



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2022년02월08일
(11) 등록번호 10-2358945
(24) 등록일자 2022년01월28일

- (51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C07D 237/14 (2006.01) A01N 43/58 (2006.01)
C07D 403/04 (2006.01) C07D 405/04 (2006.01)
- (52) CPC특허분류
C07D 237/14 (2013.01)
A01N 43/58 (2013.01)
- (21) 출원번호 10-2019-7031338
- (22) 출원일자(국제) 2018년03월28일
심사청구일자 2021년03월26일
- (85) 번역문제출일자 2019년10월23일
- (65) 공개번호 10-2019-0140934
- (43) 공개일자 2019년12월20일
- (86) 국제출원번호 PCT/US2018/024742
- (87) 국제공개번호 WO 2018/183432
국제공개일자 2018년10월04일
- (30) 우선권주장
62/477,685 2017년03월28일 미국(US)
- (56) 선행기술조사문헌
WO2015168010 A1
WO2009035150 A2

- (73) 특허권자
에프엠씨 코포레이션
미국 19104 펜실베이니아주 필라델피아 월넛 스트리트 2929
- (72) 발명자
맥켄, 스테판 프레드릭
미국 19711 델라웨어 뉴워크 올드 스테블 라인 11
- (74) 대리인
양영준

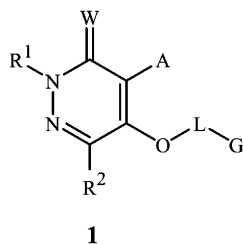
전체 청구항 수 : 총 10 항

심사관 : 장봉호

(54) 발명의 명칭 신규 피라다지논계 제초제

(57) 요약

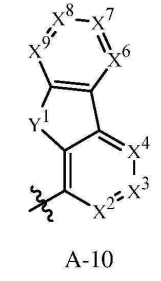
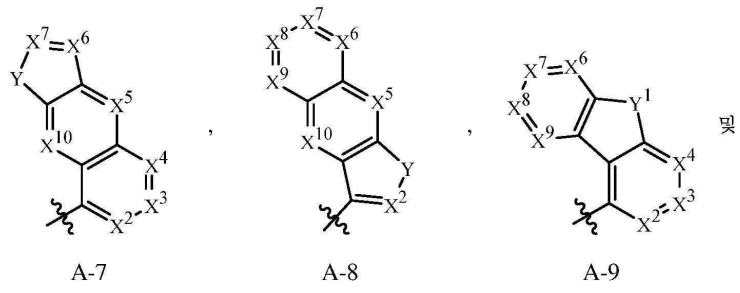
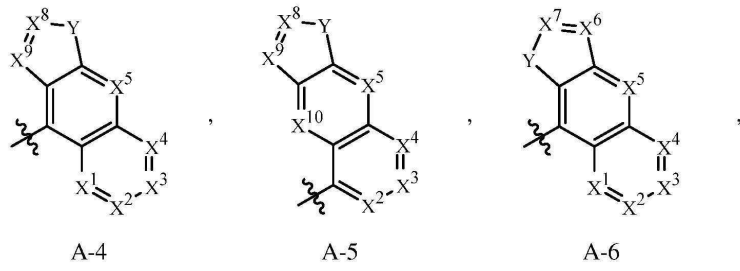
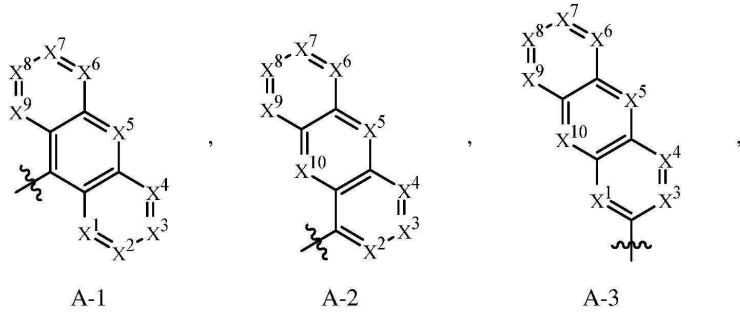
화학식 1의 화합물 (모든 입체 이성질체 포함), 이의 N-옥사이드 및 이의 염, 이들을 함유하는 농업용 조성물 및 제초제로서의 이들의 용도가 개시되어 있다:



상기 식에서, R¹, R², L, G 및 W는 본 명세서 및 청구범위에 정의한 바와 같고;

(뒷면에 계속)

A는,



중에서 선택되며;

$X^1, X^2, X^3, X^4, X^5, X^6, X^7, X^8, X^9, X^{10}, Y$ 및 Y^1 은 본 명세서 및 청구범위에 정의한 바와 같다.

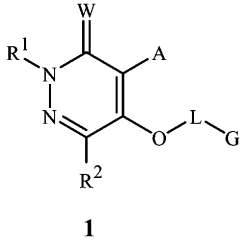
- (52) CPC특허분류
- C07D 403/04 (2013.01)
- C07D 405/04 (2013.01)

명세서

청구범위

청구항 1

화학식 1의 화합물, 이의 입체 이성질체, 이의 N-옥사이드 및 이의 염:



상기 식에서,

W는 O 또는 S이고;

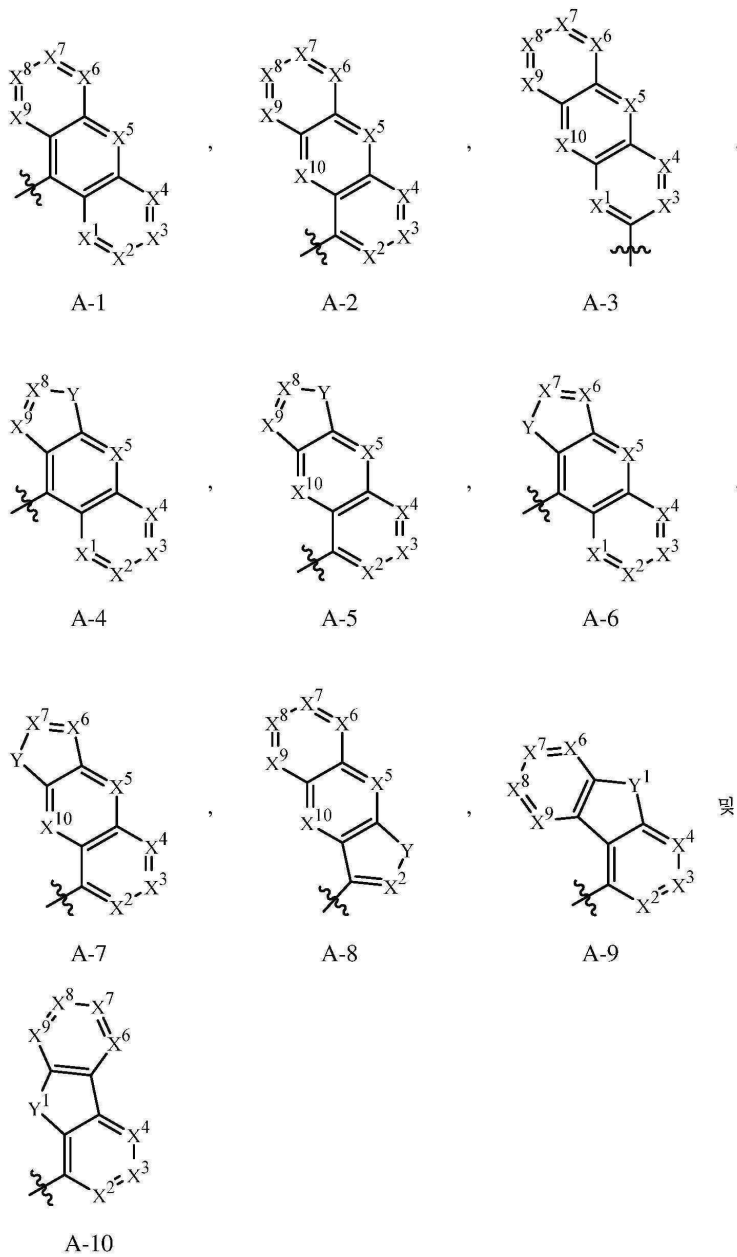
R¹은 H, C₁-C₇ 알킬, C₃-C₈ 알킬카르보닐알킬, C₃-C₈ 알콕시카르보닐알킬, C₄-C₇ 알킬사이클로알킬, C₃-C₇ 알케닐, C₃-C₇ 알키닐, C₃-C₇ 사이클로알킬, C₄-C₇ 사이클로알킬알킬, C₂-C₃ 시아노알킬, C₁-C₄ 니트로알킬, C₂-C₇ 할로알콕시알킬, C₁-C₇ 할로알킬, C₃-C₇ 할로알케닐, C₂-C₇ 알콕시알킬, C₃-C₇ 알킬티오알킬, C₁-C₇ 알콕시, 벤질 또는 페닐; 또는 탄소, 및 1개 이하의 O 및 1개 이하의 S 중에서 선택되는 환 구성원 (ring member)을 포함하는 5원 또는 6원 포화 또는 부분 포화 복소환이며;

R²는 H, 할로젠, 시아노, 포르밀, C₁-C₇ 알킬, C₃-C₈ 알킬카르보닐알킬, C₃-C₈ 알콕시카르보닐알킬, C₂-C₄ 알킬카르보닐, C₂-C₇ 알킬카르보닐옥시, C₄-C₇ 알킬사이클로알킬, C₃-C₇ 알케닐, C₃-C₇ 알키닐, C₁-C₄ 알킬설피닐, C₁-C₄ 알킬설포닐, C₁-C₄ 알킬아미노, C₂-C₈ 다이알킬아미노, C₃-C₇ 사이클로알킬, C₄-C₇ 사이클로알킬알킬, C₂-C₃ 시아노알킬, C₁-C₄ 니트로알킬, C₂-C₇ 할로알콕시알킬, C₁-C₇ 할로알킬, C₃-C₇ 할로알케닐, C₂-C₇ 알콕시알킬, C₁-C₇ 알콕시, C₁-C₅ 알킬티오 또는 C₂-C₃ 알콕시카르보닐; 또는 할로젠, C₁-C₄ 알킬 또는 C₁-C₄ 할로알킬로 치환되거나 비치환된 페닐이고;

L은 직접 결합, C₁-C₄ 알칸디일 또는 C₂-C₄ 알켄디일이며;

G는 H, C(=O)R⁵, C(=S)R⁵, CO₂R⁶, C(=O)SR⁶, S(O)₂R⁵, CONR⁷R⁸, S(O)₂NR⁷R⁸ 또는 P(=O)R⁹R¹⁰; 또는 C₁-C₄ 알킬, C₂-C₄ 알케닐, C₂-C₄ 알키닐, C₁-C₄ 할로알킬, C₂-C₄ 할로알케닐, C₂-C₄ 할로알키닐, C₂-C₄ 알콕시알킬, C₃-C₆ 사이클로알킬 또는 C₄-C₇ 사이클로알킬알킬; 또는 5원 또는 6원 복소환이고;

A는,



중에서 선택되며;

$X^1, X^2, X^3, X^4, X^5, X^6, X^7, X^8, X^9$ 및 X^{10} 은 각각 독립적으로 N 또는 CR^3 이되; $X^1, X^2, X^3, X^4, X^5, X^6, X^7, X^8, X^9$ 및 X^{10} 중 4개 이하는 N이고;

Y는 O, S 또는 NR^4 이며;

Y^1 은 O, S, NR^4 또는 $CR^{3a}R^{3b}$ 이고;

각 R^3 는 독립적으로 H, 할로젠, 시아노, 니트로, C_1-C_5 알킬, C_2-C_5 알케닐, C_2-C_5 알키닐, C_3-C_5 사이클로알킬, C_4-C_5 사이클로알킬알킬, C_1-C_5 할로알킬, C_3-C_5 할로알케닐, C_3-C_5 할로알키닐, C_2-C_5 알콕시알킬, C_1-C_5 알콕시, C_1-C_5 할로알콕시, C_1-C_5 알킬티오, C_1-C_4 알킬설퍼닐, C_1-C_4 알킬설포닐, C_1-C_5 할로알킬티오 또는 C_2-C_5 알콕시카르보닐이며;

R^{3a} 는 H, 할로젠, -CN, 니트로, C_1-C_5 알킬, C_2-C_5 알케닐, C_2-C_5 알키닐, C_3-C_5 사이클로알킬, C_4-C_5 사이클로알킬 알킬, C_1-C_5 할로알킬, C_3-C_5 할로알케닐, C_3-C_5 할로알키닐, C_2-C_5 알콕시알킬, C_1-C_5 알콕시, C_1-C_5 할로알콕시, C_1-C_5 알킬티오, C_1-C_4 알킬설퍼닐, C_1-C_4 알킬설포닐, C_1-C_5 할로알킬티오 또는 C_2-C_5 알콕시카르보닐이고;

R^{3b} 는 H, 할로젠, -CN, 니트로, C_1-C_5 알킬, C_2-C_5 알케닐, C_2-C_5 알키닐, C_3-C_5 사이클로알킬, C_4-C_5 사이클로알킬 알킬, C_1-C_5 할로알킬, C_3-C_5 할로알케닐, C_3-C_5 할로알키닐, C_2-C_5 알콕시알킬, C_1-C_5 알콕시, C_1-C_5 할로알콕시, C_1-C_5 알킬티오, C_1-C_4 알킬설퍼닐, C_1-C_4 알킬설포닐, C_1-C_5 할로알킬티오 또는 C_2-C_5 알콕시카르보닐이거나;

R^{3a} 및 R^{3b} 는 함께 =O로서 취해지거나; R^{3a} 및 R^{3b} 는 이들이 결합되어 있는 탄소 원자와 함께 3원 내지 7원 탄소환을 형성하며;

R^4 는 H, C_1-C_3 알킬 또는 C_1-C_3 할로알킬이고;

R^5 및 R^7 은 독립적으로 H, C_1-C_7 알킬, C_3-C_7 알케닐, C_3-C_7 알키닐, C_3-C_7 사이클로알킬, C_1-C_7 할로알킬, C_3-C_7 할로알케닐, C_2-C_7 알콕시알킬 또는 C_4-C_7 사이클로알킬알킬; 또는 각각 할로젠, C_1-C_4 알킬 또는 C_1-C_4 할로알킬로 치환되거나 비치환된 페닐, 벤질 또는 5원 내지 6원 복소환이며;

R^6 는 C_1-C_7 알킬, C_3-C_7 알케닐, C_3-C_7 알키닐, C_3-C_7 사이클로알킬, C_2-C_7 할로알킬, C_3-C_7 할로알케닐, C_2-C_7 알콕시알킬 또는 C_4-C_7 사이클로알킬알킬; 또는 각각 할로젠, C_1-C_4 알킬 또는 C_1-C_4 할로알킬로 치환되거나 비치환된 페닐, 벤질 또는 5원 내지 6원 복소환이고;

R^8 은 H, C_1-C_7 알킬, C_2-C_7 알케닐, C_2-C_7 알키닐, C_3-C_7 사이클로알킬, C_4-C_7 사이클로알킬알킬, C_1-C_7 할로알킬 또는 C_2-C_7 알콕시알킬이며;

R^9 은 C_1-C_7 알킬 또는 C_1-C_7 알콕시이고;

R^{10} 은 C_1-C_7 알킬 또는 C_1-C_7 알콕시이다.

청구항 2

제1항에 있어서,

R^1 은 H, C_1-C_7 알킬, C_3-C_8 알킬카르보닐알킬, C_3-C_8 알콕시카르보닐알킬, C_4-C_7 알킬사이클로알킬, C_3-C_7 알케닐, C_3-C_7 알키닐, C_3-C_7 사이클로알킬, C_4-C_7 사이클로알킬알킬, C_2-C_3 시아노알킬, C_1-C_4 니트로알킬, C_2-C_7 할로알콕시알킬, C_1-C_7 할로알킬, C_3-C_7 할로알케닐, C_2-C_7 알콕시알킬, C_3-C_7 알킬티오알킬, C_1-C_7 알콕시, 벤질 또는 페닐이고;

W는 O이며;

A는 A-1, A-4 및 A-6 중에서 선택되고;

L은 직접 결합이며;

G는 H, $C(=O)R^5$, $C(=S)R^5$, CO_2R^6 , $C(=O)SR^6$, $CONR^7R^8$ 또는 $P(=O)R^9R^{10}$; 또는 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_3-C_6 사이클로알킬 또는 C_4-C_7 사이클로알킬알킬이고;

R^2 는 H, 할로젠, 시아노, 포르밀, C_1-C_7 알킬, C_3-C_8 알킬카르보닐알킬, C_3-C_8 알콕시카르보닐알킬, C_2-C_4 알킬카르보닐, C_2-C_7 알킬카르보닐옥시, C_4-C_7 알킬사이클로알킬, C_3-C_7 알케닐, C_3-C_7 알키닐, C_1-C_4 알킬설퍼닐, C_1-C_4

알킬설폰닐, C₁-C₄ 알킬아미노, C₂-C₈ 다이알킬아미노, C₃-C₇ 사이클로알킬, C₄-C₇ 사이클로알킬알킬, C₂-C₃ 시아노알킬, C₁-C₄ 니트로알킬, C₂-C₇ 할로알콕시알킬, C₁-C₇ 할로알킬, C₃-C₇ 할로알케닐, C₂-C₇ 알콕시알킬, C₁-C₇ 알콕시 또는 C₁-C₅ 알킬티오이며;

각 R³는 독립적으로 H, 할로젠, C₁-C₃ 알킬, C₃-C₄ 사이클로알킬, C₁-C₃ 할로알킬 또는 C₁-C₃ 알콕시인 화합물.

청구항 3

제2항에 있어서,

R¹은 H, C₁-C₇ 알킬, C₃-C₈ 알콕시카르보닐알킬, C₄-C₇ 알킬사이클로알킬, C₃-C₇ 사이클로알킬, C₄-C₇ 사이클로알킬알킬, C₂-C₃ 시아노알킬, C₁-C₄ 니트로알킬, C₂-C₇ 할로알콕시알킬, C₁-C₇ 할로알킬, C₂-C₇ 알콕시알킬, C₃-C₇ 알킬티오알킬, C₁-C₇ 알콕시 또는 벤질이고;

A는 A-1이며;

G는 H, C(=O)R⁵, CO₂R⁶, CONR⁷R⁸ 또는 P(=O)R⁹R¹⁰; 또는 C₁-C₄ 알킬, C₂-C₄ 알케닐, C₁-C₄ 할로알킬, C₂-C₄ 할로알케닐, C₂-C₄ 알콕시알킬, C₃-C₆ 사이클로알킬 또는 C₄-C₇ 사이클로알킬알킬이고;

R²는 H, 할로젠, 시아노, 포르밀, C₁-C₇ 알킬, C₂-C₄ 알킬카르보닐, C₂-C₇ 알킬카르보닐옥시, C₄-C₇ 알킬사이클로알킬, C₁-C₄ 알킬설피닐, C₁-C₄ 알킬설폰닐, C₁-C₄ 알킬아미노, C₃-C₇ 사이클로알킬, C₄-C₇ 사이클로알킬알킬, C₂-C₃ 시아노알킬, C₁-C₄ 니트로알킬, C₂-C₇ 할로알콕시알킬, C₁-C₇ 할로알킬, C₂-C₇ 알콕시알킬 또는 C₁-C₇ 알콕시이며;

각 R³는 독립적으로 H, 할로젠, C₁-C₂ 알킬, 사이클로프로필 또는 C₁-C₂ 할로알킬인 화합물.

청구항 4

제3항에 있어서,

R¹은 C₁-C₄ 알킬, C₃-C₄ 사이클로알킬, C₂-C₃ 시아노알킬, C₁-C₃ 할로알킬 또는 C₂-C₄ 알콕시알킬이고;

G는 H, C(=O)R⁵, CO₂R⁶ 또는 P(=O)R⁹R¹⁰; 또는 C₁-C₄ 알킬, C₁-C₄ 할로알킬, C₂-C₄ 알콕시알킬 또는 C₃-C₆ 사이클로알킬이며;

R²는 H, 할로젠, 시아노, C₁-C₄ 알킬, C₃-C₅ 사이클로알킬, C₁-C₃ 할로알킬, C₂-C₄ 알콕시알킬 또는 C₁-C₃ 알콕시이고;

각 R³는 독립적으로 H, 할로젠, 메틸, 에틸 또는 CF₃인 화합물.

청구항 5

제4항에 있어서,

R¹은 메틸, 에틸, *n*-프로필 또는 2-메톡시에틸이고;

G는 H, C(=O)R⁵ 또는 CO₂R⁶; 또는 C₂-C₄ 알콕시알킬 또는 C₃-C₆ 사이클로알킬이며;

R²는 H, Cl, Br, I, -CN, 메틸 또는 메톡시이고;

각 R³는 독립적으로 H, F, Cl, Br 또는 메틸인 화합물.

청구항 6

제1항에 있어서,

4-(9-안트라세닐)-6-클로로-5-하이드록시-2-메틸-3(2H)-피리다지논;

6-클로로-4-(10-클로로-9-안트라세닐)-5-하이드록시-2-메틸-3(2H)-피리다지논; 및

4-(10-브로모-9-안트라세닐)-6-클로로-5-하이드록시-2-메틸-3(2H)-피리다지논으로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 화합물.

청구항 7

제1항 내지 제6항 중 어느 한 항의 화합물과, 계면활성제, 고체 희석제 및 액체 희석제로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 적어도 하나의 성분을 포함하는 제초제 조성물.

청구항 8

제1항 내지 제6항 중 어느 한 항의 화합물과, 다른 제초제 및 제초제 약해경감제 (safener)로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 적어도 하나의 추가의 활성 성분과, 계면활성제, 고체 희석제 및 액체 희석제로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 적어도 하나의 성분을 포함하는 제초제 조성물.

청구항 9

(a) 제1항 내지 제6항 중 어느 한 항의 화합물과, (b) (b1) 광계 (photosystem) II 저해제, (b2) 아세트하이드록시산 신타아제 (AHAS) 저해제, (b3) 아세틸-CoA 카르복실라아제 (ACCCase) 저해제, (b4) 옥신 유사체 (mimic), (b5) 5-에놀-피루빌시킴에이트-3-포스페이트 (EPSP) 신타아제 저해제, (b6) 광계 I 전자 다이버터 (electron diverter), (b7) 프로토포르피리노겐 옥시다아제 (PPO) 저해제, (b8) 글루타민 신테타아제 (GS) 저해제, (b9) 초장쇄 (very long chain) 지방산 (VLCFA) 쉐 연장 효소 (elongase) 저해제, (b10) 옥신 수송 저해제, (b11) 파이토펬 불포화효소 (PDS) 저해제, (b12) 4-하이드록시페닐-피루베이트 다이옥시게나아제 (HPPD) 저해제, (b13) 호모겐티세이트 솔라네실 트랜스퍼라제 (HST) 저해제, (b14) 셀룰로오스 생합성 저해제, (b15) 유사분열 방해물질 (mitotic disruptor), 유기비소제 (organic arsenical), 아실람, 브로모뷰타이드, 신메틸린, 쿠밀루론, 다조메트, 디펜조퀴트, 덤론, 에토벤자니드, 플루레놀, 포사민, 포사민-암모늄, 히단토시딘, 메탐, 메틸덤론, 올레산, 옥사지클로메폰, 펠라르곤산, 피리부티카브를 비롯한 다른 제초제, 및 (b16) 제초제 약해경감제, 및 (b1) 내지 (b16)의 화합물의 염 중에서 선택되는 적어도 하나의 추가의 활성 성분을 포함하는 제초제 혼합물.

청구항 10

원하지 않는 초목 (vegetation) 또는 이의 환경과 제1항 내지 제6항 중 어느 한 항의 화합물의 제초적 유효량을 접촉시키는 단계를 포함하는, 원하지 않는 초목 성장을 억제하는 방법.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은 특정한 피리다지논 제초제, 이의 N-옥사이드, 이의 염 및 이의 조성물, 및 원하지 않는 초목 (vegetation)을 방제하기 위한 이들의 사용 방법에 관한 것이다.

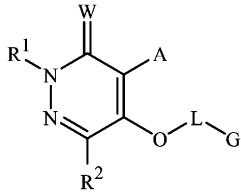
배경 기술

[0002] 원하지 않는 초목의 방제는 높은 작물 효율의 달성에 있어서 매우 중요하다. 특히 그 중에서도, 벼, 대두, 사탕무, 옥수수, 감자, 밀, 보리, 토마토 및 플랜테이션 작물과 같은 그러한 유용한 작물에 있어서의 선택적 잡초 성장 억제의 달성은 매우 바람직하다. 이러한 유용한 작물에 있어서의 억제되지 않은 잡초 생장은 현저한 생산성 저하를 야기하므로, 소비자에게 가격 상승을 전가할 수 있다. 비농경지 (noncrop area)에서의 원하지 않는 초목의 방제도 중요하다. 이 때문에 다수의 제품이 시판되고 있으나, 더욱 효과적이고, 보다 저렴하며, 독성이 낮고, 환경적으로 보다 안전하거나 작용 부위가 상이한 신규 화합물이 계속해서 요구되고 있다.

발명의 내용

[0003] 발명의 요약

[0004] 본 발명은 화학식 1의 화합물 (모든 입체 이성질체 포함), 이의 N-옥사이드 및 이의 염, 이들을 함유하는 농업용 조성물 및 제초제로서의 이들의 용도에 관한 것이다:



1

[0005]

[0006] 상기 식에서,

[0007] W는 O 또는 S이고;

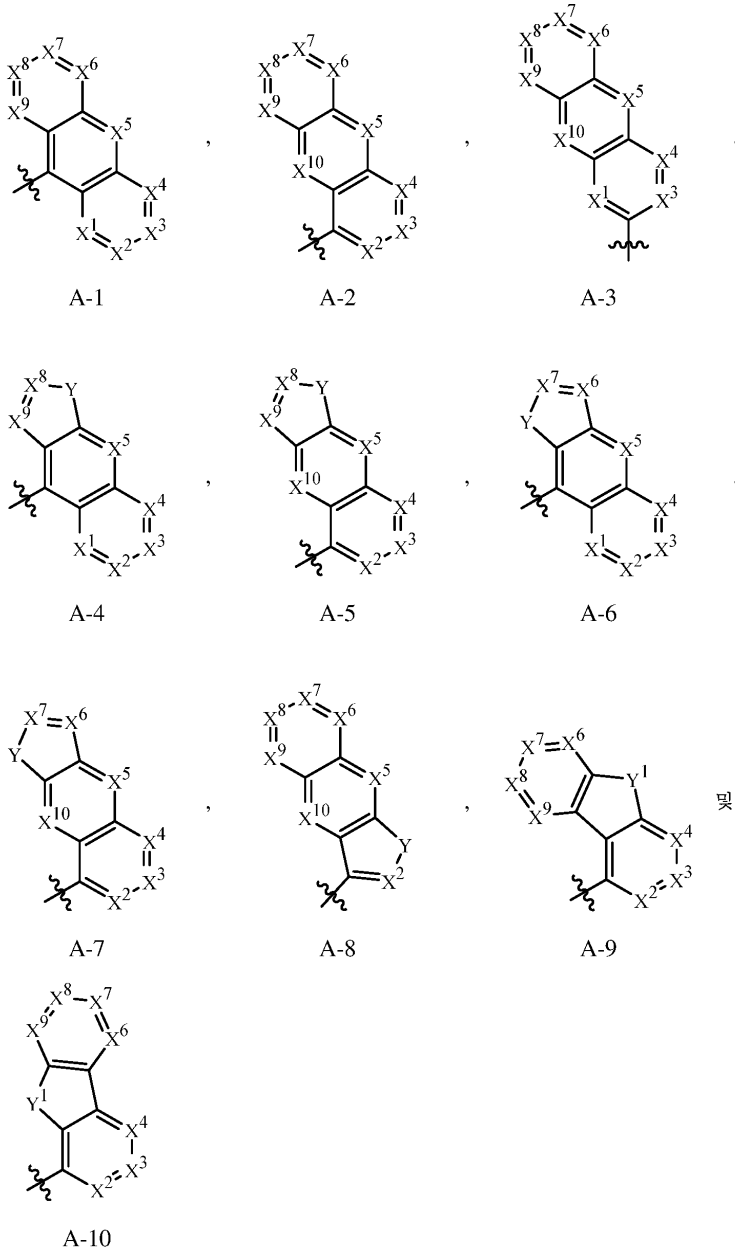
[0008] R¹은 H, C₁-C₇ 알킬, C₃-C₈ 알킬카르보닐알킬, C₃-C₈ 알콕시카르보닐알킬, C₄-C₇ 알킬사이클로알킬, C₃-C₇ 알케닐, C₃-C₇ 알키닐, C₃-C₇ 사이클로알킬, C₄-C₇ 사이클로알킬알킬, C₂-C₃ 시아노알킬, C₁-C₄ 니트로알킬, C₂-C₇ 할로알콕시알킬, C₁-C₇ 할로알킬, C₃-C₇ 할로알케닐, C₂-C₇ 알콕시알킬, C₃-C₇ 알킬티오알킬, C₁-C₇ 알콕시, 벤질 또는 페닐; 또는 탄소, 및 1개 이하의 O 및 1개 이하의 S 중에서 선택되는 환 구성원 (ring member)을 포함하는 5원 또는 6원 포화 또는 부분 포화 복소환이며;

[0009] R²는 H, 할로젠, 시아노, 포르밀, C₁-C₇ 알킬, C₃-C₈ 알킬카르보닐알킬, C₃-C₈ 알콕시카르보닐알킬, C₂-C₄ 알킬카르보닐, C₂-C₇ 알킬카르보닐옥시, C₄-C₇ 알킬사이클로알킬, C₃-C₇ 알케닐, C₃-C₇ 알키닐, C₁-C₄ 알킬설피닐, C₁-C₄ 알킬설포닐, C₁-C₄ 알킬아미노, C₂-C₈ 다이알킬아미노, C₃-C₇ 사이클로알킬, C₄-C₇ 사이클로알킬알킬, C₂-C₃ 시아노알킬, C₁-C₄ 니트로알킬, C₂-C₇ 할로알콕시알킬, C₁-C₇ 할로알킬, C₃-C₇ 할로알케닐, C₂-C₇ 알콕시알킬, C₁-C₇ 알콕시, C₁-C₅ 알킬티오 또는 C₂-C₃ 알콕시카르보닐; 또는 할로젠, C₁-C₄ 알킬 또는 C₁-C₄ 할로알킬로 임의로 치환되는 페닐이고;

[0010] L은 직접 결합, C₁-C₄ 알칸디일 또는 C₂-C₄ 알켄디일이며;

[0011] G는 H, C(=O)R⁵, C(=S)R⁵, CO₂R⁶, C(=O)SR⁶, S(O)₂R⁵, CONR⁷R⁸, S(O)₂NR⁷R⁸ 또는 P(=O)R⁹R¹⁰; 또는 C₁-C₄ 알킬, C₂-C₄ 알케닐, C₂-C₄ 알키닐, C₁-C₄ 할로알킬, C₂-C₄ 할로알케닐, C₂-C₄ 할로알키닐, C₂-C₄ 알콕시알킬, C₃-C₆ 사이클로알킬 또는 C₄-C₇ 사이클로알킬알킬; 또는 5원 또는 6원 복소환이고;

[0012] A는,



[0013]

[0014] 중에서 선택되며;

[0015] $X^1, X^2, X^3, X^4, X^5, X^6, X^7, X^8, X^9$ 및 X^{10} 은 각각 독립적으로 N 또는 CR^3 이되; $X^1, X^2, X^3, X^4, X^5, X^6, X^7, X^8, X^9$ 및 X^{10} 중 4개 이하는 N이고;

[0016] Y는 O, S 또는 NR^4 이며;

[0017] Y^1 은 O, S, NR^4 또는 $CR^{3a}R^{3b}$ 이고;

[0018] 각 R^3 는 독립적으로 H, 할로젠, 시아노, 니트로, C_1-C_5 알킬, C_2-C_5 알케닐, C_2-C_5 알키닐, C_3-C_5 사이클로알킬, C_4-C_5 사이클로알킬알킬, C_1-C_5 할로알킬, C_3-C_5 할로알케닐, C_3-C_5 할로알키닐, C_2-C_5 알콕시알킬, C_1-C_5 알콕시, C_1-C_5 할로알콕시, C_1-C_5 알킬티오, C_1-C_4 알킬설퍼닐, C_1-C_4 알킬설포닐, C_1-C_5 할로알킬티오 또는 C_2-C_5 알콕시카르보닐이며;

[0019] R^{3a}는 H, 할로젠, -CN, 니트로, C₁-C₅ 알킬, C₂-C₅ 알케닐, C₂-C₅ 알키닐, C₃-C₅ 사이클로알킬, C₄-C₅ 사이클로알킬 알킬, C₁-C₅ 할로알킬, C₃-C₅ 할로알케닐, C₃-C₅ 할로알키닐, C₂-C₅ 알콕시알킬, C₁-C₅ 알콕시, C₁-C₅ 할로알콕시, C₁-C₅ 알킬티오, C₁-C₄ 알킬설퍼닐, C₁-C₄ 알킬설포닐, C₁-C₅ 할로알킬티오 또는 C₂-C₅ 알콕시카르보닐이고;

[0020] R^{3b}는 H, 할로젠, -CN, 니트로, C₁-C₅ 알킬, C₂-C₅ 알케닐, C₂-C₅ 알키닐, C₃-C₅ 사이클로알킬, C₄-C₅ 사이클로알킬 알킬, C₁-C₅ 할로알킬, C₃-C₅ 할로알케닐, C₃-C₅ 할로알키닐, C₂-C₅ 알콕시알킬, C₁-C₅ 알콕시, C₁-C₅ 할로알콕시, C₁-C₅ 알킬티오, C₁-C₄ 알킬설퍼닐, C₁-C₄ 알킬설포닐, C₁-C₅ 할로알킬티오 또는 C₂-C₅ 알콕시카르보닐이거나;

[0021] R^{3a} 및 R^{3b}는 함께 =O로서 취해지거나; R^{3a} 및 R^{3b}는 이들이 결합되어 있는 탄소 원자와 함께, 임의로 치환된 3원 내지 7원 탄소환을 형성하며;

[0022] R⁴는 H, C₁-C₃ 알킬 또는 C₁-C₃ 할로알킬이고;

[0023] R⁵ 및 R⁷은 독립적으로 H, C₁-C₇ 알킬, C₃-C₇ 알케닐, C₃-C₇ 알키닐, C₃-C₇ 사이클로알킬, C₁-C₇ 할로알킬, C₃-C₇ 할로알케닐, C₂-C₇ 알콕시알킬 또는 C₄-C₇ 사이클로알킬알킬; 또는 각각 할로젠, C₁-C₄ 알킬 또는 C₁-C₄ 할로알킬로 임의로 치환되는 페닐, 벤질 또는 5원 내지 6원 복소환이며;

[0024] R⁶는 C₁-C₇ 알킬, C₃-C₇ 알케닐, C₃-C₇ 알키닐, C₃-C₇ 사이클로알킬, C₂-C₇ 할로알킬, C₃-C₇ 할로알케닐, C₂-C₇ 알콕시알킬 또는 C₄-C₇ 사이클로알킬알킬; 또는 각각 할로젠, C₁-C₄ 알킬 또는 C₁-C₄ 할로알킬로 임의로 치환되는 페닐, 벤질 또는 5원 내지 6원 복소환이고;

[0025] R⁸은 H, C₁-C₇ 알킬, C₂-C₇ 알케닐, C₂-C₇ 알키닐, C₃-C₇ 사이클로알킬, C₄-C₇ 사이클로알킬알킬, C₁-C₇ 할로알킬 또는 C₂-C₇ 알콕시알킬이며;

[0026] R⁹은 C₁-C₇ 알킬 또는 C₁-C₇ 알콕시이고;

[0027] R¹⁰은 C₁-C₇ 알킬 또는 C₁-C₇ 알콕시이다.

[0028] 특히, 본 발명은 화학식 1의 화합물 (모든 입체 이성질체 포함), 이의 N-옥사이드 또는 이의 염에 관한 것이다. 본 발명은 또한 본 발명의 화합물 (즉, 제조적 유효량으로)과, 계면활성제, 고체 희석제 및 액체 희석제로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 적어도 하나의 성분을 포함하는 제조제 조성물에 관한 것이다. 본 발명은 또한 원하지 않는 초목 또는 이의 환경과 본 발명의 화합물 (예를 들어, 본 명세서에 기재된 조성물로서)의 제조적 유효량을 접촉시키는 단계를 포함하는, 원하지 않는 초목 성장을 억제하는 방법에 관한 것이다.

[0029] 본 발명은 또한 (a) 화학식 1로부터 선택되는 화합물, 이의 N-옥사이드 및 이의 염과, (b) 후술하는 (b1) 내지 (b16) 중에서 선택되는 적어도 하나의 추가의 활성 성분 및 (b1) 내지 (b16)의 화합물의 염을 포함하는 제조제 혼합물을 포함한다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0030] 본 명세서에서 사용되는 용어 "포함하다", "포함하는", "(으)로는 ~를 들 수 있다 (에는 ~가 포함된다)", "~를 들 수 있는 (~가 포함되는)", "가지다", "갖는", "함유하다", "함유하는", "특징으로 하는" 또는 임의의 이들의 기타 변형체는 명시적으로 제한되는 비배타적인 포함 사항을 망라하는 것으로 의도된다. 예를 들어, 요소들의 목록을 포함하는 조성물, 혼합물, 공정 또는 방법은 반드시 그러한 요소만으로 제한되지는 않고, 명확하게 열거되지 않거나 그러한 조성물, 혼합물, 공정 또는 방법에 내재적인 다른 요소를 포함할 수도 있다.

[0031] 연결구 "이루어지는"은 명시되지 않은 임의의 요소, 단계, 또는 성분을 제외한다. 청구범위 중에서라면, 이는 인용된 것과 통상적으로 관련된 불순물을 제외하고는 인용된 것 이외의 물질을 포함하지 않을 것이다. 어구 "이루어지는"이 도입부 직후 보다는 청구범위의 구성요소부에 나타나 있는 경우에는, 그러한 구성요소부에 나타낸 요소만을 제한하며; 전체적으로는 다른 요소가 청구범위에서 배제되는 것은 아니다.

