

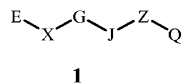
	(19) 대한민국특허청(KR) (12) 공개특허공보(A)	(11) 공개번호 10-2014-0017520 (43) 공개일자 2014년02월11일
(51) 국제특허분류(Int. Cl.) <i>A01N 37/18</i> (2006.01) <i>C07D 417/14</i> (2006.01) <i>A01N 43/80</i> (2006.01) <i>A01N 43/78</i> (2006.01) <i>A01P 3/00</i> (2006.01)		(71) 출원인 이 아이 듀폰 디 네모아 앤드 캄파니 미합중국 델라웨어주 (우편번호 19898) 월밍톤시 마아캣트 스트리트 1007
(21) 출원번호 10-2013-7018596		(72) 발명자 하나간, 매리, 앤 미국 19711 델라웨어주 뉴어크 컨트리 플라워 로드 108 세버야모, 질스 미국 19720 델라웨어주 뉴 캐슬 스톤브리지 불러바드 453
(22) 출원일자(국제) 2011년12월12일 심사청구일자 없음		(74) 대리인 김영, 양영준, 양영환
(85) 번역문제출일자 2013년07월16일		
(86) 국제출원번호 PCT/US2011/064324		
(87) 국제공개번호 WO 2012/082580 국제공개일자 2012년06월21일		
(30) 우선권주장 61/424,228 2010년12월17일 미국(US)		

전체 청구항 수 : 총 12 항

(54) 발명의 명칭 **살진균제 아조사이클릭 아미드**

(57) 요약

화학식 1의 화합물 (모든 입체 이성질체 포함), 이의 *N*-옥사이드 및 이의 염이 개시되어 있다:



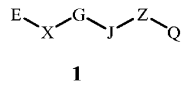
(여기서, E, X, G, J, Z, 및 Q는 본 명세서 및 특허청구범위에 정의된 바와 같다).

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

특허청구의 범위

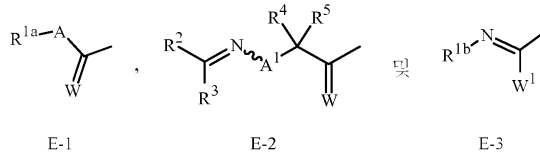
청구항 1

화학식 1로부터 선택되는 화합물, 이의 *N*-옥사이드 및 이의 염:



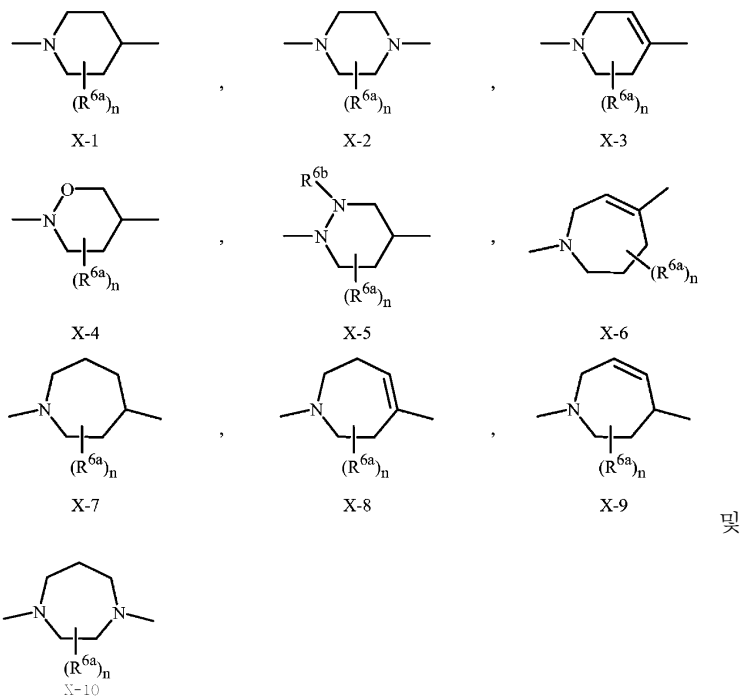
상기 식에서,

E는



로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 라디칼이고;

X는



(여기서, X 기는 좌측으로 뻗어있는 결합이 화학식 1의 E에 부착되고, 우측으로 뻗어있는 결합이 화학식 1의 G에 부착되도록 배향된다)로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 라디칼이며;

G는 탄소 원자 환 구성원 (ring member) 상에서 R^{29a} 및 질소 원자 환 구성원 상에서 R^{30a} 중에서 독립적으로 선택되는 3개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 5원 복소환이고;

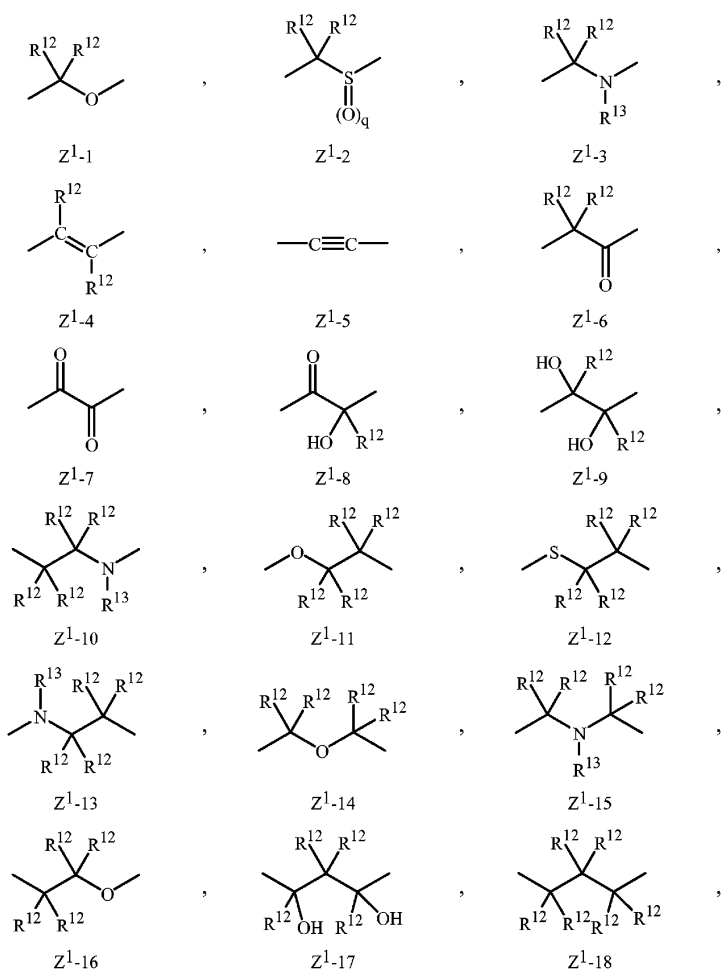
J는 각각 탄소 원자, 및 2개 이하의 O 원자, 2개 이하의 S 원자, 4개 이하의 N 원자 및 2개 이하의 Si 원자 중에서 독립적으로 선택되는 4개 이하의 헤테로 원자 중에서 선택되는 환 구성원 (여기서, 3개 이하의 탄소 원자 환 구성원은 C(=O) 및 C(=S) 중에서 독립적으로 선택되고, 황 원자 환 구성원은 S(=O)_s(=NR¹⁷)_t 중에서 독립적으로 선택되며, 규소 원자 환 구성원은 SiR¹⁰R¹¹ 중에서 독립적으로 선택된다)을 포함하고, R²³ 중에서 독립적으로 선택되는 5개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 5원, 6원 또는 7원 환, 8원 내지 11원 이환계 (bicyclic ring

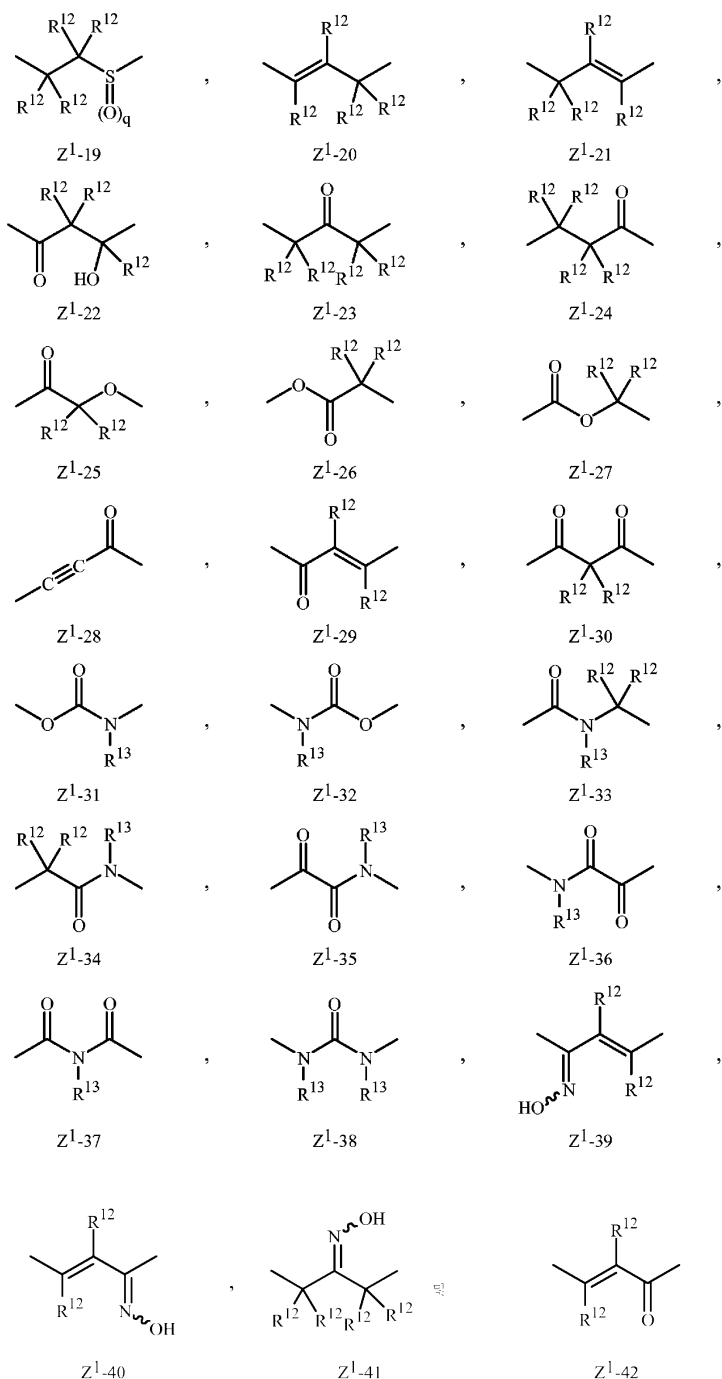
system) 또는 7원 내지 11원 스피로환계 (spirocyclic ring system)이며;

Z는 Z^1 ; 또는

각각 탄소 원자, 및 2개 이하의 O 원자, 2개 이하의 S 원자, 2개 이하의 N 원자 및 1개 이하의 Si 원자 중에서 독립적으로 선택되는 2개 이하의 헤테로 원자 중에서 선택되는 쉘 구성원 (여기서, 2개 이하의 탄소 원자 쉘 구성원은 C(=O), C(=S) 및 C(=NOH) 중에서 독립적으로 선택되고, 황 원자 쉘 구성원은 S(=O)_s(=NR¹⁷)_f 중에서 독립적으로 선택되며, 규소 원자 쉘 구성원은 SiR¹⁰R¹¹ 중에서 독립적으로 선택된다)을 포함하고, 탄소 원자 쉘 구성원 상에서 R¹² 및 질소 원자 쉘 구성원 상에서 R¹³ 중에서 독립적으로 선택되는 4개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 4원, 5원 또는 6원 포화 또는 불포화 쉘이며;

Z^1 은





(여기서, Z^1 기는 좌측으로 뻗어있는 결합이 화학식 1의 J에 부착되고, 우측으로 뻗어있는 결합이 화학식 1의 Q에 부착되도록 배향된다)로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 라디칼이고;

Q는 각각 탄소 원자 환 구성원 상에서 R^{9a} 중에서 독립적으로 선택되는 5개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 페닐 또는 나프탈레닐;

탄소 원자, 및 2개 이하의 O 원자, 2개 이하의 S 원자 및 4개 이하의 N 원자 중에서 독립적으로 선택되는 4개 이하의 헤테로 원자 중에서 선택되는 환 구성원을 포함하고, 탄소 원자 환 구성원 상에서 R^{9a} 및 질소 원자 환 구성원 상에서 R^{9b} 중에서 독립적으로 선택되는 5개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 5원 내지 6원 헤테로 방향족 환 (heteroaromatic ring) 또는 8원 내지 11원 헤테로 방향족 이환계; 또는

각각 탄소 원자, 및 2개 이하의 O 원자, 2개 이하의 S 원자, 4개 이하의 N 원자 및 2개 이하의 Si 원자 중에서 독립적으로 선택되는 4개 이하의 헤테로 원자 중에서 선택되는 환 구성원 (여기서, 3개 이하의 탄소 원자 환 구

성원은 C(=O) 및 C(=S) 중에서 독립적으로 선택되고, 황 원자 환 구성원은 S(=O)_s(=NR¹⁷)_f 중에서 독립적으로 선택되며, 규소 원자 환 구성원은 SiR¹⁰R¹¹ 중에서 독립적으로 선택된다)을 포함하고, 탄소 원자 환 구성원 상에서 R^{9a} 및 질소 원자 환 구성원 상에서 R^{9b} 중에서 독립적으로 선택되는 5개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 3원 내지 7원 비방향족 탄소환, 5원 내지 7원 비방향족 복소환 또는 8원 내지 11원 비방향족 이환계이며;

A는 CHR¹⁵, NR¹⁶ 또는 C(=O)이고;

A¹은 -O-, -S-, -N(R⁷)-, -C(R⁸)₂-, -OC(R⁸)₂-, -SC(R⁸)₂- 또는 -N(R⁷)C(R⁸)₂- (여기서, 좌측으로 돌출하는 결합은 -N=C(R²)(R³)에 연결되고, 우측으로 돌출하는 결합은 -C(R⁴)(R⁵)-에 연결된다)이며;

W는 O 또는 S이고;

W¹은 OR¹⁸, SR¹⁹, NR²⁰R²¹ 또는 R²²이며;

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

R²는 수소, 할로젠, 시아노, 아미노, -CHO, -C(=O)OH, -C(=O)NH₂, C₁-C₆ 알킬, C₂-C₆ 알케닐, C₂-C₆ 알키닐, C₁-C₆ 할로알킬, C₂-C₆ 할로알케닐, C₂-C₆ 할로알키닐, C₃-C₆ 사이클로알킬, C₃-C₆ 할로사이클로알킬, C₄-C₆ 알킬사이클로알킬, C₄-C₆ 사이클로알킬알킬, C₄-C₆ 할로사이클로알킬알킬, C₃-C₆ 사이클로알케닐, C₃-C₆ 할로사이클로알케닐, C₂-C₆ 알콕시알킬, C₂-C₆ 알킬티오알킬, C₂-C₆ 알킬설퍼닐알킬, C₂-C₆ 알킬설포닐알킬, C₂-C₆ 알킬아미노알킬, C₃-C₆ 다이알킬아미노알킬, C₂-C₆ 할로알킬아미노알킬, C₂-C₆ 알킬카르보닐, C₂-C₆ 할로알킬카르보닐, C₄-C₆ 사이클로알킬카르보닐, C₂-C₆ 알콕시카르보닐, C₄-C₆ 사이클로알콕시카르보닐, C₅-C₆ 사이클로알킬알콕시카르보닐, C₂-C₆ 알킬아미노카르보닐, C₃-C₆ 다이알킬아미노카르보닐, C₁-C₆ 알콕시, C₁-C₆ 할로알콕시, C₃-C₆ 사이클로알콕시, C₃-C₆ 할로사이클로알콕시, C₂-C₆ 알케닐옥시, C₂-C₆ 할로알케닐옥시, C₂-C₆ 알키닐옥시, C₃-C₆ 할로알키닐옥시, C₂-C₆ 알콕시알콕시, C₂-C₆ 알킬카르보닐옥시, C₂-C₆ 할로알킬카르보닐옥시, C₁-C₆ 알킬티오, C₁-C₆ 할로알킬티오, C₃-C₆ 사이클로알킬티오, C₁-C₆ 알킬아미노, C₂-C₆ 다이알킬아미노, C₁-C₆ 할로알킬아미노, C₂-C₆ 할로다이알킬아미노, C₃-C₆ 사이클로알킬아미노, C₂-C₆ 알킬카르보닐아미노, C₂-C₆ 할로알킬카르보닐아미노, C₁-C₆ 알킬설포닐아미노 또는 C₁-C₆ 할로알킬설포닐아미노이며;

R³는 수소, 할로젠, 시아노, 하이드록시, C₁-C₃ 알킬, C₁-C₃ 할로알킬, C₁-C₃ 알콕시 또는 C₁-C₃ 할로알콕시이거나;

R^2 및 R^3 는 이들이 부착되어 있는 탄소 원자와 함께, 탄소 원자, 및 2개 이하의 O 원자, 2개 이하의 S 원자, 2개 이하의 N 원자 및 2개 이하의 Si 원자 중에서 독립적으로 선택되는 4개 이하의 헤테로 원자 중에서 선택되는 환 구성원 (여기서, 3개 이하의 탄소 원자 환 구성원은 $C(=O)$ 및 $C(=S)$ 중에서 독립적으로 선택되고, 황 원자 환 구성원은 $S(=O)_s(=NR^{17})_f$ 중에서 독립적으로 선택되며, 규소 원자 환 구성원은 $SiR^{10}R^{11}$ 중에서 독립적으로 선택된다)을 포함하고, 탄소 원자 환 구성원 상에서 할로젠, 시아노, C_1-C_2 알킬, C_1-C_2 할로알킬, C_1-C_2 알콕시 및 C_1-C_2 할로알콕시, 및 질소 원자 환 구성원 상에서 시아노, C_1-C_2 알킬 및 C_1-C_2 알콕시 중에서 독립적으로 선택되는 4개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 3원 내지 7원 환을 형성하며;

R^4 는 임의로 치환된 페닐, 임의로 치환된 나프탈레닐 또는 임의로 치환된 5원 내지 6원 헤테로 방향족 환; 또는 수소, 할로젠, 시아노, 하이드록시, $-CHO$, C_1-C_4 알킬, C_2-C_4 알케닐, C_2-C_4 알키닐, C_1-C_4 할로알킬, C_2-C_4 할로알케닐, C_2-C_4 할로알키닐, C_2-C_4 알콕시알킬, C_2-C_4 알킬티오알킬, C_2-C_4 알킬설퍼닐알킬, C_2-C_4 알킬설포닐알킬, C_2-C_4 알킬카르보닐, C_2-C_4 할로알킬카르보닐, C_2-C_5 알콕시카르보닐, C_2-C_5 알킬아미노카르보닐, C_3-C_5 다이알킬아미노카르보닐, C_1-C_4 알콕시, C_1-C_4 할로알콕시, C_1-C_4 알킬티오, C_1-C_4 할로알킬티오, C_1-C_4 알킬설퍼닐, C_1-C_4 할로알킬설퍼닐, C_1-C_4 알킬설포닐, C_1-C_4 할로알킬설포닐, C_2-C_4 알킬카르보닐옥시, C_2-C_4 할로알킬카르보닐옥시, C_2-C_5 알콕시카르보닐옥시, C_2-C_5 알킬아미노카르보닐옥시 또는 C_3-C_5 다이알킬아미노카르보닐옥시이고;

R^5 는 수소, C_1-C_3 알킬 또는 C_1-C_3 할로알킬이며;

각 R^{6a} 는 독립적으로 C_1-C_4 알킬, C_1-C_4 알케닐, C_1-C_4 할로알킬, C_1-C_4 알콕시, 할로젠, 시아노 또는 하이드록시 이거나;

2개의 R^{6a} 는 함께 C_1-C_4 알킬렌 또는 C_2-C_4 알케닐렌으로서 취해, 가교 이환계 (bridged bicyclic ring system) 또는 융합 이환계를 형성하거나;

이중 결합으로 결합된 인접한 환 탄소 원자에 부착되는 2개의 R^{6a} 는 함께, C_1-C_4 알킬, C_1-C_4 할로알킬, C_1-C_4 알콕시, C_1-C_4 할로알콕시, 할로젠, 하이드록시, 아미노, 시아노 및 니트로 중에서 선택되는 3개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 $-CH=CH-CH=CH-$ 로서 취해지고;

R^{6b} 는 수소, 시아노, C_1-C_3 알킬, C_1-C_3 할로알킬, C_1-C_3 알콕시, C_2-C_3 알킬카르보닐, C_2-C_3 알콕시카르보닐 또는 C_3-C_6 사이클로알킬이며;

R^7 은 수소, 시아노, C_1-C_4 알킬, C_1-C_4 할로알킬, C_2-C_4 알콕시알킬, C_2-C_4 알킬티오알킬, C_2-C_4 알킬카르보닐, C_2-C_4 할로알킬카르보닐, C_2-C_4 알콕시카르보닐, C_2-C_4 알킬아미노카르보닐, C_3-C_5 다이알킬아미노카르보닐, C_1-C_4 알킬설포닐 또는 C_1-C_4 할로알킬설포닐이거나;

R^3 및 R^7 은 이들이 부착되어 있는 연결 원자와 함께, 연결 원자 이외에도, 탄소 원자, 및 1개 이하의 O 원자, 1개 이하의 S 원자 및 1개 이하의 N 원자 중에서 독립적으로 선택되는 3개 이하의 헤테로 원자 중에서 선택되는 환 구성원을 포함하고, 탄소 원자 환 구성원 상에서 할로젠, 시아노, 니트로, C_1-C_2 알킬, C_1-C_2 할로알킬, C_1-C_2 알콕시 및 C_1-C_2 할로알콕시, 및 질소 원자 환 구성원 상에서 시아노, C_1-C_2 알킬 및 C_1-C_2 알콕시 중에서 독립적으로 선택되는 3개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 5원 내지 7원 부분 포화 환을 형성하고;

각 R^8 은 독립적으로 수소, C_1-C_3 알킬 또는 C_1-C_3 할로알킬이며;

각 R^{9a} 는 독립적으로 할로젠, 하이드록시, 아미노, 시아노, 니트로, C_1-C_6 알킬, C_2-C_6 알케닐, C_2-C_6 알키닐, C_3-C_6 사이클로알킬, C_4-C_{10} 사이클로알킬알킬, C_4-C_{10} 알킬사이클로알킬, C_5-C_{10} 알킬사이클로알킬알킬, C_6-C_{14} 사이클

로알킬사이클로알킬, C₁-C₆ 할로알킬, C₂-C₆ 할로알케닐, C₂-C₆ 할로알키닐, C₃-C₆ 할로사이클로알킬, C₁-C₄ 알콕시, C₁-C₄ 할로알콕시, C₁-C₄ 알킬티오, C₁-C₄ 알킬설퍼닐, C₁-C₄ 알킬설포닐, C₁-C₄ 할로알킬티오, C₁-C₄ 할로알킬설퍼닐, C₁-C₄ 할로알킬설포닐, C₁-C₄ 알킬아미노, C₂-C₈ 다이알킬아미노, C₃-C₆ 사이클로알킬아미노, C₂-C₄ 알콕시알킬, C₁-C₄ 하이드록시알킬, C₂-C₄ 알킬카르보닐, C₂-C₆ 알콕시카르보닐, C₂-C₆ 알킬카르보닐옥시, C₂-C₆ 알킬카르보닐티오, C₂-C₆ 알킬아미노카르보닐, C₃-C₈ 다이알킬아미노카르보닐 또는 C₃-C₆ 트라이알킬실릴;

할로젠, 시아노, C₁-C₂ 알킬, C₁-C₂ 할로알킬, C₁-C₂ 알콕시 및 C₁-C₂ 할로알콕시 중에서 독립적으로 선택되는 3개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 페닐 또는 나프탈레닐;

탄소 원자, 및 2개 이하의 O 원자, 2개 이하의 S 원자 및 4개 이하의 N 원자 중에서 독립적으로 선택되는 4개 이하의 헤테로 원자 중에서 선택되는 환 구성원을 포함하고, 탄소 원자 환 구성원 상에서 할로젠, 시아노, C₁-C₂ 알킬, C₁-C₂ 할로알킬, C₁-C₂ 알콕시 및 C₁-C₂ 할로알콕시, 및 질소 원자 환 구성원 상에서 시아노, C₁-C₂ 알킬 및 C₁-C₂ 알콕시 중에서 독립적으로 선택되는 3개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 5원 내지 6원 헤테로 방향족 환; 또는

탄소 원자, 및 2개 이하의 O 원자, 2개 이하의 S 원자 및 4개 이하의 N 원자 중에서 독립적으로 선택되는 4개 이하의 헤테로 원자 중에서 선택되는 환 구성원 (여기서, 3개 이하의 탄소 원자 환 구성원은 C(=O) 및 C(=S) 중에서 독립적으로 선택된다)을 포함하고, 탄소 원자 환 구성원 상에서 할로젠, 시아노, C₁-C₂ 알킬, C₁-C₂ 할로알킬, C₁-C₂ 알콕시 및 C₁-C₂ 할로알콕시, 및 질소 원자 환 구성원 상에서 시아노, C₁-C₂ 알킬 및 C₁-C₂ 알콕시 중에서 독립적으로 선택되는 3개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 3원 내지 7원 비방향족 환이고;

각 R^{9b}는 독립적으로 수소, 시아노, C₁-C₃ 알킬, C₁-C₃ 할로알킬, C₁-C₃ 알콕시, C₂-C₃ 알킬카르보닐, C₂-C₃ 알콕시카르보닐 또는 C₃-C₆ 사이클로알킬이며;

각 R¹⁰ 및 R¹¹은 독립적으로 C₁-C₅ 알킬, C₂-C₅ 알케닐, C₂-C₅ 알키닐, C₃-C₅ 사이클로알킬, C₃-C₆ 할로사이클로알킬, C₄-C₁₀ 사이클로알킬알킬, C₄-C₇ 알킬사이클로알킬, C₅-C₇ 알킬사이클로알킬알킬, C₁-C₅ 할로알킬, C₁-C₅ 알콕시 또는 C₁-C₅ 할로알콕시이고;

각 R¹²는 독립적으로 수소, 할로젠, 하이드록시, 시아노, C₁-C₄ 알킬, C₁-C₄ 할로알킬, C₁-C₄ 알콕시, C₁-C₄ 할로알콕시, C₂-C₄ 알콕시알킬, C₂-C₄ 알킬카르보닐, C₂-C₄ 알콕시카르보닐 또는 C₃-C₆ 사이클로알킬이며;

각 R¹³은 독립적으로 수소, 시아노, C₁-C₄ 알킬, C₁-C₄ 할로알킬, C₁-C₄ 알콕시, C₂-C₄ 알킬카르보닐, C₂-C₄ 알콕시카르보닐 또는 C₃-C₆ 사이클로알킬이고;

R¹⁵은 수소, 할로젠, 시아노, 하이드록시, -CHO, C₁-C₄ 알킬, C₂-C₄ 알케닐, C₂-C₄ 알키닐, C₁-C₄ 할로알킬, C₂-C₄ 할로알케닐, C₂-C₄ 할로알키닐, C₂-C₄ 알콕시알킬, C₂-C₄ 알킬티오알킬, C₂-C₄ 알킬설퍼닐알킬, C₂-C₄ 알킬설포닐알킬, C₃-C₅ 알콕시카르보닐알킬, C₂-C₄ 알킬카르보닐, C₂-C₄ 할로알킬카르보닐, C₂-C₅ 알콕시카르보닐, C₂-C₅ 알킬아미노카르보닐, C₃-C₅ 다이알킬아미노카르보닐, C₁-C₄ 알콕시, C₁-C₄ 할로알콕시, C₁-C₄ 알킬티오, C₁-C₄ 할로알킬티오, C₁-C₄ 알킬설퍼닐, C₁-C₄ 할로알킬설퍼닐, C₁-C₄ 알킬설포닐 또는 C₁-C₄ 할로알킬설포닐이되; 단 R¹⁵이 하이드록시이면, R^{1a}는 탄소 원자를 통해 화학식 1의 A에 결합되며;

R¹⁶은 수소, C₁-C₄ 알킬, C₂-C₄ 알케닐, C₃-C₄ 알키닐, C₁-C₄ 할로알킬, C₂-C₄ 할로알케닐, C₂-C₄ 할로알키닐, C₂-C₄ 알콕시알킬, C₂-C₄ 알킬티오알킬, C₂-C₄ 알킬설퍼닐알킬, C₂-C₄ 알킬설포닐알킬, C₂-C₄ 알킬카르보닐, C₂-C₄ 할로알킬카르보닐, C₂-C₅ 알콕시카르보닐, C₃-C₅ 알콕시카르보닐알킬, C₂-C₅ 알킬아미노카르보닐, C₃-C₅ 다이알킬아미노카르보닐, C₁-C₄ 알킬설포닐 또는 C₁-C₄ 할로알킬설포닐이고;

각 R^{17} 은 독립적으로 수소, 시아노, C_1-C_6 알킬, C_1-C_6 할로알킬, C_3-C_8 사이클로알킬, C_3-C_8 할로사이클로알킬, C_1-C_6 알콕시, C_1-C_6 할로알콕시, C_1-C_6 알킬아미노, C_2-C_8 다이알킬아미노, C_1-C_6 할로알킬아미노 또는 페닐이며;

R^{18} 및 R^{19} 은 독립적으로 C_1-C_6 알킬, C_3-C_6 알케닐, C_3-C_6 알키닐, C_1-C_6 할로알킬, C_3-C_6 할로알케닐, C_3-C_6 할로알키닐, C_3-C_6 사이클로알킬, C_3-C_6 할로사이클로알킬, C_4-C_8 알킬사이클로알킬, C_4-C_8 사이클로알킬알킬, C_4-C_8 할로사이클로알킬알킬, C_5-C_8 알킬사이클로알킬알킬, C_2-C_6 알콕시알킬, C_4-C_8 사이클로알콕시알킬, C_3-C_6 알콕시알콕시알킬, C_2-C_6 알킬티오알킬, C_2-C_6 알킬설퍼닐알킬, C_2-C_6 알킬설포닐알킬, C_2-C_6 알킬아미노알킬, C_3-C_6 다이알킬아미노알킬, C_2-C_6 할로알킬아미노알킬, C_4-C_8 사이클로알킬아미노알킬, C_2-C_6 알킬카르보닐, C_2-C_6 할로알킬카르보닐, C_4-C_8 사이클로알킬카르보닐, C_2-C_6 알콕시카르보닐, C_2-C_6 알킬아미노카르보닐, C_3-C_8 다이알킬아미노카르보닐 또는 C_4-C_8 사이클로알킬아미노카르보닐이고;

R^{20} 은 수소, 시아노, 하이드록시, 아미노, C_1-C_6 알킬, C_3-C_6 알케닐, C_3-C_6 알키닐, C_1-C_6 할로알킬, C_3-C_6 할로알케닐, C_3-C_6 할로알키닐, C_3-C_6 사이클로알킬, C_4-C_8 사이클로알킬알킬, C_2-C_6 알콕시알킬, C_1-C_6 알콕시, C_1-C_6 할로알콕시, C_1-C_6 알킬설퍼닐, C_1-C_6 할로알킬설퍼닐, C_2-C_6 알킬카르보닐, C_2-C_6 할로알킬카르보닐, C_1-C_6 알킬아미노, C_2-C_8 다이알킬아미노, C_1-C_6 할로알킬아미노 또는 C_2-C_8 할로다이알킬아미노이며;

R^{21} 은 수소, C_1-C_6 알킬, C_3-C_6 알케닐, C_3-C_6 알키닐, C_1-C_6 할로알킬 또는 C_3-C_6 사이클로알킬이거나;

R^{20} 및 R^{21} 은 함께 $-(CH_2)_4-$, $-(CH_2)_5-$ 또는 $-(CH_2)_2O(CH_2)_2-$ 로서 취해지고;

R^{22} 는 수소, 할로젠, 시아노, C_1-C_4 알킬, C_1-C_4 할로알킬, C_2-C_4 알콕시알킬, C_2-C_4 알킬카르보닐, C_2-C_4 알콕시카르보닐, C_2-C_3 알킬아미노카르보닐 또는 C_3-C_6 다이알킬아미노카르보닐이며;

각 R^{23} 는 탄소 원자 환 구성원 상에서 R^{23a} 중에서 독립적으로 선택되고, 질소 원자 환 구성원 상에서 R^{23b} 중에서 독립적으로 선택되며;

R^{23a} 는 할로젠, 하이드록시, 시아노, C_1-C_6 알킬, C_1-C_6 할로알킬, C_1-C_4 알콕시, C_1-C_4 할로알콕시, C_2-C_6 알콕시알킬, C_2-C_4 알킬카르보닐, C_2-C_6 알콕시카르보닐 또는 C_3-C_6 사이클로알킬이고;

R^{23b} 는 시아노, C_1-C_3 알킬, C_1-C_3 할로알킬, C_1-C_3 알콕시, C_2-C_3 알킬카르보닐, C_2-C_3 알콕시카르보닐 또는 C_3-C_6 사이클로알킬이며;

각 R^{29a} 는 독립적으로 수소, 할로젠, C_1-C_3 알킬 또는 C_1-C_3 할로알킬이고;

각 R^{30a} 는 독립적으로 수소 또는 C_1-C_3 알킬이며;

n 은 0, 1 또는 2이고;

q 는 0, 1 또는 2이며;

s 및 f 는 $S(=O)_s(=NR^{17})_f$ 의 각 경우에, 독립적으로 0, 1 또는 2이되, 단 s 와 f 의 합계는 0, 1 또는 2이다.

(단, Z 가 Z^1-13 이면, Q 는 비치환된 페닐 이외의 것이다).

청구항 2

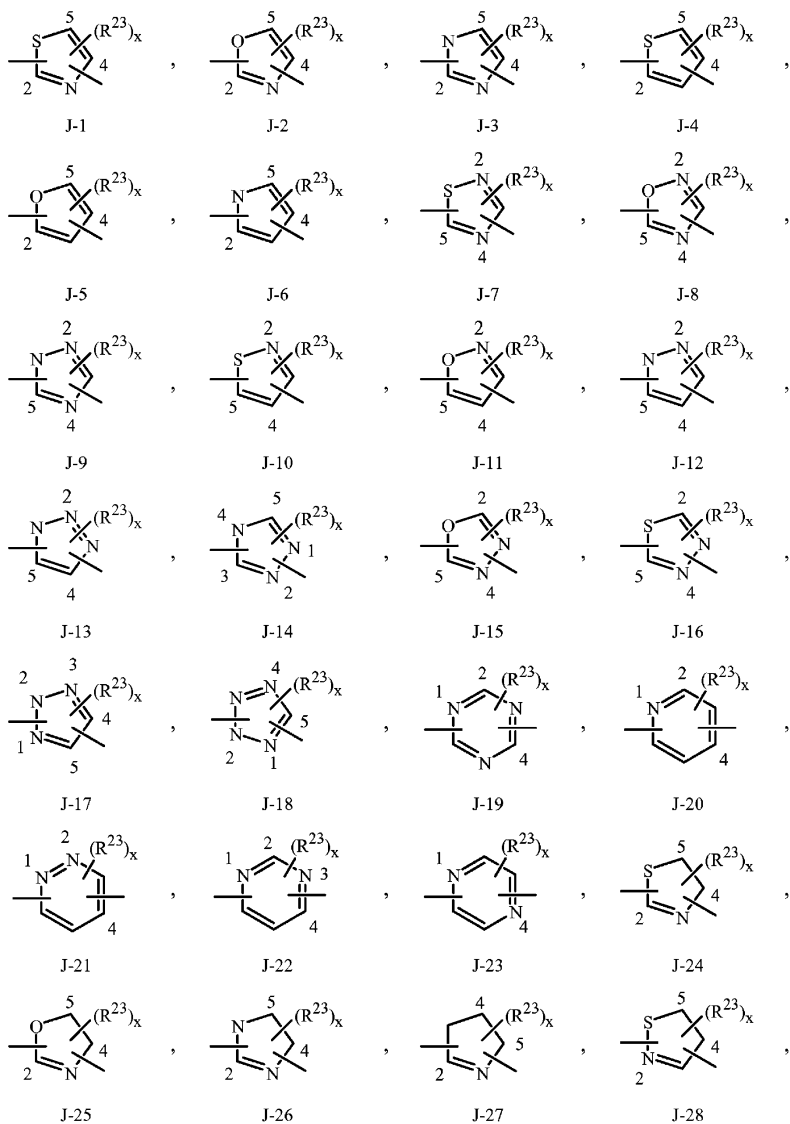
제 1 항에 있어서,

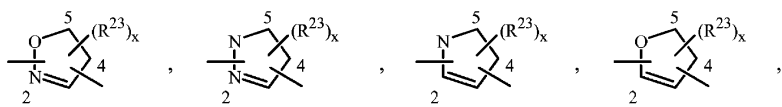
E 는 $E-1$ 이고;

X는 X-1, X-2, X-3, X-4 또는 X-5이며;

G는 탄소 원자 환 구성원 상에서 R^{29a} 및 질소 원자 환 구성원 상에서 R^{30a} 중에서 독립적으로 선택되는 2개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 5원 복소환이고;

J는



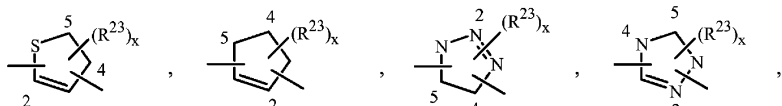


J-29

J-30

J-31

J-32

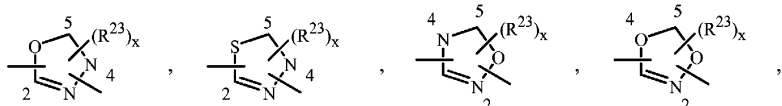


J-33

J-34

J-35

J-36

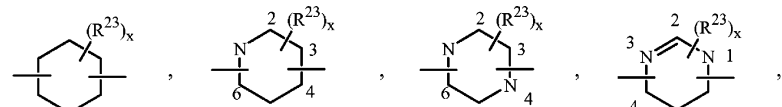


J-37

J-38

J-39

J-40

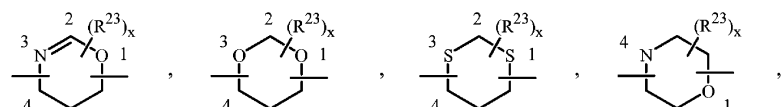


J-41

J-42

J-43

J-44

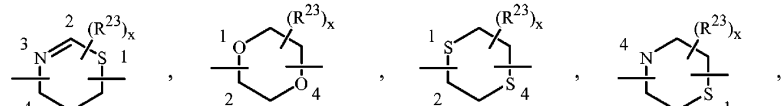


J-45

J-46

J-47

J-48

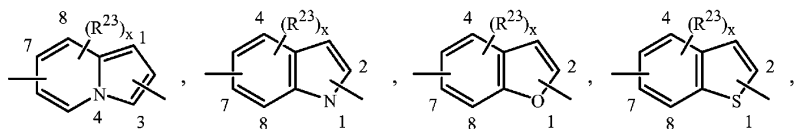


J-49

J-50

J-51

J-52

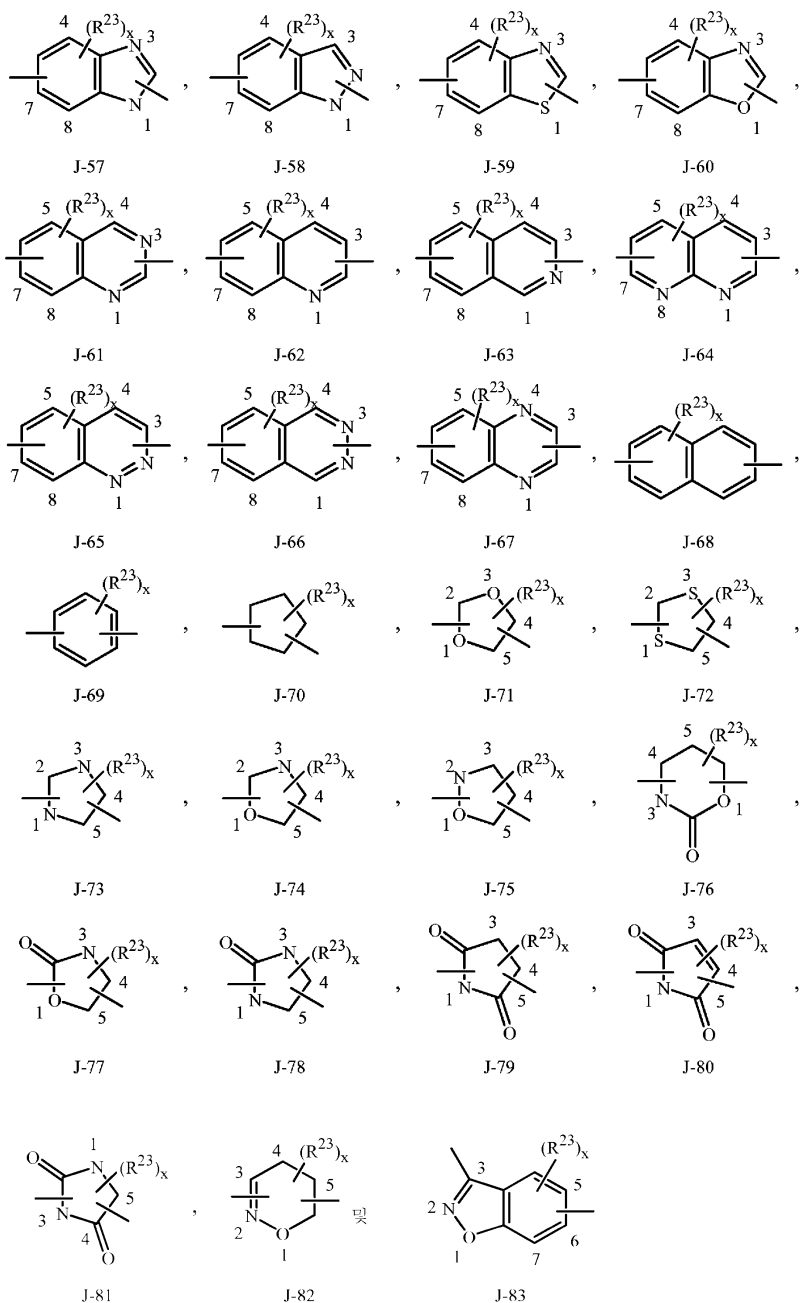


J-53

J-54

J-55

J-56



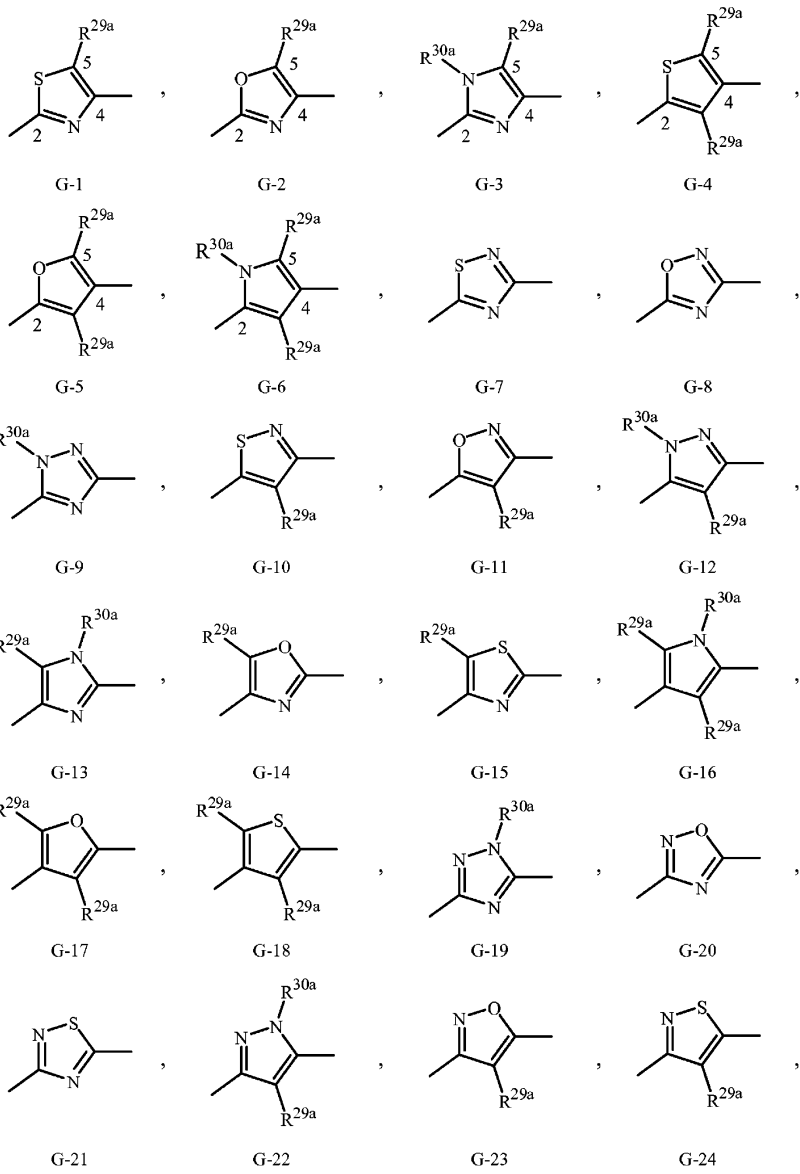
(여기서, 하나의 유동 결합 (floating bond)은 도시된 환 또는 환계의 임의의 이용가능한 탄소 또는 질소 원자를 통해 화학식 1의 G에 연결되고, 다른 하나의 유동 결합은 도시된 환 또는 환계의 임의의 이용가능한 탄소 또는 질소 원자를 통해 화학식 1의 Z에 연결되며; R^{23} 가 탄소 환 구성원에 부착되는 경우, 상기 R^{23} 는 R^{23a} 중에서 선택되고, R^{23} 가 질소 환 구성원에 부착되는 경우, 상기 R^{23} 는 R^{23b} 중에서 선택되며; x는 0 내지 5의 정수이다) 로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 환인 화합물.

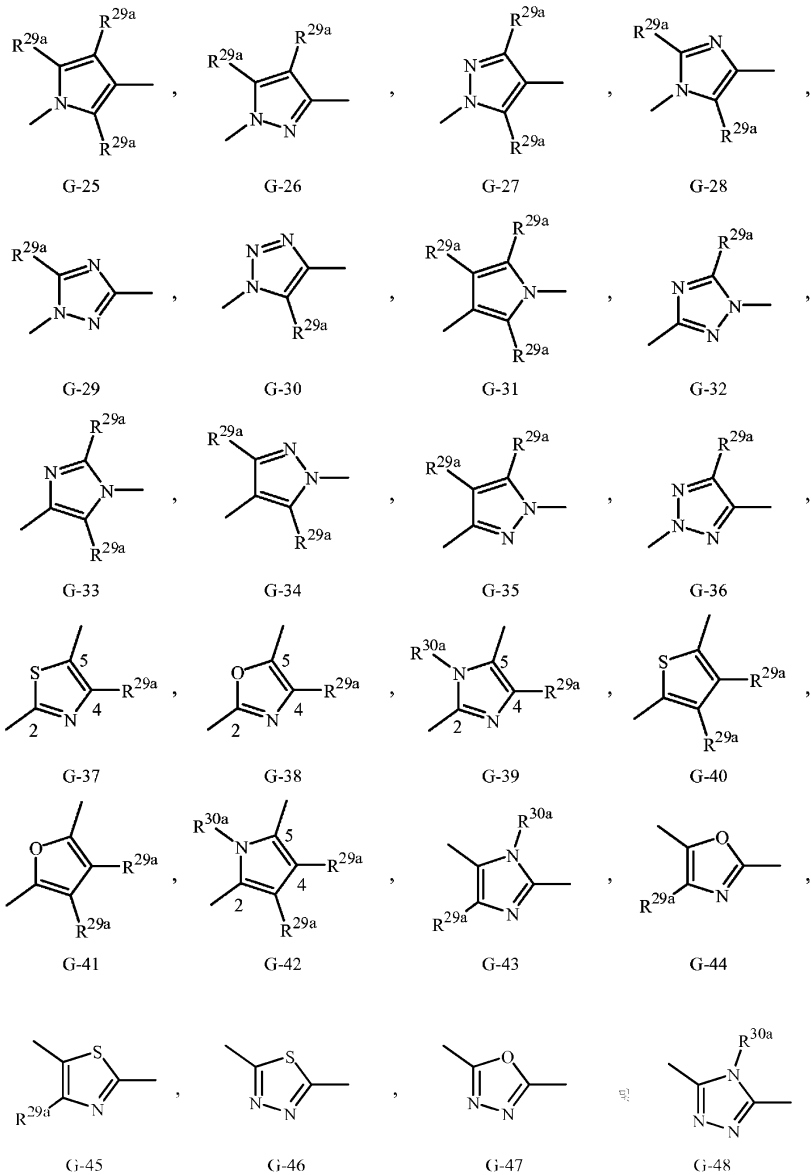
청구항 3

제 2 항에 있어서,

X는 X-1, X-2 또는 X-3이고;

G는





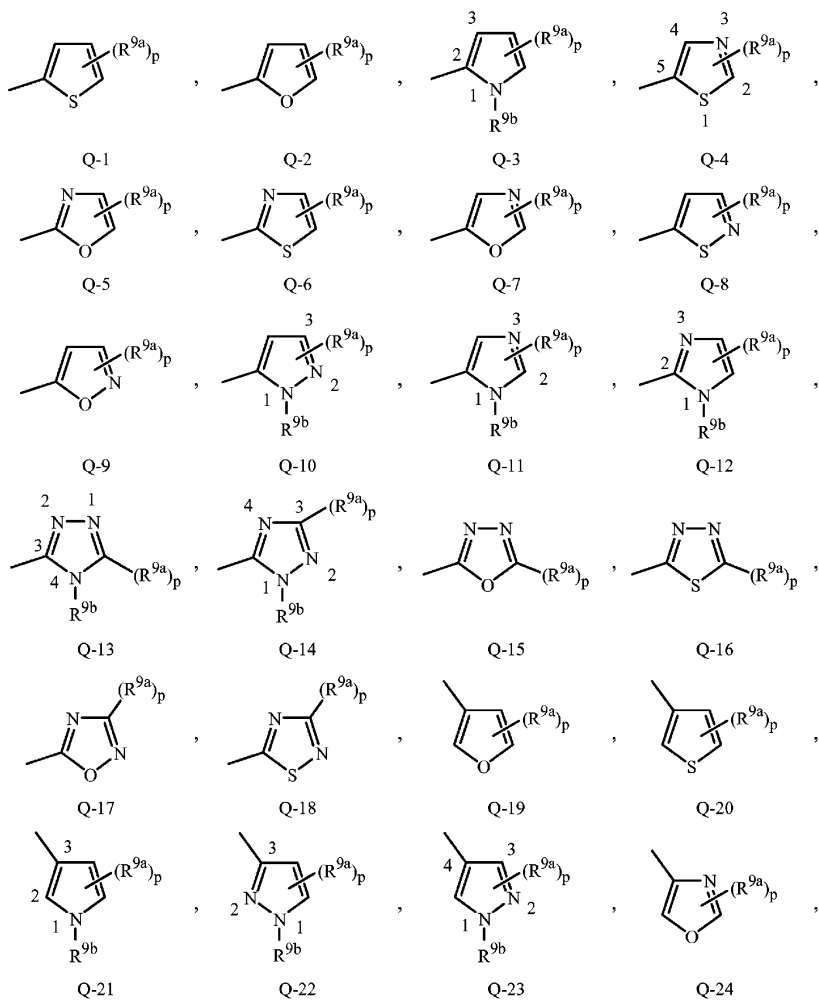
(여기서, 좌측으로 돌출하는 결합은 화학식 1의 X에 결합되고, 우측으로 돌출하는 결합은 화학식 1의 J에 결합되며;

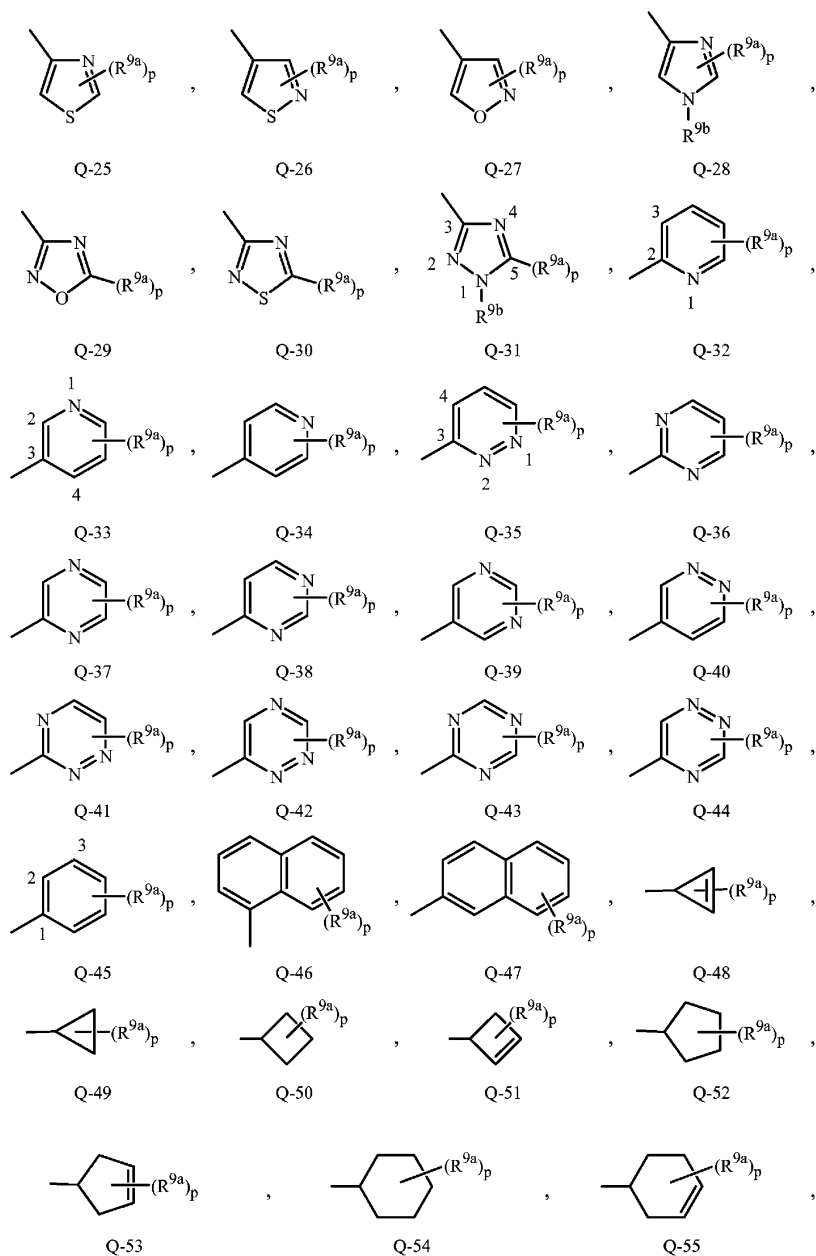
각 R^{29a} 는 H이고;

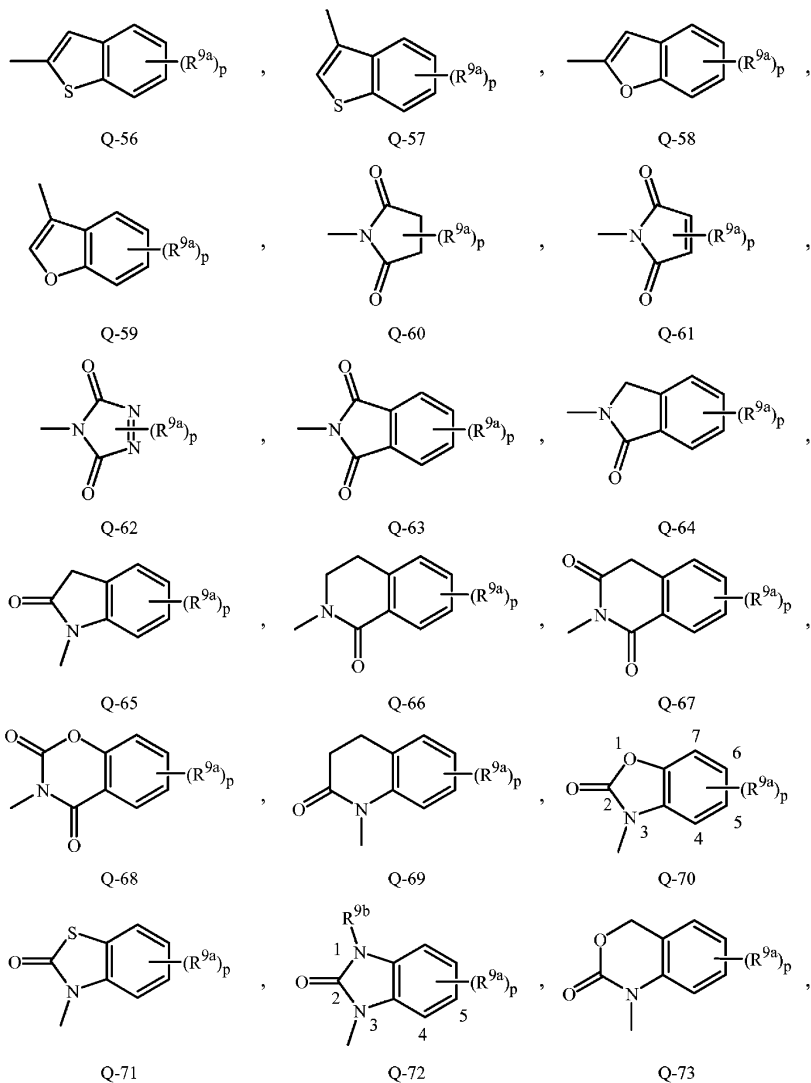
R^{30a} 는 수소 또는 메틸이다)로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 환이며;

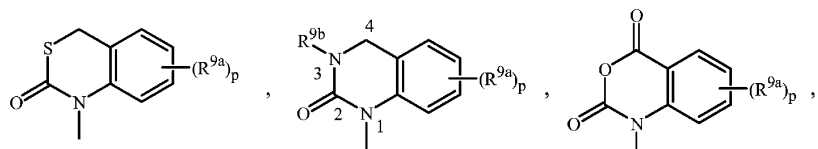
J는 J-1, J-2, J-3, J-4, J-5, J-7, J-8, J-9, J-10, J-11, J-12, J-14, J-15, J-16, J-20, J-24, J-25, J-26, J-29, J-30, J-37, J-38, J-45 및 J-69로 구성되는 그룹 중에서 선택되고;

Q는





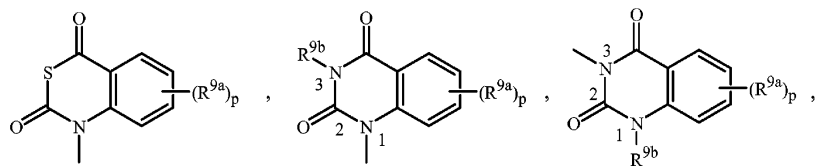




Q-74

Q-75

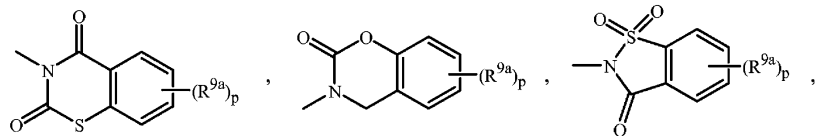
Q-76



Q-77

Q-78

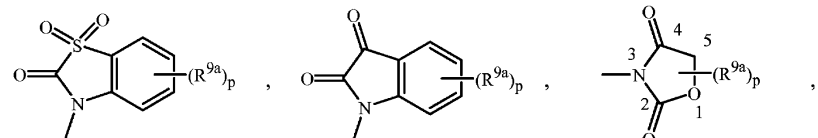
Q-79



Q-80

Q-81

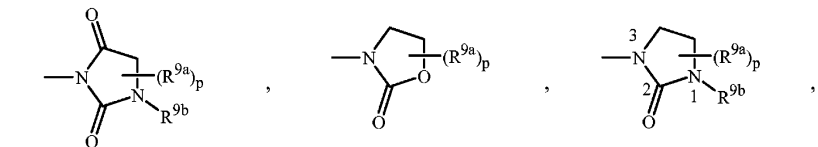
Q-82



Q-83

Q-84

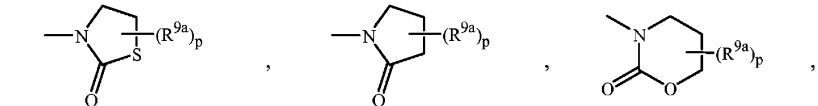
Q-85



Q-86

Q-87

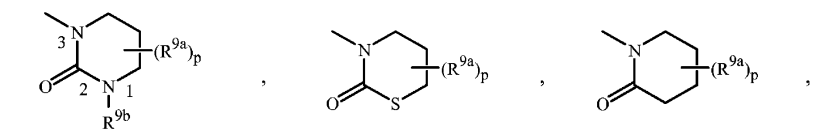
Q-88



Q-89

Q-90

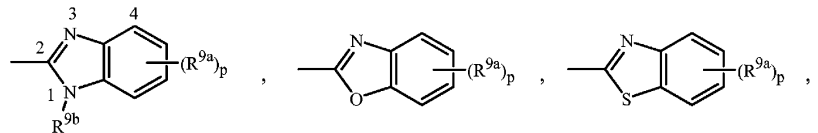
Q-91



Q-92

Q-93

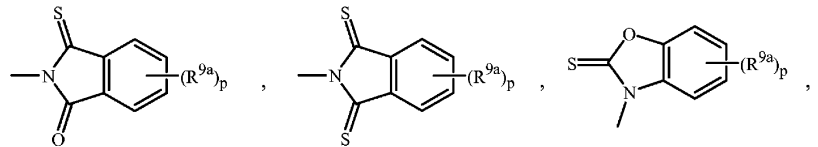
Q-94



Q-95

Q-96

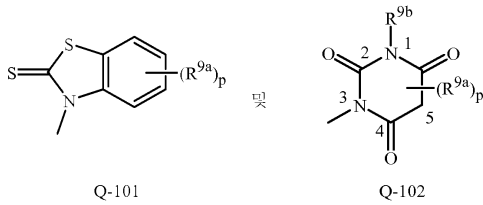
Q-97



Q-98

Q-99

Q-100

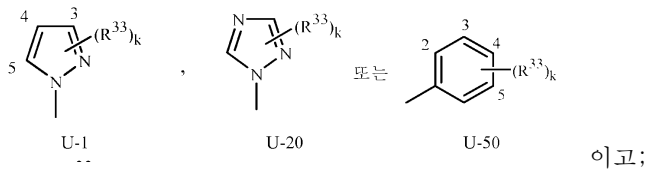


(여기서, p는 0, 1, 2, 3, 4 또는 5이다)로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 환인 화합물.

청구항 4

제 3 항에 있어서,

R^{1a}는



각 R³³는 독립적으로 할로젠, C₁-C₃ 알킬, C₁-C₃ 할로알킬 또는 C₂-C₃ 알콕시알킬이며;

k는 0, 1, 2 또는 3이고;

A는 CHR¹⁵이며;

R¹⁵는 H이고;

W는 O이며;

X는 X-1이고;

n은 0이며;

G는 G-1이고;

J는 J-29이며;

x는 0이고;

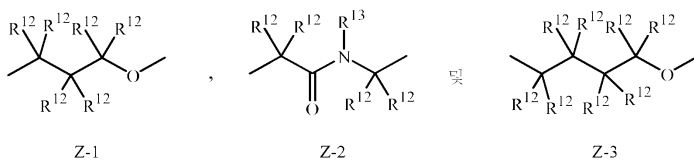
각 R^{9a}는 독립적으로 할로젠, C₁-C₆ 알킬, C₁-C₆ 할로알킬 또는 C₁-C₄ 알콕시이며;

p는 0, 1, 2 또는 3인 화합물.

