

(19) 日本国特許庁 (JP)

(12) 公表特許公報 (A)

(11) 特許出願公表番号

特表2017-526672

(P2017-526672A)

(43) 公表日 平成29年9月14日 (2017.9.14)

(51) Int.Cl.	F I	テーマコード (参考)
C07D 249/08 (2006.01)	C O 7 D 249/08 5 3 5	4 C O 6 3
A01N 47/32 (2006.01)	A O 1 N 47/32	4 C O 8 6
A01N 47/36 (2006.01)	A O 1 N 47/36 1 O 1 B	4 H O 1 1
A01P 7/04 (2006.01)	A O 1 N 47/36 1 O 1 Z	
C07D 417/12 (2006.01)	A O 1 P 7/04	
審査請求 未請求 予備審査請求 未請求 (全 189 頁) 最終頁に続く		

(21) 出願番号 特願2017-508983 (P2017-508983)
 (86) (22) 出願日 平成27年8月25日 (2015.8.25)
 (85) 翻訳文提出日 平成29年4月12日 (2017.4.12)
 (86) 国際出願番号 PCT/US2015/046667
 (87) 国際公開番号 W02016/033025
 (87) 国際公開日 平成28年3月3日 (2016.3.3)
 (31) 優先権主張番号 62/041,685
 (32) 優先日 平成26年8月26日 (2014.8.26)
 (33) 優先権主張国 米国 (US)

(71) 出願人 501035309
 ダウ アグロサイエンシズ エルエルシー
 アメリカ合衆国 インディアナ州 46268,
 インディアナポリス, ジオンスヴィレ
 ロード, 9330
 (74) 代理人 110000741
 特許業務法人小田島特許事務所
 (72) 発明者 ボーム, エリック・ダブリュー
 アメリカ合衆国インディアナ州46268
 インディアナポリス・ザイオンズビル
 ロード9330

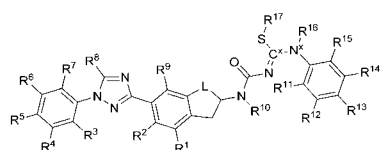
最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 所定の殺虫農薬の利用性を有する分子、ならびにそれに関する中間体、組成物および方法

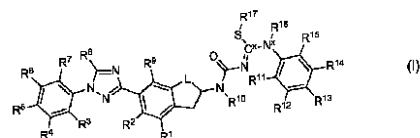
(57) 【要約】

本開示は、線形動物門、節足動物門および／若しくは軟体動物門の害虫に対する殺虫殺虫農薬の利用性を有する分子、こうした分子の製造方法およびこうした方法で使用される中間体、こうした分子を含有する組成物、ならびにこうした害虫に対するこうした分子の使用方法の分野に関する。これら分子は、例えば殺線虫剤、ダニ駆除剤、殺虫剤、殺ダニ剤および／若しくは軟体類駆除剤として使用しうる。本文書は以下の式（「式1」）を有する分子を開示する。

【化1】



(1)



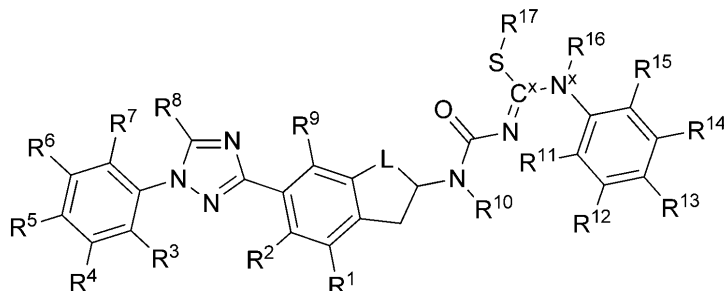
(1)

【特許請求の範囲】

【請求項 1】

以下の式

【化 1】



式1

10

式中：

(A) R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 および R^9 は、H、F、Cl、Br、I、CN、 NO_2 、OH、 (C_1-C_4) アルキル、 (C_2-C_4) アルケニル、 (C_2-C_4) アルキニル、 (C_1-C_4) ハロアルキル、 (C_1-C_4) アルコキシ、 (C_1-C_4) ハロアルコキシ、 (C_3-C_6) シクロアルキルおよび (C_3-C_6) シクロアルコキシよりなる群からそれぞれ独立に選択され、

20

ここで各アルキル、アルケニル、アルキニル、ハロアルキル、アルコキシ、ハロアルコキシ、シクロアルキルおよびシクロアルコキシは、F、Cl、CN、OHおよびオキソよりなる群から独立に選択される1個若しくはそれ以上の置換基で場合によっては置換されており；

(B) R^8 はHであり；

(C) Lは、F、Cl、CN、OHおよびオキソよりなる群から独立に選択される1個若しくはそれ以上の置換基で場合によっては置換されている (C_1-C_4) アルキルであり；

(D) R^{10} は、H、 (C_1-C_4) アルキル、 (C_2-C_4) アルケニル、 (C_2-C_4) アルキニル、 (C_1-C_4) ハロアルキル、 $((\text{C}_1-\text{C}_4)$ アルキル) $((\text{C}_3-\text{C}_6)$ シクロアルキル)、 (C_1-C_4) アルキルフェニル、 (C_1-C_4) アルキルヘテロシクリル、 $((\text{C}_1-\text{C}_4)$ アルキル)O $((\text{C}_1-\text{C}_4)$ アルキル)、 $((\text{C}_1-\text{C}_4)$ アルキル)OC(O) $((\text{C}_1-\text{C}_4)$ アルキル)、 $((\text{C}_1-\text{C}_4)$ アルキル)OC(O)O $((\text{C}_1-\text{C}_4)$ アルキル)、C(O) $((\text{C}_1-\text{C}_4)$ アルキル)およびC(O)フェニルよりなる群から選択され、

30

ここで各アルキル、アルケニル、アルキニル、ハロアルキル、シクロアルキル、フェニルおよびヘテロシクリルは、F、Cl、CN、OHおよびオキソよりなる群から独立に選択される1個若しくはそれ以上の置換基で場合によっては置換されており；

(E) R^{11} 、 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} および R^{15} は、H、F、Cl、Br、I、CN、 NO_2 、OH、 (C_1-C_4) アルキル、 (C_2-C_4) アルケニル、 (C_2-C_4) アルキニル、 (C_1-C_4) ハロアルキル、 (C_1-C_4) アルコキシ、 (C_1-C_4) ハロアルコキシ、 (C_3-C_6) シクロアルキルおよび (C_3-C_6) シクロアルコキシよりなる群からそれぞれ独立に選択され；

40

(F) R^{16} および R^{17} は、後出の(G)、H、 (C_1-C_4) アルキル、 (C_2-C_4) アルケニル、 (C_2-C_4) アルキニル、 (C_1-C_4) ハロアルキル、 $((\text{C}_1-\text{C}_4)$ アルキル) $((\text{C}_3-\text{C}_6)$ シクロアルキル)、 (C_1-C_4) アルキルフェニル、 (C_1-C_4) アルキルヘテロシクリル、 $((\text{C}_1-\text{C}_4)$ アルキル)C(O) $((\text{C}_1-\text{C}_4)$ アルキル)および $((\text{C}_1-\text{C}_4)$ アルキル)C(O)O $((\text{C}_1-\text{C}_4)$ アルキル)よりなる群からそれぞれ独立に選択され、

ここで各アルキル、アルケニル、アルキニル、ハロアルキル、シクロアルキル、フェニルおよびヘテロシクリルは、F、Cl、CN、OHおよびオキソよりなる群から独立に選択

50

される 1 個若しくはそれ以上の置換基で場合によっては置換されており；ならびに

(G) R^{16} および R^{17} は、(S) $C^x(N^x)$ と一緒になって、4～8 員ヘテロシクリル環を形成し、

ここで前記ヘテロシクリル環は、 R^{18} から独立に選択される 1 個若しくはそれ以上の置換基で場合によっては置換されていることができ、

式中 R^{18} は、H、F、Cl、Br、I、CN、OH、(C_1-C_4) アルキル、オキソ、(C_1-C_4) アルキル、(C_2-C_4) アルケニル、(C_2-C_4) アルキニル、(C_1-C_4) ハロアルキル、((C_1-C_4) アルキル) ((C_3-C_6) シクロアルキル)、(C_1-C_4) アルキルフェニル、(C_1-C_4) アルキルヘテロシクリル、((C_1-C_4) アルキル) C(O) ((C_1-C_4) アルキル)、((C_1-C_4) アルキル) C(O) O ((C_1-C_4) アルキル)、フェニルおよびヘテロシクリルよりなる群から選択され、

10

ここで各アルキル、アルケニル、アルキニル、ハロアルキル、シクロアルキル、フェニルおよびヘテロシクリルは、F、Cl、Br、I、CN、OH およびオキソよりなる群から独立に選択される 1 個若しくはそれ以上の置換基で場合によっては置換されており、を有する分子。

【請求項 2】

(A) R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 および R^9 が、H および (C_1-C_4) ハロアルコキシよりなる群からそれぞれ独立に選択され；

(B) R^8 が H であり；

(C) L が (C_1-C_4) アルキルであり；

20

(D) R^{10} が H であり；

(E) R^{11} 、 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} および R^{15} が、H、F、Cl、Br、I、(C_1-C_4) アルキル、(C_1-C_4) アルコキシおよび (C_3-C_6) シクロアルキルよりなる群からそれぞれ独立に選択され；

(F) R^{16} および R^{17} が後出の (G) 若しくは H であり；ならびに

(G) R^{16} および R^{17} が、(S) $C^x(N^x)$ と一緒になって 4～8 員ヘテロシクリル環を形成し、

ここで前記ヘテロシクリル環は、 R^{18} から独立に選択される 1 個若しくはそれ以上の置換基で場合によっては置換されていることができ、

式中 R^{18} は H、 CH_3 およびオキソよりなる群から選択される、

30

請求項 1 に記載の分子。

【請求項 3】

(A) R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 および R^9 が、H、 OCF_3 および OCF_2CF_3 よりなる群からそれぞれ独立に選択され；

(B) R^8 が H であり；

(C) L が $-CH_2-$ 若しくは $-CH_2CH_2-$ であり；

(D) R^{10} が H であり；

(E) R^{11} 、 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} および R^{15} が、H、F、Cl、 CH_3 、 CH_2CH_3 、 $CH_2CH_2CH_3$ 、 $CH(CH_3)_2$ 、 CH_3O およびシクロプロピルよりなる群からそれぞれ独立に選択され；

40

(F) R^{16} および R^{17} が後出の (G) 若しくは H であり；ならびに

(G) R^{16} および R^{17} が、(S) $C^x(N^x)$ と一緒になって 4～8 員ヘテロシクリル環を形成し、

ここで前記ヘテロシクリル環は、 R^{18} から独立に選択される 1 個若しくはそれ以上の置換基で場合によっては置換されていることができ、

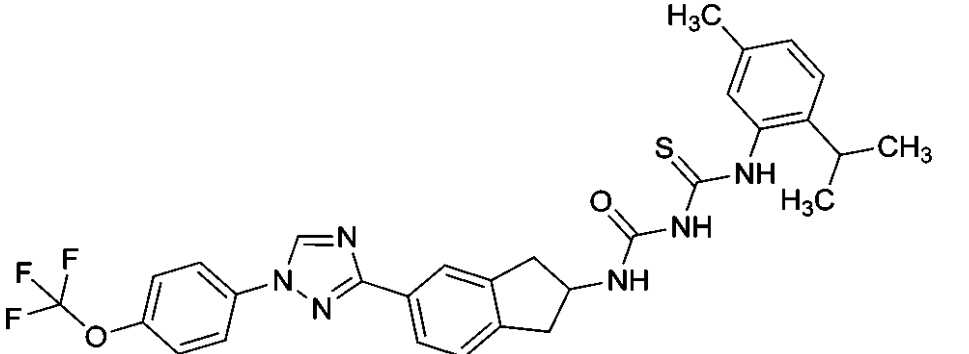
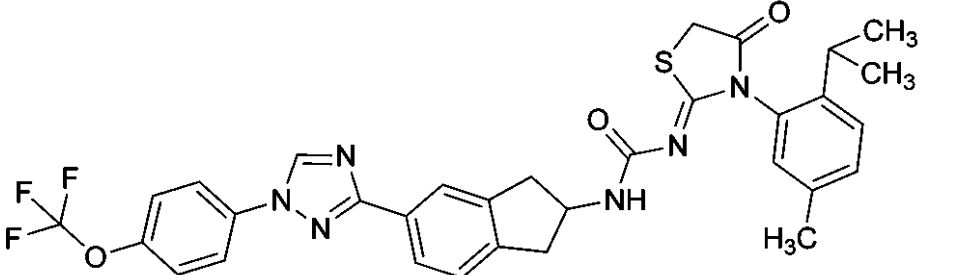
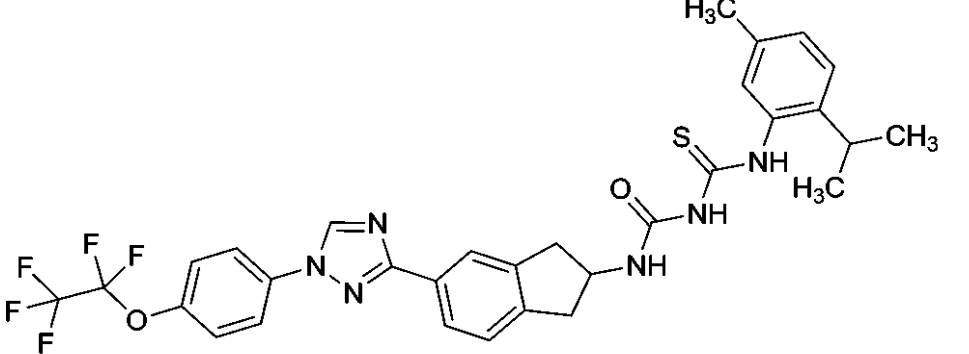
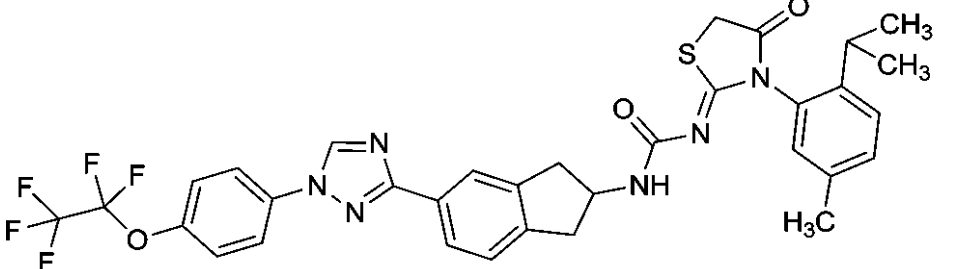
式中 R^{18} は H、 CH_3 およびオキソよりなる群から選択される、

請求項 1 に記載の分子。

【請求項 4】

前記分子が、以下の分子

【表 1 - 1】

番号	構造
F1	
F2	
F3	
F4	

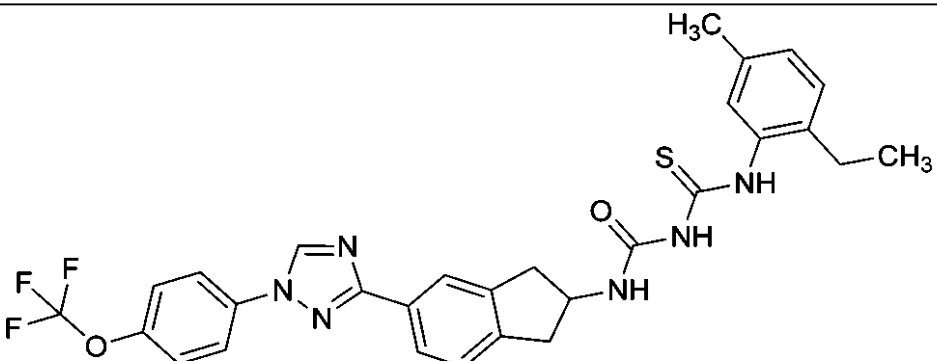
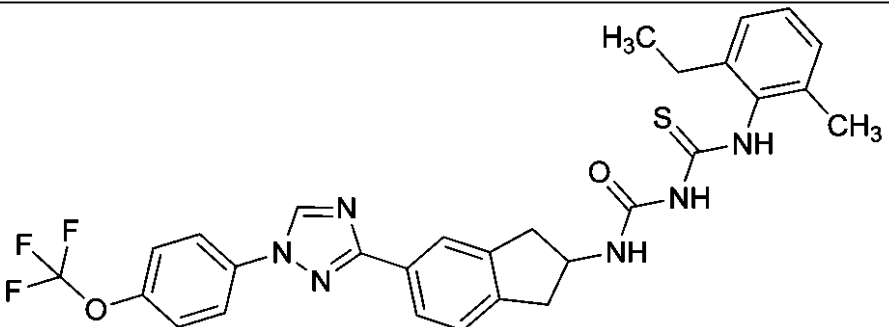
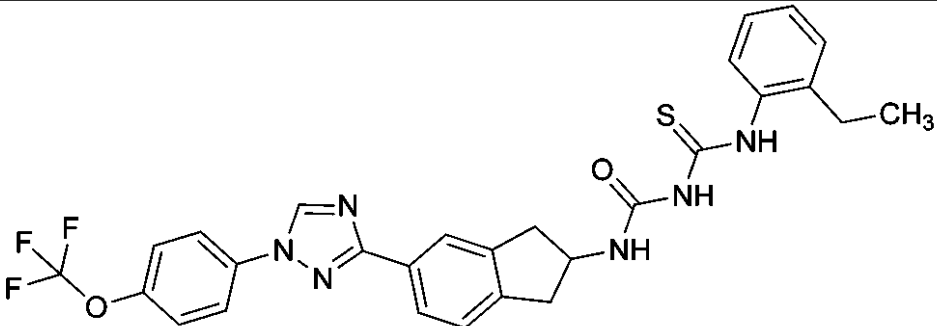
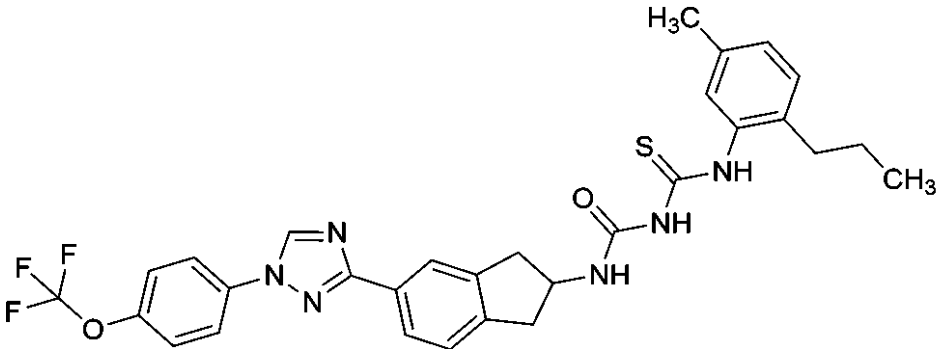
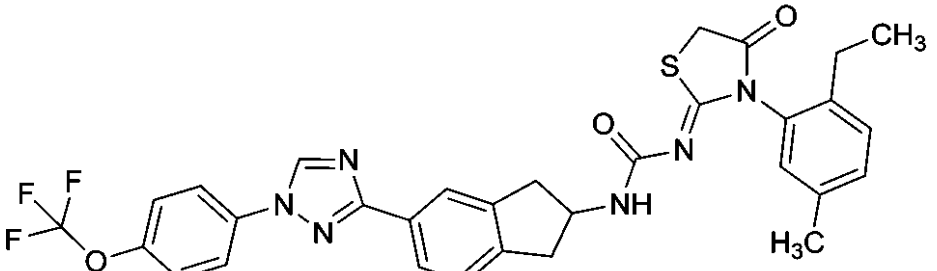
10

20

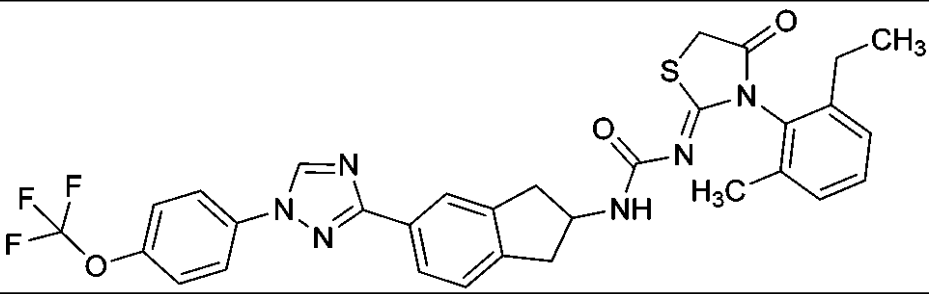
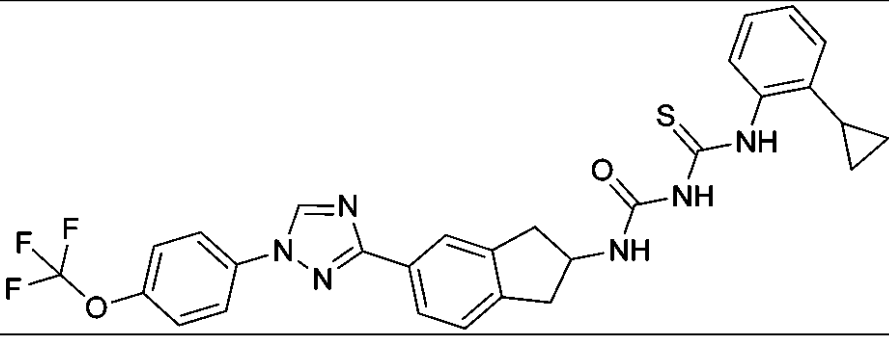
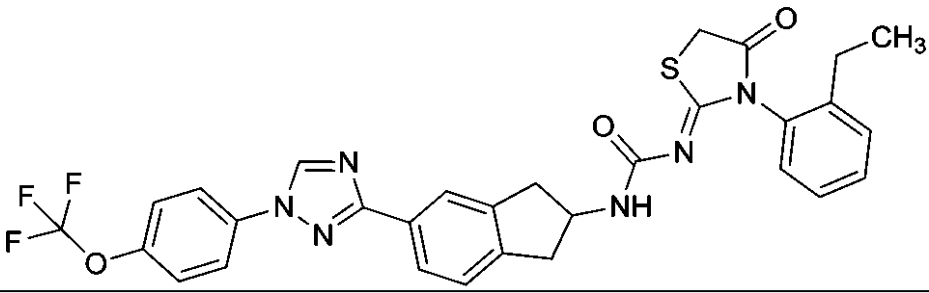
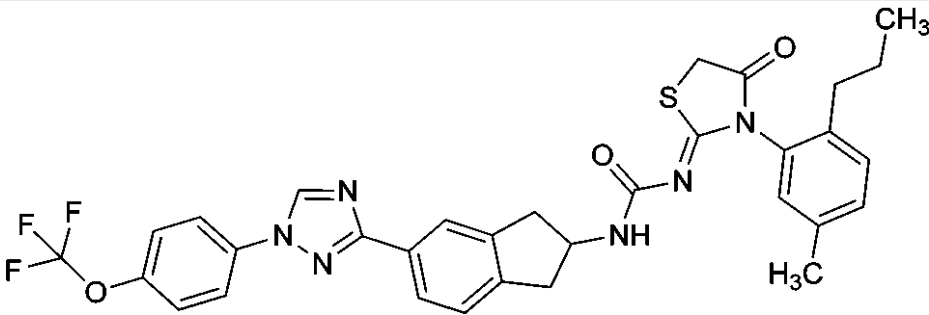
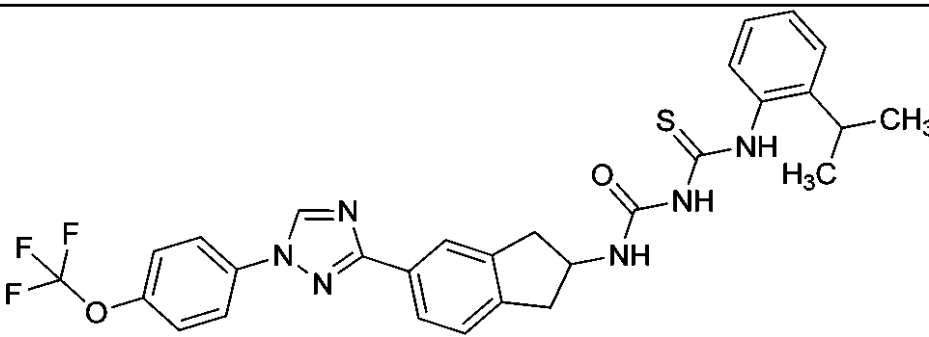
30

40

【表 1 - 2】

F5		10
F6		20
F7		30
F8		40
F9		

【表 1 - 3】

F10	
F11	
F12	
F13	
F14	

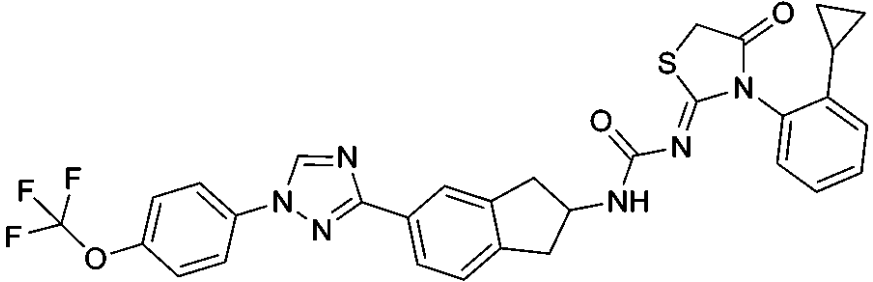
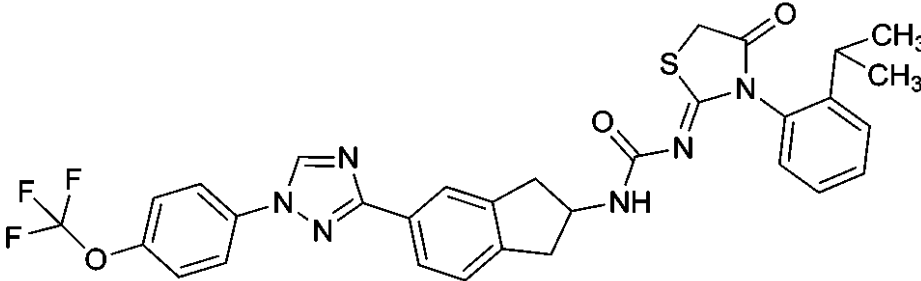
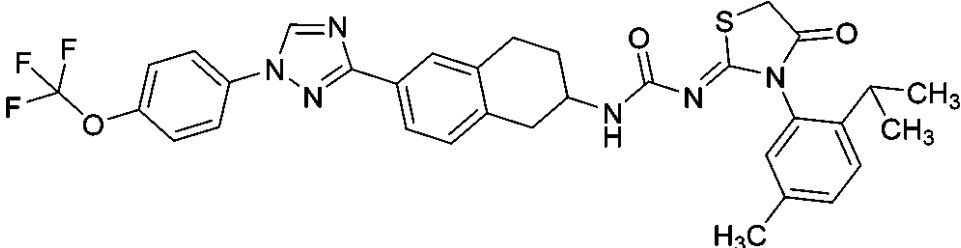
10

20

30

40

【表 1 - 4】

F15	
F16	
F17	

10

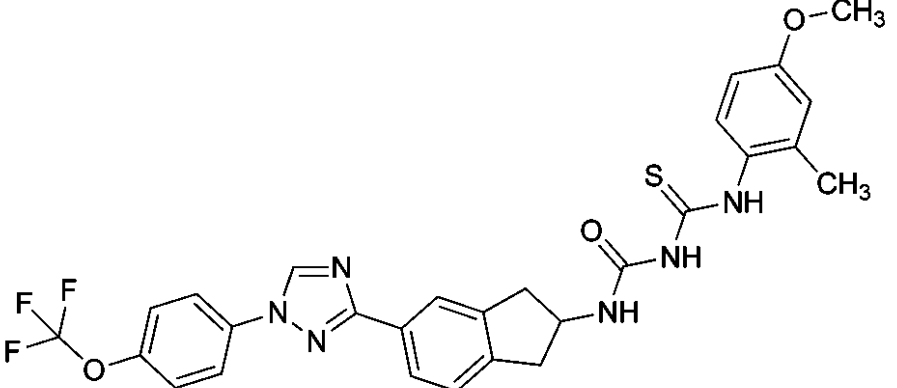
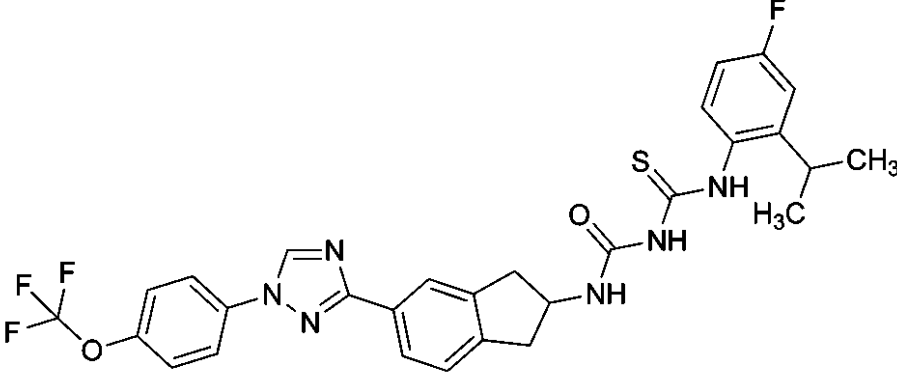
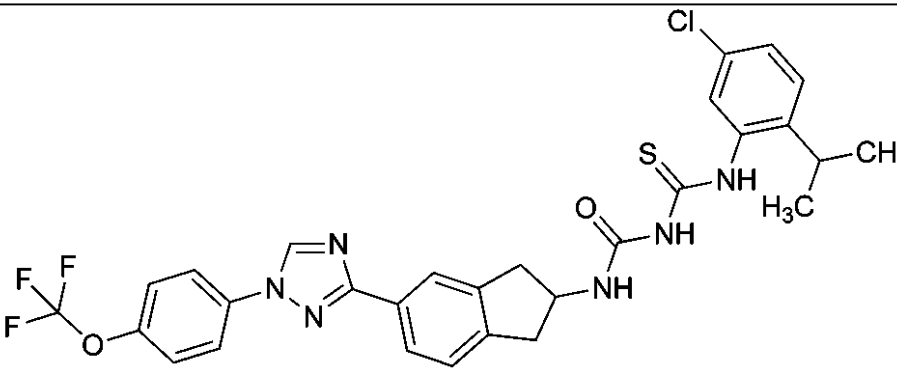
20

の 1 つから選択される、請求項 1 に記載の分子。

【請求項 5】

前記分子が、以下の分子

【表 2 - 1】

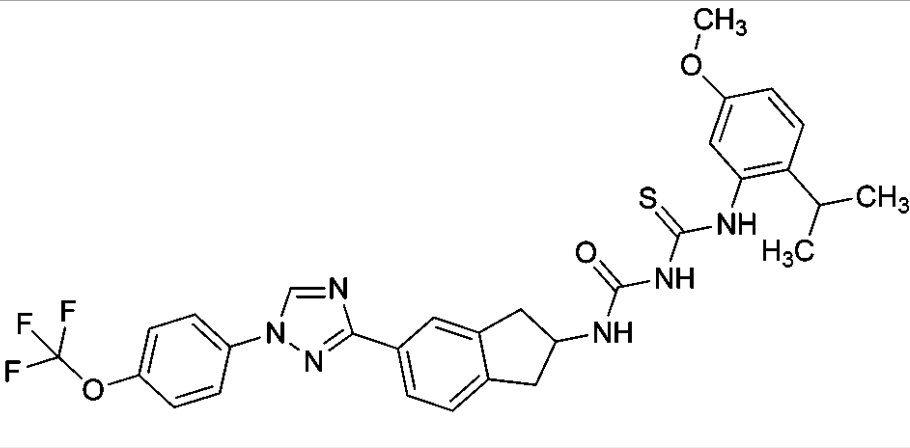
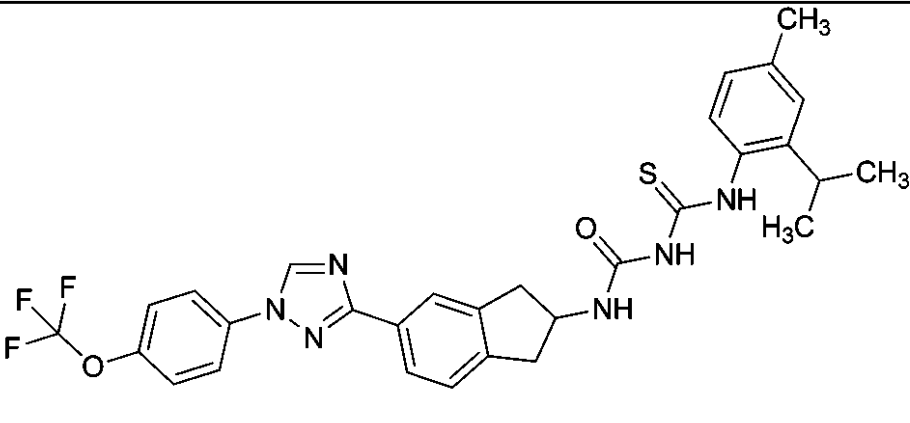
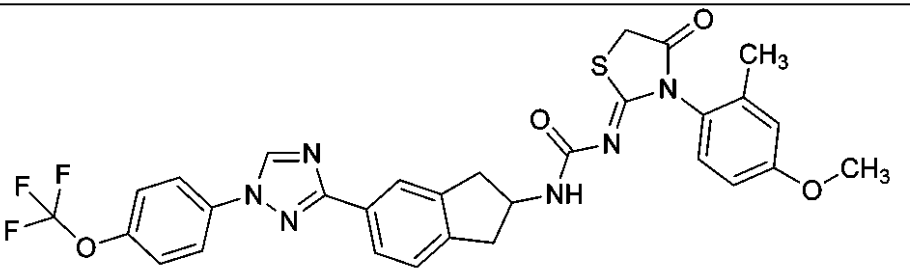
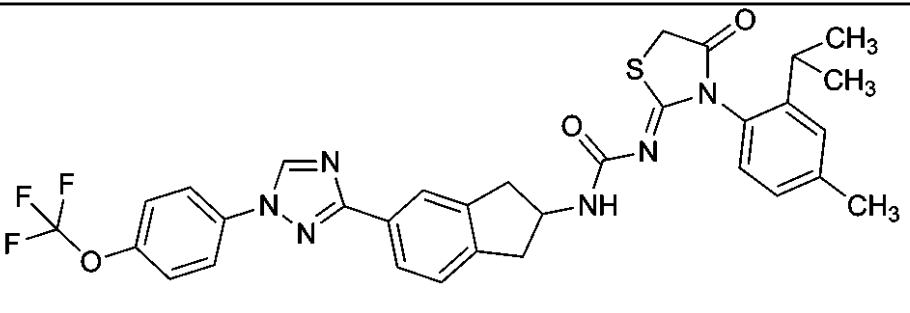
番号	構造
P1	 <chem>COc1cc(C)cc(NC(=S)NC(=O)Nc2ccc3ccccc3c2)c1NC(=O)Nc4ccc5ccccc5c4-c6nn[nH]6-c7ccc(OC(F)(F)F)cc7</chem>
P2	 <chem>CC(C)c1cc(F)cc(NC(=S)NC(=O)Nc2ccc3ccccc3c2)c1NC(=O)Nc4ccc5ccccc5c4-c6nn[nH]6-c7ccc(OC(F)(F)F)cc7</chem>
P3	 <chem>CC(C)c1cc(Cl)cc(NC(=S)NC(=O)Nc2ccc3ccccc3c2)c1NC(=O)Nc4ccc5ccccc5c4-c6nn[nH]6-c7ccc(OC(F)(F)F)cc7</chem>

10

20

30

【表 2 - 2】

P4	
P5	
P6	
P7	

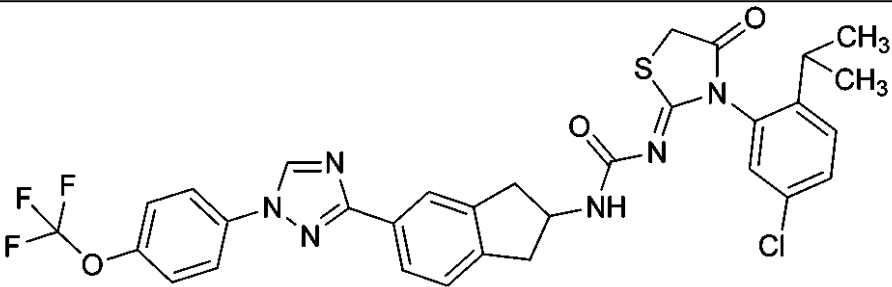
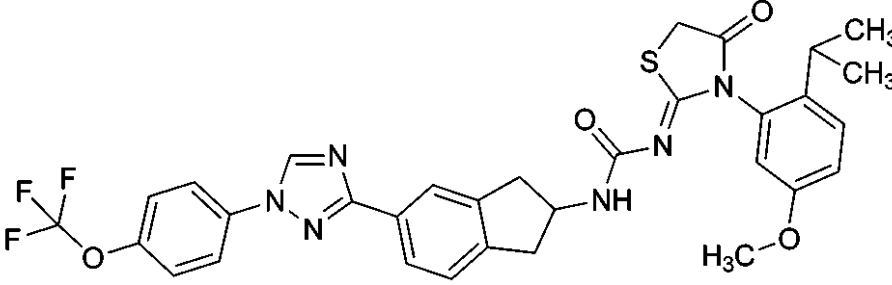
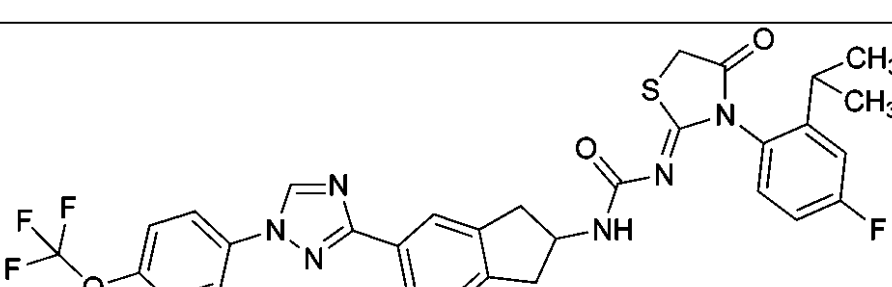
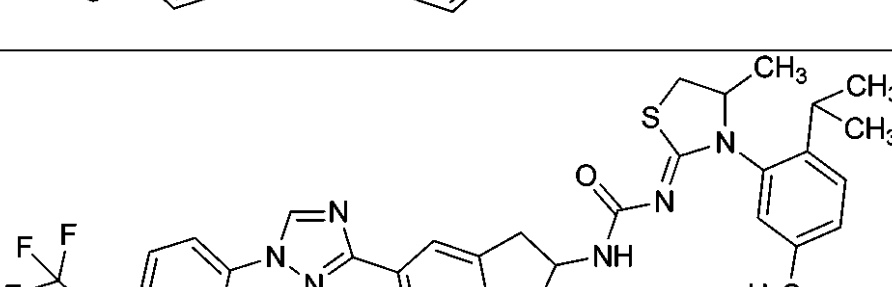
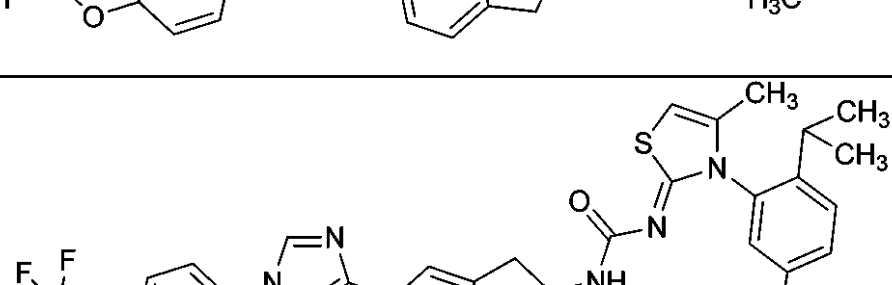
10

20

30

40

【表 2 - 3】

P8	
P9	
P10	
P11	
P12	

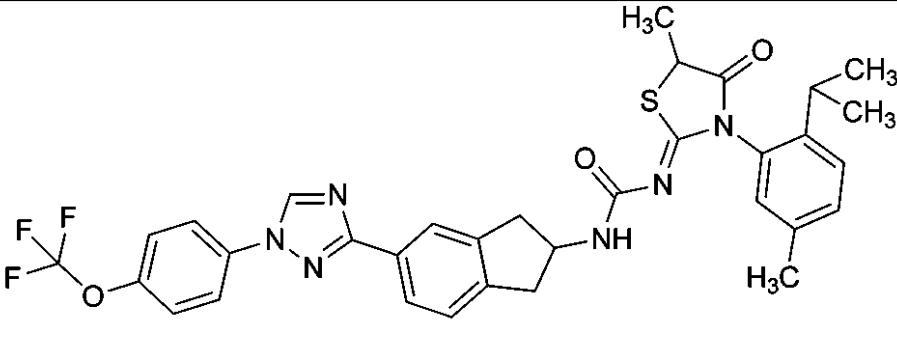
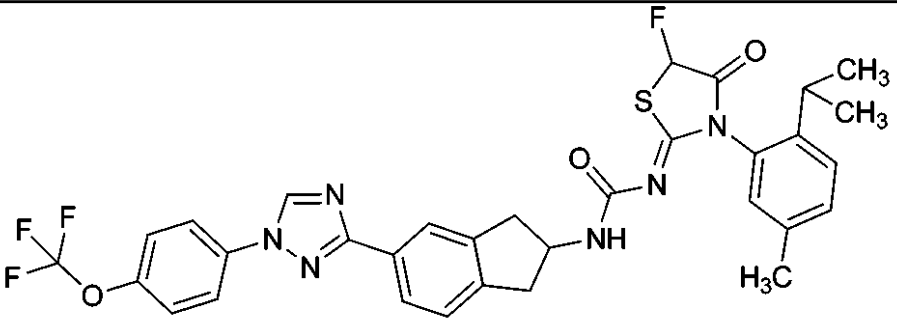
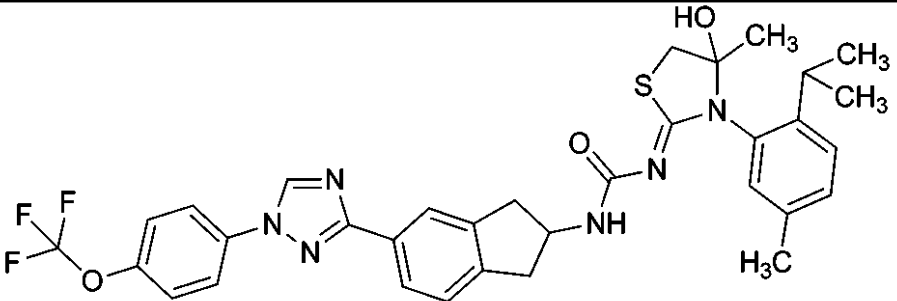
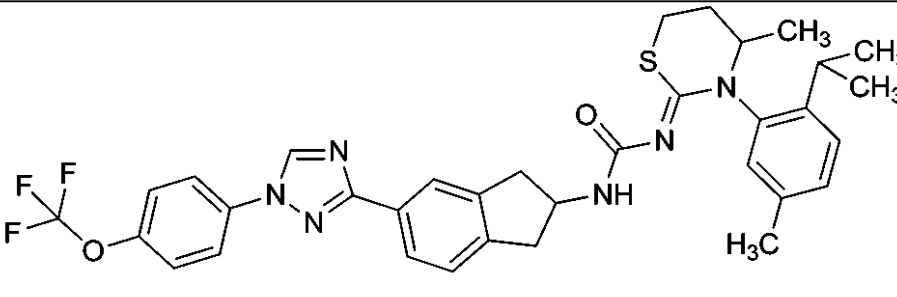
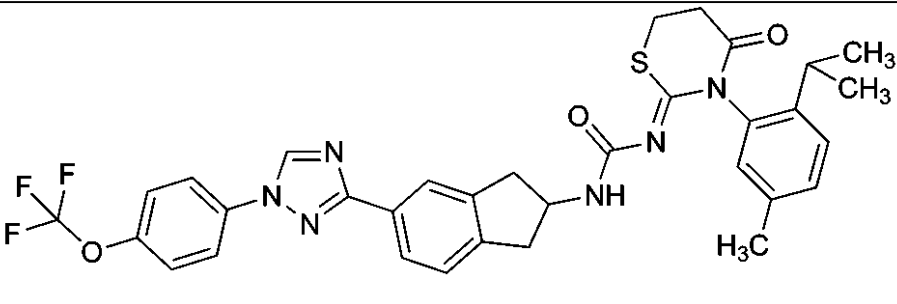
10

20

30

40

【表 2 - 4】

P13	
P14	
P15	
P16	
P17	

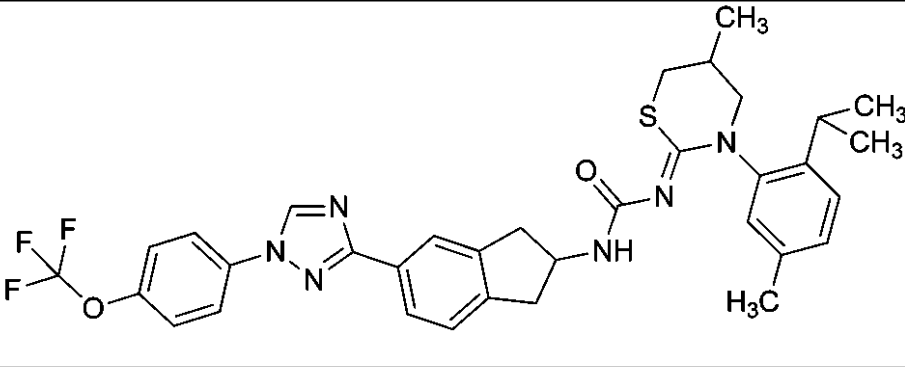
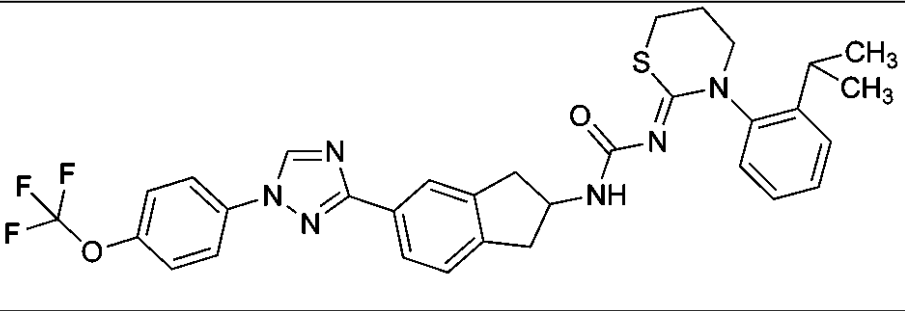
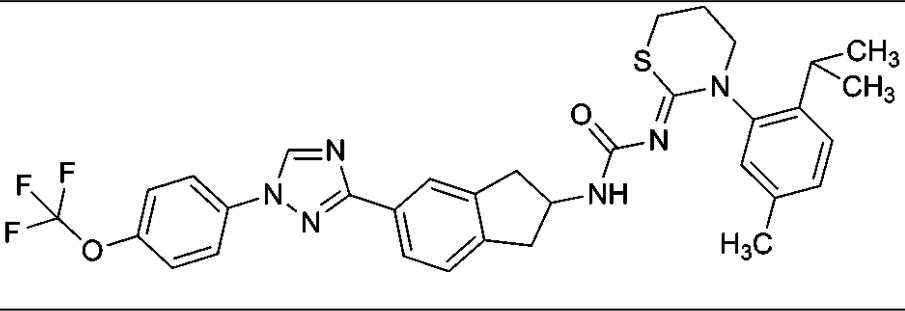
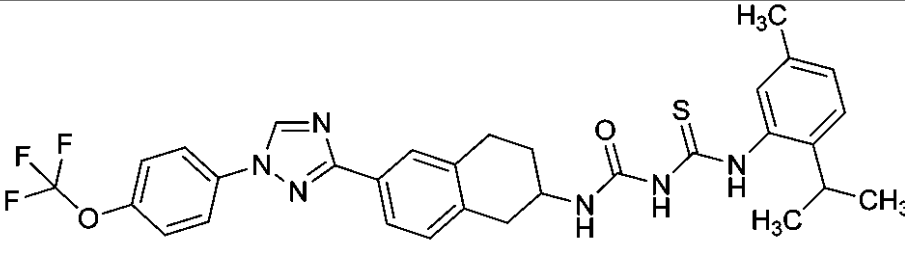
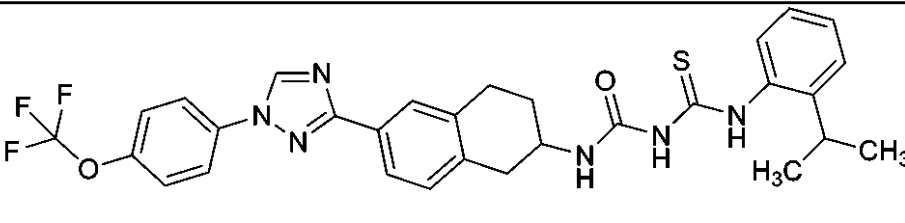
10

20

30

40

【表 2 - 5】

P18	
P19	
P20	
P21	
P22	

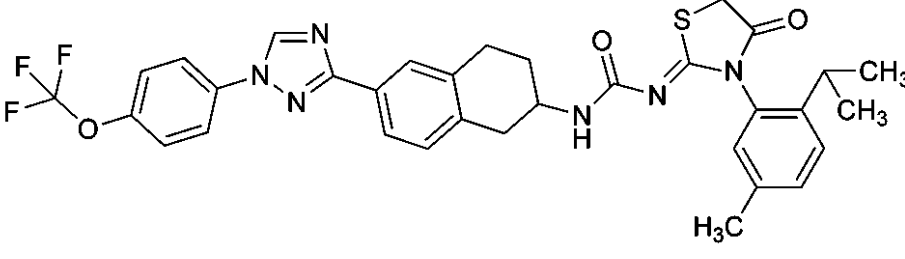
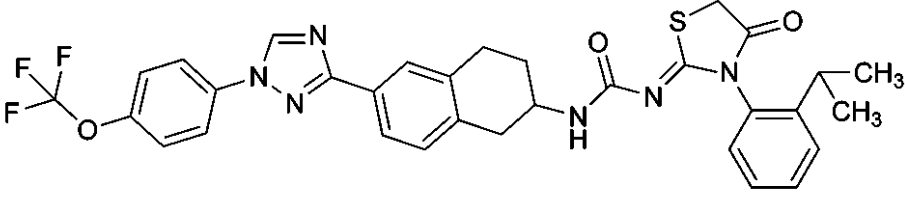
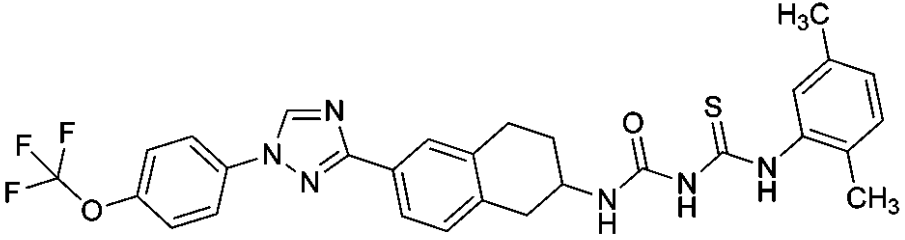
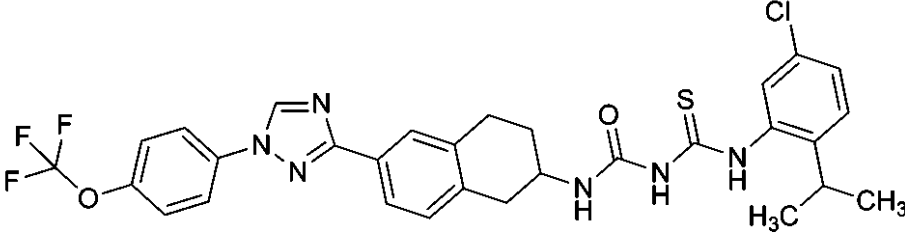
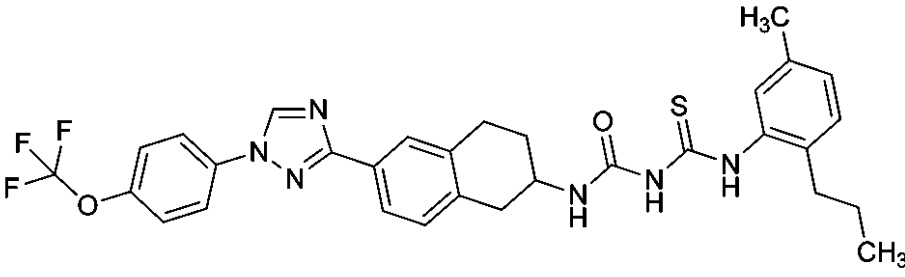
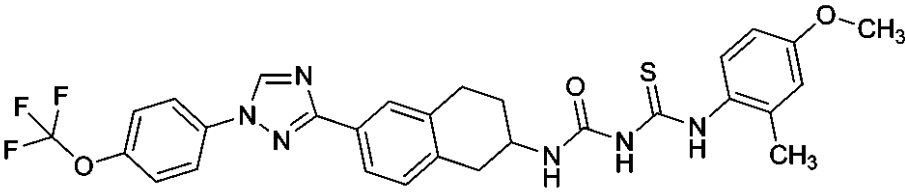
10

20

30

40

【表 2 - 6】

P23	
P24	
P25	
P26	
P27	
P28	

10

20

30

40

【表 2-7】

P29	
P30	
P31	
P32	
P33	
P34	

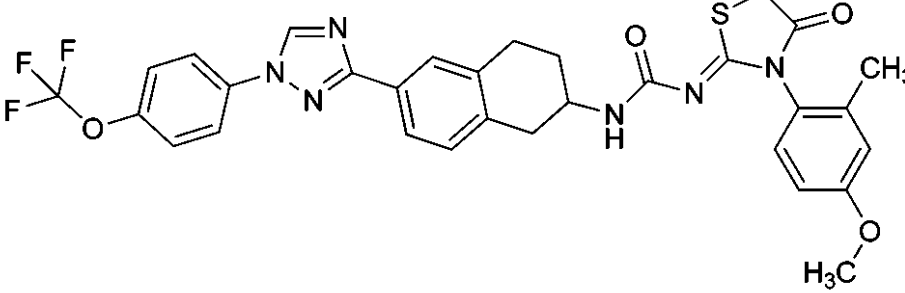
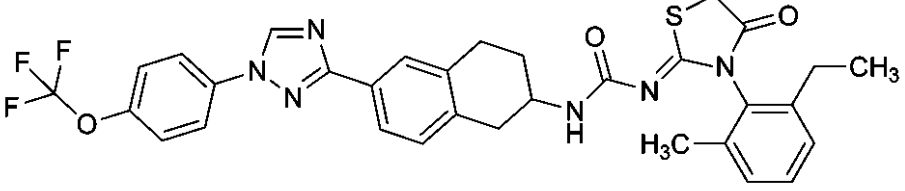
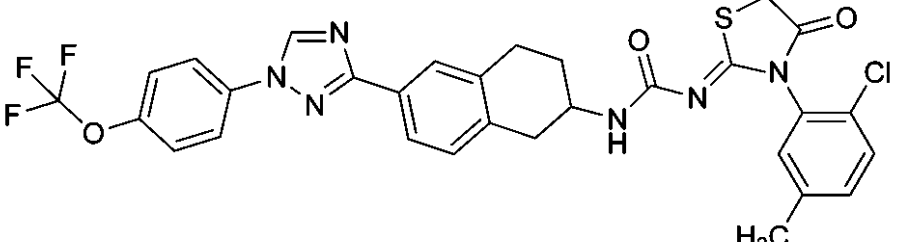
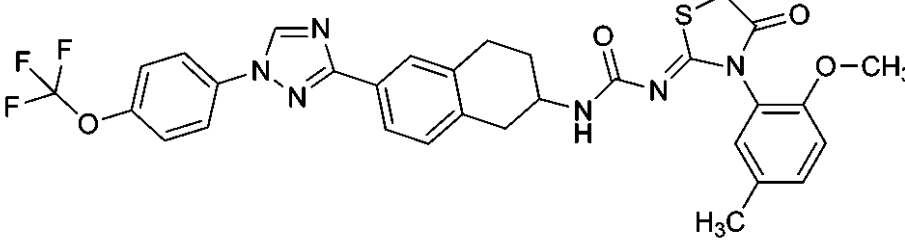
10

20

30

40

【表 2 - 8】

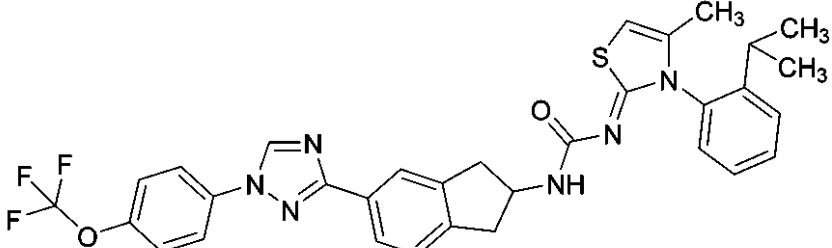
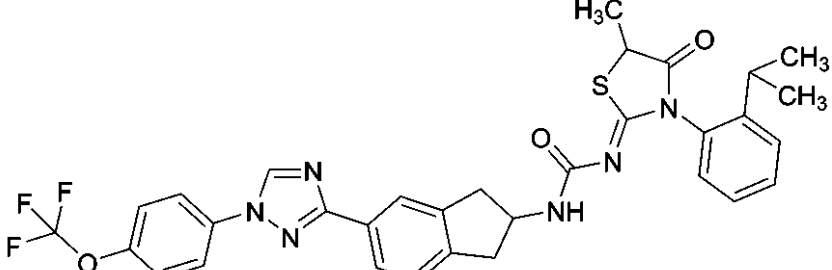
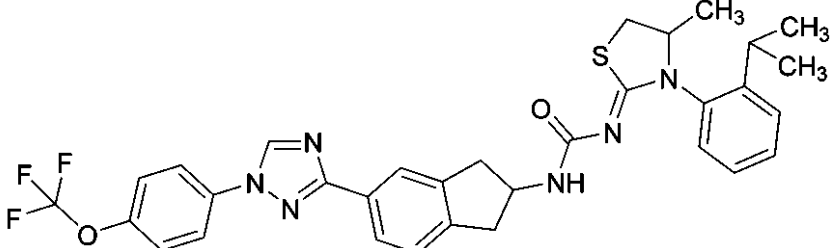
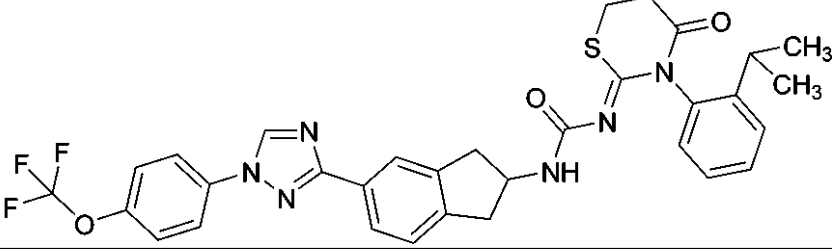
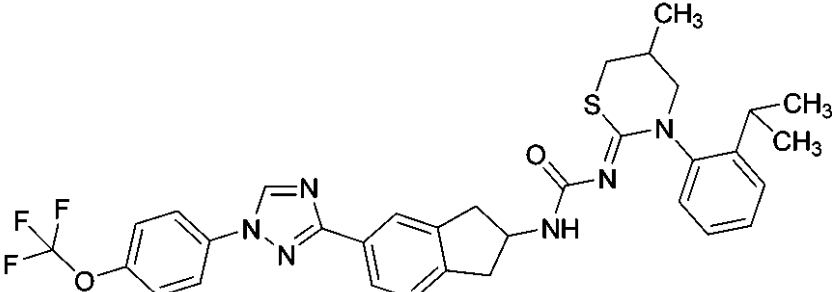
P35		10
P36		20
P37		30
P38		

の 1 つから選択される、請求項 1 に記載の分子。

【請求項 6】

前記分子が、以下の分子

【表 3 - 1】

番号	構造
FA1	
FA2	
FA3	
FA4	
FA5	

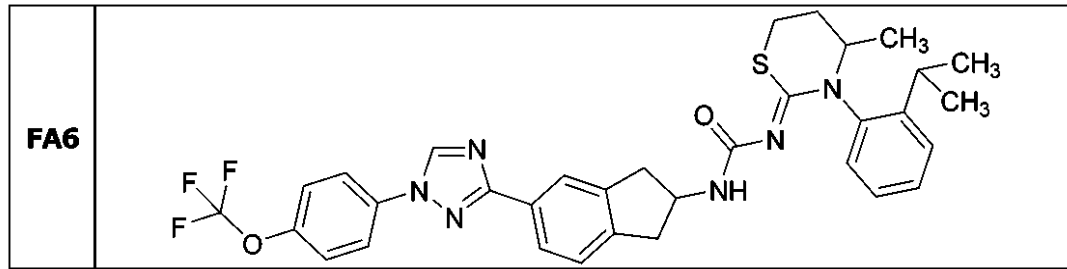
10

20

30

40

【表 3 - 2】



の 1 つから選択される、請求項 1 に記載の分子。

10

【請求項 7】

先行する請求項のいずれか 1 つに記載の分子および担体を含んでなる殺虫殺虫農薬組成物。

【請求項 8】

ダニ駆除、殺藻、殺鳥、殺菌、防カビ、除草、殺虫、軟体類駆除、殺線虫、殺鼠および／若しくは殺ウイルス特性を有する 1 種若しくはそれ以上の化合物をさらに含んでなる、請求項 7 に記載の殺虫殺虫農薬組成物。

【請求項 9】

1 種若しくはそれ以上のバイオ殺虫農薬をさらに含んでなる、請求項 7 に記載の殺虫殺虫農薬組成物。

20

【請求項 10】

種子をさらに含んでなる、請求項 7 に記載の殺虫殺虫農薬組成物。

【請求項 11】

請求項 7 に記載の殺虫殺虫農薬組成物を、病害虫を防除するために、前記病害虫を防除するのに十分な量で、ある場所に適用することを含んでなる方法。

【請求項 12】

前記病害虫が、アリ、アブラムシ、甲虫、シミ、ゴキブリ、コオロギ、ハサミムシ、ノミ、ハエ、直翅類昆虫 (grasshoppers)、ヨコバイ、シラミ、飛蝗 (locusts)、ダニ、ガ、線虫類、カイガラムシ、コムカデ類、シロアリ、アザミウマ、マダニ、ハチおよびコナジラミから選択される、請求項 11 に記載の方法。

30

【請求項 13】

前記病害虫が、LAPHEG、TRIPNI、MYZUPE 若しくは AEDSAE である。請求項 11 に記載の方法。

【請求項 14】

前記場所が、

(a) 作物、樹木、果実、穀類、かいば、匍匐植物、芝および／若しくは観賞用植物が成長している場所；

(b) 家畜が住んでいる場所；

(c) 穀類が貯蔵される場所のような、建物の内部若しくは外側表面；

(d) 含浸された木材のような、建物で使用する建設材料；ならびに／または

(e) 建物の周囲の土壌

40

である、請求項 11 に記載の方法。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

関連出願の交差引用

本出願は、2014 年 8 月 26 日に出願された米国仮出願第 62 / 041, 685 号（その完全な開示は引用することによりここに明白に組み込まれる）の利益およびそれからの優先権を主張する。

【0002】

50

技術分野

本文書に開示される本発明は、殺虫農薬（*pesticides*）（例えばダニ駆除剤、殺虫剤、軟体類駆除剤および殺線虫剤）として有用である分子の製造方法、こうした分子、ならびに病害虫を防除するためのこうした分子の使用方法の分野に関する。

【背景技術】

【0003】

背景技術

病害虫は毎年世界中で数百万のヒトの死亡を引き起こす。さらに、農業における損害を引き起こす1万種以上の病害虫が存在する。世界の農業の損害は毎年合計数十億米ドルに達する。

10

【0004】

シロアリは全部の種類の私有および公共建造物に対する被害を引き起こす。世界のシロアリの被害の損失は毎年合計数十億米ドルに達する。

【0005】

貯蔵食品病害虫は貯蔵食品を食べかつその質を落とす。世界の貯蔵食品の損害は毎年合計数十億米ドルに達するが、しかし、より重要には必要とされる食糧を人々から奪う。

【0006】

新たな殺虫農薬に対する急性の必要性が存在する。ある種の病害虫は現在使用中の殺虫農薬に対する耐性を発生している。数百種の病害虫が1種若しくはそれ以上の殺虫農薬に対し耐性である。DDT、カルバメート類および有機リン類のようなより古い殺虫農薬のいくつかに対する耐性の発生は公知である。しかし、耐性はより新しい殺虫農薬のいくつか例えばイミダクロプリドに対してさえ発生している。

20

【0007】

従って、上の理由を包含する多くの理由上、新たな殺虫農薬に対する必要性が存在する。

【発明の概要】

【0008】

定義

該定義に示される例は一般に網羅的でなく、そして本文書に開示される発明を制限すると解釈されてはならない。置換基は、それが結合されている特定の分子に関する化学結合則および立体適合性の制約に従うはずであることが理解される。

30

【0009】

「アルケニル」は、炭素および水素よりなる非環式、不飽和（最低1個の炭素－炭素二重結合）、分枝状若しくは非分枝状の置換基、例えばビニル、アリル、ブテニル、ペンテニルおよびヘキセニルを意味している。

【0010】

「アルケニルオキシ」は、炭素－酸素単結合よりさらになるアルケニル、例えばアリルオキシ、ブテニルオキシ、ペンテニルオキシ、ヘキセニルオキシを意味している。

【0011】

「アルコキシ」は、炭素－酸素単結合よりさらになるアルキル、例えばメトキシ、エトキシ、プロポキシ、イソプロポキシ、ブトキシ、イソブトキシおよびtert-ブトキシを意味している。

40

【0012】

「アルキル」は、炭素および水素よりなる非環式、飽和、分枝状若しくは非分枝状の置換基、例えばメチル、エチル、n-プロピルおよびイソプロピルを表す（ C_3 ）アルキル、n-ブチル、sec-ブチル、イソブチルおよびtert-ブチルを表す（ C_4 ）アルキルを意味している。

【0013】

「アルキニル」は、炭素および水素よりなる非環式、不飽和（最低1個の炭素－炭素三重結合）、分枝状若しくは非分枝状の置換基、例えばエチニル、プロパルギル、ブチニル

50

およびペンチニルを意味している。

【0014】

「アルキニルオキシ」は、炭素－酸素単結合よりさらになるアルキニル、例えばペンチニルオキシ、ヘキシニルオキシ、ヘプチニルオキシおよびオクチニルオキシを意味している。

【0015】

「アリール」は、水素および炭素よりなる環状芳香族置換基、例えばフェニル、ナフチルおよびビフェニルを意味している。

【0016】

「シクロアルキル」は、炭素および水素よりなる単環若しくは多環飽和置換基、例えばシクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、ノルボルニル、ビシクロ〔2. 2. 2〕オクチルおよびデカヒドロナフチルを意味している。

10

【0017】

「シクロアルコキシ」は、炭素－酸素単結合よりさらになるシクロアルキル、例えばシクロプロピルオキシ、シクロブチルオキシ、シクロペンチルオキシ、ノルボルニルオキシおよびビシクロ〔2. 2. 2〕オクチルオキシを意味している。

【0018】

「ハロ」はフルオロ、クロロ、ブロモおよびヨードを意味している。

【0019】

「ハロアルコキシ」は、1個から最大の可能な数までの同一若しくは異なるハロよりさらになるアルコキシ、例えばフルオロメトキシ、トリフルオロメトキシ、2, 2-ジフルオロプロポキシ、クロロメトキシ、トリクロロメトキシ、1, 1, 2, 2-テトラフルオロエトキシおよびペンタフルオロエトキシを意味している。

20

【0020】

「ハロアルキル」は、1個から最大の可能な数までの同一若しくは異なるハロよりさらになるアルキル、例えばフルオロメチル、トリフルオロメチル、2, 2-ジフルオロプロピル、クロロメチル、トリクロロメチルおよび1, 1, 2, 2-テトラフルオロエチルを意味している。

【0021】

「ヘテロシクリル」は、完全に飽和、部分的に不飽和若しくは完全に不飽和でありうる環状置換基を意味しており、該環状構造は最低1個の炭素および最低1個のヘテロ原子を含有し、前記ヘテロ原子は窒素、イオウ若しくは酸素である。イオウの場合、その原子はスルホキシドおよびスルホンのような他の酸化状態にあることができる。芳香族ヘテロシクリルの例は、限定されるものでないが、ベンゾフラニル、ベンゾイソチアゾリル、ベンゾイソオキサゾリル、ベンゾオキサゾリル、ベンゾチエニル、ベンゾチアゾリル、シンノリニル、フラニル、イミダゾリル、インダゾリル、インドリル、イソインドリル、イソキノリニル、イソチアゾリル、イソオキサゾリル、オキサジアゾリル、オキサゾリニル、オキサゾリル、フタラジニル、ピラジニル、ピラゾリニル、ピラゾリル、ピリダジニル、ピリジニル、ピリミジニル、ピロリル、キナゾリニル、キノリニル、キノキサリニル、テトラゾリル、チアゾリニル、チアゾリル、チエニル、トリアジニルおよびトリアゾリルを挙げることができる。完全に飽和のヘテロシクリルの例は、限定されるものでないが、ピペラジニル、ピペリジニル、モルホリニル、ピロリジニル、オキセタニル、テトラヒドロフラニル、テトラヒドロチエニルおよびテトラヒドロピラニルを挙げることができる。部分的に不飽和のヘテロシクリルの例は、限定されるものでないが、1, 2, 3, 4-テトラヒドロキノリニル、4, 5-ジヒドロ-オキサゾリル、4, 5-ジヒドロ-1H-ピラゾリル、4, 5-ジヒドロ-イソオキサゾリルおよび2, 3-ジヒドロ-〔1, 3, 4〕-オキサジアゾリルを挙げることができる。

30

40

【発明を実施するための形態】

【0022】

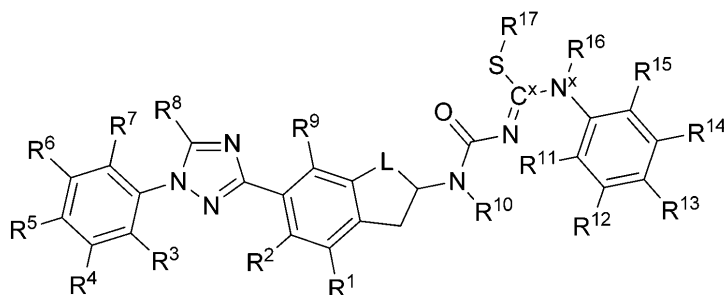
発明の詳細な記述

50

本文書は、以下の式（「式 1」）

【0023】

【化 1】



10

式 1

【0024】

を有する分子を開示し、

式中：

(A) R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 および R^9 は、H、F、Cl、Br、I、CN、 NO_2 、OH、 (C_1-C_4) アルキル、 (C_2-C_4) アルケニル、 (C_2-C_4) アルキニル、 (C_1-C_4) ハロアルキル、 (C_1-C_4) アルコキシ、 (C_1-C_4) ハロアルコキシ、 (C_3-C_6) シクロアルキルおよび (C_3-C_6) シクロアルコキシよりなる群からそれぞれ独立に選択され、

20

ここで各アルキル、アルケニル、アルキニル、ハロアルキル、アルコキシ、ハロアルコキシ、シクロアルキルおよびシクロアルコキシは、F、Cl、CN、OHおよびオキソよりなる群から独立に選択される 1 個若しくはそれ以上の置換基で場合によっては置換されており；

(B) R^8 はHであり；

(C) Lは、F、Cl、CN、OHおよびオキソよりなる群から独立に選択される 1 個若しくはそれ以上の置換基で場合によっては置換されている (C_1-C_4) アルキルであり；

(D) R^{10} は、H、 (C_1-C_4) アルキル、 (C_2-C_4) アルケニル、 (C_2-C_4) アルキニル、 (C_1-C_4) ハロアルキル、 $((C_1-C_4)$ アルキル) $((C_3-C_6)$ シクロアルキル)、 (C_1-C_4) アルキルフェニル、 (C_1-C_4) アルキルヘテロシクリル、 $((C_1-C_4)$ アルキル)O $((C_1-C_4)$ アルキル)、 $((C_1-C_4)$ アルキル)OC(O) $((C_1-C_4)$ アルキル)、 $((C_1-C_4)$ アルキル)OC(O)O $((C_1-C_4)$ アルキル)、C(O) $((C_1-C_4)$ アルキル)およびC(O)フェニルよりなる群から選択され、

30

ここで各アルキル、アルケニル、アルキニル、ハロアルキル、シクロアルキル、フェニルおよびヘテロシクリルは、F、Cl、CN、OHおよびオキソよりなる群から独立に選択される 1 個若しくはそれ以上の置換基で場合によっては置換されており；

(E) R^{11} 、 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} および R^{15} は、H、F、Cl、Br、I、CN、 NO_2 、OH、 (C_1-C_4) アルキル、 (C_2-C_4) アルケニル、 (C_2-C_4) アルキニル、 (C_1-C_4) ハロアルキル、 (C_1-C_4) アルコキシ、 (C_1-C_4) ハロアルコキシ、 (C_3-C_6) シクロアルキルおよび (C_3-C_6) シクロアルコキシよりなる群からそれぞれ独立に選択され；

40

(F) R^{16} および R^{17} は、直近後出の(G)、H、 (C_1-C_4) アルキル、 (C_2-C_4) アルケニル、 (C_2-C_4) アルキニル、 (C_1-C_4) ハロアルキル、 $((C_1-C_4)$ アルキル) $((C_3-C_6)$ シクロアルキル)、 (C_1-C_4) アルキルフェニル、 (C_1-C_4) アルキルヘテロシクリル、 $((C_1-C_4)$ アルキル)C(O) $((C_1-C_4)$ アルキル)および $((C_1-C_4)$ アルキル)C(O)O $((C_1-C_4)$ アルキル)よりなる群からそれぞれ独立に選択され、