- [0032] 연결구 "실질적으로 이루어지는"은 문자 그대로 개시된 것 이외에도, 물질, 단계, 특성, 성분, 또는 요소를 포함하는 조성물 또는 방법을 정의하는데 사용되나, 단, 이들 추가의 물질, 단계, 특성, 성분, 또는 요소는 청구된 발명의 기본적인 신규한 특성(들)에 실질적으로 영향을 미치지 않는다. 용어 "실질적으로 이루어지는"은 "포함하는"과 "이루어지는" 사이의 중간 입장을 차지한다.
- [0033] 본 발명자가 개방형 용어, 예컨대 "포함하는"으로 발명 또는 그의 부분을 정의하는 경우에는, (달리 기술되지 않는 한) 용어 "실질적으로 이루어지는" 또는 "이루어지는"을 사용하여 이러한 발명을 기재하는 것으로도 해석되어야 한다는 것을 용이하게 이해할 것이다.
- [0034] 또한, 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 충족된다: A는 참 (또는 존재함)이고 B는 거짓 (또는 존재하지 않음), A는 거짓 (또는 존재하지 않음)이고 B는 참 (또는 존재함), A 및 B가 모두 참 (또는 존재함)임.
- [0035] 또한, 본 발명의 요소 또는 성분 앞의 부정 관사 ("a" 및 "an")는 그 요소 또는 성분의 경우 (즉, 존재)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.
- [0036] 단어 단독으로 사용되거나 단어의 조합으로 사용되는 본 명세서에 언급된 용어 "모종"은 종자 배아로부터 발육되는 어린 식물을 의미한다.
- [0037] 단독으로 또는 "광엽 (broadleaf) 잡초"와 같은 낱말에 사용되는 본 명세서에 언급된 용어 "광엽"은 다이카트 (dicot; dicotyledon의 단수형) 또는 쌍떡잎 식물 - 2장의 떡잎을 갖는 배아를 특징으로 하는 피자 식물군을 설명하는데 사용되는 용어 - 을 의미한다.
- [0038] 본 명세서에 사용되는 용어 "알킬화"는 친핵체가 탄소 함유 라디칼로부터 할라이드 또는 설포네이트와 같은 이탈기를 치환하는 반응을 지칭한다. 달리 명시되지 않는 한, 용어 "알킬화"는 탄소 함유 라디칼을 알킬로 제한하지 않는다.
- [0039] 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 에틸렌, 1-프로페닐, 2-프로페닐, 및 다른 부테닐, 펜테닐 및 헥세닐 이성질체를 포함한다. "알케닐"은 또한 폴리에텐, 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-헥사디에닐을 포함할 수 있다.
- [0040] "알콕시"는 예를 들어, 메톡시, 에톡시, *n*-프로필옥시, 아이소프로필옥시 및 다른 부톡시, 펜톡시 및 헥실옥시 이성질체를 포함한다. "알콕시알킬"은 알킬이 알콕시 치환된 것을 나타낸다. "알콕시알킬"의 예로는 CH_3OCH_2 , $\text{CH}_3\text{OCH}_2\text{CH}_2$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OCH}_2$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OCH}_2$ 및 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{CH}_2$ 를 들 수 있다. "알콕시알콕시"는 알콕시가 알콕시 치환된 것을 나타낸다. "알킬티오"는 분지상 또는 직쇄상 알킬티오 부분, 예컨대 메틸티오, 에틸티오, 및 다른 프로필티오, 부틸티오, 펜틸티오 및 헥실티오 이성질체를 포함한다. "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. "알킬설퍼닐"은 알킬설퍼닐기의 두 에난티오머를 포함한다. "알킬설퍼닐"의 예로는 $\text{CH}_3\text{S(O)-}$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{S(O)-}$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{S(O)-}$, $(\text{CH}_3)_2\text{CHS(O)-}$, 및 다른 부틸설퍼닐, 펜틸설퍼닐 및 헥실설퍼닐 이성질체를 들 수 있다. "알킬설포닐"의 예로는 $\text{CH}_3\text{S(O)}_2-$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{S(O)}_2-$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{S(O)}_2-$, $(\text{CH}_3)_2\text{CHS(O)}_2-$, 및 다른 부틸설포닐, 펜틸설포닐 및 헥실설포닐 이성질체를 들 수 있다. "시아노알킬"은 1개의 시아노기로 치환된 알킬기를 나타낸다. "시아노알킬"의 예로는 NCCH_2 및 NCCH_2CH_2 (또는 $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CN}$ 으로 특정됨)를 들 수 있다. "니트로알킬"은 1개의 니트로기로 치환된 알킬기를 나타낸다. "니트로알킬"의 예로는 O_2NCH_2 및 $\text{O}_2\text{NCH}_2\text{CH}_2$ (또는 $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{NO}_2$ 로 특정됨)를 들 수 있다. "시아노"는 NC-를 의미하고, "포르밀"은 HC(=O)-를 의미한다. "알킬아미노"는 직쇄상 또는 분지상 알킬로 치환된 NH 라디칼을 포함한다. "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.

[0041] "사이클로알킬"은 예를 들어, 사이클로프로필, 사이클로부틸, 사이클로펜틸 및 사이클로헥실을 포함한다. 용어 "사이클로알킬알킬"은 알킬 부분이 사이클로알킬 치환된 것을 나타낸다. "사이클로알킬알킬"의 예로는 사이클로프로필메틸, 사이클로펜틸에틸, 및 직쇄상 또는 분지상 알킬기에 결합된 다른 사이클로알킬 부분을 들 수 있다. 용어 "알킬사이클로알킬"은 사이클로알킬 부분에 결합된 알킬기를 나타낸다.

[0042] 단독의 또는 "할로알킬"과 같은 복합어에서의, 또는 "할로겐으로 치환된 알킬"과 같은 설명에서 사용될 때의 용어 "할로겐"은 불소, 염소, 브롬 또는 요오드를 포함한다. 또한, "할로알킬"과 같은 복합어에서 사용될 때, 또는 "할로겐으로 치환된 알킬"과 같은 설명에서 사용될 때, 상기 알킬은 동일하거나 상이할 수 있는 할로겐 원자로 부분적으로 또는 완전히 치환될 수 있다. "할로알킬" 또는 "할로겐으로 치환된 알킬"의 예로는 F_3C , ClCH_2 , CF_3CH_2 및 CF_3CCl_2 를 들 수 있다. 용어 "할로알콕시", "할로알콕시알킬", "할로알킬티오", "할로알케닐", "할로알키닐" 등은 용어 "할로알킬"과 유사하게 정의된다. "할로알콕시"의 예로는 $\text{CF}_3\text{O}-$, $\text{CCl}_3\text{CH}_2\text{O}-$, $\text{HCF}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{O}-$ 및 $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{O}-$ 를 들 수 있다. "할로알콕시알킬"의 예로는 CF_3OCH_2- , $\text{CCl}_3\text{CH}_2\text{OCH}_2-$, $\text{HCF}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OCH}_2-$ 및 $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{OCH}_2-$ 를 들 수 있다. "할로알킬티오"의 예로는 $\text{CCl}_3\text{S}-$, $\text{CF}_3\text{S}-$, $\text{CCl}_3\text{CH}_2\text{S}-$ 및 $\text{ClCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{S}-$ 를 들 수 있다. "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. "할로알키닐"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.

[0043] "알킬카르보닐"은 $\text{C}(=\text{O})$ 부분에 결합된 직쇄상 또는 분지상 알킬 부분을 나타낸다. "알킬카르보닐"의 예로는 $\text{CH}_3\text{C}(=\text{O})-$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{C}(=\text{O})-$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{C}(=\text{O})-$, $(\text{CH}_3)_2\text{CHC}(=\text{O})-$ 및 다른 부록시- 또는 펜톡시카르보닐 이성질체를 들 수 있다. "알콕시카르보닐"은 $\text{C}(=\text{O})$ 부분에 결합된 직쇄상 또는 분지상 알콕시 부분을 나타낸다. "알콕시카르보닐"의 예로는 $\text{CH}_3\text{OC}(=\text{O})-$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OC}(=\text{O})-$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OC}(=\text{O})-$, $(\text{CH}_3)_2\text{CHOC}(=\text{O})-$ 및 다른 부록시- 또는 펜톡시카르보닐 이성질체를 들 수 있다. 용어 "알콕시카르보닐알킬"은 알킬 부분을 통해 결합된 직쇄상 또는 분지상 알콕시 부분을 나타낸다. 용어 "알킬카르보닐알킬"은 알킬 부분을 통해 결합된 직쇄상 또는 분지상 알킬카르보닐 부분을 나타낸다. 용어 "알킬카르보닐옥시"는 산소를 통해 결합된 알킬카르보닐 부분을 나타낸다. 알킬카르보닐옥시의 예로는 $\text{CH}_3\text{C}(=\text{O})\text{O}-$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{C}(=\text{O})\text{O}-$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{C}(=\text{O})\text{O}-$ 및 $(\text{CH}_3)_2\text{CHC}(=\text{O})\text{O}-$ 를 들 수 있다. 용어 "알칸디일" 또는 "알켄디일"은 각각, 직쇄상 또는 분지상 알칸 또는 알켄 연결쇄를 지칭한다. 알칸디일의 예로는 $-\text{CH}_2-$, $-\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)-$ 또는 $-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2-$ 를 들 수 있다. 알켄디일의 예로는 $-\text{CH}=\text{CH}-$, $-\text{CH}_2\text{C}=\text{CH}-$ 또는 $-\text{CH}=\text{C}(\text{CH}_3)-$ 를 들 수 있다. 치환기 위치와 관련하여 용어 "인접한"은 "옆에" 또는 "바로 옆에"를 의미한다.

[0044] 치환기 중 탄소 원자의 총수는 " C_i-C_j " 접두사로 나타내어지며, 여기서 i 및 j 는 1 내지 7의 수이다. 예를 들어, C_1-C_4 알킬설포닐은 메틸설포닐 내지 부틸설포닐을 나타내고; C_2 알콕시알킬은 CH_3OCH_2- 를 나타내며; C_3 알콕시알킬은 예를 들어, $\text{CH}_3\text{CH}(\text{OCH}_3)-$, $\text{CH}_3\text{OCH}_2\text{CH}_2-$ 또는 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OCH}_2-$ 를 나타내고; C_4 알콕시알킬은 총 4개의 탄소 원자를 포함하는 알콕시기로 치환된 알킬기의 다양한 이성질체를 나타내며, 이의 예로는 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OCH}_2-$ 및 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{CH}_2-$ 를 들 수 있다.

[0045] 기가 수소일 수 있는 치환기, 예를 들어 R^2 또는 R^4 를 포함하면, 이러한 치환기가 수소로서 취해지는 경우, 이는 비치환된 상기 기와 동등한 것으로 인식된다. 기의 하나 이상의 위치가 "치환되지 않은" 또는 "비치환된"이라고 하면, 수소 원자는 임의의 자유 원자가를 채우도록 부착된다. 임의로 치환된 것으로 달리 지시되지 않는 한, 용어 "페닐"은 비치환된 페닐을 의미한다. 임의로 치환된 것으로 달리 지시되지 않는 한, 용어 "벤질"은 비치환된 벤질을 의미한다.

[0046] L이 직접 결합하고, G가 H인(즉, 화학식 1의 "O-L-G" 치환기는 하이드록시 부분임) 화학식 1의 화합물은 식물 효소 또는 수용체 상의 활성 부위에 결합하여 식물에 대하여 제초 효과를 일으키는 화합물인 것으로 여겨진다. 치환기 L-G가 식물 또는 환경 내에서 하이드록시 부분으로 변환될 수 있는 기를 형성하는 화학식 1의 다른 화합물은 유사한 제초 효과를 제공하며, 본 발명의 범위 내에 있다. 따라서, L-G는 화학식 1의 화합물의 제초 활성을 소멸시키지 않고, 식물 또는 토양에서 가수분해, 산화, 환원 또는 달리 대사되거나 될 수 있어서, pH에 따라 해리 또는 비해리 형태로 된 카복실산 작용기를 제공할 수 있는 당업계에 공지된 임의의 유도체일 수 있다. 용어 "환계"는 2개 이상의 융합 환을 나타낸다. 용어 "이환계"는 2개의 융합 환으로 구성되는 환계를 나타낸다.

[0047] 본 발명의 화합물은 하나 이상의 입체 이성질체로 존재할 수 있다. 다양한 입체 이성질체는 에난티오머, 다이어스테레오머, 아트로프 이성질체 (atropisomer) 및 기하 이성질체를 포함한다. 입체 이성질체는 동일한 구조이나, 이들의 원자 공간 배열이 상이한 이성질체이며, 에난티오머, 다이어스테레오머, 시스-트랜스 이성질체 (기하 이성질체로도 공지됨) 및 아트로프 이성질체를 포함한다. 아트로프 이성질체는 회전 장벽이 이성질체 중을 분리할 수 있도록 충분히 높은 경우에 단일 결합을 중심으로 한 회전 제한으로 생긴다. 당업자는 하나의 입체 이성질체가 다른 입체 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. 게다가, 당업자는 상기 입체 이성질체를 분리, 농축, 및/또는 선택적으로 제조하는 방법을 인지한다. 본 발명의 화합물은 입체 이성질체들의 혼합물, 개별 입체 이성질체 또는 광학 활성 형태로서 존재할 수 있다.

[0048] 화학식 1의 화합물은 전형적으로 2개 이상의 형태로 존재하므로, 화학식 1은 화학식 1이 나타내는 화합물의 모든 결정질 형태 및 비결정질 형태를 포함한다. 비결정질 형태는 왁스 및 겜과 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 - 결정 격자 내에 분자의 상이한 배열 및/또는 형태를 가짐 - 로 결정화될 수 있는 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 조성이 다를 수 있다. 다형체는 결정의 형상, 밀도, 경도, 색상, 화학적 안정성, 용점, 흡습성, 현탁성, 용해 속도 및 생물학적 이용률과 같은 화학적, 물리적 및 생물학적 특성이 상이할 수 있다. 당업자는 화학식 1의 화합물의 다형체가 동일한 화학식 1의 화합물의 다른 다형체 또는 다형체들의 혼합물에 비해, 유익한 효과 (예를 들어, 유용한 제형의 제조에 대한 적합성, 생물학적 성능 개선)를 나타낼 수 있음을 인지할 것이다. 화학식 1의 화합물의 특정 다형체의 제조 및 분리는 예를 들어, 선택된 용매 및 온도를 이용한 결정화를 비롯하여, 당업자에게 공지된 방법에 의해 달성될 수 있다. 다형체의 포괄적인 논의를 위해, 문헌 [R. Hilfiker, Ed., *Polymorphism in the Pharmaceutical Industry*, Wiley-VCH, Weinheim, 2006]을 참조한다.

[0049] 당업자는 질소가 산화물로의 산화를 위해 이용가능한 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 삼차 아민이 N-옥사이드를 형성할 수 있음을 인식할 것이다. 복소환 및 삼차 아민의 N-옥사이드의 제조에 관한 합성 방법은 피옥시산, 예컨대 피아세트산 및 m-클로로피벤조산 (MCPBA), 과산화수소, 알킬 하이드로퍼옥사이드, 예컨대 t-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 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.

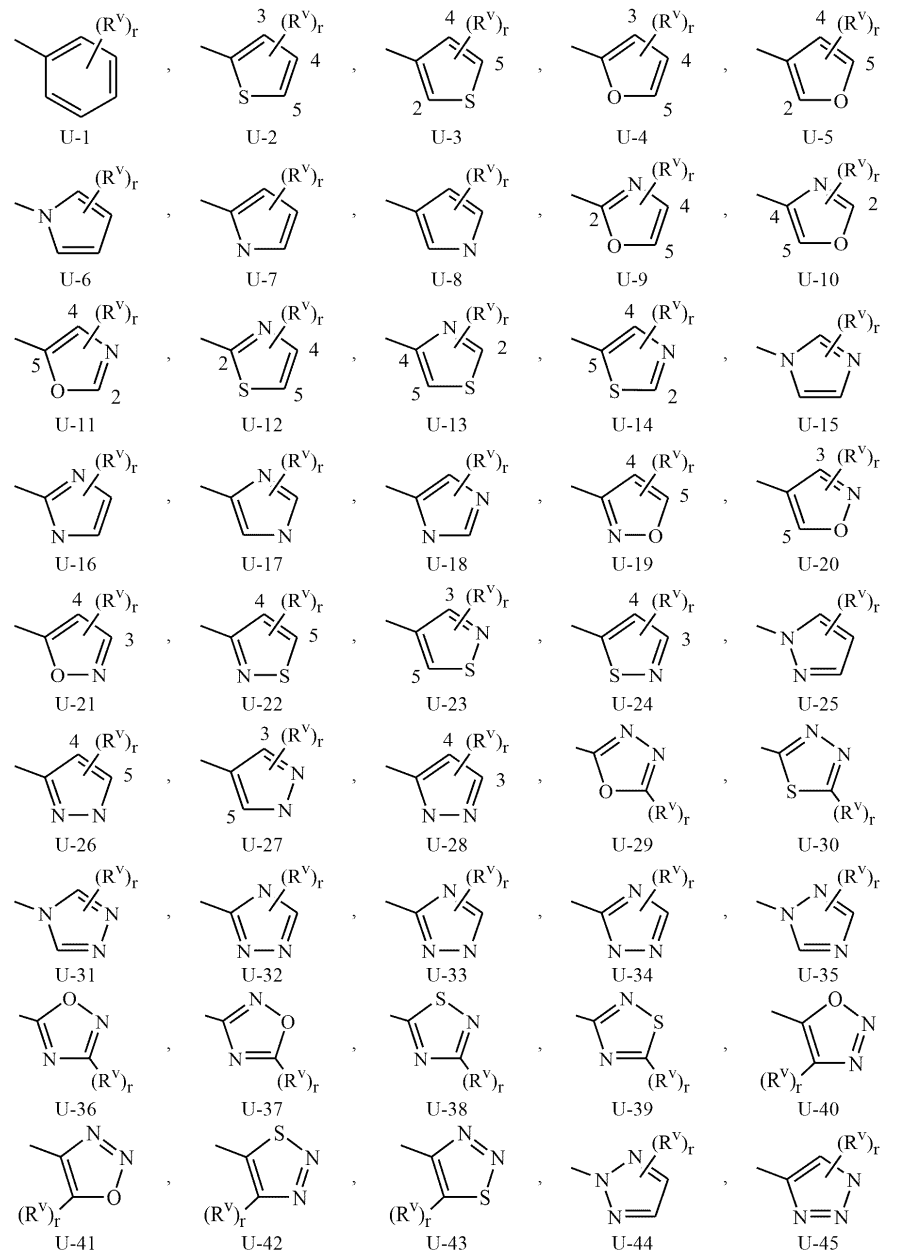
[0050] 당업자라면, 당해 환경에서 그리고 생리학적 조건 하에서 화합물의 염이 그의 대응하는 비염 형태 (nonsalt form)와 평형 상태에 있기 때문에, 염은 비염 형태의 생물학적 유용성을 공유한다는 것을 인지한다. 따라서, 다양한 화학식 1의 화합물의 염은 원하지 않는 조목의 방제에 유용하다 (즉, 농업용으로 적합함). 화학식 1의 화합물의 염은 무기 또는 유기 산, 예를 들어 브롬화수소산, 염산, 질산, 인산, 황산, 아세트산, 부티르산, 푸마르산, 락트산, 말레산, 말론산, 옥살산, 프로피온산, 살리실산, 타르타르산, 4-톨루엔설폰산 또는 발레르산과 의 산 부가염을 포함한다. 화학식 1의 화합물이 산 부분, 예컨대 예닐 작용기 (예를 들어, L은 직접 결합이고, G는 H임)를 포함하는 경우에는, 염은 또한 유기 또는 무기 염기, 예컨대 피리딘, 트라이에틸아민 또는 암모니아와 함께 형성된 염, 또는 나트륨, 칼륨, 리튬, 칼슘, 마그네슘 또는 바륨의 아미드, 수소화물, 수산화물 또는 탄산염을 포함한다. 따라서, 본 발명은 화학식 1로부터 선택되는 화합물, 이의 N-옥사이드 및 농업용으로 적합한 이의 염을 포함한다.

[0051] R⁵, R⁶ 또는 R⁷이 5원 또는 6원 질소 함유 복소환인 경우에는, 달리 기재되지 않는 한, 임의의 이용가능한 탄소

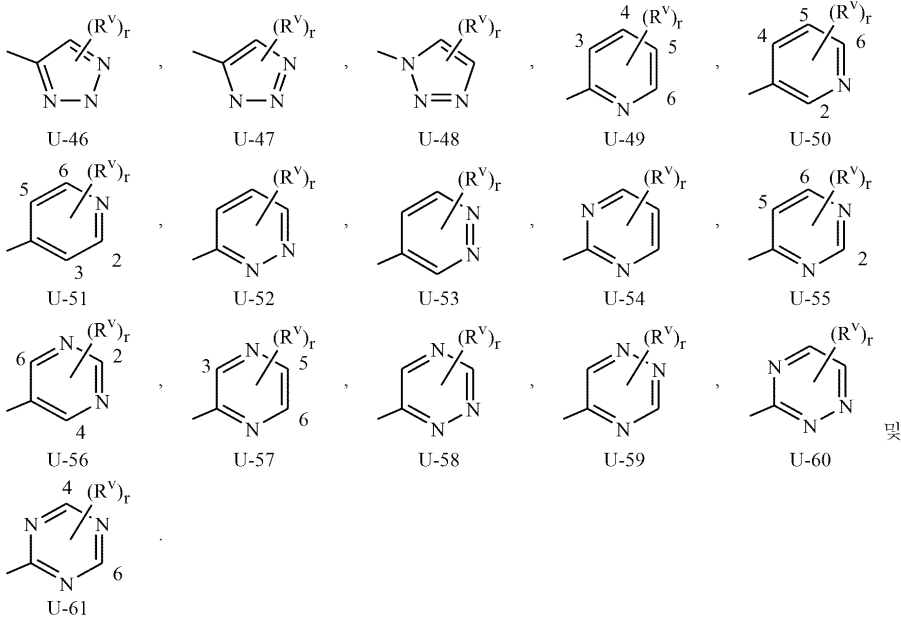
또는 질소 환 원자를 통해 화학식 1의 나머지 부분에 부착될 수 있다. 상술한 바와 같이, R^5 , R^6 또는 R^7 은 발명의 요약에 정의된 치환기 그룹 중에서 선택되는 하나 이상의 치환기로 임의로 치환된 (그 중에서도 특히) 페닐일 수 있다. 1개 내지 5개의 치환기로 임의로 치환된 페닐의 예로는 증거 1의 U-1 (여기서, R^v 는 R^5 , R^6 또는 R^7 에 대하여 발명의 요약에 정의된 치환기이고, r은 정수이다)로서 예시된 환이다.

[0052] 상술한 바와 같이, R^5 , R^6 또는 R^7 은 발명의 요약에 정의된 치환기 그룹 중에서 선택되는 하나 이상의 치환기로 임의로 치환된, 포화 또는 불포화일 수 있는 (그 중에서도 특히) 5원 또는 6원 복소환일 수 있다. 하나 이상의 치환기로 임의로 치환된 5원 또는 6원 불포화 방향족 복소환의 예로는 증거 1에 예시된 환 U-2 내지 U-61 (여기서, R^v 는 R^5 , R^6 또는 R^7 에 대하여 발명의 요약에 정의된 임의의 치환기 (즉, 할로젠, C_1 - C_4 알킬 또는 C_1 - C_4 할로 알킬)이고, r은 각 U 기의 이용가능한 위치의 수로 제한되는 0 내지 4의 정수이다)을 들 수 있다. U-29, U-30, U-36, U-37, U-38, U-39, U-40, U-41, U-42 및 U-43이 단 하나의 이용가능한 위치를 갖기 때문에, 이들 U 기에 있어서의 r은 0 또는 1의 정수로 제한되며, r이 0인 것은 U 기가 비치환되고, 수소가 (R^v)_r로 나타내는 위치에 존재한다는 것을 의미한다.

[0053] 증거 1



[0054]



[0055]

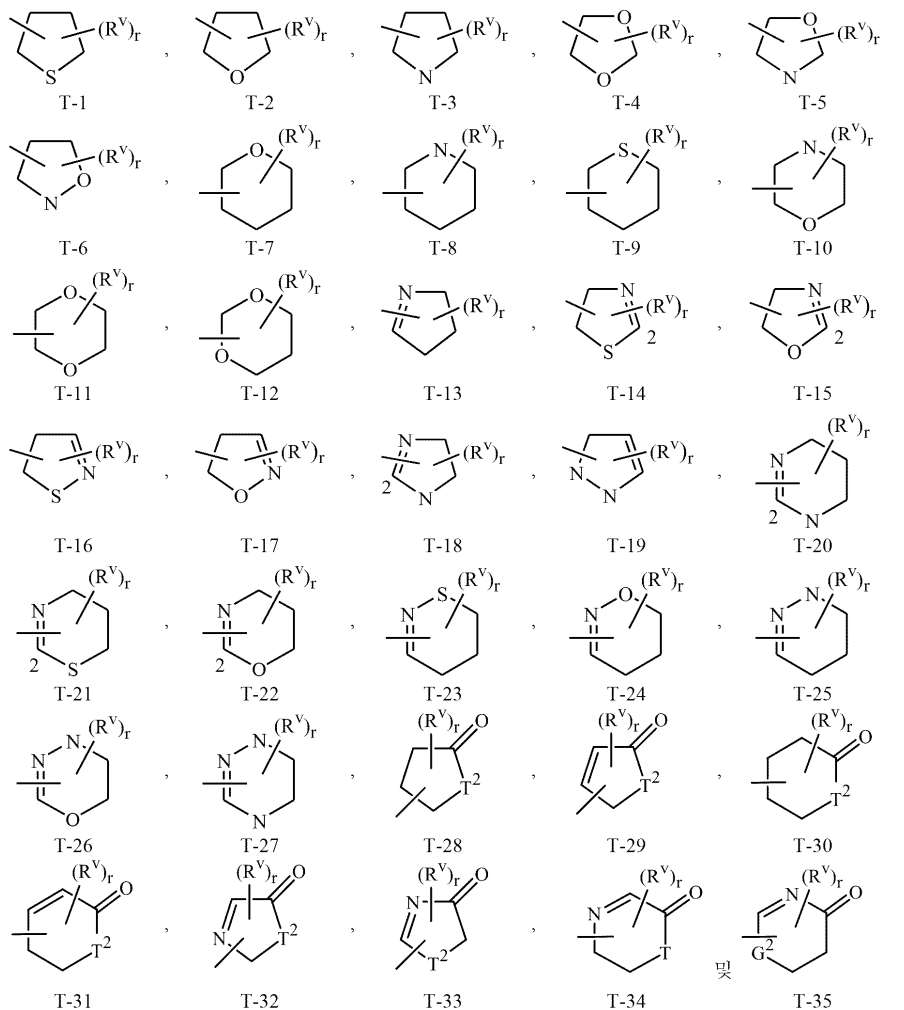
[0056]

R^5 , R^6 또는 R^7 이 R^5 , R^6 또는 R^7 에 관하여 발명의 요약에 정의된 치환기 그룹 중에서 선택되는 하나 이상의 치환기로 임의로 치환된 5원 또는 6원 포화 또는 불포화 비방향족 복소환인 경우, 상기 복소환의 1개 또는 2개의 탄소 환 구성원이 임의로 카르보닐 부분의 산화형으로 될 수 있음에 주목한다.

[0057]

2개 이하의 O 원자 및 2개 이하의 S 원자 중에서 선택되는 환 구성원을 포함하며, 탄소 원자 환 구성원이 5개 이하의 할로겐 원자로 임의로 치환된 포화 또는 비방향족 불포화 복소환인 5원 또는 6원 복소환의 예로는 증거 2에 예시된 환 T-1 내지 T-35를 들 수 있다. T 기의 부착점이 유동적인 것으로 예시되는 경우에는, T 기는 수소 원자의 치환에 의해 T 기의 임의의 이용가능한 탄소 또는 질소를 통해 화학식 1의 나머지 부분에 부착될 수 있음에 주목한다. R^v 에 상응하는 임의의 치환기는 수소 원자를 치환함으로써 임의의 이용가능한 탄소 또는 질소에 부착될 수 있다. 이러한 T 환의 경우, r은 전형적으로, 각 T 기의 이용가능한 위치의 수로 제한되는 0 내지 4의 정수이다. 용어 "임의로 치환된"은 어구 "치환되거나 비치환된"을 의미한다. T^2 가 N인 경우, 질소 원자는 R^5 , R^6 또는 R^7 에 대하여 발명의 요약에 정의된 R^v 에 상응하는 치환기 또는 H로 치환함으로써 그의 원자가를 완전히 채울 수 있음에 주목한다. R^1 에 대한 예시적인 값은 T-1, T-2, T-7 및 T-9 (즉, R^1 이 그 중에서도 특히, 탄소, 및 1개 이하의 O 및 1개 이하의 S 중에서 선택되는 환 구성원을 포함하는 5원 또는 6원 포화 또는 부분 포화 복소환인 경우) 및 T-28 내지 T-31 (여기서, T^2 는 O 또는 S임)을 포함한다.

[0058] 증거 2



[0059]

[0060]

R^v 기가 구조 U-1 내지 U-61에 나타나 있지만, 이들이 임의의 치환기이기 때문에, 이들이 존재할 필요가 없다는 것에 주목한다. R^v 가 원자에 결합되어 있는 H인 경우에는, 상기 원자가 비치환된 경우와 동일하다는 것에 주목한다. 이들의 원자기를 채우도록 치환을 요하는 질소 원자는 H 또는 R^v 로 치환된다. $(R^v)_r$ 과 U 기 사이의 부착점이 이동적인 것으로 예시되는 경우에는, $(R^v)_r$ 은 U 기의 임의의 이용가능한 탄소 원자 또는 질소 원자에 부착될 수 있음에 주목한다. U 기의 부착점이 이동적인 것으로 예시되는 경우에는, U 기는 수소 원자의 치환에 의해 U 기의 임의의 이용가능한 탄소 또는 질소를 통해 화학식 1의 나머지 부분에 부착될 수 있음에 주목한다. 일부의 U 기가 다만 4개 미만의 R^v 기 (예를 들어, U-2 내지 U-5, U-7 내지 U-48, 및 U-52 내지 U-61)로 치환될 수 있음에 주목한다.

[0061]

방향족 및 비방향족 복소환 및 복소환계를 제조할 수 있는 다양한 합성 방법이 당업계에 공지되어 있으며; 광범위한 검토를 위해서는 총 8권의 문헌 [*Comprehensive Heterocyclic Chemistry*, A. R. Katritzky and C. W. Rees editors-in-chief, Pergamon Press, Oxford, 1984] 및 총 12권의 문헌 [*Comprehensive Heterocyclic Chemistry II*, A. R. Katritzky, C. W. Rees and E. F. V. Scriven editors-in-chief, Pergamon Press, Oxford, 1996]을 참조한다.

[0062]

발명의 요약에 기재된 본 발명의 실시 형태는 하기를 포함한다 (여기서, 하기 실시 형태에 사용되는 화학식 1은 이의 N-옥사이드 및 염을 포함한다):

[0063]

실시 형태 1. 발명의 요약에 기재된 화학식 1의 화합물, 이의 N-옥사이드 및 이의 염, 이들을 함유하는 조성물, 및 원하지 않는 초목을 방지하기 위한 이들의 사용 방법.

- [0064] 실시 형태 2. R¹이 H, C₁-C₇ 알킬, C₃-C₈ 알킬카르보닐알킬, C₃-C₈ 알콕시카르보닐알킬, C₄-C₇ 알킬사이클로알킬, C₃-C₇ 알케닐, C₃-C₇ 알키닐, C₃-C₇ 사이클로알킬, C₄-C₇ 사이클로알킬알킬, C₂-C₃ 시아노알킬, C₁-C₄ 니트로알킬, C₂-C₇ 할로알콕시알킬, C₁-C₇ 할로알킬, C₃-C₇ 할로알케닐, C₂-C₇ 알콕시알킬, C₃-C₇ 알킬티오알킬, C₁-C₇ 알콕시, 벤질 또는 페닐인 실시 형태 1의 화합물.
- [0065] 실시 형태 3. R¹이 H, C₁-C₇ 알킬, C₃-C₈ 알콕시카르보닐알킬, C₄-C₇ 알킬사이클로알킬, C₃-C₇ 사이클로알킬, C₄-C₇ 사이클로알킬알킬, C₂-C₃ 시아노알킬, C₁-C₄ 니트로알킬, C₂-C₇ 할로알콕시알킬, C₁-C₇ 할로알킬, C₂-C₇ 알콕시알킬, C₃-C₇ 알킬티오알킬, C₁-C₇ 알콕시 또는 벤질인 실시 형태 1 또는 2 중 어느 하나의 화합물.
- [0066] 실시 형태 4. R¹이 C₁-C₄ 알킬, C₃-C₄ 사이클로알킬, C₂-C₃ 시아노알킬, C₁-C₃ 할로알킬 또는 C₂-C₄ 알콕시알킬인 실시 형태 3의 화합물.
- [0067] 실시 형태 5. R¹이 C₁-C₃ 알킬, NCCH₂CH₂-, C₁-C₂ 할로알킬 또는 2-메톡시에틸인 실시 형태 4의 화합물.
- [0068] 실시 형태 6. R¹이 메틸, 에틸, *n*-프로필 또는 2-메톡시에틸인 실시 형태 5의 화합물.
- [0069] 실시 형태 7. R¹이 메틸 또는 에틸인 실시 형태 6의 화합물.
- [0070] 실시 형태 8. R¹이 메틸인 실시 형태 6의 화합물.
- [0071] 실시 형태 9. R¹이 H 이외의 것인 실시 형태 1의 화합물.
- [0072] 실시 형태 10. R¹이 페닐 이외의 것인 실시 형태 1의 화합물.
- [0073] 실시 형태 11. W가 0인 실시 형태 1 내지 10 중 어느 하나의 화합물.
- [0074] 실시 형태 12. A가 A-1, A-4 및 A-6 중에서 선택되는 화학식 1 또는 실시 형태 1 내지 11 중 어느 하나의 화합물.
- [0075] 실시 형태 13. A가 A-1인 화학식 1 또는 실시 형태 12의 화합물.
- [0076] 실시 형태 14. A가 A-4인 화학식 1 또는 실시 형태 12의 화합물.
- [0077] 실시 형태 15. A가 A-6인 화학식 1 또는 실시 형태 12의 화합물.
- [0078] 실시 형태 16. A가 A-1이고, X¹, X², X³, X⁴, X⁵, X⁶, X⁷, X⁸ 및 X⁹이 각각 독립적으로 CR³인 화학식 1 또는 실시 형태 12의 화합물.
- [0079] 실시 형태 17. A가 A-1이고, X¹, X², X³, X⁴, X⁵, X⁶, X⁷, X⁸ 및 X⁹이 각각 CH인 화학식 1 또는 실시 형태 12의 화합물.
- [0080] 실시 형태 18. R²가 H, 할로젠, 시아노, 포르밀, C₁-C₇ 알킬, C₃-C₈ 알킬카르보닐알킬, C₃-C₈ 알콕시카르보닐알킬, C₂-C₄ 알킬카르보닐, C₂-C₇ 알킬카르보닐옥시, C₄-C₇ 알킬사이클로알킬, C₃-C₇ 알케닐, C₃-C₇ 알키닐, C₁-C₄ 알킬설피닐, C₁-C₄ 알킬설포닐, C₁-C₄ 알킬아미노, C₂-C₈ 다이알킬아미노, C₃-C₇ 사이클로알킬, C₄-C₇ 사이클로알킬알킬, C₂-C₃ 시아노알킬, C₁-C₄ 니트로알킬, C₂-C₇ 할로알콕시알킬, C₁-C₇ 할로알킬, C₃-C₇ 할로알케닐, C₂-C₇ 알콕시알킬, C₁-C₇ 알콕시 또는 C₁-C₅ 알킬티오인 실시 형태 1 내지 17 중 어느 하나의 화합물.
- [0081] 실시 형태 19. R²가 H, 할로젠, 시아노, 포르밀, C₁-C₇ 알킬, C₂-C₄ 알킬카르보닐, C₂-C₇ 알킬카르보닐옥시, C₄-C₇ 알킬사이클로알킬, C₁-C₄ 알킬설피닐, C₁-C₄ 알킬설포닐, C₁-C₄ 알킬아미노, C₃-C₇ 사이클로알킬, C₄-C₇ 사이클로알킬알킬, C₂-C₃ 시아노알킬, C₁-C₄ 니트로알킬, C₂-C₇ 할로알콕시알킬, C₁-C₇ 할로알킬, C₂-C₇ 알콕시알킬 또는 C₁-C₇ 알콕시인 실시 형태 18의 화합물.