청구항 5

제 4 항에 있어서,

Z는 Z¹-1, Z¹-4, Z¹-14, Z¹-16, Z¹-18,



(여기서, Z 기는 좌측으로 뻗어있는 결합이 화학식 1의 J에 부착되고, 우측으로 뻗어있는 결합이 화학식 1의 Q에 부착되도록 배향된다) 중에서 선택되고;

Q는 Q-45인 화합물.

청구항 6

제 5 항에 있어서,

Z는 Z^1-1 , Z^1-16 , Z^1-18 , Z-1 및 Z-3 중에서 선택되는 화합물.

청구항 7

제 6 항에 있어서,

Z는 Z^1-1 , Z^1-16 또는 Z-1인 화합물.

청구항 8

제 7 항에 있어서,

R^{12} 는 수소인 화합물.

청구항 9

제 1 항에 있어서, 하기 그룹 중에서 선택되는 화합물:

1-[4-[4-[5-[2-[(2,6-다이플루오로페녹시)에틸]-4,5-다이하이드로-3-아이속사졸릴]-2-티아졸릴]-1-피페리디닐]-2-[5-메틸-3-(트라이플루오로메틸)-1H-피라졸-1-일]에탄온,

1-[4-[4-[5-[(2,6-다이플루오로페녹시)메틸]-4,5-다이하이드로-3-아이속사졸릴]-2-티아졸릴]-1-피페리디닐]-2-[5-메틸-3-(트라이플루오로메틸)-1H-피라졸-1-일]에탄온 및

1-[4-[4-[5-[(2,6-다이플루오로-4-메톡시페녹시)메틸]-4,5-다이하이드로-3-아이속사졸릴]-2-티아졸릴]-1-피페리디닐]-2-[5-메틸-3-(트라이플루오로메틸)-1H-피라졸-1-일]에탄온.

청구항 10

(a) 제 1 항의 화합물; 및 (b) 적어도 하나의 다른 살진균제를 포함하는 살진균제 조성물.

청구항 11

(a) 제 1 항의 화합물; 및 (b) 계면활성제, 고체 희석제 및 액체 희석제로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 적어도 하나의 추가 성분을 포함하는 살진균제 조성물.

청구항 12

살진균적 유효량의 제 1 항의 화합물을 식물 또는 이의 부분, 또는 식물 종자에 적용하는 것을 포함하는, 진균 식물 병원체에 의한 식물병을 방제하는 방법.

명세서

기술분야

[0001] 본 발명은 특정한 아조사이클릭 아미드, 및 이의 N-옥사이드, 염 및 조성물, 및 살진균제로서의 이들의 사용 방법에 관한 것이다.

배경기술

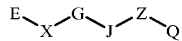
[0002] 진균 식물 병원체에 의한 식물병의 방제는 높은 작물 효율의 달성에 있어서 매우 중요하다. 관상용 작물, 야채 작물, 농작물, 곡물, 및 과실 작물에 대한 식물 병해는 현저한 생산성 저하를 야기하므로, 소비자에게 가격 상승을 전가할 수 있다. 이 때문에 다수의 제품이 시판되고 있으나, 더욱 효과적이고, 보다 저렴하며, 독성이 낮고, 환경적으로 보다 안전하거나 작용 부위가 상이한 신규 화합물이 계속해서 요구되고 있다.

발명의 내용

해결하려는 과제

[0003] (발명의 요약)

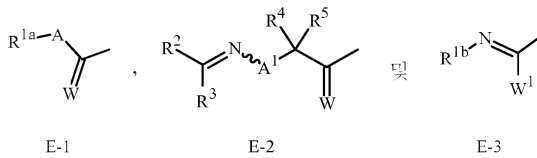
[0004] 본 발명은 화학식 1의 화합물 (모든 입체 이성질체 포함), 이의 *N*-옥사이드 및 이의 염, 이들을 함유하는 농업용 조성물 및 살진균제로서의 이들의 용도에 관한 것이다:



1

[0006] 상기 식에서,

[0007] E는



E-1

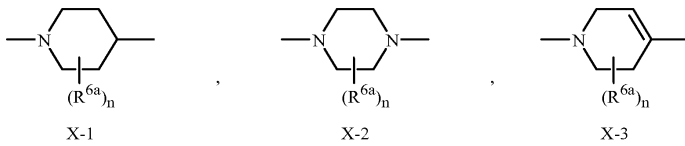
E-2

E-3

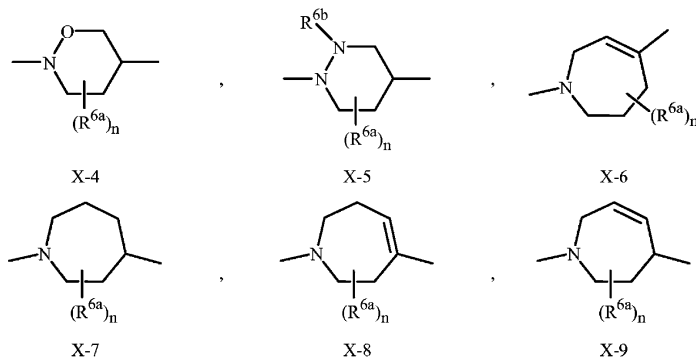
[0008]

[0009] 로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 라디칼이고;

[0010] X는



[0011]



[0012]



[0013]

[0014] (여기서, X 기는 좌측으로 뻗어있는 결합이 화학식 1의 E에 부착되고, 우측으로 뻗어있는 결합이 화학식 1의 G에 부착되도록 배향된다)로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 라디칼이며;

[0015] G는 탄소 원자 환 구성원 (ring member) 상에서 R^{29a} 및 질소 원자 환 구성원 상에서 R^{30a} 중에서 독립적으로 선택되는 3개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 5원 복소환이고;

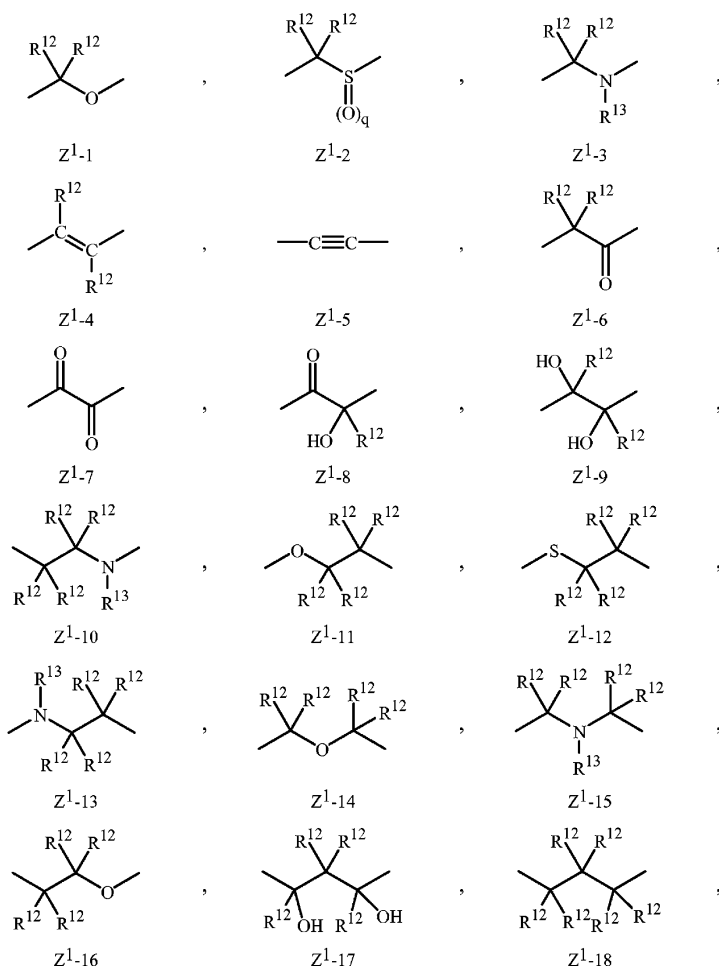
[0016] J는 각각 탄소 원자, 및 2개 이하의 O 원자, 2개 이하의 S 원자, 4개 이하의 N 원자 및 2개 이하의 Si 원자 중에서 독립적으로 선택되는 4개 이하의 헤테로 원자 중에서 선택되는 환 구성원 (여기서, 3개 이하의 탄소 원자 환 구성원은 C(=O) 및 C(=S) 중에서 독립적으로 선택되고, 황 원자 환 구성원은 S(=O)_s(=NR¹⁷)_f 중에서 독립적으로 선택되며, 규소 원자 환 구성원은 SiR¹⁰R¹¹ 중에서 독립적으로 선택된다)을 포함하고, R²³ 중에서 독립적으로

선택되는 5개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 5원, 6원 또는 7원 환, 8원 내지 11원 이환계 (bicyclic ring system) 또는 7원 내지 11원 스피로환계 (spirocyclic ring system)이며;

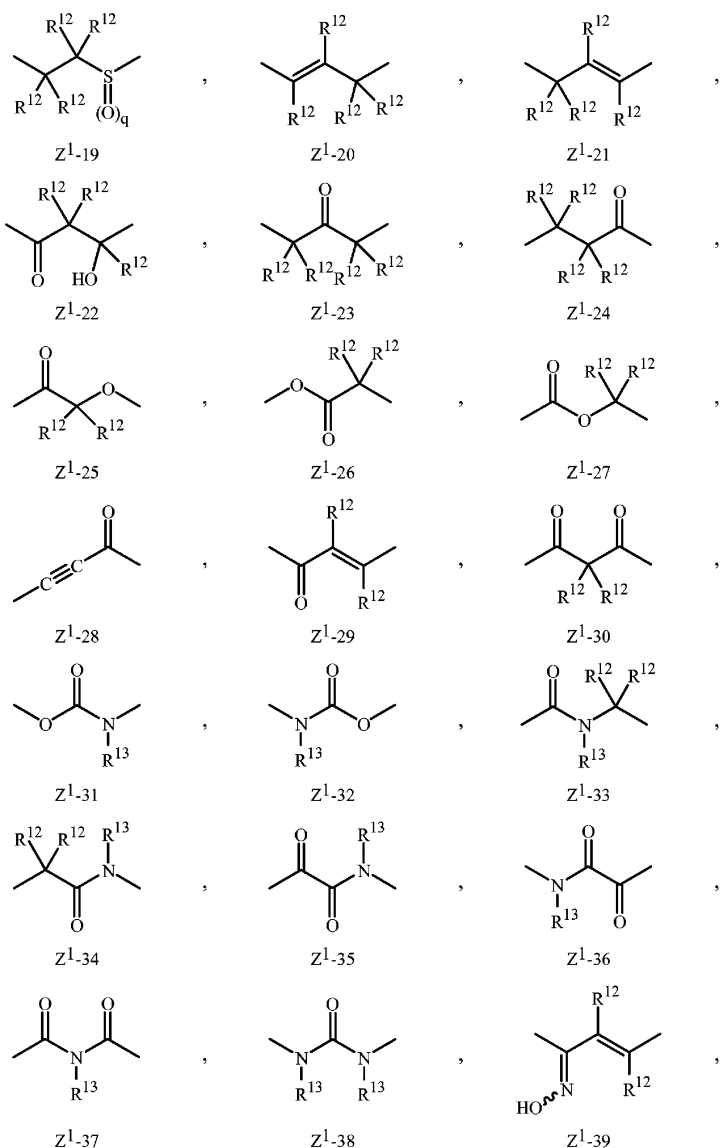
[0017] Z는 Z₁; 또는

[0018] 각각 탄소 원자, 및 2개 이하의 O 원자, 2개 이하의 S 원자, 2개 이하의 N 원자 및 1개 이하의 Si 원자 중에서 독립적으로 선택되는 2개 이하의 헤테로 원자 중에서 선택되는쇄 구성원 (여기서, 2개 이하의 탄소 원자쇄 구성원은 C(=O), C(=S) 및 C(=NOH) 중에서 독립적으로 선택되고, 황 원자쇄 구성원은 S(=O)_s(=NR¹⁷)_f 중에서 독립적으로 선택되며, 규소 원자쇄 구성원은 SiR¹⁰R¹¹ 중에서 독립적으로 선택된다)을 포함하고, 탄소 원자쇄 구성원 상에서 R¹² 및 질소 원자쇄 구성원 상에서 R¹³ 중에서 독립적으로 선택되는 4개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 4원, 5원 또는 6원 포화 또는 불포화쇄이며;

[0019] Z¹은



[0020]



[0021]

[0022]

[0023]

[0024]

[0025]

[0026]

(여기서, Z^1 기는 좌측으로 뻗어있는 결합이 화학식 1의 J에 부착되고, 우측으로 뻗어있는 결합이 화학식 1의 Q에 부착되도록 배향된다)로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 라디칼이고;

Q는 각각 탄소 원자 환 구성원 상에서 R^{9a} 중에서 독립적으로 선택되는 5개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 페닐 또는 나프탈레닐;

탄소 원자, 및 2개 이하의 O 원자, 2개 이하의 S 원자 및 4개 이하의 N 원자 중에서 독립적으로 선택되는 4개 이하의 헤테로 원자 중에서 선택되는 환 구성원을 포함하고, 탄소 원자 환 구성원 상에서 R^{9a} 및 질소 원자 환 구성원 상에서 R^{9b} 중에서 독립적으로 선택되는 5개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 5원 내지 6원 헤테로 방향족 환 (heteroaromatic ring) 또는 8원 내지 11원 헤테로 방향족 이환계; 또는

각각 탄소 원자, 및 2개 이하의 O 원자, 2개 이하의 S 원자, 4개 이하의 N 원자 및 2개 이하의 Si 원자 중에서 독립적으로 선택되는 4개 이하의 헤테로 원자 중에서 선택되는 환 구성원 (여기서, 3개 이하의 탄소 원자 환 구

성원은 C(=O) 및 C(=S) 중에서 독립적으로 선택되고, 황 원자 환 구성원은 $S(=O)_s(=NR^{17})_f$ 중에서 독립적으로 선택되며, 규소 원자 환 구성원은 $SiR^{10}R^{11}$ 중에서 독립적으로 선택된다)을 포함하고, 탄소 원자 환 구성원 상에서 R^{9a} 및 질소 원자 환 구성원 상에서 R^{9b} 중에서 독립적으로 선택되는 5개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 3원 내지 7원 비방향족 탄소환, 5원 내지 7원 비방향족 복소환 또는 8원 내지 11원 비방향족 이환계이며;

[0027] A는 CHR^{15} , NR^{16} 또는 $C(=O)$ 이고;

[0028] A^1 은 $-O-$, $-S-$, $-N(R^7)-$, $-C(R^8)_2-$, $-OC(R^8)_2-$, $-SC(R^8)_2-$ 또는 $-N(R^7)C(R^8)_2-$ (여기서, 좌측으로 돌출하는 결합은 $-N=C(R^2)(R^3)$ 에 연결되고, 우측으로 돌출하는 결합은 $-C(R^4)(R^5)-$ 에 연결된다)이며;

[0029] W는 O 또는 S이고;

[0030] W^1 은 OR^{18} , SR^{19} , $NR^{20}R^{21}$ 또는 R^{22} 이며;

[0031] R^{1a} 및 R^{1b} 는 독립적으로, 임의로 치환된 페닐, 임의로 치환된 나프탈레닐 또는 임의로 치환된 5원 내지 6원 헤테로 방향족 환; 또는 시아노, C_1-C_8 알킬, C_2-C_8 알케닐, C_2-C_8 알키닐, C_1-C_8 할로알킬, C_2-C_8 할로알케닐, C_2-C_8 할로알키닐, C_3-C_8 사이클로알킬, C_3-C_8 할로사이클로알킬, C_4-C_{10} 알킬사이클로알킬, C_4-C_{10} 사이클로알킬알킬, C_4-C_{10} 할로사이클로알킬알킬, C_5-C_{10} 알킬사이클로알킬알킬, C_2-C_8 알콕시알킬, C_2-C_8 할로알콕시알킬, C_4-C_{10} 사이클로알콕시알킬, C_3-C_{10} 알콕시알콕시알킬, C_2-C_8 알킬티오알킬, C_2-C_8 할로알킬티오알킬, C_2-C_8 알킬설퍼닐알킬, C_2-C_8 알킬설포닐알킬, C_3-C_8 알콕시카르보닐알킬, C_3-C_8 할로알콕시카르보닐알킬, C_2-C_8 알킬아미노알킬, C_3-C_{10} 다이알킬아미노알킬, C_2-C_8 할로알킬아미노알킬, C_4-C_{10} 사이클로알킬아미노알킬, C_1-C_8 알콕시, C_1-C_8 할로알콕시, C_3-C_8 사이클로알콕시, C_3-C_8 할로사이클로알콕시, C_4-C_{10} 사이클로알킬알콕시, C_2-C_8 알케닐옥시, C_2-C_8 할로알케닐옥시, C_2-C_8 알키닐옥시, C_3-C_8 할로알키닐옥시, C_2-C_8 알콕시알콕시, C_2-C_8 알킬카르보닐옥시, C_2-C_8 할로알킬카르보닐옥시, C_1-C_8 알킬티오, C_1-C_8 할로알킬티오, C_3-C_8 사이클로알킬티오, C_3-C_{10} 트라이알킬설퍼닐, C_1-C_8 알킬아미노, C_2-C_8 다이알킬아미노, C_1-C_8 할로알킬아미노, C_2-C_8 할로다이알킬아미노, C_3-C_8 사이클로알킬아미노, C_2-C_8 알킬카르보닐아미노, C_2-C_8 할로알킬카르보닐아미노, C_1-C_8 알킬설포닐아미노, C_1-C_8 할로알킬설포닐아미노, 피롤리디닐, 피페리디닐 또는 모르폴리닐이고;

[0032] R^2 는 수소, 할로젠, 시아노, 아미노, $-CHO$, $-C(=O)OH$, $-C(=O)NH_2$, C_1-C_6 알킬, C_2-C_6 알케닐, C_2-C_6 알키닐, C_1-C_6 할로알킬, C_2-C_6 할로알케닐, C_2-C_6 할로알키닐, C_3-C_6 사이클로알킬, C_3-C_6 할로사이클로알킬, C_4-C_6 알킬사이클로알킬, C_4-C_6 사이클로알킬알킬, C_4-C_6 할로사이클로알킬알킬, C_3-C_6 사이클로알케닐, C_3-C_6 할로사이클로알케닐, C_2-C_6 알콕시알킬, C_2-C_6 알킬티오알킬, C_2-C_6 알킬설퍼닐알킬, C_2-C_6 알킬설포닐알킬, C_2-C_6 알킬아미노알킬, C_3-C_6 다이알킬아미노알킬, C_2-C_6 할로알킬아미노알킬, C_2-C_6 알킬카르보닐, C_2-C_6 할로알킬카르보닐, C_4-C_6 사이클로알킬카르보닐, C_2-C_6 알콕시카르보닐, C_4-C_6 사이클로알콕시카르보닐, C_5-C_6 사이클로알킬알콕시카르보닐, C_2-C_6 알킬아미노카르보닐, C_3-C_6 다이알킬아미노카르보닐, C_1-C_6 알콕시, C_1-C_6 할로알콕시, C_3-C_6 사이클로알콕시, C_3-C_6 할로사이클로알콕시, C_2-C_6 알케닐옥시, C_2-C_6 할로알케닐옥시, C_2-C_6 알키닐옥시, C_3-C_6 할로알키닐옥시, C_2-C_6 알콕시알콕시, C_2-C_6 알킬카르보닐옥시, C_2-C_6 할로알킬카르보닐옥시, C_1-C_6 알킬티오, C_1-C_6 할로알킬티오, C_3-C_6 사이클로알킬티오, C_1-C_6 알킬아미노, C_2-C_6 다이알킬아미노, C_1-C_6 할로알킬아미노, C_2-C_6 할로다이알킬아미노, C_3-C_6 사이클로알킬아미노, C_2-C_6 알킬카르보닐아미노, C_2-C_6 할로알킬카르보닐아미노, C_1-C_6 알킬설포닐아미노 또는 C_1-C_6 할로알킬설포닐아미노이며;

[0033] R^3 는 수소, 할로젠, 시아노, 하이드록시, C_1-C_3 알킬, C_1-C_3 할로알킬, C_1-C_3 알콕시 또는 C_1-C_3 할로알콕시이거나;

- [0034] R^2 및 R^3 는 이들이 부착되어 있는 탄소 원자와 함께, 탄소 원자, 및 2개 이하의 O 원자, 2개 이하의 S 원자, 2개 이하의 N 원자 및 2개 이하의 Si 원자 중에서 독립적으로 선택되는 4개 이하의 헤테로 원자 중에서 선택되는 환 구성원 (여기서, 3개 이하의 탄소 원자 환 구성원은 $C(=O)$ 및 $C(=S)$ 중에서 독립적으로 선택되고, 황 원자 환 구성원은 $S(=O)_s(=NR^{17})_f$ 중에서 독립적으로 선택되며, 규소 원자 환 구성원은 $SiR^{10}R^{11}$ 중에서 독립적으로 선택된다)을 포함하고, 탄소 원자 환 구성원 상에서 할로젠, 시아노, C_1-C_2 알킬, C_1-C_2 할로알킬, C_1-C_2 알콕시 및 C_1-C_2 할로알콕시, 및 질소 원자 환 구성원 상에서 시아노, C_1-C_2 알킬 및 C_1-C_2 알콕시 중에서 독립적으로 선택되는 4개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 3원 내지 7원 환을 형성하며;
- [0035] R^4 는 임의로 치환된 페닐, 임의로 치환된 나프탈레닐 또는 임의로 치환된 5원 내지 6원 헤테로 방향족 환; 또는 수소, 할로젠, 시아노, 하이드록시, $-CHO$, C_1-C_4 알킬, C_2-C_4 알케닐, C_2-C_4 알키닐, C_1-C_4 할로알킬, C_2-C_4 할로알케닐, C_2-C_4 할로알키닐, C_2-C_4 알콕시알킬, C_2-C_4 알킬티오알킬, C_2-C_4 알킬설퍼닐알킬, C_2-C_4 알킬설폰닐알킬, C_2-C_4 알킬카르보닐, C_2-C_4 할로알킬카르보닐, C_2-C_5 알콕시카르보닐, C_2-C_5 알킬아미노카르보닐, C_3-C_5 다이알킬아미노카르보닐, C_1-C_4 알콕시, C_1-C_4 할로알콕시, C_1-C_4 알킬티오, C_1-C_4 할로알킬티오, C_1-C_4 알킬설퍼닐, C_1-C_4 할로알킬설퍼닐, C_1-C_4 알킬설폰닐, C_1-C_4 할로알킬설폰닐, C_2-C_4 알킬카르보닐옥시, C_2-C_4 할로알킬카르보닐옥시, C_2-C_5 알콕시카르보닐옥시, C_2-C_5 알킬아미노카르보닐옥시 또는 C_3-C_5 다이알킬아미노카르보닐옥시이고;
- [0036] R^5 는 수소, C_1-C_3 알킬 또는 C_1-C_3 할로알킬이며;
- [0037] 각 R^{6a} 는 독립적으로 C_1-C_4 알킬, C_1-C_4 알케닐, C_1-C_4 할로알킬, C_1-C_4 알콕시, 할로젠, 시아노 또는 하이드록시 이거나;
- [0038] 2개의 R^{6a} 는 함께 C_1-C_4 알킬렌 또는 C_2-C_4 알케닐렌으로서 취해, 가교 이환계 (bridged bicyclic ring system) 또는 융합 이환계를 형성하거나;
- [0039] 이중 결합으로 결합된 인접한 환 탄소 원자에 부착되는 2개의 R^{6a} 는 함께, C_1-C_4 알킬, C_1-C_4 할로알킬, C_1-C_4 알콕시, C_1-C_4 할로알콕시, 할로젠, 하이드록시, 아미노, 시아노 및 니트로 중에서 선택되는 3개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 $-CH=CH-CH=CH-$ 로서 취해지고;
- [0040] R^{6b} 는 수소, 시아노, C_1-C_3 알킬, C_1-C_3 할로알킬, C_1-C_3 알콕시, C_2-C_3 알킬카르보닐, C_2-C_3 알콕시카르보닐 또는 C_3-C_6 사이클로알킬이며;
- [0041] R^7 은 수소, 시아노, C_1-C_4 알킬, C_1-C_4 할로알킬, C_2-C_4 알콕시알킬, C_2-C_4 알킬티오알킬, C_2-C_4 알킬카르보닐, C_2-C_4 할로알킬카르보닐, C_2-C_4 알콕시카르보닐, C_2-C_4 알킬아미노카르보닐, C_3-C_5 다이알킬아미노카르보닐, C_1-C_4 알킬설폰닐 또는 C_1-C_4 할로알킬설폰닐이거나;
- [0042] R^3 및 R^7 은 이들이 부착되어 있는 연결 원자와 함께, 연결 원자 이외에도, 탄소 원자, 및 1개 이하의 O 원자, 1개 이하의 S 원자 및 1개 이하의 N 원자 중에서 독립적으로 선택되는 3개 이하의 헤테로 원자 중에서 선택되는 환 구성원을 포함하고, 탄소 원자 환 구성원 상에서 할로젠, 시아노, 니트로, C_1-C_2 알킬, C_1-C_2 할로알킬, C_1-C_2 알콕시 및 C_1-C_2 할로알콕시, 및 질소 원자 환 구성원 상에서 시아노, C_1-C_2 알킬 및 C_1-C_2 알콕시 중에서 독립적으로 선택되는 3개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 5원 내지 7원 부분 포화 환을 형성하고;
- [0043] 각 R^8 은 독립적으로 수소, C_1-C_3 알킬 또는 C_1-C_3 할로알킬이며;
- [0044] 각 R^{9a} 는 독립적으로 할로젠, 하이드록시, 아미노, 시아노, 니트로, C_1-C_6 알킬, C_2-C_6 알케닐, C_2-C_6 알키닐, C_3-C_6 사이클로알킬, C_4-C_{10} 사이클로알킬알킬, C_4-C_{10} 알킬사이클로알킬, C_5-C_{10} 알킬사이클로알킬알킬, C_6-C_{14} 사이클

로알킬사이클로알킬, C₁-C₆ 할로알킬, C₂-C₆ 할로알케닐, C₂-C₆ 할로알키닐, C₃-C₆ 할로사이클로알킬, C₁-C₄ 알콕시, C₁-C₄ 할로알콕시, C₁-C₄ 알킬티오, C₁-C₄ 알킬설퍼닐, C₁-C₄ 알킬설포닐, C₁-C₄ 할로알킬티오, C₁-C₄ 할로알킬설퍼닐, C₁-C₄ 할로알킬설포닐, C₁-C₄ 알킬아미노, C₂-C₈ 다이알킬아미노, C₃-C₆ 사이클로알킬아미노, C₂-C₄ 알콕시알킬, C₁-C₄ 하이드록시알킬, C₂-C₄ 알킬카르보닐, C₂-C₆ 알콕시카르보닐, C₂-C₆ 알킬카르보닐옥시, C₂-C₆ 알킬카르보닐티오, C₂-C₆ 알킬아미노카르보닐, C₃-C₈ 다이알킬아미노카르보닐 또는 C₃-C₆ 트라이알킬실릴;

[0045] 할로젠, 시아노, C₁-C₂ 알킬, C₁-C₂ 할로알킬, C₁-C₂ 알콕시 및 C₁-C₂ 할로알콕시 중에서 독립적으로 선택되는 3개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 페닐 또는 나프탈레닐;

[0046] 탄소 원자, 및 2개 이하의 O 원자, 2개 이하의 S 원자 및 4개 이하의 N 원자 중에서 독립적으로 선택되는 4개 이하의 헤테로 원자 중에서 선택되는 환 구성원을 포함하고, 탄소 원자 환 구성원 상에서 할로젠, 시아노, C₁-C₂ 알킬, C₁-C₂ 할로알킬, C₁-C₂ 알콕시 및 C₁-C₂ 할로알콕시, 및 질소 원자 환 구성원 상에서 시아노, C₁-C₂ 알킬 및 C₁-C₂ 알콕시 중에서 독립적으로 선택되는 3개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 5원 내지 6원 헤테로 방향족 환; 또는

[0047] 탄소 원자, 및 2개 이하의 O 원자, 2개 이하의 S 원자 및 4개 이하의 N 원자 중에서 독립적으로 선택되는 4개 이하의 헤테로 원자 중에서 선택되는 환 구성원 (여기서, 3개 이하의 탄소 원자 환 구성원은 C(=O) 및 C(=S) 중에서 독립적으로 선택된다)을 포함하고, 탄소 원자 환 구성원 상에서 할로젠, 시아노, C₁-C₂ 알킬, C₁-C₂ 할로알킬, C₁-C₂ 알콕시 및 C₁-C₂ 할로알콕시, 및 질소 원자 환 구성원 상에서 시아노, C₁-C₂ 알킬 및 C₁-C₂ 알콕시 중에서 독립적으로 선택되는 3개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 3원 내지 7원 비방향족 환이고;

[0048] 각 R^{9b}는 독립적으로 수소, 시아노, C₁-C₃ 알킬, C₁-C₃ 할로알킬, C₁-C₃ 알콕시, C₂-C₃ 알킬카르보닐, C₂-C₃ 알콕시카르보닐 또는 C₃-C₆ 사이클로알킬이며;

[0049] 각 R¹⁰ 및 R¹¹은 독립적으로 C₁-C₅ 알킬, C₂-C₅ 알케닐, C₂-C₅ 알키닐, C₃-C₅ 사이클로알킬, C₃-C₆ 할로사이클로알킬, C₄-C₁₀ 사이클로알킬알킬, C₄-C₇ 알킬사이클로알킬, C₅-C₇ 알킬사이클로알킬알킬, C₁-C₅ 할로알킬, C₁-C₅ 알콕시 또는 C₁-C₅ 할로알콕시이고;

[0050] 각 R¹²는 독립적으로 수소, 할로젠, 하이드록시, 시아노, C₁-C₄ 알킬, C₁-C₄ 할로알킬, C₁-C₄ 알콕시, C₁-C₄ 할로알콕시, C₂-C₄ 알콕시알킬, C₂-C₄ 알킬카르보닐, C₂-C₄ 알콕시카르보닐 또는 C₃-C₆ 사이클로알킬이며;

[0051] 각 R¹³은 독립적으로 수소, 시아노, C₁-C₄ 알킬, C₁-C₄ 할로알킬, C₁-C₄ 알콕시, C₂-C₄ 알킬카르보닐, C₂-C₄ 알콕시카르보닐 또는 C₃-C₆ 사이클로알킬이고;

[0052] R¹⁵은 수소, 할로젠, 시아노, 하이드록시, -CHO, C₁-C₄ 알킬, C₂-C₄ 알케닐, C₂-C₄ 알키닐, C₁-C₄ 할로알킬, C₂-C₄ 할로알케닐, C₂-C₄ 할로알키닐, C₂-C₄ 알콕시알킬, C₂-C₄ 알킬티오알킬, C₂-C₄ 알킬설퍼닐알킬, C₂-C₄ 알킬설포닐알킬, C₃-C₅ 알콕시카르보닐알킬, C₂-C₄ 알킬카르보닐, C₂-C₄ 할로알킬카르보닐, C₂-C₅ 알콕시카르보닐, C₂-C₅ 알킬아미노카르보닐, C₃-C₅ 다이알킬아미노카르보닐, C₁-C₄ 알콕시, C₁-C₄ 할로알콕시, C₁-C₄ 알킬티오, C₁-C₄ 할로알킬티오, C₁-C₄ 알킬설퍼닐, C₁-C₄ 할로알킬설퍼닐, C₁-C₄ 알킬설포닐 또는 C₁-C₄ 할로알킬설포닐이되; 단 R¹⁵이 하이드록시이면, R^{1a}는 탄소 원자를 통해 화학식 1의 A에 결합되며;

[0053] R¹⁶은 수소, C₁-C₄ 알킬, C₂-C₄ 알케닐, C₃-C₄ 알키닐, C₁-C₄ 할로알킬, C₂-C₄ 할로알케닐, C₂-C₄ 할로알키닐, C₂-C₄ 알콕시알킬, C₂-C₄ 알킬티오알킬, C₂-C₄ 알킬설퍼닐알킬, C₂-C₄ 알킬설포닐알킬, C₂-C₄ 알킬카르보닐, C₂-C₄ 할로알킬카르보닐, C₂-C₅ 알콕시카르보닐, C₃-C₅ 알콕시카르보닐알킬, C₂-C₅ 알킬아미노카르보닐, C₃-C₅ 다이알킬아미노카르보닐, C₁-C₄ 알킬설포닐 또는 C₁-C₄ 할로알킬설포닐이고;

- [0054] 각 R^{17} 은 독립적으로 수소, 시아노, C_1-C_6 알킬, C_1-C_6 할로알킬, C_3-C_8 사이클로알킬, C_3-C_8 할로사이클로알킬, C_1-C_6 알콕시, C_1-C_6 할로알콕시, C_1-C_6 알킬아미노, C_2-C_8 다이알킬아미노, C_1-C_6 할로알킬아미노 또는 페닐이며;
- [0055] R^{18} 및 R^{19} 은 독립적으로 C_1-C_6 알킬, C_3-C_6 알케닐, C_3-C_6 알키닐, C_1-C_6 할로알킬, C_3-C_6 할로알케닐, C_3-C_6 할로알키닐, C_3-C_6 사이클로알킬, C_3-C_6 할로사이클로알킬, C_4-C_8 알킬사이클로알킬, C_4-C_8 사이클로알킬알킬, C_4-C_8 할로사이클로알킬알킬, C_5-C_8 알킬사이클로알킬알킬, C_2-C_6 알콕시알킬, C_4-C_8 사이클로알콕시알킬, C_3-C_6 알콕시알킬, C_2-C_6 알킬티오알킬, C_2-C_6 알킬설퍼닐알킬, C_2-C_6 알킬설포닐알킬, C_2-C_6 알킬아미노알킬, C_3-C_6 다이알킬아미노알킬, C_2-C_6 할로알킬아미노알킬, C_4-C_8 사이클로알킬아미노알킬, C_2-C_6 알킬카르보닐, C_2-C_6 할로알킬카르보닐, C_4-C_8 사이클로알킬카르보닐, C_2-C_6 알콕시카르보닐, C_2-C_6 알킬아미노카르보닐, C_3-C_8 다이알킬아미노카르보닐 또는 C_4-C_8 사이클로알킬아미노카르보닐이고;
- [0056] R^{20} 은 수소, 시아노, 하이드록시, 아미노, C_1-C_6 알킬, C_3-C_6 알케닐, C_3-C_6 알키닐, C_1-C_6 할로알킬, C_3-C_6 할로알케닐, C_3-C_6 할로알키닐, C_3-C_6 사이클로알킬, C_4-C_8 사이클로알킬알킬, C_2-C_6 알콕시알킬, C_1-C_6 알콕시, C_1-C_6 할로알콕시, C_1-C_6 알킬설퍼닐, C_1-C_6 할로알킬설퍼닐, C_2-C_6 알킬카르보닐, C_2-C_6 할로알킬카르보닐, C_1-C_6 알킬아미노, C_2-C_8 다이알킬아미노, C_1-C_6 할로알킬아미노 또는 C_2-C_8 할로다이알킬아미노이며;
- [0057] R^{21} 은 수소, C_1-C_6 알킬, C_3-C_6 알케닐, C_3-C_6 알키닐, C_1-C_6 할로알킬 또는 C_3-C_6 사이클로알킬이거나;
- [0058] R^{20} 및 R^{21} 은 함께 $-(CH_2)_4-$, $-(CH_2)_5-$ 또는 $-(CH_2)_2O(CH_2)_2-$ 로서 취해지고;
- [0059] R^{22} 는 수소, 할로젠, 시아노, C_1-C_4 알킬, C_1-C_4 할로알킬, C_2-C_4 알콕시알킬, C_2-C_4 알킬카르보닐, C_2-C_4 알콕시카르보닐, C_2-C_3 알킬아미노카르보닐 또는 C_3-C_6 다이알킬아미노카르보닐이며;
- [0060] 각 R^{23} 는 탄소 원자 환 구성원 상에서 R^{23a} 중에서 독립적으로 선택되고, 질소 원자 환 구성원 상에서 R^{23b} 중에서 독립적으로 선택되며;
- [0061] R^{23a} 는 할로젠, 하이드록시, 시아노, C_1-C_6 알킬, C_1-C_6 할로알킬, C_1-C_4 알콕시, C_1-C_4 할로알콕시, C_2-C_6 알콕시알킬, C_2-C_4 알킬카르보닐, C_2-C_6 알콕시카르보닐 또는 C_3-C_6 사이클로알킬이고;
- [0062] R^{23b} 는 시아노, C_1-C_3 알킬, C_1-C_3 할로알킬, C_1-C_3 알콕시, C_2-C_3 알킬카르보닐, C_2-C_3 알콕시카르보닐 또는 C_3-C_6 사이클로알킬이며;
- [0063] 각 R^{29a} 는 독립적으로 수소, 할로젠, C_1-C_3 알킬 또는 C_1-C_3 할로알킬이고;
- [0064] 각 R^{30a} 는 독립적으로 수소 또는 C_1-C_3 알킬이며;
- [0065] n 은 0, 1 또는 2이고;
- [0066] q 는 0, 1 또는 2이며;
- [0067] s 및 f 는 $S(=O)_s(=NR^{17})_f$ 의 각 경우에, 독립적으로 0, 1 또는 2이되, 단 s 와 f 의 합계는 0, 1 또는 2이다.
- [0068] (단, Z 가 Z^1-13 이면, Q 는 비치환된 페닐 이외의 것이다).
- [0069] 특히, 본 발명은 화학식 1의 화합물 (모든 입체 이성질체 포함), 이의 N -옥사이드 또는 이의 염에 관한 것이다.
- [0070] 본 발명은 또한 (a) 본 발명의 화합물 (즉, 살진균적 유효량으로); 및 (b) 계면활성제, 고체 희석제 및 액체 희석제로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 적어도 하나의 추가 성분을 포함하는 살진균제 조성물에 관한 것이다.
- [0071] 본 발명은 또한 (a) 본 발명의 화합물; 및 (b) 적어도 하나의 다른 살진균제 (예를 들어, 작용 부위가 상이한

적어도 하나의 다른 살진균제)를 포함하는 살진균제 조성물에 관한 것이다.

- [0072] 본 발명은 또한 살진균적 유효량의 본 발명의 화합물 (즉, 본 명세서에 기재된 조성물로서)을 식물 또는 이의 부분, 또는 식물 종자에 적용하는 것을 포함하는, 진균 식물 병원체에 의한 식물병을 방제하는 방법에 관한 것이다.
- [0073] (발명의 상세한 설명)
- [0074] 본 명세서에서 사용되는 용어 "구성하다", "구성하는", "포함하다", "포함하는", "가지다", "갖는", "함유하다", "함유하는", "특징으로 하는" 또는 임의의 이들의 기타 변형체는 명시적으로 제한되는 비배타적인 포함 사항을 망라하는 것으로 의도된다. 예를 들어, 요소들의 목록을 포함하는 조성물, 혼합물, 공정, 방법, 용품, 또는 장치는 반드시 그러한 요소만으로 제한되지는 않고, 명확하게 열거되지 않거나 그러한 조성물, 혼합물, 공정, 방법, 용품, 또는 장치에 내재적인 다른 요소를 포함할 수도 있다.
- [0075] 연결구 "이루어지는"은 명시되지 않은 임의의 요소, 단계, 또는 성분을 제외한다. 특허청구범위 중에서라면, 그러한 것은 통상적으로 관련된 불순물을 제외하고는 열거된 것 이외의 물질을 포함하는 것으로 특허청구범위를 축소시킬 것이다. 어구 "이루어지는"이 전문 직후보다는 특허청구범위의 본문 절에 나타나 있는 경우에는, 그러한 절에 나타난 요소만을 제한하며; 다른 요소는 전체적으로 특허청구범위에서 배제되지 않는다.
- [0076] 연결구 "실질적으로 이루어지는"은 문자 그대로 개시된 것 이외에도, 물질, 단계, 특성, 성분, 또는 요소를 포함하는 조성물, 방법 또는 장치를 정의하는데 사용되나, 단, 이들 추가의 물질, 단계, 특성, 성분, 또는 요소는 청구된 발명의 기본적인 신규한 특성(들)에 실질적으로 영향을 미치지 않는다. 용어 "실질적으로 이루어지는"은 "구성하는"과 "이루어지는" 사이의 중간 입장을 차지한다.
- [0077] 본 발명자가 무제한 용어, 예컨대 "구성하는"으로 발명 또는 이의 부분을 정의하는 경우에는, 또한 (달리 언급되지 않는 한) 용어 "실질적으로 이루어지는" 또는 "이루어지는"을 사용하여 이러한 발명을 기술하는 것으로 해석되어야 한다는 것을 용이하게 이해할 것이다.
- [0078] 더욱이, 명백히 반대로 기술되지 않는다면, "또는"은 포괄적인 "또는"을 말하며 배타적인 "또는"을 말하는 것은 아니다. 예를 들어, 조건 A 또는 B는 하기 중 어느 하나에 의해 만족된다: A는 참 (또는 존재함)이고 B는 거짓 (또는 존재하지 않음), A는 거짓 (또는 존재하지 않음)이고 B는 참 (또는 존재함), A 및 B가 모두가 참 (또는 존재함)이다.
- [0079] 또한, 본 발명의 요소 또는 성분 앞의 부정 관사 ("a" 및 "an")는 요소 또는 성분의 경우 (즉, 존재)의 수에 관해서는 비제한적인 것으로 의도된다. 따라서, 부정관사 ("a" 또는 "an")는 하나 또는 적어도 하나를 포함하는 것으로 파악되어야 하며, 당해 요소 또는 성분의 단수형은 그 수가 명백하게 단수임을 의미하는 것이 아니라면 복수형을 또한 포함한다.
- [0080] 본 명세서 및 특허청구범위에 언급된 "식물"은 어린 식물 (예를 들어, 모종 (seedling)으로 발달하는 발아 종자) 및 성숙, 생식 단계 (예를 들어, 꽃 및 종자를 생성하는 식물)를 포함하는 모든 생명 단계 (life stage)의 식물계 (Kingdom Plantae), 특히 종자 식물 (종자 식물상문 (Spermatopsida))의 구성원을 포함한다. 식물 부위는 전형적으로 생육 배지 (예를 들어, 토양) 표면 아래에서 성장하는 굴지성 구성원, 예컨대 뿌리, 덩이 줄기, 구근 및 구경을 포함하며, 또한 생육 배지 위에서 성장하는 구성원, 예컨대 경엽 (줄기 및 잎 포함), 꽃, 열매 및 종자도 포함한다.
- [0081] 단어 단독으로 사용되거나 단어의 조합으로 사용되는 본 명세서에 언급된 용어 "모종"은 종자 배아로부터 발육되는 어린 식물을 의미한다.
- [0082] 상기 설명에서, 단독으로 또는 "알킬티오" 또는 "할로알킬"과 같은 복합어에 사용되는 용어 "알킬"은 직쇄상 또는 분지상 알킬, 예컨대, 메틸, 에틸, *n*-프로필, *i*-프로필, 또는 다른 부틸, 펜틸 또는 헥실 이성질체를 포함한다. "알케닐"은 직쇄상 또는 분지상 알켄, 예컨대 에테닐, 1-프로페닐, 2-프로페닐, 및 다른 부테닐, 펜테닐 및 헥세닐 이성질체를 포함한다. "알케닐"은 또한 폴리엔, 예컨대 1,2-프로파디에닐 및 2,4-헥사디에닐을 포함한다. "알키닐"은 직쇄상 또는 분지상 알킨, 예컨대 에티닐, 1-프로피닐, 2-프로피닐 및 다른 부티닐, 펜티닐 및 헥시닐 이성질체를 포함한다. "알키닐"은 또한 다수의 삼중 결합으로 구성되는 부분, 예컨대 2,5-헥사디에닐을 포함한다. "알킬렌"은 직쇄상 또는 분지상 알칸다일을 나타낸다. "알킬렌"의 예로는 CH₂, CH₂CH₂, CH(CH₃), CH₂CH₂CH₂, CH₂CH(CH₃), 및 다른 부틸렌 이성질체를 들 수 있다. "알케닐렌"은 하나의 올레핀 결합을

포함하는 직쇄상 또는 분지상 알켄디일을 나타낸다. "알케닐렌"의 예로는 $\text{CH}=\text{CH}$, $\text{CH}_2\text{CH}=\text{CH}$, $\text{CH}=\text{C}(\text{CH}_3)$ 및 다른 부테닐렌 이성질체를 들 수 있다. "알키닐렌"은 하나의 삼중 결합을 포함하는 직쇄상 또는 분지상 알킨디일을 나타낸다. "알키닐렌"의 예로는 $\text{C}\equiv\text{C}$, $\text{CH}_2\text{C}\equiv\text{C}$, $\text{C}\equiv\text{CCH}_2$, 및 다른 부티닐렌 이성질체를 들 수 있다.

[0083]

"알콕시"는 예를 들어, 메톡시, 에톡시, *n*-프로필옥시, 아이소프로필옥시 및 다른 부톡시, 펜톡시 및 헥실옥시 이성질체를 포함한다. "알콕시알킬"은 알킬이 알콕시 치환된 것을 나타낸다. "알콕시알킬"의 예로는 CH_3OCH_2 , $\text{CH}_3\text{OCH}_2\text{CH}_2$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OCH}_2$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OCH}_2$ 및 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{CH}_2$ 를 들 수 있다. "알콕시알콕시"는 알콕시가 알콕시 치환된 것을 나타낸다. "알케닐옥시"는 직쇄상 및 분지상 알케닐옥시 부분을 포함한다. "알케닐옥시"의 예로는 $\text{H}_2\text{C}=\text{CHCH}_2\text{O}$, $(\text{CH}_3)_2\text{C}=\text{CHCH}_2\text{O}$, $(\text{CH}_3)\text{CH}=\text{CHCH}_2\text{O}$, $(\text{CH}_3)\text{CH}=\text{C}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{O}$ 및 $\text{CH}_2=\text{CHCH}_2\text{CH}_2\text{O}$ 를 들 수 있다. "알키닐옥시"는 직쇄상 및 분지상 알키닐옥시 부분을 포함한다. "알키닐옥시"의 예로는 $\text{HC}\equiv\text{CCH}_2\text{O}$, $\text{CH}_3\text{C}\equiv\text{CCH}_2\text{O}$ 및 $\text{CH}_3\text{C}\equiv\text{CCH}_2\text{CH}_2\text{O}$ 를 들 수 있다. "알킬티오"는 분지상 또는 직쇄상 알킬티오 부분, 예컨대 메틸티오, 에틸티오, 및 다른 프로필티오, 부틸티오, 펜틸티오 및 헥실티오 이성질체를 포함한다. "알킬설퍼닐"은 알킬설퍼닐기의 두 에난티오머를 포함한다. "알킬설퍼닐"의 예로는 $\text{CH}_3\text{S}(\text{O})-$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{S}(\text{O})-$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{S}(\text{O})-$, $(\text{CH}_3)_2\text{CHS}(\text{O})-$ 및 다른 부틸설퍼닐, 펜틸설퍼닐 및 헥실설퍼닐 이성질체를 들 수 있다. "알킬설퍼닐"의 예로는 $\text{CH}_3\text{S}(\text{O})_2-$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{S}(\text{O})_2-$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{S}(\text{O})_2-$, $(\text{CH}_3)_2\text{CHS}(\text{O})_2-$, 및 다른 부틸설퍼닐, 펜틸설퍼닐 및 헥실설퍼닐 이성질체를 들 수 있다. "알킬티오알킬"은 알킬이 알킬티오 치환된 것을 나타낸다. "알킬티오알킬"의 예로는 CH_3SCH_2 , $\text{CH}_3\text{SCH}_2\text{CH}_2$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{SCH}_2$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{SCH}_2$ 및 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{SCH}_2\text{CH}_2$ 를 들 수 있다.

[0084]

"트라이알킬실릴"은 규소 원자에 부착되어, 이를 통해 결합되어 있는 3개의 분지상 및/또는 직쇄상 알킬 라디칼, 예컨대 트라이메틸실릴, 트라이에틸실릴 및 *tert*-부틸다이메틸실릴을 포함한다.

[0085]

"하이드록시알킬"은 하나의 하이드록시기로 치환된 알킬기를 나타낸다. "하이드록시알킬"의 예로는 HOCH_2CH_2 , $\text{CH}_3\text{CH}_2(\text{OH})\text{CH}$ 및 $\text{HOCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2$ 를 들 수 있다.

[0086]

"알킬아미노", "다이알킬아미노" 등은 상기 예와 유사하게 정의된다. 용어 "할로다이알킬아미노"는 적어도 하나의 알킬 부분 상에서 동일하거나 상이할 수 있는 하나 이상의 할로젠 원자로 치환된 다이알킬아미노기를 나타낸다. "할로다이알킬아미노"의 예로는 $\text{CF}_3(\text{CH}_3)\text{N}-$, $(\text{CF}_3)_2\text{N}-$ 및 $\text{CH}_2\text{Cl}(\text{CH}_3)\text{N}-$ 을 들 수 있다. "사이클로알킬아미노"는 아미노 질소 원자가 사이클로알킬 라디칼 및 수소 원자에 결합되어 있는 것을 의미하며, 사이클로프로필아미노, 사이클로부틸아미노, 사이클로펜틸아미노 및 사이클로헥실아미노와 같은 기를 포함한다. "할로알킬아미노알킬"은 아미노 질소 또는 알킬 부분 또는 그 조합 상에서 동일하거나 상이할 수 있는 하나 이상의 할로젠 원자로 치환된 알킬아미노알킬기를 나타낸다. "할로알킬아미노알킬"은 임의의 알킬 부분 및 질소에 부착된 할로젠기를 포함한다. "할로알킬아미노알킬"의 예로는 $\text{ClCH}_2\text{CH}_2\text{NHCH}_2-$ 및 $\text{CH}_3\text{NCH}(\text{CH}_2\text{CH}_2\text{Cl})-$ 를 들 수 있다.

[0087]

"사이클로알킬"은 예를 들어, 사이클로프로필, 사이클로부틸, 사이클로펜틸 및 사이클로헥실을 포함한다. 용어 "알킬사이클로알킬"은 사이클로알킬 부분이 알킬 치환된 것을 나타내며, 예를 들어, 에틸사이클로프로필, *i*-프로필사이클로부틸, 3-메틸사이클로펜틸 및 4-메틸사이클로헥실을 포함한다. 용어 "사이클로알킬알킬"은 알킬 부분이 사이클로알킬 치환된 것을 나타낸다. "사이클로알킬알킬"의 예로는 사이클로프로필메틸, 사이클로펜틸에틸, 및 직쇄상 또는 분지상 알킬기에 결합된 다른 사이클로알킬 부분을 들 수 있다. 용어 "사이클로알콕시"는 산소 원자를 통해 결합되는 사이클로알킬, 예컨대 사이클로펜틸옥시 및 사이클로헥실옥시를 나타낸다. "사이클로알킬알콕시"는 산소 원자를 통해 결합되어 알킬쇄에 부착되는 사이클로알킬알킬을 나타낸다. "사이클로알킬알콕시"의 예로는 사이클로프로필메톡시, 사이클로펜틸에톡시, 및 직쇄상 또는 분지상 알콕시기에 결합된 다른 사이클로알킬 부분을 들 수 있다. "시아노사이클로알킬"은 하나의 시아노기로 치환된 사이클로알킬기를 나타낸다. "시아노사이클로알킬"의 예로는 4-시아노사이클로헥실 및 3-시아노사이클로펜틸을 들 수 있다. "사이클로알케닐"은 사이클로펜테닐 및 사이클로헥세닐과 같은 기, 및 1,3- 및 1,4-사이클로헥사디에닐과 같은 2개 이상의 이중 결합을 갖는 기를 포함한다.

[0088]

단독의 또는 "할로알킬"과 같은 복합어에서의, 또는 "할로젠으로 치환된 알킬"과 같은 설명에서 사용될 때의 용어 "할로젠"은 불소, 염소, 브롬 또는 요오드를 포함한다. 또한, "할로알킬"과 같은 복합어에서, 또는 "할로젠으로 치환된 알킬"과 같은 설명에서 사용될 때, 상기 알킬은 동일하거나 상이할 수 있는 할로젠 원자로 부분적으로 또는 완전히 치환될 수 있다. "할로알킬" 또는 "할로젠으로 치환된 알킬"의 예로는 $\text{F}_3\text{C}-$, ClCH_2- , CF_3CH_2-

및 CF_3CCl_2 -를 들 수 있다. 용어 "할로사이클로알킬", "할로알콕시", "할로알킬티오", "할로알케닐", "할로알키닐" 등은 용어 "할로알킬"과 유사하게 정의된다. "할로알콕시"의 예로는 $\text{CF}_3\text{O}-$, $\text{CCl}_3\text{CH}_2\text{O}-$, $\text{HCF}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{O}-$ 및 $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{O}-$ 를 들 수 있다. "할로알킬티오"의 예로는 $\text{CCl}_3\text{S}-$, $\text{CF}_3\text{S}-$, $\text{CCl}_3\text{CH}_2\text{S}-$ 및 $\text{ClCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{S}-$ 를 들 수 있다.

"할로알킬설폰닐"의 예로는 $\text{CF}_3\text{S}(\text{O})-$, $\text{CCl}_3\text{S}(\text{O})-$, $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{S}(\text{O})-$ 및 $\text{CF}_3\text{CF}_2\text{S}(\text{O})-$ 를 들 수 있다. "할로알킬설폰닐"의 예로는 $\text{CF}_3\text{S}(\text{O})_2-$, $\text{CCl}_3\text{S}(\text{O})_2-$, $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{S}(\text{O})_2-$ 및 $\text{CF}_3\text{CF}_2\text{S}(\text{O})_2-$ 를 들 수 있다. "할로알케닐"의 예로는 $(\text{Cl})_2\text{C}=\text{CHCH}_2-$ 및 $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{CH}=\text{CHCH}_2-$ 를 들 수 있다. "할로알키닐"의 예로는 $\text{HC}\equiv\text{CCHCl}-$, $\text{CF}_3\text{C}\equiv\text{C}-$, $\text{CCl}_3\text{C}\equiv\text{C}-$ 및 $\text{FCH}_2\text{C}\equiv\text{CCH}_2-$ 를 들 수 있다.

[0089]

"알킬카르보닐"의 예로는 $\text{CH}_3\text{C}(\text{O})$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{C}(\text{O})$ 및 $(\text{CH}_3)_2\text{CHC}(\text{O})$ 를 들 수 있다. "알콕시카르보닐"의 예로는 $\text{CH}_3\text{OC}(\text{O})$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OC}(\text{O})$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OC}(\text{O})$, $(\text{CH}_3)_2\text{CHOC}(\text{O})$ 및 다른 부톡시- 또는 펜톡시카르보닐 이성질체를 들 수 있다. "알킬아미노카르보닐"의 예로는 $\text{CH}_3\text{NHC}(\text{O})-$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{NHC}(\text{O})-$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{NHC}(\text{O})-$, $(\text{CH}_3)_2\text{CHNHC}(\text{O})-$ 및 다른 부틸아미노- 또는 펜틸아미노카르보닐 이성질체를 들 수 있다. "다이알킬아미노카르보닐"의 예로는 $(\text{CH}_3)_2\text{NC}(\text{O})-$, $(\text{CH}_3\text{CH}_2)_2\text{NC}(\text{O})-$, $\text{CH}_3\text{CH}_2(\text{CH}_3)\text{NC}(\text{O})-$, $(\text{CH}_3)_2\text{CHN}(\text{CH}_3)\text{C}(\text{O})-$ 및 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2(\text{CH}_3)\text{NC}(\text{O})-$ 를 들 수 있다. 용어 "알킬카르보닐옥시"는 $\text{C}(\text{O})\text{O}$ 부분에 결합된 직쇄상 또는 분지상 알킬을 나타낸다. "알킬카르보닐옥시"의 예로는 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{C}(\text{O})\text{O}$ 및 $(\text{CH}_3)_2\text{CHC}(\text{O})\text{O}$ 를 들 수 있다.

[0090]

치환기 중 탄소 원자의 총수는 " C_i-C_j " 접두사로 나타내어지며, 여기서 i 및 j 는 1 내지 10의 수이다. 예를 들어, C_1-C_4 알킬설폰닐은 메틸설폰닐 내지 부틸설폰닐을 나타내고; C_2 알콕시알킬은 CH_3OCH_2- 를 나타내며; C_3 알콕시알킬은 예를 들어, $\text{CH}_3\text{CH}(\text{OCH}_3)-$, $\text{CH}_3\text{OCH}_2\text{CH}_2-$ 또는 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OCH}_2-$ 를 나타내고; C_4 알콕시알킬은 총 4개의 탄소 원자를 포함하는 알콕시기로 치환된 알킬기의 다양한 이성질체를 나타내며, 이의 예로는 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OCH}_2-$ 및 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{CH}_2-$ 를 들 수 있다.

[0091]

화합물이 상기 치환기의 수가 1을 초과할 수 있는 것을 나타내는 아래 첨자를 갖는 치환기로 치환되는 경우에는, 상기 치환기 (1개를 초과하는 경우)는 정의된 치환기, 예를 들어, $(\text{R}^{\text{9a}})_p$ (p 는 1, 2, 3, 4 또는 5이다) 중에서 독립적으로 선택된다. 또한, 아래 첨자가 범위, 예를 들어, $(\text{R})_{i-j}$ 를 나타내면, 치환기의 수는 i 및 j 를 포함하여 i 와 j 사이의 정수로부터 선택될 수 있다. 기가 수소일 수 있는 치환기, 예를 들어 R^{6b} 를 포함하면, 이러한 치환기가 수소로서 취해지는 경우, 이는 비치환된 상기 기와 동등한 것으로 인식된다. 가변 기 (variable group)가 어느 한 위치, 예를 들어 $(\text{R}^{\text{6a}})_n$ (여기서, n 은 0일 수 있다)에 임의로 부착되는 것으로 보여지면, 수소는 가변 기의 정의에서 인용되지 않더라도 그 위치에 있을 수 있다. 기의 하나 이상의 위치가 "치환되지 않은" 또는 "비치환된"이라고 하면, 수소 원자는 임의의 자유 원자기를 차지하도록 부착된다.

[0092]

"쇄"는 원자 (쇄 구성원) 사이의 단일 (포화) 또는 다중 결합을 갖는 단일 선으로 결합된 원자의 비환식 스트링이다. 용어 "쇄"는 화학식 1의 기 Z 를 정의하는데 사용되며, 하나의 단부 상에서 기 J 에 연결되고 다른 단부 상에서 기 Q 에 연결된다. 화학식 1의 성분으로서의 "쇄"는 탄소 또는 헤테로 원자쇄 구성원을 포함할 수 있다.쇄 자체는 비분지상이나,쇄 구성원은 또한 변수 R^{12} 및 R^{13} 에 나타낸 다른 작용기로 추가로 치환될 수 있다.쇄 길이는 발명의 요약에 기재된 바와 같이, 2개 내지 6개의쇄 구성원으로 다양할 수 있다.

[0093]

달리 명시되지 않는 한, 화학식 1의 성분 (예를 들어, 치환기 Q)으로서의 "환" 또는 "환계"는 탄소환식 또는 복소환식이다. 용어 "환계"는 2개 이상의 융합 환을 나타낸다. 용어 "이환계" 및 "융합 이환계"는 2개의 융합 환으로 구성되는 환계를 나타내며, 각각의 환은 달리 명시되지 않는 한, 포화, 부분 불포화 또는 완전 불포화될 수 있다. 용어 "융합 복소환식 이환계 (fused heterobicyclic ring system)"는 적어도 하나의 환 원자가 탄소가 아닌 융합 이환계를 나타낸다. "가교 이환계"는 하나 이상의 원자 세그먼트를 환의 인접하지 않는 환 구성원에 결합시킴으로써 형성된다. 용어 "환 구성원"은 환 또는 환계의 골격을 형성하는 원자 또는 다른 부분 (예를 들어, $\text{C}(\text{O})$, $\text{C}(\text{S})$, $\text{SiR}^{\text{10,11}}$ 또는 $\text{S}(\text{O})_s(\text{NR}^{\text{17}})_t$)을 말한다.

[0094]

용어 "탄소환", "카르보사이클" 또는 "탄소환계"는 환 골격을 형성하는 원자가 다만 탄소 중에서 선택되는 환 또는 환계를 나타낸다. 달리 표시되지 않으면, 탄소환은 포화, 부분적 불포화 또는 완전 불포화 환일 수 있다.

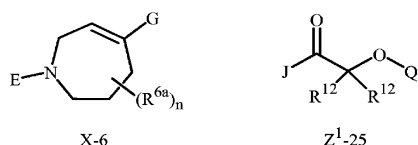
완전 불포화 탄소환이 휘켈 규칙 (Hückel's rule)을 만족시키면, 상기 환은 또한 "방향족 환"으로 명명된다. "포화 탄소환"은 단일 결합에 의해 서로 결합되는 탄소 원자로 구성되는 골격을 갖는 환을 말하며; 달리 특정되지 않으면, 나머지 탄소 원자가는 수소 원자에 의해 차지된다.

[0095] 용어 "복소환", "헤테로사이클" 또는 "복소환계"는 환 골격을 형성하는 적어도 하나의 원자가 탄소가 아닌, 예를 들어, 질소, 산소 또는 황인 환 또는 환계를 나타낸다. 전형적으로, 복소환은 4개 이하의 질소, 2개 이하의 산소 및 2개 이하의 황을 포함한다. 달리 명시되지 않는 한, 복소환은 포화, 부분 불포화 또는 완전 불포화 환일 수 있다. 완전 불포화 복소환이 휘켈 규칙을 만족시키면, 상기 환은 또한 "헤테로 방향족 환" 또는 "방향족 복소환"으로 명명된다. 달리 명시되지 않는 한, 복소환 및 복소환계는 탄소 또는 질소 상에서의 수소 치환에 의해 임의의 이용가능한 탄소 또는 질소를 통해 부착될 수 있다.

[0096] "방향족"은 각각의 환 원자가 실질적으로 동일 평면에 있고, 환 평면에 수직인 p -오비탈을 가지며, $(4n + 2) \pi$ 전자 (여기서, n 은 양의 정수이다)가 휘켈 규칙에 따르도록 환에 결합되어 있는 것을 나타낸다. 용어 "방향족 환계"는 환계의 적어도 하나의 환이 방향족인 탄소환계 또는 복소환계를 나타낸다. 용어 "방향족 탄소환계"는 환계의 적어도 하나의 환이 방향족인 탄소환계를 나타낸다. 용어 "방향족 복소환계"는 환계의 적어도 하나의 환이 방향족인 복소환계를 나타낸다. 용어 "비방향족 환계"는 완전 포화, 및 부분 또는 완전 불포화일 수 있는 탄소환계 또는 복소환계를 나타내나, 단, 환계의 어느 환도 방향족이 아니다. 용어 "비방향족 탄소환계"는 환계의 어느 환도 방향족이 아닌 탄소환계를 나타낸다. 용어 "비방향족 복소환계"는 환계의 어느 환도 방향족이 아닌 복소환계를 나타낸다.

[0097] 복소환과 관련하여 용어 "임의로 치환된"은 비치환되거나, 비치환된 유사체가 갖는 생물학적 활성을 소멸시키는 않는 적어도 하나의 비수소 치환기를 갖는 기를 말한다. 달리 명시되지 않는 한, 본 명세서에서 사용되는 하기 정의가 적용될 것이다. 용어 "임의로 치환된"은 어구 "치환되거나 비치환된" 또는 용어 "(비)치환된"과 교호적으로 사용된다. 달리 명시되지 않는 한, 임의로 치환된 기는 기의 각 치환가능한 위치에서 치환기를 가질 수 있으며, 각 치환은 다른 것과 관계가 없다.

[0098] 표현 "X 기는 좌측으로 뻗어있는 결합이 화학식 1의 E에 부착되고, 우측으로 뻗어있는 결합이 화학식 1의 G에 부착되도록 배향된다"는 하기 X-6에 대하여 설명된 것이다. 표현 " Z^1 기는 좌측으로 뻗어있는 결합이 화학식 1의 J에 부착되고, 우측으로 뻗어있는 결합이 화학식 1의 Q에 부착되도록 배향된다"는 하기 Z^1 -25 기에 대하여 설명된 것이다.