ここで各アルキル、アルケニル、アルキニル、ハロアルキル、シクロアルキル、フェニル

50

およびヘテロシクリルは、F、Cl、CN、OHおよびオキソよりなる群から独立に選択される1個若しくはそれ以上の置換基で場合によっては置換されており；ならびに

(G) R¹⁶およびR¹⁷は、(S) C^x (N^x)と一緒にあって、4～8員ヘテロシクリル環を形成し、

ここで前記ヘテロシクリル環は、R¹⁸から独立に選択される1個若しくはそれ以上の置換基で場合によっては置換されていることができ、

式中R¹⁸は、H、F、Cl、Br、I、CN、OH、(C₁–C₄)アルキル、オキソ、(C₁–C₄)アルキル、(C₂–C₄)アルケニル、(C₂–C₄)アルキニル、(C₁–C₄)ハロアルキル、((C₁–C₄)アルキル)((C₃–C₆)シクロアルキル)、(C₁–C₄)アルキルフェニル、(C₁–C₄)アルキルヘテロシクリル、((C₁–C₄)アルキル)C(O)((C₁–C₄)アルキル)、((C₁–C₄)アルキル)C(O)O((C₁–C₄)アルキル)、フェニルおよびヘテロシクリルよりなる群から選択され、

ここで各アルキル、アルケニル、アルキニル、ハロアルキル、シクロアルキル、フェニルおよびヘテロシクリルは、F、Cl、Br、I、CN、OHおよびオキソよりなる群から独立に選択される1個若しくはそれ以上の置換基で場合によっては置換されている。

【0025】

別の態様において、R¹、R²、R³、R⁴、R⁶、R⁷、R⁸、R⁹、R¹⁰およびR¹⁴はHである。本態様は、R⁵、L、R¹¹、R¹²、R¹³、R¹⁵、R¹⁶、R¹⁷およびR¹⁸の他の態様と組合せて使用しうる。

【0026】

別の態様において、R⁵は(C₁–C₄)ハロアルコキシである。本態様は、R¹、R²、R³、R⁴、R⁶、R⁷、R⁸、R⁹、L、R¹⁰、R¹¹、R¹²、R¹³、R¹⁴、R¹⁵、R¹⁶、R¹⁷およびR¹⁸の他の態様と組合せて使用しうる。

【0027】

別の態様において、R⁵はOCF₃若しくはOCF₂CF₃である。本態様は、R¹、R²、R³、R⁴、R⁶、R⁷、R⁸、R⁹、L、R¹⁰、R¹¹、R¹²、R¹³、R¹⁴、R¹⁵、R¹⁶、R¹⁷およびR¹⁸の他の態様と組合せて使用しうる。

【0028】

別の態様において、Lは–CH₂–若しくは–CH₂CH₂–である。本態様は、R¹、R²、R³、R⁴、R⁵、R⁶、R⁷、R⁸、R⁹、R¹⁰、R¹¹、R¹²、R¹³、R¹⁴、R¹⁵、R¹⁶、R¹⁷およびR¹⁸の他の態様と組合せて使用しうる。

【0029】

別の態様において、R¹¹は(C₁–C₄)アルキルである。本態様は、R¹、R²、R³、R⁴、R⁵、R⁶、R⁷、R⁸、R⁹、L、R¹⁰、R¹²、R¹³、R¹⁴、R¹⁵、R¹⁶、R¹⁷およびR¹⁸の他の態様と組合せて使用しうる。

【0030】

別の態様において、R¹¹はH若しくはCH₃である。本態様は、R¹、R²、R³、R⁴、R⁵、R⁶、R⁷、R⁸、R⁹、L、R¹⁰、R¹²、R¹³、R¹⁴、R¹⁵、R¹⁶、R¹⁷およびR¹⁸の他の態様と組合せて使用しうる。

【0031】

別の態様において、R¹²はハロ、(C₁–C₄)アルキル若しくは(C₁–C₄)アルコキシである。本態様は、R¹、R²、R³、R⁴、R⁵、R⁶、R⁷、R⁸、R⁹、L、R¹⁰、R¹¹、R¹³、R¹⁴、R¹⁵、R¹⁶、R¹⁷およびR¹⁸の他の態様と組合せて使用しうる。

【0032】

別の態様において、R¹²はH、Cl、CH₃若しくはOCH₃である。本態様は、R¹、R²、R³、R⁴、R⁵、R⁶、R⁷、R⁸、R⁹、L、R¹⁰、R¹¹、R¹³、R¹⁴、R¹⁵、R¹⁶、R¹⁷およびR¹⁸の他の態様と組合せて使用しうる。

【0033】

別の態様において、R¹³はハロ、(C₁–C₄)アルキル若しくは(C₁–C₄)アルコキシである。本態様は、R¹、R²、R³、R⁴、R⁵、R⁶、R⁷、R⁸、R⁹、L、R¹⁰、R¹¹

10

20

30

40

50

、 R^{12} 、 R^{14} 、 R^{15} 、 R^{16} 、 R^{17} および R^{18} の他の態様と組合せて使用しうる。

【0034】

別の態様において、 R^{13} はH、F、 CH_3 若しくは OCH_3 である。本態様は、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^9 、L、 R^{10} 、 R^{11} 、 R^{12} 、 R^{14} 、 R^{15} 、 R^{16} 、 R^{17} および R^{18} の他の態様と組合せて使用しうる。

【0035】

別の態様において、 R^{15} はハロ、 (C_1-C_4) アルキル、 (C_3-C_6) シクロアルキル若しくは (C_1-C_4) アルコキシである。本態様は、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^9 、L、 R^{10} 、 R^{11} 、 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{16} 、 R^{17} および R^{18} の他の態様と組合せて使用しうる。

10

【0036】

別の態様において、 R^{15} はCl、 CH_3 、 CH_2CH_3 、 $CH_2CH_2CH_3$ 、 $CH(CH_3)_2$ 、シクロプロピル若しくは OCH_3 である。本態様は、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^9 、L、 R^{10} 、 R^{11} 、 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{16} 、 R^{17} および R^{18} の他の態様と組合せて使用しうる。

【0037】

別の態様において、 R^{16} はHである。本態様は、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^9 、L、 R^{10} 、 R^{11} 、 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} 、 R^{17} および R^{18} の他の態様と組合せて使用しうる。

【0038】

別の態様において、 R^{16} および R^{17} は、一緒になって、 $-C(R^{18})-C(R^{18})-$ 、 $-C(R^{18})-C(R^{18})-C(R^{18})-$ 若しくは $-C(R^{18})=C(CR^{18})-$ である。本態様は、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^9 、L、 R^{10} 、 R^{11} 、 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} および R^{15} の他の態様と組合せて使用しうる。

20

【0039】

別の態様において、 R^{17} はHである。本態様は、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^9 、L、 R^{10} 、 R^{11} 、 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} 、 R^{16} および R^{18} の他の態様と組合せて使用しうる。

【0040】

別の態様において、 R^{18} は (C_1-C_4) アルキルである。本態様は、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^9 、L、 R^{10} 、 R^{11} 、 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} 、 R^{16} および R^{17} の他の態様と組合せて使用しうる。

30

【0041】

別の態様において、 R^{18} はH、F、 CH_3 、OH若しくはオキソである。本態様は、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^9 、L、 R^{10} 、 R^{11} 、 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} 、 R^{16} および R^{17} の他の態様と組合せて使用しうる。

【0042】

別の態様において、：

(A) R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 および R^9 は、Hおよび (C_1-C_4) ハロアルコキシよりなる群からそれぞれ独立に選択され；

40

(B) R^8 はHであり；

(C) Lは (C_1-C_4) アルキルであり；

(D) R^{10} はHであり；

(E) R^{11} 、 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} および R^{15} は、H、F、Cl、Br、I、 (C_1-C_4) アルキルおよび (C_3-C_6) シクロアルキルよりなる群からそれぞれ独立に選択され；

(F) R^{16} および R^{17} は直近後出の(G)若しくはHであり；ならびに

(G) R^{16} および R^{17} は、 $(S)C^x(N^x)$ と一緒に4～8員ヘテロシクリル環を形成し、

ここで前記ヘテロシクリル環は、 R^{18} から独立に選択される1個若しくはそれ以上の置換基で場合によっては置換されていることができ、

50

式中 R^{18} は H、 CH_3 および オキシ よりなる 群 から 選択 される。

【0043】

式 1 の 分子 の 製造 法

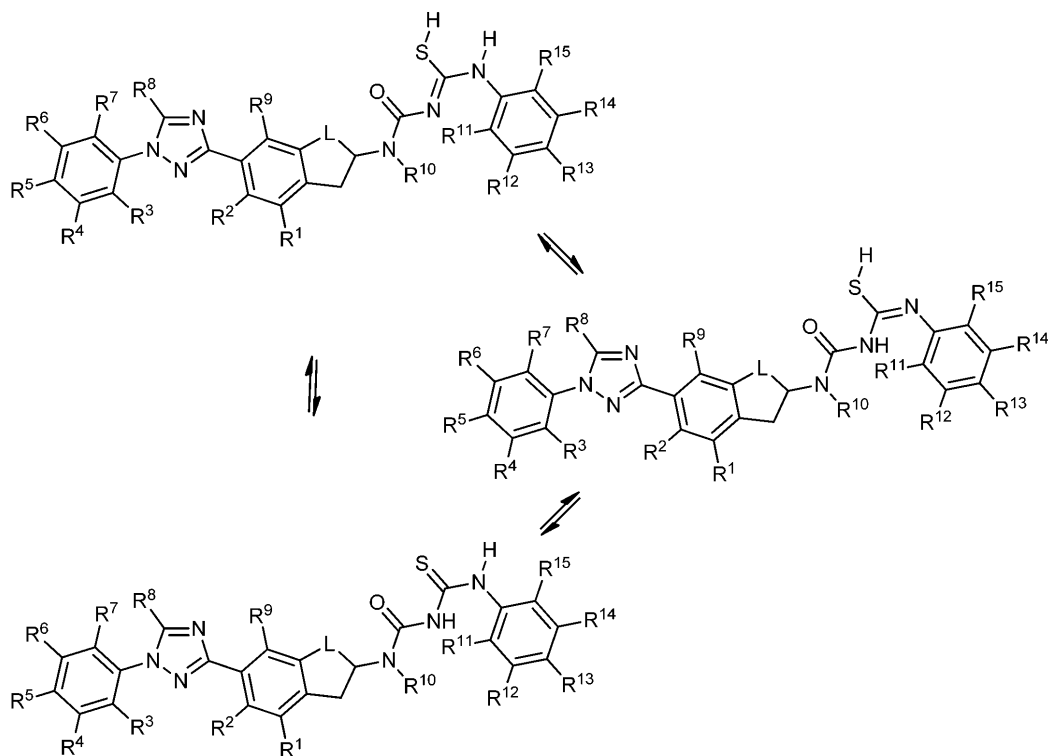
式 1 の 分子 の 多く は、 R^{16} および R^{17} が H である 場合 の よう な 2 種 若 し く は そ れ 以 上 の 互 変 異 性 体 で 描 く こ と が で き る (スキーム TAU)。該 スキーム を 単 純 化 す る た め、全 部 の 分子 は 単 一 の 互 変 異 性 体 と し て 存 在 す る と し て 描 か れ て い る。い ず れ の お よ び 全 部 の エ ネ ル ギ ー 的 に 到 達 可 能 な 互 変 異 性 体 も こ の 式 1 の 範 囲 内 に 包 含 さ れ、そ し て、該 分子 が そ れ が 描 か れ て い る 互 変 異 性 体 と し て 存 在 す る か ど う か に 関 し て い か な る 推 断 も さ れ る べ き で な い。

【0044】

【化 2】

10

スキーム TAU



20

30

【0045】

式 1 の 分子 は、一 般 に 約 400 ダ ル ト ン ない し 約 1200 ダ ル ト ン の 分子 質 量 を 有 す る こ と が で き る。

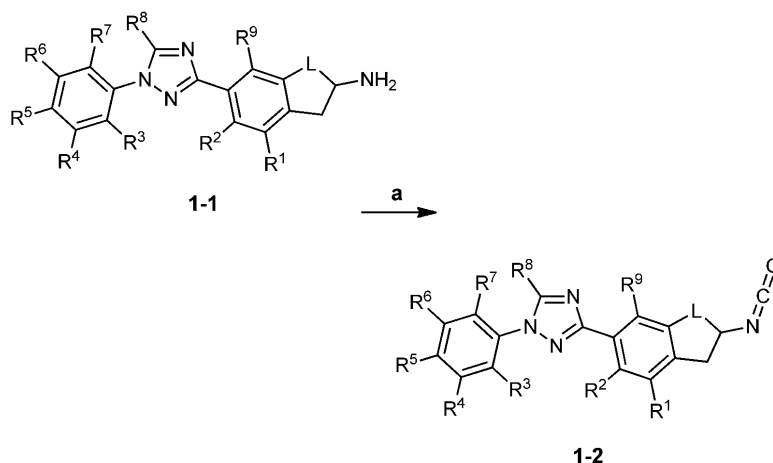
【0046】

チ オ ビ ウ レ ッ ト の 製造 法

【0047】

【化 3】

スキーム 1



10

【0048】

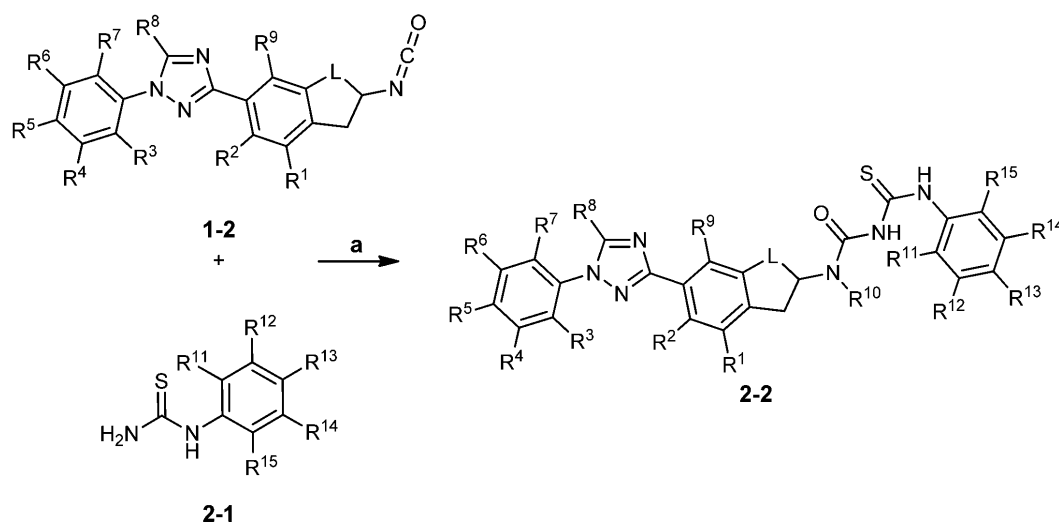
本明細書に開示されるチオビウレットは、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^9 およびLが以前に開示されたとおりである対応するイソシアネート1-2から製造される。典型的にはイソシアネート1-2は単離されないが、しかし代わりに適する前駆体からインシトゥーで生成されかつチオビウレットの製造で直接使用される。適する前駆体は、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^9 およびLが以前に開示されたとおりであるアミン1-1であり、これは、ジクロロメタンと水若しくはジエチルエーテルと水のような混合溶媒系中、重炭酸ナトリウム若しくはトリエチルアミンのような塩基の存在下、約 -10°C から約 50°C までの温度で、ホスゲン、ジホスゲン若しくはトリホスゲンのような数種の普遍的試薬の1種を使用することによりイソシアネート1-2に転化しうる（スキーム1、段階1a）。

20

【0049】

【化 4】

スキーム 2



30

40

【0050】

イソシアネート1-2は、約0.1等量ないし約2等量の炭酸セシウム若しくは水素化ナトリウムのような無機塩基の存在下に、 R^{11} 、 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} および R^{15} が以前に開示されたとおりであるN-アリアルチオ尿素2-1で直接処理することができ、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^9 、L、 R^{11} 、 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} および R^{15} が以前

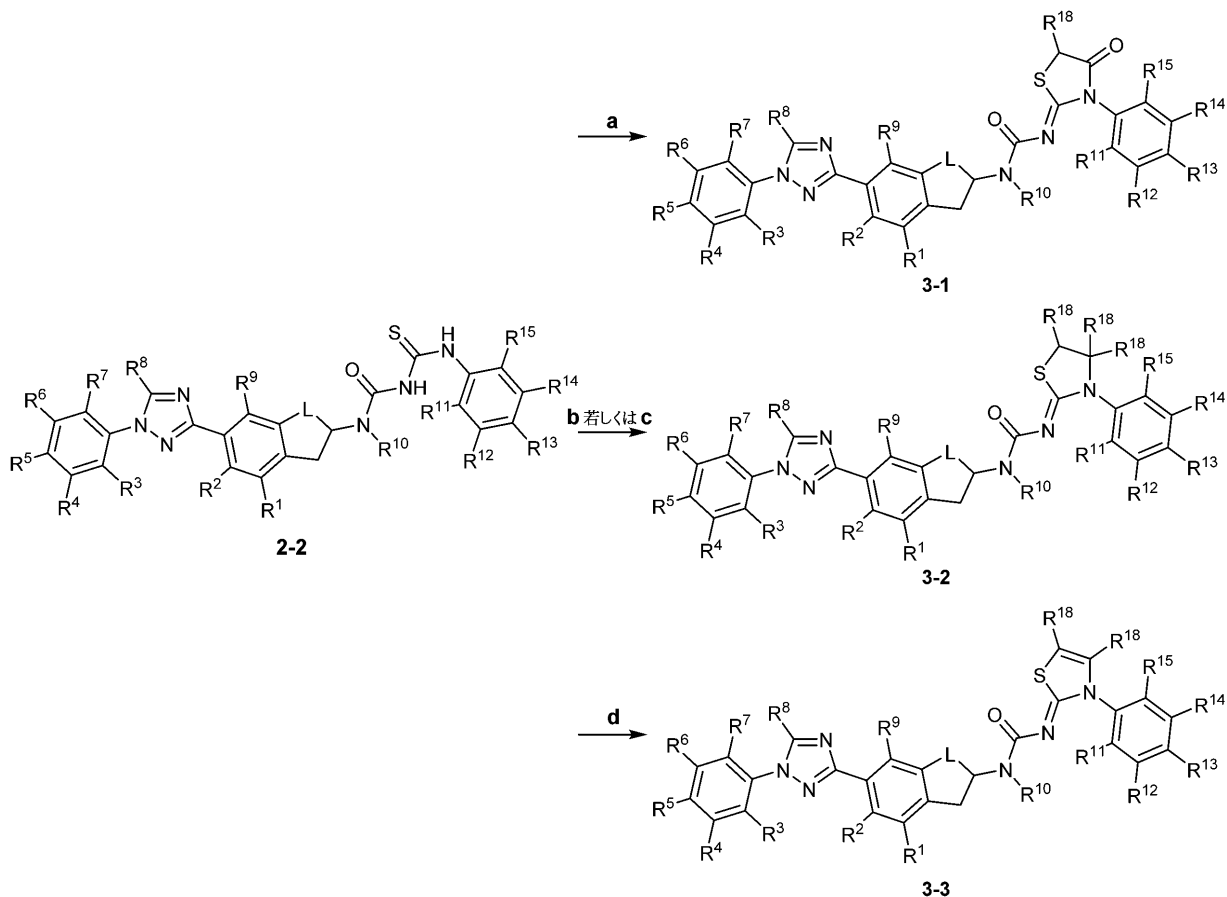
50

に開示されたとおりであるチオビウレット 2-2 の形成をもたらす（スキーム 2、段階 2 a）。該反応は、アセトニトリル、アセトン、トルエン、テトラヒドロフラン、1, 2-ジクロロエタン、ジクロロメタン若しくはそれらの混合物から選ばれる非プロトン性溶媒若しくは溶媒混合物中約 0 °C から約 100 °C まで、好ましくは約 20 °C から約 80 °C までの温度で実施しうるが、しかし、アセトニトリルの使用が好ましい。

【0051】

【化 5】

スキーム 3



【0052】

インシトゥーで生成されるチオビウレット 2-2 は、多様な環化アナログに精製を伴わず直接転化しうる（スキーム 3、段階 3 a）か、若しくは、それらは環化前に反応媒体から単離しうる。環化は、R¹、R²、R³、R⁴、R⁵、R⁶、R⁷、R⁸、R⁹、L、R¹¹、R¹²、R¹³、R¹⁴、R¹⁵および R¹⁸が以前に開示されたとおりである 2-イミノ 1, 3-チアゾリン-4-オン 3-1（段階 a）を形成するためプロモ酢酸メチルのような α-ハロエステル；R¹、R²、R³、R⁴、R⁵、R⁶、R⁷、R⁸、R⁹、L、R¹¹、R¹²、R¹³、R¹⁴、R¹⁵および R¹⁸が以前に開示されたとおりである 2-イミノ-1, 3-チアゾリン 3-2（段階 3 b）を形成するため 1-ブロモ-2-クロロエタン若しくは 1, 2-ジクロロエタンのような隣接二ハロゲン化物；2-イミノ-1, 3-チアゾリノール 3-2（段階 3 c）；または R¹、R²、R³、R⁴、R⁵、R⁶、R⁷、R⁸、R⁹、L、R¹¹、R¹²、R¹³、R¹⁴、R¹⁵および R¹⁸が以前に開示されたとおりである 2-イミノ-1, 3-チアゾール 3-3（段階 3 d）を形成するためクロロアセトンのような α-ハロケトンでの処理により達成しうる。段階 a で、約 20 °C から約 70 °C までの範囲にわたる温度でエタノール若しくはメタノールのようなプロトン性溶媒中の酢酸ナトリウムの使用が好ましい。段階 b で、約 0 °C と約 80 °C の間の温度でアセトニトリル若しくは 2-ブタノンのような溶媒中の炭酸カリウムのような無機塩基の使用が好ましい。

【0053】

10

20

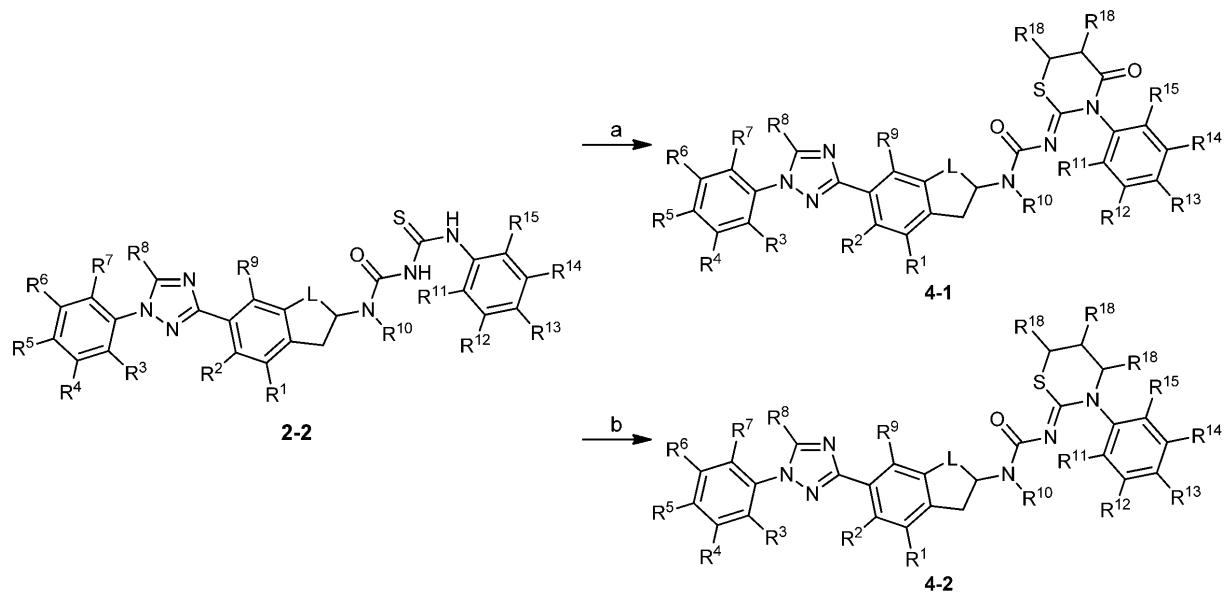
30

40

50

【化 6】

スキーム 4



10

【0054】

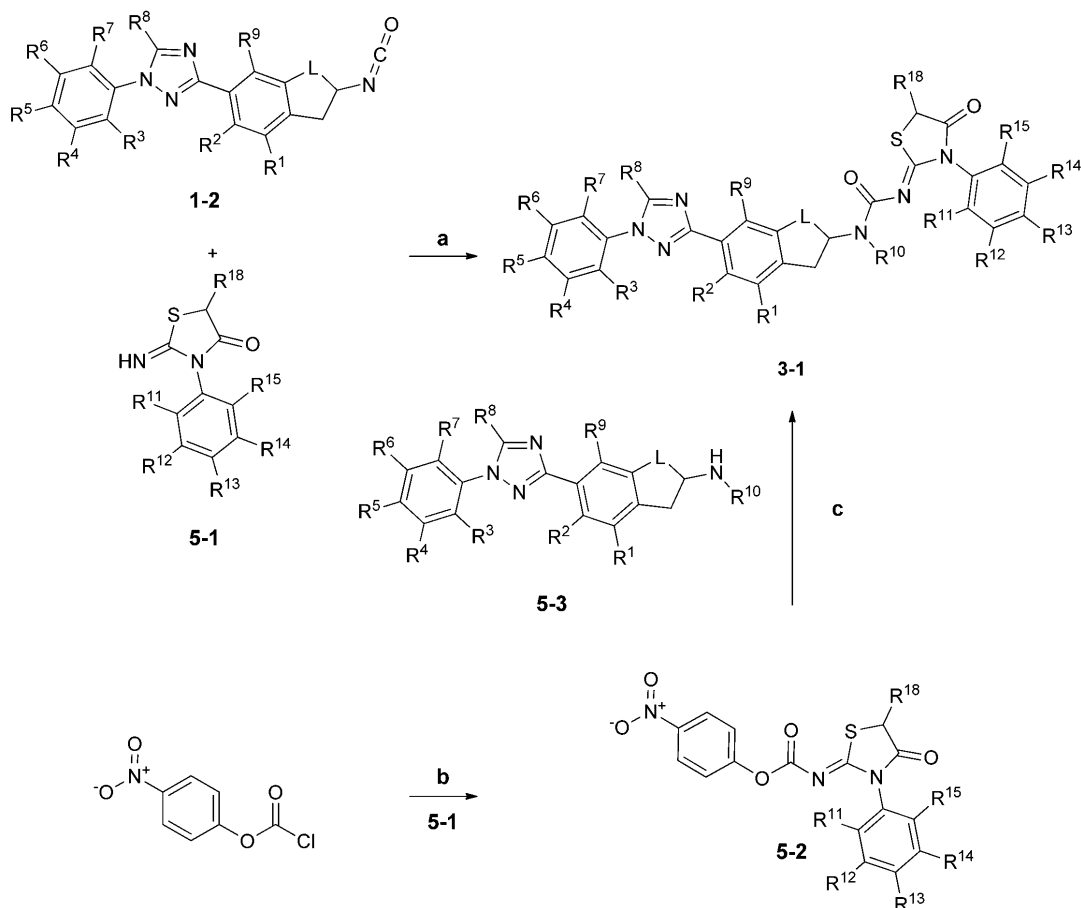
環化は、R¹、R²、R³、R⁴、R⁵、R⁶、R⁷、R⁸、R⁹、L、R¹¹、R¹²、R¹³、R¹⁴、R¹⁵およびR¹⁸が以前に開示されたとおりである2-イミノ-1,3-チアジノン4-1（スキーム4、段階4a）を形成するため塩化アクリロイルのようなα, β-不飽和酸塩化物、若しくはR¹、R²、R³、R⁴、R⁵、R⁶、R⁷、R⁸、R⁹、L、R¹¹、R¹²、R¹³、R¹⁴、R¹⁵およびR¹⁸が以前に開示されたとおりである2-イミノ-1,3-チアジニン4-2（段階4b）を形成するため1-ブロモ-3-クロロプロパンのような1,3-ジハロプロパンでのチオ尿素2-2の処理によってもまた達成しうる。

【0055】

20

【化 7】

スキーム 5



【0056】

一般構造 3-1 を有するアナログの代替の一製造方法をスキーム 5 に記述する。 R^{11} 、 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} および R^{18} が以前に開示されたとおりである 2-イミノチアゾリジン-4-オン 5-1 を、塩基の非存在下または約 0.1 等量ないし約 2 等量の炭酸セシウム若しくは水素化ナトリウムのような無機塩基の存在下のいずれかでイソシアネート 1-2 で直接処理することができ、環化されたチオビウレット 3-1 を形成する（段階 5 a）。該反応は、アセトニトリル、アセトン、トルエン、テトラヒドロフラン、1,2-ジクロロエタン、ジクロロメタン若しくはそれらの混合物から選ばれる非プロトン性溶媒若しくは溶媒混合物中、約 0℃ から約 100℃ まで、好ましくは約 20℃ から約 80℃ までの温度で実施しうるが、しかし、アセトニトリルの使用が好ましい。

【0057】

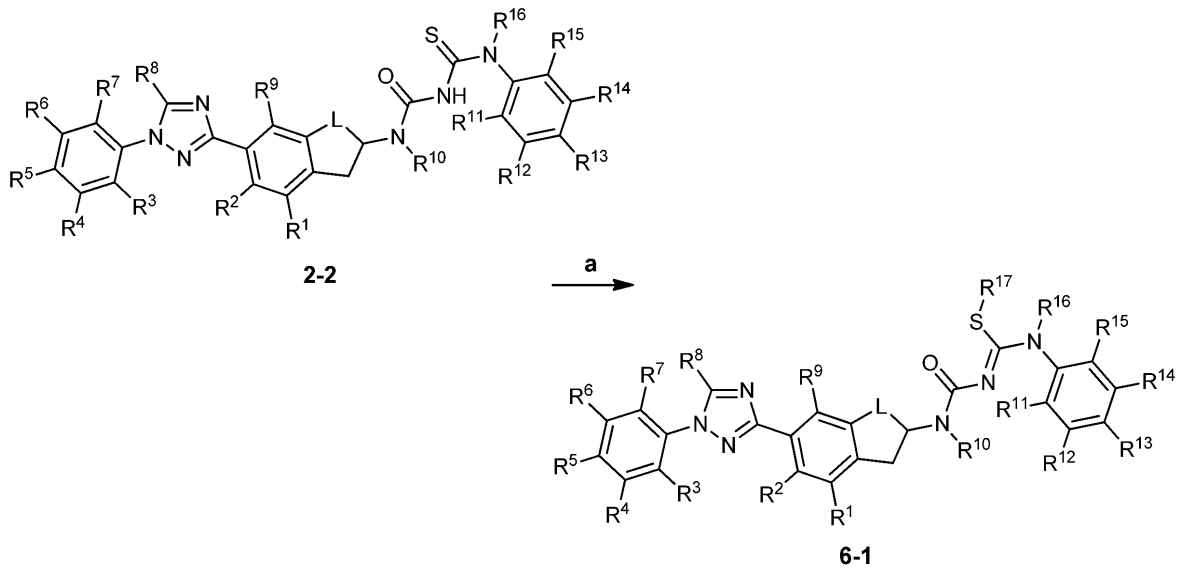
あるいは、2-イミノチアゾリジン-2-オン 5-1 をクロロギ酸 4-ニトロフェニルと反応させることができ、 R^{11} 、 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} および R^{18} が以前に開示されたとおりである 4-ニトロフェニルカルバメート 5-2 を形成する（段階 5 b）。この反応は、テトラヒドロフラン、ジオキサン若しくはアセトニトリルのような極性非プロトン性溶媒中、約 0.1 等量から約 2 等量までの炭酸セシウム若しくは炭酸カリウムのような無機塩基の存在下、好ましくは約室温で、等モル量の 2-イミノチアゾリジン-2-オン 5-1 および該クロロギ酸エステルを用いて実施しうる。4-ニトロフェニルカルバメート 5-2 は濾過および濾液の濃縮により単離しうるか、若しくは、4-ニトロフェニルカルバメート 5-2 を段階 5 c で直接使用しうる。 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^9 、 L および R^{10} が以前に開示されたとおりである トリアリールアミン 5-3 での 4-ニトロフェニルカルバメート 5-2 の処理は、環化されたチオビウレット 3-1 を生成

しうる。段階 5 c は、約 0.1 等量から約 2 等量まで、好ましくは約 1 等量ないし約 1.2 等量の炭酸セシウム若しくは炭酸カリウムのような無機塩基の存在下、約 0 °C から約 100 °C までの温度、好ましくは約室温でもまた実施しうる。

【0058】

【化 8】

スキーム 6



【0059】

チオビウレット 2-2 は、エタノールのようなプロトン性溶媒中酢酸ナトリウムのような塩基の存在下約 0 °C から約 60 °C までの温度で、 R^{17} が以前に開示されたとおりである R^{17} -ハロで処理することができ、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^9 、 L 、 R^{10} 、 R^{11} 、 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} 、 R^{16} および R^{17} が以前に開示されたとおりである S -アルキル化チオビウレット 6-1 を生じる（スキーム 6、段階 6 a）。

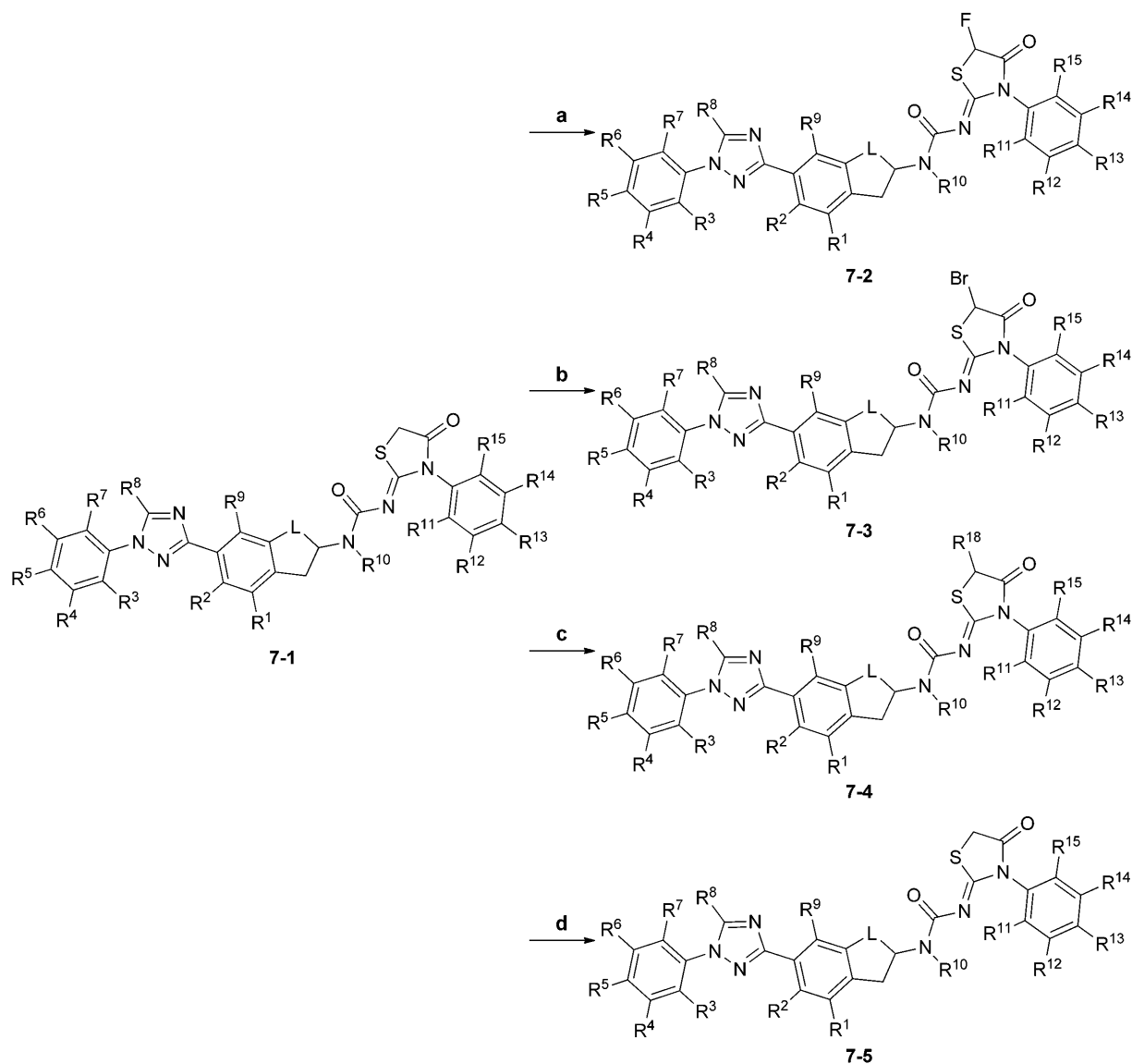
【0060】

置換チオビウレットの製造法

【0061】

【化 9】

スキーム 7



【0062】

R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^9 、 L 、 R^{10} 、 R^{11} 、 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} および R^{15} が以前に開示されたとおりである 2-イミノ 1, 3-チアゾリン-4-オン 7-1 は、無水アセトニトリル中で Selectfluor (登録商標) および 9-フルオレノンで処理することができ (JACS, 2013, 135, 17494.)、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^9 、 L 、 R^{10} 、 R^{11} 、 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} および R^{15} が以前に開示されたとおりであるモノフルオロアナログ 7-2 を提供する (スキーム 7、段階 7 a)。ジクロロメタンのような非プロトン性溶媒中約 0 °C から約 30 °C までの範囲にわたる温度での分子臭素での処理は、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^9 、 L 、 R^{10} 、 R^{11} 、 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} および R^{15} が以前に開示されたとおりであるモノプロモアナログ 7-3 を提供する (段階 7 b)。ジメチルホルムアミド若しくはテトラヒドロフランのような極性非プロトン性溶媒中で、約 1 等量若しくは約 2 等量の R^{18} が以前に開示されたとおりであるアルキル化剤 R^{18} -ハロおよび水素化ナトリウム若しくはリチウムジイソプロピルアミドのような強塩基を使用するアルキル化は、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^9 、 L 、 R^{10} 、 R^{11} 、 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} および R^{18} が以前に開示されたとおりであるモノ若しくはジアルキル化アナログ 7-4 に至ることができる (段階 7 c)。 R^{10} が H である 2-イミノ 1, 3-チアゾリン-4-オン 7-1 は、ジ

クロロメタンのような溶媒中パラホルムアルデヒドおよびトリフルオロ酢酸で処理することができ、次いで酸塩化物で処理して、 R^{10} が CH_2OCO (C_1-C_4 アルキル)でありかつ R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^9 、 L 、 R^{11} 、 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} および R^{18} が以前に開示されたとおりである2-イミノ1, 3-チアゾリン-4-オン7-5を提供する(段階7d)。同様に、 R^{10} がHである2-イミノ1, 3-チアゾリン-4-オン7-1は、ジクロロメタンのような溶媒中塩基の存在下に酸塩化物で処理することができ、 R^{10} が $C(O)$ ((C_1-C_4) アルキル)若しくは $C(O)$ フェニルである2-イミノ1, 3-チアゾリン-4-オン7-5を提供する(段階7d)。

【0063】

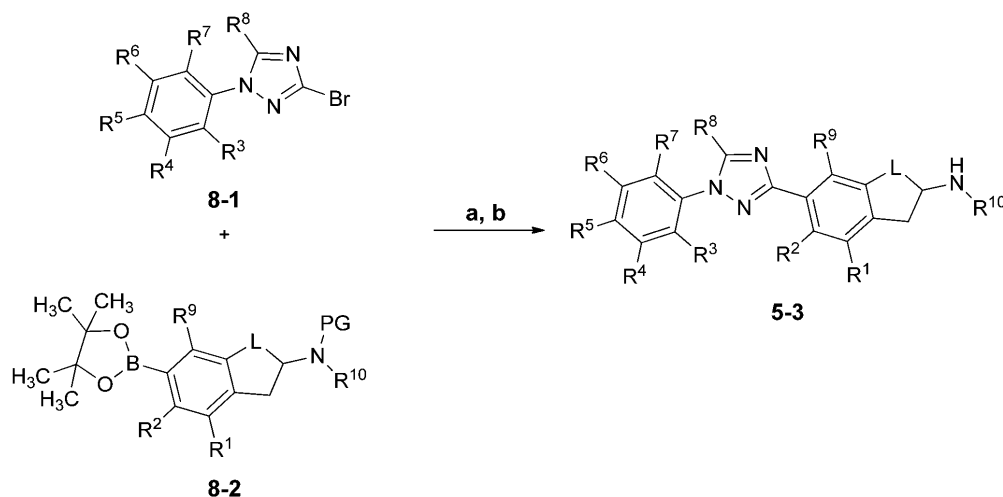
三環性アミン前駆体の製造法

10

【0064】

【化10】

スキーム8



20

【0065】

式1の分子の製造のため必要とされる三環性アミンの製造方法をスキーム8に記述する。PGがtert-ブトキシカルボニル(Boc)若しくはベンジルオキシカルボニル(Cbz)のようなアミン保護基でありかつ R^1 、 R^2 、 R^9 、 L および R^{10} が以前に開示されたとおりであるボロン酸エステル8-2との、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 および R^8 が以前に開示されたとおりであるブromo複素環8-1のカップリングは、ジオキサンおよび水のような適する溶媒系中重炭酸ナトリウム、リン酸カリウム若しくはフッ化セシウムのような塩基の存在下、慣習的若しくはマイクロ波加熱を使用する約50℃から約120℃までの温度でパラジウム触媒およびホスフィンリガンドを使用して達成することができ、N-保護されたアミノアルキルフェニル中間体を形成する(スキーム7、段階7a)。tert-ブトキシカルボニル基の脱保護は、塩化水素若しくはトリフルオロ酢酸のような強酸を用いる酸性条件下で達成することができ、次いで重炭酸ナトリウム若しくは水酸化ナトリウムのような塩基で遊離塩基化(free basing)して、トリアリールアミン5-3を提供する(段階b)。ベンジルオキシカルボニル基の脱保護は、水素およびパラジウム(0)のような遷移金属触媒を使用する標準的条件下で達成しうる。この反応順序をアミン1-1の合成に適用しうることが認識される。

30

40

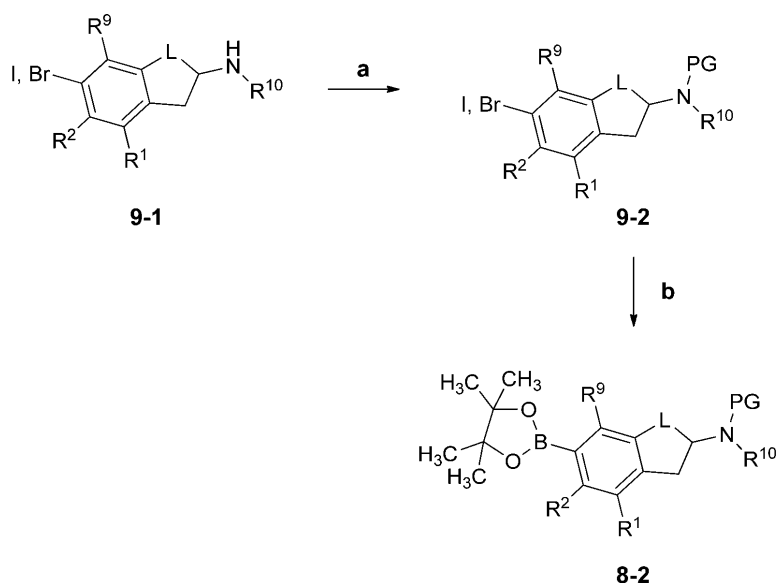
【0066】

ボロン酸エステルの製造法

【0067】

【化 1 1】

スキーム 9



10

【0068】

20

R¹、R²、R⁹、L、R¹⁰およびPGが以前に開示されたとおりである保護されたアリールアミン9-2は、R¹、R²、R⁹、LおよびR¹⁰が以前に開示されたとおりであるアリールアミン9-1を、ジクロロメタンのような溶媒中トリエチルアミンのような塩基の存在下約-10℃から約50℃までの温度で、塩化ジ-tert-ブトキシカルボニル若しくはベンジルオキシカルボニルのような活性化された窒素保護基で処理することにより製造しうる（スキーム9、段階9a）。ボロン酸エステル8-2はミヤウラ条件を使用してアリールアミン9-1から製造しうる（段階9b）。ミヤウラカップリング条件下で適合性であることが既知の標準的窒素保護基を使用しうる。

【実施例】

【0069】

30

これらの実施例は具体的説明の目的上であり、そして該開示をこれらの実施例で開示される態様のみに制限すると解釈されるべきでない。

【0070】

商業的供給源から得た出発原料、試薬および溶媒はさらなる精製なしに使用した。無水溶媒はAldrichからSure/Seal™として購入し、そして受領されたとおり使用した。融点は、Thomas Hoover Unimeltキャピラリー融点装置、若しくはStanford Research SystemsからのOptiMelt自動融点装置で得、そして未補正である。「室温」を使用する実施例は、約20℃から約24℃までの範囲にわたる温度を伴う温度と湿度が制御された実験室で実施した。分子はISIS Draw、ChemDraw若しくはACD Name Pro内の命名プログラムに従って命名されたそれらの既知の名称を与えられる。こうしたプログラムが分子に命名することが不可能である場合、分子は慣習的命名規則を使用して命名する。別の方法で述べられない限り、¹H NMRスペクトルデータはppm (δ) でであり、そして300、400若しくは600 MHzで記録し；¹³C NMRスペクトルデータはppm (δ) でであり、そして75、100若しくは150 MHzで記録し、および¹⁹F NMRスペクトルデータはppm (δ) でであり、そして376 MHzで記録した。

40

【実施例1】

【0071】

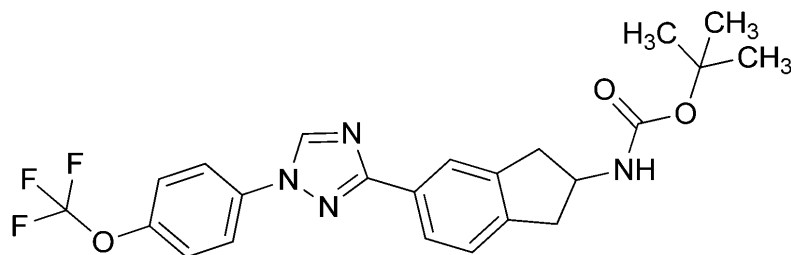
tert-ブチル（5-（1-（4-（トリフルオロメトキシ）フェニル）-1H-1, 2, 4-トリアゾル-3-イル）-2, 3-ジヒドロ-1H-インデン-2-イル）カル

50

バメート (C1) の製造

【0072】

【化12】



10

【0073】

攪拌子および窒素を装備された丸底フラスコ (100 mL) 中の 3-ブromo-1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾール (2.75 g、8.93 mmol)、tert-ブチル (5-(4,4,5,5-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロラン-2-イル)-2,3-ジヒドロ-1H-インデン-2-イル) カルバメート (3.21 g、8.93 mmol)、重炭酸ナトリウム (1.50 g、17.9 mmol)、ジオキサン (45 mL) および水 (15 mL) に、テトラキス (トリフェニルホスフィン) パラジウム (0) (1.03 g、0.893 mmol) を添加した。反応容器を真空で排気しかつ窒素でパージした (2回)。該反応を 80℃ に一夜加熱した。該反応を冷却し、酢酸エチルで希釈しかつ水で洗浄した。水層を酢酸エチルで抽出した。合わせられた有機層を塩水で洗浄し、硫酸ナトリウムで乾燥し、濾過しかつ濃縮した。溶出液として 0-40% 酢酸エチル/B (ここで B=1:1 ジクロロメタン/ヘキサン) を使用するフラッシュカラムクロマトグラフィーによる精製が、表題化合物を白色固形物 (2.10 g、51%) : ^1H NMR (400 MHz、 CDCl_3) δ 8.55 (s、1H)、8.05 (d、 $J=1.5$ Hz、1H)、8.01 (dd、 $J=7.8$ 、1.6 Hz、1H)、7.83-7.77 (m、2H)、7.39 (dt、 $J=7.9$ 、1.0 Hz、2H)、7.32 (d、 $J=7.9$ Hz、1H)、4.78 (s、1H)、4.53 (s、1H)、3.43-3.22 (m、2H)、2.85 (ddd、 $J=15.9$ 、10.1、4.9 Hz、2H)、1.45 (s、9H) ; ^{19}F NMR (376 MHz、 CDCl_3) δ -58.03 ; ESI-MS m/z 461 ($[\text{M}+\text{H}]^+$) として提供した。

20

30

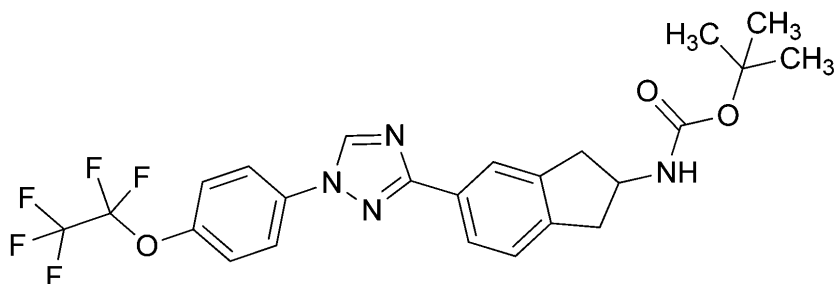
【実施例2】

【0074】

tert-ブチル (5-(1-(4-(パーフルオロエトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾール-3-イル)-2,3-ジヒドロ-1H-インデン-2-イル) カルバメート (C2) の製造

【0075】

【化13】



40

【0076】

バイアル (20 mL) 中の 3-ブromo-1-(4-(パーフルオロエトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾール (0.409 g、1.14 mmol)、tert-

50

ブチル（５－（４，４，５，５－テトラメチル－１，３，２－ジオキサボロラン－２－イル）－２，３－ジヒドロ－１Ｈ－インデン－２－イル）カルバメート（０．４１１ｇ、１．１４ｍｍｏｌ）、重炭酸ナトリウム（０．０９６０ｇ、１．１４ｍｍｏｌ）、テトラキス（トリフェニルホスフィン）パラジウム（０）（０．１３２ｇ、０．１１４ｍｍｏｌ）、ジオキサン（６ｍＬ）および水（２ｍＬ）に蓋をし、そして、容器の側からの外部ＩＲセンサー温度監視を伴うＢｉｏｔａｇｅ Ｉｎｉｔｉａｔｏｒ（登録商標）マイクロ波反応槽中１４０℃で３０分間加熱した。該反応を酢酸エチルで希釈しかつ水で洗浄した。水層を酢酸エチルで抽出した。合わせられた有機層を塩水で洗浄した。有機層を硫酸ナトリウムで乾燥し、濾過しかつ濃縮した。溶出液として０－２０％酢酸エチル／Ｂ（ここでＢ＝１：１ ジクロロメタン／ヘキサン）を使用するフラッシュカラムクロマトグラフィーによる精製、次いで５０℃で約２５ｉｎ．Ｈｇで乾燥することが、表題化合物を白色固形物（０．３４５ｇ、５９％）：ｍｐ １６１－１６５℃；¹H NMR（４００ＭＨｚ、ＣＤＣｌ₃）δ ８．５６（ｓ、１Ｈ）、８．０５（ｓ、１Ｈ）、８．０２（ｄｄ、Ｊ＝７．７、１．６Ｈｚ、１Ｈ）、７．８４－７．７８（ｍ、２Ｈ）、７．３９（ｄ、Ｊ＝８．８Ｈｚ、２Ｈ）、７．３２（ｄ、Ｊ＝７．８Ｈｚ、１Ｈ）、４．８７－４．７０（ｍ、１Ｈ）、４．６０－４．４５（ｍ、１Ｈ）、３．３４（ｄｔ、Ｊ＝１６．２、８．０Ｈｚ、２Ｈ）、２．８６（ｄｄｄ、Ｊ＝１５．８、１０．１、４．９Ｈｚ、２Ｈ）、１．４５（ｓ、９Ｈ）；¹⁹F NMR（３７６ＭＨｚ、ＣＤＣｌ₃）δ －８５．８９、－８７．８５；ＥＳＩＭＳ ｍ／ｚ ５１１（〔Ｍ＋Ｈ〕⁺）として提供した。

10

20

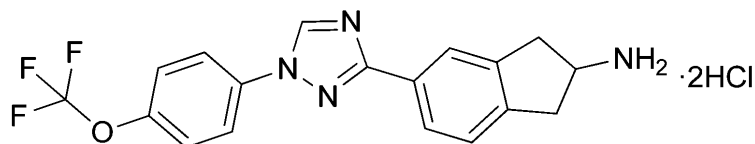
【実施例３】

【００７７】

５－（１－（４－（トリフルオロメトキシ）フェニル）－１Ｈ－１，２，４－トリアゾル－３－イル）－２，３－ジヒドロ－１Ｈ－インデン－２－アミン二塩酸塩（Ｃ３）の製造

【００７８】

【化１４】



30

【００７９】

攪拌子および窒素を装備された丸底フラスコ（１００ｍＬ）中のｔｅｒｔ－ブチル（５－（１－（４－（トリフルオロメトキシ）フェニル）－１Ｈ－１，２，４－トリアゾル－３－イル）－２，３－ジヒドロ－１Ｈ－インデン－２－イル）カルバメート（Ｃ１）（０．４８４ｇ、１．０５ｍｍｏｌ）に、ジオキサン（３ｍＬ）および塩化水素（ジオキサン中４Ｍ、３．０２ｍＬ、１２．１ｍｍｏｌ）を添加した。該反応を室温で一夜攪拌した。追加の塩化水素（ジオキサン中４Ｍ、３．０２ｍＬ、１２．１ｍｍｏｌ）を添加し、そして該反応を４０℃に一夜加熱した。さらなる塩化水素（ジオキサン中４Ｍ、３．０２ｍＬ、１２．１ｍｍｏｌ）を添加した。数時間後に該反応を室温に冷却しそしてジエチルエーテルで希釈した。固形物を濾過し、ジエチルエーテルで洗浄しかつハウスバキューム下に乾燥し、表題化合物を白色固形物（０．３７９ｇ、８３％）：¹H NMR（４００ＭＨｚ、ＤＭＳＯ－ｄ₆）δ ９．４１（ｓ、１Ｈ）、８．３６－８．１７（ｍ、３Ｈ）、８．１１－８．０４（ｍ、２Ｈ）、８．０２（ｓ、１Ｈ）、７．９８（ｄｄ、Ｊ＝７．８、１．６Ｈｚ、１Ｈ）、７．６５－７．６０（ｍ、２Ｈ）、７．４３（ｄ、Ｊ＝７．９Ｈｚ、１Ｈ）、４．１１－４．００（ｍ、２Ｈ）、３．３６（ｄｄｄ、Ｊ＝１６．９、１３．８、７．７Ｈｚ、２Ｈ）、３．０４（ｄｄｄ、Ｊ＝１７．２、１２．３、５．２Ｈｚ、２Ｈ）；¹⁹F NMR（３７６ＭＨｚ、ＤＭＳＯ－ｄ₆）δ －５６．９６；ＥＳＩＭＳ ｍ／ｚ ３６１（〔Ｍ＋Ｈ〕⁺）として提供した。

40

【実施例４】

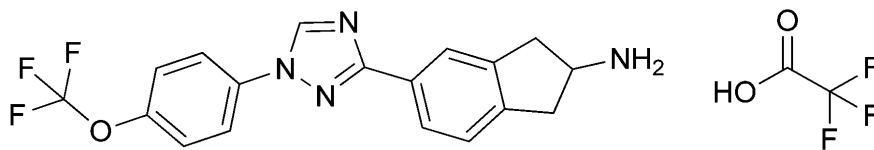
【００８０】

50

5-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)-2,3-ジヒドロ-1H-インデン-2-アミン2,2,2-トリフルオロ酢酸塩(C4)の製造

【0081】

【化15】



10

【0082】

攪拌子および窒素を装備された丸底フラスコ(200mL)中のtert-ブチル(5-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)-2,3-ジヒドロ-1H-インデン-2-イル)カルバメート(C1)(2.1g、4.6mmol)にジクロロメタン(30mL)を添加した。該反応を氷水浴で冷却し、そしてトリフルオロ酢酸(3.9mL、50mmol)を1つの部分で添加した。氷浴を除去しそして該反応を室温で一夜攪拌した。該反応混合物を濃縮し、そして残渣をジエチルエーテルでスラリーにしかつ白色固形物が得られるまで濃縮した。該固形物をジエチルエーテルおよびヘキサンとともに摩砕し、濾過し、収集しそして50℃で約25in.Hgで一夜乾燥し、表題化合物を白色固形物(1.9g、86%)：¹⁹F NMR (376MHz、DMSO-d₆) δ -56.96、-73.55；ESI MS m/z 361 ([M+H]⁺)として提供した。

20

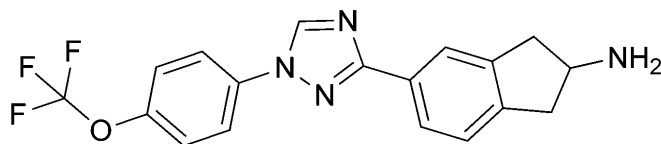
【実施例5】

【0083】

5-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)-2,3-ジヒドロ-1H-インデン-2-アミン(C5)の製造

【0084】

【化16】



30

【0085】

ジクロロメタン中の5-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)-2,3-ジヒドロ-1H-インデン-2-アミン2,2,2-トリフルオロ酢酸塩(C4)(1.46g、3.08mmol)を分液ロート中にて水酸化ナトリウム(1N)で洗浄した。有機層を層分離器に注ぎ込み(poured through)かつ濃縮した。該固形物を50℃で約25in.Hgで一夜乾燥し、表題化合物を黄褐色固形物(0.779g、70%)：¹H NMR (400MHz、CDCl₃) δ 8.55(s、1H)、8.05(d、J=1.5Hz、1H)、8.02-7.97(m、1H)、7.86-7.75(m、2H)、7.43-7.34(m、2H)、7.32(d、J=7.8Hz、1H)、3.90(s、1H)、3.25(ddd、J=16.6、10.2、6.7Hz、2H)、2.75(ddd、J=16.4、9.4、5.1Hz、2H)(NH₂は観察されない。)；¹⁹F NMR (376MHz、CDCl₃) δ -58.03；ESI MS m/z 361 ([M+H]⁺)として提供した。

40

【実施例6】

【0086】

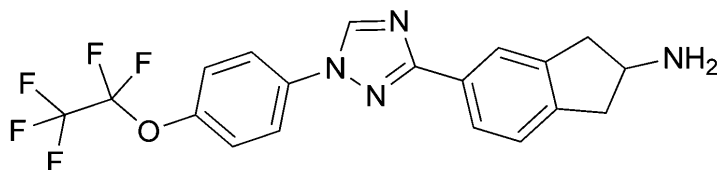
5-(1-(4-(パーフルオロエトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル

50

－ 3－イル）－ 2， 3－ジヒドロ－ 1 H－インデン－ 2－アミン（ C 6 ）の製造

【 0 0 8 7 】

【 化 1 7 】



【 0 0 8 8 】

10

攪拌子および窒素を装備された丸底フラスコ（ 1 0 0 m L ）中の t e r t－ブチル（ 5－（ 1－（ 4－（ パーフルオロエトキシ）フェニル）－ 1 H－ 1， 2， 4－トリアゾル－ 3－イル）－ 2， 3－ジヒドロ－ 1 H－インデン－ 2－イル）カルバメート（ C 2 ）（ 0． 3 0 5 g、 0． 5 9 8 m m o l ）に、ジクロロメタン（ 4 m L ）次いでトリフルオロ酢酸（ 0． 5 0 6 m L、 6． 5 7 m m o l ）を添加した。該反応を室温で一夜攪拌した。該反応混合物を氷水浴で冷却し、そして水酸化ナトリウム（ 2 M、 3． 2 9 m L、 6． 5 7 m m o l ）で塩基性にした。層を分離しそして水層をクロロホルム／イソプロパノールで抽出した（ 3： 1、 3 回）。有機層を層分離器に注ぎ込みかつ濃縮し、表題化合物をさらなる精製なしに使用される黄色油状物として提供した（ 0． 2 9 0 g、 1 1 8 % ）： ^{19}F

NMR（ 3 7 6 M H z、 C D C l ₃ ） δ － 8 5． 9 0、－ 8 7． 8 5； E S I M S m/z 4 1 1（ [M + H] ⁺ ）。

20

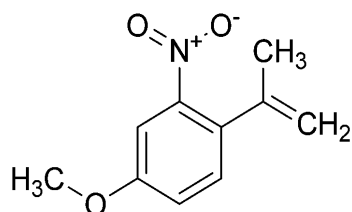
【 実施例 7 】

【 0 0 8 9 】

4－メトキシ－ 2－ニトロ－ 1－（プロプ－ 1－エン－ 2－イル）ベンゼン（ C 7 ）の製造

【 0 0 9 0 】

【 化 1 8 】



30

【 0 0 9 1 】

1－クロロ－ 4－メトキシ－ 2－ニトロベンゼン（ 5． 0 3 g、 2 6． 8 m m o l ）、 4， 4， 5， 5－テトラメチル－ 2－（プロプ－ 1－エン－ 2－イル）－ 1， 3， 2－ジオキサボロラン（ 5． 4 1 g、 3 2． 2 m m o l ）、ビス（トリフェニルホスフィン）パラジウム（ I I ）クロリド（ 1． 5 0 g、 2． 1 5 m m o l ）および炭酸ナトリウム（ 3． 4 1 g、 3 2． 2 m m o l ）に、ジオキサン／水（ 4： 1、 1 0 0 m L： 2 5 m L ）を添加した。該反応を 8 0 ° C で 5 時間加熱した。該反応を室温に一夜冷却した。該反応混合物を水で希釈し、酢酸エチルで抽出し（ 3 回）、硫酸ナトリウムで乾燥し、濾過しかつ濃縮した。溶出液として 0－ 5 % 酢酸エチル／ヘキサンを使用するフラッシュカラムクロマトグラフィーによる精製、次いで真空オーブン中で乾燥することが、表題化合物を橙色油状物（ 2． 7 4 g、 5 3 % ）： ^1H NMR（ 4 0 0 M H z、 C D C l ₃ ） δ 7． 3 7（ d、 J = 2． 7 H z、 1 H）、 7． 2 3（ d、 J = 8． 6 H z、 1 H）、 7． 0 8（ d d、 J = 8． 5、 2． 6 H z、 1 H）、 5． 2 4－ 4． 7 5（ m、 2 H）、 3． 8 6（ s、 3 H）、 2． 1 9－ 1． 8 8（ m、 3 H）； ^{13}C NMR（ 1 0 1 M H z、 C D C l ₃ ） δ 1 5 8． 7 9、 1 4 8． 6 1、 1 4 2． 5 3、 1 3 1． 4 1、 1 3 1． 3 2、 1 1 9． 2 4、 1 1 5． 2 0、 1 0 8． 6 4、 5 5． 8 4、 2 3． 3 8； E I M S m/z 1

40

50

93 ([M]⁺)として提供した。

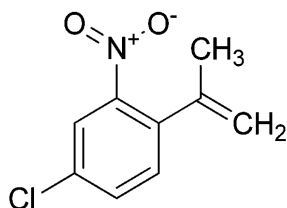
【0092】

以下の化合物は実施例7の手順に従って製造した。

4-クロロ-2-ニトロ-1-(プロプ-1-エン-2-イル)ベンゼン(C8)

【0093】

【化19】



10

【0094】

表題化合物は、一夜加熱される1-ブロモ-4-クロロ-2-ニトロベンゼンを使用して実施例7に記述されるとおり製造し、そして薄橙色液体(10.73g、84%)：¹H NMR(400MHz、DMSO-d₆) δ 8.04(d、J=2.2Hz、1H)、7.76(dd、J=8.3、2.2Hz、1H)、7.52(d、J=8.3Hz、1H)、5.24(p、J=1.5Hz、1H)、4.95(p、J=1.0Hz、1H)、2.07(dd、J=1.5、0.9Hz、3H)；¹³C NMR(101MHz、DMSO) δ 148.37、140.83、136.10、132.62、132.45、131.63、123.50、115.98、22.60；EIMS m/z 197([M]⁺)として単離された。

20

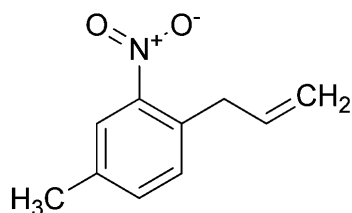
【実施例8】

【0095】

1-アリル-4-メチル-2-ニトロベンゼン(C9)の製造

【0096】

【化20】



30

【0097】

25mL反応バイアル中の1-クロロ-4-メチル-2-ニトロベンゼン(2.00g、11.7mmol)、アリルトリブチルスタナン(5.79g、17.5mmol)およびビス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(II)ジクロリド(0.818g、1.17mmol)に、1,2-ジクロロエタン(20mL)を添加した。バイアルに蓋をし、そして、容器の側からの外部IRセンサー温度監視を伴うBiotage Initiator(登録商標)マイクロ波反応槽中120℃で45分間加熱した。該反応混合物をCelite(登録商標)カートリッジに負荷した。該粗物質を、溶出液として0-50%酢酸エチル/ヘキサンを使用するフラッシュカラムクロマトグラフィー、次いで溶出液として0-100%アセトニトリル/水を使用する逆相フラッシュカラムクロマトグラフィーにより精製した。合わせられたアセトニトリル/水画分を濃縮し、酢酸エチルで抽出し、硫酸ナトリウムで乾燥し、濾過し、濃縮しかつ真空オーブン中で乾燥して、表題化合物を黄色液体(1.76g、84%)：¹H NMR(400MHz、CDCl₃) δ 7.73(d、J=0.9Hz、1H)、7.34(dd、J=7.8、1.2Hz、1H)、7.24(d、J=7.8Hz、1H)、5.96(ddt、J=16.6、10.1、6.4Hz、1H)、5.08(ddq、J=18.5、17.0、1.5Hz

40

50

、2 H)、3.64 (d、J=6.4 Hz、2 H)、2.40 (s、3 H)；¹³C NMR (101 MHz、CDCl₃) δ 149.09、137.62、135.35、133.81、131.81、131.72、124.94、116.81、36.62、20.72；EIMS m/z 176 ([M]⁺)として提供した。

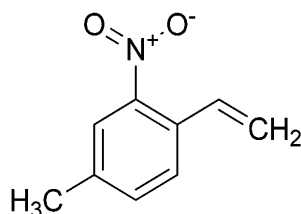
【0098】

以下の化合物は実施例8の手順に従って製造した：

4-メチル-2-ニトロ-1-ビニルベンゼン (C10)

【0099】

【化21】



10

【0100】

表題化合物は、1-クロロ-4-メチル-2-ニトロベンゼンおよびトリブチル(ビニル)スタンナンを使用して実施例8に記述されるとおり製造し、フラッシュカラムクロマトグラフィーおよび逆相クロマトグラフィーによりさらに精製し、そして黄色液体(1.26 g、65%)；¹H NMR (400 MHz、CDCl₃) δ 7.73 (d、J=0.8 Hz、1 H)、7.52 (d、J=8.0 Hz、1 H)、7.46-7.35 (m、1 H)、7.13 (dd、J=17.3、11.0 Hz、1 H)、5.71 (dd、J=17.3、0.9 Hz、1 H)、5.43 (dd、J=11.0、0.9 Hz、1 H)、2.42 (s、3 H)；¹³C NMR (101 MHz、CDCl₃) δ 147.71、138.91、133.92、132.31、130.52、128.22、124.63、118.10、20.88；EIMS m/z 163 ([M]⁺)として単離された。

20

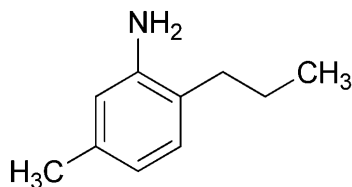
【実施例9】

【0101】

5-メチル-2-プロピルアニリン (C11) の製造

【0102】

【化22】



30

【0103】

酢酸エチル(49 mL)中の1-アリル-4-メチル-2-ニトロベンゼン(C9)(1.75 g、9.87 mmol)およびパラジウム炭素(10%、1.05 g、0.990 mmol)を含有する丸底フラスコを、真空下に排気しかつ窒素で戻し充填し(backed)(2回)、その後真空下に排気しかつ風船により水素で充填した。該反応を室温で2夜攪拌した。該反応混合物を酢酸エチルとともにCelite(登録商標)で濾過しかつ濃縮した。液体を真空オープン中で乾燥し、表題化合物を黄色液体(1.39 g、93%)；¹H NMR (400 MHz、CDCl₃) δ 6.92 (d、J=7.6 Hz、1 H)、6.55 (d、J=7.6 Hz、1 H)、6.51 (s、1 H)、3.55 (s、2 H)、2.47-2.37 (m、2 H)、2.24 (s、3 H)、1.69-1.53 (m、2 H)、0.99 (t、J=7.3 Hz、3 H)；¹³C NMR (10

40

50

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 143.91、136.52、129.46、123.83、119.49、116.29、33.05、22.10、21.05、14.19; EIMS m/z 149 ($[\text{M}]^+$)として提供した。

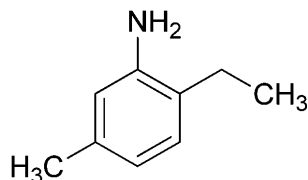
【0104】

以下の化合物は実施例9の手順に従って製造した：

2-エチル-5-メチルアニリン (C12)

【0105】

【化23】



10

【0106】

表題化合物は、4-メチル-2-ニトロ-1-ビニルベンゼン (C10) を使用して実施例9に記述されるとおり製造し、そして黄色液体 (0.926 g、88%)： ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 6.95 (d、 $J=7.6$ Hz、1H)、6.57 (d、 $J=7.6$ Hz、1H)、6.52 (s、1H)、3.56 (s、2H)、2.48 (q、 $J=7.5$ Hz、2H)、2.25 (s、3H)、1.23 (t、 $J=7.6$ Hz、3H)； ^{13}C NMR (101 MHz, CDCl_3) δ 143.80、136.48、128.32、125.22、119.59、116.15、23.67、21.03、13.24; EIMS m/z 135 ($[\text{M}]^+$)として単離された。

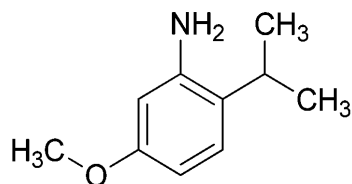
20

【0107】

2-イソプロピル-5-メトキシアニリン (C13)

【0108】

【化24】



30

【0109】

表題化合物は、4-メトキシ-2-ニトロ-1-(プロプ-1-エン-2-イル)ベンゼン (C7) を使用して実施例9に記述されるとおり製造し、そして黄色液体 (2.23 g、95%)： ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.03 (d、 $J=8.4$ Hz、1H)、6.35 (dd、 $J=8.5$ 、2.6 Hz、1H)、6.25 (d、 $J=2.6$ Hz、1H)、3.75 (s、3H)、3.65 (s、2H)、2.83 (p、 $J=6.8$ Hz、1H)、1.24 (d、 $J=6.8$ Hz、6H)；EIMS m/z 165 ($[\text{M}]^+$)として単離された。

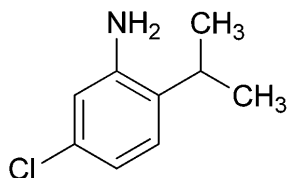
40

【0110】

5-クロロ-2-イソプロピルアニリン (C14)

【0111】

【化 2 5】



【0 1 1 2】

表題化合物は、4-クロロ-2-ニトロ-1-(プロプ-1-エン-2-イル)ベンゼン(C 8)を使用して実施例 9 に記述されるとおり製造し、そして褐色液体(1.82 g、84%)：¹H NMR (400 MHz、CDCl₃) δ 7.38–7.31 (m、1 H)、7.22–7.16 (m、1 H)、7.07 (d、J = 8.1 Hz、1 H)、6.83–6.77 (m、2 H)、2.90 (p、J = 6.8 Hz、1 H)、1.25 (d、J = 6.8 Hz、6 H)；¹³C NMR (101 MHz、CDCl₃) δ 126.91、126.83、126.51、121.34、120.07、116.37、27.44、22.34；EIMS m/z 169 ([M]⁺)として単離された。

10

【実施例 10】

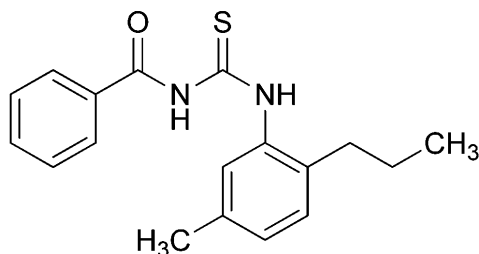
【0 1 1 3】

N-((5-メチル-2-プロピルフェニル)カルバモチオイル)ベンズアミド(C 15)の製造

20

【0 1 1 4】

【化 2 6】



30

【0 1 1 5】

5-メチル-2-プロピルアニリン(C 11)(1.38 g、9.22 mmol)およびイソチオシアン酸ベンゾイル(1.24 mL、9.22 mmol)にアセトン(13 mL)を添加した。該反応を60℃で4時間加熱した。該反応を冷却しかつ濃縮した。生じる油状物を真空オープン中で一夜乾燥し、表題化合物を褐色油状物(3.26 g、100%)：¹H NMR (400 MHz、CDCl₃) δ 12.20 (s、1 H)、9.15 (s、1 H)、7.92 (dt、J = 8.5、1.7 Hz、2 H)、7.71–7.60 (m、1 H)、7.55 (m、3 H)、7.18 (d、J = 7.8 Hz、1 H)、7.09 (dd、J = 7.8、1.1 Hz、1 H)、2.66–2.55 (m、2 H)、2.36 (s、3 H)、1.72–1.57 (m、2 H)、0.97 (t、J = 7.3 Hz、3 H)；¹³C NMR (101 MHz、CDCl₃) δ 179.64、166.90、136.22、135.72、134.57、133.74、131.68、129.79、129.22、128.64、127.55、127.24、33.28、23.58、21.01、13.98；ESIMS m/z 313 ([M+H]⁺)として提供した。

40

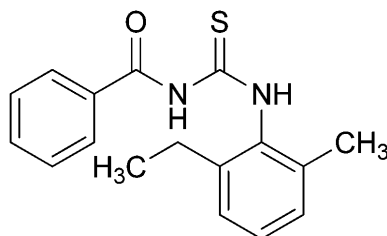
【0 1 1 6】

以下の化合物は実施例 10 の手順に従って製造した：

N-((2-エチル-6-メチルフェニル)カルバモチオイル)ベンズアミド(C 16)

【0 1 1 7】

【化 27】



【0118】

表題化合物は、2-エチル-6-メチルアニリンを使用して実施例10に記述されたと
 おり製造し、そして黄色液体 (6.41 g、100%) : ^1H NMR (400 MHz、
 CDCl_3) δ 11.88 (s、1H)、9.21 (s、1H)、8.02–7.85
 (m、2H)、7.73–7.63 (m、1H)、7.62–7.50 (m、2H)、7.
 29–7.23 (m、1H)、7.20–7.14 (m、2H)、2.75–2.57
 (m、2H)、2.33 (s、3H)、1.25 (t、 $J=7.6$ Hz、3H) ; ESI
 MS m/z 299 ($[\text{M}+\text{H}]^+$) として単離された。

