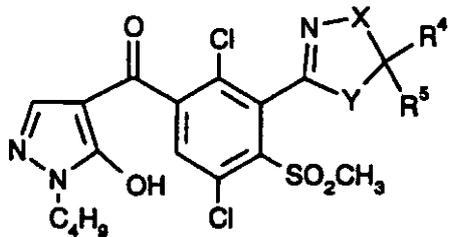
**Ib93**

化合物 Ib94.1 - Ib94.126。R²がメチルスルホニル、R³がメチル、R¹⁶がn - ブチル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

**Ib94**

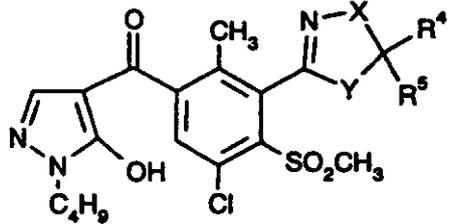
10

化合物 Ib95.1 - Ib95.126。R²がメチルスルホニル、R³が塩素、R¹⁶がn - ブチル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

Ib95

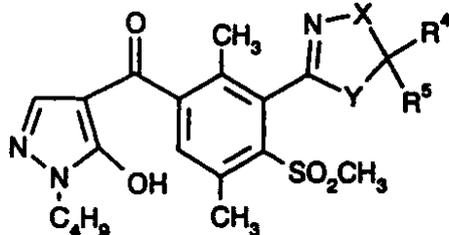
20

化合物 Ib96.1 - Ib96.126。R¹がメチル、R²がメチルスルホニル、R³が塩素、R¹⁶がn - ブチル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

Ib96

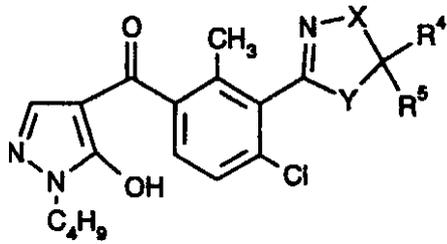
30

化合物 Ib97.1 - Ib97.126。R¹がメチル、R²がメチルスルホニル、R³がメチル、R¹⁶がn - ブチル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

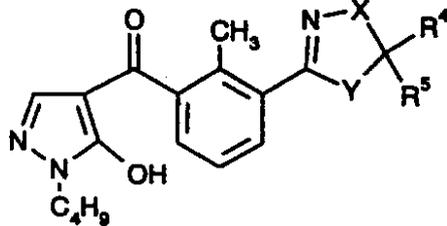
Ib97

40

化合物 Ib98.1 - Ib98.126。R¹がメチル、R¹⁶がn - ブチル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

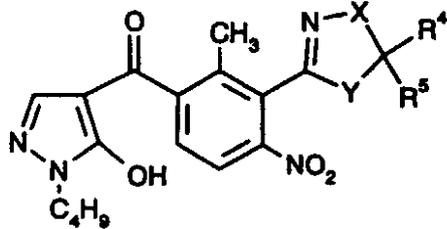
**Ib98**

化合物 Ib99.1 - Ib99.126。R¹がメチル、R²が水素、R¹⁶がn - ブチル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib99**

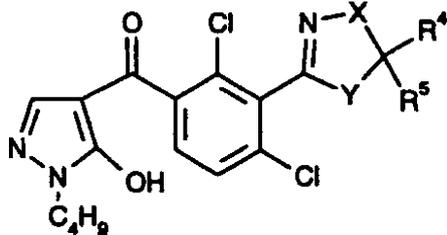
10

化合物 Ib100.1 - Ib100.126。R¹がメチル、R²がニトロ、R¹⁶がn - ブチル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib100**

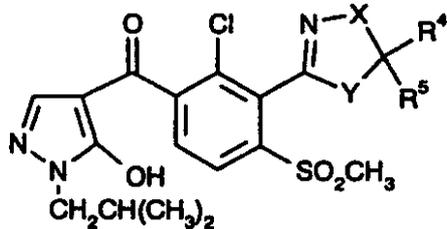
20

化合物 Ib101.1 - Ib101.126。R¹⁶がn - ブチル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib101**

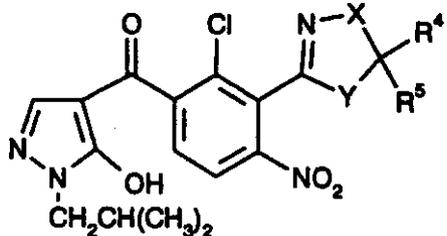
30

化合物 Ib102.1 - Ib102.126。R²がメチルスルホニル、R¹⁶がイソブチル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib102**

40

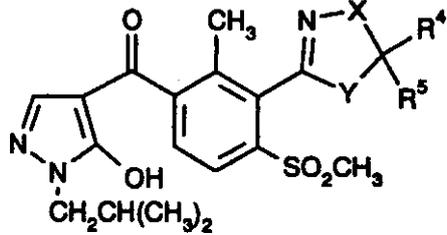
化合物 Ib103.1 - Ib103.126。R²がニトロ、R¹⁶がイソブチル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib103**

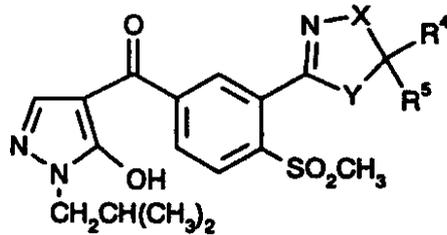
化合物 Ib104.1 - Ib104.126。R¹がメチル、R²がメチルスルホニル、R¹⁶がイソブチル、

50

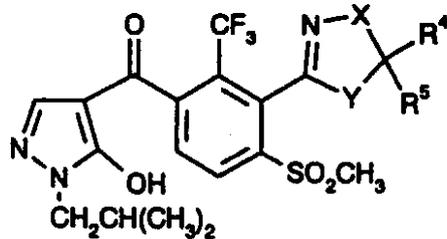
R¹⁸が水素である点に対応の化合物Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib104**

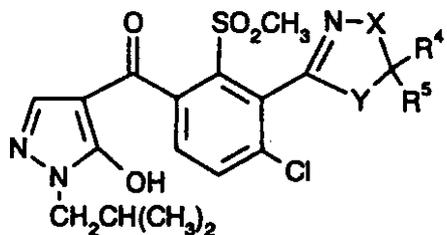
化合物Ib105.1 - Ib105.126。R¹が水素、R²がメチルスルホニル、R¹⁶がイソブチル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib105**

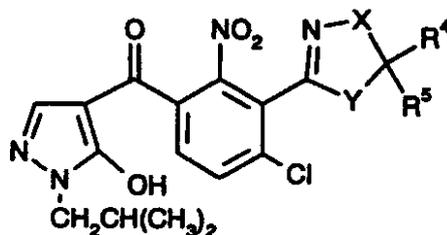
化合物Ib106.1 - Ib106.126。R¹がトリフルオロメチル、R²がメチルスルホニル、R¹⁶がイソブチル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib106**

化合物Ib107.1 - Ib107.126。R¹がメチルスルホニル、R¹⁶がイソブチル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib107**

化合物Ib108.1 - Ib108.126。R¹がニトロ、R¹⁶がイソブチル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib108**

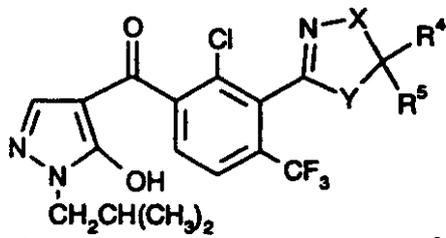
化合物Ib109.1 - Ib109.126。R²がトリフルオロメチル、R¹⁶がイソブチル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

10

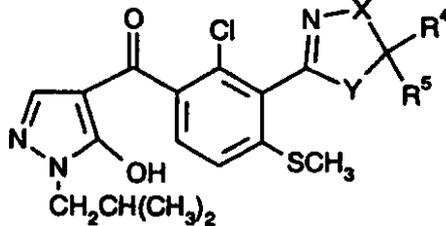
20

30

40

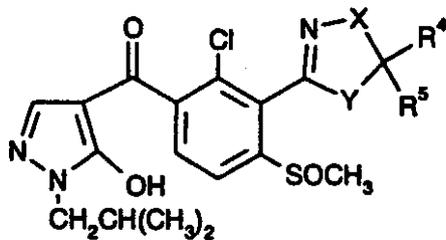
**Ib109**

化合物 Ib110.1 - Ib110.126。R²がメチルチオ、R¹⁶がイソブチル、R¹⁸が水素である点
が対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

**Ib110**

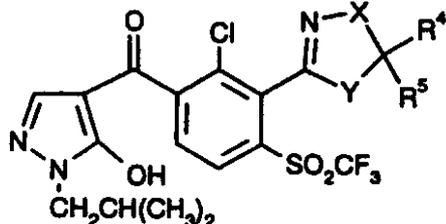
10

化合物 Ib111.1 - Ib111.126。R²がメチルスルフィニル、R¹⁶がイソブチル、R¹⁸が水素
である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

**Ib111**

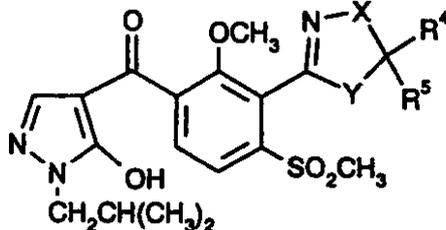
20

化合物 Ib112.1 - Ib112.126。R²がトリフルオロメチルスルホニル、R¹⁶がイソブチル、
R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

**Ib112**

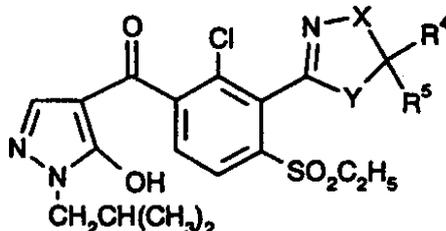
30

化合物 Ib113.1 - Ib113.126。R¹がメトキシ、R²がメチルスルホニル、R¹⁶がイソブチル
、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

**Ib113**

40

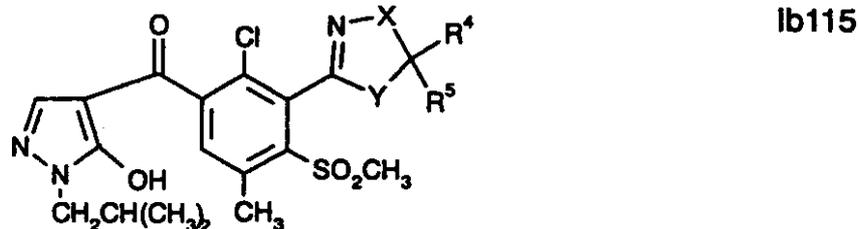
化合物 Ib114.1 - Ib114.126。R²がエチルスルホニル、R¹⁶がイソブチル、R¹⁸が水素で
ある点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

**Ib114**

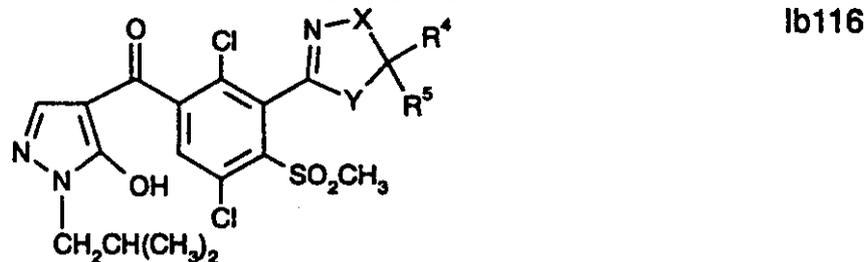
化合物 Ib115.1 - Ib115.126。R²がメチルスルホニル、R³がメチル、R¹⁶がイソブチル、

50

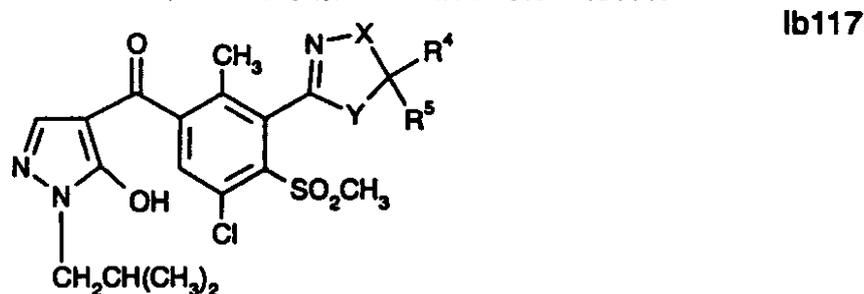
R¹⁸が水素である点に対応の化合物Ib1.1 - Ib1.126と異なる。



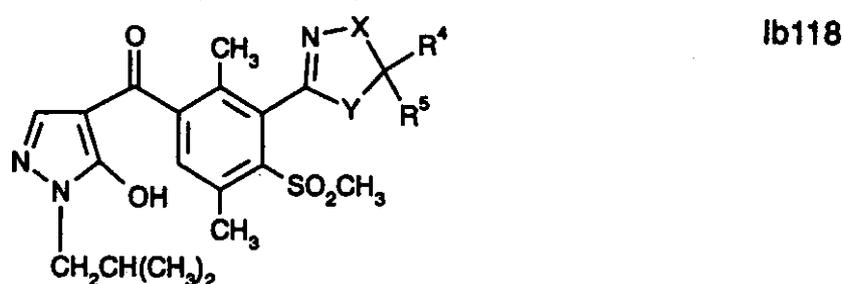
化合物Ib116.1 - Ib116.126。R²がメチルスルホニル、R³が塩素、R¹⁶がイソブチル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物Ib1.1 - Ib1.126と異なる。



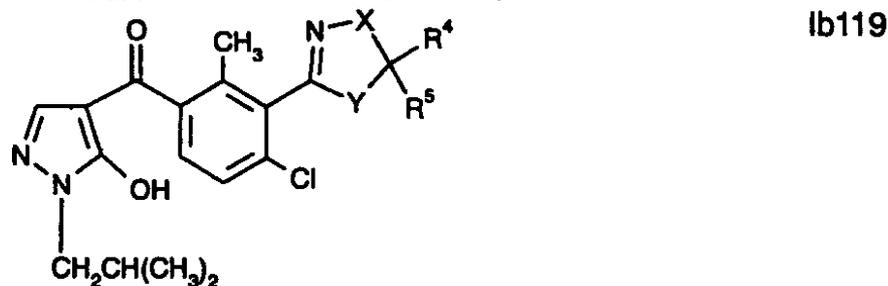
化合物Ib117.1 - Ib117.126。R¹がメチル、R²がメチルスルホニル、R³が塩素、R¹⁶がイソブチル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物Ib1.1 - Ib1.126と異なる。



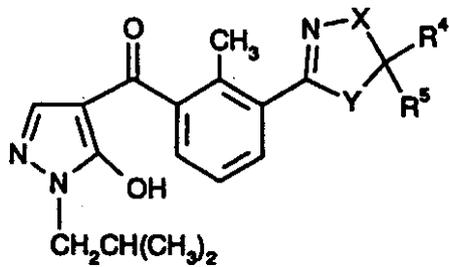
化合物Ib118.1 - Ib118.126。R¹がメチル、R²がメチルスルホニル、R³がメチル、R¹⁶がイソブチル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物Ib1.1 - Ib1.126と異なる。



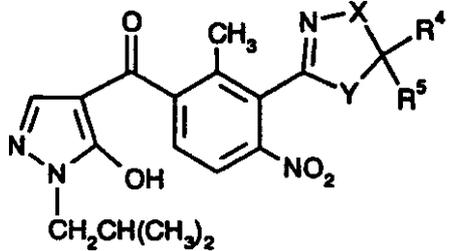
化合物Ib119.1 - Ib119.126。R¹がメチル、R¹⁶がイソブチル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物Ib1.1 - Ib1.126と異なる。



化合物Ib120.1 - Ib120.126。R¹がメチル、R²が水素、R¹⁶がイソブチル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

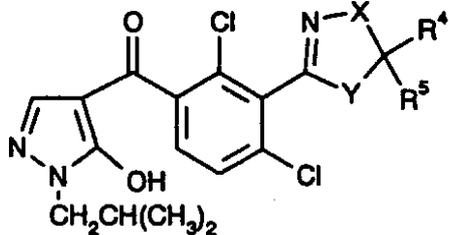
**Ib120**

化合物 Ib121.1 - Ib121.126。R¹がメチル、R²がニトロ、R¹⁶がイソブチル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

**Ib121**

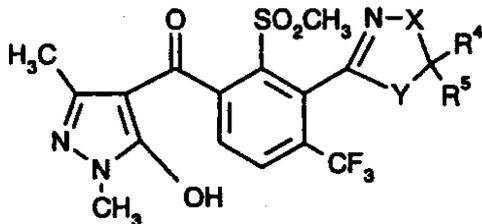
10

化合物 Ib122.1 - Ib122.126。R¹⁶がイソブチル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

**Ib122**

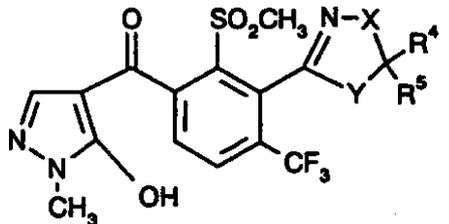
20

化合物 Ib123.1 - Ib123.126。R¹がメチルスルホニル、R²がトリフルオロメチルである点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

**Ib123**

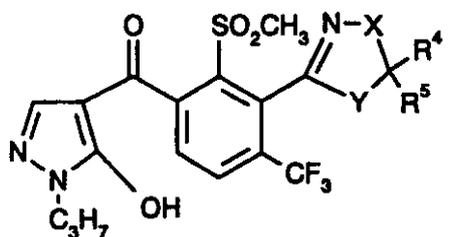
30

化合物 Ib124.1 - Ib124.126。R¹がメチルスルホニル、R²がトリフルオロメチル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

**Ib124**

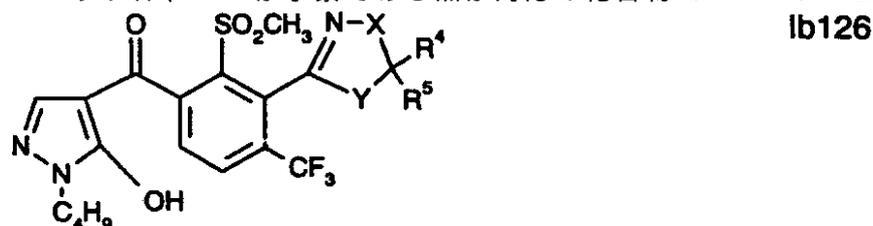
40

化合物 Ib125.1 - Ib125.126。R¹がメチルスルホニル、R²がトリフルオロメチル、R¹⁶がn-プロピル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

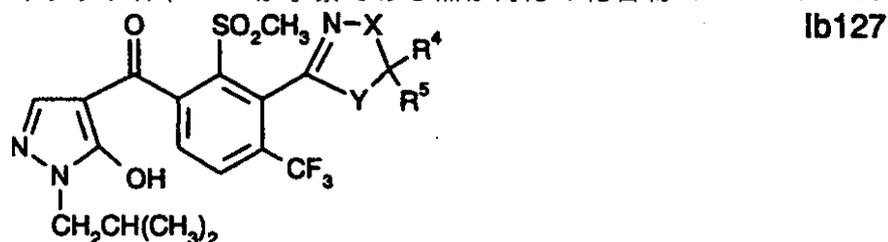
**Ib125**

50

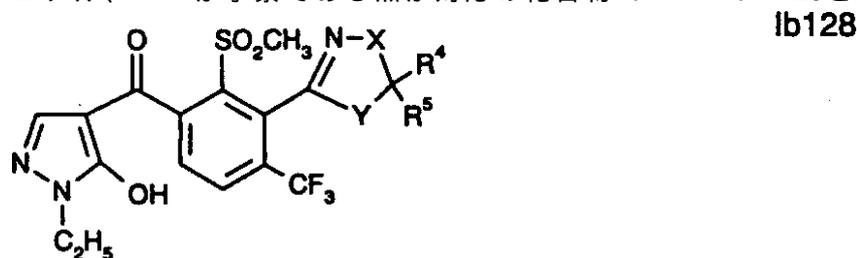
化合物Ib126.1 - Ib126.126。R¹がメチルスルホニル、R²がトリフルオロメチル、R¹⁶がn-ブチル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物Ib1.1 - Ib1.126と異なる。



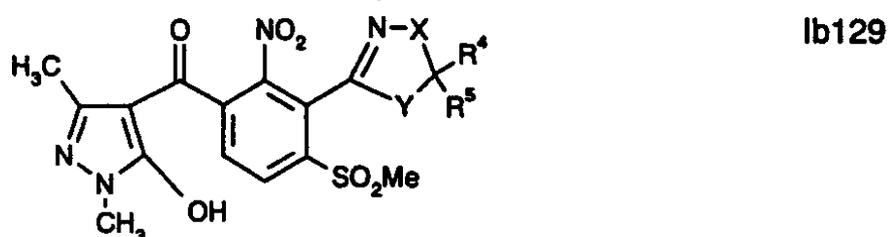
化合物Ib127.1 - Ib127.126。R¹がメチルスルホニル、R²がトリフルオロメチル、R¹⁶がイソブチル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物Ib1.1 - Ib1.126と異なる。



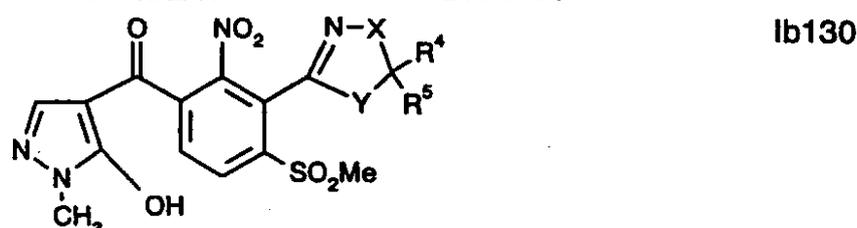
化合物Ib128.1 - Ib128.126。R¹がメチルスルホニル、R²がトリフルオロメチル、R¹⁶がエチル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物Ib1.1 - Ib1.126と異なる。



化合物Ib129.1 - Ib129.126。R¹がニトロ、R²がメチルスルホニルである点に対応の化合物Ib1.1 - Ib1.126と異なる。



化合物Ib130.1 - Ib130.126。R¹がニトロ、R²がメチルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物Ib1.1 - Ib1.126と異なる。



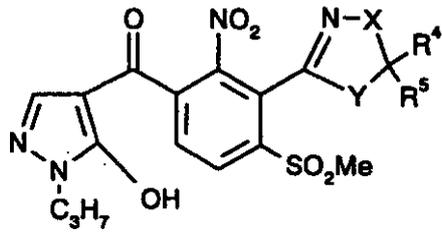
化合物Ib131.1 - Ib131.126。R¹がニトロ、R²がメチルスルホニル、R¹⁶がn-プロピル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

10

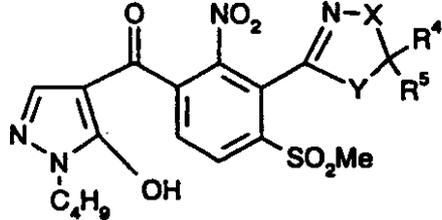
20

30

40

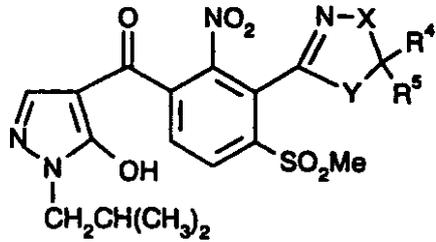
**Ib131**

化合物 Ib132.1 - Ib132.126。R¹がニトロ、R²がメチルスルホニル、R¹⁶がn - ブチル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

**Ib132**

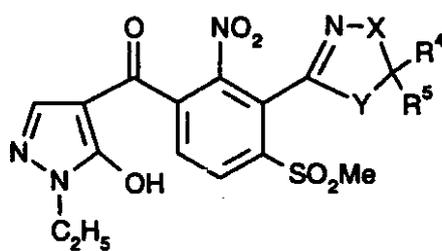
10

化合物 Ib133.1 - Ib133.126。R¹がニトロ、R²がメチルスルホニル、R¹⁶がイソブチル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

**Ib133**

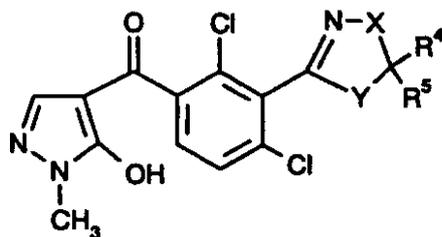
20

化合物 Ib134.1 - Ib134.126。R¹がニトロ、R²がメチルスルホニル、R¹⁶がエチル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

**Ib134**

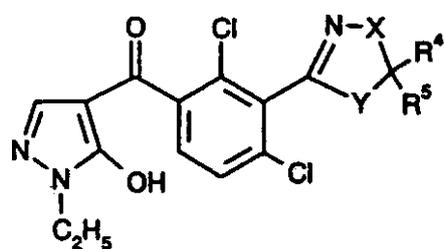
30

化合物 Ib135.1 - Ib135.126。R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

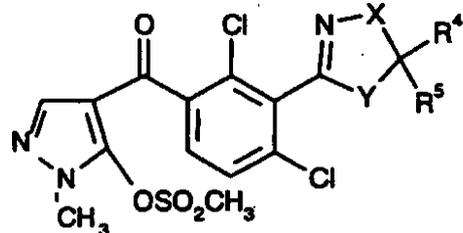
**Ib135**

40

化合物 Ib136.1 - Ib136.126。R¹⁶がエチル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

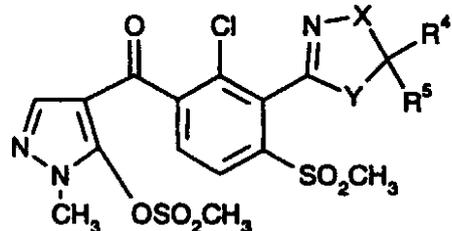
**Ib136**

化合物Ib137.1 - Ib137.126。Zがメチルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib137**

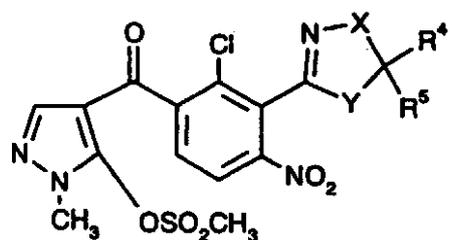
10

化合物Ib138.1 - Ib138.126。R²がメチルスルホニル、Zがメチルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib138**

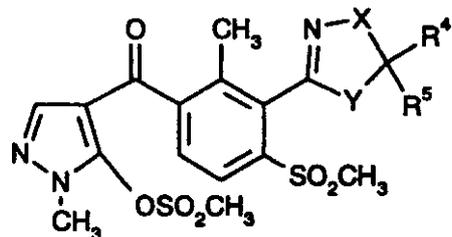
20

化合物Ib139.1 - Ib139.126。R²がニトロ、Zがメチルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib139**

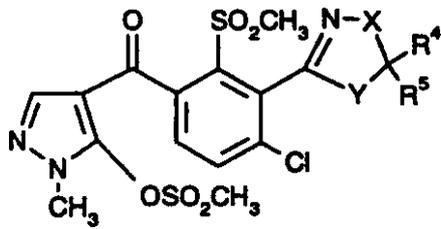
30

化合物Ib140.1 - Ib140.126。R¹がメチル、R²がメチルスルホニル、Zがメチルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

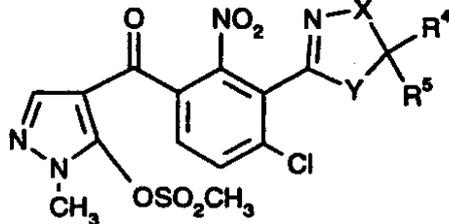
**Ib140**

40

化合物Ib141.1 - Ib141.126。R¹がメチルスルホニル、Zがメチルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

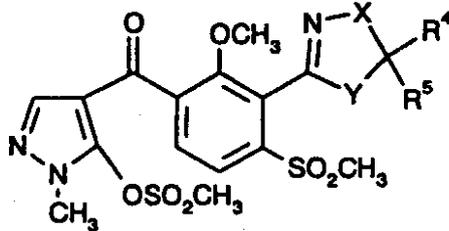
**Ib141**

化合物 Ib142.1 - Ib142.126。R¹がニトロ、Zがメチルスルホニル、R¹⁸が水素である点
が対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib142**