[0099] 화학식 1 및 본 명세서에 나타난 다른 환에서의 질소 원자와 A^1 으로 나타난 원자 사이의 파형 결합 (wavy bond)은 단일 결합을 나타내고, 인접한 이중 결합 (즉, 질소 원자를 치환기 R^2 및 R^3 에 연결시키는 결합)에 대한 기하 형태는 시스- (*E*), 트랜스- (*Z*), 또는 이들의 혼합물이다.

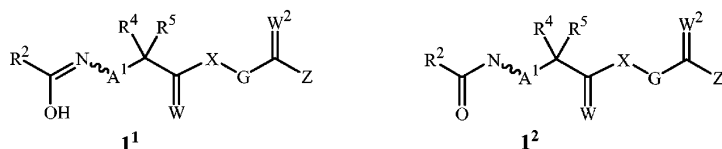
[0101] 방향족 및 비방향족 복소환 및 복소환계를 제조할 수 있는 다양한 합성 방법이 당업계에 공지되어 있으며; 광범위한 검토를 위해서는 총 8권의 문헌 [Comprehensive Heterocyclic Chemistry, A. R. Katritzky and C. W. Rees editors-in-chief, Pergamon Press, Oxford, 1984] 및 총 12권의 문헌 [Comprehensive Heterocyclic Chemistry II, A. R. Katritzky, C. W. Rees and E. F. V. Scriven editors-in-chief, Pergamon Press, Oxford, 1996]을 참조한다.

[0102] 본 발명의 화합물은 하나 이상의 입체 이성질체로 존재할 수 있다. 다양한 입체 이성질체는 에난티오머, 다이어스테레오머, 아트롭 이성질체 (atropisomer) 및 기하 이성질체를 포함한다. 당업자는 하나의 입체 이성질체가 다른 이성질체(들)에 비하여 풍부할 때 또는 다른 입체 이성질체(들)로부터 분리될 때 활성이 더 클 수 있고/있거나 유익한 효과를 나타낼 수 있음을 이해할 것이다. 부가적으로, 당업자는 상기 입체 이성질체를 분리, 농축, 및/또는 선택적으로 제조하는 방법을 안다. 본 발명의 화합물은 입체 이성질체들의 혼합물, 개별 입체 이성질체 또는 광학 활성 형태로서 존재할 수 있다. 화학식 1의 화합물은 키랄 중심을 포함하는 이의 치환기 및 다른 분자 성분 (예를 들어, X, Q 또는 Z)에 의해 하나 이상의 키랄 중심을 포함할 수 있다. 본 발명은 모

든 가능한 키랄 중심에서 풍부하며 실질적으로 순수한 입체 형태뿐만 아니라 라세미 혼합물도 포함한다.

[0103] 본 발명의 화합물은 화학식 1의 아마이드 결합 (예를 들어, C(=W)-N) 주위에서의 제한된 회전으로 인해, 하나 이상의 형태 이성질체로서 존재할 수 있다. 본 발명은 형태 이성질체의 혼합물을 포함한다. 게다가, 본 발명은 하나의 형태 이성질체가 다른 형태 이성질체에 비해 풍부한 화합물을 포함한다.

[0104] 당업자는 화학식 1의 화합물이 이의 각각의 하나 이상의 토토머 카운터파트 중 하나 이상과 평형 상태로 존재할 수 있음을 인지한다. 달리 명시되지 않는 한, 하나의 토토머 설명에 의한 화합물에 대한 언급은 모든 토토머를 포함하는 것으로 여겨진다. 예를 들어, 화학식 1에서 E가 E-2이고, R³가 하이드록시이면, 화학식 1¹로 나타낸 토토머에 대한 언급은 또한 화학식 1²로 나타낸 토토머를 포함한다.



[0105]

[0106] 게다가, 증거 1, 4 및 5에 나타낸 불포화 환 및 환계의 일부는 나타낸 것과는 상이한 환 구성원 사이의 단일 및 이중 결합의 배열을 가질 수 있다. 특정한 환 원자 배열에 대한 이러한 상이한 결합 배열은 상이한 토토머에 대응한다. 이러한 불포화 환 및 환계에 관해서는, 도시된 특정한 토토머는 나타내어진 환 원자 배열에 가능한 모든 토토머를 나타내는 것으로 고려된다.

[0107] 당업자는 질소가 산화물로의 산화를 위해 이용가능한 고립 전자쌍을 필요로 하므로, 모든 질소 함유 복소환이 N-옥사이드를 형성할 수 있는 것은 아님을 인지할 것이며; 당업자는 N-옥사이드를 형성할 수 있는 그러한 질소 함유 복소환을 인식할 것이다. 또한, 당업자라면 삼차 아민이 N-옥사이드를 형성할 수 있음을 인식할 것이다. 복소환 및 삼차 아민의 N-옥사이드의 제조에 관한 합성 방법은 퍼옥시산, 예컨대 퍼아세트산 및 m-클로로퍼벤조산 (MCPBA), 과산화수소, 알킬 하이드로퍼옥사이드, 예컨대 t-부틸 하이드로퍼옥사이드, 과붕산나트륨, 및 다이옥시란, 예컨대 다이메틸다이옥시란을 사용한 복소환 및 삼차 아민의 산화를 비롯하여, 당업자에게 공지되어 있다. 이러한 N-옥사이드의 제조 방법은 문헌에 광범위하게 설명 및 검토되었으며, 예를 들어, 문헌 [T. L. Gilchrist in *Comprehensive Organic Synthesis*, vol. 7, pp 748-750, S. V. Ley, Ed., Pergamon Press]; 문헌 [M. Tisler and B. Stanovnik in *Comprehensive Heterocyclic Chemistry*, vol. 3, pp 18-20, A. J. Boulton and A. McKillop, Eds., Pergamon Press]; 문헌 [M. R. Grimmett and B. R. T. Keene in *Advances in Heterocyclic Chemistry*, vol. 43, pp 149-161, A. R. Katritzky, Ed., Academic Press]; 문헌 [M. Tisler and B. Stanovnik in *Advances in Heterocyclic Chemistry*, vol. 9, pp 285-291, A. R. Katritzky and A. J. Boulton, Eds., Academic Press]; 및 문헌 [G. W. H. Cheeseman and E. S. G. Werstiuk in *Advances in Heterocyclic Chemistry*, vol. 22, pp 390-392, A. R. Katritzky and A. J. Boulton, Eds., Academic Press]을 참조한다.

[0108] 당업자라면, 당해 환경에서 그리고 생리학적 조건 하에서 화학적 화합물의 염이 그의 대응하는 비염 형태 (nonsalt form)와 평형 상태에 있기 때문에, 염은 비염 형태의 생물학적 유용성을 공유한다는 것을 인지한다. 따라서, 다양한 화학식 1의 화합물의 염은 진균 식물 병원체에 의한 식물병의 방제에 유용하다 (즉, 농업용으로 적합함). 화학식 1의 화합물의 염은 무기 또는 유기 산, 예를 들어 브롬화수소산, 염산, 질산, 인산, 황산, 아세트산, 부티르산, 푸마르산, 락트산, 말레산, 말론산, 옥살산, 프로피온산, 살리실산, 타르타르산, 4-톨루엔설폰산 또는 발레르산과의 산-부가염을 포함한다. 화학식 1의 화합물이 산 부분, 예컨대 카르복실산 또는 페놀을 포함하는 경우에는, 염은 또한 유기 또는 무기 염기, 예컨대 피리딘, 트라이에틸아민 또는 암모니아와 함께 형성된 염, 또는 나트륨, 칼륨, 리튬, 칼슘, 마그네슘 또는 바륨의 아마이드, 수소화물, 수산화물 또는 탄산염을 포함한다. 따라서, 본 발명은 화학식 1로부터 선택되는 화합물, 이의 N-옥사이드 및 농업적으로 적합한 이의 염을 포함한다.

[0109] 화학식 1로부터 선택된 화합물, 및 이들의 입체 이성질체, 토토머, N-옥사이드 및 염은 전형적으로 하나 이상의 형태로 존재하므로, 화학식 1은 화학식 1이 나타내는 화합물의 모든 결정질 형태 및 비결정질 형태를 포함한다. 비결정질 형태는 왁스 및 겔과 같은 고체인 실시 형태뿐만 아니라, 용액 및 용융물과 같은 액체인 실시 형태도 포함한다. 결정질 형태는 기본적으로 단결정 타입을 나타내는 실시 형태 및 다형체 (즉, 상이한 결정질 타입)의 혼합물을 나타내는 실시 형태를 포함한다. 용어 "다형체"는 상이한 결정질 형태 - 이들 형태는 결정 격자

내에 분자의 상이한 배열 및/또는 배치를 가진 -로 결정화될 수 있는 화학적 화합물의 특정 결정질 형태를 말한다. 다형체는 동일한 화학 조성을 가질 수 있지만, 이는 또한 격자 내에서 약하게 또는 강하게 결합될 수 있는 공결정화된(co-crystallized) 물 또는 기타 분자의 존재 또는 부재로 인하여 조성이 다를 수 있다. 다형체는 결정의 형상, 밀도, 경도, 색상, 화학적 안정성, 용점, 흡습성, 현탁성, 용해 속도 및 생물학적 이용성과 같은 화학적, 물리적 및 생물학적 특성이 상이할 수 있다. 당업자는 화학식 1로 나타내는 화합물의 다형체가 다른 다형체 또는 화학식 1로 나타내는 동일한 화합물의 다형체의 혼합물에 비해, 유익한 효과 (예를 들어, 유용한 제형의 제조에 대한 적합성, 생물학적 성능 개선)를 나타낼 수 있음을 인지할 것이다. 화학식 1로 나타내는 화합물의 특정 다형체의 제조 및 분리는 예를 들어, 선택된 용매 및 온도를 이용한 결정화를 비롯하여, 당업자에게 공지된 방법에 의해 달성될 수 있다.

- [0110] 발명의 요약에 기재된 본 발명의 실시 형태는 하기를 포함한다 (여기서, 하기 실시 형태에 사용되는 화학식 1은 이의 *N*-옥사이드 및 염을 포함한다):
- [0111] 실시 형태 1. E가 E-3인 화학식 1의 화합물.
- [0112] 실시 형태 2. E가 E-1 또는 E-2인 화학식 1의 화합물.
- [0113] 실시 형태 3. E가 E-1인 화학식 1 또는 실시 형태 2의 화합물.
- [0114] 실시 형태 4. E가 E-2인 화학식 1 또는 실시 형태 2의 화합물.
- [0115] 실시 형태 5. A가 CHR^{15} 또는 NR^{16} 인, 단독으로 또는 조합하여 취해진 화학식 1 또는 실시 형태 2 또는 3의 화합물.
- [0116] 실시 형태 6. A가 CHR^{15} 인 실시 형태 5의 화합물.
- [0117] 실시 형태 7. A가 NR^{16} 인 실시 형태 5의 화합물.
- [0118] 실시 형태 8. R^{15} 이 H, 할로젠, 시아노, 하이드록시, $-\text{CHO}$, $\text{C}_1\text{-C}_4$ 알킬, $\text{C}_1\text{-C}_4$ 할로알킬, $\text{C}_2\text{-C}_5$ 알콕시카르보닐 또는 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 알콕시인, 단독으로 또는 조합하여 취해진 화학식 1 또는 실시 형태 5 또는 6의 화합물.
- [0119] 실시 형태 9. R^{15} 이 H, 할로젠, 시아노, 하이드록시, 메틸 또는 메톡시인 실시 형태 8의 화합물.
- [0120] 실시 형태 10. R^{15} 이 H인 실시 형태 9의 화합물.
- [0121] 실시 형태 11. R^{16} 이 H, $\text{C}_1\text{-C}_4$ 알킬, $\text{C}_1\text{-C}_4$ 할로알킬, $\text{C}_2\text{-C}_4$ 알킬카르보닐, $\text{C}_2\text{-C}_4$ 할로알킬카르보닐 또는 $\text{C}_2\text{-C}_4$ 알콕시카르보닐인, 단독으로 또는 조합하여 취해진 화학식 1 또는 실시 형태 5 또는 7의 화합물.
- [0122] 실시 형태 12. R^{16} 이 H, 메틸, 메틸카르보닐 또는 메톡시카르보닐인 실시 형태 11의 화합물.
- [0123] 실시 형태 13. R^{16} 이 H인 실시 형태 12의 화합물.
- [0124] 실시 형태 14. A^1 이 $-\text{O}-$, $-\text{S}-$, $-\text{N}(\text{R}^7)-$, $-\text{C}(\text{R}^8)_2-$ 또는 $-\text{OC}(\text{R}^8)_2$ 인, 단독으로 또는 조합하여 취해진 화학식 1 또는 실시 형태 2 또는 4의 화합물.
- [0125] 실시 형태 15. A^1 이 $-\text{O}-$, $-\text{S}-$ 또는 $-\text{N}(\text{R}^7)-$ 인 실시 형태 14의 화합물.
- [0126] 실시 형태 16. A^1 이 $-\text{O}-$ 또는 $-\text{N}(\text{R}^7)-$ 인 실시 형태 15의 화합물.
- [0127] 실시 형태 17. 단독으로 취해진 경우 (즉, R^3 와 함께 취해지지 않음)의 R^7 이 H, $\text{C}_1\text{-C}_2$ 알킬, $\text{C}_1\text{-C}_2$ 할로알킬, $\text{CH}_3\text{C}(=\text{O})$, $\text{CF}_3\text{C}(=\text{O})$ 또는 $\text{CH}_3\text{OC}(=\text{O})$ 인, 단독으로 또는 조합하여 취해진 화학식 1 또는 실시 형태 14 내지 16 중 어느 하나의 화합물.
- [0128] 실시 형태 18. 단독으로 취해진 경우의 R^7 이 H 또는 $\text{C}_1\text{-C}_2$ 알킬인 실시 형태 17의 화합물.

- [0129] 실시 형태 19. 단독으로 취한 경우의 R^7 이 H 또는 메틸인 실시 형태 18의 화합물.
- [0130] 실시 형태 20. W가 0인, 단독으로 또는 조합하여 취해진 화학식 1 또는 실시 형태 2 내지 19 중 어느 하나의 화합물.
- [0131] 실시 형태 21. W^1 이 OR^{18} , SR^{19} 또는 $NR^{20}R^{21}$ 인, 단독으로 또는 조합하여 취해진 화학식 1 또는 실시 형태 1의 화합물.
- [0132] 실시 형태 22. W^1 이 OR^{18} 인 실시 형태 21의 화합물.
- [0133] 실시 형태 23. W^1 이 SR^{19} 인 실시 형태 21의 화합물.
- [0134] 실시 형태 24. W^1 이 $NR^{20}R^{21}$ 인 실시 형태 21의 화합물.
- [0135] 실시 형태 25. 각 R^{18} 및 R^{19} 이 독립적으로 C_1-C_6 알킬, C_3-C_4 알케닐, C_3-C_4 알키닐, C_1-C_4 할로알킬, C_3-C_6 할로알케닐, C_3-C_6 할로알키닐, C_2-C_6 알콕시알킬 및 C_3-C_6 사이클로알킬 중에서 선택되는, 단독으로 또는 조합하여 취해진 화학식 1 또는 실시 형태 1 및 21 내지 23 중 어느 하나의 화합물.
- [0136] 실시 형태 26. 각 R^{18} 및 R^{19} 이 독립적으로 C_1-C_6 알킬, C_3-C_4 알케닐, C_3-C_4 알키닐 및 C_1-C_4 할로알킬 중에서 선택되는 실시 형태 25의 화합물.
- [0137] 실시 형태 27. 각 R^{18} 및 R^{19} 이 독립적으로 C_1-C_4 알킬인 실시 형태 26의 화합물.
- [0138] 실시 형태 28. R^{20} 가 H, 시아노, 하이드록시, 아미노 및 C_1-C_6 알킬 중에서 선택되는, 단독으로 또는 조합하여 취해진 화학식 1 또는 실시 형태 1 또는 24의 화합물.
- [0139] 실시 형태 29. R^{21} 이 H 및 C_1-C_6 알킬 중에서 선택되는, 단독으로 또는 조합하여 취해진 화학식 1 또는 실시 형태 1 또는 24의 화합물.
- [0140] 실시 형태 30. R^{20} 및 R^{21} 이 $-(CH_2)_4-$, $-(CH_2)_5-$ 또는 $-(CH_2)_2O(CH_2)_2-$ 로서 함께 취해지는, 단독으로 또는 조합하여 취해진 화학식 1 또는 실시 형태 24의 화합물.
- [0141] 실시 형태 31. R^{20} 및 R^{21} 이 $-(CH_2)_4-$ 또는 $-(CH_2)_2O(CH_2)_2-$ 로서 함께 취해지는 실시 형태 30의 화합물.
- [0142] 실시 형태 32. R^{20} 및 R^{21} 이 $-(CH_2)_4-$ 로서 함께 취해지는 실시 형태 31의 화합물.
- [0143] 실시 형태 33. R^{1a} 및 R^{1b} 가 독립적으로, 임의로 치환된 페닐, 임의로 치환된 나프탈레닐 또는 임의로 치환된 5원 내지 6원 헤테로 방향족 환; 또는 시아노, C_1-C_8 알킬, C_2-C_8 알케닐, C_2-C_8 알키닐, C_1-C_8 할로알킬, C_2-C_8 할로알케닐, C_2-C_8 할로알키닐, C_3-C_8 사이클로알킬, C_2-C_8 알콕시알킬, C_2-C_8 할로알콕시알킬, C_2-C_8 알킬티오알킬, C_2-C_8 할로알킬티오알킬, C_2-C_8 알킬설퍼닐알킬, C_2-C_8 알킬설포닐알킬, C_3-C_8 알콕시카르보닐알킬, C_3-C_8 할로알콕시카르보닐알킬, C_2-C_8 알킬아미노알킬, C_3-C_{10} 다이알킬아미노알킬, C_2-C_8 할로알킬아미노알킬, C_4-C_{10} 사이클로알킬아미노알킬, C_1-C_8 알콕시, C_1-C_8 할로알콕시, C_3-C_8 사이클로알콕시, C_3-C_8 할로사이클로알콕시, C_4-C_{10} 사이클로알킬알콕시, C_2-C_8 알케닐옥시, C_2-C_8 할로알케닐옥시, C_2-C_8 알키닐옥시, C_3-C_8 할로알키닐옥시, C_2-C_8 알콕시알콕시, C_2-C_8 알킬카르보닐옥시, C_2-C_8 할로알킬카르보닐옥시, C_1-C_8 알킬티오, C_1-C_8 할로알킬티오, C_3-C_8 사이클로알킬티오, C_3-C_{10} 트라이알킬실릴, C_1-C_8 알킬아미노, C_2-C_8 다이알킬아미노, C_2-C_8 알킬카르보닐아미노, 피롤리디닐, 피페리디닐 또는 모르폴리닐인, 단독으로 또는 조합하여 취해진 화학식 1 또는 실시 형태 1 내지 32 중 어느 하나의 화합물.
- [0144] 실시 형태 34. 독립적으로 R^{1a} 및 R^{1b} 가 임의로 치환된 페닐, 임의로 치환된 나프탈레닐 또는 임의로 치환된 5

원 또는 6원 헤테로 방향족 환 이외의 것이면, R^{1a} 및 R^{1b} 가 독립적으로 시아노, C_1-C_8 알킬, C_2-C_8 알케닐, C_2-C_8 알키닐, C_1-C_8 할로알킬, C_2-C_8 할로알케닐, C_2-C_8 할로알키닐, C_3-C_8 사이클로알킬, C_2-C_8 알콕시알킬, C_2-C_8 알킬티오알킬, C_2-C_8 알킬설퍼닐알킬, C_2-C_8 알킬설포닐알킬, C_2-C_8 알킬아미노알킬, C_3-C_{10} 다이알킬아미노알킬, C_1-C_8 알콕시, C_1-C_8 할로알콕시, C_1-C_8 알킬티오, C_3-C_{10} 트라이알킬실릴, C_1-C_8 알킬아미노, C_2-C_8 다이알킬아미노, C_2-C_8 알킬카르보닐아미노, 피롤리디닐, 피페리디닐 또는 모르폴리디닐 실시 형태 33의 화합물.

[0145] 실시 형태 35. 독립적으로 R^{1a} 및 R^{1b} 가 임의로 치환된 페닐, 임의로 치환된 나프탈레닐 또는 임의로 치환된 5원 또는 6원 헤테로 방향족 환 이외의 것이면, R^{1a} 및 R^{1b} 가 독립적으로 C_2-C_5 알킬, C_2-C_5 알케닐, C_2-C_5 할로알킬, C_2-C_5 할로알케닐, C_2-C_5 할로알킬티오알킬, C_2-C_5 알콕시알킬, C_2-C_5 할로알콕시알킬, C_2-C_5 알킬티오알킬, C_2-C_5 알킬아미노알킬, C_2-C_5 알킬카르보닐옥시, C_2-C_5 할로알킬카르보닐옥시, C_2-C_5 알콕시, C_2-C_5 할로알콕시, C_2-C_5 알킬티오, C_2-C_5 알킬아미노 또는 C_2-C_5 알킬카르보닐아미노인 실시 형태 34의 화합물.

[0146] 실시 형태 36. 독립적으로 R^{1a} 및 R^{1b} 가 임의로 치환된 페닐, 임의로 치환된 나프탈레닐 또는 임의로 치환된 5원 또는 6원 헤테로 방향족 환 이외의 것이면, R^{1a} 및 R^{1b} 가 독립적으로 C_3-C_5 알킬, C_3-C_5 알케닐, C_3-C_5 할로알킬, C_3-C_5 할로알케닐, C_2-C_4 할로알킬티오알킬, C_2-C_4 알콕시알킬, C_2-C_4 할로알콕시알킬, C_2-C_4 알킬티오알킬, C_2-C_4 알킬아미노알킬, C_2-C_3 알킬카르보닐옥시, C_2-C_3 할로알킬카르보닐옥시, C_2-C_4 알콕시, C_2-C_4 할로알콕시, C_2-C_4 알킬티오, C_2-C_4 알킬아미노 또는 C_2-C_3 알킬카르보닐아미노인 실시 형태 35의 화합물.

[0147] 실시 형태 37. 독립적으로 R^{1a} 및 R^{1b} 가 임의로 치환된 페닐, 임의로 치환된 나프탈레닐 또는 임의로 치환된 5원 또는 6원 헤테로 방향족 환 이외의 것이면, R^{1a} 및 R^{1b} 가 독립적으로 C_3-C_5 할로알킬, C_3-C_5 할로알케닐, C_3-C_5 할로알킬티오알킬, C_3-C_5 할로알콕시알킬, C_2-C_3 할로알킬카르보닐옥시 또는 C_2-C_4 할로알콕시인 실시 형태 36의 화합물.

[0148] 실시 형태 38. 독립적으로 R^{1a} 및 R^{1b} 가 임의로 치환된 페닐, 임의로 치환된 나프탈레닐 또는 임의로 치환된 5원 또는 6원 헤테로 방향족 환 이외의 것이면, R^{1a} 및 R^{1b} 가 독립적으로 C_4 할로알킬, C_4 할로알케닐, C_3 할로알콕시알킬 또는 C_3 할로알콕시인 실시 형태 37의 화합물.

[0149] 실시 형태 39. 독립적으로 R^{1a} 및 R^{1b} 가 임의로 치환된 페닐, 임의로 치환된 나프탈레닐 또는 임의로 치환된 5원 또는 6원 헤테로 방향족 환이면, 임의로 치환된 페닐, 임의로 치환된 나프탈레닐 또는 임의로 치환된 5원 또는 6원 헤테로 방향족 환이 3개 이하의 독립적으로 선택된 치환기로 임의로 치환되는. 단독으로 또는 조합하여 취해진 화학식 1 또는 실시 형태 1 내지 33 중 어느 하나의 화합물.

[0150] 실시 형태 40. 독립적으로 R^{1a} 및 R^{1b} 가 임의로 치환된 페닐, 임의로 치환된 나프탈레닐 또는 임의로 치환된 5원 또는 6원 헤테로 방향족 환이면, 임의로 치환된 페닐, 임의로 치환된 나프탈레닐 또는 임의로 치환된 5원 또는 6원 헤테로 방향족 환이 2개 이하의 독립적으로 선택된 치환기로 임의로 치환되는 실시 형태 39의 화합물.

[0151] 실시 형태 41. 독립적으로 R^{1a} 및 R^{1b} 가 임의로 치환된 페닐, 임의로 치환된 나프탈레닐 또는 임의로 치환된 5원 또는 6원 헤테로 방향족 환이면, 페닐, 나프탈레닐 또는 5원 또는 6원 헤테로 방향족 환 상의 임의의 치환기가 탄소 환 구성원 상에서 R^{33a} 및 질소 환 구성원 상에서 R^{33b} 중에서 독립적으로 선택되고;

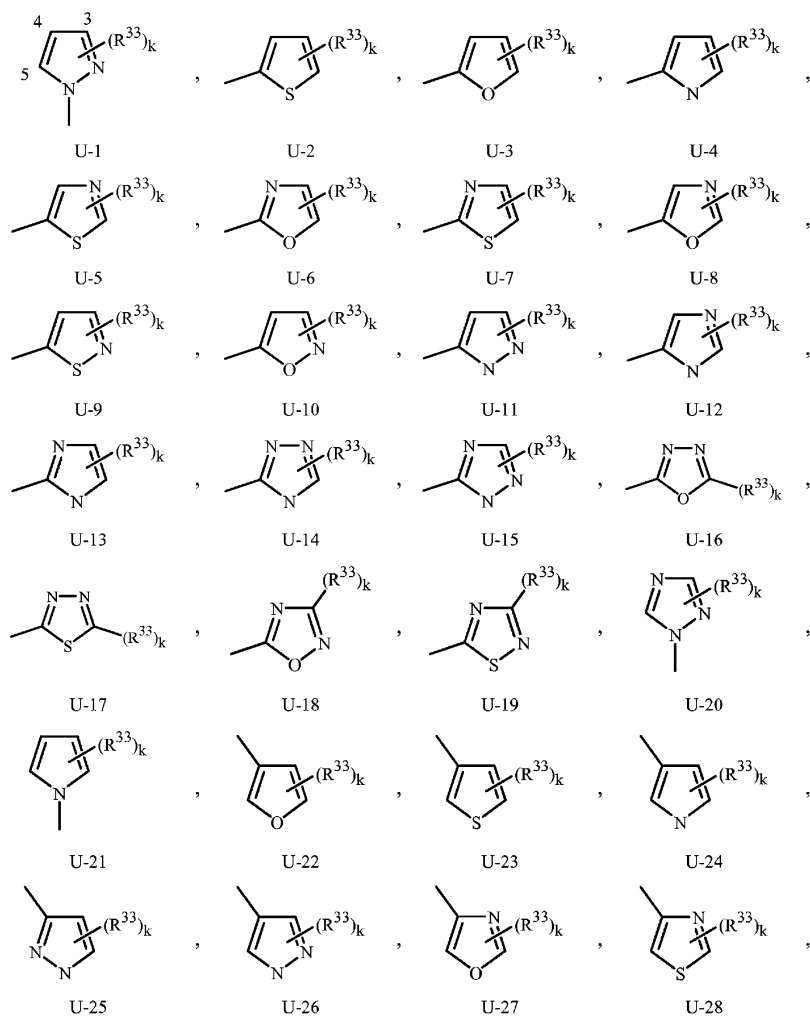
[0152] 각 R^{33a} 가 독립적으로 할로젠, 시아노, 하이드록시, 아미노, 니트로, C_1-C_6 알킬, C_2-C_6 알케닐, C_2-C_6 알키닐, C_3-C_6 사이클로알킬, C_4-C_{10} 사이클로알킬알킬, C_4-C_{10} 알킬사이클로알킬, C_5-C_{10} 알킬사이클로알킬알킬, C_1-C_6 할로알킬, C_2-C_6 할로알케닐, C_2-C_6 할로알키닐, C_3-C_6 할로사이클로알킬, C_1-C_4 알콕시, C_1-C_4 할로알콕시, C_1-C_4 알킬티오, C_1-C_4 알킬설퍼닐, C_1-C_4 알킬설포닐, C_1-C_4 할로알킬티오, C_1-C_4 할로알킬설퍼닐, C_1-C_4 할로알킬설포닐,

C₁-C₄ 알킬아미노, C₂-C₈ 다이알킬아미노, C₃-C₆ 사이클로알킬아미노, C₂-C₄ 알콕시알킬, C₁-C₄ 하이드록시알킬, C₂-C₄ 알킬카르보닐, C₂-C₆ 알콕시카르보닐, C₂-C₆ 알킬카르보닐옥시, C₂-C₆ 알킬카르보닐티오, C₂-C₆ 알킬아미노 카르보닐, C₃-C₈ 다이알킬아미노카르보닐 또는 C₃-C₆ 트라이알킬실릴이며;

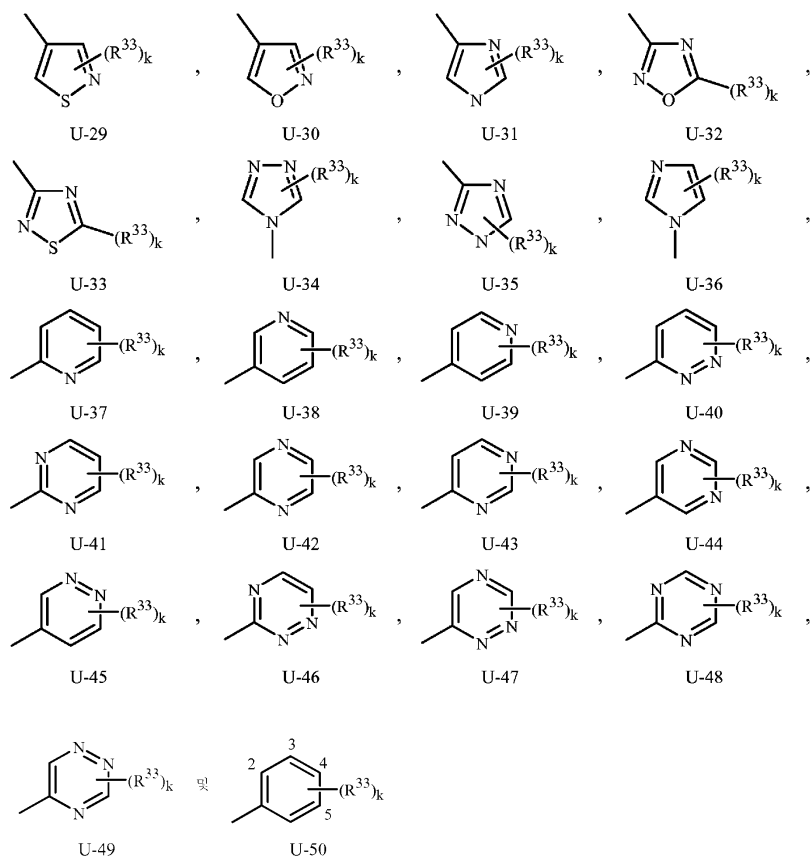
[0153] 각 R^{33b}가 독립적으로 C₁-C₆ 알킬, C₃-C₆ 알케닐, C₃-C₆ 알키닐, C₃-C₆ 사이클로알킬, C₁-C₆ 할로알킬, C₃-C₆ 할로알케닐, C₃-C₆ 할로알키닐, C₃-C₆ 할로사이클로알킬 또는 C₂-C₄ 알콕시알킬인, 단독으로 또는 조합하여 취해진 화학식 1 또는 실시 형태 1 내지 33, 및 39 내지 40 중 어느 하나의 화합물.

[0154] 실시 형태 42. 독립적으로 R^{1a} 및 R^{1b}가 증거 1에 나타낸 U-1 내지 U-50 중에서 선택되는, 단독으로 또는 조합하여 취해진 화학식 1 또는 실시 형태 1 내지 33, 및 39 내지 41 중 어느 하나의 화합물:

[0155] 증거 1



[0156]



[0157]

[0158]

[0159]

(여기서, R^{33} 가 탄소 환 구성원에 부착되는 경우에, R^{33} 는 R^{33a} 중에서 선택되고, R^{33} 가 질소 환 구성원에 부착되는 경우에 (예를 들어, U-4, U-11 내지 U-15, U-24 내지 U-26, U-31 또는 U-35에서), R^{33} 는 R^{33b} 중에서 선택되며; k 는 0, 1, 2 또는 3이다).

[0160]

실시 형태 43. 독립적으로 R^{1a} 및 R^{1b} 가 U-1 내지 U-5, U-8, U-11, U-13, U-15, U-20 내지 U-28, U-31, U-36 내지 U-39 및 U-50 중에서 선택되는, 단독으로 또는 조합하여 취해진 실시 형태 41 또는 42의 화합물.

[0161]

실시 형태 44. 독립적으로 R^{1a} 및 R^{1b} 가 U-1 내지 U-3, U-5, U-8, U-11, U-13, U-20, U-22, U-23, U-25 내지 U-28, U-36 내지 U-39 및 U-50 중에서 선택되는 실시 형태 43의 화합물.

[0162]

실시 형태 45. 독립적으로 R^{1a} 및 R^{1b} 가 U-1 내지 U-3, U-11, U-13, U-20, U-22, U-23, U-36 내지 U-39 및 U-50 중에서 선택되는 실시 형태 44의 화합물.

[0163]

실시 형태 46. 독립적으로 R^{1a} 및 R^{1b} 가 U-1, U-20 및 U-50인 실시 형태 45의 화합물.

[0164]

실시 형태 47. 독립적으로 R^{1a} 및 R^{1b} 가 U-1인 실시 형태 46의 화합물.

[0165]

실시 형태 48. 독립적으로 R^{1a} 및 R^{1b} 가 U-20인 실시 형태 46의 화합물.

[0166]

실시 형태 49. 독립적으로 R^{1a} 및 R^{1b} 가 U-50인 실시 형태 46의 화합물.

[0167]

실시 형태 50. 각 R^{33a} 가 독립적으로 할로젠, C_1 - C_6 알킬, C_1 - C_6 할로알킬 또는 C_2 - C_4 알콕시알킬인, 단독으로 또는 조합하여 취해진 화학식 1 또는 실시 형태 1 내지 49 중 어느 하나의 화합물.

[0168]

실시 형태 51. 각 R^{33a} 가 독립적으로 할로젠, C_1 - C_3 알킬, C_1 - C_3 할로알킬 또는 C_2 - C_3 알콕시알킬인 실시 형태 50의 화합물.

[0169]

실시 형태 51a. 각 R^{33} 가 독립적으로 할로젠, C_1 - C_3 알킬, C_1 - C_3 할로알킬 또는 C_2 - C_3 알콕시알킬인 실시 형태 50

의 화합물. (다만 탄소 환 구성원이 치환될 수 경우에 단순화된 언어 (simplified language))

- [0170] 실시 형태 52. 각 R^{3b} 가 독립적으로 C_1-C_6 알킬인, 단독으로 또는 조합하여 취해진 화학식 1 또는 실시 형태 1 내지 51 중 어느 하나의 화합물.
- [0171] 실시 형태 53. 단독으로 취해진 경우 (즉, R^3 와 함께 취해지지 않음)의 R^2 가 H, 시아노, C_1-C_4 알킬, C_2-C_4 알케닐, C_2-C_4 알키닐, C_1-C_4 할로알킬, C_2-C_4 할로알케닐, C_2-C_4 할로알키닐, C_2-C_4 알콕시알킬, C_2-C_4 알킬티오알킬, C_2-C_4 알킬카르보닐, C_2-C_4 할로알킬카르보닐, C_2-C_4 알콕시카르보닐, C_1-C_4 알콕시, C_1-C_4 할로알콕시, C_2-C_4 알케닐옥시, C_2-C_4 할로알케닐옥시, C_2-C_4 알키닐옥시, C_3-C_4 할로알키닐옥시, C_2-C_4 알콕시알콕시, C_1-C_4 알킬티오, C_1-C_4 할로알킬티오, C_1-C_4 알킬아미노, C_2-C_4 다이알킬아미노, C_1-C_4 할로알킬아미노 또는 C_2-C_4 할로다이알킬아미노인, 단독으로 또는 조합하여 취해진 화학식 1 또는 실시 형태 2 내지 52 중 어느 하나의 화합물.
- [0172] 실시 형태 54. 단독으로 취해진 경우의 R^2 가 H, 시아노, C_1-C_3 알킬, C_2-C_3 알케닐, C_2-C_3 알키닐, C_1-C_3 할로알킬, C_2-C_3 할로알케닐, C_2-C_3 할로알키닐, C_1-C_3 알콕시 또는 C_1-C_3 할로알콕시인 실시 형태 53의 화합물.
- [0173] 실시 형태 55. 단독으로 취해진 경우의 R^2 가 H, C_1-C_3 알킬 또는 C_1-C_3 할로알킬인 실시 형태 54의 화합물.
- [0174] 실시 형태 56. 단독으로 취해진 경우의 R^2 가 H, C_1-C_3 알킬 또는 C_1-C_3 플루오로알킬인 실시 형태 55의 화합물.
- [0175] 실시 형태 57. R^2 가 메틸, 트라이플루오로메틸 또는 CF_3CH_2 인 실시 형태 56의 화합물.
- [0176] 실시 형태 58. R^2 가 단독으로 취해지는, 단독으로 또는 조합하여 취해진 화학식 1 또는 실시 형태 2 내지 57 중 어느 하나의 화합물.
- [0177] 실시 형태 59. 단독으로 취해진 경우 (즉, R^2 또는 R^7 와 함께 취해지지 않음)의 R^3 가 H, C_1-C_3 알킬, C_1-C_3 알콕시 또는 C_1-C_3 할로알킬인, 단독으로 또는 조합하여 취해진 화학식 1 또는 실시 형태 2 내지 58 중 어느 하나의 화합물.
- [0178] 실시 형태 60. 단독으로 취해진 경우의 R^3 가 H, C_1-C_3 알킬 또는 C_1-C_3 할로알킬인 실시 형태 59의 화합물.
- [0179] 실시 형태 61. 단독으로 취해진 경우의 R^3 가 H, C_1-C_2 알킬 또는 C_1-C_3 플루오로알킬인 실시 형태 60의 화합물.
- [0180] 실시 형태 62. R^3 가 H, 메틸 또는 트라이플루오로메틸인 실시 형태 61의 화합물.
- [0181] 실시 형태 63. R^3 가 단독으로 취해지는, 단독으로 또는 조합하여 취해진 화학식 1 또는 실시 형태 2 내지 62 중 어느 하나의 화합물.
- [0182] 실시 형태 64. R^2 및 R^3 가 이들이 부착되어 있는 탄소 원자와 함께 환을 형성하는 경우에, 상기 환이 3원 내지 6원 환이고, 탄소 원자, 및 2개 이하의 O 원자, 2개 이하의 S 원자 및 2개 이하의 N 원자 중에서 독립적으로 선택되는 2개 이하의 헤테로 원자 중에서 선택되는 환 구성원 (여기서, 1개 이하의 탄소 원자 환 구성원은 C(=O) 또는 C(=S)이다)을 포함하며, 탄소 원자 환 구성원 상에서 할로젠, 시아노, C_1-C_2 알킬, C_1-C_2 할로알킬, C_1-C_2 알콕시 및 C_1-C_2 할로알콕시, 및 질소 원자 환 구성원 상에서 시아노, C_1-C_2 알킬 및 C_1-C_2 알콕시 중에서 독립적으로 선택되는 3개 이하의 치환기로 임의로 치환되는, 단독으로 또는 조합하여 취해진 화학식 1 또는 실시 형태 2 내지 52 중 어느 하나의 화합물.
- [0183] 실시 형태 65. R^4 가 임의로 치환된 페닐, 임의로 치환된 나프탈레닐 또는 임의로 치환된 5원 또는 6원 헤테로 방향족 환; 또는 수소, 시아노, 하이드록시, C_1-C_3 알킬, C_2-C_3 알케닐, C_2-C_3 알키닐, C_1-C_3 할로알킬, C_2-C_3 할로알케닐, C_2-C_3 할로알키닐, C_2-C_3 알킬카르보닐, C_2-C_3 할로알킬카르보닐, C_1-C_3 알콕시, C_1-C_3 할로알콕시, C_1-

C₃ 알킬티오, C₁-C₃ 할로알킬티오, C₂-C₃ 알킬카르보닐옥시 또는 C₂-C₃ 할로알킬카르보닐옥시인, 단독으로 또는 조합하여 취해진 화학식 1 또는 실시 형태 2 내지 64 중 어느 하나의 화합물.

[0184] 실시 형태 66. R⁴가 임의로 치환된 페닐, 임의로 치환된 나프탈레닐 또는 임의로 치환된 5원 또는 6원 헤테로 방향족 환 이외의 것이면, R⁴가 수소, 시아노, 하이드록시, C₁-C₃ 알킬, C₂-C₃ 알케닐, C₂-C₃ 알키닐, C₁-C₃ 할로알킬, C₂-C₃ 할로알케닐, C₂-C₃ 할로알키닐, C₂-C₃ 알킬카르보닐, C₂-C₃ 할로알킬카르보닐, C₁-C₃ 알콕시, C₁-C₃ 할로알콕시, C₁-C₃ 알킬티오, C₁-C₃ 할로알킬티오, C₂-C₃ 알킬카르보닐옥시 또는 C₂-C₃ 할로알킬카르보닐옥시인 실시 형태 65의 화합물.

[0185] 실시 형태 67. R⁴가 임의로 치환된 페닐, 임의로 치환된 나프탈레닐 또는 임의로 치환된 5원 또는 6원 헤테로 방향족 환 이외의 것이면, R⁴가 수소, 시아노, 하이드록시, C₁-C₃ 알킬, C₁-C₃ 할로알킬, C₁-C₃ 알콕시, C₁-C₃ 할로알콕시, C₁-C₃ 알킬티오, C₁-C₃ 할로알킬티오, C₂-C₃ 알킬카르보닐옥시 또는 C₂-C₃ 할로알킬카르보닐옥시인 실시 형태 66의 화합물.

[0186] 실시 형태 68. R⁴가 수소, 시아노, 메틸, 메톡시 또는 CH₃C(=O)O-인 실시 형태 67의 화합물.

[0187] 실시 형태 69. R⁴가 수소 또는 메틸인 실시 형태 68의 화합물.

[0188] 실시 형태 70. R⁴가 수소인 실시 형태 69의 화합물.

[0189] 실시 형태 71. R⁴가 임의로 치환된 페닐, 임의로 치환된 나프탈레닐 또는 임의로 치환된 5원 또는 6원 헤테로 방향족 환인 경우에, 임의로 치환된 페닐, 임의로 치환된 나프탈레닐 또는 임의로 치환된 5원 또는 6원 헤테로 방향족 환이 3개 이하의 임의의 치환기로 치환되는. 단독으로 또는 조합하여 취해진 화학식 1 또는 실시 형태 2 내지 65 중 어느 하나의 화합물.

[0190] 실시 형태 72. R⁴가 임의로 치환된 페닐, 임의로 치환된 나프탈레닐 또는 임의로 치환된 5원 또는 6원 헤테로 방향족 환인 경우에, 임의로 치환된 페닐, 임의로 치환된 나프탈레닐 또는 임의로 치환된 5원 또는 6원 헤테로 방향족 환이 2개 이하의 임의의 치환기로 치환되는 실시 형태 71의 화합물.

[0191] 실시 형태 73. R⁴가 임의로 치환된 페닐, 임의로 치환된 나프탈레닐 또는 임의로 치환된 5원 또는 6원 헤테로 방향족 환이면, 페닐, 나프탈레닐 또는 5원 또는 6원 헤테로 방향족 환 상의 임의의 치환기가 탄소 환 구성원 상에서 R^{32a} 및 질소 환 구성원 상에서 R^{32b} 중에서 독립적으로 선택되고;

[0192] 각 R^{32a}가 독립적으로 할로젠, 시아노, 하이드록시, 아미노, 니트로, C₁-C₆ 알킬, C₂-C₆ 알케닐, C₂-C₆ 알키닐, C₃-C₆ 사이클로알킬, C₄-C₁₀ 사이클로알킬알킬, C₄-C₁₀ 알킬사이클로알킬, C₅-C₁₀ 알킬사이클로알킬알킬, C₁-C₆ 할로알킬, C₂-C₆ 할로알케닐, C₂-C₆ 할로알키닐, C₃-C₆ 할로사이클로알킬, C₁-C₄ 알콕시, C₁-C₄ 할로알콕시, C₁-C₄ 알킬티오, C₁-C₄ 알킬설퍼닐, C₁-C₄ 알킬설포닐, C₁-C₄ 할로알킬티오, C₁-C₄ 할로알킬설퍼닐, C₁-C₄ 할로알킬설포닐, C₁-C₄ 알킬아미노, C₂-C₈ 다이알킬아미노, C₃-C₆ 사이클로알킬아미노, C₂-C₄ 알콕시알킬, C₁-C₄ 하이드록시알킬, C₂-C₄ 알킬카르보닐, C₂-C₆ 알콕시카르보닐, C₂-C₆ 알킬카르보닐옥시, C₂-C₆ 알킬카르보닐티오, C₂-C₆ 알킬아미노카르보닐, C₃-C₈ 다이알킬아미노카르보닐 또는 C₃-C₆ 트라이알킬실릴이며;

[0193] 각 R^{32b}가 독립적으로 C₁-C₆ 알킬, C₃-C₆ 알케닐, C₃-C₆ 알키닐, C₃-C₆ 사이클로알킬, C₁-C₆ 할로알킬, C₃-C₆ 할로알케닐, C₃-C₆ 할로알키닐, C₃-C₆ 할로사이클로알킬 또는 C₂-C₄ 알콕시알킬인, 단독으로 또는 조합하여 취해진 화학식 1 또는 실시 형태 2 내지 72 중 어느 하나의 화합물.

[0194] 실시 형태 74. 각 R^{32a}가 독립적으로 할로젠, C₁-C₂ 알킬, C₁-C₂ 할로알킬 또는 C₁-C₂ 알콕시인 실시 형태 73의 화합물.

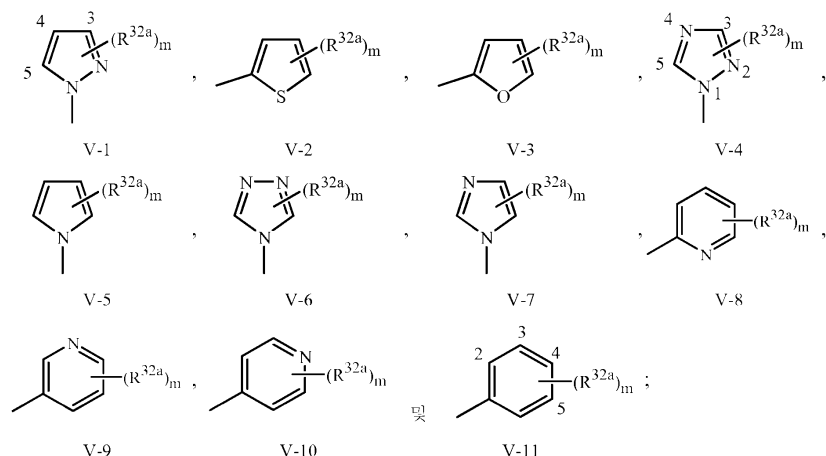
[0195] 실시 형태 75. 각 R^{32a} 가 독립적으로 Cl, Br, I, C_1-C_2 알킬, 트라이플루오로메틸 또는 메톡시인 실시 형태 74의 화합물.

[0196] 실시 형태 76. 각 R^{32a} 가 독립적으로 Cl, Br, C_1-C_2 알킬 또는 트라이플루오로메틸인 실시 형태 75의 화합물.

[0197] 실시 형태 77. R^4 가 임의로 치환된 나프탈레닐 이외의 것인, 단독으로 또는 조합하여 취해진 화학식 1 또는 실시 형태 2 내지 76 중 어느 하나의 화합물.

[0198] 실시 형태 78. R^4 가 임의로 치환된 5원 내지 6원 헤테로 방향족 환이면, R^4 가 증거 2에 하기에 나타난 V-1 내지 V-10으로 구성되는 그룹 중에서 선택되고, R^4 가 임의로 치환된 페닐이면, R^4 가 V-11 중에서 선택되는, 단독으로 또는 조합하여 취해진 실시 형태 73 내지 76 중 어느 하나의 화합물:

[0199] 증거 2



[0200]

[0201] (여기서, m은 0, 1, 2 또는 3이다).

[0202] 실시 형태 79. R^4 가 V-1 내지 V-11로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 실시 형태 78의 화합물.

[0203] 실시 형태 80. R^4 가 V-1, V-4 및 V-11 중에서 선택되는 실시 형태 79의 화합물.

[0204] 실시 형태 81. R^4 가 V-1인 실시 형태 80의 화합물.

[0205] 실시 형태 82. R^5 가 수소 또는 C_1-C_2 알킬인, 단독으로 또는 조합하여 취해진 화학식 1 또는 실시 형태 2 내지 81 중 어느 하나의 화합물.

[0206] 실시 형태 83. R^5 가 수소인 실시 형태 82의 화합물.

[0207] 실시 형태 84. X가 X-1, X-2, X-3, X-4 또는 X-5인, 단독으로 또는 조합하여 취해진 화학식 1 또는 실시 형태 1 내지 83 중 어느 하나의 화합물.

[0208] 실시 형태 85. X가 X-1, X-2 또는 X-3인 실시 형태 84의 화합물.

[0209] 실시 형태 86. X가 X-4 또는 X-5인 실시 형태 85의 화합물.

[0210] 실시 형태 87. X가 X-1 또는 X-2인 실시 형태 86의 화합물.

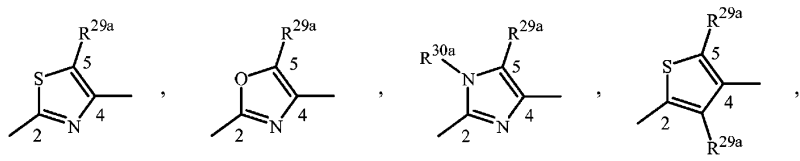
[0211] 실시 형태 88. X가 X-2인 실시 형태 87의 화합물.

[0212] 실시 형태 89. X가 X-1인 실시 형태 87의 화합물.

[0213] 실시 형태 90. 각 R^{6a} 가 독립적으로 C_1-C_2 알킬, C_1-C_2 할로알킬, C_1-C_2 알콕시, 할로젠, 시아노 또는 하이드록시인, 단독으로 또는 조합하여 취해진 화학식 1 또는 실시 형태 1 내지 89 중 어느 하나의 화합물.

- [0214] 실시 형태 91. 각 R^{6a} 가 독립적으로 메틸, 메톡시, 시아노 또는 하이드록시인 실시 형태 90의 화합물.
- [0215] 실시 형태 92. 각 R^{6a} 가 메틸인 실시 형태 91의 화합물.
- [0216] 실시 형태 93. n 이 0 또는 1인, 단독으로 또는 조합하여 취해진 화학식 1 또는 실시 형태 1 내지 92 중 어느 하나의 화합물.
- [0217] 실시 형태 94. n 이 0인 실시 형태 93의 화합물.
- [0218] 실시 형태 95. 각 R^{6b} 가 수소, 메틸 또는 에틸인, 단독으로 또는 조합하여 취해진 화학식 1 또는 실시 형태 1 내지 94 중 어느 하나의 화합물.
- [0219] 실시 형태 96. 각 R^{6b} 가 수소인 실시 형태 95의 화합물.
- [0220] 실시 형태 97. G가 탄소 원자 환 구성원 상에서 R^{29a} 및 질소 원자 환 구성원 상에서 R^{30a} 중에서 독립적으로 선택되는 2개 이하의 치환기로 임의로 치환된 5원 복소환인, 단독으로 또는 조합하여 취해진 화학식 1 또는 실시 형태 1 내지 96 중 어느 하나의 화합물.
- [0221] 실시 형태 98. G가 증거 3에 나타난 G-1 내지 G-48 중에서 선택되는, 단독으로 또는 조합하여 취해진 화학식 1 또는 실시 형태 1 내지 97 중 어느 하나의 화합물:

[0222] 증거 3

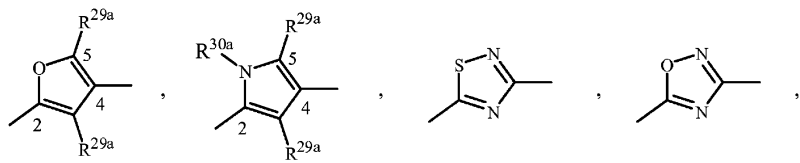


G-1

G-2

G-3

G-4

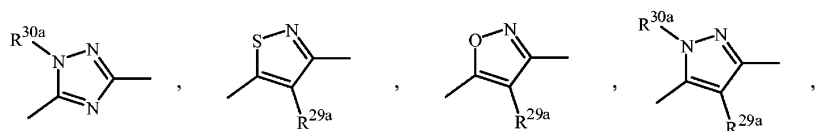


G-5

G-6

G-7

G-8

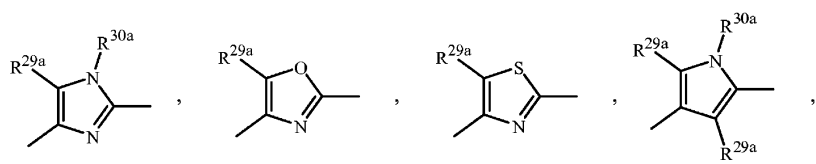


G-9

G-10

G-11

G-12

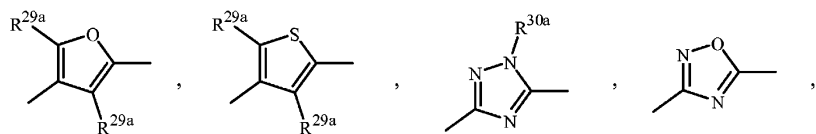


G-13

G-14

G-15

G-16

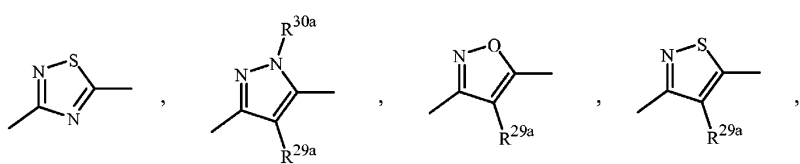


G-17

G-18

G-19

G-20



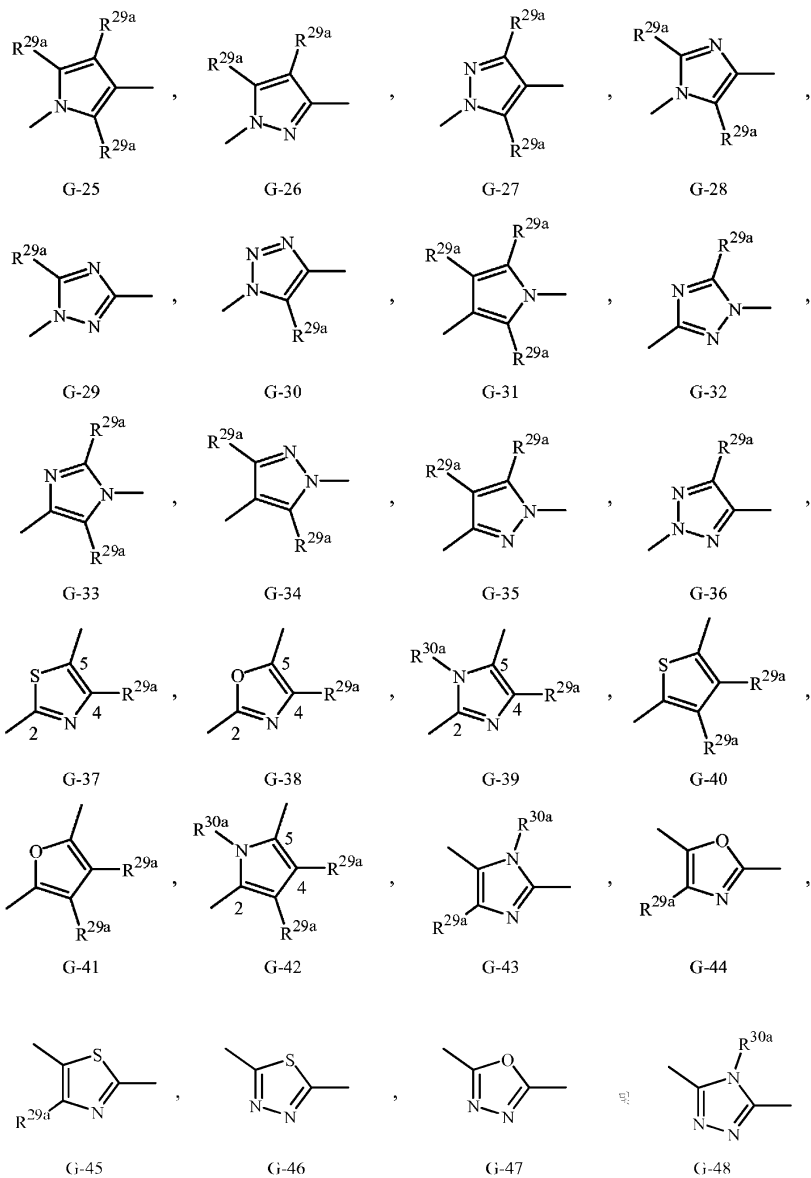
G-21

G-22

G-23

G-24

[0223]



[0224]

[0225]

[0226] (여기서, 좌측으로 돌출하는 결합은 화학식 1의 X에 결합되고, 우측으로 돌출하는 결합은 화학식 1의 J에 결합된다).

[0227] 실시 형태 99. G가 G-1 내지 G-3, G-7, G-8, G-10, G-11, G-14, G-15, G-23, G-24, G-26 내지 G-28, G-30 및 G-36 내지 G-38 중에서 선택되는 실시 형태 98의 화합물.

[0228] 실시 형태 100. G가 G-1, G-2, G-7, G-8, G-14, G-15, G-23, G-24, G-26, G-27, G-36, G-37 및 G-38 중에서 선택되는 실시 형태 99의 화합물.

[0229] 실시 형태 101. G가 G-1, G-2, G-15, G-26, G-27, G-36, G-37 및 G-38 중에서 선택되는 실시 형태 100의 화합물.

[0230] 실시 형태 102. G가 G-1, G-2, G-15, G-26, G-36 및 G-37 중에서 선택되는 실시 형태 101의 화합물.

[0231] 실시 형태 103. G가 G-1인 실시 형태 102의 화합물.

[0232] 실시 형태 104. G가 G-2인 실시 형태 102의 화합물.

[0233] 실시 형태 105. G가 G-15인 실시 형태 102의 화합물.

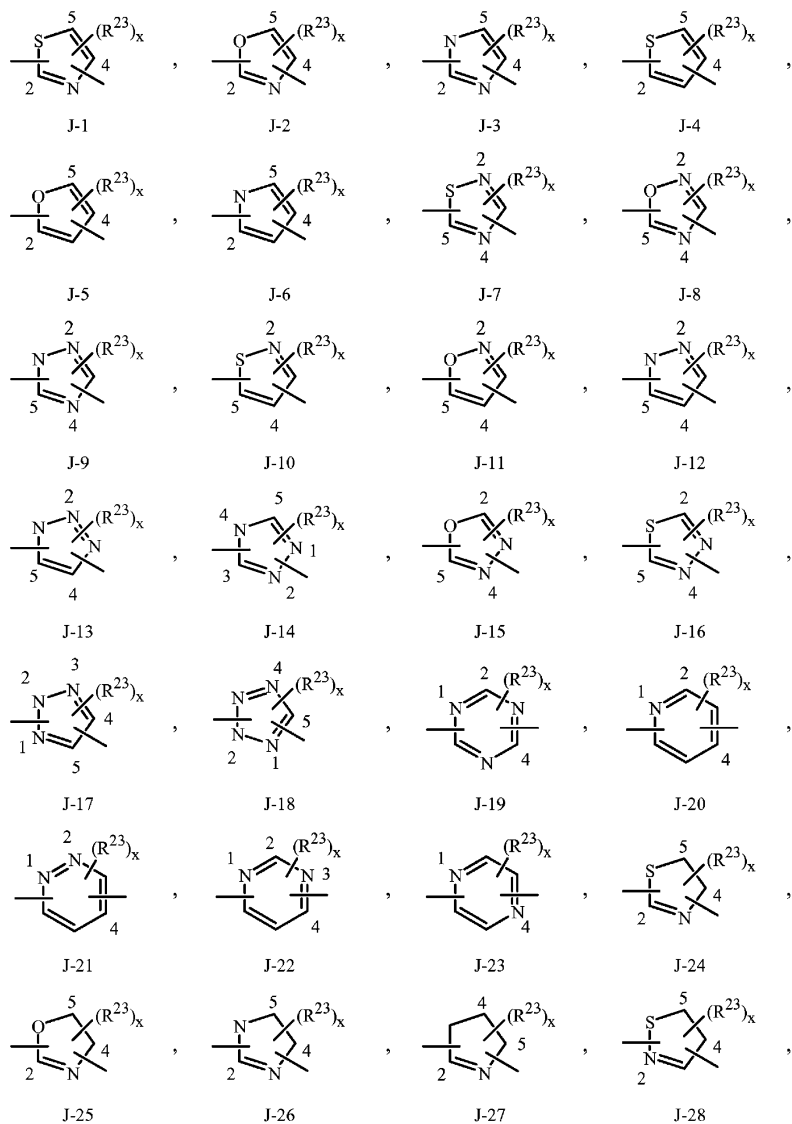
[0234] 실시 형태 106. G가 G-26인 실시 형태 102의 화합물.

[0235] 실시 형태 107. G가 G-36인 실시 형태 102의 화합물.

