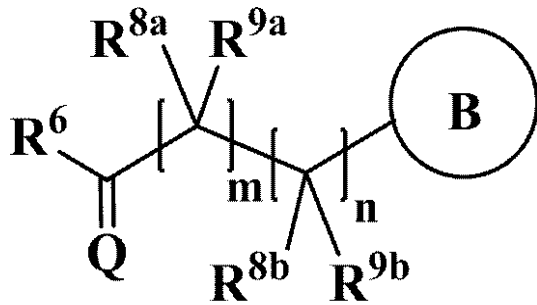


【特許請求の範囲】

【請求項 1】

式 (1) :

【化 1】

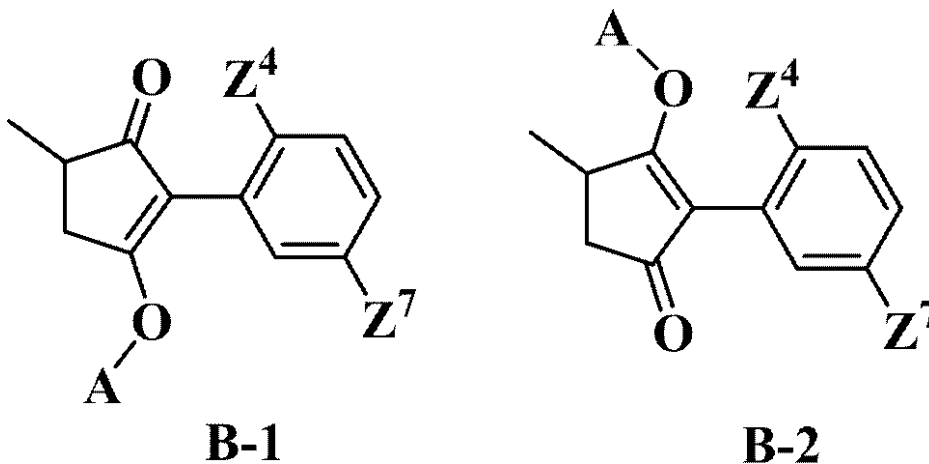


10

(1)

[式中、Bは、B - 1又はB - 2のいずれかで示される環を表し、

【化 2】



20

B-1

B-2

30

Qは、酸素原子又はNOR⁷を表し、

Aは、水素原子、C₁~C₆アルキル、R⁵で任意に置換された(C₁~C₆)アルキル、C₂~C₆アルケニル、C₂~C₆アルキニル、-S(O)_r2R^{1a}、-C(O)OR^{1b}、-C(S)OR^{1c}、-C(O)SR^{1d}、-C(S)SR^{1e}、-C(O)R²又は-C(S)R²を表し、

R^{1a}は、C₁~C₈アルキル、フェニル、(Z^a)_{q_a}で置換されたフェニル、-N(R^{4b})R^{3b}、D2-100、D2-101又はD2-102を表し、

R^{1b}は、C₁~C₈アルキル、フェニル又は(Z^b)_{q_b}で置換されたフェニルを表し、

40

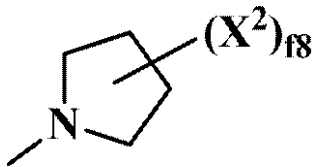
R^{1c}は、C₁~C₈アルキル又はフェニルを表し、

R^{1d}及びR^{1e}は、各々独立してC₁~C₈アルキルを表し、

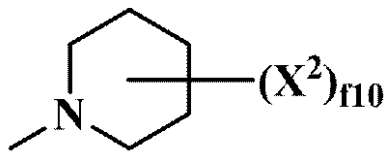
R²は、C₁~C₈アルキル、R^{5f}で任意に置換された(C₁~C₆)アルキル、フェニル、(Z^f)_{q_f}で置換されたフェニル、-N(R^{4a})R^{3a}、D2-100、D2-101又はD2-102を表し、

D2-100、D2-101及びD2-102は、下記の構造で表される環を表し、

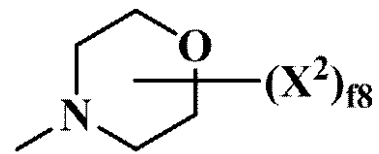
【化 3】



D2-100



D2-101



D2-102

R^{3a} 及び R^{4a} は、各々独立して $C_1 \sim C_6$ アルキルを表し、

R^{3b} 及び R^{4b} は、各々独立して水素原子又は $C_1 \sim C_6$ アルキルを表し、

R^5 は、シアノ、 $C_1 \sim C_6$ アルコキシ、 $C_1 \sim C_6$ アルキルチオ、 $C_1 \sim C_6$ アルキルスルフィニル、 $C_1 \sim C_6$ アルキルスルホニル、 $C_1 \sim C_6$ アルコキシカルボニル又はフェニルを表し、

R^{5f} は、 $-OR^f$ 、フェニル又は $(Z^f)_{qf}$ で置換されたフェニルを表し、

R^6 は、水素原子、 $C_1 \sim C_6$ アルキル又は $C_3 \sim C_8$ シクロアルキルを表し、

R^7 は、水素原子又は $C_1 \sim C_6$ アルキルを表し、

R^{8a} 、 R^{8b} 、 R^{9a} 及び R^{9b} は、各々独立して水素原子又は $C_1 \sim C_6$ アルコキシカルボニルを表し、

R^f は、フェニル又は $(Z^f)_{qf}$ で置換されたフェニルを表し、

Z^4 は、ハロゲン原子、 $C_1 \sim C_6$ アルキル、 $C_3 \sim C_8$ シクロアルキル又は $C_1 \sim C_6$ アルコキシを表し、

Z^7 は、 $-OR^{41}$ を表し、

R^{41} は、D3-3a、D3-18a、D3-18b、D3-21a、D3-21b、D3-33a、D3-55a、D3-55b、D3-57a、D3-57b、D3-58a、D3-58b、D3-60a、D3-60b 又は D3-65a を表し、

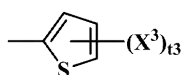
D3-3a、D3-18a、D3-18b、D3-21a、D3-21b、D3-33a、D3-55a、D3-55b、D3-57a、D3-57b、D3-58a、D3-58b、D3-60a、D3-60b 及び D3-65a は、下記の構造で表される環を表し、

10

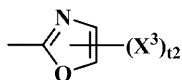
20

30

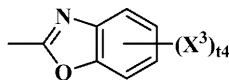
【化 4】



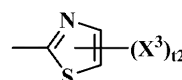
D3-3a



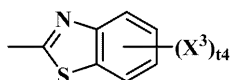
D3-18a



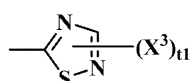
D3-18b



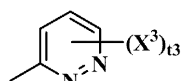
D3-21a



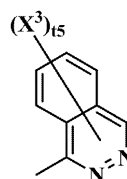
D3-21b



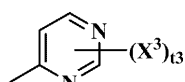
D3-33a



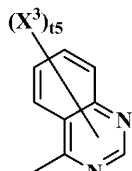
D3-55a



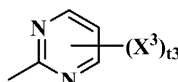
D3-55b



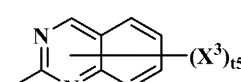
D3-57a



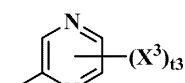
D3-57b



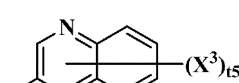
D3-58a



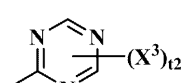
D3-58b



D3-60a



D3-60b



D3-65a

10

20

X^2 は、 $C_1 \sim C_6$ アルキルを表し、 f_8 又は f_{10} が 2 以上の整数を表すとき、各々の X^2 は互いに同一であっても又は互いに相異なってもよく、

X^3 は、ハロゲン原子、ニトロ、ハロ ($C_1 \sim C_6$) アルキル又は $C_1 \sim C_6$ アルコキシを表し、 t_2 、 t_3 、 t_4 又は t_5 が 2 以上の整数を表すとき、各々の X^3 は互いに同一であっても又は互いに相異なってもよく、

Z^a は、 $C_1 \sim C_6$ アルキルを表し、 q_a が 2 以上の整数を表すとき、各々の Z^a は互いに同一であっても又は互いに相異なってもよく、

Z^b は、ハロゲン原子又は $C_1 \sim C_6$ アルキルを表し、 q_b が 2 以上の整数を表すとき、各々の Z^b は互いに同一であっても又は互いに相異なってもよく、

Z^f は、ハロゲン原子、ニトロ、 $C_1 \sim C_6$ アルキル又は $C_1 \sim C_6$ アルコキシを表し、 q_f が 2 以上の整数を表すとき、各々の Z^f は互いに同一であっても又は互いに相異なってもよく、

t_1 は、0 又は 1 の整数を表し、

m 、 n 、 r_2 及び t_2 は、各々独立して 0、1 又は 2 の整数を表し、

t_3 は、0、1、2 又は 3 の整数を表し、

t_4 は、0、1、2、3 又は 4 の整数を表し、

q_a 、 q_b 、 q_f 及び t_5 は、各々独立して 0、1、2、3、4 又は 5 の整数を表し、

f_8 は、0、1、2、3、4、5、6、7 又は 8 の整数を表し、

f_{10} は、0、1、2、3、4、5、6、7、8、9 又は 10 の整数を表す。] で表されるケトン若しくはオキシム化合物又はそれらの塩。

40

【請求項 2】

Q は、酸素原子を表す請求項 1 記載のケトン化合物又はその塩。

【請求項 3】

Q は、 $NO R^7$ を表す請求項 1 記載のオキシム化合物又はその塩。

【請求項 4】

B は、 $B - 1$ を表し、

50

A は、水素原子を表し、

R^6 は、 $C_1 \sim C_6$ アルキルを表し、

R^{8a} 及び R^{9a} は、水素原子を表し、

Z^4 は、 $C_1 \sim C_6$ アルコキシを表し、

R^{41} は、D3 - 58 a 又は D3 - 60 b を表し

X^3 は、ハロゲン原子を表し

n は、0 を表し、

m、t3 及び t5 は 1 の整数を表す請求項 2 記載のケトン化合物又はその塩。

【請求項 5】

B は、B - 1 を表し、

10

A は、水素原子又は $C_1 \sim C_6$ アルキルを表し、

R^6 は、 $C_1 \sim C_6$ アルキルを表し、

R^{8a} 及び R^{9a} は、水素原子を表し、

Z^4 は、 $C_1 \sim C_6$ アルコキシを表し、

R^{41} は、D3 - 18 b、D3 - 58 a 又は D3 - 60 b を表し、

X^3 は、ハロゲン原子を表し

n は、0 を表し、

m、t3、t4 及び t5 は、1 の整数を表す請求項 3 記載のオキシム化合物又はその塩

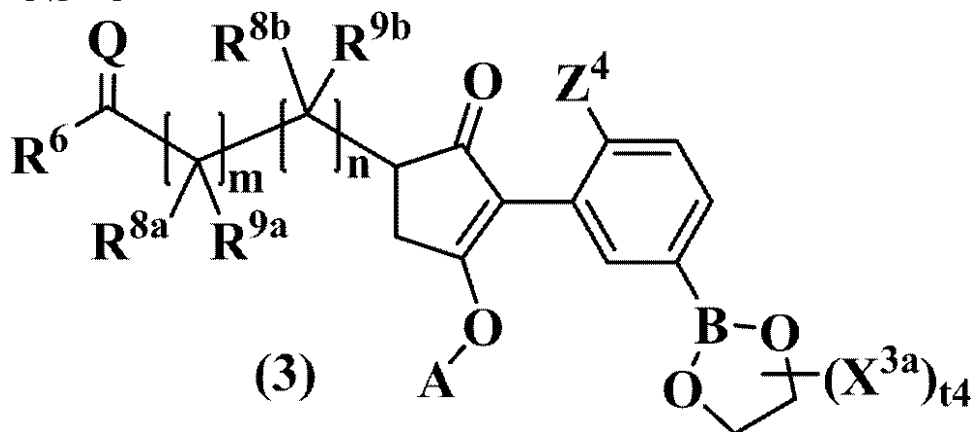
。

【請求項 6】

20

式 (3) :

【化 5】



30

[式中、Q は、 NOR^7 を表し、

A は、 $C_1 \sim C_6$ アルキルを表し、

R^6 は、 $C_1 \sim C_6$ アルキル又は $C_3 \sim C_8$ シクロアルキルを表し、

R^7 は、 $C_1 \sim C_6$ アルキルを表し、

R^{8a} 、 R^{8b} 、 R^{9a} 及び R^{9b} は、水素原子を表し、

Z^4 は、ハロゲン原子、 $C_1 \sim C_6$ アルキル、 $C_3 \sim C_8$ シクロアルキル又は $C_1 \sim C_6$ アルコキシを表し、

40

X^{3a} は、 $C_1 \sim C_6$ アルキルを表し、

m は、1 の整数を表し、

n は、0 の整数を表し、

t4 は、4 の整数を表す] で表される請求項 1 乃至請求項 5 のいずれかに記載のケトン若しくはオキシム化合物の製造中間体。

【請求項 7】

請求項 1 乃至請求項 5 のいずれかに記載のケトン及びオキシム化合物並びにそれらの塩から選ばれる 1 種又は 2 種以上を有効成分として含有する農薬。

【請求項 8】

50

請求項 1 乃至請求項 5 のいずれかに記載のケトン及びオキシム化合物並びにそれらの塩から選ばれる 1 種又は 2 種以上を有効成分として含有する除草剤。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、新規なケトン若しくはオキシム化合物又はそれらの塩、並びにケトン若しくはオキシム化合物又はそれらの塩を有効成分として含有する農薬、特に除草剤に関するものである。また、本発明における農薬とは、農園芸分野における殺虫・殺ダニ剤、殺線虫剤、除草剤及び殺菌剤等を意味する。

【背景技術】

【0002】

例えば、特許文献 1 には、ある種のケトン若しくはオキシム化合物が開示されているが、本発明に係るケトン若しくはオキシム化合物に関しては何ら開示されていない。

【先行技術文献】

【特許文献】

【0003】

【特許文献 1】国際公開第 2016/098899 号

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0004】

本発明の目的は、より低薬量で各種雑草に対して効果を確実に示し、且つ、土壤汚染や後作物への影響等の問題が軽減された、安全性の高く、除草剤の有効成分として有用な化学物質を提供することである。

【課題を解決するための手段】

【0005】

本発明者らは、上記の課題解決を目標に鋭意研究を重ねた結果、本発明に係る下記式 (1) で表される新規なケトン若しくはオキシム化合物が除草剤として優れた除草活性並びに対象となる作物に対する高い安全性を有し、且つ、ホ乳動物、魚類及び益虫等の非標的生物に対してほとんど悪影響の無い、極めて有用な化合物であることを見出し、本発明を完成した。

【0006】

すなわち、本発明は下記〔1〕～〔8〕に関するものである。

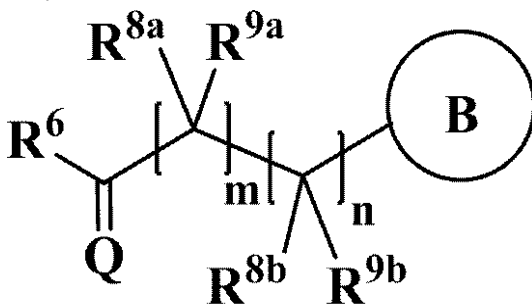
【0007】

〔1〕

式 (1) :

【0008】

【化 1】



(1)

【0009】

〔式中、Bは、B - 1 又は B - 2 のいずれかで示される環を表し、

10

20

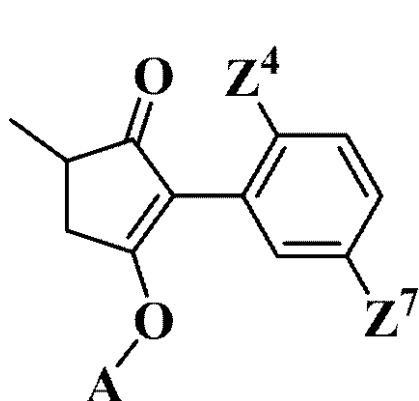
30

40

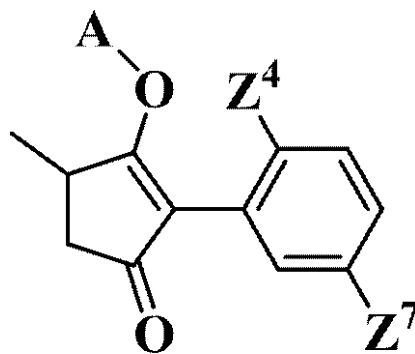
50

【0010】

【化2】



B-1



B-2

10

【0011】

Qは、酸素原子又は NOR^7 を表し、

Aは、水素原子、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_6$ アルキル、 R^5 で任意に置換された($\text{C}_1 \sim \text{C}_6$)アルキル、 $\text{C}_2 \sim \text{C}_6$ アルケニル、 $\text{C}_2 \sim \text{C}_6$ アルキニル、 $-\text{S}(\text{O})_{r_2}\text{R}^{1a}$ 、 $-\text{C}(\text{O})\text{OR}^{1b}$ 、 $-\text{C}(\text{S})\text{OR}^{1c}$ 、 $-\text{C}(\text{O})\text{SR}^{1d}$ 、 $-\text{C}(\text{S})\text{SR}^{1e}$ 、 $-\text{C}(\text{O})\text{R}^2$ 又は $-\text{C}(\text{S})\text{R}^2$ を表し、

20

R^{1a} は、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_8$ アルキル、フェニル、 $(\text{Z}^a)_{q_a}$ で置換されたフェニル、 $-\text{N}(\text{R}^{4b})\text{R}^{3b}$ 、D2-100、D2-101又はD2-102を表し、

R^{1b} は、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_8$ アルキル、フェニル又は $(\text{Z}^b)_{q_b}$ で置換されたフェニルを表し、

R^{1c} は、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_8$ アルキル又はフェニルを表し、

R^{1d} 及び R^{1e} は、各々独立して $\text{C}_1 \sim \text{C}_8$ アルキルを表し、

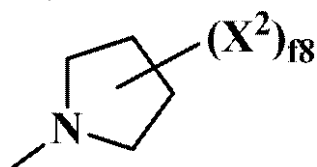
R^2 は、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_8$ アルキル、 R^{5f} で任意に置換された($\text{C}_1 \sim \text{C}_6$)アルキル、フェニル、 $(\text{Z}^f)_{q_f}$ で置換されたフェニル、 $-\text{N}(\text{R}^{4a})\text{R}^{3a}$ 、D2-100、D2-101又はD2-102を表し、

D2-100、D2-101及びD2-102は、下記の構造で表される環を表し、

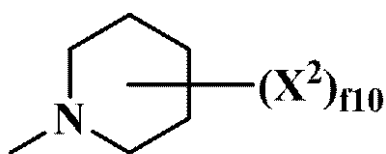
30

【0012】

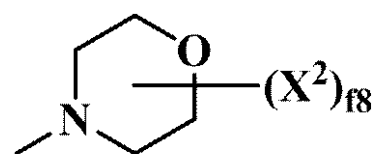
【化3】



D2-100



D2-101



D2-102

【0013】

R^{3a} 及び R^{4a} は、各々独立して $\text{C}_1 \sim \text{C}_6$ アルキルを表し、

R^{3b} 及び R^{4b} は、各々独立して水素原子又は $\text{C}_1 \sim \text{C}_6$ アルキルを表し、

R^5 は、シアノ、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_6$ アルコキシ、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_6$ アルキルチオ、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_6$ アルキルスルフィニル、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_6$ アルキルスルホニル、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_6$ アルコキシカルボニル又はフェニルを表し、

R^{5f} は、 $-\text{OR}^f$ 、フェニル又は $(\text{Z}^f)_{q_f}$ で置換されたフェニルを表し、

R^6 は、水素原子、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_6$ アルキル又は $\text{C}_3 \sim \text{C}_8$ シクロアルキルを表し、

R^7 は、水素原子又は $\text{C}_1 \sim \text{C}_6$ アルキルを表し、

R^{8a} 、 R^{8b} 、 R^{9a} 及び R^{9b} は、各々独立して水素原子又は $\text{C}_1 \sim \text{C}_6$ アルコキシカルボニルを表し、

40

50

R^f は、フェニル又は $(Z^f)_{qf}$ で置換されたフェニルを表し、

Z^4 は、ハロゲン原子、 $C_1 \sim C_6$ アルキル、 $C_3 \sim C_8$ シクロアルキル又は $C_1 \sim C_6$ アルコキシを表し、

Z^7 は、 $-OR^{41}$ を表し、

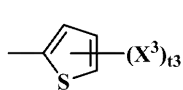
R^{41} は、D3-3a、D3-18a、D3-18b、D3-21a、D3-21b、D3-33a、D3-55a、D3-55b、D3-57a、D3-57b、D3-58a、D3-58b、D3-60a、D3-60b 又は D3-65a を表し、

D3-3a、D3-18a、D3-18b、D3-21a、D3-21b、D3-33a、D3-55a、D3-55b、D3-57a、D3-57b、D3-58a、D3-58b、D3-60a、D3-60b 及び D3-65a は、下記の構造で表される環を表し、

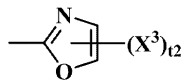
10

【0014】

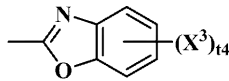
【化4】



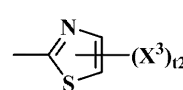
D3-3a



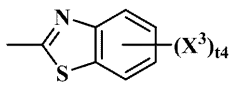
D3-18a



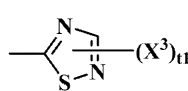
D3-18b



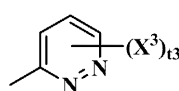
D3-21a



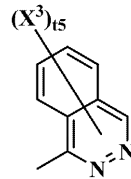
D3-21b



D3-33a

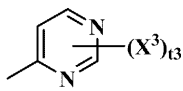


D3-55a

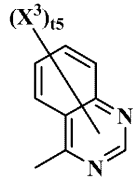


D3-55b

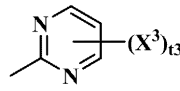
20



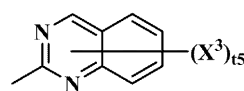
D3-57a



D3-57b

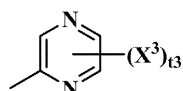


D3-58a

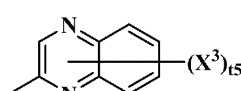


D3-58b

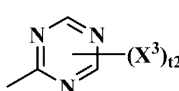
30



D3-60a



D3-60b



D3-65a

【0015】

X^2 は、 $C_1 \sim C_6$ アルキルを表し、 f_8 又は f_{10} が 2 以上の整数を表すとき、各々の X^2 は互いに同一であっても又は互いに相異なってもよく、

X^3 は、ハロゲン原子、ニトロ、ハロ($C_1 \sim C_6$) アルキル又は $C_1 \sim C_6$ アルコキシを表し、 t_2 、 t_3 、 t_4 又は t_5 が 2 以上の整数を表すとき、各々の X^3 は互いに同一であっても又は互いに相異なってもよく、

40

Z^a は、 $C_1 \sim C_6$ アルキルを表し、 q_a が 2 以上の整数を表すとき、各々の Z^a は互いに同一であっても又は互いに相異なってもよく、

Z^b は、ハロゲン原子又は $C_1 \sim C_6$ アルキルを表し、 q_b が 2 以上の整数を表すとき、各々の Z^b は互いに同一であっても又は互いに相異なってもよく、

Z^f は、ハロゲン原子、ニトロ、 $C_1 \sim C_6$ アルキル又は $C_1 \sim C_6$ アルコキシを表し、 q_f が 2 以上の整数を表すとき、各々の Z^f は互いに同一であっても又は互いに相異なってもよく、

t_1 は、0 又は 1 の整数を表し、

m 、 n 、 r_2 及び t_2 は、各々独立して 0、1 又は 2 の整数を表し、

50

t₃ は、0、1、2 又は 3 の整数を表し、
 t₄ は、0、1、2、3 又は 4 の整数を表し、
 q_a、q_b、q_f 及び t₅ は、各々独立して 0、1、2、3、4 又は 5 の整数を表し、
 f₈ は、0、1、2、3、4、5、6、7 又は 8 の整数を表し、
 f₁₀ は、0、1、2、3、4、5、6、7、8、9 又は 10 の整数を表す。] で表されるケトン若しくはオキシム化合物又はそれらの塩。

【0016】

{ 2 }

Q は、酸素原子を表す上記〔1〕に記載のケトン化合物又はその塩。

【0017】

{ 3 }

Q は、NOR⁷ を表す上記〔1〕に記載のオキシム化合物又はその塩。

【0018】

{ 4 }

B は、B - 1 を表し、

A は、水素原子を表し、

R⁶ は、C₁ ~ C₆ アルキルを表し、

R^{8a} 及び R^{9a} は、水素原子を表し、

Z⁴ は、C₁ ~ C₆ アルコキシを表し、

R⁴¹ は、D3 - 58a 又は D3 - 60b を表し

X³ は、ハロゲン原子を表し

n は、0 を表し、

m、t₃ 及び t₅ は 1 の整数を表す上記〔2〕に記載のケトン化合物又はその塩。

【0019】

{ 5 }

B は、B - 1 を表し、

A は、水素原子又は C₁ ~ C₆ アルキルを表し、

R⁶ は、C₁ ~ C₆ アルキルを表し、

R^{8a} 及び R^{9a} は、水素原子を表し、

Z⁴ は、C₁ ~ C₆ アルコキシを表し、

R⁴¹ は、D3 - 18b、D3 - 58a 又は D3 - 60b を表し、

X³ は、ハロゲン原子を表し

n は、0 を表し、

m、t₃、t₄ 及び t₅ は、1 の整数を表す上記〔3〕に記載のオキシム化合物又はその塩。

【0020】

{ 6 }

式(3) :

