



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2015-0065958
(43) 공개일자 2015년06월15일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C07D 417/14 (2006.01) A01N 43/78 (2006.01)
C07D 413/14 (2006.01) C07D 417/04 (2006.01)
(52) CPC특허분류
C07D 417/14 (2013.01)
A01N 43/78 (2013.01)
(21) 출원번호 10-2015-7014513(분할)
(22) 출원일자(국제) 2009년01월22일
심사청구일자 없음
(62) 원출원 특허 10-2010-7018519
원출원일자(국제) 2009년01월22일
심사청구일자 2013년12월16일
(85) 번역문제출일자 2015년06월01일
(86) 국제출원번호 PCT/US2009/031686
(87) 국제공개번호 WO 2009/094445
국제공개일자 2009년07월30일
(30) 우선권주장
61/062,395 2008년01월25일 미국(US)

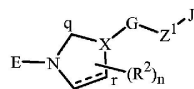
(71) 출원인
이 아이 듀폰 디 네모아 앤드 캄파니
미합중국 델라웨어주 (우편번호 19898) 월밍톤시
마켓 스트리트 1007
(72) 발명자
카미레디, 발레디
미국 19711 델라웨어주 네워크 엘크톤 로드 1090
스타인-하스켈 리서치 센터 듀폰 캄파니
파스테리스, 로버트, 제임스
미국 19713 델라웨어주 네워크 콜로라도 드라이브
842
하나간, 마리, 앤
미국 19711 델라웨어주 네워크 컨트리 플라워 로
드 108
(74) 대리인
양영준, 양영환, 김영

전체 청구항 수 : 총 10 항

(54) 발명의 명칭 살균제 복소환 화합물

(57) 요약

모든 기하 이성질체 및 입체 이성질체를 포함한 화학식 1의 화합물, 이들의 N-옥사이드, 및 이들의 염이 개시되어 있다



상기 식에서,

E, R², G, Z¹, I 및 n은 제 1 항에서 정의한 바와 같다.

화학식 1의 화합물을 함유하는 조성물, 및 유효량의 본 발명의 화합물 또는 조성물을 적용하는 것을 포함하는, 균류 병원체에 의한 식물병을 방제하는 방법도 개시되어 있다.

(52) CPC특허분류

C07D 413/14 (2013.01)

C07D 417/04 (2013.01)

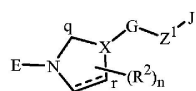
명세서

청구범위

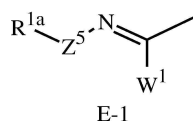
청구항 1

화학식 1의 화합물, 및 이의 N-옥사이드 및 이의 염 중에서 선택되는 화합물:

[화학식 1]



상기 식에서,



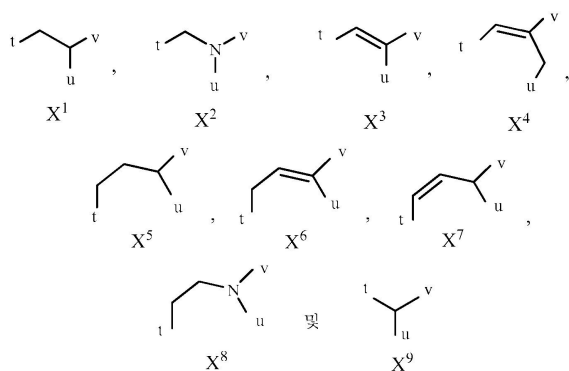
E는 이고;

G는 임의로 치환된 5원 복소환이고;

J는 각각, 탄소 원자 및 2개 이하의 O, 2개 이하의 S 및 4개 이하의 N 중에서 독립적으로 선택되는 4개 이하의 헤테로 원자, 및 C(=O), C(=S), S(=O)_s(=NR²³)_f 및 SiR¹⁷R¹⁸ 중에서 선택되는 3개 이하의 환 구성원 (ring member) 중에서 선택되는 환 구성원을 포함하며, R⁵ 중에서 독립적으로 선택되는 5개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 5원, 6원 또는 7원 환, 8원 내지 11원 이환계 (bicyclic ring system) 또는 7원 내지 11원 스피로환계 (spirocyclic ring system)이고;

W¹은 OR³⁰, SR³¹, NR³²R³³ 또는 R²⁸이며;

X는:



(여기서, "t"로 특정된 X¹, X², X³, X⁴, X⁵, X⁶, X⁷, X⁸ 또는 X⁹의 결합은 화학식 1의 "q"로 특정된 탄소 원자에 연결되고, "u"로 특정된 결합은 화학식 1의 "r"로 특정된 탄소 원자에 연결되며, "v"로 특정된 결합은 화학식 1의 G에 연결된다) 중에서 선택되는 라디칼이며;

Z¹은 직접 결합, O, C(=O), S(O)_m, CHR²⁰ 또는 NR²¹이고;

Z⁵는 직접 결합, C(=O) 또는 S(O)₂이며;

R^{1a}는 임의로 치환된 페닐, 임의로 치환된 나프탈레닐 또는 임의로 치환된 5원 내지 6원 헤테로 방향족 환

(heteroaromatic ring); 또는 시아노, C₁-C₈ 알킬, C₂-C₈ 알케닐, C₂-C₈ 알키닐, C₁-C₈ 할로알킬, C₂-C₈ 할로알케닐, C₂-C₈ 할로알키닐, C₃-C₈ 사이클로알킬, C₃-C₈ 할로사이클로알킬, C₄-C₁₀ 알킬사이클로알킬, C₄-C₁₀ 사이클로알킬알킬, C₄-C₁₀ 할로사이클로알킬알킬, C₅-C₁₀ 알킬사이클로알킬알킬, C₂-C₈ 알콕시알킬, C₂-C₈ 할로알콕시알킬, C₄-C₁₀ 사이클로알콕시알킬, C₃-C₁₀ 알콕시알콕시알킬, C₂-C₈ 알킬티오알킬, C₂-C₈ 할로알킬티오알킬, C₂-C₈ 알킬설퍼닐알킬, C₂-C₈ 알킬설퍼닐알킬, C₃-C₈ 알콕시카르보닐알킬, C₃-C₈ 할로알콕시카르보닐알킬, C₂-C₈ 알킬아미노알킬, C₃-C₁₀ 다이알킬아미노알킬, C₂-C₈ 할로알킬아미노알킬, C₄-C₁₀ 사이클로알킬아미노알킬, C₁-C₈ 알콕시, C₁-C₈ 할로알콕시, C₃-C₈ 사이클로알콕시, C₃-C₈ 할로사이클로알콕시, C₄-C₁₀ 사이클로알킬알콕시, C₂-C₈ 알케닐옥시, C₂-C₈ 할로알케닐옥시, C₂-C₈ 알키닐옥시, C₃-C₈ 할로알키닐옥시, C₂-C₈ 알콕시알콕시, C₂-C₈ 알킬카르보닐옥시, C₂-C₈ 할로알킬카르보닐옥시, C₁-C₈ 알킬티오, C₁-C₈ 할로알킬티오, C₃-C₈ 사이클로알킬티오, C₃-C₁₀ 트라이알킬실릴, C₁-C₈ 알킬아미노, C₂-C₈ 다이알킬아미노, C₁-C₈ 할로알킬아미노, C₂-C₈ 할로다이알킬아미노, C₃-C₈ 사이클로알킬아미노, C₂-C₈ 알킬카르보닐아미노, C₂-C₈ 할로알킬카르보닐아미노, C₁-C₈ 알킬설퍼닐아미노, C₁-C₈ 할로알킬설퍼닐아미노, 피롤리딘, 피페리딘 또는 모르폴리딘이고;

각 R²는 독립적으로 할로젠, 시아노, 하이드록시, C₁-C₄ 알킬, C₁-C₄ 알케닐, C₁-C₄ 할로알킬 또는 C₁-C₄ 알콕시이거나;

2개의 R² 기는 함께 C₁-C₄ 알킬렌 또는 C₂-C₄ 알케닐렌으로서 취해 가교 이환계 또는 융합 이환계를 형성하거나;

이중 결합으로 결합된 인접한 환 탄소 원자에 부착되는 2개의 R² 기는 함께, 할로젠, 시아노, 하이드록시, 아미노, 니트로, C₁-C₄ 알킬, C₁-C₄ 할로알킬, C₁-C₄ 알콕시 및 C₁-C₄ 할로알콕시 중에서 독립적으로 선택되는 3개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 -CH=CH-CH=CH-로서 취해지며;

각 R⁵는 독립적으로 H, 할로젠, 시아노, 하이드록시, 아미노, 니트로, -CHO, -C(=O)OH, -C(=O)NH₂, -NR²⁵R²⁶, C₁-C₆ 알킬, C₂-C₆ 알케닐, C₂-C₆ 알키닐, C₁-C₆ 할로알킬, C₂-C₆ 할로알케닐, C₂-C₆ 할로알키닐, C₃-C₈ 사이클로알킬, C₃-C₈ 할로사이클로알킬, C₄-C₁₀ 알킬사이클로알킬, C₄-C₁₀ 사이클로알킬알킬, C₆-C₁₄ 사이클로알킬사이클로알킬, C₄-C₁₀ 할로사이클로알킬알킬, C₅-C₁₀ 알킬사이클로알킬알킬, C₃-C₈ 사이클로알케닐, C₃-C₈ 할로사이클로알케닐, C₂-C₆ 알콕시알킬, C₄-C₁₀ 사이클로알콕시알킬, C₃-C₈ 알콕시알콕시알킬, C₂-C₆ 알킬티오알킬, C₂-C₆ 알킬설퍼닐알킬, C₂-C₆ 알킬설퍼닐알킬, C₂-C₆ 알킬아미노알킬, C₃-C₈ 다이알킬아미노알킬, C₂-C₆ 할로알킬아미노알킬, C₄-C₁₀ 사이클로알킬아미노알킬, C₂-C₆ 알킬카르보닐, C₂-C₆ 할로알킬카르보닐, C₄-C₈ 사이클로알킬카르보닐, C₂-C₆ 알콕시카르보닐, C₄-C₈ 사이클로알콕시카르보닐, C₅-C₁₀ 사이클로알킬알콕시카르보닐, C₂-C₆ 알킬아미노카르보닐, C₃-C₈ 다이알킬아미노카르보닐, C₄-C₈ 사이클로알킬아미노카르보닐, C₂-C₆ 할로알콕시알킬, C₁-C₆ 하이드록시알킬, C₁-C₆ 알콕시, C₁-C₆ 할로알콕시, C₃-C₈ 사이클로알콕시, C₃-C₈ 할로사이클로알콕시, C₄-C₁₀ 사이클로알킬알콕시, C₂-C₆ 알케닐옥시, C₂-C₆ 할로알케닐옥시, C₂-C₆ 알키닐옥시, C₂-C₆ 할로알키닐옥시, C₂-C₆ 알콕시알콕시, C₂-C₆ 알킬카르보닐옥시, C₂-C₆ 할로알킬카르보닐옥시, C₄-C₈ 사이클로알킬카르보닐옥시, C₃-C₆ 알킬카르보닐알콕시, C₁-C₆ 알킬티오, C₁-C₆ 할로알킬티오, C₃-C₈ 사이클로알킬티오, C₁-C₆ 알킬설퍼닐, C₁-C₆ 할로알킬설퍼닐, C₁-C₆ 알킬설퍼닐, C₁-C₆ 할로알킬설퍼닐, C₃-C₈ 사이클로알킬설퍼닐, C₃-C₁₀ 트라이알킬실릴, C₁-C₆ 알킬설퍼닐아미노, C₁-C₆ 할로알킬설퍼닐아미노 또는 -Z²Q이며;

각 Z²는 독립적으로 직접 결합, -O-, -C(=O)-, -S(O)_m-, -CHR²⁰ 또는 -NR²¹이고;

각 Q는 독립적으로, 각각 탄소 원자 또는 질소 원자 환 구성원 상에서 R^{7a} 중에서 독립적으로 선택되는 2개 이하의 치환기로 임의로 치환되며, 탄소 원자 환 구성원 상에서 R⁷, 질소 원자 환 구성원 상에서 R¹² 중에서 독립적으로 선택되는 5개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 페닐, 벤질, 나프탈레닐, 5원 내지 6원 헤테로 방향족 환

또는 8원 내지 11원 헤테로 방향족 이환계이거나;

각각, $C(=O)$, $C(=S)$, $S(=O)_s(=NR^{23})_f$ 및 $SiR^{17}R^{18}$ 으로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 환 구성원을 임의로 포함하고, 탄소 원자 또는 질소 원자 환 구성원 상에서 R^{7a} 중에서 독립적으로 선택되는 2개 이하의 치환기로 임의로 치환되며, 탄소 원자 환 구성원 상에서 R^7 , 질소 원자 환 구성원 상에서 R^{12} 중에서 독립적으로 선택되는 5개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 3원 내지 7원 비방향족 탄소환, 5원, 6원 또는 7원 비방향족 복소환 또는 8원 내지 11원 비방향족 이환계이며;

각 R^{7a} 는 독립적으로 $-Z^3T^A$, $-Z^3T^N$ 또는 $-Z^3T^P$ 이고;

각 Z^3 는 독립적으로 직접 결합, O, NR^{22} , $C(=O)$, $C(=S)$, $S(O)_m$, CHR^{20} , $-CHR^{20}-CHR^{20}-$, $-CR^{24}=CR^{27}-$, $-OCHR^{20}-$ 또는 $-CHR^{20}O-$ 이며;

각 T^A 는 독립적으로, 각각 탄소 원자 환 구성원 상에서 R^{29} 중에서 독립적으로 선택되는 5개 이하의 치환기로 임의로 치환되고, 질소 원자 환 구성원 상에서 R^{22} 중에서 독립적으로 선택되는 2개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 페닐, 페닐에틸닐 또는 5원 내지 6원 헤테로 방향족 환이고;

각 T^N 은 독립적으로 $C(R^{29})_2$, O, S, NR^{22} , $-C(R^{29})=CC(R^{29})-$, $-C(R^{29})=N-$, $-N=N-$, $C(=O)$, $C(=S)$, $-C\equiv C-$, $C(=NR^{23})$, $S(=O)_s(=NR^{23})_f$ 및 $SiR^{17}R^{18}$ 으로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 환 구성원을 포함하는 3원 내지 7원 비방향족 환이며;

각 T^P 는 독립적으로 $C(R^{29})_2$, O, S, NR^{22} , $-C(R^{29})=CC(R^{29})-$, $-C(R^{29})=N-$, $-N=N-$, $C(=O)$, $C(=S)$, $-C\equiv C-$, $C(=NR^{23})$, $S(=O)_s(=NR^{23})_f$ 및 $SiR^{17}R^{18}$ 으로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 환 구성원을 포함하는 8원 내지 10원 방향족 또는 7원 내지 11원 비방향족 이환계이고;

각 R^7 은 독립적으로 할로젠, 시아노, 하이드록시, 아미노, 니트로, C_1-C_6 알킬, C_2-C_6 알케닐, C_2-C_6 알키닐, C_3-C_6 사이클로알킬, C_4-C_{10} 사이클로알킬알킬, C_4-C_{10} 알킬사이클로알킬, C_5-C_{10} 알킬사이클로알킬알킬, C_6-C_{14} 사이클로알킬사이클로알킬, C_1-C_6 할로알킬, C_2-C_6 할로알케닐, C_2-C_6 할로알키닐, C_3-C_6 할로사이클로알킬, C_1-C_4 알콕시, C_1-C_4 할로알콕시, C_1-C_4 알킬티오, C_1-C_4 할로알킬티오, C_1-C_4 알킬설퍼닐, C_1-C_4 알킬설포닐, C_1-C_4 할로알킬설퍼닐, C_1-C_4 할로알킬설포닐, C_1-C_4 알킬아미노, C_2-C_8 다이알킬아미노, C_3-C_6 사이클로알킬아미노, C_2-C_4 알콕시알킬, C_1-C_4 하이드록시알킬, C_2-C_4 알킬카르보닐, C_2-C_6 알콕시카르보닐, C_2-C_6 알킬카르보닐옥시, C_2-C_6 알킬카르보닐티오, C_2-C_6 알킬아미노카르보닐, C_3-C_8 다이알킬아미노카르보닐 또는 C_3-C_6 트라이알킬설퍼닐이거나;

R^5 및 R^7 은 R^5 및 R^7 을 연결하는 원자와 함께, 탄소 원자 및 임의로 1개 이하의 O, 1개 이하의 S 및 1개 이하의 N 중에서 선택되는 3개 이하의 헤테로 원자, 및 $C(=O)$, $C(=S)$, $S(=O)_s(=NR^{23})_f$ 및 $SiR^{17}R^{18}$ 중에서 선택되는 3개 이하의 환 구성원 중에서 선택되는 환 구성원을 포함하는 임의로 치환된 5원 내지 7원 환을 형성하며;

각 R^{12} 는 독립적으로 H, C_1-C_3 알킬, C_1-C_3 알킬카르보닐, C_1-C_3 알콕시 또는 C_1-C_3 알콕시카르보닐이고;

각 R^{17} 및 R^{18} 은 독립적으로 C_1-C_5 알킬, C_2-C_5 알케닐, C_2-C_5 알키닐, C_3-C_5 사이클로알킬, C_3-C_6 할로사이클로알킬, C_4-C_{10} 사이클로알킬알킬, C_4-C_7 알킬사이클로알킬, C_5-C_7 알킬사이클로알킬알킬, C_1-C_5 할로알킬, C_1-C_5 알콕시 또는 C_1-C_5 할로알콕시이며;

각 R^{20} , R^{22} , R^{24} 및 R^{27} 은 독립적으로 H, C_1-C_4 알킬 또는 C_1-C_4 할로알킬이고;

각 R^{21} 은 독립적으로 H, C_1-C_6 알킬, C_1-C_6 할로알킬, C_3-C_8 사이클로알킬, C_2-C_6 알킬카르보닐, C_2-C_6 할로알킬카르보닐, C_2-C_6 알콕시카르보닐 또는 C_2-C_6 할로알콕시카르보닐이며;

각 R^{23} 은 독립적으로 H, 시아노, C_1-C_6 알킬, C_1-C_6 할로알킬, C_3-C_8 사이클로알킬, C_3-C_8 할로사이클로알킬, C_1-C_6 알콕시, C_1-C_6 할로알콕시, C_1-C_6 알킬아미노, C_2-C_8 다이알킬아미노, C_1-C_6 할로알킬아미노 또는 페닐이고;

각 R^{25} 은 독립적으로 H, C_1-C_6 알킬, C_1-C_6 할로알킬, C_3-C_8 사이클로알킬, C_2-C_6 알킬카르보닐, C_2-C_6 할로알킬카르보닐, C_2-C_6 알콕시카르보닐 또는 C_2-C_6 할로알콕시카르보닐이며;

각 R^{26} 은 독립적으로 C_1-C_6 알킬, C_1-C_6 할로알킬, C_3-C_8 사이클로알킬, C_2-C_6 알킬카르보닐, C_2-C_6 할로알킬카르보닐, C_2-C_6 알콕시카르보닐, C_2-C_6 할로알콕시카르보닐 또는 $-Z^4Q$ 이고;

각 Z^4 은 독립적으로 O, $C(=O)$, $S(O)_m$ 또는 CHR^{20} 이며;

R^{28} 은 H, 할로젠, 시아노, C_1-C_4 알킬, C_1-C_4 할로알킬, C_2-C_4 알콕시알킬, C_2-C_4 알킬카르보닐, C_2-C_4 알콕시카르보닐, C_2-C_3 알킬아미노카르보닐 또는 C_3-C_6 다이알킬아미노카르보닐이고;

각 R^{29} 은 독립적으로 H, 할로젠, 시아노, 하이드록시, 아미노, 니트로, $-CHO$, $-C(=O)OH$, $-C(=O)NH_2$, $-SO_2NH_2$, $-C(=S)NH_2$, $-C(=O)NHCN$, $-C(=O)NHOH$, $-SH$, $-SO_2NHCN$, $-SO_2NHOH$, $-OCN$, $-SCN$, $-SF_5$, $-NHCHO$, $-NHNH_2$, $-N_3$, $-NHOH$, $-NHCN$, $-NHC(=O)NH_2$, $-N=C=O$, $-N=C=S$, C_1-C_6 알킬, C_2-C_6 알케닐, C_2-C_6 알키닐, C_1-C_6 할로알킬, C_2-C_8 알킬카르보닐, C_2-C_8 할로알킬카르보닐, C_2-C_8 알콕시카르보닐, C_4-C_{10} 사이클로알콕시카르보닐, C_5-C_{12} 사이클로알킬알콕시카르보닐, C_2-C_8 알킬아미노카르보닐, C_3-C_{10} 다이알킬아미노카르보닐, C_2-C_6 할로알케닐, C_2-C_6 할로알키닐, C_3-C_8 사이클로알킬, C_3-C_8 할로사이클로알킬, C_4-C_{10} 알킬사이클로알킬, C_4-C_{10} 사이클로알킬알킬, C_6-C_{14} 사이클로알킬사이클로알킬, C_4-C_{10} 할로사이클로알킬알킬, C_5-C_{12} 알킬사이클로알킬알킬, C_3-C_8 사이클로알케닐, C_3-C_8 할로사이클로알케닐, C_2-C_8 알콕시알킬, C_4-C_{10} 사이클로알콕시알킬, C_3-C_{10} 알콕시알콕시알킬, C_2-C_8 알킬티오알킬, C_2-C_8 알킬설퍼닐알킬, C_2-C_8 알킬설포닐알킬, C_2-C_8 알킬아미노알킬, C_3-C_{10} 다이알킬아미노알킬, C_2-C_8 할로알킬아미노알킬, C_4-C_{10} 사이클로알킬아미노알킬, C_4-C_{10} 사이클로알킬카르보닐, C_4-C_{10} 사이클로알킬아미노카르보닐, C_2-C_7 시아노알킬, C_1-C_6 하이드록시알킬, C_4-C_{10} 사이클로알케닐알킬, C_2-C_8 할로알콕시알킬, C_2-C_8 알콕시할로알킬, C_2-C_8 할로알콕시할로알킬, C_4-C_{10} 할로사이클로알콕시알킬, C_4-C_{10} 사이클로알케닐옥시알킬, C_4-C_{10} 할로사이클로알케닐옥시알킬, C_3-C_{10} 다이알콕시알킬, C_4-C_{12} 트라이알콕시알킬, C_3-C_8 알콕시알케닐, C_3-C_8 알콕시알키닐, C_3-C_{10} 할로다이알킬아미노알킬, C_5-C_{12} 사이클로알킬(알킬)아미노알킬, C_2-C_8 알킬(티오카르보닐), C_3-C_{10} 알콕시알킬카르보닐, C_3-C_{10} 알콕시카르보닐알킬, C_2-C_8 할로알콕시카르보닐, C_3-C_{10} 알콕시알콕시카르보닐, C_2-C_8 (알킬티오)카르보닐, C_2-C_8 알콕시(티오카르보닐), C_2-C_8 알킬티오(티오카르보닐), C_2-C_8 알킬아미노(티오카르보닐), C_3-C_{10} 다이알킬아미노(티오카르보닐), C_3-C_{10} 알콕시(알킬)아미노카르보닐, C_2-C_8 알킬설포닐아미노카르보닐, C_2-C_8 할로알킬설포닐아미노카르보닐, C_2-C_8 알킬아미디노, C_3-C_{10} 다이알킬아미디노, C_1-C_6 알콕시, C_1-C_6 할로알콕시, C_2-C_8 알킬카르보닐옥시, C_1-C_6 알킬티오, C_1-C_6 할로알킬티오, C_1-C_6 알킬설퍼닐, C_1-C_6 할로알킬설퍼닐, C_1-C_6 알킬설포닐, C_1-C_6 할로알킬설포닐, C_1-C_6 알킬아미노설포닐, C_2-C_8 다이알킬아미노설포닐, C_3-C_{10} 트라이알킬설퍼닐, C_3-C_8 사이클로알콕시, C_3-C_8 할로사이클로알콕시, C_4-C_{10} 사이클로알킬알콕시, C_2-C_6 알케닐옥시, C_2-C_6 할로알케닐옥시, C_2-C_6 알키닐옥시, C_3-C_6 할로알키닐옥시, C_2-C_8 알콕시알콕시, C_2-C_8 할로알킬카르보닐옥시, C_4-C_{10} 사이클로알킬카르보닐옥시, C_3-C_{10} 알킬카르보닐알콕시, C_3-C_8 사이클로알킬티오, C_3-C_8 사이클로알킬설포닐, C_3-C_8 사이클로알케닐옥시, C_3-C_8 할로사이클로알케닐옥시, C_2-C_8 할로알콕시알콕시, C_2-C_8 알콕시할로알

콕시, C₂-C₈ 할로알콕시할로알콕시, C₃-C₁₀ 알콕시카르보닐알콕시, C₂-C₈ 알킬(티오카르보닐)옥시, C₂-C₈ 알킬카르보닐티오, C₂-C₈ 알킬(티오카르보닐)티오, C₃-C₈ 사이클로알킬설퍼닐, C₃-C₁₀ 할로트라이알킬설퍼닐, C₁-C₆ 알킬아미노, C₂-C₈ 다이알킬아미노, C₂-C₈ 알킬카르보닐아미노, C₁-C₆ 알킬설퍼닐아미노, C₁-C₆ 할로알킬아미노, C₂-C₈ 할로다이알킬아미노, C₃-C₈ 사이클로알킬아미노, C₂-C₈ 할로알킬카르보닐아미노, C₁-C₆ 할로알킬설퍼닐아미노, C₄-C₁₀ 사이클로알킬알킬아미노, C₄-C₁₀ 사이클로알킬(알킬)아미노, C₃-C₁₀ 알콕시카르보닐알킬아미노, C₁-C₆ 알콕시아미노, C₁-C₆ 할로알콕시아미노, C₄-C₁₂ 다이알킬이미도, C₂-C₈ 알콕시카르보닐아미노, C₂-C₈ 할로알콕시카르보닐아미노, C₂-C₈ 알킬아미노카르보닐아미노, C₃-C₁₀ 다이알킬아미노카르보닐아미노, C₃-C₁₀ 알킬아미노카르보닐(알킬)아미노, C₄-C₁₂ 다이알킬아미노카르보닐(알킬)아미노, C₂-C₈ 알킬아미노(티오카르보닐)아미노, C₃-C₁₀ 다이알킬아미노(티오카르보닐)아미노, C₃-C₁₀ 알킬아미노(티오카르보닐)알킬아미노 또는 C₄-C₁₂ 다이알킬아미노(티오카르보닐)알킬아미노이며;

각 R³⁰ 및 R³¹은 독립적으로 C₁-C₆ 알킬, C₃-C₆ 알케닐, C₃-C₆ 알키닐, C₁-C₆ 할로알킬, C₃-C₆ 할로알케닐, C₃-C₆ 할로알키닐, C₃-C₆ 사이클로알킬, C₃-C₆ 할로사이클로알킬, C₄-C₈ 알킬사이클로알킬, C₄-C₈ 사이클로알킬알킬, C₄-C₈ 할로사이클로알킬알킬, C₅-C₈ 알킬사이클로알킬알킬, C₂-C₆ 알콕시알킬, C₄-C₈ 사이클로알콕시알킬, C₃-C₆ 알콕시알킬, C₂-C₆ 알킬티오알킬, C₂-C₆ 알킬설퍼닐알킬, C₂-C₆ 알킬설퍼닐알킬, C₂-C₆ 알킬아미노알킬, C₃-C₆ 다이알킬아미노알킬, C₂-C₆ 할로알킬아미노알킬, C₄-C₈ 사이클로알킬아미노알킬, C₂-C₆ 알킬카르보닐, C₂-C₆ 할로알킬카르보닐, C₄-C₈ 사이클로알킬카르보닐, C₂-C₆ 알콕시카르보닐, C₂-C₆ 알킬아미노카르보닐, C₃-C₈ 다이알킬아미노카르보닐 또는 C₄-C₈ 사이클로알킬아미노카르보닐이고;

R³²는 H, 시아노, 하이드록시, 아미노, C₁-C₆ 알킬, C₃-C₆ 알케닐, C₃-C₆ 알키닐, C₁-C₆ 할로알킬, C₃-C₆ 할로알케닐, C₃-C₆ 할로알키닐, C₃-C₆ 사이클로알킬, C₄-C₈ 사이클로알킬알킬, C₂-C₆ 알콕시알킬, C₁-C₆ 알콕시, C₁-C₆ 할로알콕시, C₁-C₆ 알킬설퍼닐, C₁-C₆ 할로알킬설퍼닐, C₂-C₆ 알킬카르보닐, C₂-C₆ 할로알킬카르보닐, C₁-C₆ 알킬아미노, C₂-C₈ 다이알킬아미노, C₁-C₆ 할로알킬아미노 또는 C₂-C₈ 할로다이알킬아미노이며;

R³³는 H, C₁-C₆ 알킬, C₃-C₆ 알케닐, C₃-C₆ 알키닐, C₁-C₆ 할로알킬 또는 C₃-C₆ 사이클로알킬이거나;

R³² 및 R³³는 함께 -(CH₂)₄-, -(CH₂)₅- 또는 -(CH₂)₂O(CH₂)₂-로서 취해지고;

각 m은 독립적으로 0, 1 또는 2이고;

n은 0, 1 또는 2이며;

s 및 f는 S(=O)_s(=NR²³)_f의 각 경우에, 독립적으로 0, 1 또는 2이되, 단 s와 f의 합계는 1 또는 2이다.

청구항 2

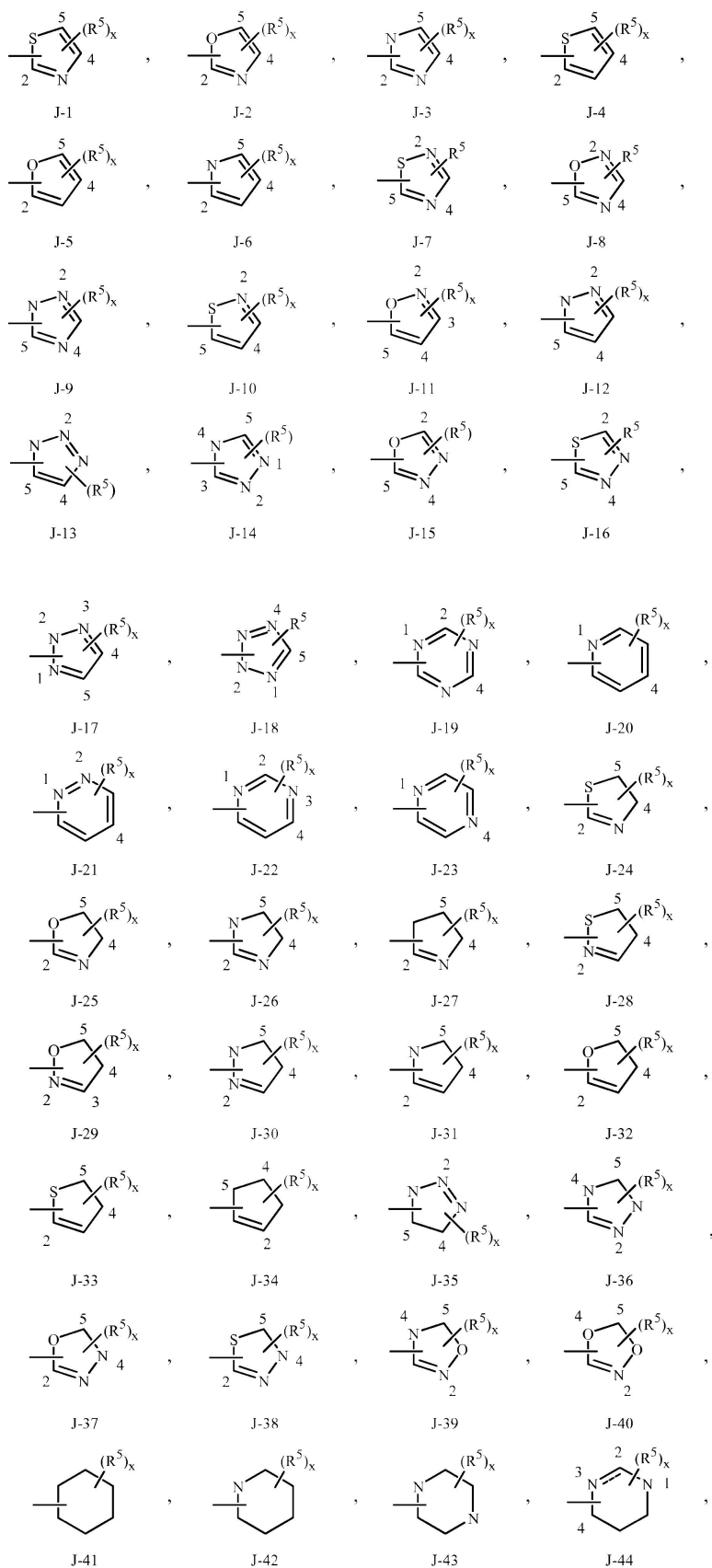
제 1 항에 있어서,

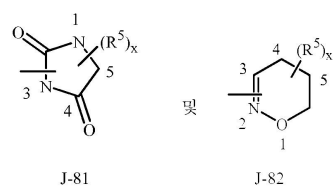
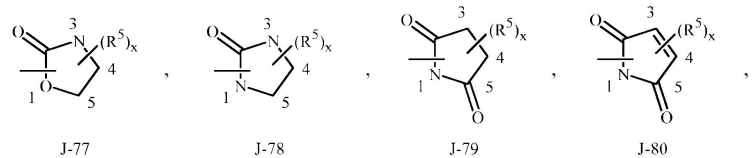
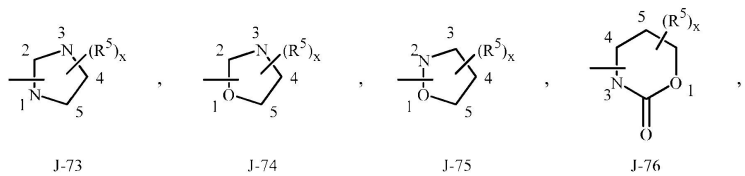
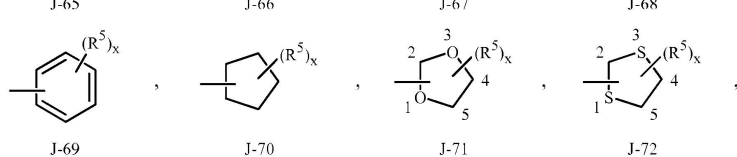
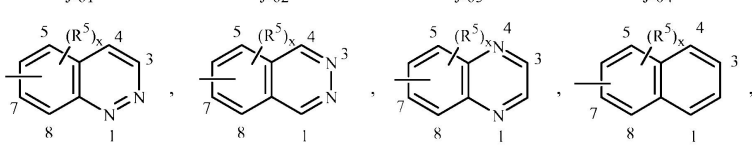
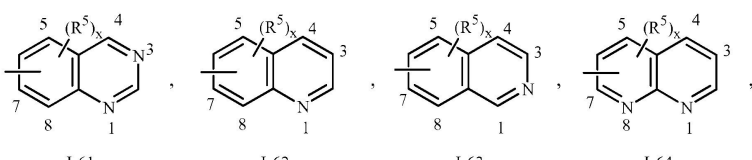
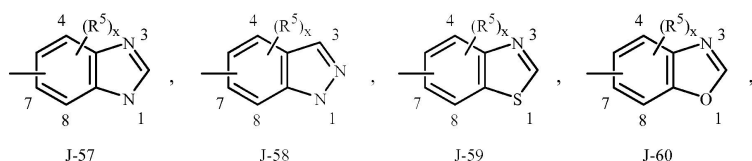
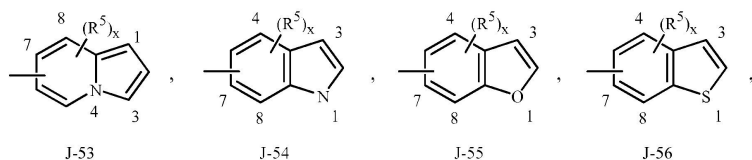
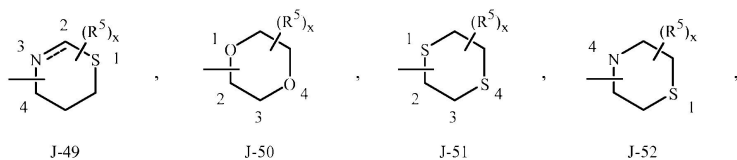
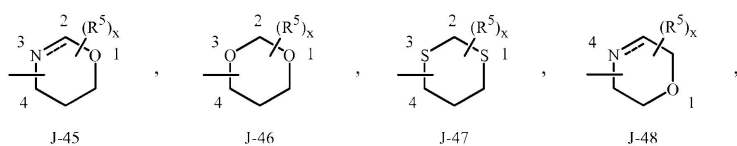
G는 탄소 환 구성원 상에서 R³ 중에서 선택되고, 질소 환 구성원 상에서 R¹¹ 중에서 선택되는 2개 이하의 치환기로 임의로 치환된 5원 복소환이며;

각 R³는 독립적으로 할로젠, C₁-C₃ 알킬 또는 C₁-C₃ 할로알킬이고;

각 R¹¹은 독립적으로 C₁-C₃ 알킬이며;

J는 J-1 내지 J-82 (여기서, 좌측으로 돌출되게 나타낸 결합은 화학식 1의 Z¹ 및 J 환의 이용가능한 탄소 또는 질소 원자 환 구성원에 결합되고; x는 0 내지 5의 정수이다):





중의 하나이고;

X는 X^1 , X^2 , X^3 , X^4 , X^5 , X^6 , X^7 또는 X^8 이며;

Z^1 은 직접 결합, CHR^{20} 또는 NR^{21} 이고;

각 R^{21} 은 독립적으로 H, C_1-C_3 알킬, C_1-C_3 알킬카르보닐 또는 C_2-C_3 알콕시카르보닐이며;

R^{1a} 는 임의로 치환된 페닐, 임의로 치환된 나프탈레닐 또는 임의로 치환된 5원 또는 6원 헤테로 방향족 환; 또는 시아노, C_1-C_8 알킬, C_2-C_8 알케닐, C_2-C_8 알키닐, C_1-C_8 할로알킬, C_2-C_8 할로알케닐, C_2-C_8 할로알키닐, C_2-C_8 할로알킬티오알킬, C_3-C_8 사이클로알킬, C_2-C_8 알콕시알킬, C_2-C_8 할로알콕시알킬, C_3-C_8 알콕시카르보닐알킬, C_3-C_8 할로알콕시카르보닐알킬, C_2-C_8 알킬티오알킬, C_2-C_8 알킬설퍼알킬, C_2-C_8 알킬설포닐알킬, C_2-C_8 알킬아미노알킬, C_2-C_8 알킬카르보닐옥시, C_2-C_8 할로알킬카르보닐옥시, C_3-C_{10} 다이알킬아미노알킬, C_1-C_8 알콕시, C_1-C_8 할로알콕시, C_1-C_8 알킬티오, C_3-C_{10} 트라이알킬실릴, C_1-C_8 알킬아미노, C_2-C_8 다이알킬아미노, C_2-C_8 알킬카르보닐아미노, 피롤리디닐, 피페리디닐 또는 모르폴리디닐이고;

각 R^2 는 독립적으로 할로젠, 시아노, 하이드록시, C_1-C_2 알킬, C_1-C_2 할로알킬 또는 C_1-C_2 알콕시이며;

R^5 는 독립적으로 H, 할로젠, 시아노, C_1-C_6 알킬, C_2-C_6 알케닐, C_2-C_6 알키닐, C_1-C_6 할로알킬, C_2-C_6 할로알케닐, C_2-C_6 할로알키닐, C_3-C_8 사이클로알킬, C_3-C_8 할로사이클로알킬, C_4-C_{10} 알킬사이클로알킬, C_4-C_{10} 사이클로알킬알킬, C_2-C_6 알콕시알킬, C_4-C_{10} 사이클로알콕시알킬, C_3-C_8 알콕시알콕시알킬, C_2-C_6 알킬티오알킬, C_2-C_6 알콕시카르보닐, C_1-C_6 알콕시, C_1-C_6 할로알콕시, C_3-C_8 사이클로알콕시, C_3-C_8 할로사이클로알콕시, C_4-C_{10} 사이클로알킬알콕시, C_2-C_6 알케닐옥시, C_2-C_6 할로알케닐옥시, C_2-C_6 알키닐옥시, C_2-C_6 할로알키닐옥시, C_2-C_6 알콕시알콕시, C_2-C_6 알킬카르보닐옥시, C_2-C_6 할로알킬카르보닐옥시, C_4-C_8 사이클로알킬카르보닐옥시, C_3-C_6 알킬카르보닐알콕시, C_1-C_6 알킬티오, C_1-C_6 할로알킬티오, C_3-C_8 사이클로알킬티오, C_3-C_{10} 트라이알킬실릴, $-NR^{25}R^{26}$ 또는 $-Z^2Q$ 이고;

각 R^{26} 는 독립적으로 C_1-C_3 알킬 또는 $-Z^4Q$ 이며;

각 Z^4 는 독립적으로 $C(=O)$ 또는 $S(=O)_2$ 이고;

각 Z^2 는 독립적으로 O, $C(=O)$, $S(O)_2$, CHR^{20} 또는 NR^{21} 이며;

각 Q는 독립적으로, 각각 탄소 원자 또는 질소 원자 환 구성원 상에서 R^{7a} 중에서 독립적으로 선택되는 1개 이하의 치환기로 임의로 치환되며, 탄소 원자 환 구성원 상에서 R^7 , 질소 원자 환 구성원 상에서 R^{12} 중에서 독립적으로 선택되는 5개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 페닐, 벤질, 나프탈레닐, 5원 내지 6원 헤테로 방향족 환 또는 8원 내지 11원 헤테로 방향족 이환계이거나;

각각, $C(=O)$, $C(=S)$, $S(=O)_2(=NR^{23})_f$ 및 $SiR^{17}R^{18}$ 으로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 환 구성원을 임의로 포함하고, 탄소 원자 또는 질소 원자 환 구성원 상에서 R^{7a} 중에서 독립적으로 선택되는 1개 이하의 치환기로 임의로 치환되며, 탄소 원자 환 구성원 상에서 R^7 , 질소 원자 환 구성원 상에서 R^{12} 중에서 독립적으로 선택되는 5개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 3원 내지 7원 비방향족 탄소환, 5원, 6원 또는 7원 비방향족 복소환 또는 8원 내지 11원 비방향족 이환계이고;

각 R^7 은 독립적으로 할로젠, 시아노, 하이드록시, 아미노, 니트로, C_1-C_3 알킬, C_1-C_3 할로알킬, C_1-C_2 알콕시 또는 C_1-C_2 할로알콕시이거나;

R^5 및 R^7 은 R^5 및 R^7 을 연결하는 원자와 함께, 탄소 원자 및 임의로 1개 이하의 O, 1개 이하의 S 및 1개 이하의

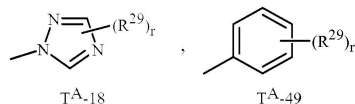
N 중에서 선택되는 3개 이하의 헤테로 원자, 및 $C(=O)$, $C(=S)$, $S(=O)_s(=NR^{23})_f$ 및 $SiR^{17}R^{18}$ 중에서 선택되는 2개 이하의 환 구성원 중에서 선택되는 환 구성원을 포함하고, R^8 중에서 선택되는 치환기로 임의로 치환되는 임의로 치환된 5원 내지 7원 환을 형성하며;

각 R^8 은 독립적으로 할로젠, 시아노, 하이드록시, 아미노, 니트로, C_1-C_6 알킬, C_2-C_6 알케닐, C_2-C_6 알키닐, C_3-C_6 사이클로알킬, C_4-C_{10} 사이클로알킬알킬, C_4-C_{10} 알킬사이클로알킬, C_5-C_{10} 알킬사이클로알킬알킬, C_1-C_6 할로알킬, C_2-C_6 할로알케닐, C_2-C_6 할로알키닐, C_3-C_6 할로사이클로알킬, C_1-C_4 알콕시, C_1-C_4 할로알콕시, C_1-C_4 알킬티오, C_1-C_4 알킬설퍼닐, C_1-C_4 알킬설포닐, C_1-C_4 할로알킬티오, C_1-C_4 할로알킬설퍼닐, C_1-C_4 할로알킬설포닐, C_1-C_4 알킬아미노, C_2-C_8 다이알킬아미노, C_3-C_6 사이클로알킬아미노, C_2-C_4 알콕시알킬, C_1-C_4 하이드록시알킬, C_2-C_4 알킬카르보닐, C_2-C_6 알콕시카르보닐, C_2-C_6 알킬카르보닐옥시, C_2-C_6 알킬카르보닐티오, C_2-C_6 알킬아미노카르보닐, C_3-C_8 다이알킬아미노카르보닐 또는 C_3-C_6 트라이알킬실릴이고;

각 R^{7a} 는 독립적으로 $-Z^3T^A$ 이며;

각 R^{29} 은 독립적으로 H, 할로젠, 시아노, 하이드록시, C_1-C_2 알킬, C_1-C_2 할로알킬, C_1-C_2 알콕시 또는 C_1-C_2 할로알콕시이고;

각 T^A 는 독립적으로 T^A-18 및 T^A-49 (여기서, 좌측으로 돌출되게 나타낸 결합은 화학식 1의 Z^3 에 결합되고; r은 0, 1, 2, 3, 4 또는 5이다):

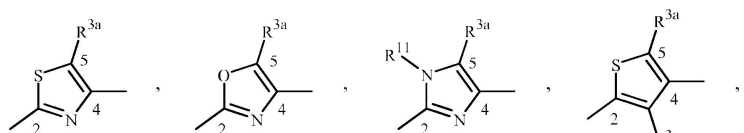


중에서 선택되는 것인 화합물.

청구항 3

제 2 항에 있어서,

G는 G-1 내지 G-59 (여기서, 좌측으로 돌출하는 결합은 화학식 1의 X에 결합되고, 우측으로 돌출하는 결합은 Z^1 에 결합된다):

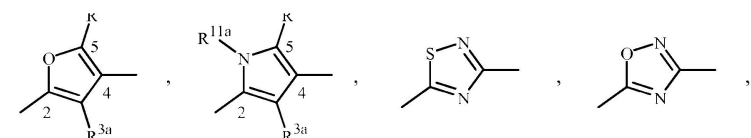


G-1

G-2

G-3

G-4

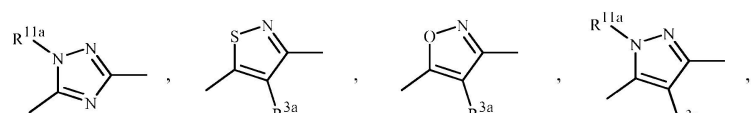


G-5

G-6

G-7

G-8

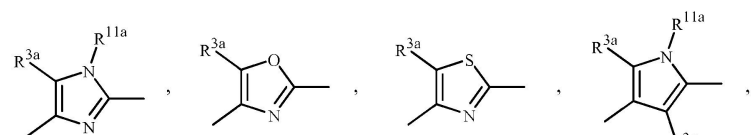


G-9

G-10

G-11

G-12

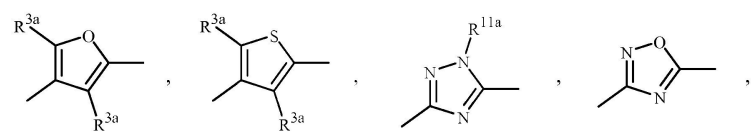


G-13

G-14

G-15

G-16

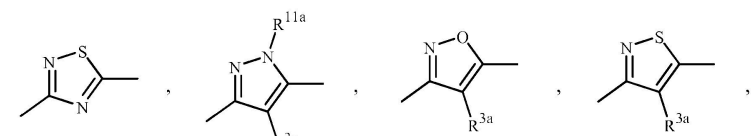


G-17

G-18

G-19

G-20

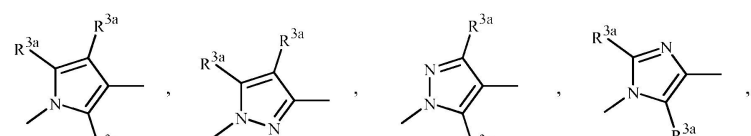


G-21

G-22

G-23

G-24

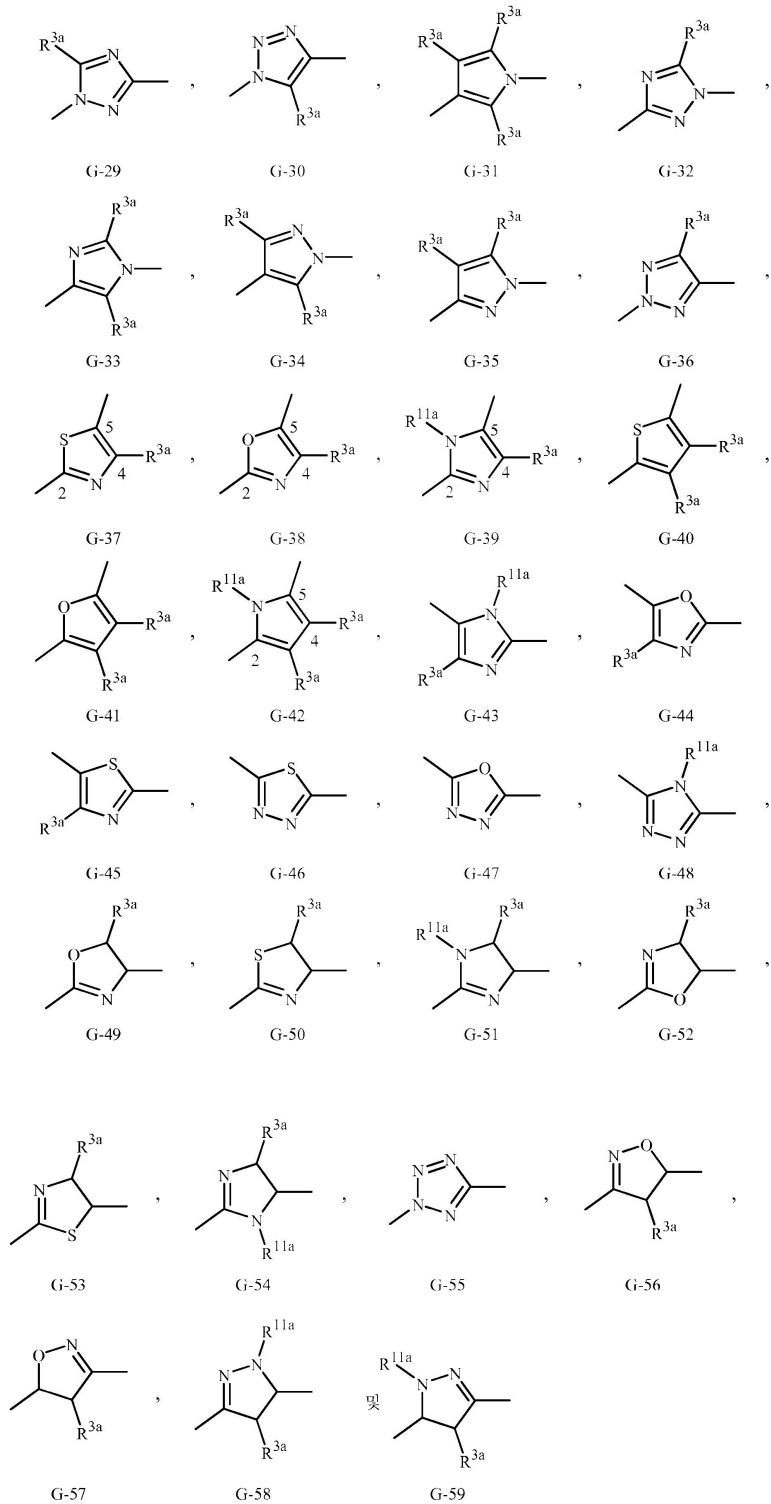


G-25

G-26

G-27

G-28



중의 하나이고;

각 R^{3a} 는 독립적으로 H 및 R^3 중에서 선택되며;

R^{11a} 는 H 및 R^{11} 중에서 선택되고;

J는 J-1, J-2, J-3, J-4, J-5, J-7, J-8, J-9, J-10, J-11, J-12, J-14, J-15, J-16, J-20, J-24, J-25, J-26, J-29, J-30, J-37, J-38, J-45 및 J-69 중에서 선택되며;

x 는 0 내지 3의 정수이고;

X 는 X^1 , X^2 또는 X^3 이며;

Z^1 은 직접 결합 또는 CHR^{20} 이고;

각 R^{21} 은 독립적으로 H 또는 메틸이며;

Z^5 는 직접 결합이고;

R^{1a} 는 각각 탄소 환 구성원 상에서 R^{4a} , 질소 환 구성원 상에서 R^{4b} 중에서 선택되는 3개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 페닐, 나프탈레닐 또는 5원 또는 6원 헤테로 방향족 환; 또는 시아노, C_1-C_8 알킬, C_2-C_8 알케닐, C_2-C_8 알키닐, C_1-C_8 할로알킬, C_2-C_8 할로알케닐, C_2-C_8 할로알키닐, C_2-C_8 할로알킬티오알킬, C_3-C_8 사이클로알킬, C_2-C_8 알콕시알킬, C_2-C_8 할로알콕시알킬, C_3-C_8 알콕시카르보닐알킬, C_3-C_8 할로알콕시카르보닐알킬, C_2-C_8 알킬티오알킬, C_2-C_8 알킬설퍼닐알킬, C_2-C_8 알킬설포닐알킬, C_2-C_8 알킬아미노알킬, C_2-C_8 알킬카르보닐옥시, C_2-C_8 할로알킬카르보닐옥시, C_3-C_{10} 다이알킬아미노알킬, C_1-C_8 알콕시, C_1-C_8 할로알콕시, C_1-C_8 알킬티오, C_3-C_{10} 트라이알킬실릴, C_1-C_8 알킬아미노, C_2-C_8 다이알킬아미노, C_2-C_8 알킬카르보닐아미노, 피롤리디닐, 피페리디닐 또는 모르폴리닐이며;

각 R^{4a} 는 독립적으로 할로젠, 시아노, 하이드록시, 아미노, 니트로, C_1-C_6 알킬, C_2-C_6 알케닐, C_2-C_6 알키닐, C_3-C_6 사이클로알킬, C_4-C_{10} 사이클로알킬알킬, C_4-C_{10} 알킬사이클로알킬, C_5-C_{10} 알킬사이클로알킬알킬, C_1-C_6 할로알킬, C_2-C_6 할로알케닐, C_2-C_6 할로알키닐, C_3-C_6 할로사이클로알킬, C_1-C_4 알콕시, C_1-C_4 할로알콕시, C_1-C_4 알킬티오, C_1-C_4 알킬설퍼닐, C_1-C_4 알킬설포닐, C_1-C_4 할로알킬티오, C_1-C_4 할로알킬설퍼닐, C_1-C_4 할로알킬설포닐, C_1-C_4 알킬아미노, C_2-C_8 다이알킬아미노, C_3-C_6 사이클로알킬아미노, C_2-C_4 알콕시알킬, C_1-C_4 하이드록시알킬, C_2-C_4 알킬카르보닐, C_2-C_6 알콕시카르보닐, C_2-C_6 알킬카르보닐옥시, C_2-C_6 알킬카르보닐티오, C_2-C_6 알킬아미노카르보닐, C_3-C_8 다이알킬아미노카르보닐 또는 C_3-C_6 트라이알킬실릴이고;

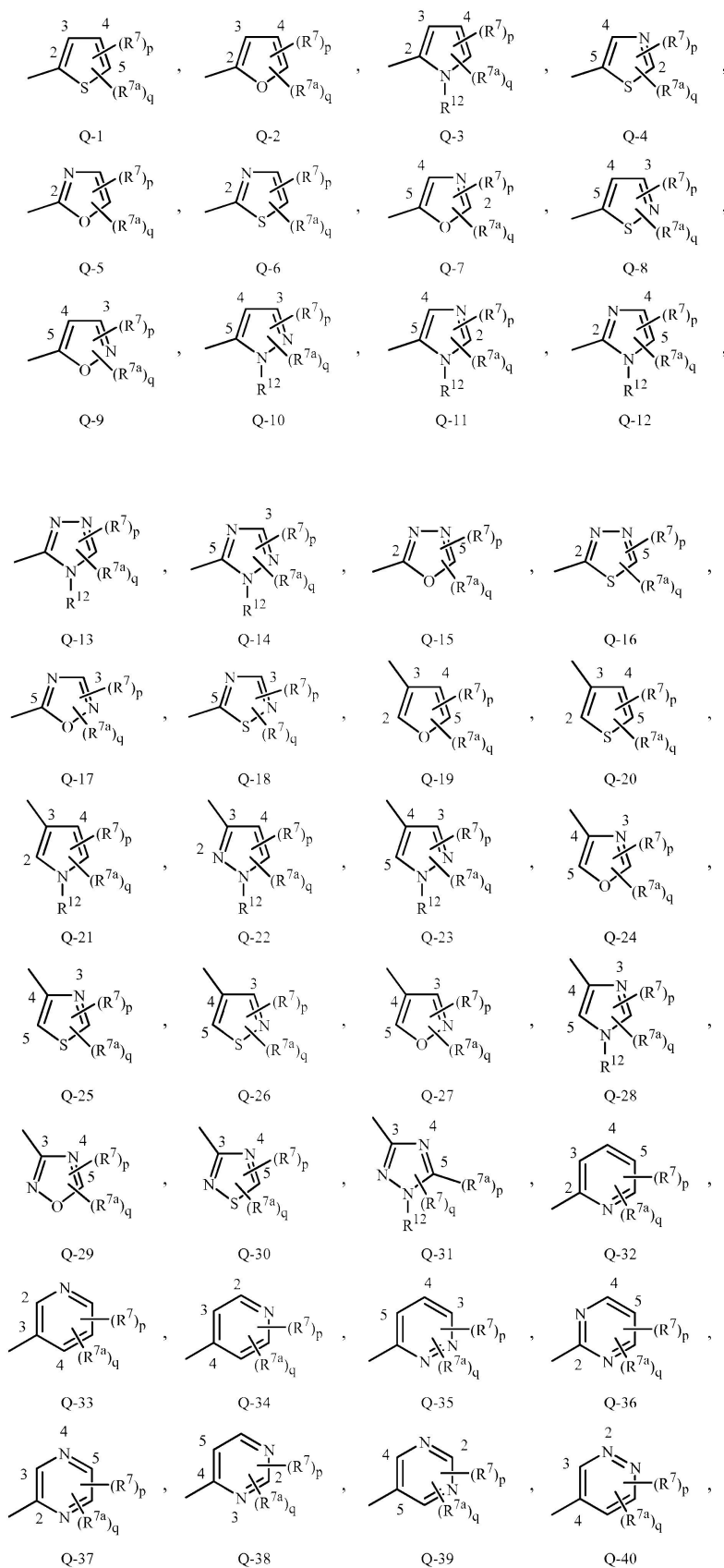
각 R^{4b} 는 독립적으로 C_1-C_6 알킬, C_3-C_6 알케닐, C_3-C_6 알키닐, C_3-C_6 사이클로알킬, C_1-C_6 할로알킬, C_3-C_6 할로알케닐, C_3-C_6 할로알키닐, C_3-C_6 할로사이클로알킬 또는 C_2-C_4 알콕시알킬이며;

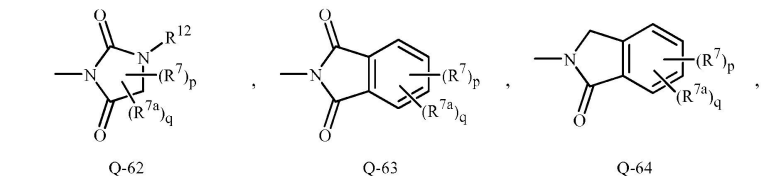
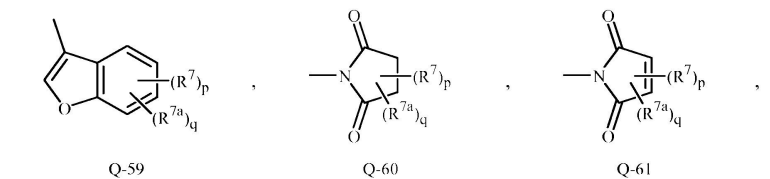
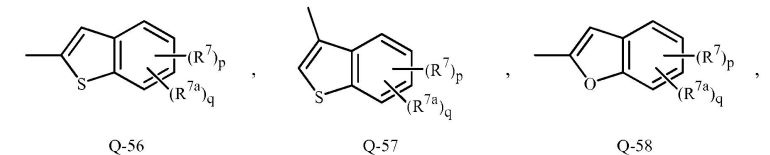
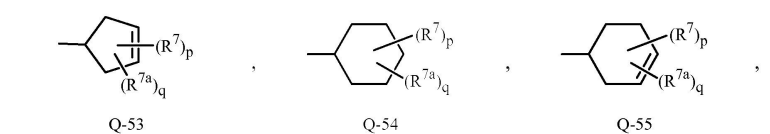
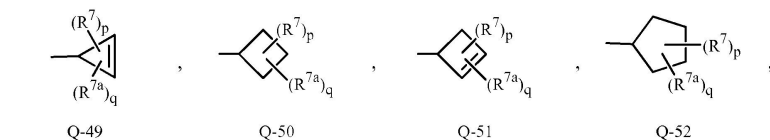
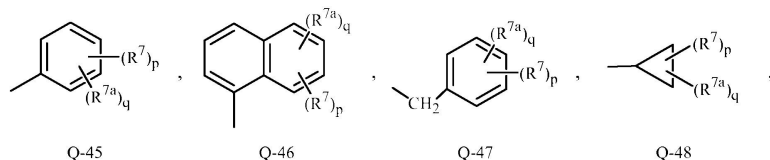
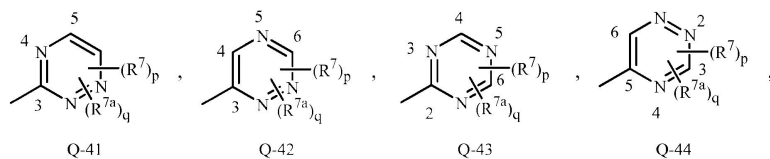
각 R^2 는 독립적으로 시아노, 하이드록시, 메틸 또는 메톡시이고;

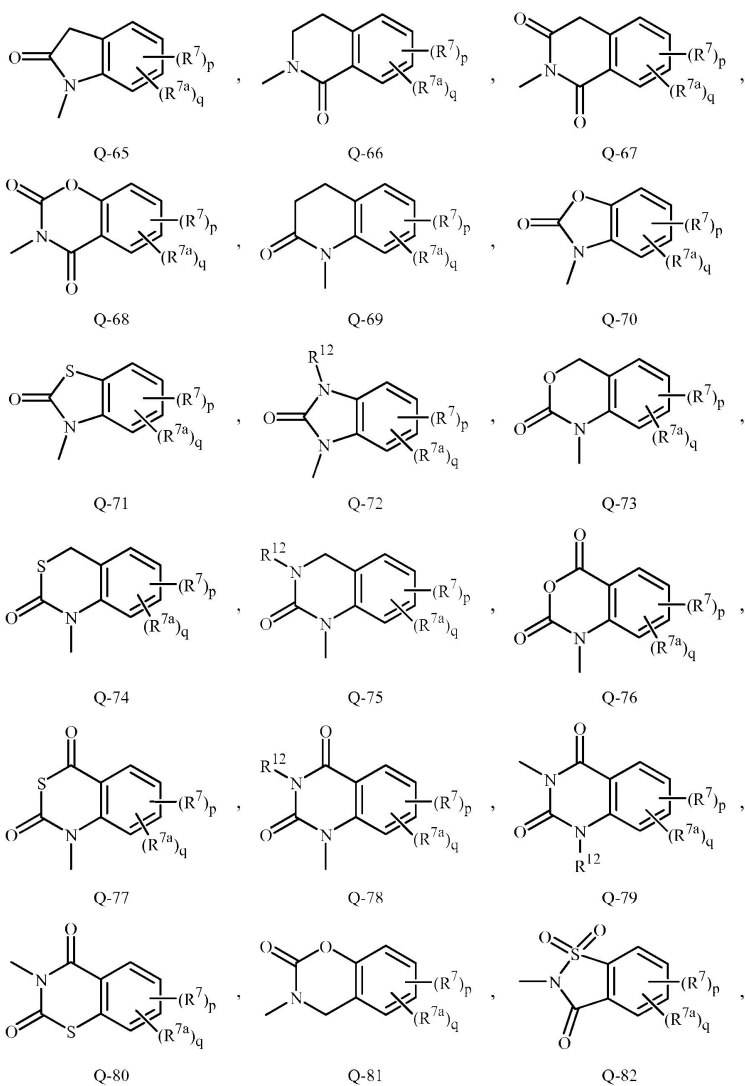
각 R^5 는 독립적으로 H, 할로젠, 시아노, C_1-C_6 알킬, C_1-C_6 할로알킬, C_3-C_8 사이클로알킬, C_3-C_8 할로사이클로알킬, C_2-C_6 알콕시알킬, C_1-C_6 알콕시, C_1-C_6 할로알콕시, C_3-C_8 사이클로알콕시, C_2-C_6 알케닐옥시, C_2-C_6 할로알케닐옥시, C_2-C_6 알키닐옥시, C_2-C_6 알콕시알콕시, C_2-C_6 알킬카르보닐옥시, C_2-C_6 할로알킬카르보닐옥시, C_1-C_6 알킬티오, C_1-C_6 할로알킬티오, C_3-C_{10} 트라이알킬실릴, $-NR^{25}R^{26}$ 또는 $-Z^2Q$ 이며;

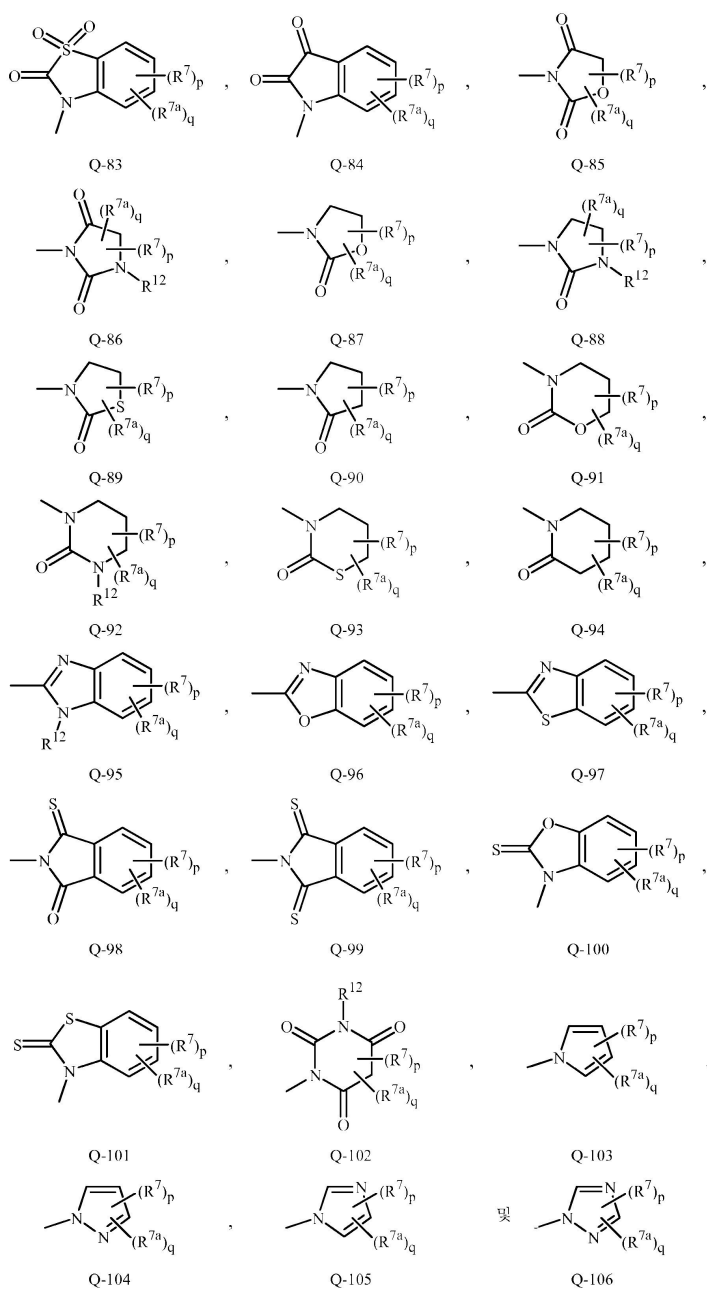
각 Z^2 는 독립적으로 직접 결합 또는 NR^{21} 이고;

Q는 Q-1 내지 Q-106 (여기서, p는 0 내지 5의 정수이고, q는 0 내지 2의 정수이다):









중의 하나이며;

각 R^7 은 독립적으로 할로젠, 시아노, 하이드록시, C_1 - C_3 알킬, C_1 - C_3 할로알킬, C_1 - C_2 알콕시 또는 C_1 - C_2 할로알콕시이고;

각 R^{28} 은 독립적으로 H, 할로젠, C_1 - C_2 알킬, C_1 - C_2 할로알킬 또는 C_1 - C_2 알콕시이며;

R^{28} 은 H, 할로젠, 시아노 또는 C_1 - C_4 알킬이고;

각 R^{30} 및 R^{31} 은 독립적으로 C_1 - C_6 알킬, C_3 - C_4 알케닐, C_3 - C_4 알키닐, C_1 - C_4 할로알킬, C_3 - C_6 할로알케닐, C_3 - C_6 할로알키닐, C_2 - C_6 알콕시알킬 및 C_3 - C_6 사이클로알킬 중에서 선택되며;

R^{32} 는 H, 시아노, 하이드록시, 아미노, C_1-C_6 알킬 또는 C_1-C_6 알콕시이고;

R^{33} 는 H 또는 C_1-C_6 알킬인 화합물.

청구항 4

제 3 항에 있어서,

G는 G-1, G-2, G-7, G-8, G-14, G-15, G-23, G-24, G-26, G-27, G-36, G-37, G-38, G-49, G-50 및 G-55 중에서 선택되고;

G는 비치환되며;

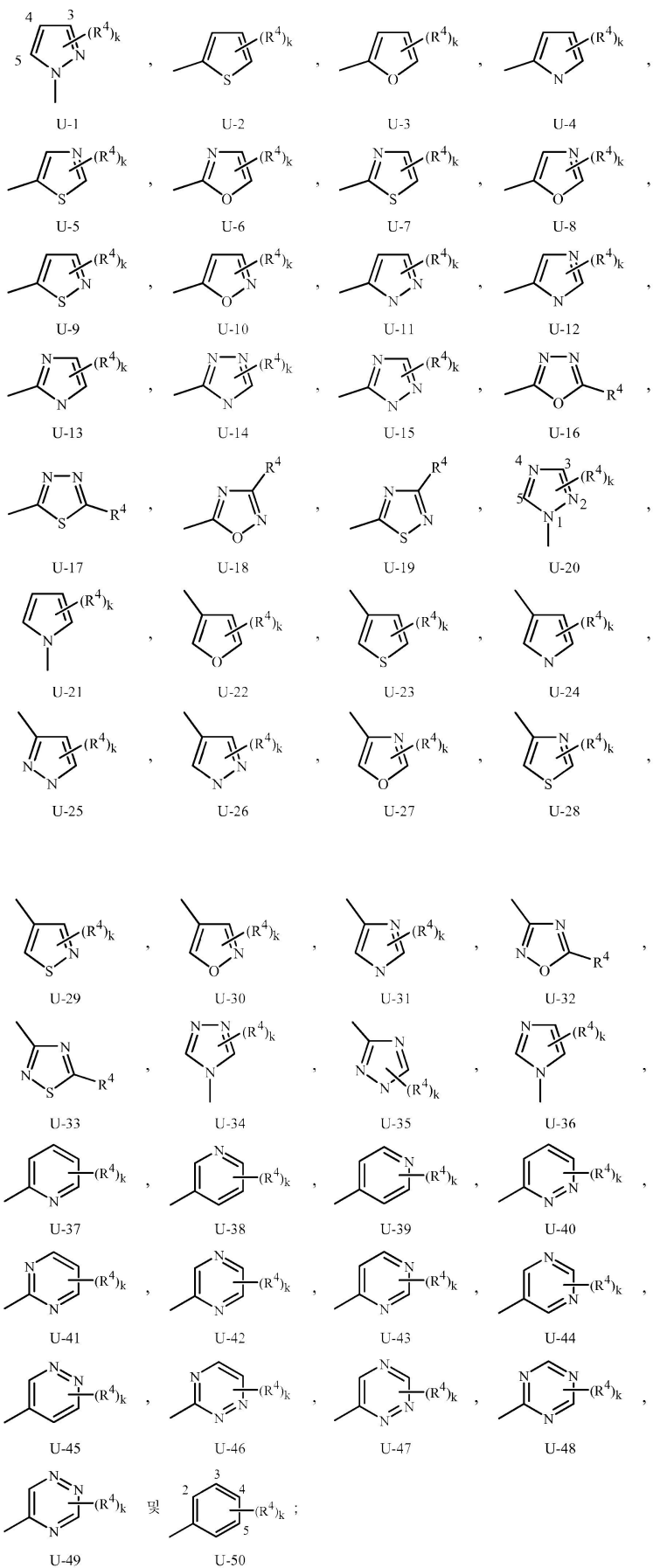
J는 J-4, J-5, J-8, J-11, J-15, J-16, J-20, J-29, J-30, J-37, J-38 및 J-69 중에서 선택되고;

x는 0 내지 2의 정수이며;

X는 X^1 또는 X^2 이며;

Z^1 은 직접 결합이고;

R^{1a} 는 U-1 내지 U-50 (여기서, R^4 가 탄소 환 구성원에 결합되면, R^4 는 R^{4a} 중에서 선택되고, R^4 가 질소 환 구성원에 결합되면, R^4 는 R^{4b} 중에서 선택되며, k는 0, 1 또는 2이다); 또는 C_2-C_5 알킬, C_2-C_5 알케닐, C_2-C_5 할로알킬, C_2-C_5 할로알케닐, C_2-C_5 할로알킬티오알킬, C_2-C_5 알콕시알킬, C_2-C_5 할로알콕시알킬, C_2-C_5 알킬티오알킬, C_2-C_5 알킬아미노알킬, C_2-C_5 알킬카르보닐옥시, C_2-C_5 할로알킬카르보닐옥시, C_2-C_5 알콕시, C_2-C_5 할로알콕시, C_2-C_5 알킬티오, C_2-C_5 알킬아미노 또는 C_2-C_5 알킬카르보닐아미노 중에서 선택되며:



각 R^5 는 독립적으로 H, 할로젠, 시아노, C_1-C_6 알킬, C_1-C_6 할로알킬, C_1-C_6 알콕시, C_1-C_6 할로알콕시, $-NR^{25}R^{26}$ 또는 $-Z^2Q$ 이고;

각 Z^2 는 직접 결합이며;

각 Q는 독립적으로 Q-1, Q-20, Q-32 내지 Q-34, Q-45 내지 Q-47, Q-60 내지 Q-73, Q-76 내지 Q-79, Q-84 내지 Q-94 및 Q-98 내지 Q-106이고;

p는 0 내지 3의 정수이며;

q는 0 내지 1의 정수이고;

각 R^7 은 독립적으로 F, Cl, 시아노, 하이드록시, 메틸 또는 메톡시이며;

R^{28} 은 H, 할로젠 또는 시아노이고;

각 R^{30} 및 R^{31} 은 독립적으로 C_1-C_6 알킬, C_3-C_4 알케닐, C_3-C_4 알키닐 및 C_1-C_4 할로알킬 중에서 선택되며;

R^{32} 는 H, 시아노, 하이드록시, 아미노, C_1-C_3 알킬 또는 C_1-C_3 알콕시 중에서 선택되고;

R^{33} 는 H 또는 메틸 중에서 선택되며;

n은 0인 화합물.

청구항 5

제 4 항에 있어서,

G는 G-1, G-2, G-15, G-26, G-27, G-36, G-37 및 G-38 중에서 선택되고;

J는 J-29이며;

X는 X^1 또는 X^2 이고; X를 포함하는 환은 포화되며;

R^{1a} 는 증거 1의 U-1 내지 U-3, U-11, U-13, U-20, U-22, U-23, U-36 내지 U-39 및 U-50 (여기서, R^4 가 탄소 환 구성원에 결합되면, R^4 는 R^{4a} 중에서 선택되고, R^4 가 질소 환 구성원에 결합되면, R^4 는 R^{4b} 중에서 선택되며, k는 0, 1 또는 2이다); 또는 C_3-C_5 알킬, C_3-C_5 알케닐, C_3-C_5 할로알킬, C_3-C_5 할로알케닐, C_2-C_4 할로알킬티오알킬, C_2-C_4 알콕시알킬, C_2-C_4 할로알콕시알킬, C_2-C_4 알킬티오알킬, C_2-C_4 알킬아미노알킬, C_2-C_3 알킬카르보닐옥시, C_2-C_3 할로알킬카르보닐옥시, C_2-C_4 알콕시, C_2-C_4 할로알콕시, C_2-C_4 알킬티오, C_2-C_4 알킬아미노 또는 C_2-C_3 알킬 카르보닐아미노 중에서 선택되고;

각 R^5 는 독립적으로 H, 할로젠, 시아노, C_1-C_6 알킬, C_1-C_6 할로알킬, C_1-C_6 알콕시, C_1-C_6 할로알콕시 또는 $-Z^2Q$ 이며;

Q는 Q-1, Q-45, Q-63, Q-64, Q-65, Q-68, Q-69, Q-70, Q-71, Q-72, Q-73, Q-76, Q-78, Q-79, Q-84, Q-85, Q-98, Q-99, Q-100 및 Q-101 내지 Q-106 중에서 선택되고;

R^{28} 은 Cl, F 또는 시아노이며;

각 R^{30} 및 R^{31} 은 독립적으로 C_1-C_4 알킬 중에서 선택되고;

R^{32} 는 H, 시아노, 하이드록시, C_1-C_2 알킬 또는 C_1-C_2 알콕시이며;

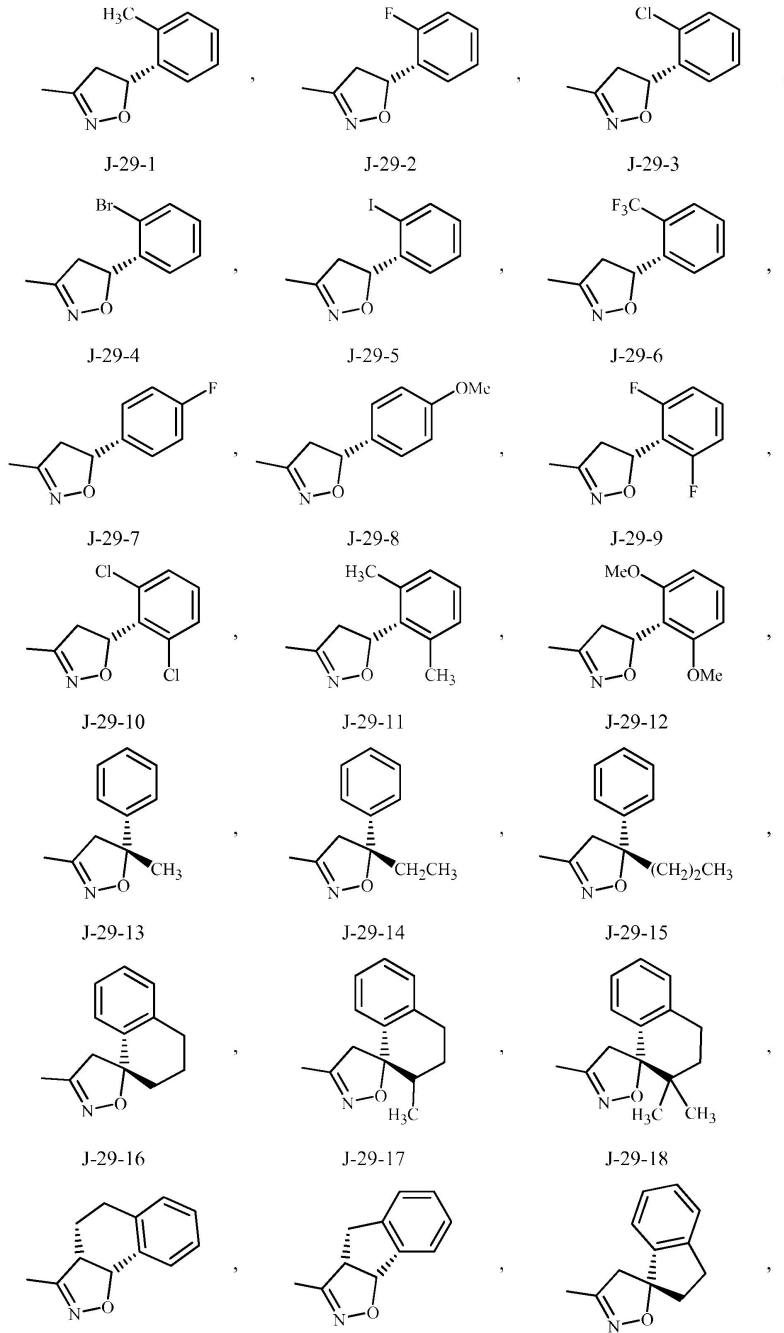
R³³는 H인 화합물.

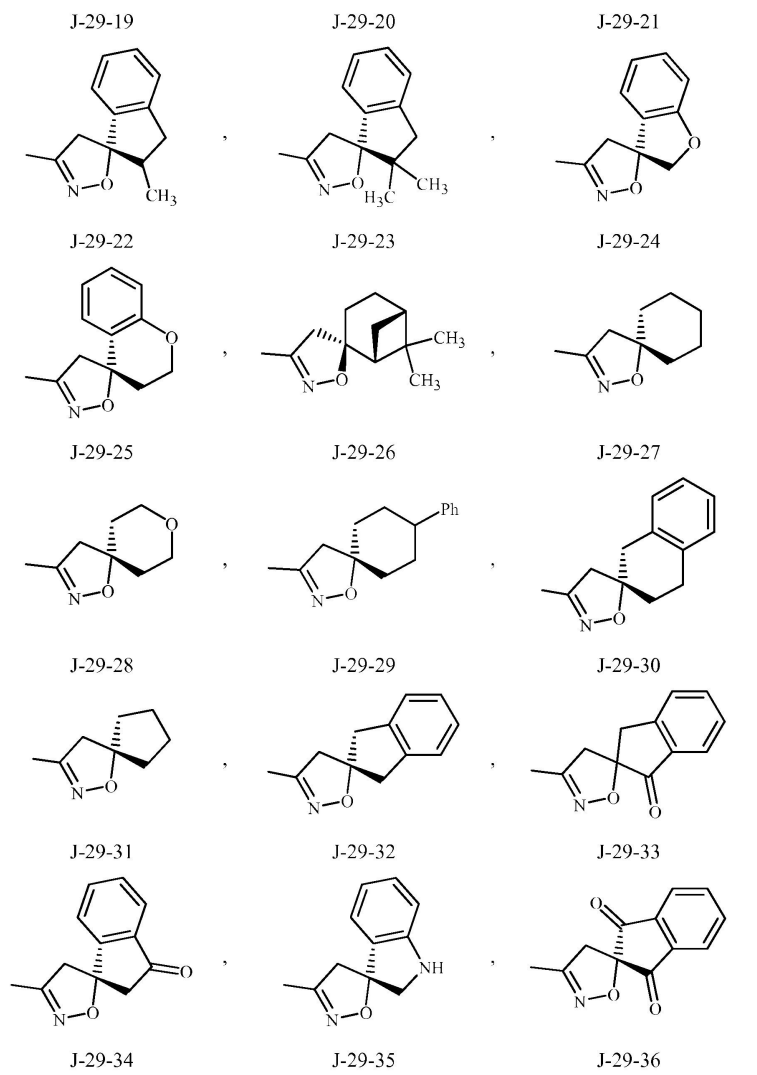
청구항 6

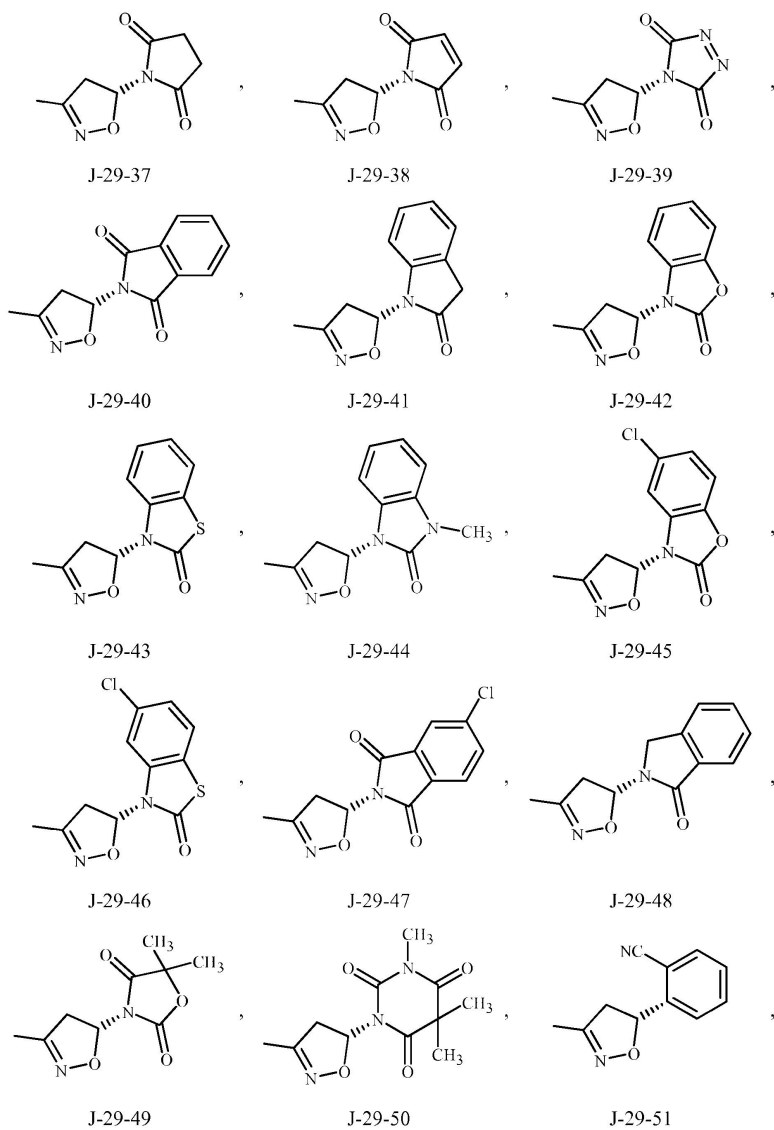
제 5 항에 있어서,

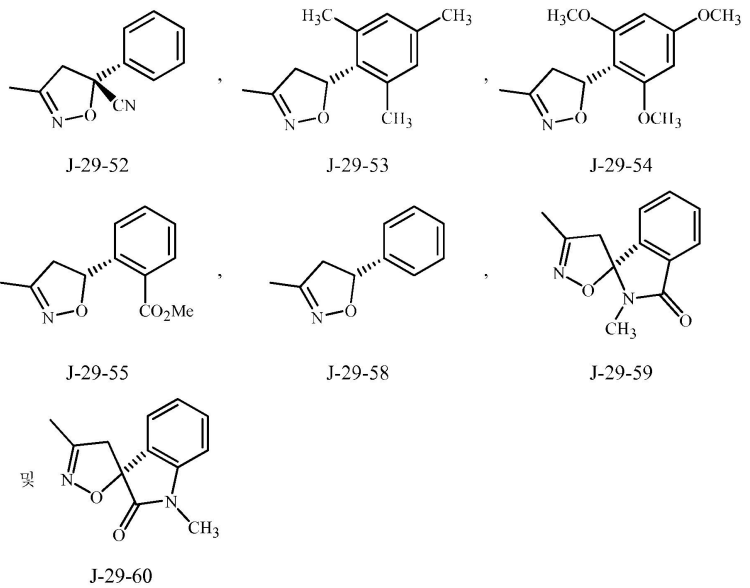
G는 G-1, G-2, G-15, G-26 및 G-36 중에서 선택되고;

J는 J-29-1 내지 J-29-60:









중의 어느 하나이며;

X는 X^1 이고;

R^{1a} 는 증거 1의 U-1, U-20 및 U-50 (여기서, R^4 는 R^{4a} 중에서 선택되고, k는 0, 1 또는 2이다); 또는 C_3-C_5 할로알킬, C_3-C_5 할로알케닐, C_3-C_5 할로알킬티오알킬, C_3-C_5 할로알콕시알킬, C_2-C_3 할로알킬카르보닐옥시 또는 C_2-C_4 할로알콕시 중에서 선택되며;

각 R^5 는 독립적으로 시아노, C_1-C_6 알킬, C_1-C_6 알콕시 또는 $-Z^2Q$ 이고;

Q는 Q-45, Q-63, Q-64, Q-65, Q-68, Q-69, Q-70, Q-71, Q-72, Q-84 및 Q-85 중에서 선택되며;

각 R^{30} 및 R^{31} 은 독립적으로 에틸 또는 메틸인 화합물.

청구항 7

제 1 항에 있어서,

메틸 4-[4-(2,3-다이하이드로스피로[1H-인덴-1,5'(4'H)-아이속사졸]-3'-일)-2-티아졸릴]-N-(2,5-다이메틸페닐)-1-피페리딘카르복시미데이트,

메틸 4-[4-[5-(2,6-다이플루오로페닐)-4,5-다이하이드로-3-아이속사졸릴]-2-티아졸릴]-N-(2,5-다이메틸페닐)-1-피페리딘카르복시미데이트,

메틸 4-[4-[4,5-다이하이드로-5-(2-옥소-3(2H)-벤족사졸릴)-3-아이속사졸릴]-2-티아졸릴]-N-(2,5-다이메틸페닐)-1-피페리딘카르복시미데이트,

메틸 N-(2,5-다이메틸페닐)-4-[4-[5-(2,6-다이메틸페닐)-4,5-다이하이드로-3-아이속사졸릴]-2-티아졸릴]-1-피페리딘카르복시미데이트,

메틸 4-[4-(3',4'-다이하이드로스피로[아이속사졸-5(4H),1'(2'H)-나프탈렌]-3-일)-2-티아졸릴]-N-(2,5-다이메틸페닐)-1-피페리딘카르복시미데이트,

메틸 N-(2,5-다이메틸페닐)-4-[4-[5-(2-플루오로페닐)-4,5-다이하이드로-3-아이속사졸릴]-2-티아졸릴]-1-피페리딘카르복시미데이트,

메틸 4-[4-(5-시아노-4,5-다이하이드로-5-페닐-3-아이속사졸릴)-2-티아졸릴]-N-(2,5-다이메틸페닐)-1-피페리딘카르복시미데이트,

메틸 4-[4-[5-(2-시아노페닐)-4,5-다이하이드로-3-아이속사졸릴]-2-티아졸릴]-N-(2,5-다이하이드로페닐)-1-피페리딘 카르복스이미데이트, 및

4-[4-(4,5-다이하이드로-5-페닐-3-아이속사졸릴)-2-티아졸릴]-N-(2,5-다이하이드로페닐)-1-피페리딘카르복스이미드 아미드로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 화합물.

청구항 8

살균적 유효량의 제 1 항의 화합물을 식물 또는 이의 부분, 또는 식물 종자 또는 모종에 적용하는 것을 포함하는, 난균류 식물 병원체에 의한 식물병을 방제하는 방법.

청구항 9

(1) 제 1 항의 화합물; 및 (2) 적어도 하나의 다른 살균제를 포함하는 살균제 조성물.

청구항 10

(1) 살균적 유효량의 제 1 항의 화합물; 및 (2) 계면활성제, 고체 희석제 및 액체 희석제로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 적어도 하나의 추가 성분을 포함하는 살균제 조성물.

발명의 설명

기술 분야

[0001]

본 발명은 특정한 복소환 화합물, 및 이의 N-옥사이드, 염 및 조성물, 및 살균제로서의 이들의 사용 방법에 관한 것이다.

배경 기술

[0002]

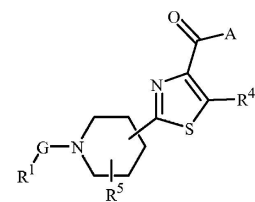
균류 식물 병원체에 의한 식물병의 방제는 높은 작물 효율의 달성에 있어서 매우 중요하다. 관상용 작물, 야채 작물, 농작물, 곡물, 및 과일 작물에 대한 식물 병해는 현저한 생산성 저하를 야기하므로, 소비자에게 가격 상승을 전가할 수 있다. 이 때문에 다수의 제품이 시판되고 있으나, 더욱 효과적이고, 보다 저렴하며, 독성이 낮고, 환경적으로 보다 안전하거나 작용 부위가 상이한 신규 화합물이 계속해서 요구되고 있다.

[0003]

국제 특허 공개 제W0 05/003128호는 특정한 화학식 i:

[0004]

[화학식 i]



[0005]

의 티아졸릴피페리딘 및 마이크로솜 트라이글리세라이드 전달 단백질 저해제로서의 이의 용도를 개시하고 있다.

[0007]

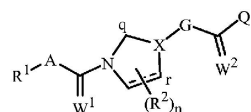
국제 특허 공개 제W0 04/058751호는 혈관 긴장도를 변화시키기 위한 피페리딘-티아졸 카르복스아미드 유도체를 개시하고 있다.

[0008]

국제 특허 공개 제W0 2007/014290호는 특정한 화학식 ii:

[0009]

[화학식 ii]



[0010]

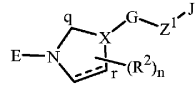
[0011]

의 카르복스아미드 유도체 및 살균제로서의 이의 용도를 개시하고 있다.

