

(19) 대한민국특허청(KR)  
(12) 공개특허공보(A)

(51) Int. Cl.<sup>7</sup>  
C07D 405/06

(11) 공개번호 특2001-0031064  
(43) 공개일자 2001년04월16일

(21) 출원번호 10-2000-7003903  
(22) 출원일자 2000년04월11일  
    번역문제출일자 2000년04월11일  
(86) 국제출원번호 PCT/EP1998/06449 (87) 국제공개번호 W0 1999/21853  
(86) 국제출원출원일자 1998년10월12일 (87) 국제공개일자 1999년05월06일  
(81) 지정국 AP ARIPO특허 : 가나 감비아 케냐 레소토 말라위 수단 스와질랜드  
                  우간다 짐바브웨  
EA 유라시아특허 : 아르메니아 아제르바이잔 벨라루스 키르기즈 카자흐스탄  
                  몰도바 러시아 타지키스탄 투르크메니스탄  
EP 유럽특허 : 오스트리아 벨기에 스위스 사이프러스 독일 덴마크 스페인 핀란드 프랑스 영국 그리스 아일랜드 이탈리아 룩셈부르크 모나코 네덜란드 포르투갈 스웨덴  
OA OAPI특허 : 부르키나파소 베냉 중앙아프리카 콩고 코트디부와르 카메룬 가봉 기네 기네비소 말리 모리타니 니제르 세네갈 차드 토고  
국내특허 : 알바니아 아르메니아 오스트리아 오스트레일리아 아제르바이잔 보스니아-헤르체고비나 바베이도스 불가리아 브라질 벨라루스 캐나다 스위스 중국 쿠바 체코 독일 덴마크 에스토니아 스페인 핀란드 영국 그루지야 가나 감비아 크로아티아 헝가리 인도네시아 이스라엘 아이슬란드 일본 케냐 키르기즈 북한 대한민국 카자흐스탄 세인트루시아 스리랑카 라이베리아 레소토 리투아니아 룩셈부르크 라트비아 몰도바 마다가스카르 마케도니아 몽고 말라위 멕시코 노르웨이 뉴질랜드 폴란드 포르투갈 루마니아 러시아 수단 스웨덴 싱가포르 슬로베니아 슬로바키아 시에라리온 타지키스탄 투르크메니스탄 터키 트리니다드토바고 우크라이나 우간다 미국 우즈베키스탄 베트남 유고슬라비아 짐바브웨 그레나다

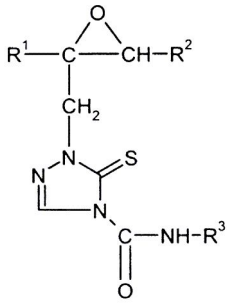
(30) 우선권주장 19746993.0 1997년10월24일 독일(DE)  
                  19823861.4 1998년05월28일 독일(DE)  
(71) 출원인 바이엘 악티엔게젤샤프트 빌프리더 하이더  
(72) 발명자 독일 데-51368 레버쿠센  
                  힐레브란트스테판  
                  독일연방공화국데-41462노이스트링거스트라세22  
                  야우테라트만프레트  
                  독일연방공화국데-51399부르샤이트월러스바움28  
                  마울러-마흐닉아스트리트  
                  독일연방공화국데-42799라이히링겐노이엔캄퍼백46아  
                  스텐젤클라우스  
                  독일연방공화국데-40595뒤셀도르프제제너스트라세17  
                  쿠글러마르틴  
                  독일연방공화국데-42799라이히링겐암글로스터47  
                  엑스너오토  
(74) 대리인 독일연방공화국데-40878라팅엔지글러스트라세51  
                  최규팔, 이은선

심사청구 : 없음

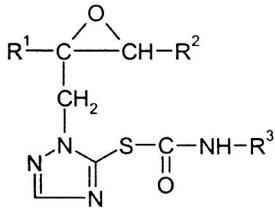
(54) 옥시라닐-트리아졸린 티온 및 살미생물제로서의 그의 용도

요약

본 발명은 신규한 하기 일반식 (I) 또는 (Ia)의 옥시라닐-트리아졸린티온, 그의 제조방법, 및 작물 보호 및 물질 보호에 있어서 살미생물제로서의 그의 용도에 관한 것이다:



(I)



(Ia)

상기 식에서,

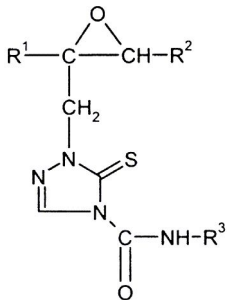
R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup> 및 R<sup>3</sup> 는 각각 명세서에 정의된 바와 같다.

