

(19) 日本国特許庁 (JP)

(12) 特 許 公 報 (B2)

(11) 特許番号

特許第5906314号
(P5906314)

(45) 発行日 平成28年4月20日 (2016. 4. 20)

(24) 登録日 平成28年3月25日 (2016. 3. 25)

(51) Int. Cl.

F I

C O 7 C 255/40	(2006. 01)	C O 7 C 255/40	C S P
A O 1 P 13/00	(2006. 01)	A O 1 P 13/00	
A O 1 P 21/00	(2006. 01)	A O 1 P 21/00	
A O 1 N 37/34	(2006. 01)	A O 1 N 37/34	1 O 1
A O 1 N 43/16	(2006. 01)	A O 1 N 43/16	C

請求項の数 18 (全 233 頁) 最終頁に続く

(21) 出願番号	特願2014-519540 (P2014-519540)
(86) (22) 出願日	平成24年7月11日 (2012. 7. 11)
(65) 公表番号	特表2014-520830 (P2014-520830A)
(43) 公表日	平成26年8月25日 (2014. 8. 25)
(86) 国際出願番号	PCT/EP2012/063613
(87) 国際公開番号	W02013/010882
(87) 国際公開日	平成25年1月24日 (2013. 1. 24)
審査請求日	平成27年7月9日 (2015. 7. 9)
(31) 優先権主張番号	102011079241.4
(32) 優先日	平成23年7月15日 (2011. 7. 15)
(33) 優先権主張国	ドイツ (DE)
(31) 優先権主張番号	61/508, 306
(32) 優先日	平成23年7月15日 (2011. 7. 15)
(33) 優先権主張国	米国 (US)

(73) 特許権者	512137348
	バイエル・インテレクチュアル・プロパティ・ゲゼルシャフト・ミット・ベシュレンクテル・ハフツング
	Bayer Intellectual Property GmbH
	ドイツ40789モンハイム・アム・ライン、アルフレート・ノーベル・シュトラッセ10番
(74) 代理人	100146318
	弁理士 岩瀬 吉和
(74) 代理人	100114188
	弁理士 小野 誠
(74) 代理人	100119253
	弁理士 金山 賢教

最終頁に続く

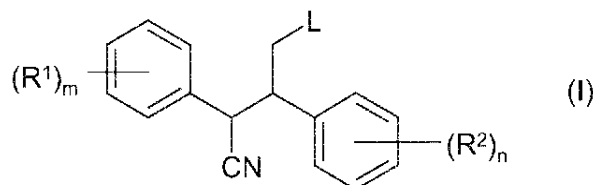
(54) 【発明の名称】 2, 3-ジフェニル-バレロニトリル誘導体、それらを製造する方法並びに除草剤及び植物成長調節剤としてのそれらの使用

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項 1】

式 (I)

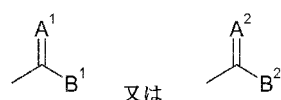
【化 1】



〔式中、

L は、式

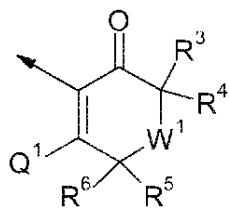
【化 2】



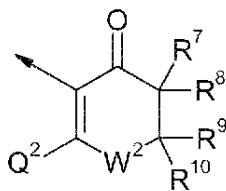
で表されるラジカルを表し；

A¹ は、酸素、硫黄又は =N-R^A を表し；B¹ は、式 (B 1) ~ 式 (B 1 4)

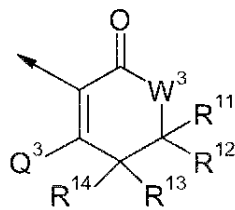
【化 3】



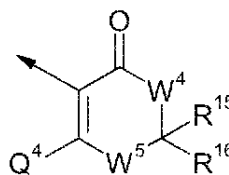
(B1)



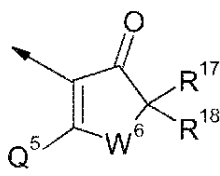
(B2)



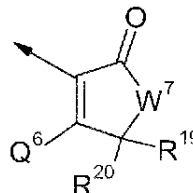
(B3)



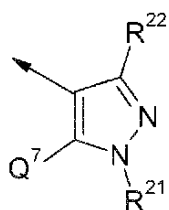
(B4)



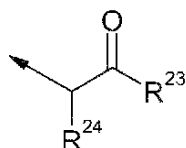
(B5)



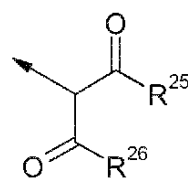
(B6)



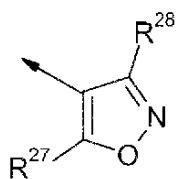
(B7)



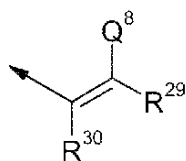
(B8)



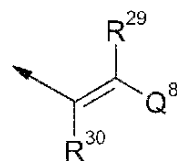
(B9)



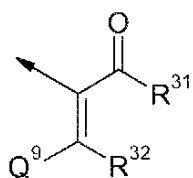
(B10)



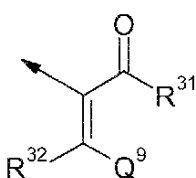
(B11)



(B12)



(B13)



(B14)

で表されるラジカルを表し；

A² は、式 (A 1) ~ 式 (A 1 2)

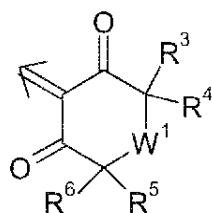
10

20

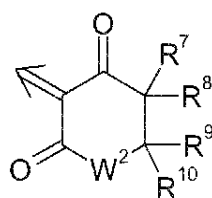
30

40

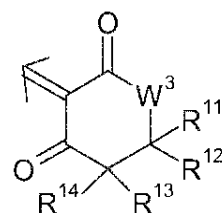
【化 4】



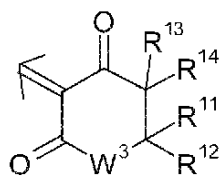
(A1)



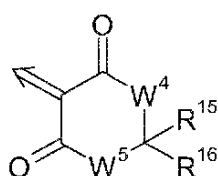
(A2)



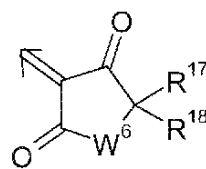
(A3)



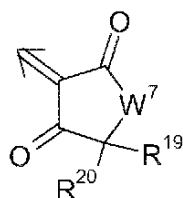
(A4)



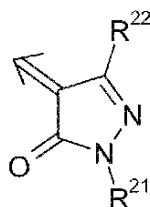
(A5)



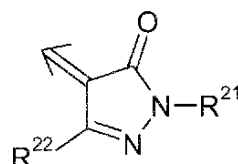
(A6)



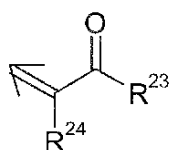
(A7)



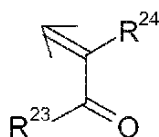
(A8)



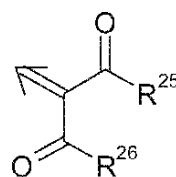
(A9)



(A10)



(A11)



(A12)

で表されるラジカルを表し；

B² は、ヒドロキシ、チオ、ハロゲンを表すか、又は、式OR³³、OM、SR³⁴、SM若しくは-NR^BR^Cで表される基を表し；

W¹ 及びW⁶ は、互いに独立して、それぞれ、二価基酸素、硫黄を表すか、又は、式NH、N-[(C₁-C₄)-アルキル]、C=O(カルボニル)、S=O(スルフィニル)、SO₂(スルホニル)若しくはCR³⁵R³⁶で表される基を表し；

W²、W³、W⁴、W⁵ 及びW⁷ は、互いに独立して、それぞれ、二価基酸素、硫黄を表すか、又は、式NH、N-[(C₁-C₄)-アルキル]、C=O(カルボニル)、S=O(スルフィニル)若しくはSO₂(スルホニル)で表される基を表し；

Q¹、Q²、Q³、Q⁴、Q⁵、Q⁶、Q⁷、Q⁸ 及びQ⁹ は、互いに独立して、それぞれ、ヒドロキシ、チオ、ハロゲンを表すか、又は、式OR³⁷、SR³⁸、SM若しくはOMで表される基を表し；

10

20

30

50

Mは、カチオンの等価物を表し；

R^A 、 R^B 及び R^C は、互いに独立して、それぞれ、水素、ヒドロキシ、 $(C_1 - C_4)$ - アルコキシ、 $(C_1 - C_4)$ - アルキル、 $(C_1 - C_4)$ - ハロアルキル、フェニル又はベンジル [ここで、最後に挙げられている2のラジカルは、それぞれ、同一であるか又は異なっている置換基で1置換又は多置換されていてもよい] を表し；

又は、

R^A 、 R^B 及び R^C は、互いに独立して、それぞれ、 $-NR^*R^{**}$ を表し、その際、 R^* 、 R^{**} は、互いに独立して、それぞれ、H、 $(C_1 - C_8)$ - アルキル、 $(C_2 - C_8)$ - アルケニル、 $(C_2 - C_8)$ - アルキニル、 $(C_1 - C_4)$ - アルコキシ- $(C_1 - C_4)$ - アルキル、 $(C_1 - C_6)$ - アルカノイル、 $[(C_1 - C_4)$ - ハロアルキル] カルボニル、 $[(C_1 - C_4)$ - アルコキシ] カルボニル、 $[(C_1 - C_4)$ - ハロアルコキシ] カルボニル、 $(C_3 - C_6)$ - シクロアルキル、 $(C_3 - C_6)$ - シクロアルキル- $(C_1 - C_4)$ - アルキル、フェニル、フェニル- $(C_1 - C_4)$ - アルキル [ここで、最後に挙げられている4のラジカルは、それぞれ、環において置換されていないか、又は、ハロゲン、 $(C_1 - C_4)$ - アルキル、 $(C_1 - C_4)$ - ハロアルキル、 $(C_1 - C_4)$ - アルコキシ及び $(C_1 - C_4)$ - ハロアルコキシからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されており、また、シクロアルキルの場合には、さらに、オキソでも置換されている] を表すか、又は、 R^* と R^{**} は、その窒素原子と一緒に、3員〜8員のヘテロ環 [ここで、該ヘテロ環は、その窒素原子に加えて、N、O及びSからなる群から選択される1個又は2個のさらなるヘテロ原子を含むことができ、及び、該ヘテロ環は、置換されていなくてもよい] を表し；

$(R^1)_m$ は、mの置換基 R^1 を表し、

ここで、 $m=1$ の場合、 R^1 は、又は、mが1より大きい場合、置換基 R^1 はそれぞれ残りのものから独立して、ハロゲン、シアノ、ニトロ、ヒドロキシ、 $(C_1 - C_8)$ - アルキル、 $(C_2 - C_6)$ - アルケニル、 $(C_2 - C_6)$ - アルキニル、 $(C_1 - C_8)$ - アルコキシ、 $(C_1 - C_8)$ - アルキルチオ、 $(C_1 - C_8)$ - アルキルスルフィニル、 $(C_1 - C_8)$ - アルキルスルホニル、 $(C_1 - C_6)$ - ハロアルキル、 $(C_1 - C_6)$ - ハロアルコキシ、 $(C_1 - C_6)$ - ハロアルキルチオ、 $(C_1 - C_6)$ - ハロアルキルスルフィニル、 $(C_1 - C_6)$ - ハロアルキルスルホニル、 $(C_2 - C_6)$ - ハロアルケニル、 $(C_2 - C_6)$ - ハロアルキニル、 $(C_1 - C_6)$ - アルコキシ- $(C_1 - C_4)$ - アルキル、 $(C_1 - C_6)$ - ハロアルコキシ- $(C_1 - C_4)$ - アルキル、 $(C_3 - C_6)$ - シクロアルキル [ここで、該シクロアルキルは、ハロゲン及び $(C_1 - C_4)$ - アルキルからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されていてもよい]、 $(C_3 - C_6)$ - シクロアルコキシ [ここで、該シクロアルコキシは、ハロゲン及び $(C_1 - C_4)$ - アルキルからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されていてもよい] を表すか、又は、式 $C(O)OR^{3'9}$ 、 $C(O)NR^{4'0}R^{4'1}$ 、 $C(O)-Het^{1'}$ 、 $NR^{4'2}R^{4'3}$ 若しくは $Het^{2'}$ で表されるラジカルを表し；

又は、いずれの場合にも、環上のオルトに位置している2つの基 R^1 は、一緒になって、式 $-Z^1-A^*-Z^2$ [式中、

A^* は、ハロゲン、 $(C_1 - C_4)$ - アルキル、 $(C_1 - C_4)$ - ハロアルキル、 $(C_1 - C_4)$ - アルコキシ及び $(C_1 - C_4)$ - ハロアルコキシからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されていてもよい1〜4個の炭素原子を有するアルキレン基を表し；

Z^1 は、直接結合、O又はSを表し；及び、

Z^2 は、直接結合、O又はSを表す]

