

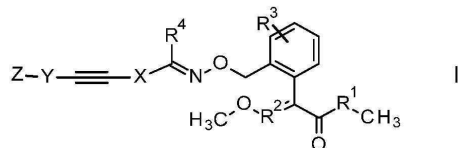
**(19) 대한민국특허청(KR)**
(12) 공개특허공보(A)**(11) 공개번호** 10-2023-0022864
(43) 공개일자 2023년02월16일

- (51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C07C 251/60 (2006.01) A01N 37/36 (2006.01)
A01N 37/50 (2006.01) A01N 43/30 (2006.01)
C07D 213/65 (2006.01) C07D 317/62 (2006.01)
- (52) CPC특허분류
C07C 251/60 (2013.01)
A01N 37/36 (2013.01)
- (21) 출원번호 10-2022-7042839
(22) 출원일자(국제) 2022년06월07일
심사청구일자 없음
(85) 번역문제출일자 2022년12월06일
(86) 국제출원번호 PCT/EP2021/065146
(87) 국제공개번호 WO 2021/249928
국제공개일자 2021년12월16일
- (30) 우선권주장
202021024406 2020년06월10일 인도(IN)
(뒷면에 계속)
- (71) 출원인
바스프 에스이
독일 루트빅샤펜 67056, 칼-보슈-스트라세 38
- (72) 발명자
쿨카르니 사랑
인도 400705 나비 몸바이 타네 벨라푸르 로드
데이 찬단
인도 400705 나비 몸바이 타네 벨라푸르 로드
(뒷면에 계속)
- (74) 대리인
특허법인코리아나

전체 청구항 수 : 총 15 항

(54) 발명의 명칭 Qo 억제제 V 에 대한 내성을 부여하는 미토콘드리아 시토크롬 B 단백질 내 아미노산 치환 F129L 을 함유하는 식물병원성 진균을 퇴치하기 위한 스트로빌루린 유형 화합물의 용도**(57) 요약**

본 발명은 Qo 억제제에 대한 내성을 부여하는 미토콘드리아 시토크롬 b 단백질 내 아미노산 치환 F129L 을 함유하는 (미토콘드리아 시토크롬 b 유전자에서의 F129L 돌연변이로도 지칭됨) 식물병원성 진균을 퇴치하기 위한 식 I 의 스트로빌루린 유형 화합물 및 이의 N-옥시드 및 염의 용도, 및 이러한 진균을 퇴치하는 방법에 관한 것이다. 본 발명은 또한 신규 화합물, 이들 화합물의 제조 방법, 적어도 하나의 이러한 화합물을 포함하는 조성물, 및 적어도 하나의 이러한 화합물로 코팅된 종자에 관한 것이다.



(52) CPC특허분류

A01N 37/50 (2013.01)
A01N 43/30 (2013.01)
C07D 213/65 (2013.01)
C07D 317/62 (2013.01)

(72) 발명자

포노트 마노즈쿠마르

독일 67056 루드비히샤펜 칼-보쉬-슈트라쎄 38

르 베주에 로낭

독일 67056 루드비히샤펜 칼-보쉬-슈트라쎄 38

로만 얀 클라스

독일 67056 루드비히샤펜 칼-보쉬-슈트라쎄 38

크레이그 이안 로버트

독일 67056 루드비히샤펜 칼-보쉬-슈트라쎄 38

그로테 토마스

독일 67157 바헨하임 임 힌하우젠 18

칸나 스프리티

인도 400705 나비 뭄바이 타네 벨라푸르 로드

라트 라케쉬

인도 400705 나비 뭄바이 타네 벨라푸르 로드

코흐 안드레아스

독일 67117 림부르거호프 슈파이어러 슈트라쎄 2

페이 마르쿠스

독일 67117 림부르거호프 슈파이어러 슈트라쎄 2

테게 바네사

독일 67117 림부르거호프 슈파이어러 슈트라쎄 2

(30) 우선권주장

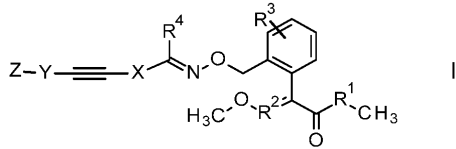
20188910.2 2020년07월31일
유럽특허청(EPO)(EP)
21176864.3 2021년05월31일
유럽특허청(EPO)(EP)

명세서

청구범위

청구항 1

식 I 의 화합물 및 이의 입체이성질체 및 호변이성질체 형태, 및 이의 N-옥시드 및 농업적으로 허용가능한 염:



[식 중,

R¹은 O 및 NH 에서 선택되고;

R²는 CH 및 N 에서 선택되고;

R³은 수소, 할로젠, CN, C₁-C₄-알킬, C₂-C₄-알케닐, C₂-C₄-알키닐, C₁-C₄-할로알킬, C₂-C₄-할로알케닐, C₂-C₄-할로알키닐, C₃-C₆-시클로알킬, -O-C₁-C₄-알킬, -O-C₁-C₄-할로알킬, -O-C₃-C₆-시클로알킬, -C₁-C₂-알킬-C₃-C₆-시클로알킬, 페닐, 3- 내지 6-원 헤테로시클로알킬 및 5- 또는 6-원 헤테로아릴에서 선택되고,

여기서 상기 헤테로시클로알킬 및 헤테로아릴은 탄소 원자 외에 N, O 및 S 에서 선택되는 1, 2 또는 3 개 헤테로원자를 함유하고, 단, 이러한 헤테로사이클은 O 및 S 에서 선택되는 2 개의 인접한 원자를 함유할 수 없고,

상기 페닐, 헤테로시클로알킬 및 헤테로아릴은 직접 또는 산소 원자를 통해 또는 C₁-C₂-알킬렌 링커를 통해 결합하고, 상기 페닐 및 헤테로아릴은 미치환되거나 할로젠, CN, NH₂, NO₂, C₁-C₄-알킬, C₁-C₄-할로알킬, -O-C₁-C₄-알킬 및 -O-C₁-C₄-할로알킬에서 선택되는 1, 2 또는 3 개의 동일하거나 상이한 치환기에 의해 치환되고;

R⁴는 수소, C₁-C₆-알킬, C₂-C₄-알케닐, C₂-C₄-알키닐, C₁-C₆-할로알킬, C₂-C₄-할로알케닐, C₂-C₄-할로알키닐, -(C₁-C₂-알킬)-O-(C₁-C₂-알킬), -(C₁-C₂-알킬)-O-(C₁-C₂-할로알킬) 및 -C₁-C₄-알킬-C₃-C₆-시클로알킬에서 선택되고;

X, Y 는 서로 독립적으로, 직접 결합 또는 2가 기 -CL¹L²- 이고;

L¹, L²는 서로 독립적으로, 수소, C₁-C₃-알킬, C₁-C₃-할로알킬, C₂-C₃-할로알케닐, C₂-C₃-할로알키닐, -(C₁-C₂-알킬)-O-(C₁-C₂-알킬), -(C₁-C₂-알킬)-O-(C₁-C₂-할로알킬), 시클로프로필 및 -C₁-C₂-알킬-시클로프로필에서 선택되거나;

L¹ 및 L²는 개재하는 탄소 원자와 함께 시클로프로필을 형성하고;

L¹ 및 L² 의 시클릭 모이어티는 서로 독립적으로, 미치환되거나 1 또는 2 개의 동일하거나 상이한 기 R^l 를 가지고;

R^l은 할로젠, CN, NO₂, C₁-C₄-알킬, C₁-C₄-할로알킬, -O-C₁-C₄-알킬 및 -O-C₁-C₄-할로알킬에서 선택되고;

Z 는 C₃-C₆-시클로알킬, 페닐, 3- 내지 6-원 헤테로시클로알킬, 3- 내지 6-원 헤테로시클로알케닐 및 5- 또는 6-원 헤테로아릴에서 선택되고,

여기서, 상기 헤테로시클로알킬, 헤테로시클로알케닐 및 헤테로아릴은 탄소 원자 외에 N, O 및 S 에서 선택되는 1, 2 또는 3 개 헤테로원자를 함유하고, 단, 이러한 헤테로사이클은 O 및 S 에서 선택되는 2 개의 인접한 원자를 함유할 수 없고,

Z 는 미치환되거나 1, 2, 3 개 또는 최대 수까지의 동일하거나 상이한 기 R^a 를 가지고:

R^a 는 할로젠, CN, NR^AR^B, C₁-C₄-알킬, C₂-C₄-알케닐, C₂-C₄-알키닐, -O-C₁-C₄-알킬, -C(=N-O-C₁-C₄-알킬)-C₁-C₄-알킬, -C(=O)-C₁-C₄-알킬, -C(=O)-O-C₁-C₄-알킬, -C(=O)-NH-C₁-C₄-알킬, -O-CH₂-C(=N-O-C₁-C₄-알킬)-C₁-C₄-알킬, C₃-C₆-시클로알킬, C₃-C₆-시클로알케닐, -C₁-C₂-알킬-C₃-C₆-시클로알킬, -O-C₃-C₆-시클로알킬, 페닐, 3- 내지 6-원 헤테로시클로알킬, 3- 내지 6-원 헤테로시클로알케닐 및 5- 또는 6-원 헤테로아릴에서 선택되고,

여기서, 상기 헤테로시클로알킬, 헤테로시클로알케닐 및 헤테로아릴은 탄소 원자 외에 N, O 및 S 에서 선택되는 1, 2 또는 3 개 헤테로원자를 함유하고, 단, 이러한 헤테로사이클은 O 및 S 에서 선택되는 2 개의 인접한 원자를 함유할 수 없고,

상기 페닐, 헤테로시클로알킬, 헤테로시클로알케닐 및 헤테로아릴은 직접 또는 산소 원자를 통해 또는 C₁-C₂-알킬렌 링커를 통해 결합하고,

및/또는

이웃 탄소 고리 원자에 결합한 2 개의 R^a 치환기는 2 개의 개재하는 탄소 고리 원자와 함께, 부분 불포화 또는 방향족 5- 내지 6-원 융합 카르보- 또는 헤테로사이클을 형성하고,

헤테로사이클은 탄소 원자 외에 고리원 원자로서 N, O 및 S 에서 독립적으로 선택되는 1 또는 2 개 헤테로원자를 포함하고, 단, 이러한 헤테로사이클은 O 및 S 에서 선택되는 2 개의 인접한 원자를 함유할 수 없고;

R^a 의 지방족 및 시클릭 모이어티는 미치환되거나 1, 2, 3, 4 개 또는 최대 수까지의 동일하거나 상이한 기 R^b 를 가지고:

R^b 는 할로젠, CN, NO₂, C₁-C₄-알킬, C₁-C₄-할로알킬, -O-C₁-C₄-알킬 및 -O-C₁-C₄-할로알킬에서 선택되고;

R^A, R^B 는 서로 독립적으로, 수소, C₁-C₄-알킬 및 C₁-C₄-할로알킬에서 선택됨].

청구항 2

제 1 항에 있어서, R¹ 이 O 및 NH 에서 선택되고; R² 가 CH 및 N 에서 선택되고, 단, R¹ 이 NH 인 경우 R² 가 N 인, 식 I 의 화합물 및 이의 입체이성질체 및 호변이성질체 형태, 및 이의 N-옥시드 및 농업적으로 허용가능한 염.

청구항 3

제 1 항 또는 제 2 항에 있어서, R² 가 N 인, 식 I 의 화합물 및 이의 입체이성질체 및 호변이성질체 형태, 및 이의 N-옥시드 및 농업적으로 허용가능한 염.

청구항 4

제 1 항 내지 제 3 항 중 어느 한 항에 있어서, R³ 이 수소, CN, 할로젠, C₁-C₂-알킬, C₁-C₂-할로알킬, C₂-C₄-알케닐, C₃-C₄-시클로알킬, -O-C₁-C₂-알킬 및 -O-C₁-C₂-할로알킬에서 선택되는, 식 I 의 화합물 및 이의 입체이성질체 및 호변이성질체 형태, 및 이의 N-옥시드 및 농업적으로 허용가능한 염.

청구항 5

제 4 항에 있어서, R³ 이 수소, 할로젠, C₁-C₂-알킬 및 C₁-C₂-할로알킬에서 선택되는, 식 I 의 화합물 및 이의 입체이성질체 및 호변이성질체 형태, 및 이의 N-옥시드 및 농업적으로 허용가능한 염.

청구항 6

제 1 항 내지 제 5 항 중 어느 한 항에 있어서, R³ 이 메틸 옥심 측쇄에 대해 오르토 위치에 있는, 식 I 의 화

합물 및 이의 입체이성질체 및 호변이성질체 형태, 및 이의 N-옥시드 및 농업적으로 허용가능한 염.

청구항 7

제 1 항 내지 제 6 항 중 어느 한 항에 있어서, R^4 가 할로젠, C_1-C_2 -알킬, C_1-C_2 -할로알킬, C_3-C_4 -시클로알킬, $-O-C_1-C_2$ -알킬 및 $-O-C_1-C_2$ -할로알킬에서 선택되는, 식 I 의 화합물 및 이의 입체이성질체 및 호변이성질체 형태, 및 이의 N-옥시드 및 농업적으로 허용가능한 염.

청구항 8

제 1 항 내지 제 7 항 중 어느 한 항에 있어서, X 가 직접 결합인, 식 I 의 화합물 및 이의 입체이성질체 및 호변이성질체 형태, 및 이의 N-옥시드 및 농업적으로 허용가능한 염.

청구항 9

제 1 항 내지 제 8 항 중 어느 한 항에 있어서, Y 가 직접 결합인, 식 I 의 화합물 및 이의 입체이성질체 및 호변이성질체 형태, 및 이의 N-옥시드 및 농업적으로 허용가능한 염.

청구항 10

제 1 항 내지 제 9 항 중 어느 한 항에 있어서, Z 가 C_3-C_4 -시클로알킬, 페닐 및 5- 또는 6-원 헤테로아릴에서 선택되고, 여기서 상기 헤테로아릴은 탄소 원자 외에 N, O 및 S 에서 선택되는 1, 2 또는 3 개 헤테로원자를 함유하고, 단, 이러한 헤테로사이클은 O 및 S 에서 선택되는 2 개의 인접한 원자를 함유할 수 없고, 상기 페닐, 및 Z 가 미치환되거나, 할로젠, CN, C_1-C_2 -알킬, C_1-C_2 -할로알킬, $-O-C_1-C_2$ -알킬, $-O-C_1-C_2$ -할로알킬, C_3-C_4 -시클로알킬 및 C_3-C_4 -할로시클로알킬에서 선택되는 1, 2 또는 3 개의 동일하거나 상이한 기 R^a 를 가지는, 식 I 의 화합물 및 이의 입체이성질체 및 호변이성질체 형태, 및 이의 N-옥시드 및 농업적으로 허용가능한 염.

청구항 11

제 10 항에 있어서, Z 가 페닐이고, Z 가 미치환되거나, 할로젠, CN, C_1-C_2 -알킬, C_1-C_2 -할로알킬, $-O-C_1-C_2$ -알킬, $-O-C_1-C_2$ -할로알킬, C_3-C_4 -시클로알킬 및 C_3-C_4 -할로시클로알킬에서 선택되는 1, 2 또는 3 개의 동일하거나 상이한 기 R^a 를 가지는, 식 I 의 화합물 및 이의 입체이성질체 및 호변이성질체 형태, 및 이의 N-옥시드 및 농업적으로 허용가능한 염.

청구항 12

보조제 및 적어도 하나의 제 1 항 내지 제 11 항 중 어느 한 항에 따른 식 I 의 화합물 또는 이의 입체이성질체 및 호변이성질체 형태 또는 이의 농업적으로 허용가능한 염 또는 N-옥시드를 포함하는 농약 조성물.

청구항 13

식물병원성 진균을 퇴치하기 위한, 제 1 항 내지 제 11 항 중 어느 한 항에 따른 화합물, 또는 제 12 항에 따른 조성물의 용도.

청구항 14

하기를 포함하는 식물병원성 진균의 퇴치 방법:

적어도 하나의 제 1 항 내지 제 11 항 중 어느 한 항에 따른 식 I 의 화합물, 또는 제 12 항에 따른 농약 조성물을 상기 식물병원성 진균으로부터 병에 걸릴 위험이 있는 식물 또는 상기 식물의 식물 번식체에 치료적으로 및/또는 예방적으로 처리하는 단계, 및/또는 상기 식물병원성 진균에게 적용하는 단계.

청구항 15

식물병원성 진균이 Qo 억제제에 대한 내성을 부여하는 미토콘드리아 시토크롬 b 단백질 내 아미노산 치환 F129L 을 함유하는, 제 13 항에 따른 용도, 또는 제 14 항에 따른 방법.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은 Qo 억제제 (QoI) 에 대한 내성을 부여하는 미토콘드리아 시토크롬 b 단백질 내 아미노산 치환 F129L 을 함유하는 (미토콘드리아 시토크롬 b 유전자에서의 F129L 돌연변이로도 지칭됨) 식물병원성 진균을 퇴치하기 위한 식 I 의 스트로빌루린 유형 화합물 및 이의 N-옥시드 및 염의 용도, 및 이러한 진균을 퇴치하는 방법에 관한 것이다. 본 발명은 또한 신규 화합물, 이들 화합물의 제조 방법, 적어도 하나의 이러한 화합물을 포함하는 조성물, 식물 건강 응용, 및 적어도 하나의 이러한 화합물로 코팅된 종자에 관한 것이다. 본 발명은 또한 미토콘드리아 시토크롬 b 단백질 내의 아미노산 치환 F129L 로 대두 녹병 진균 파코프소라 파치리지 (Phakopsora pachyrhizi) 를 방제하는 방법에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 본원에서 사용되는 "Qo 억제제" 는 미토콘드리아에서 시토크롬 bc₁ 복합체의 유비히드로퀴논 산화 중심에 결합하여 호흡을 감소 및/또는 억제할 수 있는 임의의 물질을 포함한다. 산화 중심은 전형적으로 내부 미토콘드리아 막의 외측에 위치한다. 이들 화합물의 상당수는 또한 스트로빌루린-유형 또는 스트로빌루린 유사체 화합물로 알려져 있다.

[0003] 미토콘드리아 시토크롬 b (CYTB) 유전자 내 돌연변이 F129L 은 시토크롬 b 단백질 내 위치 129 에서 F 로부터 L 로의 단일 아미노산 치환을 초래하는 CYTB (cytochrome b) 유전자에서, "L" 을 인코딩하는 코돈 (류신; 예를 들어, TTA, TTG, TTG, CTT, CTC, CTA 또는 CTG) 을 유도하는 "F" 를 인코딩하는 코돈 129 의 뉴클레오티드 (페닐알라닌; 예를 들어, TTT 또는 TTC) 의 임의의 치환, 예를 들어, 코돈 129 의 첫번째 뉴클레오티드의 'T' 에서 'C' 로의 치환 (TTT 에서 CTT 로) 을 의미할 것이다. 이러한 F129L 돌연변이는 Qo 억제제에 대한 내성을 부여하는 것으로 알려져 있다.

[0004] 종종 스트로빌루린-유형 살진균제으로서 지칭되는 QoI 살진균제는 통상적으로 작물에서 다수의 진균 병원체를 방제하는데 사용된다. Qo 억제제는 전형적으로 미토콘드리아에서 시토크롬 bc₁ 복합체 (전자 수송 복합체 III) 의 유비히드로퀴논 산화 중심에 결합함으로써 호흡을 억제함으로써 작용한다. 상기 산화 중심은 내부 미토콘드리아 막의 외측에 위치한다. QoI 의 사용의 주요 예는, 밀 잎 반점의 원인인 세프트로리아 트리티시 (Septoria tritici) (또한 마이코스파에렐라 그라미니콜라 (Mycosphaerella graminicola) 로 알려져 있음) 의 방제를 위한, 예를 들어 밀에 대한 스트로빌루린의 사용을 포함한다. 불행하게도, 이러한 QoI 의 광범위한 사용은 이러한 QoI 에 내성인 돌연변이 병원체의 선택을 초래하였다. QoI 에 대한 내성은 블루메리아 그라미니스 (Blumeria graminis), 마이코스파에렐라 피지엔시스 (Mycosphaerella fijiensis), 슈도페론스포라 큐벤시스 (Pseudoperonospora cubensis) 또는 벤투리아 이나에쿠알리스 (Venturia inaequalis) 와 같은 몇몇 식물병원성 진균에서 검출되었다. 농업적 용도에서 QoI 에 대한 내성의 주요 부분은 특이적 QoI 에 의해 조절되는 것으로 밝혀진 QoI 의 표적 단백질인, 시토크롬 bc₁ 복합체에 대한 시토크롬 b 유전자 내 단일 아미노산 잔기 치환 G143A 를 함유하는 병원체에 기인한다 (WO 2013/092224). 몇몇 상업적 QoI 살진균제가 또한 대두 녹병 방제에 널리 사용되었음에도 불구하고, QoI 살진균제에 대한 내성을 부여하는 시토크롬 b 단백질 내 단일 아미노산 잔기 치환 G143A 는 관찰되지 않았다.

[0005] 대신에 대두 녹병은 QoI 살진균제에 대한 내성을 또한 부여하는 단일 아미노산 치환 F129L 을 야기하는 시토크롬 b 유전자 내 상이한 유전적 돌연변이를 획득하였다. 통상적으로 대두 녹병에 대해 사용되는 QoI 살진균제, 즉 피라클로스트로빈, 아족시스트로빈, 피콕시스트로빈, 오리사스트로빈, 디복시스트로빈 및 메토미노스트로빈의 효능은 농업 실행에 대해 실제적인 문제가 있는 수준으로 감소되었다.

[0006] 트리플록시스트로빈은 아족시스트로빈 및 피라클로스트로빈과 같은 다른 QoI 살진균제와 동일한 정도로 F129L 아미노산 치환에 의해 덜 영향을 받은 것으로 보이지만, 트리플록시스트로빈은 민감성 집단에 대해서와 같이 F129L QoI 내성 돌연변이를 갖는 진균 집단에 대해서는 결코 효능이 없었다 (Crop Protection 27, (2008) 427-435).

[0007] 따라서, Qo 억제제에 대한 내성을 부여하는 미토콘드리아 시토크롬 b 유전자에서 F129L 돌연변이를 함유하는 병원체에 노출된 식물을 포함하는 작물에서 병원체 유도된 질환을 방제하는 새로운 방법이 요망된다. 또한, 많은 경우, 특히 낮은 적용률에서, 공지된 살진균 스트로빌루린 화합물의 살진균 활성은 불만족스러우며, 특히

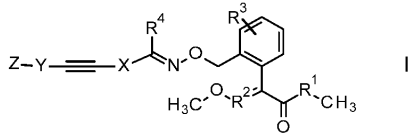
진균 병원체의 높은 비율이 Qo 억제제에 대한 내성을 부여하는 미토콘드리아 시토크롬 b 유전자 내에 돌연변이를 함유하는 경우에 그러하다. 게다가, 더 효과적이고, 덜 독성이고/이거나 환경적으로 더 안전한 새로운 살진균적 활성 화합물에 대한 지속적인 요구가 존재한다. 이에 기초하여, 본 발명의 목적은 또한 식물병원성 진균에 대한 개선된 활성 및/또는 보다 넓은 활성 스펙트럼을 갖고/갖거나, 또한 척추동물 및 무척추동물과 같은 비-표적 유기체에 대한 독성은 심지어 더욱 감소된 화합물을 제공하는 것이었다.

[0008] 특정 스트로빌루린 유형 화합물이 WO 1997/05103 및 EP 463488 에 기재되어 있다. 그러나, Qo 억제제에 대한 내성을 부여하는 미토콘드리아 시토크롬 b 단백질 내 F129L 치환을 함유하는 진균 병원체를 억제하는 것은 언급되지 않는다.

발명의 내용

[0009] 본 발명에 따른 화합물은 메틸 옥심 측쇄가 본원에 정의된 바와 같은 알킨 링커 기를 함유하는 상기 언급된 문헌에 기재된 것들과 상이하다.

[0010] 따라서, 본 발명은 신규한 식 I 의 화합물 및 이의 입체이성질체 및 호변이성질체 형태, 및 이의 N-옥시드 및 농업적으로 허용가능한 염을 제공한다.