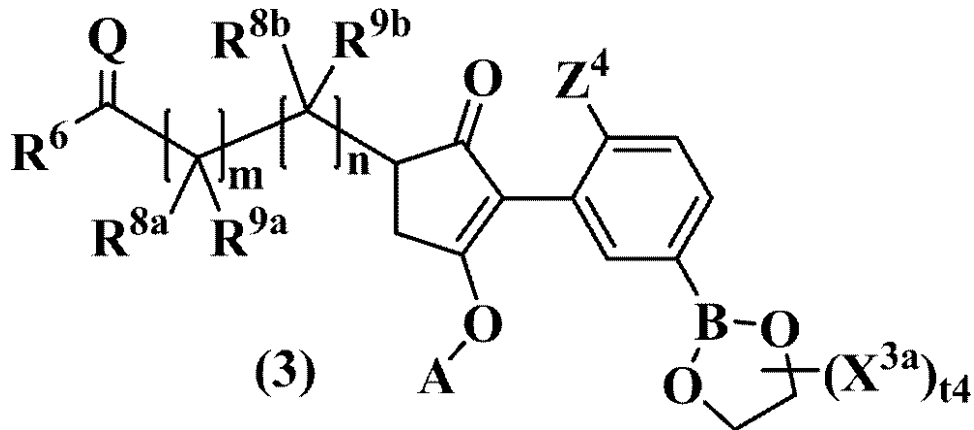
【0021】

10

20

30

【化5】



10

【0022】

[式中、Qは、 NOR^7 を表し、Aは、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_6$ アルキルを表し、 R^6 は、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_6$ アルキル又は $\text{C}_3 \sim \text{C}_8$ シクロアルキルを表し、 R^7 は、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_6$ アルキルを表し、 R^{8a} 、 R^{8b} 、 R^{9a} 及び R^{9b} は、水素原子を表し、 Z^4 は、ハロゲン原子、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_6$ アルキル、 $\text{C}_3 \sim \text{C}_8$ シクロアルキル又は $\text{C}_1 \sim \text{C}_6$ アルコキシを表し、

20

 X^{3a} は、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_6$ アルキルを表し、

mは、1の整数を表し、

nは、0の整数を表し、

t4は、4の整数を表す]で表される上記〔1〕乃至〔5〕のいずれかに記載のケトン若しくはオキシム化合物の製造中間体。

【0023】

〔7〕

上記〔1〕乃至〔5〕のいずれかに記載のケトン及びオキシム化合物並びにそれらの塩から選ばれる1種又は2種以上を有効成分として含有する農薬。

【0024】

〔8〕

上記〔1〕乃至〔5〕のいずれかに記載のケトン及びオキシム化合物並びにそれらの塩から選ばれる1種又は2種以上を有効成分として含有する除草剤。

30

【発明の効果】

【0025】

本発明化合物は、各種雑草に対して優れた除草活性並びに対象となる作物に対する高い安全性を有し、且つ、ホ乳動物、魚類及び益虫等の非標的生物に対してほとんど悪影響の無い、低残留性で環境に対する負荷も軽い。

【0026】

従って、本発明は水田、畑地及び果樹園等の農園芸分野において有用な除草剤を提供することができる。

40

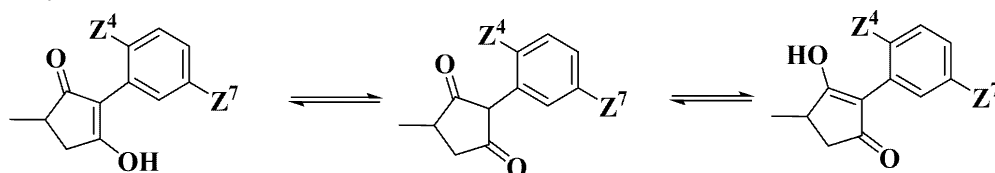
【発明を実施するための形態】

【0027】

式(1)で表される本発明化合物に関しては、置換基の種類や条件に応じて、場合によっては次式で表されるケト-エノール構造互変異性体としての存在が考えられるが、本発明はそれら全ての構造をも包含するものである。

【0028】

【化6】



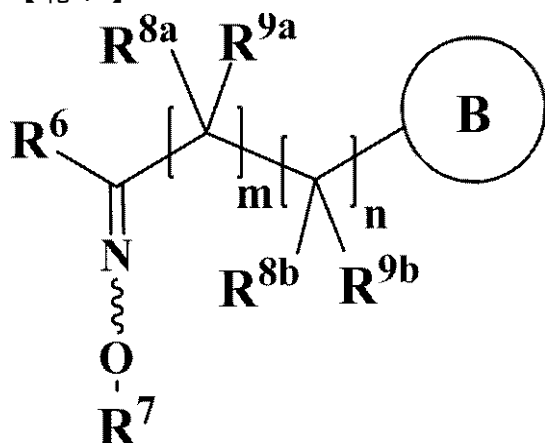
【0029】

本発明に包含される化合物には、置換基の種類によってはEの立体配置を有するE-体及びZの立体配置を有するZ-体の幾何異性体が存在する場合がある。本発明はこれらE-体、Z-体又はE-体及びZ-体を任意の割合で含む混合物を包含するものであり、本

10

【0030】

【化7】



20

【0031】

また、本発明に包含される化合物は、1個又は2個以上の不斉炭素原子の存在に起因する光学活性体が存在するが、本発明は全ての光学活性体又はラセミ体を包含する。

【0032】

本発明に包含される化合物のうちで、常法に従って酸付加塩にすることができるものは、例えば、フッ化水素酸、塩酸、臭化水素酸、沃化水素酸等のハロゲン化水素酸の塩、硝酸、硫酸、燐酸、塩素酸、過塩素酸等の無機酸の塩、メタンスルホン酸、エタンスルホン酸、トリフルオロメタンスルホン酸、ベンゼンスルホン酸、p-トルエンスルホン酸等のスルホン酸の塩、ギ酸、酢酸、プロピオン酸、トリフルオロ酢酸、フマル酸、酒石酸、蔞酸、マレイン酸、リンゴ酸、コハク酸、安息香酸、マンデル酸、アスコルビン酸、乳酸、グルコン酸、クエン酸等のカルボン酸の塩又はグルタミン酸、アスパラギン酸等のアミノ酸の塩とすることができる。

30

【0033】

或いは、本発明に包含される化合物のうちで、常法に従って金属塩にすることができるものは、例えば、リチウム、ナトリウム、カリウムといったアルカリ金属の塩、カルシウム、バリウム、マグネシウムといったアルカリ土類金属の塩又はアルミニウムの塩とすることができる。

40

【0034】

次に、本明細書において示した各置換基の具体例を以下に示す。ここで、n-はノルマル、i-はイソ、s-はセカンダリー及びtert-又はt-はターシャリーを各々意味し、Phはフェニルを意味する。

【0035】

本明細書におけるハロゲン原子としては、フッ素原子、塩素原子、臭素原子及び沃素原子が挙げられる。尚、本明細書中「ハロ」の表記もこれらのハロゲン原子を表す。

【0036】

50

本明細書における $C_a \sim C_b$ アルキルの表記は、炭素原子数が $a \sim b$ 個よりなる直鎖状又は分岐鎖状の炭化水素基を表し、例えばメチル基、エチル基、 n -プロピル基、 i -プロピル基、 n -ブチル基、 i -ブチル基、 s -ブチル基、 $tert$ -ブチル基、 n -ペンチル基、 $1, 1$ -ジメチルプロピル基、 n -ヘキシル基等が具体例として挙げられ、各々の指定の炭素原子数の範囲で選択される。

【0037】

本明細書における $C_a \sim C_b$ アルケニルの表記は、炭素原子数が $a \sim b$ 個よりなる直鎖状又は分岐鎖状で、且つ分子内に1個又は2個以上の二重結合を有する不飽和炭化水素基を表し、例えばビニル基、 1 -プロペニル基、 2 -プロペニル基、 1 -メチルエテニル基、 2 -ブテニル基、 2 -メチル- 2 -プロペニル基、 3 -メチル- 2 -ブテニル基、 $1, 1$ -ジメチル- 2 -プロペニル基等が具体例として挙げられ、各々の指定の炭素原子数の範囲で選択される。

10

【0038】

本明細書における $C_a \sim C_b$ アルキニルの表記は、炭素原子数が $a \sim b$ 個よりなる直鎖状又は分岐鎖状で、且つ分子内に1個又は2個以上の三重結合を有する不飽和炭化水素基を表し、例えばエチニル基、 1 -プロピニル基、 2 -プロピニル基、 1 -ブチニル基、 2 -ブチニル基、 3 -ブチニル基、 $1, 1$ -ジメチル- 2 -プロピニル基等が具体例として挙げられ、各々の指定の炭素原子数の範囲で選択される。

【0039】

本明細書におけるハロ ($C_a \sim C_b$) アルキルの表記は、炭素原子に結合した水素原子が、ハロゲン原子によって任意に置換された、炭素原子数が $a \sim b$ 個よりなる直鎖状又は分岐鎖状の炭化水素基を表し、このとき、2個以上のハロゲン原子によって置換されている場合、それらのハロゲン原子は互いに同一でも、又は互いに相異なってもよい。例えばフルオロメチル基、クロロメチル基、ブロモメチル基、ヨードメチル基、ジフルオロメチル基、ジクロロメチル基、トリフルオロメチル基、クロロジフルオロメチル基、トリクロロメチル基、ブロモジフルオロメチル基、 2 -フルオロエチル基、 2 -クロロエチル基、 2 -ブロモエチル基、 $2, 2$ -ジフルオロエチル基、 $2, 2, 2$ -トリフルオロエチル基、 2 -クロロ- $2, 2$ -ジフルオロエチル基、 $2, 2, 2$ -トリクロロエチル基、 $1, 1, 2, 2$ -テトラフルオロエチル基、 2 -クロロ- $1, 1, 2$ -トリフルオロエチル基、ペンタフルオロエチル基、 $3, 3, 3$ -トリフルオロプロピル基、 $2, 2, 3, 3, 3$ -ペンタフルオロプロピル基、 $1, 1, 2, 3, 3, 3$ -ヘキサフルオロプロピル基、ヘプタフルオロプロピル基、 $2, 2, 2$ -トリフルオロ- 1 - (トリフルオロメチル) エチル基、 $1, 2, 2, 2$ -テトラフルオロ- 1 - (トリフルオロメチル) エチル基、 $2, 2, 3, 3, 4, 4, 4$ -ヘプタフルオロブチル基、ノナフルオロブチル基等が具体例として挙げられ、各々の指定の炭素原子数の範囲で選択される。

20

30

【0040】

本明細書における $C_a \sim C_b$ シクロアルキルの表記は、炭素原子数が $a \sim b$ 個よりなる環状の炭化水素基を表し、3員環から6員環までの単環又は複合環構造を形成することが出来る。また、各々の環は指定の炭素原子数の範囲でアルキル基によって任意に置換されていてもよい。例えばシクロプロピル基、 1 -メチルシクロプロピル基、 2 -メチルシクロプロピル基、 $2, 2$ -ジメチルシクロプロピル基、シクロブチル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基等が具体例として挙げられ、各々の指定の炭素原子数の範囲で選択される。

40

【0041】

本明細書における $C_a \sim C_b$ アルコキシの表記は、炭素原子数が $a \sim b$ 個よりなる前記の意味であるアルキル- O -基を表し、例えばメトキシ基、エトキシ基、 n -プロピルオキシ基、 i -プロピルオキシ基、 n -ブチルオキシ基、 i -ブチルオキシ基、 s -ブチルオキシ基、 $tert$ -ブチルオキシ基等が具体例として挙げられ、各々の指定の炭素原子数の範囲で選択される。

【0042】

50

本明細書における $C_a \sim C_b$ アルキルチオの表記は、炭素原子数が $a \sim b$ 個よりなる前記の意味であるアルキル - S - 基を表し、例えばメチルチオ基、エチルチオ基、 n - プロピルチオ基、 i - プロピルチオ基、 n - ブチルチオ基、 i - ブチルチオ基、 s - ブチルチオ基、 $tert$ - ブチルチオ基等が具体例として挙げられ、各々の指定の炭素原子数の範囲で選択される。

【0043】

本明細書における $C_a \sim C_b$ アルキルスルフィニルの表記は、炭素原子数が $a \sim b$ 個よりなる前記の意味であるアルキル - S(O) - 基を表し、例えばメチルスルフィニル基、エチルスルフィニル基、 n - プロピルスルフィニル基、 i - プロピルスルフィニル基、 n - ブチルスルフィニル基、 i - ブチルスルフィニル基、 s - ブチルスルフィニル基、 $tert$ - ブチルスルフィニル基等が具体例として挙げられ、各々の指定の炭素原子数の範囲で選択される。

10

【0044】

本明細書における $C_a \sim C_b$ アルキルスルホニルの表記は、炭素原子数が $a \sim b$ 個よりなる前記の意味であるアルキル - SO₂ - 基を表し、例えばメチルスルホニル基、エチルスルホニル基、 n - プロピルスルホニル基、 i - プロピルスルホニル基、 n - ブチルスルホニル基、 i - ブチルスルホニル基、 s - ブチルスルホニル基、 $tert$ - ブチルスルホニル基等が具体例として挙げられ、各々の指定の炭素原子数の範囲で選択される。

【0045】

本明細書における $C_a \sim C_b$ アルコキシカルボニルの表記は、炭素原子数が $a \sim b$ 個よりなる前記の意味であるアルキル - O - C(O) - 基を表し、例えばメトキシカルボニル基、エトキシカルボニル基、 n - プロピルオキシカルボニル基、 i - プロピルオキシカルボニル基、 n - ブトキシカルボニル基、 i - ブトキシカルボニル基、 $tert$ - ブトキシカルボニル基等が具体例として挙げられ、各々の指定の炭素原子数の範囲で選択される。

20

【0046】

本明細書における R^5 によって任意に置換された ($C_a \sim C_b$) アルキル又は R^{5f} によって任意に置換された ($C_a \sim C_b$) アルキル等の表記は、任意の R^5 又は R^{5f} によって、炭素原子に結合した水素原子が任意に置換された炭素原子数が $a \sim b$ 個よりなる前記の意味であるアルキル基を表し、各々の指定の炭素原子数の範囲で選択される。このとき、それぞれの ($C_a \sim C_b$) アルキル基上の置換基 R^5 又は R^{5f} が2個以上存在するとき、それぞれの R^5 又は R^{5f} は互いに同一でも異なってもよい。

30

【0047】

本発明に包含される活性化合物としては、具体的に例えば第1表及び第2表に示す化合物が挙げられる。但し、第1表及び第2表の化合物は例示のためのものであって、本発明はこれらのみ限定されるものではない。

【0048】

尚、表中、Meと記載される置換基はメチル基を表し、以下同様に、Etとの記載はエチル基を、 n - Pr及びPr - n はノルマルプロピル基を、 i - Pr及びPr - i はイソプロピル基を、 c - Pr及びPr - c はシクロプロピル基を、 n - Bu及びBu - n はノルマルブチル基を、 s - Bu及びBu - s はセカンダリーブチル基を、 i - Bu及びBu - i はイソブチル基を、 t - Bu及びBu - t はターシャリーブチル基を、 c - Bu及びBu - c はシクロブチル基を、 n - Pen及びPen - n はノルマルペンチル基を、 c - Pen及びPen - c はシクロペンチル基を、 n - Hex及びHex - n はノルマルヘキシル基を、 c - Hex及びHex - c はシクロヘキシル基を、 n - Oct及びOct - n はノルマルオクチル基を、Acはアセチル基を、Phはフェニル基を、Bnはベンジル基を、Bzはベンゾイル基を、naphはナフチル基を、「=」は2重結合を、「」は3重結合をそれぞれ表す。

40

【0049】

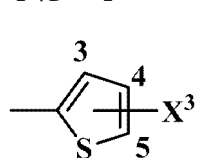
また、表中、D3 - 3a、D3 - 18b、D3 - 21a、D3 - 21b、D3 - 33a、D3 - 55a、D3 - 55b、D3 - 57a、D3 - 57b、D3 - 58a、D3 - 6

50

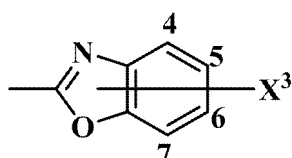
0 a、D3 - 60 b 及び D3 - 65 a との記載は、下記の構造を表す。

【0050】

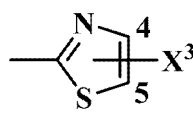
【化8】



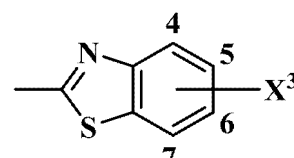
D3-3a



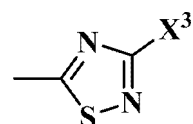
D3-18b



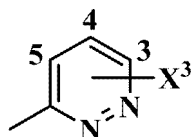
D3-21a



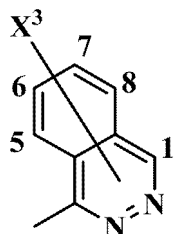
D3-21b



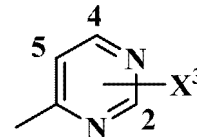
D3-33a



D3-55a

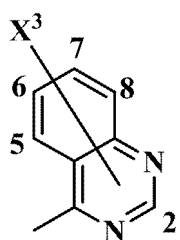


D3-55b

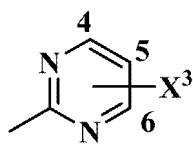


D3-57a

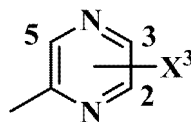
10



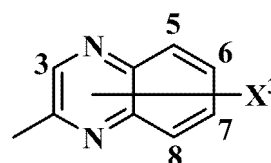
D3-57b



D3-58a

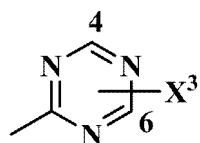


D3-60a



D3-60b

20



D3-65a

30

【0051】

上記の構造式において記載した番号は、置換基 X³ の置換位置を表すものであり、例えば、表中、「D3 - 18 b [6 - C1]」との記載は「6 - クロロベンゾオキサゾール - 2 - イル基」を表す。

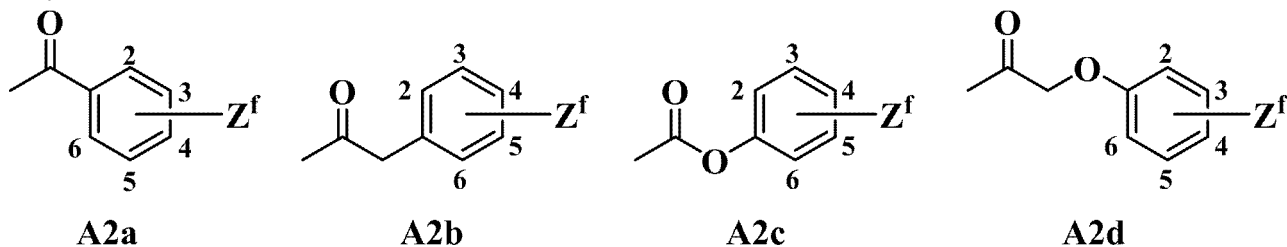
【0052】

また、表中、A2 a、A2 b、A2 c、A2 d、A2 e、A3 a、A3 b、A3 c、A3 d 及び A3 e との記載は、下記の構造を表す。

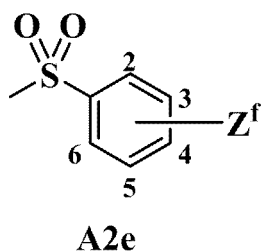
40

【0053】

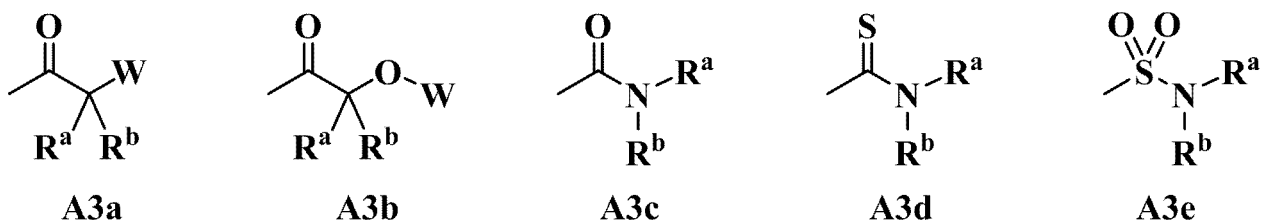
【化9】



10



20



【0054】

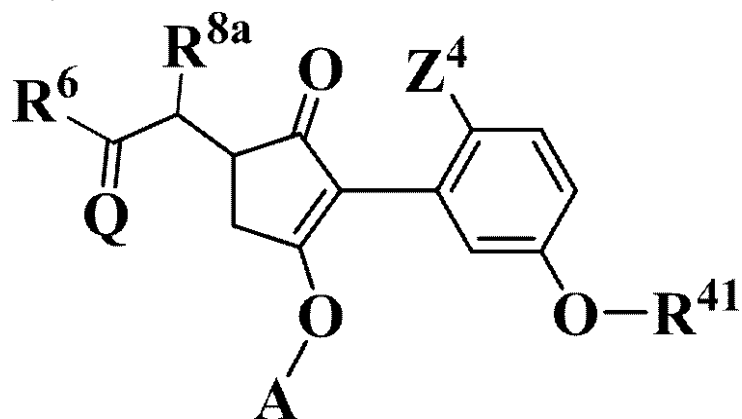
上記の構造式において記載した番号は、置換基 Z^f の置換位置を表すものであり、例えば、表中、「A2a[4-C1]」との記載は「4-クロロベンゾイル基」を表す。尚、括弧書きのないものは無置換を表す。

【0055】

〔第1表〕

【0056】

【化10】



40

【0057】

Q	R ⁶	R ^{8a}	Z ⁴	R ⁴¹ [X ³]	A
O	H	H	MeO	D3-3a[5-NO ₂]	H
O	Me	H	MeO	D3-3a[5-NO ₂]	H
O	c-Pr	H	MeO	D3-3a[5-NO ₂]	H

50

O	Me	C(O)OMe	MeO	D3-3a[5-NO ₂]	H	
O	Me	C(O)OEt	MeO	D3-3a[5-NO ₂]	H	
O	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-3a[5-NO ₂]	H	
O	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-3a[5-NO ₂]	H	
NOMe	H	H	MeO	D3-3a[5-NO ₂]	H	
NOMe	Me	H	MeO	D3-3a[5-NO ₂]	H	
NOMe	c-Pr	H	MeO	D3-3a[5-NO ₂]	H	
NOMe	Me	C(O)OMe	MeO	D3-3a[5-NO ₂]	H	
NOMe	Me	C(O)OEt	MeO	D3-3a[5-NO ₂]	H	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-3a[5-NO ₂]	H	10
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-3a[5-NO ₂]	H	
O	H	H	MeO	D3-18b[6-Cl]	H	
O	Me	H	MeO	D3-18b[6-Cl]	H	
O	c-Pr	H	MeO	D3-18b[6-Cl]	H	
O	Me	C(O)OMe	MeO	D3-18b[6-Cl]	H	
O	Me	C(O)OEt	MeO	D3-18b[6-Cl]	H	
O	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-18b[6-Cl]	H	
O	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-18b[6-Cl]	H	
NOMe	H	H	MeO	D3-18b[6-Cl]	H	
NOMe	Me	H	MeO	D3-18b[6-Cl]	H	20
NOMe	c-Pr	H	MeO	D3-18b[6-Cl]	H	
NOMe	Me	C(O)OMe	MeO	D3-18b[6-Cl]	H	
NOMe	Me	C(O)OEt	MeO	D3-18b[6-Cl]	H	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-18b[6-Cl]	H	
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-18b[6-Cl]	H	
O	H	H	MeO	D3-21a[4-Cl]	H	
O	Me	H	MeO	D3-21a[4-Cl]	H	
O	c-Pr	H	MeO	D3-21a[4-Cl]	H	
O	Me	C(O)OMe	MeO	D3-21a[4-Cl]	H	
O	Me	C(O)OEt	MeO	D3-21a[4-Cl]	H	30
O	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-21a[4-Cl]	H	
O	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-21a[4-Cl]	H	
NOMe	H	H	MeO	D3-21a[4-Cl]	H	
NOMe	Me	H	MeO	D3-21a[4-Cl]	H	
NOMe	c-Pr	H	MeO	D3-21a[4-Cl]	H	
NOMe	Me	C(O)OMe	MeO	D3-21a[4-Cl]	H	
NOMe	Me	C(O)OEt	MeO	D3-21a[4-Cl]	H	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-21a[4-Cl]	H	
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-21a[4-Cl]	H	
O	H	H	MeO	D3-21a[5-Br]	H	40
O	Me	H	MeO	D3-21a[5-Br]	H	
O	c-Pr	H	MeO	D3-21a[5-Br]	H	
O	Me	C(O)OMe	MeO	D3-21a[5-Br]	H	
O	Me	C(O)OEt	MeO	D3-21a[5-Br]	H	
O	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-21a[5-Br]	H	
O	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-21a[5-Br]	H	
NOMe	H	H	MeO	D3-21a[5-Br]	H	
NOMe	Me	H	MeO	D3-21a[5-Br]	H	
NOMe	c-Pr	H	MeO	D3-21a[5-Br]	H	
NOMe	Me	C(O)OMe	MeO	D3-21a[5-Br]	H	50