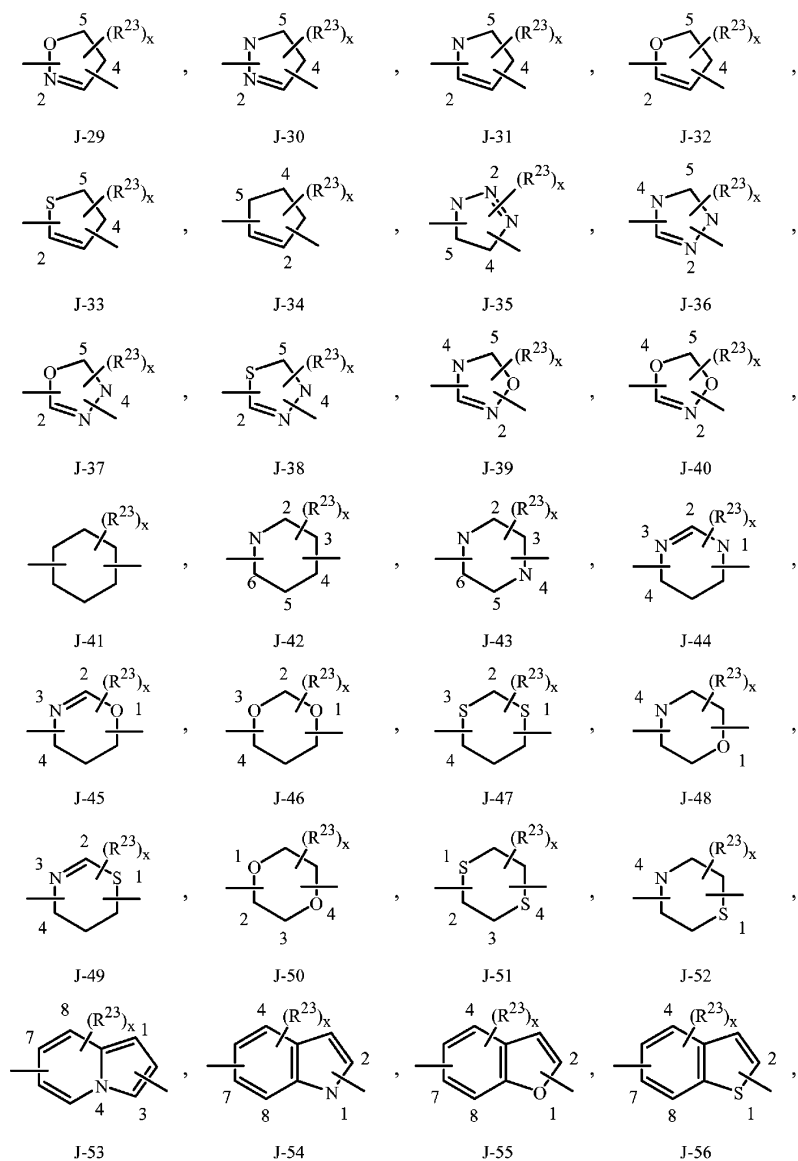
- [0236] 실시 형태 108. 각 R^{29a} 가 독립적으로 수소, 할로젠 또는 C_1-C_3 알킬인, 단독으로 또는 조합하여 취해진 화학식 1 또는 실시 형태 1 내지 107 중 어느 하나의 화합물.
- [0237] 실시 형태 109. 각 R^{29a} 가 독립적으로 수소 또는 메틸인 실시 형태 108의 화합물.
- [0238] 실시 형태 110. 각 R^{29a} 가 수소인 실시 형태 109의 화합물.
- [0239] 실시 형태 111. 각 R^{30a} 가 독립적으로 수소 또는 메틸인, 단독으로 또는 조합하여 취해진 화학식 1 또는 실시 형태 1 내지 110 중 어느 하나의 화합물.
- [0240] 실시 형태 112. 각 R^{30a} 가 수소인 실시 형태 111의 화합물.
- [0241] 실시 형태 113. G가 X 및 J에 대한 이의 부착을 제외하고는 비치환된 복소환인, 단독으로 또는 조합하여 취해진 화학식 1 또는 실시 형태 1 내지 107 중 어느 하나의 화합물.
- [0242] 실시 형태 114. J가 각각 탄소 원자, 및 2개 이하의 O 원자, 2개 이하의 S 원자 및 4개 이하의 N 원자 중에서 독립적으로 선택되는 4개 이하의 헤테로 원자 중에서 선택되는 환 구성원 (여기서, 3개 이하의 탄소 원자 환 구성원은 $C(=O)$ 및 $C(=S)$ 중에서 독립적으로 선택되고, 황 원자 환 구성원은 $S(=O)_s(=NR^{11})_t$ 중에서 독립적으로 선택된다)을 포함하고, R^{23} 중에서 독립적으로 선택되는 2개 이하의 치환기로 치환되는 5원, 6원 또는 7원 환, 8원 내지 11원 이환계 또는 7원 내지 11원 스피로환계인, 단독으로 또는 조합하여 취해진 화학식 1 또는 실시 형태 1 내지 113 중 어느 하나의 화합물.
- [0243] 실시 형태 115. J가 증거 4의 J-1 내지 J-83으로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 환인 실시 형태 114의 화합물:

[0244]

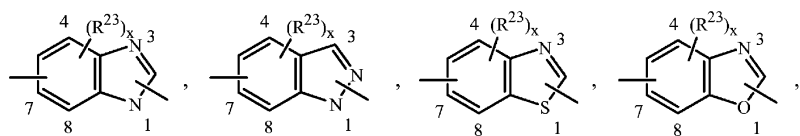
증거 4



[0245]



[0246]

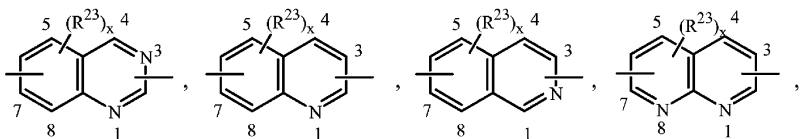


J-57

J-58

J-59

J-60

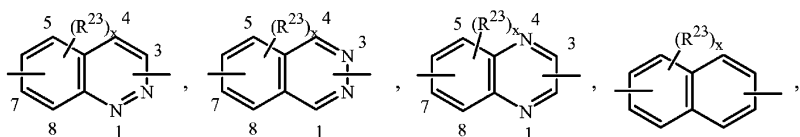


J-61

J-62

J-63

J-64

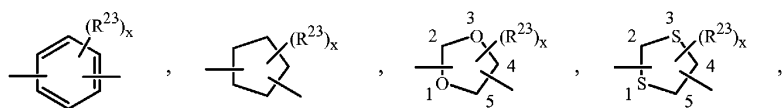


J-65

J-66

J-67

J-68

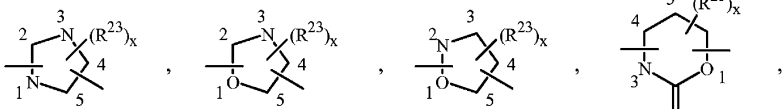


J-69

J-70

J-71

J-72

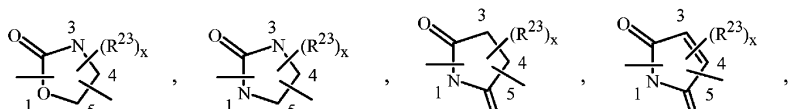


J-73

J-74

J-75

J-76

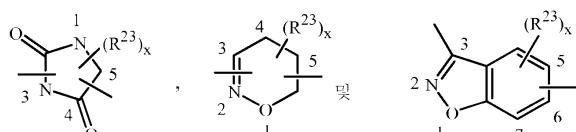


J-77

J-78

J-79

J-80



J-81

J-82

J-83

[0247]

[0248]

[0249]

(여기서, 하나의 유동 결합 (floating bond)은 도시된 환 또는 환계의 임의의 이용가능한 탄소 또는 질소 원자를 통해 화학식 1의 G에 연결되고, 다른 하나의 유동 결합은 도시된 환 또는 환계의 임의의 이용가능한 탄소 또는 질소 원자를 통해 화학식 1의 Z에 연결되며; R^{23} 가 탄소 환 구성원에 부착되는 경우, 상기 R^{23} 는 R^{23a} 중에서 선택되고, R^{23} 가 질소 환 구성원에 부착되는 경우, 상기 R^{23} 는 R^{23b} 중에서 선택되며; x는 0 내지 5의 정수이다).

[0250]

실시 형태 116. J가 J-1, J-2, J-3, J-4, J-5, J-7, J-8, J-9, J-10, J-11, J-12, J-14, J-15, J-16, J-20, J-24, J-25, J-26, J-29, J-30, J-37, J-38, J-45 및 J-69로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 환인 실시 형태 115의 화합물.

[0251]

실시 형태 117. J가 J-4, J-5, J-8, J-11, J-15, J-16, J-20, J-29, J-30, J-37, J-38 및 J-69 중에서 선택되는 실시 형태 116의 화합물.

[0252]

실시 형태 118. J가 J-4, J-5, J-11, J-20, J-29, J-37, J-38 및 J-69 중에서 선택되는 실시 형태 117의 화합물.

[0253]

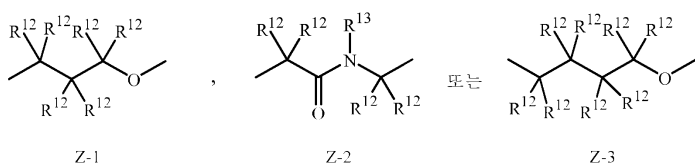
실시 형태 119. J가 J-11인 실시 형태 118의 화합물.

- [0254] 실시 형태 120. J가 J-29인 실시 형태 118의 화합물.
- [0255] 실시 형태 121. J가 J-69인 실시 형태 118의 화합물.
- [0256] 실시 형태 122. x가 0 또는 1인, 단독으로 또는 조합하여 취해진 실시 형태 115 내지 121 중 어느 하나의 화합물.
- [0257] 실시 형태 123. x가 0인 실시 형태 122의 화합물.
- [0258] 실시 형태 124. x가 1인 실시 형태 122의 화합물.
- [0259] 실시 형태 124a. R^{23} 가 시아노 또는 C_1-C_3 알킬인 실시 형태 124의 화합물.

- [0260] 실시 형태 125. Z가 Z^1 인, 단독으로 또는 조합하여 취해진 화학식 1 또는 실시 형태 1 내지 124 중 어느 하나의 화합물.

- [0261] 실시 형태 125A. Z가 Z^1-1 내지 Z^1-41 인, 단독으로 또는 조합하여 취해진 화학식 1 또는 실시 형태 1 내지 124 중 어느 하나의 화합물.

- [0262] 실시 형태 126. Z가



- [0263]

- [0264] (여기서, Z 기는 좌측으로 뻗어있는 결합이 화학식 1의 J에 부착되고, 우측으로 뻗어있는 결합이 화학식 1의 Q에 부착되도록 배향된다)인, 단독으로 또는 조합하여 취해진 화학식 1 또는 실시 형태 1 내지 124 중 어느 하나의 화합물.

- [0265] 실시 형태 127. Z가 Z^1-1 , Z^1-4 , Z^1-14 , Z^1-16 , Z^1-18 , Z-1, Z-2 및 Z-3 중에서 선택되는 실시 형태 125 및 126의 화합물.

- [0266] 실시 형태 128. Z가 Z^1-1 , Z^1-16 , Z^1-18 , Z-1 및 Z-3 중에서 선택되는 실시 형태 127의 화합물.

- [0267] 실시 형태 129. Z가 Z^1-1 , Z^1-16 또는 Z-1인 실시 형태 128의 화합물.

- [0268] 실시 형태 130. Z가 Z^1-1 인 실시 형태 129의 화합물.

- [0269] 실시 형태 131. Z가 Z^1-16 인 실시 형태 129의 화합물.

- [0270] 실시 형태 132. 각 R^{12} 가 독립적으로 수소, 할로젠, C_1-C_4 알킬 또는 C_1-C_4 알콕시인, 단독으로 또는 조합하여 취해진 화학식 1 또는 실시 형태 1 내지 131 중 어느 하나의 화합물.

- [0271] 실시 형태 133. 각 R^{12} 가 독립적으로 수소 또는 메틸인 실시 형태 132의 화합물.

- [0272] 실시 형태 134. 각 R^{12} 가 독립적으로 수소인 실시 형태 133의 화합물.

- [0273] 실시 형태 135. Q가 각각 탄소 원자 환 구성원 상에서 R^{9a} 중에서 독립적으로 선택되는 5개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 페닐 또는 나프탈레닐;

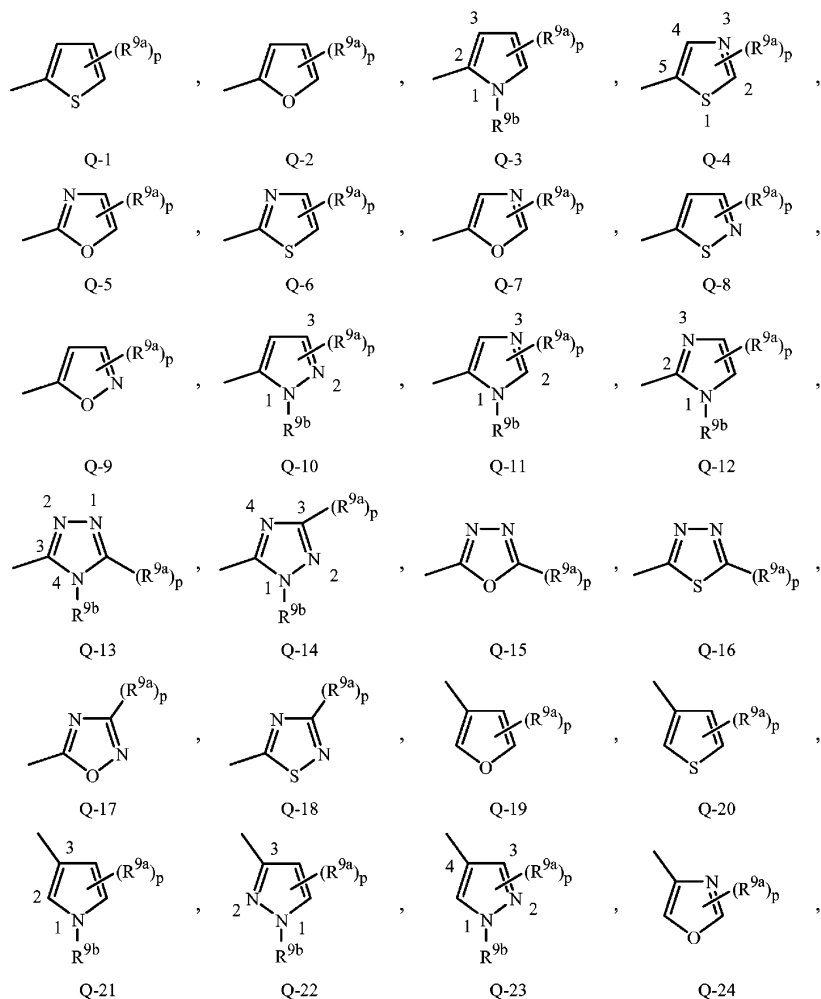
- [0274] 탄소 원자, 및 2개 이하의 O 원자, 2개 이하의 S 원자 및 4개 이하의 N 원자 중에서 독립적으로 선택되는 4개 이하의 헤테로 원자 중에서 선택되는 환 구성원을 포함하고, 탄소 원자 환 구성원 상에서 R^{9a} 및 질소 원자 환 구성원 상에서 R^{9b} 중에서 독립적으로 선택되는 5개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 5원 내지 6원 헤테로 방향족 환 또는 8원 내지 11원 헤테로 방향족 이환계; 또는

[0275] 각각 탄소 원자, 및 2개 이하의 O 원자, 2개 이하의 S 원자 및 4개 이하의 N 원자 중에서 독립적으로 선택되는 4개 이하의 헤테로 원자 중에서 선택되는 환 구성원 (여기서, 3개 이하의 탄소 원자 환 구성원은 C(=O) 및 C(=S) 중에서 독립적으로 선택되고, 황 원자 환 구성원은 S(=O)_s(=NR¹⁷)_f 중에서 독립적으로 선택된다)을 포함하

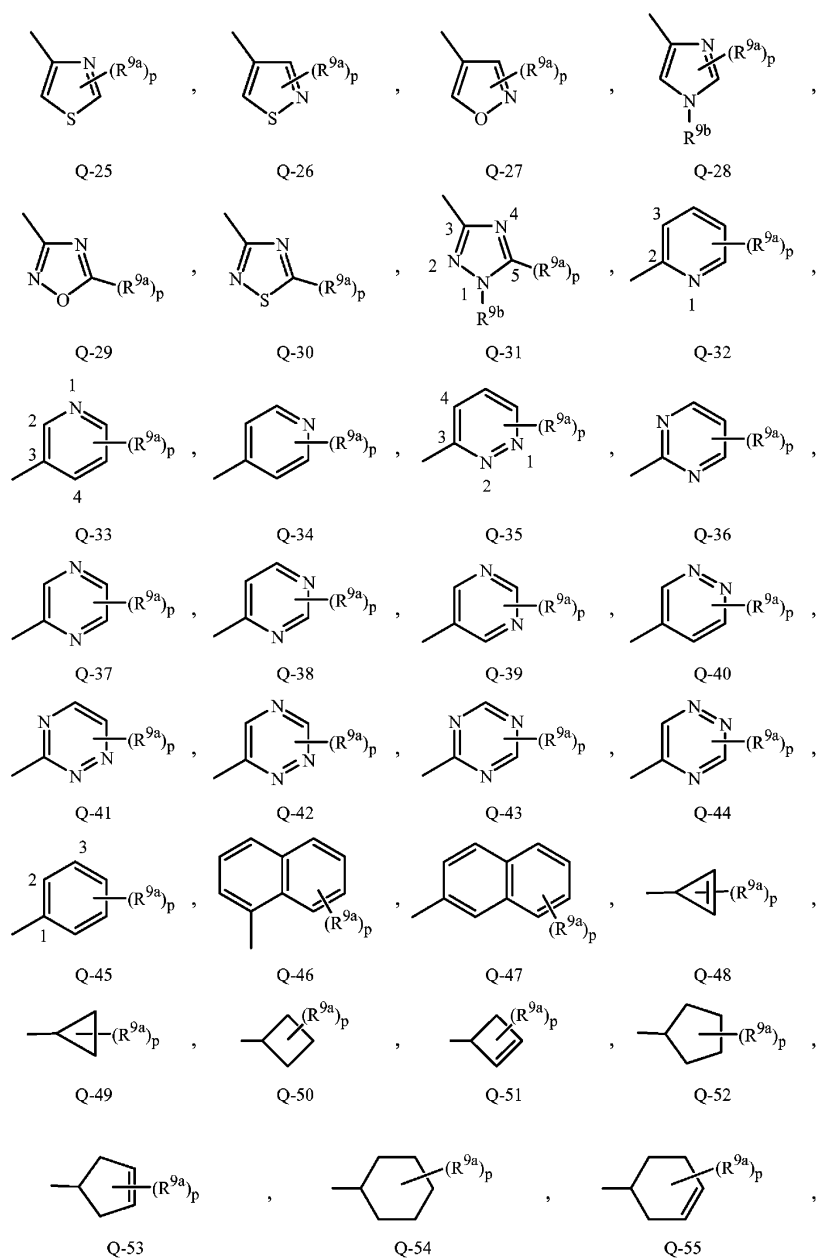
고, 탄소 원자 환 구성원 상에서 R^{9a} 및 질소 원자 환 구성원 상에서 R^{9b} 중에서 독립적으로 선택되는 5개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 3원 내지 7원 비방향족 탄소환, 5원 내지 7원 비방향족 복소환 또는 8원 내지 11원 비방향족 이환계인, 단독으로 또는 조합하여 취해진 화학식 1 또는 실시 형태 1 내지 134 중 어느 하나의 화합물.

[0276] 실시 형태 136. Q가 증거 5에 하기에 나타낸 Q-1 내지 Q-102 중에서 선택되는 환인 실시 형태 135의 화합물:

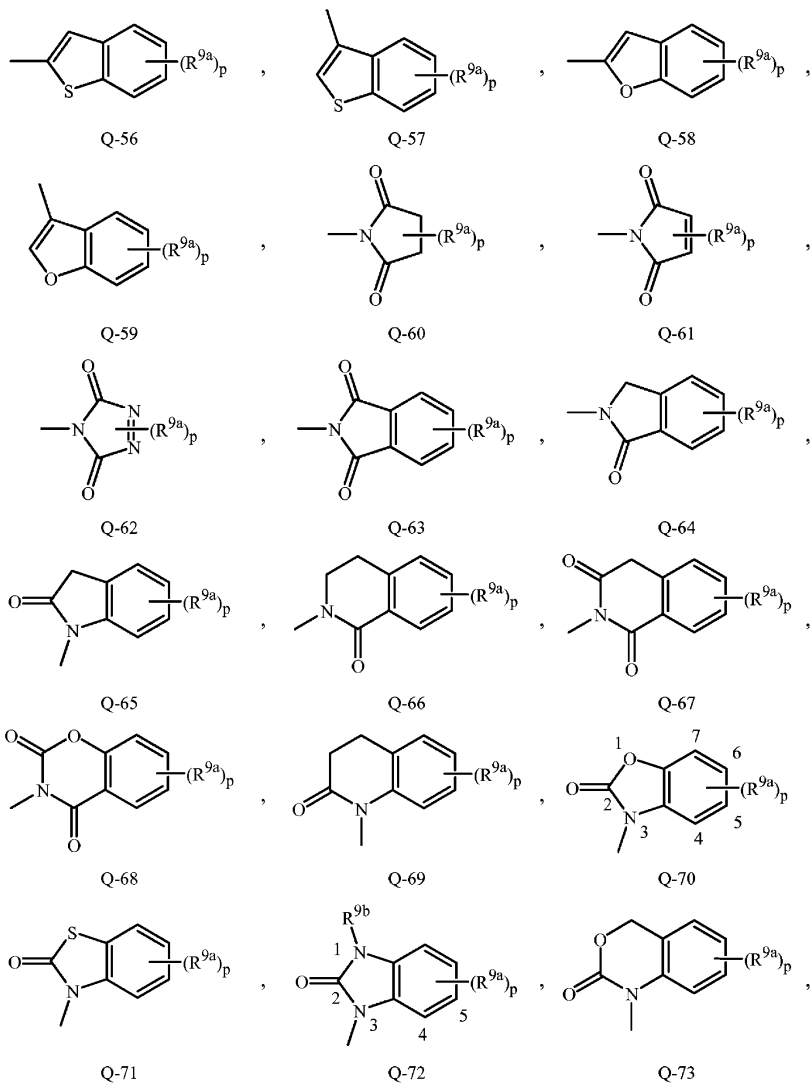
[0277] 증거 5



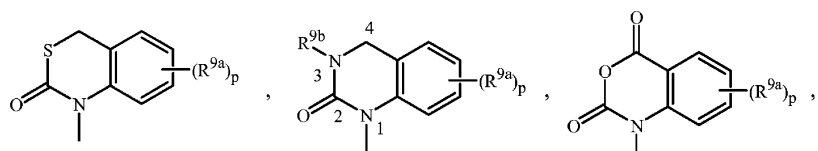
[0278]



[0279]



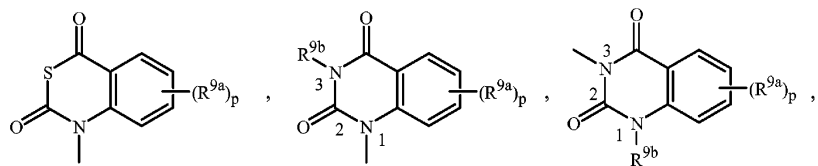
[0280]



Q-74

Q-75

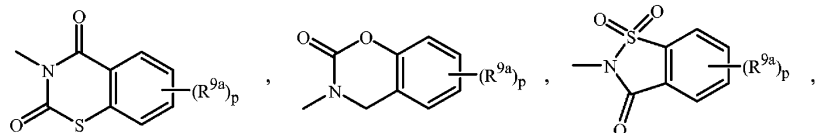
Q-76



Q-77

Q-78

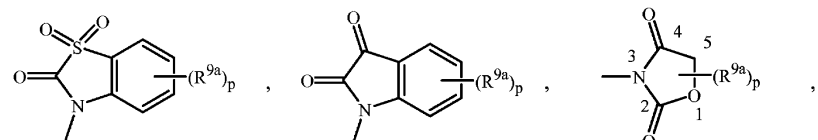
Q-79



Q-80

Q-81

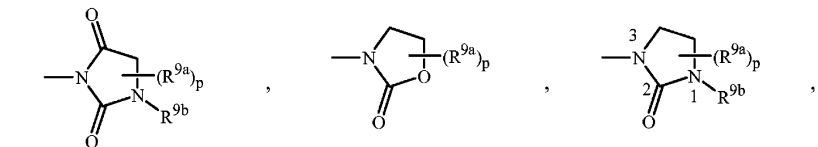
Q-82



Q-83

Q-84

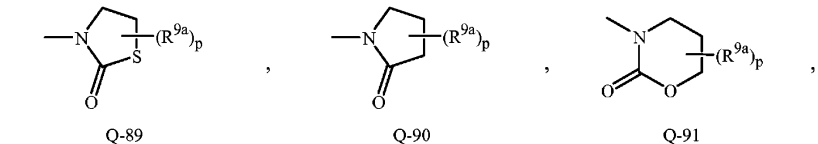
Q-85



Q-86

Q-87

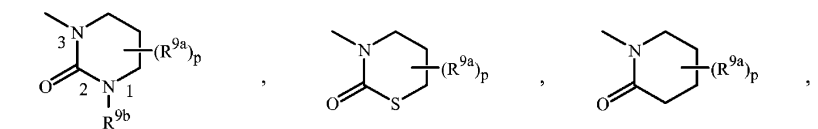
Q-88



Q-89

Q-90

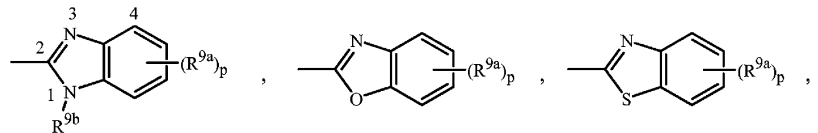
Q-91



Q-92

Q-93

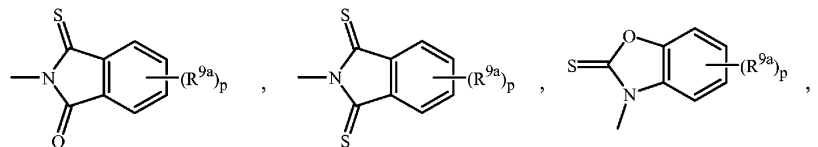
Q-94



Q-95

Q-96

Q-97



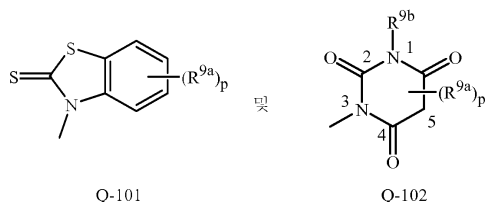
Q-98

Q-99

Q-100

[0281]

[0282]



[0283]

[0284]

(여기서, p는 0, 1, 2, 3, 4 또는 5이다).

[0285]

실시 형태 137. Q가 Q-1, Q-20, Q-32 내지 Q-34, Q-45 내지 Q-47, Q-60 내지 Q-73, Q-76 내지 Q-79, Q-84 내지 Q-94 및 Q-98 내지 Q-102 중에서 선택되는 실시 형태 136의 화합물.

[0286]

실시 형태 138. Q가 Q-1, Q-45, Q-63, Q-64, Q-65, Q-68, Q-69, Q-70, Q-71, Q-72, Q-73, Q-76, Q-78, Q-79, Q-84, Q-85, Q-98, Q-99, Q-100 내지 Q-102 중에서 선택되는 실시 형태 137의 화합물.

[0287]

실시 형태 139. Q가 Q-45, Q-63, Q-64, Q-65, Q-68, Q-69, Q-70, Q-71, Q-72, Q-84 및 Q-85 중에서 선택되는 실시 형태 138의 화합물.

[0288]

실시 형태 140. Q가 Q-45, Q-63, Q-65, Q-70, Q-71, Q-72, Q-84 및 Q-85 중에서 선택되는 실시 형태 139의 화합물.

[0289]

실시 형태 141. Q가 Q-45, Q-63, Q-65, Q-70, Q-71, Q-72 및 Q-84 중에서 선택되는 실시 형태 140의 화합물.

[0290]

실시 형태 142. Q가 Q-45, Q-63, Q-70, Q-71, Q-72 및 Q-84 중에서 선택되는 실시 형태 141의 화합물.

[0291]

실시 형태 143. Q가 Q-45인 실시 형태 142의 화합물.

[0292]

실시 형태 144. p가 0, 1, 2 또는 3인, 단독으로 또는 조합하여 취해진 실시 형태 136 내지 143 중 어느 하나의 화합물.

[0293]

실시 형태 145. 각 R^{9a} 가 독립적으로 할로젠, 하이드록시, 아미노, 시아노, 니트로, C_1-C_6 알킬, C_2-C_6 알케닐, C_2-C_6 알키닐, C_3-C_6 사이클로알킬, C_4-C_{10} 사이클로알킬알킬, C_4-C_{10} 알킬사이클로알킬, C_5-C_{10} 알킬사이클로알킬알킬, C_6-C_{14} 사이클로알킬사이클로알킬, C_1-C_6 할로알킬, C_2-C_6 할로알케닐, C_2-C_6 할로알키닐, C_3-C_6 할로사이클로알킬, C_1-C_4 알콕시, C_1-C_4 할로알콕시, C_1-C_4 알킬티오, C_1-C_4 알킬설퍼닐, C_1-C_4 알킬설포닐, C_1-C_4 할로알킬티오, C_1-C_4 할로알킬설퍼닐, C_1-C_4 할로알킬설포닐, C_1-C_4 알킬아미노, C_2-C_8 다이알킬아미노, C_3-C_6 사이클로알킬아미노, C_2-C_4 알콕시알킬, C_1-C_4 하이드록시알킬, C_2-C_4 알킬카르보닐, C_2-C_6 알콕시카르보닐, C_2-C_6 알킬카르보닐옥시, C_2-C_6 알킬카르보닐티오, C_2-C_6 알킬아미노카르보닐, C_3-C_8 다이알킬아미노카르보닐 또는 C_3-C_6 트라이알킬실릴;

[0294]

할로젠, C_1-C_2 알킬, C_1-C_2 할로알킬 및 C_1-C_2 알콕시 중에서 독립적으로 선택되는 3개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 페닐; 또는

[0295]

탄소 원자, 및 2개 이하의 O 원자, 2개 이하의 S 원자 및 4개 이하의 N 원자 중에서 독립적으로 선택되는 4개 이하의 헤테로 원자 중에서 선택되는 환 구성원을 포함하고, 탄소 원자 환 구성원 상에서 할로젠, 시아노, C_1-C_2 알킬, C_1-C_2 할로알킬, C_1-C_2 알콕시 및 C_1-C_2 할로알콕시, 및 질소 원자 환 구성원 상에서 시아노, C_1-C_2 알킬 및 C_1-C_2 알콕시 중에서 독립적으로 선택되는 3개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 5원 내지 6원 헤테로 방향족 환인, 단독으로 또는 조합하여 취해진 화학식 1 또는 실시 형태 1 내지 144 중 어느 하나의 화합물.

[0296]

실시 형태 146. 각 R^{9a} 가 독립적으로 할로젠, 아미노, 시아노, C_1-C_6 알킬, C_2-C_6 알케닐, C_2-C_6 알키닐, C_3-C_6 사이클로알킬, C_4-C_{10} 사이클로알킬알킬, C_1-C_6 할로알킬, C_3-C_6 할로사이클로알킬, C_1-C_4 알콕시, C_1-C_4 할로알콕시, C_1-C_4 알킬티오, C_1-C_4 알킬설포닐, C_1-C_4 알킬아미노, C_2-C_8 다이알킬아미노, C_2-C_4 알콕시알킬, C_2-C_4 알킬카르보닐, C_2-C_6 알콕시카르보닐, C_2-C_6 알킬카르보닐옥시, C_2-C_6 알킬아미노카르보닐 또는 C_3-C_8 다이알킬아미노카르보닐; 또는

[0297] 할로겐, C₁-C₂ 알킬, C₁-C₂ 할로알킬 및 C₁-C₂ 알콕시 중에서 독립적으로 선택되는 3개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 페닐인, 실시 형태 145의 화합물.

[0298] 실시 형태 147. 각 R^{9a}가 독립적으로 할로겐, C₁-C₆ 알킬, C₁-C₆ 할로알킬 또는 C₁-C₄ 알콕시인 실시 형태 146의 화합물.

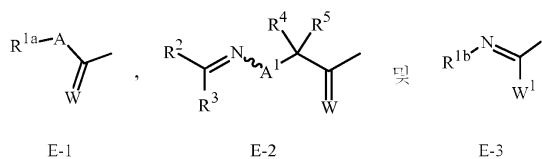
[0299] 실시 형태 148. 각 R^{9b}가 독립적으로 수소, C₁-C₃ 알킬, C₂-C₃ 알킬카르보닐, C₂-C₃ 알콕시카르보닐 또는 C₃-C₆ 사이클로알킬인, 단독으로 또는 조합하여 취해진 화학식 1 또는 실시 형태 1 내지 147 중 어느 하나의 화합물.

[0300] 상기 실시 형태 1 내지 실시 형태 148 및 본 명세서에 기재된 임의의 다른 실시 형태를 비롯한 본 발명의 실시 형태는 임의의 방식으로 조합될 수 있으며, 실시 형태의 변수에 대한 설명은 화학식 1의 화합물에 관한 것일 뿐만 아니라 화학식 1의 화합물의 제조에 유용한 출발 화합물 및 중간 화합물에 관한 것이기도 하다. 게다가, 상기 실시 형태 1 내지 148 및 본 명세서에 기재된 임의의 다른 실시 형태를 비롯한 본 발명의 실시 형태, 및 이들의 임의의 조합은 본 발명의 조성물 및 방법에 관한 것이다.

[0301] 실시 형태 1 내지 148의 조합들이 하기로 예시된다:

[0302] 실시 형태 AA.

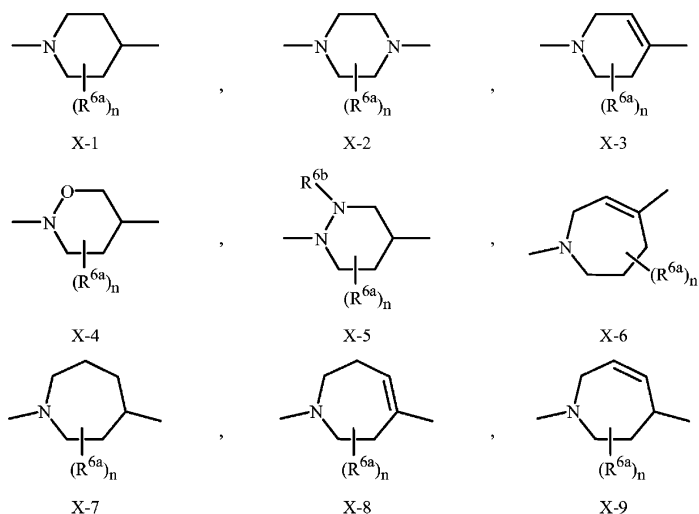
[0303] E가:



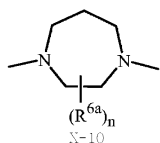
[0304]

[0305] 로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 라디칼이고;

[0306] X가



[0307] 및



[0308]

[0309] (여기서, X 기는 좌측으로 뻗어있는 결합이 화학식 1의 E에 부착되고, 우측으로 뻗어있는 결합이 화학식 1의 G에 부착되도록 배향된다)로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 라디칼이며;

[0310] G가 탄소 원자 환 구성원 상에서 R^{29a} 및 질소 원자 환 구성원 상에서 R^{30a} 중에서 독립적으로 선택되는 3개 이하

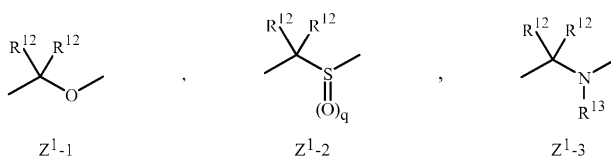
의 치환기로 임의로 치환되는 5원 복소환이고;

[0311] J가 각각 탄소 원자, 및 2개 이하의 O 원자, 2개 이하의 S 원자, 4개 이하의 N 원자 및 2개 이하의 Si 원자 중에서 독립적으로 선택되는 4개 이하의 헤테로 원자 중에서 선택되는 환 구성원 (여기서, 3개 이하의 탄소 원자 환 구성원은 C(=O) 및 C(=S) 중에서 독립적으로 선택되고, 황 원자 환 구성원은 S(=O)_s(=NR¹⁷)_f 중에서 독립적으로 선택되며, 규소 원자 환 구성원은 SiR¹⁰R¹¹ 중에서 독립적으로 선택된다)을 포함하고, R²³ 중에서 독립적으로 선택되는 5개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 5원, 6원 또는 7원 환, 8원 내지 11원 이환계 또는 7원 내지 11원 스피로환계이며;

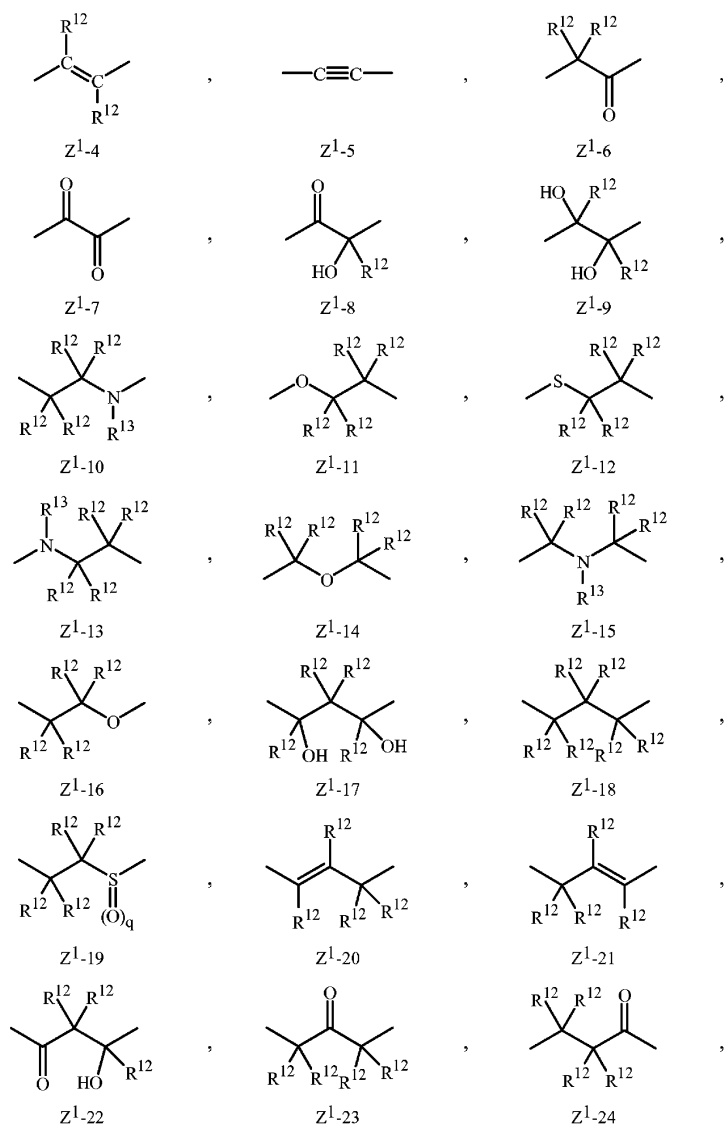
[0312] Z가 Z¹; 또는

[0313] 각각 탄소 원자, 및 2개 이하의 O 원자, 2개 이하의 S 원자, 2개 이하의 N 원자 및 1개 이하의 Si 원자 중에서 독립적으로 선택되는 2개 이하의 헤테로 원자 중에서 선택되는 채 구성원 (여기서, 2개 이하의 탄소 원자 채 구성원은 C(=O), C(=S) 및 C(=NOH) 중에서 독립적으로 선택되고, 황 원자 채 구성원은 S(=O)_s(=NR¹⁷)_f 중에서 독립적으로 선택되며, 규소 원자 채 구성원은 SiR¹⁰R¹¹ 중에서 독립적으로 선택된다)을 포함하고, 탄소 원자 채 구성원 상에서 R¹² 및 질소 원자 채 구성원 상에서 R¹³ 중에서 독립적으로 선택되는 4개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 4원, 5원 또는 6원 포화 또는 불포화 채이며;

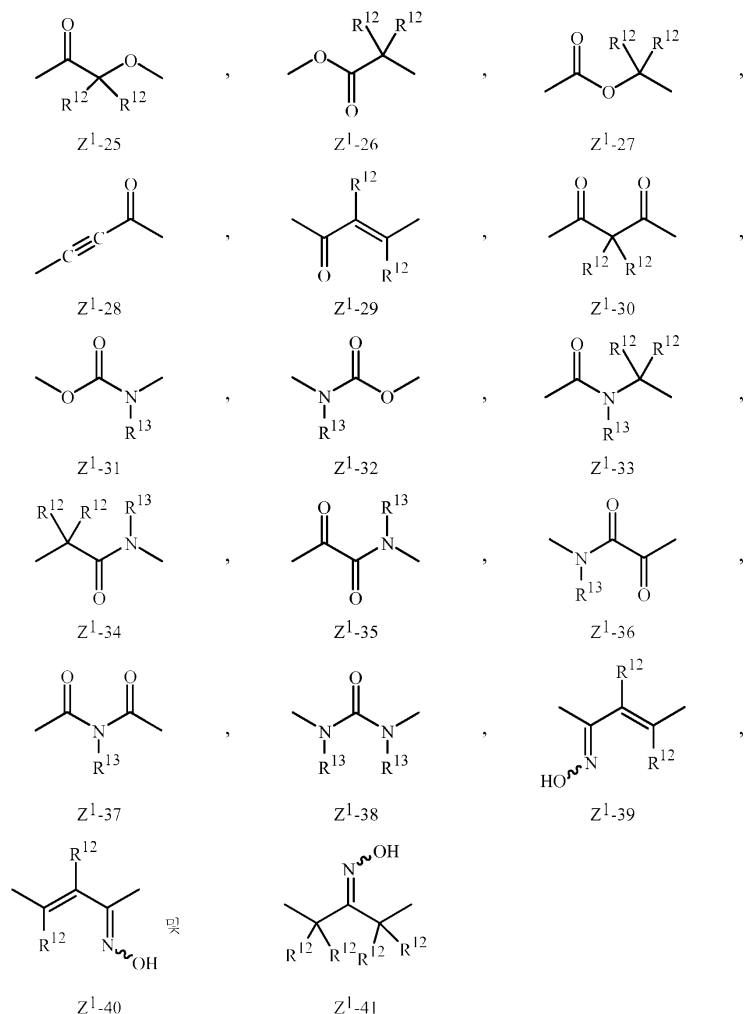
[0314] Z¹이



[0315]



[0316]



[0317]

[0318]

(여기서, Z¹ 기는 좌측으로 뻗어있는 결합이 화학식 1의 J에 부착되고, 우측으로 뻗어있는 결합이 화학식 1의 Q에 부착되도록 배향된다)로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 라디칼이고;

[0319]

Q가 각각 탄소 원자 환 구성원 상에서 R^{9a} 중에서 독립적으로 선택되는 5개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 페닐 또는 나프탈레닐;

[0320]

탄소 원자, 및 2개 이하의 O 원자, 2개 이하의 S 원자 및 4개 이하의 N 원자 중에서 독립적으로 선택되는 4개 이하의 헤테로 원자 중에서 선택되는 환 구성원을 포함하고, 탄소 원자 환 구성원 상에서 R^{9a} 및 질소 원자 환 구성원 상에서 R^{9b} 중에서 독립적으로 선택되는 5개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 5원 내지 6원 헤테로 방향족 환 또는 8원 내지 11원 헤테로 방향족 이환계; 또는

[0321]

각각 탄소 원자, 및 2개 이하의 O 원자, 2개 이하의 S 원자, 4개 이하의 N 원자 및 2개 이하의 Si 원자 중에서 독립적으로 선택되는 4개 이하의 헤테로 원자 중에서 선택되는 환 구성원 (여기서, 3개 이하의 탄소 원자 환 구성원은 C(=O) 및 C(=S) 중에서 독립적으로 선택되고, 황 원자 환 구성원은 S(=O)_s(=NR¹⁷)_f 중에서 독립적으로 선택되며, 규소 원자 환 구성원은 SiR¹⁰R¹¹ 중에서 독립적으로 선택된다)을 포함하고, 탄소 원자 환 구성원 상에서 R^{9a} 및 질소 원자 환 구성원 상에서 R^{9b} 중에서 독립적으로 선택되는 5개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 3원 내지 7원 비방향족 탄소환, 5원 내지 7원 비방향족 복소환 또는 8원 내지 11원 비방향족 이환계이며;

[0322]

A가 CHR¹⁵, NR¹⁶ 또는 C(=O)이고;

[0323]

A¹이 -O-, -S-, -N(R⁷)-, -C(R⁸)₂-, -OC(R⁸)₂-, -SC(R⁸)₂- 또는 -N(R⁷)C(R⁸)₂- (여기서, 좌측으로 돌출하는 결합은

$-N=C(R^2)(R^3)$ 에 연결되고, 우측으로 돌출하는 결합은 $-C(R^4)(R^5)-$ 에 연결된다)이며;

[0324] W가 O 또는 S이고;

[0325] W¹이 OR^{18} , SR^{19} , $NR^{20}R^{21}$ 또는 R^{22} 이며;

[0326] R^{1a} 및 R^{1b} 가 독립적으로, 임의로 치환된 페닐, 임의로 치환된 나프탈레닐 또는 임의로 치환된 5원 내지 6원 헤테로 방향족 환; 또는 시아노, C_1-C_8 알킬, C_2-C_8 알케닐, C_2-C_8 알키닐, C_1-C_8 할로알킬, C_2-C_8 할로알케닐, C_2-C_8 할로알키닐, C_3-C_8 사이클로알킬, C_3-C_8 할로사이클로알킬, C_4-C_{10} 알킬사이클로알킬, C_4-C_{10} 사이클로알킬알킬, C_4-C_{10} 할로사이클로알킬알킬, C_5-C_{10} 알킬사이클로알킬알킬, C_2-C_8 알콕시알킬, C_2-C_8 할로알콕시알킬, C_4-C_{10} 사이클로알콕시알킬, C_3-C_{10} 알콕시알콕시알킬, C_2-C_8 알킬티오알킬, C_2-C_8 할로알킬티오알킬, C_2-C_8 알킬설폰알킬, C_2-C_8 알킬설폰알킬, C_3-C_8 알콕시카르보닐알킬, C_3-C_8 할로알콕시카르보닐알킬, C_2-C_8 알킬아미노알킬, C_3-C_{10} 다이알킬아미노알킬, C_2-C_8 할로알킬아미노알킬, C_4-C_{10} 사이클로알킬아미노알킬, C_1-C_8 알콕시, C_1-C_8 할로알콕시, C_3-C_8 사이클로알콕시, C_3-C_8 할로사이클로알콕시, C_4-C_{10} 사이클로알킬알콕시, C_2-C_8 알케닐옥시, C_2-C_8 할로알케닐옥시, C_2-C_8 알키닐옥시, C_3-C_8 할로알키닐옥시, C_2-C_8 알콕시알콕시, C_2-C_8 알킬카르보닐옥시, C_2-C_8 할로알킬카르보닐옥시, C_1-C_8 알킬티오, C_1-C_8 할로알킬티오, C_3-C_8 사이클로알킬티오, C_3-C_{10} 트라이알킬실릴, C_1-C_8 알킬아미노, C_2-C_8 다이알킬아미노, C_1-C_8 할로알킬아미노, C_2-C_8 할로다이알킬아미노, C_3-C_8 사이클로알킬아미노, C_2-C_8 알킬카르보닐아미노, C_2-C_8 할로알킬카르보닐아미노, C_1-C_8 알킬설폰아미노, C_1-C_8 할로알킬설폰아미노, 피롤리디닐, 피페리디닐 또는 모르폴리닐이고;

[0327] R^2 가 수소, 할로젠, 시아노, 아미노, $-CHO$, $-C(=O)OH$, $-C(=O)NH_2$, C_1-C_6 알킬, C_2-C_6 알케닐, C_2-C_6 알키닐, C_1-C_6 할로알킬, C_2-C_6 할로알케닐, C_2-C_6 할로알키닐, C_3-C_6 사이클로알킬, C_3-C_6 할로사이클로알킬, C_4-C_6 알킬사이클로알킬, C_4-C_6 사이클로알킬알킬, C_4-C_6 할로사이클로알킬알킬, C_3-C_6 사이클로알케닐, C_3-C_6 할로사이클로알케닐, C_2-C_6 알콕시알킬, C_2-C_6 알킬티오알킬, C_2-C_6 알킬설폰알킬, C_2-C_6 알킬설폰알킬, C_2-C_6 알킬아미노알킬, C_3-C_6 다이알킬아미노알킬, C_2-C_6 할로알킬아미노알킬, C_2-C_6 알킬카르보닐, C_2-C_6 할로알킬카르보닐, C_4-C_6 사이클로알킬카르보닐, C_2-C_6 알콕시카르보닐, C_4-C_6 사이클로알콕시카르보닐, C_5-C_6 사이클로알킬알콕시카르보닐, C_2-C_6 알킬아미노카르보닐, C_3-C_6 다이알킬아미노카르보닐, C_1-C_6 알콕시, C_1-C_6 할로알콕시, C_3-C_6 사이클로알콕시, C_3-C_6 할로사이클로알콕시, C_2-C_6 알케닐옥시, C_2-C_6 할로알케닐옥시, C_2-C_6 알키닐옥시, C_3-C_6 할로알키닐옥시, C_2-C_6 알콕시알콕시, C_2-C_6 알킬카르보닐옥시, C_2-C_6 할로알킬카르보닐옥시, C_1-C_6 알킬티오, C_1-C_6 할로알킬티오, C_3-C_6 사이클로알킬티오, C_1-C_6 알킬아미노, C_2-C_6 다이알킬아미노, C_1-C_6 할로알킬아미노, C_2-C_6 할로다이알킬아미노, C_3-C_6 사이클로알킬아미노, C_2-C_6 알킬카르보닐아미노, C_2-C_6 할로알킬카르보닐아미노, C_1-C_6 알킬설폰아미노 또는 C_1-C_6 할로알킬설폰아미노이며;

[0328] R^3 가 수소, 할로젠, 시아노, 하이드록시, C_1-C_3 알킬, C_1-C_3 할로알킬, C_1-C_3 알콕시 또는 C_1-C_3 할로알콕시이거나;

[0329] R^2 및 R^3 가 이들이 부착되어 있는 탄소 원자와 함께, 탄소 원자, 및 2개 이하의 O 원자, 2개 이하의 S 원자, 2개 이하의 N 원자 및 2개 이하의 Si 원자 중에서 독립적으로 선택되는 4개 이하의 헤테로 원자 중에서 선택되는 환 구성원 (여기서, 3개 이하의 탄소 원자 환 구성원은 $C(=O)$ 및 $C(=S)$ 중에서 독립적으로 선택되고, 황 원자 환 구성원은 $S(=O)_s(=NR^{17})_f$ 중에서 독립적으로 선택되며, 규소 원자 환 구성원은 $SiR^{10}R^{11}$ 중에서 독립적으로 선택된다)을 포함하고, 탄소 원자 환 구성원 상에서 할로젠, 시아노, C_1-C_2 알킬, C_1-C_2 할로알킬, C_1-C_2 알콕시 및 C_1-C_2 할로알콕시, 및 질소 원자 환 구성원 상에서 시아노, C_1-C_2 알킬 및 C_1-C_2 알콕시 중에서 독립적으로 선택되는 4개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 3원 내지 7원 환을 형성하며;

[0330] R^4 가 임의로 치환된 페닐, 임의로 치환된 나프탈레닐 또는 임의로 치환된 5원 내지 6원 헤테로 방향족 환; 또는

수소, 할로젠, 시아노, 하이드록시, $-CHO$, C_1-C_4 알킬, C_2-C_4 알케닐, C_2-C_4 알키닐, C_1-C_4 할로알킬, C_2-C_4 할로알케닐, C_2-C_4 할로알키닐, C_2-C_4 알콕시알킬, C_2-C_4 알킬티오알킬, C_2-C_4 알킬설퍼닐알킬, C_2-C_4 알킬설포닐알킬, C_2-C_4 알킬카르보닐, C_2-C_4 할로알킬카르보닐, C_2-C_5 알콕시카르보닐, C_2-C_5 알킬아미노카르보닐, C_3-C_5 다이알킬아미노카르보닐, C_1-C_4 알콕시, C_1-C_4 할로알콕시, C_1-C_4 알킬티오, C_1-C_4 할로알킬티오, C_1-C_4 알킬설퍼닐, C_1-C_4 할로알킬설퍼닐, C_1-C_4 알킬설포닐, C_1-C_4 할로알킬설포닐, C_2-C_4 알킬카르보닐옥시, C_2-C_4 할로알킬카르보닐옥시, C_2-C_5 알콕시카르보닐옥시, C_2-C_5 알킬아미노카르보닐옥시 또는 C_3-C_5 다이알킬아미노카르보닐옥시이고;

- [0331] R^5 가 수소, C_1-C_3 알킬 또는 C_1-C_3 할로알킬이며;
- [0332] 각 R^{6a} 가 독립적으로 C_1-C_4 알킬, C_1-C_4 알케닐, C_1-C_4 할로알킬, C_1-C_4 알콕시, 할로젠, 시아노 또는 하이드록시이거나;
- [0333] 2개의 R^{6a} 가 함께 C_1-C_4 알킬렌 또는 C_2-C_4 알케닐렌으로서 취해, 가교 이환계 또는 융합 이환계를 형성하거나;
- [0334] 이중 결합으로 결합된 인접한 환 탄소 원자에 부착되는 2개의 R^{6a} 가 함께, C_1-C_4 알킬, C_1-C_4 할로알킬, C_1-C_4 알콕시, C_1-C_4 할로알콕시, 할로젠, 하이드록시, 아미노, 시아노 및 니트로 중에서 선택되는 3개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 $-CH=CH-CH=CH-$ 로서 취해지고;
- [0335] R^{6b} 가 수소, 시아노, C_1-C_3 알킬, C_1-C_3 할로알킬, C_1-C_3 알콕시, C_2-C_3 알킬카르보닐, C_2-C_3 알콕시카르보닐 또는 C_3-C_6 사이클로알킬이며;
- [0336] R^7 이 수소, 시아노, C_1-C_4 알킬, C_1-C_4 할로알킬, C_2-C_4 알콕시알킬, C_2-C_4 알킬티오알킬, C_2-C_4 알킬카르보닐, C_2-C_4 할로알킬카르보닐, C_2-C_4 알콕시카르보닐, C_2-C_4 알킬아미노카르보닐, C_3-C_5 다이알킬아미노카르보닐, C_1-C_4 알킬설포닐 또는 C_1-C_4 할로알킬설포닐이거나;
- [0337] R^3 및 R^7 이 이들이 부착되어 있는 연결 원자와 함께, 연결 원자 이외에도, 탄소 원자, 및 1개 이하의 O 원자, 1개 이하의 S 원자 및 1개 이하의 N 원자 중에서 독립적으로 선택되는 3개 이하의 헤테로 원자 중에서 선택되는 환 구성원을 포함하고, 탄소 원자 환 구성원 상에서 할로젠, 시아노, 니트로, C_1-C_2 알킬, C_1-C_2 할로알킬, C_1-C_2 알콕시 및 C_1-C_2 할로알콕시, 및 질소 원자 환 구성원 상에서 시아노, C_1-C_2 알킬 및 C_1-C_2 알콕시 중에서 독립적으로 선택되는 3개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 5원 내지 7원 부분 포화 환을 형성하고;
- [0338] 각 R^8 이 독립적으로 수소, C_1-C_3 알킬 또는 C_1-C_3 할로알킬이며;
- [0339] 각 R^{9a} 가 독립적으로 할로젠, 하이드록시, 아미노, 시아노, 니트로, C_1-C_6 알킬, C_2-C_6 알케닐, C_2-C_6 알키닐, C_3-C_6 사이클로알킬, C_4-C_{10} 사이클로알킬알킬, C_4-C_{10} 알킬사이클로알킬, C_5-C_{10} 알킬사이클로알킬알킬, C_6-C_{14} 사이클로알킬사이클로알킬, C_1-C_6 할로알킬, C_2-C_6 할로알케닐, C_2-C_6 할로알키닐, C_3-C_6 할로사이클로알킬, C_1-C_4 알콕시, C_1-C_4 할로알콕시, C_1-C_4 알킬티오, C_1-C_4 알킬설퍼닐, C_1-C_4 알킬설포닐, C_1-C_4 할로알킬티오, C_1-C_4 할로알킬설퍼닐, C_1-C_4 할로알킬설포닐, C_1-C_4 알킬아미노, C_2-C_8 다이알킬아미노, C_3-C_6 사이클로알킬아미노, C_2-C_4 알콕시알킬, C_1-C_4 하이드록시알킬, C_2-C_4 알킬카르보닐, C_2-C_6 알콕시카르보닐, C_2-C_6 알킬카르보닐옥시, C_2-C_6 알킬카르보닐티오, C_2-C_6 알킬아미노카르보닐, C_3-C_8 다이알킬아미노카르보닐 또는 C_3-C_6 트라이알킬실릴;
- [0340] 할로젠, 시아노, C_1-C_2 알킬, C_1-C_2 할로알킬, C_1-C_2 알콕시 및 C_1-C_2 할로알콕시 중에서 독립적으로 선택되는 3개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 페닐 또는 나프탈레닐;
- [0341] 탄소 원자, 및 2개 이하의 O 원자, 2개 이하의 S 원자 및 4개 이하의 N 원자 중에서 독립적으로 선택되는 4개 이하의 헤테로 원자 중에서 선택되는 환 구성원을 포함하고, 탄소 원자 환 구성원 상에서 할로젠, 시아노, C_1-C_2

알킬, C₁-C₂ 할로알킬, C₁-C₂ 알콕시 및 C₁-C₂ 할로알콕시, 및 질소 원자 환 구성원 상에서 시아노, C₁-C₂ 알킬 및 C₁-C₂ 알콕시 중에서 독립적으로 선택되는 3개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 5원 내지 6원 헤테로 방향족 환; 또는

[0342] 탄소 원자, 및 2개 이하의 O 원자, 2개 이하의 S 원자 및 4개 이하의 N 원자 중에서 독립적으로 선택되는 4개 이하의 헤테로 원자 중에서 선택되는 환 구성원 (여기서, 3개 이하의 탄소 원자 환 구성원은 C(=O) 및 C(=S) 중에서 독립적으로 선택된다)을 포함하고, 탄소 원자 환 구성원 상에서 할로젠, 시아노, C₁-C₂ 알킬, C₁-C₂ 할로알킬, C₁-C₂ 알콕시 및 C₁-C₂ 할로알콕시, 및 질소 원자 환 구성원 상에서 시아노, C₁-C₂ 알킬 및 C₁-C₂ 알콕시 중에서 독립적으로 선택되는 3개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 3원 내지 7원 비방향족 환이고;

[0343] 각 R^{9b}가 독립적으로 수소, 시아노, C₁-C₃ 알킬, C₁-C₃ 할로알킬, C₁-C₃ 알콕시, C₂-C₃ 알킬카르보닐, C₂-C₃ 알콕시 카르보닐 또는 C₃-C₆ 사이클로알킬이며;

[0344] 각 R¹⁰ 및 R¹¹이 독립적으로 C₁-C₅ 알킬, C₂-C₅ 알케닐, C₂-C₅ 알키닐, C₃-C₅ 사이클로알킬, C₃-C₆ 할로사이클로알킬, C₄-C₁₀ 사이클로알킬알킬, C₄-C₇ 알킬사이클로알킬, C₅-C₇ 알킬사이클로알킬알킬, C₁-C₅ 할로알킬, C₁-C₅ 알콕시 또는 C₁-C₅ 할로알콕시이고;

[0345] 각 R¹²가 독립적으로 수소, 할로젠, 하이드록시, 시아노, C₁-C₄ 알킬, C₁-C₄ 할로알킬, C₁-C₄ 알콕시, C₁-C₄ 할로알콕시, C₂-C₄ 알콕시알킬, C₂-C₄ 알킬카르보닐, C₂-C₄ 알콕시카르보닐 또는 C₃-C₆ 사이클로알킬이며;

[0346] 각 R¹³이 독립적으로 수소, 시아노, C₁-C₄ 알킬, C₁-C₄ 할로알킬, C₁-C₄ 알콕시, C₂-C₄ 알킬카르보닐, C₂-C₄ 알콕시 카르보닐 또는 C₃-C₆ 사이클로알킬이고;

[0347] R¹⁵이 수소, 할로젠, 시아노, 하이드록시, -CHO, C₁-C₄ 알킬, C₂-C₄ 알케닐, C₂-C₄ 알키닐, C₁-C₄ 할로알킬, C₂-C₄ 할로알케닐, C₂-C₄ 할로알키닐, C₂-C₄ 알콕시알킬, C₂-C₄ 알킬티오알킬, C₂-C₄ 알킬설퍼닐알킬, C₂-C₄ 알킬설포닐알킬, C₃-C₅ 알콕시카르보닐알킬, C₂-C₄ 알킬카르보닐, C₂-C₄ 할로알킬카르보닐, C₂-C₅ 알콕시카르보닐, C₂-C₅ 알킬아미노카르보닐, C₃-C₅ 다이알킬아미노카르보닐, C₁-C₄ 알콕시, C₁-C₄ 할로알콕시, C₁-C₄ 알킬티오, C₁-C₄ 할로알킬티오, C₁-C₄ 알킬설퍼닐, C₁-C₄ 할로알킬설퍼닐, C₁-C₄ 알킬설포닐 또는 C₁-C₄ 할로알킬설포닐이되; 단 R¹⁵이 하이드록시이면, R^{1a}가 탄소 원자를 통해 화학식 1의 A에 결합되며;

[0348] R¹⁶이 수소, C₁-C₄ 알킬, C₂-C₄ 알케닐, C₃-C₄ 알키닐, C₁-C₄ 할로알킬, C₂-C₄ 할로알케닐, C₂-C₄ 할로알키닐, C₂-C₄ 알콕시알킬, C₂-C₄ 알킬티오알킬, C₂-C₄ 알킬설퍼닐알킬, C₂-C₄ 알킬설포닐알킬, C₂-C₄ 알킬카르보닐, C₂-C₄ 할로알킬카르보닐, C₂-C₅ 알콕시카르보닐, C₃-C₅ 알콕시카르보닐알킬, C₂-C₅ 알킬아미노카르보닐, C₃-C₅ 다이알킬아미노카르보닐, C₁-C₄ 알킬설포닐 또는 C₁-C₄ 할로알킬설포닐이고;

[0349] 각 R¹⁷이 독립적으로 수소, 시아노, C₁-C₆ 알킬, C₁-C₆ 할로알킬, C₃-C₈ 사이클로알킬, C₃-C₈ 할로사이클로알킬, C₁-C₆ 알콕시, C₁-C₆ 할로알콕시, C₁-C₆ 알킬아미노, C₂-C₈ 다이알킬아미노, C₁-C₆ 할로알킬아미노 또는 페닐이며;

[0350] R¹⁸ 및 R¹⁹이 독립적으로 C₁-C₆ 알킬, C₃-C₆ 알케닐, C₃-C₆ 알키닐, C₁-C₆ 할로알킬, C₃-C₆ 할로알케닐, C₃-C₆ 할로알키닐, C₃-C₆ 사이클로알킬, C₃-C₆ 할로사이클로알킬, C₄-C₈ 알킬사이클로알킬, C₄-C₈ 사이클로알킬알킬, C₄-C₈ 할로사이클로알킬알킬, C₅-C₈ 알킬사이클로알킬알킬, C₂-C₆ 알콕시알킬, C₄-C₈ 사이클로알콕시알킬, C₃-C₆ 알콕시알킬, C₂-C₆ 알킬티오알킬, C₂-C₆ 알킬설퍼닐알킬, C₂-C₆ 알킬설포닐알킬, C₂-C₆ 알킬아미노알킬, C₃-C₆ 다이알킬아미노알킬, C₂-C₆ 할로알킬아미노알킬, C₄-C₈ 사이클로알킬아미노알킬, C₂-C₆ 알킬카르보닐, C₂-C₆ 할로알킬카르보닐, C₄-C₈ 사이클로알킬카르보닐, C₂-C₆ 알콕시카르보닐, C₂-C₆ 알킬아미노카르보닐, C₃-C₈ 다이알킬아미

노카르보닐 또는 C₄-C₈ 사이클로알킬아미노카르보닐이고;

[0351] R²⁰이 수소, 시아노, 하이드록시, 아미노, C₁-C₆ 알킬, C₃-C₆ 알케닐, C₃-C₆ 알키닐, C₁-C₆ 할로알킬, C₃-C₆ 할로알케닐, C₃-C₆ 할로알키닐, C₃-C₆ 사이클로알킬, C₄-C₈ 사이클로알킬알킬, C₂-C₆ 알콕시알킬, C₁-C₆ 알콕시, C₁-C₆ 할로알콕시, C₁-C₆ 알킬설폰, C₁-C₆ 할로알킬설폰, C₂-C₆ 알킬카르보닐, C₂-C₆ 할로알킬카르보닐, C₁-C₆ 알킬아미노, C₂-C₈ 다이알킬아미노, C₁-C₆ 할로알킬아미노 또는 C₂-C₈ 할로다이알킬아미노이며;

[0352] R²¹이 수소, C₁-C₆ 알킬, C₃-C₆ 알케닐, C₃-C₆ 알키닐, C₁-C₆ 할로알킬 또는 C₃-C₆ 사이클로알킬이거나;

[0353] R²⁰ 및 R²¹이 함께 -(CH₂)₄-, -(CH₂)₅- 또는 -(CH₂)₂O(CH₂)₂-로서 취해지고;

[0354] R²²가 수소, 할로젠, 시아노, C₁-C₄ 알킬, C₁-C₄ 할로알킬, C₂-C₄ 알콕시알킬, C₂-C₄ 알킬카르보닐, C₂-C₄ 알콕시카르보닐, C₂-C₃ 알킬아미노카르보닐 또는 C₃-C₆ 다이알킬아미노카르보닐이며;

[0355] 각 R²³가 탄소 원자 환 구성원 상에서 R^{23a} 중에서 독립적으로 선택되고, 질소 원자 환 구성원 상에서 R^{23b} 중에서 독립적으로 선택되며;

[0356] R^{23a}가 할로젠, 하이드록시, 시아노, C₁-C₆ 알킬, C₁-C₆ 할로알킬, C₁-C₄ 알콕시, C₁-C₄ 할로알콕시, C₂-C₆ 알콕시알킬, C₂-C₄ 알킬카르보닐, C₂-C₆ 알콕시카르보닐 또는 C₃-C₆ 사이클로알킬이고;

[0357] R^{23b}가 시아노, C₁-C₃ 알킬, C₁-C₃ 할로알킬, C₁-C₃ 알콕시, C₂-C₃ 알킬카르보닐, C₂-C₃ 알콕시카르보닐 또는 C₃-C₆ 사이클로알킬이며;

[0358] 각 R^{29a}가 독립적으로 수소, 할로젠, C₁-C₃ 알킬 또는 C₁-C₃ 할로알킬이고;

[0359] 각 R^{30a}가 독립적으로 수소 또는 C₁-C₃ 알킬이며;

[0360] n이 0, 1 또는 2이고;

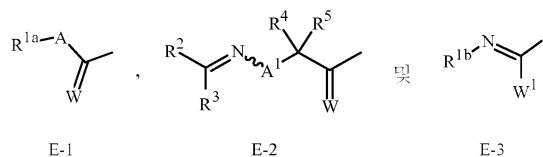
[0361] q가 0, 1 또는 2이며;

[0362] s 및 f가 S(=O)_s(=NR¹⁷)_f의 각 경우에, 독립적으로 0, 1 또는 2이되, 단 s와 f의 합계가 0, 1 또는 2인 화학식 1의 화합물

[0363] (단, Z가 Z¹-13이면, Q는 비치환된 페닐 이외의 것이다).