### 명세서

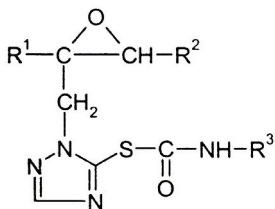
본 발명은 신규한 옥시라닐-트리아졸린티온, 그의 제조방법 및 살미생물제로서의 그의 용도에 관한 것이다.

다수의 아졸릴메틸-옥시란 유도체가 살진균성을 가지고 있다는 것은 이미 알려져 있다(참조: EP-A 0 094 564, EP-A 0 196 038 및 WO-A 96-38 440). 따라서, 예를 들어, 3-(2-클로로-페닐)-2-(4-플루오로-페닐)-2-[(4,5-디하이드로-5-티오노-1,2,4-트리아졸-1-일)-메틸]-옥시란이 진균을 구제하기 위해 사용될 수 있다. 이 물질의 활성은 우수하지만, 때때로 적용 비율이 낮은 경우 만족스럽지 않다.

따라서, 본 발명은 신규한 하기 일반식 (I) 또는 (Ia)의 옥시라닐-트리아졸린티온을 제공한다:



(I)



(Ia)

상기 식에서,

R<sup>1</sup> 은 1 내지 4 개의 탄소원자를 가지는 알킬, 1 내지 4 개의 탄소원자 및 1 내지 5 개의 할로겐 원자를 가지는 할로게노알킬, 임의로 할로겐-치환된 탄소원자수 3 내지 7 의 사이클로알킬, 나프틸, 또는 할로겐, 니트로, 페닐, 페녹시, 1 내지 4 개의 탄소원자를 가지는 알킬, 1 내지 4 개의 탄소원자를 가지는

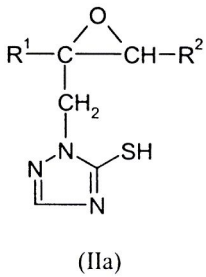
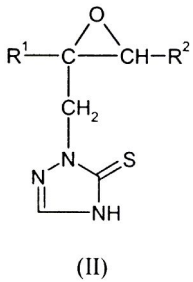
알콕시, 1 내지 4 개의 탄소원자 및 1 내지 5 개의 할로겐 원자를 가지는 할로게노알킬, 1 내지 4 개의 탄소원자 및 1 내지 5 개의 할로겐 원자를 가지는 할로게노알콕시 및 1 내지 4 개의 탄소원자 및 1 내지 5 개의 할로겐 원자를 가지는 할로게노알킬티오로 구성된 그룹중에서 선택된 동일하거나 상이한 치환체에 의해 임의로 일- 내지 삼치환된 페닐을 나타내고,

R<sup>2</sup> 는 할로겐, 1 내지 4 개의 탄소원자를 가지는 알킬, 1 내지 4 개의 탄소원자를 가지는 알콕시, 1 내지 4 개의 탄소원자 및 1 내지 5 개의 할로겐 원자를 가지는 할로게노알킬, 1 내지 4 개의 탄소원자 및 1 내지 5 개의 할로겐 원자를 가지는 할로게노알콕시 및 1 내지 4 개의 탄소원자 및 1 내지 5 개의 할로겐 원자를 가지는 할로게노알킬티오로 구성된 그룹중에서 선택된 동일하거나 상이한 치환체에 의해 임의로 일- 내지 삼치환된 페닐을 나타내며,

R<sup>3</sup> 는 알콕시알킬, 이소프로필 또는 n-도데실을 나타낸다.

본 발명에 따른 물질은 두개의 비대칭적으로 치환된 탄소원자를 함유하며, 따라서, 이들은 부분입체이성체 또는 거울상이성체 형태로 수득될 수 있다. 본 발명은 개별 이성체 및 이들의 혼합물 모두에 관한 것이다.