NOMe	Me	C(O)OEt	MeO	D3-21a[5-Br]	H	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-21a[5-Br]	H	
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-21a[5-Br]	H	
O	H	H	MeO	D3-21b[6-Cl]	H	
O	Me	H	MeO	D3-21b[6-Cl]	H	
O	c-Pr	H	MeO	D3-21b[6-Cl]	H	
O	Me	C(O)OMe	MeO	D3-21b[6-Cl]	H	
O	Me	C(O)OEt	MeO	D3-21b[6-Cl]	H	
O	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-21b[6-Cl]	H	
O	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-21b[6-Cl]	H	10
NOMe	H	H	MeO	D3-21b[6-Cl]	H	
NOMe	Me	H	MeO	D3-21b[6-Cl]	H	
NOMe	c-Pr	H	MeO	D3-21b[6-Cl]	H	
NOMe	Me	C(O)OMe	MeO	D3-21b[6-Cl]	H	
NOMe	Me	C(O)OEt	MeO	D3-21b[6-Cl]	H	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-21b[6-Cl]	H	
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-21b[6-Cl]	H	
O	H	H	MeO	D3-33a[Br]	H	
O	Me	H	MeO	D3-33a[Br]	H	
O	c-Pr	H	MeO	D3-33a[Br]	H	20
O	Me	C(O)OMe	MeO	D3-33a[Br]	H	
O	Me	C(O)OEt	MeO	D3-33a[Br]	H	
O	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-33a[Br]	H	
O	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-33a[Br]	H	
NOMe	H	H	MeO	D3-33a[Br]	H	
NOMe	Me	H	MeO	D3-33a[Br]	H	
NOMe	c-Pr	H	MeO	D3-33a[Br]	H	
NOMe	Me	C(O)OMe	MeO	D3-33a[Br]	H	
NOMe	Me	C(O)OEt	MeO	D3-33a[Br]	H	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-33a[Br]	H	30
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-33a[Br]	H	
O	H	H	MeO	D3-55a[3-Cl]	H	
O	Me	H	MeO	D3-55a[3-Cl]	H	
O	c-Pr	H	MeO	D3-55a[3-Cl]	H	
O	Me	C(O)OMe	MeO	D3-55a[3-Cl]	H	
O	Me	C(O)OEt	MeO	D3-55a[3-Cl]	H	
O	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-55a[3-Cl]	H	
O	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-55a[3-Cl]	H	
NOMe	H	H	MeO	D3-55a[3-Cl]	H	
NOMe	Me	H	MeO	D3-55a[3-Cl]	H	40
NOMe	c-Pr	H	MeO	D3-55a[3-Cl]	H	
NOMe	Me	C(O)OMe	MeO	D3-55a[3-Cl]	H	
NOMe	Me	C(O)OEt	MeO	D3-55a[3-Cl]	H	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-55a[3-Cl]	H	
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-55a[3-Cl]	H	
O	H	H	MeO	D3-55b[1-Cl]	H	
O	Me	H	MeO	D3-55b[1-Cl]	H	
O	c-Pr	H	MeO	D3-55b[1-Cl]	H	
O	Me	C(O)OMe	MeO	D3-55b[1-Cl]	H	
O	Me	C(O)OEt	MeO	D3-55b[1-Cl]	H	50

O	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-55b[1-Cl]	H	
O	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-55b[1-Cl]	H	
NOMe	H	H	MeO	D3-55b[1-Cl]	H	
NOMe	Me	H	MeO	D3-55b[1-Cl]	H	
NOMe	c-Pr	H	MeO	D3-55b[1-Cl]	H	
NOMe	Me	C(O)OMe	MeO	D3-55b[1-Cl]	H	
NOMe	Me	C(O)OEt	MeO	D3-55b[1-Cl]	H	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-55b[1-Cl]	H	
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-55b[1-Cl]	H	
O	H	H	MeO	D3-57a[4-Cl]	H	10
O	Me	H	MeO	D3-57a[4-Cl]	H	
O	c-Pr	H	MeO	D3-57a[4-Cl]	H	
O	Me	C(O)OMe	MeO	D3-57a[4-Cl]	H	
O	Me	C(O)OEt	MeO	D3-57a[4-Cl]	H	
O	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-57a[4-Cl]	H	
O	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-57a[4-Cl]	H	
NOMe	H	H	MeO	D3-57a[4-Cl]	H	
NOMe	Me	H	MeO	D3-57a[4-Cl]	H	
NOMe	c-Pr	H	MeO	D3-57a[4-Cl]	H	
NOMe	Me	C(O)OMe	MeO	D3-57a[4-Cl]	H	20
NOMe	Me	C(O)OEt	MeO	D3-57a[4-Cl]	H	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-57a[4-Cl]	H	
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-57a[4-Cl]	H	
O	H	H	MeO	D3-57b[-]	H	
O	Me	H	MeO	D3-57b[-]	H	
O	c-Pr	H	MeO	D3-57b[-]	H	
O	Me	C(O)OMe	MeO	D3-57b[-]	H	
O	Me	C(O)OEt	MeO	D3-57b[-]	H	
O	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-57b[-]	H	
O	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-57b[-]	H	30
NOMe	H	H	MeO	D3-57b[-]	H	
NOMe	Me	H	MeO	D3-57b[-]	H	
NOMe	c-Pr	H	MeO	D3-57b[-]	H	
NOMe	Me	C(O)OMe	MeO	D3-57b[-]	H	
NOMe	Me	C(O)OEt	MeO	D3-57b[-]	H	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-57b[-]	H	
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-57b[-]	H	
O	H	H	MeO	D3-58a[5-Cl]	H	
O	Me	H	MeO	D3-58a[5-Cl]	H	
O	c-Pr	H	MeO	D3-58a[5-Cl]	H	40
O	Me	C(O)OMe	MeO	D3-58a[5-Cl]	H	
O	Me	C(O)OEt	MeO	D3-58a[5-Cl]	H	
O	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-58a[5-Cl]	H	
O	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-58a[5-Cl]	H	
NOMe	H	H	MeO	D3-58a[5-Cl]	H	
NOMe	Me	H	MeO	D3-58a[5-Cl]	H	
NOMe	c-Pr	H	MeO	D3-58a[5-Cl]	H	
NOMe	Me	C(O)OMe	MeO	D3-58a[5-Cl]	H	
NOMe	Me	C(O)OEt	MeO	D3-58a[5-Cl]	H	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-58a[5-Cl]	H	50

NOMe	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-58a[5-Cl]	H	
O	H	H	MeO	D3-58a[5-Br]	H	
O	Me	H	MeO	D3-58a[5-Br]	H	
O	c-Pr	H	MeO	D3-58a[5-Br]	H	
O	Me	C(O)OMe	MeO	D3-58a[5-Br]	H	
O	Me	C(O)OEt	MeO	D3-58a[5-Br]	H	
O	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-58a[5-Br]	H	
O	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-58a[5-Br]	H	
NOMe	H	H	MeO	D3-58a[5-Br]	H	
NOMe	Me	H	MeO	D3-58a[5-Br]	H	10
NOMe	c-Pr	H	MeO	D3-58a[5-Br]	H	
NOMe	Me	C(O)OMe	MeO	D3-58a[5-Br]	H	
NOMe	Me	C(O)OEt	MeO	D3-58a[5-Br]	H	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-58a[5-Br]	H	
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-58a[5-Br]	H	
O	H	H	MeO	D3-58a[4,6-di-Cl]	H	
O	Me	H	MeO	D3-58a[4,6-di-Cl]	H	
O	c-Pr	H	MeO	D3-58a[4,6-di-Cl]	H	
O	Me	C(O)OMe	MeO	D3-58a[4,6-di-Cl]	H	
O	Me	C(O)OEt	MeO	D3-58a[4,6-di-Cl]	H	20
O	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-58a[4,6-di-Cl]	H	
O	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-58a[4,6-di-Cl]	H	
NOMe	H	H	MeO	D3-58a[4,6-di-Cl]	H	
NOMe	Me	H	MeO	D3-58a[4,6-di-Cl]	H	
NOMe	c-Pr	H	MeO	D3-58a[4,6-di-Cl]	H	
NOMe	Me	C(O)OMe	MeO	D3-58a[4,6-di-Cl]	H	
NOMe	Me	C(O)OEt	MeO	D3-58a[4,6-di-Cl]	H	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-58a[4,6-di-Cl]	H	
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-58a[4,6-di-Cl]	H	
O	H	H	MeO	D3-58a[4,6-di-OMe]	H	30
O	Me	H	MeO	D3-58a[4,6-di-OMe]	H	
O	c-Pr	H	MeO	D3-58a[4,6-di-OMe]	H	
O	Me	C(O)OMe	MeO	D3-58a[4,6-di-OMe]	H	
O	Me	C(O)OEt	MeO	D3-58a[4,6-di-OMe]	H	
O	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-58a[4,6-di-OMe]	H	
O	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-58a[4,6-di-OMe]	H	
NOMe	H	H	MeO	D3-58a[4,6-di-OMe]	H	
NOMe	Me	H	MeO	D3-58a[4,6-di-OMe]	H	
NOMe	c-Pr	H	MeO	D3-58a[4,6-di-OMe]	H	
NOMe	Me	C(O)OMe	MeO	D3-58a[4,6-di-OMe]	H	40
NOMe	Me	C(O)OEt	MeO	D3-58a[4,6-di-OMe]	H	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-58a[4,6-di-OMe]	H	
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-58a[4,6-di-OMe]	H	
O	H	H	MeO	D3-60a[3-Cl]	H	
O	Me	H	MeO	D3-60a[3-Cl]	H	
O	c-Pr	H	MeO	D3-60a[3-Cl]	H	
O	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60a[3-Cl]	H	
O	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60a[3-Cl]	H	
O	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60a[3-Cl]	H	
O	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60a[3-Cl]	H	50

NOMe	H	H	MeO	D3-60a[3-Cl]	H	
NOMe	Me	H	MeO	D3-60a[3-Cl]	H	
NOMe	c-Pr	H	MeO	D3-60a[3-Cl]	H	
NOMe	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60a[3-Cl]	H	
NOMe	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60a[3-Cl]	H	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60a[3-Cl]	H	
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60a[3-Cl]	H	
O	H	H	MeO	D3-60b[6-CF ₃]	H	
O	Me	H	MeO	D3-60b[6-CF ₃]	H	
O	c-Pr	H	MeO	D3-60b[6-CF ₃]	H	10
O	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-CF ₃]	H	
O	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-CF ₃]	H	
O	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-CF ₃]	H	
O	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-CF ₃]	H	
NOMe	H	H	MeO	D3-60b[6-CF ₃]	H	
NOMe	Me	H	MeO	D3-60b[6-CF ₃]	H	
NOMe	c-Pr	H	MeO	D3-60b[6-CF ₃]	H	
NOMe	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-CF ₃]	H	
NOMe	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-CF ₃]	H	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-CF ₃]	H	20
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-CF ₃]	H	
O	H	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	H	
O	Me	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	H	
O	c-Pr	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	H	
O	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-Cl]	H	
O	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-Cl]	H	
O	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-Cl]	H	
O	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-Cl]	H	
NOMe	H	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	H	
NOMe	Me	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	H	30
NOMe	c-Pr	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	H	
NOMe	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-Cl]	H	
NOMe	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-Cl]	H	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-Cl]	H	
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-Cl]	H	
O	H	H	MeO	D3-65a[4,6-di-Cl]	H	
O	Me	H	MeO	D3-65a[4,6-di-Cl]	H	
O	c-Pr	H	MeO	D3-65a[4,6-di-Cl]	H	
O	Me	C(O)OMe	MeO	D3-65a[4,6-di-Cl]	H	
O	Me	C(O)OEt	MeO	D3-65a[4,6-di-Cl]	H	40
O	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-65a[4,6-di-Cl]	H	
O	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-65a[4,6-di-Cl]	H	
NOMe	H	H	MeO	D3-65a[4,6-di-Cl]	H	
NOMe	Me	H	MeO	D3-65a[4,6-di-Cl]	H	
NOMe	c-Pr	H	MeO	D3-65a[4,6-di-Cl]	H	
NOMe	Me	C(O)OMe	MeO	D3-65a[4,6-di-Cl]	H	
NOMe	Me	C(O)OEt	MeO	D3-65a[4,6-di-Cl]	H	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-65a[4,6-di-Cl]	H	
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-65a[4,6-di-Cl]	H	
O	H	H	EtO	D3-60b[6-Cl]	H	50

O	Me	H	EtO	D3-60b[6-Cl]	H	
O	c-Pr	H	EtO	D3-60b[6-Cl]	H	
O	Me	C(O)OMe	EtO	D3-60b[6-Cl]	H	
O	Me	C(O)OEt	EtO	D3-60b[6-Cl]	H	
O	c-Pr	C(O)OMe	EtO	D3-60b[6-Cl]	H	
O	c-Pr	C(O)OEt	EtO	D3-60b[6-Cl]	H	
NOMe	H	H	EtO	D3-60b[6-Cl]	H	
NOMe	Me	H	EtO	D3-60b[6-Cl]	H	
NOMe	c-Pr	H	EtO	D3-60b[6-Cl]	H	
NOMe	Me	C(O)OMe	EtO	D3-60b[6-Cl]	H	10
NOMe	Me	C(O)OEt	EtO	D3-60b[6-Cl]	H	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	EtO	D3-60b[6-Cl]	H	
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	EtO	D3-60b[6-Cl]	H	
O	H	H	F	D3-60b[6-Cl]	H	
O	Me	H	F	D3-60b[6-Cl]	H	
O	c-Pr	H	F	D3-60b[6-Cl]	H	
O	Me	C(O)OMe	F	D3-60b[6-Cl]	H	
O	Me	C(O)OEt	F	D3-60b[6-Cl]	H	
O	c-Pr	C(O)OMe	F	D3-60b[6-Cl]	H	
O	c-Pr	C(O)OEt	F	D3-60b[6-Cl]	H	20
NOMe	H	H	F	D3-60b[6-Cl]	H	
NOMe	Me	H	F	D3-60b[6-Cl]	H	
NOMe	c-Pr	H	F	D3-60b[6-Cl]	H	
NOMe	Me	C(O)OMe	F	D3-60b[6-Cl]	H	
NOMe	Me	C(O)OEt	F	D3-60b[6-Cl]	H	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	F	D3-60b[6-Cl]	H	
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	F	D3-60b[6-Cl]	H	
O	H	H	Me	D3-60b[6-Cl]	H	
O	Me	H	Me	D3-60b[6-Cl]	H	
O	c-Pr	H	Me	D3-60b[6-Cl]	H	30
O	Me	C(O)OMe	Me	D3-60b[6-Cl]	H	
O	Me	C(O)OEt	Me	D3-60b[6-Cl]	H	
O	c-Pr	C(O)OMe	Me	D3-60b[6-Cl]	H	
O	c-Pr	C(O)OEt	Me	D3-60b[6-Cl]	H	
NOMe	H	H	Me	D3-60b[6-Cl]	H	
NOMe	Me	H	Me	D3-60b[6-Cl]	H	
NOMe	c-Pr	H	Me	D3-60b[6-Cl]	H	
NOMe	Me	C(O)OMe	Me	D3-60b[6-Cl]	H	
NOMe	Me	C(O)OEt	Me	D3-60b[6-Cl]	H	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	Me	D3-60b[6-Cl]	H	40
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	Me	D3-60b[6-Cl]	H	
O	H	H	Et	D3-60b[6-Cl]	H	
O	Me	H	Et	D3-60b[6-Cl]	H	
O	c-Pr	H	Et	D3-60b[6-Cl]	H	
O	Me	C(O)OMe	Et	D3-60b[6-Cl]	H	
O	Me	C(O)OEt	Et	D3-60b[6-Cl]	H	
O	c-Pr	C(O)OMe	Et	D3-60b[6-Cl]	H	
O	c-Pr	C(O)OEt	Et	D3-60b[6-Cl]	H	
NOMe	H	H	Et	D3-60b[6-Cl]	H	
NOMe	Me	H	Et	D3-60b[6-Cl]	H	50

NOMe	c-Pr	H	Et	D3-60b[6-Cl]	H	
NOMe	Me	C(O)OMe	Et	D3-60b[6-Cl]	H	
NOMe	Me	C(O)OEt	Et	D3-60b[6-Cl]	H	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	Et	D3-60b[6-Cl]	H	
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	Et	D3-60b[6-Cl]	H	
O	H	H	c-Pr	D3-60b[6-Cl]	H	
O	Me	H	c-Pr	D3-60b[6-Cl]	H	
O	c-Pr	H	c-Pr	D3-60b[6-Cl]	H	
O	Me	C(O)OMe	c-Pr	D3-60b[6-Cl]	H	
O	Me	C(O)OEt	c-Pr	D3-60b[6-Cl]	H	10
O	c-Pr	C(O)OMe	c-Pr	D3-60b[6-Cl]	H	
O	c-Pr	C(O)OEt	c-Pr	D3-60b[6-Cl]	H	
NOMe	H	H	c-Pr	D3-60b[6-Cl]	H	
NOMe	Me	H	c-Pr	D3-60b[6-Cl]	H	
NOMe	c-Pr	H	c-Pr	D3-60b[6-Cl]	H	
NOMe	Me	C(O)OMe	c-Pr	D3-60b[6-Cl]	H	
NOMe	Me	C(O)OEt	c-Pr	D3-60b[6-Cl]	H	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	c-Pr	D3-60b[6-Cl]	H	
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	c-Pr	D3-60b[6-Cl]	H	
O	H	H	MeO	D3-3a[5-NO ₂]	Me	20
O	Me	H	MeO	D3-3a[5-NO ₂]	Me	
O	c-Pr	H	MeO	D3-3a[5-NO ₂]	Me	
O	Me	C(O)OMe	MeO	D3-3a[5-NO ₂]	Me	
O	Me	C(O)OEt	MeO	D3-3a[5-NO ₂]	Me	
O	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-3a[5-NO ₂]	Me	
O	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-3a[5-NO ₂]	Me	
NOMe	H	H	MeO	D3-3a[5-NO ₂]	Me	
NOMe	Me	H	MeO	D3-3a[5-NO ₂]	Me	
NOMe	c-Pr	H	MeO	D3-3a[5-NO ₂]	Me	
NOMe	Me	C(O)OMe	MeO	D3-3a[5-NO ₂]	Me	30
NOMe	Me	C(O)OEt	MeO	D3-3a[5-NO ₂]	Me	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-3a[5-NO ₂]	Me	
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-3a[5-NO ₂]	Me	
O	H	H	MeO	D3-18b[6-Cl]	Me	
O	Me	H	MeO	D3-18b[6-Cl]	Me	
O	c-Pr	H	MeO	D3-18b[6-Cl]	Me	
O	Me	C(O)OMe	MeO	D3-18b[6-Cl]	Me	
O	Me	C(O)OEt	MeO	D3-18b[6-Cl]	Me	
O	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-18b[6-Cl]	Me	
O	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-18b[6-Cl]	Me	40
NOMe	H	H	MeO	D3-18b[6-Cl]	Me	
NOMe	Me	H	MeO	D3-18b[6-Cl]	Me	
NOMe	c-Pr	H	MeO	D3-18b[6-Cl]	Me	
NOMe	Me	C(O)OMe	MeO	D3-18b[6-Cl]	Me	
NOMe	Me	C(O)OEt	MeO	D3-18b[6-Cl]	Me	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-18b[6-Cl]	Me	
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-18b[6-Cl]	Me	
O	H	H	MeO	D3-21a[4-Cl]	Me	
O	Me	H	MeO	D3-21a[4-Cl]	Me	
O	c-Pr	H	MeO	D3-21a[4-Cl]	Me	50

O	Me	C(O)OMe	MeO	D3-21a[4-Cl]	Me	
O	Me	C(O)OEt	MeO	D3-21a[4-Cl]	Me	
O	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-21a[4-Cl]	Me	
O	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-21a[4-Cl]	Me	
NOMe	H	H	MeO	D3-21a[4-Cl]	Me	
NOMe	Me	H	MeO	D3-21a[4-Cl]	Me	
NOMe	c-Pr	H	MeO	D3-21a[4-Cl]	Me	
NOMe	Me	C(O)OMe	MeO	D3-21a[4-Cl]	Me	
NOMe	Me	C(O)OEt	MeO	D3-21a[4-Cl]	Me	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-21a[4-Cl]	Me	10
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-21a[4-Cl]	Me	
O	H	H	MeO	D3-21a[5-Br]	Me	
O	Me	H	MeO	D3-21a[5-Br]	Me	
O	c-Pr	H	MeO	D3-21a[5-Br]	Me	
O	Me	C(O)OMe	MeO	D3-21a[5-Br]	Me	
O	Me	C(O)OEt	MeO	D3-21a[5-Br]	Me	
O	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-21a[5-Br]	Me	
O	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-21a[5-Br]	Me	
NOMe	H	H	MeO	D3-21a[5-Br]	Me	
NOMe	Me	H	MeO	D3-21a[5-Br]	Me	20
NOMe	c-Pr	H	MeO	D3-21a[5-Br]	Me	
NOMe	Me	C(O)OMe	MeO	D3-21a[5-Br]	Me	
NOMe	Me	C(O)OEt	MeO	D3-21a[5-Br]	Me	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-21a[5-Br]	Me	
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-21a[5-Br]	Me	
O	H	H	MeO	D3-21b[6-Cl]	Me	
O	Me	H	MeO	D3-21b[6-Cl]	Me	
O	c-Pr	H	MeO	D3-21b[6-Cl]	Me	
O	Me	C(O)OMe	MeO	D3-21b[6-Cl]	Me	
O	Me	C(O)OEt	MeO	D3-21b[6-Cl]	Me	30
O	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-21b[6-Cl]	Me	
O	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-21b[6-Cl]	Me	
NOMe	H	H	MeO	D3-21b[6-Cl]	Me	
NOMe	Me	H	MeO	D3-21b[6-Cl]	Me	
NOMe	c-Pr	H	MeO	D3-21b[6-Cl]	Me	
NOMe	Me	C(O)OMe	MeO	D3-21b[6-Cl]	Me	
NOMe	Me	C(O)OEt	MeO	D3-21b[6-Cl]	Me	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-21b[6-Cl]	Me	
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-21b[6-Cl]	Me	
O	H	H	MeO	D3-33a[Br]	Me	40
O	Me	H	MeO	D3-33a[Br]	Me	
O	c-Pr	H	MeO	D3-33a[Br]	Me	
O	Me	C(O)OMe	MeO	D3-33a[Br]	Me	
O	Me	C(O)OEt	MeO	D3-33a[Br]	Me	
O	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-33a[Br]	Me	
O	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-33a[Br]	Me	
NOMe	H	H	MeO	D3-33a[Br]	Me	
NOMe	Me	H	MeO	D3-33a[Br]	Me	
NOMe	c-Pr	H	MeO	D3-33a[Br]	Me	
NOMe	Me	C(O)OMe	MeO	D3-33a[Br]	Me	50

NOMe	Me	C(O)OEt	MeO	D3-33a[Br]	Me	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-33a[Br]	Me	
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-33a[Br]	Me	
O	H	H	MeO	D3-55a[3-Cl]	Me	
O	Me	H	MeO	D3-55a[3-Cl]	Me	
O	c-Pr	H	MeO	D3-55a[3-Cl]	Me	
O	Me	C(O)OMe	MeO	D3-55a[3-Cl]	Me	
O	Me	C(O)OEt	MeO	D3-55a[3-Cl]	Me	
O	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-55a[3-Cl]	Me	
O	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-55a[3-Cl]	Me	10
NOMe	H	H	MeO	D3-55a[3-Cl]	Me	
NOMe	Me	H	MeO	D3-55a[3-Cl]	Me	
NOMe	c-Pr	H	MeO	D3-55a[3-Cl]	Me	
NOMe	Me	C(O)OMe	MeO	D3-55a[3-Cl]	Me	
NOMe	Me	C(O)OEt	MeO	D3-55a[3-Cl]	Me	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-55a[3-Cl]	Me	
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-55a[3-Cl]	Me	
O	H	H	MeO	D3-55b[1-Cl]	Me	
O	Me	H	MeO	D3-55b[1-Cl]	Me	
O	c-Pr	H	MeO	D3-55b[1-Cl]	Me	20
O	Me	C(O)OMe	MeO	D3-55b[1-Cl]	Me	
O	Me	C(O)OEt	MeO	D3-55b[1-Cl]	Me	
O	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-55b[1-Cl]	Me	
O	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-55b[1-Cl]	Me	
NOMe	H	H	MeO	D3-55b[1-Cl]	Me	
NOMe	Me	H	MeO	D3-55b[1-Cl]	Me	
NOMe	c-Pr	H	MeO	D3-55b[1-Cl]	Me	
NOMe	Me	C(O)OMe	MeO	D3-55b[1-Cl]	Me	
NOMe	Me	C(O)OEt	MeO	D3-55b[1-Cl]	Me	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-55b[1-Cl]	Me	30
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-55b[1-Cl]	Me	
O	H	H	MeO	D3-57a[4-Cl]	Me	
O	Me	H	MeO	D3-57a[4-Cl]	Me	
O	c-Pr	H	MeO	D3-57a[4-Cl]	Me	
O	Me	C(O)OMe	MeO	D3-57a[4-Cl]	Me	
O	Me	C(O)OEt	MeO	D3-57a[4-Cl]	Me	
O	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-57a[4-Cl]	Me	
O	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-57a[4-Cl]	Me	
NOMe	H	H	MeO	D3-57a[4-Cl]	Me	
NOMe	Me	H	MeO	D3-57a[4-Cl]	Me	40
NOMe	c-Pr	H	MeO	D3-57a[4-Cl]	Me	
NOMe	Me	C(O)OMe	MeO	D3-57a[4-Cl]	Me	
NOMe	Me	C(O)OEt	MeO	D3-57a[4-Cl]	Me	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-57a[4-Cl]	Me	
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-57a[4-Cl]	Me	
O	H	H	MeO	D3-57b[-]	Me	
O	Me	H	MeO	D3-57b[-]	Me	
O	c-Pr	H	MeO	D3-57b[-]	Me	
O	Me	C(O)OMe	MeO	D3-57b[-]	Me	
O	Me	C(O)OEt	MeO	D3-57b[-]	Me	50

