

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 公表特許公報(A)

(11) 特許出願公表番号

特表2008-503527

(P2008-503527A)

(43) 公表日 平成20年2月7日(2008.2.7)

(51) Int.Cl.	F I	テーマコード (参考)
CO7D 471/04 (2006.01)	CO7D 471/04 116	4C065
AO1N 43/90 (2006.01)	CO7D 471/04 CSP	4H011
AO1P 3/00 (2006.01)	AO1N 43/90 104	
	AO1P 3/00	

審査請求 未請求 予備審査請求 未請求 (全 83 頁)

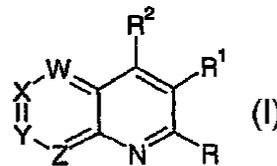
(21) 出願番号	特願2007-517181 (P2007-517181)	(71) 出願人	500584309 シンジェンタ パーティシペーションズ アクチェンゲゼルシャフト スイス国, ツェーハー 4058 バーゼ ル, シュバルツバルトアレー 215
(86) (22) 出願日	平成17年6月21日 (2005.6.21)	(71) 出願人	500371307 シンジェンタ リミテッド イギリス国 サリー ジーユー2 7ワイ エイチ, ギルドフォード, サリー リサー チ パーク, プリーストリー ロード, ユ アロピーアン リージョナル センター
(85) 翻訳文提出日	平成19年2月19日 (2007.2.19)	(74) 代理人	100099759 弁理士 青木 篤
(86) 国際出願番号	PCT/EP2005/006687	(74) 代理人	100077517 弁理士 石田 敬
(87) 国際公開番号	W02005/123698		
(87) 国際公開日	平成17年12月29日 (2005.12.29)		
(31) 優先権主張番号	0413955.6		
(32) 優先日	平成16年6月22日 (2004.6.22)		
(33) 優先権主張国	英国 (GB)		

最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 窒素含有複素環に基づく殺菌剤

(57) 【要約】

本発明は、殺菌剤として有用である一般式(I)の化合物に関連し、式中、W、X、Y、Z、R、R¹及びR²は、明細書中に開示されている。

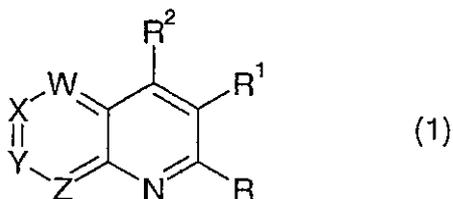


【特許請求の範囲】

【請求項 1】

一般式(1):

【化 1】



10

〔式中、

W、X、Y及びZはN又はCR⁸であってよく、そしてW、X、Y及びZのうち少なくとも1つ且つ3つ以下がNであるが、しかしW、X、Y=N及びZ=CR⁸、並びにX、Y、Z=N及びZ=CR⁸である化合物を除き;

R⁸はH、ハロ、C₁₋₄アルキル、C₁₋₄アルコキシ又はハロ(C₁₋₄)アルキル、CN、C₁₋₄アルキルチオ、C₁₋₄アルキルスルフィニル、C₁₋₄アルキルスルフォニル、アリール、ヘテロアリール、ハロ(C₁₋₆)アルコキシ、ハロ(C₁₋₄)アルキルチオ、C₂₋₄アルケニル、C₂₋₆アルキニル、C₂₋₆シクロアルキル、又はNR³R⁴であり;

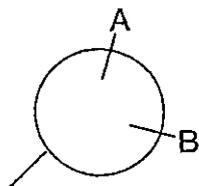
20

RはH、C₁₋₄アルキル、ハロ(C₁₋₄)アルキル、シアノ、ハロゲン又はNR³R⁴であり;

R²はハロ又はNR³R⁴であり;

R¹は次の一般式のアリール又はヘテロアリール環R²⁰であり

【化 2】

R²⁰

30

〔式中、Aは、ハロ、C₁₋₆アルキル、C₂₋₆アルケニル、C₂₋₆アルキニル、C₁₋₆アルコキシ、C₂₋₆アルケニルオキシ、C₂₋₆アルキニルオキシ、ハロ(C₁₋₆)アルキル、ハロ(C₁₋₆)アルコキシ、C₁₋₆アルキルチオ、ハロ(C₁₋₆)アルキルチオ、C₁₋₄アルコキシ(C₁₋₆)アルキル、C₃₋₆シクロアルキル、C₃₋₆シクロアルキル(C₁₋₄)アルキルから独立して選択された任意の1~4個の置換基であってよく、そして

40

Bは、独立してアリール、ヘテロアリール、アリールオキシ(フェノキシが置換されていないことを除く)、ヘテロアリールオキシ、アリール(C₁₋₄)アルコキシ(ベンジルオキシが置換されていないことを除く)、ヘテロアリール(C₁₋₄)アルコキシ、アリールチオ、アリールスルフィニル、アリールスルフォニル、ヘテロアリールチオ、ヘテロアリールスルフィニル、ヘテロアリールスルフォニル、アリール(C₂₋₄)アルケニル、アリール(C₂₋₄)アルキニル、ヘテロアリール(C₂₋₄)アルケニル、ヘテロアリール(C₂₋₄)アルキニル、アリール(C₁₋₄)アルキル、ヘテロアリール(C₁₋₄)アルキルからなる群から独立して選択される少なくとも1以上の置換基であり、そして前記任意のアリール又はヘテロアリール置換基は、任意にハロ、C₁₋₆アルキル、C₂₋₆アルケニル、C₂₋₆アルキニ

50

ル、 C_{1-6} アルコキシ、 C_{2-6} アルケニルオキシ、 C_{2-6} アルキニルオキシ、ハロ(C_{1-6})アルキル、ハロ(C_{1-6})アルコキシ、 C_{1-6} アルキルチオ、ハロ(C_{1-6})-アルキルチオ、 C_{1-4} アルコキシ(C_{1-6})アルキル、 C_{3-6} シクロアルキル、シアノ又はニトロで置換されている)；

R^3 及び R^4 は独立してH、 C_{1-8} アルキル、 C_{2-8} アルケニル、 C_{2-8} アルキニル、アリール、アリール(C_{1-8})アルキル、 C_{3-8} シクロアルキル、 C_{3-8} シクロアルキル(C_{1-6})アルキル、ヘテロアリール、ヘテロアリール(C_{1-8})アルキル、 NR^5R^6 であるかあるいは

R^3 と R^4 は一緒になって1もしくは複数の C_{1-4} アルキルもしくは C_{1-4} アルコキシで置換された C_{3-7} アルキレンもしくは C_{3-7} アルケニレン鎖を形成するかあるいは

R^3 と R^4 は、それらが結合する窒素原子と一緒に、モルフォリン、チオモルフォリン、チオモルフォリンS-酸化物もしくはチオモルフォリンS-二酸化物環もしくはピペラジンもしくはピペラジンN-(C_{1-4})アルキル(特にN-メチル)環を形成し；そして

R^5 と R^6 は独立してH、 C_{1-8} アルキル、 C_{2-8} アルケニル、 C_{2-8} アルキニル、アリール、アリール(C_{1-8})アルキル、 C_{3-8} シクロアルキル、 C_{3-8} シクロアルキル(C_{1-6})アルキル、ヘテロアリール又はヘテロアリール(C_{1-8})アルキルであり；

前記任意のアルキル、アルケニル、アルキニルもしくはシクロアルキル基もしくは成分(R^8 について以外)は、ハロゲン、シアノ、 C_{1-6} アルコキシ、 C_{1-6} アルキルカルボニル、 C_{1-6} アルコキシカルボニル、 C_{1-6} ハロアルコキシ、 C_{1-6} アルキルチオ、トリ(C_{1-4})アルキルシリル、 C_{1-6} アルキルアミノ又は C_{1-6} ジアルキルアミノであり、

前記任意のモルフォリン、チオモルフォリン、ピペリジン、ピペラジン及びピロリジン環は任意に、 C_{1-4} アルキル(特にメチル)で置換されており、そして R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 もしくは R^8 中の前記アリールもしくはヘテロアリール基もしくは成分は、ハロ、ヒドロキシ、メルカプト、 C_{1-6} アルキル、 C_{2-6} アルケニル、 C_{2-6} アルキニル、 C_{1-6} アルコキシ、 C_{2-6} アルケニルオキシ、 C_{2-6} アルキニルオキシ、ハロ(C_{1-6})アルキル、ハロ(C_{1-6})アルコキシ、 C_{1-6} アルキルチオ、ハロ(C_{1-6})アルキルチオ、ヒドロキシ(C_{1-6})アルキル、 C_{1-4} アルコキシ(C_{1-6})アルキル、 C_{3-6} シクロアルキル、 C_{3-6} シクロアルキル(C_{1-4})アルキル、フェノキシ、ベンジルオキシ、ベンゾイルオキシ、シアノ、イソシアノ、チオシアネート、イソチオシアネート、ニトロ、 $-NR^{13}R^{14}$ 、 $-NHCOR^{13}$ 、 $-NHCONR^{13}R^{14}$ 、 $-CONR^{13}R^{14}$ 、 $-SO_2R^{13}$ 、 $-OSO_2R^{13}$ 、 $-COR^{13}$ 、 $-CR^{13}=NR^{14}$ 又は $-N=CR^{13}R^{14}$ からなる群から選択される1又は複数の置換基により置換されており、ここで R^{13} 及び R^{14} は、独立して水素、 C_{1-4} アルキル、ハロ(C_{1-4})アルキル、 C_{1-4} アルコキシ、ハロ(C_{1-4})アルコキシ、 C_{1-4} アルキルチオ、 C_{3-6} シクロアルキル、 C_{3-6} シクロアルキル(C_{1-4})アルキル、フェニル又はベンジルであり、当該フェニル及びベンジル基は任意にハロゲン、 C_{1-4} アルキル又は C_{1-4} アルコキシで置換されている)の化合物。

【請求項2】

W及びZはNであり且つX及びYがCHである請求項1に記載の化合物。

【請求項3】

R^2 が NR^3R^4 である、請求項1又は2に記載の化合物。

【請求項4】

Rがハロである、請求項3に記載の化合物。

【請求項5】

請求項1~4のいずれか1項に記載の化合物であって、式中、 R^3 は C_{1-8} アルキル、ハロ(C_{1-8})アルキル、ハロ C_{1-4} アルコキシ(C_{1-8})アルキル、 C_{1-4} アルコキシハロ(C_{1-8})アルキル C_{1-4} アルコキシカルボニル(C_{1-8})アルキル、 C_{1-4} アルコキシカルボニルハロ(C_{1-8})アルキル、フェニル(C_{1-4})アルキル、 C_{2-8} アルケニル、ハロ(C_{2-8})アルケニル、 C_{2-8} アルキニル、 C_{3-8} シクロアルキル、(任意にクロロ、フルオロ又はメチルで置換され) C_{3-8} シクロアルキル(C_{1-4})アルキル、フェニルアミノ、ピペリジノ又はモルフォリノであり、フェニルアルキル又はフェニルアミノのフェニル環は任意に、1、2又は3個のハロ、 C_{1-4} アルキル、ハロ(C_{1-4})アルキル、 C_{1-4} アルコキシ及びハロ(C_{1-4})アルコキシから選択される置換基で置換されており；

R^4 はH、 C_{1-4} アルキル、ハロ(C_{1-4})アルキル又はアミノであり、又は

10

20

30

40

50

R^3 と R^4 は一緒になって C_{3-7} アルキレン又はアルケニレン鎖(任意にメチルで置換される)を形成する、又は

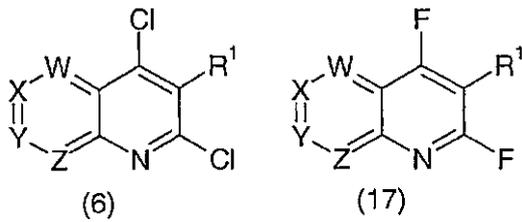
R^3 と R^4 は、それらが結合する窒素原子と一緒にあってモルフォリン、チオモルフォリン、チオモルフォリンS-酸化物もしくはチオモルフォリンS-二酸化物環又はピペラジンもしくはピペラジンN-(C_{1-4})アルキル(特にN-メチル)環を形成し、ここでモルフォリン又はピペラジン環は任意にメチルで置換されている化合物。

【請求項6】

請求項1に記載の一般式(1)(式中、R及び R^2 のうち一つがクロロ又はフルオロであり且つ他が NR^3R^4 であり且つW、X、Y、Z、 R^1 、 R^3 及び R^4 は請求項1に記載のとおりである)の化合物を調製する方法であって、一般式 NR^3R^4 のアミンを一般式(6)又は(17):

10

【化3】



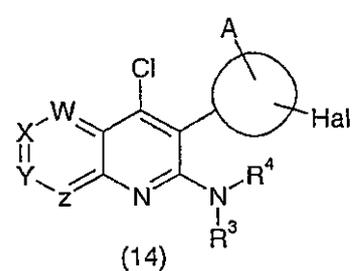
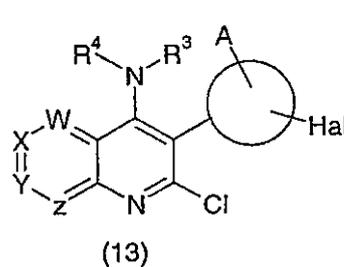
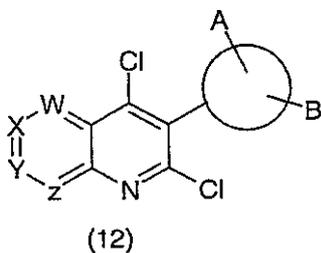
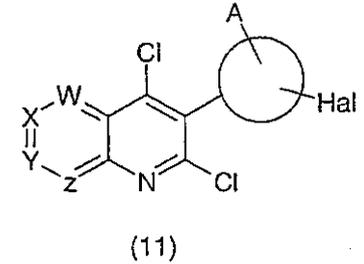
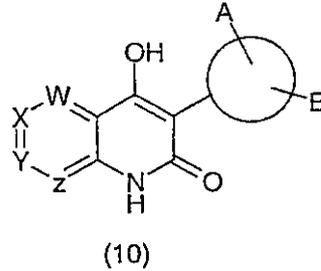
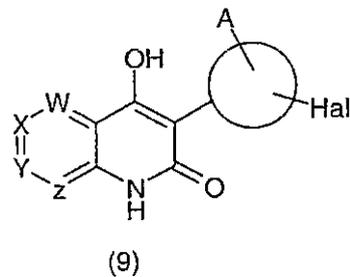
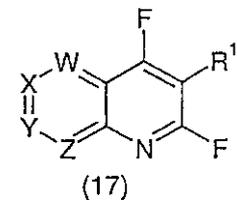
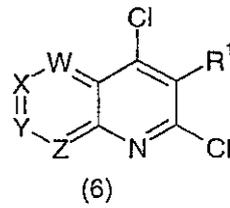
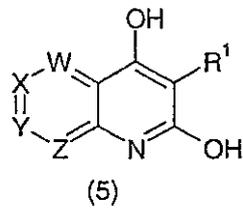
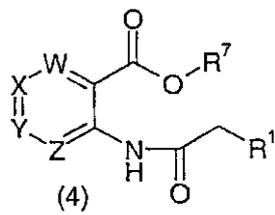
20

の化合物と反応せしめることを含んで成る方法。

【請求項7】

一般式(4)、(5)、(6)、(9)、(10)、(11)、(12)、(13)、(14)及び(17):

【化4】



(式中、W、X、Y、Z、R¹、R³、R⁴、Hal、A及びBは請求項1に規定したとおりであり且つR⁷がC₁₋₄アルキルである)
を有する中間体化学物質。

【請求項8】

殺菌上有効な量の請求項1に記載の化合物及び適切な担体を含んで成る植物殺菌組成物。

【請求項9】

植物病原性の菌類と交戦する又はコントロールする方法であって、植物に対して、植物の種子に対して、植物の部位もしくは種子に対して又は土壌もしくは他の全ての植物成長培体に対して、殺菌上有効な量の請求項1に記載の化合物又は請求項15に記載の組成物を適用することを含んで成る方法。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

縮合窒素含有複素環を有する新規ピリジン誘導体に、それらを調製する方法に、それらを製造において使用される所定の中間化学物質に、そして菌類、特に植物の真菌感染症と戦うためにそれらを使用することに関連する。

【背景技術】

【0002】

窒素含有5,6環系s-1,2,4-トリアゾロ[1,5-a]ピリミジンは、病原性菌類を制御するための有用であることが刊行物から知られている。最近の特許出願の例としては、EP-A-1249452, WO02/051845, WO02/083676, WO02/083677, WO02/088125, WO02/088126, WO02/088127が挙げ

10

20

30

40

50

られる。ピリドピラジンの誘導体は、化学刊行物において知られており、例えば、J. Med. Chem. (1968), 11(6), 1216-18, J. Med. Chem. (1970), 13(5) 及び US 3984412 から知られているが、農芸化学的な目的を除く。

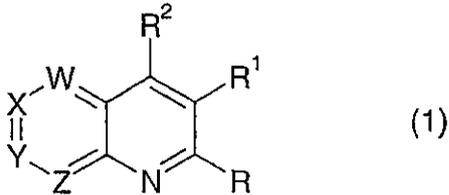
【0003】

本発明は、縮合窒素含有複素環を有する新規ピリジン誘導体を、植物及び収穫した食用穀物の病原性疾患と交戦するために提供することに関連する。

【0004】

従って、本発明によれば、一般式(1):

【化1】



10

20

〔式中、

W、X、Y及びZはN又はCR⁸であってよく、そしてW、X、Y及びZのうち少なくとも1つ且つ3つ以下がNであるが、しかしW、X、Y=N並びにZ=CR⁸、及びX、Y、Z=N及びZ=CR⁸である化合物を除き;

R⁸はH、ハロ、C₁₋₄アルキル、C₁₋₄アルコキシ又はハロ(C₁₋₄)アルキル、CN、C₁₋₄アルキルチオ、C₁₋₄アルキルスルフィニル、C₁₋₄アルキルスルフォニル、アリール、ヘテロアリール、ハロ(C₁₋₆)アルコキシ、ハロ(C₁₋₄)アルキルチオ、C₂₋₄アルケニル、C_{2,4-6}アルキニル、C₂₋₆シクロアルキル、又はNR³R⁴であり;

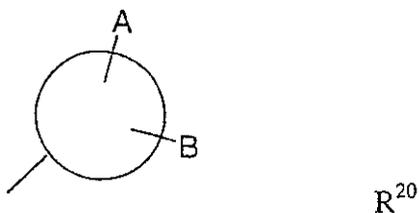
RはH、C₁₋₄アルキル、ハロ(C₁₋₄)アルキル、シアノ、ハロゲン又はNR³R⁴であり;

R²はハロ又はNRR⁴であり;

R¹は次の一般式のアリール又はヘテロアリール環R²⁰であり

30

【化2】



40

〔式中、Aは、ハロ、C₁₋₆アルキル、C₂₋₆アルケニル、C₂₋₆アルキニル、C₁₋₆アルコキシ、C₂₋₆アルケニルオキシ、C₂₋₆アルキニルオキシ、ハロ(C₁₋₆)アルキル、ハロ(C₁₋₆)アルコキシ、C₁₋₆アルキルチオ、ハロ(C₁₋₆)アルキルチオ、C₁₋₄アルコキシ(C₁₋₆)アルキル、C₃₋₆シクロアルキル、C₃₋₆シクロアルキル(C₁₋₄)アルキルから独立して選択された任意の1~4個の置換基であってよく、そして

Bは、独立してアリール、ヘテロアリール、アリールオキシ(フェノキシが置換されていないことを除く)、ヘテロアリールオキシ、アリール(C₁₋₄)アルコキシ(ベンジルオキシは置換されていないことを除く)、ヘテロアリール(C₁₋₄)アルコ

50

キシ、アリールチオ、アリールスルフィニル、アリールスルフォニル、ヘテロアリールチオ、ヘテロアリールスルフィニル、ヘテロアリールスルフォニル、アリール(C₂₋₄)アルケニル、アリール(C₂₋₄)アルキニル、ヘテロアリール(C₂₋₄)アルケニル、ヘテロアリール(C₂₋₄)アルキニル、アリール(C₁₋₄)アルキル、ヘテロアリール(C₁₋₄)アルキル、からなる群から独立して選択される少なくとも1以上の置換基であり、そして前記任意のアリール又はヘテロアリール置換基は、任意にハロ、C₁₋₆アルキル、C₂₋₆アルケニル、C₂₋₆アルキニル、C₁₋₆アルコキシ、C₂₋₆アルケニルオキシ、C₂₋₆アルキニルオキシ、ハロ(C₁₋₆)アルキル、ハロ(C₁₋₆)アルコキシ、C₁₋₆アルキルチオ、ハロ(C₁₋₆)-アルキルチオ、C₁₋₄アルコキシ(C₁₋₆)アルキル、C₃₋₆シクロアルキル、シアノ又はニトロで置換されている)；

R³及びR⁴は独立してH、C₁₋₈アルキル、C₂₋₈アルケニル、C₂₋₈アルキニル、アリール、アリール(C₁₋₈)アルキル、C₃₋₈シクロアルキル、C₃₋₈シクロアルキル(C₁₋₆)アルキル、ヘテロアリール、ヘテロアリール(C₁₋₈)アルキル、NR⁵R⁶であり、通常条件として、R³とR⁴がどちらもH又はNR⁵R⁶でないかあるいは

R³とR⁴は一緒になって1もしくは複数のC₁₋₄アルキルもしくはC₁₋₄アルコキシで置換されたC₃₋₇アルキレンもしくはC₃₋₇アルケニレン鎖を形成するかあるいは、

R³とR⁴はそれらが結合する窒素原子と一緒にあって、モルフォリン、チオモルフォリン、チオモルフォリンS-酸化物又はチオモルフォリンS-二酸化物環もしくはピペラジンもしくはピペラジンN-(C₁₋₄)アルキル(特にN-メチル)環を形成し；そして

R⁵とR⁶は独立してH、C₁₋₈アルキル、C₂₋₈アルケニル、C₂₋₈アルキニル、アリール、アリール(C₁₋₈)アルキル、C₃₋₈シクロアルキル、C₃₋₈シクロアルキル(C₁₋₆)アルキル、ヘテロアリール又はヘテロアリール(C₁₋₈)アルキルであり；

前記任意のアルキル、アルケニル、アルキニルもしくはシクロアルキル基もしくは成分(R⁸について以外)は、ハロゲン、シアノ、C₁₋₆アルコキシ、C₁₋₆アルキルカルボニル、C₁₋₆アルコキシカルボニル、C₁₋₆ハロアルコキシ、C₁₋₆アルキルチオ、トリ(C₁₋₄)アルキルシリル、C₁₋₆アルキルアミノ又はC₁₋₆ジアルキルアミノであり、

前記任意のモルフォリン、チオモルフォリン、ピペリジン、ピペラジン及びピロリジン環は任意に、C₁₋₄アルキル(特にメチル)で置換されており、そしてR³、R⁴、R⁵、R⁶もしくはR⁸中の前記アリールもしくはヘテロアリール基もしくは成分は、ハロ、ヒドロキシ、メルカプト、C₁₋₆アルキル、C₂₋₆アルケニル、C₂₋₆アルキニル、C₁₋₆アルコキシ、C₂₋₆アルケニルオキシ、C₂₋₆アルキニルオキシ、ハロ(C₁₋₆)アルキル、ハロ(C₁₋₆)アルコキシ、C₁₋₆アルキルチオ、ハロ(C₁₋₆)アルキルチオ、ヒドロキシ(C₁₋₆)アルキル、C₁₋₄アルコキシ(C₁₋₆)アルキル、C₃₋₆シクロアルキル、C₃₋₆シクロアルキル(C₁₋₄)アルキル、フェノキシ、ベンジルオキシ、ベンゾイルオキシ、シアノ、イソシアノ、チオシアネート、イソチオシアネート、ニトロ、-NR¹³R¹⁴、-NHCOR¹³、-NHCONR¹³R¹⁴、-CONR¹³R¹⁴、-SO₂R¹³、-OSO₂R¹³、-COR¹³、-CR¹³=NR¹⁴又は-N=CR¹³R¹⁴からなる群から選択される1又は複数の置換基により置換されており、ここでR¹³及びR¹⁴は、独立して水素、C₁₋₄アルキル、ハロ(C₁₋₄)アルキル、C₁₋₄アルコキシ、ハロ(C₁₋₄)アルコキシ、C₁₋₄アルキルチオ、C₃₋₆シクロアルキル、C₃₋₆シクロアルキル(C₁₋₄)アルキル、フェニル又はベンジルであり、当該フェニル及びベンジル基は任意にハロゲン、C₁₋₄アルキル又はC₁₋₄アルコキシで置換されている]