발명의 내용

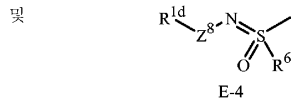
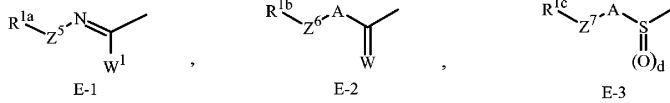
(발명의 요약)

본 발명은 화학식 1의 화합물 (모든 기하 이성질체 및 입체 이성질체 포함), 이의 N-옥사이드, 이의 염, 이들을 함유하는 농업용 조성물 및 살균제로서의 이들의 용도에 관한 것이다:



상기 식에서,

E는:



로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 라디칼이고;

A는 CHR^{15} , NR^{16} 또는 $\text{C}(=\text{O})$ 이며;

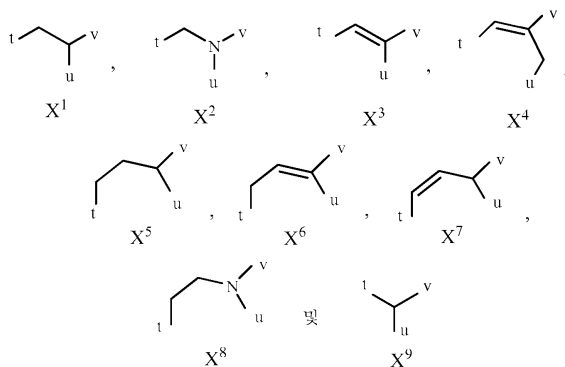
G는 임의로 치환된 5원 복소환이고;

J는 각각, 탄소 원자 및 2개 이하의 O, 2개 이하의 S 및 4개 이하의 N 중에서 독립적으로 선택되는 4개 이하의 헤테로 원자, 및 $\text{C}(=\text{O})$, $\text{C}(=\text{S})$, $\text{S}(=\text{O})_s(=\text{NR}^{23})_f$ 및 $\text{SiR}^{17}\text{R}^{18}$ 중에서 선택되는 3개 이하의 환 구성원 (ring member) 중에서 선택되는 환 구성원을 포함하며, R^5 중에서 독립적으로 선택되는 5개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 5원, 6원 또는 7원 환, 8원 내지 11원 이환계 (bicyclic ring system) 또는 7원 내지 11원 스피로환계 (spirocyclic ring system)이고;

W^1 은 OR^{30} , SR^{31} , $\text{NR}^{32}\text{R}^{33}$ 또는 R^{28} 이며;

W는 O 또는 S이고;

X는:



(여기서, "t"로 특정된 X^1 , X^2 , X^3 , X^4 , X^5 , X^6 , X^7 , X^8 또는 X^9 의 결합은 화학식 1의 "q"로 특정된 탄소 원자에

연결되고, "u"로 특정된 결합은 화학식 1의 "r"로 특정된 탄소 원자에 연결되며, "v"로 특정된 결합은 화학식 1의 G에 연결된다) 중에서 선택되는 라디칼이며;

[0027] Z^1 은 직접 결합, O, C(=O), S(O)_m, CHR²⁰ 또는 NR²¹이고;

[0028] Z^5 , Z^6 , Z^7 및 Z^8 은 독립적으로 직접 결합, C(=O) 또는 S(O)₂이며;

[0029] R^{1a} , R^{1b} , R^{1c} 및 R^{1d} 는 독립적으로 임의로 치환된 페닐, 임의로 치환된 나프탈레닐 또는 임의로 치환된 5원 내지 6원 헤테로 방향족 환 (heteroaromatic ring); 또는 시아노, C₁-C₈ 알킬, C₂-C₈ 알케닐, C₂-C₈ 알키닐, C₁-C₈ 할로알킬, C₂-C₈ 할로알케닐, C₂-C₈ 할로알키닐, C₃-C₈ 사이클로알킬, C₃-C₈ 할로사이클로알킬, C₄-C₁₀ 알킬사이클로알킬, C₄-C₁₀ 사이클로알킬알킬, C₄-C₁₀ 할로사이클로알킬알킬, C₅-C₁₀ 알킬사이클로알킬알킬, C₂-C₈ 알콕시알킬, C₂-C₈ 할로알콕시알킬, C₄-C₁₀ 사이클로알콕시알킬, C₃-C₁₀ 알콕시알콕시알킬, C₂-C₈ 알킬티오알킬, C₂-C₈ 할로알킬티오알킬, C₂-C₈ 알킬설퍼닐알킬, C₂-C₈ 알킬설포닐알킬, C₃-C₈ 알콕시카르보닐알킬, C₃-C₈ 할로알콕시카르보닐알킬, C₂-C₈ 알킬아미노알킬, C₃-C₁₀ 다이알킬아미노알킬, C₂-C₈ 할로알킬아미노알킬, C₄-C₁₀ 사이클로알킬아미노알킬, C₁-C₈ 알콕시, C₁-C₈ 할로알콕시, C₃-C₈ 사이클로알콕시, C₃-C₈ 할로사이클로알콕시, C₄-C₁₀ 사이클로알킬알콕시, C₂-C₈ 알케닐옥시, C₂-C₈ 할로알케닐옥시, C₂-C₈ 알키닐옥시, C₃-C₈ 할로알키닐옥시, C₂-C₈ 알콕시알콕시, C₂-C₈ 알킬카르보닐옥시, C₂-C₈ 할로알킬카르보닐옥시, C₁-C₈ 알킬티오, C₁-C₈ 할로알킬티오, C₃-C₈ 사이클로알킬티오, C₃-C₁₀ 트라이알킬실릴, C₁-C₈ 알킬아미노, C₂-C₈ 다이알킬아미노, C₁-C₈ 할로알킬아미노, C₂-C₈ 할로다이알킬아미노, C₃-C₈ 사이클로알킬아미노, C₂-C₈ 알킬카르보닐아미노, C₂-C₈ 할로알킬카르보닐아미노, C₁-C₈ 알킬설포닐아미노, C₁-C₈ 할로알킬설포닐아미노, 피롤리디닐, 피페리디닐 또는 모르폴리닐이고;

[0030] 각 R^2 는 독립적으로 할로젠, 시아노, 하이드록시, C₁-C₄ 알킬, C₁-C₄ 알케닐, C₁-C₄ 할로알킬 또는 C₁-C₄ 알콕시이거나;

[0031] 2개의 R^2 기는 함께 C₁-C₄ 알킬렌 또는 C₂-C₄ 알케닐렌으로서 취해 가교 이환계 또는 융합 이환계를 형성하거나;

[0032] 이중 결합으로 결합된 인접한 환 탄소 원자에 부착되는 2개의 R^2 기는 함께, 할로젠, 시아노, 하이드록시, 아미노, 니트로, C₁-C₄ 알킬, C₁-C₄ 할로알킬, C₁-C₄ 알콕시 및 C₁-C₄ 할로알콕시 중에서 독립적으로 선택되는 3개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 -CH=CH-CH=CH-로서 취해지며;

[0033] R^6 는 C₁-C₄ 알킬, C₁-C₄ 할로알킬 또는 C₂-C₄ 알콕시알킬이고;

[0034] 각 R^5 는 독립적으로 H, 할로젠, 시아노, 하이드록시, 아미노, 니트로, -CHO, -C(=O)OH, -C(=O)NH₂, -NR²⁵R²⁶, C₁-C₆ 알킬, C₂-C₆ 알케닐, C₂-C₆ 알키닐, C₁-C₆ 할로알킬, C₂-C₆ 할로알케닐, C₂-C₆ 할로알키닐, C₃-C₈ 사이클로알킬, C₃-C₈ 할로사이클로알킬, C₄-C₁₀ 알킬사이클로알킬, C₄-C₁₀ 사이클로알킬알킬, C₆-C₁₄ 사이클로알킬사이클로알킬, C₄-C₁₀ 할로사이클로알킬알킬, C₅-C₁₀ 알킬사이클로알킬알킬, C₃-C₈ 사이클로알케닐, C₃-C₈ 할로사이클로알케닐, C₂-C₆ 알콕시알킬, C₄-C₁₀ 사이클로알콕시알킬, C₃-C₈ 알콕시알콕시알킬, C₂-C₆ 알킬티오알킬, C₂-C₆ 알킬설퍼닐알킬, C₂-C₆ 알킬설포닐알킬, C₂-C₆ 알킬아미노알킬, C₃-C₈ 다이알킬아미노알킬, C₂-C₆ 할로알킬아미노알킬, C₄-C₁₀ 사이클로알킬아미노알킬, C₂-C₆ 알킬카르보닐, C₂-C₆ 할로알킬카르보닐, C₄-C₈ 사이클로알킬카르보닐, C₂-C₆ 알콕시카르보닐, C₄-C₈ 사이클로알콕시카르보닐, C₅-C₁₀ 사이클로알킬알콕시카르보닐, C₂-C₆ 알킬아미노카르보닐, C₃-C₈ 다이알킬아미노카르보닐, C₄-C₈ 사이클로알킬아미노카르보닐, C₂-C₆ 할로알콕시알킬, C₁-C₆ 하이드록시알킬, C₁-C₆ 알콕시, C₁-C₆ 할로알콕시, C₃-C₈ 사이클로알콕시, C₃-C₈ 할로사이클로알콕시, C₄-C₁₀ 사이클로알킬알콕시, C₂-C₆ 알케닐옥시, C₂-C₆ 할로알케닐옥시, C₂-C₆ 알키닐옥시, C₂-C₆ 할로알키닐옥시, C₂-C₆ 알콕시알콕시, C₂-C₆ 알킬카르보닐옥시, C₂-C₆ 할로알킬카르보닐옥시, C₄-C₈ 사이클로알킬카르보닐옥시, C₃-C₆ 알킬카르보닐알콕시,

C₁-C₆ 알킬티오, C₁-C₆ 할로알킬티오, C₃-C₈ 사이클로알킬티오, C₁-C₆ 알킬설퍼닐, C₁-C₆ 할로알킬설퍼닐, C₁-C₆ 알킬설포닐, C₁-C₆ 할로알킬설포닐, C₃-C₈ 사이클로알킬설포닐, C₃-C₁₀ 트라이알킬설킬, C₁-C₆ 알킬설포닐아미노, C₁-C₆ 할로알킬설포닐아미노 또는 -Z²Q이며;

[0035] 각 Z²는 독립적으로 직접 결합, -O-, -C(=O)-, -S(O)_m-, -CHR²⁰ 또는 -NR²¹이고;

[0036] 각 Q는 독립적으로, 각각 탄소 원자 또는 질소 원자 환 구성원 상에서 R^{7a} 중에서 독립적으로 선택되는 2개 이하의 치환기로 임의로 치환되며, 탄소 원자 환 구성원 상에서 R⁷, 질소 원자 환 구성원 상에서 R¹² 중에서 독립적으로 선택되는 5개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 페닐, 벤질, 나프탈레닐, 5원 내지 6원 헤테로 방향족 환 또는 8원 내지 11원 헤테로 방향족 이환계이거나;

[0037] 각각, C(=O), C(=S), S(=O)_s(=NR²³)_f 및 SiR¹⁷R¹⁸으로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 환 구성원을 임의로 포함하고, 탄소 원자 또는 질소 원자 환 구성원 상에서 R^{7a} 중에서 독립적으로 선택되는 2개 이하의 치환기로 임의로 치환되며, 탄소 원자 환 구성원 상에서 R⁷, 질소 원자 환 구성원 상에서 R¹² 중에서 독립적으로 선택되는 5개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 3원 내지 7원 비방향족 탄소환, 5원, 6원 또는 7원 비방향족 복소환 또는 8원 내지 11원 비방향족 이환계이며;

[0038] 각 R^{7a}는 독립적으로 -Z^{3A}T^A, -Z^{3N}T^N 또는 -Z^{3P}T^P이고;

[0039] 각 Z³는 독립적으로 직접 결합, O, NR²², C(=O), C(=S), S(O)_m-, CHR²⁰-, -CHR²⁰-CHR²⁰-, -CR²⁴=CR²⁷-, -OCHR²⁰- 또는 -CHR²⁰O-이며;

[0040] 각 T^A는 독립적으로, 각각 탄소 원자 환 구성원 상에서 R²⁹ 중에서 독립적으로 선택되는 5개 이하의 치환기로 임의로 치환되고, 질소 원자 환 구성원 상에서 R²² 중에서 독립적으로 선택되는 2개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 페닐, 페닐에티닐 또는 5원 내지 6원 헤테로 방향족 환이고;

[0041] 각 T^N은 독립적으로 C(R²⁹)₂, O, S, NR²²-, C(R²⁹)=CC(R²⁹)-, C(R²⁹)=N-, -N=N-, C(=O), C(=S), -C=C-, C(=NR²³), S(=O)_s(=NR²³)_f 및 SiR¹⁷R¹⁸으로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 환 구성원을 포함하는 3원 내지 7원 비방향족 환이며;

[0042] 각 T^P는 독립적으로 C(R²⁹)₂, O, S, NR²²-, C(R²⁹)=CC(R²⁹)-, C(R²⁹)=N-, -N=N-, C(=O), C(=S), -C=C-, C(=NR²³), S(=O)_s(=NR²³)_f 및 SiR¹⁷R¹⁸으로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 환 구성원을 포함하는 8원 내지 10원 방향족 또는 7원 내지 11원 비방향족 이환계이고;

[0043] 각 R⁷은 독립적으로 할로젠, 시아노, 하이드록시, 아미노, 니트로, C₁-C₆ 알킬, C₂-C₆ 알케닐, C₂-C₆ 알키닐, C₃-C₆ 사이클로알킬, C₄-C₁₀ 사이클로알킬알킬, C₄C₁₀ 알킬사이클로알킬, C₅C₁₀ 알킬사이클로알킬알킬, C₆-C₁₄ 사이클로알킬사이클로알킬, C₁-C₆ 할로알킬, C₂-C₆ 할로알케닐, C₂-C₆ 할로알키닐, C₃-C₆ 할로사이클로알킬, C₁-C₄ 알콕시, C₁-C₄ 할로알콕시, C₁-C₄ 알킬티오, C₁-C₄ 할로알킬티오, C₁-C₄ 알킬설퍼닐, C₁-C₄ 알킬설포닐, C₁-C₄ 할로알킬설퍼닐, C₁-C₄ 할로알킬설포닐, C₁-C₄ 알킬아미노, C₂-C₈ 다이알킬아미노, C₃-C₆ 사이클로알킬아미노, C₂-C₄ 알콕시아릴, C₁-C₄ 하이드록시아릴, C₂-C₄ 알킬카르보닐, C₂-C₆ 알콕시카르보닐, C₂-C₆ 알킬카르보닐옥시, C₂-C₆ 알킬카르보닐티오, C₂-C₆ 알킬아미노카르보닐, C₃-C₈ 다이알킬아미노카르보닐 또는 C₃-C₆ 트라이알킬설킬이거나;

[0044] R⁵ 및 R⁷은 R⁵ 및 R⁷을 연결하는 원자와 함께, 탄소 원자 및 임의로 1개 이하의 O, 1개 이하의 S 및 1개 이하의 N 중에서 선택되는 3개 이하의 헤테로 원자, 및 C(=O), C(=S), S(=O)_s(=NR²³)_f 및 SiR¹⁷R¹⁸ 중에서 선택되는 3개 이하의 환 구성원 중에서 선택되는 환 구성원을 포함하는 임의로 치환된 5원 내지 7원 환을 형성하며;

- [0045] 각 R^{12} 는 독립적으로 H, C_1-C_3 알킬, C_1-C_3 알킬카르보닐, C_1-C_3 알콕시 또는 C_1-C_3 알콕시카르보닐이고;
- [0046] R^{15} 은 H, 할로젠, 시아노, 하이드록시, $-CHO$, C_1-C_4 알킬, C_2-C_4 알케닐, C_2-C_4 알키닐, C_1-C_4 할로알킬, C_2-C_4 할로알케닐, C_2-C_4 할로알키닐, C_2-C_4 알콕시알킬, C_2-C_4 알킬티오알킬, C_2-C_4 알킬설퍼닐알킬, C_2-C_4 알킬설포닐알킬, C_2-C_4 알킬카르보닐, C_2-C_4 할로알킬카르보닐, C_2-C_5 알콕시카르보닐, C_3-C_5 알콕시카르보닐알킬, C_2-C_5 알킬아미노카르보닐, C_3-C_5 다이알킬아미노카르보닐, C_1-C_4 알콕시, C_1-C_4 할로알콕시, C_1-C_4 알킬티오, C_1-C_4 할로알킬티오, C_1-C_4 알킬설퍼닐, C_1-C_4 할로알킬설퍼닐, C_1-C_4 알킬설포닐 또는 C_1-C_4 할로알킬설포닐이며;
- [0047] R^{16} 은 H, C_1-C_4 알킬, C_2-C_4 알케닐, C_2-C_4 알키닐, C_1-C_4 할로알킬, C_2-C_4 할로알케닐, C_2-C_4 할로알키닐, C_2-C_4 알콕시알킬, C_2-C_4 알킬티오알킬, C_2-C_4 알킬설퍼닐알킬, C_2-C_4 알킬설포닐알킬, C_2-C_4 알킬카르보닐, C_2-C_4 할로알킬카르보닐, C_2-C_5 알콕시카르보닐, C_3-C_5 알콕시카르보닐알킬, C_2-C_5 알킬아미노카르보닐, C_3-C_5 다이알킬아미노카르보닐, C_1-C_4 알킬설포닐 또는 C_1-C_4 할로알킬설포닐이고;
- [0048] 각 R^{17} 및 R^{18} 은 독립적으로 C_1-C_5 알킬, C_2-C_5 알케닐, C_2-C_5 알키닐, C_3-C_5 사이클로알킬, C_3-C_6 할로사이클로알킬, C_4-C_{10} 사이클로알킬알킬, C_4-C_7 알킬사이클로알킬, C_5-C_7 알킬사이클로알킬알킬, C_1-C_5 할로알킬, C_1-C_5 알콕시 또는 C_1-C_5 할로알콕시이며;
- [0049] 각 R^{20} , R^{22} , R^{24} 및 R^{27} 은 독립적으로 H, C_1-C_4 알킬 또는 C_1-C_4 할로알킬이고;
- [0050] 각 R^{21} 은 독립적으로 H, C_1-C_6 알킬, C_1-C_6 할로알킬, C_3-C_8 사이클로알킬, C_2-C_6 알킬카르보닐, C_2-C_6 할로알킬카르보닐, C_2-C_6 알콕시카르보닐 또는 C_2-C_6 할로알콕시카르보닐이며;
- [0051] 각 R^{23} 은 독립적으로 H, 시아노, C_1-C_6 알킬, C_1-C_6 할로알킬, C_3-C_8 사이클로알킬, C_3-C_8 할로사이클로알킬, C_1-C_6 알콕시, C_1-C_6 할로알콕시, C_1-C_6 알킬아미노, C_2-C_8 다이알킬아미노, C_1-C_6 할로알킬아미노 또는 페닐이고;
- [0052] 각 R^{25} 은 독립적으로 H, C_1-C_6 알킬, C_1-C_6 할로알킬, C_3-C_8 사이클로알킬, C_2-C_6 알킬카르보닐, C_2-C_6 할로알킬카르보닐, C_2-C_6 알콕시카르보닐 또는 C_2-C_6 할로알콕시카르보닐이며;
- [0053] 각 R^{26} 은 독립적으로 C_1-C_6 알킬, C_1-C_6 할로알킬, C_3-C_8 사이클로알킬, C_2-C_6 알킬카르보닐, C_2-C_6 할로알킬카르보닐, C_2-C_6 알콕시카르보닐, C_2-C_6 할로알콕시카르보닐 또는 $-Z^4Q$ 이고;
- [0054] 각 Z^4 는 독립적으로 O, $C(=O)$, $S(O)_m$ 또는 CHR^{20} 이며;
- [0055] R^{28} 은 H, 할로젠, 시아노, C_1-C_4 알킬, C_1-C_4 할로알킬, C_2-C_4 알콕시알킬, C_2-C_4 알킬카르보닐, C_2-C_4 알콕시카르보닐, C_2-C_3 알킬아미노카르보닐 또는 C_3-C_6 다이알킬아미노카르보닐이고;
- [0056] 각 R^{29} 은 독립적으로 H, 할로젠, 시아노, 하이드록시, 아미노, 니트로, $-CHO$, $-C(=O)OH$, $-C(=O)NH_2$, $-SO_2NH_2$, $-C(=S)NH_2$, $-C(=O)NHCN$, $-C(=O)NHOH$, $-SH$, $-SO_2NHCN$, $-SO_2NHOH$, $-OCN$, $-SCN$, $-SF_5$, $-NHCHO$, $-NHNH_2$, $-N_3$, $-NHOH$, $-NHCN$, $-NHC(=O)NH_2$, $-N=C=O$, $-N=C=S$, C_1-C_6 알킬, C_2-C_6 알케닐, C_2-C_6 알키닐, C_1-C_6 할로알킬, C_2-C_8 알킬카르보닐, C_2-C_8 할로알킬카르보닐, C_2-C_8 알콕시카르보닐, C_4-C_{10} 사이클로알콕시카르보닐, C_5-C_{12} 사이클로알킬알콕시카르보닐, C_2-C_8 알킬아미노카르보닐, C_3-C_{10} 다이알킬아미노카르보닐, C_2-C_6 할로알케닐, C_2-C_6 할로알키닐, C_3-C_8 사이클로알킬, C_3-C_8 할로사이클로알킬, C_4-C_{10} 알킬사이클로알킬, C_4-C_{10} 사이클로알킬알킬, C_6-C_{14} 사이클로알킬사이클로알킬, C_4-C_{10} 할로사이클로알킬알킬, C_5-C_{12} 알킬사이클로알킬알킬, C_3-C_8

사이클로알케닐, C₃-C₈ 할로사이클로알케닐, C₂-C₈ 알콕시알킬, C₄-C₁₀ 사이클로알콕시알킬, C₃-C₁₀ 알콕시알콕시알킬, C₂-C₈ 알킬티오알킬, C₂-C₈ 알킬설퍼닐알킬, C₂-C₈ 알킬설포닐알킬, C₂-C₈ 알킬아미노알킬, C₃-C₁₀ 다이알킬아미노알킬, C₂-C₈ 할로알킬아미노알킬, C₄-C₁₀ 사이클로알킬아미노알킬, C₄-C₁₀ 사이클로알킬카르보닐, C₄-C₁₀ 사이클로알킬아미노카르보닐, C₂-C₇ 시아노알킬, C₁-C₆ 하이드록시알킬, C₄-C₁₀ 사이클로알케닐알킬, C₂-C₈ 할로알콕시알킬, C₂-C₈ 알콕시할로알킬, C₂-C₈ 할로알콕시할로알킬, C₄-C₁₀ 할로사이클로알콕시알킬, C₄-C₁₀ 사이클로알케닐옥시알킬, C₄-C₁₀ 할로사이클로알케닐옥시알킬, C₃-C₁₀ 다이알콕시알킬, C₄-C₁₂ 트라이알콕시알킬, C₃-C₈ 알콕시알케닐, C₃-C₈ 알콕시알키닐, C₃-C₁₀ 할로다이알킬아미노알킬, C₅-C₁₂ 사이클로알킬(알킬)아미노알킬, C₂-C₈ 알킬(티오카르보닐), C₃-C₁₀ 알콕시알킬카르보닐, C₃-C₁₀ 알콕시카르보닐알킬, C₂-C₈ 할로알콕시카르보닐, C₃-C₁₀ 알콕시알콕시카르보닐, C₂-C₈ (알킬티오)카르보닐, C₂-C₈ 알콕시(티오카르보닐), C₂-C₈ 알킬티오(티오카르보닐), C₂-C₈ 알킬아미노(티오카르보닐), C₃-C₁₀ 다이알킬아미노(티오카르보닐), C₃-C₁₀ 알콕시(알킬)아미노카르보닐, C₂-C₈ 알킬설포닐아미노카르보닐, C₂-C₈ 할로알킬설포닐아미노카르보닐, C₂-C₈ 알킬아미디노, C₃-C₁₀ 다이알킬아미디노, C₁-C₆ 알콕시, C₁-C₆ 할로알콕시, C₂-C₈ 알킬카르보닐옥시, C₁-C₆ 알킬티오, C₁-C₆ 할로알킬티오, C₁-C₆ 알킬설퍼닐, C₁-C₆ 할로알킬설퍼닐, C₁-C₆ 알킬설포닐, C₁-C₆ 할로알킬설포닐, C₁-C₆ 알킬아미노설포닐, C₂-C₈ 다이알킬아미노설포닐, C₃-C₁₀ 트라이알킬설퍼닐, C₃-C₈ 사이클로알콕시, C₃-C₈ 할로사이클로알콕시, C₄-C₁₀ 사이클로알킬알콕시, C₂-C₆ 알케닐옥시, C₂-C₆ 할로알케닐옥시, C₂-C₆ 알키닐옥시, C₃-C₆ 할로알키닐옥시, C₂-C₈ 알콕시알콕시, C₂-C₈ 할로알킬카르보닐옥시, C₄-C₁₀ 사이클로알킬카르보닐옥시, C₃-C₁₀ 알킬카르보닐알콕시, C₃-C₈ 사이클로알킬티오, C₃-C₈ 사이클로알킬설포닐, C₃-C₈ 사이클로알케닐옥시, C₃-C₈ 할로사이클로알케닐옥시, C₂-C₈ 할로알콕시알콕시, C₂-C₈ 알콕시할로알콕시, C₂-C₈ 할로알콕시할로알콕시, C₃-C₁₀ 알콕시카르보닐알콕시, C₂-C₈ 알킬(티오카르보닐)옥시, C₂-C₈ 알킬카르보닐티오, C₂-C₈ 알킬(티오카르보닐)티오, C₃-C₈ 사이클로알킬설퍼닐, C₃-C₁₀ 할로트라이알킬설퍼닐, C₁-C₆ 알킬아미노, C₂-C₈ 다이알킬아미노, C₂-C₈ 알킬카르보닐아미노, C₁-C₆ 알킬설포닐아미노, C₁-C₆ 할로알킬아미노, C₂-C₈ 할로다이알킬아미노, C₃-C₈ 사이클로알킬아미노, C₂-C₈ 할로알킬카르보닐아미노, C₁-C₆ 할로알킬설포닐아미노, C₄-C₁₀ 사이클로알킬알킬아미노, C₄-C₁₀ 사이클로알킬(알킬)아미노, C₃-C₁₀ 알콕시카르보닐알킬아미노, C₁-C₆ 알콕시아미노, C₁-C₆ 할로알콕시아미노, C₄-C₁₂ 다이알킬이미노, C₂-C₈ 알콕시카르보닐아미노, C₂-C₈ 할로알콕시카르보닐아미노, C₂-C₈ 알킬아미노카르보닐아미노, C₃-C₁₀ 다이알킬아미노카르보닐아미노, C₃-C₁₀ 알킬아미노카르보닐(알킬)아미노, C₄-C₁₂ 다이알킬아미노카르보닐(알킬)아미노, C₂-C₈ 알킬아미노(티오카르보닐)아미노, C₃-C₁₀ 다이알킬아미노(티오카르보닐)아미노, C₃-C₁₀ 알킬아미노(티오카르보닐)알킬아미노 또는 C₄-C₁₂ 다이알킬아미노(티오카르보닐)알킬아미노이며;

[0057]

각 R³⁰ 및 R³¹은 독립적으로 C₁-C₆ 알킬, C₃-C₆ 알케닐, C₃-C₆ 알키닐, C₁-C₆ 할로알킬, C₃-C₆ 할로알케닐, C₃-C₆ 할로알키닐, C₃-C₆ 사이클로알킬, C₃-C₆ 할로사이클로알킬, C₄-C₈ 알킬사이클로알킬, C₄-C₈ 사이클로알킬알킬, C₄-C₈ 할로사이클로알킬알킬, C₅-C₈ 알킬사이클로알킬알킬, C₂-C₆ 알콕시알킬, C₄-C₈ 사이클로알콕시알킬, C₃-C₆ 알콕시알콕시알킬, C₂-C₆ 알킬티오알킬, C₂-C₆ 알킬설퍼닐알킬, C₂-C₆ 알킬설포닐알킬, C₂-C₆ 알킬아미노알킬, C₃-C₆ 다이알킬아미노알킬, C₂-C₆ 할로알킬아미노알킬, C₄-C₈ 사이클로알킬아미노알킬, C₂-C₆ 알킬카르보닐, C₂-C₆ 할로알킬카르보닐, C₄-C₈ 사이클로알킬카르보닐, C₂-C₆ 알콕시카르보닐, C₂-C₆ 알킬아미노카르보닐, C₃-C₈ 다이알킬아미노카르보닐 또는 C₄-C₈ 사이클로알킬아미노카르보닐이고;

[0058]

R³²는 H, 시아노, 하이드록시, 아미노, C₁-C₆ 알킬, C₃-C₆ 알케닐, C₃-C₆ 알키닐, C₁-C₆ 할로알킬, C₃-C₆ 할로알케닐, C₃-C₆ 할로알키닐, C₃-C₆ 사이클로알킬, C₄-C₈ 사이클로알킬알킬, C₂-C₆ 알콕시알킬, C₁-C₆ 알콕시, C₁-C₆ 할로알콕시, C₁-C₆ 알킬설포닐, C₁-C₆ 할로알킬설포닐, C₂-C₆ 알킬카르보닐, C₂-C₆ 할로알킬카르보닐, C₁-C₆ 알킬아미노, C₂-C₈ 다이알킬아미노, C₁-C₆ 할로알킬아미노 또는 C₂-C₈ 할로다이알킬아미노이며;

- [0059] R^{33} 는 H, C_1-C_6 알킬, C_3-C_6 알케닐, C_3-C_6 알키닐, C_1-C_6 할로알킬 또는 C_3-C_6 사이클로알킬이거나;
- [0060] R^{32} 및 R^{33} 는 함께 $-(CH_2)_4-$, $-(CH_2)_5-$ 또는 $-(CH_2)_2O(CH_2)_2-$ 로서 취해지고;
- [0061] d는 1 또는 2이며;
- [0062] 각 m은 독립적으로 0, 1 또는 2이고;
- [0063] n은 0, 1 또는 2이며;
- [0064] s 및 f는 $S(=O)_s(=NR^{23})_f$ 의 각 경우에, 독립적으로 0, 1 또는 2이되, 단 s와 f의 합계는 1 또는 2이나;
- [0065] 단,
- [0066] (i) Z^6 가 직접 결합이고, A가 CHR^{15} 또는 NR^{16} 이면, R^{1b} 는 임의로 치환된 페닐, 임의로 치환된 나프탈레닐 또는 임의로 치환된 5원 내지 6원 헤테로 방향족 환 이외의 것이고;
- [0067] (ii) A가 $C(=O)$ 이면, E는 E-2이고, Z^6 는 직접 결합이며, W는 0이며;
- [0068] (iii) E가 E-3이고, R^{1c} 가 비치환된 페닐이며, X가 X^1 이고, X를 포함하는 환이 포화되며, G가 2 위치에서 화학식 1의 X에 연결되고 4 위치에서 Z^1 에 연결되는 비치환된 티아졸 환이고, Z^7 이 직접 결합이며, A가 CHR^{15} 이고, R^{15} 이 H이며, d가 2이고, J가 4 위치에서 Z^1 에 연결되고, 5 위치에서 메틸로 치환되며, 이의 3 위치에서 메타-치환된 페닐로 치환되는 아이속사졸 환이면, Z^1 은 0, $C(=O)$, $S(O)_m$, CHR^{20} 또는 NR^{21} 이다.
- [0069] 특히, 본 발명은 화학식 1의 화합물 (모든 기하 이성질체 및 입체 이성질체 포함), 이의 N-옥사이드 또는 염에 관한 것이다.
- [0070] 본 발명은 또한 살균적 유효량의 화학식 1의 화합물 (또는 이의 N-옥사이드 및 이의 염) 및 계면활성제, 고체 희석제 및 액체 희석제로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 적어도 하나의 추가 성분을 포함하는 살균제 조성물에 관한 것이다.
- [0071] 본 발명은 또한 화학식 1의 화합물 (또는 이의 N-옥사이드 및 이의 염)과 적어도 하나의 다른 살균제 (예를 들어, 작용 부위가 상이한 적어도 하나의 다른 살균제)의 혼합물을 포함하는 살균제 조성물에 관한 것이다.
- [0072] 본 발명은 또한 살균적 유효량의 본 발명의 화합물 (즉, 본 명세서에 기재된 조성물로서)을 식물 또는 이의 부분, 또는 식물 종자에 적용하는 것을 포함하는, 균류 식물 병원체에 의한 식물병을 방제하는 방법에 관한 것이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

- [0073] (발명의 상세한 설명)
- [0074] 본 명세서에서 사용되는 용어 "구성하다", "구성하는," "포함하다," "포함하는," "가지다," "갖는," "함유하다" 또는 "함유하는" 또는 임의의 이들의 기타 변형체는 비배타적인 포함 사항을 망라하는 것으로 의도된다. 예를 들어, 요소들의 목록을 포함하는 조성물, 공정, 방법, 용품, 또는 장치는 반드시 그러한 요소만으로 제한되지는 않고, 명확하게 열거되지 않거나 그러한 조성물, 공정, 방법, 용품, 또는 장치에 내재적인 다른 요소를 포함할 수도 있다. 더욱이, 명백히 반대로 기술되지 않는다면, "또는"은 포괄적인 '또는'을 말하며, 배타적인 '또는'을 말하는 것은 아니다. ". 예를 들어, 조건 A 또는 B는 하기 중 어느 하나에 의해 만족된다: A는 참 (또는 존재함)이고 B는 거짓 (또는 존재하지 않음), A는 거짓 (또는 존재하지 않음)이고 B는 참 (또는 존재함), A 및 B가 모두가 참 (또는 존재함)이다.
- [0075] 또한, 본 발명의 요소 또는 성분 앞의 부정 관사 ("a" 및 "an")는 요소 또는 성분의 경우 (즉, 발생)의 수에 관해서는 비제한적인 것으로 의도된다. 따라서, 부정 관사 ("a" 또는 "an")는 하나 또는 적어도 하나를 포함하는 것으로 파악되어야 하며, 당해 요소 또는 성분의 단수형은 그 수가 명백하게 단수임을 의미하는 것이 아니라면 복수형도 포함한다.

- [0076] "식물"은 본 명세서 및 특허청구범위에서 지칭될 때 어린 식물 (예를 들어, 모종 (seedling)으로 발달하는 발아 종자) 및 성숙, 생식 단계 (예를 들어, 꽃 및 종자를 생성하는 식물)를 포함하는 모든 생명 단계 (life stage)의 식물계 (Kingdom Plantae), 특히 종자 식물 (종자 식물상문 (Spermatopsida))의 구성원을 포함한다. 식물 부위는 전형적으로 생육 배지 (예를 들어, 토양) 표면 아래에서 성장하는 굴지성 구성원, 예컨대 뿌리, 덩이 줄기, 구근 및 구경을 포함하며, 또한 생육 배지 위에서 성장하는 구성원, 예컨대 경엽 (줄기 및 잎 포함), 꽃, 열매 및 종자도 포함한다.
- [0077] 단어 단독으로 사용되거나 단어의 조합으로 사용되는 본 명세서에 언급된 용어 모종"은 종자 배아로부터 발육되는 어린 식물을 의미한다.
- [0078] 단독으로 또는 "광엽 (broadleaf) 작물"과 같은 낱말에 사용되는 본 명세서에 언급된 용어 "광엽"은 다이카트 (dicot; dicotyledon의 단축형) 또는 쌍떡잎 식물 - 2장의 떡잎을 갖는 배아를 특징으로 하는 피자 식물군을 설명하는데 사용되는 용어- 을 의미한다.
- [0079] 본 명세서에 사용되는 용어 "알킬화제"는 탄소 함유 라디칼이 탄소 원자를 통해 이탈기에 결합되어 있는 화학적 화합물, 예컨대 할라이드 또는 설포네이트를 말하는 것으로, 이는 친핵체를 상기 탄소 원자에 결합시켜 치환가능하다. 달리 명시되지 않는 한, 용어 "알킬화"는 탄소 함유 라디칼을 알킬로 한정하지 않으며; 알킬화제의 탄소 함유 라디칼은 예를 들어, R³⁰에 지정된 다양한 특정된 탄소 결합 치환기 라디칼을 포함한다.
- [0080] 상기 설명에서, 단독으로 또는 "알킬티오" 또는 "할로알킬"과 같은 복합어에 사용되는 용어 "알킬"은 직쇄상 또는 분지상 알킬, 예컨대, 메틸, 에틸, n-프로필, i-프로필, 또는 다른 부틸, 펜틸 또는 헥실 이성질체를 포함한다. "알케닐"은 직쇄상 또는 분지상 알켄, 예컨대 에테닐, 1-프로페닐, 2-프로페닐, 및 다른 부테닐, 펜테닐 및 헥세닐 이성질체를 포함한다. "알케닐"은 또한 폴리엔, 예컨대 1,2-프로파디에닐 및 2,4-헥사디에닐을 포함한다. "알키닐"은 직쇄상 또는 분지상 알킨, 예컨대 에티닐, 1-프로피닐, 2-프로피닐 및 다른 부티닐, 펜티닐 및 헥시닐 이성질체를 포함한다. "알키닐"은 또한 다수의 삼중 결합으로 구성되는 부분, 예컨대 2,5-헥사다이닐을 포함할 수 있다. "알킬렌"은 직쇄상 또는 분지상 알칸디일을 나타낸다. "알킬렌"의 예로는 CH₂, CH₂CH₂, CH(CH₃), CH₂CH₂CH₂, CH₂CH(CH₃) 및 다른 부틸렌 이성질체를 들 수 있다. "알케닐렌"은 1개의 올레핀 결합을 포함하는 직쇄상 또는 분지상 알켄디일을 나타낸다. "알케닐렌"의 예로는 CH=CH, CH₂CH=CH, CH=C(CH₃) 및 다른 부테닐렌 이성질체를 들 수 있다. "알키닐렌"은 1개의 삼중 결합을 포함하는 직쇄상 또는 분지상 알킨디일을 나타낸다. "알키닐렌"의 예로는 C≡C, CH₂C≡C, C≡CCH₂ 및 다른 부티닐렌 이성질체를 들 수 있다.
- [0081] "알콕시"는 예를 들어, 메톡시, 에톡시, n-프로필옥시, 아이소프로필옥시 및 다른 부톡시, 펜톡시 및 헥실옥시 이성질체를 포함한다. "알케닐옥시"는 산소 원자에 부착되어 이를 통해 결합된 직쇄상 또는 분지상 알케닐을 포함한다. "알케닐옥시"의 예로는 H₂C=CHCH₂O, (CH₃)₂C=CHCH₂O, CH₃CH=CHCH₂O, CH₃CH=C(CH₃)CH₂O 및 CH₂=CHCH₂CH₂O를 들 수 있다. "알키닐옥시"는 직쇄상- 또는 분지상 알키닐옥시 부분을 포함한다. "알키닐옥시"의 예로는 HC≡CCH₂O, CH₃C≡CCH₂O 및 CH₃C≡CCH₂CH₂O를 들 수 있다.
- [0082] "알콕시알킬"은 알킬이 알콕시 치환된 것을 나타낸다. "알콕시알킬"의 예로는 CH₃OCH₂, CH₃OCH₂CH₂, CH₃CH₂OCH₂, CH₃CH₂CH₂CH₂OCH₂ 및 CH₃CH₂OCH₂CH₂를 들 수 있다. "알콕시알콕시"는 직쇄상 또는 분지상 알콕시가 직쇄상 또는 분지상 알콕시치환된 것을 나타낸다. "알콕시알콕시"의 예로는 CH₃OCH₂O, CH₃OCH₂(CH₃)CHCH₂O 및 (CH₃)₂CHOCH₂CH₂O를 들 수 있다. "알콕시알콕시알킬"의 예로는 CH₃OCH₂OCH₂, CH₃CH₂O(CH₃)CHOCH₂ 및 (CH₃CH₂)₂OCH₂OCH₂를 들 수 있다. "알콕시알케닐"은 직쇄상 또는 분지상 알케닐이 알콕시 치환된 것을 나타낸다. "알콕시알케닐"의 예로는 CH₃OCH=CH, CH₃OCH₂CH=CH, CH₃CH₂OCH=C(CH₃) 및 CH₃CH₂OCH=CH₂를 들 수 있다. "알콕시알키닐"은 직쇄상 또는 분지상 알케닐이 알콕시 치환된 것을 나타낸다. "알콕시알키닐"의 예로는 CH₃OC≡C, CH₃OCH₂C≡C 및 CH₃CH₂OC≡CCH₂를 들 수 있다.
- [0083] "알킬티오"는 분지상 또는 직쇄상 알킬티오 부분, 예컨대 메틸티오, 에틸티오, 및 다른 프로필티오, 부틸티오, 펜틸티오 및 헥실티오 이성질체를 포함한다. "알킬설퍼닐"은 알킬설퍼닐기의 두 예난티오머를 포함한다. "알킬설퍼닐"의 예로는 CH₃S(O), CH₃CH₂S(O), CH₃CH₂CH₂S(O), (CH₃)₂CHS(O) 및 다른 부틸설퍼닐, 펜틸설퍼닐 및 헥실설퍼닐 이성질체를 들 수 있다. "알킬설퍼닐"의 예로는 CH₃S(O)₂, CH₃CH₂S(O)₂, CH₃CH₂CH₂S(O)₂, (CH₃)₂CHS(O)₂,

및 다른 부틸설포닐, 펜틸설포닐 및 헥실설포닐 이성질체를 들 수 있다.

[0084] "알킬티오알킬"은 알킬이 알킬티오 치환된 것을 나타낸다. "알킬티오알킬"의 예로는 CH_3SCH_2 , $\text{CH}_3\text{SCH}_2\text{CH}_2$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{SCH}_2$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{SCH}_2$ 및 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{SCH}_2\text{CH}_2$ 를 들 수 있다. "알킬설퍼닐알킬"은 알킬이 알킬설퍼닐 치환된 것을 나타낸다. "알킬설퍼닐알킬"의 예로는 $\text{CH}_3\text{S}(=\text{O})\text{CH}_2$, $\text{CH}_3\text{S}(=\text{O})\text{CH}_2\text{CH}_2$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{S}(=\text{O})\text{CH}_2$ 및 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{S}(=\text{O})\text{CH}_2\text{CH}_2$ 를 들 수 있다. "알킬설포닐알킬"은 알킬이 알킬설포닐 치환된 것을 나타낸다. "알킬설포닐알킬"의 예로는 $\text{CH}_3\text{S}(=\text{O})_2\text{CH}_2$, $\text{CH}_3\text{S}(=\text{O})_2\text{CH}_2\text{CH}_2$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{S}(=\text{O})_2\text{CH}_2$ 및 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{S}(=\text{O})_2\text{CH}_2\text{CH}_2$ 를 들 수 있다.

[0085] "시아노알킬"은 1개의 시아노기로 치환된 알킬기를 나타낸다. "시아노알킬"의 예로는 NCCH_2 , NCCH_2CH_2 및 $\text{CH}_3\text{CH}(\text{CN})\text{CH}_2$ 를 들 수 있다. "하이드록시알킬"은 1개의 하이드록시기로 치환된 알킬기를 나타낸다. "하이드록시알킬"의 예로는 HOCH_2CH_2 , $\text{CH}_3\text{CH}_2(\text{OH})\text{CH}$ 및 $\text{HOCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2$ 를 들 수 있다.

[0086] "알킬아미노"는 직쇄상 또는 분지상 알킬로 치환된 NH 라디칼을 들 수 있다. "알킬아미노"의 예로는 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{NH}$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{NH}$, 및 $(\text{CH}_3)_2\text{CHCH}_2\text{NH}$ 를 들 수 있다. "다이알킬아미노"의 예로는 $(\text{CH}_3)_2\text{N}$, $(\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2)_2\text{N}$ 및 $\text{CH}_3\text{CH}_2(\text{CH}_3)\text{N}$ 을 들 수 있다. "알콕시아미노"는 NH 라디칼에 부착되어, 이를 통해 결합되는 직쇄상 또는 분지상 알콕시를 포함한다. "알콕시아미노"의 예로는 $\text{CH}_3\text{CH}(\text{CH}_3)\text{ONH}$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CHONH}$, 및 $(\text{CH}_3)_2\text{CHCH}(\text{CH}_3)\text{ONH}$ 를 들 수 있다. "알킬아미노알킬"은 알킬이 알킬아미노 치환된 것을 나타낸다. "알킬아미노알킬"의 예로는 CH_3NHCH_2 , $\text{CH}_3\text{NHCH}_2\text{CH}_2$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{NHCH}_2$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{NHCH}_2$ 및 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{NHCH}_2\text{CH}_2$ 를 들 수 있다. "알킬설포닐아미노"는 알킬설포닐로 치환된 NH 라디칼을 나타낸다. "알킬설포닐아미노"의 예로는 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{S}(=\text{O})_2\text{NH}$ 및 $(\text{CH}_3)_2\text{CHS}(=\text{O})_2\text{NH}$ 를 들 수 있다. "알킬아미노설포닐"은 $\text{S}(=\text{O})_2$ 라디칼에 부착되어, 이를 통해 결합되는 직쇄상 또는 분지상 알킬아미노를 나타낸다. "알킬아미노설포닐"의 예로는 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{NHS}(=\text{O})_2$ 및 $(\text{CH}_3)_2\text{CHNHS}(=\text{O})_2$ 를 들 수 있다.

[0087] "트라이알킬실릴"은 규소 원자에 부착되어, 이를 통해 결합되는 3개의 분지상 및/또는 직쇄상 알킬 라디칼, 예컨대 트라이메틸실릴, 트라이에틸실릴 및 tert-부틸다이메틸실릴을 포함한다.

[0088] "사이클로알킬"은 예를 들어, 사이클로프로필, 사이클로부틸, 사이클로펜틸, 및 사이클로헥실을 포함한다. "사이클로알케닐"은 기, 예컨대 사이클로펜테닐 및 사이클로헥세닐, 및 2개 이상의 이중 결합을 갖는 기, 예컨대 1,3- 및 1,4-사이클로헥사디에닐을 포함한다. 용어 "알킬사이클로알킬"은 사이클로알킬 부분이 알킬 치환된 것을 나타내며, 예를 들어, 에틸사이클로프로필, i-프로필사이클로부틸, 3-메틸사이클로펜틸 및 4-메틸사이클로헥실을 포함한다. 용어 "사이클로알킬알킬"은 알킬 부분이 사이클로알킬 치환된 것을 나타낸다. "사이클로알킬알킬"의 예로는 사이클로프로필메틸, 사이클로펜틸에틸, 및 직쇄상 또는 분지상 알킬기에 결합된 다른 사이클로알킬 부분을 포함한다. "알킬사이클로알킬알킬"은 알킬사이클로알킬로 치환된 알킬기를 나타낸다. "알킬사이클로알킬알킬"의 예로는 1-, 2-, 3- 또는 4-메틸 또는 -에틸 사이클로헥실메틸을 들 수 있다. 용어 "사이클로알킬사이클로알킬"은 다른 사이클로알킬 환이 사이클로알킬 치환된 것을 나타내며, 여기서 각 사이클로알킬 환은 독립적으로 3개 내지 7개의 탄소 환 구성원을 갖는다. 사이클로알킬사이클로알킬 라디칼의 예로는 사이클로프로필사이클로프로필 (예컨대, 1,1'-바이사이클로프로필-1-일, 1,1'-바이사이클로프로필-2-일), 사이클로헥실사이클로펜틸 (예컨대, 4-사이클로펜틸사이클로헥실) 및 사이클로헥실사이클로헥실 (예컨대, 1,1'-바이사이클로헥실-1-일), 및 다른 시스- 또는 트랜스-사이클로알킬사이클로알킬 이성질체 (예컨대, (1R,2S)-1,1'-바이사이클로프로필-2-일 및 (1R,2R)-1,1'-바이사이클로프로필-2-일)를 들 수 있다.

[0089] 용어 "사이클로알콕시"는 산소 원자를 통해 결합된 사이클로알킬, 예컨대 사이클로펜틸옥시 및 사이클로헥실옥시를 나타낸다. "사이클로알킬알콕시"는 산소 원자를 통해 결합된 사이클로알킬알킬을 나타낸다. "사이클로알킬알콕시"의 예로는 사이클로프로필메톡시, 사이클로펜틸에톡시, 및 직쇄상 또는 분지상 알콕시기에 결합된 다른 사이클로알킬 부분을 들 수 있다. 용어 "사이클로알콕시알킬"은 알킬 부분이 사이클로알콕시 치환된 것을 나타낸다. "사이클로알콕시알킬"의 예로는 사이클로프로폭시메틸, 사이클로펜톡시에틸, 및 직쇄상 또는 분지상 알킬기에 결합된 다른 사이클로알콕시 부분을 들 수 있다. 용어 "사이클로알케닐알킬"은 알킬기가 사이클로알케닐 치환된 것을 나타낸다. "사이클로알케닐알킬"의 예로는 2-사이클로헥센-1-일메틸, 1-사이클로펜텐-1일메틸, 및 직쇄상 또는 분지상 알킬기에 결합된 다른 사이클로알케닐 부분을 들 수 있다.

[0090] "사이클로알킬카르보닐"은 예를 들어, 사이클로프로필카르보닐 및 사이클로펜틸카르보닐을 포함한, $\text{C}(=\text{O})$ 기에 결합된 사이클로알킬을 나타낸다. "사이클로알킬카르보닐옥시"는 산소 원자에 부착되어, 이를 통해 결합된 사

이클로알킬카르보닐을 나타낸다. "사이클로알킬카르보닐옥시"의 예로는 사이클로헥실카르보닐옥시 및 사이클로펜틸카르보닐옥시를 들 수 있다. 용어 "사이클로알킬티오"는 황 원자에 부착되어, 이를 통해 결합된 사이클로알킬, 예컨대 사이클로프로필티오 및 사이클로펜틸티오를 나타내며; "사이클로알킬설포닐"은 대응하는 설포닐을 포함한다.

[0091]

"사이클로알킬아미노"는 아민기를 통해 결합된 사이클로알킬, 예컨대 사이클로프로필아미노, 사이클로부틸아미노, 사이클로펜틸아미노 및 사이클로헥실아미노를 나타낸다. "사이클로알킬(알킬)아미노"는 수소 원자가 알킬 라디칼로 치환되는 사이클로알킬아미노기를 의미한다. "사이클로알킬(알킬)아미노"의 예로는 기, 예컨대 사이클로프로필(메틸)아미노, 사이클로부틸(부틸)아미노, 사이클로펜틸(프로필)아미노, 사이클로헥실(메틸)아미노 등을 들 수 있다. 용어 "사이클로알킬아미노알킬"은 알킬기가 사이클로알킬아미노 치환된 것을 나타낸다. "사이클로알킬아미노알킬"의 예로는 사이클로프로필아미노메틸, 사이클로펜틸아미노에틸, 및 직쇄상 또는 분지상 알킬기에 결합된 다른 사이클로알킬아미노 부분을 들 수 있다. "사이클로알킬아미노카르보닐"은 C(=O) 기에 결합된 사이클로알킬아미노, 예를 들어 사이클로펜틸아미노카르보닐 및 사이클로헥실아미노카르보닐을 나타낸다.

[0092]

"알킬카르보닐"은 C(=O) 부분에 결합된 직쇄상 또는 분지상 알킬기를 나타낸다. "알킬카르보닐"의 예로는 $\text{CH}_3\text{C}(=\text{O})$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{C}(=\text{O})$ 및 $(\text{CH}_3)_2\text{CHC}(=\text{O})$ 를 들 수 있다. "알콕시카르보닐"의 예로는 $\text{CH}_3\text{OC}(=\text{O})$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OC}(=\text{O})$, $(\text{CH}_3)_2\text{CHOC}(=\text{O})$ 및 다른 부톡시- 또는 펜톡시카르보닐 이성질체를 들 수 있다. "알콕시알킬카르보닐"은 C(=O) 부분에 결합된 직쇄상 또는 분지상 알콕시알킬을 나타낸다. "알콕시알킬카르보닐"의 예로는 $\text{CH}_3\text{OCH}_2\text{C}(=\text{O})$, $\text{CH}_3\text{OCH}_2\text{CH}_2\text{C}(=\text{O})$ 및 $(\text{CH}_3)_2\text{CHOCH}_2\text{CH}_2\text{C}(=\text{O})$ 를 들 수 있다. "알콕시알콕시카르보닐"은 C(=O) 부분에 결합된 직쇄상 또는 분지상 알콕시알콕시를 나타낸다. "알콕시알콕시카르보닐"의 예로는 $\text{CH}_3\text{OCH}_2\text{OC}(=\text{O})$ 및 $(\text{CH}_3)_2\text{CHOCH}_2\text{CH}_2\text{OC}(=\text{O})$ 를 들 수 있다. "알킬아미노카르보닐"의 예로는 $\text{CH}_3\text{NHC}(=\text{O})$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{NHC}(=\text{O})$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{NHC}(=\text{O})$, $(\text{CH}_3)_2\text{CHNHC}(=\text{O})$ 및 다른 부틸아미노- 또는 펜틸아미노카르보닐 이성질체를 들 수 있다. "다이알킬아미노카르보닐"의 예로는 $(\text{CH}_3)_2\text{NC}(=\text{O})$, $(\text{CH}_3\text{CH}_2)_2\text{NC}(=\text{O})$, $\text{CH}_3\text{CH}_2(\text{CH}_3)\text{NC}(=\text{O})$, $(\text{CH}_3)_2\text{CHN}(\text{CH}_3)\text{C}(=\text{O})$ 및 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2(\text{CH}_3)\text{NC}(=\text{O})$ 를 들 수 있다.

[0093]

용어 "알킬카르보닐옥시"는 C(=O)O 부분에 결합된 직쇄상 또는 분지상 알킬을 나타낸다. "알킬카르보닐옥시"의 예로는 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{C}(=\text{O})\text{O}$ 및 $(\text{CH}_3)_2\text{CHC}(=\text{O})\text{O}$ 를 들 수 있다. "알킬카르보닐티오"는 황 원자에 부착되어, 이를 통해 결합된 직쇄상 또는 분지상 알킬카르보닐을 나타낸다. "알킬카르보닐티오"의 예로는 $\text{CH}_3\text{C}(=\text{O})\text{S}$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{C}(=\text{O})\text{S}$ 및 $(\text{CH}_3)_2\text{CHC}(=\text{O})\text{S}$ 를 들 수 있다. 용어 "알킬카르보닐아미노"는 C(=O)NH 부분에 결합된 알킬을 나타낸다. "알킬카르보닐아미노"의 예로는 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{C}(=\text{O})\text{NH}$ 및 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{C}(=\text{O})\text{NH}$ 를 들 수 있다.

[0094]

"알콕시카르보닐알킬"은 직쇄상 또는 분지상 알킬이 알콕시카르보닐 치환된 것을 나타낸다. "알콕시카르보닐알킬"의 예로는 $\text{CH}_3\text{OC}(=\text{O})\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OC}(=\text{O})\text{CH}_2\text{CH}_2$ 및 $(\text{CH}_3)_2\text{CHOC}(=\text{O})\text{CH}_2$ 를 들 수 있다. 용어 "알킬카르보닐알콕시"는 알콕시 부분에 결합된 알킬카르보닐을 나타낸다. "알킬카르보닐알콕시"의 예로는 $\text{CH}_3\text{C}(=\text{O})\text{CH}_2\text{CH}_2\text{O}$ 및 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{C}(=\text{O})\text{CH}_2\text{O}$ 를 들 수 있다. "알콕시카르보닐옥시"의 예로는 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OC}(=\text{O})\text{O}$ 및 $(\text{CH}_3)_2\text{CHOC}(=\text{O})\text{O}$ 를 들 수 있다. 용어 "알콕시카르보닐알콕시"는 직쇄상 또는 분지상 알콕시가 알콕시카르보닐 치환된 것을 나타낸다. "알콕시카르보닐알콕시"의 예로는 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OC}(=\text{O})\text{CH}_2\text{CH}_2\text{O}$ 및 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{OC}(=\text{O})\text{CH}_2\text{O}$ 를 들 수 있다.

[0095]

"사이클로알킬알콕시카르보닐"은 $\text{OC}(=\text{O})$ 부분에 결합된 사이클로알킬알킬을 나타낸다. "사이클로알킬알콕시카르보닐"의 예로는 사이클로프로필- $\text{CH}_2\text{OC}(=\text{O})$, 사이클로프로필- $\text{CH}(\text{CH}_3)\text{OC}(=\text{O})$ 및 사이클로펜틸- $\text{CH}_2\text{OC}(=\text{O})$ 를 들 수 있다.

[0096]

용어 "알콕시카르보닐아미노"는 C(=O)NH 부분에 결합된 알콕시를 나타낸다. "알콕시카르보닐아미노"의 예로는 $\text{CH}_3\text{OC}(=\text{O})\text{NH}$ 및 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OC}(=\text{O})\text{NH}$ 를 들 수 있다. "알콕시(알킬)아미노카르보닐"은 직쇄상 또는 분지상 알콕시기 및 직쇄상 또는 분지상 알킬기로 이치환된 아미노카르보닐 부분의 질소 원자를 나타낸다. "알콕시(알킬)아미노카르보닐"의 예로는 $\text{CH}_3\text{O}(\text{CH}_3)\text{NC}(=\text{O})$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{O}(\text{CH}_3)\text{NC}(=\text{O})$ 및 $(\text{CH}_3)_2\text{CHO}(\text{CH}_3)\text{NC}(=\text{O})$ 를 들 수 있다. "알콕시카르보닐알킬아미노"는 NH 라디칼에 결합된 알콕시카르보닐알킬을 나타낸다. "알콕시카르보닐알킬아미노"의 예로는 $\text{CH}_3\text{OC}(=\text{O})\text{CH}_2\text{NH}$ 및 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OC}(=\text{O})\text{CH}_2\text{CH}_2\text{NH}$ 를 들 수 있다.

[0097]

"알킬(티오카르보닐)"은 C(=S) 부분에 결합된 직쇄상 또는 분지상 알킬기를 나타낸다. "알킬(티오카르보닐)"의

예로는 $\text{CH}_3\text{C}(=\text{S})$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{C}(=\text{S})$ 및 $(\text{CH}_3)_2\text{CHC}(=\text{S})$ 를 들 수 있다. "알킬(티오펜)티오"는 $\text{C}(=\text{S})\text{S}$ 부분에 결합된 직쇄상 또는 분지상 알킬기를 나타낸다. "알킬(티오펜)티오"의 예로는 $\text{CH}_3\text{C}(=\text{S})\text{S}$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{C}(=\text{S})\text{S}$ 및 $(\text{CH}_3)_2\text{CHC}(=\text{S})\text{S}$ 를 들 수 있다. "알킬(티오펜)옥시"의 예로는 $\text{CH}_3\text{C}(=\text{S})\text{O}$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{C}(=\text{S})\text{O}$ 및 $(\text{CH}_3)_2\text{CHC}(=\text{S})\text{O}$ 를 들 수 있다. "(알킬티오)카르보닐"은 $\text{C}(=\text{O})$ 부분에 결합된 직쇄상 또는 분지상 알킬티오기를 나타낸다. "(알킬티오)카르보닐"의 예로는 $\text{CH}_3\text{SC}(=\text{O})$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{SC}(=\text{O})$ 및 $(\text{CH}_3)_2\text{CHSC}(=\text{O})$ 를 들 수 있다. "알콕시(티오펜)티오"는 $\text{C}(=\text{S})$ 부분에 결합된 직쇄상 또는 분지상 알콕시기를 나타낸다. "알콕시(티오펜)티오"의 예로는 $\text{CH}_3\text{OC}(=\text{S})$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OC}(=\text{S})$ 및 $(\text{CH}_3)_2\text{CHOC}(=\text{S})$ 를 들 수 있다. "알킬티오(티오펜)티오"는 $\text{C}(=\text{S})$ 부분에 결합된 직쇄상 또는 분지상 알킬티오기를 나타낸다. "알킬티오(티오펜)티오"의 예로는 $\text{CH}_3\text{SC}(=\text{S})$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{SC}(=\text{S})$ 및 $(\text{CH}_3)_2\text{CHSC}(=\text{S})$ 를 들 수 있다. "알킬아미노(티오펜)티오"는 $\text{C}(=\text{S})$ 부분에 결합된 직쇄상 또는 분지상 알킬아미노기를 나타낸다. "알킬아미노(티오펜)티오"의 예로는 $\text{CH}_3\text{NHC}(=\text{S})$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{NHC}(=\text{S})$ 및 $(\text{CH}_3)_2\text{CHNHC}(=\text{S})$ 를 들 수 있다. "다이알킬아미노(티오펜)티오"는 $\text{C}(=\text{S})$ 부분에 결합된 직쇄상 또는 분지상 다이알킬아미노기를 나타낸다. "다이알킬아미노(티오펜)티오"의 예로는 $(\text{CH}_3)_2\text{NC}(=\text{S})$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2(\text{CH}_3)\text{NC}(=\text{S})$ 및 $(\text{CH}_3)_2\text{C}(\text{CH}_3)\text{NC}(=\text{S})$ 를 들 수 있다.

[0098]

용어 "알킬아미노카르보닐아미노"는 $\text{C}(=\text{O})\text{NH}$ 부분에 결합된 직쇄상 또는 분지상 알킬아미노기를 나타낸다. "알킬아미노카르보닐아미노"의 예로는 $\text{CH}_3\text{NHC}(=\text{O})\text{NH}$ 및 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{NHC}(=\text{O})\text{NH}$ 를 들 수 있다. 용어 "다이알킬아미노카르보닐아미노"는 $\text{C}(=\text{O})\text{NH}$ 부분에 결합된 직쇄상 또는 분지상 다이알킬아미노기를 나타낸다. "다이알킬아미노카르보닐아미노"의 예로는 $(\text{CH}_3)_2\text{NC}(=\text{O})\text{NH}$ 및 $\text{CH}_3\text{CH}_2(\text{CH}_3)\text{NC}(=\text{O})\text{NH}$ 를 들 수 있다. 용어 "알킬아미노카르보닐(알킬)아미노"는 연결 아미노기 상의 수소 원자가 알킬 라디칼로 치환되는 알킬아미노카르보닐아미노기를 의미한다. "알킬아미노카르보닐(알킬)아미노"의 예로는 $\text{CH}_3\text{NHC}(=\text{O})\text{N}(\text{CH}_3)$ 및 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{NHC}(=\text{O})\text{N}(\text{CH}_3)$ 를 들 수 있다. 용어 "다이알킬아미노카르보닐(알킬)아미노"는 연결 아미노기 상의 수소 원자가 알킬 라디칼로 치환되는 다이알킬아미노카르보닐아미노기를 의미한다. "다이알킬아미노카르보닐(알킬)아미노"의 예로는 $(\text{CH}_3)_2\text{NC}(=\text{O})\text{N}(\text{CH}_3)$ 및 $\text{CH}_3\text{CH}_2(\text{CH}_3)\text{NC}(=\text{O})\text{N}(\text{CH}_3)$ 를 들 수 있다. 용어 "알킬아미노(티오펜)아미노"는 $\text{C}(=\text{S})\text{NH}$ 부분에 결합된 직쇄상 또는 분지상 알킬아미노기를 나타낸다. "알킬아미노(티오펜)아미노"의 예로는 $\text{CH}_3\text{NHC}(=\text{S})\text{NH}$ 및 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{NHC}(=\text{S})\text{NH}$ 를 들 수 있다.

[0099]

"알킬아미디노"는 $\text{C}(=\text{N})$ 부분의 탄소 원자에 결합된 직쇄상 또는 분지상 알킬아미노 부분, 또는 $\text{C}(=\text{N})$ 부분의 탄소 원자에 결합된 비치환된 아미노 부분 및 $\text{C}(=\text{N})$ 부분의 질소 원자에 결합된 직쇄상 또는 분지상 알킬 부분을 나타낸다. "알킬아미디노"의 예로는 $\text{CH}_3\text{NHC}(=\text{NH})$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{NHC}(=\text{NH})$ 및 $\text{H}_2\text{NC}(=\text{NCH}_3)$ 를 들 수 있다. "다이알킬아미디노"는 $\text{C}(=\text{N})$ 부분의 탄소 원자에 결합된 직쇄상 또는 분지상 다이알킬아미노 부분, 또는 $\text{C}(=\text{N})$ 부분의 탄소 원자에 결합된 직쇄상 또는 분지상 알킬아미노 부분 및 $\text{C}(=\text{N})$ 부분의 질소 원자에 결합된 직쇄상 또는 분지상 알킬 부분을 나타낸다. "다이알킬아미디노"의 예로는 $(\text{CH}_3)_2\text{NC}(=\text{NH})$, $\text{CH}_3\text{CH}_2(\text{CH}_3)\text{NC}(=\text{NH})$ 및 $\text{CH}_3\text{NHC}(=\text{NCH}_3)$ 를 들 수 있다. 용어 "다이알킬이미도"는 아미노기의 질소 원자에 결합된 2개의 직쇄상 또는 분지상 알킬카르보닐 부분을 나타낸다. "다이알킬이미도"의 예로는 $(\text{CH}_3\text{C}(=\text{O}))_2\text{N}$ 및 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{C}(=\text{O})(\text{CH}_3\text{C}(=\text{O}))\text{N}$ 을 들 수 있다.

[0100]

단독의 또는 "할로알킬"과 같은 복합어에서의, 또는 "할로젠으로 치환된 알킬"과 같은 설명에서 사용될 때의 용어 "할로젠"은 불소, 염소, 브롬 또는 요오드를 포함한다. 또한, "할로알킬"과 같은 복합어에서의, 또는 "할로젠으로 치환된 알킬"과 같은 설명에서 사용될 때, 상기 알킬은 동일하거나 상이할 수 있는 할로젠 원자로 부분적으로 또는 완전히 치환될 수 있다. "할로알킬" 또는 "할로젠으로 치환된 알킬"의 예로는 F_3C , ClCH_2 , CF_3CH_2 및 CF_3CCl_2 를 들 수 있다. 용어 "할로알케닐", "할로알킬닐", "할로알콕시", "할로알킬티오", "할로알킬아미노", "할로알킬설퍼닐", "할로알킬설포닐", "할로사이클로알킬", "할로알콕시알콕시", "할로알콕시할로알콕시", "할로알킬아미노알킬", "할로알킬설포닐아미노카르보닐", "할로트라이알킬실릴" 등은 용어 "할로알킬"과 유사하게 정의된다. "할로알케닐"의 예로는 $(\text{Cl})_2\text{C}=\text{CHCH}_2$ 및 $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{CH}=\text{CHCH}_2$ 를 들 수 있다. "할로알킬닐"의 예로는 $\text{HC}\equiv\text{CCHCl}$, $\text{CF}_3\text{C}\equiv\text{C}$, $\text{CCl}_3\text{C}\equiv\text{C}$ 및 $\text{FCH}_2\text{C}\equiv\text{CCH}_2$ 를 들 수 있다. "할로알콕시"의 예로는 CF_3O , $\text{CCl}_3\text{CH}_2\text{O}$, $\text{HCF}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{O}$ 및 $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{O}$ 를 들 수 있다. "할로알킬티오"의 예로는 CCl_3S , CF_3S , $\text{CCl}_3\text{CH}_2\text{S}$ 및 $\text{ClCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{S}$ 를 들 수 있다. "할로알

킬아미노"의 예로는 $\text{CF}_3(\text{CH}_3)\text{CHNH}$, $(\text{CF}_3)_2\text{CHNH}$ 및 $\text{CH}_2\text{ClCH}_2\text{NH}$ 를 들 수 있다. "할로알킬설퍼닐"의 예로는 $\text{CF}_3\text{S}(=\text{O})$, $\text{CCl}_3\text{S}(=\text{O})$, $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{S}(=\text{O})$ 및 $\text{CF}_3\text{CF}_2\text{S}(=\text{O})$ 를 들 수 있다. "할로알킬설퍼닐"의 예로는 $\text{CF}_3\text{S}(=\text{O})_2$, $\text{CCl}_3\text{S}(=\text{O})_2$, $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{S}(=\text{O})_2$ 및 $\text{CF}_3\text{CF}_2\text{S}(=\text{O})_2$ 를 들 수 있다. "할로사이클로알킬"의 예로는 2-클로로사이클로프로필, 2-플루오로사이클로부틸, 3-브로모사이클로펜틸 및 4-클로로사이클로헥실을 들 수 있다. "할로알콕시알콕시"의 예로는 $\text{CF}_3\text{OCH}_2\text{O}$, $\text{ClCH}_2\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{CH}_2\text{O}$, $\text{Cl}_3\text{CCH}_2\text{OCH}_2\text{O}$ 및 분지상 알킬 유도체를 들 수 있다. "할로알콕시할로알콕시"의 예로는 CF_3OCHClO , $\text{ClCH}_2\text{CH}_2\text{OCHClCH}_2\text{O}$, $\text{Cl}_3\text{CCH}_2\text{OCHClO}$, 및 분지상 알킬 유도체를 들 수 있다. "할로알킬아미노알킬"의 예로는 CH_3NHCHCl , $(\text{CH}_3)_2\text{CClNHCH}_2$ 및 $\text{CH}_3\text{NCI}(\text{CH}_3)$ 를 들 수 있다. "할로알킬설퍼닐아미노카르보닐"의 예로는 $\text{CF}_3\text{SO}_2\text{NH}(\text{C}=\text{O})$ 및 $\text{CF}_3\text{SO}_2\text{NCI}(\text{C}=\text{O})$ 를 들 수 있다. "할로트라이알킬실릴"의 예로는 $\text{CF}_3(\text{CH}_3)_2\text{Si}$, $(\text{CF}_3)_3\text{Si}$, 및 $\text{CH}_2\text{Cl}(\text{CH}_3)_2\text{Si}$ 를 들 수 있다. 단독의 또는 "할로다이알킬아미노"와 같은 복합어에서의 용어 "할로다이알킬"은 2개의 알킬기 중 적어도 1개가 적어도 1개의 할로젠 원자로 치환되는 것을 의미하며, 독립적으로 각각의 할로젠화 알킬기는 동일하거나 상이할 수 있는 할로젠 원자로 부분적으로 또는 완전히 치환될 수 있다. "할로다이알킬아미노"의 예로는 $(\text{BrCH}_2\text{CH}_2)_2\text{N}$ 및 $\text{BrCH}_2\text{CH}_2(\text{ClCH}_2\text{CH}_2)\text{N}$ 을 들 수 있다.

[0101] 달리 명시되지 않는 한, 화학식 1의 성분 (예를 들어, 치환기 J 및 Q)으로서의 "환" 또는 "환계"는 탄소환 또는 복소환이다. 용어 "환계"는 2개 이상의 연결된 환을 나타낸다. 용어 "스피로환계"는 단일 원자에서 연결된 2개의 환으로 구성되는 환계를 나타낸다 (그리하여, 환은 공통하는 단일 원자를 갖는다). 스피로환계인 J 부분의 실례는 하기 증거 A에 나타난 J-29-59이다. 용어 "이환계"는 2개 이상의 공통 원자를 공유하는 2개의 환으로 구성되는 환계를 나타낸다. "융합 이환계"에서, 공통 원자가 인접하므로, 환은 2개의 인접한 원자 및 이들을 연결시키는 결합을 공유한다. "가교 이환계"에서, 공통 원자는 인접하지 않는다 (즉, 다리목 (bridgehead) 원자 사이에 결합이 존재하지 않음). "가교 이환계"는 하나 이상의 원자 세그먼트를 환의 인접하지 않은 환 구성원에 결합시킴으로써 형성될 수 있다.

[0102] 환, 이환계 또는 스피로환계는 2개 이상의 환을 포함하는 확대 환계의 일부일 수 있으며, 여기서 환, 이환계 또는 스피로환계 상의 치환기는 함께 추가의 환을 형성하고, 확대 환계의 다른 환과 이환식 및/또는 스피로환식 관계에 있을 수 있다. 예를 들어, 하기 증거 A에 나타난 J 부분 J-29-26는 $-\text{Z}^2\text{Q}$ (여기서, Z^2 는 직접 결합이고, Q는 2개의 메틸기 (즉, R^7 치환기)로 치환된 사이클로부틸 환이다)인 1개의 R^5 치환기 및 다이하이드로 아이속사줄린 환 상의 다른 $-\text{CH}_2-$ 기 (즉, R^5 치환기)와 함께 환계의 추가의 6원 환을 형성하는 1개의 $-\text{CH}_2-$ 기 (즉, R^7 치환기)로 치환된 다이하이드로 아이속사줄린 환으로 구성된다.

[0103] 용어 "환 구성원"은 환 또는 환계의 골격을 형성하는 원자 (예를 들어, C, O, N 또는 S) 또는 다른 부분 (예를 들어, $\text{C}(=\text{O})$, $\text{C}(=\text{S})$, $\text{SiR}^{17}\text{R}^{18}$ 또는 $\text{S}(=\text{O})_s(=\text{NR}^{23})_f$)를 말한다. "방향족"은 각각의 환 원자가 실질적으로 동일 평면에 있고, 환 평면에 수직인 p-오비탈을 가지며, $(4n + 2) \pi$ 전자 (여기서, n은 양의 정수이다)가 휘켈 규칙(Hückel's rule)에 따르도록 환에 결합되어 있는 것을 나타낸다.

[0104] 용어 "탄소환"은 환 골격을 형성하는 원자가 다만 탄소로부터 선택되는 환을 나타낸다. 달리 명시되지 않는 한, 탄소환은 포화, 부분 불포화 또는 완전 불포화 환일 수 있다. 완전 불포화 탄소환이 휘켈 규칙을 만족시키면, 상기 환은 또한 "방향족 환"으로 명명된다. "포화 탄소환"은 단일 결합에 의해 서로 결합되는 탄소 원자로 구성되는 골격을 갖는 환을 말하며; 달리 규정되지 않는 한, 나머지 탄소 원자가는 수소 원자에 의해 차지된다.

[0105] 용어 "복소환" 또는 "헤테로사이클"은 환 골격을 형성하는 원자 중 적어도 하나가 탄소 이외의 것인 환을 나타낸다. 달리 명시되지 않는 한, 복소환은 포화, 부분 불포화 또는 완전 불포화 환일 수 있다. 완전 불포화 복소환이 휘켈 규칙을 만족시키면, 상기 환은 또한 "헤테로 방향족 환" 또는 "방향족 복소환"으로 명명된다. "포화 복소환"은 환 구성원 사이에 다만 단일 결합을 포함하는 복소환을 말한다. "부분 포화 복소환"은 적어도 하나의 이중 결합을 포함하나, 방향족이 아닌 복소환을 말한다.

[0106] 달리 명시되지 않는 한, 복소환 및 복소환계는 탄소 또는 질소 상에서의 수소 치환에 의해 임의의 이용가능한 탄소 또는 질소를 통해 화학식 1의 나머지 부분에 결합된다.

[0107] 화학식 1 및 본 명세서에 나타난 다른 환의 점선은 결합이 단일 결합 또는 이중 결합일 수 있음을 나타낸다.

[0108]

이미 상술한 바와 같이, J는 각각, 탄소 원자 및 2개 이하의 O, 2개 이하의 S 및 4개 이하의 N 중에서 독립적으로 선택되는 4개 이하의 헤테로 원자, 및 $C(=O)$, $C(=S)$, $S(=O)_s(=NR^{23})_f$ 및 $SiR^{17}R^{18}$ 중에서 선택되는 3개 이하의 환 구성원 중에서 선택되는 환 구성원을 포함하며, R^5 중에서 독립적으로 선택되는 5개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 5원, 6원 또는 7원 환, 8원 내지 11원 이환계 또는 7원 내지 11원 스피로환계이다. $S(=O)_s(=NR^{23})_f$ 환 구성원과 관련한 J의 정의는 3개 이하의 산화 황 부분 (예를 들어, $S(=O)$ 또는 $S(=O)_2$)을 허용하며; 이는 $S(=O)_s(=NR^{23})_f$ 의 정의가 미산화 황 원자를 허용하지 않기 때문에 (즉, s 및 f는 동시에 0일 수 없다), 2개 이하의 S 헤테로원자 이외에도, 이러한 J의 정의에서 미산화되는 것으로 고려된다. J의 정의에서, O, S, $S(=O)_s(=NR^{23})_f$, N 및 $SiR^{17}R^{18}$ 중에서 선택되는 환 구성원은 임의적이며, 이들 환 구성원의 총수는 0일 수 있다. 이들 환 구성원이 모두 존재하지 않는 경우에는 (즉, 환 구성원은 모두 탄소 원자이다), 환 또는 환계는 탄소환식이다. 이들 환 구성원 중 적어도 하나가 존재하는 경우에는, 환 또는 환계는 복소환식이다. 질소 원자 환 구성원은 화학식 1에 관한 화합물이 또한 N-옥사이드 유도체를 포함하기 때문에, N-옥사이드로서 산화될 수 있다. 정의는 $S(=O)_s(=NR^{23})_f$ 또는 $SiR^{17}R^{18}$ 의 존재로 인해 제한된 $C(=O)$ 및 $C(=S)$ 형태의 3개 이하의 탄소 환 구성원 및 이용가능한 탄소 원자 수를 허용한다. J 환 또는 환계는 임의로 탄소 및 질소 원자 상에서, R^5 중에서 독립적으로 선택되는 이용가능한 결합점의 수에 의해서만 제한된 5개 이하의 치환기로 치환된다. 5개 이하의 R^5 치환기는 임의의 $C(=O)$, $C(=S)$, $S(=O)$, $S(=NR^{23})$ 및 $SiR^{17}R^{18}$ 부분 이외의 것이다. R^5 치환기가 임의적이므로, 0개의 치환기가 존재할 수 있다. 규소 원자 환 구성원 상의 치환기는 별도로 R^{17} 및 R^{18} 로서 정의된다.

[0109]

이미 상술한 바와 같이, 각 Q는 그 중에서도 특히 독립적으로 각각, 탄소 원자 또는 질소 원자 환 구성원 상에서 R^{7a} 중에서 독립적으로 선택되는 2개 이하의 치환기로 임의로 치환되며, 탄소 원자 환 구성원 상에서 R^7 , 질소 원자 환 구성원 상에서 R^{12} 중에서 독립적으로 선택되는 5개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 5원 내지 6원 헤테로 방향족 환 또는 8원 내지 11원 헤테로 방향족 이환계이다. 이러한 정의에서, 각 헤테로 방향족 환 또는 환계는 전형적으로 2개 이하의 O, 2개 이하의 S 및 4개 이하의 N 중에서 독립적으로 선택되는 4개 이하의 헤테로원자를 포함한다. 질소 원자 환 구성원은 화학식 1에 관한 화합물이 또한 N-옥사이드 유도체를 포함하기 때문에, N-옥사이드로서 산화될 수 있다. R^{7a} , R^7 및 R^{12} 가 임의적이기 때문에, 0개 내지 5개의 치환기가 존재할 수 있는데, 이는 이용가능한 결합점의 수에 의해서만 제한된다.

[0110]

이미 상술한 바와 같이, 각 Q는 그 중에서도 특히 독립적으로 각각, $C(=O)$, $C(=S)$, $S(=O)_s(=NR^{23})_f$ 및 $SiR^{17}R^{18}$ 으로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 환 구성원을 임의로 포함하고, 탄소 원자 또는 질소 원자 환 구성원 상에서 R^{7a} 중에서 독립적으로 선택되는 2개 이하의 치환기로 임의로 치환되며, 탄소 원자 환 구성원 상에서 R^7 , 질소 원자 환 구성원 상에서 R^{12} 중에서 독립적으로 선택되는 5개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 3원 내지 7원 비방향족 탄소환, 5원, 6원 또는 7원 비방향족 복소환 또는 8원 내지 11원 비방향족 이환계이다. 이러한 정의는 환 구성원으로서, 탄소 원자 이외에도, 예컨대 산소, 질소 및 황을 포함하나, 이들에 한정되지 않는 하나 이상의 헤테로원자를 포함한다. 환 헤테로원자의 수는 0일 수 있으며, 실제로 의미상 탄소환이어야 한다. 적어도 하나의 환 헤테로원자가 존재하는 경우에는, 환 또는 환계는 복소환식이다. 정의에 나타난 바와 같이, 환 탄소 원자 중 하나 이상이 R^{7a} 중에서 선택되는 2개 이하의 환 치환기 및 R^7 및 R^{12} 중에서 선택되는 5개 이하의 치환기 이외의 것인 $C(=O)$ 및 $C(=S)$ 형태일 수 있다. 황 원자 환 구성원은 미산화되거나 산화될 수 있고; 산화 황 원자는 $S(=O)_s(=NR^{23})_f$ 로서 기재되며, $S(=O)$ 및 $S(=NR^{23})$ 부분은 R^{7a} 중에서 선택되는 2개 이하의 환 치환기 및 R^7 및 R^{12} 중에서 선택되는 5개 이하의 치환기 이외의 것이다. 질소 원자 환 구성원은 화학식 1에 관한 화합물이 또한 N-옥사이드 유도체를 포함하기 때문에, N-옥사이드로서 산화될 수 있다. 규소 원자 환 구성원 상의 치환기는 별도로 R^{17} 및 R^{18} 로서 정의된다.

[0111]

각 Q가 그 중에서도 특히 각각, 탄소 원자, 및 2개 이하의 O, 2개 이하의 S, 4개 이하의 N 및 2개 이하의 Si 원자 중에서 독립적으로 선택되는 4개 이하의 헤테로원자 중에서 선택되는 환 구성원을 포함하며, 3개 이하의 탄소

원자 환 구성원이 $C(=O)$ 및 $C(=S)$ 중에서 독립적으로 선택되고, 황 원자 환 구성원이 독립적으로 S 및 $S(=O)_s(=NR^{23})_f$ 중에서 독립적으로 선택되며, 규소 원자 환 구성원이 $SiR^{17}R^{18}$ 중에서 독립적으로 선택되고, 각각 탄소 및 질소 원자 환 구성원 상에서 R^{7a} 중에서 독립적으로 선택되는 2개 이하의 치환기로 임의로 치환되며, 각각 탄소 원자 환 구성원 상에서 R^7 , 질소 원자 환 구성원 상에서 R^{12} 중에서 독립적으로 선택되는 5개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 3원 내지 7원 비방향족 탄소환, 5원, 6원 또는 7원 비방향족 복소환 또는 8원 내지 11원 비방향족 이환계인 Q의 정의의 상술한 부분에 대한 더욱 상세한 설명에 주목된다.

[0112]

이미 상술한 바와 같이, R^5 및 R^7 은 그 중에서도 특히 R^5 및 R^7 을 연결하는 원자와 함께, 탄소 원자 및 임의로 1개 이하의 O, 1개 이하의 S 및 1개 이하의 N 중에서 선택되는 3개 이하의 헤테로 원자, 및 $C(=O)$, $C(=S)$, $S(=O)_s(=NR^{23})_f$ 및 $SiR^{17}R^{18}$ 중에서 선택되는 3개 이하의 환 구성원 중에서 선택되는 환 구성원을 포함하는 임의로 치환된 5원 내지 7원 환을 형성한다. 이러한 5원 내지 7원 환은 환 구성원으로서, 치환기 R^5 및 R^7 이 직접 결합되어 있는 2개의 원자, 및 R^5 및 R^7 이 간접적으로 결합되는 것으로 간주될 수 있는 J, Z² 및 Q의 개체 (즉, 다른 연결) 원자를 포함한다. 환의 다른 환 구성원은 R^5 및 R^7 치환기에 의해 주어진다. $S(=O)_s(=NR^{23})_f$ 환 구성원에 관한 이러한 정의는 3개 이하의 산화 황 부분 (예를 들어, $S(=O)$ 또는 $S(=O)_2$)을 허용하며; 이는 $S(=O)_s(=NR^{23})_f$ 의 정의가 미산화 황 원자를 허용하지 않기 때문에 (즉, s 및 f는 동시에 0일 수 없다), 이러한 정의에서 미산화되는 것으로 고려되는 1개 이하의 S 헤테로원자 이외의 것이다. 이러한 정의에서, O, S, $S(=O)_s(=NR^{23})_f$, N 및 $SiR^{17}R^{18}$ 중에서 선택되는 환 구성원은 임의적이며, 이들 환 구성원의 총수는 0일 수 있다. 이들 환 구성원이 모두 존재하지 않는 경우에는 (즉, 환 구성원은 모두 탄소 원자이다), 환은 탄소환이다. 이들 환 구성원 중 적어도 하나가 존재하는 경우에는, 환은 복소환이다. 질소 원자 환 구성원은 화학식 1에 관한 화합물이 또한 N-옥사이드 유도체를 포함하기 때문에, N-옥사이드로서 산화될 수 있다. 정의는 $S(=O)_s(=NR^{23})_f$ 또는 $SiR^{17}R^{18}$ 의 존재로 인해 제한된 $C(=O)$ 및 $C(=S)$ 형태의 3개 이하의 탄소 환 구성원 및 이용가능한 탄소 원자 수를 허용한다. 임의의 치환기는 이용가능한 결합점을 갖는 질소 원자 환 구성원 및 탄소 원자 환 구성원에 결합될 수 있다.

[0113]

치환기 내의 탄소 원자의 총수는 " C_i-C_j " 접두어로 나타내며, 여기서 i와 j는 1 내지 14의 수이다. 예를 들어, C_1-C_4 알킬설폰닐은 메틸설폰닐 내지 부틸설폰닐을 나타내며; C_2 알콕시알킬은 CH_3OCH_2 를 나타내며; C_3 알콕시알킬은 예를 들어, $CH_3CH(OCH_3)$, $CH_3OCH_2CH_2$ 또는 $CH_3CH_2OCH_2$ 를 나타내며; C_4 알콕시알킬은 총 4개의 탄소 원자를 포함하는 알콕시기로 치환된 알킬기의 다양한 이성질체를 나타내며, 그 예로는 $CH_3CH_2CH_2OCH_2$ 및 $CH_3CH_2OCH_2CH_2$ 를 들 수 있다.

[0114]

기, 예컨대 환 또는 환계와 관련하여, 용어 "비치환된"은 기가 화학식 1의 나머지 부분에 대한 이의 하나 이상의 결합부 이외의 임의의 치환기를 갖지 않는 것을 의미한다. 기, 예컨대 환 또는 환계 (예를 들어, G의 5원 복소환, 또는 R^{1a} , R^{1b} , R^{1c} 및 R^{1d} 의 페닐, 나프탈레닐 또는 5원 또는 6원 복소환)와 관련하여, 용어 "임의로 치환된"은 임의의 치환기의 수 또는 실체 (identity)를 특정하지 않고서, 비치환되거나 비치환된 유사체의 살균 활성을 소멸시키지 않는 적어도 하나의 비수소 치환기를 갖는 기를 말한다. 용어 "임의로 치환된"은 치환기의 수가 0일 수 있음을 의미한다. 달리 표시되지 않는 한, 임의로 치환된 기는 임의의 이용가능한 탄소 또는 질소 원자 상에서 수소 원자를 비수소 치환기로 치환함으로써 수용될 수 있는 것과 같은 수 만큼의 임의의 치환기로 치환될 수 있다. 통상, 임의의 치환기 (존재하는 경우)의 수는 1 내지 3의 범위이다.

[0115]

임의의 치환기의 수는 표시된 제한에 의해 한정될 수 있다. 예를 들어, 어구 "탄소 또는 질소 환 구성원 상에서 R^{7a} 중에서 선택되는 2개 이하의 치환기로 임의로 치환된"은 0개, 1개 또는 2개의 치환기가 존재할 수 있음 (잠재적인 연결점의 수가 허용되는 경우)을 의미한다. 유사하게는, 어구 "5개 이하의 치환기로 임의로 치환된"은 이용가능한 연결점의 수가 허용되는 경우에 0개, 1개, 2개, 3개, 4개 또는 5개의 치환기가 존재할 수 있음을 의미한다. 치환기의 수에 지정된 범위 (예를 들어, x는 증거 3에서 0 내지 5의 정수임)가 환 상의 치환기에 이용가능한 위치의 수 (예를 들어, 증거 3의 J-1의 $(R^5)_x$ 에 이용가능한 2개의 위치)를 초과하면, 실질적인 범

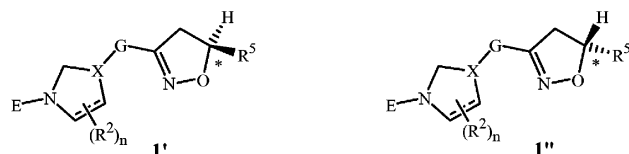
위 상한치가 이용가능한 위치의 수인 것으로 인지된다.

[0116] 화합물이 치환기의 수가 변화할 수 있음을 나타내는 아래 첨자를 갖는 치환기로 치환되어, 상기 치환기의 수가 1을 초과하는 경우에는, 상기 치환기는 정의된 치환기 그룹 중에서 독립적으로 선택된다. 기 (예를 들어, J)가 수소일 수 있는 치환기 (예를 들어, R⁵)를 포함하면, 이러한 치환기가 수소로서 간주되는 경우, 이는 비치환된 상기 기와 동등한 것으로 인지된다. 기의 위치가 "치환되지 않은" 또는 "비치환된"이라고 하면, 수소 원자는 임의의 자유 원자를 차지하도록 결합된다.

[0117] Z³가 라디칼 -CR²⁴=CR²⁷-, -OCHR²⁰ 및 -CHR²⁰O- 중에서 선택되는 경우, 라디칼의 좌측 말단은 Q의 나머지 부분에 연결되고, 라디칼의 우측 말단은 T^A, T^N 또는 T^P에 연결된다.

[0118] 본 명세서에서의 치환기의 명명은 화학 구조를 당업자에게 정확히 전달하는데 있어서 간결성을 제공하는 용인된 용어를 사용한다. 간결성을 위해, 로칸트 디스크립터 (locant descriptor)는 생략될 수 있다.

[0119] 화학식 1의 화합물은 하나 이상의 입체 이성질체로서 존재할 수 있다. 다양한 입체 이성질체는 에난티오머, 다이어스테레오머, 아트로프 이성질체 (atropisomer) 및 기하 이성질체를 포함한다. 당업자는 하나의 입체 이성질체가 다른 이성질체(들)에 비하여 풍부할 때 또는 다른 입체 이성질체(들)로부터 분리될 때 활성이 더 클 수 있고/있거나 유익한 효과를 나타낼 수 있음을 이해할 것이다. 부가적으로, 당업자는 상기 입체 이성질체를 분리, 농축, 및/또는 선택적으로 제조하는 방법을 안다. 화학식 1의 화합물은 입체 이성질체들의 혼합물, 개별 입체 이성질체 또는 광학 활성 형태로서 존재할 수 있다. 예를 들어, J가 3 위치에서 화학식 1의 나머지 부분에 결합된 J-29 (증거 3 참조)이고, J-29이 5 위치에서 H 이외의 1개의 R⁵ 치환기를 가지면, 화학식 1은 R⁵가 결합되는 탄소 원자에 키랄 중심을 갖는다. 2개의 에난티오머는 키랄 중심이 별표 (*)로 특정되어 있는 화학식 1' 및 화학식 1"로서 나타낸다.



[0120]

[0121] 화학식 1의 화합물은 라세미 혼합물, 예를 들어 동일량의 화학식 1' 및 1"의 에난티오머를 포함한다. 게다가, 화학식 1의 화합물은 라세미 혼합물과 비교하여, 화학식 1의 에난티오머가 풍부한 화합물을 포함한다. 실질적으로 순수한 화학식 1, 예를 들어, 화학식 1' 및 화학식 1"의 화합물의 에난티오머도 포함한다.

[0122] 에난티오머적으로 풍부한 (enantiomerically enriched) 경우에는, 하나의 에난티오머가 다른 것보다 더 많은 양으로 존재하며, 풍부도 (extent of enrichment)는 에난티오머 과잉률 (enantiomeric excess; "ee")의 표현으로 정의될 수 있고, 이는 (2x-1) × 100 % (여기서, x는 혼합물 중의 주된 에난티오머의 몰 분율 (예를 들어, 20 %의 ee는 에난티오머들의 60:40 비에 해당한다)로서 정의된다.

[0123] 바람직하게는 본 발명의 화학식 1의 조성물은 보다 활성을 나타내는 이성질체의 에난티오머 과잉률이 적어도 50 %; 더욱 바람직하게는 에난티오머 과잉률이 적어도 75 %; 보다 더 바람직하게는 에난티오머 과잉률이 적어도 90 %; 가장 바람직하게는 에난티오머 과잉률이 적어도 94 %이다. 에난티오머적으로 순수한 보다 활성을 나타내는 이성질체의 실시 형태가 특히 주목된다.

[0124] 화학식 1의 화합물은 추가의 키랄 중심을 포함할 수 있다. 예를 들어, 치환기 및 다른 분자 성분, 예컨대 A, R^{1a}, R^{1b}, R^{1c}, R^{1d}, G, J, Q, X¹ 내지 X⁹, Z¹, Z² 및 Z³는 그것들 자체가 키랄 중심을 포함할 수 있다. 화학식 1의 화합물은 이러한 추가의 키랄 중심의 라세미 혼합물 및 풍부한 실질적으로 순수한 입체 형태를 포함한다.

[0125] 화학식 1의 화합물은 화학식 1의 아마이드 결합 (예를 들어, C(W)-N)에 대한 제한된 회전으로 인해, 하나 이상의 형태 이성질체로서 존재할 수 있다. 화학식 1의 화합물은 형태 이성질체의 혼합물을 포함한다. 또한, 화학식 1의 화합물은 다른 형태 이성질체에 비해 하나의 입체 이성질체가 풍부한 화합물을 포함한다.

[0126] 당업자는 화학식 1의 화합물이 이의 각각의 하나 이상의 토토머 카운터파트 중 하나 이상과 평형 상태로 존재할 수 있음을 인지한다. 달리 표시하지 않는 한, 하나의 토토머 설명에 의한 화합물에 대한 언급은 모든 토토머를 포함하는 것으로 고려된다. 예를 들어, 증거 1, 2, 3 및 4에 나타난 불포화 환 및 환계의 일부는 나타난 것과

는 상이한 환 구성원 사이의 단일 및 이중 결합의 배열을 가질 수 있다. 특정한 환 원자 배열에 대한 이러한 상이한 결합 배열은 상이한 토토머에 해당한다. 이러한 불포화 환 및 환계에 관해서는, 도시된 특정한 토토머는 나타내어진 환 원자 배열에 가능한 모든 토토머를 나타내는 것으로 고려된다.

[0127]

본 발명의 화합물은 화학식 1의 N-옥사이드 유도체를 포함한다. 당업자는 질소가 산화물로의 산화를 위해 이용 가능한 고립 전자쌍을 필요로 하므로, 모든 질소 함유 복소환이 N-옥사이드를 형성할 수 있는 것은 아님을 인지할 것이며; 당업자는 N-옥사이드를 형성할 수 있는 그러한 질소 함유 복소환을 인식할 것이다. 또한, 당업자라면 3차 아민이 N-옥사이드를 형성할 수 있음을 인식할 것이다. 복소환 및 삼차 아민의 N-옥사이드의 제조에 관한 합성 방법은 퍼옥시산, 예컨대 퍼아세트산 및 m-클로로퍼벤조산 (MCPBA), 과산화수소, 알킬 하이드로퍼옥사이드, 예컨대 tert-부틸 하이드로퍼옥사이드, 과불산나트륨, 및 다이옥시란, 예컨대 다이메틸다이옥시란을 사용한 복소환 및 삼차 아민의 산화를 비롯하여, 당업자에게 공지되어 있다. 이러한 N-옥사이드의 제조 방법은 문헌에 광범위하게 설명 및 검토되었으며, 예를 들어 하기를 참조한다: 문헌 [T. L. Gilchrist in Comprehensive Organic Synthesis, vol. 7, pp 748-750, S. V. Ley, Ed., Pergamon Press]; 문헌 [M. Tisler and B. Stanovnik in Comprehensive Heterocyclic Chemistry, vol. 3, pp 18-20, A. J. Boulton and A. McKillop, Eds., Pergamon Press]; 문헌 [M. R. Grimmett and B. R. T. Keene in Advances in Heterocyclic Chemistry, vol. 43, pp 149-161, A. R. Katritzky, Ed., Academic Press]; 문헌 [M. Tisler and B. Stanovnik in Advances in Heterocyclic Chemistry, vol. 9, pp 285-291, A. R. Katritzky and A. J. Boulton, Eds., Academic Press]; 및 문헌 [G. W. H. Cheeseman and E. S. G. Werstiuk in Advances in Heterocyclic Chemistry, vol. 22, pp 390-392, A. R. Katritzky and A. J. Boulton, Eds., Academic Press]을 참조한다.

[0128]

당업자라면, 당해 환경에서 그리고 생리학적 조건 하에서 화학적 화합물의 염은 그의 대응하는 비염 형태 (nonsalt form)와 평형 상태에 있기 때문에, 염은 비염 형태의 생물학적 유용성을 공유한다는 것을 인식한다. 본 발명의 혼합물 및 조성물이 산성 또는 염기성 부분을 포함하는 경우에는, 다양한 염이 형성될 수 있고, 이들 염은 균류 식물 병원체에 의한 식물병을 방지하기 위한 본 발명의 혼합물 및 조성물에 유용하다 (즉, 농업용으로 적합함). 화합물이 염기성 부분, 예컨대 아민 작용기를 포함하는 경우에는, 염은 무기 또는 유기 산, 예컨대 브롬화수소산, 염산, 질산, 인산, 황산, 아세트산, 부티르산, 푸마르산, 락트산, 말레산, 말론산, 옥살산, 프로피온산, 살리실산, 타르타르산, 4-톨루엔설폰산 또는 발레르산과의 산-부가염을 포함한다. 화합물이 산 부분, 예컨대 카르복실산 또는 페놀을 함유하는 경우에는, 염은 또한 유기 또는 무기 염기, 예컨대 피리딘, 트라이에틸아민 또는 암모니아와 함께 형성된 염, 또는 나트륨, 칼륨, 리튬, 칼슘, 마그네슘 또는 바륨의 아미드, 수산화물, 수산화물 또는 탄산염을 포함한다.

[0129]

화학식 1로부터 선택된 화합물, 및 이들의 기하 이성질체 및 입체 이성질체, 토토머, N-옥사이드 및 염은 전형적으로 2개 이상의 형태로 존재하므로, 화학식 1은 화학식 1이 나타내는 화합물의 모든 결정질 형태 및 비결정질 형태를 포함한다. 비결정질 형태는 왁스 및 겔과 같은 고체인 실시 형태뿐만 아니라, 용액 및 용융물과 같은 액체인 실시 형태도 포함한다. 결정질 형태는 기본적으로 단결정 타입을 나타내는 실시 형태 및 다형체 (즉, 상이한 결정질 타입)의 혼합물을 나타내는 실시 형태를 포함한다. 용어 "다형체"는 상이한 결정질 형태 - 이들 형태는 결정 격자 내에 분자의 상이한 배열 및/또는 배치를 가짐 - 로 결정화될 수 있는 화학적 화합물의 특정 결정질 형태를 말한다. 다형체는 동일한 화학 조성을 가질 수 있지만, 이는 또한 격자 내에서 약하게 또는 강하게 결합될 수 있는 공결정화된 (co-crystallized) 물 또는 기타 분자의 존재 또는 부재로 인하여 조성이나 다를 수 있다. 다형체는 결정의 형상, 밀도, 경도, 색상, 화학적 안정성, 융점, 흡습성, 현탁성, 용해 속도 및 생물학적 이용성과 같은 화학적, 물리적 및 생물학적 특성이 상이할 수 있다. 당업자는 화학식 1로 나타내는 화합물의 다형체가 다른 다형체 또는 화학식 1로 나타내는 동일한 화합물의 다형체의 혼합물에 비해, 유의한 효과 (예를 들어, 유용한 제형의 제조에 대한 적합성, 생물학적 성능 개선)를 나타낼 수 있음을 인지할 것이다. 화학식 1로 나타내는 화합물의 특정 다형체의 제조 및 분리는 예를 들어, 선택된 용매 및 온도를 이용한 결정화를 비롯하여, 당업자에게 공지된 방법에 의해 달성될 수 있다.

[0130]

발명의 요약에 기재된 본 발명의 실시 형태는 하기에 기재된 것을 포함한다. 하기 실시 형태에서, 화학식 1은 이들의 기하 이성질체 및 입체 이성질체, N-옥사이드 및 염을 포함하며, "화학식 1의 화합물"에 대한 언급은 실시 형태에서 추가로 정의되지 않는 한, 발명의 요약에 규정된 치환기의 정의를 포함한다.

[0131]

실시 형태 1. E가 E-1, E-2 또는 E-3인 화학식 1의 화합물.

[0132]

실시 형태 2. E가 E-1 또는 E-2인 실시 형태 1의 화합물.

- [0133] 실시 형태 3. E가 E-1인 실시 형태 2의 화합물.
- [0134] 실시 형태 4. E가 E-2인 실시 형태 2의 화합물.
- [0135] 실시 형태 5. R^6 가 C_1-C_2 알킬 또는 C_1-C_2 할로알킬인 화학식 1의 화합물.
- [0136] 실시 형태 6. R^6 가 메틸인 실시 형태 5의 화합물.
- [0137] 실시 형태 7. A가 CHR^{15} 인 화학식 1의 화합물.
- [0138] 실시 형태 8. R^{15} 이 H, 할로젠, 시아노, 하이드록시, $-CHO$, C_1-C_4 알킬, C_1-C_4 할로알킬, C_1-C_4 알콕시 또는 C_2-C_5 알콕시카르보닐인 화학식 1의 화합물.
- [0139] 실시 형태 9. R^{15} 이 H, 할로젠, 시아노, 하이드록시, 메틸, 메톡시 또는 메톡시카르보닐인 실시 형태 8의 화합물.
- [0140] 실시 형태 10. R^{15} 이 OH인 실시 형태 9의 화합물.
- [0141] 실시 형태 11. R^{15} 이 H인 실시 형태 9의 화합물.
- [0142] 실시 형태 12. A가 NR^{16} 인 화학식 1의 화합물.
- [0143] 실시 형태 13. R^{16} 이 H, C_1-C_4 알킬, C_1-C_4 할로알킬, C_2-C_4 알킬카르보닐, C_2-C_4 할로알킬카르보닐 또는 C_2-C_4 알콕시카르보닐인 화학식 1의 화합물.
- [0144] 실시 형태 14. R^{16} 이 H, 메틸, 메틸카르보닐 또는 메톡시카르보닐인 실시 형태 13의 화합물.
- [0145] 실시 형태 15. R^{16} 이 H인 실시 형태 14의 화합물.
- [0146] 실시 형태 16. A가 $C(=O)$ 인 화학식 1의 화합물.
- [0147] 실시 형태 17. W^1 이 OR^{30} , SR^{31} 또는 $NR^{32}R^{33}$ 인 화학식 1의 화합물.
- [0148] 실시 형태 18. W^1 이 OR^{30} 인 실시 형태 17의 화합물.
- [0149] 실시 형태 19. W^1 이 SR^{31} 인 실시 형태 17의 화합물.
- [0150] 실시 형태 19a. W^1 이 $NR^{32}R^{33}$ 인 실시 형태 17의 화합물.
- [0151] 실시 형태 20. R^{28} 이 H, 할로젠, 시아노 또는 C_1-C_4 알킬인 화학식 1의 화합물.
- [0152] 실시 형태 21. R^{28} 이 H, 할로젠 또는 시아노인 실시 형태 20의 화합물.
- [0153] 실시 형태 22. R^{28} 이 Cl, F 또는 시아노인 실시 형태 21의 화합물.
- [0154] 실시 형태 23. 각 R^{30} 및 R^{31} 이 C_1-C_6 알킬, C_3-C_4 알케닐, C_3-C_4 알키닐, C_1-C_4 할로알킬, C_3-C_6 할로알케닐, C_3-C_6 할로알키닐, C_2-C_6 알콕시알킬 및 C_3-C_6 사이클로알킬 중에서 독립적으로 선택되는 화학식 1 또는 실시 형태 17의 화합물.
- [0155] 실시 형태 24. 각 R^{30} 및 R^{31} 이 C_1-C_6 알킬, C_3-C_4 알케닐, C_3-C_4 알키닐 및 C_1-C_4 할로알킬 중에서 독립적으로 선택되는 실시 형태 23의 화합물.
- [0156] 실시 형태 25. 각 R^{30} 및 R^{31} 이 C_1-C_4 알킬 중에서 독립적으로 선택되는 실시 형태 24의 화합물.

- [0157] 실시 형태 26. 각 R^{30} 및 R^{31} 이 독립적으로 에틸 또는 메틸인 실시 형태 25의 화합물.
- [0158] 실시 형태 27. 단독으로 취해진 경우 (즉, R^{33} 와 함께 취해지지 않음)의 R^{32} 가 H, 시아노, 하이드록시, 아미노, C_1-C_6 알킬 또는 C_1-C_6 알콕시인 화학식 1 또는 실시 형태 17의 화합물.
- [0159] 실시 형태 28. 단독으로 취해진 경우의 R^{32} 가 H, 시아노, 하이드록시, 아미노, C_1-C_3 알킬 또는 C_1-C_3 알콕시인 실시 형태 27의 화합물.
- [0160] 실시 형태 29. 단독으로 취해진 경우의 R^{32} 가 H, 시아노, 하이드록시, C_1-C_2 알킬 또는 C_1-C_2 알콕시인 실시 형태 28의 화합물.
- [0161] 실시 형태 30. 단독으로 취해진 경우(즉, R^{32} 와 함께 취해지지 않음)의 R^{33} 가 H 또는 C_1-C_6 알킬인 화학식 1 또는 실시 형태 17의 화합물.
- [0162] 실시 형태 31. 단독으로 취해진 경우의 R^{33} 가 H 또는 메틸인 실시 형태 30의 화합물.
- [0163] 실시 형태 32. 단독으로 취해진 경우의 R^{33} 가 H인 실시 형태 31의 화합물.
- [0164] 실시 형태 32a. R^{32} 및 R^{33} 가 단독으로 취해지는 화학식 1 또는 실시 형태 1 내지 32 중 어느 하나의 화합물.
- [0165] 실시 형태 33. W가 O인 화학식 1의 화합물.
- [0166] 실시 형태 34. W가 S인 화학식 1의 화합물.
- [0167] 실시 형태 35. X가 X^1 , X^2 , X^3 , X^4 , X^5 , X^6 , X^7 또는 X^8 인 화학식 1의 화합물.
- [0168] 실시 형태 36. X가 X^1 , X^2 또는 X^3 인 실시 형태 35의 화합물.
- [0169] 실시 형태 37. X가 X^2 또는 X^1 인 실시 형태 36의 화합물.
- [0170] 실시 형태 38. X가 X^1 인 실시 형태 37의 화합물.
- [0171] 실시 형태 39. X를 포함하는 환이 포화되는 화학식 1 또는 실시 형태 35 내지 38 중 어느 하나의 화합물.
- [0172] 실시 형태 40. Z^1 이 직접 결합, CHR^{20} 또는 NR^{21} 인 화학식 1의 화합물.
- [0173] 실시 형태 40a. Z^1 이 직접 결합 또는 CHR^{20} 인 실시 형태 40의 화합물.
- [0174] 실시 형태 41. Z^1 이 직접 결합인 실시 형태 40a의 화합물.
- [0175] 실시 형태 42. 각 R^{21} 이 독립적으로 H, C_1-C_3 알킬, C_1-C_3 알킬카르보닐 또는 C_2-C_3 알콕시카르보닐인 화학식 1 또는 실시 형태 40의 화합물.
- [0176] 실시 형태 42a. 각 R^{21} 이 독립적으로 H 또는 메틸인 실시 형태 42의 화합물.
- [0177] 실시 형태 43. Z^5 , Z^6 , Z^7 및 Z^8 이 독립적으로 각각 직접 결합인 화학식 1의 화합물.
- [0178] 실시 형태 44. 각 R^2 가 독립적으로 할로젠, 시아노, 하이드록시, C_1-C_4 알킬, C_1-C_4 알케닐, C_1-C_4 할로알킬 또는 C_1-C_4 알콕시이거나;
- [0179] 2개의 R^2 기가 함께 C_1-C_3 알킬렌 또는 C_2-C_3 알케닐렌으로서 취해 가교 이환계를 형성하거나;
- [0180] 이중 결합으로 결합된 인접한 환 탄소 원자에 부착되는 2개의 R^2 기가 함께, 할로젠, 시아노, 하이드록시, 아미노, 니트로, C_1-C_4 알킬, C_1-C_4 할로알킬, C_1-C_4 알콕시 및 C_1-C_4 할로알콕시 중에서 독립적으로 선택되는 2개 이

하의 치환기로 임의로 치환되는 $-\text{CH}=\text{CH}-\text{CH}=\text{CH}-$ 로서 취해지는 화학식 1의 화합물.

- [0181] 실시 형태 45. 각 R^2 가 독립적으로 할로젠, 시아노, 하이드록시, $\text{C}_1\text{-C}_2$ 알킬, $\text{C}_1\text{-C}_2$ 할로알킬 또는 $\text{C}_1\text{-C}_2$ 알콕시인 실시 형태 44의 화합물.
- [0182] 실시 형태 46. 각 R^2 가 독립적으로 시아노, 하이드록시, 메틸 또는 메톡시인 실시 형태 45의 화합물.
- [0183] 실시 형태 47. 각 R^2 가 메틸인 실시 형태 46의 화합물.
- [0184] 실시 형태 48. n 이 0 또는 1인 화학식 1의 화합물.
- [0185] 실시 형태 49. n 이 0인 실시 형태 48의 화합물.
- [0186] 실시 형태 50. R^{1a} , R^{1b} , R^{1c} 및 R^{1d} 가 독립적으로 임의로 치환된 페닐, 임의로 치환된 나프탈레닐 또는 임의로 치환된 5원 또는 6원 헤테로 방향족 환; 또는 시아노, $\text{C}_1\text{-C}_8$ 알킬, $\text{C}_2\text{-C}_8$ 알케닐, $\text{C}_2\text{-C}_8$ 알키닐, $\text{C}_1\text{-C}_8$ 할로알킬, $\text{C}_2\text{-C}_8$ 할로알케닐, $\text{C}_2\text{-C}_8$ 할로알키닐, $\text{C}_2\text{-C}_8$ 할로알킬티오알킬, $\text{C}_3\text{-C}_8$ 사이클로알킬, $\text{C}_2\text{-C}_8$ 알콕시알킬, $\text{C}_2\text{-C}_8$ 할로알콕시알킬, $\text{C}_3\text{-C}_8$ 알콕시카르보닐알킬, $\text{C}_3\text{-C}_8$ 할로알콕시카르보닐알킬, $\text{C}_2\text{-C}_8$ 알킬티오알킬, $\text{C}_2\text{-C}_8$ 알킬설피닐알킬, $\text{C}_2\text{-C}_8$ 알킬설포닐알킬, $\text{C}_2\text{-C}_8$ 알킬아미노알킬, $\text{C}_2\text{-C}_8$ 알킬카르보닐옥시, $\text{C}_2\text{-C}_8$ 할로알킬카르보닐옥시, $\text{C}_3\text{-C}_{10}$ 다이알킬아미노알킬, $\text{C}_1\text{-C}_8$ 알콕시, $\text{C}_1\text{-C}_8$ 할로알콕시, $\text{C}_1\text{-C}_8$ 알킬티오, $\text{C}_3\text{-C}_{10}$ 트라이알킬실릴, $\text{C}_1\text{-C}_8$ 알킬아미노, $\text{C}_2\text{-C}_8$ 다이알킬아미노, $\text{C}_2\text{-C}_8$ 알킬카르보닐아미노, 피롤리디닐, 피페리디닐 또는 모르폴리닐인 화학식 1의 화합물.
- [0187] 실시 형태 51. 독립적으로 R^{1a} , R^{1b} , R^{1c} 및 R^{1d} 가 임의로 치환된 페닐, 임의로 치환된 나프탈레닐 또는 임의로 치환된 5원 또는 6원 헤테로 방향족 환 이외의 것이면, R^{1a} , R^{1b} , R^{1c} 및 R^{1d} 가 독립적으로 시아노, $\text{C}_1\text{-C}_8$ 알킬, $\text{C}_2\text{-C}_8$ 알케닐, $\text{C}_2\text{-C}_8$ 알키닐, $\text{C}_1\text{-C}_8$ 할로알킬, $\text{C}_2\text{-C}_8$ 할로알케닐, $\text{C}_2\text{-C}_8$ 할로알키닐, $\text{C}_3\text{-C}_8$ 사이클로알킬, $\text{C}_2\text{-C}_8$ 알콕시알킬, $\text{C}_2\text{-C}_8$ 알킬티오알킬, $\text{C}_2\text{-C}_8$ 알킬설피닐알킬, $\text{C}_2\text{-C}_8$ 알킬설포닐알킬, $\text{C}_2\text{-C}_8$ 알킬아미노알킬, $\text{C}_3\text{-C}_{10}$ 다이알킬아미노알킬, $\text{C}_1\text{-C}_8$ 알콕시, $\text{C}_1\text{-C}_8$ 할로알콕시, $\text{C}_1\text{-C}_8$ 알킬티오, $\text{C}_3\text{-C}_{10}$ 트라이알킬실릴, $\text{C}_1\text{-C}_8$ 알킬아미노, $\text{C}_2\text{-C}_8$ 다이알킬아미노, $\text{C}_2\text{-C}_8$ 알킬카르보닐아미노, 피롤리디닐, 피페리디닐 또는 모르폴리닐인 실시 형태 50의 화합물.
- [0188] 실시 형태 52. 독립적으로 R^{1a} , R^{1b} , R^{1c} 및 R^{1d} 가 임의로 치환된 페닐, 임의로 치환된 나프탈레닐 또는 임의로 치환된 5원 또는 6원 헤테로 방향족 환 이외의 것이면, R^{1a} , R^{1b} , R^{1c} 및 R^{1d} 가 독립적으로 $\text{C}_1\text{-C}_8$ 알킬, $\text{C}_2\text{-C}_8$ 알케닐, $\text{C}_1\text{-C}_8$ 할로알킬, $\text{C}_2\text{-C}_8$ 알콕시알킬, $\text{C}_2\text{-C}_8$ 알킬티오알킬, $\text{C}_2\text{-C}_8$ 알킬아미노알킬, $\text{C}_1\text{-C}_8$ 알콕시, $\text{C}_1\text{-C}_8$ 알킬티오, 피롤리디닐, 피페리디닐 또는 모르폴리닐인 실시 형태 51의 화합물.
- [0189] 실시 형태 53. 독립적으로 R^{1a} , R^{1b} , R^{1c} 및 R^{1d} 가 임의로 치환된 페닐, 임의로 치환된 나프탈레닐 또는 임의로 치환된 5원 또는 6원 헤테로 방향족 환 이외의 것이면, R^{1a} , R^{1b} , R^{1c} 및 R^{1d} 가 독립적으로 $\text{C}_1\text{-C}_6$ 알킬, $\text{C}_2\text{-C}_6$ 알케닐, $\text{C}_1\text{-C}_6$ 할로알킬, $\text{C}_1\text{-C}_6$ 알콕시, 피롤리디닐, 피페리디닐 또는 모르폴리닐인 실시 형태 52의 화합물.
- [0190] 실시 형태 54. 독립적으로 R^{1a} , R^{1b} , R^{1c} 및 R^{1d} 가 임의로 치환된 페닐, 임의로 치환된 나프탈레닐 또는 임의로 치환된 5원 또는 6원 헤테로 방향족 환 이외의 것이면, R^{1a} , R^{1b} , R^{1c} 및 R^{1d} 가 독립적으로 $\text{C}_2\text{-C}_5$ 알킬, $\text{C}_2\text{-C}_5$ 알케닐, $\text{C}_2\text{-C}_5$ 할로알킬, $\text{C}_2\text{-C}_5$ 할로알케닐, $\text{C}_2\text{-C}_5$ 할로알킬티오알킬, $\text{C}_2\text{-C}_5$ 알콕시알킬, $\text{C}_2\text{-C}_5$ 할로알콕시알킬, $\text{C}_2\text{-C}_5$ 알킬티오알킬, $\text{C}_2\text{-C}_5$ 알킬아미노알킬, $\text{C}_2\text{-C}_5$ 알킬카르보닐옥시, $\text{C}_2\text{-C}_5$ 할로알킬카르보닐옥시, $\text{C}_2\text{-C}_5$ 알콕시, $\text{C}_2\text{-C}_5$ 할로알콕시, $\text{C}_2\text{-C}_5$ 알킬티오, $\text{C}_2\text{-C}_5$ 알킬아미노 또는 $\text{C}_2\text{-C}_5$ 알킬카르보닐아미노인 실시 형태 50의 화합물.
- [0191] 실시 형태 55. 독립적으로 R^{1a} , R^{1b} , R^{1c} 및 R^{1d} 가 임의로 치환된 페닐, 임의로 치환된 나프탈레닐 또는 임의로

치환된 5원 또는 6원 헤테로 방향족 환 이외의 것이면, R^{1a} , R^{1b} , R^{1c} 및 R^{1d} 가 독립적으로 C_3-C_5 알킬, C_3-C_5 알케닐, C_3-C_5 할로알킬, C_3-C_5 할로알케닐, C_2-C_4 할로알킬티오알킬, C_2-C_4 알콕시알킬, C_2-C_4 할로알콕시알킬, C_2-C_4 알킬티오알킬, C_2-C_4 알킬아미노알킬, C_2-C_3 알킬카르보닐옥시, C_2-C_3 할로알킬카르보닐옥시, C_2-C_4 알콕시, C_2-C_4 할로알콕시, C_2-C_4 알킬티오, C_2-C_4 알킬아미노 또는 C_2-C_3 알킬카르보닐아미노인 실시 형태 54의 화합물.