[0364] 실시 형태 A.

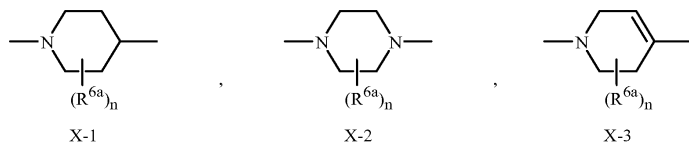
[0365] E가:



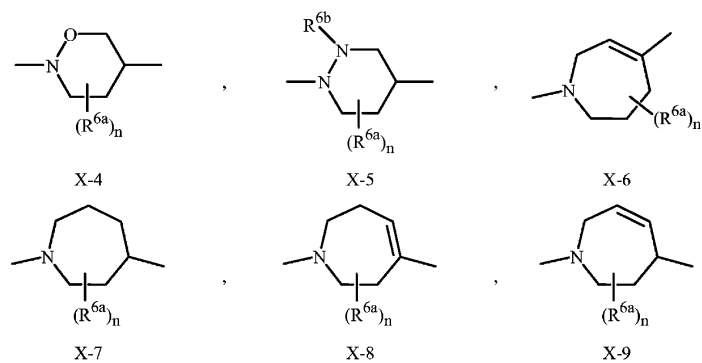
[0366]

[0367] 로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 라디칼이고;

[0368] X가

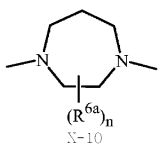


[0369]



[0370]

및



[0371]

[0372] (여기서, X 기는 좌측으로 뻗어있는 결합이 화학식 1의 E에 부착되고, 우측으로 뻗어있는 결합이 화학식 1의 G에 부착되도록 배향된다)로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 라디칼이며;

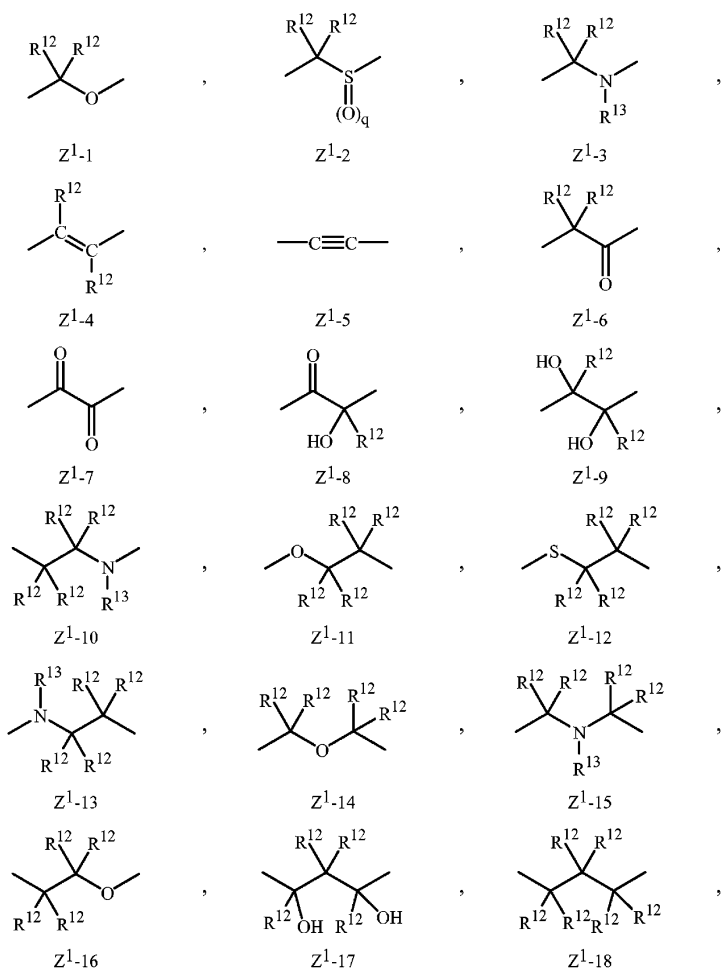
[0373] G가 탄소 원자 환 구성원 상에서 R^{29a} 및 질소 원자 환 구성원 상에서 R^{30a} 중에서 독립적으로 선택되는 3개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 5원 복소환이고;

[0374] J가 각각 탄소 원자, 및 2개 이하의 O 원자, 2개 이하의 S 원자, 4개 이하의 N 원자 및 2개 이하의 Si 원자 중에서 독립적으로 선택되는 4개 이하의 헤테로 원자 중에서 선택되는 환 구성원 (여기서, 3개 이하의 탄소 원자 환 구성원은 $C(=O)$ 및 $C(=S)$ 중에서 독립적으로 선택되고, 황 원자 환 구성원은 $S(=O)_s(=NR^{17})_f$ 중에서 독립적으로 선택되며, 규소 원자 환 구성원은 $SiR^{10}R^{11}$ 중에서 독립적으로 선택된다)을 포함하고, R^{23} 중에서 독립적으로 선택되는 5개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 5원, 6원 또는 7원 환, 8원 내지 11원 이환계 또는 7원 내지 11원 스피로환계이며;

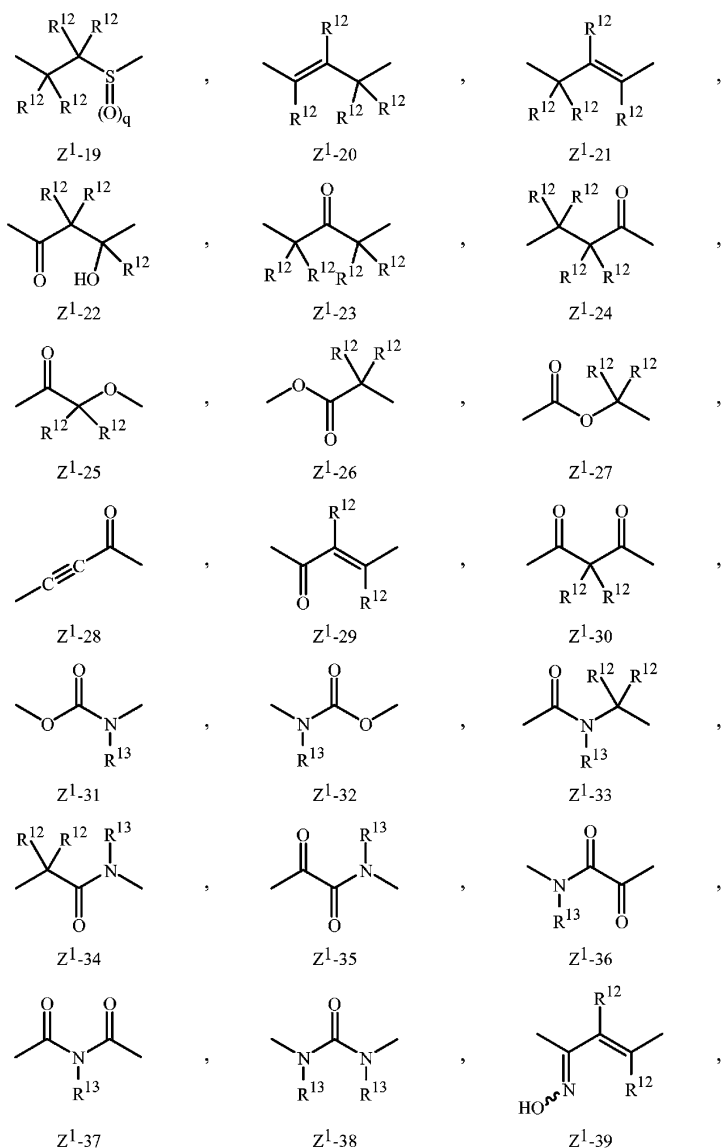
[0375] Z가 Z^1 ; 또는

[0376] 각각 탄소 원자, 및 2개 이하의 O 원자, 2개 이하의 S 원자, 2개 이하의 N 원자 및 1개 이하의 Si 원자 중에서 독립적으로 선택되는 2개 이하의 헤테로 원자 중에서 선택되는쇄 구성원 (여기서, 2개 이하의 탄소 원자쇄 구성원은 $C(=O)$, $C(=S)$ 및 $C(=NOH)$ 중에서 독립적으로 선택되고, 황 원자쇄 구성원은 $S(=O)_s(=NR^{17})_f$ 중에서 독립적으로 선택되며, 규소 원자쇄 구성원은 $SiR^{10}R^{11}$ 중에서 독립적으로 선택된다)을 포함하고, 탄소 원자쇄 구성원 상에서 R^{12} 및 질소 원자쇄 구성원 상에서 R^{13} 중에서 독립적으로 선택되는 4개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 4원, 5원 또는 6원 포화 또는 불포화쇄이며;

[0377] Z¹은



[0378]



[0379]

[0380]

[0381] (여기서, Z^1 기는 좌측으로 뻗어있는 결합이 화학식 1의 J에 부착되고, 우측으로 뻗어있는 결합이 화학식 1의 Q에 부착되도록 배향된다)로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 라디칼이고;

[0382] Q가 각각 탄소 원자 환 구성원 상에서 R^{9a} 중에서 독립적으로 선택되는 5개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 페닐 또는 나프탈레닐;

[0383] 탄소 원자, 및 2개 이하의 O 원자, 2개 이하의 S 원자 및 4개 이하의 N 원자 중에서 독립적으로 선택되는 4개 이하의 헤테로 원자 중에서 선택되는 환 구성원을 포함하고, 탄소 원자 환 구성원 상에서 R^{9a} 및 질소 원자 환 구성원 상에서 R^{9b} 중에서 독립적으로 선택되는 5개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 5원 내지 6원 헤테로 방향족 환 또는 8원 내지 11원 헤테로 방향족 이환계; 또는

[0384] 각각 탄소 원자, 및 2개 이하의 O 원자, 2개 이하의 S 원자, 4개 이하의 N 원자 및 2개 이하의 Si 원자 중에서 독립적으로 선택되는 4개 이하의 헤테로 원자 중에서 선택되는 환 구성원 (여기서, 3개 이하의 탄소 원자 환 구

성원은 C(=O) 및 C(=S) 중에서 독립적으로 선택되고, 황 원자 환 구성원은 S(=O)_s(=NR¹⁷)_f 중에서 독립적으로 선택되며, 규소 원자 환 구성원은 SiR¹⁰R¹¹ 중에서 독립적으로 선택된다)을 포함하고, 탄소 원자 환 구성원 상에서 R^{9a} 및 질소 원자 환 구성원 상에서 R^{9b} 중에서 독립적으로 선택되는 5개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 3원 내지 7원 비방향족 탄소환, 5원 내지 7원 비방향족 복소환 또는 8원 내지 11원 비방향족 이환계이며;

[0385] A가 CHR¹⁵, NR¹⁶ 또는 C(=O)이고;

[0386] A¹이 -O-, -S-, -N(R⁷)-, -C(R⁸)₂-, -OC(R⁸)₂-, -SC(R⁸)₂- 또는 -N(R⁷)C(R⁸)₂- (여기서, 좌측으로 돌출하는 결합은 -N=C(R²)(R³)에 연결되고, 우측으로 돌출하는 결합은 -C(R⁴)(R⁵)-에 연결된다)이며;

[0387] W가 O 또는 S이고;

[0388] W¹이 OR¹⁸, SR¹⁹, NR²⁰R²¹ 또는 R²²이며;

[0389] R^{1a} 및 R^{1b}가 독립적으로, 임의로 치환된 페닐, 임의로 치환된 나프탈레닐 또는 임의로 치환된 5원 내지 6원 헤테로 방향족 환; 또는 시아노, C₁-C₈ 알킬, C₂-C₈ 알케닐, C₂-C₈ 알키닐, C₁-C₈ 할로알킬, C₂-C₈ 할로알케닐, C₂-C₈ 할로알키닐, C₃-C₈ 사이클로알킬, C₃-C₈ 할로사이클로알킬, C₄-C₁₀ 알킬사이클로알킬, C₄-C₁₀ 사이클로알킬알킬, C₄-C₁₀ 할로사이클로알킬알킬, C₅-C₁₀ 알킬사이클로알킬알킬, C₂-C₈ 알콕시알킬, C₂-C₈ 할로알콕시알킬, C₄-C₁₀ 사이클로알콕시알킬, C₃-C₁₀ 알콕시알콕시알킬, C₂-C₈ 알킬티오알킬, C₂-C₈ 할로알킬티오알킬, C₂-C₈ 알킬설퍼닐알킬, C₂-C₈ 알킬설포닐알킬, C₃-C₈ 알콕시카르보닐알킬, C₃-C₈ 할로알콕시카르보닐알킬, C₂-C₈ 알킬아미노알킬, C₃-C₁₀ 다이알킬아미노알킬, C₂-C₈ 할로알킬아미노알킬, C₄-C₁₀ 사이클로알킬아미노알킬, C₁-C₈ 알콕시, C₁-C₈ 할로알콕시, C₃-C₈ 사이클로알콕시, C₃-C₈ 할로사이클로알콕시, C₄-C₁₀ 사이클로알킬알콕시, C₂-C₈ 알케닐옥시, C₂-C₈ 할로알케닐옥시, C₂-C₈ 알키닐옥시, C₃-C₈ 할로알키닐옥시, C₂-C₈ 알콕시알콕시, C₂-C₈ 알킬카르보닐옥시, C₂-C₈ 할로알킬카르보닐옥시, C₁-C₈ 알킬티오, C₁-C₈ 할로알킬티오, C₃-C₈ 사이클로알킬티오, C₃-C₁₀ 트라이알킬설퍼닐, C₁-C₈ 알킬아미노, C₂-C₈ 다이알킬아미노, C₁-C₈ 할로알킬아미노, C₂-C₈ 할로다이알킬아미노, C₃-C₈ 사이클로알킬아미노, C₂-C₈ 알킬카르보닐아미노, C₂-C₈ 할로알킬카르보닐아미노, C₁-C₈ 알킬설포닐아미노, C₁-C₈ 할로알킬설포닐아미노, 피롤리디닐, 피페리디닐 또는 모르폴리닐이고;

[0390] R²가 수소, 할로젠, 시아노, 아미노, -CHO, -C(=O)OH, -C(=O)NH₂, C₁-C₆ 알킬, C₂-C₆ 알케닐, C₂-C₆ 알키닐, C₁-C₆ 할로알킬, C₂-C₆ 할로알케닐, C₂-C₆ 할로알키닐, C₃-C₆ 사이클로알킬, C₃-C₆ 할로사이클로알킬, C₄-C₆ 알킬사이클로알킬, C₄-C₆ 사이클로알킬알킬, C₄-C₆ 할로사이클로알킬알킬, C₃-C₆ 사이클로알케닐, C₃-C₆ 할로사이클로알케닐, C₂-C₆ 알콕시알킬, C₂-C₆ 알킬티오알킬, C₂-C₆ 알킬설퍼닐알킬, C₂-C₆ 알킬설포닐알킬, C₂-C₆ 알킬아미노알킬, C₃-C₆ 다이알킬아미노알킬, C₂-C₆ 할로알킬아미노알킬, C₂-C₆ 알킬카르보닐, C₂-C₆ 할로알킬카르보닐, C₄-C₆ 사이클로알킬카르보닐, C₂-C₆ 알콕시카르보닐, C₄-C₆ 사이클로알콕시카르보닐, C₅-C₆ 사이클로알킬알콕시카르보닐, C₂-C₆ 알킬아미노카르보닐, C₃-C₆ 다이알킬아미노카르보닐, C₁-C₆ 알콕시, C₁-C₆ 할로알콕시, C₃-C₆ 사이클로알콕시, C₃-C₆ 할로사이클로알콕시, C₂-C₆ 알케닐옥시, C₂-C₆ 할로알케닐옥시, C₂-C₆ 알키닐옥시, C₃-C₆ 할로알키닐옥시, C₂-C₆ 알콕시알콕시, C₂-C₆ 알킬카르보닐옥시, C₂-C₆ 할로알킬카르보닐옥시, C₁-C₆ 알킬티오, C₁-C₆ 할로알킬티오, C₃-C₆ 사이클로알킬티오, C₁-C₆ 알킬아미노, C₂-C₆ 다이알킬아미노, C₁-C₆ 할로알킬아미노, C₂-C₆ 할로다이알킬아미노, C₃-C₆ 사이클로알킬아미노, C₂-C₆ 알킬카르보닐아미노, C₂-C₆ 할로알킬카르보닐아미노, C₁-C₆ 알킬설포닐아미노 또는 C₁-C₆ 할로알킬설포닐아미노이며;

[0391] R³가 수소, 할로젠, 시아노, 하이드록시, C₁-C₃ 알킬, C₁-C₃ 할로알킬, C₁-C₃ 알콕시 또는 C₁-C₃ 할로알콕시이거나;

- [0392] R^2 및 R^3 가 이들이 부착되어 있는 탄소 원자와 함께, 탄소 원자, 및 2개 이하의 O 원자, 2개 이하의 S 원자, 2개 이하의 N 원자 및 2개 이하의 Si 원자 중에서 독립적으로 선택되는 4개 이하의 헤테로 원자 중에서 선택되는 환 구성원 (여기서, 3개 이하의 탄소 원자 환 구성원은 $C(=O)$ 및 $C(=S)$ 중에서 독립적으로 선택되고, 황 원자 환 구성원은 $S(=O)_s(=NR^{17})_f$ 중에서 독립적으로 선택되며, 규소 원자 환 구성원은 $SiR^{10}R^{11}$ 중에서 독립적으로 선택된다)을 포함하고, 탄소 원자 환 구성원 상에서 할로젠, 시아노, C_1-C_2 알킬, C_1-C_2 할로알킬, C_1-C_2 알콕시 및 C_1-C_2 할로알콕시, 및 질소 원자 환 구성원 상에서 시아노, C_1-C_2 알킬 및 C_1-C_2 알콕시 중에서 독립적으로 선택되는 4개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 3원 내지 7원 환을 형성하며;
- [0393] R^4 가 임의로 치환된 페닐, 임의로 치환된 나프탈레닐 또는 임의로 치환된 5원 내지 6원 헤테로 방향족 환; 또는 수소, 할로젠, 시아노, 하이드록시, $-CHO$, C_1-C_4 알킬, C_2-C_4 알케닐, C_2-C_4 알키닐, C_1-C_4 할로알킬, C_2-C_4 할로알케닐, C_2-C_4 할로알키닐, C_2-C_4 알콕시알킬, C_2-C_4 알킬티오알킬, C_2-C_4 알킬설퍼닐알킬, C_2-C_4 알킬설포닐알킬, C_2-C_4 알킬카르보닐, C_2-C_4 할로알킬카르보닐, C_2-C_5 알콕시카르보닐, C_2-C_5 알킬아미노카르보닐, C_3-C_5 다이알킬아미노카르보닐, C_1-C_4 알콕시, C_1-C_4 할로알콕시, C_1-C_4 알킬티오, C_1-C_4 할로알킬티오, C_1-C_4 알킬설퍼닐, C_1-C_4 할로알킬설퍼닐, C_1-C_4 알킬설포닐, C_1-C_4 할로알킬설포닐, C_2-C_4 알킬카르보닐옥시, C_2-C_4 할로알킬카르보닐옥시, C_2-C_5 알콕시카르보닐옥시, C_2-C_5 알킬아미노카르보닐옥시 또는 C_3-C_5 다이알킬아미노카르보닐옥시이고;
- [0394] R^5 가 수소, C_1-C_3 알킬 또는 C_1-C_3 할로알킬이며;
- [0395] 각 R^{6a} 가 독립적으로 C_1-C_4 알킬, C_1-C_4 알케닐, C_1-C_4 할로알킬, C_1-C_4 알콕시, 할로젠, 시아노 또는 하이드록시 이거나;
- [0396] 2개의 R^{6a} 가 함께 C_1-C_4 알킬렌 또는 C_2-C_4 알케닐렌으로서 취해, 가교 이환계 또는 융합 이환계를 형성하거나;
- [0397] 이중 결합으로 결합된 인접한 환 탄소 원자에 부착되는 2개의 R^{6a} 가 함께, C_1-C_4 알킬, C_1-C_4 할로알킬, C_1-C_4 알콕시, C_1-C_4 할로알콕시, 할로젠, 하이드록시, 아미노, 시아노 및 니트로 중에서 선택되는 3개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 $-CH=CH-CH=CH-$ 로서 취해지고;
- [0398] R^{6b} 가 수소, 시아노, C_1-C_3 알킬, C_1-C_3 할로알킬, C_1-C_3 알콕시, C_2-C_3 알킬카르보닐, C_2-C_3 알콕시카르보닐 또는 C_3-C_6 사이클로알킬이며;
- [0399] R^7 이 수소, 시아노, C_1-C_4 알킬, C_1-C_4 할로알킬, C_2-C_4 알콕시알킬, C_2-C_4 알킬티오알킬, C_2-C_4 알킬카르보닐, C_2-C_4 할로알킬카르보닐, C_2-C_4 알콕시카르보닐, C_2-C_4 알킬아미노카르보닐, C_3-C_5 다이알킬아미노카르보닐, C_1-C_4 알킬설포닐 또는 C_1-C_4 할로알킬설포닐이거나;
- [0400] R^3 및 R^7 이 이들이 부착되어 있는 연결 원자와 함께, 연결 원자 이외에도, 탄소 원자, 및 1개 이하의 O 원자, 1개 이하의 S 원자 및 1개 이하의 N 원자 중에서 독립적으로 선택되는 3개 이하의 헤테로 원자 중에서 선택되는 환 구성원을 포함하고, 탄소 원자 환 구성원 상에서 할로젠, 시아노, 니트로, C_1-C_2 알킬, C_1-C_2 할로알킬, C_1-C_2 알콕시 및 C_1-C_2 할로알콕시, 및 질소 원자 환 구성원 상에서 시아노, C_1-C_2 알킬 및 C_1-C_2 알콕시 중에서 독립적으로 선택되는 3개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 5원 내지 7원 부분 포화 환을 형성하고;
- [0401] 각 R^8 이 독립적으로 수소, C_1-C_3 알킬 또는 C_1-C_3 할로알킬이며;
- [0402] 각 R^{9a} 가 독립적으로 할로젠, 하이드록시, 아미노, 시아노, 니트로, C_1-C_6 알킬, C_2-C_6 알케닐, C_2-C_6 알키닐, C_3-C_6 사이클로알킬, C_4-C_{10} 사이클로알킬알킬, C_4-C_{10} 알킬사이클로알킬, C_5-C_{10} 알킬사이클로알킬알킬, C_6-C_{14} 사이클로알킬사이클로알킬, C_1-C_6 할로알킬, C_2-C_6 할로알케닐, C_2-C_6 할로알키닐, C_3-C_6 할로사이클로알킬, C_1-C_4 알콕

시, C₁-C₄ 할로알콕시, C₁-C₄ 알킬티오, C₁-C₄ 알킬설퍼닐, C₁-C₄ 알킬설포닐, C₁-C₄ 할로알킬티오, C₁-C₄ 할로알킬설퍼닐, C₁-C₄ 할로알킬설포닐, C₁-C₄ 알킬아미노, C₂-C₈ 다이알킬아미노, C₃-C₆ 사이클로알킬아미노, C₂-C₄ 알콕시알킬, C₁-C₄ 하이드록시알킬, C₂-C₄ 알킬카르보닐, C₂-C₆ 알콕시카르보닐, C₂-C₆ 알킬카르보닐옥시, C₂-C₆ 알킬카르보닐티오, C₂-C₆ 알킬아미노카르보닐, C₃-C₈ 다이알킬아미노카르보닐 또는 C₃-C₆ 트라이알킬실릴;

[0403] 할로젠, 시아노, C₁-C₂ 알킬, C₁-C₂ 할로알킬, C₁-C₂ 알콕시 및 C₁-C₂ 할로알콕시 중에서 독립적으로 선택되는 3개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 페닐 또는 나프탈레닐;

[0404] 탄소 원자, 및 2개 이하의 O 원자, 2개 이하의 S 원자 및 4개 이하의 N 원자 중에서 독립적으로 선택되는 4개 이하의 헤테로 원자 중에서 선택되는 환 구성원을 포함하고, 탄소 원자 환 구성원 상에서 할로젠, 시아노, C₁-C₂ 알킬, C₁-C₂ 할로알킬, C₁-C₂ 알콕시 및 C₁-C₂ 할로알콕시, 및 질소 원자 환 구성원 상에서 시아노, C₁-C₂ 알킬 및 C₁-C₂ 알콕시 중에서 독립적으로 선택되는 3개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 5원 내지 6원 헤테로 방향족 환; 또는

[0405] 탄소 원자, 및 2개 이하의 O 원자, 2개 이하의 S 원자 및 4개 이하의 N 원자 중에서 독립적으로 선택되는 4개 이하의 헤테로 원자 중에서 선택되는 환 구성원 (여기서, 3개 이하의 탄소 원자 환 구성원은 C(=O) 및 C(=S) 중에서 독립적으로 선택된다)을 포함하고, 탄소 원자 환 구성원 상에서 할로젠, 시아노, C₁-C₂ 알킬, C₁-C₂ 할로알킬, C₁-C₂ 알콕시 및 C₁-C₂ 할로알콕시, 및 질소 원자 환 구성원 상에서 시아노, C₁-C₂ 알킬 및 C₁-C₂ 알콕시 중에서 독립적으로 선택되는 3개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 3원 내지 7원 비방향족 환이고;

[0406] 각 R^{9b}가 독립적으로 수소, 시아노, C₁-C₃ 알킬, C₁-C₃ 할로알킬, C₁-C₃ 알콕시, C₂-C₃ 알킬카르보닐, C₂-C₃ 알콕시카르보닐 또는 C₃-C₆ 사이클로알킬이며;

[0407] 각 R¹⁰ 및 R¹¹이 독립적으로 C₁-C₅ 알킬, C₂-C₅ 알케닐, C₂-C₅ 알키닐, C₃-C₅ 사이클로알킬, C₃-C₆ 할로사이클로알킬, C₄-C₁₀ 사이클로알킬알킬, C₄-C₇ 알킬사이클로알킬, C₅-C₇ 알킬사이클로알킬알킬, C₁-C₅ 할로알킬, C₁-C₅ 알콕시 또는 C₁-C₅ 할로알콕시이고;

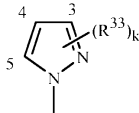
[0408] 각 R¹²가 독립적으로 수소, 할로젠, 하이드록시, 시아노, C₁-C₄ 알킬, C₁-C₄ 할로알킬, C₁-C₄ 알콕시, C₁-C₄ 할로알콕시, C₂-C₄ 알콕시알킬, C₂-C₄ 알킬카르보닐, C₂-C₄ 알콕시카르보닐 또는 C₃-C₆ 사이클로알킬이며;

[0409] 각 R¹³이 독립적으로 수소, 시아노, C₁-C₄ 알킬, C₁-C₄ 할로알킬, C₁-C₄ 알콕시, C₂-C₄ 알킬카르보닐, C₂-C₄ 알콕시카르보닐 또는 C₃-C₆ 사이클로알킬이고;

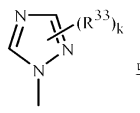
[0410] R¹⁵이 수소, 할로젠, 시아노, 하이드록시, -CHO, C₁-C₄ 알킬, C₂-C₄ 알케닐, C₂-C₄ 알키닐, C₁-C₄ 할로알킬, C₂-C₄ 할로알케닐, C₂-C₄ 할로알키닐, C₂-C₄ 알콕시알킬, C₂-C₄ 알킬티오알킬, C₂-C₄ 알킬설퍼닐알킬, C₂-C₄ 알킬설포닐알킬, C₃-C₅ 알콕시카르보닐알킬, C₂-C₄ 알킬카르보닐, C₂-C₄ 할로알킬카르보닐, C₂-C₅ 알콕시카르보닐, C₂-C₅ 알킬아미노카르보닐, C₃-C₅ 다이알킬아미노카르보닐, C₁-C₄ 알콕시, C₁-C₄ 할로알콕시, C₁-C₄ 알킬티오, C₁-C₄ 할로알킬티오, C₁-C₄ 알킬설퍼닐, C₁-C₄ 할로알킬설퍼닐, C₁-C₄ 알킬설포닐 또는 C₁-C₄ 할로알킬설포닐이되; 단 R¹⁵이 하이드록시이면, R^{1a}가 탄소 원자를 통해 화학식 1의 A에 결합되며;

[0411] R¹⁶이 수소, C₁-C₄ 알킬, C₂-C₄ 알케닐, C₃-C₄ 알키닐, C₁-C₄ 할로알킬, C₂-C₄ 할로알케닐, C₂-C₄ 할로알키닐, C₂-C₄ 알콕시알킬, C₂-C₄ 알킬티오알킬, C₂-C₄ 알킬설퍼닐알킬, C₂-C₄ 알킬설포닐알킬, C₂-C₄ 알킬카르보닐, C₂-C₄ 할로알킬카르보닐, C₂-C₅ 알콕시카르보닐, C₃-C₅ 알콕시카르보닐알킬, C₂-C₅ 알킬아미노카르보닐, C₃-C₅ 다이알킬아미노카르보닐, C₁-C₄ 알킬설포닐 또는 C₁-C₄ 할로알킬설포닐이고;

- [0412] 각 R^{17} 이 독립적으로 수소, 시아노, C_1-C_6 알킬, C_1-C_6 할로알킬, C_3-C_8 사이클로알킬, C_3-C_8 할로사이클로알킬, C_1-C_6 알콕시, C_1-C_6 할로알콕시, C_1-C_6 알킬아미노, C_2-C_8 다이알킬아미노, C_1-C_6 할로알킬아미노 또는 페닐이며;
- [0413] R^{18} 및 R^{19} 이 독립적으로 C_1-C_6 알킬, C_3-C_6 알케닐, C_3-C_6 알키닐, C_1-C_6 할로알킬, C_3-C_6 할로알케닐, C_3-C_6 할로알키닐, C_3-C_6 사이클로알킬, C_3-C_6 할로사이클로알킬, C_4-C_8 알킬사이클로알킬, C_4-C_8 사이클로알킬알킬, C_4-C_8 할로사이클로알킬알킬, C_5-C_8 알킬사이클로알킬알킬, C_2-C_6 알콕시알킬, C_4-C_8 사이클로알콕시알킬, C_3-C_6 알콕시알콕시알킬, C_2-C_6 알킬티오알킬, C_2-C_6 알킬설퍼닐알킬, C_2-C_6 알킬설포닐알킬, C_2-C_6 알킬아미노알킬, C_3-C_6 다이알킬아미노알킬, C_2-C_6 할로알킬아미노알킬, C_4-C_8 사이클로알킬아미노알킬, C_2-C_6 알킬카르보닐, C_2-C_6 할로알킬카르보닐, C_4-C_8 사이클로알킬카르보닐, C_2-C_6 알콕시카르보닐, C_2-C_6 알킬아미노카르보닐, C_3-C_8 다이알킬아미노카르보닐 또는 C_4-C_8 사이클로알킬아미노카르보닐이고;
- [0414] R^{20} 가 수소, 시아노, 하이드록시, 아미노, C_1-C_6 알킬, C_3-C_6 알케닐, C_3-C_6 알키닐, C_1-C_6 할로알킬, C_3-C_6 할로알케닐, C_3-C_6 할로알키닐, C_3-C_6 사이클로알킬, C_4-C_8 사이클로알킬알킬, C_2-C_6 알콕시알킬, C_1-C_6 알콕시, C_1-C_6 할로알콕시, C_1-C_6 알킬설퍼닐, C_1-C_6 할로알킬설퍼닐, C_2-C_6 알킬카르보닐, C_2-C_6 할로알킬카르보닐, C_1-C_6 알킬아미노, C_2-C_8 다이알킬아미노, C_1-C_6 할로알킬아미노 또는 C_2-C_8 할로다이알킬아미노이며;
- [0415] R^{21} 이 수소, C_1-C_6 알킬, C_3-C_6 알케닐, C_3-C_6 알키닐, C_1-C_6 할로알킬 또는 C_3-C_6 사이클로알킬이거나;
- [0416] R^{20} 및 R^{21} 이 함께 $-(CH_2)_4-$, $-(CH_2)_5-$ 또는 $-(CH_2)_2O(CH_2)_2-$ 로서 취해지고;
- [0417] R^{22} 가 수소, 할로젠, 시아노, C_1-C_4 알킬, C_1-C_4 할로알킬, C_2-C_4 알콕시알킬, C_2-C_4 알킬카르보닐, C_2-C_4 알콕시카르보닐, C_2-C_3 알킬아미노카르보닐 또는 C_3-C_6 다이알킬아미노카르보닐이며;
- [0418] 각 R^{23} 가 탄소 원자 환 구성원 상에서 R^{23a} 중에서 독립적으로 선택되고, 질소 원자 환 구성원 상에서 R^{23b} 중에서 독립적으로 선택되며;
- [0419] R^{23a} 가 할로젠, 하이드록시, 시아노, C_1-C_6 알킬, C_1-C_6 할로알킬, C_1-C_4 알콕시, C_1-C_4 할로알콕시, C_2-C_6 알콕시알킬, C_2-C_4 알킬카르보닐, C_2-C_6 알콕시카르보닐 또는 C_3-C_6 사이클로알킬이고;
- [0420] R^{23b} 가 시아노, C_1-C_3 알킬, C_1-C_3 할로알킬, C_1-C_3 알콕시, C_2-C_3 알킬카르보닐, C_2-C_3 알콕시카르보닐 또는 C_3-C_6 사이클로알킬이며;
- [0421] 각 R^{29a} 가 독립적으로 수소, 할로젠, C_1-C_3 알킬 또는 C_1-C_3 할로알킬이고;
- [0422] 각 R^{30a} 가 독립적으로 수소 또는 C_1-C_3 알킬이며;
- [0423] n 이 0, 1 또는 2이고;
- [0424] q 가 0, 1 또는 2이며;
- [0425] s 및 f 가 $S(=O)_s(=NR^{17})_f$ 의 각 경우에, 독립적으로 0, 1 또는 2이되, 단 s 와 f 의 합계가 0, 1 또는 2인, 발명의 요약에 기재된 실시 형태 AA의 화합물 또는 화학식 1의 화합물
- [0426] (단, Z 가 Z^1-13 이면, Q 는 비치환된 페닐 이외의 것이다).
- [0427] 실시 형태 A1.
- [0428] E가 E-1이고;

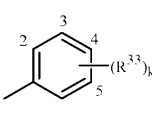
- [0429] X가 X-1, X-2, X-3, X-4 또는 X-5이며;
- [0430] G가 탄소 원자 환 구성원 상에서 R^{29a} 및 질소 원자 환 구성원 상에서 R^{30a} 중에서 독립적으로 선택되는 2개 이하의 치환기로 임의로 치환되는 5원 복소환이고;
- [0431] J가 증거 4에 나타난 J-1 내지 J-83 중에서 선택되는 실시 형태 A의 화합물.
- [0432] 실시 형태 A2.
- [0433] X가 X-1, X-2 또는 X-3이고;
- [0434] G가 증거 3에 나타난 G-1 내지 G-48 중에서 선택되며;
- [0435] 각 R^{29a} 가 H이고;
- [0436] R^{30a} 가 독립적으로 수소 또는 메틸이며;
- [0437] J가 J-1, J-2, J-3, J-4, J-5, J-7, J-8, J-9, J-10, J-11, J-12, J-14, J-15, J-16, J-20, J-24, J-25, J-26, J-29, J-30, J-37, J-38, J-45 및 J-69로 구성되는 그룹 중에서 선택되고;
- [0438] Q가 Q-1 내지 Q-102 중에서 선택되는 실시 형태 A1의 화합물.
- [0439] 실시 형태 A3.
- [0440] R^{1a} 가 U-1, U-20 또는 U-50이고;
- [0441] 각 R^{33a} 가 독립적으로 할로젠, C_1-C_3 알킬, C_1-C_3 할로알킬 또는 C_2-C_3 알콕시알킬이며;
- [0442] k가 0, 1, 2 또는 3이고;
- [0443] A가 CHR^{15} 이며;
- [0444] R^{15} 가 H이고;
- [0445] W가 0이며;
- [0446] X가 X-1이고;
- [0447] n이 0이며;
- [0448] G가 G-1이고;
- [0449] J가 J-29이며;
- [0450] x가 0이고;
- [0451] 각 R^{9a} 가 독립적으로 할로젠, C_1-C_6 알킬, C_1-C_6 할로알킬 또는 C_1-C_4 알콕시이며;
- [0452] p가 0, 1, 2 또는 3인 실시 형태 A2의 화합물.
- [0453] 실시 형태 A3a.
- [0454] R^{1a} 가
- 

U-1



U-20

또는



U-50
- [0455] 이고;
- [0456] 이고;

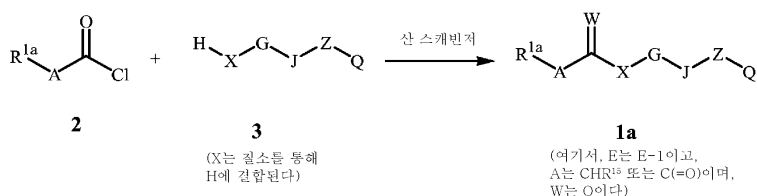
- [0457] 각 R^{33} 가 독립적으로 할로젠, C_1-C_3 알킬, C_1-C_3 할로알킬 또는 C_2-C_3 알콕시알킬이며;
- [0458] k가 0, 1, 2 또는 3이고;
- [0459] A가 CHR^{15} 이며;
- [0460] R^{15} 이 H이고;
- [0461] W가 O이며;
- [0462] X가 X-1이고;
- [0463] n이 0이며;
- [0464] G가 G-1이고;
- [0465] J가 J-29이며;
- [0466] x가 0이고;
- [0467] 각 R^{9a} 가 독립적으로 할로젠, C_1-C_6 알킬, C_1-C_6 할로알킬 또는 C_1-C_4 알콕시이며;
- [0468] p가 0, 1, 2 또는 3이다.
- [0469] 실시 형태 A4.
- [0470] Z가 Z^1-1 , Z^1-4 , Z^1-14 , Z^1-16 , Z^1-18 , Z-1, Z-2 및 Z-3 중에서 선택되고;
- [0471] Q가 Q-45인 실시 형태 A3의 화합물.
- [0472] 실시 형태 A5.
- [0473] Z가 Z^1-1 , Z^1-16 , Z^1-18 , Z-1 및 Z-3 중에서 선택되는 실시 형태 A4의 화합물.
- [0474] 실시 형태 A6.
- [0475] Z가 Z^1-1 , Z^1-16 또는 Z-1인 실시 형태 A5의 화합물.
- [0476] 실시 형태 A7.
- [0477] R^{12} 가 수소인 실시 형태 A6의 화합물.
- [0478] 구체적인 실시 형태는 하기로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 화학식 1의 화합물을 포함한다:
- [0479] 1-[4-[4-[5-[2-[(2,6-다이플루오로페녹시)에틸]-4,5-다이하이드로-3-아이속사졸릴]-2-티아졸릴]-1-피페리디닐]-2-[5-메틸-3-(트라이플루오로메틸)-1H-피라졸-1-일]에탄온,
- [0480] 1-[4-[4-[5-[(2,6-다이플루오로페녹시)메틸]-4,5-다이하이드로-3-아이속사졸릴]-2-티아졸릴]-1-피페리디닐]-2-[5-메틸-3-(트라이플루오로메틸)-1H-피라졸-1-일]에탄온 및
- [0481] 1-[4-[4-[5-[(2,6-다이플루오로-4-메톡시페녹시)메틸]-4,5-다이하이드로-3-아이속사졸릴]-2-티아졸릴]-1-피페리디닐]-2-[5-메틸-3-(트라이플루오로메틸)-1H-피라졸-1-일]에탄온.
- [0482] 본 발명은 화학식 1의 화합물 (이의 모든 입체 이성질체, N-옥사이드, 및 염 포함), 및 적어도 하나의 다른 살진균제를 포함하는 살진균제 조성물을 제공한다. 이러한 조성물의 실시 형태로서 주목해야 할 것은 상술한 임의의 화합물 실시 형태에 대응하는 화합물을 포함하는 조성물이다.
- [0483] 본 발명은 화학식 1의 화합물 (이의 모든 입체 이성질체, N-옥사이드, 및 염 포함) (즉, 살진균적 유효량으로), 및 계면활성제, 고체 희석제 및 액체 희석제로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 적어도 하나의 추가 성분을 포함하는 살진균제 조성물을 제공한다. 이러한 조성물의 실시 형태로서 주목해야 할 것은 상술한 임의의 화합물 실시 형태에 대응하는 화합물을 포함하는 조성물이다.
- [0484] 본 발명은 살진균적 유효량의 화학식 1의 화합물 (이의 모든 입체 이성질체, N-옥사이드, 또는 염 포함)을 식물

또는 이의 부분, 또는 식물 종자에 적용하는 것을 포함하는, 진균 식물 병원체에 의한 식물병을 방제하는 방법을 제공한다. 이러한 방법의 실시 형태로서 주목해야 할 것은 상술한 임의의 화합물 실시 형태에 대응하는 화합물의 살진균적 유효량을 적용하는 것을 포함하는 방법이다. 화합물이 본 발명의 조성물로서 적용되는 실시 형태에 특히 주목해야 한다.

[0485] 반응 도식 1 내지 27에 기재된 하나 이상의 하기 방법 및 변형법이 화학식 1의 화합물을 제조하는데 사용될 수 있다. 하기 E, X, G, J, Z, Z¹, Q, W, W¹, A, A¹, R^{1a}, R^{1b}, R², R³, R⁴, R⁵, R⁷, R⁸, R¹², R¹³, R¹⁶, R¹⁹, R²⁰, R²¹ 및 R²² (화학식 1 내지 50의 화합물에 있어서)의 정의는 달리 언급하지 않는 한, 발명의 요약에서 상기에 정의한 바와 같다. 화학식 1a 내지 1i의 화합물은 다양한 화학식 1의 화합물의 서브세트이고, 화학식 1a 내지 1i에 대한 모든 치환기는 화학식 1에 대하여 상기에 정의한 바와 같다.

[0486] 반응 도식 1에 나타난 바와 같이, W가 O인 화학식 1a (E가 E-1이고, A가 CHR¹⁵ 또는 C=O인 화학식 1)의 화합물은 화학식 2의 산 염화물을 산 스캐빈저의 존재하에 화학식 3의 아민과 커플링하여 제조될 수 있다. 전형적인 산 스캐빈저로는 아민 염기, 예컨대 트라이에틸아민, N,N-다이아이소프로필에틸아민 및 피리딘을 들 수 있다. 다른 스캐빈저로는 수산화물, 예컨대 수산화나트륨 및 수산화칼륨 및 탄산염, 예컨대 탄산나트륨 및 탄산칼륨을 들 수 있다. 경우에 따라서는, 폴리머에 지지된 산 스캐빈저, 예컨대 폴리머에 결합된 N,N-다이아이소프로필에틸아민 및 폴리머에 결합된 4-(다이메틸아미노)피리딘을 사용하는 것이 유용하다. 당업자는 화학식 3의 아민이 또 하나의 NH 작용기를 포함하는 경우에 혼합물이 형성될 수 있으며, 원하는 이성질체를 분리하는데 표준 분리 방법이 사용될 수 있음을 인지할 것이다.

[0487] 반응 도식 1

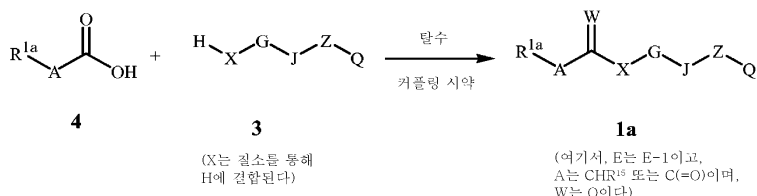


[0488]

[0489] 적어도 2 당량의 산 스캐빈저가 존재한다면, 화학식 3의 아민의 산성염도 이러한 반응에 사용될 수 있다. 아민과 염을 형성하는데 사용되는 전형적인 산으로는 염산, 옥살산 및 트라이플루오로아세트산을 들 수 있다. 후속 단계에서, W가 O인 화학식 1a의 아마이드는 다양한 표준 티아팅 시약 (standard thiating reagent), 예컨대 오황화인 또는 2,4-비스(4-메톡시페닐)-1,3-다이티아-2,4-다이포스페테인-2,4-다이설파이드 (로손 시약 (Lawesson's reagent))를 사용하여, W가 S인 화학식 1a의 티오아מיד로 전환될 수 있다.

[0490] W가 O인 화학식 1a의 화합물을 제조하기 위한 대체 절차는 반응 도식 2에 나타나있으며, 탈수 커플링 시약, 예컨대 다이사이클로헥실카르보다이이미드 (DCC), 1-(3-다이메틸아미노프로필)-3-에틸카르보다이이미드 하이드로클로라이드 (EDC) 또는 O-벤조트라이아졸-1-일-N,N,N',N'-테트라메틸우로늄 헥사플루오로포스페이트 (HBTU)의 존재하에서의 화학식 4의 산과 화학식 3의 아민 (또는 이의 산성염)의 커플링을 포함한다. 반복해서 말하지만, 폴리머에 지지된 시약, 예컨대 폴리머에 결합된 사이클로헥실카르보다이이미드가 유용하다. 전형적으로 이들 반응은 트라이에틸아민 또는 N,N-다이아이소프로필에틸아민과 같은 염기의 존재 하에 다이클로로메탄 또는 아세토니트릴과 같은 용매에서 0 내지 40℃에서 실행된다. 당업자는 화학식 3의 아민이 또 하나의 NH 작용기를 포함하는 경우에 혼합물이 형성될 수 있으며, 원하는 이성질체를 분리하는데 표준 분리 방법이 사용될 수 있음을 인지할 것이다.

[0491] 반응 도식 2



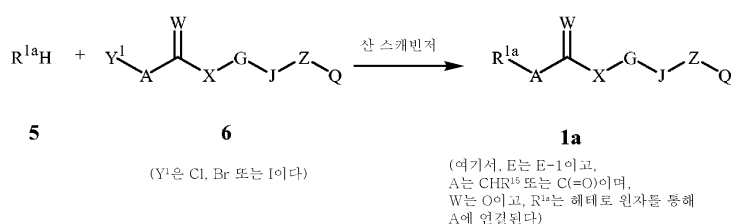
[0492]

[0493] 화학식 4의 산은 공지되어 있거나, 당업자에게 공지된 방법에 의해 제조될 수 있다. 예를 들어, R^{1a}가 헤테로 원자를 통해 아세트산 잔기에 연결되어 있는 R^{1a}CH₂COOH는 염기의 존재하에 대응하는 R^{1a}H를 할로아세트산 또는 에스테르와 반응시켜 제조될 수 있으며; 예를 들어, 미국 특허 제4,084,955호를 참조한다. R^{1a}가 탄소 원자를 통해 아세트산 잔기에 연결되어 있는 R^{1a}CH₂COOH는 대응하는 R^{1a}CH₂-할로젠 화합물로부터 할로젠을 시안화물로 치환한 후에 가수분해하여 제조될 수 있거나 (예를 들어, 문헌 [K. Adachi, *Yuki Gosei Kagaku Kyokaishi* 1969, 27, 875-876]을 참조함); R^{1a}C(=O)CH₃로부터 빌게로트-킨들러 (Willgerodt-Kindler) 반응에 의해 제조될 수 있거나 (예를 들어, 문헌 [H. R. Darabi et al., *Tetrahedron Letters* 1999, 40, 7549-7552] 및 문헌 [M. M. Alam and S. R. Adapa, *Synthetic Communications* 2003, 33, 59-63] 및 상기 문헌에 인용된 참고문헌을 참조함); R^{1a}Br 또는 R^{1a}I로부터 *tert*-부틸 아세테이트 또는 말론산다이에틸과의 팔라듐 촉매 크로스커플링 후에, 에스테르 가수분해하여 제조될 수 있다 (예를 들어, 문헌 [W. A. Moradi and S. L. Buchwald, *J. Am. Chem. Soc.* 2001, 123, 7996-8002] 및 문헌 [J. F. Hartwig et al., *J. Am. Chem. Soc.* 2002, 124, 12557-12565]을 참조함).

[0494] 합성 문헌이 다수의 아미드 생성 방법을 포함하고 있기 때문에, 반응 도식 1 및 2의 합성 절차는 화학식 1의 화합물의 제조에 유용한 다양한 방법 중 간단한 대표적인 예이다. 당업자는 또한 화학식 2의 산 염화물이 다수의 공지된 방법에 의해 화학식 4의 산으로부터 제조될 수 있음을 인식한다.

[0495] R^{1a}가 헤테로 원자를 통해 A에 연결되어 있는 화학식 1a (E가 E-1이고, A가 CHR¹⁵ 또는 C=O이며, W가 O인 화학식 1)의 특정한 화합물은 반응 도식 3에 나타난 바와 같이, 화학식 5의 화합물과 화학식 6의 할로아세트아미드 또는 염화옥살릴의 반응에 의해 제조될 수 있다. 상기 반응은 용매, 예컨대 테트라하이드로푸란, *N,N*-다이메틸포름아미드 또는 아세트니트릴 중에서 약 0 내지 80°C에서 염기, 예컨대 수소화나트륨, 탄산칼륨 또는 트라이에틸아민의 존재하에 행해진다. 화학식 6의 할로아세트아미드는 각각, 반응 도식 1 및 2에 기재된 아미드 생성 반응과 유사하게, 화학식 3의 아민과 α-할로 카르복실산 할라이드 또는 α-할로 카르복실산 또는 이의 무수물의 반응에 의해 제조될 수 있다. 화학식 6의 염화옥살릴 (즉, A는 C(=O)임)은 당업자에게 공지된 바와 같이, 화학식 3의 아민과 염화옥살릴의 반응에 의해 제조될 수 있다.

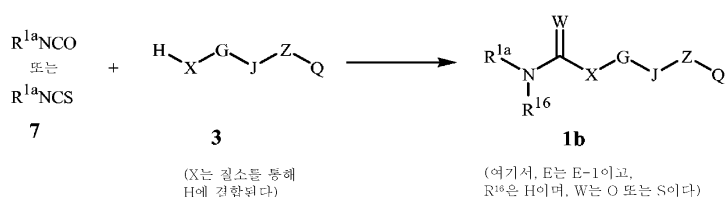
[0496] 반응 도식 3



[0497]

[0498] R¹⁶이 H이고, W가 O 또는 S인 화학식 1b (E가 E-1이고, A가 NR¹⁶인 화학식 1)의 화합물은 반응 도식 4에 나타난 바와 같이, 각각 화학식 3의 아민과 화학식 7의 아이소시아네이트 또는 아이소티오시아네이트의 반응에 의해 제조될 수 있다. 이러한 반응은 전형적으로 주위 온도에서 비프로톤성 용매, 예컨대 다이클로로메탄 또는 아세트니트릴 중에서 행해진다.

[0499] 반응 도식 4

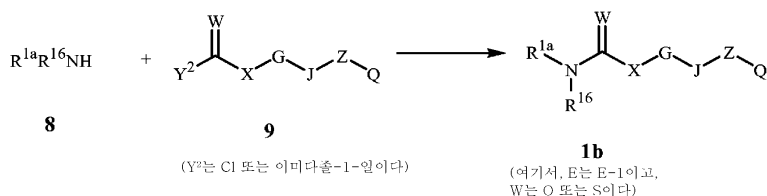


[0500]

[0501] 화학식 1b의 화합물은 또한 반응 도식 5에 나타난 바와 같이, 화학식 8의 아민과 화학식 9의 카르바모일 또는

티오펜아모일 클로라이드 또는 이미다졸의 반응에 의해 제조될 수 있다. Y^2 가 염소일 때, 이 반응은 전형적으로 산 스캐빈저의 존재하에 행해진다. 전형적인 산 스캐빈저로는 아민 염기, 예컨대 트라이에틸아민, *N,N*-다이아이소프로필에틸아민 및 피리딘을 들 수 있다. 다른 스캐빈저로는 수산화물, 예컨대 수산화나트륨 및 수산화칼륨 및 탄산염, 예컨대 탄산나트륨 및 탄산칼륨을 들 수 있다. 당업자에게 공지된 일반적인 방법에 따라, 화학식 9 (여기서, Y^2 는 Cl이다)의 카르바모일 또는 티오펜아모일 클로라이드는 각각 화학식 3의 아민으로부터 포스젠 또는 티오포스젠, 또는 이들의 등가물로 처리하여 제조될 수 있는 반면에, 화학식 9 (여기서, Y^2 는 이미다졸-1-일이다)의 카르바모일 또는 티오펜아모일 이미다졸은 각각, 화학식 3의 아민으로부터 1,1'-카르보닐다이이미다졸 또는 1,1'-티오펜아모일다이이미다졸로 처리하여 제조될 수 있다.

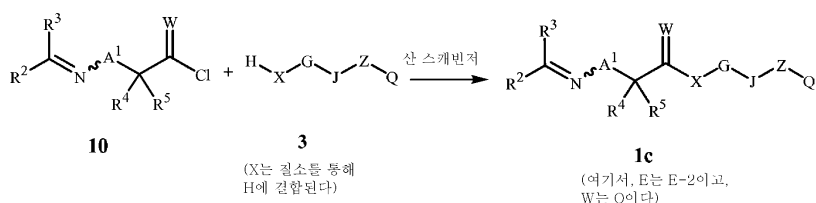
[0502] 반응 도식 5



[0503]

반응 도식 6에 나타난 바와 같이, W가 O인 화학식 1c (E가 E-2인 화학식 1)의 화합물은 반응 도식 1에 기재된 방법과 유사하게, 화학식 10의 산 염화물을 산 스캐빈저의 존재하에 화학식 3의 아민과 커플링하여 제조될 수 있다. 후속 단계에서, W가 O인 화학식 1c의 화합물은 다양한 표준 티아팅 시약, 예컨대 오황화인 또는 2,4-비스(4-메톡시페닐)-1,3-다이티아-2,4-다이포스페테인-2,4-다이설파이드 (로손 시약)를 사용하여, W가 S인 대응하는 티오아미드로 전환된다.

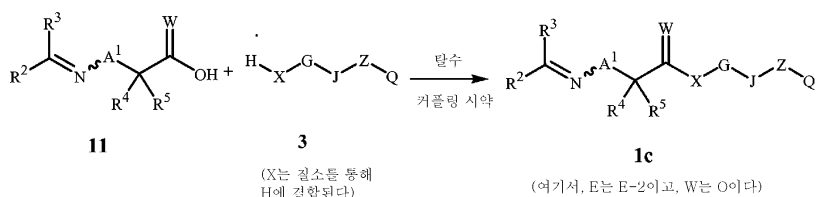
[0505] 반응 도식 6



[0506]

화학식 1c (E가 E-2이고, W가 O인 화학식 1)의 화합물을 제조하기 위한 대체 절차는 반응 도식 7에 나타나있으며, 반응 도식 2에 기재된 방법과 유사하게, 탈수 커플링 시약의 존재하에서의 화학식 11의 산과 화학식 3의 아민 (또는 이의 산성염)의 커플링을 포함한다. 화학식 11의 산은 공지되어 있거나, 당업자에게 공지된 방법에 의해 제조될 수 있다. 주요 참고문헌에 관해서는 예를 들어, 문헌 [Schumann, Paquette et al., *J. Med. & Pharm. Chem.* 1962, 5, 464-77; Van Dijk, Jan et al., *J. Med. Chem.* 1977, 20(9), 1199-206; A. Balsamo et al., *J. Med. Chem.* 1989, 32, 1398-1401] 및 상기 문헌에 인용된 참고문헌; 및 미국 특허 제4,584,014호를 참조한다.

[0508] 반응 도식 7



[0509]

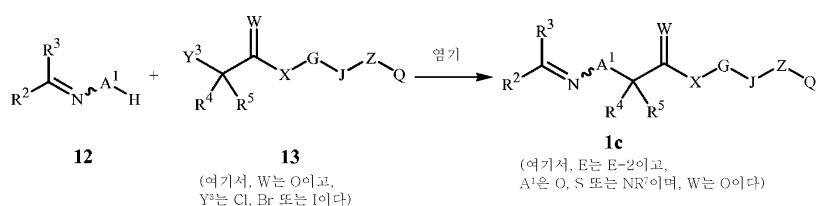
반응 도식 6과 유사하게, W가 O인 화학식 1c의 화합물은 다양한 표준 티아팅 시약, 예컨대 오황화인 또는 2,4-비스(4-메톡시페닐)-1,3-다이티아-2,4-다이포스페테인-2,4-다이설파이드 (로손 시약)를 사용하여, W가 S인 대응하는 티오아미드로 전환된다.

화학식 10의 산 염화물은 다수의 공지된 방법에 의해 화학식 11의 산으로부터 제조될 수 있다.

[0512] 합성 문헌이 다수의 아미드 생성 방법을 포함하고 있기 때문에, 반응 도식 6 및 7의 방법은 화학식 1의 화합물의 제조에 유용한 다양한 방법 중 간단한 대표적인 예이다.

[0513] A¹이 -O-, -S- 및 -N(R⁷)-이고, W가 O인 화학식 1c (E가 E-2인 화학식 1)의 화합물은 반응 도식 8에 나타낸 바와 같이, 화학식 12의 화합물과 화학식 13 (여기서, Y³는 Cl, Br 또는 I이다)의 할로아세트아미드의 반응에 의해 제조될 수 있다. 상기 반응은 용매, 예컨대 테트라하이드로푸란, N,N-다이메틸포름아미드 또는 아세토니트릴 중에서 전형적으로 약 0 내지 80℃에서 염기, 예컨대 수소화나트륨 또는 탄산칼륨의 존재하에 행해진다. 화학식 12의 이민, 옥심 및 하이드라존은 공지되어 있거나, 당업계에 공지된 방법에 의해 제조될 수 있으며; 예를 들어, 문헌 [S. Dayagi et al., in *The Chemistry of the Carbon-Nitrogen Double Bond*, ed. S. Patei, Interscience, New York 1970; S.R. Sandler et al., *Organic Functional Group Preparations*, Academic Press, New York 1972, 3, 372 및 G. Hilgetag et al., *Preparative Organic Chemistry*, John Wiley & Sons, New York 1972, 504-515]을 참조한다.

[0514] 반응 도식 8

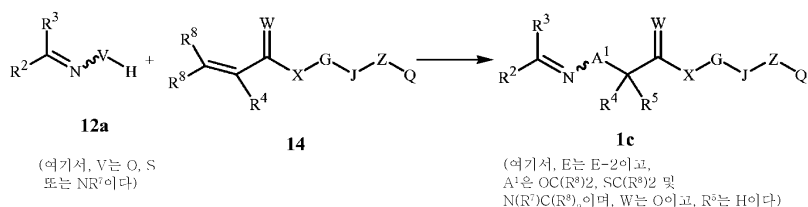


[0515]

[0516] 화학식 13의 할로아세트아미드 화합물은 각각, 반응 도식 1 및 2에 기재된 아미드 생성 반응과 유사하게, 화학식 3의 아민과 α-할로 카르복실산 할라이드 또는 α-할로 카르복실산 또는 이의 무수물의 반응에 의해 제조될 수 있다.

[0517] A¹이 -OC(R⁸)₂-, -SC(R⁸)₂- 또는 -N(R⁷)C(R⁸)₂-이고, R⁵가 H인 화학식 1c (E가 E-2인 화학식 1)의 화합물은 화학식 12a의 V 및 화학식 14의 C(R⁸)₂가 화학식 1c의 A¹을 형성하는 반응 도식 9에 나타낸 바와 같이, 화학식 12a의 화합물과 화학식 14의 α,β-불포화 아미드의 염기 촉매 축합 반응에 의해 제조될 수 있다. 상기 반응은 용매, 예컨대 테트라하이드로푸란, N,N-다이메틸포름아미드, 에탄올 또는 아세토니트릴 중에서 전형적으로 약 0 내지 80℃에서 염기, 예컨대 수산화나트륨 또는 수산화칼륨, 수소화나트륨 또는 탄산칼륨의 존재하에 행해진다. 화학식 14의 α,β-불포화 아미드는 반응 도식 1 및 2에 기재된 방법과 유사한 방법에 의해, 대응하는 α,β-불포화산 또는 산 염화물과 화학식 3의 아민의 커플링에 의해 제조될 수 있다.

[0518] 반응 도식 9

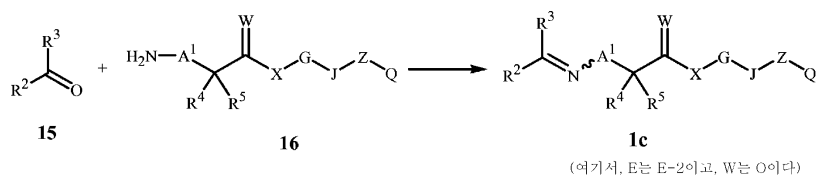


[0519]

[0520] 화학식 1c (E가 E-2인 화학식 1)의 화합물은 또한 반응 도식 10에 예시된 바와 같이, 화학식 15의 화합물을 화학식 16의 화합물과 반응시켜 제조될 수 있다. 상기 반응은 용매, 예컨대 에탄올, 테트라하이드로푸란 또는 물, 및 임의로 산촉매, 예컨대 아세트산, 염산 또는 황산의 존재하에 행해질 수 있다. 또한, 화학식 16의 산성 염은 바람직하게는 적어도 1 몰 당량의 산 스캐빈저, 예컨대 피리딘 또는 트라이에틸아민의 존재하에 반응 도식 10의 방법에 사용될 수 있다. 아민과 염을 형성하는데 사용되는 전형적인 산으로는 염산, 옥살산 및 트라이플루오로아세트산을 들 수 있다. 아민과 카르보닐 화합물의 반응은 공지되어 있으며, 예를 들어, 문헌 [S. Dayagi et al. in *The Chemistry of the Carbon-Nitrogen Double Bond*, ed. S. Patei, Interscience, New York 1970; S. R. Sandler et al., *Organic Functional Group Preparations*, Academic Press, New York 1972, 3, 372 및 G. Hilgetag et al., *Preparative Organic Chemistry*, John Wiley & Sons, New York 1972, 504-515]을 참조한다. 화학식 15의 화합물은 공지되어 있거나, 당업자에게 공지된 방법에 의해 제조될 수 있다.