[0011]

[0012] [식 중,

[0013] R¹은 O 및 NH 에서 선택되고;

[0014] R²는 CH 및 N 에서 선택되고;

[0015] R³은 수소, 할로젠, CN, C₁-C₄-알킬, C₂-C₄-알케닐, C₂-C₄-알키닐, C₁-C₄-할로알킬, C₂-C₄-할로알케닐, C₂-C₄-할로알키닐, C₃-C₆-시클로알킬, -O-C₁-C₄-알킬, -O-C₁-C₄-할로알킬, -O-C₃-C₆-시클로알킬, -C₁-C₂-알킬-C₃-C₆-시클로알킬, 페닐, 3- 내지 6-원 헤테로시클로알킬 및 5- 또는 6-원 헤테로아릴에서 선택되고,

[0016] 여기서 상기 헤테로시클로알킬 및 헤테로아릴은 탄소 원자 외에 N, O 및 S 에서 선택되는 1, 2 또는 3 개 헤테로원자를 함유하고, 단, 이러한 헤테로사이클은 O 및 S 에서 선택되는 2 개의 인접한 원자를 함유할 수 없고,

[0017] 상기 페닐, 헤테로시클로알킬 및 헤테로아릴은 직접 또는 산소 원자를 통해 또는 C₁-C₂-알킬렌 링커를 통해 결합하고, 상기 페닐 및 헤테로아릴은 미치환되거나 할로젠, CN, NH₂, NO₂, C₁-C₄-알킬, C₁-C₄-할로알킬, -O-C₁-C₄-알킬 및 -O-C₁-C₄-할로알킬에서 선택되는 1, 2 또는 3 개의 동일하거나 상이한 치환기에 의해 치환되고;

[0018] R⁴는 수소, C₁-C₆-알킬, C₂-C₄-알케닐, C₂-C₄-알키닐, C₁-C₆-할로알킬, C₂-C₄-할로알케닐, C₂-C₄-할로알키닐, -(C₁-C₂-알킬)-O-(C₁-C₂-알킬), -(C₁-C₂-알킬)-O-(C₁-C₂-할로알킬) 및 -C₁-C₄-알킬-C₃-C₆-시클로알킬에서 선택되고;

[0019] X, Y 는 서로 독립적으로, 직접 결합 또는 2가 기 -CL¹L²- 이고;

[0020] L¹, L²는 서로 독립적으로, 수소, C₁-C₃-알킬, C₁-C₃-할로알킬, C₂-C₃-할로알케닐, C₂-C₃-할로알키닐, -(C₁-C₂-알킬)-O-(C₁-C₂-알킬), -(C₁-C₂-알킬)-O-(C₁-C₂-할로알킬), 시클로프로필 및 -C₁-C₂-알킬-시클로프로필에서 선택되거나;

[0021] L¹ 및 L²는 개재하는 탄소 원자와 함께 시클로프로필을 형성하고;

[0022] L¹ 및 L² 의 시클릭 모이어티는 서로 독립적으로, 미치환되거나 1 또는 2 개의 동일하거나 상이한 기 R¹ 을 가지고;

- [0023] R^L 은 할로젠, CN, NO₂, C₁-C₄-알킬, C₁-C₄-할로알킬, -O-C₁-C₄-알킬 및 -O-C₁-C₄-할로알킬에서 선택되고;
- [0024] Z는 C₃-C₆-시클로알킬, 페닐, 3- 내지 6-원 헤테로시클로알킬, 3- 내지 6-원 헤테로시클로알케닐 및 5- 또는 6-원 헤테로아릴에서 선택되고,
- [0025] 여기서, 상기 헤테로시클로알킬, 헤테로시클로알케닐 및 헤테로아릴은 탄소 원자 외에 N, O 및 S에서 선택되는 1, 2 또는 3 개 헤테로원자를 함유하고, 단, 이러한 헤테로사이클은 O 및 S에서 선택되는 2 개의 인접한 원자를 함유할 수 없고,
- [0026] Z는 미치환되거나 1, 2, 3 개 또는 최대 수까지의 동일하거나 상이한 기 R^a를 가지고:
- [0027] R^a는 할로젠, CN, NR^AR^B, C₁-C₄-알킬, C₂-C₄-알케닐, C₂-C₄-알키닐, -O-C₁-C₄-알킬, -C(=N-O-C₁-C₄-알킬)-C₁-C₄-알킬, -C(=O)-C₁-C₄-알킬, -C(=O)-O-C₁-C₄-알킬, -C(=O)-NH-C₁-C₄-알킬, -O-CH₂-C(=N-O-C₁-C₄-알킬)-C₁-C₄-알킬, C₃-C₆-시클로알킬, C₃-C₆-시클로알케닐, -C₁-C₂-알킬-C₃-C₆-시클로알킬, -O-C₃-C₆-시클로알킬, 페닐, 3- 내지 6-원 헤테로시클로알킬, 3- 내지 6-원 헤테로시클로알케닐 및 5- 또는 6-원 헤테로아릴에서 선택되고,
- [0028] 여기서, 상기 헤테로시클로알킬, 헤테로시클로알케닐 및 헤테로아릴은 탄소 원자 외에 N, O 및 S에서 선택되는 1, 2 또는 3 개 헤테로원자를 함유하고, 단, 이러한 헤테로사이클은 O 및 S에서 선택되는 2 개의 인접한 원자를 함유할 수 없고,
- [0029] 상기 페닐, 헤테로시클로알킬, 헤테로시클로알케닐 및 헤테로아릴은 직접 또는 산소 원자를 통해 또는 C₁-C₂-알킬렌 링커를 통해 결합하고,
- [0030] 및/또는
- [0031] 이웃 탄소 고리 원자에 결합한 2 개의 R^a 치환기는 2 개의 개재하는 탄소 고리 원자와 함께, 부분 불포화 또는 방향족 5- 내지 6-원 융합 카르보- 또는 헤테로사이클을 형성하고,
- [0032] 헤테로사이클은 탄소 원자 외에 고리원 원자로서 N, O 및 S에서 독립적으로 선택되는 1 또는 2 개 헤테로원자를 포함하고, 단, 이러한 헤테로사이클은 O 및 S에서 선택되는 2 개의 인접한 원자를 함유할 수 없고;
- [0033] R^a의 지방족 및 시클릭 모이어티는 미치환되거나 1, 2, 3, 4 개 또는 최대 수까지의 동일하거나 상이한 기 R^b를 가지고:
- [0034] R^b는 할로젠, CN, NO₂, C₁-C₄-알킬, C₁-C₄-할로알킬, -O-C₁-C₄-알킬 및 -O-C₁-C₄-할로알킬에서 선택되고;
- [0035] R^A, R^B는 서로 독립적으로, 수소, C₁-C₄-알킬 및 C₁-C₄-할로알킬에서 선택됨].
- [0036] 본 발명이 특정 구현예에 대해 설명될 것이지만, 이 설명은 제한적인 의미로 해석되지는 않는다.
- [0037] 본 발명의 구체적인 예시적 구현예를 설명하기에 앞서, 본 발명의 이해를 위해 중요한 정의가 제시된다. 이 명세서 및 첨부된 청구항에서 사용된 바와 같이, 단수 형태의 부정관사는, 문맥상 달리 명확하게 진술하지 않는 한, 각각의 복수를 포함한다. 본 발명의 맥락에서, "약" 및 "대략"이라는 용어는 해당 기술의 기술적 효과를 여전히 보장하기 위해 통상의 기술자가 이해할 수 있는 정확도의 간격을 의미한다. 이 용어는 전형적으로 표시된 수치로부터 ±20%, 바람직하게는 ±15%, 보다 바람직하게는 ±10%, 그리고 보다 더 바람직하게는 ±5%의 편차를 나타낸다. "포함하는"이라는 용어는 제한적이지 않은 것으로 이해되어야 한다. 본 발명의 목적상, 용어 "~로 이루어지는"은 용어 "~로 구성되는"의 바람직한 구현예인 것으로 간주된다.
- [0038] 달리 지시되지 않는 한, 다음의 정의는 본원의 발명 및 첨부된 청구항을 설명하기 위해 사용되는 다양한 용어의 의미 및 범주를 예시하고 정의하기 위해 설명된다. 이러한 정의가 일반적인 정의로 의도되는 것이 아니고 본 출원에만 관련되는 것으로 문자 그대로 해석해서는 안된다.
- [0039] 용어 "화합물 I"은 식 I의 화합물을 지칭한다. 마찬가지로, 이 용어는 모든 하위 식에 적용되며, 예를 들어, "화합물 I.2"는 식 I.2의 화합물을 지칭하고, 또는 "화합물 V"는 식 V의 화합물을 지칭하는 것, 등이다.

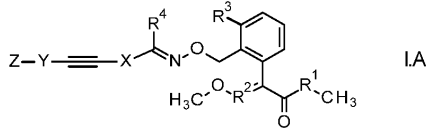
- [0040] 변수에 대한 치환기의 선택의 맥락에서 사용될 때 용어 "독립적으로" 는, 하나 초과와 치환기가 다수의 가능한 치환기에서 선택되는 경우, 이들 치환기는 동일하거나 상이할 수 있다는 것을 의미한다.
- [0041] 상기 변수의 정의에서 언급한 유기 모이어티 또는 기는 개별 기 구성원의 개별 목록에 대한 집합적인 용어이다. 용어 "C_v-C_w" 는 각각의 경우에 가능한 탄소 원자의 수를 나타낸다.
- [0042] 용어 "할로젠" 은 플루오린, 염소, 브롬 및 요오드를 지칭한다.
- [0043] 용어 "C₁-C₄-알킬" 은 1 내지 4 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 또는 분지형 포화 탄화수소 기, 예를 들어 메틸 (CH₃), 에틸 (C₂H₅), 프로필, 1-메틸에틸 (이소프로필), 부틸, 1-메틸프로필, 2-메틸프로필, 1,1-디메틸에틸을 지칭한다.
- [0044] 용어 "C₂-C₄-알케닐" 은 2 내지 4 개의 탄소 원자 및 임의의 위치 내 이중 결합을 갖는 직쇄 또는 분지형 불포화 탄화수소 라디칼, 예컨대 에테닐, 1-프로페닐, 2-프로페닐, 1-메틸에테닐, 1-부테닐, 2-부테닐, 3-부테닐, 1-메틸-1-프로페닐, 2-메틸-1-프로페닐, 1-메틸-2-프로페닐, 2-메틸-2-프로페닐을 지칭한다.
- [0045] 용어 "C₂-C₄-알키닐" 은 2 내지 4 개의 탄소 원자를 갖고 적어도 하나의 삼중 결합을 함유하는 직쇄 또는 분지형 불포화 탄화수소 라디칼, 예컨대 에티닐, 프로프-1-이닐, 프로프-2-이닐, 부트-1-이닐, 부트-2-이닐, 부트-3-이닐, 1-메틸-프로프-2-이닐을 지칭한다.
- [0046] 용어 "C₁-C₄-할로알킬" 은 1 내지 4 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 또는 분지형 알킬 기 (여기서 이들 기 중의 수소 원자의 일부 또는 전부는 상기 언급된 바와 같은 할로젠 원자로 대체될 수 있음), 예를 들어 클로로메틸, 브로모메틸, 디클로로메틸, 트리클로로메틸, 플루오로메틸, 디플루오로메틸, 트리플루오로메틸, 클로로플루오로메틸, 디클로로플루오로메틸, 클로로디플루오로메틸, 1-클로로에틸, 1-브로모에틸, 1-플루오로에틸, 2-플루오로에틸, 2,2-디플루오로에틸, 2,2,2-트리플루오로에틸, 2-클로로-2-플루오로에틸, 2-클로로-2,2-디플루오로에틸, 2,2-디클로로-2-플루오로에틸, 2,2,2-트리클로로에틸 및 펜타플루오로에틸, 2-플루오로프로필, 3-플루오로프로필, 2,2-디플루오로프로필, 2,3-디플루오로프로필, 2-클로로프로필, 3-클로로프로필, 2,3-디클로로프로필, 2-브로모프로필, 3-브로모프로필, 3,3,3-트리플루오로프로필, 3,3,3-트리클로로프로필, CH₂-C₂F₅, CF₂-C₂F₅, CF(CF₃)₂, 1-(플루오로메틸)-2-플루오로에틸, 1-(클로로메틸)-2-클로로에틸, 1-(브로모메틸)-2-브로모에틸, 4-플루오로부틸, 4-클로로부틸, 4-브로모부틸 또는 노나플루오로부틸을 지칭한다.
- [0047] 용어 "-O-C₁-C₄-알킬" 은 알킬 기 내의 임의의 위치에서, 산소를 통해 결합된 1 내지 4 개의 탄소 원자를 갖는 직쇄 또는 분지형 알킬 기, 예를 들어 OCH₃, OCH₂CH₃, O(CH₂)₂CH₃, 1-메틸에톡시, O(CH₂)₃CH₃, 1-메틸프로폭시, 2-메틸프로폭시 또는 1,1-디메틸에톡시를 지칭한다.
- [0048] 용어 "C₃-C₆-시클로알킬" 은 3 내지 6 개의 탄소 고리 구성원을 갖는 모노시클릭 포화 탄화수소 라디칼, 예컨대 시클로프로필 (C₃H₅), 시클로부틸, 시클로펜틸 또는 시클로헥실을 지칭한다. 용어 "C₃-C₆-시클로알케닐" 은 3 내지 6 개의 탄소 고리 구성원 및 하나 이상의 이중 결합을 갖는 모노시클릭 포화 탄화수소 라디칼을 지칭한다.
- [0049] 용어 "3- 내지 6-원 헤테로시클로알킬" 은 탄소 원자 외에 고리 구성원으로서 하나 이상의 헤테로원자, 예컨대 O, N, S 를 갖는 3- 내지 6-원 모노시클릭 포화 고리 시스템을 지칭한다. 용어 "C₃-C₆-원 헤테로시클로알케닐" 은 탄소 원자 외에 고리 구성원으로서 하나 이상의 헤테로원자, 예컨대 O, N 및 S, 및 하나 이상의 이중 결합을 갖는 3- 내지 6-원 모노시클릭 고리 시스템을 지칭한다.
- [0050] 용어 "-C₁-C₄-알킬-C₃-C₆-시클로알킬" 은 1 내지 4 개의 탄소 원자를 갖는 알킬 (상기 정의된 바와 같음) 을 지칭하며, 여기서 알킬 라디칼의 1 개 수소 원자는 3 내지 6 개의 탄소 원자를 갖는 시클로알킬 라디칼에 의해 대체된다.
- [0051] 용어 "페닐" 은 C₆H₅ 를 지칭한다.
- [0052] O, N 및 S 로 이루어지는 군으로부터의 1, 2, 3 또는 4 개 헤테로원자를 함유하는 용어 "5- 또는 6-원 헤테로아릴" 은 5 또는 6 개의 고리 원자를 갖는 방향족 헤테로사이클을 의미하는 것으로 이해될 것이다. 예는 하기

를 포함한다:

- [0053] - 탄소 원자에 추가로, 예를 들어 1, 2 또는 3 개의 N 원자 및/또는 1 개의 황 및/또는 1 개의 산소 원자를 함유하는 5-원 헤테로아릴: 예를 들어 2-티에닐, 3-티에닐, 3-피라졸릴, 4-피라졸릴, 5-피라졸릴, 2-옥사졸릴, 4-옥사졸릴, 5-옥사졸릴, 2-티아졸릴, 4-티아졸릴, 5-티아졸릴, 2-이미다졸릴, 4-이미다졸릴 및 1,3,4-트리아졸-2-일;
- [0054] - 탄소 원자에 추가로, 예를 들어 고리원으로서 1, 2, 3 또는 4 개의 N 원자를 함유하는 6-원 헤테로아릴, 예를 들어 2-피리디닐, 3-피리디닐, 4-피리디닐, 3-피리다지닐, 4-피리다지닐, 2-피리미디닐, 4-피리미디닐, 5-피리미디닐 및 2-피라지닐.
- [0055] 용어 "C₁-C₂-알킬렌 링커" 는 한 말단에서 식 I 의 코어 구조에 결합하고 다른 말단에서 특정 치환기에 결합하는 -CH₂- 또는 -CH₂-CH₂- 와 같은 2가 알킬 기를 의미한다.
- [0056] 본원에 사용된 바와 같이, "화합물", 특히 "화합물 I" 은 모든 비율의 이의 모든 입체이성질체 및 호변이성질체 형태 및 혼합물, 전구약물, 동위원소 형태, 이의 농업적으로 허용되는 염, 이의 N-옥시드 및 S-옥시드를 포함한다.
- [0057] 용어 "입체이성질체" 는 공간에서의 원자의 방향만 상이한 개별 화합물의 모든 이성질체에 사용되는 일반적인 용어이다. 용어 입체이성질체는 거울 이미지 이성질체 (거울상이성질체), 거울 이미지 이성질체의 혼합물 (라세미체, 라세미 혼합물), 기하 (시스/트랜스 또는 E/Z) 이성질체, 및 서로의 거울 이미지가 아닌 하나 초과 의 키랄 중심을 갖는 화합물의 이성질체 (부분입체이성질체) 를 포함한다. 용어 "호변이성질체" 는 단지 하나 (또는 그 이상) 의 이동 원자의 위치 및 전자 분포에서 서로 상이한 2 개 (또는 그 이상) 의 화합물의 공존 을 의미하며, 예를 들어 케토-에놀 호변이성질체이다. 본원에 사용된 용어 "농업적으로 허용가능한 염" 은 본원에 기재된 화합물에서 발견되는 특정한 치환기에 따라 산 또는 염기로 제조된 활성 화합물의 염을 포함한다. "N-옥시드" 는 질소-함유 헤테로아릴 또는 헤테로사이클의 질소 원자의 옥시드를 지칭한다. N-옥시드는 산화제, 예를 들어 퍼옥시드, 예컨대 m-클로로-퍼벤조산 또는 과산화수소의 존재 하에 형성될 수 있다. N-옥시드는 아민-N-옥시드라고도 알려진 아민 옥시드를 지칭하고, N → O 결합을 포함하는 화학적 화합물이다.
- [0058] 변수에 있어서, 중간체의 구현예는 화합물 I 의 구현예에 상응한다.
- [0059] 이들 화합물 I, 및 적용가능한 경우 본원에 제공된 모든 하위 식, 예를 들어 식 I.1 및 I.2, 및 중간체 예컨대 화합물 II, III, IV 및 V 가 바람직하며, 여기서 치환기 및 변수 (예컨대 n, X, Y, Z, R¹, R², R³, R⁴, R^a 및 R^b) 는 서로 독립적으로 또는 보다 바람직하게는 조합으로 (본원에 정의된 바와 같은 2 개 이상의 치환기의 임의 의 가능한 조합) 하기 의미를 갖는다:
- [0060] 또한, 정의 (예컨대 식물병원성 진균, 처리, 작물, 화합물 II, 추가의 활성 성분, 용매, 고체 담체) 가 서로 독립적으로 또는 보다 바람직하게는 하기 의미의 조합, 보다 더 바람직하게는 본원의 화합물 I 의 바람직한 의미 와 조합 (본원에 제공된 바와 같은 2 개 이상의 정의의 임의의 가능한 조합) 인 용도, 방법, 혼합물 및 조성물이 바람직하다:
- [0061] 본 발명의 한 구현예는 R¹ 이 0 및 NH 에서 선택되고; R² 가 CH 및 N 에서 선택되고, 단, R¹ 이 NH 인 경우 R² 가 N 인 바람직한 화합물 I 에 관한 것이다. 또 다른 구현예는 R² 가 N 인 화합물에 관한 것이다. 추가 구현예는 R² 가 CH 인 화합물 I 에 관한 것이다.
- [0062] 추가 구현예에 따르면, R³ 은 수소, 할로젠, CN, C₁-C₄-알킬, C₂-C₄-알케닐, C₁-C₄-할로알킬, C₂-C₄-할로알케닐, C₃-C₆-시클로알킬, -O-C₁-C₄-알킬, -O-C₁-C₄-할로알킬, -C₁-C₂-알킬-C₃-C₆-시클로알킬 및 3- 내지 6-원 헤테로시클로알킬에서 선택되고; 보다 바람직하게는 수소, 할로젠, CN, C₁-C₄-알킬, C₂-C₄-알케닐, C₂-C₄-알키닐, C₁-C₄-할로알킬, C₃-C₄-시클로알킬, -O-C₁-C₄-알킬, -O-C₁-C₄-할로알킬 및 3- 내지 4-원 헤테로시클로알킬에서 선택되고 (여기서 상기 헤테로시클로알킬은 탄소 원자 외에 N, O 및 S 에서 선택되는 1 또는 2 개 헤테로원자를 함유하고, 단, 이러한 헤테로사이클은 O 및 S 에서 선택되는 2 개의 인접한 원자를 함유할 수 없고, 상기 헤테로시클로알킬은 직접 또는 산소 원자를 통해 또는 C₁-C₂-알킬렌 링커를 통해 결합함); 보다 더 바람직하게는 수소, C₁-

C₂-알킬, C₂-알케닐, C₁-C₂-할로알킬, -O-C₁-C₂-알킬, O-C₁-C₂-할로알킬, C₃-C₄-시클로알킬, -C₁-C₂-알킬-C₃-C₄-시클로알킬 및 3- 내지 4-원 헤테로시클로알킬에서 선택되고; 보다 더 바람직하게는 수소, C₁-C₂-알킬, C₁-C₂-할로알킬, C₃-C₄-시클로알킬, -O-C₁-C₂-알킬 및 -O-C₁-C₂-할로알킬에서 선택되고; 특히 바람직하게는 수소, 할로젠, C₁-C₂-알킬 및 C₁-C₂-할로알킬에서 선택되고, 특히 수소 또는 메틸이다.

[0063] 바람직하게는, R³ 은 분자의 메틸 옥심 측쇄에 대해 오르토 위치에 있고, 여기서 화합물은 식 I.A 의 것이다:



[0064]

[0065] 추가 구현예에 따르면, R⁴ 는 수소, C₁-C₄-알킬, C₂-C₄-알케닐, C₁-C₄-할로알킬, C₂-C₄-할로알케닐, -(C₁-C₂-알킬)-O-(C₁-C₂-알킬) 및 -CH₂-시클로프로필에서 선택되고; 보다 바람직하게는 수소, C₁-C₄-알킬 및 C₁-C₄-할로알킬에서 선택되고, 보다 더 바람직하게는 메틸 및 C₁-할로알킬에서 선택되고; 특히 메틸이다.

[0066] 추가 구현예에 따르면, X 는 직접 결합이다.

[0067] 추가 구현예에 따르면, Y 는 직접 결합이다. 보다 바람직하게는, X 및 Y 는 직접 결합이다.

[0068] 추가 구현예에 따르면, X 및 Y 중 적어도 하나는 2가 기 -CL¹L²- 이다.

[0069] 추가 구현예에 따르면, L¹ 및 L² 는 서로 독립적으로, 수소, C₁-C₃-알킬, C₁-C₃-할로알킬, 시클로프로필 및 -CH₂-시클로프로필에서 선택되거나; L¹ 및 L² 는 개재하는 탄소 원자와 함께, 시클로프로필을 형성하고; 보다 바람직하게는 L¹ 및 L² 는 서로 독립적으로, 수소 및 C₁-C₃-알킬에서 선택되거나; L¹ 및 L² 는 개재하는 탄소 원자와 함께, 시클로프로필을 형성하고; 특히 L¹ 및 L² 는 둘 모두 수소이다.

[0070] 추가 구현예에 따르면, Z 는 C₃-C₆-시클로알킬, 페닐 및 5- 또는 6-원 헤테로아릴에서 선택되고, 여기서 상기 헤테로아릴은 탄소 원자 외에 N, O 및 S 에서 선택되는 1, 2 또는 3 개 헤테로원자를 함유하고, 단, 이러한 헤테로아릴은 O 및 S 에서 선택되는 2 개의 인접한 원자를 함유할 수 없고, Z 는 미치환되거나 본원에서 정의된 바와 같은 1, 2 또는 3 개의 동일하거나 상이한 기 R^a 를 가지고; 보다 바람직하게는 Z 는 미치환되거나 본원에서 정의된 바와 같은 1 또는 2 개의 동일하거나 상이한 기 R^a 를 가지고; 특히 Z 는 미치환되거나 본원에서 정의된 바와 같은 1 개의 기 R^a 를 가진다.

[0071] 추가 구현예에 따르면, Z 는 C₃-C₆-시클로알킬, 페닐 및 5- 또는 6-원 헤테로아릴에서 선택되고, 여기서 상기 헤테로아릴은 탄소 원자 외에 N, O 및 S 에서 선택되는 1, 2 또는 3 개 헤테로원자를 함유하고, 단, 이러한 헤테로아릴은 O 및 S 에서 선택되는 2 개의 인접한 원자를 함유할 수 없고, Z 는 본원에서 정의된 바와 같은 1, 2 또는 3 개의 동일하거나 상이한 기 R^a 를 가지고; 보다 바람직하게는 Z 는 본원에서 정의된 바와 같은 1 또는 2 개의 동일하거나 상이한 기 R^a 를 가지고; 특히 Z 는 본원에서 정의된 바와 같은 1 개의 기 R^a 를 가진다.

[0072] 추가 구현예에 따르면, Z 는 시클로프로필 및 페닐에서 선택되고, Z 는 미치환되거나 본원에서 정의된 바와 같은 1, 2 또는 3 개의 동일하거나 상이한 기 R^a 를 가지고; 보다 바람직하게는 Z 는 미치환되거나 본원에서 정의된 바와 같은 1 또는 2 개의 동일하거나 상이한 기 R^a 를 가지고; 특히 Z 는 미치환되거나 본원에서 정의된 바와 같은 1 개의 기 R^a 를 가진다.

[0073] 추가 구현예에 따르면, Z 는 페닐이고, Z 는 미치환되거나 본원에서 정의된 바와 같은 1, 2 또는 3 개의 동일하거나 상이한 기 R^a 를 가지고/가지거나 이웃 탄소 고리 원자에 결합한 2 개의 R^a 치환기는, 2 개의 개재하는 탄소 고리 원자와 함께, 부분 불포화 또는 방향족 5- 내지 6-원 융합 카르보- 또는 헤테로사이클을 형성하고, 여

기서 헤테로사이클은 탄소 원자 외에 고리원 원자로서 N, O 및 S 에서 독립적으로 선택되는 1 또는 2 개 헤테로 원자를 포함하고, 단, 이러한 헤테로사이클은 O 및 S 에서 선택되는 2 개의 인접한 원자를 함유할 수 없고; R^a 는 미치환되거나, 할로젠, CN, NO₂, C₁-C₄-알킬, C₁-C₄-할로알킬, -O-C₁-C₄-알킬 및 -O-C₁-C₄-할로알킬에서 선택되는 1, 2, 3, 4 개 또는 최대 수까지의 동일하거나 상이한 기 R^b 를 가진다. 상기 융합 카르보사이클은 시클로펜텐 고리 (인단 바이시클릭 고리 시스템에서 융합 페닐과 함께 생성), 시클로펜타디엔 고리 (1H-인텐 바이시클릭 고리 시스템에서 융합 페닐과 함께 생성), 시클로헥센 고리 (테트라린 바이시클릭 고리 시스템에서 축합 페닐 고리와 함께 생성), 시클로헥사디엔 고리 (디히드로나프탈렌 바이시클릭 고리 시스템에서 융합 페닐과 함께 생성), 시클로헥텐 고리 (6,7,8,9-테트라히드로-5H-벤조[7]아놀렌 바이시클릭 고리 시스템에서 융합 페닐과 함께 생성) 일 수 있다. 상기 융합 헤테로사이클은 2,3-디히드로푸란 고리 (2,3-디히드로벤조푸란 바이시클릭 고리 시스템에서 융합 페닐과 함께 생성), 3,4-디히드로-2H-피란 고리 (크로만 바이시클릭 고리 시스템에서 융합 페닐과 함께 생성), 푸란 고리 (벤조푸란 바이시클릭 고리 시스템에서 융합 페닐 고리와 함께 생성), 1,3-디옥솔 고리 (벤조-1,3-디옥솔 바이시클릭 고리 시스템에서 융합 페닐 고리와 함께 생성), 2,3-디히드로-1H-피롤 고리 (인돌린 바이시클릭 고리 시스템에서 융합 페닐 고리와 함께 생성), 1,3-디히드로-피롤-2-온 고리 (인돌린-2-온 바이시클릭 고리 시스템에서 융합 페닐 고리와 함께 생성) 일 수 있고, 보다 바람직하게는 상기 융합 헤테로사이클은 위치 5 에서 측쇄에 결합함으로써 Z 를 초래하여, 2 개의 R^a 치환기와 함께 1,3-벤조디옥솔-5-일을 형성하는 1,3-디옥솔 고리 (벤조-1,3-디옥솔 바이시클릭 고리 시스템에서 융합 페닐 고리와 함께 생성) 일 수 있다.

[0074] 상기 언급한 구현예에 따르면, R^a 는 바람직하게는 할로젠, CN, C₁-C₄-알킬, C₂-C₄-알케닐, C₂-C₄-알키닐, -O-C₁-C₄-알킬, -C(=N-O-C₁-C₄-알킬)-C₁-C₄-알킬, -C(=O)-C₁-C₄-알킬, -O-CH₂-C(=N-O-C₁-C₄-알킬)-C₁-C₄-알킬, C₃-C₄-시클로알킬, -C₁-C₂-알킬-C₃-C₄-시클로알킬, -O-C₃-C₄-시클로알킬, 페닐, 3- 내지 5-원 헤테로시클로알킬, 3- 내지 5-원 헤테로시클로알케닐 및 5- 또는 6-원 헤테로아릴에서 선택되고, 여기서 상기 헤테로시클로알킬, 헤테로시클로알케닐 및 헤테로아릴은 탄소 원자 외에 N, O 및 S 에서 선택되는 1, 2 또는 3 개 헤테로원자를 함유하고, 단, 이러한 헤테로사이클은 O 및 S 에서 선택되는 2 개의 인접한 원자를 함유할 수 없고, 상기 페닐, 헤테로시클로알킬, 헤테로시클로알케닐 및 헤테로아릴은 직접 또는 산소 원자를 통해 또는 C₁-C₂-알킬렌 링커를 통해 결합한다.