の化合物が提供されている。

【0005】

本発明は、上に規定した一般式(1)の化合物を含み、好適に次のような化合物：C₇アルキレン及びC₃₋₇アルケニレンはR³及びR⁴によって形成された鎖として排除され；好適にR³及びR⁴が形成するC₃₋₆鎖は1又は複数のメチル基で任意に置換されて良く；好適にチオモルフォリン、チオモルフォリンS-酸化物、チオモルフォリンS-酸化物及びピペラジンは、R³とR⁴が形成しうる環として除外され；好適にトリ(C₁₋₄)アルキルシリルは、アルキル、アルケニル、アルキニルもしくはシクロアルキル基もしくは成分の任意の置換基の場合に除外されそして任意のモルフォリン、ピペリジン又はピロリジン環は未置換である化合物を含む。

【0006】

10

20

30

40

50

本発明の化合物は1又は複数の不斉炭素原子を含み且つエナンチオマー(ジアステレオマーのペアとして)として又はそれらの混合物として存在しうる。それらは、結合について束縛回転が理由となってジアステレオマーとしても存在しうる。しかしながら、エナンチオマー又はジアステレオマーの混合物は、個々の異性体又は異性体ペアへ分離されて良く、そして本発明は、かかる異性体及びその混合物を全割合で包含する。任意の全ての化合物について、1つの異性体は他のものよりも殺菌活性が高く良い。

【0007】

特に断らない限り、アルキル基及びアルコキシ、アルキルチオなどのアルキル成分は、1~8個、適切に1~6個及び典型的に1~4個の炭素原子を直鎖又は分鎖の形態において含む。例えば、メチル、エチル、n-及びイソ-プロピル、n-, sec-, イソ-及びtert-ブチル、n-ペンチル及びn-ヘキシルが挙げられる。シクロアルキル基は3~8、典型的に3~6の炭素原子を含み、そしてビシクロアルキル基の例えば、ビシクロ[2.2.1]ヘプチル基を含む。ハロアルキル基又は成分は典型的に、トリクロロメチルもしくはトリフルオロメチルである又はトリクロロメチルもしくはトリフルオロメチル末端基を含む。用語フルオロアルキルとは、1又は複数のフッ素原子によって置換されたアルキル基であり、例えば、トリフルオロメチル、ジフルオロエチル又はトリフルオロメチル末端基を含んで成るアルキルである。

10

【0008】

他で特に断らない限り、アルケニル及びアルキニル成分はまた、2~8個、適切に2~6個及び典型的に2~4個の炭素原子を直鎖又は分鎖を含む。例としては、アリル、2-メチルアリル及びプロパルギルである。任意の置換基としては、ハロ、典型的にフルオロを含む。ハロ-置換したアルケニルの例は、3,4,4-トリフルオロ-n-ブテニルである。

20

【0009】

ハロには、フルオロ、クロロ、プロモ及びヨードが含まれる。最も共通して、それは、フルオロ、クロロ又はプロモであり且つ通常フルオロ又はクロロである。

【0010】

アリールには、通常フェニルであるが、ナフチル、アントリル及びフェナントリルが含まれる。

【0011】

ヘテロアリールは典型的に、1又は複数のO、N又はSヘテロ原子を含む5-又は6-員芳香族環でありそれは1又は複数の他の芳香族又は芳香族複素環の例えばベンゼン環へ融合されて良い。例としては、チエニル、フリル、ピロリル、イソオキサゾリル、オキサゾリル、オキサジアゾリル、ピラゾリル、イミダゾリル、トリアゾリル、イソチアゾリル、テトラゾリル、チアジアゾリル、ピリジル、ピリミジニル、ピラジニル、ピリダジニル、トリアジニル、ベンゾフリル、ベンゾチエニル、ジベンゾフリル、ベンゾチアゾリル、ベンゾオキサゾリル、ベンゾイミダゾリル、インドリル、キノリル及びキノキサリニル基が挙げられ、そしてここで適宜そのN-酸化物が挙げられる。

30

【0012】

一般式(1)に包含される6,6-環系は、1,8-ナフチリジン(W、X及びYは全てCR⁸であり且つZはNである)、1,7-ナフチリジン(W、X及びZは全てCR⁸であり、且つYはNである)、1,6-ナフチリジン(W、Y及びZは全てCR⁸であり且つXはNである)、1,5-ナフチリジン(X、Y及びZは全てCR⁸であり且つWはNである)、ピリド[2,3-c]ピリダジン(W及びXはどちらもCR⁸であり且つY及びZはどちらもNである)、ピリド[2,3-d]ピリダジン(W及びZはどちらもCR⁸であり且つX及びYはどちらもNである)、ピリド[3,2-c]ピリダジン(Y及びZはどちらもCR⁸であり且つW及びXはどちらもNである)、ピリド[2,3-b]ピラジン(X及びYはどちらもCR⁸であり且つW及びZはどちらもNである)、ピリド[2,3-d]ピリミジン(W及びYはどちらもCR⁸であり且つX及びZはどちらもNである)、ピリド[3,2-d](ピリミジンX及びZはどちらもCR⁸であり且つW及びYはどちらもNである)、ピリド[2,3-e][1,2,4]トリアジン(YはCR⁸であり且つW、X及びZは全てNである)、及びピリド[3,2-e]-[1,2,4]トリアジン(XはCR⁸であり且つW、Y及びZは全てNである)である。特に注目は、ピリド[2,3-b]ピラジン及びピリド[3,2-e][1,

40

50

2,4]トリアジンである。

【0013】

R^8 (W、X、Y及びZの CR^8 値について同じ又は異なって良い)は、H、ハロ(例えば、クロロ又はブロモである)、 C_{1-4} アルキル(例えば、メチル)、 C_{1-4} アルコキシ(例えば、メトキシ)又はハロ(C_{1-4})アルキル(例えば、トリフルオロメチル)、CN、C1-4アルキルチオ、 C_{1-4} アルキルスルフィニル、 C_{1-4} アルキルスルフォニル、アリール、ヘテロアリール、ハロ(C_{1-6})アルコキシ、ハロ(C_{1-4})アルキルチオ、 C_{2-4} アルケニル、 $C_{2.4-6}$ アルキニル、 C_{2-6} シクロアルキル、又は NR^3R^4 である。通常、 R^8 はHであろう。

【0014】

R及び R^2 のうち1つ、好適にRは NR^3R^4 である。他は典型的にハロ、特に クロロ又はフルオロである。ピリド[2,3-b]ピラジン環系の場合、更なるの活性化合物は、 R^2 が NR^3R^4 であり且つRがクロロ又はフルオロであるものである。 R^3 は典型的に C_{1-8} アルキル(例えば、エチル、n-プロピル、n-ブチル、sec-ブチル(S-もしくはR-異性体もしくはラセミ体)、イソブチル及びtert-ブチルである)、ハロ(C_{1-8})アルキル(例えば、2,2,2-トリフルオロエチル、2,2,2-トリフルオロ-1-メチルエチル(S-もしくはR-異性体もしくはラセミ体)、2,2,2-トリフルオロ-1-メチルプロピル(S-もしくはR-異性体もしくはラセミ体)、3,3,3-トリフルオロプロピル及び4,4,4-トリフルオロブチル)、 C_{1-4} アルコキシ(C_{1-8})アルキル(例えば、メトキシメチル及びメトキシ-イソ-ブチル)、 C_{1-4} アルコキシハロ(C_{1-8})アルキル(例えば、2-メトキシ-2-トリフルオロメチルエチル)、 C_{1-4} アルキルカルボニル(C_{1-8})アルキル(例えば、1-アセチルエチル及び1-tert-ブチルカルボニルエチル)、 C_{1-4} アルキルカルボニルハロ(C_{1-8})アルキル(例えば1-アセチル-2,2,2-トリフルオロエチル)、フェニル(C_{1-4})アルキル(例えばベンジル)、 C_{2-8} アルケニル(例えばアリル及びメチルアリル)、ハロ(C_{2-5})アルケニル(例えば3-メチル-4,4-ジフルオロブタ-3-エニル)、 C_{2-8} アルキニル(例えばプロパルギル)、クロロ、フルオロ又はメチルで任意に置換された C_{3-8} シクロアルキル(例えば、シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル及びシクロヘキシル)、 C_{3-8} シクロアルキル(C_{1-4})アルキル(例えば、シクロプロピルメチル、シクロブチルメチル、シクロペンチルメチル及びシクロヘキシルメチル)、フェニルアミノ、ピペリジノ又はモルホリノであり、当該フェニルアルキル又はフェニルアミノのフェニル環は、ハロ(典型的にフルオロ、クロロ又はブロモ)、 C_{1-4} アルキル(典型的にメチル)、ハロ(C_{1-4})アルキル(典型的にトリフルオロメチル)、 C_{1-4} アルコキシ(典型的にメトキシ)及びハロ(C_{1-4})アルコキシ(典型的にトリフルオロメトキシ)から選択された1、2又は3個の置換基で置換されている。 R^4 は典型的に、H、 C_{1-4} アルキル(例えばエチル及びn-プロピルである)、ハロ(C_{1-4})-アルキル(例えば2,2,2-トリフルオロエチル)又はアミノである。代替的に、 R^3 と R^4 は、一緒になってメチルで任意に置換された C_{4-6} アルキレンの例えば3-メチルペンチレンを形成する、又はそれらが結合している窒素と一緒にモルフォリン、チオモルフォリン、チオモルフォリンS-酸化物もしくはチオモルフォリンS-酸化物環もしくはピペラジンもしくはピペラジンN-(C_{1-4})アルキル(特にN-メチル)環を形成し、ここで当該モルフォリンもしくはピペラジン環は任意にメチルで置換されている。

【0015】

典型的に、 R^1 は、式 R^{20} の芳香族炭素環又は複素環、好適に、任意に置換されたフェニル、ピリジル又はチアゾール基であり、そしてAは、1~4個の独立してハロゲン原子、特にフッ素及び塩素原子であり、そして特にフッ素原子であり、又はそれは1~3個の、ハロ(例えばフルオロ及びクロロ)、 C_{1-4} アルキル(例えばメチル)、ハロ(C_{1-4})アルキル(例えば、トリフルオロメチル)、 C_{1-4} アルコキシ(例えば、メトキシ)又はハロ(C_{1-4})アルコキシ(例えば、トリフルオロメトキシ)から選択された置換基であり、そしてBは少なくとも1又は複数のアリール、ヘテロアリール、アリールオキシ(但し、フェノキシは置換されてなければならない)、ヘテロアリールオキシ、アリール(C_{1-4})アルコキシ(但しベンジルオキシは置換されてなければならない)、ヘテロアリール(C_{1-4})アルコキシ、アリールチオ、アリールスルフィニル、アリールスルフォニル、ヘテロアリールチオ、ヘテロアリールスルフィニル、ヘテロアリールスルフォニル、アリール(C_{2-4})アルケニル、アリール

10

20

30

40

50

(C₂₋₄)アルキニル、ヘテロアリール(C₂₋₄)アルケニル、ヘテロアリール(C₂₋₄)アルキニル、アリール(C₁₋₄)アルキル、ヘテロアリール(C₁₋₄)アルキルを含んで成る群から選択された置換基である。例えば、2,6-ジフルオロ-4-フェニル-フェニル、2-フルオロ-4-フェニル-6-クロロフェニル、2,5,6-トリフルオロ-4-フェニルフェニル、2,4,6-トリフルオロ-4-フェニル-フェニル、2-クロロ-4-フェニル-フェニル、2-フルオロ-4-フェニル-6-メトキシフェニル、及び2-フルオロ-6-トリフルオロメチル-4-フェニル-フェニルである。

【0016】

そしてまた注目のもは、R¹がアリール又はヘテロアリール環、R²⁰がピリジル基であり且つAは1～3個のハロゲン原子であるかあるいは、ハロ(例えばフルオロ及びクロロ)、C₁₋₄アルキル(例えばメチル)、ハロ(C₁₋₄)アルキル(例えばトリフルオロメチル)、C₁₋₄アルコキシ(例えばメトキシ)又はハロ(C₁₋₄)アルコキシ(例えばトリフルオロメトキシ)から選択された1～3個の置換基で置換されており、そしてBは少なくとも1又は複数のアリール、ヘテロアリール、アリールオキシ(フェノキシは置換されていないことを除く)、ヘテロアリールオキシ、アリール(C₁₋₄)アルコキシ(ベンジルオキシは置換されていないことを除く)、ヘテロアリール(C₁₋₄)アルコキシ、アリールチオ、アリールスルフィニル、アリールスルフォニル、ヘテロアリールチオ、ヘテロアリールスルフィニル、ヘテロアリールスルフォニル、アリール(C₂₋₄)アルケニル、アリール(C₂₋₄)アルキニル、ヘテロアリール(C₂₋₄)アルケニル、ヘテロアリール(C₂₋₄)アルキニル、アリール(C₁₋₄)アルキル、ヘテロアリール(C₁₋₄)アルキルから選択された置換基である。例としては、3-フルオロ-5-フェニルピリド-2-イル、3-クロロ-5-フェニルピリド-2-イル及び3,5-ジフルオロ-4-フェニルピリド-2-イルである。

10

20

【0017】

ひとつの観点において、本発明は、一般式(1)の化合物を提供し、ここでW及びZはNであり且つ他の2つはCR⁸であり、又はW、Y及びZはNであり且つXはCR⁸であり、又はW、X及びZはNであり且つYはCR⁸であり；

R⁸はH、ハロ、C₁₋₄アルキル、C₁₋₄アルコキシ又はハロ(C₁₋₄)アルキルであり；

R及びR²(好適にR²)のうち1つはNR³R⁴であり、そして他はハロであり；

R¹は、アリール又はヘテロアリール環R²⁰であり、そしてAは、ハロ、C₁₋₆アルキル、C₂₋₆アルケニル、C₂₋₆アルキニル、C₁₋₆アルコキシ、C₂₋₆アルケニルオキシ、C₂₋₆アルキニルオキシ、ハロ(C₁₋₆)アルキル、ハロ(C₁₋₆)アルコキシ、C₁₋₆アルキルチオ、ハロ(C₁₋₆)アルキルチオ、C₁₋₄アルコキシ(C₁₋₆)アルキル、C₃₋₆シクロアルキル、C₃₋₆シクロアルキル(C₁₋₄)アルキルから選択される置換基であり、そしてBは少なくとも1又は複数のアリール、ヘテロアリール、アリールオキシ(フェノキシは置換されていないことを除く)、ヘテロアリールオキシ、アリール(C₁₋₄)アルコキシ(但しベンジルオキシは置換されていない)、ヘテロアリール(C₁₋₄)アルコキシ、アリールチオ、アリールスルフィニル、アリールスルフォニル、ヘテロアリールチオ、ヘテロアリールスルフィニル、ヘテロアリールスルフォニル、アリール(C₂₋₄)アルケニル、アリール(C₂₋₄)アルキニル、ヘテロアリール(C₂₋₄)アルケニル、ヘテロアリール(C₂₋₄)アルキニル、アリール(C₁₋₄)アルキル、ヘテロアリール(C₁₋₄)アルキルから選択される置換基であり、そして前記アリール又はヘテロアリール置換基は、ハロ、C₁₋₆アルキル、C₂₋₆アルケニル、C₂₋₆アルキニル、C₁₋₆アルコキシ、C₂₋₆アルケニルオキシ、C₂₋₆アルキニルオキシ、ハロ(C₁₋₆)アルキル、ハロ(C₁₋₆)アルコキシ、C₁₋₆アルキルチオ、ハロ(C₁₋₆)アルキルチオ、C₁₋₄アルコキシ(C₁₋₆)アルキル、C₃₋₆シクロアルキル、シアノ又はニトロであり；

30

40

R³及びR⁴は独立してH、C₁₋₈アルキル、C₂₋₈アルケニル、C₂₋₈アルキニル、アリール、アリール(C₁₋₈)アルキル、C₃₋₇シクロアルキル、C₃₋₈シクロアルキル(C₁₋₆)アルキル、ヘテロアリール、ヘテロアリール(C₁₋₈)アルキル、NR⁵R⁶であり、但し、R³及びR⁴のうち1つはNR⁵R⁶である、又は

R³とR⁴は一緒になってC₃₋₇アルキレン又はC₃₋₇アルケニレン鎖(1又は複数のC₁₋₄アルキル又はC₁₋₄アルコキシ基で置換される)を形成する又は

R³とR⁴はそれらが結合する窒素と一緒にあって、モルフォリン、チオモルフォリン、チオ

50

モルフォリンS-酸化物もしくはチオモルフォリンS-二酸化物環もしくはピペラジンもしくはピペラジンN-(C₁₋₄)アルキル(特にN-メチル)環を形成し;そして

R⁵及びR⁶は独立してH、C₁₋₈アルキル、C₂₋₈アルケニル、C₂₋₈アルキニル、アリール、アリール(C₁₋₈)アルキル、C₃₋₈シクロアルキル、C₃₋₈シクロアルキル(C₁₋₆)アルキル、ヘテロアリール又はヘテロアリール(C₁₋₈)アルキルであり;前記アルキル、アルケニル、アルキニルもしくはシクロアルキル基もしくは成分(R⁸に関して以外)の全てはハロゲン、シアノ、C₁₋₆アルコキシ、C₁₋₆アルキルカルボニル、C₁₋₆アルコキシカルボニル、C₁₋₆ハロアルコキシ、C₁₋₆アルキルチオ、トリ(C₁₋₄)アルキルシリル、C₁₋₆アルキルアミノ又はC₁₋₆ジアルキルアミノで置換されており、前記モルフォリン、チオモルフォリン、ピペリジン、ピペラジン及びピロリジン環の全ては、C₁₋₄アルキル(特にメチル)で置換されている。特に注目なものは、WとZはどちらもNであり且つXとYがどちらもCHである化合物である。

10

【0018】

更なる実施態様において、本発明は、上記一般式(1)の化合物を含み、次のことを除く: C₇アルキレン及びC₃₋₇アルケニレンは、R³及びR⁴によって形成された鎖として除外され;R³とR⁴が形成しうるC₃₋₆鎖は任意に1又は複数のメチル基で置換されて良く;チオモルフォリン、チオモルフォリンS-酸化物、チオモルフォリンS-ジ酸化物及びピペラジンは、R³とR⁴が形成しうる環として除外される;トリ(C₁₋₄)アルキルシリルは、アルキル、アルケニル、アルキニルもしくはシクロアルキル基もしくは成分の置換基として除外され、そしてモルフォリン、ピペリジン又はピロリジン環の全ては、未置換である。

20

【0019】

本発明の更なる実施態様において、式1の化合物の置換基の値は以下のように規定されている:

R³は、C₁₋₈アルキル、ハロ(C₁₋₈)アルキル、ハロC₁₋₄アルコキシ(C₁₋₈)アルキル、C₁₋₄アルコキシハロ(C₁₋₈)アルキル、C₁₋₄アルコキシカルボニル(C₁₋₈)アルキル、C₁₋₄アルコキシカルボニルハロ(C₁₋₈)アルキル、フェニル(C₁₋₄)アルキル、C₂₋₈アルケニル、ハロ(C₂₋₈)アルケニル、アルキニル、C₃₋₈シクロアルキル(クロロ、フルオロ又はメチルで任意に置換された)、C₃₋₈シクロアルキル(C₁₋₄)アルキル、フェニルアミノ、ピペリジノ又はモルフォリノ、フェニルアルキル又はフェニルアミノのフェニル環は、任意に、ハロ、C₁₋₄アルキル、ハロ(C₁₋₄)アルキル、C₁₋₄アルコキシ及びハロ-(C₁₋₄)アルコキシから選択された1、2又は3個の置換基で置換されており;そしてR⁴はH、C₁₋₄アルキル、ハロ(C₁₋₄)アルキル又はアミノ、C₁₋₄アルコキシ及びハロ(C₁₋₄)アルコキシであるかあるいはR³とR⁴は一緒になって任意にメチルで置換されるC₃₋₇アルキレン又はアルケニレン鎖を形成するかあるいはR³とR⁴が結合する窒素原子と一緒に、モルフォリン、チオモルフォリン、チオモルフォリンS-酸化物もしくはチオモルフォリンS-酸化物環もしくはピペラジンもしくはピペラジンN-(C₁₋₄)アルキル(特にN-メチル)環を形成し、ここで当該モルフォリン又はピペラジン間は任意にメチルで置換されている。特に、Rがハロであり、そして/又はR²がNR³R⁴である化合物が特に注目され、ここでNR³R⁴は上に規定したとおりであり、そして/又はW及びZはNであり且つYはCH₃である。

30

【0020】

本発明の更なる実施態様は、式(1)

(式中、

X、W及びZはNであり且つYはCR⁸であり;

R⁸は、H又はハロであり;

Rは、ハロであり且つR²はNR³R⁴であり;

R¹は、アリール又はヘテロアリール環R²⁰であり、そしてAはハロ、C₁₋₆アルキル、C₂₋₆アルケニル、C₂₋₆アルキニルから選択され、そしてBは、アリール、ヘテロアリール、アリーロキシ(フェノキシは置換されていないことを除く)、ヘテロアリーロキシ、アリールチオ、アリールスルフィニル、アリールスルフォニル、ヘテロアリールチオ、ヘテロアリールスルフィニル、ヘテロアリールスルフォニル、アリール(C₂₋₄)アルケ

40

50

ニル、アリール(C₂₋₄)アルキニル、ヘテロアリール(C₂₋₄)アルケニル、ヘテロアリール(C₂₋₄)アルキニル、アリール(C₁₋₄)アルキルから選択された1又は複数の置換基であり、そして前記アリール又はヘテロアリール置換基は、ハロ、C₁₋₆アルキル、C₂₋₆アルケニル、C₂₋₆アルケニル、C₁₋₆アルコキシ、シアノ又はニトロで任意に置換されており;R³及びR⁴は独立してH、C₁₋₈アルキル、C₁₋₈フルオロアルキル、C₁₋₈ペルフルオロアルキルC₂₋₈アルケニル、C₂₋₈アルケニル、アリール、C₃₋₈シクロアルキル、ヘテロアリールである。特に注目は上記一般式(1)の化合物であり、但し次のことを除くC₇アルキレン及びC₃₋₇アルケニレンはR³とR⁴によって形成された鎖のとして除外され;トリ(C₁₋₄)アルキルシリルは、アルキル、アルケニル、アルキニルもしくはシクロアルキル基もしくは成分の置換基として除外され、そして全てのモロフォリン、ピペリジン又はピロリジン環は未置換である)

10

の化合物を提供する。

【0021】

上記本発明の更なる実施態様において、式(1)の化合物は、式中、W、X及びZはNであり、そしてそれぞれ他の環構成員はCHであり;

Rはクロロ又はフルオロであり;

R²はNR³R⁴であり;

R¹は式R²⁰のアリール又はヘテロアリール環であり;

R²⁰は4-置換2,6-ジフルオロフェニル、4-置換2,3,6-トリフルオロフェニル、3-置換2,4,6-トリフルオロフェニル、4-置換2-クロロ-6-フルオロフェニル、4-置換2-クロロフェニル、5-置換3-フルオロピリド-2-イル、5-置換3-クロロピリド-2-イル、2-置換4-クロロ-チアゾール-5-イル、2-置換4-フルオロ-チアゾール-5-イルであり;

20

R³は水素、メチル、エチル、1,1,1-トリフルオロエチル、2-メチルプロペン-3-イルであり;

R⁴はプロパ-2-イル、ブタ-2-イル、2-メチルプロパ-3-イル、2-メチルブタ-3-イル、1,1,1-トリフルオロプロパ-2-イル、1,1,1-トリフルオロエチル、1,1,1-トリフルオロブタ-2-イル、1,1,1-トリフルオロ-3-メチル-ブタ-2-イル、2-メチルペンタ-4-イル、1,1,1-トリフルオロ-4-メチルペンタ-2-イル、1,1,1-トリフルオロ-3-メチルペンタ-2-イル、3-メチルペンタ-2-イル、1,1,-ジフルオロシクロペンタ-2-イル、ヘプタフルオロプロパ-1-イル、ノナフルオロブタ-1-イル、1-カルボキシエチル-2メチルプロパ-1-イル、1-カルボキシメチル-2-メチルプロパ-1-イル、1,1,1,-トリフルオロ-2-カルボキシエチル-2-エチル、1,1,1-トリフルオロ-2-カルボキシメチル2-エチルであり;

30

Bはフェニル、4-フルオロフェニル、2-フルオロフェニル、3-フルオロフェニル、4-クロロフェニル、2-クロロフェニル、3-クロロフェニル、2-ピリジル、3-ピリジル、4-ピリジル、5-フルオロ-2-ピリジル、6-フルオロ-3-ピリジル、2-フルオロ-4-ピリジル、2-フェニルエテニル、2-(4-フルオロフェニル)エテニル、フェニルエテニル、(4-メチルフェニル)エチニル、(4-フルオロフェニル)エチニル、4-フルオロフェノキシ、2-フルオロフェノキシ、3-フルオロフェノキシ、フェニルチオ、フェニルスルフィニル、フェニルスルフォニルである;