[0192]

실시 형태 56. 독립적으로 R^{1a} , R^{1b} , R^{1c} 및 R^{1d} 가 임의로 치환된 페닐, 임의로 치환된 나프탈레닐 또는 임의로 치환된 5원 또는 6원 헤테로 방향족 환 이외의 것이면, R^{1a} , R^{1b} , R^{1c} 및 R^{1d} 가 독립적으로 C_3-C_5 할로알킬, C_3-C_5 할로알케닐, C_3-C_5 할로알킬티오알킬, C_3-C_5 할로알콕시알킬, C_2-C_3 할로알킬카르보닐옥시 또는 C_2-C_4 할로알콕시인 실시 형태 55의 화합물.

[0193]

실시 형태 57. 독립적으로 R^{1a} , R^{1b} , R^{1c} 및 R^{1d} 가 임의로 치환된 페닐, 임의로 치환된 나프탈레닐 또는 임의로 치환된 5원 또는 6원 헤테로 방향족 환 이외의 것이면, R^{1a} , R^{1b} , R^{1c} 및 R^{1d} 가 독립적으로 C_4 할로알킬, C_4 할로알케닐, C_3 할로알콕시알킬 또는 C_3 할로알콕시인 실시 형태 56의 화합물.

[0194]

실시 형태 58. 독립적으로 R^{1a} , R^{1b} , R^{1c} 및 R^{1d} 가 임의로 치환된 페닐, 임의로 치환된 나프탈레닐 또는 임의로 치환된 5원 또는 6원 헤테로 방향족 환이면, 임의로 치환된 페닐, 임의로 치환된 나프탈레닐 또는 임의로 치환된 5원 또는 6원 헤테로 방향족 환이 3개 이하의 독립적으로 선택된 치환기로 임의로 치환되는 화학식 1 또는 실시 형태 50의 화합물.

[0195]

실시 형태 59. 독립적으로 R^{1a} , R^{1b} , R^{1c} 및 R^{1d} 가 임의로 치환된 페닐, 임의로 치환된 나프탈레닐 또는 임의로 치환된 5원 또는 6원 헤테로 방향족 환이면, 임의로 치환된 페닐, 임의로 치환된 나프탈레닐 또는 임의로 치환된 5원 또는 6원 헤테로 방향족 환이 2개 이하의 독립적으로 선택된 치환기로 임의로 치환되는 화학식 1 또는 실시 형태 58의 화합물.

[0196]

실시 형태 60. 독립적으로 R^{1a} , R^{1b} , R^{1c} 및 R^{1d} 가 임의로 치환된 페닐, 임의로 치환된 나프탈레닐 또는 임의로 치환된 5원 또는 6원 헤테로 방향족 환이면, 페닐, 나프탈레닐 또는 5원 또는 6원 헤테로 방향족 환 상의 임의의 치환기가 탄소 환 구성원 상에서 R^{4a} , 질소 환 구성원 상에서 R^{4b} 중에서 독립적으로 선택되고;

[0197]

각 R^{4a} 가 독립적으로 할로젠, 시아노, 하이드록시, 아미노, 니트로, C_1-C_6 알킬, C_2-C_6 알케닐, C_2-C_6 알키닐, C_3-C_6 사이클로알킬, C_4-C_{10} 사이클로알킬알킬, C_4-C_{10} 알킬사이클로알킬, C_5-C_{10} 알킬사이클로알킬알킬, C_1-C_6 할로알킬, C_2-C_6 할로알케닐, C_2-C_6 할로알키닐, C_3-C_6 할로사이클로알킬, C_1-C_4 알콕시, C_1-C_4 할로알콕시, C_1-C_4 알킬티오, C_1-C_4 알킬설퍼닐, C_1-C_4 알킬설퍼닐, C_1-C_4 할로알킬티오, C_1-C_4 할로알킬설퍼닐, C_1-C_4 할로알킬설퍼닐, C_1-C_4 알킬아미노, C_2-C_8 다이알킬아미노, C_3-C_6 사이클로알킬아미노, C_2-C_4 알콕시알킬, C_1-C_4 하이드록시알킬, C_2-C_4 알킬카르보닐, C_2-C_6 알콕시카르보닐, C_2-C_6 알킬카르보닐옥시, C_2-C_6 알킬카르보닐티오, C_2-C_6 알킬아미노카르보닐, C_3-C_8 다이알킬아미노카르보닐 또는 C_3-C_6 트라이알킬설퍼닐이며;

[0198]

각 R^{4b} 가 독립적으로 C_1-C_6 알킬, C_3-C_6 알케닐, C_3-C_6 알키닐, C_3-C_6 사이클로알킬, C_1-C_6 할로알킬, C_3-C_6 할로알케닐, C_3-C_6 할로알키닐, C_3-C_6 할로사이클로알킬 또는 C_2-C_4 알콕시알킬인 화학식 1 또는 실시 형태 58 또는 59의 화합물.

[0199]

실시 형태 61. 독립적으로 R^{1a} , R^{1b} , R^{1c} 및 R^{1d} 가 임의로 치환된 나프탈레닐 이외의 것인 화학식 1 또는 실시 형태 1 내지 60 중 어느 하나의 화합물.

[0200]

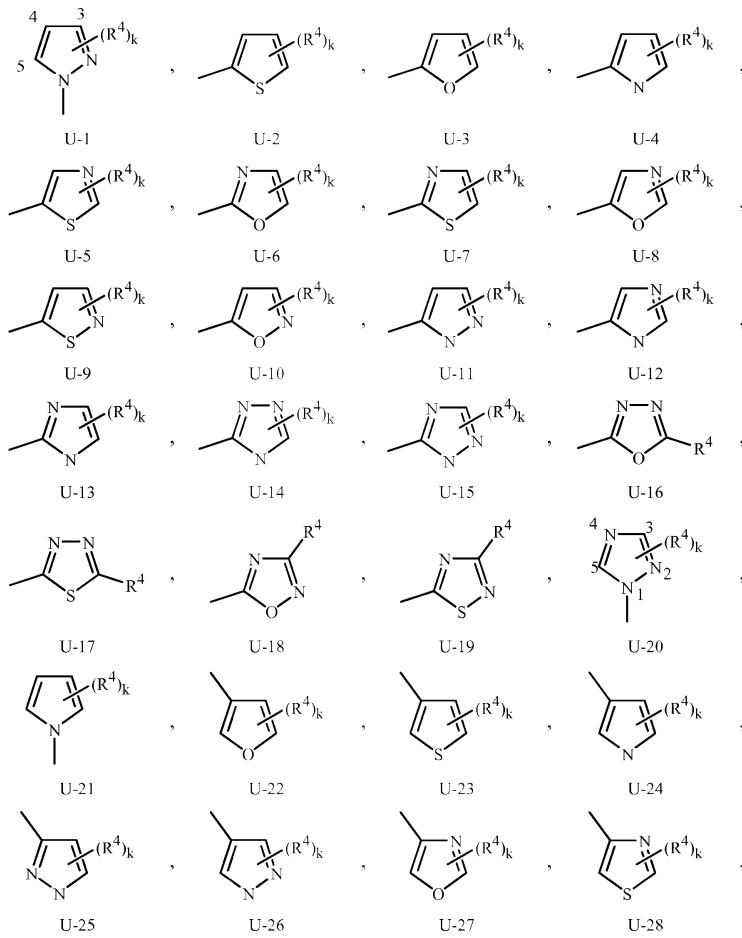
실시 형태 62. 각 R^{4a} 가 독립적으로 할로젠, 시아노, 니트로, C_1-C_3 알킬, C_2-C_3 알케닐, C_2-C_3 알키닐, 사이클로프로필, C_1-C_3 할로알킬, C_2-C_3 할로알케닐, C_2-C_3 할로알키닐, 할로사이클로프로필, C_1-C_2 알콕시, C_1-C_2 할로알콕시, C_1-C_2 알킬티오, C_1-C_2 할로알킬티오, C_2-C_3 알콕시알킬, C_2-C_3 알킬카르보닐, C_2-C_3 알콕시카르보닐, C_2-C_3

알킬아미노카르보닐 또는 C₃-C₄ 다이알킬아미노카르보닐인 실시 형태 60의 화합물.

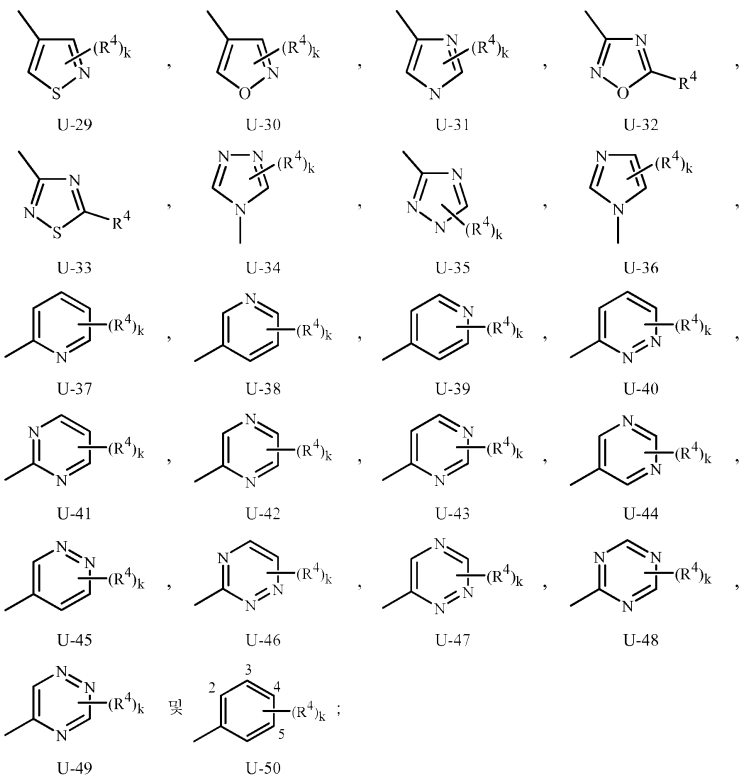
- [0201] 실시 형태 63. 각 R^{4a}가 독립적으로 할로젠, 시아노, 니트로, C₁-C₃ 알킬, C₂-C₃ 알케닐, C₂-C₃ 알키닐, 사이클로프로필, C₁-C₃ 할로알킬, C₂-C₃ 할로알케닐, C₂-C₃ 할로알키닐, 할로사이클로프로필, C₁-C₂ 알콕시 또는 C₁-C₂ 할로알콕시인 실시 형태 62의 화합물.
- [0202] 실시 형태 64. 각 R^{4a}가 독립적으로 할로젠, C₁-C₃ 알킬, C₁-C₃ 할로알킬, C₁-C₂ 알콕시 또는 C₁-C₂ 할로알콕시인 실시 형태 63의 화합물.
- [0203] 실시 형태 65. 각 R^{4a}가 독립적으로 할로젠, C₁-C₂ 알킬, C₁-C₂ 할로알킬 또는 C₁-C₂ 알콕시인 실시 형태 64의 화합물.
- [0204] 실시 형태 66. 각 R^{4a}가 독립적으로 Cl, Br, I, C₁-C₂ 알킬, 트라이플루오로메틸 또는 메톡시인 실시 형태 65의 화합물.
- [0205] 실시 형태 67. 각 R^{4a}가 독립적으로 Cl, Br, C₁-C₂ 알킬 또는 트라이플루오로메틸인 실시 형태 66의 화합물.
- [0206] 실시 형태 68. 각 R^{4b}가 독립적으로 C₁-C₃ 알킬, C₃ 알케닐 (예를 들어, 알릴), C₃ 알키닐 (예를 들어, 프로파닐), 사이클로프로필, C₁-C₃ 할로알킬, C₃ 할로알케닐, C₃ 할로알키닐, 할로사이클로프로필 또는 C₂-C₃ 알콕시알킬인 실시 형태 60의 화합물.
- [0207] 실시 형태 69. 각 R^{4b}가 독립적으로 C₁-C₃ 알킬, C₃ 알케닐, C₃ 알키닐, 사이클로프로필, C₁-C₃ 할로알킬, C₃ 할로알케닐 또는 할로사이클로프로필인 실시 형태 68의 화합물.
- [0208] 실시 형태 70. 각 R^{4b}가 독립적으로 C₁-C₂ 알킬 또는 C₁-C₂ 할로알킬인 실시 형태 69의 화합물.
- [0209] 실시 형태 71. 각 R^{4b}가 독립적으로 C₁-C₂ 알킬 또는 트라이플루오로메틸인 실시 형태 70의 화합물.
- [0210] 실시 형태 72. 각 R^{4b}가 독립적으로 C₁-C₂ 알킬인 실시 형태 71의 화합물.
- [0211] 실시 형태 72a. 독립적으로 R^{1a}, R^{1b}, R^{1c} 및 R^{1d}가 임의로 치환된 페닐, 임의로 치환된 나프탈레닐 또는 임의로 치환된 5원 또는 6원 헤테로 방향족 환인 화학식 1 또는 실시 형태 1 내지 72 중 어느 하나의 화합물.
- [0212] 실시 형태 73. 독립적으로 R^{1a}, R^{1b}, R^{1c} 및 R^{1d}가 임의로 치환된 페닐, 임의로 치환된 나프탈레닐 또는 임의로 치환된 5원 또는 6원 헤테로 방향족 환이면, R^{1a}, R^{1b}, R^{1c} 및 R^{1d}가 독립적으로 증거 1의 U-1 내지 U-50 중에서 선택되는 실시 형태 60 내지 72a 중 어느 하나의 화합물.

[0213]

증거 1



[0214]

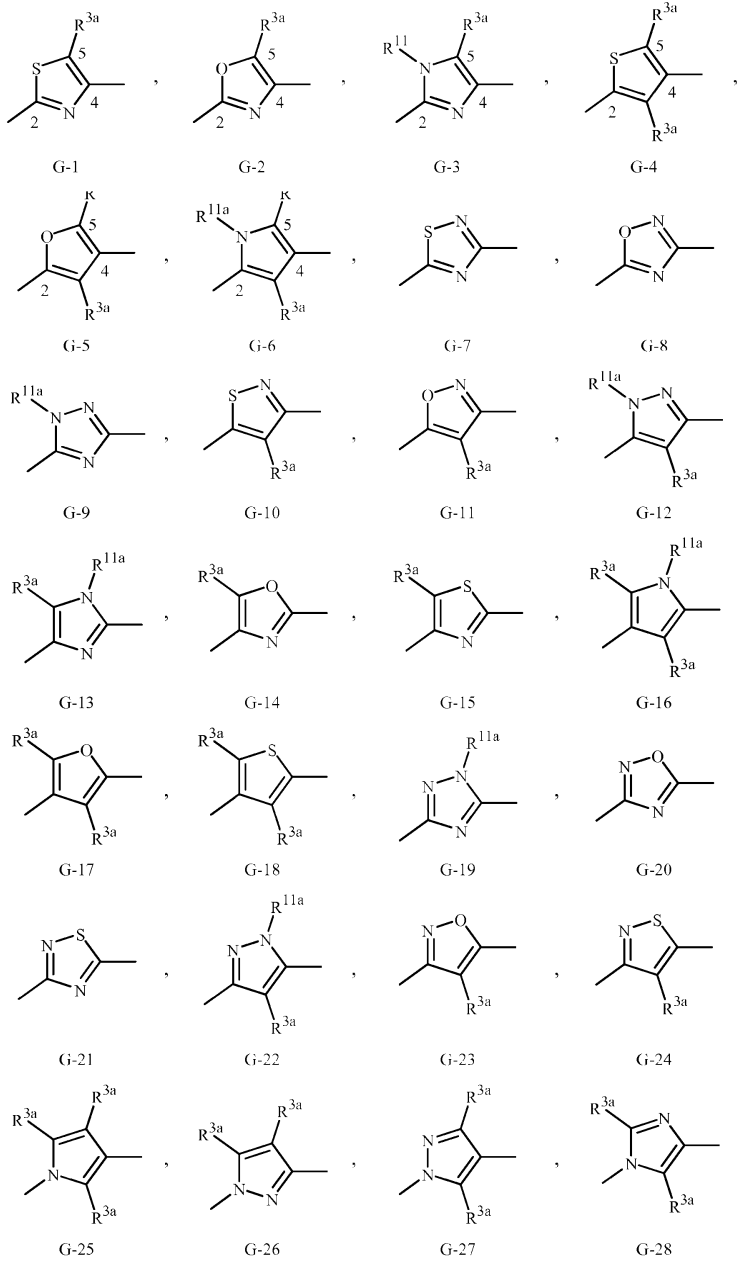


[0215]

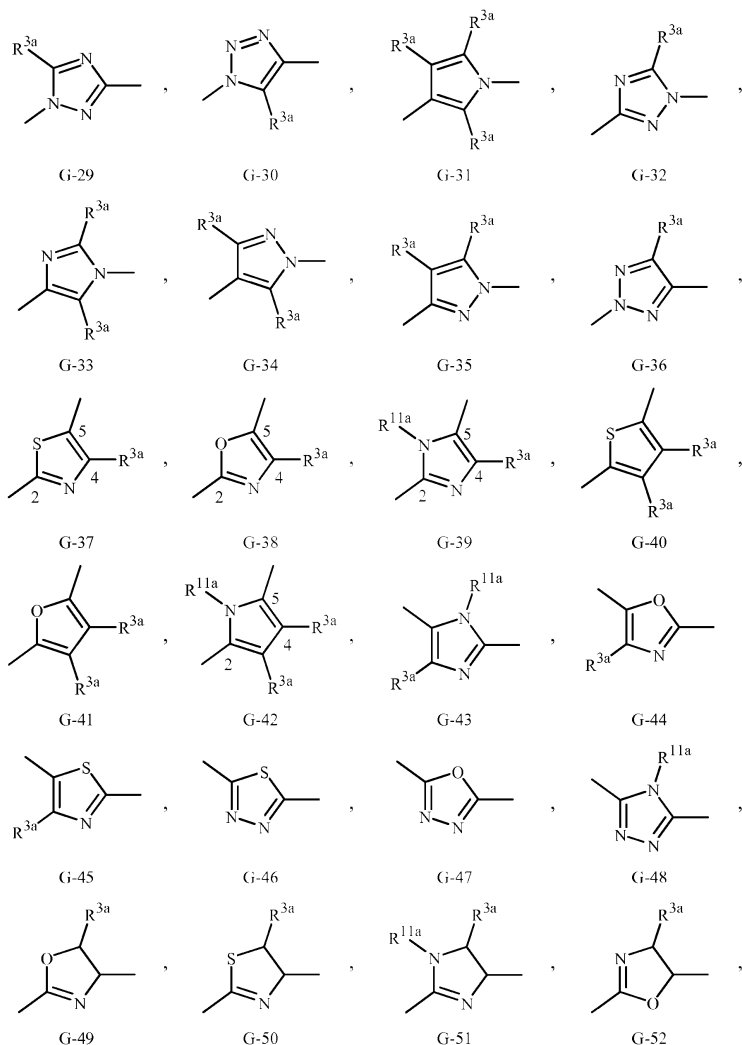
- [0216] (여기서, R^4 가 탄소 환 구성원에 결합되면, 상기 R^4 는 R^{4a} 중에서 선택되고, R^4 가 질소 환 구성원에 결합되면 (예를 들어, U-4, U-11, U-12, U-13, U-14, U-15, U-24, U-25, U-26, U-31 또는 U-35), 상기 R^4 는 R^{4b} 중에서 선택되며; k는 0, 1 또는 2이다).
- [0217] 실시 형태 74. k가 1 내지 2의 정수인 실시 형태 73의 화합물.
- [0218] 실시 형태 75. R^{1a} , R^{1b} , R^{1c} 및 R^{1d} 가 독립적으로 U-1 내지 U-5, U-8, U-11, U-13, U-15, U-20 내지 U-28, U-31, U-36 내지 U-39 및 U-50 중에서 선택되는 실시 형태 73의 화합물.
- [0219] 실시 형태 76. R^{1a} , R^{1b} , R^{1c} 및 R^{1d} 가 독립적으로 U-1 내지 U-3, U-5, U-8, U-11, U-13, U-20, U-22, U-23, U-25 내지 U-28, U-36 내지 U-39 및 U-50 중에서 선택되는 실시 형태 75의 화합물.
- [0220] 실시 형태 77. R^{1a} , R^{1b} , R^{1c} 및 R^{1d} 가 독립적으로 U-1 내지 U-3, U-11, U-13, U-20, U-22, U-23, U-36 내지 U-39 및 U-50 중에서 선택되는 실시 형태 76의 화합물.
- [0221] 실시 형태 78. R^{1a} , R^{1b} , R^{1c} 및 R^{1d} 가 독립적으로 U-1, U-20 및 U-50 중에서 선택되는 실시 형태 77의 화합물.
- [0222] 실시 형태 79. R^{1a} , R^{1b} , R^{1c} 및 R^{1d} 가 독립적으로 U-1인 실시 형태 78의 화합물.
- [0223] 실시 형태 80. R^{1a} , R^{1b} , R^{1c} 및 R^{1d} 가 독립적으로 U-20인 실시 형태 78의 화합물.
- [0224] 실시 형태 81. R^{1a} , R^{1b} , R^{1c} 및 R^{1d} 가 독립적으로 U-50인 실시 형태 78의 화합물.
- [0225] 실시 형태 82. k가 1이고, R^4 가 U-1의 3 위치 또는 5 위치에 연결되는 실시 형태 79의 화합물.
- [0226] 실시 형태 83. k가 2이고, 하나의 R^4 가 U-1의 3 위치에 연결되며, 다른 R^4 가 5 위치에 연결되는 실시 형태 79의 화합물.
- [0227] 실시 형태 84. k가 1이고, R^4 가 U-20의 3 위치 또는 5 위치에 연결되는 실시 형태 80의 화합물.
- [0228] 실시 형태 85. k가 2이고, 하나의 R^4 가 U-20의 3 위치에 연결되며, 다른 R^4 가 5 위치에 연결되는 실시 형태 80의 화합물.
- [0229] 실시 형태 86. k가 1이고, R^4 가 U-50의 2 위치 또는 3 위치에 연결되는 실시 형태 81의 화합물.
- [0230] 실시 형태 87. k가 2이고, 하나의 R^4 가 U-50의 2 위치에 연결되며, 다른 R^4 가 5 위치에 연결되는 실시 형태 81의 화합물.
- [0231] 실시 형태 88. G가 탄소 환 구성원 상에서 R^3 , 질소 환 구성원 상에서 R^{11} 중에서 선택되는 2개 이하의 치환기로 임의로 치환된 5원 복소환이고;
- [0232] 각 R^3 가 독립적으로 할로젠, C_1-C_3 알킬 또는 C_1-C_3 할로알킬이며;
- [0233] 각 R^{11} 이 독립적으로 C_1-C_3 알킬인 화학식 1의 화합물.
- [0234] 실시 형태 89. G가 증거 2의 G-1 내지 G-59 중에서 선택되는 실시 형태 88의 화합물.

[0235]

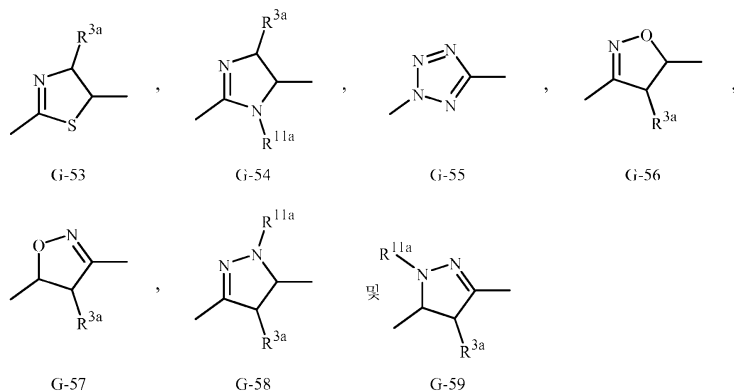
증거 2



[0236]



[0237]



[0238]

[0239]

(여기서, 좌측으로 돌출하는 결합은 화학식 1의 X에 결합되고, 우측으로 돌출하는 결합은 Z¹에 결합되며; 각 R^{3a}는 독립적으로 H 및 R³ 중에서 선택되고; R^{11a}는 H 및 R¹¹ 중에서 선택된다).

[0240]

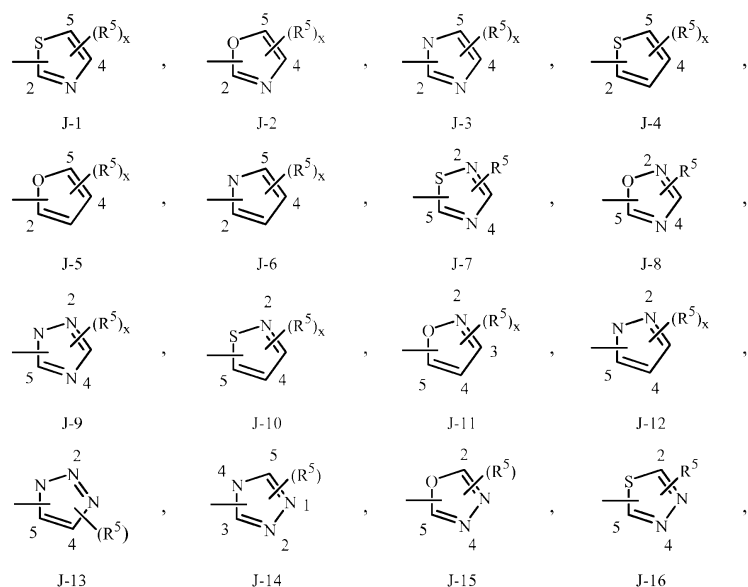
실시 형태 90. G가 G-1 내지 G-3, G-7, G-8, G-10, G-11, G-14, G-15, G-23, G-24, G-26 내지 G-28, G-30, G-36 내지 G-38 및 G-49 내지 G-55 중에서 선택되는 실시 형태 89의 화합물.

[0241]

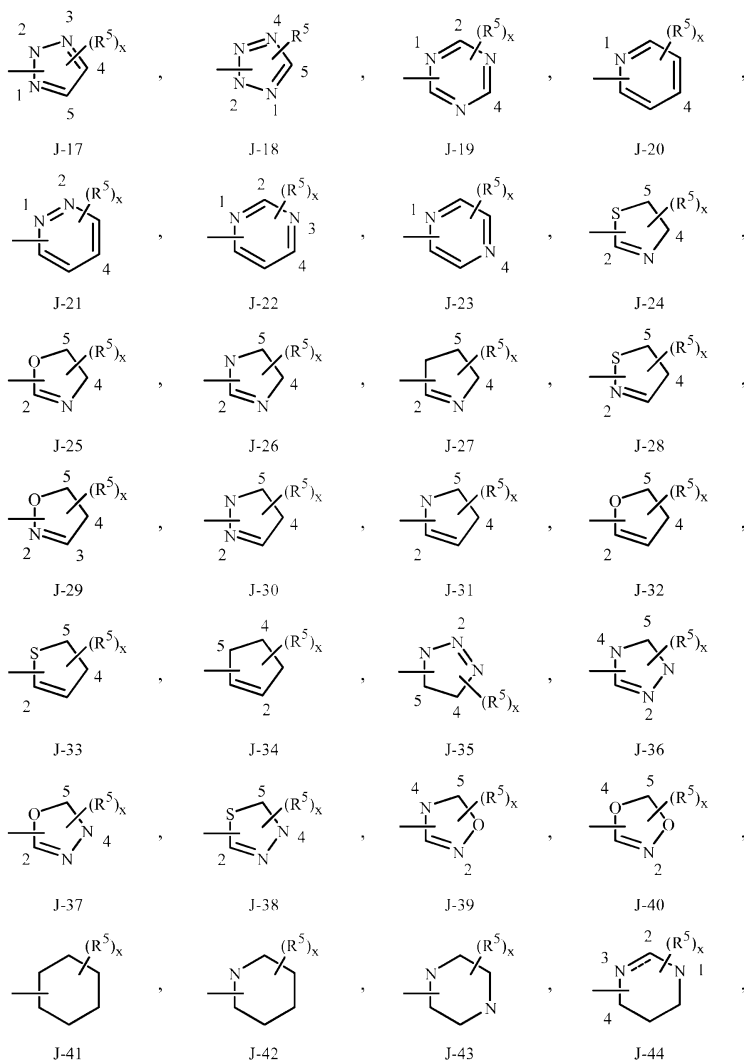
실시 형태 91. G가 G-1, G-2, G-7, G-8, G-14, G-15, G-23, G-24, G-26, G-27, G-36, G-37, G-38, G-49, G-50 및 G-55 중에서 선택되는 실시 형태 90의 화합물.

- [0242] 실시 형태 92. G가 G-1, G-2, G-15, G-26, G-27, G-36, G-37 및 G-38 중에서 선택되는 실시 형태 91의 화합물.
- [0243] 실시 형태 93. G가 G-1, G-2, G-15, G-26 및 G-36 중에서 선택되는 실시 형태 92의 화합물.
- [0244] 실시 형태 94. G가 G-1인 실시 형태 93의 화합물.
- [0245] 실시 형태 95. G가 G-2인 실시 형태 93의 화합물.
- [0246] 실시 형태 96. G가 G-15인 실시 형태 93의 화합물.
- [0247] 실시 형태 97. G가 G-26인 실시 형태 93의 화합물.
- [0248] 실시 형태 98. G가 G-36인 실시 형태 93의 화합물.
- [0249] 실시 형태 99. 각 R^3 가 독립적으로 할로젠, C_1-C_3 알킬 또는 C_1-C_3 할로알킬인 실시 형태 88 내지 98 중 어느 하나의 화합물.
- [0250] 실시 형태 100. 각 R^3 가 독립적으로 할로젠 또는 메틸인 실시 형태 99의 화합물.
- [0251] 실시 형태 101. 각 R^{3a} 가 H이고, R^{11a} 가 H 또는 메틸인 실시 형태 89 내지 100 중 어느 하나의 화합물.
- [0252] 실시 형태 102. G가 비치환된 화학식 1 또는 실시 형태 88 내지 98 중 어느 하나의 화합물.
- [0253] 실시 형태 103. J가 증거 3의 J-1 내지 J-82 중에서 선택되는 화학식 1의 화합물.

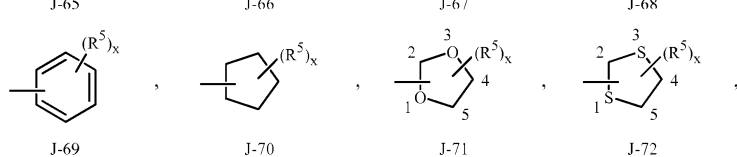
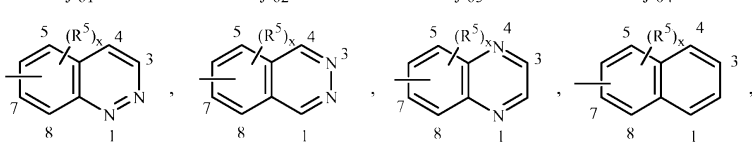
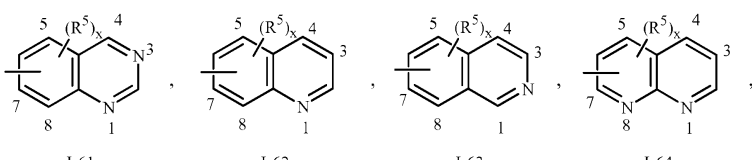
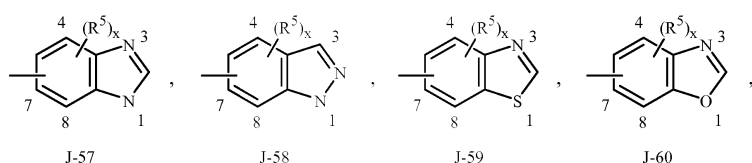
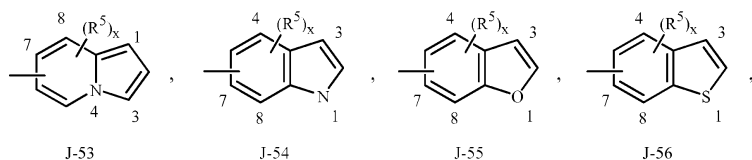
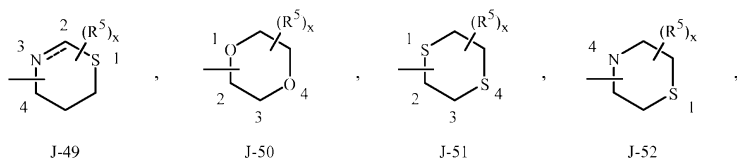
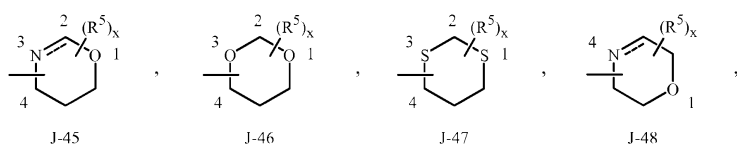
[0254] 증거 3



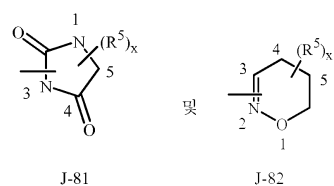
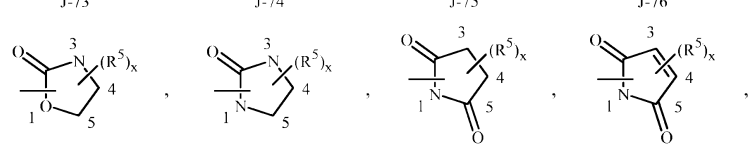
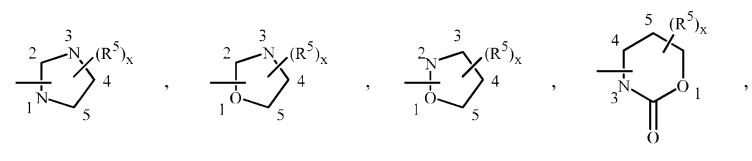
[0255]



[0256]



[0257]

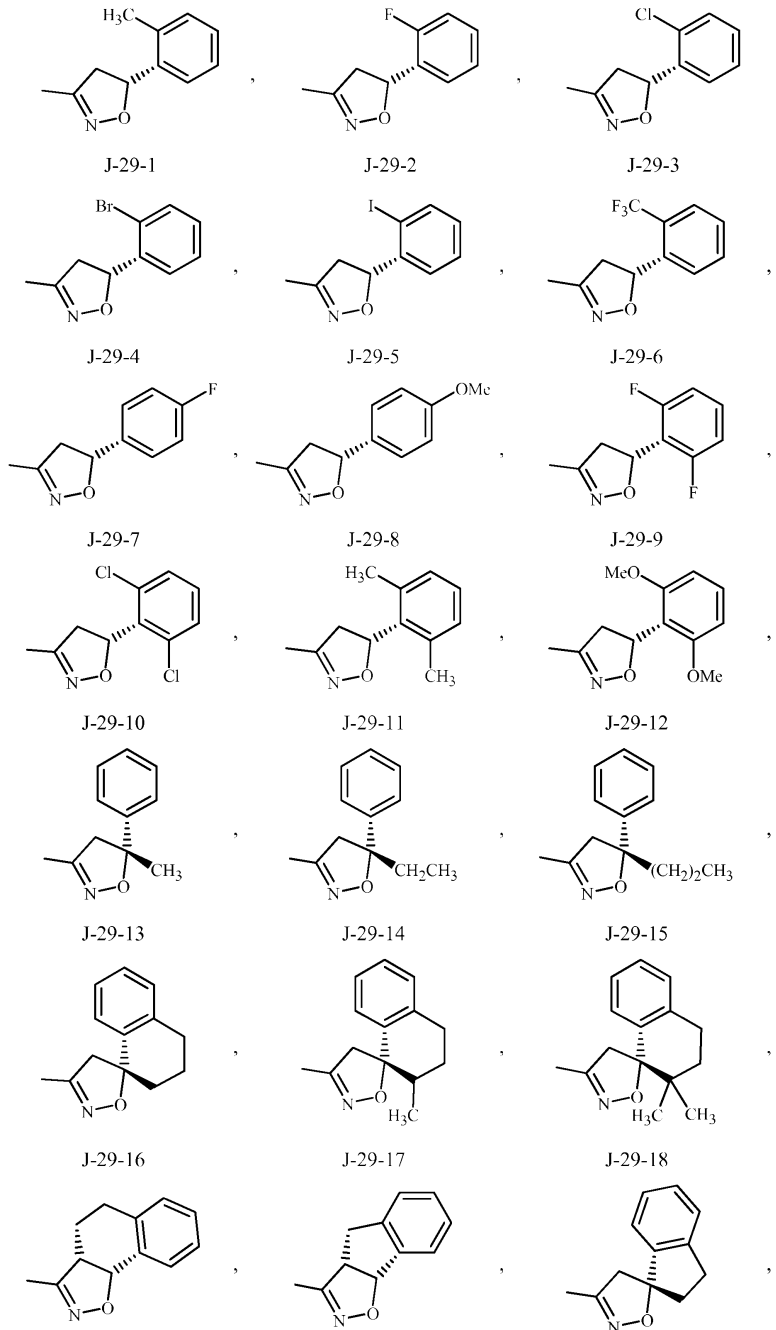


[0258]

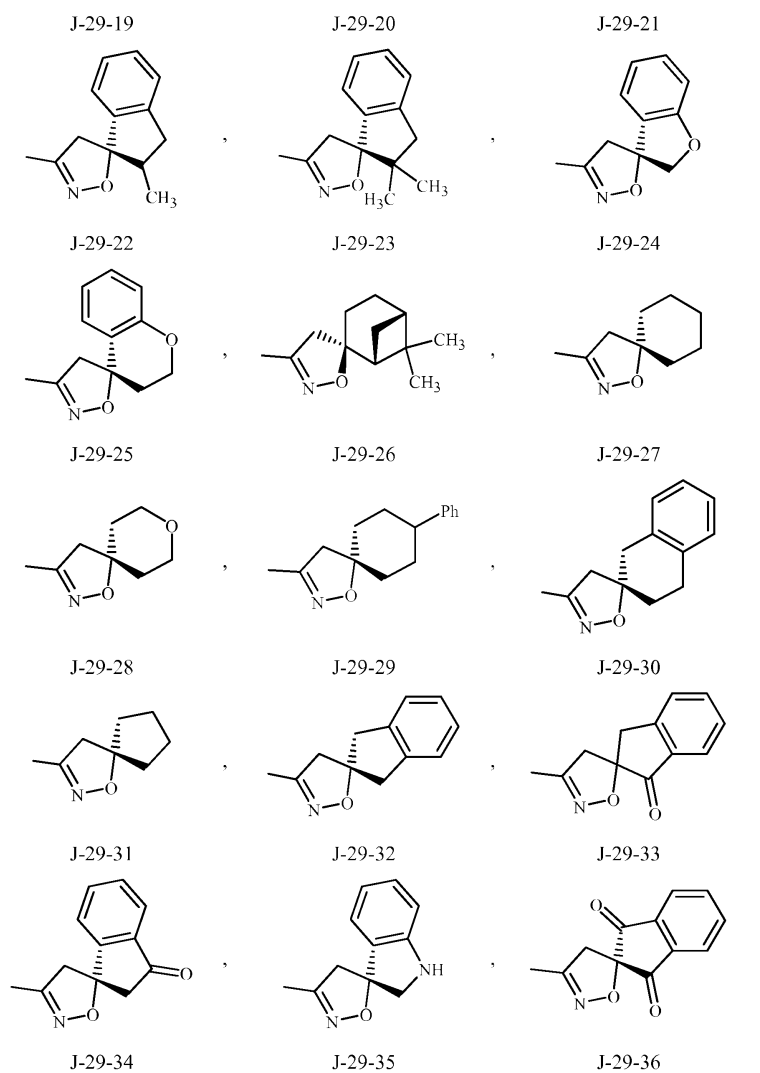
[0259] (여기서, 좌측으로 돌출되게 나타낸 결합은 화학식 1의 Z^1 및 J 환의 이용가능한 탄소 또는 질소 원자 환 구성 원에 결합되고; x는 0 내지 5의 정수이다).

[0260] 실시 형태 104. J가 증거 A의 J-29-1 내지 J-29-60 중에서 선택되는 환인 실시 형태 103의 화합물.

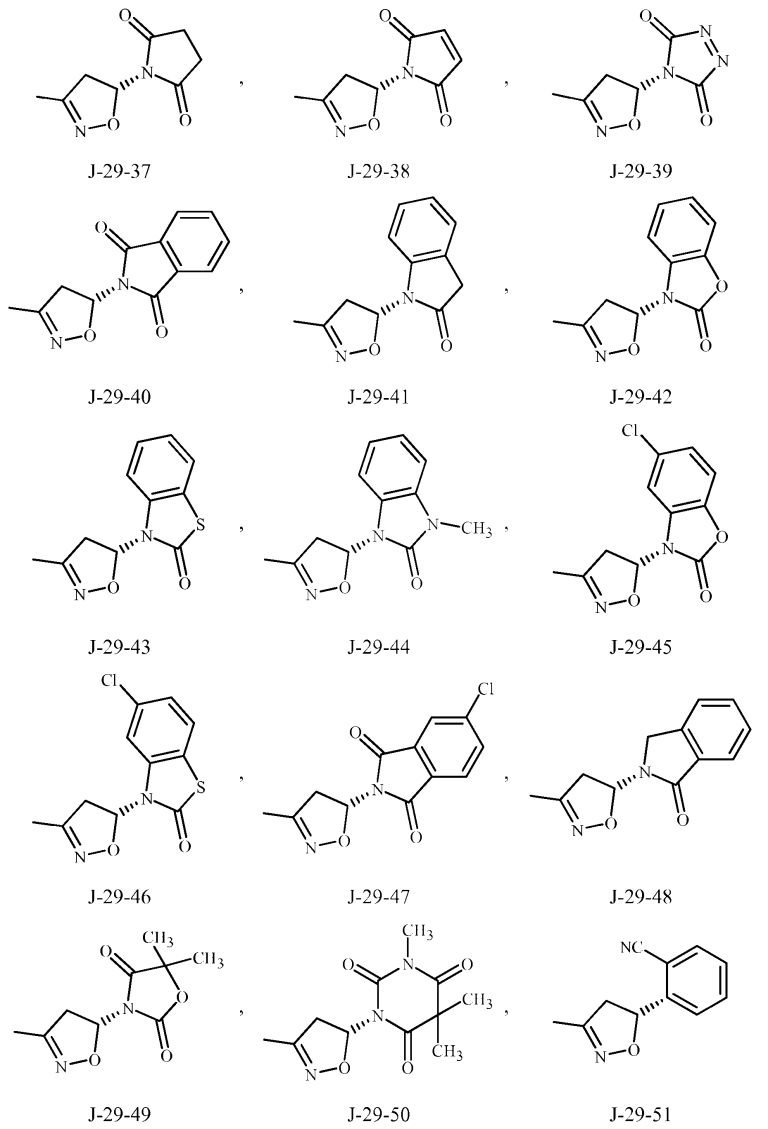
[0261] 증거 A



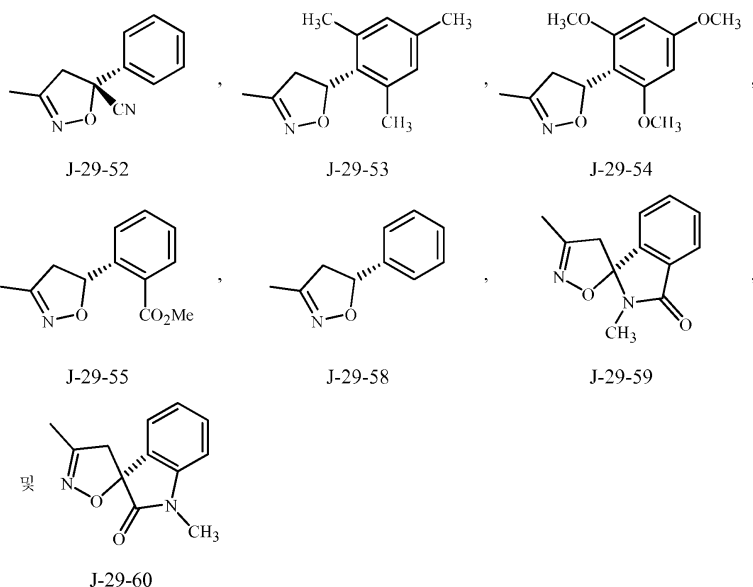
[0262]



[0263]



[0264]



[0265]

[0266]

실시 형태 105. J가 J-1, J-2, J-3, J-4, J-5, J-7, J-8, J-9, J-10, J-11, J-12, J-14, J-15, J-16, J-20, J-24, J-25, J-26, J-29, J-30, J-37, J-38, J-45 및 J-69 중에서 선택되는 실시 형태 103의 화합물.

[0267]

실시 형태 106. J가 J-4, J-5, J-8, J-11, J-15, J-16, J-20, J-29, J-30, J-37, J-38 및 J-69 중에서 선택되는 실시 형태 105의 화합물.

[0268]

실시 형태 107. J가 J-4, J-5, J-11, J-20, J-29, J-37, J-38 및 J-69 중에서 선택되는 실시 형태 106의 화합물.

[0269]

실시 형태 108. J가 J-11인 실시 형태 107의 화합물.

[0270]

실시 형태 109. J가 J-29인 실시 형태 107의 화합물.

[0271]

실시 형태 110. J가 J-69인 실시 형태 107의 화합물.

[0272]

실시 형태 111. x가 0 내지 3의 정수인 실시 형태 103 내지 110 중 어느 하나의 화합물.

[0273]

실시 형태 111a. x가 0 내지 2의 정수인 실시 형태 111 중 어느 하나의 화합물.

[0274]

실시 형태 112. x가 1 또는 2인 실시 형태 111a의 화합물.

[0275]

실시 형태 113. x가 1인 실시 형태 112의 화합물.

[0276]

실시 형태 114. J-11의 3 위치가 화학식 1의 Z^1 에 연결되고, J-11의 5 위치가 H 이외의 R^5 중에서 선택되는 치환기로 치환되는 실시 형태 108의 화합물.

[0277]

실시 형태 115. J-11의 3 위치가 화학식 1의 Z^1 에 연결되고, J-11의 5 위치가 $-Z^2Q$ 로 치환되는 실시 형태 108의 화합물.

[0278]

실시 형태 116. J-29의 3 위치가 화학식 1의 Z^1 에 연결되고, J-29의 5 위치가 H 이외의 R^5 중에서 선택되는 치환기로 치환되는 실시 형태 109의 화합물.

[0279]

실시 형태 117. J-29의 3 위치가 화학식 1의 Z^1 에 연결되고, J-29의 5 위치가 $-Z^2Q$ 로 치환되는 실시 형태 109의 화합물.

[0280]

실시 형태 118. 단독으로 취해진 경우 (즉, R^7 과 함께 취해지지 않음)의 각 R^5 가 독립적으로 H, 할로젠, 시아노, C_1-C_6 알킬, C_2-C_6 알케닐, C_2-C_6 알키닐, C_1-C_6 할로알킬, C_2-C_6 할로알케닐, C_2-C_6 할로알키닐, C_3-C_8 사이클로알킬, C_3-C_8 할로사이클로알킬, C_4-C_{10} 알킬사이클로알킬, C_4-C_{10} 사이클로알킬알킬, C_2-C_6 알콕시알킬, C_4-

C₁₀ 사이클로알콕시알킬, C₃-C₈ 알콕시알콕시알킬, C₂-C₆ 알킬티오알킬, C₂-C₆ 알콕시카르보닐, C₁-C₆ 알콕시, C₁-C₆ 할로알콕시, C₃-C₈ 사이클로알콕시, C₃-C₈ 할로사이클로알콕시, C₄-C₁₀ 사이클로알킬알콕시, C₂-C₆ 알케닐옥시, C₂-C₆ 할로알케닐옥시, C₂-C₆ 알키닐옥시, C₂-C₆ 할로알키닐옥시, C₂-C₆ 알콕시알콕시, C₂-C₆ 알킬카르보닐옥시, C₂-C₆ 할로알킬카르보닐옥시, C₄-C₈ 사이클로알킬카르보닐옥시, C₃-C₆ 알킬카르보닐알콕시, C₁-C₆ 알킬티오, C₁-C₆ 할로알킬티오, C₃-C₈ 사이클로알킬티오, C₃-C₁₀ 트라이알킬실릴, -NR²⁵R²⁶ 또는 -Z²Q인 화학식 1의 화합물.

[0281]

실시 형태 119. 단독으로 취해진 경우의 각 R⁵가 독립적으로 H, 할로젠, 시아노, C₁-C₆ 알킬, C₁-C₆ 할로알킬, C₃-C₈ 사이클로알킬, C₃-C₈ 할로사이클로알킬, C₂-C₆ 알콕시알킬, C₁-C₆ 알콕시, C₁-C₆ 할로알콕시, C₃-C₈ 사이클로알콕시, C₂-C₆ 알케닐옥시, C₂-C₆ 할로알케닐옥시, C₂-C₆ 알키닐옥시, C₂-C₆ 알콕시알콕시, C₂-C₆ 알킬카르보닐옥시, C₂-C₆ 할로알킬카르보닐옥시, C₁-C₆ 알킬티오, C₁-C₆ 할로알킬티오, C₃-C₁₀ 트라이알킬실릴, -NR²⁵R²⁶ 또는 -Z²Q인 실시 형태 118의 화합물.

[0282]

실시 형태 120. 단독으로 취해진 경우의 각 R⁵가 독립적으로 H, 할로젠, 시아노, C₁-C₆ 알킬, C₁-C₆ 할로알킬, C₁-C₆ 알콕시, C₁-C₆ 할로알콕시, -NR²⁵R²⁶ 또는 -Z²Q인 실시 형태 119의 화합물.

[0283]

실시 형태 120a. 단독으로 취해진 경우의 각 R⁵가 독립적으로 H, 할로젠, 시아노, C₁-C₆ 알킬, C₁-C₆ 할로알킬, C₁-C₆ 알콕시, C₁-C₆ 할로알콕시 또는 -Z²Q인 실시 형태 120의 화합물.

[0284]

실시 형태 120b. 단독으로 취해진 경우의 각 R⁵가 독립적으로 H, 시아노, C₁-C₆ 알킬, C₁-C₆ 알콕시 또는 -Z²Q인 실시 형태 120a의 화합물.

[0285]

실시 형태 121. 단독으로 취해진 경우의 각 R⁵가 독립적으로 -Z²Q인 실시 형태 120b의 화합물.

[0286]

실시 형태 121a. 각 R⁵가 단독으로 취해지는 화학식 1 또는 실시 형태 1 내지 121 중 어느 하나의 화합물.

[0287]

실시 형태 122. R⁵의 일례가 -Z²Q이고, R⁵의 다른 예가 H, 할로젠, 시아노, C₁-C₄ 알킬, C₁-C₄ 할로알킬 및 C₁-C₄ 알킬카르보닐 중에서 독립적으로 선택되는 화학식 1의 화합물.

[0288]

실시 형태 123. R⁵의 일례가 -Z²Q이고, R⁵의 다른 예가 H, 시아노 및 C₁-C₃ 알킬 중에서 독립적으로 선택되는 실시 형태 122의 화합물.

[0289]

실시 형태 124. R⁵의 단 하나의 예가 -Z²Q인 실시 형태 123의 화합물.

[0290]

실시 형태 125. 각 R²⁶가 독립적으로 C₁-C₃ 알킬 또는 -Z⁴Q인 화학식 1의 화합물.

[0291]

실시 형태 126. 각 Z⁴가 독립적으로 C(=O) 또는 S(O)₂인 화학식 1 또는 실시 형태 125의 화합물.

[0292]

실시 형태 127. 각 Z⁴가 C(=O)인 실시 형태 126의 화합물.

[0293]

실시 형태 128. 각 Z²가 독립적으로 직접 결합, O, C(=O), S(O)₂, CHR²⁰ 또는 NR²¹인 화학식 1의 화합물.

[0294]

실시 형태 128a. 각 Z²가 독립적으로 직접 결합 또는 NR²¹인 실시 형태 128의 화합물.

[0295]

실시 형태 128b. 각 Z²가 직접 결합인 실시 형태 128a의 화합물.

[0296]

실시 형태 129. 각 Q가 독립적으로 각각, 탄소 원자 또는 질소 원자 환 구성원 상에서 R^{7a} 중에서 독립적으로 선택되는 1개 이하의 치환기로 임의로 치환되며, 탄소 원자 환 구성원 상에서 R⁷, 질소 원자 환 구성원 상에서

R^{12} 중에서 독립적으로 선택되는 5개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 페닐, 벤질, 나프탈레닐, 5원 내지 6원 헤테로 방향족 환 또는 8원 내지 11원 헤테로 방향족 이환계이거나;

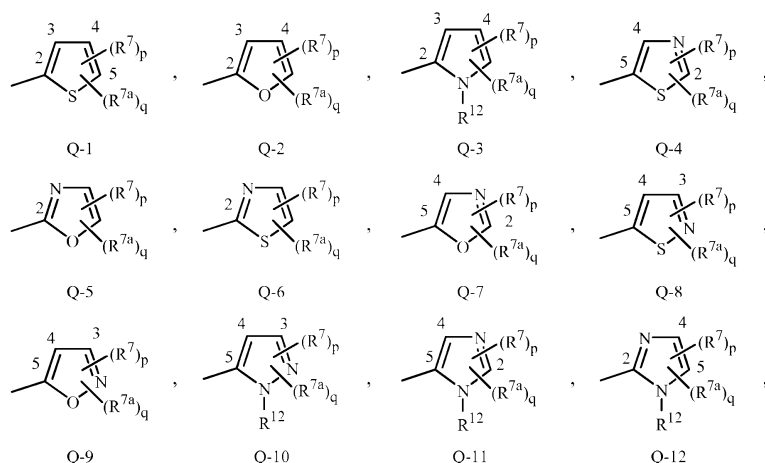
[0297] 각각, $C(=O)$, $C(=S)$, $S(=O)_2(=NR^{23})_f$ 및 $SiR^{17}R^{18}$ 으로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 환 구성원을 임의로 포함하고, 탄소 원자 또는 질소 원자 환 구성원 상에서 R^{7a} 중에서 독립적으로 선택되는 1개 이하의 치환기로 임의로 치환되며, 탄소 원자 환 구성원 상에서 R^7 , 질소 원자 환 구성원 상에서 R^{12} 중에서 독립적으로 선택되는 5개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 3원 내지 7원 비방향족 탄소환, 5원, 6원 또는 7원 비방향족 복소환 또는 8원 내지 11원 비방향족 이환계인 화학식 1의 화합물.

[0298] 실시 형태 130. 각 Q가 독립적으로 각각, 탄소 원자 환 구성원 상에서 R^7 , 질소 원자 환 구성원 상에서 R^{12} 중에서 독립적으로 선택되는 5개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 페닐, 벤질, 나프탈레닐, 5원 내지 6원 헤테로 방향족 환 또는 8원 내지 11원 헤테로 방향족 이환계이거나;

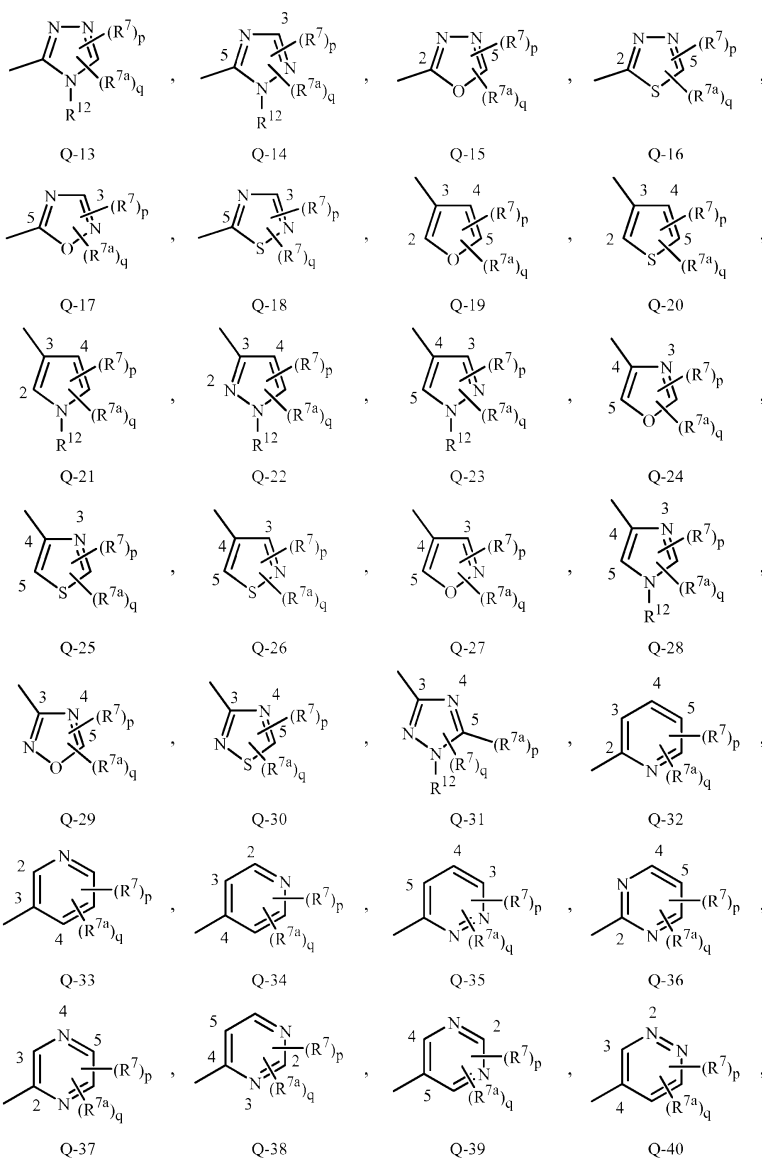
[0299] 각각, $C(=O)$, $C(=S)$, $S(=O)_2(=NR^{23})_f$ 및 $SiR^{17}R^{18}$ 으로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 환 구성원을 임의로 포함하고, 탄소 원자 환 구성원 상에서 R^7 , 질소 원자 환 구성원 상에서 R^{12} 중에서 독립적으로 선택되는 5개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 3원 내지 7원 비방향족 탄소환, 5원, 6원 또는 7원 비방향족 복소환 또는 8원 내지 11원 비방향족 이환계인 실시 형태 129의 화합물.

[0300] 실시 형태 131. 각 Q가 증거 4의 Q-1 내지 Q-106 중에서 독립적으로 선택되는 화학식 1 또는 실시 형태 129 또는 130의 화합물.

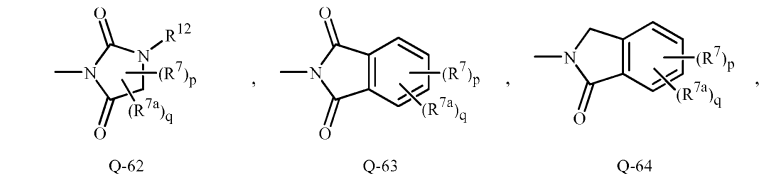
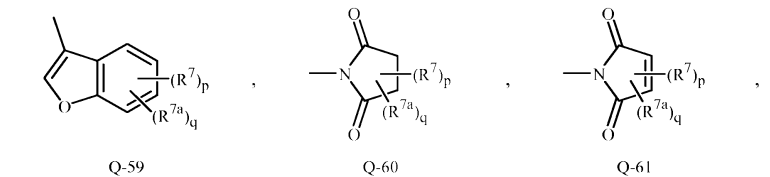
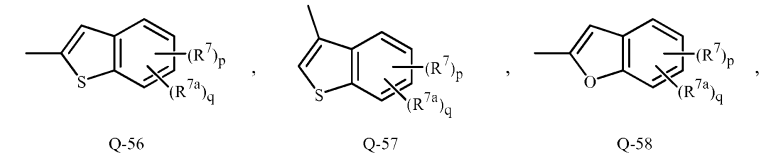
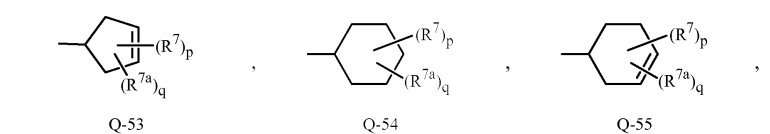
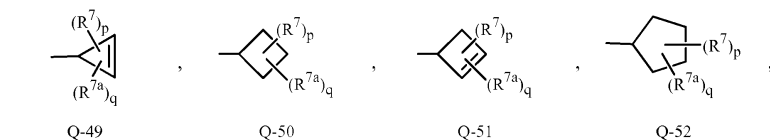
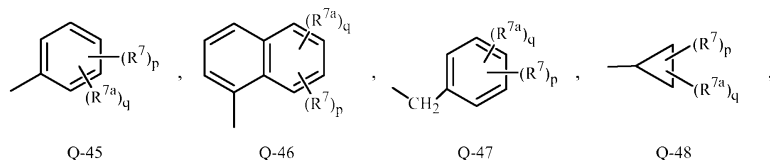
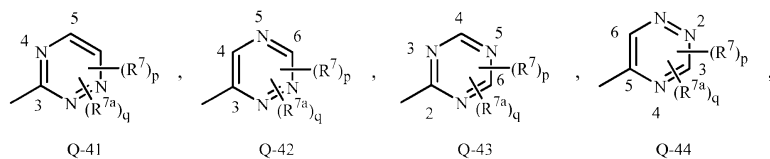
[0301] 증거 4



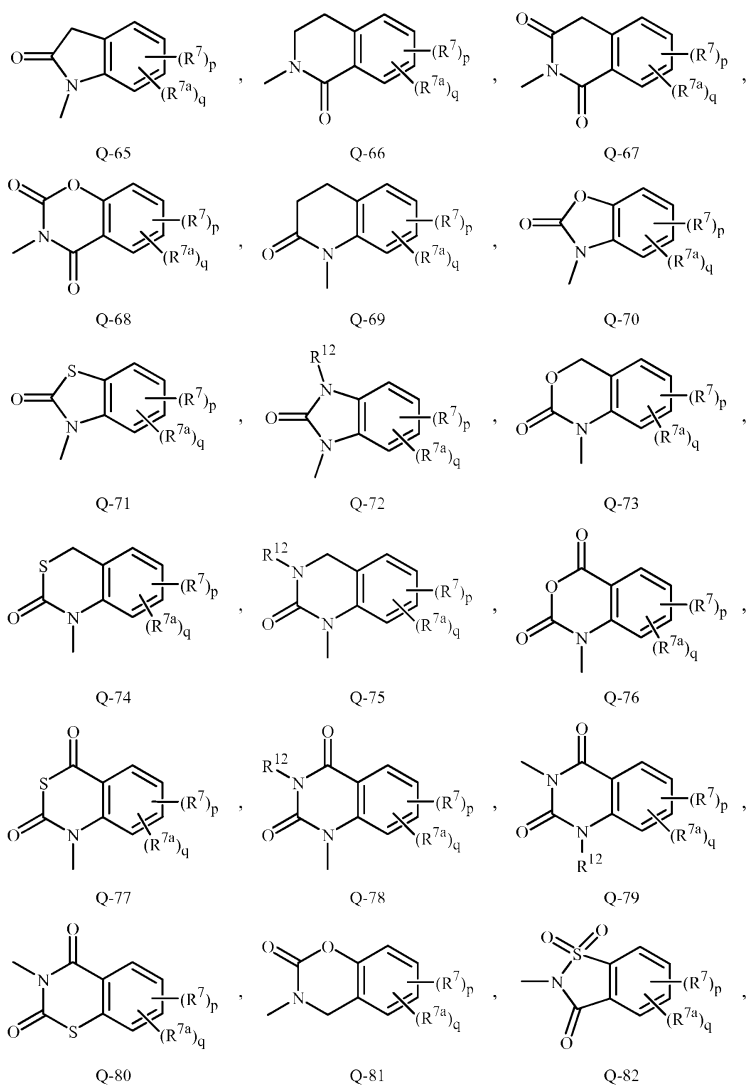
[0302]



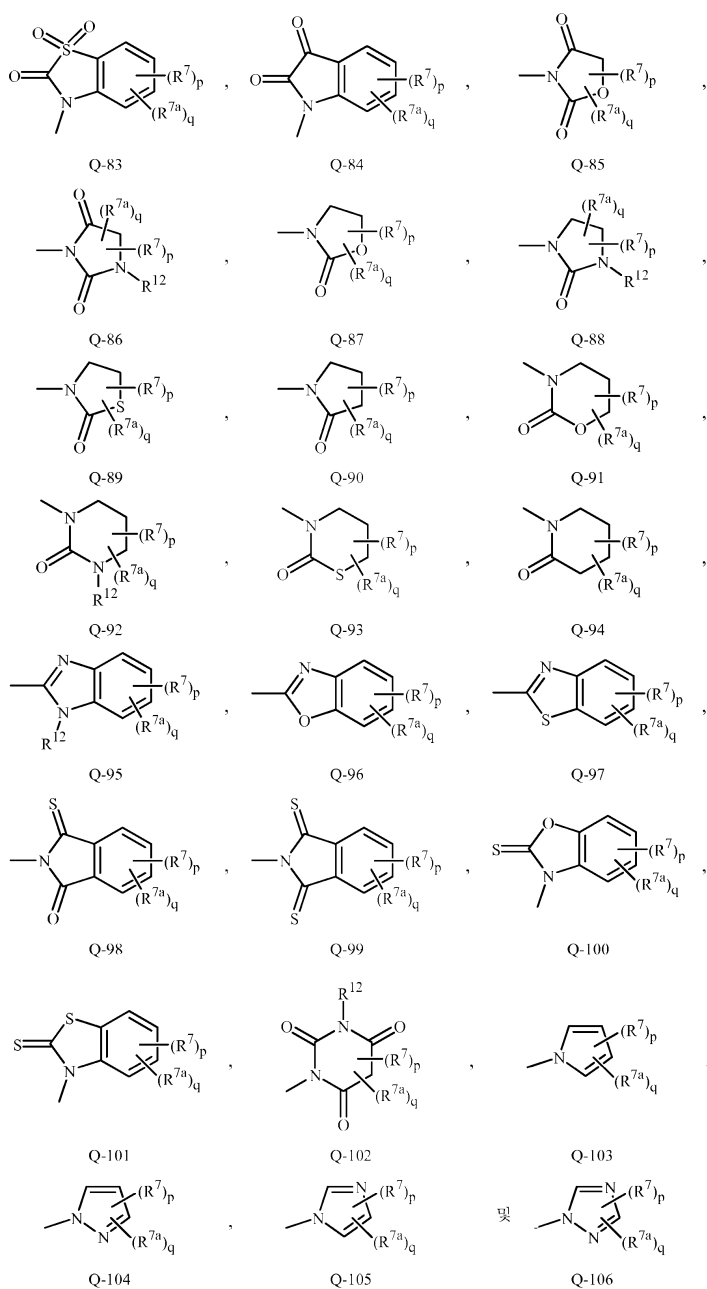
[0303]



[0304]



[0305]



[0306]

[0307] (여기서, p는 0 내지 5의 정수이고, q는 0 내지 2의 정수이다).

[0308] 실시 형태 132. p가 0 내지 3의 정수인 실시 형태 131의 화합물.

[0309] 실시 형태 132a. q가 0 내지 1의 정수인 실시 형태 131의 화합물.

[0310] 실시 형태 133. 각 Q가 Q-1, Q-20, Q-32 내지 Q-34, Q-45 내지 Q-47, Q-60 내지 Q-73, Q-76 내지 Q-79, Q-84 내지 Q-94 및 Q-98 내지 Q-106 중에서 독립적으로 선택되는 실시 형태 131의 화합물.

[0311] 실시 형태 134. 각 Q가 Q-1, Q-45, Q-63, Q-64, Q-65, Q-68, Q-69, Q-70, Q-71, Q-72, Q-73, Q-76, Q-78, Q-79, Q-84, Q-85, Q-98, Q-99, Q-100 및 Q-101 내지 Q-106 중에서 독립적으로 선택되는 실시 형태 133의 화합물.

[0312] 실시 형태 135. 각 Q가 Q-45, Q-63, Q-64, Q-65, Q-68, Q-69, Q-70, Q-71, Q-72, Q-84 및 Q-85 중에서 독립적으로 선택되는 실시 형태 134의 화합물.

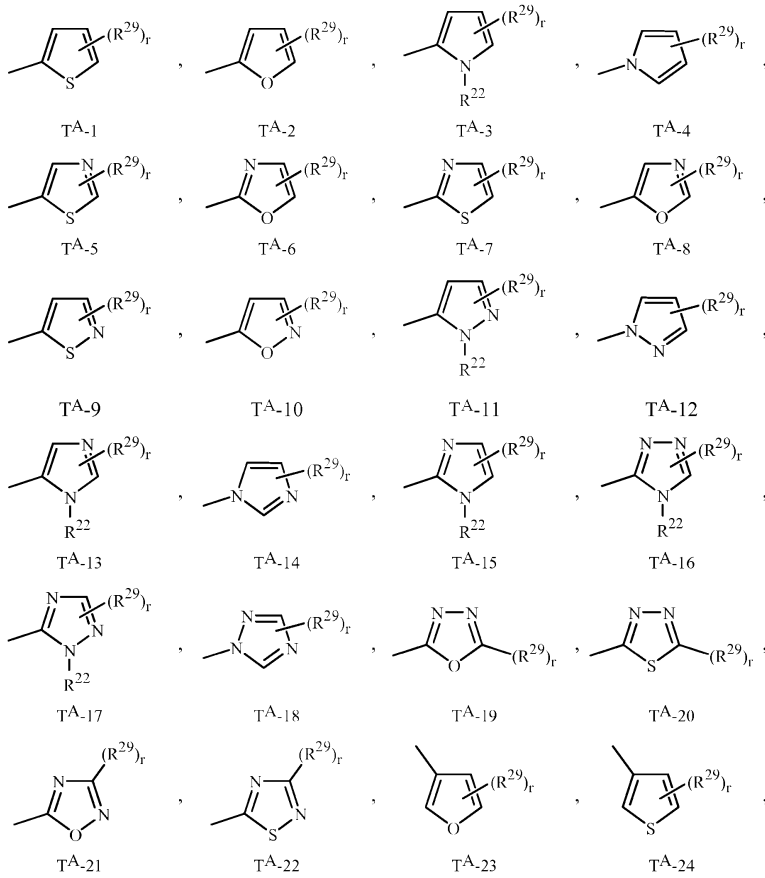
- [0313] 실시 형태 136. 각 Q가 Q-45, Q-63, Q-65, Q-70, Q-71, Q-72, Q-84 및 Q-85 중에서 독립적으로 선택되는 실시 형태 135의 화합물.
- [0314] 실시 형태 137. 각 Q가 Q-45, Q-63, Q-65, Q-70, Q-71, Q-72 및 Q-84 중에서 독립적으로 선택되는 실시 형태 136의 화합물.
- [0315] 실시 형태 138. 단독으로 취해진 경우 (즉, R^5 와 함께 취해지지 않음)의 각 R^7 이 독립적으로 할로젠, 시아노, 하이드록시, 아미노, 니트로, C_1-C_3 알킬, C_1-C_3 할로알킬, C_1-C_2 알콕시 또는 C_1-C_2 할로알콕시인 화학식 1 또는 실시 형태 129 내지 137 중 어느 하나의 화합물.
- [0316] 실시 형태 138a. 단독으로 취해진 경우의 각 R^7 이 독립적으로 할로젠, 시아노, 하이드록시, C_1-C_3 알킬, C_1-C_3 할로알킬, C_1-C_2 C_1-C_2 알콕시 또는 C_1-C_2 할로알콕시인 실시 형태 138의 화합물.
- [0317] 실시 형태 138b. 단독으로 취해진 경우의 각 R^7 이 독립적으로 F, Cl, Br, 시아노, 하이드록시, 메틸 또는 메톡시인 실시 형태 138a의 화합물.
- [0318] 실시 형태 138c. 각 R^7 이 단독으로 취해지는 화학식 1 또는 실시 형태 1 내지 138b 중 어느 하나의 화합물.
- [0319] 실시 형태 139. R^5 및 R^7 이 R^5 및 R^7 을 연결하는 원자와 함께, 탄소 원자 및 임의로 1개 이하의 O, 1개 이하의 S 및 1개 이하의 N 중에서 선택되는 3개 이하의 헤테로 원자, 및 $C(=O)$, $C(=S)$, $S(=O)_s(=NR^{23})_f$ 및 $SiR^{17}R^{18}$ 중에서 선택되는 2개 이하의 환 구성원 중에서 선택되는 환 구성원을 포함하는 임의로 치환된 5원 내지 7원 환을 형성하는 화학식 1의 화합물.
- [0320] 실시 형태 140. R^5 및 R^7 이 R^5 및 R^7 을 연결하는 원자와 함께, 탄소 원자 및 임의로 1개 이하의 O, 1개 이하의 S 및 1개 이하의 N 중에서 선택되는 3개 이하의 헤테로 원자, 및 $C(=O)$, $C(=S)$, $S(=O)_s(=NR^{23})_f$ 및 $SiR^{17}R^{18}$ 중에서 선택되는 2개 이하의 환 구성원 중에서 선택되는 환 구성원을 포함하고, R^8 중에서 선택되는 치환기로 임의로 치환되는 임의로 치환된 5원 내지 7원 환을 형성하며;
- [0321] 각 R^8 이 독립적으로 할로젠, 시아노, 하이드록시, 아미노, 니트로, C_1-C_6 알킬, C_2-C_6 알케닐, C_2-C_6 알키닐, C_3-C_6 사이클로알킬, C_4-C_{10} 사이클로알킬알킬, C_4-C_{10} 알킬사이클로알킬, C_5-C_{10} 알킬사이클로알킬알킬, C_1-C_6 할로알킬, C_2-C_6 할로알케닐, C_2-C_6 할로알키닐, C_3-C_6 할로사이클로알킬, C_1-C_4 알콕시, C_1-C_4 할로알콕시, C_1-C_4 알킬티오, C_1-C_4 알킬설퍼닐, C_1-C_4 알킬설폰, C_1-C_4 할로알킬티오, C_1-C_4 할로알킬설퍼닐, C_1-C_4 할로알킬설폰, C_1-C_4 알킬아미노, C_2-C_8 다이알킬아미노, C_3-C_6 사이클로알킬아미노, C_2-C_4 알콕시알킬, C_1-C_4 하이드록시알킬, C_2-C_4 알킬카르보닐, C_2-C_6 알콕시카르보닐, C_2-C_6 알킬카르보닐옥시, C_2-C_6 알킬카르보닐티오, C_2-C_6 알킬아미노카르보닐, C_3-C_8 다이알킬아미노카르보닐 또는 C_3-C_6 트라이알킬실릴인 실시 형태 139의 화합물.
- [0322] 실시 형태 141. 환이 R^5 및 R^7 을 연결하는 원자 이외의 환 구성원 상에서 R^8 중에서 선택되는 4개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 실시 형태 140의 화합물.
- [0323] 실시 형태 142. R^5 및 R^7 을 연결하는 원자 이외의 환 구성원 상에서 R^8 중에서 선택되는 2개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 실시 형태 141의 화합물.
- [0324] 실시 형태 143. 각 R^8 이 독립적으로 C_1-C_3 알킬인 실시 형태 140 내지 142 중 어느 하나의 화합물.
- [0325] 실시 형태 144. 각 R^{7a} 이 독립적으로 $-Z^3T^A$ 인 화학식 1의 화합물.
- [0326] 실시 형태 145. 각 T^A 가 독립적으로, 각각 탄소 원자 환 구성원 상에서 R^{29} 중에서 독립적으로 선택되는 3개 이하의 치환기로 임의로 치환되고, 질소 원자 환 구성원 상에서 R^{22} 중에서 독립적으로 선택되는 1개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 페닐, 페닐에티닐 또는 5원 내지 6원 헤테로 방향족 환인 화학식 1 또는 실시 형태 144의

화합물.

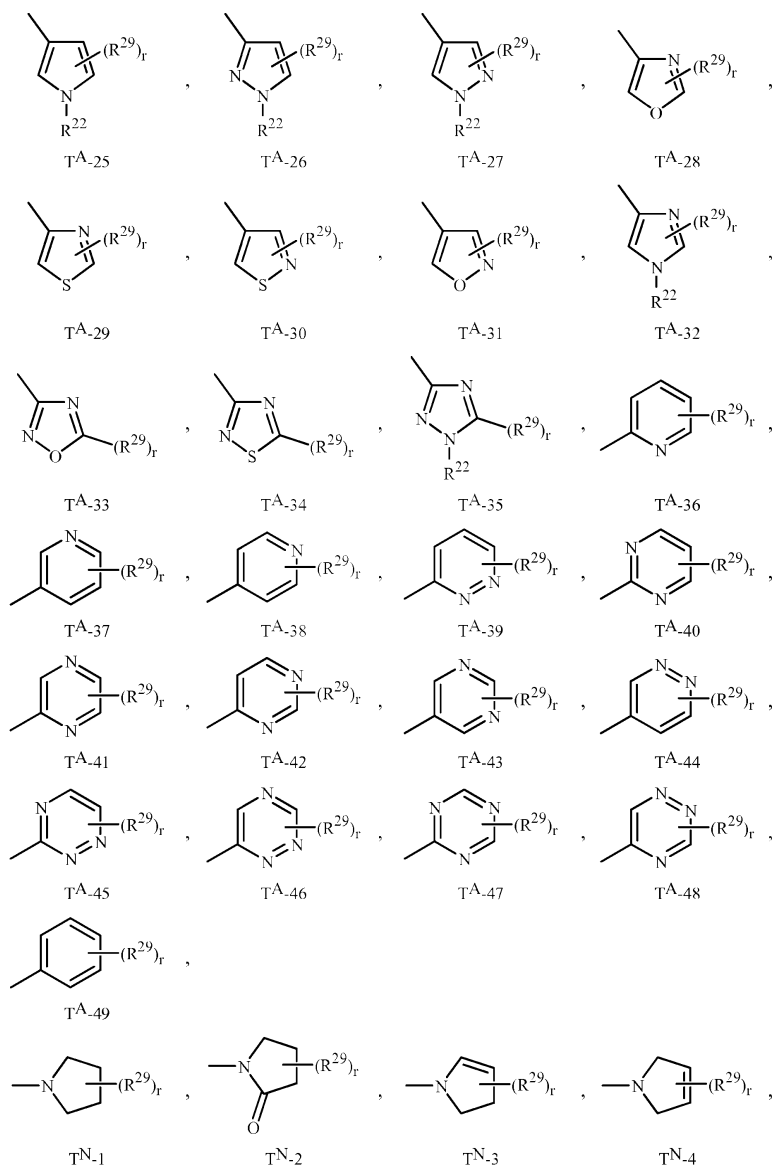
- [0327] 실시 형태 146. 각 T^A 가 독립적으로, 각각 탄소 원자 환 구성원 상에서 R^{29} 중에서 독립적으로 선택되는 2개 이하의 치환기로 임의로 치환되고, 질소 원자 환 구성원 상에서 R^{22} 중에서 독립적으로 선택되는 1개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 페닐 또는 5원 내지 6원 헤테로 방향족 환인 실시 형태 145의 화합물.
- [0328] 실시 형태 147. 각 T^A 가 페닐인 실시 형태 146의 화합물.
- [0329] 실시 형태 148. 각 T^A 가 독립적으로 5원 또는 6원 헤테로 방향족 환인 실시 형태 146의 화합물.
- [0330] 실시 형태 149. 각 R^{7a} 가 독립적으로 $-Z^3T^N$ 인 화학식 1의 화합물.
- [0331] 실시 형태 150. R^{7a} 이 독립적으로 $-Z^3T^P$ 인 화학식 1의 화합물.
- [0332] 실시 형태 151. 각 Z^3 가 독립적으로 직접 결합, O, C(=O), C(=S), S(O)_m, CHR^{20} , $CHR^{20}-CHR^{20}$, $CR^{24}=CR^{27}$ 또는 $OCHR^{20}$ 인 화학식 1 또는 실시 형태 144 내지 150 중 어느 하나의 화합물.
- [0333] 실시 형태 152. 각 Z^3 가 독립적으로 직접 결합, O, S(O)_m, CHR^{20} , $CHR^{20}-CHR^{20}$, $CR^{24}=CR^{27}$ 또는 $OCHR^{20}$ 인 실시 형태 151의 화합물.
- [0334] 실시 형태 153. 각 Z^3 가 독립적으로 직접 결합, O, S(O)_m, CHR^{20} , $CHR^{20}-CHR^{20}$ 또는 $CR^{24}=CR^{27}$ 인 실시 형태 152의 화합물.
- [0335] 실시 형태 154. 각 Z^3 가 독립적으로 직접 결합, O, CHR^{20} 또는 $CHR^{20}-CHR^{20}$ 인 실시 형태 153의 화합물.
- [0336] 실시 형태 155. 각 Z^3 가 독립적으로 직접 결합 또는 O인 실시 형태 154의 화합물.
- [0337] 실시 형태 156. 각 Z^3 가 독립적으로 직접 결합인 실시 형태 155의 화합물.
- [0338] 실시 형태 157. 각 Z^3 가 독립적으로 O인 실시 형태 155의 화합물.
- [0339] 실시 형태 158. 각 T^A 가 증거 5의 T^A-1 내지 T^A-49 중에서 독립적으로 선택되고, 각 T^N 이 T^N-1 내지 T^N-32 중에서 독립적으로 선택되며, 각 T^P 가 T^P-1 내지 T^P-35 중에서 독립적으로 선택되는 화학식 1의 화합물.

[0340]

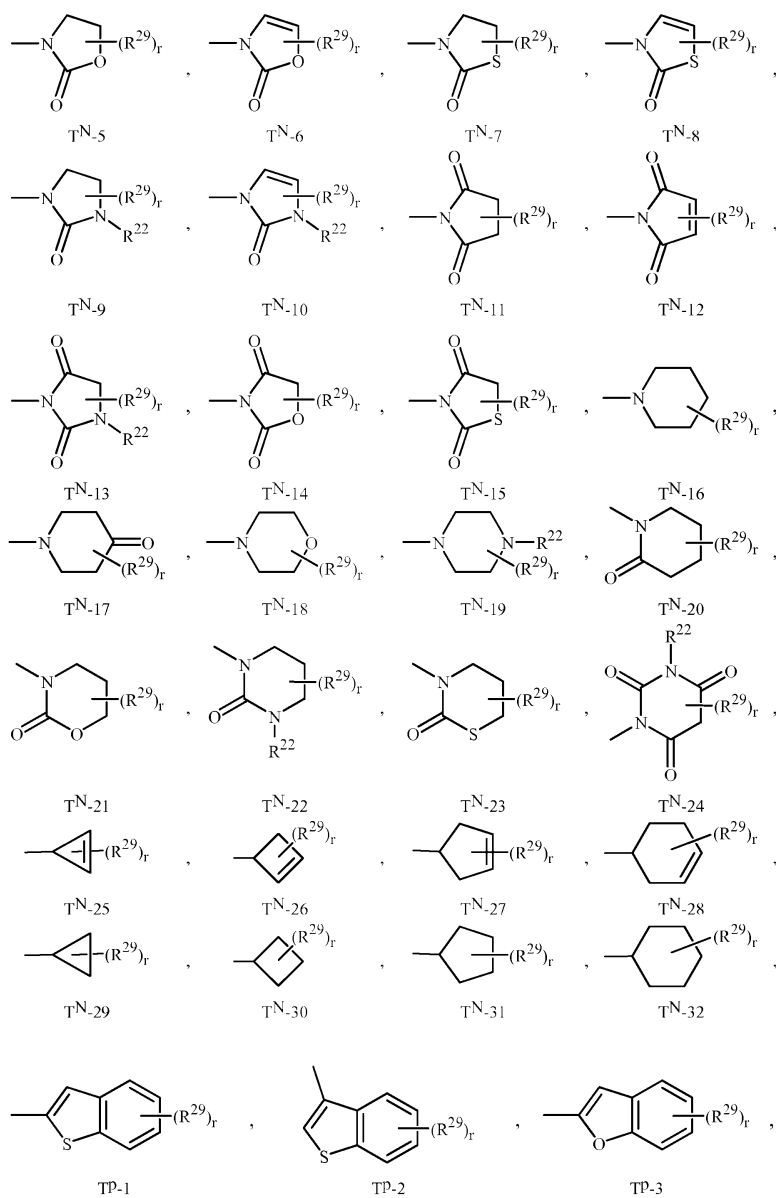
증거 5

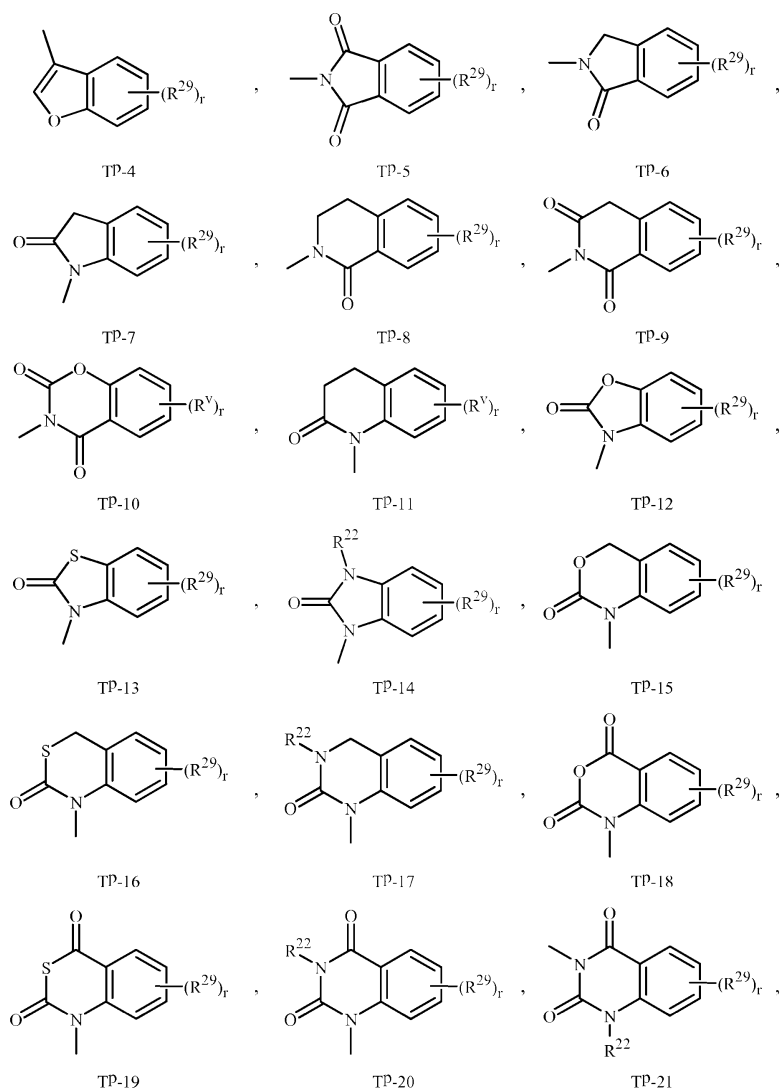


[0341]

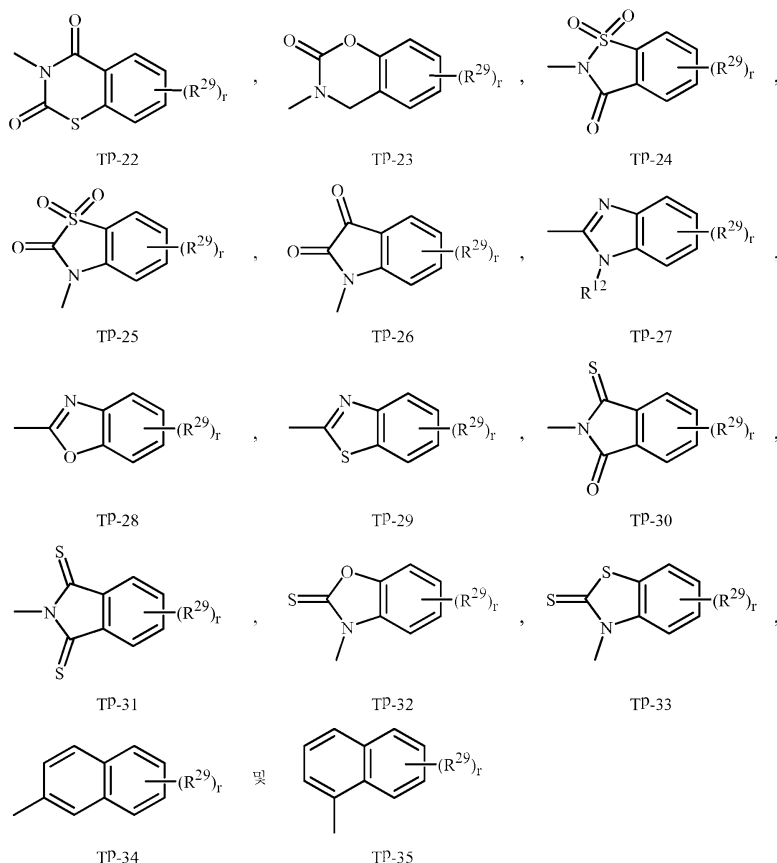


[0342]





[0344]



[0345]

[0346] (여기서, 좌측으로 돌출되게 나타난 결합은 화학식 1의 Z³에 결합되고; R은 0, 1, 2, 3, 4 또는 5이다).

[0347] 실시 형태 159. r이 0, 1, 2 또는 3인 실시 형태 158의 화합물.

[0348] 실시 형태 160. 각 T^A가 T^A-1 내지 T^A-18, T^A-23 내지 T^A-38 및 T^A-49 중에서 독립적으로 선택되거나, T^N이 T^N-1, T^N-2, T^N-5, T^N-6, T^N-9 내지 T^N-16 및 T^N-29 중에서 선택되거나, T^P가 T^P-1 내지 T^P-6, T^P-34 및 T^P-35 중에서 선택되는 실시 형태 158의 화합물.

[0349] 실시 형태 161. 각 T^A가 독립적으로 T^A-1 내지 T^A-18, T^A-23 내지 T^A-38 및 T^A-49 중에서 선택되거나, T^N이 T^N-1, T^N-2, T^N-5, T^N-6, T^N-9 내지 T^N-16 및 T^N-29 중에서 선택되는 실시 형태 160의 화합물.

[0350] 실시 형태 162. 각 T^A가 T^A-18 및 T^A-49 중에서 독립적으로 선택되는 실시 형태 161의 화합물.

[0351] 실시 형태 163. 각 T^A가 독립적으로 T^A-18인 실시 형태 162의 화합물.

[0352] 실시 형태 164. T^A가 T^A-49인 실시 형태 162의 화합물.

[0353] 실시 형태 165. 각 R²⁹이 독립적으로 H, 할로젠, 시아노, 하이드록시, -C(=O)OH, -C(=O)NH₂, -SO₂NH₂, -SH, C₁-C₆ 알킬, C₂-C₆ 알케닐, C₂-C₆ 알키닐, C₁-C₆ 할로알킬, C₂-C₈ 알킬카르보닐, C₂-C₈ 알콕시카르보닐, C₄-C₁₀ 사이클로알콕시카르보닐, C₅-C₁₂ 사이클로알킬알콕시카르보닐, C₂-C₈ 알킬아미노카르보닐, C₃-C₁₀ 다이알킬아미노카르보닐, C₂-C₆ 할로알케닐, C₂-C₆ 할로알키닐, C₃-C₈ 사이클로알킬, C₃-C₈ 할로사이클로알킬, C₄-C₁₀ 알킬사이클로알킬, C₄-C₁₀ 사이클로알킬알킬, C₆-C₁₄ 사이클로알킬사이클로알킬, C₄-C₁₀ 할로사이클로알킬알킬, C₅-C₁₂ 알킬사이클로알킬알킬, C₂-C₈ 알콕시알킬, C₄-C₁₀ 사이클로알콕시알킬, C₃-C₁₀ 알콕시알콕시알킬, C₂-C₈ 알킬티오알킬, C₂-C₈ 알킬설폰알킬, C₂-C₈ 알킬설폰알킬, C₂-C₈ 알킬아미노알킬, C₃-C₁₀ 다이알킬아미노알킬, C₂-C₈ 할로알킬아미노알킬,

C₄-C₁₀ 사이클로알킬아미노알킬, C₄-C₁₀ 사이클로알킬카르보닐, C₄-C₁₀ 사이클로알킬아미노카르보닐, C₂-C₇ 시아노알킬, C₁-C₆ 하이드록시알킬, C₄-C₁₀ 사이클로알케닐알킬, C₂-C₈ 할로알콕시알킬, C₂-C₈ 알콕시할로알킬, C₃-C₁₀ 알콕시알킬카르보닐, C₃-C₁₀ 알콕시카르보닐알킬, C₃-C₁₀ 알콕시(알킬)아미노카르보닐, C₂-C₈ 알킬아미디노, C₃-C₁₀ 다이알킬아미디노, C₁-C₆ 알콕시, C₁-C₆ 할로알콕시, C₂-C₈ 알킬카르보닐옥시, C₁-C₆ 알킬티오, C₁-C₆ 할로알킬티오, C₁-C₆ 알킬설퍼닐, C₁-C₆ 알킬설포닐, C₁-C₆ 알킬아미노설포닐, C₂-C₈ 다이알킬아미노설포닐, C₃-C₁₀ 트라이알킬실릴, C₂-C₈ 알콕시알콕시, C₁-C₆ 알킬아미노, C₂-C₈ 다이알킬아미노, C₂-C₈ 알킬카르보닐아미노, C₁-C₆ 알킬설포닐아미노 또는 C₁-C₆ 할로알킬아미노인 화학식 1의 화합물.

[0354] 실시 형태 166. 각 R²⁹이 독립적으로 H, 할로젠, 시아노, 하이드록시, C₁-C₆ 알킬, C₂-C₆ 알케닐, C₂-C₆ 알킬닐, C₁-C₆ 할로알킬, C₂-C₈ 알킬카르보닐, C₂-C₈ 알콕시카르보닐, C₃-C₈ 사이클로알킬, C₄-C₁₀ 알킬사이클로알킬, C₄-C₁₀ 사이클로알킬알킬, C₆-C₁₄ 사이클로알킬사이클로알킬, C₂-C₈ 알콕시알킬, C₃-C₁₀ 다이알킬아미노알킬, C₂-C₇ 시아노알킬, C₁-C₆ 하이드록시알킬, C₂-C₈ 할로알콕시알킬, C₃-C₁₀ 알콕시알킬카르보닐, C₃-C₁₀ 알콕시카르보닐알킬, C₁-C₆ 알콕시, C₁-C₆ 할로알콕시, C₂-C₈ 알킬카르보닐옥시, C₁-C₆ 알킬티오, C₁-C₆ 할로알킬티오, C₁-C₆ 알킬설퍼닐, C₁-C₆ 알킬설포닐, C₁-C₆ 알킬아미노 또는 C₂-C₈ 다이알킬아미노인 실시 형태 165의 화합물.

[0355] 실시 형태 167. 각 R²⁹이 독립적으로 H, 할로젠, 시아노, 하이드록시, C₁-C₂ 알킬, C₁-C₂ 할로알킬, C₁-C₂ 알콕시 또는 C₁-C₂ 할로알콕시인 실시 형태 166의 화합물.

[0356] 실시 형태 167a. 각 R²⁹이 독립적으로 할로젠, 시아노, 하이드록시, C₁-C₂ 알킬, C₁-C₂ 할로알킬, C₁-C₂ 알콕시 또는 C₁-C₂ 할로알콕시인 실시 형태 167의 화합물.

[0357] 실시 형태 167b. 각 R²⁹이 독립적으로 할로젠, C₁-C₂ 알킬, C₁-C₂ 할로알킬 또는 C₁-C₂ 알콕시인 실시 형태 167a의 화합물.

[0358] 실시 형태 168. E가 E-2 또는 E-3이고, G가 2 위치에서 화학식 1의 X에 연결되고 4 위치에서 화학식 1의 Z¹에 연결되는 임의로 치환된 티아졸 환이고, A가 CHR¹⁵이며, J가 4 위치에서 화학식 1의 Z¹에 연결되는 임의로 치환된 아이속사졸 환이면, Z¹이 O, C(=O), S(O)_m, CHR²⁰ 또는 NR²¹인 화학식 1의 화합물.

[0359] 실시 형태 169. E가 E-2 또는 E-3이고, G가 2 위치에서 화학식 1의 X에 연결되고 4 위치에서 화학식 1의 Z¹에 연결되는 임의로 치환된 티아졸 환이며, J가 4 위치에서 화학식 1의 Z¹에 연결되는 임의로 치환된 아이속사졸 환이면, Z¹이 O, C(=O), S(O)_m, CHR²⁰ 또는 NR²¹인 화학식 1의 화합물.

[0360] 실시 형태 170. E가 E-2 또는 E-3이면, G가 2 위치에서 화학식 1의 X에 연결되고 4 위치에서 화학식 1의 Z¹에 연결되는 임의로 치환된 티아졸 환이고, A가 CHR¹⁵이며, Z¹이 직접 결합이고, J가 아이속사졸 환의 3 위치 또는 5 위치에서 화학식 1의 나머지 부분에 연결되는 임의로 치환된 아이속사졸 환인 화학식 1의 화합물.

[0361] 실시 형태 171. E가 E-2 또는 E-3이면, G가 2 위치에서 화학식 1의 X에 연결되고 4 위치에서 화학식 1의 Z¹에 연결되는 임의로 치환된 티아졸 환이고, A가 CHR¹⁵이며, Z¹이 직접 결합이고, J가 아이속사졸 환의 3 위치에서 화학식 1의 나머지 부분에 연결되는 임의로 치환된 아이속사졸 환인 화학식 1의 화합물.

[0362] 실시 형태 172. E가 E-2 또는 E-3이면, G가 2 위치에서 화학식 1의 X에 연결되고 4 위치에서 화학식 1의 Z¹에 연결되는 임의로 치환된 티아졸 환이고, Z¹이 직접 결합이며, J가 아이속사졸 환의 3 위치에서 화학식 1의 나머지 부분에 연결되는 임의로 치환된 아이속사졸 환인 화학식 1의 화합물.

[0363] 실시 형태 173. E가 E-2이고, X가 X²이며, X를 포함하는 환이 포화되면, A가 CHR¹⁵이고, G가 임의로 치환된 5원

헤테로 방향족 환이며, Z^1 이 직접 결합이고, J가 페닐 또는 5원 또는 6원 헤테로 방향족 환 또는 나프탈레닐 또는 8원 내지 11원 헤테로 방향족 이환계이며, J 환 또는 환계가 H 이외의 적어도 하나의 R^5 로 치환되는 화학식 1의 화합물.

[0364] 실시 형태 174. E가 E-2이고, X가 X^2 이며, X를 포함하는 환이 포화되면, A가 CHR^{15} 이고, G가 임의로 치환된 5원 헤테로 방향족 환이며, Z^1 이 직접 결합이고, J가 페닐 또는 5원 또는 6원 헤테로 방향족 환 또는 나프탈레닐 또는 8원 내지 11원 헤테로 방향족 이환계이며, J 환 또는 환계가 Z^2Q 인 적어도 하나의 R^5 로 치환되는 화학식 1의 화합물.

[0365] 실시 형태 175. E가 E-2 또는 E-3이고, X가 X^1 이며, X를 포함하는 환이 포화되면, A가 NH이고, G가 2 위치에서 화학식 1의 X에 연결되고 4 위치에서 화학식 1의 Z^1 에 연결되는 임의로 치환된 티아졸 환이며, J가 2 위치에서 화학식 1의 나머지 부분에 연결되는 임의로 치환된 이미다졸 환이고, Z^1 이 O, C(=O), S(O)_m, CHR^{20} 또는 NR^{21} 인 화학식 1의 화합물.

[0366] 실시 형태 176. E가 E-2 또는 E-3이고, X가 X^1 이며, X를 포함하는 환이 포화되면, A가 NR^{16} 이고, G가 2 위치에서 화학식 1의 X에 연결되고 4 위치에서 화학식 1의 Z^1 에 연결되는 임의로 치환된 티아졸 환이며, J가 2 위치에서 화학식 1의 나머지 부분에 연결되는 임의로 치환된 이미다졸 환이고, Z^1 이 O, C(=O), S(O)_m, CHR^{20} 또는 NR^{21} 인 화학식 1의 화합물.

[0367] 실시 형태 177. E가 E-2 또는 E-3이고, G가 2 위치에서 화학식 1의 X에 연결되고 4 위치에서 화학식 1의 Z^1 에 연결되는 임의로 치환된 티아졸 환이면, J가 임의로 치환된 이미다졸릴 이외의 것인 화학식 1의 화합물.

[0368] 실시 형태 178. 화합물의 전체 분자량이 850 이하인 화학식 1 또는 실시 형태 1 내지 177 중 어느 하나의 화합물.

[0369] 실시 형태 179. 화합물의 전체 분자량이 700 이하인 실시 형태 17의 화합물.

[0370] 본 발명의 실시 형태는 또한 하기를 포함한다:

[0371] 실시 형태 C1. E가 E-1, E-2 또는 E-3인 화학식 1의 화합물.

[0372] 실시 형태 C2. E가 E-1 또는 E-2인 실시 형태 C1의 화합물.

[0373] 실시 형태 C3. E가 E-1인 실시 형태 C2의 화합물.

[0374] 실시 형태 C4. E가 E-4이고, R^6 가 C₁-C₂ 알킬 또는 C₁-C₂ 할로알킬인 화학식 1의 화합물.

[0375] 실시 형태 C4a. R^6 가 C₁-C₂ 알킬 또는 C₁-C₂ 할로알킬인 화학식 1의 화합물.

[0376] 실시 형태 C5. R^6 가 메틸인 실시 형태 C4a의 화합물.

[0377] 실시 형태 C6. A가 CHR^{15} 인 화학식 1의 화합물.

[0378] 실시 형태 C7. R^{15} 이 H, 할로젠, 시아노, 하이드록시, -CHO, C₁-C₄ 알킬, C₁-C₄ 할로알킬 또는 C₂-C₆ 알콕시카르보닐인 화학식 1의 화합물.