[0075] 바람직하게는, R^a 는 할로젠, CN, C₁-C₄-알킬, C₂-C₄-알케닐, C₂-C₄-알키닐, -O-C₁-C₄-알킬, -C(=O)-C₁-C₂-알킬, -C(=N-O-C₁-C₄-알킬)-C₁-C₄-알킬, C₃-C₄-시클로알킬, -O-C₃-C₄-시클로알킬, 페닐, 3- 내지 5-원 헤테로시클로알킬 및 5- 또는 6-원 헤테로아릴에서 선택되고, 여기서 상기 헤테로시클로알킬 및 헤테로아릴은 탄소 원자 외에 N, O 및 S 에서 선택되는 1 또는 2 개 헤테로원자를 함유하고, 단, 이러한 헤테로사이클은 O 및 S 에서 선택되는 2 개의 인접한 원자를 함유할 수 없고, 상기 페닐, 헤테로시클로알킬 및 헤테로아릴은 직접 또는 산소 원자를 통해 또는 메틸렌 링커를 통해 결합한다.

[0076] 보다 바람직하게는, R^a 는 할로젠, CN, C₁-C₃-알킬, -O-C₁-C₃-알킬, -C(=N-O-CH₃)-CH₃, C₃-C₄-시클로알킬, -O-C₃-C₄-시클로알킬, 페닐, 3- 내지 5-원 헤테로시클로알킬 및 5- 또는 6-원 헤테로아릴에서 선택되고, 여기서 상기 헤테로시클로알킬 및 헤테로아릴은 탄소 원자 외에 N, O 및 S 에서 선택되는 1 또는 2 개 헤테로원자를 함유하고, 단, 이러한 헤테로사이클은 O 및 S 에서 선택되는 2 개의 인접한 원자를 함유할 수 없고, 상기 페닐, 헤테로시클로알킬 및 헤테로아릴은 직접 또는 산소 원자를 통해 또는 메틸렌 링커를 통해 결합한다.

[0077] 특히, R^a 는 할로젠, CN, C₁-C₂-알킬, -O-C₁-C₂-알킬, 에틸, 에틸 및 -C(=N-O-CH₃)-CH₃ 에서 선택된다.

[0078] 추가 구현예에 따르면, R^a 는 할로젠, C₁-C₂-알킬, -O-C₁-C₂-알킬에서 선택되고, 여기서 지방족 모이어티는 미치환되거나 할로젠에서 선택되는 1, 2 또는 3 개의 동일하거나 상이한 기 R^b 를 가진다.

[0079] R^a 에 대한 상기 언급한 구현예에 따르면, 상기 언급한 헤테로시클로알킬은 보다 바람직하게는 4-원 헤테로시클로알킬이고, 여기서 상기 헤테로시클로알킬은 탄소 원자 외에 N, O 및 S, 바람직하게는 N 에서 선택되는 1 개의

헤테로원자를 함유한다.

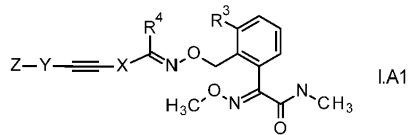
- [0080] R^a 에 대한 상기 언급한 구현예에 따르면, 상기 언급한 헤테로아틸은 보다 바람직하게는 5-원 헤테로아틸이고, 여기서 상기 헤테로아틸은 탄소 원자 외에 N, O 및 S 에서 선택되는 1 또는 2 개 헤테로원자를 함유하고, 단, 이러한 헤테로아틸은 O 및 S 에서 선택되는 2 개의 인접한 원자를 함유할 수 없고, 바람직하게는 헤테로원자는 N 및 O 에서 선택된다.
- [0081] R^a 에 대한 상기 언급한 구현예에 따르면, R^a 의 지방족 및 시클릭 모이어티는 미치환되거나, 할로젠, CN, NO₂, C₁-C₄-알킬, C₁-C₄-할로알킬, -O-C₁-C₄-알킬 및 -O-C₁-C₄-할로알킬; 보다 바람직하게는 할로젠에서 선택되는 1, 2, 3, 4 개 또는 최대 수까지의 동일하거나 상이한 기 R^b 를 가지고; 보다 더 바람직하게는 R^a 의 시클릭 모이어티만은 미치환되거나, 할로젠, CN, NO₂, C₁-C₄-알킬, C₁-C₄-할로알킬, -O-C₁-C₄-알킬 및 -O-C₁-C₄-할로알킬에서 선택되는 1, 2, 3, 4 개 또는 최대 수까지의 동일하거나 상이한 기 R^b 를 가지고; 보다 더 바람직하게는 R^a 의 페닐 모이어티만은 미치환되거나, 할로젠, CN, C₁-C₄-알킬, C₁-C₄-할로알킬, -O-C₁-C₄-알킬 및 -O-C₁-C₄-할로알킬에서 선택되는 1, 2, 3, 4 또는 5 개의 동일하거나 상이한 기 R^b 를 가지고; 특히 상기 페닐은 미치환되거나, 할로젠, CN, C₁-C₂-알킬, C₁-C₂-할로알킬, -O-C₁-C₂-알킬 및 -O-C₁-C₂-할로알킬에서 선택되는 1, 2 또는 3 개의 동일하거나 상이한 기 R^b 를 가진다.
- [0082] 추가 구현예에 따르면, X 및 Y 는 둘 모두 직접 결합이고, Z 는, 미치환되거나 1, 2 또는 3 개의 동일하거나 상이한 치환기 R^a 를 가지는 페닐이고, 여기서 R^a 는 할로젠, C₁-C₂-알킬 및 -O-C₁-C₂-알킬에서 선택되고, R^a 의 지방족 모이어티는 미치환되거나, 할로젠에서 선택되는 1, 2 또는 3 개의 동일하거나 상이한 기 R^b 를 가진다.
- [0083] 추가 바람직한 구현예에 따르면, 본 발명은 하기와 같은 식 I 의 화합물, 및 이의 입체이성질체 및 호변이성질체 형태, 및 이의 N-옥시드 및 농업적으로 허용가능한 염에 관한 것이다:
- [0084] R^1 은 O 및 NH 에서 선택되고;
- [0085] R^2 는 CH 또는 N 이고;
- [0086] R^3 은 수소, 할로젠 또는 C₁-C₄-알킬이고, 여기서 R^3 은 메틸 옥심 측쇄에 대해 오르토 위치에 있고;
- [0087] R^4 는 C₁-C₆-알킬에서 선택되고;
- [0088] X, Y 는 둘 모두 직접 결합이고;
- [0089] Z 는 시클로프로필, 페닐 및 5-원 헤테로아틸에서 선택되고,
- [0090] 여기서 상기 헤테로아틸은 탄소 원자 외에 N, O 및 S 에서 선택되는 1, 2 또는 3 개 헤테로원자를 함유하고, 단, 이러한 헤테로아틸은 O 및 S 에서 선택되는 2 개의 인접한 원자를 함유할 수 없고,
- [0091] Z 는 미치환되거나 1, 2, 3 개 또는 최대 수까지의 동일하거나 상이한 기 R^a 를 가지고;
- [0092] R^a 는 할로젠, CN, C₁-C₄-할로알킬, C₁-C₄-알킬, -O-C₁-C₄-알킬, -O-C₁-C₄-할로알킬, -C(=N-O-C₁-C₄-알킬)-C₁-C₄-알킬, -C(=O)-C₁-C₄-알킬, C₃-C₄-시클로알킬, -C₁-C₂-알킬-C₃-C₄-시클로알킬, -O-C₃-C₄-시클로알킬, 페닐, 3- 내지 5-원 헤테로시클로알킬 및 5- 또는 6-원 헤테로아틸에서 선택되고, 여기서 상기 헤테로시클로알킬 및 헤테로아틸은 탄소 원자 외에 N, O 및 S 에서 선택되는 1 또는 2 개 헤테로원자를 함유하고, 단, 이러한 헤테로사이클은 O 및 S 에서 선택되는 2 개의 인접한 원자를 함유할 수 없고, 상기 페닐, 헤테로시클로알킬 및 헤테로아틸은 직접 또는 산소 원자를 통해 또는 메틸렌 링커를 통해 결합하고, 상기 언급한 R^a 의 시클릭 모이어티는 미치환되거나, 할로젠, CN, C₁-C₂-알킬, C₁-C₂-할로알킬, -O-C₁-C₂-알킬 및 -O-C₁-C₂-할로알킬에서 선택되는 1, 2 또는 3 개의 동일하거나 상이한 기 R^b 를 가지고;

[0093] 및/또는

[0094] 이웃 탄소 고리 원자에 결합한 2 개의 R⁴ 치환기는, 2 개의 개재하는 탄소 고리 원자와 함께, 부분 불포화 또는 방향족 5- 내지 6-원 융합 카르보- 또는 헤테로사이클을 형성하고,

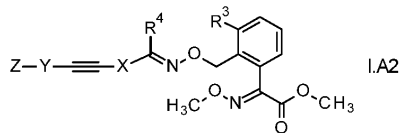
[0095] 헤테로사이클은 탄소 원자 외에 고리원 원자로서 N, O 및 S 에서 독립적으로 선택되는 1 또는 2 개 헤테로원자를 포함하고, 단, 이러한 헤테로사이클은 O 및 S 에서 선택되는 2 개의 인접한 원자를 함유할 수 없음.

[0096] 추가 구현예에 따르면, R³ 은 메틸 옥심 측쇄에 대해 오르토 위치에 있고, R¹ 은 NH 이고 R² 는 N 이며, 이때 화합물은 식 I.A1 의 것이다:



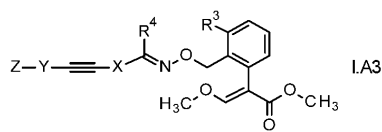
[0097]

[0098] 추가 구현예에 따르면, R³ 은 메틸 옥심 측쇄에 대해 오르토 위치에 있고, R¹ 은 O 이고, R² 는 N 이며, 이때 화합물은 식 I.A2 의 것이다:



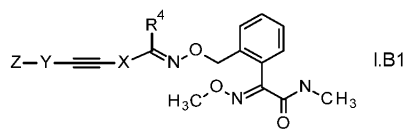
[0099]

[0100] 추가 구현예에 따르면, R³ 은 메틸 옥심 측쇄에 대해 오르토 위치에 있고, R¹ 은 O 이고, R² 는 CH 이며, 이때 화합물은 식 I.A3 의 것이다:



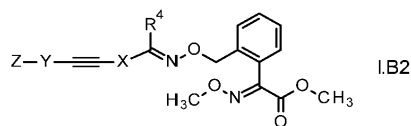
[0101]

[0102] 추가 구현예에 따르면, R¹ 은 NH 이고, R² 는 N 이고, R³ 은 H 이며, 이때 화합물은 식 I.B1 의 것이다:



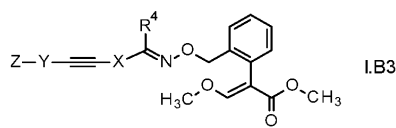
[0103]

[0104] 추가 구현예에 따르면, R¹ 은 O 이고, R² 는 N 이고, R³ 은 H 이며, 이때 화합물은 식 I.B2 의 것이다:



[0105]

[0106] 추가 구현예에 따르면, R¹ 은 O 이고, R² 는 CH 이고, R³ 은 H 이며, 이때 화합물은 식 I.B3 의 것이다:



[0107]

[0108] 바람직하게는, 식 I 의 R³ 은 하기 라디칼 3-1 ~ 3-8 중 하나이다:

No.	R ³
3-1	CH ₃
3-2	OCH ₃
3-3	CHF ₂

No.	R ³
3-4	C ₃ H ₅
3-5	CH=CH ₂
3-6	CH ₂ CH=C(CH ₃) ₂

No.	R ³
3-7	CF ₃
3-8	C(=NOCH ₃)CH ₃
3-9	H

[0109]

[0110] 보다 더 바람직하게는 R³ 은 H, CH₃, OCH₃, CF₃, CHF₂ 또는 C₃H₅, 특히 H 또는 CH₃ 이다.

[0111] 본 발명의 특히 바람직한 구현에는 R⁴ 가 하기 라디칼 4-1 ~ 4-10 중 하나인 화합물 I 에 관한 것이다:

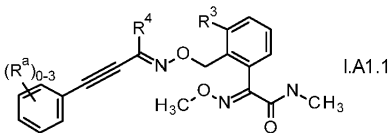
No.	R ⁴
4-1	CH ₃
4-2	C ₂ H ₅
4-3	CH ₂ OCH ₃
4-4	CH ₂ CF ₃

No.	R ⁴
4-5	CH ₂ C ₆ H ₅
4-6	CHF ₂
4-7	CH ₂ C ₃ H ₅
4-8	CH ₂ -C(=NOCH ₃)CH ₃

No.	R ⁴
4-9	C≡CH
4-10	C≡CCH ₃

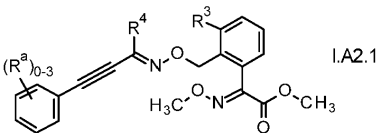
[0112]

[0113] 본 발명의 특히 바람직한 구현에는, X 및 Y 가 직접 결합이고 Z 가 페닐인 화합물 I 에 관한 것이다. 보다 더 바람직하게는, X 및 Y 는 직접 결합이고, Z 는 페닐이고, R³ 은 메틸 옥심 측쇄에 대해 오르토 위치에 있고, R¹ 은 NH 이고, R² 는 N 이며, 여기서 페닐 Z 는 미치환되거나 본원에서 정의된 바와 같은 1, 2 또는 3 개의 기 R^a 에 의해 치환되고, 이때 화합물은 식 I.A1.1 의 것이다:



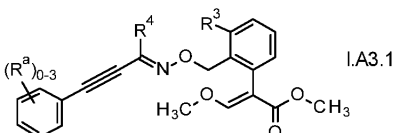
[0114]

[0115] 추가 구현예에 따르면, X 및 Y 는 직접 결합이고, Z 는 페닐이고, R³ 은 메틸 옥심 측쇄에 대해 오르토 위치에 있고, R¹ 은 O 이고, R² 는 N 이며, 여기서 페닐 Z 는 미치환되거나 본원에서 정의된 바와 같은 1, 2 또는 3 개의 기 R^a 에 의해 치환되고, 이때 화합물은 식 I.A2.1 의 것이다:



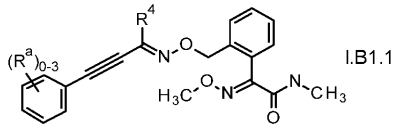
[0116]

[0117] 추가 구현예에 따르면, X 및 Y 는 직접 결합이고, Z 는 페닐이고, R³ 은 메틸 옥심 측쇄에 대해 오르토 위치에 있고, R¹ 은 O 이고, R² 는 CH 이며, 여기서 페닐 Z 는 미치환되거나 본원에서 정의된 바와 같은 1, 2 또는 3 개의 기 R^a 에 의해 치환되고, 이때 화합물은 식 I.A3.1 의 것이다:



[0118]

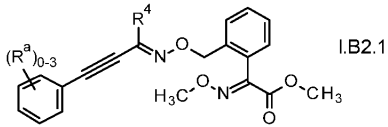
[0119] 추가 구현예에 따르면, X 및 Y 는 직접 결합이고, Z 는 페닐이고, R¹ 은 NH 이고, R² 는 N 이고, R³ 은 H 이며, 여기서 페닐 Z 는 미치환되거나 본원에서 정의된 바와 같은 1, 2 또는 3 개의 기 R^a 에 의해 치환되고, 이때 화합물은 식 I.B1.1 의 것이다:



[0120]

[0121]

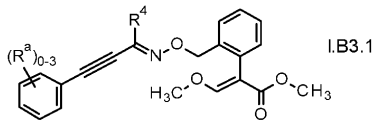
추가 구현예에 따르면, X 및 Y 는 직접 결합이고, Z 는 페닐이고, R¹ 은 O 이고, R² 는 N 이고, R³ 은 H 이며, 여기서 페닐 Z 는 미치환되거나 본원에서 정의된 바와 같은 1, 2 또는 3 개의 기 R^a 에 의해 치환되고, 이때 화합물은 식 I.B2.1 의 것이다:



[0122]

[0123]

추가 구현예에 따르면, X 및 Y 는 직접 결합이고, Z 는 페닐이고, R¹ 은 O 이고, R² 는 CH 이고, R³ 은 H 이며, 여기서 페닐 Z 는 미치환되거나 본원에서 정의된 바와 같은 1, 2 또는 3 개의 기 R^a 에 의해 치환되고, 이때 화합물은 식 I.B3.1 의 것이다:



[0124]

[0125]

본 발명의 특히 바람직한 구현예는 R^a 가 하기 라디칼 a-1 ~ a-17 중 하나에서 선택되는 것인 화합물 I 에 관한 것이다:

No.	R ^a
a-1	F
a-2	Cl
a-3	Br
a-4	CH ₃
a-5	CHF ₂
a-6	CF ₃

No.	R ^a
a-7	OCH ₃
a-8	OCHF ₂
a-9	OCF ₃
a-10	C ₂ H ₅
a-11	CH ₂ CF ₃
a-12	CH=CH ₂

No.	R ^a
a-13	C ₆ H ₅
a-14	C≡CH
a-15	C≡CCH ₃
a-16	C ₃ H ₅
a-17	C(=NOCH ₃)CH ₃

[0126]

[0127]

한 구현예에서, 화합물 I 은 식 I.A1.1 의 것이고 여기서 R³ 은 CH₃ 이고, R^a 및 R⁴ 는 하기 표 A 의 임의의 열에 따른 것이며, 이때 화합물은 I.A1.1-A-1 ~ I.A1.1-A-552 로 명명된다.

[0128]

또 다른 구현예에서, 화합물 I 은 식 I.A2.1 의 것이고 여기서 R³ 은 CH₃ 이고, R^a 및 R⁴ 는 하기 표 A 의 임의의 열에 따른 것이며, 이때 화합물은 I.A2.1-A-1 ~ I.A2.1-A-552 로 명명된다.

[0129]

또 다른 구현예에서, 화합물 I 은 식 I.A3.1 의 것이고 여기서 R³ 은 CH₃ 이고, R^a 및 R⁴ 는 하기 표 A 의 임의의 열에 따른 것이며, 이때 화합물은 I.A3.1-A-1 ~ I.A3.1-A-552 로 명명된다.

[0130]

또 다른 구현예에서, 화합물 I 은 식 I.B1.1 의 것이고 R^a 및 R⁴ 는 하기 표 A 의 임의의 열에 따른 것이며, 이때 화합물은 I.B1.1-A-1 ~ I.B1.1-A-552 로 명명된다.

[0131]

또 다른 구현예에서, 화합물 I 은 식 I.B2.1 의 것이고 R^a 및 R⁴ 는 하기 표 A 의 임의의 열에 따른 것이며, 이때 화합물은 I.B2.1-A-1 ~ I.B2.1-A-552 로 명명된다.

[0132]

또 다른 구현예에서, 화합물 I 은 식 I.B3.1 의 것이고 R^a 및 R⁴ 는 하기 표 A 의 임의의 열에 따른 것이며, 이때 화합물은 I.B3.1-A-1 ~ I.B3.1-A-552 로 명명된다.

[0133] 표 A:

No.	(R ^a) ₀₋₃	R ⁴
A-1	-	CH ₃
A-2	2-F	CH ₃
A-3	2-Cl	CH ₃
A-4	2-Br	CH ₃
A-5	2-CH ₃	CH ₃
A-6	2-CHF ₂	CH ₃
A-7	2-CF ₃	CH ₃
A-8	2-OCH ₃	CH ₃
A-9	2-OCHF ₂	CH ₃
A-10	2-OCF ₃	CH ₃
A-11	2-C ₂ H ₅	CH ₃
A-12	2-CH ₂ CF ₃	CH ₃
A-13	2-CH=CH ₂	CH ₃
A-14	2-C ₆ H ₅	CH ₃
A-15	2-C≡CH	CH ₃
A-16	2-C≡CCH ₃	CH ₃
A-17	2-C ₃ H ₅	CH ₃
A-18	2-C(=NOCH ₃)CH ₃	CH ₃
A-19	2-CN	CH ₃
A-20	3-F	CH ₃
A-21	3-Cl	CH ₃
A-22	3-Br	CH ₃
A-23	3-CH ₃	CH ₃
A-24	3-CHF ₂	CH ₃
A-25	3-CF ₃	CH ₃
A-26	3-OCH ₃	CH ₃
A-27	3-OCHF ₂	CH ₃
A-28	3-OCF ₃	CH ₃
A-29	3-C ₂ H ₅	CH ₃
A-30	3-CH ₂ CF ₃	CH ₃
A-31	3-CH=CH ₂	CH ₃
A-32	3-C ₆ H ₅	CH ₃
A-33	3-C≡CH	CH ₃

[0134]

No.	(R ^a) ₀₋₃	R ⁴
A-34	3-C≡CCH ₃	CH ₃
A-35	3-C ₃ H ₅	CH ₃
A-36	3-C(=NOCH ₃)CH ₃	CH ₃
A-37	3-CN	CH ₃
A-38	4-F	CH ₃
A-39	4-Cl	CH ₃
A-40	4-Br	CH ₃
A-41	4-CH ₃	CH ₃
A-42	4-CHF ₂	CH ₃
A-43	4-CF ₃	CH ₃
A-44	4-OCH ₃	CH ₃
A-45	4-OCHF ₂	CH ₃
A-46	4-OCF ₃	CH ₃
A-47	4-C ₂ H ₅	CH ₃
A-48	4-CH ₂ CF ₃	CH ₃
A-49	4-CH=CH ₂	CH ₃
A-50	4-C ₆ H ₅	CH ₃
A-51	4-C≡CH	CH ₃
A-52	4-C≡CCH ₃	CH ₃
A-53	4-C ₃ H ₅	CH ₃
A-54	4-C(=NOCH ₃)CH ₃	CH ₃
A-55	4-CN	CH ₃
A-56	-	C ₂ H ₅
A-57	2-F	C ₂ H ₅
A-58	2-Cl	C ₂ H ₅
A-59	2-Br	C ₂ H ₅
A-60	2-CH ₃	C ₂ H ₅
A-61	2-CHF ₂	C ₂ H ₅
A-62	2-CF ₃	C ₂ H ₅
A-63	2-OCH ₃	C ₂ H ₅
A-64	2-OCHF ₂	C ₂ H ₅
A-65	2-OCF ₃	C ₂ H ₅
A-66	2-C ₂ H ₅	C ₂ H ₅
A-67	2-CH ₂ CF ₃	C ₂ H ₅
A-68	2-CH=CH ₂	C ₂ H ₅
A-69	2-C ₆ H ₅	C ₂ H ₅
A-70	2-C≡CH	C ₂ H ₅
A-71	2-C≡CCH ₃	C ₂ H ₅
A-72	2-C ₃ H ₅	C ₂ H ₅
A-73	2-C(=NOCH ₃)CH ₃	C ₂ H ₅
A-74	2-CN	C ₂ H ₅
A-75	3-F	C ₂ H ₅
A-76	3-Cl	C ₂ H ₅
A-77	3-Br	C ₂ H ₅

[0135]

No.	(R ^a) ₀₋₃	R ⁴
A-78	3-CH ₃	C ₂ H ₅
A-79	3-CHF ₂	C ₂ H ₅
A-80	3-CF ₃	C ₂ H ₅
A-81	3-OCH ₃	C ₂ H ₅
A-82	3-OCHF ₂	C ₂ H ₅
A-83	3-OCF ₃	C ₂ H ₅
A-84	3-C ₂ H ₅	C ₂ H ₅
A-85	3-CH ₂ CF ₃	C ₂ H ₅
A-86	3-CH=CH ₂	C ₂ H ₅
A-87	3-C ₆ H ₅	C ₂ H ₅
A-88	3-C≡CH	C ₂ H ₅
A-89	3-C≡CCH ₃	C ₂ H ₅
A-90	3-C ₃ H ₅	C ₂ H ₅
A-91	3-C(=NOCH ₃)CH ₃	C ₂ H ₅
A-92	3-CN	C ₂ H ₅
A-93	4-F	C ₂ H ₅
A-94	4-Cl	C ₂ H ₅
A-95	4-Br	C ₂ H ₅
A-96	4-CH ₃	C ₂ H ₅
A-97	4-CHF ₂	C ₂ H ₅
A-98	4-CF ₃	C ₂ H ₅
A-99	4-OCH ₃	C ₂ H ₅
A-100	4-OCHF ₂	C ₂ H ₅
A-101	4-OCF ₃	C ₂ H ₅
A-102	4-C ₂ H ₅	C ₂ H ₅
A-103	4-CH ₂ CF ₃	C ₂ H ₅
A-104	4-CH=CH ₂	C ₂ H ₅
A-105	4-C ₆ H ₅	C ₂ H ₅
A-106	4-C≡CH	C ₂ H ₅
A-107	4-C≡CCH ₃	C ₂ H ₅
A-108	4-C ₃ H ₅	C ₂ H ₅
A-109	4-C(=NOCH ₃)CH ₃	C ₂ H ₅
A-110	4-CN	C ₂ H ₅
A-111	-	CH ₂ CF ₃
A-112	2-F	CH ₂ CF ₃
A-113	2-Cl	CH ₂ CF ₃
A-114	2-Br	CH ₂ CF ₃
A-115	2-CH ₃	CH ₂ CF ₃
A-116	2-CHF ₂	CH ₂ CF ₃
A-117	2-CF ₃	CH ₂ CF ₃
A-118	2-OCH ₃	CH ₂ CF ₃
A-119	2-OCHF ₂	CH ₂ CF ₃
A-120	2-OCF ₃	CH ₂ CF ₃
A-121	2-C ₂ H ₅	CH ₂ CF ₃

[0136]

No.	(R ^a) ₀₋₃	R ⁴
A-122	2-CH ₂ CF ₃	CH ₂ CF ₃
A-123	2-CH=CH ₂	CH ₂ CF ₃
A-124	2-C ₆ H ₅	CH ₂ CF ₃
A-125	2-C≡CH	CH ₂ CF ₃
A-126	2-C≡CCH ₃	CH ₂ CF ₃
A-127	2-C ₃ H ₅	CH ₂ CF ₃
A-128	2-C(=NOCH ₃)CH ₃	CH ₂ CF ₃
A-129	2-CN	CH ₂ CF ₃
A-130	3-F	CH ₂ CF ₃
A-131	3-Cl	CH ₂ CF ₃
A-132	3-Br	CH ₂ CF ₃
A-133	3-CH ₃	CH ₂ CF ₃
A-134	3-CHF ₂	CH ₂ CF ₃
A-135	3-CF ₃	CH ₂ CF ₃
A-136	3-OCH ₃	CH ₂ CF ₃
A-137	3-OCHF ₂	CH ₂ CF ₃
A-138	3-OCF ₃	CH ₂ CF ₃
A-139	3-C ₂ H ₅	CH ₂ CF ₃
A-140	3-CH ₂ CF ₃	CH ₂ CF ₃
A-141	3-CH=CH ₂	CH ₂ CF ₃
A-142	3-C ₆ H ₅	CH ₂ CF ₃
A-143	3-C≡CH	CH ₂ CF ₃
A-144	3-C≡CCH ₃	CH ₂ CF ₃
A-145	3-C ₃ H ₅	CH ₂ CF ₃
A-146	3-C(=NOCH ₃)CH ₃	CH ₂ CF ₃
A-147	3-CN	CH ₂ CF ₃
A-148	4-F	CH ₂ CF ₃
A-149	4-Cl	CH ₂ CF ₃
A-150	4-Br	CH ₂ CF ₃
A-151	4-CH ₃	CH ₂ CF ₃
A-152	4-CHF ₂	CH ₂ CF ₃
A-153	4-CF ₃	CH ₂ CF ₃
A-154	4-OCH ₃	CH ₂ CF ₃
A-155	4-OCHF ₂	CH ₂ CF ₃
A-156	4-OCF ₃	CH ₂ CF ₃
A-157	4-C ₂ H ₅	CH ₂ CF ₃
A-158	4-CH ₂ CF ₃	CH ₂ CF ₃
A-159	4-CH=CH ₂	CH ₂ CF ₃
A-160	4-C ₆ H ₅	CH ₂ CF ₃
A-161	4-C≡CH	CH ₂ CF ₃
A-162	4-C≡CCH ₃	CH ₂ CF ₃
A-163	4-C ₃ H ₅	CH ₂ CF ₃
A-164	4-C(=NOCH ₃)CH ₃	CH ₂ CF ₃
A-165	4-CN	CH ₂ CF ₃