又は本発明の他の実施態様において、W、X及びZはNであり、そしてそれぞれの他の環構成員はCHであり;

40

R¹はクロロ又はフルオロであり;

R²はNR³R⁴であり;

R¹は式R²⁰の環のアリール又はヘテロアリール環であり;

R²⁰は4-置換2,6-ジフルオロフェニル、4-置換2-クロロ-6-フルオロフェニル、4-置換2-クロロフェニル、5-置換3-フルオロピリド-2-イル、5-置換3-クロロピリド-2-イルであり;

R³は、水素、エチル、2-メチルプロペン-3-イルであり;

R⁴は、プロパ-2-イル、ブタ-2-イル、2-メチルプロパ-3-イル、2-メチルブタ-3-イル、1,1,1-トリフルオロプロパ-2-イル、1,1,1-トリフルオロエチル、1,1,1-トリフルオロブ

50

タ-2-イル、1,1,1-トリフルオロ-3-メチル-ブタ-2-イル;1,1,1-トリフルオロ-4-メチルペンタ-2-イル、1,1,1-トリフルオロ-3-メチルペンタ-2-イル、1,1-ジフルオロシクロペンタ-2-イル、ヘプタフルオロプロパ-1-イル、1-カルボキシエチル-2-メチルプロパ-1-イル、1,1,1,-トリフルオロ-2-カルボキシエチル-2-エチルであり;

Bはフェニル、4-フルオロフェニル、2-フルオロフェニル、3-フルオロフェニル、2-クロロフェニル、3-クロロフェニル、2-ピリジル、3-ピリジル、4-ピリジル、4-クロロフェニル、5-フルオロ-2-ピリジル、6-フルオロ-3-ピリジル、2-フェニルエチル、2-(4-フルオロフェニル)エチニル、(4-メチルフェニル)エチニル、(4-フルオロフェニル)エチニル、4-フルオロフェノキシ、フェニルチオ、フェニルスルフィニル(又はベンゼンスルフィニル)、フェニルスルフォニル(又はベンゼンスルフォニル)である)

の化合物である。

【0022】

本発明の更に他の観点は、式(1)

(式中、

W及びZはNであり且つ他の2つはCR⁸である、又はW、Y及びZはNであり且つXはCR⁸であり、R⁸はH又はハロであり;

Rはハロであり且つR²はNR³R⁴であり;

R¹はアリール又はヘテロアリール環R²⁰であり且つAはハロ、C₁₋₆アルキル、C₂₋₆アルケニル、C₂₋₆アルキニルから選択される置換基であり、そしてBはアリール、ヘテロアリール、アリールオキシ(フェノキシは置換されていないことを除く)、ヘテロアリールオキシ、アリールチオ、アリールスルフィニル、アリールスルフォニル、ヘテロアリールチオ、ヘテロアリールスルフィニル、ヘテロアリールスルフォニル、アリール(C₂₋₄)アルケニル、アリール(C₂₋₄)アルキニル、ヘテロアリール(C₂₋₄)アルケニル、ヘテロアリール(C₂₋₄)アルキニル、アリール(C₁₋₄)アルキル、ヘテロアリール(C₁₋₄)アルキルから選択される1又は複数の置換基であり、そして前記アリール又はヘテロアリール置換基は、任意にハロ、C₁₋₆アルキル、C₂₋₆アルケニル、C₂₋₆アルキニル、C₁₋₆アルコキシ、シアノ又はニトロで置換され;

R³及びR⁴は独立して、H、C₁₋₈アルキル、C₁₋₈フルオロアルキル、C₁₋₈ペルフルオロアルキル、C₂₋₈アルケニル、C₂₋₈アルキニル、アリール、C₃₋₈シクロアルキル、ヘテロアリールである)

の化合物を提供する。

【0023】

更なる実施態様において、本発明は、上に規定した一般式(1)の化合物を含み、但し次のことを除く:C₇アルキレン及びC₃₋₇アルケニレンは、R³及びR⁴によって形成された鎖のとして除外される;トリ(C₁₋₄)アルキルシリルは、アルキル、アルケニル、アルキニルもしくはシクロアルキル基もしくは成分の任意の置換基のとしてに除外され、そして任意のモルフォリン、ピペリジン又はピロリジン環は未置換である。

【0024】

本発明の更なる実施態様において、式(1)の化合物は、W及びZはNである、又はW、Y及びZはNであり、そして各他の環構成員はCHであり;

Rはクロロ又はフルオロであり;

R²はNR³R⁴であり;

R¹は式R²⁰のアリール又はヘテロアリール環であり;

R²⁰は4-置換2,6-ジフルオロフェニル、4-置換2,3,6-トリフルオロフェニル、3-置換2,4,6-トリフルオロフェニル、4-置換2-クロロ-6-フルオロフェニル、4-置換2-クロロフェニル、5-置換3-フルオロピリド-2-イル、5-置換3-クロロピリド-2-イル、2-置換4-クロロ-チアゾール-5-イル、2-置換4-フルオロ-チアゾール-5-イルであり;

R³は水素、メチル、エチル、1,1,1-トリフルオロエチル、2-メチルプロペン-3-イルであり;

R⁴はプロパ-2-イル、ブタ-2-イル、2-メチルプロパ-3-イル、2-メチルブタ-3-イル、1、

10

20

30

40

50

1,1-トリフルオロプロパ-2-イル、1,1,1-トリフルオロエチル、1,1,1-トリフルオロブタ-2-イル、1,1,1-トリフルオロ-3-メチル-ブタ-2-イル；2-メチルペンタ-4-イル、1,1,1-トリフルオロ-4-メチルペンタ-2-イル、1,1,1-トリフルオロ-3-メチルペンタ-2-イル、3-メチルペンタ-2-イル、1,1-ジフルオロシクロペンタ-2-イル、ヘプタフルオロプロパ-1-イル、ノナフルオロブタ-1-イル、1-カルボキシエチル-2-メチルプロパ-1-イル、1-カルボキシメチル-2-メチルプロパ-1-イル、1,1,1-トリフルオロ-2-カルボキシエチル-2-エチル、1,1,1-トリフルオロ-2-カルボキシメチル-2-エチルであり；

Bはフェニル、4-フルオロフェニル、2-フルオロフェニル、3-フルオロフェニル、4-クロロフェニル、2-クロロフェニル、3-クロロフェニル、2-ピリジル、3-ピリジル、4-ピリジル、5-フルオロ-2-ピリジル、6-フルオロ-3-ピリジル、2-フルオロ-4-ピリジル、2-フェニルエチニル、2-(4-フルオロフェニル)エチニル、フェニルエチニル、(4-メチルフェニル)エチニル、(4-フルオロフェニル)エチニル、4-フルオロフェノキシ、2-フルオロフェノキシ、3-フルオロフェノキシ、フェニルチオ、フェニルスルフィニル、フェニルスルフォニル、又はベンゼンスルフォニルである；又は

本発明の他の実施態様において、W及びZはNである、又はW、Y及びZはNであり、そして各他の環構成員はCHであり；

Rはクロロ又はフルオロであり；

R²はNR³R⁴であり；

R¹は式R²⁰のアリール又はヘテロアリール環であり；

R²⁰は4-置換2,6-ジフルオロフェニル、4-置換2-クロロ-6-フルオロフェニル、4-置換2-クロロフェニル、5-置換3-フルオロピリド-2-イル、5-置換3-クロロピリド-2-イルであり；

R³は水素、エチル、2-メチルプロペン-3-イルであり；

R⁴はプロパ-2-イル、ブタ-2-イル、2-メチルプロパ-3-イル、2-メチルブタ-3-イル、1,1,1-トリフルオロプロパ-2-イル、1,1,1-トリフルオロエチル、1,1,1-トリフルオロブタ-2-イル、1,1,1-トリフルオロ-3-メチル-ブタ-2-イル、1,1,1-トリフルオロ-4-メチルペンタ-2-イル、1,1,1-トリフルオロ-3-メチルペンタ-2-イル、1,1,1-ジフルオロシクロペンタ-2-イル、ヘプタフルオロプロパ-1-イル、1-カルボキシエチル-2-メチルプロパ-1-イル、1,1,1-トリフルオロ-2-カルボキシエチル-2-エチルであり；

Bはフェニル、4-フルオロフェニル、4-クロロフェニル、5-フルオロ-2-ピリジル、6-フルオロ-3-ピリジル、2-フェニルエチニル、2-(4-フルオロフェニル)エチニル、(4-フルオロフェニル)エチニル、(4-フルオロフェニル)エチニル、4-フルオロフェノキシ、フェニルチオ、フェニルスルフィニル(又はベンゼンスルフィニル)、フェニルスルフォニル(又はベンゼンスルフォニル)

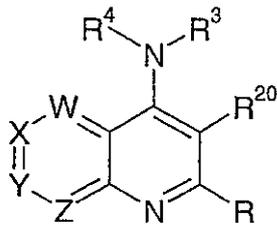
である化合物である。

【0025】

本発明の一部を形成する化合物は下の表1~27に例示されている。特性決定データは後の実施例に与えられている。単一の化合物が、所定数の表に与えられており、その後所定数の置換基の組み合わせが表1に与えられている。例えば、化合物22.005は、表22に記載の化合物である。ここでそこに記載の置換基は、表1に規定した置換基、位置No.5と組み合わせられる。表1~27において、前記化合物は、下に記載の一般式を有する。

【0026】

【化3】



(2)

10

【0027】

【表1】

表1

位置No.	R	R ³	R ⁴	R ²⁰
001	Cl	H	-CH(CH ₃) ₂	
002	Cl	H	-CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	
003	Cl	H	-CH ₂ CH(CH ₃) ₂	
004	Cl	H	-CH(CH ₃)CH(CH ₃) ₂	
005	Cl	H	-CH(CH ₃)(CF ₃)	
006	Cl	H	-CH ₂ CF ₃	
007	Cl	H	-CH(CF ₃)CH ₂ CH ₃	

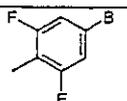
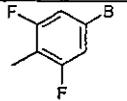
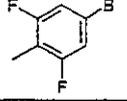
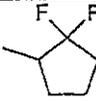
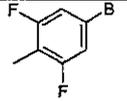
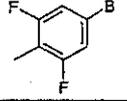
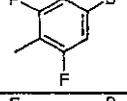
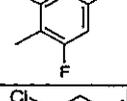
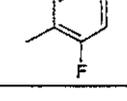
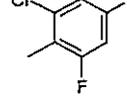
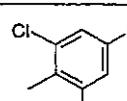
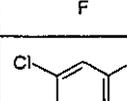
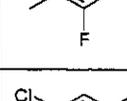
20

30

40

【0028】

【表 2】

位置No.	R	R ³	R ⁴	R ²⁰
008	Cl	H	-CH(CF ₃)CH(CH ₃) ₂	
009	Cl	H	-CH(CF ₃)CH ₂ CH(CH ₃) ₂	
010	Cl	H	-CH(CF ₃)CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	
011	Cl	H		
012	Cl	H	-CF ₂ CF ₂ CF ₃	
013	Cl	H	-CH(CH[CH ₃] ₂)COOCH ₂ CH ₃	
014	Cl	H	-CH(CF ₃)COOCH ₂ CH ₃	
015	Cl	H	-CH(CH ₃) ₂	
016	Cl	H	-CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	
017	Cl	H	-CH ₂ CH(CH ₃) ₂	
018	Cl	H	-CH(CH ₃)CH(CH ₃) ₂	
019	Cl	H	-CH(CH ₃)(CF ₃)	

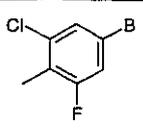
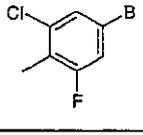
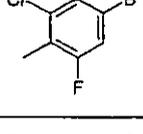
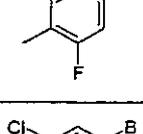
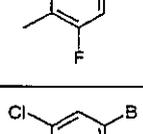
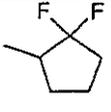
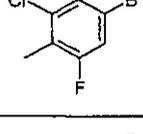
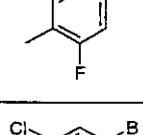
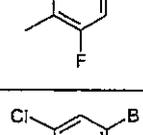
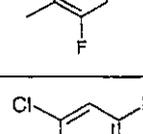
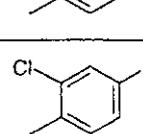
10

20

30

40

【表 3】

位置No.	R	R ³	R ⁴	R ²⁰
020	Cl	H	-CH ₂ CF ₃	
021	Cl	H	-CH(CF ₃)CH ₂ CH ₃	
022	Cl	H	-CH(CF ₃)CH(CH ₃) ₂	
023	Cl	H	-CH(CF ₃)CH ₂ CH(CH ₃) ₂	
024	Cl	H	-CH(CF ₃)CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	
025	Cl	H		
026	Cl	H	-CF ₂ CF ₂ CF ₃	
027	Cl	H	-CH(CH[CH ₃]) ₂ COOCH ₂ CH ₃	
028	Cl	H	-CH(CF ₃)COOCH ₂ CH ₃	
029	Cl	H	-CH(CH ₃) ₂	
030	Cl	H	-CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	

10

20

30

40

【 0 0 3 0 】

【表 4】

位置No.	R	R ³	R ⁴	R ²⁰
031	Cl	H	-CH ₂ CH(CH ₃) ₂	
032	Cl	H	-CH(CH ₃)CH(CH ₃) ₂	
033	Cl	H	-CH(CH ₃)(CF ₃)	
034	Cl	H	-CH ₂ CF ₃	
035	Cl	H	-CH(CF ₃)CH ₂ CH ₃	
036	Cl	H	-CH(CF ₃)CH(CH ₃) ₂	
037	Cl	H	-CH(CF ₃)CH ₂ CH(CH ₃) ₂	
038	Cl	H	-CH(CF ₃)CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	
039	Cl	H		
040	Cl	H	-CF ₂ CF ₂ CF ₃	
041	Cl	H	-CH(CH[CH ₃] ₂)COOCH ₂ CH ₃	
042	Cl	H	-CH(CF ₃)COOCH ₂ CH ₃	

10

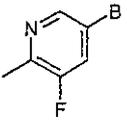
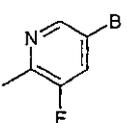
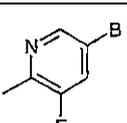
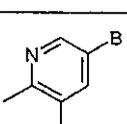
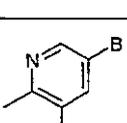
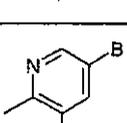
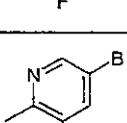
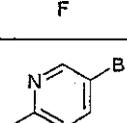
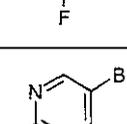
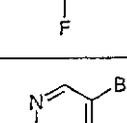
20

30

40

【 0 0 3 1 】

【表 5】

位置No.	R	R ³	R ⁴	R ²⁰
043	Cl	H	-CH(CH ₃) ₂	
044	Cl	H	-CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	
045	Cl	H	-CH ₂ CH(CH ₃) ₂	
046	Cl	H	-CH(CH ₃)CH(CH ₃) ₂	
047	Cl	H	-CH(CH ₃)(CF ₃)	
048	Cl	H	-CH ₂ CF ₃	
049	Cl	H	-CH(CF ₃)CH ₂ CH ₃	
050	Cl	H	-CH(CF ₃)CH(CH ₃) ₂	
051	Cl	H	-CH(CF ₃)CH ₂ CH(CH ₃) ₂	
052	Cl	H	-CH(CF ₃)CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	

10

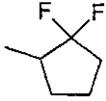
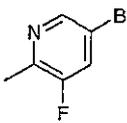
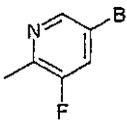
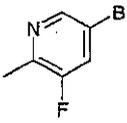
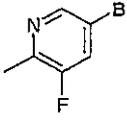
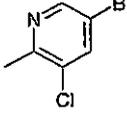
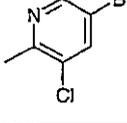
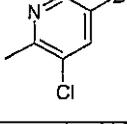
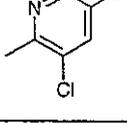
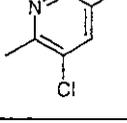
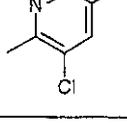
20

30

40

【 0 0 3 2 】

【表 6】

位置No.	R	R ³	R ⁴	R ²⁰
053	Cl	H		
054	Cl	H	-CF ₂ CF ₂ CF ₃	
055	Cl	H	-CH(CH[CH ₃] ₂)COOCH ₂ CH ₃	
056	Cl	H	-CH(CF ₃)COOCH ₂ CH ₃	
057	Cl	H	-CH(CH ₃) ₂	
058	Cl	H	-CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	
059	Cl	H	-CH ₂ CH(CH ₃) ₂	
060	Cl	H	-CH(CH ₃)CH(CH ₃) ₂	
061	Cl	H	-CH(CH ₃)(CF ₃)	
062	Cl	H	-CH ₂ CF ₃	

10

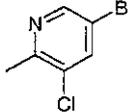
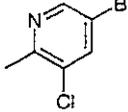
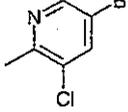
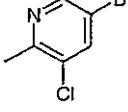
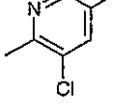
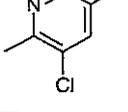
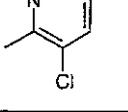
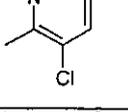
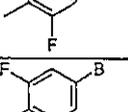
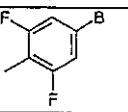
20

30

40

【 0 0 3 3 】

【表 7】

位置No.	R	R ³	R ⁴	R ²⁰
063	Cl	H	-CH(CF ₃)CH ₂ CH ₃	
064	Cl	H	-CH(CF ₃)CH(CH ₃) ₂	
065	Cl	H	-CH(CF ₃)CH ₂ CH(CH ₃) ₂	
066	Cl	H	-CH(CF ₃)CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	
067	Cl	H		
068	Cl	H	-CF ₂ CF ₂ CF ₃	
069	Cl	H	-CH(CH[CH ₃] ₂)COOCH ₂ CH ₃	
070	Cl	H	-CH(CF ₃)COOCH ₂ CH ₃	
071	Cl	CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	
072	Cl	CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	
073	Cl	CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH(CH ₃) ₂	

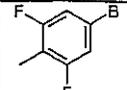
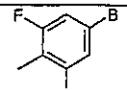
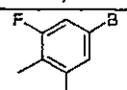
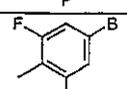
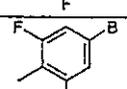
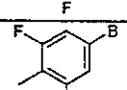
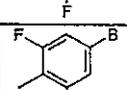
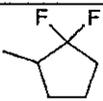
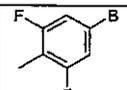
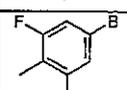
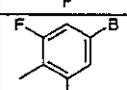
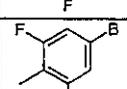
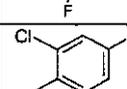
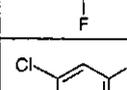
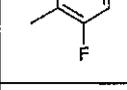
10

20

30

40

【表 8】

位置No.	R	R ³	R ⁴	R ²⁰
074	Cl	CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃)CH(CH ₃) ₂	
075	Cl	CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃)(CF ₃)	
076	Cl	CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CF ₃	
077	Cl	CH ₂ CH ₃	-CH(CF ₃)CH ₂ CH ₃	
078	Cl	CH ₂ CH ₃	-CH(CF ₃)CH(CH ₃) ₂	
079	Cl	CH ₂ CH ₃	-CH(CF ₃)CH ₂ CH(CH ₃) ₂	
080	Cl	CH ₂ CH ₃	-CH(CF ₃)CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	
081	Cl	CH ₂ CH ₃		
082	Cl	CH ₂ CH ₃	-CF ₂ CF ₂ CF ₃	
083	Cl	CH ₂ CH ₃	-CH(CH[CH ₃] ₂)COOCH ₂ CH ₃	
084	Cl	CH ₂ CH ₃	-CH(CF ₃)COOCH ₂ CH ₃	
085	Cl	CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	
086	Cl	CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	
087	Cl	CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH(CH ₃) ₂	

10

20

30

40

【 0 0 3 5 】

【表 9】

位置No.	R	R ³	R ⁴	R ²⁰
088	Cl	CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃)CH(CH ₃) ₂	
089	Cl	CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃)(CF ₃)	
090	Cl	CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CF ₃	
091	Cl	CH ₂ CH ₃	-CH(CF ₃)CH ₂ CH ₃	
092	Cl	CH ₂ CH ₃	-CH(CF ₃)CH(CH ₃) ₂	
093	Cl	CH ₂ CH ₃	-CH(CF ₃)CH ₂ CH(CH ₃) ₂	
094	Cl	CH ₂ CH ₃	-CH(CF ₃)CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	
095	Cl	CH ₂ CH ₃		
096	Cl	CH ₂ CH ₃	-CF ₂ CF ₂ CF ₃	
097	Cl	CH ₂ CH ₃	-CH(CH[CH ₃] ₂)COOCH ₂ CH ₃	

10

20

30

40

【 0 0 3 6 】

【表 10】

位置No.	R	R ³	R ⁴	R ²⁰
098	Cl	CH ₂ CH ₃	-CH(CF ₃)COOCH ₂ CH ₃	
099	Cl	CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	
100	Cl	CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	
101	Cl	CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH(CH ₃) ₂	
102	Cl	CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃)CH(CH ₃) ₂	
103	Cl	CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃)(CF ₃)	
104	Cl	CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CF ₃	
105	Cl	CH ₂ CH ₃	-CH(CF ₃)CH ₂ CH ₃	
106	Cl	CH ₂ CH ₃	-CH(CF ₃)CH(CH ₃) ₂	
107	Cl	CH ₂ CH ₃	-CH(CF ₃)CH ₂ CH(CH ₃) ₂	
108	Cl	CH ₂ CH ₃	-CH(CF ₃)CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	
109	Cl	CH ₂ CH ₃		

10

20

30

40

【表 1 1】

位置No.	R	R ³	R ⁴	R ²⁰
110	Cl	CH ₂ CH ₃	-CF ₂ CF ₂ CF ₃	
111	Cl	CH ₂ CH ₃	-CH(CH[CH ₃] ₂)COOCH ₂ CH ₃	
112	Cl	CH ₂ CH ₃	-CH(CF ₃)COOCH ₂ CH ₃	
113	Cl	CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	
114	Cl	CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	
115	Cl	CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH(CH ₃) ₂	
116	Cl	CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃)CH(CH ₃) ₂	
117	Cl	CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃)(CF ₃)	
118	Cl	CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CF ₃	
119	Cl	CH ₂ CH ₃	-CH(CF ₃)CH ₂ CH ₃	

10

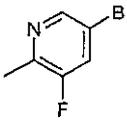
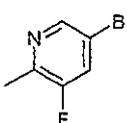
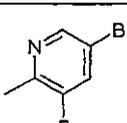
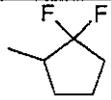
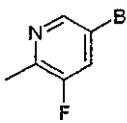
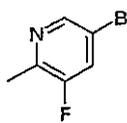
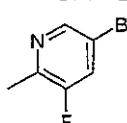
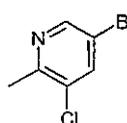
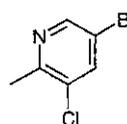
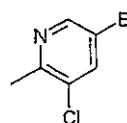
20

30

40

【 0 0 3 8 】

【表 1 2】

位置No.	R	R ³	R ⁴	R ²⁰
120	Cl	CH ₂ CH ₃	-CH(CF ₃)CH(CH ₃) ₂	
121	Cl	CH ₂ CH ₃	-CH(CF ₃)CH ₂ CH(CH ₃) ₂	
122	Cl	CH ₂ CH ₃	-CH(CF ₃)CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	
123	Cl	CH ₂ CH ₃		
124	Cl	CH ₂ CH ₃	-CF ₂ CF ₂ CF ₃	
125	Cl	CH ₂ CH ₃	-CH(CH[CH ₃] ₂)COOCH ₂ CH ₃	
126	Cl	CH ₂ CH ₃	-CH(CF ₃)COOCH ₂ CH ₃	
127	Cl	CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	
128	Cl	CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	
129	Cl	CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH(CH ₃) ₂	

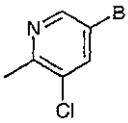
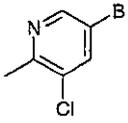
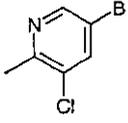
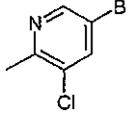
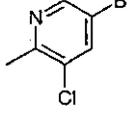
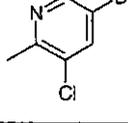
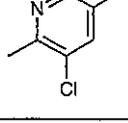
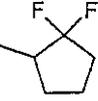
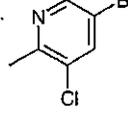
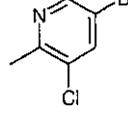
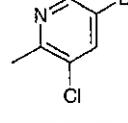
10