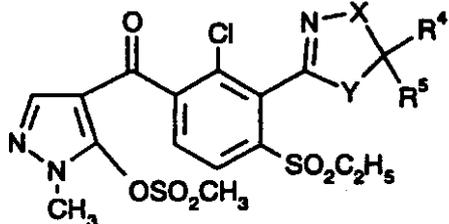
10

化合物 Ib143.1 - Ib143.126。R¹がメトキシ、R²とZがメチルスルホニル、R¹⁸が水素で
ある点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib143**

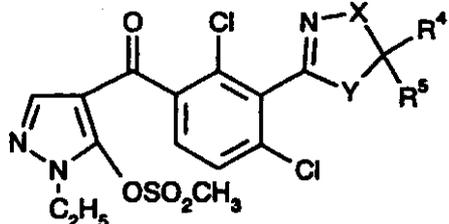
20

化合物 Ib144.1 - Ib144.126。R¹がエチルスルホニル、Zがメチルスルホニル、R¹⁸が水
素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

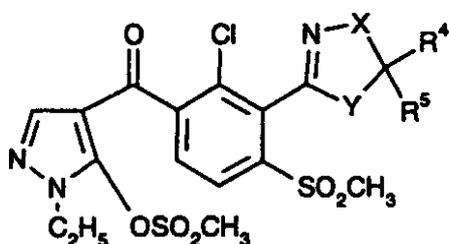
**Ib144**

30

化合物 Ib145.1 - Ib145.126。R¹⁶がエチル、Zがメチルスルホニル、R¹⁸が水素である点
が対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib145**

化合物 Ib146.1 - Ib146.126。R²がメチルスルホニル、R¹⁶がエチル、Zがメチルスルホ
ニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

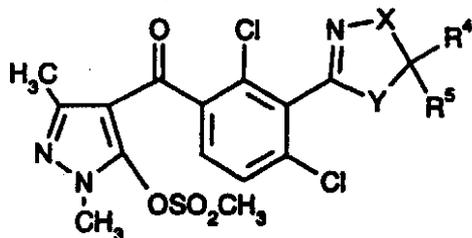
**Ib146**

40

化合物 Ib147.1 - Ib147.126。R²がニトロ、R¹⁶がエチル、Zがメチルスルホニル、R¹⁸
が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

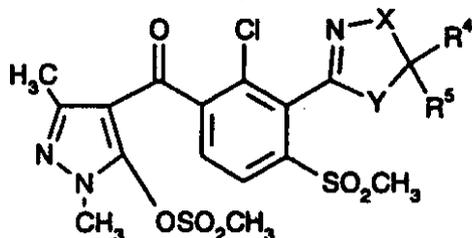
50

26と異なる。



Ib153

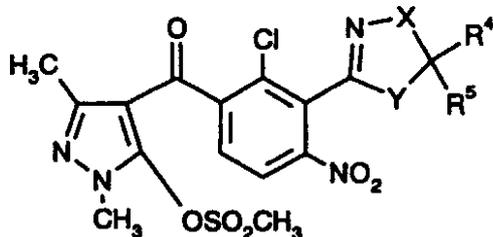
化合物 Ib154.1 - Ib154.126。R²とZがメチルスルホニルである点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。



Ib154

10

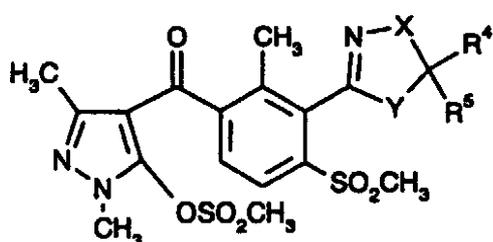
化合物 Ib155.1 - Ib155.126。R²がニトロ、Zがメチルスルホニルである点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。



Ib155

20

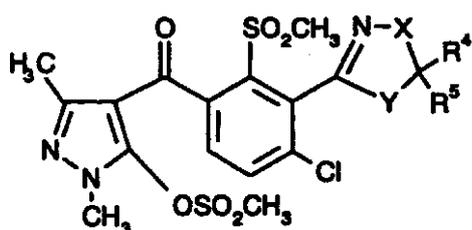
化合物 Ib156.1 - Ib156.126。R¹がメチル、R²とZがメチルスルホニルである点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。



Ib156

30

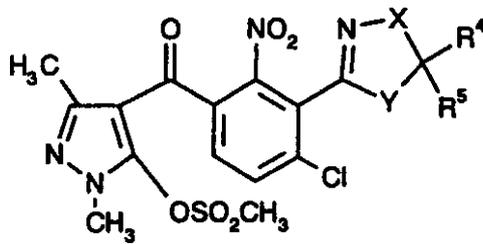
化合物 Ib157.1 - Ib157.126。R¹とZがメチルスルホニルである点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。



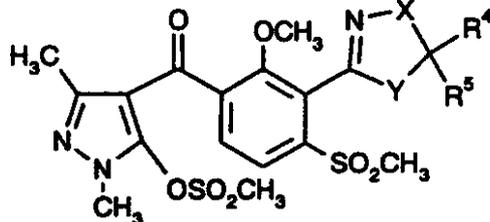
Ib157

40

化合物 Ib158.1 - Ib158.126。R¹がニトロ、Zがメチルスルホニルである点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

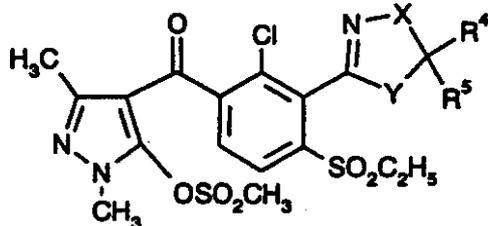
**Ib158**

化合物 Ib159.1 - Ib159.126。R¹がメトキシ、R²とZがメチルスルホニルである点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib159**

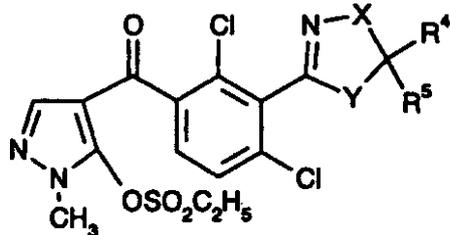
10

化合物 Ib160.1 - Ib160.126。R²がエチルスルホニル、Zがメチルスルホニルである点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib160**

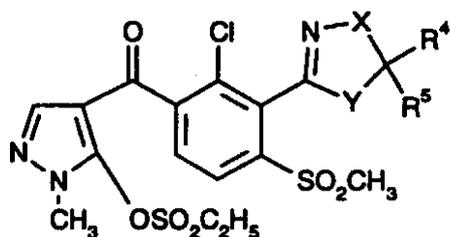
20

化合物 Ib161.1 - Ib161.126。Zがエチルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib161**

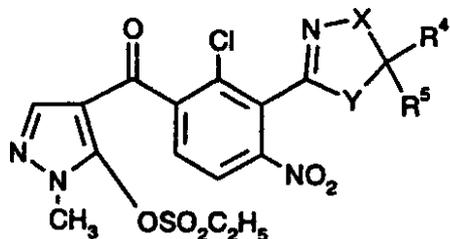
30

化合物 Ib162.1 - Ib162.126。R²がメチルスルホニル、Zがエチルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib162**

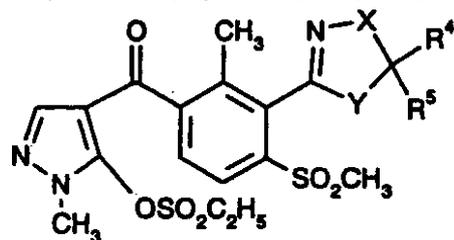
40

化合物 Ib163.1 - Ib163.126。R²がニトロ、Zがエチルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

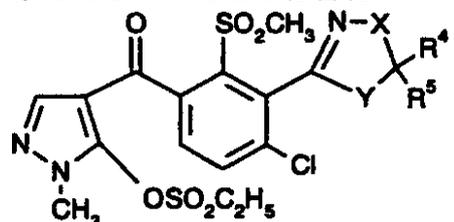
**Ib163**

50

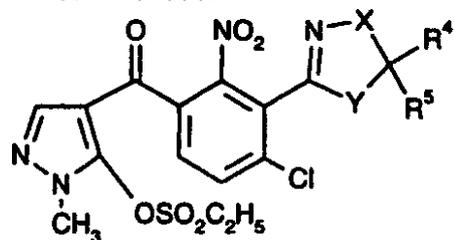
化合物 Ib164.1 - Ib164.126。R¹がメチル、R²がメチルスルホニル、Zがエチルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

**Ib164**

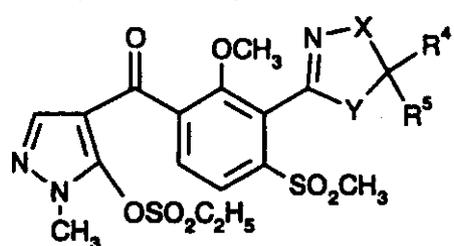
化合物 Ib165.1 - Ib165.126。R¹がメチルスルホニル、Zがエチルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

**Ib165**

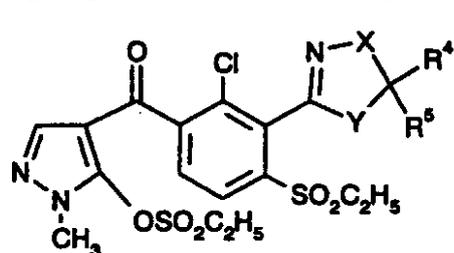
化合物 Ib166.1 - Ib166.126。R¹がニトロ、Zがエチルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

**Ib166**

化合物 Ib167.1 - Ib167.126。R¹がメトキシ、R²がメチルスルホニル、Zがエチルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

**Ib167**

化合物 Ib168.1 - Ib168.126。R²とZがエチルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

**Ib168**

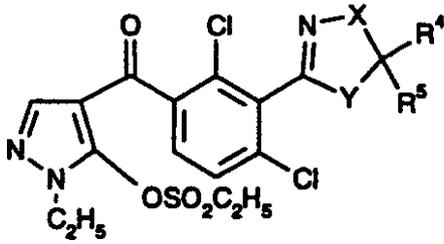
化合物 Ib169.1 - Ib169.126。R¹⁶がエチル、Zがエチルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

10

20

30

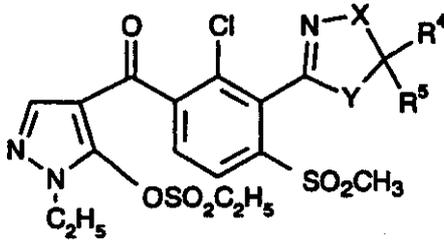
40

lb169

化合物 lb170.1 - lb170.126。R²がメチルスルホニル、R¹⁶がエチル、Zがエチルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 lb1.1 - lb1.126 と異なる。

lb170

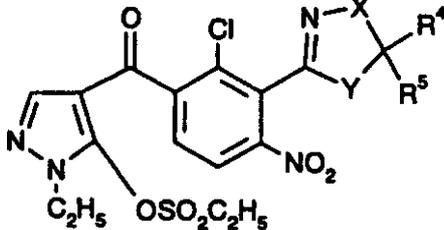
10



化合物 lb171.1 - lb171.126。R²がニトロ、R¹⁶がエチル、Zがエチルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 lb1.1 - lb1.126 と異なる。

lb171

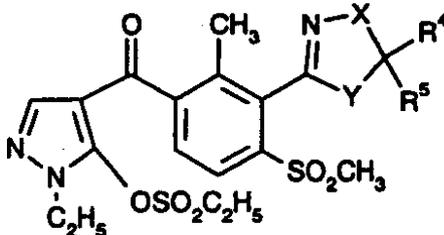
20



化合物 lb172.1 - lb172.126。R¹がメチル、R²がメチルスルホニル、R¹⁶がエチル、Zがエチルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 lb1.1 - lb1.126 と異なる。

lb172

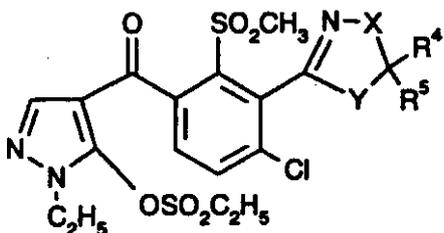
30



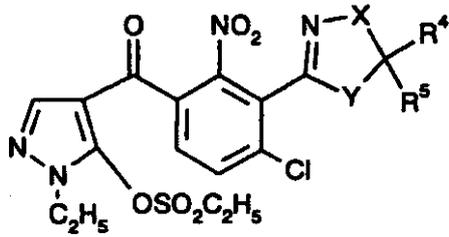
化合物 lb173.1 - lb173.126。R¹がメチルスルホニル、R¹⁶がエチル、Zがエチルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 lb1.1 - lb1.126 と異なる。

lb173

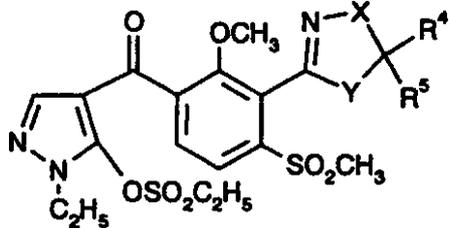
40



化合物 lb174.1 - lb174.126。R¹がニトロ、R¹⁶がエチル、Zがエチルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 lb1.1 - lb1.126 と異なる。

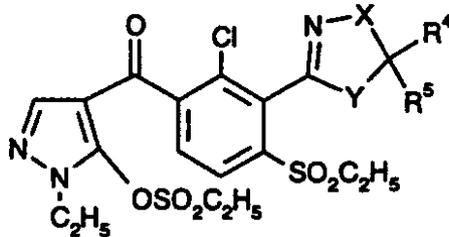
**Ib174**

化合物Ib175.1 - Ib175.126。R¹がメトキシ、R²がメチルスルホニル、R¹⁶がエチル、Zがエチルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib175**

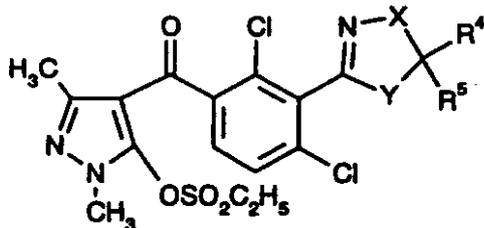
10

化合物Ib176.1 - Ib176.126。R²がエチルスルホニル、R¹⁶がエチル、Zがエチルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib176**

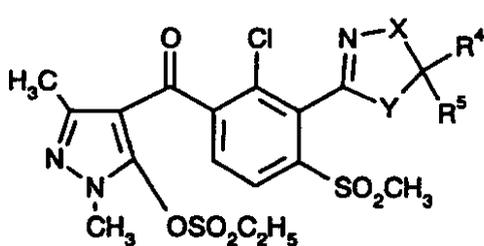
20

化合物Ib177.1 - Ib177.126。Zがエチルスルホニルである点に対応の化合物Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib177**

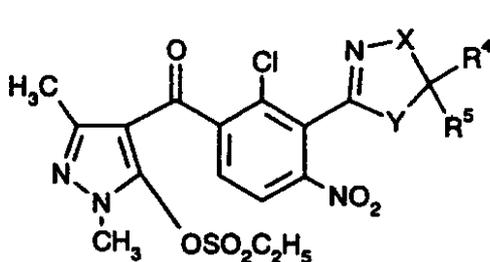
30

化合物Ib178.1 - Ib178.126。R²がメチルスルホニル、Zがエチルスルホニルである点に対応の化合物Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib178**

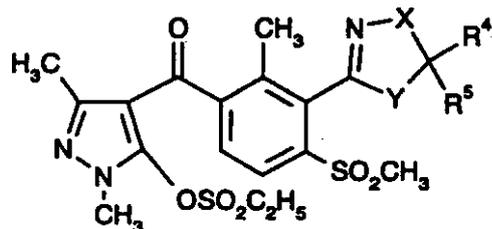
40

化合物Ib179.1 - Ib179.126。R²がニトロ、Zがエチルスルホニルである点に対応の化合物Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

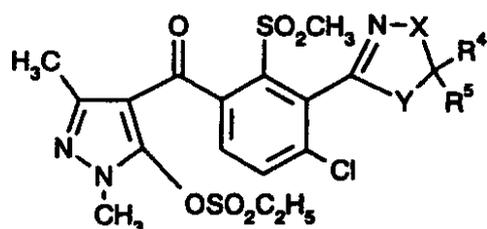
**Ib179**

50

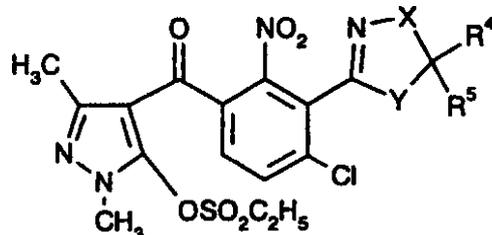
化合物 Ib180.1 - Ib180.126。R¹がメチル、R²がメチルスルホニル、Zがエチルスルホニルである点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib180**

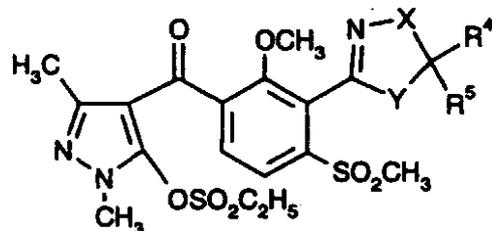
化合物 Ib181.1 - Ib181.126。R¹がメチルスルホニル、Zがエチルスルホニルである点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib181**

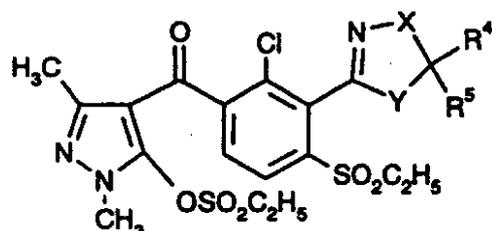
化合物 Ib182.1 - Ib182.126。R¹がニトロ、Zがエチルスルホニルである点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib182**

化合物 Ib183.1 - Ib183.126。R¹がメトキシ、R²がメチルスルホニル、Zがエチルスルホニルである点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib183**

化合物 Ib184.1 - Ib184.126。R²とZがエチルスルホニルである点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib184**

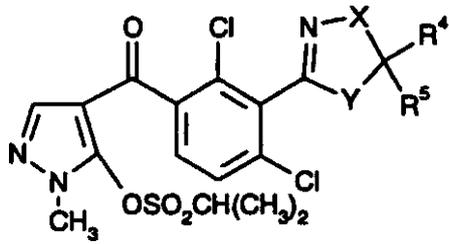
化合物 Ib185.1 - Ib185.126。Zがイソプロピルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

10

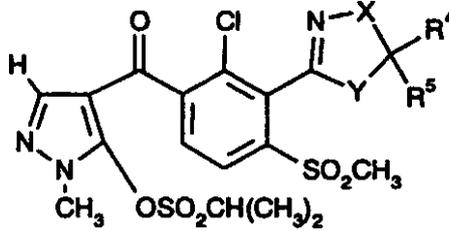
20

30

40

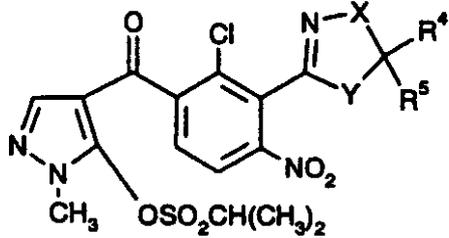
**Ib185**

化合物 Ib186.1 - Ib186.126。R²がメチルスルホニル、Zがイソプロピルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib186**

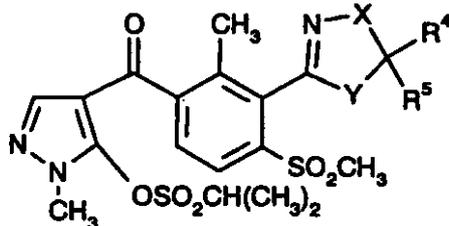
10

化合物 Ib187.1 - Ib187.126。R²がニトロ、Zがイソプロピルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib187**

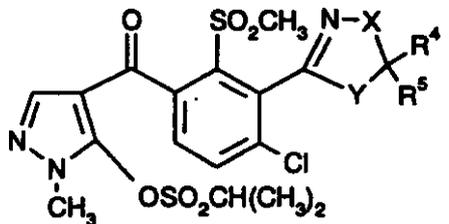
20

化合物 Ib188.1 - Ib188.126。R¹がメチル、R²がメチルスルホニル、Zがイソプロピルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib188**

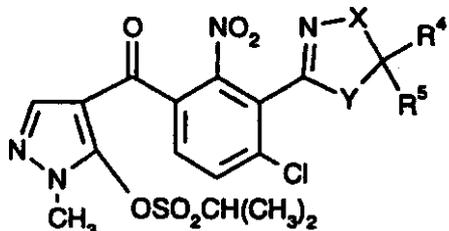
30

化合物 Ib189.1 - Ib189.126。R¹がメチルスルホニル、Zがイソプロピルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib189**

40

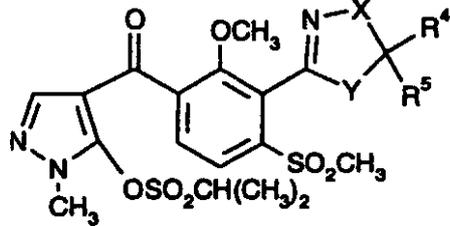
化合物 Ib190.1 - Ib190.126。R¹がニトロ、Zがイソプロピルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib190**

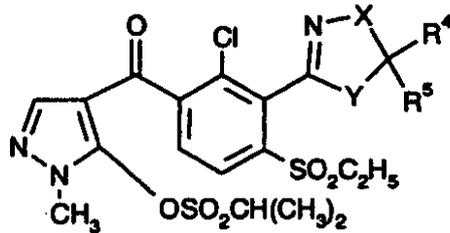
化合物 Ib191.1 - Ib191.126。R¹がメトキシ、R²がメチルスルホニル、Zがイソプロピル

50

スルホニル、 R^{18} が水素である点に対応の化合物Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

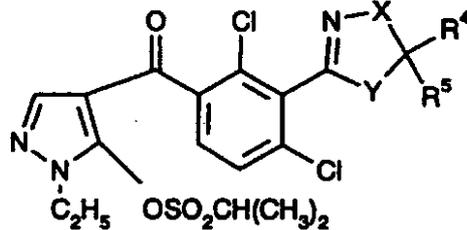
**Ib191**

化合物Ib192.1 - Ib192.126。 R^2 がエチルスルホニル、Zがイソプロピルスルホニル、 R^{18} が水素である点に対応の化合物Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib192**

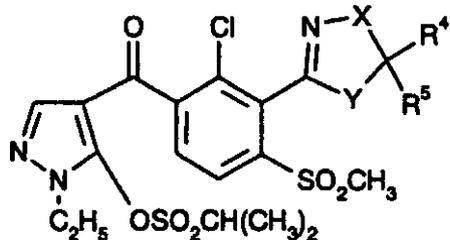
10

化合物Ib193.1 - Ib193.126。 R^{16} がエチル、Zがイソプロピルスルホニル、 R^{18} が水素である点に対応の化合物Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib193**

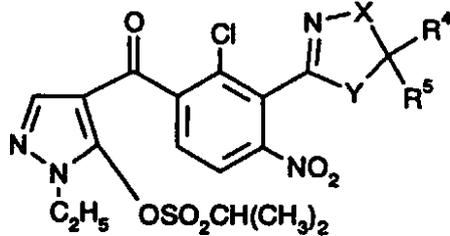
20

化合物Ib194.1 - Ib194.126。 R^2 がメチルスルホニル、 R^{16} がエチル、Zがイソプロピルスルホニル、 R^{18} が水素である点に対応の化合物Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib194**

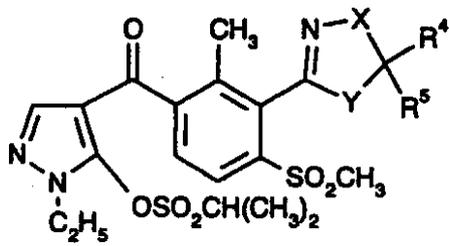
30

化合物Ib195.1 - Ib195.126。 R^2 がニトロ、 R^{16} がエチル、Zがイソプロピルスルホニル、 R^{18} が水素である点に対応の化合物Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

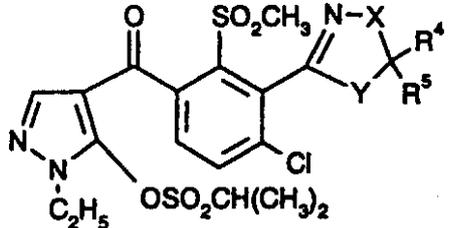
**Ib195**

40

化合物Ib196.1 - Ib196.126。 R^1 がメチル、 R^2 がメチルスルホニル、 R^{16} がエチル、Zがイソプロピルスルホニル、 R^{18} が水素である点に対応の化合物Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

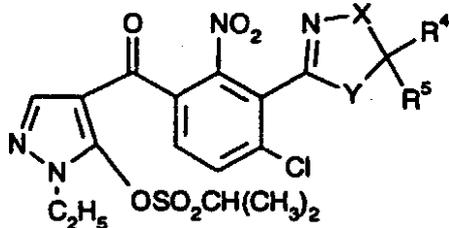
**Ib196**

化合物 Ib197.1 - Ib197.126。R¹がメチルスルホニル、R¹⁶がエチル、Zがイソプロピルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib197**

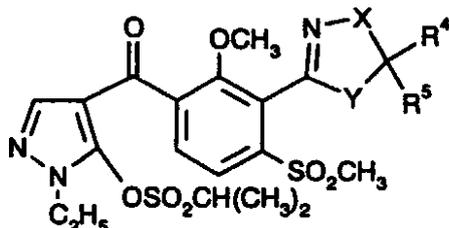
10

化合物 Ib198.1 - Ib198.126。R¹がニトロ、R¹⁶がエチル、Zがイソプロピルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib198**

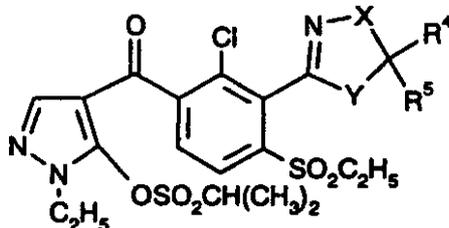
20

化合物 Ib199.1 - Ib199.126。R¹がメトキシ、R²がメチルスルホニル、R¹⁶がエチル、Zがイソプロピルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib199**

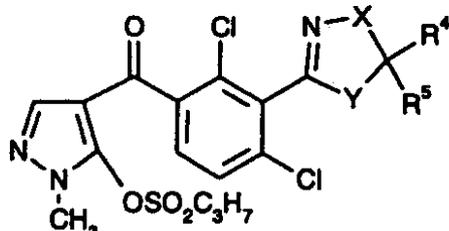
30

化合物 Ib200.1 - Ib200.126。R²がエチルスルホニル、R¹⁶がエチル、Zがイソプロピルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib200**

40

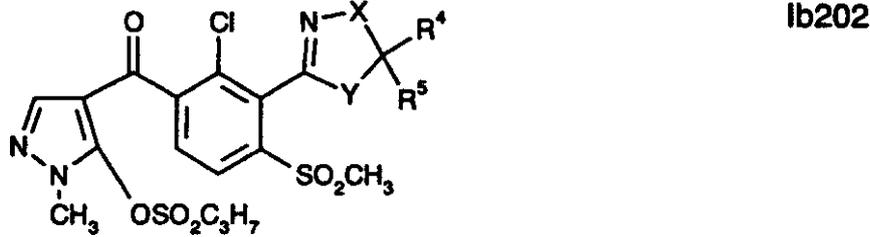
化合物 Ib201.1 - Ib201.126。Zがn-プロピルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib201**

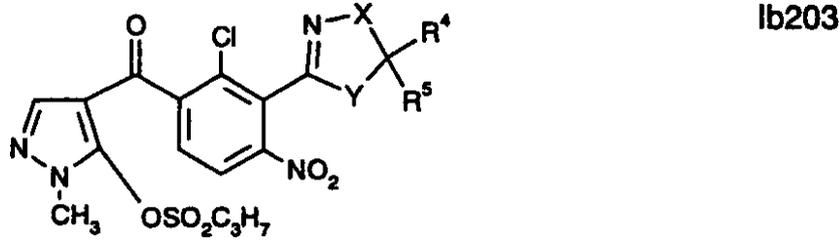
化合物 Ib202.1 - Ib202.126。R²がメチルスルホニル、Zがn-プロピルスルホニル、R¹