화학식 16의 화합물은 직접 제조될 수 있거나, 화학식 16의 대응하는 *N*-보호된 화합물의 탈보호에 의해 제조될 수 있다. 화학식 16의 *N*-보호된 화합물은 반응 도식 1, 2, 3, 및 4에 대하여 이미 기재된 것과 유사한 방법에 의해 제조될 수 있다. 적절한 *N*-보호된 질소의 선택 및 용도는 당업자에게 명백할 것이며; 대표적인 예에 관해서는 문헌 [T. W. Greene and P. G. M. Wuts, *Protective Groups in Organic Synthesis*, 2nd ed.; Wiley: New York, 1991]을 참조한다.

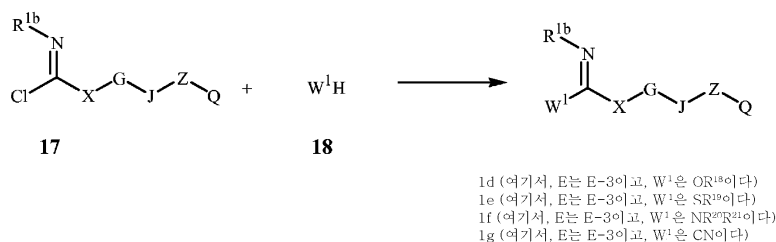
[0521] 반응 도식 10



[0522]

반응 도식 11에 나타난 바와 같이, 화학식 1d 내지 1g (E가 E-3이고, W¹이 OR¹⁸, SR¹⁹, NR²⁰R²¹ 또는 CN인 화학식 1)의 특정 화합물은 화학식 17의 이미도일 클로라이드를 산 스캐빈저의 존재하에 화학식 18의 화합물과 반응시켜 제조될 수 있다. 적절한 산 스캐빈저로는 아민 염기, 예컨대 트라이에틸아민, *N,N*-다이아이소프로필에틸아민 및 피리딘, 수산화물, 예컨대 수산화나트륨 및 수산화칼륨, 및 탄산염, 예컨대 탄산나트륨 및 탄산칼륨을 들 수 있으나, 이들에 한정되지 않는다. 대안적으로, 화학식 17 및 18의 화합물은 산 스캐빈저의 부재하에 접촉되어, 대응하는 HCl 염으로서 화학식 1d 내지 1f의 화합물을 제공할 수 있으며, 이들은 또한 본 발명의 화합물이다. 필요에 따라, HCl 염은 표준 방법에 의해 유리 염기로 되어, 화학식 1d 내지 1f의 화합물을 얻을 수 있다. 상기 반응이 산 스캐빈저의 존재하에 또는 부재하에 행해지는지의 여부에 관계없이, 전형적으로 적절한 유기 용매 중에서 약 -20 내지 100℃의 온도에서 행해진다. 이러한 방법에 적합한 용매를 형성하는데 다양한 용매, 예를 들어 아세트니트릴과 같은 니트릴, 테트라하이드로푸란과 같은 에테르, 및 다이클로로메탄과 같은 할로젠화 탄화수소, 및 *N,N*-다이메틸포름아미드와 같은 아미드, 및 이들의 혼합물을 사용할 수 있다. 화학식 1d 내지 1g의 화합물은 일반적으로 각각, 아이소우레아, 아이소티오우레아, 구아니딘 및 시아노아미딘으로 분류될 수 있다. 이런 화합물 부류에 대한 주요 참고문헌에 관해서는 문헌 [J. Lon Mathias, *Organic Preparations and Procedures International* 1980, 12(5), 309-326; *Comprehensive Organic Chemistry*, vol. 2, I. O. Sutherland, Ed., Pergamon Press, Oxford; *Rodd's Chemistry of Carbon Compounds*, vol. 1C, Elsevier, New York; A. R. Katritzky et al., *J. Organic Chem.* 2004, 69, 309-313]을 참조한다. 당업자는 특정한 화학식 1d, 1f 및 1g의 화합물이 대응하는 화학식 1e의 화합물로부터 적절한 화학식 18의 화합물로 처리하여 제조될 수 있음을 인지할 것이다. 예를 들어, 티우로늄 염의 제조 및 이의 구아니딘으로의 전환은 문헌 [C. R. Rasmussen et al., *Synthesis* 1988, 6, 460-466]에 기재되어 있다. 화학식 17의 이미도일 클로라이드는 화학식 1b (E가 E-1이고, A가 NH인 화학식 1)의 화합물로부터 용매, 예컨대 다이클로로메탄 중에서 염화티오닐, 옥시염화인 또는 오염화인으로 처리하여 제조될 수 있다. 전형적인 반응 조건에 관해서는 예를 들어, 문헌 [W. Zielinski et al., *Heterocycles* 1998, 48, 319-327] 또는 국제 특허 출원 공개 제W0/2009/094445호를 참조한다. 다수의 화학식 18의 화합물은 시판 중이며, 화학 분야에서 충분히 입증된 방법에 의해 제조될 수 있다.

[0524] 반응 도식 11

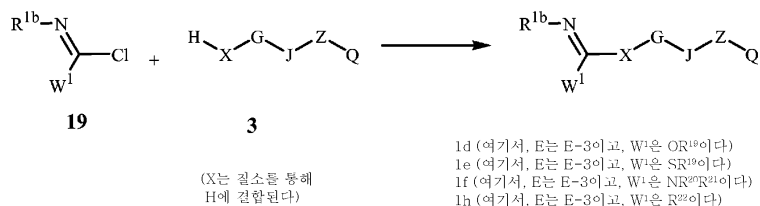


[0525]

반응 도식 12에 나타난 대체 절차에 있어서, 특정한 화학식 1d 내지 1f 및 화학식 1h (E가 E-3이고, W¹이 CR²²인 화학식 1)의 화합물은 반응 도식 11에 기재된 것과 유사한 조건을 이용하여 화학식 3의 아민을 화학식 19의 이미도일 클로라이드와 반응시켜 제조될 수 있다. 다수의 화학식 19의 이미도일 클로라이드는 당업계에 개시된 방법에 의해 제조될 수 있으며, 예를 들어, 문헌 [R. Bonnett in *The Chemistry of the Carbon-Nitrogen*

Double Bond, S. Patei, Ed., Interscience Publishers], 및 상기 문헌에 인용된 참고문헌을 참조한다. 일부의 화학식 19의 이미도일 클로라이드는 시판 중이며 (예를 들어, R^{1b}가 페닐, 치환된 페닐 또는 저급 알킬이고, W¹이 OMe, SMe, 또는 N(Me)₂인 화학식 19가 시판될 수 있음), 화학 분야에서 입증된 방법에 의해 제조될 수 있다.

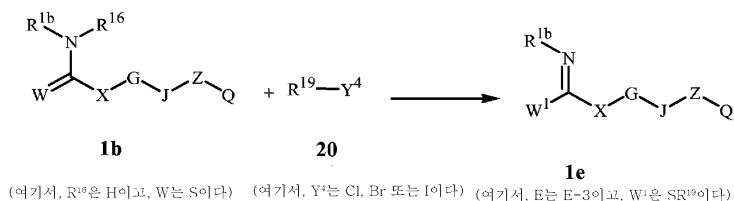
[0527] 반응 도식 12



[0528]

[0529] 반응 도식 11 및 12는 단지 두 가지의 화학식 1e의 화합물의 제조 방법을 나타낸다. 반응 도식 13에 나타낸 또 하나의 방법에 있어서, 화학식 1e의 화합물은 화학식 1b (E가 E-1이고, A가 NH이며, W가 S인 화학식 1)의 티오우레아를 화학식 20 (여기서, Y⁴는 친핵 반응 이탈기, 예컨대 할라이드 (예를 들어, Cl, Br, I) 또는 설포네이트 (예를 들어, 메실레이트, 트라이플레이트, *p*-톨루엔설포네이트) 등이다)의 알킬화제 또는 아실화제와 반응시켜 제조될 수 있다. 상기 방법은 약 0 내지 100℃의 온도에서 산 스캐빈저 및 적절한 유기 용매의 존재하에 행해질 수 있다. 적절한 용매로는 예를 들어, 다이클로로메탄, 테트라하이드로푸란, 아세트니트릴, *N,N*-다이메틸포름아미드, 및 이들의 혼합물을 들 수 있다. 적절한 산 스캐빈저는 예를 들어, 아민 염기, 예컨대 트라이에틸아민, *N,N*-다이아이소프로필에틸아민 및 피리딘, 수산화물, 예컨대 수산화나트륨 및 수산화칼륨 및 탄산염, 예컨대 탄산나트륨 및 탄산칼륨을 포함한다. 대안적으로, 화학식 1b 및 20의 화합물은 산 스캐빈저의 부재하에 접촉되어, 대응하는 화학식 1e의 아이소티우로늄 염을 얻을 수 있으며, 이는 또한 본 발명의 화합물이다. 후속 반응에서, 염은 당업계에 기술된 표준 방법을 이용하여 유리 염기로 되어, 화학식 1e의 화합물을 얻을 수 있다. 티우로늄 염의 제조 및 이의 구아니딘으로의 전환을 예시하는 일례에 관해서는, 문헌 [C. R. Rasmussen et al., *Synthesis* 1988, 6, 460-466] 또는 국제 특허 출원 공개 제W0/2009/094445호를 참조한다. 다수의 화학식 20의 화합물은 공지되어 있으며, 당업계에 개시된 일반적인 방법에 의해 제조될 수 있다.

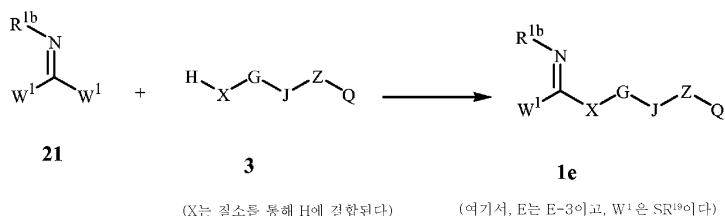
[0530] 반응 도식 13



[0531]

[0532] 화학식 1e의 화합물은 또한 반응 도식 14에 예시된 바와 같이, 화학식 3의 아민을 화학식 21의 다이티오카르바미산과 반응시켜 제조될 수 있다. 반응 도식 14의 반응은 전형적으로 적절한 용매 중에서 약 0 내지 100℃의 온도에서 행해진다. 적절한 용매의 예로는 아세트니트릴, 테트라하이드로푸란, 다이클로로메탄, *N,N*-다이메틸포름아미드, 및 이들의 혼합물을 들 수 있다. 화학식 21의 다이티오카르바미산은 문헌 [참조: Alvarez-Ibarra et al., *Organic Preparations and Procedures* 1991, 23(5), 611-616]의 일반적인 방법에 따라 대응하는 아민, 이황화탄소 및 2 당량의 염기로부터 알킬화제와의 처리에 의해 제조될 수 있다.

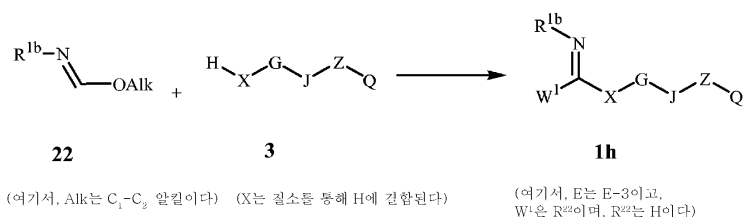
[0533] 반응 도식 14



[0534]

[0535] 특정한 화학식 1h (여기서, R²²는 H이다)의 화합물은 반응 도식 15에 나타난 바와 같이, 화학식 3의 아민을 화학식 22의 메톡시 또는 에톡시 이민으로 처리하여 제조될 수 있다. 화학식 22의 이민은 대응하는 아민으로부터 얻어질 수 있다. 절차는 촉매량의 *p*-톨루엔설폰산의 존재하에 톨루엔 또는 자일렌 중에서 아민을 트라이메틸오르토포르메이트 또는 트라이에틸오르토포르메이트와 가열하는 것을 포함한다.

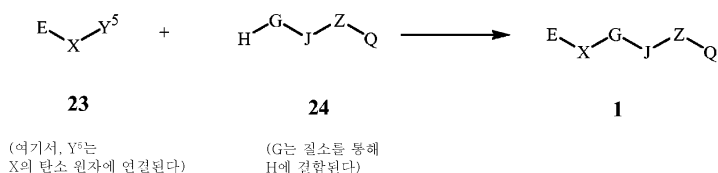
[0536] 반응 도식 15



[0537]

[0538] 화학식 1 (여기서, X의 탄소는 G의 질소 원자에 연결된다)의 화합물은 반응 도식 16에 나타난 바와 같이, 화학식 23의 화합물의 적절한 이탈기 (즉, Y⁵)와 화학식 24의 질소 함유 헤테로사이클의 치환 반응에 의해 제조될 수 있다. 적절한 염기로는 수소화나트륨 또는 탄산칼륨을 들 수 있으며, 반응은 용매, 예컨대 *N,N*-다이메틸포름아미드 또는 아세트니트릴 중에서 0 내지 80°C에서 행해질 수 있다. 화학식 23의 화합물 중의 적절한 이탈기로는 브로마이드, 아이오다이드, 메실레이트 (OS(O)₂CH₃), 트라이플레이트 (OS(O)₂CF₃) 등을 들 수 있다. 화학식 23의 화합물은 당업계에 공지된 일반적인 방법을 이용하여, 대응하는 화합물 (여기서, Y⁵는 OH이다)로부터 제조될 수 있다.

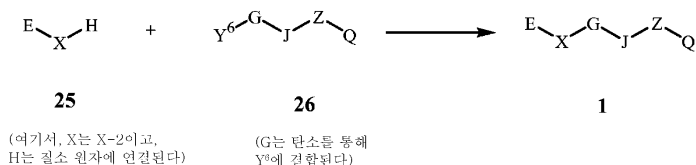
[0539] 반응 도식 16



[0540]

[0541] 화학식 1 (여기서, X의 질소는 G의 탄소 원자에 연결된다)의 화합물은 반응 도식 17에 나타난 바와 같이, 화학식 25의 화합물과 화학식 26 (여기서, Y⁶는 이탈기 (예를 들어, 브로마이드, 아이오다이드, 메실레이트 (OS(O)₂CH₃), 트라이플레이트 (OS(O)₂CF₃) 등이다)의 복소화 화합물의 반응에 의해 제조될 수 있다. 상기 반응은 염기, 예컨대 탄산칼륨의 존재하에 용매, 예컨대 다이메틸설폭사이드, *N,N*-다이메틸포름아미드 또는 아세트니트릴 중에서 약 0 내지 80°C의 온도에서 행해질 수 있다. 화학식 26의 화합물은 당업자에게 공지된 방법에 의해, 대응하는 화합물 (여기서, Y⁶는 OH이다)로부터 제조될 수 있다.

[0542] 반응 도식 17

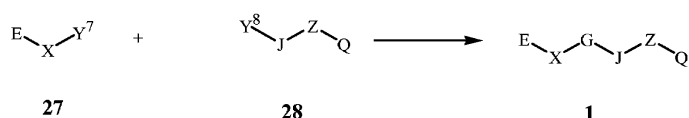


[0543]

[0544] 화학식 1의 화합물은 또한 반응 도식 18에 나타난 바와 같이, 적절히 작용화된 화학식 27의 화합물과 적절히 작용화된 화학식 28의 화합물의 반응에 의해 제조될 수 있다. 작용기 Y^7 및 Y^8 은 부분, 예컨대 알데히드, 케톤, 에스테르, 산, 아마이드, 티오아미드, 니트릴, 아민, 알코올, 티올, 하이드라진, 옥심, 아마딘, 아마이드옥심, 올레핀, 아세틸렌, 할라이드, 알킬 할라이드, 메탄설폰네이트, 트라이플루오로메탄설폰네이트, 보론산, 보로네이트 등 중에서 선택되지만 이로 한정되지 않으며, 이들은 적절한 반응 조건하에서 다양한 복소환 G의 제조를 가능하게 할 것이다. 합성 문헌은 5원 헤테로 방향족 환 (예를 들어, G-1 내지 G-48)을 형성하기 위한 다수의 일반적인 방법을 기술하고 있으며; 예를 들어, 문헌 [*Comprehensive Heterocyclic Chemistry*, Vol. 4-6, A. R. Katritzky and C. W. Rees editors, Pergamon Press, New York, 1984]; 문헌 [*Comprehensive Heterocyclic Chemistry II*, Vol. 2-4, A. R. Katritzky, C. W. Rees, and E. F. Scriven editors, Pergamon Press, New York, 1996]; 및 시리즈인 문헌 [*The Chemistry of Heterocyclic Compounds*, E. C. Taylor, editor, Wiley, New York]을 참조한다. 당업자는 원하는 복소환 G를 제조하기 위해 적절한 작용기를 어떻게 선택하는지를 안다.

[0545] 화학식 27의 티오아미드 (Y^7 이 $-\text{C}(=\text{S})\text{NH}_2$ 인 화학식 27의 화합물)는 반응 도식 18에 나타난 바와 같이, G가 예를 들어, 티아졸 (즉, G는 G-1임)인 화학식 1의 화합물을 제조하기 위한 특히 중요한 중간체이다. 일례로서, Y^7 이 티오아미드기인 화학식 27의 화합물과, Y^8 이 브로모아세틸기인 화학식 28의 화합물의 반응에 의해, G가 티아졸 환인 화학식 1의 화합물이 얻어질 것이다.

[0546] 반응 도식 18



[0547]

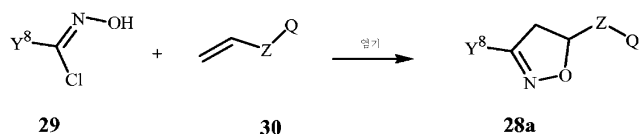
[0548] 하나의 전형적인 절차에서, 화학식 28의 브로모메틸 케톤 (Y^8 이 $\text{BrCH}_2\text{C}(=\text{O})$ 인 화학식 28의 화합물)은 전형적으로 실온과 용매의 환류 온도 사이의 온도에서 화학식 27의 티오아미드 유도체와 혼합된다. 전형적인 용매로는 아세톤 및 아세토니트릴을 들 수 있으나, 이에 한정되지 않는다. 반응성이 낮은 클로로메틸 케톤 (Y^8 이 $\text{ClCH}_2\text{C}(=\text{O})$ 인 화학식 28의 화합물)의 경우, 할라이드 염, 예컨대 브롬화나트륨 또는 요오드화나트륨을 첨가하여, *원위치에서* 더욱 활성화된 할로메틸 케톤을 제조하는 것이 유용하다. 이러한 경우에는, 예를 들어, 클로로메틸 케톤 및 브롬화나트륨은 화학식 27의 티오아미드를 첨가하기 전에, 잠시 동안 함께 가열된다. 화학식 27의 티오아미드는 공지되어 있으며, 반응 도식 25에 기재된 방법에 의해 제조될 수 있다.

[0549] 화학식 28a의 특정한 화합물은 반응 도식 19에 나타난 바와 같이, 화학식 29의 대응하는 하이드록사모일 클로라이드와 화학식 30의 올레핀 유도체의 환화 첨가 반응에 의해 제조될 수 있다.

[0550] J가 예를 들어, 증거 4에 나타난 J-29 (즉, 아이속사졸린)인 화학식 28a의 할로메틸 케톤이 특히 유용하다. 이러한 방법에서, 모든 3개의 반응 성분 (화학식 29 및 30의 화합물, 및 염기)는 화학식 29의 하이드록사모일 클로라이드의 가수분해 또는 이량체화를 최소화하도록 접촉된다. 하나의 전형적인 절차에서, 삼차 아민 염기, 예컨대 트라이에틸아민 또는 무기 염기, 예컨대 알칼리 금속 또는 알칼리 토금속 탄산염, 중탄산염 또는 인산염일 수 있는 염기는 화학식 30의 올레핀 유도체와 혼합되며, 화학식 29의 하이드록사모일 클로라이드는 환화 첨가 반응이 비교적 급속도로 진행되는 온도, 전형적으로 5 내지 25°C의 온도에서 서서히 첨가된다. 대안적으로, 염기는 다른 2개의 성분 (화학식 29 및 30의 화합물)에 서서히 첨가될 수 있다. 화학식 29의 하이드록사모일 클로라이드가 실질적으로 반응 매질에 불용성을 나타내는 경우에 이러한 대체 절차가 바람직하다. 반응 매질 중

의 용매는 과량으로 사용되는 물 또는 불활성 유기 용매, 예컨대 톨루엔, 헥산 또는 심지어는 올레핀 유도체일 수 있다. 생성물은 여과 또는 수세 후에, 용매 증발에 의해 염 부산물로부터 분리될 수 있다. 조생성물은 결정화에 의해 정제될 수 있거나, 조생성물은 반응 도식 18의 방법에서 직접 사용될 수 있다. 이러한 방법은 실시예 1, 단계 B; 실시예 2, 단계 B; 실시예 3, 단계 B; 및 실시예 4, 단계 A에 예시되어 있다.

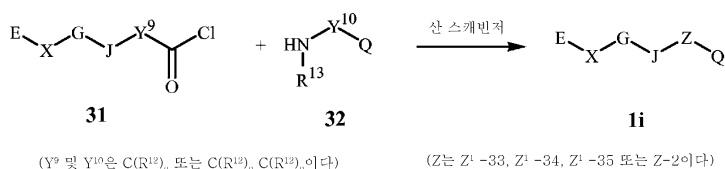
[0551] 반응 도식 19



[0552]

[0553] 반응 도식 20에 나타난 바와 같이, 화학식 1i (Z 또는 Z¹ (예를 들어, Z-2)이 아미드를 포함하는 화학식 1)의 화합물은 화학식 31의 산 염화물을 산 스캐빈저의 존재하에 화학식 32의 아민 또는 아닐린과 커플링하여 제조될 수 있다. 전형적인 산 스캐빈저로는 아민 염기, 예컨대 트라이에틸아민, *N,N*-다이아이소프로필에틸아민 및 피리딘을 들 수 있다. 다른 스캐빈저로는 수산화물, 예컨대 수산화나트륨 및 수산화칼륨 및 탄산염, 예컨대 탄산나트륨 및 탄산칼륨을 들 수 있다. 경우에 따라서는, 폴리머에 지지된 산 스캐빈저, 예컨대 폴리머에 결합된 *N,N*-다이아이소프로필에틸아민 및 폴리머에 결합된 4-(다이메틸아미노)피리딘을 사용하는 것이 유용하다. 당업자는 화학식 32의 아민이 또 하나의 NH 작용기를 포함하는 경우에 혼합물이 형성될 수 있으며, 원하는 이성질체를 분리하는데 표준 분리 방법이 사용될 수 있음을 인지할 것이다.

[0554] 반응 도식 20

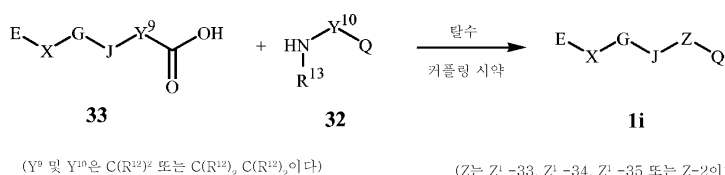


[0555]

[0556] 적어도 2 당량의 산 스캐빈저가 존재한다면, 화학식 32의 아민의 산성염도 이러한 반응에 사용될 수 있다. 아민과 염을 형성하는데 사용되는 전형적인 산으로는 염산, 옥살산 및 트라이플루오로아세트산을 들 수 있다.

[0557] Z 또는 Z¹ (예를 들어, Z-2)이 아미드를 포함하는 화학식 1i의 화합물을 제조하기 위한 대체 절차는 반응 도식 21에 나타나 있으며, 탈수 커플링 시약, 예컨대 다이사이클로헥실카르보다이이미드 (DCC), 1-(3-다이메틸아미노프로필)-3-에틸카르보다이이미드 하이드로클로라이드 (EDC) 또는 *O*-벤조트라이아졸-1-일-*N,N,N'*,*N'*-테트라메틸우로늄 헥사플루오로포스페이트 (HBTU)의 존재하에서의 화학식 33의 산과 화학식 32의 아민 또는 아닐린 (또는 이의 산성염)의 커플링을 포함한다. 반복해서 말하지만, 폴리머에 지지된 시약, 예컨대 폴리머에 결합된 사이클로헥실카르보다이이미드가 유용하다. 이들 반응은 전형적으로 트라이에틸아민 또는 *N,N*-다이아이소프로필에틸아민과 같은 염기의 존재 하에 다이클로로메탄 또는 아세토니트릴과 같은 용매에서 0 내지 40℃에서 실행된다. 당업자는 화학식 32의 아민이 또 하나의 NH 작용기를 포함하는 경우에 혼합물이 형성될 수 있으며, 원하는 이성질체를 분리하는데 표준 분리 방법이 사용될 수 있음을 인지할 것이다. 이러한 방법은 Z-2의 경우, 실시예 4, 단계 C에 예시되어 있다.

[0558] 반응 도식 21



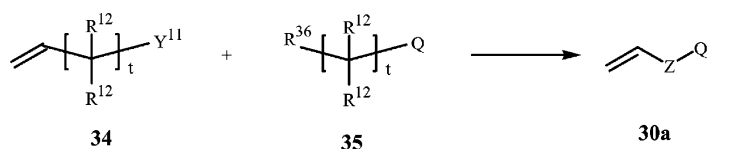
[0559]

[0560] 합성 문헌이 다수의 아미드 생성 방법을 포함하고 있기 때문에, 반응 도식 20 및 21의 합성 절차는 화학식 1의 화합물의 제조에 유용한 다양한 방법 중 간단한 대표적인 예이다. 당업자는 또한 화학식 31의 산 염화물이 다수의 공지된 방법에 의해 화학식 33의 산으로부터 제조될 수 있음을 인식한다.

[0561] 당업자는 다수의 화학식 33의 화합물이 -ZQ가 $-Y^9CO_2H$ 로 치환되는 상기 반응 도식 18 및 19에 기재된 것과 유사한 방법에 의해 직접 제조될 수 있음을 인지할 것이다. 따라서, -ZQ가 Y^9CO_2H 로 치환되는 화학식 28 및 30에 대응하는 화합물은 화학식 1의 화합물의 제조에 유용한 중간체이다. 이러한 방법은 실시예 4, 단계 A 및 B에 기재되어 있다.

[0562] 화학식 30a의 특정 올레핀은 반응 도식 22에 나타난 바와 같이, 염기의 존재하에서의 화학식 34의 화합물의 적절한 이탈기 Y^{11} 과 화학식 35의 화합물의 치환 반응에 의해 제조될 수 있다. 적절한 염기로는 수소화나트륨, 탄산칼륨 또는 탄산나트륨을 들 수 있으며, 반응은 용매, 예컨대 *N,N*-다이메틸포름아미드 또는 아세토니트릴 중에서 0 내지 80℃에서 행해진다. 화학식 34의 화합물의 적절한 이탈기로는 클로라이드, 브로마이드, 아이오다이드, 메실레이트 ($-OS(O_2)CH_3$), 트라이플레이트 ($-OS(O)_2CF_3$) 등을 들 수 있다. 화학식 34의 화합물은 당업계에 공지된 일반적인 방법에 의해, 대응하는 화합물 (여기서, Y^{11} 은 OH이다)로부터 제조될 수 있다. 다수의 화학식 34의 화합물이 공지되어 있거나, 당업계에 공지된 일반적인 방법에 의해 제조될 수 있다. 이러한 방법은 Z^1-1 의 경우, 실시예 1, 단계 A에 기재되어 있다. 합성 문헌은 또한 화학식 30a의 올레핀을 형성하기 위한 다수의 일반적인 방법을 기술하고 있으며, 예를 들어, Z^1-2 , 문헌 [A. Saha and B. C. Ranu, *Tet. Lett.* 2010, 51, 1902-1905]; Z^1-3 , 문헌 [S. Nandi and J. K. Ray, *Tet. Lett.* 2009, 50, 6993-6997]; Z^1-10 , 문헌 [A. deMeijere, et. al., *Eur. J. Org. Chem.* 2009, 2635-2641]; Z^1-14 , 국제 특허 출원 공개 제WO 2008/043019호 (L. Yingchun, et. al.); Z^1-15 , 문헌 [P. P. Santos, et. al., *Tetrahedron* 2005, 61(50), 11986-11990]; Z^1-16 , 문헌 [B. H. Lipshutz, et. al., *J. Org. Chem.* 2009, 74, 2854-2857] 및 Z^1-19 , 문헌 [S. Mobashery, et. al., *J. Am. Chem. Soc.* 2000, 122, 6799-6800]을 참조한다.

[0563] 반응 도식 22



(여기서, R^{36} 은 OH, NHR^{18} , SH 이고, Y^{11} 은 이탈기, 예컨대 할로겐 또는 토실레이트이며, t 는 0 또는 1이다)

(Z 는 Z^1-1 , Z^1-2 , Z^1-3 , Z^1-10 , Z^1-14 , Z^1-15 , Z^1-16 또는 Z^1-19 이다)

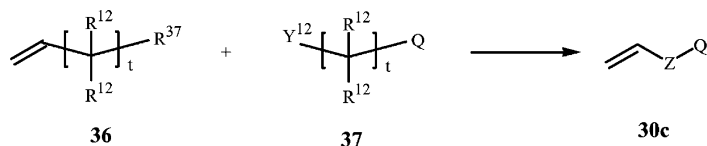
[0564]

[0565] 당업자는 Q가 Z에 대한 부착점으로서 환 질소를 갖는 환계 (예를 들어, Q는 Q-70이고, R^{36} 은 H이며, t 는 0이다)인 화학식 30b의 화합물이 친핵체로서 환계의 대응하는 NH를 사용하여 제조될 수 있음을 인지할 것이다. 화학식 35의 화합물의 적절한 이탈기 Y^{11} 의 치환 반응은 Z^1-18 의 경우, 반응 도식 16 및 실시예 3, 단계 A에 기재된 것과 유사한 조건을 이용하여 행해진다.

[0566] 화학식 30c의 특정 화합물은 또한 반응 도식 23에 나타난 바와 같이, 염기의 존재하에서의 화학식 37의 화합물의 적절한 이탈기 Y^{12} 과 화학식 36의 화합물의 치환 반응에 의해 제조될 수 있다. 적절한 염기로는 수소화나트륨, 탄산칼륨 또는 탄산나트륨을 들 수 있으며, 반응은 용매, 예컨대 *N,N*-다이메틸포름아미드 또는 아세토니트릴 중에서 0 내지 80℃에서 행해진다. 화학식 37의 화합물의 적절한 이탈기로는 클로라이드, 브로마이드, 아이오다이드, 메실레이트 ($-OS(O_2)CH_3$), 트라이플레이트 ($-OS(O)_2CF_3$) 등을 들 수 있다. 화학식 37의 화합물은 당업계에 공지된 일반적인 방법에 의해, 대응하는 화합물 (여기서, Y^{12} 은 OH이다)로부터 제조될 수 있다. 다수의 화학식 36의 화합물이 공지되어 있거나, 당업계에 공지된 일반적인 방법에 의해 제조될 수 있다. 이러한 방법은 Z^1-14 의 경우, 실시예 2, 단계 A에 기재되어 있다. 합성 문헌은 또한 화학식 30c의 올레핀을 형성하기 위한 다수의 일반적인 방법을 기술하고 있으며, 예를 들어, Z^1-1 , 문헌 [S. G. Ouellet, et. al., *Tet. Lett.* 2009, 50, 3776-3779]; Z^1-2 , 문헌 [S. Saubern, et. al., *Tetrahedron* 2010, 66, 2761-2767]; Z^1-3 , 문헌 [S.

Ahmad, et. al., *Bioorg. Med. Chem. Lett.* 2010, 20, 1128-1133]; Z^1 -11, 국제 특허 출원 공개 제WO 2002/018455호 (S. E. Yoo, et. al.); Z^1 -15, 국제 특허 출원 공개 제WO 2008/103615호 (N. D. Smith, et. al.)를 참조한다.

[0567] 반응 도식 23



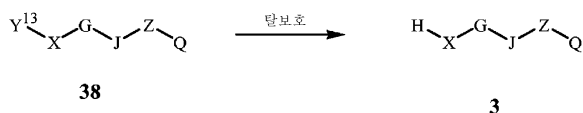
(여기서, R^{37} 은 OH, NHR^{13} , SH 이고,
 Y^{12} 는 이탈기, 예컨대 할로겐이며,
 t 는 0 또는 1이다)

(Z 는 Z^1 -1, Z^1 -2, Z^1 -3, Z^1 -11, Z^1 -12,
 Z^1 -13, Z^1 -14, Z^1 -15 또는 Z^1 -19이다)

[0568]

[0569] 화학식 3의 아민은 반응 도식 24에 나타난 바와 같이, 탈보호 반응을 통해 Y^{13} 이 아민 보호기인 화학식 38의 화합물로부터 제조될 수 있다. 다양한 아민 보호기가 반응 도식 24의 방법에 적합하며 (예를 들어, 문헌 [T. W. Greene and P. G. M. Wuts, *Protective Groups in Organic Synthesis*, 2nd ed.; Wiley: New York, 1991]을 참조), 적절한 보호기의 선택은 화학 합성의 숙련자에게 명백할 것이다. 탈보호 후에, 화학식 3의 아민은 당업계에서 공지된 일반적인 방법에 의해 이의 산성염 또는 유리 아민으로서 분리될 수 있다.

[0570] 반응 도식 24



(Y^{13} 은 X의 질소에 연결된 아민 보호기이다)

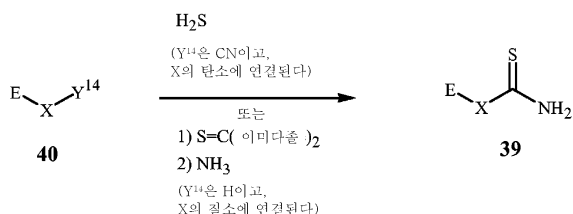
[0571]

[0572] 당업자는 다수의 화학식 38의 화합물이 기 E가 Y^{13} 으로 치환되는 상기 반응 도식 16 내지 18 및 반응 도식 20 및 21에 기재된 것과 유사한 방법에 의해 제조될 수 있음을 인지할 것이다. 따라서, E가 Y^{13} 으로 치환되는 화학식 23, 25, 27, 31 및 33에 대응하는 화합물은 화학식 1의 화합물의 제조를 위한 유용한 중간체이다.

[0573] 화학식 39의 티오아미드는 화학식 1 및 27의 화합물의 제조를 위한 특히 유용한 중간체이다. 화학식 39의 티오아미드는 반응 도식 25에 나타난 바와 같이, 화학식 40 (여기서, Y^{14} 은 X의 탄소에 연결되는 니트릴 부분이다)의 대응하는 니트릴에 황화수소를 첨가하여 제조될 수 있다. 반응 도식 25의 방법은 화학식 40의 화합물을 피리딘, 다이에틸아민 또는 다이에탄올아민과 같은 아민의 존재하에 황화수소와 접촉시켜 행해질 수 있다. 대안적으로, 황화수소는 알칼리 금속 또는 암모니아와의 이의 바이설파이드 염 형태로 사용될 수 있다. 이러한 타입의 반응은 문헌에 충분히 입증되어 있으며; 예를 들어, 유럽 특허 제EP 696581호를 참조한다.

[0574] 반응 도식 25에 나타난 바와 같이, 화학식 39의 티오아미드는 문헌 [J. L. Collins, et. al., *J. Med. Chem.* 1998, 41(25), 5037-5054]에 기재된 바와 같이, 화학식 40 (여기서, Y^{14} 은 H이며, X의 질소에 연결된다)의 화합물을 티오카르보닐 다이이미다졸과 접촉시킨 후에 암모니아로 처리하여 제조될 수 있다.

[0575] 반응 도식 25



(Y^{14} 은 CN이고,
X의 탄소에 연결된다)

(Y^{14} 은 H이고,
X의 질소에 연결된다)

[0576]

[0577] 상기 반응 도식에 나타난 코어 6원 및 7원 복소환계 (화학식 1의 X)는 공지되어 있거나, 당업자에 공지된 방법

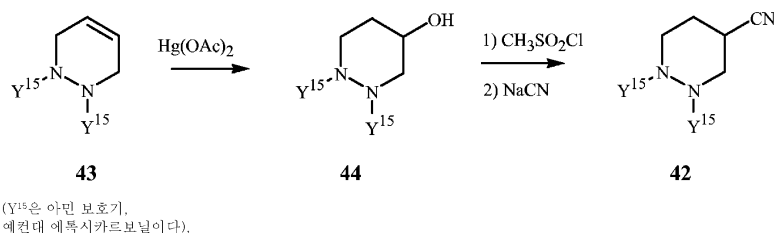
에 의해 제조될 수 있다. 합성 문헌은 포화된 및 부분 불포화된 6원 및 7원 복소환계를 생성하는 다수의 일반적인 방법을 기술한다. 예를 들어, 문헌 [*Comprehensive Heterocyclic Chemistry*, Vol. 3 and 7, A. R. Katritzky and C. W. Rees editors, Pergamon Press, New York, 1984]; 문헌 [*Comprehensive Heterocyclic Chemistry II*, Vol. 6 and 9, A. R. Katritzky, C. W. Rees, and E. F. Scriven editors, Pergamon Press, New York, 1996]; 및 시리즈인 문헌 [*The Chemistry of Heterocyclic Compounds*, E. C. Taylor, editor, Wiley, New York]을 참조한다. 또한, 이들 환계 중 다수에 대한 다수의 특징에는 당업자에게 공지된 사이파인더 (Scifinder) 및 바일슈타인 (Beilstein)과 같은 전자 데이터베이스를 이용한 구조 탐색을 통해 최초 합성 문헌에서 발견될 수 있다. 당업자는 원하는 복소환을 제조하기 위해 적절한 보호기 및 작용기를 어떻게 선택하는지를 알 것이다.

[0578]

예를 들어, 코어 헤테로사이클이 헥사하이드로피리다진 (예를 들어, X-5)인 중간체 시아노 화합물 (42)은 반응 도식 26에 개요된 3개의 단계 순서에 의해 제조될 수 있다. 테트라하이드로피리다진 (43)은 아세트산제이수온의 존재하에 하이드록실화되어, 화합물 (44)을 얻는다 (문헌 [Vartanyan, R. S. et al. *Armianskii Khimicheskii Zhurnal* 1991, 44(4), 259]을 참조함). 화합물 (44)의 하이드록실기는 표준 방법을 이용하여, 이의 대응하는 메실레이트로 전환되고, 시안화물 음이온으로 치환되어, 화합물 (42)을 얻을 수 있다.

[0579]

반응 도식 26



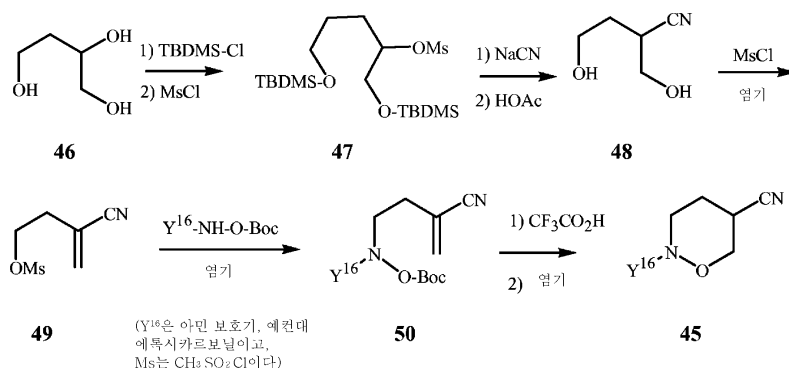
[0580]

[0581]

또 하나의 예에서, 코어 헤테로사이클이 테트라하이드로-1,2-옥사진 (예를 들어, X-4)인 중간체 시아노 화합물 (45)은 반응 도식 27에 개요된 바와 같이 8개의 단계로 제조될 수 있다. 트라이올 (46)의 일차 하이드록실기가 보호되고, 이차 하이드록실기가 메실화 (mesylation)되고, 시안화물로 치환된 후에, 탈보호되어, 시아노다이올 (48)을 얻는다. 메실화에 이어서, 염기 처리에 의해 올레핀 (49)을 얻고, 메실기는 *O,N* 다이프로텍트된 (di-protected) 하이드록실아민으로 치환된다. *O* 보호기는 제거된 후에, 염기 촉매 환화 반응에 의해, 화학식 45의 화합물을 얻을 수 있다.

[0582]

반응 도식 27



[0583]

[0584]

대안적으로, 테트라하이드로-1,2-옥사진 (예를 들어, X-4)은 문헌 [Ensley, H.E. and Mahadevan, S., *Tetrahedron Lett.* 1989, 30(25), 3255]에 기재된 바와 같이 니트로실 하이드라이드 또는 니트로소포름알데히드와 치환된 디엔의 환화 첨가 반응에 의해 제조될 수 있거나, 문헌 [Riddell, F. G. and Williams, D. A. R., *Tetrahedron* 1974, 30(9), 1083]에 기재된 바와 같이 치환된 1,4-다이브로모부탄과 *N*-하이드록시우레탄의 반응에 의해 제조될 수 있다.

[0585]

화학식 1의 화합물을 제조하기 위해 상술한 일부의 시약 및 반응 조건이 중간체에 존재하는 특정한 작용기에 적합하지 않을 수 있는 것으로 인지된다. 이러한 경우에, 합성에 보호/탈보호 시퀀스 또는 작용기 상호 변환을

포함시키는 것이 원하는 생성물을 얻는데 도움이 될 것이다. 보호기의 사용 및 선택은 화학 합성에서의 당업자에게 자명할 것이다 (예를 들어, 문헌 [Greene, T. W.; Wuts, P. G. M. *Protective Groups in Organic Synthesis*, 2nd ed.; Wiley: New York, 1991] 참조). 당업자는 경우에 따라서는, 각각의 반응 도식에 나타난 바와 같이, 화학식 1의 화합물의 합성을 완료하기 위해, 소정 시약의 도입 후에, 상세히 기재되어 있지 않은 추가의 통상적인 합성 단계를 행할 필요가 있을 수 있음을 인지할 것이다. 당업자는 또한 화학식 1의 화합물을 제조하기 위해 제시된 특정 시퀀스로 나타난 것과는 다른 순서로 상기 반응 도식에 예시된 단계의 조합을 행할 필요가 있음을 인지할 것이다.

[0586] 당업자는 또한 치환기를 추가하거나 기존의 치환기를 변경하기 위해, 화학식 1의 화합물 및 본 명세서에 기재된 중간체에 대하여 다양한 친전자성, 친핵성, 라디칼, 유기 금속, 산화, 및 환원 반응을 행할 수 있음을 인지할 것이다.

[0587] 더 이상 상술하지 않고도, 상술한 설명을 이용하는 당업자라면 본 발명을 최대한으로 이용할 수 있을 것으로 여겨진다. 그러므로, 하기 실시예는 단순히 예시적인 것으로 그리고 어떠한 임의의 방식으로든 본 개시 내용을 한정하지 않는 것으로 해석되어야 한다. 하기 실시예에서의 단계들은 전체적인 합성 변환에서 각 단계에 있어서의 절차를 예시하며, 각 단계에 있어서의 출발 물질은 그 절차가 다른 실시예 또는 단계에 설명된 특정한 예비 실행에 의해 반드시 제조된 것은 아닐 수도 있다. 크로마토그래피 용매 혼합물 또는 달리 나타내는 경우를 제외하고는 백분율은 중량 기준이다. 달리 명시되지 않는 한, 크로마토그래피 용매 혼합물에 대한 부 및 백분율은 체적 기준이다. ¹H NMR 스펙트럼은 테트라메틸실란으로부터의 다운필드 (ppm)로 나타내며; "s"는 싱글릿을 의미하고, "d"는 더블릿을 의미하며, "t"는 트리플릿을 의미하고, "q"는 콰르텟을 의미하며, "m"은 멀티플릿을 의미하고, "dd"는 더블릿 오브 더블릿 (doublet of doublets)을 의미하며, "dt"는 더블릿 오브 트리플릿 (doublet of triplets)을 의미하고, "br s"는 브로드 싱글릿을 의미한다.

[0588] 하기 실시예에서, 중간체, 1-[2-[5-메틸-3-(트라이플루오로메틸)-1H-피라졸-1-일]아세틸]-4-피페리딘카르보티오아미드를 국제 특허 출원 공개 제WO 2008/013622호, 실시예 8, 단계 A 또는 A1, B 및 C에 개시된 방법에 의해 제조하였다.

[0589] 실시예 1

[0590] 1-[4-[4-[5-[2-(2,6-다이플루오로페녹시)에틸]-4,5-다이하이드로-3-아이속사졸릴]-2-티아졸릴]-1-피페리딘릴]-2-[5-메틸-3-(트라이플루오로메틸)-1H-피라졸-1-일]에탄온 (화합물 2)의 제조

[0591] 단계 A: 2-(3-부텐-1-일옥시)-1,3-다이플루오로벤젠의 제조

[0592] 아세트니트릴 (40 mL) 중의 4-브로모-1-부텐 (4.21 g, 31.38 mmol), 2,6-다이플루오로페놀 (3.4 g, 26.15 mmol) 및 탄산칼륨 (5.41 g, 39.23 mmol)의 현탁액을 8시간 동안 50°C로 가열하였다. 얻어진 혼합물을 실온으로 냉각시켜, 여과하였다. 여과액을 물로 희석하여, 아세트산에틸로 2회 추출하였다. 합한 추출물을 포화 NaCl 수용액으로 세정하여, 건조시키고 (MgSO₄), 감압하에 농축시켜, 담황색 액체로서의 표제 화합물 3.37 g을 얻었다.

[0593] ¹H NMR (CDCl₃) δ 2.50-2.60 (m, 2H), 4.10-4.22 (m, 2H), 5.14 (dd, 2H), 5.83-5.99 (m, 1H), 6.83-7.00 (m, 3H).

[0594] 단계 B: 2-클로로-1-[5-[2-(2,6-다이플루오로페녹시)에틸]-4,5-다이하이드로-3-아이속사졸릴]에탄온의 제조

[0595] 아세트니트릴 (50 mL) 중의 2-(3-부텐-1-일옥시)-1,3-다이플루오로벤젠 (즉, 단계 A의 생성물) (3.37 g, 18.3 mmol), 3-클로로-N-하이드록시-2-옥소-프로판이미도일 클로라이드 (2.84 g, 18.3 mmol) 및 탄산나트륨 (4.62 g, 54.9 mmol)의 현탁액을 실온에서 하룻밤 동안 교반하였다. 얻어진 혼합물을 실리카 겔 상에서 농축시켜, 용리제로서 20% 아세트산에틸/헥산을 사용하여 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 담황색 오일로서의 표제 화합물 3.22 g을 얻어, 정지 시에 결정화되었다.

[0596] ¹H NMR (CDCl₃) δ 2.00-2.23 (m, 2H), 3.01 (dd, 1H), 3.40 (dd, 1H), 4.20-4.30 (m, 2H), 4.68 (s, 2H), 5.10-5.27 (m, 1H), 6.83-7.02 (m, 3H).

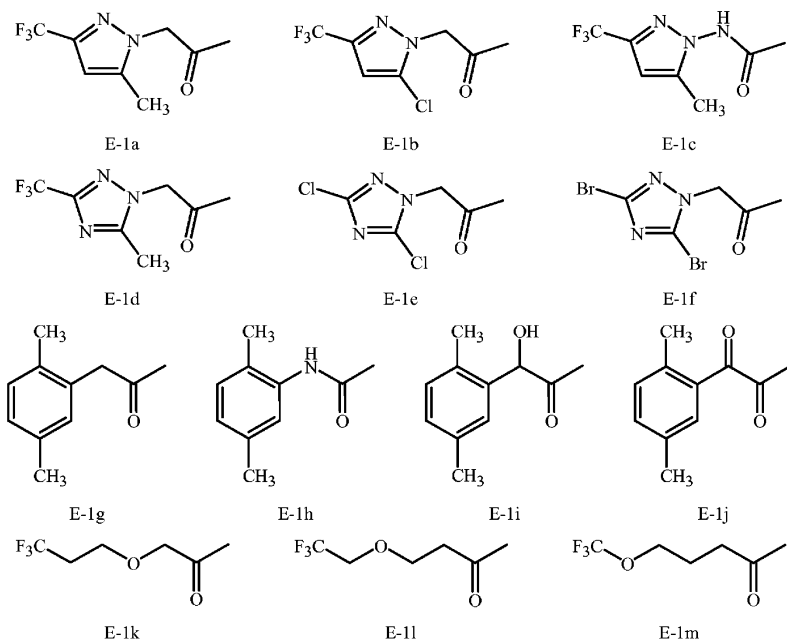
[0597] 단계 C: 1-[4-[4-[5-[2-(2,6-다이플루오로페녹시)에틸]-4,5-다이하이드로-3-아이속사졸릴]-2-티아졸릴]-1-피페리딘릴]-2-[5-메틸-3-(트라이플루오로메틸)-1H-피라졸-1-일]에탄온의 제조

- [0598] 2-클로로-1-[5-[2-(2,6-다이플루오로페녹시)에틸]-4,5-다이하이드로-3-아이속사졸릴]에탄온 (즉, 단계 B의 생성물) (0.5 g, 1.65 mmol), 브롬화나트륨 (0.25 g, 2.48 mmol) 및 아세톤 (10 mL)의 혼합물을 40분간 50℃로 가열하였다. 실온으로 냉각한 후에, 1-[2-[5-메틸-3-(트라이플루오로메틸)-1*H*-피라졸-1-일]아세틸]-4-피페리딘카르보-티오아미드 (0.55 g, 1.65 mmol)를 첨가하여, 반응 혼합물을 하룻밤 동안 교반하였다. 반응물을 감압하에 농축시켜, 잔류물을 물로 희석시켜, 아세트산에틸로 추출하였다. 유기상을 분리하여, 황산마그네슘으로 건조시키고, 여과하여, 실리카 겔 상에서 농축시켜, 용리제로서 50 내지 100% EtOAc/헥산을 사용하여 중압 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 고형 황색 폼 (foam)으로서의 표제 화합물, 본 발명의 화합물 511 mg을 얻었다.
- [0599] ^1H NMR (CDCl_3): δ 1.70-1.90 (m, 2H), 2.10-2.30 (m, 4H), 2.32 (s, 3H), 2.90 (br t, 1H), 3.20-3.40 (m, 3H), 3.58 (dd, 1H), 4.05 (d, 1H), 4.32 (t, 2H), 4.58 (d, 1H), 4.95-5.10 (m, 3H), 6.33 (s, 1H), 6.82-7.00 (m, 3H), 7.59 (s, 1H), $M+1 = 584$.
- [0600] 실시예 2
- [0601] 2-[[[4,5-다이하이드로-3-[2-[1-[2-[5-메틸-3-(트라이플루오로메틸)-1*H*-피라졸-1-일]아세틸]-4-피페리딘]-4-티아졸릴]-5-아이속사졸릴]메톡시]메틸]-1*H*-아이소인돌-1,3(2*H*)-다이온 (화합물 3)의 제조
- [0602] 단계 A: 2-[(2-프로펜-1-일옥시)메틸]-1*H*-아이소인돌-1,3(2*H*)-다이온의 제조
- [0603] 아세트니트릴 (40 mL) 중의 알릴 알코올 (1.46 g, 25.1 mmol), 2-(브로모메틸)-1*H*-아이소인돌-1,3(2*H*)-다이온 (5.0 g, 20.9 mmol) 및 중탄산나트륨 (3.5 g, 41.84 mmol)의 현탁액을 4시간 동안 환류하에 가열하였다. 추가의 5 mL의 알릴 알코올을 첨가하여, 반응물을 추가로 4시간 동안 환류하에 가열하였다. 얻어진 혼합물을 실온으로 냉각시키고, 디캔드하여, 실리카 겔 상에서 농축시켜, 용리제로서 40 내지 100% EtOAc/헥산을 사용하여 중압 컬럼 크로마토그래피로 정제하여, 약간의 출발 물질 브로마이드를 함유하는 백색 고체로서의 표제 화합물 1 g을 얻었다.
- [0604] ^1H NMR (CDCl_3) δ 4.11-4.15 (m, 2H) 5.10-5.20 (m, 3H), 5.37 (d, 1H), 5.83-5.95 (m, 1H), 7.70-8.00 (m, 4H).
- [0605] 단계 B: 2-[[[3-(2-클로로아세틸)-4,5-다이하이드로-5-아이속사졸릴]메톡시]메틸]-1*H*-아이소인돌-1,3(2*H*)-다이온의 제조
- [0606] 아세트니트릴 (15 mL) 중의 2-[(2-프로펜-1-일옥시)메틸]-1*H*-아이소인돌-1,3(2*H*)-다이온 (즉, 단계 A의 생성물) (1.0 g, 4.61 mmol), 3-클로로-N-하이드록시-2-옥소-프로판이미도일 클로라이드 (0.71 g, 4.61 mmol) 및 탄산나트륨 (1.16 g, 13.83 mmol)의 현탁액을 실온에서 하룻밤 동안 교반하였다. 얻어진 혼합물을 여과하여, 실리카 겔 상에서 농축시켜, 용리제로서 20 내지 100% 아세트산에틸/헥산을 사용하여 중압 액체 크로마토그래피로 정제하여, 담황색 오일로서의 표제 화합물 0.73 g을 얻었다.
- [0607] ^1H NMR (CDCl_3) δ 3.03-3.20 (m, 2H), 3.75-3.90 (m, 2H), 4.65 (s, 2H), 4.87-4.97 (m, 1H), 5.18 (s, 2H), 7.77-7.90 (m, 4H).
- [0608] 단계 C: 2-[[[4,5-다이하이드로-3-[2-[1-[2-[5-메틸-3-(트라이플루오로메틸)-1*H*-피라졸-1-일]아세틸]-4-피페리딘]-4-티아졸릴]-5-아이속사졸릴]메톡시]메틸]-1*H*-아이소인돌-1,3(2*H*)-다이온의 제조
- [0609] 2-[[[3-(2-클로로아세틸)-4,5-다이하이드로-5-아이속사졸릴]메톡시]메틸]-1*H*-아이소인돌-1,3(2*H*)-다이온 (즉, 단계 B의 생성물) (0.73 g, 2.17 mmol), 브롬화나트륨 (0.34 g, 3.26 mmol) 및 아세트니트릴 (25 mL)의 혼합물을 30분간 50℃로 가열하였다. 실온으로 냉각한 후에, 1-[2-[5-메틸-3-(트라이플루오로메틸)-1*H*-피라졸-1-일]아세틸]-4-피페리딘카르보티오아미드 (0.73 g, 2.17 mmol)를 첨가하여, 반응 혼합물을 하룻밤 동안 교반하였다. 반응물을 감압하에 농축시켜, 물로 희석하여, 염화메틸렌으로 3회 추출하였다. 합한 유기상을 황산마그네슘으로 건조시키고, 여과하여, 실리카 겔 상에서 농축시켜, 용리제로서 100% 아세트산에틸을 사용하여 중압 액체 크로마토그래피로 정제하여, 담황색 고형 폼으로서의 표제 화합물, 본 발명의 화합물 193 mg을 얻었다.
- [0610] ^1H NMR (CDCl_3): δ 1.70-1.82 (m, 2H), 2.20 (br t, 2H), 2.32 (s, 3H), 2.89 (t, 1H), 3.30-3.40 (m, 3H), 3.60 (dd, 1H), 3.80 (d, 2H), 4.03 (d, 1H), 4.58 (d, 1H), 4.83-5.05 (m, 3H), 5.21 (s, 2H), 6.35 (s, 1H), 7.56 (s, 1H), 7.75-7.80 (m, 2H), 7.87-7.97 (m, 2H).

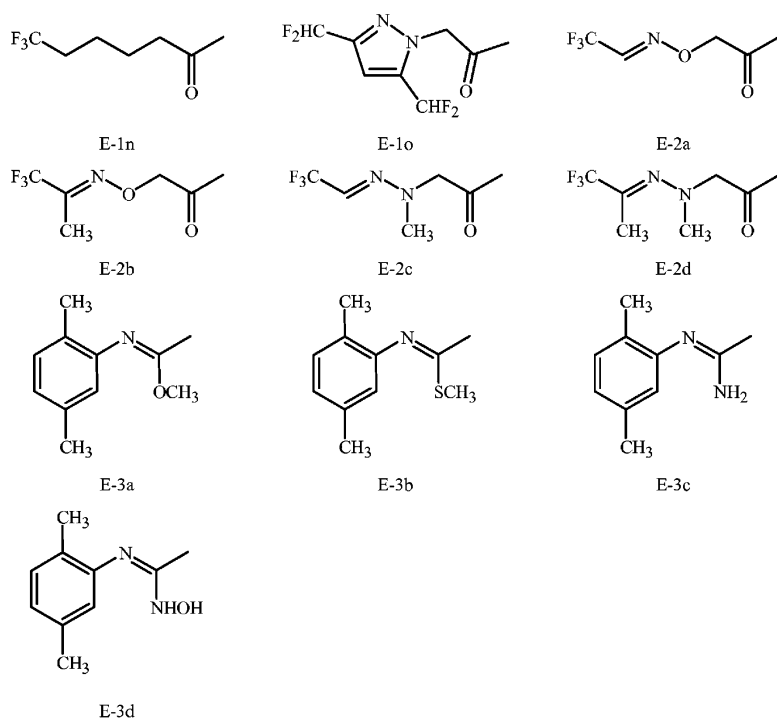
- [0611] 실시예 3
- [0612] 5-클로로-3-[3-[4,5-다이하이드로-3-[2-[1-[2-[5-메틸-3-(트라이플루오로메틸)-1H-피라졸-1-일]아세틸]-4-피페리딘]-4-티아졸릴]-5-아이속사졸릴]프로필]-2(3H)-벤조티아졸론 (화합물 8)의 제조
- [0613] 단계 A: 5-클로로-3-(4-펜텐-1-일)-2(3H)-벤조티아졸론의 제조
- [0614] 아세트니트릴 (30 mL) 중의 5-브로모-1-펜텐 (12.5 g, 84.5 mmol), 5-클로로-2(3H)-벤조티아졸론 (5.22 g, 28.2 mmol) 및 탄산칼륨 (11.66 g, 84.5 mmol)의 현탁액을 실온에서 48시간 동안 교반하였다. 얻어진 혼합물을 여과하여, 농축시켜, 황색 오일로서의 표제 화합물 6.5 g을 얻었다.
- [0615] ^1H NMR (CDCl_3) δ 1.80-1.90 (m, 2H), 2.17-2.22 (m, 2H), 3.92 (t, 2H), 5.00-5.18 (m, 2H), 5.80-5.90 (m, 1H), 7.03 (s, 1H), 7.15 (d, 1H), 7.34 (d, 1H).
- [0616] 단계 B: 5-클로로-3-[3-[3-(2-클로로아세틸)-4,5-다이하이드로-5-아이속사졸릴]프로필]-2(3H)-벤조티아졸론의 제조
- [0617] 아세트니트릴 (30 mL) 중의 5-클로로-3-(4-펜텐-1-일)-2(3H)-벤조티아졸론 (즉, 단계 A의 생성물) (2.17 g, 8.58 mmol), 3-클로로-N-하이드록시-2-옥소-프로판이미도일 클로라이드 (1.33 g, 8.58 mmol) 및 탄산나트륨 (2.49 g, 29.64 mmol)의 현탁액을 실온에서 하룻밤 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 물로 희석하여, 아세트산 에틸로 3회 추출하였다. 합한 유기상을 포화 NaCl 수용액으로 세정하여, 황산마그네슘으로 건조시키고, 여과하여, 농축시켜, 질은 황색 오일로서의 표제 화합물 2.77 g을 얻었다.
- [0618] ^1H NMR (CDCl_3) δ 1.70-2.00 (m, 4H), 2.85 (dd, 1H), 3.25(dd, 1H), 3.90-4.03 (m, 2H), 4.66 (s, 2H), 4.85-4.95 (m, 1H), 7.05 (d, 1H), 7.17 (dd, 1H), 7.36 (d, 1H).
- [0619] 단계 C: 5-클로로-3-[3-[4,5-다이하이드로-3-[2-[1-[2-[5-메틸-3-(트라이플루오로메틸)-1H-피라졸-1-일]아세틸]-4-피페리딘]-4-티아졸릴]-5-아이속사졸릴]프로필]-2(3H)-벤조티아졸론의 제조
- [0620] 5-클로로-3-[3-[3-(2-클로로아세틸)-4,5-다이하이드로-5-아이속사졸릴]프로필]-2(3H)-벤조티아졸론 (즉, 단계 B의 생성물) (0.81 g, 2.17 mmol), 브롬화나트륨 (0.34 g, 3.26 mmol), 1-[2-[5-메틸-3-(트라이플루오로메틸)-1H-피라졸-1-일]아세틸]-4-피페리딘카르보티오아미드 (0.73 g, 2.19 mmol), 및 아세트니트릴 (15 mL)의 혼합물을 실온에서 6일간 교반하였다. 반응 혼합물을 물로 희석하여, 아세트산에틸로 3회 추출하였다. 합한 유기상을 포화 NaCl 수용액으로 세정하여, 황산마그네슘으로 건조시키고, 여과하여, 실리카 겔 상에서 농축시켜, 용리제로서로서 60 내지 100% 아세트산에틸/헥산을 사용하여, 중압 액체 크로마토그래피로 정제하여, 담황색 고형품으로서의 표제 화합물, 본 발명의 화합물 435 mg을 얻었다.
- [0621] ^1H NMR (CDCl_3): δ 1.70-2.03 (m, 6H), 2.20 (br t, 2H), 2.33 (s, 3H), 2.90 (t, 1H), 3.10 (dd, 1H), 3.25-3.35 (m, 2H), 3.50 (dd, 1H), 3.95-4.10 (m, 3H), 4.55 (d, 1H), 4.75-4.90 (m, 1H), 4.95-5.05 (m, 2H), 6.38 (s, 1H), 7.08 (s, 1H), 7.18 (d, 1H), 7.38 (d, 1H), 7.58 (s, 1H).
- [0622] 실시예 4
- [0623] N-[(2,6-다이플루오로페닐)메틸]-4,5-다이하이드로-3-[2-[1-[2-[5-메틸-3-(트라이플루오로메틸)-1H-피라졸-1-일]아세틸]-4-피페리딘]-4-티아졸릴]-5-아이속사졸아세트아미드 (화합물 4)의 제조
- [0624] 단계 A: 3-(2-클로로아세틸)-4,5-다이하이드로-5-아이속사졸아세트산의 제조
- [0625] 아세트니트릴 (50 mL) 중의 3-클로로-N-하이드록시-2-옥소-프로판이미도일 클로라이드 (3.6 g, 23.23 mmol), 3-부텐산 (2.0 g, 23.23 mmol) 및 중탄산나트륨 (5.86 g, 69.77 mmol)의 혼합물을 실온에서 하룻밤 동안 교반하였다. 얻어진 혼합물을 물로 희석하고, 1 N HCl로 pH 6으로 조절하여, 아세트산에틸로 2회 추출하였다. 합한 유기상을 포화 NaCl 수용액으로 세정하여, 황산마그네슘으로 건조시키고, 여과하여, 농축시켜, 1-클로로부탄/헥산으로 트리뷰레이션하여, 담황색 고체로서의 표제 화합물 0.70 g을 얻었다.
- [0626] ^1H NMR ($\text{DMSO}-d_6$) δ 2.60-2.70 (m, 2H), 2.90 (dd, 1H), 3.30 (dd, 1H), 4.80-4.90 (m, 2H), 5.05-5.18 (m, 1H), 12.45 (br s, 1H).