10

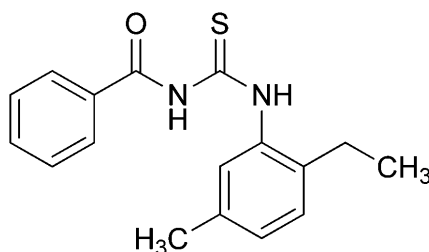
【0119】

N-((2-エチル-5-メチルフェニル)カルバモチオイル)ベンズアミド (C17)

【0120】

【化 28】

20



【0121】

表題化合物は、2-エチル-5-メチルアニリン (C12) を使用して実施例10に記
 述されたとおり製造し、そして橙色固形物 (2.10 g、97%) : mp 105–10
 7 °C ; ^1H NMR (400 MHz、 CDCl_3) δ 12.18 (s、1H)、9.14
 (s、1H)、7.92 (dt、 $J=8.6$ 、1.7 Hz、2H)、7.73–7.60
 (m、1H)、7.59–7.53 (m、2H)、7.50 (s、1H)、7.21 (d
 、 $J=7.8$ Hz、1H)、7.11 (dd、 $J=7.8$ 、1.1 Hz、1H)、2.7
 1–2.59 (m、2H)、2.37 (s、3H)、1.24 (t、 $J=7.6$ Hz、3
 H) ; ^{13}C NMR (101 MHz、 CDCl_3) δ 179.72、166.94、1
 36.22、136.13、135.53、133.75、131.65、129.23
 、128.88、128.86、127.53、127.23、24.26、20.98
 、14.56 ; ESI MS m/z 299 ($[\text{M}+\text{H}]^+$) として単離された。

30

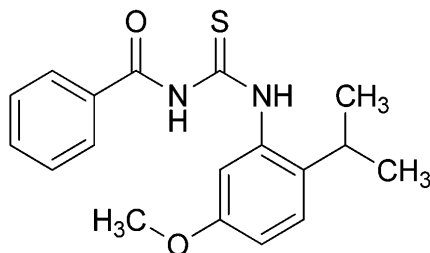
40

【0122】

N-((2-イソプロピル-5-メトキシフェニル)カルバモチオイル)ベンズアミド (C18)

【0123】

【化 2 9】



【0124】

10

表題化合物は、2-イソプロピル-5-メトキシアニリン (C13) を使用して実施例 10 に記述されるとおり製造し、そして黄色液体 (4.63 g、100%) : ^1H NMR (400 MHz、 CDCl_3) δ 12.23 (s、1H)、9.13 (s、1H)、7.98–7.82 (m、2H)、7.74–7.61 (m、1H)、7.61–7.51 (m、2H)、7.32–7.26 (m、2H)、6.89 (dd、 $J=8.7$ 、2.7 Hz、1H)、3.81 (s、3H)、3.10 (p、 $J=6.9$ Hz、1H)、1.26 (d、 $J=6.8$ Hz、6H) ; ESI-MS m/z 329 ($[\text{M}+\text{H}]^+$) として単離された。

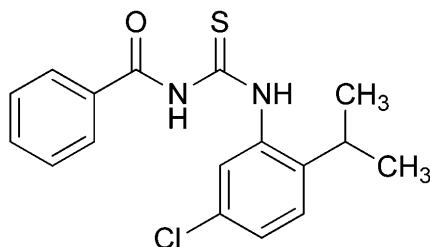
【0125】

N-((5-クロロ-2-イソプロピルフェニル)カルバモチオイル)ベンズアミド (C19)

20

【0126】

【化 3 0】



30

【0127】

表題化合物は、5-クロロ-2-イソプロピルアニリン (C14) を使用して実施例 10 に記述されるとおり製造し、次いでフラッシュカラムクロマトグラフィーにより精製し、そして薄黄色固形物 (16.3 g、98%) : ^1H NMR (400 MHz、 $\text{DMSO}-d_6$) δ 12.32 (s、1H)、11.76 (s、1H)、8.07–7.95 (m、2H)、7.72–7.63 (m、1H)、7.60–7.50 (m、3H)、7.42 (d、 $J=8.5$ Hz、1H)、7.37 (dd、 $J=8.5$ 、2.2 Hz、1H)、3.08 (hept、 $J=6.9$ Hz、1H)、1.19 (d、 $J=6.8$ Hz、6H) ; ^{13}C NMR (101 MHz、 DMSO) δ 181.12、168.37、142.95、137.03、133.18、131.93、129.67、128.75、128.40、127.61、127.55、127.52、27.63、22.84 ; ESI-MS m/z 333 ($[\text{M}+\text{H}]^+$) として単離された。

40

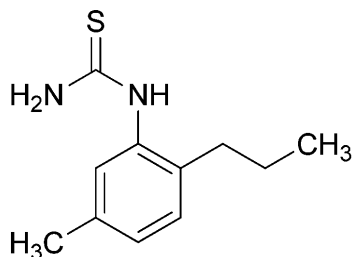
【実施例 11】

【0128】

1-(5-メチル-2-プロピルフェニル)チオ尿素 (C20) の製造

【0129】

【化 3 1】



【0130】

10

メタノール（80 mL）中のN-（（5-メチル-2-プロピルフェニル）カルバモチオイル）ベンズアミド（C15）（3.21 g、10.3 mmol）に水酸化ナトリウム（2 N、10.3 mL、20.5 mmol）を添加し、そして50℃で2時間加熱し、その後週末にわたり室温で撹拌した。該反応を濃縮し、水で希釈し、ジクロロメタンで抽出し、層分離器で濾過し、濃縮し、かつ真空オーブン中で乾燥して、表題化合物を黄褐色固形物（1.80 g、83%）：mp 143-145℃；¹H NMR（400 MHz、CDCl₃）δ 7.84（s、1H）、7.20（d、J=7.8 Hz、1H）、7.12（dd、J=7.8、1.2 Hz、1H）、7.04（s、1H）、5.99（d、J=254.5 Hz、2H）、2.57（d、J=7.5 Hz、2H）、2.33（s、3H）、1.59（dq、J=14.8、7.4 Hz、2H）、0.95（t、J=7.3 Hz、3H）；¹³C NMR（101 MHz、CDCl₃）δ 181.96、137.53、136.74、134.00、130.69、129.72、127.85、32.90、23.66、20.80、13.93；ESI MS m/z 209（[M+H]⁺）として提供した。

20

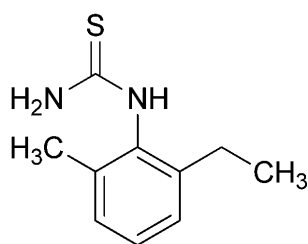
【0131】

以下の化合物は実施例11の手順に従って製造した：

1-（2-エチル-6-メチルフェニル）チオ尿素（C21）

【0132】

【化 3 2】



30

【0133】

表題化合物は、N-（（2-エチル-6-メチルフェニル）カルバモチオイル）ベンズアミド（C16）を使用して実施例11に記述されるとおり製造し、水との摩砕によりさらに精製し、そして白色固形物（3.46 g、83%）：¹H NMR（400 MHz、CDCl₃）δ 7.63（s、1H）、7.25（d、J=7.9 Hz、1H）、7.22-7.11（m、2H）、6.13（bs、1H）、5.33（bs、1H）、2.77-2.55（m、2H）、2.31（s、3H）、1.21（t、J=7.6 Hz、3H）；ESI MS m/z 195（[M+H]⁺）として単離された。

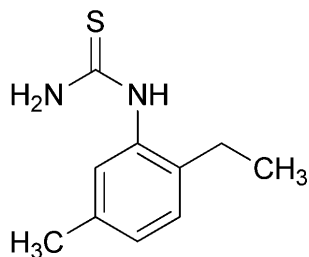
40

【0134】

1-（2-エチル-5-メチルフェニル）チオ尿素（C22）

【0135】

【化 3 3】



【0136】

10

表題化合物は、N-((2-エチル-5-メチルフェニル)カルバモチオイル)ベンズアミド(C17)を使用して実施例11に記述されたとおり製造し、そして淡橙色固形物(1.26g、94%)：mp 143-147℃；¹H NMR(400MHz、CDCl₃) δ 7.48(s、1H)、7.23(d、J=7.8Hz、1H)、7.14(d、J=8.0Hz、1H)、7.04(s、1H)、5.86(s、2H)、2.61(q、J=7.5Hz、2H)、2.33(s、3H)、1.19(t、J=7.6Hz、3H)；¹³C NMR(101MHz、CDCl₃) δ 182.13、138.27、137.53、133.74、129.95、129.93、127.84、24.00、20.79、14.77；ESI MS m/z 195([M+H]⁺)として単離された。

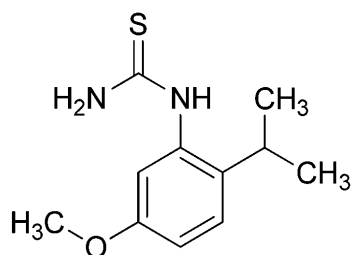
20

【0137】

1-(2-イソプロピル-5-メトキシフェニル)チオ尿素(C23)

【0138】

【化 3 4】



30

【0139】

表題化合物は、N-((2-イソプロピル-5-メトキシフェニル)カルバモチオイル)ベンズアミド(C18)を使用して実施例11に記述されたとおり製造し、そして橙色固形物(2.65g、83%)：mp 134-139℃；¹H NMR(400MHz、CDCl₃) δ 7.60(s、1H)、7.30(d、J=8.7Hz、1H)、6.93(dd、J=8.7、2.7Hz、1H)、6.75(d、J=2.7Hz、1H)、5.88(s、2H)、3.79(s、3H)、3.10(p、J=6.9Hz、1H)、1.19(d、J=6.9Hz、6H)；ESI MS m/z 225([M+H]⁺)として単離された。

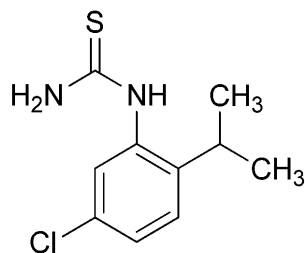
40

【0140】

1-(5-クロロ-2-イソプロピルフェニル)チオ尿素(C24)

【0141】

【化 3 5】



【0142】

10

表題化合物は、N-((5-クロロ-2-イソプロピルフェニル)カルバモチオイル)ベンズアミド(C19)を使用して実施例69に記述されるとおり製造し、そして褐色粘性ガム状物(1.38g、93%)：¹H NMR(400MHz、CDCl₃) δ 7.96(s、1H)、7.34(d、J=1.4Hz、2H)、7.24(t、J=1.3Hz、1H)、5.97(s、2H)、3.27-3.10(m、1H)、1.21(d、J=6.8Hz、6H)；ESI-MS m/z 229([M+H]⁺)として単離された。

【実施例12】

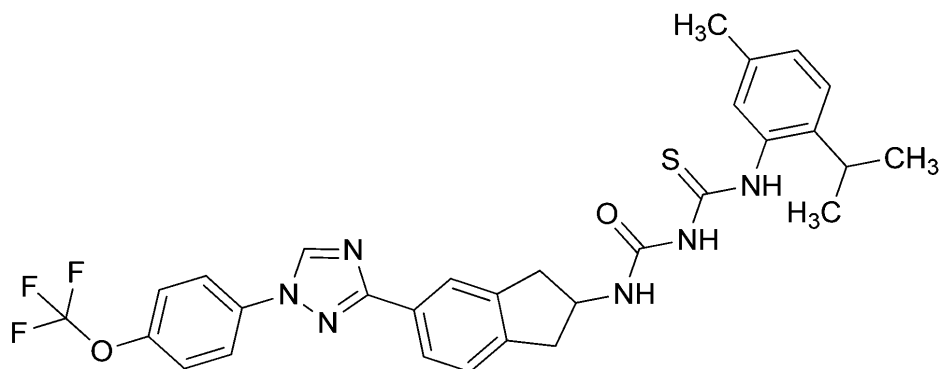
【0143】

20

1-[(2-イソプロピル-5-メチルフェニル)カルバモチオイル]-3-[5-[1-[4-(トリフルオロメトキシ)フェニル]-1,2,4-トリアゾル-3-イル]インダン-2-イル]尿素(F1)の製造

【0144】

【化 3 6】



30

【0145】

攪拌子および窒素を装備されたバイアル(25mL)中の5-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)-2,3-ジヒドロ-1H-インデン-2-アミン二塩酸塩(C3)(0.279g、0.645mmol)に、ジクロロメタン(4mL)、水(2mL)および重炭酸ナトリウム(0.271g、3.22mmol)を添加した。該反応混合物を氷水浴中で冷却した。トリホスゲン(0.0770g、0.258mmol)を1つの部分で添加し、そして該反応を、出発原料の転化がLCMSにより観察されるまで活発に攪拌した。該反応混合物を分液ロート中に注ぎかつジクロロメタンで希釈した。層を分離し、そして水層をジクロロメタンで抽出した。有機層を層分離器に注ぎ込みかつ濃縮した。結果として生じる固形物を、攪拌子および窒素を装備された丸底フラスコ(100mL)中でアセトニトリル(6mL)に懸濁した。これに炭酸セシウム(0.231g、0.709mmol)および1-(2-イソプロピル-5-メチルフェニル)チオ尿素(0.134g、0.645mmol)を添加した。該反応を室温で一夜攪拌した。該混合物を酢酸エチルで希釈しかつ半飽和塩水で洗浄した。水層を酢酸エチルで抽出した。合わせられた有機層を硫酸ナトリウムで乾燥し

40

50

、濾過しかつ濃縮した。溶出液として0-30%酢酸エチル／B（ここでB＝1：1 ジクロロメタン／ヘキサン）を使用するフラッシュカラムクロマトグラフィーによる精製が、表題化合物を白色固形物（0.148 g、39%）として提供した。

【0146】

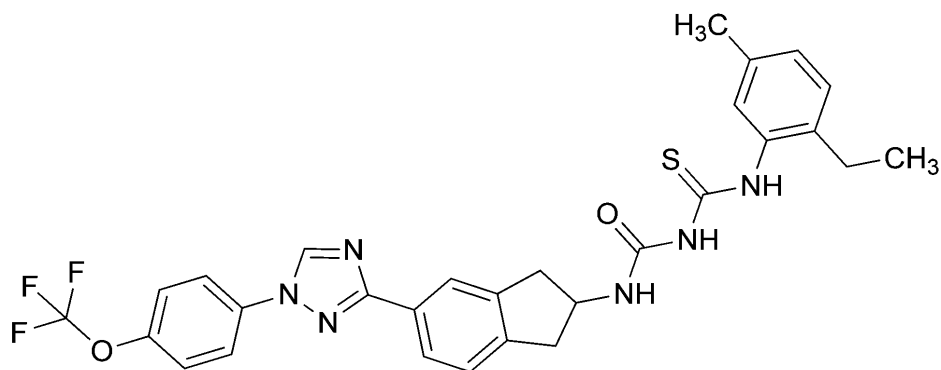
以下の化合物は実施例12に開示される手順に従って製造した：

1-[(2-エチル-5-メチルフェニル)カルバモチオイル]-3-[5-[1-[4-(トリフルオロメトキシ)フェニル]-1,2,4-トリアゾル-3-イル]インダン-2-イル]尿素(F5)

【0147】

【化37】

10



20

【0148】

5-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)-2,3-ジヒドロ-1H-インデン-2-アミン2,2,2-トリフルオロ酢酸塩(C4)および1-(2-エチル-5-メチルフェニル)チオ尿素(C22)を使用して、白色固形物として単離された(0.077 g、32%)。

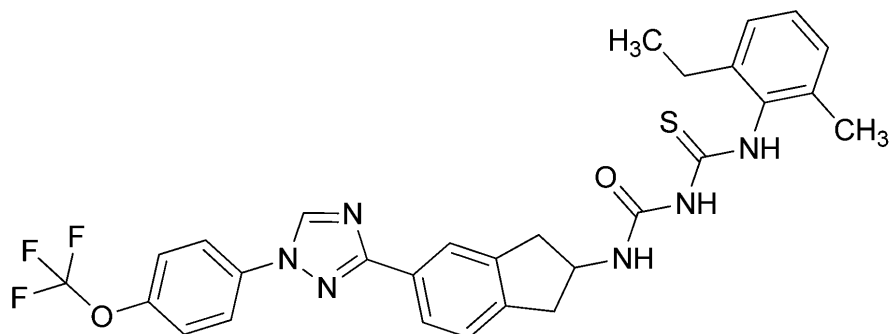
【0149】

1-[(2-エチル-6-メチルフェニル)カルバモチオイル]-3-[5-[1-[4-(トリフルオロメトキシ)フェニル]-1,2,4-トリアゾル-3-イル]インダン-2-イル]尿素(F6)

30

【0150】

【化38】



40

【0151】

5-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)-2,3-ジヒドロ-1H-インデン-2-アミン2,2,2-トリフルオロ酢酸塩(C4)および1-(2-エチル-6-メチルフェニル)チオ尿素(C21)を使用して、白色固形物として単離された(0.110 g、45%)。

【0152】

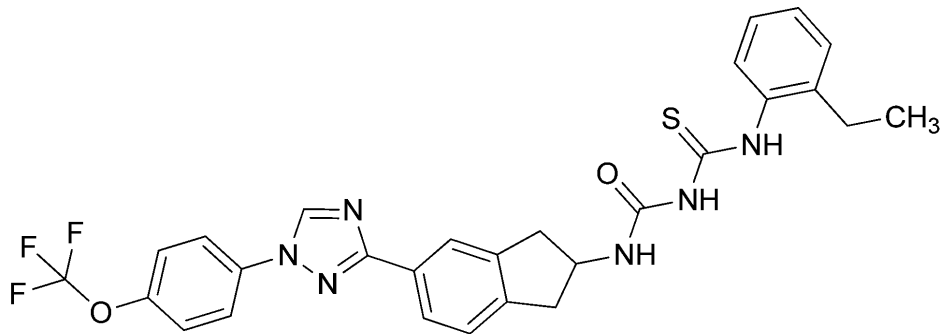
1-[(2-エチルフェニル)カルバモチオイル]-3-[5-[1-[4-(トリフルオロメトキシ)フェニル]-1,2,4-トリアゾル-3-イル]インダン-2-イル]

50

尿素 (F 7)

【0153】

【化39】



10

【0154】

5-〔1-〔4-〔トリフルオロメトキシ〕フェニル〕-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル〕-2,3-ジヒドロ-1H-インデン-2-アミン (C 5) および 1-〔2-エチルフェニル〕チオ尿素を使用して、白色固形物として単離された (0.108 g、44%)。

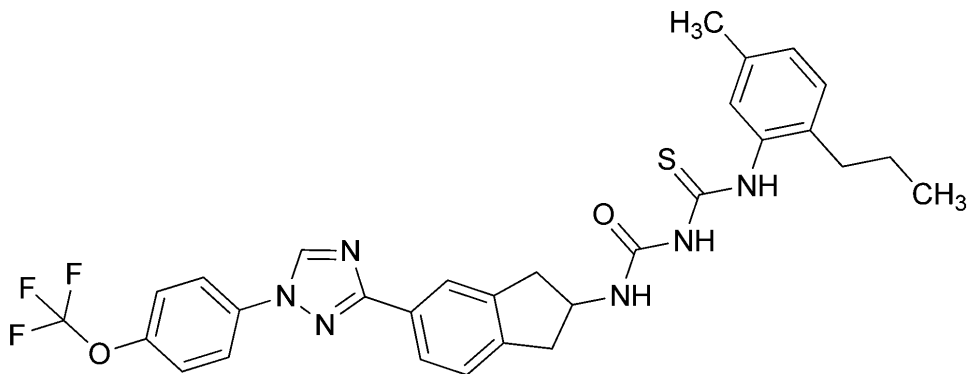
【0155】

1-〔〔5-メチル-2-プロピルフェニル〕カルバモチオイル〕-3-〔5-〔1-〔4-〔トリフルオロメトキシ〕フェニル〕-1,2,4-トリアゾル-3-イル〕インダン-2-イル〕尿素 (F 8)

20

【0156】

【化40】



30

【0157】

5-〔1-〔4-〔トリフルオロメトキシ〕フェニル〕-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル〕-2,3-ジヒドロ-1H-インデン-2-アミン (C 5) および 1-〔5-メチル-2-プロピルフェニル〕チオ尿素 (C 20) を使用して、白色固形物として単離された (0.103 g、40%)。

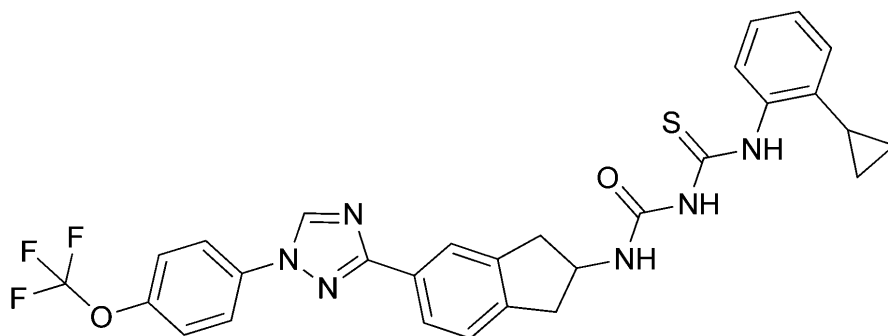
40

【0158】

1-〔〔2-シクロプロピルフェニル〕カルバモチオイル〕-3-〔5-〔1-〔4-〔トリフルオロメトキシ〕フェニル〕-1,2,4-トリアゾル-3-イル〕インダン-2-イル〕尿素 (F 11)

【0159】

【化 4 1】



10

【0160】

5-((1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)-2,3-ジヒドロ-1H-インデン-2-アミン(C5)および1-(2-シクロプロピルフェニル)チオ尿素を使用して、白色固形物として単離された(0.106g、42%)。

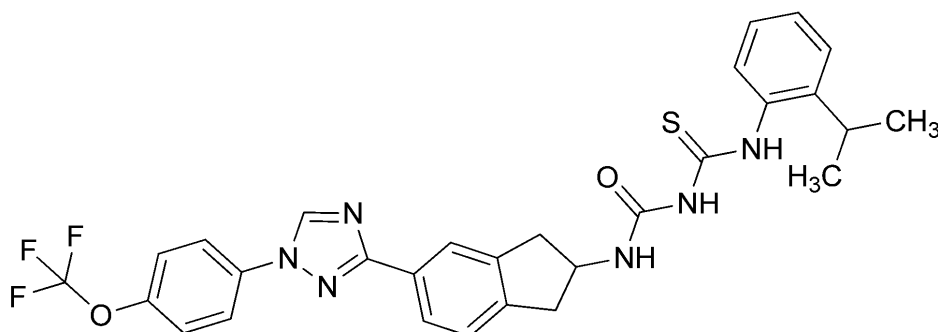
【0161】

1-[(2-イソプロピルフェニル)カルバモチオイル]-3-[5-[1-[4-(トリフルオロメトキシ)フェニル]-1,2,4-トリアゾル-3-イル]インダン-2-イル]尿素(F14)

20

【0162】

【化 4 2】



30

【0163】

5-((1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)-2,3-ジヒドロ-1H-インデン-2-アミン(C5)および1-(2-イソプロピルフェニル)チオ尿素を使用して、白色固形物として単離された(0.106g、42%)。

【実施例 13】

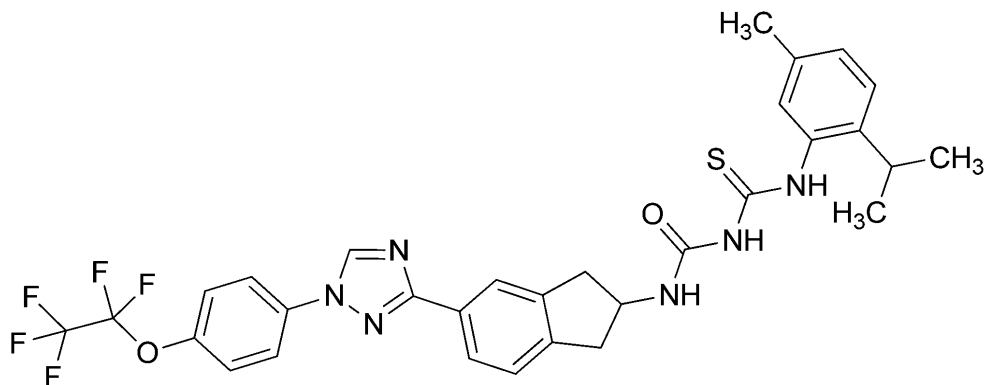
【0164】

1-[(2-イソプロピル-5-メチルフェニル)カルバモチオイル]-3-[5-[1-[4-(1,1,2,2,2-ペンタフルオロエトキシ)フェニル]-1,2,4-トリアゾル-3-イル]インダン-2-イル]尿素(F3)の製造

40

【0165】

【化 4 3】



10

【0166】

攪拌子および窒素を装備された丸底フラスコ（100 mL）中の5-（1-（4-（パーフルオロエトキシ）フェニル）-1H-1, 2, 4-トリアゾル-3-イル）-2, 3-ジヒドロ-1H-インデン-2-アミン（C6）（0.245 g、0.597 mmol）に、重炭酸ナトリウム（0.150 g、1.79 mmol）次いでジクロロメタン（4 mL）および水（2 mL）を添加した。トリホスゲン（0.0710 g、0.239 mmol）を1つの部分で添加しそして該反応を活発に攪拌した。LCMSにより観察されるところのイソシアネートへの転化後に、該反応混合物を層分離器に注ぎ込みそして丸底フラスコ（100 mL）中で濃縮した。攪拌子および窒素をフラスコに添加し、そして該固形物をアセトニトリル（6 mL）に溶解した。炭酸セシウム（0.214 g、0.657 mmol）次いで1-（2-イソプロピル-5-メチルフェニル）チオ尿素（0.124 g、0.597 mmol）を添加し、そして該反応を室温で一夜攪拌した。該反応混合物を酢酸エチルで希釈しかつ水で洗浄した。水層を酢酸エチルで抽出した。合わせられた有機層を塩水で洗浄し、硫酸ナトリウムで乾燥し、濾過しかつ濃縮した。溶出液として0-30%酢酸エチル／B（ここでB=1:1 ジクロロメタン／ヘキサン）を使用するフラッシュカラムクロマトグラフィーによる精製、次いで結果として生じる固形物のジエチルエーテルとの摩砕が、表題化合物を黄色固形物（0.141 g、37%）として提供した。

20

30

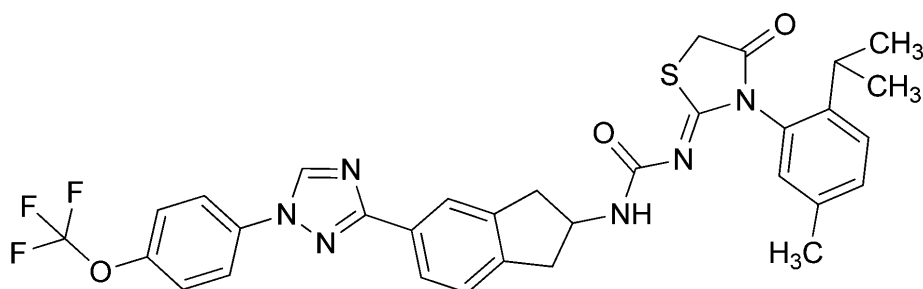
【実施例 14】

【0167】

(Z)-1-（3-（2-イソプロピル-5-メチルフェニル）-4-オキソチアゾリジン-2-イルイデン）-3-（5-（1-（4-（トリフルオロメトキシ）フェニル）-1H-1, 2, 4-トリアゾル-3-イル）-2, 3-ジヒドロ-1H-インデン-2-イル）尿素（F2）の製造

【0168】

【化 4 4】



40

【0169】

攪拌子およびビグリュウラムを装備されたバイアル（25 mL）中の1-〔（2-イソプロピル-5-メチルフェニル）カルバモチオイル〕-3-〔5-〔1-〔4-（ト

50

リフルオロメトキシ) フェニル] - 1, 2, 4-トリアゾル-3-イル] インダン-2-イル] 尿素 (F1) (0.100 g、0.168 mmol) に、エタノール (3 mL) 次いで酢酸ナトリウム (0.0550 g、0.673 mmol) およびプロモ酢酸メチル (0.0230 mL、0.252 mmol) を添加した。該反応を70℃に一夜加熱した。該反応を室温に冷却しかつ酢酸エチルで希釈した。水層を酢酸エチルで抽出した。合わせられた有機層を塩水で洗浄し、硫酸ナトリウムで乾燥し、濾過しかつ濃縮した。溶出液として0-30%酢酸エチル/B (ここでB=1:1 ジクロロメタン/ヘキサン) を使用するフラッシュカラムクロマトグラフィーによる精製、次いで50℃で約25 in. Hgで一夜乾燥することが、表題化合物を白色固形物 (0.0839 g、79%) として提供した。

10

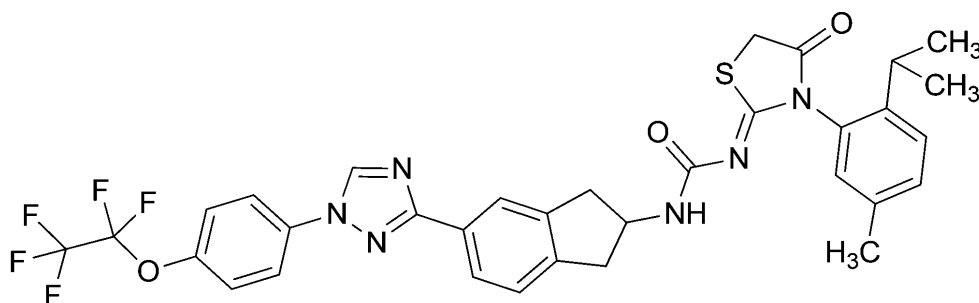
【0170】

以下の化合物は実施例14に開示される手順に従って製造した：

(Z)-1-(3-(2-イソプロピル-5-メチルフェニル)-4-オキソチアゾリジン-2-イリデン)-3-(5-(1-(4-(パーフルオロエトキシ) フェニル)-1H-1, 2, 4-トリアゾル-3-イル)-2, 3-ジヒドロ-1H-インデン-2-イル) 尿素 (F4)

【0171】

【化45】



20

【0172】

1-[(2-イソプロピル-5-メチルフェニル) カルバモチオイル] - 3-[5-[1-[4-(1, 1, 2, 2, 2-ペンタフルオロエトキシ) フェニル] - 1, 2, 4-トリアゾル-3-イル] インダン-2-イル] 尿素 (F3) を使用して、白色固形物として単離された (0.078 g、66%)。

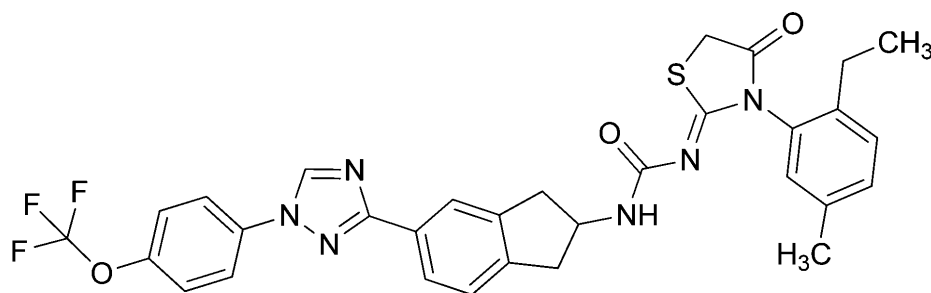
30

【0173】

(Z)-1-(3-(2-エチル-5-メチルフェニル)-4-オキソチアゾリジン-2-イリデン)-3-(5-(1-(4-(トリフルオロメトキシ) フェニル)-1H-1, 2, 4-トリアゾル-3-イル)-2, 3-ジヒドロ-1H-インデン-2-イル) 尿素 (F9)

【0174】

【化46】



40

【0175】

1-[(2-エチル-5-メチルフェニル) カルバモチオイル] - 3-[5-[1-[1-

50

[4-(トリフルオロメトキシ)フェニル]-1,2,4-トリアゾル-3-イル]インダン-2-イル]尿素(F5)を使用して、白色固形物として単離された(0.050g、72%)。

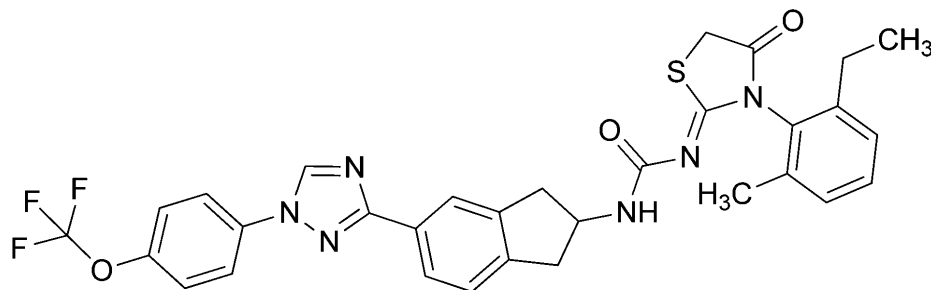
【0176】

(Z)-1-(3-(2-エチル-6-メチルフェニル)-4-オキソチアゾリジン-2-イリデン)-3-(5-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)-2,3-ジヒドロ-1H-インデン-2-イル)尿素(F10)

【0177】

【化47】

10



【0178】

20

1-[(2-エチル-6-メチルフェニル)カルバモチオイル]-3-[5-[1-[4-(トリフルオロメトキシ)フェニル]-1,2,4-トリアゾル-3-イル]インダン-2-イル]尿素(F6)を使用して、白色固形物として単離された(0.047g、46%)。

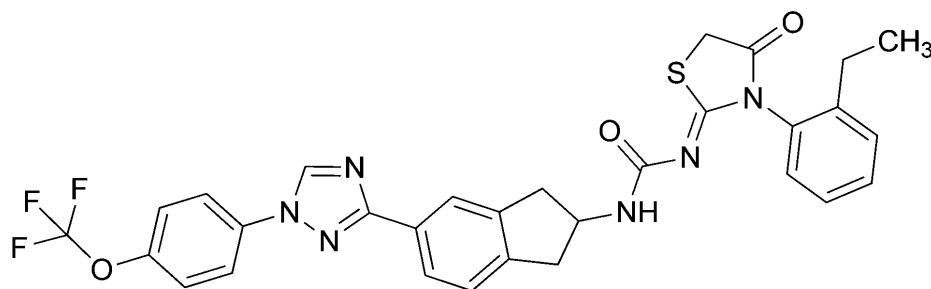
【0179】

(Z)-1-(3-(2-エチルフェニル)-4-オキソチアゾリジン-2-イリデン)-3-(5-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)-2,3-ジヒドロ-1H-インデン-2-イル)尿素(F12)

【0180】

【化48】

30



【0181】

40

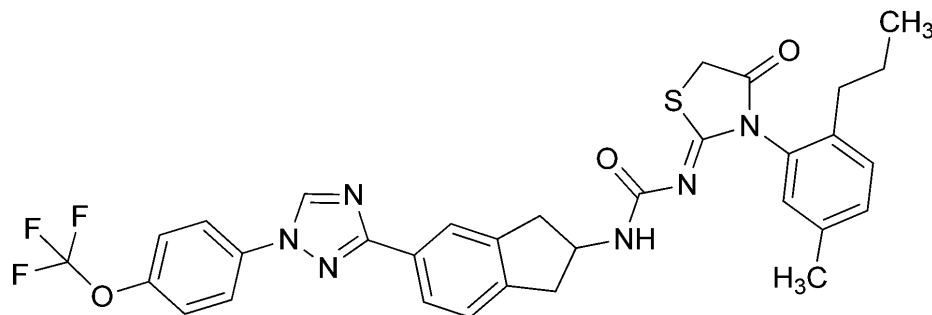
1-[(2-エチルフェニル)カルバモチオイル]-3-[5-[1-[4-(トリフルオロメトキシ)フェニル]-1,2,4-トリアゾル-3-イル]インダン-2-イル]尿素(F7)を使用して、白色固形物として単離された(0.083g、81%)。

【0182】

(Z)-1-(3-(5-メチル-2-プロピルフェニル)-4-オキソチアゾリジン-2-イリデン)-3-(5-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)-2,3-ジヒドロ-1H-インデン-2-イル)尿素(F13)

【0183】

【化 4 9】



10

【0184】

1-[(5-メチル-2-プロピルフェニル)カルバモチオイル]-3-[5-[1-[4-(トリフルオロメトキシ)フェニル]-1,2,4-トリアゾル-3-イル]インダン-2-イル]尿素(F8)を使用して、白色固形物として単離された(0.079 g、81%)。

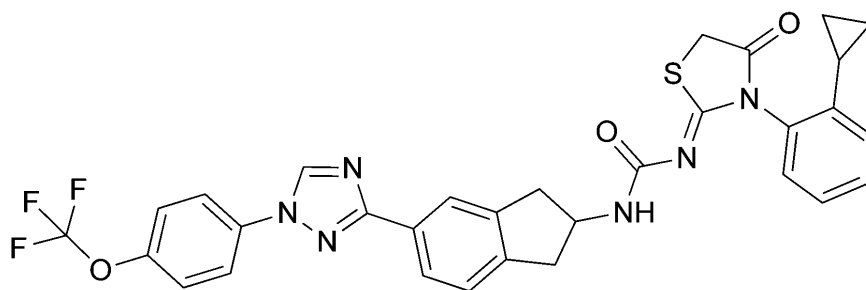
【0185】

(Z)-1-(3-(2-シクロプロピルフェニル)-4-オキソチアゾリジン-2-イリデン)-3-(5-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)-2,3-ジヒドロ-1H-インデン-2-イル)尿素(F15)

20

【0186】

【化 5 0】



30

【0187】

1-[(2-シクロプロピルフェニル)カルバモチオイル]-3-[5-[1-[4-(トリフルオロメトキシ)フェニル]-1,2,4-トリアゾル-3-イル]インダン-2-イル]尿素(F11)を使用して、白色固形物として単離された(0.097 g、83%)。

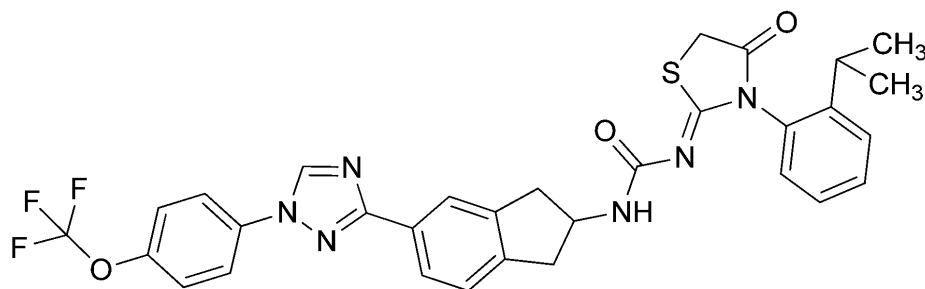
【0188】

(Z)-1-(3-(2-イソプロピルフェニル)-4-オキソチアゾリジン-2-イリデン)-3-(5-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)-2,3-ジヒドロ-1H-インデン-2-イル)尿素(F16)

40

【0189】

【化 5 1】



10

【0190】

1-[(2-イソプロピルフェニル)カルバモチオイル]-3-[5-[1-[4-(トリフルオロメトキシ)フェニル]-1,2,4-トリアゾル-3-イル]インダン-2-イル]尿素(F14)を使用して、白色固形物として単離された(0.079g、78%)。

【実施例15】

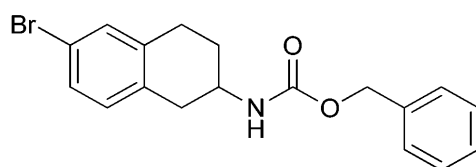
【0191】

ベンジル(6-ブロモ-1,2,3,4-テトラヒドロナフタレン-2-イル)カルバメート(C25)の製造

【0192】

20

【化 5 2】



【0193】

テトラヒドロフラン／水(2.4mL、1:1)中の6-ブロモ-1,2,3,4-テトラヒドロナフタレン-2-アミン(0.14g、0.62mmol)および水酸化ナトリウム(0.099g、2.5mmol)を室温で攪拌した。クロロギ酸ベンジル(0.10mL、0.68mmol)を添加した。該反応を1時間攪拌した。該反応を塩水でクエンチしそして酢酸エチルで希釈した。有機層を分離しかつ濃縮し、表題化合物を橙色固形物として提供し、これをさらなる精製なしに使用した(0.28g、125%)：E S I M S m/z 360、362([M+H]⁺)。

30

【実施例16】

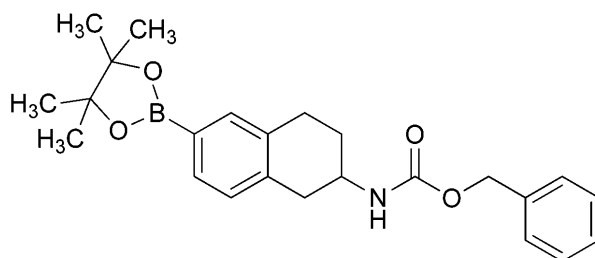
【0194】

ベンジル(4,4,5,5-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロラン-2-イル)-1,2,3,4-テトラヒドロナフタレン-2-イル)カルバメート(C26)の製造

40

【0195】

【化 5 3】



50

【0196】

ジオキサン（3.4 mL）中のベンジル（6-ブromo-1, 2, 3, 4-テトラヒドロナフタレン-2-イル）カルバメート（C25）（0.28 g、0.85 mmol）、[1, 1'-ビス（ジフェニルホスフィノ）フェロセン]ジクロロパラジウム（II）（0.038 g、0.052 mmol）、ビス（ピナコラト）ジボロン（0.26 mg、1.0 mmol）および酢酸カリウム（0.17 g、1.7 mmol）を75℃で一夜加熱した。該反応を冷却し、水でクエンチしかつ酢酸エチルで抽出した。有機層を硫酸ナトリウムで乾燥し、濾過しかつ濃縮した。溶出液として0-100%酢酸エチル／ヘキサンを使用するフラッシュカラムクロマトグラフィーによる精製が、表題化合物を澄明油状物（0.11 g、35%）：¹H NMR（400 MHz、CDCl₃）δ 7.54（d、J=7.6 Hz、2H）、7.40-7.29（m、5H）、7.07（d、J=7.6 Hz、1H）、5.10（s、2H）、4.78（s、1H）、4.06（s、1H）、3.15（dd、J=16.5、5.1 Hz、1H）、2.89（t、J=6.6 Hz、2H）、2.67（dd、J=16.7、8.2 Hz、1H）、2.09（d、J=2.7 Hz、1H）、1.79（d、J=11.6 Hz、1H）、1.33（s、12H）；¹³C NMR（126 MHz、CDCl₃）δ 155.70、137.44、136.50、135.36、134.77、132.18、128.96、128.53、128.13、126.99、83.72、66.63、60.40、46.68、36.20、25.03、24.83；ESI MS m/z 408（[M+H]⁺）として提供した。

10

20

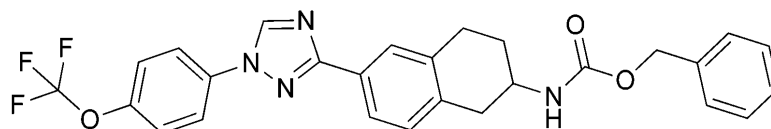
【実施例17】

【0197】

ベンジル（6-（1-（4-（トリフルオロメトキシ）フェニル）-1H-1, 2, 4-トリアゾル-3-イル）-1, 2, 3, 4-テトラヒドロナフタレン-2-イル）カルバメートの製造

【0198】

【化54】



30

【0199】

ジオキサン（1.3 mL）および水（0.4 mL）中の3-bromo-1-（4-（トリフルオロメトキシ）フェニル）-1H-1, 2, 4-トリアゾール（0.088 g、0.29 mmol）、ベンジル（6-（4, 4, 5, 5-テトラメチル-1, 3, 2-ジオキサボロラン-2-イル）-1, 2, 3, 4-テトラヒドロナフタレン-2-イル）カルバメート（C26）（0.12 g、0.26 mmol）、ジクロロ[1, 1'-ビス（ジ-tert-ブチルホスフィノ）フェロセン]パラジウム（II）（0.015 g、0.023 mmol）およびリン酸カリウム（0.16 g、0.75 mmol）を、75℃で6時間加熱した。該反応を冷却しかつ酢酸エチルで希釈し、そして塩水で洗浄した。塩水層を酢酸エチルで抽出した。有機層を硫酸ナトリウムで乾燥し、濾過しかつ濃縮した。溶出液として0-100%酢酸エチル／B（ここでBは1：1 ジクロロメタン／ヘキサンである）を使用するフラッシュカラムクロマトグラフィーによる精製が、表題化合物を白色固形物（0.088 g、65%）：mp 138-139℃；¹H NMR（400 MHz、CDCl₃）δ 8.55（s、1H）、7.93（d、J=6.0 Hz、2H）、7.83-7.76（m、2H）、7.42-7.29（m、7H）、7.17（d、J=8.4 Hz、1H）、5.12（s、2H）、4.83（d、J=8.0 Hz、1H）、4.10（s、1H）、3.20（d、J=18.6 Hz、1H）、2.98（t、J=6.7 Hz、2H）、2.72（dd、J=16.5、8.2 Hz、1H）、2.12（

40

50

s、1H)、1.84 (d、J=12.7 Hz、1H) ; ^{19}F NMR (376 MHz、 CDCl_3) δ -58.03 ; ESI-MS m/z 509 ($[\text{M}+\text{H}]^+$) として提供した。

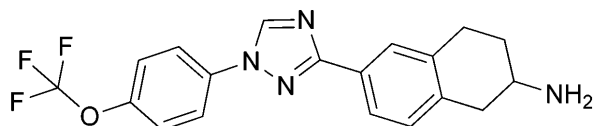
【実施例 18】

【0200】

6-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)-1,2,3,4-テトラヒドロナフタレン-2-アミン (C28) の製造

【0201】

【化 55】



10

【0202】

酢酸エチル (1.7 mL) 中のベンジル (6-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)-1,2,3,4-テトラヒドロナフタレン-2-イル) カルバメート (C27) (0.088 g、0.17 mmol) およびパラジウム炭素 (10 wt%、0.018 g、0.017 mmol) を、水素 (風船) 下で 6 時間攪拌した。該反応を Celite (登録商標) で濾過し、酢酸エチルで洗浄しかつ濃縮し、表題化合物を黒色固形物として提供した。(0.060 g、91%) : mp 112-116 °C ; ^1H NMR (400 MHz、 CDCl_3) δ 8.55 (s、1H)、7.92 (d、J=7.7 Hz、2H)、7.84-7.76 (m、2H)、7.38 (dq、J=7.8、1.0 Hz、2H)、7.19 (d、J=7.9 Hz、1H)、3.29-3.18 (m、1H)、3.09-2.91 (m、3H)、2.61 (dd、J=16.3、9.3 Hz、1H)、2.09-2.00 (m、1H)、1.64 (ddd、J=12.8、10.3、6.0 Hz、1H)、1.43 (s、2H) ; ^{19}F NMR (376 MHz、 CDCl_3) δ -58.04 ; ESI-MS m/z 373 ($[\text{M}]^+$) 。

20

【0203】

6-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)-1,2,3,4-テトラヒドロナフタレン-2-アミン (C28) の代替製造法

30

ジクロロメタン (225 mL) 中の tert-ブチル (6-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)-1,2,3,4-テトラヒドロナフタレン-2-イル) カルバメート (CA38) (15.0 g、32.6 mmol) の溶液に、3,3,3-トリフルオロ酢酸 (27.0 mL、359 mmol) を 0 °C で 1 つの部分で添加した。添加後に氷浴を除去し、そして該反応混合物を室温で 16 時間攪拌した。該反応混合物を減圧下に濃縮し、そして残渣をジエチルエーテル/ヘキサンとともに摩砕した。結果として生じる 3,3,3-トリフルオロ酢酸塩をジクロロメタンに溶解し、そして水酸化ナトリウム (1 N) で洗浄した。有機層を分離しかつ濃縮して、表題化合物を灰白色固形物 (7.50 g、64%) : ^1H NMR (400 MHz、 CDCl_3) δ 8.54 (s、1H)、7.91 (d、J=7.6 Hz、2H)、7.79 (d、J=8.8 Hz、2H)、7.37 (d、J=8.8 Hz、2H)、7.18 (d、J=8 Hz、1H)、3.26-3.19 (m、1H)、3.08-2.93 (m、3H)、2.64-2.57 (m、1H)、2.06-2.02 (m、1H)、1.68-1.59 (m、1H) ; ESI-MS m/z 375 ($[\text{M}+\text{H}]^+$) として提供した。

40

【実施例 19】

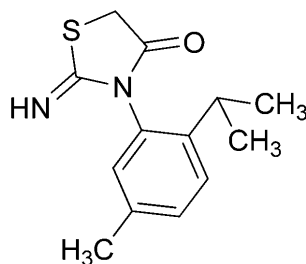
【0204】

50

2-イミノ-3-(2-イソプロピル-5-メチルフェニル)チアゾリジン-4-オン (C 29) の製造

【0205】

【化56】



10

【0206】

段階1。2-イソプロピル-5-メチルアニリン (286 g、1.91 mol) および重炭酸ナトリウム (270 g、3.22 mol) を、窒素雰囲気下に攪拌しながら丸底フラスコに充填し、そして0~5℃に冷却した。塩化2-クロロアセチル (218 g、1.93 mol) を、0~5℃で1時間の期間にわたり一滴ずつ添加した。該反応を0~5℃で1時間攪拌した。反応の完了後に精製水 (2.86 L) を添加し、そして25~30℃で15分間攪拌した。層をその後分離した。有機層を水 (2×2.86 L) および塩水 (1.43 L) で洗浄した。水層を合わせかつ酢酸エチル (1.43 L) で抽出した。有機層を硫酸ナトリウムで乾燥し、濾過し、そして真空 (500~600 mmHg) 下50~55℃で2/5容量まで濃縮した。ヘキサン (2.86 L) を添加し、そして該混合物を25~30℃で1時間攪拌した。該固形物を濾過し、ヘキサン (1.43 L) で洗浄しかつ真空 (500~600 mmHg) 下45~50℃で乾燥して、2-クロロ-N-(2-イソプロピル-5-メチルフェニル)アセトアミドを灰白色固形物 (270 g、66%) : mp 97-99℃; ¹H NMR (300 MHz、CDCl₃) δ 8.27 (s、1 H)、7.60 (s、1 H)、7.20 (d、J=7.95 Hz、1 H)、7.04 (d、J=7.89 Hz、1 H)、4.25 (s、2 H)、2.99 (q、J=6.78 Hz、1 H)、2.34 (s、3 H)、1.26 (d、J=6.84 Hz、6 H); ¹³C NMR (100 MHz、CDCl₃) δ 164.07、137.28、136.33、132.95、127.35、125.62、124.46、43.21、27.86、22.98、21.00; ESIMS m/z 226 ([M+H]⁺) として生じた。

20

30

【0207】

段階2。2-クロロ-N-(2-イソプロピル-5-メチルフェニル)アセトアミド (290 g、1.28 mol) およびアセトン (1.60 L) を、窒素雰囲気下で攪拌しながら丸底フラスコに充填した。チオシアン酸カリウム (250 g、2.57 mol) を、温度を15~20℃で維持して30分の期間にわたり部分で添加した。該反応を15~20℃で10分間攪拌し、その時間の後に温度を53~55℃ゆっくりと上げ、そして53~55℃で3時間維持した。該反応をその後20~25℃に冷却し、炭酸セシウム (20.9 g、0.0641 mol) を添加し、そして該反応混合物を20~25℃で30分間攪拌した。完了後に該反応混合物をCelite (登録商標) で濾過し、アセトン (1.45 L) で洗浄しそして濾液を収集した。濾液を真空 (500~600 mmHg) 下40~45℃で濃縮し、シロップを提供した。該シロップを酢酸エチル (2.90 L) に溶解し、水 (2×2.90 L) および塩水 (1.45 L) で洗浄した。有機層を硫酸ナトリウムで乾燥し、濾過しかつ真空 (500~600 mmHg) 下50~55℃で濃縮して、表題化合物を暗褐色シロップ (345 g、99%) : ¹H NMR (400 MHz、CDCl₃) δ 7.64 (s、1 H)、7.44-7.38 (m、1 H)、7.21 (d、J=8.0 Hz、1 H)、7.12-7.02 (m、1 H)、3.88 (s、2 H)、3.04 (tp、J=13.7、6.9 Hz、1 H)、2.38-2.31 (m、1 H)、2.32 (s、3 H)、1.25 (d、J=6.8 Hz、6 H); ESIMS m/z 2

40

50

48 ($[M]^+$) として提供した。

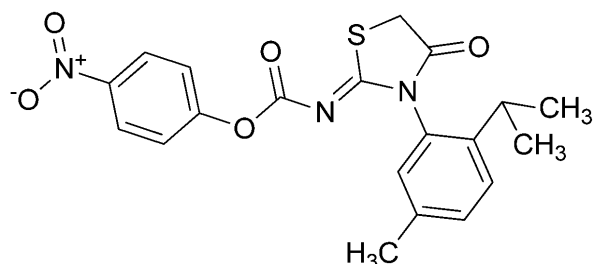
【実施例 20】

【0208】

(Z)-4-ニトロフェニル(3-(2-イソプロピル-5-メチルフェニル)-4-オキソチアゾリジン-2-イリデン)カルバメート(C30)の製造

【0209】

【化57】



10

【0210】

アセトニトリル(9.8 mL)中の2-イミノ-3-(2-イソプロピル-5-メチルフェニル)チアゾリジン-4-オン(C29)(0.97 g、3.9 mmol)、クロロギ酸4-ニトロフェニル(0.83 g、4.1 mmol)および炭酸セシウム(1.3 g、4.1 mmol)を室温で30分撹拌した。該反応をジクロロメタンで希釈しかつシリカゲルに吸着させた。溶出液として0-100%酢酸エチル/ヘキサンを使用するフラッシュカラムクロマトグラフィーによる精製が、表題化合物を橙色泡状物(1.4 g、87%)： ^1H NMR(400 MHz、 CDCl_3) δ 8.22(d、 $J=9.2$ Hz、2H)、7.35(d、 $J=8.1$ Hz、1H)、7.32-7.27(m、3H)、6.90-6.85(m、1H)、4.06(d、 $J=1.8$ Hz、2H)、2.61(p、 $J=6.8$ Hz、1H)、2.36(d、 $J=0.8$ Hz、3H)、1.25-1.12(m、6H)；ESI-MS m/z 414 ($[M+H]^+$) として提供した。

20

【実施例 21】

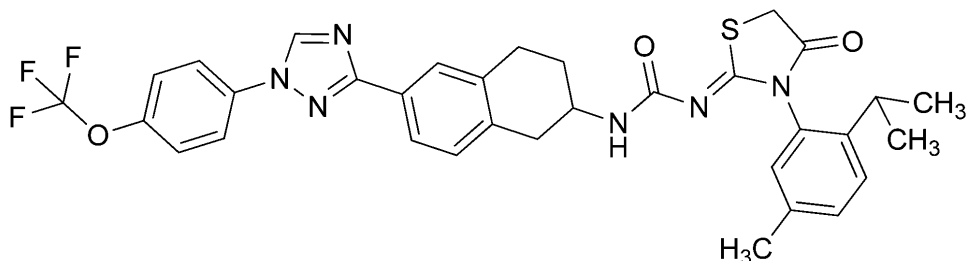
【0211】

(Z)-1-(3-(2-イソプロピル-5-メチルフェニル)-4-オキソチアゾリジン-2-イリデン)-3-(6-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)-1,2,3,4-テトラヒドロナフタレン-2-イル)尿素(F17)の製造

30

【0212】

【化58】



40

【0213】

アセトニトリル(1.6 mL)中の6-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)-1,2,3,4-テトラヒドロナフタレン-2-アミン(C28)(0.060 g、0.16 mmol)、(Z)-4-ニトロフェニル(3-(2-イソプロピル-5-メチルフェニル)-4-オキソチアゾリジン-2-イリデン)カルバメート(C30)(0.080 g、0.19 mmol)および炭酸セシウム(0.026 g、0.080 mmol)を室温で4時間撹拌した。該反応を水

50

およびジクロロメタンで希釈しかつ層分離器で濾過した。溶液が濃縮しかつCeliteカートリッジ上に負荷した。溶出液として0-100%酢酸エチル/B（ここでBは1:1ジクロロメタン/ヘキサンである）を使用するフラッシュカラムクロマトグラフィーによる精製が、表題化合物を黄褐色固形物（0.083g、79%）として提供した。

【実施例22】

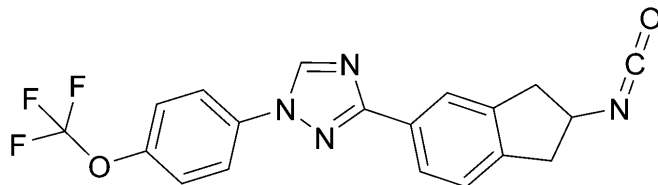
【0214】

3-(2-イソシアナト-2,3-ジヒドロ-1H-インデン-5-イル)-1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1,2,4-トリアゾール(CA1)の製造

【0215】

10

【化59】



【0216】

窒素雰囲気下のジクロロメタンおよび水（15:7.5mL）中の5-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾール-3-イル)-2,3-ジヒドロ-1H-インデン-2-アミン(C5)（3.00g、8.33mmol）の溶液に、重炭酸ナトリウム（2.10g、25.0mmol）を添加した。該反応混合物を氷水浴中で冷却し、そしてジクロロメタン中のトリホスゲン（1.20g、4.17mmol）をゆっくりと添加し；該反応混合物を2時間攪拌した。該反応混合物をジクロロメタンで希釈し、そして層を分離し；水層をジクロロメタンで抽出した。合わせられた有機層を硫酸ナトリウムで乾燥し、濾過しかつ濃縮して、表題化合物を白色固形物として提供し、これをさらなる精製若しくは特徴付けなしに次の段階で使用した（2.60g、81%）。

20

【0217】

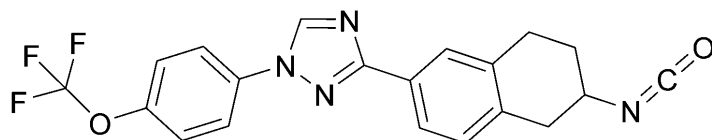
以下の化合物は実施例22の手順に従って製造した：

30

3-(6-イソシアナト-5,6,7,8-テトラヒドロナフタレン-2-イル)-1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾール(CA2)

【0218】

【化60】



40

【0219】

表題化合物は、6-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾール-3-イル)-1,2,3,4-テトラヒドロナフタレン-2-アミン(C28)を使用して実施例22に記述されるとおり製造し、そして白色固形物（2.6g、78%）：¹H NMR（400MHz、CDCl₃）δ 8.55（s、1H）、8.56（s、1H）、7.95（d、J=6.4Hz、2H）、7.81-7.78（m、2H）、7.38（d、J=8.4Hz、2H）、7.18（d、J=8.4Hz、1H）、4.02-3.94（bs、1H）、3.20-3.15（m、1H）、3.10-3.03（m、1H）、2.98-2.90（m、1H）、2.17-2.12（m、1H）、2.04-1.97（m、1H）；ESIMS m/z 402（[M+H]⁺

50

)として単離された。

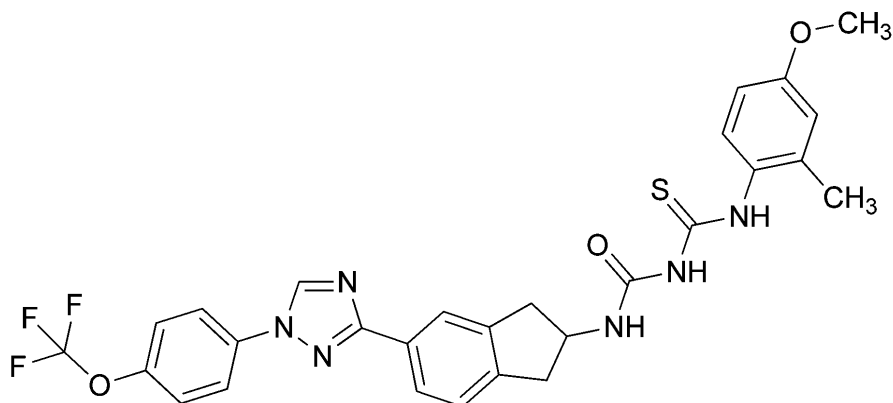
【実施例 23】

【0220】

3-(2-イソシアナト-2,3-ジヒドロ-1H-インデン-5-イル)-1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾール(P1)の製造

【0221】

【化61】



10

【0222】

20

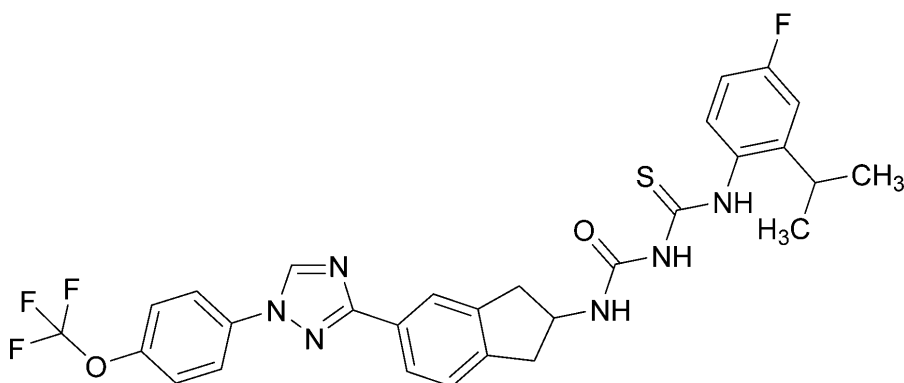
アセトニトリル(5.0 mL)中の3-(2-イソシアナト-2,3-ジヒドロ-1H-インデン-5-イル)-1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾール(CA1)(0.40 g、1.0 mmol)の溶液に、炭酸セシウム(0.37 g、1.1 mmol)および1-(4-メトキシ-2-メチルフェニル)チオ尿素(CA3)(0.203 g、1.03 mmol)を添加し、そして該反応混合物をrtで16 h攪拌した。該反応混合物を酢酸エチルで希釈しかつ塩水で洗浄した。水層を酢酸エチルで抽出した。合わせられた有機層をNa₂SO₄で乾燥し、濾過しかつ減圧下に濃縮した。該粗生成物を、ヘキサン中40%の酢酸エチルで溶出するカラムクロマトグラフィー(100~200メッシュシリカ)により精製して、化合物10a(0.08 g、13%)を白色固形物として提供した。以下の化合物は実施例23の手順に従って製造した：

30

1-[(4-フルオロ-2-イソプロピルフェニル)カルバモチオイル]-3-[5-[1-[4-(トリフルオロメトキシ)フェニル]-1,2,4-トリアゾール-3-イル]インデン-2-イル]尿素(P2)

【0223】

【化62】



40

【0224】

表題化合物は、1-(4-フルオロ-2-イソプロピルフェニル)チオ尿素(CA5)を使用して実施例23に記述されるとおり製造し、そして灰白色固形物(0.070 g、

50

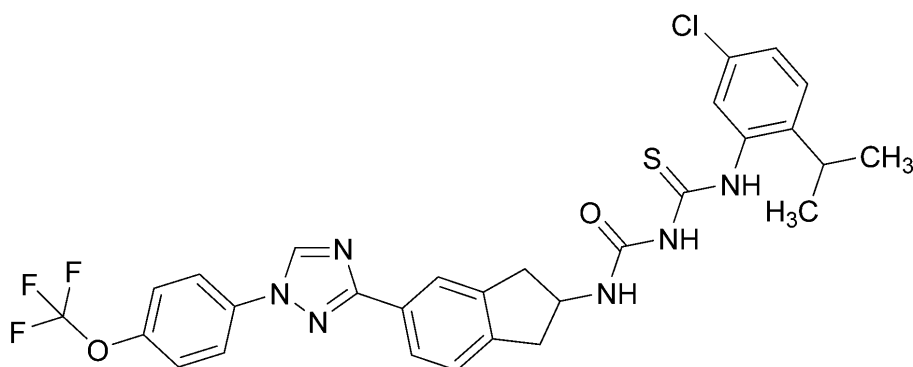
13%)として単離された。

【0225】

1-[(5-クロロ-2-イソプロピルフェニル)カルバモチオイル]-3-[5-[1-[4-(トリフルオロメトキシ)フェニル]-1,2,4-トリアゾル-3-イル]インダン-2-イル]尿素(P3)

【0226】

【化63】



10

【0227】

表題化合物は、1-(5-クロロ-2-イソプロピルフェニル)チオ尿素(C24)を使用して実施例23に記述されるとおり製造し、そして白色固形物(0.110g、18%)として単離された。

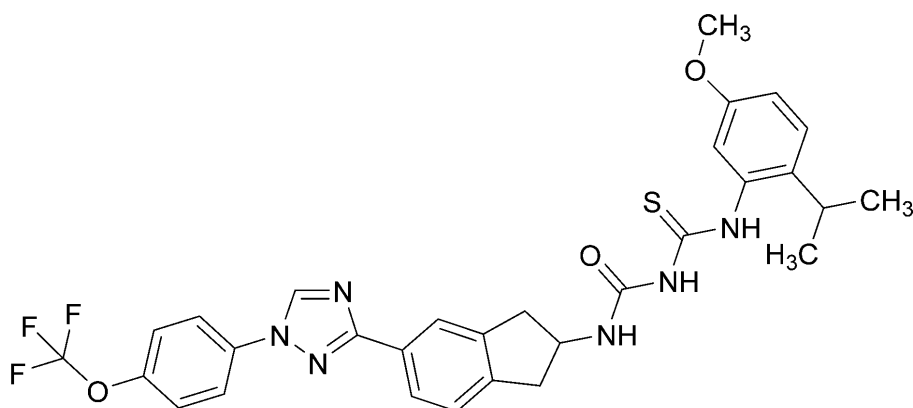
20

【0228】

1-[(2-イソプロピル-5-メトキシフェニル)カルバモチオイル]-3-[5-[1-[4-(トリフルオロメトキシ)フェニル]-1,2,4-トリアゾル-3-イル]インダン-2-イル]尿素(P4)

【0229】

【化64】



30

【0230】

表題化合物は、1-(2-イソプロピル-5-メトキシフェニル)チオ尿素(C23)を使用して実施例23に記述されるとおり製造し、そして白色固形物(0.050g、8%)として単離された。

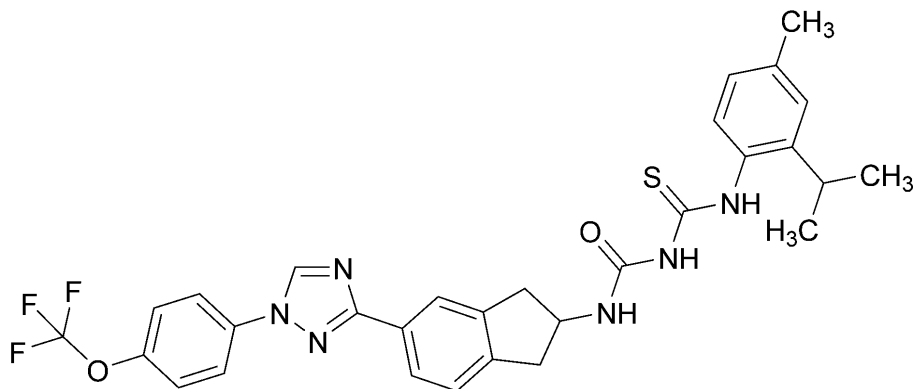
40

【0231】

1-[(2-イソプロピル-4-メチルフェニル)カルバモチオイル]-3-[5-[1-[4-(トリフルオロメトキシ)フェニル]-1,2,4-トリアゾル-3-イル]インダン-2-イル]尿素(P5)

【0232】

【化 6 5】



10

【0 2 3 3】

表題化合物は、1-(2-イソプロピル-4-メチルフェニル)チオ尿素(CA4)を使用して実施例23に記述されたとおり製造し、そして淡緑色固形物(0.040g、7%)として単離された。

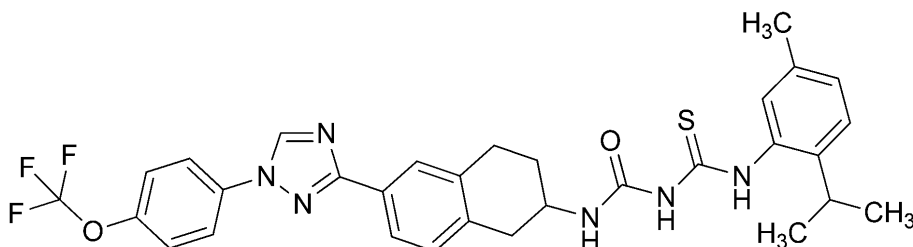
【0 2 3 4】

1-[(2-イソプロピル-5-メチルフェニル)カルバモチオイル]-3-[6-[1-[4-(トリフルオロメトキシ)フェニル]-1,2,4-トリアゾル-3-イル]テトラリン-2-イル]尿素(P21)

20

【0 2 3 5】

【化 6 6】



30

【0 2 3 6】

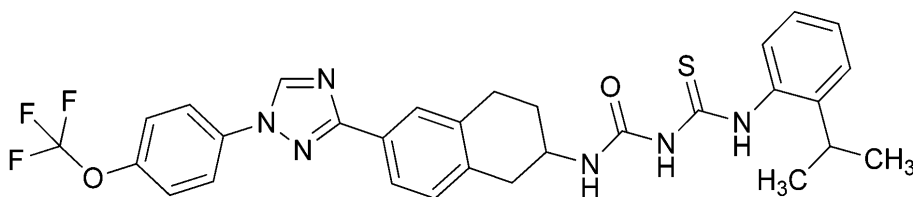
表題化合物は、1-(2-イソプロピル-5-メチルフェニル)チオ尿素を使用して実施例23に記述されたとおり製造し、そして灰白色固形物(0.1g、26%)として単離された。

【0 2 3 7】

1-[(2-イソプロピルフェニル)カルバモチオイル]-3-[6-[1-[4-(トリフルオロメトキシ)フェニル]-1,2,4-トリアゾル-3-イル]テトラリン-2-イル]尿素(P22)

【0 2 3 8】

【化 6 7】



40

【0 2 3 9】

表題化合物は、1-(2-イソプロピルフェニル)チオ尿素を使用して実施例23に記述されたとおり製造し、そして灰白色固形物(0.090g、22%)として単離された。

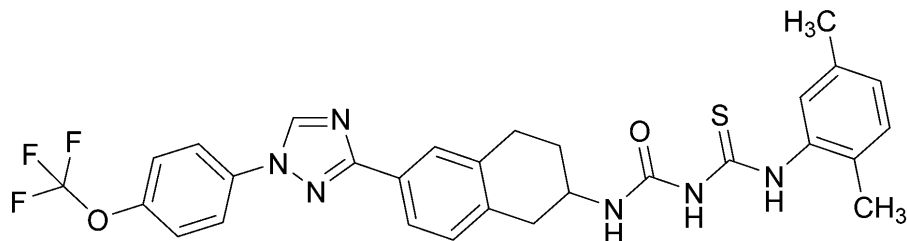
50

【0240】

1-[(2,5-ジメチルフェニル)カルバモチオイル]-3-[6-[1-[4-(トリフルオロメトキシ)フェニル]-1,2,4-トリアゾル-3-イル]テトラリン-2-イル]尿素(P25)

【0241】

【化68】



10

【0242】

表題化合物は、1-(2,5-ジメチルフェニル)チオ尿素を使用して実施例23に記述されるとおり製造し、そして灰白色固形物(0.060g、17%)として単離された。

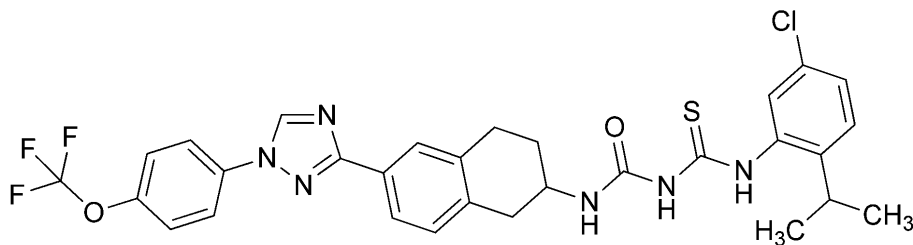
【0243】

1-[(5-クロロ-2-イソプロピルフェニル)カルバモチオイル]-3-[6-[1-[4-(トリフルオロメトキシ)フェニル]-1,2,4-トリアゾル-3-イル]テトラリン-2-イル]尿素(P26)

20

【0244】

【化69】



30

【0245】

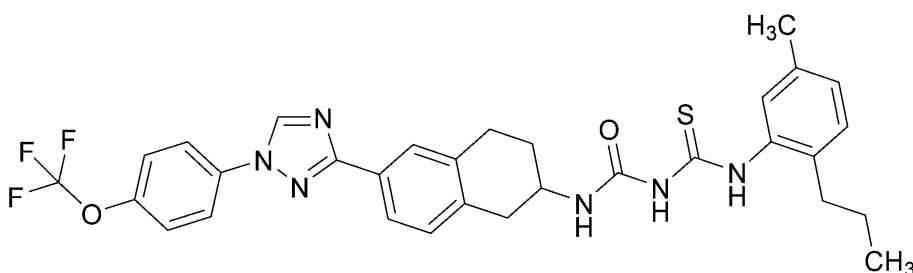
表題化合物は、1-(5-クロロ-2-イソプロピルフェニル)チオ尿素(C24)を使用して実施例23に記述されるとおり製造し、そして灰白色固形物(0.090g、23%)として単離された。

【0246】

1-[(5-メチル-2-プロピルフェニル)カルバモチオイル]-3-[6-[1-[4-(トリフルオロメトキシ)フェニル]-1,2,4-トリアゾル-3-イル]テトラリン-2-イル]尿素(P27)

【0247】

【化70】



40

【0248】

50

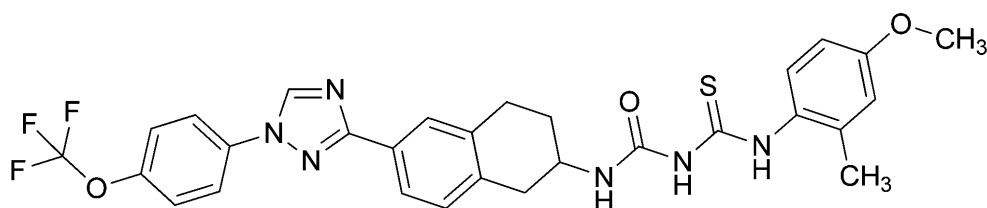
表題化合物は、1-（5-メチル-2-プロピルフェニル）チオ尿素（C 2 0）を使用して実施例 2 3 に記述されるとおり製造し、そして灰白色固形物（0. 0 9 5 g、2 5 %）として単離された。

【0 2 4 9】

1-〔（4-メトキシ-2-メチルフェニル）カルバモチオイル〕-3-〔6-〔1-〔4-（トリフルオロメトキシ）フェニル〕-1, 2, 4-トリアゾル-3-イル〕テトラリン-2-イル〕尿素（P 2 8）