50

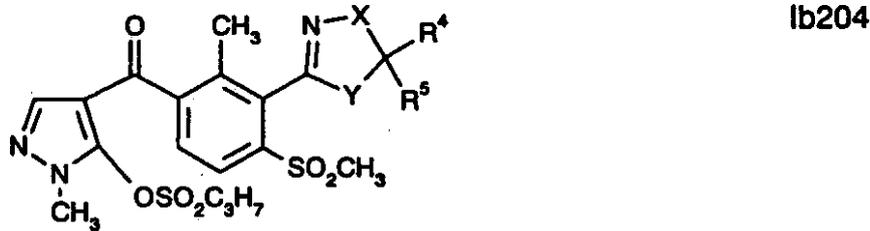
⁸が水素である点に対応の化合物Ib1.1 - Ib1.126と異なる。



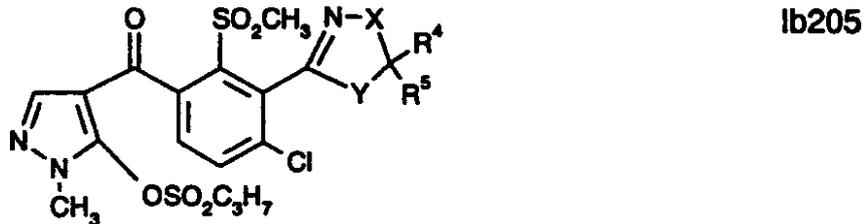
化合物Ib203.1 - Ib203.126。R²がニトロ、Zがn-プロピルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物Ib1.1 - Ib1.126と異なる。



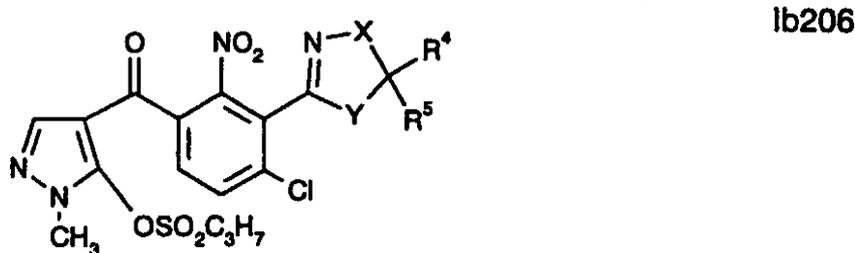
化合物Ib204.1 - Ib204.126。R¹がメチル、R²がメチルスルホニル、Zがn-プロピルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物Ib1.1 - Ib1.126と異なる。



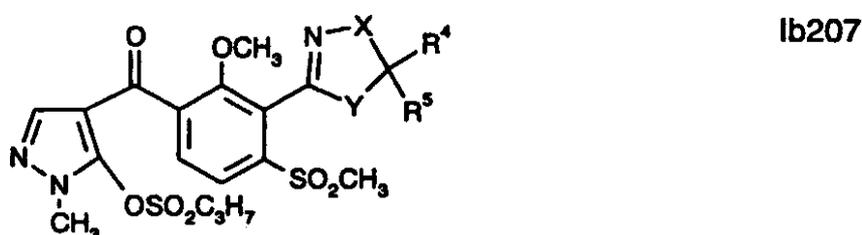
化合物Ib205.1 - Ib205.126。R¹がメチルスルホニル、Zがn-プロピルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物Ib1.1 - Ib1.126と異なる。



化合物Ib206.1 - Ib206.126。R¹がニトロ、Zがn-プロピルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物Ib1.1 - Ib1.126と異なる。



化合物Ib207.1 - Ib207.126。R¹がメトキシ、R²がメチルスルホニル、Zがn-プロピルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物Ib1.1 - Ib1.126と異なる。



10

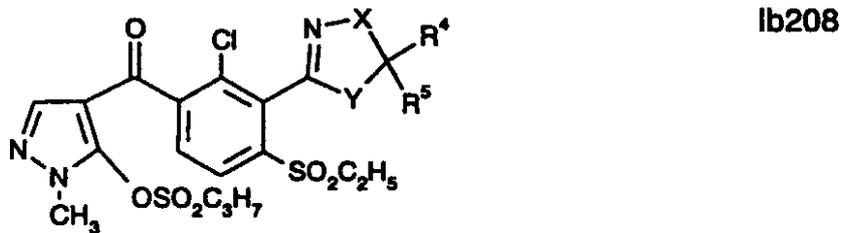
20

30

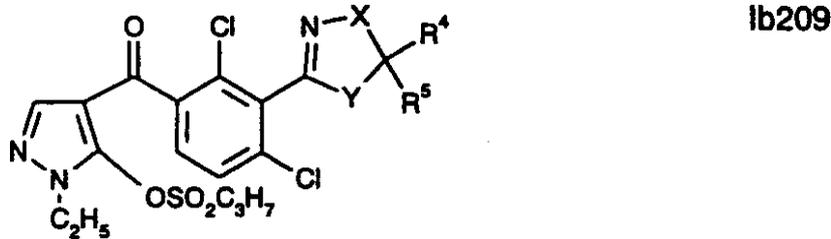
40

50

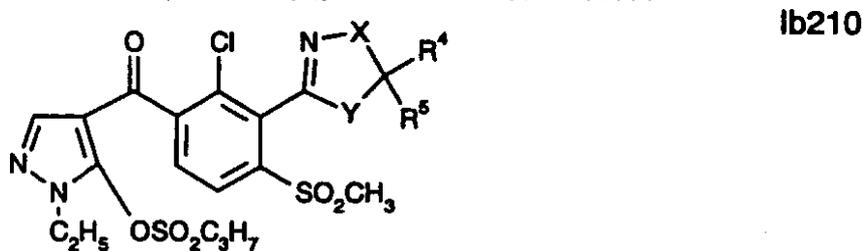
化合物 Ib208.1 - Ib208.126。R²がエチルスルホニル、Zがn - プロピルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。



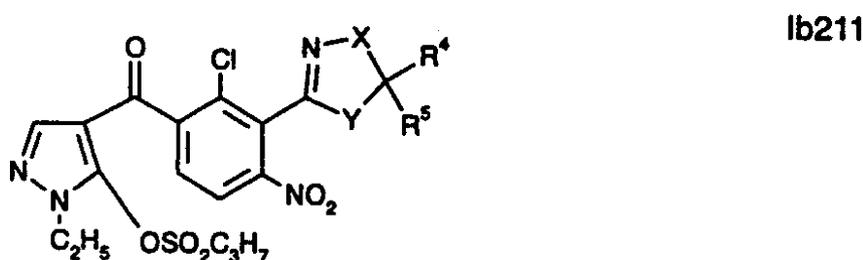
化合物 Ib209.1 - Ib209.126。R¹⁶がエチル、Zがn - プロピルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。



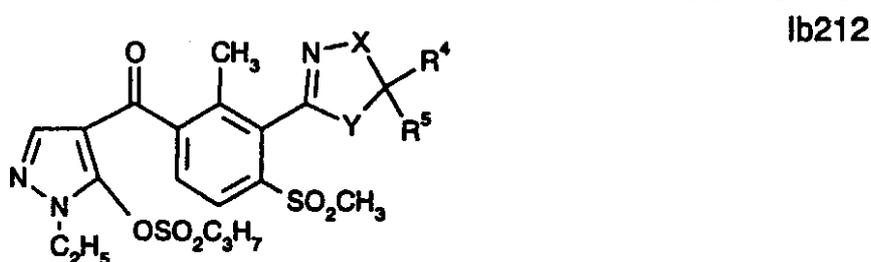
化合物 Ib210.1 - Ib210.126。R²がメチルスルホニル、R¹⁶がエチル、Zがn - プロピルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。



化合物 Ib211.1 - Ib211.126。R²がニトロ、R¹⁶がエチル、Zがn - プロピルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。



化合物 Ib212.1 - Ib212.126。R¹がメチル、R²がメチルスルホニル、R¹⁶がエチル、Zがn - プロピルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。



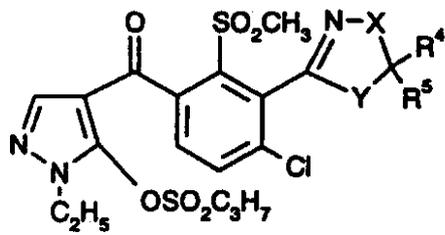
化合物 Ib213.1 - Ib213.126。R¹がメチルスルホニル、R¹⁶がエチル、Zがn - プロピルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

10

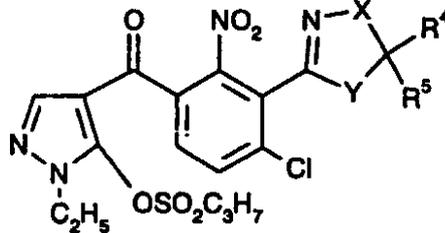
20

30

40

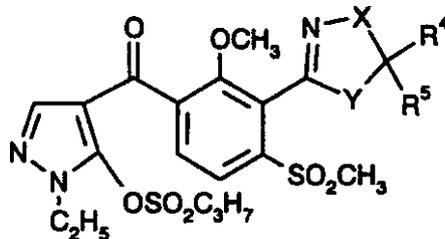
**Ib213**

化合物 Ib214.1 - Ib214.126。R¹がニトロ、R¹⁶がエチル、Zがn - プロピルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

**Ib214**

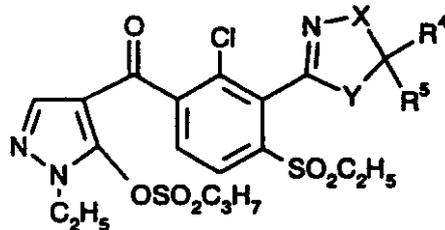
10

化合物 Ib215.1 - Ib215.126。R¹がメトキシ、R²がメチルスルホニル、R¹⁶がエチル、Zがn - プロピルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

**Ib215**

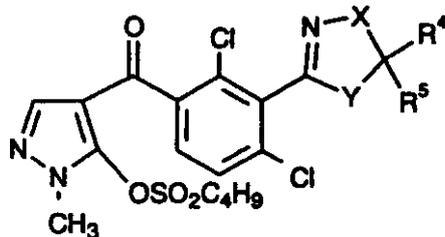
20

化合物 Ib216.1 - Ib216.126。R²がエチルスルホニル、R¹⁶がエチル、Zがn - プロピルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

**Ib216**

30

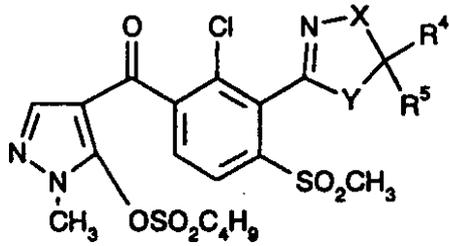
化合物 Ib217.1 - Ib217.126。Zがn - ブチルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

**Ib217**

40

化合物 Ib218.1 - Ib218.126。R²がメチルスルホニル、Zがn - ブチルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

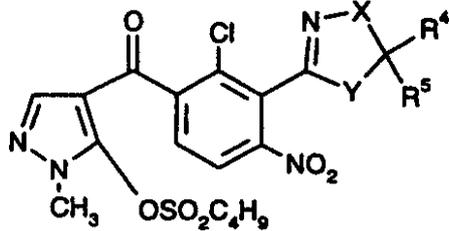
Ib218



化合物Ib219.1 - Ib219.126。R²がニトロ、Zがn - ブチルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

Ib219

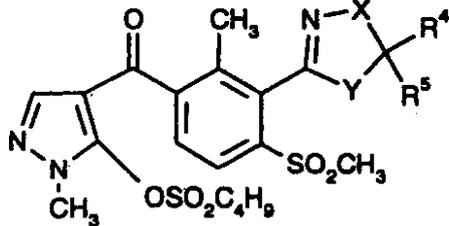
10



化合物Ib220.1 - Ib220.126。R¹がメチル、R²がメチルスルホニル、Zがn - ブチルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

Ib220

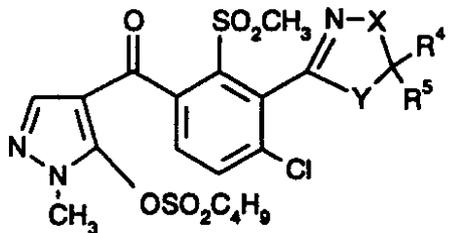
20



化合物Ib221.1 - Ib221.126。R¹がメチルスルホニル、Zがn - ブチルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

Ib221

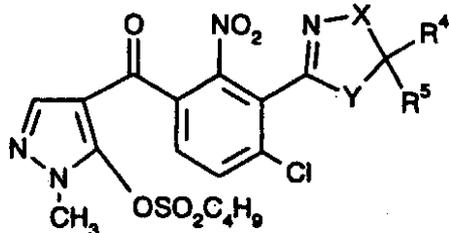
30



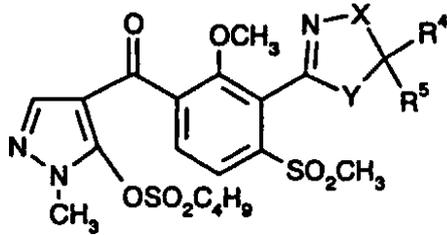
化合物Ib222.1 - Ib222.126。R¹がニトロ、Zがn - ブチルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

Ib222

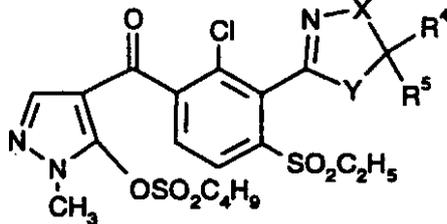
40



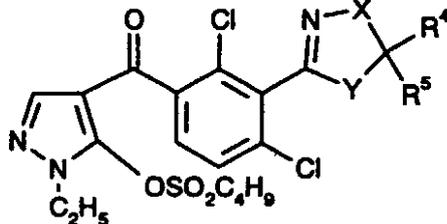
化合物Ib223.1 - Ib223.126。R¹がメトキシ、R²がメチルスルホニル、Zがn - ブチルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

lb223

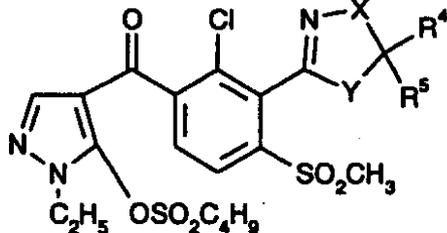
化合物 lb224.1 - lb224.126。R²がエチルスルホニル、Zがn - ブチルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 lb1.1 - lb1.126と異なる。

lb224

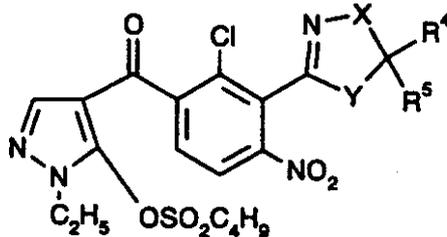
化合物 lb225.1 - lb225.126。R¹⁶がエチル、Zがn - ブチルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 lb1.1 - lb1.126と異なる。

lb225

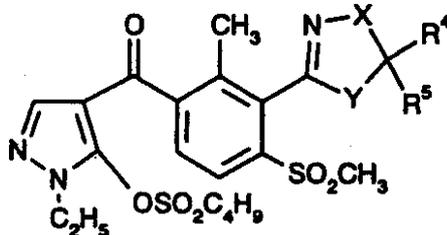
化合物 lb226.1 - lb226.126。R²がメチルスルホニル、R¹⁶がエチル、Zがn - ブチルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 lb1.1 - lb1.126と異なる。

lb226

化合物 lb227.1 - lb227.126。R²がニトロ、R¹⁶がエチル、Zがn - ブチルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 lb1.1 - lb1.126と異なる。

lb227

化合物 lb228.1 - lb228.126。R¹がメチル、R²がメチルスルホニル、R¹⁶がエチル、Zがn - ブチルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 lb1.1 - lb1.126と異なる。

lb228

10

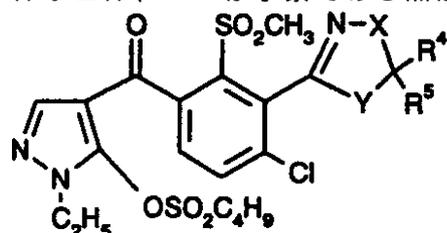
20

30

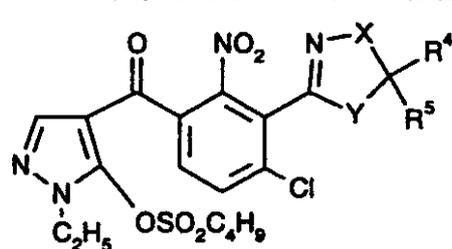
40

50

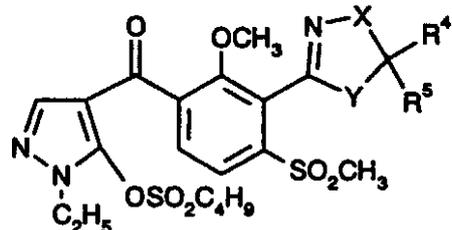
化合物 Ib229.1 - Ib229.126。R¹がメチルスルホニル、R¹⁶がエチル、Zがn-ブチルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。



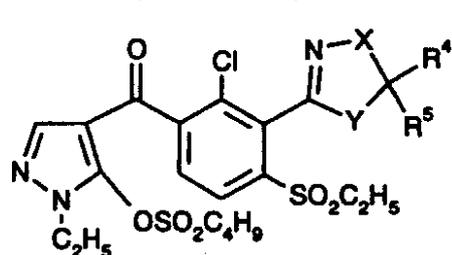
化合物 Ib230.1 - Ib230.126。R¹がニトロ、R¹⁶がエチル、Zがn-ブチルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。



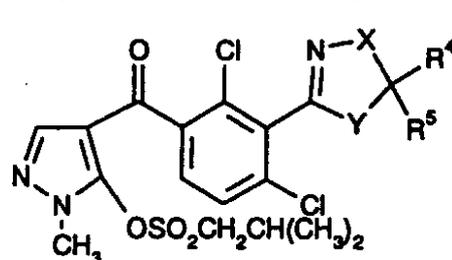
化合物 Ib231.1 - Ib231.126。R¹がメトキシ、R²がメチルスルホニル、R¹⁶がエチル、Zがn-ブチルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。



化合物 Ib232.1 - Ib232.126。R²がエチルスルホニル、R¹⁶がエチル、Zがn-ブチルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。



化合物 Ib233.1 - Ib233.126。Zがイソブチルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。



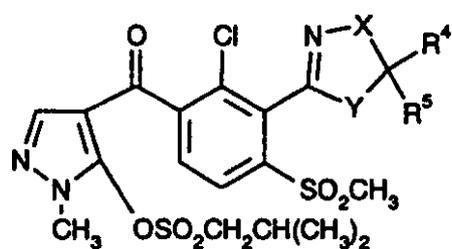
化合物 Ib234.1 - Ib234.126。R²がメチルスルホニル、Zがイソブチルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

10

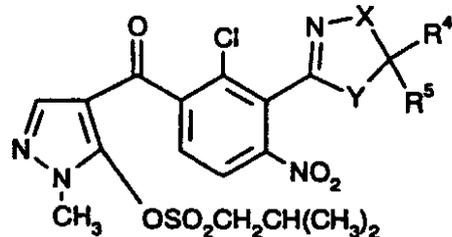
20

30

40

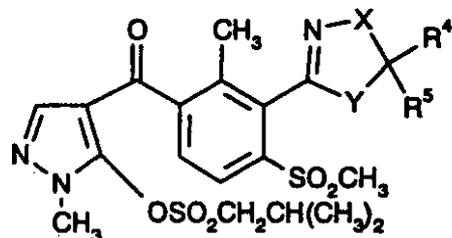
**Ib234**

化合物 Ib235.1 - Ib235.126。R²がニトロ、Zがイソブチルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib235**

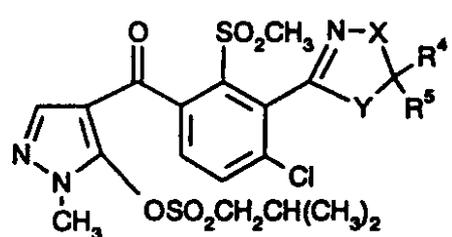
10

化合物 Ib236.1 - Ib236.126。R¹がメチル、R²がメチルスルホニル、Zがイソブチルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib236**

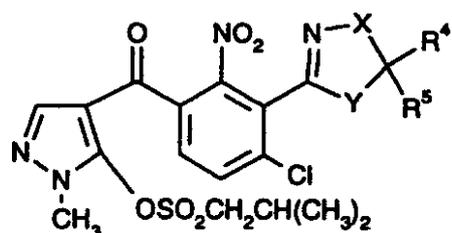
20

化合物 Ib237.1 - Ib237.126。R¹がメチルスルホニル、Zがイソブチルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib237**

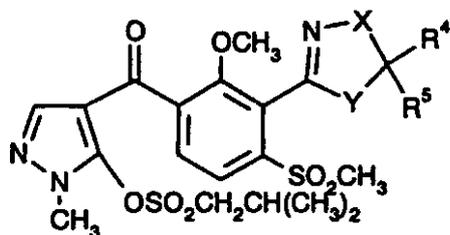
30

化合物 Ib238.1 - Ib238.126。R¹がニトロ、Zがイソブチルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

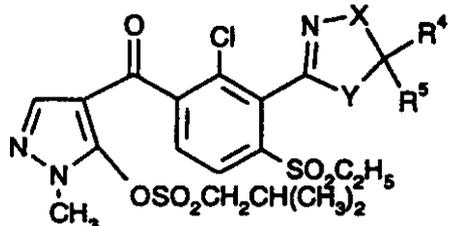
**Ib238**

40

化合物 Ib239.1 - Ib239.126。R¹がメトキシ、R²がメチルスルホニル、Zがイソブチルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

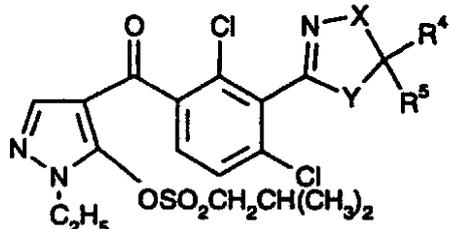
**Ib239**

化合物 Ib240.1 - Ib240.126。R²がエチルスルホニル、Zがイソブチルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

**Ib240**

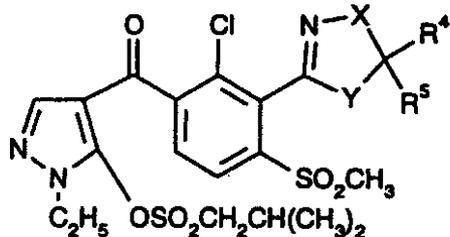
10

化合物 Ib241.1 - Ib241.126。R¹⁶がエチル、Zがイソブチルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

**Ib241**

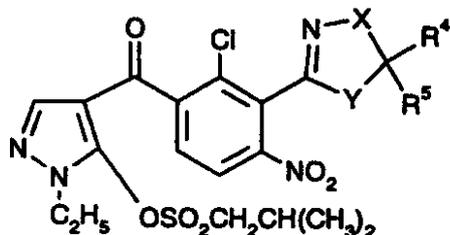
20

化合物 Ib242.1 - Ib242.126。R²がメチルスルホニル、R¹⁶がエチル、Zがイソブチルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

**Ib242**

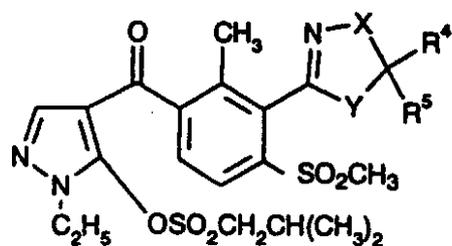
30

化合物 Ib243.1 - Ib243.126。R²がニトロ、R¹⁶がエチル、Zがイソブチルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

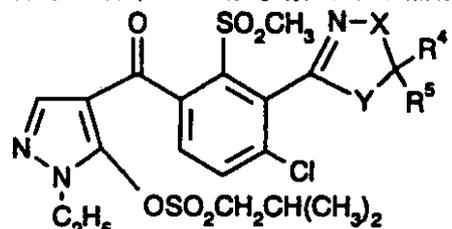
**Ib243**

40

化合物 Ib244.1 - Ib244.126。R¹がメチル、R²がメチルスルホニル、R¹⁶がエチル、Zがイソブチルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126 と異なる。

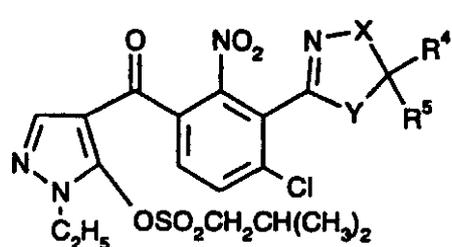
**Ib244**

化合物 Ib245.1 - Ib245.126。R¹がメチルスルホニル、R¹⁶がエチル、Zがイソブチルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib245**

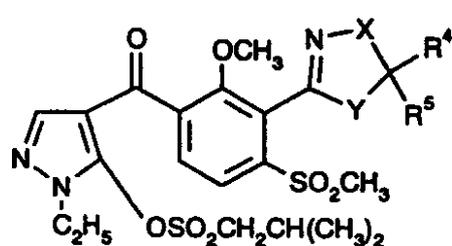
10

化合物 Ib246.1 - Ib246.126。R¹がニトロ、R¹⁶がエチル、Zがイソブチルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib246**

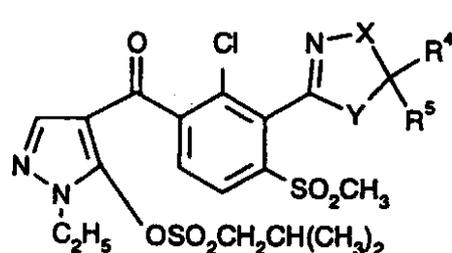
20

化合物 Ib247.1 - Ib247.126。R¹がメトキシ、R²がメチルスルホニル、R¹⁶がエチル、Zがイソブチルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib247**

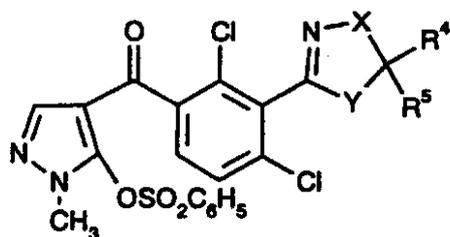
30

化合物 Ib248.1 - Ib248.126。R²がメチルスルホニル、R¹⁶がエチル、Zがイソブチルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

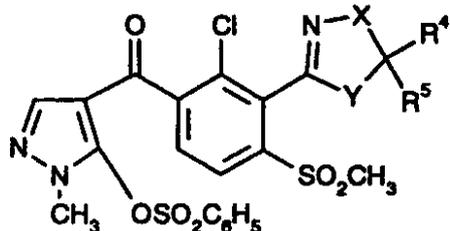
**Ib248**

40

化合物 Ib249.1 - Ib249.126。Zがフェニルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

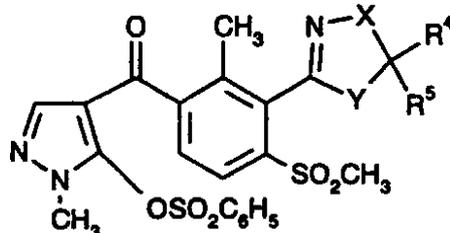
**Ib249**

化合物 Ib250.1 - Ib250.126。R²がメチルスルホニル、Zがフェニルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib250**

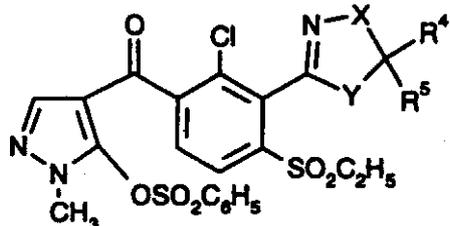
10

化合物 Ib251.1 - Ib251.126。R¹がメチル、R²がメチルスルホニル、Zがフェニルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib251**

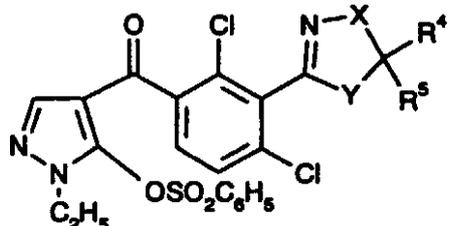
20

化合物 Ib252.1 - Ib252.126。R²がエチルスルホニル、Zがフェニルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib252**

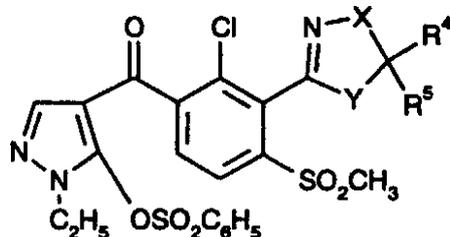
30

化合物 Ib253.1 - Ib253.126。R¹⁶がエチル、Zがフェニルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib253**