[0379] 실시 형태 C8. R^{15} 이 H, 할로젠, 시아노, 하이드록시, 메틸 또는 메톡시카르보닐인 실시 형태 C7의 화합물.

[0380] 실시 형태 C9. R^{15} 이 H인 실시 형태 C8의 화합물.

[0381] 실시 형태 C10. A가 NR^{16} 인 화학식 1의 화합물.

[0382] 실시 형태 C11. R^{16} 이 H, C₁-C₄ 알킬, C₁-C₄ 할로알킬, C₂-C₄ 알킬카르보닐, C₂-C₄ 할로알킬카르보닐 또는 C₂-C₄

알콕시카르보닐인 화학식 1의 화합물.

- [0383] 실시 형태 C12. R^{16} 이 H, 메틸, 메틸카르보닐 또는 메톡시카르보닐인 실시 형태 C11의 화합물.
- [0384] 실시 형태 C13. R^{16} 이 H인 실시 형태 C12의 화합물.
- [0385] 실시 형태 C14. A가 CH_2 또는 NH인 화학식 1의 화합물.
- [0386] 실시 형태 C14a. A가 CH_2 인 화학식 1의 화합물.
- [0387] 실시 형태 C15. W^1 이 H, CN, 할로젠, C_1-C_4 알킬, OR^{30} , SR^{31} 또는 $NR^{32}R^{33}$ 인 화학식 1의 화합물.
- [0388] 실시 형태 C16. W^1 이 H, CN, 할로젠, OR^{30} , SR^{31} 또는 $NR^{32}R^{33}$ 인 실시 형태 C15의 화합물.
- [0389] 실시 형태 C17. W^1 이 시아노, 할로젠 또는 OR^{30} 인 실시 형태 C16의 화합물.
- [0390] 실시 형태 C18. W^1 이 시아노, Cl, F 또는 OR^{30} 인 실시 형태 C17의 화합물.
- [0391] 실시 형태 C19. 각 R^{30} 및 R^{31} 이 독립적으로 C_1-C_6 알킬, C_3-C_4 알케닐, C_3-C_4 알키닐, C_1-C_4 할로알킬, C_3-C_6 할로알케닐, C_3-C_6 할로알키닐, C_2-C_6 알콕시알킬 및 C_3-C_6 사이클로알킬 중에서 선택되는 화학식 1의 화합물.
- [0392] 실시 형태 C19a. R^{32} 가 H, 시아노, 하이드록시, 아미노, C_1-C_6 알킬 중에서 선택되는 화학식 1의 화합물.
- [0393] 실시 형태 C19b. R^{33} 가 H, C_1-C_6 알킬 중에서 선택되는 화학식 1의 화합물.
- [0394] 실시 형태 C20. 각 R^{30} 및 R^{31} 이 C_1-C_6 알킬, C_3-C_4 알케닐, C_3-C_4 알키닐 및 C_1-C_4 할로알킬 중에서 선택되는 실시 형태 C19의 화합물.
- [0395] 실시 형태 C21. 각 R^{30} 및 R^{31} 이 독립적으로 C_1-C_4 알킬인 실시 형태 C20의 화합물.
- [0396] 실시 형태 C20. 각 R^{32} 및 R^{33} 이 C_1-C_6 알킬, C_3-C_4 알케닐, C_3-C_4 알키닐 및 C_1-C_4 할로알킬 중에서 선택되는 실시 형태 C19의 화합물.
- [0397] 실시 형태 C22. W가 O인 화학식 1의 화합물.
- [0398] 실시 형태 C23. W가 S인 화학식 1의 화합물.
- [0399] 실시 형태 24. X가 X^1 , X^2 , X^3 , X^4 , X^5 , X^6 , X^7 및 X^8 중에서 선택되는 화학식 1의 화합물.
- [0400] 실시 형태 C25. X가 X^1 , X^2 또는 X^3 인 실시 형태 C24의 화합물.
- [0401] 실시 형태 C26. X가 X^1 또는 X^2 인 실시 형태 C25의 화합물.
- [0402] 실시 형태 C27. X가 X^1 인 실시 형태 C26의 화합물.
- [0403] 실시 형태 C28. X를 포함하는 환이 포화되는 화학식 1의 화합물.
- [0404] 실시 형태 C29. Z^1 이 직접 결합, CHR^{20} 또는 NR^{21} 인 화학식 1의 화합물.
- [0405] 실시 형태 C30. Z^1 이 직접 결합인 실시 형태 C29의 화합물.
- [0406] 실시 형태 C31. R^{21} 이 H, C_1-C_3 알킬, C_1-C_3 알킬카르보닐 또는 C_2-C_3 알콕시카르보닐인 화학식 1의 화합물.
- [0407] 실시 형태 C32. Z^5 , Z^6 , Z^7 및 Z^8 이 각각 직접 결합인 화학식 1의 화합물.

- [0408] 실시 형태 C33. 각 R^2 가 독립적으로 C_1-C_4 알킬, C_1-C_4 알케닐, C_1-C_4 할로알킬, C_1-C_4 알콕시, 할로젠, 시아노 또는 하이드록시이거나;
- [0409] 2개의 R^2 가 함께 C_1-C_3 알킬렌 또는 C_2-C_3 알케닐렌으로서 취해 가교 이환계를 형성하거나;
- [0410] 이중 결합으로 결합된 인접한 환 탄소 원자에 부착되는 2개의 R^2 가 함께, C_1-C_4 알킬, C_1-C_4 할로알킬, C_1-C_4 알콕시, C_1-C_4 할로알콕시, 할로젠, 하이드록시, 아미노, 시아노 및 니트로 중에서 선택되는 3개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 $-CH=CH-CH=CH-$ 로서 취해지는 화학식 1의 화합물.
- [0411] 실시 형태 C34. 각 R^2 가 독립적으로 C_1-C_4 알킬, C_1-C_2 할로알킬, C_1-C_2 알콕시, 할로젠, 시아노 또는 하이드록시인 실시 형태 C33의 화합물.
- [0412] 실시 형태 C35. 각 R^2 가 독립적으로 메틸, 메톡시, 시아노 또는 하이드록시인 실시 형태 C34의 화합물.
- [0413] 실시 형태 36. 각 R^2 가 독립적으로 메틸인 실시 형태 C35의 화합물.
- [0414] 실시 형태 C37. n 이 0 또는 1인 화학식 1의 화합물.
- [0415] 실시 형태 C38. n 이 0인 실시 형태 C37의 화합물.
- [0416] 실시 형태 C39. n 이 1인 실시 형태 C38의 화합물.
- [0417] 실시 형태 C40. R^{1a} , R^{1b} , R^{1c} 및 R^{1d} 가 각각 시아노, C_1-C_8 알킬, C_2-C_8 알케닐, C_2-C_8 알키닐, C_1-C_8 할로알킬, C_2-C_8 할로알케닐, C_2-C_8 할로알키닐, C_3-C_8 사이클로알킬, C_2-C_8 알콕시알킬, C_2-C_8 알킬티오알킬, C_2-C_8 알킬설피닐알킬, C_2-C_8 알킬설포닐알킬, C_2-C_8 알킬아미노알킬, C_3-C_{10} 다이알킬아미노알킬, C_1-C_8 알콕시, C_1-C_8 할로알콕시, C_1-C_8 알킬티오, C_3-C_{10} 트라이알킬실릴, C_1-C_8 알킬아미노, C_2-C_8 다이알킬아미노 또는 C_2-C_8 알킬카르보닐아미노, 피롤리디닐, 피페리디닐 또는 모르폴리닐인 화학식 1의 화합물.
- [0418] 실시 형태 C41. R^{1a} , R^{1b} , R^{1c} 및 R^{1d} 가 C_1-C_8 알킬, C_2-C_8 알케닐, C_1-C_8 할로알킬, C_2-C_8 알콕시알킬, C_2-C_8 알킬티오알킬, C_2-C_8 알킬아미노알킬, C_1-C_8 알콕시, C_1-C_8 알킬티오, 피롤리디닐, 피페리디닐 또는 모르폴리닐인 실시 형태 C40의 화합물.
- [0419] 실시 형태 C42. R^{1a} , R^{1b} , R^{1c} 및 R^{1d} 가 C_1-C_6 알킬, C_2-C_6 알케닐, C_1-C_6 할로알킬, C_1-C_6 알콕시, 피롤리디닐, 피페리디닐 또는 모르폴리닐인 실시 형태 C41의 화합물.
- [0420] 실시 형태 C43. R^{1a} , R^{1b} , R^{1c} 및 R^{1d} 가 임의로 치환된 페닐, 나프탈레닐 또는 5원 또는 6원 헤테로 방향족 환인 화학식 1의 화합물.
- [0421] 실시 형태 C44. R^{1a} , R^{1b} , R^{1c} 및 R^{1d} 가 임의로 치환된 페닐 또는 5원 또는 6원 헤테로 방향족 환인 실시 형태 C43의 화합물.
- [0422] 실시 형태 C45. R^{1a} , R^{1b} , R^{1c} 및 R^{1d} 가 탄소 환 구성원 상에서 R^{4a} , 질소 환 구성원 상에서 R^{4b} 중에서 독립적으로 선택되는 3개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 페닐 또는 5원 또는 6원 헤테로 방향족 환이고;
- [0423] 각 R^{4a} 가 독립적으로 C_1-C_6 알킬, C_2-C_6 알케닐, C_2-C_6 알키닐, C_3-C_6 사이클로알킬, C_4-C_{10} 사이클로알킬알킬, C_4-C_{10} 알킬사이클로알킬, C_5-C_{10} 알킬사이클로알킬알킬, C_1-C_6 할로알킬, C_2-C_6 할로알케닐, C_2-C_6 할로알키닐, C_3-C_6 할로사이클로알킬, 할로젠, 하이드록시, 아미노, 시아노, 니트로, C_1-C_4 알콕시, C_1-C_4 할로알콕시, C_1-C_4 알킬티오, C_1-C_4 알킬설피닐, C_1-C_4 알킬설포닐, C_1-C_4 할로알킬티오, C_1-C_4 할로알킬설피닐, C_1-C_4 할로알킬설포닐, C_1-C_4 알킬아미노, C_2-C_8 다이알킬아미노, C_3-C_6 사이클로알킬아미노, C_2-C_4 알콕시알킬, C_1-C_4 하이드록시알킬, C_2-C_4 알킬카르보닐, C_2-C_6 알콕시카르보닐, C_2-C_6 알킬카르보닐옥시, C_2-C_6 알킬카르보닐티오, C_2-C_6 알킬아미노카르보

닐, C₃-C₈ 다이알킬아미노카르보닐 또는 C₃-C₆ 트라이알킬실릴이며;

[0424]

각 R^{4b}가 독립적으로 C₁-C₆ 알킬, C₃-C₆ 알케닐, C₃-C₆ 알키닐, C₃-C₆ 사이클로알킬, C₁-C₆ 할로알킬, C₃-C₆ 할로알케닐, C₃-C₆ 할로알키닐, C₃-C₆ 할로사이클로알킬 또는 C₂-C₄ 알콕시알킬인 실시 형태 C44의 화합물.

[0425]

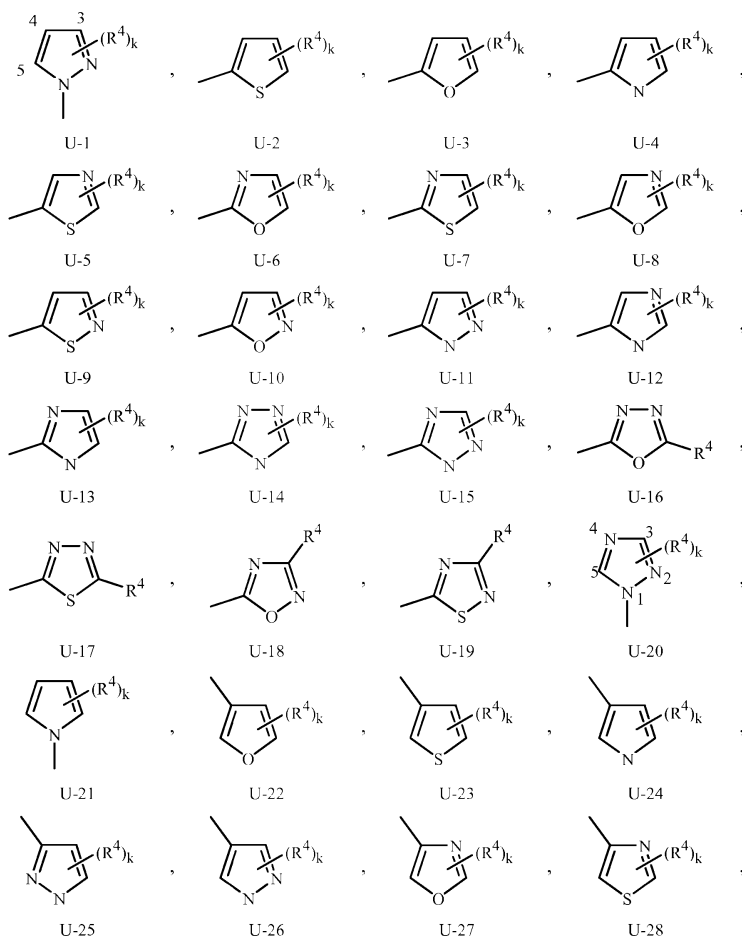
실시 형태 C46. R^{1a}, R^{1b}, R^{1c} 및 R^{1d}가 탄소 환 구성원 상에서 R^{4a}, 질소 환 구성원 상에서 R^{4b} 중에서 독립적으로 선택되는 2개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 페닐 또는 5원 또는 6원 헤테로 방향족 환인 실시 형태 C45의 화합물.

[0426]

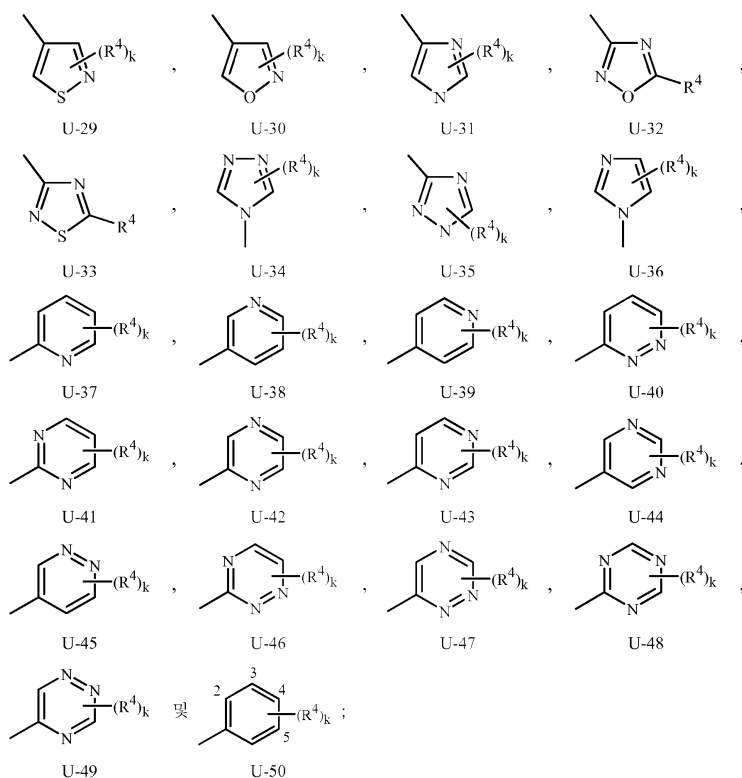
실시 형태 C47. R^{1a}, R^{1b}, R^{1c} 및 R^{1d}가 증거 1의 U-1 내지 U-50 중에서 선택되는 실시 형태 C45의 화합물.

[0427]

증거 1



[0428]



[0429]

[0430]

(여기서, R^4 가 탄소 환 구성원에 결합되면, R^4 는 R^{4a} 중에서 선택되고, R^4 가 질소 환 구성원에 결합되면 (예를 들어, U-4, U-14, U-15, U-24, U-25, U-26, U-31 또는 U-35 내지 U-15, U-24 내지 U-26, U-31 또는 U-35), R^4 는 R^{4b} 중에서 선택되고; k 는 0, 1 또는 2이다).

[0431]

실시 형태 C48. R^{1a} , R^{1b} , R^{1c} 및 R^{1d} 가 U-1 내지 U-5, U-8, U-11, U-13, U-15, U-20 내지 U-28, U-31, U-36 내지 U-39 및 U-50 중에서 선택되는 실시 형태 C47의 화합물.

[0432]

실시 형태 C49. R^{1a} , R^{1b} , R^{1c} 및 R^{1d} 가 U-1 내지 U-3, U-5, U-8, U-11, U-13, U-20, U-22, U-23, U-25 내지 U-28, U-36 내지 U-39 및 U-50 중에서 선택되는 실시 형태 C48의 화합물.

[0433]

실시 형태 C50. R^{1a} , R^{1b} , R^{1c} 및 R^{1d} 가 U-1 내지 U-3, U-11, U-13, U-20, U-22, U-23, U-36 내지 U-39 및 U-50 중에서 선택되는 실시 형태 C49의 화합물.

[0434]

실시 형태 C51. R^{1a} , R^{1b} , R^{1c} 및 R^{1d} 가 U-1, U-20 및 U-50 중에서 선택되는 실시 형태 C50의 화합물.

[0435]

실시 형태 C52. R^{1a} , R^{1b} , R^{1c} 및 R^{1d} 가 U-1인 실시 형태 C51의 화합물.

[0436]

실시 형태 C53. R^{1a} , R^{1b} , R^{1c} 및 R^{1d} 가 U-20인 실시 형태 C52의 화합물.

[0437]

실시 형태 C54. R^{1a} , R^{1b} , R^{1c} 및 R^{1d} 가 U-50인 실시 형태 53의 화합물.

[0438]

실시 형태 C55. 각 R^{4a} 가 독립적으로 C_1 - C_3 알킬, C_2 - C_3 알케닐, C_2 - C_3 알키닐, 사이클로프로필, C_1 - C_3 할로알킬, C_2 - C_3 할로알케닐, C_2 - C_3 할로알키닐, 할로사이클로프로필, 할로젠, 시아노, 니트로, C_1 - C_2 알콕시, C_1 - C_2 할로알콕시, C_1 - C_2 알킬티오, C_1 - C_2 할로알킬티오, C_2 - C_3 알콕시알킬, C_2 - C_3 알킬카르보닐, C_2 - C_3 알콕시카르보닐, C_2 - C_3 알킬아미노카르보닐 또는 C_3 - C_4 다이알킬아미노카르보닐인 실시 형태 C47의 화합물.

[0439]

실시 형태 C56. 각 R^{4a} 가 독립적으로 C_1 - C_3 알킬, C_2 - C_3 알케닐, C_2 - C_3 알키닐, 사이클로프로필, C_1 - C_3 할로알킬,

C₂-C₃ 할로알케닐, C₂-C₃ 할로알킬닐, 할로사이클로프로필, 할로젠, 시아노, 니트로, C₁-C₂ 알콕시 또는 C₁-C₂ 할로알콕시인 실시 형태 C55의 화합물.

[0440] 실시 형태 C57. 각 R^{4a}가 독립적으로 C₁-C₃ 알킬, C₁-C₃ 할로알킬, 할로젠, C₁-C₂ 알콕시 또는 C₁-C₂ 할로알콕시인 실시 형태 C56의 화합물.

[0441] 실시 형태 C58. 각 R^{4a}가 독립적으로 C₁-C₂ 알킬, C₁-C₂ 할로알킬, 할로젠 또는 C₁-C₂ 알콕시인 실시 형태 C57의 화합물.

[0442] 실시 형태 C59. 각 R^{4a}가 독립적으로 C₁-C₂ 알킬, 트라이플루오로메틸, Cl, Br, I 또는 메톡시인 실시 형태 C58의 화합물.

[0443] 실시 형태 C60. 각 R^{4a}가 독립적으로 C₁-C₂ 알킬, 트라이플루오로메틸, Cl 또는 Br인 실시 형태 C59의 화합물.

[0444] 실시 형태 C61. 각 R^{4b}가 독립적으로 C₁-C₃ 알킬, C₃ 알케닐 (예를 들어, 알릴), C₃ 알킬닐 (예를 들어, 프로파길), 사이클로프로필, C₁-C₃ 할로알킬, C₃ 할로알케닐, C₃ 할로알킬닐, 할로사이클로프로필 또는 C₂-C₃ 알콕시알킬인 실시 형태 C47의 화합물.

[0445] 실시 형태 C62. 각 R^{4b}가 독립적으로 C₁-C₃ 알킬, C₃ 알케닐, C₃ 알킬닐, 사이클로프로필, C₁-C₃ 할로알킬, C₃ 할로알케닐 또는 할로사이클로프로필인 실시 형태 C61의 화합물.

[0446] 실시 형태 C63. 각 R^{4b}가 독립적으로 C₁-C₂ 알킬 또는 C₁-C₂ 할로알킬인 실시 형태 C62의 화합물.

[0447] 실시 형태 C64. 각 R^{4b}가 독립적으로 C₁-C₂ 알킬 또는 트라이플루오로메틸인 실시 형태 C63의 화합물.

[0448] 실시 형태 C65. 각 R^{4b}가 독립적으로 C₁-C₂ 알킬인 실시 형태 C64의 화합물.

[0449] 실시 형태 C66. k가 1 또는 2인 실시 형태 C47의 화합물.

[0450] 실시 형태 C66a. 적어도 하나의 R⁴가 Cl인 실시 형태 C66의 화합물.

[0451] 실시 형태 C67. 적어도 하나의 R⁴가 Br인 실시 형태 C66의 화합물.

[0452] 실시 형태 C68. 적어도 하나의 R⁴가 메틸인 실시 형태 C66의 화합물.

[0453] 실시 형태 C69. k가 1 또는 2이고, 적어도 하나의 R⁴가 에틸인 실시 형태 66의 화합물.

[0454] 실시 형태 C70. 적어도 하나의 R⁴가 트라이플루오로메틸인 실시 형태 C66의 화합물.

[0455] 실시 형태 C71. 적어도 하나의 R⁴가 메톡시인 실시 형태 C66의 화합물.

[0456] 실시 형태 C72. k가 1이고, R⁴가 U-1의 3 위치 또는 5 위치에 연결되는 실시 형태 52의 화합물.

[0457] 실시 형태 C73. k가 2이고, 하나의 R⁴가 U-1의 3 위치에 연결되고, 다른 R⁴가 5 위치에 연결되는 실시 형태 C52의 화합물.

[0458] 실시 형태 C74. k가 1이고, R⁴가 U-20의 3 위치 또는 5 위치-에 연결되는 실시 형태 C53의 화합물.

[0459] 실시 형태 C75. k가 2이고, 하나의 R⁴가 U-20의 3 위치에 연결되고, 다른 R⁴가 5 위치에 연결되는 실시 형태 C53의 화합물.

[0460] 실시 형태 C76. k가 1이고, R⁴가 U-50의 2 위치 또는 3 위치에 연결되는 실시 형태 C54의 화합물.

[0461] 실시 형태 C77. k 가 2이고, 하나의 R^4 가 U-50의 2 위치에 연결되고, 다른 R^4 가 5 위치에 연결되는 실시 형태 C54의 화합물.

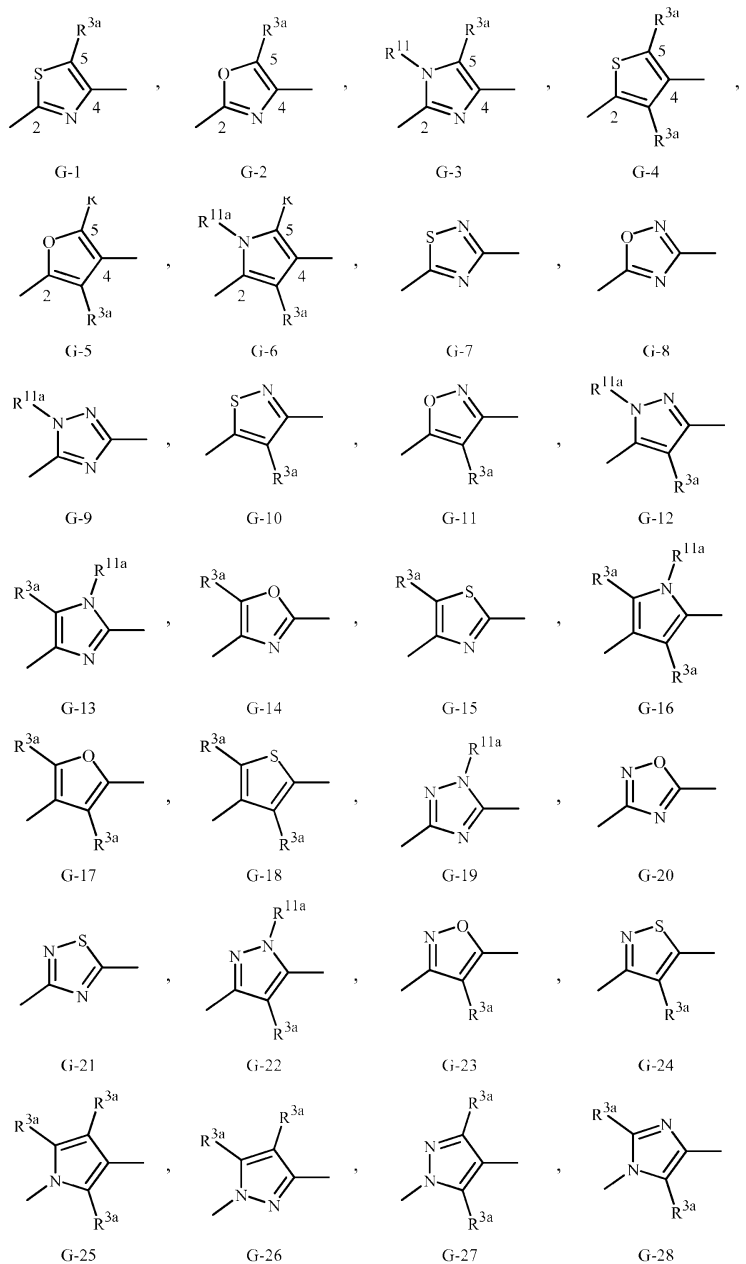
[0462] 실시 형태 C78. G 가 탄소 환 구성원 상에서 R^3 중에서 선택되고, 질소 환 구성원 상에서 R^{11} 중에서 선택되는 2개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 5원 복소환이고;

[0463] 각 R^3 가 독립적으로 C_1 - C_3 알킬, C_1 - C_3 할로알킬 또는 할로젠이며;

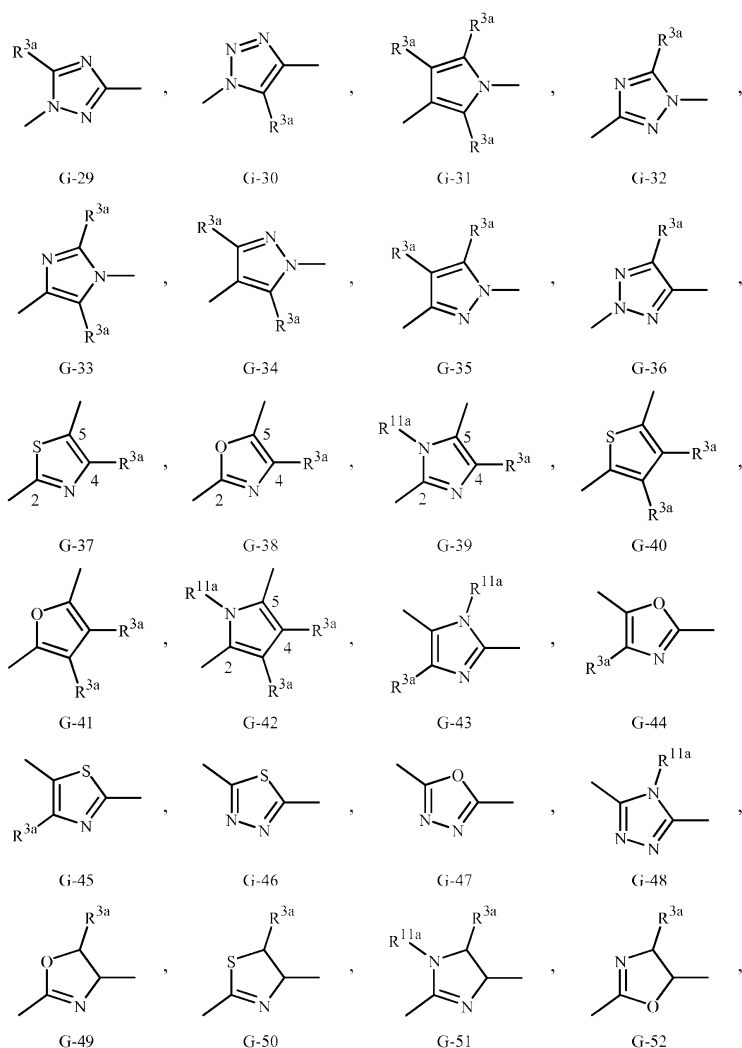
[0464] 각 R^{11} 이 독립적으로 C_1 - C_3 알킬인 화학식 1의 화합물.

[0465] 실시 형태 C79. G 가 증거 2의 G-1 내지 G-59 중에서 선택되는 실시 형태 C78의 화합물.

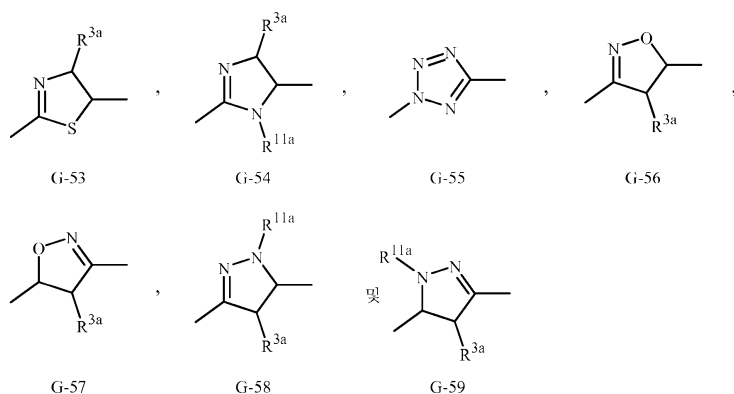
[0466] 증거 2



[0467]



[0468]



[0469]

[0470]

(여기서, 좌측으로 돌출하는 결합은 X에 결합되고, 우측으로 돌출하는 결합은 Z¹에 결합되며; 각 R^{3a}가 H 또는 R³ 중에서 독립적으로 선택되고; R^{11a}가 H 및 R¹¹ 중에서 독립적으로 선택된다);

[0471]

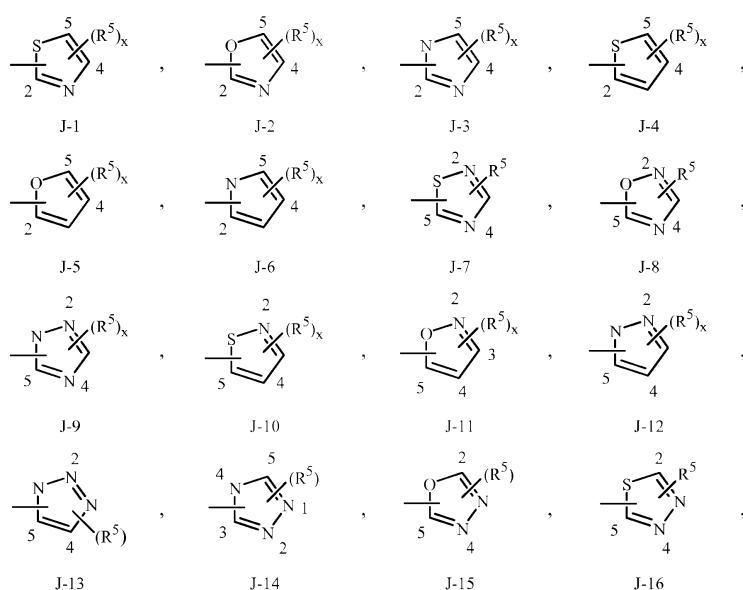
실시 형태 C80. G가 G-1 내지 G-3, G-7, G-8, G-10, G-11, G-14, G-15, G-23, G-24, G-26 내지 G-28, G-30, G-36 내지 G-38 및 G-49 내지 G-55 중에서 선택되는 실시 형태 C79의 화합물.

[0472]

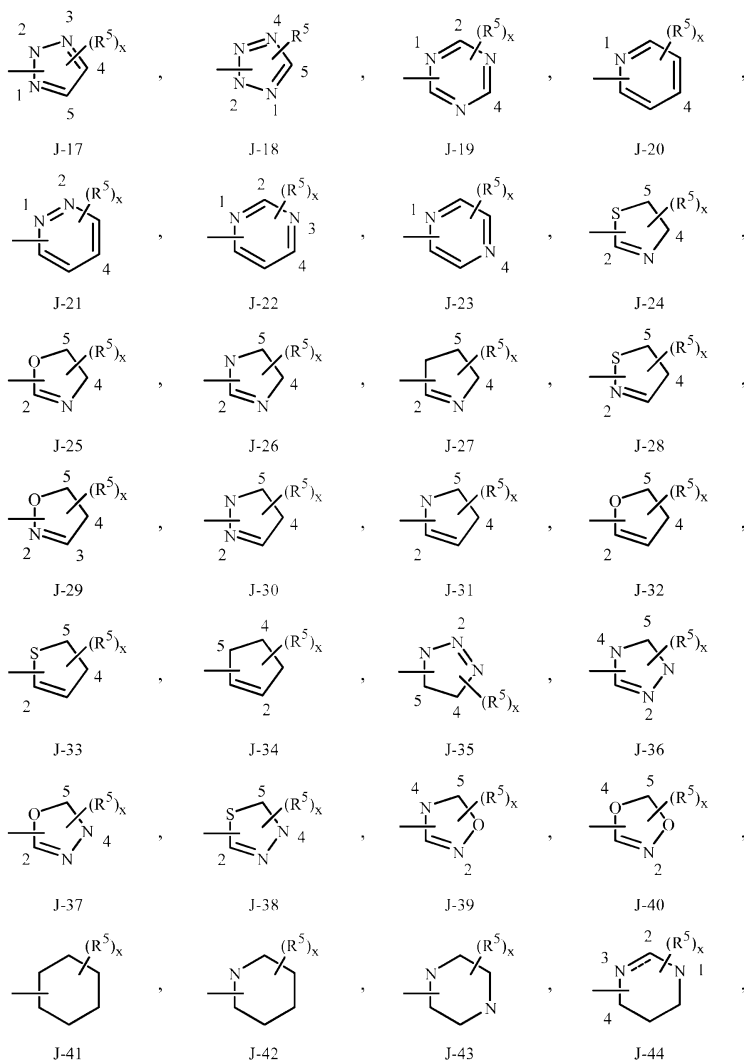
실시 형태 C81. G가 G-1, G-2, G-7, G-8, G-14, G-15, G-23, G-24, G-26, G-27, G-36, G-37, G-38, G-49, G-50 및 G-55 중에서 선택되는 실시 형태 C80의 화합물.

- [0473] 실시 형태 C82. G가 G-1, G-2, G-15, G-26, G-27, G-36, G-37 및 G-38 중에서 선택되는 실시 형태 C81의 화합물.
- [0474] 실시 형태 C83. G가 G-1, G-2, G-15, G-26 및 G-36 중에서 선택되는 실시 형태 C82의 화합물.
- [0475] 실시 형태 C84. G가 G-1인 실시 형태 C83의 화합물.
- [0476] 실시 형태 C85. G가 G-2인 실시 형태 C83의 화합물.
- [0477] 실시 형태 C86. G가 G-15인 실시 형태 C83의 화합물.
- [0478] 실시 형태 C87. G가 G-26인 실시 형태 C83의 화합물.
- [0479] 실시 형태 C88. G가 G-36인 실시 형태 C83의 화합물.
- [0480] 실시 형태 C89. R^{3a} 가 H, C_1-C_3 알킬 또는 할로젠인 실시 형태 C79 내지 C88 중 어느 하나의 화합물.
- [0481] 실시 형태 C90. R^{3a} 가 H, 메틸 또는 할로젠인 실시 형태 C89의 화합물.
- [0482] 실시 형태 C91. R^{3a} 가 H이고, R^{11a} 가 H 또는 메틸인 실시 형태 C79 내지 C88 중 어느 하나의 화합물.
- [0483] 실시 형태 C92. G가 비치환되는 화학식 1 또는 실시 형태 C79 내지 C88 중 어느 하나의 화합물.
- [0484] 실시 형태 C93. J가 각각, 탄소, 1개 이하의 O, 1개 이하의 S 및 3개 이하의 N 중에서 선택되는 3개 이하의 헤테로 원자, 및 C(=O), C(=S), S(O) 및 S(O)₂ 중에서 선택되는 3개 이하의 환 구성원 중에서 선택되는 환 구성원을 포함하며, R^5 중에서 독립적으로 선택되는 5개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 5원 또는 6원 환, 8원 내지 11원 이환계 또는 7원 내지 11원 스피로환계인 화학식 1의 화합물.
- [0485] 실시 형태 C94. J가 각각, R^5 중에서 독립적으로 선택되는 5개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 페닐 또는 5원 또는 6원 헤테로 방향족 환, 또는 나프탈레닐 또는 8원 내지 11원 헤테로 방향족 이환계이거나; J가 각각, 탄소, 및 C(=O), C(=S), S(O), S(O)₂ 및 SiR¹⁷R¹⁸ 중에서 선택되는 3개 이하의 환 구성원 중에서 선택되는 환 구성원을 포함하며, R^5 중에서 독립적으로 선택되는 5개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 5원, 6원 또는 7원 비방향족 환, 8원 내지 11원 비방향족 이환계 또는 7원 내지 11원 스피로환계인 화학식 1의 화합물.
- [0486] 실시 형태 C95. J가 증거 3의 J-1 내지 J-82 중에서 선택되는 화학식 1의 화합물.

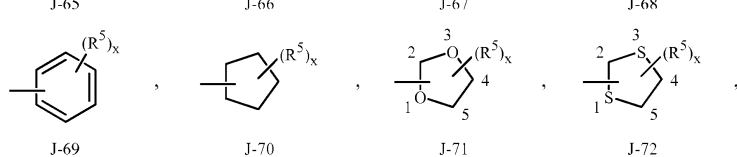
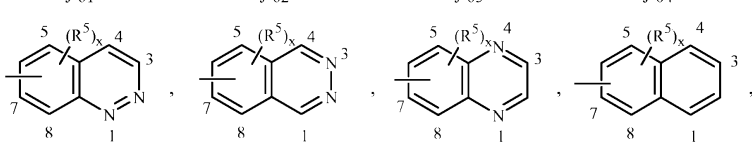
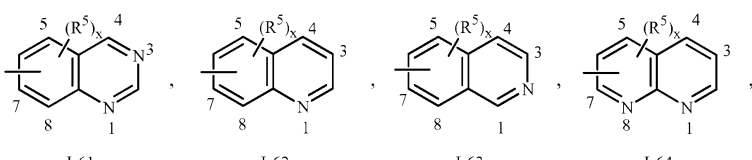
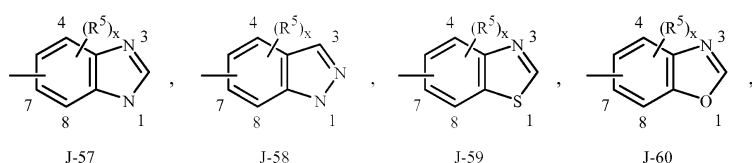
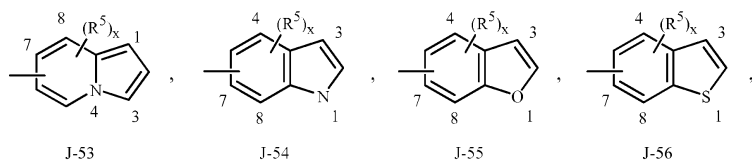
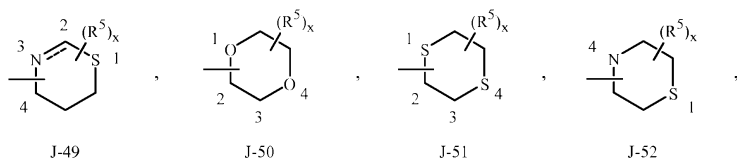
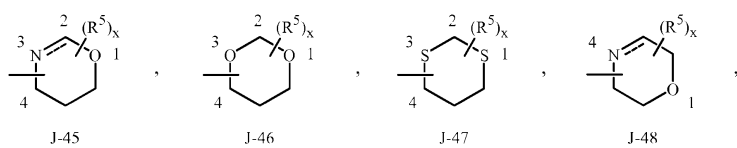
[0487] 증거 3



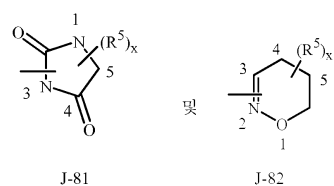
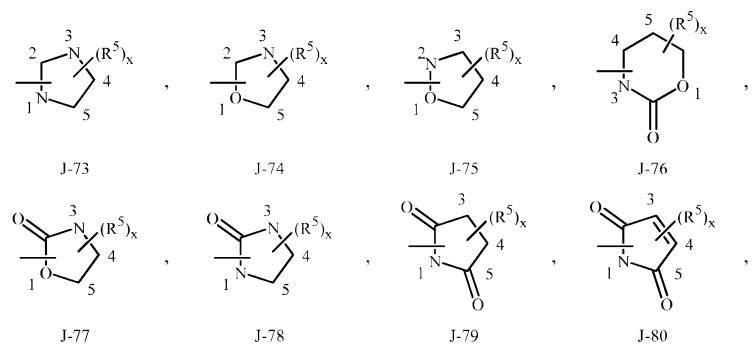
[0488]



[0489]



[0490]



[0491]

[0492]

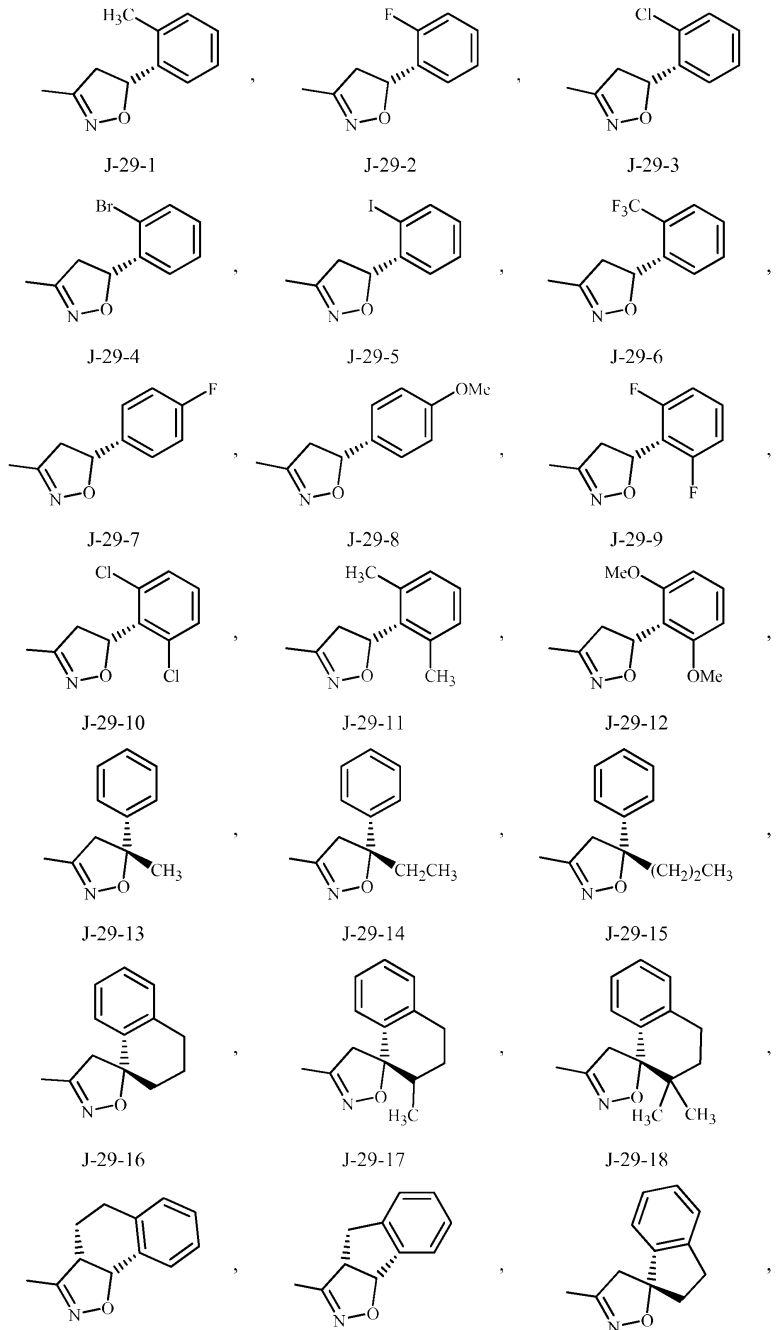
(여기서, 좌측으로 돌출되게 나타낸 결합은 Z^1 에 결합되고; x는 0 내지 3의 정수이다).

[0493]

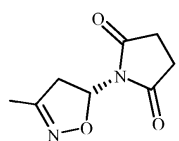
실시 형태 C96. J가 증거 A에서 하기에 나타낸 J-29-1 내지 J-29-60 중에서 선택되는 환인 실시 형태 C95의 화합물.

[0494]

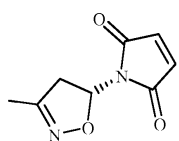
증거 A



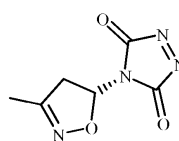
[0495]



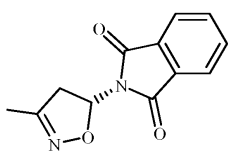
J-29-37



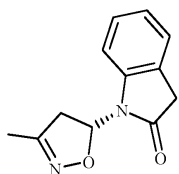
J-29-38



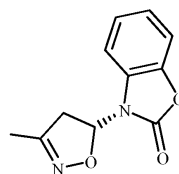
J-29-39



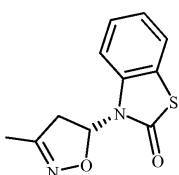
J-29-40



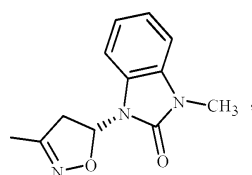
J-29-41



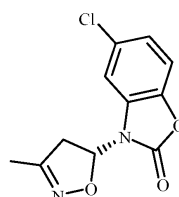
J-29-42



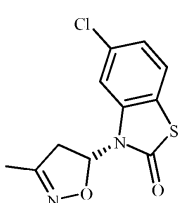
J-29-43



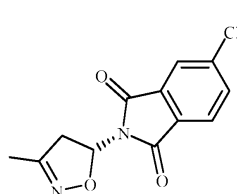
J-29-44



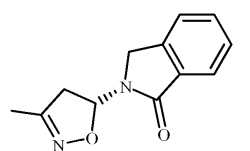
J-29-45



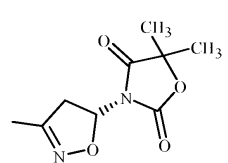
J-29-46



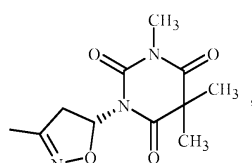
J-29-47



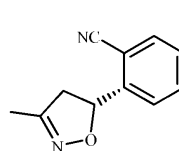
J-29-48



J-29-49

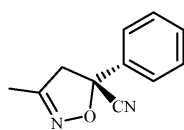


J-29-50

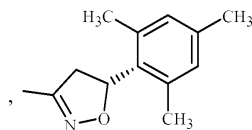


J-29-51

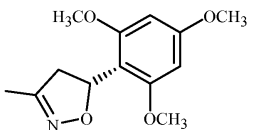
[0497]



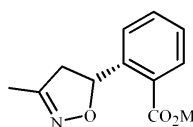
J-29-52



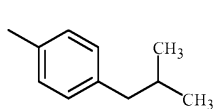
J-29-53



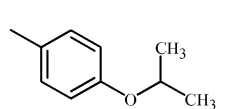
J-29-54



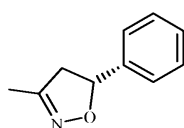
J-29-55



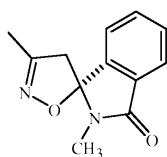
J-29-56



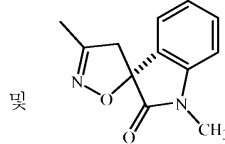
J-29-57



J-29-58



J-29-59



J-29-60

[0498]

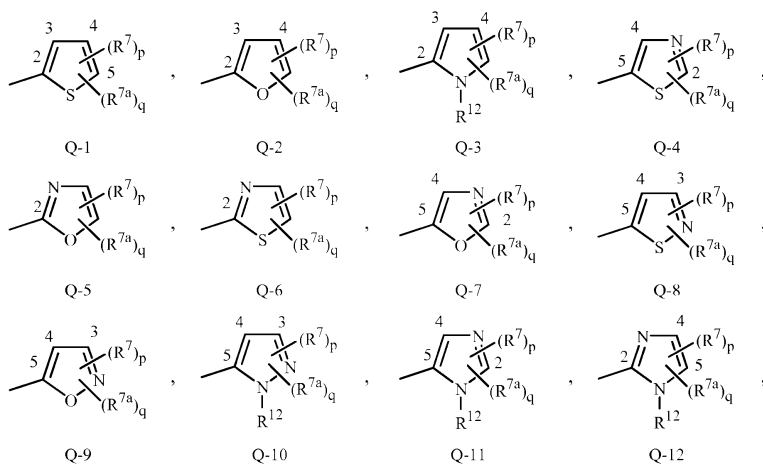
- [0499] 실시 형태 C97. J가 J-1, J-2, J-3, J-4, J-5, J-7, J-8, J-9, J-10, J-11, J-12, J-14, J-15, J-16, J-20, J-24, J-25, J-26, J-29, J-30, J-37, J-38, J-45 및 J-69 중에서 선택되는 실시 형태 C95의 화합물.
- [0500] 실시 형태 C98. J가 J-4, J-5, J-8, J-11, J-15, J-16, J-20, J-29, J-30, J-37, J-38 및 J-69 중에서 선택되는 실시 형태 C97의 화합물.
- [0501] 실시 형태 C99. J가 J-4, J-5, J-11, J-20, J-29, J-37, J-38 및 J-69 중에서 선택되는 실시 형태 C98의 화합물.
- [0502] 실시 형태 C100. J가 J-11인 실시 형태 C99의 화합물.
- [0503] 실시 형태 C101. J가 J-29인 실시 형태 C99의 화합물.
- [0504] 실시 형태 C102. J가 J-69인 실시 형태 C99의 화합물.
- [0505] 실시 형태 C103. J가 표 A에 나타난 J-29-1 내지 J-29-60 중 어느 하나 중에서 선택되는 실시 형태 C96의 화합물.
- [0506] 실시 형태 C104. x가 0, 1 또는 2인 실시 형태 C95의 화합물.
- [0507] 실시 형태 C104a. x가 1 또는 2인 실시 형태 C95의 화합물.
- [0508] 실시 형태 C105. x가 0인 실시 형태 C104의 화합물.
- [0509] 실시 형태 C106. R^5 가 Z^2Q 인 실시 형태 C95의 화합물.
- [0510] 실시 형태 C107. J-11의 3 위치가 화학식 1의 Z^1 에 연결되고, J-11의 5 위치가 H 이외의 R^5 중에서 선택되는 치환기로 치환되는 실시 형태 C100의 화합물.
- [0511] 실시 형태 C108. J-11의 3 위치가 화학식 1의 Z^1 에 연결되고, J-11의 5 위치가 Z^2Q 로 치환되는 실시 형태 C100의 화합물.
- [0512] 실시 형태 C109. J-29의 3 위치가 화학식 1의 Z^1 에 연결되고, J-29의 5 위치가 H 이외의 R^5 중에서 선택되는 치환기로 치환되는 실시 형태 C101의 화합물.
- [0513] 실시 형태 C110. J-29의 3 위치가 화학식 1의 Z^1 에 연결되고, J-29의 5 위치가 Z^2Q 로 치환되는 실시 형태 C101의 화합물.
- [0514] 실시 형태 C111. 각 R^5 가 독립적으로 H, 시아노, C_1-C_6 알킬, C_2-C_6 알케닐, C_2-C_6 알키닐, C_1-C_6 할로알킬, C_2-C_6 할로알케닐, C_2-C_6 할로알키닐, C_3-C_8 사이클로알킬, C_3-C_8 할로사이클로알킬, C_4-C_{10} 알킬사이클로알킬, C_4-C_{10} 사이클로알킬알킬, C_2-C_6 알콕시알킬, C_4-C_{10} 사이클로알콕시알킬, C_3-C_8 알콕시알콕시알킬, C_2-C_6 알킬티오알킬, C_2-C_6 알콕시카르보닐, C_1-C_6 알콕시, C_1-C_6 할로알콕시, C_3-C_8 사이클로알콕시, C_3-C_8 할로사이클로알콕시, C_4-C_{10} 사이클로알킬알콕시, C_2-C_6 알케닐옥시, C_2-C_6 할로알케닐옥시, C_2-C_6 알키닐옥시, C_2-C_6 할로알키닐옥시, C_2-C_6 알콕시알콕시, C_2-C_6 알킬카르보닐옥시, C_2-C_6 할로알킬카르보닐옥시, C_4-C_8 사이클로알킬카르보닐옥시, C_3-C_6 알킬카르보닐알콕시, C_1-C_6 알킬티오, C_1-C_6 할로알킬티오, C_3-C_8 사이클로알킬티오, C_3-C_{10} 트라이알킬실릴, $-NR^{25}R^{26}$ 또는 Z^2Q 인 화학식 1 또는 실시 형태 C95의 화합물.
- [0515] 실시 형태 C112. 각 R^5 가 독립적으로 H, 시아노, C_1-C_6 알킬, C_1-C_6 할로알킬, C_3-C_8 사이클로알킬, C_3-C_8 할로사이클로알킬, C_2-C_6 알콕시알킬, C_1-C_6 알콕시, C_1-C_6 할로알콕시, C_3-C_8 사이클로알콕시, C_2-C_6 알케닐옥시, C_2-C_6 할로알케닐옥시, C_2-C_6 알키닐옥시, C_2-C_6 알콕시알콕시, C_2-C_6 알킬카르보닐옥시, C_2-C_6 할로알킬카르보닐옥시, C_1-C_6 알킬티오, C_1-C_6 할로알킬티오, C_3-C_{10} 트라이알킬실릴, $-NR^{25}R^{26}$ 또는 Z^2Q 인 실시 형태 C111의 화합물.
- [0516] 실시 형태 C113. 각 R^5 가 독립적으로 H, 시아노, C_1-C_6 알킬, C_1-C_6 할로알킬, C_1-C_6 알콕시, C_1-C_6 할로알콕시,

$-NR^{25}R^{26}$ 또는 Z^2Q 인 실시 형태 C112의 화합물.

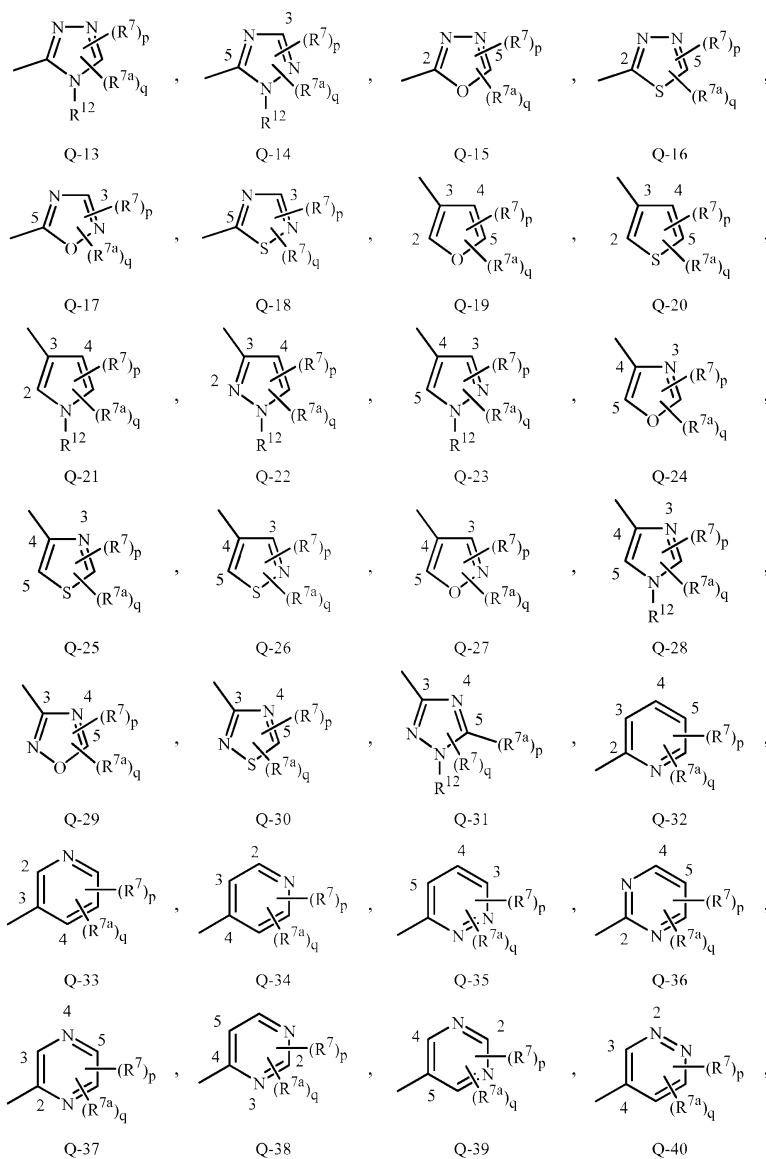
- [0517] 실시 형태 C114. R^5 의 일례가 Z^2Q 이고, R^5 의 다른 예가 H, 시아노, C_1-C_4 알킬, C_1-C_4 할로알킬, C_1-C_4 알킬카르보닐 및 할로겐 중에서 독립적으로 선택되는 화학식 1 또는 실시 형태 95의 화합물.
- [0518] 실시 형태 C115. R^5 의 일례가 Z^2Q 이고, R^5 의 다른 예가 H, 시아노 및 C_1-C_3 알킬 중에서 독립적으로 선택되는 실시 형태 C114의 화합물.
- [0519] 실시 형태 C115a. R^5 의 단 하나의 예가 Z^2Q 인 실시 형태 C114의 화합물.
- [0520] 실시 형태 C116. 각 R^5 가 $-NR^{26}R^{25}$ 이면, 각 R^{26} 가 독립적으로 C_1-C_3 알킬 또는 $-Z^4Q$ 인 화학식 1의 화합물.
- [0521] 실시 형태 C117. 각 Z^4 가 독립적으로 $C(=O)$ 또는 $S(O)_2$ 인 화학식 1 또는 실시 형태 C116의 화합물.
- [0522] 실시 형태 C118. 각 Z^4 가 $C(=O)$ 인 실시 형태 C117의 화합물.
- [0523] 실시 형태 C119. 각 Z^2 가 독립적으로 직접 결합, O, $C(=O)$, $S(O)_2$ 또는 CHR^{20} 인 화학식 1의 화합물.
- [0524] 실시 형태 C120. Z^2 가 직접 결합인 실시 형태 C119의 화합물.
- [0525] 실시 형태 C121. 각 Q가 독립적으로, 각각 $C(=O)$, $C(=S)$, $S(O)$, $S(O)_2$ 및 $SiR^{17}R^{18}$ 으로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 환 구성원을 임의로 포함하고, 탄소 원자 환 구성원 상에서 R^7 , 질소 원자 환 구성원 상에서 R^{12} 중에서 독립적으로 선택되는 5개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 3원 내지 7원 비방향족 탄소환, 5원, 6원 또는 7원 비방향족 복소환 또는 8원 내지 11원 비방향족 이환계인 화학식 1의 화합물.
- [0526] 실시 형태 C122. 각 Q가 독립적으로 하나의 R^7 으로 치환되는 8원 내지 11원 헤테로 방향족 이환계인 화학식 1의 화합물.
- [0527] 실시 형태 C123. 각 Q가 독립적으로, 각각 탄소 환 구성원 상에서 R^7 , 질소 환 구성원 상에서 R^{12} 중에서 선택되는 3개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 임의로 치환된 페닐, 벤질, 나프탈레닐 또는 5원 또는 6원 헤테로 방향족 환인 화학식 1의 화합물.
- [0528] 실시 형태 C124. 각 Q가 독립적으로 하나의 R^7 으로 치환되는 페닐인 실시 형태 C123의 화합물.
- [0529] 실시 형태 C125. 각 Q가 독립적으로 하나의 R^7 으로 치환되는 벤질인 실시 형태 C124의 화합물.
- [0530] 실시 형태 C126. 각 Q가 증거 4의 Q-1 내지 Q-106 중에서 독립적으로 선택되는 화학식 1의 화합물.

[0531]

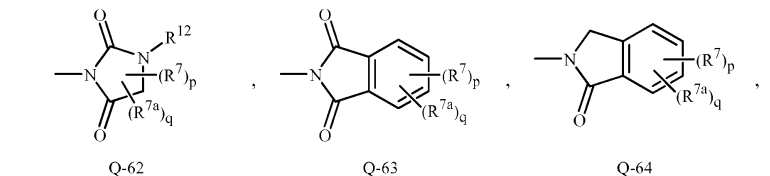
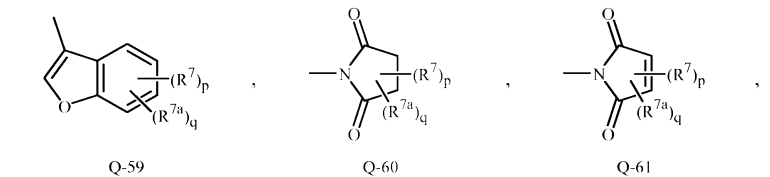
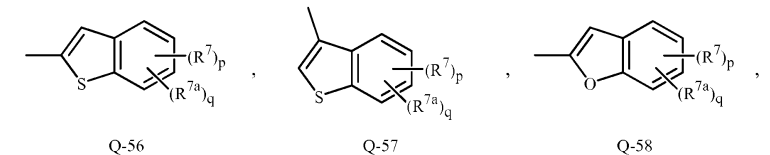
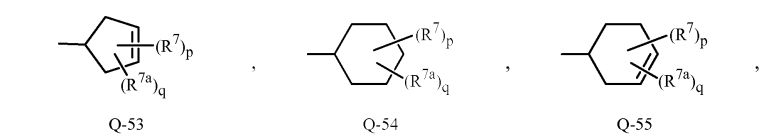
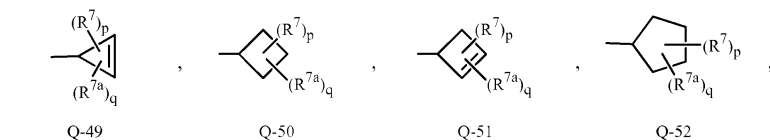
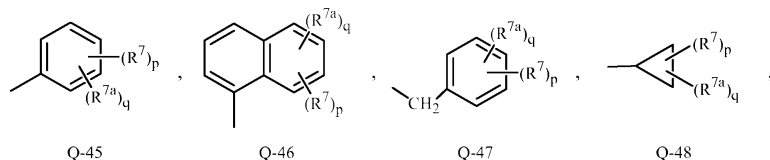
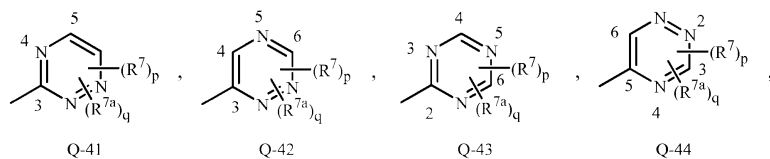
증거 4



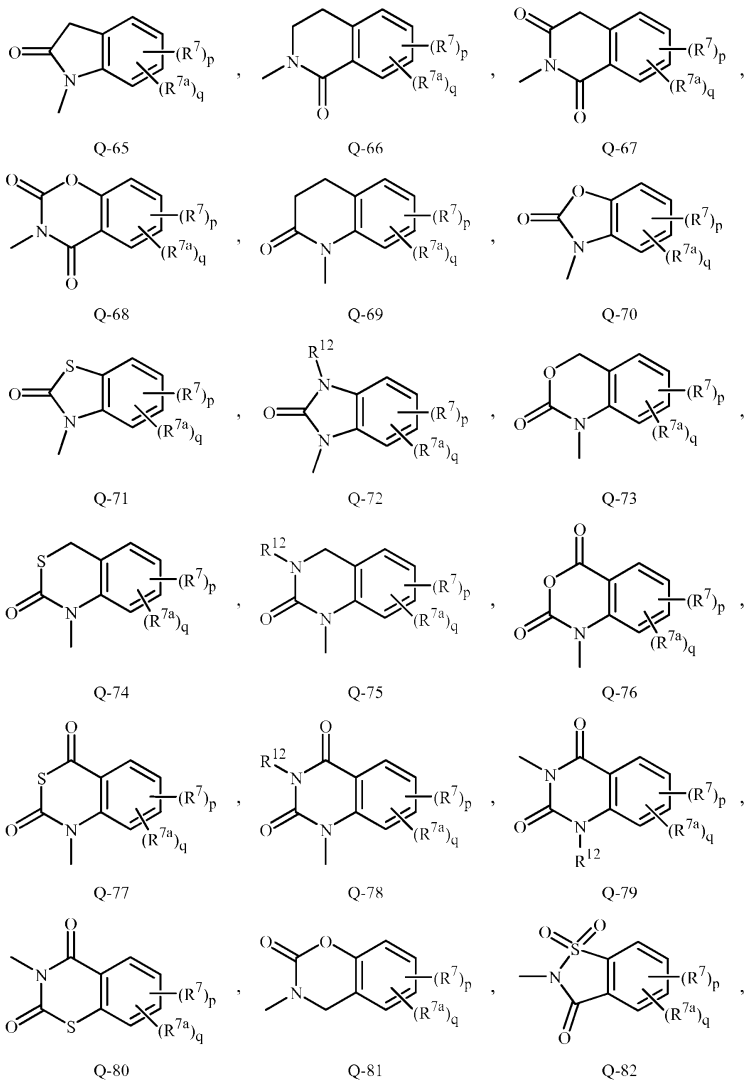
[0532]



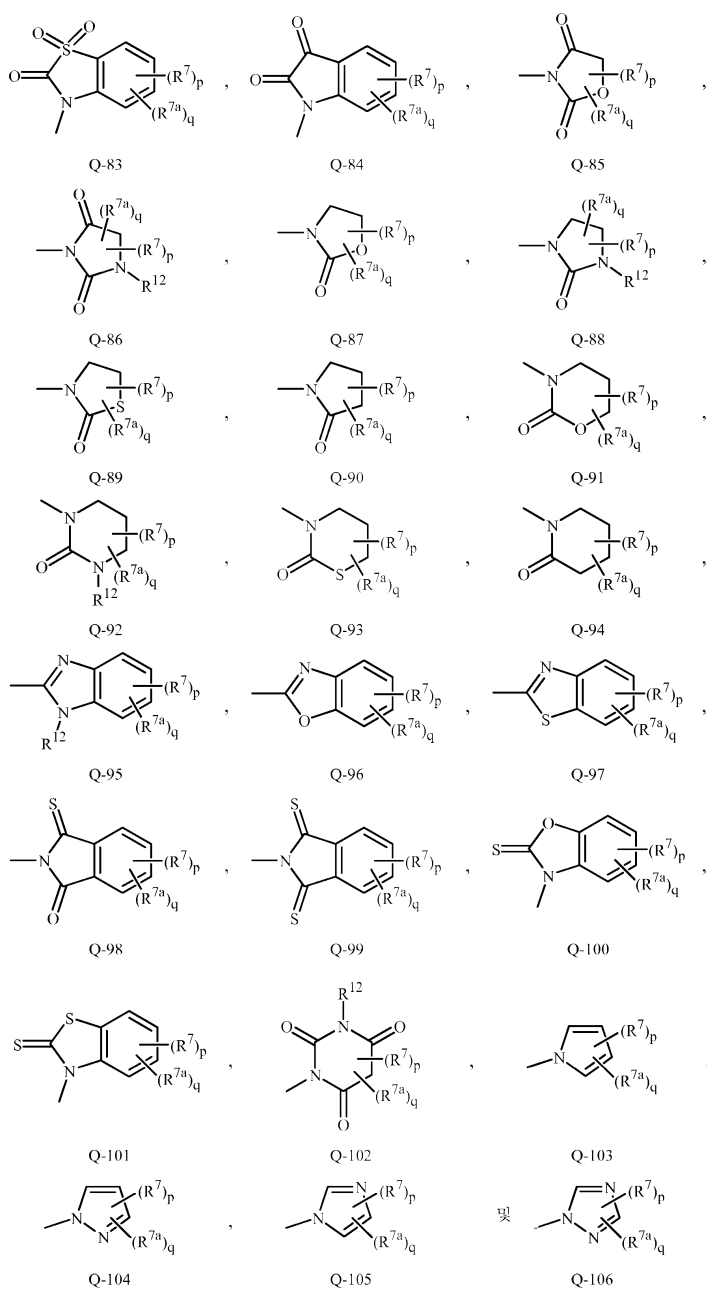
[0533]



[0534]



[0535]



[0536]

[0537]

(여기서, p는 0, 1, 2, 3, 4 또는 5이고, Q는 0, 1 또는 2이다).

[0538]

실시 형태 C127. p가 0, 1, 2 또는 3인 실시 형태 C126의 화합물.

[0539]

실시 형태 C128. 각 Q가 Q-1, Q-20, Q-32 내지 Q-34, Q-45 내지 Q-47, Q-60 내지 Q-73, Q-76 내지 Q-79, Q-84 내지 Q-94 및 Q-98 내지 Q-106 중에서 독립적으로 선택되는 실시 형태 C126의 화합물.

[0540]

실시 형태 C129. 각 Q가 Q-1, Q-45, Q-63, Q-64, Q-65, Q-68, Q-69, Q-70, Q-71, Q-72, Q-73, Q-76, Q-78, Q-79, Q-84, Q-85, Q-98, Q-99, Q-100 및 Q-101 내지 Q-106 중에서 독립적으로 선택되는 실시 형태 C128의 화합물.

[0541]

실시 형태 C130. 각 Q가 Q-45, Q-63, Q-64, Q-65, Q-68, Q-69, Q-70, Q-71, Q-72, Q-84 및 Q-85 중에서 독립적으로 선택되는 실시 형태 C129의 화합물.

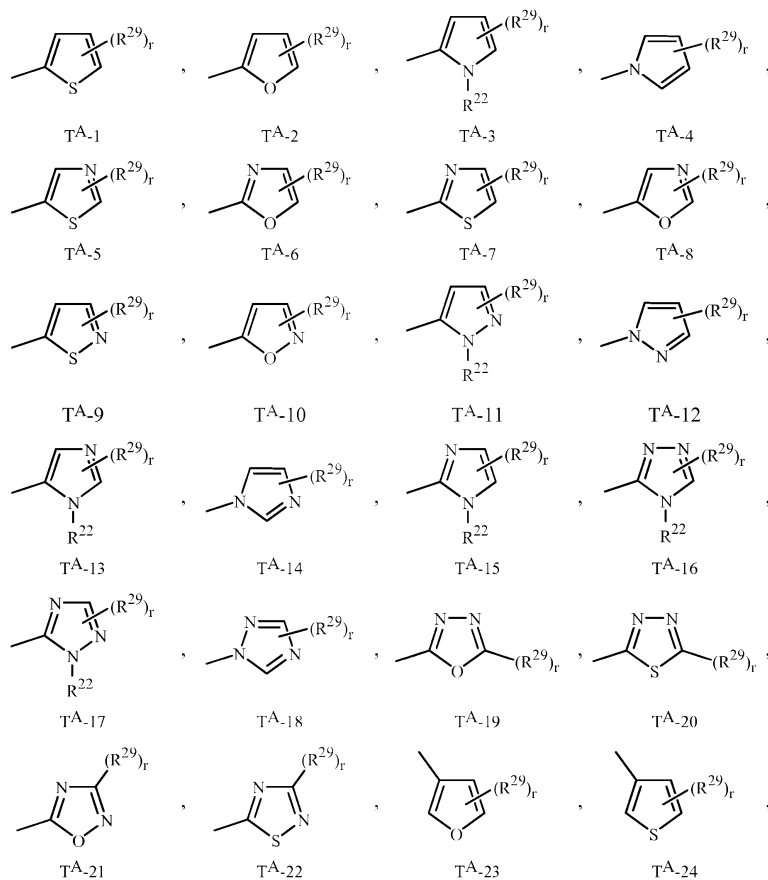
[0542]

실시 형태 C131. 각 Q가 Q-45, Q-63, Q-65, Q-70, Q-71, Q-72, Q-84 및 Q-85 중에서 독립적으로 선택되는 실시 형태 C130의 화합물.

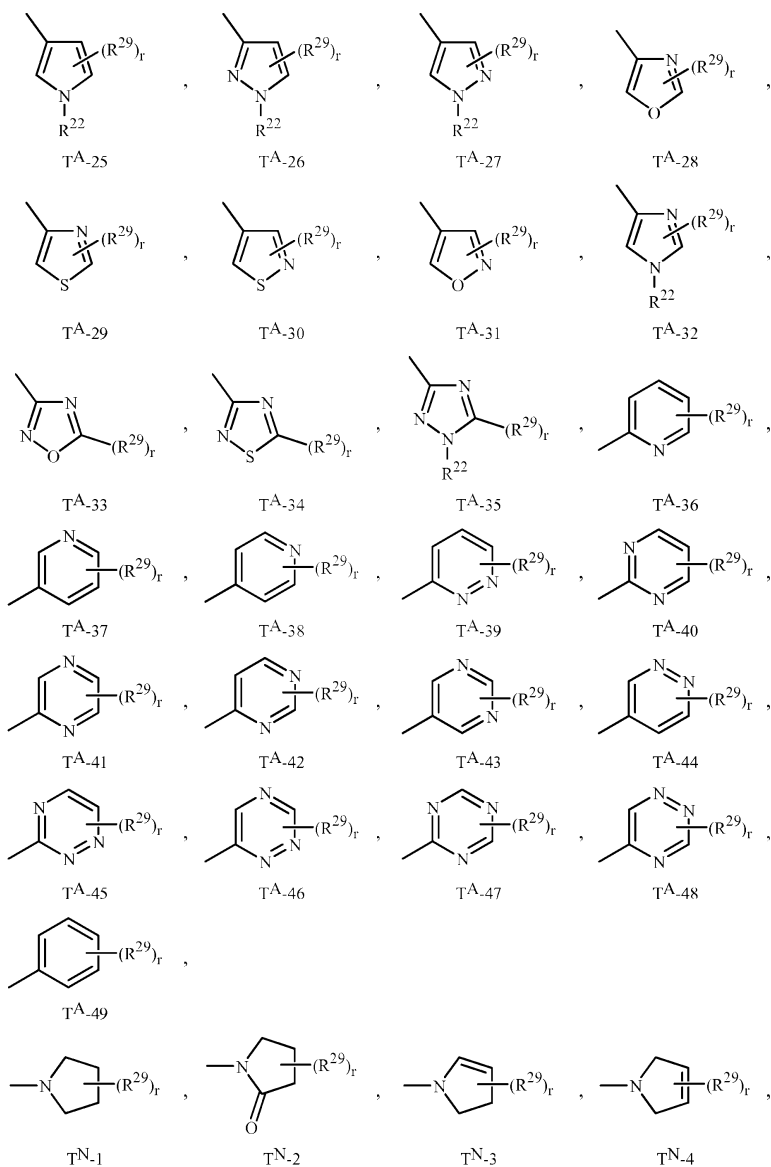
- [0543] 실시 형태 C132. 각 Q가 Q-45, Q-63, Q-65 또는 Q-70, Q-71, Q-72 및 Q-84 중에서 독립적으로 선택되는 실시 형태 C131의 화합물.
- [0544] 실시 형태 C133. 각 R^7 이 독립적으로 C_1-C_3 알킬, C_1-C_3 할로알킬, 할로젠, 하이드록시, 아미노, 시아노, 니트로, C_1-C_2 알콕시 또는 C_1-C_2 할로알콕시인 화학식 1 또는 실시 형태 C126의 화합물.
- [0545] 실시 형태 C134. 각 R^7 이 독립적으로 C_1-C_3 알킬, C_1-C_3 할로알킬, C_1-C_2 할로알콕시, 할로젠, 하이드록시, 시아노 또는 C_1-C_2 알콕시인 실시 형태 C133의 화합물.
- [0546] 실시 형태 C135. 각 R^7 이 독립적으로 메틸, F, Cl, Br, 하이드록시, 시아노 또는 메톡시인 실시 형태 C134의 화합물.
- [0547] 실시 형태 C136. R^5 및 R^7 이 R^5 및 R^7 을 연결하는 원자와 함께, 임의로 치환된 5원 내지 7원 환을 형성하면, 환 구성원이 탄소 및 임의로 1개 이하의 O, 1개 이하의 S 및 1개 이하의 N 중에서 선택되는 3개 이하의 헤테로원자 중에서 선택되고, 임의로 C(=O), C(=S), S(O), S(O)₂ 및 $SiR^{17}R^{18}$ 으로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 1개 내지 3개의 환 구성원을 포함하는 화학식 1의 화합물.
- [0548] 실시 형태 C137. R^5 및 R^7 이 R^5 및 R^7 을 연결하는 원자와 함께, 임의로 치환된 5원 내지 7원 환을 형성하면, R^5 및 R^7 이 R^5 및 R^7 을 연결하는 원자와 함께, 탄소 및 임의로 1개 이하의 O, 1개 이하의 S 및 1개 이하의 N 중에서 선택되는 1개 내지 3개의 헤테로원자 중에서 선택되는 환 구성원을 포함하고, 임의로 C(=O), C(=S), S(O), S(O)₂ 및 $SiR^{17}R^{18}$ 으로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 3개 이하의 환 구성원을 포함하며, R^5 및 R^7 을 연결하는 원자 이외의 환 구성원 상에서 R^8 중에서 선택되는 치환기로 임의로 치환되는 5원 내지 7원 환을 형성하고; 각 R^8 이 독립적으로 C_1-C_6 알킬, C_2-C_6 알케닐, C_2-C_6 알키닐, C_3-C_6 사이클로알킬, C_4-C_{10} 사이클로알킬알킬, C_4-C_{10} 알킬사이클로알킬, C_5-C_{10} 알킬사이클로알킬알킬, C_1-C_6 할로알킬, C_2-C_6 할로알케닐, C_2-C_6 할로알키닐, C_3-C_6 할로사이클로알킬, 할로젠, 하이드록시, 아미노, 시아노, 니트로, C_1-C_4 알콕시, C_1-C_4 할로알콕시, C_1-C_4 알킬티오, C_1-C_4 알킬설퍼닐, C_1-C_4 알킬설포닐, C_1-C_4 할로알킬티오, C_1-C_4 할로알킬설퍼닐, C_1-C_4 할로알킬설포닐, C_1-C_4 알킬아미노, C_2-C_8 다이알킬아미노, C_3-C_6 사이클로알킬아미노, C_2-C_4 알콕시알킬, C_1-C_4 하이드록시알킬, C_2-C_4 알킬카르보닐, C_2-C_6 알콕시카르보닐, C_2-C_6 알킬카르보닐옥시, C_2-C_6 알킬카르보닐티오, C_2-C_6 알킬아미노카르보닐, C_3-C_8 다이알킬아미노카르보닐 또는 C_3-C_6 트라이알킬실릴인 실시 형태 C136의 화합물.
- [0549] 실시 형태 C138. 환이 R^5 및 R^7 을 연결하는 원자 이외의 환 구성원 상에서 R^8 중에서 선택되는 4개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 실시 형태 C137의 화합물.
- [0550] 실시 형태 C139. 환이 R^5 및 R^7 을 연결하는 원자 이외의 환 구성원 상에서 R^8 중에서 선택되는 2개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 실시 형태 C138의 화합물.
- [0551] 실시 형태 C140. 각 R^8 이 독립적으로 C_1-C_3 알킬인 실시 형태 C137, C138 및 C39 중 어느 하나의 화합물.
- [0552] 실시 형태 C141. R^{7a} 가 $-Z^3T^A$ 인 화학식 1 또는 실시 형태 C26의 화합물.
- [0553] 실시 형태 C142. 각 Z^3 가 독립적으로 직접 결합, O, NR^{22} , C(=O), C(=S), S(O)_m, CHR^{20} , $CHR^{20}-CHR^{20}$, $CR^{24}=CR^{27}$, 또는 $OCHR^{20}$ 인 실시 형태 C141의 화합물.
- [0554] 실시 형태 C143. 각 Z^3 가 독립적으로 직접 결합, O, NR^{22} , S(O)_m, CHR^{20} , $CHR^{20}-CHR^{20}$, $CR^{24}=CR^{27}$, 또는 $OCHR^{20}$ 인 실시 형태 C142의 화합물.

- [0555] 실시 형태 C144. 각 Z^3 가 독립적으로 직접 결합, O, NR^{22} , $S(O)_m$, CHR^{20} , $CHR^{20}-CHR^{20}$ 또는 $CR^{24}=CR^{27}$ 인 실시 형태 C143의 화합물.
- [0556] 실시 형태 C145. 각 Z^3 가 독립적으로 직접 결합, O, NR^{22} , CHR^{20} 또는 $CHR^{20}-CHR^{20}$ 인 실시 형태 C144의 화합물.
- [0557] 실시 형태 C146. 각 Z^3 가 독립적으로 직접 결합, O 또는 NR^{22} 인 실시 형태 145의 화합물.
- [0558] 실시 형태 C147. 각 Z^3 가 독립적으로 직접 결합인 실시 형태 146의 화합물.
- [0559] 실시 형태 C148. 각 Z^3 가 독립적으로 O인 실시 형태 C147의 화합물.
- [0560] 실시 형태 C149. T^A 가 페닐인 실시 형태 C141의 화합물.
- [0561] 실시 형태 C150. T^A 가 5원 또는 6원 헤테로 방향족 환인 실시 형태 C149의 화합물.
- [0562] 실시 형태 C151. R^{7a} 이 $-Z^3T^A$ 인 화학식 1 또는 실시 형태 C126의 화합물.
- [0563] 실시 형태 C152. R^{7a} 이 $-Z^3T^N$ 인 화학식 1 또는 실시 형태 C126의 화합물.
- [0564] 실시 형태 C153. R^{7a} 이 $-Z^3T^P$ 인 화학식 1 또는 실시 형태 C126의 화합물.
- [0565] 실시 형태 C154. 각 T^A 가 증거 5의 T^A-1 내지 T^A-49 중에서 독립적으로 선택되고, 각 T^N 이 T^N-1 내지 T^N-32 중에서 독립적으로 선택되며, 각 T^P 가 T^P-1 내지 T^P-35 중에서 독립적으로 선택되는 화학식 1의 화합물.

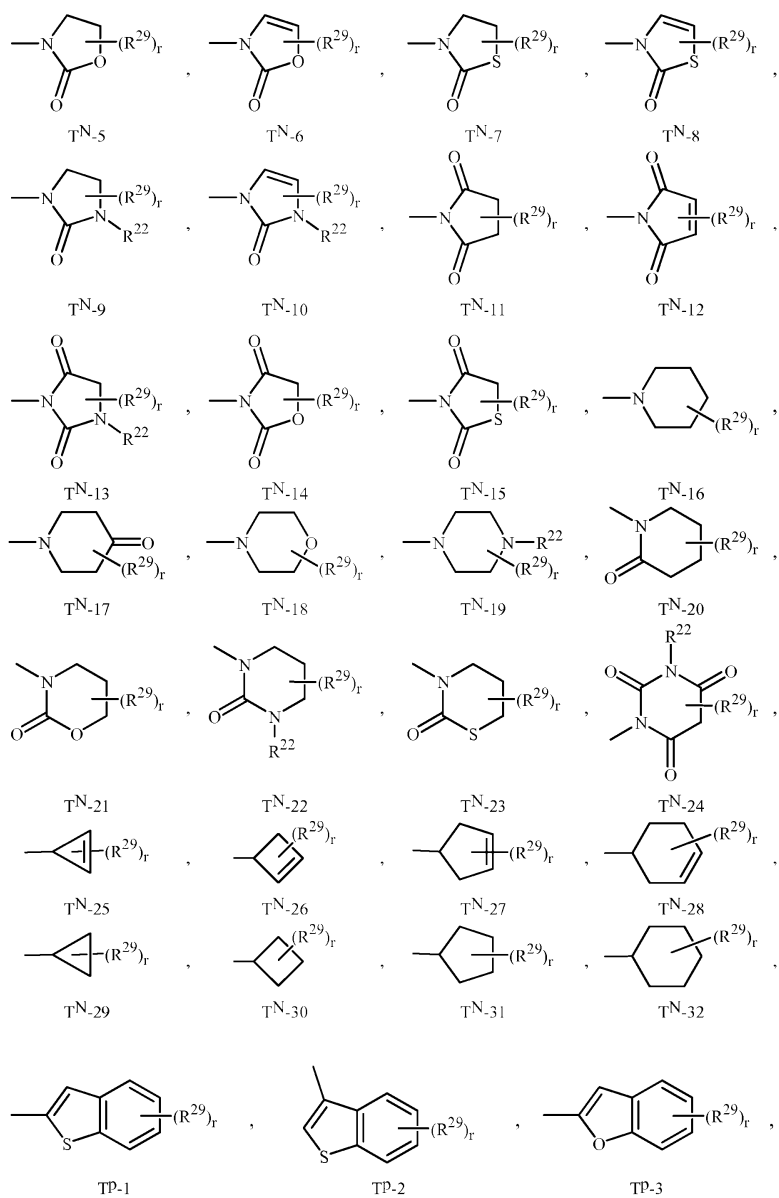
[0566] 증거 5

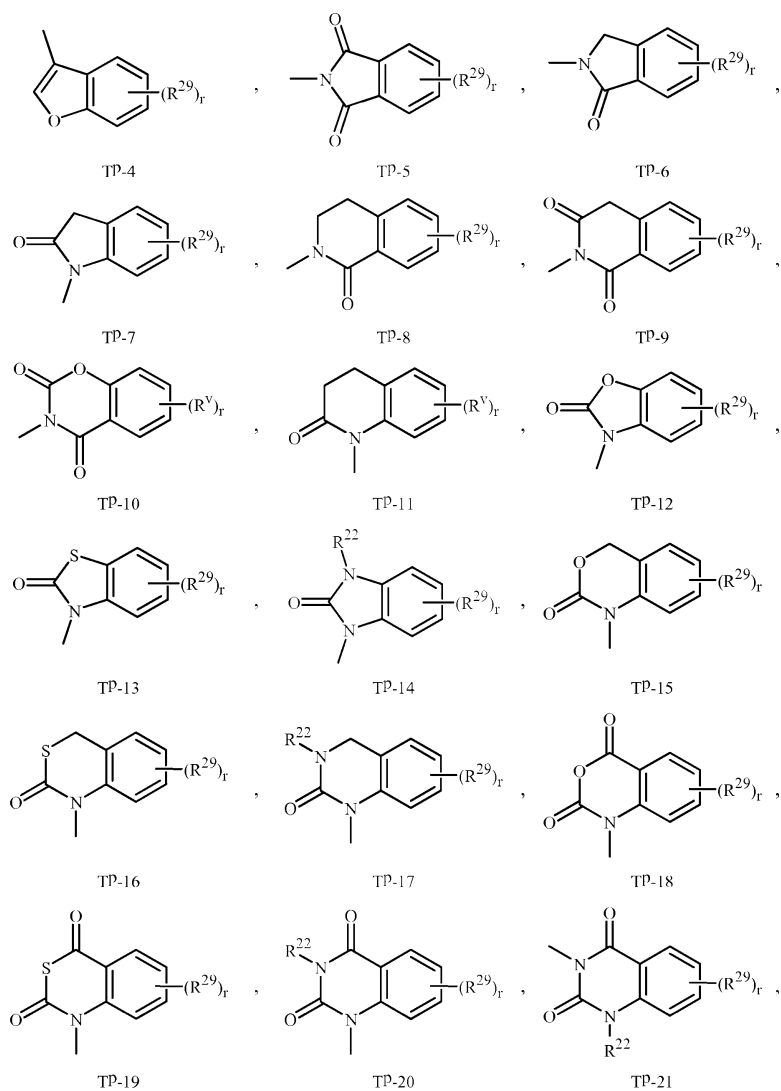


[0567]

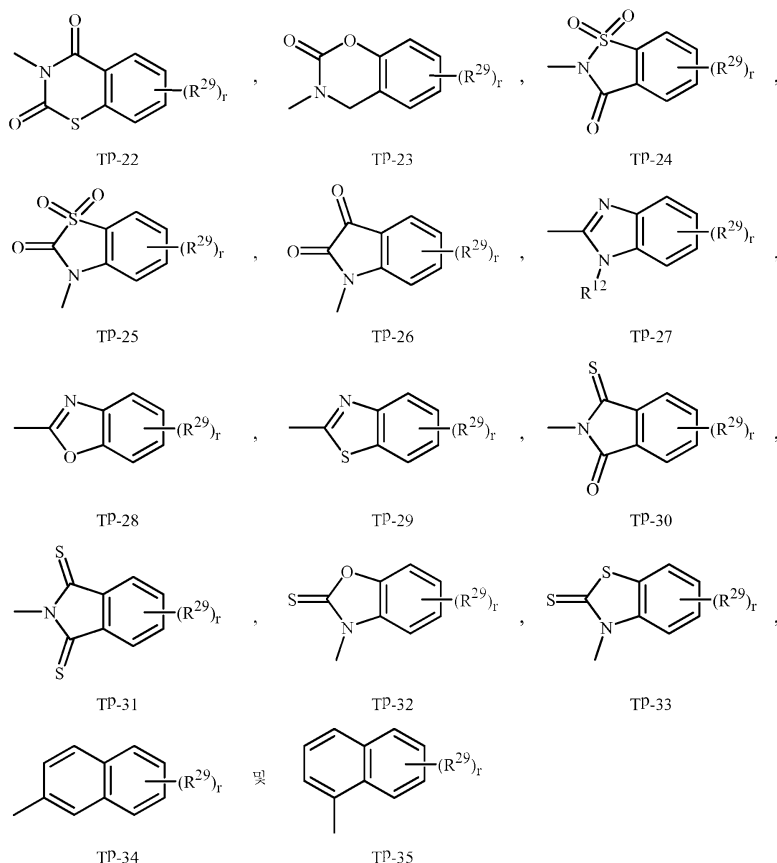


[0568]





[0570]



[0571]

[0572]

(여기서, 좌측으로 돌출되게 나타난 결합은 Z^3 에 결합되고; r은 0, 1, 2, 3, 4 또는 5이다).

[0573]

실시 형태 C155. r이 0, 1, 2 또는 3인 실시 형태 C154의 화합물.

[0574]

실시 형태 C156. T^A 가 T^A-1 내지 T^A-18 , T^A-23 내지 T^A-38 및 T^A-49 중에서 선택되거나, T^N 이 T^N-1 , T^N-2 , T^N-5 , T^N-6 , T^N-9 내지 T^N-16 및 T^N-29 중에서 선택되거나, T^P 가 T^P-1 내지 T^P-6 , T^P-34 및 T^P-38 중에서 선택되는 실시 형태 C154의 화합물.

[0575]

실시 형태 C157. T^A 가 T^A-1 내지 T^A-18 , T^A-23 내지 T^A-38 및 T^A-49 중에서 선택되거나, T^N 이 T^N-1 , T^N-2 , T^N-5 , T^N-6 , T^N-9 내지 T^N-16 및 T^N-29 중에서 선택되는 실시 형태 C156의 화합물.

[0576]

실시 형태 C158. T^A 가 T^A-18 및 T^A-49 중에서 선택되는 실시 형태 C157의 화합물.

[0577]

실시 형태 C159. T^A 가 T^A-18 인 실시 형태 C158의 화합물.

[0578]

실시 형태 C160. T^A 가 T^A-49 인 실시 형태 C158의 화합물.

[0579]

실시 형태 C161. 각 R^{29} 이 독립적으로 H, 할로젠, 시아노, 하이드록시, $-C(=O)OH$, $-C(=O)NH_2$, $-SO_2NH_2$, $-SH$, C_1-C_6 알킬, C_2-C_6 알케닐, C_2-C_6 알킬닐, C_1-C_6 할로알킬, C_2-C_8 알킬카르보닐, C_2-C_8 알콕시카르보닐, C_4-C_{10} 사이클로알콕시카르보닐, C_5-C_{12} 사이클로알킬알콕시카르보닐, C_2-C_8 알킬아미노카르보닐, C_3-C_{10} 다이알킬아미노카르보닐, C_2-C_6 할로알케닐, C_2-C_6 할로알킬닐, C_3-C_8 사이클로알킬, C_3-C_8 할로사이클로알킬, C_4-C_{10} 알킬사이클로알킬, C_4-C_{10} 사이클로알킬알킬, C_6-C_{14} 사이클로알킬사이클로알킬, C_4-C_{10} 할로사이클로알킬알킬, C_5-C_{12} 알킬사이클로알킬알킬, C_2-C_8 알콕시알킬, C_4-C_{10} 사이클로알콕시알킬, C_3-C_{10} 알콕시알콕시알킬, C_2-C_8 알킬티오알킬, C_2-C_8 알킬설퍼닐알킬, C_2-C_8 알킬아미노알킬, C_3-C_{10} 다이알킬아미노알킬, C_2-C_8 할로알킬아미노

알킬, C₄-C₁₀ 사이클로알킬아미노알킬, C₄-C₁₀ 사이클로알킬카르보닐, C₄-C₁₀ 사이클로알킬아미노카르보닐, C₂-C₇ 시아노알킬, C₁-C₆ 하이드록시알킬, C₄-C₁₀ 사이클로알케닐알킬, C₂-C₈ 할로알콕시알킬, C₂-C₈ 알콕시할로알킬, C₃-C₁₀ 알콕시알킬카르보닐, C₃-C₁₀ 알콕시카르보닐알킬, C₃-C₁₀ 알콕시(알킬)아미노카르보닐, C₂-C₈ 알킬아미디노, C₃-C₁₀ 다이알킬아미디노, C₁-C₆ 알콕시, C₁-C₆ 할로알콕시, C₂-C₈ 알킬카르보닐옥시, C₁-C₆ 알킬티오, C₁-C₆ 할로알킬티오, C₁-C₆ 알킬설퍼닐, C₁-C₆ 알킬설포닐, C₁-C₆ 알킬아미노설포닐, C₂-C₈ 다이알킬아미노설포닐, C₃-C₁₀ 트라이알킬설퍼닐, C₂-C₈ 알콕시알콕시, C₁-C₆ 알킬아미노, C₂-C₈ 다이알킬아미노, C₂-C₈ 알킬카르보닐아미노, C₁-C₆ 알킬설포닐아미노 또는 C₁-C₆ 할로알킬아미노인 화학식 1의 화합물.

[0580] 실시 형태 C162. 각 R²⁹이 독립적으로 H, 할로젠, 시아노, 하이드록시, C₁-C₆ 알킬, C₂-C₆ 알케닐, C₂-C₆ 알키닐, C₁-C₆ 할로알킬, C₂-C₈ 알킬카르보닐, C₂-C₈ 알콕시카르보닐, C₃-C₈ 사이클로알킬, C₄-C₁₀ 알킬사이클로알킬, C₄-C₁₀ 사이클로알킬알킬, C₆-C₁₄ 사이클로알킬사이클로알킬, C₂-C₈ 알콕시알킬, C₃-C₁₀ 다이알킬아미노알킬, C₂-C₇ 시아노알킬, C₁-C₆ 하이드록시알킬, C₂-C₈ 할로알콕시알킬, C₃-C₁₀ 알콕시알킬카르보닐, C₃-C₁₀ 알콕시카르보닐알킬, C₁-C₆ 알콕시, C₁-C₆ 할로알콕시, C₂-C₈ 알킬카르보닐옥시, C₁-C₆ 알킬티오, C₁-C₆ 할로알킬티오, C₁-C₆ 알킬설퍼닐, C₁-C₆ 알킬설포닐, C₁-C₆ 알킬아미노 또는 C₂-C₈ 다이알킬아미노인 실시 형태 C161의 화합물.

[0581] 실시 형태 C163. 각 R²⁹이 독립적으로 H, 할로젠, 시아노, 하이드록시, C₁-C₂ 알킬, C₁-C₂ 할로알킬, C₁-C₂ 알콕시 또는 C₁-C₂ 할로알콕시인 실시 형태 C162의 화합물.

[0582] 실시 형태 C164. G가 2 위치에서 화학식 1의 X에 연결되고, 4 위치에서 화학식 1의 Z¹에 연결되는 임의로 치환된 티아졸 환이고, A가 CHR¹⁵이며, J가 4 위치에서 화학식 1의 Z¹에 연결되는 임의로 치환된 아이속사졸 환이면, Z¹이 O, C(=O), S(O)_m, CHR²⁰ 또는 NR²¹인 화학식 1의 화합물.

[0583] 실시 형태 C165. G가 2 위치에서 화학식 1의 X에 연결되고, 4 위치에서 화학식 1의 Z¹에 연결되는 임의로 치환된 티아졸 환이고, J가 4 위치에서 화학식 1의 Z¹에 연결되는 임의로 치환된 아이속사졸 환이면, Z¹이 O, C(=O), S(O)_m, CHR²⁰ 또는 NR²¹인 화학식 1의 화합물.

[0584] 실시 형태 C166. G가 2 위치에서 화학식 1의 X에 연결되고, 4 위치에서 화학식 1의 Z¹에 연결되는 임의로 치환된 티아졸 환이면, A가 CHR¹⁵이고, Z¹이 직접 결합이며, J가 아이속사졸 환의 3 위치 또는 5 위치에서 화학식 1의 나머지 부분에 연결되는 임의로 치환된 아이속사졸 환인 화학식 1의 화합물.

[0585] 실시 형태 C167. G가 2 위치에서 화학식 1의 X에 연결되고, 4 위치에서 화학식 1의 Z¹에 연결되는 임의로 치환된 티아졸 환이면, A가 CHR¹⁵이고, Z¹이 직접 결합이며, J가 아이속사졸 환의 3 위치에서 화학식 1의 나머지 부분에 연결되는 임의로 치환된 아이속사졸 환인 화학식 1의 화합물.

[0586] 실시 형태 C168. G가 2 위치에서 화학식 1의 X에 연결되고, 4 위치에서 화학식 1의 Z¹에 연결되는 임의로 치환된 티아졸 환이면, Z¹이 직접 결합이고, J가 아이속사졸 환의 3 위치에서 화학식 1의 나머지 부분에 연결되는 임의로 치환된 아이속사졸 환인 화학식 1의 화합물.

[0587] 실시 형태 C169. X가 X²이고, X를 포함하는 환이 포화되면, A가 CHR¹⁵이고, G가 임의로 치환된 5원 헤테로 방향족 환이며, Z¹이 직접 결합이고, J가 페닐 또는 5원 또는 6원 헤테로 방향족 환 또는 나프탈레닐 또는 8원 내지 11원 헤테로 방향족 이환계이며, J 환 또는 환계가 H 이외의 적어도 하나의 R⁵로 치환되는 화학식 1의 화합물.

[0588] 실시 형태 C170. X가 X²이고, X를 포함하는 환이 포화되면, A가 CHR¹⁵이고, G가 임의로 치환된 5원 헤테로 방향족 환이며, Z¹이 직접 결합이고, J가 페닐 또는 5원 또는 6원 헤테로 방향족 환 또는 나프탈레닐 또는 8원 내지

11원 헤테로 방향족 이환계이며, J 환 또는 환계는 Z^2Q 인 적어도 하나의 R^5 로 치환되는 화학식 1의 화합물.

[0589] 실시 형태 C171. X가 X^1 이고, X를 포함하는 환이 포화되면, A가 NH이고, G가 2 위치에서 화학식 1의 X에 연결되고, 4 위치에서 화학식 1의 Z^1 에 연결되는 임의로 치환된 티아졸 환이며, J가 2 위치에서 화학식 1의 나머지 부분에 연결되는 임의로 치환된 이미다졸 환이고, Z^1 이 O, C(=O), S(O)_m, CHR²⁰ 또는 NR²¹인 화학식 1의 화합물.

[0590] 실시 형태 C172. X가 X^1 이고, X를 포함하는 환이 포화되면, A가 NR¹⁶이고, G가 2 위치에서 화학식 1의 X에 연결되고 4 위치에서 화학식 1의 Z^1 에 연결되는 임의로 치환된 티아졸 환이며, J가 2 위치에서 화학식 1의 나머지 부분에 연결되는 임의로 치환된 이미다졸 환이고, Z^1 이 O, C(=O), S(O)_m, CHR²⁰ 또는 NR²¹인 화학식 1의 화합물.

[0591] 실시 형태 C173. G가 2 위치에서 화학식 1의 X에 연결되고, 4 위치에서 화학식 1의 Z^1 에 연결되는 임의로 치환된 티아졸 환이면, J가 임의로 치환된 이미다졸릴 이외의 것인 화학식 1의 화합물.

[0592] 상기 실시 형태 1 내지 179 및 본 명세서에 기재된 임의의 다른 실시 형태를 비롯한 본 발명의 실시 형태는 어떤 식으로도 조합될 수 있으며, 실시 형태에 있어서의 변수에 대한 설명은 실시 형태에서 추가로 정의되지 않는 한, 화학식 1의 화합물을 포함하는 조성물 뿐만 아니라, 화학식 1의 화합물, 화학식 1의 화합물을 제조하는데 유용한 출발 화합물 및 중간 화합물에도 관한 것이다. 게다가, 상기 실시 형태 1 내지 179 및 본 명세서에 기재된 임의의 다른 실시 형태를 비롯한 본 발명의 실시 형태, 및 이들의 임의의 조합은 본 발명의 화합물, 조성물 및 방법에 관한 것이다. 실시 형태 1 내지 179의 조합들이 하기에 의해 예시된다:

[0593] 실시 형태 A1.