【0 2 5 0】

【化 7 1】



10

【0 2 5 1】

表題化合物は、1-（4-メトキシ-2-メチルフェニル）チオ尿素（C A 3）を使用して実施例 2 3 に記述されるとおり製造し、そして白色固形物（0. 0 6 4 g、1 0 %）として単離された。

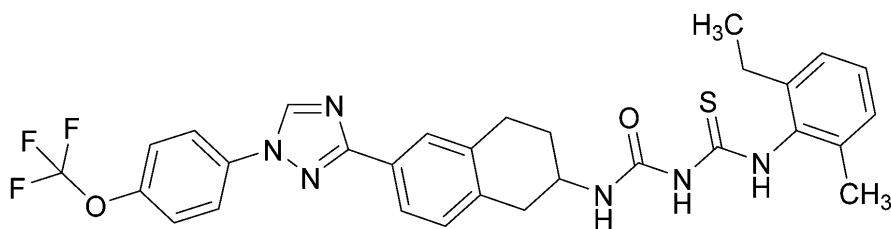
20

【0 2 5 2】

1-〔（2-エチル-6-メチルフェニル）カルバモチオイル〕-3-〔6-〔1-〔4-（トリフルオロメトキシ）フェニル〕-1, 2, 4-トリアゾル-3-イル〕テトラリン-2-イル〕尿素（P 2 9）

【0 2 5 3】

【化 7 2】



30

【0 2 5 4】

表題化合物は、1-（2-エチル-6-メチルフェニル）チオ尿素（C 2 1）を使用して実施例 2 3 に記述されるとおり製造し、そして灰白色固形物（0. 1 2 0 g、3 2 %）として単離された。

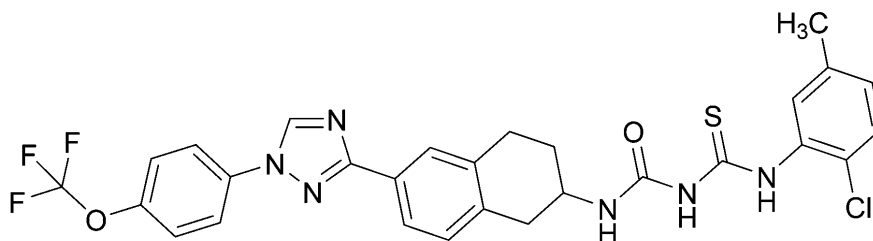
【0 2 5 5】

1-〔（2-クロロ-5-メチルフェニル）カルバモチオイル〕-3-〔6-〔1-〔4-（トリフルオロメトキシ）フェニル〕-1, 2, 4-トリアゾル-3-イル〕テトラリン-2-イル〕尿素（P 3 0）

40

【0 2 5 6】

【化 7 3】



【0257】

10

表題化合物は、1-(2-クロロ-5-メチルフェニル)チオ尿素を使用して実施例23に記述されるとおり製造し、そして灰白色固形物(0.060g、16%)として単離された。

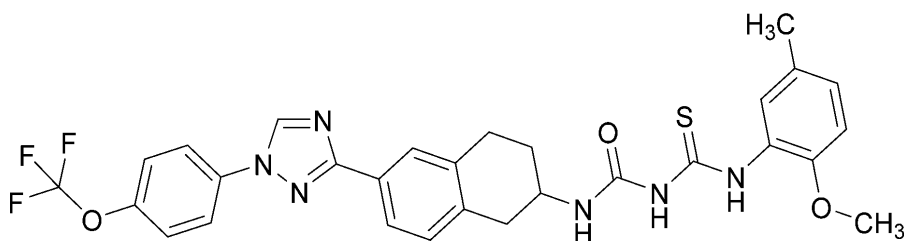
【0258】

1-[(2-メトキシ-5-メチルフェニル)カルバモチオイル]-3-[6-[1-[4-(トリフルオロメトキシ)フェニル]-1,2,4-トリアゾル-3-イル]テトラリン-2-イル]尿素(P31)

【0259】

【化 7 4】

20



【0260】

表題化合物は、1-(2-メトキシ-5-メチルフェニル)チオ尿素を使用して実施例23に記述されるとおり製造し、そして灰白色固形物(0.065g、18%)として単離された。

30

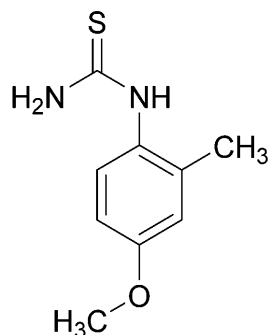
【実施例24】

【0261】

1-(4-メトキシ-2-メチルフェニル)チオ尿素(CA3)の製造

【0262】

【化 7 5】



40

【0263】

メタノール(40mL)中のN-((4-メトキシ-2-メチルフェニル)カルバモチオイル)ベンズアミド(CA6)(4.0g、13mmol)の溶液に水酸化ナトリウム(2N、12mL、27mmol)を添加し、そして該反応混合物を50℃で6時間攪拌

50

した。該反応混合物を室温に冷却しかつ濃縮した。水層をジクロロメタンで抽出した。合わせられた有機層を塩水で洗浄し、硫酸ナトリウムで乾燥し、濾過しかつ濃縮して、表題化合物を灰色固形物 (1.4 g、54%) : mp 198–200 °C ; ^1H NMR (300 MHz、DMSO- d_6) δ 9.06 (s、1H)、7.50 (bs、1H)、7.03 (d、J=8.7 Hz、1H)、6.82 (d、J=2.7 Hz、1H)、6.74 (dd、J=9.0、8.4 Hz、1H)、3.73 (s、3H)、2.14 (s、3H) ; ESIMS m/z 197 ($[\text{M}+\text{H}]^+$) として提供した。

【0264】

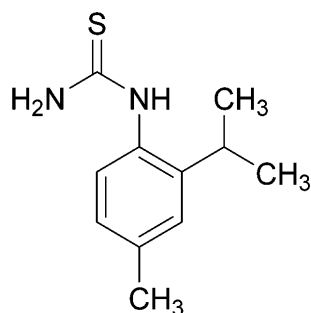
以下の化合物は実施例24の手順に従って製造した：

1- (2-イソプロピル-4-メチルフェニル) チオ尿素 (CA4)

10

【0265】

【化76】



20

【0266】

表題化合物は、N- ((2-イソプロピル-4-メチルフェニル) カルバモチオイル) ベンズアミド (CA7) を使用して実施例24に記述されたとおり製造し、そして淡黄色固形物 (3.0 g、91%) : mp 142–145 °C ; ^1H NMR (400 MHz、DMSO- d_6) δ 9.14 (s、1H)、7.50 (bs、1H)、7.13 (s、1H)、6.98 (s、2H)、6.50 (bs、1H)、3.04–2.99 (m、1H)、2.29 (s、3H)、1.13 (d、J=7.6 Hz、6H) ; ESIMS m/z 209 ($[\text{M}+\text{H}]^+$) として単離された。

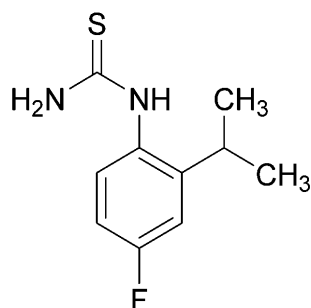
【0267】

30

1- (4-フルオロ-2-イソプロピルフェニル) チオ尿素 (CA5)

【0268】

【化77】



40

【0269】

表題化合物は、N- ((4-フルオロ-2-イソプロピルフェニル) カルバモチオイル) ベンズアミド (CA8) を使用して実施例24に記述されたとおり製造し、そして白色固形物 (2.8 g、93%) : mp 168–172 °C ; ^1H NMR (400 MHz、DMSO- d_6) δ 9.16 (s、1H)、7.55 (bs、1H)、7.15–7.11 (m、2H)、7.05–6.97 (m、1H)、6.50 (bs、1H)、3.05–3.00 (m、1H)、1.13 (d、J=6.8 Hz、6H) ; ESIMS m/z 209 ($[\text{M}+\text{H}]^+$) として単離された。

50

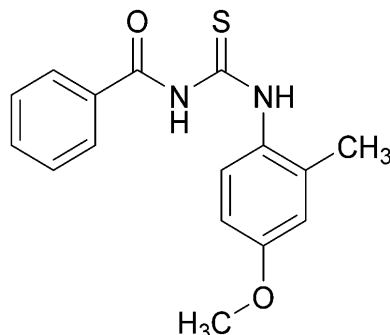
【実施例 25】

【0270】

N-((4-メトキシ-2-メチルフェニル)カルバモチオイル)ベンズアミド (CA6) の製造

【0271】

【化78】



10

【0272】

アセトン (70 mL) 中の 4-メトキシ-2-メチルアニリン (2.0 g、15 mmol) の溶液にイソチオシアン酸ベンゾイル (2.0 mL、15 mmol) を添加し、そして該反応混合物を 50 °C で 16 時間加熱した。該反応混合物を濃縮して、表題化合物を灰白色固形物 (4.0 g、91%) : ^1H NMR (400 MHz、 CDCl_3) δ 12.1 (s、1H)、9.13 (s、1H)、7.92–7.89 (m、2H)、7.68–7.64 (m、1H)、7.57–7.50 (m、3H)、6.82–6.80 (m、2H)、3.82–3.80 (s、3H)、2.33 (s、3H) として提供した。

20

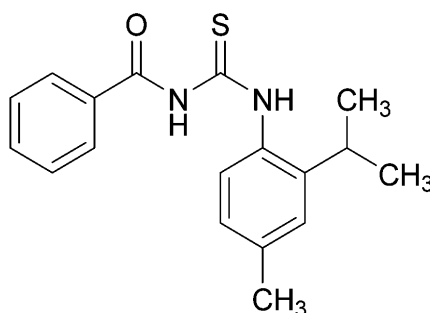
【0273】

以下の化合物は実施例 25 の手順に従って製造した：

N-((2-イソプロピル-4-メチルフェニル)カルバモチオイル)ベンズアミド (CA7)

【0274】

【化79】



30

【0275】

表題化合物は、2-イソプロピル-4-メチルアニリン (CA9) を使用して実施例 25 に記述されるとおり製造し、そして淡黄色固形物 (5.0 g、76%) : ^1H NMR (400 MHz、 CDCl_3) δ 12.1 (s、1H)、9.15 (s、1H)、7.92–7.90 (m、2H)、7.68–7.64 (m、1H)、7.58–7.53 (m、2H)、7.45–7.43 (m、1H)、7.17 (s、1H)、7.08 (dd、 $J=8.4$ 、 1.6 Hz、1H)、3.15–3.08 (m、1H)、2.38 (s、3H)、1.27 (d、 $J=6.8$ Hz、6H) ; ESI-MS m/z 313 ($[\text{M}+\text{H}]^+$) として単離された。

40

【0276】

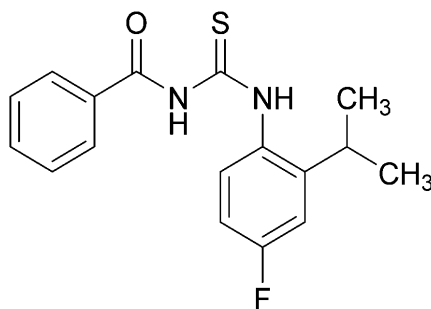
N-((4-フルオロ-2-イソプロピルフェニル)カルバモチオイル)ベンズアミド (

50

C A 8)

【0277】

【化80】



10

【0278】

表題化合物は、4-フルオロ-2-イソプロピルアニリン (C A 10) を使用して実施例 25 に記述されるとおり製造し、そして淡黄色固形物 (4.5 g、88%) : ^1H NMR (400 MHz、 CDCl_3) δ 12.1 (s、1H)、9.18 (s、1H)、7.93–7.90 (m、2H)、7.69–7.64 (m、1H)、7.58–7.52 (m、3H)、7.06 (dd、 $J=8.4$ 、 1.6 Hz、1H)、6.99–6.94 (m、1H)、3.15–3.11 (m、1H)、1.26 (d、 $J=6.8$ Hz、6H) ; ESI/MS m/z 317 ($[\text{M}+\text{H}]^+$) として単離された。

20

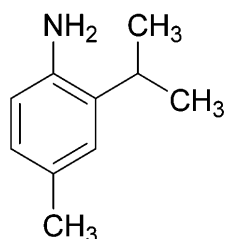
【実施例 26】

【0279】

2-イソプロピル-4-メチルアニリン (C A 9) の製造

【0280】

【化81】



30

【0281】

酢酸エチル (40 mL) 中の 4-メチル-1-ニトロ-2-(プロプ-1-エン-2-イル)ベンゼン (C A 11) (3.6 g、20 mmol) の溶液にパラジウム炭素 (10%、0.50 g) を添加し、そして該反応混合物を排気しかつ水素でバージした。該反応混合物を水素 (50 psi) 下で 24 時間攪拌した。該反応混合物を Celite (登録商標) のパッドで濾過し、酢酸エチルで洗浄しかつ濃縮した。該粗生成物をジエチルエーテルとともに摩砕して、表題化合物を淡黄色液体 (2.8 g、93%) : ^1H NMR (300 MHz、 CDCl_3) δ 6.95 (s、1H)、6.83 (d、 $J=7.5$ Hz、1H)、6.60 (d、 $J=8.1$ Hz、1H)、3.50 (bs、2H)、2.93–2.85 (m、1H)、2.25 (s、3H)、1.25 (d、 $J=6.9$ Hz、6H) ; ESI/MS m/z 150 ($[\text{M}+\text{H}]^+$) として提供した。

40

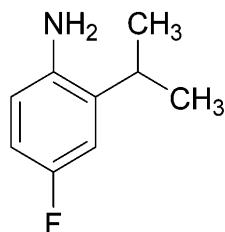
【0282】

以下の化合物は実施例 26 の手順に従って製造した :

4-フルオロ-2-イソプロピルアニリン (C A 10)

【0283】

【化 8 2】



【0284】

表題化合物は、4-フルオロ-1-ニトロ-2-(プロプ-1-エン-2-イル)ベンゼン(CA12)を使用して実施例26に記述されるとおり製造し、そして灰白色固形物(2.5g、90%)： ^1H NMR(400MHz、 CDCl_3) δ 6.85(dd、 $J=10.5$ 、 2.4 Hz、1H)、6.75–6.69(m、1H)、6.63–6.58(m、1H)、3.44(bs、2H)、2.93–2.84(m、1H)、1.24(d、 $J=6.0$ Hz、6H)；ESI-MS m/z 154($[\text{M}+\text{H}]^+$)として単離された。

10

【実施例27】

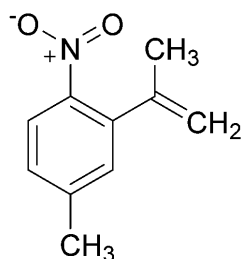
【0285】

4-メチル-1-ニトロ-2-(プロプ-1-エン-2-イル)ベンゼン(CA11)の製造

20

【0286】

【化 8 3】



30

【0287】

1,4-ジオキサンおよび水(30:10mL)中の2-クロロ-4-メチル-1-ニトロベンゼン(5.0g、29mmol)および4,4,5,5-テトラメチル-2-(プロプ-1-エン-2-イル)-1,3,2-ジオキサボロラン(5.9g、35mmol)の攪拌溶液に炭酸ナトリウム(3.7g、35mmol)を添加し；該反応混合物をアルゴンで10分間脱気した。ビス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(II)ジクロリド(1.6g、2.3mmol)を該反応混合物(追加の5分間脱気された)に添加し、そして該反応混合物を100℃に16時間加熱した。該反応混合物を室温に冷却し、水(30mL)で希釈しかつ酢酸エチル(2×100mL)で抽出した。合わせられた有機層を硫酸ナトリウムで乾燥し、濾過しかつ濃縮した。溶出液として20–80%酢酸エチル/ヘキサンを使用するフラッシュカラムクロマトグラフィーによる精製が、表題化合物を淡黄色固形物(3.6g、73%)： ^1H NMR(300MHz、 CDCl_3) δ 7.81(d、 $J=8.4$ Hz、1H)、7.16(d、 $J=8.4$ Hz、1H)、7.10(s、1H)、5.15(t、 $J=1.5$ Hz、1H)、4.90(s、1H)、2.42(s、3H)、2.07(s、3H)；ESI-MS m/z 178($[\text{M}+\text{H}]^+$)として提供した。

40

【0288】

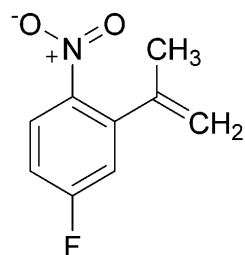
以下の化合物は実施例27の手順に従って製造した：

4-フルオロ-1-ニトロ-2-(プロプ-1-エン-2-イル)ベンゼン(CA12)

【0289】

50

【化 8 4】



【0290】

10

表題化合物は、2-クロロ-4-フルオロ-1-ニトロベンゼンを使用して実施例27に記述されるとおり製造し、そして淡黄色液体(2.6g、84%)：¹H NMR(400MHz、CDCl₃) δ 7.97-7.93(m、1H)、7.10-7.06(m、1H)、7.01(dd、J=8.8、2.8Hz、1H)、5.19(t、J=1.6Hz、1H)、4.96(s、1H)、2.08(s、3H)；ESI-MS m/z 182([M+H]⁺)として単離された。

【実施例28】

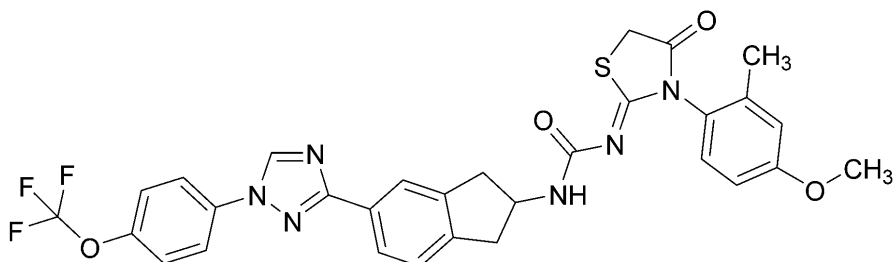
【0291】

(Z)-1-(3-(4-メトキシ-2-メチルフェニル)-4-オキソチアゾリジン-2-イリデン)-3-(5-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)-2,3-ジヒドロ-1H-インデン-2-イル)尿素(P6)の製造

20

【0292】

【化 8 5】



30

【0293】

エタノール(5mL)中の3-(2-イソシアナト-2,3-ジヒドロ-1H-インデン-5-イル)-1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾール(P1)(0.40g、0.69mmol)の溶液に、酢酸ナトリウム(0.12g、1.4mmol)および2-ブロモ酢酸メチル(0.10mL、1.0mmol)を添加した。該反応混合物を70℃に一夜加熱し、室温に冷却しかつ酢酸エチルで希釈した。水層を酢酸エチルで抽出した。合わせられた有機層を塩水で洗浄し、硫酸ナトリウムで乾燥し、濾過しかつ濃縮した。溶出液として70-80%アセトニトリル/水中0.1%ギ酸を使用する逆相カラムクロマトグラフィーによる精製が、表題化合物を淡黄色固形物(0.12g、28%)として提供した。

40

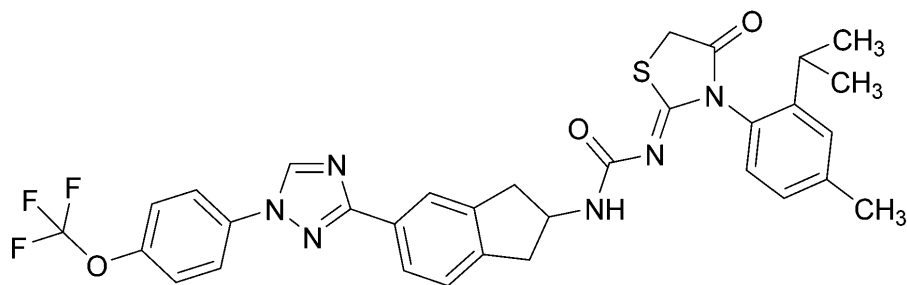
【0294】

以下の化合物は実施例28の手順に従って製造した：

(Z)-1-(3-(2-イソプロピル-4-メチルフェニル)-4-オキソチアゾリジン-2-イリデン)-3-(5-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)-2,3-ジヒドロ-1H-インデン-2-イル)尿素(P7)

【0295】

【化 8 6】



【0 2 9 6】

10

表題化合物は、1-[(2-イソプロピル-4-メチルフェニル)カルバモチオイル]-3-[5-[1-[4-(トリフルオロメトキシ)フェニル]-1,2,4-トリアゾル-3-イル]インダン-2-イル]尿素(P5)を使用して実施例28に記述される
とおり製造し、そして灰白色固形物(0.090 g、14%)として単離された。

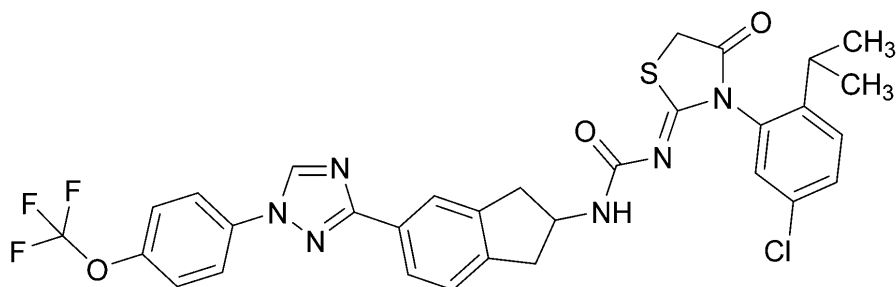
【0 2 9 7】

(Z)-1-(3-(5-クロロ-2-イソプロピルフェニル)-4-オキソチアゾリジン-2-イリデン)-3-(5-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)-2,3-ジヒドロ-1H-インデン-2-イル)尿素(P8)

【0 2 9 8】

20

【化 8 7】



30

【0 2 9 9】

表題化合物は、1-[(5-クロロ-2-イソプロピルフェニル)カルバモチオイル]-3-[5-[1-[4-(トリフルオロメトキシ)フェニル]-1,2,4-トリアゾル-3-イル]インダン-2-イル]尿素(P3)を使用して実施例28に記述される
とおり製造し、そして淡黄色液体(0.060 g、23%)として単離された。

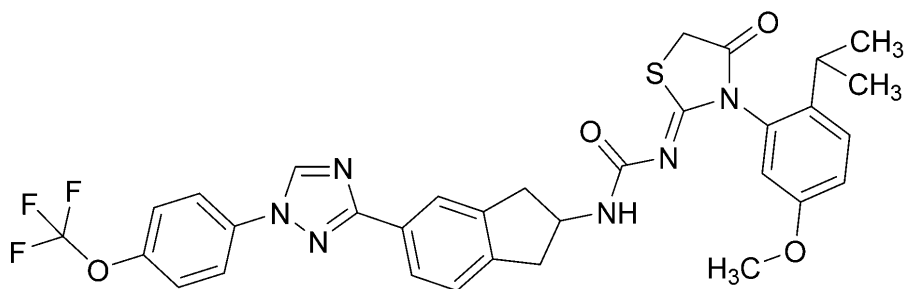
【0 3 0 0】

(Z)-1-(3-(2-イソプロピル-5-メトキシフェニル)-4-オキソチアゾリジン-2-イリデン)-3-(5-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)-2,3-ジヒドロ-1H-インデン-2-イル)尿素(P9)

40

【0 3 0 1】

【化 8 8】



10

【0302】

表題化合物は、1-[(2-イソプロピル-5-メトキシフェニル)カルバモチオイル]-3-[5-[1-[4-(トリフルオロメトキシ)フェニル]-1,2,4-トリアゾル-3-イル]インダン-2-イル]尿素(P4)を使用して実施例28に記述されるとおり製造し、そして淡黄色固形物(0.095g、15%)として単離された。

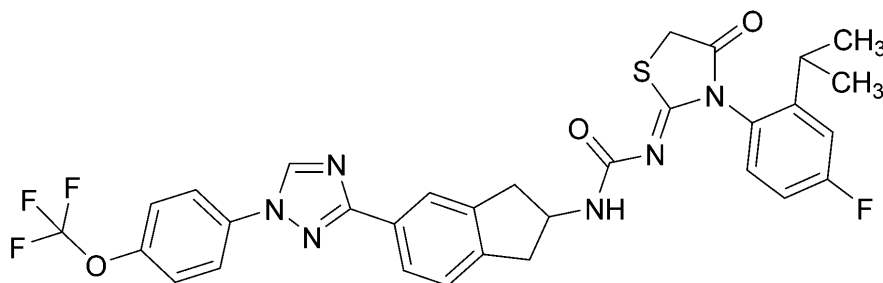
【0303】

(Z)-1-(3-(4-フルオロ-2-イソプロピルフェニル)-4-オキソチアゾリジン-2-イリデン)-3-(5-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)-2,3-ジヒドロ-1H-インデン-2-イル)尿素(P10)

20

【0304】

【化 8 9】



30

【0305】

表題化合物は、1-[(4-フルオロ-2-イソプロピルフェニル)カルバモチオイル]-3-[5-[1-[4-(トリフルオロメトキシ)フェニル]-1,2,4-トリアゾル-3-イル]インダン-2-イル]尿素(P2)を使用して実施例28に記述されるとおり製造し、そして灰白色固形物(0.190g、35%)として単離された。

【実施例29】

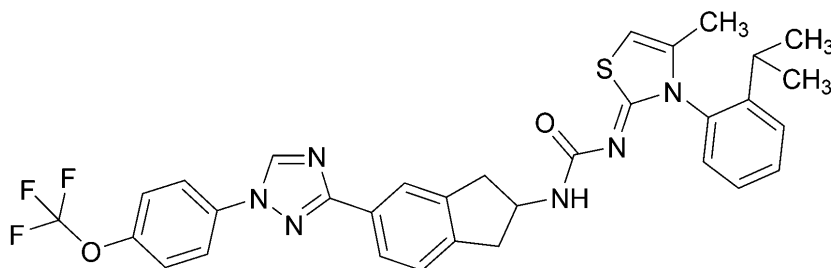
【0306】

(Z)-1-(3-(2-イソプロピルフェニル)-4-メチルチアゾル-2(3H)-イリデン)-3-(5-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)-2,3-ジヒドロ-1H-インデン-2-イル)尿素(FA1)の製造

40

【0307】

【化 9 0】



【0308】

10

2-ブタノン（5 mL）中の1-〔（2-イソプロピルフェニル）カルバモチオイル〕-3-〔5-〔1-〔4-（トリフルオロメトキシ）フェニル〕-1, 2, 4-トリアゾル-3-イル〕インダン-2-イル〕尿素（F14）（0.30 g、0.52 mmol）の溶液に、トリエチルアミン（0.080 mL、0.57 mmol）次いでクロロアセトン（0.047 mL、0.57 mmol）を添加し、そして該反応混合物を80℃で16時間加熱した。該反応混合物を室温に冷却しそして水で希釈した。水層をジクロロメタン（2×25 mL）で抽出しかつ分離した。合わせられた有機層を塩水で洗浄し、硫酸ナトリウムで乾燥し、濾過しかつ濃縮した。調製的高速液体クロマトグラフィーによる精製が、表題化合物を淡褐色固形物（0.055 g、19%）として提供した。

【0309】

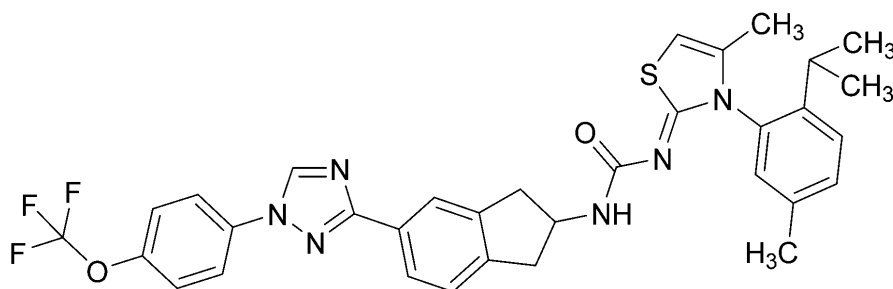
20

以下の化合物は実施例29の手順に従って製造した：

（Z）-1-（3-（2-イソプロピル-5-メチルフェニル）-4-メチルチアゾル-2（3H）-イリデン）-3-（5-（1-（4-（トリフルオロメトキシ）フェニル）-1H-1, 2, 4-トリアゾル-3-イル）-2, 3-ジヒドロ-1H-インデン-2-イル）尿素（P12）

【0310】

【化 9 1】



30

【0311】

表題化合物は、1-〔（2-イソプロピル-5-メチルフェニル）カルバモチオイル〕-3-〔5-〔1-〔4-（トリフルオロメトキシ）フェニル〕-1, 2, 4-トリアゾル-3-イル〕インダン-2-イル〕尿素（F1）を使用して実施例29に記述されるとおり製造し、そして灰白色固形物（0.030 g、11%）として単離された。

40

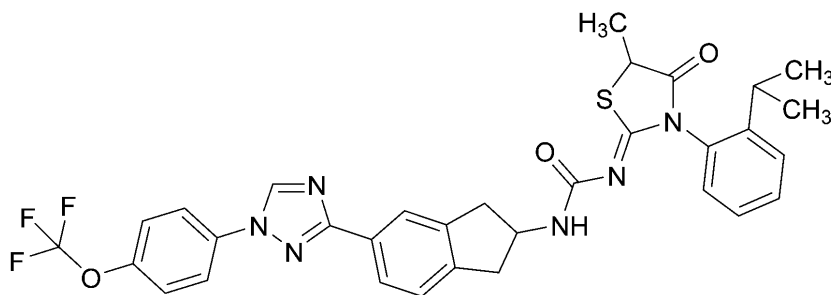
【実施例30】

【0312】

（Z）-1-（3-（2-イソプロピルフェニル）-5-メチル-4-オキソチアゾリジン-2-イリデン）-3-（5-（1-（4-（トリフルオロメトキシ）フェニル）-1H-1, 2, 4-トリアゾル-3-イル）-2, 3-ジヒドロ-1H-インデン-2-イル）尿素（FA2）の製造

【0313】

【化 9 2】



10

【0314】

エタノール（2 mL）中の 1-[(2-イソプロピルフェニル)カルバモチオイル]-3-[5-[1-[4-(トリフルオロメトキシ)フェニル]-1,2,4-トリアゾル-3-イル]インダン-2-イル]尿素（F14）（0.25 g、0.43 mmol）の溶液に、酢酸ナトリウム（0.078 g、0.83 mmol）および 2-ブロモプロパン酸メチル（0.072 mL、0.65 mmol）を添加し、そして 60℃ に 16 時間加熱した。該反応混合物を rt に冷却しかつ水で希釈した。水層を酢酸エチル（2×25 mL）で抽出した。合わせられた有機層を硫酸ナトリウムで乾燥し、濾過しかつ濃縮した。溶出液として 70-80% アセトニトリル／水中 0.1% ギ酸を使用する逆相カラムクロマトグラフィーによる精製が、表題化合物を淡黄色固形物（0.11 g、37%）として提供した。

20

【0315】

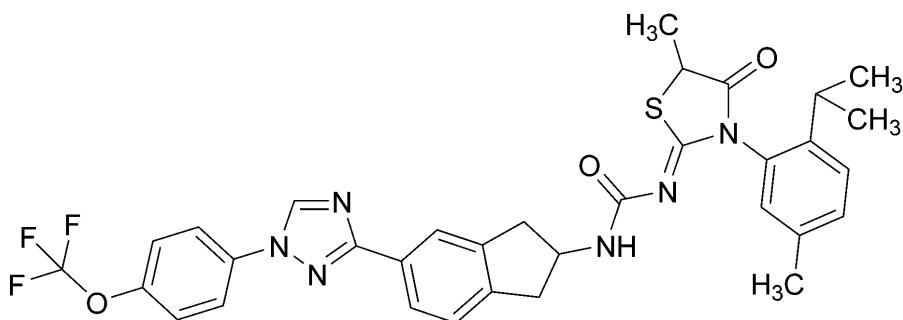
以下の化合物は実施例 30 の手順に従って製造した：

(Z)-1-(3-(2-イソプロピル-5-メチルフェニル)-5-メチル-4-オキソチアゾリジン-2-イリデン)-3-(5-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)-2,3-ジヒドロ-1H-インデン-2-イル)尿素（P13）

【0316】

【化 9 3】

30



【0317】

40

表題化合物は、1-[(2-イソプロピル-5-メチルフェニル)カルバモチオイル]-3-[5-[1-[4-(トリフルオロメトキシ)フェニル]-1,2,4-トリアゾル-3-イル]インダン-2-イル]尿素（F1）を使用して実施例 30 に記述されるとおり製造し、そして灰白色固形物（0.095 g、35%）として単離された。

【実施例 31】

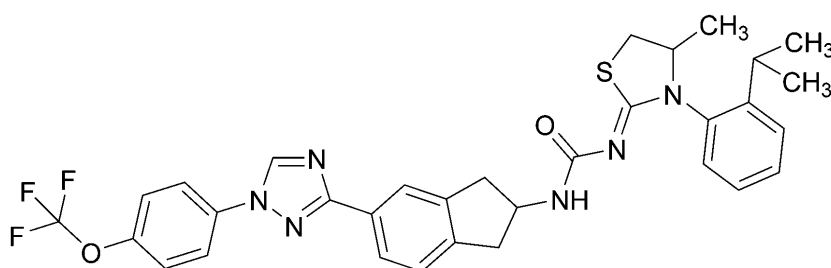
【0318】

(Z)-1-(3-(2-イソプロピルフェニル)-4-メチルチアゾリジン-2-イリデン)-3-(5-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)-2,3-ジヒドロ-1H-インデン-2-イル)尿素（FA3）の製造

50

【0319】

【化94】



10

【0320】

2-ブタノン（3 mL）中の1-〔（2-イソプロピルフェニル）カルバモチオイル〕-3-〔5-〔1-〔4-（トリフルオロメトキシ）フェニル〕-1,2,4-トリアゾル-3-イル〕インダン-2-イル〕尿素（F14）（0.20 g、0.33 mmol）の溶液に、炭酸カリウム（0.096 g、0.52 mmol）、1,2-ジブロモプロパン（0.050 mL、0.52 mmol）を添加し、そして該反応混合物を80℃に16時間加熱した。該反応混合物を室温に冷却しかつ水で希釈した。水層をジクロロメタンで2回抽出した。合わせられた有機層を硫酸ナトリウムで乾燥し、濾過しかつ濃縮した。溶出液として70-80%アセトニトリル／水中0.1%ギ酸を使用する逆相カラムクロマトグラフィーによる精製が、表題化合物を淡黄色固形物（0.030 g、14%）として

20

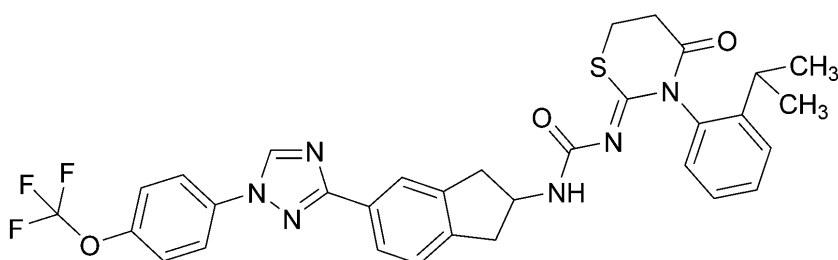
【実施例32】

【0321】

（Z）-1-（3-（2-イソプロピルフェニル）-4-オキソ-1,3-チアジナン-2-イリデン）-3-（5-（1-（4-（トリフルオロメトキシ）フェニル）-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル）-2,3-ジヒドロ-1H-インデン-2-イル）尿素（FA4）の製造

【0322】

【化95】



30

【0323】

2-ブタノン（2 mL）中の1-〔（2-イソプロピル-5-メチルフェニル）カルバモチオイル〕-3-〔5-〔1-〔4-（トリフルオロメトキシ）フェニル〕-1,2,4-トリアゾル-3-イル〕インダン-2-イル〕尿素（F1）（0.30 g、0.52 mmol）の溶液に塩化アクリロイル（0.050 mL、0.62 mmol）を添加し、そして40℃で4時間加熱した。該反応混合物を室温に冷却しかつ濃縮した。溶出液として70-80%アセトニトリル／水中0.1%ギ酸を使用する逆相カラムクロマトグラフィーによる精製が、表題化合物を灰白色固形物（0.016 g、5%）として提供した。

40

【0324】

以下の化合物は実施例32の手順に従って製造した：

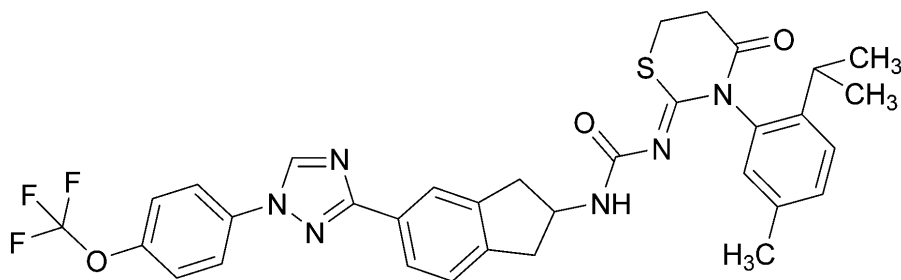
（Z）-1-（3-（2-イソプロピル-5-メチルフェニル）-4-オキソ-1,3-チアジナン-2-イリデン）-3-（5-（1-（4-（トリフルオロメトキシ）フェニル）-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル）-2,3-ジヒドロ-1H-インデン-2-イル）尿素（FA4）の製造

50

ル) - 1H-1, 2, 4-トリアゾル-3-イル) - 2, 3-ジヒドロ-1H-インデン-2-イル) 尿素 (P 17)

【0325】

【化96】



10

【0326】

表題化合物は、1-[(2-イソプロピルフェニル)カルバモチオイル]-3-[5-[1-[4-(トリフルオロメトキシ)フェニル]-1, 2, 4-トリアゾル-3-イル]インダン-2-イル]尿素 (F 14) を使用して実施例 32 に記述されるとおり製造し、そして黄色固形物 (0.015 g、7%) として単離された。

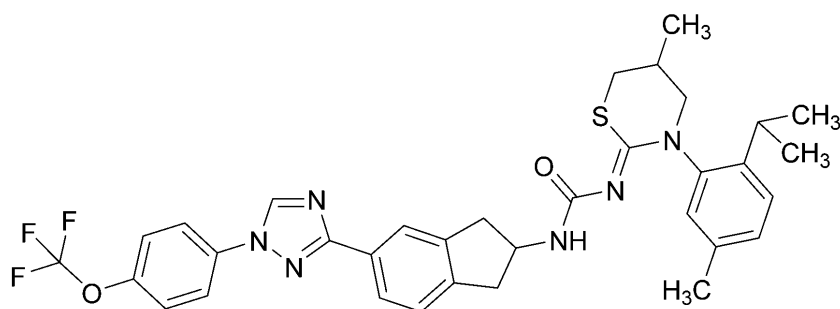
【実施例 33】

【0327】

(Z)-1-(3-(2-イソプロピル-5-メチルフェニル)-5-メチル-1, 3-チアジナ-2-イリデン)-3-(5-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1, 2, 4-トリアゾル-3-イル)-2, 3-ジヒドロ-1H-インデン-2-イル) 尿素 (P 18) の製造

【0328】

【化97】



30

【0329】

アセトニトリル (10 mL) 中の 3-(2-イソシアナト-2, 3-ジヒドロ-1H-インデン-5-イル)-1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1, 2, 4-トリアゾール (CA 1) (0.35 g、0.92 mmol) の溶液に、炭酸セシウム (0.60 g、1.8 mmol) および 3-(2-イソプロピル-5-メチルフェニル)-5-メチル-1, 3-チアジナ-2-イミン (CA 13) (0.24 g、0.92 mmol) を添加した。該反応混合物を室温で 16 時間攪拌した。該反応混合物を酢酸エチルで希釈しそして 50% 飽和塩水で洗浄した。水層を酢酸エチルで抽出した。合わせられた有機層を硫酸ナトリウムで乾燥し、濾過しかつ濃縮した。溶出液として逆相カラムクロマトグラフィー 70-80% アセトニトリル/水中 0.1% ギ酸による精製が、表題化合物を灰白色固形物 (0.10 g、17%) として提供した。

40

【0330】

以下の化合物は実施例 33 の手順に従って製造した：

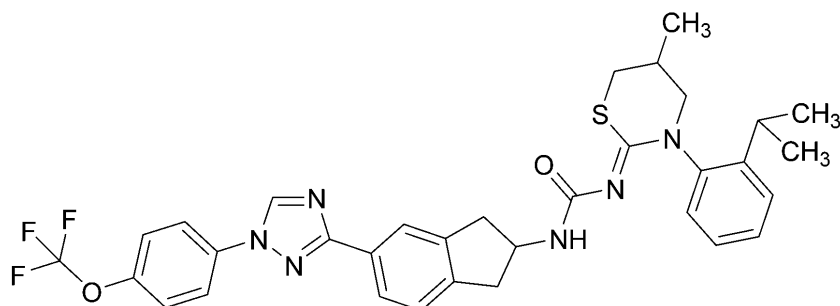
(Z)-1-(3-(2-イソプロピルフェニル)-5-メチル-1, 3-チアジナ-2-イリデン)-3-(5-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-

50

1, 2, 4-トリアゾル-3-イル)-2, 3-ジヒドロ-1H-インデン-2-イル)
尿素 (FA5)

【0331】

【化98】



10

【0332】

表題化合物は、3-(2-イソプロピルフェニル)-5-メチル-1, 3-チアジナン-2-イミン (CA14) を使用して実施例33に記述されるとおり製造し、そして灰白色固形物 (0.140 g、28%) として単離された。

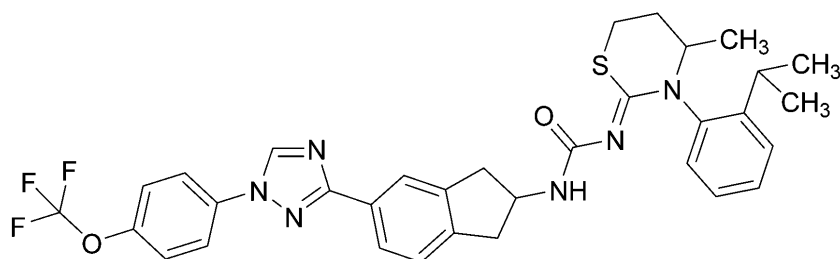
【0333】

(Z)-1-(3-(2-イソプロピルフェニル)-4-メチル-1, 3-チアジナン-2-イリデン)-3-(5-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1, 2, 4-トリアゾル-3-イル)-2, 3-ジヒドロ-1H-インデン-2-イル)
尿素 (FA6)

20

【0334】

【化99】



30

【0335】

表題化合物は、3-(2-イソプロピルフェニル)-4-メチル-1, 3-チアジナン-2-イミン (CA16) を使用して実施例33に記述されるとおり製造し、そして淡黄色固形物 (0.050 g、10%) として単離された。

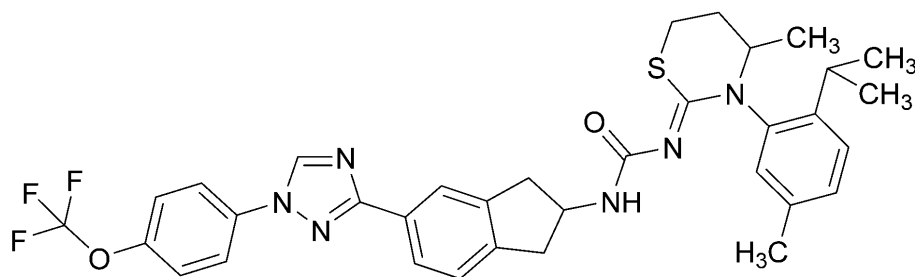
【0336】

(Z)-1-(3-(2-イソプロピル-5-メチルフェニル)-4-メチル-1, 3-チアジナン-2-イリデン)-3-(5-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1, 2, 4-トリアゾル-3-イル)-2, 3-ジヒドロ-1H-インデン-2-イル) 尿素 (P16)

40

【0337】

【化 1 0 0】



10

【0 3 3 8】

表題化合物は、3-(2-イソプロピル-5-メチルフェニル)-4-メチル-1,3-チアジナ-2-イミン(CA15)を使用して実施例33に記述されるとおり製造し、そして黄緑色液体(0.013g、3%)として単離された。

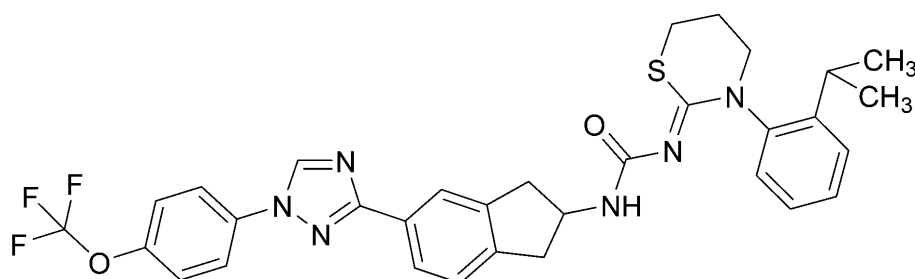
【0 3 3 9】

(Z)-1-(3-(2-イソプロピルフェニル)-1,3-チアジナ-2-イリデン)-3-(5-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)-2,3-ジヒドロ-1H-インデン-2-イル)尿素(P19)

【0 3 4 0】

20

【化 1 0 1】



30

【0 3 4 1】

表題化合物は、3-(2-イソプロピルフェニル)-1,3-チアジナ-2-イミン(CA18)を使用して実施例33に記述されるとおり製造し、そして淡黄色固形物(0.060g、15%)として単離された。

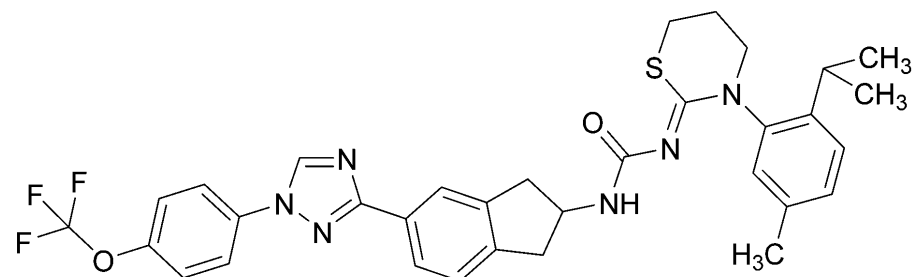
【0 3 4 2】

(Z)-1-(3-(2-イソプロピル-5-メチルフェニル)-1,3-チアジナ-2-イリデン)-3-(5-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)-2,3-ジヒドロ-1H-インデン-2-イル)尿素(P20)

【0 3 4 3】

40

【化 1 0 2】



【0 3 4 4】

50

表題化合物は、3-(2-イソプロピル-5-メチルフェニル)-1,3-チアジナン-2-イミン(CA17)を使用して実施例33に記述されるとおり製造し、そして灰白色固形物(0.053g、6%)として単離された。

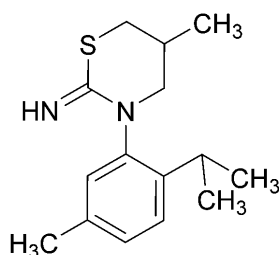
【実施例34】

【0345】

3-(2-イソプロピル-5-メチルフェニル)-5-メチル-1,3-チアジナン-2-イミン(CA13)の製造

【0346】

【化103】



10

【0347】

2-ブタノン(13mL)中の1-(2-イソプロピル-5-メチルフェニル)チオ尿素(0.50g、2.6mmol)の溶液に、カリウム(0.71g、5.1mmol)、1,3-ジブロモブタン(0.46mL、3.9mmol)を添加し、そして該反応混合物を60℃で16時間加熱した。該反応混合物を室温に冷却した。該反応混合物を水で希釈しかつ酢酸エチルで抽出した。有機層を塩水で洗浄し、硫酸ナトリウムで乾燥し、濾過しかつ濃縮して、表題化合物をガム様油状物として提供し、これを精製なしに次の段階で使用した(0.30g、74%)：EIMS m/z 263([M]⁺)。

20

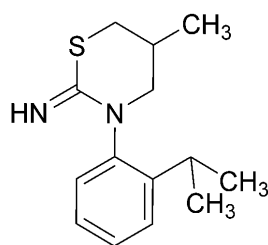
【0348】

以下の化合物は実施例34の手順に従って製造した：

3-(2-イソプロピルフェニル)-5-メチル-1,3-チアジナン-2-イミン(CA14)

【0349】

【化104】



30

【0350】

表題化合物は、1-(2-イソプロピルフェニル)チオ尿素を使用して実施例34に記述されるとおり製造し、そしてガム様油状物：ESIMS m/z 249([M+H]⁺)として単離された。

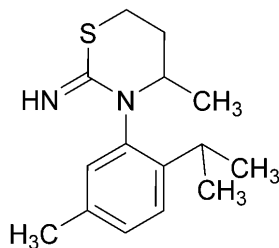
40

【0351】

3-(2-イソプロピル-5-メチルフェニル)-4-メチル-1,3-チアジナン-2-イミン(CA15)

【0352】

【化 1 0 5】



【0 3 5 3】

10

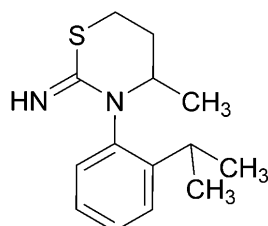
表題化合物は、1-ブロモ-3-クロロ-2-メチルプロパンを使用して実施例 3 4 に記述されるとおり製造し、そして黄褐色油状物 (0.24 g、89%) として単離された。

【0 3 5 4】

3-(2-イソプロピルフェニル)-4-メチル-1,3-チアジナン-2-イミン (CA 16)

【0 3 5 5】

【化 1 0 6】



20

【0 3 5 6】

表題化合物は、1-(2-イソプロピルフェニル)チオ尿素および1-ブロモ-3-クロロ-2-メチルプロパンを使用して実施例 3 4 に記述されるとおり製造し、そしてガム様油状物: ESIMS m/z 249 ($[M+H]^+$) として単離された。

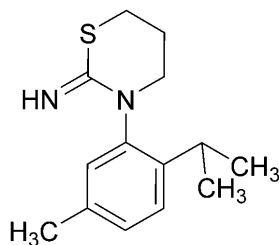
【0 3 5 7】

30

3-(2-イソプロピル-5-メチルフェニル)-1,3-チアジナン-2-イミン (CA 17)

【0 3 5 8】

【化 1 0 7】



40

【0 3 5 9】

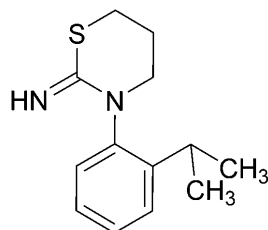
表題化合物は、1,3-ジブロモブタンを使用して実施例 3 4 に記述されるとおり製造した: ESIMS m/z 249 ($[M+H]^+$)。

【0 3 6 0】

3-(2-イソプロピルフェニル)-1,3-チアジナン-2-イミン (CA 18)

【0 3 6 1】

【化 1 0 8】



【0 3 6 2】

表題化合物は、1-(2-イソプロピルフェニル)チオ尿素および1,3-ジプロモブタンを使用して実施例34に記述されるとおり製造した：E S I M S m/z 235 ($[M+H]^+$)。

10

【実施例35】

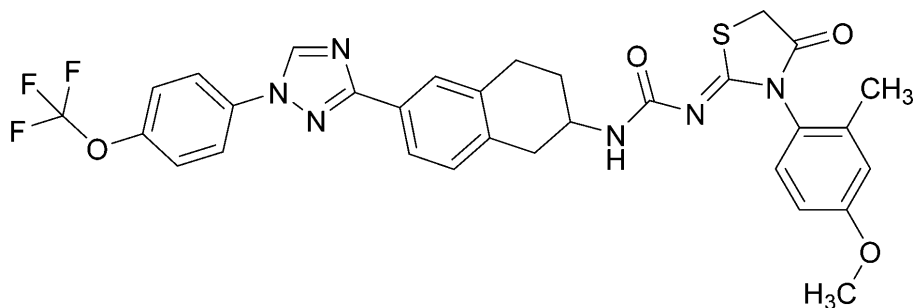
【0 3 6 3】

(Z)-1-(3-(4-メトキシ-2-メチルフェニル)-4-オキソチアゾリジン-2-イリデン)-3-(6-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)-1,2,3,4-テトラヒドロナフタレン-2-イル)尿素(P35)の製造

【0 3 6 4】

【化 1 0 9】

20



【0 3 6 5】

30

アセトニトリル中の6-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)-1,2,3,4-テトラヒドロナフタレン-2-アミン(C28)(0.25g、0.66mmol)の攪拌溶液に、アルゴン雰囲気下室温でクロロギ酸4-ニトロフェニル(0.16g、0.80mmol)を添加し、そして1時間攪拌した。2-イミノ-3-(4-メトキシ-2-メチルフェニル)チアゾリジン-4-オン(CA19)(0.17g、0.73mmol)次いで炭酸セシウム(0.43g、1.3mmol)およびジイソプロピルエチルアミン(0.28g、2.0mmol)を添加した。該反応混合物を室温で16時間攪拌した。該反応混合物をCelite(登録商標)で濾過しそして濾液を濃縮した。調製的高速液体クロマトグラフィーによる精製が、表題化合物を灰白色固形物(0.075g、19%)として提供した。

40

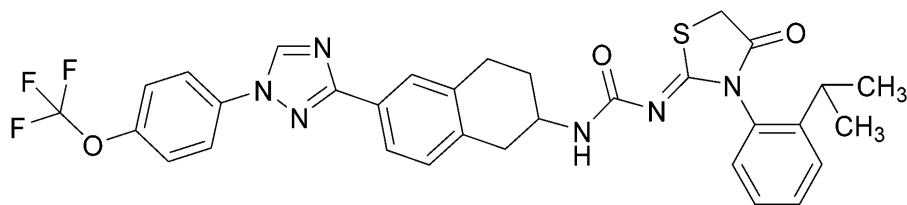
【0 3 6 6】

以下の化合物は実施例35の手順に従って製造した：

(Z)-1-(3-(2-イソプロピルフェニル)-4-オキソチアゾリジン-2-イリデン)-3-(6-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)-1,2,3,4-テトラヒドロナフタレン-2-イル)尿素(P24)

【0 3 6 7】

【化 1 1 0】



【0 3 6 8】

表題化合物は、2-イミノ-3-(2-イソプロピルフェニル)チアゾリジン-4-オン (CA 24) を使用して実施例 35 に記述されるとおり製造し、そして灰白色固形物 (0.190 g、28%) として単離された。

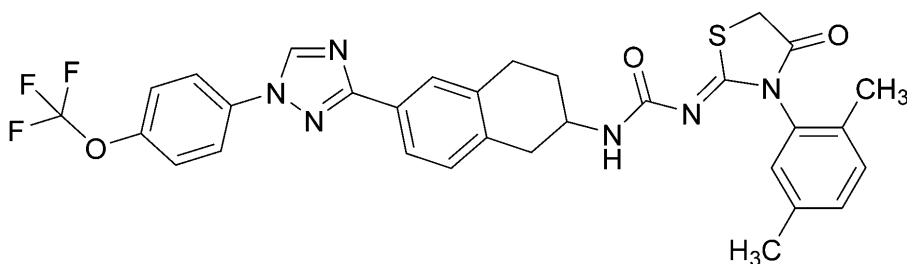
10

【0 3 6 9】

(Z)-1-(3-(2,5-ジメチルフェニル)-4-オキソチアゾリジン-2-イリデン)-3-(6-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)-1,2,3,4-テトラヒドロナフタレン-2-イル)尿素 (P 32)

【0 3 7 0】

【化 1 1 1】



20

【0 3 7 1】

表題化合物は、3-(2,5-ジメチルフェニル)-2-イミノチアゾリジン-4-オン (CA 20) を使用して実施例 35 に記述されるとおり製造し、そして灰白色固形物 (0.090 g、20%) として単離された。

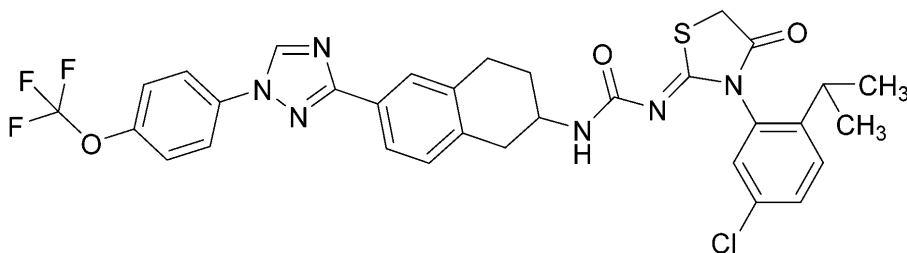
30

【0 3 7 2】

(Z)-1-(3-(5-クロロ-2-イソプロピルフェニル)-4-オキソチアゾリジン-2-イリデン)-3-(6-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)-1,2,3,4-テトラヒドロナフタレン-2-イル)尿素 (P 33)

【0 3 7 3】

【化 1 1 2】



40

【0 3 7 4】

表題化合物は、3-(5-クロロ-2-イソプロピルフェニル)-2-イミノチアゾリジン-4-オン (CA 22) を使用して実施例 35 に記述されるとおり製造し、そして灰白色固形物 (0.030 g、8%) として単離された。

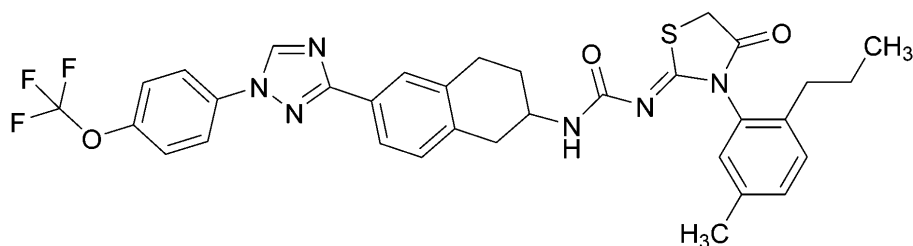
【0 3 7 5】

50

(Z)－1－(3－(5－メチル－2－プロピルフェニル)－4－オキソチアゾリジン－2－イリデン)－3－(6－(1－(4－(トリフルオロメトキシ)フェニル)－1H－1,2,4－トリアゾル－3－イル)－1,2,3,4－テトラヒドロナフタレン－2－イル)尿素 (P 3 4)

【0376】

【化113】



10

【0377】

表題化合物は、2－イミノ－3－(5－メチル－2－プロピルフェニル)チアゾリジン－4－オン (CA 2 5) を使用して実施例 3 5 に記述されるとおり製造し、そして灰白色固形物 (0.055 g、14%) として単離された。

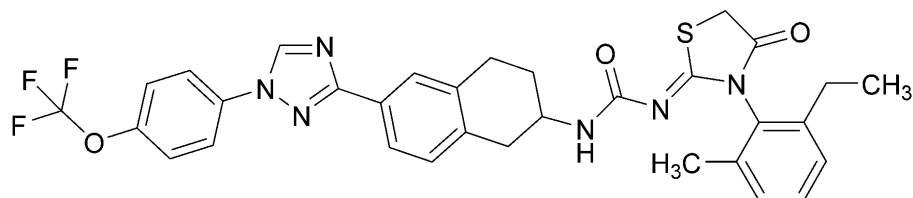
【0378】

(Z)－1－(3－(2－エチル－6－メチルフェニル)－4－オキソチアゾリジン－2－イリデン)－3－(6－(1－(4－(トリフルオロメトキシ)フェニル)－1H－1,2,4－トリアゾル－3－イル)－1,2,3,4－テトラヒドロナフタレン－2－イル)尿素 (P 3 6)

20

【0379】

【化114】



30

【0380】

表題化合物は、3－(2－エチル－6－メチルフェニル)－2－イミノチアゾリジン－4－オン (CA 2 1) を使用して実施例 3 5 に記述されるとおり製造し、そして灰白色固形物 (0.100 g、25%) として単離された。

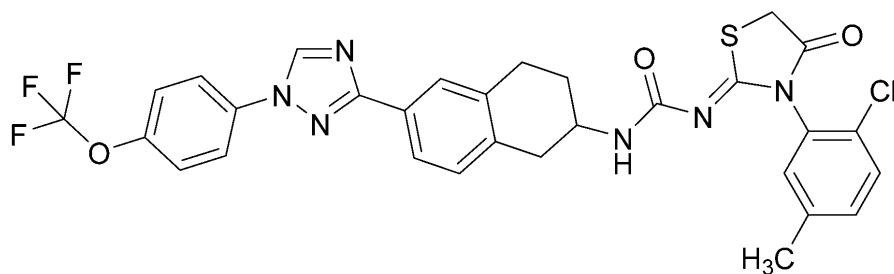
【0381】

(Z)－1－(3－(2－クロロ－5－メチルフェニル)－4－オキソチアゾリジン－2－イリデン)－3－(6－(1－(4－(トリフルオロメトキシ)フェニル)－1H－1,2,4－トリアゾル－3－イル)－1,2,3,4－テトラヒドロナフタレン－2－イル)尿素 (P 3 7)

40

【0382】

【化115】



50

【0383】

表題化合物は、3-(2-クロロ-5-メチルフェニル)-2-イミノチアゾリジン-4-オン(CA23)を使用して実施例35に記述されるとおり製造し、そして灰白色固形物(0.050g、10%)として単離された。

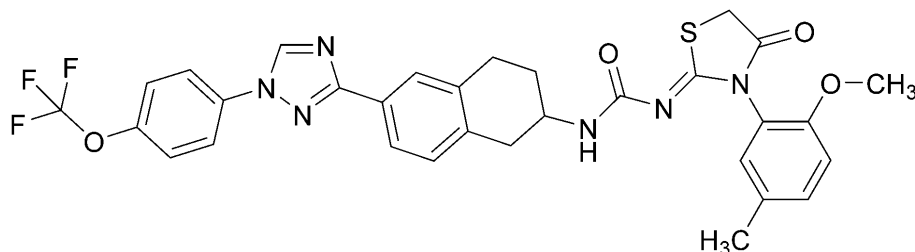
【0384】

(Z)-1-(3-(2-メトキシ-5-メチルフェニル)-4-オキソチアゾリジン-2-イリデン)-3-(6-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)-1,2,3,4-テトラヒドロナフタレン-2-イル)尿素(P38)

【0385】

10

【化116】



【0386】

20

表題化合物は、2-イミノ-3-(2-メトキシ-5-メチルフェニル)チアゾリジン-4-オン(CA26)を使用して実施例35に記述されるとおり製造し、そして灰白色固形物(0.120g、30%)として単離された。

【実施例36】

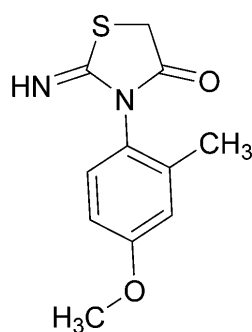
【0387】

2-イミノ-3-(4-メトキシ-2-メチルフェニル)チアゾリジン-4-オン(CA19)の製造

【0388】

【化117】

30



【0389】

40

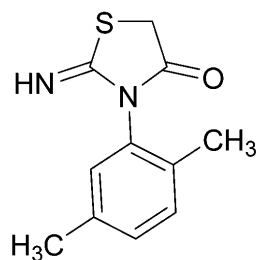
アセトン(15mL)中のN-カルバモチオイル-2-クロロ-N-(4-メトキシ-2-メチルフェニル)アセトアミド(CA27)(0.700g、3.27mmol)の溶液およびチオシアン酸カリウム(0.636g、6.55mmol)にを還流に5時間加熱した。該反応混合物を室温に冷却し次いで炭酸セシウム(0.0550g、0.160mmol)を添加し、そして該反応混合物を室温で5時間攪拌した。該反応混合物を濃縮し、そして残渣をフラッシュカラムクロマトグラフィーにより精製して、表題化合物を灰白色固形物として提供し、これをさらなる精製なしに使用した(0.650g、84%)：ESIMS m/z 237([M+H]⁺)。

【0390】

以下の化合物は実施例36の手順に従って製造した：

50

3-(2,5-ジメチルフェニル)-2-イミノチアゾリジン-4-オン (CA20)
 【0391】
 【化118】



10

【0392】

表題化合物は、N-カルバモチオイル-2-クロロ-N-(2,5-ジメチルフェニル)アセトアミド (CA28) を使用して実施例36に記述されたとおり製造し、そして褐色液体 (0.800 g、44%) : ^1H NMR (300 MHz、 CDCl_3) δ 7.84 (br s、1H)、7.23-7.19 (m、2H)、6.94 (s、1H)、4.08 (s、2H)、2.34 (s、3H)、2.12 (s、3H) ; ESIMS m/z 221 ($[\text{M}+\text{H}]^+$) として単離された。

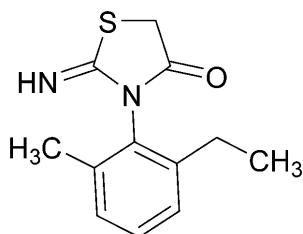
【0393】

3-(2-エチル-6-メチルフェニル)-2-イミノチアゾリジン-4-オン (CA21)

20

【0394】

【化119】



30

【0395】

表題化合物は、N-カルバモチオイル-2-クロロ-N-(2-エチル-6-メチルフェニル)アセトアミド (CA29) を使用して実施例36に記述されたとおり製造し、そして淡褐色固形物 (1.3 g、81%) : mp 120-123°C ; ^1H NMR (400 MHz、 CDCl_3) δ 7.83 (br s、1H)、7.31-7.19 (m、3H)、4.18-4.03 (m、2H)、2.47 (q、 $J=7.2$ Hz、2H)、2.21-2.03 (s、3H)、1.18 (t、 $J=6.8$ Hz、3H) ; ESIMS m/z 235 ($[\text{M}+\text{H}]^+$) として単離された。

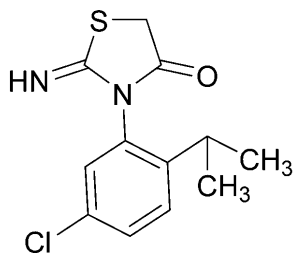
【0396】

3-(5-クロロ-2-イソプロピルフェニル)-2-イミノチアゾリジン-4-オン (CA22)

40

【0397】

【化 1 2 0】



【0 3 9 8】

10

表題化合物は、N-カルバモチオイル-2-クロロ-N-(5-クロロ-2-イソプロピルフェニル)アセトアミド(CA30)を使用して実施例36に記述されるとおり製造し、そして淡黄色液体(0.450g、40%)： ^1H NMR(400MHz、 CDCl_3) δ 7.89(b r s、1H)、7.41(b r s、1H)、7.11(d、 $J=1.6\text{Hz}$ 、1H)、4.10(b r s、2H)、2.70(m、1H)、1.24-1.19(m、6H)；ESIMS m/z 269($[\text{M}+\text{H}]^+$)として単離された。

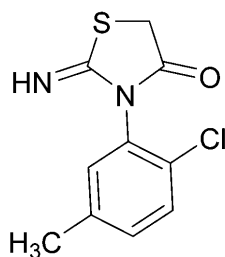
【0 3 9 9】

20

3-(2-クロロ-5-メチルフェニル)-2-イミノチアゾリジン-4-オン(CA23)

【0 4 0 0】

【化 1 2 1】



30

【0 4 0 1】

表題化合物は、N-カルバモチオイル-2-クロロ-N-(2-クロロ-5-メチルフェニル)アセトアミド(CA31)を使用して実施例36に記述されるとおり製造し、そして淡褐色固形物(0.700g、45%)： mp 128-129 $^{\circ}\text{C}$ ； ^1H NMR(400MHz、 CDCl_3) δ 7.87(b r s、1H)、7.44(b r d、 $J=7.8\text{Hz}$ 、1H)、7.24(b r s、1H)、7.11(s、1H)、4.17-4.04(m、4H)、2.38(s、3H)；ESIMS m/z 241($[\text{M}+\text{H}]^+$)として単離された。

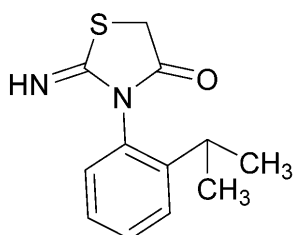
【0 4 0 2】

40

2-イミノ-3-(2-イソプロピルフェニル)チアゾリジン-4-オン(CA24)

【0 4 0 3】

【化 1 2 2】



【0 4 0 4】

50

表題化合物は、N-カルバモチオイル-2-クロロ-N-(2-イソプロピルフェニル)アセトアミド(CA32)を使用して実施例36に記述されるとおり製造し、そして褐色液体(2.1g、63%)：¹H NMR(300MHz、CDCl₃) δ 7.48(m、2H)、7.37-7.29(m、1H)、7.08(d、J=7.7Hz、1H)、4.09(s、2H)、2.65-2.78(m、1H)、1.20(dd、J=6.6、2.2Hz、6H)；ESIMS m/z 235([M+H]⁺)として単離された。

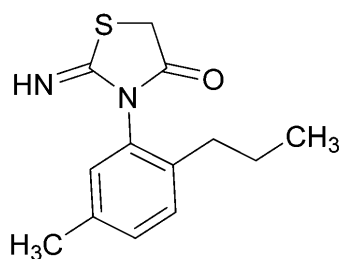
【0405】

2-イミノ-3-(5-メチル-2-プロピルフェニル)チアゾリジン-4-オン(CA25)

10

【0406】

【化123】



20

【0407】

表題化合物は、N-カルバモチオイル-2-クロロ-N-(5-メチル-2-プロピルフェニル)アセトアミド(CA33)を使用して実施例36に記述されるとおり製造し、そして褐色液体(0.600g、34%)：¹H NMR(300MHz、CDCl₃) δ 7.84(br s、1H)、7.29(m、2H)、6.92(s、1H)、4.10-4.08(m、2H)、2.40-2.35(m、3H)、1.60-1.53(m、2H)、0.95-0.89(m、3H)；ESIMS m/z 249([M+H]⁺)として単離された。

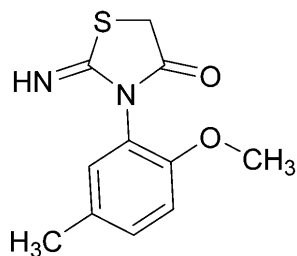
【0408】

2-イミノ-3-(2-メトキシ-5-メチルフェニル)チアゾリジン-4-オン(CA26)

30

【0409】

【化124】



40

【0410】

表題化合物は、N-カルバモチオイル-2-クロロ-N-(2-メトキシ-5-メチルフェニル)アセトアミド(CA34)を使用して実施例36に記述されるとおり製造し、そして淡褐色固形物(0.650g、37%)：mp 118-121℃；¹H NMR(300MHz、CDCl₃) δ 7.22(s、1H)、7.00-6.92(m、2H)、4.15-3.94(m、2H)、3.79(s、3H)、2.32(s、3H)；ESIMS m/z 237([M+H]⁺)として単離された。

【実施例37】

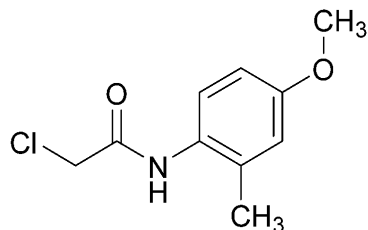
【0411】

50

2-クロロ-N-(4-メトキシ-2-メチルフェニル)アセトアミド (CA 27) の製造

【0412】

【化125】



10

【0413】

酢酸エチル (25 mL) 中の (0.600 g、7.21 mmol) 中の 4-メトキシ-2-メチルアニリン (0.500 g、4.00 mmol) および重炭酸ナトリウム (0.600 g、7.21 mmol) の溶液に、塩化2-クロロアセチル (0.490 g、4.40 mmol) を室温で一滴ずつ添加した。該反応混合物を6時間攪拌した。該反応を濃縮しかつn-ペンタンとともに摩砕し、濾過しかつ乾燥して、表題化合物を灰白色固形物 (0.650 g、76%) : ^1H NMR (300 MHz、 CDCl_3) δ 8.05 (s、1H)、7.62–7.58 (m、1H)、6.77–6.74 (dd、 $J=7.6$ 、4.2 Hz、1H)、4.22 (s、2H)、3.79 (s、3H)、2.26 (s、3H) ; ESI-MS m/z 212 ($[\text{M}+\text{H}]^+$) として提供した。

20

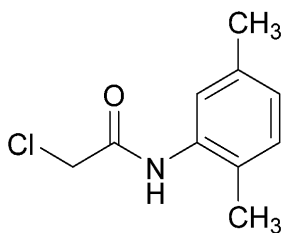
【0414】

以下の化合物は実施例37の手順に従って製造した：

2-クロロ-N-(2,5-ジメチルフェニル)アセトアミド (CA 28)

【0415】

【化126】



30

【0416】

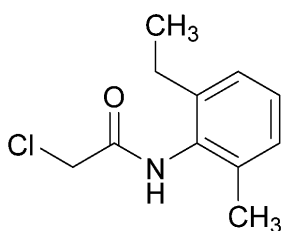
表題化合物は、2,5-ジメチルアニリンを使用して実施例37に記述されるとおり製造し、そして灰白色固形物 (1.6 g、98%) : ESI-MS m/z 198 ($[\text{M}+\text{H}]^+$) として単離された。

【0417】

2-クロロ-N-(2-エチル-6-メチルフェニル)アセトアミド (CA 29)

【0418】

【化127】



40

【0419】

表題化合物は、2-エチル-6-メチルアニリンを使用して実施例37に記述されると

50

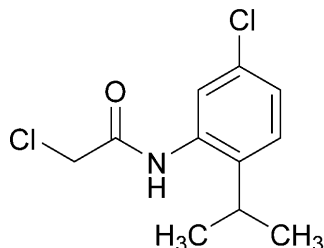
おり製造し、そして灰白色固形物（1.5 g、96%）：ESIMS m/z 212（ $[M+H]^+$ ）として単離された。

【0420】

2-クロロ-N-（5-クロロ-2-イソプロピルフェニル）アセトアミド（CA30）

【0421】

【化128】



10

【0422】

表題化合物は、5-クロロ-2-イソプロピルアニリン（C14）を使用して実施例37に記述されるとおり製造し、そして灰白色固形物（1.0 g、40%）： ^1H NMR（400 MHz、 $CDCl_3$ ） δ 8.34（s、1H）、7.94（s、1H）、7.26（m、1H）、7.13–7.16（m、1H）、4.24（s、2H）、3.02–2.95（m、1H）、1.27（d、 $J=6.8$ Hz、6H）；ESIMS m/z 246（ $[M+H]^+$ ）として単離された。