[0137]

No.	(R ^a) ₀₋₃	R ⁴
A-166	-	CH ₂ OCH ₃
A-167	2-F	CH ₂ OCH ₃
A-168	2-Cl	CH ₂ OCH ₃
A-169	2-Br	CH ₂ OCH ₃
A-170	2-CH ₃	CH ₂ OCH ₃
A-171	2-CHF ₂	CH ₂ OCH ₃
A-172	2-CF ₃	CH ₂ OCH ₃
A-173	2-OCH ₃	CH ₂ OCH ₃
A-174	2-OCHF ₂	CH ₂ OCH ₃
A-175	2-OCF ₃	CH ₂ OCH ₃
A-176	2-C ₂ H ₅	CH ₂ OCH ₃
A-177	2-CH ₂ CF ₃	CH ₂ OCH ₃
A-178	2-CH=CH ₂	CH ₂ OCH ₃
A-179	2-C ₆ H ₅	CH ₂ OCH ₃
A-180	2-C≡CH	CH ₂ OCH ₃
A-181	2-C≡CCH ₃	CH ₂ OCH ₃
A-182	2-C ₃ H ₅	CH ₂ OCH ₃
A-183	2-C(=NOCH ₃)CH ₃	CH ₂ OCH ₃
A-184	2-CN	CH ₂ OCH ₃
A-185	3-F	CH ₂ OCH ₃
A-186	3-Cl	CH ₂ OCH ₃
A-187	3-Br	CH ₂ OCH ₃
A-188	3-CH ₃	CH ₂ OCH ₃
A-189	3-CHF ₂	CH ₂ OCH ₃
A-190	3-CF ₃	CH ₂ OCH ₃
A-191	3-OCH ₃	CH ₂ OCH ₃
A-192	3-OCHF ₂	CH ₂ OCH ₃
A-193	3-OCF ₃	CH ₂ OCH ₃
A-194	3-C ₂ H ₅	CH ₂ OCH ₃
A-195	3-CH ₂ CF ₃	CH ₂ OCH ₃
A-196	3-CH=CH ₂	CH ₂ OCH ₃
A-197	3-C ₆ H ₅	CH ₂ OCH ₃
A-198	3-C≡CH	CH ₂ OCH ₃
A-199	3-C≡CCH ₃	CH ₂ OCH ₃
A-200	3-C ₃ H ₅	CH ₂ OCH ₃
A-201	3-C(=NOCH ₃)CH ₃	CH ₂ OCH ₃
A-202	3-CN	CH ₂ OCH ₃
A-203	4-F	CH ₂ OCH ₃
A-204	4-Cl	CH ₂ OCH ₃
A-205	4-Br	CH ₂ OCH ₃
A-206	4-CH ₃	CH ₂ OCH ₃
A-207	4-CHF ₂	CH ₂ OCH ₃
A-208	4-CF ₃	CH ₂ OCH ₃
A-209	4-OCH ₃	CH ₂ OCH ₃

[0138]

No.	(R ^a) ₀₋₃	R ⁴
A-210	4-OCHF ₂	CH ₂ OCH ₃
A-211	4-OCF ₃	CH ₂ OCH ₃
A-212	4-C ₂ H ₅	CH ₂ OCH ₃
A-213	4-CH ₂ CF ₃	CH ₂ OCH ₃
A-214	4-CH=CH ₂	CH ₂ OCH ₃
A-215	4-C ₆ H ₅	CH ₂ OCH ₃
A-216	4-C≡CH	CH ₂ OCH ₃
A-217	4-C≡CCH ₃	CH ₂ OCH ₃
A-218	4-C ₃ H ₅	CH ₂ OCH ₃
A-219	4-C(=NOCH ₃)CH ₃	CH ₂ OCH ₃
A-220	4-CN	CH ₂ OCH ₃
A-221	-	CH ₂ -C(=NOCH ₃)CH ₃
A-222	2-F	CH ₂ -C(=NOCH ₃)CH ₃
A-223	2-Cl	CH ₂ -C(=NOCH ₃)CH ₃
A-224	2-Br	CH ₂ -C(=NOCH ₃)CH ₃
A-225	2-CH ₃	CH ₂ -C(=NOCH ₃)CH ₃
A-226	2-CHF ₂	CH ₂ -C(=NOCH ₃)CH ₃
A-227	2-CF ₃	CH ₂ -C(=NOCH ₃)CH ₃
A-228	2-OCH ₃	CH ₂ -C(=NOCH ₃)CH ₃
A-229	2-OCHF ₂	CH ₂ -C(=NOCH ₃)CH ₃
A-230	2-OCF ₃	CH ₂ -C(=NOCH ₃)CH ₃
A-231	2-C ₂ H ₅	CH ₂ -C(=NOCH ₃)CH ₃
A-232	2-CH ₂ CF ₃	CH ₂ -C(=NOCH ₃)CH ₃
A-233	2-CH=CH ₂	CH ₂ -C(=NOCH ₃)CH ₃
A-234	2-C ₆ H ₅	CH ₂ -C(=NOCH ₃)CH ₃
A-235	2-C≡CH	CH ₂ -C(=NOCH ₃)CH ₃
A-236	2-C≡CCH ₃	CH ₂ -C(=NOCH ₃)CH ₃
A-237	2-C ₃ H ₅	CH ₂ -C(=NOCH ₃)CH ₃
A-238	2-C(=NOCH ₃)CH ₃	CH ₂ -C(=NOCH ₃)CH ₃
A-239	2-CN	CH ₂ -C(=NOCH ₃)CH ₃
A-240	3-F	CH ₂ -C(=NOCH ₃)CH ₃
A-241	3-Cl	CH ₂ -C(=NOCH ₃)CH ₃
A-242	3-Br	CH ₂ -C(=NOCH ₃)CH ₃
A-243	3-CH ₃	CH ₂ -C(=NOCH ₃)CH ₃
A-244	3-CHF ₂	CH ₂ -C(=NOCH ₃)CH ₃
A-245	3-CF ₃	CH ₂ -C(=NOCH ₃)CH ₃
A-246	3-OCH ₃	CH ₂ -C(=NOCH ₃)CH ₃
A-247	3-OCHF ₂	CH ₂ -C(=NOCH ₃)CH ₃
A-248	3-OCF ₃	CH ₂ -C(=NOCH ₃)CH ₃
A-249	3-C ₂ H ₅	CH ₂ -C(=NOCH ₃)CH ₃
A-250	3-CH ₂ CF ₃	CH ₂ -C(=NOCH ₃)CH ₃
A-251	3-CH=CH ₂	CH ₂ -C(=NOCH ₃)CH ₃
A-252	3-C ₆ H ₅	CH ₂ -C(=NOCH ₃)CH ₃
A-253	3-C≡CH	CH ₂ -C(=NOCH ₃)CH ₃

[0139]

No.	(R ^a) ₀₋₃	R ⁴
A-254	3-C≡CCH ₃	CH ₂ -C(=NOCH ₃)CH ₃
A-255	3-C ₃ H ₅	CH ₂ -C(=NOCH ₃)CH ₃
A-256	3-C(=NOCH ₃)CH ₃	CH ₂ -C(=NOCH ₃)CH ₃
A-257	3-CN	CH ₂ -C(=NOCH ₃)CH ₃
A-258	4-F	CH ₂ -C(=NOCH ₃)CH ₃
A-259	4-Cl	CH ₂ -C(=NOCH ₃)CH ₃
A-260	4-Br	CH ₂ -C(=NOCH ₃)CH ₃
A-261	4-CH ₃	CH ₂ -C(=NOCH ₃)CH ₃
A-262	4-CHF ₂	CH ₂ -C(=NOCH ₃)CH ₃
A-263	4-CF ₃	CH ₂ -C(=NOCH ₃)CH ₃
A-264	4-OCH ₃	CH ₂ -C(=NOCH ₃)CH ₃
A-265	4-OCHF ₂	CH ₂ -C(=NOCH ₃)CH ₃
A-266	4-OCF ₃	CH ₂ -C(=NOCH ₃)CH ₃
A-267	4-C ₂ H ₅	CH ₂ -C(=NOCH ₃)CH ₃
A-268	4-CH ₂ CF ₃	CH ₂ -C(=NOCH ₃)CH ₃
A-269	4-CH=CH ₂	CH ₂ -C(=NOCH ₃)CH ₃
A-270	4-C ₆ H ₅	CH ₂ -C(=NOCH ₃)CH ₃
A-271	4-C≡CH	CH ₂ -C(=NOCH ₃)CH ₃
A-272	4-C≡CCH ₃	CH ₂ -C(=NOCH ₃)CH ₃
A-273	4-C ₃ H ₅	CH ₂ -C(=NOCH ₃)CH ₃
A-274	4-C(=NOCH ₃)CH ₃	CH ₂ -C(=NOCH ₃)CH ₃
A-275	4-CN	CH ₂ -C(=NOCH ₃)CH ₃
A-276	-	CHF ₂
A-277	2-F	CHF ₂
A-278	2-Cl	CHF ₂
A-279	2-Br	CHF ₂
A-280	2-CH ₃	CHF ₂
A-281	2-CHF ₂	CHF ₂
A-282	2-CF ₃	CHF ₂
A-283	2-OCH ₃	CHF ₂
A-284	2-OCHF ₂	CHF ₂
A-285	2-OCF ₃	CHF ₂
A-286	2-C ₂ H ₅	CHF ₂
A-287	2-CH ₂ CF ₃	CHF ₂
A-288	2-CH=CH ₂	CHF ₂
A-289	2-C ₆ H ₅	CHF ₂
A-290	2-C≡CH	CHF ₂
A-291	2-C≡CCH ₃	CHF ₂
A-292	2-C ₃ H ₅	CHF ₂
A-293	2-C(=NOCH ₃)CH ₃	CHF ₂
A-294	2-CN	CHF ₂
A-295	3-F	CHF ₂
A-296	3-Cl	CHF ₂
A-297	3-Br	CHF ₂

[0140]

No.	(R ^a) ₀₋₃	R ⁴
A-298	3-CH ₃	CHF ₂
A-299	3-CHF ₂	CHF ₂
A-300	3-CF ₃	CHF ₂
A-301	3-OCH ₃	CHF ₂
A-302	3-OCHF ₂	CHF ₂
A-303	3-OCF ₃	CHF ₂
A-304	3-C ₂ H ₅	CHF ₂
A-305	3-CH ₂ CF ₃	CHF ₂
A-306	3-CH=CH ₂	CHF ₂
A-307	3-C ₆ H ₅	CHF ₂
A-308	3-C≡CH	CHF ₂
A-309	3-C≡CCH ₃	CHF ₂
A-310	3-C ₃ H ₅	CHF ₂
A-311	3-C(=NOCH ₃)CH ₃	CHF ₂
A-312	3-CN	CHF ₂
A-313	4-F	CHF ₂
A-314	4-Cl	CHF ₂
A-315	4-Br	CHF ₂
A-316	4-CH ₃	CHF ₂
A-317	4-CHF ₂	CHF ₂
A-318	4-CF ₃	CHF ₂
A-319	4-OCH ₃	CHF ₂
A-320	4-OCHF ₂	CHF ₂
A-321	4-OCF ₃	CHF ₂
A-322	4-C ₂ H ₅	CHF ₂
A-323	4-CH ₂ CF ₃	CHF ₂
A-324	4-CH=CH ₂	CHF ₂
A-325	4-C ₆ H ₅	CHF ₂
A-326	4-C≡CH	CHF ₂
A-327	4-C≡CCH ₃	CHF ₂
A-328	4-C ₃ H ₅	CHF ₂
A-329	4-C(=NOCH ₃)CH ₃	CHF ₂
A-330	4-CN	CHF ₂
A-331	-	CH ₂ C ₃ H ₅
A-332	2-F	CH ₂ C ₃ H ₅
A-333	2-Cl	CH ₂ C ₃ H ₅
A-334	2-Br	CH ₂ C ₃ H ₅
A-335	2-CH ₃	CH ₂ C ₃ H ₅
A-336	2-CHF ₂	CH ₂ C ₃ H ₅
A-337	2-CF ₃	CH ₂ C ₃ H ₅
A-338	2-OCH ₃	CH ₂ C ₃ H ₅
A-339	2-OCHF ₂	CH ₂ C ₃ H ₅
A-340	2-OCF ₃	CH ₂ C ₃ H ₅
A-341	2-C ₂ H ₅	CH ₂ C ₃ H ₅

[0141]

No.	(R ^a) ₀₋₃	R ⁴
A-342	2-CH ₂ CF ₃	CH ₂ C ₃ H ₅
A-343	2-CH=CH ₂	CH ₂ C ₃ H ₅
A-344	2-C ₆ H ₅	CH ₂ C ₃ H ₅
A-345	2-C≡CH	CH ₂ C ₃ H ₅
A-346	2-C≡CCH ₃	CH ₂ C ₃ H ₅
A-347	2-C ₃ H ₅	CH ₂ C ₃ H ₅
A-348	2-C(=NOCH ₃)CH ₃	CH ₂ C ₃ H ₅
A-349	2-CN	CH ₂ C ₃ H ₅
A-350	3-F	CH ₂ C ₃ H ₅
A-351	3-Cl	CH ₂ C ₃ H ₅
A-352	3-Br	CH ₂ C ₃ H ₅
A-353	3-CH ₃	CH ₂ C ₃ H ₅
A-354	3-CHF ₂	CH ₂ C ₃ H ₅
A-355	3-CF ₃	CH ₂ C ₃ H ₅
A-356	3-OCH ₃	CH ₂ C ₃ H ₅
A-357	3-OCHF ₂	CH ₂ C ₃ H ₅
A-358	3-OCF ₃	CH ₂ C ₃ H ₅
A-359	3-C ₂ H ₅	CH ₂ C ₃ H ₅
A-360	3-CH ₂ CF ₃	CH ₂ C ₃ H ₅
A-361	3-CH=CH ₂	CH ₂ C ₃ H ₅
A-362	3-C ₆ H ₅	CH ₂ C ₃ H ₅
A-363	3-C≡CH	CH ₂ C ₃ H ₅
A-364	3-C≡CCH ₃	CH ₂ C ₃ H ₅
A-365	3-C ₃ H ₅	CH ₂ C ₃ H ₅
A-366	3-C(=NOCH ₃)CH ₃	CH ₂ C ₃ H ₅
A-367	3-CN	CH ₂ C ₃ H ₅
A-368	4-F	CH ₂ C ₃ H ₅
A-369	4-Cl	CH ₂ C ₃ H ₅
A-370	4-Br	CH ₂ C ₃ H ₅
A-371	4-CH ₃	CH ₂ C ₃ H ₅
A-372	4-CHF ₂	CH ₂ C ₃ H ₅
A-373	4-CF ₃	CH ₂ C ₃ H ₅
A-374	4-OCH ₃	CH ₂ C ₃ H ₅
A-375	4-OCHF ₂	CH ₂ C ₃ H ₅
A-376	4-OCF ₃	CH ₂ C ₃ H ₅
A-377	4-C ₂ H ₅	CH ₂ C ₃ H ₅
A-378	4-CH ₂ CF ₃	CH ₂ C ₃ H ₅
A-379	4-CH=CH ₂	CH ₂ C ₃ H ₅
A-380	4-C ₆ H ₅	CH ₂ C ₃ H ₅
A-381	4-C≡CH	CH ₂ C ₃ H ₅
A-382	4-C≡CCH ₃	CH ₂ C ₃ H ₅
A-383	4-C ₃ H ₅	CH ₂ C ₃ H ₅
A-384	4-C(=NOCH ₃)CH ₃	CH ₂ C ₃ H ₅
A-385	4-CN	CH ₂ C ₃ H ₅

[0142]

No.	(R ^a) ₀₋₃	R ⁴
A-386	2-F, 3-F	CH ₃
A-387	2-F, 4-F	CH ₃
A-388	2-F, 5-F	CH ₃
A-389	3-F, 4-F	CH ₃
A-390	3-F, 5-F	CH ₃
A-391	2-Cl, 3-Cl	CH ₃
A-392	2-Cl, 4-Cl	CH ₃
A-393	2-Cl, 5-Cl	CH ₃
A-394	3-Cl, 4-Cl	CH ₃
A-395	3-Cl, 5-Cl	CH ₃
A-396	2-CH ₃ , 3-CH ₃	CH ₃
A-397	2-CH ₃ , 4-CH ₃	CH ₃
A-398	2-CH ₃ , 5-CH ₃	CH ₃
A-399	3-CH ₃ , 4-CH ₃	CH ₃
A-400	3-CH ₃ , 5-CH ₃	CH ₃
A-401	2-OCH ₃ , 3-OCH ₃	CH ₃
A-402	2-OCH ₃ , 4-OCH ₃	CH ₃
A-403	2-OCH ₃ , 5-OCH ₃	CH ₃
A-404	3-OCH ₃ , 4-OCH ₃	CH ₃
A-405	3-OCH ₃ , 5-OCH ₃	CH ₃
A-406	2-CF ₃ , 3-CF ₃	CH ₃
A-407	2-CF ₃ , 4-CF ₃	CH ₃
A-408	2-CF ₃ , 5-CF ₃	CH ₃
A-409	3-CF ₃ , 4-CF ₃	CH ₃
A-410	3-CF ₃ , 5-CF ₃	CH ₃
A-411	2-OCF ₃ , 3-OCF ₃	CH ₃
A-412	2-OCF ₃ , 4-OCF ₃	CH ₃
A-413	2-OCF ₃ , 5-OCF ₃	CH ₃
A-414	3-OCF ₃ , 4-OCF ₃	CH ₃
A-415	3-OCF ₃ , 5-OCF ₃	CH ₃
A-416	2-F, 3-Cl	CH ₃
A-417	2-F, 4-Cl	CH ₃
A-418	2-F, 5-Cl	CH ₃
A-419	3-F, 4-Cl	CH ₃
A-420	3-F, 5-Cl	CH ₃
A-421	2-CH ₃ , 3-Cl	CH ₃
A-422	2-CH ₃ , 4-Cl	CH ₃
A-423	2-CH ₃ , 5-Cl	CH ₃
A-424	3-CH ₃ , 4-Cl	CH ₃
A-425	3-CH ₃ , 5-Cl	CH ₃
A-426	2-OCH ₃ , 3-Cl	CH ₃
A-427	2-OCH ₃ , 4-Cl	CH ₃
A-428	2-OCH ₃ , 5-Cl	CH ₃
A-429	3-OCH ₃ , 4-Cl	CH ₃

[0143]

No.	(R ^a) ₀₋₃	R ⁴
A-430	3-OCH ₃ , 5-Cl	CH ₃
A-431	2-CF ₃ , 3-Cl	CH ₃
A-432	2-CF ₃ , 4-Cl	CH ₃
A-433	2-CF ₃ , 5-Cl	CH ₃
A-434	3-CF ₃ , 4-Cl	CH ₃
A-435	3-CF ₃ , 5-Cl	CH ₃
A-436	2-OCF ₃ , 3-Cl	CH ₃
A-437	2-OCF ₃ , 4-Cl	CH ₃
A-438	2-OCF ₃ , 5-Cl	CH ₃
A-439	3-OCF ₃ , 4-Cl	CH ₃
A-440	3-OCF ₃ , 5-Cl	CH ₃
A-441	2-F, 3-CH ₃	CH ₃
A-442	2-F, 4-CH ₃	CH ₃
A-443	2-F, 5-CH ₃	CH ₃
A-444	3-F, 4-CH ₃	CH ₃
A-445	3-F, 5-CH ₃	CH ₃
A-446	2-Cl, 3-CH ₃	CH ₃
A-447	2-Cl, 4-CH ₃	CH ₃
A-448	2-Cl, 5-CH ₃	CH ₃
A-449	3-Cl, 4-CH ₃	CH ₃
A-450	3-Cl, 5-CH ₃	CH ₃
A-451	2-OCH ₃ , 3-CH ₃	CH ₃
A-452	2-OCH ₃ , 4-CH ₃	CH ₃
A-453	2-OCH ₃ , 5-CH ₃	CH ₃
A-454	3-OCH ₃ , 4-CH ₃	CH ₃
A-455	3-OCH ₃ , 5-CH ₃	CH ₃
A-456	2-CF ₃ , 3-CH ₃	CH ₃
A-457	2-CF ₃ , 4-CH ₃	CH ₃
A-458	2-CF ₃ , 5-CH ₃	CH ₃
A-459	3-CF ₃ , 4-CH ₃	CH ₃
A-460	3-CF ₃ , 5-CH ₃	CH ₃
A-461	2-OCF ₃ , 3-CH ₃	CH ₃
A-462	2-OCF ₃ , 4-CH ₃	CH ₃
A-463	2-OCF ₃ , 5-CH ₃	CH ₃
A-464	3-OCF ₃ , 4-CH ₃	CH ₃
A-465	3-OCF ₃ , 5-CH ₃	CH ₃
A-466	2-F, 3-OCH ₃	CH ₃
A-467	2-F, 4-OCH ₃	CH ₃
A-468	2-F, 5-OCH ₃	CH ₃
A-469	3-F, 4-OCH ₃	CH ₃
A-470	3-F, 5-OCH ₃	CH ₃
A-471	2-Cl, 3-OCH ₃	CH ₃
A-472	2-Cl, 4-OCH ₃	CH ₃
A-473	2-Cl, 5-OCH ₃	CH ₃

[0144]

No.	(R ^a) ₀₋₃	R ⁴
A-474	3-Cl, 4-OCH ₃	CH ₃
A-475	3-Cl, 5-OCH ₃	CH ₃
A-476	2-CH ₃ , 3-OCH ₃	CH ₃
A-477	2-CH ₃ , 4-OCH ₃	CH ₃
A-478	2-CH ₃ , 5-OCH ₃	CH ₃
A-479	3-CH ₃ , 4-OCH ₃	CH ₃
A-480	3-CH ₃ , 5-OCH ₃	CH ₃
A-481	2-CF ₃ , 3-OCH ₃	CH ₃
A-482	2-CF ₃ , 4-OCH ₃	CH ₃
A-483	2-CF ₃ , 5-OCH ₃	CH ₃
A-484	3-CF ₃ , 4-OCH ₃	CH ₃
A-485	3-CF ₃ , 5-OCH ₃	CH ₃
A-486	2-OCF ₃ , 3-OCH ₃	CH ₃
A-487	2-OCF ₃ , 4-OCH ₃	CH ₃
A-488	2-OCF ₃ , 5-OCH ₃	CH ₃
A-489	3-OCF ₃ , 4-OCH ₃	CH ₃
A-490	3-OCF ₃ , 5-OCH ₃	CH ₃
A-491	2-F, 3-CF ₃	CH ₃
A-492	2-F, 4-CF ₃	CH ₃
A-493	2-F, 5-CF ₃	CH ₃
A-494	3-F, 4-CF ₃	CH ₃
A-495	3-F, 5-CF ₃	CH ₃
A-496	2-Cl, 3-CF ₃	CH ₃
A-497	2-Cl, 4-CF ₃	CH ₃
A-498	2-Cl, 5-CF ₃	CH ₃
A-499	3-Cl, 4-CF ₃	CH ₃
A-500	3-Cl, 5-CF ₃	CH ₃
A-501	2-CH ₃ , 3-CF ₃	CH ₃
A-502	2-CH ₃ , 4-CF ₃	CH ₃
A-503	2-CH ₃ , 5-CF ₃	CH ₃
A-504	3-CH ₃ , 4-CF ₃	CH ₃
A-505	3-CH ₃ , 5-CF ₃	CH ₃
A-506	2-OCH ₃ , 3-CF ₃	CH ₃
A-507	2-OCH ₃ , 4-CF ₃	CH ₃
A-508	2-OCH ₃ , 5-CF ₃	CH ₃
A-509	3-OCH ₃ , 4-CF ₃	CH ₃
A-510	3-OCH ₃ , 5-CF ₃	CH ₃
A-511	2-OCF ₃ , 3-CF ₃	CH ₃
A-512	2-OCF ₃ , 4-CF ₃	CH ₃
A-513	2-OCF ₃ , 5-CF ₃	CH ₃
A-514	3-OCF ₃ , 4-CF ₃	CH ₃
A-515	3-OCF ₃ , 5-CF ₃	CH ₃
A-516	2-F, 3-OCF ₃	CH ₃
A-517	2-F, 4-OCF ₃	CH ₃

[0145]

No.	(R ^a) ₀₋₃	R ⁴
A-518	2-F, 5-OCF ₃	CH ₃
A-519	3-F, 4-OCF ₃	CH ₃
A-520	3-F, 5-OCF ₃	CH ₃
A-521	2-Cl, 3-OCF ₃	CH ₃
A-522	2-Cl, 4-OCF ₃	CH ₃
A-523	2-Cl, 5-OCF ₃	CH ₃
A-524	3-Cl, 4-OCF ₃	CH ₃
A-525	3-Cl, 5-OCF ₃	CH ₃
A-526	2-CH ₃ , 3-OCF ₃	CH ₃
A-527	2-CH ₃ , 4-OCF ₃	CH ₃
A-528	2-CH ₃ , 5-OCF ₃	CH ₃
A-529	3-CH ₃ , 4-OCF ₃	CH ₃
A-530	3-CH ₃ , 5-OCF ₃	CH ₃
A-531	2-OCH ₃ , 3-OCF ₃	CH ₃
A-532	2-OCH ₃ , 4-OCF ₃	CH ₃
A-533	2-OCH ₃ , 5-OCF ₃	CH ₃
A-534	3-OCH ₃ , 4-OCF ₃	CH ₃
A-535	3-OCH ₃ , 5-OCF ₃	CH ₃
A-536	2-CF ₃ , 3-OCF ₃	CH ₃
A-537	2-CF ₃ , 4-OCF ₃	CH ₃
A-538	2-CF ₃ , 5-OCF ₃	CH ₃
A-539	3-CF ₃ , 4-OCF ₃	CH ₃
A-540	3-CF ₃ , 5-OCF ₃	CH ₃
A-541	3,4,5-F ₃ *	CH ₃
A-542	2,4,6-F ₃	CH ₃
A-543	3,4,5-Cl ₃	CH ₃
A-544	2,4,6-Cl ₃	CH ₃
A-545	3,4,5-(CH ₃) ₃	CH ₃
A-546	2,4,6-(CH ₃) ₃	CH ₃
A-547	3,4,5-(OCH ₃) ₃	CH ₃
A-548	2,4,6-(OCH ₃) ₃	CH ₃
A-549	3,4,5-(CF ₃) ₃	CH ₃
A-550	2,4,6-(CF ₃) ₃	CH ₃
A-551	3,4,5-(OCF ₃) ₃	CH ₃
A-552	2,4,6-(OCF ₃) ₃	CH ₃

[0146]

[0147]

* 은 위치 3,4 및 5 에서의 3 플루오로를 나타낸다.