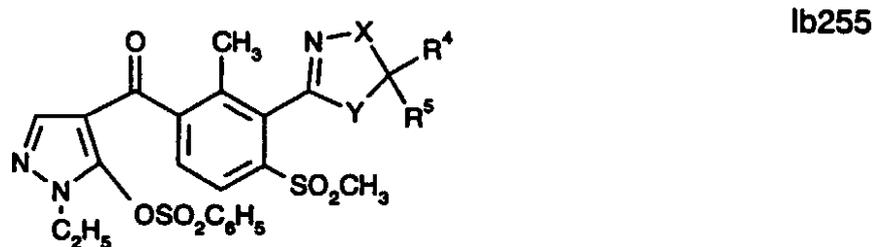
40

化合物 Ib254.1 - Ib254.126。R²がメチルスルホニル、R¹⁶がエチル、Zがフェニルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

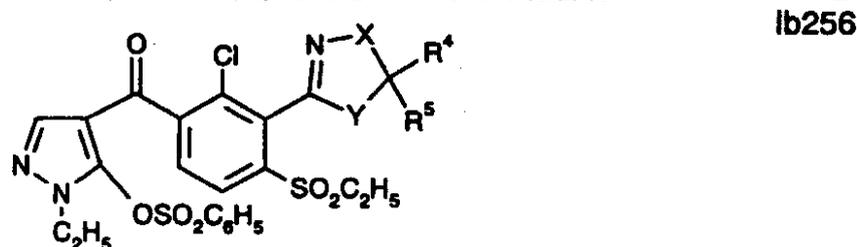
**Ib254**

50

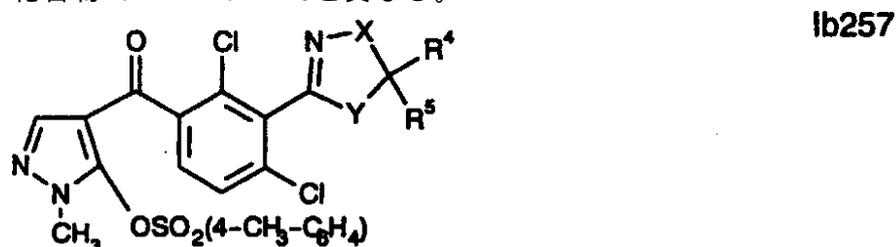
化合物 Ib255.1 - Ib255.126。R¹がメチル、R²がメチルスルホニル、R¹⁶がエチル、Zがフェニルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。



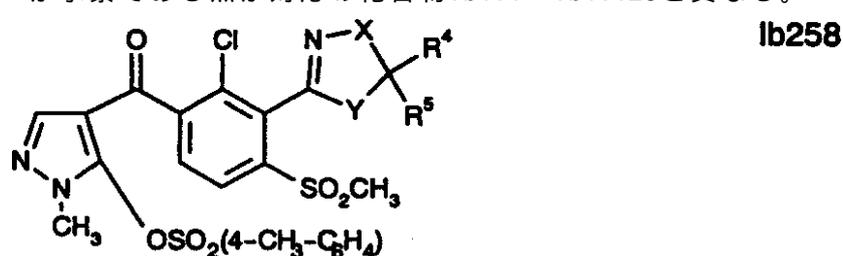
化合物 Ib256.1 - Ib256.126。R²がエチルスルホニル、R¹⁶がエチル、Zがフェニルスルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。



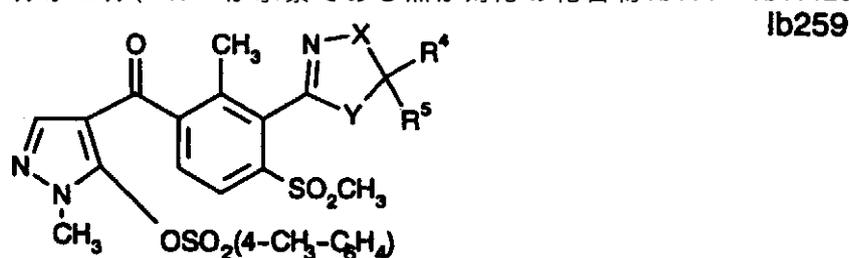
化合物 Ib257.1 - Ib257.126。Zがp-トルエンシルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。



化合物 Ib258.1 - Ib258.126。R²がメチルスルホニル、Zがp-トルエンシルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。



化合物 Ib259.1 - Ib259.126。R¹がメチル、R²がメチルスルホニル、Zがp-トルエンシルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。



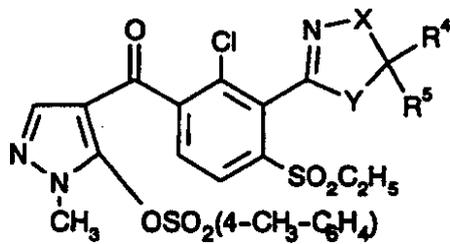
化合物 Ib260.1 - Ib260.126。R²がエチルスルホニル、Zがp-トルエンシルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

10

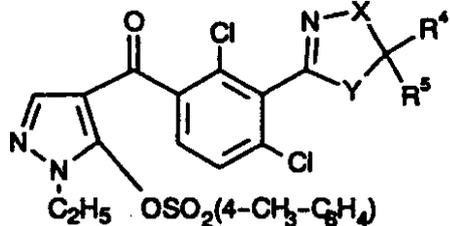
20

30

40

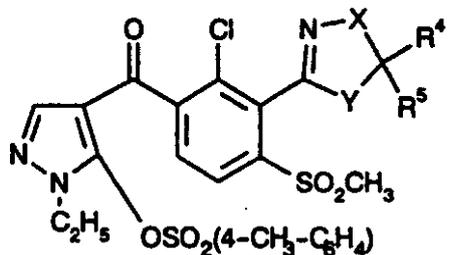
**Ib260**

化合物 Ib261.1 - Ib261.126。R¹⁶がエチル、Zがp - トルエンシルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib261**

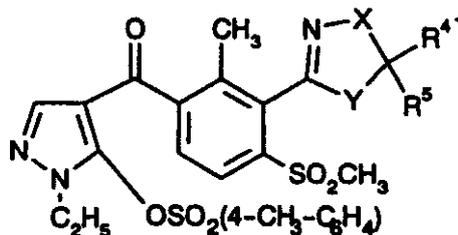
10

化合物 Ib262.1 - Ib262.126。R²がメチルスルホニル、R¹⁶がエチル、Zがp - トルエンシルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib262**

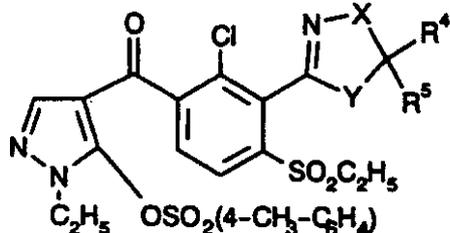
20

化合物 Ib263.1 - Ib263.126。R¹がメチル、R²がメチルスルホニル、R¹⁶がエチル、Zがp - トルエンシルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib263**

30

化合物 Ib264.1 - Ib264.126。R²がエチルスルホニル、R¹⁶がエチル、Zがp - トルエンシルホニル、R¹⁸が水素である点に対応の化合物 Ib1.1 - Ib1.126と異なる。

**Ib264**

40

更に極めて好ましくは、式 I で表され、式中

R¹が、ハロゲン、C₁ - C₆アルキル、C₁ - C₆アルキルチオまたはC₁ - C₆アルキルスルホニル、特に塩素、メチル、メチルチオまたはメチルスルホニルを、

R²が、水素、ニトロ、ハロゲン、C₁ - C₆アルキルチオ、C₁ - C₆アルキルスルフィニルまたはC₁ - C₆アルキルスルホニル、特に水素、ニトロ、塩素、メチルチオ、メチルスルフィニル、メチルスルホニル、エチルスルホニルまたはプロピルスルホニルを、

R³が水素を、

R⁴、R⁵が水素、ハロゲン、C₁ - C₄アルキル、C₁ - C₄ハロアルキル、C₁ - C₄アルコ

50

キシ、 $C_1 - C_4$ アルキルチオまたは $CO R^6$ 、特に水素、弗素、メチル、エチル、プロピル、トリフルオロメチル、クロロメチル、1-クロロエタ-1-イル、メトキシ、エトキシ、エチルチオ、またはエトキシカルボニルを意味するか、或いは

R^4 および R^5 が共同で、 $C_1 - C_4$ アルキルによりモノ置換ないしポリ置換されてもよく、および/または酸素により、または $C_1 - C_4$ アルキル置換されていてもよい窒素により中断されてもよい $C_2 - C_6$ アルカンジイル鎖を形成し、

R^6 が $C_1 - C_4$ アルコキシ、特にエチルを、

XがOまたは $CR^{10}R^{11}$ を、

YがO、Sまたは $CR^{13}R^{14}$ を、

R^{10} 、 R^{11} 、 R^{13} 、 R^{14} が水素、 $C_1 - C_4$ アルキル、 $C_1 - C_4$ ハロアルキル、特に水素、メチルまたはクロロメチルを意味するか、或いは

R^5 および R^{13} が共同で、 $C_1 - C_4$ アルキルによりモノ置換ないしポリ置換されてもよく、および/または酸素により、または $C_1 - C_4$ アルキル置換されていてもよい窒素により中断されてもよい $C_2 - C_6$ アルカンジイル鎖、特に1,3-プロパンジイルを形成し、

R^{16} が $C_1 - C_6$ アルキル、特にメチル、エチル、プロピル、2-メチルプロピルまたはブチルを、

ZがHまたは SO_2R^{17} を、

R^{17} が $C_1 - C_4$ アルキル、特にメチル、エチル、プロピル、2-メチルプロピルを意味するものうち、

4-[2-クロロ-3-(4,5-ジヒドロイソキサゾール-3-イル)-4-メチルスルホニルベンゾイル]-1-エチル-5-ヒドロキシ-1H-ピラゾール、4-[2-クロロ-3-(4,5-ジヒドロイソキサゾール-3-イル)-4-メチルスルホニルベンゾイル]-1,3-ジメチル-5-ヒドロキシ-1H-ピラゾール、4-[2-クロロ-3-(5-シアノ-4,5-ジヒドロイソキサゾール-3-イル)-4-メチルスルホニルベンゾイル]-1,3-ジメチル-5-ヒドロキシ-1H-ピラゾールおよび4-[2-クロロ-3-(4,5-ジヒドロチアゾール-2-イル)-4-メチルスルホニルベンゾイル]-1,3-ジメチル-5-ヒドロキシ-1H-ピラゾール以外の3-ヘテロシクリル置換ベンゾイル誘導体、またはその農業上使用可能な塩、特にアルカリ金属塩およびアンモニウム塩が挙げられる。

式Iの3-ヘテロシクリル置換ベンゾイル誘導体は、例えば以下の工程による、種々の経路により得られる。

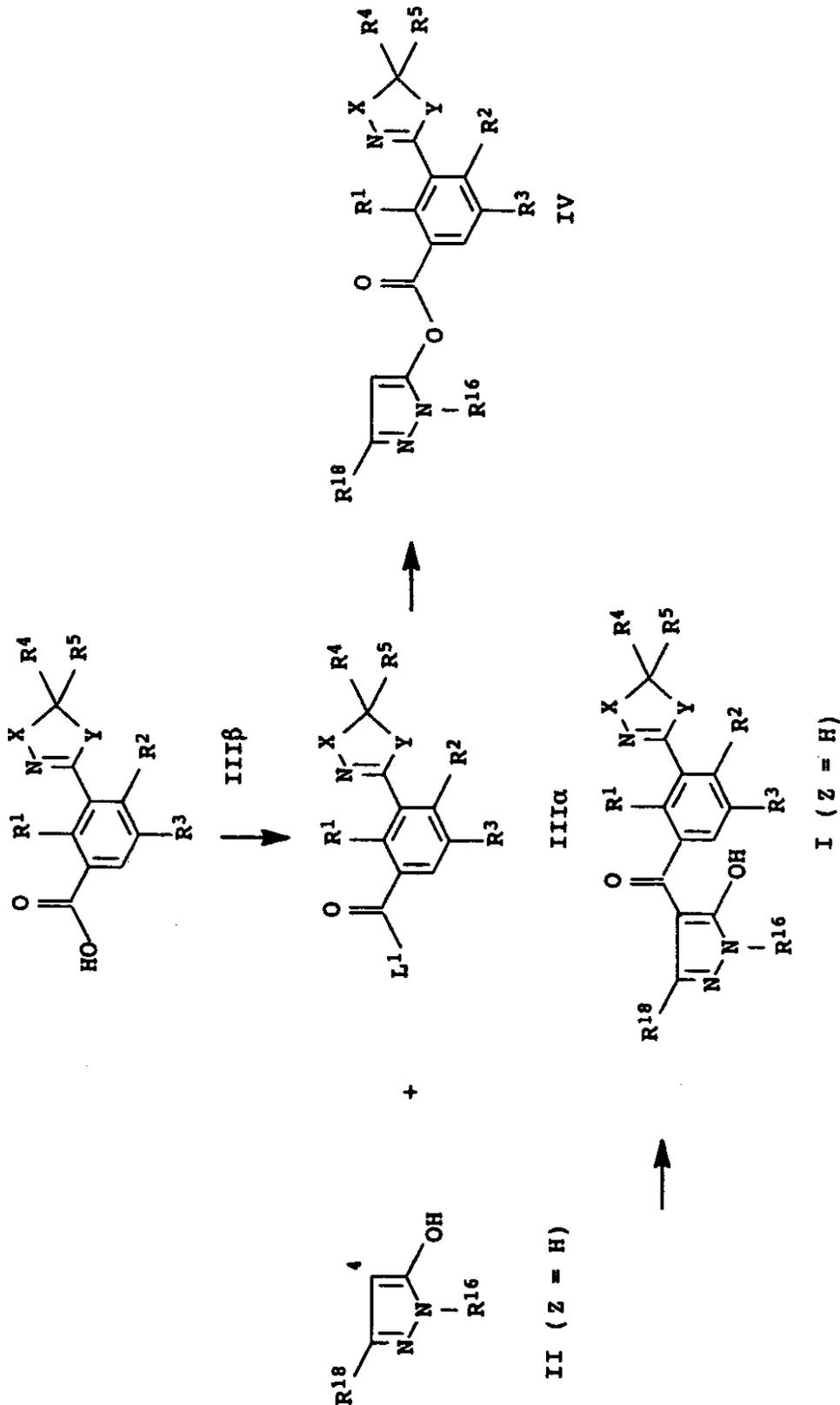
工程A:

式IIのピラゾール($Z = H$)と、活性化安息香酸III または安息香酸III (現場で活性化されるのが好ましい)の反応により、アシル化生成物が得られ、次いでこれを転位反応に付す。

10

20

30



10

20

30

40

式中 L¹ は求核的に着脱可能な脱離基、例えばハロゲン、例えば臭素、塩素、ヘテロアリアル、例えばイミダゾリル、ピリジル、カルボキシラート、例えばアセタート、トリフルオロアセタート等を意味する。

活性化安息香酸は、ハロゲン化ベンゾイルの場合のように直接使用可能であるが、現場にて、例えばジシクロヘキシルカルボジイミド、トリフェニルホスフィン/アゾジカルボン酸エステル、2-ピリジンジスルフィド/トリフェニルホスフィン、カルボニルジイミダゾール等を用いて生成させることも可能である。

塩基の存在下にアシル化反応を行うことも有利である。反応体および助剤塩基を等モル量

50

で用いるのが好ましい。助剤塩基をわずかに過剰量で、例えば I I に対して 1 . 2 ~ 1 . 5 モル当量で用いると、特定の環境下で有効である。

適する助剤塩基は、第三級アルキルアミン、ピリジンまたは炭酸アルカリ金属塩である。使用可能な溶媒の例は、塩素化炭化水素、例えば塩化メチレン、1, 2 - ジクロロエタン、芳香族炭化水素、例えばトルエン、キシレン、クロロベンゼン、エーテル、例えばジエチルエーテル、メチル tert - ブチルエーテル、テトラヒドロフラン、ジオキサン、極性非プロトン性溶媒、例えばアセトニトリル、ジメチルホルムアミド、ジメチルスルホキシド、またはエステル、例えば酢酸エチルまたはこれらの混合物である。

活性化カルボン酸成分としてハロゲン化ベンゾイルを使用する場合は、この反応体の添加の際に反応混合物を冷却すると有利である。次いでこの混合物を 20 ~ 100、好ましくは 25 ~ 50 で反応が完結するまで攪拌する。後処理は慣用の方法で、例えば反応混合物を水に注入し、所望の生成物を抽出する等の方法により行われる。これに使用される特に適する溶媒は塩化メチレン、ジエチルエーテルおよび酢酸エチルである。有機層を乾燥させた後、溶媒を除去し、得られた粗エステルは精製せずに転位反応に使用される。

エステルの転位により、式 I の化合物が得られるが、この反応は 20 ~ 40、で、溶媒中、塩基の存在下に、好ましくはシアノ化合物を触媒として用いて行われる。

使用可能な溶媒の例は、アセトニトリル、塩化メチレン、1, 2 - ジクロロエタン、ジオキサン、酢酸エチル、トルエン、またはこれらの混合物である。好ましい溶媒はアセトニトリルおよびジオキサンである。

適する塩基は第三級アミン、例えばトリエチルアミン、ピリジン、または炭酸アルカリ金属塩、例えば炭酸ナトリウム、炭酸カリウムであり、これらの全てはエステルに対して等モル量または 4 倍までの過剰量で使用される。トリエチルアミンまたは炭酸アルカリ金属塩が好ましく用いられるが、エステルに対する等モル量の 2 倍の割合で用いるのが好ましい。

適するシアノ化合物は、無機シアノ化物、例えばシアニ化ナトリウム、シアニ化カリウム、および有機シアノ化合物、例えばアセトンシアノヒドリン、トリメチルシリルシアニドである。これらは、エステルに対して 1 ~ 50 モル%の量で使用される。好ましく用いられる物質は、アセトンシアノヒドリンまたはトリメチルシリルシアニドであり、エステルに対して例えば 5 ~ 15 モル%、好ましくは 10 モル%の量で用いられる。

後処理は公知方法で行われる。例えば反応混合物を希鉱酸、例えば 5% 塩酸または硫酸で酸性とし、有機溶媒、例えば塩化メチレンまたは酢酸エチルで抽出する。有機抽出物は 5 - 10% の炭酸アルカリ金属塩溶液、例えば炭酸ナトリウムまたは炭酸カリウム溶液で抽出可能である。水層を酸性と成し、得られた沈殿を吸引濾過し、および/または塩化メチレンまたは酢酸エチルで抽出し、乾燥、濃縮する。

(ヒドロキシピラゾールからのエステルの合成例と、エステルの転位における実施例は、例えばヨーロッパ特許出願公開第 2 8 2 9 4 4 号公報および米国特許第 4 6 4 3 7 5 7 号明細書に記載されている。)

工程 B :

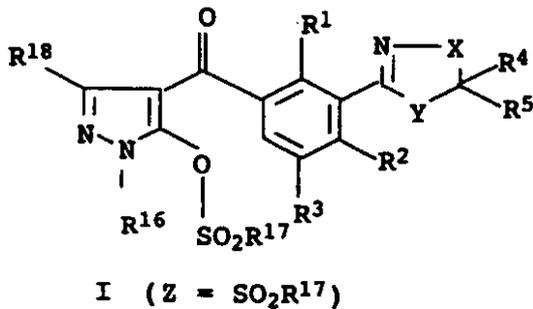
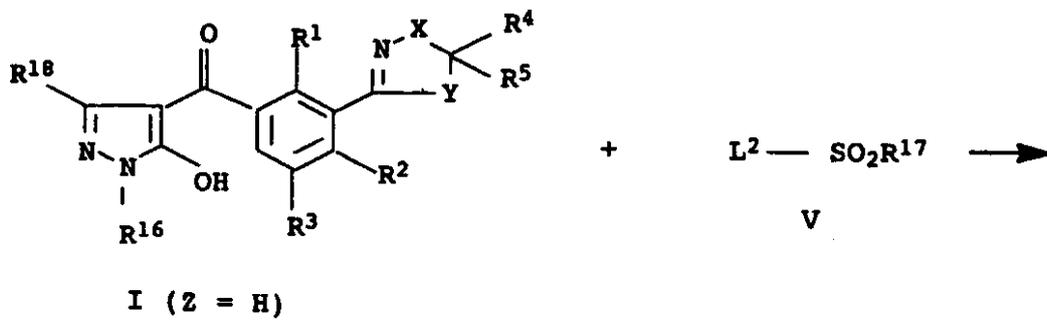
式 I (Z = H) の 3 - ヘテロシクリル置換ベンゾイル誘導体と、式 V (Z = S O ₂ R ¹⁷) の化合物の反応

10

20

30

40



上記式中 L² は求核的に着脱可能な脱離基、例えばハロゲン、例えば臭素、塩素、ヘテロアリール、例えばイミダゾリル、ピリジル、スルホナート、例えば O S O₂ R¹⁷ 等を意味する。

式 V の化合物は、ハロゲン化スルホンルまたはスルホン酸無水物の場合等には直接使用可能であり、また、活性化スルホン酸等の場合は（スルホン酸、ジシクロヘキシルカルボジイミド、カルボニルジイミダゾール等により）現場で生成可能である。

通常、出発化合物は、等モル量で使用される。しかしながら、いずれかの成分を過剰量で用いるのも有効である。

塩基の存在下に反応を行うのも有効である。反応体および助剤塩基を等モル量で用いるのが好ましい。助剤塩基を I I に対して過剰量、例えば 1.5 ~ 3 モル当量で用いると、特定の環境下で有効である。

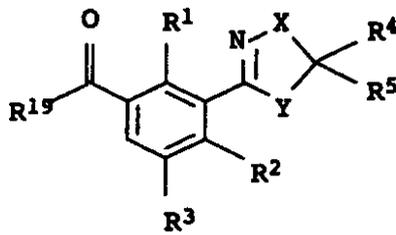
適する助剤塩基は、第三級アルキルアミン、例えばトリエチルアミンまたはピリジン、炭酸アルカリ金属塩、例えば炭酸ナトリウムまたは炭酸カリウム、およびアルカリ金属水素化物、例えば水素化ナトリウムであり、トリエチルアミンおよびピリジンが好ましく用いられる。使用可能な溶媒の例は、塩基化炭化水素、例えば塩化メチレン、1, 2 - ジクロロエタン、芳香族炭化水素、例えばトルエン、キシレン、クロロベンゼン、エーテル、例えばジエチルエーテル、メチル tert - ブチルエーテル、テトラヒドロフラン、ジオキサン、極性非プロトン性溶媒、例えばアセトニトリル、ジメチルホルムアミド、ジメチルスルホキシド、またはエステル、例えば酢酸エチルまたはこれらの混合物である。

通常、反応温度を 0 ~ 反応混合物の沸点までの範囲とする。

生成物を得るための公知方法により後処理を行う。

出発材料として使用され公知の、式 I I (Z = H) で表されるピラゾールは、公知方法により製造可能である（例えばヨーロッパ特許出願公開第 2 4 0 0 0 1 号公報、および J. Prakt. Chem. 315, 383 (1973)）。

式 I I I で表される新規の 3 - ヘテロシクリル置換安息香酸誘導体



III

において各置換基は以下の意味を有する。すなわち、上記式中

R¹、R²が水素、ニトロ、ハロゲン、シアノ、C₁-C₆アルキル、C₁-C₆ハロアルキル、C₁-C₆アルコキシ、C₁-C₆ハロアルコキシ、C₁-C₆アルキルチオ、C₁-C₆ハロアルキルチオ、C₁-C₆アルキルスルフィニル、C₁-C₆ハロアルキルスルフィニル、C₁-C₆アルキルスルホニルまたはC₁-C₆ハロアルキルスルホニル、

R³が水素、ハロゲンまたはC₁-C₆アルキル、

R⁴、R⁵が水素、ハロゲン、シアノ、ニトロ、C₁-C₄アルキル、C₁-C₄アルコキシ-C₁-C₄アルキル、ジ(C₁-C₄アルコキシ)-C₁-C₄アルキル、ジ(C₁-C₄アルキル)アミノ-C₁-C₄アルキル、[2,2-ジ(C₁-C₄アルキル)ヒドラジノ-1]-C₁-C₄アルキル、C₁-C₆アルキルイミノオキシ-C₁-C₄アルキル、C₁-C₄アルコキシカルボニル-C₁-C₄アルキル、C₁-C₄アルキルチオ-C₁-C₄アルキル、C₁-C₄ハロアルキル、C₁-C₄シアノアルキル、C₃-C₈シクロアルキル、C₁-C₄アルコキシ、C₁-C₄アルコキシ-C₂-C₄アルコキシ、C₁-C₄ハロアルコキシ、ヒドロキシル、C₁-C₄アルキルカルボニルオキシ、C₁-C₄アルキルチオ、C₁-C₄ハロアルキルチオ、ジ(C₁-C₄アルキル)アミノ、COR⁶、フェニルまたはベンジル(最後に挙げた2個の基は完全または部分的にハロゲン化されていてもよく、および/または1個~3個の以下の基すなわちニトロ、シアノ、C₁-C₄アルキル、C₁-C₄ハロアルキル、C₁-C₄アルコキシまたはC₁-C₄ハロアルコキシを有してもよい)を意味するか、或いはR⁴およびR⁵が共同で、C₁-C₄アルキルによりモノ置換ないしテトラ置換されてもよく、および/または酸素により、またはC₁-C₄アルキル置換されていてもよい窒素により中断されてもよいC₂-C₆アルカンジイル鎖を形成するか、または

R⁴およびR⁵が対応の炭素原子と共にカルボニルまたはチオカルボニル基を形成し、R⁶が水素、C₁-C₄アルキル、C₁-C₄ハロアルキル、C₁-C₄アルコキシ、C₁-C₄アルコキシ-C₂-C₄アルコキシ、C₁-C₄ハロアルコキシ、C₃-C₆アルケニルオキシ、C₃-C₆アルキニルオキシまたはNR⁷R⁸、

R⁷が水素、C₁-C₄アルキル、

R⁸がC₁-C₄アルキル、

XがO、S、NR⁹、COまたはCR¹⁰R¹¹、

YがO、S、NR¹²、COまたはCR¹³R¹⁴、

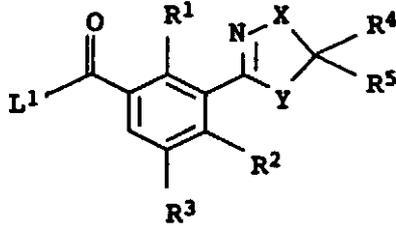
R⁹、R¹²が水素またはC₁-C₄アルキル、

R¹⁰、R¹¹、R¹³、R¹⁴が水素、C₁-C₄アルキル、C₁-C₄ハロアルキル、C₁-C₄アルコキシカルボニル、C₁-C₄ハロアルコキシカルボニルまたはCONR⁷R⁸をそれぞれ意味し、

R⁴およびR⁹、またはR⁴およびR¹⁰、またはR⁵およびR¹²、またはR⁵およびR¹³が共同で、C₁-C₄アルキルによりモノ置換ないしテトラ置換されていてもよく、および/または酸素により、またはC₁-C₄アルキルにより置換されていてもよい窒素原子により中断されてもよいC₂-C₆アルカンジイル鎖を形成し、R¹⁹がヒドロキシルまたは加水分解により除去可能な基を意味する。このうち式IIIの化合物は、2-クロロ-3-(4,5-ジヒドロイソオキサゾール-3-イル)-4-メチルスルホニル安息香酸メチル、2-クロロ-3-(4,5-ジヒドロイソオキサゾール-2-イル)-4-メチルスルホニル安息香酸メチル、および2,4-ジクロロ-3-(5-メチルカルボニルオキシ-4,5-ジヒドロイソオキサゾール-3-イル)安息香酸メチル以外を意味するものである。

加水分解により除去可能な基の例は、アルコキシ、フェノキシ、アルキルチオ、無置換または置換の、フェニルチオ、ハロゲン化物、窒素を介して結合されるヘテロアリアル、アミノ、無置換または置換のイミノ等である。

下式 IIII' の 3 - ヘテロシクリル - 置換ハロゲン安息香酸 ($L^{1'}$ = ハロゲン) (R^{19} = ハロゲンの場合の IIII に対応) が好ましい。

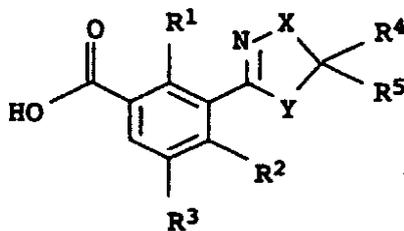


IIIIα'