- [0082] 실시 형태 20. R^2 가 H, 할로젠, 시아노, C_1-C_4 알킬, C_3-C_5 사이클로알킬, C_1-C_3 할로알킬, C_2-C_4 알콕시알킬 또는 C_1-C_3 알콕시인 실시 형태 19의 화합물.
- [0083] 실시 형태 21. R^2 가 H, 할로젠, 시아노, C_1-C_3 알킬, 사이클로프로필, C_1-C_2 할로알킬, 메톡시 또는 에톡시인 실시 형태 20의 화합물.
- [0084] 실시 형태 22. R^2 가 H, Cl, Br, I, 시아노, 메틸 또는 메톡시인 실시 형태 21의 화합물.
- [0085] 실시 형태 23. R^2 가 H, Cl, 메틸 또는 메톡시인 실시 형태 22의 화합물.
- [0086] 실시 형태 24. R^2 가 Cl 또는 메틸인 실시 형태 23의 화합물.
- [0087] 실시 형태 25. R^2 가 H 이외의 것인 실시 형태 1 내지 23 중 어느 하나의 화합물.
- [0088] 실시 형태 26. R^2 가 페닐 이외의 것인 실시 형태 1 내지 17 중 어느 하나의 화합물.
- [0089] 실시 형태 27. R^2 가 할로젠, C_1-C_7 알킬, C_1-C_4 알킬아미노, C_2-C_8 다이알킬아미노 또는 C_3-C_7 사이클로알킬인 실시 형태 18의 화합물.
- [0090] 실시 형태 28. R^2 가 C_1-C_4 알킬아미노 또는 C_2-C_8 다이알킬아미노인 실시 형태 27의 화합물.
- [0091] 실시 형태 29. L이 직접 결합인 화학식 1 또는 실시 형태 1 내지 28 중 어느 하나의 화합물.
- [0092] 실시 형태 30. L이 직접 결합이고, G가 H, $C(=O)R^5$, $C(=S)R^5$, CO_2R^6 , $C(=O)SR^6$, $CONR^7R^8$ 또는 $P(=O)R^9R^{10}$; 또는 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_3-C_6 사이클로알킬 또는 C_4-C_7 사이클로알킬알킬인 화학식 1 또는 실시 형태 1 내지 28 중 어느 하나의 화합물.
- [0093] 실시 형태 31. G가 H, $C(=O)R^5$, CO_2R^6 , $CONR^7R^8$ 또는 $P(=O)R^9R^{10}$; 또는 C_1-C_4 알킬, C_2-C_4 알케닐, C_1-C_4 할로알킬, C_2-C_4 할로알케닐, C_2-C_4 알콕시알킬, C_3-C_6 사이클로알킬 또는 C_4-C_7 사이클로알킬알킬인 실시 형태 30의 화합물.
- [0094] 실시 형태 32. G가 H, $C(=O)R^5$, CO_2R^6 또는 $P(=O)R^9R^{10}$; 또는 C_1-C_4 알킬, C_1-C_4 할로알킬, C_2-C_4 알콕시알킬 또는 C_3-C_6 사이클로알킬인 실시 형태 31의 화합물.
- [0095] 실시 형태 33. G가 H, $C(=O)R^5$ 또는 CO_2R^6 ; 또는 C_2-C_4 알콕시알킬 또는 C_3-C_6 사이클로알킬인 실시 형태 32의 화합물.
- [0096] 실시 형태 34. G가 H인 실시 형태 33의 화합물.
- [0097] 실시 형태 35. G가 $C(=O)R^5$ 인 실시 형태 33의 화합물.
- [0098] 실시 형태 36. G가 CO_2R^6 인 실시 형태 33의 화합물.
- [0099] 실시 형태 37. G가 C_2-C_4 알콕시알킬인 실시 형태 33의 화합물.
- [0100] 실시 형태 38. G가 C_3-C_6 사이클로알킬인 실시 형태 33의 화합물.
- [0101] 실시 형태 39. L이 C_1-C_2 알칸디일 또는 C_2-C_3 알켄디일인 화학식 1 또는 실시 형태 1 내지 28 중 어느 하나의 화합물.
- [0102] 실시 형태 40. L이 C_1-C_2 알칸디일인 실시 형태 39의 화합물.

- [0103] 실시 형태 41. L이 C₂-C₃ 알켄디일인 실시 형태 39의 화합물.
- [0104] 실시 형태 42. L이 -CH₂- 또는 -CH=CH-인 실시 형태 39의 화합물.
- [0105] 실시 형태 43. L이 -CH₂-인 실시 형태 42의 화합물.
- [0106] 실시 형태 44. 각 R³가 독립적으로 H, 할로겐, C₁-C₃ 알킬, C₃-C₄ 사이클로알킬, C₁-C₃ 할로알킬 또는 C₁-C₃ 알콕시인 화학식 1 또는 실시 형태 1 내지 43 중 어느 하나의 화합물.
- [0107] 실시 형태 45. 각 R³가 독립적으로 H, 할로겐, C₁-C₂ 알킬, 사이클로프로필 또는 C₁-C₂ 할로알킬인 실시 형태 44의 화합물.
- [0108] 실시 형태 46. 각 R³가 독립적으로 H, 할로겐, 메틸, 에틸 또는 CF₃인 실시 형태 45의 화합물.
- [0109] 실시 형태 47. 각 R³가 독립적으로 H, F, Cl, Br 또는 메틸인 실시 형태 46의 화합물.
- [0110] 실시 형태 48. 각 R³가 H인 실시 형태 47의 화합물.
- [0111] 상기 실시 형태 1 내지 48 및 본 명세서에 기재된 임의의 다른 실시 형태를 비롯한 본 발명의 실시 형태는 어떤 식으로도 조합될 수 있으며, 실시 형태의 변수에 대한 설명은 화학식 1의 화합물에 관한 것일 뿐만 아니라, 화학식 1의 화합물의 제조에 유용한 출발 화합물 및 중간 화합물에 관한 것이기도 하다. 게다가, 상기 실시 형태 1 내지 48 및 본 명세서에 기재된 임의의 다른 실시 형태를 비롯한 본 발명의 실시 형태, 및 이들의 임의의 조합은 본 발명의 조성물 및 방법에 관한 것이다.
- [0112] 실시 형태 A.
- [0113] R¹이 H, C₁-C₇ 알킬, C₃-C₈ 알킬카르보닐알킬, C₃-C₈ 알콕시카르보닐알킬, C₄-C₇ 알킬사이클로알킬, C₃-C₇ 알케닐, C₃-C₇ 알키닐, C₃-C₇ 사이클로알킬, C₄-C₇ 사이클로알킬알킬, C₂-C₃ 시아노알킬, C₁-C₄ 니트로알킬, C₂-C₇ 할로알콕시알킬, C₁-C₇ 할로알킬, C₃-C₇ 할로알케닐, C₂-C₇ 알콕시알킬, C₃-C₇ 알킬티오알킬, C₁-C₇ 알콕시, 벤질 또는 페닐이고;
- [0114] W가 0이며;
- [0115] A가 A-1, A-4 및 A-6 중에서 선택되고;
- [0116] L이 직접 결합하며;
- [0117] G가 H, C(=O)R⁵, C(=S)R⁵, CO₂R⁶, C(=O)SR⁶, CONR⁷R⁸ 또는 P(=O)R⁹R¹⁰; 또는 C₁-C₄ 알킬, C₂-C₄ 알케닐, C₂-C₄ 알키닐, C₁-C₄ 할로알킬, C₂-C₄ 할로알케닐, C₂-C₄ 할로알키닐, C₂-C₄ 알콕시알킬, C₃-C₆ 사이클로알킬 또는 C₄-C₇ 사이클로알킬알킬이고;
- [0118] R²가 H, 할로겐, 시아노, 포르밀, C₁-C₇ 알킬, C₃-C₈ 알킬카르보닐알킬, C₃-C₈ 알콕시카르보닐알킬, C₂-C₄ 알킬카르보닐, C₂-C₇ 알킬카르보닐옥시, C₄-C₇ 알킬사이클로알킬, C₃-C₇ 알케닐, C₃-C₇ 알키닐, C₁-C₄ 알킬설퍼닐, C₁-C₄ 알킬설포닐, C₁-C₄ 알킬아미노, C₂-C₈ 다이알킬아미노, C₃-C₇ 사이클로알킬, C₄-C₇ 사이클로알킬알킬, C₂-C₃ 시아노알킬, C₁-C₄ 니트로알킬, C₂-C₇ 할로알콕시알킬, C₁-C₇ 할로알킬, C₃-C₇ 할로알케닐, C₂-C₇ 알콕시알킬, C₁-C₇ 알콕시 또는 C₁-C₅ 알킬티오이며;
- [0119] 각 R³가 독립적으로 H, 할로겐, C₁-C₃ 알킬, C₃-C₄ 사이클로알킬, C₁-C₃ 할로알킬 또는 C₁-C₃ 알콕시인 화학식 1의 화합물, 이의 N-옥사이드 및 이의 염, 이들을 함유하는 조성물, 및 원하지 않는 초목을 방제하기 위한 이들의 사용 방법.
- [0120] 실시 형태 B.

- [0121] R¹이 H, C₁-C₇ 알킬, C₃-C₈ 알콕시카르보닐알킬, C₄-C₇ 알킬사이클로알킬, C₃-C₇ 사이클로알킬, C₄-C₇ 사이클로알킬 알킬, C₂-C₃ 시아노알킬, C₁-C₄ 니트로알킬, C₂-C₇ 할로알콕시알킬, C₁-C₇ 할로알킬, C₂-C₇ 알콕시알킬, C₃-C₇ 알킬 티오알킬, C₁-C₇ 알콕시 또는 벤질이고;
- [0122] A가 A-1이며;
- [0123] G가 H, C(=O)R⁵, CO₂R⁶, CONR⁷R⁸ 또는 P(=O)R⁹R¹⁰; 또는 C₁-C₄ 알킬, C₂-C₄ 알케닐, C₁-C₄ 할로알킬, C₂-C₄ 할로알케닐, C₂-C₄ 알콕시알킬, C₃-C₆ 사이클로알킬 또는 C₄-C₇ 사이클로알킬알킬이고;
- [0124] R²가 H, 할로젠, 시아노, 포르밀, C₁-C₇ 알킬, C₂-C₄ 알킬카르보닐, C₂-C₇ 알킬카르보닐옥시, C₄-C₇ 알킬사이클로알킬, C₁-C₄ 알킬설퍼닐, C₁-C₄ 알킬설포닐, C₁-C₄ 알킬아미노, C₃-C₇ 사이클로알킬, C₄-C₇ 사이클로알킬알킬, C₂-C₃ 시아노알킬, C₁-C₄ 니트로알킬, C₂-C₇ 할로알콕시알킬, C₁-C₇ 할로알킬, C₂-C₇ 알콕시알킬 또는 C₁-C₇ 알콕시이며;
- [0125] 각 R³가 독립적으로 H, 할로젠, C₁-C₂ 알킬, 사이클로프로필 또는 C₁-C₂ 할로알킬인 실시 형태 A의 화합물.
- [0126] 실시 형태 C.
- [0127] R¹이 C₁-C₄ 알킬, C₃-C₄ 사이클로알킬, C₂-C₃ 시아노알킬, C₁-C₃ 할로알킬 또는 C₂-C₄ 알콕시알킬이고;
- [0128] G가 H, C(=O)R⁵, CO₂R⁶ 또는 P(=O)R⁹R¹⁰; 또는 C₁-C₄ 알킬, C₁-C₄ 할로알킬, C₂-C₄ 알콕시알킬 또는 C₃-C₆ 사이클로알킬이며;
- [0129] R²가 H, 할로젠, 시아노, C₁-C₄ 알킬, C₃-C₅ 사이클로알킬, C₁-C₃ 할로알킬, C₂-C₄ 알콕시알킬 또는 C₁-C₃ 알콕시이고;
- [0130] 각 R³가 독립적으로 H, 할로젠, 메틸, 에틸 또는 CF₃인 실시 형태 B의 화합물.
- [0131] 실시 형태 D.
- [0132] R¹이 메틸, 에틸, *n*-프로필 또는 2-메톡시에틸이고;
- [0133] G가 H, C(=O)R⁵ 또는 CO₂R⁶; 또는 C₂-C₄ 알콕시알킬 또는 C₃-C₆ 사이클로알킬이며;
- [0134] R²가 H, Cl, Br, I, -CN, 메틸 또는메톡시이고;
- [0135] 각 R³가 독립적으로 H, F, Cl, Br 또는 메틸인 실시 형태 C의 화합물.
- [0136] 구체적인 실시 형태는 하기로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 화학식 1의 화합물을 포함한다:
- [0137] 4-(9-안트라세닐)-6-클로로-5-하이드록시-2-메틸-3(2*H*)-피리다지논 (화합물 1);
- [0138] 6-클로로-4-(10-클로로-9-안트라세닐)-5-하이드록시-2-메틸-3(2*H*)-피리다지논 (화합물 2); 및
- [0139] 4-(10-브로모-9-안트라세닐)-6-클로로-5-하이드록시-2-메틸-3(2*H*)-피리다지논 (화합물 3).
- [0140] 본 발명은 또한 본 발명의 화합물 (예를 들어, 본 명세서에 기재된 조성물로서)의 제조적 유효량을 원하지 않는 초목 부위에 적용하는 단계를 포함하는, 원하지 않는 초목을 방제하는 방법에 관한 것이다. 사용 방법에 관한 실시 형태로서 주목되는 것은 상술한 실시 형태의 화합물을 포함하는 것이다. 본 발명의 화합물은 밀, 보리, 옥수수, 대두, 해바라기, 목화, 평지 및 벼와 같은 농작물과, 사탕수수, 감귤류, 유실 작물 및 견과 작물과 같은 특수 작물에 있어서의 선택적 잡초 방제에 특히 유용하다.
- [0141] 또한 실시 형태로서 주목할 만한 것은 상술한 실시 형태의 화합물을 포함하는 본 발명의 제조제 조성물이다.
- [0142] 본 발명은 또한 (a) 화학식 1로부터 선택되는 화합물, 이의 *N*-옥사이드 및 이의 염과, (b) (b1) 광계

(photosystem) II 저해제, (b2) 아세토하이드록시산 신타아제 (AHAS) 저해제, (b3) 아세틸-CoA 카르복실라아제 (ACCCase) 저해제, (b4) 옥신 유사체 (mimic), (b5) 5-에놀-피루빌시킴에이트-3-포스페이트 (EPSP) 신타아제 저해제, (b6) 광계 I 전자 다이버터 (electron diverter), (b7) 프로토포르피리노겐 옥시다아제 (PPO) 저해제, (b8) 글루타민 신타아제 (GS) 저해제, (b9) 초장쇄 (very long chain) 지방산 (VLCFA) 쉐 연장 효소 (elongase) 저해제, (b10) 옥신 수송 저해제, (b11) 파이토텐 불포화효소 (PDS) 저해제, (b12) 4-하이드록시페닐-피루베이트 다이옥시게나아제 (HPPD) 저해제, (b13) 호모겐티세이트 솔라네실 트랜스퍼라제 (HST) 저해제, (b14) 셀룰로오스 생합성 저해제, (b15) 유사분열 방해물질 (mitotic disruptor), 유기비소제 (organic arsenical), 아설람, 브로모부타이드, 신메틸린, 쿠밀루론, 다조메트, 디펜조퀴트, 덤론, 에토벤자니드, 플루레놀, 포사민, 포사민-암모늄, 히단토시딘, 메탐, 메틸덤론, 올레산, 옥사지클로메폰, 펠라르곤산 및 피리부티카브를 비롯한 다른 제초제, 및 (b16) 제초제 약해경감제 (safener) 중에서 선택되는 적어도 하나의 추가의 활성 성분 및 (b1) 내지 (b16)의 화합물의 염을 포함하는 제초제 혼합물을 포함한다.

[0143] "광계 II 저해제" (b1)는 Q_B 결합 니치 (binding niche)에서 D-1 단백질에 결합되어, 엽록체 틸라코이드막에 있어서의 Q_A 에서 Q_B 에로의 전자 전달을 저지하는 화합물이다. 광계 II를 통과하는 것이 저지된 전자는 일련의 반응을 통해 전달되어, 세포막을 파괴하여, 엽록체 팽윤, 막 누출을 일으켜서, 결국은 세포 파괴를 야기하는 독성 화합물을 생성한다. Q_B 결합 니치는 3개의 상이한 결합 부위를 갖는다: 결합 부위 A는 트리아진, 예컨대 아트라진, 트리아지논, 예컨대 헥사지논, 및 우라실, 예컨대 브로마실에 결합하고, 결합 부위 B는 페닐우레아, 예컨대 디우론에 결합하며, 결합 부위 C는 벤조티아다디아졸, 예컨대 벤타존, 니트릴, 예컨대 브로복시닐 및 페닐-피리다진, 예컨대 피리데이트에 결합한다. 광계 II 저해제의 예로는 아메트린, 아미카르바존, 아트라진, 벤타존, 브로마실, 브로모페녹심, 브로복시닐, 클로르브로무론, 클로리다존, 클로로톨루론, 클로록수론, 쿠밀루론, 시아나진, 다이무론, 데스메디팜, 데스메트린, 디메푸론, 디메타메트린, 디우론, 에티디무론, 페누론, 플루오메투론, 헥사지논, 아이옥시닐, 아이소프로투론, 아이소우론, 레나실, 리누론, 메타미트론, 메타벤즈티아주론, 메토브로무론, 메톡수론, 메트리부진, 모노리누론, 네부론, 펜타노클로르, 펜메디팜, 프로메톤, 프로메트린, 프로파닐, 프로파진, 피리다폴, 피리데이트, 시두론, 시마진, 시메트린, 테부티우론, 테르바실, 테르부메톤, 테르부틸라진, 테르부트린 및 트리아에타진을 들 수 있다.

[0144] "AHAS 저해제" (b2)는 아세토라테이트 신타아제 (ALS)로도 알려진 아세토하이드록시산 신타아제 (AHAS)를 저해하여, 단백질 합성 및 세포 증식에 필요한 분지쇄 지방족 아미노산, 예컨대 발린, 류신 및 아이소류신의 생성을 저해함으로써 식물을 죽게 하는 화합물이다. AHAS 저해제의 예로는 아미도설푸론, 아짐설푸론, 벤설푸론-메틸, 비스피리락-나트륨, 클로란설푸론-메틸, 클로리무론-에틸, 클로르설푸론, 시노설푸론, 사이클로설푸론, 디클로설푸론, 에타메트설푸론-메틸, 에톡시설푸론, 플라자설푸론, 플로라설푸론, 플루카르바존-나트륨, 플루메트설푸론, 플루피르설푸론-메틸, 플루피르설푸론-나트륨, 포람설푸론, 할로설푸론-메틸, 이마자메타벤즈-메틸, 이마자목스, 이마자픽, 이마자피르, 이마자퀸, 이마제타피르, 이마조설푸론, 요오도설푸론-메틸 (나트륨 염 포함), 아이오펜설푸론 (2-요오도-N-[(4-메톡시-6-메틸-1,3,5-트리아진-2-일)아미노]카르보닐]벤젠설푸론아미드), 메소설푸론-메틸, 메타조설푸론 (3-클로로-4-(5,6-다이하이드로-5-메틸-1,4,2-다이옥사진-3-일)-N-[(4,6-다이메톡시-2-피리미디닐)아미노]카르보닐]-1-메틸-1H-피리다졸-5-설푸론아미드), 메토설푸론, 메트설푸론-메틸, 니코설푸론, 옥사설푸론, 페녹스설푸론, 프리미설푸론-메틸, 프로폭시카르바존-나트륨, 프로피리설푸론 (2-클로로-N-[(4,6-다이메톡시-2-피리미디닐)아미노]카르보닐]-6-프로필이미다조[1,2-b]피리다진-3-설푸론아미드), 프로설푸론, 피라조설푸론-에틸, 피리벤족심, 피리프탈리드, 피리미노박-메틸, 피리티오박-나트륨, 림설푸론, 설푸메투론-메틸, 설푸설푸론, 티엔카르바존, 티펜설푸론-메틸, 트리아아파몬 (N-[2-[(4,6-다이메톡시-1,3,5-트리아진-2-일)카르보닐]-6-플루오로페닐]-1,1-다이플루오로-N-메틸메탄설푸론아미드), 트리아아설푸론, 트리아베누론-메틸, 트리아플록시설푸론 (나트륨 염 포함), 트리아플루설푸론-메틸 및 트리아토설푸론을 들 수 있다.

[0145] "ACCCase 저해제" (b3)는 식물에서의 지질 및 지방산 합성의 초기 단계를 촉진시키는데 관여하는, 아세틸-CoA 카르복실라아제 효소를 억제하는 화합물이다. 지질은 세포막의 필수 성분이며, 이것이 없으면 새로운 세포가 생성될 수 없다. 아세틸 CoA 카르복실라아제의 억제 및 후속 지질 생성 부족에 의해, 특히 분열 조직과 같은 활발한 성장 부위에서의 세포막 보전 (cell membrane integrity)의 손실을 가져온다. 결국은 새싹 및 뿌리줄기 성장이 중지되어, 새싹 분열 조직 및 뿌리줄기 눈 (bud)이 시들기 시작한다. ACCCase 저해제의 예로는 알록시딴, 부트록시딴, 클레토딴, 클로디나포프, 사이클록시딴, 사이할로포프, 디클로포프, 페녹사프로프, 플루아지포프, 할록시포프, 피녹사텐, 프로록시딴, 프로파퀴자포프, 퀴잘로포프, 세톡시딴, 테프랄록시딴 및 트랄록시딴 - 분해형, 예컨대 페녹사프로프-P, 플루아지포프-P, 할록시포프-P 및 퀴잘로포프-P 및 에스테르형, 예컨대

클로디나포프-프로파르길, 사이할로포프-부틸, 디클로포프-메틸 및 페녹사프로프-P-에틸 포함 - 을 들 수 있다.

[0146] 옥신은 다수의 식물 조직에 있어서의 성장을 조절하는 식물 호르몬이다. "옥신 유사체" (b4)는 식물 성장 호르몬 옥신과 유사한 화합물이므로, 무제한 및 무질서한 성장을 일으키게 되어, 감수성 종에 있어서의 식물 사멸을 가져온다. 옥신 유사체의 예로는 아미노사이클로피라카로르 (6-아미노-5-클로로-2-사이클로프로필-4-피리미딘카르복실산) 및 이의 메틸 및 에틸 에스테르 및 이의 나트륨 및 칼륨 염, 아미노파이랄리드, 베나졸린-에틸, 클로람벤, 클라시포스, 클로메프로프, 클로파이랄리드, 디캄바, 2,4-D, 2,4-DB, 디클로르프로프, 플루록시피르, 할라옥시펜 (4-아미노-3-클로로-6-(4-클로로-2-플루오로-3-메톡시페닐)-2-피리딘카르복실산), 할라옥시펜-메틸 (메틸 4-아미노-3-클로로-6-(4-클로로-2-플루오로-3-메톡시페닐)-2-피리딘카르복실레이트), MCPA, MCPB, 메코프로프, 피클로람, 퀴클로락, 퀴메락, 2,3,6-TBA, 트라이클로피르 및 메틸 4-아미노-3-클로로-6-(4-클로로-2-플루오로-3-메톡시페닐)-5-플루오로-2-피리딘카르복실레이트를 들 수 있다.

[0147] "EPSP 신타아제 저해제" (b5)는 방향족 아미노산, 예컨대 타이로신, 트립토판 및 페닐알라닌의 합성에 관여하는 효소, 5-에놀-피루빌시킴에이트-3-포스페이트 신타아제를 억제하는 화합물이다. EPSP 저해제 제조제는 식물 잎을 통해 용이하게 흡수되어, 체관부에서 성장점으로 전위된다. 글리포세이트는 이러한 그룹에 속하는 비교적 비선택적인 발아 후 제조제이다. 글리포세이트는 에스테르 및 염, 예컨대 암모늄, 아이소프로필암모늄, 칼륨, 나트륨 (세스퀴나트륨 포함) 및 트라이메슘 (또는 설포세이트로 명명됨)을 포함한다.

[0148] "광계 I 전자 다이버터" (b6)는 광계 I로부터 전자를 수용하여, 수회 사이클 후에, 하이드록실 라디칼을 생성하는 화합물이다. 이들 라디칼은 극도의 반응성을 나타내며, 막 지방산 및 클로로필을 비롯한 불포화 지질을 쉽게 파괴한다. 이는 세포막 보전을 파괴하므로, 세포 및 세포소기관이 "누출되어", 급속 잎 시들음 및 건조로 이어지며, 결국 식물 사멸을 초래한다. 이러한 두 번째 타입의 광합성 저해제의 예로는 디쿼트 및 파라쿼트를 들 수 있다.

[0149] "PPO 저해제" (b7)는 효소 프로토포르피리노젠 옥시다아제를 억제하여, 빠르게 식물에 고 반응성 화합물을 생성시키므로, 세포막을 파괴시켜, 세포액을 누출시키는 화합물이다. PPO 저해제의 예로는 아시플루오르펜-나트륨, 아자페니딘, 벤즈펜디존, 비페녹스, 부타페나실, 카르펜트라존, 카르펜트라존-에틸, 클로메톡시펜, 시니돈-에틸, 플루아졸레이트, 플루벤피르-에틸, 플루미클로락-펜틸, 플루미옥사진, 플루오로글리코펜-에틸, 플루티아세트-메틸, 포메사펜, 할로사펜, 락토펴, 옥사디아르길, 옥사디아존, 옥시플루오르펜, 펜톡사존, 프로플루아졸, 피라클로닐, 피라플루펜-에틸, 사플루페나실, 설펜트라존, 티디아지민, 트라이플루다이목사진 (다이하이드로-1,5-다이메틸-6-티옥소-3-[2,2,7-트라이플루오로-3,4-다이하이드로-3-옥소-4-(2-프로핀-1-일)-2H-1,4-벤족사진-6-일]-1,3,5-트리아자진-2,4(1H,3H)-다이온) 및 티아페나실 (메틸 N-[2-[[[2-클로로-5-[3,6-다이하이드로-3-메틸-2,6-다이옥소-4-(트라이플루오로메틸)-1(2H)-피리미디닐]-4-플루오로페닐]티오]-1-옥소프로필]-β-알라니네이트)을 들 수 있다.

[0150] "GS 저해제" (b8)는 식물이 암모니아를 글루타민으로 전환시키는데 사용하는 글루타민 신타아제 효소의 활성을 억제하는 화합물이다. 그 결과, 암모니아는 축적시키고, 글루타민 레벨은 감소시킨다. 식물 피해는 아마도 암모니아 독성과 다른 대사 과정에 필요한 아미노산 결핍의 복합 효과로 인해 발생된다. GS 저해제로는 글루포시네이트 및 이의 에스테르 및 염, 예컨대 글루포시네이트-암모늄 및 다른 포스포노트리신 유도체, 글루포시네이트-P ((2S)-2-아미노-4-(하이드록시메틸포스피닐)부탄산) 및 빌라나포스를 들 수 있다.

[0151] "VLCFA 쇠 연장 효소 저해제" (b9)는 다양한 화학 구조를 갖는 제조제로, 쇠 연장 효소를 억제한다. 쇠 연장 효소는 VLCFA의 생합성에 관여하는 염록체 또는 그 부근에 위치한 효소 중의 하나이다. 식물에서, 초장쇄 지방산은 잎 표면에서의 건조를 방지하고 화분립에 안정을 부여하는 소수성 폴리머의 주성분이다. 이러한 제조제로는 아세토클로르, 알라클로르, 아닐로포스, 부타클로르, 카벤스트롤, 디메타클로르, 디메텐아미드, 디페나미드, 페녹사설폰 (3-[[[2,5-다이클로로-4-에톡시페닐]메틸]설포닐]-4,5-다이하이드로-5,5-다이메틸아이속사졸), 펜트라자미드, 플루페나세트, 인다노판, 메페나세트, 메타자클로르, 메톨라클로르, 나프로아닐라이드, 나프로파마이드, 나프로파마이드-M ((2R)-N,N-다이에틸-2-(1-나프탈레닐옥시)프로판아미드), 페톡사미드, 피페로포스, 프레틸라클로르, 프로파클로르, 프로피소클로르, 피록사설폰, 및 테닐클로르 - 분해형, 예컨대 S-메톨라클로르 포함 - 및 클로로아세트아미드 및 옥시아세트아미드를 들 수 있다.

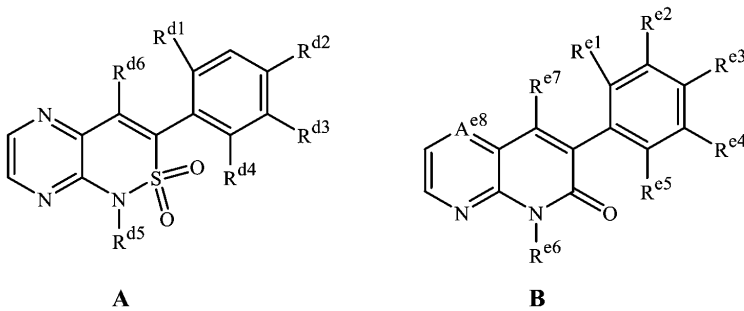
[0152] "옥신 수송 저해제" (b10)는 예를 들어, 옥신 캐리어 단백질과 결합함으로써, 식물에서 옥신 수송을 저해하는 화학 물질이다. 옥신 수송 저해제의 예로는 디플루벤조피르, 나프탈람 (N-(1-나프틸)프탈람산 및 2-[(1-나프탈레닐아미노)카르보닐]벤조산으로도 알려짐)을 들 수 있다.

[0153] "PDS 저해제" (b11)는 파이토엔 불포화효소 단계에서 카로테노이드 생합성 경로를 저해하는 화합물이다. PDS 저해제의 예로는 베플루부타미드, 디플루페니칸, 플루리돈, 플루로클로리돈, 플루르타몬, 노르플루라존 및 피콜리나펜을 들 수 있다.

[0154] "HPPD 저해제" (b12)는 4-하이드록시페닐-피루베이트 다이옥시게나아제의 합성의 생합성을 저해하는 화학 물질이다. HPPD 저해제의 예로는 벤조바이사이클론, 벤조페납, 바이사이클로피론 (4-하이드록시-3-[[2-[(2-메톡시에톡시)메틸]-6-(트라이플루오로메틸)-3-피리디닐]카르보닐]바이사이클로[3.2.1]옥트-3-엔-2-온), 펜퀴노트리온 (2-[[8-클로로-3,4-다이하이드로-4-(4-메톡시페닐)-3-옥소-2-퀴녹살리닐]카르보닐]-1,3-사이클로헥산디온), 아이속사클로르톨, 아이속사플루톨, 메소트리온, 피라셀포톨, 피라졸리네이트, 피라족시펜, 설코트리온, 테푸틸트리온, 템보트리온, 툴피랄레이트 (1-[[1-에틸-4-[3-(2-메톡시에톡시)-2-메틸-4-(메틸설포닐)벤조일]-1H-피라졸-5-일]옥시]에틸 메틸 카르보네이트), 토프라메존, 5-클로로-3-[(2-하이드록시-6-옥소-1-사이클로헥센-1-일)카르보닐]-1-(4-메톡시페닐)-2(1H)-퀴녹살리논, 4-(2,6-다이에틸-4-메틸페닐)-5-하이드록시-2,6-다이에틸-3(2H)-피리다지논, 4-(4-플루오로페닐)-6-[(2-하이드록시-6-옥소-1-사이클로헥센-1-일)카르보닐]-2-메틸-1,2,4-트리아진-3,5(2H,4H)-다이온, 5-[(2-하이드록시-6-옥소-1-사이클로헥센-1-일)카르보닐]-2-(3-메톡시페닐)-3-(3-메톡시프로필)-4(3H)-피리미디논, 2-메틸-N-(4-메틸-1,2,5-옥사다이아졸-3-일)-3-(메틸설포닐)-4-(트라이플루오로메틸)벤즈아미드 및 2-메틸-3-(메틸설포닐)-N-(1-메틸-1H-테트라졸-5-일)-4-(트라이플루오로메틸)벤즈아미드를 들 수 있다.

[0155] "HST 저해제" (b13)는 호모젠티세이트를 2-메틸-6-솔라닐-1,4-벤조퀴논으로 전환시키는 식물의 능력을 파괴함으로써, 카로테노이드 생합성을 저해한다. HST 저해제의 예로는 사이클로피리모레이트 (6-클로로-3-(2-사이클로프로필-6-메틸페녹시)-4-피리다지닐 4-모르폴린카르복실레이트), 할록시딘, 피리클로르, 3-(2-클로로-3,6-다이플루오로페닐)-4-하이드록시-1-메틸-1,5-나프티리딘-2(1H)-온, 7-(3,5-다이클로로-4-피리디닐)-5-(2,2-다이플루오로에틸)-8-하이드록시피리도[2,3-b]피라진-6(5H)-온 및 4-(2,6-다이에틸-4-메틸페닐)-5-하이드록시-2,6-다이에틸-3(2H)-피리다지논을 들 수 있다.

[0156] HST 저해제로는 화학식 A 및 B의 화합물도 들 수 있다:



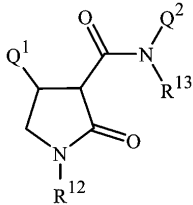
[0157] A

[0158] 상기 식에서, R^{d1}은 H, Cl 또는 CF₃이고; R^{d2}는 H, Cl 또는 Br이며; R^{d3}는 H 또는 Cl이고; R^{d4}는 H, Cl 또는 CF₃이며; R^{d5}는 CH₃, CH₂CH₃ 또는 CH₂CHF₂이고; R^{d6}는 OH 또는 -OC(=O)-i-Pr이며; R^{e1}은 H, F, Cl, CH₃ 또는 CH₂CH₃이고; R^{e2}는 H 또는 CF₃이며; R^{e3}는 H, CH₃ 또는 CH₂CH₃이고; R^{e4}는 H, F 또는 Br이며; R^{e5}는 Cl, CH₃, CF₃, OCF₃ 또는 CH₂CH₃이고; R^{e6}는 H, CH₃, CH₂CHF₂ 또는 C≡CH이며; R^{e7}은 OH, -OC(=O)Et, -OC(=O)-i-Pr 또는 -OC(=O)-t-Bu이고; A^{e8}은 N 또는 CH이다.

[0159] 셀룰로오스 생합성 저해제 (b14)는 특정 식물에서의 셀룰로오스 생합성을 저해한다. 이것은 어린 식물 또는 급속하게 성장하는 식물에 대하여 발아 전 또는 초기 발아 후 적용된 경우에 가장 효과적이다. 셀룰로오스 생합성 저해제의 예로는 클로르티아미드, 디클로베닐, 플루폭삼, 인다지플람 (N²-[(1R,2S)-2,3-다이하이드로-2,6-다이메틸-1H-인덴-1-일]-6-(1-플루오로에틸)-1,3,5-트리아진-2,4-다이아민), 아이속사벤 및 트리아자지플람을 들 수 있다.