[0148]

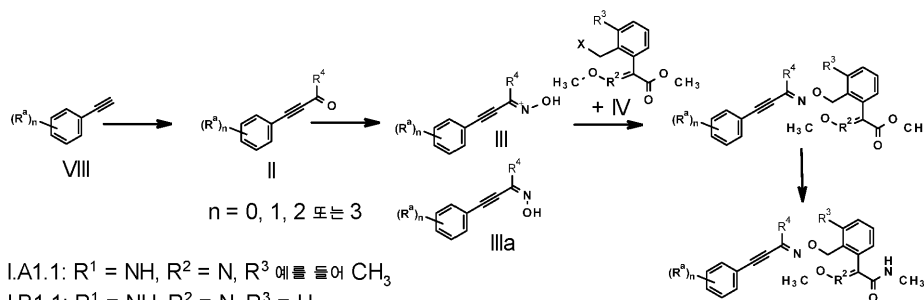
화합물은 공지된 선행 기술 방법 (예를 들어 EP 463488) 에 의해, 그리고 유리하게는 하기 모식도 1 ~ 4 에서 및 이러한 출처의 실험 부분에서 나타낸 합성에 의해 수득될 수 있다.

[0149]

화합물 I 을 제조하기 위한 적합한 방법을 모식도 1 에서 예시한다.

[0150]

모식도 1:



[0151]

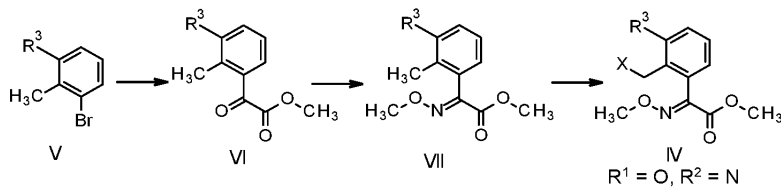
이는 상응하는 아세틸렌 화합물 VIII 로부터 케톤 II 를 형성시키는 것으로 시작한다.

아세틸렌 양성자를

-78℃ 의 반응 온도에서 테트라히드로푸란 (THF) 또는 2-메틸-THF 와 같은 용매 중 n-부틸 리튬과 같은 염기에 의해 먼저 추출한 후, -78℃ 에서 BF₃-디에틸 에테레이트의 존재 하에 에틸 아세테이트와 같은 친전자체로 이를 케칭한다. 케톤 II 의 상응하는 옥심으로의 전환을, 약 10 내지 25℃ 의 실온에서 2 내지 4 시간 동안, 바람직하게는 약 15℃ 에서 메탄올-물 혼합물과 같은 극성 용매 중 히드록실아민 히드로클로라이드 및 피리딘 또는 소듐 아세테이트와 같은 염기를 사용하여 수행한다. 반응은 E-옥심 III 및 Z-옥심 IIIa 의 혼합물을 제공한다. 약 24℃ 의 실온 (RT) 에서 12 시간 동안 소듐 히드라이드, 세슘 카르보네이트 또는 포타슘 카르보네이트와 같은 염기를 사용하고 디메틸 포름아미드 (DMF) 또는 아세토니트릴과 같은 유기 용매를 사용하여, 바람직하게는 세슘 카르보네이트를 염기로서 및 아세토니트릴 (AcN) 을 용매로서 사용하여 염기성 조건 하에 E/Z 옥심 혼합물 (III 및 IIIa) 을 중간체 IV (여기서, X 는 이탈기 예컨대 할로젠, 톨루엔-메탄술포네이트이고, 바람직하게는 X 는 Cl 또는 Br 임) 와 반응시킨다. R¹ 이 O 인 생성 에스테르 화합물 I.2 는, RT 에서 THF 를 용매로서 사용하여 메틸 아민 (바람직하게는 40% 수용액) 과의 반응에 의해 R¹ 이 NH 인 식 I.1 의 아미드로 전환될 수 있다.

[0153] 중간체 IV 를 제조하기 위한 일반적 방법을 모식도 2 에서 나타낸다.

[0154] 모식도 2:



[0155]

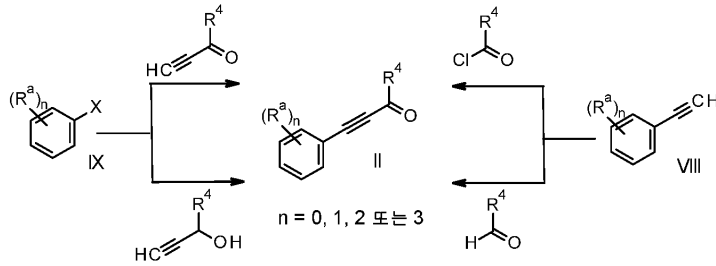
[0156] 화합물 VI 은, 리튬-할로젠 교환에 의해 또는 그리냐르 시약을 생성시키고 용매의 존재 하에 디메틸 옥살레이트 또는 클로로메틸 옥살레이트와의 추가 반응에 의해 화합물 V 로부터 수득될 수 있다. 바람직한 용매는 THF 또는 2-메틸-THF 이고, 온도는 -70 내지 -78℃ 일 수 있다. 중간체 VI 의 중간체 VII 로의 전환은, 메탄올과 같은 극성 용매 중 N-메틸히드록실아민 히드로클로라이드 및 염기 예컨대 피리딘 또는 소듐 아세테이트를 사용하여 달성될 수 있다. 반응 온도는 바람직하게는 약 65℃ 이다. E/Z 혼합물이 통상 수득된다. 이들 이성질체는 당업계에 공지된 정제 기법 (예를 들어, 컬럼 크로마토그래피, 결정화) 에 의해 분리될 수 있다.

중간체 VII 의 브롬화는 R¹ 이 O 이고 R² = N 이며 X 가 Br 인 원하는 중간체 화합물 IV 를 제공한다. 중간체 VII 과 N-브로모숙신이미드의 이러한 반응은, 약 70 내지 100℃ 의 온도에서 카본 테트라클로라이드, 클로로벤젠 및 아세토니트릴과 같은 용매 중에서, 1,1'-아조비스(시클로헥산카르보니트릴) 또는 아조비스이소부티로니트릴과 같은 라디칼 개시제를 사용하여 실행된다. 바람직한 라디칼 개시제는 1,1'-아조비스(시클로헥산카르보니트릴) 이고, 바람직한 용매는 클로로벤젠이며 바람직한 온도는 80℃ 이다.

[0157] 상이한 치환기 R³ 을 함유하는 화합물의 합성은 모식도 2 에서와 유사한 순서를 따르며, 여기서 R³ 은 브로모이다. 중간체 III 과 중간체 IV 의 커플링 (여기서, R³ 은 브로모임) 은 상기 기재된 바와 같은 화합물 I 을 제공한다. 표준 화학 반응, 예컨대 스즈키 (Suzuki) 또는 스틸 (Stille) 반응을 사용하여, 브로모 기는 예를 들어 다른 R³ 치환기 예컨대 시클로알킬, 알콕시 및 알케닐로 전환될 수 있다. 예를 들어 에테닐의 추가적인 변형은 다른 R³ 치환기 예컨대 에틸, CN 및 할로알킬을 갖는 화합물 I 을 제공한다.

[0158] 케톤 II 의 제조는 또한 다른 공지된 방법 (모식도 3) 을 사용하여 실행될 수 있다.

[0159] 모식도 3:



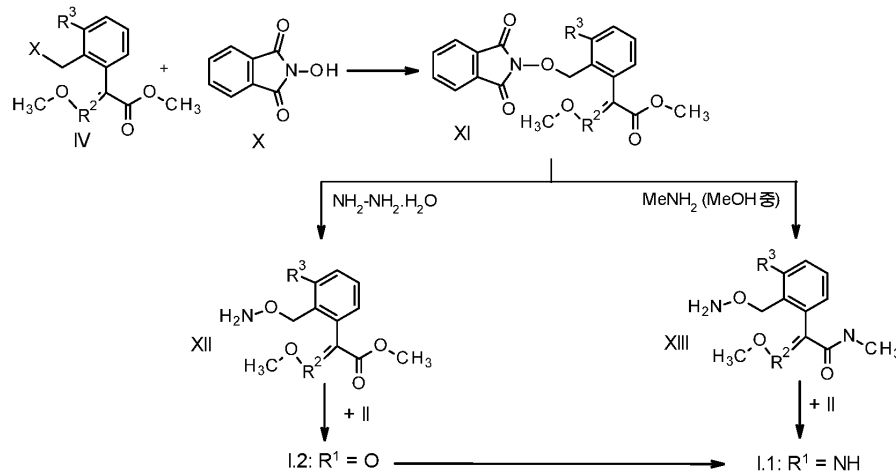
[0160]

[0161] 산 클로라이드와의 말단 아세틸렌 화합물 VIII 의 팔라듐 및/또는 구리-촉매화된 교차 커플링을 통상 적용한다 (J. Org. Chem. 2004, 69, 1615). 또 다른 가능성은 말단 알킨 VIII 의 염기-촉매화된 알루미늄화 (alumination) 의 형성, 이후 이의 산 클로라이드와의 반응에 의한 것이다 (J. Org. Chem. 2005, 70, 6126-6128). 대안적으로, 케톤 II 는 아세틸렌 양성자의 추출, 이후 이의 알데히드로의 켄칭 및 후속적인 알코올의 산화에 의해 아세틸렌 VIII 로부터 수득될 수 있다 (Org. Biomol. Chem. 2018, 16, 6659). 케톤 II 는 또한, 아릴 할라이드 IX 와 말단 알킨 (Chem. Cat. Chem. 2015, 7, 3266) 또는 알킬닐 알코올의 팔라듐 및 구리-촉매화된 교차 커플링, 이후 알코올의 산화 (Adv. Synth. Cat. 2017, 22, 4062) 에 의해 전구체 IX (여기서 X 는 할로젠, 바람직하게는 요오드임) 로부터 수득될 수 있다.

[0162] 화합물 VIII 은 일반적으로 시판되거나, 다르게는 선행 기술에서 공지된 방법을 사용하여 이용가능하다 (Org. Lett. 2019, 21, 3990).

[0163] 화합물 I 의 제조를 위한 또 다른 일반적 방법을 모식도 4 에서 나타낸다.

[0164] 모식도 4:



[0165]

[0166] 중간체 IV 를, DMF 중 트리에틸아민과 같은 염기를 사용하여 *N*-히드록시숙신이미드 X 와 반응시킨다. 반응 온도는 통상 50 내지 70°C, 바람직하게는 약 70°C 이다. 상응하는 *O*-벤질히드록실 아민 XII 로의 전환은, 바람직하게는 약 25°C 에서 용매로서 메탄올 중 히드라진 히드레이트를 사용하여, 프탈이미드 기의 제거를 통해 달성된다. 대안적으로, 약 25°C 에서 용매로서 메탄올 중 메틸 아민을 사용하는 프탈이미드 기의 제거는 중간체 XIII 을 제공할 수 있다. 중간체 XII 및 XIII 각각은 약 50 내지 65°C 에서 용매로서 메탄올 중 아세트산 또는 피리딘을 사용하여 케톤 II 로 축합될 수 있다. 대안적으로, 축합은 또한 약 70°C 에서 용매로서 THF 를 사용하여 티타늄 (IV) 에톡사이드 (Ti(OEt)₄) 로 실행될 수 있다. 원하는 생성물은 통상 원치 않는 이성질체를 동반하는데, 이는 예를 들어 컬럼 크로마토그래피, 결정화에 의해 제거될 수 있다.

[0167] 상기 나타낸 모식도 1 ~ 4 는 R³ 이 메틸 옥심 측쇄에 대해 오르토 위치에 있는 화합물 I 의 합성을 기재하지만, R³ 이 페닐 고리의 상이한 위치에 있는 상응하는 화합물에 대해서도 마찬가지로 적용될 수 있다.

[0168] 화합물 I 및 이의 조성물 각각은, 특히 플라스모디오포로마이세테스 (Plasmodiophoromycetes), 페로노스포로마이세테스 (Peronosporomycetes) (동의어 난균류 (Oomycetes)), 호상균강 (Chytridiomycetes), 접합균류

(Zygomycetes), 자낭균류 (Ascomycetes), 담자균류 (Basidiomycetes) 및 듀테로마이세테스 (Deuteromycetes) (동어의 불완전균류 (Fungi imperfecti)) 의 클래스로부터의 토양 매개 진균을 포함하는 광범위한 스펙트럼의 식물병원성 진균에 대해 효과적인 살진균제로서 적합하다. 이들은 엽면 살진균제, 종자 드레싱을 위한 살진균제 및 토양 살진균제와 같이 작물 보호에서 사용될 수 있다.

- [0169] 화합물 I 및 이의 조성물은 바람직하게는 다양한 재배 식물, 예컨대 곡류, 예를 들어 밀, 호밀, 보리, 라이밀, 귀리 또는 쌀; 비트, 과일, 콩과 식물 예컨대 대두, 유지 식물, 조롱박, 섬유 식물, 감귤류 과일, 채소류, 녹나무과 식물, 에너지 및 원료 식물, 옥수수; 담배; 견과; 커피; 차; 바나나; 덩굴 식물 (생식용 포도 및 포도즙 포도 덩굴); 천연 고무 식물; 또는 장식용 및 산림 식물; 식물 번식재, 예컨대 종자; 및 이들 식물의 작물 재료에서의 식물병원성 진균의 방제에 유용하다.
- [0170] 본 발명에 따르면 상기 재배 식물 모두는, 겨울 및 봄 품종, 특히 밀 및 보리와 같은 곡류, 뿐만 아니라 유채, 예를 들어 겨울 밀, 봄 밀, 겨울 보리 등을 포함하지만 이에 제한되지 않는 각각의 재배 식물에 속하는 모든 종, 아종, 변종, 품종 및/또는 잡종을 포함하는 것으로 이해된다.
- [0171] 옥수수는 또한 인디언 옥수수 또는 옥수수 (*Zea mays*) 로 알려져 있으며, 이는 필드 옥수수 및 스위트 옥수수와 같은 모든 종류의 옥수수를 포함한다. 본 발명에 따르면, 모든 대두 재배종 또는 품종은 특히 불확정 및 확정 재배종 또는 품종으로 구성된다.
- [0172] 용어 "재배 식물" 은 식물에 새로운 형질을 제공하거나 이미 존재하는 형질을 변형시키기 위해 돌연변이유발 또는 유전 공학에 의해 변형된 식물을 포함하는 것으로 이해되어야 한다.
- [0173] 화합물 I 및 이의 조성물 각각은 하기 식물 질환의 원인 인자를 방제하는데 특히 적합하다: 대두 및 곡류에서의 녹병 (예를 들어, 대두에서의 파코프소라 파치리지 (*Phakopsora pachyrhizi*) 및 *P. 메이브로미아에* (*P. meibomiae*); 밀에서의 폭시니아 트리티시 (*Puccinia tritici*) 및 *P. 스트리이포르미스* (*P. striiformis*)); 특수 작물, 대두, 유채 및 해바라기에서의 곰팡이 (예를 들어, 스트로베리 및 덩굴에서의 보트리티스 시네레아 (*Botrytis cinerea*), 유채, 해바라기 및 대두에서의 스크레로티니아 스크레로티움 (*Sclerotinia sclerotiorum*), *S. 마이너* (*S. minor*) 및 *S. 롤프시이* (*S. rolfsii*)); 곡류에서의 푸사리움 질환 (예를 들어, 밀에서의 푸사리움 컬모룸 (*Fusarium culmorum*) 및 *F. 그라미네아룸* (*F. graminearum*)); 특수 작물에서의 노균병 (예를 들어, 덩굴에서의 플라스모파라 비티콜라 (*Plasmopara viticola*), 감자에서의 피토프토라 인페스탄스 (*Phytophthora infestans*)); 특수 작물 및 곡류에서의 흰가루병 (예를 들어, 덩굴에서의 운시놀라 네카토르 (*Uncinula necator*), 다양한 특수 작물에서의 에리시페 종 (*Erysiphe spp.*), 곡류에서의 블루메리아 그라미니스 (*Blumeria graminis*)); 및 곡류, 대두 및 옥수수에서의 잎 반점 (예를 들어, 곡류에서의 세프토리아 트리티시 (*Septoria tritici*) 및 *S. 노도룸* (*S. nodorum*), 대두에서의 *S. 글리시네스* (*S. glycines*), 옥수수 및 대두에서의 세르코스포라 종 (*Cercospora spp.*)).
- [0174] 화합물 I 및 이의 조성물 각각은, Qo 억제제에 대한 내성을 부여하는 미토콘드리아 시토크롬 b 단백질 내 아미노산 치환 F129L 을 함유하는 식물병원성 진균을 퇴치하기에 특히 적합하다.
- [0175] 시토크롬 b (cytb, 또한 cob 로서 언급됨) 유전자 내 돌연변이 F129L 은 시토크롬 b 단백질 (Cytb) 내 위치 129 에서 F (페닐알라닌) 로부터 L (류신) 로의 단일 아미노산 치환을 초래하는 시토크롬 b 유전자에서, "L" 을 인코딩하는 코돈 (류신; 예를 들어, TTA, TTG, TTT, CTT, CTC, CTA 또는 CTG) 을 유도하는 "F" 를 인코딩하는 코돈 129 의 뉴클레오티드 (페닐알라닌; 예를 들어, TTT 또는 TTC) 의 임의의 치환, 예를 들어, 코돈 129 의 첫번째 뉴클레오티드의 'T' 에서 'C' 로의 치환 (TTT 에서 CTT 로) 을 의미할 것이다. 본 발명에서, 시토크롬 b 유전자 내의 돌연변이 F129L 은 시토크롬 b 단백질 내의 F (페닐알라닌) 에서 L (류신) 로의 위치 129 에서의 단일 아미노산 치환 (F129L) 인 것으로 이해될 것이다.
- [0176] 많은 다른 식물병원성 진균은 녹병, 특히 대두 녹병 (파코프소라 파치리지 (*Phakopsora pachyrhizi*) 및 파코프소라 메이브로미아에 (*Phakopsora meibromiae*)) 뿐만 아니라 알테르나리아 (*Alternaria*), 피레노포라 (*Pyrenophora*) 및 리조크토니아 (*Rhizoctonia*) 속으로부터의 진균과 같은 Qo 억제제에 대한 내성을 부여하는 시토크롬 b 유전자 내 F129L 돌연변이를 획득하였다.
- [0177] 바람직한 진균 종은 알테르나리아 솔라니 (*Alternaria solani*), 파코프소라 파치리지 (*Phakopsora pachyrhizi*), 파코프소라 메이브로미아에 (*Phakopsora meibromiae*), 피레노포라 테레스 (*Pyrenophora teres*), 피레노포라 트리티시-레펜티스 (*Pyrenophora tritici-repentis*) 및 리조크토니아 솔라니 (*Rhizoctonia solani*); 특히 파코프소라 파치리지 (*Phakopsora pachyrhizi*) 이다.

- [0178] 한 양태에서, 본 발명은 Qo 억제제에 대한 내성을 부여하는 미토콘드리아 시토크롬 b 단백질 내 아미노산 치환 F129L 을 함유하는 식물병원성 진균에 의해 감염되기 쉽고/쉽거나 공격받는 식물을 보호하는 방법에 관한 것으로, 이 방법은 적어도 하나의 식 I 의 화합물 또는 적어도 하나의 식 I 의 화합물을 포함하는 조성물을, 상기 식물에 적용하는 단계, 상기 식물의 식물 번식체에 처리하는 단계 및/또는 상기 식물병원성 진균에 적용하는 단계를 포함한다.
- [0179] 또 다른 구현예에 따르면, 식물병원성 진균의 퇴치 방법은 a) Qo 억제제에 대한 내성을 부여하는 미토콘드리아 시토크롬 b 단백질 내 아미노산 치환 F129L 을 함유하는 식물병원성 진균, 또는 본원에 정의된 바와 같은 식물 병원성 진균으로부터 병에 걸릴 위험이 있는 물질, 식물, 토양 또는 종자를 식별하는 단계, 및 b) 상기 진균 또는 물질, 식물, 토양 또는 식물 번식체를 유효량의 적어도 하나의 식 I 의 화합물, 또는 이를 포함하는 조성물로 처리하는 단계를 포함한다.
- [0180] 용어 "Qo 억제제에 대한 내성을 부여하는 미토콘드리아 시토크롬 b 단백질 내 아미노산 치환 F129L 을 함유하는 식물병원성 진균" 은 방제하고자 하는 진균 단리물의 적어도 10%, 바람직하게는 진균의 적어도 30%, 보다 바람직하게는 적어도 50%, 보다 더 바람직하게는 적어도 75%, 가장 바람직하게는 90 내지 100%; 특히 95 내지 100% 가 Qo 억제제에 대한 내성을 부여하는 미토콘드리아 시토크롬 b 단백질 내 이러한 F129L 치환을 함유한다는 것으로 이해되어야 한다.
- [0181] 화합물 I 및 이의 조성물 각각은 또한 저장된 생성물 또는 수확물의 보호 및 물질의 보호시 유해한 미생물의 방제에 적합하다.
- [0182] 화합물 I 은 살진균적 유효량의 활성 물질과 진균, 진균 공격으로부터 보호하고자 하는 식물, 식물 번식체, 예컨대 종자; 토양, 표면, 물질 또는 공간을 처리함으로써 그 자체로 또는 조성물의 형태로 사용된다. 적용은 진균에 의한 식물, 식물 번식체, 예컨대 종자; 토양, 표면, 물질 또는 공간의 감염 전 및 후 둘 모두에 실행될 수 있다.
- [0183] 농약 조성물은 살진균적 유효량의 화합물 I 을 포함한다. 용어 "살진균적 유효량" 은 재배 식물에서의 또는 저장된 생성물 또는 수확물 또는 물질의 보호시 유해한 진균 방제에 충분하고, 처리된 식물, 처리된 저장된 생성물 또는 수확물, 또는 처리된 물질에 실질적 손상을 초래하지 않는 조성물 또는 화합물 I 의 양을 의미한다. 이러한 양은 광범위하게 달라질 수 있으며, 다양한 인자, 예컨대 방제하고자 하는 진균 종, 처리된 재배 식물, 저장된 생성물, 수확물 또는 물질, 기후 조건 및 사용된 특정 화합물 I 에 따라 좌우된다.
- [0184] 식물 번식체는 화합물 I 그 자체 또는 적어도 하나의 화합물 I 을 포함하는 조성물로 식물식수 또는 이식시 또는 그 전에 예방적으로 처리될 수 있다.
- [0185] 식물 보호에 이용되는 경우, 적용되는 활성 물질의 양은, 원하는 효과의 유형에 따라, 0.001 내지 2 kg/ha, 바람직하게는 0.005 내지 2 kg/ha, 보다 바람직하게는 0.05 내지 0.9 kg/ha, 특히 0.1 내지 0.75 kg/ha 이다.
- [0186] 예를 들어 분말살포, 코팅 또는 드레칭에 의한, 종자와 같은 식물 번식체의 처리에서, 일반적으로 100 kg 의 식물 번식체 (바람직하게는 종자) 당 0.1 내지 1000 g, 바람직하게는 1 내지 1000 g, 보다 바람직하게는 1 내지 100 g, 가장 바람직하게는 5 내지 100 g 의 활성 물질의 양이 요구된다.
- [0187] 사용자는 통상 예비주입 장치, 배낭형 분무기, 분무 탱크, 분무 비행장치, 또는 관개 시스템으로부터 농약 조성물을 적용한다. 통상, 농약 조성물은 물, 완충제 및/또는 추가의 보조제로 원하는 적용 농도로 제조되며, 그에 따라 본 발명에 따른 즉시 사용가능 분무액 또는 농약 조성물이 수득된다. 통상, 농업 유용 면적의 1 헥타르 당 20 내지 2000 리터, 바람직하게는 50 내지 400 리터의 즉시 사용가능 분무액이 적용된다.
- [0188] 화합물 I, 그의 N-옥시드 및 염은 통상적인 유형의 농약 조성물, 예를 들어 용액, 에멀전, 현탁액, 분진, 분말, 페이스트, 과립, 압착물, 캡슐 및 이의 혼합물로 전환될 수 있다. 조성물 유형에 대한 예 ("Catalogue of pesticide formulation types and international coding system", Technical Monograph No. 2, 6th Ed. May 2008, CropLife International 을 또한 참조) 는 현탁액 (예를 들어 SC, OD, FS), 유화성 농축물 (예를 들어 EC), 에멀전 (예를 들어 EW, EO, ES, ME), 캡슐 (예를 들어 CS, ZC), 페이스트, 파스티유, 습윤성 분말 또는 분진 (예를 들어 WP, SP, WS, DP, DS), 압착물 (예를 들어 BR, TB, DT), 과립 (예를 들어 WG, SG, GR, FG, GG, MG), 살근충 물품 (예를 들어 LN), 뿐만 아니라 종자와 같은 식물 번식체의 처리를 위한 겔 제형 (예를 들어 GF) 이다. 조성물은 Mollet and Grubemann, Formulation technology, Wiley VCH, Weinheim, 2001; 또는 Knowles, New developments in crop protection product formulation, Agrow Reports DS243, T&F Informa,

London, 2005 에 의해 기재된 바와 같은 공지된 방식으로 제조된다. 본 발명은 또한 보조제 및 적어도 하나의 화합물 I 을 포함하는 농약 조성물에 관한 것이다. 적합한 보조제는 용매, 액체 담체, 고체 담체 또는 충전제, 계면활성제, 분산제, 유화제, 습윤제, 아주반트 (adjuvant), 가용화제, 침투 촉진제, 보호성 콜로이드, 접착제, 증점제, 보습제, 기피제, 유인제, 섭식 자극제 (feeding stimulant), 상용화제, 살균제, 동결 방지제, 소포제, 착색제, 접착제 및 결합제이다.