또한, 본 발명에 따라 일반식 (I) 또는 (Ia)의 옥시라닐-트리아졸린티온은 하기 일반식 (II) 또는 (IIa)의 옥시란 유도체를, 경우에 따라 촉매의 존재하 및, 경우에 따라 희석제의 존재하에서 하기 일반식 (III)의 이소시아네이트와 반응시킴으로써 수득됨이 밝혀졌다:



상기 식에서,

R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup> 및 R<sup>3</sup> 는 각각 상기 정의된 바와 같다.

최종적으로, 신규한 일반식 (I) 또는 (Ia)의 옥시라닐-트리아졸린티온은 매우 우수한 살미생물성을 가지며, 작물 보호 및 물질 보호에 있어서 원치않는 미생물을 구제하기 위해 사용될 수 있다.

놀랍게도, 본 발명에 따른 일반식 (I) 또는 (Ia)의 옥시라닐-트리아졸린티온은 작용 성향이 동일하며 구조적으로 가장 유사한 선행 기술 화합물 보다 월등한 살미생물 활성, 특히 살진균 활성을 가진다. 따라서, 본 발명에 따른 물질은 살진균성면에 있어서 3-(2-클로로-페닐)-2-(4-플루오로-페닐)-2-[(4,5-디하이드로-5-티오노-1,2,4-트리아졸-1-일)-메틸]-옥시란을 능가한다.

일반식 (I) 또는 (Ia)는 본 발명에 따른 옥시라닐-트리아졸린티온의 일반적 정의를 제공한다.

R<sup>1</sup> 은 바람직하게는 메틸, 에틸, n-프로필, 이소프로필, n-부틸, sec-부틸, 이소부틸, t-부틸, 플루오로-t-부틸, 디플루오로-t-부틸 또는 불소, 염소 및 브롬으로 구성된 그룹중에서 선택된 동일하거나 상이한 치환체에 의해 임의로 일- 내지 삼치환된 탄소원자수 3 내지 6 의 사이클로알킬을 나타내거나, 나프틸을 나타내거나, 불소, 염소, 브롬, 니트로, 페닐, 페녹시, 메틸, 에틸, t-부틸, 메톡시, 에톡시, 트리플루오로메틸, 트리클로로메틸, 디플루오로메틸, 디플루오로클로로메틸, 트리플루오로메톡시, 디플루오로메톡시 및 트리플루오로메틸티오로 구성된 그룹중에서 선택된 동일하거나 상이한 치환체에 의해 일- 내지 삼치환될 수 있는 페닐을 나타내고,

R<sup>2</sup> 는 바람직하게는 불소, 염소, 브롬, 메틸, 에틸, 이소프로필, t-부틸, 메톡시, 에톡시, 트리플루오로메틸, 트리클로로메틸, 디플루오로메틸, 디플루오로클로로메틸, 트리플루오로메톡시, 디플루오로메톡시 및 트리플루오로메틸티오로 구성된 그룹중에서 선택된 동일하거나 상이한 치환체에 의해 일- 내지 삼치환될 수 있는 페닐을 나타내며,

R<sup>3</sup> 는 바람직하게는 알콕시 부위에 1 내지 6 개의 탄소원자 및 알킬 부위에 1 내지 6 개의 탄소원자를 가

지는 알콕시알킬을 나타내거나, 또한 바람직하게는 이소프로필 또는 n-도데실을 나타낸다.

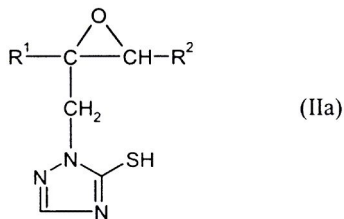
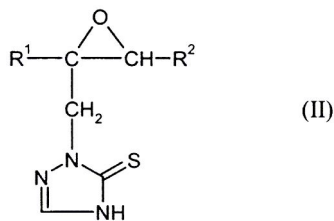
R<sup>1</sup> 이 불소, 염소, 브롬, 니트로, 페닐, 페녹시, 메틸, 에틸, t-부틸, 메톡시, 에톡시, 트리플루오로메틸, 트리클로로메틸, 디플루오로메틸, 디플루오로클로로메틸, 트리플루오로메톡시, 디플루오로메톡시 및 트리플루오로메틸티오로 구성된 그룹중에서 선택된 동일하거나 상이한 치환체에 의해 일- 내지 삼치환될 수 있는 페닐을 나타내고,