O	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-57b[-]	Me	
O	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-57b[-]	Me	
NOMe	H	H	MeO	D3-57b[-]	Me	
NOMe	Me	H	MeO	D3-57b[-]	Me	
NOMe	c-Pr	H	MeO	D3-57b[-]	Me	
NOMe	Me	C(O)OMe	MeO	D3-57b[-]	Me	
NOMe	Me	C(O)OEt	MeO	D3-57b[-]	Me	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-57b[-]	Me	
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-57b[-]	Me	
O	H	H	MeO	D3-58a[5-Cl]	Me	10
O	Me	H	MeO	D3-58a[5-Cl]	Me	
O	c-Pr	H	MeO	D3-58a[5-Cl]	Me	
O	Me	C(O)OMe	MeO	D3-58a[5-Cl]	Me	
O	Me	C(O)OEt	MeO	D3-58a[5-Cl]	Me	
O	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-58a[5-Cl]	Me	
O	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-58a[5-Cl]	Me	
NOMe	H	H	MeO	D3-58a[5-Cl]	Me	
NOMe	Me	H	MeO	D3-58a[5-Cl]	Me	
NOMe	c-Pr	H	MeO	D3-58a[5-Cl]	Me	
NOMe	Me	C(O)OMe	MeO	D3-58a[5-Cl]	Me	20
NOMe	Me	C(O)OEt	MeO	D3-58a[5-Cl]	Me	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-58a[5-Cl]	Me	
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-58a[5-Cl]	Me	
O	H	H	MeO	D3-58a[5-Br]	Me	
O	Me	H	MeO	D3-58a[5-Br]	Me	
O	c-Pr	H	MeO	D3-58a[5-Br]	Me	
O	Me	C(O)OMe	MeO	D3-58a[5-Br]	Me	
O	Me	C(O)OEt	MeO	D3-58a[5-Br]	Me	
O	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-58a[5-Br]	Me	
O	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-58a[5-Br]	Me	30
NOMe	H	H	MeO	D3-58a[5-Br]	Me	
NOMe	Me	H	MeO	D3-58a[5-Br]	Me	
NOMe	c-Pr	H	MeO	D3-58a[5-Br]	Me	
NOMe	Me	C(O)OMe	MeO	D3-58a[5-Br]	Me	
NOMe	Me	C(O)OEt	MeO	D3-58a[5-Br]	Me	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-58a[5-Br]	Me	
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-58a[5-Br]	Me	
O	H	H	MeO	D3-58a[4,6-di-Cl]	Me	
O	Me	H	MeO	D3-58a[4,6-di-Cl]	Me	
O	c-Pr	H	MeO	D3-58a[4,6-di-Cl]	Me	40
O	Me	C(O)OMe	MeO	D3-58a[4,6-di-Cl]	Me	
O	Me	C(O)OEt	MeO	D3-58a[4,6-di-Cl]	Me	
O	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-58a[4,6-di-Cl]	Me	
O	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-58a[4,6-di-Cl]	Me	
NOMe	H	H	MeO	D3-58a[4,6-di-Cl]	Me	
NOMe	Me	H	MeO	D3-58a[4,6-di-Cl]	Me	
NOMe	c-Pr	H	MeO	D3-58a[4,6-di-Cl]	Me	
NOMe	Me	C(O)OMe	MeO	D3-58a[4,6-di-Cl]	Me	
NOMe	Me	C(O)OEt	MeO	D3-58a[4,6-di-Cl]	Me	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-58a[4,6-di-Cl]	Me	50

NOMe	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-58a[4,6-di-Cl]	Me	
O	H	H	MeO	D3-58a[4,6-di-OMe]	Me	
O	Me	H	MeO	D3-58a[4,6-di-OMe]	Me	
O	c-Pr	H	MeO	D3-58a[4,6-di-OMe]	Me	
O	Me	C(O)OMe	MeO	D3-58a[4,6-di-OMe]	Me	
O	Me	C(O)OEt	MeO	D3-58a[4,6-di-OMe]	Me	
O	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-58a[4,6-di-OMe]	Me	
O	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-58a[4,6-di-OMe]	Me	
NOMe	H	H	MeO	D3-58a[4,6-di-OMe]	Me	
NOMe	Me	H	MeO	D3-58a[4,6-di-OMe]	Me	10
NOMe	c-Pr	H	MeO	D3-58a[4,6-di-OMe]	Me	
NOMe	Me	C(O)OMe	MeO	D3-58a[4,6-di-OMe]	Me	
NOMe	Me	C(O)OEt	MeO	D3-58a[4,6-di-OMe]	Me	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-58a[4,6-di-OMe]	Me	
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-58a[4,6-di-OMe]	Me	
O	H	H	MeO	D3-60a[3-Cl]	Me	
O	Me	H	MeO	D3-60a[3-Cl]	Me	
O	c-Pr	H	MeO	D3-60a[3-Cl]	Me	
O	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60a[3-Cl]	Me	
O	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60a[3-Cl]	Me	20
O	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60a[3-Cl]	Me	
O	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60a[3-Cl]	Me	
NOMe	H	H	MeO	D3-60a[3-Cl]	Me	
NOMe	Me	H	MeO	D3-60a[3-Cl]	Me	
NOMe	c-Pr	H	MeO	D3-60a[3-Cl]	Me	
NOMe	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60a[3-Cl]	Me	
NOMe	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60a[3-Cl]	Me	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60a[3-Cl]	Me	
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60a[3-Cl]	Me	
O	H	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	Me	30
O	Me	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	Me	
O	c-Pr	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	Me	
O	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-Cl]	Me	
O	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-Cl]	Me	
O	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-Cl]	Me	
O	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-Cl]	Me	
NOMe	H	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	Me	
NOMe	Me	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	Me	
NOMe	c-Pr	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	Me	
NOMe	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-Cl]	Me	40
NOMe	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-Cl]	Me	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-Cl]	Me	
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-Cl]	Me	
O	H	H	MeO	D3-60b[6-CF ₃]	Me	
O	Me	H	MeO	D3-60b[6-CF ₃]	Me	
O	c-Pr	H	MeO	D3-60b[6-CF ₃]	Me	
O	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-CF ₃]	Me	
O	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-CF ₃]	Me	
O	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-CF ₃]	Me	
O	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-CF ₃]	Me	50

NOMe	H	H	MeO	D3-60b[6-CF ₃]	Me	
NOMe	Me	H	MeO	D3-60b[6-CF ₃]	Me	
NOMe	c-Pr	H	MeO	D3-60b[6-CF ₃]	Me	
NOMe	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-CF ₃]	Me	
NOMe	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-CF ₃]	Me	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-CF ₃]	Me	
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-CF ₃]	Me	
O	H	H	MeO	D3-65a[4,6-di-Cl]	Me	
O	Me	H	MeO	D3-65a[4,6-di-Cl]	Me	
O	c-Pr	H	MeO	D3-65a[4,6-di-Cl]	Me	10
O	Me	C(O)OMe	MeO	D3-65a[4,6-di-Cl]	Me	
O	Me	C(O)OEt	MeO	D3-65a[4,6-di-Cl]	Me	
O	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-65a[4,6-di-Cl]	Me	
O	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-65a[4,6-di-Cl]	Me	
NOMe	H	H	MeO	D3-65a[4,6-di-Cl]	Me	
NOMe	Me	H	MeO	D3-65a[4,6-di-Cl]	Me	
NOMe	c-Pr	H	MeO	D3-65a[4,6-di-Cl]	Me	
NOMe	Me	C(O)OMe	MeO	D3-65a[4,6-di-Cl]	Me	
NOMe	Me	C(O)OEt	MeO	D3-65a[4,6-di-Cl]	Me	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-65a[4,6-di-Cl]	Me	20
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-65a[4,6-di-Cl]	Me	
O	H	H	EtO	D3-60b[6-Cl]	Me	
O	Me	H	EtO	D3-60b[6-Cl]	Me	
O	c-Pr	H	EtO	D3-60b[6-Cl]	Me	
O	Me	C(O)OMe	EtO	D3-60b[6-Cl]	Me	
O	Me	C(O)OEt	EtO	D3-60b[6-Cl]	Me	
O	c-Pr	C(O)OMe	EtO	D3-60b[6-Cl]	Me	
O	c-Pr	C(O)OEt	EtO	D3-60b[6-Cl]	Me	
NOMe	H	H	EtO	D3-60b[6-Cl]	Me	
NOMe	Me	H	EtO	D3-60b[6-Cl]	Me	30
NOMe	c-Pr	H	EtO	D3-60b[6-Cl]	Me	
NOMe	Me	C(O)OMe	EtO	D3-60b[6-Cl]	Me	
NOMe	Me	C(O)OEt	EtO	D3-60b[6-Cl]	Me	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	EtO	D3-60b[6-Cl]	Me	
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	EtO	D3-60b[6-Cl]	Me	
O	H	H	F	D3-60b[6-Cl]	Me	
O	Me	H	F	D3-60b[6-Cl]	Me	
O	c-Pr	H	F	D3-60b[6-Cl]	Me	
O	Me	C(O)OMe	F	D3-60b[6-Cl]	Me	
O	Me	C(O)OEt	F	D3-60b[6-Cl]	Me	40
O	c-Pr	C(O)OMe	F	D3-60b[6-Cl]	Me	
O	c-Pr	C(O)OEt	F	D3-60b[6-Cl]	Me	
NOMe	H	H	F	D3-60b[6-Cl]	Me	
NOMe	Me	H	F	D3-60b[6-Cl]	Me	
NOMe	c-Pr	H	F	D3-60b[6-Cl]	Me	
NOMe	Me	C(O)OMe	F	D3-60b[6-Cl]	Me	
NOMe	Me	C(O)OEt	F	D3-60b[6-Cl]	Me	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	F	D3-60b[6-Cl]	Me	
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	F	D3-60b[6-Cl]	Me	
O	H	H	Me	D3-60b[6-Cl]	Me	50

O	Me	H	Me	D3-60b[6-C1]	Me	
O	c-Pr	H	Me	D3-60b[6-C1]	Me	
O	Me	C(O)OMe	Me	D3-60b[6-C1]	Me	
O	Me	C(O)OEt	Me	D3-60b[6-C1]	Me	
O	c-Pr	C(O)OMe	Me	D3-60b[6-C1]	Me	
O	c-Pr	C(O)OEt	Me	D3-60b[6-C1]	Me	
NOMe	H	H	Me	D3-60b[6-C1]	Me	
NOMe	Me	H	Me	D3-60b[6-C1]	Me	
NOMe	c-Pr	H	Me	D3-60b[6-C1]	Me	
NOMe	Me	C(O)OMe	Me	D3-60b[6-C1]	Me	10
NOMe	Me	C(O)OEt	Me	D3-60b[6-C1]	Me	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	Me	D3-60b[6-C1]	Me	
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	Me	D3-60b[6-C1]	Me	
O	H	H	Et	D3-60b[6-C1]	Me	
O	Me	H	Et	D3-60b[6-C1]	Me	
O	c-Pr	H	Et	D3-60b[6-C1]	Me	
O	Me	C(O)OMe	Et	D3-60b[6-C1]	Me	
O	Me	C(O)OEt	Et	D3-60b[6-C1]	Me	
O	c-Pr	C(O)OMe	Et	D3-60b[6-C1]	Me	
O	c-Pr	C(O)OEt	Et	D3-60b[6-C1]	Me	20
NOMe	H	H	Et	D3-60b[6-C1]	Me	
NOMe	Me	H	Et	D3-60b[6-C1]	Me	
NOMe	c-Pr	H	Et	D3-60b[6-C1]	Me	
NOMe	Me	C(O)OMe	Et	D3-60b[6-C1]	Me	
NOMe	Me	C(O)OEt	Et	D3-60b[6-C1]	Me	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	Et	D3-60b[6-C1]	Me	
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	Et	D3-60b[6-C1]	Me	
O	H	H	c-Pr	D3-60b[6-C1]	Me	
O	Me	H	c-Pr	D3-60b[6-C1]	Me	
O	c-Pr	H	c-Pr	D3-60b[6-C1]	Me	30
O	Me	C(O)OMe	c-Pr	D3-60b[6-C1]	Me	
O	Me	C(O)OEt	c-Pr	D3-60b[6-C1]	Me	
O	c-Pr	C(O)OMe	c-Pr	D3-60b[6-C1]	Me	
O	c-Pr	C(O)OEt	c-Pr	D3-60b[6-C1]	Me	
NOMe	H	H	c-Pr	D3-60b[6-C1]	Me	
NOMe	Me	H	c-Pr	D3-60b[6-C1]	Me	
NOMe	c-Pr	H	c-Pr	D3-60b[6-C1]	Me	
NOMe	Me	C(O)OMe	c-Pr	D3-60b[6-C1]	Me	
NOMe	Me	C(O)OEt	c-Pr	D3-60b[6-C1]	Me	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	c-Pr	D3-60b[6-C1]	Me	40
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	c-Pr	D3-60b[6-C1]	Me	
O	H	H	MeO	D3-60b[6-C1]	CH ₂ CH=CH ₂	
O	Me	H	MeO	D3-60b[6-C1]	CH ₂ CH=CH ₂	
O	c-Pr	H	MeO	D3-60b[6-C1]	CH ₂ CH=CH ₂	
O	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-C1]	CH ₂ CH=CH ₂	
O	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-C1]	CH ₂ CH=CH ₂	
O	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-C1]	CH ₂ CH=CH ₂	
O	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-C1]	CH ₂ CH=CH ₂	
NOMe	H	H	MeO	D3-60b[6-C1]	CH ₂ CH=CH ₂	
NOMe	Me	H	MeO	D3-60b[6-C1]	CH ₂ CH=CH ₂	50

NOMe	c-Pr	H	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CH=CH ₂	
NOMe	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CH=CH ₂	
NOMe	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CH=CH ₂	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CH=CH ₂	
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CH=CH ₂	
O	H	H	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ C CH	
O	Me	H	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ C CH	
O	c-Pr	H	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ C CH	
O	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ C CH	
O	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ C CH	10
O	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ C CH	
O	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ C CH	
NOMe	H	H	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ C CH	
NOMe	Me	H	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ C CH	
NOMe	c-Pr	H	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ C CH	
NOMe	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ C CH	
NOMe	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ C CH	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ C CH	
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ C CH	
O	H	H	MeO	D3-60b [6-C I]	Bn	20
O	Me	H	MeO	D3-60b [6-C I]	Bn	
O	c-Pr	H	MeO	D3-60b [6-C I]	Bn	
O	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b [6-C I]	Bn	
O	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b [6-C I]	Bn	
O	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b [6-C I]	Bn	
O	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b [6-C I]	Bn	
NOMe	H	H	MeO	D3-60b [6-C I]	Bn	
NOMe	Me	H	MeO	D3-60b [6-C I]	Bn	
NOMe	c-Pr	H	MeO	D3-60b [6-C I]	Bn	
NOMe	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b [6-C I]	Bn	30
NOMe	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b [6-C I]	Bn	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b [6-C I]	Bn	
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b [6-C I]	Bn	
O	H	H	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CH ₂ SMe	
O	Me	H	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CH ₂ SMe	
O	c-Pr	H	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CH ₂ SMe	
O	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CH ₂ SMe	
O	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CH ₂ SMe	
O	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CH ₂ SMe	
O	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CH ₂ SMe	40
NOMe	H	H	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CH ₂ SMe	
NOMe	Me	H	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CH ₂ SMe	
NOMe	c-Pr	H	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CH ₂ SMe	
NOMe	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CH ₂ SMe	
NOMe	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CH ₂ SMe	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CH ₂ SMe	
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CH ₂ SMe	
O	H	H	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CH ₂ S(O)Me	
O	Me	H	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CH ₂ S(O)Me	
O	c-Pr	H	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CH ₂ S(O)Me	50

O	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CH ₂ S(O)Me	
O	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CH ₂ S(O)Me	
O	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CH ₂ S(O)Me	
O	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CH ₂ S(O)Me	
NOMe	H	H	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CH ₂ S(O)Me	
NOMe	Me	H	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CH ₂ S(O)Me	
NOMe	c-Pr	H	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CH ₂ S(O)Me	
NOMe	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CH ₂ S(O)Me	
NOMe	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CH ₂ S(O)Me	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CH ₂ S(O)Me	10
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CH ₂ S(O)Me	
O	H	H	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CH ₂ S(O) ₂ Me	
O	Me	H	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CH ₂ S(O) ₂ Me	
O	c-Pr	H	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CH ₂ S(O) ₂ Me	
O	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CH ₂ S(O) ₂ Me	
O	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CH ₂ S(O) ₂ Me	
O	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CH ₂ S(O) ₂ Me	
O	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CH ₂ S(O) ₂ Me	
NOMe	H	H	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CH ₂ S(O) ₂ Me	
NOMe	Me	H	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CH ₂ S(O) ₂ Me	20
NOMe	c-Pr	H	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CH ₂ S(O) ₂ Me	
NOMe	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CH ₂ S(O) ₂ Me	
NOMe	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CH ₂ S(O) ₂ Me	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CH ₂ S(O) ₂ Me	
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CH ₂ S(O) ₂ Me	
O	H	H	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CH ₂ OMe	
O	Me	H	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CH ₂ OMe	
O	c-Pr	H	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CH ₂ OMe	
O	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CH ₂ OMe	
O	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CH ₂ OMe	30
O	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CH ₂ OMe	
O	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CH ₂ OMe	
NOMe	H	H	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CH ₂ OMe	
NOMe	Me	H	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CH ₂ OMe	
NOMe	c-Pr	H	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CH ₂ OMe	
NOMe	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CH ₂ OMe	
NOMe	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CH ₂ OMe	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CH ₂ OMe	
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CH ₂ OMe	
O	H	H	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CO ₂ Me	40
O	Me	H	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CO ₂ Me	
O	c-Pr	H	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CO ₂ Me	
O	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CO ₂ Me	
O	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CO ₂ Me	
O	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CO ₂ Me	
O	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CO ₂ Me	
NOMe	H	H	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CO ₂ Me	
NOMe	Me	H	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CO ₂ Me	
NOMe	c-Pr	H	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CO ₂ Me	
NOMe	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b [6-C I]	CH ₂ CO ₂ Me	50

NOMe	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-Cl]	CH ₂ CO ₂ Me	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-Cl]	CH ₂ CO ₂ Me	
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-Cl]	CH ₂ CO ₂ Me	
O	H	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	CH ₂ CN	
O	Me	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	CH ₂ CN	
O	c-Pr	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	CH ₂ CN	
O	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-Cl]	CH ₂ CN	
O	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-Cl]	CH ₂ CN	
O	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-Cl]	CH ₂ CN	
O	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-Cl]	CH ₂ CN	10
NOMe	H	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	CH ₂ CN	
NOMe	Me	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	CH ₂ CN	
NOMe	c-Pr	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	CH ₂ CN	
NOMe	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-Cl]	CH ₂ CN	
NOMe	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-Cl]	CH ₂ CN	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-Cl]	CH ₂ CN	
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-Cl]	CH ₂ CN	
O	H	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	C(O)Me	
O	Me	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	C(O)Me	
O	c-Pr	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	C(O)Me	20
O	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-Cl]	C(O)Me	
O	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-Cl]	C(O)Me	
O	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-Cl]	C(O)Me	
O	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-Cl]	C(O)Me	
NOMe	H	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	C(O)Me	
NOMe	Me	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	C(O)Me	
NOMe	c-Pr	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	C(O)Me	
NOMe	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-Cl]	C(O)Me	
NOMe	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-Cl]	C(O)Me	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-Cl]	C(O)Me	30
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-Cl]	C(O)Me	
O	H	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	C(O)Bu-t	
O	Me	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	C(O)Bu-t	
O	c-Pr	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	C(O)Bu-t	
O	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-Cl]	C(O)Bu-t	
O	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-Cl]	C(O)Bu-t	
O	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-Cl]	C(O)Bu-t	
O	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-Cl]	C(O)Bu-t	
NOMe	H	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	C(O)Bu-t	
NOMe	Me	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	C(O)Bu-t	40
NOMe	c-Pr	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	C(O)Bu-t	
NOMe	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-Cl]	C(O)Bu-t	
NOMe	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-Cl]	C(O)Bu-t	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-Cl]	C(O)Bu-t	
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-Cl]	C(O)Bu-t	
O	H	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	C(O)OMe	
O	Me	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	C(O)OMe	
O	c-Pr	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	C(O)OMe	
O	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-Cl]	C(O)OMe	
O	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-Cl]	C(O)OMe	50

O	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b [6-C I]	C(O)OMe	
O	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b [6-C I]	C(O)OMe	
NOMe	H	H	MeO	D3-60b [6-C I]	C(O)OMe	
NOMe	Me	H	MeO	D3-60b [6-C I]	C(O)OMe	
NOMe	c-Pr	H	MeO	D3-60b [6-C I]	C(O)OMe	
NOMe	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b [6-C I]	C(O)OMe	
NOMe	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b [6-C I]	C(O)OMe	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b [6-C I]	C(O)OMe	
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b [6-C I]	C(O)OMe	
O	H	H	MeO	D3-60b [6-C I]	C(O)SMe	10
O	Me	H	MeO	D3-60b [6-C I]	C(O)SMe	
O	c-Pr	H	MeO	D3-60b [6-C I]	C(O)SMe	
O	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b [6-C I]	C(O)SMe	
O	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b [6-C I]	C(O)SMe	
O	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b [6-C I]	C(O)SMe	
O	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b [6-C I]	C(O)SMe	
NOMe	H	H	MeO	D3-60b [6-C I]	C(O)SMe	
NOMe	Me	H	MeO	D3-60b [6-C I]	C(O)SMe	
NOMe	c-Pr	H	MeO	D3-60b [6-C I]	C(O)SMe	
NOMe	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b [6-C I]	C(O)SMe	20
NOMe	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b [6-C I]	C(O)SMe	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b [6-C I]	C(O)SMe	
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b [6-C I]	C(O)SMe	
O	H	H	MeO	D3-60b [6-C I]	C(S)OMe	
O	Me	H	MeO	D3-60b [6-C I]	C(S)OMe	
O	c-Pr	H	MeO	D3-60b [6-C I]	C(S)OMe	
O	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b [6-C I]	C(S)OMe	
O	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b [6-C I]	C(S)OMe	
O	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b [6-C I]	C(S)OMe	
O	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b [6-C I]	C(S)OMe	30
NOMe	H	H	MeO	D3-60b [6-C I]	C(S)OMe	
NOMe	Me	H	MeO	D3-60b [6-C I]	C(S)OMe	
NOMe	c-Pr	H	MeO	D3-60b [6-C I]	C(S)OMe	
NOMe	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b [6-C I]	C(S)OMe	
NOMe	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b [6-C I]	C(S)OMe	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b [6-C I]	C(S)OMe	
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b [6-C I]	C(S)OMe	
O	H	H	MeO	D3-60b [6-C I]	C(S)OPh	
O	Me	H	MeO	D3-60b [6-C I]	C(S)OPh	
O	c-Pr	H	MeO	D3-60b [6-C I]	C(S)OPh	40
O	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b [6-C I]	C(S)OPh	
O	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b [6-C I]	C(S)OPh	
O	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b [6-C I]	C(S)OPh	
O	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b [6-C I]	C(S)OPh	
NOMe	H	H	MeO	D3-60b [6-C I]	C(S)OPh	
NOMe	Me	H	MeO	D3-60b [6-C I]	C(S)OPh	
NOMe	c-Pr	H	MeO	D3-60b [6-C I]	C(S)OPh	
NOMe	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b [6-C I]	C(S)OPh	
NOMe	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b [6-C I]	C(S)OPh	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b [6-C I]	C(S)OPh	50

NOMe	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-Cl]	C(S)OPh	
O	H	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	C(S)SMe	
O	Me	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	C(S)SMe	
O	c-Pr	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	C(S)SMe	
O	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-Cl]	C(S)SMe	
O	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-Cl]	C(S)SMe	
O	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-Cl]	C(S)SMe	
O	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-Cl]	C(S)SMe	
NOMe	H	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	C(S)SMe	
NOMe	Me	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	C(S)SMe	10
NOMe	c-Pr	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	C(S)SMe	
NOMe	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-Cl]	C(S)SMe	
NOMe	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-Cl]	C(S)SMe	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-Cl]	C(S)SMe	
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-Cl]	C(S)SMe	
O	H	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	SO ₂ Me	
O	Me	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	SO ₂ Me	
O	c-Pr	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	SO ₂ Me	
O	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-Cl]	SO ₂ Me	
O	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-Cl]	SO ₂ Me	20
O	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-Cl]	SO ₂ Me	
O	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-Cl]	SO ₂ Me	
NOMe	H	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	SO ₂ Me	
NOMe	Me	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	SO ₂ Me	
NOMe	c-Pr	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	SO ₂ Me	
NOMe	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-Cl]	SO ₂ Me	
NOMe	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-Cl]	SO ₂ Me	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-Cl]	SO ₂ Me	
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-Cl]	SO ₂ Me	
O	H	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a	30
O	Me	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a	
O	c-Pr	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a	
O	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a	
O	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a	
O	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a	
O	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a	
NOMe	H	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a	
NOMe	Me	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a	
NOMe	c-Pr	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a	
NOMe	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a	40
NOMe	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a	
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a	
O	H	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a[2-Me]	
O	Me	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a[2-Me]	
O	c-Pr	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a[2-Me]	
O	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a[2-Me]	
O	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a[2-Me]	
O	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a[2-Me]	
O	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a[2-Me]	50