- [0627] 단계 B: 4,5-다이하이드로-3-[2-[1-[2-[5-메틸-3-(트라이플루오로메틸)-1*H*-피라졸-1-일]아세틸]-4-피페리딘]-4-티아졸릴]-5-아이속사졸아세트산의 제조
- [0628] 3-(2-클로로아세틸)-4,5-다이하이드로-5-아이속사졸아세트산 (즉, 단계 A의 생성물) (0.70 g, 3.4 mmol), 브롬화나트륨 (0.52 g, 5.1 mmol) 및 아세톤 (10 mL)의 혼합물을 30분간 50℃로 가열하였다. 실온으로 냉각한 후에, 1-[2-[5-메틸-3-(트라이플루오로메틸)-1*H*-피라졸-1-일]아세틸]-4-피페리딘카르보티오아미드 (1.13 g, 3.39 mmol)를 첨가하여, 반응 혼합물을 하룻밤 동안 교반하였다. 반응물을 감압하에 농축시켜, 잔류물을 물로 희석하고, 1 N HCl로 pH 6으로 조절하여, 아세트산에틸로 2회 추출하였다. 합한 유기상을 포화 NaCl 수용액으로 세정하여, 황산마그네슘으로 건조시키고, 여과하여, 농축시켜, 담황색 고형 품으로서의 표제 화합물 1.07 g을 얻었다.
- [0629] ^1H NMR (CDCl_3): δ 1.70-1.85 (m, 2H), 2.10-2.30 (m, 2H), 2.32 (s, 3H), 2.70 (dd, 1H), 2.85-2.95 (m, 3H), 3.23 (dd, 1H), 3.30-3.40 (m, 2H), 3.60 (dd, 1H), 4.07 (br d, 1H), 4.60 (br d, 1H), 4.95-5.20 (m, 3H), 6.35 (s, 1H), 7.61 (s, 1H).
- [0630] 단계 C: *N*-[(2,6-다이플루오로페닐)메틸]-4,5-다이하이드로-3-[2-[1-[2-[5-메틸-3-(트라이플루오로메틸)-1*H*-피라졸-1-일]아세틸]-4-피페리딘]-4-티아졸릴]-5-아이속사졸아세트아미드의 제조
- [0631] 4,5-다이하이드로-3-[2-[1-[2-[5-메틸-3-(트라이플루오로메틸)-1*H*-피라졸-1-일]아세틸]-4-피페리딘]-4-티아졸릴]-5-아이속사졸아세트산 (즉, 단계 B의 생성물) (150 mg, 0.31 mmol), 2,6-다이플루오로벤질아민 (49 mg, 0.34 mmol), 1-에틸-3-(3-다이메틸아미노프로필)카르보다이이미드 (89 mg, 0.46 mmol), 4-(다이메틸아미노)피리딘 (4 mg, 0.034 mmol) 및 염화메틸렌 (3 mL)의 혼합물을 실온에서 6시간 동안 교반하였다. 얻어진 혼합물을 물로 희석하여, 아세트산에틸로 추출하였다. 합한 유기 추출물을 포화 NaCl 수용액으로 세정하여, 황산마그네슘으로 건조시키고, 여과하여, 실리카 겔 상에서 농축시켜, 용리제로서 50 내지 100% 아세트산에틸/헥산을 사용하여 중압 액체 크로마토그래피로 정제하여, 담황색 고형 품으로서의 표제 화합물, 본 발명의 화합물 57 mg을 얻었다.
- [0632] ^1H NMR (CDCl_3): δ 1.70-1.83 (m, 2H), 2.10-2.25 (m, 2H), 2.32 (s, 3H), 2.58 (dd, 1H), 2.65 (dd, 1H), 2.89 (t, 1H), 3.18-3.98 (m, 3H), 3.55 (dd, 1H), 4.00-4.10 (m, 1H), 4.50-4.60 (m, 3H), 4.85-5.15 (m, 3H), 6.27 (t, 1H), 6.33 (s, 1H), 6.80-6.90 (m, 2H), 7.20-7.30 (m, 1H), 7.55 (s, 1H).
- [0633] 당업계에 공지된 방법과 함께 본 명세서에 기재된 절차에 의해, 표 1 내지 10의 하기 화합물이 제조될 수 있다. 하기 약어가 하기 표에 사용된다: *n*은 노르말을 의미하고, *i*는 아이소를 의미하며, Me는 메틸을 의미하고, Et는 에틸을 의미하며, Ph는 페닐을 의미하고, OMe는 메톡시를 의미하며, SMe는 메틸티오를 의미하고, CN은 시아노를 의미하며, Ph는 페닐을 의미하고, NO₂는 니트로를 의미하며, S(O)Me는 메틸설폰을 의미하고, S(O)₂Me는 메틸설폰을 의미한다.

[0634] 하기에 나타낸 프래그먼트 E-1a 내지 E-3d는 표 1 내지 10에 언급되어 있다.



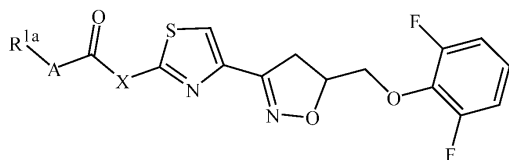
[0635]



[0636]

[0637] 본 발명은 하기 예시적인 종류를 포함하나, 이들에 한정되지 않는다.

[0638] [표 1a]



A 는 CHR^{15} 이고, R^{15} 은 H 이며, X 는 X-1 이고, n 은 0 이다.

R^{1a}	R^{1a}
Ph	3-에틸페닐
2-메틸페닐	3-(CF_3)페닐
2-메톡시페닐	3-시아노페닐
2-클로로페닐	3-니트로페닐
2-브로모페닐	2,5-다이클로로페닐
2-에톡시페닐	5-브로모-2-클로로페닐
2-(메틸티오)페닐	2-클로로-5-메틸페닐
3-클로로페닐	2-메톡시-5-(CF_3)페닐
3-브로모페닐	2,5-다이에틸페닐
3-요오도페닐	3-메틸피라졸-1-일
3-메틸페닐	3-클로로피라졸-1-일
2-클로로-5-(CF_3)페닐	3-브로모피라졸-1-일
2,5-다이브로모페닐	3-(CF_3)피라졸-1-일
2-브로모-5-메틸페닐	3,5-다이에틸피라졸-1-일
2-브로모-5-(CF_3)페닐	3-클로로-5-메틸피라졸-1-일
5-클로로-2-메틸페닐	3-브로모-5-메틸피라졸-1-일
5-브로모-2-메틸페닐	5-메톡시-3-메틸피라졸-1-일
2,5-다이에틸페닐	3,5-다이에틸피라졸-1-일
2-메틸-5-(CF_3)페닐	5-에틸-3-(CF_3)피라졸-1-일
5-시아노-2-메틸페닐	2,5-다이에틸-3-푸릴
2-메틸-5-니트로페닐	2,5-다이에틸-3-티에닐
5-클로로-2-메톡시페닐	2,5-다이클로로-3-티에닐
5-브로모-2-메톡시페닐	1,4-다이에틸-3-피롤릴
2-메톡시-5-메틸페닐	1,4-다이에틸-3-피라졸릴
3-에틸-5-메틸피라졸-1-일	1,3-다이에틸-4-피라졸릴
5-메틸-3-(CF_3)피라졸-1-일	2,5-다이에틸-4-옥사졸릴
5-메틸-3-(C_2F_5)피라졸-1-일	2,5-다이에틸-4-티아졸릴
5-클로로-3-메틸피라졸-1-일	3,6-다이에틸-2-피리딜
3,5-다이클로로피라졸-1-일	2,5-다이에틸-3-피리딜

[0639]

R ^{1a}	R ^{1a}
5-클로로-3-(CF ₃)피라졸-1-일	2,5-다이메틸-4-페리딜
5-브로모-3-메틸피라졸-1-일	3,6-다이클로로-2-페리딜
3,5-다이브로모피라졸-1-일	2,5-다이클로로-3-페리딜
5-브로모-3-(CF ₃)피라졸-1-일	2,5-다이클로로-4-페리딜
3,5-다이메틸-2-티에닐	4-브로모-3-페리다지닐
3,5-다이클로로-2-티에닐	4-(CF ₃)-2-페리미디닐
3,5-다이메틸-2-푸릴	3,6-다이메틸-2-페라지닐
4-메틸-2-(CF ₃)-5-티아졸릴	2,5-다이메틸-4-페리미디닐
4-메틸-2-(CF ₃)-5-옥사졸릴	4-메톡시-5-페리미디닐
1-메틸-4-(CF ₃)-2-이미다졸릴	3,6-다이메틸-4-페리다지닐
2,4-다이메틸-1-피롤릴	1-메틸-4-(CF ₃)이미다졸-2-일
1-메틸-3-(CF ₃)피라졸-5-일	3,5-비스-(CF ₃)피라졸-1-일
3-브로모-5-(CF ₃)피라졸-1-일	3-클로로-5-(CF ₃)피라졸-1-일
3-메틸-5-(CF ₃)피라졸-1-일	3,5-비스-(다이플루오로메톡시)피라졸-1-일
3-메톡시-5-(CF ₃)피라졸-1-일	3,5-다이메톡시피라졸-1-일
3,5-다이브로모피라졸-1-일	5-에톡시-3-메틸피라졸-1-일
5-메톡시-3-메틸피라졸-1-일	5-에톡시-3-(CF ₃)피라졸-1-일
5-메톡시-3-(CF ₃)피라졸-1-일	3,5-다이브로모트리아졸-1-일
3,5-다이클로로트리아졸-1-일	3-클로로-5-메틸트리아졸-1-일
3-메틸-5-클로로트리아졸-1-일	3-브로모-5-메틸트리아졸-1-일
3-메틸-5-브로모트리아졸-1-일	3-(CF ₃)-5-클로로트리아졸-1-일
3-클로로-5-(CF ₃)트리아졸-1-일	3-(CF ₃)-5-브로모트리아졸-1-일
3-브로모-5-(CF ₃)트리아졸-1-일	3,5-비스(CF ₃)트리아졸-1-일
<i>m</i> -부틸	트라이플루오로메톡시에틸
<i>i</i> -아밀	2-메톡시에톡시
3-메틸-2-부텐-1-일	3,3,3-트라이플루오로프로폭시
프로파르길	2,2,2-트라이플루오로에틸카르보닐옥시
4,4,4-트라이플루오로부탄-1-일	알릴옥시
3,3-다이클로로-2-프로펜-1-일	프로필티오
2-(CF ₃)사이클로프로필-1-일	3,3,3-트라이플루오로프로필티오
<i>i</i> -부톡시	3,3,3-트라이플루오로프로필아미노
2,2,2-트라이플루오로에톡시메틸	3,5-비스-(다이플루오로메틸)피라졸-1-일

[0640]

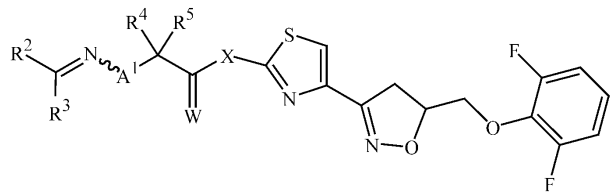
[0641]

본 발명은 또한 표 1b 내지 1d를 포함하며, 각각은 표 1a의 테이블 헤딩 (table heading) (즉, "A는 CHR¹⁵이고, R¹⁵은 H이며, X는 X-1이고, n은 0이다")이 하기에 나타난 각각의 테이블 헤딩으로 교체되는 것을 제외하고는, 상기 표 1a와 동일하게 구성된다. 예를 들어, 표 1b에서 테이블 헤딩은 "A는 CHR¹⁵이고, R¹⁵은 H이며, X는 X-2이고, n은 0이다"이며, R^{1a}는 상기 표 1a에 정의한 바와 같다. 따라서, 표 1b의 첫 번째 항목은 구체적으로, A가 CHR¹⁵이고, R¹⁵이 H이며, X가 X-2이고, n이 0이며, R^{1a}가 페닐인 화학식 1의 화합물을 개시한다.

표	테이블 헤딩			
	A는	X는	n	R ^{6b} 는
1b	CHR ¹⁵ 이고, R ¹⁵ 은 H이다	X-2	0	-
1c	CHR ¹⁵ 이고, R ¹⁵ 은 H이다	X-4	0	-
1d	CHR ¹⁵ 이고, R ¹⁵ 은 H이다	X-5	0	H

[0642]

[0643] [표 2]



W 는 O 이고, X 는 X-1 이며, n 은 0 이다.

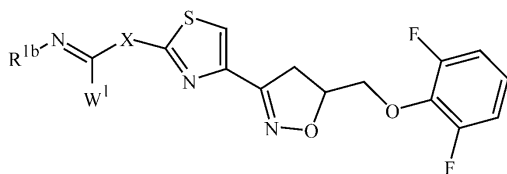
R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	A ¹
CH ₃	CH ₃	H	H	O
CH ₃	CH ₃	H	H	S
CH ₃	CH ₃	H	H	NH
CH ₃	CH ₃	H	H	N(Me)
CH ₃	CH ₃	H	H	CH ₂
CH ₃	CH ₃	H	H	OCH ₂
CH ₃	CH ₃	H	H	SCH ₂
CH ₃	CH ₃	H	H	NHCH ₂
CH ₃	CH ₃	H	H	-N(Me)CH ₂ -
CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	O
CH ₃	CH ₃	CH ₃	CH ₃	O
CH ₃	CH ₃	H	H	O
CF ₃	H	H	H	O
CF ₃	H	H	H	S
CF ₃	H	H	H	NH
CF ₃	H	H	H	N(Me)
CF ₃	H	H	H	CH ₂
CF ₃	H	H	H	OCH ₂
CF ₃	H	H	H	SCH ₂
CF ₃	H	H	H	NHCH ₂
CF ₃	H	H	H	-N(Me)CH ₂ -
CF ₃	CH ₃	H	H	O
CF ₃	CH ₃	H	H	S
CF ₃	CH ₃	H	H	NH
CF ₃	CH ₃	H	H	N(Me)
CF ₃	CH ₃	H	H	CH ₂
CF ₃	CH ₃	H	H	OCH ₂

[0644]

R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	A ¹
CF ₃	CH ₃	H	H	SCH ₂
CF ₃	CH ₃	H	H	NHCH ₂
CF ₃	CH ₃	H	H	-N(Me)CH ₂ -
CF ₃	H	Me	H	O
CF ₃	CH ₃	H	Me	O
CF ₃ CH ₂	H	H	H	O
CF ₃ CH ₂	CH ₃	H	H	O
Et	H	H	H	O
Et	CH ₃	H	H	O
CH ₃	H	H	H	O

[0645]

[0646] [표 3]

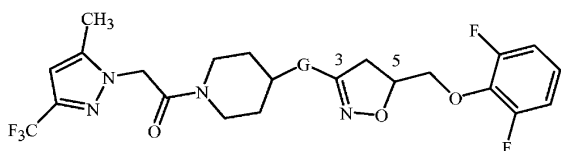


X는 X-1 이고, n은 0 이다.

R ^{1b}	W ¹	R ^{1b}	W ¹
2-메틸페닐	OMe	2-메톡시-5-메틸페닐	NHOH
2-메톡시페닐	SMe	2-메톡시-5-(CF ₃)-페닐	NHOMe
2-클로로페닐	NH ₂	2,5-다이메틸페닐	NHNH ₂
2-브로모페닐	NHOH	3,5-다이메틸피라졸-1-일	OMe
2-에틸페닐	NHOMe	3,5-다이클로로피라졸-1-일	SMe
2-에톡시페닐	NHNH ₂	3,5-다이브로모피라졸-1-일	NH ₂
2-(메틸티오)-페닐	OMe	3,5-비스-(CF ₃)-피라졸-1-일	NHOH
2-(트라이플루오로메톡시)-페닐	SMe	5-메틸-3-(CF ₃)-피라졸-1-일	NHOMe
3-클로로페닐	NH ₂	3,5-다이메틸-1,2,4-트라이아졸-1-일	NHNH ₂
3-브로모페닐	NHOH	3,5-다이클로로-1,2,4-트라이아졸-1-일	OMe
3-메틸페닐	NHOMe	3,5-다이브로모-1,2,4-트라이아졸-1-일	SMe
2,5-다이메틸페닐	NHNH ₂	<i>n</i> -부틸	NH ₂
2,5-다이클로로페닐	OMe	<i>i</i> -아밀	NHOH
2-클로로-5-(CF ₃)-페닐	SMe	3-메틸-2-부텐-1-일	NHOMe
2,5-다이브로모페닐	NH ₂	프로파르길	NHNH ₂
2-브로모-5-(CF ₃)-페닐	NHOH	4,4,4-트라이플루오로부탄-1-일	OMe
5-클로로-2-메틸페닐	NHOMe	3,3-다이클로로-2-프로펜-1-일	SMe
5-브로모-2-메틸페닐	NHNH ₂	2-CF ₃ 사이클로프로판-1-일	NH ₂
2-메틸-5-(CF ₃)-페닐	OMe	<i>i</i> -부톡시	NHOH
5-클로로-2-메톡시페닐	SMe	트라이플루오로메톡시에틸	NHOMe
5-브로모-2-메톡시페닐	NH ₂	3,3,3-트라이플루오로프로폭시	NHNH ₂

[0647]

[0648] [표 4]



[0649]

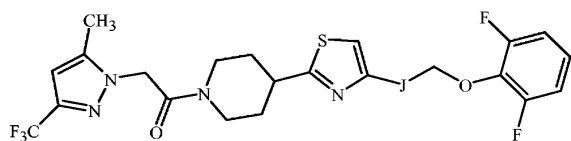
[0650]

표 4에서, 각각의 G 구조는 G의 좌측으로 돌출하는 결합이 화학식 1의 X (예를 들어, X-1)에 연결되고, G의 우측으로 돌출하는 결합이 J의 탄소 또는 질소에 결합되는 증거 3 (즉, G-1 내지 G-48)의 것이다. 예를 들어, 표 4에 기재된 첫 번째 화합물은 E가 E-1a이고, X가 X-1이며, n이 0이고, J가 J-29 (3/5)이며, x가 0이고, Z가 Z¹-1이며, 각 R¹²가 치환기 H이고, Q가 Q-45이며, (R^{9a})_p가 2,6-다이-F인 화학식 1의 화합물이다. J 다음에 나오는 괄호 안의 숫자는 G 및 Z (예를 들어, Z¹-1)에 대한 J 환의 부착점을 말한다. 첫번째 번호는 G가 부착되는 J 상의 환 위치이며, 두번째 번호는 Z가 부착되는 J 상의 환 위치이다.

G	R ^{29a}	R ^{30a}	G	R ^{29a}	R ^{30a}
G-2	H	-	G-26	H	-
G-3	H	1-Me	G-27	H	-
G-4	H	-	G-28	H	-
G-5	H	-	G-29	H	-
G-6	H	1-Me	G-29	5-Me	-
G-7	-	-	G-29	5-Cl	-
G-8	-	-	G-29	5-Br	-
G-9	-	1-Me	G-29	5-CF ₃	-
G-9	-	H	G-30	H	-
G-10	H	-	G-31	H	-
G-11	H	-	G-32	H	-
G-12	H	1-Me	G-33	H	-
G-13	H	H	G-34	H	-
G-14	H	-	G-35	H	-
G-14	5-Me	-	G-36	H	-
G-15	H	-	G-37	H	-
G-15	5-Me	-	G-38	H	-
G-16	H	1-Et	G-39	H	1-Me
G-17	H	-	G-40	H	-
G-18	H	-	G-41	H	-
G-19	-	H	G-42	H	1-Me
G-20	-	-	G-43	H	1-Me
G-21	-	-	G-44	H	-
G-22	H	1-Me	G-45	H	-
G-23	H	-	G-46	-	-
G-24	H	-	G-47	-	-
G-25	H	-	G-48	-	4-Me

[0651]

[0652] [표 5]



[0653]

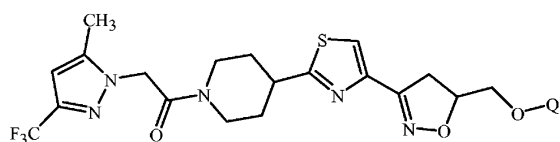
[0654]

표 5에서, J (예를 들어, J-1 내지 J-83)의 구조는 상기 실시 형태에서 증거 4에 나타나있으며, (R²³)_x 치환기가 존재하지 않는다. 상기 구조의 티아졸 환은 화학식 1의 G에 대응한다. J 다음에 나오는 괄호 안의 숫자는 G (즉, 티아졸) 및 Z (즉, Z¹-1)에 대한 J 환의 부착점을 말한다. 첫번째 번호는 G가 부착되는 J 상의 환 위치이며, 두번째 번호는 Z가 부착되는 J 상의 환 위치이다. 예를 들어, 표 5에 기재된 첫 번째 화합물은 E가 E-1a이고, X가 X-1이며, n이 0이고, G가 G-1이며, R^{29a}가 H이고, Z가 Z¹-1이며, 각 R¹²가 H이고, Q가 Q-45이며, (R^{9a})_p가 2,6-다이-F이고, J가 J-1 (2/4)인 화학식 1의 화합물이다.

J	J	J	J	J	J
J-1 (2/4)	J-9 (1/4)	J-24 (4/2)	J-32 (5/3)	J-44 (2/5)	J-70 (1/3)
J-1 (2/5)	J-9 (4/1)	J-24 (5/2)	J-32 (5/2)	J-44 (2/6)	J-71 (2/4)
J-1 (4/2)	J-10 (3/5)	J-25 (2/4)	J-32 (4/2)	J-45 (2/4)	J-71 (4/2)
J-1 (5/2)	J-10 (5/3)	J-25 (2/5)	J-33 (2/4)	J-45 (2/5)	J-72 (2/4)
J-2 (2/4)	J-11 (3/5)	J-25 (4/2)	J-33 (2/5)	J-45 (2/6)	J-72 (4/2)
J-2 (2/5)	J-11 (5/3)	J-25 (5/2)	J-33 (3/5)	J-46 (2/4)	J-73 (2/4)
J-2 (4/2)	J-12 (3/5)	J-26 (2/4)	J-33 (5/3)	J-46 (2/5)	J-73 (4/2)
J-2 (5/2)	J-12 (5/3)	J-26 (2/5)	J-33 (5/2)	J-46 (4/2)	J-73 (1/3)
J-3 (2/4)	J-12 (1/3)	J-26 (4/2)	J-33 (4/2)	J-46 (5/2)	J-73 (1/4)
J-3 (2/5)	J-12 (3/1)	J-26 (5/2)	J-34 (1/3)	J-47 (2/4)	J-73 (4/1)
J-3 (4/2)	J-13 (1/4)	J-26 (1/4)	J-34 (1/4)	J-47 (2/5)	J-74 (2/4)
J-3 (5/2)	J-13 (4/1)	J-26 (4/1)	J-34 (3/5)	J-47 (4/2)	J-74 (2/5)
J-3 (1/4)	J-14 (3/5)	J-27 (2/4)	J-34 (3/1)	J-47 (5/2)	J-74 (4/2)
J-3 (4/1)	J-14 (5/3)	J-27 (2/5)	J-34 (4/1)	J-48 (3/5)	J-74 (5/2)
J-4 (2/4)	J-15 (2/5)	J-27 (3/5)	J-35 (1/4)	J-49 (2/4)	J-74 (3/5)
J-4 (2/5)	J-16 (2/5)	J-27 (4/2)	J-35 (4/1)	J-49 (2/5)	J-74 (5/3)
J-4 (4/2)	J-17 (2/4)	J-27 (5/2)	J-36 (1/3)	J-49 (4/2)	J-75 (3/5)
J-4 (5/2)	J-17 (4/2)	J-27 (5/3)	J-36 (3/1)	J-49 (5/2)	J-75 (5/3)
J-4 (3/5)	J-18 (2/5)	J-28 (3/5)	J-36 (3/5)	J-50 (2/6)	J-75 (2/4)
J-4 (5/3)	J-18 (5/2)	J-28 (5/3)	J-36 (5/3)	J-51 (2/6)	J-75 (2/5)
J-5 (2/4)	J-19 (2/4)	J-29 (5/3)	J-37 (2/5)	J-52 (2/6)	J-75 (3/5)
J-5 (2/5)	J-19 (4/2)	J-30 (3/5)	J-37 (5/2)	J-53 (2/3)	J-75 (5/3)
J-5 (4/2)	J-20 (2/4)	J-30 (5/3)	J-37 (2/4)	J-54 (2/3)	J-76 (3/6)
J-5 (5/2)	J-20 (2/5)	J-30 (1/3)	J-37 (4/2)	J-55 (2/3)	J-76 (6/3)
J-5 (3/5)	J-20 (2/6)	J-30 (3/1)	J-38 (2/5)	J-56 (2/3)	J-77 (3/5)
J-5 (5/3)	J-20 (3/5)	J-30 (1/4)	J-38 (5/2)	J-57 (2/4)	J-77 (5/3)
J-6 (2/4)	J-20 (4/2)	J-30 (4/1)	J-38 (2/4)	J-58 (3/4)	J-78 (1/3)
J-6 (2/5)	J-20 (5/2)	J-31 (1/3)	J-38 (4/2)	J-59 (2/4)	J-79 (1/3)
J-6 (4/2)	J-21 (3/5)	J-31 (1/4)	J-39 (3/5)	J-60 (2/4)	J-79 (3/1)
J-6 (5/2)	J-21 (3/6)	J-31 (2/4)	J-39 (5/3)	J-61 (2/4)	J-80 (1/3)
J-6 (3/5)	J-21 (5/3)	J-31 (2/5)	J-40 (3/5)	J-62 (2/4)	J-80 (3/1)
J-6 (5/3)	J-22 (2/4)	J-31 (3/5)	J-40 (5/3)	J-63 (3/4)	J-81 (3/5)
J-6 (1/3)	J-22 (2/5)	J-31 (3/1)	J-41 (1/3)	J-64 (2/3)	J-81 (5/3)
J-6 (3/1)	J-22 (4/6)	J-31 (4/1)	J-41 (1/4)	J-65 (3/4)	J-82 (3/5)
J-7 (5/3)	J-22 (4/2)	J-31 (4/2)	J-42 (1/3)	J-66 (6/7)	J-82 (3/6)
J-7 (3/5)	J-22 (5/2)	J-31 (5/2)	J-42 (1/4)	J-67 (2/3)	J-82 (5/3)
J-8 (5/3)	J-23 (2/5)	J-32 (2/4)	J-43 (1/4)	J-68 (2/3)	J-82 (6/3)
J-8 (3/5)	J-23 (2/6)	J-32 (2/5)	J-44 (1/3)	J-69 (1/3)	J-83 (3/5)
J-9 (5/3)	J-24 (2/4)	J-32 (3/5)	J-44 (2/4)	J-69 (1/4)	J-83 (3/6)
J-9 (3/5)	J-24 (2/5)				

[0655]

[0656] [표 6]



[0657]

[0658] 표 6에서, 각각의 Q 구조는 증거 5 (즉, Q-1 내지 Q-102)의 것이다. Z에 대응하는 상기 구조의 -CH₂-O- 가교는 각 R¹²가 화학식 1의 H인 Z¹-1이다. 예를 들어, 표 6에 기재된 첫 번째 화합물은 E가 E-1a이고, X가 X-1이며, n이 0이고, G가 G-1이며, R^{29a}가 H이고, J가 J-29 (3/5)이며, (R²³)_x 치환기가 존재하지 않고, Z가 Z¹-1이며, 각 R¹²가 H인 화학식 1의 화합물이다.

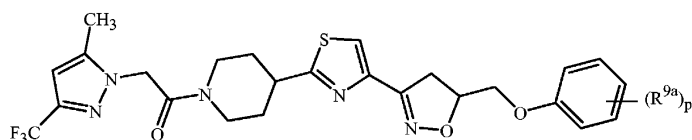
Q	(R ^{9a}) _p	R ^{9b}	Q	(R ^{9a}) _p	R ^{9b}
Q-1	H	-	Q-60	H	-
Q-2	H	-	Q-61	H	-
Q-3	H	1-CH ₃	Q-62	H	-
Q-4	2-Me	-	Q-63	H	-
Q-5	5-(2-F-벤질)	-	Q-63	5-Cl	-
Q-6	5-Ph	-	Q-63	5-CN	-
Q-7	2-Ph	-	Q-63	5-Ph	-
Q-8	H	-	Q-63	5-CF ₃	-
Q-9	H	-	Q-63	5-CH ₃	-
Q-10	H	1-CH ₃	Q-64	H	-
Q-11	H	1-CH ₃	Q-65	H	-
Q-12	H	1-CH ₃	Q-66	H	-
Q-13	H	4-CH ₃	Q-67	H	-
Q-14	H	1-CH ₃	Q-68	H	-
Q-15	5-(2-Cl-벤질)	-	Q-69	H	-
Q-16	Ph	-	Q-70	H	-
Q-17	Ph	-	Q-70	4-Cl	-
Q-18	H	-	Q-70	4-CH ₃	-
Q-19	H	-	Q-70	4-OCH ₃	-
Q-20	H	-	Q-70	5-F	-
Q-21	H	1-CH ₃	Q-70	5-Cl	-
Q-22	H	1-CH ₃	Q-70	6-F	-
Q-23	H	1-CH ₃	Q-71	H	-
Q-24	2-Ph	-	Q-71	5-Cl	-
Q-25	2-Ph	-	Q-72	H	H
Q-26	H	-	Q-72	H	1-CH ₃
Q-27	H	-	Q-72	H	1-CO ₂ CH ₃
Q-28	H	1-CH ₂ CH ₃	Q-72	H	1-OCH ₃
Q-29	Ph	-	Q-72	H	1-C(=O)CH ₃
Q-30	H	-	Q-73	H	-
Q-31	Ph	1-CH ₃	Q-74	H	-
Q-32	3-CH ₃	-	Q-75	H	3-CH ₃
Q-33	4-CH ₃	-	Q-76	H	-
Q-34	H	-	Q-77	H	-

[0659]

Q	(R ^{9a}) _p	R ^{9b}	Q	(R ^{9a}) _p	R ^{9b}
Q-35	4-Ph	-	Q-78	H	3-CH ₃
Q-36	H	-	Q-79	H	1-CH ₃
Q-37	H	-	Q-83	H	-
Q-38	H	-	Q-84	H	-
Q-39	H	-	Q-85	5,5-다이-CH ₃	-
Q-40	H	-	Q-86	H	1-CH ₃
Q-41	H	-	Q-86	5,5-다이-CH ₃	1-CH ₃
Q-42	H	-	Q-87	H	-
Q-43	H	-	Q-88	H	1-CH ₃
Q-44	H	-	Q-89	H	-
Q-45	H	-	Q-90	H	-
Q-46	H	-	Q-91	H	-
Q-47	H	-	Q-92	H	1-CH ₃
Q-48	2-F	-	Q-93	H	-
Q-50	H	-	Q-94	H	-
Q-51	H	-	Q-95	H	1-CH ₃
Q-52	H	-	Q-96	H	-
Q-53	H	-	Q-97	H	-
Q-54	H	-	Q-98	H	-
Q-55	H	-	Q-99	H	-
Q-56	H	-	Q-100	H	-
Q-57	H	-	Q-101	H	-
Q-58	H	-	Q-102	5,5-다이-CH ₃	1-CH ₃
Q-59	H	-			

[0660]

[0661] [표 7a]



[0662]

[0663] 예를 들어, 표 7에 기재된 첫 번째 화합물은 E가 E-1a이고, X가 X-1이며, n이 0이고, G가s G-1이며, R^{29a}가 H이고, J가 J-29 (3/5)이며, (R²³)_x 치환기가 존재하지 않고, Z가 Z¹-1이며, 각 R¹²가 H이고, Q가 Q-45인 화학식 1의 화합물이다.

$(R^{9a})_p$	$(R^{9a})_p$	$(R^{9a})_p$
2-F-4-CN	2-F-6-CN	2-F-4-CH ₃
2-F-6-CH ₃	2-F-4-CF ₃	2-F-6-CF ₃
2-F-4-OCH ₃	2-F-6-OCH ₃	2,6-다이-F-4-CN
2-F-3-Cl	2-F-3-CN	2-CH ₃ -6-OCH ₃
2-CH ₃ -6-CF ₃	2-CH ₃ -6-CN	2-CH ₃ -6-Cl
2,6-다이-F-4-CH ₃	2,6-다이-F-4-OCH ₃	2,6-다이-F-4-CF ₃
2,6-다이-F-4-Cl	2,4-다이-F-6-Cl	2,4,6-트라이-F
2,6-다이-Cl-4-F	2,4-다이-Cl-6-F	2,4,6-트라이-Cl
2-F-4,6-다이-Cl	2-Cl-4,6-다이-F	2,6-다이-F-4-Br
2,6-다이-Cl	2,6-다이-CH ₃	2,6-다이-OCH ₃
2,6-다이-CF ₃	2-F-4-OCF ₃	2-F-6-(1H-1,2,4-트리아졸-1-일)
2-F	2-OH	2-NH ₂
2-CN	2-NO ₂	2-CH ₃
3-Et	3-CH=CH ₂	2-C≡CH
2-사이클로프로필	2-사이클로헥실	2-CH ₂ -사이클로헥실
2-CF ₃	2-CH=CHCl	2-C≡CCl
3-OCH ₃	2-OCF ₃	3-SCH ₃
2-S(=O)CH ₃	3-SO ₂ CH ₃	2-SCF ₃
2-NH(CH ₃)	2-N(CH ₃) ₂	2-NH-사이클로헥실
2-CH ₂ OCH ₃	3-CH ₂ OH	2-C(=O)CH ₃
2-CO ₂ CH ₂ CH ₃	3-OC(=O)CH ₃	3-SC(=O)CH ₃
2-C(=O)NH(CH ₃)	2-C(=O)N(CH ₃) ₂	3-Si(CH ₃) ₃
2-페닐	2-(나프탈렌-1-일)	2-(피리딘-3-일)
3-(1H-1,2,4-트리아졸-1-일)	2-(4-포르폴리닐)	2-(2,6-다이-F-페닐)
2-[1,1'-바이사이클로프로필]-2-일		

[0664]

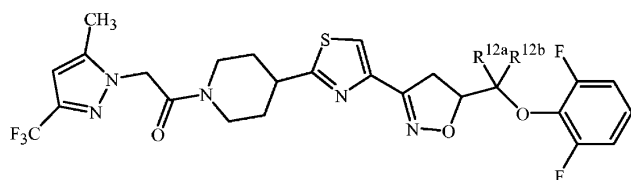
[0665]

본 발명은 또한 표 7b 내지 7v를 포함하며, 각각은 표 7a의 테이블 헤딩 (즉, "E는 E-1a이다")이 하기에 나타난 각각의 테이블 헤딩으로 교체되는 것을 제외하고는, 상기 표 7a와 동일하게 구성된다. 예를 들어, 표 7b에서 테이블 헤딩은 "E는 E-1b이다"이고, $(R^{9a})_p$ 는 상기 표 7a에 정의한 바와 같다. 따라서, 표 7b의 첫 번째 항목은 구체적으로, E-1b이고, X가 X-1이며, n이 0이고, G가 G-1이며, R^{29a} 가 H이고, J가 J-29 (3/5)이며, $(R^{23})_x$ 치환기가 존재하지 않고, Z가 Z¹-1이며, 각 R¹²가 H이고, Q가 Q-45이며, $(R^{9a})_p$ 가 2-F-4-CN인 화학식 1의 화합물을 개시한다.

표	테이블 헤딩	표	테이블 헤딩	표	테이블 헤딩
7b	E는 E-1b이다.	7j	E는 E-1j이다.	7r	E는 E-2c이다.
7c	E는 E-1c이다.	7k	E는 E-1k이다.	7s	E는 E-2d이다.
7d	E는 E-1d이다.	7l	E는 E-1l이다.	7t	E는 E-3a이다.
7e	E는 E-1e이다.	7m	E는 E-1m이다.	7u	E는 E-3b이다.
7f	E는 E-1f이다.	7n	E는 E-1n이다.	7v	E는 E-3c이다.
7g	E는 E-1g이다.	7o	E는 E-1o이다.	7w	E는 E-3d이다.
7h	E는 E-1h이다.	7p	E는 E-2a이다.		
7i	E는 E-1i이다.	7q	E는 E-2b이다.		

[0666]

[표 8]



[0668]

[0669]

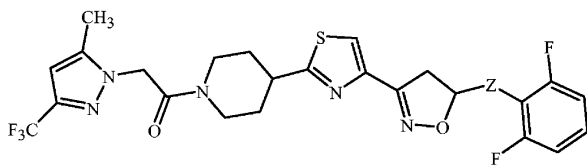
표 8에 기재된 첫 번째 화합물은 E가 E-1a이고, X가 X-1이며, n이 0이고, G가 G-1이며, R^{29a} 가 H이고, J가 J-29

(3/5)이며, $(R^{23})_x$ 치환기가 존재하지 않고, Z가 Z¹-1이며, Q가 Q-45이고, $(R^{9a})_p$ 가 2,6-다이-F인 화학식 1의 화합물이다.

R ^{12a}	R ^{12b}	R ^{12a}	R ^{12b}	R ^{12a}	R ^{12b}
H	F	H	CH ₂ CH ₃	H	C(=O)CH ₃
H	Br	CH ₃	CH ₃	H	C(=O)OCH ₃
H	Cl	H	OCH ₃	H	사이클로프로필
H	CN	H	CH ₂ OCH ₃	H	사이클로헥실
H	CH ₃				

[0670]

[0671] [표 9]



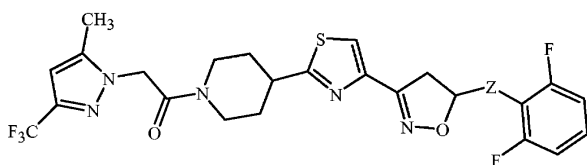
[0672]

표 9에서 Z (예를 들어, Z¹-3)의 구조는 발명의 요약에 나타나있다. 예를 들어, 표 9에 기재된 첫 번째 화합물은 E가 E-1a이고, X가 X-1이며, n이 0이고, G가 G-1이며, R^{29a}가 H이고, J가 J-29 (3/5)이며, $(R^{23})_x$ 치환기가 존재하지 않고, Q가 Q-45이며, $(R^{9a})_p$ 가 2,6-다이-F이고, Z가 Z¹-3이며, R^{12a}가 H이고, R^{12b}가 H이며, R¹³이 H인 화학식 1의 화합물이다.

Z	R ^{12a}	R ^{12b}	R ¹³	Z	R ^{12a}	R ^{12b}	R ¹³
Z ¹ -3	H	H	H	Z ¹ -28	-	-	-
Z ¹ -3	H	H	CH ₃	Z ¹ -30	H	H	-
Z ¹ -5	-	-	-	Z ¹ -31	-	-	CH ₃
Z ¹ -6	H	H	-	Z ¹ -32	-	-	CH ₃
Z ¹ -7	-	-	-	Z ¹ -33	H	H	CH ₃
Z ¹ -8	H	-	-	Z ¹ -34	H	H	CH ₃
Z ¹ -25	H	H	-	Z ¹ -35	-	-	CH ₃
Z ¹ -26	H	H	-	Z ¹ -36	-	-	CH ₃
Z ¹ -27	H	H	-	Z ¹ -37	-	-	CH ₃

[0674]

[0675] [표 10]



[0676]

표 10에서 Z가 Z¹ (예를 들어, Z¹-2)인 Z의 구조는 발명의 요약에 나타나있으며, Z가 Z-1 내지 Z-3인 Z의 구조는 실시 형태 126에 나타나있다. 예를 들어, 표 10에 기재된 첫 번째 화합물은 E가 E-1a이고, X가 X-1이며, n이 0이고, G가 G-1이며, R^{29a}가 H이고, J가 J-29 (3/5)이며, $(R^{23})_x$ 치환기가 존재하지 않고, Q가 Q-45이며, $(R^{9a})_p$ 가 2,6-다이-F이고, Z가 Z¹-2이며, 각 R¹²가 H이고, q가 0인 화학식 1의 화합물이다. Z에서 좌측으로 돌출하는 결합은 J에 연결되고, 우측으로 돌출하는 결합은 Q에 연결된다.

	Z		Z
Z ¹ -2	-CH ₂ S-	Z ¹ -19	-CH ₂ CH ₂ S(=O)-
Z ¹ -2	-CH ₂ S(=O)-	Z ¹ -19	-CH ₂ CH ₂ S(=O) ₂ -
Z ¹ -2	-CH ₂ S(=O) ₂ -	Z ¹ -20	-CH ₂ CH=CH-
Z ¹ -4	-CH=CH-	Z ¹ -21	-CH=CHCH ₂ -
Z ¹ -6	-CH ₂ C(=O)-	Z ¹ -22	-C(=O)CH ₂ CH(OH)-
Z ¹ -9	-CH(OH)CH(OH)-	Z ¹ -23	-CH ₂ C(=O)CH ₂ -
Z ¹ -10	-CH ₂ CH ₂ NH-	Z ¹ -24	-CH ₂ CH ₂ C(=O)-
Z ¹ -11	-OCH ₂ CH ₂ -	Z ¹ -29	-C(=O)CH=CH-
Z ¹ -12	-SCH ₂ CH ₂ -	Z ¹ -38	-NHC(=O)NH-
Z ¹ -13	-NHCH ₂ CH ₂ -	Z ¹ -39	-C(=NOH)CH=CH-
Z ¹ -14	-CH ₂ OCH ₂ -	Z ¹ -40	-CH=CHC(=NOH)-
Z ¹ -15	-CH ₂ NHCH ₂ -	Z ¹ -41	-CH ₂ C(=NOH)CH ₂ -
Z ¹ -16	-CH ₂ CH ₂ O-	Z ¹ -42	-CH=CHC(=O)-
Z ¹ -17	-CH(OH)CH ₂ CH(OH)-	Z-1	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ O-
Z ¹ -18	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	Z-2	-CH ₂ C(=O)NHCH ₂ -
Z ¹ -19	-CH ₂ CH ₂ S-	Z-3	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ O-

[0678]

[0679] 제형/유용성

[0680] 본 발명의 화학식 1의 화합물 (이의 *N*-옥사이드 및 염 포함)은 일반적으로 담체로서 작용하는 계면활성제, 고체 희석제 및 액체 희석제로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 적어도 하나의 추가 성분과 함께, 조성물, 즉, 제형 중의 살진균제 활성 성분으로서 사용될 것이다. 제형 또는 조성물 성분은 활성 성분의 물리적 특성, 적용 방식 및 환경 인자, 예를 들어, 토양형, 수분 및 온도와 상응하도록 선택된다.

[0681] 유용한 제형은 액체 조성물 및 고체 조성물을 포함한다. 액체 조성물은 용액 (유제 (emulsifiable concentrate) 포함), 현탁제, 에멀전 (마이크로에멀전 및/또는 유현탁제 (suspoemulsion) 포함) 등을 포함하며, 이들은 임의로 젤로 증점될 수 있다. 수성 액체 조성물의 일반적인 유형은 액체 (soluble concentrate), 액상 수화제 (suspension concentrate), 캡슐 현탁제, 농축 에멀전, 마이크로에멀전 및 유현탁제이다. 비수성 액체 조성물의 일반적인 유형은 유제, 마이크로유제 (microemulsifiable concentrate), 분산성 액체 (dispersible concentrate) 및 오일 분산액이다.

[0682] 고체 조성물의 일반적인 유형은 분체 (dust), 분말, 과립, 펠릿, 환약, 향정 (pastille), 정제, 충전 필름 (종자 코팅 포함) 등이 있으며, 이들은 수분산성 ("습윤성") 또는 수용성일 수 있다. 필름 형성 용액 또는 유동성 현탁제로 형성되는 필름 및 코팅이 종자 처리에 특히 유용하다. 활성 성분은 (마이크로)캡슐화될 수 있으며, 추가로 현탁 제형 또는 고체 제형으로 형성될 수 있거나; 또는 활성 성분의 전체 제형은 캡슐화 (또는 "오버코팅")될 수 있다. 캡슐화는 활성 성분의 방출을 제어하거나 지연시킬 수 있다. 유화성 (emulsifiable) 과립은 유제 제형과 건조 과립 제형의 이점을 모두 갖추고 있다. 고강도 조성물은 주로 추가 제형을 위한 중간체로서 사용된다.

[0683] 분무형 제형은 전형적으로 분무 전에 적절한 매질에서 증량된다. 그러한 액체 및 고체 제형은 보통 물인 분무 매질에서 용이하게 희석되도록 제형화된다. 분무량 (Spray volume)은 헥타르 당 약 1 내지 수천 리터 범위일 수 있으나, 보다 전형적으로는 헥타르 당 약 10 내지 수백 리터 범위이다. 분무형 제형은 공중 또는 지상 적용에 의한 경엽 처리를 위해, 또는 식물의 생육 배지에로의 적용을 위해 물 또는 다른 적절한 매질과 탱크 혼합될 수 있다. 액체 및 건조 제형은 식재 동안에 점적 관개 시스템 내로 직접 계량되거나 도랑 내로 계량될 수 있다. 액체 및 고체 제형은 전신 흡수 (systemic uptake)를 통해 발육 중인 뿌리 및 다른 지하 식물 부분 및/또는 경엽을 보호하기 위해 식재 이전에 종자 처리로서 작물 종자 및 다른 원하는 초목 상에 적용될 수 있다.

[0684] 제형은 전형적으로 총 100 중량%가 되는 하기의 근사적인 범위 내에서 유효량의 활성 성분, 희석제 및 계면활성제를 함유할 것이다.

	중량%		
	활성 성분	희석제	계면활성제
수분산성 및 수용성 파립, 정제 및 분말	0.001-90	0-99.999	0-15
오일 분산액, 현탁제, 에멀전, 용액 (유제 포함)	1-50	40-99	0-50
분제	1-25	70-99	0-5
파립 및 펠렛	0.001-95	5-99.999	0-15
고강도 조성물	90-99	0-10	0-2

[0685]

[0686]

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

[0687]

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

[0688]

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

[0689]

계면활성제는 비이온성, 음이온성 또는 양이온성으로 분류될 수 있다. 본 발명의 조성물에 유용한 비이온성 계면활성제로는 알코올 알콕실레이트, 예컨대 천연 및 합성 알코올 (분지상 또는 직쇄상일 수 있음) 계이며, 알코올 및 에틸렌 옥사이드, 프로필렌 옥사이드, 부틸렌 옥사이드 또는 이들의 혼합물로부터 제조된 알코올 알콕실레이트; 아민 에톡실레이트, 알칸올아미드 및 에톡실화 알칸올아미드; 알콕실화 트라이글리세라이드, 예를 들어 에톡실화 대두유, 피마자유 및 평지씨유; 알킬페놀 알콕실레이트, 예를 들어 옥틸페놀 에톡실레이트, 노닐페놀 에톡실레이트, 다이노닐 페놀 에톡실레이트 및 도데실 페놀 에톡실레이트 (페놀과 에틸렌 옥사이드, 프로필렌 옥사이드, 부틸렌 옥사이드 또는 이들의 혼합물로부터 제조됨); 에틸렌 옥사이드 또는 프로필렌 옥사이드로부터 제조된 블록 중합체 및 역 블록 중합체 (말단 블록이 프로필렌 옥사이드로부터 제조됨); 에톡실화 지방산; 에톡실화 지방 에스테르 및 오일; 에톡실화 메틸 에스테르; 에톡실화 트라이스티릴페놀 (에틸렌 옥사이드, 프로필렌 옥사이드, 부틸렌 옥사이드 또는 이들의 혼합물로부터 제조된 것들을 포함); 지방산 에스테르, 글리세롤 에스테르, 라놀린계 유도체, 폴리에톡실레이트 에스테르, 예컨대 폴리에톡실화 소르비탄 지방산 에스테르, 폴리에톡실

화 소르비톨 지방산 에스테르 및 폴리에톡실화 글리세롤 지방산 에스테르; 기타 소르비탄 유도체, 예컨대 소르비탄 에스테르; 폴리머 계면활성제, 예컨대 랜덤 공중합체, 블록 공중합체, 알키드 peg (폴리에틸렌 글리콜) 수지, 그래프트 또는 콤 (comb) 중합체 및 스타 중합체; 폴리에틸렌 글리콜 (peg); 폴리에틸렌 글리콜 지방산 에스테르; 실리콘계 계면활성제; 및 당 유도체, 예컨대 수크로스 에스테르, 알킬 폴리글리코사이드 및 알킬 폴리사카라이드를 들 수 있으나, 이들에 한정되지 않는다.

[0690] 유용한 음이온성 계면활성제로는 알킬아릴 설포산 및 이의 염; 카르복실레이트화 알코올 또는 알킬페놀 에톡실레이트; 다이페닐 설포네이트 유도체; 리그닌 및 리그닌 유도체, 예를 들어 리그노설포네이트; 말레산 또는 석신산 또는 이들의 무수물; 올레핀 설포네이트; 포스페이트 에스테르, 예컨대 알코올 알콕실레이트의 포스페이트 에스테르, 알킬페놀 알콕실레이트의 포스페이트 에스테르 및 스티릴 페놀 에톡실레이트의 포스페이트 에스테르; 단백질을 계면활성제; 사르코신 유도체; 스티릴 페놀 에테르 설페이트; 오일 및 지방산의 설페이트 및 설포네이트; 에톡실화 알킬페놀의 설페이트 및 설포네이트; 알코올의 설페이트; 에톡실화 알코올의 설페이트; 아민 및 아미드의 설포네이트, 예컨대 *N,N*-알킬타우레이트; 벤젠, 쿠멘, 톨루엔, 자일렌, 및 도데실벤젠 및 트라이데실벤젠의 설포네이트; 축합된 나프탈렌의 설포네이트; 나프탈렌 및 알킬 나프탈렌의 설포네이트; 분별 증류된 (fractionated) 석유의 설포네이트; 설포석시나메이트; 및 설포석시네이트 및 이들의 유도체, 예컨대 다이알킬 설포석시네이트 염을 들 수 있으나, 이들에 한정되지 않는다.

[0691] 유용한 양이온성 계면활성제로는 아미드 및 에톡실화 아미드; 아민, 예컨대 *N*-알킬 프로판다이아민, 트라이프로필렌트리아민 및 다이프로필렌테트라민, 및 에톡실화 아민, 에톡실화 다이아민 및 프로폭실화 아민 (아민과 에틸렌 옥사이드, 프로필렌 옥사이드, 부틸렌 옥사이드 또는 이들의 혼합물로부터 제조됨); 아민 염, 예컨대 아민 아세테이트 및 다이아민 염; 사차 암모늄 염, 예컨대 사차 염, 에톡실화 사차 염 및 이중사차 (diquaternary) 염; 및 아민 옥사이드, 예컨대 알킬다이메틸아민 옥사이드 및 비스-(2-하이드록시에틸)-알킬아민 옥사이드를 들 수 있으나, 이들에 한정되지 않는다.

[0692] 비이온성 계면활성제와 음이온성 계면활성제의 혼합물, 또는 비이온성 계면활성제와 양이온성 계면활성제의 혼합물도 본 발명의 조성물에 유용하다. 비이온성, 음이온성 및 양이온성 계면활성제 및 이들의 추천 용도는 문헌 [참조: *McCutcheon's Emulsifiers and Detergents*, annual American and International Editions published by McCutcheon's Division, The Manufacturing Confectioner Publishing Co.]; 문헌 [참조: *Sisely and Wood, Encyclopedia of Surface Active Agents*, Chemical Publ. Co., Inc., New York, 1964]; 및 문헌 [참조: *A. S. Davidson and B. Milwidsky, Synthetic Detergents*, Seventh Edition, John Wiley and Sons, New York, 1987]을 비롯한 다양한 간행된 참고문헌에 개시되어 있다.

[0693] 본 발명의 조성물은 또한 제형 조제로서 당업자에게 알려진 제형 보조제 및 첨가제를 함유할 수 있다 (이들 중 일부는 또한 고체 희석제, 액체 희석제 또는 계면활성제로 기능하는 것으로 간주될 수 있음). 그러한 제형 보조제 및 첨가제는 pH (완충제), 가공 중의 발포 (소포제, 예를 들어, 폴리오르가노실록산), 활성 성분의 침강 (현탁화제), 점도 (요변성 증점제), 용기내 (in-container) 미생물 생장 (항균제), 제품 동결 (부동제), 색상 (염료/안료 분산액), 워시-오프 (필름 형성제 또는 스티커), 증발 (증발 지연제), 및 다른 제형 속성을 제어할 수 있다. 필름 형성제는 예를 들어, 폴리비닐 아세테이트, 폴리비닐 아세테이트 공중합체, 폴리비닐피롤리돈-비닐 아세테이트 공중합체, 폴리비닐 알코올, 폴리비닐 알코올 공중합체 및 왁스를 포함한다. 제형 보조제 및 첨가제의 예로는 문헌 [참조: *McCutcheon's Volume 2: Functional Materials*, annual International and North American editions published by McCutcheon's Division, The Manufacturing Confectioner Publishing Co.]; 및 국제 특허 출원 공개 제WO 03/024222호에 열거된 것들을 들 수 있다.

[0694] 화학식 1의 화합물 및 임의의 다른 활성 성분은 전형적으로 활성 성분을 용매에 용해시키거나 액체 또는 건조 희석제에서 분쇄함으로써 본 발명의 조성물 내로 혼입된다. 유제를 비롯한 용액은 성분들을 단순히 혼합함으로써 제조될 수 있다. 유제로서 사용하려는 액체 조성물의 용매가 수불혼화성인 경우에는, 물로 희석시에 활성제 함유 용매를 유화시키기 위하여 유화제가 전형적으로 첨가된다. 2,000 μm 이하의 입경을 가진 활성 성분 슬러리는 매체 밀을 이용하여 습식 밀링하여, 평균 직경이 3 μm 미만인 입자를 얻을 수 있다. 수성 슬러리는 완성된 액상 수화제로 제조되거나 (예를 들어, 미국 특허 제3,060,084호 참조) 또는 분무 건조에 의해 추가로 가공되어 수분산성 과립을 형성할 수 있다. 건조 제형은 통상 건식 밀링 공정을 필요로 하며, 이것에 의해 2 내지 10 μm 범위의 평균 입경이 형성된다. 분제 및 분말은 블렌딩 및 통상 분쇄 (예를 들어, 해머 밀 또는 유체 에너지 밀을 이용)에 의해 제조될 수 있다. 과립 및 펠릿은 활성 물질을 미리 형성된 과립 담체 상에 분무함으로써 또는 응집 기술에 의해 제조될 수 있다. 문헌 [Browning, "Agglomeration", *Chemical Engineering*, December 4, 1967, pp 147-48], 문헌 [Perry's *Chemical Engineer's Handbook*, 4th Ed., McGraw-Hill, New York, 1963,

pages 8-57 및 그 이하] 및 국제 특허 출원 공개 제W0 91/13546호를 참조한다. 펠릿은 미국 특허 제4,172,714호에 기재된 바와 같이 제조될 수 있다. 수분산성 및 수용성 과립은 미국 특허 제4,144,050호, 제3,920,442호 및 독일 특허 제3,246,493호에 교시된 바와 같이 제조될 수 있다. 정제는 미국 특허 제5,180,587호, 제5,232,701호 및 제5,208,030호에 교시된 바와 같이 제조될 수 있다. 필름은 영국 특허 제2,095,558호 및 미국 특허 제3,299,566호에 교시된 바와 같이 제조될 수 있다.

[0695] 제형화 분야에 관한 추가의 정보에 대해서는, 문헌 [T. S. Woods, "The Formulator's Toolbox - Product Forms for Modern Agriculture" in *Pesticide Chemistry and Bioscience, The Food-Environment Challenge*, T. Brooks and T. R. Roberts, Eds., Proceedings of the 9th International Congress on Pesticide Chemistry, The Royal Society of Chemistry, Cambridge, 1999, pp. 120-133]을 참조한다. 또한 미국 특허 제3,235,361호, 컬럼 6, 16행 내지 컬럼 7, 19행 및 실시예 10 내지 41; 미국 특허 제3,309,192호, 컬럼 5, 43행 내지 컬럼 7, 62행 및 실시예 8, 12, 15, 39, 41, 52, 53, 58, 132, 138 내지 140, 162 내지 164, 166, 167 및 169 내지 182; 미국 특허 제2,891,855호, 컬럼 3, 66행 내지 컬럼 5, 17행 및 실시예 1 내지 4; 문헌 [Klingman, *Weed Control as a Science*, John Wiley and Sons, Inc., New York, 1961, pp 81-96]; 문헌 [Hance et al., *Weed Control Handbook*, 8th Ed., Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1989]; 및 문헌 [*Developments in formulation technology*, PJB Publications, Richmond, UK, 2000]을 참조한다.

[0696] 하기 실시예에서, 모든 백분율은 중량 기준이며, 모든 제형은 통상적인 방식으로 제조된다. 화합물 번호는 인덱스 표 A 내지 B의 화합물을 말한다. 더 이상 상술하지 않고도, 상술한 설명을 이용하는 당업자라면 본 발명을 최대한으로 이용할 수 있을 것으로 여겨진다. 그러므로, 하기 실시예는 단순히 예시적인 것으로 그리고 어떠한 임의의 방식으로든 본 개시 내용을 한정하지 않는 것으로 해석되어야 한다. 달리 표시되는 경우를 제외하고는 백분율은 중량 기준이다.

[0697] 실시예 A

고강도 농축물		
화합물 2		98.5%
실리카 에어로젤		0.5%
합성 비결정질 미세 실리카		1.0%

[0698]

[0699] 실시예 B

습윤성 분말		
화합물 10		65.0%
도데실페놀 폴리메틸렌 글리콜 에테르		2.0%
소듐 리그닌설포네이트		4.0%
소듐 실리코알루미네이트		6.0%
몬트모릴로나이트 (소성됨)		23.0%

[0700]

[0701] 실시예 C

과립		
화합물 16		10.0%
에터펄자이트 과립 (저 휘발성 물질, 0.71/0.30 mm; U.S.S. No. 25-50 시브 (sieve))		90.0%

[0702]

[0703] 실시예 D

압출 펠릿		
화합물 2		25.0%
무수 황산나트륨		10.0%
조제의 칼슘 리그닌설포네이트		5.0%
소듐 알킬나프탈렌설포네이트		1.0%
칼슘/마그네슘 벤토나이트		59.0%

[0704]

[0705] 실시예 E

유제	
화합물 10	10.0%
폴리옥시에틸렌 소르비톨 헥사올레이트	20.0%
C ₆ -C ₁₀ 지방산 메틸 에스테르	70.0%

[0706]

[0707] 실시예 F

마이트로에멀전	
화합물 16	5.0%
폴리비닐피롤리돈-비닐 아세테이트 공중합체	30.0%
알킬폴리글리코사이드	30.0%
글리세릴 모노올레이트	15.0%
물	20.0%

[0708]

[0709] 실시예 G

종자 처리	
화합물 2	20.00%
폴리비닐피롤리돈-비닐 아세테이트 공중합체	5.00%
몬탄산 왁스	5.00%
칼슘 리그닌설포네이트	1.00%
폴리옥시에틸렌/폴리옥시프로필렌 블록 공중합체	1.00%
스테아릴 알코올 (POE 20)	2.00%
폴리오르가노실란	0.20%
착색제 적색 염료	0.05%
물	65.75%

[0710]

[0711] 수용성 및 수분산성 제형은 전형적으로 적용 전에 물로 희석되어, 수성 조성물이 형성된다. 식물 또는 이의 부분에 직접 적용하기 위한 수성 조성물 (예를 들어, 분무 탱크 조성물)은 전형적으로 적어도 약 1 ppm 이상 (예를 들어, 1 ppm 내지 100 ppm)의 본 발명의 화합물(들)을 포함한다.

[0712] 본 발명의 화합물은 식물병 방제제로서 유용하다. 따라서, 본 발명은 또한 유효량의 본 발명의 화합물 또는 상기 화합물을 함유하는 살진균제 조성물을 보호할 식물 또는 이의 부분, 또는 보호할 식물 종자에 적용하는 것을 포함하는, 진균 식물 병원체에 의한 식물병을 방제하는 방법을 포함한다. 본 발명의 화합물 및/또는 조성물은 담자균류 (Basidiomycete), 자낭균류 (Ascomycete), 난균류 (Oomycete) 및 불완전 균류 (Deuteromycete)의 광범위한 진균 식물 병원체에 의한 병해 방제를 제공한다. 이들은 광범위한 식물병, 특히 관상용, 잔디, 야채, 농작물, 곡물, 및 과실 작물의 경엽 병원체를 방제하는데 유효하다. 이러한 병원체는 *파이토프토라* (*Phytophthora*) 병, 예컨대 *파이토프토라 인페스탄스* (*Phytophthora infestans*), *파이토프토라 메가스페르마* (*Phytophthora megasperma*), *파이토프토라 파라시티카* (*Phytophthora parasitica*), *파이토프토라 신나모미* (*Phytophthora cinnamomi*) 및 *파이토프토라 캡사이시* (*Phytophthora capsici*), *피티움* (*Pythium*) 병, 예컨대 *피티움 아파니데르마툼* (*Pythium aphanidermatum*), 및 페로노스포라세아에 패밀리 (Peronosporaceae family)의 병, 예컨대 *플라스모파라 비티콜라* (*Plasmopara viticola*), *페로노스포라 스피시스* (*Peronospora* spp.) (*페로노스포라 타바시나* (*Peronospora tabacina*) 및 *페로노스포라 파라시티카* (*Peronospora parasitica*) 포함), *슈도페로노스포라 스피시스* (*Pseudoperonospora* spp.) (*슈도페로노스포라 쿠벤시스* (*Pseudoperonospora cubensis*) 포함) 및 *브레미아 락투카에* (*Bremia lactucae*)를 포함하는 난균류; *알테르나리아* (*Alternaria*) 병, 예컨대 *알테르나리아 솔라니* (*Alternaria solani*) 및 *알테르나리아 브라시카에* (*Alternaria brassicae*), *귀그나르디아* (*Guignardia*) 병, 예컨대 *귀그나르디아 비드웰* (*Guignardia bidwell*), *벤틀리아* (*Venturia*) 병, 예컨대 *벤틀리아 이나에퀼리스* (*Venturia inaequalis*), *셉토리아* (*Septoria*) 병, 예컨대 *셉토리아 노도룸* (*Septoria nodorum*) 및 *셉토리아 트리티시* (*Septoria tritici*), 흰가루병, 예컨대 *에리시페 스피시스* (*Erysiphe* spp.) (*에리시페 그라미니스* (*Erysiphe graminis*) 및 *에리시페 폴리고니* (*Erysiphe polygoni*) 포함), *운시눌라 네카투르* (*Uncinula necatur*), *스파에로테카 폴리게나* (*Sphaerotheca fuliginea*) 및 *포도스파에라 류코트리카* (*Podosphaera leucotricha*), *슈도세르코스포렐라 헤르포르트릭코이데스* (*Pseudocercospora herpotrichoides*), *보트리티스* (*Botrytis*) 병, 예컨대 *보트리티스 시네레아* (*Botrytis cinerea*), *모닐리니아 프루티콜라* (*Monilinia fructicola*), *스클레로티니아* (*Sclerotinia*) 병, 예컨대 *스클레로티니아 스킴로티옴*

(*Sclerotinia sclerotiorum*), 마그나포르테 그리세아 (*Magnaporthe grisea*), 포몹시스 비티콜라 (*Phomopsis viticola*), 헬민토스포리움 (*Helminthosporium*) 병, 예컨대 헬민토스포리움 트리티시 레펜티스 (*Helminthosporium tritici repentis*), 피레노포라 테레스 (*Pyrenophora teres*), 안트라크노세 (anthracnose) 병, 예컨대 글로메렐라 (*Glomerella*) 또는 콜레토티리쿰 스피시스 (*Colletotrichum* spp.) (예컨대 콜레토티리쿰 그라미니콜라 (*Colletotrichum graminicola*) 및 콜레토티리쿰 오르비쿨라레 (*Colletotrichum orbiculare*)), 및 가에우만노마이세스 그라미니스 (*Gaeumannomyces graminis*)를 포함하는 자낭균류; 푸시니아 스피시스 (*Puccinia* spp.) (예컨대 푸시니아 레콘디타 (*Puccinia recondita*), 푸시니아 스트리이포르미스 (*Puccinia striiformis*), 푸시니아 호르데이 (*Puccinia hordei*), 푸시니아 그라미니스 (*Puccinia graminis*) 및 푸시니아 아라키디스 (*Puccinia arachidis*)), 헤밀레이아 바스타트릭스 (*Hemileia vastatrix*) 및 파콥소라 파키리지 (*Phakopsora pachyrhizi*)에 의한 녹병 (rust disease)을 포함하는 담자균류; 루트스트로에미아 플로코숨 (*Rutstroemia floccosum*; 스클레로티니아 호모에오카르파 (*Sclerotinia homoeocarpa*)으로도 공지됨)을 비롯한 다른 병원체; 리조크토니아 스피시스 (*Rhizoctonia* spp.) (예컨대, 리조크토니아 솔라니 (*Rhizoctonia solani*)); 푸사리움 (*Fusarium*) 병, 예컨대 푸사리움 로세움 (*Fusarium roseum*), 푸사리움 그라미네아룸 (*Fusarium graminearum*) 및 푸사리움 옥시스포룸 (*Fusarium oxysporum*); 베르티실리움 달리아에 (*Verticillium dahliae*); 스클레로티움 롤프시 (*Sclerotium rolfsii*); 린코스포리움 세칼리스 (*Rhynchosporium secalis*); 세르코스포리디움 페르소나툼 (*Cercosporidium personatum*), 세르코스포라 아라키디콜라 (*Cercospora arachidicola*) 및 세르코스포라 베티콜라 (*Cercospora beticola*); 및 이들 병원체와 근연 관계에 있는 기타 속 (genus) 및 종을 포함한다. 조성물 또는 배합물은 이들의 살균 활성 이외에도, 박테리아, 예컨대 에르위니아 아밀로보라 (*Erwinia amylovora*), 크산토모나스 캄페스트리스 (*Xanthomonas campestris*), 슈도모나스 시린가에 (*Pseudomonas syringae*), 및 다른 근연 종에 대한 활성도 갖는다.