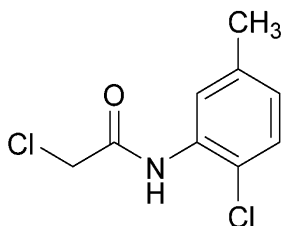
20

【0423】

2-クロロ-N-（2-クロロ-5-メチルフェニル）アセトアミド（CA31）

【0424】

【化129】



30

【0425】

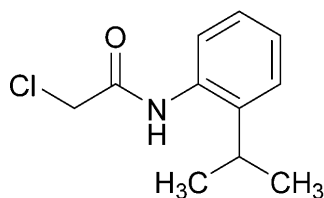
表題化合物は、2-クロロ-5-メチルアニリンを使用して実施例37に記述されるとおり製造し、そして灰白色固形物（1.4 g、90%）： ^1H NMR（400 MHz、 $CDCl_3$ ） δ 8.85（bs、1H）、8.85（s、1H）、7.88（d、 $J=8.4$ Hz、1H）、6.91（dd、 $J=8.4$ Hz、2 Hz、1H）、4.22（s、2H）、2.35（s、3H）；ESIMS m/z 218（ $[M+H]^+$ ）として単離された。

【0426】

2-クロロ-N-（2-イソプロピルフェニル）アセトアミド（CA32）

【0427】

【化130】



40

【0428】

50

表題化合物は、2-イソプロピルアニリンを使用して実施例37に記述されるとおり製造し、そして灰白色固形物(0.700g、88%)：¹H NMR(400MHz、CDCl₃) δ 8.31(s、1H)、7.79-7.76(m、1H)、7.33-7.29(m、1H)、7.25-7.19(m、2H)、4.25(s、2H)、3.07-3.00(m、1H)、1.27(d、J=6.8Hz、6H)；ESIMS m/z 212([M+H]⁺)として単離された。

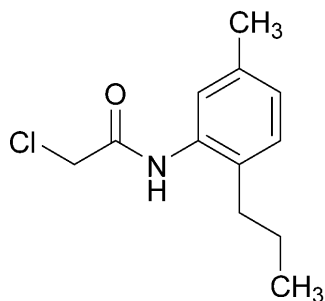
【0429】

2-クロロ-N-(5-メチル-2-プロピルフェニル)アセトアミド(CA33)

【0430】

【化131】

10



【0431】

20

表題化合物は、5-メチル-2-プロピルアニリン(C11)を使用して実施例37に記述されるとおり製造し、そして灰白色固形物(1.7g、75%)：¹H NMR(400MHz、CDCl₃) δ 8.26(bs、1H)、7.72(s、1H)、7.08(d、J=8.0Hz、1H)、6.95(d、J=7.6Hz、1H)、4.23(s、2H)、2.54(t、J=7.2Hz、2H) 1.66-1.57(m、2H)、0.97(t、J=7.2Hz、3H)；ESIMS m/z 226([M+H]⁺)として単離された。

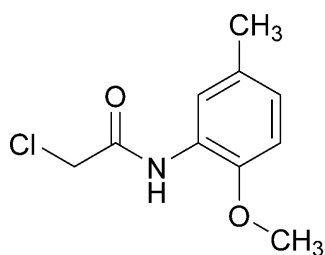
【0432】

2-クロロ-N-(2-メトキシ-5-メチルフェニル)アセトアミド(CA34)

【0433】

【化132】

30



【0434】

40

表題化合物は、2-メトキシ-5-メチルアニリンを使用して実施例36に記述されるとおり製造し、そして灰白色固形物(1.4g、90%)：¹H NMR(300MHz、CDCl₃) δ 8.90(s、1H)、8.16(d、J=1.5Hz、1H)、6.90-6.87(m、1H)、6.79(d、J=7.8Hz、1H)、4.19(s、2H)、3.88(s、3H)；ESIMS m/z 214([M+H]⁺)として単離された。

【実施例38】

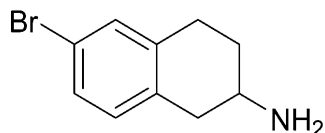
【0435】

6-ブロモ-1,2,3,4-テトラヒドロナフタレン-2-アミン(CA35)の製造

【0436】

50

【化 1 3 3】



【0 4 3 7】

メタノール（450 mL）中の6-ブロモ-3,4-ジヒドロナフタレン-2-オン（25.0 g、111 mmol）、酢酸アンモニウム（5.58 g、72.5 mmol）の溶液に、室温で4 Åモレキュラーシーブの存在下にシアノホウ水素化ナトリウム（7.75 g、123 mmol）を添加した。該反応混合物を室温で一夜攪拌した。該反応混合物を塩酸（2 N）で酸性化し、10分間攪拌しそして濃縮した。残渣を水に溶解し

10

かつジクロロメタン（2×200 mL）で洗浄した。水層を水酸化ナトリウム（2 N）で塩基性化しそしてジクロロメタン（3×300 mL）で抽出した。有機層を硫酸ナトリウムで乾燥し、濾過しかつ濃縮し、表題化合物を褐色固形物（12.3 g、49%）：¹H NMR（300 MHz、CDCl₃）δ 7.24（d、J=10.8 Hz、1H）、7.19（d、J=2.4 Hz、1H）、6.93（d、J=8.1 Hz、1H）、3.19-3.13（m、1H）、2.96-2.80（m、3H）、2.51-2.43（m、1H）、2.02-1.93（m、1H）、1.62-1.44（m、2H）；E S I M S m/z 228（[M+H]⁺）として提供した。

20

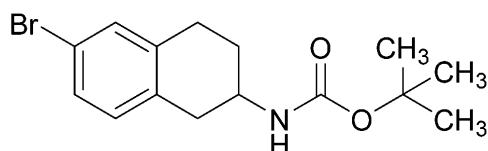
【実施例 3 9】

【0 4 3 8】

tert-ブチル（6-ブロモ-1,2,3,4-テトラヒドロナフタレン-2-イル）カルバメート（CA 36）の製造

【0 4 3 9】

【化 1 3 4】



30

【0 4 4 0】

ジクロロメタン（90 mL）中の6-ブロモ-1,2,3,4-テトラヒドロナフタレン-2-アミン（CA 35）（10.0 g、44.2 mmol）、トリエチルアミン（8.95 g、88.5 mmol）の溶液に、二炭酸ジ-tert-ブチル（11.6 g、53.1 mmol）を室温で一滴ずつ添加した。該反応混合物を室温で16時間攪拌した。該反応混合物を塩水でクエンチしかつジクロロメタンで希釈した。分離された有機層を硫酸ナトリウムで乾燥し、濾過しかつ濃縮し、表題化合物を褐色固形物（11.3 g、77%）：¹H NMR（300 MHz、CDCl₃）δ 7.26-7.21（m、2H）、6.92（d、J=5.1 Hz、1H）、4.54（bs、1H）、3.94（bs、1H）、3.08-3.01（m、1H）、2.87-2.82（m、2H）、2.59-2.51（m、1H）、2.07-2.02（m、1H）、1.77-1.67（m、1H）、1.45（s、9H）；E S I M S m/z 326（[M+H]⁺）として提供した。

40

【実施例 4 0】

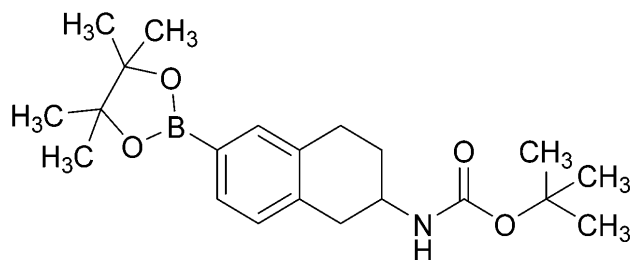
【0 4 4 1】

tert-ブチル（6-（4,4,5,5-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロラン-2-イル）-1,2,3,4-テトラヒドロナフタレン-2-イル）カルバメート（CA 37）の製造

【0 4 4 2】

50

【化 1 3 5】



【0 4 4 3】

10

ジオキサン（150 mL）中の *tert*-ブチル（6-ブロモ-1, 2, 3, 4-テトラヒドロナフタレン-2-イル）カルバメート（CA36）（11.2 g、34.3 mmol）、[1, 1'-ビス（ジフェニルホスフィノ）フェロセン]ジクロロパラジウム（II）（1.70 g、2.05 mmol）、ビス（ピナコラト）ジボロン（10.6 g、41.2 mmol）および酢酸カリウム（6.73 g、68.7 mmol）を100℃で一夜加熱した。該反応を冷却し、水でクエンチしかつ酢酸エチルで抽出した。有機層を硫酸ナトリウムで乾燥し、濾過しかつ濃縮した。溶出液として30-100%酢酸エチル／ヘキサンを使用するフラッシュカラムクロマトグラフィーによる精製が、表題化合物を淡褐色固形物（15.0 g、90%）：¹H NMR（300 MHz、CDCl₃）δ 7.54（d、J=7.5 Hz、2H）、7.07（d、J=7.2 Hz、1H）、4.65（s、1H）、4.05（s、1H）、3.10（s、1H）、2.90-2.85（m、2H）、2.67-2.62（m、1H）、2.05（br s、1H）、1.44（s、9H）、1.33（s、12H）；ESI MS m/z 375（[M+H]⁺）として提供した。

20

【実施例 4 1】

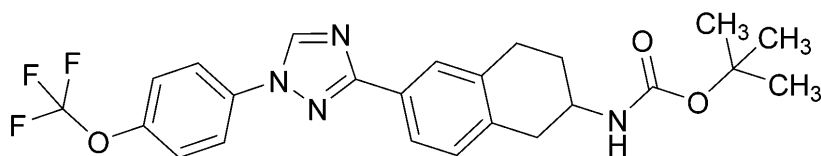
【0 4 4 4】

tert-ブチル（6-（1-（4-（トリフルオロメトキシ）フェニル）-1H-1, 2, 4-トリアゾル-3-イル）-1, 2, 3, 4-テトラヒドロナフタレン-2-イル）カルバメート（CA38）の製造

【0 4 4 5】

30

【化 1 3 6】



【0 4 4 6】

ジオキサン：水（3：1、420 mL）中の 3-ブロモ-1-（4-（トリフルオロメトキシ）フェニル）-1H-1, 2, 4-トリアゾール（12.0 g、39.0 mmol）の溶液に、*tert*-ブチル（6-（4, 4, 5, 5-テトラメチル-1, 3, 2-ジオキサボロラン-2-イル）-1, 2, 3, 4-テトラヒドロナフタレン-2-イル）カルバメート（CA37）（16.0 g、42.9 mmol）、リン酸カリウム（23.8 g、112 mmol）および[1, 1'-ビス（ジフェニルホスフィノ）フェロセン]ジクロロパラジウム（II）ジクロロメタン錯体（2.80 g、3.42 mmol）を添加した。該反応を排気しかつ窒素でパージし、そして100℃で一夜加熱した。該反応混合物を室温に冷却しそして酢酸エチルおよび水で希釈した。分離された水層を酢酸エチルで抽出した。合わせられた有機層を塩水で洗浄し、硫酸ナトリウムで乾燥し、濾過しかつ濃縮した。溶出液として20-40%酢酸エチル／ヘキサンを使用するフラッシュカラムクロマトグラフィーによる精製が、表題化合物を淡褐色固形物（15.0 g、80%）：¹

40

50

¹H NMR (300 MHz, CDCl₃) δ 8.54 (s, 1H)、7.92 (m, 2H)、7.80 (dd, J=6.9, 2.1 Hz, 2H)、7.38 (d, J=8.1 Hz, 2H)、7.17 (d, J=8.4 Hz, 1H)、3.17 (dd, J=16.8 Hz, 5.1, 1H)、2.97 (t, J=7.2, 2H)、2.72–2.63 (m, 1H)、2.13–2.08 (bs, 1H)、1.92 (s, 1H)、1.82–1.75 (m, 1H)、1.48 (s, 9H); ESI-MS m/z 476 ([M+H]⁺)として提供した。

【0447】

以下の予言的分子は、上に開示されるスキーム若しくは実施例に従って製造しうる：

【0448】

【表1-1】

表1. P系列の化合物の構造および製造方法

番号	構造	おそらく製造 に対応しうる 実施例
P1		実施例 12
P2		実施例 12
P3		実施例 12

10

20

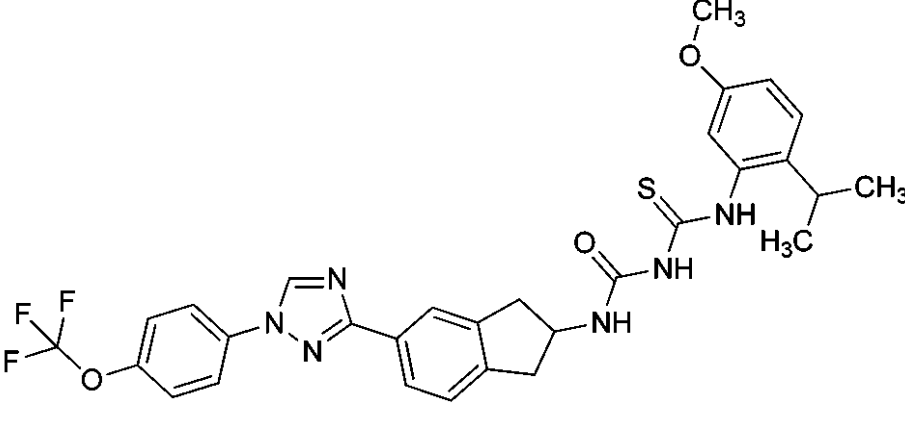
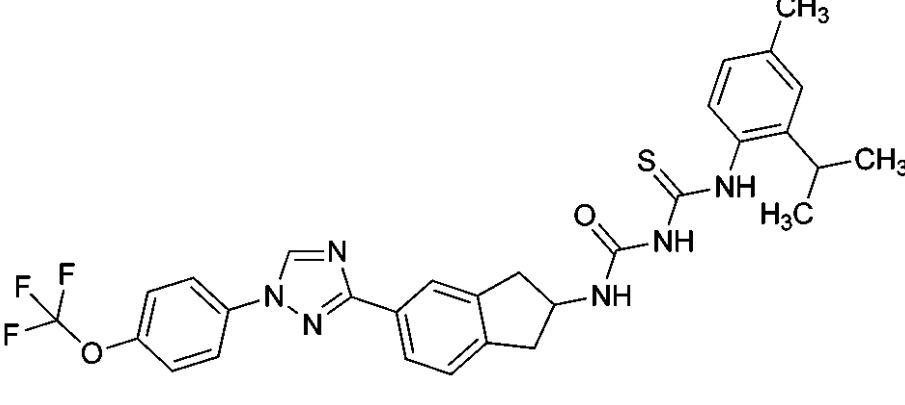
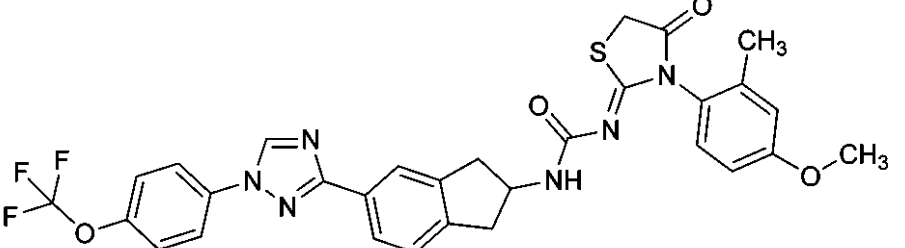
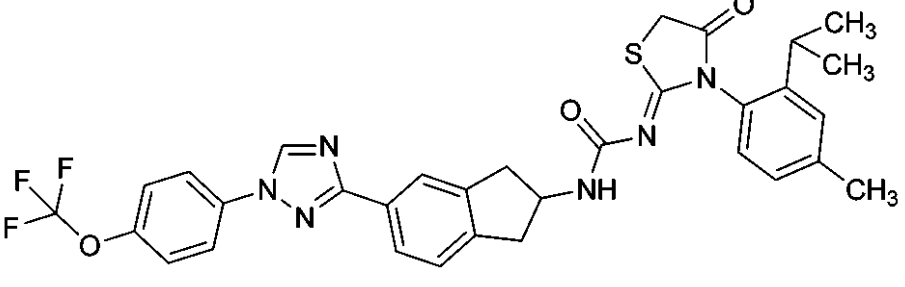
30

40

50

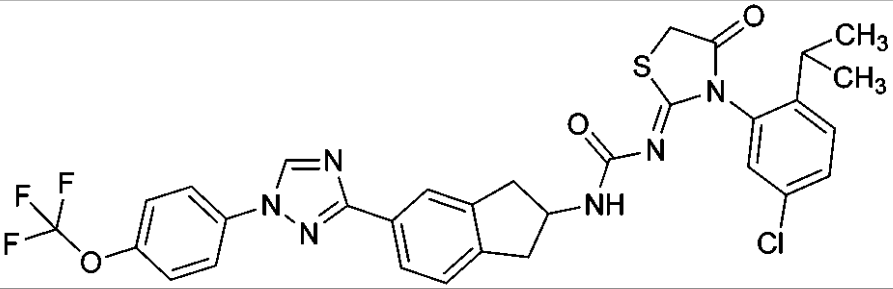
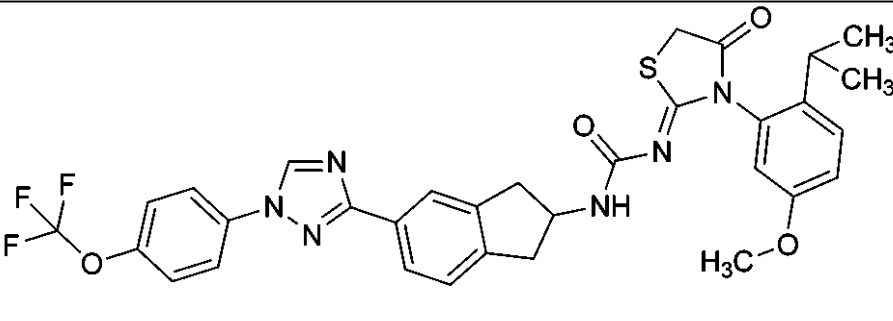
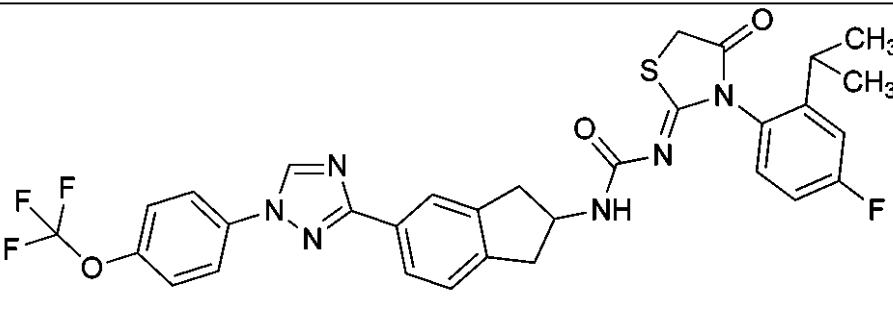
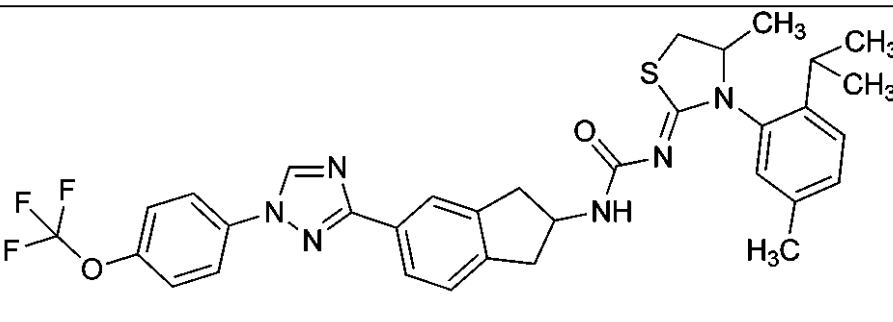
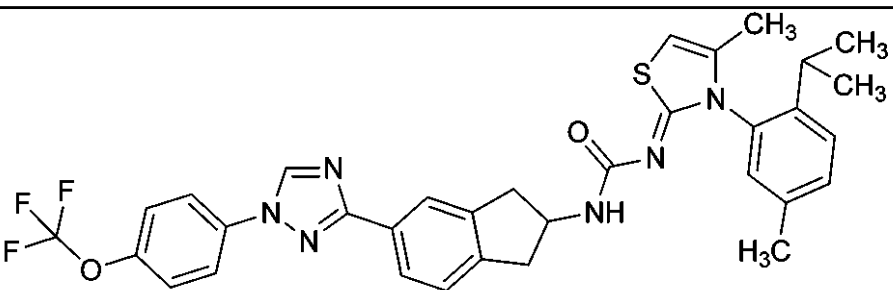
【 0 4 4 9 】

【 表 1 - 2 】

P4		実施例 12
P5		実施例 12
P6		実施例 14
P7		実施例 14

【 0 4 5 0 】

【表 1 - 3】

P8		実施例 14
P9		実施例 14
P10		実施例 14
P11		スキーム 3
P12		スキーム 3

10

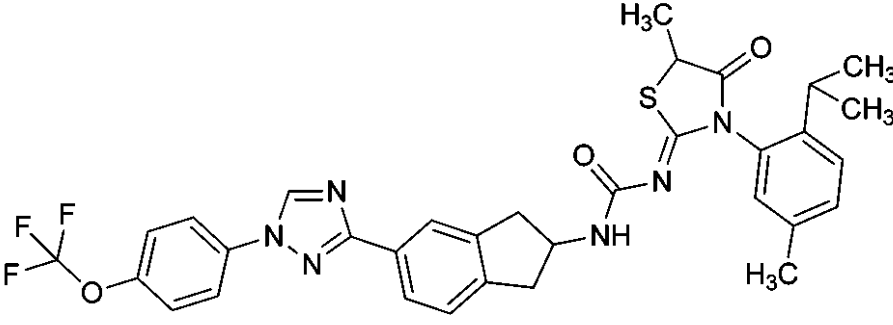
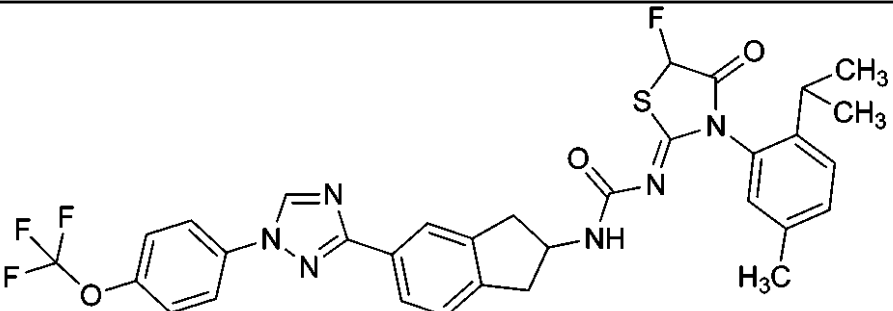
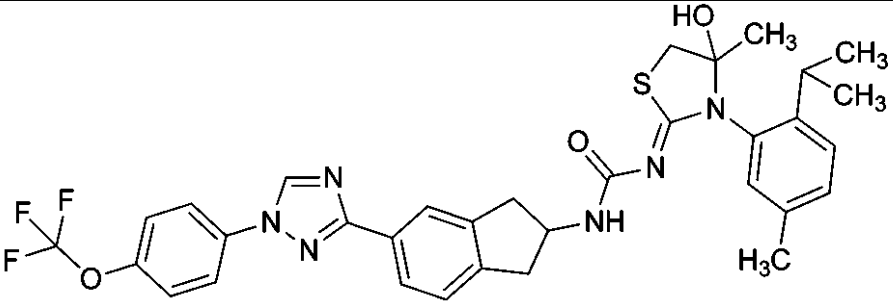
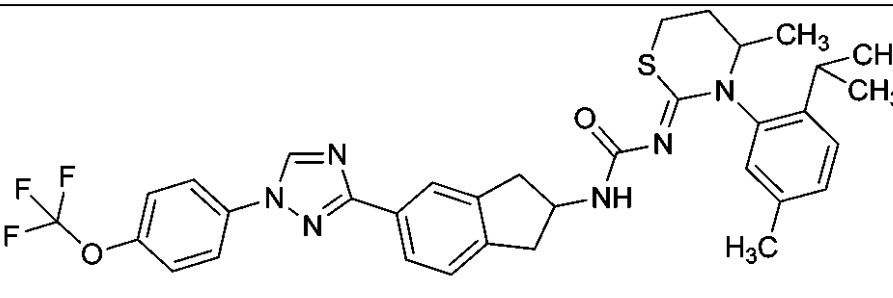
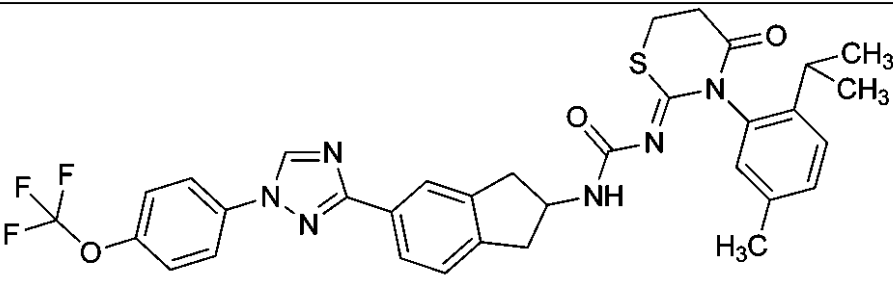
20

30

40

【 0 4 5 1 】

【表 1 - 4】

P13		実施例 14
P14		スキーム 7
P15		スキーム 3
P16		スキーム 3
P17		スキーム 3

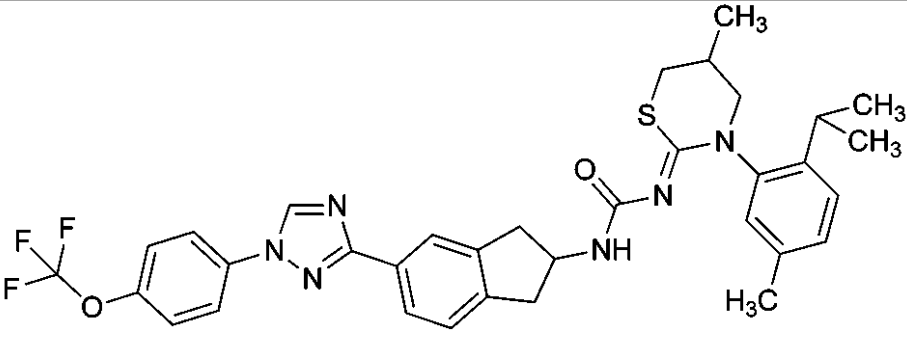
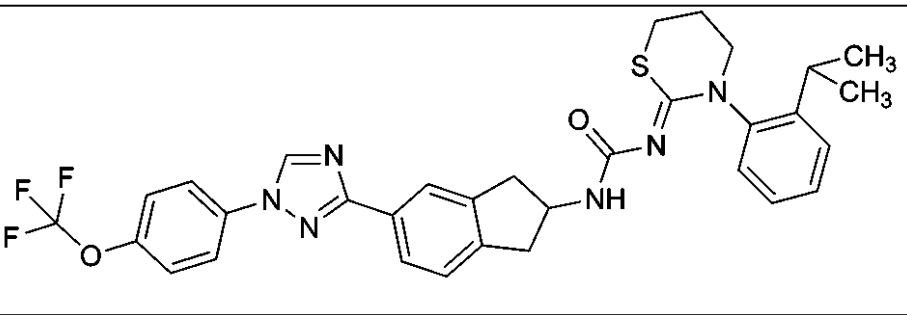
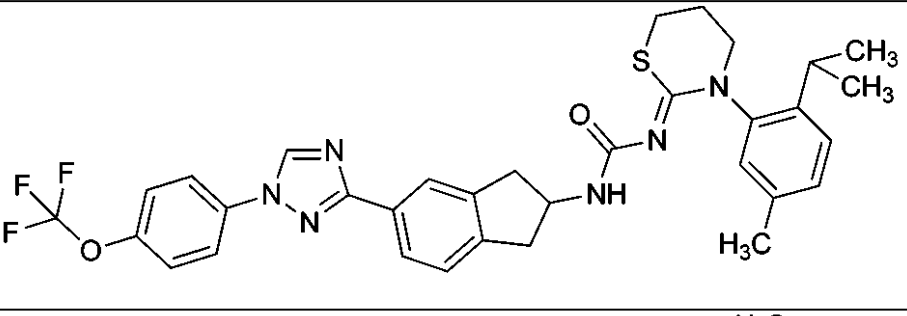
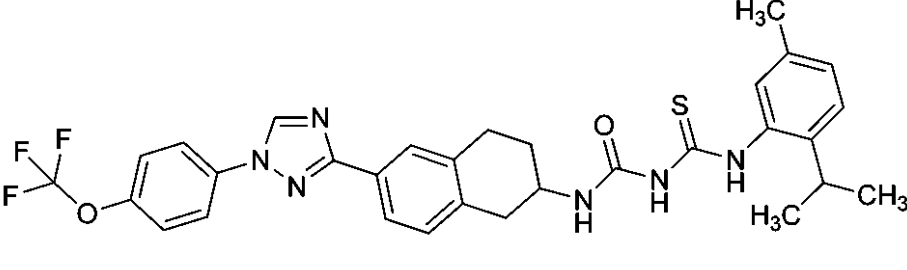
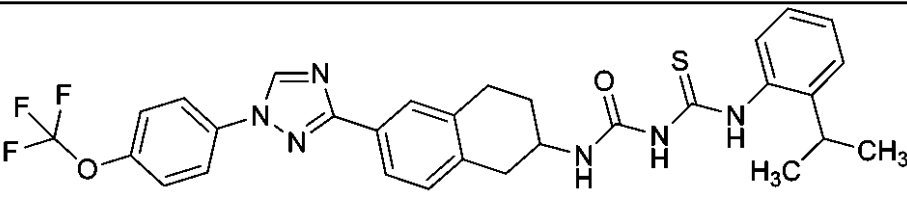
10

20

30

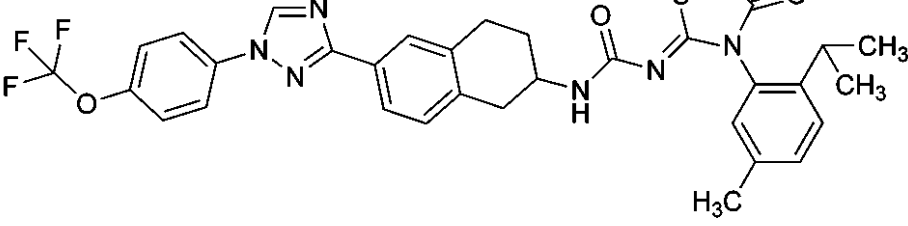
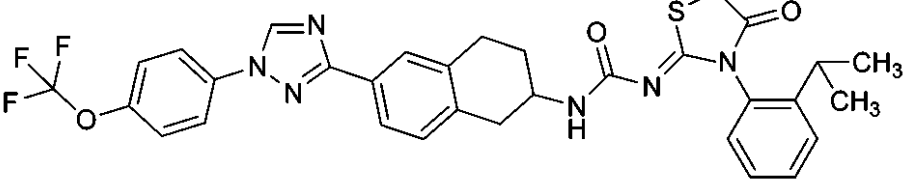
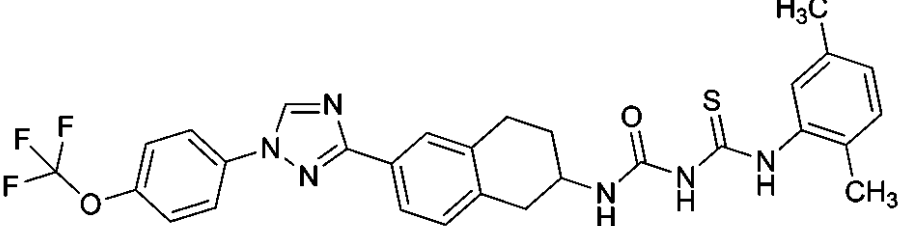
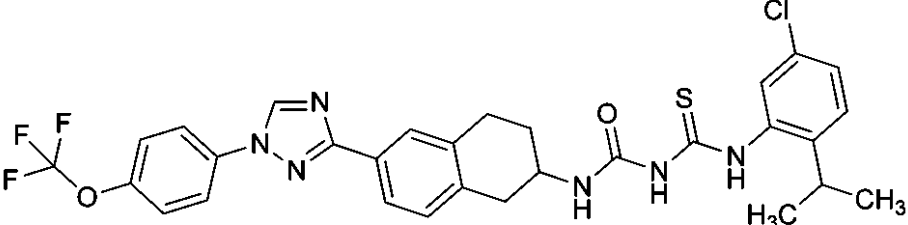
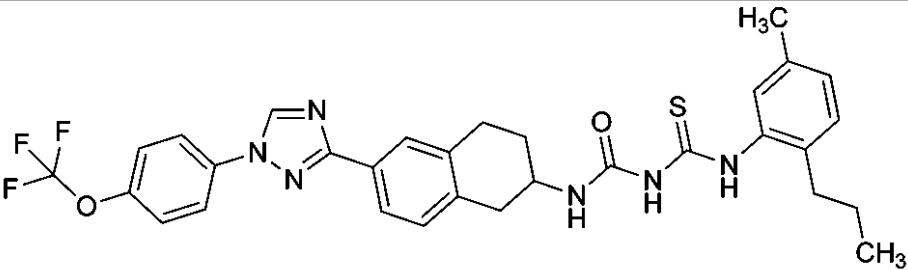
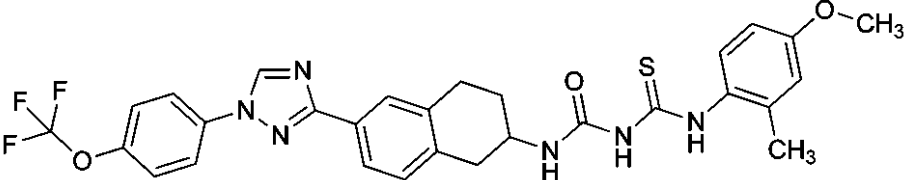
40

【表 1 - 5】

P18		スキーム 3
P19		スキーム 3
P20		スキーム 3
P21		実施例 12
P22		実施例 12

【 0 4 5 3 】

【表 1 - 6】

P23		実施例 14
P24		実施例 14
P25		実施例 12
P26		実施例 12
P27		実施例 12
P28		実施例 12

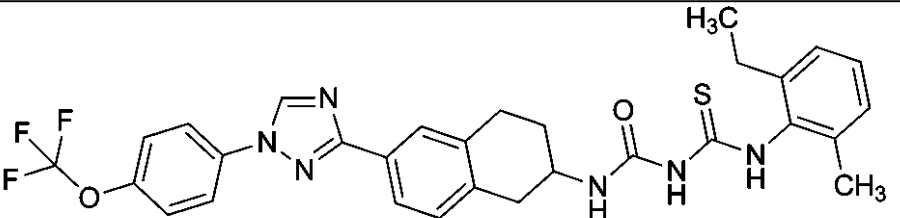
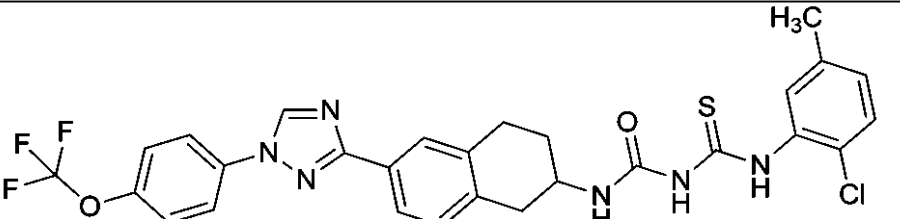
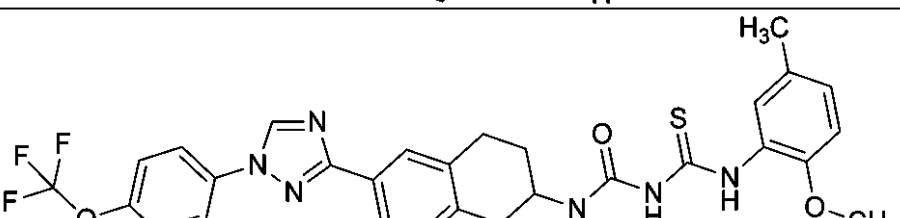
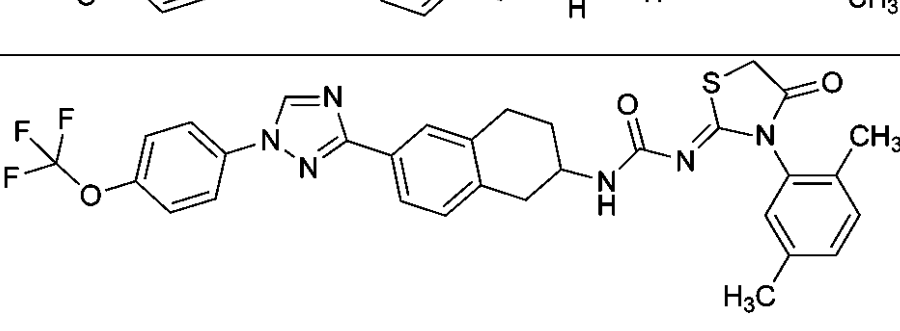
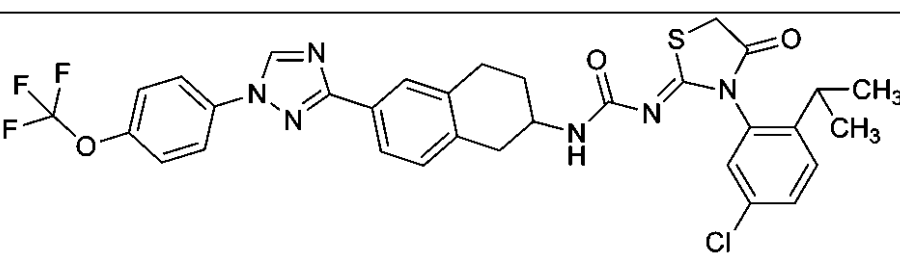
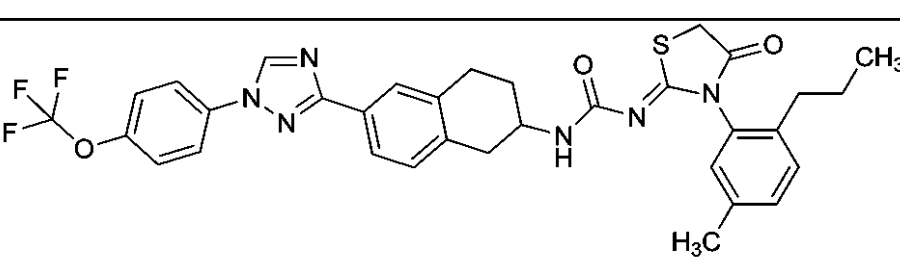
10

20

30

40

【表 1 - 7】

P29		実施例 12
P30		実施例 12
P31		実施例 12
P32		実施例 14
P33		実施例 14
P34		実施例 14

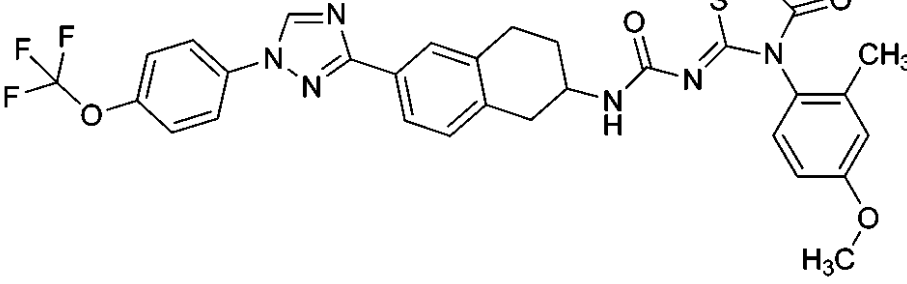
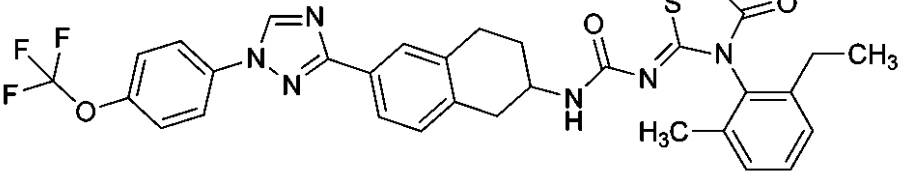
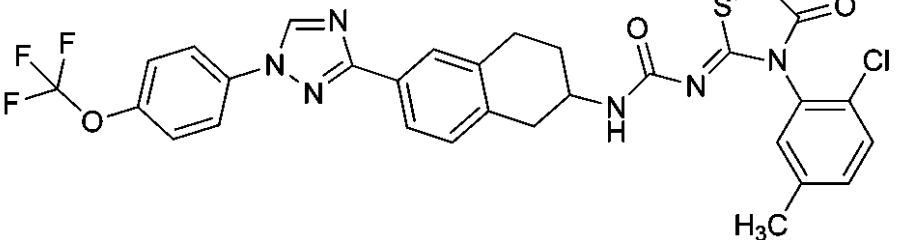
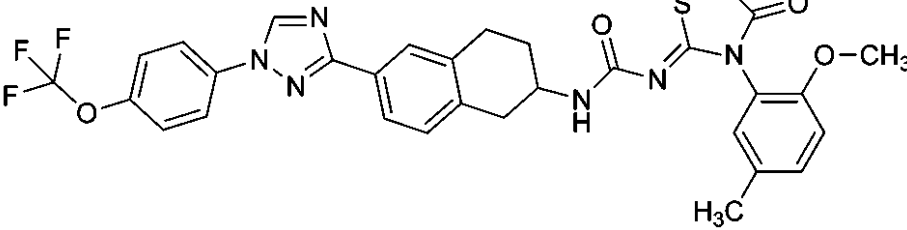
10

20

30

40

【表 1 - 8】

P35		実施例 14
P36		実施例 14
P37		実施例 14
P38		実施例 14

10

20

30

【0456】

実施例 A：シロイチモジヨトウ（「BAW」）およびイラクサギンウワバ（「CL」）でのバイオアッセイ

BAWは、その集団を減少させるための効果的な寄生生物、疾患若しくは捕食生物をほとんど有しない。BAWは多くの雑草、樹木、草、マメおよび農作物にはびこる。多様な場所で、それは、他の植物のなかでもアスパラガス、ワタ、トウモロコシ、ダイズ、タバコ、アルファルファ、サトウダイコン、コショウ、トマト、ジャガイモ、タマネギ、エンドウ（peas）、ヒマワリおよび柑橘類に対する経済的関心事である。CLは多様な栽培植物および雑草を常食とする。それはアブラナ科植物を容易に常食とし、そしてブロッコリー、キャベツ、カリフラワー、ハクサイ、コラード、ケール、カラシナ、ラディッシュ、ルタバガ、カブおよびミズガラシを損傷することが報告されている。傷害される他の野菜作物は、ビート、カンタロープ、セロリ、キュウリ、ライマメ、レタス、アメリカボウフウ、エンドウ（pea）、コショウ、ジャガイモ、サヤマメ、ハウレンソウ、カボチャ、サツマイモ、トマトおよびスイカを包含する。CLはある種の殺虫剤に対し耐性であることもまた知られている。結果、上の要因により、これら病害虫の防除が重要である。さらに、これら病害虫を防除する分子は他の病害虫の防除において有用である。

40

【0457】

本文書に開示されるある種の分子を、以下の実施例に記述される手順を使用してBAW

50

およびCLに対し試験した。結果の報告において、「BAWおよびCL評価の表」を使用した（表の節を参照されたい）。

【0458】

BAW（シロイチモジヨトウ（Spodoptera exigua））でのバイオアッセイ

BAWでのバイオアッセイは128ウェルダイエットトレイアッセイを使用して実施した。1ないし5匹の第二齢BAW幼虫を、（50μLの90：10 アセトン－水混合物に溶解された）50μg/cm²の試験化合物が（8ウェルのそれぞれに）適用されかつその後乾燥させられていた、1mLの人工餌で事前に満たされていたダイエットトレイの各ウェル（3mL）中に置いた。トレイを透明な自己接着性カバーで覆いかつ25℃、14：10の明－暗で5ないし7日間保持した。死亡パーセントを各ウェル中の幼虫について記録し；8ウェル中の活性をその後平均した。結果は「表ABC：アッセイ結果」および「表ABCD：アッセイ結果」と題された表に示す（表の節を参照されたい）。

【0459】

CL（イラクサギンウワバ（Trichoplusia ni））でのバイオアッセイ

CLでのバイオアッセイは128ウェルダイエットトレイアッセイを使用して実施した。1ないし5匹の第二齢CL幼虫を、（50μLの90：10 アセトン－水混合物に溶解された）50μg/cm²の試験化合物が（8ウェルのそれぞれに）適用されかつその後乾燥させられていた、1mLの人工餌で事前に満たされていたダイエットトレイの各ウェル（3mL）中に置いた。トレイを透明な自己接着性カバーで覆いかつ25℃、14：10の明－暗で5ないし7日間保持した。死亡パーセントを各ウェル中の幼虫について記録し；8ウェル中の活性をその後平均した。結果は「表ABC：アッセイ結果」および「表ABCD：アッセイ結果」と題された表に示す（表の節を参照されたい）。

【0460】

実施例B：モモアカアブラムシ（「GPA」）（モモアカアブラムシ（Myzus persicae））でのバイオアッセイ。

GPAはモモの木の最も重大なアブラムシ病害虫であり、低下された成長、葉のしぼみおよび多様な組織の死を引き起こす。それがナス科のナス属植物／ジャガイモのメンバーへのジャガイモウイルスYおよびジャガイモ葉巻き病ウイルスのような植物ウイルス、ならびに多くの他の食用作物への多様なモザイクウイルスの輸送の媒介昆虫として作用するため、それはまた危険でもある。GPAは、他の植物のなかでもブロッコリー、ゴボウ、キャベツ、ニンジン、カリフラワー、ダイコン、ナス、サヤインゲン（green beans）、レタス、マカダミア、パパイア、コショウ、サツマイモ、トマト、ミズガラシおよびズッキーニのような植物を攻撃する。GPAはまた、カーネーション、キク、ハボタン（flowering white cabbage）、ポインセチアおよびバラのような多くの観賞用作物も攻撃する。GPAは多くの殺虫農薬に対する耐性を発生している。

【0461】

本文書に開示されるある種の分子を、以下の実施例に記述される手順を使用してGPAに対し試験した。結果の報告において、「GPAおよびYFM評価の表」を使用した（表の節を参照されたい）。

【0462】

2～3枚の小（3～5cm）本葉をもつ3インチ鉢中で生育されたキャベツ種苗を試験支持体として使用した。種苗に、化学物質適用1日前に20～50匹のGPA（無翅成虫および若虫段階）をはびこらせた。個別の種苗を含む4個の鉢を各処理に使用した。試験化合物（2mg）を2mLのアセトン／MeOH（1：1）溶媒に溶解して1000ppmの試験化合物のストック溶液を形成した。ストック溶液を水中0.025%Tween

20で5倍希釈して200ppmの試験化合物の溶液を得た。携帯式吸引器型噴霧器を、液体流出までキャベツ葉の両側に溶液を噴霧するために使用した。参照植物（溶媒確認）は、20容量%のアセトン／MeOH（1：1）溶媒を含有するのみの希釈液を噴霧し

た。処理された植物は、等級分類する前におよそ25℃および周囲相対湿度（RH）で保持室に3日間保持した。評価は植物あたりの生存アブラムシの数を顕微鏡下で計数することにより実施した。防除パーセントを、後に続くところのAbbottの補正式（W. S. Abbott, “A Method of Computing the Effectiveness of an Insecticide” J. Econ. Entomol. 18 (1925), pp. 265–267）を使用することにより測定した。補正防除% = $100 \times (X - Y) / X$ 式中X = 溶媒確認植物上の生存アブラムシの数、およびY = 処理された植物上の生存アブラムシの数。結果は「表ABC：アッセイ結果」および「表ABCD：アッセイ結果」と題された表に示す（表の節を参照されたい）。

【0463】

10

実施例C：ネッタイシマカ「YFM」（ネッタイシマカ（*Aedes aegypti*））でのバイオアッセイ

YFMは日中ヒトを餌にすることを好み、そして最も頻繁にはヒト住居地中若しくはその近くで見出される。YFMは数種の疾患を伝播するための媒介昆虫である。それは Dengue 熱および黄熱病のウイルスを蔓延させ得る蚊である。黄熱病はマラリアの後の第二の最も危険な蚊媒介性疾患である。黄熱病は急性ウイルス性出血性疾患であり、そして治療を伴わない重度に冒された人の50%までが黄熱病で死亡することができる。毎年、世界で、推定される20万の黄熱病症例が存在し、3万の死亡を引き起こす。Dengue 熱はやっかいなウイルス性疾患であり；それはそれが生じ得る強い痛みのためときに「骨折熱」若しくは「心臓破り熱」と呼ばれる。Dengue 熱は1年に約2万の人々を殺す。結果、上の要因によりこの病害虫の防除が重要である。さらに、吸血性病害虫として知られるこの病害虫（YFM）を防除する分子は、ヒトおよび動物の疾病を引き起こす他の病害虫の防除において有用である。

20

【0464】

本文書に開示されるある種の分子を、以下の段落に記述される手順を使用してYFMに対し試験した。結果の報告において「GPAおよびYFM評価の表」を使用した（表の節を参照されたい）。

【0465】

100 μL のジメチルスルホキシド（DMSO）に溶解された400 μg の分子を含有する（4000 ppm の溶液に同等）マスタープレートを使用する。集成された分子のマスタープレートはウェルあたり15 μL を含有する。このプレートに、135 μL の90：10 水：アセトン混合物を各ウェルに添加する。ロボット（Biomek（登録商標）NXPLaboratory Automation Workstation）を、マスタープレートから空の96ウェル浅型プレート（「嬢」プレート）に15 μL の吸引を分注するようプログラムする。マスターあたり創成される6個の複製物（「嬢」プレート）が存在する。創成される嬢プレートにその後直ちにYFM幼虫をはびこらせる。

30

【0466】

プレートを処理するはずである前の日に、蚊の卵を肝粉末を含有するMillipore水中に置いて孵化を開始させる（4g. を400mL中に）。嬢プレートをロボットを使用して創成した後に、それらに220 μL の肝粉末／幼虫の蚊の混合物（約1日齢幼虫）をはびこらせる。プレートに蚊の幼虫をはびこらせた後に、非蒸発性蓋を使用してプレートを覆い乾燥を低減する。プレートは等級分類する前に3日間室温で保持する。3日後に各ウェルを観察し、そして死亡率に基づき点数を付ける。

40

【0467】

結果は「表ABC：アッセイ結果」および「表ABCD：アッセイ結果」と題される表に示す（表の節を参照されたい）。

【0468】

農業で許容できる酸付加塩、塩誘導体、溶媒和物、エステル誘導体、多形、同位体および放射性核種

式1の分子は殺虫殺虫農薬的に許容できる酸付加塩に配合しうる。制限しない例として

50

、アミン官能性は、塩酸、臭化水素酸、硫酸、リン酸、酢酸、安息香酸、クエン酸、マロン酸、サリチル酸、リンゴ酸、フマル酸、シュウ酸、コハク酸、酒石酸、乳酸、グルコン酸、アスコルビン酸、マレイン酸、アスパラギン酸、ベンゼンスルホン酸、メタンスルホン酸、エタンスルホン酸、ヒドロキシメタンスルホン酸およびヒドロキシエタンスルホン酸と塩を形成し得る。加えて、制限しない例として、酸官能性は、アルカリ若しくはアルカリ土類金属に由来するものならびにアンモニアおよびアミンに由来するものを包含する塩を形成し得る。好ましい陽イオンの例はナトリウム、カリウムおよびマグネシウムを包含する。

【0469】

式1の分子は塩誘導体に配合しうる。制限しない例として、塩誘導体は、遊離塩基を十分な量の所望の酸と接触させて塩を生じさせることにより製造し得る。遊離塩基は、希薄水性水酸化ナトリウム（NaOH）、炭酸カリウム、アンモニアおよび重炭酸ナトリウムのような適する希薄水性塩基溶液で塩を処理することにより再生させうる。一例として、多くの場合、2, 4-Dのような殺虫農薬は、それをそのジメチルアミン塩に転化することにより、より水溶性にされる。

10

【0470】

式1の分子は溶媒との安定な複合体に配合することができ、その結果複合体形成されない溶媒が除去された後に複合体が無傷のまま留まる。これら複合体はしばしば「溶媒和物」と称される。しかしながら、溶媒としての水と安定な水和物を形成することがとりわけ望ましい。

20

【0471】

式1の分子はエステル誘導体にすることができる。これらエステル誘導体はその場合、本文書に開示される本発明が適用されると同一の様式で適用し得る。

【0472】

式1の分子は多様な結晶多形として作成しうる。同一分子の異なる結晶多形若しくは構造は大きく異なる物理特性および生物学的性能を有し得るため、多形は殺虫農薬の開発で重要である。

【0473】

式1の分子は多様な同位体を用いて作成しうる。 ^1H の代わりに ^2H （重水素としてもまた知られる）を有する分子がとりわけ重要である。

30

【0474】

式1の分子は多様な放射性核種を用いて作成しうる。 ^{14}C を有する分子がとりわけ重要である。

【0475】

立体異性体

式1の分子は1種若しくはそれ以上の立体異性体として存在しうる。従って、ある種の分子はラセミ混合物として製造し得る。1種の立体異性体が他の立体異性体より活性でありうることが当業者により認識されるであろう。個々の立体異性体は、既知の選択的合成手順により、分割された出発原料を使用する慣習的合成手順により、若しくは慣習的分割手順により得ることができる。本文書に開示されるある種の分子は2種若しくはそれ以上の異性体として存在し得る。多様な異性体は幾何異性体、ジアステレオマーおよび鏡像異性体を包含する。従って、本文書に開示される分子は、幾何異性体、ラセミ混合物、個別の立体異性体および光学活性の混合物を包含する。1種の異性体が他者より活性でありうることを当業者により認識されるであろう。本開示に開示される構造は明快さのためただ1つの幾何学的形態で描かれるが、しかし該分子の全部の幾何学的形態を表すことを意図している。

40

【0476】

組合せ

別の態様において、式1の分子は、式1の分子の作用様式（「M o A」）と同一、類似若しくは異なる作用様式をそれぞれ有する1種若しくはそれ以上の化合物と（1種の組成

50

混合物または同時若しくは逐次適用でのような) 組合せで使用する。作用様式は、例えば以下: アセチルコリンエステラーゼ (AChE) 阻害剤; GABA 作動性クロライドチャンネルアンタゴニスト; ナトリウムチャンネル調節物質; ニコチン性アセチルコリン (nAChR) アゴニスト; ニコチン性アセチルコリン受容体 (nAChR) アロステリック活性化物質; クロライドチャンネル活性化物質; 幼若ホルモン模倣物; 雑多な非特異的 (多部位) 阻害剤; 選択的同翅類摂食阻害剤; ダニ成長阻害剤; 昆虫中腸膜の微生物性攪乱物質; ミトコンドリア ATP 合成酵素の阻害剤; プロトン勾配の破壊を介する酸化的リン酸化の脱共役剤; ニコチン性アセチルコリン受容体 (nAChR) チャンネル阻害剤; キチン生合成の阻害剤、タイプ 0; キチン生合成の阻害剤、タイプ 1; 脱皮攪乱物質 (moulting disruptor)、双翅類; エクジソン受容体アゴニスト; オクトパミン受容体アゴニスト; ミトコンドリア複合体 I I I 電子伝達阻害剤; ミトコンドリア複合体 I 電子伝達阻害剤; 電位依存性ナトリウムチャンネル阻害剤; アセチル CoA カルボキシラーゼの阻害剤; ミトコンドリア複合体 I V 電子伝達阻害剤; ミトコンドリア複合体 I I 電子伝達阻害剤; およびリアノジン受容体調節物質を包含する。

10

【0477】

別の態様において、式 1 の分子は、ダニ駆除、殺藻、殺鳥、殺菌、防カビ、除草、殺虫、軟体類駆除、殺線虫、殺鼠および/若しくは殺ウイルス特性を有する 1 種若しくはそれ以上の化合物と (1 種の組成混合物または同時若しくは逐次適用でのような) 組合せで使用する。

【0478】

20

別の態様において、式 1 の分子は、摂食阻害剤、鳥類忌避剤、化学殺菌剤、除草剤毒性緩和剤、昆虫誘引物質、昆虫忌避剤、哺乳動物忌避剤、交信攪乱剤、植物活性化物質、植物成長調節剤および/若しくは共力剤である 1 種若しくはそれ以上の化合物と (1 種の組成混合物または同時若しくは逐次適用でのような) 組合せで使用する。

【0479】

別の態様において、式 1 の分子は、臭化 (3-エトキシプロピル) 水銀、1, 2-ジクロロプロパン、1, 3-ジクロロプロパン、1-メチルシクロプロパン、1-ナフトール、2-(オクチルチオ) エタノール、2, 3, 5-トリヨード安息香酸、2, 3, 6-TBA、2, 3, 6-TBA ジメチルアンモニウム塩、2, 3, 6-TBA リチウム塩、2, 3, 6-TBA カリウム塩、2, 3, 6-TBA ナトリウム塩、2, 4, 5-T、2, 4, 5-T 2-ブトキシプロピル、2, 4, 5-T 2-エチルヘキシル、2, 4, 5-T 3-ブトキシプロピル、2, 4, 5-TB、2, 4, 5-T ブトメチル、2, 4, 5-T ブトチル、2, 4, 5-T ブチル、2, 4, 5-T イソブチル、2, 4, 5-T イソクチル (isocetyl)、2, 4, 5-T イソプロピル、2, 4, 5-T メチル、2, 4, 5-T ペンチル、2, 4, 5-T ナトリウム塩、2, 4, 5-T トリエチルアンモニウム塩、2, 4, 5-T トロラミン、2, 4-D、2, 4-D 2-ブトキシプロピル、2, 4-D 2-エチルヘキシル、2, 4-D 3-ブトキシプロピル、2, 4-D アンモニウム塩、2, 4-D B、2, 4-D B ブチル、2, 4-D B ジメチルアンモニウム塩、2, 4-D B イソクチル、2, 4-D B カリウム塩、2, 4-D B ナトリウム塩、2, 4-D ブトチル、2, 4-D ブチル、2, 4-D ジエチルアンモニウム塩、2, 4-D ジメチルアンモニウム塩、2, 4-D ジオラミン、2, 4-D ドデシルアンモニウム塩、2, 4-D E B、2, 4-D E P、2, 4-D エチル、2, 4-D ヘプチルアンモニウム塩、2, 4-D イソブチル、2, 4-D イソクチル、2, 4-D イソプロピル、2, 4-D イソプロピルアンモニウム塩、2, 4-D リチウム塩、2, 4-D メブチル、2, 4-D メチル、2, 4-D オクチル、2, 4-D ペンチル、2, 4-D カリウム塩、2, 4-D プロピル、2, 4-D ナトリウム塩、2, 4-D テフリル、2, 4-D テトラデシルアンモニウム塩、2, 4-D トリエチルアンモニウム塩、2, 4-D トリス (2-ヒドロキシプロピル) アンモニウム塩、2, 4-D トロラミン、2 i P、塩化 2-メトキシエチル水銀、2-フェニルフェノール、3, 4-DA、3, 4-DB、3, 4-DP、4-アミノピリジン、4-CPA、4-CPA ジオラミン (4-CPA-dioline)、4-CPA カ

30

40

50

リウム塩、4-CPAナトリウム塩、4-CPB、4-CPP、4-ヒドロキシフェネチルアルコール、8-ヒドロキシキノリン硫酸塩、8-フェニルマーキュリオキシキノリン (phenylmercurioxyquinoline)、アバメクチン、アブシジン酸、ACC、アセフェート、アセキノシル、アセタミプリド、アセチオン、アセトクロール、アセトホス、アセトプロール、アシベンゾラル、アシベンゾラルS-メチル、アシフルオルフェン、アシフルオルフェンメチル、アシフルオルフェンナトリウム塩、アクロニフェン、アクレップ (acrep)、アクリナトリン、アクロレイン、アクリロニトリル、アシペタックス、アシペタックス銅、アシペタックス亜鉛、アフィドピロペン、アフォキシラネル (afoxolaner)、アラクロール、アラニカルブ、アルベンダゾール、アルジカルブ、アルジモルフ、アルドキシカルブ、アルドリン、アレスリン、アリシン、アリドクロール、アロサミジン、アロキシジム、アロキシジムナトリウム、アリルアルコール、アリキシカルブ、アロラック、アルファシペルメトリン、アルファエンドスルファン、アメトクトラジン、アメトリジオン、アメトリン、アミブジン、アミカルバゾン、アミカルチアゾール (amicarthiazol)、アミジチオン、アミドフルメット、アミドスルフロン、アミノカルブ、アミノシクロピラクロル、アミノシクロピラクロルメチル、アミノシクロピラクロルカリウム塩、アミノピラリド、アミノピラリドカリウム塩、アミノピラリドトリス (2-ヒドロキシプロピル) アンモニウム塩、アミプロホスメチル、アミプロホス、アミスルブロム、アミトン、アミトンシュウ酸塩、アミトラズ、アミトロール、スルファミン酸アンモニウム、 α -ナフタレン酢酸アンモニウム、アンバム、アンプロピルホス、アナバシン、硫酸アナバシン、アンシミドール、アニラジン、アニロホス、アニスロン、アントラキノ、アンツ、アホラート、アラマイト、三酸化ヒ素、アソメート、アスピリン、アシュラム、アシュラムカリウム塩、アシュラムナトリウム塩、アチダチオン、アトラトン、アトラジン、オーレオフアンギン (aureofungin)、アビグリシン、アビグリシン塩酸塩、アザコナゾール、アザジラクチン、アザフェニジン、アザメチホス、アジムスルフロン、アジンホスエチル、アジンホスメチル、アジプロトリン、アジチラム、アゾベンゼン、アゾシクロチン、アゾトエート、アゾキシストロビン、バクメデシュ (bachmedesh)、バルバン、ヘキサフルオロケイ酸バリウム、多硫化バリウム、バルトリン、BCPC、ベフルブタミド、ベナラキシル、ベナラキシルM、ベナゾリン、ベナゾリンジメチルアンモニウム塩、ベナゾリンエチル、ベナゾリンカリウム塩、ベンカルバゾン、ベンクロチアズ、ベンダイオカルブ、ベンフルラリン、ベンフラカルブ、ベンフレセート、ベノダニル、ベノミル、ベノキサコル、ベノキサホス、ベンキノックス、ベンスルフロン、ベンスルフロンメチル、ベンスリド、ベンスルトップ、ベントラルロン、ベントゾン、ベントゾンナトリウム塩、ベンチアバリカルブ、ベンチアバリカルブイソプロピル、ベンチアゾール、ベントラニル、ベンザドックス、ベンザドックスアンモニウム塩、塩化ベンザルコニウム、ベンザマクリル、ベンザマクリルイソブチル、ベンザモルフ、ベンズフェンジゾン、ベンジブラム、ベンゾビシクロン、ベンゾフェナップ、ベンゾフルオル、ベンゾヒドロキサム酸、ベンゾベンジフルピル、ベンゾキシメート、ベンゾイルプロップ、ベンゾイルプロップエチル、ベンズチアズロン、安息香酸ベンジル、ベンジルアデニン、ベルベリン、ベルベリン塩化物、ベータ・シフルトリン、ベータ・シペルメトリン、ベトキサジン、ビシクロピロン、ビフェナゼート、ビフェノックス、ビフェントリン、ビフチュンツィ (bifujunzhi)、ビラナホス、ビラナホスナトリウム塩、ビナバクリル、ビンチンシアオ (bingqingxiao)、バイオアレスリン、バイオエタノメトリン (bioethanomethrin)、バイオペルメトリン、バイオレスメトリン、ビフェニル、ビスアジル、ビスメルチアゾール、ビスピリバック、ビスピリバックナトリウム塩、ビストリフルロン、ビテルタノール、ビチオノール、ビキサフェン、ブラストサイジンS、ハウ砂、ボルドー液、ハウ酸、ボスカリド、ブラシノリド、ブラシノリドエチル、ブレビコミン、プロジファクム、プロフェンバレレート (brofenvalerate)、プロフラニリド (broflanilide)、プロフルトリネート (brofluthrinat)、プロマシル、プロマシルリチウム塩、プロマシルナトリウム塩、プロマジオロン、プロメタリン、プロメトリン (bro

10

20

30

40

50

methrin)、ブロムフェンビンホス、ブromoアセトアミド、ブromoボニル、ブromo
 ブチド、ブromoシクレン、ブromoDDT、ブromoフェノキシム、ブromoホス、ブromoホス
 エチル、ブromoプロピレート、ブromoタロニル(bromothalonil)、ブromo
 キシニル、ブromoキシニルブチラート、ヘプタン酸ブromoキシニル、オクタン酸ブromoキ
 シニル、ブromoキシニルカリウム塩、ブロムピラゾン、ブロムコナゾール、ブロノポール
 、ブカルポラート、ブフェンカルブ、ブミナホス、ブピリメート、ブプロフェジン、バー
 ガンディー混合物(Burgundy mixture)、ブスルファン、ブタカルブ、
 ブタクロール、ブタフェナシル、ブタミホス、ブタチオホス、ブテナクロール、ブテトリ
 ン(butethrin)、ブチダゾール、ブチオベート、ブチウロン、ブトカルボキシ
 ム、ブトネート、ブトピロノキシム、ブトキシカルボキシム、ブトルアリン、ブトロキシ
 ジム、ブツロン、ブチルアミン、ブチレート、カコジル酸、カズサホス、カフェンストロ
 ール、ヒ酸カルシウム、塩素酸カルシウム、カルシウムシアナミド、多硫化カルシウム、
 カルピンホス、カンベンジクロール、カンフェクロール、カンファー、カプタホール、キャ
 タン、カルバモルフ、カーバノレート、カルバリル、カルバスラム、カルベンダジム、カル
 ベンダジムベンゼンスルホン酸塩、カルベンダジム亜硫酸塩、カルベタミド、カルボフ
 ラン、二硫化炭素、四塩化炭素、カルボフェノチオン、カルボスルファン、カルボキサゾ
 ール、カルボキシド(carboxide)、カルボキシム、カルフェントラゾン、カル
 フェントラゾンエチル、カルプロパミド、カルタップ、カルタップ塩酸塩、カルバクロ
 ール、カルボン、CDEA、セロシジン、CEPC、セラルレ、チェシュハント混合物(C
 heshunt mixture)、キノメチオナート、キトサン、クロベンチアゾン、
 クロメトキシフェン、クロラロース、クロランベン、クロランベンアンモニウム塩、クロ
 ランベンジオラミン、クロランベンメチル、クロランベンメチルアンモニウム塩、クロラ
 ンベンナトリウム塩、クロラミンリン(chloramine phosphorus)
 、クロラムフェニコール、クロラニホルメタン、クロラニル、クロラノクリル、クロラン
 トラニリプロール、クロラジホップ、クロラジホッププロパルギル、クロラジン、クロル
 ベンシド、クロルベンズロン、クロルビシクレン、クロルブロムロン、クロルブファム、
 クロルデン、クロルデコン、クロルジメホルム、塩酸クロルジメホルム、クロルエンペン
 トリン(chlorempenthrin)、クロレトキシホス、クロレツロン、クロル
 フェナック、クロルフェナックアンモニウム塩、クロルフェナックナトリウム塩、クロル
 フェナピル、クロルフェナゾール、クロルフェネトール、クロルフェンプロップ、クロル
 フェンソン、クロルフェンスルフィド、クロルフェンビンホス、クロルフルアズロン、ク
 ロルフルラゾール、クロルフルレン、クロルフルレンメチル、クロルフルレノール、クロ
 ルフルレノールメチル、クロリダゾン、クロリムロン、クロリムロンエチル、クロルメホ
 ス、クロルメコート、塩化クロルメコート、クロルニジン、クロルニトロフェン、クロロ
 ベンジレート、クロロジニトロナフタレン、クロロホルム、クロロメブホルム、クロロメ
 チウロン、クロロネブ、クロロファシノン、クロロファシノンナトリウム塩、クロロピク
 リン、クロロポン、クロロプラレトリン(chloroprallethrin)、クロ
 ロプロピレート、クロロタロニル、クロロトルロン、クロロクスロン、クロロキシニル、
 クロルホニウム、塩化クロルホニウム、クロルホキシム、クロルプラゾホス、クロルプロ
 カルブ、クロルプロファム、クロルピリホス、クロルピリホスメチル、クロルキノックス
 、クロルスルフロン、クロルタール、クロルタールジメチル、クロルタールモノメチル、
 クロルチアミド、クロルチオホス、クロゾリネート、コリン塩化物、コレカルシフェロー
 ル、クロマフェノジド、シネリンI、シネリンII、シネリン類、シニドンエチル、シン
 メチリン、シノスルフロン、シオブチド、シサニリド(cisanilide)、シスメ
 トリン、クラシホス、クレトジム、クリンバゾール、クリオジネート、クロジナホップ、
 クロジナホッププロパルギル、クロエトカルブ、クロフェンセット、クロフェンセットカ
 リウム塩、クロフェンテジン、クロフィブリン酸、クロホップ、クロホップイソブチル、
 クロマゾン、クロメプロップ、クロプロップ、クロプロキシジム、クロピラリド、クロピ
 ラリドメチル、クロピラリドオラミン(clopyralid-amine)、クロ
 ピラリドカリウム塩、クロピラリドトリス(2-ヒドロキシプロピル)アンモニウム塩、

10

20

30

40

50

クロキントセット、クロキントセットメキシル、クロランスラム、クロランスラムメチル、クロサンテル、クロチアニジン、クロトリマゾール、クロキシホナック、クロキシホナックナトリウム塩、CMA、コドレルア、コロホネート、酢酸銅、アセト亜ヒ酸銅、ヒ酸銅、塩基性炭酸銅、水酸化銅、ナフテン酸銅、オレイン酸銅、オキシ塩化銅、ケイ酸銅、硫酸銅、クロム酸亜鉛銅 (copper zinc chromate)、クマクロール、クマフリル、クマホス、クマテトラリル、クミトエート、クモキシストロビン、クモキシストロビン、CPMC、CPMF、CPPC、クレダジン、クレゾール、クリミジン、クロタミトン、クロトキシホス、クルホメート、氷晶石、キュウルア、クフラネブ、クミルロン、クプロバム (cuprobam)、酸化第一銅、クルクメノール、シアナミド、シアナトリン、シアナジン、シアノフェンホス、シアノホス、シアントエート、シアントラニリプロール、シアゾファミド、シブトリン、シクラフラミド、シクラニリド、シクラニリプロール、シクレトリン、シクロエート、シクロヘキシミド、シクロプラート、シクロプロトリン、シクロピリモレート、シクロスルファミロン、シクロキサプリド、シクロキシジム、シクルロン、シエノピラフェン、シフルフェナミド、シフルメトフェン、シフルトリン、シハロジアミド (cyhalodiamide)、シハロホップ、シハロホップブチル、シハロトリン、シヘキサチン、シミアゾール、シミアゾール塩酸塩、シモキサニル、シオメトリニル、シペンダゾール、シペルメトリン、シペルコート、シペルコートクロリド、シフェノトリン、シプラジン、シプラゾール、シプロコナゾール、シプロジニル、シプロフラム、シプロミッド、シプロスルファミド、シロマジン、シチオアート、ダイムロン、ダラポン、ダラポンカルシウム塩、ダラポンマグネシウム塩、ダラポンナトリウム塩、ダミノジッド、タヨウトン (dayoutong)、ダゾメット、ダゾメットナトリウム塩、DBCP、d-カンファー、DCIP、DCPTA、DDT、デバカルブ、デカフェンチン、デカルボフラン、デヒドロ酢酸、デラクロール、デルタメトリン、デメフィオン、デメフィオン-O、デメフィオン-S、ジメトン、ジメトンメチル、ジメトン-O、ジメトン-O-メチル、ジメトン-S、ジメトン-S-メチル、ジメトン-S-メチルスルホン、デスメディファム、デスメトリン、d-ファンシルチュエビンチュツィ (d-fanshiluquebingjuzhi)、ジアフェンチウロン、ジアリホス、ジアレート、ジアミダホス、ケイ藻土、ダイアジノン、フタル酸ジブチル、コハク酸ジブチル、ジカンバ、ジカンバジグリコールアミン、ジカンバジメチルアンモニウム塩、ジカンバジオラミン、ジカンバイソプロピルアンモニウム塩、ジカンバメチル、ジカンバオラミン (dicamba-olamine)、ジカンバカリウム塩、ジカンバナトリウム塩、ジカンバトロラミン、ジカプトン、ジクロベニル、ジクロフェンチオン、ジクロフルアニド、ジクロロン、ジクロラル尿素 (dichloralurea)、ジクロルベンズロン (dichlorbenzuron)、ジクロフルレノール、ジクロフルレノールメチル、ジクロルメート、ジクロルミド、ジクロロメゾチアズ、ジクロロフェン、ジクロルプロップ、ジクロルプロップ2-エチルヘキシル、ジクロルプロップブチル、ジクロルプロップジメチルアンモニウム塩、ジクロルプロップエチルアンモニウム塩、ジクロルプロップイソクチル、ジクロルプロップメチル、ジクロルプロップP、ジクロルプロップP2-エチルヘキシル、ジクロルプロップPジメチルアンモニウム塩、ジクロルプロップカリウム塩、ジクロルプロップPカリウム塩、ジクロルプロップPナトリウム塩、ジクロルプロップナトリウム塩、ジクロルボス、ジクロゾリン、ジクロブトラゾール、ジクロシメット、ジクロホップ、ジクロホップメチル、ジクロメジン、ジクロメジンナトリウム塩、ジクロラン、ジクロスラム、ジコホル、ジクマロール、ジクレシル、ジクロトホス、ジシクラニル、ジシクロノン、ディルドリン、ジエノクロル、ジエタムコート、ジエタムコートジクロリド、ジエタチル、ジエタチルエチル、ジエトフェンカルブ、ジエトラート、ジエチルピロカーボネート、ジエチルトルアミド、ジフェナクム、ジフェノコナゾール、ジフェノペンテン、ジフェノペンテンエチル、ジフェノキスロン、ジフェンゾコート、ジフェンゾコートメチル硫酸塩、ジフェチアロン、ジフロビダジン、ジフルベンズロン、ジフルフェニカン、ジフルフェンゾピル、ジフルフェンゾピルナトリウム塩、ジフルメトリム、ジケグラック、ジケグラックナトリウム塩、ジロール、ジマチフ (dimatif)、ジメ