NOMe	H	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a[2-Me]	
NOMe	Me	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a[2-Me]	
NOMe	c-Pr	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a[2-Me]	
NOMe	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a[2-Me]	
NOMe	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a[2-Me]	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a[2-Me]	
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a[2-Me]	
O	H	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a[4-Cl]	
O	Me	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a[4-Cl]	
O	c-Pr	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a[4-Cl]	10
O	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a[4-Cl]	
O	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a[4-Cl]	
O	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a[4-Cl]	
O	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a[4-Cl]	
NOMe	H	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a[4-Cl]	
NOMe	Me	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a[4-Cl]	
NOMe	c-Pr	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a[4-Cl]	
NOMe	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a[4-Cl]	
NOMe	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a[4-Cl]	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a[4-Cl]	20
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a[4-Cl]	
O	H	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a[2,6-di-Me]	
O	Me	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a[2,6-di-Me]	
O	c-Pr	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a[2,6-di-Me]	
O	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a[2,6-di-Me]	
O	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a[2,6-di-Me]	
O	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a[2,6-di-Me]	
O	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a[2,6-di-Me]	
NOMe	H	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a[2,6-di-Me]	
NOMe	Me	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a[2,6-di-Me]	30
NOMe	c-Pr	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a[2,6-di-Me]	
NOMe	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a[2,6-di-Me]	
NOMe	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a[2,6-di-Me]	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a[2,6-di-Me]	
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a[2,6-di-Me]	
O	H	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a[2,6-di-OMe]	
O	Me	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a[2,6-di-OMe]	
O	c-Pr	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a[2,6-di-OMe]	
O	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a[2,6-di-OMe]	
O	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a[2,6-di-OMe]	40
O	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a[2,6-di-OMe]	
O	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a[2,6-di-OMe]	
NOMe	H	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a[2,6-di-OMe]	
NOMe	Me	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a[2,6-di-OMe]	
NOMe	c-Pr	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a[2,6-di-OMe]	
NOMe	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a[2,6-di-OMe]	
NOMe	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a[2,6-di-OMe]	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a[2,6-di-OMe]	
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2a[2,6-di-OMe]	
O	H	H	MeO	D3-60b[6-Cl]	A2b	50

O	Me	H	MeO	D3-60b[6-C1]	A2b	
O	c-Pr	H	MeO	D3-60b[6-C1]	A2b	
O	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-C1]	A2b	
O	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-C1]	A2b	
O	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-C1]	A2b	
O	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-C1]	A2b	
NOMe	H	H	MeO	D3-60b[6-C1]	A2b	
NOMe	Me	H	MeO	D3-60b[6-C1]	A2b	
NOMe	c-Pr	H	MeO	D3-60b[6-C1]	A2b	
NOMe	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-C1]	A2b	10
NOMe	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-C1]	A2b	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-C1]	A2b	
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-C1]	A2b	
O	H	H	MeO	D3-60b[6-C1]	A2b[4-F]	
O	Me	H	MeO	D3-60b[6-C1]	A2b[4-F]	
O	c-Pr	H	MeO	D3-60b[6-C1]	A2b[4-F]	
O	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-C1]	A2b[4-F]	
O	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-C1]	A2b[4-F]	
O	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-C1]	A2b[4-F]	
O	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-C1]	A2b[4-F]	20
NOMe	H	H	MeO	D3-60b[6-C1]	A2b[4-F]	
NOMe	Me	H	MeO	D3-60b[6-C1]	A2b[4-F]	
NOMe	c-Pr	H	MeO	D3-60b[6-C1]	A2b[4-F]	
NOMe	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-C1]	A2b[4-F]	
NOMe	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-C1]	A2b[4-F]	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-C1]	A2b[4-F]	
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-C1]	A2b[4-F]	
O	H	H	MeO	D3-60b[6-C1]	A2c	
O	Me	H	MeO	D3-60b[6-C1]	A2c	
O	c-Pr	H	MeO	D3-60b[6-C1]	A2c	30
O	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-C1]	A2c	
O	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-C1]	A2c	
O	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-C1]	A2c	
O	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-C1]	A2c	
NOMe	H	H	MeO	D3-60b[6-C1]	A2c	
NOMe	Me	H	MeO	D3-60b[6-C1]	A2c	
NOMe	c-Pr	H	MeO	D3-60b[6-C1]	A2c	
NOMe	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-C1]	A2c	
NOMe	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-C1]	A2c	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-C1]	A2c	40
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-C1]	A2c	
O	H	H	MeO	D3-60b[6-C1]	A2c[4-C1]	
O	Me	H	MeO	D3-60b[6-C1]	A2c[4-C1]	
O	c-Pr	H	MeO	D3-60b[6-C1]	A2c[4-C1]	
O	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-C1]	A2c[4-C1]	
O	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-C1]	A2c[4-C1]	
O	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-C1]	A2c[4-C1]	
O	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-C1]	A2c[4-C1]	
NOMe	H	H	MeO	D3-60b[6-C1]	A2c[4-C1]	
NOMe	Me	H	MeO	D3-60b[6-C1]	A2c[4-C1]	50

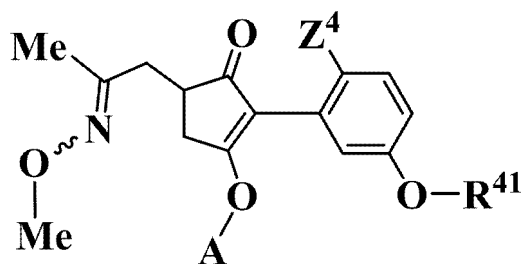
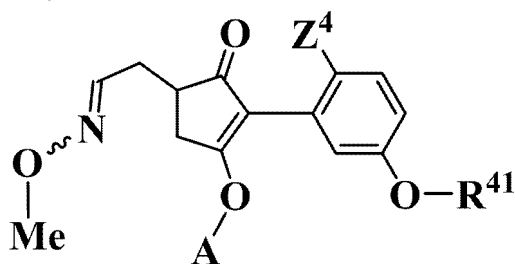
NOMe	c-Pr	H	MeO	D3-60b[6-C1]	A2c[4-C1]	
NOMe	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-C1]	A2c[4-C1]	
NOMe	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-C1]	A2c[4-C1]	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-C1]	A2c[4-C1]	
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-C1]	A2c[4-C1]	
O	H	H	MeO	D3-60b[6-C1]	A2c[4-Me]	
O	Me	H	MeO	D3-60b[6-C1]	A2c[4-Me]	
O	c-Pr	H	MeO	D3-60b[6-C1]	A2c[4-Me]	
O	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-C1]	A2c[4-Me]	
O	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-C1]	A2c[4-Me]	10
O	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-C1]	A2c[4-Me]	
O	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-C1]	A2c[4-Me]	
NOMe	H	H	MeO	D3-60b[6-C1]	A2c[4-Me]	
NOMe	Me	H	MeO	D3-60b[6-C1]	A2c[4-Me]	
NOMe	c-Pr	H	MeO	D3-60b[6-C1]	A2c[4-Me]	
NOMe	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-C1]	A2c[4-Me]	
NOMe	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-C1]	A2c[4-Me]	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-C1]	A2c[4-Me]	
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-C1]	A2c[4-Me]	
O	H	H	MeO	D3-60b[6-C1]	A2d	20
O	Me	H	MeO	D3-60b[6-C1]	A2d	
O	c-Pr	H	MeO	D3-60b[6-C1]	A2d	
O	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-C1]	A2d	
O	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-C1]	A2d	
O	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-C1]	A2d	
O	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-C1]	A2d	
NOMe	H	H	MeO	D3-60b[6-C1]	A2d	
NOMe	Me	H	MeO	D3-60b[6-C1]	A2d	
NOMe	c-Pr	H	MeO	D3-60b[6-C1]	A2d	
NOMe	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-C1]	A2d	30
NOMe	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-C1]	A2d	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-C1]	A2d	
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-C1]	A2d	
O	H	H	MeO	D3-60b[6-C1]	A2d[4-NO ₂]	
O	Me	H	MeO	D3-60b[6-C1]	A2d[4-NO ₂]	
O	c-Pr	H	MeO	D3-60b[6-C1]	A2d[4-NO ₂]	
O	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-C1]	A2d[4-NO ₂]	
O	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-C1]	A2d[4-NO ₂]	
O	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-C1]	A2d[4-NO ₂]	
O	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-C1]	A2d[4-NO ₂]	40
NOMe	H	H	MeO	D3-60b[6-C1]	A2d[4-NO ₂]	
NOMe	Me	H	MeO	D3-60b[6-C1]	A2d[4-NO ₂]	
NOMe	c-Pr	H	MeO	D3-60b[6-C1]	A2d[4-NO ₂]	
NOMe	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-C1]	A2d[4-NO ₂]	
NOMe	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-C1]	A2d[4-NO ₂]	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-C1]	A2d[4-NO ₂]	
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-C1]	A2d[4-NO ₂]	
O	H	H	MeO	D3-60b[6-C1]	A2e	
O	Me	H	MeO	D3-60b[6-C1]	A2e	
O	c-Pr	H	MeO	D3-60b[6-C1]	A2e	50

O	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-C1]	A2e	
O	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-C1]	A2e	
O	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-C1]	A2e	
O	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-C1]	A2e	
NOMe	H	H	MeO	D3-60b[6-C1]	A2e	
NOMe	Me	H	MeO	D3-60b[6-C1]	A2e	
NOMe	c-Pr	H	MeO	D3-60b[6-C1]	A2e	
NOMe	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-C1]	A2e	
NOMe	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-C1]	A2e	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-C1]	A2e	10
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-C1]	A2e	
O	H	H	MeO	D3-60b[6-C1]	A2e[4-Me]	
O	Me	H	MeO	D3-60b[6-C1]	A2e[4-Me]	
O	c-Pr	H	MeO	D3-60b[6-C1]	A2e[4-Me]	
O	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-C1]	A2e[4-Me]	
O	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-C1]	A2e[4-Me]	
O	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-C1]	A2e[4-Me]	
O	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-C1]	A2e[4-Me]	
NOMe	H	H	MeO	D3-60b[6-C1]	A2e[4-Me]	
NOMe	Me	H	MeO	D3-60b[6-C1]	A2e[4-Me]	20
NOMe	c-Pr	H	MeO	D3-60b[6-C1]	A2e[4-Me]	
NOMe	Me	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-C1]	A2e[4-Me]	
NOMe	Me	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-C1]	A2e[4-Me]	
NOMe	c-Pr	C(O)OMe	MeO	D3-60b[6-C1]	A2e[4-Me]	
NOMe	c-Pr	C(O)OEt	MeO	D3-60b[6-C1]	A2e[4-Me]	

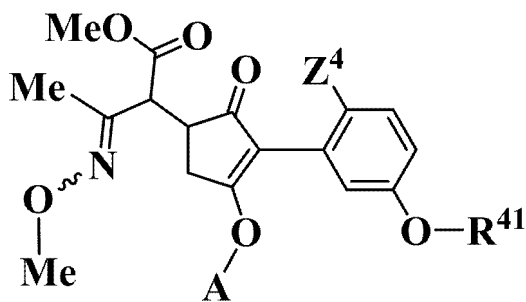
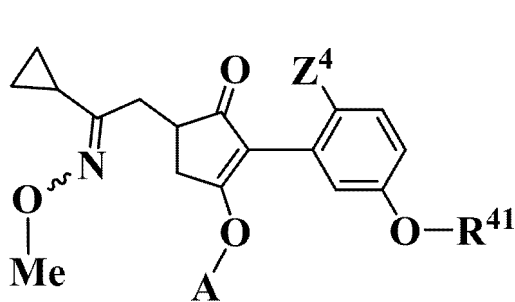
[第2表]

【0058】

【化11】



30



40

【0059】

Z ⁴	R ⁴¹ [X ³]	A	R ^a	R ^b	W
MeO	D3-60b[6-C1]	A3a	Me	Me	Ph

50

MeO	D3-60b[6-Cl]	A3b	Me	Me	Ph
MeO	D3-60b[6-Cl]	A3c	Me	Me	-
MeO	D3-60b[6-Cl]	A3c	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -		-
MeO	D3-60b[6-Cl]	A3c	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -		-
MeO	D3-60b[6-Cl]	A3c	-CH ₂ CH ₂ CH(Me)CH ₂ CH ₂ -		-
MeO	D3-60b[6-Cl]	A3c	-CH ₂ CH ₂ OCH ₂ CH ₂ -		-
MeO	D3-60b[6-Cl]	A3d	Me	Me	-
MeO	D3-60b[6-Cl]	A3d	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -		-
MeO	D3-60b[6-Cl]	A3d	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -		-
MeO	D3-60b[6-Cl]	A3d	-CH ₂ CH ₂ OCH ₂ CH ₂ -		-
MeO	D3-60b[6-Cl]	A3e	H	Me	-
MeO	D3-60b[6-Cl]	A3e	Me	Me	-
MeO	D3-60b[6-Cl]	A3e	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -		-
MeO	D3-60b[6-Cl]	A3e	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -		-
MeO	D3-60b[6-Cl]	A3e	-CH ₂ CH ₂ OCH ₂ CH ₂ -		-

10

次に、本発明化合物の製造法を以下に説明する。

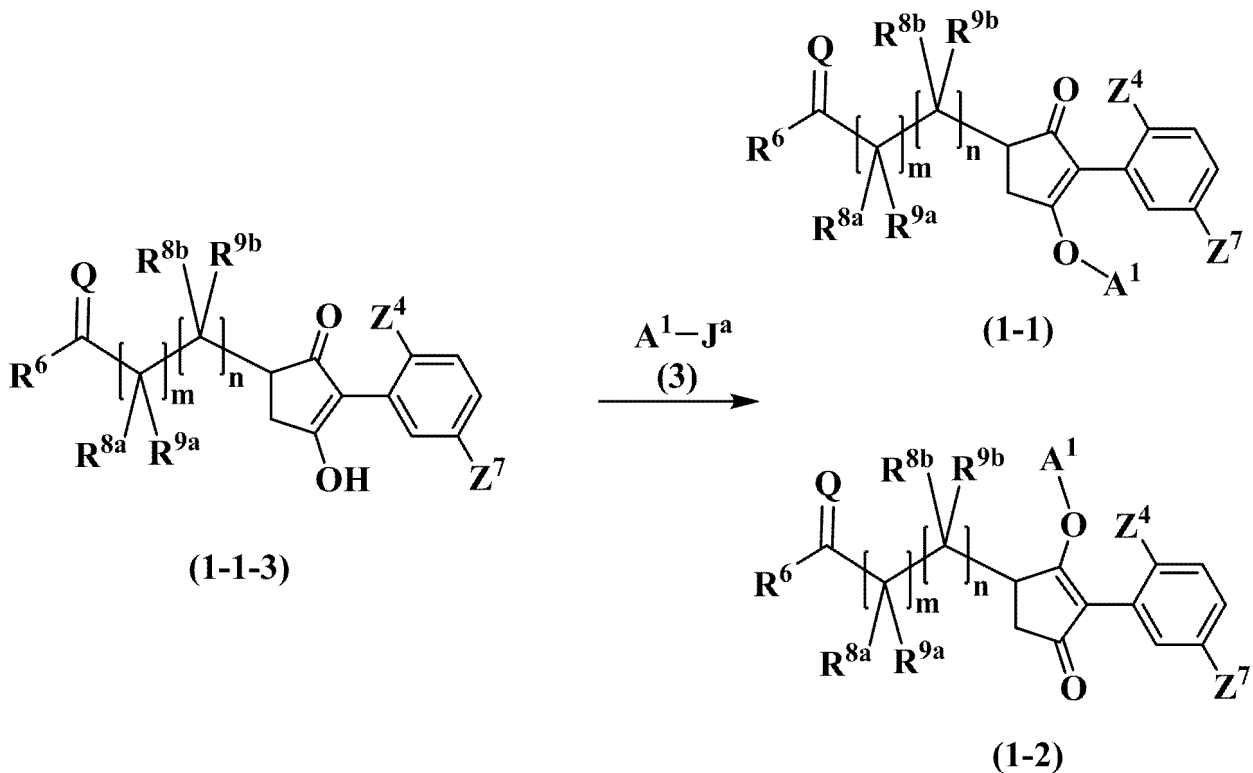
【0060】

製造法 A

【0061】

【化12】

20



30

40

【0062】

[式中、A¹は、C₁~C₆アルキル、R⁵で任意に置換された(C₁~C₆)アルキル、C₂~C₆アルケニル、C₂~C₆アルキニル、-S(O)_{r2}R^{1a}、-C(O)OR^{1b}、-C(S)OR^{1c}、-C(O)SR^{1d}、-C(S)SR^{1e}、-C(O)R²又は-C(S)R²を表し、J^aは、ハロゲン原子、-OSO₂Me、-OSO₂CF₃等の脱離基を表し、Q、r₂、R^{1a}、R^{1b}、R^{1c}、R^{1d}、R^{1e}、R²、R⁶、R^{8a}、R^{8b}、R^{9a}、R^{9b}、Z⁴、Z⁷、m及びnは前記と同じ意味を表す。]

本発明化合物のうち、式(1-1-3)で表される化合物と、式(3)で表される化合物とを、国際公開第2016/098899号記載の方法に準じて反応させることにより

50

、式(1-1)で表される本発明化合物及び式(1-2)で表される本発明化合物を製造することができる。

【0063】

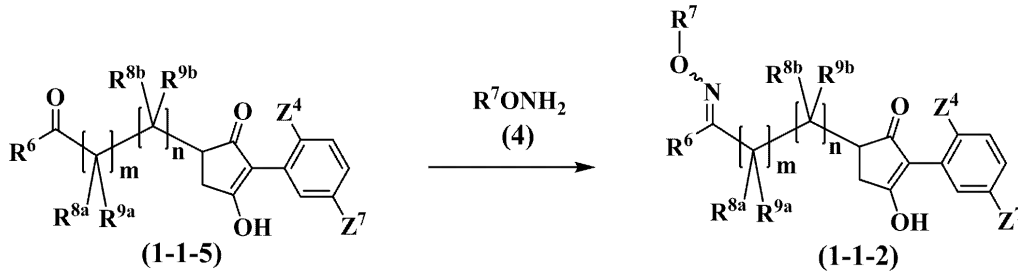
式(3)で表される化合物の或るものは公知化合物であり、一部は市販品として入手できる。また、それ以外のものも文献記載の公知の方法に準じて製造することができる。

【0064】

製造法B

【0065】

【化13】



10

【0066】

(式中、 R^6 、 R^7 、 R^{8a} 、 R^{8b} 、 R^{9a} 、 R^{9b} 、 Z^4 、 Z^7 、 m 及び n は前記と同じ意味を表す。)

式(1-1-3)で表される化合物のうち、式(1-1-5)で表される化合物と、式(4)で表される化合物とを、国際公開第2016/098899号記載の方法に準じて反応させることにより、式(1-1-3)で表される化合物のうち、式(1-1-2)で表される本発明化合物を製造することが出来る。

20

【0067】

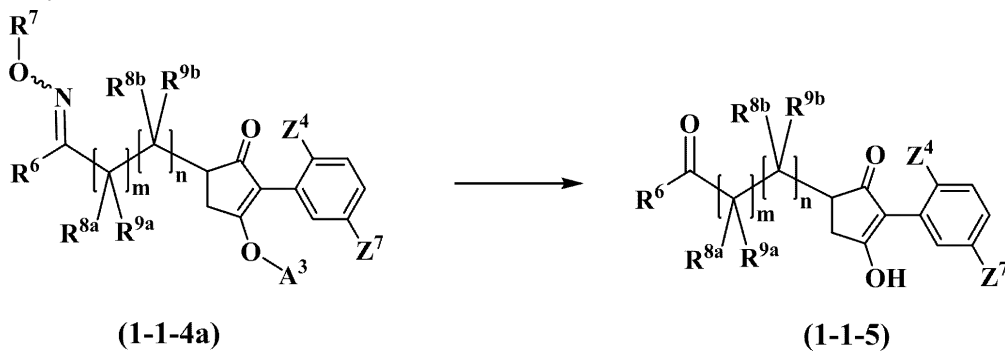
式(4)で表される化合物の或るものは公知化合物であり、一部は市販品として入手できる。また、それ以外のものも文献記載の公知の方法に準じて製造することができる。

【0068】

製造法C

【0069】

【化14】



30

【0070】

(式中、 R^6 、 R^7 、 R^{8a} 、 R^{8b} 、 R^{9a} 、 R^{9b} 、 Z^4 、 Z^7 、 m 及び n は前記と同じ意味を表し、 A^3 は、 $C_1 \sim C_6$ アルキルを表す。)

本発明化合物のうち、式(1-1-4a)で表される化合物を、国際公開第2016/098899号記載の方法に準じて反応させることにより、式(1-1-3)で表される化合物のうち、式(1-1-5)で表される本発明化合物を得ることができる。

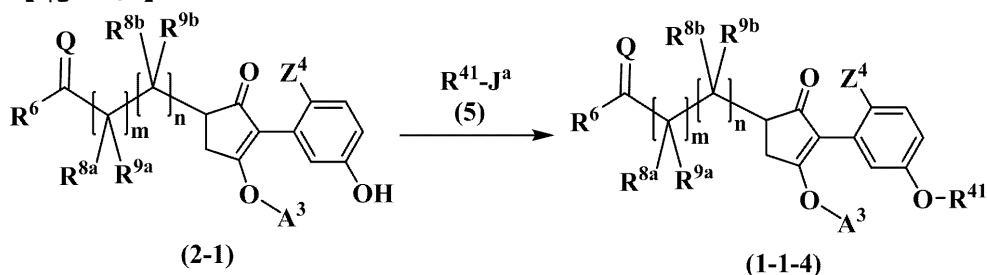
40

【0071】

製造法D

【0072】

【化 1 5】



【0073】

(式中、 J^a 、 A^3 、 Q 、 R^6 、 R^{8a} 、 R^{8b} 、 R^{9a} 、 R^{9b} 、 R^{41} 、 Z^4 、 m 及び n は前記と同じ意味を表す。)

式(2-1)で表される化合物と、式(5)で表される化合物とを、場合によっては塩基存在下、反応させることにより、本発明化合物のうち、式(1-1-4)で表される化合物を製造することができる。

【0074】

ここで用いられる式(5)で表される化合物の量は、式(2-1)で表される化合物1当量に対して、0.1~100当量の範囲で用いることができる。

【0075】

本反応は、必要ならば、トリエチルアミン、ピリジン、4-(ジメチルアミノ)ピリジン、1,8-ジアザビシクロ[5.4.0]-7-ウンデセン、 n -ブチルリチウム、リチウムジイソプロピルアミド、リチウムビス(トリメチルシリル)アミド、ナトリウムビス(トリメチルシリル)アミド、カリウムビス(トリメチルシリル)アミド、水素化ナトリウム、ナトリウムメトキシド、水酸化ナトリウム、水酸化カリウム、炭酸ナトリウム、炭酸カリウム等の塩基を使用することができる。使用することができる塩基の量は、式(2-1)で表される化合物1当量に対して、0.1~100当量の範囲で用いることができる。

【0076】

本反応は、無溶媒で実施してもよいが、溶媒を用いてもよく、例えば、 N,N -ジメチルホルムアミド、 N,N -ジメチルアセトアミド、アセトニトリル、ジメチルスルホキシド、1,3-ジメチル-2-イミダゾリノン等の極性溶媒、メタノール、エタノール、プロパノール、2-プロパノール、エチレングリコール等のアルコール類、ジエチルエーテル、テトラヒドロフラン、ジフェニルエーテル等のエーテル類、ベンゼン、トルエン、キシレン等の芳香族炭化水素類、塩化メチレン、クロロホルム、四塩化炭素等のハロゲン化炭化水素類、ペンタン、 n -ヘキサン等の脂肪族炭化水素類が挙げられる。これらの溶媒は単独で用いても、これらの内の2種類以上を混合して用いてもよい。