20

30

40

【表 1 3】

位置No.	R	R ³	R ⁴	R ²⁰
130	Cl	CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃)CH(CH ₃) ₂	
131	Cl	CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃)(CF ₃)	
132	Cl	CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CF ₃	
133	Cl	CH ₂ CH ₃	-CH(CF ₃)CH ₂ CH ₃	
134	Cl	CH ₂ CH ₃	-CH(CF ₃)CH(CH ₃) ₂	
135	Cl	CH ₂ CH ₃	-CH(CF ₃)CH ₂ CH(CH ₃) ₂	
136	Cl	CH ₂ CH ₃	-CH(CF ₃)CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	
137	Cl	CH ₂ CH ₃		
138	Cl	CH ₂ CH ₃	-CF ₂ CF ₂ CF ₃	
139	Cl	CH ₂ CH ₃	-CH(CH[CH ₃]) ₂ COOCH ₂ CH ₃	

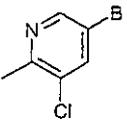
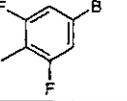
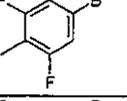
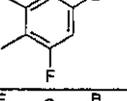
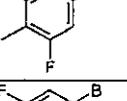
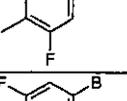
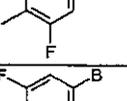
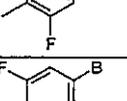
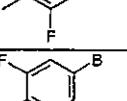
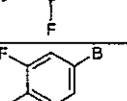
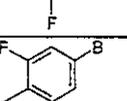
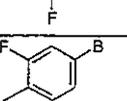
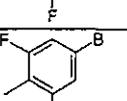
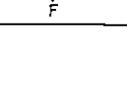
10

20

30

40

【表 1 4】

位置No.	R	R ³	R ⁴	R ²⁰
140	Cl	CH ₂ CH ₃	-CH(CF ₃)COOCH ₂ CH ₃	
141	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CH ₃) ₂	
142	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	
143	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH ₂ CH(CH ₃) ₂	
144	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CH ₃)CH(CH ₃) ₂	
145	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CH ₃)(CF ₃)	
146	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH ₂ CF ₃	
147	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CF ₃)CH ₂ CH ₃	
148	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CF ₃)CH(CH ₃) ₂	
149	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CF ₃)CH ₂ CH(CH ₃) ₂	
150	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CF ₃)CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	
151	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂		
152	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CF ₂ CF ₂ CF ₃	
153	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CH[CH ₃] ₂)COOCH ₂ CH ₃	

10

20

30

40

【表 15】

位置No.	R	R ³	R ⁴	R ²⁰
154	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CF ₃)COOCH ₂ CH ₃	
155	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CH ₃) ₂	
156	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	
157	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH ₂ CH(CH ₃) ₂	
158	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CH ₃)CH(CH ₃) ₂	
159	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CH ₃)(CF ₃)	
160	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH ₂ CF ₃	
161	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CF ₃)CH ₂ CH ₃	
162	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CF ₃)CH(CH ₃) ₂	
163	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CF ₃)CH ₂ CH(CH ₃) ₂	
164	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CF ₃)CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	

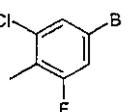
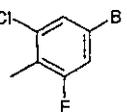
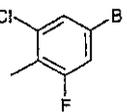
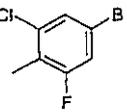
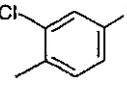
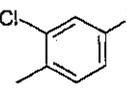
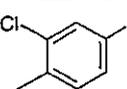
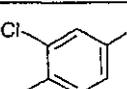
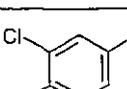
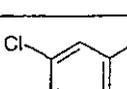
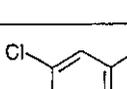
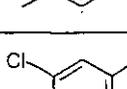
10

20

30

40

【表 16】

位置No.	R	R ³	R ⁴	R ²⁰
165	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂		
166	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CF ₂ CF ₂ CF ₃	
167	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CH[CH ₃]) ₂ COOCH ₂ CH ₃	
168	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CF ₃)COOCH ₂ CH ₃	
169	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CH ₃) ₂	
170	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	
171	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH ₂ CH(CH ₃) ₂	
172	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CH ₃)CH(CH ₃) ₂	
173	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CH ₃)(CF ₃)	
174	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH ₂ CF ₃	
175	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CF ₃)CH ₂ CH ₃	
176	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CF ₃)CH(CH ₃) ₂	

10

20

30

40

【表 17】

位置No.	R	R ³	R ⁴	R ²⁰
177	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CF ₃)CH ₂ CH(CH ₃) ₂	
178	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CF ₃)CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	
179	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂		
180	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CF ₂ CF ₂ CF ₃	
181	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CH[CH ₃]) ₂ COOCH ₂ CH ₃	
182	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CF ₃)COOCH ₂ CH ₃	
183	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CH ₃) ₂	
184	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	
185	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH ₂ CH(CH ₃) ₂	
186	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CH ₃)CH(CH ₃) ₂	
187	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CH ₃)(CF ₃)	

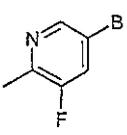
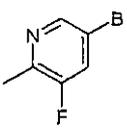
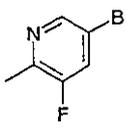
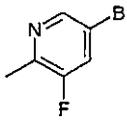
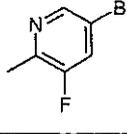
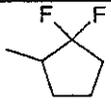
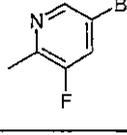
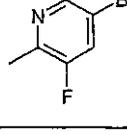
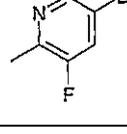
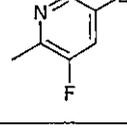
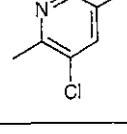
10

20

30

40

【表 18】

位置No.	R	R ³	R ⁴	R ²⁰
188	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH ₂ CF ₃	
189	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CF ₃)CH ₂ CH ₃	
190	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CF ₃)CH(CH ₃) ₂	
191	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CF ₃)CH ₂ CH(CH ₃) ₂	
192	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CF ₃)CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	
193	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂		
194	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CF ₂ CF ₂ CF ₃	
195	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CH[CH ₃] ₂)COOCH ₂ CH ₃	
196	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CF ₃)COOCH ₂ CH ₃	
197	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CH ₃) ₂	

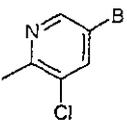
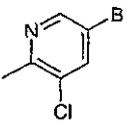
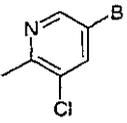
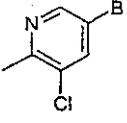
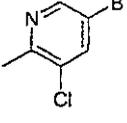
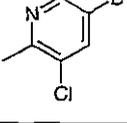
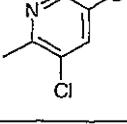
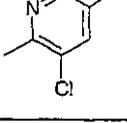
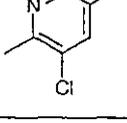
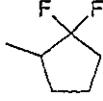
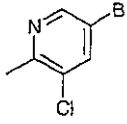
10

20

30

40

【表 19】

位置No.	R	R ³	R ⁴	R ²⁰
198	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	
199	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH ₂ CH(CH ₃) ₂	
200	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CH ₃)CH(CH ₃) ₂	
201	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CH ₃)(CF ₃)	
202	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH ₂ CF ₃	
203	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CF ₃)CH ₂ CH ₃	
204	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CF ₃)CH(CH ₃) ₂	
205	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CF ₃)CH ₂ CH(CH ₃) ₂	
206	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CF ₃)CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	
207	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂		

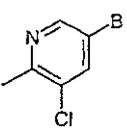
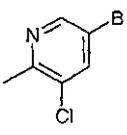
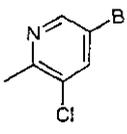
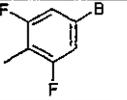
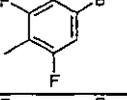
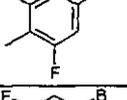
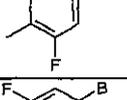
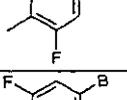
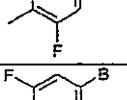
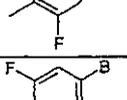
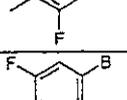
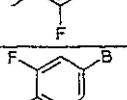
10

20

30

40

【表 20】

位置No.	R	R ³	R ⁴	R ²⁰
208	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CF ₂ CF ₂ CF ₃	
209	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CH[CH ₃]) ₂ COOCH ₂ CH ₃	
210	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CF ₃)COOCH ₂ CH ₃	
211	F	H	-CH(CH ₃) ₂	
212	F	H	-CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	
213	F	H	-CH ₂ CH(CH ₃) ₂	
214	F	H	-CH(CH ₃)CH(CH ₃) ₂	
215	F	H	-CH(CH ₃)(CF ₃)	
216	F	H	-CH ₂ CF ₃	
217	F	H	-CH(CF ₃)CH ₂ CH ₃	
218	F	H	-CH(CF ₃)CH(CH ₃) ₂	
219	F	H	-CH(CF ₃)CH ₂ CH(CH ₃) ₂	
220	F	H	-CH(CF ₃)CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	

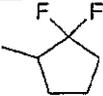
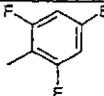
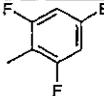
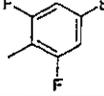
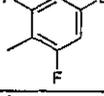
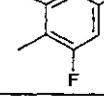
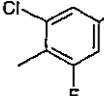
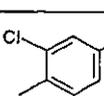
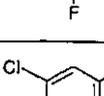
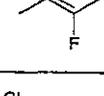
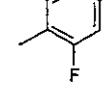
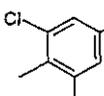
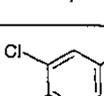
10

20

30

40

【表 2 1】

位置No.	R	R ³	R ⁴	R ²⁰
221	F	H		
222	F	H	-CF ₂ CF ₂ CF ₃	
223	F	H	-CH(CH[CH ₃] ₂)COOCH ₂ CH ₃	
224	F	H	-CH(CF ₃)COOCH ₂ CH ₃	
225	F	H	-CH(CH ₃) ₂	
226	F	H	-CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	
227	F	H	-CH ₂ CH(CH ₃) ₂	
228	F	H	-CH(CH ₃)CH(CH ₃) ₂	
229	F	H	-CH(CH ₃)(CF ₃)	
230	F	H	-CH ₂ CF ₃	
231	F	H	-CH(CF ₃)CH ₂ CH ₃	
232	F	H	-CH(CF ₃)CH(CH ₃) ₂	

10

20

30

40

【表 2 2】

位置No.	R	R ³	R ⁴	R ²⁰
233	F	H	$-\text{CH}(\text{CF}_3)\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	
234	F	H	$-\text{CH}(\text{CF}_3)\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_3$	
235	F	H		
236	F	H	$-\text{CF}_2\text{CF}_2\text{CF}_3$	
237	F	H	$-\text{CH}(\text{CH}[\text{CH}_3]_2)\text{COOCH}_2\text{CH}_3$	
238	F	H	$-\text{CH}(\text{CF}_3)\text{COOCH}_2\text{CH}_3$	
239	F	H	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	
240	F	H	$-\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_3$	
241	F	H	$-\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	
242	F	H	$-\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	
243	F	H	$-\text{CH}(\text{CH}_3)(\text{CF}_3)$	

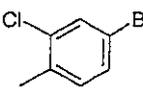
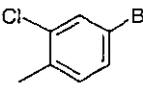
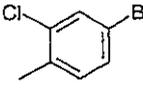
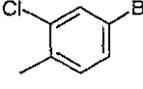
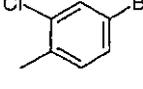
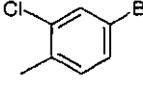
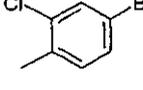
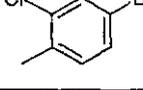
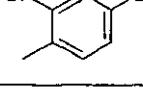
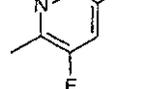
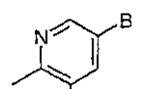
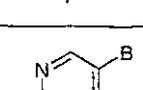
10

20

30

40

【表 2 3】

位置No.	R	R ³	R ⁴	R ²⁰
244	F	H	-CH ₂ CF ₃	
245	F	H	-CH(CF ₃)CH ₂ CH ₃	
246	F	H	-CH(CF ₃)CH(CH ₃) ₂	
247	F	H	-CH(CF ₃)CH ₂ CH(CH ₃) ₂	
248	F	H	-CH(CF ₃)CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	
249	F	H		
250	F	H	-CF ₂ CF ₂ CF ₃	
251	F	H	-CH(CH[CH ₃] ₂)COOCH ₂ CH ₃	
252	F	H	-CH(CF ₃)COOCH ₂ CH ₃	
253	F	H	-CH(CH ₃) ₂	
254	F	H	-CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	
255	F	H	-CH ₂ CH(CH ₃) ₂	

10

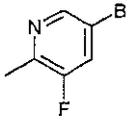
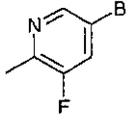
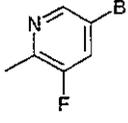
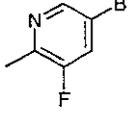
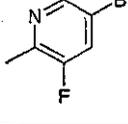
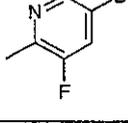
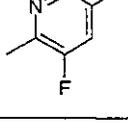
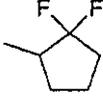
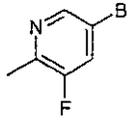
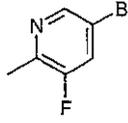
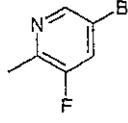
20

30

40

【 0 0 5 0 】

【表 2 4】

位置No.	R	R ³	R ⁴	R ²⁰
256	F	H	-CH(CH ₃)CH(CH ₃) ₂	
257	F	H	-CH(CH ₃)(CF ₃)	
258	F	H	-CH ₂ CF ₃	
259	F	H	-CH(CF ₃)CH ₂ CH ₃	
260	F	H	-CH(CF ₃)CH(CH ₃) ₂	
261	F	H	-CH(CF ₃)CH ₂ CH(CH ₃) ₂	
262	F	H	-CH(CF ₃)CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	
263	F	H		
264	F	H	-CF ₂ CF ₂ CF ₃	
265	F	H	-CH(CH[CH ₃] ₂)COOCH ₂ CH ₃	

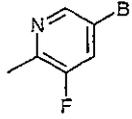
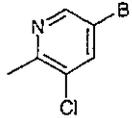
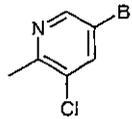
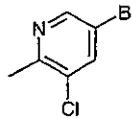
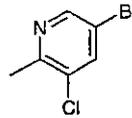
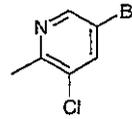
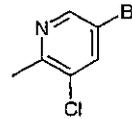
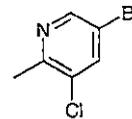
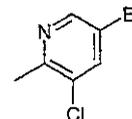
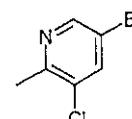
10

20

30

40

【表 2 5】

位置No.	R	R ³	R ⁴	R ²⁰
266	F	H	-CH(CF ₃)COOCH ₂ CH ₃	
267	F	H	-CH(CH ₃) ₂	
268	F	H	-CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	
269	F	H	-CH ₂ CH(CH ₃) ₂	
270	F	H	-CH(CH ₃)CH(CH ₃) ₂	
271	F	H	-CH(CH ₃)(CF ₃)	
272	F	H	-CH ₂ CF ₃	
273	F	H	-CH(CF ₃)CH ₂ CH ₃	
274	F	H	-CH(CF ₃)CH(CH ₃) ₂	
275	F	H	-CH(CF ₃)CH ₂ CH(CH ₃) ₂	

10

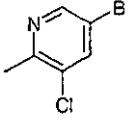
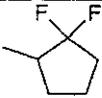
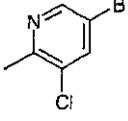
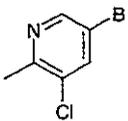
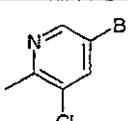
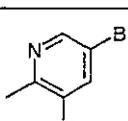
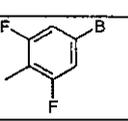
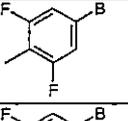
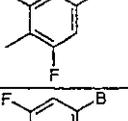
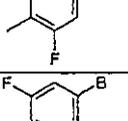
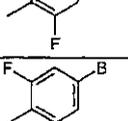
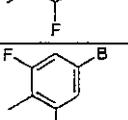
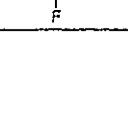
20

30

40

【 0 0 5 2 】

【表 2 6】

位置No.	R	R ³	R ⁴	R ²⁰
276	F	H	-CH(CF ₃)CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	
277	F	H		
278	F	H	-CF ₂ CF ₂ CF ₃	
279	F	H	-CH(CH[CH ₃] ₂)COOCH ₂ CH ₃	
280	F	H	-CH(CF ₃)COOCH ₂ CH ₃	
281	F	CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	
282	F	CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	
283	F	CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH(CH ₃) ₂	
284	F	CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃)CH(CH ₃) ₂	
285	F	CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃)(CF ₃)	
286	F	CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CF ₃	
287	F	CH ₂ CH ₃	-CH(CF ₃)CH ₂ CH ₃	

10

20

30

40

【表 27】

位置No.	R	R ³	R ⁴	R ²⁰
288	F	CH ₂ CH ₃	-CH(CF ₃)CH(CH ₃) ₂	
289	F	CH ₂ CH ₃	-CH(CF ₃)CH ₂ CH(CH ₃) ₂	
290	F	CH ₂ CH ₃	-CH(CF ₃)CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	
291	F	CH ₂ CH ₃		
292	F	CH ₂ CH ₃	-CF ₂ CF ₂ CF ₃	
293	F	CH ₂ CH ₃	-CH(CH[CH ₃] ₂)COOCH ₂ CH ₃	
294	F	CH ₂ CH ₃	-CH(CF ₃)COOCH ₂ CH ₃	
295	F	CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	
296	F	CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	
297	F	CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH(CH ₃) ₂	
298	F	CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃)CH(CH ₃) ₂	
299	F	CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃)(CF ₃)	

10

20

30

40

【 0 0 5 4 】

【表 28】

位置No.	R	R ³	R ⁴	R ²⁰
300	F	CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CF ₃	
301	F	CH ₂ CH ₃	-CH(CF ₃)CH ₂ CH ₃	
302	F	CH ₂ CH ₃	-CH(CF ₃)CH(CH ₃) ₂	
303	F	CH ₂ CH ₃	-CH(CF ₃)CH ₂ CH(CH ₃) ₂	
304	F	CH ₂ CH ₃	-CH(CF ₃)CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	
305	F	CH ₂ CH ₃		
306	F	CH ₂ CH ₃	-CF ₂ CF ₂ CF ₃	
307	F	CH ₂ CH ₃	-CH(CH[CH ₃] ₂)COOCH ₂ CH ₃	
308	F	CH ₂ CH ₃	-CH(CF ₃)COOCH ₂ CH ₃	
309	F	CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	
310	F	CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	

10

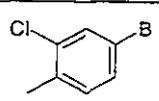
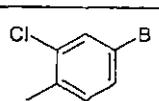
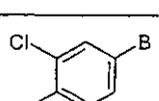
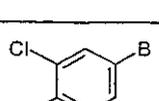
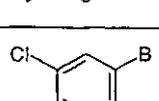
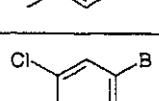
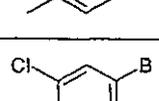
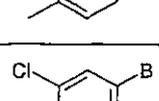
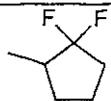
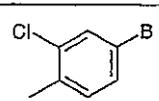
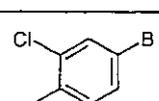
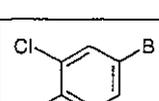
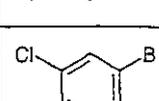
20

30

40

【 0 0 5 5 】

【表 29】

位置No.	R	R ³	R ⁴	R ²⁰
311	F	CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH(CH ₃) ₂	
312	F	CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃)CH(CH ₃) ₂	
313	F	CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃)(CF ₃)	
314	F	CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CF ₃	
315	F	CH ₂ CH ₃	-CH(CF ₃)CH ₂ CH ₃	
316	F	CH ₂ CH ₃	-CH(CF ₃)CH(CH ₃) ₂	
317	F	CH ₂ CH ₃	-CH(CF ₃)CH ₂ CH(CH ₃) ₂	
318	F	CH ₂ CH ₃	-CH(CF ₃)CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	
319	F	CH ₂ CH ₃		
320	F	CH ₂ CH ₃	-CF ₂ CF ₂ CF ₃	
321	F	CH ₂ CH ₃	-CH(CH[CH ₃] ₂)COOCH ₂ CH ₃	
322	F	CH ₂ CH ₃	-CH(CF ₃)COOCH ₂ CH ₃	

10

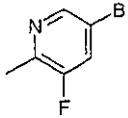
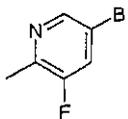
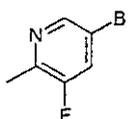
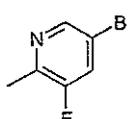
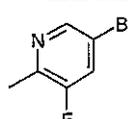
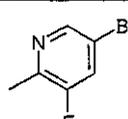
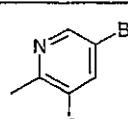
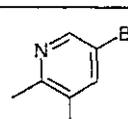
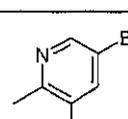
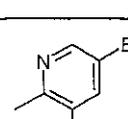
20

30

40

【 0 0 5 6 】

【表 3 0】

位置No.	R	R ³	R ⁴	R ²⁰
323	F	CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	
324	F	CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	
325	F	CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH(CH ₃) ₂	
326	F	CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃)CH(CH ₃) ₂	
327	F	CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃)(CF ₃)	
328	F	CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CF ₃	
329	F	CH ₂ CH ₃	-CH(CF ₃)CH ₂ CH ₃	
330	F	CH ₂ CH ₃	-CH(CF ₃)CH(CH ₃) ₂	
331	F	CH ₂ CH ₃	-CH(CF ₃)CH ₂ CH(CH ₃) ₂	
332	F	CH ₂ CH ₃	-CH(CF ₃)CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	

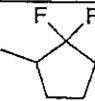
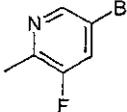
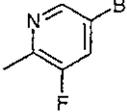
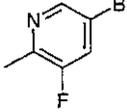
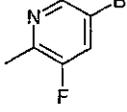
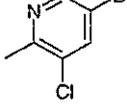
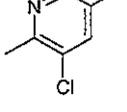
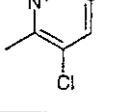
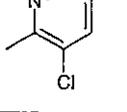
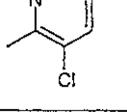
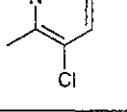
10

20

30

40

【表 3 1】

位置No.	R	R ³	R ⁴	R ²⁰
333	F	CH ₂ CH ₃		
334	F	CH ₂ CH ₃	-CF ₂ CF ₂ CF ₃	
335	F	CH ₂ CH ₃	-CH(CH[CH ₃] ₂)COOCH ₂ CH ₃	
336	F	CH ₂ CH ₃	-CH(CF ₃)COOCH ₂ CH ₃	
337	F	CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	
338	F	CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	
339	F	CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH(CH ₃) ₂	
340	F	CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃)CH(CH ₃) ₂	
341	F	CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃)(CF ₃)	
342	F	CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CF ₃	

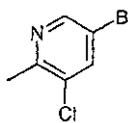
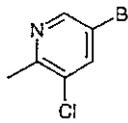
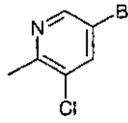
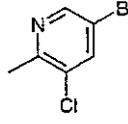
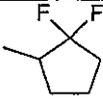
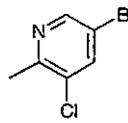
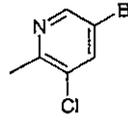
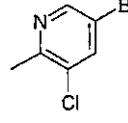
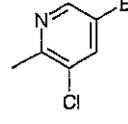
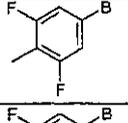
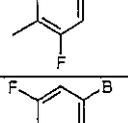
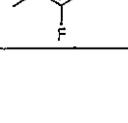
10