[0160] "다른 제초제" (b15)에는 다양한 상이한 작용 모드를 통해 작용하는 제초제, 예컨대 유사분열 방해물질 (예를 들어, 플람프로프-M-메틸 및 플람프로프-M-아이소프로필), 유기비소제 (예를 들어, DSMA 및 MSMA), 7,8-다이하

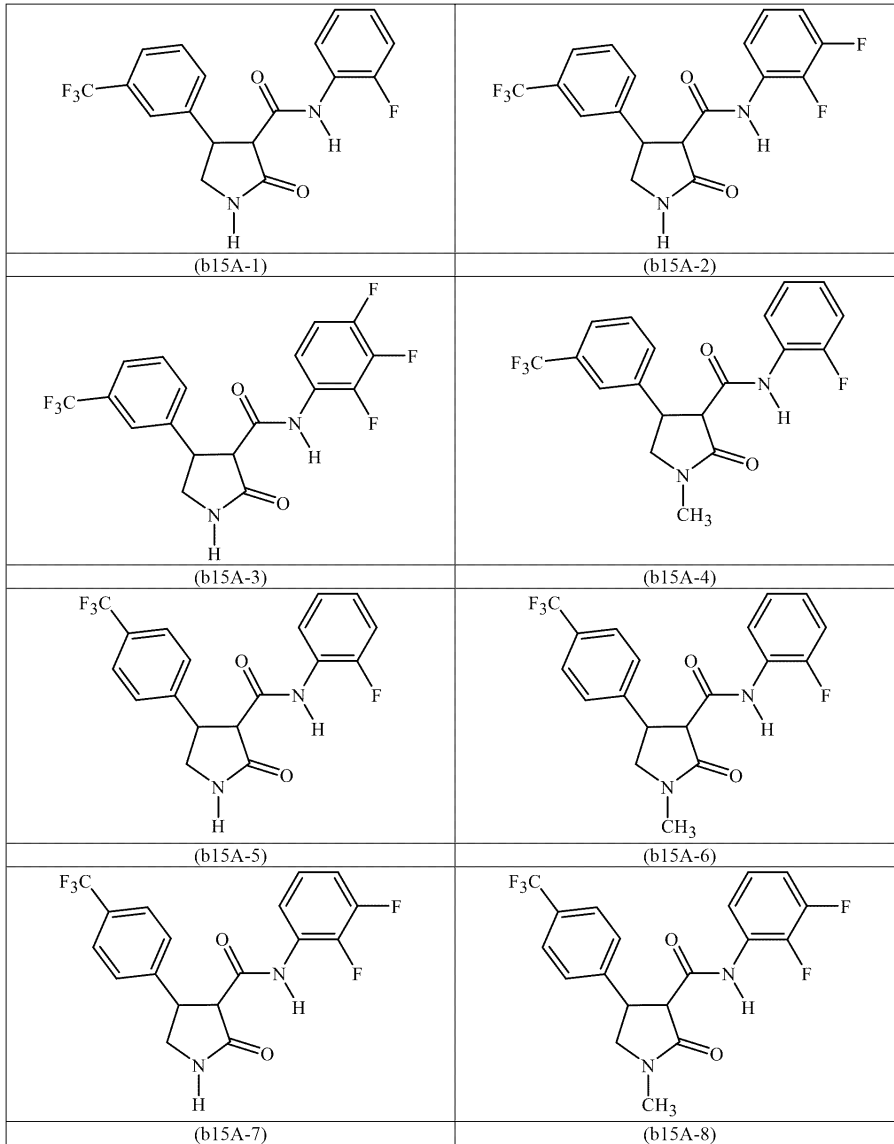
이드로프로테오에이트 신타아제 저해제, 엽록체 아이소프레노이드 합성 저해제 및 세포벽 생합성 저해제가 포함된다. 다른 제조제로는 미지의 작용 모드를 갖거나, (b1) 내지 (b14)에 열거된 특정 카테고리 분류되지 않거나 상기에 열거된 작용 모드의 조합을 통해 작용하는 그러한 제조제가 포함된다. 다른 제조제의 예로는 아클로니펜, 아설람, 아미트롤, 브로모부타이드, 신메틸린, 클로마존, 쿠밀루론, 다이무론, 디펜조퀴트, 에토벤자니드, 플루오메투론, 플루레놀, 포사민, 포사민-암모늄, 다조메트, 딤론, 이프펜카르바존 (1-(2,4-다이클로로페닐)-N-(2,4-다이플루오로페닐)-1,5-다이하이드로-N-(1-메틸에틸)-5-옥소-4H-1,2,4-트리아졸-4-카르복사미드), 메탐, 메틸딤론, 올레산, 옥사지클로메폰, 펠라르곤산, 피리부티카브 및 5-[[[(2,6-다이플루오로페닐)메톡시]메틸]-4,5-다이하이드로-5-메틸-3-(3-메틸-2-티에닐)아이속사졸을 들 수 있다. "다른 제조제" (b15)로는 화학식 (b15A)의 화합물도 들 수 있다:



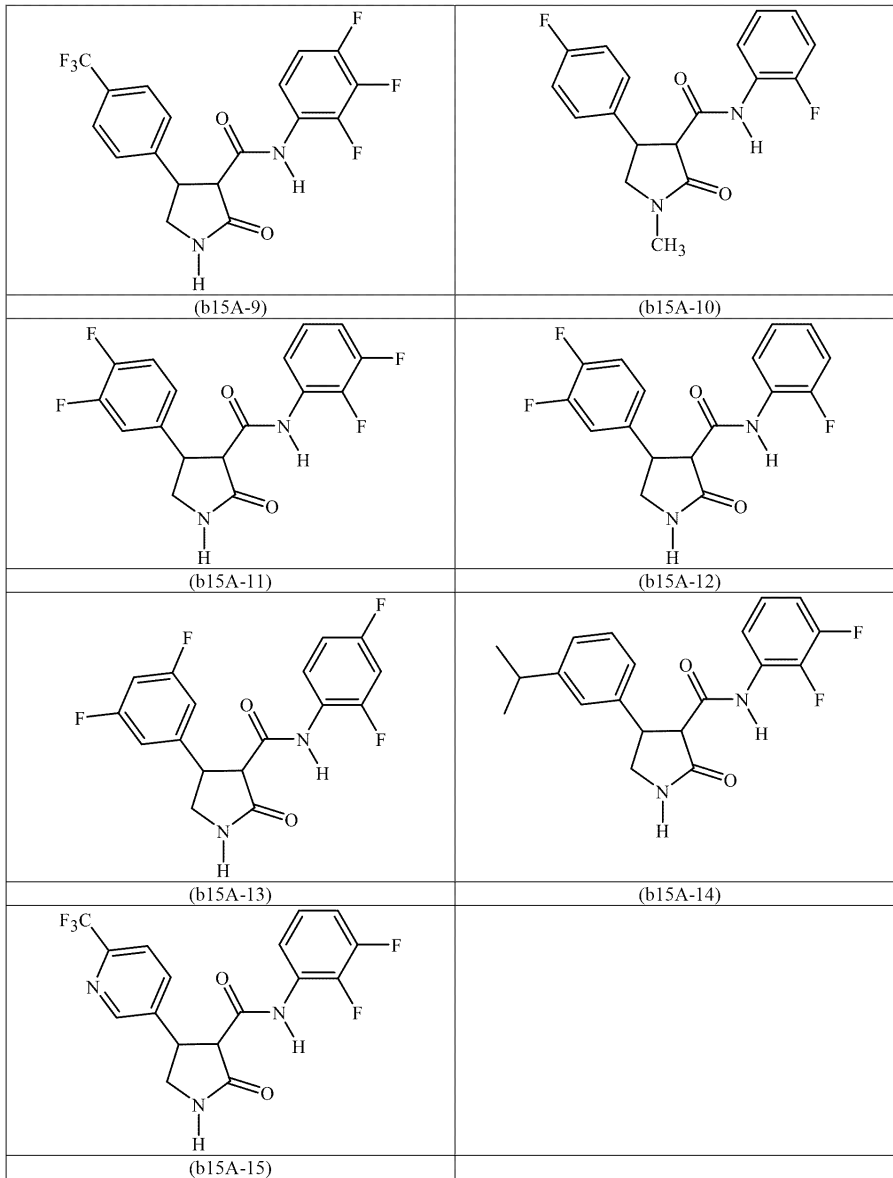
(b15A)

- [0161]
- [0162] 상기 식에서,
- [0163] R¹²는 H, C₁-C₆ 알킬, C₁-C₆ 할로알킬 또는 C₄-C₈ 사이클로알킬이고;
- [0164] R¹³은 H, C₁-C₆ 알킬 또는 C₁-C₆ 알콕시이며;
- [0165] Q¹은 페닐, 티에닐, 피리디닐, 벤조다이옥솔릴, 나프틸, 나프탈레닐, 벤조푸라닐, 푸라닐, 벤조티오페닐 및 피라졸릴로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 임의로 치환된 환계이고, 치환되는 경우 상기 환계는 1개 내지 3개의 R¹⁴으로 치환되며;
- [0166] Q²는 페닐, 피리디닐, 벤조다이옥솔릴, 피리디노닐, 티아디아아졸릴, 티아졸릴, 및 옥사졸릴로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 임의로 치환된 환계이고, 치환되는 경우 상기 환계는 1개 내지 3개의 R¹⁵으로 치환되며;
- [0167] 각 R¹⁴은 독립적으로 할로겐, C₁-C₆ 알킬, C₁-C₆ 할로알킬, C₁-C₆ 알콕시, C₁-C₆ 할로알콕시, C₃-C₈ 사이클로알킬, 시아노, C₁-C₆ 알킬티오, C₁-C₆ 알킬설피닐, C₁-C₆ 알킬설포닐, SF₅, NHR¹⁷; 1개 내지 3개의 R¹⁶으로 임의로 치환되는 페닐; 또는 1개 내지 3개의 R¹⁶으로 임의로 치환되는 피라졸릴이고;
- [0168] 각 R¹⁵은 독립적으로 할로겐, C₁-C₆ 알킬, C₁-C₆ 할로알킬, C₁-C₆ 알콕시, C₁-C₆ 할로알콕시, 시아노, 니트로, C₁-C₆ 알킬티오, C₁-C₆ 알킬설피닐, C₁-C₆ 알킬설포닐이며;
- [0169] 각 R¹⁶은 독립적으로 할로겐, C₁-C₆ 알킬 또는 C₁-C₆ 할로알킬이고;
- [0170] R¹⁷은 C₁-C₄ 알콕시카르보닐이다.
- [0171] "다른 제조제" (b15)가 또한 화학식 (b15A)의 화합물을 포함하는 일 실시 형태에서, R¹²가 H 또는 C₁-C₆ 알킬인 것이 바람직하고; 더욱 바람직하게는 R¹²는 H 또는 메틸이다. 바람직하게는 R¹³은 H이다. 바람직하게는 Q¹은 각각 1개 내지 3개의 R¹⁴으로 치환되는 페닐 환 또는 피리디닐 환이고; 더욱 바람직하게는 Q¹은 1개 내지 2개의 R¹⁴으로 치환되는 페닐 환이다. 바람직하게는 Q²는 1개 내지 3개의 R¹⁵으로 치환되는 페닐 환이고; 더욱 바람직하게는 Q²는 1 내지 2개의 R¹⁵으로 치환되는 페닐 환이다. 바람직하게는 각 R¹⁴은 독립적으로 할로겐, C₁-C₄ 알킬,

C₁-C₃ 할로알킬, C₁-C₃ 알콕시 또는 C₁-C₃ 할로알콕시이고; 더욱 바람직하게는 각 R¹⁴은 독립적으로 클로로, 플루오로, 브로모, C₁-C₂ 할로알킬, C₁-C₂ 할로알콕시 또는 C₁-C₂ 알콕시이다. 바람직하게는 각 R¹⁵은 독립적으로 할로젠, C₁-C₄ 알킬, C₁-C₃ 할로알콕시이고; 더욱 바람직하게는 각 R¹⁵은 독립적으로 클로로, 플루오로, 브로모, C₁-C₂ 할로알킬, C₁-C₂ 할로알콕시 또는 C₁-C₂ 알콕시이다. "다른 제조제" (b15)로서 특히 바람직한 것으로는 하기 (b15A-1) 내지 (b15A-15) 중 어느 하나를 들 수 있다:

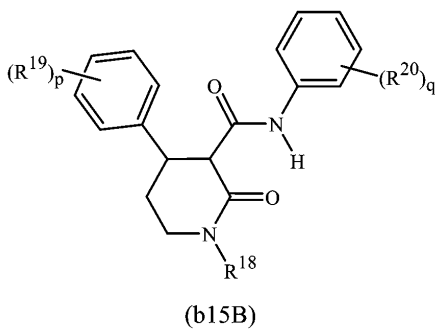


[0172]



[0173]

[0174] "다른 제조제" (b15)로는 화학식 (b15B)의 화합물도 들 수 있다:



[0175]

[0176] 상기 식에서,

[0177] R¹⁸은 H, C₁-C₆ 알킬, C₁-C₆ 할로알킬 또는 C₄-C₈ 사이클로알킬이고;

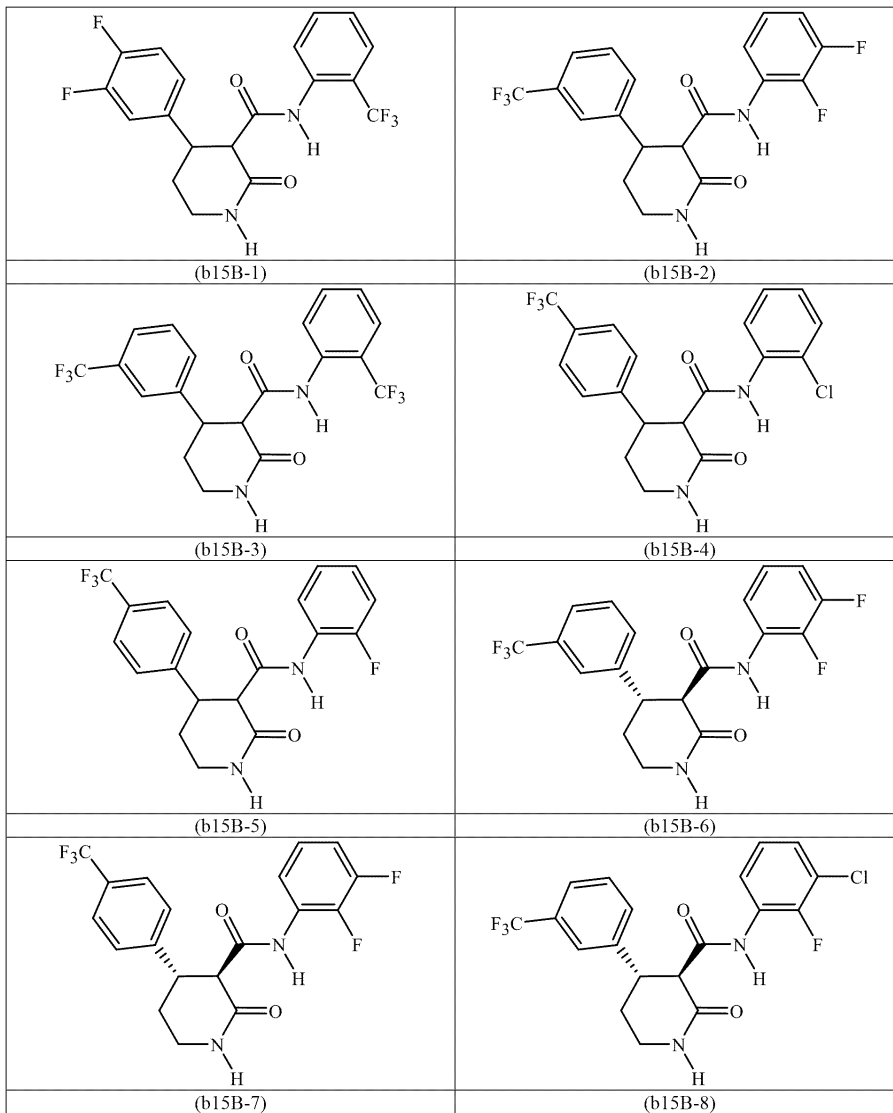
[0178] 각 R¹⁹은 독립적으로 할로겐, C₁-C₆ 할로알킬 또는 C₁-C₆ 할로알콕시이며;

[0179] p는 0, 1, 2 또는 3의 정수이고;

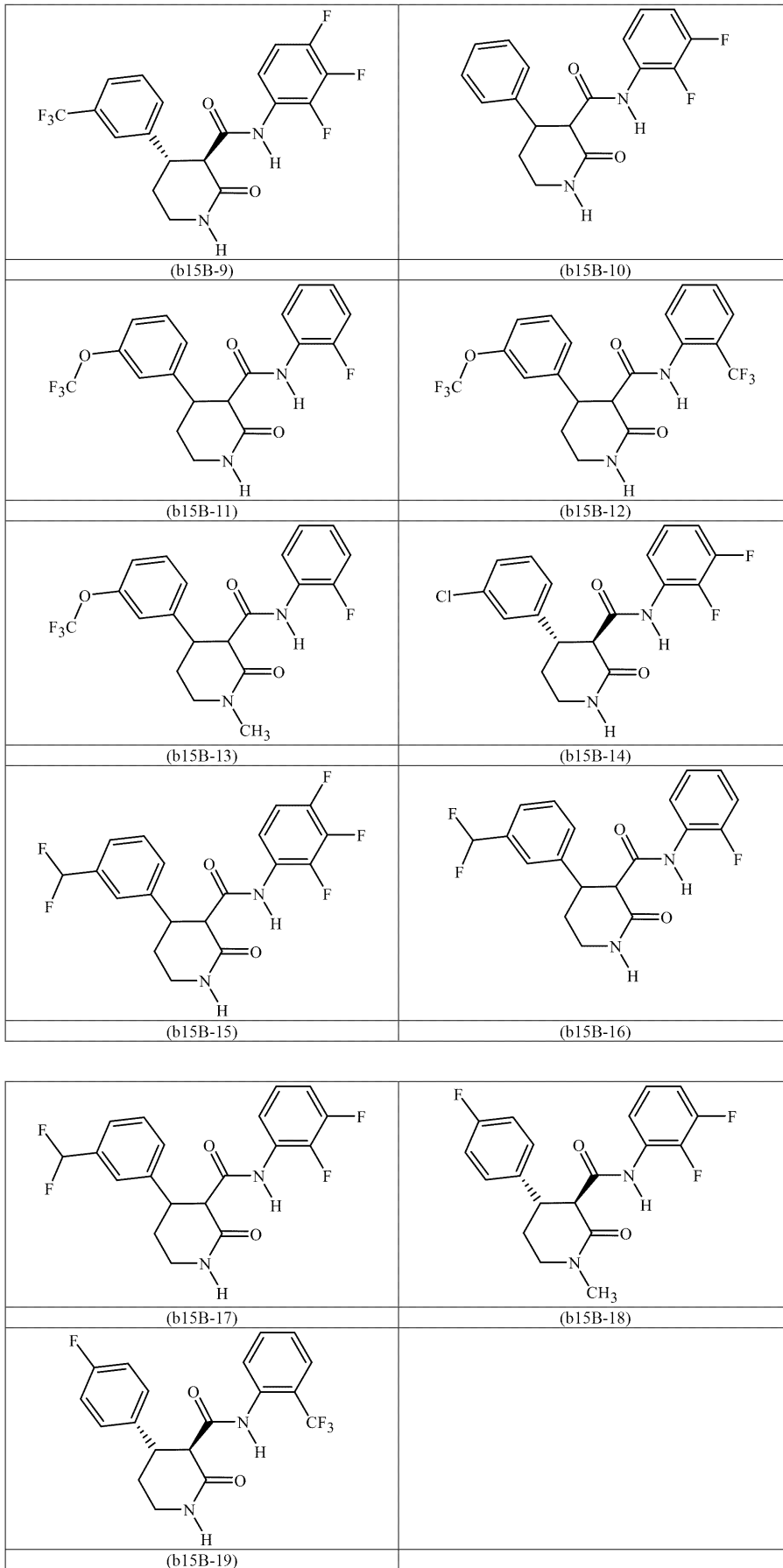
[0180] 각 R²⁰는 독립적으로 할로겐, C₁-C₆ 할로알킬 또는 C₁-C₆ 할로알콕시이며;

[0181] q는 0, 1, 2 또는 3의 정수이다.

[0182] "다른 제초제" (b15)가 또한 화학식 (b15B)의 화합물을 포함하는 일 실시 형태에서, R¹⁸이 H, 메틸, 에틸 또는 프로필인 것이 바람직하고; 더욱 바람직하게는 R¹⁸은 H 또는 메틸이며; 가장 바람직하게는 R¹⁸은 H이다. 바람직하게는 각 R¹⁹은 독립적으로 클로로, 플루오로, C₁-C₃ 할로알킬 또는 C₁-C₃ 할로알콕시이고; 더욱 바람직하게는 각 R¹⁹은 독립적으로 클로로, 플루오로, C₁ 플루오로알킬 (즉, 플루오로메틸, 디플루오로메틸 또는 트리플루오로메틸) 또는 C₁ 플루오로알콕시 (즉, 트리플루오로메톡시, 디플루오로메톡시 또는 플루오로메톡시)이다. 바람직하게는 각 R²⁰는 독립적으로 클로로, 플루오로, C₁ 할로알킬 또는 C₁ 할로알콕시이고; 더욱 바람직하게는 각 R²⁰는 독립적으로 클로로, 플루오로, C₁ 플루오로알킬 (즉, 플루오로메틸, 디플루오로메틸 또는 트리플루오로메틸) 또는 C₁ 플루오로알콕시 (즉, 트리플루오로메톡시, 디플루오로메톡시 또는 플루오로메톡시)이다. "다른 제초제" (b15)로서 특히 바람직한 것으로는 하기 (b15B-1) 내지 (b15B-19) 중 어느 하나를 들 수 있다:

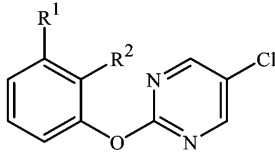


[0183]



하지 않는 초목을 방제하는 것을 지지하지는 않는다. 제초제 약해경감제의 예로는 베녹사코르, 클로퀀토세트-멕실, 쿠밀루론, 사이오메트리닐, 사이프로살파마이드, 다이무론, 다이클로르미드, 다이사이클로논, 다이에틀레이트, 디메피페레이트, 펜클로라졸-에틸, 펜클로림, 플루라졸, 플록소페닐, 푸틸아졸, 아이속사디펜-에틸, 메펜피르-다이에틸, 메페네이트, 메톡시페논, 나프탈산 무수물, 옥사베트리닐, *N*-(아미노카르보닐)-2-메틸벤젠설포나미드 및 *N*-(아미노카르보닐)-2-플루오로벤젠설포나미드, 1-브로모-4-[(클로로메틸)설포닐]벤젠, 2-(다이클로로메틸)-2-메틸-1,3-다이옥솔란 (MG 191), 4-(다이클로로아세틸)-1-옥사-4-아조스피로[4.5]데칸 (MON 4660), 2,2-다이클로로-1-(2,2,5-트라이메틸-3-옥사졸리디닐)-에탄올 및 2-메톡시-*N*-[[4-[[[(메틸아미노)카르보닐]아미노]페닐]설포닐]-벤즈아미드]를 들 수 있으나, 이에 한정되지 않는다.

[0187] 다른 실시 형태에서, "다른 제초제" (b15)는 화학식 (b15C)의 화합물을 포함한다:



(b15C)

[0188]

[0189] 상기 식에서, R¹은 Cl, Br 또는 CN이고; R²는 C(=O)CH₂CH₂CF₃, CH₂CH₂CH₂CH₂CF₃ 또는 3-CHF₂-아이속사졸-5-일이다.

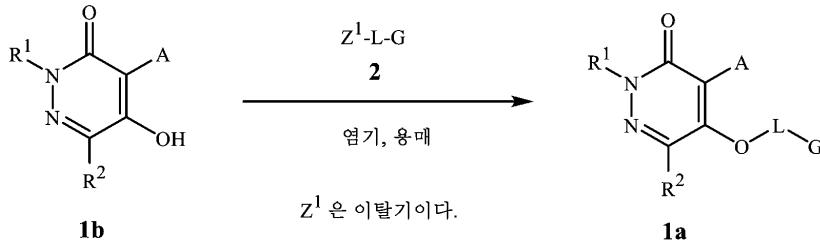
[0190] 원하지 않는 초목의 우수한 방제 (예를 들어, 상승 작용 이상 (greater-than-additive)의 효과로 인한 것과 같은 낮은 사용률, 광범위한 잡초 방제, 또는 작물 안전성 향상) 또는 저항성 잡초의 생육 저지를 위해, 본 발명의 화합물과, 아트라진, 아짐설푸론, 베플루부타미드, *S*-베플루부타미드, 벤즈아이소티아졸리논, 카르펜트라존-에틸, 클로리무론-에틸, 클로르설파푸론-메틸, 클로마존, 클로파이랄리드 칼륨, 클로란설파-메틸, 2-[(2,4-다이클로로페닐)메틸]-4,4-다이메틸-아이속사졸리디논,

2-[(2,5-다이클로로페닐)메틸]-4,4-다이메틸-아이속사졸리디논, 에타메트설파푸론-메틸, 플루메트설파, 4-(4-플루오로페닐)-6-[(2-하이드록시-6-옥소-1-사이클로헥센-1-일)카르보닐]-2-메틸-1,2,4-트리아진-3,5-(2*H*,4*H*)-다 이온, 플루피르설파푸론-메틸, 플루티아세트-메틸, 포메사펜, 이마제타피르, 레나실, 메스트리온, 메트리부진, 메 트설파푸론-메틸, 페톡사미드, 피클로람, 피록사설포, 퀴클로라, 립설푸론, *S*-메톨라클로르, 설펠트라존, 티펜설파 푸론-메틸, 트라이플루설파푸론-메틸 및 트라이베누론-메틸로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 제초제의 혼합물이 바람직하다.

[0191] 반응 도식 1 내지 16 에 기재된 하나 이상의 하기 방법 및 변형법이 화학식 1의 화합물을 제조하는데 사용될 수 있다. 화학식 1 내지 29의 화합물에 있어서의 기 R¹, R², W, A, L 및 G의 정의는 달리 언급하지 않는 한, 발명의 요약에 상기에서 정의한 바와 같다. 화학식 1a, 1b 및 1c는 화학식 1의 화합물의 서브세트이고, 화학식 1a, 1b 및 1c에 대한 모든 치환기는 달리 명시되지 않는 한, 화학식 1에 대하여 상기에서 정의한 바와 같다.

[0192] 반응 도식 1에 나타낸 바와 같이, 화학식 1a (W가 0이고, L 및 G가 상기에서 정의한 바와 같으나, L이 직접 결합 이외의 것이고, G가 수소 이외의 것인 화학식 1의 화합물의 서브세트)의 피리다지논은 화학식 1b (즉, W가 0 이고, L이 직접 결합이며, G가 H인 화학식 1)의 치환된 5-하이드록시-3(2*H*)-피리다지논을 적절한 용매 중에서 염기의 존재 하에 화학식 2 (즉, Z¹이 이탈기 (또는 이핵체 (nucleofuge)로 알려짐), 예컨대 할로젠인 Z¹-L-G)의 적절한 친전자성 시약과 반응시킴으로써 제조될 수 있다. Z¹이 Cl이고, L이 직접 결합인 화학식 2를 나타 내는 시약 등급의 몇가지 예로는 산염화물 (G가 -(C=O)R⁵임), 클로로포르메이트 (G가 -CO₂R⁶임), 카르바모일 클 로라이드 (G가 -CONR⁷R⁸임), 설포닐 클로라이드 (G가 -S(O)₂R⁵임) 및 클로로설포나미드 (G가 -S(O)₂NR⁷R⁸임)를 들 수 있다. 이러한 반응에 대한 적절한 염기의 예로는 탄산칼륨, 수산화나트륨, 수산화칼륨, 수소화나트륨 또는 칼륨 *tert*-부톡사이드를 들 수 있으나 이에 한정되지 않으며, 사용된 특정한 염기에 따라, 적절한 용매는 양성 자성 또는 비양성자성일 수 있고, 무수 또는 수성 혼합물이 사용될 수 있다. 이러한 반응에 대한 바람직한 용 매로는 아세토니트릴, 메탄올, 에탄올, 테트라하이드로푸란, 다이에틸 에테르, 1,2-다이메톡시에탄, 다이옥산, 다이클로로메탄 또는 *N,N*-다이메틸포름아미드를 들 수 있다. 상기 반응은 다양한 온도 하에서 행해질 수 있 으며, 상기 온도는 전형적으로 0°C 내지 용매의 환류 온도의 범위이다.

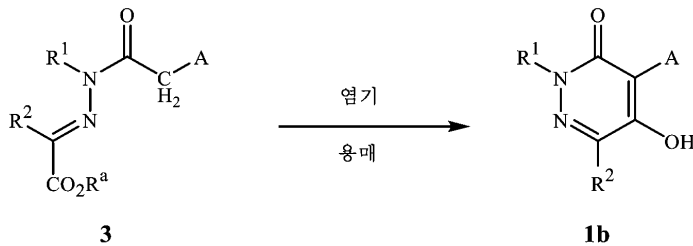
[0193] 반응 도식 1



[0194]

[0195] 화학식 **1b**의 치환된 5-하이드록시-3(2*H*)-피리다지논은 반응 도식 2에 개요된 바와 같이, 염기 및 용매의 존재 하에서 화학식 **3** (여기서, R^a는 알킬, 전형적으로 메틸 또는 에틸임)의 하이드라지드 에스테르의 환화 반응에 의해 제조될 수 있다. 이러한 반응에 대한 적절한 염기로는 탄산칼륨, 수산화나트륨, 수산화칼륨, 수소화나트륨, 칼륨 *t*-부톡사이드 또는 1,8-다이아자바이사이클로[5.4.0]운데스-7-엔을 들 수 있으나 이에 한정되지 않는다. 사용된 특정한 염기에 따라, 적절한 용매는 양성자성 또는 비양성자성일 수 있고, 무수 또는 수성 혼합물로서 사용될 수 있다. 이러한 환화 반응에 대한 용매로는 아세토니트릴, 메탄올, 에탄올, 테트라하이드로푸란, 다이에틸 에테르, 다이옥산, 1,2-다이메톡시에탄, 다이클로로메탄 또는 *N,N*-다이메틸포름아미드를 들 수 있다. 이러한 환화 반응에 대한 온도는 통상 0°C 내지 용매의 환류 온도의 범위이다. 화학식 CH₃(CO₂C₂H₅)C=NNCH₃C(=O)CH₂Ar (여기서, Ar은 화학식 **3**에 나타낸 이환계 대신에 치환된 페닐임)의 하이드라지드 에스테르 중간체를 대응하는 4-아릴-5-하이드록시-피리다지논으로 환화하는 문헌의 방법은 미국 특허 제 8,541,414호 및 제8,470,738호에 개시되어 있다. 이들 특허에 설명된 동일한 조건이 화학식 **3**의 하이드라존 에스테르를 화학식 **1b**의 피리다지논으로 환화하는데 적용가능하다.

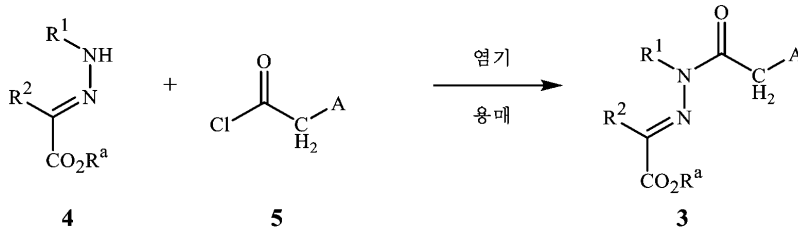
[0196] 반응 도식 2



[0197]

[0198] 화학식 **3**의 치환된 하이드라지드 에스테르는 반응 도식 3에 개요된 바와 같이, 화학식 **4** (여기서, R^a는 알킬, 전형적으로 메틸 또는 에틸임)의 하이드라존 에스테르를 염기 및 용매의 존재 하에서 화학식 **5**의 산염화물과 커플링함으로써 제조될 수 있다. 이러한 반응에 대한 바람직한 염기는 통상 삼차 아민, 예컨대 트라이에틸아민 또는 후니그 염기 (Hunig's base)이지만, *N,N*-다이메틸아미노피리딘, 탄산칼륨, 수산화나트륨, 수산화칼륨, 수소화나트륨 또는 칼륨 *t*-부톡사이드를 비롯한 다른 염기도 사용될 수 있다. 사용된 특정한 염기에 따라, 적절한 용매는 양성자성 또는 비양성자성일 수 있으며, 여기서 반응은 무수 조건 하에서, 또는 쇼텐-바우만 (Schotten-Baumann) 조건 하에서의 수성 혼합물로서 일어난다. 질소 상에서의 이러한 아실화에 사용되는 용매로는 아세토니트릴, 테트라하이드로푸란, 다이에틸 에테르, 다이옥산, 톨루엔, 1,2-다이메톡시에탄, 다이클로로메탄 또는 *N,N*-다이메틸포름아미드를 들 수 있다. 이러한 반응에 대한 온도는 0°C 내지 용매의 환류 온도의 범위일 수 있다. 화학식 CH₃(CO₂C₂H₅)C=NNCH₃C(=O)Ar (여기서, Ar은 치환된 페닐임)의 관련 하이드라지드 에스테르 중간체의 제조 방법은 특허 문헌에 기재되어 있으며, 미국 특허 제8,541,414호 및 제8,470,738호, 및 미국 특허 출원 공개 제2010/0267561호를 참조한다. 이들 특허 공보에 개시된 절차는 반응 도식 3에 나타낸 바와 같이 본 발명의 화합물을 제조하는데 유용한 중간체를 제조하는데 직접 적용가능하다.

[0199] 반응 도식 3

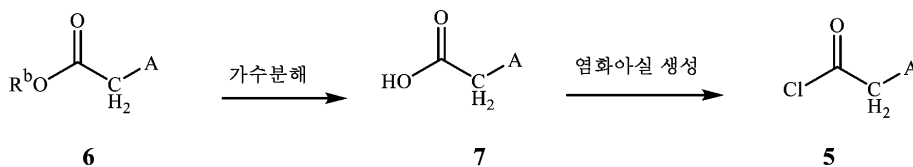


[0200]

[0201] 화학식 4의 하이드라존 에스테르는 적절한 용매, 예컨대 에탄올, 메탄올, 아세토니트릴 또는 다이옥산 또는 다이클로로메탄 중에서 통상 0 내지 80°C의 범위의 온도에서 화학식 R¹NHNH₂의 적절히 치환된 하이드라진과 화학식 R²(C=O)CO₂R^a (여기서, R^a는 전형적으로 메틸 또는 에틸임)의 케톤 또는 알데히드 에스테르의 반응에 의해 용이하게 입수가능하다. 미국 특허 출원 공개 제2007/0112038호 및 제2005/0256123호에는 메틸하이드라진 및 케톤 에스테르 CH₃(C=O)CO₂C₂H₅로부터 하이드라존을 생성하는 절차가 개시되어 있다.

[0202] 반응 도식 4에 나타낸 바와 같이, 화학식 5의 염화아세틸은 화학식 6 (여기서, R^b는 전형적으로 메틸 또는 에틸임)의 대응하는 아세트산 에스테르로부터 에스테르 가수분해 및 산염화물 생성에 의해 제조될 수 있다. 이러한 변환에 대한 표준 방법은 문헌에 공지되어 있다. 예를 들어, 에스테르 가수분해는 화학식 6의 에스테르의 알코올 용액을 알칼리 금속 수산화물 수용액과 함께 가열하고, 이어서 무기산으로 산성화하여 달성될 수 있다. 그 다음에 생성된 화학식 7의 카르복실산은 불활성 용매, 예컨대 다이클로로메탄 중에서 염화옥살릴 및 촉매량의 N,N-다이메틸포름아미드로 처리하여 화학식 5의 대응하는 산염화물로 전환될 수 있다. 문헌 [J. Heterocyclic Chem. 1983, 20(6), 1697-1703; J. Med. Chem. 2007, 50(1), 40-64]; 및 국제 특허 공개 제WO 2005/012291호, 제WO 98/49141호 및 제WO 98/49158호에는 벤조푸란- 및 벤조티오펜-아세테이트 에스테르의 대응하는 아세트산으로의 가수분해가 개시되어 있다. 문헌 [Monatshefte für Chemie 1968, 99(2) 715-720] 및 국제 특허 공개 제WO 2004046122호, 제WO 2009/038974호 및 제JP09077767호에는 벤조푸란- 및 벤조티오펜-아세트산의 대응하는 산염화물로의 전환에 대하여 개시되어 있다.

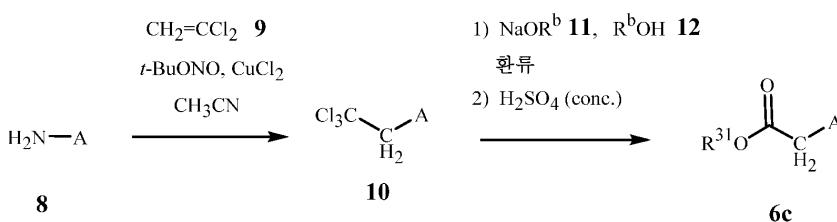
[0203] 반응 도식 4



[0204]

[0205] 반응 도식 5에 나타낸 바와 같이, 화학식 6c의 헤테로아릴아세트산 유도체는 화학식 8의 적절히 치환된 헤테로아릴 아민으로부터 제조될 수 있다. 본 방법에 따라, 화학식 8의 아민은 1,1-다이클로로에텐 (9)의 존재 하에서 다이아조화되어 (바람직하게는 아세토니트릴 중에서 염화제이구리의 존재 하에 t-부틸 나이트라이트를 사용), 화학식 10의 상응하는 트라이클로로에틸헤테로사이클이 얻어진다. 그 다음에, 화학식 10의 트라이클로로에틸헤테로사이클은 적절한 용매, 예컨대 화학식 12의 알코올 중에서 적절한 알칼리 또는 알칼리 토류 금속 알콕사이드, 예컨대 화학식 11의 나트륨 알콕사이드와 함께 가열한 다음에, 예컨대 진한 황산을 사용하여 산성화하여, 화학식 6c의 헤테로사이클릭 아세트산 에스테르가 얻어진다. 본 방법은 문헌 [Pest. Manag. Sci. 2011, 67, 1499-1521] 및 미국 특허 제5,376,677호에 개시되어 있다.

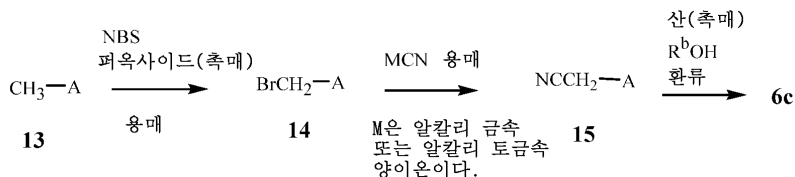
[0206] 반응 도식 5



[0207]

[0208] 화학식 6c의 헤테로아릴아세트산 에스테르를 제조하기 위한 대체 방법은 반응 도식 6에 개요되어 있다. 문헌 [Pest. Manag. Sci. 2011, 67, 1499-1521]의 방법에 의해 교시된 바와 같이, 화학식 13의 메틸 헤테로사이클은 불활성 용매, 예컨대 다이클로로메탄, 다이클로로에탄 또는 테트라클로로메탄 중에서 자유 라디칼 조건 하에 (예를 들어, 촉매로서의 과산화벤조일) *N*-브로모석신이미드 (NBS)로 브롬화하여, 화학식 14의 헤테로아릴 메틸 브로마이드를 얻을 수 있다. 화학식 14의 화합물을 알칼리 또는 알칼리성 시안화물 (예를 들어, 시안화칼륨)과 반응시켜 브롬을 시안화물로 치환하여, 화학식 15의 헤테로아릴 아세토니트릴을 얻고, 이를 통상 용매의 환류 온도에서 산성 알코올 (예를 들어, 메탄올 또는 에탄올 중의 HCl) 중에서 가열하여 에스테르화와 함께 화학식 6c의 아세테이트로 가수분해될 수 있다. 알코올 R^bOH는 저급 알칸올이다.

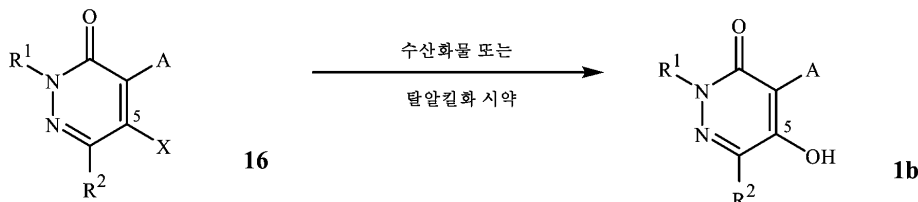
[0209] 반응 도식 6



[0210]

[0211] 피리다지논 환의 5 위치에서의 이탈기의 가수분해는 반응 도식 7에 나타난 바와 같이 행해질 수 있다. X 기가 저급 알콕시, 저급 알킬설파이드 (설폭사이드 또는 설피온), 할라이드 또는 *N*-결합 아졸인 경우에는, 0 내지 120 °C의 온도에서 용매, 예컨대 테트라하이드로푸란, 다이메톡시에탄 또는 다이옥산 중에서 염기성 시약, 예컨대 수산화테트라부틸암모늄을 사용한 가수분해에 의해 제거될 수 있다. 본 가수분해에 유용한 다른 수산화물 시약으로는 수산화칼륨, 수산화리튬 및 수산화나트륨을 들 수 있다 (예를 들어, 국제 특허 공개 제WO 2009/086041호 참조). X 기가 저급 알콕시인 경우에는, X 기의 가수분해는 또한 탈알킬화 시약, 예컨대 삼브롬화붕소 또는 모르폴린을 사용하여 행해질 수 있다 (예를 들어, 국제 특허 공개 제WO 2009/086041호, 제WO 2013/160126호 및 제WO 2013/050421호 참조).