【0077】

反応温度は、-80 から反応混合物の還流温度までの任意の温度を設定することができる。

【0078】

反応時間は、反応基質の濃度、反応温度によって変化するが、通常5分から100時間の範囲で任意に設定できる。

【0079】

式(5)で表される化合物の或るものは公知化合物であり、一部は市販品として入手できる。また、それ以外のもも文献記載の公知の方法に準じて製造することができる。

【0080】

式(2-1)で表される化合物の或るものは公知化合物であり、例えば下記の合成例1の方法により製造することができる。

【0081】

合成例1

【0082】

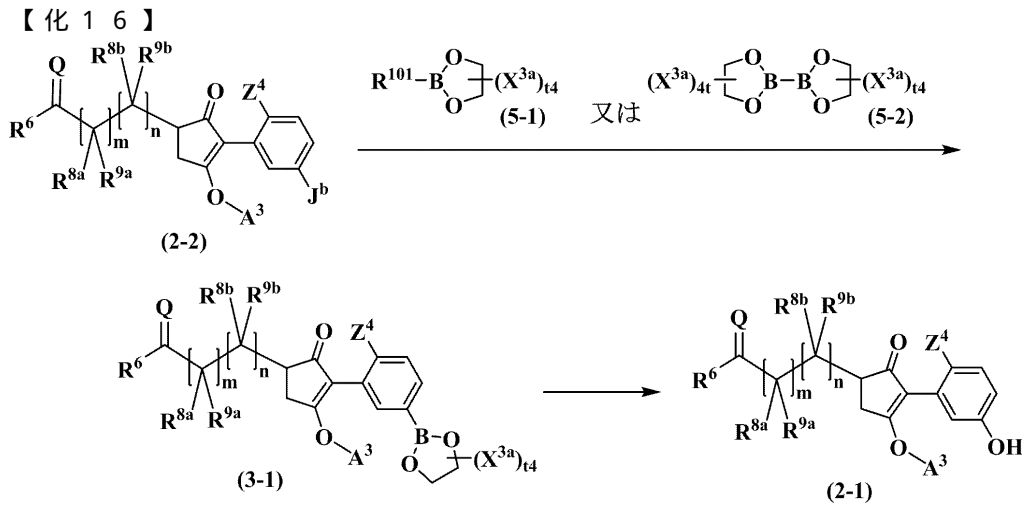
10

20

30

40

50



10

20

30

40

【0083】

[式中、J^a、A³、Q、R⁶、R^{8a}、R^{8b}、R^{9a}、R^{9b}、Z⁴、X^{3a}、t₄、m及びnは前記と同じ意味を表し、J^bは、ハロゲン原子、-OSO₂Me、-OSO₂CF₃等の脱離基を表し、R¹⁰¹は、C₁~C₆アルコキシを表す。]

式(2-2)で表される化合物と、式(5-1)で表される化合物又は式(5-2)で表される化合物とを、例えばザ・ジャーナル・オブ・オーガニック・ケミストリー(The Journal of Organic Chemistry) 1995年、60巻、7508頁等に記載の公知の方法に準じて反応させることにより、式(3-1)で表される化合物を製造することができる。

【0084】

式(2-2)で表される化合物は、例えば国際公開第2016/098899号に記載の公知の方法に準じて製造することができる。

【0085】

式(5-1)で表される化合物及び式(5-2)で表される化合物の或るものは公知化合物であり、一部は市販品として入手できる。また、それ以外のものも文献記載の公知の方法に準じて製造することができる。

【0086】

更に、式(3-1)で表される化合物を文献既知の公知の方法、例えば国際公開第2004/087686号等に記載の方法に準じて反応させることにより、式(2-1)で表される化合物を製造することができる。

【0087】

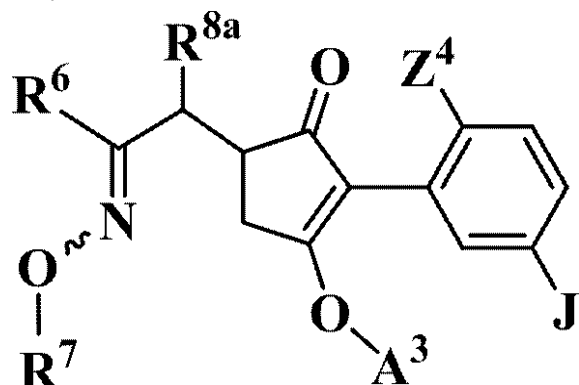
合成例1と同様に製造した製造中間体の例を第3表及び第4表に示すが、これらのみに限定されるものではない。表中、Meとの記載はメチル基を表し、以下同様に、Etはエチル基を、c-Pr及びPr-cはシクロプロピル基をそれぞれ表す。

【0088】

[第3表]

【0089】

【化 17】



【0090】

Z ⁴	R ⁶	R ⁷	A ³	J	R ^{8a}
F	Me	Me	H	Br	C(O)OMe
F	Me	Me	H	Br	C(O)OEt
F	Me	Me	H	Br	C(O)OH
F	Me	Me	H	Br	H
F	Me	Me	H	OH	H
Me	Me	Me	H	Br	C(O)OMe
Me	Me	Me	H	Br	C(O)OEt
Me	Me	Me	H	Br	C(O)OH
Me	Me	Me	H	Br	H
Me	Me	Me	H	OH	H
Et	Me	Me	H	Br	C(O)OMe
Et	Me	Me	H	Br	C(O)OEt
Et	Me	Me	H	Br	C(O)OH
Et	Me	Me	H	Br	H
Et	Me	Me	H	OH	H
c-Pr	Me	Me	H	Br	C(O)OMe
c-Pr	Me	Me	H	Br	C(O)OEt
c-Pr	Me	Me	H	Br	C(O)OH
c-Pr	Me	Me	H	Br	H
c-Pr	Me	Me	H	OH	H
OMe	Me	Me	H	Br	C(O)OMe
OMe	Me	Me	H	Br	C(O)OEt
OMe	Me	Me	H	Br	C(O)OH
OMe	Me	Me	H	Br	H
OMe	Me	Me	H	OH	H
OMe	c-Pr	Me	H	Br	C(O)OMe
OMe	c-Pr	Me	H	Br	C(O)OEt
OMe	c-Pr	Me	H	Br	C(O)OH
OMe	c-Pr	Me	H	Br	H
OMe	c-Pr	Me	H	OH	H
OEt	Me	Me	H	Br	C(O)OMe
OEt	Me	Me	H	Br	C(O)OEt
OEt	Me	Me	H	Br	C(O)OH
OEt	Me	Me	H	Br	H
OEt	Me	Me	H	OH	H

10

20

30

40

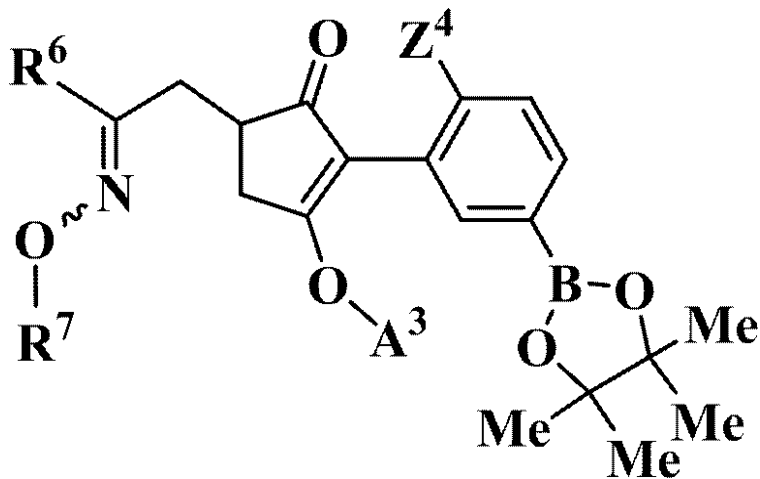
50

OE t	c-Pr	Me	H	Br	C(O)OMe	
OE t	c-Pr	Me	H	Br	C(O)OE t	
OE t	c-Pr	Me	H	Br	C(O)OH	
OE t	c-Pr	Me	H	Br	H	
OE t	c-Pr	Me	H	OH	H	
F	Me	Me	Me	Br	C(O)OMe	
F	Me	Me	Me	Br	C(O)OE t	
F	Me	Me	Me	Br	C(O)OH	
F	Me	Me	Me	Br	H	
F	Me	Me	Me	OH	H	10
Me	Me	Me	Me	Br	C(O)OMe	
Me	Me	Me	Me	Br	C(O)OE t	
Me	Me	Me	Me	Br	C(O)OH	
Me	Me	Me	Me	Br	H	
Me	Me	Me	Me	OH	H	
Et	Me	Me	Me	Br	C(O)OMe	
Et	Me	Me	Me	Br	C(O)OE t	
Et	Me	Me	Me	Br	C(O)OH	
Et	Me	Me	Me	Br	H	
Et	Me	Me	Me	OH	H	20
c-Pr	Me	Me	Me	Br	C(O)OMe	
c-Pr	Me	Me	Me	Br	C(O)OE t	
c-Pr	Me	Me	Me	Br	C(O)OH	
c-Pr	Me	Me	Me	Br	H	
c-Pr	Me	Me	Me	OH	H	
OMe	Me	Me	Me	Br	C(O)OMe	
OMe	Me	Me	Me	Br	C(O)OE t	
OMe	Me	Me	Me	Br	C(O)OH	
OMe	Me	Me	Me	Br	H	
OMe	Me	Me	Me	OH	H	30
OMe	c-Pr	Me	Me	Br	C(O)OMe	
OMe	c-Pr	Me	Me	Br	C(O)OE t	
OMe	c-Pr	Me	Me	Br	C(O)OH	
OMe	c-Pr	Me	Me	Br	H	
OMe	c-Pr	Me	Me	OH	H	
OE t	Me	Me	Me	Br	C(O)OMe	
OE t	Me	Me	Me	Br	C(O)OE t	
OE t	Me	Me	Me	Br	C(O)OH	
OE t	Me	Me	Me	Br	H	
OE t	Me	Me	Me	OH	H	40
OE t	c-Pr	Me	Me	Br	C(O)OMe	
OE t	c-Pr	Me	Me	Br	C(O)OE t	
OE t	c-Pr	Me	Me	Br	C(O)OH	
OE t	c-Pr	Me	Me	Br	H	
OE t	c-Pr	Me	Me	OH	H	

〔第4表〕

【0091】

【化 18】



10

【0092】

Z ⁴	R ⁶	R ⁷	A ³
F	Me	Me	Me
Me	Me	Me	Me
Et	Me	Me	Me
c-Pr	Me	Me	Me
OMe	Me	Me	Me
OMe	c-Pr	Me	Me
OEt	Me	Me	Me
OEt	c-Pr	Me	Me

20

製造法 A 乃至製造法 D、並びに合成例 1 は、必要であれば窒素、アルゴン等の不活性ガス雰囲気下で実施しても良い。

【0093】

30

製造法 A 乃至製造法 D、並びに合成例 1 において、反応終了後の反応混合物は、直接濃縮、又は有機溶媒に溶解し、水洗後濃縮、又は氷水に投入、有機溶媒抽出後濃縮といった通常の後処理を行ない、目的の本発明化合物を得ることができる。また、精製の必要が生じたときには、再結晶、カラムクロマトグラフ、薄層クロマトグラフ、液体クロマトグラフ分取等の任意の精製方法によって分離、精製することができる。

【0094】

本発明化合物は水田用の除草剤として、湛水下の土壌処理及び茎葉処理のいずれの処理方法においても使用できる。水田雑草としては、例えば、ヒルムシロ (*Potamogeton distinctus*) 等に代表されるヒルムシロ科 (*Potamogetonaceae*) 雑草、ヘラオモダカ (*Alisma canaliculatum*)、ウリカワ (*Sagittaria pygmaea*) 及びオモダカ (*Sagittaria trifolia*) 等に代表されるオモダカ科 (*Alismataceae*) 雑草、アゼガヤ (*Leptochloa chinensis*)、イヌビエ (*Echinochloa crus-galli*)、タイヌビエ (*Echinochloa oryzicola*)、アシカキ (*Homalocenchrus japonicus*) 及びキシウスズメノヒエ (*Paspalum distichum*) 等に代表されるイネ科 (*Gramineae*) 雑草、クログワイ (*Eleocharis kuroguwai*)、ホタルイ (*Scirpus juncooides*)、シズイ (*Scirpus nipponicus*)、ミスガヤツリ (*Cyperus serotinus*)、タマガヤツリ (*Cyperus difformis*) 及びヒナガヤツリ (*Cyperus hakonen*)

40

50

sis)等に代表されるカヤツリグサ科(Cyperaceae)雑草、ウキクサ(Spirodela polyrhiza)及びアオウキクサ(Lemna paucicostata)等に代表されるウキクサ科(Lemnaceae)雑草、イボクサ(Murdannia keisak)等に代表されるツククサ科(Commelinaceae)雑草、ミズアオイ(Monochoria korsakowii)及びコナギ(Monochoria vaginalis)等に代表されるミズアオイ科(Pontederiaceae)雑草、ミゾハコベ(Elatine triandra)等に代表されるミゾハコベ科(Elatinaceae)雑草、ヒメミソハギ(Ammannia multiflora)及びキカシグサ(Rotala indica)等に代表されるミソハギ科(Lythraceae)雑草、チョウジタデ(Lidwigia epilobioides)等に代表されるアカバナ科(Oenotheraceae)雑草、アブノメ(Dopatrium junceum)、オオアブノメ(Gratiola japonica)、ククモ(Limnophila sessilifolia)、アゼナ(Lindernia pyxidaria)及びアメリカアゼナ(Lindernia dubia)等に代表されるゴマノハグサ科(Scrophulariaceae)雑草、クサネム(Aeschynomene indica)等に代表されるマメ科(Leguminosae)雑草、並びにアメリカセンダングサ(Bidens frondosa)及びタウコギ(Bidens tripartita)等に代表されるキク科(Compositae)雑草等が挙げられる。

【0095】

また、本発明化合物は、畑地および果樹園用の除草剤として、土壌処理、土壌混和処理及び茎葉処理のいずれの処理方法においても使用できる。畑地雑草としては、例えば、イヌホウズキ(Solanum nigrum)及びチョウセンアサガオ(Datura stramonium)等に代表されるナス科(Solanaceae)雑草、アメリカフウロ(Granium carolinianum)等に代表されるフウロソウ科(Geraniaceae)雑草、イチビ(Abutilon theophrasti)及びアメリカキンゴジカ(Sida spinosa)等に代表されるアオイ科(Malvaceae)雑草、マルバアサガオ(Ipomoea purpurea)等のアサガオ類(Ipomoea spp.)及びヒルガオ類(Calystegia spp.)等に代表されるヒルガオ科(Convulvulaceae)雑草、イヌビユ(Amaranthus lividus)及びアオビユ(Amaranthus retroflexus)等に代表されるヒユ科(Amaranthaceae)雑草、オナモミ(xanthium pensylvanicum)、ブタクサ(Ambrosia artemisiifolia)、ヒマワリ(Helianthus annuus)、ハキダメギク(Galinsoga ciliata)、セイヨウトゲアザミ(Cirsium arvense)、ノボロギク(Senecio vulgaris)及びヒメジョオン(Erigeron annuus)等に代表されるキク科(Compositae)雑草、イヌガラシ(Rorippa indica)、ノハラガラシ(Sinapis arvensis)及びナズナ(Capsella Bursapastoris)等に代表されるアブラナ科(Cruciferae)雑草、イヌタデ(Polygonum Blumei)及びソバカズラ(Polygonum convolvulus)等に代表されるタデ科(Polygonaceae)雑草、スベリヒユ(Portulaca oleracea)等に代表されるスベリヒユ科(Portulacaceae)雑草、シロザ(Chenopodium album)、コアカザ(Chenopodium ficifolium)及びホウキギ(Kochia scoparia)等に代表されるアカザ科(Chenopodiaceae)雑草、ハコベ(Stellaria media)等に代表されるナデシコ科(Caryophyllaceae)雑草、オオイヌノフグリ(Veronica persica)等に代表されるゴマノハグサ科(Scrophulariaceae)雑草、ツククサ(Commelina communis)等に代表されるツククサ科(Commelinaceae)雑草、ホトケノザ(Lamiu

m amplexicaule) 及びヒメオドリコソウ (*Lamium purpureum*) 等に代表されるシソ科 (*Labiatae*) 雑草、コニシキソウ (*Euphorbia supina*) 及びオオニシキソウ (*Euphorbia maculata*) 等に代表されるトウダイグサ科 (*Euphorbiaceae*) 雑草、ヤエムグラ (*Galium spurium*) 及びアカネ (*Rubia akane*) 等に代表されるアカネ科 (*Rubiaceae*) 雑草、スミレ (*Viola mandshurica*) 等に代表されるスミレ科 (*Violaceae*) 雑草並びにアメリカツノクサネム (*Sesbania exaltata*) 及びエビスグサ (*Cassia obtusifolia*) 等に代表されるマメ科 (*Leguminosae*) 雑草、カタバミ (*Oxalis corniculata*) に代表されるカタバミ科 (*Oxalidaceae*) 等の広葉雑草 (*Broad-leaved weeds*)。野生ソルガム (*Sorghum bicolor*)、オオクサキビ (*Panicum dichotomiflorum*)、ジョンソングラス (*Sorghum halepense*)、イヌビエ (*Echinochloa crus-galli* var. *crus-galli*)、ヒメイヌビエ (*Echinochloa crus-galli* var. *pratensis*)、栽培ビエ (*Echinochloa utilis*)、メヒシバ (*Digitaria ciliaris*)、カラスムギ (*Avena fatua*)、ブラックグラス (*Alopecurus myosuroides*)、オヒシバ (*Eleusine indica*)、エノコログサ (*Setaria viridis*)、アキノエノコログサ (*Setaria faberi*) 及びスズメノテッポウ (*Alopecurus aequalis*) 等に代表されるイネ科雑草 (*Graminaceous weeds*) 並びにハマスゲ (*Cyperus rotundus*, *Cyperus esculentus*) 等に代表されるカヤツリグサ科雑草 (*Cyperaceous weeds*) 等が挙げられる。

【0096】

また、本発明化合物は、水田、畑地及び果樹園等の農園芸分野以外に芝地、運動場、空地、道路脇、及び線路端等非農耕地において、土壌処理、土壌混和処理及び茎葉処理のいずれの処理方法においても使用できる。その雑草としては、畑地および果樹園用雑草で述べたものに加えて、スズメノカタビラ (*Poa annua*)、セイヨウタンポポ (*Taraxacum officinale*)、オオアレチノギク (*Conyza sumatrensis*)、タネツケバナ (*Cardamine flexuosa*)、シロツメクサ (*Trifolium repens*)、チドメグサ (*Hydrocotyle sibthorpioides*)、オオバコ (*Plantago asiatica*)、ヒメクグ (*Cyperus brevifolius*, *Kyllinga brevifolia*)、スギナ (*Equisetum arvense*) 等が挙げられる。

【0097】

本発明化合物は必要に応じて製剤または散布時に他種の除草剤、各種殺虫剤、殺菌剤、植物生長調節剤又は共力剤等と混合施用しても良い。

【0098】

特に、他の除草剤と混合施用することにより、施用薬量の減少による低コスト化、混合薬剤の相乗作用による殺草スペクトラムの拡大や、より高い殺草効果が期待できる。この際、同時に複数の公知除草剤との組み合わせも可能である。

【0099】

本発明化合物と混合使用されるのに好ましい除草剤としては、例えば、アセトクロール (*acetochlor*/一般名)、アシフルオルフェン (*acifluorfen*/一般名)、アクロニフェン (*aclonifen*/一般名)、アラクロール (*alachlor*/一般名)、アロキシジム (*alloxydim*/一般名)、アロキシジムナトリウム (*alloxydim sodium*/一般名)、アメトリン (*ametryn*/一般名)、アミカルバゾン (*amicarbazone*/一般名)、アミドスルフロン (*amidosulfuron*/一般名)、アミノシクロピラクロール (*aminocyclopirachlor*/一般名)、アミノシクロピラクロールの塩およびエステル (*ami*

nocyclopirachlor salts and esters)、アミノピラ
 リド(aminopyralid/一般名)、アミノピラリドの塩およびエステル(am
 inopyralid salts and esters)、アミプロホスメチル(a
 miprophos methyl/一般名)、アミトロール(amitrol/一般名
)、アニコホス(anilofos/一般名)、アシュラム(asulam/一般名)、
 アトラジン(atrazine/一般名)、アザフェニジン(azafenidin/一
 般名)、アジムスルフロン(azimsulfuron/一般名)、ベフルブタミド(b
 eflubutamid/一般名)、ベナゾリンエチル(benazolin-ethyl
 /一般名)、ベンカルバゾン(bencarbazone/一般名)、ベンフルラリン
 (benfluralin、benefin/一般名)、ベンフレセート(benfur
 esate/一般名)、ベンスルフロンメチル(bensulfuron-methyl
 /一般名)、ベンスリド(bensulide/一般名)、ベントゾン(bentazo
 ne/一般名)、ベントゾンナトリウム(bentazone sodium/一般名)
 、ベントゾンの塩(bentazone salts)、ベンチオカーブ(benthi
 ocarb/一般名)、ベンズフェンジゾン(benzfendizone/一般名)、
 ベンゾビシクロン(benzobicyclon/一般名)、ベンゾフェナップ(ben
 zofenap/一般名)、ピアラホス(bialaphos/一般名)、ピアラホスナ
 トリウム(bialaphos sodium/一般名)、ビシクロピロン(bicyc
 lopyrone/一般名)、ピフェノックス(bifenox/一般名)、ビスピリバ
 ック(bispyribac/一般名)、ビスピリバックナトリウム(bispyrib
 ac sodium/一般名)、プロマシル(bromacil/一般名)、プロモブチ
 ド(bromobutide/一般名)、プロモフェノキシム(bromofenoxi
 m/一般名)、プロモキシニル(bromoxynil/一般名)、プロモキシニルの塩
 およびエステル(bromoxynil salts and esters)、ブタク
 ロール(butachlor/一般名)、ブタフェナシル(butafenacil/一
 般名)、ブタミホス(butamifos/一般名)、ブテナクロール(butenac
 hlor/一般名)、ブトラリン(butralin/一般名)、ブトロキシジム(bu
 troxydim/一般名)、ブチレート(butylate/一般名)、カフェンスト
 ロール(cafenstrole/一般名)、カルベタミド(carbetamide/一
 般名)、カルフェントラゾンエチル(carfentrazone-ethyl)、ク
 ロメトキシフェン(chlomethoxyfen/一般名)、クロメトキシニル(ch
 lomethoxynil/一般名)、クロランベン(chloramben/一般名)
 、クロランベンの塩およびエステル(chloramben salts and es
 ters)、クロランスラムメチル(chloransulam methyl/一般名)
 、クロルフルレノールメチル(chlorflurenol methyl/一般名)
 、クロリダゾン(chloridazon/一般名)、クロリムロンエチル(chlor
 imuron ethyl/一般名)、クロロブロムロン(chlorobromuro
 n/一般名)、クロロトルロン(chlorotoluron/一般名)、クロロクスロ
 ン(chloroxuron/一般名)、クロルフタリム(chlorphthalim/
 一般名)、クロルプロファム(chlorpropham/一般名)、クロロIPC(c
 hlorpropham/一般名)、クロルスルフロン(chlorsulfuron/
 一般名)、クロルタルジメチル(chlorthal-dimethyl/一般名)、ク
 ロルチアミド(chlorthiamid/一般名)、シニドンエチル(cinidon
 -ethyl/一般名)、シンメスリン(cinmethylin/一般名)、シノスル
 フロン(cinosulfuron/一般名)、クレトジム(clethodim/一般
 名)、クロジナホップ(clodinafop/一般名)、クロジナホッププロパルギル
 (clodinafop propargyl/一般名)、クロマゾン(clomazo
 ne/一般名)、クロメプロップ(clomeprop/一般名)、クロピラリド(cl
 opyralid/一般名)、クロピラリドの塩およびエステル(clopyralid
 salts and esters)、CNP(一般名)、クミルロン(cumyl lu

10

20

30

40

50

ron / 一般名)、シアナジン(cyanazin / 一般名)、シクロエート(cycloate / 一般名)、シクロピリモレート(cyclopyrimorate / 一般名、SW-065 / 試験名)、シクロスルフアムロン(cyclosulfamuron / 一般名)、シクロキシジム(cycloxydim / 一般名)、シハロホップブチル(cyhalofop-butyl / 一般名)、DAH-500 (試験名)、ダラボン(dalapon / 一般名)、ダゾメット(dazomet / 一般名)、デスメディファム(desmedipham / 一般名)、デスメトリン(desmetryn / 一般名)、ダイカンバ(dicamba / 一般名)、ダイカンバの塩およびエステル(dicamba salts and esters)、ジクロベニル(dichlobenil / 一般名)、ジクロホップ(diclofop / 一般名)、ジクロホップメチル(diclofop-methyl / 一般名)、ジクロルプロップ(dichlorprop / 一般名)、ジクロルプロップの塩およびエステル(dichlorprop salts and esters)、Pジクロルプロップ(dichlorprop P / 一般名)、Pジクロルプロップの塩およびエステル(dichlorprop P salts and esters)、ジクロスラム(diclosulam / 一般名)、ジフェンゾコート(difenzoquat / 一般名)、ジフルフェニカン(diflufenican / 一般名)、ジフルフェンゾピル(diflufenzopyr / 一般名)、ジフルフェンゾピルナトリウム(diflufenzopyr sodium / 一般名)、ジメピペレート(dimepiperate / 一般名)、ジメタメトリン(dimethametryn / 一般名)、ジメタクロール(dimethachlor / 一般名)、ジメテナミド(dimethenamid / 一般名)、Pジメテナミド(dimethenamid p / 一般名)、ジメシピン(dimethipin / 一般名)、ジニトロアミン(dinitramine / 一般名)、ジノセブ(dinoseb / 一般名)、ジノテルブ(dinoterb / 一般名)、DNOC / 一般名、ジフェナミド(diphenamid / 一般名)、ジクワット(diquat / 一般名)、ジチオピル(dithiopyl / 一般名)、ジウロン(diuron / 一般名)、DSMA / 一般名、ダイムロン(dymron / 一般名)、エンドタル(endothal / 一般名)、EPTC / 一般名、エスプロカルブ(esprocarb / 一般名)、エタルフルラリン(ethalfluralin / 一般名)、エタメトスルフロンメチル(ethametsulfuron methyl / 一般名)、エトフメセート(ethofumesate / 一般名)、エトベンザニド(etobenzanid / 一般名)、エトキシスルフロン(ethoxysulfuron / 一般名)、フラザスルフロン(flazasulfuron / 一般名)、フェノキサプロップ(fenoxaprop / 一般名)、フェノキサプロップエチル(fenoxaprop-ethyl / 一般名)、フェノキサスルホン(fenoxasulfone / 一般名)、フェンキノトリオン(fenquionotriion / 一般名)、フェントラザミド(fentrazamide / 一般名)、フラムプロップ(flamprop / 一般名)、フラザスルフロン(flazasulfuron / 一般名)、フロラスラム(florasulam / 一般名)、フルアジホップ(fluaazifop / 一般名)、フルアジホップブチル(fluaazifop-butyl / 一般名)、フルアゾレート(fluazolate / 一般名)、フルカルバゾンナトリウム(flucarbazon-sodium / 一般名)、フルセトスルフロン(flucetosulfuron / 一般名)、フルクロラリン(flucloralin / 一般名)、フルフェナセット(flufenacet / 一般名)、フルフェンピルエチル(flufenpyl-ethyl / 一般名)、フルメツラム(flumetsulam / 一般名)、フルミクロラックペンチル(flumiclorac-penty / 一般名)、フルミオキサジン(flumioxazin / 一般名)、フルオメツロン(flumeturon / 一般名)、フルオログリコフェンエチル(fluroglycofen-ethyl / 一般名)、フルピルスルフロン(flupyrsulfuron / 一般名)、フルボキサム(flupoxam / 一般名)、フルレノール(flurenol / 一般名)、フルリドン(fluridone / 一般名)、フルクロリドン(flurochloridone / 一般名)