で表される基であり、その際、該基 $-Z^1-A^*-Z^2$ は、その基に結合しているフェニル環の炭素原子と一緒に、縮合した5員又は6員の環を形成し；及び、

$(R^2)_n$ は、nの置換基 R^2 を表し、

ここで、 $n = 1$ の場合、 R^2 は、又は、 n が 1 より大きい場合、置換基 R^2 はそれぞれ残りのものから独立して、ハロゲン、シアノ、ニトロ、ヒドロキシ、 $(C_1 - C_8)$ - アルキル、 $(C_2 - C_6)$ - アルケニル、 $(C_2 - C_6)$ - アルキニル、 $(C_1 - C_8)$ - アルコキシ、 $(C_1 - C_8)$ - アルキルチオ、 $(C_1 - C_8)$ - アルキルスルフィニル、 $(C_1 - C_8)$ - アルキルスルホニル、 $(C_1 - C_6)$ - ハロアルキル、 $(C_1 - C_6)$ - ハロアルコキシ、 $(C_1 - C_6)$ - ハロアルキルチオ、 $(C_1 - C_6)$ - ハロアルキルスルフィニル、 $(C_1 - C_6)$ - ハロアルキルスルホニル、 $(C_2 - C_6)$ - ハロアルケニル、 $(C_2 - C_6)$ - ハロアルキニル、 $(C_1 - C_6)$ - アルコキシ- $(C_1 - C_4)$ - アルキル、 $(C_1 - C_6)$ - ハロアルコキシ- $(C_1 - C_4)$ - アルキル、 $(C_3 - C_6)$ - シクロアルキル [ここで、該シクロアルキルは、ハロゲン及び $(C_1 - C_4)$ - アルキルからなる群から選択される 1 以上のラジカルで置換されていてもよい]、 $(C_3 - C_6)$ - シクロアルコキシ [ここで、該シクロアルコキシは、ハロゲン及び $(C_1 - C_4)$ - アルキルからなる群から選択される 1 以上のラジカルで置換されていてもよい] を表すか、又は、式 $C(O)OR^{44}$ 、 $C(O)NR^{45}R^{46}$ 、 $C(O)-Het^3$ 、 $NR^{47}R^{48}$ 若しくは Het^4 で表されるラジカルを表し

10

又は、いずれの場合にも、環上のオルトに位置している 2 つの基 R^2 は、一緒になって、式 $-Z^3-A^{**}-Z^4$ [式中、

A^{**} は、ハロゲン、 $(C_1 - C_4)$ - アルキル、 $(C_1 - C_4)$ - ハロアルキル、 $(C_1 - C_4)$ - アルコキシ及び $(C_1 - C_4)$ - ハロアルコキシからなる群から選択される 1 以上のラジカルで置換されていてもよい 1 ~ 4 個の炭素原子を有するアルキレン基を表し；

20

Z^3 は、直接結合、O 又は S を表し；及び、

Z^4 は、直接結合、O 又は S を表す]

で表される基であり、その際、該基 $-Z^3-A^{**}-Z^4$ は、その基に結合しているフェニル環の炭素原子と一緒に、縮合した 5 員又は 6 員の環を形成し；

R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^9 、 R^{10} 、 R^{11} 、 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} 、 R^{16} 、 R^{17} 、 R^{18} 、 R^{19} 及び R^{20} は、互いに独立して、それぞれ、水素、ハロゲン、シアノ、ニトロ、ヒドロキシ、 $(C_1 - C_4)$ - アルキル、 $(C_1 - C_4)$ - ハロアルキル、 $(C_1 - C_4)$ - アルコキシ、 $(C_1 - C_4)$ - ハロアルコキシ、 $(C_1 - C_4)$ - アルコキシ- $(C_1 - C_4)$ - アルキル、 $(C_1 - C_4)$ - ハロアルコキシ- $(C_1 - C_4)$ - アルキル、 $(C_3 - C_6)$ - シクロアルキル、 $(C_3 - C_6)$ - ハロシクロアルキル、 $(C_3 - C_6)$ - シクロアルコキシ、 $(C_2 - C_6)$ - アルケニル、 $(C_2 - C_6)$ - ハロアルケニル、 $(C_2 - C_6)$ - アルキニル、 $(C_2 - C_6)$ - ハロアルキニル、 $(C_1 - C_4)$ - アルキルチオ、 $(C_1 - C_4)$ - アルキルスルホニル、 $(C_1 - C_4)$ - アルキルスルフィニル、フェニル [ここで、該フェニルは、置換されていてもよい] を表すか、又は、基 $C(O)OR^{49}$ 、 $C(O)NR^{50}R^{51}$ 、 $C(O)Het^5$ 、 $NR^{52}R^{53}$ 若しくは Het^6 を表し；又は

30

式 (B1) 又は式 (A1) で表される基の中の R^3 及び R^5 は、一緒になって、2 個若しくは 3 個の炭素原子を有する直鎖のアルキレン基若しくはアルケニレン基からなる二価架橋 [ここで、該鎖の中の CH_2 基は酸素原子で置き換えられてもよく、及び、該鎖の中の CH_2 基又は CH 基は、 $(C_1 - C_4)$ - アルキル、 $(C_1 - C_4)$ - ハロアルキル、 $(C_1 - C_4)$ - アルコキシ及び $(C_1 - C_4)$ - ハロアルコキシからなる群から選択される 1 以上のラジカルで置換されていてもよい] を表し；

40

R^{21} は、水素、 $(C_1 - C_4)$ - アルキル、 $(C_1 - C_4)$ - ハロアルキル、 $(C_3 - C_6)$ - シクロアルキル、 $(C_3 - C_6)$ - ハロシクロアルキルを表すか、又は、基 $C(O)OR^{54}$ 、 $C(O)NR^{55}R^{56}$ 、 $C(O)Het^7$ 、 $NR^{57}R^{58}$ 若しくは Het^8 を表し；

R^{22} は、水素、 $(C_1 - C_4)$ - アルキル、 $(C_1 - C_4)$ - ハロアルキル、 $(C_3 - C_6)$ - シクロアルキル、 $(C_3 - C_6)$ - ハロシクロアルキル、 $(C_1 - C_4)$ - アルキルチオ、 $(C_1 - C_4)$ - アルキルスルホニル、 $(C_1 - C_4)$ - アルキルスルフィ

50

ニルを表すか、又は、式 $C(O)OR^{59}$ 、 $C(O)NR^{60}R^{61}$ 、 $C(O)Het^{9}$ 、 $NR^{62}R^{63}$ 若しくは Het^{10} で表される基を表し；

R^{23} 及び R^{29} は、互いに独立して、それぞれ、水素、 (C_1-C_4) - アルキル、 (C_1-C_4) - ハロアルキル、 (C_3-C_6) - シクロアルキル、 (C_3-C_6) - ハロシクロアルキル、 (C_1-C_4) - アルコキシ又は (C_1-C_4) - ハロアルコキシを表し；

R^{24} 及び R^{30} は、互いに独立して、それぞれ、水素、ハロゲン、シアノ、 (C_1-C_4) - アルキル、 (C_1-C_4) - ハロアルキル、 (C_3-C_6) - シクロアルキル、 (C_3-C_6) - ハロシクロアルキル、 (C_1-C_4) - アルコキシ又は (C_1-C_4) - ハロアルコキシを表し；

R^{25} 、 R^{26} 、 R^{31} 及び R^{32} は、互いに独立して、それぞれ、水素、 (C_1-C_4) - アルキル、 (C_1-C_4) - ハロアルキル、 (C_1-C_4) - アルコキシ、 (C_1-C_4) - ハロアルコキシ、 (C_1-C_4) - アルコキシ- (C_1-C_4) - アルキル、 (C_1-C_4) - ハロアルコキシ- (C_1-C_4) - アルキル、 (C_3-C_6) - シクロアルキル、 (C_3-C_6) - ハロシクロアルキル、 (C_3-C_6) - シクロアルコキシ、 (C_2-C_6) - アルケニル、 (C_2-C_6) - ハロアルケニル、 (C_2-C_6) - アルキニル、 (C_2-C_6) - ハロアルキニル、 (C_1-C_4) - アルキルチオ、 (C_1-C_4) - アルキルスルホニル、 (C_1-C_4) - アルキルスルフィニル、 $NR^{64}R^{65}$ 又は Het^{11} を表し；

R^{27} は、水素、 (C_1-C_6) - アルキル、 (C_1-C_4) - ハロアルキル、 (C_3-C_6) - シクロアルキル又は (C_3-C_6) - ハロシクロアルキルを表し；

R^{28} は、水素、 (C_1-C_6) - アルキル、 (C_1-C_4) - ハロアルキルを表すか、又は、式 $C(O)OR^{66}$ で表されるラジカルを表し；

R^{33} 、 R^{34} 、 R^{37} 及び R^{38} は、互いに独立して、それぞれ、 (C_1-C_8) - アルキル、 (C_3-C_6) - シクロアルキル、フェニル [ここで、最後に挙げられている 3 のラジカルは、それぞれ、いずれの場合にも残りのものから独立して、置換されていないか、又は、ハロゲン、シアノ、ニトロ、ヒドロキシ、 (C_1-C_4) - アルコキシ、 (C_1-C_4) - アルキルチオからなる群から選択される 1 以上のラジカルで置換されており、及び、親ラジカルとしてのシクロアルキルラジカル又はフェニルラジカルの場合、 (C_1-C_4) - アルキル及び (C_1-C_4) - ハロアルキルでも置換されている] を表すか、又は、式 $-C(O)R^{67}$ 、 $-C(O)OR^{68}$ 、 $-C(O)NR^{69}R^{70}$ 、 $-C(O)Het^{12}$ 若しくは $-SO_2R^{71}$ で表される基を表し；

R^{35} 及び R^{36} は、互いに独立して、それぞれ、 R^3 のように定義され；

R^{39} 、 R^{44} 、 R^{49} 、 R^{54} 、 R^{59} 及び R^{66} は、互いに独立して、それぞれ、水素、 (C_1-C_4) - アルキル、 (C_1-C_4) - ハロアルキル、 (C_3-C_6) - シクロアルキル、 (C_3-C_6) - ハロシクロアルキル、 (C_2-C_4) - アルケニル、 (C_2-C_4) - ハロアルケニル、 (C_2-C_4) - アルキニル又は上記基 M を表し；

R^{40} 、 R^{41} 、 R^{42} 、 R^{43} 、 R^{45} 、 R^{46} 、 R^{47} 、 R^{48} 、 R^{50} 、 R^{51} 、 R^{52} 、 R^{53} 、 R^{55} 、 R^{56} 、 R^{57} 、 R^{58} 、 R^{60} 、 R^{61} 、 R^{62} 、 R^{63} 、 R^{64} 、 R^{65} 、 R^{69} 及び R^{70} は、互いに独立して、それぞれ、水素、 (C_1-C_6) - アルキル、 (C_2-C_6) - アルケニル若しくは (C_2-C_6) - アルキニル [ここで、最後に挙げられている 3 のラジカルは、それぞれ、いずれの場合にも残りのものから独立して、置換されていないか、又は、ハロゲン、ニトロ、シアノ及びフェニル (ここで、該フェニルは、置換されていてもよい) からなる群から選択される 1 以上のラジカルで置換されている] を表すか、又は、

(C_3-C_6) - シクロアルキル若しくはフェニル [ここで、最後に挙げられている 2 のラジカルは、それぞれ、いずれの場合にも残りのものから独立して、置換されていないか、又は、ハロゲン、ニトロ、シアノ、 (C_1-C_4) - アルキル、 (C_1-C_4) - ハロアルキル、フェニル及びベンジルからなる群から選択される 1 以上のラジカルで置換されており、ここで、最後に挙げられている 2 のラジカルは、それぞれ、置換されていてもよ

10

20

30

40

50

い]を表し；

$R^{6,7}$ は、水素、 (C_1-C_8) －アルキル若しくは (C_1-C_8) －ハロアルキル〔ここで、最後に挙げられている2のラジカルは、それぞれ、残りのものから独立して、そのアルキル部分が酸素又は硫黄で中断されていてもよい〕を表すか、又は、フェニル若しくはベンジル〔ここで、最後に挙げられている2のラジカルは、それぞれ、残りのものから独立して、置換されていないか、又は、ハロゲン、シアノ、 (C_1-C_4) －アルキル、 (C_2-C_4) －アルケニル、 (C_2-C_4) －アルキニル、 (C_3-C_6) －シクロアルキル、 (C_1-C_4) －ハロアルキル及び (C_3-C_6) －ハロシクロアルキルからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されている〕を表し；

$R^{6,8}$ は、 (C_1-C_8) －アルキル、 (C_1-C_8) －ハロアルキル、 (C_3-C_6) －シクロアルキル、 (C_3-C_6) －ハロシクロアルキル、 (C_2-C_8) －アルケニル、 (C_2-C_8) －ハロアルケニル又は (C_2-C_4) －アルキニルを表し；

$R^{7,1}$ は、 (C_1-C_6) －アルキル、 (C_1-C_6) －ハロアルキルを表すか、又は、フェニル若しくはベンジル〔ここで、最後に挙げられている2のラジカルは、それぞれ、残りのものから独立して、置換されていないか、又は、ハロゲン、シアノ、 (C_1-C_4) －アルキル、 (C_2-C_4) －アルケニル、 (C_2-C_4) －アルキニル、 (C_3-C_6) －シクロアルキル、 (C_1-C_4) －ハロアルキル及び (C_3-C_6) －ハロシクロアルキルからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されている〕を表し；