10

20

30

40

50

フルトリン、ジメホックス、ジメフロネ、ジメピペレート、ジメタクロン (dimetachlone)、ジメタン (dimetan)、ジメタカルブ (dimethacarb)、ジメタクロール、ジメタメトリン、ジメテナミド、ジメテナミドP、ジメチピン、ジメチリモール、ジメトエート、ジメトモルフ、ジメトリン、ジメチルカルバート、フタル酸ジメチル、ジメチルビンホス、ジメチラン、ジメキサノ、ジミダゾン、ジモキシストロビン、ジネックス、ジネックスジクレキシシ、ティンチュンエツォ (dingjunezu)、ジニコナゾール、ジニコナゾールM、ジニトラミン、ジノブトン、ジノカップ、ジノカップー4、ジノカップー6、ジノクトン、ジノフェナート、ジノペントン、ジノプロップ、ジノサム、ジノセブ、酢酸ジノセブ、ジノセブアンモニウム塩、ジノセブジオラミン (dinoseseb-diollamine)、ジノセブナトリウム塩、ジノセブトロラミン、ジノスルホン、ジノテフラン、ジノテルブ、酢酸ジノテルブ、ジノテルボン、ジオフェノラン、ジオキサベンゾホス、ジオキサカルブ、ジオキサチオン、ダイファシノン、ダイファシノンナトリウム塩、ジフェナミド、ジフェニルスルホン、ジフェニルアミン、ジプロバリン、ジプロベトリン、ジピメチトロン (dipymetitron)、ジピリチオン、ジクワット、ジクワットジプロミド、ディスパールア、ジスル、ジスルフィラム、ジスルホトン、ジスルナトリウム、ジタリムホス、ジチアノン、ジチクロホス、ジチオエーテル、ジチオピル、ジウロン、dーリモネン、DMPA、DNOC、DNOCアンモニウム塩、DNOCカリウム塩、DNOCナトリウム塩、ドデモルフ、酢酸ドデモルフ、安息香酸ドデモルフ、ドジシン、ドジシン塩酸塩、ドジシンナトリウム塩、ドジン、ドフェナピン、ドミニカルア、ドラメクチン、ドラゾキシロン、DSMA、ズフリン、EBEP、EBP、エクジステロン、エジフェンホス、エグリナジン、エグリナジンエチル、エマメクチン、エマメクチン安息香酸塩、EMPC、エンペントリン、エンドスルファン、エンドタール、エンドタールニアンモニウム塩、エンドタールニカリウム塩、エンドタールニナトリウム塩、エンドチオン、エンドリン、エネストロブリン、エノキサストロビン、EPN、エポコレオン、エポフェノナン、エポキシコナゾール、エプリノメクチン、エプロナズ、イブシロン・メトフルトリン、イブシロン・モンフルオロトリン、EPTC、エルボン、エルゴカルシフェロール、アルルチシアンカオアン (erlujixiancaoan)、エスデパレトリン (esdepallethrine)、エスフェンバレレート、エスロプロカルブ、エタセラシル、エタコナゾール、エタホス、エテム (etem)、エタボキサム、エタクロル (ethachlor)、エタルフルラリン、エタメトスルフルロン、エタメトスルフルロンメチル、エタプロクロル (ethaprochlor)、エテホン、エチジムロン、エチオフェンカルブ、エチオレート、エチオン、エチオジン、エチプロール、エチリモール、エトエートメチル、エトフメセート、エトヘキサジオール、エトプロホス、エトキシフェン、エトキシフェンエチル、エトキシキン、エトキシスルフロネ、エチクロゼート、ギ酸エチル、 α -ナフタレン酢酸エチル、エチルDDD、エチレン、二臭化エチレン、二塩化エチレン、エチレンオキシド、エチリシン、エチル水銀2, 3-ジヒドロキシプロピルメルカプチド、酢酸エチル水銀、臭化エチル水銀、塩化エチル水銀、リン酸エチル水銀、エチノフェン、エトニプロミド、エトベンザニド、エトフェンプロックス、エトキサゾール、エトリジアゾール、エトリムホス、オイゲノール、EXD、ファモキサドン、ファミフル、フェンアミドン、フェナミノスルフ、フェナミストロビン、フェナミホス、フェナパニル、フェナリモル、フェナシュラム、フェナザフロル、フェナザキン、フェンブコナゾール、酸化フェンブタスズ、フェンクロラゾール、フェンクロラゾールエチル、フェンクロルホス、フェンクロリム、フェネタカルブ、フェンフルトリン、フェンフラム、フェンヘキサミド、フェニトロパン、フェニトロチオン、フェンチュントン (fenjuntong)、フェノブカルブ、フェノプロップ、フェノプロップ3-ブトキシプロピル、フェノプロップブトメチル、フェノプロップブトチル、フェノプロップブチル、フェノプロップイソクチル、フェノプロップメチル、フェノプロップカリウム塩、フェノチオカルブ、フェノキサクリム、フェノキサニル、フェノキサプロップ、フェノキサプロップエチル、フェノキサプロップP、フェノキサプロップPエチル、フェノキサスルホン、フェノキシカルブ、フェンピクロニル、フェンピリトリン

10

20

30

40

50

、フェンプロパトリン、フェンプロピジン、フェンプロピモルフ、フェンピラザミン、フェンピロキシメート、フェンキノトリオン、フェンリダゾン、フェンリダゾンカリウム塩、フェンリダゾンプロピル、フェンソン、フェンスルホチオン、フェンテラコール、フェンチアプロップ、フェンチアプロップエチル、フェンチオン、フェンチオン・エチル、フェンチン、酢酸フェンチン、フェンチンクロリド、水酸化フェンチン、フェントラザミド、フェントリファニル、フェニユロン、フェニユロンTCA、フェンバレレート、ファーバム、フェリムゾン、硫酸第一鉄、フィプロニル、フランプロップ、フランプロップイソプロピル、フランプロップM、フランプロップメチル、フランプロップMイソプロピル、フランプロップMメチル、フラザスルフロニ、フロクマフェン、フロメトキン、フロニカミド、フロラスラム、フルアクリピリム、フルアザインドリジン (fluazaindoline)、フルアジホップ、フルアジホップブチル、フルアジホップメチル、フルアジホップP、フルアジホップPブチル、フルアジナム、フルアゾレート、フルアズロン、フルベンジアミド、フルベンジミン、フルカルバゾン、フルカルバゾンナトリウム塩、フルセトスルフロニ、フルクロラリン、フルコフロニ、フルシクロクスロン、フルシトリネート、フルジオキシソニル、フルエネチル、フルエンスルホン、フルフェナセット、フルフェネリム、フルフェニカン、フルフェノクスロン、フルフェノキシストロビン、フルフェンプロックス、フルフェンピル、フルフェンピルエチル、フルフィプロール、フルヘキサホン (fluhexafon)、フルメトリン、フルメトベル、フルメトラリン、フルメツラム、フルメジン、フルミクロラック、フルミクロラックペンチル、フルミオキサジン、フルミプロピン、フルモルフ、フルオメツロン、フルオピコリド、フルオピラム、フルオルベンシド、フルオリダミド、フルオロアセトアミド、フロロジフェン、フルオログリコフェン、フルオログリコフェンエチル、フルオルイミド、フルオロミジン、フルオロニトロフェン、フルオチウロン、フルオトリマゾール、フルオキサストロビン、フルポキサム、フルプロバシル、フルプロバジン、フルプロパネート、フルプロパネートナトリウム塩、フルピラジフロニ、フルピルスルフロニ、フルピルスルフロニメチル、フルピルスルフロニメチルナトリウム塩、フルキンコナゾール、フルララネル、フルラゾール、フルレノール、フルレノールブチル、フルレノールメチル、フルリドン、フルロクロリドン、フルロキシピル、フルロキシピルブトメチル、フルロキシピルメブチル、フルルプリミドール、フルルスルアミド (flursulamid)、フルルタモン、フルシラゾール、フルスルファミド、フルチアセット、フルチアセットメチル、フルチアニル、フルトラニル、フルトリアホール、フルバリネート、フルキサピロキサド、フルキソフェニム、ホルベット、ホメサフェン、ホメサフェンナトリウム塩、ホノホス、ホラムスルフロニ、ホルクロルフェニユロン、ホルムアルデヒド、ホルメタネート、塩酸ホルメタネート、ホルモチオン、ホルムパラネート、塩酸ホルムパラネート、ホサミン、ホサミンアンモニウム、ホセチル (fosetyl)、ホセチル (fosetyl-aluminium)、ホスメチラン、ホスピレート、ホスチアゼート、ホスチエタン、フロンタリン、フベリダゾール、フカオチン (fucaojing)、フカオミ (fucaoimi)、フナイヒカオリン (funaihecaoling)、フフェンチオ尿素 (fuphenthiourea)、フララン (furalane)、フララキシル、フラメトリン、フラメトピル、フラチオカルブ、フルカルバニル、フルコナゾール、フルコナゾール・シス、フレトリン (furethrin)、フルフラール、フリラゾール、フルメシクロックス、フロファネート、フリロキシフェン、ガンマシハロトリン、ガンマHCH、ジェニット (genit)、ジベレリン酸、ジベレリン類、グリフトル (gliftor)、グルホシネート、グルホシネートアンモニウム塩、グルホシネートP、グルホシネートPアンモニウム塩、グルホシネートPナトリウム塩、グリオジン、グリオキシム、グリホサート、グリホサートジアンモニウム塩、グリホサートジメチルアンモニウム塩、グリホサートイソプロピルアンモニウム塩、グリホサートモノアンモニウム塩、グリホサートカリウム塩、グリホサートセスキナトリウム塩、グリホサートトリメシウム塩、グリホシン、ゴシップルア、グランドルア、グリセオフルビン、グアザチン、酢酸グアザチン、ハラクリネート、ハラウキシフェン、ハラウキシフェンメチル、ハルフェンプロックス、ハロフェノジド、ハロサフェ

10

20

30

40

50

ン、ハロスルフロン、ハロスルフロンメチル、ハロキシジン、ハロキシホップ、ハロキシ
 ホップエトチル、ハロキシホップメチル、ハロキシホップP、ハロキシホップPエトチル
 、ハロキシホップPメチル、ハロキシホップナトリウム塩、HCH、ヘメル (heme l
)、ヘンパ、HEOD、ヘプタクロル、ヘプタフルトリン、ヘプテノホス、ヘプトパルギ
 ル、ハービマイシン、ヘテロホス、ヘキサクロロアセトン、ヘキサクロロベンゼン、ヘキ
 サクロロブタジエン、ヘキサクロロフェン、ヘキサコナゾール、ヘキサフルムロン、ヘキ
 サフルラート (hexaflurate)、ヘキサルア、ヘキサミド、ヘキサジノン、ヘ
 キシルチオホス、ヘキシチアゾクス、HHDN、ホロスルフ、ファンカイウォ (huan
 caiw o)、ファンカオリン (huangcaoling)、ファンチュンツォ (hu
 anjunzuo)、ヒドラメチルノン、ヒドラガフェン、消石灰、シアン化水素、ヒド
 ロブレン、ヒメキサゾール、ヒキンカルブ、IAA、IBA、イカリジン、イマザリル、
 イマザリルニトラート、硫酸イマザリル、イマザメタベンズ、イマザメタベンズメチル、
 イマザモックス、イマザモックスアンモニウム塩、イマザピック、イマザピックアンモニ
 ウム塩、イマザピル、イマザピルイソプロピルアンモニウム塩、イマザキン、イマザキン
 アンモニウム塩、イマザキンメチル、イマザキンナトリウム塩、イマゼタピル、イマゼタ
 ピルアンモニウム塩、イマゾスルフロン、イミベンコナゾール、イミシアホス、イミダク
 ロプリド、イミダクロチズ、イミノクタジン、イミノクタジン酢酸塩、イミノクタジンアル
 ベシル酸塩、イミプロトリン、イナベンフィド、インダノファン、インダジフラム、イン
 ドキサカルブ、イネジン、ヨードボニル、ヨードカルブ、ヨードメタン、ヨードスルフ
 ロン、ヨードスルフロンメチル、ヨードスルフロンメチルナトリウム塩、ヨーフェンスル
 フロン、ヨーフェンスルフロンナトリウム塩、アイオキシニル (ioxynil)、アイ
 オキシニル (ioxynil octanoate)、アイオキシニルリチウム塩、アイ
 オキシニルナトリウム塩、イパジン、イプコナゾール、イプフェンカルバゾン、イプロベ
 ンホス、イプロジオン、イプロバリカルブ、イプリミダム、イプスジェノール、イプセノ
 ール、IPSP、イサミドホス、イサゾホス、イソベンザン、イソカルバミド、イソカル
 ボホス、イソシル、イソドリン、イソフェンホス、イソフェンホスメチル、イソフェタミ
 ド、イソラン、イソメチオジン、イソノルロン、イソポリネート、イソプロカルブ、イソ
 プロパリン、イソプロチオラン、イソプロツロン、イソピラザム、イソピリモール、イソ
 チオエート、イソチアニル、イソウロン、イソバレジオン、イソキサベン、イソキサクロ
 ルトール、イソキサジフェン、イソキサジフェンエチル、イソキサフルトール、イソキサ
 ピリホップ、イソキサチオン、イベルメクチン、イゾパンホス (izopamfos)、
 ジャポニルア、ジャポトリン (japothrin) 類、ジャスモリンI、ジャスモリン
 II、ジャスモン酸、チアフアンションツォン (jiahuangchongzong)
 、チアチツェンシアオリン (jiajizengxiaolin)、チアシャンチュンツ
 ィ (jiaxiangjunzhi)、チエカオワン (jiecaowan)、チエカオ
 シ (jiecaoxi)、ヨードフェンホス、幼若ホルモンI、幼若ホルモンII、幼若
 ホルモンIII、カデスリン、カップビフェントリン、カップテフルトリン、カルブチレ
 ート、カレタザン、カレタザンカリウム塩、カスガマイシン、カスガマイシン塩酸塩、ケ
 チュンリン (kejulin)、ケレバン、ケトスピラドックス、ケトスピラドックス
 カリウム、カイネチン、キノブレン、クレソキシムメチル、クイカオシ (kuicaox
 i)、ラクトフェン、ラムダシハロトリン、ラチルア、ヒ酸鉛、レナシル、レピメクチン
 、レプトホス、リンデン、リネアチン、リニュロン、リリムホス、リトルア、ループルア
 、ルフェヌロン、ルヴティンチュンツィ (lvdingjunzhi)、ルヴシアンカオ
 リン (lvxiancaolin)、リチダチオン、MAA、マラチオン、マレイン酸ヒ
 ドラジド、マロノベン、マルトデキストリン、MAMA、マンカップー、マンゼブ、マン
 ジプロパミド、マンドストロビン、マンネブ、マトリン、マジドックス、MC PA、MC
 PA 2-エチルヘキシル、MC PAブトチル、MC PAブチル、MC PAジメチルアンモ
 ニウム塩、MC PAジオラミン、MC PAエチル、MC PAイソブチル、MC PAイソク
 チル、MC PAイソプロピル、MC PAメチル、MC PAオラミン、MC PAカリウム塩
 、MC PAナトリウム塩、MC PAチオエチル、MC PATロラミン、MCPB、MCP

10

20

30

40

50

Bエチル、MCPBメチル、MCPBナトリウム塩、メベニル、メカルバム、メカルビン
 ジド、メカルホン、メコプロップ、メコプロップ2-エチルヘキシル、メコプロップジメ
 チルアンモニウム塩、メコプロップジオラミン、メコプロップエタジル、メコプロップイ
 ソクチル、メコプロップメチル、メコプロップP、メコプロップP2-エチルヘキシル、
 メコプロップPジメチルアンモニウム塩、メコプロップPイソブチル、メコプロップカリ
 ウム塩、メコプロップPカリウム塩、メコプロップナトリウム塩、メコプロップトロラミ
 ン、メジメホルム (medimeform)、メジノテルブ、メジノテルブアセタート、
 メドルア、メフェナセット、メフェンピル、メフェンピルジエチル、メフルイジド、メフ
 ルイジドジオラミン、メフルイジドカリウム塩、メガトモ酸、メナゾン、メパニピリム、
 メペルフルトリン、メフェナート、メホスホラン、メピコート、メピコートクロリド、メ
 ピコート五ホウ酸塩、メプロニル、メブチルジノカップ、塩化第二水銀、酸化水銀、塩化
 第一水銀、メルホス、メソプラジン、メソスルフロソ、メソスルフロソメチル、メソトリ
 オン、メスルフェン、メスルフェンホス、メタフルミゾソ、メタラキシル、メタラキシル
 M、メタアルデヒド、カーバム、カーバムアンモニウム塩、メタミホップ、メタミトロン
 、カーバムカリウム塩、カーバムナトリウム塩、メタザクロール、メタゾスルフロソ、メ
 タゾキシロン、メトコナゾール、メテパ (metepa)、メトフルラゾソ、メタベンズ
 チアズロン、メタクリホス、メタルプロバリン、メタミドホス、メタスルホカルブ、メサ
 ゴール、メトフロキシサム、メチダチオン、メチオベンカルブ、メチオカルブ、メチオピリ
 スルフロソ (methiopyrisulfuron)、メチオテパ、メチオゾリン、メ
 チウロン、メトクロトホス、メトメトン、メソミル、メトプレソ、メトプロトリソ、メ
 キンブチル、メトトリソ、メトキシクロル、メトキシフェノジド、メトキシフェノソ、メ
 チルアホラート、臭化メチル、メチルオイゲノール、ヨウ化メチル、イソチオシアン酸メ
 チル、メチルアセトホス (methylacetophos)、メチルクロロホルム、メ
 チルダイムロン、塩化メチレン、安息香酸メチル水銀、メチル水銀ジシアンジアミド、メ
 チル水銀ペンタクロロフェノキシド、メチルネオデカナミド、メチラム、メトベンズロン
 、メトブロムロン、メトフルトリソ、メトラクロール、メトルカルブ、メトミノストロビ
 ン、メトスラム、メトキサジアゾソ、メトキシロン、メトラフェノソ、メトリブジン、メ
 トスルホバックス、メトスルフロソ、メトスルフロソメチル、メビンホス、メキサカルベ
 ート、ミエシュアン (mieshuan)、ミルベメクチソ、ミルベマイシソオキシム、
 ミルネブ、ミパホックス、マイレックス、MNAF、モクチュソ (moguchun)、
 モリネート、モロスルタップ (molosultap)、モソフルオロトリソ、モナリッ
 ド、モソソウロン、モノクロロ酢酸、モノクロトホス、モノリニュロン、モノスルフロソ
 、モノスルフロソエステル、モニュロン、モニュロンTCA、モソファムコート、モソフ
 アムコートジクロリド、モロキシジン、モロキシジン塩酸塩、モソホチオン、モソジド (m
 orzid)、モキシデクチソ、MSMA、ムスカルア、ミクロブタニル、ミクロゾリ
 ン、N- (エチル水銀) -p-トルエンスルホソアニリド、ナーバム、ナフタロホス、ナ
 レッド、ナフタレン、ナフタレンアセトアミド、無水ナフタル酸、ナフトキシ酢酸、ナブ
 ロアニリド、ナプロバミド、ナプロバミドM、ナブタラム、ナブタラムナトリウム塩、ナ
 タマイシソ、ネブロン、ニクロサミド、ニクロサミドオラミン、ニコスルフロソ、ニコチ
 ン、ニフルリジド、ニピラクロフェソ、ニテンピラム、ニチアジン、ニトラリソ、ニト
 ラピリソ、ニトリラカルブ、ニトロフェソ、ニトロフルオルフェソ、ニトロスチレン、ニ
 トロタル・イソプロピル、ノルボルミド、ノルフルラゾソ、ノルニコチソ、ノルロン、ノ
 バルロン、ノビフルムロン、ヌアリモール、OCH、オクタクロロジプロピルエーテル、
 オクチリソソ、オフラセ、オメトエート、オルベンカルブ、オルフルアルア、オルトジクロ
 ロベンゼソ、オルトスルファムロン、オリクタアルア、オリサストロビン、オリザリソ、オ
 ストール、オストラモン (ostramone)、オキシサベトリニル、オキサジアアルギル
 、オキサジアゾソ、オキサジキシル、オキサマート (oxamate)、オキサミル、オ
 キサピラゾソ、オキサピラゾソジモラミン (oxapyrazone-dimolamine)、オキサピラゾソナトリウム、オキサスルフロソ、オキサチアピプロリソ、オキサ
 ジクロメホソ、オキシソ銅、オキシソリニック酸、オキシソコナゾール、オキシソコナゾー

10

20

30

40

50

ルフマル酸塩、オキシカルボキシン、オキシジメトンメチル、オキシデプロホス、オキシ
 ジスルホトン、オキシフローフェン、オキシマトリン、オキシテトラサイクリン、オキシ
 テトラサイクリン塩酸塩、パクロブトラゾール、パイチョンティン (paichongding)、
 パラジクロロベンゼン、パラフルロン、パラコート、パラコートジクロリド、
 パラコートジメチル硫酸塩、パラチオン、パラチオンメチル、パリノール、ペブレート、
 ペフラゾエート、ペラルゴン酸、ペンコナゾール、ペンシクロン、ペンディメタリン、ペ
 ンフルフェン、ペンフルロン、ペノキススラム、ペンタクロロフェノール、ラウリン酸ペ
 ンタクロロフェニル、ペンタノクロール、ペンチオピラド、ペントメトリン (pentmethrin)、
 ペントキサゾン、ペルフルイドン、ペルメトリン、ペトキサミド、フェ
 ナマクリル、フェナジンオキシド、フェニソファミ、フェンカプトン、フェンメディファミ
 ム、フェンメディファミエチル、フェノベンズロン、フェノトリン、フェンプロキシド (phenproxide)、
 フェントエート、フェニルマーキュリ尿素 (phenylmercuriurea)、酢酸フェニル水銀、塩化フェニル水銀、ピロカテコールのフェ
 ニル水銀誘導体、硝酸フェニル水銀、サリチル酸フェニル水銀、ホレート、ホサセチム、
 ホサロン、ホスダイフェン、ホスホラン、ホスホランメチル、ホスグリシン (phosglycin)、
 ホスメット、ホスニクロル、ホスファミドン、ホスフィン、ホスホカルブ
 、リン、ホスチン (phostin)、ホキシム、ホキシムメチル、フタリド、ピカルブ
 トラゾクス、ピクロラム、ピクロラム 2-エチルヘキシル、ピクロラムイソクチル、ピク
 ロラムメチル、ピクロラムオラミン、ピクロラムカリウム、ピクロラムトリエチルアンモ
 ニウム塩、ピクロラムトリス (2-ヒドロキシプロピル) アンモニウム塩、ピコリナフェ
 ン、ピコキシストロビン、ピンドン、ピンドンナトリウム塩、ピノキサデン、ピペラリン
 、ピペロニルブトキシド、ピペロニルシクロネン、ピペロホス、ピプロクタニル (piproctanyl)、
 ピプロクタニル (piproctanyl bromide)、ピ
 プロタール (piprotal)、ピリメタホス、ピリミカーブ、ピリミオキシホス、ピ
 リミホスエチル、ピリミホスメチル、プリフェナート、ポリカルバメート、ポリオキシ
 ン類、ポリオキシソリム、ポリオキシソリム亜鉛、ポリチアラン (polythialan)、
 亜ヒ酸カリウム、アジ化カリウム、シアン酸カリウム、ジベレリン酸カリウム、ナフテン
 酸カリウム、多硫化カリウム、チオシアン酸カリウム、 α -ナフタレン酢酸カリウム、p
 p'-DDT、プラレトリン、プレコセン I、プレコセン II、プレコセン III、プレ
 チラクロール、プリミドホス、プリミスルフロソ、プリミスルフロソメチル、プロベナゾ
 ール、プロクロラズ、プロクロラズマンガン塩、プロクロノール、プロシアジン、プロシ
 ミドン、プロジアミン、プロフェノホス、プロフルアゾール、プロフルラリン、プロフル
 トリン、プロホキシジム、プログリナジン、プログリナジンエチル、プロヘキサジオン、
 プロヘキサジオンカルシウム塩、プロヒドロジャスモン、プロマシル、プロメカルブ、プ
 ロメトン、プロメトリン、プロムリット、プロバク・香[ル、プロバミジン、プロバミジ
 ン二塩酸塩、プロバモカルブ、プロバモカルブ塩酸塩、プロパニル、プロパホス、プロパ
 キザホップ、プロパルギット、プロパルトリン、プロバジン、プロペタムホス、プロファミ
 ム、プロピコナゾール、プロピネブ、プロピソクロール、プロボキスル、プロボキシカル
 バゾン、プロボキシカルバゾンナトリウム塩、プロピルイソム (propyl isome)
 、プロピリスルフロソ、プロピザミド、プロキナジド、プロスレル (prosule
 r)、プロスルファリン、プロスルホカルブ、プロスルフロソ、プロチダチオン、プロチ
 オカルブ、プロチオカルブ塩酸塩、プロチオコナゾール、プロチオホス、プロトエート、
 プロトリフェンブト、プロキサン、プロキサンナトリウム塩、プリナクロール、ピダノン
 、ピジフルメトフェン (pydiflumetofen)、ピフルブミド、ピメトロジン
 、ピラカルボリド、ピラクロホス、ピラクロニル、ピラクロストロビン、ピラフルフェン
 、ピラフルフェンエチル、ピラフルプロール、ピラマト (pyramat)、ピラメトス
 トロビン、ピラオキシストロビン、ピラスルホトール、ピラジフルミド、ピラゾリネート
 、ピラゾホス、ピラゾスルフロソ、ピラゾスルフロソエチル、ピラゾチオン、ピラゾキシ
 フェン、ピレスメトリン、ピレトリン I、ピレトリン II、ピレトリン類、ピリバムベン
 ズイソプロピル (pyribambenz-isopropyl)、ピリバムベンズプロ

ピル (pyri bambenz-propyl)、ピリベンカルブ、ピリベンゾキシム、
 ピリブチカルブ、ピリクロル、ピリダベン、ピリダフォル、ピリダリル、ピリダフェンチ
 オン、ピリデート、ピリジニトリル、ピリフェノックス、ピリフルキナゾン、ピリフタリ
 ド、ピリメタニル、ピリミジフェン、ピリミノバック、ピリミノバックメチル、ピリミノ
 ストロピン、ピリミスルファン、ピリミテート、ピリニュロン、ピリオフェノン、ピリプ
 ロール、ピリプロパノール (pyripropanol)、ピリプロキシフェン、ピリソ
 キサゾール、ピリチオバック、ピリチオバックナトリウム塩、ピロラン (pyrolan)
)、ピロキロン、ピロキサスルホン、ピロキススラム、ピロキシクロル、ピロキシフル、
 ニガキ、キナセトール、キナセトールスルフェート、キナルホス、キナルホスメチル、キ
 ナザミド、キンクロラック、キンコナゾール、キンメラック、キノクラミン、キノナミド
 、キノチオン、キノキシフェン、キンチオホス、キントゼン、キザロホップ、キザロホッ
 プエチル、キザロホップP、キザロホップPエチル、キザロホップPテフリル、チュウエ
 ンツイ (quwenzhi)、チュインティン (quyingding)、ラベンザゾー
 ル、ラフォキサニド、レベミド、レスカルア、レスメトリン、ロデタニル、ロドジャポニ
 ンIII、リバビリン、リムスルフロソ、ロテノン、リアニア、サフルフェナシル、サイ
 チュンマオ (saijunmao)、サイセントン (saisentong)、サリチル
 アニリド、サンギナリン、サントニン、シュラーダン、シリロシド、セブチラジン、セク
 ブメトン、セダキサソ、セラメクチン、セミアミトラズ、セミアミトラズクロリド、セサ
 メックス、セサモリン、セトキシジム、シュアンチアアノカオリン (shuangji
 ancaolin)、シデュロン、シグルール、シラフルオフエン、シラトラン、シリカ
 ゲル、シルチオファム、シマジソ、シメコナゾール、シメトン、シメトリン、シントフェ
 ン、SMA、エスメトラクロール、亜ヒ酸ナトリウム、アジ化ナトリウム、塩素酸ナトリ
 ウム、フッ化ナトリウム、フルオロ酢酸ナトリウム、ヘキサフルオロケイ酸ナトリウム、
 ナフテン酸ナトリウム、ナトリウムオルトフェニルフェノキシド、ナトリウムペンタクロ
 ロフェノキシド、多硫化ナトリウム、チオシアン酸ナトリウム、 α -ナフタレン酢酸ナト
 リウム、ソファミド、スピネトラム、スピノサド、スピロジクロフェン、スピロメシフェ
 ン、スピロテトラマト、スピロキサミン、ストレプトマイシン、ストレプトマイシンセス
 キ硫酸塩、ストリキニーネ、スルカトール、スルコフロソ、スルコフロソナトリウム、ス
 ルコトリオン、スルファレート、スルフェントラゾン、スルフィラム、スルフルラミド、
 スルホメツロン、スルホメツロンメチル、スルホスルフロソ、スルホテップ、スルホキサ
 フロル、スルホキシド、スルホキシム、イオウ、硫酸、フッ化スルフリル、スルグリカピ
 ン、スルプロホス、スルトロペン、スウェップ、タウフルバリネート、タブロン (tav
 ron)、タジムカルブ、TCA、TCAアンモニウム塩、TCAカルシウム塩、TCA
 エタジル、TCAマグネシウム塩、TCAナトリウム塩、TDE、テブコナゾール、テブ
 フェノジド、テブフェンピラド、テブフロキン、テブピリムホス、テブタム、テブチウロ
 ン、テクロフタラム、テクナゼン、テコラム (tecoram)、テフルベンズロン、テ
 フルトリン、テフリルトリオン、テムボトリオン、テムホス、テパ、TEPP、テブラロ
 キシジム、テラレトリン、ターバシル、テルブカルブ、テルブクロル、テルブホス、テル
 ブメトン、テルブチラジン、テルブトリン、テトシクラシス、テトラクロロエタン、テト
 ラクロルピンホス、テトラコナゾール、テトラジホン、テトラフルロン、テトラメスリン
 、テトラメチルフルトリン、テトラミン、テトラナクチン (tetranactin)、
 テトラニリプロール (tetraniliprole)、テトラスル、硫酸タリウム、テ
 ニルクロール、シータシペルメトリン、チアベンダゾール、チアクロプリド、チアジフル
 オール、チアメトキサム、チアプロニル (thiapronil)、チアザフルロン、チ
 アゾピル、チクロホス、チシオフエン、チジアジミン、チジアズロン、チエンカルバゾン
 、チエンカルバゾンメチル、チフェンスルフロソ、チフェンスルフロソメチル、チフルザ
 ミド、チオベンカルブ、チオカルボキシム、チオクロルフェンヒム、チオシクラム、チオ
 シクラム塩酸塩、チオシクラムシュウ酸塩、チオジアゾール銅、チオジカルブ、チオフ
 ノックス、チオフルオキシメート (thiofluoximate)、チオヘンパ (th
 iohempa)、チメロサル、チオメトン、チオナジン、チオフアネート、チオフ

10

20

30

40

50

ネートメチル、チオキノックス、チオセミカルバジド、チオスルタップ (thiosultap)、チオスルタップニアンモニウム塩、チオスルタップ (thiosultaperdisodium)、チオスルタップーナトリウム塩、チオテパ、チウラム、ツリンギエンシン、チアジニル、チアフエナシル、ティアオチエアン (tiaojiean)、チオカルバジル、チオクロリム、チオキサザフェン、チオキシミド、チルパート、トルクロホスメチル、トルフェンピラド、トルプロカルブ、トルピラレート、トリルフルアニド、酢酸トリル水銀、トブラメゾン、トラルコキシジム、トラロシトリン、トラロメトリン、トラロピリル、トランスフルトリン、トランスペルメトリン、トレタミン、トリアコンタノール、トリアジメホン、トリアジメノール、トリアファモン、トリアレート、トリアミホス、トリアペンテノール、トリアラテン、トリアリモール、トリアスルフロン、トリアザメート、トリアズブチル、トリアジフラム、トリアゾホス、トリアゾキシド、トリベニューロン、トリベニューロンメチル、トリブホス、酸化トリブチルスズ、トリカンバ、トリクラミド、トリクロロホン、トリクロロメタホス-3、トリクロロナート、トリクロピル、トリクロピルブトチル、トリクロピルエチル、トリクロピリカルブ、トリクロピルトリエチルアンモニウム塩、トリシクラゾール、トリデモルフ、トリジファン、トリエタジン、トリフェンモルフ、トリフェノホス、トリフロキシストロビン、トリフロキシスルフロン、トリフロキシスルフロンナトリウム塩、トリフルジモキサジン (trifludimoxazin)、トリフルメゾピリム、トリフルミゾール、トリフルムロン、トリフルラリン、トリフルスルフロン、トリフルスルフロンメチル、トリホップ、トリホップメチル、トリホブシム、トリホリン、トリヒドロキシトリアジン、トリメドルア、トリメタカルブ、トリメツロン (trimeturon)、トリネキサバック、トリネキサバックエチル、トリプレン、トリプロピندان、トリプトリド、トリタック (tritac)、トリチコナゾール、トリトスルフロン、トランクコール (trunc-call)、ウニコナゾール、ウニコナゾールP、アーバサイド (urbacide)、ウレデパ、バレレート (valerate)、バリダマイシン、バリフェナレート、バロン (valone)、バミドチオン、バンガード (vanguard)、バニリプロール、バーナレート、ピンクロゾリン、ワルファリン、ワルファリンカリウム、ワルファリンナトリウム、シャオチョンリウリン (xiaochongliulin)、シンチュンアン (xinjunan)、シウォチュンアン (xiwojunan)、XMC、キシラクロル、キシレノール類、キシリルカルブ、イシチン (yishijing)、ザリラミド、ゼアチン、ツェンシアオアン (zengxiaoan)、ゼータシベルメトリン、ナフテン酸亜鉛、リン化亜鉛、チアゾール亜鉛、ジネブ、ジラム、ゾラプロホス、ゾキサミド、ツォミファンロン (zuomihunaglong)、 α -クロロヒドリン、 α -エクジソン、 α -ムルチストリアチンおよび α -ナフタレン酢酸の1種若しくはそれ以上のような「別の化合物」と（1種の組成混合物または同時若しくは逐次適用でのような）組合せで使用しうる。さらなる情報については、alanwood.netに配置されている“COMPENDIUM OF PESTICIDE COMMON NAMES”を参照されたい。また、“THE PESTICIDE MANUAL”第15版、C D S Tomlinにより編、British Crop Production Councilによる著作権 2009年、またはその以前若しくはより最近の版も参照されたい。

10

20

30

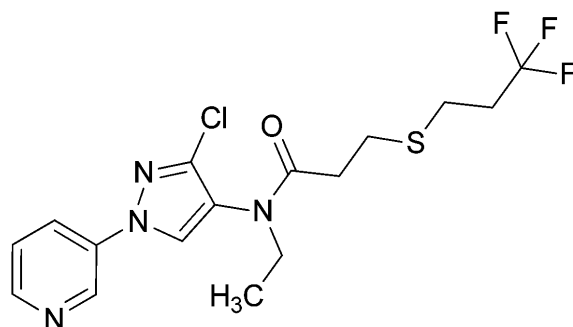
40

【0480】

別の態様において、式1の分子は、以下の化合物と（1種の組成混合物または同時若しくは逐次適用でのような）組合せでもまた使用しうる。

【0481】

【化 1 3 7】



10

【0 4 8 2】

別の態様において、式 1 の分子は 1 種若しくはそれ以上の生物殺虫農薬と（1 種の組成混合物または同時若しくは逐次適用でのような）組合せでもまた使用しうる。「生物殺虫農薬」という用語は、化学的殺虫農薬に類似の様式で適用される微生物の生物学的病害虫防除剤に使用される。普遍的にこれらは細菌性であるが、しかし、トリコデルマ属（*Trichoderma*）スピーシーズおよびアンペロミセス キスカリス（*Ampe l o m y c e s q u i s q u a l i s*）（ブドウうどんこ病の防除剤）を包含する真菌性防除剤の例もまた存在する。放線菌（*Bacillus subtilis*）は植物病原体を防除するのに使用される。雑草およびげっ歯類もまた微生物の剤で防除されている。1 つの公知の殺虫剤の例は、チョウ目、コウチュウ目およびハエ目の細菌性疾患、バチルス チューリングエンシス（*Bacillus thuringiensis*）である。それは他の生物体に対する影響をほとんど有しないため、それは合成殺虫農薬より環境に優しいと考えられている。生物学的殺虫剤は：昆虫病原性糸状菌（例えば黒きょう病菌（*Metarhizium anisopliae*））；昆虫病原性線虫（例えばステイネルネマ フェルチアエ（*Steinernema feltiae*））；および昆虫病原性ウイルス（例えばコドリंगा（*Cydia pomonella*）顆粒ウイルス）に基づく製品を包含する。

20

【0 4 8 3】

昆虫病原性生物体の他の例は、限定されるものでないが、バキュロウイルス、細菌および他の原核生物体、真菌、原生動物ならびに微孢子虫類を挙げることができる。生物学的に派生される殺虫剤は、限定されるものでないが、ロテノン、ベラトリジンならびに微生物毒素；昆虫耐性（*tolerant*）すなわち耐性（*resistant*）植物変種；および殺虫剤を産生する若しくは昆虫耐性特性を遺伝子操作された生物体に運搬するのいずれかのために組換え DNA 技術により改変されている生物体を挙げることができる。一態様において、式 1 の分子は、種子処理および土壌改良の領域で 1 種若しくはそれ以上の生物殺虫農薬とともに使用しうる。The Manual of Biocontrol Agents は、入手可能な生物学的殺虫剤（および他の生物学に基づく防除）製品の総説を与える。Copping L. G.（編）（2004）. The Manual of Biocontrol Agents（以前は the Biopesticide Manual）第 3 版。British Crop Production Council（BCPC）、英国サリー州ファーマム。

30

40

【0 4 8 4】

別の態様において、上の可能な組合せは多様な重量比で使用しうる。例えば、ある 2 成分混合物、別の化合物に対する式 1 の分子の重量比は約 100：1 から約 1：100 までであり得；別の例において、該重量比は約 50：1 ないし約 1：50 であり得；別の例において、該重量比は約 20：1 ないし約 20 につき 1 であり得；別の例において、該重量比は約 10：1 ないし約 1：10 であり得；別の例において、該重量比は約 5：1 ないし 1：5 であり得；別の例において、該重量比は約 3：1 ないし約 1：3 であり得；別の例において、該重量比は約 2：1 ないし約 1：2 であり得；そして最後の例において該重量比は約 1：1 であり得る。しかしながら、好ましくは、約 10：1 ないし約 1：10 未満

50

の重量比が好ましい。式 1 の 1 種若しくはそれ以上の分子および上の可能な組合せからの 1 種若しくはそれ以上の他の化合物を含んでなる 3 若しくは 4 成分の混合物を使用することもまたときに好ましい。

【 0 4 8 5 】

【表 2】

表A

番号	別の化合物に対する式 1 の分子の 重量比の範囲
1	100:1 ないし 1:100
2	50:1 ないし 1:50
3	20:1 ないし 1:20
4	10:1 ないし 1:10
5	5:1 ないし 1:5
6	3:1 ないし 1:3
7	2:1 ないし 1:2
8	1:1

10

20

【 0 4 8 6 】

共力的殺虫農薬組成物であることが予見される別の化合物に対する式 1 のある分子若しくはそのいずれかの農業で許容できる塩の重量比は、 $X : Y$ として描くことができ；式中 X は式 1 のある分子若しくはそのいずれかの農業で許容できる塩の重量部分であり、および Y は別の化合物の重量部分である。 X の重量部分の数値範囲は、表 B に図で示されたとおり、 $0 < X \leq 100$ であり、そして Y の重量部分は $0 < Y \leq 100$ である。制限しない例として、別の化合物に対する該殺虫農薬の重量比は約 20 : 1 でありうる。

30

【 0 4 8 7 】

【表 3】

表B

別の化合物 (Y) 重量部分	100	X,Y		X,Y			X,Y			
	50	X,Y	X,Y	X,Y			X,Y	X,Y		
	20	X,Y		X,Y	X,Y		X,Y		X,Y	
	15	X,Y	X,Y					X,Y	X,Y	X,Y
	10	X,Y		X,Y						
	5	X,Y	X,Y	X,Y				X,Y		
	3	X,Y	X,Y		X,Y	X,Y		X,Y	X,Y	X,Y
	2	X,Y		X,Y	X,Y		X,Y		X,Y	
	1	X,Y	X,Y	X,Y	X,Y	X,Y	X,Y	X,Y	X,Y	X,Y
		1	2	3	5	10	15	20	50	100

式1の分子

(X) 重量部分

【0488】

共力的殺虫農薬組成物であることが予見される別の化合物に対する式1のある分子若しくはそのいずれかの農業で許容できる塩の重量比の範囲は、 $X_1 : Y_1$ ないし $X_2 : Y_2$ として描くことができ、式中XおよびYは上のおり定義される。特定の一態様において、重量比の範囲は、 $X_1 > Y_1$ かつ $X_2 < Y_2$ である $X_1 : Y_1$ ないし $X_2 : Y_2$ でありうる。制限しない例として、別の化合物に対する式1のある分子若しくはそのいずれかの農業で許容できる塩の重量比の範囲は、約3 : 1と約1 : 3の間でありうる。いくつかの態様において、重量比の範囲は、 $X_1 > Y_1$ かつ $X_2 > Y_2$ である $X_1 : Y_1$ ないし $X_2 : Y_2$ でありうる。制限しない例として、別の化合物に対する式1のある分子若しくはそのいずれかの農業で許容できる塩の範囲は、約15 : 1と約3 : 1の間でありうる。さらなる態様において、重量比の範囲は、 $X_1 < Y_1$ かつ $X_2 < Y_2$ である $X_1 : Y_1$ ないし $X_2 : Y_2$ でありうる。制限しない例として、別の化合物に対する式1のある分子若しくはそのいずれかの農業で許容できる塩の重量比の範囲は、約1 : 3と約1 : 20の間でありうる。

【0489】

製剤

殺虫農薬はその純粋な形態で適用にまれに適する。殺虫農薬を必要とされる濃度でかつ適切な形態で使用して適用、取り扱い、輸送、貯蔵の容易さおよび最大殺虫農薬活性を可能にすることができるように、他の物質を添加することが通常必要である。かように、殺虫農薬は、例えばベイト剤 (baits)、CE剤 (concentrated emulsions)、粉剤、乳剤 (emulsifiable concentrates)、燻蒸剤、ゲル剤、粒剤、微小被包化、種子処理、SC剤 (suspension concentrates)、SE剤 (suspoemulsions)、錠剤、水溶性液体、水和性顆粒剤若しくはドライフロアブル剤、水和剤 (wetttable powder s)、および超低容量溶液に調合される。製剤の種類についてのさらなる情報については、CropLife Internationalによる“Catalogue of

Pesticide Formulation Types and International Coding System” 技術モノグラフ第2号、第5版（2002）を参照されたい。

【0490】

殺虫農薬は、こうした殺虫農薬の濃縮製剤から調製される水性懸濁液若しくは乳剤として最もしばしば適用される。こうした水溶解性、水に懸濁可能若しくは乳化可能な製剤は、水和剤若しくは水和性顆粒剤として通常知られる固形物、または乳剤として通常知られる液体、あるいは水性懸濁液のいずれでもある。水和性顆粒剤を形成するよう固めることができる水和剤は、殺虫農薬、担体および界面活性剤の緊密な混合物を含んでなる。殺虫農薬の濃度は通常約10%から約90重量%までである。担体は、通常、アタパルジャイト粘土、モントモリロナイト粘土、ケイ藻土若しくは精製ケイ酸塩のなかから選択される。水和剤の約0.5%から約10%までを含んでなる効果的な界面活性剤は、スルホン酸化リグニン、縮合ナフタレンスルホネート、ナフタレンスルホネート、アルキルベンゼンスルホネート、アルキルサルフェート、およびアルキルフェノールのエチレンオキシド付加物のような非イオン性界面活性剤のなかに見出される。

10

【0491】

殺虫農薬の乳剤は、水と混合可能な溶媒若しくは水と混合不可能な有機溶媒および乳化剤の混合物のいずれかである担体に溶解された液体1リットルあたり約50から約500グラムまでのような便宜的濃度の殺虫農薬を含んでなる。有用な有機溶媒は、芳香族物質（aromatics）、とりわけキシレン、および石油画分、とりわけ、重質芳香族ナフサのような石油の高沸点ナフタレンおよびオレフィン部分を包含する。ロジン誘導体を包含するテルペン溶媒、シクロヘキサノンのような脂肪族ケトン、および2-エトキシエタノールのような複合アルコールのような他の有機溶媒もまた使用しうる。乳剤の適する乳化剤は慣習的な陰イオン性および非イオン性界面活性剤から選択される。

20

【0492】

水性懸濁液は、約5%から約50重量%までの範囲の濃度で水性担体に分散された水不溶性殺虫農薬の懸濁液を含んでなる。懸濁液は、殺虫農薬を微細に粉碎すること、ならびにそれを水および界面活性剤から構成される担体に活発に混合することにより製造する。無機塩および合成若しくは天然のガムのような成分もまた、水性担体の密度および粘度を増大させるために添加してもよい。水性混合物を調製することおよびサンドミル、ボールミル若しくはピストン型ホモジェナイザーのような器具中でそれを均質化することにより、殺虫農薬を同時に粉碎および混合することがしばしば最も効果的である。

30

【0493】

殺虫農薬は土壌への適用にとりわけ有用である顆粒状組成物としてもまた適用しうる。顆粒状組成物は通常、粘土若しくは類似の物質を含んでなる担体に分散された約0.5%から約10重量%までの殺虫農薬を含有する。こうした組成物は通常、殺虫農薬を適する溶媒に溶解すること、および約0.5から約3mmまでの範囲の適切な粒子径に前成形されている顆粒状担体にそれを塗布することにより製造する。こうした組成物は、担体および化合物のドウ若しくはペーストを作成すること、ならびに粉碎および乾燥して所望の顆粒粒子径を得ることによってもまた調合しうる。

40

【0494】

殺虫農薬を含有する粉剤は、粉末の形態の殺虫農薬をカオリン粘土、粉碎火山岩などのような適する微粉農業担体と緊密に混合することにより製造する。粉剤は適しては約1%から約10%までの殺虫農薬を含有し得る。それらは種子粉衣として若しくはダストブローワー機械を用いる茎葉散布として適用し得る。

【0495】

農業化学で広範に使用されている適切な有機溶媒、通常は噴霧油のような石油中の溶液の形態の殺虫農薬を適用することが等しく实际的である。

【0496】

殺虫農薬はエアゾル組成物の形態でもまた適用し得る。こうした組成物中で、殺虫農薬

50

は圧力を発生させる噴射剤混合物である担体に溶解若しくは分散されている。エアゾル組成物は、該混合物がそれから霧化バルブを通して分注される容器に包装される。

【0497】

殺虫農薬ベイト剤は殺虫農薬を食物若しくは誘引物質または双方と混合する場合に形成される。病害虫が該ベイト剤を食べる場合にそれらは該殺虫農薬もまた消費する。ベイト剤は顆粒、ゲル、流動可能な粉末、液体若しくは固体の形態をとりうる。それらは病害虫の潜伏場所で使用し得る。

【0498】

燻蒸剤は、比較的高い蒸気圧を有しかつこれゆえに土壌若しくは閉鎖空間中で病害虫を殺すのに十分な濃度の気体として存在し得る殺虫農薬である。燻蒸剤の毒性はその濃度および曝露時間に比例する。それらは拡散のための良好な能力を特徴とし、そして病害虫の呼吸器系に浸透するか若しくは病害虫のクチクラを通して吸収されることにより作用する。燻蒸剤は、ガスを通さないシートの下、ガス封止室若しくは建物の中、または特殊なチャンパー中で、貯蔵食品害虫を防除するために適用される。

【0499】

殺虫農薬は、殺虫農薬の粒子若しくは液滴を多様な種類のプラスチックポリマー中に懸濁することにより微小被包化し得る。ポリマーの化学を変えることにより、若しくは処理において因子を変えることにより、多様な大きさ、溶解性、壁厚および浸透性の程度のマイクロカプセルを形成し得る。これらの因子は中の有効成分が放出される速度を左右し、それは順に製品の残余の性能、作用の速度およびにおいに影響を及ぼす。

【0500】

油剤濃縮物は、溶液中に殺虫農薬を保持することができる溶媒に殺虫農薬を溶解することにより作成する。殺虫農薬の油剤は、通常、殺虫殺虫農薬作用を有する溶媒それら自身、および殺虫農薬の取り込みの速度を増大させる外皮の蠟性被覆の溶解により、他の製剤より迅速な病害虫の消滅および死滅を提供する。油剤の他の利点は、より良好な貯蔵安定性、隙間のより良好な浸透および脂性表面へのより良好な付着を包含する。

【0501】

別の態様はEW剤であり、ここで、該エマルションは、それぞれ層状の液晶コーティングを提供されかつ水層に分散されている油性小球を含んでなり、各油性小球は農業で活性である最低1種の化合物を含んでなり、かつ：（1）最低1種の非イオン性親油性界面活性剤、（2）最低1種の非イオン性親水性界面活性剤、および（3）最低1種のイオン性界面活性剤、を含んでなるモノラメラ若しくはオリグラメラの層で個別に被覆されており、該小球は800ナノメートル未満の平均粒子径を有する。該態様に関するさらなる情報は、特許出願番号第11／495,228号を有する2007年2月1日公開の米国特許公開第20070027034号明細書に開示されている。使用の容易さのため、本態様を「O I W E」と称することができる。

【0502】

さらなる情報については、D. Dentによる“ Insect Pest Management ”第2版、版権 CAB International (2000)を参照されたい。加えて、より詳細な情報については、Arnold Mallisによる“ Handbook of Pest Control—The Behavior, Life History, and Control of Household Pests ”、第9版、G I E Media Incによる版権 2004年を参照されたい。

【0503】

他の製剤成分

一般に、式1に開示される分子が製剤中で使用される場合、こうした製剤は他の成分もまた含有し得る。これらの成分は、限定されるものでないが（これは網羅的でなくかつ相互に排除しない一覧である）湿潤剤、展着剤、粘着剤、浸透剤、緩衝剤、封鎖剤、ドリフト低減剤、適合性剤、消泡剤、清浄剤および乳化剤を挙げることができる。数種の成分を直ちに記述する。

10

20

30

40

50

【0504】

湿潤剤は、液体に添加される場合に、液体とそれが広がっている表面の間の界面張力を低下させることにより液体の広がりすなわち浸透力を増大させる物質である。湿潤剤は殺虫農薬製剤で2種の主要な機能、すなわち、加工および製造の間に水中の粉末の湿潤の速度を増大させて可溶性液体の濃縮物若しくはSC剤を作成するため；ならびに、噴霧タンク中での製品の水との混合の間に、水和剤の湿潤時間を短縮しかつ水和性顆粒剤中への水の浸透を改良するために使用される。水和剤、SC剤および水和性顆粒剤の製剤で 사용되는湿潤剤の例は：ラウリル硫酸ナトリウム；ジオクチルスルホコハク酸ナトリウム；アルキルフェノールエトキシレート；および脂肪アルコールエトキシレートである。

【0505】

分散助剤は、粒子表面上に吸着しそして粒子の分散の状態を保存するのを助けかつそれらが再凝集することを予防する物質である。分散助剤は、製造の間に分散および懸濁を促進するため、ならびに粒子が噴霧タンク中で水に再分散することを確実にするために殺虫農薬製剤に添加される。それらは水和剤、SC剤および水和性顆粒中で広範に使用されている。分散助剤として使用される界面活性剤は、粒子表面上に強く吸着する能力を有しかつ粒子の再凝集に対する荷電若しくは立体障壁を提供する。最も普遍的に使用される界面活性剤は陰イオン性、非イオン性、若しくは該2種類の混合物である。水和剤の製剤について、最も普遍的な分散助剤はリグノスルホン酸ナトリウムである。SC剤について、非常に良好な吸着および安定化は、ナフタレンスルホン酸ナトリウムホルムアルデヒド縮合物のような多価電解質を使用して得られる。トリスチリルフェノールエトキシレートホスフェートエステルもまた使用される。アルキルアリアルエチレンオキシド縮合物およびEO-POブロックコポリマーのような非イオン性物（non-ionic）は、ときに、SC剤のための分散助剤として陰イオン性物（anionic）と組合せられる。近年、新たな種類の非常に高分子量のポリマー界面活性剤が分散助剤として開発された。これらは非常に長い疎水性「バックボーン」、および「クシ」界面活性剤の「歯」を形成する多数のエチレンオキシド鎖を有する。これら高分子量ポリマーは、疎水性バックボーンが粒子表面上に多くのアンカリング点を有するため、SC剤に非常に良好な長期安定性を与えることができる。殺虫農薬製剤で 사용되는分散助剤の例は：リグノスルホン酸ナトリウム；ナフタレンスルホン酸ナトリウムホルムアルデヒド縮合物；トリスチリルフェノールエトキシレートホスフェートエステル；脂肪アルコールエトキシレート；アルキルエトキシレート；EO-POブロックコポリマー；およびグラフトコポリマーである。

【0506】

乳化剤は、1液層の液滴の別の液層中の懸濁剤を安定化する物質である。乳化剤なしでは該2種の液体は2個の混合不可能な液層に分離するであろう。最も普遍的に使用される乳化剤ブレンドは、12若しくはそれ以上のエチレンオキシド単位をもつアルキルフェノール若しくは脂肪アルコールおよびドデシルベンゼンスルホン酸の油溶性カルシウム塩を含有する。8から18までの親水-親油バランス（「HLB」）値の範囲が、通常、良好な安定なエマルジョンを提供することができる。エマルジョンの安定性はときに、少量のEO-POブロックコポリマー界面活性剤の添加により改良することができる。

【0507】

可溶化剤は、臨界ミセル濃度より上の濃度で水中でミセルを形成することができる界面活性剤である。ミセルはその後、ミセルの疎水性部分の内側の水不溶性物質を溶解若しくは可溶化することが可能である。可溶化に通常使用される界面活性剤の種類は、非イオン性物、ソルビタンモノオレエート、ソルビタンモノオレエートエトキシレート、およびメチルオレエートエステルである。

【0508】

界面活性剤は、ときに、標的に対する殺虫農薬の生物学的性能を改良するための噴霧タンク混合物への補助物質として、単独でまたは鉱物若しくは植物油のような他の添加物とともにのいずれでも使用される。生物増強に使用される界面活性剤の種類は一般に殺虫農薬の性質および作用様式に依存する。しかしながら、それらはしばしば：アルキルエトキ

10

20

30

40

50

シレート；直鎖脂肪アルコールエトキシレート；脂肪アミンエトキシレートのような非イオン性物である。

【0509】

農業製剤中の担体若しくは希釈剤は、必要とされる濃度の製品を生じるように殺虫農薬に添加される物質である。担体は通常高吸収能力をもつ物質である一方、希釈剤は通常低吸収能力をもつ物質である。担体および希釈剤は、粉剤、水和剤、粒剤および水和性顆粒剤の製剤で使用される。

【0510】

有機溶媒は、主に、乳剤、EW剤、SE剤の製剤、および超低容量製剤、ならびにより小さい程度まで顆粒状製剤で使用される。ときに溶媒の混合物が使用される。溶媒の第一の主な群はケロセン若しくは精製パラフィンのような脂肪パラフィン油である。第二の主な群（および最も普遍的なもの）は、キシレンならびにC9およびC10芳香族溶媒のより高分子量の画分のような芳香族溶媒を含んでなる。塩素化炭化水素は、製剤が水中に乳化される場合に殺虫農薬の結晶化を予防するための補助溶媒として有用である。アルコールが溶解力を増大するための補助溶媒としてときに使用される。他の溶媒は、植物油、種子油、ならびに植物および種子油のエステルを包含しうる。

10

【0511】

増粘剤若しくはゲル化剤は、主に、SC剤、エマルジョン剤およびSE剤の製剤中で、液体のレオロジーすなわち流動特性を改変するため、ならびに分散された粒子若しくは液滴の分離および沈殿を予防するために使用される。増粘剤、ゲル化剤および沈殿防止剤は、一般に2種のカテゴリー、すなわち水不溶性微粒子および水溶性ポリマーに入る。粘土およびシリカを使用してSC剤の製剤を製造することが可能である。これらの種類の物質の例は、限定されるものでないが、モントモリロナイト、ベントナイト、ケイ酸アルミニウムマグネシウムおよびアタパルジャイトを挙げることができる。水溶性多糖が増粘ゲル化剤として長年使用されている。最も普遍的に使用される多糖の種類は、種子および海藻の天然の抽出物であるか、若しくはセルロースの合成誘導体である。これらの種類の物質の例は、限定されるものでないが、グアールガム；ローカストビーニングガム；カラギーナン；アルギン酸塩；メチルセルロース；カルボキシメチルセルロースナトリウム（SCMC）；ヒドロキシエチルセルロース（HEC）を挙げることができる。他の種類の沈殿防止剤は、化工デンプン、ポリアクリレート、ポリビニルアルコールおよびポリエチレンオキシドに基づく。別の良好な沈殿防止剤はキサントガムである。

20

30

【0512】

微生物は調合された製品の損傷を引き起こし得る。従って、保存剤を、それらの影響を排除若しくは低減するのに使用する。こうした剤の例は、限定されるものでないが：プロピオン酸およびそのナトリウム塩；ソルビン酸およびそのナトリウム若しくはカリウム塩；安息香酸およびそのナトリウム塩；p-ヒドロキシ安息香酸ナトリウム塩；p-ヒドロキシ安息香酸メチル；ならびに1，2-ベンズイソチアゾリン-3-オン（BIT）を挙げることができる。

【0513】

界面活性剤の存在は、しばしば、水に基づく製剤が製造および噴霧タンクによる適用での混合操作の間に泡立つことを引き起こす。泡立つ傾向を減少させるため、消泡剤を、しばしば製造段階の間若しくは瓶に充填する前のいずれかに添加する。一般に2種類の消泡剤すなわちシリコーンおよびシリコーン以外が存在する。シリコーンは通常ジメチルポリシロキサンの水性乳剤である一方、シリコーン以外の消泡剤は、オクタノールおよびノナノールのような水不溶性の油若しくはシリカである。双方の場合で、消泡剤の機能は空気と水の界面から界面活性剤を追い出すことである。

40

【0514】

「環境に優しい」剤（例えば補助物質、界面活性剤、溶媒）は、作物保護製剤の全体的環境フットプリントを低減し得る。環境に優しい剤は、生物分解性であり、そして一般に天然のかつ／若しくは持続可能な供給源、例えば植物および動物供給源由来である。特定

50

の例は：植物油、種子油、およびそれらのエステル、またアルコキシル化アルキルポリグルコシドである。

【0515】

さらなる情報については、D. A. Knowlesにより編集された“Chemistry and Technology of Agrochemical Formulations”、Kluwer Academic Publishersによる版權1998年を参照されたい。A. S. Perry、I. Yamamoto、I. IshayaおよびR. Perryによる“Insecticides in Agriculture and Environment—Retrospects and Prospects”、Springer-Verlagによる版權1998年もまた参照されたい。

10

【0516】

病害虫

全般として、式1の分子は、病害虫、例えば甲虫、ハサミムシ、ゴキブリ、ハエ。アブラムシ、カイガラムシ、コナジラミ、ヨコバイ、アリ、ハチ、シロアリ、ガ、チョウ、シラミ、直翅類昆虫（grasshoppers）、飛蝗（locusts）、コオロギ、ノミ、アザミウマ、シミ、ダニ、マダニ、線虫類およびコムカデ類を防除するのに使用しうる。

【0517】

別の態様において、式1の分子は線形動物門および／若しくは節足動物門の病害虫を防除するのに使用しうる。

20

【0518】

別の態様において、式1の分子は銚角亜門、多足亜門および／若しくは六脚亜門の病害虫を防除するのに使用しうる。

【0519】

別の態様において、式1の分子はクモ綱、コムカデ綱および／若しくは昆虫綱の病害虫を防除するのに使用しうる。

【0520】

別の態様において、式1の分子はシラミ目の病害虫を防除するのに使用しうる。特定の属の網羅的でない一覧は、限定されるものでないが、ブタジラミ属（Haematopinus）スピーシーズ、ホプロプレウラ属（Hoplopleura）スピーシーズ、ケモノホソジラミ属（Linognathus）スピーシーズ、シラミ属（Pediculus）スピーシーズおよびイエネズミジラミ属（Polyplax）スピーシーズを挙げることができる。特定の種の網羅的でない一覧は、限定されるものでないがウマジラミ（Haematopinus asini）、ブタジラミ（Haematopinus suis）、イヌジラミ（Linognathus setosus）、ヒツジジラミ（Linognathus ovillus）、アタマジラミ（Pediculus humanus capitis）、コロモジラミ（Pediculus humanus humanus）およびケジラミ（Pthirus pubis）を挙げることができる。

30

【0521】

別の態様において、式1の分子はコウチュウ目の病害虫を防除するのに使用しうる。特定の属の網羅的でない一覧は、限定されるものでないが、ミツバマメゾウムシ属（Acanthoscelides）スピーシーズ、アグリオテス属（Agriotes）スピーシーズ、アントノムス属（Anthonomus）スピーシーズ、ホソクチゾウムシ属（Apion）スピーシーズ、カンショコガネ属（Apogonia）スピーシーズ、ウリハムシ属（Aulacophora）スピーシーズ、ブルクス属（Bruchus）スピーシーズ、セロステルナ属（Cerosterna）スピーシーズ、セロトマ属（Cerotoma）スピーシーズ、サルゾウムシ属（Ceutorhynchus）スピーシーズ、カエトクネマ属（Chaetocnema）スピーシーズ、コラスピス属（Colaspis）スピーシーズ、クテニセラ属（Ctenicera）スピーシーズ、シギゾウ

40

50

ムシ属 (Curculio) スピーシーズ、コガネカブト属 (Cyclocephala) スピーシーズ、ディアブロティカ属 (Diabrotica) スピーシーズ、タコゾウムシ属 (Hypera) スピーシーズ、イプス属 (Ips) スピーシーズ、リクツス属 (Lycтус) スピーシーズ、メガスケリス属 (Megascelis) スピーシーズ、チビケシキスイ属 (Meligethes) スピーシーズ、オチオリンクス属 (Otiorrhynchus) スピーシーズ、パントモルス属 (Pantomorus) スピーシーズ、フィロファガ属 (Phyllophaga) スピーシーズ、キスジノミハムシ属 (Phyllotreta) スピーシーズ、リゾトログス属 (Rhizotrogus) スピーシーズ、リンキテス属 (Rhynchites) スピーシーズ、リンコフォルス属 (Rhynchophorus) スピーシーズ、スコリツス属 (Scolytus) スピーシーズ、スフェノフォルス属 (Sphenophorus) スピーシーズ、コクゾウムシ属 (Sitophilus) スピーシーズおよびトリボリウム属 (Tribolium) スピーシーズを挙げることができる。特定の種の網羅的でない一覧は、限定されるものではないが、インゲンマメゾウムシ (Acanthoscelides obtectus)、アオナガタマムシ (Agrius planipennis)、ツヤハダゴマダラカミキリ (Anoplophora glabripennis)、ワタミハナゾウムシ (Anthonomus grandis)、アタエニウス スプレツルス (Ataenius spretulus)、アトマリア リネアリス (Atomaria linearis)、ボチノデレス プンクチベントリス (Bothynoderes punctiventris)、エンドウゾウムシ (Bruchus pisorum)、ヨツモンマメゾウムシ (Callosobruchus maculatus)、クリヤケシキスイ (Carpophilus hemipterus)、カッシダ ビッタタ (Cassida vittata)、セロトマ トリフルカタ (Cerotoma trifurcata)、キャベツサヤゾウムシ (Ceutorhynchus assimilis)、セウトリンクス ナピ (Ceutorhynchus napi)、コノデルス スカラリス (Conoderus scalaris)、コノデルス スチグモス (Conoderus stigmatus)、スモモゾウムシ (Conotrachelus nenuphar)、コチニス ニチダ (Cotinis nitida)、クリオセリス アスパラギ (Crioceris asparagi)、サビカクムネチビヒラタムシ (Cryptolestes ferrugineus)、カクムネチビヒラタムシ (Cryptolestes pusillus)、トルコカクムネチビヒラタムシ (Cryptolestes turcicus)、シリンドロコプツルス アドスペルス (Cylindrocopturus adspersus)、デポラウス マルギナツス (Deporaus marginatus)、オビカツオブシムシ (Dermestes lardarius)、ハラジロカツオブシムシ (Dermestes maculatus)、インゲンテントウ (Epilachna varivestis)、ファウスチヌス クバエ (Faustinus cubae)、ヒロビウス パレス (Hyllobius pales)、アルファルフアタコゾウムシ (Hypera postica)、コーヒーミノキクイムシ (Hypothenemus hampei)、タバコシバンムシ (Lasioderma serricornis)、コロラドハムシ (Leptinotarsa decemlineata)、リオゲニス フスクス (Liogenys fuscus)、リオゲニス スツラリス (Liogenys suturalis)、イネミズゾウムシ (Lissorhoptus oryzophilus)、マエコラスピス ジョリベチ (Maecolaspis joliveti)、メラノツス コムニス (Melanotus communis)、メリゲテス アエネウス (Meligethes aeneus)、ヨーロッパコフキコガネ (Melolontha melolontha)、オベレア ブレビス (Oberia brevis)、オベレア リネアリス (Oberia linearis)、サイカブト (Oryctes rhinoceros)、オオメノコギリヒラタムシ (Oryzaephilus mercator)、ノコギリヒラタムシ (Oryzaephilus surinamensis)

s)、クビアカクビホソハムシ (Oulema melanopus)、イネクビホソハムシ (Oulema oryzae)、フィロファガ クヤバナ (Phyllophaga cuyabana)、マメコガネ (Popillia japonica)、オオコナナガシנקイ (Prostephanus truncatus)、コナナガシנקイムシ (Rhyzopertha dominica)、アカアシチビコフキゾウムシ (Sitona lineatus)、グラナリアコクゾウムシ (Sitophilus granarius)、コクゾウムシ (Sitophilus oryzae)、コクゾウムシ (Sitophilus zeamais)、ジンサンシバンムシ (Stegobium paniceum)、コクヌストモドキ (Tribolium castaneum)、ヒラタコクヌストモドキ (Tribolium confusum)、キマダラカツオブシムシ (Trogoderma variabile) およびザブルス テネブリオイデス (Zabrus tenebrioides) を挙げることができる。

10

【0522】

別の態様において、式1の分子はハサミムシ目の病害虫を防除するのに使用しうる。

【0523】

別の態様において、式1の分子はゴキブリ目の病害虫を防除するのに使用しうる。特定の種の網羅的でない一覧は、限定されるものでないがチャバネゴキブリ (Blattella germanica)、トウヨウゴキブリ (Blatta orientalis)、パルコブラッタ ペンシルバニカ (Parcoblatta pennsylvanica)、ワモンゴキブリ (Periplaneta americana)、コワモンゴキブリ (Periplaneta australasiae)、トビイロゴキブリ (Periplaneta brunnea)、クロゴキブリ (Periplaneta fuliginosa)、オガサワラゴキブリ (Pycnoscelus surinamensis) およびチャオビゴキブリ (Supella longipalpa) を挙げることができる。

20

【0524】

別の態様において、式1の分子はハエ目の病害虫を防除するのに使用しうる。特定の属の網羅的でない一覧は、限定されるものでないがヤブカ属 (Aedes) スピーシーズ、アグロミザ属 (Agromyza) スピーシーズ、アナストレファ属 (Anastrepha) スピーシーズ、ハマダラカ属 (Anopheles) スピーシーズ、バクトロセラ属 (Bactrocera) スピーシーズ、セラチチス属 (Ceratitis) スピーシーズ、メクラアブ属 (Chrysops) スピーシーズ、コクリオミイア属 (Cochliomyia) スピーシーズ、コンタリニア属 (Contarinia) スピーシーズ、イエカ属 (Culex) スピーシーズ、ダシネウラ属 (Dasineura) スピーシーズ、デリア属 (Delia) スピーシーズ、ショウジョウバエ属 (Drosophila) スピーシーズ、ヒメイエバエ属 (Fannia) スピーシーズ、ヒレミイア属 (Hydemyia) スピーシーズ、リリオミザ属 (Liriomyza) スピーシーズ、イエバエ属 (Musca) スピーシーズ、フォルビア属 (Phorbia) スピーシーズ、アブ属 (Tabanus) スピーシーズおよびガガンボ属 (Tipula) スピーシーズを挙げることができる。特定の種の網羅的でない一覧は、限定されるものでないが、ムラサキウマゴヤシハモグリムシ (Agromyza frontella)、カリブミバエ (Anastrepha suspensa)、メキシコミバエ (Anastrepha ludens)、アナストレファ オブリカ (Anastrepha obliqua)、ウリミバエ (Bactrocera cucurbitae)、ミカンコミバエ (Bactrocera dorsalis)、バクトロセラ インバデンス (Bactrocera invadens)、モモミバエ (Bactrocera zonata)、チチュウカイミバエ (Ceratitis capitata)、ダイコンタマバエ (Dasineura brassicae)、タネバエ (Delia platura)、ヒメイエバエ (Fannia canicularis)、コブアシヒメイエバエ (Fannia scalaris)、ウマバエ (Gasterophilus intestinalis)

30

40

50

alis)、グラシリア ペルセアエ (Gracillia perseae)、ノサシバエ (Haematobia irritans)、キスジウシバエ (Hypoderma lineatum)、アブラナハモグリバエ (Liriomyza brassicae)、ヒツジシラミバエ (Melophagus ovinus)、ムスカ アウツムナリス (Musca autumnalis)、イエバエ (Musca domestica)、ヒツジバエ (Oestrus ovis)、オスシネラ フリット (Oscinella frit)、テンサイハモグリバエ (Pegomya betae)、ニンジンサビバエ (Psila rosae)、ヨーロッパオウトウミバエ (Rhagoletis cerasi)、リンゴミバエ (Rhagoletis pomonella)、ラゴレチス メンダックス (Rhagoletis mendax)、ムギアカタマバエ (Sitodiplosis mosellana) およびサシバエ (Stomoxys calcitrans) を挙げるができる。

【0525】

別の態様において、式1の分子はカメムシ目の病害虫を防除するのに使用しうる。特定の属の網羅的でない一覧は、限定されるものでないが、アデルゲス属 (Adelges) スピーシーズ、アウラカスピス属 (Aulacaspis) スピーシーズ、アフロフォラ属 (Aphrophora) スピーシーズ、ワタアブラムシ属 (Aphis) スピーシーズ、ベミシア属 (Bemisia) スピーシーズ、ロウムシ属 (Ceroplastes) スピーシーズ、キオナスピス属 (Chionaspis) スピーシーズ、トビイロマルカイガラムシ属 (Chrysomphalus) スピーシーズ、カタカイガラムシ属 (Coccus) スピーシーズ、ミドリヒメヨコバイ属 (Empoasca) スピーシーズ、レピドサフェス属 (Lepidosaphes) スピーシーズ、ラギノトムス属 (Lagynotomus) スピーシーズ、マキバカスミカメ属 (Lygus) スピーシーズ、マクロシフム属 (Macrosiphum) スピーシーズ、ツマグロヨコバイ属 (Nephotettix) スピーシーズ、ネザラ属 (Nezara) スピーシーズ、フィラエヌス属 (Philaenus) スピーシーズ、オオマダラカスミカメ属 (Phytocoris) スピーシーズ、ピエゾドルス属 (Piezodorus) スピーシーズ、ミカンコナカイガラムシ属 (Planococcus) スピーシーズ、クワコナカイガラムシ属 (Pseudococcus) スピーシーズ、ロパロシフム属 (Rhopalosiphum) スピーシーズ、ハンエンカタカイガラムシ属 (Saissetia) スピーシーズ、テリオアフィス属 (Therioaphis) スピーシーズ、トウメイエラ属 (Toumeyella) スピーシーズ、トキシプテラ属 (Toxoptera) スピーシーズ、トリアレウロデス属 (Triaeuroides) スピーシーズ、サシガメ属 (Triatoma) スピーシーズおよびヤノネカイガラムシ属 (Unaspis) スピーシーズを挙げるができる。特定の種の網羅的でない一覧は、限定されるものでないが、アクロステルヌム ヒラレ (Acrosternum hilare)、エンドウヒゲナガアブラムシ (Acyrtosiphon pisum)、タマナコナジラミ (Aleyrodes proletella)、スパイラリングコナジラミ (Aleurodicus dispersus)、ミカンワタコナジラミ (Aleurothrixus floccosus)、フタテンミドリヒメヨコバイ (Amrasca biguttula biguttula)、アカマルカイガラムシ (Aonidiella aurantii)、ワタアブラムシ (Aphis gossypii)、ダイズアブラムシ (Aphis glycines)、ヨーロッパリンゴアブラムシ (Aphis pomi)、ジャガイモヒゲナガアブラムシ (Aulacorthum solani)、シルバーリーフコナジラミ (Bemisia argentifolii)、タバココナジラミ (Bemisia tabaci)、アメリカコバネナガカメムシ (Blissus leucopterus)、ブラキコリネラ アスパラギ (Brachycorynella asparagi)、ブレベンニア レヒ (Brevennia rehi)、ダイコンアブラムシ (Brevicoryne brassicae)、カロコリス ノルベギクス (Calocoris norvegicus)、ルビーロウカイガラムシ (Ceroplas

10

20

30

40

50

tes rubens)、タイワントコジラミ (Cimex hemipterus)、
 トコジラミ (Cimex lectularius)、ダグベルツス ファスシアツス (Dagbertus fasciatus)、ディケロプス フルカツス (Dichelops furcatus)、ロシアコムギアブラムシ (Diuraphis noxia)、ミカンキジラミ (Diaphorina citri)、オオバコアブラムシ (Dysaphis plantaginea)、ジスデルクス スツレルス (Dysdercus suturellus)、エデッサ メディタブンダ (Edessa medietabunda)、リングワタムシ (Eriosoma lanigerum)、エウリガスター マウラ (Eurygaster maura)、エウスキスツス ヘロス (Euschistus heros)、エウスキスツス セルプス (Euschistus servus)、ヘロベルチス アントニイ (Helopeltis antonii)、ヘロベルチス テイボラ (Helopeltis theivora)、ワタフキカイガラムシ (Icerya purchasi)、イディオスコプス ニチズルス (Idioscopus nitidulus)、ヒメトビウンカ (Laodelphax striatellus)、タイワンクモヘリカメムシ (Leptocorisa oratorius)、クモヘリカメムシ (Leptocorisa varicornis)、リグス ヘスペルス (Lygus hesperus)、マコネリコッカス ヒルスツス (Maconelllicoccus hirsutus)、チューリップヒゲナガアブラムシ (Macrosiphum euphorbiae)、ムギヒゲナガアブラムシ (Macrosiphum granarium)、バラアブラムシ (Macrosiphum rosae)、ヨツテンヨコバイ (Macrosteles quadrilineatus)、マハナルバ フリムビオラタ (Mahanarva frimbolata)、ムギウスイロアブラムシ (Metopolophium dirhodum)、ミクチス ロンギコルニス (Mictis longicornis)、モモアカアブラムシ (Myzus persicae)、ツماغロヨコバイ (Nephotettix cinctipes)、ネウロコルプス ロンギロストリス (Neurocolpus longirostris)、ミナミアオカメムシ (Nezara viridula)、トビイロウンカ (Nilaparvata lugens)、マルクロホシカイガラムシ (Parlatoria pergandii)、ヒメクロカイガラムシ (Parlatoria ziziphi)、トウモロコシウンカ (Peregrinus maidis)、ブドウネアブラムシ (Phylloxera vitifoliae)、フィソケルメス ピセアエ (Physokermes piceae)、フィトコリス カリフォルニクス (Phytocoris californicus)、フィトコリス レラチプス (Phytocoris relativus)、ピエゾドルス グイルジニイ (Piezodorus guildinii)、ポエシロカプスス リネアツス (Poecillocapsus lineatus)、プサルス バクシニコラ (Psallus vaccinicola)、プセウダシスタ ペルセアエ (Pseudacysta perseae)、パインアップルコナカイガラムシ (Pseudococcus brevipes)、ナシマルカイガラムシ (Quadraspidiotus perniciosus)、トウモロコシアブラムシ (Rhopalosiphum maidis)、ムギクビレアブラムシ (Rhopalosiphum padi)、オリーブカタカイガラムシ (Saissetia oleae)、スカプトコリス カスタネア (Scaptocoris castanea)、ムギミドリアブラムシ (Schizaphis graminum)、ムギヒゲナガアブラムシ (Sitobion avenae)、セジロウンカ (Sogatella furcifera)、オンシツコナジラミ (Trialeurodes vaporariorum)、トリアレウロデス アブチロネウス (Trialeurodes abutiloneus)、ヤノネカイガラムシ (Unaspis yanonensis) およびズリア エントレリアナ (Zulia entrerriana) を挙げることができる。