R<sup>2</sup> 는 불소, 염소, 브롬, 메틸, 에틸, 이소프로필, t-부틸, 메톡시, 에톡시, 트리플루오로메틸, 트리클로로메틸, 디플루오로메틸, 디플루오로클로로메틸, 트리플루오로메톡시, 디플루오로메톡시 및 트리플루오로메틸티오로 구성된 그룹중에서 선택된 동일하거나 상이한 치환체에 의해 일- 내지 삼치환될 수 있는 페닐을 나타내며,

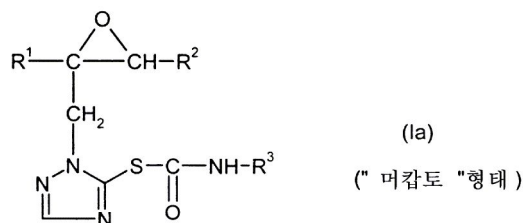
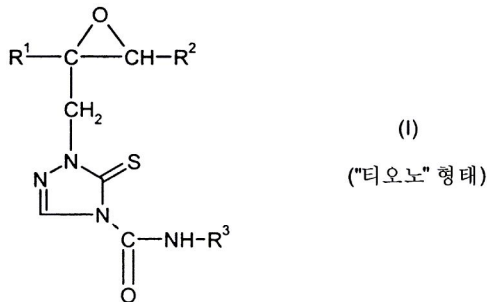
R<sup>3</sup> 는 알콕시 부위에 1 내지 4 개의 탄소원자 및 알킬 부위에 1 내지 4 개의 탄소원자를 가지는 알콕시알킬을 나타내고, 또한 이소프로필 또는 n-도데실을 나타내는 일반식 (I) 또는 (Ia)의 옥시라닐-트리아졸린티온이 특히 바람직하다.

상기 언급된 치환체 정의는 마음대로 서로 조합할 수 있다. 또한, 정의를 개별적으로 적용하지 않아도 된다.

본 발명에 따른 물질을 제조하는데 출발물질로서 필요한 옥시란 유도체는 하기 일반식 (II)의 "티오노" 형태 또는 하기 일반식 (IIa)의 토토머 "머캅토" 형태로 존재할 수 있다:

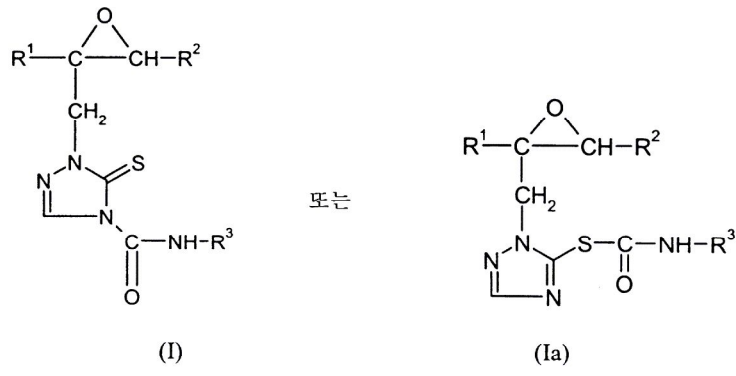


따라서, 본 발명에 따른 물질은 일반식 (II)의 "티오노" 형태 및 일반식 (IIa)의 "머캅토" 형태 모두로부터 유도될 수 있다. 이것은 본 발명에 따른 물질이 하기 일반식 (I) 또는 하기 일반식 (Ia)의 물질, 또는 일반식 (I) 및 일반식 (Ia)의 물질의 혼합물로서 존재할 수 있음을 의미한다:

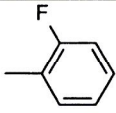
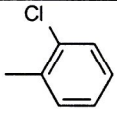
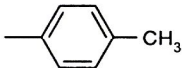
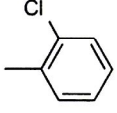
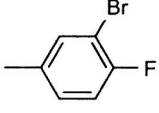
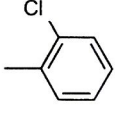
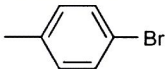
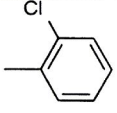
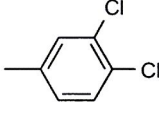
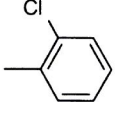
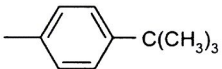
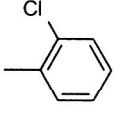
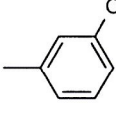
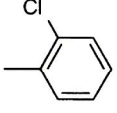
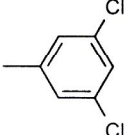
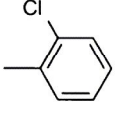
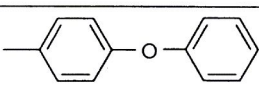
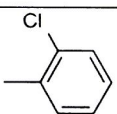