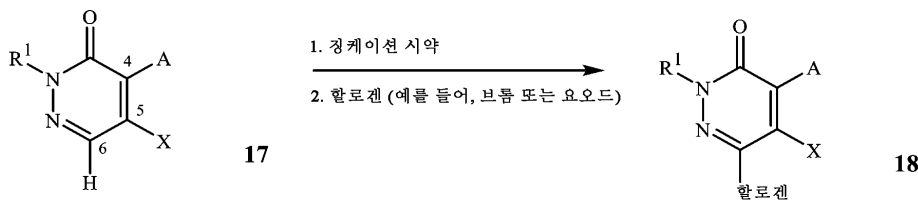
[0212] 반응 도식 7



[0213]

[0214] 피리다지논의 6 위치에서의 할로겐의 도입은 징케이션 (zincation), 이어서 할로겐화에 의해 행해질 수 있다. 피리다지논의 징케이션의 조건, 시약 및 예에 관해서는 문헌 [Verhelst, T., Ph.D. thesis, University of Antwerp, 2012]을 참조한다. 전형적으로 화학식 17의 피리다지논은 -20 내지 30 °C의 온도에서 테트라하이드로푸란 중에서 Zn(TMP)-LiCl 또는 Zn(TMP)₂-MgCl₂-LiCl (즉, 톨루엔/테트라하이드로푸란 중에서의 2,2,6,6-비스(테트라메틸피페리딘)아연, 마그네슘 클로라이드, 리튬 클로라이드 복합체)로 처리하여, 아연 시약을 생성한다. 브롬, *N*-브로모석신이미드 또는 요오드의 후속 첨가에 의해, 화학식 18 (여기서, R²는 각각, Br 또는 I임)의 화합물이 얻어진다. 트라이클로로아이소시아누르산 또는 1,3-다이클로로-5,5-다이메틸하이단토인과 같은 시약으로, 화학식 18 (여기서, R²는 Cl임)의 화합물이 얻어진다. 이러한 방법은 반응 도식 8에 나타난다. 다양한 적절한 징케이션 시약의 제법에 관해서는, 국제 특허 공개 제WO 2008/138946호 및 제WO 2010/092096호 뿐만 아니라, 문헌 [Wunderlich, S. Ph.D. thesis, University of Munich, 2010] 및 상기 문헌에 인용된 참고문헌을 참조한다. 피리다지논 환의 6 위치에서의 징케이션은 피리다지논 환의 4 위치에서의 방향족/헤테로 방향족 (heteroaromatic) 치환기, 알콕시 치환기 또는 할로겐의 존재 하에, 또는 피리다지논 환의 5 위치에서의 할로겐 또는 알콕시 치환기의 존재 하에 행해질 수 있다.

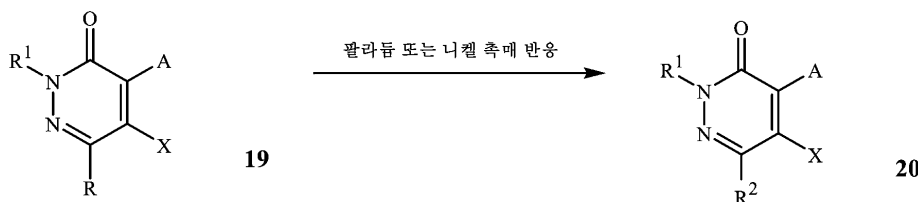
[0215] 반응 도식 8



[0216]

[0217] 화학식 19 (여기서, R²는 할로젠 또는 설포네이트임)의 화합물의 R² 치환기는 추가로 다른 작용기로 변환될 수 있다. R²가 알킬, 사이클로알킬 또는 치환된 알킬인 화합물은 반응 도식 9에 나타난 바와 같이, 화학식 19의 화합물의 전이금속 촉매 반응에 의해 제조될 수 있다. 이러한 반응 타입의 검토에 관해서는, 문헌 [E. Negishi, *Handbook of Organopalladium Chemistry for Organic Synthesis*, John Wiley and Sons, Inc., New York, 2002], 문헌 [N. Miyaura, *Cross-Coupling Reactions: A Practical Guide*, Springer, New York, 2002], 문헌 [H. C. Brown et al., *Organic Synthesis via Boranes*, Aldrich Chemical Co., Milwaukee, Vol. 3, 2002], 문헌 [Suzuki et al., *Chemical Reviews* 1995, 95, 2457-2483] 및 문헌 [Molander et al., *Accounts of Chemical Research* 2007, 40, 275-286]을 참조한다. 또한 문헌 [Tetrahedron Organic Chemistry Series Vol. 26: *Palladium in Heterocyclic Chemistry*, 2nd Ed., Gribble and Li, editors, Elsevier, Amsterdam, 2007]을 참조한다. 부흐발트-하르트빅 (Buchwald-Hartwig) 화학 반응의 검토에 관해서는 문헌 [Yudin and Hartwig, *Catalyzed Carbon-Heteroatom Bond Formation*, 2010, Wiley, New York]을 참조한다.

[0218] 반응 도식 9



[0219] R은 할로젠 또는 설포네이트이다.

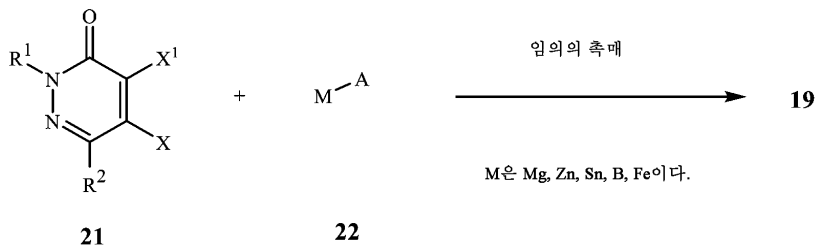
R은 알킬, 사이클로알킬 또는 치환된 알킬이다.

[0220] 화학식 21의 R² 위치에서의 다른 작용기의 도입에 관한 관련 합성 방법은 당업계에 공지되어 있다. 구리 촉매 반응은 CF₃ 기를 도입하는데 유용하다. 본 반응에 관한 시약의 포괄적인 최근 검토에 관해서는 문헌 [Wu, Neumann and Beller in *Chemistry: An Asian Journal*, 2012, ASAP], 및 상기 문헌에 인용된 참고문헌을 참조한다. 이러한 위치에서의 황 함유 치환기의 도입에 관해서는, 국제 특허 공개 제WO 2013/160126호에 개시된 방법을 참조한다. 시아노기의 도입에 관해서는, 국제 특허 공개 제2014/031971호를 참조한다. 니트로기의 도입에 관해서는, 문헌 [*J. Am. Chem. Soc.* 2009, 12898]을 참조한다. 플루오로 치환기의 도입에 관해서는, 문헌 [*J. Am. Chem. Soc.* 2014, 3792]을 참조한다.

[0221] 화학식 19의 화합물은 반응 도식 10에 나타난 바와 같이, 화학식 22의 유기 금속 시약과, 4 위치에 반응기를 갖는 화학식 21의 피리다지논의 반응에 의해 제조될 수 있다. 이탈기에 따라, 전이 금속 촉매가 바람직할 수 있다. 이탈기가 저급 알콕시, N-결합 아졸 (예컨대, 피라졸 또는 트리아아졸) 또는 설포네이트인 경우에는, 촉매가 필요치 않으며, 마그네슘 시약 또는 리튬 시약과의 직접적인 반응이 4 위치에서 일어날 수 있다. 이러한 반응은 유기 마그네슘 시약과 반응하지 않는 각종 용매 중에서 행해질 수 있다. 전형적인 반응 조건은 용매로서의 테트라하이드로푸란, -20 내지 65°C의 반응 온도, 및 과잉량의 유기 마그네슘 또는 유기 리튬 시약을 포함한다. 4 위치의 반응기가 할로젠인 경우에는, 전이 금속 촉매 및 리간드가 도움이 된다. 붕소 (스즈키 (Suzuki) 반응), 주석 (스틸레 (Stille) 반응) 및 아연 (네기시 (Negishi) 반응)을 비롯한 다양한 상이한 커플링 파트너가 사용될 수 있으며; 이들 반응은 다양한 리간드와 함께 팔라듐 및 니켈 촉매에 의해 촉진될 수 있다. 이들 반응에 대한 조건은 당업계에 공지되어 있으며; 예를 들어, 문헌 [*Palladium-Catalyzed Coupling Reactions: Practical Aspects and Future Development* Edited by Arpad Molnar, Wiley, 2013] 및 상기 문헌에 인용된 참고문헌을 참조한다. 무촉매 프로세스에 사용되는 유기 마그네슘 시약은 마그네슘의 탄소-할로젠 결합으로의 직접 삽입 (임의로 할로젠화리튬의 존재 하에), *i*-프로필마그네슘 할라이드에 의한 그리냐르 교환 반응 (임의로 할로젠화리튬의 존재 하에), 또는 마그네슘염, 예컨대 마그네슘 브로마이드 에테레이트(magnesium

bromide etherate)를 사용한 반응에 의한 유기 리튬 시약의 변환에 의해 제조될 수 있다. 유기 마그네슘 시약에 대하여 불활성인 각종 기가 이들 반응에서 피리다지논의 5 위치 및 R²에 존재할 수 있다. 화학식 21의 화합물은 문헌 [Knochel et al. *Angew.* 2011, 50, 9794-9824] 및 문헌 [*Heterocycles* 2014, 88, 827-844]에서 찾은 방법에 따라 제조될 수 있다.

[0222] 반응 도식 10

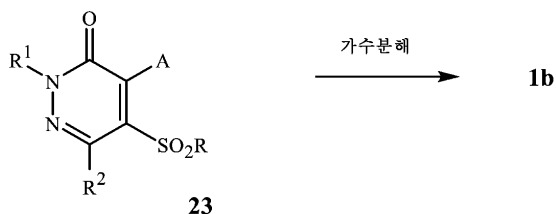


[0223]

[0224] 화학식 21의 화합물은 당업계에 공지되어 있으며, 문헌 [Maes and Lemiere in *Comprehensive Heterocyclic Chemistry III Volume 8*, Katritzky, Ramsden, Scriven and Taylor editors] 및 상기 문헌에 인용된 참고문헌에 기재된 방법에 의해 제조될 수 있다. 또한 문헌 [Verhelst, Ph.D. thesis University of Antwerp] 및 상기 문헌에 인용된 참고문헌을 참조한다. 피리다지논에서의 작용기 변환은 또한 문헌 [Stevenson et. al. *J. Heterocyclic Chem.* 2005, 42, 427]; 미국 특허 제6,077,953호; 국제 특허 공개 제WO 2009/086041호 및 상기 문헌에 인용된 참고문헌; 미국 특허 제2,782,195호; 국제 특허 공개 제WO 2013/160126호; 및 국제 특허 공개 제WO 2013/050421호에 기재되어 있다.

[0225] 화학식 1b의 화합물은 또한 염기 수용액 중의 화학식 23의 설폰의 가수분해에 의해 제조될 수 있다. 적절한 염기로는 수산화나트륨, 수산화칼륨 또는 수산화테트라부틸암모늄을 들 수 있다. 전형적인 반응 온도는 0 내지 80°C의 범위이고, 전형적인 반응 시간은 1 내지 12시간이다. 이러한 방법은 반응 도식 11에 나타낸다.

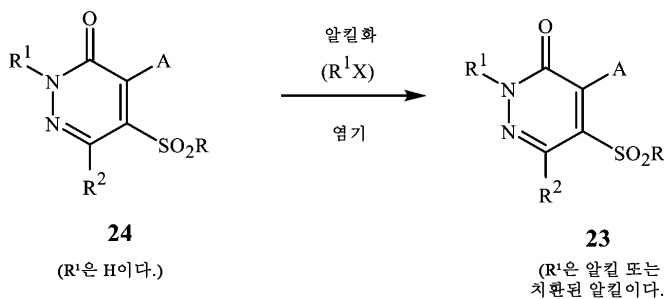
[0226] 반응 도식 11



[0227]

[0228] 화학식 23의 화합물은 알킬 할라이드 및 설포네이트에 의한 R¹이 H인 화학식 24의 화합물의 알킬화에 의해 제조될 수 있다. 이러한 방법에 유용한 전형적인 염기로는 탄산칼륨, 탄산나트륨 또는 탄산세슘을 들 수 있다. 전형적인 용매로는 반응 도식 12에 나타낸 아세토니트릴, 테트라하이드로푸란 또는 N,N-다이메틸포름아미드를 들 수 있다.

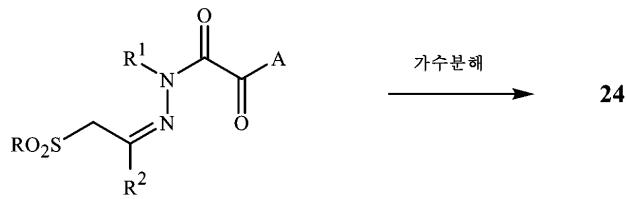
[0229] 반응 도식 12



[0230]

[0231] 화학식 24의 화합물은 염기로 처리하여, 화학식 25의 화합물의 환화에 의해 제조될 수 있다. 이러한 방법에 유용한 전형적인 염기로는 탄산칼륨, 탄산나트륨 또는 탄산세슘을 들 수 있다. 전형적인 용매로는 반응 도식 13에 나타낸 아세토니트릴, 테트라하이드로푸란 또는 N,N-다이메틸포름아미드를 들 수 있다.

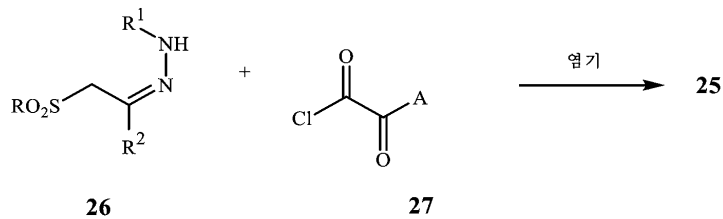
[0232] 반응 도식 13



[0233]

[0234] 화학식 25의 화합물은 반응 도식 14에 나타난 방법에 의해 제조될 수 있다. 이러한 방법에서, 화학식 26의 화합물은 염기의 존재 하에 화학식 27의 화합물과 커플링된다. 이러한 방법에 유용한 염기로는 트라이에틸아민, 탄산나트륨 또는 탄산칼륨, 피리딘 또는 다이아이스프로필에틸아민을 들 수 있다.

[0235] 반응 도식 14

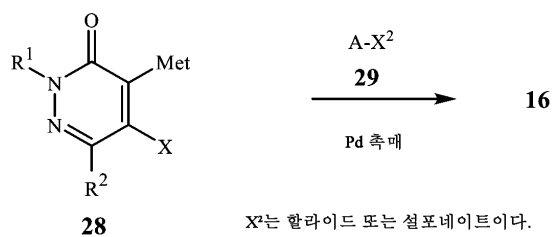


[0236]

[0237] 화학식 26의 화합물은 당업계에 공지된 방법에 의해 제조될 수 있다.

[0238] 화학식 16의 화합물은 화학식 28의 유기 금속 피리다지는 커플링 파트너를 화학식 29의 헤테로아릴 할라이드 및 설포네이트와 커플링 반응시켜 제조될 수 있다. 유기 금속 커플링 파트너는 예를 들어, 유기 아연, 유기 마그네슘, 유기 주석 또는 유기 붕소 시약일 수 있다. 팔라듐 촉매, 예컨대 팔라듐 테트라키스(트라이페닐포스핀) 및 다른 팔라듐 공급원, 예컨대 Pd₂dba₃ 및 Pd(OAc)₂, 및 포스핀 또는 N-복소환 카르벤 리간드로부터 발생된 것들은 커플링 절차에 사용될 수 있다 (문헌 [Maes et al. *J. Org. Chem.* **2011**, 76, 9648-9659]). 다이알킬 바이아릴포스핀 리간드, 예컨대 X-Phos, S-Phos 및 Ru-Phos를 기제로 하는 팔라듐 예비촉매 (문헌 [Buchwald et al. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2013**, 52(2), 615-619]) 또는 N-복소환 카르벤 리간드, 예컨대 PEPPSI-i-Pr 및 PEPPSI-i-Pent로부터 유도된 예비촉매 (문헌 [Organ et al. *Eur. J. Org. Chem.* 2010, 4343-4354])도 이러한 커플링을 달성할 수 있다. 상기 반응은 테트라하이드로푸란, 다이메톡시에탄, N-메틸-2-피롤리돈 및 다이옥산과 같은 용매 중에서 행해질 수 있다. 커플링 파트너는 헤테로사이클릭 할라이드 또는 설포네이트 중 어느 하나일 수 있다. 상기 반응에 특히 유용한 부류의 커플링 파트너는 헤테로 방향족 화합물의 노나플레이트 (OSO₂C₄F₉)를 기제로 하는 것들이다. 할로젠화 헤테로사이클릭 커플링 파트너는 시판 중이거나 문헌에 공지되어 있다. 다른 유용한 부류의 헤테로사이클릭 할라이드 및 합성 경로는 문헌 [Tetrahedron Organic Chemistry Series Vol. 26: *Palladium in Heterocyclic Chemistry*, 2nd Ed., Gribble and Li, editors, Elsevier, Amsterdam, 2007]에 나타나 있다.

[0239] 반응 도식 15



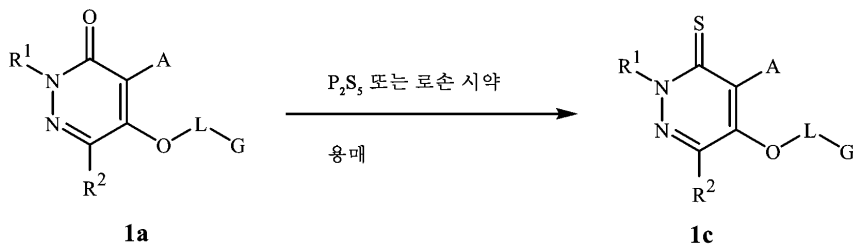
[0240]

[0241] 피리다지논의 4 위치의 징케이션은 징케이션 시약, 예컨대 톨루엔/테트라하이드로푸란 중의 2,2,6,6-비스(테트라메틸피페리딘)아연, 마그네슘 클로라이드, 리튬 클로라이드 복합체 (즉, Zn(TMP)-LiCl 또는 Zn(TMP)₂-MgCl₂-LiCl)로 행해질 수 있다.

[0242] 이러한 위치의 마그네시이션 (magnesium)은 또한 Mg(TMP)-LiCl로 처리하여 행해질 수 있다. 4-징케이선 및 4-마그네시이션 피리다지논의 팔라듐 촉매 크로스 커플링 및 피리다지논 메탈화의 조건에 관해서는 문헌 [Verhelst, T., Ph.D. thesis, University of Antwerp, 2012]을 참조한다. 4-스탄닐피리다지논에 대한 합성 및 크로스 커플링 조건은 문헌 [Stevenson et. al. *J. Heterocyclic Chem.* **2005**, *42*, 427]에 공지되어 있다.

[0243] 반응 도식 16에 나타난 바와 같이, 화학식 1a의 피리다지논 (W가 O인 화학식 1의 화합물의 서브세트)은 통상 0 °C 내지 실온 범위의 온도에서 적절한 용매 (예를 들어, 톨루엔, 테트라하이드로푸란 또는 다이옥산) 중에서 일반적으로 피리딘 중의 오황화인 또는 로손 시약 (Lawesson's reagent) (2,4-비스-(4-메톡시페닐)-1,3-다이티아-2,4-다이포스페탄 2,4-다이설파이드)인 티오네이션 (thionation) 시약으로 티오네이션하여, 대응하는 화학식 1c (즉, W가 S인 화학식 1)의 티온이 얻어질 수 있다.

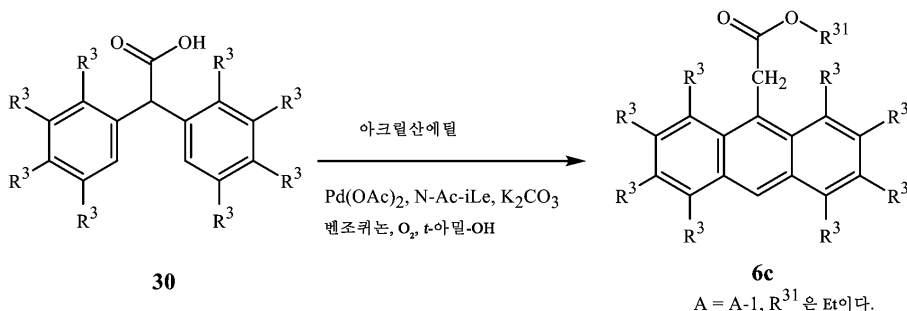
[0244] 반응 도식 16



[0245]

[0246] 화학식 6c (여기서, A=A-1이고, R³¹=Et임)의 화합물은 문헌 [*Angew. Chem. Int. Ed.*, **2016**, *55*, 8652-8655]에 기재되고 반응 도식 17에 나타난 절차를 사용하여, 산소 분위기 하에 tert-아밀 알코올 중에서 아세트산팔라듐 (II), 벤조퀴논, N-아세틸-아이소루신 및 탄산칼륨의 존재 하에 화학식 30의 다이-아릴 아세트산과 아크릴산에틸의 반응에 의해 제조될 수 있다.

[0247] 반응 도식 17



[0248]

[0249] 당업자는 다양한 작용기가 다른 것으로 전환되어 상이한 화학식 1의 화합물을 얻을 수 있음을 인지한다. 단순하고 직접적으로 작용기의 상호 변환을 예시하는 중요한 자료에 관해서는, 문헌 [Larock, R. C., *Comprehensive Organic Transformations: A Guide to Functional Group Preparations*, 2nd Ed., Wiley-VCH, New York, 1999]을 참조한다. 예를 들어, 화학식 1의 화합물을 제조하기 위한 중간체는 방향족 니트로기를 포함할 수 있으며, 아미노기로 환원된 다음에, 잔트마이어 (Sandmeyer) 반응과 같은 당업계에 공지된 반응에 의해 다양한 할라이드로 전환되어, 화학식 1의 화합물이 얻어질 수 있다. 상기 반응은 또한 많은 경우에, 대체 순서로 행해질 수 있다.

[0250] 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.; Wiley: New York, 1991] 참조). 당업자는 경우에 따라서는, 임의의 각 반응 도식에 나타난 바와 같이, 소정 시약의 도입 후에, 화학식 1의 화합물의 합성을 완료하기 위해, 상세히 기재되어 있지 않은 추가의 통상적인 합성 단계를 행할 필요가 있을 수 있음을 인지할 것이다. 당업자는 또한 화학식 1의 화합물을 제조하는데 제시된 특정 시퀀스로 나타난 것과는 다른 순서로 상기 반응 도식에 예시된 단계의 조합을 행하는 것이 필요할 수 있음을 인지할 것이다.

- [0251] 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.
- [0252] 더 이상 상술하지 않고도, 상술한 설명을 이용하는 당업자라면 본 발명을 최대한으로 이용할 수 있을 것으로 여겨진다. 하기 비제한적인 실시예는 본 발명을 예시한다. 하기 실시예에서의 단계들은 전체적인 합성 변환에서 각 단계에 있어서의 절차를 예시하며, 각 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. 모든 NMR 스펙트럼은 달리 명시되지 않는 한, 500 MHz에서 테트라메틸실란으로부터의 CDCl_3 다운필드로 나타내며, "s"는 단일선을 의미하고, "brs"는 브로드 단일선을 의미하며, "d"는 이중선을 의미하고, "t"는 삼중선을 의미하며, "m"은 다중선을 의미한다.
- [0253] 합성예 1
- [0254] 4-(9-안트라세닐)-6-클로로-5-하이드록시-2-메틸-3(2H)-피리다지논 (화합물 1)의 제조
- [0255] 단계 A: 4-(9-안트라세닐)-6-클로로-5-메톡시-2-메틸-3(2H)-피리다지논의 제조
- [0256] 빙수 냉각조를 사용하여 15°C 미만의 온도에서, 2,2,6,6-테트라메틸피페리디닐마그네슘 클로라이드 리튬 클로라이드 복합체 용액의 용액 (테트라하이드로푸란/톨루엔 중의 1.0 M, 38.0 mL, 38.0 mmol)에, 염화아연 용액 (2-메틸테트라하이드로푸란 중의 1.9 M 용액 10 mL, 19.0 mmol)을 첨가하였다. 얻어진 용액을 5°C에서 15분간, 25°C에서 45분간 교반하였다. 그 다음에 얻어진 비스(2,2,6,6-테트라메틸피페리디닐)아연, 리튬 클로라이드, 마그네슘 클로라이드 복합체 용액을 첨가 갈때기에 옮기고, -40°C에서 6-클로로-5-메톡시-2-메틸-3(2H)-피리다지논 (3.0 g, 17.2 mmol)과 테트라하이드로푸란 (86 mL)의 현탁액에 적가하였다. 얻어진 용액을 -40°C에서 15분간 교반하고, 5°C로 가온시켜, 5°C에서 45분간 교반하였다. 용액을 연속하여 9-브로모안트라센 (4.2 g, 16.3 mmol)과 SPhos 예비 촉매-G2 (클로로(2-다이사이클로헥실포스포노-2',6'-다이메톡시-1,1'-바이페닐)[2-(2'-아미노-1,1'-바이페닐)]팔라듐(II), 1.2 g, 1.7 mmol)로 처리하였다. 얻어진 암갈색 용액을 3시간 동안 용매의 환류 온도에서 가열하고, 주위 온도로 냉각시켜, 농축시켰다. 잔류물을 아세트산에틸과 포화 염화암모늄 수용액에 분배하여, 얻어진 수층을 아세트산에틸로 추출하고, 합한 유기층을 연속하여 물 및 염수로 세정하여, 무수 MgSO_4 로 건조시키고, 여과하여, 농축시켜, 황색 오일 8.63 g을 얻었다. 오일을 헥산 중의 0% 내지 100% 아세트산에틸의 그라디언트로 용리하는 실리카 겔 (330 g) 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 오일상 고체로서의 표제 화합물 3.35 g을 얻었다.
- [0257] ^1H NMR δ 8.57 (s, 1H), 8.08–8.03 (m, 2H), 7.69–7.63 (m, 2H), 7.53–7.45 (m, 4H), 3.82 (s, 3H), 3.05 (s, 3H).
- [0258] 단계 B: 4-(9-안트라세닐)-6-클로로-5-하이드록시-2-메틸-3(2H)-피리다지논의 제조
- [0259] 단계 A의 생성물 2.15 g (6.1 mmol)과 모르폴린 (12 mL)의 혼합물을 2시간 동안 100°C로 가열하였다. 얻어진 반응 혼합물을 농축시켜, 잔류물을 다이에틸 에테르로 트리튜레이션 (trituration)하였다. 여과 후에, 얻어진 고체를 다이에틸 에테르로 세정하여, 프릿 갈때기에서 건조시켰다. 얻어진 고체를 1 N 염산 수용액 (약 30 mL)에 현탁시키고, 주위 온도에서 2시간 동안 교반하여, 여과하였다. 고체를 수세하고, 진공 하에 건조시켜, 담황색 고체로서의 표제 화합물, 본 발명의 화합물 1.50 g을 얻었다.
- [0260] ^1H NMR ($\text{DMSO}-d_6$) δ 8.70 (s, 1H), 8.15 (d, 2H), 7.68 (d, 2H), 7.52 (t, 2H), 7.45 (t, 2H), 5.75 (s, 1H), 3.67 (s, 3H).
- [0261] 합성예 2
- [0262] 6-클로로-4-(10-클로로-9-안트라세닐)-5-하이드록시-2-메틸-3(2H)-피리다지논 (화합물 2)의 제조
- [0263] 단계 A: 6-클로로-4-(10-클로로-9-안트라세닐)-5-메톡시-2-메틸-3(2H)-피리다지논의 제조
- [0264] 합성예 1의 단계 A의 생성물 (143 mg, 0.41 mmol), *N*-클로로석신이미드 (65 mg, 0.49 mmol) 및 클로로포름 (4 mL)의 용액을 실온에서 15시간 동안 교반하였다. 얻어진 용액을 다이클로로메탄으로 희석하여, 2회 수세하고,

유기층을 무수 MgSO₄로 건조시켜, 여과하고, 농축시켜, 황색 글래스로서의 표제 화합물 160 mg을 얻었다. 조생성물을 추가의 정제없이 다음 단계에 사용하였다.

[0265] ¹H NMR δ 8.60 (d, 2H), 7.69 (d, 2H), 7.62 (변형된(distorted) t, 2H), 7.53 (변형된 t, 2H), 3.82 (s, 3H), 3.09 (s, 3H).

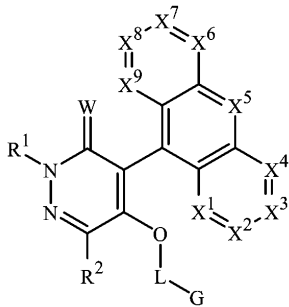
[0266] 단계 B: 6-클로로-4-(10-클로로-9-안트라세닐)-5-하이드록시-2-메틸-3(2H)-피리다지논의 제조

[0267] 단계 A의 생성물 155 mg과 모르폴린 (1 mL)의 현탁액을 2시간 동안 100 °C로 가열하였다. 얻어진 혼합물을 다이에틸 에테르 (5 mL)로 희석하고, 30분간 교반하여, 얻어진 상청액을 고체 생성물로부터 디캔테이션하였다. 고체 생성물을 다이클로로메탄과 1 N 염산 수용액에 분배하고, 유기층을 무수 MgSO₄로 건조시켜, 여과하고, 농축시켜, 황색 고체로서의 표제 화합물, 본 발명의 화합물 120 mg을 얻었다.

[0268] ¹H NMR (DMSO-d₆) δ 8.52 (d, 2H), 7.61 (d, 2H), 7.74 (변형된 t, 2H), 7.56 (변형된 t, 2H), 3.67 (s, 3H).

[0269] 당업계에 공지된 방법과 함께 본 명세서에 기재된 절차에 의해, 표 1 내지 (960)의 하기 화합물이 제조될 수 있다. 하기 약어가 하기 표에 사용된다: *t*는 삼차를 의미하고, *s*는 이차를 의미하며, *n*은 노르말을 의미하고, *i*는 아이소를 의미하며, *c*는 사이클로를 의미하고, Me는 메틸을 의미하며, Et는 에틸을 의미하고, Pr은 프로필을 의미하며, Bu는 부틸을 의미하고, *i*-Pr은 아이소프로필을 의미하며, *c*-Pr은 사이클로프로필을 의미하고, *t*-Bu는 삼차 부틸을 의미하며, Ph는 페닐을 의미하고, OMe는 메톡시를 의미하며, OEt는 에톡시를 의미하고, SMe는 메틸티오를 의미하며, -CN은 시아노를 의미하고, -NO₂는 니트로를 의미하며, TMS는 트라이메틸실릴을 의미하고, SOMe는 메틸설퍼닐을 의미하며, C₂F₅는 CF₂CF₃를 의미하고, SO₂Me는 메틸설포닐을 의미한다.

[0270] [표 1]



[0271]

[0272] W=O, R¹=Me, R²=Me, L-G=H이고, 나머지 변수는 하기에 정의됨.

X ¹	X ²	X ³	X ⁴	X ⁵	X ⁶	X ⁷	X ⁸	X ⁹
CH	CH	CH	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CH	CH	CH	CF	CH	CH	CH	CH
CH	CH	CH	CH	CCl	CH	CH	CH	CH
CH	CH	CH	CH	CBr	CH	CH	CH	CH
CH	CH	CH	CH	Cl	CH	CH	CH	CH
CH	CH	CH	CH	COCH ₃	CH	CH	CH	CH
CH	CH	CH	CH	CCF ₃	CH	CH	CH	CH
CH	CH	CH	CH	COCF ₂ H	CH	CH	CH	CH
CH	CH	CH	CH	COCF ₃	CH	CH	CH	CH
CH	CH	CH	CH	CCH ₃	CH	CH	CH	CH
CH	CH	CH	CH	CCCH ₂ CH ₃	CH	CH	CH	CH
CH	CH	CH	CH	CNO ₂	CH	CH	CH	CH
CH	CH	CH	CH	N	CH	CH	CH	CH
CH	CF	CH	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CCl	CH	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CBr	CH	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CH	Cl	CH	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CH	COCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CCF ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CH	COCF ₂ H	CH	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CH	COCF ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CCCH ₂ CH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CNO ₂	CH	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CH	N	CH	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CH	CH	CF	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CH	CH	CCl	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CH	CH	CBr	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CH	CH	Cl	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CH	CH	COCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CH	CH	CCF ₃	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CH	CH	COCF ₂ H	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CH	CH	COCF ₃	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CH	CH	CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CH	CH	CCCH ₂ CH ₃	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CH	CH	CNO ₂	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CH	CH	N	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CF	CH	CH	CH	CH	CH	CF	CH
CH	CF	CH	CH	CH	CH	CH	CCl	CH
CH	CF	CH	CH	CH	CH	CH	CBr	CH
CH	CF	CH	CH	CH	CH	CH	Cl	CH
CH	CF	CH	CH	CH	CH	CH	COCH ₃	CH
CH	CF	CH	CH	CH	CH	CH	CCF ₃	CH
CH	CF	CH	CH	CH	CH	CH	COCF ₂ H	CH
CH	CF	CH	CH	CH	CH	CH	COCF ₃	CH
CH	CF	CH	CH	CH	CH	CH	CCH ₃	CH
CH	CF	CH	CH	CH	CH	CH	CCCH ₂ CH ₃	CH
CH	CF	CH	CH	CH	CH	CH	CNO ₂	CH
CH	CF	CH	CH	CH	CH	CH	N	CH
CH	CCl	CH	CH	CH	CH	CH	CCl	CH
CH	CCl	CH	CH	CH	CH	CH	CBr	CH
CH	CCl	CH	CH	CH	CH	CH	Cl	CH
CH	CCl	CH	CH	CH	CH	CH	COCH ₃	CH
CH	CCl	CH	CH	CH	CH	CH	CCF ₃	CH
CH	CCl	CH	CH	CH	CH	CH	COCF ₂ H	CH

[0273]

X ¹	X ²	X ³	X ⁴	X ⁵	X ⁶	X ⁷	X ⁸	X ⁹
CH	CCl	CH	CH	CH	CH	CH	COCF ₃	CH
CH	CCl	CH	CH	CH	CH	CH	CCH ₃	CH
CH	CCl	CH	CH	CH	CH	CH	CCCH ₂ CH ₃	CH
CH	CCl	CH	CH	CH	CH	CH	CNO ₂	CH
CH	CCl	CH	CH	CH	CH	CH	N	CH
CH	CBr	CH	CH	CH	CH	CH	CBr	CH
CH	CBr	CH	CH	CH	CH	CH	Cl	CH
CH	CBr	CH	CH	CH	CH	CH	COCH ₃	CH
CH	CBr	CH	CH	CH	CH	CH	CCF ₃	CH
CH	CBr	CH	CH	CH	CH	CH	COCF ₂ H	CH
CH	CBr	CH	CH	CH	CH	CH	COCF ₃	CH
CH	CBr	CH	CH	CH	CH	CH	CCH ₃	CH
CH	CBr	CH	CH	CH	CH	CH	CCCH ₂ CH ₃	CH
CH	CBr	CH	CH	CH	CH	CH	CNO ₂	CH
CH	CBr	CH	CH	CH	CH	CH	N	CH
CH	Cl	CH	CH	CH	CH	CH	Cl	CH
CH	Cl	CH	CH	CH	CH	CH	COCH ₃	CH
CH	Cl	CH	CH	CH	CH	CH	CCF ₃	CH
CH	Cl	CH	CH	CH	CH	CH	COCF ₂ H	CH
CH	Cl	CH	CH	CH	CH	CH	COCF ₃	CH
CH	Cl	CH	CH	CH	CH	CH	CCH ₃	CH
CH	Cl	CH	CH	CH	CH	CH	CCCH ₂ CH ₃	CH
CH	Cl	CH	CH	CH	CH	CH	CNO ₂	CH
CH	Cl	CH	CH	CH	CH	CH	N	CH
CH	COCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	COCH ₃	CH
CH	COCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CCF ₃	CH
CH	COCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	COCF ₂ H	CH
CH	COCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	COCF ₃	CH
CH	COCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CCH ₃	CH
CH	COCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CCCH ₂ CH ₃	CH
CH	COCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CNO ₂	CH
CH	COCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	N	CH
CH	CCF ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CCF ₃	CH
CH	CCF ₃	CH	CH	CH	CH	CH	COCF ₂ H	CH
CH	CCF ₃	CH	CH	CH	CH	CH	COCF ₃	CH
CH	CCF ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CCH ₃	CH
CH	CCF ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CCCH ₂ CH ₃	CH
CH	CCF ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CNO ₂	CH
CH	CCF ₃	CH	CH	CH	CH	CH	N	CH
CH	COCF ₂ H	CH	CH	CH	CH	CH	COCF ₂ H	CH
CH	COCF ₂ H	CH	CH	CH	CH	CH	COCF ₃	CH
CH	COCF ₂ H	CH	CH	CH	CH	CH	CCH ₃	CH
CH	COCF ₂ H	CH	CH	CH	CH	CH	CCCH ₂ CH ₃	CH
CH	COCF ₂ H	CH	CH	CH	CH	CH	CNO ₂	CH
CH	COCF ₂ H	CH	CH	CH	CH	CH	N	CH
CH	COCF ₃	CH	CH	CH	CH	CH	COCF ₃	CH
CH	COCF ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CCH ₃	CH
CH	COCF ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CCCH ₂ CH ₃	CH
CH	COCF ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CNO ₂	CH
CH	COCF ₃	CH	CH	CH	CH	CH	N	CH
CH	CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CCH ₃	CH
CH	CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CCCH ₂ CH ₃	CH
CH	CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CNO ₂	CH
CH	CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	N	CH
CH	CCCH ₂ CH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CCCH ₂ CH ₃	CH
CH	CCCH ₂ CH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CNO ₂	CH

[0274]