【0526】

別の態様において、式1の分子はハチ目の病害虫を防除するのに使用しうる。特定の属の網羅的でない一覧は、限定されるものでないが、トガリハキリアリ属 (Acromyrmex) スピーシーズ、ハキリアリ属 (Atta) スピーシーズ、オオアリ属 (Campotonotus) スピーシーズ、ジブリオン属 (Diprion) スピーシーズ、ヤマアリ属 (Formica) スピーシーズ、ヒメアリ属 (Monomorium) スピーシーズ、ネオジブリオン属 (Neodiprion) スピーシーズ、シュウカクアリ属 (Pogonomyrmex) スピーシーズ、アシナガバチ属 (Polistes) スピーシーズ、トフシアリ属 (Solenopsis) スピーシーズ、クロスズメバチ属 (Vespalia) スピーシーズおよびクマバチ属 (Xyllocopa) スピーシーズを挙げることができる。特定の種の網羅的でない一覧は、限定されるものでないがカブラハバチ (Athalia rosae)、テキサスハキリアリ (Atta texana)、アルゼンチンアリ (Iridomyrmex humilis)、モノモリウム ミニムム (Monomorium minimum)、イエヒメアリ (Monomorium pharaonis)、ヒアリ (Solenopsis invicta)、アカカミアリ (Solenopsis geminata)、ソレノプシス モレスト (Solenopsis molesta)、ソレノプシス リクテリ (Solenopsis richter)、ソレノプシス キシロニ (Solenopsis xyloni) およびタピノマセシレ (Tapinoma sessile) を挙げることができる。

10

【0527】

別の態様において、式1の分子はシロアリ目の病害虫を防除するのに使用しうる。特定の属の網羅的でない一覧は、限定されるものでないが、イエシロアリ属 (Coptotermes) スピーシーズ、コルニテルメス属 (Cornitermes) スピーシーズ、ダイコクシロアリ属 (Cryptotermes) スピーシーズ、ヘテロテルメス属 (Heterotermes) スピーシーズ、カロテルメス属 (Kaloterme) スピーシーズ、インシシテルメス属 (Incisitermes) スピーシーズ、マクロテルメス属 (Macrotermes) スピーシーズ、マルギニテルメス属 (Marginitermes) スピーシーズ、ミクロセロテルメス属 (Microcerotermes) スピーシーズ、プロコルニテルメス属 (Procornitermes) スピーシーズ、ヤマトシロアリ属 (Reticulitermes) スピーシーズ、ツチミゾガラシシロアリ属 (Schedorhinotermes) スピーシーズおよびアメリカオオシロアリ属 (Zootermopsis) スピーシーズを挙げることができる。特定の種の網羅的でない一覧は、限定されるものでないがコプトテルメス クルビグナツス (Coptotermes curvignathus)、コプトテルメス フレンキ (Coptotermes frenchi)、イエシロアリ (Coptotermes formosanus)、ヘテロテルメス アウレウス (Heterotermes aureus)、ミクロテルメス オベシ (Microtermes obesi)、レチクリテルメス バニウレンシス (Reticulitermes banyulensis)、レチクリテルメス グラッセイ (Reticulitermes grassei)、キアシシロアリ (Reticulitermes flavipes)、レチクリテルメス ハゲニ (Reticulitermes hageni)、レチクリテルメス ヘスペルス (Reticulitermes hesperus)、レチクリテルメス サントネンシス (Reticulitermes santonensis)、ヤマトシロアリ (Reticulitermes speratus)、レチクリテルメス チビアリス (Reticulitermes tibialis) およびレチクリテルメス ビルギニクス (Reticulitermes virginicus) を挙げることができる。

20

30

40

【0528】

別の態様において、式1の分子はチョウ目の病害虫を防除するのに使用しうる。特定の属の網羅的でない一覧は、限定されるものでないが、コカクモンハマキ属 (Adoxophyes) スピーシーズ、ヤガ属 (Agrotis) スピーシーズ、アルギロタエニア属 (Argyrotaenia) スピーシーズ、カコエシア属 (Cacoecia) スピー

50

シーズ、ハマキホソガ属 (Caloptilia) スピーシーズ、キロ属 (Chilo)
 スピーシーズ、クリソデイクシス属 (Chrysodeixis) スピーシーズ、モンキ
 チョウ属 (Colias) スピーシーズ、クランブス属 (Crambus) スピーシーズ
 、ジアフニア属 (Diaphania) スピーシーズ、ジアトラエア属 (Diatra
ea) スピーシーズ、エアリアス属 (Earias) スピーシーズ、エフェスチア属 (E
phestia) スピーシーズ、エピメシス属 (Epimecis) スピーシーズ、フェ
 ルチア属 (Feltia) スピーシーズ、ゴルチナ属 (Gortyna) スピーシーズ、
 ヘリコベルパ属 (Helicoverpa) スピーシーズ、ヘリオティス属 (Helio
this) スピーシーズ、インダルベラ属 (Indarbela) スピーシーズ、リトコ
 レチス属 (Lithocolletis) スピーシーズ、ロクサグロチス属 (Loxag
rotis) スピーシーズ、オビカレハ属 (Malacosoma) スピーシーズ、ペリ
 ドロマ属 (Peridroma) スピーシーズ、キンモンホソガ属 (Phyllonor
ycter) スピーシーズ、キョトウ属 (Pseudaletia) スピーシーズ、セサ
 ミア属 (Sesamia) スピーシーズ、スポドプテラ属 (Spodoptera) スピ
 ーシーズ、シナンテドン属 (Synanthedon) スピーシーズおよびスガ属 (Yp
onomeuta) スピーシーズを挙げることができる。特定の種の網羅的でない一覧は
 、限定されるものでないが、シラホシアシプトクチバ (Achaea janata)、
 リンゴコカクモンハマキ (Adoxophyes orana)、タマナヤガ (Agro
tis ipsilon)、アラバマ アルギラセア (Alabama argilla
cea)、アモルビア クネアナ (Amorbia cuneana)、アミエロイス
 トランシテラ (Amyelois transitella)、アナカンプトデス デフ
 ェクタリア (Anacamptodes defectaria)、モモキバガ (Ana
rsia lineatella)、ヒメアカキリバ (Anomis sabulife
ra)、アンチカルシア ゲンマタリス (Anticarsia gemmatalis
)、アルキプス アルギロスピラ (Archips argyrospila)、アルキ
 プス ロサナ (Archips rosana)、ミカンコハマキ (Argyrotae
nia citrana)、ガンマキンウワバ (Autographa gamma)、
 ボナゴタ クラナオデス (Bonagota cranaodes)、ユウレイセセリ (Borbo
cinnara)、ブクラトリクス ツルベリエラ (Bucculatr
ix thurberielia)、カプア レチクラナ (Capua reticul
ana)、モモシンクイガ (Carposina niponensis)、ニカメイガ
 (Chilo suppressalis)、キロ ポリクリス (Chilo pol
ychrysus)、クルメチア トランスベルサ (Chlumetia transv
ersa)、ハスオビハマキ (Choristoneura rosaceana)、コ
 ブノメイガ (Cnaphalocrocis medinalis)、ココアツマキホソ
 ガ (Conopomorpha cramerella)、オオボクトウ (Cossus
cossus)、シディア カリヤナ (Cydia caryana)、スモモヒメハ
 マキ (Cydia funebrana)、シディア モレスト (Cydia mole
sta)、エンドウシンクイ (Cydia nigricana)、コドリング (Cyd
ia pomonella)、ダルナ ジズクタ (Darna diducta)、ジア
 トラエア サッカラリス (Diatraea saccharalis)、ジアトラエア
 グランジオセラ (Diatraea grandiosella)、ミスジアオリング
 (Earias insulana)、クサオビリング (Earias vittell
a)、エクジトロファ アウランチアヌム (Ecdytolopha aurantia
num)、モロコシマダラメイガ (Elasmopalpus lignosellus
)、スジマダラメイガ (Ephestia cautella)、チャマダラメイガ (E
phestia elutella)、スジコナマダラメイガ (Ephestia ku
ehniella)、エピノチア アポレマ (Epinotia aporema)、リ
 ンゴウスチャイロハマキ (Epiphyas postvittana)、バナナセセリ
 (Erionota thrax)、ブドウホソハマキ (Eupoecilia amb

iguella)、エウクソア アウキシリアリス (Euxoa auxiliaris)、ナシヒメシンクイ (Grapholita molesta)、マエウスキノメイガ (Hedylepta indicata)、オオタバコガ (Helicoverpa armigera)、アメリカタバコガ (Helicoverpa zea)、ニセアメリカタバコガ (Heliothis virescens)、ハイマダラノメイガ (Heliothis undalis)、ケイフェリア リコペルシセラ (Keiferia lycopersicella)、ナスノメイガ (Leucinodes orbonalis)、レウコプテラ コフェエラ (Leucoptera coffeella)、レウコプテラ マリフォリエラ (Leucoptera malifoliella)、ロベシア ボトラナ (Lobesia botrana)、ロクサグロチス アルビコスタ (Loxagrotis albicosta)、マイマイガ (Lymantria dispar)、モモハモグリガ (Lyonetia clerkella)、マハセナ コルベッチ (Mahasena corbetti)、ヨトウガ (Mamestra brassicae)、マメノメイガ (Maruca testulalis)、メチサ プラナ (Metisa plana)、アメリカキヨトウ (Mythimna unipuncta)、ネオレウシノデス エレガンタリス (Neoleucinodes elegantalis)、ニンフラ デプンクタリス (Nymphula depunctalis)、ナミスジフユナミシャク (Operophtera brumata)、ヨーロッパアワノメイガ (Ostrinia nubilalis)、オキシジア ベスリア (Oxydia vesulia)、パンデミス セラサナ (Pandemis cerasana)、トビハマキ (Pandemis heparana)、アフリカオナシ アゲハ (Papilio demodocus)、ワタアカミムシガ (Pectinophora gossypiella)、ニセタマナヤガ (Peridroma saucia)、ペリレウコプテラ コフェエラ (Perileucoptera coffeella)、ジャガイモキバガ (Phthorimaea operculella)、ミカンコハモグリ (Phyllocnistis citrella)、モンシロチョウ (Pieris rapae)、プラチペナ スカブラ (Plathypena scabra)、ノシメマダラメイガ (Plodia interpunctella)、コナガ (Plutella xylostella)、ブドウヒメハマキ (Polychrosis viteana)、プライス エンドカルパ (Prays endocarpa)、プライス オレアエ (Prays oleae)、アワヨトウ (Pseudaletia unipuncta)、ダイズシャクトリムシ (Pseudoplusia includens)、ラキブルシア ヌ (Rachiplusia nu)、イッテンオオメイガ (Scirpophaga incertulas)、イネヨトウ (Sesamia inferens)、セサミア ノナグリオイデス (Sesamia nonagrioides)、セトラ ニテンス (Setora nitens)、バクガ (Sitotroga cerealella)、テングハマキ (Sparganothis pillariana)、シロイチモジヨトウ (Spodoptera exigua)、ツマジロクサヨトウ (Spodoptera frugiperda)、スボドプテラ エリダニア (Spodoptera eridania)、テクラ バシリデス (Thecla basilides)、コイガ (Tineola bisselliella)、イラクサギンウワバ (Trichoplusia ni)、トマトキバガ (Tuta absoluta)、コーヒーゴマフボクトウ (Zeuzera coffeae) およびゴマフボクトウ (Zeuzera pyrina) を挙げることができる。

【0529】

別の態様において、式1の分子はハジラミ目の病害虫を防除するのに使用しうる。特定の属の網羅的でない一覧は、限定されるものでないが、アナチコーラ属 (Anaticola) スピーシーズ、ボビコーラ属 (Bovicola) スピーシーズ、ケロピステス属 (Chelopistes) スピーシーズ、ゴニオデス属 (Goniodes) スピーシーズ、メナカンツス属 (Menacanthus) スピーシーズおよびケモノハジラミ属

10

20

30

40

50

(Trichodectes) スピーシーズを挙げることができる。特定の種の網羅的で
ない一覧は、限定されるものでないがウシハジラミ (Bovicola bovis)、
ヤギハジラミ (Bovicola caprae)、ヒツジハジラミ (Bovicola
ovis)、ツノハジラミ (Chelopistes meleagridis)、カ
クアゴハジラミ (Goniodes dissimilis)、マルハジラミ (Goni
odes gigas)、フクロマルハジラミ (Menacanthus strami
neus)、ニワトリハジラミ (Menopon gallinae) およびイヌハジラ
ミ (Trichodectes canis) を挙げることができる。

【0530】

別の態様において、式1の分子はバッタ目の害虫を防除するのに使用しう。特定の
属の網羅的でない一覧は、限定されるものでないが、メラノプルス属 (Melanopl
us) スピーシーズおよびプテロフィラ属 (Pterophylla) スピーシーズを挙
げることができる。特定の種の網羅的でない一覧は、限定されるものでないが、モルモン
キリギリス (Anabrus simplex)、ケラ (Gryllotalpa af
ricana)、グリロタルパ アウストラリス (Gryllotalpa austr
alis)、グリロタルパ ブラキプテラ (Gryllotalpa brachypt
era)、グリロタルパ ヘキサダクトラ (Gryllotalpa hexadact
yla)、トノサマバッタ (Locusta migratoria)、マイクロセントル
ム レチネルベ (Microcentrum retinerve)、サバクトビバッタ
(Schistocerca gregaria) およびスクデリア フルカタ (Scu
dderia furcata) を挙げることができる。

【0531】

別の態様において、式1の分子はノミ目の害虫を防除するのに使用しう。特定の種
の網羅的でない一覧は、限定されるものでないが、スズメトリノミ (Ceratophy
llus gallinae)、セラトフィルス ニゲル (Ceratophyllus
niger)、イヌノミ (Ctenocephalides canis)、ネコノミ
(Ctenocephalides felis) およびヒトノミ (Pulex irr
itans) を挙げることができる。

【0532】

別の態様において、式1の分子はアザミウマ目の害虫を防除するのに使用しう。特
定の属の網羅的でない一覧は、限定されるものでないが、カリオトリプス属 (Calio
thrips) スピーシーズ、フランクリニエラ属 (Frankliniella) スピ
ーシーズ、スシルトトリプス属 (Scirtothrips) スピーシーズおよびトリプ
ス属 (Thrips) スピーシーズを挙げることができる。特定の種の網羅的でない一覧
は、限定されるものでないが、ウスグロアザミウマ (Frankliniella fu
sca)、ミカンキイロアザミウマ (Frankliniella occidenta
lis)、フランクリニエラ スクルトゼイ (Frankliniella schul
tzei)、フランクリニエラ ウィリアムシ (Frankliniella will
iamsi)、クロトンアザミウマ (Heliothrips haemorrhoid
alis)、リピフォロトリプス クルエンタツス (Rhipiphorothrips
cruentatus)、スシルトトリプス シトリ (Scirtothrips c
itri)、チャノキイロアザミウマ (Scirtothrips dorsalis)
およびタエニオトリプス ロバランテナリス (Taeniothrips rhopal
antennalis)、ハナアザミウマ (Thrips hawaiiensis)、
クロゲハナアザミウマ (Thrips nigropilosus)、トリプス オリエ
ンタリス (Thrips orientalis)、ネギアザミウマ (Thrips t
abaci) を挙げることができる。

【0533】

別の態様において、式1の分子はシミ目の害虫を防除するのに使用しう。特定の属
の網羅的でない一覧は、限定されるものでないがセイヨウシミ属 (Lepisma) スピ

10

20

30

40

50

ーシーズおよびマダラシミ属 (Thermobia) スピーシーズを挙げることができる。

【0534】

別の態様において、式1の分子はダニ目の害虫を防除するのに使用しうる。特定の属の網羅的でない一覧は、限定されるものでないが、コナダニ属 (Acarus) スピーシーズ、アクロプス属 (Aculops) スピーシーズ、ウシマダニ属 (Boophilus) スピーシーズ、ニキビダニ属 (Demodex) スピーシーズ、カクマダニ属 (Dermacentor) スピーシーズ、エピトリメルス属 (Epitrimerus) スピーシーズ、エリオフィエス属 (Eriophyes) スピーシーズ、マダニ属 (Ixodes) スピーシーズ、ツメハダニ属 (Oligonychus) スピーシーズ、マルハダニ属 (Panonychus) スピーシーズ、ネダニ属 (Rhizoglyphus) スピーシーズおよびナミハダニ属 (Tetranychus) スピーシーズを挙げることができる。特定の種の網羅的でない一覧は、限定されるものでないが、アカリンダニ (Acarapis woodi)、アシプトコナダニ (Acarus siro)、アセリアマンギフェラエ (Aceria mangiferae)、トマトサビダニ (Aculops lycopersici)、ミカンサビダニ (Aculus pelekassii)、リンゴサビダニ (Aculus schlechtendali)、マダニ (Amblyomma americanum)、チャノヒメハダニ (Brevipalpus obovatus)、ミナミヒメハダニ (Brevipalpus phoenicis)、アメリカイヌカクマダニ (Dermacentor variabilis)、ヤケヒョウヒダニ (Dermatophagoides pteronyssinus)、エオテトラニクス カルピニ (Eotetranychus carpini)、ネコシヨウヒゼンダニ (Notoedres cati)、マンゴーツメハダニ (Oligonychus coffeae)、チビコブツメハダニ (Oligonychus ilicis)、ミカンハダニ (Panonychus citri)、リンゴハダニ (Panonychus ulmi)、フィロコプトルタ オレイボラ (Phyllocoptuta oleivora)、チャノホコリダニ (Polyphagotarsonemus latus)、クリイロコイタマダニ (Rhipicephalus sanguineus)、ヒゼンダニ (Sarcoptes scabiei)、テゴロフス ペルセアフロラエ (Tegolophus perseafloreae)、ナミハダニ (Tetranychus urticae) およびミツバチヘギイタダニ (Varroa destructor) を挙げることができる。

【0535】

別の態様において、式1の分子はコムカデ目の害虫を防除するのに使用しうる。特定の種の網羅的でない一覧は、限定されるものでないがミゾコムカデ (Scutigere lla immaculata) を挙げることができる。

【0536】

別の態様において、式1の分子は線形動物門の害虫を防除するのに使用しうる。特定の属の網羅的でない一覧は、限定されるものでないが、アフレンコイデス属 (Aphelenchoides) スピーシーズ、ベロノライムス属 (Belonolaimus) スピーシーズ、クリコネメラ属 (Criconemella) スピーシーズ、ジチレンクス属 (Ditylenchus) スピーシーズ、ヘテロデラ属 (Heterodera) スピーシーズ、ヒルスクマニエラ属 (Hirschmanniella) スピーシーズ、ホプロライムス属 (Hoplolaimus) スピーシーズ、ネコブセンチュウ属 (Meloidogyne) スピーシーズ、ネグサレセンチュウ属 (Pratylenchus) スピーシーズおよびバナナネモグリセンチュウ属 (Radopholus) スピーシーズを挙げることができる。特定の種の網羅的でない一覧は、限定されるものでないが、犬糸状虫 (Dirofilaria immitis)、トウモロコシシストセンチュウ (Heterodera zeae)、サツマイモネコブセンチュウ (Meloidogyne incognita)、ジャワネコブセンチュウ (Meloidogyne ja

10

20

30

40

50

vanica)、回旋糸状虫 (Onchocerca volvulus)、バナナネモグリセンチュウ (Radopholus similis) およびニセフクロセンチュウ (Rotylenchulus reniformis) を挙げることができる。

【0537】

付加的な情報については、Arnold Mallis による “HANDBOOK OF PEST CONTROL—THE BEHAVIOR, LIFE HISTORY, AND CONTROL OF HOUSEHOLD PESTS”、第9版、GIE Media Inc による著作権 2004 年を参照されたい。

【0538】

適用

線形動物門、節足動物門および／若しくは軟体動物門の病害虫を防除することは、一般に、病害虫の集団、病害虫の活動性若しくはその双方がある場所で低下されることを意味している。これは：

- (a) 病害虫集団がある場所から駆逐される；
- (b) 病害虫がある場所の中若しくは周囲で行動能力を奪われる；または
- (c) 病害虫がある場所の中若しくは周囲で根絶される

場合に発生し得る。もちろんこれらの結果の組合せが発生し得る。一般に、病害虫の集団、活動性若しくは双方は、望ましくは50パーセント以上、好ましくは90パーセント以上、および最も好ましくは98パーセント以上低下される。一般に、該場所はヒトの中若しくは上でなく；結果、該場所は一般にヒト以外の場所である。

【0539】

別の態様において、式1の分子が適用される場所は、線形動物門、節足動物門および／若しくは軟体動物門の病害虫により生息されている、若しくは生息されるようになりうる、またはそれにより横断されるいかなる場所でもあり得る。例えば、該場所は：

- (a) 作物、樹木、果実、穀類、かいば、匍匐植物、芝および／若しくは観賞用植物が成長している場所；
- (b) 家畜が住んでいる場所；
- (c) (穀類が貯蔵される場所のような) 建物の内部若しくは外側表面；
- (d) (含浸された木材のような) 建物で使用される建設材料；ならびに
- (e) 建物の周囲の土壌

であり得る。式1の分子を使用するための特定の作付け区域は、リンゴ、トウモロコシ、ヒマワリ、ワタ、ダイズ、キャノーラ、小麦、米、モロコシ、大麦、オート麦、ジャガイモ、オレンジ、アルファルファ、レタス、イチゴ、トマト、コショウ、アブラナ科植物、セイヨウナシ、タバコ、アーモンド、サトウダイコン、豆類およびその他の高価な作物が成長している若しくはそれらの種子が播かれる予定である区域を包含する。多様な植物を栽培する場合は式1の分子とともに硫酸アンモニウムを使用することもまた有利である。

【0540】

別の態様において、式1の分子は、一般に、防除を提供するために1ヘクタールあたり約0.1グラムから1ヘクタールあたり約5000グラムまでの量で使用する。別の態様において、式1の分子を1ヘクタールあたり約0.1グラムから1ヘクタールあたり約5000グラムまでの量で使用する。別の態様において、式1の分子を1ヘクタールあたり約0.01グラムから1ヘクタールあたり約50グラムまでの量で使用する。別の態様において、式1の分子を1ヘクタールあたり約0.01グラムから1ヘクタールあたり約50グラムまでの量で使用する。

【0541】

式1の分子は、単独で、若しくは植物の活力を高めるため(例えば、より良好な根系を成長させるため、ストレスの多い生育条件をより良好に耐えるため)の他の化合物と、混合物中で使用されても、同時に若しくは順次適用されてもよい。こうした他の化合物は、例えば、植物のエチレン受容体を調節する化合物、最も注目すべきは(1-MCPとしてもまた知られる)1-メチルシクロプロペンである。さらに、こうした分子は、成長している植物が貴重な農業産物を産生し始める前のような、病害虫の活動性が低い時間の間に

使用しうる。こうした時間は、病虫害圧が通常低い早期の植え付け期を包含する。

【0542】

式1の分子は、病虫害を防除するために植物の葉および結実部分に適用し得る。該分子は病虫害と直接接触することができるか、または殺虫農薬を含有する葉、果実体を食べる若しくは樹液を抽出する場合に病虫害が殺虫農薬を消費することができるかのいずれかである。式1の分子は土壌に適用することもまたでき、そしてこの様式で適用される場合、根および幹を食べ物とする病虫害を防除し得る。根は分子を吸収して植物の葉部分にそれを取り込んで、地面より上を咀嚼するおよび樹液を食べ物とする病虫害を防除し得る。

【0543】

一般に、ベイト剤では、該ベイト剤は、例えばシロアリが該ベイト剤と接触し得かつ／若しくはそれに引きつけられ得る地中に置かれる。ベイト剤は、例えばアリ、シロアリ、ゴキブリおよびハエが該ベイト剤と接触し得かつ／若しくはそれに引きつけられ得る建築物の表面（水平、垂直若しくは傾斜表面）にもまた塗布し得る。ベイト剤は式1の分子を含み得る。

10

【0544】

式1の分子はカプセルの内側に被包化し得るか若しくはその表面上に置くことができる。カプセルの大きさはナノメートルサイズ（直径が約100～900ナノメートル）からマイクロメートルサイズ（直径が約10～900ミクロン）までの範囲にあることができる。

【0545】

ある種の殺虫農薬に抵抗する一部の病虫害の卵の独特の能力のため、式1の分子の反復適用が、新たに発生される幼虫を防除するのに望ましいことがある。

20

【0546】

植物中の殺虫農薬の全身性の動きを、式1の分子を植物の異なる部分に適用することにより（例えば1領域を噴霧することにより）該植物の1部分の病虫害を防除するのに利用しうる。例えば、葉を食べ物とする昆虫の防除は、細流灌漑若しくは畝間散布により、土壌を例えば植え付け前若しくは後の土壌灌注で処理することにより、または植物の種子を播種前に処理することにより、達成し得る。

【0547】

種子処理は、特殊化された特徴を発現するよう遺伝子操作された植物がそれから発芽することができるものを包含する全部の種類の種子に適用し得る。代表的な例は、バチルス チューリングエンシス (Bacillus thuringiensis) のような無脊椎動物病虫害に対し毒性のタンパク質若しくは他の殺虫性毒素を発現するもの、「ラウンドアップレディー」種子のような除草剤耐性を発現するもの、または、殺虫性毒素、除草剤耐性、栄養強化、干魃耐性、若しくはいずれかの他の有益な特徴を発現する「スタック」外来遺伝子をもつものを包含する。さらに、式1の分子でのこうした種子処理は、ストレスの多い生育条件をより良好に耐える植物の能力をさらに高めうる。これはより健康でより活発な植物をもたらし、それは収穫時のより高収量につながり得る。一般に、100,000種子あたり約1グラムないし約500グラムの式1の分子が良好な利益を提供すると期待され、100,000種子あたり約10グラムから約100グラムまでの量がより良好な利益を提供すると期待され、そして、100,000種子あたり約25グラムから約75グラムまでの量がなおより良好な利益を提供すると期待される。

30

40

【0548】

式1の分子を、バチルス チューリングエンシス (Bacillus thuringiensis) 若しくは他の殺虫性毒素のような特殊化された特徴を発現するよう遺伝子操作された植物、または除草剤耐性を発現するもの、あるいは殺虫性毒素、除草剤耐性、栄養強化、若しくはいずれかの他の有益な特徴を発現する「スタック」外来遺伝子をもつものの上、中若しくは周囲で使用しうるということが、容易に明らかであるはずである。

【0549】

式1の分子は、獣医学の領域ですなわちヒト以外の動物飼育の分野において内寄生生物

50

および外寄生生物を防除するのに使用しうる。式1の分子は、例えば錠剤、カプセル剤、飲料、顆粒剤の形態での経口投与による、例えば液浸すること、噴霧すること、注ぐこと（pouring on）、しみをつけること（spotting on）および散布することの形態での皮膚適用による、ならびに例えば注入の形態の非経口投与によるように適用される。

【0550】

式1の分子は、家畜飼育、例えば畜牛、ヒツジ、ブタ、ニワトリおよびガチョウでもまた有利に使用しうる。それらはウマ、イヌおよびネコのような愛玩動物でもまた有利に使用しうる。防除すべき特定の病害虫はこうした動物にとって煩わしいノミおよびマダニとなろう。適する製剤は飲用水若しくは飼料とともに動物に経口投与される。適する投薬量および製剤は種に依存する。

10

【0551】

式1の分子は、上で列挙された動物におけるとりわけ腸の寄生虫を防除するためにもまた使用しうる。

【0552】

式1の分子はヒトの保健のための治療方法でもまた使用しうる。こうした方法は、限定されるものでないが、例えば錠剤、カプセル剤、飲料、顆粒剤の形態の経口投与および皮膚適用によるを挙げることができる。

【0553】

世界中の病害虫は、（こうした病害虫にとって）新たな環境に移動されており、そしてその後こうした新たな環境で新たな侵入生物種となっている。式1の分子は、こうした新たな環境でこうした新たな侵入生物種を防除するためにそれらにもまた使用しうる。

20

【0554】

式1の分子は、作物のような植物が成長している（例えば植え付け前、植え付け、収穫前）、およびこうした植物を商業的に損傷し得る（実際の存在がなくとも）低レベルの病害虫が存在する区域でもまた使用しうる。こうした区域でのこうした分子の使用は、該区域で栽培されている植物に利益を与えるためである。こうした利益は、限定されるものでないが、植物の健康状態を改良すること、植物の収量を改良すること（例えば増大されたバイオマスおよび／若しくは貴重な成分の増大された含量）、植物の活力を改良すること（例えば改良された植物成長および／若しくはより緑色の葉）、植物の質を改良すること（例えばある種の成分の改良された含量若しくは組成）、ならびに該植物の非生物学的および／若しくは生物学的ストレスに対する耐性を改良することを挙げることができる。

30

【0555】

殺虫農薬が使用若しくは商業的に販売され得る前に、こうした殺虫農薬は多様な政府当局（地方、地域、州、国および国際的）による非常に長い評価過程を受ける。大量のデータ要件が規制当局により指定され、そして、しばしば、ワールドワイドウェブへの接続を伴うコンピュータを使用して、製品登録者による若しくは製品登録者の代理の第三者によるデータ生成および提出により対処されなければならない。これらの政府当局がその後こうしたデータを審査し、そして安全性の確認が結論づけられる場合は、潜在的使用者若しくは販売者に製品登録承認を提供する。その後、製品登録が賦与されかつ裏付けられている場所で、こうした使用者若しくは販売者はこうした殺虫農薬を使用若しくは販売してよい。

40

【0556】

式1の分子は病害虫に対するその有効性を確認するため試験し得る。さらに、作用様式研究を、前記分子が他の殺虫農薬と異なる作用様式を有するかどうかを確認するために実施し得る。その後、こうした取得されたデータを第三者にインターネットによるように流布し得る。

【0557】

本文書の見出しは便宜性のみのためであり、そしてこの文書のいかなる部分も解釈するために使用してはならない。

50

【 0 5 5 8 】

表の節

【 0 5 5 9 】

【 表 4 - 1 】

表 2 : F 系列の化合物の構造および製造方法

番号	構造	製造に対応する 実施例
F1		12
F2		14
F3		13
F4		14

10

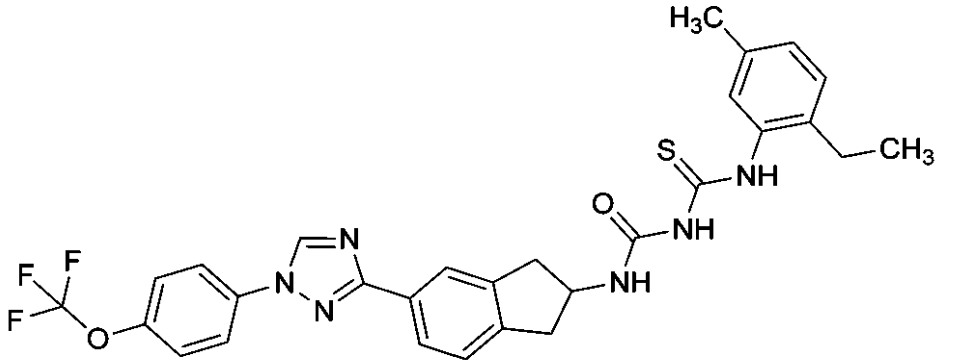
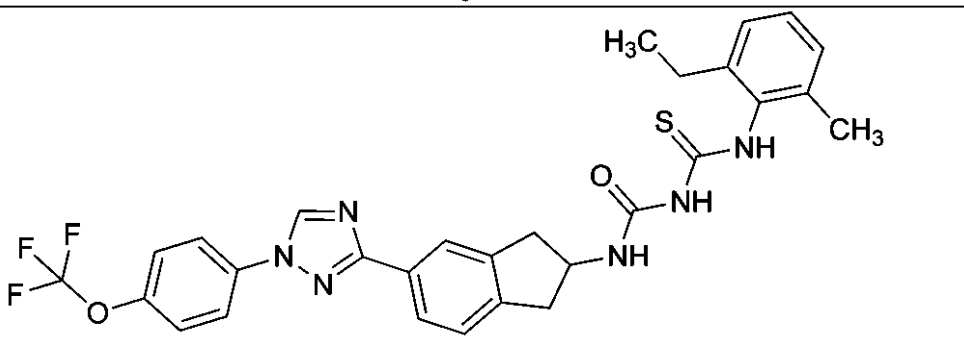
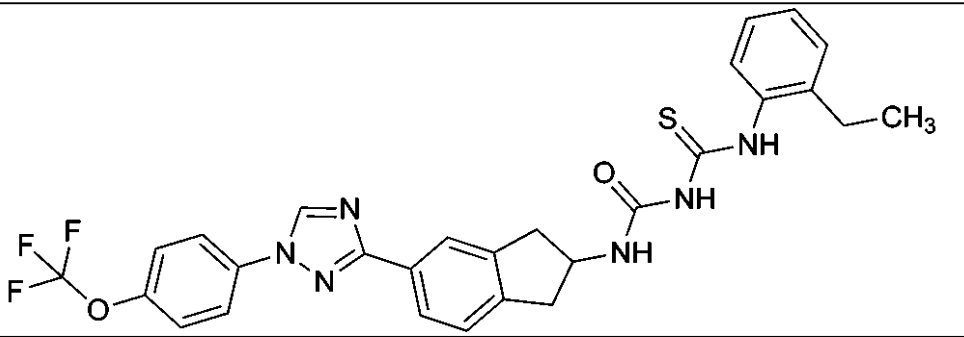
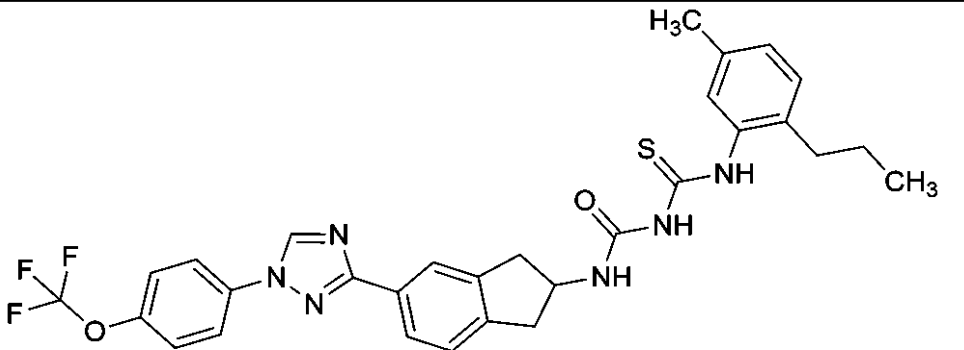
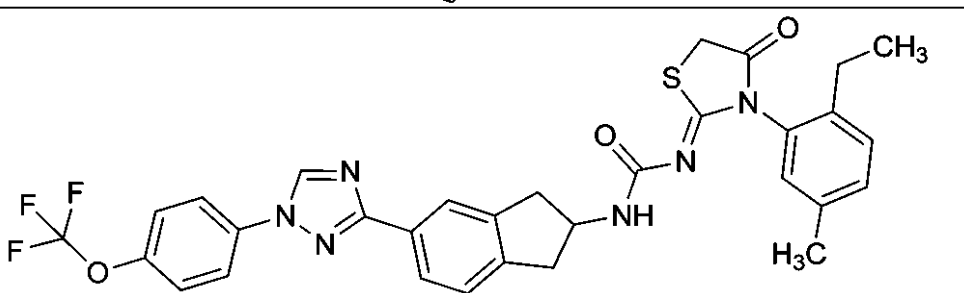
20

30

40

【 0 5 6 0 】

【表 4 - 2】

F5		12
F6		12
F7		12
F8		12
F9		14

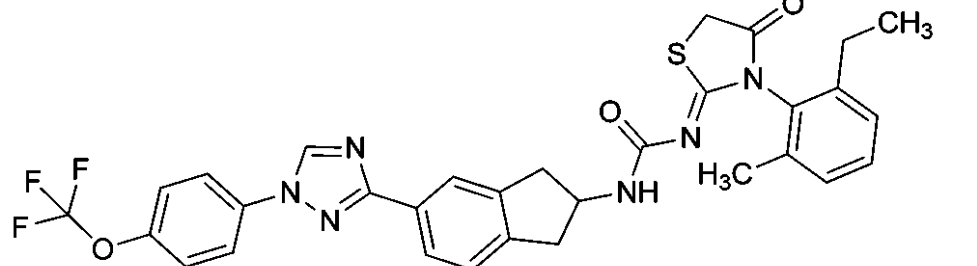
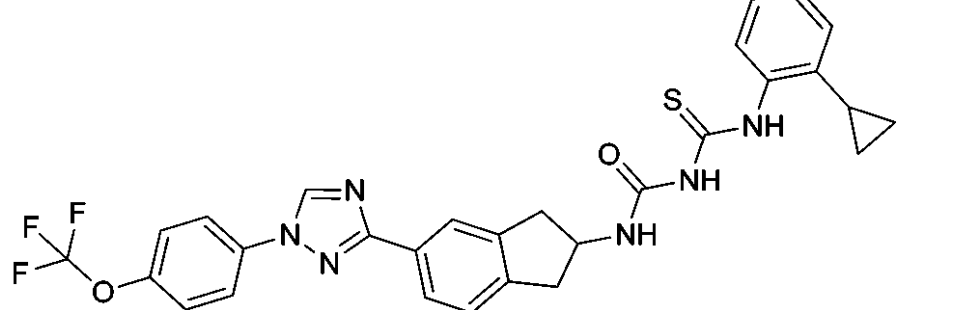
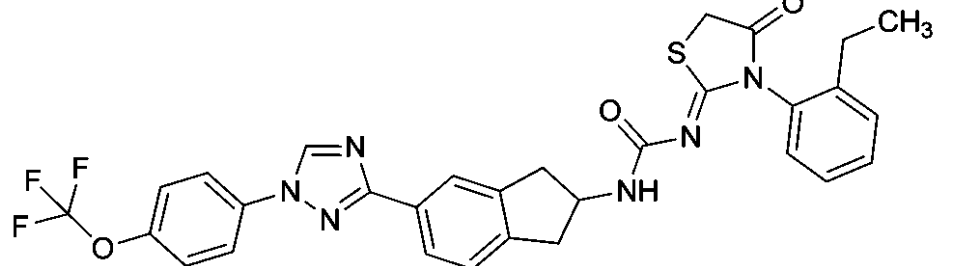
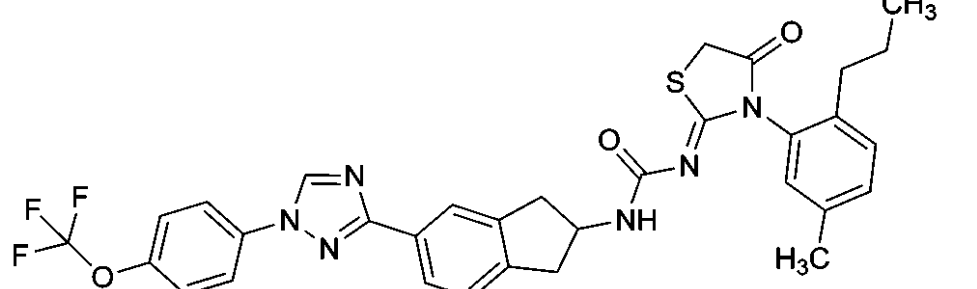
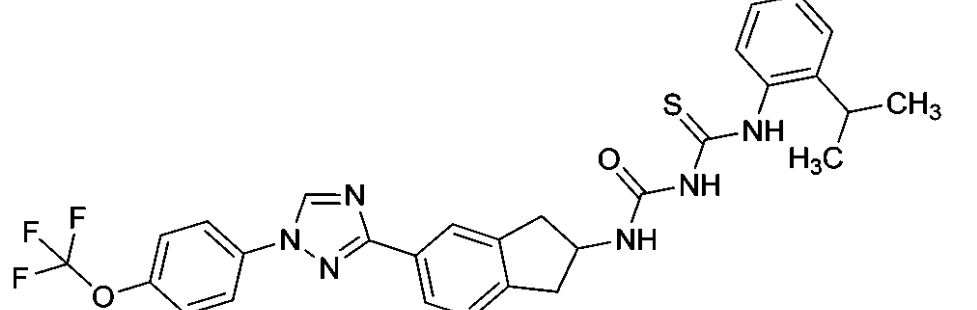
10

20

30

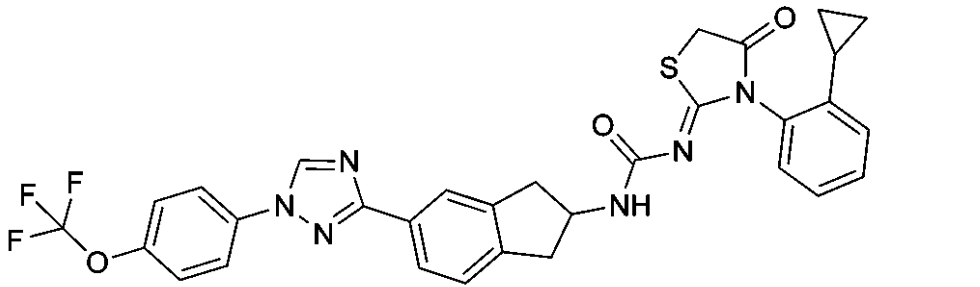
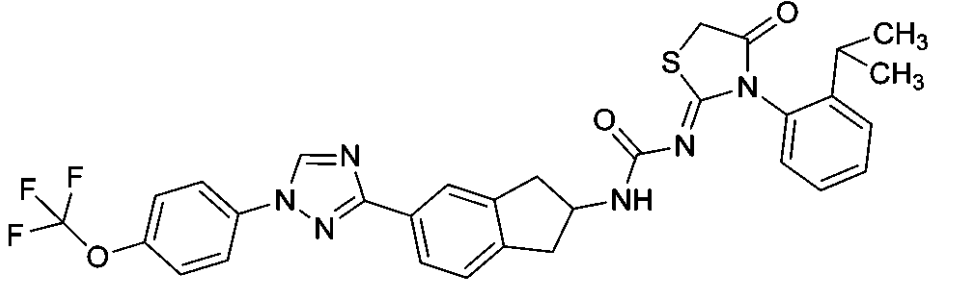
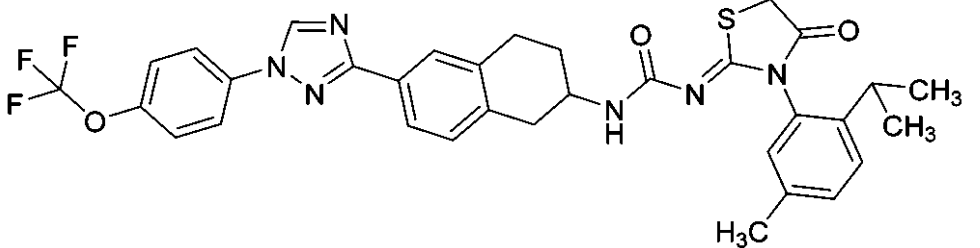
40

【表 4 - 3】

F10		14
F11		12
F12		12
F13		14
F14		12

【 0 5 6 2 】

【表 4 - 4】

F15		14
F16		14
F17		21

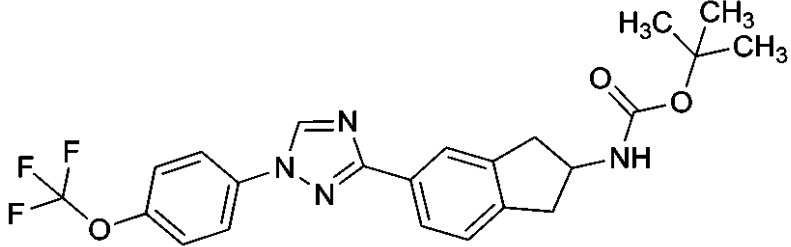
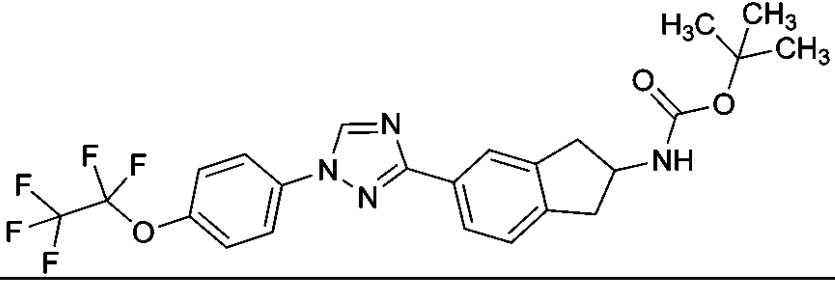
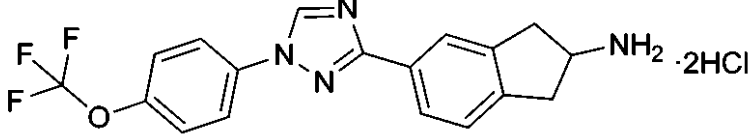
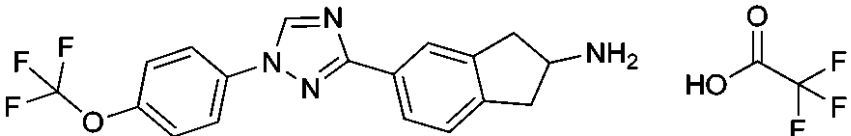
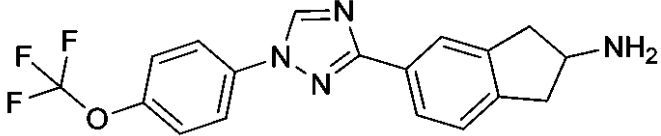
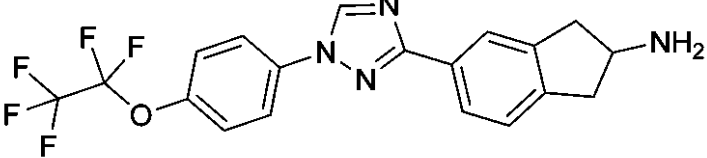
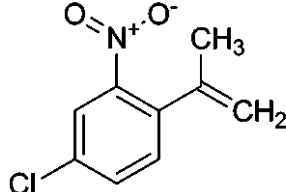
10

20

【 0 5 6 3 】

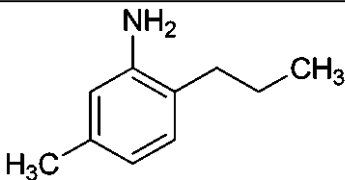
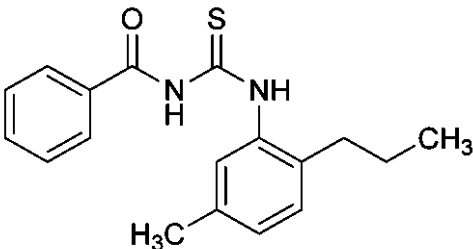
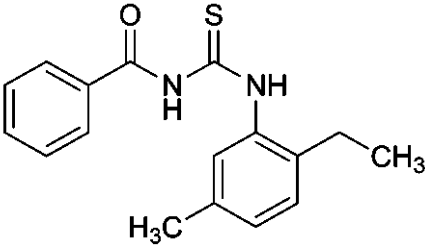
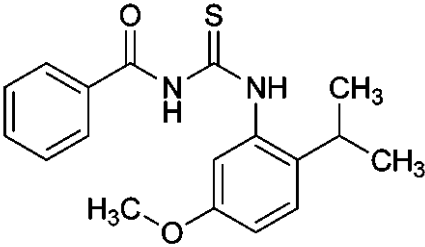
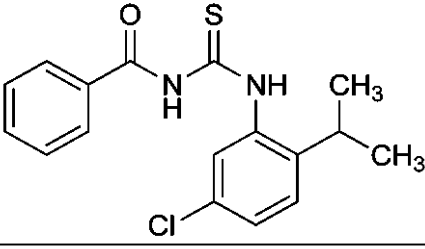
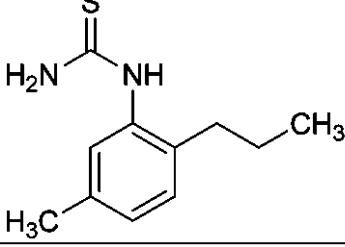
【表 5 - 1】

表 3：C系列の化合物の構造および製造方法

番号	構造	製造に対応 しうる実施 例
C1		1
C2		2
C3		3
C4		4
C5		5
C6		6
C8		7

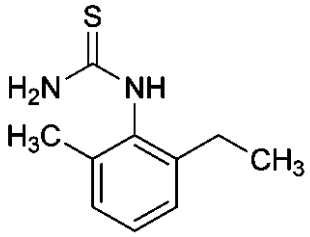
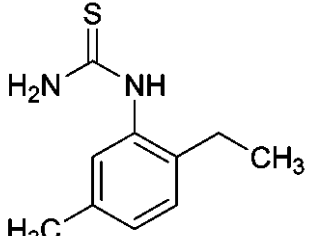
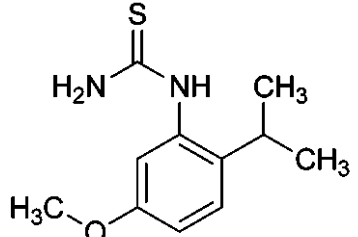
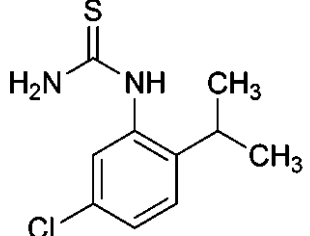
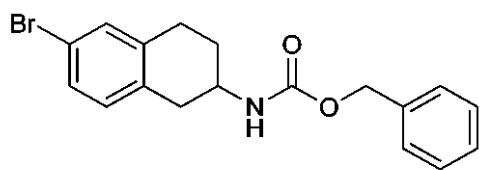
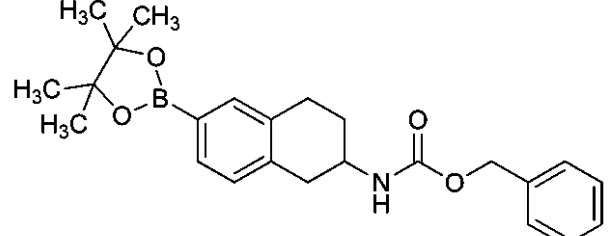
【0564】

【表 5 - 2】

C11		9
C15		10
C17		10
C18		10
C19		10
C20		11

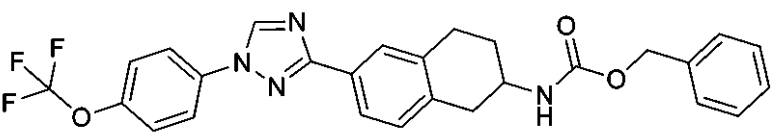
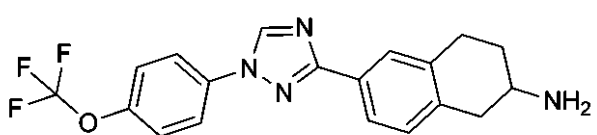
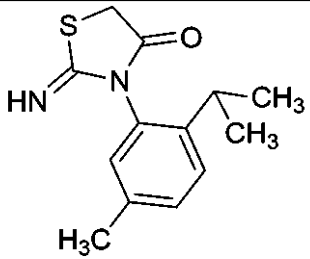
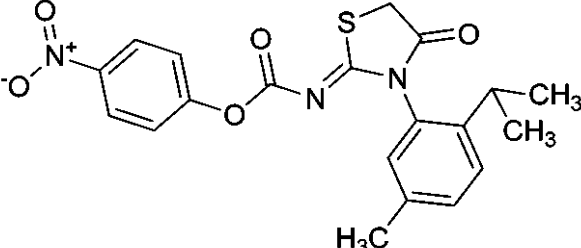
【 0 5 6 5 】

【表 5 - 3】

C21		11
C22		11
C23		11
C24		11
C25		15
C26		16

【 0 5 6 6 】

【表 5 - 4】

C27		17
C28		18
C29		19
C30		20

10

20

30

【 0 5 6 7 】

【表 6 - 1】

表 4 ; 表 2 の化合物の分析データ

番号	Mp (°C)	IR (cm ⁻¹)	質量 (m/z)	¹ H NMR	¹³ CNMR; ¹⁹ F NMR
F1	134 (分解)		ESIMS m/z 595 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 9.63 (s, 1H), 8.63 (s, 1H), 7.99 (d, J = 8.7 Hz, 2H), 7.83 - 7.74 (m, 2H), 7.38 (d, J = 8.6 Hz, 2H), 7.26 (s, 5H), 7.14 (s, 1H), 4.65 - 4.60 (m, 1H), 3.36 (td, J = 18.5, 17.7, 7.3 Hz, 2H), 3.05 (d, J = 8.7 Hz, 1H), 2.84 (s, 2H), 2.31 (s, 3H), 1.22 (d, J = 6.8 Hz, 6H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -58.02
F2	171 (分解)		ESIMS m/z 635 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO-d ₆) δ 9.36 (s, 1H), 8.11 - 8.02 (m, 2H), 7.93 (d, J = 7.1 Hz, 1H), 7.88 (d, J = 7.8 Hz, 2H), 7.66 - 7.57 (m, 2H), 7.34 (d, J = 8.0 Hz, 1H), 7.29 (d, J = 7.7 Hz, 1H), 7.25 - 7.19 (m, 1H), 6.99 (dd, J = 1.8, 0.9 Hz, 1H), 4.41 (q, J = 7.4 Hz, 1H), 4.13 (d, J = 18.0 Hz, 1H), 4.01 (d, J = 18.0 Hz, 1H), 3.25 - 3.06 (m, 2H), 2.93 - 2.82 (m, 2H), 2.62 (hept, J = 6.8 Hz, 1H), 2.30 - 2.23 (m, 3H), 1.11 (dd, J = 6.8, 1.4 Hz, 3H), 1.07 (d, J = 6.8 Hz, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO-d ₆) δ -56.96

【 0 5 6 8 】

【表 6 - 2】

F3			ESIMS m/z 645 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 11.87 (s, 1H), 9.83 (s, 1H), 9.40 (s, 1H), 8.12 - 8.06 (m, 2H), 8.02 (s, 1H), 7.96 (dd, <i>J</i> = 7.8, 1.6 Hz, 1H), 7.63 (d, <i>J</i> = 9.1 Hz, 2H), 7.43 (t, <i>J</i> = 6.9 Hz, 2H), 7.23 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.21 (d, <i>J</i> = 1.8 Hz, 1H), 7.09 (d, <i>J</i> = 7.9 Hz, 1H), 4.50 (d, <i>J</i> = 6.4 Hz, 1H), 3.44 - 3.34 (m, 1H), 3.05 - 2.80 (m, 4H), 2.27 (s, 3H), 1.16 (d, <i>J</i> = 6.9 Hz, 6H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -85.19, -86.91
F4	131-141		ESIMS m/z 685 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.55 (s, 1H), 8.04 - 7.96 (m, 2H), 7.85 - 7.76 (m, 2H), 7.45 - 7.37 (m, 2H), 7.30 (t, <i>J</i> = 7.6 Hz, 3H), 6.86 - 6.81 (m, 1H), 5.69 (d, <i>J</i> = 7.9 Hz, 1H), 4.74 - 4.59 (m, 1H), 4.04 - 3.83 (m, 2H), 3.46 - 3.27 (m, 2H), 3.00 - 2.76 (m, 2H), 2.62 (hept, <i>J</i> = 6.7 Hz, 1H), 2.32 (s, 3H), 1.21 - 1.08 (m, 6H)	

10

20

30

【 0 5 6 9 】

【表 6 - 3】

F5			ESIMS m/z 581 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 11.94 (s, 1H), 9.82 (s, 1H), 9.39 (d, <i>J</i> = 2.4 Hz, 1H), 8.11 - 8.05 (m, 2H), 8.02 (d, <i>J</i> = 1.5 Hz, 1H), 7.96 (d, <i>J</i> = 8.1 Hz, 1H), 7.67 - 7.59 (m, 2H), 7.43 (t, <i>J</i> = 7.5 Hz, 2H), 7.40 - 7.32 (m, 1H), 7.17 (d, <i>J</i> = 7.8 Hz, 1H), 7.04 (d, <i>J</i> = 7.9 Hz, 1H), 4.50 (d, <i>J</i> = 6.6 Hz, 1H), 3.33 (s, 4H), 2.97 - 2.81 (m, 2H), 2.27 (s, 3H), 1.12 (t, <i>J</i> = 7.5 Hz, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -56.96	10
F6			ESIMS m/z 579 ([M-H] ⁻)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 11.56 (s, 1H), 9.84 (s, 1H), 9.39 (s, 1H), 8.13 - 8.05 (m, 2H), 8.02 (s, 1H), 8.00 - 7.93 (m, 1H), 7.63 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 2H), 7.42 (d, <i>J</i> = 7.9 Hz, 2H), 7.17 (d, <i>J</i> = 7.4 Hz, 1H), 7.15 - 7.07 (m, 2H), 4.51 (d, <i>J</i> = 7.1 Hz, 1H), 3.33 (s, 4H), 2.97 - 2.77 (m, 2H), 2.18 (s, 3H), 1.14 (t, <i>J</i> = 7.6 Hz, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -56.96	20
						30

【 0 5 7 0 】

【表 6 - 4】

F7			ESIMS m/z 567 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 11.99 (s, 1H), 9.84 (s, 1H), 9.39 (s, 1H), 8.12 - 8.05 (m, 2H), 8.02 (d, <i>J</i> = 1.5 Hz, 1H), 7.96 (dd, <i>J</i> = 7.8, 1.6 Hz, 1H), 7.66 - 7.59 (m, 2H), 7.55 (dd, <i>J</i> = 5.6, 3.7 Hz, 1H), 7.44 (dd, <i>J</i> = 11.0, 7.5 Hz, 2H), 7.32 - 7.27 (m, 1H), 7.26 - 7.20 (m, 2H), 4.62 - 4.41 (m, 1H), 3.33 (s, 2H), 2.89 (ddd, <i>J</i> = 17.1, 13.2, 4.8 Hz, 2H), 2.67 - 2.51 (m, 2H), 1.15 (t, <i>J</i> = 7.6 Hz, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -56.96
F8			ESIMS m/z 595 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 11.97 (s, 1H), 9.81 (s, 1H), 9.39 (s, 1H), 8.12 - 8.05 (m, 2H), 8.02 (d, <i>J</i> = 1.6 Hz, 1H), 7.96 (d, <i>J</i> = 7.7 Hz, 1H), 7.63 (d, <i>J</i> = 8.8 Hz, 2H), 7.43 (t, <i>J</i> = 7.1 Hz, 2H), 7.38 (s, 1H), 7.15 (d, <i>J</i> = 7.7 Hz, 1H), 7.03 (d, <i>J</i> = 7.9 Hz, 1H), 4.49 (d, <i>J</i> = 7.4 Hz, 1H), 3.33 (s, 2H), 3.00 - 2.78 (m, 2H), 2.50 (p, <i>J</i> = 1.9 Hz, 2H), 2.27 (s, 3H), 1.51 (dt, <i>J</i> = 14.9, 7.5 Hz, 2H), 0.89 (t, <i>J</i> = 7.3 Hz, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -56.96

10

20

30

【 0 5 7 1 】

【表 6 - 5】

F9	125-131		ESIMS m/z 621 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.54 (s, 1H), 8.03 - 7.94 (m, 2H), 7.83 - 7.75 (m, 2H), 7.38 (dd, J = 8.9, 1.2 Hz, 2H), 7.26 (s, 3H), 6.87 (d, J = 1.7 Hz, 1H), 5.69 (d, J = 7.9 Hz, 1H), 4.76 - 4.53 (m, 1H), 4.00 - 3.81 (m, 2H), 3.35 (dt, J = 16.5, 8.0 Hz, 2H), 2.87 (dtd, J = 15.0, 10.0, 9.5, 4.6 Hz, 2H), 2.39 (q, J = 7.6 Hz, 2H), 2.33 (d, J = 1.3 Hz, 3H), 1.13 (td, J = 7.6, 0.6 Hz, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -58.03
F10	152 (分解)		ESIMS m/z 621 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.54 (s, 1H), 8.05 - 7.95 (m, 2H), 7.85 - 7.75 (m, 2H), 7.44 - 7.36 (m, 2H), 7.30 (t, J = 7.6 Hz, 2H), 7.23 - 7.11 (m, 2H), 5.68 (d, J = 7.9 Hz, 1H), 4.76 - 4.59 (m, 1H), 3.94 (s, 2H), 3.44 - 3.22 (m, 2H), 2.86 (ddt, J = 15.9, 9.9, 4.7 Hz, 2H), 2.41 (q, J = 7.6 Hz, 2H), 2.10 (s, 3H), 1.15 (td, J = 7.6, 0.7 Hz, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -58.03

10

20

30

【 0 5 7 2 】

【表 6 - 6】

F11			ESIMS m/z 579 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 12.27 (s, 1H), 9.83 (s, 1H), 9.39 (s, 1H), 8.11 - 8.04 (m, 2H), 8.02 (s, 1H), 7.99 - 7.93 (m, 1H), 7.81 - 7.76 (m, 1H), 7.66 - 7.59 (m, 2H), 7.49 - 7.39 (m, 2H), 7.25 - 7.13 (m, 2H), 7.05 (dd, <i>J</i> = 7.3, 1.9 Hz, 1H), 4.57 - 4.43 (m, 1H), 3.46 - 3.24 (m, 2H), 2.98 - 2.79 (m, 2H), 1.96 - 1.77 (m, 1H), 1.02 - 0.91 (m, 2H), 0.74 - 0.56 (m, 2H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -56.96	10
F12	146 (分解)		ESIMS m/z 607 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.54 (s, 1H), 8.03 - 7.96 (m, 2H), 7.84 - 7.75 (m, 2H), 7.45 - 7.34 (m, 4H), 7.34 - 7.27 (m, 2H), 7.06 (dd, <i>J</i> = 7.8, 1.3 Hz, 1H), 5.66 (d, <i>J</i> = 7.9 Hz, 1H), 4.74 - 4.59 (m, 1H), 4.00 - 3.86 (m, 2H), 3.35 (dt, <i>J</i> = 16.6, 8.3 Hz, 2H), 2.87 (ddd, <i>J</i> = 16.2, 10.8, 5.0 Hz, 2H), 2.44 (q, <i>J</i> = 7.6 Hz, 2H), 1.16 (dd, <i>J</i> = 7.8, 7.3 Hz, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -58.03	20 30

【 0 5 7 3 】

【表 6 - 7】

F13	136 (分解)		ESIMS m/z 633 ([M-H] ⁻)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.54 (s, 1H), 8.05 - 7.95 (m, 2H), 7.83 - 7.75 (m, 2H), 7.42 - 7.35 (m, 2H), 7.29 (d, J = 7.8 Hz, 1H), 7.25 - 7.13 (m, 2H), 6.90 - 6.85 (m, 1H), 5.68 (d, J = 7.8 Hz, 1H), 4.74 - 4.57 (m, 1H), 4.03 - 3.78 (m, 2H), 3.35 (dt, J = 16.5, 8.1 Hz, 2H), 2.87 (dtd, J = 14.6, 10.3, 9.6, 4.6 Hz, 2H), 2.40 - 2.23 (m, 5H), 1.55 (s, 2H), 0.89 (t, J = 7.3 Hz, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -58.03	10
F14			ESIMS m/z 581 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 11.93 (s, 1H), 9.85 (s, 1H), 9.39 (s, 1H), 8.12 - 8.05 (m, 2H), 8.02 (s, 1H), 7.96 (dd, J = 7.7, 1.6 Hz, 1H), 7.63 (dd, J = 9.2, 1.0 Hz, 2H), 7.49 - 7.39 (m, 3H), 7.36 (dd, J = 7.8, 1.6 Hz, 1H), 7.28 (td, J = 7.5, 1.5 Hz, 1H), 7.21 (td, J = 7.5, 1.7 Hz, 1H), 4.60 - 4.38 (m, 1H), 3.42 - 3.26 (m, 2H), 3.02 (hept, J = 6.9 Hz, 1H), 2.89 (ddd, J = 17.1, 13.2, 4.8 Hz, 2H), 1.18 (d, J = 6.9 Hz, 6H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -56.96	20
						30

【 0 5 7 4 】

【表 6 - 8】

F15	141 (分解)		ESIMS m/z 619 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.54 (s, 1H), 8.04 - 7.97 (m, 2H), 7.82 - 7.76 (m, 2H), 7.43 - 7.33 (m, 3H), 7.29 (dd, J = 7.7, 1.3 Hz, 2H), 7.15 (dd, J = 7.7, 1.6 Hz, 1H), 7.09 (dd, J = 7.7, 1.4 Hz, 1H), 5.68 (d, J = 7.9 Hz, 1H), 4.66 (ddt, J = 11.8, 7.3, 3.6 Hz, 1H), 4.04 - 3.85 (m, 2H), 3.44 - 3.26 (m, 2H), 2.87 (ddt, J = 15.9, 9.7, 5.1 Hz, 2H), 1.68 (ddd, J = 13.9, 8.6, 5.4 Hz, 1H), 0.93 - 0.77 (m, 2H), 0.71 - 0.61 (m, 1H), 0.57 (ddt, J = 11.0, 6.8, 2.4 Hz, 1H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -58.03
F16	239-243		ESIMS m/z 621 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.54 (s, 1H), 8.04 - 7.96 (m, 2H), 7.82 - 7.75 (m, 2H), 7.46 - 7.41 (m, 2H), 7.41 - 7.35 (m, 2H), 7.33 - 7.27 (m, 2H), 7.03 (dt, J = 8.0, 0.9 Hz, 1H), 5.65 (d, J = 8.0 Hz, 1H), 4.71 - 4.60 (m, 1H), 4.01 - 3.86 (m, 2H), 3.43 - 3.23 (m, 2H), 2.95 - 2.76 (m, 2H), 2.67 (hept, J = 6.9 Hz, 1H), 1.16 (ddd, J = 10.1, 6.9, 1.1 Hz, 6H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -58.03

10

20

30

【表 6 - 9】

F17	169-175		ESIMS m/z 649 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.54 (s, 1H), 7.93 - 7.88 (m, 2H), 7.81 - 7.77 (m, 2H), 7.41 - 7.35 (m, 2H), 7.33 (dd, J = 8.0, 1.9 Hz, 1H), 7.27 (s, 1H), 7.14 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 6.87 (s, 1H), 5.57 - 5.47 (m, 1H), 4.18 (s, 1H), 3.92 (d, J = 2.2 Hz, 2H), 3.17 (dt, J = 16.6, 5.2 Hz, 1H), 2.93 (dd, J = 11.4, 5.9 Hz, 2H), 2.75 - 2.58 (m, 2H), 2.34 (t, J = 0.9 Hz, 3H), 2.18 - 2.01 (m, 1H), 1.79 (s, 1H), 1.19 - 1.09 (m, 6H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -58.03
------------	---------	--	--	--	---

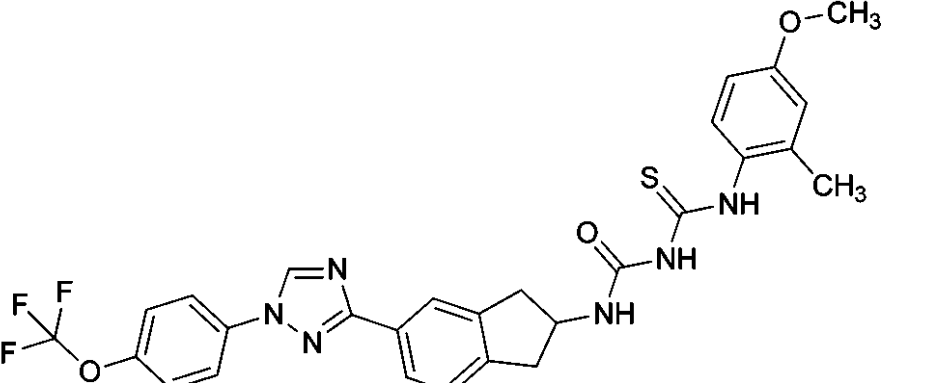
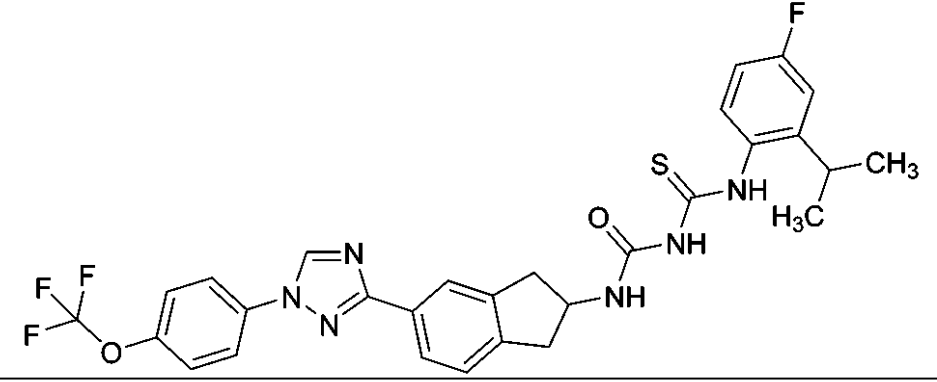
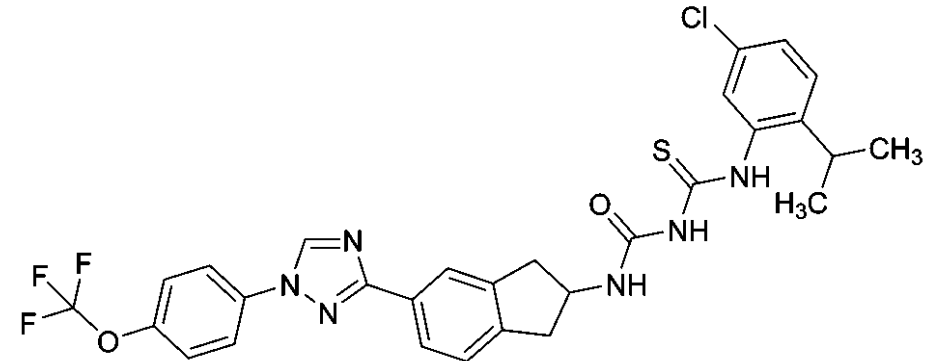
10

20

【 0 5 7 6 】

【表 7 - 1】

表 5. 例示される P 系列の化合物の構造および製造方法

番号	構造	製造に対応 しうる実施 例
P1		23
P2		23
P3		23

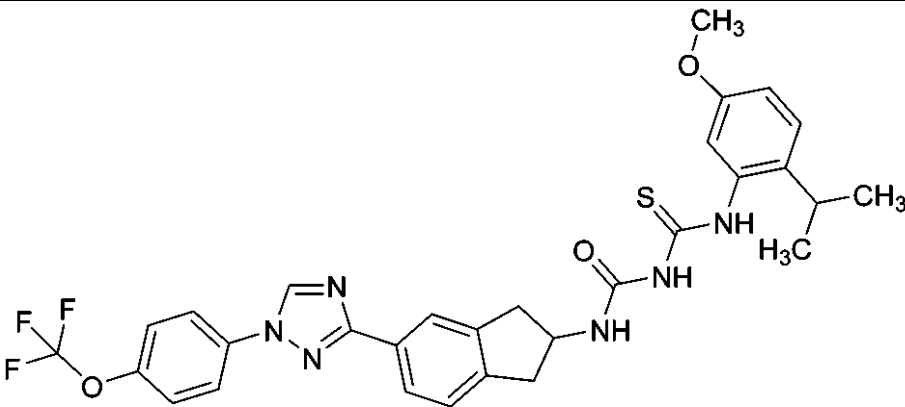
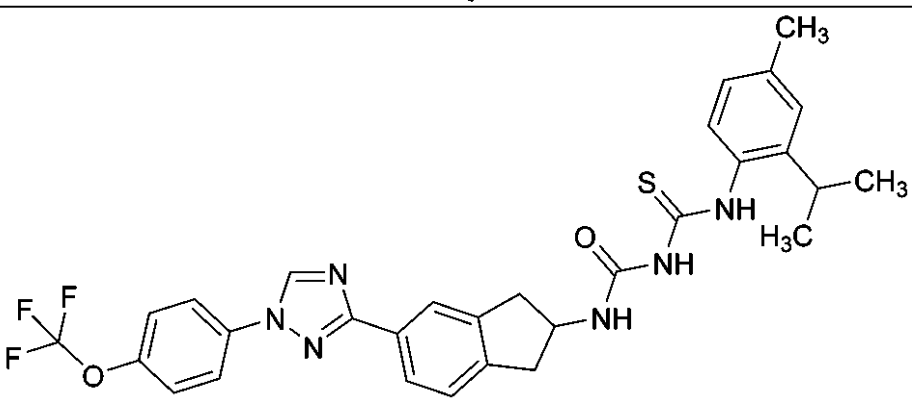
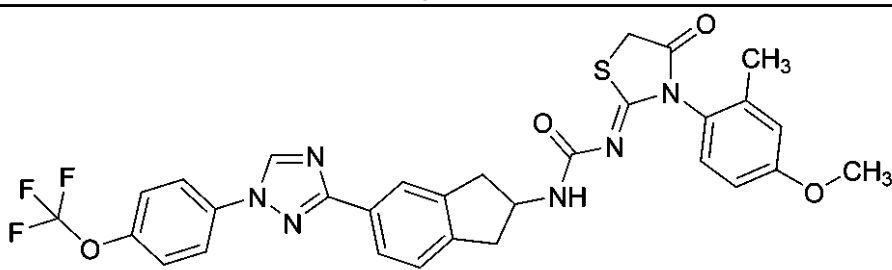
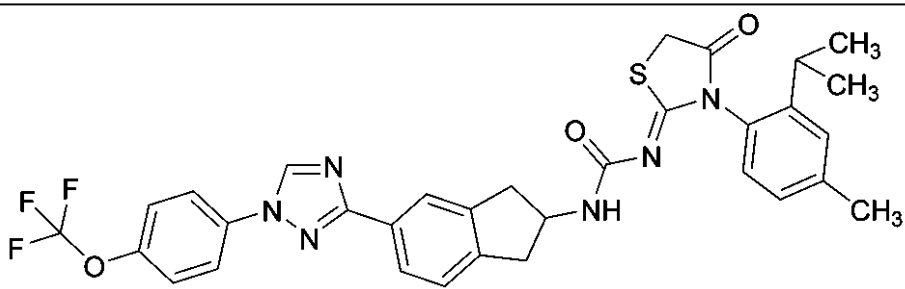
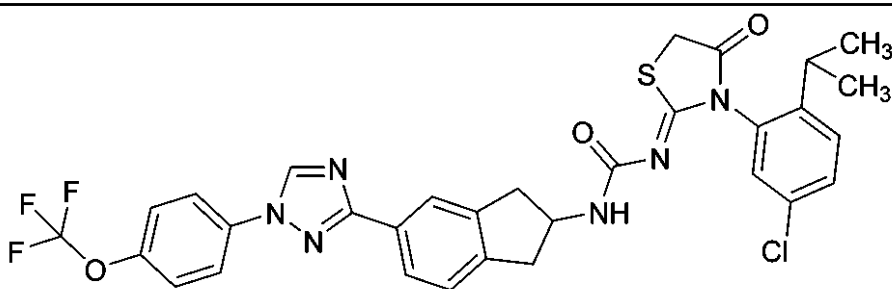
10