[0594] E가 E-1 또는 E-2이고;

[0595] G가 탄소 환 구성원 상에서 R^3 , 질소 환 구성원 상에서 R^{11} 중에서 선택되는 2개 이하의 치환기로 임의로 치환된 5원 복소환이며;

[0596] 각 R^3 가 독립적으로 할로젠, C₁-C₃ 알킬 또는 C₁-C₃ 할로알킬이고;

[0597] 각 R^{11} 이 독립적으로 C₁-C₃ 알킬이며;

[0598] J가 증거 3에 나타난 J-1 내지 J-82 (여기서, 좌측으로 돌출되게 나타난 결합은 화학식 1의 Z^1 및 J 환의 이용 가능한 탄소 또는 질소 원자 환 구성원에 결합되고; x가 0 내지 5의 정수이다) 중 하나이고;

[0599] X가 X^1 , X^2 , X^3 , X^4 , X^5 , X^6 , X^7 또는 X^8 이며;

[0600] Z^1 이 직접 결합, CHR²⁰ 또는 NR²¹이고;

[0601] 각 R^{21} 이 독립적으로 H, C₁-C₃ 알킬, C₁-C₃ 알킬카르보닐 또는 C₂-C₃ 알콕시카르보닐이며;

[0602] R^{1a} , R^{1b} 및 R^{1c} 가 독립적으로 임의로 치환된 페닐, 임의로 치환된 나프탈레닐 또는 임의로 치환된 5원 또는 6원 헤테로 방향족 환; 또는 시아노, C₁-C₈ 알킬, C₂-C₈ 알케닐, C₂-C₈ 알키닐, C₁-C₈ 할로알킬, C₂-C₈ 할로알케닐, C₂-C₈ 할로알키닐, C₂-C₈ 할로알킬티오알킬, C₃-C₈ 사이클로알킬, C₂-C₈ 알콕시알킬, C₂-C₈ 할로알콕시알킬, C₃-C₈ 알콕시카르보닐알킬, C₃-C₈ 할로알콕시카르보닐알킬, C₂-C₈ 알킬티오알킬, C₂-C₈ 알킬설퍼닐알킬, C₂-C₈ 알킬설포닐알킬, C₂-C₈ 알킬아미노알킬, C₂-C₈ 알킬카르보닐옥시, C₂-C₈ 할로알킬카르보닐옥시, C₃-C₁₀ 다이알킬아미노알킬, C₁-C₈ 알콕시, C₁-C₈ 할로알콕시, C₁-C₈ 알킬티오, C₃-C₁₀ 트라이알킬실릴, C₁-C₈ 알킬아미노, C₂-C₈ 다이알킬아미노, C₂-C₈ 알킬카르보닐아미노, 피롤리디닐, 피페리디닐 또는 모르폴리닐이고;

[0603] 각 R^2 가 독립적으로 할로젠, 시아노, 하이드록시, C₁-C₂ 알킬, C₁-C₂ 할로알킬 또는 C₁-C₂ 알콕시이며;

- [0604] R^5 가 독립적으로 H, 할로젠, 시아노, C_1-C_6 알킬, C_2-C_6 알케닐, C_2-C_6 알키닐, C_1-C_6 할로알킬, C_2-C_6 할로알케닐, C_2-C_6 할로알키닐, C_3-C_8 사이클로알킬, C_3-C_8 할로사이클로알킬, C_4-C_{10} 알킬사이클로알킬, C_4-C_{10} 사이클로알킬알킬, C_2-C_6 알콕시알킬, C_4-C_{10} 사이클로알콕시알킬, C_3-C_8 알콕시알콕시알킬, C_2-C_6 알킬티오알킬, C_2-C_6 알콕시카르보닐, C_1-C_6 알콕시, C_1-C_6 할로알콕시, C_3-C_8 사이클로알콕시, C_3-C_8 할로사이클로알콕시, C_4-C_{10} 사이클로알킬알콕시, C_2-C_6 알케닐옥시, C_2-C_6 할로알케닐옥시, C_2-C_6 알키닐옥시, C_2-C_6 할로알키닐옥시, C_2-C_6 알콕시알콕시, C_2-C_6 알킬카르보닐옥시, C_2-C_6 할로알킬카르보닐옥시, C_4-C_8 사이클로알킬카르보닐옥시, C_3-C_6 알킬카르보닐알콕시, C_1-C_6 알킬티오, C_1-C_6 할로알킬티오, C_3-C_8 사이클로알킬티오, C_3-C_{10} 트라이알킬실릴, $-NR^{25,26}$ 또는 $-Z^2Q$ 이고;
- [0605] 각 R^{26} 가 독립적으로 C_1-C_3 알킬 또는 $-Z^4Q$ 이며;
- [0606] 각 Z^4 가 독립적으로 $C(=O)$ 또는 $S(=O)_2$ 이고;
- [0607] 각 Z^2 가 독립적으로 O, $C(=O)$, $S(O)_2$, CHR^{20} 또는 NR^{21} 이며;
- [0608] 각 Q가 독립적으로, 각각, 탄소 원자 또는 질소 원자 환 구성원 상에서 R^{7a} 중에서 독립적으로 선택되는 1개 이하의 치환기로 임의로 치환되고, 탄소 원자 환 구성원 상에서 R^7 , 질소 원자 환 구성원 상에서 R^{12} 중에서 독립적으로 선택되는 5개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 페닐, 벤질, 나프탈레닐, 5원 내지 6원 헤테로 방향족 환 또는 8원 내지 11원 헤테로 방향족 이환계이거나;
- [0609] 각각, $C(=O)$, $C(=S)$, $S(=O)_s(=NR^{23})_f$ 및 $SiR^{17,18}$ 으로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 환 구성원을 임의로 포함하고, 탄소 원자 또는 질소 원자 환 구성원 상에서 R^{7a} 중에서 독립적으로 선택되는 1개 이하의 치환기로 임의로 치환되며, 탄소 원자 환 구성원 상에서 R^7 , 질소 원자 환 구성원 상에서 R^{12} 중에서 독립적으로 선택되는 5개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 3원 내지 7원 비방향족 탄소환, 5원, 6원 또는 7원 비방향족 복소환 또는 8원 내지 11원 비방향족 이환계이고;
- [0610] 각 R^7 이 독립적으로 할로젠, 시아노, 하이드록시, 아미노, 니트로, C_1-C_3 알킬, C_1-C_3 할로알킬, C_1-C_2 알콕시 또는 C_1-C_2 할로알콕시이거나;
- [0611] R^5 및 R^7 이 R^5 및 R^7 를 연결하는 원자와 함께, 탄소 원자 및 임의로 1개 이하의 O, 1개 이하의 S 및 1개 이하의 N 중에서 선택되는 3개 이하의 헤테로원자, 및 $C(=O)$, $C(=S)$, $S(=O)_s(=NR^{23})_f$ 및 $SiR^{17,18}$ 중에서 선택되는 2개 이하의 환 구성원 중에서 선택되는 환 구성원을 포함하고, R^8 중에서 선택되는 치환기로 임의로 치환되는 임의로 치환된 5원 내지 7원 환을 형성하며;
- [0612] 각 R^8 이 독립적으로 할로젠, 시아노, 하이드록시, 아미노, 니트로, C_1-C_6 알킬, C_2-C_6 알케닐, C_2-C_6 알키닐, C_3-C_6 사이클로알킬, C_4-C_{10} 사이클로알킬알킬, C_4-C_{10} 알킬사이클로알킬, C_5-C_{10} 알킬사이클로알킬알킬, C_1-C_6 할로알킬, C_2-C_6 할로알케닐, C_2-C_6 할로알키닐, C_3-C_6 할로사이클로알킬, C_1-C_4 알콕시, C_1-C_4 할로알콕시, C_1-C_4 알킬티오, C_1-C_4 알킬설퍼닐, C_1-C_4 알킬설포닐, C_1-C_4 할로알킬티오, C_1-C_4 할로알킬설퍼닐, C_1-C_4 할로알킬설포닐, C_1-C_4 알킬아미노, C_2-C_8 다이알킬아미노, C_3-C_6 사이클로알킬아미노, C_2-C_4 알콕시알킬, C_1-C_4 하이드록시알킬, C_2-C_4 알킬카르보닐, C_2-C_6 알콕시카르보닐, C_2-C_6 알킬카르보닐옥시, C_2-C_6 알킬카르보닐티오, C_2-C_6 알킬아미노카르보닐, C_3-C_8 다이알킬아미노카르보닐 또는 C_3-C_6 트라이알킬실릴이고;
- [0613] 각 R^{7a} 가 독립적으로 $-Z^3T^A$ 이며;
- [0614] 각 R^{29} 이 독립적으로 H, 할로젠, 시아노, 하이드록시, C_1-C_2 알킬, C_1-C_2 할로알킬, C_1-C_2 알콕시 또는 C_1-C_2 할로

알콕시이고;

- [0615] 각 T^A 가 증거 5에 나타난 T^A -18 및 T^A -49 (여기서, 좌측으로 돌출되게 나타난 결합은 화학식 1의 Z^3 에 결합되고; r 은 0, 1, 2, 3, 4 또는 5이다) 중에서 독립적으로 선택되며;
- [0616] R^{15} 이 H, 할로젠, 시아노, 하이드록시, $-CHO$, C_1-C_4 알킬, C_1-C_4 할로알킬, C_1-C_4 알콕시 또는 C_2-C_5 알콕시카르보닐이고;
- [0617] R^{16} 이 H, C_1-C_4 알킬, C_1-C_4 할로알킬, C_2-C_4 알킬카르보닐, C_2-C_4 할로알킬카르보닐 또는 C_2-C_4 알콕시카르보닐인 화학식 1의 화합물.
- [0618] 실시 형태 A2.
- [0619] G가 증거 2에 나타난 G-1 내지 G-59 (여기서, 좌측으로 돌출하는 결합은 화학식 1의 X에 결합되고, 우측으로 돌출하는 결합은 Z^1 에 결합된다) 중의 하나이고;
- [0620] 각 R^{3a} 가 독립적으로 H 및 R^3 중에서 선택되며;
- [0621] R^{11a} 가 H 및 R^{11} 중에서 선택되고;
- [0622] J가 J-1, J-2, J-3, J-4, J-5, J-7, J-8, J-9, J-10, J-11, J-12, J-14, J-15, J-16, J-20, J-24, J-25, J-26, J-29, J-30, J-37, J-38, J-45 및 J-69 중에서 선택되며;
- [0623] x 가 0 내지 3의 정수이고;
- [0624] X 가 X^1 , X^2 또는 X^3 이며;
- [0625] Z^1 이 직접 결합 또는 CHR^{20} 이고;
- [0626] 각 R^{21} 이 독립적으로 H 또는 메틸이며;
- [0627] Z^5 및 Z^6 가 독립적으로 각각 직접 결합이고;
- [0628] R^{1a} 및 R^{1b} 가 독립적으로, 각각 탄소 환 구성원 상에서 R^{4a} , 질소 환 구성원 상에서 R^{4b} 중에서 선택되는 3개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 페닐, 나프탈레닐 또는 5원 또는 6원 헤테로 방향족 환; 또는 시아노, C_1-C_8 알킬, C_2-C_8 알케닐, C_2-C_8 알키닐, C_1-C_8 할로알킬, C_2-C_8 할로알케닐, C_2-C_8 할로알키닐, C_2-C_8 할로알킬티오알킬, C_3-C_8 사이클로알킬, C_2-C_8 알콕시알킬, C_2-C_8 할로알콕시알킬, C_3-C_8 알콕시카르보닐알킬, C_3-C_8 할로알콕시카르보닐알킬, C_2-C_8 알킬티오알킬, C_2-C_8 알킬설퍼닐알킬, C_2-C_8 알킬설포닐알킬, C_2-C_8 알킬아미노알킬, C_2-C_8 알킬카르보닐옥시, C_2-C_8 할로알킬카르보닐옥시, C_3-C_{10} 다이알킬아미노알킬, C_1-C_8 알콕시, C_1-C_8 할로알콕시, C_1-C_8 알킬티오, C_3-C_{10} 트라이알킬실릴, C_1-C_8 알킬아미노, C_2-C_8 다이알킬아미노, C_2-C_8 알킬카르보닐아미노, 피롤리디닐, 피페리디닐 또는 모르폴리닐이며;
- [0629] 각 R^{4a} 가 독립적으로 할로젠, 시아노, 하이드록시, 아미노, 니트로, C_1-C_6 알킬, C_2-C_6 알케닐, C_2-C_6 알키닐, C_3-C_6 사이클로알킬, C_4-C_{10} 사이클로알킬알킬, C_4-C_{10} 알킬사이클로알킬, C_5-C_{10} 알킬사이클로알킬알킬, C_1-C_6 할로알킬, C_2-C_6 할로알케닐, C_2-C_6 할로알키닐, C_3-C_6 할로사이클로알킬, C_1-C_4 알콕시, C_1-C_4 할로알콕시, C_1-C_4 알킬티오, C_1-C_4 알킬설퍼닐, C_1-C_4 알킬설포닐, C_1-C_4 할로알킬티오, C_1-C_4 할로알킬설퍼닐, C_1-C_4 할로알킬설포닐, C_1-C_4 알킬아미노, C_2-C_8 다이알킬아미노, C_3-C_6 사이클로알킬아미노, C_2-C_4 알콕시알킬, C_1-C_4 하이드록시알킬, C_2-C_4 알킬카르보닐, C_2-C_6 알콕시카르보닐, C_2-C_6 알킬카르보닐옥시, C_2-C_6 알킬카르보닐티오, C_2-C_6 알킬아미노카르보닐, C_3-C_8 다이알킬아미노카르보닐 또는 C_3-C_6 트라이알킬실릴이고;
- [0630] 각 R^{4b} 가 독립적으로 C_1-C_6 알킬, C_3-C_6 알케닐, C_3-C_6 알키닐, C_3-C_6 사이클로알킬, C_1-C_6 할로알킬, C_3-C_6 할로알

케닐, C₃-C₆ 할로알킬닐, C₃-C₆ 할로사이클로알킬 또는 C₂-C₄ 알콕시알킬이며;

[0631] 각 R²가 독립적으로 시아노, 하이드록시, 메틸 또는 메톡시이고;

[0632] 각 R⁵가 독립적으로 H, 할로젠, 시아노, C₁-C₆ 알킬, C₁-C₆ 할로알킬, C₃-C₈ 사이클로알킬, C₃-C₈ 할로사이클로알킬, C₂-C₆ 알콕시알킬, C₁-C₆ 알콕시, C₁-C₆ 할로알콕시, C₃-C₈ 사이클로알콕시, C₂-C₆ 알케닐옥시, C₂-C₆ 할로알케닐옥시, C₂-C₆ 알키닐옥시, C₂-C₆ 알콕시알콕시, C₂-C₆ 알킬카르보닐옥시, C₂-C₆ 할로알킬카르보닐옥시, C₁-C₆ 알킬티오, C₁-C₆ 할로알킬티오, C₃-C₁₀ 트라이알킬실릴, -NR^{25,26} 또는 -Z²Q이며;

[0633] 각 Z²가 독립적으로 직접 결합 또는 NR²¹이고;

[0634] Q가 증거 4에 나타난 Q-1 내지 Q-106 (여기서, p는 0 내지 5의 정수이고, q는 0 내지 2의 정수이다) 중의 하나이며;

[0635] 각 R⁷이 독립적으로 할로젠, 시아노, 하이드록시, C₁-C₃ 알킬, C₁-C₃ 할로알킬, C₁-C₂ 알콕시 또는 C₁-C₂ 할로알콕시이고;

[0636] 각 R²⁹이 독립적으로 H, 할로젠, C₁-C₂ 알킬, C₁-C₂ 할로알킬 또는 C₁-C₂ 알콕시이며;

[0637] R¹⁵이 H, 할로젠, 시아노, 하이드록시, 메틸, 메톡시 또는 메톡시카르보닐이고;

[0638] R¹⁶이 H, 메틸, 메틸카르보닐 또는 메톡시카르보닐이며;

[0639] R²⁸이 H, 할로젠, 시아노 또는 C₁-C₄ 알킬이고;

[0640] 각 R³⁰ 및 R³¹이 C₁-C₆ 알킬, C₃-C₄ 알케닐, C₃-C₄ 알키닐, C₁-C₄ 할로알킬, C₃-C₆ 할로알케닐, C₃-C₆ 할로알킬닐, C₂-C₆ 알콕시알킬 및 C₃-C₆ 사이클로알킬 중에서 독립적으로 선택되며;

[0641] R³²가 H, 시아노, 하이드록시, 아미노, C₁-C₆ 알킬 또는 C₁-C₆ 알콕시이고;

[0642] R³³가 H 또는 C₁-C₆ 알킬인 실시 형태 A1의 화합물.

[0643] 실시 형태 A3.

[0644] G가 G-1, G-2, G-7, G-8, G-14, G-15, G-23, G-24, G-26, G-27, G-36, G-37, G-38, G-49, G-50 및 G-55 중에서 선택되고;

[0645] G가 비치환되며;

[0646] J가 J-4, J-5, J-8, J-11, J-15, J-16, J-20, J-29, J-30, J-37, J-38 및 J-69 중에서 선택되고;

[0647] x가 0 내지 2의 정수이며;

[0648] W가 O이고;

[0649] X가 X¹ 또는 X²이며;

[0650] Z¹이 직접 결합이고;

[0651] R^{1a} 및 R^{1b}가 독립적으로 증거 1에 나타난 U-1 내지 U-50 (여기서, R⁴가 탄소 환 구성원에 결합되면, 상기 R⁴는 R^{4a} 중에서 선택되고, R⁴가 질소 환 구성원에 결합되면, 상기 R⁴는 R^{4b} 중에서 선택되며, k는 0, 1 또는 2이다); 또는 C₂-C₅ 알킬, C₂-C₅ 알케닐, C₂-C₅ 할로알킬, C₂-C₅ 할로알케닐, C₂-C₅ 할로알킬티오알킬, C₂-C₅ 알콕시알킬, C₂-C₅ 할로알콕시알킬, C₂-C₅ 알킬티오알킬, C₂-C₅ 알킬아미노알킬, C₂-C₅ 알킬카르보닐옥시, C₂-C₅ 할로알킬카르보

닐옥시, C₂-C₅ 알콕시, C₂-C₅ 할로알콕시, C₂-C₅ 알킬티오, C₂-C₅ 알킬아미노 또는 C₂-C₅ 알킬카르보닐아미노 중에서 선택되며;

[0652] 각 R⁵가 독립적으로 H, 할로젠, 시아노, C₁-C₆ 알킬, C₁-C₆ 할로알킬, C₁-C₆ 알콕시, C₁-C₆ 할로알콕시, -NR²⁵R²⁶ 또는 -Z²Q이고;

[0653] 각 Z²가 직접 결합이며;

[0654] 각 Q가 독립적으로 Q-1, Q-20, Q-32 내지 Q-34, Q-45 내지 Q-47, Q-60 내지 Q-73, Q-76 내지 Q-79, Q-84 내지 Q-94 및 Q-98 내지 Q-106이고;

[0655] p가 0 내지 3의 정수이며;

[0656] q가 0 내지 1의 정수이고;

[0657] 각 R⁷이 독립적으로 F, Cl, 시아노, 하이드록시, 메틸 또는 메톡시이며;

[0658] R²⁸이 H, 할로젠 또는 시아노이고;

[0659] 각 R³⁰ 및 R³¹이 C₁-C₆ 알킬, C₃-C₄ 알케닐, C₃-C₄ 알키닐 및 C₁-C₄ 할로알킬 중에서 독립적으로 선택되며;

[0660] R³²가 H, 시아노, 하이드록시, 아미노, C₁-C₃ 알킬 또는 C₁-C₃ 알콕시 중에서 선택되고;

[0661] R³³가 H 또는 메틸이며;

[0662] n이 0인 실시 형태 A2의 화합물.

[0663] 실시 형태 A4.

[0664] G가 G-1, G-2, G-15, G-26, G-27, G-36, G-37 및 G-38 중에서 선택되고;

[0665] J가 J-29이며;

[0666] X가 X¹ 또는 X²이고; X를 포함하는 환이 포화되며;

[0667] R^{1a} 및 R^{1b}가 독립적으로 증거 1의 U-1 내지 U-3, U-11, U-13, U-20, U-22, U-23, U-36 내지 U-39 및 U-50 (여기서, R⁴가 탄소 환 구성원에 결합되면, 상기 R⁴는 R^{4a} 중에서 선택되고, R⁴가 질소 환 구성원에 결합되면, 상기 R⁴는 R^{4b} 중에서 선택되며, k는 0, 1 또는 2이다); 또는 C₃-C₅ 알킬, C₃-C₅ 알케닐, C₃-C₅ 할로알킬, C₃-C₅ 할로알케닐, C₂-C₄ 할로알킬티오알킬, C₂-C₄ 알콕시알킬, C₂-C₄ 할로알콕시알킬, C₂-C₄ 알킬티오알킬, C₂-C₄ 알킬아미노알킬, C₂-C₃ 알킬카르보닐옥시, C₂-C₃ 할로알킬카르보닐옥시, C₂-C₄ 알콕시, C₂-C₄ 할로알콕시, C₂-C₄ 알킬티오, C₂-C₄ 알킬아미노 또는 C₂-C₃ 알킬카르보닐아미노 중에서 선택되고;

[0668] 각 R⁵가 독립적으로 H, 할로젠, 시아노, C₁-C₆ 알킬, C₁-C₆ 할로알킬, C₁-C₆ 알콕시, C₁-C₆ 할로알콕시 또는 -Z²Q이고;

[0669] Q가 Q-1, Q-45, Q-63, Q-64, Q-65, Q-68, Q-69, Q-70, Q-71, Q-72, Q-73, Q-76, Q-78, Q-79, Q-84, Q-85, Q-98, Q-99, Q-100 및 Q-101 내지 Q-106 중에서 선택되며;

[0670] R²⁸이 Cl, F 또는 시아노이고;

[0671] 각 R³⁰ 및 R³¹이 C₁-C₄ 알킬 중에서 독립적으로 선택되며;

[0672] R³²가 H, 시아노, 하이드록시, C₁-C₂ 알킬 또는 C₁-C₂ 알콕시이고;

- [0673] R^{33} 가 H인 실시 형태 A3의 화합물.
- [0674] 실시 형태 A5.
- [0675] G가 G-1, G-2, G-15, G-26 및 G-36 중에서 선택되고;
- [0676] J가 증거 A의 J-29-1 내지 J-29-60 중의 어느 하나이며;
- [0677] X가 X^1 이고;
- [0678] R^{1a} 및 R^{1b} 가 각각 증거 1의 U-1, U-20 및 U-50 (여기서, R^4 가 R^{4a} 중에서 선택되고, k가 0, 1 또는 2이다); 또는 C_3-C_5 할로알킬, C_3-C_5 할로알케닐, C_3-C_5 할로알킬티오알킬, C_3-C_5 할로알콕시알킬, C_2-C_3 할로알킬카르보닐옥시 또는 C_2-C_4 할로알콕시 중에서 선택되며;
- [0679] 각 R^5 가 독립적으로 시아노, C_1-C_6 알킬, C_1-C_6 알콕시 또는 $-Z^2Q$ 이고;
- [0680] Q가 Q-45, Q-63, Q-64, Q-65, Q-68, Q-69, Q-70, Q-71, Q-72, Q-84 및 Q-85 중에서 선택되며;
- [0681] 각 R^{30} 및 R^{31} 이 독립적으로 에틸 또는 메틸인 실시 형태 A4의 화합물.
- [0682] 구체적인 실시 형태는 하기로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 화학식 1의 화합물을 포함한다:
- [0683] 메틸 4-[4-(2,3-다이하이드로스포로[1H-인덴-1,5'(4'H)-아이속사졸]-3'-일)-2-티아졸릴]-N-(2,5-다이메틸페닐)-1-피페리딘카르복시미데이트,
- [0684] 메틸 4-[4-[5-(2,6-다이플루오로페닐)-4,5-다이하이드로-3-아이속사졸릴]-2-티아졸릴]-N-(2,5-다이메틸페닐)-1-피페리딘카르복시미데이트,
- [0685] 메틸 4-[4-[4,5-다이하이드로-5-(2-옥소-3(2H)-벤족사졸릴)-3-아이속사졸릴]-2-티아졸릴]-N-(2,5-다이메틸페닐)-1-피페리딘카르복시미데이트,
- [0686] 메틸 N-(2,5-다이메틸페닐)-4-[4-[5-(2,6-다이메틸페닐)-4,5-다이하이드로-3-아이속사졸릴]-2-티아졸릴]-1-피페리딘카르복시미데이트,
- [0687] 메틸 4-[4-(3',4'-다이하이드로스포로[아이속사졸-5(4H),1'(2'H)-나프탈렌]-3-일)-2-티아졸릴]-N-(2,5-다이메틸페닐)-1-피페리딘카르복시미데이트,
- [0688] 메틸 N-(2,5-다이메틸페닐)-4-[4-[5-(2-플루오로페닐)-4,5-다이하이드로-3-아이속사졸릴]-2-티아졸릴]-1-피페리딘카르복시미데이트,
- [0689] 메틸 4-[4-(5-시아노-4,5-다이하이드로-5-페닐-3-아이속사졸릴)-2-티아졸릴]-N-(2,5-다이메틸페닐)-1-피페리딘카르복시미데이트,
- [0690] 메틸 4-[4-[5-(2-시아노페닐)-4,5-다이하이드로-3-아이속사졸릴]-2-티아졸릴]-N-(2,5-다이메틸페닐)-1-피페리딘카르복시미데이트, 및
- [0691] 4-[4-(4,5-다이하이드로-5-페닐-3-아이속사졸릴)-2-티아졸릴]-N-(2,5-다이메틸페닐)-1-피페리딘카르복시미드 아미드.
- [0692] 실시 형태 1 내지 179의 조합들이 추가로 하기로 예시된다:
- [0693] 실시 형태 B1.
- [0694] E가 E-1, E-2 또는 E-3이고;
- [0695] R^{1a} , R^{1b} , R^{1c} 및 R^{1d} 가 탄소 환 구성원 상에서 R^{4a} , 질소 환 구성원 상에서 R^{4b} 중에서 독립적으로 선택되는 3개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 페닐 또는 5원 또는 6원 헤테로 방향족 환; 또는 C_1-C_8 알킬, C_2-C_8 알케닐, C_1-C_8 할로알킬, C_2-C_8 알콕시알킬, C_2-C_8 알킬티오알킬, C_2-C_8 알킬아미노알킬, C_1-C_8 알콕시, C_1-C_8 알킬티오, 피롤리디닐, 피페리디닐 또는 모르폴리닐이며;

- [0696] G가 탄소 환 구성원 상에서 R^3 , 질소 환 구성원 상에서 R^{11} 중에서 선택되는 2개 이하의 치환기로 임의로 치환된 5원 복소환이고;
- [0697] J가 J-1 내지 J-82 (증거 3에 나타냄) (여기서, 좌측으로 돌출되게 나타낸 결합은 Z^1 에 결합된다) 중의 하나이며;
- [0698] 각 R^2 가 독립적으로 C_1-C_2 알킬, C_1-C_2 할로알킬, C_1-C_2 알콕시, 할로젠, 시아노 또는 하이드록시이고;
- [0699] 각 R^3 가 독립적으로 C_1-C_3 알킬, C_1-C_3 할로알킬 또는 할로젠이며;
- [0700] 각 R^{4a} 가 독립적으로 C_1-C_6 알킬, C_2-C_6 알케닐, C_2-C_6 알키닐, C_3-C_6 사이클로알킬, C_4-C_{10} 사이클로알킬알킬, C_4-C_{10} 알킬사이클로알킬, C_5-C_{10} 알킬사이클로알킬알킬, C_1-C_6 할로알킬, C_2-C_6 할로알케닐, C_2-C_6 할로알키닐, C_3-C_6 할로사이클로알킬, 할로젠, 하이드록시, 아미노, 시아노, 니트로, C_1-C_4 알콕시, C_1-C_4 할로알콕시, C_1-C_4 알킬티오, C_1-C_4 알킬설퍼닐, C_1-C_4 알킬설포닐, C_1-C_4 할로알킬티오, C_1-C_4 할로알킬설퍼닐, C_1-C_4 할로알킬설포닐, C_1-C_4 알킬아미노, C_2-C_8 다이알킬아미노, C_3-C_6 사이클로알킬아미노, C_2-C_4 알콕시알킬, C_1-C_4 하이드록시알킬, C_2-C_4 알킬카르보닐, C_2-C_6 알콕시카르보닐, C_2-C_6 알킬카르보닐옥시, C_2-C_6 알킬카르보닐티오, C_2-C_6 알킬아미노카르보닐, C_3-C_8 다이알킬아미노카르보닐 또는 C_3-C_6 트라이알킬설퍼닐이고;
- [0701] 각 R^{4b} 가 독립적으로 C_1-C_6 알킬, C_3-C_6 알케닐, C_3-C_6 알키닐, C_3-C_6 사이클로알킬, C_1-C_6 할로알킬, C_3-C_6 할로알케닐, C_3-C_6 할로알키닐, C_3-C_6 할로사이클로알킬 또는 C_2-C_4 알콕시알킬이며;
- [0702] 각 R^{11} 이 독립적으로 C_1-C_3 알킬이고;
- [0703] R^{15} 이 H, 할로젠, 시아노, 하이드록시, $-CHO$, C_1-C_4 알킬, C_1-C_4 할로알킬 또는 C_2-C_5 알콕시카르보닐이며;
- [0704] R^{16} 이 H, C_1-C_4 알킬, C_1-C_4 할로알킬, C_2-C_4 알킬카르보닐, C_2-C_4 할로알킬카르보닐 또는 C_2-C_4 알콕시카르보닐이고;
- [0705] x가 0, 1, 2, 3, 4 또는 5인 화학식 1의 화합물.
- [0706] 실시 형태 B2.
- [0707] E가 E-1 또는 E-2이고;
- [0708] W^1 이 H, 시아노, 할로젠, OR^{30} , SR^{31} 또는 $NR^{32}R^{33}$ 이며;
- [0709] Z^5 및 Z^6 가 각각 직접 결합이고;
- [0710] G가 G-1 내지 G-59 (증거 2에 나타냄) (여기서, 좌측으로 돌출하는 결합은 X에 결합되고, 우측으로 돌출하는 결합은 Z^1 에 결합되며; 각 R^{3a} 는 H 및 R^3 중에서 독립적으로 선택되고; R^{11a} 는 H 및 R^{11} 중에서 선택된다) 중의 하나이며;
- [0711] J가 J-1, J-2, J-3, J-4, J-5, J-7, J-8, J-9, J-10, J-11, J-12, J-14, J-15, J-16, J-20, J-24, J-25, J-26, J-29, J-30, J-37, J-38, J-45 및 J-69 중에서 선택되고;
- [0712] Q가 Q-1 내지 Q-106 (증거 4에 나타냄)이며;
- [0713] R^{1a} 및 R^{1b} 가 U-1 내지 U-50 (증거 1에 나타냄) 중에서 선택되고;
- [0714] 각 R^2 가 독립적으로 메틸, 메톡시, 시아노 또는 하이드록시이며;
- [0715] 각 R^5 가 독립적으로 H, 시아노, C_1-C_6 알킬, C_2-C_6 알케닐, C_2-C_6 알키닐, C_1-C_6 할로알킬, C_2-C_6 할로알케닐, C_2-

C₆ 할로알킬, C₃-C₈ 사이클로알킬, C₃-C₈ 할로사이클로알킬, C₄-C₁₀ 알킬사이클로알킬, C₄-C₁₀ 사이클로알킬알킬, C₂-C₆ 알콕시알킬, C₄-C₁₀ 사이클로알콕시알킬, C₃-C₈ 알콕시알콕시알킬, C₂-C₆ 알킬티오알킬, C₂-C₆ 알콕시카르보닐, C₁-C₆ 알콕시, C₁-C₆ 할로알콕시, C₃-C₈ 사이클로알콕시, C₃-C₈ 할로사이클로알콕시, C₄-C₁₀ 사이클로알킬알콕시, C₂-C₆ 알케닐옥시, C₂-C₆ 할로알케닐옥시, C₂-C₆ 알키닐옥시, C₂-C₆ 할로알키닐옥시, C₂-C₆ 알콕시알콕시, C₂-C₆ 알킬카르보닐옥시, C₂-C₆ 할로알킬카르보닐옥시, C₄-C₈ 사이클로알킬카르보닐옥시, C₃-C₆ 알킬카르보닐알콕시, C₁-C₆ 알킬티오, C₁-C₆ 할로알킬티오, C₃-C₈ 사이클로알킬티오, C₃-C₁₀ 트라이알킬실릴, -NR^{25, 26} 또는 Z²Q이고;

[0716] R¹⁵이 H, 시아노, 할로젠, 하이드록시, 메틸 또는 메톡시카르보닐이며;

[0717] R¹⁶이 H, 메틸, 메틸카르보닐 또는 메톡시카르보닐이고;

[0718] 각 R³⁰ 및 R³¹이 독립적으로 C₁-C₆ 알킬, C₃-C₄ 알케닐, C₃-C₄ 알키닐, C₁-C₄ 할로알킬, C₃-C₆ 할로알케닐, C₃-C₆ 할로알키닐, C₂-C₆ 알콕시알킬 및 C₃-C₆ 사이클로알킬 중에서 선택되며; R³²가 H, 시아노, 하이드록시, 아미노, C₁-C₆ 알킬 중에서 선택되고;

[0719] R³³가 H, C₁-C₆ 알킬 중에서 선택되며;

[0720] 각 Z⁴가 C(=O)이고;

[0721] k가 0, 1 또는 2이며;

[0722] p가 0, 1, 2 또는 3이고;

[0723] q가 0, 1 또는 2인 실시 형태 B1의 화합물.

[0724] 실시 형태 B3.

[0725] G가 G-1, G-2, G-7, G-8, G-14, G-15, G-23, G-24, G-26, G-27, G-36, G-37, G-38, G-49, G-50 및 G-55 중에서 선택되고;

[0726] J가 J-4, J-5, J-8, J-11, J-15, J-16, J-20, J-29, J-30, J-37, J-38 및 J-69 중에서 선택되며;

[0727] 각 Q가 독립적으로 Q-1, Q-20, Q-32 내지 Q-34, Q-45 내지 Q-47, Q-60 내지 Q-73, Q-76 내지 Q-79, Q-84 내지 Q-94 및 Q-98 내지 Q-106이고;

[0728] A가 CH₂ 또는 NH이며;

[0729] W¹이 시아노, Cl, F, Br 또는 OR³⁰이고;

[0730] W가 O이고;

[0731] X가 X¹, X² 또는 X³이며;

[0732] 각 R⁵가 독립적으로 H, 시아노, C₁-C₆ 알킬, C₁-C₆ 할로알킬, C₃-C₈ 사이클로알킬, C₃-C₈ 할로사이클로알킬, C₂-C₆ 알콕시알킬, C₁-C₆ 알콕시, C₁-C₆ 할로알콕시, C₃-C₈ 사이클로알콕시, C₂-C₆ 알케닐옥시, C₂-C₆ 할로알케닐옥시, C₂-C₆ 알키닐옥시, C₂-C₆ 알콕시알콕시, C₂-C₆ 알킬카르보닐옥시, C₂-C₆ 할로알킬카르보닐옥시, C₁-C₆ 알킬티오, C₁-C₆ 할로알킬티오, C₃-C₁₀ 트라이알킬실릴, -NR^{25, 26} 또는 Z²Q이고;

[0733] Z¹이 직접 결합하며;

[0734] Z²가 직접 결합 또는 NR²¹이고;

- [0735] R^{1a} 및 R^{1b} 가 U-1 내지 U-3, U-11, U-13, U-20, U-22, U-23, U-36 내지 U-39 및 U-50 중에서 선택되며;
- [0736] 각 R^3 가 독립적으로 메틸 또는 할로겐이며;
- [0737] 각 R^{4a} 가 독립적으로 C_1-C_2 알킬, C_1-C_2 할로알킬, 할로겐, C_1-C_2 알콕시 또는 C_1-C_2 할로알콕시이고;
- [0738] 각 R^{4b} 가 독립적으로 C_1-C_2 알킬 또는 C_1-C_2 할로알킬이며;
- [0739] 각 R^7 이 독립적으로 할로겐, 시아노, C_1-C_3 알킬, C_1-C_3 할로알킬, 하이드록시, C_1-C_2 알콕시 또는 C_1-C_2 할로알콕시이고;
- [0740] R^{30} 및 R^{31} 가 C_1-C_6 알킬, C_3-C_4 알케닐, C_3-C_4 알키닐 및 C_1-C_4 할로알킬 중에서 선택되며;
- [0741] k가 1 또는 2이고;
- [0742] n이 0이며;
- [0743] x가 1 또는 2인 실시 형태 B2의 화합물.
- [0744] 실시 형태 B4.
- [0745] G가 G-1, G-2, G-15, G-26, G-27, G-36, G-37 및 G-38 중에서 선택되고; G가 비치환되며;
- [0746] J가 J-29이고;
- [0747] Q가 Q-1, Q-45, Q-63, Q-64, Q-65, Q-68, Q-69, Q-70, Q-71, Q-72, Q-73, Q-76, Q-78, Q-79, Q-84, Q-85, Q-98, Q-99, Q-100 및 Q-101 내지 Q-106 중에서 선택되며;
- [0748] X가 X^1 또는 X^2 이고; X를 포함하는 환이 포화되며;
- [0749] R^{1a} 및 R^{1b} 가 U-1, U-20 또는 U-50 중에서 선택되고;
- [0750] 각 R^{4a} 가 독립적으로 C_1-C_2 알킬, 트라이플루오로메틸, Cl, Br, I 또는 메톡시이며;
- [0751] 각 R^{4b} 가 독립적으로 C_1-C_2 알킬 또는 트라이플루오로메틸이고;
- [0752] 각 R^5 가 독립적으로 H, 시아노, C_1-C_6 알킬, C_1-C_6 할로알킬, C_1-C_6 알콕시, C_1-C_6 할로알콕시, $-NR^{25}R^{26}$ 또는 Z^2Q 인 실시 형태 B3의 화합물.
- [0753] 실시 형태 B5.
- [0754] E가 E-1이고;
- [0755] G가 G-1, G-2, G-15, G-26 및 G-36 중에서 선택되며;
- [0756] J가 J-29-1 내지 J-29-60 (증거 A에 나타냄) 중 어느 하나이고;
- [0757] Q가 Q-45, Q-63, Q-64, Q-65, Q-68, Q-69, Q-70, Q-71, Q-72, Q-84 및 Q-85 중에서 선택되며;
- [0758] X가 X^1 인 실시 형태 B4의 화합물.
- [0759] A가 CHR^{15} 또는 NR^{16} 인 이의 기하 이성질체 및 입체 이성질체, N-옥사이드, 및 염을 비롯한 화학식 1의 화합물 (상기 실시 형태 1 내지 179, C1 내지 C173, A1 내지 A5, 및 B1 내지 B5를 포함하나, 이들에 한정되지 않음)에 특히 주목해야 한다.
- [0760] R^{1a} , R^{1b} , R^{1c} 및 R^{1d} 가 임의로 치환된 페닐, 임의로 치환된 나프탈레닐 또는 임의로 치환된 5원 내지 6원 헤테로 방향족 환; 또는 시아노, C_1-C_8 알킬, C_2-C_8 알케닐, C_2-C_8 알키닐, C_1-C_8 할로알킬, C_2-C_8 할로알케닐, C_2-C_8 할로알키닐, C_3-C_8 사이클로알킬, C_3-C_8 할로사이클로알킬, C_4-C_{10} 알킬사이클로알킬, C_4-C_{10} 사이클로알킬알킬, C_4-C_{10}

할로사이클로알킬알킬, C₅-C₁₀ 알킬사이클로알킬알킬, C₂-C₈ 알콕시알킬, C₄-C₁₀ 사이클로알콕시알킬, C₃-C₁₀ 알콕시알콕시알킬, C₂-C₈ 알킬티오알킬, C₂-C₈ 알킬설퍼닐알킬, C₂-C₈ 알킬설폰닐알킬, C₂-C₈ 알킬아미노알킬, C₃-C₁₀ 다이알킬아미노알킬, C₂-C₈ 할로알킬아미노알킬, C₄-C₁₀ 사이클로알킬아미노알킬, C₁-C₈ 알콕시, C₁-C₈ 할로알콕시, C₃-C₈ 사이클로알콕시, C₃-C₈ 할로사이클로알콕시, C₄-C₁₀ 사이클로알킬알콕시, C₂-C₈ 알케닐옥시, C₂-C₈ 할로알케닐옥시, C₂-C₈ 알키닐옥시, C₃-C₈ 할로알키닐옥시, C₂-C₈ 알콕시알콕시, C₁-C₈ 알킬티오, C₁-C₈ 할로알킬티오, C₃-C₈ 사이클로알킬티오, C₃-C₁₀ 트라이알킬실릴, C₁-C₈ 알킬아미노, C₂-C₈ 다이알킬아미노, C₁-C₈ 할로알킬아미노, C₂-C₈ 할로다이알킬아미노, C₃-C₈ 사이클로알킬아미노, C₂-C₈ 알킬카르보닐아미노, C₂-C₈ 할로알킬카르보닐아미노, C₁-C₈ 알킬설폰닐아미노, C₁-C₈ 할로알킬설폰닐아미노, 피롤리딘, 피페리딘 또는 모르폴리딘인의 기하 이성질체 및 입체 이성질체, N-옥사이드, 및 염을 비롯한 화학식 1의 화합물 (상기 실시 형태 1 내지 179, C1 내지 C173, A1 내지 A5, 및 B1 내지 B5를 포함하나, 이들에 한정되지 않음)에 주목해야 한다.

[0761] 또한, 각 T^A가 독립적으로, 각각 R²⁹ 중에서 독립적으로 선택되는 5개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 페닐, 페닐에틸닐 또는 5원 내지 6원 헤테로 방향족 환인 이의 기하 이성질체 및 입체 이성질체, N-옥사이드, 및 염을 비롯한 화학식 1의 화합물 (상기 실시 형태 1 내지 179, C1 내지 C173, A1 내지 A5, 및 B1 내지 B5를 포함하나, 이들에 한정되지 않음)에 주목해야 한다.

[0762] 또한, R³²가 H, 시아노, 하이드록시, 아미노, C₁-C₆ 알킬, C₃-C₆ 알케닐, C₃-C₆ 알키닐, C₁-C₆ 할로알킬, C₃-C₆ 할로알케닐, C₃-C₆ 할로알키닐, C₃-C₆ 사이클로알킬, C₄-C₈ 사이클로알킬알킬, C₂-C₆ 알콕시알킬, C₁-C₆ 알콕시, C₁-C₆ 할로알콕시, C₁-C₆ 알킬설폰닐, C₁-C₆ 할로알킬설폰닐, C₁-C₆ 알킬아미노, C₂-C₈ 다이알킬아미노, C₁-C₆ 할로알킬아미노 또는 C₂-C₈ 할로다이알킬아미노인 이의 기하 이성질체 및 입체 이성질체, N-옥사이드, 및 염을 비롯한 화학식 1의 화합물 (상기 실시 형태 1 내지 179, C1 내지 C173, A1 내지 A5, 및 B1 내지 B5를 포함하나, 이들에 한정되지 않음)에 주목해야 한다.

[0763] 또한, R²⁹이 H 이외의 것인 이의 기하 이성질체 및 입체 이성질체, N-옥사이드, 및 염을 비롯한 화학식 1의 화합물 (상기 실시 형태 1 내지 179, C1 내지 C173, A1 내지 A5, 및 B1 내지 B5를 포함하나, 이들에 한정되지 않음)에 주목해야 한다.

[0764] 또한, 각 Z³가 직접 결합, O, C(=O), C(=S), S(O)_m, CHR²⁰, -CR²⁴=CR²⁷-, -OCHR²⁰- 또는 -CHR²⁰O-인 이의 기하 이성질체 및 입체 이성질체, N-옥사이드, 및 염을 비롯한 화학식 1의 화합물 (상기 실시 형태 1 내지 179, C1 내지 C173, A1 내지 A5, 및 B1 내지 B5를 포함하나, 이들에 한정되지 않음)에 주목해야 한다.

[0765] 또한, 상기 실시 형태 1 내지 179, C1 내지 C173, A1 내지 A5, 및 B1 내지 B5를 포함하나, 이들에 한정되지 않는 화학식 1의 화합물이 주목할 만하다.

[0766] 본 발명은 화학식 1의 화합물 (이의 모든 기하 이성질체 및 입체 이성질체, 이의 N-옥사이드, 및 이의 염 포함), 및 적어도 하나의 다른 살균제를 포함하는 살균제 조성물을 제공한다. 이러한 조성물의 실시 형태로서 주목해야 할 것은 상술한 임의의 화합물 실시 형태에 대응하는 화합물을 포함하는 조성물이다.

[0767] 본 발명은 살균적 유효량의 화학식 1의 화합물 (이의 모든 기하 이성질체 및 입체 이성질체, 이의 N-옥사이드, 및 이의 염 포함), 및 계면활성제, 고체 희석제 및 액체 희석제로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 적어도 하나의 추가 성분을 포함하는 살균제 조성물을 제공한다. 이러한 조성물의 실시 형태로서 주목해야 할 것은 상술한 임의의 화합물 실시 형태에 대응하는 화합물을 포함하는 조성물이다.

[0768] 본 발명은 살균적 유효량의 화학식 1의 화합물 (이의 모든 기하 이성질체 및 입체 이성질체, 이의 N-옥사이드, 및 이의 염 포함)을 식물 또는 이의 부분, 또는 식물 종자에 적용하는 것을 포함하는, 진균류 식물 병원체에 의한 식물병을 방제하는 방법을 제공한다. 이러한 방법의 실시 형태로서 주목해야 할 것은 상술한 임의의 화합물 실시 형태에 대응하는 화합물의 살균적 유효량을 적용하는 것을 포함하는 방법이다. 화합물이 본 발명의 조성물로서 적용되는 실시 형태에 특히 주목해야 한다.

[0769] 반응 도식 1 내지 36에 기재된 하나 이상의 하기 방법 및 변형법은 화학식 1의 화합물을 제조하는데 사용될 수 있다. 하기 화학식 1 내지 57의 화합물의 A, E, G, J, T^A, Q, W, W¹, X, Z¹, Z², Z³, Z⁵, Z⁶, Z⁷, Z⁸, R^{1a}, R^{1b},

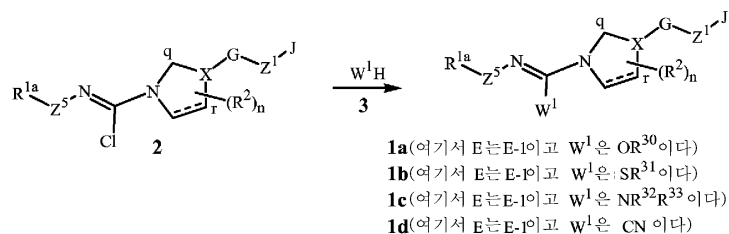
R^{1c} , R^{1d} , R^2 , R^5 , R^{15} , R^{16} , R^{31} , R^{32} , d 및 n의 정의는 달리 언급하지 않는 한, 발명의 요약에 상기에서 정의한 바와 같다. 화학식 1a 내지 1u는 화학식 1의 화합물의 서브세트이고, 화학식 1a 내지 1u의 모든 치환기는 화학식 1에 대하여 상기에서 정의한 바와 같다.

[0770]

반응 도식 1에 나타난 바와 같이, 화학식 1a 내지 1d (E가 E-1이고, W^1 이 OR^{30} , SR^{31} , $NR^{32}R^{33}$ 또는 CN인 화학식 1)의 특정 화합물은 화학식 2의 이미도일 클로라이드를 산 스캐빈저의 존재하에 화학식 3의 화합물과 반응시켜 제조될 수 있다. 적절한 산 스캐빈저로는 아민 염기, 예컨대 트라이에틸아민, N,N-다이아이소프로필에틸아민 및 피리딘, 수산화물, 예컨대 수산화나트륨 및 수산화칼륨, 및 탄산염, 예컨대 탄산나트륨 및 탄산칼륨을 들 수 있으나, 이들에 한정되지 않는다. 대안적으로, 화학식 2 및 3의 화합물은 산 스캐빈저의 부재하에 접촉되어, 대응하는 HCl 염으로서 화학식 1a 내지 1c의 화합물을 제공할 수 있으며, 또한 본 발명의 화합물이다. 필요에 따라, HCl 염은 표준 방법에 의해 유리 염기로 되어, 화학식 1a 내지 1d의 화합물을 얻을 수 있다. 반응이 산 스캐빈저의 존재 또는 부재하에 행해지는 것에 관계없이, 전형적으로 적절한 유기 용매 중에서 약 -20 내지 100 °C의 온도에서 행해진다. 이러한 방법에 대한 적절한 용매를 형성하도록 다양한 용매, 예를 들어 니트릴, 예컨대, 아세토니트릴, 에테르, 예컨대 테트라하이드로퓨란, 및 할로겐화탄화수소, 예컨대 다이클로로메탄, 및 아마이드, 예컨대 N,N-다이메틸포름아미드, 및 이들의 혼합물이 사용될 수 있다. 화학식 1a 내지 1d의 화합물은 통상적으로 각각, 아이소우레아, 아이소티오우레아, 구아니딘 및 시아노아미딘으로 분류될 수 있다. 이런 화합물 부류에 대한 주요 참조 문헌에 관해서는 예를 들어, 문헌 [J. Lon Mathias, Organic Preparations and Procedures International 1980, 12(5), 309-326; Comprehensive Organic Chemistry, vol. 2, I. O. Sutherland, Ed., Pergamon Press, Oxford; Rodd's Chemistry of Carbon Compounds, vol. 1C, Elsevier, New York; A. R. Katritzky et al., J. Organic Chem. 2004, 69, 309-313]을 참조한다. 당업자는 특정한 화학식 1a, 1c, 및 1d의 화합물이 적절한 화학식 3의 화합물과의 처리에 의해 대응하는 화학식 1b의 화합물로부터 제조될 수 있다. 예를 들어, 티우로늄 염 및 구아니딘으로의 이의 변환체에 대한 제조 방법은 문헌 [참조: C. R. Rasmussen et al., Synthesis 1988, 6, 460-466]에 기재되어 있다. 또한, 상기 방법은 실시예 3 및 실시예 9의 단계 C에 예증되어 있다. 화학식 2의 이미도일 클로라이드는 후술하는 바와 같이 제조될 수 있다 (하기 반응 도식 7 단락 참조). 다수의 화학식 3의 화합물은 시판 중이며, 화학 분야에 충분히 입증된 방법에 의해 제조될 수 있다.

[0771]

반응 도식 1

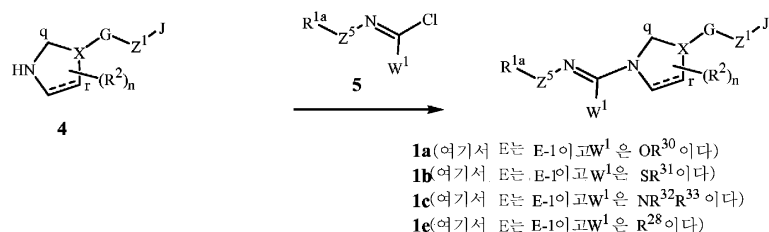


[0772]

[0773]

반응 도식 2에 나타난 바와 같이, 대체 절차에 있어서, 특정한 화학식 1a 내지 1c 및 화학식 1e (E가 E-1이고, W^1 이 R^{28} 인 화학식 1)의 화합물은 반응 도식 1에 기재된 것과 유사한 조건을 이용하여 화학식 4의 아민을 화학식 5의 이미도일 클로라이드와 반응시켜 제조될 수 있다. 다수의 화학식 5의 이미도일 클로라이드는 당업계에 개시된 방법에 의해 제조될 수 있다 (예를 들어, 문헌 [R. Bonnett in The Chemistry of the Carbon-Nitrogen Double Bond, S. Patei, Ed., Interscience Publishers], 및 상기 문헌에 인용된 참조 문헌을 참조한다). 일부의 화학식 5의 이미도일 클로라이드는 시판 중이며 (예를 들어, R^{1a} 가 페닐, 치환된 페닐 또는 저급 알킬이고, Z^5 가 직접 결합이며, W가 OMe, SMe, 또는 N(Me)₂인 화학식 5가 시판될 수 있음), 화학 분야에 입증된 방법에 의해 제조될 수 있다. 화학식 4의 화합물을 제조하는 방법은 반응 도식 20에서 후술한다.

[0774] 반응 도식 2

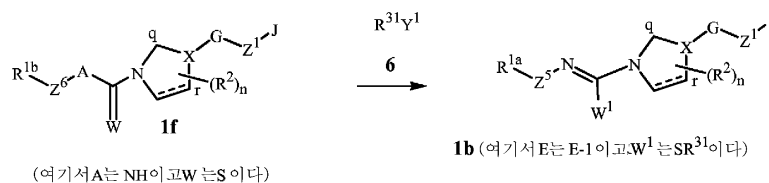


[0775]

[0776] 반응 도식 1 및 2는 단지 2개의 화학식 1b의 화합물의 제조 방법을 나타낸다. 반응 도식 3에 나타난 바와 같이, 또 하나의 방법에 있어서, 화학식 1b의 화합물은 화학식 1f (E가 E-2이고, A가 NH이며, W가 S인 화학식 1)의 티오우레아를 화학식 6 (여기서, Y¹은 친핵 반응 이탈기, 예컨대 할라이드 (예를 들어, Cl, Br, I) 또는 설포네이트 (예를 들어, 메실레이트, 트라이플레이트, p-톨루엔설포네이트) 등이다)의 알킬화제 또는 아실화제와 반응시켜 제조될 수 있다. 상기 방법은 약 0 내지 100℃의 온도에서 산 스캐빈저 및 적절한 유기 용매의 존재하에 행해진다. 적절한 용매로는 예를 들어, 다이클로로메탄, 테트라하이드로퓨란, 아세토니트릴, N,N-다이메틸포름아미드, 및 이들의 혼합물을 들 수 있다. 적절한 산 스캐빈저는 예를 들어, 아민 염기, 예컨대 트라이에틸아민, N,N-다이아이소프로필에틸아민 및 피리딘, 수산화물, 예컨대 수산화나트륨 및 수산화칼륨 및 탄산염, 예컨대 탄산나트륨 및 탄산칼륨을 포함한다. 대안적으로, 화학식 1f 및 6의 화합물은 산 스캐빈저의 부재하에 접촉되어, 대응하는 화학식 1b의 아이소티우로늄 염을 얻을 수 있으며, 이는 또한 본 발명의 화합물이다. 후속 반응에서, 염은 당업계의 표준 방법을 이용하여 유리 염기로 되어, 화학식 1b의 화합물을 얻을 수 있다. 티우로늄 염 및 이의 변환체인 구아니딘의 제법을 예시하는 일례로는 문헌 [C. R. Rasmussen et al., Synthesis 1988, 6, 460-466]을 참조한다. 또한, 실시예 1의 단계 D는 반응 도식 3의 방법을 예시한다.

[0777] 다수의 화학식 6의 화합물은 공지되어 있으며, 당업계에 개시된 일반적인 방법에 의해 제조될 수 있다. 화학식 1f의 화합물의 제조에 관해서는 반응 도식 6을 참조한다.

[0778] 반응 도식 3

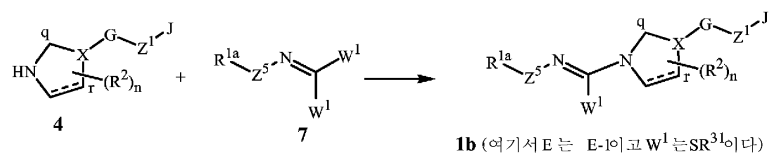


[0779]

[0780] 화학식 1b의 화합물은 또한 반응 도식 4에 예시된 바와 같이, 화학식 4의 아민을 화학식 7의 다이티오키르바산과 반응시켜 제조될 수 있다. 반응 도식 4의 반응은 전형적으로 약 0 내지 100℃의 온도에서 적절한 용매 중에서 행해진다. 적절한 용매의 예로는 아세토니트릴, 테트라하이드로퓨란, 다이클로로메탄, N,N-다이메틸포름아미드, 및 이들의 혼합물을 들 수 있다.

[0781] 화학식 7의 다이티오키르바산은 대응하는 아민, 이황화탄소 및 2 당량의 염기로부터, 문헌 [참조: Alvarez-Ibarra et al., Organic Preparations and Procedures 1991, 23(5), 611-616]의 일반적인 방법에 따라 알킬화제와의 처리에 의해 제조될 수 있다.

[0782] 반응 도식 4

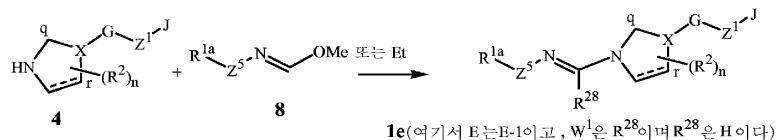


[0783]

[0784] 특정한 화학식 1e (여기서, R²⁸은 H이다)의 화합물은 반응 도식 5에 나타난 바와 같이, 화학식 4의 아민을 화학식 8의 메톡시 또는 에톡시 이민으로 처리하여 제조될 수 있다. 화학식 8의 이민은 대응하는 아민으로부터 얻

어질 수 있다. 절차는 촉매량의 p-톨루엔설포네이트의 존재하에 톨루엔 또는 자일렌 중에서 아민을 트라이메틸 오르토포르메이트 또는 트라이에틸 오르토포르메이트로 가열하는 것을 포함한다. 반응 도식 5의 방법은 실시예 2에 예시되어 있다.

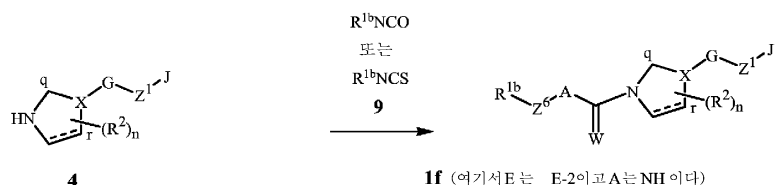
[0785] 반응 도식 5



[0786]

[0787] 화학식 1f (E가 E-2이고, A가 NH인 화학식 1)의 화합물은 반응 도식 6에 나타난 바와 같이, 화학식 4의 아민을 화학식 9의 아이소시아네이트 또는 아이소티오시아네이트와 반응시켜 제조될 수 있다. 이러한 반응은 전형적으로 주위 온도에서 비양성자성 용매, 예컨대 다이클로로메탄 또는 아세토니트릴 중에서 행해진다. 반응 도식 6의 방법은 실시예 1의 단계 C, 실시예 4, 실시예 5 및 실시예 9의 단계 A에 예시되어 있다.

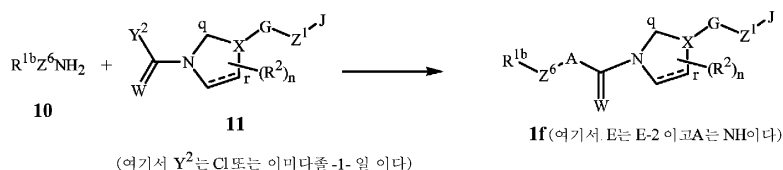
[0788] 반응 도식 6



[0789]

[0790] 화학식 1f의 화합물은 또한 반응 도식 7에 나타난 바와 같이, 화학식 10의 아민과 화학식 11 (Y²는 Cl 또는 이미다졸-1-일이다)의 카르바모일 또는 티오카르바모일 클로라이드 또는 이미다졸의 반응에 의해 제조될 수 있다. Y²가 염소인 경우, 반응은 전형적으로 산 스캐빈저의 존재하에 행해진다. 전형적인 산 스캐빈저로는 아민 염기, 예컨대 트라이에틸아민, N,N-다이아이소프로필에틸아민 및 피리딘을 들 수 있다. 다른 스캐빈저로는 수산화물, 예컨대 수산화나트륨 및 수산화칼륨 및 탄산염, 예컨대 탄산나트륨 및 탄산칼륨을 들 수 있다. 당업자에게 공지된 일반적인 방법에 따라, 화학식 11 (여기서, Y²는 Cl이다)의 카르바모일 또는 티오카르바모일 클로라이드는 각각 화학식 4의 아민으로부터 포스겐 또는 티오포스겐, 또는 이들의 등가물로 처리하여 제조될 수 있는 반면에, 화학식 11 (Y²가 이미다졸-1-일인 경우)의 카르바모일 또는 티오카르바모일 이미다졸은 각각, 화학식 3의 아민으로부터 1,1'-카르보닐다이이미다졸 또는 1,1'-티오카르보닐다이이미다졸로 처리하여 제조될 수 있다.

[0791] 반응 도식 7



[0792]

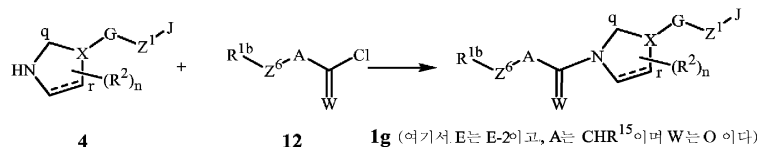
[0793] 화학식 2의 이미도일 클로라이드 (반응 도식 1 참조)는 화학식 1f의 화합물로부터 용매, 예컨대 다이클로로메탄 중에서 염화티오닐, 옥시염화인 또는 오염화인으로 처리하여 제조될 수 있다. 전형적인 반응 조건에 관해서는 예를 들어, 문헌 [W. Zielinski et al., Heterocycles 1998, 48, 319-327] 및 반응 도식 1 및 2에 주어진 참조 문헌을 참조한다. 또한, 실시예 10의 단계 B는 화학식 2의 화합물의 제법을 예시한다.

[0794] 반응 도식 8에 나타난 바와 같이, 화학식 1g (E가 E-2이고, A가 CHRR¹⁵이며, W가 O인 화학식 1)의 화합물은 화학식 12의 산 염화물을 산 스캐빈저의 존재하에 화학식 4의 아민과 커플링하여 제조될 수 있다. 전형적인 산 스캐빈저로는 아민 염기, 예컨대 트라이에틸아민, N,N-다이아이소프로필에틸아민 및 피리딘을 들 수 있다. 다른 스캐빈저로는 수산화물, 예컨대 수산화나트륨 및 수산화칼륨 및 탄산염, 예컨대 탄산나트륨 및 탄산칼륨을 들 수 있다. 경우에 따라서는, 폴리머에 지지된 산 스캐빈저, 예컨대 폴리머에 결합된 N,N-다이아이소프로필에틸

아민 및 폴리머에 결합된 4-(다이메틸아미노)피리딘을 사용하는 것이 유용하다. 적어도 2 당량의 산 스캐빈저가 존재한다면, 화학식 4의 아민의 산성염도 이러한 반응에 사용될 수 있다. 아민과 염을 형성하는데 사용되는 전형적인 산으로는 염산, 옥살산 및 트라이플루오로아세트산을 들 수 있다.

[0795]

반응 도식 8



[0796]

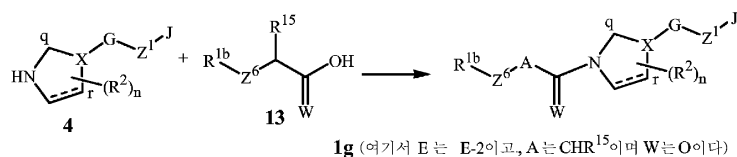
후속 단계에서, 화학식 1g의 아미드는 다양한 표준 티아팅 시약 (standard thiating reagent), 예컨대 오황화인 또는 2,4-비스(4-메톡시페닐)-1,3-다이티아-2,4-다이포스페테인-2,4-다이설파이드 (로손 시약 (Lawesson's reagent))를 사용하여, W가 S인 화학식 1g의 티오아미드로 전환될 수 있다.

[0798]

화학식 1g의 화합물을 제조하기 위한 대체 절차는 반응 도식 9에 나타나있으며, 탈수 커플링 시약, 예컨대 다이사이클로헥실카르보다이이미드 (DCC), 1-(3-다이메틸아미노프로필)-3-에틸카르보다이이미드 하이드로클로라이드 (EDC) 또는 0-벤조트라이아졸-1-일-N,N',N'-테트라메틸우로늄 헥사플루오로포스페이트 (HBTU)의 존재하에서의 화학식 13의 산과 화학식 4의 아민 (또는 이의 산성염)의 커플링을 포함한다. 폴리머에 지지된 시약, 예컨대 폴리머에 결합된 다이사이클로헥실카르보다이이미드도 유용하다. 반응 도식 9의 방법은 전형적으로 적절한 용매 예컨대, 다이클로로메탄 또는 아세트니트릴 중에서 염기 예컨대, 트라이에틸아민 또는 N,N-다이아이소프로필에틸아민의 존재하에 약 0 내지 40℃의 온도에서 행해진다. 반응 도식 9은 실시예 6의 단계 D, 실시예 7 및 실시예 8에 예시되어 있다.

[0799]

반응 도식 9



[0800]

상술한 바와 같이, 화학식 1g의 아미드는 다양한 표준 티아팅 시약을 사용하여, W가 S인 화학식 1g의 티오아미드로 전환될 수 있다.

[0801]

다수의 화학식 13의 산은 공지되어 있거나, 당업자에게 공지된 방법에 의해 제조될 수 있다. 화학식 12의 산 염화물은 다수의 공지된 방법에 의해 화학식 13의 산으로부터 용이하게 제조될 수 있다.

[0802]

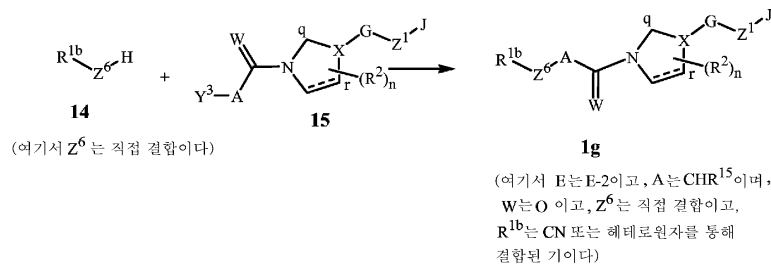
합성 문헌이 다수의 아미드 생성 방법을 포함하고 있기 때문에, 반응 도식 8 및 9의 합성 절차는 화학식 1g의 화합물의 제조에 유용한 다양한 방법 중 간단한 대표적인 예이다.

[0803]

[0804]

특정한 화학식 1g (여기서, W는 O이고, Z⁶는 직접 결합이며, R^{1b}는 시아노 또는 헤테로원자를 통해 연결된 기이다)의 화합물은 반응 도식 10에 나타난 바와 같이, 화학식 14의 화합물 및 화학식 15 (여기서, Y³는 Cl, Br 또는 I이다)의 할로아세트아미드를 반응시킴으로써 제조될 수 있다. 상기 반응은 염기 예컨대, 수소화나트륨 또는 탄산칼륨의 존재하에 용매 예컨대, 테트라하이드로푸란, N,N-다이메틸포름아미드 또는 아세트니트릴 중에서 약 0 내지 80℃의 온도에서 행해진다. 화학식 15의 할로아세트아미드는 각각 반응 도식 8 및 9에 기재된 아미드 생성 반응과 유사하게, 화학식 4의 아민과 α-할로카르복실산 할라이드 또는 α-할로카르복실산 또는 이의 무수물의 반응에 의해 제조될 수 있다.

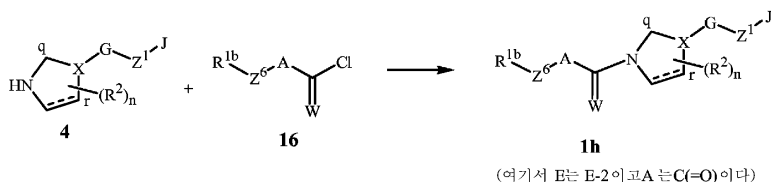
[0805] 반응 도식 10



[0806]

[0807] 반응 도식 11에 나타낸 바와 같이, 화학식 1h (E가 E-2이고, A가 C(=O)인 화학식 1)의 화합물은 반응 도식 8에 기재된 방법과 유사하게, 화학식 16의 α -케토산 클로라이드를 적절한 산 스캐빈저의 존재하에 화학식 4의 아민과 커플링하여 제조될 수 있다. α -케토산 클로라이드는 당업자에게 공지된 표준 방법에 의해 대응하는 α -케토산으로부터 제조될 수 있다.

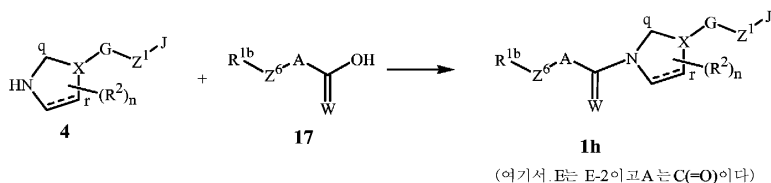
[0808] 반응 도식 11



[0809]

[0810] 대안적으로, 반응 도식 12에 나타낸 바와 같이, 화학식 1h의 화합물은 반응 도식 9에 기재된 방법과 유사하게 화학식 4의 아민 (또는 이의 산성염)을 탈수 커플링 시약의 존재하에 화학식 17의 α -케토산과 커플링하여 제조될 수 있다. 다수의 화학식 17의 α -케토산은 공지되어 있으며, 당업자에게 공지된 방법에 의해 제조될 수 있다.

[0811] 반응 도식 12

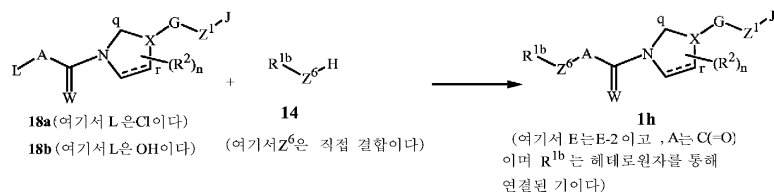


[0812]

[0813] 반응 도식 13에 나타낸 바와 같이, 화학식 1h (여기서, R^{1b}는 헤테로원자를 통해 연결된 기이다)의 화합물은 반응 도식 8에 기재된 방법과 유사하게, 화학식 14의 화합물을 적절한 산 스캐빈저의 존재하에 화학식 18a의 α -케토산 클로라이드와 반응시켜 제조될 수 있다. 화학식 18a의 화합물은 당업계에 공지된 방법에 의해, 용매, 예컨대 클로로포름 또는 톨루엔 중에서 0 내지 110°C에서 염화옥살릴로 처리하거나, 산 스캐빈저의 존재하에 에틸 클로로옥소아세테이트로 처리하여, 화학식 18a (예를 들어, L은 OEt이다)의 α -케토에스테르를 얻은 다음에, 화학식 18b의 α -케토산으로의 표준 에스테르 가수분해하는 것을 포함한 2단계 절차에서 화학식 4의 대응하는 아민으로부터 제조될 수 있다. 당업자는 또한 화학식 1h의 화합물이 반응 도식 9에 기재된 방법과 유사하게, 탈수 커플링 시약의 존재하에서의 화학식 4의 아민 (이의 산성염)과 화학식 18b의 α -케토산의 커플링에 의해 제조될 수 있다.

[0814]

반응 도식 13



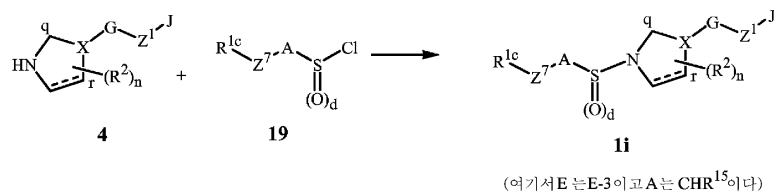
[0815]

[0816]

반응 도식 14에 나타낸 바와 같이, 특정한 화학식 1i (E가 E-3이고, A가 CHR¹⁵인 화학식 1)의 화합물은 화학식 19의 염화설피닐, 염화설포닐 또는 염화설파모일을 적절한 산 스캐빈저의 존재하에 화학식 4의 아민과 반응시켜 제조될 수 있다. 반응 도식 14의 방법은 용매 예컨대, 다이클로로메탄, 테트라하이드로푸란, 아세토니트릴 또는 다이메틸포름아미드 중에서 약 -20 내지 100℃의 온도에서 행해진다. 적절한 산 스캐빈저는 예를 들어, 아민 염기, 예컨대 트라이에틸아민, N,N-다이아이소프로필에틸아민 및 피리딘, 수산화물, 예컨대 수산화나트륨 및 수산화칼륨 및 탄산염, 예컨대 탄산나트륨 및 탄산칼륨을 포함한다. 다수의 화학식 19의 화합물은 공지되어 있거나, 당업자에 의해 제조될 수 있다. 각각, 염화설피닐, 염화설포닐 및 염화설파모일, 및 설펜아미드, 설펜아미드 및 설파미드로의 이들의 변환체의 제조에 대한 주요 참조 문헌에 관해서는 예를 들어, 문헌 [J. G. Tillett in The Chemistry of Sulfinic Acids, Esters and their Derivatives, S. Patai, Ed., John Wiley & Sons, 1990]; 문헌 [The Chemistry of Sulfonic Acids, Esters and their Derivatives, S. Patai and Z. Rappoport, Eds., John Wiley & Sons, 1991]; 문헌 [J. H. Youn et al., Tetrahedron Letters 1986, 27(13), 1493-1494] 및 상기 문헌에 기재된 참조문헌; 문헌 [Comprehensive Organic Chemistry, vol. 3, Neville Jones, Ed., Pergamon Press, Oxford, 1979]을 참조한다.

[0817]

반응 도식 14



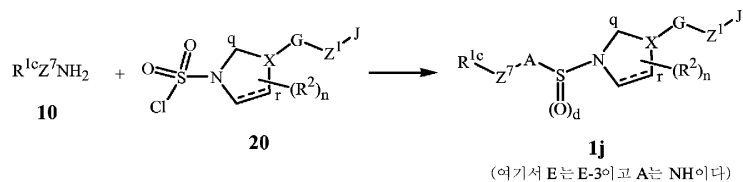
[0818]

[0819]

화학식 1j (E가 E-3이고, A가 NH이며, d가 2인 화학식 1)의 화합물의 제조 방법은 반응 도식 15에 나타낸다. 나타낸 바와 같이, 화학식 20의 염화설파모일은 반응 도식 14에 기재된 방법과 유사하게, 화학식 10의 아민으로 처리된다. 화학식 20의 염화설파모일은 반응 도식 14에 인용된 참조문헌에 기재된 방법에 의해, 화학식 4의 대응하는 아민을 염화설피닐로 처리하여 제조될 수 있다.

[0820]

반응 도식 15



[0821]

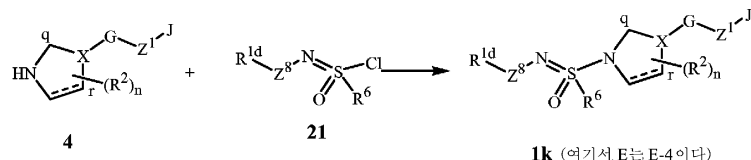
[0822]

반응 도식 16에 나타낸 바와 같이, 화학식 1k (E가 E-4인 화학식 1)의 화합물은 화학식 21의 설펜이미도일 클로라이드를 적절한 산 스캐빈저의 존재하에 화학식 4의 아민과 반응시켜 제조될 수 있다. 반응 도식 16의 방법은 전형적으로 적절한 용매 예컨대, 다이클로로메탄, 테트라하이드로푸란, 아세토니트릴 또는 다이메틸포름아미드 중에서 약 -20 내지 100℃의 온도에서 행해진다. 적절한 산 스캐빈저로는 아민 염기, 예컨대 트라이에틸아민, N,N-다이아이소프로필에틸아민 및 피리딘, 수산화물 예컨대 수산화나트륨 및 수산화칼륨 및 탄산염, 예컨대 탄산나트륨 및 탄산칼륨을 들 수 있으나, 이들에 한정되지 않는다. 다수의 화학식 21의 화합물은 공지되어 있으며, 다양한 공개된 참조문헌에 개시된 방법에 의해 제조될 수 있다. 설펜이미도일 클로라이드 및 설펜아미드와 미드로의 이의 변환체의 제조에 대한 주요 참조 문헌에 관해서는 문헌 [C. R. Johnson, J. Organic Chem.

1979, 44, 2055-2061; K. Okuma et al., J. Organic Chemistry 1988, 53, 4190-4193; C. R. Johnson in Comprehensive Organic Chemistry, vol. 3, part 11, Neville Jones, Ed., Pergamon Press, Oxford, 1979]을 참조한다.

[0823]

반응 도식 16



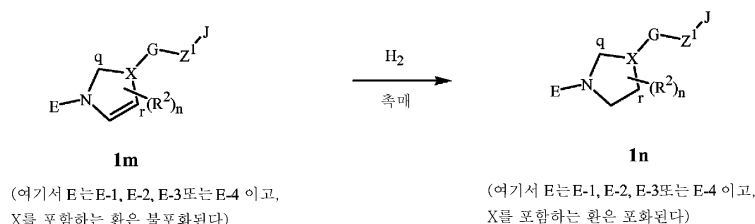
[0824]

[0825]

화학식 1n (E가 E-1, E-2, E-3 또는 E-4이고, X를 포함하는 환이 포화되는 화학식 1)의 화합물은 반응 도식 17에 나타난 바와 같이, 촉매 수소화에 의해 화학식 1m (E가 E-1, E-2, E-3 또는 E-4이고, X를 포함하는 환이 불포화되는 화학식 1)의 화합물로부터 제조될 수 있다. 전형적인 조건은 주위 온도에서 용매, 예컨대 에탄올 중에서 현탁된, 담체에 대한 금속의 중량비가 5 내지 20 %인 금속 촉매, 예컨대 불활성 담체, 예컨대 활성탄에 담지된 팔라듐의 존재하에, 화학식 1m의 화합물을 70 내지 700 kPa, 바람직하게는 270 내지 350 kPa의 압력의 수소 가스에 노출시키는 것을 포함한다. 이러한 타입의 환원은 공지되어 있으며; 예를 들어, 문헌 [Catalytic Hydrogenation, L. Cerveny, Ed., Elsevier Science, Amsterdam, 1986]을 참조한다. 당업자는 화학식 1m의 화합물에 존재할 수 있는 다른 특정한 작용기도 촉매 수소화 조건하에 환원될 수 있으므로, 적절한 촉매 및 조건의 선택을 요한다는 것을 인지할 것이다.

[0826]

반응 도식 17



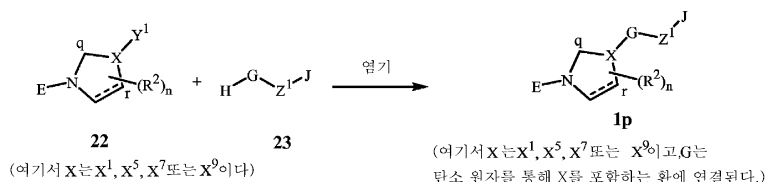
[0827]

[0828]

특정한 화학식 1p (X가 X¹, X⁵, X⁷ 또는 X⁹이고, G가 탄소 원자를 통해 X를 포함하는 환에 연결되는 화학식 1)의 화합물은 반응 도식 18에 나타난 바와 같이 염기의 존재하에 화학식 22 상의 적절한 이탈기 Y¹를 화학식 23의 질소 함유 복소환으로 치환함으로써 제조될 수 있다. 적절한 염기로는 수소화나트륨 또는 탄산칼륨을 들 수 있다. 반응은 적절한 용매, 예컨대 N,N-다이메틸포름아미드 또는 아세토니트릴 중에서 약 0 내지 80℃의 온도에서 행해진다. 화학식 22의 화합물의 적절한 이탈기는 친핵 반응 이탈기, 예컨대 할라이드 (예를 들어, Cl, Br, I) 또는 설포네이트 (예를 들어, 메실레이트, 트라이플레이트, p-톨루엔설포네이트) 등을 포함한다. 화학식 22의 화합물은 당업계에 공지된 일반적인 방법을 이용하여, 대응하는 화합물 (여기서, Y¹는 OH이다)로부터 제조될 수 있다.

[0829]

반응 도식 18



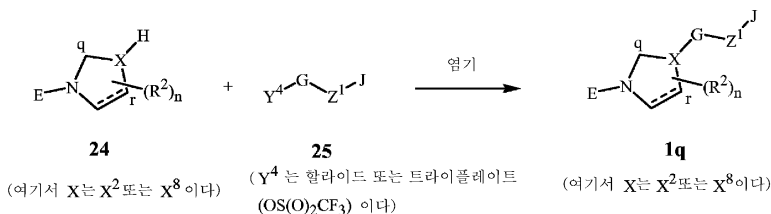
[0830]

[0831]

특정한 화학식 1q (X가 X² 또는 X⁸인 화학식 1)의 화합물은 반응 도식 19에 나타난 바와 같이, 화학식 24의 화합물과 화학식 25의 헤테로사이클릭 할라이드 또는 트라이플레이트 (OS(O)₂CF₃)의 반응에 의해 제조될 수 있다. 상기 반응은 염기, 예컨대 탄산칼륨의 존재하에 용매, 예컨대 다이메틸설폭사이드, N,N-다이메틸포름아미드 또는

는 아세토니트릴 중에서 약 0 내지 80℃에서 행해진다. Y^4 가 트라이플레이트인 화학식 25의 화합물은 당업자에게 공지된 방법에 의해, 대응하는 화합물 (여기서, Y^4 는 OH이다)로부터 제조될 수 있다.

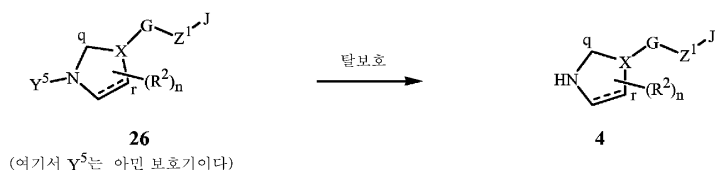
[0832] 반응 도식 19



[0833]

[0834] 화학식 4의 아민은 반응 도식 20에 나타난 바와 같이, 화학식 26 (여기서, Y^5 는 아민 보호기이다)의 대응하는 보호 아민으로부터 제조될 수 있다. 유일한 요건이 기가 반응 시에 치환가능하여, 화학식 4의 화합물을 형성하는 것이므로, 다양한 아민 보호기가 본 방법에 유용하다. 적절한 보호기의 예에 관해서는 문헌 [T. W. Greene and P. G. M. Wuts, Protective Groups in Organic Synthesis, 2nd ed., John Wiley & Sons, Inc., New York, 1991]을 참조한다. 당업계에 공지된 일반적인 방법에 의해, 보호기가 제거될 수 있으며, 아민은 이의 산성염 또는 유리 아민으로서 분리될 수 있다. 당업자는 또한 화학식 26의 보호 아민이, 기 E가 화학식 1의 화합물의 제조를 위한 화학식 26의 유용한 중간체를 얻도록 Y^5 로 치환되는 상기 반응 도식 17, 18 및 19에 기재된 것과 유사한 방법으로 제조될 수 있음을 인지할 것이다. 반응 도식 20의 방법은 실시예 1의 단계 B 및 실시예 6의 단계 C에 예시되어 있다.

[0835] 반응 도식 20



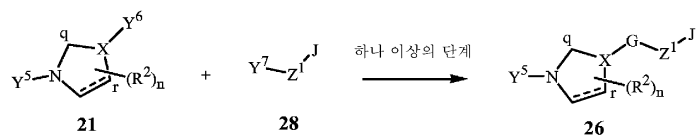
[0836]

[0837] 화학식 26의 화합물은 또한 반응 도식 21에 나타난 바와 같이, 적절히 작용화된 화학식 27의 화합물과 적절히 작용화된 화학식 28의 화합물의 반응에 의해 제조될 수 있다. 작용기 Y^6 및 Y^7 은 적절한 반응 조건하에서 다양한 복소환 G를 구성할 수 있는 부분, 예컨대 알데히드, 케톤, 에스테르, 산, 아마이드, 티오아마이드, 니트릴, 아민, 알코올, 티올, 하이드라진, 옥심, 아마딘, 아마이드옥심, 올레핀, 아세틸렌, 할라이드, 알킬 할라이드, 메탄설포네이트, 트라이플루오로메탄설포네이트, 보론산, 보로네이트 등 중에서 선택되나, 이들에 한정되지 않는다. 일례로서, 화학식 27 (여기서, Y^6 는 티오아미드기이다)의 화합물과, 화학식 28 (여기서, Y^7 은 브로모아세틸기이다)의 화합물의 반응에 의해, 화학식 26 (여기서, G는 티아졸 환이다)의 화합물이 얻어질 것이다. 합성 문헌은 5원 헤테로 방향족 환 및 5원 부분 포화 복소환 (예를 들어, G-1 내지 G-59)을 형성하는 다수의 일반적인 방법을 기술하고 있다 (예를 들어, 문헌 [Comprehensive Heterocyclic Chemistry, vol. 4-6, A. R. Katritzky and C. W. Rees Eds., Pergamon Press, New York, 1984; Comprehensive Heterocyclic Chemistry II, vol. 2-4, A. R. Katritzky, C. W. Rees, and E. F. Scriven Eds., Pergamon Press, New York, 1996; 및 시리즈, The Chemistry of Heterocyclic Compounds, E. C. Taylor, Ed., John Wiley & Sons, New York]을 참조함). 방향족 환과의 크로스 커플링 반응에 사용되는 유기 아연 시약을 제조하기 위한 화학식 27 (여기서, X는 X^1 이고, Y^6 는 Br, I, 메탄설포네이트 또는 트라이플루오로메탄설포네이트이다)의 중간체의 용도가 기재되어 있다 (예를 들어, 문헌 [S. Bellotte, Synlett 1998, 379-380, 및 M. Nakamura et al., Synlett 2005, 1794-1798]을 참조함). 원하는 복소환 G를 구성하도록 적절한 작용기를 선택하는 방법은 당업자에게 공지되어 있다. 반응 도식 21의 방법은 또한 실시예 6의 단계 B에 예시되어 있다.

[0838] 다수의 화학식 27 및 28의 화합물은 공지되어 있으며, 당업자에 의해 제조될 수 있다.

[0839]

반응 도식 21



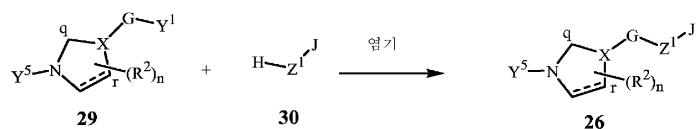
[0840]

[0841]

특정한 화학식 26 (여기서, Z^1 은 O, S, 또는 NR^{21} 이다)의 화합물은 반응 도식 22에 나타난 바와 같이, 염기의 존재하에 화학식 29의 G 환 상의 적절한 이탈기 Y^1 을 화학식 30의 화합물로 치환함으로써 제조될 수 있다. 적절한 염기로는 수소화나트륨 또는 탄산칼륨을 들 수 있다. 반응은 용매 예컨대, N,N-다이메틸포름아미드 또는 아세트니트릴 중에서 약 0 내지 80°C의 온도에서 행해진다. 화학식 29의 화합물의 적절한 이탈기는 친핵 반응 이탈기, 예컨대 할라이드 (예를 들어, Cl, Br, I) 또는 설포네이트 (예를 들어, 메실레이트, 트라이플레이트, p-톨루엔설포네이트) 등을 포함한다. 화학식 29의 화합물은 당업계에 공지된 일반적인 방법에 의해 대응하는 화합물 (여기서, Y^1 는 OH이다)로부터 제조될 수 있다. 다수의 화학식 30의 화합물은 공지되어 있으며, 당업계에 공지된 일반적인 방법에 의해 제조될 수 있다.

[0842]

반응 도식 22



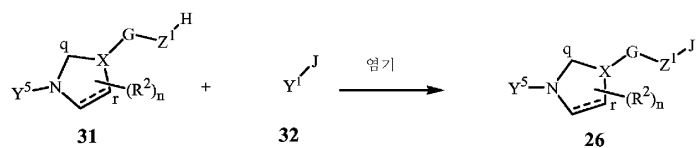
[0843]

[0844]

특정한 화학식 26 (여기서, Z^1 은 O, S, 또는 NR^{21} 이다)의 화합물은 반응 도식 23에 나타난 바와 같이 염기의 존재하에 화학식 32의 J 환 상의 적절한 이탈기 Y^1 을 화학식 30의 화합물로 치환함으로써 제조될 수 있다. 적절한 염기로는 수소화나트륨 또는 탄산칼륨을 들 수 있다. 반응은 용매, 예컨대 N,N-다이메틸포름아미드 또는 아세트니트릴 중에서 약 0 내지 80°C의 온도에서 행해진다. 화학식 32의 화합물의 적절한 이탈기는 친핵 반응 이탈기, 예컨대 할라이드 (예를 들어, Cl, Br, I) 또는 설포네이트 (예를 들어, 메실레이트, 트라이플레이트, p-톨루엔설포네이트) 등을 포함한다. 화학식 32의 화합물은 당업계에 공지된 일반적인 방법을 이용하여, 대응하는 화합물 (여기서, Y^1 는 OH이다)로부터 제조될 수 있다.

[0845]

반응 도식 23



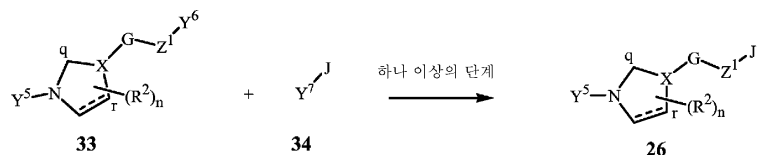
[0846]

[0847]

화학식 26의 화합물은 또한 반응 도식 24에 나타난 바와 같이, 적절히 작용화된 화학식 33의 화합물과 적절히 작용화된 화학식 34의 화합물의 반응에 의해 제조될 수 있다. 작용기 Y^6 및 Y^7 은 적절한 반응 조건하에서 다양한 복소환 J를 구성할 수 있는 부분, 예컨대 알데히드, 케톤, 에스테르, 산, 아마이드, 티오아미드, 니트릴, 아민, 알코올, 티올, 하이드라진, 옥심, 아미딘, 아마이드옥심, 올레핀, 아세틸렌, 할라이드, 알킬 할라이드, 메탄설포네이트, 트라이플루오로메탄설포네이트, 보론산, 보로네이트 등 중에서 선택되나, 이들에 한정되지 않는다. 일례로서, 염기의 존재하에서의 화학식 33 (여기서, Y^6 는 클로로 옥심 부분이다)의 화합물과 화학식 34 (여기서, Y^7 은 비닐기 또는 아세틸렌기이다)의 화합물의 반응에 의해, 각각 화학식 26 (여기서, J는 아이소사졸린 또는 아이소사졸이다)의 화합물이 얻어질 것이다. 반응 도식 24의 방법은 실시예 1의 단계 A에 예시되어 있다. 합성 문헌은 탄소환 및 탄소환계, 및 복소환 및 복소환계 (예를 들어, J-1 내지 J-82)의 생성에 관한 다수의 일반적인 방법을 포함하며; 예를 들어, 문헌 [Comprehensive Heterocyclic Chemistry, vol. 4-6, A. R. Katritzky and C. W. Rees Eds., Pergamon Press, New York, 1984; Comprehensive Heterocyclic Chemistry II, vol. 2-4, A. R. Katritzky, C. W. Rees, and E. F. Scriven Eds., Pergamon Press, New York, 1996; 시

리즈, The Chemistry of Heterocyclic Compounds, E. C. Taylor, Ed., John Wiley & Sons, New York, 및 Rodd's Chemistry of Carbon Compounds, vol. 2-4, Elsevier, New York]을 참조한다. 니트릴 옥사이드와 올레핀의 고리화 첨가 반응에 대한 일반적인 절차는 화학 문헌에 기록되어 있다. 관련 문헌에 관해서는 문헌 [Lee, Synthesis 56, 1057, 508-509 and Kanemasa et al., Tetrahedron 2000, 1982, 6-1064] 및 상기 문헌에 인용된 참조 문헌을 참조한다. 당업자는 원하는 복소환 J를 구성하기 위한 적절한 작용기의 선택 방법을 인지하고 있다. 다수의 화학식 34의 화합물은 공지되어 있으며, 당업계에 개시된 일반적인 방법에 의해 제조될 수 있다.

[0848] 반응 도식 24

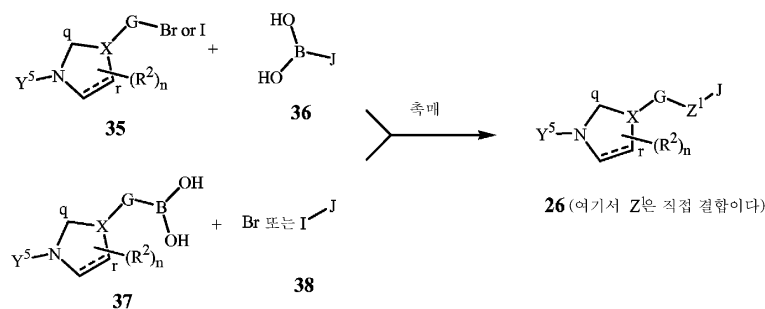


[0849]

[0850] (여기서, Y⁶ 및 Y⁷은 원하는 복소환 J의 구성에 적합한 작용기이다).

[0851] 화학식 26 (여기서 Z¹은 직접 결합이다)의 화합물의 대체 제법은 반응 도식 25에 나타낸 바와 같이 각각 화학식 35 또는 38의 아이오다이드 또는 브로마이드와 화학식 36 또는 37의 보론산의 Pd 촉매 크로스 커플링을 비롯한 공지된 스즈키 (Suzuki) 반응을 포함한다. 이러한 타입의 변환에는 다수의 촉매가 유용한데; 특히 유용한 촉매는 테트라키스(트라이페닐포스핀)팔라듐이다. 용매, 예컨대 테트라하이드로퓨란, 아세토니트릴, 다이에틸 에테르 및 다이옥산이 적합하다. 스즈키 반응 및 관련된 커플링 절차는 G-J 결합 형성을 위한 다수의 대체 수단을 제공한다. 주요 참조 문헌에 관해서는 예를 들어, 문헌 [C. A. Zifcick and D. J. Hlasta, Tetrahedron 2004, 60, 8991-9016]을 참조한다. G-J 결합의 합성에 적용가능한 팔라듐 화학의 철저한 검토에 관해서는, 예를 들어 문헌 [J. J. Li and G. W. Gribble, Eds., Palladium in Heterocyclic Chemistry: A Guide for the Synthetic Chemist, Elsevier, Oxford, UK, 2000]을 참조한다. 당업계에 공지된 다수의 다른 금속 촉매 크로스 커플링 반응 조건은 화학식 26의 화합물의 제조에 적합하다.

[0852] 반응 도식 25

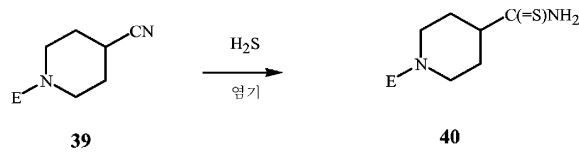


[0853]

[0854] 당업자는 다수의 화학식 1의 화합물이 기 Y⁵가 E로 치환되는 상기 반응 도식 21 내지 25에 기재된 것과 유사한 방법에 의해 직접 제조될 수 있음을 인지할 것이다. 따라서, Y⁵가 E로 치환되는 화학식 27, 29, 31, 33, 35 및 37에 대응하는 화합물은 화학식 1의 화합물의 제조에 유용한 중간체이다.

[0855] 화학식 40의 티오아미드는 화학식 1 (여기서, X는 X¹이다)의 화합물을 제조하기 위한 특히 유용한 중간체이다. 화학식 40의 티오아미드는 반응 도식 26에 나타낸 바와 같이, 대응하는 화학식 39의 니트릴에 황화수소를 첨가하여 제조될 수 있다.

[0856] 반응 도식 26



[0857]

[0858] 반응 도식 26의 방법은 아민, 예컨대 피리딘, 다이에틸아민 또는 다이에탄올아민의 존재하에, 화학식 39의 화합물과 황화수소를 접촉시켜 행해질 수 있다. 대안적으로, 황화수소는 알칼리 금속 또는 암모니아와의 이의 바이설라이드 염 형태로 사용될 수 있다. 이러한 타입의 반응은 문헌에 충분히 입증되어 있다 (예를 들어, 유럽 특허 EP 696,581 참조).

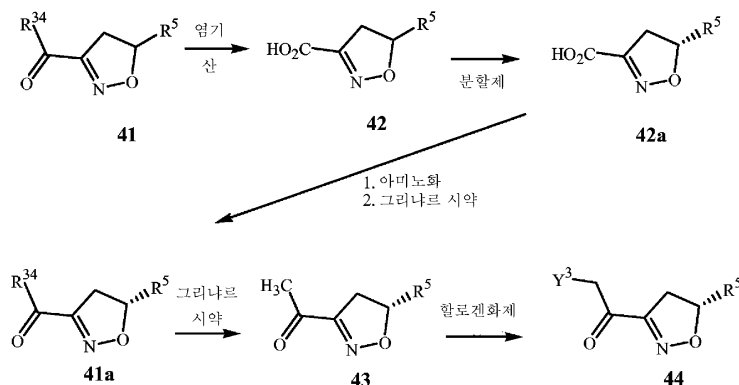
[0859]

화학식 44의 할로메틸 아이속사졸 케톤은 J가 예를 들어, 증거 A에 나타난 J-29-1 내지 J-29-12 중에서 선택되는 특정한 화학식 1의 키랄 화합물을 제조하기 위한 특히 유용한 중간체이다. 화학식 44의 할로메틸 아이속사졸 케톤은 반응 도식 27에 나타난 단단계 반응 순서에 의해 제조될 수 있다.

[0860]

당업자는 또한 화학식 42의 화합물이 화학식 41a의 라세미 유사체로 직접 전환된 다음에, 화학식 43 및 44의 라세미 유사체 및 특정한 화학식 1의 라세미 화합물 (예를 들어, J-29-1 내지 J-29-12의 라세미 유사체를 포함하는 화합물)을 제조하는데 사용될 수 있도록, 반응 도식 27이 분할제를 사용하지 않고서 실시될 수 있음을 인지할 것이다.

[0861] 반응 도식 27



[0862]

[0863] (여기서, R^{34} 는 C_2-C_8 다이알킬아미노, 1-피페리디닐, 1-피롤리디닐 또는 4-모르폴리닐이고, Y^3 는 Cl, Br 또는 I이며, R^5 는 발명의 요약에 상기에서 정의한 바와 같다).

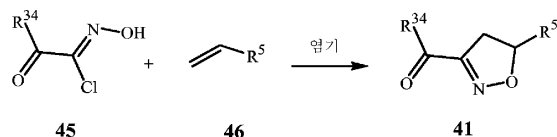
[0864]

화학식 42의 라세미 카르복실산의 제조는 바람직하게는 약 25 내지 45°C의 온도에서 수산화성 공용매, 예컨대 메탄올 또는 테트라하이드로푸란 중에서 약간 과량의 수산화나트륨을 사용하여, 화학식 41의 대응하는 화합물의 염기성 또는 산성 가수분해의 공지된 방법에 따라 달성될 수 있다. 생성물은 pH를 약 1 내지 3으로 조절한 다음에, 임의로 증발에 의한 유기 용매의 제거 후에 여과 또는 추출하여 분리될 수 있다. 화학식 42의 라세미 카르복실산은 적절한 키랄 아민 염기, 예컨대 실크닌, 다이하이드로실크닌 또는 이들의 혼합물의 디아스테레오머 염의 전형적인 분별 결정에 의해 분해될 수 있다. 약 85:15 비율의 실크닌-다이하이드로실크닌 혼합물은 예를 들어, 용해도가 낮은 염으로서의 R^5 가 치환된 페닐기인 화학식 42a의 (R)-배열 카르복실산을 제공하기 때문에, 특히 유용하다. 또한, 이들 키랄 아민 염기는 상업적 공급원으로부터 용이하게 얻을 수 있다. 화학식 44의 (R)-배열 할로메틸 케톤 중간체는 화학식 40의 티오아미드와 커플링한 후에 더욱더 살균적으로 활성인 화학식 1의 최종 생성물을 제공한다. 화학식 44의 할로메틸 케톤은 우선 화학식 41 또는 41a의 아미드를 1 몰 당량의 메틸마그네슘 할라이드 (그리냐르 시약)와 적절한 용매 또는 용매 혼합물, 예컨대 테트라하이드로푸란 및 톨루엔 중에서 약 0 내지 20°C의 온도에서 반응시켜 얻어진다. 화학식 43의 조제의 케톤 생성물은 산성 수용액으로 키템 (quenching), 추출, 및 농축시켜 분리될 수 있다. 그 다음에, 화학식 43의 조제의 케톤은 시약, 예컨대 염화설푸릴로 할로젠화되어, 화학식 44 (여기서, Y^3 는 Cl이다)의 클로로메틸 케톤을 제공하거나, 분자 브롬으로

할로겐화되어, 화학식 44 (여기서, Y^3 은 Br이다)의 대응하는 브로모메틸 케톤을 제공한다. 화학식 44의 할로메틸 케톤은 용매, 예컨대 헥산 또는 메탄올로 결정화되어 정제될 수 있거나, 티오아미드와의 축합 반응 시에 추가의 정제없이 사용될 수 있다.

[0865] 화학식 41의 화합물은 반응 도식 28에 나타난 바와 같이, 화학식 45의 하이드록사모일 클로라이드와 화학식 46의 올레핀의 고리화 첨가 반응에 의해 제조될 수 있다.

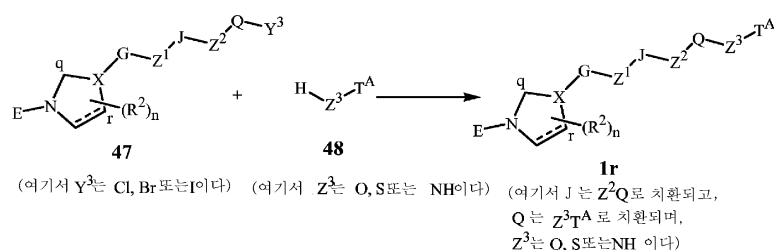
[0866] 반응 도식 28



[0867] 이 방법에서, 모든 3개의 반응 성분 (화학식 45 및 46의 화합물, 및 염기)은 화학식 45의 하이드록사모일 클로라이드의 가수분해 또는 이량체화를 최소화하도록 접촉된다. 하나의 전형적인 절차에서, 삼차 아민 염기, 예컨대 트라이에틸아민 또는 무기 염기, 예컨대 알칼리 금속 또는 알칼리 토금속 탄산염, 중탄산염 또는 인산염일 수 있는 염기는 화학식 46의 올레핀 유도체와 혼합되며, 화학식 45의 하이드록사모일 클로라이드는 고리화 첨가 반응이 비교적 급속도로 진행되는 온도, 전형적으로 약 5 내지 25℃의 온도에서 서서히 첨가된다. 대안적으로, 염기는 다른 2개의 성분 (화학식 45 및 46의 화합물)에 서서히 첨가될 수 있다. 화학식 45의 하이드록사모일 클로라이드가 실질적으로 반응 매질에 불용성을 나타내는 경우에 이러한 대체 절차가 바람직하다. 반응 매질 중의 용매는 과량으로 사용되는 물 또는 불활성 유기 용매, 예컨대 톨루엔, 헥산 또는 심지어는 올레핀 유도체일 수 있다. 생성물은 여과 또는 수세 후에, 용매 증발에 의해 염 부산물로부터 분리될 수 있다. 조 생성물은 결정화에 의해 정제될 수 있거나, 조 생성물은 반응 도식 27의 방법에 직접 사용될 수 있다. 화학식 41의 화합물은 화학식 42의 카르복실산의 전구체이며, 또한 반응 도식 27에 나타난 바와 같이, 화학식 41 (즉, 41a)의 화합물의 분해된 에난티오머를 제조하는데 유용하다.

[0869] 특정한 화학식 1r (여기서, J는 Z^2Q 로 치환되고, Q는 Z^3T^A 로 치환된다)의 화합물은 다수의 방법 중 하나에 의해 제조될 수 있다. 반응 도식 29에 나타난 하나의 방법에서, 화학식 47 (여기서, Y^3 은 이탈기, 예컨대 할로겐 (예를 들어, Cl, Br 또는 I)이다)의 화합물은 반응 도식 29에 나타난 바와 같이, 화학식 48 (여기서, Z^3 는 O, S 또는 NH이다)의 화합물과 반응한다.

[0870] 반응 도식 29



[0871] Z³가 O인 경우에, 반응은 공지된 울만 (Ullmann) 에테르 합성이며, 전형적으로 무기 염기, 예컨대 탄산칼륨 또는 탄산세슘의 존재하에 금속 촉매, 예를 들어, 요오드화구리를 사용하여 행해진다. 대략 실온 내지 150℃의 온도에서 용매, 예컨대 다이메틸 설펝사이드 및 N,N-다이메틸포름아미드 중에서 행해진다. 화학식 1r (여기서, Z³는 O이다)의 다이아릴 에테르는 또한 친핵성 방향족 치환 또는 아릴보론산 다이아릴에테르 방법을 포함한 팔라듐 촉매 부흐발트-하르트비히 (Buchwald-Hartwig) 반응을 이용하여 제조될 수 있다. 울만 다이아릴에테르 합성을 비롯한 이들 방법의 최근 검토에 관해서는 예를 들어, 문헌 [R. Frien and D. Kikeji, Synthesis 2006, 14, 2271-2285]을 참조한다.

[0873] 다이아릴 에테르에 관해 기재된 것과 유사한 조건은 또한 화학식 1r (여기서, Z는 S 또는 NH이다)의 화합물을 제조하기 위해 사용될 수 있다. 황 및 질소 유사체의 제조의 최근 검토에 관해서는, 예를 들어, 문헌 [S. V.

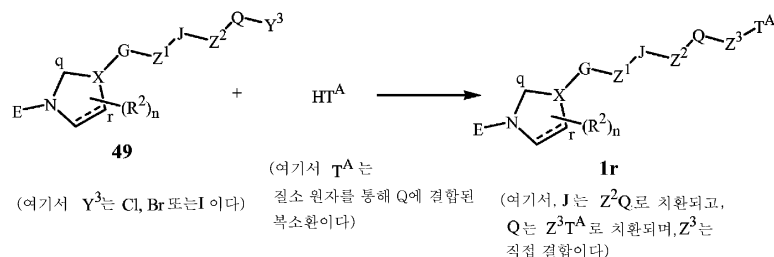
Ley and A. W Thomas Angew. Chem., Int. Ed. Engl. 2003, 42, 5400]을 참조한다.

[0874]

유사한 구리 촉매 방법은 반응 도식 30에 나타난 바와 같이, 화학식 1r (여기서, Z^3 는 직접 결합이고, T^A 는 질소 원자를 통해 Q에 결합된 복소환이다 (예를 들어, T^A 는 트리아아졸 또는 이의 염이다))의 화합물을 제조하는데 사용될 수 있다.