X ¹	X ²	X ³	X ⁴	X ⁵	X ⁶	X ⁷	X ⁸	X ⁹
CH	CCCH ₂ CH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	N	CH
CH	CNO ₂	CH	CH	CH	CH	CH	CNO ₂	CH
CH	CNO ₂	CH	CH	CH	CH	CH	N	CH
CH	N	CH	CH	CH	CH	CH	N	CH
CH	CF	CH	CH	CCl	CH	CH	CH	CH
CH	CCl	CH	CH	CCl	CH	CH	CH	CH
CH	CBr	CH	CH	CCl	CH	CH	CH	CH
CH	Cl	CH	CH	CCl	CH	CH	CH	CH
CH	COCH ₃	CH	CH	CCl	CH	CH	CH	CH
CH	CCF ₃	CH	CH	CCl	CH	CH	CH	CH
CH	COCF ₂ H	CH	CH	CCl	CH	CH	CH	CH
CH	COCF ₃	CH	CH	CCl	CH	CH	CH	CH
CH	CCH ₃	CH	CH	CCl	CH	CH	CH	CH
CH	CCCH ₂ CH ₃	CH	CH	CCl	CH	CH	CH	CH
CH	CNO ₂	CH	CH	CCl	CH	CH	CH	CH
CH	N	CH	CH	CCl	CH	CH	CH	CH
CH	CF	CH	CH	CBr	CH	CH	CH	CH
CH	CCl	CH	CH	CBr	CH	CH	CH	CH
CH	CBr	CH	CH	CBr	CH	CH	CH	CH
CH	Cl	CH	CH	CBr	CH	CH	CH	CH
CH	COCH ₃	CH	CH	CBr	CH	CH	CH	CH
CH	CCF ₃	CH	CH	CBr	CH	CH	CH	CH
CH	COCF ₂ H	CH	CH	CBr	CH	CH	CH	CH
CH	COCF ₃	CH	CH	CBr	CH	CH	CH	CH
CH	CCH ₃	CH	CH	CBr	CH	CH	CH	CH
CH	CCCH ₂ CH ₃	CH	CH	CBr	CH	CH	CH	CH
CH	CNO ₂	CH	CH	CBr	CH	CH	CH	CH
CH	N	CH	CH	CBr	CH	CH	CH	CH
CH	CF	CH	CH	CCl	CH	CH	CF	CH
CH	CF	CH	CH	CCl	CH	CH	CCl	CH
CH	CF	CH	CH	CCl	CH	CH	CBr	CH
CH	CF	CH	CH	CCl	CH	CH	Cl	CH
CH	CF	CH	CH	CCl	CH	CH	COCH ₃	CH
CH	CF	CH	CH	CCl	CH	CH	CCF ₃	CH
CH	CF	CH	CH	CCl	CH	CH	COCF ₂ H	CH
CH	CF	CH	CH	CCl	CH	CH	COCF ₃	CH
CH	CF	CH	CH	CCl	CH	CH	CCH ₃	CH
CH	CF	CH	CH	CCl	CH	CH	CCCH ₂ CH ₃	CH
CH	CF	CH	CH	CCl	CH	CH	CNO ₂	CH
CH	CF	CH	CH	CCl	CH	CH	N	CH
CH	CCl	CH	CH	CCl	CH	CH	CCl	CH
CH	CCl	CH	CH	CCl	CH	CH	CBr	CH
CH	CCl	CH	CH	CCl	CH	CH	Cl	CH
CH	CCl	CH	CH	CCl	CH	CH	COCH ₃	CH
CH	CCl	CH	CH	CCl	CH	CH	CCF ₃	CH
CH	CCl	CH	CH	CCl	CH	CH	COCF ₂ H	CH
CH	CCl	CH	CH	CCl	CH	CH	COCF ₃	CH
CH	CCl	CH	CH	CCl	CH	CH	CCH ₃	CH
CH	CCl	CH	CH	CCl	CH	CH	CCCH ₂ CH ₃	CH
CH	CCl	CH	CH	CCl	CH	CH	CNO ₂	CH
CH	CCl	CH	CH	CCl	CH	CH	N	CH
CH	CBr	CH	CH	CCl	CH	CH	CBr	CH
CH	CBr	CH	CH	CCl	CH	CH	Cl	CH
CH	CBr	CH	CH	CCl	CH	CH	COCH ₃	CH
CH	CBr	CH	CH	CCl	CH	CH	CCF ₃	CH
CH	CBr	CH	CH	CCl	CH	CH	COCF ₂ H	CH

[0275]

X ¹	X ²	X ³	X ⁴	X ⁵	X ⁶	X ⁷	X ⁸	X ⁹
CH	CBr	CH	CH	CCl	CH	CH	COCF ₃	CH
CH	CBr	CH	CH	CCl	CH	CH	CCH ₃	CH
CH	CBr	CH	CH	CCl	CH	CH	CCCH ₂ CH ₃	CH
CH	CBr	CH	CH	CCl	CH	CH	CNO ₂	CH
CH	CBr	CH	CH	CCl	CH	CH	N	CH
CH	Cl	CH	CH	CCl	CH	CH	Cl	CH
CH	Cl	CH	CH	CCl	CH	CH	COCH ₃	CH
CH	Cl	CH	CH	CCl	CH	CH	CCF ₃	CH
CH	Cl	CH	CH	CCl	CH	CH	COCF ₂ H	CH
CH	Cl	CH	CH	CCl	CH	CH	COCF ₃	CH
CH	Cl	CH	CH	CCl	CH	CH	CCH ₃	CH
CH	Cl	CH	CH	CCl	CH	CH	CCCH ₂ CH ₃	CH
CH	Cl	CH	CH	CCl	CH	CH	CNO ₂	CH
CH	Cl	CH	CH	CCl	CH	CH	N	CH
CH	COCH ₃	CH	CH	CCl	CH	CH	COCH ₃	CH
CH	COCH ₃	CH	CH	CCl	CH	CH	CCF ₃	CH
CH	COCH ₃	CH	CH	CCl	CH	CH	COCF ₂ H	CH
CH	COCH ₃	CH	CH	CCl	CH	CH	COCF ₃	CH
CH	COCH ₃	CH	CH	CCl	CH	CH	CCH ₃	CH
CH	COCH ₃	CH	CH	CCl	CH	CH	CCCH ₂ CH ₃	CH
CH	COCH ₃	CH	CH	CCl	CH	CH	CNO ₂	CH
CH	COCH ₃	CH	CH	CCl	CH	CH	N	CH
CH	CCF ₃	CH	CH	CCl	CH	CH	CCF ₃	CH
CH	CCF ₃	CH	CH	CCl	CH	CH	COCF ₂ H	CH
CH	CCF ₃	CH	CH	CCl	CH	CH	COCF ₃	CH
CH	CCF ₃	CH	CH	CCl	CH	CH	CCH ₃	CH
CH	CCF ₃	CH	CH	CCl	CH	CH	CCCH ₂ CH ₃	CH
CH	CCF ₃	CH	CH	CCl	CH	CH	CNO ₂	CH
CH	CCF ₃	CH	CH	CCl	CH	CH	N	CH
CH	COCF ₂ H	CH	CH	CCl	CH	CH	COCF ₂ H	CH
CH	COCF ₂ H	CH	CH	CCl	CH	CH	COCF ₃	CH
CH	COCF ₂ H	CH	CH	CCl	CH	CH	CCH ₃	CH
CH	COCF ₂ H	CH	CH	CCl	CH	CH	CCCH ₂ CH ₃	CH
CH	COCF ₂ H	CH	CH	CCl	CH	CH	CNO ₂	CH
CH	COCF ₂ H	CH	CH	CCl	CH	CH	N	CH
CH	COCF ₃	CH	CH	CCl	CH	CH	COCF ₃	CH
CH	COCF ₃	CH	CH	CCl	CH	CH	CCH ₃	CH
CH	COCF ₃	CH	CH	CCl	CH	CH	CCCH ₂ CH ₃	CH
CH	COCF ₃	CH	CH	CCl	CH	CH	CNO ₂	CH
CH	COCF ₃	CH	CH	CCl	CH	CH	N	CH
CH	CCH ₃	CH	CH	CCl	CH	CH	CCH ₃	CH
CH	CCH ₃	CH	CH	CCl	CH	CH	CCCH ₂ CH ₃	CH
CH	CCH ₃	CH	CH	CCl	CH	CH	CNO ₂	CH
CH	CCH ₃	CH	CH	CCl	CH	CH	N	CH
CH	CCCH ₂ CH ₃	CH	CH	CCl	CH	CH	CCCH ₂ CH ₃	CH
CH	CCCH ₂ CH ₃	CH	CH	CCl	CH	CH	CNO ₂	CH
CH	CCCH ₂ CH ₃	CH	CH	CCl	CH	CH	N	CH
CH	C-NO ₂	CH	CH	CCl	CH	CH	CNO ₂	CH
CH	C-NO ₂	CH	CH	CCl	CH	CH	N	CH
CH	N	CH	CH	CCl	CH	CH	N	CH
CH	CF	CH	CH	CBr	CH	CH	CF	CH
CH	CF	CH	CH	CBr	CH	CH	CCl	CH
CH	CF	CH	CH	CBr	CH	CH	CBr	CH
CH	CF	CH	CH	CBr	CH	CH	Cl	CH
CH	CF	CH	CH	CBr	CH	CH	COCH ₃	CH
CH	CF	CH	CH	CBr	CH	CH	CCF ₃	CH

[0276]

X ¹	X ²	X ³	X ⁴	X ⁵	X ⁶	X ⁷	X ⁸	X ⁹
CH	CF	CH	CH	CBr	CH	CH	COCF ₂ H	CH
CH	CF	CH	CH	CBr	CH	CH	COCF ₃	CH
CH	CF	CH	CH	CBr	CH	CH	CCH ₃	CH
CH	CF	CH	CH	CBr	CH	CH	CCCH ₂ CH ₃	CH
CH	CF	CH	CH	CBr	CH	CH	CNO ₂	CH
CH	CF	CH	CH	CBr	CH	CH	N	CH
CH	CCl	CH	CH	CBr	CH	CH	CCl	CH
CH	CCl	CH	CH	CBr	CH	CH	CBr	CH
CH	CCl	CH	CH	CBr	CH	CH	Cl	CH
CH	CCl	CH	CH	CBr	CH	CH	COCH ₃	CH
CH	CCl	CH	CH	CBr	CH	CH	CCF ₃	CH
CH	CCl	CH	CH	CBr	CH	CH	COCF ₂ H	CH
CH	CCl	CH	CH	CBr	CH	CH	COCF ₃	CH
CH	CCl	CH	CH	CBr	CH	CH	CCH ₃	CH
CH	CCl	CH	CH	CBr	CH	CH	CCCH ₂ CH ₃	CH
CH	CCl	CH	CH	CBr	CH	CH	CNO ₂	CH
CH	CCl	CH	CH	CBr	CH	CH	N	CH
CH	CBr	CH	CH	CBr	CH	CH	CBr	CH
CH	CBr	CH	CH	CBr	CH	CH	Cl	CH
CH	CBr	CH	CH	CBr	CH	CH	COCH ₃	CH
CH	CBr	CH	CH	CBr	CH	CH	CCF ₃	CH
CH	CBr	CH	CH	CBr	CH	CH	COCF ₂ H	CH
CH	CBr	CH	CH	CBr	CH	CH	COCF ₃	CH
CH	CBr	CH	CH	CBr	CH	CH	CCH ₃	CH
CH	CBr	CH	CH	CBr	CH	CH	CCCH ₂ CH ₃	CH
CH	CBr	CH	CH	CBr	CH	CH	CNO ₂	CH
CH	CBr	CH	CH	CBr	CH	CH	N	CH
CH	Cl	CH	CH	CBr	CH	CH	Cl	CH
CH	Cl	CH	CH	CBr	CH	CH	COCH ₃	CH
CH	Cl	CH	CH	CBr	CH	CH	CCF ₃	CH
CH	Cl	CH	CH	CBr	CH	CH	COCF ₂ H	CH
CH	Cl	CH	CH	CBr	CH	CH	COCF ₃	CH
CH	Cl	CH	CH	CBr	CH	CH	CCH ₃	CH
CH	Cl	CH	CH	CBr	CH	CH	CCCH ₂ CH ₃	CH
CH	Cl	CH	CH	CBr	CH	CH	CNO ₂	CH
CH	Cl	CH	CH	CBr	CH	CH	N	CH
CH	COCH ₃	CH	CH	CBr	CH	CH	COCH ₃	CH
CH	COCH ₃	CH	CH	CBr	CH	CH	CCF ₃	CH
CH	COCH ₃	CH	CH	CBr	CH	CH	COCF ₂ H	CH
CH	COCH ₃	CH	CH	CBr	CH	CH	COCF ₃	CH
CH	COCH ₃	CH	CH	CBr	CH	CH	CCH ₃	CH
CH	COCH ₃	CH	CH	CBr	CH	CH	CCCH ₂ CH ₃	CH
CH	COCH ₃	CH	CH	CBr	CH	CH	CNO ₂	CH
CH	COCH ₃	CH	CH	CBr	CH	CH	N	CH
CH	CCF ₃	CH	CH	CBr	CH	CH	CCF ₃	CH
CH	CCF ₃	CH	CH	CBr	CH	CH	COCF ₂ H	CH
CH	CCF ₃	CH	CH	CBr	CH	CH	COCF ₃	CH
CH	CCF ₃	CH	CH	CBr	CH	CH	CCH ₃	CH
CH	CCF ₃	CH	CH	CBr	CH	CH	CCCH ₂ CH ₃	CH
CH	CCF ₃	CH	CH	CBr	CH	CH	CNO ₂	CH
CH	CCF ₃	CH	CH	CBr	CH	CH	N	CH
CH	COCF ₂ H	CH	CH	CBr	CH	CH	COCF ₂ H	CH
CH	COCF ₂ H	CH	CH	CBr	CH	CH	COCF ₃	CH
CH	COCF ₂ H	CH	CH	CBr	CH	CH	CCH ₃	CH
CH	COCF ₂ H	CH	CH	CBr	CH	CH	CCCH ₂ CH ₃	CH
CH	COCF ₂ H	CH	CH	CBr	CH	CH	CNO ₂	CH

[0277]

X ¹	X ²	X ³	X ⁴	X ⁵	X ⁶	X ⁷	X ⁸	X ⁹
CH	COCF ₂ H	CH	CH	CBr	CH	CH	N	CH
CH	COCF ₃	CH	CH	CBr	CH	CH	COCF ₃	CH
CH	COCF ₃	CH	CH	CBr	CH	CH	CCH ₃	CH
CH	COCF ₃	CH	CH	CBr	CH	CH	CCCH ₂ CH ₃	CH
CH	COCF ₃	CH	CH	CBr	CH	CH	CNO ₂	CH
CH	COCF ₃	CH	CH	CBr	CH	CH	N	CH
CH	CCH ₃	CH	CH	CBr	CH	CH	CCH ₃	CH
CH	CCH ₃	CH	CH	CBr	CH	CH	CCCH ₂ CH ₃	CH
CH	CCH ₃	CH	CH	CBr	CH	CH	CNO ₂	CH
CH	CCH ₃	CH	CH	CBr	CH	CH	N	CH
CH	CCCH ₂ CH ₃	CH	CH	CBr	CH	CH	CCCH ₂ CH ₃	CH
CH	CCCH ₂ CH ₃	CH	CH	CBr	CH	CH	CNO ₂	CH
CH	CCCH ₂ CH ₃	CH	CH	CBr	CH	CH	N	CH
CH	CNO ₂	CH	CH	CBr	CH	CH	CNO ₂	CH
CH	CNO ₂	CH	CH	CBr	CH	CH	N	CH
CH	N	CH	CH	CBr	CH	CH	N	CH
CH	CH	CH	CF	CH	CF	CH	CH	CH
CH	CH	CH	CCl	CH	CF	CH	CH	CH
CH	CH	CH	CBr	CH	CF	CH	CH	CH
CH	CH	CH	Cl	CH	CF	CH	CH	CH
CH	CH	CH	COCH ₃	CH	CF	CH	CH	CH
CH	CH	CH	CCF ₃	CH	CF	CH	CH	CH
CH	CH	CH	COCF ₂ H	CH	CF	CH	CH	CH
CH	CH	CH	COCF ₃	CH	CF	CH	CH	CH
CH	CH	CH	CCH ₃	CH	CF	CH	CH	CH
CH	CH	CH	CCCH ₂ CH ₃	CH	CF	CH	CH	CH
CH	CH	CH	CNO ₂	CH	CF	CH	CH	CH
CH	CH	CH	N	CH	CF	CH	CH	CH
CH	CH	CH	CCl	CH	CCl	CH	CH	CH
CH	CH	CH	CBr	CH	CCl	CH	CH	CH
CH	CH	CH	Cl	CH	CCl	CH	CH	CH
CH	CH	CH	COCH ₃	CH	CCl	CH	CH	CH
CH	CH	CH	CCF ₃	CH	CCl	CH	CH	CH
CH	CH	CH	COCF ₂ H	CH	CCl	CH	CH	CH
CH	CH	CH	COCF ₃	CH	CCl	CH	CH	CH
CH	CH	CH	CCH ₃	CH	CCl	CH	CH	CH
CH	CH	CH	CCCH ₂ CH ₃	CH	CCl	CH	CH	CH
CH	CH	CH	CNO ₂	CH	CCl	CH	CH	CH
CH	CH	CH	N	CH	CCl	CH	CH	CH
CH	CH	CH	CBr	CH	CBr	CH	CH	CH
CH	CH	CH	Cl	CH	CBr	CH	CH	CH
CH	CH	CH	COCH ₃	CH	CBr	CH	CH	CH
CH	CH	CH	CCF ₃	CH	CBr	CH	CH	CH
CH	CH	CH	COCF ₂ H	CH	CBr	CH	CH	CH
CH	CH	CH	COCF ₃	CH	CBr	CH	CH	CH
CH	CH	CH	CCH ₃	CH	CBr	CH	CH	CH
CH	CH	CH	CCCH ₂ CH ₃	CH	CBr	CH	CH	CH
CH	CH	CH	CNO ₂	CH	CBr	CH	CH	CH
CH	CH	CH	N	CH	CBr	CH	CH	CH
CH	CH	CH	Cl	CH	Cl	CH	CH	CH
CH	CH	CH	COCH ₃	CH	Cl	CH	CH	CH
CH	CH	CH	CCF ₃	CH	Cl	CH	CH	CH
CH	CH	CH	COCF ₂ H	CH	Cl	CH	CH	CH
CH	CH	CH	COCF ₃	CH	Cl	CH	CH	CH
CH	CH	CH	CCH ₃	CH	Cl	CH	CH	CH
CH	CH	CH	CCCH ₂ CH ₃	CH	Cl	CH	CH	CH

[0278]

X ¹	X ²	X ³	X ⁴	X ⁵	X ⁶	X ⁷	X ⁸	X ⁹
CH	CH	CH	CNO ₂	CH	Cl	CH	CH	CH
CH	CH	CH	N	CH	Cl	CH	CH	CH
CH	CH	CH	COCH ₃	CH	COCH ₃	CH	CH	CH
CH	CH	CH	CCF ₃	CH	COCH ₃	CH	CH	CH
CH	CH	CH	COCF ₂ H	CH	COCH ₃	CH	CH	CH
CH	CH	CH	COCF ₃	CH	COCH ₃	CH	CH	CH
CH	CH	CH	CCH ₃	CH	COCH ₃	CH	CH	CH
CH	CH	CH	CCCH ₂ CH ₃	CH	COCH ₃	CH	CH	CH
CH	CH	CH	CNO ₂	CH	COCH ₃	CH	CH	CH
CH	CH	CH	N	CH	COCH ₃	CH	CH	CH
CH	CH	CH	CCF ₃	CH	CCF ₃	CH	CH	CH
CH	CH	CH	COCF ₂ H	CH	CCF ₃	CH	CH	CH
CH	CH	CH	COCF ₃	CH	CCF ₃	CH	CH	CH
CH	CH	CH	CCH ₃	CH	CCF ₃	CH	CH	CH
CH	CH	CH	CCCH ₂ CH ₃	CH	CCF ₃	CH	CH	CH
CH	CH	CH	CNO ₂	CH	CCF ₃	CH	CH	CH
CH	CH	CH	N	CH	CCF ₃	CH	CH	CH
CH	CH	CH	COCF ₂ H	CH	COCF ₂ H	CH	CH	CH
CH	CH	CH	COCF ₃	CH	COCF ₂ H	CH	CH	CH
CH	CH	CH	CCH ₃	CH	COCF ₂ H	CH	CH	CH
CH	CH	CH	CCCH ₂ CH ₃	CH	COCF ₂ H	CH	CH	CH
CH	CH	CH	CNO ₂	CH	COCF ₂ H	CH	CH	CH
CH	CH	CH	N	CH	COCF ₂ H	CH	CH	CH
CH	CH	CH	COCF ₃	CH	COCF ₃	CH	CH	CH
CH	CH	CH	CCH ₃	CH	COCF ₃	CH	CH	CH
CH	CH	CH	CCCH ₂ CH ₃	CH	COCF ₃	CH	CH	CH
CH	CH	CH	CNO ₂	CH	COCF ₃	CH	CH	CH
CH	CH	CH	N	CH	COCF ₃	CH	CH	CH
CH	CH	CH	CCH ₃	CH	CCH ₃	CH	CH	CH
CH	CH	CH	CCCH ₂ CH ₃	CH	CCH ₃	CH	CH	CH
CH	CH	CH	CNO ₂	CH	CCH ₃	CH	CH	CH
CH	CH	CH	N	CH	CCCH ₂ CH ₃	CH	CH	CH
CH	CH	CH	CCCH ₂ CH ₃	CH	CCCH ₂ CH ₃	CH	CH	CH
CH	CH	CH	CNO ₂	CH	CCCH ₂ CH ₃	CH	CH	CH
CH	CH	CH	N	CH	CCCH ₂ CH ₃	CH	CH	CH
CH	CH	CH	CNO ₂	CH	CNO ₂	CH	CH	CH
CH	CH	CH	N	CH	CNO ₂	CH	CH	CH
CH	CF	CH	CH	CH	N	CH	CH	CH
CH	CF	CH	CH	CH	N	CH	CH	CH
CH	CF	CH	CH	CH	CF	CH	CH	CH
CH	CCl	CH	CH	CH	CF	CH	CH	CH
CH	CBr	CH	CH	CH	CF	CH	CH	CH
CH	Cl	CH	CH	CH	CF	CH	CH	CH
CH	Cl	CH	CH	CH	CF	CH	CH	CH
CH	COCH ₃	CH	CH	CH	CF	CH	CH	CH
CH	CCF ₃	CH	CH	CH	CF	CH	CH	CH
CH	COCF ₂ H	CH	CH	CH	CF	CH	CH	CH
CH	COCF ₃	CH	CH	CH	CF	CH	CH	CH
CH	COCF ₃	CH	CH	CH	CF	CH	CH	CH
CH	CCH ₃	CH	CH	CH	CF	CH	CH	CH
CH	CCH ₃	CH	CH	CH	CF	CH	CH	CH
CH	CCCH ₂ CH ₃	CH	CH	CH	CF	CH	CH	CH
CH	CNO ₂	CH	CH	CH	CF	CH	CH	CH
CH	N	CH	CH	CH	CF	CH	CH	CH
CH	CCl	CH	CH	CH	CF	CH	CH	CH
CH	CBr	CH	CH	CH	CF	CH	CH	CH
CH	Cl	CH	CH	CH	CF	CH	CH	CH
CH	Cl	CH	CH	CH	CF	CH	CH	CH
CH	COCH ₃	CH	CH	CH	CF	CH	CH	CH
CH	CCF ₃	CH	CH	CH	CF	CH	CH	CH
CH	COCF ₂ H	CH	CH	CH	CF	CH	CH	CH

[0279]

X ¹	X ²	X ³	X ⁴	X ⁵	X ⁶	X ⁷	X ⁸	X ⁹
CH	COCF ₃	CH	CH	CH	CCl	CH	CH	CH
CH	CCH ₃	CH	CH	CH	CCl	CH	CH	CH
CH	CCCH ₂ CH ₃	CH	CH	CH	CCl	CH	CH	CH
CH	CNO ₂	CH	CH	CH	CCl	CH	CH	CH
CH	N	CH	CH	CH	CCl	CH	CH	CH
CH	CBr	CH	CH	CH	CBr	CH	CH	CH
CH	Cl	CH	CH	CH	CBr	CH	CH	CH
CH	COCH ₃	CH	CH	CH	CBr	CH	CH	CH
CH	CCF ₃	CH	CH	CH	CBr	CH	CH	CH
CH	COCF ₂ H	CH	CH	CH	CBr	CH	CH	CH
CH	COCF ₃	CH	CH	CH	CBr	CH	CH	CH
CH	CCH ₃	CH	CH	CH	CBr	CH	CH	CH
CH	CCCH ₂ CH ₃	CH	CH	CH	CBr	CH	CH	CH
CH	CNO ₂	CH	CH	CH	CBr	CH	CH	CH
CH	N	CH	CH	CH	CBr	CH	CH	CH
CH	Cl	CH	CH	CH	Cl	CH	CH	CH
CH	COCH ₃	CH	CH	CH	Cl	CH	CH	CH
CH	CCF ₃	CH	CH	CH	Cl	CH	CH	CH
CH	COCF ₂ H	CH	CH	CH	Cl	CH	CH	CH
CH	COCF ₃	CH	CH	CH	Cl	CH	CH	CH
CH	CCH ₃	CH	CH	CH	Cl	CH	CH	CH
CH	CCCH ₂ CH ₃	CH	CH	CH	Cl	CH	CH	CH
CH	CNO ₂	CH	CH	CH	Cl	CH	CH	CH
CH	N	CH	CH	CH	Cl	CH	CH	CH
CH	COCH ₃	CH	CH	CH	COCH ₃	CH	CH	CH
CH	CCF ₃	CH	CH	CH	COCH ₃	CH	CH	CH
CH	COCF ₂ H	CH	CH	CH	COCH ₃	CH	CH	CH
CH	COCF ₃	CH	CH	CH	COCH ₃	CH	CH	CH
CH	CCH ₃	CH	CH	CH	COCH ₃	CH	CH	CH
CH	CCCH ₂ CH ₃	CH	CH	CH	COCH ₃	CH	CH	CH
CH	CNO ₂	CH	CH	CH	COCH ₃	CH	CH	CH
CH	N	CH	CH	CH	COCH ₃	CH	CH	CH
CH	CCF ₃	CH	CH	CH	CCF ₃	CH	CH	CH
CH	COCF ₂ H	CH	CH	CH	CCF ₃	CH	CH	CH
CH	COCF ₃	CH	CH	CH	CCF ₃	CH	CH	CH
CH	CCH ₃	CH	CH	CH	CCF ₃	CH	CH	CH
CH	CCCH ₂ CH ₃	CH	CH	CH	CCF ₃	CH	CH	CH
CH	CNO ₂	CH	CH	CH	CCF ₃	CH	CH	CH
CH	N	CH	CH	CH	CCF ₃	CH	CH	CH
CH	COCF ₂ H	CH	CH	CH	COCF ₂ H	CH	CH	CH
CH	COCF ₃	CH	CH	CH	COCF ₂ H	CH	CH	CH
CH	CCH ₃	CH	CH	CH	COCF ₂ H	CH	CH	CH
CH	CCCH ₂ CH ₃	CH	CH	CH	COCF ₂ H	CH	CH	CH
CH	CNO ₂	CH	CH	CH	COCF ₂ H	CH	CH	CH
CH	N	CH	CH	CH	COCF ₂ H	CH	CH	CH
CH	COCF ₃	CH	CH	CH	COCF ₃	CH	CH	CH
CH	CCH ₃	CH	CH	CH	COCF ₃	CH	CH	CH
CH	CCCH ₂ CH ₃	CH	CH	CH	COCF ₃	CH	CH	CH
CH	CNO ₂	CH	CH	CH	COCF ₃	CH	CH	CH
CH	N	CH	CH	CH	COCF ₃	CH	CH	CH
CH	CCH ₃	CH	CH	CH	CCH ₃	CH	CH	CH
CH	CCCH ₂ CH ₃	CH	CH	CH	CCH ₃	CH	CH	CH
CH	CNO ₂	CH	CH	CH	CCH ₃	CH	CH	CH
CH	N	CH	CH	CH	CCH ₃	CH	CH	CH
CH	CCCH ₂ CH ₃	CH	CH	CH	CCCH ₂ CH ₃	CH	CH	CH
CH	CNO ₂	CH	CH	CH	CCCH ₂ CH ₃	CH	CH	CH

[0280]

X ¹	X ²	X ³	X ⁴	X ⁵	X ⁶	X ⁷	X ⁸	X ⁹
CH	N	CH	CH	CH	CCCH ₂ CH ₃	CH	CH	CH
CH	CNO ₂	CH	CH	CH	CNO ₂	CH	CH	CH
CH	N	CH	CH	CH	CNO ₂	CH	CH	CH
CH	N	CH	CH	CH	N	CH	CH	CH
CH	CF	CH	CF	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CCl	CH	CF	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CBr	CH	CF	CH	CH	CH	CH	CH
CH	Cl	CH	CF	CH	CH	CH	CH	CH
CH	COCH ₃	CH	CF	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CCF ₃	CH	CF	CH	CH	CH	CH	CH
CH	COCF ₂ H	CH	CF	CH	CH	CH	CH	CH
CH	COCF ₃	CH	CF	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CCH ₃	CH	CF	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CCCH ₂ CH ₃	CH	CF	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CNO ₂	CH	CF	CH	CH	CH	CH	CH
CH	N	CH	CF	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CF	CH	CCl	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CCl	CH	CCl	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CBr	CH	CCl	CH	CH	CH	CH	CH
CH	Cl	CH	CCl	CH	CH	CH	CH	CH
CH	COCH ₃	CH	CCl	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CCF ₃	CH	CCl	CH	CH	CH	CH	CH
CH	COCF ₂ H	CH	CCl	CH	CH	CH	CH	CH
CH	COCF ₃	CH	CCl	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CCH ₃	CH	CCl	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CCCH ₂ CH ₃	CH	CCl	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CNO ₂	CH	CCl	CH	CH	CH	CH	CH
CH	N	CH	CCl	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CF	CH	COCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CCl	CH	COCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CBr	CH	COCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH
CH	Cl	CH	COCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH
CH	COCH ₃	CH	COCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CCF ₃	CH	COCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH
CH	COCF ₂ H	CH	COCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH
CH	COCF ₃	CH	COCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CCH ₃	CH	COCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CCCH ₂ CH ₃	CH	COCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CNO ₂	CH	COCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH
CH	N	CH	COCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CF	CH	CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CCl	CH	CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CBr	CH	CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH
CH	Cl	CH	CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH
CH	COCH ₃	CH	CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CCF ₃	CH	CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH
CH	COCF ₂ H	CH	CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH
CH	COCF ₃	CH	CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CCH ₃	CH	CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CCCH ₂ CH ₃	CH	CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CNO ₂	CH	CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH
CH	N	CH	CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CF	CH	CCF ₃	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CCl	CH	CCF ₃	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CBr	CH	CCF ₃	CH	CH	CH	CH	CH
CH	Cl	CH	CCF ₃	CH	CH	CH	CH	CH

[0281]

X ¹	X ²	X ³	X ⁴	X ⁵	X ⁶	X ⁷	X ⁸	X ⁹
CH	COCH ₃	CH	CCF ₃	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CCF ₃	CH	CCF ₃	CH	CH	CH	CH	CH
CH	COCF ₂ H	CH	CCF ₃	CH	CH	CH	CH	CH
CH	COCF ₃	CH	CCF ₃	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CCH ₃	CH	CCF ₃	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CCCH ₂ CH ₃	CH	CCF ₃	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CNO ₂	CH	CCF ₃	CH	CH	CH	CH	CH
CH	N	CH	CCF ₃	CH	CH	CH	CH	CH
CF	CH	CH	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CH	CF	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CCl	CH	CH	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CH	C-Cl	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CH	CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CF	CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CCH ₃	CF	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CCl	CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CCH ₃	CCl	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CBr	CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CCl	CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CCH ₃	CH
CCl	CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CCl	CH
CCl	CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CF	CH
CCl	CCl	CH	CH	CH	CH	CH	CCH ₃	CH
CCl	CF	CH	CH	CH	CH	CH	CCH ₃	CH
CBr	CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CCH ₃	CH
CBr	CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CCl	CH
CBr	CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CF	CH
CBr	CCl	CH	CH	CH	CH	CH	CCH ₃	CH
CBr	CF	CH	CH	CH	CH	CH	CCH ₃	CH
CF	CH	CH	CH	CCl	CH	CH	CH	CH
CH	CH	CF	CH	CCl	CH	CH	CH	CH
CCl	CH	CH	CH	CCl	CH	CH	CH	CH
CH	CH	C-Cl	CH	CCl	CH	CH	CH	CH
CCH ₃	CH	CH	CH	CCl	CH	CH	CH	CH
CH	CH	CCH ₃	CH	CCl	CH	CH	CH	CH
CF	CCH ₃	CH	CH	CCl	CH	CH	CH	CH
CH	CCH ₃	CF	CH	CCl	CH	CH	CH	CH
CCl	CCH ₃	CH	CH	CCl	CH	CH	CH	CH
CH	CCH ₃	CCl	CH	CCl	CH	CH	CH	CH
CBr	CCH ₃	CH	CH	CCl	CH	CH	CH	CH
CCl	CCH ₃	CH	CH	CCl	CH	CH	CCH ₃	CH
CCl	CCH ₃	CH	CH	CCl	CH	CH	CCl	CH
CCl	CCH ₃	CH	CH	CCl	CH	CH	CF	CH
CCl	CCl	CH	CH	CCl	CH	CH	CCH ₃	CH
CCl	CF	CH	CH	CCl	CH	CH	CCH ₃	CH
CBr	CCH ₃	CH	CH	CCl	CH	CH	CCH ₃	CH
CBr	CCH ₃	CH	CH	CCl	CH	CH	CCl	CH
CBr	CCH ₃	CH	CH	CCl	CH	CH	CF	CH
CBr	CCl	CH	CH	CCl	CH	CH	CCH ₃	CH
CBr	CF	CH	CH	CCl	CH	CH	CCH ₃	CH
CF	CH	CH	CH	CBr	CH	CH	CH	CH
CH	CH	CF	CH	CBr	CH	CH	CH	CH
CCl	CH	CH	CH	CBr	CH	CH	CH	CH
CH	CH	C-Cl	CH	CBr	CH	CH	CH	CH
CCH ₃	CH	CH	CH	CBr	CH	CH	CH	CH
CH	CH	CCH ₃	CH	CBr	CH	CH	CH	CH

[0282]

X ¹	X ²	X ³	X ⁴	X ⁵	X ⁶	X ⁷	X ⁸	X ⁹
CF	CCH ₃	CH	CH	CBr	CH	CH	CH	CH
CH	CCH ₃	CF	CH	CBr	CH	CH	CH	CH
CCl	CCH ₃	CH	CH	CBr	CH	CH	CH	CH
CH	CCH ₃	CCl	CH	CBr	CH	CH	CH	CH
CBr	CCH ₃	CH	CH	CBr	CH	CH	CH	CH
CCl	CCH ₃	CH	CH	CBr	CH	CH	CCH ₃	CH
CCl	CCH ₃	CH	CH	CBr	CH	CH	CCl	CH
CCl	CCH ₃	CH	CH	CBr	CH	CH	CF	CH
CCl	CCl	CH	CH	CBr	CH	CH	CCH ₃	CH
CCl	CF	CH	CH	CBr	CH	CH	CCH ₃	CH
CBr	CCH ₃	CH	CH	CBr	CH	CH	CCH ₃	CH
CBr	CCH ₃	CH	CH	CBr	CH	CH	CCl	CH
CBr	CCH ₃	CH	CH	CBr	CH	CH	CF	CH
CBr	CCl	CH	CH	CBr	CH	CH	CCH ₃	CH
CBr	CF	CH	CH	CBr	CH	CH	CCH ₃	CH

[0283]

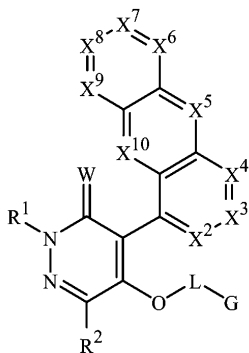
[0284] 본 발명은 또한 표 2 내지 48을 포함하며, 여기서 표 1의 헤더 행 문구 (Header Row Phrase) (즉, "W=0, R¹=Me, R²=Me, L-G=H")가 각각의 표에 열거된 헤더 행 문구로 대체되며, 나머지 변수는 표 1에 정의된 바와 같다.

표	헤더 행 문구
2	W=O, R ¹ =Me, R ² =Cl, L-G=H
3	W=O, R ¹ =Me, R ² =Br, L-G=H
4	W=O, R ¹ =Me, R ² =OCH ₃ , L-G=H
5	W=O, R ¹ =Et, R ² =CH ₃ , L-G=H
6	W=O, R ¹ =Et, R ² =Cl, L-G=H
7	W=O, R ¹ =Et, R ² =Br, L-G=H
8	W=O, R ¹ =Et, R ² =OCH ₃ , L-G=H
9	W=O, R ¹ =CH ₂ CH ₂ OCH ₃ , R ² =CH ₃ , L-G=H
10	W=O, R ¹ =CH ₂ CH ₂ OCH ₃ , R ² =Cl, L-G=H
11	W=O, R ¹ =CH ₂ CH ₂ OCH ₃ , R ² =Br, L-G=H
12	W=O, R ¹ =CH ₂ CH ₂ OCH ₃ , R ² =OCH ₃ , L-G=H
13	W=O, R ¹ =Me, R ² =CH ₃ , L-G=C(O)CH ₃
14	W=O, R ¹ =Me, R ² =Cl, L-G=C(O)CH ₃
15	W=O, R ¹ =Me, R ² =Br, L-G=C(O)CH ₃
16	W=O, R ¹ =Me, R ² =OCH ₃ , L-G=C(O)CH ₃
17	W=O, R ¹ =Et, R ² =CH ₃ , L-G=C(O)CH ₃
18	W=O, R ¹ =Et, R ² =Cl, L-G=C(O)CH ₃
19	W=O, R ¹ =Et, R ² =Br, L-G=C(O)CH ₃
20	W=O, R ¹ =Et, R ² =OCH ₃ , L-G=C(O)CH ₃
21	W=O, R ¹ =CH ₂ CH ₂ OCH ₃ , R ² =CH ₃ , L-G=C(O)CH ₃
22	W=O, R ¹ =CH ₂ CH ₂ OCH ₃ , R ² =Cl, L-G=C(O)CH ₃
23	W=O, R ¹ =CH ₂ CH ₂ OCH ₃ , R ² =Br, L-G=C(O)CH ₃
24	W=O, R ¹ =CH ₂ CH ₂ OCH ₃ , R ² =OCH ₃ , L-G=C(O)CH ₃
25	W=O, R ¹ =Me, R ² =CH ₃ , L-G=C(O)CH ₂ CH ₃
26	W=O, R ¹ =Me, R ² =Cl, L-G=C(O)CH ₂ CH ₃
27	W=O, R ¹ =Me, R ² =Br, L-G=C(O)CH ₂ CH ₃
28	W=O, R ¹ =Me, R ² =OCH ₃ , L-G=C(O)CH ₂ CH ₃
29	W=O, R ¹ =Et, R ² =CH ₃ , L-G=C(O)CH ₂ CH ₃
30	W=O, R ¹ =Et, R ² =Cl, L-G=C(O)CH ₂ CH ₃
31	W=O, R ¹ =Et, R ² =Br, L-G=C(O)CH ₂ CH ₃
32	W=O, R ¹ =Et, R ² =OCH ₃ , L-G=C(O)CH ₂ CH ₃
33	W=O, R ¹ =CH ₂ CH ₂ OCH ₃ , R ² =CH ₃ , L-G=C(O)CH ₂ CH ₃
34	W=O, R ¹ =CH ₂ CH ₂ OCH ₃ , R ² =Cl, L-G=C(O)CH ₂ CH ₃
35	W=O, R ¹ =CH ₂ CH ₂ OCH ₃ , R ² =Br, L-G=C(O)CH ₂ CH ₃
36	W=O, R ¹ =CH ₂ CH ₂ OCH ₃ , R ² =OCH ₃ , L-G=C(O)CH ₂ CH ₃
37	W=O, R ¹ =Me, R ² =CH ₃ , L-G=C(O)OCH ₃
38	W=O, R ¹ =Me, R ² =Cl, L-G=C(O)OCH ₃
39	W=O, R ¹ =Me, R ² =Br, L-G=C(O)OCH ₃
40	W=O, R ¹ =Me, R ² =OCH ₃ , L-G=C(O)OCH ₃
41	W=O, R ¹ =Et, R ² =CH ₃ , L-G=C(O)OCH ₃
42	W=O, R ¹ =Et, R ² =Cl, L-G=C(O)OCH ₃
43	W=O, R ¹ =Et, R ² =Br, L-G=C(O)OCH ₃
44	W=O, R ¹ =Et, R ² =OCH ₃ , L-G=C(O)OCH ₃
45	W=O, R ¹ =CH ₂ CH ₂ OCH ₃ , R ² =CH ₃ , L-G=C(O)OCH ₃
46	W=O, R ¹ =CH ₂ CH ₂ OCH ₃ , R ² =Cl, L-G=C(O)OCH ₃
47	W=O, R ¹ =CH ₂ CH ₂ OCH ₃ , R ² =Br, L-G=C(O)OCH ₃
48	W=O, R ¹ =CH ₂ CH ₂ OCH ₃ , R ² =OCH ₃ , L-G=C(O)OCH ₃

[0285]

[0286]

[표 49]



[0287]

[0288] W=O, R¹=CH₃, R²=CH₃, L-G=H이고, 나머지 변수는 하기에 정의됨.