[0713] 식물병 방제는 통상 유효량의 본 발명의 화합물을 감염-전이나 감염-후에 보호할 식물의 부분, 예컨대 뿌리, 줄기, 경엽, 열매, 종자, 덩이 줄기 또는 구근, 또는 보호할 식물이 생육하고 있는 매지 (토양 또는 샌드)에 적용함으로써 달성된다. 화합물은 또한 종자 및 종자에서 발생하는 모종을 보호하도록 종자에 적용될 수 있다. 화합물은 또한 식물을 처리하도록 관개 용수를 통해 적용될 수 있다.

[0714] 이들 화합물의 적용량 (rate of application) (즉, 살진균적 유효량)은 방제할 식물병, 보호할 식물종, 주위 습도 및 온도와 같은 인자에 의해 영향을 받을 수 있으며, 실제 사용 조건하에 결정되어야 한다. 당업자는 원하는 레벨의 식물병 방제에 필요한 살진균적 유효량을 간단한 실험을 통하여 용이하게 결정할 수 있다. 경엽은 통상 활성 성분 약 1 g/ha 미만 내지 약 5,000 g/ha의 비율로 처리되는 경우에 보호될 수 있다. 종자 및 모종은 통상 종자가 종자 1 킬로그램 당 약 0.1 내지 약 10 g의 비율로 처리되는 경우에 보호될 수 있다.

[0715] 본 발명의 화합물은 또한 살진균제, 살충제, 살선충제, 살세균제 (bactericide), 진드기 구충제, 제초제, 제초제 완화제, 생장 조절제, 예컨대 곤충 탈피 억제제 (insect molting inhibitor) 및 발근 촉진제 (rooting stimulant), 불임화제, 신호 화학물질 (semiochemical), 방충제, 유인 물질, 페로몬, 섭식 촉진 물질, 식물 영양소, 다른 생물 활성 화합물 또는 곤충병원성 세균, 곤충병원성 바이러스 또는 곤충병원성 진균을 비롯한 하나 이상의 다른 생물 활성 화합물 또는 생물 활성제와 혼합되어, 훨씬 더 광범위한 농업 보호를 부여하는 다성분 농약을 생성할 수 있다. 따라서, 본 발명은 또한 화학식 1의 화합물 (살진균적 유효량으로) 및 적어도 하나의 추가의 생물 활성 화합물 또는 생물 활성제 (생물학적 유효량으로)를 포함하는 조성물에 관한 것으로, 추가로 계면활성제, 고체 희석제 또는 액체 희석제 중 적어도 하나를 포함할 수 있다. 다른 생물 활성 화합물 또는 생물 활성제는 계면활성제, 고체 희석제 또는 액체 희석제 중 적어도 하나를 포함하는 조성물 중에서 제형화될 수 있다. 본 발명의 혼합물에 관해서는, 하나 이상의 다른 생물 활성 화합물 또는 생물 활성제는 프리믹스 (premix)를 형성하도록 화학식 1의 화합물과 함께 제형화될 수 있거나, 하나 이상의 다른 생물 활성 화합물 또는 생물 활성제는 화학식 1의 화합물과는 별도로 제형화될 수 있으며, 제형은 적용 전에 함께 배합되거나 (예를 들어, 스프레이 탱크 중에서), 연속하여 적용된다.

[0716] 화학식 1의 화합물 이외에도, 부류 (1) 메틸 벤즈이미다졸 카르바메이트 (MBC) 살진균제; (2) 다이카르복스이미드 살진균제; (3) 탈메틸화 저해제 (DMI) 살진균제; (4) 페닐아미드 살진균제; (5) 아민/모르폴린 살진균제; (6) 인지질 생합성 저해제 살진균제; (7) 카르복스아미드 살진균제; (8) 하이드록시(2-아미노-)피리미딘 살진균제; (9) 아닐리노피리미딘 살진균제; (10) N-페닐 카르바메이트 살진균제; (11) 퀴논 아웃사이드 (outside) 저해제 (QoI) 살진균제; (12) 페닐피롤 살진균제; (13) 퀴놀린 살진균제; (14) 지질 과산화 저해제 살진균제; (15) 멜라닌 생합성 저해제-환원 효소 (MBI-R) 살진균제; (16) 멜라닌 생합성 저해제-탈수 효소 (MBI-D) 살진균제; (17) 하이드록시아닐리드 살진균제; (18) 스쿠알렌-에폭시다아제 저해제 살진균제; (19) 폴리옥신

살진균제; (20) 페닐우레아 살진균제; (21) 퀴논 인사이드 (inside) 저해제 (QiI) 살진균제; (22) 벤즈아미드 살진균제; (23) 에노피라누론산 (enopyranuronic acid) 항생제 살진균제; (24) 헥소피라노실 항생제 살진균제; (25) 글루코피라노실 항생제; 단백질 합성 살진균제; (26) 글루코피라노실 항생제; 트레할라아제 및 이노시톨 생합성 살진균제; (27) 시아노아세트아미드옥심 살진균제; (28) 카르바메이트 살진균제; (29) 산화적 인산화 언커플링 (uncoupling) 살진균제; (30) 유기 주석 살진균제; (31) 카르복실산 살진균제; (32) 헤테로 방향족 살진균제; (33) 포스포네이트 살진균제; (34) 프탈람산 (phthalamic acid) 살진균제; (35) 벤조트리아진 살진균제; (36) 벤젠-설폰아미드 살진균제; (37) 피리다지논 살진균제; (38) 티오펜-카르복사미드 살진균제; (39) 피리미딘아미드 살진균제; (40) 카르복실산 아미드 (CAA) 살진균제; (41) 테트라사이클린 항생제 살진균제; (42) 티오펜-카르바메이트 살진균제; (43) 벤즈아미드 살진균제; (44) 숙주 식물 방어 유도 살진균제; (45) 멀티사이트 접촉 활성 살진균제; (46) 부류 (1) 내지 (45) 이외의 살진균제; 및 부류 (1) 내지 (46)의 화합물의 염으로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 적어도 하나의 살진균제 화합물을 포함하는 조성물에 주목해야 한다.

[0717] 이들 살진균제 화합물 부류에 대한 추가의 설명이 하기에 주어진다.

[0718] (1) "메틸 벤즈이미다졸 카르바메이트 (MBC) 살진균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 1)는 미소관 중합 (microtubule assembly) 시에 β -튜불린에 결합함으로써, 유사 분열을 저해한다. 미소관 중합 저해는 세포 분열, 세포 내의 수송 및 세포 구조를 방해할 수 있다. 메틸 벤즈이미다졸 카르바메이트 살진균제로는 벤즈이미다졸 및 티오파네이트 살진균제를 들 수 있다. 벤즈이미다졸로는 베노밀, 카르벤다짐, 푸베리다졸 및 티아벤다졸을 들 수 있다. 티오파네이트로는 티오파네이트 및 티오파네이트-메틸을 들 수 있다.

[0719] (2) "다이카르복사미드 살진균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 2)는 NADH 사이토크롬 c 환원 효소 저해를 통해 진균류에서의 지질 과산화를 저해하는데 제시된다. 예로는 클로졸리네이트, 이프로디온, 프로사이미돈 및 빈클로졸린을 들 수 있다.

[0720] (3) "탈메틸화 저해제 (DMI) 살진균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 3)는 스테롤 생성에 중요한 역할을 하는 C14-탈메틸화 효소를 저해한다. 스테롤, 예컨대 에르고스테롤은 기능 세포벽의 발육에 필수적인 막 구조 및 막 기능에 필요하다. 따라서, 이들 살진균제에 노출되면, 감수성 진균류의 비정상 성장을 초래하여, 결국은 감수성 진균류의 사멸을 가져온다. DMI 살진균제는 몇 가지의 화학적 부류로 나뉘어진다: 아졸 (트리아아졸 및 이미다졸 포함), 피리미딘, 피페라진 및 피리딘. 트리아아졸로는 아자코나졸, 비터타놀, 브로무코나졸, 사이프로코나졸, 디페노코나졸, 디니코나졸 (디니코나졸-M 포함), 에폭시코나졸, 펜부코나졸, 플루빈코나졸, 플루실라졸, 플루트리아폴, 헥사코나졸, 이미벤코나졸, 이프코나졸, 메트코나졸, 마이클로부타닐, 펜코나졸, 프로피코나졸, 프로티오코나졸, 시메코나졸, 테부코나졸, 테트라코나졸, 트리아디메폰, 트라이아디메놀, 트라이티코나졸 및 유니코나졸을 들 수 있다. 이미다졸로는 클로트리마졸, 이마잘릴, 옥스포코나졸, 프로클로라즈, 페푸라조에이트 및 트라이플루미졸을 들 수 있다. 피리미딘으로는 페나리몰 및 누아리몰을 들 수 있다. 피페라진으로는 트리포린을 들 수 있다. 피리딘으로는 피리페녹스를 들 수 있다. 생화학적 연구에 의하면, 상기에 언급된 살진균제 전부가 문헌 [참조: K. H. Kuck et al. in *Modern Selective Fungicides - Properties, Applications and Mechanisms of Action*, H. Lyr (Ed.), Gustav Fischer Verlag: New York, 1995, 205-258]에 기재된 DMI 살진균제임을 알 수 있다.

[0721] (4) "페닐아미드 살진균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 4)는 난균류에 있어서의 RNA 폴리메라아제의 특이적 저해제이다. 이들 살진균제에 노출된 감수성 진균류는 우리딘을 rRNA에 혼입하는 능력이 감소된다. 감수성 진균류의 성장 및 발육은 이러한 부류의 살진균제에 노출시킴으로써 저지된다. 페닐아미드 살진균제로는 아실알라닌, 옥사졸리디논 및 부티로락톤 살진균제를 들 수 있다. 아실알라닌으로는 베날락실, 베날락실-M, 푸탈락실, 메탈락실 및 메탈락실-M/메페녹삼을 들 수 있다. 옥사졸리디논으로는 옥사딕실을 들 수 있다. 부티로락톤으로는 오프레이스를 들 수 있다.

[0722] (5) "아민/모르폴린 살진균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 5)는 스테롤 생합성 경로 내의 2개의 표적 부위, $\Delta^8 \rightarrow \Delta^7$ 아이소메라아제 및 Δ^{14} 환원 효소를 저해한다. 스테롤, 예컨대 에르고스테롤은 기능 세포벽의 발육에 필수적인 막 구조 및 막 기능에 필요하다. 따라서, 이들 살진균제에 노출되면, 감수성 진균류의 비정상 성장을 초래하여, 결국은 감수성 진균류의 사멸을 가져온다. 아민/모르폴린 살진균제 (비 DMI (non-DMI) 스테롤 생합성 저해제로도 공지됨)로는 모르폴린, 피페리딘 및 스피로케탈-아민 살진균제를 들 수 있다. 모르폴린으로는 알디모르프, 도데모르프, 펜프로피모르프, 트라이데모르프 및 트라이모르파미드를 들 수 있다. 피페리딘으로는 펜프로피딘 및 피페랄린을 들 수 있다. 스피로케탈-아민으로는 스피록사민을 들

수 있다.

- [0723] (6) "인지질 생합성 저해제 살진균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 6)는 인지질 생합성에 영향을 미침으로써 진균류 성장을 저해한다. 인지질 생합성 살진균제로는 포스포로티올레이트 및 다이티올란 살진균제를 들 수 있다. 포스포로티올레이트로는 에디펜포스, 이프로벤포스 및 피라조포스를 들 수 있다. 다이티올란으로는 아이소프로티올란을 들 수 있다.
- [0724] (7) "카르복스아미드 살진균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 7)는 석시네이트 탈수소 효소로 명명되는 크레브스 회로 (TCA 회로)의 중요한 효소를 방해함으로써 복합체 II (석시네이트 탈수소효소) 진균류 호흡을 저해한다. 호흡 저해에 의해, 진균류가 ATP 생성하는 것을 저지하므로, 진균류의 성장 및 번식을 저해한다. 카르복스아미드 살진균제로는 벤즈아미드, 푸란 카르복스아미드, 옥사티인 (oxathiin) 카르복스아미드, 티아졸 카르복스아미드, 피라졸 카르복스아미드 및 피리딘 카르복스아미드를 들 수 있다. 벤즈아미드로는 베노다닐, 플루톨라닐 및 메프로닐을 들 수 있다. 푸란 카르복스아미드로는 펜푸람을 들 수 있다. 옥사티인 카르복스아미드로는 카르복신 및 옥시카르복신을 들 수 있다. 티아졸 카르복스아미드로는 티플루자미드를 들 수 있다. 피라졸 카르복스아미드로는 푸라메트피르, 펜티오피라드, 빅사펜, 아이소피라잠, *N*-[2-(1*S*,2*R*)-[1,1'-바이사이클로프로필]-2-일페닐]-3-(다이플루오로메틸)-1-메틸-1*H*-피라졸-4-카르복스아미드 및 펜플루펜 (*N*-[2-(1,3-다이메틸부틸)페닐]-5-플루오로-1,3-다이메틸-1*H*-피라졸-4-카르복스아미드)을 들 수 있다. 피리딘 카르복스아미드로는 보스칼리드를 들 수 있다.
- [0725] (8) "하이드록시(2-아미노-)피리미딘 살진균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 8)는 아데노신 데아미나아제 저해에 의해 핵산 합성을 저해한다. 예로는 부피리메이트, 디메티리몰 및 에티리몰을 들 수 있다.
- [0726] (9) "아닐리노피리미딘 살진균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 9)는 아미노산 메티오닌의 생합성을 저해하고, 감염 중에 식물 세포를 용해시키는 가수분해 효소의 분비를 방해하는 것으로 제시된다. 예로는 사이프로디닐, 메파니피람 및 피리메타닐을 들 수 있다.
- [0727] (10) "*N*-페닐 카르바메이트 살진균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 10)는 β -튜불린에 결합하여, 미소관 중합을 방해함으로써, 유사 분열을 저해한다. 미소관 중합 저해는 세포 분열, 세포 내의 수송 및 세포 구조를 방해할 수 있다. 예로는 디에토펜카브를 들 수 있다.
- [0728] (11) "퀴논 아웃사이드 저해제 (QoI) 살진균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 11)는 유비퀴놀 산화 효소에 영향을 미침으로써 진균류의 복합체 III 미토콘드리아 호흡을 저해한다. 유비퀴놀 산화는 진균류의 미토콘드리아 내막에 위치하는 사이토크롬 *bc_L* 복합체의 "퀴논 아웃사이드" (*Q_o*) 부위에서 저지된다. 미토콘드리아 호흡 저해는 정상적인 진균류 성장 및 발육을 저지시킨다. 퀴논 아웃사이드 저해제 살진균제 (스트로빌루린 살진균제로도 공지됨)로는 메톡시아크릴레이트, 메톡시카르바메이트, 옥시미노아세테이트, 옥시미노아세트아미드, 옥사졸리딘디온, 다이하이드로다이옥사진, 이미다졸리논 및 벤질카르바메이트 살진균제를 들 수 있다. 메톡시아크릴레이트로는 아족시스트로빈, 에네스트로부린 (SYP-Z071), 피록시스트로빈 및 피라옥시스트로빈 (SYP-3343)을 들 수 있다. 메톡시카르바메이트로는 피라클로스트로빈 및 피라메토스트로빈 (SYP-4155)을 들 수 있다. 옥시미노아세테이트로는 크레속심-메틸 및 트라이플록시스트로빈을 들 수 있다. 옥시미노아세트아미드로는 디목시스트로빈, 메토미노스트로빈, 오리사스트로빈, α -[메톡시이미노]-*N*-메틸-2-[[[1-[3-(트라이플루오로메틸)페닐]에톡시]이미노]메틸]벤젠아세트아미드 및 2-[[[3-(2,6-다이클로로페닐)-1-메틸-2-프로펜-1-일리덴]아미노]옥시]메틸]- α -(메톡시이미노)-*N*-메틸벤젠아세트아미드를 들 수 있다. 옥사졸리딘디온으로는 파목사돈을 들 수 있다. 다이하이드로다이옥사진으로는 플루옥사스트로빈을 들 수 있다. 이미다졸리논으로는 페나미돈을 들 수 있다. 벤질카르바메이트로는 피리벤카브를 들 수 있다.
- [0729] (12) "페닐피롤 살진균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 12)는 진균류의 삼투압 시그널 전달과 관련된 MAP 단백질 키나아제를 저해한다. 펜피클로닐 및 플루디옥소닐은 이러한 살진균제 부류의 예이다.
- [0730] (13) "퀴놀린 살진균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 13)는 초기 세포 시그널링에서 G-단백질에 영향을 미침으로써 시그널 전달을 저해하는 것으로 제시된다. 이들은 흰가루병을 일으키는 진균류의 발아 및/또는 부착기 형성을 저해하는 것으로 밝혀졌다. 퀴녹시펜 및 테부플로퀸은 이러한 살진균제 부류의 예이다.
- [0731] (14) "지질 과산화 저해제 살진균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 14)는 진균류의 막

합성에 영향을 미치는 지질 과산화를 저해하는 것으로 제시된다. 이러한 부류의 구성원, 예컨대 에트리다리아졸은 또한 기타 생물학적 과정, 예컨대 호흡 및 멜라닌 생합성에 영향을 미칠 수 있다. 지질 과산화 살진균제로는 방향족 탄소 및 1,2,4-티아다리아졸 살진균제를 들 수 있다. 방향족 탄소 살진균제로는 바이페닐, 클로로넵, 디클로란, 퀸토젠, 텍나젠 및 톨클로포스-메틸을 들 수 있다. 1,2,4-티아다리아졸 살진균제로는 에트리다리아졸을 들 수 있다.

- [0732] (15) "멜라닌 생합성 저해제-환원 효소 (MBI-R) 살진균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 16.1)는 멜라닌 생합성에서의 나프탈 환원 (naphthal reduction) 단계를 저해한다. 멜라닌은 일부의 진균류에 의한 숙주 식물 감염에 필요하다. 멜라닌 생합성 저해제-환원 효소 살진균제로는 아이소벤조푸라논, 피롤로퀴놀리논 및 트리아아졸로벤조티아졸 살진균제를 들 수 있다. 아이소벤조푸라논으로는 프탈라이드를 들 수 있다. 피롤로퀴놀리논으로는 피로퀼론을 들 수 있다. 트리아아졸로벤조티아졸로는 트라이사이클라졸을 들 수 있다.
- [0733] (16) "멜라닌 생합성 저해제-탈수 효소 (MBI-D) 살진균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 16.2)는 멜라닌 생합성에서의 시탈론 탈수 효소를 저해한다. 멜라닌은 일부의 진균류에 의한 숙주 식물 감염에 필요하다. 멜라닌 생합성 저해제-탈수 효소 살진균제로는 사이클로프로판카르복스아미드, 카르복스아미드 및 프로피온아미드 살진균제를 들 수 있다. 사이클로프로판카르복스아미드로는 카르프로파미드를 들 수 있다. 카르복스아미드로는 디클로사이메트를 들 수 있다. 프로피온아미드로는 페녹사닐을 들 수 있다.
- [0734] (17) "하이드록시아닐리드 살진균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 17)는 스테롤 생성에 중요한 역할을 하는 C4-탈메틸화 효소를 저해한다. 예로는 펜헥사미드를 들 수 있다.
- [0735] (18) "스쿠알렌-에폭시다아제 저해제 살진균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 18)는 에르고스테롤 생합성 경로에서의 스쿠알렌-에폭시다아제를 저해한다. 스테롤, 예컨대 에르고스테롤은 기능 세포벽의 발육에 필수적인 막 구조 및 막 기능에 필요하다. 따라서, 이들 살진균제에 노출되면, 감수성 진균류의 비정상 성장을 초래하여, 결국은 감수성 진균류의 사멸을 가져온다. 스쿠알렌-에폭시다아제 저해제 살진균제로는 티오카르바메이트 및 알릴아민 살진균제를 들 수 있다. 티오카르바메이트로는 피리부티카브를 들 수 있다. 알릴아민으로는 나프티핀 및 테르비나핀을 들 수 있다.
- [0736] (19) "폴리옥신 살진균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 19)는 키틴 신타아제를 저해한다. 예로는 폴리옥신을 들 수 있다.
- [0737] (20) "페닐우레아 살진균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 20)는 세포 분열에 영향을 미치는 것으로 제시된다. 예로는 펜사이쿠론을 들 수 있다.
- [0738] (21) "퀴논 인사이드 저해제 (QiI) 살진균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 21)는 유비퀴놀 환원 효소에 영향을 미침으로써 진균류의 복합체 III 미토콘드리아 호흡을 저해한다. 유비퀴놀 환원은 진균류의 미토콘드리아 내막에 위치하는 사이토크롬 bc_1 복합체의 "퀴논 인사이드" (Q_i) 부위에서 저지된다. 미토콘드리아 호흡 저해는 정상적인 진균류 성장 및 발육을 저지시킨다. 퀴논 인사이드 저해제 살진균제로는 시아노이미다졸 및 설파모일트리아아졸 살진균제를 들 수 있다. 시아노이미다졸로는 시아조파미드를 들 수 있다. 설파모일트리아아졸로는 아미설브롬을 들 수 있다.
- [0739] (22) "벤즈아미드 살진균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 22)는 β -튜블린에 결합하여, 미소관 중합을 방해함으로써, 유사 분열을 저해한다. 미소관 중합 저해는 세포 분열, 세포 내의 수송 및 세포 구조를 방해할 수 있다. 예로는 족사미드를 들 수 있다.
- [0740] (23) "에노피라누론산 항생제 살진균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 23)는 단백질 생합성에 영향을 미침으로써 진균류 성장을 저해한다. 예로는 블라스티시딘-S를 들 수 있다.
- [0741] (24) "헥소피라노실 항생제 살진균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 24)는 단백질 생합성에 영향을 미침으로써 진균류 성장을 저해한다. 예로는 카수가마이신을 들 수 있다.
- [0742] (25) "글루코피라노실 항생제: 단백질 합성 살진균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 25)는 단백질 생합성에 영향을 미침으로써 진균류 성장을 저해한다. 예로는 스트렙토마이신을 들 수 있다.
- [0743] (26) "글루코피라노실 항생제: 트레할라아제 및 이노시톨 생합성 살진균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 26)는 이노시톨 생합성 경로에서의 트레할라아제를 저해한다. 예로는 발리다마이신을

들 수 있다.

- [0744] (27) "시아노아세트아미드옥심 살진균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 27)로는 사이목사닐을 들 수 있다.
- [0745] (28) "카르바메이트 살진균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 28)는 진균류 성장의 멀티사이트 저해제인 것으로 고려된다. 이들은 세포막의 지방산 합성을 저해한 다음에, 세포막 투과성을 방해하는 것으로 제시된다. 프로파마카브, 프로파마카브-하이드로클로라이드, 요오도카브, 및 프로티오카브는 이러한 살진균제 부류의 예이다.
- [0746] (29) "산화적 인산화 언커플링 살진균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 29)는 언커플링 산화적 인산화에 의해 진균류 호흡을 저해한다. 호흡 저해는 정상적인 진균류 성장 및 발육을 저지시킨다. 이러한 부류로는 2,6-다이니트로아닐린, 예컨대 플루아지남, 피리미돈하이드라존, 예컨대 페림존 및 다이니트로페닐 크로토네이트, 예컨대 디노캡, 맵틸디노캡 및 비나프크릴을 들 수 있다.
- [0747] (30) "유기 주석 살진균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 30)는 산화적 인산화 경로에서의 아데노신 트라이포스페이트 (ATP) 신타아제를 저해한다. 예로는 펜틴 아세테이트, 펜틴 클로라이드 및 펜틴 하이드록사이드를 들 수 있다.
- [0748] (31) "카르복실산 살진균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 31)는 테옥시리보핵산 (DNA) 토포아이소메라아제형 II (자이라아제)에 영향을 미침으로써 진균류 성장을 저해한다. 예로는 옥솔린산을 들 수 있다.
- [0749] (32) "헤테로 방향족 살진균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 32)는 DNA/리보핵산 (RNA) 합성에 영향을 미치는 것으로 제시된다. 헤테로 방향족 살진균제로는 아이숙사졸 및 아이소티아졸론 살진균제를 들 수 있다. 아이숙사졸로는 하이멕사졸을 들 수 있으며, 아이소티아졸론으로는 옥틸리논을 들 수 있다.
- [0750] (33) "포스포네이트 살진균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 33)로는 아인산 및 포세틸-알루미늄을 비롯한 이의 각종 염을 들 수 있다.
- [0751] (34) "프탈람산 살진균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 34)로는 테클로프탈람을 들 수 있다.
- [0752] (35) "벤조트라이아진 살진균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 35)로는 트라이아족사이드를 들 수 있다.
- [0753] (36) "벤젠-설펜아미드 살진균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 36)로는 플루설파미드를 들 수 있다.
- [0754] (37) "피리다지논 살진균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 37)로는 디클로메진을 들 수 있다.
- [0755] (38) "티오펜-카르복사미드 살진균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 38)는 ATP 생성에 영향을 미치는 것으로 제시된다. 예로는 실티오팜을 들 수 있다.
- [0756] (39) "피리미딘아미드 살진균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 39)는 인지질 생합성에 영향을 미침으로써 진균류 성장을 저해하며, 예로는 디플루메토림을 들 수 있다.
- [0757] (40) "카르복실산 아미드 (CAA) 살진균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 40)는 인지질 생합성 및 세포벽 침착을 저해하는 것으로 제시된다. 이러한 과정의 저해는 표적 진균류의 성장을 저지하여, 표적 진균류의 사멸을 가져온다. 카르복실산 아미드 살진균제로는 신남산 아미드, 발린아미드 카르바메이트 및 만델산 아미드 살진균제를 들 수 있다. 신남산 아미드로는 디메토모르프 및 플루모르프를 들 수 있다. 발린아미드 카르바메이트로는 벤티아발리카브, 벤티아발리카브-아이소프로필, 이프로발리카브, 발리페날레이트 및 발리페날을 들 수 있다. 만델산 아미드로는 만디프로파미드, *N*-[2-[4-[[3-(4-클로로페닐)-2-프로판-1-일]옥시]-3-메톡시페닐]에틸]-3-메틸-2-[(메틸설포닐)아미노]부탄아미드 및 *N*-[2-[4-[[3-(4-클로로페닐)-2-프로판-1-일]옥시]-3-메톡시페닐]에틸]-3-메틸-2-[(에틸설포닐)아미노]부탄아미드를 들 수 있다.
- [0758] (41) "테트라사이클린 항생제 살진균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 41)는 복합체 1

니코틴아미드 아데닌 다이뉴클레오티드 (NADH) 산화 환원 효소에 영향을 미침으로써 진균류 성장을 저해한다. 예로는 옥시테트라사이클린을 들 수 있다.

[0759] (42) "티오카르바메이트 살진균제 (b42)" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 42)로는 메타 설포카브를 들 수 있다.

[0760] (43) "벤즈아미드 살진균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 43)는 스펙트린양 단백질의 비편재화에 의해 진균류 성장을 저해한다. 예로는 아실피콜라이드 살진균제, 예컨대 플루오피콜라이드 및 플루 오피람을 들 수 있다.

[0761] (44) "숙주 식물 방어 유도 살진균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 P)로는 숙주 식물 방어 메카니즘을 유도한다. 숙주 식물 방어 유도 살진균제로는 벤조-티아다디아졸, 벤즈아이소티아졸 및 티아 다이아졸-카르복스아미드 살진균제를 들 수 있다. 벤조-티아다디아졸로는 아시벤졸라-S-메틸을 들 수 있다. 벤즈아이소티아졸로는 프로베나졸을 들 수 있다. 티아다디아졸-카르복스아미드로는 티아디닐 및 아이소티아닐 을 들 수 있다.

[0762] (45) "멀티사이트 접촉 살진균제"는 다수의 작용 부위를 통해 진균류 성장을 저해하며, 접촉/예방 활성을 갖는 다. 이러한 부류의 살진균제로는 (45.1) "구리 살진균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 M1), (45.2) "황 살진균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 M2), (45.3) "다이티 오카르바메이트 살진균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 M3), (45.4) "프탈이미드 살 진균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 M4), (45.5) "클로로니트릴 살진균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 M5), (45.6) "설파미드 살진균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 M6), (45.7) "구아니딘 살진균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 M7), (45.8) "트라이아진 살진균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 M8) 및 (45.9) "퀴논 살진균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 M9)를 들 수 있다. "구리 살진균제"는 전형적으로 구리(II) 산화 상태의 구리를 함유하는 무기 화합물이며; 예로는 조성물, 예컨대 보르도액 (Bordeaux mixture; 삼염기성 황산구리)을 비롯한 옥시염화구리, 황산구리 및 수산화구리를 들 수 있 다. "황 살진균제"는 황 원자 환 또는 쇠를 포함하는 무기 화합물이며; 예로는 황 원소를 들 수 있다. "다 이티오카르바메이트 살진균제"는 다이티오카르바메이트 분자 부분을 포함하며; 예로는 만코젯, 메티람, 프로피 넵, 퍼밤, 마넵, 티람, 지넵 및 지람을 들 수 있다. "프탈이미드 살진균제"는 프탈이미드 분자 부분을 포함하 며; 예로는 폴페트, 캡탄 및 캡타폴을 들 수 있다. "클로로니트릴 살진균제"는 클로로 및 시아노로 치환된 방 향족 환을 포함하며; 예로는 클로로탈로닐을 들 수 있다. "설파미드 살진균제"로는 디클로플루아니드 및 톨리 플루아니드를 들 수 있다. "구아니딘 살진균제"로는 도딘, 구아자틴, 이미녹타딘 알베실레이트 및 이미녹타딘 트라이아세테이트를 들 수 있다. "트라이아진 살진균제"로는 아닐라진을 들 수 있다. "퀴논 살진균제"로는 디 티아논을 들 수 있다.

[0763] (46) "부류 (1) 내지 (45) 이외의 살진균제"로는 작용 모드가 미지일 수 있는 특정 살진균제를 들 수 있다. 이 들은 (46.1) "티아졸 카르복스아미드 살진균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 U5), (46.2) "페닐-아세트아미드 살진균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 U6), (46.3) "퀴 나졸리논 살진균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 U7), (46.4) "벤조페논 살진균제" (Fungicide Resistance Action Committee (FRAC) 코드 U8) 및 (46.5) "트라이아졸로피리미딘 살진균제"를 포함 한다. 티아졸 카르복스아미드로는 에타복삼을 들 수 있다. 페닐-아세트아미드로는 사이플루페나미드 및 *N*-[[[사이클로프로필메톡시]아미노][6-(다이플루오로메톡시)-2,3-다이플루오로페닐]-메틸렌]벤젠아세트아미드를 들 수 있다. 퀴나졸리논으로는 프로퀴나지드를 들 수 있다. 벤조페논으로는 메트라페논을 들 수 있다. 트라 이아졸로피리미딘으로는 아메톡트라딘을 들 수 있다. (b46) 부류로는 또한 베크사진, 플록사피록사드, 네오-아 소진 (메탄아르손산제이철 (ferric methanearsonate), 피리오페논, 피롤리트린, 퀴노메티오네이트, 테부플로린, *N*-[2-[4-[[3-(4-클로로페닐)-2-프로핀-1-일]옥시]-3-메톡시페닐]에틸]-3-메틸-2-[(메틸설포닐아미노)부탄아미 드, *N*-[2-[4-[[3-(4-클로로페닐)-2-프로핀-1-일]옥시]-3-메톡시페닐]에틸]-3-메틸-2-[(메틸설포닐아미노)부탄아 미드, 2-[[2-플루오로-5-(트라이플루오로메틸페닐티오)-2-[3-(2-메톡시페닐)-2-티아졸리디닐리덴]아세트니트릴, 3-[5-(4-클로로페닐)-2,3-다이메틸-3-아이속사졸리디닐]피리딘, 4-플루오로페닐 *N*-[1-[[[1-(4-시아노페닐에틸] 설포닐]메틸]프로필]카르바메이트, 5-클로로-6-(2,4,6-트라이플루오로페닐)-7-(4-메틸피페리딘-1-일)[1,2,4]트 라이아졸로[1,5-*a*]피리미딘, *N*-(4-클로로-2-니트로페닐)-*N*-에틸-4-메틸벤젠설포나미드, *N*-[[[사이클로프로필메 톡시아미노][6-(다이플루오로메톡시)-2,3-다이플루오로페닐]메틸렌]벤젠아세트아미드, *N*'-[4-[4-클로로-3-(트라 이플루오로메틸페녹시)-2,5-다이메틸페닐]-*N*-에틸-*N*-메틸메탄아미드아미드, 1-[(2-프로페닐티오카르보닐)-2-(1-

메틸에틸)-4-(2-메틸페닐)-5-아미노-1H-피라졸-3-온, *N*[9-(다이클로로메틸렌)-1,2,3,4-테트라하이드로-1,4-메타노나프탈렌-5-일]-3-(다이플루오로메틸)-1-메틸-1H-피라졸-4-카르복사미드, 3-(다이플루오로메틸)-*N*[9-(다이플루오로메틸렌)-1,2,3,4-테트라하이드로-1,4-메타노나프탈렌-5-일]-1-메틸-1H-피라졸-4-카르복사미드, *N*[9-(다이브로모메틸렌)-1,2,3,4-테트라하이드로-1,4-메타노나프탈렌-5-일]-3-(다이플루오로메틸)-1-메틸-1H-피라졸-4-카르복사미드, *N*[9-(다이브로모메틸렌)-1,2,3,4-테트라하이드로-1,4-메타노나프탈렌-5-일]-1-메틸-3-(트라이플루오로메틸)-1H-피라졸-4-카르복사미드, *N*[9-(다이플루오로메틸렌)-1,2,3,4-테트라하이드로-1,4-메타노나프탈렌-5-일]-1-메틸-3-(트라이플루오로메틸)-1H-피라졸-4-카르복사미드, 및 *N*'-[4-[[3-[(4-클로로페닐메틸)-1,2,4-티아다이하졸-5-일]옥시]-2,5-다이메틸페닐]-*N*-에틸-*N*-메틸-메탄이미드아미드를 들 수 있다.

[0764] 따라서, 화학식 1의 화합물 및 상술한 부류 (1) 내지 (46)으로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 적어도 하나의 살진균제 화합물을 포함하는 혼합물 (즉, 조성물)에 주목해야 한다. 또한, 상기 혼합물 (살진균적 유효량으로)과, 추가로 계면활성제, 고체 희석제 및 액체 희석제로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 적어도 하나의 추가 성분을 포함하는 조성물에 주목해야 한다. 화학식 1의 화합물과, 부류 (1) 내지 (46)와 관련하여 상기에 열거된 특정 화합물의 그룹 중에서 선택되는 적어도 하나의 살진균제 화합물을 포함하는 혼합물 (즉, 조성물)에 특히 주목해야 한다. 또한 상기 혼합물 (살진균적 유효량으로)과, 추가로 계면활성제, 고체 희석제 및 액체 희석제로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 적어도 하나의 추가의 계면활성제를 포함하는 조성물에 특히 주목해야 한다.

[0765] 본 발명의 화합물과 함께 제형화될 수 있는 다른 생물 활성 화합물 또는 생물 활성제의 예로는 살충제, 예컨대 아바멕틴, 아세페이트, 아세타미프리트, 아크리나트린, 아미도플루메트 (S-1955), 아버멕틴, 아자디라크틴, 아진포스-메틸, 비펜트린, 비페나제이트, 부프로페진, 카르보푸란, 칼탐, 클로란트라닐리프롤, 클로르페나피르, 클로르플루아주론, 클로르피리포스, 클로르피리포스-메틸, 크로마페노자이드, 클로티아니딘, 사이안트라닐리프롤 (3-브로모-1-(3-클로로-2-피리디닐)-*N*[4-시아노-2-메틸-6-[(메틸아미노)카르보닐]페닐]-1H-피라졸-5-카르복사미드), 사이플루메토펜, 사이플루트린, 베타-사이플루트린, 사이할로트린, 람다-사이할로트린, 사이퍼메트린, 사이로마진, 델타메트린, 디아펜티우론, 디아지논, 디엘드린, 디플루벤주론, 디메플루트린, 디메토에이트, 디노테푸란, 디오페놀란, 에마멕틴, 엔도설판, 에스펜탈레레이트, 에티프롤, 페노티오카브, 페녹시카브, 펜프로파트린, 펜발레레이트, 피프로닐, 플로니카미드, 플루벤디아미드, 플루사이트리네이트, 타우-플루발리네이트, 플루페네림 (UR-50701), 플루페녹수론, 포노포스, 할로페노자이드, 헥사플루무론, 하이드라메틸논, 이미다클로프리트, 인독사카브, 아이소펜포스, 루페누론, 말라티온, 메페플루트린, 메타플루미존, 메트알데히드, 메타미도포스, 메티다티온, 메토밀, 메토프렌, 메톡시클로르, 메톡시페노자이드, 메토플루트린, 밀베마이신 옥심, 모노크로토포스, 니코틴, 니텐피람, 니티아진, 노발루론, 노비플루무론 (XDE-007), 옥사밀, 파라티온, 파라티온-메틸, 퍼메트린, 포레이트, 포살론, 포스메트, 포스파미돈, 피리미카브, 프로페노포스, 프로플루트린, 피메트로진, 피라플루프롤, 피레트린, 피리달릴, 피리플루퀴나존, 피리프롤, 피리프록시펜, 로테논, 리아노딘, 스피네토람, 스피노사드, 스피로디클로펜, 스피로메시펜 (BSN 2060), 스피로테트라마트, 설포사플로르, 설포로포스, 테부페노자이드, 테플루벤주론, 테플루트린, 터부포스, 테트라클로르빈포스, 테트라메틸플루트린, 티아클로프리트, 티아메톡삼, 티오디카브, 티오설판-소듐, 톨벤피라드, 트랄로메트린, 트라이아자메이트, 트라이클로르폰 및 트라이플루무론; 및 곤충병원성 세균, 예컨대 *바실러스 투링지엔시스* 서브서피시즈 *아이자와이* (*Bacillus thuringiensis* subsp. *aizawai*), *바실러스 투링지엔시스* 서브서피시즈 *쿠르스타키* (*Bacillus thuringiensis* subsp. *kurstaki*), 및 캡슐화된 *바실러스 투링지엔시스* 델타-내독소 (*Bacillus thuringiensis* delta-endotoxin) (예를 들어, 셀캡 (Cellcap), MPV, MPVII); 곤충병원성 진균, 예컨대 풍뎡이 녹강균 (green muscardine fungus); 및 바콜로바이러스, 핵다각체병 바이러스 (NPV), 예컨대 HzNPV, AfNPV를 비롯한 곤충병원성 바이러스; 및 과립병 바이러스 (granulosis virus, GV), 예컨대 CpGV를 비롯한 생물 작용제 (biological agent)가 있다.

[0766] 본 발명의 화합물 및 이의 조성물은 무척추 해충에 유독한 단백질 (예를 들어, *바실러스 투링지엔시스* 델타-내독소)을 발현하도록 유전적으로 형질전환된 식물에 적용될 수 있다. 외부로부터 적용된 본 발명의 살진균제 화합물의 효과는 발현된 독소 단백질로 상승 작용이 일어날 수 있다.

[0767] 농업용 보호제 (즉, 살충제, 살진균제, 살선충제, 진드기 구충제, 제초제 및 생물 작용제)에 관한 일반적인 참고문헌으로는 문헌 [참조: *The Pesticide Manual*, 13th Edition, C. D. S. Tomlin, Ed., British Crop Protection Council, Farnham, Surrey, U.K., 2003] 및 문헌 [참조: *The BioPesticide Manual*, 2nd Edition,

L. G. Copping, Ed., British Crop Protection Council, Farnham, Surrey, U.K., 2001]을 들 수 있다.

- [0768] 이들 다양한 혼합 파트너 중 하나 이상이 사용되는 실시 형태의 경우, 이들 다양한 혼합 파트너 (전체) 대 화학식 1의 화합물의 중량비는 전형적으로 약 1:3000 내지 약 3000:1이다. 약 1:300 내지 약 300:1 (예를 들어, 약 1:30 내지 약 30:1의 비)의 중량비에 주목해야 한다. 당업자는 원하는 생물학적 활성 범위에 필요한 활성 성분의 생물학적 유효량을 간단한 실험을 통하여 용이하게 결정할 수 있다. 이들 추가의 성분을 포함시키면, 화학식 1의 화합물 단독에 의해 방제되는 범위를 초과하여, 방제되는 질환의 범위를 확대할 수 있음이 명백할 것이다.
- [0769] 경우에 따라서는, 본 발명의 화합물과 다른 생물 활성 (특히 살진균제) 화합물 또는 생물 활성제 (즉, 활성 성분)의 배합물은 상가 작용 이상 (greater-than-additive (즉, 상승))의 효과를 가져올 수 있다. 효과적인 해충 방제를 보장하면서 환경에 방출되는 활성 성분의 양을 감소시키는 것이 항상 바람직하다. 살진균제 활성 성분의 상승 작용이 농학적으로 만족스러운 레벨의 균류 방제를 부여하는 적용량으로 일어나는 경우에는, 이러한 배합물은 작물 생산비를 감소시키고 환경 부하를 저감시키는데 유리할 수 있다.
- [0770] 화학식 1의 화합물과 적어도 하나의 다른 살진균제 활성 성분의 배합물에 주목해야 한다. 다른 살진균제 활성 성분이 화학식 1의 화합물과 작용 부위가 상이한 그러한 배합물에 특히 주목해야 한다. 경우에 따라서는, 유사한 방제 범위를 갖지만, 작용 부위가 상이한 적어도 하나의 다른 살진균제 활성 성분과의 배합물이 저항성 관리에 특히 유리할 것이다. 따라서, 본 발명의 조성물은 추가로 유사한 방제 범위를 갖지만, 작용 부위가 상이한 생물학적 유효량의 적어도 하나의 추가의 살진균제 활성 성분을 포함할 수 있다.
- [0771] 화학식 1의 화합물 이외에도, (1) 알킬렌비스(다이티오카르바메이트) 살진균제; (2) 사이목사닐; (3) 페닐아미드 살진균제; (4) 프로퀴나지드 (6-요오도-3-프로필-2-프로필옥시-4(3H)-퀴나졸리논); (5) 클로로탈로닐; (6) 진균류 미토콘드리아 호흡 전자 이동 부위의 복합체 II에서 작용하는 카르복시아미드; (7) 퀴녹시펜; (8) 메트라페논; (9) 사이플루페나미드; (10) 사이프로디닐; (11) 구리 화합물; (12) 프탈이미드 살진균제; (13) 포세틸-알루미늄; (14) 벤즈이미다졸 살진균제; (15) 시아조파미드; (16) 플루아지남; (17) 이프로발리카브; (18) 프로파코카브; (19) 발리도마이신; (20) 다이클로로페닐 다이카르복스이미드 살진균제; (21) 족사미드; (22) 플루오피콜라이드; (23) 만디프로파미드; (24) 인지질 생합성 및 세포벽 침착에 작용하는 카르복실산 아미드; (25) 디메토모르프; (26) 비 DMI 스테롤 생합성 저해제; (27) 스테롤 생합성에 있어서의 탈메틸화 효소 저해제; (28) bc_1 복합체 살진균제; 및 (1) 내지 (28)의 화합물의 염으로 구성되는 그룹 중에서 선택되는 적어도 하나의 화합물을 포함하는 조성물에 특히 주목해야 한다.
- [0772] 살진균제 화합물 부류에 대한 추가의 설명이 하기에 주어진다.
- [0773] 스테롤 생합성 저해제 (그룹 (27))는 스테롤 생합성 경로의 효소를 저해하여 진균류를 방제한다. 탈메틸화 효소 저해 살진균제는 진균류의 스테롤 전구체인 라노스테롤 또는 24-메틸렌 다이하이드로라노스테롤의 위치 14에서의 탈메틸화의 저해를 포함한 진균류 스테롤 생합성 경로 내에 공통 작용 부위를 갖는다. 이 부위에서 작용하는 화합물은 종종 탈메틸화 효소 저해제, DMI 살진균제, 또는 DMI로서 명명된다. 탈메틸화 효소는 예를 들어, 문헌 [참조: *J. Biol. Chem.* 1992, 267, 13175-79] 및 상기 문헌에 인용된 참고문헌에 기재되어 있다. DMI 살진균제는 몇 가지의 화학적 부류로 나뉘어진다: 아졸 (트리아아졸 및 이미다졸 포함), 피리미딘, 피페라진 및 피리딘. 트리아아졸로는 아자코나졸, 브로무코나졸, 사이프로코나졸, 디페노코나졸, 디니코나졸 (디니코나졸-M 포함), 에폭시코나졸, 에타코나졸, 펜부코나졸, 플루코코나졸, 플루실라졸, 플루트리아폴, 헥사코나졸, 이미벤코나졸, 이프코나졸, 메트코나졸, 마이클로부타닐, 펜코나졸, 프로피코나졸, 프로티오코나졸, 퀴코나졸, 시메코나졸, 테부코나졸, 테트라코나졸, 트리아디메폰, 트리아디메놀, 트라이티코나졸 및 유니코나졸을 들 수 있다. 이미다졸로는 클로트리마졸, 에코나졸, 이마잘릴, 아이소코나졸, 미코나졸, 옥스포코나졸, 프로클로라즈 및 트라이플루미졸을 들 수 있다. 피리미딘으로는 페나리몰, 누아리몰 및 트리아리몰을 들 수 있다. 피페라진으로는 트리포린을 들 수 있다. 피리딘으로는 부티오베이트 및 피리페녹스를 들 수 있다. 생화학적 연구에 의하면, 상기에 언급된 살진균제 전부가 문헌 [참조: K. H. Kuck et al. in *Modern Selective Fungicides - Properties, Applications and Mechanisms of Action*, H. Lyr (Ed.), Gustav Fischer Verlag: New York, 1995, 205-258]에 기재된 DMI 살진균제임을 알 수 있다.
- [0774] bc_1 복합체 살진균제 (그룹 28)는 미토콘드리아 호흡 연쇄의 bc_1 복합체를 저해하는 살진균제 작용 모드를 갖는다. bc_1 복합체는 종종 전자 전달 연쇄의 복합체 III, 및 유비하이드로퀴논:사이토크롬 *c* 산화 환원 효소를 비

못하여, 생화학 문헌에 다른 이름으로 언급되어 있다. 이러한 복합체는 효소 위원회 번호 (Enzyme Commission number) EC1.10.2.2로 고유하게 식별된다. bc_1 복합체는 예를 들어, 문헌 [참조: *J. Biol. Chem.* 1989, 264, 14543-48]; 문헌 [참조: *Methods Enzymol.* 1986, 126, 253-71]; 및 상기 문헌에 인용된 참고문헌에 기재되어 있다. 스트로빌루린계 살진균제, 예컨대 아족시스트로빈, 디목시스트로빈, 에네스트로부린 (SYP-Z071), 플루옥사스트로빈, 크레속심-메틸, 메토미노스트로빈, 오리사스트로빈, 피콕시스트로빈, 피라클로스트로빈, 피라메토스트로빈, 피라옥시스트로빈 및 트라이플록시스트로빈은 이러한 작용 모드를 갖는 것으로 알려져 있다 (H. Sauter et al., *Angew. Chem. Int. Ed.* 1999, 38, 1328-1349). 미토콘드리아 호흡 연쇄의 bc_1 복합체를 저해하는 다른 살진균제 화합물은 파목사돈 및 페나미돈을 포함한다.

[0775] 알킬렌비스(다이티오카르바메이트) (그룹 (1))는 화합물, 예컨대 만코젠, 마넵, 프로피넵 및 지넵을 포함한다. 페닐아미드 (그룹 (3))는 메탈락실, 베날락실, 푸랄락실 및 옥사딕실과 같은 화합물을 포함한다. 카르복시아미드 (그룹 (6))는 보스칼리드, 카르복신, 펜푸람, 플루톨라닐, 푸라메트피르, 메프로닐, 옥시카르복신, 티플루자미드, 펜티오피라드 및 *N*-[2-(1,3-다이메틸부틸)페닐]-5-플루오로-1,3-다이메틸-1*H*-피라졸-4-카르복시아미드 (국제 특허 출원 공개 제WO 2003/010149호)와 같은 화합물을 포함하며, 호흡 전자 전달 연쇄의 복합체 II (석시네이트 탈수소효소)를 붕괴시킴으로써 미토콘드리아 기능을 저해시키는 것으로 알려져 있다. 구리 화합물 (그룹 (11))은 조성물, 예컨대 보르도액 (삼염기성 황산구리)을 비롯하여, 옥시염화구리, 황산구리 및 수산화구리와 같은 화합물을 포함한다. 프탈이미드 (그룹 (12))는 폴페트 및 캡탄과 같은 화합물을 포함한다. 벤즈이미다졸 살진균제 (그룹 (14))는 베노밀 및 카벤다짐을 포함한다. 다이클로로페닐 다이카르복시아미드 살진균제 (그룹 (20))는 클로졸리네이트, 다이클로졸린, 이프로디온, 아이소발레디온, 마이클로졸린, 프로사이미돈 및 빈클로졸린을 포함한다.

[0776] 비 DMI 스테롤 생합성 저해제 (그룹 (26))는 모르폴린 및 피페리딘 살진균제를 포함한다. 모르폴린 및 피페리딘은 DMI 스테롤 생합성 (그룹 (27))에 의해 달성되는 저해 보다 느린 시점에서 스테롤 생합성 경로의 단계를 저해하는 것으로 나타난 스테롤 생합성 저해제이다. 모르폴린으로는 알디모르프, 도데모르프, 펜프로피모르프, 트라이데모르프 및 트라이모르파미드를 들 수 있다. 피페리딘으로는 펜프로피딘을 들 수 있다.

[0777] 화학식 1의 화합물과, 아족시스트로빈, 크레속심-메틸, 트라이플록시스트로빈, 피라클로스트로빈, 피콕시스트로빈, 디목시스트로빈, 메토미노스트로빈/페노미노스트로빈, 카르벤다짐, 클로로탈로닐, 퀴녹시펜, 메트라페논, 사이플루페나미드, 펜프로피딘, 펜프로피모르프, 브로무코나졸, 사이프로코나졸, 디페노코나졸, 에폭시코나졸, 펜부코나졸, 플루실라졸, 헥사코나졸, 이프로코나졸, 메트코나졸, 펜코나졸, 프로피코나졸, 프로퀴나지드, 프로티오코나졸, 테부코나졸, 트라이티코나졸, 파목사돈, 프로클로라즈, 펜티오피라드 및 보스칼리드 (니코비펜)의 배합물도 주목해야 한다.

[0778] 본 발명의 화합물과, 하기 그룹, 즉, 아족시스트로빈, 크레속심-메틸, 트라이플록시스트로빈, 피라클로스트로빈, 피콕시스트로빈, 디목시스트로빈, 메토미노스트로빈/페노미노스트로빈, 퀴녹시펜, 메트라페논, 사이플루페나미드, 펜프로피딘, 펜프로피모르프, 사이프로코나졸, 에폭시코나졸, 플루실라졸, 메트코나졸, 프로피코나졸, 프로퀴나지드, 프로티오코나졸, 테부코나졸, 트라이티코나졸, 파목사돈 및 펜티오피라드 중에서 선택되는 살진균제의 혼합물이 진균 식물 병원체에 의한 식물병의 우수한 방제 (예를 들어, 보다 낮은 사용률 또는 훨씬 더 광범위한 방제된 식물 병원체) 또는 저항성 관리에 바람직하다.

[0779] 특히 바람직한 혼합물 (화합물 번호는 인덱스 표 A 내지 표 C의 화합물을 말함)은 하기 그룹: 화합물 2, 화합물 10 또는 화합물 16과 아메톡트라딘의 배합물, 화합물 2, 화합물 10 또는 화합물 16과 아족시스트로빈의 배합물, 화합물 2, 화합물 10 또는 화합물 16과 빅사펜의 배합물, 화합물 2, 화합물 10 또는 화합물 16과 보스칼리드의 배합물, 화합물 2, 화합물 10 또는 화합물 16과 사이플루페나미드의 배합물, 화합물 2, 화합물 10 또는 화합물 16과 사이프로코나졸의 배합물, 화합물 2, 화합물 10 또는 화합물 16과 디목시스트로빈의 배합물, 화합물 2, 화합물 10 또는 화합물 16과 에폭시코나졸의 배합물, 화합물 2, 화합물 10 또는 화합물 16과 파목사돈의 배합물, 화합물 2, 화합물 10 또는 화합물 16과 펜프로피딘의 배합물, 화합물 2, 화합물 10 또는 화합물 16과 펜프로피모르프의 배합물, 화합물 2, 화합물 10 또는 화합물 16과 플루오피람의 배합물, 화합물 2, 화합물 10 또는 화합물 16과 플루실라졸의 배합물, 화합물 2, 화합물 10 또는 화합물 16과 플루티아닐의 배합물, 화합물 2, 화합물 10 또는 화합물 16과 아이스피라잠의 배합물, 화합물 2, 화합물 10 또는 화합물 16과 아이스티아닐의 배합물, 화합물 2, 화합물 10 또는 화합물 16과 크레속심-메틸의 배합물, 화합물 2, 화합물 10 또는 화합물 16과 만디프로파미드의 배합물, 화합물 2, 화합물 10 또는 화합물 16과 맵틸디노캡의 배합물, 화합물 2, 화합물 10 또는 화합물 16과 메트코나졸의 배합물, 화합물 2, 화합물 10 또는 화합물 16과 메토미노스트로빈/페노미노스트로빈의

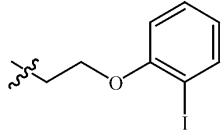
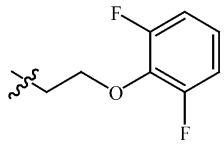
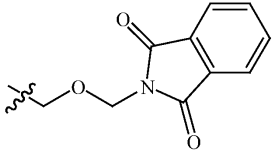
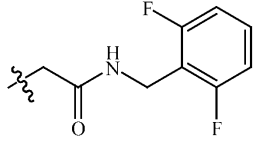
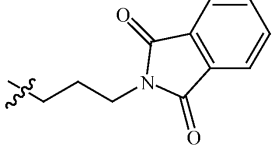
배합물, 화합물 2, 화합물 10 또는 화합물 16과 메트라페논의 배합물, 화합물 2, 화합물 10 또는 화합물 16과 펜플루펜의 배합물, 화합물 2, 화합물 10 또는 화합물 16과 펜티오피라드의 배합물, 화합물 2, 화합물 10 또는 화합물 16과 피콕시스트로빈의 배합물, 화합물 2, 화합물 10 또는 화합물 16과 프로피코나졸의 배합물, 화합물 2, 화합물 10 또는 화합물 16과 프로키나지드의 배합물, 화합물 2, 화합물 10 또는 화합물 16과 프로티오코나졸의 배합물, 화합물 2, 화합물 10 또는 화합물 16과 피라클로스트로빈의 배합물, 화합물 2, 화합물 10 또는 화합물 16과 피라메토스트로빈의 배합물, 화합물 2, 화합물 10 또는 화합물 16과 피라옥시스트로빈의 배합물, 화합물 2, 화합물 10 또는 화합물 16과 피리벤카브의 배합물, 화합물 2, 화합물 10 또는 화합물 16과 퀴녹시펜의 배합물, 화합물 2, 화합물 10 또는 화합물 16과 테부코나졸의 배합물, 화합물 2, 화합물 10 또는 화합물 16과 테부플로킨의 배합물, 화합물 2, 화합물 10 또는 화합물 16과 트라이플록시스트로빈의 배합물, 화합물 2, 화합물 10 또는 화합물 16과 트라이티코나졸의 배합물, 화합물 2, 화합물 10 또는 화합물 16과 발리페날레이트의 배합물 중에서 선택된다.

[0780] 하기 시험은 특정 병원체에 대한 본 발명의 화합물의 방제 효과를 예증한다. 그러나, 화합물에 의해 주어진 병해 방제 보호는 이들 종류에 한정되지 않는다. 화합물 설명에 관해서는 인덱스 표 A를 참조한다.

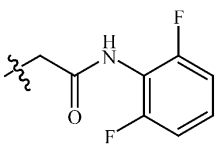
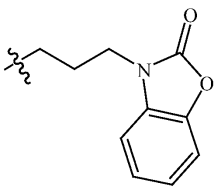
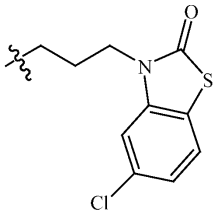
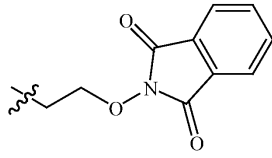
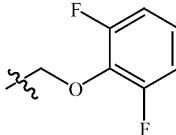
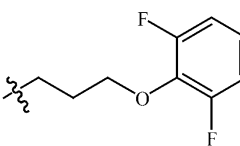
[0781] 인덱스 표 A에서, 컬럼 "MS (M+1)"에 기록된 수치는 최대 동위원소 존재비를 갖는 분자 (즉, M)에 H^+ (분자량 1)를 첨가하여 형성되는 관찰된 분자 이온의 분자량이다. 동위원소 존재비가 낮은 하나 이상의 고 원자량 동위원소 (예를 들어, ^{37}Cl , ^{81}Br)를 포함하는 분자 이온의 존재는 기록되지 않는다. 다수의 할로젠을 포함하는 화합물에 의해 발생하는 교대 (alternate) 분자 이온 피크 (예를 들어, M+2 또는 M+4)는 기록되어 있지 않다. 기록된 M+1 피크를 대기압 화학 이온화 (AP^+) 또는 전기 분무 이온화 (ESI)를 이용하여 질량 분석에 의해 관찰하였다.

[0782] 그 다음에, 인덱스 표 A의 물결선은 J 환 (아이속사졸린)에 대한 각각의 Z-Q 기의 부착점을 나타낸다.

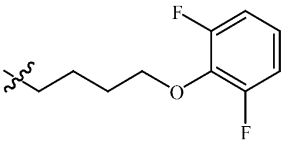
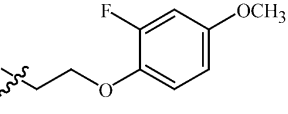
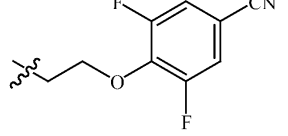
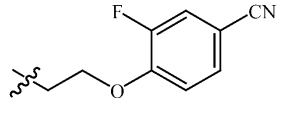
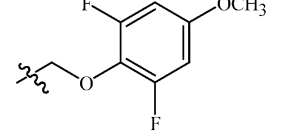
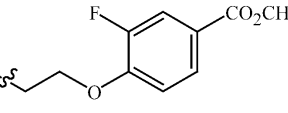
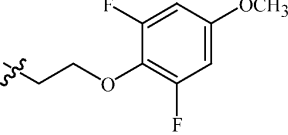
[0783] 인덱스 표 A

화합물	Z-Q	MS (M+1)
1		674
2		584**
3		617**
4		611**
5		615

[0784]

화합물	Z-Q	MS (M+1)
6		597
7		603
8		653**
9		617
10		570
11		598

[0785]

화합물	Z-Q	MS (M+1)
12		612
13		596
14		609
15		591
16		600
17		624
18		614

** ¹H NMR 데이터에 관해서는 합성예를 참조한다.

본 발명의 생물학적 실시예

시험 A 내지 시험 C에 관한 시험 현탁액을 제조하기 위한 일반적인 프로토콜: 시험 화합물을 먼저 최종 체적의 3%에 해당하는 양으로 아세톤에 용해시킨 다음에, 계면활성제 트렘 (Trem)[®] 014 (다가 알코올 에스테르) 250 ppm을 함유하는 아세톤 및 정제수 (50/50 체적 믹스)에 원하는 농도 (ppm)로 현탁시켰다. 그 다음에, 얻어진 시험 현탁액을 시험 A 내지 시험 C에 사용하였다. 시험 식물에 대하여 유출할 수 있을 정도의 40 ppm 시험 현탁액을 분무하는 것은 160 g/ha의 비율에 상당하였다.

시험 A

포도 모종에 *플라스모파라 비티콜라* (*Plasmopara viticola*) (포도 흰가루병의 병원균 (causal agent))의 포자 현탁액을 접종시켜, 20℃에서 24시간 동안 포화 분위기에서 인큐베이션하였다. 짧은 건조 기간 후에, 시험 현탁액을 포도 모종에 유출할 수 있을 정도로 분무한 다음에, 20℃에서 5일간 생장상 (growth chamber)에 옮겨 둔 후에, 포도 모종을 다시 20℃에서 24시간 동안 포화 분위기에 두었다. 제거 후에, 시각적인 발병 등급 (visual disease rating)을 작성하였다.

시험 B

시험 현탁액을 토마토 모종에 유출할 수 있을 정도로 분무하였다. 그 다음날에, 모종에 *파이토프토라 인페스탄스* (*Phytophthora infestans*) (토마토 역병의 병원균)의 포자 현탁액을 접종시켜, 20℃에서 24시간 동안 포화 분위기에서 인큐베이션한 다음에, 20℃에서 5일간 생장상에 옮겨 둔 후에, 시각적인 발병 등급을 작성하였다.

시험 C

[0794] 토마토 모종에 파이토프토라 인페스탄스 (*Phytophthora infestans*) (토마토 역병의 병원균)의 포자 현탁액을 접종시켜, 20℃에서 17시간 동안 포화 분위기에서 인큐베이션하였다. 짧은 건조 기간 후에, 시험 현탁액을 토마토 모종에 유출할 수 있을 정도로 분무한 다음에, 20℃에서 4일간 성장상에 옮겨 둔 후에, 시각적인 발병 등급을 작성하였다.

[0795] 시험 A 내지 시험 C 이외에도, 화합물을 토마토 식물에 분무하여, 처리 후 24 시간 후에 *보트리티스 시네레아* (*Botrytis cinerea*)를 접종시키고, 화합물을 밀 식물에 분무하여, *블루메리아 그라미니스* 폼 스페시스 *트리티시* (*Blumeria graminis f. sp. tritici*)를 접종시켰다. 시험 화합물은 시험된 적용량으로 시험 조건하에 이들 추가의 병원균에 대하여 현저한 활성을 나타내지 않았다.

[0796] 시험 A 내지 시험 C에 대한 결과는 표 A에 나타낸다. 표에서, 100의 등급은 100% 병해 방제를 나타내고, 0의 등급은 병해 방제를 전혀 나타내지 않음을 나타낸다 (대조군과 비교).

[0797] [표 A]

화합물 번호	시험 A	시험 B	시험 C
1	86	99	91
2	96	100	99
3	40	95	46
4	24	100	99
5	67	100	99
6	0	9	46
8	0	100	0
9	0	99	73
10	0	100	64
11	100	100	99
12	100	99	92
13	100	100	95
14	99	100	73
15	100	100	99
16	99	100	99
17	100	100	99
18	79	71	17

[0798]