20

30

40

【表 3 2】

位置No.	R	R ³	R ⁴	R ²⁰
343	F	CH ₂ CH ₃	-CH(CF ₃)CH ₂ CH ₃	
344	F	CH ₂ CH ₃	-CH(CF ₃)CH(CH ₃) ₂	
345	F	CH ₂ CH ₃	-CH(CF ₃)CH ₂ CH(CH ₃) ₂	
346	F	CH ₂ CH ₃	-CH(CF ₃)CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	
347	F	CH ₂ CH ₃		
348	F	CH ₂ CH ₃	-CF ₂ CF ₂ CF ₃	
349	F	CH ₂ CH ₃	-CH(CH[CH ₃] ₂)COOCH ₂ CH ₃	
350	F	CH ₂ CH ₃	-CH(CF ₃)COOCH ₂ CH ₃	
351	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CH ₃) ₂	
352	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	
353	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH ₂ CH(CH ₃) ₂	

10

20

30

40

【表 3 3】

位置No.	R	R ³	R ⁴	R ²⁰
354	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CH ₃)CH(CH ₃) ₂	
355	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CH ₃)(CF ₃)	
356	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH ₂ CF ₃	
357	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CF ₃)CH ₂ CH ₃	
358	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CF ₃)CH(CH ₃) ₂	
359	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CF ₃)CH ₂ CH(CH ₃) ₂	
360	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CF ₃)CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	
361	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂		
362	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CF ₂ CF ₂ CF ₃	
363	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CH[CH ₃] ₂)COOCH ₂ CH ₃	
364	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CF ₃)COOCH ₂ CH ₃	
365	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CH ₃) ₂	
366	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	
367	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH ₂ CH(CH ₃) ₂	

10

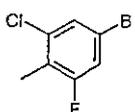
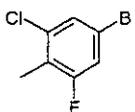
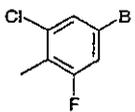
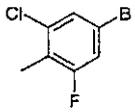
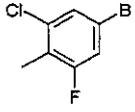
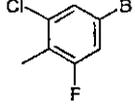
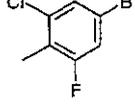
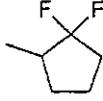
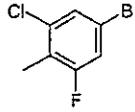
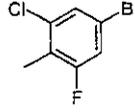
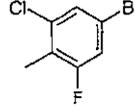
20

30

40

【 0 0 6 0 】

【表 3 4】

位置No.	R	R ³	R ⁴	R ²⁰
368	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CH ₃)CH(CH ₃) ₂	
369	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CH ₃)(CF ₃)	
370	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH ₂ CF ₃	
371	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CF ₃)CH ₂ CH ₃	
372	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CF ₃)CH(CH ₃) ₂	
373	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CF ₃)CH ₂ CH(CH ₃) ₂	
374	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CF ₃)CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	
375	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂		
376	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CF ₂ CF ₂ CF ₃	
377	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CH[CH ₃] ₂)COOCH ₂ CH ₃	

10

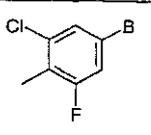
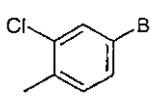
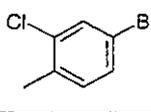
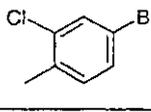
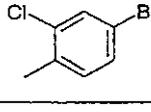
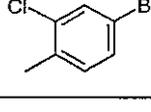
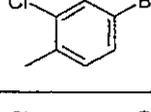
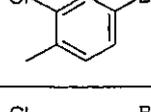
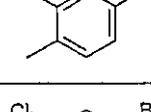
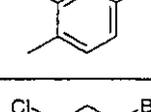
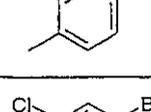
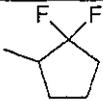
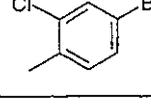
20

30

40

【 0 0 6 1 】

【表 3 5】

位置No.	R	R ³	R ⁴	R ²⁰
378	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CF ₃)COOCH ₂ CH ₃	
379	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CH ₃) ₂	
380	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	
381	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH ₂ CH(CH ₃) ₂	
382	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CH ₃)CH(CH ₃) ₂	
383	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CH ₃)(CF ₃)	
384	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH ₂ CF ₃	
385	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CF ₃)CH ₂ CH ₃	
386	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CF ₃)CH(CH ₃) ₂	
387	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CF ₃)CH ₂ CH(CH ₃) ₂	
388	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CF ₃)CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	
389	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂		

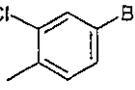
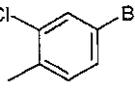
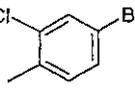
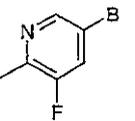
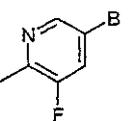
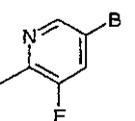
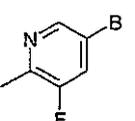
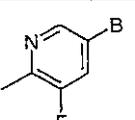
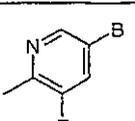
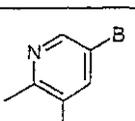
10

20

30

40

【表 3 6】

位置No.	R	R ³	R ⁴	R ²⁰
390	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CF ₂ CF ₂ CF ₃	
391	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CH[CH ₃]) ₂ COOCH ₂ CH ₃	
392	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CF ₃)COOCH ₂ CH ₃	
393	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CH ₃) ₂	
394	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	
395	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH ₂ CH(CH ₃) ₂	
396	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CH ₃)CH(CH ₃) ₂	
397	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CH ₃)(CF ₃)	
398	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH ₂ CF ₃	
399	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CF ₃)CH ₂ CH ₃	

10

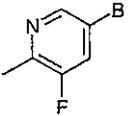
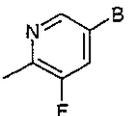
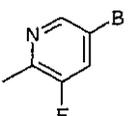
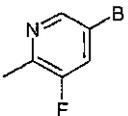
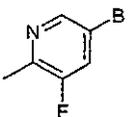
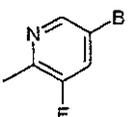
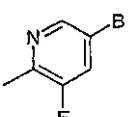
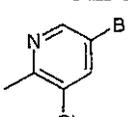
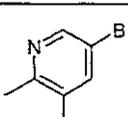
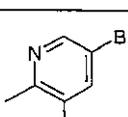
20

30

40

【 0 0 6 3 】

【表 3 7】

位置No.	R	R ³	R ⁴	R ²⁰
400	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CF ₃)CH(CH ₃) ₂	
401	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CF ₃)CH ₂ CH(CH ₃) ₂	
402	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CF ₃)CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	
403	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂		
404	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CF ₂ CF ₂ CF ₃	
405	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CH[CH ₃] ₂)COOCH ₂ CH ₃	
406	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CF ₃)COOCH ₂ CH ₃	
407	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CH ₃) ₂	
408	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	
409	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH ₂ CH(CH ₃) ₂	

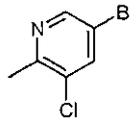
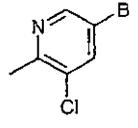
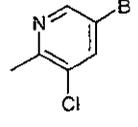
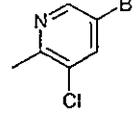
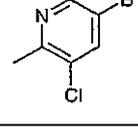
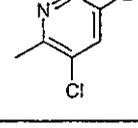
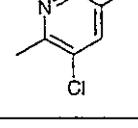
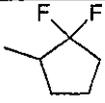
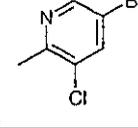
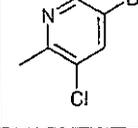
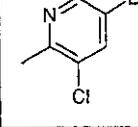
10

20

30

40

【表 3 8】

位置No.	R	R ³	R ⁴	R ²⁰
410	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CH ₃)CH(CH ₃) ₂	
411	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CH ₃)(CF ₃)	
412	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH ₂ CF ₃	
413	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CF ₃)CH ₂ CH ₃	
414	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CF ₃)CH(CH ₃) ₂	
415	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CF ₃)CH ₂ CH(CH ₃) ₂	
416	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CF ₃)CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	
417	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂		
418	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CF ₂ CF ₂ CF ₃	
419	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CH[CH ₃] ₂)COOCH ₂ CH ₃	

10

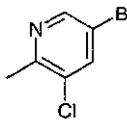
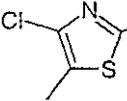
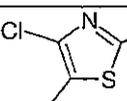
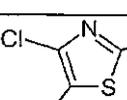
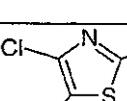
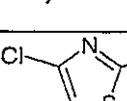
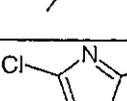
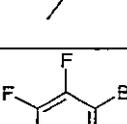
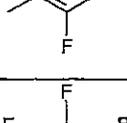
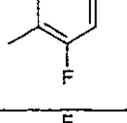
20

30

40

【 0 0 6 5 】

【表 3 9】

位置No.	R	R ³	R ⁴	R ²⁰
420	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CF ₃)COOCH ₂ CH ₃	
421	Cl	H	CH(CH[CH ₃] ₂)COOCH ₃	
422	Cl	CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CF ₃	
423	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CF ₃)CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	
424	F	H	CH(CH[CH ₃] ₂)COOCH ₃	
425	F	CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CF ₃	
426	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CF ₃)CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	
427	Cl	H	CH(CH[CH ₃] ₂)COOCH ₃	
428	Cl	CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CF ₃	
429	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CF ₃)CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	

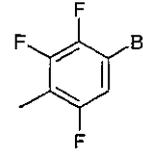
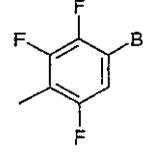
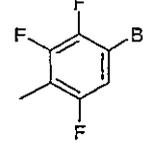
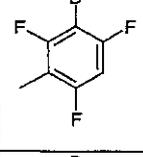
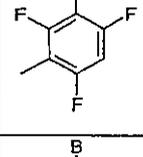
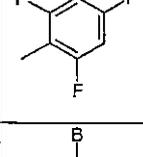
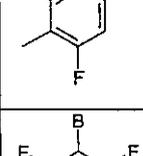
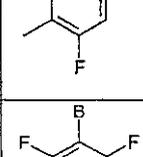
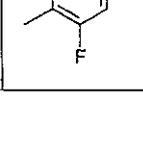
10

20

30

40

【表 4 0】

位置No.	R	R ³	R ⁴	R ²⁰
430	F	H	CH(CH[CH ₃] ₂)COOCH ₃	
431	F	CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CF ₃	
432	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CF ₃)CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	
433	Cl	H	CH(CH[CH ₃] ₂)COOCH ₃	
434	Cl	CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CF ₃	
435	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CF ₃)CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	
436	F	H	CH(CH[CH ₃] ₂)COOCH ₃	
437	F	CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CF ₃	
438	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CF ₃)CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	

10

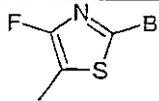
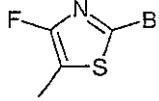
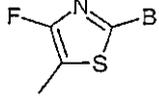
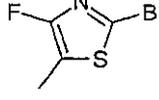
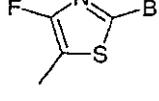
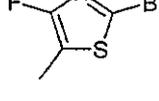
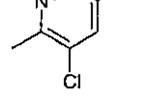
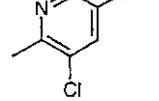
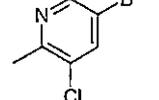
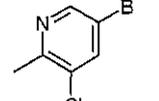
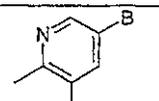
20

30

40

【 0 0 6 7 】

【表 4 1】

位置No.	R	R ³	R ⁴	R ²⁰
439	Cl	H	CH(CH[CH ₃] ₂)COOCH ₃	
440	Cl	CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CF ₃	
441	Cl	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CF ₃)CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	
442	F	H	CH(CH[CH ₃] ₂)COOCH ₃	
443	F	CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CF ₃	
444	F	CH ₂ C(CH ₃)=CH ₂	-CH(CF ₃)CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	
445	CN	-CH=CH ₂	3-ピリジル	
446	CF ₃	NH ₂	フェニル	
447	Br	-NH-フェニル	シクロヘキシル	
448	CN	-CH=CH ₂	フェニル	
449	CF ₃	NH ₂	3-ピリジル	

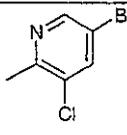
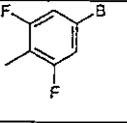
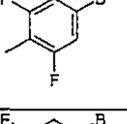
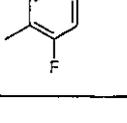
10

20

30

40

【表 4 2】

位置No.	R	R ³	R ⁴	R ²⁰
450	Br	-NH-フェニル	3-ピリジル	
451	CN	-CH=CH ₂	3-ピリジル	
452	CF ₃	NH ₂	フェニル	
453	Br	-NH-フェニル	シクロヘキシル	

10

20

【 0 0 6 9 】

表2

表2は453個の一般式(2)の化合物からなり、ここでW及びZはNであり、X及びYはCHであり、Bはフェニルであり、そして、R、R³、R⁴及びR²⁰の値は表1に列挙したとおりである。

【 0 0 7 0 】

表3

表3は453個の一般式(2)化合物からなり、ここでW及びZはNであり、X及びYはCHであり、Bは4-フルオロフェニルであり、R、R³、R⁴及びR²⁰の値は表1に列挙したとおりである。

【 0 0 7 1 】

表4

表4は453個の一般式(2)化合物からなり、ここでW及びZはNであり、X及びYはCHであり、Bは4-クロロフェニルであり、R、R³、R⁴及びR²⁰の値は表1に列挙したとおりである。

30

【 0 0 7 2 】

表5

表5は453個の一般式(2)化合物からなり、ここでW及びZはNであり、X及びYはCHであり、Bは5-フルオロ-2-ピリジルであり、R、R³、R⁴及びR²⁰の値は表1に列挙したとおりである。

【 0 0 7 3 】

表6

表6は453個の一般式(2)化合物からなり、ここでW及びZはNであり、X及びYはCHであり、Bは6-フルオロ-3-ピリジルであり、R、R³、R⁴及びR²⁰の値は表1に列挙したとおりである。

40

【 0 0 7 4 】

表7

表7は453個の一般式(2)化合物からなり、ここでW及びZはNであり、X及びYはCHであり、Bは2-フェニルエチニルであり、R、R³、R⁴及びR²⁰の値は表1に列挙したとおりである。

【 0 0 7 5 】

表8

表8は453個の一般式(2)化合物からなり、ここでW及びZはNであり、X及びYはCHであり

50

、Bは2-(4-フルオロフェニル)エチニルであり、R、R³、R⁴及びR²⁰の値は表1に列挙したとおりである。

【0076】

表9

表9は453個の一般式(2)化合物からなり、ここでW及びZはNであり、X及びYはCHであり、Bは(4-メチルフェニル)エチニルであり、そしてR、R³、R⁴及びR²⁰の値は表1に列挙したとおりである。

【0077】

表10

表10は453個の一般式(2)化合物からなり、ここでW及びZはNであり、X及びYはCHであり、Bは(4-フルオロフェニル)エチニルであり、R、R³、R⁴及びR²⁰の値は表1に列挙したとおりである。

10

【0078】

表11

表11は453個の一般式(2)化合物からなり、ここでW及びZはNであり、X及びYはCHであり、Bは4-フルオロフェノキシであり、R、R³、R⁴及びR²⁰の値は表1に列挙したとおりである。

【0079】

表12

表12は453個の一般式(2)化合物からなり、ここでW及びZはNであり、X及びYはCHであり、Bはフェニルチオであり、R、R³、R⁴及びR²⁰の値は表1に列挙したとおりである。

20

【0080】

表13

表13は453個の一般式(2)化合物からなり、ここでW及びZはNであり、X及びYはCHであり、Bはフェニルスルフィニルであり、R、R³、R⁴及びR²⁰の値は表1に列挙したとおりである。

【0081】

表14

表14は453個の一般式(2)化合物からなり、ここでW及びZはNであり、X及びYはCHであり、Bはフェニルスルフォニルであり、R、R³、R⁴及びR²⁰の値は表1に列挙したとおりである。

30

【0082】

表15

表15は453個の一般式(2)化合物からなり、ここでW、Y及びZはNであり、XはCHであり、Bはフェニルであり、R、R³、R⁴及びR²⁰の値は表1に列挙したとおりである。

【0083】

表16

表16は453個の一般式(2)化合物からなり、ここでW、Y及びZはNであり、XはCHであり、Bは4-フルオロフェニルであり、R、R³、R⁴及びR²⁰の値は表1に列挙したとおりである。

【0084】

表17

表17は453個の一般式(2)化合物からなり、ここでW、Y及びZはNであり、XはCHであり、Bは4-クロロフェニルであり、R、R³、R⁴及びR²⁰の値は表1に列挙したとおりである。

40

【0085】

表18

表18は453個の一般式(2)化合物からなり、ここでW、Y及びZはNであり、XはCHであり、Bは5-フルオロ-2-ピリジルであり、R、R³、R⁴及びR²⁰の値は表1に列挙したとおりである。

【0086】

表19

表19は453個の一般式(2)化合物からなり、ここでW、Y及びZはNであり、XはCHであり、B

50

は6-フルオロ-3-ピリジルであり、R、R³、R⁴及びR²⁰の値は表1に列挙したとおりである。

【 0 0 8 7 】

表20

表20は、453個の一般式(2)化合物からなり、ここでW、Y及びZはNであり、XはCHであり、Bは2-フェニルエチニルであり、R、R³、R⁴及びR²⁰の値は表1に列挙したとおりである。

【 0 0 8 8 】

表21

表21は453個の一般式(2)化合物からなり、ここでW、Y及びZはNであり、XはCHであり、Bは2-(4-フルオロフェニル)エチニルであり、R、R³、R⁴及びR²⁰の値は表1に列挙したとおりである。

10

【 0 0 8 9 】

表22

表22は453個の一般式(2)化合物からなり、ここでW、Y及びZはNであり、XはCHであり、Bは(4-メチルフェニル)エチニルであり、R、R³、R⁴及びR²⁰の値は表1に列挙したとおりである。

【 0 0 9 0 】

表23

表23は453個の一般式(2)化合物からなり、ここでW、Y及びZはNであり、XはCHであり、Bは(4-フルオロフェニル)エチニルであり、R、R³、R⁴及びR²⁰の値は表1に列挙したとおりである。

20

【 0 0 9 1 】

表24

表24は453個の一般式(2)化合物からなり、ここでW、Y及びZはNであり、XはCHであり、Bは4-フルオロフェノキシであり、R、R³、R⁴及びR²⁰の値は表1に列挙したとおりである。

【 0 0 9 2 】

表25

表25は453個の一般式(2)化合物からなり、ここでW、Y及びZはNであり、XはCHであり、Bはフェニルチオであり、R、R³、R⁴及びR²⁰の値は表1に列挙したとおりである。

【 0 0 9 3 】

表26

表26は453個の一般式(2)化合物からなり、ここでW、Y及びZはNであり、XはCHであり、Bはフェニルスルフィニルであり、R¹、R³、R⁴及びR²⁰の値は表1に列挙したとおりである。

30

【 0 0 9 4 】

表27

表27は453個の一般式(2)化合物からなり、ここでW、Y及びZはNであり、XはCHであり、Bはフェニルスルフォニルであり、R¹、R³、R⁴及びR²⁰の値は表1に列挙したとおりである。

【 0 0 9 5 】

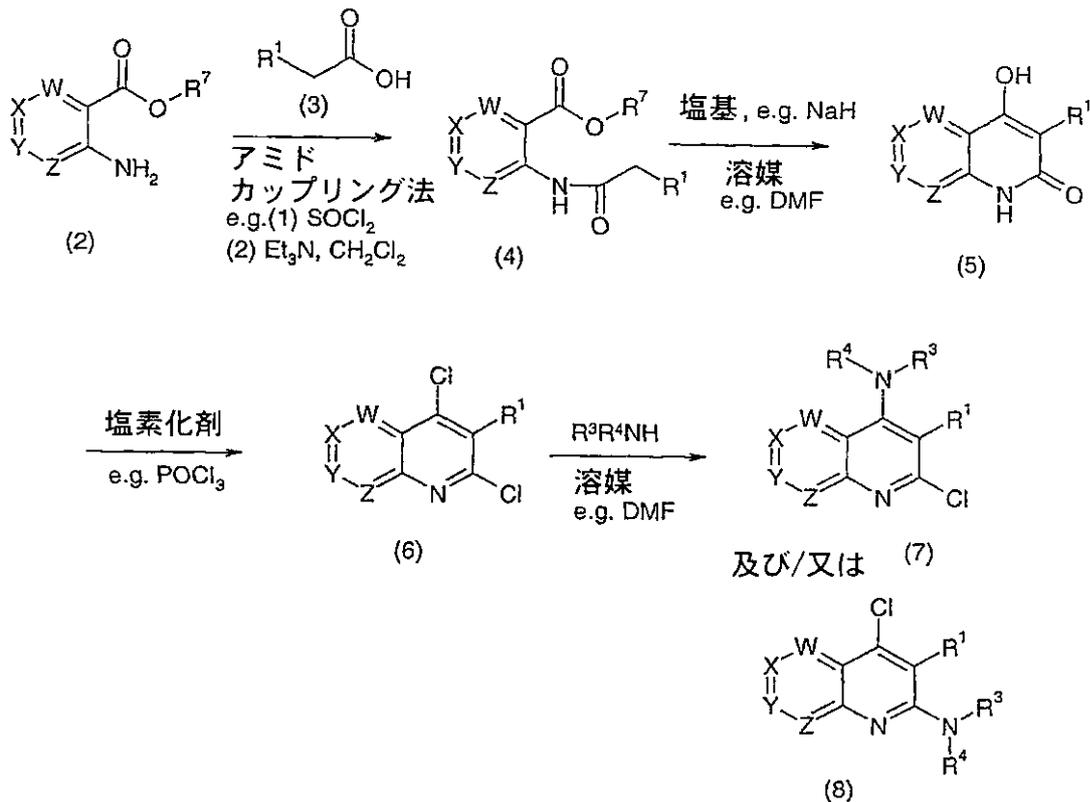
一般式(1)の化合物の例である式(7)又は(8)の化合物であって、R及びR²の1つがNR³R⁴である化合物はスキーム1に示すことができ、ここでW、X、Y、Z、R¹、R³及びR⁴は上記の意味を有し且つR⁷はC₁₋₄アルキルである。

40

【 0 0 9 6 】

【化4】

スキーム1



10

20

40

50

【0097】

一般式(4)の化合物は、一般式(2)の化合物（商業上入手可能であるか、あるいは刊行物に公知の方法によって調製されて良い）から、標準的なカップリング方法を使用することで、一般式(3)の酸との反応により調製されて良く、例えば、塩素化剤の例えば、塩化チオニルを使用することで酸塩化物に転換し、しかる後に、適切な溶媒の例えば、ジクロロメタン又はトルエン中、塩基の例えば、トリエチルアミンの存在下で、任意に生じる酸塩化物の反応によって調製されて良い。一般式(5)の化合物は、適切な溶媒の例えば、N,N-ジメチルホルムアミド(DMF)又はトルエン中、室温～150℃、しかし好適に60～90℃で、一般式(4)の化合物を塩基の例えば、水素化ナトリウムにより、任意にルイス酸の例えば、酸化マグネシウムの存在下で調製できる。一般式(6)の化合物は、純溶媒又は適切な溶媒の例えば、トルエン中、50～100℃、しかし好適には80～110℃で、又はマイクロ波リアクター中、150～300℃で、しかし好適に200～250℃で一般式(5)の化合物と塩素化試薬の例えば、オキシ塩化リンとの反応により調製できる。式(7)及び(8)の化合物は、一般式(6)の化合物とアミンR³R⁴NHとの、純溶媒中、又は適切な溶媒の例えば、DMF中、室温～150℃、しかし好適には、50～80℃の温度での反応によって調製できる。もし、化合物(7)及び(8)が、混合物として生産されれば、それらは、適切な手段の例えば、結晶化又は純相もしくは逆相条件下でクロマトグラフィーなどの適切な手段によって調製されて良い。

【0098】

式(15)及び(16)の化合物（一般式(1)の化合物の例である）は、スキーム2に示されるように調製されて良く、ここでHalはハロゲンの例えば、臭素又はヨウ素である。式(10)の化合物は、式(9)の化合物（それらはスキーム1における式(5)の化合物の例である）の反応によって、適切な溶媒の例えば、トルエン又はエタノール中、化合物B-D（ここでBは、R

について上で規定した置換基であり、そしてDは、臭酸 $B(OH)_2$ 、トリ(C_{1-4})アルキルスズなどの金属基である)とのパラジウム触媒の例えば、 $PdP(Ph_3)_4$ 又は $Pd_2(dba)_3$ 、リガンドの例えば、 PPh_3 又は $P(t-Bu)_3$ 、塩基の例えば K_2CO_3 又は CsF の存在下、適切な溶媒の例えばトルエン又はエタノール中室温～還流温度、しかし好適には50～100 でのクロスカップリング反応によって調製されて良い。

【0099】

式(11)の化合物は、式(9)の化合物と塩素化試薬の例えば、オキシ塩化リンとの、純溶媒中又は適切な溶媒の例えばトルエン又はジクロロエタン中、50～150 、しかし60 ～110 の温度での反応によって形成されて良い。