Het^1 、 Het^2 、 Het^3 、 Het^4 、 Het^5 、 Het^6 、 Het^7 、 Het^8 、 Het^9 、 Het^{10} 、 Het^{11} 及び Het^{12} は、互いに独立して、それぞれ、飽和又は部分的不飽和のヘテロ環のラジカル〔ここで、該ヘテロ環は、3～9個の環原子及び該環の1位に環ヘテロ原子としての少なくとも1個の窒素原子を有し、及び、場合により、N、O及びSからなる群から選択される1個、2個又は3個のさらなる環ヘテロ原子を有し、並びに、該ヘテロ環の該ラジカルはその環の1位にある窒素原子で式(I)で表される化合物の分子の残りの部分に結合しており、並びに、該ヘテロ環は、置換されていないか、又は、ハロゲン、 (C_1-C_4) －アルキル、 (C_1-C_4) －ハロアルキル、 (C_1-C_4) －アルコキシ、 (C_1-C_4) －ハロアルコキシ、 (C_1-C_4) －アルキルチオ及びオキソからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されている〕であり；及び、

m 、 n は、互いに独立して、それぞれ、0、1、2、3、4又は5を表す〕で表される化合物又はその塩。

【請求項2】

$(R^1)_m$ が、 m の置換基 R^1 を表し、
ここで、 $m=1$ の場合、 R^1 が、又は、 m が1より大きい場合、置換基 R^1 がそれぞれ残りのものから独立して、ハロゲン、シアノ、ニトロ、ヒドロキシ、 (C_1-C_6) －アルキル、 (C_2-C_4) －アルケニル、 (C_2-C_4) －アルキニル、 (C_1-C_6) －アルコキシ、 (C_1-C_6) －アルキルチオ、 (C_1-C_6) －アルキルスルフィニル、 (C_1-C_6) －アルキルスルホニル、 (C_1-C_4) －ハロアルキル、 (C_1-C_4) －ハロアルコキシ、 (C_1-C_4) －ハロアルキルチオ、 (C_1-C_4) －ハロアルキルスルフィニル、 (C_1-C_4) －ハロアルキルスルホニル、 (C_2-C_4) －ハロアルケニル、 (C_2-C_4) －ハロアルキニル、 (C_1-C_4) －アルコキシ－ (C_1-C_4) －アルキル、 (C_1-C_4) －ハロアルコキシ－ (C_1-C_4) －アルキル、 (C_3-C_6) －シクロアルキル〔ここで、該シクロアルキルは、ハロゲン及び (C_1-C_4) －アルキルからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されていてもよい〕、 (C_3-C_6) －シクロアルコキシ〔ここで、該シクロアルコキシは、ハロゲン及び (C_1-C_4) －アルキルからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されていてもよい〕を表すか、又は、式 $C(O)OR^{3,9}$ 、 $C(O)NR^{4,10}R^{4,11}$ 、 $C(O)-Het^1$ 、 $NR^{4,2}R^{4,3}$ 又は Het^2 で表されるラジカルを表し；

又は、いずれの場合にも、環上のオルトに位置している2つの基 R^1 が、一緒になって、式 $-Z^1-A^*-Z^2$ 〔式中、

10

20

30

40

50

A^* は、ハロゲン、 $(C_1 - C_4)$ - アルキル、 $(C_1 - C_4)$ - ハロアルキル、 $(C_1 - C_4)$ - アルコキシ及び $(C_1 - C_4)$ - ハロアルコキシからなる群から選択される 1 以上のラジカルで置換されていてもよい 1 ~ 4 個の炭素原子を有するアルキレン基を表し；

Z^1 は、直接結合、O 又は S を表し；及び、

Z^2 は、直接結合、O 又は S を表す]

で表される基であり、その際、該基 $-Z^1 - A^* - Z^2$ は、その基に結合しているフェニル環の炭素原子と一緒に、縮合した 5 員又は 6 員の環を形成し；

$R^{3\ 9}$ が、水素、 $(C_1 - C_4)$ - アルキル、 $(C_1 - C_4)$ - ハロアルキル、 $(C_3 - C_6)$ - シクロアルキル、 $(C_3 - C_6)$ - ハロシクロアルキル、 $(C_2 - C_4)$ - アルケニル、 $(C_2 - C_4)$ - ハロアルケニル、 $(C_2 - C_4)$ - アルキニル又はカチオンの等価物を表し；

$R^{4\ 0}$ 、 $R^{4\ 1}$ 、 $R^{4\ 2}$ 及び $R^{4\ 3}$ が、互いに独立して、それぞれ、水素若しくは $(C_1 - C_4)$ - アルキル [ここで、該アルキルは、置換されていないか、又は、ハロゲン、ニトロ、シアノ及びフェニルからなる群から選択される 1 以上のラジカルで置換されている] を表すか、又は、

$(C_3 - C_6)$ - シクロアルキル若しくはフェニル [ここで、最後に挙げられている 2 のラジカルは、それぞれ、いずれの場合にも残りのものから独立して、置換されていないか、又は、ハロゲン、 $(C_1 - C_4)$ - アルキル、 $(C_1 - C_4)$ - ハロアルキル、フェニル及びベンジルからなる群から選択される 1 以上のラジカルで置換されている] を表し；

Het^1 及び Het^2 が、互いに独立して、それぞれ、飽和又は部分的不飽和のヘテロ環のラジカル [ここで、該ヘテロ環は、3 ~ 6 個の環原子及び該環の 1 位に環ヘテロ原子としての少なくとも 1 個の窒素原子を有し、及び、場合により、N、O 及び S からなる群から選択される 1 個、2 個又は 3 個のさらなる環ヘテロ原子を有し、並びに、該ヘテロ環の該ラジカルはその環の 1 位にある窒素原子で式 (I) で表される化合物の分子の残りの部分に結合しており、並びに、該ヘテロ環は、置換されていないか、又は、ハロゲン、 $(C_1 - C_4)$ - アルキル、 $(C_1 - C_4)$ - ハロアルキ及びオキソからなる群から選択される 1 以上のラジカルで置換されている] を表し；及び、

m は、0、1、2、3、4 又は 5 を表す；

ことを特徴とする、請求項 1 に記載の化合物又はその塩。

【請求項 3】

$(R^2)_n$ が、 n の置換基 R^2 を表し、

ここで、 $n = 1$ の場合、 R^2 が、又は、 n が 1 より大きい場合、置換基 R^2 がそれぞれ互いに独立して、ハロゲン、シアノ、ニトロ、ヒドロキシ、 $(C_1 - C_6)$ - アルキル、 $(C_2 - C_4)$ - アルケニル、 $(C_2 - C_4)$ - アルキニル、 $(C_1 - C_6)$ - アルコキシ、 $(C_1 - C_6)$ - アルキルチオ、 $(C_1 - C_6)$ - アルキルスルフィニル、 $(C_1 - C_6)$ - アルキルスルホニル、 $(C_1 - C_4)$ - ハロアルキル、 $(C_1 - C_4)$ - ハロアルコキシ、 $(C_1 - C_4)$ - ハロアルキルチオ、 $(C_1 - C_4)$ - ハロアルキルスルフィニル、 $(C_1 - C_4)$ - ハロアルキルスルホニル、 $(C_2 - C_4)$ - ハロアルケニル、 $(C_2 - C_4)$ - ハロアルキニル、 $(C_1 - C_4)$ - アルコキシ- $(C_1 - C_4)$ - アルキル、 $(C_1 - C_4)$ - ハロアルコキシ- $(C_1 - C_4)$ - アルキル、 $(C_3 - C_6)$ - シクロアルキル [ここで、該シクロアルキルは、ハロゲン及び $(C_1 - C_4)$ - アルキルからなる群から選択される 1 以上のラジカルで置換されていてもよい]、 $(C_3 - C_6)$ - シクロアルコキシ [ここで、該シクロアルコキシは、ハロゲン及び $(C_1 - C_4)$ - アルキルからなる群から選択される 1 以上のラジカルで置換されていてもよい] を表すか、又は、式 $C(O)OR^{4\ 4}$ 、 $C(O)NR^{4\ 5}R^{4\ 6}$ 、 $C(O)-Het^3$ 、 $NR^{4\ 7}R^{4\ 8}$ 若しくは Het^4 で表されるラジカルを表し；

又は、いずれの場合にも、環上のオルトに位置している 2 つの基 R^2 が、一緒になって、式 $-Z^3 - A^{**} - Z^4$ [式中、

A^{**} は、ハロゲン、 $(C_1 - C_4)$ - アルキル、 $(C_1 - C_4)$ - ハロアルキル、(

C_1-C_4)-アルコキシ及び(C_1-C_4)-ハロアルコキシからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されていてもよい1~4個の炭素原子を有するアルキレン基を表し；

Z^3 は、直接結合、O又はSを表し；及び、

Z^4 は、直接結合、O又はSを表す]

で表される基であり、その際、該基- $Z^3-A^{**}-Z^4$ は、その基に結合しているフェニル環の炭素原子と一緒に、縮合した5員又は6員の環を形成し；

R^{44} が、水素、(C_1-C_4)-アルキル、(C_1-C_4)-ハロアルキル、(C_3-C_6)-シクロアルキル、(C_3-C_6)-ハロシクロアルキル、(C_2-C_4)-アルケニル、(C_2-C_4)-ハロアルケニル、(C_2-C_4)-アルキニル又はカチオンの等価物を表し；

R^{45} 、 R^{46} 、 R^{47} 及び R^{48} が、互いに独立して、それぞれ、水素若しくは(C_1-C_4)-アルキル[ここで、該アルキルは、置換されていないか、又は、ハロゲン、ニトロ、シアノ及びフェニルからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されている]を表すか、又は、(C_3-C_6)-シクロアルキル若しくはフェニル[ここで、最後に挙げられている2のラジカルは、それぞれ、いずれの場合にも残りのものから独立して、置換されていないか、又は、ハロゲン、(C_1-C_4)-アルキル、(C_1-C_4)-ハロアルキル、フェニル及びベンジルからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されている]を表し；

Het^3 及び Het^4 が、互いに独立して、それぞれ、飽和又は部分的不飽和のヘテロ環のラジカル[ここで、該ヘテロ環は、3~6個の環原子及び該環の1位に環ヘテロ原子としての少なくとも1個の窒素原子を有し、及び、場合により、N、O及びSからなる群から選択される1個、2個又は3個のさらなる環ヘテロ原子を有し、並びに、該ヘテロ環の該ラジカルはその環の1位にある窒素原子で式(I)で表される化合物の分子の残りの部分に結合しており、並びに、該ヘテロ環は、置換されていないか、又は、ハロゲン、(C_1-C_4)-アルキル、(C_1-C_4)-ハロアルキ及びオキソからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されている]を表し；及び、

n が、0、1、2、3、4又は5を表す；

ことを特徴とする、請求項1又は2に記載の化合物又はその塩。

【請求項4】

(R^1)_mが、 m の置換基 R^1 を表し、

ここで、 $m=1$ の場合、 R^1 が、又は、 m が1より大きい場合、置換基 R^1 がそれぞれ残りのものから独立して、ハロゲン、シアノ、ニトロ、ヒドロキシ、(C_1-C_4)-アルキル、(C_1-C_4)-アルコキシ、(C_1-C_4)-アルキルチオ、(C_1-C_4)-アルキルスルフィニル、(C_1-C_4)-アルキルスルホニル、(C_1-C_4)-ハロアルキル、(C_1-C_4)-ハロアルコキシ、(C_1-C_4)-ハロアルキルチオ、(C_1-C_4)-ハロアルキルスルフィニル、(C_1-C_4)-ハロアルキルスルホニル、(C_1-C_4)-アルコキシ-(C_1-C_4)-アルキル、(C_3-C_6)-シクロアルキルを表すか、又は、式 $C(O)OR^{39}$ 、 $C(O)NR^{40}R^{41}$ 、 $C(O)-Het^1$ 、 $NR^{42}R^{43}$ 若しくは Het^2 で表されるラジカルを表し；

又は、いずれの場合にも、環上のオルトに位置している2つの基 R^1 が、一緒になって、式- $Z^1-A^*-Z^2$ [式中、

A^* は、ハロゲン、(C_1-C_4)-アルキル、(C_1-C_4)-ハロアルキル、(C_1-C_4)-アルコキシ及び(C_1-C_4)-ハロアルコキシからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されていてもよい1~4個の炭素原子を有するアルキレン基を表し；

Z^1 は、直接結合、O又はSを表し；及び、

Z^2 は、直接結合、O又はSを表す]

で表される基であり、その際、該基- $Z^1-A^*-Z^2$ は、その基に結合しているフェニル環の炭素原子と一緒に、縮合した5員又は6員の環を形成し；及び、

R^{39} が、水素、 $(C_1 - C_4)$ - アルキル又はカチオンの等価物を表し；

R^{40} 、 R^{41} 、 R^{42} 及び R^{43} が、互いに独立して、それぞれ、水素、 $(C_1 - C_4)$ - アルキル、 $(C_1 - C_4)$ - ハロアルキル、ベンジル、 $(C_3 - C_6)$ - シクロアルキル又はフェニルを表し；