[0875]

반응 도식 30



[0876]

[0877]

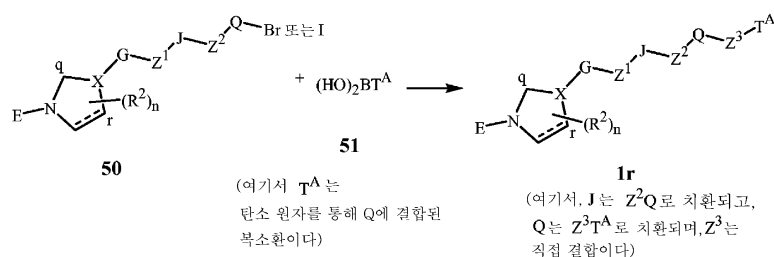
리간드, 예컨대 (1R,2R)-N,N-다이메틸-1,2-사이클로헥센다이아민은 구리 촉매의 용해성 및 반응성을 증가시키도록 사용될 수 있다. 반응은 전형적으로 용매, 예컨대 다이메틸설폭사이드 또는 혼합 용매, 예컨대 다이메틸설폭사이드-물 중에서 대략 실온 내지 200℃의 온도에서 행해진다. 주요 참조 문헌에 관해서는 예를 들어, 문헌 [Andersen et al., Synlett 2005, 14, 2209-2213]을 참조한다.

[0878]

화학식 1r (여기서, Z^3 는 직접 결합이고, T^A 는 탄소 원자를 통해 Q에 결합된다)의 화합물은 반응 도식 31에 나타난 바와 같이, Pd 촉매 크로스 커플링을 비롯한 공지된 스즈키 반응을 포함한다.

[0879]

반응 도식 31



[0880]

[0881]

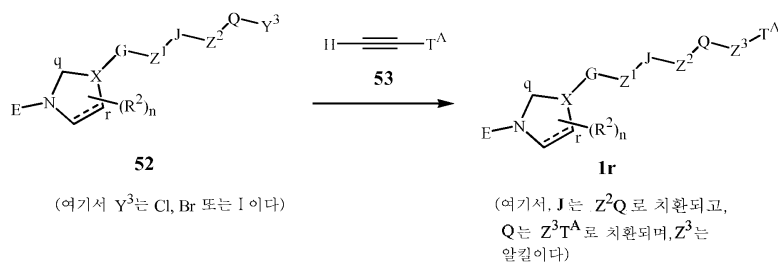
화학식 50의 아이오다이드 또는 브로마이드와, 화학식 51의 보론산의 커플링 조건은 상기 반응 도식 25에 기재된 것과 유사하다. 다수의 촉매가 이러한 형태의 변환에 유용하며; 전형적인 촉매는 테트라키스(트라이페닐포스핀)팔라듐이다. 용매, 예컨대 테트라하이드로퓨란, 아세토니트릴, 다이에틸 에테르 및 다이옥산이 적합하다. 스즈키 반응 및 관련된 커플링 절차는 Z^3 가 직접 결합인 QT^A 결합을 형성하기 위한 다수의 대체 수단을 제공한다. 주요 참조 문헌에 관해서는 예를 들어, 문헌 [C. A. Zifacsak and D. J. Hlasta, Tetrahedron 2004, 60, 8991-9016]을 참조한다. $Q-Z^3G^A$ 결합의 합성에 적용가능한 팔라듐 화학의 철저한 검토에 관해서는, 예를 들어 문헌 [J. J. Li and G. W. Gribble, editors, Palladium in Heterocyclic Chemistry: A Guide for the Synthetic Chemist, Elsevier: Oxford, UK, 2000]을 참조한다. 이러한 일반적인 방법에 관한 다양한 촉매 종류, 염기 및 반응 조건이 당업계에 공지되어 있다.

[0882]

반응 도식 32에 나타난 바와 같이, 화학식 1r (여기서, Z^3 는 알킨이다)의 화합물의 제조 방법으로는 금속 촉매 및 염기의 존재하에서의 화학식 52 (여기서, Y^3 은 할로젠, 예컨대 요오드 또는 브로마이드이다)의 할라이드와, 화학식 53의 알킨의 Pd 촉매 크로스 커플링을 이용한 공지된 소노가시라 (Sonogashira) 반응을 들 수 있다.

[0883]

반응 도식 32



[0884]

[0885]

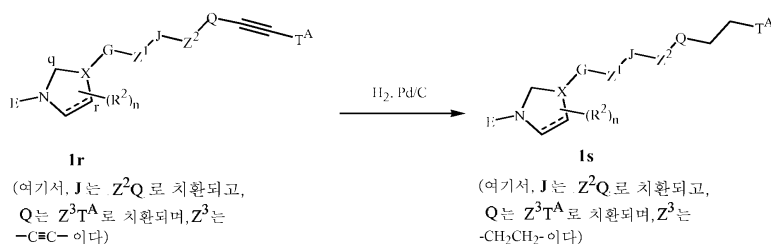
다수의 촉매가 이러한 형태의 변환에 유용하며; 전형적인 촉매는 다이클로로비스(트라이-*o*-톨릴포스핀)팔라듐 (II)이다. 적절한 용매로는 테트라하이드로푸란, 아세트ونی트릴 및 아세트산에틸을 들 수 있다. 적절한 금속 촉매로는 예를 들어, 요오드화구리를 들 수 있다. 전형적인 염기로는 예를 들어, 트라이에틸아민 또는 후니그 염기 (Hunig's base)를 들 수 있다. 주요 참조 문헌에 관해서는 예를 들어, 문헌 [I. Campbell, Organocopper Reagents 1994, 217-235]을 참조한다.

[0886]

반응 도식 33에 나타난 바와 같이, 화학식 1r (여기서, Z^3 는 $-C\equiv C-$ 이다)의 화합물은 탄소에 담지된 촉매, 예를 들어, 팔라듐의 존재하에 수소로 환원하여, 화학식 1f (여기서, Z^3 는 $-CH_2CH_2-$ 이다)의 화합물을 제조하기 위한 출발 물질로서 작용할 수 있다.

[0887]

반응 도식 33



[0888]

[0889]

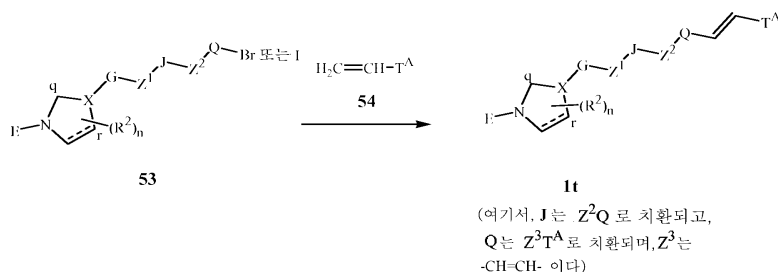
환원은 전형적으로 당업자에게 공지된 방법을 이용하여, 대기압 내지 700 kPa, 바람직하게는 400 kPa의 압력에서 용매, 예컨대 아세트산에틸 또는 에탄올 중에서 수소 분위기하에 행해진다.

[0890]

반응 도식 34에 나타난 바와 같이, 특정한 화학식 1t (여기서, Z^3 는 $-CH=CH-$ 이다)의 화합물의 제법으로는 금속 촉매 및 염기, 예컨대 트라이에틸아민 또는 중탄산나트륨의 존재하에서의 화학식 53 (여기서, Y^3 의 요오드 또는 브로마이드와, 화학식 54의 알켄의 Pd 촉매 크로스 커플링을 이용한 공지된 Heck) 반응을 들 수 있다.

[0891]

반응 도식 34



[0892]

[0893]

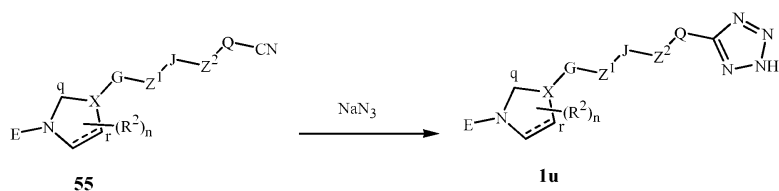
다수의 촉매가 이러한 형태의 변환에 유용하며; 전형적인 촉매는 트리스(다이벤질리덴아세톤)다이팔라듐이다. 적절한 용매로는 N,N-다이메틸포름아미드 및 아세트ونی트릴을 들 수 있다. Heck 반응의 검토에 관해서는 예를 들어, 문헌 [W. Cabri and I. Candiani, Acc. Chem Res. 1995, 28, 2-7]을 참조한다.

[0894]

화학식 1u (여기서, Z^3 는 직접 결합이고, T^A 는 탄소를 통해 Q에 결합된 테트라졸이다)의 화합물은 반응 도식 35

에 나타낸 바와 같이, 화학식 55의 니트릴로부터 제조될 수 있다.

[0895] 반응 도식 35

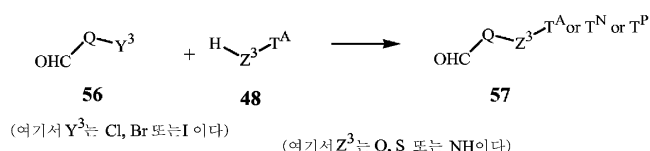


[0896]

[0897] 이러한 방법에서, 화학식 55의 니트릴은 용매, 예컨대 N,N-다이메틸포름아미드 또는 톨루엔 중에서 대략 실온 내지 140℃의 온도에서 아자이드, 예컨대 아자이드화나트륨 또는 트라이메틸실릴 아자이드와 반응하여, 화학식 1u의 화합물을 생성한다. 주요 참조 문헌에 관해서는 예를 들어, 문헌 [B. Schmidt, D. Meid and D. Kieser, Tetrahedron 2006, 63, 492-496]을 참조한다.

[0898] 반응 도식 31 및 32에 기재된 것과 유사한 반응은 또한 커플링 전에 중간체에 대하여 행해질 수 있으며, 예를 들어, 반응 도식 36에 나타낸 바와 같이, 화학식 56의 알데히드는 화학식 57의 치환 알데히드를 제조하기 위한 유용한 출발 물질이다. 다수의 화학식 48의 알데히드 출발 물질은 예를 들어, 플루오로벤즈알데히드, 클로로벤즈알데히드, 브로모벤즈알데히드 및 요오도벤즈알데히드의 오르토, 메타 및 파라 이성질체로 시판 중이다.

[0899] 반응 도식 36



[0900]

[0901] 유사하게는, 반응 도식 30 내지 35에 기재된 반응은 또한 화학식 57의 알데히드 유도체를 제조하는데 사용될 수 있으며, 예를 들어, 2-(페닐티오)벤즈알데히드에 관해서는 문헌 [W. Mansawat, et. al. Tetrahedron Letters 2007, 48(24), 4235-4238]을; 2-(2-페닐에티닐)벤즈알데히드에 관해서는 문헌 [A. Cwik, Z. Hell, F. Figueras, Advanced Synthesis & Catalysis 2006, 348(4/5), 523-530]을; 2-(페닐에티닐)벤즈알데히드에 관해서는 문헌 [T. Sakamoto, Y. Kondo, N. Miura, K. Hayashi, H. Yamanaka, Heterocycles 1986, 24(8), 2311-14]을; 2-(1H-1,2,4-트리아졸-1-일)벤즈알데히드에 관해서는 문헌 [J. Rosevear, J. F. K. Wilshire, John F. K. Australian Journal of Chemistry 1991, 44(8), 1097-1114]을 참조한다.

[0902] 화학식 1의 화합물을 제조하기 위해 상술한 일부의 시약 및 반응 조건이 중간체에 존재하는 특정한 작용기에 적합하지 않을 수 있는 것으로 인지된다. 이러한 경우에, 합성에 보호/탈보호 시퀀스 또는 작용기 상호 변환을 포함시키는 것이 원하는 생성물을 얻는데 도움이 될 것이다. 보호기의 사용 및 선택은 화학 합성에서의 당업자에게 자명할 것이다 (예를 들어, 문헌 [Greene, T. W.; Wuts, P. G. M. Protective Groups in Organic Synthesis, 2nd ed.; John Wiley & Sons, New York, 1991] 참조). 당업자는 경우에 따라서는, 각각의 반응 도식에 나타낸 바와 같이, 화학식 1의 화합물의 합성을 완료하기 위해, 소정 시약의 도입 후에, 상세히 기재되어 있지 않은 추가의 통상적인 합성 단계를 행할 필요가 있을 수 있음을 인지할 것이다. 당업자는 또한 화학식 1의 화합물을 제조하기 위해 제시된 특정 시퀀스로 나타낸 것과는 다른 순서로 상기 반응 도식에 예시된 단계의 조합을 행할 필요가 있음을 인지할 것이다.

[0903] 당업자는 또한 치환기를 추가하거나 기존의 치환기를 변경하기 위해, 화학식 1의 화합물 및 본 명세서에 기재된 중간체에 대하여 다양한 친전자성, 친핵성, 라디칼, 유기 금속, 산화, 및 환원 반응을 행할 수 있음을 인지할 것이다.

[0904] 더 이상 상술하지 않고도, 상술한 설명을 이용하는 당업자라면 본 발명을 최대한으로 이용할 수 있을 것으로 여겨진다. 그러므로, 하기 실시예는 단순히 예시적인 것으로 그리고 어떠한 임의의 방식으로든 본 개시 내용을 한정하지 않는 것으로 해석되어야 한다. 하기 실시예에서의 단계들은 전체적인 합성 변환에서 각각의 단계에 있어서의 절차를 예시하며, 각각의 단계에 있어서의 출발 물질은 그 절차가 다른 실시예 또는 단계에 설명된 특정한 예비 실행에 의해 반드시 제조된 것은 아닐 수도 있다. 크로마토그래피 용매 혼합물 또는 달리 나타내는 경우를 제외하고는 백분율은 중량 기준이다. 달리 명시되지 않는 한, 크로마토그래피 용매 혼합물에 대한 부

및 백분율은 체적 기준이다. ^1H NMR 스펙트럼은 테트라메틸실란으로부터의 다운필드 (ppm)로 나타내며; "s"는 싱글릿을 의미하고, "d"는 더블릿을 의미하며, "t"는 트라이플릿을 의미하고, "q"는 콰르텟을 의미하며, "m"은 멀티플릿을 의미하고, "dd"는 더블릿 오브 더블릿 (doublet of doublets)을 의미하며, "br m"은 브로드 멀티플릿을 의미하고, "br s"는 브로드 싱글릿을 의미한다.

실시예 1

메틸 4-[4-(4,5-다이하이드로-5-페닐-3-아이속사졸릴)-2-티아졸릴]-N-(2,5-다이메틸페닐)-1-피페리딘카르복스이미도티오에이트의 제조

단계 A: 1,1-다이메틸에틸 4-[4-(4,5-다이하이드로-5-페닐-3-아이속사졸릴)-2-티아졸릴]-1-피페리딘카르복실레이트의 제조

에탄올 (5 mL) 중의 1,1-다이메틸에틸 4-(4-포르밀-2-티아졸릴)-1-피페리딘카르복실레이트 (1.0 g, 3.4 mmol)의 혼합물에, 하이드록실아민 (50 wt.%, 0.25 mL, 4.0 mmol) 수용액을 첨가하였다. 반응 혼합물을 60°C로 1 시간 동안 가열하고, 그 동안에 반응 혼합물이 균일하게 되었다. 얻어진 반응 용액을 실온으로 냉각시켜, 테트라하이드로푸란 (10 mL)으로 희석시켰다. 스티렌 (0.57 mL, 5 mmol)을 반응 혼합물에 첨가한 다음에, 클로록스 (Clorox)® (차아염소산나트륨 수용액) (10.5 mL)를 3 시간에 걸쳐서 조금씩 첨가하였다. 반응 혼합물을 하룻밤 동안 실온에서 교반한 다음에, 여과하였다. 여과에 의해 수집된 고체를 물 및 다이에틸 에테르로 세정하고, 공기 건조시켜, 백색 분말 (610 mg)로서의 표제 화합물을 얻었다. 여과액을 중탄산나트륨 포화 수용액으로 희석시켜, 다이에틸 에테르로 추출하였다. 추출물을 건조시키고 (MgSO_4), 감압하에 농축시켜, 황색 오일 (850 mg)로서의 더욱 많은 표제 화합물을 얻었다. 오일을 다이에틸 에테르 (4 mL)로 희석하여, 정치시에 백색 고체 (233 mg)로서의 표제 화합물을 얻었다.

^1H NMR (CDCl_3) δ 1.47 (s, 9H), 1.7 (m, 2H), 2.1 (m, 2H), 2.85 (m, 2H), 3.2 (m, 1H), 3.45 (m, 1H), 3.84 (m, 1H) 4.2 (br s, 2H), 5.75 (m, 1H), 7.25-7.40 (m, 5H), 7.61 (s, 1H).

단계 B: 4-[4-(4,5-다이하이드로-5-페닐-3-아이속사졸릴)-2-티아졸릴]피페리딘의 제조

다이클로로메탄 (50 mL) 중의 1,1-다이메틸에틸 4-[4-(4,5-다이하이드로-5-페닐-3-아이속사졸릴)-2-티아졸릴]-1-피페리딘카르복실레이트 (즉, 단계 A의 생성물) (0.815 g, 1.97 mmol)의 용액에, 염화수소와 다이에틸 에테르의 용액 (2 M, 10 mL, 20 mmol)을 첨가하였다. 반응 혼합물을 실온에서 1 시간 동안 교반하여, 고무상 침전물을 얻었다. 메탄올을 첨가하여, 침전물을 용해시켜, 반응 혼합물을 추가로 1 시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 감압하에 농축시켜, 아세트산메틸과 중탄산나트륨 포화 수용액에 분배하여, 유기층을 건조시키고 (MgSO_4), 농축시켜, 정치시에 고화되는 투명한 오일 (0.31 g)로서의 표제 화합물을 얻었다.

^1H NMR (CDCl_3) δ 1.65 (br s, 1 H), 1.7 (m, 2H), 2.1 (m, 2H), 2.75 (m, 2H), 3.1-3.25 (m, 3H), 3.41 (m, 1H), 3.83 (m, 1H), 5.75 (m, 1H), 7.25-7.40 (m, 5H), 7.60 (s, 1H).

단계 C: 4-[4-(4,5-다이하이드로-5-페닐-3-아이속사졸릴)-2-티아졸릴]-N-(2,5-다이메틸페닐)-1-피페리딘카르보티오아미드의 제조

다이클로로메탄 (10 mL) 중의 4-[4-(4,5-다이하이드로-5-페닐-3-아이속사졸릴)-2-티아졸릴]피페리딘 (즉, 단계 B의 생성물) (1.0 g, 3.2 mmol)의 용액에, 2,5-다이메틸페닐 아이소티오시아네이트 (0.52 g, 3.2 mmol)와 다이클로로메탄 (5 mL)의 용액을 1 분간에 걸쳐서 첨가하였다. 반응 혼합물을 실온에서 20 분간 교반하여, 농축시키고, 아세트산메틸 (4 mL)에 용해시켜, 0°C에서 하룻밤 동안 유지시키고, 여과시켜, 120 내지 123°C에서 용융하는 백색 분말 (1.35 g)로서의 표제 화합물을 얻었다.

^1H NMR (CDCl_3) δ 1.9 (m, 2H), 2.15 (m, 2H), 2.22 (s, 3H), 2.30 (s, 3H), 3.20 (m, 2H), 3.30 (m, 1H), 3.41 (m, 1H), 3.82 (m, 1H), 4.58 (m, 2H), 5.75 (m, 1H), 6.93 (m, 3H), 7.10 (m, 1H), 7.25-7.40 (m, 5H), 7.62 (s, 1H).

단계 D: 메틸 4-[4-(4,5-다이하이드로-5-페닐-3-아이속사졸릴)-2-티아졸릴]-N-(2,5-다이메틸페닐)-1-피페리딘카르복스이미도티오에이트의 제조

- [0917] 다이클로로메탄 (2 mL) 중의 14-[4-(4,5-다이하이드로-5-페닐-3-아이속사졸릴)-2-티아졸릴]-N-(2,5-다이메틸페닐)-1-피페리딘카르보티오아미드 (즉, 단계 C의 생성물) (476 mg, 1.0 mmol) 및 요오드화메틸 (0.25 mL, 4.0 mmol)의 용액을 실온에서 3 시간 동안 진탕시켰다. 그 다음에, 반응 혼합물을 다이클로로메탄으로 희석시키고, 중탄산나트륨 포화 수용액 및 염화나트륨 포화 수용액으로 세정하여, 건조시키고 (MgSO₄), 농축시켜, 폼상 (foamy) 백색 고체 (480 mg)를 얻었다. 고체를 아세트산메틸/석유 에테르로 결정화하여, 114 내지 116°C에서 용융하는 백색 분말 (320 mg)로서의 표제 화합물, 본 발명의 화합물을 얻었다.
- [0918] ¹H NMR (CDCl₃) δ 1.9 (m, 2H), 2.08 (s, 3H), 2.12 (s, 3H), 2.1 (m, 2H), 2.28 (s, 3H), 3.05 (m, 2H), 3.30 (m, 1H), 3.42 (m, 1H), 3.82 (m, 1H), 4.28 (m, 2H), 5.75 (m, 1H), 6.57 (m, 1H), 6.75 (m, 1H), 7.0 (m, 1H), 7.25-7.40 (m, 5H), 7.63 (s, 1H).
- [0919] 실시예 2
- [0920] N-[[4-[4-(4,5-다이하이드로-5-페닐-3-아이속사졸릴)-2-티아졸릴]-1-피페리딘]메틸렌]-2,5-다이메틸벤젠아민의 제조
- [0921] 환류시에 톨루엔 (20 mL) 중의 트라이메틸 오르토포르메이트 (21.8 mL, 200 mmol), p-톨루엔설폰산 (380 mg, 2.0 mmol)의 용액에, 톨루엔 (15 mL) 중의 2,5-다이메틸아닐린 (2.5 mL, 20 mmol)의 용액을 1 시간에 걸쳐서 첨가하였다. 추가로 1 시간 후에, 반응 혼합물을 실온으로 냉각시켜, 하룻밤 동안 교반하였다. 혼합물을 중탄산나트륨 포화 수용액, 염화나트륨 포화 수용액으로 세정하여, 감압하에 농축시켜, 소량의 고체를 함유하는 호박색 오일을 얻었다. 여과시켜, 오일 (3.2 g)을 얻어, 추가의 정제없이사용하였다. 톨루엔 (2 mL) 중의 오일 (326 mg, 2.0 mmol) 및 4-[4-(4,5-다이하이드로-5-페닐-3-아이속사졸릴)-2-티아졸릴]피페리딘 (즉, 실시예 1, 단계 B의 생성물) (313 mg, 1.0 mmol)의 혼합물을 70°C로 1 시간 동안 가열하고, 냉각시켜, 농축시켰다. 얻어진 고체를 용리제로서 아세트산에틸-헥산을 사용하여, 실리카 겔 상에서 칼럼 크로마토그래피로 정제하여, 폼상 백색 고체 (400 mg)로서의 표제 화합물, 본 발명의 화합물을 얻었다.
- [0922] ¹H NMR (CDCl₃) δ 1.82 (m, 2H), 2.2 (m, 2H), 2.22 (s, 3H), 2.28 (s, 3H), 3.1 (br m, 2H), 3.30 (m, 1H), 3.41 (m, 1H), 3.82 (m, 1H), 4.1 (br m, 2H), 5.75 (m, 1H), 6.58 (m, 1H), 6.78 (m, 1H), 7.02 (m, 1H), 7.25-7.40 (m, 6H), 7.63 (s, 1H).
- [0923] 실시예 3
- [0924] 메틸 4-[4-(4,5-다이하이드로-5-페닐-3-아이속사졸릴)-2-티아졸릴]-N-(2,5-다이메틸페닐)-1-피페리딘카르복스이미데이트의 제조
- [0925] 메탄올 (5 mL) 중의 메틸 4-[4-(4,5-다이하이드로-5-페닐-3-아이속사졸릴)-2-티아졸릴]-N-(2,5-다이메틸페닐)-1-피페리딘카르복스이미도티오에이트 (즉, 실시예 1, 단계 D의 생성물) (0.10 g, 0.20 mmol)의 용액을 바이오테이지 (Biotage)® 크레이터 (Creator) XM 마이크로파 장치에서 140°C로 1.5 시간 동안 가열하였다. 반응 혼합물을 감압하에 농축시켰다. 얻어진 잔류물을 용리제로서 1:1 아세트산에틸-헥산을 사용하여 실리카 겔 상에서 칼럼 크로마토그래피로 정제하여, 폼상 백색 고체 (19 mg)로서의 표제 화합물, 본 발명의 화합물을 얻었다.
- [0926] ¹H NMR (CDCl₃) δ 1.66-1.75 (m, 2H), 1.97-2.01 (m, 2H), 2.11 (s, 3H), 2.25 (s, 3H), 2.76-2.82 (m, 2H), 3.10-3.15 (m, 1H), 3.38-3.44 (m, 1H), 3.68 (s, 3H), 3.80-3.82 (m, 1H), 3.84-3.88 (m, 2H), 5.71-5.76 (m, 1H), 6.61-6.67 (m, 2H), 6.97-6.99 (d, 1H), 7.30-7.34 (m, 1H), 7.36-7.40 (m, 4H), 7.60 (s, 1H).
- [0927] 실시예 4
- [0928] 4-[4-(4,5-다이하이드로-5-페닐-3-아이속사졸릴)-2-티아졸릴]-N-펜틸-1-피페리딘카르복스아미드의 제조
- [0929] 다이클로로메탄 (10 mL) 중의 4-[4-(4,5-다이하이드로-5-페닐-3-아이속사졸릴)-2-티아졸릴]피페리딘 (즉, 실시예 1, 단계 B의 생성물) (0.10 g, 0.32 mmol) 및 펜틸 아이소시아네이트 (0.036 g, 0.32 mmol)의 용액을 실온에서 하룻밤 동안 교반한 다음에, 여과하여, 감압하에 농축시켜, 백색 고체를 얻었다. 고체를 다이에틸 에테르로 슬러리화하고, 여과하여, 공기 건조시켜, 132 내지 134°C에 용융하는 백색 분말 (0.081 g)로서의 표제 화합물, 본 발명의 화합물을 얻었다.

- [0930] ^1H NMR (CDCl_3) δ 0.90 (t, 3H), 1.30-1.34 (m, 4H), 1.49-1.53 (m, 2H), 1.72-1.82 (m, 2H), 2.14 (d, 2H), 2.94 (t, 2H), 3.20-3.26 (m, 3H), 3.39-3.45 (m, 1H), 3.80-3.88 (m, 1H), 4.03 (d, 2H), 4.44, (s, 1H), 5.74 (q, 1H), 7.32-7.34 (m, 1H), 7.35-7.41 (m, 4H), 7.61 (s, 1H).
- [0931] 실시예 5
- [0932] 4-[4-(4,5-다이하이드로-5-페닐-3-아이속사졸릴)-2-티아졸릴]-N-2-프로펜-1-일]-1-피페리딘카르보티오아미드의 제조
- [0933] 다이클로로메탄 (10 mL) 중의 4-[4-(4,5-다이하이드로-5-페닐-3-아이속사졸릴)-2-티아졸릴]피페리딘 (즉, 실시예 1, 단계 B의 생성물) (0.10 g, 0.32 mmol) 및 알릴 아이소티오시아네이트 (0.027 g, 0.32 mmol)의 용액을 실온에서 하룻밤 동안 교반한 다음에, 여과하여, 감압하에 농축시켰다. 얻어진 고체를 용리제로서 아세트산에틸을 사용하여, 실리카 겔 상에서 칼럼 크로마토그래피로 정제하여, 품상 백색 고체 (85 mg)로서의 표제 화합물, 본 발명의 화합물을 얻었다.
- [0934] ^1H NMR (CDCl_3) δ 1.84-1.94 (m, 2H), 2.16-2.22 (m, 2H), 3.24 (t, 2H), 3.30-3.36 (m, 1H), 3.38-3.44 (m, 1H), 3.80-3.88 (m, 1H), 4.32-4.36 (m, 2H), 4.69 (d, 2H), 5.19 (t, 1H), 5.26 (s, 1H), 5.65 (s, 1H), 5.71-5.77 (m, 1H), 5.90-6.00 (m, 1H), 7.31-7.35 (m, 1H), 7.37-7.39 (m, 4H), 7.60 (s, 1H).
- [0935] 실시예 6
- [0936] 1-[4-[4-[4,5-다이하이드로-5-(2-플루오로페닐)-3-아이속사졸릴]-2-티아졸릴]-1-피페리딘]-4,4,4-트라이플루오로-3-메틸-1-부탄온의 제조
- [0937] 단계 A: 2-클로로-1-[4,5-다이하이드로-5-(2-플루오로페닐)-3-아이속사졸릴]에탄온
- [0938] 55°C로 가열된 무수 톨루엔 (15 mL) 중의 2-플루오로스티렌 (2.78 g, 22.8 mmol) 및 중탄산나트륨 (2.88 g, 34.2 mmol)의 현탁액에, 3-클로로-N-하이드록시-2-옥소-프로판이미도일 클로라이드 (1.78 g, 11.4 mmol)를 첨가하였다. 55°C에서 2 시간 후에, 반응 혼합물을 냉각시키고, 여과하여, 여과액을 감압하에 농축시켰다. 얻어진 잔류물을 용리제로서 헥산 중의 10% 아세트산에틸을 사용하여, 실리카 겔 상에서 칼럼 크로마토그래피로 정제하여, 42 내지 44°C에서 용융하는 황색 고체 (2.35 g)로서의 표제 화합물을 얻었다.
- [0939] ^1H NMR (CDCl_3) δ 3.24 (m, 1H), 3.62 (m, 1H), 4.73 (s, 2H), 6.02 (m, 1H), 7.18 (m, 1H), 7.26 (m, 1H), 7.36 (m, 2H).
- [0940] 단계 B: 1,1-다이메틸에틸 4-[4-(4,5-다이하이드로-5-(2-플루오로페닐)-3-아이속사졸릴)-2-티아졸릴]-1-피페리딘카르복실레이트
- [0941] 에탄올 (10 mL) 중의 1-tert-부톡시카르보닐피페리딘-4-카르보티오아미드 (1 g, 4.10 mmol)의 용액에, 2-클로로-1-[4,5-다이하이드로-5-(2-플루오로페닐)-3-아이속사졸릴]에탄온 (즉, 단계 A의 생성물) (0.99 g)을 첨가한 다음에, 피리딘 (0.34 mL, 4.10 mmol)을 첨가하였다. 반응 혼합물을 77°C로 3 시간 동안 가열한 다음에, 실온에서 하룻밤 동안 교반하였다. 에탄올을 반응 혼합물로부터 제거하여, 잔존하는 잔류물을 아세트산에틸 (50 mL)로 희석하였다. 유기층을 분리하여, 물 및 염화나트륨 포화 수용액으로 세정하고, 건조시켜 (MgSO_4), 감압하에 농축시켰다. 얻어진 오일을 실리카 겔 상에서 칼럼 크로마토그래피로 정제하여, 담황색 점착성 오일 (1.11 g)로서의 표제 화합물을 얻었다.
- [0942] ^1H NMR (CDCl_3) δ 1.46 (s, 9H), 1.65 (m, 2H), 2.04 (m, 2H), 2.82 (m, 1H), 3.24 (m, 1H), 3.40, (m, 1H), 4.02 (m, 2H), 5.98 (m, 1H), 7.08 (m, 2H), 7.27 (m, 1H), 7.35 (m, 1H), 7.61 (s, 1H).
- [0943] ^{19}F NMR (CDCl_3) δ 118.39 (1F).
- [0944] 단계 C: 4-[4-[5-(2-플루오로페닐)-4,5-다이하이드로-3-아이속사졸릴]-2-티아졸릴]피페리딘 하이드로클로라이드
- [0945] 에탄올 (20 mL) 중의 1,1-다이메틸에틸 4-[4-(4,5-다이하이드로-5-(2-플루오로페닐)-3-아이속사졸릴)-2-티아졸릴]-1-피페리딘카르복실레이트 (즉, 단계 B의 생성물) (1.05 g, 2.43 mmol)의 용액에, 에테르 중의 염화수소 용액 (2 M, 12.2 mL)을 첨가하였다. 반응 혼합물을 실온에서 하룻밤 동안 교반한 다음에, 감압하에 농축시켜, 무

색 고체 (0.807 g)로서의 표제 화합물을 얻었다.

[0946] ^1H NMR (CDCl_3) δ 1.84 (m, 2H), 2.21 (m, 2H), 3.04 (m, 1H), 3.42 (m, 3H), 3.84 (m, 1H), 5.88 (m, 1H), 7.23 (m, 2H), 7.38 (m, 2H), 8.07 (s, 1H), 8.86 (br s, 1H), 9.02 (br s, 1H).

[0947] 단계 D: 1-[4-[4-[4,5-다이하이드로-5-(2-플루오로페닐)-3-아이속사졸릴]-2-티아졸릴]-1-피페리딘]-4,4,4-트라이플루오로-3-메틸-1-부탄온

[0948] 다이클로로메탄 (3 mL) 중의 4,4,4-트라이플루오로-3-메틸-부탄산 (64 mg, 0.408 mmol)의 용액에, 1-프로판포스폰산 환상 무수물 용액 (아세트산에틸 중의 50%, 0.5 mL)을 첨가하였다. 5 분간 교반한 후에, 4-[4-[5-(2-플루오로페닐)-4,5-다이하이드로-3-아이속사졸릴]-2-티아졸릴]피페리딘 하이드로클로라이드 (즉, 단계 C의 생성물) (150 mg, 0.408 mmol), 트라이에틸아민 (0.1 mL) 및 4-다이메틸아미노피리딘 (5 mg)을 연속적으로 첨가하였다. 반응 혼합물을 3 시간 동안 교반한 다음에, 감압하에 농축시켰다. 얻어진 물질을 실리카 겔 상에서 칼럼 크로마토그래피로 정제하여, 오일 (151 mg)로서의 표제 화합물, 본 발명의 화합물을 얻었다.

[0949] ^1H NMR (CDCl_3) δ 1.16 (m, 3H), 1.74 (m, 2H), 2.24 (m, 3H), 2.82 (m, 3H), 3.36 (m, 3H), 3.86 (m, 2H), 4.62 (m, 1H), 5.98 (m, 1H), 7.08 (m, 2H), 7.27 (m, 1H), 7.42 (m, 1H), 7.61 (s, 1H).

[0950] ^{19}F NMR (CDCl_3) δ -118.39, -74.371, -73.851, -70.865.

[0951] 실시예 7

[0952] 5-클로로-1-[4-[4-[4,5-다이하이드로-5-(2-플루오로페닐)-3-아이속사졸릴]-2-티아졸릴]-1-피페리딘]-1-펜탄온의 제조

[0953] 다이클로로메탄 (3 mL) 중의 5-클로로펜탄산 (64 mg, 0.408 mmol)의 용액에, 1-프로판포스폰산 환상 무수물 용액 (아세트산에틸 중의 50%, 0.5 mL)을 첨가하였다. 5 분간 교반한 후에, 4-[4-[5-(2-플루오로페닐)-4,5-다이하이드로-3-아이속사졸릴]-2-티아졸릴]피페리딘 하이드로클로라이드 (즉, 실시예 6, 단계 C의 생성물) (150 mg, 0.408 mmol), 트라이에틸아민 (0.1 mL) 및 4-다이메틸아미노피리딘 (5 mg)을 연속적으로 첨가하였다. 반응 혼합물을 3 시간 동안 교반한 다음에, 감압하에 농축시켰다. 얻어진 물질을 실리카 겔 상에서 칼럼 크로마토그래피로 정제하여, 오일 (126 mg)로서의 표제 화합물, 본 발명의 화합물을 얻었다.

[0954] ^1H NMR (CDCl_3) δ 1.16 (m, 4H), 1.74 (m, 2H), 2.20 (m, 2H), 2.39 (m, 2H), 2.82 (m, 1H), 3.56 (m, 2H), 3.42 (m, 3H), 3.84 (m, 2H), 4.62 (m, 1H), 5.98 (m, 1H), 7.08 (m, 1H), 7.16 (m, 1H), 7.27 (m, 1H), 7.44 (m, 1H), 7.61 (s, 1H). ^{19}F NMR (CDCl_3) δ 118.39 (1F).

[0955] 실시예 8

[0956] 1-[4-[4-[4,5-다이하이드로-5-(2-플루오로페닐)-3-아이속사졸릴]-2-티아졸릴]-1-피페리딘]-4-펜틴-1-온의 제조

[0957] 다이클로로메탄 (3 mL) 중의 4-펜틴산 (pentynoic acid) (64 mg, 0.408 mmol)의 용액에, 1-프로판포스폰산 환상 무수물 용액 (아세트산에틸 중의 50%, 0.5 mL)을 첨가하였다. 5 분간 첨가한 후에, 4-[4-[5-(2-플루오로페닐)-4,5-다이하이드로-3-아이속사졸릴]-2-티아졸릴]피페리딘 하이드로클로라이드 (즉, 실시예 6, 단계 C의 생성물) (150 mg, 0.408 mmol), 트라이에틸아민 (0.1 mL) 및 4-다이메틸아미노피리딘 (5 mg)을 연속적으로 첨가하였다. 반응 혼합물을 3 시간 동안 교반한 다음에, 감압하에 농축시켰다. 얻어진 물질을 실리카 겔 상에서 칼럼 크로마토그래피로 정제하여, 오일 (142 mg)로서의 표제 화합물, 본 발명의 화합물을 얻었다.

[0958] ^1H NMR (CDCl_3) δ 1.78 (m, 2H), 2.21 (m, 2H), 2.39 (m, 2H), 2.59 (m, 3H), 2.82 (m, 1H), 3.46 (m, 3H), 3.84 (m, 2H), 4.62 (m, 1H), 5.98 (m, 1H), 7.08 (m, 1H), 7.16 (m, 1H), 7.26 (m, 1H), 7.44 (m, 1H), 7.61 (s, 1H). ^{19}F NMR (CDCl_3) δ 118.39 (1F).

[0959] 실시예 9

[0960] 4-[4-(4,5-다이하이드로-5-페닐-3-아이속사졸릴)-2-티아졸릴]-N-(2,5-다이메틸페닐)-1-피페리딘카르복시미드

아미드의 제조

- [0961] 단계 A: 4-[4-(4,5-다이하이드로-5-페닐-3-아이속사졸릴)-2-티아졸릴]-N-(2,5-다이메틸페닐)-1-피페리딘카르복스아미드의 제조
- [0962] 다이클로로메탄 (15 mL) 중의 4-[4-(4,5-다이하이드로-5-페닐-3-아이속사졸릴)-2-티아졸릴]피페리딘 (즉, 실시예 1, 단계 B의 생성물) (1.56 g, 5.0 mmol)의 혼합물에, 2,5-다이메틸페닐아이소티오시아네이트 (0.736 g, 5.0 mmol) 및 1,8-다이아자바이사이클로[5.4.0]운테스-7-엔 (약 3 내지 5 μ L)을 첨가하였다. 반응 혼합물을 실온에서 30 분간 교반하여, 감압하에 농축시켜, 용리제로서 헥산 중의 0 내지 100% 아세트산에틸로 용리하는 실리카 겔 상에서 칼럼 크로마토그래피로 정제하여, 백색 고체 (1.25 g)로서의 표제 화합물을 얻었다. 일부분의 백색 고체를 아세트산메틸로 결정화하여, 124 내지 127℃에서 용융하는 백색 고체로서의 표제 화합물을 얻었다. 다른 부분의 백색 고체를 i-프로판올로 결정화하여, 141 내지 144℃에서 용융하는 백색 고체로서의 표제 화합물을 얻었다.
- [0963] ^1H NMR (CDCl_3): δ 1.85 (m, 2H), 1.99 (m, 2H), 2.21 (s, 3H), 2.31 (s, 3H), 3.08 (m, 2H), 3.25 (m, 1H), 3.42 (dd, 1H), 3.82 (dd, 1H), 4.15 (m, 2H), 5.78 (dd, 1H), 6.12 (br s, 1H), 6.82 (m, 1H), 7.02 (m, 1H), 7.2 - 7.4 (m, 5H), 7.46 (m, 1H), 7.62 (s, 1H).
- [0964] 단계 B: 4-[4-(4,5-다이하이드로-5-페닐-3-아이속사졸릴)-2-티아졸릴]-N-(2,5-다이메틸페닐)-1-피페리딘카르복스이미도일 클로라이드의 제조
- [0965] 다이클로로메탄 (10 mL) 중의 4-[4-(4,5-다이하이드로-5-페닐-3-아이속사졸릴)-2-티아졸릴]-N-(2,5-다이메틸페닐)-1-피페리딘카르복스아미드 (즉, 단계 A의 생성물) (0.406 g, 0.88 mmol)의 혼합물에, 오염화인 (0.208 g, 1.0 mmol)을 첨가하였다. 반응 혼합물을 40℃로 16 시간 동안 가열시킨 다음에, 감압하에 농축시켜, 품상 백색 고체 (0.52 g)로서의 표제 화합물을 얻었다.
- [0966] ^1H NMR (CDCl_3): δ 2.22 (m, 2H), 2.27 (s, 3H), 2.32 (s, 3H), 2.50 (m, 2H), 3.45 (m, 1H), 3.63 (m, 1H), 3.82-3.95 (m, 3H), 4.87 (m, 2H), 5.78 (m, 1H), 7.02 (s, 1H), 7.1-7.2 (m, 2H), 7.3-7.40 (m, 5H), 7.71 (s, 1H).
- [0967] 단계 C: 4-[4-(4,5-다이하이드로-5-페닐-3-아이속사졸릴)-2-티아졸릴]-N-(2,5-다이메틸페닐)-1-피페리딘카르복스이미드아미드의 제조
- [0968] 다이클로로메탄 (4 mL) 중의 4-[4-(4,5-다이하이드로-5-페닐-3-아이속사졸릴)-2-티아졸릴]-N-(2,5-다이메틸페닐)-1-피페리딘카르복스이미도일 클로라이드 (즉, 단계 B의 생성물) (0.300 g, 0.63 mmol)의 혼합물을 메탄올 중의 암모니아 용액 (7M, 10 mL)에 적가하여, 0℃로 냉각시켰다. 반응 혼합물을 2 분간 교반하고, 감압하에 농축시켜, 얻어진 황갈색 고체를 다이클로로메탄과 중탄산나트륨 포화 수용액에 분배하였다. 유기층을 건조시키고, 감압하에 농축시켜, 품상 백색 고체 (0.25 g)로서의 표제 화합물, 본 발명의 화합물을 얻었다.
- [0969] ^1H NMR (CDCl_3): δ 1.90 (m, 2H), 2.15 (m, 2H), 2.18 (s, 3H), 2.27 (s, 3H), 3.07 (m, 2H), 3.25 (m, 1H), 3.41 (m, 1H), 3.82 (m, 2H), 4.02 (m, 2H), 5.75 (m, 1H), 6.72 (br s, 1H), 6.81 (br m, 1H), 7.03 (m, 1H), 7.3-7.42 (m, 5H), 7.61 (s, 1H).
- [0970] 실시예 10
- [0971] 1-[4-[4-[5-(2,6-다이플루오로페닐)-4,5-다이하이드로-3-아이속사졸릴]-2-티아졸]-1-피페리딘]-2-(2,5-다이메틸페닐)-1,2-에탄디온의 제조
- [0972] 단계 A: 5-(2,6-다이플루오로페닐)-4,5-다이하이드로-N,N-다이메틸-3-아이속사졸카르복스아미드의 제조
- [0973] 기계식 교반기, 온도계 및 첨가 깔때기를 갖춘 1000-mL 둥근 바닥 플라스크에, 2-(다이메틸아미노)-N-하이드록시-2-옥소에탄이미도일 클로라이드 (94.0 g, 0.62 mol) 및 클로로벤젠 (275 g) 중의 2,6-다이플루오로스티렌 (84.0 g, 0.60 mol)의 용액을 첨가하였다. 반응 혼합물을 10℃로 냉각시킨 다음에, 물 (350 mL) 중의 중탄산칼륨 (70 g, 0.70 mol)의 용액을 온도를 10 내지 15℃로 유지하면서, 1 시간에 걸쳐서 적가하였다. 반응 혼합물의 가스 크로마토그래피 분석을 행한 바, 약 3%의 2-(다이메틸아미노)-N-하이드록시-2-옥소-에탄이미도일 클로

라이드가 잔존하였으며, 물 (200 mL)을 반응 혼합물에 첨가하여, 층을 분리하였다. 유기층을 물 (300 mL)로 세정하여, 감압하에 농축시켰다. 톨루엔을 얻어진 잔류물에 첨가하여, 혼합물을 감압하에 농축시켜, 오일 (144 g)로서의 표제 화합물을 얻었다.

[0974] ^1H NMR (CDCl_3): δ 3.1 (s, 3H), 3.3 (s, 3H), 3.4 (m, 1H), 3.57 (m, 1H), 6.0 (m, 1H), 6.95 (m, 2H), 7.35 (m, 1H).

[0975] 단계 B: 1-(4,5-다이하이드로-5-(2,6-다이플루오로페닐)-3-아이속사졸릴)에탄온의 제조

[0976] 온도계 및 첨가 깔때기를 갖춘 1000-mL 플라스크에, 5-(2,6-다이플루오로페닐)-4,5-다이하이드로-N,N-다이메틸-3-아이속사졸카르복스아미드 (즉, 단계 A의 생성물) (80.0 g, 0.31 mol) 및 톨루엔 (320 mL)을 첨가하였다. 반응 혼합물을 -5°C 로 냉각시켜, 메틸 마그네슘 브로마이드 용액 (테트라하이드로푸란 중의 3.0 M, 120 mL, 0.36 mmol)을 온도를 -10 내지 -5°C 로 유지하면서 적가하였다. 반응 혼합물의 가스 크로마토그래피 분석을 행한 바, 약 2%의 5-(2,6-다이플루오로페닐)-4,5-다이하이드로-N,N-다이메틸-3-아이속사졸카르복스아미드가 잔존하였으며, 온도를 10 내지 30°C 로 유지하면서, 반응 혼합물을 진한 염산 (80 mL)과 물 (320 mL)의 교반 용액에 부었다. 유기층을 분리하여, 염화나트륨 포화 수용액 (80 mL)으로 세정한 다음에, 감압하에 농축시켰다. 얻어진 오일을 헥산 (100 mL)으로 결정화하고, 여과에 의해 수집하여, 헥산으로 세정하고, 진공 오븐 중에서 하룻밤 동안 23°C 에서 건조시켜, 47 내지 50°C 에서 용융하는 왁스상 회색을 띤 백색 고체 (65 g)로서의 표제 화합물을 얻었다.

[0977] ^1H NMR (CDCl_3): δ 2.6 (s, 3H), 3.3 (m, 1H), 3.5 (m, 1H), 6.1 (m, 1H), 6.9 (m, 2H), 7.3 (m, 1H).

[0978] 단계 C: 2-브로모-1-(4,5-다이하이드로-5-(2,6-다이플루오로페닐)-3-아이속사졸릴)에탄온의 제조

[0979] 기계식 교반기, 온도계, 첨가 깔때기 및 스크리버를 갖춘 500-mL 플라스크에, 1-(4,5-다이하이드로-5-(2,6-다이플루오로페닐)-3-아이속사졸릴)에탄온 (즉, 단계 B의 생성물) (60.0 g, 0.27 mmol) 및 다이클로로메탄 (130 mL)을 첨가하였다. 반응 혼합물을 33°C 로 가열하고, 다이클로로메탄 (100 mL) 중의 브롬 용액 (39.2 mL, 0.24 mol)을 첨가 깔때기를 통해 적가하였다. 브롬 용액 약 5 mL를 첨가한 후에, 첨가를 중지하고, 반응 혼합물을 33°C 에서 약 10 분간 교반한 바, 그 동안에 반응 혼합물의 색상이 적색에서 황색으로 변색되었다. 반응 혼합물을 5°C 로 냉각시켜, 잔존하는 브롬 용액을 90 분간에 걸쳐서 적가하였다. 첨가 완료한 후에, 반응 혼합물을 아황산수소나트륨 용액 (물 100 mL 중의 3.5 g)으로 세정하였다. 유기층을 감압하에 농축시키고, 헥산을 첨가하여, 얻어진 고체 침전물을 여과에 의해 수집하고, 헥산으로 세정하여, 갈색 고체 (73 g)로서의 표제 화합물을 얻어, 추가의 정제없이 사용하였다.

[0980] 단계 D: 4-[4-[5-(2,6-다이플루오로페닐)-4,5-다이하이드로-3-아이속사졸릴]-2-티아졸릴]피페리딘의 제조

[0981] 아세톤 (100 mL) 중의 1-tert-부톡시카르보닐피페리딘-4-카르보티오아미드 (7.33 g, 30 mmol) 및 2-브로모-1-(4,5-다이하이드로-5-(2,6-다이플루오로페닐)-3-아이속사졸릴)에탄온 (즉, 단계 C의 생성물) (9.12 g, 30 mmol)의 혼합물을 45°C 로 3 시간 동안 가열한 다음에, 실온에서 하룻밤 동안 교반하였다. 아세톤 용매를 증발시켜, 얻어진 잔류물을 다이클로로메탄 (100 mL) 및 트라이플루오로아세트산 (40 mL)에 용해시켰다. 혼합물을 실온에서 3 시간 동안 교반한 다음에, 감압하에 농축시켰다. 얻어진 오일을 염산 수용액 (0.5 N, 200 mL)에 용해시켜, 아세트산에틸로 추출하였다. 유기층을 수산화나트륨 수용액 (수중의 10%)을 첨가하여 염기성화하였다. 유기층을 분리하여, 염화나트륨 포화 수용액으로 세정하고, 건조시켜 (MgSO_4), 여과하고, 감압하에 농축시켜, 진한 호박색 오일 (8.62 g, 잔류 아세트산에틸 포함)로서의 표제 화합물을 얻었다. 아세트산에틸로 추출한 염산 용액을 계속해서 수산화나트륨 수용액 (수중의 50%)을 첨가하여 염기성화한 다음에, 아세트산에틸로 추출하였다. 유기층을 염화나트륨 포화 수용액으로 세정하여, 건조시키고 (MgSO_4), 여과하여, 감압하에 농축시켜, 오일 (1.33 g, 잔류 아세트산에틸 포함)로서의 한층 더 많은 표제 생성물을 얻었다.

[0982] ^1H NMR (CDCl_3): δ 1.70-1.80 (m, 2H), 1.87 (br s, 1H), 2.22 (m, 2H), 2.77 (m, 2H), 3.18 (m, 3H), 3.62 (m, 1H), 3.80 (m, 1H), 6.05 (m, 1H), 6.92 (m, 2H), 7.30 (m, 1H), 7.64 (s, 1H).

[0983] 단계 E: 2,5-다이메틸- α -옥소벤젠아세트산의 제조

[0984] 2 방울의 2-브로모-1,4-다이메틸벤젠 및 요오드 결정을 마그네슘 조각 (magnesium turnings) (1.7 g, 70.8 mmol)에 첨가하였다. 반응을 개시하기 위해 가열한 후에, 테트라하이드로푸란 (50 mL)을 첨가한 다음에, 2-브

로모-1,4-다이메틸벤젠 (10 g, 54.1 mmol)을 반응 혼합물에 적가하였다. 반응물을 첨가 완료 후 추가로 1.5 시간 동안 환류하에 가열한 다음에, -65℃로 냉각시켜, THF (60 mL) 중의 염화옥살릴 용액 (5.2 mL, 7.6 g, 60 mmol)을 적가하였다. 1 시간 후에, 반응 혼합물을 0℃로 가온시켜, 염화암모늄 포화 수용액으로 켄칭하고 (quenching), 물에 부어, 아세트산에틸 (3x)로 추출하였다. 합한 유기 추출물을 염화나트륨 포화 수용액으로 세정하고, 건조시켜 (MgSO₄), 감압하에 농축시켰다. 조제의 혼합물을 아세트산에틸에 용해시켜, 수산화나트륨 (1 N)으로 2회 추출하였다. 합한 수층을 HCl (1 N)로 pH 3로 조절하여, 아세트산에틸 (3x)로 추출하였다. 합한 유기 추출물을 건조시키고 (MgSO₄), 감압하에 농축시켜, 황갈색 고체 (4.49 g)로서의 표제 화합물 얻었다.

[0985] ¹H NMR (CDCl₃) δ 2.39 (s, 3H), 2.55 (s, 3H), 7.21 (d, 1H), 7.33 (d, 1H), 7.77 (s, 1H), 10.00 (br s, 1H, COOH).

[0986] 단계 F: 1-[4-[4-[5-(2,6-다이플루오로페닐)-4,5-다이하이드로-3-아이속사졸릴]-2-티아졸]-1-피페리디닐]-2-(2,5-다이메틸페닐)-1,2-에탄디온의 제조

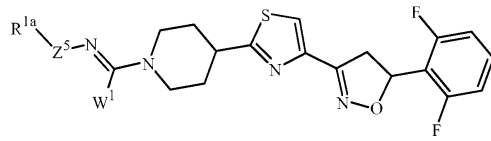
[0987] 다이클로로메탄 (5 mL) 중의 2,5-다이메틸-α-옥소-벤젠아세트산 (즉, 단계 E의 생성물) (199 mg, 1.1 mmol)의 혼합물에, 4-[4-[5-(2,6-다이플루오로페닐)-4,5-다이하이드로-3-아이속사졸릴]-2-티아졸릴]피페리딘 (즉, 단계 D의 생성물) (390 mg, 1.1 mmol), 1-(3-다이메틸아미노프로필)-3-에틸카르보다이이미드 하이드로클로라이드 (235 mg, 1.2 mmol), 1-하이드록시-1H-벤조트라이아졸 (13.5 mg, 0.1 mmol) 및 4-메틸모르폴린 (123 μl, 1.1 mmol)을 첨가하였다. 반응 혼합물을 실온에서 하룻밤 동안 교반한 다음에, 물에 부어, 다이클로로메탄 (3x)으로 추출하였다. 합한 유기 추출물을 건조시켜 (MgSO₄), 감압하에 농축시켰다. 얻어진 물질을 실리카 겔 40 g으로 프리패킹된 레디세프 (RediSep)® Rf 튜브 (Teledyne Isco, Inc. 제) 및 용리제로서의 아세트산에틸-헥산을 이용하여 플래시 칼럼 크로마토그래피로 정제하여, 품상 백색 고체 (158 mg)로서의 표제 화합물, 본 발명의 화합물을 얻었다.

[0988] ¹H NMR (CDCl₃) δ 1.81-2.00 (m, 2H), 2.16 (d, 1H), 2.30 (d, 1H), 2.36 (s, 3H), 2.62 (s, 3H), 3.03-3.12 (m, 1H), 3.22-3.30 (m, 1H), 3.33-3.43 (m, 1H), 3.63 (dd, 1H), 3.67-3.75 (m, 1H), 3.80 (dd, 1H), 4.66-4.73 (m, 1H), 6.08 (dd, 1H), 6.92 (t, 2H), 7.20 (d, 1H), 7.27-7.34 (m, 2H), 7.51 (s, 1H), 7.67 (s, 1H). ¹⁹F NMR (CDCl₃) δ -113.93 (t, 1F).

[0989] 당업계에 공지된 방법과 함께 본 명세서에 기재된 절차에 의해, 표 1 내지 13의 하기 화합물이 제조될 수 있다. 하기 약어가 하기 표에 사용된다: t는 삼차를 의미하고, s 또는 sec는 이차를 의미하며, n은 노르말을 의미하고, i는 아이소를 의미하며, c는 사이클로를 의미하고, Me는 메틸을 의미하고, Et는 에틸을 의미하며, Pr은 프로필을 의미하고, i-Pr은 아이소프로필을 의미하며, Bu는 부틸을 의미하고, Ph는 페닐을 의미하며, MeO는 메톡시를 의미하고, EtO는 에톡시를 의미하며, MeS는 메틸티오를 의미하고, EtS는 에틸티오를 의미하며, CN은 시아노를 의미하고, SO는 설포닐을 의미하며, SO₂는 설포닐을 의미하고, Ph는 페닐을 의미한다.

[0990]

[표 1]



Z⁵는 직접 결합이고, W¹은 MeO이다.

R ^{1a}
페닐
2-메틸페닐
2-메톡시페닐
2-클로로페닐
2-브로모페닐
2-에틸페닐
2-에톡시페닐
2-(메틸티오)페닐
2-(에틸티오)페닐
2-(트라이플루오로메톡시)페닐
3-클로로페닐
3-브로모페닐
3-요오도페닐
3-메틸페닐
2,5-다이클로로페닐
5-브로모-2-클로로페닐
2-클로로-5-요오도페닐
2-클로로-5-메틸페닐
2-클로로-5-에틸페닐
2-클로로-5-프로필페닐
2-클로로-5-이-프로필페닐
2-클로로-5-(트라이플루오로메틸)페닐
2-클로로-5-(2,2,2-트라이플루오로에틸)페닐
2-클로로-5-(헥사플루오로에틸)페닐
2-클로로-5-시아노페닐
2-클로로-5-니트로페닐
2-브로모-5-클로로페닐
2,5-다이브로모페닐
2-브로모-5-요오도페닐
2-브로모-5-메틸페닐
2-브로모-5-에틸페닐
2-브로모-5-프로필페닐

Z⁵는 직접 결합이고, W¹은 MeO이다.

R ^{1a}
2-메틸-5-(4-메틸-3-펜테닐)페닐
2-메틸-5-프로파길페닐
2-메틸-5-(3-메틸프로파길)페닐
5-사이클로프로필-2-메틸페닐
5-사이클로헥실-2-메틸페닐
2-메틸-5-(헥사플루오로아이소프로필)페닐
5-(3,3-다이클로로-2-프로펜-1-일)-2-메틸페닐
2-메틸-5-(4,4,4-트라이플루오로-2-부틴-1-일)페닐
5-(2,2-다이클로로사이클로프로판-1-일)-2-메틸페닐
2-메틸-5-(트라이플루오로메톡시)페닐
2-클로로-5-(i-부틸티오)페닐
2-클로로-5-(에틸설포닐)페닐
2-클로로-5-(트라이플루오로메틸티오)페닐
2-클로로-5-(트라이플루오로메틸설포닐)페닐
2-클로로-5-(메틸아미노)페닐
2-클로로-5-(tert-부틸아미노)페닐
2,5-다이메틸-3-푸릴
2,5-다이메틸-3-티에닐
2,5-다이클로로-3-티에닐
1,4-다이메틸-3-피롤릴
1,4-다이메틸-3-피라졸릴
1,3-다이메틸-4-피라졸릴
2,5-다이메틸-4-옥사졸릴
2,5-다이메틸-4-티아졸릴
3-브로모-4-티아졸릴
3-브로모-4-아이소자졸릴
1-메틸-4-이미다졸릴
5-(트라이플루오로메틸)-3-(1,2,4-옥사다리아졸릴)
5-(트라이플루오로메틸)-3-(1,2,4-티아다리아졸릴)
2-브로모-1-(1,3,4-트리아졸릴)
5-(트라이플루오로메틸)-3-(1,2,4-트리아졸릴)
2-브로모-1-이미다졸릴

[0991]

Z⁵는 직접 결합이고, W¹은 MeO 이다.

R ^{1a}
2-브로모-5-i-프로필페닐
2-브로모-5-(트라이플루오로메틸)페닐
2-브로모-5-(2,2,2-트라이플루오로에틸)페닐
2-브로모-5-(펜타플루오로에틸)페닐
2-브로모-5-시아노페닐
2-브로모-5-니트로페닐
5-클로로-2-메틸페닐
5-브로모-2-메틸페닐
5-요오도-2-메틸페닐
2,5-다이메틸페닐
5-에틸-2-메틸페닐
2-메틸-5-프로필페닐
5-i-프로필-2-메틸페닐
2-메틸-5-(트라이플루오로메틸)페닐
2-메틸-5-(2,2,2-트라이플루오로에틸)페닐
2-메틸-5-(펜타플루오로에틸)페닐
5-시아노-2-메틸페닐
2-메틸-5-니트로페닐
5-클로로-2-메톡시페닐
5-브로모-2-메톡시페닐
5-요오도-2-메톡시페닐
2-메톡시-5-메틸페닐
5-에틸-2-메톡시페닐
2-메톡시-5-프로필페닐
5-i-프로필-2-메톡시페닐
2-메톡시-5-(트라이플루오로메틸)페닐
2-메톡시-5-(2,2,2-트라이플루오로에틸)페닐
2-메톡시-5-(펜타플루오로에틸)페닐
5-시아노-2-메톡시페닐
2-메톡시-5-니트로페닐
2,5-다이에틸페닐
3,5-다이메틸피라졸-1-일
3,5-다이클로로피라졸-1-일
3,5-다이하로모피라졸-1-일
3,5-비스-(트라이플루오로메틸)피라졸-1-일

Z⁵는 직접 결합이고, W¹은 MeO 이다.

R ^{1a}
3,6-다이메틸-2-피리딜
2,5-다이메틸-3-피리딜
2,5-다이메틸-4-피리딜
3,6-다이클로로-2-피리딜
2,5-다이클로로-3-피리딜
2,5-다이클로로-4-피리딜
4-브로모-3-피리다지닐
4-(트라이플루오로메틸)-2-피리미디닐
3,6-다이메틸-2-피라지닐
2,5-다이메틸-4-피리미디닐
4-메톡시-5-피리미디닐
3,6-다이메틸-4-피리다지닐
5-(트라이플루오로메틸)-3-(1,2,4-트리아지닐)
5-메톡시-6-(1,2,4-트리아지닐)
4-(트라이플루오로메틸)-2-(1,3,5-트리아지닐)
3,6-다이메틸-5-(1,2,4-트리아지닐)
1-메틸-4-(트라이플루오로메틸)이미다졸-2-일
시아노
메틸
에틸
n-프로필
i-프로필
n-부틸
i-부틸
sec-부틸
t-부틸
n-아밀
i-아밀
t-아밀
n-헥실
i-헥실
3,3,3-트라이메틸헥스-1-일
n-옥틸
알릴
3-메틸-2-부텐-1-일

[0992]

Z²는 직접 결합이고, W'은 MeO 이다.

R ^{1a}
5-메틸-3-(트라이플루오로메틸)피라졸-1-일
5-메틸-3-(2,2,2-트라이플루오로에틸)피라졸-1-일
3,5-다이메틸-1,2,4-트리아졸-1-일
3,5-다이클로로-1,2,4-트리아졸-1-일
3,5-다이하이드로-1,2,4-트리아졸-1-일
2-클로로-5-(다이메틸아미노)페닐
2-클로로-5-(다이에틸아미노)페닐
2-클로로-5-(사이클로프로필아미노)페닐
3-(메톡시메틸)페닐
2-클로로-5-(에톡시메틸)페닐
2-클로로-5-(하이드록시메틸)페닐
2-클로로-5-(메톡시카르보닐)페닐
2-클로로-5-(에틸카르보닐)페닐
2-클로로-5-(메틸카르보닐옥시)페닐
2-클로로-5-(메틸아미노카르보닐)페닐
2-클로로-5-(다이메틸아미노카르보닐)페닐
2-메틸-5-(트라이메틸실릴)페닐
3,5-다이메틸-2-티에닐
3,5-다이클로로-2-티에닐
3,5-다이메틸-2-푸릴
1-메틸-2-피롤릴
4-메틸-2-(트라이플루오로메틸)-5-티아졸릴
4-(트라이플루오로메틸)-2-티아졸릴
4-(트라이플루오로메틸)-2-옥사졸릴
4-메틸-2-(트라이플루오로메틸)-5-옥사졸릴
4-브로모-5-아이소티아졸릴
4-브로모-5-아이속사졸릴
1-메틸-5-피라졸릴
1-메틸-5-이미다졸릴
1-메틸-4-(트라이플루오로메틸)-2-이미다졸릴
4-메틸-3-(1,3,4-트리아졸릴)
2-메틸-3-(1,2,4-트리아졸릴)
5-(트라이플루오로메틸)-2-(1,3,4-티아다리아졸릴)

Z²는 직접 결합이고, W'은 MeO 이다.

R ^{1a}
4,4-다이메틸-2-펜텐-1-일
2,2,2-트라이플루오로에틸
3,3,3-트라이플루오로프로필
1,1-다이클로로-1-프로펜-3-일
1,1,1-트라이플루오로-2-부틴-4-일
사이클로프로필
사이클로펜틸
사이클로헥실
사이클로프로필메틸
사이클로헥실메틸
2,2-다이메틸사이클로헥실
2-메톡시에틸
2-에톡시에틸
2-(t-부톡시)-에틸
2-사이클로부톡시에틸
2-사이클로헥실에틸
2-(에톡시에톡시)에틸
2-(메틸티오)에틸
2-(메틸설퍼닐)에틸
2-(메틸설포닐)에틸
2-(메틸아미노)에틸
2,2,2-트라이플루오로에틸아미노에틸
2-사이클로헥실아미노에틸
메톡시
2-클로로에톡시
사이클로헥실옥시
2-클로로펜트-1-일옥시
사이클로헥실메톡시
알릴옥시
1-브로모-1-프로펜-3-일옥시
프로파길옥시
1,1,1-트라이플루오로-2-부틴-4-일옥시
2-메톡시에톡시

[0993]

Z⁵는 직접 결합이고, W¹은 MeO 이다.

R ^{1a}
5-(트라이플루오로메틸)-2-(1,3,4- 옥사다이아졸릴)
3-(트라이플루오로메틸)-5-(1,2,4- 티아다이아졸릴)
3-(트라이플루오로메틸)-5-(1,2,4- 옥사다이아졸릴)
3-(트라이플루오로메틸)-1-(1,2,4- 트리아아졸릴)
2,5-다이메틸-1-피롤릴
1-메틸-3-(트라이플루오로메틸)피라졸-5-일
3-(트라이플루오로메틸)피라졸-1-일
5-부틸-2-메틸페닐
5-헥실-2-메틸페닐
5-알릴-2-메틸페닐

Z⁵는 직접 결합이고, W¹은 MeO 이다.

R ^{1a}
트라이메틸실릴
에틸아미노
다이에틸아미노
다이메틸아미노
2,2,2-트라이플루오로에틸아미노
t-부틸아미노
N-메틸-N-부틸아미노
메틸카르보닐아미노
트라이플루오로메틸카르보닐아미노
메틸설폰닐아미노
클로로메틸설폰닐아미노

Z⁵는 C(=O)이고, W¹은 MeO 이다.

R ^{1a}
2,5-다이메틸페닐
2,5-다이클로로페닐
2-메틸-5-클로로페닐
2-클로로-5-메틸페닐
2-메틸-5-(트라이플루오로메틸)페닐
2,6-다이클로로페닐
메틸
i-프로필

Z⁵는 C(=O)이고, W¹은 MeO 이다.

R ^{1a}
i-부틸
3,3,3-트라이플루오로프로프-1-일
사이클로프로필
i-프로폭시
사이클로헥실옥시
다이메틸아미노
다이에틸아미노
(트라이플루오로메톡시)메틸

Z⁵는 S(O)₂이고, W¹은 MeO 이다.

R ^{1a}
2,5-다이메틸페닐
2,5-다이클로로페닐
2-메틸-5-클로로페닐
2-클로로-5-메틸페닐
2-메틸-5-(트라이플루오로메틸)페닐
2,6-다이클로로페닐

Z⁵는 S(O)₂이고, W¹은 MeO 이다.

R ^{1a}
i-부틸
트라이플루오로메틸
사이클로프로필
메톡시
사이클로헥실옥시
다이메틸아미노

[0994]

Z^s는 S(O)₂이고, W^l은 MeO이다.

R ^{1a}
메틸
i-프로필

Z^s는 S(O)₂이고, W^l은 MeO이다.

R ^{1a}
다이에틸아미노
메톡시메틸

Z^s는 직접 결합이고, W^l은 EtO이다.

R ^{1a}
2-메틸페닐
2-메톡시페닐
3-클로로페닐
3-브로모페닐
3-(트라이플루오로메틸)페닐
3-메틸페닐
2,5-다이클로로페닐
2-클로로-5-메틸페닐
2-클로로-5-(트라이플루오로메틸)페닐
2,5-다이브로모페닐
2-브로모-5-메틸페닐
2-브로모-5-(트라이플루오로메틸)페닐
5-클로로-2-메틸페닐
5-브로모-2-메틸페닐
2-메틸-5-(트라이플루오로메틸)페닐
5-클로로-2-메톡시페닐

Z^s는 직접 결합이고, W^l은 EtO이다.

R ^{1a}
5-브로모-2-메톡시페닐
2-메톡시-5-(트라이플루오로메틸)페닐
3,5-다이에틸피라졸-1-일
3,5-다이클로로피라졸-1-일
3,5-다이브로모피라졸-1-일
3,5-비스-(트라이플루오로메틸)피라졸-1-일
5-메틸-3-(트라이플루오로메틸)피라졸-1-일
3,5-다이에틸-1,2,4-트리아졸-1-일
3,5-다이클로로-1,2,4-트리아졸-1-일
3,5-다이브로모-1,2,4-트리아졸-1-일
메틸
2-메틸프로필
3-메틸부틸
에톡시
3,3,3-트라이플루오로프로폭시
4,4,4-트라이플루오로부틸

Z^s는 직접 결합이고, W^l은 MeS이다.

R ^{1a}
2-메틸페닐
2-메톡시페닐
3-클로로페닐
3-브로모페닐
3-(트라이플루오로메틸)페닐
3-메틸페닐
2,5-다이클로로페닐
2-클로로-5-메틸페닐
2-클로로-5-(트라이플루오로메틸)페닐
2,5-다이브로모페닐

Z^s는 직접 결합이고, W^l은 MeS이다.

R ^{1a}
5-브로모-2-메톡시페닐
2-메톡시-5-(트라이플루오로메틸)페닐
3,5-다이에틸피라졸-1-일
3,5-다이클로로피라졸-1-일
3,5-다이브로모피라졸-1-일
3,5-비스-(트라이플루오로메틸)피라졸-1-일
5-메틸-3-(트라이플루오로메틸)피라졸-1-일
3,5-다이에틸-1,2,4-트리아졸-1-일
3,5-다이클로로-1,2,4-트리아졸-1-일
3,5-다이브로모-1,2,4-트리아졸-1-일

[0995]

Z^I 는 직접 결합이고, W^I 은 MeS 이다. R^{Ia} 2-브로모-5-메틸페닐 2-브로모-5-(트라이플루오로메틸)페닐 5-클로로-2-메틸페닐 5-브로모-2-메틸페닐 2-메틸-5-(트라이플루오로메틸)페닐 5-클로로-2-메톡시페닐	Z^I 는 직접 결합이고, W^I 은 MeS 이다. R^{Ia} 메틸 2-메틸프로필 3-메틸부틸 에톡시 3,3,3-트라이플루오로프로폭시 4,4,4-트라이플루오로부틸
Z^I 는 직접 결합이고, W^I 은 EtS 이다. R^{Ia} 2-메틸페닐 2-메톡시페닐 3-클로로페닐 3-브로모페닐 3-(트라이플루오로메틸)페닐 3-메틸페닐 2,5-다이클로로페닐 2-클로로-5-메틸페닐 2-클로로-5-(트라이플루오로메틸)페닐 2,5-다이브로모페닐 2-브로모-5-메틸페닐 2-브로모-5-(트라이플루오로메틸)페닐 5-클로로-2-메틸페닐 5-브로모-2-메틸페닐 2-메틸-5-(트라이플루오로메틸)페닐 5-클로로-2-메톡시페닐	Z^I 는 직접 결합이고, W^I 은 EtS 이다. R^{Ia} 5-브로모-2-메톡시페닐 2-메톡시-5-(트라이플루오로메틸)페닐 3,5-다이메틸피라졸-1-일 3,5-다이클로로피라졸-1-일 3,5-다이브로모피라졸-1-일 3,5-비스-(트라이플루오로메틸)피라졸-1-일 5-메틸-3-(트라이플루오로메틸)피라졸-1-일 3,5-다이메틸-1,2,4-트리아졸-1-일 3,5-다이클로로-1,2,4-트리아졸-1-일 3,5-다이브로모-1,2,4-트리아졸-1-일 메틸 2-메틸프로필 3-메틸부틸 에톡시 3,3,3-트라이플루오로프로폭시 4,4,4-트라이플루오로부틸
Z^I 는 직접 결합이고, W^I 은 NH_2 이다. R^{Ia} 2-메틸페닐 2-메톡시페닐 3-클로로페닐 3-브로모페닐 3-(트라이플루오로메틸)페닐 3-메틸페닐	Z^I 는 직접 결합이고, W^I 은 NH_2 이다. R^{Ia} 5-브로모-2-메톡시페닐 2-메톡시-5-(트라이플루오로메틸)페닐 3,5-다이메틸피라졸-1-일 3,5-다이클로로피라졸-1-일 3,5-다이브로모피라졸-1-일 3,5-비스-(트라이플루오로메틸)피라졸-1-일

[0996]

Z⁵는 직접 결합이고, W¹은 NH₂이다.

R ^{1a}
2,5-다이클로로페닐
2-클로로-5-메틸페닐
2-클로로-5-(트라이플루오로메틸)페닐
2,5-다이브로모페닐
2-브로모-5-메틸페닐
2-브로모-5-(트라이플루오로메틸)페닐
5-클로로-2-메틸페닐
5-브로모-2-메틸페닐
2-메틸-5-(트라이플루오로메틸)페닐
5-클로로-2-메톡시페닐

Z⁵는 직접 결합이고, W¹은 NH₂이다.

R ^{1a}
5-메틸-3-(트라이플루오로메틸)피라졸-1-일
3,5-다이메틸-1,2,4-트리아졸-1-일
3,5-다이클로로-1,2,4-트리아졸-1-일
3,5-다이브로모-1,2,4-트리아졸-1-일
메틸
2-메틸프로필
3-메틸부틸
에톡시
3,3,3-트라이플루오로프로폭시
4,4,4-트라이플루오로부틸

Z⁵는 직접 결합이고, W¹은 HONH-이다.

R ^{1a}
2-메틸페닐
2-메톡시페닐
3-클로로페닐
3-브로모페닐
3-(트라이플루오로메틸)페닐
3-메틸페닐
2,5-다이클로로페닐
2-클로로-5-메틸페닐
2-클로로-5-(트라이플루오로메틸)페닐
2,5-다이브로모페닐
2-브로모-5-메틸페닐
2-브로모-5-(트라이플루오로메틸)페닐
5-클로로-2-메틸페닐
5-브로모-2-메틸페닐
2-메틸-5-(트라이플루오로메틸)페닐
5-클로로-2-메톡시페닐

Z⁵는 직접 결합이고, W¹은 HONH-이다.

R ^{1a}
5-브로모-2-메톡시페닐
2-메톡시-5-(트라이플루오로메틸)페닐
3,5-다이메틸피라졸-1-일
3,5-다이클로로피라졸-1-일
3,5-다이브로모피라졸-1-일
3,5-비스-(트라이플루오로메틸)피라졸-1-일
5-메틸-3-(트라이플루오로메틸)피라졸-1-일
3,5-다이메틸-1,2,4-트리아졸-1-일
3,5-다이클로로-1,2,4-트리아졸-1-일
3,5-다이브로모-1,2,4-트리아졸-1-일
메틸
2-메틸프로필
3-메틸부틸
에톡시
3,3,3-트라이플루오로프로폭시
4,4,4-트라이플루오로부틸

Z⁵는 직접 결합이고, W¹은 MeONH-이다.

R ^{1a}
2-메틸페닐
2-메톡시페닐

Z⁵는 직접 결합이고, W¹은 MeONH-이다.

R ^{1a}
5-브로모-2-메톡시페닐
2-메톡시-5-(트라이플루오로메틸)페닐

[0997]

Z⁵는 직접 결합이고, W¹은 MeONH이다.

R ^{1a}
3-클로로페닐
3-브로모페닐
3-(트라이플루오로메틸)페닐
3-메틸페닐
2,5-다이클로로페닐
2-클로로-5-메틸페닐
2-클로로-5-(트라이플루오로메틸)페닐
2,5-다이브로모페닐
2-브로모-5-메틸페닐
2-브로모-5-(트라이플루오로메틸)페닐
5-클로로-2-메틸페닐
5-브로모-2-메틸페닐
2-메틸-5-(트라이플루오로메틸)페닐
5-클로로-2-메톡시페닐

Z⁵는 직접 결합이고, W¹은 MeONH이다.

R ^{1a}
3,5-다이메틸피라졸-1-일
3,5-다이클로로피라졸-1-일
3,5-다이브로모피라졸-1-일
3,5-비스-(트라이플루오로메틸)피라졸-1-일
5-메틸-3-(트라이플루오로메틸)피라졸-1-일
3,5-다이메틸-1,2,4-트리아졸-1-일
3,5-다이클로로-1,2,4-트리아졸-1-일
3,5-다이브로모-1,2,4-트리아졸-1-일
메틸
2-메틸프로필
3-메틸부틸
에톡시
3,3,3-트라이플루오로프로폭시
4,4,4-트라이플루오로부틸

Z⁵는 직접 결합이고, W¹은 NCNH₂이다.

R ^{1a}
2-메틸페닐
2-메톡시페닐
3-클로로페닐
3-브로모페닐
3-(트라이플루오로메틸)페닐
3-메틸페닐
2,5-다이클로로페닐
2-클로로-5-메틸페닐
2-클로로-5-(트라이플루오로메틸)페닐
2,5-다이브로모페닐
2-브로모-5-메틸페닐
2-브로모-5-(트라이플루오로메틸)페닐
5-클로로-2-메틸페닐
5-브로모-2-메틸페닐
2-메틸-5-(트라이플루오로메틸)페닐
5-클로로-2-메톡시페닐

Z⁵는 직접 결합이고, W¹은 NCNH₂이다.

R ^{1a}
5-브로모-2-메톡시페닐
2-메톡시-5-(트라이플루오로메틸)페닐
3,5-다이메틸피라졸-1-일
3,5-다이클로로피라졸-1-일
3,5-다이브로모피라졸-1-일
3,5-비스-(트라이플루오로메틸)피라졸-1-일
5-메틸-3-(트라이플루오로메틸)피라졸-1-일
3,5-다이메틸-1,2,4-트리아졸-1-일
3,5-다이클로로-1,2,4-트리아졸-1-일
3,5-다이브로모-1,2,4-트리아졸-1-일
메틸
2-메틸프로필
3-메틸부틸
에톡시
3,3,3-트라이플루오로프로폭시
4,4,4-트라이플루오로부틸

Z⁵는 직접 결합이고, W¹은 H₂NNH₂이다.

R ^{1a}
2-메틸페닐
2-메톡시페닐
3-클로로페닐
3-브로모페닐
3-(트라이플루오로메틸)페닐
3-메틸페닐
2,5-다이클로로페닐
2-클로로-5-메틸페닐
2-클로로-5-(트라이플루오로메틸)페닐
2,5-다이브로모페닐
2-브로모-5-메틸페닐
2-브로모-5-(트라이플루오로메틸)페닐
5-클로로-2-메틸페닐
5-브로모-2-메틸페닐
2-메틸-5-(트라이플루오로메틸)페닐
5-클로로-2-메톡시페닐

Z⁵는 직접 결합이고, W¹은 H₂NNH₂이다.

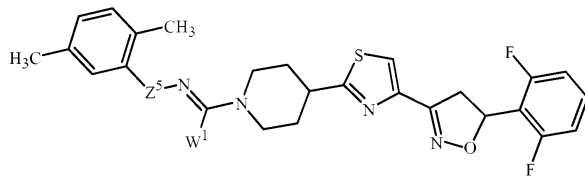
R ^{1a}
5-브로모-2-메톡시페닐
2-메톡시-5-(트라이플루오로메틸)페닐
3,5-다이메틸피라졸-1-일
3,5-다이클로로피라졸-1-일
3,5-다이브로모피라졸-1-일
3,5-비스-(트라이플루오로메틸)피라졸-1-일
5-메틸-3-(트라이플루오로메틸)피라졸-1-일
3,5-다이메틸-1,2,4-트리아졸-1-일
3,5-다이클로로-1,2,4-트리아졸-1-일
3,5-다이브로모-1,2,4-트리아졸-1-일
메틸
2-메틸프로필
3-메틸부틸
에톡시
3,3,3-트라이플루오로프로폭시
4,4,4-트라이플루오로부틸

[0998]

[0999]

[1000]

[표 2]



Z⁵는 직접 결합이다.

W ¹
에톡시
프로폭시
i-프로폭시
i-부톡시
아밀옥시
3,3-다이메틸부톡시
알릴옥시
3-메틸-2-부텐-1-일옥시
2,2,2-트라이플루오로에톡시
3,3,3-트라이플루오로프로폭시
1,1-다이클로로-1-프로펜-3-일옥시
1,1,1-트라이플루오로-2-부텐-4-일옥시
사이클로프로폭시
사이클로펜톡시
사이클로헥실옥시
사이클로프로필메톡시
사이클로헥실메톡시
2-메톡시에톡시
2-에톡시에톡시
2-t-부톡시에톡시
2-사이클로부톡시에톡시
2-(에톡시에톡시)에톡시
2-(메틸티오)에톡시
2-(메틸설퍼닐)에톡시
2-(메틸설포닐)에톡시
2,2-(다이메틸아미노)에톡시
2,2,2-(트라이플루오로에틸아미노)에톡시
메틸카르보닐옥시
t-부틸카르보닐옥시
트라이플루오로메틸카르보닐옥시
사이클로프로필카르보닐옥시

Z⁵는 직접 결합이다.

W ¹
2-메틸티오에틸티오
2-메틸설퍼닐에틸티오
2-메틸설포닐에틸티오
2,2-다이메틸아미노에틸티오
2,2,2-트라이플루오로에틸아미노에틸티오
메틸카르보닐티오
t-부틸카르보닐티오
트라이플루오로메틸카르보닐티오
사이클로프로필카르보닐티오
메톡시카르보닐티오
메틸아미노카르보닐티오
다이메틸아미노카르보닐티오
아미노
하이드록시아미노
시아노아미노
아미노아미노
메틸아미노
에틸아미노
i-프로필아미노
t-부틸아미노
3,3-다이메틸부틸아미노
알릴아미노
3-메틸-2-부텐-1-일아미노
2,2,2-트라이플루오로에틸아미노
3,3,3-트라이플루오로프로필아미노
1,1-다이클로로-1-프로펜-3-일아미노
1,1,1-트라이플루오로-2-부텐-4-일아미노
프로파길아미노
사이클로프로필아미노
사이클로헥실아미노
사이클로프로필메틸아미노

[1001]

Z⁵는 직접 결합이다.

W ¹
메톡시카르보닐옥시
메틸아미노카르보닐옥시
다이메틸아미노카르보닐옥시
메톡시티오
에톡시티오
프로필티오
i-프로필티오
t-부틸티오
알릴설펜
3-메틸-2-부텐-1-일티오
2,2,2-트라이플루오로에틸티오
3,3,3-트라이플루오로프로필티오
1,1-다이클로로-1-프로펜-3-일티오
1,1,1-트라이플루오로-2-부텐-4-일티오
사이클로프로필설펜
사이클로펜틸티오
사이클로헥실티오
사이클로프로필메틸티오
사이클로헥실메틸티오
2-메톡시에틸티오
2-에톡시에틸티오
2-t-부톡시에틸티오
2-사이클로부톡시에틸티오
2-(에톡시에톡시에틸)티오
H
메틸
에틸
프로필
i-프로필

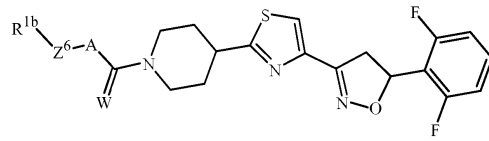
Z⁶는 직접 결합이다.

W ¹
2-메톡시에틸아미노
2-에톡시에틸아미노
2-t-부톡시에틸아미노
2-(에톡시에톡시)에틸아미노
메톡시아미노
에톡시아미노
2,2,2-트라이플루오로에톡시아미노
메틸설펜아미노
트라이플루오로메틸설펜아미노
메틸아미노아미노
에틸아미노아미노
다이메틸아미노아미노
2,2,2-트라이플루오로에틸아미노아미노
다이메틸아미노
시아노아미노
N-메틸-N-부틸아미노
N-메틸-N-알릴아미노
N-메틸-N-프로파릴아미노
N-메틸-N-사이클로프로필아미노
메톡시에틸
에톡시에틸
메틸카르보닐
메톡시카르보닐
메틸아미노카르보닐
다이메틸아미노카르보닐
시아노
i-부틸
트라이플루오로메틸
메톡시메틸

[1002]

[1003]

[표 3]



Z⁶는 직접 결합이고, A는 C(=O)이며,
W는 O이다.

R ^{1b}
2-메틸페닐
2-메톡시페닐
3-클로로페닐
3-브로모페닐
3-(트라이플루오로메틸)페닐
3-메틸페닐
2,5-다이클로로페닐
2-클로로-5-메틸페닐
2-클로로-5-(트라이플루오로메틸)페닐
2,5-다브로모페닐
2-브로모-5-메틸페닐
2-브로모-5-(트라이플루오로메틸)페닐
5-클로로-2-메틸페닐
5-브로모-2-메틸페닐
2-메틸-5-(트라이플루오로메틸)페닐
5-클로로-2-메톡시페닐
5-브로모-2-메톡시페닐
2-메톡시-5-(트라이플루오로메틸)페닐
2,5-다이메틸페닐
3,5-다이메틸-2-티에닐
3,5-다이클로로-2-티에닐
3,5-다이메틸-2-푸릴
4-메틸-2-(트라이플루오로메틸)-5-티아졸릴
1-메틸-3-(트라이플루오로메틸)피라졸-5-일
2,5-다이메틸-3-푸릴
2,5-다이메틸-3-티에닐
2,5-다이클로로-3-티에닐
3,6-다이메틸-2-피리딜

Z⁶는 직접 결합이고, A는 C(=O)이며,
W는 O이다.

R ^{1b}
3,3,3-트라이메틸헥스-1-일
n-옥틸
알릴
3-메틸-2-부텐-1-일
4,4-다이메틸-2-펜텐-1-일
4,4,4-트라이플루오로부틸
3,3,3-트라이플루오로프로필
1,1-다이클로로-1-프로펜-3-일
1,1,1-트라이플루오로-2-부텐-4-일
사이클로프로필
사이클로펜틸
사이클로헥실
사이클로프로필메틸
사이클로헥실메틸
2,2-다이메틸사이클로헥실
2-메톡시에틸
2-에톡시에틸
2-부톡시에틸
2-사이클로부톡시에틸
2-사이클로헥실에틸
2-(에톡시에톡시)에틸
2-(메틸티오)에틸
2-(메틸설퍼닐)에틸
2-(메틸설포닐)에틸
2-(메틸아미노)에틸
2-(2,2,2-트라이플루오로에틸)아미노에틸
2-(사이클로헥실아미노)에틸
메톡시

[1004]

Z⁶는 직접 결합이고, A는 C(=O)이며, W는 O이다.

R ^{1b}
2,5-다이메틸-3-페리딜
2,5-다이메틸-4-페리딜
3,6-다이클로로-2-페리딜
2,5-다이클로로-3-페리딜
2,5-다이클로로-4-페리딜
메틸
에틸
n-프로필
i-프로필
n-부틸
i-부틸
sec-부틸
t-부틸
n-아밀
i-아밀
t-아밀
n-헥실
i-헥실

Z⁶는 직접 결합이고, A는 C(=O)이며, W는 O이다.

R ^{1b}
2-클로로에톡시
에톡시
3,3,3-트라이플루오로프로폭시
알릴옥시
1-브로모-1-프로펜-3-일옥시
프로파길옥시
1,1,1-트라이플루오로-2-부탄-4-일옥시
2-메톡시에톡시
에틸아미노
다이에틸아미노
다이에틸아미노
2,2,2-트라이플루오로에틸아미노
t-부틸아미노
N-메틸-N-부틸아미노
메틸카르보닐아미노
트라이플루오로메틸카르보닐아미노
메틸설포닐아미노
클로로메틸설포닐아미노

Z⁶는 직접 결합이고, A는 NH이며, W는 O이다.

R ^{1b}
시아노
메틸
에틸
n-프로필
i-프로필
n-부틸
i-부틸
sec-부틸
t-부틸
n-아밀
i-아밀
t-아밀

Z⁶는 직접 결합이고, A는 NH이며, W는 O이다.

R ^{1b}
2-t-부톡시에틸
2-사이클로부톡시에틸
2-사이클로헥실에틸
2-(에톡시에톡시)에틸
2-(메틸티오)에틸
2-(메틸설포닐)에틸
2-(메틸설포닐)에틸
2-(메틸아미노)에틸
2-(2,2,2-트라이플루오로에틸아미노)에틸
2-(사이클로헥실아미노)에틸
메톡시
2-클로로에톡시

[1005]

Z^a는 직접 결합이고, A 는 NH 이며, W 는 O 이다.

R ^{1b}
n-헥실
i-헥실
3,3,3-트라이메틸헥스-1-일
n-옥틸
알릴
3-메틸-2-부텐-1-일
4,4-다이메틸-2-펜텐-1-일
2,2,2-트라이플루오로에틸
3,3,3-트라이플루오로프로필
1,1-다이클로로-1-프로펜-3-일
1,1,1-트라이플루오로-2-부텐-4-일
사이클로프로필
사이클로펜틸
사이클로헥실
사이클로프로필메틸
사이클로헥실메틸
2,2-다이메틸사이클로헥실
2-메톡시에틸
2-에톡시에틸

Z^a는 직접 결합이고, A 는 HOCH-이며, W 는 O 이다.

R ^{1b}
메틸
에틸
n-프로필
i-프로필
n-부틸
i-부틸
sec-부틸
t-부틸
n-아밀
i-아밀
t-아밀

Z^a는 직접 결합이고, A 는 NH 이며, W 는 O 이다.

R ^{1b}
사이클로헥실옥시
2-클로로펜트-1-일옥시
사이클로헥실메톡시
알릴옥시
1-브로모-1-프로펜-3-일옥시
프로파길옥시
1,1,1-트라이플루오로-2-부텐-4-일옥시
2-메톡시에톡시
트라이메틸실릴
에틸아미노
다이에틸아미노
다이메틸아미노
2,2,2-트라이플루오로에틸아미노
t-부틸아미노
N-메틸-N-부틸아미노
메틸카르보닐아미노
트라이플루오로메틸카르보닐아미노
메틸설포닐아미노
클로로메틸설포닐아미노

Z^a는 직접 결합이고, A 는 HOCH-이며, W 는 O 이다.

R ^{1b}
4,4,4-트라이플루오로부트-1-일
3,3,3-트라이플루오로프로필
1,1-다이클로로-1-프로펜-3-일
1,1,1-트라이플루오로-2-부텐-4-일
사이클로프로필
사이클로펜틸
사이클로헥실
사이클로프로필메틸
사이클로헥실메틸
2-(에톡시에톡시)에틸
2-(메틸티오)에틸

[1006]

Z⁶는 직접 결합이고, A는 HOCH-이며, W는 O이다.

R ^{1b}
n-헥실
i-헥실
3,3,3-트라이메틸헥스-1-일
n-옥틸
알릴
3-메틸-2-부텐-1-일
4,4-다이메틸-2-펜텐-1-일
2,2-다이메틸사이클로헥실

Z⁶는 직접 결합이고, A는 CH₂이며, W는 O이다.

R ^{1b}
시아노
메틸
에틸
n-프로필
i-프로필
n-부틸
i-부틸
sec-부틸
t-부틸
n-아밀
i-아밀
t-아밀
n-헥실
i-헥실
3,3,3-트라이메틸헥스-1-일
n-옥틸
알릴
3-메틸-2-부텐-1-일
4,4-다이메틸-2-펜텐-1-일
4,4,4-트라이플루오로부틸
3,3,3-트라이플루오로프로필
1,1-다이클로로-1-프로펜-3-일

Z⁶는 직접 결합이고, A는 HOCH-이며, W는 O이다.

R ^{1b}
2-(메틸설폰)에틸
2-(메틸설폰)에틸
2-(메틸아미노)에틸
2-(2,2,2-트라이플루오로에틸아미노)에틸
2-사이클로헥실에틸
2-(에폭시에폭시)에틸
2-메톡시에틸
2-(2,2,2-트라이플루오로에폭시)에틸

Z⁶는 직접 결합이고, A는 CH₂이며, W는 O이다.

R ^{1b}
2-t-부톡시에틸
2-사이클로부톡시에틸
2-사이클로헥실에틸
2-(에폭시에폭시)에틸
2-(메틸티오)에틸
2-(메틸설폰)에틸
2-(메틸아미노)에틸
2,2,2-트라이플루오로에틸아미노에틸
2-사이클로헥실아미노에틸
메톡시
2-클로로에톡시
사이클로헥실옥시
3,3,3-트라이플루오로메틸프로폭시
사이클로헥실메톡시
알릴옥시
1,1-다이클로로-1-프로펜-3-일옥시
프로파길옥시
1,1,1-트라이플루오로-2-부텐-4-일옥시
2-메톡시에톡시
트라이메틸실릴
에틸아미노

Z⁶는 직접 결합이고, A는 CH₂이며, W는 O이다.

R ^{1b}
1,1,1-트라이플루오로-2-부텐-4-일
사이클로프로필
사이클로펜틸
사이클로헥실
사이클로프로필메틸
사이클로헥실메틸
2,2-다이메틸사이클로헥실
2-메톡시에틸
2-에톡시에틸

Z⁶는 직접 결합이고, A는 CH₂이며, W는 O이다.

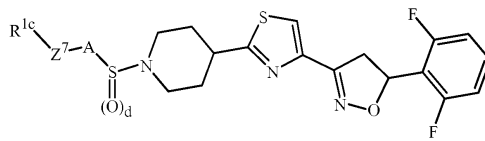
R ^{1b}
다이에틸아미노
다이메틸아미노
2,2,2-트라이플루오로에틸아미노
t-부틸아미노
N-메틸-N-부틸아미노
메틸카르보닐아미노
트라이플루오로메틸카르보닐아미노
메틸설폰아미노
클로로메틸설폰아미노

[1007]

[1008]

[1009]

[표 4]



Z'은 직접 결합이고, A는 NH이며, d는 2이다.

R ^{1c}
2-메틸페닐
2-메톡시페닐
3-클로로페닐
3-브로모페닐
3-(트라이플루오로메틸)페닐
3-메틸페닐
2,5-다이클로로페닐
2-클로로-5-메틸페닐
2-클로로-5-(트라이플루오로메틸)페닐
2,5-다이브로모페닐
2-브로모-5-메틸페닐
2-브로모-5-(트라이플루오로메틸)페닐
5-클로로-2-메틸페닐
5-브로모-2-메틸페닐
2-메틸-5-(트라이플루오로메틸)페닐
5-클로로-2-메톡시페닐

Z'은 직접 결합이고, A는 NH이며, d는 2이다.

R ^{1c}
5-브로모-2-메톡시페닐
2-메톡시-5-(트라이플루오로메틸)페닐
3,5-다이메틸피라졸-1-일
3,5-다이클로로피라졸-1-일
3,5-다이브로모피라졸-1-일
3,5-비스-(트라이플루오로메틸)피라졸-1-일
5-메틸-3-(트라이플루오로메틸)피라졸-1-일
3,5-다이메틸-1,2,4-트리아졸-1-일
3,5-다이클로로-1,2,4-트리아졸-1-일
3,5-다이브로모-1,2,4-트리아졸-1-일
메틸
2-메틸프로필
3-메틸부틸
에톡시
3,3,3-트라이플루오로프로폭시
4,4,4-트라이플루오로부틸

Z'은 직접 결합이고, A는 CH₂이며, d는 1이다.

R ^{1c}
2,5-다이클로로페닐
2-클로로-5-메틸페닐
2-클로로-5-(트라이플루오로메틸)페닐
2,5-다이브로모페닐
5-클로로-2-메틸페닐
2-메틸-5-(트라이플루오로메틸)페닐
2,5-다이메틸페닐
3,5-다이메틸피라졸-1-일
3,5-다이클로로피라졸-1-일
3,5-다이브로모피라졸-1-일
3,5-비스-(트라이플루오로메틸)피라졸-1-일

Z'은 직접 결합이고, A는 CH₂이며, d는 1이다.

R ^{1c}
2,5-다이클로로페닐
2-클로로-5-메틸페닐
2-클로로-5-(트라이플루오로메틸)페닐
2,5-다이브로모페닐
5-클로로-2-메틸페닐
2-메틸-5-(트라이플루오로메틸)페닐
2,5-다이메틸페닐
3,5-다이메틸피라졸-1-일
3,5-다이클로로피라졸-1-일
3,5-다이브로모피라졸-1-일
3,5-비스-(트라이플루오로메틸)피라졸-1-일

[1010]

Z'은 직접 결합이고, A는 CH₂이며, d는 1이다.

R ^{1c}
일
5-메틸-3-(트라이플루오로메틸)피라졸-1-일
3,5-다이메틸-1,2,4-트리아졸-1-일
3,5-다이클로로-1,2,4-트리아졸-1-일
3,5-다이브로모-1,2,4-트리아졸-1-일

Z'은 직접 결합이고, A는 CH₂이며, d는 1이다.

R ^{1c}
5-메틸-3-(트라이플루오로메틸)피라졸-1-일
3,5-다이메틸-1,2,4-트리아졸-1-일
3,5-다이클로로-1,2,4-트리아졸-1-일
3,5-다이브로모-1,2,4-트리아졸-1-일

[1011]

[1012]

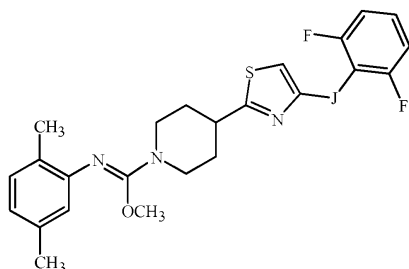
[표 5]

R ^{1d}	R ^{1d}
2-메틸페닐	5-브로모-2-메톡시페닐
2-메톡시페닐	2-메톡시-5-(트라이플루오로메틸)페닐
3-클로로페닐	3,5-다이메틸피라졸-1-일
3-브로모페닐	3,5-다이클로로피라졸-1-일
3-(트라이플루오로메틸)페닐	3,5-다이브로모피라졸-1-일
3-메틸페닐	3,5-비스-(트라이플루오로메틸)피라졸-1-일
2,5-다이클로로페닐	5-메틸-3-(트라이플루오로메틸)피라졸-1-일
2-클로로-5-메틸페닐	3,5-다이메틸-1,2,4-트리아졸-1-일
2-클로로-5-(트라이플루오로메틸)페닐	3,5-다이클로로-1,2,4-트리아졸-1-일
2,5-다이브로모페닐	3,5-다이브로모-1,2,4-트리아졸-1-일
2-브로모-5-메틸페닐	메틸
2-브로모-5-(트라이플루오로메틸)페닐	2-메틸프로필
5-클로로-2-메틸페닐	3-메틸부틸
5-브로모-2-메틸페닐	에톡시
2-메틸-5-(트라이플루오로메틸)페닐	3,3,3-트라이플루오로프로폭시
5-클로로-2-메톡시페닐	4,4,4-트라이플루오로부틸

[1013]

[1014]

[표 6a]



[1015]

[1016]

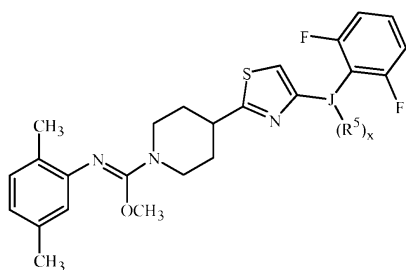
표 6a에서, J (예를 들어, J-1)의 구조는 상기 실시 형태의 증거 3에 나타나 있으며, 여기서, 바로 위에 나타난 바와 같이, x는 1이고, R⁵는 Q (즉, -Z²Q (여기서, Z²는 직접 결합이다))이며, Q는 2,6-다이플루오로페닐이다. 상기 구조의 티아졸 환은 화학식 1의 G에 해당한다. J 다음의 괄호내의 번호는 G (즉, 티아졸) 및 Q (즉, 2,6-다이플루오로페닐)에 대한 J 환의 결합점을 말한다. 첫번째 번호는 G가 결합되는 J 상의 환 위치이며, 두번째 번호는 Q가 결합되는 J 상의 환 위치이다.

J	J	J	J	J	J	J
J-1 (2/4)	J-6 (3/1)	J-21 (3/6)	J-27 (5/3)	J-33 (4/2)	J-45 (2/4)	J-73 (4/2)
J-1 (2/5)	J-7 (5/3)	J-21 (5/3)	J-28 (3/5)	J-34 (1/3)	J-45 (2/5)	J-73 (1/3)
J-1 (4/2)	J-7 (3/5)	J-22 (2/4)	J-28 (5/3)	J-34 (1/4)	J-45 (2/6)	J-73 (1/4)
J-1 (5/2)	J-8 (5/3)	J-22 (2/5)	J-29 (3/5)	J-34 (3/5)	J-46 (2/4)	J-73 (4/1)
J-2 (2/4)	J-8 (3/5)	J-22 (4/6)	J-29 (5/3)	J-34 (3/1)	J-46 (2/5)	J-74 (3/5)
J-2 (2/5)	J-9 (4/1)	J-22 (4/2)	J-30 (3/5)	J-34 (4/1)	J-46 (4/2)	J-74 (5/3)
J-2 (4/2)	J-10 (3/5)	J-22 (5/2)	J-30 (5/3)	J-35 (4/1)	J-46 (5/2)	J-75 (3/5)
J-2 (5/2)	J-10 (5/3)	J-23 (2/5)	J-30 (3/1)	J-36 (1/3)	J-47 (2/4)	J-75 (5/3)
J-3 (4/1)	J-11 (3/5)	J-23 (2/6)	J-30 (4/1)	J-36 (3/1)	J-47 (2/5)	J-75 (2/4)
J-4 (2/4)	J-11 (5/3)	J-24 (2/4)	J-31 (2/4)	J-36 (3/5)	J-47 (4/2)	J-75 (2/5)
J-4 (2/5)	J-12 (3/1)	J-24 (2/5)	J-31 (2/5)	J-36 (5/3)	J-47 (5/2)	J-76 (3/6)
J-4 (4/2)	J-13 (1/4)	J-24 (4/2)	J-31 (3/5)	J-37 (2/5)	J-48 (3/5)	J-76 (6/3)
J-4 (5/2)	J-13 (4/1)	J-24 (5/2)	J-31 (3/1)	J-37 (5/2)	J-49 (2/4)	J-77 (3/5)
J-4 (3/5)	J-14 (5/3)	J-25 (2/4)	J-31 (4/1)	J-37 (2/4)	J-49 (2/5)	J-77 (5/3)
J-4 (5/3)	J-15 (2/5)	J-25 (2/5)	J-31 (4/2)	J-37 (4/2)	J-49 (4/2)	J-78 (1/3)
J-5 (2/5)	J-16 (2/5)	J-25 (4/2)	J-31 (5/2)	J-38 (2/5)	J-49 (5/2)	J-79 (1/3)
J-5 (4/2)	J-17 (4/2)	J-25 (5/2)	J-32 (2/4)	J-38 (5/2)	J-50 (2/6)	J-79 (3/1)
J-5 (5/2)	J-18 (5/2)	J-26 (2/4)	J-32 (2/5)	J-38 (2/4)	J-51 (2/6)	J-80 (1/3)
J-5 (3/5)	J-19 (2/4)	J-26 (2/5)	J-32 (3/5)	J-38 (4/2)	J-52 (2/6)	J-80 (3/1)
J-5 (5/3)	J-19 (4/2)	J-26 (4/2)	J-32 (5/3)	J-40 (3/5)	J-69 (1/3)	J-81 (3/5)
J-6 (2/4)	J-20 (2/4)	J-26 (5/2)	J-32 (5/2)	J-40 (5/3)	J-69 (1/4)	J-81 (5/3)
J-6 (3/5)	J-20 (2/5)	J-26 (4/1)	J-32 (4/2)	J-41 (1/3)	J-70 (1/3)	J-82 (3/5)
J-6 (2/5)	J-20 (2/6)	J-27 (2/4)	J-33 (2/4)	J-41 (1/4)	J-71 (2/4)	J-82 (3/6)
J-6 (4/2)	J-20 (3/5)	J-27 (2/5)	J-33 (2/5)	J-44 (1/3)	J-71 (4/2)	J-82 (5/3)
J-6 (5/2)	J-20 (4/2)	J-27 (3/5)	J-33 (3/5)	J-44 (2/4)	J-72 (2/4)	J-82 (6/3)
J-6 (4/2)	J-20 (5/2)	J-27 (4/2)	J-33 (5/3)	J-44 (2/5)	J-72 (4/2)	
J-6 (5/3)	J-21 (3/5)	J-27 (5/2)	J-33 (5/2)	J-44 (2/6)	J-73 (2/4)	

[1017]

[1018]

[표 6b]



[1019]

[1020]

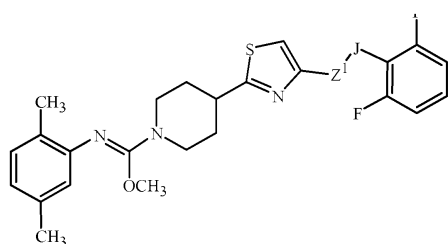
표 6b에서, J (예를 들어, J-3)의 구조는 상기 실시 형태의 증거 3에 나타나 있으며, 여기서, 바로 위의 구조에 나타낸 바와 같이, x는 2이고, 하나의 R^5 치환기는 Q (즉, $-Z^2Q$ (여기서, Z^2 는 직접 결합이다))이며, Q는 2,6-다이플루오로페닐이다. 다른 R^5 치환기는 헤딩 $(R^5)_x$ 아래에 표로 만들어져 있다. 상기 구조의 티아졸 환은 화학식 1의 G에 해당한다. J 다음의 괄호내의 번호는 G (즉, 티아졸) 및 Q (즉, 2,6-다이플루오로페닐)에 대한 J 환의 결합점을 말한다. 첫번째 번호는 G가 결합되는 J 상의 환 위치이며, 두번째 번호는 Q가 결합되는 J 상의 환 위치이다.