【0100】

式(12)の化合物は、(9) (10)へ転換するための条件を使用することで式(11)の化合物をクロスカップリングさせることによって、又は(9) (11)へ転換するための条件を使用することで式(10)の化合物の塩素化のいずれかによって調製されて良い。

10

【0101】

式(13)及び(14)の化合物は、式(11)の化合物とアミン R^3R^4NH を、純溶媒中又は適切な溶媒の例えば、DMF中、室温で、好適には約50～80 で反応させることによって調製されて良い。もし化合物(13)及び(14)が、混合物として生産されたら、それらは適切な手段の例えば、結晶化又は順相又は逆相条件下でのクロマトグラフィーによって調製されて良い。

【0102】

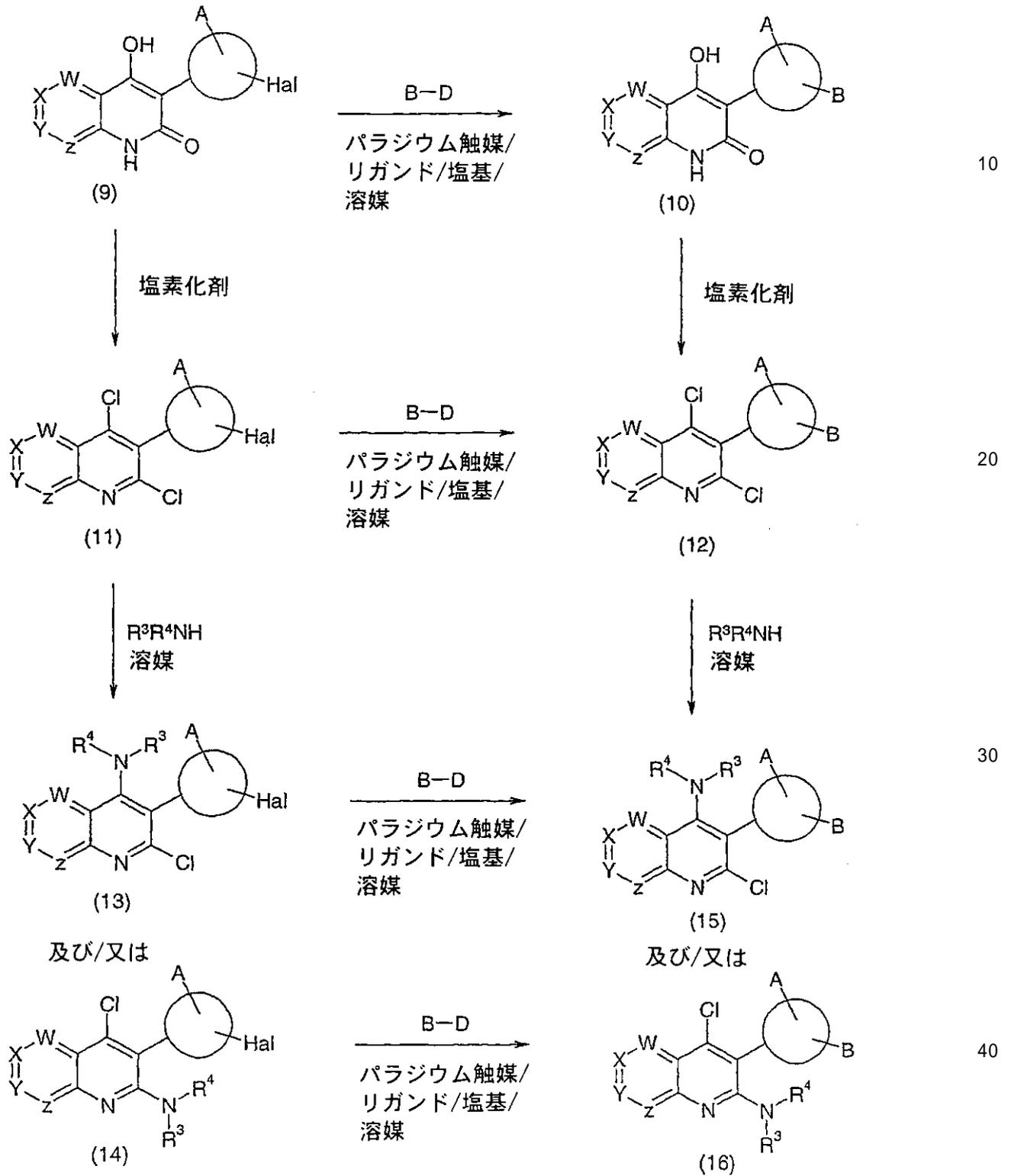
式(15)及び(16)の化合物は、式(12)の化合物を、アミン R^3R^4NH と、純溶媒又は適切な溶媒の例えばDMF中、室温で、しかし好適には50～80 で反応させることによって調製されて良い。もし化合物(15)及び(16)が混合物として生産されれば、それらは、適切な手段の例えば、結晶化又は順相もしくは逆相条件下でのクロマトグラフィーによって分離されて良い。式(15)及び(16)の化合物は、式(13)及び(14)の化合物それぞれから、(9) (10)へ転換」するための条件を使用するでクロスカップリングさせることによって個々に調製されて良い。

20

【0103】

【化5】

スキーム2



【0104】

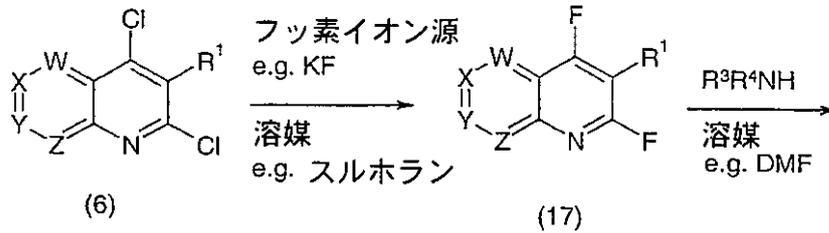
式(17)の化合物は、スキーム3に示すように、式(6)の化合物から、フッ化物イオンの源の例えば、フッ化カリウムと、適切な溶媒の例えばスルフォラン中、50~200℃、しかし好適には80~150℃で反応させることによって調製されて良い。式(18)の化合物及び/又は

式(19)の化合物は、式(17)のジフルオロ化合物から、式 R^3R^4NH のアミンと適切な溶媒の例えばDMF又は CH_2Cl_2 中、0 ~ 100 °C、しかし好適に室温で調製されて良い。

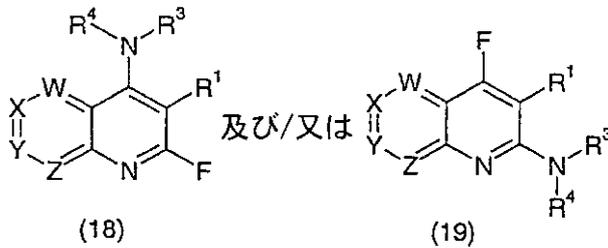
【0105】

【化6】

スキーム3



10



20

【0106】

スキーム4において、一般式(20)の化合物(2つの R^3R^4N 基は同一である)は、一般式(17)の化合物から、適切な溶媒の例えばDMF中、0 ~ 150 °C、好適に、室温 ~ 100 °Cで過剰のアミン R^3R^4NH との反応によって調製されて良い。

【0107】

【化7】

30

スキーム4

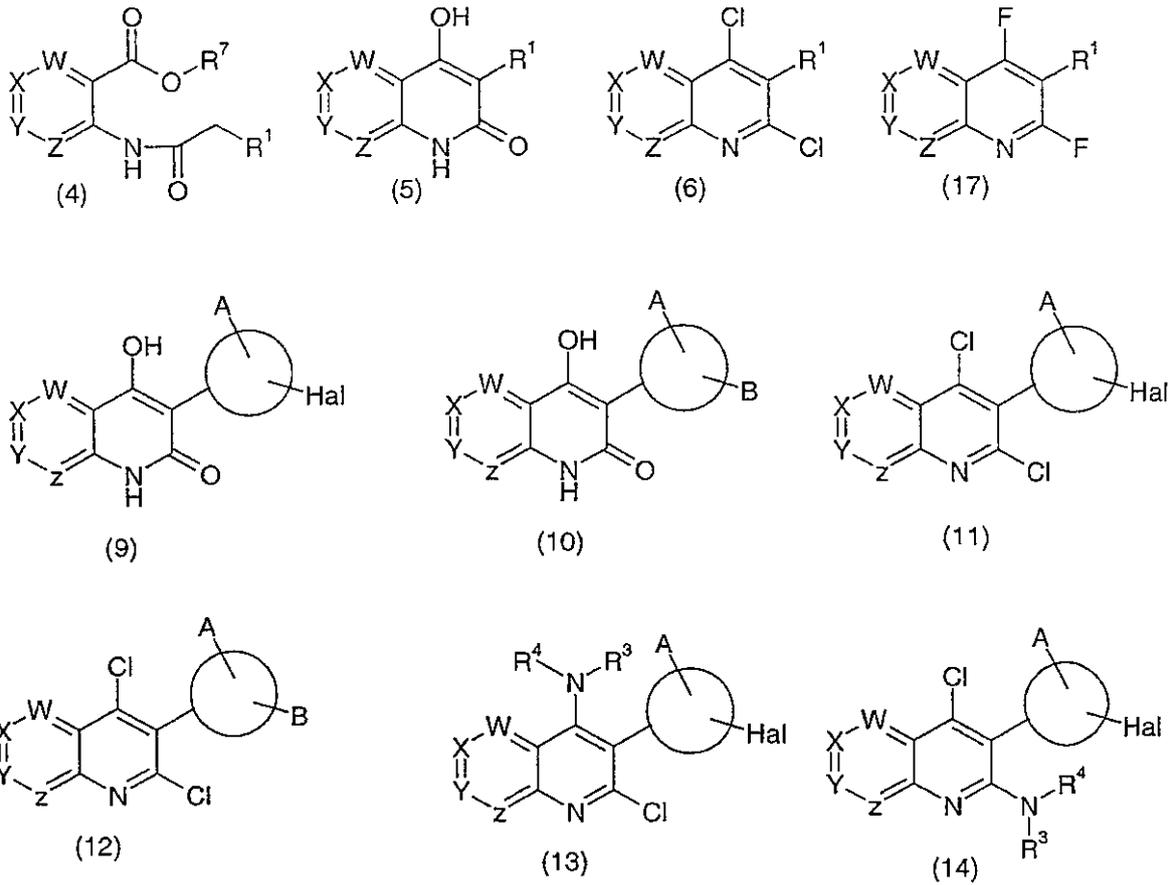


40

【0108】

一般式(4)、(5)、(6)、(9)、(10)、(11)、(12)、(13)、(14)及び(17)を有する中間体化合物：

【化8】



10

20

(式中、W、X、Y、Z、R¹、R³、R⁴、R⁷、Hal、A及びBは上で規定したとおりである)

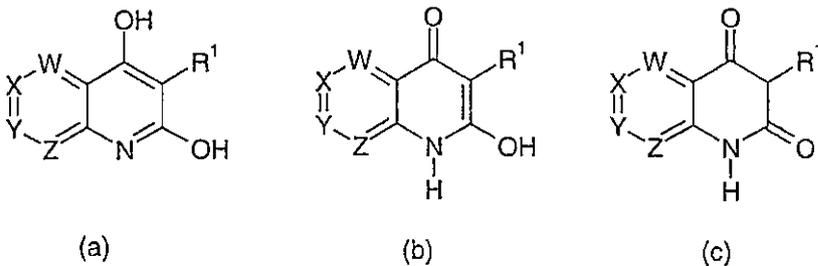
30

は、新規化合物であると考えられ、そして本発明の更なる部分を形成する。

【0109】

一般式(5)の中間体は、互変異性体形態(a)、(b)及び(c)並びに式(5)：

【化9】



40

に示される形態において存在しうることに留意すべきである。：

【0110】

本発明は、一般式(5)で定義されたように、かかる互変異性体を全て包含する。

【0111】

下の表に列挙された中間体が特に注目である。表28において、化合物は一般式(4)(R¹は

50

R^{20} であり、 R^7 はメチル、W、X、Y、Zであり且つBは表28に示す値を有する)を有する。

【 0 1 1 2 】

【 表 4 3 】

表28

化合物No.	B	W	X	Y	Z
1	フェニル	N	CH	CH	N
2	4-フルオロフェニル	N	CH	CH	N
3	4-クロロフェニル	N	CH	CH	N
4	5-フルオロ-2-ピリジル	N	CH	CH	N
5	6-フルオロ-3-ピリジル	N	CH	CH	N
6	2-フェニルエチル	N	CH	CH	N
7	2-(4-フルオロフェニル)エチニル	N	CH	CH	N
8	(4-メチルフェニル)エチニル	N	CH	CH	N
9	(4-フルオロフェニル)エチニル	N	CH	CH	N
10	4-フルオロフェノキシ	N	CH	CH	N
11	フェニルチオ	N	CH	CH	N
12	フェニルスルフィニル	N	CH	CH	N
13	フェニルスルフォニル	N	CH	CH	N
14	フェニル	N	CH	N	N
15	4-フルオロフェニル	N	CH	N	N
16	4-クロロフェニル	N	CH	N	N
17	5-フルオロ-2-ピリジル	N	CH	N	N
18	6-フルオロ-3-ピリジル	N	CH	N	N
19	2-フェニルエチル	N	CH	N	N
20	2-(4-フルオロフェニル)エチニル	N	CH	N	N
21	(4-メチルフェニル)エチニル	N	CH	N	N
22	(4-フルオロフェニル)エチニル	N	CH	N	N
23	4-フルオロフェノキシ	N	CH	N	N
24	フェニルチオ	N	CH	N	N
25	フェニルスルフィニル	N	CH	N	N
26	フェニルスルフォニル	N	CH	N	N

10

20

30

【 0 1 1 3 】

表29

表29は一般式(5)の26個の化合物からなり、ここで R^1 は R^{20} であり、W、X、Y、Z及びBは表28に与えられた値を有し且つ R^{20} は4-置換2,6-ジフルオロフェニルである。

40

【 0 1 1 4 】

表30

表30は一般式(5)の26個の化合物からなり、ここで R^1 は R^{20} であり、そしてBは表28に示される値を有し且つ R^{20} は4-置換2-クロロ-6-フルオロフェニルである。

【 0 1 1 5 】

表31

表31は一般式(5)の26個の化合物からなり、ここで R^1 は R^{20} であり、そしてBは表28に示される値を有し且つ R^{20} は4-置換2-クロロフェニルである。

【 0 1 1 6 】

50

表32

表32は一般式(5)の26個の化合物からなり、ここで R^1 は R^{20} であり、W、X、Y、Z及びBは表28に与えられた値であり且つ R^{20} は5-置換3-フルオロピリド-2-イルである。

【0 1 1 7】

表33

表33は一般式(5)の26個の化合物からなり、ここで R^1 は R^{20} であり、W、X、Y、Z及びBは表28に与えられた値であり且つ R^{20} は5-置換3-クロロピリド-2-イルである。

【0 1 1 8】

表34

表34は一般式(6)の26個の化合物からなり、ここで R^1 は R^{20} であり、W、X、Y、Z及びBは表28に示される値を有し且つ R^{20} は4-置換2,6-ジフルオロフェニルである。

【0 1 1 9】

表35

表35は一般式(6)の26個の化合物からなり、ここで R^1 は R^{20} であり、W、X、Y、Z及びBは表28に与えられた値であり且つ R^{20} は4-置換2-クロロ-6-フルオロフェニルである。

【0 1 2 0】

表36

表36は一般式(6)の26個の化合物からなり、ここで R^1 は R^{20} であり、そしてBは表28に示される値を有し且つ R^{20} は4-置換2-クロロフェニルである。

【0 1 2 1】

表37

表37は一般式(6)の26個の化合物からなり、ここで R^1 は R^{20} であり、W、X、Y、Z及びBは表28に与えられた値であり且つ R^{20} は5-置換3-フルオロピリド-2-イルである。

【0 1 2 2】

表38

表38は一般式(6)の26個の化合物からなり、ここで R^1 は R^{20} であり、W、X、Y、Z及びBは表28に与えられた値であり且つ R^{20} は5-置換3-クロロピリド-2-イルである。

【0 1 2 3】

表39

表39は一般式(17)の26個の化合物からなり、ここで R^1 は R^{20} であり、W、X、Y、Z及びBは表28に与えられた値であり且つ R^{20} は4-置換2,6-ジフルオロフェニルである。

【0 1 2 4】

表40

表40は一般式(17)の26個の化合物からなり、ここで R^1 は R^{20} であり、そしてBは表28に示される値を有し且つ R^{20} は4-置換2-クロロ-6-フルオロフェニルである。

【0 1 2 5】

表41

表41は一般式(17)の26個の化合物からなり、ここで R^1 は R^{20} であり、W、X、Y、Z及びBは表28に与えられた値であり且つ R^{20} は4-置換2-クロロフェニルである。

【0 1 2 6】

表42

表42は一般式(17)の26個の化合物からなり、ここで R^1 は R^{20} であり、W、X、Y、Z及びBは表28に与えられた値であり且つ R^{20} は5-置換3-フルオロピリド-2-イルである。

【0 1 2 7】

表43

表43は、一般式(17)の26個の化合物からなり、ここで R^1 は R^{20} であり、そしてBは表28に示される値を有し且つ R^{20} は5-置換3-クロロピリド-2-イルである。

【0 1 2 8】

表44

表44は一般式(4)の26個の化合物からなり、ここで R^1 は R^{20} であり、W、X、Y、Z及びBは

10

20

30

40

50

表28に与えられたとおりであり、そして R^7 はメチルであり且つ R^{20} は4-置換2,6-ジフルオロフェニルである。

【 0 1 2 9 】

表45

表45は一般式(4)の26個の化合物からなり、ここで R^1 は R^{20} であり、W、X、Y、Z及びBは表28に与えられたとおりであり、そして R^7 はメチルであり且つ R^{20} は4-置換2-クロロ-6-フルオロフェニルである。

【 0 1 3 0 】

表46

表46は一般式(4)の26個の化合物からなり、ここで R^1 は R^{20} であり、W、X、Y、Z及びBは表28に与えられたとおりであり、そして R^7 はメチルであり且つ R^{20} は4-置換2-クロロフェニルである。

10

【 0 1 3 1 】

表47

表47は一般式(4)の26個の化合物からなり、ここで R^1 は R^{20} であり、W、X、Y、Z及びBは表28に与えられたとおりであり、そして R^7 はメチルであり且つ R^{20} は5-置換3-フルオロピリド-2-イルである。

【 0 1 3 2 】

表48

表48 は一般式(4)の26個の化合物からなり、ここで R^1 は R^{20} であり、W、X、Y、Z及びBは表28に与えられたとおりであり、そして R^7 はメチルであり且つ R^{20} は5-置換3-クロロピリド-2-イルである。

20

【 0 1 3 3 】

表49

表49は一般式(4)の26個の化合物からなり、ここで R^1 は R^{20} であり、W、X、Y、Z及びBは表28に与えられたとおりであり、 R^7 はエチルであり且つ R^{20} は4-置換2,6-ジフルオロフェニルである。

【 0 1 3 4 】

表50

表50は一般式(4)の26個の化合物からなり、ここで R^1 は R^{20} であり、W、X、Y、Z及びBは表28に与えられたとおりであり、 R^7 はエチルであり且つ R^{20} は4-置換2-クロロ-6-フルオロフェニルである。

30

【 0 1 3 5 】

表51

表51 は一般式(4)の26個の化合物からなり、ここで R^1 は R^{20} であり、W、X、Y、Z及びBは表28に与えられた値を有し、 R^7 はエチルであり且つ R^{20} は4-置換2-クロロフェニルである。

【 0 1 3 6 】

表52

表52は一般式(4)の26個の化合物からなり、ここで R^1 は R^{20} であり、W、X、Y、Z及びBは表28に与えられた値を有し、 R^7 はエチルであり且つ R^{20} は5-置換3-フルオロピリド-2-イルである。

40

【 0 1 3 7 】

表53

表53は一般式(4)の26個の化合物からなり、ここで R^1 は R^{20} であり、W、X、Y、Z及びBは表28に与えられたとおりであり、 R^7 はエチルであり且つ R^{20} は、5-置換3-クロロピリド-2-イルである。

【 0 1 3 8 】

式(1)の化合物は活性殺菌剤であり且つ1又は複数の以下の病原体をコントロールするために使用されて良い:ピリクリア・オリザエ (*Pyricularia oryzae* (マグナボルテ・グ

50

リセア(*Magnaporthe grisea*))(イネ及びコムギ上の)、及び他のピリクリア(*pyricularia*)
 spp.(他の宿主上の); プッシニアトリトリチシトザ(*Puccinia triticitza*)(又はレコンジ
 ダ(*recondita*))、プッシニア・ストリイホルミス(*Puccinia striiformis*)及び他のコムギ
 ヒのサビ菌類及び (*rust*)(コムギ上の)、プッシニア・ホルデイ(*Puccinia hordei*)、プ
 ッシニア・ストリイホルミス及び他のサビ菌類(オオムギ上の)、並びにサビ菌類(他の
 宿主、例えば、シバフ、ライ、コーヒー、ナシ、リンゴ、ピーナッツ、サトウキビ、野菜
 及び観葉植物); エリシフィ・シチョラセラム(*Erysiphe cichoracearum*)(ウリ科植物、例
 えばメロン上の); ブルメリア(*Blumeria*)(又はエリシフィ)グラミニス(*graminis*)(ウドン
 コ病)(オオムギ、コムギ、ライムギ及びシバフ並びに様々な宿主上の他のウドンコ病、例
 えば、ホップ上でのスファエロテカムアクラリス(*Sphaerotheca macularis*)、ウリ科植物
 (例えばキュウリ)上でのスファエロテカフスカ(*Sphaerotheca fusca*)(スファエロテカフ
 リジニア(*Sphaerotheca fuliginea*))、トマト、ナス及びピーマン上のレベイルラ・タウ
 リカ(*Leveillula taurica*)、リンゴ上のフォドスファエラ・ルーコトリカ(*Podosphaera l*
eucotricha)及びブドウ上のアンシニユラ・ネクター(*Uncinula necator*); *Cochliobolus s*
pp.、穀類(例えばコムギ、オオムギ、ライムギ)、シバフ及び他の宿主上でのヘルミン
 トスポリウム(*Helminthosporium*) spp.、ドレクスレラ(*Drechslera*) spp.(ピレノフォーラ
 (*Pyrenophora*) spp.)、リンコスポリウム(*Rhynchosporium*) spp.、マイコスファエレラグラ
 ミニコラ(*Mycosphaerella graminicola*)(セプトリア・トリチシ(*Septoria tritici*))及
 びファエオスファエリア・ノドラム(*Phaeosphaeria nodorum*)(スタグノスポライゾドラム
 (*Stagonospora raizodorum*)又はセプトリアノドラム(*Septorianodorum*))、ピーナッツ上のシ
 ユードセロコスボレラ・ヘルポトリコイド(*Pseudocercospora herpotrichoides*)及び
 ガエウマンオマイセス・グラミニス(*Gaeumannomyces graminis*); 他の宿主上の例えばサト
 ウキビ、バナナ、ダイズ及びイネのセルコスポーラ・アラヒチコーラ(*Cercospora arachi*
dicola)及びセルコスポリヂウム・ベルソナタム(*Cercosporidium personatum*); トマト、
 イチゴ、野菜、ワイン上のボトリチス・シネレア(*Botrytis cinerea*)(ハイイロカビ)及び
 他の宿主上のボトリチス(*Botrytis*) spp.; 野菜(例えば、ニンジン)、オイルシードレーブ、
 リンゴ、トマト、ポテト、穀類(例えばコムギ)及び宿主上のオルターナリア(*Alternaria*)
 spp.; リンゴ、ナシ、石果、ツリーナッツ及び他の宿主上のベンツリア(*Venturia*) spp.(例
 えば、ベンツリアイナエクアリス(*Venturia inaequalis*)(スカブ)); ある範囲の宿主、例
 えば、(例えばコムギ)及びトマト上のクラドポリウム(*Cladosporium*) spp.; 石果、ツリー
 ナッツ及び他の宿主上のモンリニア(*Monilinia*) spp.; トマト、シバ、コムギ、ウリ科植物
 及び他の宿主上のジチルネラ(*Didyrella*) spp.; オイルシードレーブ、シバ、イネ、ポテ
 ト、コムギ及び他の宿主上のフォーマ(*Phoma*) spp.; コムギ、木材及び他の宿主上のアスペ
 ルギルス(*Aspergillus*) spp. 及びアウレオバシヂウニ(*Aureobasidiuni*) spp.; ナシ、コムギ
 、オオムギ及び他の宿主上のアスコチタ(*Ascochyta*) spp.; リンゴ、ナシ、タマネギ及び他
 の宿主上のステウリフィウム(*Stemphylium*) spp. プレオスポーラ(*Pleospora*) spp.); リン
 ゴ及びナシ上の夏疾患(例えば、苦腐病(グロメラ・シングラータ(*Glomerella cingulata*
))、黒菌病又は赤星病(ボトリスファエリア・オブツサ(*Botryosphaeria obtusa*))、ブル
 ックスフルーツスポット(ミコスファエレラポルニ(*Mycosphaerella pomni*))、セダーリン
 ゴサビ病(ジムノスポランジウム・ジュニペリ-バージニアナエ(*Gymnosporangium juniper*
i-virginianae))、スス点病(グロエオデス・ポミゲナ(*Gloeodes pomigena*))、小染(シゾ
 チリウム・ポミ(*Schizothyrium pomi*))及び白腐病(ボトリオスファエラ・ドチデア(*Botry*
osphaeria dothidea)); ブドウ上のプラスモパラピチコーラ(*Plasmopara viticola*); 他の
 ベト病、例えば、レタス上のブレミア・レタス(*Bremia lactucae*)、ダイズ、タバコ、タ
 マネギ 及び他の宿主上のペロノスポーラ(*Peronospora*) spp.、ホップ上のシュードペルノ
 スポーラ・ヒュムリ(*Pseudoperonospora humuli*)及びウリ科植物上のシュードペルノスポ
 ーラ・キューベシス(*Pseudoperonospora cubensis*); シバ及び他の宿主上のピチリウム(*Py*
thium) spp.(例えば、ピチリウム・ウルチマム(*Pythium ultimum*)); ポテト及びトマト上
 のプルジトフィトーラ・インフェスタンス(*Platyphthora infestans*)、及び野菜、イチ
 ゴ、アボガド、コショウ、観葉植物、タバコ、ココア及び他の宿主上のフィトフィトーラ