式中、 $R^1 \sim R^5$ 、 X 、 Y は式 IIII の場合と同様の意味を有する。

$L^{1'}$ はハロゲン、特に塩素または臭素を意味する。

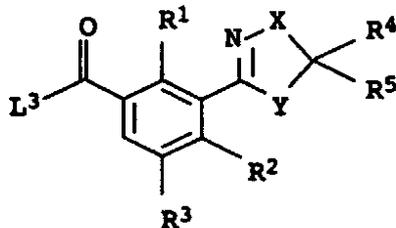
同様に、式 IIII の 3 - ヘテロシクリル置換安息香酸が好ましい (R^{19} = ヒドロキシルの場合の IIII に対応)。



IIIIβ

上記 $R^1 \sim R^5$ 、 X 、 Y は式 IIII の場合と同様の意味を有する。

同様に、式 IIII の 3 - ヘテロシクリル置換安息香酸エステルが好ましい (R^{19} = $C_1 - C_6$ アルコキシの場合の IIII に対応)。



IIIIγ

上記 $R^1 \sim R^5$ 、 X 、 Y は式 IIII の場合と同様の意味を有し、

L^3 は $C_1 - C_6$ アルコキシを意味する。

式 IIII の 3 - ヘテロシクリル置換安息香酸誘導体の特に好ましい実施の形態において、 $R^1 \sim R^5$ 、 X および Y は、式 I の 3 - ヘテロシクリル置換ベンゾイル誘導体の場合に対応する。

他の好ましい例として、式 IIII において各置換基が以下の意味を有する場合の 3 - ヘテロシクリル置換安息香酸誘導体が挙げられる。すなわち、

R^1 がハロゲン、 $C_1 - C_6$ アルキル、 $C_1 - C_6$ アルキルチオ、または $C_1 - C_6$ アルキルスルホニル、特に塩素、メチル、メチルチオまたはメチルスルホニル、更に好ましくは塩素、

R^2 が水素、ニトロ、ハロゲン、 $C_1 - C_6$ アルキルチオ、 $C_1 - C_6$ アルキルスルフィニル、または $C_1 - C_6$ アルキルスルホニル、特にハロゲン、ニトロ、塩素、メチルチオ、メチルスルフィニル、メチルスルホニル、エチルスルホニルまたはプロピルスルホニル、極めて好ましくは水素、塩素、メチルチオ、メチルスルホニル、エチルスルホニルまたはプロ

10

20

30

40

50

ピルスルホニル、

R^3 が水素、

R^4 、 R^5 が水素、ハロゲン、 $C_1 - C_4$ アルキル、 $C_1 - C_4$ ハロアルキル、 $C_1 - C_4$ アルコキシ、ヒドロキシル、 $C_1 - C_4$ アルキルカルボニルオキシ、 $C_1 - C_4$ アルキルチオ、または $CO R^6$ 、特に、水素、弗素、メチル、エチル、プロピル、トリフルオロメチル、クロロメチル、2-クロロエタ-1-イル、メトキシ、エトキシ、2-メチルプロパ-1-オキシ、ヒドロキシル、メチルカルボニルオキシエチルチオ、ホルミル、メチルカルボニル、メトキシカルボニルまたはエトキシカルボニル、極めて好ましくは水素、弗素、メチル、エチル、トリフルオロメチル、クロロメチル、2-クロロエタ-1-イル、メトキシ、エトキシ、2-メチルプロパ-1-オキシ、ヒドロキシル、メチルカルボニルオキシ、エチルチオ、ホルミル、メチルカルボニル、メトキシカルボニルまたはエトキシカルボニルを意味するか、または

R^4 および R^5 が共同で、 $C_1 - C_4$ アルキルによりモノ置換ないしポリ置換されてもよく、および/または酸素により、または $C_1 - C_4$ アルキル置換されていてもよい窒素により中断されてもよい $C_2 - C_6$ アルカンジイル鎖、特に1,2-ブタンジイル、2-オキソ-1,5-ペンタンジイルを形成するか、または

R^4 および R^5 が対応の炭素原子と共にカルボニル基を形成し、

R^6 が水素、 $C_1 - C_4$ アルキル、 $C_1 - C_4$ アルコキシ、特に水素、メチル、メトキシまたはエトキシ、

XがO、S、 NR^9 、COまたは $CR^{10}R^{11}$ 、

YがO、Sまたは $CR^{13}R^{14}$ 、

R^{10} 、 R^{11} 、 R^{13} 、 R^{14} が水素、 $C_1 - C_4$ アルキル、 $C_1 - C_4$ ハロアルキル、 $C_1 - C_4$ アルコキシカルボニル、特に水素、メチル、クロロメチルまたはメトキシカルボニルを意味するか、或いは

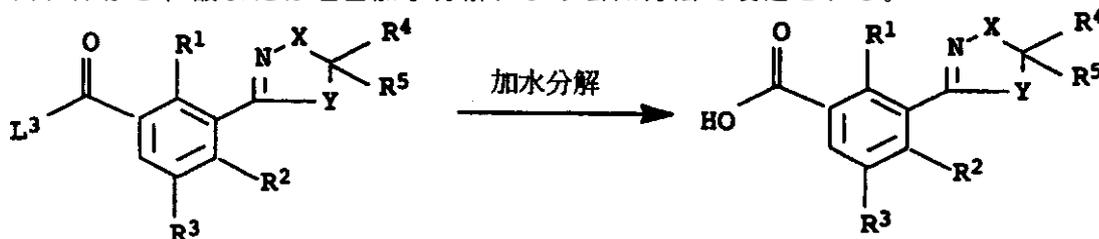
R^5 および R^{13} が共同で、 $C_1 - C_4$ アルキルによりモノ置換ないしポリ置換されていてもよく、および/または酸素により、または $C_1 - C_4$ アルキルにより置換されていてもよい窒素原子により中断されてもよい $C_2 - C_6$ アルカンジイル鎖を形成し、

R^{19} がヒドロキシ、ハロゲンまたは $C_1 - C_6$ アルコキシ、特にヒドロキシ、塩素、メトキシまたはエトキシを意味する、

2-クロロ-3-(4,5-ジヒドロイソオキサゾール-3-イル)-4-メチルスルホニル安息香酸メチル、2-クロロ-3-(4,5-ジヒドロオキサゾール-2-イル)-4-メチルスルホニル安息香酸メチル、2,4-ジクロロ-3-(5-メチルカルボニルオキシ-4,5-ジヒドロイソオキサゾール-3-イル)安息香酸メチル以外の式II Iの3-ヘテロシクリル置換安息香酸誘導体が好ましい。

式II I'のハロゲン化ベンジル($L^1 = Cl, Br$)は、公知方法により、式II Iの安息香酸と、ハロゲン化剤、例えば塩化チオニル、臭化チオニル、ホスゲン、ジホスゲン、トリホスゲン、塩化オキサリルまたは臭化オキサリルとを反応させることにより得られる。

式II Iの安息香酸は、式II I ($L^3 = C_1 - C_6$ アルコキシ)で示される対応のエステルから、酸または塩基加水分解により公知方法で製造される。



IIIγ

IIIβ

同様に、式II Iの安息香酸も、式Vで示される対応の臭素-または沃素-置換化合物と、一酸化炭素および水とを、高压下、パラジウム、ニッケル、コバルト、ロジウム遷移

10

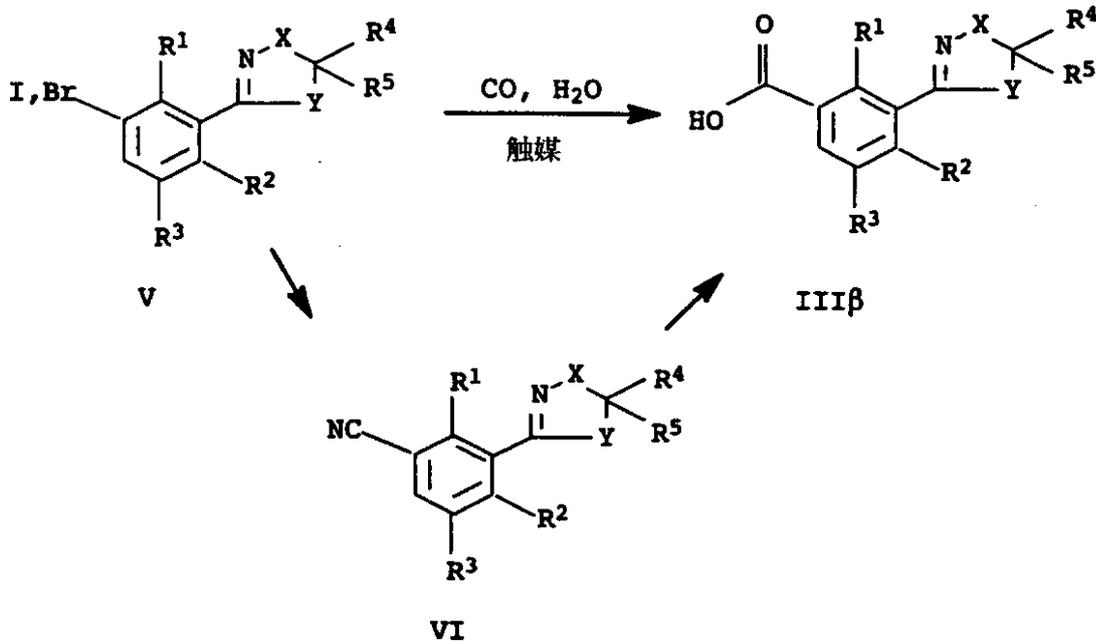
20

30

40

50

金属触媒および塩基の存在下に反応させることにより得られる。



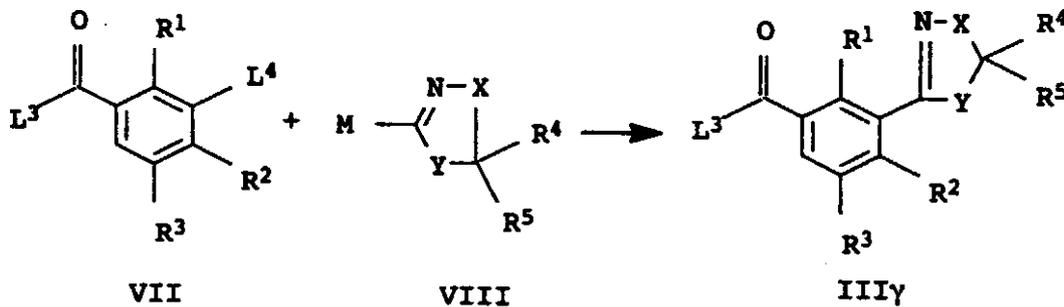
10

更に、ローゼンムント・フォン・ブラウン反応 (Rosenmund-von Braunreaction: 例えばOrg. Synth. Vol III (1955)、212参照) により式Vの化合物を、式VIで示される対応のニトリルに変換し、次いでこのニトリルを加水分解に付し式IIIの化合物に変換することが可能である。

20

式IIIのエステルは、式VIIのアリールハロゲン化合物またはアリールスルホナート (L^4 は、脱離基、例えば臭素、沃素、トリフラート、フルオロスルホニルオキシ等を意味する) を、それぞれ式VIIIで表され、式中Mが $Sn(C_1-C_4\text{-アルキル})_3$ 、 $B(OH)_2$ 、 $ZnHal$ ($Hal = \text{塩素、臭素}$) を意味する複素環式錫酸塩 (スチル (Stille) カップリング)、複素環式硼素化合物 (スズキカップリング) または複素環式亜鉛化合物 (ネグシ反応) と、公知方法により (例えばTetrahedron Lett. 27 (1986)、5269参照)、パラジウムまたはニッケル遷移金属触媒の存在下に、塩基の存在下または不存在下に反応させることにより得られる。

30



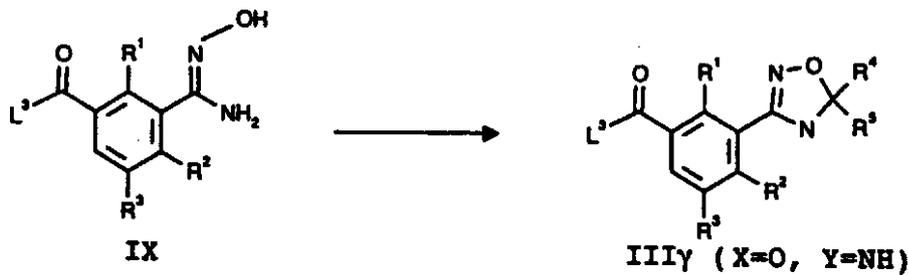
($L^4 = Br, I,$
 $OSO_2CF_3,$
 OSO_2F)

($M = Sn(C_1-C_4\text{-アルキル})_3,$
 $B(OH)_2, ZnHal$ ($Hal = Cl, Br$))

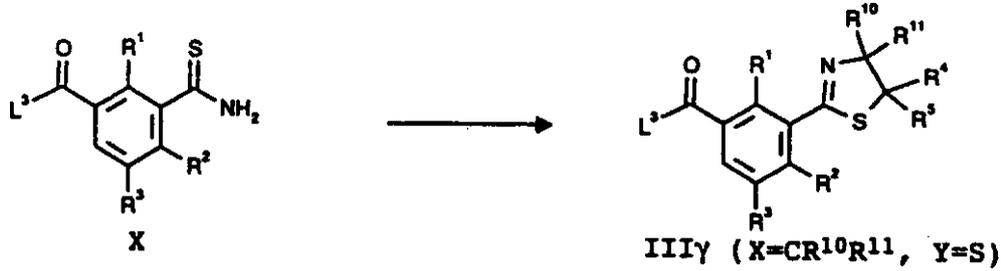
40

同様に、3位で結合するヘテロシクリルを合成することにより、式IIIのエステルを得ることも可能である。

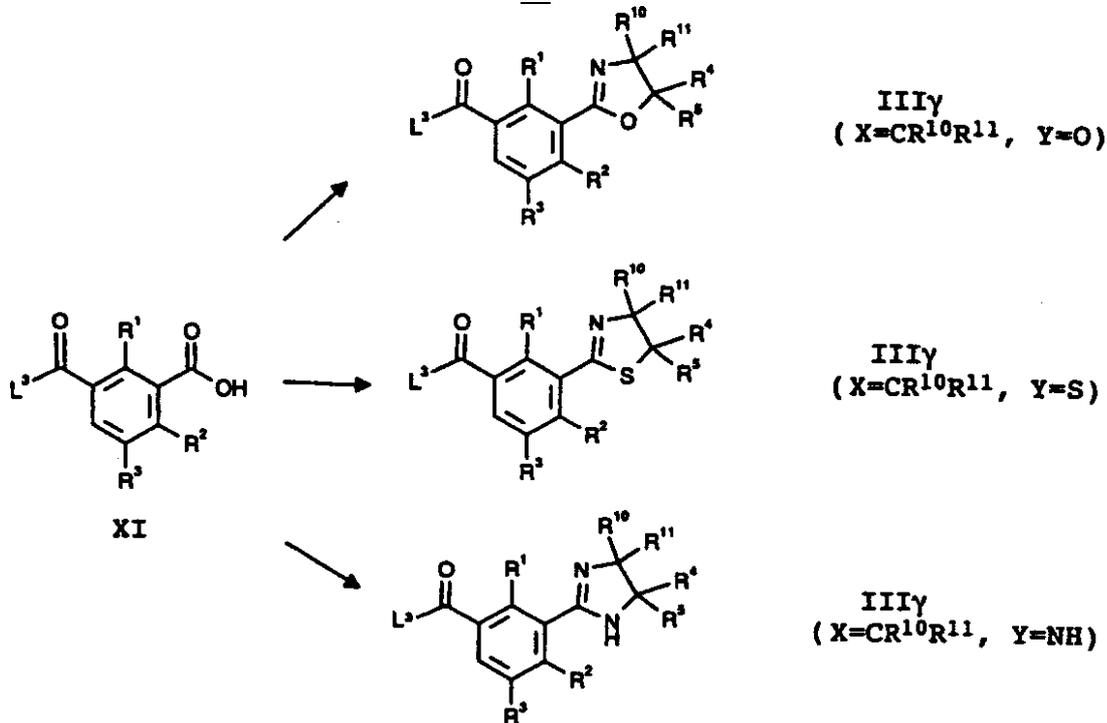
例えば、1, 2, 4-オキサジアゾリン-3-イル誘導体 (III ($X = O, Y = NH$)) は、式IXのアミドオキシムから、これをアルデヒドまたはケトンと縮合させることにより得られる (例えばArch. Phar. 326 (1993)、383-389)。



式Xのチオアミドは、2 - チアゾリニル誘導体 I (X = C R¹⁰ R¹¹、 Y = S) の適当な前駆体である (例えばTetrahedron 42 (1986)、1449-1460)。



2 - オキサゾリニル、2 - チアゾリニルおよび2 - イミダゾリニル誘導体 (I I I (X = C R¹⁰ R¹¹、 Y = Oまたは Y = Sまたは Y = N H)) は式 X I のカルボン酸から製造可能である (例えばTetrahedron Lett. 22 (1981)、4471-4474参照)。



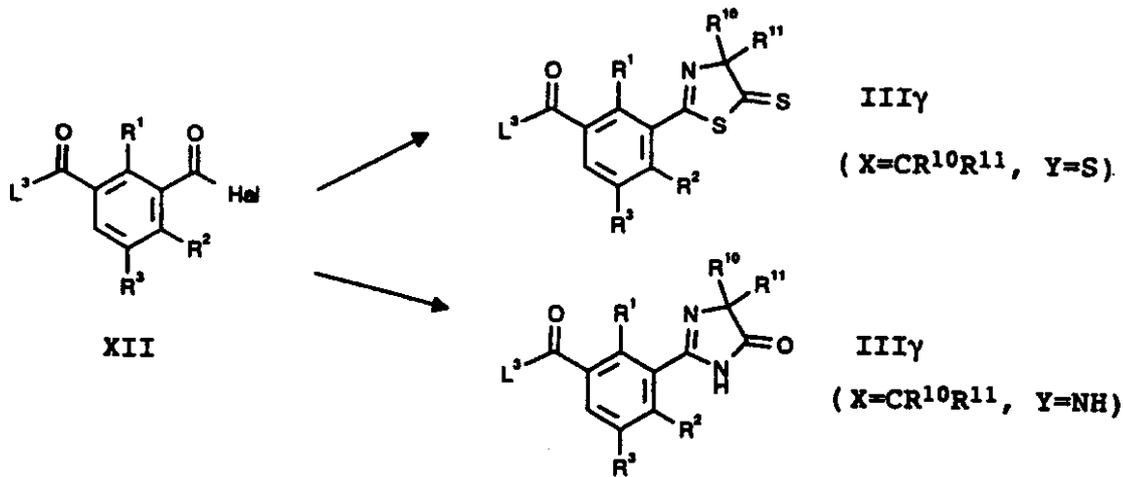
1, 3 - チアゾール - 5 (4 H) - チオン - 2 - イル (例えばHelv. Chim. Acta 69 (1986)、374-388) および5 - オキサ - 2 - イミダゾリン - 2 - イル誘導体 (例えばHeterocycles 29 (1989)、1185-1189) (I I I (X = C R¹⁰ R¹¹、 Y = Sまたは Y = N H)) は、文献により公知の方法で、式 X I I (H a l はハロゲンを意味する) のハロゲン化カルボン酸、特に塩化カルボン酸から得られる。

10

20

30

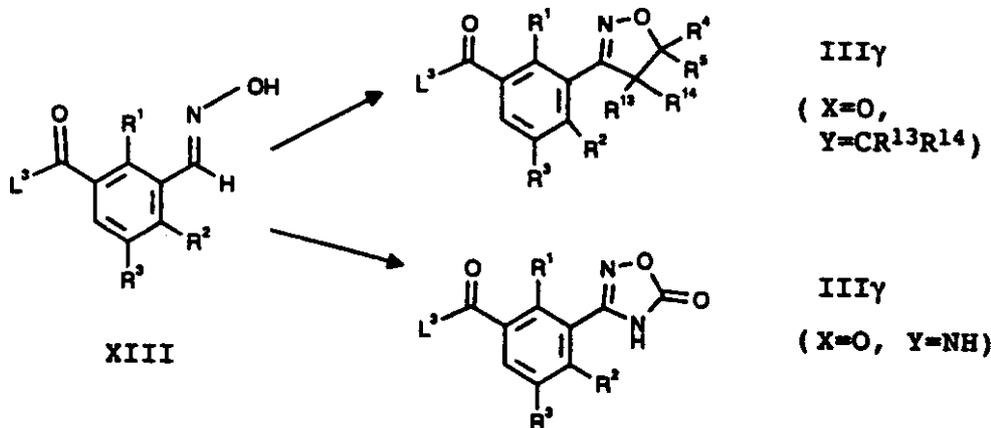
40



10

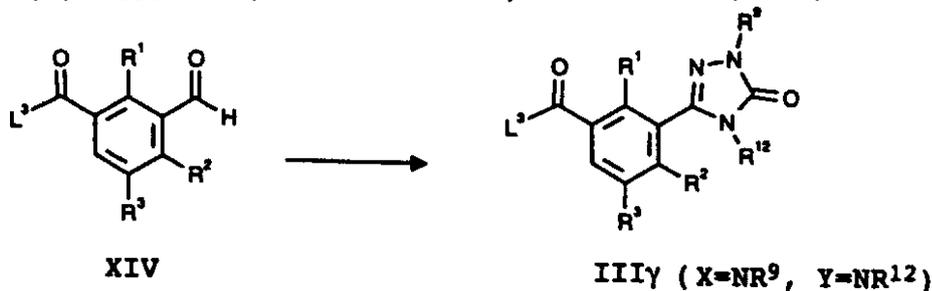
式XIIIのオキシムを、公知方法により、中間体の塩化ヒドロキサム酸XIVを介して4,5-ジヒドロイソキサゾール-3-イル誘導体(III (X=O, Y=CR¹³R¹⁴))に変換することができる。前記中間体からニトリルオキシドを現場で製造し、得られたニトリルオキシドをアルケンと反応させることにより所望の生成物が得られる(例えばChem. Ber. 106 (1973)、3258-3274参照)。クロロスルホニルイソシアナートとニトリルオキシドとの1,3-双極子環付加反応(1,3-Dipolar cycloaddition reactions)により1,2,4-オキシジアゾリン-5-オン-3-イル誘導体(III (X=O, Y=NH)) (例えばHeterocycles 27 (1988)、683-685)が生成する。

20



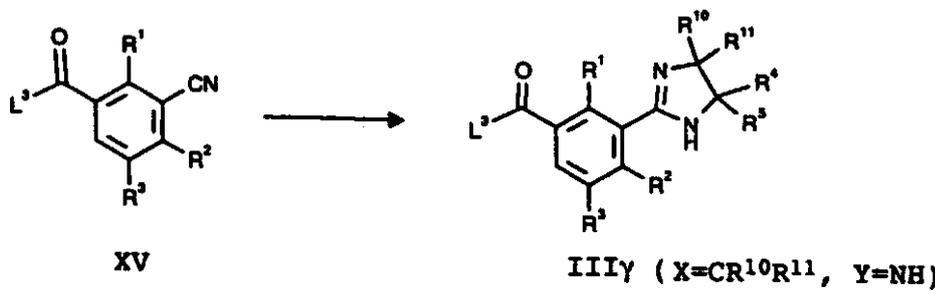
30

式XIVのアルデヒドを、中間体としてのセミカルバゾンを経由して2,4-ジヒドロ-1,2,4-トリアゾール-3-オン-5-イル誘導体(III (X=NR⁹, Y=NR¹²))に変換する(例えばJ. Heterocyclic Chem. 23 (1986)、881-883)。

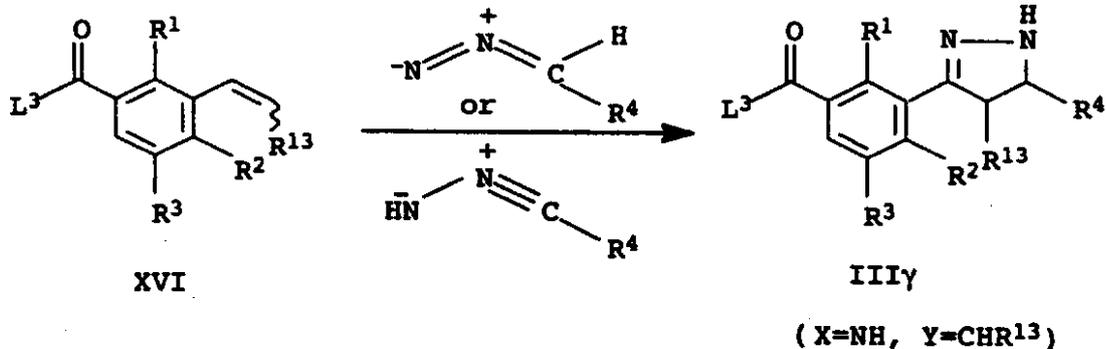


40

また、2-イミダゾリニル誘導体(III (X=CR¹⁰R¹¹, Y=NH))は、式XVのベンズニトリルから、公知方法により製造される(例えばJ. Org. Chem. 52 (1987)、1017-1021)。



ジアゾアルケンまたはニトリロイミンの、式XVIのアリールアルカンとの1,3-双極子環付加反応は、3-ピラゾリニル誘導体(III (X=NH、Y=CHR¹³))の合成に用いられる。



出発化合物として使用される式Vの臭素-または沃素置換化合物は、対応のアニリンから、文献により公知の方法、例えばサンドマイヤー反応に類似の方法により得られ、このアニリンは適当なニトロ化合物を還元することにより合成される。式Vの臭素置換化合物は、適当な出発材料を直接臭素化することによっても得られる(Monatsh. Chem. 99 (1968)、815-822)。

式VIのニトリルは、上記方法により得られる。このニトリルは、同様に対応のアニリンからサンドマイヤー反応によっても合成可能である。

式VIIの出発化合物は公知であるが(例えばColl. Czech. Chem. Commun. 40 (1975)、3009-3019)、公知合成方法を適宜に組み合わせると容易に製造される。

例えば、スルホナートVII (L⁴=OSO₂CF₃、OSO₂F)が、対応のフェノールから製造される。またこのフェノールは公知であり(例えばヨーロッパ特許出願公開第195247号公報)、公知方法により製造可能である(例えばSynthesis 1993、735-762参照)。

ハロゲン化合物VII (L⁴=Cl、BrまたはI)は、例えば、XIXの対応のアニリンから、サンドマイヤー反応により得られる。

式IXのアミドオキシム、式Xのチオアミド、および式XIのカルボン酸は、式XVのニトリルから公知方法により合成される。

更に式XIのカルボン酸を式XIVのアルデヒドから公知方法により製造することが可能である(例えばJ. March、Advanced Organic Chemistry、第3版(1985)、629頁等、Wiley-Interscience Publication)。

式XIIのハロゲン化カルボン酸は、式XIで示される対応のカルボン酸から標準的方法と同様の方法により製造される。

式XIIIのオキシムは、式XIVのアルデヒドをヒドロキシルアミンと公知方法を用いて反応させることにより有効に製造される(例えばJ. March、Advanced Organic Chemistry、第3版(1985)、805-806頁、Wiley-Interscience Publication)。

未だ公知ではない式XIVのアルデヒドが、公知方法に類似の方法により製造される。つまり、これらは式XVIIのメチル化合物の、例えばN-プロモスクシンイミドまたは1,3-ジプロモ-5,5-ジメチルヒダントインによる臭素化と、これに次ぐ酸化により製造される(例えばSynth. Commun. 22 (1992)、1967-1971)。