Het^1 及び Het^2 が、互いに独立して、それぞれ、モルホリノ基、ピペリジノ基又はピロリジノ基を表し；

m が、0、1、2、3、4 又は 5 を表し；

$(R^2)_n$ が、 n の置換基 R^2 を表し、

ここで、 $n = 1$ の場合、 R^2 が、又は、 n が 1 より大きい場合、置換基 R^2 がそれぞれ互いに独立して、ハロゲン、シアノ、ニトロ、ヒドロキシ、 $(C_1 - C_4)$ - アルキル、 $(C_1 - C_4)$ - アルコキシ、 $(C_1 - C_4)$ - アルキルチオ、 $(C_1 - C_4)$ - アルキルスルフィニル、 $(C_1 - C_4)$ - アルキルスルホニル、 $(C_1 - C_4)$ - ハロアルキル、 $(C_1 - C_4)$ - ハロアルコキシ、 $(C_1 - C_4)$ - ハロアルキルチオ、 $(C_1 - C_4)$ - ハロアルキルスルフィニル、 $(C_1 - C_4)$ - ハロアルキルスルホニル、 $(C_1 - C_4)$ - アルコキシ - $(C_1 - C_4)$ - アルキル、 $(C_3 - C_6)$ - シクロアルキルを表すか、又は、式 $C(O)OR^{44}$ 、 $C(O)NR^{45}R^{46}$ 、 $C(O)-Het^3$ 、 $NR^{47}R^{48}$ 若しくは Het^4 で表されるラジカルを表し；

又は、いずれの場合にも、環上のオルトに位置している 2 つの基 R^2 が、一緒になって、式 $-Z^3-A^{**}-Z^4$ [式中、

A^{**} は、ハロゲン、 $(C_1 - C_4)$ - アルキル、 $(C_1 - C_4)$ - ハロアルキル、 $(C_1 - C_4)$ - アルコキシ及び $(C_1 - C_4)$ - ハロアルコキシからなる群から選択される 1 以上のラジカルで置換されていてもよい 1 ~ 4 個の炭素原子を有するアルキレン基を表し；

Z^3 は、直接結合、O 又は S を表し；及び、

Z^4 は、直接結合、O 又は S を表す]

で表される基であり、その際、該基 $-Z^3-A^{**}-Z^4$ は、その基に結合しているフェニル環の炭素原子と一緒に、縮合した 5 員又は 6 員の環を形成し；

R^{44} が、水素、 $(C_1 - C_4)$ - アルキル又はカチオンの等価物を表し；

R^{45} 、 R^{46} 、 R^{47} 及び R^{48} が、互いに独立して、それぞれ、水素、 $(C_1 - C_4)$ - アルキル、 $(C_1 - C_4)$ - ハロアルキル、ベンジル、 $(C_3 - C_6)$ - シクロアルキル又はフェニルを表し；

Het^3 及び Het^4 が、互いに独立して、それぞれ、モルホリノ基、ピペリジノ基又はピロリジノ基を表し；及び、

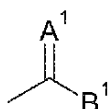
n が、0、1、2、3、4 又は 5 を表す；

ことを特徴とする、請求項 1 ~ 3 のいずれかに記載の化合物又はその塩。

【請求項 5】

L が、式

【化 5】



[式中、 A^1 及び B^1 は、式 (I) において定義されているとおりである]

で表されるラジカルを表すことを特徴とする、請求項 1 ~ 4 のいずれかに記載の化合物又はその塩。

【請求項 6】

A^1 が、酸素、硫黄又は $=N-R^A$ を表し；

B^1 が、上記式 (B1) ~ (B14) で表されるラジカルを表し；

R^A が、水素、ヒドロキシ、 $(C_1 - C_4)$ - アルコキシ、 $(C_1 - C_4)$ - アルキル、 $(C_1 - C_4)$ - ハロアルキル、フェニル [ここで、該フェニルは、置換されていない

10

20

30

40

50

か、又は、ハロゲン、 (C_1-C_4) -アルキル、 (C_1-C_4) -ハロアルキル、 (C_1-C_4) -アルコキシ、 (C_1-C_4) -ハロアルコキシからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されている]若しくはベンジル[ここで、該ベンジルは、そのフェニル部分において、置換されていないか、又は、ハロゲン、 (C_1-C_4) -アルキル、 (C_1-C_4) -ハロアルキル、 (C_1-C_4) -アルコキシ、 (C_1-C_4) -ハロアルコキシからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されている]を表すか、又は、 $-NR^*R^{**}$ [ここで、 R^* 、 R^{**} は、互いに独立して、それぞれ、H、 (C_1-C_4) -アルキル、 (C_2-C_4) -アルケニル、 (C_2-C_4) -アルキニル、 (C_1-C_4) -アルコキシ- (C_1-C_4) -アルキル、 (C_1-C_4) -アルカノイル、 $[(C_1-C_4)$ -ハロアルキル]カルボニル、 $[(C_1-C_4)$ -アルコキシ]カルボニル、 $[(C_1-C_4)$ -ハロアルコキシ]カルボニル、 (C_3-C_6) -シクロアルキル、 (C_3-C_6) -シクロアルキル- (C_1-C_4) -アルキル、フェニル、フェニル- (C_1-C_4) -アルキル[ここで、最後に挙げられている4のラジカルは、それぞれ、その環において、置換されていないか、又は、ハロゲン、 (C_1-C_4) -アルキル、 (C_1-C_4) -ハロアルキル、 (C_1-C_4) -アルコキシ若しくは (C_1-C_4) -ハロアルコキシからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されており、又は、シクロアルキルの場合には、オキソでも置換されている]を表すか、又は、 R^* と R^{**} は、その窒素原子と一緒に、3~6員のヘテロ環[ここで、該ヘテロ環は、その窒素原子に加えて、N、O及びSからなる群から選択される1個又は2個のさらなる環ヘテロ原子を含むことができ、及び、該ヘテロ環は、置換されていないか、又は、 (C_1-C_4) -アルキル、 (C_1-C_4) -ハロアルキル及びオキソからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されていてもよい]を表す]を表し；

$(R^1)_m$ 、 $(R^2)_n$ 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^9 、 R^{10} 、 R^{11} 、 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} 、 R^{16} 、 R^{17} 、 R^{18} 、 R^{19} 、 R^{20} 、 R^{21} 、 R^{22} 、 R^{23} 、 R^{24} 、 R^{25} 、 R^{26} 、 R^{27} 、 R^{28} 、 R^{29} 、 R^{30} 、 R^{31} 及び R^{32} が、上記で記載されている意味を有し；

W^1 及び W^6 が、互いに独立して、それぞれ、二価基酸素、硫黄を表すか、又は、式NH、N- $[(C_1-C_4)$ -アルキル]、C=O、S=O、SO₂若しくはCR^{3 5}R^{3 6}で表される基を表し；

W^2 、 W^3 、 W^4 、 W^5 及び W^7 が、互いに独立して、それぞれ、式O、S、NH、N- $[(C_1-C_4)$ -アルキル]、C=O、S=O又はSO₂で表される二価基を表し；

Q^1 、 Q^2 、 Q^3 、 Q^4 、 Q^5 、 Q^6 、 Q^7 、 Q^8 及び Q^9 が、互いに独立して、それぞれ、ヒドロキシ、チオ、ハロゲンを表すか、又は、式OR^{3 7}、SR^{3 8}、SM若しくはOMで表される基を表し；

Mが、カチオンの等価物を表し；

$R^{3 5}$ 及び $R^{3 6}$ が、互いに独立して、それぞれ、 R^3 に関して定義されているとおりであり；及び、

$R^{3 7}$ 、 $R^{3 8}$ 、 $R^{6 6}$ 、 $R^{6 7}$ 、 $R^{6 8}$ 、 $R^{6 9}$ 、 $R^{7 0}$ 、 $R^{7 1}$ 、Het^{1 2}及びMが、上記で記載されている意味を有する；

ことを特徴とする、請求項5に記載の化合物又はその塩。

【請求項7】

$R^{3 7}$ 及び $R^{3 8}$ が、互いに独立して、それぞれ、 (C_1-C_6) -アルキル、 (C_1-C_6) -ハロアルキル、 (C_1-C_4) -アルコキシ- (C_1-C_4) -アルキル、 (C_3-C_6) -シクロアルキル[ここで、該シクロアルキルは、置換されていないか、又は、ハロゲン、 (C_1-C_4) -アルキル及び (C_1-C_4) -アルコキシからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されている]、フェニル[ここで、該フェニルは、置換されていないか、又は、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシ、ニトロ、 (C_1-C_4) -アルキル、 (C_1-C_4) -ハロアルキル及び (C_1-C_4) -アルコキシからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されている]を表すか、又は、式-C(O)R^{6 7}、-C(O)OR^{6 8}、-C(O)NR^{6 9}R^{7 0}、-C(O)Het^{1 2}若しくは-S

$O_2 R^{71}$ で表される基を表し；

R^{67} が、水素、 $(C_1 - C_6)$ - アルキル、 $(C_1 - C_4)$ - ハロアルキル、フェニル又はベンジル [ここで、最後に挙げられている 2 のラジカルは、それぞれ、残りのものから独立して、置換されていないか、又は、ハロゲン、シアノ、 $(C_1 - C_4)$ - アルキル及び $(C_1 - C_4)$ - ハロアルキルからなる群から選択される 1 以上のラジカルで置換されている] を表し；

R^{68} が、 $(C_1 - C_6)$ - アルキル又は $(C_1 - C_4)$ - ハロアルキルを表し；

R^{69} 及び R^{70} が、互いに独立して、それぞれ、水素、 $(C_1 - C_4)$ - アルキル、ベンジル、 $(C_3 - C_6)$ - シクロアルキル又はフェニル [ここで、最後に挙げられている 2 のラジカルは、それぞれ、残りのものから独立して、置換されていないか、又は、ハロゲン、ニトロ、シアノ、 $(C_1 - C_4)$ - アルキル及び $(C_1 - C_4)$ - ハロアルキルからなる群から選択される 1 以上のラジカルで置換されている] を表し；

R^{71} が、 $(C_1 - C_4)$ - アルキル、 $(C_1 - C_4)$ - ハロアルキル、フェニル又はベンジル [ここで、最後に挙げられている 2 のラジカルは、それぞれ、残りのものから独立して、置換されていないか、又は、ハロゲン、シアノ、 $(C_1 - C_4)$ - アルキル、 $(C_2 - C_4)$ - アルケニル及び $(C_2 - C_4)$ - ハロアルキルからなる群から選択される 1 以上のラジカルで置換されている] を表し；

Het^{12} が、飽和又は部分的な飽和のヘテロ環のラジカル [ここで、該ヘテロ環は、3～6 個の環原子及び該環の 1 位に環ヘテロ原子としての少なくとも 1 個の窒素原子を有し、及び、場合により、N、O 及び S からなる群から選択される 1 個、2 個又は 3 個のさらなる環ヘテロ原子を有し、並びに、該ヘテロ環の該ラジカルはその環の 1 位にある窒素原子で式 (I) で表される化合物の分子の残りの部分に結合しており、並びに、該ヘテロ環は、置換されていないか、又は、ハロゲン、 $(C_1 - C_4)$ - アルキル、 $(C_1 - C_4)$ - ハロアルキル、 $(C_1 - C_4)$ - アルコキシ、 $(C_1 - C_4)$ - ハロアルコキシ、 $(C_1 - C_4)$ - アルキルチオ及びオキソからなる群から選択される 1 以上のラジカルで置換されている] を表し；及び、

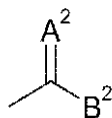
M が、金属イオン等価物、アンモニウムイオン [ここで、該アンモニウムイオンは、 $(C_1 - C_4)$ - アルキル、 $(C_3 - C_6)$ - シクロアルキル、フェニル、 $(C_3 - C_6)$ - シクロアルキル - $(C_1 - C_4)$ - アルキル及びフェニル - $(C_1 - C_4)$ - アルキルからなる群から選択される 1～4 の同一であるか又は異なっているラジカルで置換されていてもよい] 又は第三級スルホニウムイオン [ここで、該第三級スルホニウムイオンは、 $(C_1 - C_4)$ - アルキル、 $(C_3 - C_6)$ - シクロアルキル、フェニル、 $(C_3 - C_6)$ - シクロアルキル - $(C_1 - C_4)$ - アルキル及びフェニル - $(C_1 - C_4)$ - アルキルからなる群から選択される 3 の同一であるか又は異なっているラジカルで置換されている] を表す；

ことを特徴とする、請求項 5 又は 6 に記載の化合物又はその塩。

【請求項 8】

L が、式

【化 6】



[式中、 A^2 及び B^2 は、上記意味を有する]