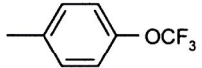
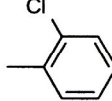
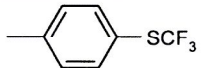
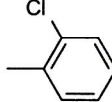

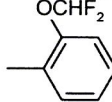
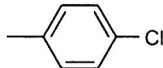
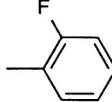
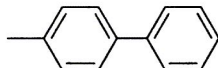
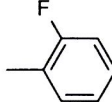
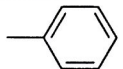
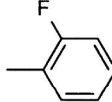
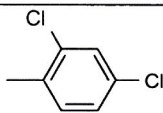
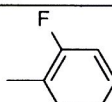
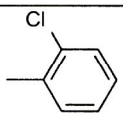
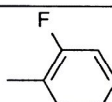
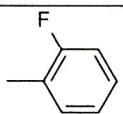
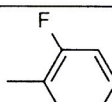
본 발명에 따른 물질의 예로 하기 표에 기재된 옥시라닐-트리아졸린티온이 언급될 수 있다:

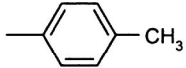
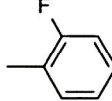

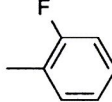
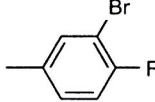
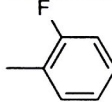
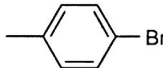
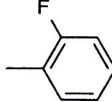
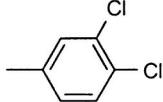
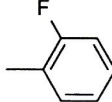
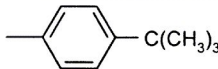
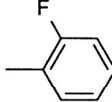
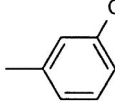
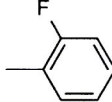
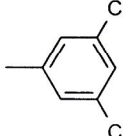
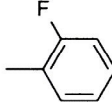
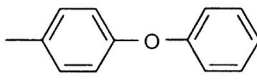
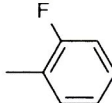
표 1



R <sup>1</sup>	R <sup>2</sup>	R <sup>3</sup>
		-CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -O-CH <sub>3</sub>
		-CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -O-CH <sub>3</sub>
		-CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -O-CH <sub>3</sub>
		-CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -O-CH <sub>3</sub>
		-CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -O-CH <sub>3</sub>

R <sup>1</sup>	R <sup>2</sup>	R <sup>3</sup>
		-CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -O-CH <sub>3</sub>
		-CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -O-CH <sub>3</sub>
		-CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -O-CH <sub>3</sub>
		-CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -O-CH <sub>3</sub>
		-CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -O-CH <sub>3</sub>
		-CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -O-CH <sub>3</sub>
		-CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -O-CH <sub>3</sub>
		-CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -O-CH <sub>3</sub>
		-CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -O-CH <sub>3</sub>

R <sup>1</sup>	R <sup>2</sup>	R <sup>3</sup>
		-CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -O-CH <sub>3</sub>
		-CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -O-CH <sub>3</sub>
		-CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -O-CH <sub>3</sub>
		-CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -O-CH <sub>3</sub>
		-CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -O-CH <sub>3</sub>
		-CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -O-CH <sub>3</sub>
		-CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -O-CH <sub>3</sub>
		-CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -O-CH <sub>3</sub>
		-CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -O-CH <sub>3</sub>

R <sup>1</sup>	R <sup>2</sup>	R <sup>3</sup>
		-CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -O-CH <sub>3</sub>
		-CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -O-C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>
		-CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -O-CH <sub>3</sub>
		-CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -O-CH <sub>3</sub>
		-CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -O-CH <sub>3</sub>
		-CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -O-CH <sub>3</sub>
		-CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -O-CH <sub>3</sub>
		-CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -O-CH <sub>3</sub>
		-CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -O-CH <sub>3</sub>