、フルロキシピル (fluroxypyr / 一般名)、フルロキシピルのエステル (fluroxypyr esters)、フルプリミドール (flurprimidol / 一般名)、フルタモン (flurtamone / 一般名)、フルチアセットメチル (fluthiacet-methyl / 一般名)、フォメサフェン (fomesafen / 一般名)、フォラムスルフロン (foramsulfuron / 一般名)、フォサミン (fosamine / 一般名)、グルホシネート (glufosinate / 一般名)、グルホシネートアンモニウム (glufosinate-ammonium / 一般名)、グリホサート (glyphosate / 一般名)、グリホサートアンモニウム (glyphosate-ammonium / 一般名)、グリホサートイソプロピルアミン (glyphosate-iso-propylammonium / 一般名)、グリホサートカリウム (glyphosate-potassium / 一般名)、グリホサートナトリウム (glyphosate-sodium / 一般名)、グリホサートトリメシウム (glyphosate-trimesium / 一般名)、ハロウキシフェン (halauxifen / 一般名)、ハロウキシフェンの塩およびエステル (halauxifen salts and esters)、ハロサフェン (halosafen / 一般名)、ハロスルフロン (halosulfuron / 一般名)、ハロスルフロンメチル (halosulfuron-methyl / 一般名)、ハロキシホップ (haloxyfop / 一般名)、ハロキシホップメチル (haloxyfop-methyl / 一般名)、ヘキサジノン (hexazinone / 一般名)、イマザメタベンズメチル (imazamethabenzmethyl / 一般名)、イマザモックス (imazamox / 一般名)、イマザピク (imazapic / 一般名)、イマザピル (imazapyr / 一般名)、イマゼタピル (imazethapyr / 一般名)、イマザキン (imazaquin / 一般名)、イマゾスルフロン (imazosulfuron / 一般名)、インダノファン (indanofan / 一般名)、インダジフラム (indaziflam / 一般名)、ヨードスルフロンメチルナトリウム (iodosulfuron-methyl-sodium / 一般名)、アイオキシニル (ioxynil octanoate / 一般名)、アイオキシニルの塩およびエステル (ioxynil salts and esters)、イプフェンカルバゾン (ipfencarbazone / 一般名)、イソプロチュロン (isoproturon / 一般名)、イソウロン (isouron / 一般名)、イソキサベン (isoxaben / 一般名)、イソキサフルトール (isoxaflutole / 一般名)、カルブチレート (karbutilate / 一般名)、ラクトフェン (lactofen / 一般名)、レナシル (lenacil / 一般名)、リニユロン (linuron / 一般名)、マレイン酸ヒドラジド (maleic hydrazide / 一般名)、MCPA (一般名)、MCPAの塩およびエステル (MCPA salts and esters)、MCPB (一般名)、MCPBの塩およびエステル (MCPB salts and esters)、メコプロップ (mecoprop、MCP P / 一般名)、メコプロップの塩およびエステル (mecoprop salts and esters)、Pメコプロップ (mecoprop P、MCP P P / 一般名)、Pメコプロップの塩およびエステル (mecoprop P salts and esters)、メフェナセット (mefenacet / 一般名)、メフルイジド (mefluidide / 一般名)、メソスルフロンメチル (mesosulfuron methyl / 一般名)、メソトリオン (mesotrione / 一般名)、メタム (metam / 一般名)、メタミホップ (metamifop / 一般名)、メタミトロン (metamitron / 一般名)、メタザクロール (metazachlor / 一般名)、メタベンズチアズロン (methabenzthiazuron / 一般名)、メタゾスルフロン (metazosulfuron / 一般名)、メチオゾリン (methiozolin / 一般名)、メチルアジド (methyl azide / 一般名)、臭化メチル (methyl bromide / 一般名)、メチルダイムロン (methyl dymron / 一般名)、ヨウ化メチル (methyl iodide / 一般名)、メトベンズロン (metobenzuron

10

20

30

40

50

/一般名)、メトラクロール (metolachlor/一般名)、Sメトラクロール (metolachlor S/一般名)、メトスラム (metosulam/一般名)、
 メトリブジン (metribuzin/一般名)、メトスルフロンメチル (metsulfuron-methyl/一般名)、メトクスロン (metoxuron/一般名)、
 モリネート (molinate/一般名)、モノリニuron (monolinuron/一般名)、モノスルフロン (monosulfuron/一般名)、モノスルフロンメチル (monosulfuron-methyl/一般名)、MSMA/一般名、ナプロア
 ニリド (naproanilide/一般名)、ナプロパミド (napropamide/一般名)、ナプタラム (naptalam/一般名)、ナプタラムナトリウム (naptalam sodium/一般名)、ネブロン (neburon/一般名)、ニコスル
 フロン (nicosulfuron/一般名)、ノルフルラゾン (norflurazon/一般名)、OK-701 (試験名)、オレイン酸 (oleic acid/一般名)
 、オルベンカーブ (orbencarb/一般名)、オルソスルファミロン (orthosulfamuron/一般名)、オリザリン (oryzalin/一般名)、オキサジ
 アルギル (oxadiargyl/一般名)、オキサジアゾン (oxadiazon/一般名)、オキサスルフロン (oxasulfuron/一般名)、オキサジクロメホン (oxaziclomefone/一般名)、オキシフルオルフェン (oxyfluorfen/一般名)、パラコート (paraquat/一般名)、ペラルゴン酸 (pelargonic acid/一般名)、ペンディメタリン (pendimethalin/一般名)
 名)、ペノキススラム (penoxsulam/一般名)、ペンタノクロール (pentanochlor/一般名)、ペントキサゾン (pentoxazone/一般名)、ペ
 トキサミド (pethoxamid/一般名)、フェンメディファミエチル (phenmedipham ethyl/一般名)、ピクロラム (picloram/一般名)、ピ
 クロラムの塩およびエステル (picloram salts and esters)
 、ピコリナフェン (picolinafen/一般名)、ピノキサデン (pinoxaden/一般名)、ピペロフォス (piperophos/一般名)、プレチラクロール (pretilachlor/一般名)、プリミスルフロンメチル (primisulfuron methyl/一般名)、プロジアミン (prodiamine/一般名)、プロフルアゾール (proflumazone/一般名)、プロフォキシジム (profoxydim/一般名)、プロメトン (prometon/一般名)、プロメトリン (prometryn/一般名)、プロバクロール (propachlor/一般名)、プロパニル (propamil/一般名)、プロパキサホップ (propaquizafop/一般名)、プロパジン (propazine/一般名)、プロファミン (propham/一般名)、プロピソクロール (propisochlor/一般名)、プロボキシカルバゾンナトリウム (propoxycarbazone-sodium/一般名)、プロピリスルフロン (propyrisulfuron/一般名)、プロビザミド (propyzamide/一般名)、プルスルホカーブ (prosulfocarb/一般名)、プロスルフロン (prosulfuron/一般名)、ピラクロニル (pyraclonil/一般名)、ピラフルフェンエチル (pyraflufen ethyl/一般名)、ピラスルホトール (pyrasulfotole/一般名)、ピラゾリネート (pyrazolynate/一般名)、ピラゾスルフロン (pyrazosulfuron/一般名)、ピラゾスルフロンエチル (pyrazosulfuron-ethyl/一般名)、ピラゾキシフェン (pyrazoxyfen/一般名)、ピリベンゾキシム (pyribenzoxim/一般名)、ピリブチカルブ (pyributicarb/一般名)、ピリダフォル (pyridafol/一般名)、ピリデート (pyridate/一般名)、ピリフタリド (pyrifthalid/一般名)、ピリミノバックメチル (pyriminobac-methyl/一般名)、ピリミスルファン (pyrimisulfan/一般名)、ピリチオバックナトリウム (pyrithiobac sodium/一般名)、ピロキサスルホン (pyroxasulfone/一般名)、ピロキシスラム (pyroxsulam/一般名)、キンクロラック (quinclorac/一般名)、キンメ

10

20

30

40

50

ラック (quinmerac / 一般名)、キノクラミン (quinoclamine / 一般名)、キザロホップ (quizalofop / 一般名)、キザロホップエチル (quizalofop-ethyl / 一般名)、キザロホップテフルル (quizalofop-tefuryl / 一般名)、Pキザロホップ (quizalofop P / 一般名)、Pキザロホップエチル (quizalofop P-ethyl / 一般名)、Pキザロホップテフルル (quizalofop P-tefuryl / 一般名)、リムスルフロン (rim sulfuron / 一般名)、サフルフェナシル (saflufenacil / 一般名)、セトキシジム (sethoxydim / 一般名)、シデュロン (siduron / 一般名)、シマジン (simazine / 一般名)、シメトリン (simetryn / 一般名)、SL-261 (試験名)、スルコトリオン (sulcotrione / 一般名)、スルフエントラゾン (sulfentrazone / 一般名)、スルフォメツロンメチル (sulfometuron methyl / 一般名)、スルフォスルフロン (sulfosulfuron / 一般名)、TCBA (2, 3, 6-TBA / 一般名)、TCBAの塩およびエステル (2, 3, 6-TBA salts and esters)、TCTP (chlorthal-dimethyl, tetorachlorothio-
 phene / 一般名)、テブタム (tebutam / 一般名)、テブティウロン (tebuthiuron / 一般名)、テフルルトリオン (tefuryltrione / 一般名)、テンボトリオン (tembotrione / 一般名)、テブラロキシジム (tepraloxym / 一般名)、ターバシル (terbacil / 一般名)、ターブメトン (terbumeton / 一般名)、ターブチラジン (terbutylazine / 一般名)、ターブトリン (terbutryn / 一般名)、テトラピオン (tetrapion / flupropanate / 一般名)、テニルクロール (thenylchlor / 一般名)、チアザフルロン (thiazafuron / 一般名)、チアゾピル (thiazopyr / 一般名)、チジアジミン (thidiazimin / 一般名)、チジアズロン (thidiazuron / 一般名)、チエンカルバゾンメチル (thiencarbazone-methyl / 一般名)、チフェンスルフロンメチル (thifensulfuron-methyl / 一般名)、トルピラレート (tolpyralate / 一般名)、トプラメゾン (topramezon / 一般名)、トラルコキシジム (tralkoxydim / 一般名)、トリアファモン (triafamone / 一般名)、トリアレート (triallate / 一般名)、トリアスルフロン (triasulfuron / 一般名)、トリアジフラム (triaziflam / 一般名)、トリベニユロンメチル (tribenuron-methyl / 一般名)、トリクロピル (tricyclopyr / 一般名)、トリクロピルの塩およびエステル (tricyclopyr salts and esters)、トリディファン (tridiphane / 一般名)、トリエタジン (trietazine / 一般名)、トリフルディモキサジン (trifludimoxadin / 一般名)、トリフロキシスルフロン (trifloxysulfuron / 一般名)、トリフルラリン (trifluralin / 一般名)、トリフルスルフロンメチル (triflusulfuron methyl / 一般名)、トリトスルフロン (tritofluron / 一般名)、2, 4-PA (一般名)、2, 4-PAの塩およびエステル (2, 4-PA salts and esters)、2, 4-DB (一般名)、2, 4-DBの塩およびエステル (2, 4-DB salts and esters) 等が挙げられる。これらの成分は単独でまたは2種以上混合して使用することができ、混合する場合の比も自由に選択できる。

【0100】

薬害軽減剤としては、例えば、AD-67、ベノキサコル (benoxacor / 一般名)、クロキントセツトメキシル (cloquintocet-mexyl / 一般名)、シオメトリニル (cyomerinil / 一般名)、ジクロルミド (dichlormid / 一般名)、ジシクロノン (dicyclonone / 一般名)、シプロスルファミド (cyprosulfamide / 一般名)、ジエトレート (diethorate / 一般名)、DKA-24、ダイムロン (dymron / 一般名)、フェンクロラゾールエチ

10

20

30

40

50

ル (f e n c l o r a z o l e - e t h y l / 一 般 名) 、 フェンクロリム (f e n c l o r i m / 一 般 名) 、 ヘキシム (H E X I M / 一 般 名) 、 フルラゾール (f l u r a z o l e / 一 般 名) 、 フルキソフェニム (f l u x o f e n i m / 一 般 名) 、 フリラゾール (f u r i l a z o l e / 一 般 名) 、 イソキサジフェン (i s o x a d i f e n / 一 般 名) 、 イソキサジフェンエチル (i s o x a d i f e n e t h y l / 一 般 名) 、 MCPA、メコプロップ (m e c o p r o p / 一 般 名) 、 メフェンピル (m e f e n p y r / 一 般 名) 、 メフェンピルエチル (m e f e n p y r - e t h y l / 一 般 名) 、 メフェンピルジエチル (m e f e n p y r - d i e t h y l / 一 般 名) 、 メフェネート (m e p h e n a t e / 一 般 名) 、 MG - 191、NA (N a p h t h a l i c a n h y d r i d e) 、 OM (O c t a m e t h y l e n e d i a m i n e) 、 オキサベトリニル (o x a b e t r i n i l / 一 般 名) 、 PPG - 1292、R - 29148等が挙げられる。これらの成分は単独でまたは2種以上混合して使用することができ、混合する場合の比も自由に選択できる。

10

【0101】

本発明化合物を除草剤として施用するにあたっては、通常適当な固体担体又は液体担体と混合し、更に所望により界面活性剤、浸透剤、展着剤、増粘剤、凍結防止剤、結合剤、固結防止剤、崩壊剤及び分解防止剤等を添加して、水和剤、乳剤、フロアブル剤、ドライフロアブル剤、液剤、粉剤、粒剤又はゲル剤等任意の剤型の製剤にて実用に供することができる。また、省力化及び安全性向上の観点から、上記任意の剤型の製剤を水溶性包装体に封入して供することもできる。

20

【0102】

固体担体としては、例えば石英、カオリナイト、パイロフィライト、セリサイト、タルク、ベントナイト、酸性白土、アタパルジャイト、ゼオライト及び珪藻土等の天然鉱物質類、炭酸カルシウム、硫酸アンモニウム、硫酸ナトリウム及び塩化カリウム等の無機塩類、合成珪酸並びに合成珪酸塩が挙げられる。

【0103】

液体担体としては、例えばエチレングリコール、プロピレングリコール及びイソプロパノール等のアルコール類、キシレン、アルキルベンゼン及びアルキルナフタレン等の芳香族炭化水素類、ブチルセロソルブ等のエーテル類、シクロヘキサノン等のケトン類、ブチロラクトン等のエステル類、N - メチルピロリドン、N - オクチルピロリドン等の酸アミド類、大豆油、なたね油、綿実油及びヒマシ油等の植物油並びに水が挙げられる。

30

【0104】

これら固体及び液体担体は、単独で用いても2種以上を併用してもよい。

【0105】

界面活性剤としては、例えばポリオキシエチレンアルキルエーテル、ポリオキシエチレンアルキルアリアルエーテル、ポリオキシエチレンスチリルフェニルエーテル、ポリオキシエチレンポリオキシプロピレンブロックコポリマー、ポリオキシエチレン脂肪酸エステル、ソルビタン脂肪酸エステル及びポリオキシエチレンソルビタン脂肪酸エステル等のノニオン性界面活性剤、アルキル硫酸塩、アルキルベンゼンスルホン酸塩、リグニンスルホン酸塩、アルキルスルホコハク酸塩、ナフタレンスルホン酸塩、アルキルナフタレンスルホン酸塩、ナフタレンスルホン酸のホルマリン縮合物の塩、アルキルナフタレンスルホン酸のホルマリン縮合物の塩、ポリオキシエチレンアルキルアリアルエーテル硫酸及び燐酸塩、ポリオキシエチレンスチリルフェニルエーテル硫酸及び燐酸塩、ポリカルボン酸塩及びポリスチレンスルホン酸塩等のアニオン性界面活性剤、アルキルアミン塩及びアルキル4級アンモニウム塩等のカチオン性界面活性剤並びにアミノ酸型及びペタイン型等の両性界面活性剤が挙げられる。

40

【0106】

これら界面活性剤の含有量は、特に限定されるものではないが、本発明の製剤100質量部に対し、通常0.05から20質量部の範囲が望ましい。また、これら界面活性剤は、単独で用いても2種以上を併用してもよい。

50

【 0 1 0 7 】

本発明化合物は必要に応じて製剤又は散布時に他種の除草剤、各種殺虫剤、殺菌剤、植物生長調節剤又は共力剤等と混合施用してもよい。

【 0 1 0 8 】

特に、他の除草剤と混合施用することにより、施用薬量の減少による低コスト化、混合薬剤の相乗作用による殺草スペクトラムの拡大や、より高い殺草効果が期待できる。この際、同時に複数の公知除草剤との組み合わせも可能である。

【 0 1 0 9 】

本発明化合物の施用薬量は適用場面、施用時期、施用方法、栽培作物等により差異はあるが一般には有効成分量としてヘクタール (h a) 当たり 0 . 0 0 5 から 5 0 k g 程度が適当である。

10

【 0 1 1 0 】

次に本発明化合物を用いる場合の製剤の配合例を示す。但し本発明の配合例は、これら

水と和剤

本発明化合物	0 . 1 ~ 8 0 部
固体担体	5 ~ 9 8 . 9 部
界面活性剤	1 ~ 1 0 部
その他	0 ~ 5 部

その他として、例えば固結防止剤、分解防止剤等が挙げられる。

20

乳 剤

本発明化合物	0 . 1 ~ 3 0 部
液体担体	4 5 ~ 9 5 部
界面活性剤	4 . 9 ~ 1 5 部
その他	0 ~ 1 0 部

その他として、例えば展着剤、分解防止剤等が挙げられる。

フロアブル (f l o w a b l e) 剤

本発明化合物	0 . 1 ~ 7 0 部
液体担体	1 5 ~ 9 8 . 8 9 部
界面活性剤	1 ~ 1 2 部
その他	0 . 0 1 ~ 3 0 部

その他として、例えば凍結防止剤、増粘剤等が挙げられる。

30

ドライフロアブル (d r y f l o w a b l e) 剤

本発明化合物	0 . 1 ~ 9 0 部
固体担体	0 ~ 9 8 . 9 部
界面活性剤	1 ~ 2 0 部
その他	0 ~ 1 0 部

その他として、例えば結合剤、分解防止剤等が挙げられる。

液 剤

本発明化合物	0 . 0 1 ~ 7 0 部
液体担体	2 0 ~ 9 9 . 9 9 部
その他	0 ~ 1 0 部

その他として、例えば凍結防止剤、展着剤等が挙げられる。

40

粒 剤

本発明化合物	0 . 0 1 ~ 8 0 部
固体担体	1 0 ~ 9 9 . 9 9 部
その他	0 ~ 1 0 部

その他として、例えば結合剤、分解防止剤等が挙げられる。

粉 剤

本発明化合物	0 . 0 1 ~ 3 0 部
--------	-----------------

50

固体担体 65 ~ 99 . 99 部

その他 0 ~ 10 部

その他として、例えばドリフト防止剤、分解防止剤等が挙げられる。

【0111】

使用に際しては上記製剤をそのまま、又は水で1 ~ 10000倍に希釈して散布する。

【0112】

製剤例

次に具体的に本発明化合物を有効成分とする農薬製剤例を示すがこれらのみに限定されるものではない。尚、以下の配合例において「部」は質量部を意味する。

〔配合例1〕水和剤

本発明化合物 No. 1 - 001	20 部
パイロフィライト	76 部
ソルポール 5039	2 部
(アニオン性界面活性剤：東邦化学工業(株)商品名)	
カープレックス # 80	2 部
(合成含水珪酸：塩野義製薬(株)商品名)	

以上を均一に混合粉碎して水和剤とする。

〔配合例2〕乳剤

本発明化合物 No. 1 - 001	5 部
キシレン	75 部
N-メチルピロリドン	15 部
ソルポール 2680	5 部
(アニオン性界面活性剤：東邦化学工業(株)商品名)	

以上を均一に混合して乳剤とする。

〔配合例3〕フロアブル剤

本発明化合物 No. 1 - 001	25 部
アグリゾール S - 710	10 部
(非イオン性界面活性剤：花王(株)商品名)	
ルノックス 1000C	0.5 部
(アニオン性界面活性剤：東邦化学工業(株)商品名)	
キサントガム	0.02 部
水	64.48 部

以上を均一に混合した後、湿式粉碎してフロアブル剤とする。

〔配合例4〕ドライフロアブル剤

本発明化合物 No. 1 - 001	75 部
ハイテノール NE - 15	5 部
(アニオン性界面活性剤：第一工業製薬(株)商品名)	
バニレックス N	10 部
(アニオン性界面活性剤：日本製紙(株)商品名)	
カープレックス # 80	10 部
(合成含水珪酸：塩野義製薬(株)商品名)	

以上を均一に混合粉碎した後、少量の水を加えて攪拌混合捏和し、押出式造粒機で造粒し、乾燥してドライフロアブル剤とする。

〔配合例5〕粒剤

本発明化合物 No. 1 - 001	1 部
ベントナイト	55 部
タルク	44 部

以上を均一に混合粉碎した後、少量の水を加えて攪拌混合捏和し、押出式造粒機で造粒し、乾燥して粒剤とする。

10

20

30

40

50

【実施例】

【0113】

以下に本発明の除草剤において、活性成分として用いられる式(1)で表されるケトン若しくはオキシム化合物の合成例、試験例を実施例として具体的に述べることで、本発明を更に詳しく説明するが、本発明はこれらによって限定されるものではない。

【0114】

合成例に記載した中圧分取液体クロマトグラフィーは、山善社製、中圧分取装置；Y F L C - W p r e p (流速18 ml/min、シリカゲル40 μmのカラム)を使用した。

【0115】

また、実施例のプロトン核磁気共鳴ケミカルシフト値は、基準物質としてMe₄Si(テトラメチルシラン)を用い、300 MHzにて測定した。また測定に使用した溶媒を以下の合成例中に記載する。また、実施例のプロトン核磁気共鳴ケミカルシフト値における記号は、下記の意味を表す。

s : シングレット、b r s : ブロードシングレット、d : ダブレット、t : トリプレット、q : カルテット、m : マルチプレット

合成例

合成例1 : 2 - [5 - { (6 - クロロキノキサリン - 2 - イル) オキシ } - 2 - メトキシフェニル] - 3 - メトキシ - 5 - { 2 - (メトキシイミノ) プロピル } シクロペンタ - 2 - エン - 1 - オンの製造 (化合物No.1-002)

工程1 : メチル 2 - { 3 - (5 - プロモ - 2 - メトキシフェニル) - 4 - ヒドロキシ - 2 - オキシシクロペンタ - 3 - エン - 1 - イル } - 3 - オキソブタノエートの製造

アセト酢酸メチル1.45 g 及びアセトニトリル60 mlの混合溶液に、炭酸カリウム17.7 gを添加し、室温にて30分間攪拌した。この混合溶液に、別途調整した2 - (5 - プロモ - 2 - メトキシフェニル) シクロペンタ - 4 - エン - 1 , 3 - ジオン3 g 及びアセトニトリル60 mlの混合溶液を添加し、室温にて15分間攪拌した。反応終了後、該反応溶液の溶媒を留去した後、1 mol/L塩酸60 mlを添加し、酢酸エチル60 mlにて抽出した。得られた有機層を、飽和食塩水次いで無水硫酸ナトリウムで脱水・乾燥後、減圧下にて溶媒を留去した。得られた残留物をn - ヘキサン : 酢酸エチル [3 : 1 ~ 1 : 1 (体積比、以下同じである。) のグラジエント] にて溶出する中圧分取液体クロマトグラフィーにて精製し、目的物4.3 gを白色固体として得た。

融点 ; 122 - 125

工程2 : 2 - (5 - プロモ - 2 - メトキシフェニル) - 3 - ヒドロキシ - 5 - (2 - オキソプロピル) シクロペンタ - 2 - エン - 1 - オンの製造

メチル 2 - { 3 - (5 - プロモ - 2 - メトキシフェニル) - 4 - ヒドロキシ - 2 - オキシシクロペンタ - 3 - エン - 1 - イル } - 3 - オキソブタノエート0.3 g、メタノール2 ml 及び水2 mlの混合溶液に、水酸化カリウム0.15 gを添加し、室温にて5時間攪拌した。反応終了後、該反応溶液の溶媒を減圧下にて留去した。得られた残留物に水5 mlを添加し、次いで濃塩酸を添加してpH 1とした。該反応混合物を酢酸エチル7 mlにて抽出した。得られた有機層を、飽和食塩水次いで無水硫酸ナトリウムの順で脱水・乾燥し、減圧下にて溶媒を留去することにより、目的物0.25 gを薄黄色固体として得た。

融点 ; 160 - 164

工程3 : 2 - (5 - プロモ - 2 - メトキシフェニル) - 3 - ヒドロキシ - 5 - { 2 - (メトキシイミノ) プロピル } シクロペンタ - 2 - エン - 1 - オンの製造

2 - (5 - プロモ - 2 - メトキシフェニル) - 3 - ヒドロキシ - 5 - (2 - オキソプロピル) シクロペンタ - 2 - エン - 1 - オン0.25 g、メタノール4 ml 及び水1 mlの混合溶媒に、O - メチルヒドロキシルアミン 塩酸塩94 mgを添加し、室温にて2時間攪拌した。反応終了後、該反応溶液の溶媒を減圧下にて留去した。得られた残留物に水7 mlを添加した後、酢酸エチル7 mlにて抽出した。得られた有機層を飽和食塩水次いで無水硫酸ナトリウムの順で脱水・乾燥し、減圧下にて溶媒を留去することにより、目的物

10

20

30

40

50

0.24 g を白色固体として得た。

融点；149 - 153

工程4：2 - (5 - ブロモ - 2 - メトキシフェニル) - 3 - メトキシ - 5 - { 2 - (メトキシイミノ) プロピル } シクロペンタ - 2 - エン - 1 - オンの製造

2 - (5 - ブロモ - 2 - メトキシフェニル) - 3 - ヒドロキシ - 5 - { 2 - (メトキシイミノ) プロピル } シクロペンタ - 2 - エン - 1 - オン 3.5 g 及び N, N - ジメチルホルムアミド 95 ml の混合溶液に、炭酸カリウム 2 g 次いでジメチル硫酸 1.8 g を順次添加し、室温にて45分間撹拌した。反応終了後、該反応溶液に水 100 ml を添加し、酢酸エチル 100 ml にて抽出した。得られた有機層を水洗した後、飽和食塩水次いで無水硫酸ナトリウムで脱水・乾燥後、減圧下にて溶媒を留去した。得られた残留物を n - ヘキサン - 酢酸エチル (15 : 1 ~ 1 : 3 のグラジエント) にて溶出する中圧分取液体クロマトグラフィーにて精製し、目的物 3.2 g を黄色油状物として得た。

$^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3)$; 7.44-7.33 (m, 1H), 7.27-7.21 (m, 1H), 6.86-6.72 (m, 1H), 3.85 and 3.84 and 3.67 and 3.66 (s, 6H), 3.76 and 3.75 (s, 3H), 3.23-3.10 and 2.98-2.49 (m, 4H), 2.43-2.20 (m, 1H), 1.92 and 1.87 (s, 3H).