で表されるラジカルを表すことを特徴とする、請求項 1～7 のいずれかに記載の化合物又はその塩。

【請求項 9】

A^2 が、上記式 (A1)～(A12) で表されるラジカルを表し；

B^2 が、ヒドロキシ、チオ、ハロゲンを表すか、又は、式 OR^{33} 、OM、 SR^{34} 、SM 若しくは $NR^B R^C$ で表される基を表し；

R^B 及び R^C が、互いに独立して、水素、ヒドロキシ、 (C_1-C_4) －アルコキシ、 (C_1-C_4) －アルキル、 (C_1-C_4) －ハロアルキル、フェニル [ここで、該フェニルは、置換されていないか、又は、ハロゲン、 (C_1-C_4) －アルキル、 (C_1-C_4) －ハロアルキル、 (C_1-C_4) －アルコキシ、 (C_1-C_4) －ハロアルコキシからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されている] 若しくはベンジル [ここで、該ベンジルは、そのフェニル部分において、置換されていないか、又は、ハロゲン、 (C_1-C_4) －アルキル、 (C_1-C_4) －ハロアルキル、 (C_1-C_4) －アルコキシ、 (C_1-C_4) －ハロアルコキシからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されている] を表すか、又は、 $-NR^*R^{**}$ [ここで、 R^* 、 R^{**} は、互いに独立して、それぞれ、H、 (C_1-C_4) －アルキル、 (C_2-C_4) －アルケニル、 (C_2-C_4) －アルキニル、 (C_1-C_4) －アルコキシ、 (C_1-C_4) －アルキル、 (C_1-C_4) －アルカノイル、 $[(C_1-C_4)$ －ハロアルキル] カルボニル、 $[(C_1-C_4)$ －アルコキシ] カルボニル、 $[(C_1-C_4)$ －ハロアルコキシ] カルボニル、 (C_3-C_6) －シクロアルキル、 (C_3-C_6) －シクロアルキル－ (C_1-C_4) －アルキル、フェニル、フェニル－ (C_1-C_4) アルキル [ここで、最後に挙げられている4のラジカルは、それぞれ、その環において、置換されていないか、又は、ハロゲン、 (C_1-C_4) －アルキル、 (C_1-C_4) －ハロアルキル、 (C_1-C_4) －アルコキシ若しくは (C_1-C_4) －ハロアルコキシからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されており、又は、シクロアルキルの場合には、オキソでも置換されている] を表すか、又は、 R^* と R^{**} は、その窒素原子と一緒に、3～6員のヘテロ環 [ここで、該ヘテロ環は、その窒素原子に加えて、N、O及びSからなる群から選択される1個又は2個のさらなる環ヘテロ原子を含むことができ、及び、該ヘテロ環は、置換されていなくてもよい] か、又は、 (C_1-C_4) －アルキル、 (C_1-C_4) －ハロアルキル及びオキソからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されていてもよい] を表す] を表し；

$(R^1)_m$ 、 $(R^2)_n$ 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^9 、 R^{10} 、 R^{11} 、 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} 、 R^{16} 、 R^{17} 、 R^{18} 、 R^{19} 、 R^{20} 、 R^{21} 、 R^{22} 、 R^{23} 、 R^{24} 、 R^{25} 及び R^{26} が、上記で記載されている意味を有し；

W^1 及び W^6 が、互いに独立して、それぞれ、二価基酸素、硫黄を表すか、又は、式 NH 、 $N-[(C_1-C_4)$ －アルキル]、 $C=O$ 、 $S=O$ 、 SO_2 若しくは $CR^{35}R^{36}$ で表される基を表し；

W^2 、 W^3 、 W^4 、 W^5 及び W^7 が、互いに独立して、それぞれ、式 O 、 S 、 NH 、 $N-[(C_1-C_4)$ －アルキル]、 $C=O$ 、 $S=O$ 又は SO_2 で表される二価基を表し；

R^{33} 及び R^{34} が、互いに独立して、それぞれ、 (C_1-C_4) －アルキル、 (C_1-C_4) －ハロアルキル、 (C_1-C_4) －アルコキシ、 (C_1-C_4) －アルキル、 (C_3-C_6) －シクロアルキル [ここで、該シクロアルキルは、置換されていないか、又は、ハロゲン、 (C_1-C_4) －アルキル及び (C_1-C_4) －アルコキシからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されている]、フェニル [ここで、該フェニルは、置換されていないか、又は、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシ、ニトロ、 (C_1-C_4) －アルキル、 (C_1-C_4) －ハロアルキル及び (C_1-C_4) －アルコキシからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されている] を表すか、又は、式 $-C(O)R^{67}$ 、 $-C(O)OR^{68}$ 、 $-C(O)NR^{69}R^{70}$ 、 $-C(O)Het^{12}$ 若しくは $-SO_2R^{71}$ で表される基を表し；

R^{35} 及び R^{36} が、互いに独立して、それぞれ、 R^3 のように定義され；

R^{67} が、水素、 (C_1-C_6) －アルキル、 (C_1-C_4) －ハロアルキル、フェニル又はベンジル [ここで、最後に挙げられている2のラジカルは、それぞれ、残りのものから独立して、置換されていないか、又は、ハロゲン、シアノ、 (C_1-C_4) －アルキル及び (C_1-C_4) －ハロアルキルからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されている] を表し；

R^{68} が、 (C_1-C_6) －アルキル又は (C_1-C_4) －ハロアルキルであり；

R^{69} 及び R^{70} が、互いに独立して、それぞれ、水素、 (C_1-C_4) －アルキル、

10

20

30

40

50

ベンジル、 $(C_3 - C_6)$ - シクロアルキル又はフェニル [ここで、最後に挙げられている 2 のラジカルは、それぞれ、残りのものから独立して、置換されていないか、又は、ハロゲン、ニトロ、シアノ、 $(C_1 - C_4)$ - アルキル及び $(C_1 - C_4)$ - ハロアルキルからなる群から選択される 1 以上のラジカルで置換されている] を表し；

$R^{7,1}$ が、 $(C_1 - C_4)$ - アルキル、 $(C_1 - C_4)$ - ハロアルキル、フェニル又はベンジル [ここで、最後に挙げられている 2 のラジカルは、それぞれ、残りのものから独立して、置換されていないか、又は、ハロゲン、シアノ、 $(C_1 - C_4)$ - アルキル、 $(C_2 - C_4)$ - アルケニル及び $(C_1 - C_4)$ - ハロアルキルからなる群から選択される 1 以上のラジカルで置換されている] を表し；

$Het^{1,2}$ が、飽和又は部分的不飽和のヘテロ環のラジカル [ここで、該ヘテロ環は、3～6 個の環原子及び該環の 1 位に環ヘテロ原子としての少なくとも 1 個の窒素原子を有し、及び、場合により、N、O 及び S からなる群から選択される 1 個、2 個又は 3 個のさらなる環ヘテロ原子を有し、並びに、該ヘテロ環の該ラジカルはその環の 1 位にある窒素原子で式 (I) で表される化合物の分子の残りの部分に結合しており、並びに、該ヘテロ環は、置換されていないか、又は、ハロゲン、 $(C_1 - C_4)$ - アルキル、 $(C_1 - C_4)$ - ハロアルキル、 $(C_1 - C_4)$ - アルコキシ、 $(C_1 - C_4)$ - ハロアルコキシ、 $(C_1 - C_4)$ - アルキルチオ及びオキソからなる群から選択される 1 以上のラジカルで置換されている] を表す；

ことを特徴とする、請求項 8 に記載の化合物又はその塩。

【請求項 10】

前記化合物が、富化されたトレオラセミ化合物として存在していることを特徴とする、請求項 1～9 のいずれかに記載の化合物又はその塩。

【請求項 11】

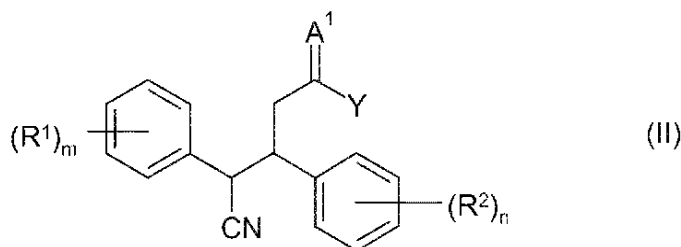
前記化合物が、立体化学的配置 [2R, 3R] を有する富化されたトレオ-2 エナンチオマーとして存在していることを特徴とする、請求項 1～9 のいずれかに記載の化合物又はその塩。

【請求項 12】

請求項 1～11 のいずれかにおいて定義されている式 (I) で表される化合物又はその塩を調製する方法であって、

(a) 式 (I) [式中、L は、式 $C(=A^1) - B^1$ で表されるラジカルを表し、 B^1 は、式 (B1)～(B9) 及び式 (B11)～(B14) で表されるラジカルを表し、並びに、 $Q^1 \sim Q^9$ は、それぞれ、OH、SH、SM 又は OM を表し、並びに、残りのラジカルは、調製しようとする式 (I) で表される個々の化合物において定義されているとおりである] で表される化合物及びその塩を調製するために、式 (II)

【化 7】



[式中、 A^1 、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ は、式 (I) において定義されているとおりであり、Y は、脱離基を表す]

で表される化合物を、式 $H - B^1$ [式中、 B^1 は、ラジカル L において定義されているとおりであり、及び、 $Q^1 \sim Q^9$ は、それぞれ、調製しようとする式 (I) で表される化合物において定義されているとおりである] で表される化合物と直接反応させて、化合物 (I) を生成させるか、又は、O-アルキル化生成物若しくは S-アルキル化生成物を中間体として生成させ、及び、形成された O-アルキル化中間体若しくは S-アルキル化中間

体を転位させてC-アルキル化生成物としての式(I)で表される化合物を生成させること；又は、

(b) 式(I)〔式中、Lは、式 $-C(=A^1)-B^1$ で表されるラジカルを表し、 B^1 は、式(B1)～(B7)及び式(B11)～(B14)で表されるラジカルを表し、並びに、基 B^1 の中の $Q^1\sim Q^9$ は、それぞれ、式SH又は式SMで表される基を表し、残りのラジカルは、調製しようとする式(I)で表される個々の化合物において定義されているとおりである〕で表される化合物及びその塩を調製するために、式(I)〔式中、Lは、式 $-C(=A^1)-B^1$ で表されるラジカルを表し、ここで、 A^1 は、式(I)において定義されているとおりであり、及び、 B^1 は、式(I)におけるラジカル B^1 と同様に定義されるが、基 B^1 の中の $Q^1\sim Q^9$ がそれぞれ基OH又は基OMを表している点で異なっている〕で表される化合物を、ハロゲン化剤と反応させて、化合物(I)〔ここで、基 B^1 の中の $Q^1\sim Q^9$ は、それぞれ、ハロゲン原子を表す〕を生成させ、及び、硫化剤と反応させ、及び、式(I)で表される所望の化合物を場合により反応混合物から分離させるか又は単離すること；又は、

10

(c) 式(I)〔式中、Lは、式 $-C(=A^1)-B^1$ で表されるラジカルを表し、 B^1 は、式(B1)～(B7)及び式(B11)～(B14)で表されるラジカルを表し、並びに、基 B^1 の中の $Q^1\sim Q^9$ は、それぞれ、式 $OR^{3,7}$ で表される基を表し、並びに、残りのラジカルは、調製しようとする式(I)で表される個々の化合物において定義されているとおりである〕で表される化合物及びその塩を調製するために、式(I)〔式中、Lは、式 $-C(=A^1)-B^1$ で表されるラジカルを表し、ここで、 A^1 は、式(I)において定義されているとおりであり、及び、 B^1 は、式(I)におけるラジカル B^1 と同様に定義されるが、基 B^1 の中の $Q^1\sim Q^9$ がそれぞれ基OH又は基OMを表している点で異なっている〕で表される化合物を、式 $Y'-R^{3,7}$ 〔式中、 Y' は、脱離基を表し、及び、 $R^{3,7}$ は、式(I)において定義されているとおりである〕で表される化合物と反応させ、及び、式(I)で表される所望の化合物を場合により反応混合物から分離させるか又は単離すること；又は、

20

(d) 式(I)〔式中、Lは、式 $-C(=A^1)-B^1$ で表されるラジカルを表し、 B^1 は、式(B1)～(B7)及び式(B11)～(B14)で表されるラジカルを表し、並びに、基 B^1 の中の $Q^1\sim Q^9$ は、それぞれ、式 $SR^{3,8}$ で表される基を表し、並びに、残りのラジカルは、調製しようとする式(I)で表される個々の化合物において定義されているとおりである〕で表される化合物及びその塩を調製するために、式(I)〔式中、Lは、式 $-C(=A^1)-B^1$ で表されるラジカルを表し、ここで、 A^1 は、式(I)において定義されているとおりであり、及び、 B^1 は、式(I)におけるラジカル B^1 と同様に定義されるが、基 B^1 の中の $Q^1\sim Q^9$ がそれぞれ基SH又は基SMを表している点で異なっている〕で表される化合物を、式 $Y'-R^{3,8}$ 〔式中、 Y' は、脱離基を表し、及び、 $R^{3,8}$ は、式(I)において定義されているとおりである〕で表される化合物と反応させ、及び、式(I)で表される所望の化合物を場合により反応混合物から分離させるか又は単離すること；又は、

30

(e) 式(I)〔式中、Lは、式 $-C(=A^1)-B^1$ で表されるラジカルを表し、 B^1 は、式(B1)～(B7)及び式(B11)～(B14)で表されるラジカルを表し、並びに、基 B^1 の中の $Q^1\sim Q^9$ は、それぞれ、式 $SR^{3,8}$ で表される基を表し、並びに、残りのラジカルは、調製しようとする式(I)で表される個々の化合物において定義されているとおりである〕で表される化合物及びその塩を調製するために、式(I)〔式中、Lは、式 $-C(=A^1)-B^1$ で表されるラジカルを表し、ここで、 A^1 は、式(I)において定義されているとおりであり、及び、 B^1 は、式(I)におけるラジカル B^1 と同様に定義されるが、基 B^1 の中の $Q^1\sim Q^9$ がそれぞれハロゲン原子を表している点で異なっている〕で表される化合物を、式 $H-S-R^{3,8}$ で表されるチオ化合物と反応させ、及び、式(I)で表される所望の化合物を場合により反応混合物から分離させるか又は単離すること；又は、