J	(R ⁵) _x	J	(R ⁵) _x	J	(R ⁵) _x
J-3 (2/4)	1-CH ₃	J-74 (2/4)	3-CH ₃	J-69 (1/3)	4-OCF ₃
J-3 (2/5)	1-CH ₃	J-74 (2/5)	3-CH ₃	J-69 (1/3)	4-SMe
J-3 (4/2)	1-CH ₃	J-74 (4/2)	3-CH ₃	J-69 (1/3)	4-SOMe
J-3 (5/2)	1-CH ₃	J-74 (5/2)	3-CH ₃	J-69 (1/3)	4-SO ₂ Me
J-9 (5/3)	1-CH ₃	J-75 (3/5)	2-CH ₃	J-69 (1/3)	4-SCF ₃
J-9 (3/5)	1-CH ₃	J-75 (5/3)	2-CH ₃	J-69 (1/3)	4-CH ₂ OCHF ₂
J-12 (3/5)	1-CH ₃	J-69 (1/3)	4-F	J-69 (1/3)	4-CH ₂ OH
J-12 (5/3)	1-CH ₃	J-69 (1/3)	4-Cl	J-74 (2/5)	3-C(=O)CH ₃
J-14 (3/5)	1-CH ₃	J-69 (1/3)	4-OH	J-69 (1/3)	4-OC(=O)CH ₃
J-39 (3/5)	4-CH ₃	J-69 (1/3)	4-NH ₂	J-69 (1/3)	4-SC(=O)CH ₃
J-39 (5/3)	4-CH ₃	J-69 (1/3)	4-OEt	J-69 (1/3)	4-C(=O)NHMe

[1021]

[1022]

[표 6c]



[1023]

[1024]

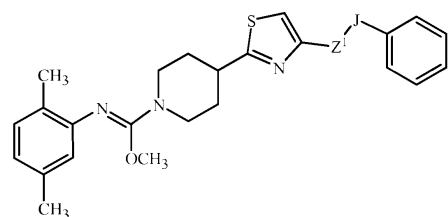
표 6c에서, J (예를 들어, J-3)의 구조는 상기 실시 형태의 증거 3에 나타나 있으며, 여기서, 바로 위의 구조에 나타난 바와 같이, x는 1이고, R⁵는 Q (즉, -Z²Q (여기서, Z²는 직접 결합이다))이며, Q는 2,6-다이플루오로페닐이다. J 다음의 괄호내의 번호는 Z¹ 및 Q (즉, 2,6-다이플루오로페닐)에 대한 J 환의 결합점을 말한다. 첫번째 번호는 Z¹이 결합되는 J 상의 환 위치이며, 두번째 번호는 Q가 결합되는 J 상의 환 위치이다.

Z ¹	J	Z ¹	J	Z ¹	J
CH ₂	J-3 (1/4)	CH ₂	J-18 (2/5)	CH ₂	J-31 (1/4)
CH ₂	J-6 (1/3)	CH ₂	J-26 (1/4)	CH ₂	J-35 (1/4)
CH ₂	J-9 (1/3)	CH ₂	J-30 (1/3)	CH ₂	J-36(1/3)
CH ₂	J-12 (1/3)	CH ₂	J-30 (1/4)	CH ₂	J-42 (1/3)
CH ₂	J-17 (2/4)	CH ₂	J-31 (1/3)	CH ₂	J-42 (1/4)

[1025]

[1026]

[표 6d]



[1027]

[1028]

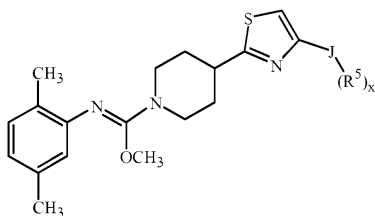
표 6d에서, J (예를 들어, J-29)의 구조는 상기 실시 형태의 증거 3에 나타나 있으며, 여기서, 바로 위의 구조에 나타난 바와 같이, x는 1이고, R⁵는 Q (즉, -Z²Q (여기서, Z²는 직접 결합이다))이며, Q는 페닐이다. J 다음의 괄호내의 번호는 Z¹ 및 Q (즉, 페닐)에 대한 J 환의 결합점을 말한다. 첫번째 번호는 Z¹이 결합되는 J 상의 환 위치이며, 두번째 번호는 Q가 결합되는 J 상의 환 위치이다.

Z ¹	J	Z ¹	J	Z ¹	J
O	J-29 (3/5)	S(=O) ₂	J-29 (3/5)	N(n-Pr)	J-29 (3/5)
S	J-29 (3/5)	NH	J-29 (3/5)	CH ₂	J-29 (3/5)
S(=O)	J-29 (3/5)	N(Me)	J-29 (3/5)	CH(-i-Bu)	J-29 (3/5)

[1029]

[1030]

[표 6e]



[1031]

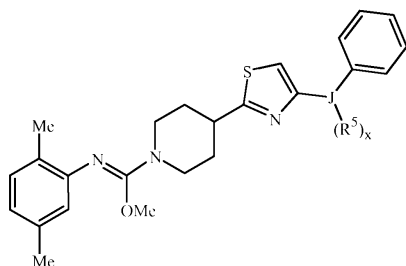
[1032]

표 6e에서, J (예를 들어, J-53)의 구조는 상기 실시 형태의 증거 3에 나타나 있으며, 여기서, J 환에 결합된 R⁵ 치환기는 바로 위의 구조에서 (R⁵)_x로서 나타내어진다. 상기 구조의 티아졸 환은 화학식 1의 G에 해당한다. J 다음의 괄호내의 번호는 G (즉, 티아졸)에 대한 J 환의 결합점을 말한다.

J	(R ⁵) _x	J	(R ⁵) _x	J	(R ⁵) _x
J-53 (2)	H	J-29 (3)	5-(4-Me-3-펜텐-1-일)	J-69 (1)	3-c-Pr
J-54 (2)	H	J-29 (3)	5-(3,3-다이-Me-1-부틴-1-일)	J-69 (1)	3-c-Bu
J-55 (2)	H	J-29 (3)	5-(4-Me-c-헥실)	J-69 (1)	3-c-펜틸
J-56 (2)	H	J-29 (3)	5-CF ₂ CF ₃	J-69 (1)	3-c-헥실
J-57 (2)	1-Me	J-29 (3)	5-(3,3-다이-Cl-2-프로펜-1-일)	J-69 (1)	3-OCF ₃
J-58 (3)	1-Me	J-29 (3)	5-SiMe ₃	J-69 (1)	3-O-i-Pr
J-59 (2)	H	J-69 (1)	4-S(=O) ₂ CH ₂ CF ₃	J-69 (1)	3-O-i-Bu
J-60 (2)	H	J-22 (2)	4-NH-i-Bu	J-69 (1)	3-Cl
J-61 (2)	H	J-22 (2)	4-N(Et) ₂	J-69 (1)	3-Br
J-62 (2)	H	J-22 (2)	4-NH-c-헥실	J-69 (1)	4-I
J-63 (3)	H	J-69 (1)	4-CH ₂ O-i-Pr	J-69 (1)	4-Me
J-64 (2)	H	J-69 (1)	4-C(=O)-i-Pr	J-69 (1)	4-Et
J-65 (3)	H	J-29 (3)	5-NHC(=O)CH ₃	J-69 (1)	4-n-Pr
J-66 (6)	H	J-29 (3)	5-N(C(=O)CH ₃) ₂	J-69 (1)	4-i-Pr
J-53 (2)	H	J-29 (3)	5-N(Me)C(=O)Ph	J-69 (1)	4-n-Bu
J-53 (2)	H	J-29 (3)	5-N(Et)C(=O)CH ₃	J-69 (1)	4-t-Bu
J-67 (2)	H	J-29 (3)	5-N(Et)C(=O)Ph	J-69 (1)	4-(CH ₂) ₄ CH ₃
J-68 (2)	H	J-29 (3)	5-NHC(=O)OMe	J-69 (1)	4-(CH ₂) ₂ CH(Me) ₂
J-53 (2)	H	J-29 (3)	5-NHC(=O)OEt	J-69 (1)	4-C(Me) ₂ (Et)
J-53 (2)	H	J-29 (3)	5-N(Me)C(=O)OEt	J-69 (1)	4-c-Pr
J-53 (2)	H	J-69 (1)	3-Cl	J-69 (1)	4-c-Bu
J-53 (2)	H	J-69 (1)	3-Br	J-69 (1)	4-c-펜틸
J-68 (2)	H	J-69 (1)	3-I	J-69 (1)	4-c-헥실
J-53 (2)	H	J-69 (1)	3-Me	J-69 (1)	4-OCF ₃
J-53 (2)	H	J-69 (1)	3-Et	J-69 (1)	4-O-i-Pr
J-53 (2)	H	J-69 (1)	3-n-Pr	J-69 (1)	4-O-i-Bu
J-53 (2)	H	J-69 (1)	3-i-Pr	J-69 (1)	3,4-다이-Cl
J-53 (2)	H	J-69 (1)	3-Bu	J-69 (1)	3,4-다이-Br
J-53 (2)	H	J-69 (1)	3-i-Bu	J-69 (1)	3,4-다이-Me
J-53 (2)	H	J-69 (1)	3-s-Bu	J-69 (1)	3,4-다이-Et
J-53 (2)	H	J-69 (1)	3-t-Bu	J-69 (1)	3,4-다이-OMe
J-53 (2)	H	J-69 (1)	3-(CH ₂) ₄ CH ₃	J-69 (1)	3,4-다이-OEt
		J-69 (1)	3-(CH ₂) ₂ CH(Me) ₂	J-4 (2)	5-i-Bu
		J-69 (1)	3-C(Me) ₂ (Et)	J-5 (2)	5-i-Bu

[1033]

[1034] [표 6f]



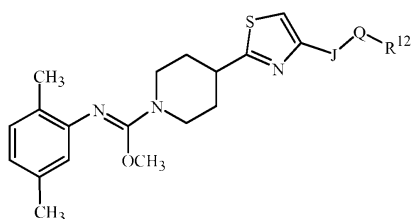
[1035]

[1036] 표 6f에서, J (예를 들어, J-29)의 구조는 상기 실시 형태의 증거 3에 나타나 있으며, 여기서, 바로 위의 구조에 나타낸 바와 같이, x는 2 또는 3이고, 하나의 R^5 치환기는 Q (즉, $-Z^2Q$ (여기서, Z^2 는 직접 결합이다))이며, Q는 페닐이다. 다른 하나 또는 2개의 R^5 치환기는 헤딩 (R^5)_x 아래에 표로 만들어져 있다. 상기 구조의 티아졸 환은 화학식 1의 G에 해당한다. J 다음의 괄호내의 번호는 G (즉, 티아졸) 및 Q (즉, 페닐)에 대한 J 환의 결합점을 말한다. 첫번째 번호는 G가 결합되는 J 상의 환 위치이며, 두번째 번호는 Q가 결합되는 J 상의 환 위치이다.

J	(R^5) _x	J	(R^5) _x	J	(R^5) _x
J-29 (3/5)	4-CH ₃	J-29 (3/5)	4,4-다이-Me	J-29 (3/5)	5-CF ₃
J-29 (3/5)	5-CH ₃	J-29 (3/5)	5-Et	J-29 (3/5)	5-OMe
J-29 (3/5)	4,5-다이-Me	J-29 (3/5)	5-(c-Pr)		

[1037]

[1038] [표 6g]



[1039]

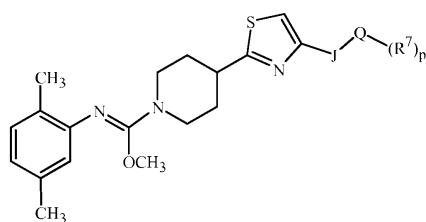
[1040] 표 6g에서, J (예를 들어, J-29)의 구조는 상기 실시 형태의 증거 3에 나타나 있으며, 여기서, 바로 위의 구조에 나타낸 바와 같이, x는 1이고, R^5 는 Q (즉, $-Z^2Q$ (여기서, Z^2 는 직접 결합이다))이다. Q의 구조는 상기 실시 형태의 증거 4에 나타나있으며, 여기서 p 및 q는 0이고, Q의 경우에 따라서는 환에 결합된 R^{12} 치환기는 상기 구조에 나타낸다. R^{12} 칼럼의 대시 "-"는 R^{12} 치환기가 Q 환에 존재하지 않음을 나타낸다. 상기 구조의 티아졸 환은 화학식 1의 G에 해당한다. J 다음의 괄호내의 번호는 G (즉, 티아졸) 및 Q에 대한 J 환의 결합점을 말한다. 첫번째 번호는 G가 결합되는 J 상의 환 위치이며, 두번째 번호는 Q가 결합되는 J 상의 환 위치이다.

J	Q	R ¹²	J	Q	R ¹²	J	Q	R ¹²
J-29 (3/5)	Q-1	-	J-29 (3/5)	Q-25	-	J-29 (3/5)	Q-50	-
J-29 (3/5)	Q-2	-	J-29 (3/5)	Q-26	-	J-29 (3/5)	Q-51	-
J-29 (3/5)	Q-3	Me	J-29 (3/5)	Q-27	-	J-29 (3/5)	Q-52	-
J-29 (3/5)	Q-4	-	J-29 (3/5)	Q-28	Me	J-29 (3/5)	Q-53	-
J-2 9(3/5)	Q-5	-	J-29 (3/5)	Q-29	-	J-29 (3/5)	Q-54	-
J-29 (3/5)	Q-6	-	J-29 (3/5)	Q-30	-	J-29 (3/5)	Q-55	-
J-29 (3/5)	Q-7	-	J-29 (3/5)	Q-31	Me	J-29 (3/5)	Q-56	-
J-29 (3/5)	Q-8	-	J-29 (3/5)	Q-32	-	J-29 (3/5)	Q-57	-
J-29 (3/5)	Q-9	-	J-29 (3/5)	Q-33	-	J-29 (3/5)	Q-58	-
J-29 (3/5)	Q-10	Me	J-29 (3/5)	Q-34	-	J-29 (3/5)	Q-59	-
J-29 (3/5)	Q-11	Me	J-29 (3/5)	Q-35	-	J-29 (3/5)	Q-60	-
J-29 (3/5)	Q-12	Me	J-29 (3/5)	Q-36	-	J-29 (3/5)	Q-61	-
J-29 (3/5)	Q-13	Me	J-29 (3/5)	Q-36	-	J-29 (3/5)	Q-61	-
J-29(3/5)	Q-14	Me	J-29 (3/5)	Q-37	-	J-29 (3/5)	Q-61	-
J-29 (3/5)	Q-15	-	J-29 (3/5)	Q-38	-	J-29 (3/5)	Q-62	-
J-29 (3/5)	Q-16	-	J-29 (3/5)	Q-39	-	J-29 (3/5)	Q-63	-
J-29 (3/5)	Q-17	-	J-29 (3/5)	Q-40	-	J-29 (3/5)	Q-64	-
J-29(3/5)	Q-18	-	J-29 (3/5)	Q-41	-	J-29 (3/5)	Q-65	-
J-29 (3/5)	Q-19	-	J-29 (3/5)	Q-42	-	J-29 (3/5)	Q-66	-
J-29 (3/5)	Q-20	-	J-29 (3/5)	Q-43	-	J-29 (3/5)	Q-67	-
J-29 (3/5)	Q-21	Me	J-29 (3/5)	Q-44	-	J-29 (3/5)	Q-68	-
J-29 (3/5)	Q-22	Me	J-29 (3/5)	Q-46	-	J-29 (3/5)	Q-69	-
J-29 (3/5)	Q-23	Me	J-29 (3/5)	Q-48	-			
J-29 (3/5)	Q-24	H	J-29 (3/5)	Q-49	-			

[1041]

[1042]

[표 6h]



[1043]

[1044]

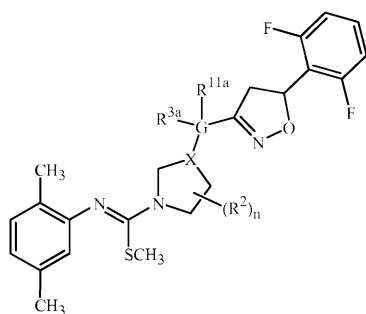
표 6h에서, J (예를 들어, J-29)의 구조는 상기 실시 형태의 증거 3에 나타나 있으며, 여기서, 바로 위의 구조에 나타낸 바와 같이, x는 1이고, R⁵는 Q (즉, -Z²Q (여기서, Z²는 직접 결합이다))이다. Q의 구조는 상기 실시 형태의 증거 4에 나타나있으며, 여기서 q는 0이고, R¹²는 H이며, p는 1 또는 2이고, 환에 결합된 1개 또는 2개의 R⁷ 치환기는 상기 구조에서 (R⁷)_p로서 나타내어진다. 상기 구조의 티아졸 환은 화학식 1의 G에 해당한다. J 다음의 괄호내의 번호는 G (즉, 티아졸) 및 Q에 대한 J 환의 결합점을 말한다. 첫번째 번호는 G가 결합되는 J 상의 환 위치이며, 두번째 번호는 Q가 결합되는 J 상의 환 위치이다.

J	Q	(R ⁷) _p	J	Q	(R ⁷) _p
J-29 (3/5)	Q-45	2-Me	J-29 (3/5)	Q-45	3-OH
J-29 (3/5)	Q-45	3-Me	J-29 (3/5)	Q-45	3-NH ₂
J-29 (3/5)	Q-45	4-Me	J-29 (3/5)	Q-45	2-CN
J-29 (3/5)	Q-45	2-Cl	J-29 (3/5)	Q-45	4-O-t-Bu
J-2 9(3/5)	Q-45	3-Cl	J-2 9(3/5)	Q-45	4-SMe
J-29 (3/5)	Q-45	4-Cl	J-29 (3/5)	Q-45	4-SCF ₃
J-29 (3/5)	Q-45	2-OMe	J-29 (3/5)	Q-45	3-S(=O) ₂ Me
J-29 (3/5)	Q-45	3-OMe	J-29 (3/5)	Q-45	3-NHMe
J-29 (3/5)	Q-45	4-OMe	J-29 (3/5)	Q-45	4-N(Me) ₂
J-29 (3/5)	Q-45	2-Et	J-29 (3/5)	Q-45	2-CH ₂ OMe
J-29 (3/5)	Q-45	3-i-Pr	J-29 (3/5)	Q-45	3-C(=O)Me
J-29 (3/5)	Q-45	2,6-다이-Me	J-29 (3/5)	Q-45	3-C(=O) ₂ Me
J-29 (3/5)	Q-45	4-CH=CH ₂	J-29 (3/5)	Q-45	3-C(=O)NHMe
J-29(3/5)	Q-45	4-C≡CH	J-29(3/5)	Q-45	4-OC(=O)OMe
J-29 (3/5)	Q-45	4-c-Pr	J-29 (3/5)	Q-45	4-SC(=O)Me
J-29 (3/5)	Q-45	3-CF ₃	J-29 (3/5)	Q-45	3-C(=O)N(Me) ₂
J-29 (3/5)	Q-45	3-OCF ₃	J-29 (3/5)	Q-45	4-SiMe ₃
J-29(3/5)	Q-45	4-Br	J-29(3/5)	Q-45	2,6-다이-Et

[1045]

[1046]

[표 7]



[1047]

[1048]

표 7에서, G (예를 들어, G-1)의 구조는 상기 실시 형태의 증거 2에 나타나 있으며, 여기서, G 환의 일부의 경우에 존재하는 R^{3a} 및 R^{11a} 치환기는 바로 위의 구조에 나타내어지고, 좌측으로 돌출하는 결합은 X에 결합되며, 우측으로 돌출하는 결합은 옥사졸 환 (화학식 1의 J 환에 대응)에 결합된다. R^{11a} 칼럼의 대시 "-"는 R^{11a} 치환기가 G 환에 존재하지 않음을 나타낸다. (R²)_n 칼럼의 대시 "-"는 n이 0이고, 수소가 모든 이용가능한 위치에 존재함을 나타낸다.

X	$(R^3)_n$	G	R^{3a}	R^{11a}
X ¹	—	G-1	H	—
X ¹	—	G-2	H	—
X ¹	—	G-3	H	H
X ¹	—	G-4	H	—
X ¹	—	G-5	H	—
X ¹	—	G-6	H	H
X ¹	—	G-7	H	—
X ¹	—	G-8	H	—
X ¹	—	G-9	H	H
X ¹	—	G-10	H	—
X ¹	—	G-11	H	—
X ¹	—	G-12	H	H
X ¹	—	G-13	H	H
X ¹	—	G-14	H	—
X ¹	—	G-15	H	—
X ¹	—	G-16	H	H
X ¹	—	G-17	H	—
X ¹	—	G-18	H	—
X ¹	—	G-19	H	H
X ¹	—	G-20	H	—
X ¹	—	G-21	H	—
X ¹	—	G-22	H	H
X ¹	—	G-23	H	—
X ¹	—	G-24	H	—
X ¹	—	G-25	H	—
X ¹	—	G-26	H	—
X ¹	—	G-27	H	—
X ¹	—	G-28	H	—
X ¹	—	G-29	H	—
X ¹	—	G-30	H	—
X ¹	—	G-31	H	—
X ¹	—	G-32	H	—
X ¹	—	G-33	H	—
X ¹	—	G-34	H	—

[1049]

X	(R ²) _n	G	R ^{3a}	R ^{11a}
X ¹	—	G-35	H	—
X ¹	—	G-36	H	—
X ¹	—	G-37	H	—
X ¹	—	G-38	H	—
X ¹	—	G-39	H	H
X ¹	—	G-40	H	—
X ¹	—	G-41	H	—
X ¹	—	G-42	H	H
X ¹	—	G-43	H	H
X ¹	—	G-44	H	—
X ¹	—	G-45	H	—
X ¹	—	G-46	H	—
X ¹	—	G-47	H	—
X ¹	—	G-48	H	H
X ¹	—	G-49	H	—
X ¹	—	G-50	H	—
X ¹	—	G-51	H	H
X ¹	—	G-52	H	—
X ¹	—	G-53	H	—
X ¹	—	G-54	H	H
X ¹	—	G-55	H	—
X ¹	—	G-56	H	—
X ¹	—	G-57	H	—
X ¹	—	G-58	H	H
X ¹	—	G-59	H	H
X ¹	—	G-2	Me	—
X ¹	—	G-2	Cl	—
X ¹	—	G-2	F	—
X ¹	—	G-2	CF ₃	—
X ¹	—	G-14	n-Pr	—
X ¹	—	G-3	H	Me
X ¹	—	G-3	H	n-Pr
X ¹	—	G-26	5-Me	—
X ¹	2-Me	G-1	H	—
X ¹	3-Me	G-1	H	—

[1050]

X	(R ²) _n	G	R ^{3a}	R ^{11a}
X ¹	2,6-디메틸-4-메톡시페놀	G-1	H	-
X ¹	3,5-디메틸-4-메톡시페놀	G-1	H	-
X ¹	3-tert-부틸-4-메톡시페놀	G-1	H	-
X ¹	4-메톡시페놀	G-1	H	-
X ¹	4-히드록시페놀	G-1	H	-
X ¹	4-클로로페놀	G-1	H	-
X ¹	4-브로모페놀	G-1	H	-
X ¹	4-사이아노페놀	G-1	H	-
X ²	-	G-1	H	-
X ²	-	G-2	H	-
X ²	-	G-3	H	H
X ²	-	G-4	H	-
X ²	-	G-5	H	-
X ²	-	G-6	H	H
X ²	-	G-7	H	-
X ²	-	G-8	H	-
X ²	-	G-9	H	H
X ²	-	G-10	H	-
X ²	-	G-11	H	-
X ²	-	G-12	H	H
X ²	-	G-13	H	H
X ²	-	G-14	H	-
X ²	-	G-15	H	-
X ²	-	G-16	H	H
X ²	-	G-17	H	-
X ²	-	G-18	H	-
X ²	-	G-19	H	H
X ²	-	G-20	H	-
X ²	-	G-21	H	-
X ²	-	G-22	H	H
X ²	-	G-23	H	-
X ²	-	G-24	H	-
X ²	-	G-31	H	-
X ²	-	G-32	H	-
X ²	-	G-33	H	-

[1051]

X	(R ²) _n	G	R ^{3a}	R ^{11a}
X ²	—	G-34	H	—
X ²	—	G-35	H	—
X ²	—	G-37	H	—
X ²	—	G-38	H	—
X ²	—	G-39	H	H
X ²	—	G-40	H	—
X ²	—	G-41	H	—
X ²	—	G-42	H	H
X ²	—	G-43	H	H
X ²	—	G-44	H	—
X ²	—	G-45	H	—
X ²	—	G-46	H	—
X ²	—	G-47	H	—
X ²	—	G-48	H	H
X ²	—	G-49	H	—
X ²	—	G-50	H	—
X ²	—	G-51	H	H
X ²	—	G-52	H	—
X ²	—	G-53	H	—
X ²	—	G-54	H	H
X ²	—	G-2	Me	—
X ²	—	G-2	Cl	—
X ²	—	G-2	F	—
X ²	—	G-2	CF ₃	—
X ²	—	G-14	n-Pr	—
X ²	—	G-3	H	Me
X ²	—	G-3	H	n-Pr
X ²	2-Me	G-1	H	—
X ²	3-Me	G-1	H	—
X ²	2,6-다이-Me	G-1	H	—
X ²	3,5-다이-Me	G-1	H	—
X ²	3-n-Bu	G-1	H	—
X ³	—	G-1	H	—
X ³	—	G-2	H	—
X ³	—	G-3	H	H

[1052]

X	$(R^2)_n$	G	R^{3a}	R^{11a}
X^3	—	G-4	H	—
X^3	—	G-5	H	—
X^3	—	G-6	H	H
X^3	—	G-7	H	—
X^3	—	G-8	H	—
X^3	—	G-9	H	H
X^3	—	G-10	H	—
X^3	—	G-11	H	—
X^3	—	G-12	H	H
X^3	—	G-13	H	H
X^3	—	G-14	H	—
X^3	—	G-15	H	—
X^3	—	G-16	H	H
X^3	—	G-17	H	—
X^3	—	G-18	H	—
X^3	—	G-19	H	H
X^3	—	G-20	H	—
X^3	—	G-21	H	—
X^3	—	G-22	H	H
X^3	—	G-23	H	—
X^3	—	G-24	H	—
X^3	—	G-31	H	—
X^3	—	G-32	H	—
X^3	—	G-33	H	—
X^3	—	G-34	H	—
X^3	—	G-35	H	—
X^3	—	G-37	H	—
X^3	—	G-38	H	—
X^3	—	G-39	H	H
X^3	—	G-40	H	—
X^3	—	G-41	H	—
X^3	—	G-42	H	H
X^3	—	G-43	H	H
X^3	—	G-44	H	—
X^3	—	G-45	H	—

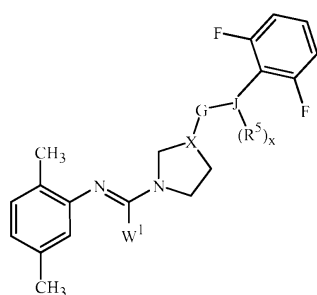
[1053]

X	(R ⁵) _n	G	R ^{3a}	R ^{11a}
X ³	-	G-46	H	-
X ³	-	G-47	H	-
X ³	-	G-48	H	H
X ³	-	G-49	H	-
X ³	-	G-50	H	-
X ³	-	G-51	H	H
X ³	-	G-52	H	-
X ³	-	G-53	H	-
X ³	-	G-54	H	H
X ³	-	G-2	Me	-
X ³	-	G-2	Cl	-
X ³	-	G-2	F	-
X ³	-	G-2	CF ₃	-
X ³	-	G-14	n-Pr	-
X ³	-	G-3	H	Me
X ³	-	G-3	H	n-Pr
X ³	2-Me	G-1	H	-
X ³	3-Me	G-1	H	-
X ³	2,6-다이-Me	G-1	H	-
X ³	3,5-다이-Me	G-1	H	-
X ³	3-n-Bu	G-1	H	-
X ³	5-Me	G-1	H	-
X ³	6-Me	G-1	H	-
X ⁴	-	G-1	H	-
X ⁵	-	G-1	H	-
X ⁶	-	G-1	H	-
X ⁷	-	G-1	H	-
X ⁸	-	G-1	H	-
X ⁹	-	G-1	H	-

[1054]

[1055]

[표 8]



[1056]

[1057]

표 8에서, J (예를 들어, J-1)의 구조는 상기 실시 형태의 증거 3에 나타나 있으며, 여기서, 바로 위의 구조에 나타낸 바와 같이, x는 1 또는 2이고, 하나의 R⁵ 치환기는 Q (즉, -Z²Q (여기서, Z²는 직접 결합이다))이며, Q는 2,6-다이플루오로페닐이다. 다른 가능한 R⁵ 치환기는 헤딩 (R⁵)_x 아래에 표로 만들어져 있다. (R⁵)_x 칼럼의 대신 "-" 는 Q 이외의 R⁵ 치환기가 존재하지 않음을 나타낸다. G (예를 들어, G-1 또는 G-2)의 구조는 증거 2에 나타나있으며, 여기서 R^{3a}는 수소이다. J 다음의 괄호내의 번호는 G 및 Q (즉, 2,6-다이플루오로페닐)에 대한 J 환의 결합점을 말한다. 첫번째 번호는 G가 결합되는 J 상의 환 위치이며, 두번째 번호는 Q가 결합되는 J 상의 환 위치이다.

X	G	J	(R ⁵) _x	W ¹
X ¹	G-1	J-1 (2/4)	—	메틸티오
X ¹	G-1	J-1 (2/4)	—	아미노
X ¹	G-1	J-1 (2/4)	—	하이드록시아미노
X ¹	G-1	J-1 (2/4)	—	메틸하이드록시아미노
X ¹	G-1	J-1 (2/4)	—	시아노아미노
X ¹	G-1	J-2 (2/4)	—	메틸티오
X ¹	G-1	J-2 (2/4)	—	아미노
X ¹	G-1	J-2 (2/4)	—	하이드록시아미노
X ¹	G-1	J-2 (2/4)	—	메틸하이드록시아미노
X ¹	G-1	J-2 (2/4)	—	시아노아미노
X ¹	G-1	J-3 (2/4)	1-Me	메틸티오
X ¹	G-1	J-3 (2/4)	1-Me	아미노
X ¹	G-1	J-3 (2/4)	1-Me	하이드록시아미노
X ¹	G-1	J-3 (2/4)	1-Me	메틸하이드록시아미노
X ¹	G-1	J-3 (2/4)	1-Me	시아노아미노
X ¹	G-1	J-4 (2/5)	—	메틸티오
X ¹	G-1	J-4 (2/5)	—	아미노
X ¹	G-1	J-4 (2/5)	—	하이드록시아미노
X ¹	G-1	J-4 (2/5)	—	메틸하이드록시아미노
X ¹	G-1	J-4 (2/5)	—	시아노아미노
X ¹	G-1	J-11 (3/5)	—	메틸티오
X ¹	G-1	J-11 (3/5)	—	아미노
X ¹	G-1	J-11 (3/5)	—	하이드록시아미노
X ¹	G-1	J-11 (3/5)	—	메틸하이드록시아미노
X ¹	G-1	J-11 (3/5)	—	시아노아미노
X ¹	G-1	J-12 (3/5)	1-Me	메틸티오
X ¹	G-1	J-12 (3/5)	1-Me	아미노
X ¹	G-1	J-12 (3/5)	1-Me	하이드록시아미노
X ¹	G-1	J-12 (3/5)	1-Me	메틸하이드록시아미노
X ¹	G-1	J-12 (3/5)	1-Me	시아노아미노

[1058]

X	G	J	$(R^5)_x$	W^1
X ¹	G-1	J-15 (2/5)	—	메틸티오
X ¹	G-1	J-15 (2/5)	—	아미노
X ¹	G-1	J-15 (2/5)	—	하이드록시아미노
X ¹	G-1	J-15 (2/5)	—	메틸하이드록시아미노
X ¹	G-1	J-15 (2/5)	—	시아노아미노
X ¹	G-1	J-16 (2/5)	—	메틸티오
X ¹	G-1	J-16 (2/5)	—	아미노
X ¹	G-1	J-16 (2/5)	—	하이드록시아미노
X ¹	G-1	J-16 (2/5)	—	메틸하이드록시아미노
X ¹	G-1	J-16 (2/5)	—	시아노아미노
X ¹	G-1	J-22 (2/4)	—	메틸티오
X ¹	G-1	J-22 (2/4)	—	아미노
X ¹	G-1	J-22 (2/4)	—	하이드록시아미노
X ¹	G-1	J-22 (2/4)	—	메틸하이드록시아미노
X ¹	G-1	J-22 (2/4)	—	시아노아미노
X ¹	G-1	J-24 (2/4)	—	메틸티오
X ¹	G-1	J-24 (2/4)	—	아미노
X ¹	G-1	J-24 (2/4)	—	하이드록시아미노
X ¹	G-1	J-24 (2/4)	—	메틸하이드록시아미노
X ¹	G-1	J-24 (2/4)	—	시아노아미노
X ¹	G-1	J-25 (2/4)	—	메틸티오
X ¹	G-1	J-25 (2/4)	—	아미노
X ¹	G-1	J-25 (2/4)	—	하이드록시아미노
X ¹	G-1	J-25 (2/4)	—	메틸하이드록시아미노
X ¹	G-1	J-25 (2/4)	—	시아노아미노
X ¹	G-1	J-26 (2/4)	—	메틸티오
X ¹	G-1	J-26 (2/4)	—	아미노
X ¹	G-1	J-26 (2/4)	—	하이드록시아미노
X ¹	G-1	J-26 (2/4)	—	메틸하이드록시아미노
X ¹	G-1	J-26 (2/4)	—	시아노아미노
X ¹	G-1	J-28 (3/5)	—	메틸티오
X ¹	G-1	J-28 (3/5)	—	아미노

[1059]

X	G	J	(R ⁵) _x	W ¹
X ¹	G-1	J-28 (3/5)	—	하이드록시아미노
X ¹	G-1	J-28 (3/5)	—	메틸하이드록시아미노
X ¹	G-1	J-28 (3/5)	—	시아노아미노
X ¹	G-1	J-30 (3/5)	—	메틸티오
X ¹	G-1	J-30 (3/5)	—	아미노
X ¹	G-1	J-30 (3/5)	—	하이드록시아미노
X ¹	G-1	J-30 (3/5)	—	메틸하이드록시아미노
X ¹	G-1	J-30 (3/5)	—	시아노아미노
X ¹	G-1	J-30 (3/5)	1-Me	메틸티오
X ¹	G-1	J-30 (3/5)	1-Me	아미노
X ¹	G-1	J-30 (3/5)	1-Me	하이드록시아미노
X ¹	G-1	J-30 (3/5)	1-Me	메틸하이드록시아미노
X ¹	G-1	J-30 (3/5)	1-Me	시아노아미노
X ¹	G-1	J-37 (2/5)	4-Ac	메틸티오
X ¹	G-1	J-37 (2/5)	4-Ac	아미노
X ¹	G-1	J-37 (2/5)	4-Ac	하이드록시아미노
X ¹	G-1	J-37 (2/5)	4-Ac	메틸하이드록시아미노
X ¹	G-1	J-37 (2/5)	4-Ac	시아노아미노
X ¹	G-1	J-38 (2/5)	4-Ac	메틸티오
X ¹	G-1	J-38 (2/5)	4-Ac	아미노
X ¹	G-1	J-38 (2/5)	4-Ac	하이드록시아미노
X ¹	G-1	J-38 (2/5)	4-Ac	메틸하이드록시아미노
X ¹	G-1	J-38 (2/5)	4-Ac	시아노아미노
X ¹	G-2	J-1 (2/4)	—	메틸티오
X ¹	G-2	J-1 (2/4)	—	아미노
X ¹	G-2	J-1 (2/4)	—	하이드록시아미노
X ¹	G-2	J-1 (2/4)	—	메틸하이드록시아미노
X ¹	G-2	J-1 (2/4)	—	시아노아미노
X ¹	G-2	J-2 (2/4)	—	메틸티오
X ¹	G-2	J-2 (2/4)	—	아미노
X ¹	G-2	J-2 (2/4)	—	하이드록시아미노
X ¹	G-2	J-2 (2/4)	—	메틸하이드록시아미노

[1060]

X	G	J	(R ⁵) _x	W ¹
X ¹	G-2	J-2 (2/4)	—	시아노아미노
X ¹	G-2	J-3 (2/4)	1-Me	메틸티오
X ¹	G-2	J-3 (2/4)	1-Me	아미노
X ¹	G-2	J-3 (2/4)	1-Me	하이드록시아미노
X ¹	G-2	J-3 (2/4)	1-Me	메틸하이드록시아미노
X ¹	G-2	J-3 (2/4)	1-Me	시아노아미노
X ¹	G-2	J-4 (2/5)	—	메틸티오
X ¹	G-2	J-4 (2/5)	—	아미노
X ¹	G-2	J-4 (2/5)	—	하이드록시아미노
X ¹	G-2	J-4 (2/5)	—	메틸하이드록시아미노
X ¹	G-2	J-4 (2/5)	—	시아노아미노
X ¹	G-2	J-11 (3/5)	—	메틸티오
X ¹	G-2	J-11 (3/5)	—	아미노
X ¹	G-2	J-11 (3/5)	—	하이드록시아미노
X ¹	G-2	J-11 (3/5)	—	메틸하이드록시아미노
X ¹	G-2	J-11 (3/5)	—	시아노아미노
X ¹	G-2	J-12 (3/5)	1-Me	메틸티오
X ¹	G-2	J-12 (3/5)	1-Me	아미노
X ¹	G-2	J-12 (3/5)	1-Me	하이드록시아미노
X ¹	G-2	J-12 (3/5)	1-Me	메틸하이드록시아미노
X ¹	G-2	J-12 (3/5)	1-Me	시아노아미노
X ¹	G-2	J-15 (2/5)	—	메틸티오
X ¹	G-2	J-15 (2/5)	—	아미노
X ¹	G-2	J-15 (2/5)	—	하이드록시아미노
X ¹	G-2	J-15 (2/5)	—	메틸하이드록시아미노
X ¹	G-2	J-15 (2/5)	—	시아노아미노
X ¹	G-2	J-16 (2/5)	—	메틸티오
X ¹	G-2	J-16 (2/5)	—	아미노
X ¹	G-2	J-16 (2/5)	—	하이드록시아미노
X ¹	G-2	J-16 (2/5)	—	메틸하이드록시아미노
X ¹	G-2	J-16 (2/5)	—	시아노아미노
X ¹	G-2	J-22 (2/4)	—	메틸티오

[1061]

X	G	J	(R ⁵) _x	W ¹
X ¹	G-2	J-22 (2/4)	—	아미노
X ¹	G-2	J-22 (2/4)	—	하이드록시아미노
X ¹	G-2	J-22 (2/4)	—	메틸하이드록시아미노
X ¹	G-2	J-22 (2/4)	—	시아노아미노
X ¹	G-2	J-24 (2/4)	—	메틸티오
X ¹	G-2	J-24 (2/4)	—	아미노
X ¹	G-2	J-24 (2/4)	—	하이드록시아미노
X ¹	G-2	J-24 (2/4)	—	메틸하이드록시아미노
X ¹	G-2	J-24 (2/4)	—	시아노아미노
X ¹	G-2	J-25 (2/4)	—	메틸티오
X ¹	G-2	J-25 (2/4)	—	아미노
X ¹	G-2	J-25 (2/4)	—	하이드록시아미노
X ¹	G-2	J-25 (2/4)	—	메틸하이드록시아미노
X ¹	G-2	J-25 (2/4)	—	시아노아미노
X ¹	G-2	J-26 (2/4)	—	메틸티오
X ¹	G-2	J-26 (2/4)	—	아미노
X ¹	G-2	J-26 (2/4)	—	하이드록시아미노
X ¹	G-2	J-26 (2/4)	—	메틸하이드록시아미노
X ¹	G-2	J-26 (2/4)	—	시아노아미노
X ¹	G-2	J-28 (3/5)	—	메틸티오
X ¹	G-2	J-28 (3/5)	—	아미노
X ¹	G-2	J-28 (3/5)	—	하이드록시아미노
X ¹	G-2	J-28 (3/5)	—	메틸하이드록시아미노
X ¹	G-2	J-28 (3/5)	—	시아노아미노
X ¹	G-2	J-30 (3/5)	—	메틸티오
X ¹	G-2	J-30 (3/5)	—	아미노
X ¹	G-2	J-30 (3/5)	—	하이드록시아미노
X ¹	G-2	J-30 (3/5)	—	메틸하이드록시아미노
X ¹	G-2	J-30 (3/5)	—	시아노아미노
X ¹	G-2	J-30 (3/5)	1-Me	메틸티오
X ¹	G-2	J-30 (3/5)	1-Me	아미노
X ¹	G-2	J-30 (3/5)	1-Me	하이드록시아미노

[1062]

X	G	J	(R ⁵) _x	W ¹
X ¹	G-2	J-30 (3/5)	1-Me	메틸하이드록시아미노
X ¹	G-2	J-30 (3/5)	1-Me	시아노아미노
X ¹	G-2	J-37 (2/5)	4-Ac	메틸티오
X ¹	G-2	J-37 (2/5)	4-Ac	아미노
X ¹	G-2	J-37 (2/5)	4-Ac	하이드록시아미노
X ¹	G-2	J-37 (2/5)	4-Ac	메틸하이드록시아미노
X ¹	G-2	J-37 (2/5)	4-Ac	시아노아미노
X ¹	G-2	J-38 (2/5)	4-Ac	메틸티오
X ¹	G-2	J-38 (2/5)	4-Ac	아미노
X ¹	G-2	J-38 (2/5)	4-Ac	하이드록시아미노
X ¹	G-2	J-38 (2/5)	4-Ac	메틸하이드록시아미노
X ¹	G-2	J-38 (2/5)	4-Ac	시아노아미노
X ¹	G-2	J-38 (2/5)	4-Ac	하이드록시아미노
X ¹	G-2	J-38 (2/5)	4-Ac	메틸하이드록시아미노
X ¹	G-2	J-38 (2/5)	4-Ac	시아노아미노
X ²	G-1	J-1 (2/4)	—	메틸티오
X ²	G-1	J-1 (2/4)	—	아미노
X ²	G-1	J-1 (2/4)	—	하이드록시아미노
X ²	G-1	J-1 (2/4)	—	메틸하이드록시아미노
X ²	G-1	J-1 (2/4)	—	시아노아미노
X ²	G-1	J-2 (2/4)	—	메틸티오
X ²	G-1	J-2 (2/4)	—	아미노
X ²	G-1	J-2 (2/4)	—	하이드록시아미노
X ²	G-1	J-2 (2/4)	—	메틸하이드록시아미노
X ²	G-1	J-2 (2/4)	—	시아노아미노
X ²	G-1	J-3 (2/4)	1-Me	메틸티오
X ²	G-1	J-3 (2/4)	1-Me	아미노
X ²	G-1	J-3 (2/4)	1-Me	하이드록시아미노
X ²	G-1	J-3 (2/4)	1-Me	메틸하이드록시아미노
X ²	G-1	J-3 (2/4)	1-Me	시아노아미노
X ²	G-1	J-4 (2/5)	—	메틸티오
X ²	G-1	J-4 (2/5)	—	아미노

[1063]

X	G	J	(R ⁵) _x	W ¹
X ²	G-1	J-4 (2/5)	—	하이드록시아미노
X ²	G-1	J-4 (2/5)	—	메틸하이드록시아미노
X ²	G-1	J-4 (2/5)	—	시아노아미노
X ²	G-1	J-11 (3/5)	—	메틸티오
X ²	G-1	J-11 (3/5)	—	아미노
X ²	G-1	J-11 (3/5)	—	하이드록시아미노
X ²	G-1	J-11 (3/5)	—	메틸하이드록시아미노
X ²	G-1	J-11 (3/5)	—	시아노아미노
X ²	G-1	J-12 (3/5)	1-Me	메틸티오
X ²	G-1	J-12 (3/5)	1-Me	아미노
X ²	G-1	J-12 (3/5)	1-Me	하이드록시아미노
X ²	G-1	J-12 (3/5)	1-Me	메틸하이드록시아미노
X ²	G-1	J-12 (3/5)	1-Me	시아노아미노
X ²	G-1	J-15 (2/5)	—	메틸티오
X ²	G-1	J-15 (2/5)	—	아미노
X ²	G-1	J-15 (2/5)	—	하이드록시아미노
X ²	G-1	J-15 (2/5)	—	메틸하이드록시아미노
X ²	G-1	J-15 (2/5)	—	시아노아미노
X ²	G-1	J-16 (2/5)	—	메틸티오
X ²	G-1	J-16 (2/5)	—	아미노
X ²	G-1	J-16 (2/5)	—	하이드록시아미노
X ²	G-1	J-16 (2/5)	—	메틸하이드록시아미노
X ²	G-1	J-16 (2/5)	—	시아노아미노
X ²	G-1	J-22 (2/4)	—	메틸티오
X ²	G-1	J-22 (2/4)	—	아미노
X ²	G-1	J-22 (2/4)	—	하이드록시아미노
X ²	G-1	J-22 (2/4)	—	메틸하이드록시아미노
X ²	G-1	J-22 (2/4)	—	시아노아미노
X ²	G-1	J-24 (2/4)	—	메틸티오
X ²	G-1	J-24 (2/4)	—	아미노
X ²	G-1	J-24 (2/4)	—	하이드록시아미노
X ²	G-1	J-24 (2/4)	—	메틸하이드록시아미노

[1064]

X	G	J	(R ³) _x	W ¹
X ²	G-1	J-24 (2/4)	—	시아노아미노
X ²	G-1	J-25 (2/4)	—	메틸티오
X ²	G-1	J-25 (2/4)	—	아미노
X ²	G-1	J-25 (2/4)	—	하이드록시아미노
X ²	G-1	J-25 (2/4)	—	메틸하이드록시아미노
X ²	G-1	J-25 (2/4)	—	시아노아미노
X ²	G-1	J-26 (2/4)	—	메틸티오
X ²	G-1	J-26 (2/4)	—	아미노
X ²	G-1	J-26 (2/4)	—	하이드록시아미노
X ²	G-1	J-26 (2/4)	—	메틸하이드록시아미노
X ²	G-1	J-26 (2/4)	—	시아노아미노
X ²	G-1	J-28 (3/5)	—	메틸티오
X ²	G-1	J-28 (3/5)	—	아미노
X ²	G-1	J-28 (3/5)	—	하이드록시아미노
X ²	G-1	J-28 (3/5)	—	메틸하이드록시아미노
X ²	G-1	J-28 (3/5)	—	시아노아미노
X ²	G-1	J-30 (3/5)	—	메틸티오
X ²	G-1	J-30 (3/5)	—	아미노
X ²	G-1	J-30 (3/5)	—	하이드록시아미노
X ²	G-1	J-30 (3/5)	—	메틸하이드록시아미노
X ²	G-1	J-30 (3/5)	—	시아노아미노
X ²	G-1	J-30 (3/5)	1-Me	메틸티오
X ²	G-1	J-30 (3/5)	1-Me	아미노
X ²	G-1	J-30 (3/5)	1-Me	하이드록시아미노
X ²	G-1	J-30 (3/5)	1-Me	메틸하이드록시아미노
X ²	G-1	J-30 (3/5)	1-Me	시아노아미노
X ²	G-1	J-37 (2/5)	4-Ac	메틸티오
X ²	G-1	J-37 (2/5)	4-Ac	아미노
X ²	G-1	J-37 (2/5)	4-Ac	하이드록시아미노
X ²	G-1	J-37 (2/5)	4-Ac	메틸하이드록시아미노
X ²	G-1	J-37 (2/5)	4-Ac	시아노아미노
X ²	G-1	J-38 (2/5)	4-Ac	메틸티오

[1065]

X	G	J	(R ²) _x	W ⁱ
X ²	G-1	J-38 (2/5)	4-Ac	아미노
X ²	G-1	J-38 (2/5)	4-Ac	하이드록시아미노
X ²	G-1	J-38 (2/5)	4-Ac	메틸하이드록시아미노
X ²	G-1	J-38 (2/5)	4-Ac	시아노아미노
X ²	G-2	J-1 (2/4)	—	메틸티오
X ²	G-2	J-1 (2/4)	—	아미노
X ²	G-2	J-1 (2/4)	—	하이드록시아미노
X ²	G-2	J-1 (2/4)	—	메틸하이드록시아미노
X ²	G-2	J-1 (2/4)	—	시아노아미노
X ²	G-2	J-2 (2/4)	—	메틸티오
X ²	G-2	J-2 (2/4)	—	아미노
X ²	G-2	J-2 (2/4)	—	하이드록시아미노
X ²	G-2	J-2 (2/4)	—	메틸하이드록시아미노
X ²	G-2	J-2 (2/4)	—	시아노아미노
X ²	G-2	J-3 (2/4)	1-Me	메틸티오
X ²	G-2	J-3 (2/4)	1-Me	아미노
X ²	G-2	J-3 (2/4)	1-Me	하이드록시아미노
X ²	G-2	J-3 (2/4)	1-Me	메틸하이드록시아미노
X ²	G-2	J-3 (2/4)	1-Me	시아노아미노
X ²	G-2	J-4 (2/5)	—	메틸티오
X ²	G-2	J-4 (2/5)	—	아미노
X ²	G-2	J-4 (2/5)	—	하이드록시아미노
X ²	G-2	J-4 (2/5)	—	메틸하이드록시아미노
X ²	G-2	J-4 (2/5)	—	시아노아미노
X ²	G-2	J-11 (3/5)	—	메틸티오
X ²	G-2	J-11 (3/5)	—	아미노
X ²	G-2	J-11 (3/5)	—	하이드록시아미노
X ²	G-2	J-11 (3/5)	—	메틸하이드록시아미노
X ²	G-2	J-11 (3/5)	—	시아노아미노
X ²	G-2	J-12 (3/5)	1-Me	메틸티오
X ²	G-2	J-12 (3/5)	1-Me	아미노
X ²	G-2	J-12 (3/5)	1-Me	하이드록시아미노

[1066]

X	G	J	(R ⁵) _x	W ⁱ
X ²	G-2	J-12 (3/5)	1-Me	메틸하이드록시아미노
X ²	G-2	J-12 (3/5)	1-Me	시아노아미노
X ²	G-2	J-15 (2/5)	—	메틸티오
X ²	G-2	J-15 (2/5)	—	아미노
X ²	G-2	J-15 (2/5)	—	하이드록시아미노
X ²	G-2	J-15 (2/5)	—	메틸하이드록시아미노
X ²	G-2	J-15 (2/5)	—	시아노아미노
X ²	G-2	J-16 (2/5)	—	메틸티오
X ²	G-2	J-16 (2/5)	—	아미노
X ²	G-2	J-16 (2/5)	—	하이드록시아미노
X ²	G-2	J-16 (2/5)	—	메틸하이드록시아미노
X ²	G-2	J-16 (2/5)	—	시아노아미노
X ²	G-2	J-22 (2/4)	—	메틸티오
X ²	G-2	J-22 (2/4)	—	아미노
X ²	G-2	J-22 (2/4)	—	하이드록시아미노
X ²	G-2	J-22 (2/4)	—	메틸하이드록시아미노
X ²	G-2	J-22 (2/4)	—	시아노아미노
X ²	G-2	J-24 (2/4)	—	메틸티오
X ²	G-2	J-24 (2/4)	—	아미노
X ²	G-2	J-24 (2/4)	—	하이드록시아미노
X ²	G-2	J-24 (2/4)	—	메틸하이드록시아미노
X ²	G-2	J-24 (2/4)	—	시아노아미노
X ²	G-2	J-25 (2/4)	—	메틸티오
X ²	G-2	J-25 (2/4)	—	아미노
X ²	G-2	J-25 (2/4)	—	하이드록시아미노
X ²	G-2	J-25 (2/4)	—	메틸하이드록시아미노
X ²	G-2	J-25 (2/4)	—	시아노아미노
X ²	G-2	J-26 (2/4)	—	메틸티오
X ²	G-2	J-26 (2/4)	—	아미노
X ²	G-2	J-26 (2/4)	—	하이드록시아미노
X ²	G-2	J-26 (2/4)	—	메틸하이드록시아미노
X ²	G-2	J-26 (2/4)	—	시아노아미노

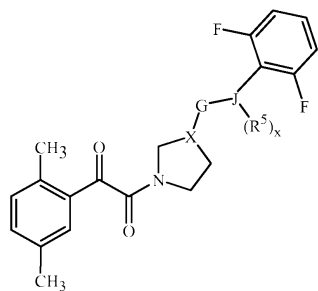
[1067]

X	G	J	(R ⁵) _x	W ⁱ
X ²	G-2	J-28 (3/5)	—	메틸티오
X ²	G-2	J-28 (3/5)	—	아미노
X ²	G-2	J-28 (3/5)	—	하이드록시아미노
X ²	G-2	J-28 (3/5)	—	메틸하이드록시아미노
X ²	G-2	J-28 (3/5)	—	시아노아미노
X ²	G-2	J-30 (3/5)	—	메틸티오
X ²	G-2	J-30 (3/5)	—	아미노
X ²	G-2	J-30 (3/5)	—	하이드록시아미노
X ²	G-2	J-30 (3/5)	—	메틸하이드록시아미노
X ²	G-2	J-30 (3/5)	—	시아노아미노
X ²	G-2	J-30 (3/5)	1-Me	메틸티오
X ²	G-2	J-30 (3/5)	1-Me	아미노
X ²	G-2	J-30 (3/5)	1-Me	하이드록시아미노
X ²	G-2	J-30 (3/5)	1-Me	메틸하이드록시아미노
X ²	G-2	J-30 (3/5)	1-Me	시아노아미노
X ²	G-2	J-37 (2/5)	4-Ac	메틸티오
X ²	G-2	J-37 (2/5)	4-Ac	아미노
X ²	G-2	J-37 (2/5)	4-Ac	하이드록시아미노
X ²	G-2	J-37 (2/5)	4-Ac	메틸하이드록시아미노
X ²	G-2	J-37 (2/5)	4-Ac	시아노아미노
X ²	G-2	J-38 (2/5)	4-Ac	메틸티오
X ²	G-2	J-38 (2/5)	4-Ac	아미노
X ²	G-2	J-38 (2/5)	4-Ac	하이드록시아미노
X ²	G-2	J-38 (2/5)	4-Ac	메틸하이드록시아미노
X ²	G-2	J-38 (2/5)	4-Ac	시아노아미노

[1068]

[1069]

[표 9]



[1070]

[1071]

표 9에서, J (예를 들어, J-1)의 구조는 상기 실시 형태의 증거 3에 나타나 있으며, 여기서, 바로 위의 구조에 나타난 바와 같이, x는 1 또는 2이고, 하나의 R⁵ 치환기는 Q (즉, -Z²Q (여기서, Z²는 직접 결합이다))이며, Q는 2,6-다이플루오로페닐이다. 다른 가능한 R⁵ 치환기는 헤딩 (R⁵)_x 아래에 표로 만들어져 있다. (R⁵)_x 칼럼의 대신 "-" 는 Q 이외의 R⁵ 치환기가 존재하지 않음을 나타낸다. G (예를 들어, G-1 또는 G-2)의 구조는 증거 2에 나타나 있으며, 여기서 R^{3a}는 수소이다. J 다음의 괄호내의 번호는 G (즉, 티아졸) 및 Q (즉, 2,6-다이플루오로페닐)에 대한 J 환의 결합점을 말한다. 첫번째 번호는 G가 결합되는 J 상의 환 위치이며, 두번째 번호는 Q가 결합되는 J 상의 환 위치이다.

X	G	J	(R ⁵) _x	X	G	J	(R ⁵) _x
						J-38	
X ¹	G-1	J-1 (2/4)	—	X ¹	G-2	(2/5)	4-Ac
X ¹	G-1	J-2 (2/4)	—	X ²	G-1	J-1 (2/4)	—
X ¹	G-1	J-3 (2/4)	1-Me	X ²	G-1	J-2 (2/4)	—
X ¹	G-1	J-4 (2/5)	—	X ²	G-1	J-3 (2/4)	1-Me
X ¹	G-1	J-11 (3/5)	—	X ²	G-1	J-4 (2/5)	—
						J-11	
X ¹	G-1	J-12 (3/5)	1-Me	X ²	G-1	(3/5)	—
						J-12	
X ¹	G-1	J-15 (2/5)	—	X ²	G-1	(3/5)	1-Me
						J-15	
X ¹	G-1	J-16 (2/5)	—	X ²	G-1	(2/5)	—
						J-16	
X ¹	G-1	J-22 (2/4)	—	X ²	G-1	(2/5)	—
						J-22	
X ¹	G-1	J-24 (2/4)	—	X ²	G-1	(2/4)	—
						J-24	
X ¹	G-1	J-25 (2/4)	—	X ²	G-1	(2/4)	—
						J-25	
X ¹	G-1	J-26 (2/4)	—	X ²	G-1	(2/4)	—
						J-26	
X ¹	G-1	J-28 (3/5)	—	X ²	G-1	(2/4)	—
						J-28	
X ¹	G-1	J-30 (3/5)	—	X ²	G-1	(3/5)	—
						J-30	
X ¹	G-1	J-30 (3/5)	1-Me	X ²	G-1	(3/5)	—
						J-30	
X ¹	G-1	J-37 (2/5)	4-Ac	X ²	G-1	(3/5)	1-Me
						J-37	
X ¹	G-1	J-38 (2/5)	4-Ac	X ²	G-1	(2/5)	4-Ac
						J-38	
X ¹	G-2	J-1 (2/4)	—	X ²	G-1	(2/5)	4-Ac
X ¹	G-2	J-2 (2/4)	—	X ²	G-2	J-1 (2/4)	—

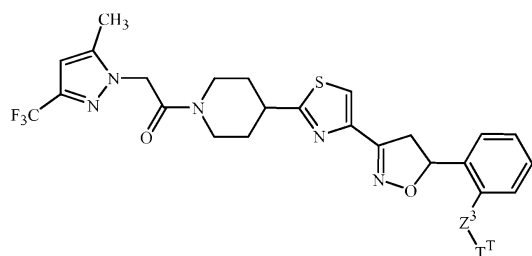
[1072]

X	G	J	(R ⁵) _x	X	G	J	(R ⁵) _x
X ¹	G-2	J-3 (2/4)	1-Me	X ²	G-2	J-2 (2/4)	—
X ¹	G-2	J-4 (2/5)	—	X ²	G-2	J-3 (2/4)	1-Me
X ¹	G-2	J-11 (3/5)	—	X ²	G-2	J-4 (2/5)	—
X ¹	G-2	J-12 (3/5)	1-Me	X ²	G-2	J-11	—
X ¹	G-2	J-15 (2/5)	—	X ²	G-2	J-12	—
X ¹	G-2	J-16 (2/5)	—	X ²	G-2	J-15	1-Me
X ¹	G-2	J-22 (2/4)	—	X ²	G-2	J-16	—
X ¹	G-2	J-24 (2/4)	—	X ²	G-2	J-22	—
X ¹	G-2	J-25 (2/4)	—	X ²	G-2	J-24	—
X ¹	G-2	J-26 (2/4)	—	X ²	G-2	J-25	—
X ¹	G-2	J-28 (3/5)	—	X ²	G-2	J-26	—
X ¹	G-2	J-30 (3/5)	—	X ²	G-2	J-28	—
X ¹	G-2	J-30 (3/5)	1-Me	X ²	G-2	J-30	—
X ¹	G-2	J-37 (2/5)	4-Ac	X ²	G-2	J-30	—
X ¹	G-1	J-1 (2/4)	—	X ²	G-2	J-37	1-Me
				X ²	G-2	J-1	4-Ac

[1073]

[1074]

[표 10]



[1075]

[1076]

표 10에서, "T"는 T^A, T^N 또는 T^P를 나타내고, T^A, T^N 및 T^P (예를 들어, T^A-1, T^N-12 및 T^P-20)의 구조는 상기 실시 형태의 증거 5에 나타낸 바와 같으며, 여기서 r은 0이다. 존재하는 경우, T^A 및 T^N에 결합된 R²²는 메틸이다.

Z^3 는 직 접 결 합 이 다.

T^1	T^1	T^1	T^1	T^1	T^1
T^A-1	T^A-21	T^A-41	T^N-12	T^N-32	T^P-20
T^A-2	T^A-22	T^A-42	T^N-13	T^P-1	T^P-21
T^A-3	T^A-23	T^A-43	T^N-14	T^P-2	T^P-22
T^A-4	T^A-24	T^A-44	T^N-15	T^P-3	T^P-23
T^A-5	T^A-25	T^A-45	T^N-16	T^P-4	T^P-24
T^A-6	T^A-26	T^A-46	T^N-17	T^P-5	T^P-25
T^A-7	T^A-27	T^A-47	T^N-18	T^P-6	T^P-26
T^A-8	T^A-28	T^A-48	T^N-19	T^P-7	T^P-27
T^A-9	T^A-29	T^A-49	T^N-20	T^P-8	T^P-28
T^A-10	T^A-30	T^N-1	T^N-21	T^P-9	T^P-29
T^A-11	T^A-31	T^N-2	T^N-22	T^P-10	T^P-30
T^A-12	T^A-32	T^N-3	T^N-23	T^P-11	T^P-31
T^A-13	T^A-33	T^N-4	T^N-24	T^P-12	T^P-32
T^A-14	T^A-34	T^N-5	T^N-25	T^P-13	T^P-33
T^A-15	T^A-35	T^N-6	T^N-26	T^P-14	T^P-34
T^A-16	T^A-36	T^N-7	T^N-27	T^P-15	T^P-35
T^A-17	T^A-37	T^N-8	T^N-28	T^P-16	
T^A-18	T^A-38	T^N-9	T^N-29	T^P-17	
T^A-19	T^A-39	T^N-10	T^N-30	T^P-18	
T^A-20	T^A-40	T^N-11	T^N-31	T^P-19	

Z^3 는 O 이 다.

T^1	T^1	T^1	T^1	T^1	T^1
T^A-1	T^A-21	T^A-41	T^N-12	T^N-32	T^P-20
T^A-2	T^A-22	T^A-42	T^N-13	T^P-1	T^P-21
T^A-3	T^A-23	T^A-43	T^N-14	T^P-2	T^P-22
T^A-4	T^A-24	T^A-44	T^N-15	T^P-3	T^P-23
T^A-5	T^A-25	T^A-45	T^N-16	T^P-4	T^P-24
T^A-6	T^A-26	T^A-46	T^N-17	T^P-5	T^P-25
T^A-7	T^A-27	T^A-47	T^N-18	T^P-6	T^P-26
T^A-8	T^A-28	T^A-48	T^N-19	T^P-7	T^P-27
T^A-9	T^A-29	T^A-49	T^N-20	T^P-8	T^P-28

[1077]

Z^3 는 O 이다.

T^1	T^1	T^1	T^1	T^1	T^1
T^A-10	T^A-30	T^N-1	T^N-21	T^P-9	T^P-29
T^A-11	T^A-31	T^N-2	T^N-22	T^P-10	T^P-30
T^A-12	T^A-32	T^N-3	T^N-23	T^P-11	T^P-31
T^A-13	T^A-33	T^N-4	T^N-24	T^P-12	T^P-32
T^A-14	T^A-34	T^N-5	T^N-25	T^P-13	T^P-33
T^A-15	T^A-35	T^N-6	T^N-26	T^P-14	T^P-34
T^A-16	T^A-36	T^N-7	T^N-27	T^P-15	T^P-35
T^A-17	T^A-37	T^N-8	T^N-28	T^P-16	
T^A-18	T^A-38	T^N-9	T^N-29	T^P-17	
T^A-19	T^A-39	T^N-10	T^N-30	T^P-18	
T^A-20	T^A-40	T^N-11	T^N-31	T^P-19	

Z^3 는 CH_2 이다.

T^1	T^1	T^1	T^1	T^1	T^1
T^A-1	T^A-21	T^A-41	T^N-12	T^N-32	T^P-20
T^A-2	T^A-22	T^A-42	T^N-13	T^P-1	T^P-21
T^A-3	T^A-23	T^A-43	T^N-14	T^P-2	T^P-22
T^A-4	T^A-24	T^A-44	T^N-15	T^P-3	T^P-23
T^A-5	T^A-25	T^A-45	T^N-16	T^P-4	T^P-24
T^A-6	T^A-26	T^A-46	T^N-17	T^P-5	T^P-25
T^A-7	T^A-27	T^A-47	T^N-18	T^P-6	T^P-26
T^A-8	T^A-28	T^A-48	T^N-19	T^P-7	T^P-27
T^A-9	T^A-29	T^A-49	T^N-20	T^P-8	T^P-28
T^A-10	T^A-30	T^N-1	T^N-21	T^P-9	T^P-29
T^A-11	T^A-31	T^N-2	T^N-22	T^P-10	T^P-30
T^A-12	T^A-32	T^N-3	T^N-23	T^P-11	T^P-31
T^A-13	T^A-33	T^N-4	T^N-24	T^P-12	T^P-32
T^A-14	T^A-34	T^N-5	T^N-25	T^P-13	T^P-33
T^A-15	T^A-35	T^N-6	T^N-26	T^P-14	T^P-34
T^A-16	T^A-36	T^N-7	T^N-27	T^P-15	T^P-35
T^A-17	T^A-37	T^N-8	T^N-28	T^P-16	
T^A-18	T^A-38	T^N-9	T^N-29	T^P-17	
T^A-19	T^A-39	T^N-10	T^N-30	T^P-18	
T^A-20	T^A-40	T^N-11	T^N-31	T^P-19	

[1078]

Z^3 는 $-C\equiv C-$ 이 다.

T^1	T^1	T^1	T^1	T^1	T^1
T^A-1	T^A-21	T^A-41	T^N-12	T^N-32	T^P-20
T^A-2	T^A-22	T^A-42	T^N-13	T^P-1	T^P-21
T^A-3	T^A-23	T^A-43	T^N-14	T^P-2	T^P-22
T^A-4	T^A-24	T^A-44	T^N-15	T^P-3	T^P-23
T^A-5	T^A-25	T^A-45	T^N-16	T^P-4	T^P-24
T^A-6	T^A-26	T^A-46	T^N-17	T^P-5	T^P-25
T^A-7	T^A-27	T^A-47	T^N-18	T^P-6	T^P-26
T^A-8	T^A-28	T^A-48	T^N-19	T^P-7	T^P-27
T^A-9	T^A-29	T^A-49	T^N-20	T^P-8	T^P-28
T^A-10	T^A-30	T^N-1	T^N-21	T^P-9	T^P-29
T^A-11	T^A-31	T^N-2	T^N-22	T^P-10	T^P-30
T^A-12	T^A-32	T^N-3	T^N-23	T^P-11	T^P-31
T^A-13	T^A-33	T^N-4	T^N-24	T^P-12	T^P-32
T^A-14	T^A-34	T^N-5	T^N-25	T^P-13	T^P-33
T^A-15	T^A-35	T^N-6	T^N-26	T^P-14	T^P-34
T^A-16	T^A-36	T^N-7	T^N-27	T^P-15	T^P-35
T^A-17	T^A-37	T^N-8	T^N-28	T^P-16	
T^A-18	T^A-38	T^N-9	T^N-29	T^P-17	
T^A-19	T^A-39	T^N-10	T^N-30	T^P-18	
T^A-20	T^A-40	T^N-11	T^N-31	T^P-19	

Z^3 는 $-CH_2CH_2-$ 이 다.

T^1	T^1	T^1	T^1	T^1	T^1
T^A-1	T^A-21	T^A-41	T^N-12	T^N-32	T^P-20
T^A-2	T^A-22	T^A-42	T^N-13	T^P-1	T^P-21
T^A-3	T^A-23	T^A-43	T^N-14	T^P-2	T^P-22
T^A-4	T^A-24	T^A-44	T^N-15	T^P-3	T^P-23
T^A-5	T^A-25	T^A-45	T^N-16	T^P-4	T^P-24
T^A-6	T^A-26	T^A-46	T^N-17	T^P-5	T^P-25
T^A-7	T^A-27	T^A-47	T^N-18	T^P-6	T^P-26
T^A-8	T^A-28	T^A-48	T^N-19	T^P-7	T^P-27
T^A-9	T^A-29	T^A-49	T^N-20	T^P-8	T^P-28
T^A-10	T^A-30	T^N-1	T^N-21	T^P-9	T^P-29

[1079]

Z^3 는 $-CH_2CH_2-$ 이 다.

T^1	T^1	T^1	T^1	T^1	T^1
T^A-11	T^A-31	T^N-2	T^N-22	T^P-10	T^P-30
T^A-12	T^A-32	T^N-3	T^N-23	T^P-11	T^P-31
T^A-13	T^A-33	T^N-4	T^N-24	T^P-12	T^P-32
T^A-14	T^A-34	T^N-5	T^N-25	T^P-13	T^P-33
T^A-15	T^A-35	T^N-6	T^N-26	T^P-14	T^P-34
T^A-16	T^A-36	T^N-7	T^N-27	T^P-15	T^P-35
T^A-17	T^A-37	T^N-8	T^N-28	T^P-16	
T^A-18	T^A-38	T^N-9	T^N-29	T^P-17	
T^A-19	T^A-39	T^N-10	T^N-30	T^P-18	
T^A-20	T^A-40	T^N-11	T^N-31	T^P-19	

[1080]

Cc1cc(C(F)(F)F)nn1CC(=O)N2CCCCC2c3nc4c(s3)c5ccccc5C4O2C(F)(F)F

[1083]

$T^A \cong T^A-18$ 이다.

Z^3	Z^3	Z^3	Z^3	Z^3	Z^3
NH	C(=O)	S	-CH(CH ₃)-	-CH=C(CH ₃)-	-CH ₂ O-
NCH ₃	C(=S)	SO ₂	-CH(CF ₃)-	-OCH ₂ -	

 $T^\Lambda \cong T^\Lambda\text{-}36$ 이 다.

Z^3	Z^3	Z^3	Z^3	Z^3	Z^3
NH	C(=O)	S	-CHCH ₃ -	-CH=C(CH ₃)-	-CH ₂ O-
NCH ₃	C(=S)	SO ₂	-CHCF ₃ -	-OCH ₂ -	

T^A 는 T^A -49 이다.

Z^3	Z^3	Z^3	Z^3	Z^3	Z^3
NH	C(=O)	S	-CHCH ₃ -	-CH=C(CH ₃)-	-CH ₂ O-
NCH ₃	C(=S)	SO ₂	-CHCF ₃ -	-OCH ₂ -	

[1084]

[1085]

R1a[Z5]=N=C(N1CCXC1G)W1

[1086]

[1087]

- 175 -

R^1 는 2,5-다이메틸페닐이고, Z^1 는 직접 결합이며, W^1 은 메톡시이고, X는 X^1 이며, G는 G-1이다.

J	J	J	J	J	J
J-29-1	J-29-11	J-29-21	J-29-31	J-29-41	J-29-51
J-29-2	J-29-12	J-29-22	J-29-32	J-29-42	J-29-52
J-29-3	J-29-13	J-29-23	J-29-33	J-29-43	J-29-53
J-29-4	J-29-14	J-29-24	J-29-34	J-29-44	J-29-54
J-29-5	J-29-15	J-29-25	J-29-35	J-29-45	J-29-55
J-29-6	J-29-16	J-29-26	J-29-36	J-29-46	J-29-58
J-29-7	J-29-17	J-29-27	J-29-37	J-29-47	J-29-59
J-29-8	J-29-18	J-29-28	J-29-38	J-29-48	J-29-60
J-29-9	J-29-19	J-29-29	J-29-39	J-29-49	
J-29-10	J-29-20	J-29-30	J-29-40	J-29-50	

R^1 는 2,5-다이클로로페닐이고, Z^1 는 직접 결합이며, W^1 은 MeO 이고, X는 X^1 이며, G는 G-1이다.

J	J	J	J	J	J
J-29-1	J-29-11	J-29-21	J-29-31	J-29-41	J-29-51
J-29-2	J-29-12	J-29-22	J-29-32	J-29-42	J-29-52
J-29-3	J-29-13	J-29-23	J-29-33	J-29-43	J-29-53
J-29-4	J-29-14	J-29-24	J-29-34	J-29-44	J-29-54
J-29-5	J-29-15	J-29-25	J-29-35	J-29-45	J-29-55
J-29-6	J-29-16	J-29-26	J-29-36	J-29-46	J-29-58
J-29-7	J-29-17	J-29-27	J-29-37	J-29-47	J-29-59
J-29-8	J-29-18	J-29-28	J-29-38	J-29-48	J-29-60
J-29-9	J-29-19	J-29-29	J-29-39	J-29-49	
J-29-10	J-29-20	J-29-30	J-29-40	J-29-50	

[1088]

R^{1a}는 3,5-다이메틸피라졸이고, Z⁵는 직접 결합이며, W¹은 MeO 이고, X는 X¹이며, G는 G-1 이다.

J	J	J	J	J	J
J-29-1	J-29-11	J-29-21	J-29-31	J-29-41	J-29-51
J-29-2	J-29-12	J-29-22	J-29-32	J-29-42	J-29-52
J-29-3	J-29-13	J-29-23	J-29-33	J-29-43	J-29-53
J-29-4	J-29-14	J-29-24	J-29-34	J-29-44	J-29-54
J-29-5	J-29-15	J-29-25	J-29-35	J-29-45	J-29-55
J-29-6	J-29-16	J-29-26	J-29-36	J-29-46	J-29-58
J-29-7	J-29-17	J-29-27	J-29-37	J-29-47	J-29-59
J-29-8	J-29-18	J-29-28	J-29-38	J-29-48	J-29-60
J-29-9	J-29-19	J-29-29	J-29-39	J-29-49	
J-29-10	J-29-20	J-29-30	J-29-40	J-29-50	

R^{1a}는 5-메틸-3-트라이플루오로메틸피라졸이고, Z⁵는 직접 결합이며, W¹은 MeO 이고, X는 X¹이며, G는 G-1 이다.

J	J	J	J	J	J
J-29-1	J-29-11	J-29-21	J-29-31	J-29-41	J-29-51
J-29-2	J-29-12	J-29-22	J-29-32	J-29-42	J-29-52
J-29-3	J-29-13	J-29-23	J-29-33	J-29-43	J-29-53
J-29-4	J-29-14	J-29-24	J-29-34	J-29-44	J-29-54
J-29-5	J-29-15	J-29-25	J-29-35	J-29-45	J-29-55
J-29-6	J-29-16	J-29-26	J-29-36	J-29-46	J-29-58
J-29-7	J-29-17	J-29-27	J-29-37	J-29-47	J-29-59
J-29-8	J-29-18	J-29-28	J-29-38	J-29-48	J-29-60
J-29-9	J-29-19	J-29-29	J-29-39	J-29-49	
J-29-10	J-29-20	J-29-30	J-29-40	J-29-50	

R^{1a}는 2,5-다이메틸페닐이고, Z⁵는 직접 결합이며, W¹은 MeS 이고, X는 X¹이며, G는 G-1 이다.

J	J	J	J	J	J
J-29-1	J-29-11	J-29-21	J-29-31	J-29-41	J-29-51
J-29-2	J-29-12	J-29-22	J-29-32	J-29-42	J-29-52
J-29-3	J-29-13	J-29-23	J-29-33	J-29-43	J-29-53
J-29-4	J-29-14	J-29-24	J-29-34	J-29-44	J-29-54
J-29-5	J-29-15	J-29-25	J-29-35	J-29-45	J-29-55

[1089]

R^{1a} 는 2,5-다이메틸페닐이고, Z^5 는 직접 결합이며, W^1 은 MeS 이고, X는 X^1 이며, G는 G-1이다.

J	J	J	J	J	J
J-29-6	J-29-16	J-29-26	J-29-36	J-29-46	J-29-58
J-29-7	J-29-17	J-29-27	J-29-37	J-29-47	J-29-59
J-29-8	J-29-18	J-29-28	J-29-38	J-29-48	J-29-60
J-29-9	J-29-19	J-29-29	J-29-39	J-29-49	
J-29-10	J-29-20	J-29-30	J-29-40	J-29-50	

R^{1a} 는 2,5-다이클로로페닐이고, Z^5 는 직접 결합이며, W^1 은 MeS 이고, X는 X^1 이며, G는 G-1이다.

J	J	J	J	J	J
J-29-1	J-29-11	J-29-21	J-29-31	J-29-41	J-29-51
J-29-2	J-29-12	J-29-22	J-29-32	J-29-42	J-29-52
J-29-3	J-29-13	J-29-23	J-29-33	J-29-43	J-29-53
J-29-4	J-29-14	J-29-24	J-29-34	J-29-44	J-29-54
J-29-5	J-29-15	J-29-25	J-29-35	J-29-45	J-29-55
J-29-6	J-29-16	J-29-26	J-29-36	J-29-46	J-29-58
J-29-7	J-29-17	J-29-27	J-29-37	J-29-47	J-29-59
J-29-8	J-29-18	J-29-28	J-29-38	J-29-48	J-29-60
J-29-9	J-29-19	J-29-29	J-29-39	J-29-49	
J-29-10	J-29-20	J-29-30	J-29-40	J-29-50	

R^{1a} 는 3,5-다이메틸피라졸이고, Z^5 는 직접 결합이며, W^1 은 MeS 이고, X는 X^1 이며, G는 G-1이다.

J	J	J	J	J	J
J-29-1	J-29-11	J-29-21	J-29-31	J-29-41	J-29-51
J-29-2	J-29-12	J-29-22	J-29-32	J-29-42	J-29-52
J-29-3	J-29-13	J-29-23	J-29-33	J-29-43	J-29-53
J-29-4	J-29-14	J-29-24	J-29-34	J-29-44	J-29-54
J-29-5	J-29-15	J-29-25	J-29-35	J-29-45	J-29-55
J-29-6	J-29-16	J-29-26	J-29-36	J-29-46	J-29-58
J-29-7	J-29-17	J-29-27	J-29-37	J-29-47	J-29-59
J-29-8	J-29-18	J-29-28	J-29-38	J-29-48	J-29-60
J-29-9	J-29-19	J-29-29	J-29-39	J-29-49	
J-29-10	J-29-20	J-29-30	J-29-40	J-29-50	

[1090]

R^{1a}는 5-메틸-3-트라이플루오로메틸피라졸이고, Z⁵는 직접 결합이며, W¹은 MeS¹이고, X는 X¹이며, G는 G-1이다.

J	J	J	J	J	J
J-29-1	J-29-11	J-29-21	J-29-31	J-29-41	J-29-51
J-29-2	J-29-12	J-29-22	J-29-32	J-29-42	J-29-52
J-29-3	J-29-13	J-29-23	J-29-33	J-29-43	J-29-53
J-29-4	J-29-14	J-29-24	J-29-34	J-29-44	J-29-54
J-29-5	J-29-15	J-29-25	J-29-35	J-29-45	J-29-55
J-29-6	J-29-16	J-29-26	J-29-36	J-29-46	J-29-58
J-29-7	J-29-17	J-29-27	J-29-37	J-29-47	J-29-59
J-29-8	J-29-18	J-29-28	J-29-38	J-29-48	J-29-60
J-29-9	J-29-19	J-29-29	J-29-39	J-29-49	
J-29-10	J-29-20	J-29-30	J-29-40	J-29-50	

R^{1a}는 2,5-다이메틸페닐이고, Z⁵는 직접 결합이며, W¹은 NH₂¹이고, X는 X¹이며, G는 G-1이다.

J	J	J	J	J	J
J-29-1	J-29-11	J-29-21	J-29-31	J-29-41	J-29-51
J-29-2	J-29-12	J-29-22	J-29-32	J-29-42	J-29-52
J-29-3	J-29-13	J-29-23	J-29-33	J-29-43	J-29-53
J-29-4	J-29-14	J-29-24	J-29-34	J-29-44	J-29-54
J-29-5	J-29-15	J-29-25	J-29-35	J-29-45	J-29-55
J-29-6	J-29-16	J-29-26	J-29-36	J-29-46	J-29-58
J-29-7	J-29-17	J-29-27	J-29-37	J-29-47	J-29-59
J-29-8	J-29-18	J-29-28	J-29-38	J-29-48	J-29-60
J-29-9	J-29-19	J-29-29	J-29-39	J-29-49	
J-29-10	J-29-20	J-29-30	J-29-40	J-29-50	

R^{1a}는 2,5-다이클로로페닐이고, Z⁵는 직접 결합이며, W¹은 NH₂¹이고, X는 X¹이며, G는 G-1이다.

J	J	J	J	J	J
J-29-1	J-29-11	J-29-21	J-29-31	J-29-41	J-29-51
J-29-2	J-29-12	J-29-22	J-29-32	J-29-42	J-29-52
J-29-3	J-29-13	J-29-23	J-29-33	J-29-43	J-29-53
J-29-4	J-29-14	J-29-24	J-29-34	J-29-44	J-29-54

[1091]

R^{1a} 는 2,5-다이클로로페닐이고, Z^5 는 직접 결합이며, W^1 은 NH_2 이고, X 는 X^1 이며, G 는 G-1이다.

J	J	J	J	J	J
J-29-5	J-29-15	J-29-25	J-29-35	J-29-45	J-29-55
J-29-6	J-29-16	J-29-26	J-29-36	J-29-46	J-29-58
J-29-7	J-29-17	J-29-27	J-29-37	J-29-47	J-29-59
J-29-8	J-29-18	J-29-28	J-29-38	J-29-48	J-29-60
J-29-9	J-29-19	J-29-29	J-29-39	J-29-49	
J-29-10	J-29-20	J-29-30	J-29-40	J-29-50	

R^{1a} 는 3,5-다이메틸피라졸이고, Z^5 는 직접 결합이며, W^1 은 NH_2 이고, X 는 X^1 이며, G 는 G-1이다.

J	J	J	J	J	J
J-29-1	J-29-11	J-29-21	J-29-31	J-29-41	J-29-51
J-29-2	J-29-12	J-29-22	J-29-32	J-29-42	J-29-52
J-29-3	J-29-13	J-29-23	J-29-33	J-29-43	J-29-53
J-29-4	J-29-14	J-29-24	J-29-34	J-29-44	J-29-54
J-29-5	J-29-15	J-29-25	J-29-35	J-29-45	J-29-55
J-29-6	J-29-16	J-29-26	J-29-36	J-29-46	J-29-58
J-29-7	J-29-17	J-29-27	J-29-37	J-29-47	J-29-59
J-29-8	J-29-18	J-29-28	J-29-38	J-29-48	J-29-60
J-29-9	J-29-19	J-29-29	J-29-39	J-29-49	
J-29-10	J-29-20	J-29-30	J-29-40	J-29-50	

R^{1a} 는 5-메틸-3-트라이플루오로메틸피라졸이고, Z^5 는 직접 결합이며, W^1 은 NH_2 이고, X 는 X^1 이며, G 는 G-1이다.

J	J	J	J	J	J
J-29-1	J-29-11	J-29-21	J-29-31	J-29-41	J-29-51
J-29-2	J-29-12	J-29-22	J-29-32	J-29-42	J-29-52
J-29-3	J-29-13	J-29-23	J-29-33	J-29-43	J-29-53
J-29-4	J-29-14	J-29-24	J-29-34	J-29-44	J-29-54
J-29-5	J-29-15	J-29-25	J-29-35	J-29-45	J-29-55
J-29-6	J-29-16	J-29-26	J-29-36	J-29-46	J-29-58
J-29-7	J-29-17	J-29-27	J-29-37	J-29-47	J-29-59
J-29-8	J-29-18	J-29-28	J-29-38	J-29-48	J-29-60
J-29-9	J-29-19	J-29-29	J-29-39	J-29-49	

[1092]

R^{1a} 는 5-메틸-3-트라이플루오로메틸피라졸이고, Z^5 는 직접 결합이며, W^1 은 NH_2 이고, X 는 X^1 이며, G 는 G-1이다.

J	J	J	J	J	J
J-29-10	J-29-20	J-29-30	J-29-40	J-29-50	

R^{1a} 는 2,5-다이메틸페닐이고, Z^5 는 직접 결합이며, W^1 은 $NHOH$ 이고, X 는 X^1 이며, G 는 G-1이다.

J ¹	J	J	J	J	J
J-29-1	J-29-11	J-29-21	J-29-31	J-29-41	J-29-51
J-29-2	J-29-12	J-29-22	J-29-32	J-29-42	J-29-52
J-29-3	J-29-13	J-29-23	J-29-33	J-29-43	J-29-53
J-29-4	J-29-14	J-29-24	J-29-34	J-29-44	J-29-54
J-29-5	J-29-15	J-29-25	J-29-35	J-29-45	J-29-55
J-29-6	J-29-16	J-29-26	J-29-36	J-29-46	J-29-58
J-29-7	J-29-17	J-29-27	J-29-37	J-29-47	J-29-59
J-29-8	J-29-18	J-29-28	J-29-38	J-29-48	J-29-60
J-29-9	J-29-19	J-29-29	J-29-39	J-29-49	
J-29-10	J-29-20	J-29-30	J-29-40	J-29-50	

R^{1a} 는 2,5-다이클로로페닐이고, Z^5 는 직접 결합이며, W^1 은 $NHOH$ 이고, X 는 X^1 이며, G 는 G-1이다.

J	J	J	J	J	J
J-29-1	J-29-11	J-29-21	J-29-31	J-29-41	J-29-51
J-29-2	J-29-12	J-29-22	J-29-32	J-29-42	J-29-52
J-29-3	J-29-13	J-29-23	J-29-33	J-29-43	J-29-53
J-29-4	J-29-14	J-29-24	J-29-34	J-29-44	J-29-54
J-29-5	J-29-15	J-29-25	J-29-35	J-29-45	J-29-55
J-29-6	J-29-16	J-29-26	J-29-36	J-29-46	J-29-58
J-29-7	J-29-17	J-29-27	J-29-37	J-29-47	J-29-59
J-29-8	J-29-18	J-29-28	J-29-38	J-29-48	J-29-60
J-29-9	J-29-19	J-29-29	J-29-39	J-29-49	
J-29-10	J-29-20	J-29-30	J-29-40	J-29-50	

[1093]

R^{1a} 는 3,5-다이메틸피라졸이고, Z^5 는 직접 결합이며, W^1 은 NHOH 이고, X는 X^1 이며, G는 G-1 이다.

J	J	J	J	J	J
J-29-1	J-29-11	J-29-21	J-29-31	J-29-41	J-29-51
J-29-2	J-29-12	J-29-22	J-29-32	J-29-42	J-29-52
J-29-3	J-29-13	J-29-23	J-29-33	J-29-43	J-29-53
J-29-4	J-29-14	J-29-24	J-29-34	J-29-44	J-29-54
J-29-5	J-29-15	J-29-25	J-29-35	J-29-45	J-29-55
J-29-6	J-29-16	J-29-26	J-29-36	J-29-46	J-29-58
J-29-7	J-29-17	J-29-27	J-29-37	J-29-47	J-29-59
J-29-8	J-29-18	J-29-28	J-29-38	J-29-48	J-29-60
J-29-9	J-29-19	J-29-29	J-29-39	J-29-49	
J-29-10	J-29-20	J-29-30	J-29-40	J-29-50	

R^{1a} 는 5-메틸-3-트라이플루오로메틸피라졸이고, Z^5 는 직접 결합이며, W^1 은 NHOH 이고, X는 X^1 이며, G는 G-1 이다.

J	J	J	J	J	J
J-29-1	J-29-11	J-29-21	J-29-31	J-29-41	J-29-51
J-29-2	J-29-12	J-29-22	J-29-32	J-29-42	J-29-52
J-29-3	J-29-13	J-29-23	J-29-33	J-29-43	J-29-53
J-29-4	J-29-14	J-29-24	J-29-34	J-29-44	J-29-54
J-29-5	J-29-15	J-29-25	J-29-35	J-29-45	J-29-55
J-29-6	J-29-16	J-29-26	J-29-36	J-29-46	J-29-58
J-29-7	J-29-17	J-29-27	J-29-37	J-29-47	J-29-59
J-29-8	J-29-18	J-29-28	J-29-38	J-29-48	J-29-60
J-29-9	J-29-19	J-29-29	J-29-39	J-29-49	
J-29-10	J-29-20	J-29-30	J-29-40	J-29-50	

R^{1a} 는 2,5-다이메틸페닐이고, Z^5 는 직접 결합이며, W^1 은 NHOMe 이고, X는 X^1 이며, G는 G-1 이다.

J	J	J	J	J	J
J-29-1	J-29-11	J-29-21	J-29-31	J-29-41	J-29-51
J-29-2	J-29-12	J-29-22	J-29-32	J-29-42	J-29-52
J-29-3	J-29-13	J-29-23	J-29-33	J-29-43	J-29-53
J-29-4	J-29-14	J-29-24	J-29-34	J-29-44	J-29-54
J-29-5	J-29-15	J-29-25	J-29-35	J-29-45	J-29-55

[1094]

R^{1a} 는 2,5-다이메틸페닐이고, Z^5 는 직 접 결함이며, W^1 은 NHOMe 이고, X 는 X^1 이며, G 는 G-1 이다.

J	J	J	J	J	J
J-29-6	J-29-16	J-29-26	J-29-36	J-29-46	J-29-58
J-29-7	J-29-17	J-29-27	J-29-37	J-29-47	J-29-59
J-29-8	J-29-18	J-29-28	J-29-38	J-29-48	J-29-60
J-29-9	J-29-19	J-29-29	J-29-39	J-29-49	
J-29-10	J-29-20	J-29-30	J-29-40	J-29-50	

R^{1a} 는 2,5-다이클로로페닐이고, Z^5 는 직 접 결함이며, W^1 은 NHOMe 이고, X 는 X^1 이며, G 는 G-1 이다.

J	J	J	J	J	J
J-29-1	J-29-11	J-29-21	J-29-31	J-29-41	J-29-51
J-29-2	J-29-12	J-29-22	J-29-32	J-29-42	J-29-52
J-29-3	J-29-13	J-29-23	J-29-33	J-29-43	J-29-53
J-29-4	J-29-14	J-29-24	J-29-34	J-29-44	J-29-54
J-29-5	J-29-15	J-29-25	J-29-35	J-29-45	J-29-55
J-29-6	J-29-16	J-29-26	J-29-36	J-29-46	J-29-58
J-29-7	J-29-17	J-29-27	J-29-37	J-29-47	J-29-59
J-29-8	J-29-18	J-29-28	J-29-38	J-29-48	J-29-60
J-29-9	J-29-19	J-29-29	J-29-39	J-29-49	
J-29-10	J-29-20	J-29-30	J-29-40	J-29-50	

R^{1a} 는 3,5-다이메틸피라졸이고, Z^5 는 직 접 결함이며, W^1 은 NHOMe 이고, X 는 X^1 이며, G 는 G-1 이다.

J	J	J	J	J	J
J-29-1	J-29-11	J-29-21	J-29-31	J-29-41	J-29-51
J-29-2	J-29-12	J-29-22	J-29-32	J-29-42	J-29-52
J-29-3	J-29-13	J-29-23	J-29-33	J-29-43	J-29-53
J-29-4	J-29-14	J-29-24	J-29-34	J-29-44	J-29-54
J-29-5	J-29-15	J-29-25	J-29-35	J-29-45	J-29-55
J-29-6	J-29-16	J-29-26	J-29-36	J-29-46	J-29-58
J-29-7	J-29-17	J-29-27	J-29-37	J-29-47	J-29-59
J-29-8	J-29-18	J-29-28	J-29-38	J-29-48	J-29-60
J-29-9	J-29-19	J-29-29	J-29-39	J-29-49	
J-29-10	J-29-20	J-29-30	J-29-40	J-29-50	

[1095]

R^{1a}는 5-메틸-3-트라이플루오로메틸피라졸이고, Z⁵는 직접 결합이며, W¹은 NHOMe 이고, X는 X¹이며, G는 G-1 이다.

J	J	J	J	J	J
J-29-1	J-29-11	J-29-21	J-29-31	J-29-41	J-29-51
J-29-2	J-29-12	J-29-22	J-29-32	J-29-42	J-29-52
J-29-3	J-29-13	J-29-23	J-29-33	J-29-43	J-29-53
J-29-4	J-29-14	J-29-24	J-29-34	J-29-44	J-29-54
J-29-5	J-29-15	J-29-25	J-29-35	J-29-45	J-29-55
J-29-6	J-29-16	J-29-26	J-29-36	J-29-46	J-29-58
J-29-7	J-29-17	J-29-27	J-29-37	J-29-47	J-29-59
J-29-8	J-29-18	J-29-28	J-29-38	J-29-48	J-29-60
J-29-9	J-29-19	J-29-29	J-29-39	J-29-49	
J-29-10	J-29-20	J-29-30	J-29-40	J-29-50	

R^{1a}는 2,5-다이메틸페닐이고, Z⁵는 직접 결합이며, W¹은 NHCN 이고, X는 X¹이며, G는 G-1 이다.

J	J	J	J	J	J
J-29-1	J-29-11	J-29-21	J-29-31	J-29-41	J-29-51
J-29-2	J-29-12	J-29-22	J-29-32	J-29-42	J-29-52
J-29-3	J-29-13	J-29-23	J-29-33	J-29-43	J-29-53
J-29-4	J-29-14	J-29-24	J-29-34	J-29-44	J-29-54
J-29-5	J-29-15	J-29-25	J-29-35	J-29-45	J-29-55
J-29-6	J-29-16	J-29-26	J-29-36	J-29-46	J-29-58
J-29-7	J-29-17	J-29-27	J-29-37	J-29-47	J-29-59
J-29-8	J-29-18	J-29-28	J-29-38	J-29-48	J-29-60
J-29-9	J-29-19	J-29-29	J-29-39	J-29-49	
J-29-10	J-29-20	J-29-30	J-29-40	J-29-50	

R^{1a}는 2,5-다이클로로페닐이고, Z⁵는 직접 결합이며, W¹은 NHCN 이고, X는 X¹이며, G는 G-1 이다.

J	J	J ¹	J	J	J
J-29-1	J-29-11	J-29-21	J-29-31	J-29-41	J-29-51
J-29-2	J-29-12	J-29-22	J-29-32	J-29-42	J-29-52
J-29-3	J-29-13	J-29-23	J-29-33	J-29-43	J-29-53
J-29-4	J-29-14	J-29-24	J-29-34	J-29-44	J-29-54

[1096]

R^{1a} 는 2,5-다이클로로페닐이고, Z^5 는 직접 결합이며, W^1 은 NHCN 이고, X 는 X^1 이며, G 는 G-1 이다.

J	J	J ¹	J	J	J
J-29-5	J-29-15	J-29-25	J-29-35	J-29-45	J-29-55
J-29-6	J-29-16	J-29-26	J-29-36	J-29-46	J-29-58
J-29-7	J-29-17	J-29-27	J-29-37	J-29-47	J-29-59
J-29-8	J-29-18	J-29-28	J-29-38	J-29-48	J-29-60
J-29-9	J-29-19	J-29-29	J-29-39	J-29-49	
J-29-10	J-29-20	J-29-30	J-29-40	J-29-50	

R^{1a} 는 3,5-다이메틸피라졸이고, Z^5 는 직접 결합이며, W^1 은 NHCN 이고, X 는 X^1 이며, G 는 G-1 이다.

J	J	J	J	J	J
J-29-1	J-29-11	J-29-21	J-29-31	J-29-41	J-29-51
J-29-2	J-29-12	J-29-22	J-29-32	J-29-42	J-29-52
J-29-3	J-29-13	J-29-23	J-29-33	J-29-43	J-29-53
J-29-4	J-29-14	J-29-24	J-29-34	J-29-44	J-29-54
J-29-5	J-29-15	J-29-25	J-29-35	J-29-45	J-29-55
J-29-6	J-29-16	J-29-26	J-29-36	J-29-46	J-29-58
J-29-7	J-29-17	J-29-27	J-29-37	J-29-47	J-29-59
J-29-8	J-29-18	J-29-28	J-29-38	J-29-48	J-29-60
J-29-9	J-29-19	J-29-29	J-29-39	J-29-49	
J-29-10	J-29-20	J-29-30	J-29-40	J-29-50	

R^{1a} 는 5-메틸-3-트라이플루오로메틸피라졸이고, Z^5 는 직접 결합이며, W^1 은 NHCN 이고, X 는 X^1 이며, G 는 G-1 이다.

J	J	J	J	J	J
J-29-1	J-29-11	J-29-21	J-29-31	J-29-41	J-29-51
J-29-2	J-29-12	J-29-22	J-29-32	J-29-42	J-29-52
J-29-3	J-29-13	J-29-23	J-29-33	J-29-43	J-29-53
J-29-4	J-29-14	J-29-24	J-29-34	J-29-44	J-29-54
J-29-5	J-29-15	J-29-25	J-29-35	J-29-45	J-29-55
J-29-6	J-29-16	J-29-26	J-29-36	J-29-46	J-29-58
J-29-7	J-29-17	J-29-27	J-29-37	J-29-47	J-29-59
J-29-8	J-29-18	J-29-28	J-29-38	J-29-48	J-29-60
J-29-9	J-29-19	J-29-29	J-29-39	J-29-49	

[1097]

R^{1a} 는 5-메틸-3-트라이플루오로메틸피라졸이고, Z^5 는 직접 결합이며, W^1 은 NHCN 이고, X 는 X^1 이며, G 는 G-1 이다.

J	J	J	J	J	J
J-29-10	J-29-20	J-29-30	J-29-40	J-29-50	

R^{1a} 는 2,5-다이메틸페닐이고, Z^5 는 직접 결합이며, W^1 은 MeO 이고, X 는 X^2 이며, G 는 G-1 이다.

J	J	J	J	J	J
J-29-1	J-29-11	J-29-21	J-29-31	J-29-41	J-29-51
J-29-2	J-29-12	J-29-22	J-29-32	J-29-42	J-29-52
J-29-3	J-29-13	J-29-23	J-29-33	J-29-43	J-29-53
J-29-4	J-29-14	J-29-24	J-29-34	J-29-44	J-29-54
J-29-5	J-29-15	J-29-25	J-29-35	J-29-45	J-29-55
J-29-6	J-29-16	J-29-26	J-29-36	J-29-46	J-29-58
J-29-7	J-29-17	J-29-27	J-29-37	J-29-47	J-29-59
J-29-8	J-29-18	J-29-28	J-29-38	J-29-48	J-29-60
J-29-9	J-29-19	J-29-29	J-29-39	J-29-49	
J-29-10	J-29-20	J-29-30	J-29-40	J-29-50	

R^{1a} 는 2,5-다이메틸페닐이고, Z^5 는 직접 결합이며, W^1 은 MeS 이고, X 는 X^2 이며, G 는 G-1 이다.

J	J	J	J	J	J
J-29-1	J-29-11	J-29-21	J-29-31	J-29-41	J-29-51
J-29-2	J-29-12	J-29-22	J-29-32	J-29-42	J-29-52
J-29-3	J-29-13	J-29-23	J-29-33	J-29-43	J-29-53
J-29-4	J-29-14	J-29-24	J-29-34	J-29-44	J-29-54
J-29-5	J-29-15	J-29-25	J-29-35	J-29-45	J-29-55
J-29-6	J-29-16	J-29-26	J-29-36	J-29-46	J-29-58
J-29-7	J-29-17	J-29-27	J-29-37	J-29-47	J-29-59
J-29-8	J-29-18	J-29-28	J-29-38	J-29-48	J-29-60
J-29-9	J-29-19	J-29-29	J-29-39	J-29-49	
J-29-10	J-29-20	J-29-30	J-29-40	J-29-50	

[1098]

R^{1a} 는 2,5-다이메틸페닐이고, Z^5 는 직접 결합이며, W^1 은 NH_2 이고, X 는 X^2 이며, G 는 G-1이다.

J	J	J	J	J	J
J-29-1	J-29-11	J-29-21	J-29-31	J-29-41	J-29-51
J-29-2	J-29-12	J-29-22	J-29-32	J-29-42	J-29-52
J-29-3	J-29-13	J-29-23	J-29-33	J-29-43	J-29-53
J-29-4	J-29-14	J-29-24	J-29-34	J-29-44	J-29-54
J-29-5	J-29-15	J-29-25	J-29-35	J-29-45	J-29-55
J-29-6	J-29-16	J-29-26	J-29-36	J-29-46	J-29-58
J-29-7	J-29-17	J-29-27	J-29-37	J-29-47	J-29-59
J-29-8	J-29-18	J-29-28	J-29-38	J-29-48	J-29-60
J-29-9	J-29-19	J-29-29	J-29-39	J-29-49	
J-29-10	J-29-20	J-29-30	J-29-40	J-29-50	

R^{1a} 는 2,5-다이메틸페닐이고, Z^5 는 직접 결합이며, W^1 은 $NHOH$ 이고, X 는 X^2 이며, G 는 G-1이다.

J	J	J	J	J	J
J-29-1	J-29-11	J-29-21	J-29-31	J-29-41	J-29-51
J-29-2	J-29-12	J-29-22	J-29-32	J-29-42	J-29-52
J-29-3	J-29-13	J-29-23	J-29-33	J-29-43	J-29-53
J-29-4	J-29-14	J-29-24	J-29-34	J-29-44	J-29-54
J-29-5	J-29-15	J-29-25	J-29-35	J-29-45	J-29-55
J-29-6	J-29-16	J-29-26	J-29-36	J-29-46	J-29-58
J-29-7	J-29-17	J-29-27	J-29-37	J-29-47	J-29-59
J-29-8	J-29-18	J-29-28	J-29-38	J-29-48	J-29-60
J-29-9	J-29-19	J-29-29	J-29-39	J-29-49	
J-29-10	J-29-20	J-29-30	J-29-40	J-29-50	

R^{1a} 는 2,5-다이메틸페닐이고, Z^5 는 직접 결합이며, W^1 은 $NHOMe$ 이고, X 는 X^2 이며, G 는 G-1이다.

J	J	J	J	J	J
J-29-1	J-29-11	J-29-21	J-29-31	J-29-41	J-29-51
J-29-2	J-29-12	J-29-22	J-29-32	J-29-42	J-29-52
J-29-3	J-29-13	J-29-23	J-29-33	J-29-43	J-29-53
J-29-4	J-29-14	J-29-24	J-29-34	J-29-44	J-29-54
J-29-5	J-29-15	J-29-25	J-29-35	J-29-45	J-29-55

[1099]

R^{1a} 는 2,5-다이메틸페닐이고, Z^5 는 직접 결합이며, W^1 은 $NHOMe$ 이고, X 는 X^2 이며, G 는 $G-1$ 이다.

J	J	J	J	J	J
J-29-6	J-29-16	J-29-26	J-29-36	J-29-46	J-29-58
J-29-7	J-29-17	J-29-27	J-29-37	J-29-47	J-29-59
J-29-8	J-29-18	J-29-28	J-29-38	J-29-48	J-29-60
J-29-9	J-29-19	J-29-29	J-29-39	J-29-49	
J-29-10	J-29-20	J-29-30	J-29-40	J-29-50	

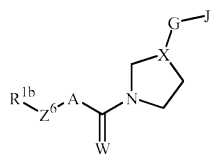
R^{1a} 는 2,5-다이메틸페닐이고, Z^5 는 직접 결합이며, W^1 은 $NHCN$ 이고, X 는 X^2 이며, G 는 $G-1$ 이다.