- [0189] 살진균제로서의 사용 형태로의 화합물 I 또는 이를 포함하는 조성물을 다른 살진균제와 혼합하는 것은 많은 경우에 활성의 살진균제 스펙트럼의 확장 또는 살진균제 내성 발달의 방지를 초래한다. 또한 많은 경우, 상승작용 효과가 수득된다 (상승작용 혼합물).
- [0190] 화합물 I 과 함께 사용될 수 있는, 살충제 II 의 하기 목록은, 가능한 조합물을 예시하기 위한 것으로 의도되지만 이에 제한되는 것은 아니다:
- [0191] A) 호흡 억제제
- [0192] - Q₀ 위치에서의 복합체 III 의 억제제: 아족시스트로빈 (A.1.1), 쿠메톡시스트로빈 (A.1.2), 코우목시스트로빈 (A.1.3), 디목시스트로빈 (A.1.4), 에네스트로부린 (A.1.5), 페나민스트로빈 (A.1.6), 페녹시스트로빈/플루페녹시스트로빈 (A.1.7), 플루옥사스트로빈 (A.1.8), 크레속심-메틸 (A.1.9), 만테스트로빈 (A.1.10), 메토미노스트로빈 (A.1.11), 오리사스트로빈 (A.1.12), 피콕시스트로빈 (A.1.13), 피라클로스트로빈 (A.1.14), 피라메토스트로빈 (A.1.15), 피라옥시스트로빈 (A.1.16), 트리플록시스트로빈 (A.1.17), 2-(2-(3-(2,6-디클로로페닐)-1-메틸-알릴리덴아미노옥시메틸)-페닐)-2-메톡시이미노-N-메틸-아세트아미드 (A.1.18), 피리벤카르브 (A.1.19), 트리클로피리카르브/클로로딘카르브 (A.1.20), 파목사돈 (A.1.21), 페나미돈 (A.1.21), 메틸-N-[2-[(1,4-디메틸-5-페닐-피라졸-3-일)옥실메틸]페닐]-N-메톡시-카르바메이트 (A.1.22), 메틸테트라프롤 (A.1.25), (Z,2E)-5-[1-(2,4-디클로로페닐)피라졸-3-일]-옥시-2-메톡시이미노-N,3-디메틸-펜트-3-엔아미드 (A.1.34), (Z,2E)-5-[1-(4-클로로페닐)피라졸-3-일]-옥시-2-메톡시이미노-N,3-디메틸-펜트-3-엔아미드 (A.1.35), 피리미노스트로빈 (A.1.36), 비푸준치 (A.1.37), 2-(오르토-((2,5-디메틸페닐-옥시메틸렌)페닐)-3-메톡시-아크릴산 메틸에스테르 (A.1.38);
- [0193] - Q_i 위치에서의 복합체 III 의 억제제: 시아조파미드 (A.2.1), 아미술브롬 (A.2.2), [(6S,7R,8R)-8-벤질-3-[(3-히드록시-4-메톡시-피리딘-2-카르보닐)아미노]-6-메틸-4,9-디옥소-1,5-디옥소난-7-일] 2-메틸프로파노에이트 (A.2.3), 펜피록사미드 (A.2.4), 플로릴피록사미드 (A.2.5), 메타릴피록사미드 (A.2.6);
- [0194] - 복합체 II 의 억제제: 베노다닐 (A.3.1), 벤조빈디플루피르 (A.3.2), 비사켄 (A.3.3), 보스칼리드 (A.3.4), 카르복신 (A.3.5), 펜푸람 (A.3.6), 플루오피람 (A.3.7), 플루톨라닐 (A.3.8), 플록사피록사드 (A.3.9), 푸라메트피르 (A.3.10), 이소페타미드 (A.3.11), 이소피라잠 (A.3.12), 메프로닐 (A.3.13), 옥시카르복신 (A.3.14), 펜플루펜 (A.3.15), 펜티오피라드 (A.3.16), 피디플루메토펜 (A.3.17), 피라지플루미드 (A.3.18), 세닥산 (A.3.19), 테클로프탈람 (A.3.20), 티플루자미드 (A.3.21), 인피르플록삼 (A.3.22), 피라프로포인 (A.3.23), 플루인다피르 (A.3.28), N-[2-[2-클로로-4-(트리플루오로-메틸)페녹시]페닐]-3-(디플루오로메틸)-5-플루오로-1-메틸-피라졸-4-카르복사미드 (A.3.29), 메틸 (E)-2-[2-[(5-시아노-2-메틸-페녹시)메틸]페닐]-3-메톡시-프로프-2-에노에이트 (A.3.30), 이소플루시프람 (A.3.31), 2-(디플루오로메틸)-N-(1,1,3-트리메틸-인단-4-일)-피리딘-3-카르복사미드 (A.3.32), 2-(디플루오로메틸)-N-[(3R)-1,1,3-트리메틸인단-4-일]-피리딘-3-카르복사미드 (A.3.33), 2-(디플루오로메틸)-N-(3-에틸-1,1-디메틸-인단-4-일)-피리딘-3-카르복사미드 (A.3.34), 2-(디플루오로메틸)-N-[(3R)-3-에틸-1,1-디메틸-인단-4-일]-피리딘-3-카르복사미드 (A.3.35), 2-(디플루오로메틸)-N-(1,1-디메틸-3-프로필-인단-4-일)피리딘-3-카르복사미드 (A.3.36), 2-(디플루오로메틸)-N-[(3R)-1,1-디메틸-3-프로필-인단-4-일]-피리딘-3-카르복사미드 (A.3.37), 2-(디플루오로메틸)-N-(3-이소부틸-1,1-디메틸-인단-4-일)-피리딘-3-카르복사미드 (A.3.38), 2-(디플루오로메틸)-N-[(3R)-3-이소부틸-1,1-디메틸-인단-4-일]피리딘-3-카르복사미드 (A.3.39) 시클로부트리플루람 (A.3.24);
- [0195] - 다른 호흡 억제제: 디플루메토림 (A.4.1); 니트로페닐 유도체: 비나프크릴 (A.4.2), 디노부톤 (A.4.3), 디노카프 (A.4.4), 플루아지남 (A.4.5), 메프틸디노카프 (A.4.6), 페핀존 (A.4.7); 유기금속 화합물: 펜틴 염, 예를 들어 펜틴-아세테이트 (A.4.8), 펜틴 클로라이드 (A.4.9) 또는 펜틴 히드록시드 (A.4.10); 아메톡트라딘 (A.4.11); 실티오팜 (A.4.12);
- [0196] B) 스테롤 생합성 억제제 (SBI 살진균제)
- [0197] - C14 데메틸라아제 억제제: 트리아졸: 아자코나졸 (B.1.1), 비테르탄올 (B.1.2), 브로무코나졸 (B.1.3), 시프

로코나졸 (B.1.4), 디페노코나졸 (B.1.5), 디니코나졸 (B.1.6), 디니코나졸-M (B.1.7), 에폭시코나졸 (B.1.8), 펜부코나졸 (B.1.9), 플루퀸코나졸 (B.1.10), 플루실라졸 (B.1.11), 플루트리아폴 (B.1.12), 핵사코나졸 (B.1.13), 이미벤코나졸 (B.1.14), 이프코나졸 (B.1.15), 메트코나졸 (B.1.17), 미클로부타닐 (B.1.18), 옥스포코나졸 (B.1.19), 파클로부트라졸 (B.1.20), 펜코나졸 (B.1.21), 프로피코나졸 (B.1.22), 프로티오코나졸 (B.1.23), 시메코나졸 (B.1.24), 테부코나졸 (B.1.25), 테트라코나졸 (B.1.26), 트리아디메폰 (B.1.27), 트리아디메놀 (B.1.28), 트리티코나졸 (B.1.29), 유니코나졸 (B.1.30), 2-(2,4-디플루오로페닐)-1,1-디플루오로-3-(테트라졸-1-일)-1-[5-[4-(2,2,2-트리플루오로에톡시)페닐]-2-피리딜]프로판-2-올 (B.1.31), 2-(2,4-디플루오로페닐)-1,1-디플루오로-3-(테트라졸-1-일)-1-[5-[4-(트리플루오로메톡시)페닐]-2-피리딜]프로판-2-올 (B.1.32), 플루옥시티오코나졸 (B.1.33), 이프펜트리플루코나졸 (B.1.37), 메펜트리플루코나졸 (B.1.38), (2*R*)-2-[4-(4-클로로페녹시)-2-(트리플루오로메틸)페닐]-1-(1,2,4-트리아졸-1-일)프로판-2-올, (2*S*)-2-[4-(4-클로로페녹시)-2-(트리플루오로메틸)페닐]-1-(1,2,4-트리아졸-1-일)프로판-2-올, 2-(클로로메틸)-2-메틸-5-(*p*-톨릴메틸)-1-(1,2,4-트리아졸-1-일메틸)시클로펜탄올 (B.1.43); 이미다졸: 이마잘틸 (B.1.44), 페푸라조에이트 (B.1.45), 프로클로라즈 (B.1.46), 트리플루미졸 (B.1.47); 피리미딘, 피리딘, 피페라진: 페나리몰 (B.1.49), 피리페녹스 (B.1.50), 트리포린 (B.1.51), [3-(4-클로로-2-플루오로-페닐)-5-(2,4-디플루오로페닐)이속사졸-4-일]-3-피리딜)메탄올 (B.1.52), 4-[[6-[2-(2,4-디플루오로페닐)-1,1-디플루오로-2-히드록시-3-(1,2,4-트리아졸-1-일)프로필]-3-피리딜]옥시]벤조니트릴 (B.1.53), 2-[6-(4-브로모페녹시)-2-(트리플루오로메틸)-3-피리딜]-1-(1,2,4-트리아졸-1-일)프로판-2-올 (B.1.54), 2-[6-(4-클로로페녹시)-2-(트리플루오로메틸)-3-피리딜]-1-(1,2,4-트리아졸-1-일)프로판-2-올 (B.1.55);

[0198] - 델타14-리덕타아제 억제제: 알디모르프 (B.2.1), 도데모르프 (B.2.2), 도데모르프-아세테이트 (B.2.3), 펜프로모르프 (B.2.4), 트리데모르프 (B.2.5), 펜프로피딘 (B.2.6), 피페랄린 (B.2.7), 스피록사민 (B.2.8);

[0199] - 3-케토 리덕타아제의 억제제: 펜헥사미드 (B.3.1);

[0200] - 기타 스테롤 생합성 억제제: 클로르페노미졸 (B.4.1);

[0201] C) 핵산 합성 억제제

[0202] - 페닐아미드 또는 아실 아미노산 살진균제: 베날락실 (C.1.1), 베날락실-M (C.1.2), 키랄락실 (C.1.3), 메탈락실 (C.1.4), 메탈락실-M (C.1.5), 오푸라세 (C.1.6), 옥사딕실 (C.1.7);

[0203] - 기타 핵산 합성 억제제: 히백사졸 (C.2.1), 옥틸리논 (C.2.2), 옥솔린산 (C.2.3), 부피리메이트 (C.2.4), 5-플루오로시토신 (C.2.5), 5-플루오로-2-(*p*-톨릴메톡시)피리미딘-4-아민 (C.2.6), 5-플루오로-2-(4-플루오로페닐메톡시)피리미딘-4-아민 (C.2.7), 5-플루오로-2-(4-클로로페닐메톡시)피리미딘-4-아민 (C.2.8);

[0204] D) 세포 분열 및 세포골격의 억제제

[0205] - 튜블린 억제제: 베노밀 (D.1.1), 카벤다짐 (D.1.2), 푸베리다졸 (D.1.3), 티아벤다졸 (D.1.4), 티오파네이트-메틸 (D.1.5), 피리다클로메틸 (D.1.6), *N*-에틸-2-[(3-에티닐-8-메틸-6-퀴놀릴)옥시]부탄아미드 (D.1.8), *N*-에틸-2-[(3-에티닐-8-메틸-6-퀴놀릴)옥시]-2-메틸-술폰아닐-아세트아미드 (D.1.9), 2-[(3-에티닐-8-메틸-6-퀴놀릴)옥시]-*N*-(2-플루오로에틸)부탄아미드 (D.1.10), 2-[(3-에티닐-8-메틸-6-퀴놀릴)옥시]-*N*-(2-플루오로에틸)-2-메톡시-아세트아미드 (D.1.11), 2-[(3-에티닐-8-메틸-6-퀴놀릴)옥시]-*N*-프로필-부탄아미드 (D.1.12), 2-[(3-에티닐-8-메틸-6-퀴놀릴)옥시]-2-메톡시-*N*-프로필-아세트아미드 (D.1.13), 2-[(3-에티닐-8-메틸-6-퀴놀릴)옥시]-2-메틸술폰아닐-*N*-프로필-아세트아미드 (D.1.14), 2-[(3-에티닐-8-메틸-6-퀴놀릴)옥시]-*N*-(2-플루오로에틸)-2-메틸술폰아닐-아세트아미드 (D.1.15), 4-(2-브로모-4-플루오로페닐)-*N*-(2-클로로-6-플루오로페닐)-2,5-디메틸-피라졸-3-아민 (D.1.16);

[0206] - 기타 세포 분열 억제제: 디에토펜카르브 (D.2.1), 에타복삼 (D.2.2), 펜사이큐론 (D.2.3), 플루오피콜리드 (D.2.4), 족사미드 (D.2.5), 메트라페논 (D.2.6), 피리오페논 (D.2.7), 페나마크틸 (D.2.8);

[0207] E) 아미노산 및 단백질 합성의 억제제

[0208] - 메티오닌 합성 억제제: 시프로디닐 (E.1.1), 메파니피림 (E.1.2), 피리메타닐 (E.1.3);

[0209] - 단백질 합성 억제제: 블라스티시딘-S (E.2.1), 카스가마이신 (E.2.2), 카스가마이신 히드로클로라이드-히드레이트 (E.2.3), 밀디오마이신 (E.2.4), 스트렙토마이신 (E.2.5), 옥시테트라사이클린 (E.2.6);

[0210] F) 신호 변환 억제제

- [0211] - MAP / 히스티딘 키나아제 억제제: 플루오로이미드 (F.1.1), 이프로디온 (F.1.2), 프로시미돈 (F.1.3), 빈클로졸린 (F.1.4), 플루디옥소닐 (F.1.5);
- [0212] - G 단백질 억제제: 퀴녹시펜 (F.2.1);
- [0213] G) 지질 및 막 합성 억제제
- [0214] - 인지질 생합성 억제제: 에디펜포스 (G.1.1), 이프로벤포스 (G.1.2), 피라조포스 (G.1.3), 이소프로티올레인 (G.1.4);
- [0215] - 지질 과산화: 디클로란 (G.2.1), 킨토젠 (G.2.2), 테크나젠 (G.2.3), 톨칼로포스-메틸 (G.2.4), 바이페닐 (G.2.5), 클로로넵 (G.2.6), 에트리디아졸 (G.2.7), 아연 티아졸 (G.2.8);
- [0216] - 인지질 생합성 및 세포 벽 침적: 디메토모르프 (G.3.1), 플루모르프 (G.3.2), 만디프로파미드 (G.3.3), 피리모르프 (G.3.4), 벤티아발리카르브 (G.3.5), 이프로발리카르브 (G.3.6), 발리페날레이트 (G.3.7);
- [0217] - 세포 막 투과성 및 지방산에 영향을 미치는 화합물: 프로파모카르브 (G.4.1);
- [0218] - 옥시스테롤 결합 단백질의 억제제: 옥사티아피프롤린 (G.5.1), 플루옥사피프롤린 (G.5.3), 4-[1-[2-[3-(디플루오로메틸)-5-메틸-피라졸-1-일]아세틸]-4-피페리딘]-N-테트라린-1-일-피리딘-2-카르복사미드 (G.5.4), 4-[1-[2-[3,5-비스(디플루오로메틸)피라졸-1-일]아세틸]-4-피페리딘]-N-테트라린-1-일-피리딘-2-카르복사미드 (G.5.5), 4-[1-[2-[3-(디플루오로메틸)-5-(트리플루오로메틸)피라졸-1-일]아세틸]-4-피페리딘]-N-테트라린-1-일-피리딘-2-카르복사미드 (G.5.6), 4-[1-[2-[5-시클로프로필-3-(디플루오로메틸)피라졸-1-일]아세틸]-4-피페리딘]-N-테트라린-1-일-피리딘-2-카르복사미드 (G.5.7), 4-[1-[2-[5-메틸-3-(트리플루오로메틸)피라졸-1-일]아세틸]-4-피페리딘]-N-테트라린-1-일-피리딘-2-카르복사미드 (G.5.8), 4-[1-[2-[5-(디플루오로메틸)-3-(트리플루오로메틸)피라졸-1-일]아세틸]-4-피페리딘]-N-테트라린-1-일-피리딘-2-카르복사미드 (G.5.9), 4-[1-[2-[3,5-비스(트리플루오로메틸)피라졸-1-일]아세틸]-4-피페리딘]-N-테트라린-1-일-피리딘-2-카르복사미드 (G.5.10), (4-[1-[2-[5-시클로프로필-3-(트리플루오로메틸)피라졸-1-일]아세틸]-4-피페리딘]-N-테트라린-1-일-피리딘-2-카르복사미드 (G.5.11);
- [0219] H) 다중 위치 작용을 갖는 억제제
- [0220] - 무기 활성 물질: 보르도 혼합물 (H.1.1), 구리 (H.1.2), 구리 아세테이트 (H.1.3), 구리 히드록시드 (H.1.4), 구리 옥시클로라이드 (H.1.5), 염기성 구리 술페이트 (H.1.6), 황 (H.1.7);
- [0221] - 티오- 및 디티오카르바메이트: 페르밤 (H.2.1), 만코제브 (H.2.2), 마네브 (H.2.3), 메탐 (H.2.4), 메티람 (H.2.5), 프로피네브 (H.2.6), 티람 (H.2.7), 지네브 (H.2.8), 지람 (H.2.9);
- [0222] - 유기염소 화합물: 아닐라진 (H.3.1), 클로로탈로닐 (H.3.2), 카프타폴 (H.3.3), 카프탄 (H.3.4), 폴페트 (H.3.5), 디클로플루아니드 (H.3.6), 디클로로펜 (H.3.7), 헥사클로로벤젠 (H.3.8), 펜타클로르페놀 (H.3.9) 및 이의 염, 프탈라이드 (H.3.10), 톨릴플루아니드 (H.3.11);
- [0223] - 구아니딘 등: 구아니딘 (H.4.1), 도딘 (H.4.2), 도딘 유리 염기 (H.4.3), 구아자틴 (H.4.4), 구아자틴-아세테이트 (H.4.5), 이미녹타딘 (H.4.6), 이미녹타딘-트리아세테이트 (H.4.7), 이미녹타딘-트리스(알베실레이트) (H.4.8), 디티아논 (H.4.9), 2,6-디메틸-1*H*,5*H*-[1,4]디티이노[2,3-*c*:5,6-*c'*]디피롤-1,3,5,7(2*H*,6*H*)-테트라온 (H.4.10);
- [0224] I) 세포 벽 합성 억제제
- [0225] - 글루칸 합성의 억제제: 발리다마이신 (I.1.1), 폴리옥신 B (I.1.2);
- [0226] - 펠라닌 합성 억제제: 피로퀼론 (I.2.1), 트리스클라졸 (I.2.2), 카르프로파미드 (I.2.3), 디시클로메트 (I.2.4), 페녹사닐 (I.2.5);
- [0227] J) 식물 방어 유도제
- [0228] - 아시벤졸라-S-메틸 (J.1.1), 프로베나졸 (J.1.2), 이소티아닐 (J.1.3), 티아디닐 (J.1.4), 프로헥사디온-칼슘 (J.1.5); 포스포네이트: 포세틸 (J.1.6), 포세틸-알루미늄 (J.1.7), 아인산 및 이의 염 (J.1.8), 칼슘 포스포네이트 (J.1.11), 포타슘 포스포네이트 (J.1.12), 포타슘 또는 소듐 바이카르보네이트 (J.1.9), 4-시클로프로필-N-(2,4-디메톡시페닐)티아디아졸-5-카르복사미드 (J.1.10);

[0229] K) 미지의 작용 방식

[0230] - 브로노폴 (K.1.1), 치노메티오네이트 (K.1.2), 시플루페나미드 (K.1.3), 시목사닐 (K.1.4), 다조메트 (K.1.5), 데바카르브 (K.1.6), 디클로시메트 (K.1.7), 디클로메진 (K.1.8), 디펜조퀴트 (K.1.9), 디펜조퀴트-메틸술페이트 (K.1.10), 디페닐아민 (K.1.11), 페니트로판 (K.1.12), 펜피라자민 (K.1.13), 플루메토버 (K.1.14), 플루메틸술폴람 (K.1.60), 플루술폴라미드 (K.1.15), 플루티아닐 (K.1.16), 하핀 (K.1.17), 메타술폴카르브 (K.1.18), 니트라피린 (K.1.19), 니트로탈-이소프로필 (K.1.20), 톨프로카르브 (K.1.21), 옥신-구리 (K.1.22), 프로퀴나지드 (K.1.23), 세복틸아민 (K.1.61), 테부플로퀸 (K.1.24), 테클로프탈람 (K.1.25), 트리아족시드 (K.1.26), *N'*-(4-(4-클로로-3-트리플루오로메틸-페녹시)-2,5-디메틸-페닐)-*N*-에틸-*N*-메틸 포름아미딘 (K.1.27), *N'*-(4-(4-플루오로-3-트리플루오로메틸-페녹시)-2,5-디메틸-페닐)-*N*-에틸-*N*-메틸 포름아미딘 (K.1.28), *N'*-[4-[[3-[(4-클로로페닐)메틸]-1,2,4-티아디아졸-5-일]옥시]-2,5-디메틸-페닐]-*N*-에틸-*N*-메틸-포름아미딘 (K.1.29), *N'*-(5-브로모-6-인단-2-일옥시-2-메틸-3-피리딜)-*N*-에틸-*N*-메틸-포름아미딘 (K.1.30), *N'*-[5-브로모-6-[1-(3,5-디플루오로페닐)에톡시]-2-메틸-3-피리딜]-*N*-에틸-*N*-메틸-포름아미딘 (K.1.31), *N'*-[5-브로모-6-(4-이소프로필시클로헥속시)-2-메틸-3-피리딜]-*N*-에틸-*N*-메틸-포름아미딘 (K.1.32), *N'*-[5-브로모-2-메틸-6-(1-페닐에톡시)-3-피리딜]-*N*-에틸-*N*-메틸-포름아미딘 (K.1.33), *N'*-(2-메틸-5-트리플루오로메틸-4-(3-트리메틸실라닐-프로폭시)-페닐)-*N*-에틸-*N*-메틸 포름아미딘 (K.1.34), *N'*-(5-디플루오로메틸-2-메틸-4-(3-트리메틸실라닐-프로폭시)-페닐)-*N*-에틸-*N*-메틸 포름아미딘 (K.1.35), 2-(4-클로로-페닐)-*N*-[4-(3,4-디메톡시-페닐)-이속사졸-5-일]-2-프로프-2-이닐옥시-아세트아미드 (K.1.36), 3-[5-(4-클로로-페닐)-2,3-디메틸-이속사졸리딘-3-일]-피리딘 (피리속사졸) (K.1.37), 3-[5-(4-메틸페닐)-2,3-디메틸-이속사졸리딘-3-일]-피리딘 (K.1.38), 5-클로로-1-(4,6-디메톡시-피리미딘-2-일)-2-메틸-1*H*-벤조이미다졸 (K.1.39), 에틸 (Z)-3-아미노-2-시아노-3-페닐-프로프-2-에노에이트 (K.1.40), 피카르부트라족스 (K.1.41), 펜틸 *N*-[6-[[Z)-[(1-메틸테트라졸-5-일)-페닐-메틸렌]아미노]옥시메틸]-2-피리딜]카르바메이트 (K.1.42), 부트-3-이닐 *N*-[6-[[Z)-[(1-메틸테트라졸-5-일)-페닐-메틸렌]아미노]옥시메틸]-2-피리딜]카르바메이트 (K.1.43), 이프플루페노퀸 (K.1.44), 퀴노푸멜린 (K.1.47), 벤지오티아졸리논 (K.1.48), 브로모탈로닐 (K.1.49), 2-(6-벤질-2-피리딜)퀴나졸린 (K.1.50), 2-[6-(3-플루오로-4-메톡시-페닐)-5-메틸-2-피리딜]퀴나졸린 (K.1.51), 디클로벤티아족스 (K.1.52), *N'*-(2,5-디메틸-4-페녹시-페닐)-*N*-에틸-*N*-메틸-포름아미딘 (K.1.53), 아미노피리펜 (K.1.54), 플루오피모미드 (K.1.55), *N'*-[5-브로모-2-메틸-6-(1-메틸-2-프로폭시-에톡시)-3-피리딜]-*N*-에틸-*N*-메틸-포름아미딘 (K.1.56), *N'*-[4-(4,5-디클로로티아졸-2-일)옥시-2,5-디메틸-페닐]-*N*-에틸-*N*-메틸-포름아미딘 (K.1.57), 플루페녹사디아잠 (K.1.58), *N*-메틸-4-[5-(트리플루오로메틸)-1,2,4-옥사디아졸-3-일]벤젠카르보티오아미드 (K.1.59), *N*-메톡시-*N*-[[4-[5-(트리플루오로메틸)-1,2,4-옥사디아졸-3-일]페닐]메틸]시클로프로판카르복사미드 (WO2018/177894, WO 2020/212513);

[0231] 이원 혼합물에서 성분 1) 및 성분 2) 의 중량비는 일반적으로 사용되는 성분의 특성에 좌우되고, 통상적으로 1:10,000 내지 10,000:1, 종종 1:100 내지 100:1, 자주 1:50 내지 50:1, 바람직하게는 1:20 내지 20:1, 보다 바람직하게는 1:10 내지 10:1, 보다 더 바람직하게는 1:4 내지 4:1 및 특히 1:2 내지 2:1 의 범위이다. 추가 구현예에 따르면, 성분 1) 및 성분 2) 의 중량비는 통상적으로 1000:1 내지 1:1, 종종 100: 1 내지 1:1, 자주 50:1 내지 1:1, 바람직하게는 20:1 내지 1:1, 보다 바람직하게는 10:1 내지 1:1, 보다 더 바람직하게는 4:1 내지 1:1 및 특히 2:1 내지 1:1 의 범위이다. 추가 구현예에 따르면, 성분 1) 및 성분 2) 의 중량비는 통상적으로 20,000:1 내지 1:10, 종종 10,000:1 내지 1:1, 자주 5,000:1 내지 5:1, 바람직하게는 5,000:1 내지 10:1, 보다 바람직하게는 2,000:1 내지 30:1, 보다 더 바람직하게는 2,000:1 내지 100:1 및 특히 1,000:1 내지 100:1 의 범위이다. 추가 구현예에 따르면, 성분 1) 및 성분 2) 의 중량비는 통상적으로 1:1 내지 1:1000, 종종 1:1 내지 1:100, 자주 1:1 내지 1:50, 바람직하게는 1:1 내지 1:20, 보다 바람직하게는 1:1 내지 1:10, 보다 더 바람직하게는 1:1 내지 1:4 및 특히 1:1 내지 1:2 의 범위이다. 추가 구현예에 따르면, 성분 1) 및 성분 2) 의 중량비는 통상적으로 10:1 내지 1:20,000, 종종 1:1 내지 1:10,000, 자주 1:5 내지 1:5,000, 바람직하게는 1:10 내지 1:5,000, 보다 바람직하게는 1:30 내지 1:2,000, 보다 더 바람직하게는 1:100 내지 1:2,000 내지 및 특히 1:100 내지 1:1,000 의 범위이다.