40

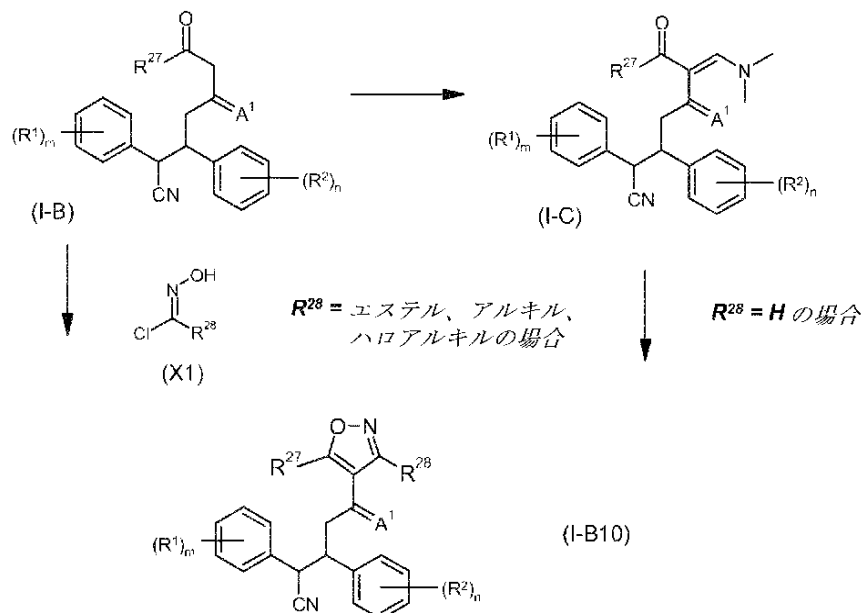
(f) 式(I)〔式中、Lは、式 $-C(=A^1)-B^1$ で表されるラジカルを表し、

50

及び、 B^1 は、式 (B 1 0) で表される基を表す] で表される化合物及びその塩 [=化合物 (I-B 1 0)] を調製するために、式 (I) [式中、 L は、式 $-C(=A^1)-B^*$ で表されるラジカルを表し、 A^1 は、式 (I) において定義されているとおりであり、及び、 B^* は、式 $-CH_2-CO-R^{27}$ [式中、 R^{27} は、式 (B 1 0) において定義されているとおりである] で表されるラジカルである] で表される化合物を [=化合物 (I-B)] を、

【化 8】

スキーム



N, N-ジメチルホルムアミドジメチルアセタールと反応させて、式 (I-C) で表される化合物を生成させ (スキームを参照されたい)、及び、その化合物 (I-C) を、ヒドロキシルアミン又はその塩との閉環を伴う反応に付して、式 (I-B 1 0) [式中、 $R^{28} = H$] で表される化合物を生成させるか、又は、化合物 (I-B) を、式 (X 1)

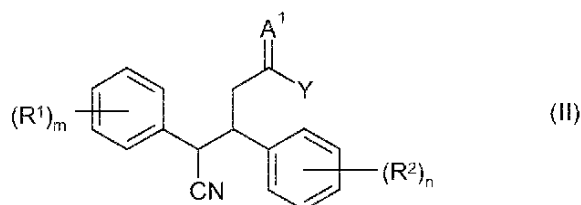
【化 9】



[式中、 R^{28} は、式 (B 1 0) において定義されているとおりである] で表される化合物との閉環を伴う反応に付して、式 (I-B 1 0) [式中、式 (X 1) の中の R^{28} は、 $R^{28} = H$ であることを除いて、調製しようとする式 (I-B 1 0) で表される化合物において定義されているとおりである] で表される化合物を生成させること；又は、

(g) 式 (I) [式中、 L は、式 $-C(=A^1)-B^1$ で表されるラジカルを表し、及び、 B^1 は、式 (B 1 0) で表される基を表す] で表される化合物及びその塩 [=化合物 (I-B 1 0)] を調製するために、式 (I I)

【化 1 0】



〔式中、 A^1 、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ は、式(I)において定義されているとおりであり、並びに、Yは、脱離基を表す〕

で表される化合物を、

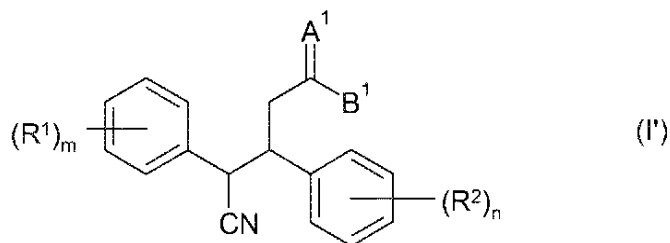
場合によりカップリング剤の存在下で、式 $X-(B10)$ 〔式中、 $(B10)$ は、基 B^1 におけるのと同様に定義され、及び、Xは、脱離基である〕で表される化合物と反応させて、式(I)で表される化合物を生成させる(交差カップリング反応)か、

又は、

式 $X'-(B10)$ 〔式中、 X' は、金属又は金属誘導体基を表す〕で表される活性化された化合物と反応させて、式(I)で表される化合物を生成させること；又は、

(h) 式(I)〔式中、Lは、式 $-C(=A^2)-B^2$ で表されるラジカルを表し、及び、 B^2 は、式 OR^{33} 又は式 SR^{34} で表されるラジカルを表す〕で表される化合物及びその塩を調製するために、式(I')

【化11】

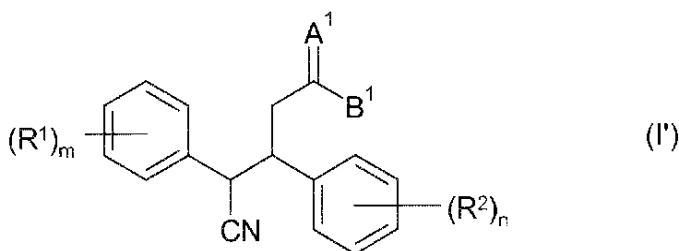


〔式中、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ は、式(I)において定義されているとおりであり、 A^1 は、ラジカルO又はラジカルSを表し、及び、 B^1 は、Lがラジカル $-C(=A^1)-B^1$ を表す式(I)に関して上記で定義されている式(B1)、式(B2)、式(B3)、式(B4)、式(B5)、式(B6)、式(B7)、式(B8)、式(B9)、式(B11)、式(B12)、式(B13)又は式(B14)で表されるラジカルを表し、その際、ラジカル B^1 の中の $Q^1 \sim Q^9$ は、それぞれ、OH又はOMを表す〕

で表される化合物を、式 $Y'-B^2$ 〔式中、 B^2 は、ラジカルLにおいて定義されているとおりであり、及び、 Y' は、脱離基を表す〕で表される化合物と反応させて、化合物(I)〔ここで、 B^2 は、 $A^1=O$ である場合にはラジカル OR^{33} を表し、又は、 $A^1=S$ である場合にはラジカル SR^{34} を表し、ここで、化合物(I)の中の基 $-C(=A^2)-$ は、化合物(I')の中の基 $-C-B^1$ と比較して、より安定な互変異性体又は構造的に固定された互変異性体〔ここで、ラジカル $-C(=A^2)-$ は、互変異性的に、ラジカル $=C(-B^1)-$ に対応する〕を表す〕を生成させること；又は、

(i) 式(I)〔式中、Lは、式 $-C(=A^2)-B^2$ で表されるラジカルを表し、及び、 B^2 は、式 $-NR^B R^C$ で表されるラジカルを表す〕で表される化合物及びその塩を調製するために、式(I')

【化12】



〔式中、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ は、式(I)において定義されているとおりであり、 A^1 は、式 $-NR^B$ で表されるラジカルを表し、及び、 B^1 は、Lがラジカル $-C(=A^1)-B^1$ を表す式(I)に関して上記で定義されている式(B1)、式(B2)、式(B3)、式(B4)、式(B5)、式(B6)、式(B7)、式(B8)、式(B9)、

式 (B 1 1)、式 (B 1 2)、式 (B 1 3) 又は式 (B 1 4) で表されるラジカルを表し、その際、ラジカル B^1 の中の $Q^1 \sim Q^9$ は、それぞれ、OH 又は OM を表す〕で表される化合物を、式 $Y' - R^C$ [式中、 R^C は、 B^2 のラジカル $-NR^B R^C$ において定義されているとおりであり、及び、 Y' は、脱離基を表す] で表される化合物と反応させて、化合物 (I) [ここで、 B^2 は、ラジカル $-NR^B R^C$ を表し、ここで、化合物 (I) の中の基 $-C (=A^2) -$ は、化合物 (I') の中の基 $-C - B^1$ と比較して、より安定な互変異性体又は構造的に固定された互変異性体 [ここで、ラジカル $-C (=A^2) -$ は、互変異性的に、ラジカル $=C (-B^1) -$ に対応する] を表す] を生成させること；

を特徴とする、前記調製方法。

10

【請求項 1 3】

除草性組成物又は植物成長調節性組成物であって、請求項 1 ～ 1 1 のいずれかで定義されている式 (I) で表される 1 種類以上の化合物又はその塩及び作物保護において慣習的な製剤助剤を含んでいることを特徴とする、前記組成物。

【請求項 1 4】

有害な植物を防除する方法又は植物の成長を調節する方法であって、有効量の請求項 1 ～ 1 1 のいずれかで定義されている式 (I) で表される 1 種類以上の化合物又はその塩を、植物、植物の種子、植物がその中で若しくはその上で生育する土壌又は耕作されている領域に施用することを特徴とする、前記方法。

【請求項 1 5】

20

式 (I) で表される前記化合物又はその塩を、有害な植物を選択的に防除するために又は有用な植物の作物若しくは観賞植物の成長を調節するために使用することを特徴とする、請求項 1 4 に記載の方法。

【請求項 1 6】

前記作物植物がトランスジェニック作物植物であることを特徴とする、請求項 1 5 に記載の方法。

【請求項 1 7】

除草剤又は植物成長調節剤としての、請求項 1 ～ 1 1 のいずれかに記載の式 (I) で表される化合物又はその塩の使用。

【請求項 1 8】

30

前記化合物を、有用な植物の作物又は観賞植物の中で有害な植物を防除するための選択的除草剤として又は植物成長調節剤として施用することを特徴とする、請求項 1 7 に記載の使用。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0 0 0 1】

本発明は、除草剤及び植物成長調節剤の技術分野、例えば、場合により有用な植物の作物の中の広葉雑草及びイネ科雑草を防除するための除草剤又は作物植物の成長に影響を与えるために使用され得る植物成長調節剤の技術分野に関する。

【背景技術】

40

【0 0 0 2】

有用な植物の作物の中で有害な植物を選択的に防除するための今日までに知られている作物保護剤又は望ましくない植生を防除するための活性化合物は、それらの施用において、場合により、以下の不利点を有している：(a) それらは、特定の有害な植物に対して除草活性を全く示さないか又は不十分な除草活性しか示さない；(b) 活性化合物を用いて防除し得る有害な植物の範囲の広さが不十分である；(c) 有用な植物の作物の中におけるそれらの選択性が低すぎる；及び／又は、(d) それらは、毒物学的に望ましくないプロフィールを有している。さらに、多くの有用な植物に対して植物成長調節剤として使用し得る一部の活性化合物は、別の有用な植物において収穫高の望ましくない低下を引き起こし、又は、作物植物との適合性を示さないか若しくは狭い施用量範囲内でのみしか適

50

合性を示さない。既知活性化合物の一部は、入手が困難な前駆物質及び試薬に起因して、工業規模で経済的に製造することができず、又は、それらは、不十分な化学的安定性しか示さない。別の活性化合物の場合、その活性は、気候及び土壌条件などの環境条件に過度に左右される。

【0003】

除草作用を示すシアノブチレート類は、公開された特許出願EP-A-5341、EP-A-266725（US 4, 224, 052）、EP-A-270830、JP-04/297454、JP-04/297455、JP-05/058979、WO 2011/003775、WO 2011/003776、WO 2011/042378及びWO 2011/073143の中に開示されている。

10

【0004】

EP-A-5341には、フェニルラジカルにおいて場合により置換されていてもよい4-シアノ-3, 4-ジフェニルブタン酸の除草作用を示すエステル類及びアミド類が記載されている。EP-A-5341によると、そのトレオ異性体は、概して、有害な植物を非選択的に防除するのに適しており、それに対して、そのエリトロ/トレオ異性体混合物は、一部の有用な植物の作物の中で有害な植物を選択的に防除するのに適している。さらに、EP-A-5341には、そのトレオ形態に属する2種類のエナンチオマーが異なった活性を有しているということが記載されており、フェニルラジカルにおいて置換されていない4-シアノ-3, 4-ジフェニルブタン酸のエナンチオマー対のエナンチオマーの異なった活性に対して典型的な方法で調べられた。

20

【0005】

EP-A-266725には、イネ作物の中の雑草を防除するために選択的に使用することが可能な数種類のエリトロ/トレオ異性体混合物が開示されている。

【0006】

EP-A-270830には、トレオ異性体及びエリトロ/トレオ異性体混合物を種々の有害なイネ科植物において果序の発達を防止する植物調節剤として使用することが可能であるということが記載されている。

【0007】

WO 2011/003775には、効果的な除草剤として使用することが可能な、好ましくは、有用な植物の作物の中でも効果的な除草剤として使用することが可能な、4-シアノ-3, 4-ジフェニルブタン酸の特定のエステル類が開示されている。

30

【0008】

WO 2011/003776、WO 2011/042378及びWO 2011/073143には、効果的な除草剤として使用することが可能な、好ましくは、有用な植物の作物の中でも効果的な除草剤として使用することが可能な、フェニルラジカルが特定の置換されている4-シアノ-3, 4-ジフェニルブタン酸及びエステル類が開示されている。