式XIIIのオキシムを、公知方法により式XVのニトリルに変換することも可能である

10

20

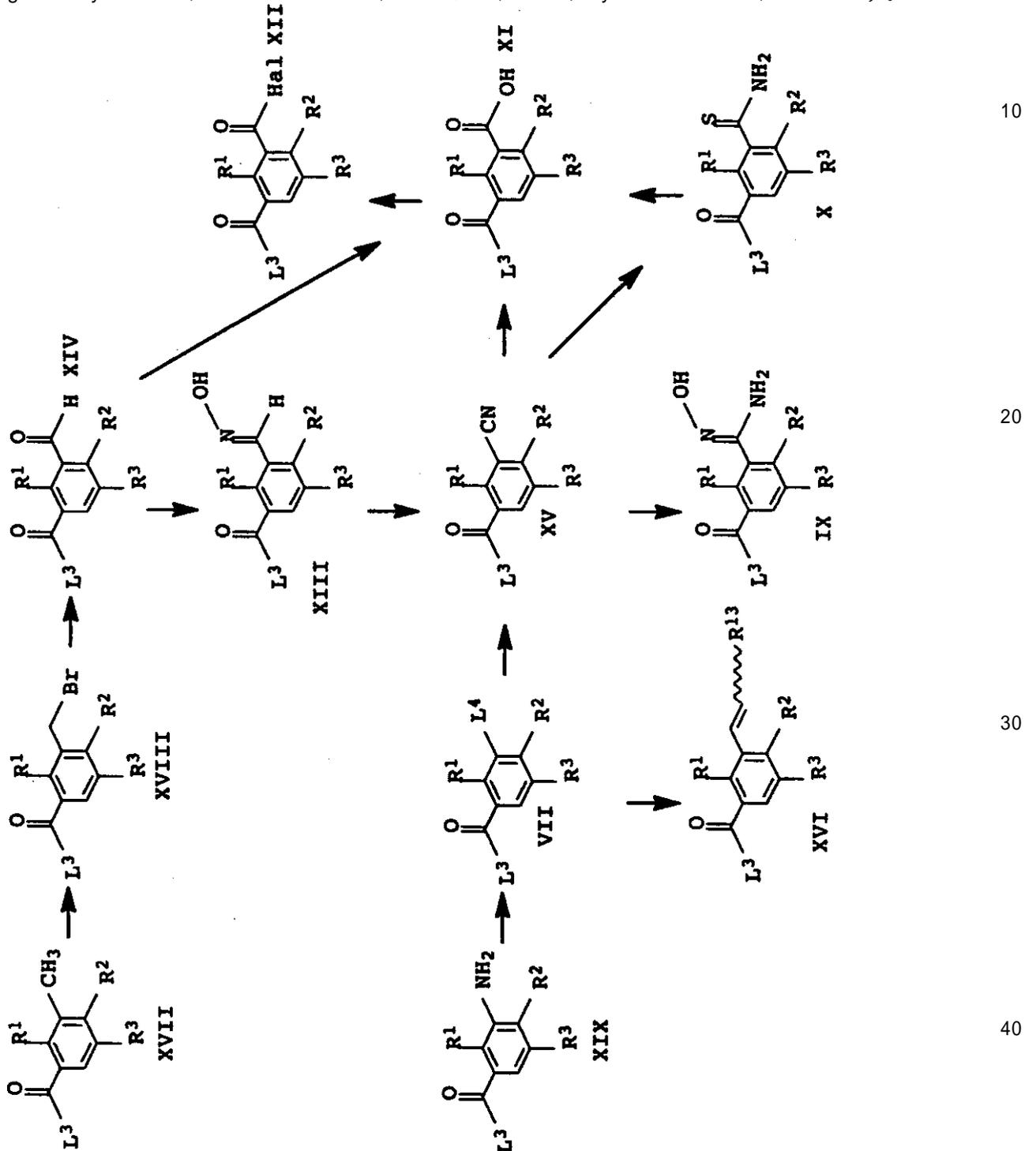
30

40

50

(例えばJ. March、Advanced Organic Chemistry、第3版(1985)、931-932頁、Wiley-Interscience Publication)。

式XVIのアリールアルケンは、式VIIのハロゲン化合物またはスルホナート ($L^4 = Br, Cl, OSO_2CF_3, OSO_2F$) から、特にオレフィンとの、パラジウム触媒の存在下におけるヘック反応により製造される(例えばHeck著、Palladium Reagents in Organic Synthesis、Academic Press、ロンドン、1985、Synthesis 1993、735-762)。



[合成実施例]

4 - [2 - クロロ - 3 - (4, 5 - ジヒドロイソキサゾール - 3 - イル) - 4 - メチルスルホニルベンゾイル] - 5 - ヒドロキシ - 1 - メチル - 1H - ピラゾール (化合物 3.35)

375 ml の無水ジオキサン中の 43.60 g (0.13 モル) の 2 - クロロ - 3 - (4, 5 - ジヒドロイソキサゾール - 3 - イル) - 4 - メチルスルホニルベンゾイルクロリ

10

20

30

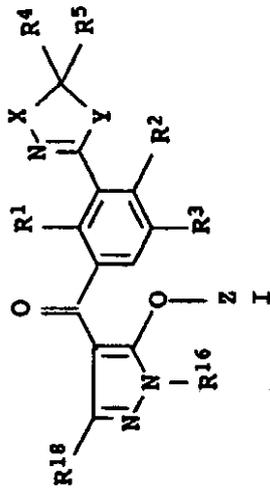
40

50

ドと、375 mlの無水ジオキサン中の13.56 g (0.134 mol)のトリエチルアミンとを、室温、保護ガス雰囲気下に、12.74 g (0.13 mol)の5-ヒドロキシ-1-メチルピラゾールおよび300 mlの無水ジオキサンの溶液に同時に滴下した。反応混合物を室温にて2時間攪拌した後、シリカゲルにより濾過し、残留物をジオキサンで洗浄した。溶出液を減圧下に約500 mlに濃縮し、17.94 g (0.13 mol)の乾燥した微粉末状態の炭酸カリウムを添加した。混合物を6時間環流した後、溶媒を減圧留去し、残留物を約700 mlの水に採取した。不溶成分を濾別し、10%塩酸をゆっくりと添加して濾液のpHを2-3とした。得られた沈殿を吸引濾過した。これにより46.16 g (理論量の92%)の4-[2-クロロ-3-(4,5-ジヒドロイソキサゾール-3-イル)-4-メチルスルホニルベンゾイル]-5-ヒドロキシ-1-メチル-1H-ピラゾール(融点>250)を得た。

表3に上記化合物と、更に同様の方法で製造された、または製造可能な他の3-ヘテロシクリル置換ベンゾイル誘導体を示す(10%塩酸酸性として最終生成物が沈殿しない場合は、酢酸エチルまたはジクロロメタンにより抽出し、次いで有機層を乾燥し、減圧濃縮に付す)。

表 3:



No.	R ¹	R ²	R ³	X	R ⁴	R ⁵	Y	R ¹⁶	Z	R ¹⁸	物理データ 融点 [°C]; ¹ H NMR [δ (ppm)]
3.1	Cl	Cl	H	O	H	H	CH ₂	n-C ₄ H ₉	H	H	116 - 117
3.2	Cl	Cl	H	O	H	H	CH ₂	i-C ₄ H ₉	H	H	148 - 151
3.3	Cl	Cl	H	O	H	H	CH ₂	n-C ₄ H ₉	C ₂ H ₅ SO ₂	H	0.95(t); 1.32(m); 1.62(t); 1.92(quin); 3.30(t); 3.78(quad); 4.17(t); 4.61(t); 7.42(d); 7.48(m).

10

20

30

40

No.	R ¹	R ²	R ³	X	R ⁴	R ⁵	Y	R ¹⁶	Z	R ¹⁸	物理データ 融点 [°C]; ¹ H NMR [δ (ppm)]
3.4	Cl	Cl	H	O	H	H	CH ₂	i-C ₄ H ₉	i-C ₄ H ₉ SO ₂	H	0.96(d); 1.21(d); 2.33(m); 2.48(m); 3.30(t); 3.67(d); 3.97(d); 4.58(t); 7.42(d); 7.50(m).
3.5	Cl	Cl	H	O	H	H	CH ₂	n-C ₃ H ₇	i-C ₄ H ₉ SO ₂	H	0.97(t); 1.20(d); 1.96(m); 2.49(m); 3.30(t); 3.68(d); 4.12(t); 4.59(t); 7.42(d); 7.49(d); 7.52(s).
3.6	Cl	Cl	H	O	H	H	CH ₂	n-C ₃ H ₇	C ₂ H ₅ SO ₂	H	0.97(t); 1.12(d); 1.63(t); 1.94(m); 3.29(t); 3.76(q); 4.14(t); 4.60(t); 7.42(d); 7.48(d); 7.51(s).
3.7	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	COOC ₂ H ₅	H	CH ₂	CH ₃	H	H	70 - 75
3.8	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	COOC ₂ H ₅	H	CH ₂	C ₂ H ₅	H	H	65 - 70
3.9	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	CH ₃	H	CH ₂	CH ₃	H	H	230 - 235
3.10	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	CH ₃	H	CH ₂	C ₂ H ₅	H	H	210 - 215
3.11	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	CH ₃	H	CH ₂	n-C ₃ H ₇	H	H	95 - 100
3.12	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	CH ₃	H	CH ₂	CH ₃	C ₂ H ₅ SO ₂	H	70 - 75

10

20

30

40

No.	R ¹	R ²	R ³	X	R ⁴	R ⁵	Y	R ¹⁶	Z	R ¹⁸	物理データ 融点 [°C]; ¹ H NMR [δ (ppm)]
3.13	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	CH ₃	H	CH ₂	C ₂ H ₅	C ₂ H ₅ SO ₂	H	78 - 83
3.14	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	CH ₃	H	CH ₂	C ₂ H ₅	i-C ₄ H ₉ SO ₂	H	1.24 (2d); 1.53 (t); 2.52 (m); 3.05 (dd); 3.29 (s); 3.52 (dd); 3.73 (d); 4.24 (q); 5.05 (m); 7.49 (s); 7.66 (d); 8.18 (d).
3.15	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	CH ₃	H	CH ₂	n-C ₃ H ₇	C ₂ H ₅ SO ₂	H	0.96 (t); 1.53 (d); 1.68 (t); 1.95 (sext); 3.07 (dd); 3.32 (s); 3.58 (dd); 3.86 (quart); 4.15 (t); 5.03 (m); 7.46 (d); 7.64 (d); 8.18 (d).
3.16	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	CH ₃	CH ₃	CH ₂	CH ₃	H	H	220 - 225
3.17	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	CH ₃	CH ₃	CH ₂	C ₂ H ₅	H	H	82 - 86
3.18	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	CH ₃	CH ₃	CH ₂	n-C ₃ H ₇	H	H	70 - 75
3.19	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	CH ₃	CH ₃	CH ₂	n-C ₄ H ₉	H	H	68 - 73
3.20	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	CH ₃	CH ₃	CH ₂	i-C ₄ H ₉	H	H	45 - 50
3.21	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	C ₂ H ₅	H	CH ₂	CH ₃	H	H	220 - 225
3.22	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	C ₂ H ₅	H	CH ₂	C ₂ H ₅	H	H	170 - 175

10

20

30

40

No.	R ¹	R ²	R ³	X	R ⁴	R ⁵	Y	R ¹⁶	Z	R ¹⁸	物理データ 融点 [°C]; ¹ H NMR [δ (ppm)]
3.23	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	H	H	CH ₂	n-C ₃ H ₇	H	H	65 - 70
3.24	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	H	H	CH ₂	n-C ₄ H ₉	H	H	55 - 60
3.25	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	H	H	CH ₂	i-C ₄ H ₉	H	H	58 - 63
3.26	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	H	H	CH ₂	n-C ₄ H ₉	C ₂ H ₅ SO ₂	H	78 - 83
3.27	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	H	H	CH ₂	n-C ₄ H ₉	i-C ₄ H ₉ SO ₂	H	0.94(t); 1.19(d); 1.22(t); 1.38(m); 1.74(br); 1.91(m); 2.53(m); 3.26(s); 4.45(t); 3.76(d); 4.18(t); 4.62(t); 7.45(s); 7.64(d); 8.16(d).
3.28	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	H	H	CH ₂	i-C ₄ H ₉	i-C ₄ H ₉ SO ₂	H	0.96(d); 1.21(d); 2.33(m); 2.51(m); 3.28(s); 3.44(t); 3.75(d); 3.99(d); 4.61(t); 7.45(s); 7.66(d); 8.17(d).
3.29	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	H	H	CH ₂	i-C ₄ H ₉	C ₂ H ₅ SO ₂	H	0.97(d); 1.66(t); 2.36(m); 3.29(s); 3.43(t); 3.82(q); 3.99(d); 4.60(t); 7.47(s); 7.68(d); 8.18(d).

10

20

30

40

No.	R ¹	R ²	R ³	X	R ⁴	R ⁵	Y	R ¹⁶	Z	R ¹⁸	物理データ 融点 [°C]; ¹ H NMR [δ (ppm)]
3.30	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	H	H	CH ₂	CH ₃	C ₂ H ₅ SO ₂	H	1.68(t); 3.29(s); 3.43(t); 3.78(q); 3.92(s); 3.63(t); 7.46(s); 7.62(d); 8.17(d).
3.31	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	H	H	CH ₂	CH ₃	i-C ₄ H ₉ SO ₂	H	1.23(d); 2.53(m); 3.28(s); 3.43(t); 3.70(d); 3.91(s); 4.61(t); 7.48(s); 7.66(d); 8.18(d).
3.32	Cl	Cl	H	O	H	H	CH ₂	n-C ₃ H ₇	H	H	119 - 121
3.33	Cl	Cl	H	O	H	H	CH ₂	CH ₃	H	CH ₃	115 - 117
3.34	Cl	NO ₂	H	O	H	H	CH ₂	C ₂ H ₅	H	H	217 - 218
3.35	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	H	H	CH ₂	CH ₃	H	H	> 250
3.36	Cl	Cl	H	O	H	H	CH ₂	C ₂ H ₅	H	H	125 - 128
3.37	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	H	H	CH ₂	C ₂ H ₅	n-C ₃ H ₇ SO ₂	H	78 - 83
3.38	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	H	H	CH ₂	C ₂ H ₅	C ₂ H ₅ SO ₂	H	1.52(t); 1.68(t); 3.29(s); 3.43(t); 3.82(q); 4.24(q); 4.63(t); 7.48(s); 7.65(d); 8.07(d).
3.39	Cl	SO ₂ C ₂ H ₅	H	O	CH ₃	CH ₃	CH ₂	CH ₃	H	H	> 200

10

20

30

40

No.	R ¹	R ²	R ³	X	R ⁴	R ⁵	Y	R ¹⁶	Z	R ¹⁸	物理データ 融点 [°C]; ¹ H NMR [δ (ppm)]
3.40	Cl	SO ₂ C ₂ H ₅	H	O	CH ₃	H	CH ₂	CH ₃	H	H	220 - 223
3.41	Cl	SO ₂ C ₂ H ₅	H	O	CH ₃	H	CH ₂	C ₂ H ₅	H	H	> 230
3.42	Cl	SO ₂ -n-C ₃ H ₇	H	O	CH ₃	H	CH ₂	CH ₃	H	H	1.12(t); 1.53(d); 1.76(quin); 3.18(dd); 3.38(t); 3.55(dd); 3.73(s); 5.04(m); 5.55(s, br.); 7.37(s); 7.68(d); 8.13(d).
3.43	Cl	SO ₂ -n-C ₃ H ₇	H	O	CH ₃	H	CH ₂	C ₂ H ₅	H	H	1.07(t); 1.50(m); 1.78(quin); 3.07(dd); 3.39(t); 3.55(dd); 4.12(t); 5.08(m); 7.38(s); 7.69(d); 8.11(d).
3.44	Cl	SO ₂ CH ₃	H	CH ₂	H	H	O	CH ₃	H	H	
3.45 a)	Cl	SO ₂ CH ₃	H	C(CH ₃) ₂	H	H	O	CH ₃	H	H	1.33(s); 3.40(s); 4.17(s); 7.43(s); 7.79(d); 8.04(d).
3.46	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	H	H	CH ₂	C ₂ H ₅	Na ⁺	H	218 - 220
3.47	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	H	H	CH ₂	C ₂ H ₅	K ⁺	H	193
3.48	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	H	H	CH ₂	C ₂ H ₅	Li ⁺	H	> 230

10

20

30

40

No.	R ¹	R ²	R ³	X	R ⁴	R ⁵	Y	R ¹⁶	Z	R ¹⁸	物理データ 融点 [°C]; ¹ H NMR [δ (ppm)]
3.49	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	H	H	CH ₂	C ₂ H ₅	NH ₄ ⁺	H	170 - 175
3.50	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	H	H	CH ₂	CH ₃	Na ⁺	H	> 240
3.51	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	H	H	CH ₂	CH ₃	K ⁺	H	206 - 214
3.52	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	H	H	CH ₂	CH ₃	Li ⁺	H	> 240
3.53	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	H	H	CH ₂	CH ₃	NH ₄ ⁺	H	
3.54 a)	Cl	SO ₂ CH ₃	H	C(CH ₃) ₂	H	H	O	C ₂ H ₅	H	H	1.27(t); 1.36(s); 3.41(q); 4.01(q); 4.18(s); 7.47(s); 7.83(d); 8.07(d).
3.55	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	H	-(CH ₂) ₃ CH-		C ₂ H ₅	H	H	99-104
3.56	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	H	-(CH ₂) ₃ CH-		CH ₃	H	H	95-100
3.57	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	-(CH ₂) ₄ -	-(CH ₂) ₄ -	CH ₂	CH ₃	H	H	230-235
3.58	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	-(CH ₂) ₄ -	-(CH ₂) ₄ -	CH ₂	C ₂ H ₅	H	H	190-195
3.59	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	-(CH ₂) ₂ O(CH ₂) ₂	-(CH ₂) ₂ O(CH ₂) ₂	CH ₂	C ₂ H ₅	H	H	95-100
3.60	Cl	SO ₂ C ₂ H ₅	H	O	CH ₃	CH ₃	CH ₂	CH ₃	H	H	< 230
3.61	Cl	SO ₂ C ₂ H ₅	H	O	CH ₃	CH ₃	CH ₂	C ₂ H ₅	H	H	198-200
3.62	Cl	SO ₂ C ₂ H ₅	H	O	H	H	CH ₂	CH ₃	H	H	215-218
3.63	Cl	SO ₂ C ₂ H ₅	H	O	H	H	CH ₂	C ₂ H ₅	H	H	213-215
3.64	Cl	SO ₂ -n-C ₃ H ₇	H	O	H	H	CH ₂	CH ₃	H	H	186-190

10

20

30

40

No.	R ¹	R ²	R ³	X	R ⁴	R ⁵	Y	R ¹⁶	Z	R ¹⁸	物理データ 融点 [°C]; ¹ H-NMR [δ (ppm)]
3.65	Cl	SO ₂ -n-C ₃ H ₇	H	O	H	H	CH ₂	C ₂ H ₅	H	H	84-86
3.66	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	-(CH ₂) ₂ O(CH ₂) ₂ -		CH ₂	CH ₃	H	H	90-95
3.67	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	C ₂ H ₅	C ₂ H ₅	CH ₂	CH ₃	H	H	70-75
3.68	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	C ₂ H ₅	C ₂ H ₅	CH ₂	C ₂ H ₅	H	H	50-55
3.69	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	OCH ₃	H	CH ₂	CH ₃	H	H	3.18-3.99(1H); 5.78(1H); 7.50(1H); 7.81(1H); 8.09(1H).
3.70	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	CH ₃	H	CHCH ₂ Cl	CH ₃	H	H	1.52(3H); 3.30-4.12(6H); 4.36(1H); 4.93(1H); 7.49(1H); 7.81(1H); 8.09(1H).
3.71	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	CH ₃	H	CHCH ₂ Cl	C ₂ H ₅	H	H	1.27(3H); 1.55(3H); 3.28-4.02(7H); 4.37(1H); 4.92(1H); 7.48(1H); 7.80(1H); 8.07(1H).
3.72	Cl	SO ₂ CH ₃	H	C(CH ₃) ₂	H	H	O	CH ₃	H	H	132-135
3.73	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	OC ₂ H ₅	H	CH ₂	CH ₃	H	H	95-100
3.74	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	OC ₂ H ₅	H	CH ₂	C ₂ H ₅	H	H	1.16(3H); 1.27(3H); 3.20-4.00(9H); 5.89(1H); 7.50(1H); 7.82(1H); 8.07(1H).

10

20

30

40

No.	R ¹	R ²	R ³	X	R ⁴	R ⁵	Y	R ¹⁶	Z	R ¹⁸	物理データ 融点 [°C]; ¹ H-NMR [δ (ppm)]
3.75	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	C ₂ H ₅	C ₂ H ₅	CH ₂	C ₂ H ₅	K ⁺	H	200-205
3.76	Cl	SO ₂ C ₂ H ₅	H	C(CH ₃) ₂	H	H	O	CH ₃	H	H	120-123
3.77	Cl	SO ₂ -n-C ₃ H ₇	H	O	CH ₃	CH ₃	CH ₂	C ₂ H ₅	H	H	152-158
3.78	Cl	SO ₂ -n-C ₃ H ₇	H	O	CH ₃	CH ₃	CH ₂	CH ₃	H	H	172-176
3.79	Cl	SO ₂ -n-C ₃ H ₇	H	O	CH ₃	H	CH ₂	CH ₃	H	H	188-205
3.80	Cl	SCH ₃	H	O	H	H	CH ₂	C ₂ H ₅	H	H	1.29(t); 2.56(s); 3.28(t); 3.93(q); 4.49(t); 7.40(s); 7.43(d); 7.55(d).
3.81	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	CH ₂ Cl	H	CH ₂	C ₂ H ₅	H	H	78-82
3.82	CH ₃	H	H	CH ₂	H	H	S	C ₂ H ₅	H	H	1.44(t); 2.50(s); 3.49(t); 4.09(q); 4.53(t); 7.35(m); 7.48(d); 7.62(d).
3.83	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	CH ₂ Cl	H	CH ₂	CH ₃	H	H	81-85
3.84	Cl	SCH ₃	H	O	H	H	CH ₂	CH ₃	H	H	151-153
3.85	Cl	SOCH ₃	H	O	H	H	CH ₂	C ₂ H ₅	H	H	1.28(t); 2.82(s); 3.40(m); 3.92(m); 4.52(t); 7.45(s); 7.82(d); 8.10(d).
3.86	CH ₃	SO ₂ CH ₃	H	O	H	H	CH ₂	CH ₃	H	H	205-210
3.87	Cl	Cl	H	CH ₂	H	H	S	C ₂ H ₅	H	H	173-179

10

20

30

40

No.	R ¹	R ²	R ³	X	R ⁴	R ⁵	Y	R ¹⁶	Z	R ¹⁸	物理データ 融点 [°C]; ¹ H-NMR [δ (ppm)]
3.88	Cl	SCH ₃	H	CH ₂	H	H	S	C ₂ H ₅	H	H	1.43(t); 2.51(s); 3.59(t); 4.08(q); 4.51(t); 7.22(d); 7.41(s); 7.50(d).
3.89	Cl	SO ₂ CH ₃	H	CH ₂	H	H	S	C ₂ H ₅	H	H	1.50(t); 3.28(s); 3.62(t); 4.10(q); 4.49(t); 7.36(s); 7.68(d); 8.19(d).
3.90	CH ₃	SO ₂ CH ₃	H	O	H	H	CH ₂	C ₂ H ₅	H	H	174-180
3.91	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	CH ₂ Cl	H	CH ₂	CH ₃	H	H	77-83
3.92	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	F	H	CH ₂	CH ₃	H	H	
3.93	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	F	H	CH ₂	C ₂ H ₅	H	H	
3.94	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	F	F	CH ₂	CH ₃	H	H	
3.95	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	F	F	CH ₂	C ₂ H ₅	H	H	
3.96	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	CH ₃	H	CHCH ₃	C ₂ H ₅	H	H	183-184
3.97	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	CF ₃	H	CH ₂	CH ₃	H	H	223-225
3.98	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	CF ₃	H	CH ₂	C ₂ H ₅	H	H	183-184
3.99	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	SC ₂ H ₅	H	CH ₂	CH ₃	H	H	195-196
3.100	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	SC ₂ H ₅	H	CH ₂	C ₂ H ₅	H	H	199-200
3.101	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	CH ₃	H	CHCH ₃	CH ₃	H	H	230-233
3.102	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	CHCl(CH ₃)	H	CH ₂	C ₂ H ₅	H	H	102-107
3.103	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	CHCl(CH ₃)	H	CH ₂	CH ₃	H	H	80-85

10

20

30

40

No.	R ¹	R ²	R ³	X	R ⁴	R ⁵	Y	R ¹⁶	Z	R ¹⁸	物理データ 融点 [°C]; ¹ H-NMR [δ (ppm)]
3.104	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	n-C ₃ H ₇	H	CH ₂	CH ₃	H	H	
3.105	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	n-C ₃ H ₇	H	CH ₂	C ₂ H ₅	H	H	
3.106	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	H	H	CH ₂	CH ₃	⁺ NH ₂ (CH ₃) ₂	H	200
3.107	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	H	H	CH ₂	CH ₃	⁺ NH ₂ (CH ₂ CH ₂ OH)	H	187
3.108	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	H	H	CH ₂	CH ₃	⁺ NH ₃ (CH ₂ CH ₂ OCH ₂ CH ₂ OH)	H	180
3.109	SCH ₃	SCH ₃	H	O	H	H	CH ₂	CH ₃	H	H	2.33(s); 2.51(s); 3.40(t); 3.70(s); 4.58(t); 5.15(brs); 7.21(s); 7.31(d); 7.42(d).
3.110	SCH ₃	SCH ₃	H	O	H	H	CH ₂	C ₂ H ₅	H	H	1.38(t); 2.33(s); 2.49(s); 3.41(t); 4.10(q); 4.58(t); 7.25(s); 7.32(d); 7.41(d); 7.82(brs).
3.111	SO ₂ CH ₃	SO ₂ CH ₃	H	O	H	H	CH ₂	CH ₃	H	H	oil
3.112	SO ₂ CH ₃	SO ₂ CH ₃	H	O	H	H	CH ₂	C ₂ H ₅	H	H	oil

a) 2-クロロ-3-(1'-クロロ-2', 2'-ジメチルエチルアミノカルボニル)-4-メチルスルホニルベンゾイルクロリドと
2当量の炭酸カリウムから合成

出発材料の合成例を以下に示す。

[2-クロロ-3-(4, 5-ジヒドロイソオキサゾール-3-イル)-4-メチルスルホニルベンゾイルクロリド (化合物 4.5)]

工程 a) 2-クロロ-3-メチル-4-メチルチオアセトフェノン

10

20

30

40

50

157 g (2モル)の塩化アセチルの、420モルの1,2-ジクロロエタン中の溶液を、286 g (2.14モル)の三塩化アルミニウムの420 mlの1,2-ジクロロエタンの懸濁液に、15~20 で滴下した。次いで346 g (2モル)の2-クロロ-6-メチルチオトルエンの、1リットル1,2-ジクロロエタン溶液を滴下した。反応混合物を12時間攪拌した後、これを3リットルの氷と1リットルの濃HClの混合物に注入した。混合物を塩化メチレンにて抽出し、有機層を水で洗浄し、硫酸ナトリウムで乾燥し、濃縮した。残留物を減圧下に蒸留した。これにより256 g (理論量の60%)の2-クロロ-3-メチル-4-メチルチオアセトフェノンが得られた(融点:46)。

工程b) 2-クロロ-3-メチル-4-メチルスルホニルアセトフェノン

163.0 g (0.76モル)の2-クロロ-3-メチル-4-メチルチオアセトフェノンを、1.5リットルの氷酢酸に溶解し、18.6 gのタングステン酸ナトリウムを添加し、173.3 gの30%過酸化水素溶液を冷却しながら滴下した。2日間攪拌を継続し、得られた混合物を水で希釈した。沈殿した固体を吸引濾過し、水で洗浄し、乾燥した。これにより164.0 g (理論量の88%)の2-クロロ-3-メチル-4-メチルスルホニルアセトフェノンが得られた(融点:110~111)。

工程c) 2-クロロ-3-メチル-4-メチルスルホニル安息香酸

82 g (0.33モル)の2-クロロ-3-メチル-4-メチルスルホニルアセトフェノンを、700 mlのジオキサンに溶解し、1リットルの12.5%次亜塩素酸ナトリウム溶液を室温にて滴下した。80にて1時間攪拌を継続した。冷却後、二層が形成された。このうち下層を水で希釈して弱酸性とした。沈殿した固体を吸引濾過し、水で洗浄し、乾燥した。これにより60 g (理論量の73%)の2-クロロ-3-メチル-4-メチルスルホニル安息香酸が得られた(融点:230~231)。

工程d) 2-クロロ-3-メチル-4-メチルスルホニル安息香酸メチル

100 g (0.4モル)の2-クロロ-3-メチル-4-メチルスルホニル安息香酸を、1リットルのメタノールに溶解し、塩化水素をガスを還流温度にて5時間通過させた。次いで混合物を濃縮した。これにより88.5 g (理論量の84%)の2-クロロ-3-メチル-4-メチルスルホニル安息香酸メチルが得られた(融点:107~108)。

工程e) 3-プロモメチル-2-クロロ-4-メチルスルホニル安息香酸メチル

2リットルのテトラクロロメタンに溶解した82 g (0.1モル)の2-クロロ-3-メチル-4-メチルスルホニル安息香酸メチル、および56 g (0.31 g)のN-プロモスクシンイミドを、数回に分けて、露光下に添加した。反応混合物を濾過し、濾液を濃縮し、残留物を200 mlのメチル tert-ブチルエーテルに採取した。この溶液を石油エーテルで処理し、沈殿した固体を吸引濾過し、乾燥した。これにより74.5 g (理論量の70%)の3-プロモメチル-2-クロロ-4-メチルスルホニル安息香酸メチルが得られた(融点:74~75)。