10

20

30

40

50

(Phytophthora) spp.; イネ、及びシバ上のタナテボ - ラスククルネリス (Thanatephorus cucurbitae) 並びに様々な宿主の例えば、コムギ及びオオムギ、ピーナッツ、野菜、ワタ及びシバ上のリヒゾクトニア (Rhizoctonia) spp.; シバ、ピーナッツ、ポテト、オイルシードレープ及び他の宿主上のスクレロトニア (Sclerotinia) spp.; シバ、ピーナッツ及び他の宿主上のスクレロチウラン (Sclerotium) spp.; イネ上のジベレラ・フジクroi (Gibberella fujikuroi); 様々な範囲の宿主の例えば、シバ、コーヒー及び野菜などのコレトリカム (Colletotrichum) spp.; シバ上のラエチサリア・フシフォルミス (Laetisaria fuciformis); パナナ、ピーナッツ、シトラス、ペカン、パパイヤ及び他の宿主上のミコスファエラ (Mycosphaerella) spp.; シトラス、ダイズ、メロン、ナシ、ルピナス及び他の宿主上のジアポルテ (Diaporthe) spp.; シトラス、ワイン、オリーブ、ペカン、バラ及び他の宿主上のエリシノエ (Elsinoe) spp.; 様々な範囲の宿主の例えば、ホップ、ポテト及びトマト上のベルチシラム (Verticillium) spp.; オイルシードレープ 及び他の宿主上のピレノペシザ (Pyrenopeziza) spp.; 脈管漏出立ち枯れを生ずるココア上のオンコバシジウランテオプロマエ (Oncobasidium theobromae); 様々な宿主上のしかし特にコムギ、オオムギ、シバ及びダイズを除く上のフザリウム (Fusarium) spp.、チフラ (Typhula) spp.、ミコロドチウム・ニバル (Microdochium nivale)、ウスチラゴ (Ustilago) spp.、ウロシスチス (Urocystis) spp.、チレチア (Tilletia) spp. 及びクラビセプスル・ブルプレア (Claviceps purpurea); オオムギ及び他の宿主上のラムラリア (Ramularia) spp.; 特に果物の収穫後の疾患 (例えば、オレンジ上のペニシリウム・ジジタツム (Penicillium digitatum)、ペニシリウム・イタリカム (Penicillium italicum) 及びトリコデンナ・ビリデ (Trichodenna viride)、バナナ上のコレトリカム・ムサエ (Colletotrichum musae) 及びグレオスポリウム・ムサラム (Gloeosporium musarum) 並びにブドウ上のボトリチス・シネレア (Botrytis cinerea); ワイン上の他の病原体、特にエウチパ・ラタ (Eutypa lata)、グイグナルジア・ビドウェリ (Guignardia bidwellii)、フェリヌス・イグニアルス (Phellinus igniarius)、フォモプシス・ピチコーラ (Phomopsis viticola)、シュードペジア・トラケイフィラ (Pseudopeziza tracheiphila) 及びステレム・ヒリスタム (Stereum hirsutum); 木上の他の病原体 (例えば、ロフォデリウム・セヂチオサム (Lophodermium seditiosum)) 又は木材上の、特に、セプハロアスカス・フラグラン (Cephalosporium fragrans)、セラトシスチス (Ceratomyces) spp.、オプヒオストマ・ピセアエ (Ophiostoma piceae)、ペニシリウム (Penicillium) spp.、トリコデルマ・シュードコニンジ (Trichoderma pseudokoningii)、トリコデルマ・ビリデ (Trichoderma viride)、トリコデルマ・ハルジアナム (Trichoderma harzianum)、アスペルギルス・ニガー (Aspergillus niger)、レプトグラフィウム・リンダーバーグ (Leptographium lindbergii) 及びアウレオバシジウム・プルランス (Aureobasidium pullulans); 及びウイルス疾患の菌類ベクター (例えば、on cereals as the vector of オオムギ黄色モザイクウイルス (BYMV) のベクターとしての穀物上のポリミキサグラミニス (Polymyxa graminis) 及び叢根病のベクターとしてのサトウキビ上のポリミキサ・ベタエ (Polymyxa betae)).

【 0 1 3 9 】

式(1)の化合物は、1又は複数の菌類に対して活性であるよう植物組織において求頂的に、求底的に又は局所的に移動しうる。更に、式(1)の化合物は、植物上で1又は複数の真菌に対して気相において十分活性である揮発物質である。

【 0 1 4 0 】

従って、本発明は、殺菌上有効な量の式(1)の化合物又は式(1)の化合物を含有する組成物を植物へ、植物の種子へ、植物のある場所へ、植物もしくは種子の場所へ、又は土壌もしくは任意の他の植物増殖媒体、例えば、栄養溶液へ適用することを含んで成る、植物病原性菌類に有効且つコントロールする方法を含んで成る。

【 0 1 4 1 】

用語「植物」とは、本明細書中、種子、茂み及び樹木を含む。更に、本発明の殺菌方法は、保護、治療、全身、殺虫 (eradicator) 及び孢子形成阻害 (antispore) 処置を含む。

【 0 1 4 2 】

10

20

30

40

50

式(1)の化合物は、好適に、組成物の形態において、農業、園芸及び芝草のために使用される。

【0143】

式(1)の化合物又は式(1)の化合物を含有する組成物を植物へ、植物の種子へ、植物のある場所へ、植物もしくは種子の部位へ、又は土壌もしくは任意の他の植物増殖媒体へ適用するために、式(1)の化合物は、通常、式(1)の化合物に加えて、適切な不活性希釈剤又は担体、及び任意に界面活性剤(SFA)を含む組成物へ処方される。SFAは、界面活性を低下させること及びそれによって他の特性(例えば、分散、エマルジョン及び湿潤性)を変化させることによって界面の特性を改変することができる化学物質である(例えば、液体/固体、液体/空気又は液体/液体界面)である。全ての組成物(液体及び固体製剤)は、0.0001~95%、一層好適に1~85%、例えば5~60%の式(1)の化合物を含んで成る。前記組成物は、真菌のコントロールのために一般に使用され、従って、式(1)の化合物は、0.1g~10kg/ha、好適に1g~6kg/ha、一層好適に1g~1kg/haで適用される。

10

【0144】

式(1)の化合物は、種子粉衣で使用された場合、0.0001g~10g(例えば0.001g又は0.05g)、好適に0.005g~10g、一層好適に0.005g~4g/kg種子で使用される。

【0145】

他の観点において、本発明は、殺菌上有効な量の式(1)の化合物及び適切な担体又は希釈剤を含んで成る殺菌組成物を含んで成る。

【0146】

本発明は、更なる観点において、ある部位で有効且つコントロールする方法を供し、それは菌類を処理すること、又は菌類のいる部位を式(1)の化合物を含んで成る殺菌上有効な量の組成物で処理することを含んで成る。

20

【0147】

組成物はある数の製剤型から選択されて良く、例えば、可塵粉末(dustable)(DP)、可溶性粉末(SP)、水溶性顆粒(SG)、水分散性顆粒(WG)、水和剤(wetable powders)(WP)、顆粒(GR)(除放又は即時放出)、液剤(soluble concentrate)(SL)、油剤(oil miscible liquid)(OL)、超低体積液体(UL)、乳剤(emulsifiable concentrates)(EC)、分散性濃縮物(DC)、エマルジョン剤(水中油(EW)及び油中水の両方(EO))、マイクロエマルジョン剤(ME)、ゾル剤(suspension concentrates)(SC)、エアロゾル、噴霧/煤煙製剤、カプセル懸濁剤(CS)及び種子処理製剤が挙げられる。多くの場合、選定の種類の製剤は、式(1)の化合物の想定される且つ物理的、化学的及び生物学的特性に依存するだろう。

30

【0148】

可塵粉末(DP)は、式(1)の化合物と、1又は複数の固形希釈剤(例えば、天然の粘土、カオリン、ろう石、ベントナイト、アルミナ、モンモリロナイト、珪藻土、胡粉、珪藻土(diatomaceous earths)、リン酸カルシウム、炭酸カルシウム及び炭酸マグネシウム、硫黄、ライム、小麦粉(flours)、タルク及び他の有機及び無機担体)を混合すること並びに機械的に当該混合物を粉砕して粉末にすることによって調製されて良い。

【0149】

可溶性粉末(SP)は、式(1)の化合物と、1もしくは複数の水溶性無機塩(例えば、炭酸ナトリウム、炭酸カルシウム又は硫酸マグネシウム)又は1もしくは複数の水溶性有機塩(例えば、多糖類)、及び任意に、1又は複数の湿潤剤、1又は複数の分散剤又は当該剤の混合物を混合して分散性/溶解性を高めることによって調製されうる。次いで、混合物は、微小粒子へ粉砕されて良い。類似の組成物は、水溶性顆粒(SG)から粒状にされて良い。

40

【0150】

可湿性粉末(WP)は、式(1)の化合物と、1もしくは複数の固体希釈剤もしくは担体、1又は複数の可湿剤及び、好適に、1又は複数の分散剤及び、任意に、1又は複数の懸濁剤を混合し液体中での分散性を促すことによって調製されて良い。次いで、混合物は、微粉にされる。類似する組成物は水分散性顆粒(WG)を形成するために粉砕されて良い。

【0151】

50

顆粒(GR)は、式(1)の化合物と1又は複数の粉末状固形希釈物の混合物を粉砕することによって、又は式(1)の化合物(又はその、適切剤中の溶液)を多孔性顆粒物質(例えば、軽石、アパタルジャイトクレー、フラー土、珪藻土(Kieselguhr)、珪藻土又は挽いたコーンコブ)に吸着させることによって、又は式(1)の化合物(又は適切な剤中その溶液)を硬核物質(例えば、砂、ケイ酸塩、天然炭酸塩、硫酸塩又はリン酸塩)に吸着させることによって、そして必要なら乾燥させることによって予め形成されたブランク顆粒(blank granules)形成されて良い。吸収又は吸着を助けるために共通に使用される剤としては溶媒(例えば、脂肪族及び芳香族石油溶媒、アルコール、エーテル、ケトン及びエステル)及び増粘剤(例えば、ポリビニルアセテート、ポリビニルアルコール、デキストリン、糖及び植物油)が挙げられる。1又は複数の他の添加剤も顆粒中に含まれて良い(例えば、乳化剤、湿潤剤又は分散剤)。

10

【0152】

分散性濃縮物(Dispersible Concentrates (DC))は、式(1)の化合物を水中又は有機溶媒の例えば、ケトン、アルコール又はグリコールエーテルに溶かすことによって調製されて良い。これらの溶液は、界面活性剤(例えば、水溶性を高めるため又は噴霧タンク中での結晶化を防ぐため)を含みうる。

【0153】

エマルション化可能濃縮物(EC)又は油中水エマルション(EW)は、式(1)の化合物を有機溶媒(任意に1又は複数の湿潤剤、1又は複数の乳化剤又は前記剤の混合物を含む)中に溶かすことによって調製されて良い。EC中で使用するための適切な有機溶媒としては、芳香族炭化水素(例えば、アルキルベンゼン又はアルキルナフタレン、例えば、SOLVESSO 100、SOLVESSO 150及び SOLVESSO 200; SOLVESSOは登録商標である)、ケトン(例えば、シクロヘキサノン又はメチルシクロヘキサノン)、アルコール(例えば、ベンジルアルコール、フルフリルアルコール又はブタノール)、N-アルキルピロリドン(例えば、N-メチルピロリドン又はN-オクチルピロリドン)、脂肪酸のジメチルアミド(例えばC₈-C₁₀脂肪酸ジメチルアミド)及び塩素化炭化水素が挙げられる。EC産物は、水へ加えることにより自発的に乳化し、適切な装置による噴霧適用を可能にするために十分な安定性を有するエマルションを生産する。EWの調製には、式(1)の化合物を液体(もしそれが室温で液体でなければ、それは適温、典型的に70 未満で融解されうる)として又は溶液において(それを適切な溶媒中で溶かすことによって)獲得し且つ生ずる液体又は溶液を、高せん断下で、1又は複数のSFAを含有する水中で乳化し、エマルションを獲得することを含む。EW中で使用するために適切な溶媒としては、植物油、塩素化炭化水素(例えば、クロロベンゼン)、芳香族溶媒(例えば、アルキルベンゼン又はアルキルナフタレン)及び水中での溶解度が低い他の適切な有機溶媒が挙げられる。

20

30

【0154】

マイクロエマルション(ME)は、水を、1又は複数の溶媒と1又は複数のSFAの混合物と混合し、熱動力学的に適切な等方性液体を自然に生産することによって調製されて良い。式(1)の化合物は、最初、水中又は溶媒/SFA混合物中に存在する。ME中で使用するための適切な溶媒としては、EC又はES中で使用するために本明細書中先に記載のものが挙げられる。MEは水中油又は油中水系(この系の存在は電導度測定によって決定されて良い)のいずれかであって良く且つ水溶性及び油溶性の農薬を同じ製剤中で混合するために適切であって良い。MEは水中で希釈するため、常用の水中油マイクロエマルションとして残すため又はエマルションを形成するためのいずれかのために適切である。

40

【0155】

ゾル剤(Suspension concentrates)(SC)は、式(1)の化合物の微細に分割した不溶性固体粒子の水性又は非水性懸濁を含んで成りうる。SCは、固体状の式(1)の化合物を、適切な媒体中、任意に1又は複数の分散剤を伴いでポールミル又はビードミルにかけ、当該化合物の微粒子懸濁を生産することによって調製されて良い。1又は複数の湿潤剤は組成物中に含まれて良く且つ懸濁剤は粒子が沈殿する速度を下げるために含まれて良い。代替的に、式(1)の化合物は、乾燥粉砕されて、本明細書中先に記載の所望の最終産物を生産する

50

ために記載の剤を含有する水へ加えられて良い。

【0156】

エアロゾル製剤は、式(1)の化合物及び適切な推進剤(例えば、n-ブタン)を含んで成りうる。式(1)の化合物は、非加圧、手押し、手動噴霧ポンプにおいて使用するための組成物を提供するために、適切な媒体(例えば、水又は水混和性液体の例えば、n-プロパノール)中で溶かされる又は分散させられて良い。

【0157】

式(1)の化合物は、当該化合物を含有する煙を、閉鎖空間で発生させるための適切な組成物を形成するために乾燥状態で花火混合物(pyrotechnic mixture)と混合されて良い。

【0158】

カプセル懸濁(CS)は、EW製剤の調製と類似する方法で調製されてよいが、更なるポリマー化段階を伴い、油滴の水性分散体が獲得されるように、調製されて良く、ここで各油滴は、ポリマーシェルによって封入されており且つ式(1)の化合物を含み、そして任意にそのための担体又は希釈剤を担持する。前記ポリマーシェルは、界面重縮合反応によって又は液滴形成によって生産されて良い。組成物は、式(1)の化合物のコントロールされた放出を提供し且つそれらは種子処理のために使用されて良い。式(1)の化合物は、緩やかな、コントロールされた放出を供するために生物分解性ポリマーマトリクスで処方されて良い。

【0159】

組成物は、1又は複数の添加剤を、当該組成物の生物学的性能を向上させる(例えば、表層の湿潤性、維持又は分散性を向上させることによって;処理した表層上の濡れへの耐性を向上させることによって;式(1)の化合物の吸収又は移動性を向上させることによって)ために含む。かかる添加剤としては、界面活性剤、油の例えば、所定の鉱物油又は天然の植物油(例えば、大豆油及び菜種油)ベースとする噴霧添加剤、並びにこれらと他の生物増強アジュバント(その成分は、式(1)の化合物の作用を助ける又は改変しうる)の混合物が挙げられる。

【0160】

式(1)の化合物は、種子処理使用のために、例えば、粉末組成物(例えば、乾燥種子処理のための粉末(DS)、水和剤(SS)又はスラリー処理のための水分散性粉末(WF))として、又は液体組成物(例えば、流動可能濃縮物(FS)、溶液(LS)又はカプセル懸濁(CS))として調製されて良い。DS、SS、WF、FS及びLS組成物の調製は、それぞれ上記DP、SP、WP、SC及びDC組成物のそれに非常に類似する。種子を処理するための組成物は、当該組成物が種子へ接着するのを補助する剤(例えば、鉱物油又は膜形成バリア)を含む。

【0161】

湿潤剤、分散剤及び乳化剤は、カチオン性、アニオン性、両親媒性又は非イオン型のSFAであって良い。

【0162】

カチオン性の適切なSFAとしては、第四アンモニウム化合物(例えば、セチルトリメチルアンモニウムブロミド)、イミダゾリン及びアミン塩が挙げられる。

【0163】

適切なアニオン性SFAとしては、脂肪酸のアルカリ金属塩、スルホン酸の脂肪族モノエステルの塩(例えば、ラウリル硫酸ナトリウム)、スルホン化された芳香族化合物の塩(例えば、ナトリウムドデシルベンゼンスルホネート、カルシウムドデシルベンゼンスルホネート、ブチルナフタレンスルホネート及びナトリウムジイソプロピル-とトリイソプロピル-ナフタレンスルホネートの混合物)、スルホン酸エーテル、アルコールスルホン酸エーテル(例えば、ナトリウムラウレス3-スルホネート)、カルボン酸エーテル(例えば、ナトリウムラウレス-3-カルボキシレート)、リン酸エステル(1又は複数の脂肪アルコールとリン酸(主にモノエステル)又は五酸化リン(主にジエステル)との反応産物、例えば、ラウリルアルコールと四リン酸との反応産物;加えて、これらの産物はエトキシ化されて良い)、スルホスクシンナメート、パラフィン又はオレフィンスルホネート、タウレート及

10

20

30

40

50

びリグノスルホネートが挙げられる。

【0164】

両性型の適切なSFAとしては、ベタイン、プロピオネート及びグリシネートが挙げられる。

【0165】

非イオン型の適切なSFAとしては、酸化アルキレンの濃縮産物の、例えば、エチレン酸化物、酸化プロピレン、酸化ブチレン又はそれらの混合物、脂肪アルコール(例えば、オレイルアルコール又はセチルアルコール)との又はアルキルフェノール(例えば、オクチルフェノール、ノニルフェノール又はオクチルクレゾール)との混合物;長鎖脂肪酸又はヘキシトール無水物から誘導された部分エステル;当該部分エステルと酸化エチレンの濃縮産物;ブロックポリマー(酸化エチレン及び酸化プロピレンを含んで成る);アルカノールアミド;単純エステル(例えば、脂肪酸ポリエチレングリコールエステル);アミン酸化物(例えば、ラウリルジメチルアミン酸化物);及びレクチンが挙げられる。

10

【0166】

適切な懸濁剤としては親水性コロイド(例えば、多糖類、ポリビニルピロリドン又はナトリウムカルボキシメチルセルロース)及び膨潤粘土(例えば、ベントナイト又はアタパルガイト)が挙げられる。

【0167】

式(1)の化合物は、殺菌化合物を適用する任意の手段によって適用されて良い。それは例えば、植物の任意の部分の例えば、葉、茎、枝又は根、などに対して、種子に対してそれが播かれる前に又は植物が生長するか植えられる媒体(例えば、根を囲む土壌、一般土壌、水田又は水耕栽培系)に対して直接適用されて良い又はそれは噴霧により、ダスティング(dusted on)により、浸漬により、クリーム又はペースト剤として、蒸気として又は土壌もしくは水性環境における組成物(例えば、顆粒状組成物又は水溶性バッグに詰め込まれた組成物)の分配もしくは組み込みによって適用されて良い。

20

【0168】

式(1)の化合物は、植物中へ注射されるかあるいは電気動学的噴霧技術もしくは他の低体積方法を使用することで噴霧される、又は大地もしくは空気かんがい系(land or aerial irrigation systems)によって適用されて良い。

【0169】

水性製剤(水性溶液又は分散体)として使用するための組成物は、一般に活性成分を高い割合で含有する濃縮物の形態で供給され、当該濃縮物は使用前に水が加えられる。DC、SC、EC、EW、ME、SG、SP、WP、WG及びCSを含むこれらの濃縮物は往々にして、非常に長い期間の保存に持ちこたえ、かかる保存後、常用の噴霧装置で適用されるために、十分な時間に渡り均一さを維持し適用できる水性製剤を形成するために水を添加できることに対する要請がある。水性製剤は様々な量の式(1)(例えば0.0001~10重量%)の化合物を、それらが使用される目的に依存して有する。

30

【0170】

式(1)の化合物は、肥料(例えば、窒素を、カリウムを、又はリン酸を含有する肥料など)との混合物において使用されて良い。適切な製剤型としては、肥料の顆粒を含む。混合物は適切に最大25重量%の式(1)の化合物を含む。

40

【0171】

従って、本発明は、肥料及び式(1)の化合物を含んで成る肥料組成物をも提供する。

【0172】

本発明の組成物は、生物活性を有する他の化合物の例えば、微量栄養素又は類似もしくは相補的な殺菌活性を有するもしくは植物成長調節、農薬、昆虫駆除、化合物、もしくは線虫撲滅もしくはダニ駆除活性を有する化合物を含む。

【0173】

他の殺菌剤を含むとは、式(1)の化合物が単独の場合よりも、生じる組成物がより幅広い活性を有しうるかあるいはより高いレベルの固有活性を有しうることを意味する。更に

50

、他の殺菌剤は、式(1)の化合物の殺菌活性に対して相乗効果を有しうる。

【0174】

式(1)の化合物は、組成物の単独の活性成分でありうるかあるいはそれは適宜、1又は複数の更なる活性成分の例えば、農薬、殺菌剤、相乗作用物、除草剤または植物成長調節物質との混合されて良い。更なる活性成分は：ある部位での持続性又はより幅広い活性；当該活性と相乗効果を有する又は捕捉する(例えば、効果の速度を上昇させることによって又は撥水性を解消することによって)；又は個々の組成物に対する耐性の進行を解消又は予防することを有する組成物を提供する。特定の更なる活性成分は、当該組成物の用途に依存するだろう。