【先行技術文献】**【特許文献】****【0009】**

40

【特許文献1】欧州特許出願公開第5341号

【特許文献2】欧州特許出願公開第266725号（米国特許第4, 224, 052号）

【特許文献3】欧州特許出願公開第270830号

【特許文献4】特開平04/297454号

【特許文献5】特開平04/297455号

【特許文献6】特開平05/058979号

【特許文献7】国際特許出願公開第2011/003775号

【特許文献8】国際特許出願公開第2011/003776号

【特許文献9】国際特許出願公開第2011/042378号

【特許文献10】国際特許出願公開第2011/073143号

50

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0010】

上記物質の類の既知化合物の除草活性は、特に、低施用量において、及び／又は、作物植物との適合性において、改善する価値が残されている。

【0011】

上述の理由により、作物植物の中で選択的に施用するための又は非農耕地で使用するための高い活性を示す代替的な除草剤が依然として求められている。除草剤又は植物成長調節剤として有利な方法で使用することが可能な代替的な活性化合物を提供することも望ましい。

10

【0012】

従って、本発明の目的は、比較的低い施用量においてさえ経済的に重要な有害植物に対して極めて有効であり且つ作物植物の中で選択的に使用することが可能な、好ましくは有害植物に対する良好な活性を示しながら作物植物の中で選択的に使用することが可能な、除草活性を示す化合物を提供することである。

【課題を解決するための手段】

【0013】

驚くべきことに、2, 3-ジフェニルバレロニトリル誘導体の群に属する上記シアノブチレート類の活性化合物と比較して、酸基又はエステル基においてさらなる構造的修飾を受けている化合物が、特別な除草作用を示し、一部の作物の中では、好ましくは有害な植物を選択的に防除するために使用することが可能であるということが、見いだされた。

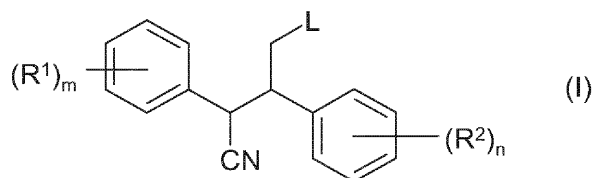
20

【0014】

本発明は、式 (I)

【0015】

【化1】



30

〔式中、

L は、式

【0016】

【化2】



で表されるラジカルを表し；

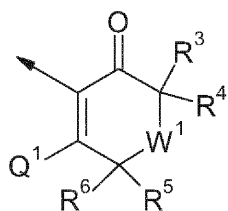
40

A¹ は、酸素、硫黄又は =N-R^A を表し；

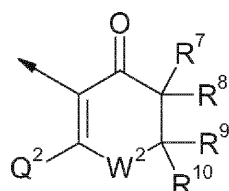
B¹ は、式 (B1) ~ 式 (B14)

【0017】

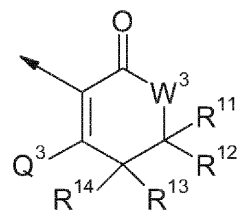
【化 3】



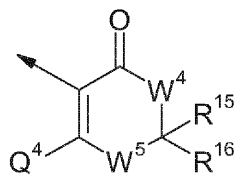
(B1)



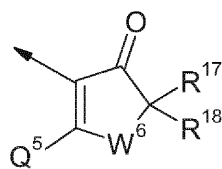
(B2)



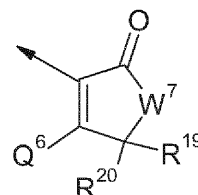
(B3)



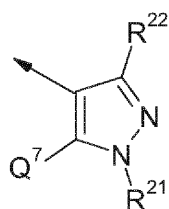
(B4)



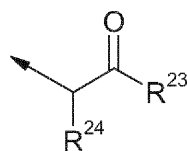
(B5)



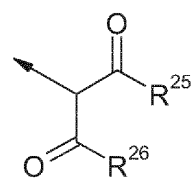
(B6)



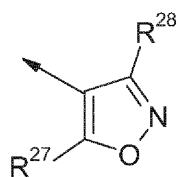
(B7)



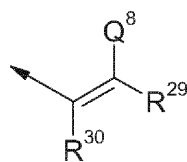
(B8)



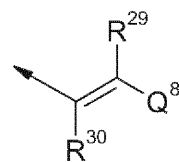
(B9)



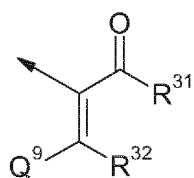
(B10)



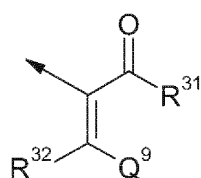
(B11)



(B12)



(B13)



(B14)

で表されるラジカルを表し；

A² は、式 (A 1) ~ 式 (A 1 2)

【 0 0 1 8 】

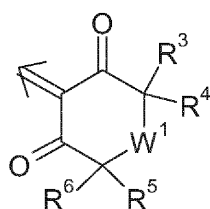
10

20

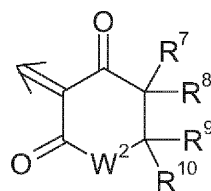
30

40

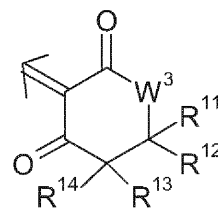
【化 4】



(A1)

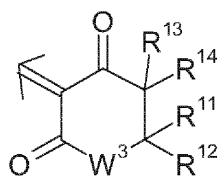


(A2)

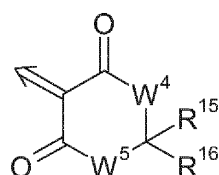


(A3)

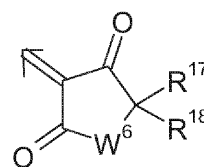
10



(A4)

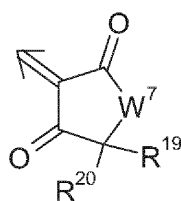


(A5)

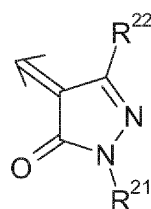


(A6)

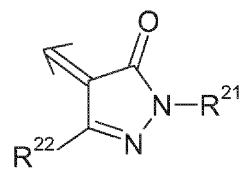
20



(A7)

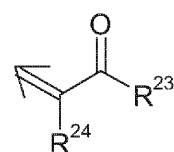


(A8)

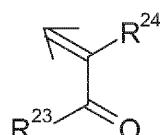


(A9)

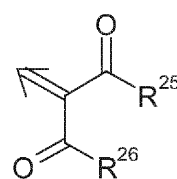
30



(A10)



(A11)



(A12)

で表されるラジカルを表し；

B² は、ヒドロキシ、チオ、ハロゲンを表すか、又は、式OR³³、OM、SR³⁴、SM若しくは-NR^BR^Cで表される基を表し；

40

W¹ 及びW⁶ は、互いに独立して、それぞれ、二価基酸素、硫黄を表すか、又は、式NH、N-[(C₁-C₄)-アルキル]、C=O(カルボニル)、S=O(スルフィニル)、SO₂(スルホニル)若しくはCR³⁵R³⁶で表される基を表し；

W²、W³、W⁴、W⁵ 及びW⁷ は、互いに独立して、それぞれ、二価基酸素、硫黄を表すか、又は、式NH、N-[(C₁-C₄)-アルキル]、C=O(カルボニル)、S=O(スルフィニル)若しくはSO₂(スルホニル)で表される基を表し；

Q¹、Q²、Q³、Q⁴、Q⁵、Q⁶、Q⁷、Q⁸ 及びQ⁹ は、互いに独立して、それぞれ、ヒドロキシ、チオ、ハロゲンを表すか、又は、式OR³⁷、SR³⁸、SM若しくはOMで表される基を表し；

50

Mは、カチオンの等価物、好ましくは、金属イオン等価物、アンモニウムイオン〔ここで、該アンモニウムイオンは、 (C_1-C_6) －アルキル、 (C_2-C_6) －アルケニル、 (C_2-C_6) －アルキニル、 (C_3-C_6) －シクロアルキル、 (C_5-C_6) －シクロアルケニル、 (C_5-C_6) －シクロアルキニル、フェニル、 (C_3-C_6) －シクロアルキル－ (C_1-C_4) －アルキル、 (C_5-C_6) －シクロアルケニル－ (C_1-C_4) －アルキル、フェニル－ (C_1-C_4) －アルキルからなる群から選択される1～4の同一であるか又は異なっているラジカルで置換されていてもよい〕又は第三級スルホニウムイオン〔ここで、該第三級スルホニウムイオンは、好ましくは、 (C_1-C_6) －アルキル、 (C_2-C_6) －アルケニル、 (C_2-C_6) －アルキニル、 (C_3-C_6) －シクロアルキル、 (C_5-C_6) －シクロアルケニル、 (C_5-C_6) －シクロアルキニル、フェニル、 (C_3-C_6) －シクロアルキル－ (C_1-C_4) －アルキル、 (C_5-C_6) －シクロアルケニル－ (C_1-C_4) －アルキル、フェニル－ (C_1-C_4) －アルキルからなる群から選択される3の同一であるか又は異なっているラジカル、特に、 (C_1-C_4) －アルキルからなる群から選択される3の同一であるか又は異なっているラジカルで置換されている〕を表し；

R^A 、 R^B 及び R^C は、互いに独立して、それぞれ、水素、ヒドロキシ、 (C_1-C_4) －アルコキシ、 (C_1-C_4) －アルキル、 (C_1-C_4) －ハロアルキル、フェニル又はベンジル〔ここで、最後に挙げられている2のラジカルは、それぞれ、同一であるか又は異なっている置換基で1置換又は多置換されていてもよく、好ましくは、互いに独立して、置換されていないか、又は、ハロゲン、 (C_1-C_4) －アルキル、 (C_1-C_4) －ハロアルキル、 (C_1-C_4) －アルコキシ及び (C_1-C_4) －ハロアルコキシからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されている〕を表し；
又は、

R^A 、 R^B 及び R^C は、互いに独立して、それぞれ、 $-NR^*R^{**}$ を表し、その際、 R^* 、 R^{**} は、互いに独立して、それぞれ、H、 (C_1-C_8) －アルキル、 (C_2-C_8) －アルケニル、 (C_2-C_8) －アルキニル、 (C_1-C_4) －アルコキシ－ (C_1-C_4) －アルキル、 (C_1-C_6) －アルカノイル、 $[(C_1-C_4)$ －ハロアルキル]カルボニル、 $[(C_1-C_4)$ －アルコキシ]カルボニル、 $[(C_1-C_4)$ －ハロアルコキシ]カルボニル、 (C_3-C_6) －シクロアルキル、 (C_3-C_6) －シクロアルキル－ (C_1-C_4) －アルキル、フェニル、フェニル－ (C_1-C_4) －アルキル〔ここで、最後に挙げられている4のラジカルは、それぞれ、環において置換されていないか、又は、ハロゲン、 (C_1-C_4) －アルキル、 (C_1-C_4) －ハロアルキル、 (C_1-C_4) －アルコキシ及び (C_1-C_4) －ハロアルコキシからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されており、また、シクロアルキルの場合には、さらに、オキソでも置換されている〕を表すか、又は、 R^* と R^{**} は、その窒素原子と一緒に、3員～8員のヘテロ環〔ここで、該ヘテロ環は、その窒素原子に加えて、N、O及びSからなる群から選択される1個又は2個のさらなるヘテロ原子を含むことができ、及び、該ヘテロ環は、置換されていないか、又は、 (C_1-C_4) －アルキル、 (C_1-C_4) －ハロアルキル及びオキソからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されていてもよい〕を表し；

$(R^1)_m$ は、mの置換基 R^1 を表し、
ここで、 $m=1$ の場合、 R^1 は、又は、mが1より大きい場合、置換基 R^1 はそれぞれ残りのものから独立して、ハロゲン、シアノ、ニトロ、ヒドロキシ、 (C_1-C_8) －アルキル、 (C_2-C_6) －アルケニル、 (C_2-C_6) －アルキニル、 (C_1-C_8) －アルコキシ、 (C_1-C_8) －アルキルチオ、 (C_1-C_8) －アルキルスルフィニル、 (C_1-C_8) －アルキルスルホニル、 (C_1-C_6) －ハロアルキル、 (C_1-C_6) －ハロアルコキシ、 (C_1-C_6) －ハロアルキルチオ、 (C_1-C_6) －ハロアルキルスルフィニル、 (C_1-C_6) －ハロアルキルスルホニル、 (C_2-C_6) －ハロアルケニル、 (C_2-C_6) －ハロアルキニル、 (C_1-C_6) －アルコキシ－ (C_1-C_4) －アルキル、 (C_1-C_6) －ハロアルコキシ－ (C_1-C_4) －アルキル、 (C_3-C_6)

) シクロアルキル [ここで、該シクロアルキルは、ハロゲン及び (C₁ - C₄) - アルキルからなる群から選択される 1 以上のラジカルで置換されていてもよい]、(C₃ - C₆) - シクロアルコキシ [ここで、該シクロアルコキシは、ハロゲン及び (C₁ - C₄) - アルキルからなる群から選択される 1 以上のラジカルで置換されていてもよい] を表すか、又は、式 C(O)OR^{3 9}、C(O)NR^{4 0}R^{4 1}、C(O)-Het¹、NR^{4 2}R^{4 3} 若しくは Het² で表されるラジカルを表し；