工程f) 2-クロロ-3-ホルミル-4-メチルスルホニル安息香酸メチル

41.0 g (0.12モル)の3-プロモメチル-2-クロロ-4-メチルスルホニル安息香酸メチルの250 mlのアセトニトリル溶液を、42.1 g (0.36モル)のN-メチルモルホリンN-オキシドで処理した。このバッチを室温にて12時間攪拌し、次いで濃縮し、残留物を酢酸エチル中に採取した。得られた溶液を水で抽出し、硫酸ナトリウムで乾燥させ、濃縮した。これにより、31.2 g (理論量の94%)の2-クロロ-3-ホルミル-4-メチルスルホニル安息香酸メチルが得られた(融点:98~105)。

工程g) 2-クロロ-3-ヒドロキシミノメチル-4-メチルスルホニル安息香酸

15.00 g (54ミリモル)の2-クロロ-3-ホルミル-4-メチルスルホニル安息香酸メチルおよび4.20 g (60ミリモル)の塩酸ヒドロキシルアミンを、300 mlのメタノールに取り込み、3.18 g (30ミリモル)の炭酸ナトリウムの80 mlの水溶液を滴下した。混合物を室温にて12時間攪拌した後、メタノールを留去し、残留物を水で希釈し、混合物をジエチルエーテルで抽出した。有機層を乾燥した後、溶媒を除去した。これにより14.40 g (理論量の91%)の2-クロロ-3-ヒドロキシミノメ

10

20

30

40

50

チル - 4 - メチルスルホニル安息香酸メチルが得られた (融点 : 126 ~ 128)。
工程 h) 2 - クロロ - 3 - (4 , 5 - ジヒドロイソオキサゾール - 3 - イル) - 4 - メチルスルホニル安息香酸メチル (化合物 4 . 3)

158 . 0 g (0 . 54 モル) の 2 - クロロ - 3 - ヒドロキシイミノメチル - 4 - メチルスルホニル安息香酸メチルと 1 リットルのジクロロメタンによる溶液に 15 ~ 20 にてエチレンを 30 分間通過させた。1 . 6 g の酢酸ナトリウムを添加した後、454 ml の次亜塩素酸ナトリウム溶液を 10 にて、同時にエチレンを通過させながら滴下した。次いでエチレンを 10 にて更に 15 分間通じた。混合物を 12 時間攪拌した後、層を分離させ、有機相を水洗し、乾燥し、濃縮した。これにより 156 . 5 g (理論量の 90 %) 2 - クロロ - (4 , 5 - ジヒドロイソオキサゾール - 3 - イル) - 4 - メチルスルホニル安息香酸メチルが得られた。

10

(¹H NMR (ppm) : 3 . 24 (s)、3 . 42 (t)、3 . 99 (s)、4 . 60 (t)、7 . 96 (d)、8 . 10 (d))。

工程 i) 2 - クロロ - 3 - (4 , 5 - ジヒドロイソオキサゾール - 3 - イル) - 4 - メチルスルホニル安息香酸 (化合物 4 . 4)

32 . 8 g の水酸化ナトリウムの 330 ml メタノール溶液を、170 . 0 g (0 . 54 モル) の 2 - クロロ - 3 - (4 , 5 - ジヒドロイソオキサゾール - 3 - イル) - 4 - メチルスルホニル安息香酸メチルおよび 1 リットルのメタノールから成る混合物に、40 ~ 45 にて滴下した。得られた懸濁液を 50 にて 5 時間攪拌した。溶媒を留去した後、残留物を 1 . 5 リットルの水に採取し、水層を酢酸エチルにて 3 回抽出した。水層を塩酸性とし、酢酸エチルで 3 回抽出した。有機相を合わせた後、中性となるまで水で洗浄し、乾燥し、濃縮した。これにより 148 . 8 g (理論量の 91 %) の 2 - クロロ - 3 - (4 , 5 - ジヒドロイソオキサゾール - 3 - イル) - 4 - メチルスルホニル安息香酸が得られた。

20

(¹H NMR (ppm) : 3 . 26 (s)、3 . 45 (t)、4 . 63 (t)、8 . 15 (s)、8 . 53 (s、br))。

工程 j) 2 - クロロ - 3 - (4 , 5 - ジヒドロイソオキサゾール - 3 - イル) - 4 - メチルスルホニルベンゾイルクロリド (化合物 4 . 5)

50 ml の乾燥トルエン中の 74 . 8 g (0 . 63 モル) の塩化チオニルを、139 . 0 g の 2 - クロロ - 3 - (4 , 5 - ジヒドロイソオキサゾール - 3 - イル) - 4 - メチルスルホニル安息香酸、1 ml のジメチルホルムアミド、および 1 リットルの乾燥トルエンから成る溶液に 50 にて滴下した。混合物を 110 に 6 時間加熱した後、溶液を留去した。これにより 2 - クロロ - 3 - (4 , 5 - ジヒドロイソオキサゾール - 3 - イル) - 4 - メチルスルホニルベンゾイルクロリドが定量的収量で得られた。

30

(¹H NMR (ppm) : 3 . 25 (s)、3 . 46 (t)、4 . 62 (t)、8 . 21 (dd))。

[2 - クロロ - 3 - (5 - メチル - 4 , 5 - ジヒドロイソオキサゾール - 3 - イル) - 4 - メチルスルホニルベンゾイルクロリド (化合物 4 . 39)]

工程 a) 2 - クロロ - 3 - (5 - メチル - 4 , 5 - ジヒドロイソオキサゾール - 3 - イル) - 4 - メチルスルホニル安息香酸メチル (化合物 4 . 25)

40

15 . 0 g (52 ミリモル) の 2 - クロロ - 3 - ヒドロキシイミノメチル - 4 - メチルスルホニル安息香酸メチルの 200 ml のジクロロメタン溶液に、プロペンを室温にて 30 分間通過させた。1 . 6 g の酢酸ナトリウムを添加した後、42 . 8 ml の次亜塩素酸ナトリウム溶液の室温にて、同時にプロペンを通過させながら滴下した。次いでプロペンを室温にて更に 15 分間通じた。混合物を 3 時間還流した後、室温にて 12 時間攪拌し、還流下にプロペンを再度 5 時間にわたり通過させ、混合物を室温にて更に 12 時間攪拌した。各層を分離した後、有機層を水洗し、乾燥させ、濃縮した。これにより 15 . 5 g (理論量の 89 %) の 2 - クロロ - 3 - (5 - メチル - 4 , 5 - ジヒドロイソオキサゾール - 3 - イル) - 4 - メチルスルホニル安息香酸メチル (融点 : 130 ~ 135) が得られた。

50

工程 b) 2 - クロロ - 3 - (5 - メチル - 4 , 5 - ジヒドロイソオキサゾール - 3 - イル) - 4 - メチルスルホニル安息香酸 (化合物 4 . 2 6)

3 . 5 2 g (8 8 ミリモル) の水酸化ナトリウムの 1 0 0 m l のメタノール溶液を、 1 5 . 0 0 g (4 5 ミリモル) の 2 - クロロ - 3 - (5 - メチル - 4 , 5 - ジヒドロイソオキサゾール - 3 - イル) - 4 - メチルスルホニル安息香酸メチルと 2 0 0 m l のメタノールから成る混合物にゆっくりと滴下した。得られた懸濁液を室温にて 4 8 時間攪拌した。溶媒を留去した後、残留物を水に採取し、水層を酢酸エチルで 3 回洗浄した。水層を塩酸性とし、酢酸エチルで 3 回抽出した。有機層を合わせて、中性となるまで水洗し、乾燥させ、濃縮した。これにより 2 - クロロ - 3 - (5 - メチル - 4 , 5 - ジヒドロイソオキサゾール - 3 - イル) - 4 - メチルスルホニル安息香酸が得られた (融点 : 1 7 3 ~ 1 7 8) 。

10

工程 c) 2 - クロロ - 3 - (5 - メチル - 4 , 5 - ジヒドロイソキソキサゾール - 3 - イル) - 4 - メチルスルホニルベンゾイルクロリド (化合物 4 . 3 9)

5 . 7 g (5 1 ミリモル) の塩化チオニルを、 1 3 . 0 g (4 1 ミリモル) の 2 - クロロ - 3 - (5 - メチル - 4 , 5 - ジヒドロイソオキサゾール - 3 - イル) - 4 - メチルスルホニル安息香酸、 1 m l のジメチルホルムアミド、および 2 5 0 m l の乾燥トルエンから成る溶液に室温にて滴下した。次いで混合物を反応が完結するまで還流し、冷却後、溶媒を留去した。これにより 2 - クロロ - 3 - (5 - メチル - 4 , 5 - ジヒドロイソオキサゾール - 3 - イル) - 4 - メチルスルホニルベンゾイルクロリドが定量的収量で得られた。 [2 - クロロ - 3 - (1 ' - クロロ - 2 ' , 2 ' - ジメチルエチルアミノカルボニル) - 4 - メチルスルホニルベンゾイルクロリド]

20

工程 a) 2 - クロロ - 3 - ヒドロキシカルボニル - 4 - メチルスルホニル安息香酸メチル 1 7 0 m l の水中の 1 3 . 8 g (0 . 1 (融点 : 9 8 ~ 1 0 5) 1 モル) の燐酸水素ナトリウム一水塩、

4 9 . 3 g (0 . 4 3 モル) の 3 0 % 過酸化水素溶液および 6 6 . 2 g (0 . 5 9 モル) の 8 0 % 亜塩素酸ナトリウム水溶液を、 1 1 5 . 3 g (0 . 4 2 モル) の 2 - クロロ - 3 - ホルミル - 4 - メチルスルホニル安息香酸メチルと 2 0 0 0 m l のアセトニトリルとから成る溶液に、 5 にて順次添加した。次いで反応溶液を 5 にて 1 時間、室温にて 1 2 時間攪拌した。 1 0 % の塩酸にて pH を 1 と成し、 1 5 0 0 m l の 4 0 % の亜硫酸水素ナトリウム水溶液を添加した。混合物を室温にて 1 時間攪拌した後、水層を酢酸エチルで 3 回抽出した。有機層を合わせて亜硫酸水素ナトリウム溶液で洗浄し、乾燥した。溶媒を留去し、 1 0 2 g の 2 - クロロ - 3 - ヒドロキシカルボニル - 4 - メチルスルホニル安息香酸メチルを得た。

30

(¹H NMR ((p p m) : 3 . 3 4 (s) , 3 . 9 3 (s) , 8 . 0 8 (s) , 1 4 . 5 0 (s , b r)) 。

工程 b) 2 - クロロ - 3 - クロロカルボニル - 4 - メチルスルホニル安息香酸メチル ジメチルホルムアミド 2 滴と、 1 1 . 9 g (0 . 1 モル) の塩化チオニルを、 6 . 0 g (0 . 0 2 1 モル) の 2 - クロロ - 3 - ヒドロキシカルボニル - 4 - メチルスルホニル安息香酸メチルと、 5 0 m l の乾燥トルエンとから成る溶液に添加し、溶液を 4 時間還流した。溶媒を減圧下に除去すると、 6 . 2 g の 2 - クロロ - 3 - クロロカルボニル - 4 - メチルスルホニル安息香酸メチルが得られた。

40

(¹H NMR ((p p m) : 3 . 2 1 (s) , 4 . 0 2 (s) , 8 . 0 2 (d) , 8 . 0 7 (d)) 。

工程 c) 2 - クロロ - 3 - (1 ' - ヒドロキシ - 2 ' , 2 ' - ジメチルエチルアミノカルボニル) - 4 - メチルスルホニル安息香酸メチル

7 . 8 0 g (2 5 ミリモル) の 2 - クロロ - 3 - クロロカルボニル - 4 - メチルスルホニル安息香酸メチルの溶液を、 4 . 5 4 g (5 0 ミリモル) の 2 , 2 - ジメチルエタノールアミンの 4 0 m l のジクロロメタン溶液に、 0 ~ 5 で滴下した。反応混合物を室温にて 6 時間攪拌した後、水で 3 回抽出し、乾燥させ、濃縮した。これにより 8 . 2 0 g (理論量の 8 0 %) の 2 - クロロ - 3 - (1 ' - 2 ' , 2 ' - ジメチルエチルアミノカルボニル

50

) - 4 - メチルスルホニル安息香酸メチルが得られた (融点: 70 ~ 72)。

工程 d) 2 - クロロ - 3 - (1' - クロロ - 2' , 2' - ジメチルエチルアミノカルボニル) - 4 - メチルスルホニル安息香酸メチル

6.9 g (20 ミリモル) の 2 - クロロ - 3 - (1' - ヒドロキシ - 2' , 2' - ジメチルエチルアミノカルボニル) - 4 - メチルスルホニル安息香酸メチルと 5 ml の塩化チオニルの混合物を、室温にて 6 時間攪拌した。溶液を 50 ml のジクロロメタンで希釈し、次いで濃縮し、残留物を 20 ml のジクロロメタンに溶解した。シクロヘキサンを添加すると、結晶状沈殿が得られ、これを吸引濾過し、乾燥した。これにより 6.4 g (理論量の 88%) の 2 - クロロ - 3 - (1' - クロロ - 2' , 2' - ジメチルエチルアミノカルボニル) - 4 - メチルスルホニル安息香酸メチルが得られた。

10

工程 e) 2 - クロロ - 3 - (4' , 4' - ジメチル - 4' , 5' - ジヒドロキサゾール - 2 - イル) - 4 - メチルスルホニル安息香酸 (化合物 4.38)

5.82 g (15 ミリモル) の 2 - クロロ - 3 - (1' - クロロ - 2' , 2' - ジメチルエチルアミノカルボニル) - 4 - メチルスルホニル安息香酸と、0.81 g (20 ミリモル) の水酸化ナトリウムとの、80 ml のメタノール溶液を室温にて 8 時間攪拌した。溶媒を留去した後、残留物を水に採取し、混合物を酢酸エチルにて 3 回洗浄した。水層を塩酸酸性とし、酢酸エチルで 3 回抽出した。有機層を乾燥させた後、溶媒を減圧下に除去した。これにより 3.10 g (理論量の 56%) の 2 - クロロ - 3 - (4' , 4' - ジメチル - 4' , 5' - ジヒドロキサゾール - 2 - イル) - 4 - メチルスルホニル安息香酸が得られた。

20

(¹H NMR (ppm) : 1.34 (s)、3.40 (s)、4.13 (s)、8.07 (s)、13.95 (s、br))。

工程 f) 2 - クロロ - 3 - (1' - クロロ - 2' , 2' - ジメチルエチルアミノカルボニル) - 4 - メチルスルホニルベンゾイルクロリド

3.00 g (9 ミリモル) の 2 - クロロ - 3 - (4' , 4' - ジメチル - 4' , 5' - ジヒドロキサゾール - 2 - イル) - 4 - メチルスルホニル安息香酸、1.43 g の塩化チオニルおよびジメチルホルムアミド 1 滴の、80 ml の乾燥トルエン中の溶液を 3 時間還流した。冷却後、溶媒を減圧下に留去した。これにより 3.43 g (理論量の 86%) の 2 - クロロ - 3 - (1' - クロロ - 2' , 2' - ジメチルエチルアミノカルボニル) - 4 - メチルスルホニルベンゾイルクロリドが得られた。

30

[2 - クロロ - 3 - (1, 3, 4 - オキサチアゾリン - 2 - オン - 5 - イル) - 4 - メチルスルホニル安息香酸メチル (化合物 4.22)]

工程 a) 3 - アミノカルボニル - 2 - クロロ - 4 - メチルスルホニル安息香酸メチル

15.0 g (48 ミリモル) の 2 - クロロ - 3 - クロロカルボニル - 4 - メチルスルホニル安息香酸メチルと 300 ml の乾燥ジオキサノンとから成る溶液に、アンモニアを 2 時間通過させた。得られた沈殿を吸引濾過し、濾液を濃縮した。これにより 15.2 g の 3 - アミノカルボニル - 2 - クロロ - 4 - メチルスルホニル安息香酸メチルが定量的収量で得られた。

工程 b) 2 - クロロ - 3 - (1, 3, 4 - オキサチアゾリン - 2 - オン - 5 - イル) - 4 - メチルスルホニル安息香酸メチル

40

9.80 g (75 ミリモル) の塩化クロロカルボニルスルホニルを、4.37 g (15 ミリモル) の 3 - アミノカルボニル - 2 - クロロ - 4 - メチルスルホニル安息香酸メチルの 150 ml の乾燥トルエン溶液に滴下した。混合物を還流下に 48 時間攪拌した後、溶媒を減圧下に留去し、残留物をシリカゲルクロマトグラフィーに付した (溶離液 : 酢酸エチル / クロロヘキサン = 1 / 1)。これにより 3.70 g (理論量の 70%) の 2 - クロロ - 3 - (1, 3, 4 - オキサチアゾリン - 2 - オン - 5 - イル) - 4 - メチルスルホニル安息香酸メチルが得られた。

[2 - クロロ - 4 - メチルスルホニル - 3 - (4, 5 - ジヒドロキサゾール - 3 - イル) - 安息香酸メチル (化合物 4.41)]

41.8 g (0.41 モル) のトリエチルアミン、次いで 150 ml のトルエン中の 3 1

50

、1 g (0.10 モル) の 2 - クロロ - 3 - クロロカルボニル - 4 - メチルスルホニル安息香酸メチルを、500 ml のトルエン中の 26.6 g (0.13 モル) の臭化水素酸 1 - アミノ - 2 - ブロモエタンに、室温にて滴下した。混合物を 5 時間加熱還流し、次いで室温にて 12 時間攪拌し、更に 5.0 g (0.02 モル) の臭化水素酸 1 - アミノ - 2 - ブロモエタンを添加し、混合物を 7.5 時間加熱還流した。反応混合物を放冷し、酢酸エチルで希釈し、水で洗浄し、乾燥し、濃縮した。残留物をメチル - tert - ブチルエーテル / 酢酸エチルにより再結晶した。14.5 g (理論量の 46%) の 2 - クロロ - 4 - メチルスルホニル - 3 - (4, 5 - ジヒドロオキサゾール - 2 - イル) 安息香酸メチルを得た。

[2 - クロロ - 3 - (5 - メトキシ - 5 - メチル - 4, 5 - ジヒドロイソオキサゾール - 3 - イル) - 4 - メチルスルホニル安息香酸 (化合物 4.60)]

工程 a) 2 - クロロ - 3 - (5 - メトキシ - 5 - メチル - 4, 5 - ジヒドロイソオキサゾール - 3 - イル) - 4 - メチルスルホニル安息香酸メチル

7.3 g (10.2 ミリモル) の 2 - メトキシ - 1 - プロパン、28 ml の次亜塩素酸ナトリウム溶液 (12.5%) およびスパチュラ 1 杯の酢酸ナトリウムを、順次 200 ml の塩化メチレン中の 10.0 g (34 ミリモル) の 2 - クロロ - 3 - (ヒドロキシイミノメチル) - 4 - メチルスルホニル安息香酸メチルに添加した。得られた混合物を室温にて 12 時間攪拌し、溶媒を除去し、残留物を酢酸エチルに採取し、水洗し、乾燥し、濃縮した。残留物をシリカゲルクロマトグラフィーに付した (溶離液: シクロヘキサン: 酢酸エチル = 3:2)。これにより 5.8 g (理論量の 47%) の 2 - クロロ - 3 - (5 - メトキシ - 5 - メチル - 4, 5 - ジヒドロイソオキサゾール - 3 - イル) - 4 - メチルスルホニル安息香酸メチルが得られた (融点: 100 ~ 105)。

工程 b) 2 - クロロ - 3 - (5 - メトキシ - 5 - メチル - 4, 5 - ジヒドロイソオキサゾール - 3 - イル) - 4 - メチルスルホニル安息香酸エステル

100 ml のピリジン中の、5.5 g (15.0 ミリモル) の 2 - クロロ - 3 - (5 - メトキシ - 5 - メチル - 4, 5 - ジヒドロイソオキサゾール - 3 - イル) - 4 - メチルスルホニル安息香酸メチルを、200 ml のピリジン中の 5.0 g (37.5 ミリモル) の沃化リチウムに、還流温度にて滴下した。この混合物をこの温度にて 4 時間攪拌し、次いで冷却し、溶媒を除去し、残留物をトルエン中に採取し、再濃縮した。次いで残留物を水と混合し、塩化メチレンで洗浄し、塩酸を使用して pH を 1 に調整した。水層を塩化メチレンで抽出し、得られた有機層を乾燥、濃縮した。これにより 4.7 g (理論量の 90%) の 2 - クロロ - (5 - メトキシ - 5 - メチル - 4, 5 - ジヒドロイソオキサゾール - 3 - イル) - 4 - メチルスルホニル安息香酸エステルが得られた (融点: 40 ~ 45)。

[2 - クロロ - 3 - (2 - メチル - 2 H - 1, 3, 4 - ジオキサゾール - 5 - イル) - 4 - メチルスルホニル安息香酸メチル (化合物 4.44)]

150 ml の塩化メチレン中の 8.0 g (27.4 ミリモル) の 2 - クロロ - 3 - (ヒドロキシイミノメチル) - 4 - メチルスルホニル安息香酸メチルを滴下して、16.0 g (27.4 ミリモル) の 12.5% の次亜塩素酸ナトリウム溶液と混合し、スパチュラ 1 杯の酢酸ナトリウムを添加した。1 時間後、34.4 g (0.74 モル) のアセトアルデヒドを 36 時間に亘り少量ずつ添加し、得られた混合物をゆっくりと 55 に加熱した。次いで混合物を室温にて 48 時間攪拌し、水洗し、乾燥し、濃縮した。残留物を塩化メチレンに採取し、10.0 g (0.23 モル) のアセトニトリルとスパチュラ 1 杯の酢酸ナトリウムとを添加し、得られた混合物を 8 時間加熱還流した。72 時間後、更に 10.0 g (0.23 モル) のアセトアルデヒドを添加し、混合物を室温にて攪拌した。次いで混合物を水洗し、乾燥し、濃縮した。残留物をシリカゲルに通過させた (溶離液: イソプロパノール: シクロヘキサン = 1:9)。これにより 5.0 g (理論量の 55%) の 2 - クロロ - 3 - (2 - メチル - 2 H - 1, 3, 4 - ジオキサゾール - 5 - イル) - 4 - メチルスルホニル安息香酸メチルが得られた。

以下の表 4 に、上述の化合物と、更に、同様の方法で製造された、または製造可能な式 I I I の他の安息香酸誘導体を示す。

10

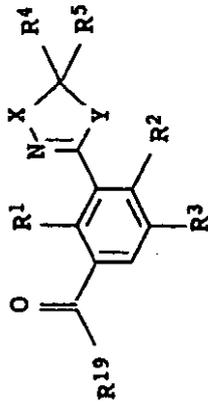
20

30

40

50

表 4:



III

No.	R ¹	R ²	R ³	X	R ⁴	R ⁵	Y	R ¹⁹	物理データ 融点 [°C]; ¹ H NMR [δ (ppm)]
4.1	Cl	Cl	H	O	H	H	CH ₂	OCH ₃	3.29 (t); 3.91 (s); 4.58 (t); 7.46 (d); 7.83 (d).
4.2	Cl	Cl	H	O	H	H	CH ₂	OH	3.28 (t); 4.60 (t); 7.02 (s, br); 7.46 (d); 7.98 (d).
4.3	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	H	H	CH ₂	OCH ₃	3.24 (s); 3.42 (t); 3.99 (s); 4.60 (t); 7.96 (d); 8.10 (d).
4.4	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	H	H	CH ₂	OH	3.26 (s); 3.45 (t); 4.63 (t); 8.15 (s); 8.53 (s, br).
4.5	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	H	H	CH ₂	Cl	3.25 (s); 3.46 (t); 4.62 (t); 8.21 (dd).
4.6	Cl	Cl	H	C(CH ₃) ₂	H	H	O	OH	1.31 (s); 4.16 (s); 7.69 (d); 7.90 (d); 13.8 (s, br).

10

20

30

40

NO.	R ¹	R ²	R ³	X	R ⁴	R ⁵	Y	R ¹⁹	物理データ 融点 [°C]; ¹ H NMR [δ (ppm)]
4.7	Cl	SO ₂ C ₂ H ₅	H	O	CH ₃	CH ₃	CH ₂	OCH ₃	1.25 (t); 1.57 (s); 3.21 (s); 3.42 (q); 3.99 (s); 7.94 (d); 8.07 (d).
4.8	Cl	SO ₂ C ₂ H ₅	H	O	CH ₃	CH ₃	CH ₂	OH	1.13 (t); 1.47 (s); 3.15 (s); 3.43 (q); 8.06 (s); 13.8 (s, br).
4.9	Cl	SO ₂ C ₂ H ₅	H	O	H	H	CH ₂	OCH ₃	1.28 (t); 3.41 (m); 4.02 (s); 4.62 (t); 7.95 (d); 8.06 (d).
4.10	Cl	SO ₂ C ₂ H ₅	H	O	H	H	CH ₂	OH	137-140
4.11	Cl	SO ₂ C ₂ H ₅	H	O	CH ₃	H	CH ₂	OCH ₃	1.26 (t); 1.53 (d); 3.06 (dd); 3.42 (q); 3.49 (dd); 5.05 (m); 7.95 (d); 8.07 (d).
4.12	Cl	SO ₂ C ₂ H ₅	H	O	CH ₃	H	CH ₂	OH	140-143
4.13	Cl	SO ₂ CH ₃	H	CH ₂	H	H	O	OCH ₃	3.30 (s); 3.98 (s); 4.11 (t); 4.55 (t); 7.97 (d); 8.08 (d).
4.14	Cl	SO ₂ CH ₃	H	CH ₂	H	H	O	OH	3.38 (s); 4.00 (t); 4.46 (t); 8.08 (s).
4.15	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	H	H	CH ₂	OH	3.30 (s); 3.35 (t); 4.15 (s, br); 4.50 (t); 8.05 (s).
4.16	Cl	SO ₂ -n-C ₃ H ₇	H	O	CH ₃	CH ₃	CH ₂	OCH ₃	0.95 (t); 1.47 (s); 1.58 (quin); 3.12 (s); 3.31 (s); 3.43 (t); 3.93 (s); 8.09 (dd).
4.17	Cl	SO ₂ -n-C ₃ H ₇	H	O	CH ₃	CH ₃	CH ₂	OH	0.93 (t); 1.47 (s); 1.58 (quin); 3.15 (s); 3.42 (t); 8.05 (s).

No.	R ¹	R ²	R ³	X	R ⁴	R ⁵	Y	R ¹⁹	物理データ 融点 [°C]; ¹ H NMR [δ (ppm)]
4.18	Cl	SO ₂ -n-C ₃ H ₇	H	O	H	H	CH ₂	OCH ₃	0.92 (t); 1.55 (quin); 3.39 (m); 3.93 (s); 4.50 (t); 8.08 (dd).
4.19	Cl	SO ₂ -n-C ₃ H ₇	H	O	H	H	CH ₂	OH	148-150
4.20	Cl	SO ₂ -n-C ₃ H ₇	H	O	CH ₃	H	CH ₂	OCH ₃	0.93 (t); 1.49 (d); 1.58 (quin); 2.94 (dd); 3.42 (m); 3.93 (s); 4.97 (m); 8.10 (dd).
4.21	Cl	SO ₂ -n-C ₃ H ₇	H	O	CH ₃	H	CH ₂	OH	0.94 (t); 1.39 (d); 1.58 (quin); 2.96 (dd); 3.50 (m); 4.95 (m); 8.05 (s).
4.22	Cl	SO ₂ CH ₃	H	S	=O		O	OCH ₃	3.24 (s); 4.02 (s); 8.14 (dd).
4.23	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	COOC ₂ H ₅	H	CH ₂	OCH ₃	118-121
4.24	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	COOC ₂ H ₅	H	CH ₂	OH	
4.25	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	CH ₃	H	CH ₂	OCH ₃	130-135
4.26	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	CH ₃	H	CH ₂	OH	173-178
4.27	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	CH ₃	CH ₃	CH ₂	OCH ₃	1.57 (s); 3.18 (s); 3.27 (s); 4.01 (s); 7.97 (d); 8.12 (d).
4.28	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	CH ₃	CH ₃	CH ₂	OH	1.48 (s); 3.15 (s); 3.34 (s); 8.08 (dd).
4.29	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	C ₂ H ₅	H	CH ₂	OCH ₃	0.97 (t); 1.72 (m); 3.10 (dd); 3.32 (s); 3.37 (dd); 4.72 (m); 8.08 (dd).