X ²	X ³	X ⁴	X ⁵	X ⁶	X ⁷	X ⁸	X ⁹	X ¹⁰
CH	CH	CH	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CF	CH	CH	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CCl	CH	CH	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CH	CCl	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CF	CH	CCl	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CCl	CH	CCl	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CCH ₃	CH	CCl	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CH	CBr	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CF	CH	CBr	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CCl	CH	CBr	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CCH ₃	CH	CBr	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CCH ₃	CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CCH ₃	CH	CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CCH ₃	CH	CH	CCl	CH	CH	CH	CH	CH
CCH ₃	CH	CH	CH	CBr	CH	CH	CH	CH
CCH ₃	CH	CH	CH	CCl	CH	CH	CH	CH
CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CBr	CH	CH	CH
CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CCl	CH	CH	CH
CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CBr	CH	CH
CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CCl	CH	CH
CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CH	CBr	CH
CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CH	CCl	CH
CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CH	CH	CBr
CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CH	CH	CCl

[0289]

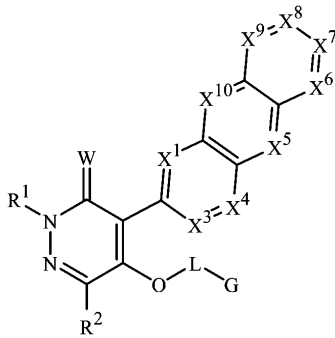
[0290] 본 발명은 또한 표 50 내지 56을 포함하며, 여기서 각각의 표에 열거된 특정 변수는 표 49의 헤더 행 문구에서의 대응하는 변수를 대체한다. 예를 들어, 표 50에서, 헤더 행 문구는 "W=O, R¹=CH₃, R²=Cl, L-G=H이고, 나머지 변수는 하기에 정의됨."이다.

표	헤더 행 변수
50	R ² =Cl
51	R ² =OCH ₃
52	R ¹ =CH ₂ CH ₃
53	R ¹ =CH ₂ CH ₃ , R ² =Cl
54	R ¹ =CH ₂ CH ₃ , R ² =OCH ₃
55	R ¹ =CH ₂ CH ₂ OCH ₃
56	R ¹ =CH ₂ CH ₂ OCH ₃ , R ² =Cl

[0291]

[0292]

[표 57]



[0293]

[0294] W=O, R¹=CH₃, R²=CH₃, L-G=H이고, 나머지 변수는 하기에 정의됨.

X ¹	X ³	X ⁴	X ⁵	X ⁶	X ⁷	X ⁸	X ⁹	X ¹⁰
CH	CH	CH	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CF	CH	CH	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CCl	CH	CH	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CH	CCl	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CF	CH	CCl	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CCl	CH	CCl	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CCH ₃	CH	CCl	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CH	CBr	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CF	CH	CBr	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CCl	CH	CBr	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CCH ₃	CH	CBr	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CCH ₃	CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CCH ₃	CH	CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CCH ₃	CH	CH	CCl	CH	CH	CH	CH	CH
CCH ₃	CH	CH	CH	CBr	CH	CH	CH	CH
CCH ₃	CH	CH	CH	CCl	CH	CH	CH	CH
CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CBr	CH	CH	CH
CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CCl	CH	CH	CH
CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CBr	CH	CH
CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CCl	CH	CH
CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CH	CBr	CH
CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CH	CCl	CH
CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CH	CH	CBr
CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CH	CH	CCl

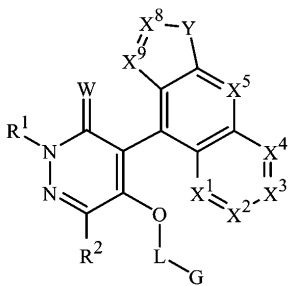
[0295]

[0296] 본 발명은 또한 표 58 내지 65를 포함하며, 여기서 각각의 표에 열거된 특정 변수는 표 57의 헤더 행 문구에서의 대응하는 변수를 대체한다. 예를 들어, 표 58에서, 헤더 행 문구는 "W=O, R¹=CH₃, R²=Cl, L-G=H이고, 나머지 변수는 하기에 정의됨."이다.

표	헤더 행 변수
58	R ² =Cl
59	R ² =OCH ₃
60	R ¹ =CH ₂ CH ₃
61	R ¹ =CH ₂ CH ₃ , R ² =Cl
62	R ¹ =CH ₂ CH ₃ , R ² =OCH ₃
63	R ¹ =CH ₂ CH ₂ OCH ₃
64	R ¹ =CH ₂ CH ₂ OCH ₃ , R ² =Cl
65	R ¹ =CH ₂ CH ₂ OCH ₃ , R ² =OCH ₃

[0297]

[0298] [표 66]



[0299]

[0300] W=O, R¹=CH₃, R²=CH₃, Y=O, L-G=H이고, 나머지 변수는 하기에 정의됨.

X ¹	X ²	X ³	X ⁴	X ⁵	X ⁸	X ⁹
CH	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CF	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CCl	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH
CH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CH ₃	CF	CH	CH	CH	CH	CH
CH ₃	CCl	CH	CH	CH	CH	CH
CH ₃	CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH
Cl	CH	CH	CH	CH	CH	CH
Cl	CF	CH	CH	CH	CH	CH
Cl	CCl	CH	CH	CH	CH	CH
Cl	CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CH	CH	CH	CCl	CH	CH
CH	CF	CH	CH	CCl	CH	CH
CH	CCl	CH	CH	CCl	CH	CH
CH	CCH ₃	CH	CH	CCl	CH	CH
CH	CH	CH	CH	CBr	CH	CH
CH	CF	CH	CH	CBr	CH	CH
CH	CCl	CH	CH	CBr	CH	CH
CH	CCH ₃	CH	CH	CBr	CH	CH
CH	CCH ₃	CCH ₃	CH	CH	CH	CH
CH	CCH ₃	CH	CH	CCH ₃	CH	CH
CH	CCH ₃	CH	CCH ₃	CH	CH	CH
CH	CCH ₃	CH	CH	CH	CCH ₃	CH
CH	CCH ₃	CH	CH	CH	CBr	CH
CH	CCH ₃	CH	CH	CH	CCl	CH
CH	CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CBr
CH	CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CCl
CH	CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CCH ₃

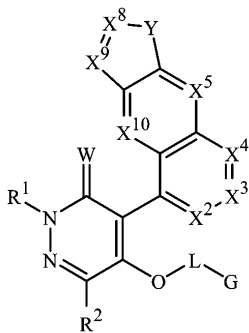
[0301]

[0302] 본 발명은 또한 표 67 내지 74를 포함하며, 여기서 각각의 표에 열거된 특정 변수는 표 66의 헤더 행 문구에서의 대응하는 변수를 대체한다. 예를 들어, 표 67의 헤더 행 문구는 "W=O, R¹=CH₃, R²=CH₃, Y=S, L-G=H이고, 나머지 변수는 하기에 정의됨."이다.

표	헤더 행 변수
67	Y=S
68	Y=NCH ₃
69	R ² =Cl
70	R ² =Cl, Y=S
71	R ² =Cl, Y=NCH ₃
72	R ² =OCH ₃
73	R ² =OCH ₃ , Y=S
74	R ² =OCH ₃ , Y=NCH ₃

[0303]

[0304] [표 75]



[0305]

[0306] W=O, R¹=CH₃, R²=CH₃, Y=O, L-G=H이고, 나머지 변수는 하기에 정의됨.

X ²	X ³	X ⁴	X ⁵	X ⁸	X ⁹	X ¹⁰
CH	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CF	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CCl	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CH	CH	CCl	CH	CH	CH
CF	CH	CH	CCl	CH	CH	CH
CCl	CH	CH	CCl	CH	CH	CH
CCH ₃	CH	CH	CCl	CH	CH	CH
CH	CH	CH	CBr	CH	CH	CH
CF	CH	CH	CBr	CH	CH	CH
CCl	CH	CH	CBr	CH	CH	CH
CCH ₃	CH	CH	CBr	CH	CH	CH
CCH ₃	CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH
CCH ₃	CH	CH	CCH ₃	CH	CH	CH
CCH ₃	CH	CCH ₃	CH	CH	CH	CH
CCH ₃	CH	CH	CH	CCH ₃	CH	CH
CCH ₃	CH	CH	CH	CBr	CH	CH
CCH ₃	CH	CH	CH	CCl	CH	CH
CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CBr	CH
CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CCl	CH
CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CCH ₃	CH
CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CBr
CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CCl
CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CCH ₃

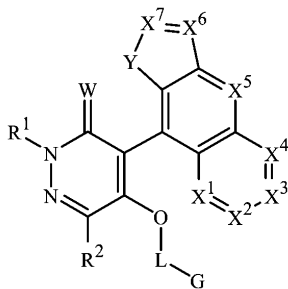
[0307]

[0308] 본 발명은 또한 표 76 내지 83을 포함하며, 여기서 각각의 표에 열거된 특정 변수는 표 75의 헤더 행 문구에서의 대응하는 변수를 대체한다. 예를 들어, 표 76의 헤더 행 문구는 "W=O, R¹=CH₃, R²=CH₃, Y=S, L-G=H이고, 나머지 변수는 하기에 정의됨."이다.

표	헤더 행 변수
76	Y=S
77	Y=NCH ₃
78	R ² =Cl
79	R ² =Cl, Y=S
80	R ² =Cl, Y=NCH ₃
81	R ² =OCH ₃
82	R ² =OCH ₃ , Y=S
83	R ² =OCH ₃ , Y=NCH ₃

[0309]

[0310] [표 84]



[0311]

[0312] W=O, R¹=CH₃, R²=CH₃, Y=O, L-G=H이고, 나머지 변수는 하기에 정의됨.

X ¹	X ²	X ³	X ⁴	X ⁵	X ⁶	X ⁷
CH	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CF	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CCl	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH
CH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CH ₃	CF	CH	CH	CH	CH	CH
CH ₃	CCl	CH	CH	CH	CH	CH
CH ₃	CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH
Cl	CH	CH	CH	CH	CH	CH
Cl	CF	CH	CH	CH	CH	CH
Cl	CCl	CH	CH	CH	CH	CH
Cl	CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CH	CH	CH	CCl	CH	CH
CH	CF	CH	CH	CCl	CH	CH
CH	CCl	CH	CH	CCl	CH	CH
CH	CCH ₃	CH	CH	CCl	CH	CH
CH	CH	CH	CH	CBr	CH	CH
CH	CF	CH	CH	CBr	CH	CH
CH	CCl	CH	CH	CBr	CH	CH
CH	CCH ₃	CH	CH	CBr	CH	CH
CH	CCH ₃	CCH ₃	CH	CH	CH	CH
CH	CCH ₃	CH	CH	CCH ₃	CH	CH
CH	CCH ₃	CH	CCH ₃	CH	CH	CH
CH	CCH ₃	CH	CH	CH	CCH ₃	CH
CH	CCH ₃	CH	CH	CH	CBr	CH
CH	CCH ₃	CH	CH	CH	CCl	CH
CH	CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CBr
CH	CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CCl
CH	CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CCH ₃

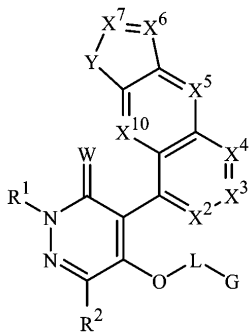
[0313]

[0314] 본 발명은 또한 표 85 내지 92를 포함하며, 여기서 각각의 표에 열거된 특정 변수는 표 84의 헤더 행 문구에서의 대응하는 변수를 대체한다. 예를 들어, 표 85의 헤더 행 문구는 "W=O, R¹=CH₃, R²=CH₃, Y=S, L-G=H이고, 나머지 변수는 하기에 정의됨."이다.

표	헤더 행 변수
85	Y=S
86	Y=NCH ₃
87	R ² =Cl
88	R ² =Cl, Y=S
89	R ² =Cl, Y=NCH ₃
90	R ² =OCH ₃
91	R ² =OCH ₃ , Y=S
92	R ² =OCH ₃ , Y=NCH ₃

[0315]

[0316] [표 93]



[0317]

[0318] W=O, R¹=CH₃, R²=CH₃, L-G=H, Y=O이고, 나머지 변수는 하기에 정의됨.

X ²	X ³	X ⁴	X ⁵	X ⁶	X ⁷	X ¹⁰
CH	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CF	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CCl	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CH	CH	CCl	CH	CH	CH
CF	CH	CH	CCl	CH	CH	CH
CCl	CH	CH	CCl	CH	CH	CH
CCH ₃	CH	CH	CCl	CH	CH	CH
CH	CH	CH	CBr	CH	CH	CH
CF	CH	CH	CBr	CH	CH	CH
CCl	CH	CH	CBr	CH	CH	CH
CCH ₃	CH	CH	CBr	CH	CH	CH
CCH ₃	CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH
CCH ₃	CH	CH	CCH ₃	CH	CH	CH
CCH ₃	CH	CCH ₃	CH	CH	CH	CH
CCH ₃	CH	CH	CH	CCH ₃	CH	CH
CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CCH ₃	CH	CH	CH	CCl	CH	CH
CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CBr	CH
CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CCl	CH
CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CCH ₃	CH
CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CBr
CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CCl
CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CCH ₃

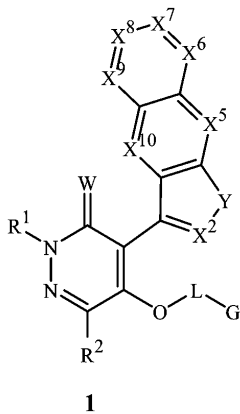
[0319]

[0320] 본 발명은 또한 표 94 내지 101을 포함하며, 여기서 각각의 표에 열거된 특정 변수는 표 93의 헤더 행 문구에서의 대응하는 변수를 대체한다. 예를 들어, 표 94의 헤더 행 문구는 "W=O, R¹=CH₃, R²=CH₃, L-G=H, Y=S이고, 나머지 변수는 하기에 정의됨."이다.

표	헤더 행 변수
94	Y=S
95	Y=NCH ₃
96	R ² =Cl
97	R ² =Cl, Y=S
98	R ² =Cl, Y=NCH ₃
99	R ² =OCH ₃
100	R ² =OCH ₃ , Y=S
101	R ² =OCH ₃ , Y=NCH ₃

[0321]

[0322] [표 102]



[0323]

[0324] $W=O$, $R^1=CH_3$, $R^2=CH_3$, $L-G=H$, $Y=O$ 이고, 나머지 변수는 하기에 정의됨.

X^2	X^5	X^6	X^7	X^8	X^9	X^{10}
CH	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CF	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CCl	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CCH ₃	CCl	CH	CH	CH	CH	CH
CCH ₃	CH	CBr	CH	CH	CH	CH
CCH ₃	CH	CCl	CH	CH	CH	CH
CCH ₃	CH	CH	CBr	CH	CH	CH
CCH ₃	CH	CH	CCl	CH	CH	CH
CCH ₃	CH	CH	CH	CBr	CH	CH
CCH ₃	CH	CH	CH	CCl	CH	CH
CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CBr	CH
CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CCl	CH
CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CBr
CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CCl

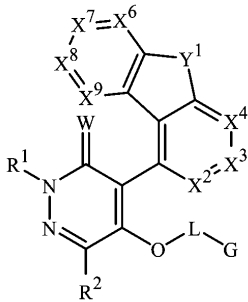
[0325]

[0326] 본 발명은 또한 표 103 내지 110을 포함하며, 여기서 각각의 표에 열거된 특정 변수는 표 102의 헤더 행 문구에서 대응하는 변수를 대체한다. 예를 들어, 표 103에서, 헤더 행 문구는 " $W=O$, $R^1=CH_3$, $R^2=CH_3$, $L-G=H$, $Y=S$ 이고, 나머지 변수는 하기에 정의됨."이다.

표	헤더 행 변수
103	$Y=S$
104	$Y=NCH_3$
105	$R^2=Cl$
106	$R^2=Cl, Y=S$
107	$R^2=Cl, Y=NCH_3$
108	$R^2=OCH_3$
109	$R^2=OCH_3, Y=S$
110	$R^2=OCH_3, Y=NCH_3$

[0327]

[0328] [표 111]



[0329]

[0330] W=O, R¹=CH₃, R²=CH₃, L-G=H, Y¹=O이고, 나머지 변수는 하기에 정의됨.

X ²	X ³	X ⁴	X ⁶	X ⁷	X ⁸	X ⁹
CH	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CF	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CCl	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CH	CH	CH	CH	CCl	CH
CF	CH	CH	CH	CH	CCl	CH
CCl	CH	CH	CH	CH	CCl	CH
CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CCl	CH
CH	CH	CH	CH	CH	CBr	CH
CF	CH	CH	CH	CH	CBr	CH
CCl	CH	CH	CH	CH	CBr	CH
CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CBr	CH
CCH ₃	CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH
CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CCH ₃	CH
CCH ₃	CH	CH	CCH ₃	CH	CH	CH
CCH ₃	CH	CCH ₃	CH	CH	CH	CH
CCH ₃	CH	CBr	CH	CH	CH	CH
CCH ₃	CH	CCl	CH	CH	CH	CH
CCH ₃	CH	CH	CH	CBr	CH	CH
CCH ₃	CH	CH	CH	CCl	CH	CH
CCH ₃	CH	CH	CH	CCH ₃	CH	CH
CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CBr
CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CCl
CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CCH ₃

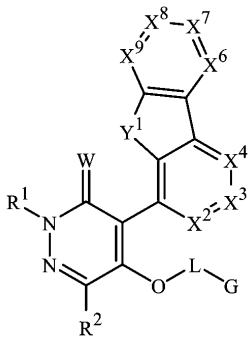
[0331]

[0332] 본 발명은 또한 표 112 내지 122를 포함하며, 여기서 각각의 표에 열거된 특정 변수는 표 111의 헤더 행 문구에서의 대응하는 변수를 대체한다. 예를 들어, 표 112의 헤더 행 문구는 "W=O, R¹=CH₃, R²=CH₃, L-G=H, Y¹=S이고, 나머지 변수는 하기에 정의됨."이다.

표	헤더 행 변수
112	Y ¹ =S
113	Y ¹ =NCH ₃
114	Y ¹ =C(O)
115	R ² =Cl
116	R ² =Cl, Y ¹ =S
117	R ² =Cl, Y ¹ =NCH ₃
118	R ² =Cl, Y ¹ =C(O)
119	R ² =OCH ₃
120	R ² =OCH ₃ , Y ¹ =S
121	R ² =OCH ₃ , Y ¹ =NCH ₃
122	R ² =OCH ₃ , Y ¹ =C(O)

[0333]

[0334] [표 123]



[0335]

[0336] $W=0$, $R^1=CH_3$, $R^2=CH_3$, $L-G=H$, $Y^1=O$ 이고, 나머지 변수는 하기에 정의됨.

X ²	X ³	X ⁴	X ⁶	X ⁷	X ⁸	X ⁹
CH	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CF	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CCl	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CH	CH	CH	CH	CH	CCl	CH
CF	CH	CH	CH	CH	CCl	CH
CCl	CH	CH	CH	CH	CCl	CH
CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CCl	CH
CH	CH	CH	CH	CH	CBr	CH
CF	CH	CH	CH	CH	CBr	CH
CCl	CH	CH	CH	CH	CBr	CH
CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CBr	CH
CCH ₃	CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH
CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CCH ₃	CH
CCH ₃	CH	CH	CCH ₃	CH	CH	CH
CCH ₃	CH	CCH ₃	CH	CH	CH	CH
CCH ₃	CH	CBr	CH	CH	CH	CH
CCH ₃	CH	CCl	CH	CH	CH	CH
CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CCH ₃	CH	CH	CH	CCl	CH	CH
CCH ₃	CH	CH	CH	CCH ₃	CH	CH
CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CBr
CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CCl
CCH ₃	CH	CH	CH	CH	CH	CCH ₃

[0337]

[0338] 본 발명은 또한 표 124 내지 134를 포함하며, 여기서 각각의 표에 열거된 특정 변수는 표 123의 헤더 행 문구에서의 대응하는 변수를 대체한다. 예를 들어, 표 124의 헤더 행 문구는 " $W=0$, $R^1=CH_3$, $R^2=CH_3$, $L-G=H$, $Y^1=S$ 이고, 나머지 변수는 하기에 정의됨."이다.

표	헤더 행 변수
124	$Y^1=S$
125	$Y^1=NCH_3$
126	$Y^1=C(O)$
127	$R^2=Cl$
128	$R^2=Cl, Y^1=S$
129	$R^2=Cl, Y^1=NCH_3$
130	$R^2=Cl, Y^1=C(O)$
131	$R^2=OCH_3$
132	$R^2=OCH_3, Y^1=S$
133	$R^2=OCH_3, Y^1=NCH_3$
134	$R^2=OCH_3, Y^1=C(O)$

[0339]

[0340] 본 발명의 화합물은 일반적으로 담체로서 작용하는 계면활성제, 고체 희석제 및 액체 희석제로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 적어도 하나의 추가 성분과 함께, 조성물, 즉, 제형 중의 제조제 활성 성분으로서 사용될 것이다. 제형 또는 조성물 성분은 활성 성분의 물리적 특성, 적용 방식 및 환경 인자, 예를 들어, 토양형, 수분 및 온도와 상응하도록 선택된다.

[0341]

유용한 제형은 액체 조성물 및 고체 조성물을 포함한다. 액체 조성물은 용액 (유제 (emulsifiable concentrate) 포함), 현탁액, 에멀전 (마이크로에멀전, 수중유형 에멀전, 액상 농축액 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, 수중유형 에멀전, 액상 농축액 및 유현탁제이다. 비수성 액체 조성물의 일반적인 유형은 유제, 마이크로유제 (microemulsifiable concentrate), 분산성 액제 (dispersible concentrate) 및 오일 분산액이다.

[0342]

고체 조성물의 일반적인 유형은 분체 (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; 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 중간체로서 사용된다.

[0343] 분무형 제형은 전형적으로 분무 전에 적절한 매질에서 증량된다. 그러한 액체 및 고체 제형은 보통 물인 분무 매질에서 용이하게 희석되도록 제형화되나, 때때로 방향족 또는 파라핀계 탄화수소 또는 식물유와 같은 다른 적절한 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 배지에서의 적용을 위해 물 또는 다른 적절한 매질과 탱크 혼합될 수 있다. 액체 및 건조 제형은 점적 관개 시스템 내로 직접 계량되거나 식재 동안 고랑 내로 계량될 수 있다.

[0344] 제형은 전형적으로 총 100 중량%가 되는 하기의 근사적인 범위 내에서 유효량의 활성 성분, 희석제 및 계면활성제를 함유할 것이다.

	중량%		
	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
분체	1-25	70-99	0-5
과립 및 펠릿	0.001-99	5-99.999	0-15
고강도 조성물	90-99	0-10	0-2

[0345]

[0346] 고체 희석제는 예를 들어, 점토, 예컨대 벤토나이트, 몬모틸로나이트, 애터필사이트 및 카올린, 석고, 셀룰로오스, 이산화티탄, 산화아연, 전분, 텍스트린, 당류 (예를 들어, 락토스, 수크로스), 실리카, 탭크, 운모, 규조토, 우레아, 탄산칼슘, 탄산나트륨 및 중탄산나트륨, 및 황산나트륨을 포함한다. 전형적인 고체 희석제는 문헌 [Watkins et al., *Handbook of Insecticide Dust Diluents and Carriers*, 2nd Ed., Dorland Books, Caldwell, New Jersey]에 기재되어 있다.

[0347]

액체 희석제는 예를 들어, 물, *N,N*-다이메틸알칸아미드 (예를 들어, *N,N*-다이메틸포름아미드), 리모넨, 다이메틸 설폭사이드, *N*-알킬피롤리돈 (예를 들어, *N*-메틸피롤리돈), 알킬 포스페이트 (예를 들어, 트라이에틸 포스페이트), 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, 방향족 탄화수소, 탈방향족 (dearomatized) 지방족 화합물, 알킬벤젠, 알킬나프탈렌, 케톤, 예컨대 사이클로헥사논, 2-헵타논, 아이소포론 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 락타이트 에스테르, 이염기성 에스테르, 알킬 및 아릴 벤조에이트 및 γ -부티로락톤, 및 직쇄상, 분지상, 포화 또는 불포화될 수 있는 알코올, 예컨대 메탄올, 에탄올, *n*-프로판올, 아이소프로필 알코올, *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, 크레졸 및 벤질 알코올을 포함한다. 액체 희석제는 또한 포화 및 불포화 지방산 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, 평지씨유, 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 [Marsden, *Solvents Guide*, 2nd Ed., Interscience, New York, 1950]에 기재되어 있다.

[0348]

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 유용할 수 있다.

[0349]

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, 알코올과 에틸렌 옥사이드, 프로필렌 옥사이드, 부틸렌 옥사이드 또는 이들의 혼합물로부터 제조된 알코올 알콕실레이트; 아민 에톡실레이트, 알칸올아미드 및 에톡실화 알칸올아미드; 알콕실화 트라이글리세리드, 예컨대 에톡실

화 대두유, 피마자유 및 평지씨유; 알킬페놀 알콧실레이트, 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, 라놀린계 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.

[0350] 유용한 음이온성 계면활성제로는 알킬아릴 설포산 및 이들의 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 알콧실레이트의 포스페이트 에스테르, 알킬페놀 알콧실레이트의 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, 툴루엔, 자일렌, 및 도데실벤젠 및 트라이데실벤젠의 설포네이트; 축합 나프탈렌의 설포네이트; 나프탈렌 및 알킬 나프탈렌의 설포네이트; 분별 증류된 (fractionated) 석유의 설포네이트; 설포석시나메이트; 및 설포석시네이트 및 이들의 유도체, 예컨대 다이알킬 설포석시네이트 염을 들 수 있으나, 이들에 한정되지 않는다.

[0351] 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.

[0352] 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 [McCutcheon's Emulsifiers and Detergents, annual American and International Editions published by McCutcheon's Division, The Manufacturing Confectioner Publishing Co.]; 문헌 [Sisely and Wood, Encyclopedia of Surface Active Agents, Chemical Publ. Co., Inc., New York, 1964]; 및 문헌 [A. S. Davidson and B. Milwidsky, Synthetic Detergents, Seventh Edition, John Wiley and Sons, New York, 1987]을 비롯한 다양한 간행된 참고문헌에 개시되어 있다.

[0353] 본 발명의 조성물은 또한 제형 조제로서 당업자에게 알려진 제형 보조제 및 첨가제를 함유할 수 있다 (이들 중 일부는 또한 고체 희석제, 액체 희석제 또는 계면활성제로 기능하는 것으로 간주될 수 있음). 그러한 제형 보조제 및 첨가제는 pH (완충제), 가공 중의 발포 (소포제, 예를 들어, 폴리오르가노실록산), 활성 성분의 침강 (현탁화제), 점도 (요변성 증점제), 용기내 (in-container) 미생물 생장 (항균제), 제품 동결 (부동제), 색상 (염료/안료 분산액), 위시-오프 (필름 형성제 또는 스티커), 증발 (증발 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 [McCutcheon's Volume 2: Functional Materials, annual International and North American editions published by McCutcheon's Division, The Manufacturing Confectioner Publishing Co.]; 및 국제 특허 공개 제WO 03/024222호에 열거된 것들을 들 수 있다.

[0354] 화학식 1의 화합물 및 임의의 다른 활성 성분은 전형적으로 활성 성분을 용매에 용해시키거나 액체 또는 건조 희석제에서 분쇄함으로써 본 발명의 조성물 내로 혼입된다. 유제를 비롯한 용액은 성분들을 단순히 혼합함으로써 제조될 수 있다. 유제로서 사용하려는 액체 조성물의 용매가 수불혼화성인 경우에는, 물로 희석시에 활성제 함유 용매를 유화시키기 위하여 유화제가 전형적으로 첨가된다. 입경이 2,000 μm 이하인 활성 성분 슬러리는

매체 밀을 이용하여 습식 밀링하여, 평균 직경이 3 μm 미만인 입자를 얻을 수 있다. 수성 슬러리는 완성된 역상 수화제로 제조되거나 (예를 들어, 미국 특허 제3,060,084호 참조), 분무 건조에 의해 추가로 가공되어 수분산성 과립을 형성할 수 있다. 건조 제형은 통상 건식 밀링 공정을 필요로 하며, 이것에 의해 2 내지 10 μm 범위의 평균 입경이 형성된다. 분제 및 분말은 블렌딩 및 통상 분쇄 (예를 들어, 해머 밀 또는 유체 에너지 밀을 이용)에 의해 제조될 수 있다. 과립 및 펠릿은 활성 물질을 미리 형성된 과립 담체 상에 분무하거나 응집 기술에 의해 제조될 수 있다. 문헌 [Browning, "Agglomeration", *Chemical Engineering*, December 4, 1967, pp 147-48, *Perry's Chemical Engineer's Handbook*, 4th Ed., McGraw-Hill, New York, 1963, pages 8-57 및 그 이하] 및 국제 특허 공개 제WO 91/13546호를 참조한다. 펠릿은 미국 특허 제4,172,714호에 기재된 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.

[0355] 제형 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.

[0356] 하기 실시예에서, 모든 백분율은 중량 기준이며, 모든 제형은 통상적인 방법으로 제조된다. 화합물 번호는 인덱스 표 A의 화합물을 지칭한다. 더 이상 상술하지 않고도, 상술한 설명을 이용하는 당업자라면 본 발명을 최대한으로 이용할 수 있을 것으로 여겨진다. 따라서, 하기 실시예는 단지 예시적인 것으로 해석되어야 하며, 어떤 식으로든 본 발명을 제한하지 않는 것으로 해석되어야 한다. 달리 표시되는 경우를 제외하고는, 백분율은 중량 기준이다.

<u>실시예 A</u>	
<u>고강도 농축물</u>	
화합물 1	98.5%
실리카 에어로겔	0.5%
합성 비결정질 미세 실리카	1.0%
<u>실시예 B</u>	
<u>습윤성 분말</u>	
화합물 1	65.0%
도데실페놀 폴리에틸렌 글리콜 에테르	2.0%
소듐 리그닌설포네이트	4.0%
소듐 실리코알루미네이트	6.0%
몬모릴로나이트 (소성됨)	23.0%
<u>실시예 C</u>	
<u>과립</u>	
화합물 1	10.0%
에터펠자이트 과립 (저 휘발성 물질, 0.71/0.30 mm; U.S.S. No. 25-50 시브 (sieve))	90.0%
<u>실시예 D</u>	
<u>압출 펠릿</u>	
화합물 1	25.0%
무수 황산나트륨	10.0%
조제의 칼슘 리그닌설포네이트	5.0%
소듐 알킬나프탈렌설포네이트	1.0%
칼슘/마그네슘 벤토나이트	59.0%
<u>실시예 E</u>	
<u>유제</u>	
화합물 1	10.0%
폴리옥시에틸렌 소르비톨 헥사올레이트	20.0%
C ₆ -C ₁₀ 지방산 메틸 에스테르	70.0%
<u>실시예 F</u>	
<u>마이크로에멀전</u>	
화합물 1	5.0%
폴리비닐피롤리돈-비닐 아세테이트 공중합체	30.0%
알킬폴리글리코사이드	30.0%
글리세릴 모노올레이트	15.0%
물	20.0%

[0357]

실시예 G
액상 수화제

화합물 1	35%
부틸 폴리옥시에틸렌/폴리프로필렌 블록 공중합체	4.0%
스테아르산/폴리에틸렌 글리콜 공중합체	1.0%
스티렌 아크릴 중합체	1.0%
잔탄검	0.1%
프로필렌 글리콜	5.0%
실리콘계 소포제	0.1%
1,2-벤즈아이소티아졸린-3-온	0.1%
물	53.7%

실시예 H
수중 에멀전

화합물 1	10.0%
부틸 폴리옥시에틸렌/폴리프로필렌 블록 공중합체	4.0%
스테아르산/폴리에틸렌 글리콜 공중합체	1.0%
스티렌 아크릴 중합체	1.0%
잔탄검	0.1%
프로필렌 글리콜	5.0%
실리콘계 소포제	0.1%
1,2-벤즈아이소티아졸린-3-온	0.1%
방향족 석유계 탄화수소	20.0%
물	58.7%

실시예 I
오일 분산액

화합물 1	25%
폴리옥시에틸렌 소르비톨 헥사올레에이트	15%
유기 변성된 벤토나이트 점토	2.5%
지방산 메틸 에스테르	57.5%

[0358]

[0359]

[0360]

[0361]

본 발명은 또한 "화합물 1"이 "화합물 2", "화합물 3", "화합물 4", "화합물 5", "화합물 6", "화합물 7", "화합물 8", "화합물 9" 또는 "화합물 10"으로 교체되는 것을 제외하고는, 상기 실시예 A 내지 I를 포함한다.

시험 결과는 본 발명의 화합물이 고 활성 발아 전 및/또는 발아 후 제초제 및/또는 식물 생장 조절제인 것을 나타낸다. 본 발명의 화합물은 통상 발아 후 잡초 방제 (즉, 잡초 유묘 (weed seedling)가 토양으로부터 발아된 후에 살포됨) 및 발아 전 잡초 방제 (즉, 잡초 유묘가 토양으로부터 발아되기 전에 살포됨)에 대하여 최고 활성을 나타낸다. 이들 중 상당수는 연료 저장 탱크, 산업용 저장소 (industrial storage area), 주차장, 자동차 극장, 비행장, 하천 제방, 관개수로 및 기타 수로 주변, 게시판, 및 고속 도로 및 철로 구조물 주변에서와 같은 모든 초목의 완전 방제가 요구되는 영역에서의 광역 발아 전 및/또는 발아 후 잡초 방제에 대한 유용성을 갖는다. 본 발명의 화합물 중 상당수는 잡초에 대한 작물의 선택적 대사작용에 의해서나, 작물 및 잡초의 생리적 억제 부위에서의 선택적 활성에 의해서나, 작물과 잡초의 혼합체의 환경 또는 그 내부에서의 선택적 배치에 의해, 작물/잡초 혼합체 내의 풀 및 광엽 잡초의 선택적 방제에 유용하다. 당업자는 화합물 또는 화합물 그룹 내의 이들 선택 인자의 바람직한 조합이 일상적인 생물학적 및/또는 생화학적 분석을 행함으로써 용이하게 결정될 수 있음을 인지할 것이다. 본 발명의 화합물은 자주개자리, 보리, 목화, 밀, 평지, 사탕무, 콩 (옥수수), 수수, 대두, 벼, 귀리, 땅콩, 야채, 토마토, 감자, 다년생 플랜테이션 작물 - 커피, 코코아, 기름 야자 나무, 고무, 사탕수수, 감귤류, 포도, 과수, 견과 나무, 바나나, 플랜테인, 파인애플, 홉, 차 및 수목림, 예컨대 유칼립투스 및 구과 식물 (예를 들어, 테다소나무) 포함 -, 및 잔디종 (예를 들어, 켄터키 블루그래스, 세인트 어거스틴 그래스, 켄터키 웨스큐 및 버뮤다 그래스)을 들 수 있으나, 이들에 한정되지 않는 중요한 농업용 작물에 대하여 내성을 나타낼 수 있다. 본 발명의 화합물은 제초제에 대한 내성을 포함하며, 무척추 해충에 유독한 단백질 (예컨대, 바실러스 투린지엔시스 (*Bacillus thuringiensis*) 독소)을 발현하고/하거나, 다른 유용한 형질을 발현하도록 유전적으로 형질 전환되거나 번식된 작물에 사용될 수 있다. 당업자는 모든 화합물이 모든 잡초에 대하여 동일하게 효과적이지 않음을 인지할 것이다. 대안으로, 당해 화합물은 식물 생장을 변화시키는데 유용하다.