工程5：3 - メトキシ - 2 - { 2 - メトキシ - 5 - (4, 4, 5, 5 - テトラメチル - 1, 3, 2 - ジオキサボロラン - 2 - イル) フェニル } - 5 - { 2 - (メトキシイミノ) プロピル } シクロペンタ - 2 - エン - 1 - オンの製造

2 - (5 - ブロモ - 2 - メトキシフェニル) - 3 - メトキシ - 5 - { 2 - (メトキシイミノ) プロピル } シクロペンタ - 2 - エン - 1 - オン 1 g、ビス(ピナコラト)ジボロン 1 g、1, 4 - ジオキサン 5 ml の混合溶液に、酢酸カリウム 0.38 g、2 - ジシクロヘキシルホスフィノ - 2', 6' - ジメトキシビフェニル 0.21 g、[1, 1' - ビス(ジフェニルホスフィノ)フェロセン]パラジウム (II) ジクロリド ジクロロメタン付加物 0.24 g を順次添加した。添加終了後、該反応容器中を窒素ガスで置換した後、85 にて3時間撹拌した。反応終了後、該反応混合物に水 3 ml を添加した後、酢酸エチル 20 ml で抽出した。得られた有機層を、飽和食塩水次いで無水硫酸ナトリウムで脱水・乾燥後、減圧下にて溶媒を留去した。得られた残留物を n - ヘキサン - 酢酸エチル (8 : 1 ~ 1 : 3 のグラジエント) にて溶出する中圧分取液体クロマトグラフィーにて精製し、目的物 1.1 g を橙色油状物として得た。

$^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3)$; 7.83-7.70 (m, 1H), 7.60-7.50 (m, 1H), 6.98-6.85 (m, 1H), 3.94-3.60 (m, 9H), 2.97-2.43 (m, 3H), 2.31-2.14 (m, 2H), 1.99-1.83 (m, 3H), 1.31 and 1.24 (s, 12H).

工程6：2 - (5 - ヒドロキシ - 2 - メトキシフェニル) - 3 - メトキシ - 5 - { 2 - (メトキシイミノ) プロピル } シクロペンタ - 2 - エン - 1 - オンの製造

3 - メトキシ - 2 - { 2 - メトキシ - 5 - (4, 4, 5, 5 - テトラメチル - 1, 3, 2 - ジオキサボロラン - 2 - イル) フェニル } - 5 - { 2 - (メトキシイミノ) プロピル } シクロペンタ - 2 - エン - 1 - オン 0.9 g 及びテトラヒドロフラン 9 ml の混合溶液を 0 に冷却して、水酸化ナトリウム 0.25 g、30 重量% 過酸化水素水 0.6 ml を順次添加した。添加終了後、室温にて40分間撹拌した。反応終了後、該反応溶液に、水 10 ml を添加して、酢酸エチル 10 ml にて抽出した。得られた有機層を、飽和食塩水次いで無水硫酸ナトリウムで脱水・乾燥後、減圧下にて溶媒を留去した。得られた残留物を n - ヘキサン - 酢酸エチル (3 : 1 ~ 1 : 3 のグラジエント) にて溶出する中圧分取液体クロマトグラフィーにて精製し、目的物 0.19 g を黄色油状物として得た。

$^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3)$; 6.80-6.50 (m, 3H), 3.95-3.60 (m, 9H), 3.22-2.20 (m, 5H), 1.94 and 1.92 and 1.87 and 1.86 (s, 3H) (OHのシグナルは観測されなかった)。

工程7：2 - [5 - { (6 - クロロキノキサリン - 2 - イル) オキシ } - 2 - メトキシフェニル] - 3 - メトキシ - 5 - { 2 - (メトキシイミノ) プロピル } シクロペンタ - 2 - エン - 1 - オンの製造

2 - (5 - ヒドロキシ - 2 - メトキシフェニル) - 3 - メトキシ - 5 - { 2 - (メトキシイミノ) プロピル } シクロペンタ - 2 - エン - 1 - オン 0.19 g 及びアセトニトリル

3 ml の混合溶液に、炭酸カリウム 0.25 g 及び 2,6-ジクロロキノキサリン 0.13 g を添加した。添加終了後、80 にて 2 時間攪拌した。反応終了後、該反応溶液を室温まで放冷した後、水 7 ml を添加し、酢酸エチル 7 ml で抽出した。得られた残留物を n-ヘキサン-酢酸エチル (8:1~1:2 のグラジエント) にて溶出する中圧分取液体クロマトグラフィーにて精製し、目的物 0.25 g を黄色油状物として得た。

$^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3)$; 8.71-8.67 (m, 1H), 8.09-8.02 (m, 1H), 7.73-7.57 (m, 2H), 7.26-7.18 (m, 1H), 7.10-7.04 (m, 1H), 7.00-6.92 (m, 1H), 3.93-3.79 (m, 9H), 3.22-3.11 and 2.98-2.20 (m, 5H), 1.93 and 1.92 and 1.86 (s, 3H).

合成例 2: 2-[5-{(6-クロロキノキサリン-2-イル)オキシ}-2-メトキシフェニル]-3-ヒドロキシ-5-(2-オキソプロピル)シクロペンタ-2-エン-1-オンの製造 (化合物 No.2-001)

2-[5-{(6-クロロキノキサリン-2-イル)オキシ}-2-メトキシフェニル]-3-メトキシ-5-{2-(メトキシイミノ)プロピル}シクロペンタ-2-エン-1-オン 0.12 g 及びアセトン 2 ml の混合溶液に、2 M 塩酸水溶液 1 ml を添加した。添加終了後、該反応混合物を 60 にて 40 分間攪拌した。反応終了後、該反応混合物に酢酸エチル 5 ml を添加し、有機層を取り出した。得られた有機層を水洗した後、無水硫酸ナトリウムにて脱水・乾燥後、減圧下にて溶媒を留去し、目的物 65 mg を黄白色固体として得た。

融点; 161 - 165

合成例 3: 2-[5-{(6-クロロキノキサリン-2-イル)オキシ}-2-メトキシフェニル]-3-ヒドロキシ-5-{2-(メトキシイミノ)プロピル}シクロペンタ-2-エン-1-オンの製造 (化合物 No.1-001)

2-[5-{(6-クロロキノキサリン-2-イル)オキシ}-2-メトキシフェニル]-3-ヒドロキシ-5-(2-オキソプロピル)シクロペンタ-2-エン-1-オン 50 mg、メタノール 1.5 ml 及び水 0.5 ml の混合溶液に、O-メチルヒドロキシルアミン 塩酸塩 14 mg を添加した。添加終了後、該反応混合物を室温にて 2 時間攪拌した。反応終了後、該反応混合物から減圧下にて溶媒を留去した。得られた残留物に酢酸エチル 5 ml を添加した後、水洗した。得られた有機層を、飽和食塩水次いで無水硫酸ナトリウムの順で脱水・乾燥し、減圧下にて溶媒を留去した。得られた残留物を n-ヘキサン-酢酸エチル (1:1~1:2 のグラジエント) にて溶出するシリカゲルクロマトグラフィーにて精製し、目的物 19 mg を黄色油状物として得た。

$^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3)$; 10.52 and 9.24 (brs, 1H), 8.72-8.67 (m, 1H), 8.08-8.03 (m, 1H), 7.87-7.82 and 7.50-7.46 (m, 1H), 7.77-7.69 (m, 1H), 7.62-7.57 (m, 1H), 7.25-7.18 (m, 1H), 7.13-7.01 (m, 1H), 4.00 and 3.92 (s, 3H), 3.88 and 3.82 (s, 3H), 2.98-2.68 (m, 3H), 2.58-2.48 (m, 1H), 2.38-2.18 (m, 1H), 1.98-1.82 (m, 3H).

反応例 1: 2-(5-プロモ-2-メトキシフェニル)シクロペンタ-4-エン1,3-ジオンの製造

工程 1: (5-プロモ-2-メトキシフェニル)(フラン-2-イル)メタノールの製造

フラン 36.6 g 及び 5-プロモ-2-メトキシベンズアルデヒド 105 g を、国際公開第 2016/098899 号記載の方法で反応させることにより、目的物 105 g を黄色油状物として得た。

$^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3)$; 7.52-7.41 (m, 1H), 7.40-7.26 (m, 2H), 6.77 (d, J=8.8Hz, 1H), 6.31-6.29 (m, 1H), 6.15-6.09 (m, 1H), 6.04-6.01 (m, 1H), 3.79 (s, 1H), 2.98 (brs, 1H).

工程 2: 5-(5-プロモ-2-メトキシフェニル)-4-ヒドロキシシクロペンタ-2-エン-1-オンの製造

(5-プロモ-2-メトキシフェニル)(フラン-2-イル)メタノール 105 g を、国際公開第 2016/098899 号記載の方法で反応させることにより、目的物 100 g を黒色油状物として得た。

10

20

30

40

50

$^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3)$; .7.60-7.55 (m, 1H), 7.42-7.24 (m, 2H), 6.77-6.72 (m, 1H), 6.35-6.30 (m, 1H), 5.00 (brs, 1H), 3.72 (s, 3H), 3.41-3.40 (m, 1H).

工程 3 : 2 - (5 - プロモ - 2 - メトキシフェニル) シクロペンタ - 4 - エン - 1 , 3 - ジオンの製造

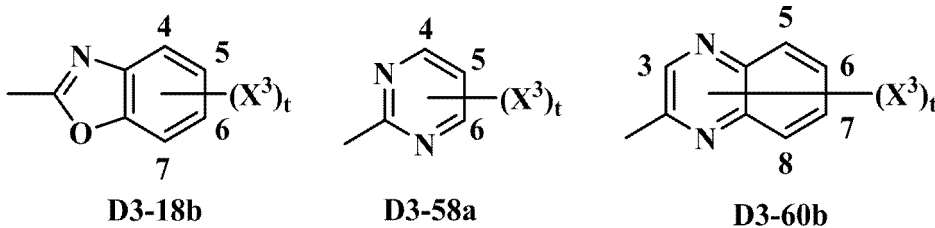
5 - (5 - プロモ - 2 - メトキシフェニル) - 4 - ヒドロキシシクロペンタ - 2 - エン - 1 - オン 100 g を、国際公開第 2016 / 098899 号記載の方法で反応させることにより、目的物 22.7 g を黄色固体として得た。

融点 ; 123 - 125

本発明化合物は、前記合成例に準じて合成することができる。合成例 1 乃至合成例 3 と同様に製造した本発明化合物の例を第 5 表及び第 6 表に示すが、本発明はこれらのみに限られるものではない。表中、Me との記載はメチル基を表し、D3 - 18b、D3 - 58a、D3 - 60b で表される構造は下記の構造を表す。尚、構造式において記載した番号は、置換基 X^3 の置換位置を表すものであり、例えば表中、「D3 - 60b (6 - C1)」との記載は「6 - クロロキノキサリン - 2 - イル基」を表す。

【 0 1 1 6 】

【 化 1 9 】

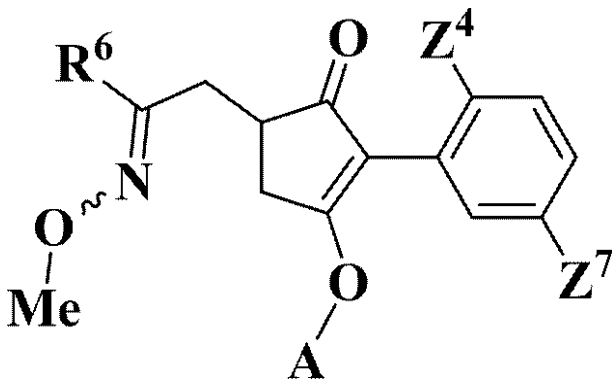


【 0 1 1 7 】

[第 5 表]

【 0 1 1 8 】

【 化 2 0 】



【 0 1 1 9 】

No.	Z ⁴	Z ⁷	A	R ⁶	m.p. ()
1-001	MeO	O[D3-60b(6-C1)]	H	Me	*1
1-002	MeO	O[D3-60b(6-C1)]	Me	Me	*1
1-003	MeO	O[D3-18b(6-C1)]	Me	Me	*1
1-004	MeO	O[D3-58a(5-C1)]	Me	Me	*1
1-005	MeO	O[D3-58a(5-C1)]	H	Me	*1

[第 6 表]

【 0 1 2 0 】

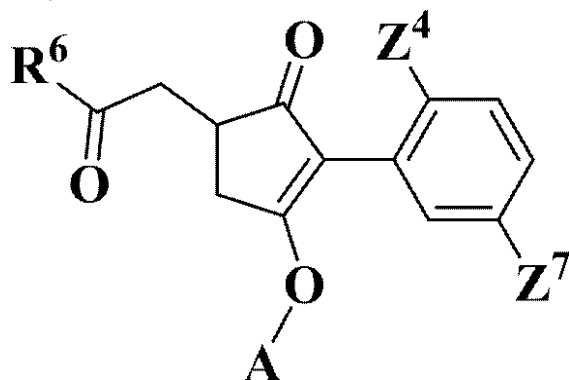
10

20

30

40

【化 2 1】



10

【 0 1 2 1】

No.	Z ⁴	Z ⁷	A	R ⁶	m.p.()
2-001	MeO	O[D3-60b(6-Cl)]	H	Me	161-165
2-002	MeO	O[D3-58a(5-Cl)]	H	Me	*1

本発明化合物のうち、融点の記載のない化合物の¹H-NMRデータを第7表に示す。

【 0 1 2 2】

20

尚、プロトン核磁気共鳴ケミカルシフト値は、基準物質としてMe₄Si(テトラメチルシラン)を用い、重クロロホルム溶媒中で、300MHzにて測定した。また、第7表の記号は下記の意味を表す。s:シングレット、brs:ブロードシングレット、d:ダブルレット、t:トリプレット、m:マルチプレット。また、2種以上の構造異性体が存在する場合に解析が可能なシグナルについて、各々のケミカルシフト値を「and」で標記した。

【 0 1 2 3】

〔第7表〕

No. ¹H-NMR (CDCl₃, Me₄Si, 300MHz)

30

1-001;

10.52 and 9.24 (brs, 1H), 8.72-8.67 (m, 1H), 8.08-8.03 (m, 1H), 7.87-7.82 and 7.50-7.46 (m, 1H), 7.77-7.69 (m, 1H), 7.62-7.57 (m, 1H), 7.25-7.18 (m, 1H), 7.13-7.01 (m, 1H), 4.00 and 3.92 (s, 3H), 3.88 and 3.82 (s, 3H), 2.98-2.68 (m, 3H), 2.58-2.48 (m, 1H), 2.38-2.18 (m, 1H), 1.98-1.82 (m, 3H).

1-002;

8.71-8.67 (m, 1H), 8.09-8.02 (m, 1H), 7.73-7.57 (m, 2H), 7.26-7.18 (m, 1H), 7.10-7.04 (m, 1H), 7.00-6.92 (m, 1H), 3.93-3.79 (m, 9H), 3.22-3.11 and 2.98-2.20 (m, 5H), 1.93 and 1.92 and 1.86 (s, 3H).

40

1-003;

7.65-7.12 (m, 5H), 7.03-6.87 (m, 1H), 4.00-3.69 (m, 9H), 3.33-2.16 (m, 5H), 1.99-1.83 (m, 3H).

1-004;

8.71-8.39 (m, 2H), 7.22-6.82 (m, 3H), 3.98-3.66 (m, 9H), 3.33-2.13 (m, 5H), 1.97-1.83 (m, 3H).

1-005;

8.56-8.41 (m, 2H), 7.87-7.40 (m, 1H), 7.21-6.91 (m, 2H), 4.05-3.72 (m, 6H), 3.42-2.15 (m, 5H), 1.98-1.81 (m, 3H). (OHに相当するシグナルは検出されなかった。)

2-002;

50

9.58-9.16 (m, 1H), 8.72-8.42 (m, 2H), 7.87-7.65 (m, 1H), 7.23-6.99 (m, 2H), 4.06-2.49 (m, 7H), 2.43-2.14 (m, 4H).

試験例

次に、本発明化合物の除草剤としての有用性について、以下の試験例において具体的に説明するが、本発明はこれらのみ限定されるものではない。

〔試験例1〕湛水条件における雑草発生前処理による除草効果試験

1 / 1 0 0 0 0 アールのワグネルポットに沖積土壌を入れた後、水を入れて混和し、水深4cmの湛水条件とした。ノビエ、ホタルイ及びコナギの種子を上記カップに混播した後、2.5葉期のイネ苗を移植した。播種当日、配合例2に準じて調製した本発明化合物の乳剤を所定の薬量になるように水で希釈し、水面に処理した。カップを25乃至30の温室内に置いて植物を育成し、薬剤処理3週間後に、各種植物に対する影響を下記の判定基準に従い調査した。結果を第8表に示す。

10

【0124】

判定基準

- 5 ... 殺草率 90%以上 (ほとんど完全枯死)
- 4 ... 殺草率 70%以上90%未満
- 3 ... 殺草率 40%以上70%未満
- 2 ... 殺草率 20%以上40%未満
- 1 ... 殺草率 5%以上20%未満
- 0 ... 殺草率 5%以下 (ほとんど効力なし)

20

〔試験例2〕湛水条件における雑草生育期処理による除草効果試験

1 / 1 0 0 0 0 アールのワグネルポットに沖積土壌を入れた後、水を入れて混和し、水深4cmの湛水条件とした。ノビエ、ホタルイ及びコナギの種子を上記カップに混播し、25乃至30の温室内に置いて植物を育成した。ノビエ、ホタルイ及びコナギが1乃至2葉期に達したとき、配合例2に準じて調製した本発明化合物の乳剤を所定の薬量になるように水で希釈し、水面に処理した。薬剤処理3週間後に、各種植物に対する影響を試験例1の判定基準に従って調査した。結果を第9表に示す。

〔試験例3〕茎葉処理による除草効果試験

1 / 1 0 0 0 0 アールのワグネルポットに沖積土壌を入れた後、水を入れて混和し、水深0.1乃至0.5cmの条件とした。イヌビエ、アゼガヤ、タマガヤツリ及びイネの種子を播種し、25乃至30の温室内に置いて植物を育成した。14日間育成したのち、配合例2に準じて調製した本発明化合物の乳剤を所定の薬量になるように水で希釈し、茎葉部へ小型スプレーで均一に処理した。薬剤処理3週間後に、各種植物に対する影響を試験例1の判定基準に従って調査した。結果を第10表に示す。

30

〔試験例4〕土壌処理による除草効果試験

縦21cm、横13cm、深さ7cmのプラスチック製箱に殺菌した洪積土壌を入れ、メヒシバ、エノコログサ、イヌビエ、カラスムギ、ブラックグラス、イタリアンライグラス、セイヨウヌカボ、イチビ、アオゲイトウ、シロザ、ハコベ、ヤエムグラ、オオイヌノフグリ、トウモロコシ、ダイズ、イネ、コムギ、ビート及びナタネの種子をそれぞれスポット状に播種し、約1.5cm覆土した。次いで配合例2に準じて調製した本発明化合物の乳剤を所定の薬量になるように水で希釈し、土壌表面へ小型スプレーで均一に処理した。プラスチック製箱を25乃至30の温室内に置いて植物を育成し、薬剤処理3週間後に、各種植物に対する影響を試験例1の判定基準に従って調査した。結果を第11表に示す。

40

〔試験例5〕茎葉処理による除草効果試験

縦21cm、横13cm、深さ7cmのプラスチック製箱に殺菌した洪積土壌を入れ、メヒシバ、エノコログサ、イヌビエ、カラスムギ、ブラックグラス、イタリアンライグラス、セイヨウヌカボ、イチビ、アオゲイトウ、シロザ、ハコベ、ヤエムグラ、オオイヌノフグリ、トウモロコシ、ダイズ、イネ、コムギ、ビート及びナタネの種子をそれぞれスポット状に播種し、約1.5cm覆土した後、25乃至30の温室内において植物を育成した。1

50

4日間育成したのち、配合例2に準じて調製した本発明化合物の乳剤を所定の薬量になるように水で希釈し、茎葉部へ小型スプレーで均一に処理した。薬剤処理3週間後に、各種植物に対する影響を試験例1の判定基準に従って調査した。結果を第12表に示す。

【0125】

尚、第8表乃至第12表中の記号は以下の意味を表す。

A：ノビエ、B：ホタルイ、C：コナギ、D：アゼガヤ、E：コゴメガヤツリ、F：メヒシバ、G：エノコログサ、H：イヌビエ、I：カラスムギ、J：ブラックグラス、K：イタリアンライグラス、L：セイヨウヌカボ、M：イチビ、N：アオゲイトウ、O：シロザ、P：ハコベ、Q：ヤエムグラ、R：オオイヌノフグリ、a：移植イネ、b：直播イネ、c：トウモロコシ、d：ダイズ、e：コムギ、f：ビート、g：ナタネ

10

また処理薬量(g/ha)とは、1ヘクタール(1ha)あたりに換算したときに、記載した数値のグラム(g)数だけ処理されるように濃度を調整したことを表す。

【0126】

〔第8表〕

No.	処理薬量 (g/ha)	A	B	C	a
1-001	320	5	2	2	5
1-002	320	2	0	0	0

20

〔第9表〕

No.	処理薬量 (g/ha)	A	B	C
1-001	320	5	0	0
1-002	320	2	0	0

〔第10表〕

No.	処理薬量 (g/ha)	H	D	E	b
1-001	320	5	5	5	5
1-002	320	5	5	4	1

30

〔第11表〕

No.	処理薬量 (g/ha)	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P	Q	R	b	c	d	e	f	g
1-001	320	5	5	5	4	3	5	5	0	0	0	0	0	0	5	0	0	0	0	0

40

〔第12表〕

No.	処理薬量 (g/ha)	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P	Q	R	b	c	d	e	f	g
1-001	320	5	5	5	5	5	5	5	0	0	0	0	0	0	5	5	0	5	0	1

50

1-002 320 1 3 5 4 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 1 0 0 0 0

【産業上の利用可能性】

【0127】

本発明のケトン若しくはオキシム化合物は新規な化合物であり、イネ用、トウモロコシ用、ダイズ用、麦用、ビート用及びナタネ用の選択性除草剤として有用である。

フロントページの続き

(51) Int.Cl.		F I			テーマコード(参考)
A 0 1 N 43/54	(2006.01)	A 0 1 N	43/54		B
A 0 1 N 43/76	(2006.01)	A 0 1 N	43/76	1 0 1	

Fターム(参考) 4C056 AA01 AB01 AC02 AD03 AE03 CA15 CC01 CD05
4H011 AB01 BB09 BB10 DA16 DD02 DD03 DD04 DE15