[0232] 삼원 혼합물, 즉 성분 1) 및 성분 2) 및 화합물 III (성분 3) 을 포함하는 조성물에서, 성분 1) 및 성분 2) 의 중량비는 사용되는 활성 물질의 특성에 좌우되고, 통상적으로 1:100 내지 100:1, 자주 1:50 내지 50:1, 바람직하게는 1:20 내지 20:1, 보다 바람직하게는 1:10 내지 10:1 및 특히 1:4 내지 4:1 의 범위이고, 성분 1) 및 성분 3) 의 중량비는 통상적으로 1:100 내지 100:1, 자주 1:50 내지 50:1, 바람직하게는 1:20 내지 20:1, 보다 바람직하게는 1:10 내지 10:1 및 특히 1:4 내지 4:1 의 범위이다. 원하는 경우에, 임의의 추가의 활성 성분이 20:1 내지 1:20 의 비로 성분 1) 에 첨가된다. 이 비는 중자 처리에 의해 적용되는 혼합물에 또한 적합

하다.

- [0233] 군 A) 의 Q₀ 위치의 복합체 III 의 억제제로부터 선택되는, 보다 바람직하게는 화합물 (A.1.1), (A.1.4), (A.1.8), (A.1.9), (A.1.10), (A.1.12), (A.1.13), (A.1.14), (A.1.17), (A.1.21), (A.1.25), (A.1.34) 및 (A.1.35) 로부터 선택되는; 특히 (A.1.1), (A.1.4), (A.1.8), (A.1.9), (A.1.13), (A.1.14), (A.1.17), (A.1.25), (A.1.34) 및 (A.1.35) 로부터 선택되는 적어도 하나의 활성 물질을 성분 2) 로서 포함하는 혼합물이 바람직하다.
- [0234] 군 A) 의 Q_i 위치의 복합체 III 의 억제제로부터 선택되는, 보다 바람직하게는 화합물 (A.2.1), (A.2.3), (A.2.4) 및 (A.2.6) 으로부터 선택되는; 특히 (A.2.3), (A.2.4) 및 (A.2.6) 으로부터 선택되는 적어도 하나의 활성 물질을 성분 2) 로서 포함하는 혼합물이 또한 바람직하다.
- [0235] 군 A) 의 복합체 II 의 억제제로부터 선택되는, 보다 바람직하게는 화합물 (A.3.2), (A.3.3), (A.3.4), (A.3.7), (A.3.9), (A.3.11), (A.3.12), (A.3.15), (A.3.16), (A.3.17), (A.3.18), (A.3.19), (A.3.20), (A.3.21), (A.3.22), (A.3.23), (A.3.24), (A.3.28), (A.3.31), (A.3.32), (A.3.33), (A.3.34), (A.3.35), (A.3.36), (A.3.37), (A.3.38) 및 (A.3.39) 로부터 선택되는; 특히 (A.3.2), (A.3.3), (A.3.4), (A.3.7), (A.3.9), (A.3.12), (A.3.15), (A.3.17), (A.3.19), (A.3.22), (A.3.23), (A.3.24), (A.3.31), (A.3.32), (A.3.33), (A.3.34), (A.3.35), (A.3.36), (A.3.37), (A.3.38) 및 (A.3.39) 로부터 선택되는 적어도 하나의 활성 물질을 성분 2) 로서 포함하는 혼합물이 또한 바람직하다.
- [0236] 군 A) 의 기타 호흡 억제제로부터 선택되는, 보다 바람직하게는 화합물 (A.4.5) 및 (A.4.11); 특히 (A.4.11) 로부터 선택되는 적어도 하나의 활성 물질을 성분 2) 로서 포함하는 혼합물이 또한 바람직하다.
- [0237] 군 B) 의 C14 테메틸라아제 억제제로부터 선택되는, 보다 바람직하게는 화합물 (B.1.4), (B.1.5), (B.1.8), (B.1.10), (B.1.11), (B.1.12), (B.1.13), (B.1.17), (B.1.18), (B.1.21), (B.1.22), (B.1.23), (B.1.25), (B.1.26), (B.1.29), (B.1.33), (B.1.34), (B.1.37), (B.1.38), (B.1.43), (B.1.46), (B.1.53), (B.1.54) 및 (B.1.55) 로부터 선택되는; 특히 (B.1.5), (B.1.8), (B.1.10), (B.1.17), (B.1.22), (B.1.23), (B.1.25), (B.1.33), (B.1.34), (B.1.37), (B.1.38), (B.1.43) 및 (B.1.46) 으로부터 선택되는 적어도 하나의 활성 물질을 성분 2) 로서 포함하는 혼합물이 또한 바람직하다.
- [0238] 군 B) 의 델타14-리덕타아제 억제제로부터 선택되는, 보다 바람직하게는 화합물 (B.2.4), (B.2.5), (B.2.6) 및 (B.2.8); 특히 (B.2.4) 로부터 선택되는 적어도 하나의 활성 물질을 성분 2) 로서 포함하는 혼합물이 또한 바람직하다.
- [0239] 군 C) 의 페닐아미드 및 아실 아미노산 살진균제로부터 선택되는, 보다 바람직하게는 화합물 (C.1.1), (C.1.2), (C.1.4) 및 (C.1.5) 로부터 선택되는; 특히 (C.1.1) 및 (C.1.4) 로부터 선택되는 적어도 하나의 활성 물질을 성분 2) 로서 포함하는 혼합물이 또한 바람직하다.
- [0240] 군 C) 의 기타 핵산 합성 억제제로부터 선택되는, 보다 바람직하게는 화합물 (C.2.6), (C.2.7) 및 (C.2.8) 로부터 선택되는 적어도 하나의 활성 물질을 성분 2) 로서 포함하는 혼합물이 또한 바람직하다.
- [0241] 군 D) 로부터 선택되는, 보다 바람직하게는 화합물 (D.1.1), (D.1.2), (D.1.5), (D.2.4) 및 (D.2.6) 으로부터 선택되는; 특히 (D.1.2), (D.1.5) 및 (D.2.6) 으로부터 선택되는 적어도 하나의 활성 물질을 성분 2) 로서 포함하는 혼합물이 또한 바람직하다.
- [0242] 군 E) 로부터 선택되는, 보다 바람직하게는 화합물 (E.1.1), (E.1.3), (E.2.2) 및 (E.2.3); 특히 (E.1.3) 으로부터 선택되는 적어도 하나의 활성 물질을 성분 2) 로서 포함하는 혼합물이 또한 바람직하다.
- [0243] 군 F) 로부터 선택되는, 보다 바람직하게는 화합물 (F.1.2), (F.1.4) 및 (F.1.5) 로부터 선택되는 적어도 하나의 활성 물질을 성분 2) 로서 포함하는 혼합물이 또한 바람직하다.
- [0244] 군 G) 로부터 선택되는, 보다 바람직하게는 화합물 (G.3.1), (G.3.3), (G.3.6), (G.5.1), (G.5.3), (G.5.4), (G.5.5), (G.5.6), (G.5.7), (G.5.8), (G.5.9), (G.5.10) 및 (G.5.11) 로부터 선택되는; 특히 (G.3.1), (G.5.1) 및 (G.5.3) 으로부터 선택되는 적어도 하나의 활성 물질을 성분 2) 로서 포함하는 혼합물이 또한 바람직하다.
- [0245] 군 H) 로부터 선택되는, 보다 바람직하게는 화합물 (H.2.2), (H.2.3), (H.2.5), (H.2.7), (H.2.8), (H.3.2), (H.3.4), (H.3.5), (H.4.9) 및 (H.4.10) 으로부터 선택되는; 특히 (H.2.2), (H.2.5), (H.3.2), (H.4.9) 및

(H.4.10) 으로부터 선택되는 적어도 하나의 활성 물질을 성분 2) 로서 포함하는 혼합물이 또한 바람직하다.

[0246] 군 I) 로부터 선택되는, 보다 바람직하게는 화합물 (I.2.2) 및 (I.2.5) 로부터 선택되는 적어도 하나의 활성 물질을 성분 2) 로서 포함하는 혼합물이 또한 바람직하다.

[0247] 군 J) 로부터 선택되는, 보다 바람직하게는 화합물 (J.1.2), (J.1.5), (J.1.8), (J.1.11) 및 (J.1.12); 특히 (J.1.5) 로부터 선택되는 적어도 하나의 활성 물질을 성분 2) 로서 포함하는 혼합물이 또한 바람직하다.

[0248] 군 K) 로부터 선택되는, 보다 바람직하게는 화합물 (K.1.41), (K.1.42), (K.1.44), (K.1.47), (K.1.57), (K.1.58) 및 (K.1.59) 로부터 선택되는; 특히 (K.1.41), (K.1.44), (K.1.47), (K.1.57), (K.1.58) 및 (K.1.59) 로부터 선택되는 적어도 하나의 활성 물질을 성분 2) 로서 포함하는 혼합물이 또한 바람직하다

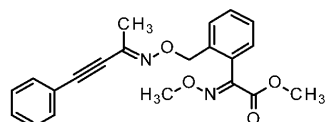
[0249] 활성 성분의 혼합물을 포함하는 조성물은, 예를 들어 화합물 I 의 조성물에 관해 제시된 통상의 수단에 의해 제조될 수 있다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0250] 실시예:

[0251] 합성 공정

[0252] 실시예 1: 메틸 (2E)-2-메톡시이미노-2-[2-[[E)-(1-메틸-3-페닐-프로프-2-이닐리덴)아미노]옥시메틸]페닐]아세테이트 (실시예는 하기 표 S 에 따라 번호매김)



[0253]

[0254] 단계 1: 4-페닐부트-3-인-2-온

[0255] -78°C 에서 THF (150 ml) 중 페닐 아세틸렌 (10 g, 1 eq.) 의 교반된 용액에 n-부틸 리튬 (73 ml, 헥산 1.2 eq. 중 1.6 M 용액) 을 적가하고, 동일한 온도에서 30 분 동안 교반하였다. 그런 다음, THF (15 ml) 중 에틸 아세테이트 (12 ml, 1.2 eq.) 를 -78°C 에서, 이후 보론 트리플루오라이드 디에틸 에테르 복합체 (33 ml, 50% 용액, 1.2 eq.) 를 동일한 온도에서 적가하고, 반응 혼합물을 30 분 동안 교반하였다. TLC 에 의해 표시된 반응 완료 후, 반응 혼합물을 포화 암모늄 클로라이드 수용액 (200 ml) 으로 켄칭한 다음, 물 (100 mL) 을 첨가하고, 혼합물을 에틸 아세테이트 (3 x 200 mL) 로 추출하고, 조합된 유기상을 염수를 사용하여 세척하고, 소듐 술페이트로 건조시켰다. 용매를 제거하여 미정제 생성물을 수득하고, 이를 헵탄 중 15-20% 에틸 아세테이트를 이동상으로서 사용하여 combi 플래시 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제하여, 4-페닐부트-3-인-2-온 (10 g, 71% 수율) 을 수득하였다.

[0256] ¹H NMR (500 MHz, DMSO-d6): δ 7.67-7.65(m, 2H), 7.59 – 7.56 (m, 1H), 7.37 – 7.15 (m, 2H), 2.45 (s, 3H).

[0257] 단계 2: 4-페닐부트-3-인-2-온 옥심

[0258] 25°C 에서 메탄올 (10 ml) 및 물 (2.0 ml) 중 4-페닐부트-3-인-2-온 (200 mg, 1 eq.) 의 교반된 용액에 히드록실아민 히드록클로라이드 (190 mg, 2 eq.) 및 소듐 아세테이트 (394 mg, 2 eq.) 를 첨가하였다. 혼합물을 약 20°C 에서 4 시간 동안 교반하였다. 반응의 TLC 표시된 완료 후, 혼합물을 건조되도록 증발시키고, 물 (30 ml) 을 이에 첨가하고, 에틸 아세테이트 (3 x 30 ml) 로 추출하고, 조합된 유기상을 염수를 사용하여 세척하고, 소듐 술페이트로 건조시켰다. 용매를 제거하여 220 mg 미정제 4-페닐부트-3-인-2-온 옥심을 시스 및 트랜스 (50:50) 이성질체 둘 모두의 혼합물로서 수득하였고, 이를 임의의 정제 없이 다음단계에 직접 사용하였다.

[0259] 단계 3: 메틸 (2E)-2-메톡시이미노-2-[2-[[E)-(1-메틸-3-페닐-프로프-2-이닐리덴)아미노]옥시-메틸]페닐]아세테이트

[0260] 10°C 에서 AcN (200 ml) 중 4-페닐부트-3-인-2-온 옥심 (시스:트랜스 이성질체의 혼합물로서 15 g) 의 교반된 용액에 메틸 (2E)-2-[2-(클로로메틸)페닐]-2-메톡시이미노-아세테이트 (82 ml, DMF 중 33% 용액), 이후 세슘 카르보네이트 (61.4 g, 2 eq.) 를 첨가하였다. 그런 다음, 반응 혼합물을 25°C 에서 16 시간 동안

교반하였다. 반응의 TLC 표시된 완료 후, 물 (200 ml)을 첨가하고, 에틸 아세테이트 (3 x 200 ml) 로 추출하였다. 조합된 유기상을 염수로 세척하고, 소듐 술페이트로 건조시켰다. 용매를 제거하여 미정제 생성물을 수득하고, 이를 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제하여 7.5 g (21% 수율) 의 순수 표제 화합물을 수득하였다.

¹H NMR (500 MHz, DMSO-d6): δ 7.54-7.52 (m, 2H), 7.46-7.41 (m, 6H), 7.24-7.22 (m, 1H), 5.01 (s, 2H), 3.96 (s, 3H), 3.76 (s, 3H), 1.99 (s, 3H).

[0261]

[0262]

대안적으로, 표제 화합물을 하기와 같이 수득하였다.

[0263]

단계 2a: 메틸 (2E)-2-[2-(아미노옥시메틸)페닐]-2-메톡시이미노-아세테이트

[0264]

25°C 에서 메탄올 (10 ml) 중 메틸 (2E)-2-[2-[(1,3-디옥소이소인돌린-2-일)옥시메틸]페닐]-2-메톡시이미노-아세테이트 (400 mg, 1 eq.) 의 교반된 용액에 히드라진 히드레이트 (54 mg, 1 eq.) 를 첨가하고, 30 분 동안 동일한 온도에서 교반하였다. 반응의 TLC 표시된 완료 후, 용매를 증발시키고, 미정제 반응 혼합물을 컬럼 크로마토그래피 처리하여 순수 생성물 (150 mg) 을 수득하였다.

[0265]

¹H NMR (300 MHz, DMSO-d6): δ 7.41-7.33 (m, 3H), 7.18-7.16 (m, 1H), 5.93 (s, 2H), 4.39 (s, 2H), 3.92 (s, 3H), 3.75 (s, 3H).

[0266]

단계 3a: 메틸 (2E)-2-메톡시이미노-2-[2-[(E)-(1-메틸-3-페닐-프로프-2-이닐리덴)아미노]옥시-메틸]페닐]아세테이트

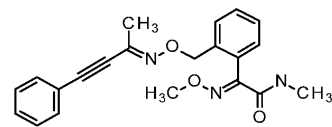
[0267]

메탄올 (5 ml) 중 4-페닐부트-3-인-2-온 (240 mg, 1.2 eq.) 및 메틸 (2E)-2-[2-(아미노옥시메틸)페닐]-2-메톡시이미노-아세테이트 (330 mg, 1 eq.) 의 교반된 용액에 아세트산 (0.2 ml) 을 첨가하고, 65°C 에서 가열하고, 이 온도에서 2 시간 동안 교반하였다. 반응의 TLC 표시된 완료 후, 혼합물을 건조되도록 증발시키고, 물 (50 ml) 을 이에 첨가하고, 에틸 아세테이트 (3 x 30 ml) 로 추출하고, 조합된 유기상을 염수를 사용하여 세척하고, 소듐 술페이트로 건조시켰다. 미정제 생성물을 헵탄 중 20% 에틸 아세테이트를 이동상으로서 사용하여 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제하여, 160 mg (32% 수율) 의 표제 화합물을 수득하였다.

[0268]

실시예 2: (2E)-2-메톡시이미노-N-메틸-2-[2-[(E)-(1-메틸-3-페닐-프로프-2-이닐리덴)-아미노]옥시메틸]페닐]아세트아미드

[0269]



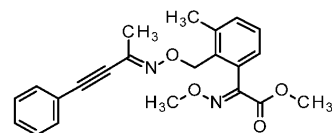
[0270]

25°C 에서 THF (5 mL) 중 메틸 (2E)-2-메톡시이미노-2-[2-[(E)-(1-메틸-3-페닐-프로프-2-인-일리덴)아미노]옥시메틸]페닐]아세테이트 (실시예 1) (120 mg, 1 eq.) 의 교반된 용액에 메틸 아민 (0.4 mL, 물 중 40% 용액) 을 첨가하고, 4 시간 동안 교반하였다. TLC 에 의해 표시된 바와 같은 반응의 완료 후, 반응 혼합물을 증발시키고, 헵탄 (5 mL x 3 회) 으로 세척하고, combi 플래시 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제하여, 11 mg (9% 수율) 의 순수 표제 화합물을 수득하였다.

[0271]

실시예 15: 메틸 (2E)-2-메톡시이미노-2-[3-메틸-2-[(E)-(1-메틸-3-페닐-프로프-2-이닐리덴)아미노]옥시메틸]페닐]아세테이트

[0272]



[0273]

아세트니트릴 (15 ml) 중 4-페닐부트-3-인-2-온 옥심 (1 g, 시스:트랜스 이성질체의 혼합물로서, 1 eq.) 의 교반된 용액에, 아세트니트릴 (5 ml) 에 용해된 세슘 카르보네이트 (4.08 g, 2 eq.) 및 메틸 (2E)-2-[2-(브로모-메틸)-3-메틸-페닐]-2-메톡시이미노-아세테이트 (1.7 g, 1 eq.) 를 25°C 에서 첨가하고, 이 온도에서 4 시간 동안 교반하였다. 반응의 TLC 표시된 완료 후, 혼합물을 셀라이트를 통해 여과하고, 에틸 아세테이트 (3 x 30 ml) 로 세척하였다. 그런 다음, 여과물을 증발시키고, 헵탄 중 15% 에틸 아세테이트를 이동상으로서 사용하여 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제하여, 1.1 g (수율 51%) 의 표제 화합물을 수득하였다.

¹H NMR (500 MHz, DMSO-d6): δ 7.54-7.52 (m, 2H), 7.47-7.42 (m, 3H), 7.34-7.29 (m, 2H), 7.04-7.02 (m, 1H), 5.01 (bs, 2H), 3.93 (s, 3H), 3.74 (s, 3H) 2.40 (s, 3H), 1.96 (s, 3H).

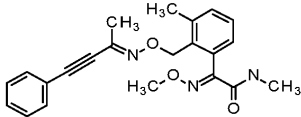
[0274]

[0275]

실시예

16:

(2E)-2-메톡시이미노-N-메틸-2-[3-메틸-2-[(E)-(1-메틸-3-페닐-프로프-2-이닐리덴)아미노]옥시메틸]페닐]아세트아미드



[0276]

[0277]

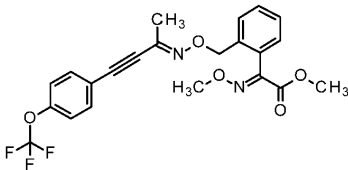
25℃ 에서 THF (10 ml) 중 메틸 (2E)-2-메톡시이미노-2-[2-[(E)-(1-메틸-3-페닐-프로프-2-인-일리덴)아미노]옥시메틸]페닐]아세테이트 (실시예 15) (750 mg, 1 eq.) 의 교반된 용액에 메틸 아민 (0.6 ml, 물 중 40% 용액) 을 첨가하고, 5 시간 동안 교반하였다. TLC 에 의해 표시된 바와 같은 반응 완료 후, 물 (50 ml) 을 반응 혼합물에 첨가하고, 에틸 아세테이트 (3 x 30 ml) 를 사용하여 추출하고, 조합된 유기상을 염수를 사용하여 세척하고, 소듐 술페이트로 건조시켰다. 용매를 제거하여 미정제 생성물을 수득하고, 이를 헵탄 중 35% 에틸 아세테이트를 이동상으로서 사용하여 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제하여, 450 mg (60% 수율) 의 순수 표제 화합물을 수득하였다.

[0278]

¹H NMR (500 MHz, DMSO-d6): δ 8.21 (s, 1H) 7.54-7.52 (m, 2H), 7.46-7.42 (m, 3H), 7.31-7.26 (m, 2H), 6.96-6.94 (m, 1H), 5.00 (bs, 2H), 3.88 (s, 3H), 2.70 (s, 3H) 2.39 (s, 3H), 1.96 (s, 3H).

[0279]

실시예 12: 메틸 (2E)-2-메톡시이미노-2-[2-[(E)-[1-메틸-3-[4-(트리플루오로메톡시)페닐]프로프-2-이닐리덴]아미노]옥시메틸]페닐]아세테이트



[0280]

[0281]

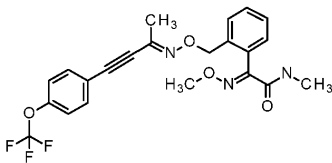
아세트니트릴 (8 ml) 중 4-[4-(트리플루오로메톡시)페닐]부트-3-인-2-온 옥심 (시스:트랜스 이성질체의 혼합물로서 300 mg, 1 eq.) 의 교반된 용액에 세슘 카르보네이트 (820 mg, 2 eq.) 및 메틸 (2E)-2-[2-(브로모메틸)페닐]-2-메톡시이미노-아세테이트 (350 mg, 1 eq.) 를 25℃ 에서 첨가하고, 이 온도에서 2 시간 동안 교반하였다. 반응의 TLC 표시된 완료 후, 혼합물을 셀라이트를 통해 여과하고, 에틸 아세테이트 (25 ml) 로 세척하였다. 그런 다음, 여과물을 증발시키고, 헵탄 중 15-20% 에틸 아세테이트를 이동상으로서 사용하여 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제하여, 표제 화합물 (500 mg, 90% 수율) 을 수득하였다.

[0282]

¹H NMR (500 MHz, DMSO-d6): δ 7.69-7.67 (m, 2H), 7.46 - 7.24 (m, 5H), 7.24-7.22 (m, 1H), 5.01 (s, 2H), 3.95 (s, 3H), 3.76 (s, 3H), 1.99 (s, 3H).

[0283]

실시예 11: (2E)-2-메톡시이미노-N-메틸-2-[2-[(E)-[1-메틸-3-[4-(트리플루오로메톡시)페닐]-프로프-2-이닐리덴]아미노]옥시메틸]페닐]아세트아미드



[0284]

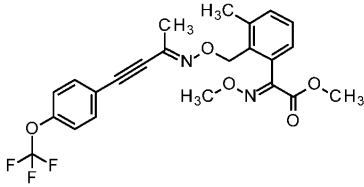
[0285]

실온에서 THF (6 ml) 중 메틸 (2E)-2-메톡시이미노-2-[2-[(E)-[1-메틸-3-[4-(트리플루오로메톡시)페닐]프로프-2-이닐리덴]아미노]옥시메틸]페닐]아세테이트 (상기 실시예 12) 의 교반된 용액에 메틸 아민 (0.6 ml, 물 중 40% 용액) 을 첨가하고 2 시간 동안 교반하였다. TLC 에 의해 표시된 바와 같은 반응 완료 후, 물 (15 ml) 을 반응 혼합물에 첨가하고, 에틸 아세테이트 (3 x 15 ml) 를 사용하여 추출하고, 조합된 유기상을 염수를 사용

하여 세척하고, 소듐 술페이트로 건조시켰다. 용매를 제거하여 미정제 생성물을 수득하고, 이를 헵탄 중 30-35% 에틸 아세테이트를 이동상으로서 사용하여 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제하여, 표제 화합물 (220 mg, 73% 수율) 을 수득하였다.

¹H NMR (500 MHz, DMSO-d₆): δ 8.26 (s, 1H), 8.25 – 8.25 (d, J = 5Hz, 2H), 7.69 - 7.67 (m, 5H), 7.36-7.15 (m, 1H), 5.02 (s, 2H), 3.90 (s, 3H), 2.71 (d, J = 5Hz, 3H), 2.02 (s, 3H).

실시예 22: 메틸 (2E)-2-메톡시이미노-2-[3-메틸-2-[[*(E)*]-[1-메틸-3-[4-(트리플루오로메톡시)-페닐]프로프-2-이닐리덴]아미노]옥시메틸]페닐]아세테이트



단계 1: 트리메틸-[2-[4-(트리플루오로메톡시)페닐]에티닐]실란

질소 하 THF (5 ml) 중 1-요오도-4-(트리플루오로메톡시)벤젠 (500 mg, 1 eq.) 의 교반된 용액에 트리에틸아민 (3.5 ml, 3 eq.), 트리메틸실릴 아세틸렌 (0.731 ml, 3 eq.), CuI (33 mg, 0.1 eq.) 및 PdCl₂(PPh₃)₂ (122 mg, 0.1 eq.) 을 첨가하고, 60°C 에서 2 시간 동안 교반하였다. 반응의 TLC 표시된 완료 후, 혼합물을 셀라이트를 통해 여과하고 물 (10 ml) 을 첨가하였다. 유기상을 에틸 아세테이트 (3 x 15 ml) 를 사용하여 추출하고, 조합된 유기상을 염수를 사용하여 세척하고, 소듐 술페이트로 건조시켰다. 용매를 제거하여 미정제 생성물을 수득하고, 이를 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제하여, 트리메틸-[2-[4-(트리플루오로메톡시)페닐]에티닐]실란 (400 mg, 89% 수율) 을 수득하였다.

¹H NMR (500 MHz, CDCl₃): δ 7.29 (d, J = 8.00 Hz, 2H), 6.95 (d, J = 8.00 Hz, 2H), 0.06 (s, 9H).

단계 2: 1-에티닐-4-(트리플루오로메톡시)벤젠

THF (44 ml) 중 트리메틸-[2-[4-(트리플루오로메톡시)페닐]에티닐]실란 (4.4 g, 1 eq.) 의 교반된 용액에 테트라부틸암모늄 플루오라이드 (TBAF) (1.7 ml, THF 중 1 M 용액) 를 0°C 에서 적가하였다. 생성 용액을 0 내지 5°C 에서 5 분 동안 교반하였다. TLC 에 의해 표시된 바와 같은 반응의 완료 후, 물 (50 ml) 을 0°C 에서 첨가하여 반응 혼합물을 쉐킷하였다. 유기상을 에틸 아세테이트 (3 x 25 ml) 를 사용하여 추출하고, 조합된 유기상을 염수를 사용하여 세척하고, 소듐 술페이트로 건조시켰다. 용매를 제거하여 미정제 생성물을 수득하고, 이를 헵탄 중 2-5% 에틸 아세테이트를 이동상으로서 사용하여 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제하여, 1-에티닐-4-(트리플루오로메톡시)벤젠 (1 g, 41% 수율) 을 수득하였다.

¹H NMR (500 MHz, CDCl₃): δ 7.43 (d, J = 8.00 Hz, 2H), 7.08 (d, J = 8.00 Hz, 2H), 3.01 (s, 1H).