10

20

30

40

No.	R ¹	R ²	R ³	X	R ⁴	R ⁵	Y	R ¹⁹	物理データ 融点 [°C]; ¹ H NMR [δ (ppm)]
4.30	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	H	-(CH ₂) ₃ -CH-		OCH ₃	1.57 (m); 1.81 (m); 2.21 (m); 3.20 (s); 4.02 (s); 4.32 (t); 5.35 (dd); 7.92 (d); 8.18 (d).
4.31	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	H	-(CH ₂) ₃ -CH-		OH	1.72 (m); 2.01 (m); 3.27 (s); 4.24 (t); 5.23 (dd); 8.05 (d); 8.15 (d); 13.8 (s, br).
4.32	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	-(CH ₂) ₂ -O-(CH ₂) ₂ -		CH ₂	OCH ₃	2.00 (m); 3.23 (s); 3.27 (s); 3.72 (m); 4.00 (s); 7.96 (d); 8.04 (d).
4.33	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	-(CH ₂) ₂ -O-(CH ₂) ₂ -		CH ₂	OH	78-83
4.34	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	-(CH ₂) ₄ -		CH ₂	OCH ₃	1.78 (m); 2.24 (m); 3.27 (s); 3.36 (s); 3.98 (s); 7.94 (d); 8.12 (d).
4.35	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	-(CH ₂) ₄ -		CH ₂	OH	1.76 (m); 2.05 (m); 3.30 (s); 3.33 (s); 8.09 (dd).
4.36	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	C ₂ H ₅	C ₂ H ₅	CH ₂	OCH ₃	1.00 (t); 1.85 (m); 3.13 (s); 3.27 (s); 3.98 (s); 7.94 (d); 8.11 (d).
4.37	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	C ₂ H ₅	C ₂ H ₅	CH ₂	OH	0.91 (t); 1.76 (m); 3.12 (s); 3.33 (s); 8.07 (dd); 13.75 (s, br).
4.38	Cl	SO ₂ CH ₃	H	C(CH ₃) ₂	H	H	O	OH	1.34 (s); 3.40 (s); 4.13 (s); 8.07 (s); 13.95 (s, br).
4.39	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	CH ₃	H	CH ₂	Cl	

No.	R ¹	R ²	R ³	X	R ⁴	R ⁵	Y	R ¹⁹	物理データ 融点 [°C]; ¹ H-NMR [δ (ppm)]
4.40	Cl	SO ₂ CH ₃	H	CH ₂	H	H	O	OH	> 260
4.41	Cl	SO ₂ CH ₃	H	CH ₂	H	H	O	OCH ₃	3.29 (3H); 3.96 (3H); 4.12 (2H); 4.55 (2H); 7.98 (1H); 8.09 (1H).
4.42	Cl	SCH ₃	H	O	H	H	CH ₂	OCH ₃	202-203
4.43	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	COOMe	H	CHCO ₂ CH ₃	OCH ₃	1.05 (3H); 1.35 (3H); 3.19 (3H); 4.01 (3H); 4.09 (2H); 4.35 (2H); 5.06 (1H); 5.77 (1H); 8.08 (1H); 8.17 (1H).
4.44	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	CH ₃	H	O	OCH ₃	1.78 (3H); 3.30 (3H); 3.98 (3H); 6.40 (1H); 8.08 (1H); 8.15 (1H).
4.45	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	CHO	H	CHCH ₃	OCH ₃	80-85
4.46	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	CH ₃	H	CHCH ₂ Cl	OCH ₃	1.65 (3H); 3.27 (3H); 3.50 (2H); 4.00 (3H); 4.22 (1H); 4.88/5.08 (1H); 7.99 (1H); 8.12 (1H).
4.47	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	CH ₃	H	CHCH ₂ Cl	OH	100-105
4.48	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	CHO	H	CHCH ₃	OH	180-185
4.49	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	SC ₂ H ₅	H	CH ₂	OCH ₃	1.30 (3H); 2.75 (2H); 3.25 (1H); 3.34 (3H); 3.78 (1H); 3.94 (3H); 6.22 (1H); 8.15 (2H).
4.50	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	SC ₂ H ₅	H	CH ₂	OH	65-67
4.51	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	CH ₃	H	CHCH ₃	OCH ₃	1.01 (3H); 1.28 (3H); 3.33 (4H); 3.96 (3H); 4.98 (1H); 8.12 (1H); 8.20 (1H).

10

20

30

40

No.	R ¹	R ²	R ³	X	R ⁴	R ⁵	Y	R ¹⁹	物理データ 融点 [°C]; ¹ H-NMR [δ (ppm)]
4.52	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	CH ₃	H	CRCH ₃	OH	68-75
4.53	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	OCOCH ₃	H	CH ₂	OCH ₃	105-110
4.54	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	H	H	CH ₂	OH	
4.55	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	OCOCH ₃	H	CH ₂	OH	45-50
4.56	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	OCH ₃	H	CH ₂	OH	60-65
4.57	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	CHCl(CH ₃)	H	CH ₂	OCH ₃	1.63 (3H); 3.23 (3H); 3.50 (2H); 3.99 (3H); 4.25 (1H); 4.83/5.03 (1H); 7.96 (1H); 8.13 (1H).
4.58	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	CHCl(CH ₃)	H	CH ₂	OH	1.56 (3H); 3.33 (3H); 3.43 (2H); 4.36 (1H); 4.93 (1H); 8.10 (2H).
4.59	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	CH ₃	OCH ₃	CH ₂	OCH ₃	100-105
4.60	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	CH ₃	OCH ₃	CH ₂	OH	40-45
4.61	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	CF ₃	OCOCH ₃	CH ₂	OCH ₃	60-65
4.62	Cl	SCH ₃	H	O	H	H	CH ₂	OH	
4.63	Cl	SO ₂ Me	H	O	COCH ₃	H	CH ₂	OCH ₃	2.36 (3H); 3.25 (3H); 3.66 (2H); 4.01 (3H); 5.20 (1H); 8.01 (1H); 8.12 (1H).
4.64	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	CF ₃	H	CH ₂	OCH ₃	156
4.65	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	CF ₃	H	CH ₂	OH	170
4.66	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	F	F	CH ₂	OCH ₃	
4.67	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	F	F	CH ₂	OH	
4.68	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	F	H	CH ₂	OCH ₃	142-143

10

20

30

40

No.	R ¹	R ²	R ³	X	R ⁴	R ⁵	Y	R ¹⁹	物理データ 融点 [°C]; ¹ H-NMR [δ (ppm)]
4.69	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	F	H	CH ₂	OH	
4.70	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	CH ₂ Cl	H	CH ₂	OCH ₃	107-110
4.71	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	CH ₂ Cl	H	CH ₂	OH	60-65
4.72	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	OCH ₃	H	CH ₂	OCH ₃	105-110
4.73	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	OC ₂ H ₅	H	CH ₂	OCH ₃	155-160
4.74	Cl	SO ₂ CH ₃	H	CH ₂	H	H	S	OCH ₃	
4.75	CH ₃	H	H	C=O	H	H	S	OCH ₃	112-120
4.76	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	CF ₃	OH	CH ₂	OH	3.38 (s); 3.56 (d); 3.79 (d); 8.16 (s); 8.67 (s, br).
4.77	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	O-t-C ₄ H ₉	H	CH ₂	OCH ₃	130-135
4.78	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	O-t-C ₄ H ₉	H	CH ₂	OH	1.25 (s); 3.05 (dd); 3.34 (s); 3.45 (dd); 6.17 (m); 8.08 (s).
4.79	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	CH ₃	H	CHCH ₃	OCH ₃	1.01 (d); 1.28 (d); 3.35 (m); 3.96 (s); 4.99 (m); 8.12 (d); 8.20 (d).
4.80	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	CH ₃	H	CHCH ₃	OH	68-75
4.81	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	SC ₂ H ₅	H	CH ₂	OCH ₃	1.30 (t); 2.77 (q); 3.25 (dd); 3.34 (s); 3.78 (dd); 3.94 (s); 6.22 (m), 8.24 (s).
4.82	Cl	SO ₂ CH ₃	H	O	SC ₂ H ₅	H	CH ₂	OH	65-67
4.83	SCH ₃	SCH ₃	H	O	H	H	CH ₂	OCH ₂ CH ₃	1.28 (t); 2.30 (s); 2.46 (s); 3.28 (t); 4.31 (q); 4.45 (t); 7.42 (d); 7.68 (d).

No.	R ¹	R ²	R ³	X	R ⁴	R ⁵	Y	R ¹⁹	物理データ 融点 [°C]; ¹ H-NMR [δ (ppm)]
4.84	SCH ₃	SCH ₃	H	O	H	H	CH ₂	OH	2.32 (s); 2.48 (s); 3.28 (t); 4.42 (t); 7.48 (d); 7.64 (d); 13.2 (s).
4.85	SO ₂ CH ₃	SO ₂ CH ₃	H	O	H	H	CH ₂	OH	3.25 (s); 3.35 (s); 3.44 (t); 8.05 (d); 8.45 (d).

10

20

30

40

式 I の 3 - ヘテロシクリル置換ベンゾイル誘導体およびその農業上有用な塩は、異性体混合物の形態と、純粋な異性体の形態の双方において除草剤として好適に用いられる。通常式 I の化合物を含む除草剤組成物は、特に高施与率で非耕作地帯の植生を非常に良好に制御するという効果を奏する。農作物、例えばコムギ、イネ、トウモロコシ、ダイズおよび綿花において、本発明の除草剤は、農作物には実質的な被害を与えずに広葉の雑草および

50

イネ科雑草に作用する。この効果は特に低施与率にて観察される。

施与方法に応じて、式Iの化合物およびこれを含む除草剤組成物は、更にの多数の農作物に使用し、望ましくない植物を防除することも可能である。例えば以下の農作物が適している。

タマネギ (<i>Allium cepa</i>)	
パイナップル (<i>Ananas comosus</i>)	
ナンキンマメ (<i>Arachis hypogaea</i>)	
アスパラガス (<i>Asparagus officinalis</i>)	
フダンソウ (<i>Beta vulgaris spec. altissima</i>)	
サトウジシャ (<i>Beta vulgaris spec. rapa</i>)	10
アブラナ (変種カブラ) (<i>Brassica napus var. napus</i>)	
カブカンラン (変種ナポブラシーカ) (<i>Brassica napus var. napobrassica</i>)	
テンサイ (変種シルベストリス) (<i>Brassica rapa var. silvestris</i>)	
トウツバキ (<i>Camellia sinensis</i>)	
ベニバナ (<i>Carthamus tinctorius</i>)	
キヤリーヤイリノイネンシス (<i>Carya illinoensis</i>)	
レモン (<i>Citrus limon</i>)	
ナツミカン (<i>Citrus sinensis</i>)	20
コーヒー [<i>Coffea arabica</i> (<i>Coffea canephora</i> , <i>Coffea liberica</i>)]	
キュウリ (<i>Cucumis sativus</i>)	
ギョウギシバ (<i>Cynodon dactylon</i>)	
ニンジン (<i>Daucus carota</i>)	
アブラヤシ (<i>Elaeis guineensis</i>)	
イチゴ (<i>Fragaria vesca</i>)	
大豆 (<i>Glycine max</i>)	
木綿 [<i>Gossypium hirsutum</i> (<i>Gossypium arboreum</i> , <i>Gossypium herbaceum</i> , <i>Gossypium vitifolium</i>)]	30
ヒマワリ (<i>Helianthus annuus</i>)	
ゴムノキ (<i>Hevea brasiliensis</i>)	
大麦 (<i>Hordeum vulgare</i>)	
カラハナソウ (<i>Humulus lupulus</i>)	
アメリカイモ (<i>Ipomoea batatas</i>)	
オニグルミ (<i>Juglans regia</i>)	
レンズマメ (<i>Lens culinaris</i>)	
アマ (<i>Linum usitatissimum</i>)	
トマト (<i>Lycopersicon lycopersicum</i>)	40
リンゴ属 (<i>Malus spec.</i>)	
キヤツサバ (<i>Manihot esculenta</i>)	
ムラサキウマゴヤシ (<i>Medicago sativa</i>)	
バショウ属 (<i>Musa spec.</i>)	
タバコ [<i>Nicotiana tabacum</i> (<i>N. rustica</i>)]	
オリーブ (<i>Olea europaea</i>)	
イネ (<i>Oryza sativa</i>)	
アズキ (<i>Phaseolus lunatus</i>)	
ゴガツササゲ (<i>Phaseolus vulgaris</i>)	
トウヒ (<i>Picea abies</i>)	50

マツ属 (*Pinus spec.*)
 シロエンドウ (*Pisum sativum*)
 サクラ (*Prunus avium*)
 モモ (*Prunus persica*)
 ナシ (*Pyrus communis*)
 スグリ (*Ribes sylvestri*)
 トウゴマ (*Ricinus communis*)
 サトウキビ (*Saccharum officinarum*)
 ライムギ (*Secale cereale*)
 ジャガイモ (*Solanum tuberosum*)
 モロコシ [*Sorghum bicolor (s. vulgare)*]
 カカオ (*Theobroma cacao*)
 ムラサキツメクサ (*Trifolium pratense*)
 小麦 (*Triticum aestivum*)
 トリテイカム、ドラム (*Triticum durum*)
 ソラマメ (*Vicia faba*)
 ブドウ (*Vitis vinifera*)
 トウモロコシ (*Zea mays*)。

更に、遺伝子工学的方法を含む培養の結果として除草剤の作用に耐性を有する農作物においても化合物Iを使用することができる。

化合物I、またはこれを含有する除草剤組成物は、例えば直接的に噴霧可能な水溶液、粉末、懸濁液、高濃度の水性、油性またはその他の懸濁液または分散液、エマルジョン、油性分散液、ペースト、ダスト剤、散布剤または顆粒の形で噴霧、ミスト法、ダスト法、散布法または注入法によって適用することができる。適用形式は、完全に使用目的に基づいて決定される。いずれの場合にも、本発明の有効物質の可能な限りの微細分が保証されるべきである。

除草剤組成物は、除草有効量の少なくとも1種類の式Iの化合物またはIの農業上有用な塩、および農作物保護物質の製剤により従来より使用されている助剤を含むものである。適する不活性添加剤としては、中位乃至高位の沸点の鉱油留分、例えば燈油またはディーゼル油、更にコールタール油等、並びに植物性または動物性産出源の油、脂肪族、環状および芳香族炭化水素、例えばパラフィン、テトラヒドロナフタレン、アルキル化ナフタレンまたはその誘導体、アルキル化ベンゼン及びその誘導体、アルコール、例えばメタノール、エタノール、プロパノール、ブタノール、シクロヘキサノール、ケトン、例えばシクロヘキサノン、強極性溶剤、例えばアミン、N-メチルピロリドン、水が使用される。水性使用形は乳濁液濃縮物、ペースト、または湿潤可能な粉末、水分散可能な粉末より水の添加により製造することができる。乳濁液、ペーストまたは油分散液を製造するためには、物質をそのまま、または油または溶剤中に溶解して、湿潤剤、接着剤、分散剤または乳化剤により水中に均質に混合することができる。しかも有効物質、湿潤剤、接着剤、分散剤または乳化剤および場合により溶剤または油より成る濃縮物を製造することもでき、これは水にて希釈するのに適する。

適する界面活性剤(助剤)としては次のものが挙げられる。リグノスルホン酸、フェノールスルホン酸、ナフタレンスルホン酸、ジブチルナフタレンスルホン酸、または脂肪酸、アルキルスルホナート、アルキルアリアルスルホナート、アルキルスルファート、ラウリルエーテルスルファート、脂肪アルコールスルファートの各アルカリ金属塩、アルカリ土類金属塩、アンモニウム塩、並びに硫化ヘキサ-、ヘプタ-及びオクタデカノールの塩、脂肪アルコールグリコールエーテルの塩、スルホン化ナフタレンおよびナフタレン誘導体とホルムアルデヒドとの縮合生成物、ナフタレン或はナフタレンスルホン酸とフェノールおよびホルムアルデヒドとの縮合生成物、ポリオキシエチレン-オクチルフェノールエーテル、エトキシ化イソオクチルフェノール、オクチルフェノール、ノニルフェノール、アルキルフェニルポリグリコールエーテル、トリブチルフェニルポリグリコールエーテル

10

20

30

40

50

、アルキルアリールポリエーテルアルコール、イソトリデシルアルコール、脂肪アルコール/エチレンオキシド縮合物、エトキシ化ヒマシ油、ポリオキシエチレンアルキルエーテル、ポリオキシプロピレンアルキルエーテル、ラウリルアルコールポリグリコールエーテルアセタート、ソルビトールエステル、リグニン - 亜硫酸廃液およびメチルセルロース

。粉末、散布剤およびダスト剤は有効物質と固状担体物質とを混合または一緒に磨砕することにより製造することができる。

粒状体、例えば被覆 - 、含浸 - および均質粒状体は、有効物質を固状担体物質に結合することにより製造することができる。固状担体物質は、例えば鉱物土、例えばシリカ、シリカゲル、珪酸塩、滑石、カオリン、石灰石、石灰、白亜、膠塊粒土、石灰質黄色粘土、粘土、白雲石、珪藻土、硫酸カルシウム、硫酸マグネシウム、酸化マグネシウム、磨砕合成樹脂、肥料、例えば硫酸アンモニウム、リン酸アンモニウム、硝酸アンモニウム、尿素、および植物性生成物、例えば穀物粉、樹皮粉、木材粉およびクルミ穀粉、セルロース粉末および他の固状担体物質である。

直接使用可能な製品における式 I の化合物の濃度は、広範囲に変更可能である。一般的に製剤は、約 0.001 - 98 重量%、好ましくは 0.01 - 95 重量%の少なくとも 1 種類の有効成分を含有する。この際有効物質は純度 90 ~ 100%、特に 95 ~ 100% (NMR スペクトルによる) で使用される。

上述の製品の製造例を以下に示す。

I. 20 重量部の化合物 No. 3.2 を、アルキル化ベンゼン 80 重量部、エチレンオキシド 8 ~ 10 モルをオレイン酸 - N - モノエタノールアミド 1 モルに付加した付加生成物 10 重量部、ドデシルベンゼンスルホン酸のカルシウム塩 5 重量部およびエチレンオキシド 40 モルをヒマシ油 1 モルに付加した付加生成物 5 重量部より成る混合物中に溶解する。この溶液を 10000 重量部の水に注入し、かつ細分布することにより有効成分 0.02 重量%を含有する水性分散液が得られる。

II. 20 重量部の化合物 No. 3.9 を、シクロヘキサノン 40 重量部、イソブタノール 30 重量部、エチレンオキシド 7 モルをイソオクチルフェノール 1 モルに付加した付加生成物 20 重量部、エチレンオキシド 40 モルをヒマシ油 1 モルに付加した付加生成物 10 重量部より成る混合物中に分散する。この分散液を水 10000 重量部に注入することにより有効成分 0.02 重量%を含有する水性分散液が得られる。

III. 20 重量部の化合物 No. 3.10 を、シクロヘキサノン 25 重量部、沸点 210 ~ 280 の鉱油留分 65 重量部およびエチレンオキシド 40 モルをヒマシ油 1 モルに付加した付加生成物 10 重量部より成る混合物中に溶解する。この溶液を水 10000 重量部に注入し、細分散することにより有効成分 0.02 重量%を含有する水性分散液が得られる。

IV. 20 重量部の化合物 No. 3.16 を、ジイソブチルナフタレンスルホン酸のナトリウム塩 3 重量部、亜硫酸塩廃液から得られたリグノスルホン酸のナトリウム塩 17 重量部および粉末状シリカゲル 60 重量部と十分に混和し、かつハンマーミル中において磨砕する。この混合物を水 20000 重量部に細分布することにより有効物質 0.1 重量%を含有する噴霧液が得られる。

V. 3 重量部の化合物 No. 3.21 を細粒状カオリン 97 重量部と密に混和する。これにより有効物質 3 重量%を含有する噴霧液が得られる。

VI. 20 重量部の化合物 No. 3.22 を、ドデシルベンゼンスルホン酸カルシウム 2 重量部、脂肪アルコールポリグリコールエーテル 8 重量部、フェノール/尿素/ホルムアルデヒド縮合物のナトリウム塩 2 重量部、およびパラフィン系鉱油 68 重量部と密に混和する。安定な油状分散液が得られる。

VII. 1 重量部の化合物 No. 3.34 を、シクロヘキサノン 70 重量部、エトキシ化イソオクチルフェノール 20 重量部、およびエトキシ化ヒマシ油 10 重量部から成る混合物に溶解する。これにより、安定な乳濁液濃縮物が得られる。

VIII. 1 重量部の化合物 No. 3.35 を、80 重量部のシクロヘキサノンと 20 重量

10

20

30

40

50

部のW e t t o l (登録商標) E M 3 1 (B A S F社製、エトキシ化ヒマシ油を基礎とする非イオン性乳濁液)との混合物に溶解する。これにより安定な乳濁液濃縮物が得られる。

式Iの化合物、またはこれを含む除草剤組成物は発芽前法または発芽後法により施用される。有効物質の、ある種の栽培植物に対する耐性が低い場合は、下部に成長している望ましくない植物または露出している土壌には付着しても、敏感な栽培植物の葉にできるだけ接触しないように、噴霧装置により除草剤を噴霧することができる(後直接撒布、レイバイ)。

防除処置の使用目的、季節、目的の植物および成長段階に応じて、ヘクタールあたりの有効物質(a . i .)の施与量を0 . 0 0 1 - 3 . 0 k g、好ましくは0 . 0 1 - 1 . 0 k gとする。

有効作用範囲を拡張し、相乗効果を達成するために、式Iの3 - ヘテロシクリル置換ベンゾイル誘導体を、多様な他の除草剤ないし生長抑制有効物質と混合し、同時に施与することが可能である。その混合対称物質としては、例えば1, 2, 4 - チアジアゾール、1, 3, 4 - チアジアゾール、アミド、アミノ燐酸およびその誘導体、アミノトリアゾール、アニリド、アリーールオキシ - /ヘテロアリーールオキシアルカン酸およびその誘導体、安息香酸およびその誘導体、ベンゾチアジアジノン、2 - (ヘテロアリーール/アロイル) - 1, 3 - シクロヘキサンジオン、ヘテロアリーールアリーールケトン、ベンジルイソオキサゾリジノン、メタ - C F₃ - フェニル誘導体、カルバマート、キノリンカルボン酸およびその誘導体、クロロアセトアニリド、シクロヘキセノンオキシムエーテル誘導体、ジアジン、ジクロロプロピオン酸およびその誘導体、ジヒドロベンゾフラン、ジヒドロフラン - 3 - オン、ジニトロアニリン、ジニトロフェノール、ジフェニルエーテル、ジピリジル、ハロカルボン酸およびその誘導体、尿素、3 - フェニルウラシル、イミダゾール、イミダゾリノン、N - フェニル - 3, 4, 5, 6 - テトラヒドロフタルイミド、オキサジアゾール、オキシラン、フェノール、アリーールオキシ - およびヘテロアリーールオキシフェノキシプロピオン酸エステル、フェニル酢酸およびその誘導体、2 - フェニルプロピオン酸およびその誘導体、ピラゾール、フェニルピラゾール、ピリダジン、ピリジンカルボン酸およびその誘導体、ピリミジルエーテル、スルホンアミド、スルホニル尿素、トリアジン、トリアジノン、トリアゾリノン、トリアゾールカルボキシアミドおよびウラシルなどが挙げられる。

更に、式Iの化合物は、単独でまたは他の除草剤と組み合わせて、更なる植物保護剤、例えば殺害虫剤または植物病原菌またはバクテリア防除薬剤との混合物として有効に施与される。苗栄養不足、希元素欠乏などの症状治療のために使用されるミネラル塩溶液と混合し得ること、植物に無害の油類、油濃縮物類に添加し得ることも重要である。

[使用実施例]

式Iの3 - ヘテロシクリル置換ベンゾイル誘導体の除草効果を、以下の温室実験により示す。

プラスチック植木鉢を栽培容器として用い、約3 . 0 %腐触したローム質の砂を培養基とした。被検植物の種子を種類ごとに播種した。

発芽前法により、水中に懸濁または乳化させた有効物質を、種子を撒いた後に細分布したノズルを使用して直接撒布した。出芽と成長を促進するために栽培容器を軽く灌水し、次いで植物が根付くまで半透明のプラスチックの覆いを被せた。有効物質により害が与えられない限り、この被覆が被検植物の均一な出芽を促進する。

出芽前法による処理を行う目的で、被検植物を、発育型に応じて草丈3 - 15 cmまで育成した後、水中に懸濁または乳化させた有効物質で処理した。この場合、被検植物を直接播種し同一の容器で栽培することも、当初は別々に苗として植え、処理の行われる2 - 3日前に試験用容器に移植することも可能である。発芽後法の場合の有効物質(a . i .)の使用量を、1ヘクタール当たり31 . 2 ~ 15 . 6 gとした。

各被検植物を種類ごとに10 - 25 または20 - 35 に保持し、実験期間を2 - 4週間とした。この間、被検植物を管理し、個々の処理に対する反応を評価した。

0 - 100の基準に基づき評価を行った。この基準において100は植物が全く出芽しないか、或いは少なくとも地上に出ている部分の全てが破壊してしまったことを示し、0は全く被害がないか、または正常な成長を遂げたことを示す。

以下に温室実験で使用した植物の種類を示す。

学名	一般名
<i>Chenopodium album</i>	アカザ
<i>Setaria faberii</i>	アキノエノコログサ
<i>Sinapsis alba</i>	シロガラシ
<i>Solanum nigrum</i>	イヌホオズキ
<i>Triticum aestivum</i>	コムギ
<i>Zea mays</i>	トウモロコシ

化合物3.33(表3)は、上述の単子葉および双子葉有害植物に対して非常に作用し、1ヘクタールあたりそれぞれ31.2および15.6gの施与割合で出芽後法に用いた場合冬コムギとトウモロコシにおける許容性が示された。

フロントページの続き

- (72)発明者 カルドルフ, ウヴェ
ドイツ国、D 6 8 1 5 9、マンハイム、デー 3 . 4
- (72)発明者 バウマン, エルンスト
ドイツ国、D 6 7 3 7 3、ドゥーデンホーフェン、ファルケンシュトラーセ、6アー
- (72)発明者 エンゲル, シュテファン
ドイツ国、D 6 5 5 1 0、イートシュタイン、フリードリヒ エーベルト シュトラーセ、1 3
- (72)発明者 マイア, グイド
ドイツ国、D 6 7 4 3 3、ノイシュタット、グートロイトハウスシュトラーセ、8
- (72)発明者 ヴィチェル, マティアス
ドイツ国、D 6 7 0 6 1、ルートヴィッヒスハーフェン、ヴィテルスバッハシュトラーセ、8 1
- (72)発明者 ラック, ミヒヤエル
ドイツ国、D 6 9 1 2 3、ハイデルベルク、ザントヴィンゲルト、6 7
- (72)発明者 ゲツ, ノルベルト
ドイツ国、D 6 7 5 4 7、ヴォルムス、シェファーストラーセ、2 5
- (72)発明者 ゲブハルト, ヨーアヒム
ドイツ国、D 6 7 1 5 7、ヴァヘンハイム、ペガウア、シュトラーセ、5 1
- (72)発明者 ミスリッツ, ウルフ
ドイツ国、D 6 7 4 3 3、ノイシュタット、マンデルリング、7 4
- (72)発明者 ヴァルター, ヘルムート
ドイツ国、D 6 7 2 8 3、オブリヒハイム、グリーンシュタター、シュトラーセ、8 2
- (72)発明者 ヴェストファレン, カール - オットー
ドイツ国、D 6 7 3 4 6、シュパイア、マウスベルクヴェーク、5 8
- (72)発明者 オッテン, マルティナ
ドイツ国、D 6 7 0 6 9、ルートヴィッヒスハーフェン、グンターシュトラーセ、2 8
- (72)発明者 ラインハイマー, ヨーアヒム
ドイツ国、D 6 7 0 6 3、ルートヴィッヒスハーフェン、メルツィガー、シュトラーセ、2 4

審査官 瀬下 浩一

- (56)参考文献 特開平 1 1 - 2 4 0 8 7 2 (J P , A)
特開平 1 1 - 2 4 0 8 7 0 (J P , A)
特開平 1 0 - 2 3 7 0 7 2 (J P , A)
特表平 1 0 - 5 0 9 1 4 0 (J P , A)
国際公開第 9 6 / 0 2 6 2 0 6 (W O , A 1)

(58)調査した分野(Int.Cl. , D B名)

C07D261/00 - 261/20, 401/00 - 421/14
A01N 1/00 - 65/02
A01P 1/00 - 23/00
REGISTRY(STN)
CAplus(STN)
MARPAT(STN)