20

30

【 0 5 7 7 】

【表 7 - 2】

P4		23
P5		23
P6		28
P7		28
P8		28

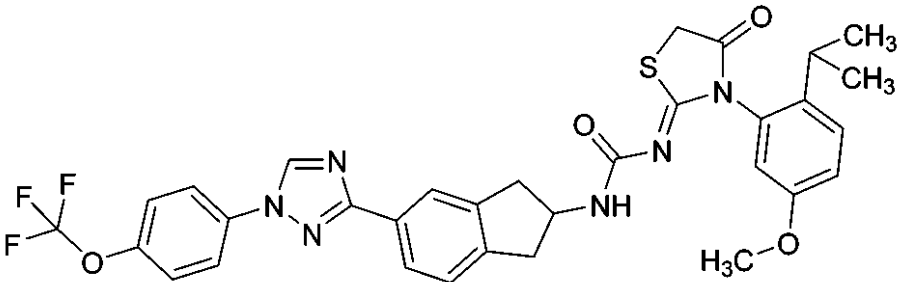
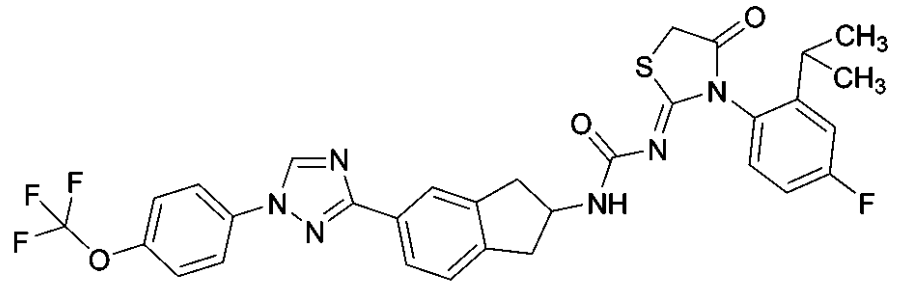
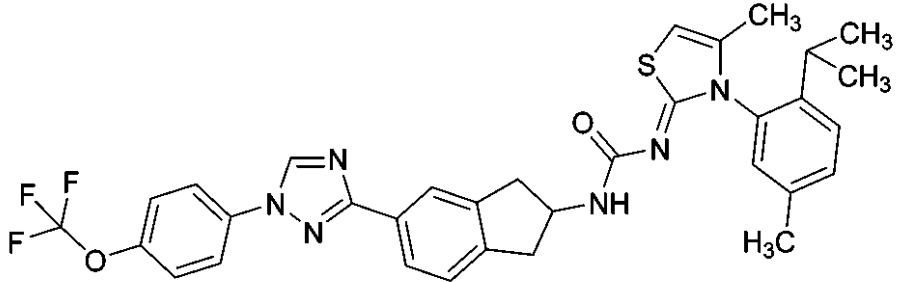
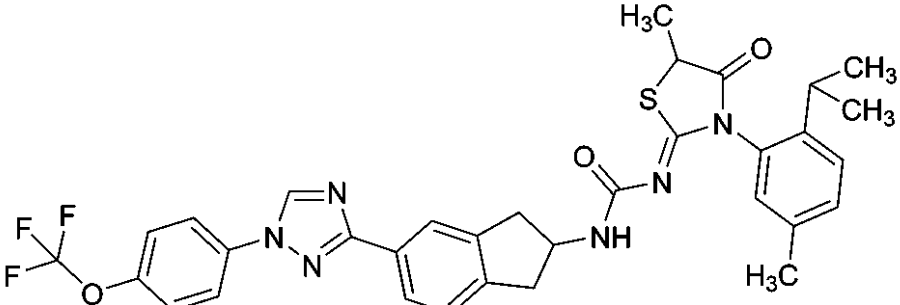
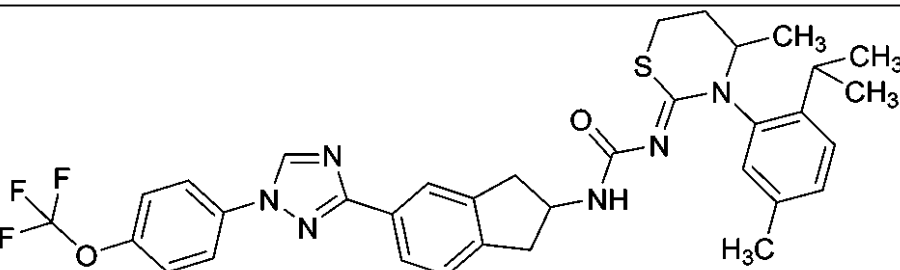
10

20

30

40

【表 7 - 3】

P9		28
P10		28
P12		29
P13		30
P16		33

10

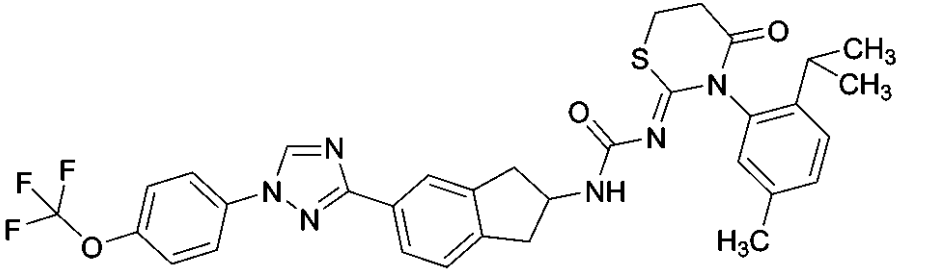
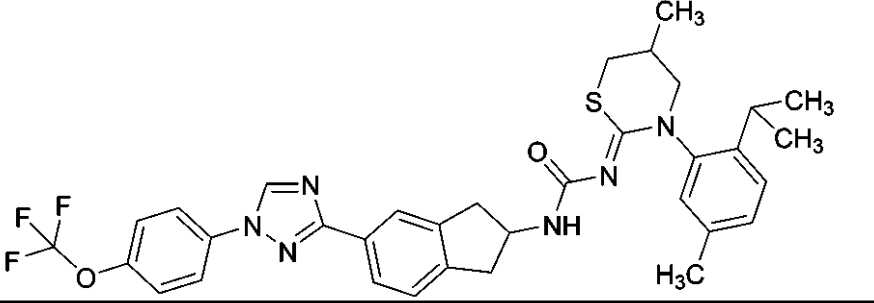
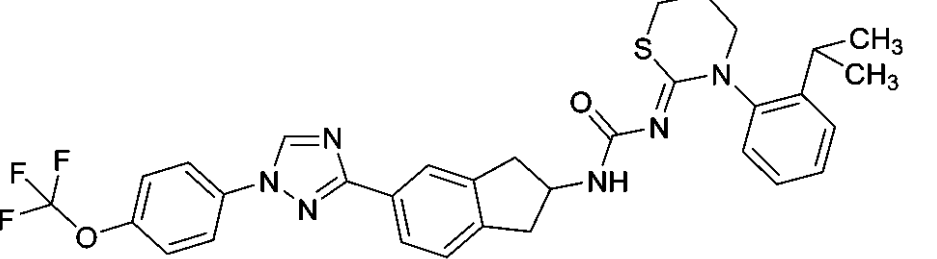
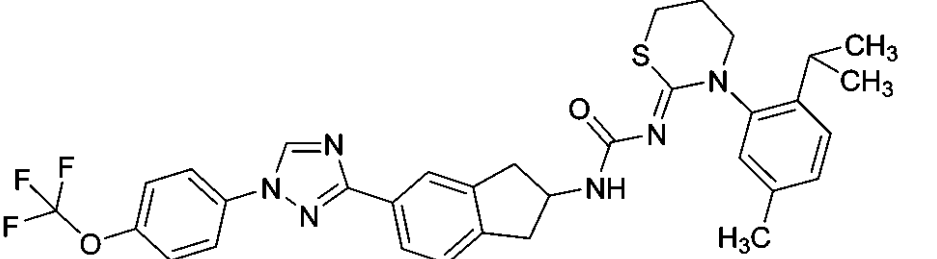
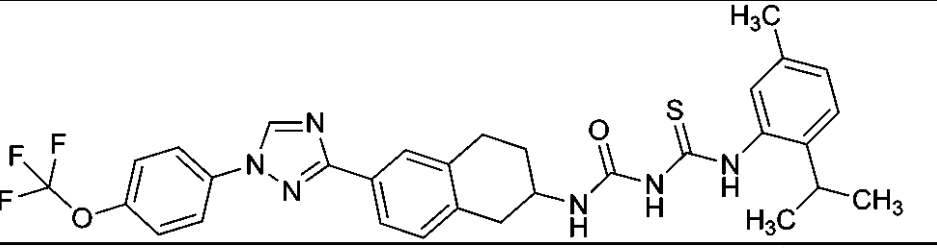
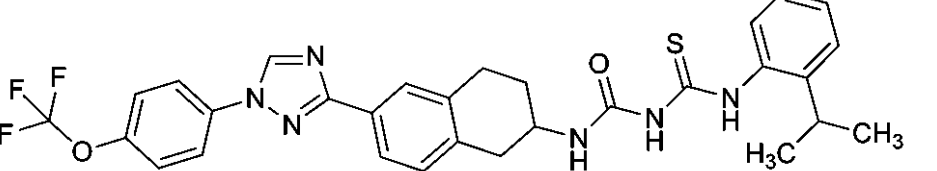
20

30

40

【 0 5 7 9 】

【表 7 - 4】

P17		32
P18		33
P19		33
P20		33
P21		23
P22		23

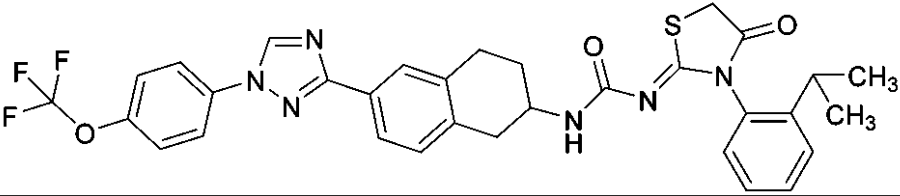
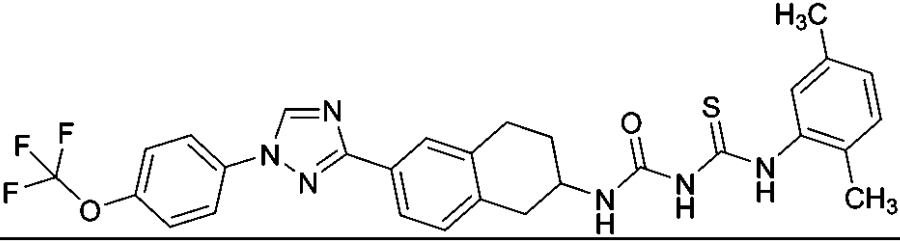
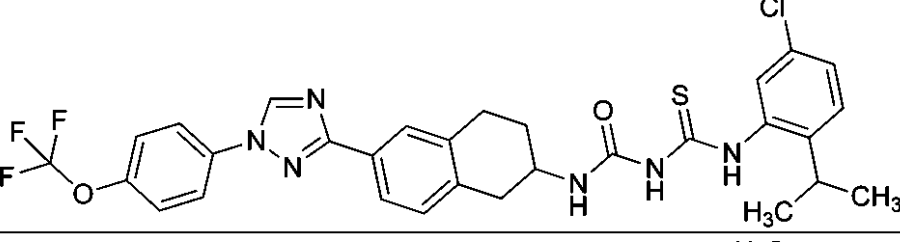
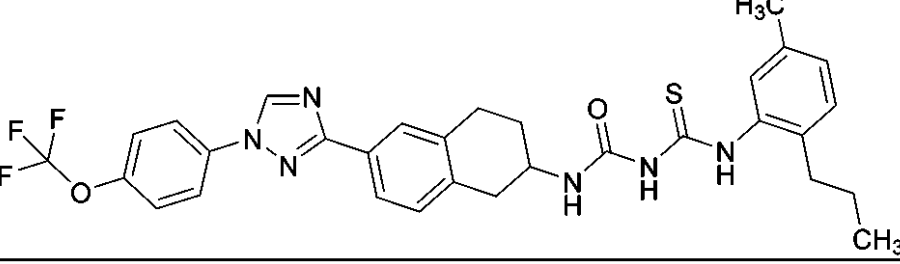
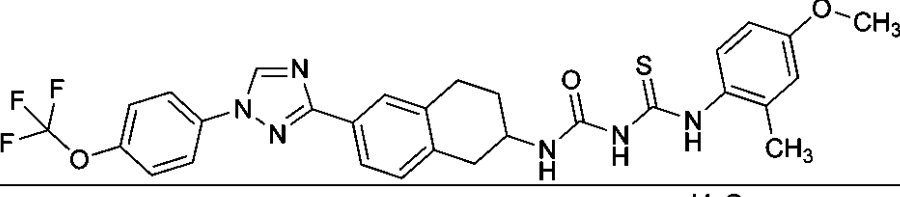
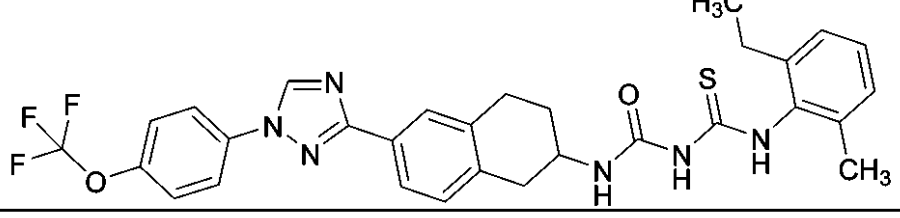
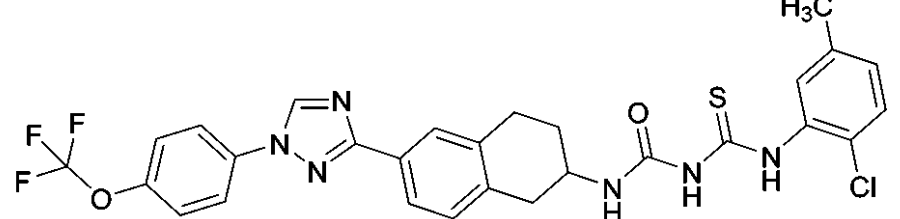
10

20

30

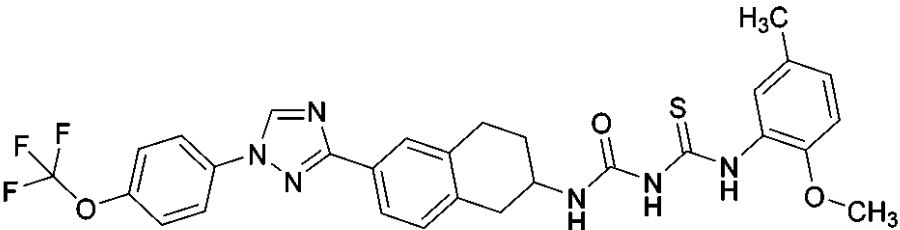
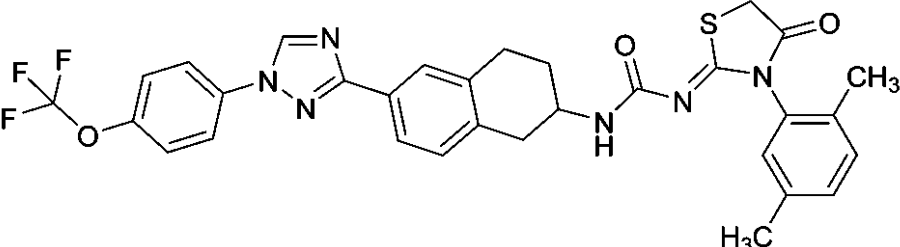
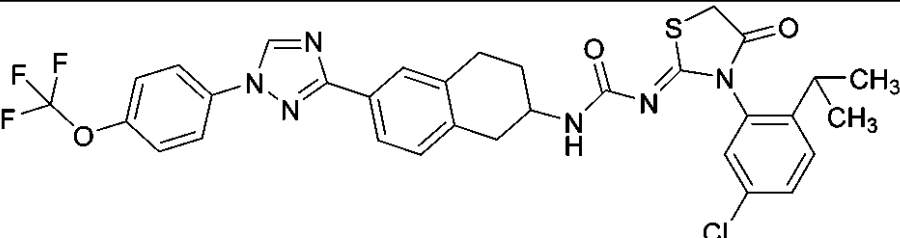
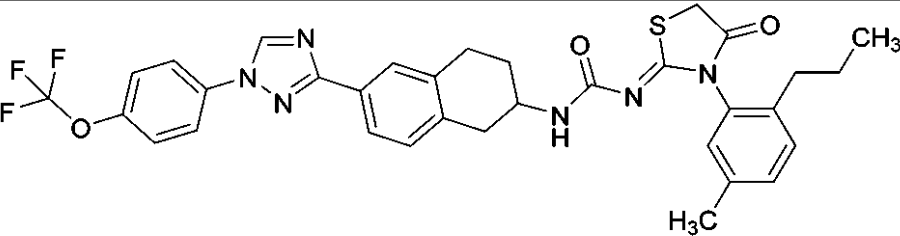
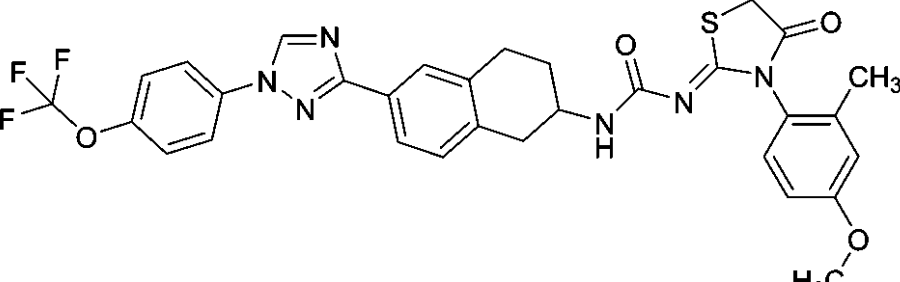
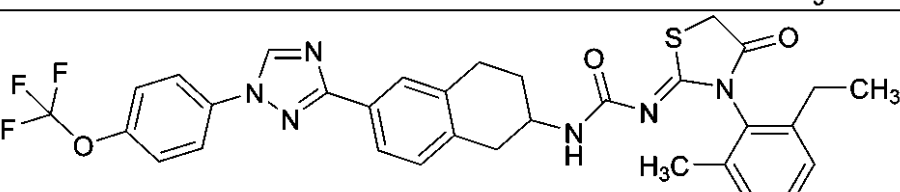
40

【表 7 - 5】

P24		35
P25		23
P26		23
P27		23
P28		23
P29		23
P30		23

【 0 5 8 1 】

【表 7 - 6】

P31		23
P32		35
P33		35
P34		35
P35		35
P36		35

10

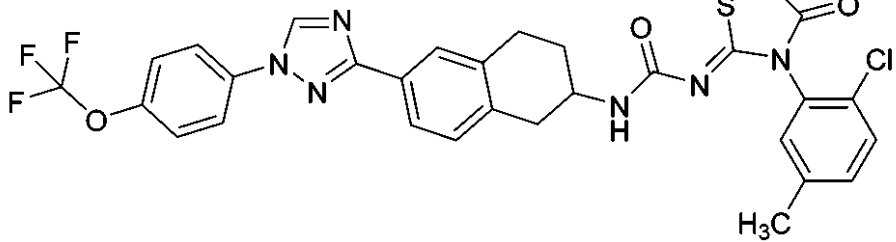
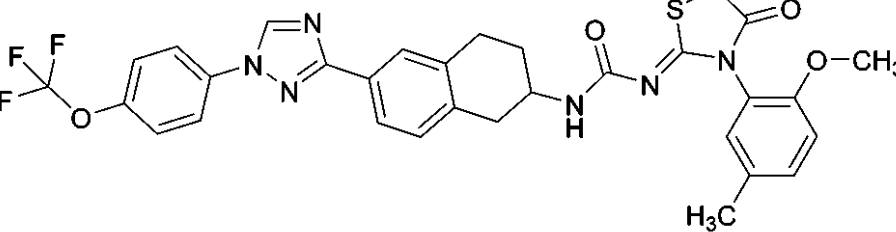
20

30

40

【 0 5 8 2 】

【表 7 - 7】

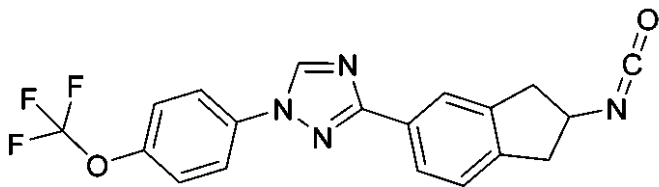
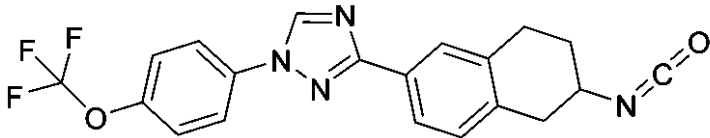
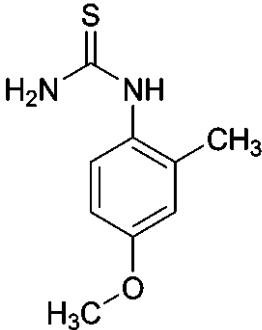
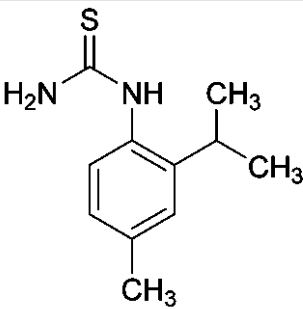
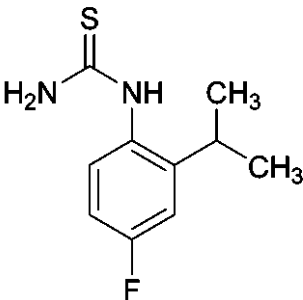
P37		35
P38		35

10

【 0 5 8 3 】

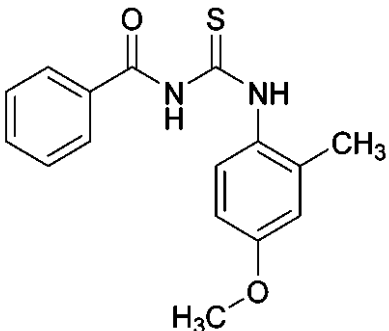
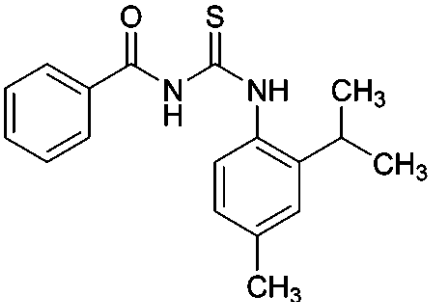
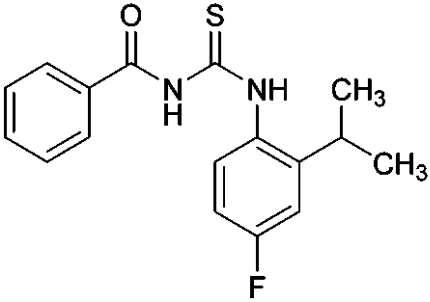
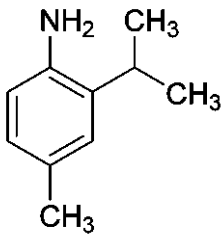
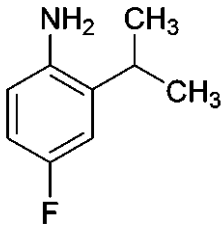
【表 8 - 1】

表 6. CA系列の化合物の構造および製造方法

番号	構造	製造に対応する実施例
CA1		22
CA2		22
CA3		24
CA4		24
CA5		24

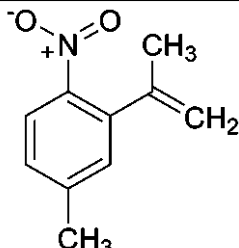
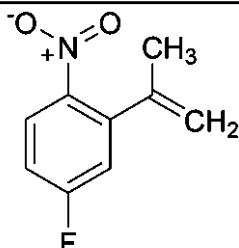
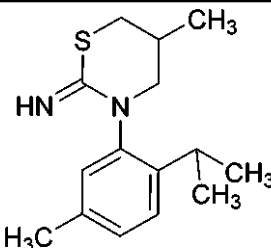
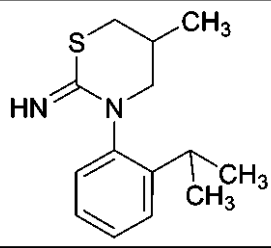
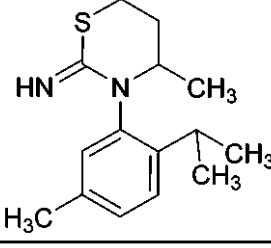
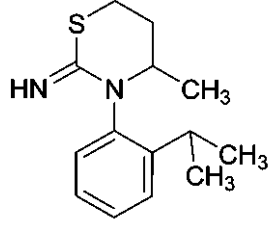
【 0 5 8 4 】

【表 8 - 2】

CA6		25
CA7		25
CA8		25
CA9		26
CA10		26

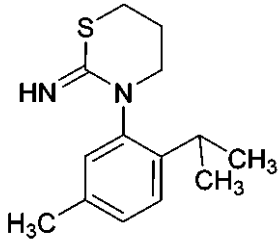
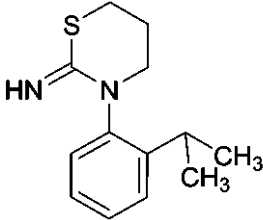
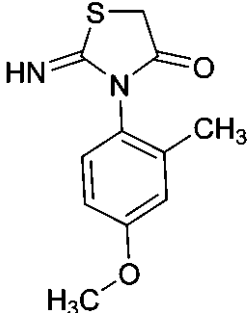
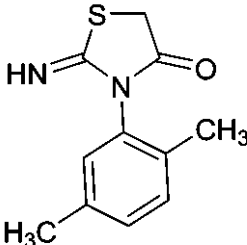
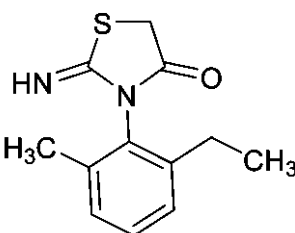
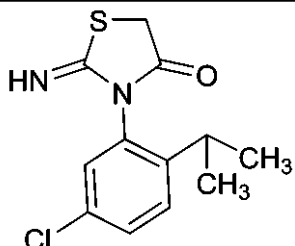
【 0 5 8 5 】

【表 8 - 3】

CA11		27
CA12		27
CA13		34
CA14		34
CA15		34
CA16		34

【 0 5 8 6 】

【表 8 - 4】

CA17		34
CA18		34
CA19		36
CA20		36
CA21		36
CA22		36

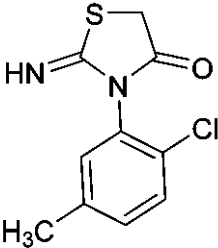
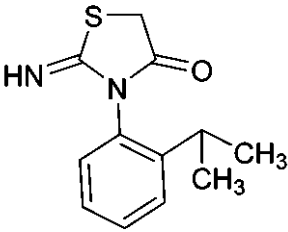
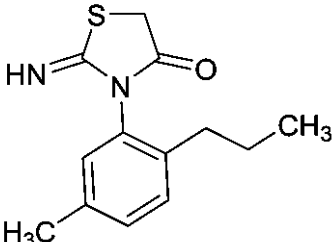
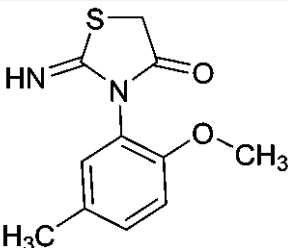
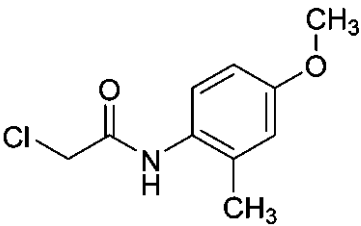
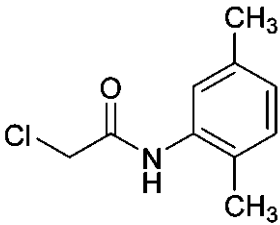
10

20

30

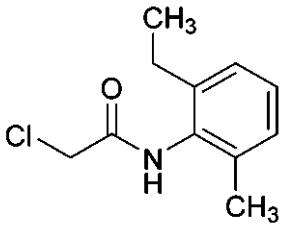
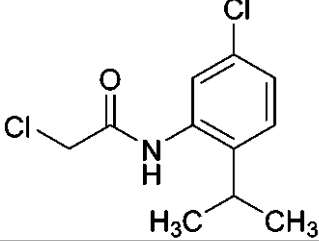
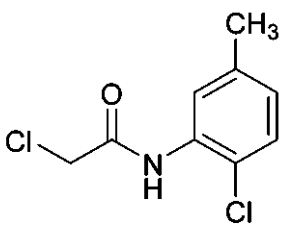
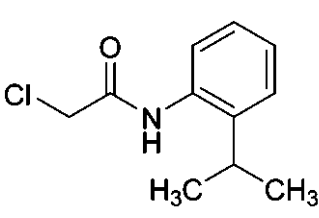
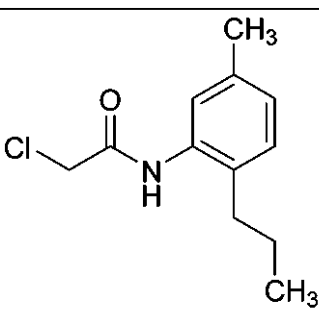
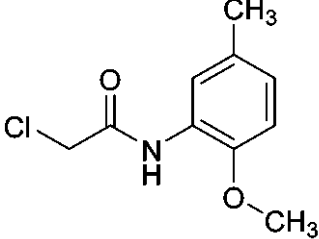
40

【表 8 - 5】

CA23		36
CA24		36
CA25		36
CA26		36
CA27		37
CA28		37

【 0 5 8 8 】

【表 8 - 6】

CA29		37
CA30		37
CA31		37
CA32		37
CA33		37
CA34		37

10

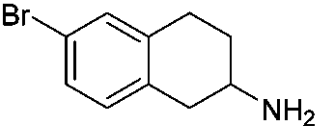
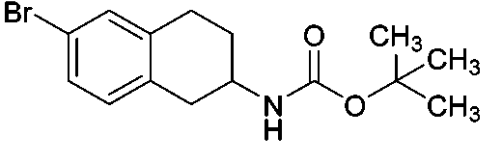
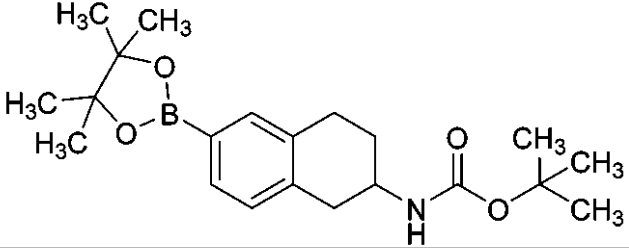
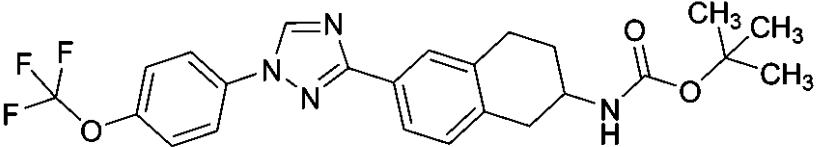
20

30

40

【 0 5 8 9 】

【表 8 - 7】

CA35		38
CA36		39
CA37		40
CA38		41

10

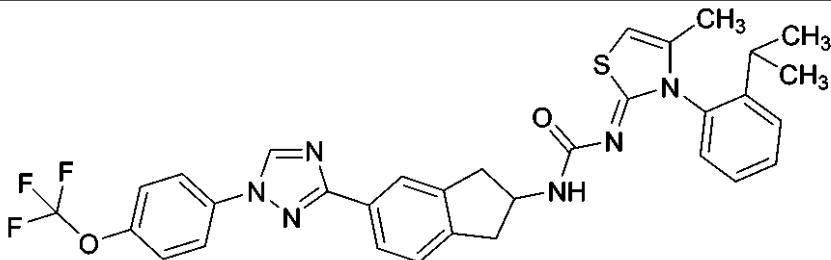
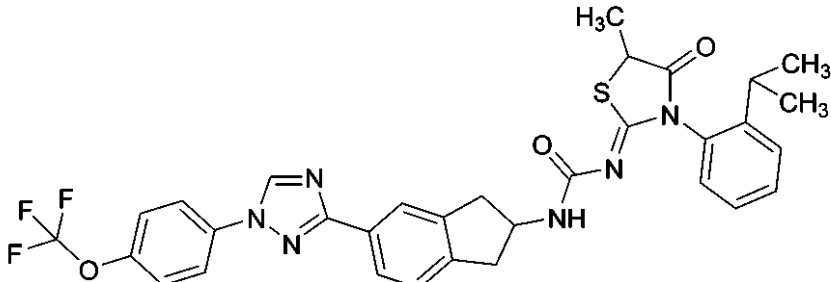
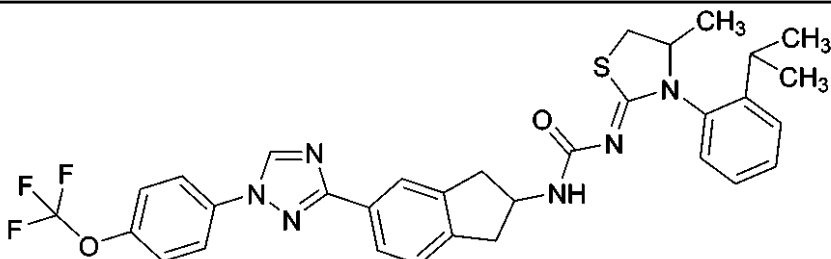
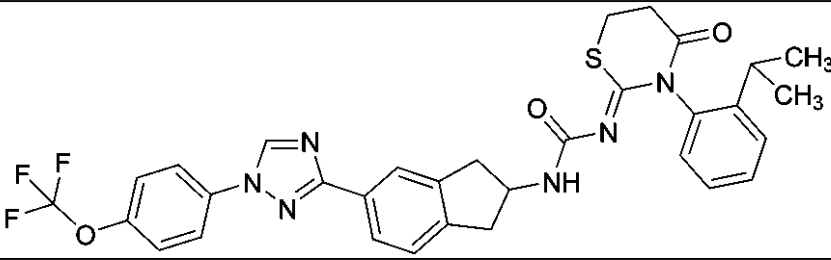
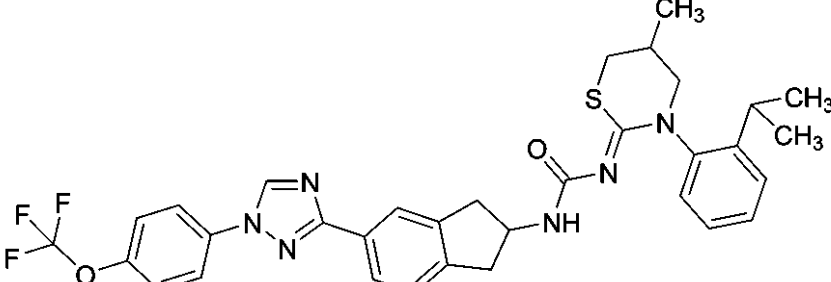
20

30

【 0 5 9 0 】

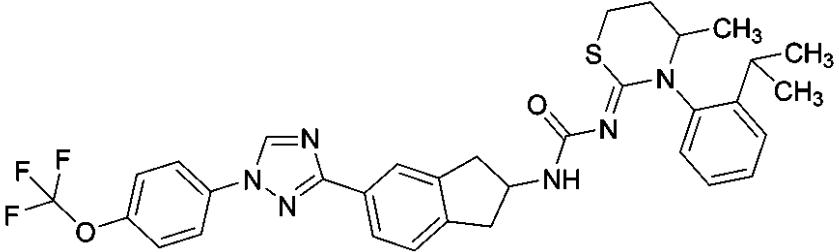
【表 9 - 1】

表 7. FA 系列の化合物の構造および製造方法

番号	構造	製造に対応 しうる実施 例
FA1		29
FA2		30
FA3		31
FA4		32
FA5		33

【0591】

【表 9 - 2】

FA6		33
------------	--	----

【 0 5 9 2 】

【表 10 - 1】

表 8 : 表 5 の化合物の分析データ

番号	Mp (°C)	IR (cm ⁻¹)	質量 (<i>m/z</i>)	¹ H NMR	¹³ CNMR; ¹⁹ F NMR
P1	166-168		ESIMS <i>m/z</i> 583 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 11.5 (bs, 1H), 9.38 (bs, 1H), 8.60 (s, 1H), 8.05 - 8.00 (m, 2H), 7.79 (d, <i>J</i> = 8.8 Hz, 2H), 7.37 (d, <i>J</i> = 8.8 Hz, 2H), 7.31 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 2H), 6.76 - 6.74 (m, 2H), 4.63 (bs, 1H), 3.78 (s, 3H), 3.42 - 3.32 (m, 2H), 2.94 - 2.80 (m, 2H), 2.25 (s, 3H)	
P2	186-188		ESIMS <i>m/z</i> 599 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 11.81 (s, 1H), 9.87 (s, 1H), 9.39 (s, 1H), 8.09 - 7.94 (m, 4H), 7.62 (d, <i>J</i> = 8.7 Hz, 2H), 7.45 - 7.36 (m, 3H), 7.16 (dd, <i>J</i> = 10.5, 3.0 Hz, 1H), 7.08 - 7.01 (m, 1H), 4.52 - 4.47 (m, 1H), 3.38 - 3.27 (m, 2H), 3.01 - 2.83 (m, 3H), 1.17 (d, <i>J</i> = 6.6 Hz, 6H)	
P3	167-169		ESIMS <i>m/z</i> 615 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 11.81 (s, 1H), 9.93 (s, 1H), 9.38 (s, 1H), 8.09 - 8.06 (m, 2H), 8.02 (s, 1H), 7.96 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.63 (d, <i>J</i> = 8.8 Hz, 2H), 7.57 (d, <i>J</i> = 2.0 Hz, 1H), 7.45 - 7.31 (m, 4H), 4.52 - 4.47 (m, 1H), 3.37 - 3.28 (m, 2H), 3.03 - 2.96 (m, 1H), 2.93 - 2.84 (m, 2H), 1.17 (d, <i>J</i> = 6.8 Hz, 6H)	

【 0 5 9 3 】

【表 1 0 - 2】

P4	170-172		ESIMS m/z 611 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 11.91 (s, 1H), 9.84 (s, 1H), 9.38 (s, 1H), 8.07 (d, <i>J</i> = 9.2 Hz, 2H), 8.02 (s, 1H), 7.96 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 2H), 7.62 (d, <i>J</i> = 8.8 Hz, 2H), 7.43 (t, <i>J</i> = 10.0 Hz, 2H), 7.25 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 1H), 7.10 (d, <i>J</i> = 2.4 Hz, 1H), 6.85 (dd, <i>J</i> = 8.8, 2.4 Hz, 1H), 4.52 - 4.48 (m, 1H), 3.72 (s, 3H), 3.37 - 3.28 (m, 2H), 2.98 - 2.85 (m, 3H), 1.15 (d, <i>J</i> = 6.8 Hz, 6H)	10
P5	120-122		ESIMS m/z 595 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 11.82 (s, 1H), 9.81 (s, 1H), 9.39 (s, 1H), 8.09 - 8.06 (m, 2H), 8.01 (s, 1H), 7.95 (d, <i>J</i> = 9.0 Hz, 1H), 7.62 (d, <i>J</i> = 9.0 Hz, 2H), 7.44 - 7.40 (m, 2H), 7.25 (d, <i>J</i> = 8.1 Hz, 1H), 7.15 (s, 1H), 7.01 (d, <i>J</i> = 8.1 Hz, 1H), 4.50 - 4.47 (m, 1H), 3.38 - 3.35 (m, 2H), 3.02 - 2.83 (m, 3H), 2.30 (s, 3H), 1.16 (d, <i>J</i> = 6.9 Hz, 6H)	20 30
P6	133-136		ESIMS m/z 632 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 9.36 (s, 1H), 8.07 - 8.03 (m, 2H), 7.90 - 7.87 (m, 3H), 7.61 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 2H), 7.30 (d, <i>J</i> = 8.1 Hz, 1H), 7.11 (d, <i>J</i> = 9.0 Hz, 1H), 6.90 - 6.81 (m, 2H), 4.44 - 4.40 (m, 1H), 4.13 - 4.02 (m, 2H), 3.75 (s, 3H), 3.22 - 3.10 (m, 2H), 2.96 - 2.85 (m, 2H), 2.03 (s, 3H)	40

【表 10 - 3】

P7	141-144		ESIMS m/z 635 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 9.36 (s, 1H), 8.07 (d, <i>J</i> = 9.2 Hz, 2H), 7.89 - 7.87 (m, 3H), 7.62 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 2H), 7.30 - 7.24 (m, 2H), 7.09 - 7.02 (m, 2H), 4.42 - 4.39 (m, 1H), 4.12 (d, <i>J</i> = 17.7 Hz, 1H), 4.00 (d, <i>J</i> = 17.7 Hz, 1H), 3.18 - 3.08 (m, 2H), 2.90 - 2.83 (m, 2H), 2.64 - 2.60 (m, 1H), 2.32 (s, 3H), 1.13 - 1.07 (m, 6H)	10
P8	153-155		ESIMS m/z 655 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 9.36 (s, 1H), 8.05 (d, <i>J</i> = 8.8 Hz, 2H), 7.95 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 1H), 7.89 - 7.87 (m, 2H), 7.60 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 2H), 7.49 - 7.42 (m, 3H), 7.30 (d, <i>J</i> = 5.4 Hz, 1H), 4.42 - 4.39 (m, 1H), 4.14 (d, <i>J</i> = 18.0 Hz, 1H), 3.96 (d, <i>J</i> = 18.0 Hz, 1H), 3.28 - 3.12 (m, 2H), 2.90 - 2.84 (m, 2H), 2.69 - 2.65 (m, 1H), 1.13 - 1.07 (m, 6H)	20 30

【0595】

【表 10 - 4】

P9	137-140		ESIMS m/z 651 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 9.36 (s, 1H), 8.05 (d, J = 9.2 Hz, 2H), 7.94 - 7.87 (m, 3H), 7.60 (d, J = 8.8 Hz, 2H), 7.35 (d, J = 9.2 Hz, 1H), 7.29 (d, J = 7.6 Hz, 1H), 6.98 (dd, J = 8.8, 2.4 Hz, 1H), 6.80 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 4.42 - 4.39 (m, 1H), 4.12 (d, J = 17.6 Hz, 1H), 3.98 (d, J = 17.6 Hz, 1H), 3.20 - 3.11 (m, 2H), 2.90 - 2.85 (m, 2H), 2.61 - 2.58 (m, 1H), 1.11 - 1.06 (m, 6H)	10
P10	222-224		ESIMS m/z 639 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 9.36 (s, 1H), 8.05 (d, J = 8.7 Hz, 2H), 7.91 - 7.87 (m, 3H), 7.61 (d, J = 8.4 Hz, 2H), 7.32 - 7.25 (m, 3H), 7.15 - 7.10 (m, 1H), 4.42 - 4.39 (m, 1H), 4.14 (d, J = 18.0 Hz, 1H), 4.00 (d, J = 18.0 Hz, 1H), 3.18 - 3.10 (m, 2H), 2.90 - 2.83 (m, 2H), 2.68 - 2.64 (m, 1H), 1.17 - 1.07 (m, 6H)	20 30
P12	122-124		ESIMS m/z 633 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 9.30 (s, 1H), 8.06 (d, J = 9.0 Hz, 2H), 7.95 - 7.90 (m, 2H), 7.61 (d, J = 8.7 Hz, 2H), 7.39 - 7.34 (m, 2H), 7.27 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 7.00 (s, 1H), 6.64 (s, 1H), 4.61 - 4.59 (m, 1H), 3.28 - 3.23 (m, 2H), 2.99 - 2.91 (m, 2H), 2.67 - 2.63 (m, 1H), 2.30 (s, 3H), 2.08 (s, 3H), 1.10 (d, J = 6.6 Hz, 3H), 1.01 (d, J = 6.6 Hz, 3H)	40

【表 10 - 5】

P13	140-142		ESIMS m/z 649 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 9.36 (s, 1H), 8.09 - 8.04 (m, 2H), 7.95 - 7.87 (m, 3H), 7.61 (d, J = 8.4 Hz, 2H), 7.35 - 7.28 (m, 2H), 7.21 (d, J = 7.2 Hz, 1H), 7.05 (s, 1H), 4.42 - 4.36 (m, 1H), 3.17 - 3.08 (m, 2H), 2.91 - 2.83 (m, 2H), 2.64 - 2.55 (m, 1H), 2.27 (s, 3H), 1.60 - 1.55 (m, 3H), 1.14 - 1.04 (m, 6H)	10
P16			ESIMS m/z 650 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (300 MHz, CD ₃ OD) δ 9.11 (s, 1H), 8.01 - 7.92 (m, 4H), 7.50 - 7.30 (m, 5H), 7.19 - 7.10 (m, 1H), 4.47 (bs, 2H), 3.80 (bs, 1H), 3.52 - 3.47 (m, 2H), 3.27 - 3.22 (m, 2H), 2.86 - 2.72 (m, 3H), 2.43 - 2.35 (m, 5H), 1.43 - 1.10 (m, 9H)	20
P17	170-172		ESIMS m/z 667 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.55 - 8.54 (m, 1H), 8.06 - 7.96 (m, 2H), 7.80 (d, J = 8.8 Hz, 2H), 7.54 (s, 1H), 7.44 - 7.32 (m, 4H), 7.16 (d, J = 8.4 Hz, 1H), 7.01 - 6.98 (m, 1H), 4.70 (s, 1H), 3.43 - 3.14 (m, 6H), 3.15 (d, J = 6.0, 1H), 2.96 - 2.92 (m, 1H), 2.75 (t, J = 6.4, 1H), 2.30 (s, 3H), 1.23 - 1.10 (m, 6H)	30

【表 10 - 6】

P18	156-158		ESIMS m/z 650 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.53 (s, 1H), 7.97 (s, 1H), 7.95 (s, 1H), 7.78 (d, $J = 9.2$ Hz, 2H), 7.37 (d, $J = 8.4$ Hz, 2H), 7.26 (s, 1H), 7.19 (dd, $J = 8.4, 4.0$ Hz, 1H), 7.08 (d, $J = 8.4$, 1H), 6.84 (s, 1H), 5.08 (d, $J = 8.0$ Hz, 1H), 4.59 (d, $J = 7.2$ Hz, 1H), 3.59 (s, 1H), 3.38 (d, $J = 6.8$ Hz, 1H), 3.33 - 3.24 (m, 2H), 3.00 - 2.73 (m, 4H), 2.49 (bs, 1H), 2.29 (s, 3H), 1.18 - 1.12 (m, 9H)	10
P19	105-107		ESIMS m/z 621 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃) δ 8.52 (s, 1H), 7.96 - 7.93 (m, 2H), 7.77 (d, $J = 8.7$ Hz, 2H), 7.38 - 7.28 (m, 4H), 7.21 - 7.02 (m, 3H), 5.05 (d, $J =$ 7.5 Hz, 1H), 4.62 - 4.54 (m, 1H), 3.72 - 3.64 (m, 1H), 3.54 - 3.46 (m, 1H), 3.34 - 3.22 (m, 2H), 3.10 - 2.92 (m, 3H), 2.84 - 2.70 (m, 2H), 2.35 - 2.29 (m, 2H), 1.24 - 1.14 (m, 6H)	20 30

【0598】

【表 10 - 7】

P20	220-222		ESIMS m/z 636 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃) δ 8.53 (s, 1H), 7.97 (s, 1H), 7.94 (s, 1H), 7.79 (d, J = 8.7 Hz, 2H), 7.37 (d, J = 8.4 Hz, 2H), 7.24 - 7.19 (m, 2H), 7.08 (d, J = 7.5 Hz, 1H), 6.86 (s, 1H), 5.08 - 5.06 (m, 1H), 4.60 (m, 1H), 3.71 - 3.65 (m, 1H), 3.53 - 3.47 (m, 1H), 3.33 - 3.26 (m, 2H), 3.09 - 3.05 (m, 2H), 2.93 - 2.72 (m, 3H), 2.35 - 2.25 (m, 5H), 1.21 - 1.13 (m, 6H)	10
P21	147-151		ESIMS m/z 609 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 11.84 (s, 1H), 9.86 (s, 1H), 8.60 (s, 1H), 7.90 (d, J = 5.0 Hz, 2H), 7.83 - 7.78 (m, 2H), 7.38 (d, J = 8.6 Hz, 2H), 7.26 - 7.09 (m, 4H), 5.97 (s, 1H), 4.15 (s, 1H), 3.24 - 2.92 (m, 4H), 2.68 (s, 1H), 2.32 (s, 3H), 2.17 (d, J = 11.8 Hz, 1H), 1.76 (s, 1H), 1.23 (d, J = 6.9 Hz, 6H)	20
P22	171-174		ESIMS m/z 595 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 11.85 (s, 1H), 9.50 (s, 1H), 8.59 (s, 1H), 7.92 (d, J = 5.5 Hz, 2H), 7.83 - 7.77 (m, 2H), 7.36 (dd, J = 18.0, 10.6 Hz, 3H), 7.16 (d, J = 8.4 Hz, 1H), 5.70 (s, 1H), 4.18 (s, 1H), 3.14 (ddd, J = 28.8, 15.1, 6.0 Hz, 2H), 3.00 (t, J = 6.6 Hz, 2H), 2.71 (s, 1H), 2.15 (s, 1H), 1.80 (s, 1H), 1.25 (d, J = 6.8 Hz, 6H)	30 40

【表 10 - 8】

P24	128-132		ESIMS m/z 635 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.55 - 8.58 (m, 1H), 7.91 - 7.93 (m, 2H), 7.80 - 7.82 (dd, J = 6.6, 2Hz, 2H), 7.46 (m, 2H), 7.40-7.41 (d, J =8.4Hz, 2H), 7.32 (m, 1H), 7.15 (d, J =8.7Hz, 1H), 7.07 - 7.08 (d, J = 7.8Hz, 1H), 5.51 - 5.52 (m, 1H), 4.19 - 4.20 (m, 1H), 3.93 - 3.94 (s, 2H), 3.20 (m, 1H), 2.95 - 2.97 (m, 2H), 2.71 (m, 2H), 2.12 - 2.14 (br, s, 1H), 1.81 - 1.83 (br, s, 1H), 1.19 - 1.21 (m, 6H)	
P25	188-191		ESIMS m/z 581 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- d_6) δ 11.95 (s, 1H), 9.89 (s, 1H), 9.38 (s, 1H), 8.10 - 8.05 (m, 2H), 7.92 - 7.83 (m, 2H), 7.68 - 7.58 (m, 2H), 7.42 (s, 1H), 7.25 (t, J = 8.1 Hz, 2H), 7.15 (d, J = 7.7 Hz, 1H), 7.00 (dd, J = 7.4, 1.7 Hz, 1H), 4.05 (d, J = 8.7 Hz, 1H), 3.13 (dd, J = 16.9, 5.0 Hz, 1H), 2.95 (t, J = 6.6 Hz, 2H), 2.74 (dd, J = 16.8, 7.2 Hz, 1H), 2.27 (s, 3H), 2.17 (s, 3H), 2.03 (d, J = 11.4 Hz, 1H), 1.83 (dt, J = 13.5, 7.1 Hz, 1H)	

10

20

30

【0600】

【表 1 0 - 9】

P26	179-183		ESIMS m/z 629 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃) δ 11.96 (s, 1H), 9.55 (s, 1H), 8.60 (s, 1H), 7.91 (d, J = 5.2 Hz, 2H), 7.83 - 7.77 (m, 2H), 7.50 (s, 1H), 7.38 (d, J = 8.6 Hz, 2H), 7.28 (d, J = 1.3 Hz, 3H), 7.16 (d, J = 8.5 Hz, 1H), 5.77 (s, 1H) 4.17 (s, 1H), 3.23 - 2.93 (m, 4H), 2.69 (dd, J = 16.6, 8.6 Hz, 1H), 2.15 (s, 1H), 1.88 - 1.73 (m, 1H), 1.23 (d, J = 6.8 Hz, 6H)	10
P27	152-156		ESIMS m/z 609 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃) δ 11.81 (s, 1H), 9.57 (s, 1H), 8.60 (s, 1H), 7.91 (d, J = 5.1 Hz, 2H), 7.84 - 7.75 (m, 2H), 7.42 - 7.34 (m, 2H), 7.30 (s, 1H), 7.19 - 7.12 (m, 2H), 7.07 (d, J = 7.9 Hz, 1H), 4.17 (s, 1H), 3.18 (dd, J = 16.6, 5.2 Hz, 1H), 3.00 (t, J = 6.7 Hz, 2H), 2.70 (s, 1H), 2.55 (t, J = 7.7 Hz, 2H), 2.32 (s, 3H), 2.15 (s, 1H), 1.80 (s, 1H), 1.64 - 1.56 (m, 5H), 0.95 (t, J = 7.3 Hz, 3H)	20 30

【表 1 0 - 1 0】

P28	173-176		ESIMS m/z 597 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃) δ 11.56 (s, 1H), 9.50 (s, 1H), 8.59 (s, 1H), 7.92 (d, J = 5.8 Hz, 2H), 7.80 (d, J = 9.0 Hz, 2H), 7.41 - 7.31 (m, 4H), 7.16 (d, J = 8.4 Hz, 1H), 6.78 (d, J = 7.2 Hz, 2H), 5.87 (s, 1H), 4.17 (s, 1H), 3.79 (s, 3H), 3.17 (d, J = 16.3 Hz, 1H), 2.99 (s, 2H), 2.72 (s, 1H), 2.27 (s, 3H), 2.14 (s, 1H), 1.81 (s, 1H)	10
P29	192-195		ESIMS m/z 596 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃) δ 11.46 (s, 1H), 9.85 (s, 1H), 8.59 (s, 1H), 7.92 (d, J = 5.3 Hz, 2H), 7.80 (d, J = 8.9 Hz, 2H), 7.38 (d, J = 8.6 Hz, 2H), 7.21 (d, J = 7.5 Hz, 1H), 7.17 - 7.09 (m, 3H), 5.82 (s, 1H), 4.16 (s, 1H), 3.17 (dd, J = 16.7, 5.2 Hz, 1H), 2.98 (t, J = 6.6 Hz, 2H), 2.66 (dq, J = 23.2, 8.1 Hz, 3H), 2.28 (s, 3H), 2.15 (s, 1H), 1.86 - 1.72 (m, 1H), 1.23 (t, J = 7.6 Hz, 3H)	20 30

【表 1 0 - 1 1】

P30	188-191		ESIMS m/z 602 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 12.34 (s, 1H), 10.05 (s, 1H), 9.38 (s, 1H), 8.11 - 8.00 (m, 2H), 7.93 - 7.81 (m, 3H), 7.66 - 7.55 (m, 2H), 7.42 (d, J = 8.2 Hz, 1H), 7.26 (d, J = 7.8 Hz, 2H), 7.14 - 7.05 (m, 1H), 4.07 (s, 1H), 3.13 (dd, J = 16.8, 5.0 Hz, 1H), 2.95 (t, J = 6.6 Hz, 2H), 2.75 (dd, J = 16.8, 7.1 Hz, 1H), 2.30 (s, 3H), 2.04 (d, J = 13.7 Hz, 1H), 1.83 (dt, J = 13.4, 7.1 Hz, 1H)	
P31	171-175		ESIMS m/z 597 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃) δ 12.11 (s, 1H), 9.23 (s, 1H), 8.61 (s, 1H), 8.20 (s, 1H), 7.90 (dd, J = 4.2, 2.6 Hz, 2H), 7.85 - 7.73 (m, 2H), 7.38 (d, J = 8.6 Hz, 2H), 7.12 (d, J = 8.4 Hz, 1H), 6.99 (d, J = 8.6 Hz, 1H), 6.82 (d, J = 8.4 Hz, 1H), 6.08 (s, 1H), 4.17 (s, 1H), 3.87 (s, 3H), 3.15 (dd, J = 16.7, 5.2 Hz, 1H), 2.97 (t, J = 6.6 Hz, 2H), 2.66 (dd, J = 16.7, 8.5 Hz, 1H), 2.31 (s, 3H), 2.21 - 2.06 (m, 1H), 1.78 (q, J = 11.9, 9.9 Hz, 1H), 1.57 (s, 3H)	

10

20

30

【 0 6 0 3】

40

【表 1 0 - 1 2】

P32	160-162		ESIMS m/z 621 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.54 (s, 1H), 7.89 - 7.93 (m, 2H), 7.77 - 7.82 (d, J = 8.8 Hz, 2H), 7.38 (d, J = 8.80 Hz, 2H), 7.20 - 7.24 (d, J = 7.6 Hz, 1H), 7.17 (br d, J = 9.78 Hz, 2H), 6.91 (s, 1H), 5.53 (d, J = 7.6 Hz, 1H), 4.18 (br s, 1H), 3.91 (s, 2H), 3.18 (br dd, J = 16.63, 5.38 Hz, 1H), 2.94 (m, 2H), 2.69 (br dd, J = 16.8, 8.4, Hz, 1H), 2.35 (s, 3H), 2.08 - 2.14 (m, 4H), 1.74 - 1.87 (m, 1H)	10
P33	146-148		ESIMS m/z 669 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.55 (s, 1H), 7.91 (d, J = 4.89 Hz, 2H), 7.75 - 7.82 (dd, J = 6.8, 2Hz, 2H), 7.34 - 7.45 (m, 4H), 7.12 - 7.18 (m, 1H), 7.07 (t, J = 2.45 Hz, 1H), 5.48 - 5.54 (dd, J = 8, 3.6 Hz, 1H), 4.15 - 4.22 (m, 1H), 3.91 - 3.98 (s, 2H), 3.15 - 3.27 (m, 1H), 2.86 - 3.00 (m, 2H), 2.57 - 2.75 (m, 2H), 2.12 (br s, 1H), 1.74 - 1.87 (m, 1H), 1.12 - 1.20 (m, 6H)	20 30

【表 10 - 13】

P34	140-142		ESIMS m/z 650 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.54 (s, 1H), 7.89 - 7.95 (m, 2H), 7.79 (dd, J = 6.8, 2.0 Hz, 2H), 7.39 (d, J = 8.8 Hz, 1H), 7.21 (d, J = 8.31 Hz, 2H), 7.14 (d, J = 8Hz, 1H), 6.89 - 6.97 (m, 2H), 5.52 (dd, J = 8.1, 4.5 Hz, 1H), 4.19 (br s, 1H), 3.90 (d, J = 2.0 HZ, 2H), 3.18 (dd, J = 16.6, 5.2 Hz, 1H), 2.93 - 2.96 (m, 2H), 2.70 - 2.62 (m, 1H), 2.34 (m, 5H), 2.1 (br, s, 1H), 1.79 (m, 1H), 1.5 (s, 2H), 0.94 (t, J = 7.2 Hz, 3H)	
P35	173-180		ESIMS m/z 637 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.53 (s, 1H), 7.89 (d, J = 5.0 Hz, 2H), 7.80 - 7.75 (m, 2H), 7.37 (d, J = 8.4 Hz, 2H), 7.13 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 6.99 (dd, J = 7.8, 4.3 Hz, 1H), 6.82 (d, J = 8.6 Hz, 2H), 5.57 - 5.50 (m, 1H), 4.18 (s, 1H), 4.12 - 3.88 (m, 2H), 3.79 (s, 3H), 3.16 (dd, J = 16.6, 5.4 Hz, 1H), 2.93 (d, J = 7.3 Hz, 2H), 2.73 - 2.63 (m, 1H), 2.10 (d, J = 1.9 Hz, 4H), 1.81 (s, 1H)	

10

20

30

【0605】

【表 1 0 - 1 4】

P36	128-130		ESIMS m/z 635 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.55 - 8.53 (m, 1H), 7.90 (d, J = 4.4 Hz, 2H), 7.82 - 7.77 (dd, J = 6.8, 2.0 Hz, 2H), 7.38 (d, J = 8.3 Hz, 2H), 7.31 (d, J = 7.8 Hz, 1H), 7.13 - 7.23 (m, 3H), 5.53 (d, J = 7.8 Hz, 1H), 4.17 (br s, 1H), 3.94 (s, 2H), 3.21 - 3.16 (dd, J = 16.4, 5.2 Hz, 1H), 2.99 - 2.93 (m, 2H), 2.69 (m 1H), 2.43 (q, J = 7.66 Hz, 2H), 2.13 (m, 4H), 1.85 - 1.75 (m, 1H), 1.23 - 1.15 (m, 3H)	10
P37	152-154		ESIMS m/z 641 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.54 (s, 1H), 7.96 - 7.90 (m, 2H), 7.82 - 7.76 (dd, J = 6.8, 2.0 Hz, 2H), 7.43 - 7.37 (m, 3H), 7.22 (d, J = 6.8 Hz, 1H), 7.18 - 7.13 (dd, J = 8.4, 2.4 Hz, 1H), 7.06 (br s, 1H), 5.50 (dd, J = 8.0, 4.0 Hz, 1H), 4.20 (br s, 1H), 3.95 (m, 2H), 3.19 (m, 1H), 3.00 - 2.92 (m, 2H), 2.76 - 2.66 (m, 1H), 2.38 (s, 3H), 2.16 - 2.10 (m, 1H), 1.84 (br d, J = 7.8 Hz, 1H)	20 30

【 0 6 0 6 】

【表 1 0 - 1 5】

P38	165-168		ESIMS m/z 637 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.54 (s, 1H), 7.93 - 7.89 (m, 2H), 7.79 (dd, J = 6.8, 2.0 Hz, 2H), 7.38 (d, J = 8.8 Hz, 2H), 7.21 (d, J = 8.4 Hz, 1H), 7.14 (dd, J = 8.4, 3.2 Hz, 1H), 6.97 - 6.89 (m, 2H), 5.52 (d, J = 7.6 Hz, 1H), 4.19 (br s, 1H), 3.96 - 3.91 (m, 2H), 3.77 (d, J = 2.0 Hz, 3H), 3.23 - 3.13 (m, 1H), 2.95 (m, 2H), 2.72 - 2.65 (m, 1H), 2.32 (s, 3H), 2.17 - 2.06 (m, 1H), 1.86 - 1.75 (m, 1H)	
------------	---------	--	--	---	--

10

20

【 0 6 0 7 】

【表 1 1 - 1】

表 9 : 表 6 の化合物の分析データ

番号	Mp (°C)	IR (cm ⁻¹)	質量 (<i>m/z</i>)	¹ H NMR	¹³ CNMR; ¹⁹ F NMR
FA1	124-126		ESIMS <i>m/z</i> 619 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 9.35 (s, 1H), 8.07 - 8.04 (m, 2H), 7.88 - 7.86 (m, 2H), 7.60 (d, <i>J</i> = 9.0 Hz, 2H), 7.53 - 7.42 (m, 2H), 7.34 - 7.29 (m, 2H), 7.20 (d, <i>J</i> = 7.5 Hz, 1H), 7.13 (d, <i>J</i> = 7.5 Hz, 1H), 6.50 (s, 1H), 4.46 - 4.38 (m, 1H), 3.18 - 3.05 (m, 2H), 2.88 - 2.80 (m, 2H), 2.45 (d, <i>J</i> = 6.6 Hz, 1H), 2.30 (s, 3H), 1.13 (t, <i>J</i> = 6.9 Hz, 6H)	
FA2	130-132		ESIMS <i>m/z</i> 635 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 9.36 (s, 1H), 8.06 (d, <i>J</i> = 9.6 Hz, 2H), 7.93 - 7.87 (m, 3H), 7.60 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 2H), 7.47 - 7.39 (m, 2H), 7.30 - 7.26 (m, 2H), 7.22 - 7.20 (m, 1H), 4.42 - 4.27 (m, 1H), 3.19 - 3.10 (m, 2H), 2.70 - 2.62 (m, 1H), 1.59 (t, <i>J</i> = 7.2 Hz, 3H), 2.30 (s, 3H), 1.17 - 1.10 (m, 3H), 1.09 (t, <i>J</i> = 6.8 Hz, 3H)	

10

20

30

【 0 6 0 8 】

【表 1 1 - 2】

FA3	94-96		ESIMS m/z 622 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 9.85 (d, <i>J</i> = 6.6 Hz, 1H), 9.35 (s, 1H), 8.05 (d, <i>J</i> = 8.7 Hz, 3H), 7.96 (s, 1H), 7.90 (d, <i>J</i> = 8.1 Hz, 1H), 7.61 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 3H), 7.37 - 7.35 (m, 1H), 7.17 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 1H), 7.12-7.01 (m, 2H), 6.77 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 1H), 4.49 (t, <i>J</i> = 6.6 Hz, 1H), 4.59 (bs, 1H), 3.45 - 3.41 (m, 1H), 2.87 (d, <i>J</i> = 11.1 Hz, 3H), 2.73 - 2.68 (m, 1H), 1.36 - 1.23 (m, 3H), 0.97 - 0.92 (m, 6H)	
FA4	190-192		ESIMS m/z 653 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ <u>8.55 (s, 1H)</u> , <u>8.06 - 8.02 (m, 2H)</u> , <u>7.95 (bs, 1H)</u> , <u>7.80 (d, <i>J</i> = 8.8 Hz, 2H)</u> , <u>7.61 (bs, 1H)</u> , <u>7.40 - 7.33 (m, 4H)</u> , <u>7.20 - 7.19 (m, 2H)</u> , <u>4.47 (bs, 1H)</u> , <u>3.49 - 3.37 (m, 2H)</u> , <u>3.28 - 3.26 (m, 2H)</u> , <u>3.15 (bs, 1H)</u> , <u>2.99 - 2.96 (m, 2H)</u> , <u>2.78 - 2.76 (m, 2H)</u> , <u>1.22 (d, <i>J</i> = 6.4 Hz, 6H)</u>	
FA5	103-106		ESIMS m/z 636 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.53 (s, 1H), 7.97 - 7.94 (m, 2H), 7.78 (d, <i>J</i> = 9.2 Hz, 2H), 7.37 (d, <i>J</i> = 8.8 Hz, 2H), 7.33 - 7.30 (m, 1H), 7.26 - 7.17 (m, 2H), 7.03 - 7.00 (m, 2H), 5.05 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 4.61 - 4.56 (m, 1H), 3.60 - 3.56 (m, 1H), 3.40 - 3.20 (m, 4H), 3.01 - 2.90 (m, 2H), 2.88 - 2.70 (m, 3H), 2.55 - 2.45 (m, 2H), 1.40 - 1.10 (m, 6H)	

【表 1 1 - 3】

FA6	146-148		ESIMS m/z 636 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃) δ 8.52 (s, 1H), 7.95 – 7.93 (m, 2H), 7.77 (d, J = 9.0 Hz, 2H), 7.60 – 7.32 (m, 5H), 7.22 – 7.13 (m, 2H), 4.42 – 4.39 (m, 1H), 3.90 – 3.66 (m, 1H), 3.40 – 3.20 (m, 3H), 3.16 – 2.90 (m, 3H), 2.50 – 2.30 (m, 3H), 1.46 – 1.40 (m, 3H), 1.30 – 1.20 (m, 6H)	
------------	---------	--	--	---	--

10

【0 6 1 0】

【表 1 2】

BAW およびCL 評価の表	
%防除 (すなわち死亡率)	評価
50-100	A
0 以上 -50 未満	B
試験されない	C
このバイオアッセイでは活性は気付かれない	D

20

【0 6 1 1】

【表 1 3】

GPA およびYFM 評価の表	
%防除 (すなわち死亡率)	評価
80-100	A
0 以上 - 80 未満	B
試験されない	C
このバイオアッセイでは活性は気付かれない	D

40

【0 6 1 2】

【表 1 4 - 1】

表ABC：生物学的結果

番号	昆虫種			
	BAW	CL	GPA	YFM
F1	A	A	C	A
F2	A	A	B	A
F3	A	A	C	A
F4	A	A	B	A
F5	A	A	C	C
F6	A	A	C	C
F7	A	A	C	C
F8	A	A	C	C
F9	A	A	C	A
F10	A	A	C	A
F11	A	A	C	A
F12	A	A	D	A
F13	A	A	B	A
F14	A	A	C	C
F15	A	A	B	A
F16	A	A	C	A
F17	A	A	C	A
P1	A	A	C	A
P2	A	A	C	A
P3	A	A	C	A
P4	A	A	C	A
P5	A	A	C	A

10

20

30

40

【0 6 1 3】

【表 1 4 - 2】

P6	A	A	C	A
P7	A	A	C	A
P8	A	A	C	A
P9	A	A	C	A
P10	A	A	C	A
P12	A	A	C	A
P13	A	A	C	B
P16	A	A	C	C
P17	A	A	C	C
P18	A	A	C	A
P19	A	A	C	A
P20	A	A	C	A
P21	A	A	C	A
P22	A	A	C	A
P23	A	A	C	A
P24	A	A	C	A
P25	A	A	C	A
P26	A	A	C	A
P27	A	A	C	A
P28	A	A	C	A
P29	A	A	C	A
P30	A	A	C	A
P31	A	A	C	A
P32	A	A	C	B
P33	A	A	C	A
P34	A	A	C	D

10

20

30

40

【表 1 4－3】

P35	A	A	C	A
P36	A	A	C	A
P37	A	A	C	D
P38	A	A	C	A
FA1	A	A	C	A
FA2	A	A	B	A
FA3	A	D	C	B
FA4	A	A	C	C
FA5	A	A	C	A
FA6	A	A	C	A

10

【 0 6 1 5】

20

【表 1 5】

表ABCD：生物学的結果

番号	昆虫種			
	BAW	CL	GPA	YFM
C1	A	A	B	A
C2	A	A	C	C
C3	A	A	C	A
C4	C	C	C	D
C5	C	C	C	C
C6	C	C	C	C
C8	C	C	C	D
C15	C	C	C	C
C17	C	C	C	D
C18	C	C	C	D
C19	C	C	C	C
C20	C	C	C	D
C21	C	C	C	C
C22	C	C	C	D
C23	C	C	C	C
C24	C	C	C	C
C25	C	C	C	C
C26	C	C	C	C
C27	C	C	C	C
C28	C	C	C	C
C29	B	A	C	B
C30	D	C	C	D

10

20

30

40

【国際調査報告】

INTERNATIONAL SEARCH REPORT		International application No. PCT/US2015/046667												
A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER IPC(B) - A01N 43/653 (2015.01) CPC - A01N 43/653 (2015.10) According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC														
B. FIELDS SEARCHED Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols) IPC(B) - A01N 43/647, 43/653 (2015.01) CPC - A01N 43/647, 43/653; C07D 249/08 (2015.10) Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched USPC - 504/272, 273; 514/383; IPC(B) - A01N 43/647, 43/653 (2015.01); CPC - A01N 43/647, 43/653; C07D 249/08 (2015.10) (keyword delimited) Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used) PatBase, STN, PubChem, Google Patents, Google Scholar Search terms used: triazine pesticide benzamide triazole														
C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT <table border="1"> <thead> <tr> <th>Category*</th> <th>Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages</th> <th>Relevant to claim No.</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>A</td> <td>US 2013/0019348 A1 (CROUSE et al) 17 January 2013 (17.01.2013) entire document</td> <td>1-14</td> </tr> <tr> <td>A</td> <td>US 2009/0076113 A1 (DUNKEL et al) 19 March 2009 (19.03.2009) entire document</td> <td>1-14</td> </tr> <tr> <td>A</td> <td>WO 2014/004064 A1 (E I DU PONT DE NEMOURS AND COMPANY) 03 January 2014 (03.01.2014) entire document</td> <td>1-14</td> </tr> </tbody> </table>			Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.	A	US 2013/0019348 A1 (CROUSE et al) 17 January 2013 (17.01.2013) entire document	1-14	A	US 2009/0076113 A1 (DUNKEL et al) 19 March 2009 (19.03.2009) entire document	1-14	A	WO 2014/004064 A1 (E I DU PONT DE NEMOURS AND COMPANY) 03 January 2014 (03.01.2014) entire document	1-14
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.												
A	US 2013/0019348 A1 (CROUSE et al) 17 January 2013 (17.01.2013) entire document	1-14												
A	US 2009/0076113 A1 (DUNKEL et al) 19 March 2009 (19.03.2009) entire document	1-14												
A	WO 2014/004064 A1 (E I DU PONT DE NEMOURS AND COMPANY) 03 January 2014 (03.01.2014) entire document	1-14												
☐ Further documents are listed in the continuation of Box C. ☐ See patent family annex.														
* Special categories of cited documents: "A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance "E" earlier application or patent but published on or after the international filing date "L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified) "O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means "P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed "T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention "X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone "Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art "&" document member of the same patent family														
Date of the actual completion of the international search 07 October 2015		Date of mailing of the international search report 27 NOV 2015												
Name and mailing address of the ISA/ Mail Stop PCT, Attn: ISA/US, Commissioner for Patents P.O. Box 1450, Alexandria, Virginia 22313-1450 Facsimile No. 571-273-8300		Authorized officer Blaine Copenheaver PCT Helpdesk: 571-272-4300 PCT OSP: 571-272-7774												

フロントページの続き

(51)Int.Cl.		F I		テーマコード (参考)
A 6 1 K 31/4196 (2006.01)		C 0 7 D 417/12		C S P
A 6 1 K 31/427 (2006.01)		A 6 1 K 31/4196		
A 6 1 K 31/541 (2006.01)		A 6 1 K 31/427		
A 6 1 P 33/14 (2006.01)		A 6 1 K 31/541		
		A 6 1 P 33/14		

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

(72)発明者 クルーズ, ゲイリー・デイ
 アメリカ合衆国インディアナ州46268インディアナポリス・ザイオンズビルロード9330
 (72)発明者 スパークス, トーマス・シー
 アメリカ合衆国インディアナ州46268インディアナポリス・ザイオンズビルロード9330
 (72)発明者 フイツシャー, リンジー・ジー
 アメリカ合衆国インディアナ州46268インディアナポリス・ザイオンズビルロード9330

Fターム(参考) 4C063 AA01 BB09 CC62 DD41 EE01 EE03
 4C086 AA01 AA02 AA03 BC60 BC82 BC87 GA07 GA10 MA01 MA04
 NA14 ZB37 ZC61
 4H011 AC01 BB14 DA02 DA15 DA16 DD03 DD04 DD05 DE15