단계 3: 4-[4-(트리플루오로메톡시)페닐]부트-3-인-2-온

-78°C 에서 THF (10 ml) 중 1-에티닐-4-(트리플루오로메톡시)벤젠 (1 g, 1 eq.) 의 교반된 용액에 n-부틸 리튬의 2.5 M 용액 (2.58 ml, 헥산 중 2.5 M, 1.2 eq.) 을 적가하고, 동일한 온도에서 20 분 동안 교반하였다. 그런 다음, THF (2 ml) 중 에틸 아세테이트 (0.63 ml, 1.2 eq.) 를 -78°C 에서, 이후 보론 트리플루오라이드 디에틸 에테르 복합체 (0.72 ml, 1.2 eq.) 를 동일한 온도에서 적가하고, 반응 혼합물을 1 시간 동안 교반하였다. TLC 에 의해 표시된 바와 같은 반응의 완료 후, 반응 혼합물을 포화 암모늄 클로라이드 용액으로 쉐킷하고, 에틸 아세테이트 (3 x 15 ml) 를 추출하고, 조합된 유기상을 염수를 사용하여 세척하고, 소듐 술페이트로 건조시켰다. 용매 제거 후, 미정제 생성물을 헵탄 중 15-20% 에틸 아세테이트를 이동상으로서 사용하여 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제하여, 4-[4-(트리플루오로메톡시)페닐]부트-3-인-2-온 (0.5 g, 41% 수율) 을 수득하였다.

¹H NMR (500 MHz, CDCl₃): δ 7.64 (d, J = 8.00 Hz, 2H), 7.26 (d, J = 8.00 Hz, 2H), 3.1 (s, 3H).

[0298] 단계 4: 4-[4-(트리플루오로메톡시)페닐]부트-3-인-2-온 옥심

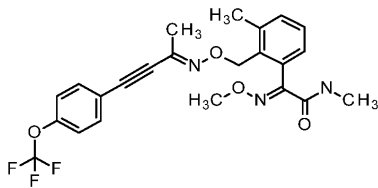
[0299] 10℃ 에서 메탄올:물 (4:1) 의 혼합물 중 4-[4-(트리플루오로메톡시)페닐]부트-3-인-2-온 (500 mg, 1 eq.) 의 교반된 용액에 히드록실아민 히드로클로라이드 (302 mg, 2 eq.) 및 소듐 아세테이트 (359 mg, 2 eq.) 를 첨가하였다. 혼합물을 10 내지 15℃ 에서 2 시간 동안 교반하였다. 반응의 TLC 표시된 완료 후, 혼합물을 건조되도록 증발시키고, 물 (15 ml) 을 첨가하고, 에틸 아세테이트 (3 x 15 ml) 로 추출하였다. 조합된 유기상을 염수를 사용하여 세척하고, 소듐 술페이트로 건조시키고, 용매를 제거하여 4-[4-(트리플루오로메톡시)페닐]부트-3-인-2-온 옥심 (500 mg, 93% 수율) 을 E 및 Z 이성질체의 혼합물 (50:50) 로서 수득하고, 이를 임의의 정제 없이 다음 단계에 직접 사용하였다.

[0300] 단계 5: 메틸 (2E)-2-메톡시이미노-2-[3-메틸-2-[(E)-[1-메틸-3-[4-(트리플루오로메톡시)페닐]프로프-2-이닐리덴]아미노]옥시메틸]페닐]아세테이트

[0301] 아세트니트릴 (8 ml) 중 4-[4-(트리플루오로메톡시)페닐]부트-3-인-2-온 옥심 (시스:트랜스 이성질체의 혼합물로서 250 mg, 1 eq.) 의 교반된 용액에 세슘 카르보네이트 (670 mg, 2 eq.) 및 메틸 (2E)-2-[2-(브로모메틸)-3-메틸-페닐]-2-메톡시이미노-아세테이트 (308 mg, 1 eq.) 를 25℃ 에서 첨가하고, 이 온도에서 2 시간 동안 교반하였다. 반응의 TLC 표시된 완료 후, 혼합물을 셀라이트를 통해 여과하고, 에틸 아세테이트 (25 ml) 로 세척하였다. 그런 다음, 여과물을 증발시키고, 헥산 중 15-20% 에틸 아세테이트를 이동상으로서 사용하여 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제하여, 표제 화합물 (400 mg, 84% 수율) 을 수득하였다.

[0302] ¹H NMR (500 MHz, DMSO-d₆): δ 7.77 (d, J = 8 Hz, 2H), 7.49 (d, J = 8 Hz, 2H), 7.34 – 7.29 (m, 2H), 7.01 – 7.00 (m, 1H), 5.50 (bs, 1H), 5.00 (bs, 1H), 3.86 (s, 3H), 3.65 (s, 3H), 2.46 (s, 3H), 2.05 (s, 3H).

[0303] 실시예 21: (2E)-2-메톡시이미노-N-메틸-2-[3-메틸-2-[(E)-[1-메틸-3-[4-(트리플루오로메톡시)페닐]프로프-2-이닐리덴]아미노]옥시메틸]페닐]아세트아미드



[0304]

[0305] 25℃ 에서 THF (6 ml) 중 메틸 (2E)-2-메톡시이미노-2-[3-메틸-2-[(E)-[1-메틸-3-[4-(트리플루오로메톡시)페닐]프로프-2-이닐리덴]아미노]옥시메틸]페닐]아세테이트 (상기 실시예 22) (300 mg, 1 eq) 의 교반된 용액에 메틸 아민 (0.6 ml, 물 중 40% 용액) 을 첨가하고, 2 시간 동안 교반하였다. TLC 에 의해 표시된 바와 같은 반응 완료 후, 물 (15 ml) 을 반응 혼합물에 첨가하고, 에틸 아세테이트 (3 x 15 ml) 를 사용하여 추출하고, 조합된 유기상을 염수를 사용하여 세척하고, 소듐 술페이트로 건조시켰다. 용매의 제거 후, 미정제 생성물을 헥산 중 30-35% 에틸 아세테이트를 이동상으로서 사용하여 컬럼 크로마토그래피에 의해 정제하여, 표제 화합물 (220 mg, 71% 수율) 을 수득하였다.

[0306] ¹H NMR (500 MHz, DMSO-d₆): δ 8.2 (bs, 1H), 7.67 (d, J = 5 Hz, 2H), 7.44 (d, J = 10 Hz, 2H), 7.30 – 7.27 (m, 2H), 6.9 – 7.00 (m, 1H), 5.00 (bs, 2H), 3.3 (s, 3H), 2.68 (d, 3H), 2.39 (s, 3H), 1.97 (s, 3H).

[0307] 표 S 에서의 하기 실시예를 상기 기재된 바와 같이 합성하고, 표 L 에서 기재된 바와 같이 LCMS 에 의해 특징분 석하였다.

[0308] 표 L: LCMS 방법

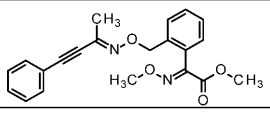
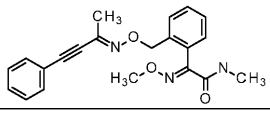
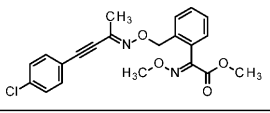
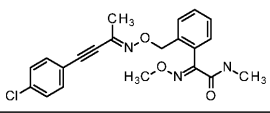
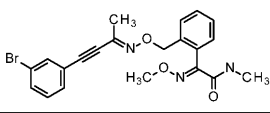
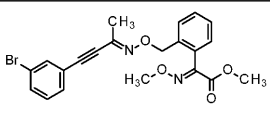
방법 A	장치 세부사항
컬럼: Agilent Eclipse Plus C18 (50 mm × 4.6 mm × 3 μm) 이동상: A: 물 중 10 mM 암모늄 포르메이트. B: 아세트니트릴 중 0.1% 포름산. 구배: 10% B → 100% B, 1.5 분. 유지 1 분 100% B. 1 분 10% B. 실행 시간: 3.50 또는 3.75 분. 유량: 1.2 ml/분; 컬럼 온: 30°C/40°C	LCMS2020 (Shimadzu) 이온화 공급원: ESI 질량 범위: 100 – 800 amu 극성: 이중; 방식: 스캔 LC 시스템: Nexera 고압 구배 시스템, 바이너리 펌프 검출기: PDA 스캔 파장: 220 nm / 최대 플롯
방법 B	장치 세부사항
컬럼: Xbridge Shield RP18 (2.1 x 50mm x 5 μm) 이동상: A: H ₂ O+10mM NH ₄ HCO ₃ ; B: 아세트니트릴 구배: 5% B, 0.40 분 및 5-95% B, 0.40-3.40 분, 95% B 에서 0.45 분 동안 유지, 95-5% B, 0.01 분, 실행 시간: 4.50 분. 유량: 0.8 ml/분; 컬럼 온: 40°C	Agilent 1200 & 6120B 이온화 공급원: ESI 질량 범위: 100 – 1000 amu 극성: 양성; 방식: 스캔 LC 시스템: Nexera 고압 구배 시스템, 바이너리 펌프 검출기: PDA 스캔 파장: 220 nm
방법 C	장치 세부사항
컬럼: Xbridge Shield RP18 (2.1 x 50mm x 5 μm) 이동상: A: H ₂ O+10mM NH ₄ HCO ₃ ; B: 아세트니트릴. 구배: 50%B, 0.40 분; 50-100% B, 0.40-3.40 분, 100% B 에서 0.45 분 동안 유지, 100-50% B, 0.01 분. 실행 시간: 4.50 분. 유량: 0.8 ml/분; 컬럼 온: 40°C	Agilent 1200 & 6120B 이온화 공급원: ESI 질량 범위: 100 – 1000 amu 극성: 양성; 방식: 스캔 LC 시스템: Nexera 고압 구배 시스템, 바이너리 펌프 검출기: PDA 스캔 파장: 220 nm
방법 D	장치 세부사항
컬럼: Xbridge Shield RP18 (2.1 x 50mm x 5 μm)	Agilent 1200 & 6120B

[0309]

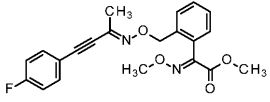
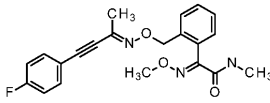
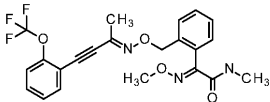
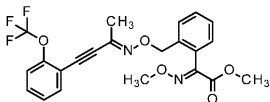
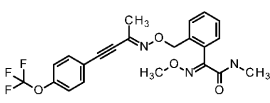
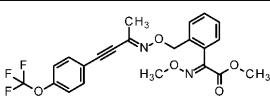
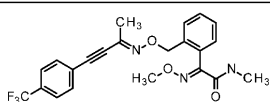
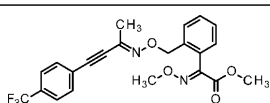
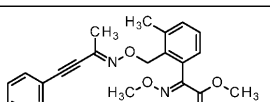
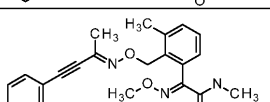
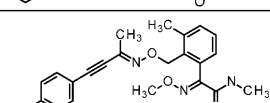
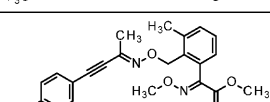
<p>이동상: A: H₂O+10mM NH₄HCO₃; B: 아세토니트릴. 구배: 50%B, 0.40 분; 50-100% B, 0.40-3.40 분, 100% B 에서 0.45 분 동안 유지, 100-50% B, 0.01 분. 실행 시간: 4.50 분. 유량: 0.8 ml/분; 컬럼 온도: 40°C</p>	<p>이온화 공급원: ESI 질량 범위:100 – 1000 amu 극성: 양성; 방식: 스캔 LC 시스템: Nexera 고압 구배 시스템, 바이너리 펌프 검출기: PDA 스캔 파장: 220 nm</p>
<p>방법 E</p>	<p>장치 세부사항</p>
<p>컬럼: Kinetex -C18 (50 mm × 2.1 mm × 5 μm) 이동상: A: 물 중 0.037% 트리플루오로아세트산. B: 아세토니트릴 중 0.018% 트리플루오로아세트 산. 구배: 5% B, 0.40 분; 5-95% B, 0.4-3.0 분, 95% B 에서 1.00 분 동안 유지; 95-5%B, 0.01 분. 유량: 1.0 mL/분; 컬럼 온도: 40°C</p>	<p>Shimadzu LC-20AD&MS 2020 이온화 공급원: ESI 질량 범위: 100 – 1000 amu 극성: 양성; 방식: 스캔 LC 시스템: Nexera 고압 구배 시스 템, 바이너리 펌프 검출기: DAD 스캔 파장: 220 nm / 최대 플롯</p>
<p>방법 F</p>	<p>장치 세부사항</p>
<p>컬럼: Agilent Eclipse Plus C18 (50 mm × 4.6 m m × 3 μm) 이동상: A: 물 중 10 mM 암모늄 포르메이트. B: 아세토니트릴 구배: 10% B → 100% B, 5 분. 유지 3 분 100% B. 2 분 10% B. 실행 시간: 10 분. 유량: 1.2 ml/분; 컬럼 온도: 40°C</p>	<p>LCMS2020 (Shimadzu) 이온화 공급원: ESI 질량 범위: 100 – 800 amu 극성: 이중; 방식: 스캔 LC 시스템: Nexera 고압 구배 시스 템, 바이너리 펌프 검출기: PDA 스캔 파장: 220 nm / 최대 플롯</p>

[0310]

[0311] 표 S:

No.	구조	R _t [분]	질량	방법
1		2.04	365	A
2		1.93	364	A
3		2.21	399	A
4		2.1	398	A
5		2.15	444	A
6		2.07	443	A

[0312]

No.	구조	R _t [분]	질량	방법
7		2.11	383	A
8		2.04	382	A
9		2.10	448	A
10		2.23	449	A
11		2.14	448	A
12		2.23	449	A
13		2.13	432	A
14		2.21	433	A
15		2.17	379	A
16		2.05	378	A
17		2.18	446	A
18		2.26	447	A

[0313]

No.	구조	R _t [분]	질량	방법
19		2.16	392	A
20		2.27	383	A
21		2.19	462	A
22		2.08	463	A
23		2.24	393	A
24		2.14	392	A
25		2.17	462	A
26		2.25	463	A
27		2.19	462	A
28		2.28	463	A
29		2.19	456	A
30		2.3	459	A

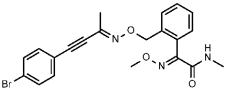
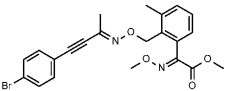
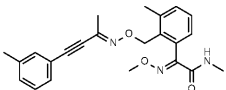
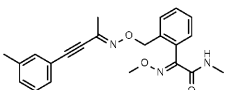
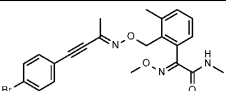
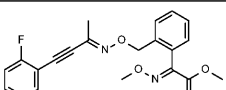
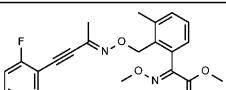
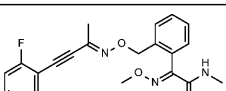
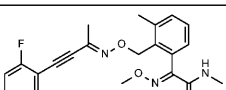
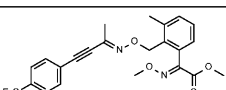
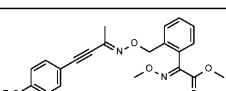
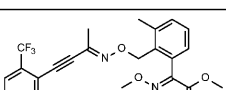
[0314]

No.	구조	R _i [분]	질량	방법
31		2.16	412	A
32		2.2	413	A
33		2.07	396	A
34		2.18	397	A
35		2.07	383	A
36		2.18	397	A
37		2.01	382	A
38		2.06	396	A
39		2.26	447	A
40		2.16	446	A
41		2.2	433	A
42		2.24	393	A

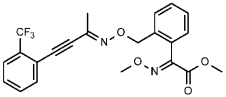
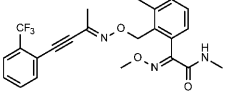
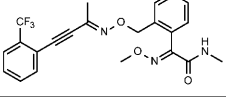
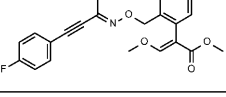
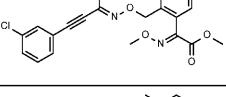
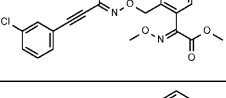
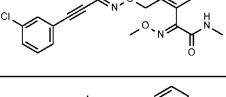
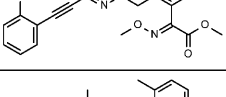
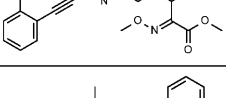
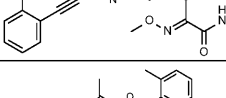
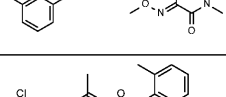
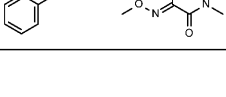
[0315]

No.	구조	R _t [분]	질량	방법
43		2.19	379	A
44		2.10	432	A
45		2.25	459	A
46		2.2	445	A
47		2.15	458	A
48		2.14	444	A
49		2.14	392	A
50		2.21	379	A
51		2.09	378	A
52		2.24	449	A
53		2.14	448	A
54		2.12	445	A

[0316]

No.	구조	R _t [분]	질량	방법
55		2.14	444	A
56		2.29	459	A
57		2.16	392	A
58		2.09	378	A
59		2.19	456	A
60		2.1	383	A
61		2.15	397	A
62		1.99	382	A
63		2.04	396	A
64		2.26	447	A
65		2.21	433	A
66		2.23	447	A

[0317]

No.	구조	R _t [분]	질량	방법
67		2.19	433	A
68		2.12	446	A
69		2.09	432	A
70		2.17	396	A
71		2.09	399	A
72		2.2	413	A
73		2.1	398	A
74		2.18	399	A
75		2.2	413	A
76		2.08	398	A
77		2.16	412	A
78		4.6	412	F

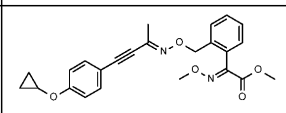
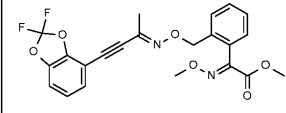
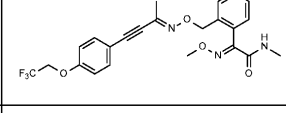
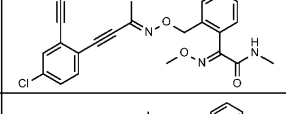
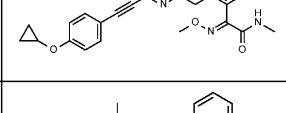
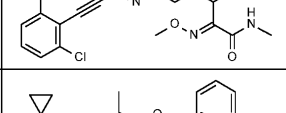
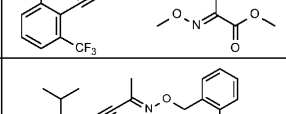
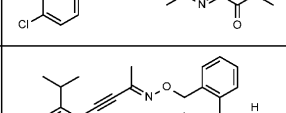
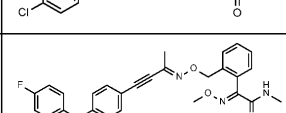
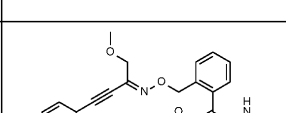
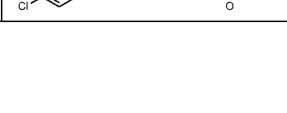
[0318]

No.	구조	R _t [분]	질량	방법
79		2.22	449	A
80		2.14	448	A
81		2.21	449	A
82		2.06	448	A
83		2.02	416	A
84		1.84	444.1	C
85		2.26	445.1	C
86		2.25	438.2	C
87		2.29	423.2	C
88		1.88	422.2	C
89		2.31	405.2	C
90		2.19	417.1	C

[0319]

No.	구조	R _t [분]	질량	방법
91		2.62	439.1	C
92		3.43	404.2	B
93		2.20	433.1	C
94		2.49	467.1	C
95		2.42	437.2	C
96		2.02	436.2	C
97		2.54	437.1	C
98		2.14	463.1	C
99		2.13	466.1	C
100		2.52	475.1	C
101		1.75	444.1	C

[0320]

No.	구조	R _t [분]	질량	방법
102		2.17	421.2	C
103		2.19	445.1	C
104		1.72	462.2	C
105		2.17	436.1	C
106		1.73	420.2	C
107		1.76	432.1	C
108		2.48	473.2	C
109		2.79	441.2	C
110		2.45	440.2	C
111		2.19	474.2	C
112		2.73	428	E

[0321]

No.	구조	R _t [분]	질량	방법
113		2.94	429.1	D
114		2.15	382	A
115		2.47	492.2	C
116		1.74	450.2	C
117		3.16	449.1	B
118		2.78	493.2	C
119		2.13	472.2	C
120		3.10	488.2	D
121		3.23	489.2	D
122		2.13	454	A
123		2.12	455	A

[0322]

No.	구조	R _t [분]	질량	방법
124		2.12	454	A
125		2.01	455	A
126		1.90	464	A
127		2.01	455	A
128		1.89	453	A

[0323]

[0324]

생물학적 연구

[0325]

온실

[0326]

화합물을 아세톤 및/또는 디메틸술폰과 에톡실화된 알킬페놀을 기재로 하는 습윤제/유화제 Wettol의 혼합물 중에 99 대 1의 용매-유화제 비(부피)로 용해시켜 총 부피가 5 ml가 되도록 하였다. 이어서, 물을 총 부피가 100 ml가 되도록 첨가하였다. 이어서, 이 저장 용액을 기재된 용매-유화제-물 혼합물로 하기 표에 제시된 최종 농도로 희석하였다.

[0327]

사용예 1. 파코프소라 파치리지에 의해 야기된 대두에서의 대두 녹병의 보호적 제어 (PHAKPA P2)

[0328]

이어서, 아래 기재된 바와 같은 농도의 활성 성분 또는 그의 혼합물을 함유하는, 앞서 기재된 분무 용액을 화분에 심은 대두 묘목의 잎에 분무하여 흘러내리게 하였다. 식물을 공기 건조되도록 두었다. 시험 식물을 2일 동안 23-27°C 및 60 내지 80%의 상대 습도의 온실 챔버에서 재배하였다. 그 후 파코프소라 파치리지의 포자를 식물에 접종하였다. 사용된 균주는 Qo 억제제에 대한 내성을 부여하는 미토콘드리아 시토크롬 b 단백질 내 아미노산 치환 F129L을 함유한다. 인공 접종의 성공을 보장하기 위해서, 식물을 약 95%의 상대 습도 및 20 내지 24°C의 가습 챔버에 24시간 동안 옮겨두었다. 시험 식물을 최대 14일 동안 23 내지 27°C 및 60 내지 80%의 상대 습도의 온실 챔버에서 재배하였다. 잎에 대한 진균 공격의 정도를 병든 잎 면적%로서 시각적으로 평가하였고, 처리되지 않은 대조군의 질환 수준은 일반적으로 85%보다 높았다.

[0329]

사용예 2. 파코프소라 파치리지에 의해 야기된 대두에서의 대두 녹병의 보호적 제어 (PHAKPA P6)

[0330]

아래 기재된 바와 같은 농도의 활성 성분을 함유하는, 앞서 기재된 분무 용액을 화분에 심은 대두 묘목의 잎에 분무하여 흘러내리게 하였다. 식물을 공기 건조되도록 두었다. 시험 식물을 6일 동안 23-27°C 및 60 내지 80%의 상대 습도의 온실 챔버에서 재배하였다. 그 후 파코프소라 파치리지의 포자를 식물에 접종하였다. 사용된 균주는 Qo 억제제에 대한 내성을 부여하는 미토콘드리아 시토크롬 b 단백질 내 아미노산 치환 F129L을 함유한다. 인공 접종의 성공을 보장하기 위해서, 식물을 약 95%의 상대 습도 및 23 내지 27°C의 가습 챔버에 24시간 동안 옮겨두었다. 시험 식물을 최대 14일 동안 23 내지 27°C 및 60 내지 80%의 상대 습도의 온실 챔버에서 재배하였다. 잎에 대한 진균 공격의 정도를 병든 잎 면적%로서 시각적으로 평가하였고, 처리되지 않은 대조군의 질환 수준은 일반적으로 85%보다 높았다.

[0331]

상기 언급한 사용예의 결과가 하기 표에 제시되어 있다. 아래의 모든 시험 결과는 Qo 억제제에 대한 내성을 부여하는 미토콘드리아 시토크롬 b 단백질 내 아미노산 치환 F129L을 함유하는 식물병원성 진균의 방제에 관해 제시된다.

No.	구조	PHAKPA 질 환 수 준 (%)	
		16 ppm 에서의 P2	16 ppm 에서의 P6
22		93	97
23		0	0
25		0	0
26		2	6
27		0	0
28		0	0
29		1	0
30		0	0
31		0	5
32		12	35
33		0	0
34		0	0
35		32	25
36		4	9
37		6	8

No.	구조	PHAKPA 질 환 수 준 (%)	
		16 ppm 에서의 P2	16 ppm 에서의 P6
38		0	1
39		2	1
40		0	0
41		50	67
42		3	6
43		40	27
44		1	5
45		25	22
46		47	37
47		0	0
48		0	2
49		0	0
51		0	0
52		13	33
53		0	0

[0334]

No.	구조	PHAKPA 질 환 수 준 (%)	
		16 ppm 에서의 P2	16 ppm 에서의 P6
54		22	25
55		23	40
56		18	37
57		0	0
58		2	4
59		13	28
60		40	17
61		8	8
62		2	2
63		0	0
64		43	60
65		80	70
66		17	30
67		50	60

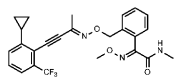
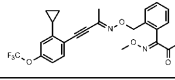
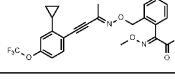
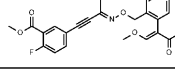
No.	구조	PHAKPA 질 환 수 준 (%)	
		16 ppm 에서의 P2	16 ppm 에서의 P6
68		0	1
69		1	2
70		0	0
71		20	17
72		7	8
73		1	0
74		42	47
75		22	40
76		3	4
77		0	0
78		0	0
79		67	50
80		43	28
82		4	27
83		17	22

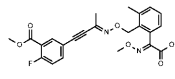
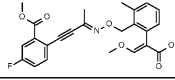
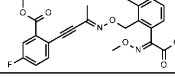
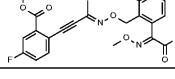
[0335]

No.	구조	PHAKPA 질환 수준 (%)	
		16 ppm 에서의 P2	16 ppm 에서의 P6
84		77	67
85		100	83
86		5	18
88		77	60
90		30	57
91		53	43
92		60	57
93		87	97
94		53	47
98		73	93
99		0	0
100		77	77
101		4	2
102		80	63
103		28	22

No.	구조	PHAKPA 질환 수준 (%)	
		16 ppm 에서의 P2	16 ppm 에서의 P6
104		53	32
106		23	13
107		27	15
108		90	87
109		11	12
110		0	2
111		33	23
112		38	25
113		87	77
114		0	0
115		2	1
116		80	67
117		77	63
118		3	4

[0336]

No.	구조	PHAKPA 질 환 수 준 (%)	
		16 ppm 에서의 P2	16 ppm 에서의 P6
119		77	77
120		15	22
121		87	53
122		73	60

No.	구조	PHAKPA 질 환 수 준 (%)	
		16 ppm 에서의 P2	16 ppm 에서의 P6
123		43	37
124		14	53
125		17	45
127		53	47

[0337]