J	J	J	J	J	J
J-29-1	J-29-11	J-29-21	J-29-31	J-29-41	J-29-51
J-29-2	J-29-12	J-29-22	J-29-32	J-29-42	J-29-52
J-29-3	J-29-13	J-29-23	J-29-33	J-29-43	J-29-53
J-29-4	J-29-14	J-29-24	J-29-34	J-29-44	J-29-54
J-29-5	J-29-15	J-29-25	J-29-35	J-29-45	J-29-55
J-29-6	J-29-16	J-29-26	J-29-36	J-29-46	J-29-56
J-29-7	J-29-17	J-29-27	J-29-37	J-29-47	J-29-57
J-29-8	J-29-18	J-29-28	J-29-38	J-29-48	J-29-58
J-29-9	J-29-19	J-29-29	J-29-39	J-29-49	J-29-59
J-29-10	J-29-20	J-29-30	J-29-40	J-29-50	J-29-60

[1100]

[1101]

[표 13]



[1102]

[1103]

표 13에서, G (예를 들어, $G-1$) 및 J (예를 들어, $J-29-1$)의 구조는 상기 실시 형태에서 각각, 증거 2 및 A에 나타나있다. G 환의 일부의 경우에 결합된 치환기 R^{3a} 는 수소이다.

R^{1b}는 2,5-다이메틸페닐이고, Z⁶는 직접 결합이며, A는 C(=O)이고, W는 O이며, X는 X¹이고, G는 G-1이다.

J	J	J	J	J	J
J-29-1	J-29-11	J-29-21	J-29-31	J-29-41	J-29-51
J-29-2	J-29-12	J-29-22	J-29-32	J-29-42	J-29-52
J-29-3	J-29-13	J-29-23	J-29-33	J-29-43	J-29-53
J-29-4	J-29-14	J-29-24	J-29-34	J-29-44	J-29-54
J-29-5	J-29-15	J-29-25	J-29-35	J-29-45	J-29-55
J-29-6	J-29-16	J-29-26	J-29-36	J-29-46	J-29-58
J-29-7	J-29-17	J-29-27	J-29-37	J-29-47	J-29-59
J-29-8	J-29-18	J-29-28	J-29-38	J-29-48	J-29-60
J-29-9	J-29-19	J-29-29	J-29-39	J-29-49	
J-29-10	J-29-20	J-29-30	J-29-40	J-29-50	

R^{1b}는 2,5-다이클로로페닐이고, Z⁶는 직접 결합이며, A는 C(=O)이고, W는 O이며, X는 X¹이고, G는 G-1이다.

J	J	J	J	J	J
J-29-1	J-29-11	J-29-21	J-29-31	J-29-41	J-29-51
J-29-2	J-29-12	J-29-22	J-29-32	J-29-42	J-29-52
J-29-3	J-29-13	J-29-23	J-29-33	J-29-43	J-29-53
J-29-4	J-29-14	J-29-24	J-29-34	J-29-44	J-29-54
J-29-5	J-29-15	J-29-25	J-29-35	J-29-45	J-29-55
J-29-6	J-29-16	J-29-26	J-29-36	J-29-46	J-29-58
J-29-7	J-29-17	J-29-27	J-29-37	J-29-47	J-29-59
J-29-8	J-29-18	J-29-28	J-29-38	J-29-48	J-29-60
J-29-9	J-29-19	J-29-29	J-29-39	J-29-49	
J-29-10	J-29-20	J-29-30	J-29-40	J-29-50	

R^{1b}는 4,4,4-트라이플루오로부틸이고, Z⁶는 직접 결합이며, A는 C(=O)이고, W는 O이며, X는 X¹이고, G는 G-1이다.

J	J	J	J	J	J
J-29-1	J-29-11	J-29-21	J-29-31	J-29-41	J-29-51
J-29-2	J-29-12	J-29-22	J-29-32	J-29-42	J-29-52
J-29-3	J-29-13	J-29-23	J-29-33	J-29-43	J-29-53

[1104]

R^{1b}는 4,4,4-트라이플루오로부틸이고, Z⁶는 직접 결합이며, A는 C(=O)이고, W는 O이며, X는 X¹이고, G는 G-1이다.

J	J	J	J	J	J
J-29-4	J-29-14	J-29-24	J-29-34	J-29-44	J-29-54
J-29-5	J-29-15	J-29-25	J-29-35	J-29-45	J-29-55
J-29-6	J-29-16	J-29-26	J-29-36	J-29-46	J-29-58
J-29-7	J-29-17	J-29-27	J-29-37	J-29-47	J-29-59
J-29-8	J-29-18	J-29-28	J-29-38	J-29-48	J-29-60
J-29-9	J-29-19	J-29-29	J-29-39	J-29-49	
J-29-10	J-29-20	J-29-30	J-29-40	J-29-50	

R^{1b}는 i-프로필이고, Z⁶는 직접 결합이며, A는 NH이고, W는 O이며, X는 X¹이고, G는 G-1이다.

J	J	J	J	J	J
J-29-1	J-29-11	J-29-21	J-29-31	J-29-41	J-29-51
J-29-2	J-29-12	J-29-22	J-29-32	J-29-42	J-29-52
J-29-3	J-29-13	J-29-23	J-29-33	J-29-43	J-29-53
J-29-4	J-29-14	J-29-24	J-29-34	J-29-44	J-29-54
J-29-5	J-29-15	J-29-25	J-29-35	J-29-45	J-29-55
J-29-6	J-29-16	J-29-26	J-29-36	J-29-46	J-29-58
J-29-7	J-29-17	J-29-27	J-29-37	J-29-47	J-29-59
J-29-8	J-29-18	J-29-28	J-29-38	J-29-48	J-29-60
J-29-9	J-29-19	J-29-29	J-29-39	J-29-49	
J-29-10	J-29-20	J-29-30	J-29-40	J-29-50	

R^{1b}는 i-프로필이고, Z⁶는 직접 결합이며, A는 CH₂, 이고, W는 O이며, X는 X¹이고, G는 G-1이다.

J ¹	J	J	J	J	J
J-29-1	J-29-11	J-29-21	J-29-31	J-29-41	J-29-51
J-29-2	J-29-12	J-29-22	J-29-32	J-29-42	J-29-52
J-29-3	J-29-13	J-29-23	J-29-33	J-29-43	J-29-53
J-29-4	J-29-14	J-29-24	J-29-34	J-29-44	J-29-54
J-29-5	J-29-15	J-29-25	J-29-35	J-29-45	J-29-55
J-29-6	J-29-16	J-29-26	J-29-36	J-29-46	J-29-58
J-29-7	J-29-17	J-29-27	J-29-37	J-29-47	J-29-59
J-29-8	J-29-18	J-29-28	J-29-38	J-29-48	J-29-60

[1105]

R^{1b}는 i-프로필이고, Z⁶는 직접 결합이며, A는 CH₂, 이고, W는 O이며, X는 X¹이고, G는 G-1이다.

J ¹	J	J	J	J	J
J-29-9	J-29-19	J-29-29	J-29-39	J-29-49	
J-29-10	J-29-20	J-29-30	J-29-40	J-29-50	

R^{1b}는 i-프로필이고, Z⁶는 직접 결합이며, A는 CHOH 이고, W는 O이며, X는 X¹이고, G는 G-1이다.

J	J	J	J	J	J
J-29-1	J-29-11	J-29-21	J-29-31	J-29-41	J-29-51
J-29-2	J-29-12	J-29-22	J-29-32	J-29-42	J-29-52
J-29-3	J-29-13	J-29-23	J-29-33	J-29-43	J-29-53
J-29-4	J-29-14	J-29-24	J-29-34	J-29-44	J-29-54
J-29-5	J-29-15	J-29-25	J-29-35	J-29-45	J-29-55
J-29-6	J-29-16	J-29-26	J-29-36	J-29-46	J-29-58
J-29-7	J-29-17	J-29-27	J-29-37	J-29-47	J-29-59
J-29-8	J-29-18	J-29-28	J-29-38	J-29-48	J-29-60
J-29-9	J-29-19	J-29-29	J-29-39	J-29-49	
J-29-10	J-29-20	J-29-30	J-29-40	J-29-50	

R^{1b}는 3,3,3-트라이플루오로프로폭시이고, Z⁶는 직접 결합이며, A는 CH₂ 이고, W는 O이며, X는 X¹이고, G는 G-1이다.

J	J	J	J	J	J
J-29-1	J-29-11	J-29-21	J-29-31	J-29-41	J-29-51
J-29-2	J-29-12	J-29-22	J-29-32	J-29-42	J-29-52
J-29-3	J-29-13	J-29-23	J-29-33	J-29-43	J-29-53
J-29-4	J-29-14	J-29-24	J-29-34	J-29-44	J-29-54
J-29-5	J-29-15	J-29-25	J-29-35	J-29-45	J-29-55
J-29-6	J-29-16	J-29-26	J-29-36	J-29-46	J-29-58
J-29-7	J-29-17	J-29-27	J-29-37	J-29-47	J-29-59
J-29-8	J-29-18	J-29-28	J-29-38	J-29-48	J-29-60
J-29-9	J-29-19	J-29-29	J-29-39	J-29-49	
J-29-10	J-29-20	J-29-30	J-29-40	J-29-50	

[1106]

[1107]

제형/유효성

[1108]

본 발명의 화학식 1의 화합물 (또는 이의 N-옥사이드 또는 염)은 일반적으로 담체로서 작용하는 계면활성제, 고체 희석제 및 액체 희석제로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 적어도 하나의 추가 성분과 함께, 조성물, 즉, 제형 중의 살균제 활성 성분으로서 사용될 것이다. 화학식 1의 단서 조항 (a)의 배제 범위 내의 화합물도 사용될 수 있다. 제형 또는 조성물 성분은 활성 성분의 물리적 특성, 적용 방식 및 환경 인자, 예를 들어, 토양형, 수분 및 온도와 상응하도록 선택된다.

[1109]

유용한 제형은 액체 조성물 및 고체 조성물을 포함한다. 액체 조성물은 용액 (유제 (emulsifiable concentrate) 포함), 현탁제, 에멀전 (마이크로에멀전 및/또는 유현탁제 (suspoemulsion) 포함) 등을 포함하며, 이들은 임의로 젤로 증점될 수 있다. 수성 액체 조성물의 일반적인 유형은 액제 (soluble concentrate), 액상 수화제 (suspension concentrate), 캡슐 현탁제, 농축 에멀전, 마이크로에멀전 및 유현탁제이다. 비수성 액체 조성물의 일반적인 유형은 유제, 마이크로유제 (microemulsifiable concentrate), 분산성 액제 (dispersible concentrate) 및 오일 분산액이다.

[1110]

고체 조성물의 일반적인 유형은 분제 (dust), 분말, 과립, 펠릿, 환약, 향정 (pastille), 정제, 충전 필름 (종자 코팅 포함) 등이 있으며, 이들은 수분산성 ("습윤성") 또는 수용성일 수 있다. 필름 형성 용액 또는 유동성 현탁제로 형성되는 필름 및 코팅이 종자 처리에 특히 유용하다. 활성 성분은 (마이크로)캡슐화될 수 있으며, 추가로 현탁 제형 또는 고체 제형으로 형성될 수 있거나; 또는 활성 성분의 전체 제형은 캡슐화 (또는 "오버코팅")될 수 있다. 캡슐화는 활성 성분의 방출을 제어하거나 지연시킬 수 있다. 유화성 (emulsifiable) 과립은 유제 제형과 건조 과립 제형의 이점을 모두 갖추고 있다. 고강도 조성물은 주로 추가 제형화를 위한 중간체로

서 사용된다.

[1111] 분무형 제형은 전형적으로 분무 전에 적절한 매질에서 증량된다. 그러한 액체 및 고체 제형은 보통 물인 분무 매질에서 용이하게 희석되도록 제형화된다. 분무량 (Spray volume)은 헥타르 당 약 1 내지 수천 리터 범위일 수 있으나, 보다 전형적으로는 헥타르 당 약 10 내지 수백 리터 범위이다. 분무형 제형은 공중 또는 지상 적용에 의한 경엽 처리를 위해, 또는 식물의 생육 배지에로의 적용을 위해 물 또는 다른 적절한 매질과 탱크 혼합될 수 있다. 액체 및 건조 제형은 식재 동안에 점적 관개 시스템 내로 직접 계량되거나 도랑 내로 계량될 수 있다. 액체 및 고체 제형은 전신 흡수 (systemic uptake)를 통해 발육 중인 뿌리 및 다른 지하 식물 부분 및/또는 경엽을 보호하기 위해 식재 이전에 종자 처리로서 식물 종자 상에 적용될 수 있다.

[1112] 제형은 전형적으로 총 100 중량%가 되는 제형 표의 하기의 근사적인 범위 내에서 유효량의 활성 성분, 희석제 및 계면활성제를 함유할 것이다.

[1113] 제형 표

	제형 표		
	증량%		
	활성 성분	희석제	계면활성제
수분산성 및 수용성 과립, 정제 및 분말	0.001-90	0-99.999	0-15
오일 분산액, 현탁액, 에멀전, 용액 (유제 포함)	1-50	40-99	0-50
분제	1-25	70-99	0-5
과립 및 펠릿	0.001-95	5-99.999	0-15
고강도 조성물	90-99	0-10	0-2

[1114]

[1115] 고체 희석제는 예를 들어, 클레이, 예컨대 벤토나이트, 몬트모릴로나이트, 애터펄사이트 및 카올린, 석고, 셀룰로오스, 이산화탄, 산화아연, 전분, 텍스트린, 당 (예를 들어, 락토스, 수크로스), 실리카, 탭크, 운모, 규조토, 우레아, 탄산칼슘, 탄산나트륨 및 중탄산나트륨, 및 황산나트륨을 포함한다. 전형적인 고체 희석제는 문헌 [참조: Watkins et al., Handbook of Insecticide Dust Diluents and Carriers, 2nd Ed., Dorland Books, Caldwell, New Jersey]에 기재되어 있다.

[1116]

액체 희석제는 예를 들어, 물, N,N-다이메틸알칸아미드 (예를 들어, N,N-다이메틸포름아미드), 리모넨, 다이메틸 설펡사이드, N-알킬피롤리돈 (예를 들어, N-메틸피롤리돈), 에틸렌 글리콜, 트라이에틸렌 글리콜, 프로필렌 글리콜, 다이프로필렌 글리콜, 폴리프로필렌 글리콜, 프로필렌 카르보네이트, 부틸렌 카르보네이트, 파라핀 (예를 들어, 백색 광유, 노르말 파라핀, 아이소파라핀), 알킬벤젠, 알킬나프탈렌, 글리세린, 글리세롤 트리아세테이트, 소르비톨, 트리아세틴, 방향족 탄화수소, 탈방향족 (dearomatized) 지방족 화합물, 알킬벤젠, 알킬나프탈렌, 케톤, 예컨대 사이클로헥사논, 2-헵타논, 아이소프로판 및 4-하이드록시-4-메틸-2-펜타논, 아세테이트, 예컨대 아이소아밀 아세테이트, 헥실 아세테이트, 헵틸 아세테이트, 옥틸 아세테이트, 노닐 아세테이트, 트라이데실 아세테이트 및 아이소보르닐 아세테이트, 기타 에스테르, 예컨대 알킬화 락테이트 에스테르, 이염기성 에스테르 및 γ -부티로락톤, 및 직쇄상, 분지상, 포화 또는 불포화될 수 있는 알코올, 예컨대 메탄올, 에탄올, n-프로판올, 아이소프로판올, n-부탄올, 아이소부틸 알코올, n-헥산올, 2-에틸헥산올, n-옥탄올, 데칸올, 아이소데실 알코올, 아이소옥타데칸올, 세틸 알코올, 라우릴 알코올, 트라이데실 알코올, 올레일 알코올, 사이클로헥산올, 테트라하이드로푸르푸릴 알코올, 다이아세톤 알코올 및 벤질 알코올을 포함한다. 액체 희석제는 또한 포화 및 불포화 지방산의 글리세롤 에스테르 (전형적으로 C₆-C₂₂), 예컨대 식물 종자 및 과실유 (예를 들어, 올리브유, 피마자유, 아마인유, 참기름, 콘유 (옥수수 기름), 낙화생유, 해바라기씨유, 포도씨유, 홍화유, 면실유, 대두유, 채종유, 코코넛유 및 팜핵유), 동물성 지방 (예를 들어, 우지, 돈지, 라드, 간유, 어유), 및 이들의 혼합물을 포함한다. 액체 희석제는 또한 알킬화 지방산 (예를 들어, 메틸화, 에틸화, 부틸화)을 포함하며, 여기서 지방산은 식물원 및 동물원으로부터의 글리세롤 에스테르의 가수분해에 의해 얻어질 수 있으며, 증류에 의해 정제될 수 있다. 전형적인 액체 희석제는 문헌 [참조: Marsden, Solvents Guide, 2nd Ed., Interscience, New York, 1950]에 기재되어 있다.

[1117]

본 발명의 고체 및 액체 조성물은 종종 하나 이상의 계면활성제를 포함한다. 액체에 첨가될 때, 계면활성제 ("표면활성제"로도 공지됨)는 일반적으로 액체의 표면 장력을 변경시키며, 가장 흔히는 감소시킨다. 계면활성제 분자 내의 친수성 및 친유성 기의 성질에 따라, 계면활성제는 습윤제, 분산제, 유화제 또는 소포제로서 유용

할 수 있다.

- [1118] 계면활성제는 비이온성, 음이온성 또는 양이온성으로 분류될 수 있다. 본 발명의 조성물에 유용한 비이온성 계면활성제로는 알코올 알콕실레이트, 예컨대 천연 및 합성 알코올 (분지상 또는 직쇄상일 수 있음) 계이며, 알코올 및 에틸렌 옥사이드, 프로필렌 옥사이드, 부틸렌 옥사이드 또는 이들의 혼합물로부터 제조된 알코올 알콕실레이트; 아민 에톡실레이트, 알칸올아미드 및 에톡실화 알칸올아미드; 알콕실화 트라이글리세리드, 예컨대 에톡실화 대두유, 피마자유 및 채종유; 알킬페놀 알콕실레이트, 예컨대 옥틸페놀 에톡실레이트, 노닐페놀 에톡실레이트, 다이노닐 페놀 에톡실레이트 및 도데실 페놀 에톡실레이트 (페놀과 에틸렌 옥사이드, 프로필렌 옥사이드, 부틸렌 옥사이드 또는 이들의 혼합물로부터 제조됨); 에틸렌 옥사이드 또는 프로필렌 옥사이드로부터 제조된 블록 중합체 및 역 블록 중합체 (말단 블록이 프로필렌 옥사이드로부터 제조됨); 에톡실화 지방산; 에톡실화 지방 에스테르 및 오일; 에톡실화 메틸 에스테르; 에톡실화 트라이스티릴페놀 (에틸렌 옥사이드, 프로필렌 옥사이드, 부틸렌 옥사이드 또는 이들의 혼합물로부터 제조된 것들을 포함); 지방산 에스테르, 글리세롤 에스테르, 라놀린 계 유도체, 폴리에톡실레이트 에스테르, 예컨대 폴리에톡실화 소르비탄 지방산 에스테르, 폴리에톡실화 소르비톨 지방산 에스테르 및 폴리에톡실화 글리세롤 지방산 에스테르; 기타 소르비탄 유도체, 예컨대 소르비탄 에스테르; 폴리머 계면활성제, 예컨대 랜덤 공중합체, 블록 공중합체, 알키드 peg (폴리에틸렌 글리콜) 수지, 그라프트 또는 콤 (comb) 중합체 및 스타 중합체; 폴리에틸렌 글리콜 (peg); 폴리에틸렌 글리콜 지방산 에스테르; 실리콘계 계면활성제; 및 당 유도체, 예컨대 수크로스 에스테르, 알킬 폴리글리코사이드 및 알킬 폴리사카라이드를 들 수 있으나, 이들에 한정되지 않는다.
- [1119] 유용한 음이온성 계면활성제로는 알킬아릴 설포산 및 이의 염; 카르복실화 알코올 또는 알킬페놀 에톡실레이트; 다이페닐 설포네이트 유도체; 리그닌 및 리그닌 유도체, 예컨대 리그노설포네이트; 말레산 또는 석신산 또는 이들의 무수물; 올레핀 설포네이트; 포스페이트 에스테르, 예컨대 알코올 알콕실레이트의 포스페이트 에스테르, 알킬페놀 알콕실레이트의 포스페이트 에스테르 및 스티릴 페놀 에톡실레이트의 포스페이트 에스테르; 단백질계 계면활성제; 사르코신 유도체; 스티릴 페놀 에테르 설페이트; 오일 및 지방산의 설페이트 및 설포네이트; 에톡실화 알킬페놀의 설페이트 및 설포네이트; 알코올의 설페이트; 에톡실화 알코올의 설페이트; 아민 및 아미드의 설포네이트, 예컨대 N,N-알킬타우레이트; 벤젠, 쿠멘, 톨루엔, 자일렌, 및 도데실벤젠 및 트라이데실벤젠의 설포네이트; 축합 나프탈렌의 설포네이트; 나프탈렌 및 알킬 나프탈렌의 설포네이트; 분별 증류된 (fractionated) 석유의 설포네이트; 설포석시나메이트; 및 설포석시네이트 및 그 유도체, 예컨대 다이알킬 설포석시네이트 염을 들 수 있으나, 이들에 한정되지 않는다.
- [1120] 유용한 양이온성 계면활성제로는 아미드 및 에톡실화 아미드; 아민, 예컨대 N-알킬 프로판디아민, 트라이프로필렌트리아민 및 다이프로필렌테트라민, 및 에톡실화 아민, 에톡실화 다이아민 및 프로폭실화 아민 (아민과 에틸렌 옥사이드, 프로필렌 옥사이드, 부틸렌 옥사이드 또는 이들의 혼합물로부터 제조됨); 아민 염, 예컨대 아민 아세테이트 및 다이아민 염; 사차 암모늄 염, 예컨대 사차 염, 에톡실화 사차 염 및 이중사차 (diquaternary) 염; 및 아민 옥사이드, 예컨대 알킬다이메틸아민 옥사이드 및 비스-(2-하이드록시에틸)-알킬아민 옥사이드를 들 수 있으나, 이들에 한정되지 않는다.
- [1121] 비이온성 계면활성제와 음이온성 계면활성제의 혼합물, 또는 비이온성 계면활성제와 양이온성 계면활성제의 혼합물도 본 발명의 조성물에 유용하다. 비이온성, 음이온성 및 양이온성 계면활성제 및 이들의 추천 용도는 문헌 [참조: McCutcheon's Emulsifiers and Detergents, annual American and International Editions published by McCutcheon's Division, The Manufacturing Confectioner Publishing Co.]; 문헌 [참조: Sisely and Wood, Encyclopedia of Surface Active Agents, Chemical Publ. Co., Inc., New York, 1964]; 및 문헌 [참조: A. S. Davidson and B. Milwidsky, Synthetic Detergents, Seventh Edition, John Wiley and Sons, New York, 1987]을 비롯한 다양한 간행된 참조문헌에 개시되어 있다.
- [1122] 본 발명의 조성물은 또한 제형 조제로서 당업자에게 알려진 제형 보조제 및 첨가제를 함유할 수 있다. 그러한 제형 보조제 및 첨가제는 pH (완충제), 가공 중의 발포 (소포제, 예를 들어, 폴리오르가노실록산 (예를 들어, 로도실 (Rhodorsil)® 416)), 활성 성분의 침강 (현탁제), 점도 (요변성 증점제), 용기내 (in-container) 미생물 생장 (항균제), 제품 동결 (부동제), 색상 (염료/안료 분산액 (예를 들어, 프로-이제드 (Pro-lzed)® 컬러런트 레드 (Colorant Red)), 위시-오프 (필름 형성제 또는 스티커), 중발 (중발 지연제), 및 다른 제형 속성을 제어할 수 있다. 필름 형성제는 예를 들어, 폴리비닐 아세테이트, 폴리비닐 아세테이트 공중합체, 폴리비닐피롤리돈-비닐 아세테이트 공중합체, 폴리비닐 알코올, 폴리비닐 알코올 공중합체 및 왁스를 포함한다. 제형 보조제 및 첨가제의 예로는 문헌 [참조: McCutcheon's Volume 2: Functional Materials, annual International and North American editions published by McCutcheon's Division, The Manufacturing Confectioner Publishing

Co.]; 및 국제특허 공개 WO 03/024222호에 열거된 것들을 들 수 있다.

[1123]

유제를 비롯한 용액은 성분들을 단순히 혼합함으로써 제조될 수 있다. 유제로서 사용하려는 액체 조성물의 용매가 수분혼화성인 경우에는, 물로 희석시에 활성제 함유 용매를 유화시키기 위하여 유화제가 전형적으로 첨가된다. 2,000 μm 이하의 입경을 가진 활성 성분 슬러리는 매체 밀을 이용하여 습식 밀링하여, 평균 직경이 3 μm 미만인 입자를 얻을 수 있다. 수성 슬러리는 완성된 액상 수화제로 제조되거나 (예를 들어, 미국 특허 제 3,060,084호 참조) 또는 분무 건조에 의해 추가로 가공되어 수분산성 과립을 형성할 수 있다. 건조 제형은 통상 건조 밀링 공정을 필요로 하며, 이것에 의해 2 내지 10 μm 범위의 평균 입경이 형성된다. 분체 및 분말은 블렌딩 및 통상, 해머 밀 또는 유체 에너지 밀에서와 같은 분쇄에 의해 제조될 수 있다. 과립 및 펠릿은 활성 물질을 미리 형성된 과립 담체 상에 분무함으로써 또는 응집 기술에 의해 제조될 수 있다. 문헌 [Browning, "Agglomeration", Chemical Engineering, December 4, 1967, pp 147-48], 문헌 [Perry's Chemical Engineer's Handbook, 4th Ed., McGraw-Hill, New York, 1963, pages 8-57 및 그 이하] 및 국제특허 공개 WO 91/13546호를 참조한다. 펠릿은 미국 특허 제4,172,714호에 개시된 바와 같이 제조될 수 있다. 수분산성 및 수용성 과립은 미국 특허 제4,144,050호, 제3,920,442호 및 독일 특허 제3,246,493호에 교시된 바와 같이 제조될 수 있다. 정제는 미국 특허 제5,180,587호, 제5,232,701호 및 제5,208,030호에 교시된 바와 같이 제조될 수 있다. 필름은 영국 특허 제2,095,558호 및 미국 특허 제3,299,566호에 교시된 바와 같이 제조될 수 있다.

[1124]

제형화 분야에 관한 추가의 정보에 대해서는, 문헌 [T. S. Woods, "The Formulator's Toolbox - Product Forms for Modern Agriculture" in Pesticide Chemistry and Bioscience, The Food-Environment Challenge, T. Brooks and T. R. Roberts, Eds., Proceedings of the 9th International Congress on Pesticide Chemistry, The Royal Society of Chemistry, Cambridge, 1999, pp. 120-133]을 참조한다. 또한 미국 특허 제3,235,361호, 컬럼 6, 16행 내지 컬럼 7, 19행 및 실시예 10 내지 41; 미국 특허 제3,309,192호, 컬럼 5, 43행 내지 컬럼 7, 62행 및 실시예 8, 12, 15, 39, 41, 52, 53, 58, 132, 138 내지 140, 162 내지 164, 166, 167 및 169 내지 182; 미국 특허 제2,891,855호, 컬럼 3, 66행 내지 컬럼 5, 17행 및 실시예 1 내지 4; 문헌 [Klingman, Weed Control as a Science, John Wiley and Sons, Inc., New York, 1961, pp 81-96]; 문헌 [Hance et al., Weed Control Handbook, 8th Ed., Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1989]; 및 문헌 [Developments in formulation technology, PJB Publications, Richmond, UK, 2000]을 참조한다.

[1125]

하기 실시예에서, 모든 백분율은 중량 기준이며, 모든 제형은 통상적인 방식으로 제조된다. 화합물 번호는 인덱스 표 A 내지 B의 화합물을 말한다. 더 이상 상술하지 않고도, 상술한 설명을 이용하는 당업자라면 본 발명을 최대한으로 이용할 수 있을 것으로 여겨진다. 그러므로, 하기 실시예는 단순히 예시적인 것으로 그리고 어떠한 임의의 방식으로든 본 개시 내용을 한정하지 않는 것으로 해석되어야 한다. 달리 표시되는 경우를 제외하고는 백분율은 중량 기준이다.

[1126]

실시예 A

고강도 농축물	
화합물 25	98.5%
실리카 에어로겔	0.5%
합성 비결정질 미세 실리카	1.0%

[1127]

[1128]

실시예 B

습윤성 분말	
화합물 34	65.0%
도데실페놀 폴리에틸렌 글리콜 에테르	2.0%
소듐 리그닌설포네이트	4.0%
소듐 실리코알루미네이트	6.0%
몬트모릴로나이트 (소성됨)	23.0%

[1129]

[1130]

실시예 C

과립		
화합물 44		10.0%
에터펄자이트 과립 (저 휘발성 물질, 0.71/0.30 mm; U.S.S. No. 25-50 시브 (sieve))		90.0%

[1131]

[1132]

실시예 D

암출 펠릿		
화합물 75		25.0%
무수 황산나트륨		10.0%
조제의 칼슘 리그닌설포네이트		5.0%
소듐 알킬나프탈렌설포네이트		1.0%
칼슘/마그네슘 벤토나이트		59.0%

[1133]

[1134]

실시예 E

유제		
화합물 77		10.0%
폴리옥시에틸렌 소르비톨 헥솔레이트		20.0%
C ₆ -C ₁₀ 지방산 메틸에스테르		70.0%

[1135]

[1136]

실시예 F

마이크로에멀전		
화합물 67		5.0%
폴리비닐피롤리돈-비닐 아세테이트 공중합체		30.0%
알킬폴리글리코사이드		30.0%
글리세릴 모노올레이트		15.0%
물		20.0%

[1137]

[1138]

실시예 G

종자 처리		
화합물 52		20.00%
폴리비닐피롤리돈-비닐 아세테이트 공중합체		5.00%
몬탄산 왁스		5.00%
칼슘 리그닌설포네이트		1.00%
폴리옥시에틸렌/폴리옥시프로필렌 블록 공중합체		1.00%
스테아릴 알코올 (POE 20)		2.00%
폴리오르가노실란		0.20%
착색제 적색 염료		0.05%
물		65.75%

[1139]

[1140]

제형, 예컨대, 상기 제형 표의 제형은 전형적으로 편리한 적용에 적합한 수성 조성물을 형성하도록 물로 희석된다. 식물 또는 이의 부분에 직접 적용하기 위한 수성 조성물 (예를 들어, 스프레이 탱크 조성물)은 전형적으로 본 발명의 화합물(들)의 적어도 약 1 ppm 이상 (예를 들어, 1 ppm 내지 300 ppm)이다.

[1141]

본 발명의 화합물은 식물병 방제제로서 유용하다. 따라서, 본 발명은 또한 유효량의 본 발명의 화합물 또는 상기 화합물을 함유하는 살균제 조성물을 보호할 식물 또는 이의 부분, 또는 보호할 식물 종자에 적용하는 것을 포함하는, 균류 식물 병원체에 의한 식물병을 방제하는 방법을 포함한다. 본 발명의 화합물 및/또는 조성물은 담자균류 (Basidiomycete), 자낭균류 (Ascomycete), 난균류 (Oomycete) 및 불완전 균류 (Deuteromycete)의 광범위한 균류 식물 병원체에 의한 병해 방제를 제공한다. 이들은 광범위한 식물병, 특히 관상용 작물, 잔디, 야채, 농작물, 곡물, 및 과실 작물의 경엽 병원체를 방제하는데 유효하다. 이러한 병원체는 파이토프토라 (Phytophthora) 병, 예컨대 파이토프토라 인페스탄스 (Phytophthora infestans), 파이토프토라 메가스페르마 (Phytophthora megasperma), 파이토프토라 파라시티카 (Phytophthora parasitica), 파이토프토라 신나모미

(*Phytophthora cinnamomi*) 및 파이토프토라 캡사이시 (*Phytophthora capsici*), 피티움 (*Pythium*) 병, 예컨대 피티움 아파니테르마툼 (*Pythium aphanidermatum*), 및 페로노스포라세아에 패밀리 (*Peronosporaceae* family)의 병, 예컨대 플라스모파라 비티콜라 (*Plasmopara viticola*), 페로노스포라 스피시즈 (*Peronospora* spp.) (페로노스포라 타바시나 (*Peronospora tabacina*) 및 페로노스포라 파라시티카 (*Peronospora parasitica*) 포함), 슈도페로노스포라 스피시즈 (*Pseudoperonospora* spp.) (슈도페로노스포라 쿠벤시스 (*Pseudoperonospora cubensis*) 포함) 및 브레미아 락투카에 (*Bremia lactucae*)를 포함하는 난균강; 알테르나리아 (*Alternaria*) 병, 예컨대 알테르나리아 솔라니 (*Alternaria solani*) 및 알테르나리아 브라시카에 (*Alternaria brassicae*), 귀그나르디아 (*Guignardia*) 병, 예컨대 귀그나르디아 비드웰 (*Guignardia bidwell*), 벤투리아 (*Venturia*) 병, 예컨대 벤투리아 이나에퀼리스 (*Venturia inaequalis*), 셉토리아 (*Septoria*) 병, 예컨대 셉토리아 노도룸 (*Septoria nodorum*) 및 셉토리아 트리티시 (*Septoria tritici*), 흰가루병, 예컨대 에리시페 스피시즈 (*Erysiphe* spp.) (에리시페 그라미니스 (*Erysiphe graminis*) 및 에리시페 폴리고니 (*Erysiphe polygoni*) 포함), 운시놀라 네카투르 (*Uncinula necatur*), 스파에로테카 풀리게나 (*Sphaerotheca fuliginea*) 및 포도스파에라 류코트리카 (*Podosphaera leucotricha*), 슈도세르코스포렐라 헤르포르트코이데스 (*Pseudocercospora herpotrichoides*), 보트리티스 (*Botrytis*) 병, 예컨대 보트리티스 시네레아 (*Botrytis cinerea*), 몬닐리니아 프룩티콜라 (*Monilinia fructicola*), 스크레로티니아 (*Sclerotinia*) 병, 예컨대 스크레로티니아 스크레로티오룸 (*Sclerotinia sclerotiorum*), 마그나포르테 그리세아 (*Magnaporthe grisea*), 포몹시스 비티콜라 (*Phomopsis viticola*), 헬민토스포리움 (*Helminthosporium*) 병, 예컨대 헬민토스포리움 트리티시 레펜티스 (*Helminthosporium tritici repentis*), 피레노포라 테레스 (*Pyrenophora teres*), 안트라크노세 (*anthracnose*) 병, 예컨대 글로메렐라 (*Glomerella*) 또는 콜레토티리쿰 스피시즈 (*Colletotrichum* spp.) (예컨대, 콜레토티리쿰 그라미니콜라 (*Colletotrichum graminicola*) 및 콜레토티리쿰 오르비쿨라레 (*Colletotrichum orbiculare*)), 및 가에우만노마이세스 그라미니스 (*Gaeumannomyces graminis*)를 포함하는 자낭균류 (*Ascomycetes*); 푸시니아 스피시즈 (*Puccinia* spp.) (예컨대 푸시니아 레콘디타 (*Puccinia recondita*), 푸시니아 스트리이포르미스 (*Puccinia striiformis*), 푸시니아 호르데이 (*Puccinia hordei*), 푸시니아 그라미니스 (*Puccinia graminis*) 및 푸시니아 아라키디스 (*Puccinia arachidis*)), 헤밀레이아 바스타트릭스 (*Hemileia vastatrix*) 및 파콥소라 파키리지 (*Phakopsora pachyrhizi*)에 의한 녹병 (*rust disease*)을 포함하는 담자균류 (*Basidiomycetes*); 리조크토니아 스피시즈 (*Rhizoctonia* spp.) (예컨대, 리조크토니아 솔라니 (*Rhizoctonia solani*))를 포함하는 다른 병원체; 푸사리움 (*Fusarium*) 병, 예컨대 푸사리움 로세움 (*Fusarium roseum*), 푸사리움 그라미네아룸 (*Fusarium graminearum*) 및 푸사리움 옥시스포룸 (*Fusarium oxysporum*); 베르티실리움 달리아에 (*Verticillium dahliae*); 스크레로티움 롤프시 (*Sclerotium rolfsii*); 린코스포리움 세칼리스 (*Rhynchosporium secalis*); 세르코스포리디움 페르소나툼 (*Cercosporidium personatum*), 세르코스포라 아라키디콜라 (*Cercospora arachidicola*) 및 세르코스포라 베티콜라 (*Cercospora beticola*); 및 이들 병원체와 근연 관계에 있는 기타 속 (*genus*) 및 종을 포함한다. 조성물 또는 배합물은 이들의 살균 활성 이외에도, 박테리아, 예컨대 에르위니아 아밀로보라 (*Erwinia amylovora*), 크산토모나스 캄페스트리스 (*Xanthomonas campestris*), 슈도모나스 시린가에 (*Pseudomonas syringae*), 및 다른 근연 종에 대한 활성도 갖는다.

[1142] 식물병 방제는 통상 유효량의 본 발명의 화합물을 감염-전이나 감염-후에 보호할 식물의 부분, 예컨대 뿌리, 줄기, 경엽, 열매, 종자, 덩이 줄기 또는 구근, 또는 보호할 식물이 생육하고 있는 배지 (토양 또는 샌드)에 적용함으로써 달성된다. 화합물은 또한 종자 및 종자에서 발생하는 모종을 보호하도록 종자에 적용될 수 있다. 화합물은 또한 식물을 처리하도록 관개 용수를 통해 적용될 수 있다.

[1143] 이들 화합물의 적용량 (*rate of application*)은 다수의 환경 인자에 의해 영향을 받을 수 있으며, 실제 사용 조건하에 결정되어야 한다. 경엽은 통상 활성 성분 약 1 g/ha 미만 내지 약 5,000 g/ha의 비율로 처리되는 경우에 보호될 수 있다. 종자 및 모종은 통상 종자가 종자 1 킬로그램 당 약 0.1 내지 약 10 g의 비율로 처리되는 경우에 보호될 수 있다.

[1144] 본 발명의 화합물은 또한 살균제, 살충제, 살선충제, 살세균제 (*bactericide*), 진드기 구충제, 제초제, 제초제 완화제, 생장 조절제, 예컨대 곤충 탈피 억제제 (*insect molting inhibitor*) 및 발근 촉진제 (*rooting stimulant*), 불임화제, 신호 화학물질 (*semiochemicals*), 방충제, 유인 물질, 페로몬, 섭식 촉진 물질, 식물 영양소, 다른 생물 활성 화합물 또는 곤충병원성 세균, 곤충병원 바이러스 또는 곤충병원균을 비롯한 하나 이상의 다른 생물 활성 화합물 또는 생물 활성제와 혼합되어, 훨씬 더 광범위한 농업 보호를 부여하는 다성분 농약을 생성할 수 있다. 따라서, 본 발명은 또한 살균적 유효량의 화학식 1의 화합물 및 생물학적 유효량의 적어도 하나의 추가의 생물 활성 화합물 또는 생물 활성제를 포함하는 조성물에 관한 것으로, 추가로 계면활성제, 고체 희석제 또는 액체 희석제 중 적어도 하나를 포함할 수 있다. 다른 생물 활성 화합물 또는 생물 활성제는 계면

활성제, 고체 또는 액체 희석제 중 적어도 하나를 포함하는 조성물 중에서 제형화될 수 있다. 본 발명의 혼합물에 관해서는, 하나 이상의 다른 생물 활성 화합물 또는 생물 활성제는 프리믹스 (premix)를 형성하도록 화학식 1의 화합물과 함께 제형화될 수 있거나, 하나 이상의 다른 생물 활성 화합물 또는 생물 활성제는 화학식 1의 화합물과는 별도로 제형화될 수 있으며, 제형은 적용 전에 배합되거나 (예를 들어, 스프레이 탱크 중에서), 연속하여 적용된다.

[1145]

화학식 1의 화합물 이외에도, 부류 (1) 메틸 벤즈이미다졸 카르바메이트 (MBC) 살균제; (2) 다이카르복시이미드 살균제; (3) 탈메틸화 저해제 (DMI) 살균제; (4) 페닐아미드 살균제; (5) 아민/모르폴린 살균제; (6) 인지질 생합성 저해제 살균제; (7) 카르복시아미드 살균제; (8) 하이드록시(2-아미노-)피리미딘 살균제; (9) 아닐리노피리미딘 살균제; (10) N-페닐 카르바메이트 살균제; (11) 퀴논 아웃사이드 (outside) 저해제 (QoI) 살균제; (12) 페닐피롤 살균제; (13) 퀴놀린 살균제; (14) 지질 과산화 저해제 살균제; (15) 멜라닌 생합성 저해제-환원 효소 (MBI-R) 살균제; (16) 멜라닌 생합성 저해제-탈수 효소 (MBI-D) 살균제; (17) 하이드록시아닐리드 살균제; (18) 스쿠알렌-에폭시다아제 저해제 살균제; (19) 폴리옥신 살균제; (20) 페닐우레아 살균제; (21) 퀴논 인사이드 (inside) 저해제 (QiI) 살균제; (22) 벤즈아미드 살균제; (23) 에노피라누론산 (enopyranuronic acid) 항생제 살균제; (24) 핵소피라노실 항생제 살균제; (25) 글루코피라노실 항생제: 단백질 합성 살균제; (26) 글루코피라노실 항생제: 트레할라아제 및 이노시톨 생합성 살균제; (27) 시아노아세트아미드옥심 살균제; (28) 카르바메이트 살균제; (29) 산화적 인산화 언커플링 (uncoupling) 살균제; (30) 유기 주석 살균제; (31) 카르복실산 살균제; (32) 헤테로 방향족 살균제; (33) 포스포네이트 살균제; (34) 프탈람산 (phthalamic acid) 살균제; (35) 벤조트리아진 살균제; (36) 벤젠-설폰아미드 살균제; (37) 피리다진은 살균제; (38) 티오펜-카르복시아미드 살균제; (39) 피리미딘아미드 살균제; (40) 카르복실산 아미드 (CAA) 살균제; (41) 테트라사이클린 항생제 살균제; (42) 티오펜카르바메이트 살균제; (43) 벤즈아미드 살균제; (44) 숙주 식물 방어 유도 살균제; (45) 멀티사이트 접촉 활성 살균제; (46) 부류 (1) 내지 (45) 이외의 살균제; 및 부류 (1) 내지 (46)의 화합물의 염으로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 적어도 하나의 살균제 화합물을 포함하는 조성물에 주목해야 한다.

[1146]

이들 살균제 화합물 부류에 대한 추가의 설명이 하기에 주어진다.

[1147]

(1) "메틸 벤즈이미다졸 카르바메이트 (MBC) 살균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 1)는 미소관 중합 (microtubule assembly) 시에 β -튜불린에 결합함으로써, 유사 분열을 저해한다. 미소관 중합 저해는 세포 분열, 세포 내의 수송 및 세포 구조를 방해할 수 있다. 메틸 벤즈이미다졸 카르바메이트 살균제로는 벤즈이미다졸 및 티오파네이트 살균제를 들 수 있다. 벤즈이미다졸로는 베노밀, 카르벤다짐, 푸베리다졸 및 티아벤다졸을 들 수 있다. 티오파네이트로는 티오파네이트 및 티오파네이트-메틸을 들 수 있다.

[1148]

(2) "다이카르복시이미드 살균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 2)는 NADH 사이토크롬 c 환원 효소 저해를 통해 균류에서의 지질 과산화를 저해하는데 제시된다. 이의 예로는 클로졸리네이트, 이프로디온, 프로사이미돈 및 빈클로졸린을 들 수 있다.

[1149]

(3) "탈메틸화 저해제 (DMI) 살균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 3)는 스테롤 생성에 중요한 역할을 하는 C14-탈메틸화 효소를 저해한다. 스테롤, 예컨대 에르고스테롤은 기능 세포벽의 발육에 필수적인 막 구조 및 막 기능에 필요하다. 따라서, 이들 살균제에 노출되면, 감수성 균류의 비정상 성장을 초래하여, 결국은 감수성 균류의 사멸을 가져온다. DMI 살균제는 몇 가지의 화학적 분류로 나뉘어진다: 아졸 (트라이아졸 및 이미다졸 포함), 피리미딘, 피페라진 및 피리딘. 트라이아졸로는 아자코나졸, 비터타놀, 브로무코나졸, 사이프로코나졸, 디페노코나졸, 디니코나졸 (디니코나졸-M 포함), 에폭시코나졸, 펜부코나졸, 플루퀴코나졸, 플루실라졸, 플루트리아폴, 헥사코나졸, 이미벤코나졸, 이프코나졸, 메트코나졸, 마이클로부타닐, 펜코나졸, 프로피코나졸, 프로티오키코나졸, 퀴코나졸, 시메코나졸, 테부코나졸, 테트라코나졸, 트라이아디메폰, 트라이아디메놀, 트라이티코나졸 및 유니코나졸을 들 수 있다. 이미다졸로는 클로트리마졸, 이마잘릴, 옥스포코나졸, 프로클로라즈, 페푸라조에이트 및 트라이플루미졸을 들 수 있다. 피리미딘으로는 페나리몰 및 누아리몰을 들 수 있다. 피페라진으로는 트리포린을 들 수 있다. 피리딘으로는 피리페녹스를 들 수 있다. 생화학적 연구에 의하면, 상기에 언급된 살균제 전부가 문헌 [참조: K. H. Kuck et al., Modern Selective Fungicides - Properties, Applications and Mechanisms of Action, H. Lyr (Ed.), Gustav Fischer Verlag: New York, 1995, 205-258]에 기재된 DMI 살균제임을 알 수 있다.

[1150]

(4) "페닐아미드 살균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 4)는 난균류에 있어서의 RNA 폴리메라아제의 특이적 저해제이다. 이들 살균제에 노출된 감수성 균류는 우리딘을 rRNA에 혼입하는 능력이 감소된다. 감수성 균류의 성장 및 발육은 이러한 부류의 살균제에 노출시킴으로써 저지된다. 페닐아미드 살균제

로는 아실알라닌, 옥사졸리딘 및 부티로락톤 살균제를 들 수 있다. 아실알라닌으로는 베날락실, 베날락실-M, 푸랄락실, 메탈락실 및 메탈락실-M/메페녹삼을 들 수 있다. 옥사졸리딘으로는 옥사디실을 들 수 있다. 부티로락톤으로는 오프레이스를 들 수 있다.

[1151] (5) "아민/모르폴린 살균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 5)는 스테롤 생합성 경로 내의 2개의 표적 부위, $\Delta^8 \rightarrow \Delta^7$ 아이소메라아제 및 Δ^{14} 환원 효소를 저해한다. 스테롤, 예컨대 에르고스테롤은 기능 세포벽의 발육에 필수적인 막 구조 및 막 기능에 필요하다. 따라서, 이들 살균제에 노출되면, 감수성 균류의 비정상 성장을 초래하여, 결국은 감수성 균류의 사멸을 가져온다. 아민/모르폴린 살균제 (비 DMI (non-DMI) 스테롤 생합성 저해제로도 공지됨)로는 모르폴린, 피페리딘 및 스피로케탈-아민 살균제를 들 수 있다. 모르폴린으로는 알디모르프, 도데모르프, 펜프로피모르프, 트라이데모르프 및 트라이모르파미드를 들 수 있다. 피페리딘으로는 펜프로피딘 및 피페랄린을 들 수 있다. 스피로케탈-아민으로는 스피록사민을 들 수 있다.

[1152] (6) "인지질 생합성 저해제 살균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 6)는 인지질 생합성에 영향을 미침으로써 균류 성장을 저해한다. 인지질 생합성 살균제로는 포스포로티올레이트 및 다이티올란 살균제를 들 수 있다. 포스포로티올레이트로는 에디펜포스, 이프로벤포스 및 피라조포스를 들 수 있다. 다이티올란으로는 아이스포로티올란을 들 수 있다.

[1153] (7) "카르복스아미드 살균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 7)는 석신산 탈수소효소로 명명되는 크레브스 회로 (TCA 회로)의 중요한 효소를 방해함으로써 복합체 II (석신산 탈수소효소) 균류 호흡을 저해한다. 호흡 저해에 의해, 균류가 ATP 생성하는 것을 저지하므로, 균류의 성장 및 번식을 저해한다. 카르복스아미드 살균제로는 벤즈아미드, 푸란 카르복스아미드, 옥사티인 (oxathiin) 카르복스아미드, 티아졸 카르복스아미드, 피라졸 카르복스아미드 및 피리딘 카르복스아미드를 들 수 있다. 벤즈아미드로는 베노다닐, 플루톨라닐 및 메프로닐을 들 수 있다. 푸란 카르복스아미드로는 펜푸람을 들 수 있다. 옥사티인 카르복스아미드로는 카르복신 및 옥시카르복신을 들 수 있다. 티아졸 카르복스아미드로는 티플루자미드를 들 수 있다. 피라졸 카르복스아미드로는 푸라메트피르, 펜티오피라드, 빅사펜, N-[2-(1S,2R)-[1,1'-바이사이클로프로필]-2-일페닐]-3-(다이플루오로메틸)-1-메틸-1H-피라졸-4-카르복스아미드 및 N-[2-(1,3-다이메틸부틸)페닐]-5-플루오로-1,3-다이메틸-1H-피라졸-4-카르복스아미드를 들 수 있다. 피리딘 카르복스아미드로는 보스칼리드를 들 수 있다.

[1154] (8) "하이드록시(2-아미노-)피리미딘 살균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 8)는 아데노신 데아미나아제 저해에 의해 핵산 합성을 저해한다. 이의 예로는 부피리메이트, 디메티리몰 및 에티리몰을 들 수 있다.

[1155] (9) "아닐리노피리미딘 살균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 9)는 아미노산 메티오닌의 생합성을 저해하고, 감염 중에 식물 세포를 용해시키는 가수분해 효소의 분비를 방해하는 것으로 제시된다. 이의 예로는 사이프로디닐, 메파니피림 및 피리메타닐을 들 수 있다.

[1156] (10) "N-페닐 카르바메이트 살균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 10)는 β -튜블린에 결합하여, 미소관 중합을 방해함으로써, 유사 분열을 저해한다. 미소관 중합 저해는 세포 분열, 세포 내의 수송 및 세포 구조를 방해할 수 있다. 이의 예로는 디에토펜카르를 들 수 있다.

[1157] (11) "퀴논 아웃사이드 저해제 (QoI) 살균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 11)는 유비퀴놀 산화 효소에 영향을 미침으로써 균류의 복합체 III 미토콘드리아 호흡을 저해한다. 유비퀴놀 산화는 균류의 미토콘드리아 내막에 위치하는 사이토크롬 bc_1 복합체의 "퀴논 아웃사이드" (Q_o) 부위에서 저지된다. 미토콘드리아 호흡 저해는 정상적인 균류 성장 및 발육을 저지시킨다. 퀴논 아웃사이드 저해제 살균제 (스트로빌루린 살균제로도 공지됨)로는 메톡시아크릴레이트, 메톡시카르바메이트, 옥시미노아세테이트, 옥시미노아세트아미드, 옥사졸리딘디온, 다이하이드로다이옥사진, 이미다졸리논 및 벤질카르바메이트 살균제를 들 수 있다. 메톡시아크릴레이트로는 아족시스트로빈, 에네스트로부린 (SYP-Z071) 및 피록시스트로빈을 들 수 있다. 메톡시카르바메이트로는 피라클로스트로빈을 들 수 있다. 옥시미노아세테이트로는 크레속심-메틸 및 트라이플록시스트로빈을 들 수 있다. 옥시미노아세트아미드로는 디록시스트로빈, 메토미노스트로빈, 오리사스트로빈, α -[메톡시이미노]-N-메틸-2-[[[1-[3-(트라이플루오로메틸)페닐]에톡시]이미노]메틸]벤젠아세트아미드 및 2-[[[3-(2,6-다이클로로페닐)-1-메틸-2-프로펜-1-일리덴]아미노]옥시]메틸]- α -(메톡시이미노)-N-메틸벤젠아세트아미드를 들 수 있다. 옥사졸리딘디온으로는 파목사돈을 들 수 있다. 다이하이드로다이옥사진으로는 플루옥사스트로빈을 들 수 있다. 이미다졸리논으로는 페나미돈을 들 수 있다. 벤질카르바메이트로는 피리벤카르를 들 수 있다.

[1158] (12) "페닐피롤 살균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 12)는 균류의 삼투압 시그널 전

달과 관련된 MAP 단백질 키나아제를 저해한다. 펜피클로닐 및 플루디옥소닐은 이러한 살균제 부류의 예이다.

- [1159] (13) "퀴놀린 살균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 13)는 초기 세포 시그널링에서 G-단백질에 영향을 미침으로써 시그널 전달을 저해하는 것으로 제시된다. 이들은 흰가루병을 일으키는 균류의 발아 및/또는 부착기 형성을 저해하는 것으로 밝혀졌다. 퀴녹시펜은 이러한 살균제 부류의 일례이다.
- [1160] (14) "지질 과산화 저해제 살균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 14)는 균류의 막 합성에 영향을 미치는 지질 과산화를 저해하는 것으로 제시된다. 이러한 부류의 구성원, 예컨대 에트리다디아졸은 또한 기타 생물학적 과정, 예컨대 호흡 및 멜라닌 생합성에 영향을 미칠 수 있다. 지질 과산화 살균제로는 방향족 탄소 및 1,2,4-티아다디아졸 살균제를 들 수 있다. 방향족 탄소 살균제로는 바이페닐, 클로로넵, 디클로란, 키토젠, 텍나젠 및 톨클로포스-메틸을 들 수 있다. 1,2,4-티아다디아졸 살균제로는 에트리다디아졸을 들 수 있다.
- [1161] (15) "멜라닌 생합성 저해제-환원 효소 (MBI-R) 살균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 16.1)는 멜라닌 생합성에서의 나프탈 환원 (naphthal reduction) 단계를 저해한다. 멜라닌은 일부의 균류에 의한 숙주 식물 감염에 필요하다. 멜라닌 생합성 저해제-환원 효소 살균제로는 아이소벤조푸라논, 피롤로퀴놀리논 및 트리아아졸로벤조티아졸 살균제를 들 수 있다. 아이소벤조푸라논으로는 프탈라이드를 들 수 있다. 피롤로퀴놀리논으로는 피로퀼론을 들 수 있다. 트리아아졸로벤조티아졸로는 트라이사이클라졸을 들 수 있다.
- [1162] (16) "멜라닌 생합성 저해제-탈수 효소 (MBI-D) 살균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 16.2)는 멜라닌 생합성에서의 시탈론 탈수 효소를 저해한다. 멜라닌은 일부의 균류에 의한 숙주 식물 감염에 필요하다. 멜라닌 생합성 저해제-탈수 효소 살균제로는 사이클로프로판카르복스아미드, 카르복스아미드 및 프로피온아미드 살균제를 들 수 있다. 사이클로프로판카르복스아미드로는 카르프로파미드를 들 수 있다. 카르복스아미드로는 디클로사이메트를 들 수 있다. 프로피온아미드 폐녹사닐을 들 수 있다.
- [1163] (17) "하이드록시아닐리드 살균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 17)는 스테롤 생성에 중요한 역할을 하는 C4-탈메틸화 효소를 저해한다. 이의 예로는 펜헥사미드를 들 수 있다.
- [1164] (18) "스쿠알렌-에폭시다아제 저해제 살균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 18)는 에르고스테롤 생합성 경로에서의 스쿠알렌-에폭시다아제를 저해한다. 스테롤, 예컨대 에르고스테롤은 기능 세포벽의 발육에 필수적인 막 구조 및 막 기능에 필요하다. 따라서, 이들 살균제에 노출되면, 감수성 균류의 비정상 성장을 초래하여, 결국은 감수성 균류의 사멸을 가져온다. 스쿠알렌-에폭시다아제 저해제 살균제로는 티오카르바메이트 및 알릴아민 살균제를 들 수 있다. 티오카르바메이트로는 피리부티카브를 들 수 있다. 알릴아민으로는 나프티핀 및 테르비나핀을 들 수 있다.
- [1165] (19) "폴리옥신 살균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 19)는 키틴 신타아제를 저해한다. 이의 예로는 폴리옥신을 들 수 있다.
- [1166] (20) "페닐우레아 살균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 20)는 세포 분열에 영향을 미치는 것으로 제시된다. 이의 예로는 펜사이쿠톤을 들 수 있다.
- [1167] (21) "퀴논 인사이드 저해제 (QiI) 살균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 21)는 유비퀴놀 환원 효소에 영향을 미침으로써 균류의 복합체 III 미토콘드리아 호흡을 저해한다. 유비퀴놀 환원은 균류의 미토콘드리아 내막에 위치하는 사이토크롬 bc₁ 복합체의 "퀴논 인사이드" (Q_i) 부위에서 저지된다. 미토콘드리아 호흡 저해는 정상적인 균류 성장 및 발육을 저지시킨다. 퀴논 인사이드 저해제 살균제로는 시아노이미다졸 및 설파모일트리아아졸 살균제를 들 수 있다. 시아노이미다졸로는 시아조파미드를 들 수 있다. 설파모일트리아아졸로는 아미설브롬을 들 수 있다.
- [1168] (22) "벤즈아미드 살균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 22)는 β-튜블린에 결합하여, 미소관 중합을 방해함으로써, 유사 분열을 저해한다. 미소관 중합 저해는 세포 분열, 세포 내의 수송 및 세포 구조를 방해할 수 있다. 이의 예로는 족사미드를 들 수 있다.
- [1169] (23) "에노피라논산 항생제 살균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 23)는 단백질 생합성에 영향을 미침으로써 균류 성장을 저해한다. 이의 예로는 블라스티시딘-S를 들 수 있다.
- [1170] (24) "헥소피라노실 항생제 살균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 24)는 단백질 생합성에 영향을 미침으로써 균류 성장을 저해한다. 이의 예로는 카수가마이신을 들 수 있다.

- [1171] (25) "글루코피라노실 항생제: 단백질 합성 살균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 25)는 단백질 생합성에 영향을 미침으로써 균류 성장을 저해한다. 이의 예로는 스트렙토마이신을 들 수 있다.
- [1172] (26) "글루코피라노실 항생제: 트레할라아제 및 이노시톨 생합성 살균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 26)는 이노시톨 생합성 경로에서의 트레할라아제를 저해한다. 이의 예로는 발리다마이신을 들 수 있다.
- [1173] (27) "시아노아세트아미드옥심 살균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 27)로는 사이복사닐을 들 수 있다.
- [1174] (28) "카르바메이트 살균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 28)는 균류 성장의 멀티사이트 저해제인 것으로 고려된다. 이들은 세포막의 지방산 합성을 저해한 다음에, 세포막 투과성을 방해하는 것으로 제시된다. 프로파마카브, 프로파마카브-하이드로클로라이드, 요오도카브, 및 프로티오카브는 이러한 살균제 부류의 예이다.
- [1175] (29) "산화적 인산화 언커플링 살균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 29)는 언커플링 산화적 인산화에 의해 균류 호흡을 저해한다. 호흡 저해는 정상적인 균류 성장 및 발육을 저지시킨다. 이러한 부류로는 2,6-다이니트로아닐린, 예컨대 플루아지남, 피리미돈하이드라존, 예컨대 페림존 및 다이니트로페닐 크로토네이트, 예컨대 디노캡, 맵틸디노캡 및 비나파크릴을 들 수 있다.
- [1176] (30) "유기 주석 살균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 30)는 산화적 인산화 경로에서의 아데노신 트라이포스페이트 (ATP) 신타아제를 저해한다. 이의 예로는 펜틴 아세테이트, 펜틴 클로라이드 및 펜틴 하이드록사이드를 들 수 있다.
- [1177] (31) "카르복실산 살균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 31)는 테옥시리보핵산 (DNA) 토포아이소메라아제형 II (자이라아제)에 영향을 미침으로써 균류 성장을 저해한다. 이의 예로는 옥솔린산을 들 수 있다.
- [1178] (32) "헤테로 방향족 살균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 32)는 DNA/리보핵산 (RNA) 합성에 영향을 미치는 것으로 제시된다. 헤테로 방향족 살균제로는 아이속사졸 및 아이소티아졸론 살균제를 들 수 있다. 아이속사졸로는 하이백사졸을 들 수 있으며, 아이소티아졸론으로는 옥틸리논을 들 수 있다.
- [1179] (33) "포스포네이트 살균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 33)로는 포세틸-알루미늄을 비롯한 아인산 및 이의 각종 염을 들 수 있다.
- [1180] (34) "프탈람산 살균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 34)로는 테클로프탈람을 들 수 있다.
- [1181] (35) "벤조트리아진 살균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 35)로는 트리아아족사이드를 들 수 있다.
- [1182] (36) "벤젠-설폰아미드 살균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 36)로는 플루설파미드를 들 수 있다.
- [1183] (37) "피리다진은 살균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 37)로는 디클로메진을 들 수 있다.
- [1184] (38) "티오펜-카르복사미드 살균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 38)는 ATP 생성에 영향을 미치는 것으로 제시된다. 이의 예로는 실티오팜을 들 수 있다.
- [1185] (39) "피리미딘아미드 살균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 39)는 인지질 생합성에 영향을 미침으로써 균류 성장을 저해하며, 이의 예로는 디플루메토림을 들 수 있다.
- [1186] (40) "카르복실산 아마이드 (CAA) 살균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 40)는 인지질 생합성 및 세포벽 침착을 저해하는 것으로 제시된다. 이러한 과정의 저해는 표적 균류의 성장을 저지하여, 표적 균류의 사멸을 가져온다. 카르복실산 아마이드 살균제로는 신남산 아마이드, 발린아미드 카르바메이트 및 만텔산 아마이드 살균제를 들 수 있다. 신남산 아마이드로는 디메토모르프 및 플루모르프를 들 수 있다. 발린아미드 카르바메이트로는 벤티아발리카브, 벤티아발리카브-아이소프로필, 이프로발리카브 및 발리페날을 들 수 있다. 만텔산 아마이드로는 만디프로파미드, N-[2-[4-[[3-(4-클로로페닐)-2-프로핀-1-일]옥시]-3-메톡시페닐]에틸]-3-메

틸-2-[(메틸설포닐)아미노]부탄아미드 및 N-[2-[4-[[3-(4-클로로페닐)-2-프로핀-1-일]옥시]-3-메톡시페닐]에틸]-3-메틸-2-[(에틸설포닐)아미노]부탄아미드를 들 수 있다.

[1187] (41) "테트라사이클린 항생제 살균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 41)는 복합체 1 니코틴아미드 아데닌 디뉴클레오티드 (NADH) 산화 환원 효소에 영향을 미침으로써 균류 성장을 저해한다. 이의 예로는 옥시테트라사이클린을 들 수 있다.

[1188] (42) "티오카르바메이트 살균제 (b42)" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 42)로는 메타설포카브를 들 수 있다.

[1189] (43) "벤즈아미드 살균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 43)는 스펙트린양 단백질의 비편재화에 의해 균류 성장을 저해한다. 이의 예로는 아실피콜라이드 살균제, 예컨대 플루오피콜라이드 및 플루오피람을 들 수 있다.

[1190] (44) "숙주 식물 방어 유도 살균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 P)로는 숙주 식물 방어 메카니즘을 유도한다. 숙주 식물 방어 유도 살균제로는 벤조-티아다디아졸, 벤즈아이소티아졸 및 티아다디아졸-카르복사미드 살균제를 들 수 있다. 벤조-티아다디아졸로는 아시벤졸라-S-메틸을 들 수 있다. 벤즈아이소티아졸로는 프로베나졸을 들 수 있다. 티아다디아졸-카르복사미드로는 티아디닐 및 아이소티아닐을 들 수 있다.

[1191] (45) "멀티사이트 접촉 살균제"는 다수의 작용 부위를 통해 균류 성장을 저해하며, 접촉/예방 활성을 갖는다. 이러한 부류의 살균제로는 (45.1) "구리 살균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 M1), (45.2) "황 살균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 M2), (45.3) "다이티오카르바메이트 살균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 M3), (45.4) "프탈이미드 살균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 M4), (45.5) "클로로니트릴 살균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 M5), (45.6) "설파미드 살균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 M6), (45.7) "구아니딘 살균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 M7), (45.8) "트리아진 살균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 M8) 및 (45.9) "퀴논 살균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 M9)를 들 수 있다. "구리 살균제"는 전형적으로 구리(II) 산화 상태의 구리를 함유하는 무기 화합물이며; 이의 예로는 조성물, 예컨대 보르도액 (Bordeaux mixture; 삼염기성 황산구리)을 비롯한 옥시염화구리, 황산구리 및 수산화구리를 들 수 있다. "황 살균제"는 황 원자 환 또는 쇠를 포함하는 무기 화합물질이며; 이의 예로는 황 원소를 들 수 있다. "다이티오카르바메이트 살균제"는 다이티오카르바메이트 분자 부분을 포함하며; 이의 예로는 만코젠, 메티람, 프로피넬, 퍼밤, 마넵, 티람, 지넵 및 지람을 들 수 있다. "프탈이미드 살균제"는 프탈이미드 분자 부분을 포함하며; 이의 예로는 폴페트, 캡탄 및 캡타폴을 들 수 있다. "클로로니트릴 살균제"는 클로로 및 시아노로 치환된 방향족 환을 포함하며; 이의 예로는 클로로탈로닐을 들 수 있다. "설파미드 살균제"로는 디클로플루아니드 및 툴리플루아니드를 들 수 있다. "구아니딘 살균제"로는 도딘, 구아자틴, 이미녹타딘 알베실레이트 및 이미녹타딘 트리아아세테이트를 들 수 있다. "트리아진 살균제"로는 아닐라진을 들 수 있다. "퀴논 살균제"로는 디티아논을 들 수 있다.

[1192] (46) "부류 (1) 내지 (45) 이외의 살균제"로는 작용 모드가 미지일 수 있는 특정 살균제를 들 수 있다. 이들은 (46.1) "티아졸 카르복사미드 살균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 U5), (46.2) "페닐-아세트아미드 살균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 U6), (46.3) "퀴나졸리논 살균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 U7) 및 (46.4) "벤조페논 살균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 U8)를 포함한다. 티아졸 카르복사미드로는 에타복삼을 들 수 있다. 페닐-아세트아미드로는 사이플루페나미드 및 N-[[[사이클로프로필메톡시]아미노][6-(다이플루오로메톡시)-2,3-다이플루오로페닐]-메틸렌]벤젠아세트아미드를 들 수 있다. 퀴나졸리논으로는 프로퀴나지드 및 2-부톡시-6-요오도-3-프로필-4H-1-벤조피란-4-온을 들 수 있다. 벤조페논으로는 메트라페논을 들 수 있다. (b46) 부류로는 또한 베크사진, 네오-아소진 (메탄아르손산제이철 (ferric methanearsonate), 피롤리트린, 퀴노메티오네이트, N-[2-[4-[[3-(4-클로로페닐)-2-프로핀-1-일]옥시]-3-메톡시페닐]에틸]-3-메틸-2-[(메틸설포닐)아미노]부탄아미드, N-[2-[4-[[3-(4-클로로페닐)-2-프로핀-1-일]옥시]-3-메톡시페닐]에틸]-3-메틸-2-[(에틸설포닐)아미노]부탄아미드, 2-[[2-플루오로-5-(트라이플루오로메틸)페닐]티오]-2-[3-(2-메톡시페닐)-2-티아졸리디닐렌]아세토니트릴, 3-[5-(4-클로로페닐)-2,3-다이메틸-3-이속사졸리디닐]피리딘, 4-플루오로페닐 N-[1-[[[1-(4-시아노페닐)에틸]설포닐]메틸]프로필]카르바메이트, 5-클로로-6-(2,4,6-트라이플루오로페닐)-7-(4-메틸피페리딘-1-일)[1,2,4]트리아아졸로[1,5-a]피리미딘, N-(4-클로로-2-니트로페닐)-N-에틸-4-메틸벤젠설포나미드, N-[[[사이

클로프로필메톡시)아미노][6-(다이플루오로메톡시)-2,3-다이플루오로페닐]메틸렌]벤젠아세트아미드, N'-[4-[4-클로로-3-(트라이플루오로메틸)페녹시]-2,5-다이메틸페닐]-N-에틸-N-메틸메탄이미드아미드 및 1-[(2-프로페닐티오)카르보닐]-2-(1-메틸에틸)-4-(2-메틸페닐)-5-아미노-1H-피라졸-3-온을 들 수 있다.

[1193] 따라서, 화학식 1의 화합물 및 상술한 부류 (1) 내지 (46)으로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 적어도 하나의 살균제 화합물을 포함하는 혼합물 (즉, 조성물)에 주목해야 한다. 또한, 상기 혼합물 (살균적 유효량으로)과, 추가로 계면활성제, 고체 희석제 및 액체 희석제로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 적어도 하나의 추가 성분을 포함하는 조성물에 주목해야 한다. 화학식 1의 화합물과, 부류 (1) 내지 (46)와 관련하여 상기에 열거된 특정 화합물의 그룹 중에서 선택되는 적어도 하나의 살균제 화합물을 포함하는 혼합물 (즉, 조성물)에 특히 주목해야 한다. 또한 상기 혼합물 (살균적 유효량으로)과, 추가로 계면활성제, 고체 희석제 및 액체 희석제로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 적어도 하나의 추가의 계면활성제를 포함하는 조성물에 특히 주목해야 한다.

[1194] 본 발명의 화합물과 함께 제형화될 수 있는 다른 생물 활성 화합물 또는 생물 활성제의 예로는 살충제, 예컨대 아바멕틴, 아세페이트, 아세타미프리트, 아미도플루메트 (S-1955), 아바멕틴, 아자디라크틴, 아진포스-메틸, 비펜트린, 비페나제이트, 3-브로모-1-(3-클로로-2-피리디닐)-N-[4-시아노-2-메틸-6-[(메틸아미노)카르보닐]페닐]-1H-피라졸-5-카르복사미드, 부프로페진, 카르보푸란, 칼탐, 클로란트라닐리프롤 (DPX-E2Y45), 클로르페나피르, 클로르플루아주론, 클로르피리포스, 클로르피리포스-메틸, 크로마페노자이드, 클로티아니딘, 사이플루메토펜, 사이플루트린, 베타-사이플루트린, 사이할로트린, 람다-사이할로트린, 사이피메트린, 사이로마진, 델타메트린, 디아펜티우론, 디아지논, 디엘드린, 디플루벤주론, 디메플루트린, 디메토에이트, 디노테푸란, 디오페놀란, 에마멕틴, 엔도살판, 에스펜발레레이트, 에티프롤, 페노티오카브, 페녹시카브, 펜프로파트린, 펜발레레이트, 피프로닐, 플로니카미드, 플루벤디아미드, 플루사이트리네이트, 타우-플루발리네이트, 플루페네립 (UR-50701), 플루페녹수론, 포노포스, 할로페노자이드, 핵사플루무론, 하이드라메틸논, 이미다클로프리트, 인독사카브, 아이소펜포스, 루페누론, 말라티온, 메타플루미존, 메트알데히드, 메타미도포스, 메티다티온, 메토밀, 메토프렌, 메톡시클로르, 메토프루트린, 모노크로토포스, 메톡시페노자이드, 니텐피람, 니티아진, 노발루론, 노비플루무론 (XDE-007), 옥사밀, 파라티온, 파라티온-메틸, 퍼메트린, 포레이트, 포살론, 포스메트, 포스파미돈, 피리미카브, 프로페노포스, 프로플루트린, 피메트로진, 피라플루프롤, 피레트린, 피리달릴, 피리플루퀴나존, 피리프롤, 피리프록시펜, 로테논, 라노딘, 스피네토람, 스피노사드, 스피로디클로펜, 스피로메시펜 (BSN 2060), 스피로테트라마트, 설프로포스, 테부페노자이드, 테플루벤주론, 테플루트린, 터부포스, 테트라클로르빈포스, 티아클로프리트, 티아메톡삼, 티오디카브, 티오살판-소듐, 트랄로메트린, 트라이아자메이트, 트라이클로르폰 및 트라이플루무론; 및 곤충병원성 세균, 예컨대 바실러스 투린지엔시스 (*Bacillus thuringiensis*) 서브스피시스 (subsp.) 아이자와이 (aizawai), 바실러스 투린지엔시스 (*Bacillus thuringiensis*) 서브스피시스 (subsp.) 쿠르스타키 (kurstaki), 및 바실러스 투린지엔시스 (*Bacillus thuringiensis*)의 캡슐화 델타-내독소 (예를 들어, 셀캡 (Cellcap), MPV, MPVII); 곤충병원균, 예컨대 풍뎡이 녹강균 (green muscardine fungus); 및 바콜로바이러스, 핵다각체형 바이러스 (NPV), 예컨대 HzNPV, AfNPV를 비롯한 곤충병원성 바이러스; 및 과립병 바이러스 (GV), 예컨대 CpGV를 비롯한 생물 작용제 (biological agent)가 있다.

[1195] 효과적인 방제에 필요한 적용량 (rate of application) (즉, 생물학적 유효량)은 방제할 식물병, 위치, 시기, 주 작물, 주위 습도, 온도 등과 같은 그러한 인자에 따라 것이다. 당업자는 원하는 레벨의 식물병 방제에 필요한 생물학적 유효량을 간단한 실험을 통하여 용이하게 결정할 수 있다.

[1196] 본 발명의 화합물 및 이의 조성물은 무척추 해충에 유독한 단백질 (예를 들어, 바실러스 투린지엔시스 델타-내독소 (*Bacillus thuringiensis* delta-endotoxin))을 발현하도록 유전적으로 형질전환된 식물에 적용될 수 있다. 외부로부터 적용된 본 발명의 살균제 화합물의 효과는 발현된 독소 단백질로 상승 작용이 일어날 수 있다.

[1197] 농업용 보호제 (즉, 살충제, 살균제, 살선충제, 진드기 구충제, 제초제 및 생물 작용제)에 관한 일반적인 참조 문헌으로는 문헌 [참조: The Pesticide Manual, 13th Edition, C. D. S. Tomlin, Ed., British Crop Protection Council, Farnham, Surrey, U.K., 2003] 및 문헌 [참조: The BioPesticide Manual, 2 Edition, L. G. Copping, Ed., British Crop Protection Council, Farnham, Surrey, U.K., 2001]을 들 수 있다.

[1198] 이들 다양한 혼합 파트너 중 하나 이상을 사용하는 실시 형태의 경우, 화학식 1의 화합물에 대한 이들 다양한 혼합 파트너 (전체)의 중량비는 전형적으로 약 1:3000 내지 약 3000:1이다. 약 1:300 내지 약 300:1 (예를 들어, 약 1:30 내지 약 30:1의 비)의 중량비가 주목된다. 당업자는 원하는 생물학적 활성 범위에 필요한 활성 성분의 생물학적 유효량을 간단한 실험을 통하여 용이하게 결정할 수 있다. 이들 추가의 성분을 포함시키면, 화

화학식 1의 화합물 단독에 의해 방제되는 범위를 초과하여, 방제되는 질환의 범위를 확대할 수 있음이 명백할 것이다.

[1199] 경우에 따라서는, 본 발명의 화합물과 다른 생물 활성 (특히 살균성) 화합물 또는 생물 활성제 (즉, 활성 성분)의 배합물은 첨가제를 상회하는 (즉, 상승) 효과를 가져올 수 있다. 효과적인 해충 방제를 보장하면서 환경에 방출되는 활성 성분의 양을 감소시키는 것이 항상 바람직하다. 살균제 활성 성분의 상승 작용이 농학적으로 만족스러운 레벨의 균류 방제를 부여하는 적용량으로 일어나는 경우에는, 이러한 배합물은 작물 생산비를 감소시키고 환경 부하를 저감시키는데 유리할 수 있다.

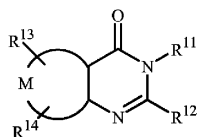
[1200] 화학식 1의 화합물과 적어도 하나의 다른 살균제 활성 성분의 배합물에 주목해야 한다. 다른 살균제 활성 성분이 화학식 1의 화합물과 상이한 작용 부위를 갖는 그러한 배합물에 특히 주목해야 한다. 경우에 따라서는, 유사한 방제 범위를 갖지만, 상이한 작용 부위를 갖는 적어도 하나의 다른 살균제 활성 성분과의 배합물은 저항성 관리에 특히 유리할 것이다. 따라서, 본 발명의 조성물은 추가로 유사한 방제 범위를 갖지만, 작용 부위가 상이한 생물학적 유효량의 적어도 하나의 추가의 살균제 활성 성분을 포함할 수 있다.

[1201] 화학식 1의 화합물 이외에도, (1) 알킬렌비스(다리티오카르바메이트) 살균제; (2) 사이목사닐; (3) 페닐아미드 살균제; (4) 피리미딘은 살균제; (5) 클로로탈로닐; (6) 균류 미토콘드리아 호흡 전자 이동 부위의 복합체 II에서 작용하는 카르복시아미드; (7) 퀴녹시펜; (8) 메트라페논; (9) 사이플루페나미드; (10) 사이프로디닐; (11) 구리 화합물; (12) 프탈리미드 살균제; (13) 포세틸-알루미늄; (14) 벤즈이미다졸 살균제; (15) 시아조파미드; (16) 플루아지남; (17) 이프로발리카브; (18) 프로파모카브; (19) 발리도마이신; (20) 다이클로로페닐 다이카르복시아미드 살균제; (21) 족사미드; (22) 플루오피콜라이드; (23) 만디프로파미드; (24) 인지질 생합성 및 세포벽 침착에 작용하는 카르복실산 아미드; (25) 디메토모르프; (26) 비DMI (non-DMI) 스테롤 생합성 저해제; (27) 스테롤 생합성에 있어서의 탈메틸 효소 저해제; (28) bc₁ 복합 살균제; 및 (1) 내지 (28)의 화합물의 염으로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 적어도 하나의 화합물을 포함하는 조성물에 특히 주목해야 한다.

[1202] 살균제 화합물 부류에 대한 추가의 설명이 하기에 주어진다.

[1203] 피리미딘은 살균제 (그룹 (4))는 화학식 A1의 화합물을 포함한다:

[1204] [화학식 A1]



[1205]

[1206] 상기식에서, M은 융합 페닐, 티오펜 또는 피리딘 환을 형성하고; R¹¹은 C₁-C₆ 알킬이며; R¹²은 C₁-C₆ 알킬 또는 C₁-C₆ 알콕시이고; R¹³은 할로젠이며; R¹⁴은 수소 또는 할로젠이다.

[1207] 피리미딘은 살균제는 PCT 특허출원공개 제WO 94/26722호 및 미국 특허 제6,066,638호, 제6,245,770호, 제6,262,058호 및 제6,277,858호에 기재되어 있다. 하기 그룹: 6-브로모-3-프로필-2-프로필옥시-4(3H)-퀴나졸리논, 6,8-다이요도-3-프로필-2-프로필옥시-4(3H)-퀴나졸리논, 6-요오도-3-프로필-2-프로필옥시-4(3H)-퀴나졸리논 (프로퀴나지드), 6-클로로-2-프로폭시-3-프로필티에노[2,3-d]피리미딘-4(3H)-온, 6-브로모-2-프로폭시-3-프로필티에노[2,3-d]피리미딘-4(3H)-온, 7-브로모-2-프로폭시-3-프로필티에노[3,2-d]피리미딘-4(3H)-온, 6-브로모-2-프로폭시-3-프로필피리도[2,3-d]피리미딘-4(3H)-온, 6,7-다이브로모-2-프로폭시-3-프로필티에노[3,2-d]피리미딘-4(3H)-온, 및 3-(사이클로프로필메틸)-6-요오도-2-(프로필티오)피리도[2,3-d]피리미딘-4(3H)-온 중에서 선택되는 피리미딘은 살균제에 주목해야 한다.

[1208] 스테롤 생합성 저해제 (그룹 (27))는 스테롤 생합성 경로의 효소를 저해함으로써 균류를 방제한다. 탈메틸 효소 저해 살균제는 균류의 스테롤 전구체인 라노스테롤 또는 24-메틸렌 다이하이드로라노스테롤의 위치 14에서의 탈메틸화의 저해를 포함한 진균 스테롤 생합성 경로 내에 공통 작용 부위를 갖는다. 이 부위에서 작용하는 화합물은 종종 탈메틸 효소 저해제, DMI 살균제, 또는 DMI로서 명명된다. 탈메틸 효소는 종종 사이토크롬 P-450 (14DM)을 비롯하여, 생화학 문헌에 다른 이름으로 언급되어 있다. 탈메틸 효소는 예를 들어, 문헌 [참조: J. Biol. Chem. 1992, 267, 13175-79] 및 상기 문헌에 인용된 참조문헌에 기재되어 있다. DMI 살균제는 몇 가지의 화학적 분류로 나뉘어진다: 아졸 (트라이아졸 및 이미다졸 포함), 피리미딘, 피페라진 및 피리딘. 트라이

아졸은 아자코나졸, 브로무코나졸, 사이프로코나졸, 디페노코나졸, 디니코나졸 (디니코나졸-M 포함), 에폭시코나졸, 에타코나졸, 펜부코나졸, 플루퀸코나졸, 플루실라졸, 플루트리아폴, 헥사코나졸, 이미벤코나졸, 이프코나졸, 메트코나졸, 마이클로부타닐, 펜코나졸, 프로피코나졸, 프로티오코나졸, 퀴코나졸, 시메코나졸, 테부코나졸, 테트라코나졸, 트라이아디메폰, 트라이아디메놀, 트라이티코나졸 및 유니코나졸을 포함한다. 이미다졸은 클로트리마졸, 에코나졸, 이마잘릴, 아이소코나졸, 미코나졸, 옥스포코나졸, 프로클로라즈 및 트라이플루미졸을 포함한다. 피리미딘은 페나리몰, 누아리몰 및 트라이아리몰을 포함한다. 피페라진으로는 트리포린을 들 수 있다. 피리딘은 부티오베이트 및 피리페녹스를 포함한다. 생화학적 연구에 의하면, 상기에 언급된 살균제 전부가 문헌 [참조: K. H. Kuck et al., Modern Selective Fungicides - Properties, Applications and Mechanisms of Action, H. Lyr (Ed.), Gustav Fischer Verlag: New York, 1995, 205-258]에 기재된 DMI 살균제임을 알 수 있다.

[1209] bc₁ 복합 살균제 (그룹 28)는 미토콘드리아 호흡 연쇄의 bc₁ 복합체를 저해하는 살균제 작용 모드를 갖는다. bc₁ 복합체는 종종 전자 전달 연쇄의 복합체 III, 및 유비하이드로퀴논:사이토크롬 c 산화 환원 효소를 비롯하여, 생화학 문헌에 다른 이름으로 언급되어 있다. 이러한 복합체는 효소 위원회 번호 (Enzyme Commission number) EC1.10.2.2로 고유하게 식별된다. bc₁ 복합체는 예를 들어, 문헌 [참조: J. Biol. Chem. 1989, 264, 14543-48]; 문헌 [참조: Methods Enzymol. 1986, 126, 253-71]; 및 상기 문헌에 인용된 참조 문헌에 기재되어 있다. 스트로빌루린계 살균제, 예컨대 아족시스트로빈, 디목시스트로빈, 에네스트로부린 (SYP-Z071), 플루옥사스트로빈, 크레속심-메틸, 메토미노스트로빈, 오리사스트로빈, 피콕시스트로빈, 피라클로스트로빈 및 트라이플록시스트로빈은 이러한 작용 모드를 갖는 것으로 공지되어 있다 (H. Sauter et al., Angew. Chem. Int. Ed. 1999, 38, 1328-1349). 미토콘드리아 호흡 연쇄의 bc₁ 복합체를 저해하는 다른 살균제 화합물은 파목사돈 및 페나미돈을 포함한다.

[1210] 알킬렌비스(다이티오카르바메이트) (그룹 (1))는 화합물, 예컨대 만코젠, 마넵, 프로피넵 및 지넵을 포함한다. 페닐아미드 (그룹 (3))는 화합물, 예컨대 메탈락실, 베날락실, 푸랄락실 및 옥사디실을 포함한다. 카르복사미드 (그룹 (6))는 화합물, 예컨대 보스칼리드, 카르복신, 펜푸람, 플루톨라닐, 푸라메트피르, 메프로닐, 옥시카르복신, 티플루자미드, 펜티오피라드 및 N-[2-(1,3-다이메틸부틸)페닐]-5-플루오로-1,3-다이메틸-1H-피라졸-4-카르복사미드 (PCT 특허공개 제WO 2003/010149호)를 포함하며, 호흡 전자 전달 연쇄의 복합체 II (식산산탈수소효소)를 붕괴시킴으로써 미토콘드리아 기능을 저해시키는 것으로 알려져 있다. 구리 화합물 (그룹 (11))은 화합물, 예컨대 조성물, 예컨대 보르도 혼합물 (삼염기성 황산구리)을 비롯하여, 옥시염화구리, 황산구리 및 수산화구리를 포함한다. 프탈이미드 (그룹 (12))는 화합물, 예컨대 폴페트 및 캡탄을 포함한다. 벤즈이미다졸 살균제 (그룹 (14))는 베노밀 및 카벤다짐을 포함한다. 다이클로로페닐 다이카르복사미드 살균제 (그룹 (20))는 클로졸리네이트, 다이클로졸린, 이프로디온, 아이소발레디온, 마이클로졸린, 프로사이미돈 및 빈클로졸린을 포함한다.

[1211] 비 DMI 스테롤 생합성 저해제 (그룹 (26))는 모르폴린 및 피페리딘 살균제를 포함한다. 모르폴린 및 피페리딘은 DMI 스테롤 생합성 (그룹 (27))에 의해 달성되는 저해 보다 느린 시점에서 스테롤 생합성 경로의 단계를 저해하는 것으로 나타난 스테롤 생합성 저해제이다. 모르폴린으로는 알디모르프, 도데모르프, 펜프로피모르프, 트라이데모르프 및 트라이모르파미드를 들 수 있다. 피페리딘은 펜프로피딘을 포함한다.

[1212] 화학식 1의 화합물과, 아족시스트로빈, 크레속심-메틸, 트라이플록시스트로빈, 피라클로스트로빈, 피콕시스트로빈, 디목시스트로빈, 메토미노스트로빈/페노미노스트로빈, 카르벤다짐, 클로로탈로닐, 퀴녹시펜, 메트라페논, 사이플루페나미드, 펜프로피딘, 펜프로피모르프, 브로무코나졸, 사이프로코나졸, 디페노코나졸, 에폭시코나졸, 펜부코나졸, 플루실라졸, 헥사코나졸, 이프코나졸, 메트코나졸, 펜코나졸, 프로피코나졸, 프로퀴나지드, 프로티오코나졸, 테부코나졸, 트라이티코나졸, 파목사돈, 프로클로라즈, 펜티오피라드 및 보스칼리드 (니코비펜)의 배합물도 주목해야 한다.

[1213] 본 발명의 화합물과, 하기 그룹, 즉, 아족시스트로빈, 크레속심-메틸, 트라이플록시스트로빈, 피라클로스트로빈, 피콕시스트로빈, 디목시스트로빈, 메토미노스트로빈/페노미노스트로빈, 퀴녹시펜, 메트라페논, 사이플루페나미드, 펜프로피딘, 펜프로피모르프, 사이프로코나졸, 에폭시코나졸, 플루실라졸, 메트코나졸, 프로피코나졸, 프로퀴나지드, 프로티오코나졸, 테부코나졸, 트라이티코나졸, 파목사돈 및 펜티오피라드 중에서 선택되는 살균제의 혼합물이 균류 식물 병원체에 의한 식물병의 우수한 방제 (예를 들어, 보다 낮은 사용률 또는 훨씬 더 광범위한 방제되는 식물 병원체) 또는 저항성 관리에 바람직하다.

- 205 -

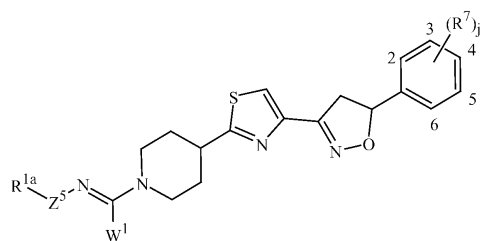
26, 화합물 31, 화합물 34, 화합물 39, 화합물 40, 화합물 44, 화합물 52, 화합물 65, 화합물 67, 화합물 68, 화합물 70, 화합물 71, 화합물 72, 화합물 73, 화합물 75 또는 화합물 77과 테부코나졸의 배합물, 화합물 3, 화합물 14, 화합물 15, 화합물 16, 화합물 17, 화합물 20, 화합물 25, 화합물 26, 화합물 31, 화합물 34, 화합물 39, 화합물 40, 화합물 44, 화합물 52, 화합물 65, 화합물 67, 화합물 68, 화합물 70, 화합물 71, 화합물 72, 화합물 73, 화합물 75 또는 화합물 77과 트라이티코나졸의 배합물, 화합물 3, 화합물 14, 화합물 15, 화합물 16, 화합물 17, 화합물 20, 화합물 25, 화합물 26, 화합물 31, 화합물 34, 화합물 39, 화합물 40, 화합물 44, 화합물 52, 화합물 65, 화합물 67, 화합물 68, 화합물 70, 화합물 71, 화합물 72, 화합물 73, 화합물 75 또는 화합물 77과 파목사돈의 배합물, 및 화합물 3, 화합물 14, 화합물 15, 화합물 16, 화합물 17, 화합물 20, 화합물 25, 화합물 26, 화합물 31, 화합물 34, 화합물 39, 화합물 40, 화합물 44, 화합물 52, 화합물 65, 화합물 67, 화합물 68, 화합물 70, 화합물 71, 화합물 72, 화합물 73, 화합물 75 또는 화합물 77과 펜티오피라드의 배합물.

[1215]

하기 시험은 특정 병원체에 대한 본 발명의 화합물의 방제 효과를 예증한다. 그러나, 화합물에 의해 주어진 병해 방제 보호는 이들 종류에 한정되지 않는다. 화합물 설명에 관해서는 인덱스 표 A 내지 B를 참조한다. 하기 약어가 하기 인덱스 표에 사용된다: t는 삼차이고, i는 아이소이며, c는 사이클로이고, Me는 메틸이며, Bu는 부틸이고, t-Bu는 tert-부틸이며, Ph는 페닐이고, OMe는 메톡시이다. 약어 "Ex."는 "실시예"를 나타내며, 화합물이 제조되는 실시예를 나타내는 번호가 이어진다. 하기 표에서, $(R^7)_j$ 의 대시 ("-")는 j가 0이고, 수소가 모든 이용가능한 위치에 존재하는 것을 나타낸다. 인덱스 표 A 내지 B는 대기압 화학 이온화 (AP^+)를 이용하여 질량 분석에 의해 관찰된, 분자에 대하여 H^+ (분자량 1)를 첨가하여 형성된 최고 동위원소 존재비 어미 이온 (M+1)의 분자량을 나타낸다.

[1216]

인덱스 표 A



Z^5 는 직접 결합이다.

화합물	R^{1a}	W^1	$(R^7)_j$	AP ⁺ (M+1)	M.P. (°C)
1 (Ex. 1)	2,5-다이-Me-Ph	SMe	—	491	**
2 (Ex. 2)	2,5-다이-Me-Ph	H	—	445	**
3 (Ex. 3)	2,5-다이-Me-Ph	OMe	—	475	**
21 ^a	2,5-다이-Me-Ph	H	—	445	
22	2,5-다이-Me-Ph	Cl	—		***
23 (Ex. 9)	2,5-다이-Me-Ph	NH ₂	—	460	**
24	2,5-다이-Me-Ph	NMe ₂	—	488	
25	2,5-다이-Me-Ph	NHOH	2,6-다이-F	512	
26 ^b	2,5-다이-Me-Ph	SMe	2,6-다이-F	527	
27	2,5-다이-Me-Ph	NHC(=O)Me	—	502	
28	2,5-다이-Me-Ph	NHMe	—	474	
29	2,5-다이-Me-Ph	OEt	—	489	
30	2,5-다이-Me-Ph	4-모르폴리닐	—	530	
31	2,5-다이-Me-Ph	NH ₂	2,6-다이-F	496	
32	2,5-다이-Me-Ph	CN	—	470	
34	2,5-다이-Me-Ph	NHOMe	2,6-다이-F	526	
35	2,5-다이-Me-Ph	NHMe	2,6-다이-F	510	
38	2,5-다이-Me-Ph	NMe ₂	2,6-다이-F	524	
39	2,5-다이-Me-Ph	NHOEt	2,6-다이-F	540	
42	2,5-다이-Me-Ph	NHCN	2,6-다이-F	521	
44	2,5-다이-Me-Ph	OMe	2,6-다이-F	511	

** ¹H NMR 데이터에 관해서는 합성예를 참조한다.

*** ¹H NMR 데이터에 관해서는 인덱스 표 C를 참조한다.

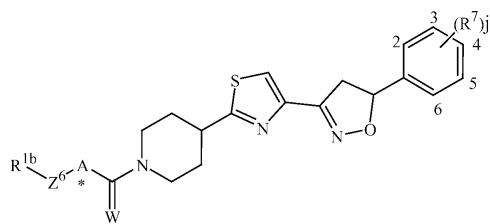
a. HCl 염.

b. HI 염.

[1217]

[1218]

인덱스 표 B



Z⁶는 직접 결합이다.

화합물	R ^{1b}	A	W	(R ⁷) _j	AP ⁺ (M+1)	M.P. (°C)
4 (Ex. 4)	CH ₃ (CH ₂) ₂	NH	O	—	427	**
5 (Ex. 5)	CH ₂ =CHCH ₂	NH	S	—	413	**
6 (Ex. 6)	CF ₃ CH(Me)	CH ₂	O	2-F	470	**
7 (Ex. 7)	ClCH ₂ (CH ₂) ₂	CH ₂	O	2-F	450	**
8 (Ex. 8)	CH≡CCH ₂	CH ₂	O	2-F	412	**
9	c-헥실	NH	O	—	439	
10	Ph-CH ₂	NH	O	—	447	
11	CH ₃	NMe	O	—	385	
12	CH ₃ CH ₂	NEt	O	—	413	
13	CH ₃ CH ₂	NH	O	—	385	
14	n-Pr	NH	O	—	399	
15	i-Pr	NH	O	—	399	159-161
16	t-Bu	NH	O	—	413	174-176
17	CH ₃ CH ₂ CH(Me)	NH	O	—	413	128-130
18	EtOC(=O)CH ₂	NH	O	—	443	109-110
19	c-펜틸	NH	O	—	425	173-175
20	c-헥실-CH ₂	NH	O	—	453	148-150
40	2,5-다이-Me-Ph	C(=O)	O	2-F	492	
41	5-Me-3-CF ₃ -피라졸-1-일	C(=O)	O	2-F	536	
43	5-Me-3-CF ₃ -피라졸-1-일	C(=O)	O	2,6-다이-F	554	
45	Ph	C(=O)	O	2-F	464	
46	2-티에닐	C(=O)	O	2-F	470	
47	2-푸라닐	C(=O)	O	2-F	454	
48	Et	CH(OH)	O	2,6-다이-F	436	

[1219]

Z⁶는 직접 결합이다.

화합물	R ^{1b}	A	W	(R ⁷) _j	AP ⁺ (M+1)	M.P. (°C)
49	i-Pr	CH(OH)	O	2,6-다이-F	450	
50 ^e	PhCH ₂	CH(OH)	O	2,6-다이-F	498	
51	2,4,6-트라이-Me-Ph	C(=O)	O	2-F	506	
52 (Ex. 10)	2,5-다이-Me-Ph	C(=O)	O	2,6-다이-F	510	**
53	CF ₃	CH(OH)	O	2,6-다이-F	476	
54 ^d	i-Pr	CH(OH)	O	2,6-다이-F	450	
55 ^c	i-Pr	CH(OH)	O	2,6-다이-F	450	
56 ^c	i-Bu	CH(OH)	O	2,6-다이-F	464	
57	i-Bu	CH(OH)	O	2,6-다이-F	464	
58	n-Bu	CH(OH)	O	2,6-다이-F	464	
59 ^c	c-헥실	CH(OH)	O	2,6-다이-F	490	
60 ^d	c-헥실	CH(OH)	O	2,6-다이-F	490	
61	n-헥실	CH(OH)	O	2,6-다이-F	492	
63	CN	CH ₂	O	2,6-다이-F	417	
64	MeC(=O)O	CH ₂	O	2,6-다이-F	450	
65	Me	C(=O)	O	2,6-다이-F	420	
66	Et	C(=O)	O	2,6-다이-F	434	
67	n-Pr	C(=O)	O	2,6-다이-F	448	
68	i-Pr	C(=O)	O	2,6-다이-F	448	
69	i-Bu	C(=O)	O	2,6-다이-F	462	
70	s-Bu	C(=O)	O	2,6-다이-F	462	
71	2-티에닐	C(=O)	O	2,6-다이-F	448	
72	2-푸라닐	C(=O)	O	2,6-다이-F	472	
73	CH ₃ (CH ₂) ₄	CH ₂	O	2,6-다이-F	462	
74	CF ₃ CH ₂ O	CH ₂	O	2,6-다이-F	490	
75	CF ₃ CH ₂ CH ₂ O	CH ₂	O	2,6-다이-F	504	
76	3-CF ₃ -c-헥스-1-일	CH ₂	O	2,6-다이-F	542	
77	CF ₃ CH ₂ OCH ₂	CH ₂	O	2,6-다이-F	504	

** ¹H NMR 데이터에 관해서는 합성예를 참조한다.

c. 상기 구조에서 별표 “*” 로 나타낸 탄소 원자에서의 S-이성질체.

d. 상기 구조에서 별표 “*” 로 나타낸 탄소 원자에서의 R-이성질체.

Z⁶는 S(=O)₂이다.

화합물	R ^{1b}	A	W	(R ⁷) _j	AP ⁺ (M-1)	M.P. (°C)
33	2,5-다이-Me-Ph	NH	O	-	523	

Z⁶는 S(=O)₂이다.

화합물	R ^{1b}	A	W	(R ⁷) _j	AP ⁺ (M+1)	M.P. (°C)
62	Me	CH ₂	O	2,6-다이-F	470	

Z⁶는 C(=O)이다.

화합물	R ^{1b}	A	W	(R ⁷) _j	AP ⁺ (M+1)	M.P. (°C)
36	2,5-다이-Me-Ph	NH	O	2,6-다이-F	524	
37	2,5-다이-Me-Ph	NH	O	2-F	507	

인덱스 표 C

화합물 번호	¹ H NMR 데이터 (달리 나타내지 않으면 (CDCl ₃ 용액) ^a
22	δ 2.22 (m, 2H), 2.27 (s, 3H), 2.32 (s, 3H), 2.50 (m, 2H), 3.45 (m, 1H), 3.63 (m, 1H), 3.82-3.95 (m, 3H), 4.87 (m, 2H), 5.78 (m, 1H), 7.02 (s, 1H), 7.1-7.2 (m, 2H), 7.3-7.40 (m, 5H), 7.71 (s, 1H).

본 발명의 생물학적 실시예

- [1225] 시험 A 내지 시험 C에 관한 시험 현탁액을 제조하기 위한 일반적인 프로토콜: 시험 화합물을 먼저 최종 체적의 3%에 상당하는 양으로 아세톤에 용해시킨 다음에, 계면활성제 트렘 (Trem)® 014 (다가 알코올 에스테르) 250 ppm을 함유하는 아세톤 및 정제수 (50/50 체적 믹스)에 원하는 농도 (ppm)로 현탁시켰다. 그 다음에, 얻어진 시험 현탁액을 시험 A 내지 시험 C에 사용하였다. 시험 식물에 대하여 유출할 수 있을 정도의 200 ppm 시험 현탁액을 분무하는 것은 500 g/ha의 비율에 상당하였다.
- [1226] 시험 A
- [1227] 포도 모종을 플라스모파라 비티콜라 (*Plasmopara viticola*) (포도 흰가루병의 병원균)의 포자 현탁액으로 접종시켜, 20℃에서 24 시간 동안 포화 분위기에서 인큐베이션하였다. 짧은 건조 기간 후에, 시험 현탁액을 포도 모종에 유출할 수 있을 정도로 분무한 다음에, 20℃에서 5 일간 성장상 (growth ch호박색)에 옮겨 둔 후에, 포도 모종을 다시 20℃에서 24 시간 동안 포화 분위기에 두었다. 제거 후에, 육안 병해 평가 척도 (visual disease rating)를 작성하였다.
- [1228] 시험 B
- [1229] 시험 현탁액을 토마토 모종에 유출할 수 있을 정도로 분무하였다. 그 다음날에, 모종을 파이토프토라 인페스탄스 (*Phytophthora infestans*) (토마토 역병의 병원균)의 포자 현탁액으로 접종시켜, 20℃에서 24 시간 동안 포화 분위기에서 인큐베이션한 다음에, 20℃에서 5 일간 성장상에 옮겨 둔 후에, 육안 병해 평가 척도를 작성하였다.
- [1230] 시험 C
- [1231] 토마토 모종을 파이토프토라 인페스탄스 (*Phytophthora infestans*) (토마토 역병의 병원균)의 포자 현탁액으로 접종시켜, 20℃에서 17 시간 동안 포화 분위기에서 인큐베이션하였다. 짧은 건조 기간 후에, 시험 현탁액을 토마토 모종에 유출할 수 있을 정도로 분무한 다음에, 20℃에서 4 일간 성장상에 옮겨 둔 후에, 육안 병해 평가 척도를 작성하였다.
- [1232] 시험 A 내지 시험 C 이외에도, 화합물을 2개의 분리된 세트로 된 토마토 묘목에 분무하여, 처리 후 24 시간 후에 보트리티스 시네레아 (*Botrytis cinerea*) 또는 알테르나리아 솔라니 (*Alternaria solani*)로 접종시키고, 밀 식물을 처리 후 24 시간 후에 에리시페 그라미니스 (*Erysiphe graminis*) f. sp. 트리티시 (*tritici*)로 접종시켰다. 시험 화합물은 시험된 살포량으로 시험 조건하에 이들 추가의 병원균에 대하여 현저한 활성을 나타내지 않았다.
- [1233] 시험 A 내지 시험 C에 대한 결과는 표 A에 나타낸다. 표에서, 100의 평가 척도는 100 % 병해 방제를 나타내고, 0의 평가 척도는 병해 방제를 전혀 나타내지 않음을 나타낸다 (대조군과 비교). 대시 (-)는 시험 결과가 없음을 나타내고, "*"는 40 ppm으로 시험된 화합물을 나타내며, "**"는 10 ppm으로 시험된 화합물을 나타낸다.

[1234]

[표 A]

화합물 번호	시 험 A	시 험 B	시 험 C
1*	96	97	53
2	17	88	0
3*	99	100	99
4*	86	100	76
5*	83	99	73
6	0	33	0
7	98	100	71
8	46	40	0
9	0	57	0
10	25	93	24
11	0	0	0
12	8	40	0
13	57	99	0
14	88	100	99
15	86	100	91
16	86	100	95
17*	86	100	95
18*	39	63	26
19*	67	100	63
20*	95	100	93
21	0	95	0
23**	79	100	33
24*	79	97	39
25*	100	100	99
26*	99	100	93
27*	4	99	58
28*	43	95	0
29*	92	99	80
30*	58	64	17
31*	99	100	97
32*	31	58	0
33*	0	0	0
34*	100	100	97

[1235]

35*	0	86	26
36*	0	99	99
37*	0	63	0
38*	8	33	0
39*	99	100	97
40*	99	100	98
41*	17	26	0
42*	99	100	99
43*	0	25	0
44*	100	100	99
45*	0	0	0
46*	0	0	0
47*	85	33	0
48*	88	100	91
49*	97	98	100
50*	0	87	0
51*	0	52	0
52*	100	100	96
53*	-	100	95
54*	-	100	99
55**	10	100	99
56*	98	84	50
57*	-	100	97
58*	-	100	99
59*	-	99	83
60*	-	100	73
61*	-	100	47
62*	99	99	95
63*	94	100	92
64*	80	100	68
65*	88	100	99
66*	-	100	99
67*	100	100	99
68*	99	100	93
69*	99	84	64
70*	100	100	88
71*	99	100	94
72*	100	100	99
73*	99	100	99
74**	100	10	97
75**	100	100	97
76*	66	67	0
77**	100	100	99

[1236]