【0175】

本発明の殺菌化合物は、AC 382042 (N-(1-シアノ-1,2-ジメチルプロピル)-2-(2,4-ジクロロフェノキシ)プロピオンアミド)、アシベンゾラー-S-メチル、アナニカルブ、アルジモルフ、アニラジン、アザコナゾール、アザフェニジン、アゾキシストロピン、ベナラキシル、ベノミル、ベンチアバリカルブ、ピロキサゾール、ピテルタノール、プラスチジンス、ボスカリド(ニコベフィンの新たな名前)、プロムコナゾール、プピリメート、カプタフォル、カプタン、カルベンダジムクロロハイドレート、アジムクロロハイドレート、カルボキシ、カルプロパミド、カルボン、CGA 41396、CGA 41397、チノメチオネート、クロロベンゾチアゾン、クロロタロニル、クロロゾリネート、クロジラコン、銅含有化合物の例えば、オキシ塩化銅、銅オキシキノレート、リン酸銅、銅タレート(copper tallate)、並びにBordeaux混合物、シアマダゾスルファミド、シアゾファミド(IKF-916)、シフルフェナミド、シモキサニル、シプロコナゾール、シプロジニル、デバカルブ、ジ-2-ピリジルジスルフィド、1,1'-ジ酸化物、ジクロロフラニド、ジクロシメト、ジクロメジン、ジクロラン、ジエトフェンカルブ、ジフェノコナゾール、ジフフェンゾカット、ジフルメトリム0,0-ジ-イソ-プロピル-S-ベンジルチオフォスフェート、ジメフルゾール、ジメトコナゾール、ジメチリモール、ジメトモルフ、ジメトキシストロピン、ジニコナゾール、ジノキャップ、ジチアノン、ドデシルジメチルアンモニウムクロリド、ドデモルフ、ドジン、ドグアジン、エジフェンフォス、エポキシコナゾール、エタボキサム、エチリモール、エチル(Z)-N-ベンジル-N([メチル(メチル-チオエチルイデンアミノオキシカルボニル)アミノ]チオ)-(3-アラニネート、エトリチアゾール、ファモキサゾン、フェノアミドン、フェナリモール、フェンブコナゾール、フェンフラム、フェンヘキサミド、フェノキサニル(AC 382042)、フェンピクロニル、フェンプロビジン、フェンプロビモルフ、酢酸フェンチン、過酸化フェンチン、フェルバム、フェルミゾン、フルアジナム、フルジオキシニル、フルメトベール、フルモルフ、フルオロイミド、フルオキサストロピン、フルキインコナゾール、フルシラゾール、フルスルファミド、フルトラニル、フルトリアフォル、フォルベット、フォセチル-アルミニウム、フベリダゾール、フララキシル、フラメトピル、グアザチン、ヘキサコナゾール、ヒドロキシイソキサゾール、ヒメキサゾール、イマザリル、イミベンコナゾール、イミノクタジン、イミノクタジントリアセテート、イブコナゾール、イプロベンフォス、イプロジオン、イプロバリカルブ、イソプロバニルブチルカルバメート、イソプロチオラン、カスガマイシン、クレゾキシム-メチル、LY186054、LY211795、LY248908、マンコゼブ、メナブ、メフェノキサム、メバニピリム、メプロニル、メタラキシル、メタラキシルM、メタコナゾール、メチラム、メチラム-亜鉛、メトミノストロピン、メトラ-フェノン、MON65500(N-アリル-4,5-ジメチル-2-トリメチルシリルチオフェン-3-カルボキサミジン)、myc-ロブタニル、NTN0301、ネオアゾジン、ニッケルジチルジチオカルバメート、ニトロタール-イソプロピル、ヌアリモル、オフレース、有機水銀化合物、オリサストロピン、オキサジキシル、オキサスルフロ、オキシリン酸、オキソコナゾール、オキシカルボキシ、プフラゾエート、ペンコナゾール、ペンシクロン、酸化フェナジン、リン酸、フタリド、ピコキシストロピン、ポリオキシンド、ポリラム、プロベナゾール、プロクロラズ、プロシミドン、プロバモカルブ、プロバモカルブヒドロクロリド、プロピコナゾール、プロピネブ、プロピオン酸、プロキナジド、プロチオコナゾール、ピラクロストロピン、ピラゾフォス、ピリフェノクス、ピリメタニル、ピロ

10

20

30

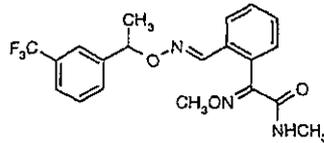
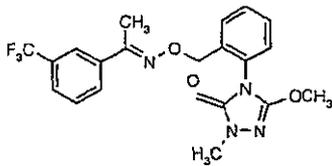
40

50

キノリン、ピロキシフル、ピロルニトリン、第4級アンモニウム化合物、キノメチオネート、キノキシフェン、キントゼン、シルチオフアム(MON 65500)、S-イマザリル、シメコナゾール、スピコナゾール、ナトリウムペンタクロロフェナート、スピロクスアミン、ストレプトマイシン、サルファー、テブコナゾール、テクロフタルム、テクナゼン、テトラコナゾール、チアベンダゾール、チフルザミド、2-(チオシアノメチルチオ)-ベンゾチアゾール、チオフアネート-メチル、チラム、チアジニル、チミベンコナゾール、トルクロフォス-メチル、トリルフラニド、トリアジメフォン、トリアジメントール、トリアズブチル、トリアゾキシド、トリシクラゾール、トリデモルフ、トリフロキシストロピン、トリフルミゾール、トリフォリン、トリチコナゾール、パリダマイシンA、ババム、ピンクロゾリン、XRD-563、ジネブ、ジラム、ゾキサミド及び式

【化10】

10



20

の化合物である。

【0176】

式(1)の化合物は、土、泥炭又は他の、植物を種子伝染病、土壌伝染病又は葉の細菌による疾患に対して保護するための発根培地と混合されて良い。

【0177】

いくつかの混合物が、活性成分であって、常用の製剤型と有意に異なる物理、化学又は生物学的な特性を有する活性成分を含み、従ってそれらは有意に常用の製剤型と同じ傾向を示さない。これらの場合、他の製剤型が調製されて良い。例えば、ひとつの活性成分が非水溶性固体であり且つ他が非水溶性液体である場合、それらは、とりもなおさずそれらは、各固形活性成分を懸濁として(SCのと類似する製剤類似物を使用することで)分散させることによって同じ連続水性層において各活性成分を分散させることが可能であるが、液体活性成分をエマルジョンとして分散させる(EWのと類似する製剤を使用することで)。生じる組成物は、サスポエマルジョン(SE)製剤である。

30

【0178】

本発明は、以下の例によって説明されており、ここで以下の略記が使用されている：

ml=ミリリットル

f=微細

g=グラム

THF =テトラヒドロフラン

ppm=百万分の一

DCM=ジクロロメタン

s =一重項

DMF=N,N-ジメチルホルムアミド

d=二重項

DMSO=ジメチルスルフォキシド

t=三重項

DMAP=4-ジメチルアミノピリジン

q=四重項

NMR=核磁気共鳴

m=多重項

HPLC=高性能液体クロマトグラフィー b=ブロード

40

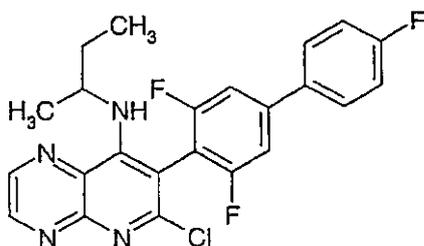
【実施例1】

【0179】

実施例1

この例は、下の式のsec-ブチル-[6-クロロ-7-[(4-フルオロフェニル)-2,6-ジフルオロフェニル]-ピリド [2,3-b]ピラジン-8-イル]-アミン、化合物3.002の調製を示す。

【化 1 1】



3.002

10

段階1: 2,6-ジフルオロ-4-プロモベンジルメタンスルホネートの調製

2,6-ジフルオロ-4-プロモベンジルアルコール(9.50g)及びトリエチルアミン(5.0g)を10に冷却したTHF中へ攪拌しながら溶かした。塩化メタンスルホニル(4.8g)をTHF(10ml)の溶液中10分に渡り加え、そして当該溶液から白色固体が沈殿した。次いで、反応を、1時間に渡り室温に暖め、そして固体を回収してジエチルエーテルで洗浄した。ろ過物を蒸発させて2,6-ジフルオロ-4-プロモベンジルメタンスルホネート(13.0g)を金色の油として獲得しそれは除々に結晶化した。

$^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3)$ ppm: 3.05(s, 3H), 5.3(s, 2H), 7.15(t, 2H).

20

【0180】

段階2: 2,4-ジフルオロ-4-プロモベンジルシアニドの調製

シアン化カリウム(2.8g)を水中に溶かし且つエタノール(100ml)中の段階1の産物(13.0g)の攪拌した溶液へ加えた。反応を2時間に渡り攪拌し、そして冷却して溶媒を蒸発させて塊を獲得した。水を加えて混合物をDCMで抽出して硫酸マグネシウム上で乾燥させた。溶液を蒸発させて塊を獲得してそれを少量のエチルエーテルと練和して2,4-ジフルオロ-4-プロモベンジルシアニドを明褐色固体(5.2g)として獲得した。

$^1\text{NMR}(\text{CDCl}_3)$ ppm: 3.7(s, 2H), 7.18(t, 2H).

【0181】

段階3: 2,6-dフルオロ-4-プロモフェニル酢酸の調製

段階2(4.2g)に由来する産物を水(25ml)と濃硫酸(25ml)の混合物へ溶かし、そして反応を3時間に渡り還流した。次いで、反応を冷却して回収した固体を水で洗浄して乾燥させ2,6-dフルオロ-4-プロモフェニル酢酸を明褐色結晶固体(3.8g)として獲得した。

$^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3)$ ppm: 3.75(s, 2H), 7.1(t, 2H).

30

【0182】

段階4: 2,6-ジフルオロ-4-プロモフェニルアセチルクロリドの調製

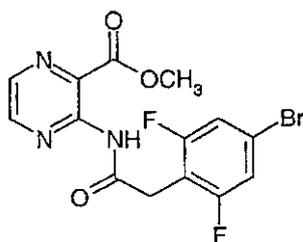
段階3(3.6g)に由来する産物を塩化チオニル(10ml)へ滴下して加え、予め60に加熱し、2滴のDMFを加えた。反応は迅速であり且つ添加後、反応を更なる一時間に渡り還流し、そして冷却して蒸発させて酸塩化物を茶色の液体(3.6g)として獲得し、それを更なる精製を伴わずに次の反応で使用した。

40

【0183】

段階5: メチル3-[2-(4-プロモ-2,6-ジフルオロ-フェニル)-アセチルアミノ]-ピラジン-2-カルボキシレートの調製

【化 1 2】



10

DCM(10ml)中段階4(3.6g)に由来する粗製の酸塩化物の溶液をメチル2-アミノピラジんカルボキシレート(2.2g)及びピリジン(5ml)のDCM中10 で攪拌した溶液へ滴下して加えて反応を室温で15時間に渡り攪拌し、そして溶媒を蒸発させて水を加え、しかる後に酢酸エチルで抽出した。有機画分を水及び水性炭酸ナトリウムで洗浄し、しかる後に塩酸で希釈した。酢酸エチルを硫酸マグネシウム上で蒸発させて暗色の塊を獲得し、それをジエチルエーテルと練和し、そして3-[2-(4-ブromo-2,6-ジフルオロ-フェニル)-アセチルアミノ]-ピラジん-2-カルボキシレートを黄淡色の固体(2.9 g)として単離した。

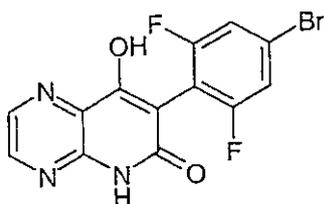
$^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3)$ ppm:4.0(s,2H),4.05(s,3H),7.15(dd,2H),8.4(d,1H),8.6(d,1H).

【 0 1 8 4】

20

段階6:7-(4-ブromo-2,6-ジフルオロ-フェニル)-8-ヒドロキシ-5H-ピリド[2,3-]ピラジん-6-オンの調製:

【化 1 3】



30

無水DMF(20ml)中の段階5(2.9g)に由来する産物及び炭酸カリウム(2.1g)を100 (油浴)へ4時間に渡り加熱し、黄色の懸濁を獲得した。溶媒を蒸発させて乾燥して暗色の固体をジエチルエーテルと練和し、そして淡緑色の固体を回収した。この固体を水に溶かして4Mの塩酸で酸性化し、そして沈殿した固体を回収して乾燥させ7-(4-ブromo-2,6-ジフルオロ-フェニル)-8-ヒドロキシ-5H-ピリド[2,3-]ピラジん-6-オンを淡黄色の固体(1.6g)として獲得した。

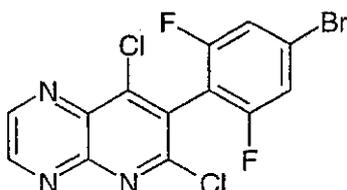
$^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3)$ ppm:7.3(d,2H),8.55(d,1H),8.65(d,1H).

【 0 1 8 5】

40

段階7:7-(4-ブromo-2,6-ジフルオロ-フェニル)-6,8-ジクロロ-ピリド[2,3-b]ピラジんの調製

【化 1 4】



10

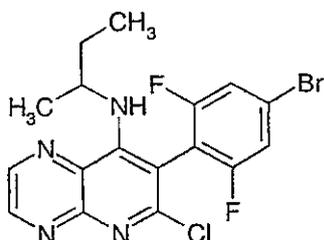
段階6(0.353g)に由来する産物及びオキシ塩化リン(3ml)を室温で一緒に混合して攪拌しながら6時間に渡り還流した。反応を冷却して蒸発して乾燥させ、水及びDCMを加えた。DCM抽出物を水性炭酸ナトリウムで洗浄し、硫酸マグネシウムで乾燥させて、蒸発させて油を獲得し、ジエチルエーテルを伴うシリカゲル溶出によるフラッシュカラムクロマトグラフィーにより精製し、7-(4-ブromo-2,6-ジフルオロ-フェニル)-6,8-ジクロロ-ピリド[2,3-b]ピラジンを赤みを帯びた固体(0.205g)として獲得し、それを更なる精製を伴わずに次の精製に使用した。

【 0 1 8 6】

段階8:[7-(4-ブromo-2,6-ジフルオロ-フェニル)-6-クロロ-ピリド[2,3-b]ピラジン-8-イル]-sec-ブチル-アミンの調製

20

【化 1 5】



30

段階7(0.205g)に由来する産物及びs-ブチルアミン(1.0ml)を密閉管中で一緒に混合して室温で4日に渡り攪拌した。反応混合物を蒸発させて塊を獲得し、それをジエチルエーテル:ヘキサン1:2、次いでジエチルエーテル:ヘキサン4:1を伴うシリカゲル溶出によるフラッシュカラムクロマトグラフィーによって精製して[7-(4-ブromo-2,6-ジフルオロ-フェニル)-6-クロロ-ピリド[2,3-b]ピラジン-8-イル]-sec-ブチル-アミンを黄色固体(0.095g)として獲得した。

$^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3)$ ppm:0.8(t,3H),1.1(d,3H),1.45(m,2H),3.15(m,2H),6.95(bd,1H),7.3(d,2H),8.7(d,1H),9.0(d,1H).

40

【 0 1 8 7】

段階9:sec-ブチル-[6-クロロ-7-[(4-フルオロフェニル)-2,6-ジフルオロフェニル]-ピリド[2,3-b]ピラジン-8-イル]-アミンの調製、化合物3.002

段階8に由来する産物(0.027g)、4-フルオロフェニルボロン酸(0.012g)、炭酸カリウム(0.020g)及びテトラキス(トリフェニルフォスフィン)パラジウム(0.001g)を混合してトルエン(2.0ml)中で6時間に渡り還流した。反応を冷却して蒸発させて粗製産物をジエチルエーテルに溶かして、ジエチルエーテルを伴うシリカゲル溶出によるフラッシュカラムクロマトグラフィーにより精製し、表題の産物を白色ガム(0.01g)として獲得した。

$^1\text{HNMR}(\text{CDCl}_3)$ ppm:0.7(t,3H),1.1(d,3H),1.45(m,2H),3.2(m,1H),6.95(bd,1H),7.15(d,2H),7.2(d,2H),7.65(m,2H),8.7(d,1H),9.0(d,1H).

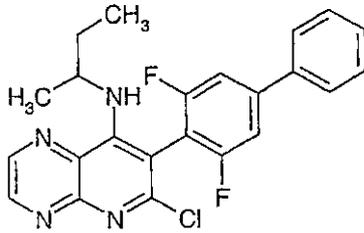
50

【 0 1 8 8 】

実施例2

これはsec-ブチル-[6-クロロ-7-[フェニル-2,6-ジフルオロフェニル]-ピリド[2,3-b]ピラジン-8-yl]-アミン,化合物2.002の調製を説明する。

【化16】



2.002

10

前記化合物を実施例1段階8の産物に由来する実施例1の段階9に類似するように調製したが、カップリング反応を、4-フルオロフェニルボロン酸の代わりにフェニルボロン酸で行った。

$^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3)$ ppm: 0.75 (t, 3H), 1.1 (d, 3H), 1.45 (m, 2H), 3.2 (m, 1H), 6.95 (bd, 1H), 7.3 (d, 2H), 7.45-7.5 (m, 3H), 7.65 (d, 2H), 8.65 (fd, 1H), 9.0 (fd, 1H).

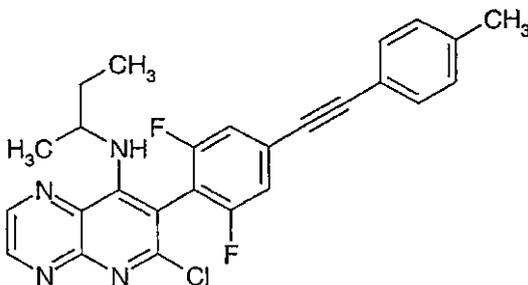
20

【 0 1 8 9 】

実施例3

この例は、下の式のsec-ブチル-[6-クロロ-7-(2,6-ジフルオロ-(4メチルフェニルエチニル)-フェニル)-ピリド[2,3-b]ピラジン-8-イル]-アミンの調製を説明する、化合物 9.002

【化17】



9.002

30

[7-(4-プロモ-2,6-ジフルオロ-フェニル)-6-クロロ-ピリド[2,3-b]ピラジン-8-イル]-sec-ブチル-アミン(0.030g)、4-メチルフェニルアセチレン(0.016g)、ヨウ化第一銅(0.001g)、ジクロロビス(トリフェニルフォスフィン)パラジウム(0.003g)及びトリエチルアミン(5ml)を7時間に渡り還流した。反応を冷却して蒸発させ塊を獲得し、それをジエチルエーテル中で溶解し、そしてジエチルエーテルを伴うシリカゲル溶出によるフラッシュカラムクロマトグラフィーによって精製し、表題の化合物をガム(0.008g)として獲得した。

40

$^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3)$ ppm: 0.75 (t, 3H), 1.05 (d, 3H), 1.45 (m, 1H), 2.4 (s, 3H), 3.15 (m, 1H), 6.95 (bd, 1H), 7.2 (d, 4H), 7.45 (d, 2H), 8.15 (bs, 1H), 9.0 (bs, 1H).

【 0 1 9 0 】

実施例4

この例は、一般式(1)の化合物の殺菌特性を説明する。

50

セプトリア・トリキ(*Septoria tritici*)(葉枯病):極低温保存に由来する菌類の分生子を直接、栄養ブロス(PDBポテトデキストロースブロス)中で混合した。試験化合物(DMSO)の溶液をマイクロタイタープレート(96-ウェル形態)へ配置した後、真菌胞子を含有する栄養ブロスを加えた。試験プレートを24 でインキュベートし且つ72時間後増殖の阻害を光度測定した。

【0191】

ピリクラリア・オリザエ(*Pyricularia oryzae*)(イモチ病):極低温保存に由来する菌類の分生子を直接、栄養ブロス(PDBポテトデキストロースブロス)中で混合した。試験化合物(DMSO)の溶液をマイクロタイタープレート(96-ウェル形態)へ配置した後、真菌胞子を含有する栄養ブロスを加えた。試験プレートを24 でインキュベートし且つ72時間後増殖の阻害を光度測定した

10

【0192】

以下の化合物は、疾患を60%超コントロールした:

セプトリア・トリキ(*Septoria tritici*): 2.002

ピリクラリア・オリザエ(*Pyricularia oryzae*): 2.002

【 国際調査報告 】

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International Application No.
PCT/EP2005/006687

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER IPC 7 C07D241/36 A01N43/60		
According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC		
B. FIELDS SEARCHED		
Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols) IPC 7 C07D A01N		
Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched		
Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practical, search terms used) EPO-Internal, BEILSTEIN Data, CHEM ABS Data		
C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		
Category *	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	US 4 801 592 A (GRAF ET AL) 31 January 1989 (1989-01-31) the whole document	1-9
P, X	WO 2004/056824 A (SYNGENTA LIMITED; SYNGENTA PARTICIPATIONS AG; CROWLEY, PATRICK, JELF;) 8 July 2004 (2004-07-08) the whole document	1-9
P, X	WO 2004/056825 A (SYNGENTA LIMITED; SYNGENTA PARTICIPATIONS AG; CROWLEY, PATRICK, JELF;) 8 July 2004 (2004-07-08) the whole document	1-9
P, X	WO 2004/056826 A (SYNGENTA LIMITED; SYNGENTA PARTICIPATIONS AG; CROWLEY, PATRICK, JELF;) 8 July 2004 (2004-07-08) the whole document	1-9
	----- -/-	
<input checked="" type="checkbox"/> Further documents are listed in the continuation of box C. <input checked="" type="checkbox"/> Patent family members are listed in annex.		
* Special categories of cited documents : *A* document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance *E* earlier document but published on or after the international filing date *L* document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified) *O* document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means *P* document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed *T* later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention *X* document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone *Y* document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art. *Z* document member of the same patent family		
Date of the actual completion of the international search 22 September 2005		Date of mailing of the international search report 05/10/2005
Name and mailing address of the ISA European Patent Office, P.B. 5818 Patentlaan 2 NL - 2280 HV Rijswijk Tel. (+31-70) 340-2040, Tx. 31 651 epo nl, Fax: (+31-70) 340-3016		Authorized officer Timmermans, M

Form PCT/ISA/210 (second sheet) (January 2004)

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International Application No
PCT/EP2005/006687

G.(Continuation) DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		
Category *	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
P, X	WO 2004/056829 A (SYNGENTA LIMITED; SYNGENTA PARTICIPATIONS AG; CROWLEY, PATRICK, JELF;) 8 July 2004 (2004-07-08) the whole document -----	1-9

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International Application No PCT/EP2005/006687

Patent document cited in search report		Publication date	Patent family member(s)	Publication date
US 4801592	A	31-01-1989	DE 3644825 A1	14-07-1988
			EP 0275520 A1	27-07-1988
			ES 2028042 T3	01-07-1992
			GR 3003327 T3	17-02-1993
			JP 63174986 A	19-07-1988
WO 2004056824	A	08-07-2004	AU 2003292381 A1	14-07-2004
			CA 2507670 A1	08-07-2004
WO 2004056825	A	08-07-2004	AU 2003288410 A1	14-07-2004
			CA 2509451 A1	08-07-2004
			EP 1575948 A1	21-09-2005
WO 2004056826	A	08-07-2004	AU 2003288418 A1	14-07-2004
			CA 2508658 A1	08-07-2004
			EP 1575949 A1	21-09-2005
WO 2004056829	A	08-07-2004	AU 2003288412 A1	14-07-2004
			CA 2510376 A1	08-07-2004
			EP 1575956 A1	21-09-2005

フロントページの続き

(81)指定国 AP(BW, GH, GM, KE, LS, MW, MZ, NA, SD, SL, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), EA(AM, AZ, BY, KG, KZ, MD, RU, TJ, TM), EP(AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, MC, NL, PL, PT, RO, SE, SI, SK, TR), OA(BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, ML, MR, NE, SN, TD, TG), AE, AG, AL, AM, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, HR, HU, ID, IL, IN, IS, JP, KE, KG, KM, KP, KR, KZ, LC, LK, LR, LS, LT, LU, LV, MA, MD, MG, MK, MN, MW, MX, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PG, PH, PL, PT, RO, RU, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, SY, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, YU, ZA, ZM, ZW

(74)代理人 100087871

弁理士 福本 積

(74)代理人 100087413

弁理士 古賀 哲次

(74)代理人 100117019

弁理士 渡辺 陽一

(72)発明者 クロウリー, パトリック ジェルフ

イギリス国, パークシャー アールジー 4 2 6 イーワイ, ブラックネル, ジェーロツ ヒル
インターナショナル リサーチ センター, シンジェンタ リミテッド

(72)発明者 ミュラー, ウルス

スイス国, ツェーハー - 4 0 5 8 バーゼル, シュバルツバルトアレー 2 1 5, シンジェンタ
クロップ プロテクション アクチェンゲゼルシャフト

(72)発明者 ドブラー, マルクス

アメリカ合衆国, マサチューセッツ 0 2 1 3 9, ケンブリッジ, マサチューセッツ アベニュー
2 5 0, ノバルティス インスティテューツ フォー バイオメディカル リサーチ インコーポ
レイティド

(72)発明者 ウィリアムズ, ジョン

イギリス国, パークシャー アールジー 4 2 6 イーワイ, ブラックネル, ジェーロツ ヒルズ
インターナショナル リサーチ センター, シンジェンタ リミテッド

Fターム(参考) 4C065 AA04 BB12 CC01 DD03 EE02 HH01 JJ07 KK01 LL01 PP03

4H011 AA01 BB09 BC07 DA13