본 발명의 화합물이 원하지 않는 초목을 죽이거나 손상시키거나, 이의 생장을 감소시킴으로써 원하지 않는 초목을 방제하도록 발아 전 및 발아 후 제초제 활성을 갖고 있기 때문에, 본 발명의 화합물은 본 발명의 화합물, 또는 상기 화합물과, 계면활성제, 고체 희석제 또는 액체 희석제 중 적어도 하나를 포함하는 조성물의 제초적 유효량을, 원하지 않는 초목의 경엽 또는 다른 부분 또는 원하지 않는 초목의 환경, 예컨대 원하지 않는 초목이

생장하거나 원하지 않는 초목의 종자 또는 다른 번식체 (propagule)를 둘러싸는 토양 또는 물에 접촉시키는 것을 포함하는 다양한 방법에 의해 유용하게 적용될 수 있다. 원하지 않는 초목은 풀 잡초 및 광엽 잡초로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 적어도 하나를 포함한다. 원하지 않는 초목은 새포아풀 (annual bluegrass), 고깔닭의장풀 (Benghal dayflower), 쥐꼬리뚝새풀 (blackgrass), 까마중, 광엽 시그널그래스 (broadleaf signalgrass), 캐나다 영경귀, 참새귀리, 도꼬마리 (잔뜩 펜실바니아늄 (*Xanthium pensylvanicum*)), 돼지풀 (common ragweed), 개양귀비, 야생 제비꽃, 가을강아지풀, 갈퀴덩쿨, 강아지풀 (green foxtail), 기니 그래스 (guinea grass), 서양도깨비바늘 (hairy beggarticks), 제초제 내성 쥐꼬리뚝새풀, 쥐꼬리말초, 이탈리아인 라이그래스 (Italian rye grass), 흰독말풀, 시리아수수새 (소검 할레펜스 (*Sorghum halepense*)), 쯤바랭이, 작은 종자 카나리아풀 (little seed canary grass), 나팔꽃, 펜실베니아 버들여뀌, 쯤나팔꽃, 공단풀, 구주개밀, 털비름, 수수 (shattercane), 냉이, 실키 윈드그래스 (silky windgrass), 해바라기(감자의 잡초로서), 야생 메밀 (폴리고눔 콘볼부루스 (*Polygonum convolvulus*)), 들갓 (브라시카 카버 (*Brassica kabera*)), 야생 귀리 (아베나 파투아 (*Avena fatua*)), 야생 포인세티아, 금강아지풀 및 기름골 (사이페루스 에스쿨렌투스 (*Cyperus esculentus*))로 구성되는 그룹 중에서 선택된다.

[0362] 본 발명의 화합물의 제조적 유효량은 다수의 인자에 의해 결정된다. 이들 인자는 선택된 제형, 적용 방법, 존재하는 초목의 양 및 종류, 성장 조건 등을 포함한다. 일반적으로, 본 발명의 화합물의 제조적 유효량은 약 0.001 내지 20 kg/ha, 바람직하게는 약 0.004 내지 1 kg/ha의 범위이다. 당업자는 원하는 레벨의 잡초 방제에 필요한 제조적 유효량을 용이하게 결정할 수 있다.

[0363] 통상적인 일 실시 형태에서, 본 발명의 화합물은 성장 배지 (예를 들어, 토양)와 접촉하는, 종자, 묘종 및/또는 보다 큰 식물일 수 있는 원하는 초목 (예를 들어, 작물) 및 원하지 않는 초목 (즉, 잡초)을 포함하는 장소에, 전형적으로 제형화된 조성물로 적용된다. 이러한 장소에서, 본 발명의 화합물을 포함하는 조성물은 특히 원하지 않는 초목의 식물 또는 이의 부분, 및/또는 식물과 접촉하고 있는 성장 배지에 직접 적용될 수 있다.

[0364] 가장 통상적으로는, 본 발명의 화합물이 원하지 않는 초목을 방제하는데 사용되긴 하지만, 처리된 장소에서의 원하는 초목과 본 발명의 화합물의 접촉으로, 유전자 변형을 통해 포함된 형질을 비롯하여, 원하는 초목의 유전 형질에 의한 탁월한 상가 효과 또는 상승 효과를 가져올 수 있다. 예를 들어, 초식성 (phytophagous) 해충 또는 식물병에 대한 내성, 생물적/비생물적 스트레스에 대한 내성 또는 저장안정성은 원하는 초목에서의 유전 형질로부터 예기되는 것보다 클 수 있다.

[0365] 본 발명의 화합물은 또한 제초제, 제초제 약해경감제, 살진균제, 살충제, 살선충제, 살세균제 (bactericide), 진드기 구충제, 성장 조절제, 예컨대 곤충 탈피 억제제 (insect molting inhibitor) 및 발근 촉진제 (rooting stimulant), 불임화제, 신호 화학물질 (semiochemical), 방충제, 유인 물질, 페로몬, 섭식 촉진 물질, 식물 영양소, 다른 생물 활성 화합물 또는 곤충병원성 세균, 곤충병원성 바이러스 또는 곤충병원성 진균을 비롯한 하나 이상의 다른 생물 활성 화합물 또는 생물 활성제와 혼합되어, 훨씬 더 광범위한 농업 보호를 부여하는 다성분 농약을 생성할 수 있다. 본 발명의 화합물과 다른 제초제의 혼합물은 추가의 잡초종에 대한 활성 범위를 확대시켜, 임의의 저항성 바이오타입의 증식을 억제할 수 있다. 따라서, 본 발명은 또한 화학식 1의 화합물 (제조적 유효량으로) 및 적어도 하나의 추가의 생물 활성 화합물 또는 생물 활성제 (생물학적 유효량으로)를 포함하는 조성물에 관한 것으로, 추가로 계면활성제, 고체 희석제 또는 액체 희석제 중 적어도 하나를 포함할 수 있다. 다른 생물 활성 화합물 또는 생물 활성제는 계면활성제, 고체 희석제 또는 액체 희석제 중 적어도 하나를 포함하는 조성물 중에서 제형화될 수 있다. 본 발명의 혼합물의 경우, 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 함께 배합되거나 (예를 들어, 스프레이 탱크 중에서), 연속하여 적용된다.

[0366] 하나 이상의 하기 제초제와 본 발명의 화합물의 혼합물은 잡초 방제에 특히 유용할 수 있다: 아세트클로르, 아시플루오르펜 및 이의 나트륨 염, 아클로니펜, 아크롤레인 (2-프로페날), 알라클로르, 알록시딴, 아메트린, 아미카르바존, 아미도살푸론, 아미노사이클로피라클로르 및 이의 에스테르 (예를 들어, 메틸, 에틸) 및 염 (예를 들어, 나트륨, 칼륨), 아미노파이라리드, 아미트룰, 암모늄 실파메이트, 아닐로포스, 아실람, 아트라진, 아짐살푸론, 베플루부타미드, 베나졸린, 베나졸린-에틸, 벤카르바존, 벤플루랄린, 베푸레세이트, 벤살푸론-메틸, 벤살라이드, 베타존, 벤조바이사이클론, 벤조페납, 바이사이클로피론, 비페녹스, 빌라나포스, 비스피리박 및 이의 나트륨 염, 브로마실, 브로모부타이드, 브로모페녹심, 브로목시닐, 브로목시닐 옥타노에이트, 부타클로르, 부타페나실, 부타미포스, 부트랄린, 부트록시딴, 부틸레이트, 카펜스트롤, 카르베타미드, 카르펜트라존-에틸, 카테킨, 클로메톡시펜, 클로람벤, 클로르브로무론, 클로르플루레놀-메틸, 클로리다존, 클로리무론-에틸, 클로로

톨루론, 클로르프로팜, 클로르셀푸론, 클로르탈-다이메틸, 클로르티아미드, 시니돈-에틸, 신메틸린, 시노셀푸론, 클라시포스, 클레폭시덤, 클레토딤, 클로디나포프-프로파르길, 클로마존, 클로메프로프, 클로파이랄리드, 클로파이랄리드-올라민, 클로란셀람-메틸, 쿠밀루론, 시아나진, 사이클로에이트, 사이클로피리모레이트, 사이클로설파무론, 사이클록시덤, 사이할로포프-부틸, 2,4-D 및 이의 부토틸, 부틸, 아이소옥틸 및 아이소프로필 에스테르 및 이의 다이메틸암모늄, 디올라민 및 트롤라민 염, 다이무론, 달라폰, 달라폰-나트륨, 다조메트, 2,4-DB 및 이의 다이메틸암모늄, 칼륨 및 나트륨 염, 데스메디팜, 데스메트린, 디캄바 및 이의 디글리콜암모늄, 다이메틸암모늄, 칼륨 및 나트륨 염, 디클로베닐, 디클로르프로프, 디클로포프-메틸, 디클로셀람, 디펜조퀴트 메틸설페이트, 디플루페니칸, 디플루펜조피르, 디메푸론, 디메피페레이트, 디메타클로르, 디메타메트린, 디메텐아미드, 디메텐아미드-P, 디메티핀, 다이메틸아르신산 및 이의 나트륨 염, 디니트라민, 디노테르브, 디페나미드, 디퀴트 다이브로마이드, 디티오피르, 디우론, DNOC, 엔도탈, EPTC, 에스프로카브, 에탈플루랄린, 에타메트설파무론-메틸, 에티오진, 에토푸메세이트, 에톡시펜, 에톡시설파무론, 에토벤자니드, 페녹사프로프-에틸, 페녹사프로프-P-에틸, 페녹사셀폰, 펜퀴노트리온, 펜트라자미드, 페누론, 페누론-TCA, 플람프로프-메틸, 플람프로프-M-아이소프로필, 플람프로프-M-메틸, 플라자설파무론, 플로라셀람, 플루아지포프-부틸, 플루아지포프-P-부틸, 플루아졸레이트, 플루카르바존, 플루세토설파무론, 플루클로랄린, 플루페나세트, 플루펜피르, 플루펜피르-에틸, 플루메트설파람, 플루미클로락-펜틸, 플루미옥사진, 플루오메투론, 플루오로글리코헨-에틸, 플루폭삼, 플루피르설파무론-메틸 및 이의 나트륨 염, 플루레놀, 플루레놀-부틸, 플루리돈, 플루로클로리돈, 플루록시피르, 플루르타몬, 플루티아세트-메틸, 포메사펜, 포람설파무론, 포사민-암모늄, 글루포시네이트, 글루포시네이트-암모늄, 글루포시네이트-P, 글리포세이트 및 이의 염, 예컨대 암모늄, 아이소프로필암모늄, 칼륨, 나트륨 (세스퀴나트륨 포함) 및 트라이메슘 (또는 설포세이트로 명명됨), 할라옥시펜, 할라옥시펜-메틸, 할로설파무론-메틸, 할록시포프-에토틸, 할록시포프-메틸, 헥사지논, 히단토시딘, 이마자메타벤즈-메틸, 이마자목스, 이마자픽, 이마자피르, 이마자퀸, 이마자퀸-암모늄, 이마제타피르, 이마제타피르-암모늄, 이마조설파무론, 인다노판, 인다지플람, 아이오펜설파무론, 요오도설파무론-메틸, 아이옥시닐, 아이옥시닐 옥타노에이트, 아이옥시닐-나트륨, 이프펜카르바존, 아이소프로투론, 아이소우론, 아이속사벤, 아이속사플루톨, 아이속사클로르톨, 락토펴, 레나실, 리누론, 말레산 하이드라자이드, MCPA 및 이의 염 (예를 들어, MCPA-다이메틸암모늄, MCPA-칼륨 및 MCPA-나트륨), 에스테르 (예를 들어, MCPA-2-에틸헥실, MCPA-부토틸) 및 티오에스테르 (예를 들어, MCPA-티오에틸), MCPB 및 이의 염 (예를 들어, MCPB-나트륨) 및 에스테르 (예를 들어, MCPB-에틸), 메코프로프, 메코프로프-P, 메페나세트, 메플루이다이드, 메소설파무론-메틸, 메소트리온, 메탐-나트륨, 메타미포프, 메타미트론, 메타자클로르, 메타조설파무론, 메타벤즈티아주론, 메틸아르손산 및 이의 칼슘, 모노암모늄, 일나트륨 및 이나트륨 염, 메틸딤론, 메토벤주론, 메토브로무론, 메톨라클로르, S-메톨라클로르, 메토설파람, 메톡수론, 메트리부진, 메트설파무론-메틸, 몰리네이트, 모노리누론, 나프로아닐라이드, 나프로파마이드, 나프로파마이드-M, 나프탈람, 네부론, 니코설파무론, 노르플루라존, 오르벤카브, 오르토설파무론, 오리잘린, 옥사디아르길, 옥사디아존, 옥사설파무론, 옥사지클로메폰, 옥시플루오르펜, 파라퀴트 다이클로라이드, 페블레이트, 펠라르곤산, 펜디메탈린, 페녹스설파람, 펜타노클로르, 펜톡사존, 피플루이돈, 페톡사미드, 페톡시아미드, 펜메디팜, 피클로람, 피클로람-칼륨, 피콜리나펜, 피녹사덴, 피페로포스, 프레틸라클로르, 프리미설파무론-메틸, 프로다이아민, 프로폭시덤, 프로메톤, 프로메트린, 프로파클로르, 프로파닐, 프로파퀴자포프, 프로파진, 프로팜, 프로피소클로르, 프로폭시카르바존, 프로피리설파무론, 프로피자마이드, 프로설포카브, 프로설파무론, 피라클로닐, 피라플루펜-에틸, 피라설포톨, 피라조길, 피라졸리네이트, 피라족시펜, 피라조설파무론-에틸, 피리벤족심, 피리부티카브, 피리데이트, 피리프탈리드, 피리미노박-메틸, 피리미설파, 피리티오박, 피리티오박-나트륨, 피록사셀폰, 피록스설파람, 퀴클로락, 퀴클락, 퀴노클라민, 퀴잘로포프-에틸, 퀴잘로포프-P-에틸, 퀴잘로포프-P-테푸릴, 림설파무론, 사플루페나실, 세톡시덤, 시두론, 시마진, 시메트린, 셀코트리온, 셀펜트라존, 설포메투론-메틸, 설포설파무론, 2,3,6-TBA, TCA, TCA-나트륨, 테부탐, 테부티우론, 테푸릴트리온, 템보트리온, 테프랄록시덤, 테르바실, 테르부메톤, 테르부틸라진, 테르부트린, 테닐클로르, 티아조피르, 티엔카르바존, 티펜설파무론-메틸, 티오벤카브, 티아페나실, 티오카르바질, 톨피랄레이트, 토프라메존, 트랄록시덤, 트라이-알레이트, 트리아아파몬, 트리아아설파무론, 트리아지플람, 트라이베누론-메틸, 트라이클로피르, 트라이클로피르-부토틸, 트라이클로피르-트라이에틸암모늄, 트라이디판, 트라이에타진, 트라이플록시설파무론, 트라이플루디복사진, 트라이플루랄린, 트라이플루설파무론-메틸, 트라이토설파무론, 베르놀레이트, 3-(2-클로로-3,6-다이플루오로페닐)-4-하이드록시-1-메틸-1,5-나프티리딘-2(1H)-온, 5-클로로-3-[(2-하이드록시-6-옥소-1-사이클로헥센-1-일)카르보닐]-1-(4-메톡시페닐)-2(1H)-퀴놀살리논, 2-클로로-N-(1-메틸-1H-테트라졸-5-일)-6-(트라이플루오로메틸)-3-피리딘카르복사미드, 7-(3,5-다이클로로-4-피리디닐)-5-(2,2-다이플루오로에틸)-8-하이드록시피리도[2,3-b]피라진-6(5H)-온, 4-(2,6-다이에틸-4-메틸페닐)-5-하이드록시-2,6-다이메틸-3(2H)-피리다지논, 5-[[[(2,6-다이플루오로페닐)메톡시]메틸]-4,5-다이하이드로-5-메틸-3-(3-메틸-2-티에닐)아이속사졸 (이전에는 메티옥솔린), 4-(4-플루오로페닐)-6-[(2-하이드록시-6-옥소-1-사이클로헥센-

1-일)카르보닐]-2-메틸-1,2,4-트리아진-3,5-(2H,4H)-다이온, 메틸 4-아미노-3-클로로-6-(4-클로로-2-플루오로-3-메톡시페닐)-5-플루오로-2-피리딘카복실레이트, 2-메틸-3-(메틸설포닐)-N-(1-메틸-1H-테트라졸-5-일)-4-(트리플루오로메틸)벤즈아미드 및 2-메틸-N-(4-메틸-1,2,5-옥사디아아졸-3-일)-3-(메틸설포닐)-4-(트리플루오로메틸)벤즈아미드. 다른 제초제는 또한 생물 제초제, 예컨대, 알테르나리아 데스트루엔스 (*Alternaria destruens* (Simmons)), 콜레토티리쿰 글로에오스포리오데스 (*Colletotrichum gloeosporioides* (Penz.) Penz. & Sacc., 드레치시에라 모노세라스 (*Drechslera monoceras*) (MTB-951), 마이로테슘 베르루카리아 (*Myrothecium verrucaria*) (Albertini & Schweinitz) Ditmar: Fries, 파이토포토라 팔미보라 (*Phytophthora palmivora*) (Butl.) Butl. 및 푸치니아 틀라스페오스 (*Puccinia thlaspeos* (Schub))를 포함한다.

[0367] 원하지 않는 초목의 우수한 방제 (예를 들어, 상승 효과로 인한 것과 같은 낮은 사용률, 광범위한 잡초 방제, 또는 작물 안전성 향상) 또는 저항성 잡초의 생육 저지를 위해, 본 발명의 화합물과, 아트라진, 아짐설푸론, S-베플루부타미드, 벤즈아이소티아졸리논, 카르펜트라존-에틸, 클로리무론-에틸, 클로르설푸론-메틸, 클로마존, 클로파이랄리드 칼륨, 클로란설프-메틸, 2-[(2,4-다이클로로페닐)메틸]-4,4-다이메틸-3-아이속사졸리디논, 2-[(2,5-다이클로로페닐)메틸]-4,4-다이메틸-3-아이속사졸리디논, 에타메트설푸론-메틸, 플루메트설프, 4-(4-플루오로페닐)-6-[(2-하이드록시-6-옥소-1-사이클로헥센-1-일)카르보닐]-2-메틸-1,2,4-트리아진-3,5-(2H,4H)-다이온, 플루피르설프-메틸, 플루티아세트-메틸, 포메사펜, 이마제타피르, 레나실, 메스트리온, 메트리부진, 메트설푸론-메틸, 페톡사미드, 피클로람, 피록사설프, 퀴클로라, 립설푸론, S-메톨라클로르, 설프엔트라존, 티펜설푸론-메틸, 트라이플루설프-메틸 및 트라이베누론-메틸로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 제초제의 혼합물이 바람직하다.

[0368] 본 발명의 화합물은 또한 식물 성장 조절제, 예컨대 아비글리신, N-(페닐메틸)-1H-푸린-6-아민, 에포콜레온, 지베렐린산, 지베렐린 A₄ 및 A₇, 하판 단백질, 메피퀴트 클로라이드, 프로헥사디온 칼슘, 프로하이드로자스몬, 나트륨 니트로페놀레이트 및 트리넥사팍-메틸, 및 식물 성장 변형 유기체, 예컨대 바실러스 세레우스 (*Bacillus cereus*) 균주 BP01과 병용하여 사용될 수 있다.

[0369] 농업용 보호제 (즉, 제초제, 제초제 약해경감제, 살충제, 살진균제, 살선충제, 진드기 구충제 및 생물 작용제)에 관한 일반적인 참고문헌으로는 문헌 [*The Pesticide Manual, 13th Edition*, C. D. S. Tomlin, Ed., British Crop Protection Council, Farnham, Surrey, U.K., 2003] 및 문헌 [*The BioPesticide Manual, 2nd Edition*, L. G. Copping, Ed., British Crop Protection Council, Farnham, Surrey, U.K., 2001]을 들 수 있다.

[0370] 이들 다양한 혼합 파트너 중 하나 이상을 사용하는 실시 형태의 경우, 혼합 파트너는 전형적으로, 혼합 파트너를 단독으로 사용할 때에 통상적인 양과 유사한 양으로 사용된다. 특히 혼합물 중에서, 활성 성분은 종종 활성 성분의 단독 사용에 대한 제품 라벨에 지정된 2분의 1의 적용률과 완전 적용률 사이의 적용률로 적용된다. 이러한 양은 참고문헌, 예컨대 [*The Pesticide Manual and The BioPesticide Manual*]에 기재되어 있다. 화학식 1의 화합물에 대한 이들 다양한 혼합 파트너 (전체)의 중량비는 전형적으로 약 1:3000 내지 약 3000:1이다. 약 1:300 내지 약 300:1의 중량비 (예를 들어, 약 1:30 내지 약 30:1의 비)에 주목된다. 당업자는 원하는 생물학적 활성 범위에 필요한 활성 성분의 생물학적 유효량을 간단한 실험을 통하여 용이하게 결정할 수 있다. 이들 추가의 성분을 포함시키면, 방제되는 잡초의 범위를 화학식 1의 화합물 단독에 의해 방제되는 범위 이상으로 확대시킬 수 있음이 명백할 것이다.

[0371] 경우에 따라서는, 본 발명의 화합물과 다른 생물 활성 (특히 제초성) 화합물 또는 생물 활성제 (즉, 활성 성분)의 배합물은 잡초에 대하여 상가 작용 이상 (즉, 상승)의 효과를 가져오고/가져오거나, 작물 또는 다른 원하는 식물에 대하여 상가 작용 이하 (즉, 약해경감)의 효과를 가져올 수 있다. 효과적인 해충 구제를 보장하면서 환경에 방출되는 활성 성분의 양을 감소시키는 것이 항상 바람직하다. 과도한 작물 피해없이 훨씬 더 효과적인 잡초 방제를 제공하도록 다량의 활성 성분을 사용하는 능력도 바람직하다. 제초제 활성 성분의 혼합물의 상승 작용이 농학적으로 만족스러운 레벨의 잡초 방제를 부여하는 살포량으로 잡초에 발생하는 경우에는, 이러한 배합물은 작물 생산비를 감소시키고 환경 부하를 저감시키는데 유리할 수 있다. 제초제 활성 성분의 약해경감이 작물에 나타나는 경우에는, 이러한 배합물은 잡초 경합을 줄임으로써 작물 보호를 증가시키는데 유리할 수 있다.

[0372] 본 발명의 화합물과 적어도 하나의 다른 제초제 활성 성분의 배합물이 주목된다. 다른 제초제 활성 성분이 본 발명의 화합물과는 작용 부위가 상이한 그러한 배합물이 특히 주목된다. 경우에 따라서는, 유사한 방제 범위를 갖지만, 작용 부위가 상이한 적어도 하나의 다른 제초제 활성 성분과의 배합물이 저항성 관리에 특히 유리할 것이다. 따라서, 본 발명의 조성물은 유사한 방제 범위를 갖지만, 작용 부위가 상이한 적어도 하나의 추가의 제

초제 활성 성분을 (제조적 유효량으로) 추가로 포함할 수 있다.

[0373] 본 발명의 화합물은 또한 특정한 작물에 대한 안전성을 증대시키기 위해, 제초제 약해경감제, 예컨대 알리도클로르, 베크사코르, 클로퀸토세트-멕실, 쿠밀루론, 사이오메트리닐, 사이프로설폰아미드, 다이무론, 다이클로르미드, 다이사이클로논, 디에틸레이트, 디메피페레이트, 펜클로라졸-에틸, 펜클로림, 플루라졸, 플룩소페닐, 푸릴아졸, 아이속사디펜-에틸, 메펜피르-다이에틸, 메페네이트, 메톡시페논 나프탈산 무수물 (1,8-나프탈산 무수물), 옥사베트리닐, *N*-(아미노카르보닐)-2-메틸벤젠설폰아미드, *N*-(아미노카르보닐)-2-플루오로벤젠설폰아미드, 1-브로모-4-[(클로로메틸)설폰일]벤젠 (BCS), 4-(다이클로로아세틸)-1-옥사-4-아조스피로[4.5]데칸 (MON 4660), 2-(다이클로로메틸)-2-메틸-1,3-다이옥솔란 (MG 191), 에틸 1,6-다이하이드로-1-(2-메톡시페닐)-6-옥소-2-페닐-5-피리미딘카르복실레이트, 2-하이드록시-*N,N*-다이메틸-6-(트라이플루오로메틸)피리딘-3-카르복사미드, 3-옥소-1-사이클로헥센-1-일 1-(3,4-다이메틸페닐)-1,6-다이하이드로-6-옥소-2-페닐-5-피리미딘카르복실레이트, 2,2-다이클로로-1-(2,2,5-트라이메틸-3-옥사졸리디닐)-에탄온 및 2-메톡시-*N*-[[4-[(메틸아미노)카르보닐]아미노]페닐]설폰일]-벤즈아미드와 병용하여 사용될 수 있다. 제초제 약해경감제의 해독적 유효량은 본 발명의 화합물과 동시에 적용되거나, 종자 처리로서 적용될 수 있다. 따라서, 본 발명의 한 측면은 본 발명의 화합물 및 제초제 약해경감제의 해독적 유효량을 포함하는 제초제 혼합물에 관한 것이다. 종자 처리는 작물에 대한 해독 작용을 물리적으로 제한하기 때문에, 선택적 잡초 방제에 특히 유용하다. 따라서, 특히 유용한 본 발명의 실시 형태는 작물 부위를 본 발명의 화합물의 제조적 유효량과 접촉시키는 것을 포함하며, 작물로 성장하는 종자가 약해경감제의 해독적 유효량으로 처리되는, 작물에서의 원하지 않는 초목 성장을 선택적으로 억제하는 방법이다. 약해경감제의 해독적 유효량은 간단한 실험을 통하여 당업자에 의해 용이하게 결정될 수 있다.

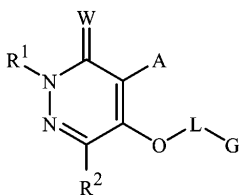
[0374] 본 발명의 화합물은 또한 (1) 제초 효과를 부여하는 유전적으로 유도된 전사산물의 하향 조절, 간섭, 억제 또는 침묵 (silencing)을 통해 특정 표적의 양에 영향을 주는 DNA, RNA 및/또는 화학적으로 변형된 뉴클레오티드를 포함하나 이에 한정되지 않는 폴리뉴클레오티드; 또는 (2) 약해경감 효과를 부여하는 유전적으로 유도된 전사산물의 하향 조절, 간섭, 억제 또는 침묵을 통해 특정 표적의 양에 영향을 주는 DNA, RNA 및/또는 화학적으로 변형된 뉴클레오티드를 포함하나 이에 한정되지 않는 폴리뉴클레오티드와 혼합될 수 있다.

[0375] 본 발명의 화합물 (제조적 유효량으로)과, 다른 제초제 및 제초제 약해경감제 (유효량으로)로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 적어도 하나의 추가의 활성 성분과, 계면활성제, 고체 희석제 및 액체 희석제로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 적어도 하나의 성분을 포함하는 조성물이 주목된다.

[0376] 원하지 않는 초목의 우수한 방제 (예를 들어, 상승 작용으로 인한 것과 같은 낮은 사용률, 광범위한 잡초 방제, 또는 작물 안전성 향상) 또는 저항성 잡초의 생육 저지를 위해, 본 발명의 화합물과, 클로리무론-에틸, 니코실푸론, 메소트리온, 티펜설폰-메틸, 플루피르설폰-메틸, 트라이베누론, 피록사설폰, 피록사텐, 탬보트리온, 피록스설파, 메틀라클로르 및 *S*-메틀라클로르로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 제초제의 혼합물이 바람직하다.

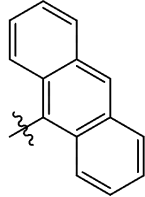
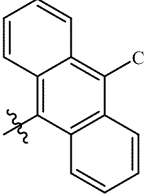
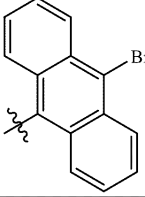
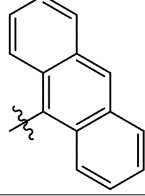
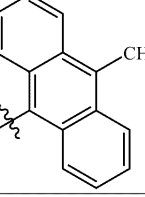
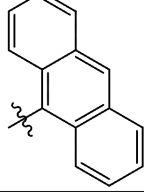
[0377] 하기 시험은 특정 잡초에 대한 본 발명의 화합물의 방제 효과를 예증한다. 그러나, 상기 화합물에 의해 주어진 잡초 방제는 이들 종류에 한정되지 않는다. 화합물 설명에 관해서는 인덱스 표 A를 참조한다. 하기 약어가 하기 인덱스 표에 사용된다: "Cmpd. No."는 "화합물 번호"를 나타내고, "Ex."는 "실시예"를 나타내며, 화합물이 제조되는 실시예를 나타내는 번호가 이어진다. ¹H NMR 스펙트럼은 달리 명시되지 않는 한, DMSO-*d*₆ 용액 중에서의 테트라메틸실란으로부터의 다운필드 (ppm)로 나타내며; "s"는 단일선을 의미하고, "d"는 이중선을 의미하며, "t"는 삼중선을 의미하고, "m"은 다중선을 의미한다.

[0378] 인덱스 표 A

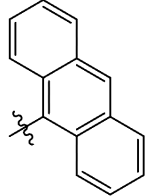
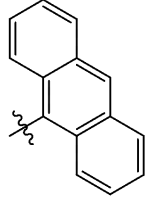
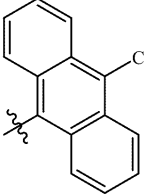
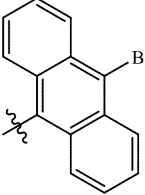


[0379]

[0380] W는 0임.

Cmpd. No.	R ¹	R ²	L	G	A	M.P (°C)
1 (Ex. 1)	Me	Cl	직접 결합	H		236-238 *
2 (Ex. 2)	Me	Cl	직접 결합	H		*
3	Me	Cl	직접 결합	H		*
4	Me	Cl	직접 결합	CH ₃		*
5	Me	Cl	직접 결합	H		*
6	Me	Cl	직접 결합	C(=O)CH ₃		*

[0381]

7	Me	Cl	직접 결합	H (모르폴린 염)		*
8	Me	Me	직접 결합	H		*
9	Me	Me	직접 결합	H		*
10	Me	Me	직접 결합	H		*

* ¹H NMR 또는 M.S. 데이터에 관해서는 인덱스 표 B를 참조한다.

[0382]

[0383]

인덱스 표 B

Cmpd. No.	¹ H NMR 데이터 (달리 명시되지 않는 한, DMSO- <i>d</i> ₆ 용액) ^a 및 M.S. 데이터
1	δ 8.70 (s, 1H), 8.15 (d, 2H), 7.68 (d, 2H), 7.52 (t, 2H), 7.45 (t, 2H), 5.75 (s, 1H), 3.67 (s, 3H).
2	δ 8.52 (d, 2H), 7.61 (d, 2H), 7.74 (변형된 t, 2H), 7.56 (변형된 t, 2H), 3.67 (s, 3H).
3	δ 8.53 (d, 2H), 7.80 (d, 2H), 7.74-7.71 (m, 2H), 7.56-7.53 (m, 2H), 3.67 (s, 3H).
4	(CDCl ₃) δ 8.57 (s, 1H), 8.08-8.04 (m, 2H), 7.68-7.64 (m, 2H), 7.51-7.46 (m, 4H), 3.82 (s, 3H), 3.05 (s, 3H).
5	δ 11.05 (br s, 1H), 8.44 (d, 2H), 7.70 (d, 2H), 7.58 (t, 2H), 7.47 (t, 2H), 3.68 (s, 3H), 3.16 (s, 3H).
6	(CDCl ₃) δ 8.55 (s, 1H), 8.03 (변형된 d, 2H), 7.60 (변형된 d, 2H), 7.49-7.42 (m, 4H), 3.91 (s, 3H), 1.68 (s, 3H).
7	335 (M-1).
8	δ 10.12 (s, 1H), 8.69 (s, 1H), 8.13 (d, 2H), 7.60 (d, 2H), 7.51 (t, 2H), 7.42 (t, 2H), 3.65 (s, 3H), 2.33 (s, 3H).
9	δ 10.23 (s, 1H), 8.52 (d, 2H), 7.74-7.70 (m, 4H), 7.57-7.52 (m, 2H), 3.65 (s, 3H), 2.32 (s, 3H).
10	δ 10.25 (s, 1H), 8.53 (d, 2H), 7.76-7.69 (m, 4H), 7.54 (dd, 2H), 3.65 (s, 3H), 2.32 (s, 3H).

^a ¹H NMR 데이터는 테트라메틸실란으로부터의 다운필드 (ppm)로 나타낸다. 커플링은 (s)-단일선, (d)-이중선, (t)-삼중선, (m)-다중선으로 나타낸다.

[0384]

[0385]

본 발명의 생물학적 실시예

[0386]

시험 A

[0387]

피 (에키노클로아 크루스-갈리 (*Echinochloa crus-galli*)), 땀싸리 (코키아 스킵아리아 (*Kochia scoparia*)), 패지풀 (암브로시아 엘라티오르 (*Ambrosia elatior*)), 이탈리아안 라이그래스 (로리엄 멀티플로럼 (*Lolium multiflorum*)), 강아지풀 (세타리아 비리디스 (*Setaria viridis*)) 및 명아주 (아마란투스 레트로플렉서스 (*Amaranthus retroflexus*)) 중에서 선택되는 식물종의 종자를 옥토와 모래의 블렌드에 심어, 계면활성제를 포함하는 비식물독성 (non-phytotoxic) 용매 혼합물 중에서 제제화된 시험 화학물질을 사용한 지향성 토양 분무 (directed soil spray)로 발아 전 처리하였다.

[0388]

동시에, 이러한 잡초종 중에서 선택되는 식물과, 밀 (트리티쿰 아에스티BUM (*Triticum aestivum*)), 옥수수 (제아 메이즈 (*Zea mays*)), 쥐꼬리뚝새풀 (알로페쿠루스 마이어수로이데스 (*Alopecurus myosuroides*)) 및 갈퀴덩굴 (catchweed bedstraw, 갈륨 아파린 (*Galium aparine*))도 동일한 옥토와 모래의 블렌드를 포함하는 화분에 심어, 동일한 방법으로 제제화된 시험 화학물질로 발아 후 살포 처리하였다. 발아 후 처리를 위한 식물은 키가 2 내지 10 cm 범위로, 1엽기 내지 2엽기이었다. 처리된 식물 및 미처리 대조군을 온실에 약 10일간 유지시킨 후에, 모든 처리된 식물을 미처리 대조군과 비교하여, 피해를 육안으로 평가하였다. 표 A에 요약된 식물 반응 평가 척도 (plant response rating)는 0 내지 100 스케일을 기준으로 하며, 여기서 0은 효과가 없음을

나타내고, 100은 완전 방제를 나타낸다. 대시 (-) 반응은 시험 결과가 없음을 의미한다.

표 A	화합물							
125 g ai/ha	1	2	3	5	6	7	8	
발아 후								
피	20	20	60	30	10	0	50	
취꼬리뚝새풀	10	60	70	0	0	10	30	
옥수수	0	0	10	20	0	10	10	
가을강아지풀	-	-	-	-	20	10	60	
강아지풀	50	60	90	30	-	-	-	
갈퀴덩굴	90	100	90	70	100	100	90	
넙싸리	20	70	50	0	20	10	10	
명아주	100	100	100	90	100	100	100	
돼지풀	90	90	90	20	90	100	90	
이탈리안 라이그래스	40	80	50	50	70	60	100	
밀	10	30	60	0	10	0	0	
표 A	화합물							
31 g ai/ha	1	2	3	5	6	7	8	
발아 후								
피	0	0	20	0	0	0	10	
취꼬리뚝새풀	0	0	10	0	0	0	0	
옥수수	0	0	0	10	0	10	10	
가을강아지풀	-	-	-	-	0	0	10	
강아지풀	10	10	40	0	-	-	-	
갈퀴덩굴	70	20	90	20	80	70	80	
넙싸리	10	10	10	0	0	0	0	
명아주	90	100	100	50	100	100	90	
돼지풀	80	90	80	10	90	90	90	
이탈리안 라이그래스	20	50	40	0	20	10	90	
밀	0	0	20	0	10	0	0	
표 A	화합물							
125 g ai/ha	1	2	3	5	6	7	8	
발아 전								
피	0	0	50	0	0	0	10	
가을강아지풀	-	-	-	-	10	0	10	
강아지풀	0	90	80	0	-	-	-	
넙싸리	20	10	50	0	0	0	0	
명아주	100	100	100	60	100	100	100	
돼지풀	100	100	100	0	100	40	90	
이탈리안 라이그래스	30	70	80	0	30	0	50	
표 A	화합물							
31 g ai/ha	1	2	3	5	6	7	8	
발아 전								
피	0	0	0	0	0	0	0	
가을강아지풀	-	-	-	-	0	0	0	
강아지풀	0	0	10	0	-	-	-	
넙싸리	0	0	0	0	0	0	0	
명아주	100	100	100	0	80	60	100	
돼지풀	70	80	20	0	40	0	40	
이탈리안 라이그래스	20	20	20	0	30	0	10	

[0389]

[0390] 시험 B

[0391]

벼 (오리자 사티바 (*Oryza sativa*)), 알방동사니 (small-flower umbrella sedge, 사이페루스 디포르미스 (*Cyperus difformis*)), 생이가래 (헤테란테라 리모사 (*Heteranthera limosa*)) 및 피 (에키노클로아 크루스-갈리 (*Echinochloa crus-galli*)) 중에서 선택된 담수답 (flooded paddy) 시험에 있어서의 식물종을 시험을 위해 2엽기로 성장시켰다. 처리 시에, 시험 화분을 토양 표면에서 3 cm 상방으로 침수시켜, 시험 화합물을 논용수에 직접 사용하여 처리한 다음에, 시험 기간 중에 물 깊이를 그대로 유지시켰다. 처리된 식물 및 대조군을 온실에 13 내지 15일간 유지시킨 후에, 모든 종을 대조군과 비교하여, 육안으로 평가하였다. 표 B에 요약된 식물 반응 평가 척도는 0 내지 100 스케일을 기준으로 하며, 여기서 0은 효과가 없음을 나타내고, 100은 완전 방제를 나타낸다. 대시 (-) 반응은 시험 결과가 없음을 의미한다.

표 B 250 g ai/ha	화합물					
	1	2	5	6	7	8
침수						
피	20	0	0	0	0	15
생이가래	85	80	90	85	100	90
벼	0	0	0	0	0	15
알팡등사니	90	75	95	95	100	90

[0392]