又は、いずれの場合にも、環上のオルトに位置している 2 つの基 R¹ は、一緒になって、式 -Z¹-A*-Z² [式中、

A* は、ハロゲン、(C₁ - C₄) - アルキル、(C₁ - C₄) - ハロアルキル、(C₁ - C₄) - アルコキシ及び (C₁ - C₄) - ハロアルコキシからなる群から選択される 1 以上のラジカルで置換されていてもよい 1 ~ 4 個の炭素原子を有するアルキレン基を表し；

Z¹ は、直接結合、O 又は S を表し；及び、

Z² は、直接結合、O 又は S を表す]

で表される基であり、その際、該基 -Z¹-A*-Z² は、その基に結合しているフェニル環の炭素原子と一緒に、縮合した 5 員又は 6 員の環を形成し；及び、

(R²)_n は、n の置換基 R² を表し、

ここで、n = 1 の場合、R² は、又は、n が 1 より大きい場合、置換基 R² はそれぞれ残りのものから独立して、ハロゲン、シアノ、ニトロ、ヒドロキシ、(C₁ - C₈) - アルキル、(C₂ - C₆) - アルケニル、(C₂ - C₆) - アルキニル、(C₁ - C₈) - アルコキシ、(C₁ - C₈) - アルキルチオ、(C₁ - C₈) - アルキルスルフィニル、(C₁ - C₈) - アルキルスルホニル、(C₁ - C₆) - ハロアルキル、(C₁ - C₆) - ハロアルコキシ、(C₁ - C₆) - ハロアルキルチオ、(C₁ - C₆) - ハロアルキルスルフィニル、(C₁ - C₆) - ハロアルキルスルホニル、(C₂ - C₆) - ハロアルケニル、(C₂ - C₆) - ハロアルキニル、(C₁ - C₆) - アルコキシ - (C₁ - C₄) - アルキル、(C₁ - C₆) - ハロアルコキシ - (C₁ - C₄) - アルキル、(C₃ - C₆) - シクロアルキル [ここで、該シクロアルキルは、ハロゲン及び (C₁ - C₄) - アルキルからなる群から選択される 1 以上のラジカルで置換されていてもよい]、(C₃ - C₆) - シクロアルコキシ [ここで、該シクロアルコキシは、ハロゲン及び (C₁ - C₄) - アルキルからなる群から選択される 1 以上のラジカルで置換されていてもよい] を表すか、又は、式 C(O)OR^{4 4}、C(O)NR^{4 5}R^{4 6}、C(O)-Het³、NR^{4 7}R^{4 8} 若しくは Het⁴ で表されるラジカルを表し

又は、いずれの場合にも、環上のオルトに位置している 2 つの基 R² は、一緒になって、式 -Z³-A**-Z⁴ [式中、

A** は、ハロゲン、(C₁ - C₄) - アルキル、(C₁ - C₄) - ハロアルキル、(C₁ - C₄) - アルコキシ及び (C₁ - C₄) - ハロアルコキシからなる群から選択される 1 以上のラジカルで置換されていてもよい 1 ~ 4 個の炭素原子を有するアルキレン基を表し；

Z³ は、直接結合、O 又は S を表し；及び、

Z⁴ は、直接結合、O 又は S を表す]

で表される基であり、その際、該基 -Z³-A**-Z⁴ は、その基に結合しているフェニル環の炭素原子と一緒に、縮合した 5 員又は 6 員の環を形成し；

R³、R⁴、R⁵、R⁶、R⁷、R⁸、R⁹、R^{1 0}、R^{1 1}、R^{1 2}、R^{1 3}、R^{1 4}、R^{1 5}、R^{1 6}、R^{1 7}、R^{1 8}、R^{1 9} 及び R^{2 0} は、互いに独立して、それぞれ、水素、ハロゲン、シアノ、ニトロ、ヒドロキシ、(C₁ - C₄) - アルキル、(C₁ - C₄) - ハロアルキル、(C₁ - C₄) - アルコキシ、(C₁ - C₄) - ハロアルコキシ、(C₁ - C₄) - アルコキシ - (C₁ - C₄) - アルキル、(C₁ - C₄) - ハロアルコキシ - (C₁ - C₄) - アルキル、(C₃ - C₆) - シクロアルキル、(C₃ - C₆) - ハロシクロアルキル、(C₃ - C₆) - シクロアルコキシ、(C₂ - C₆) - アルケニル、(C₂ - C₆) - ハロアルケニル、(C₂ - C₆) - アルキニル、(C₂ - C₆) -

10

20

30

40

50

ハロアルキニル、 (C_1-C_4) -アルキルチオ、 (C_1-C_4) -アルキルスルホニル、 (C_1-C_4) -アルキルスルフィニル、フェニル〔ここで、該フェニルは、置換されていてもよく、好ましくは、置換されていないか又はハロゲン、 (C_1-C_4) -アルキル、 (C_1-C_4) -ハロアルキル、 (C_1-C_4) -アルコキシ及び (C_1-C_4) -ハロアルコキシからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されている〕を表すか、又は、基 $C(O)OR^{49}$ 、 $C(O)NR^{50}R^{51}$ 、 $C(O)Het^5$ 、 $NR^{52}R^{53}$ 若しくは Het^6 を表し；又は

式(B1)又は式(A1)で表される基の中の R^3 と R^5 は、一緒になって、2個若しくは3個の炭素原子を有する直鎖のアルキレン基若しくはアルケニレン基からなる二価架橋〔ここで、該鎖の中の CH_2 基は酸素原子で置き換えられてもよく、及び、該鎖の中の CH_2 基又は CH 基は、 (C_1-C_4) -アルキル、 (C_1-C_4) -ハロアルキル、 (C_1-C_4) -アルコキシ及び (C_1-C_4) -ハロアルコキシからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されていてもよい〕を表し、好ましくは、式 $-CH_2CH_2-$ 、 $-CH_2CH_2CH_2-$ 、 $-CH(CH_3)CH_2-$ 、 $-C(CH_3)_2CH_2-$ 、 $-CH_2CH(CH_3)-$ 、 $-CH_2C(CH_3)_2-$ 、 $-C(CH_3)CH(CH_3)-$ 、 $-CH_2CH_2CH_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-CH=CHCH_2-$ 、 $-CH_2CH=CH-$ 、 $-OCH_2-$ 、 $-CH_2O-$ 、 $-OCH_2CH_2-$ 、 $-CH_2OCH_2-$ 、 $-CH_2CH_2O-$ 又は $-OCH_2O-$ で表される二価脂肪族架橋〔特に、式 $-CH_2CH_2-$ 又は $-CH=CH-$ で表される二価脂肪族架橋〕を表し；

R^{21} は、水素、 (C_1-C_4) -アルキル、 (C_1-C_4) -ハロアルキル、 (C_3-C_6) -シクロアルキル、 (C_3-C_6) -ハロシクロアルキルを表すか、又は、基 $C(O)OR^{54}$ 、 $C(O)NR^{55}R^{56}$ 、 $C(O)Het^7$ 、 $NR^{57}R^{58}$ 若しくは Het^8 を表し；

R^{22} は、水素、 (C_1-C_4) -アルキル、 (C_1-C_4) -ハロアルキル、 (C_3-C_6) -シクロアルキル、 (C_3-C_6) -ハロシクロアルキル、 (C_1-C_4) -アルキルチオ、 (C_1-C_4) -アルキルスルホニル、 (C_1-C_4) -アルキルスルフィニルを表すか、又は、式 $C(O)OR^{59}$ 、 $C(O)NR^{60}R^{61}$ 、 $C(O)Het^9$ 、 $NR^{62}R^{63}$ 若しくは Het^{10} で表される基を表し；

R^{23} 及び R^{29} は、互いに独立して、それぞれ、水素、 (C_1-C_4) -アルキル、 (C_1-C_4) -ハロアルキル、 (C_3-C_6) -シクロアルキル、 (C_3-C_6) -ハロシクロアルキル、 (C_1-C_4) -アルコキシ又は (C_1-C_4) -ハロアルコキシを表し；

R^{24} 及び R^{30} は、互いに独立して、それぞれ、水素、ハロゲン、シアノ、 (C_1-C_4) -アルキル、 (C_1-C_4) -ハロアルキル、 (C_3-C_6) -シクロアルキル、 (C_3-C_6) -ハロシクロアルキル、 (C_1-C_4) -アルコキシ又は (C_1-C_4) -ハロアルコキシを表し；

R^{25} 、 R^{26} 、 R^{31} 及び R^{32} は、互いに独立して、それぞれ、水素、 (C_1-C_4) -アルキル、 (C_1-C_4) -ハロアルキル、 (C_1-C_4) -アルコキシ、 (C_1-C_4) -ハロアルコキシ、 (C_1-C_4) -アルコキシ- (C_1-C_4) -アルキル、 (C_1-C_4) -ハロアルコキシ- (C_1-C_4) -アルキル、 (C_3-C_6) -シクロアルキル、 (C_3-C_6) -ハロシクロアルキル、 (C_3-C_6) -シクロアルコキシ、 (C_2-C_6) -アルケニル、 (C_2-C_6) -ハロアルケニル、 (C_2-C_6) -アルキニル、 (C_2-C_6) -ハロアルキニル、 (C_1-C_4) -アルキルチオ、 (C_1-C_4) -アルキルスルホニル、 (C_1-C_4) -アルキルスルフィニル、 $NR^{64}R^{65}$ 又は Het^{11} を表し；

R^{27} は、水素、 (C_1-C_6) -アルキル、 (C_1-C_4) -ハロアルキル、 (C_3-C_6) -シクロアルキル又は (C_3-C_6) -ハロシクロアルキルを表し；

R^{28} は、水素、 (C_1-C_6) -アルキル、 (C_1-C_4) -ハロアルキルを表すか、又は、式 $C(O)OR^{66}$ で表されるラジカルを表し；

R^{33} 、 R^{34} 、 R^{37} 及び R^{38} は、互いに独立して、それぞれ、 (C_1-C_8) -

10

20

30

40

50

アルキル、 (C_3-C_6) -シクロアルキル、フェニル [ここで、最後に挙げられている3ラジカルは、それぞれ、いずれの場合にも残りのものから独立して、置換されていないか、又は、ハロゲン、シアノ、ニトロ、ヒドロキシ、 (C_1-C_4) -アルコキシ、 (C_1-C_4) -アルキルチオからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されており、及び、親ラジカルとしてのシクロアルキルラジカル又はフェニルラジカルの場合、 (C_1-C_4) -アルキル及び (C_1-C_4) -ハロアルキルでも置換されている]を表すか、又は、式 $-C(O)R^{67}$ 、 $-C(O)OR^{68}$ 、 $-C(O)NR^{69}R^{70}$ 、 $-C(O)Het^{12}$ 若しくは $-SO_2R^{71}$ で表される基を表し；

R^{35} 及び R^{36} は、互いに独立して、それぞれ、 R^3 に関して定義されているとおりであるか、又は、好ましくは、水素、 (C_1-C_4) -アルキル若しくは (C_1-C_4) -ハロアルキルであり；

10

R^{39} 、 R^{44} 、 R^{49} 、 R^{54} 、 R^{59} 及び R^{66} は、互いに独立して、それぞれ、水素、 (C_1-C_4) -アルキル、 (C_1-C_4) -ハロアルキル、 (C_3-C_6) -シクロアルキル、 (C_3-C_6) -ハロシクロアルキル、 (C_2-C_4) -アルケニル、 (C_2-C_4) -ハロアルケニル、 (C_2-C_4) -アルキニル又は上記基Mを表し、好ましくは、 (C_1-C_4) -アルキルを表し；

R^{40} 、 R^{41} 、 R^{42} 、 R^{43} 、 R^{45} 、 R^{46} 、 R^{47} 、 R^{48} 、 R^{50} 、 R^{51} 、 R^{52} 、 R^{53} 、 R^{55} 、 R^{56} 、 R^{57} 、 R^{58} 、 R^{60} 、 R^{61} 、 R^{62} 、 R^{63} 、 R^{64} 、 R^{65} 、 R^{69} 及び R^{70} は、互いに独立して、それぞれ、水素、 (C_1-C_6) -アルキル、 (C_2-C_6) -アルケニル若しくは (C_2-C_6) -アルキニル [ここで、最後に挙げられている3のラジカルは、それぞれ、いずれの場合にも残りのものから独立して、置換されていないか、又は、ハロゲン、ニトロ、シアノ及びフェニル (ここで、該フェニルは、置換されていてもよく、好ましくは、置換されていないか、又は、ハロゲン、ニトロ、シアノ、 (C_1-C_4) -アルキル及び (C_1-C_4) -ハロアルキルからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されている) からなる群から選択される1以上のラジカルで置換されている]を表すか、又は、

20

(C_3-C_6) -シクロアルキル若しくはフェニル [ここで、最後に挙げられている2のラジカルは、それぞれ、いずれの場合にも残りのものから独立して、置換されていないか、又は、ハロゲン、ニトロ、シアノ、 (C_1-C_4) -アルキル、 (C_1-C_4) -ハロアルキル、フェニル及びベンジルからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されており、ここで、最後に挙げられている2のラジカルは、それぞれ、置換されていてもよく、好ましくは、置換されていないか、又は、ハロゲン、ニトロ、シアノ、 (C_1-C_4) -アルキル及び (C_1-C_4) -ハロアルキルからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されている]を表し；

30

R^{67} は、水素、 (C_1-C_8) -アルキル若しくは (C_1-C_8) -ハロアルキル [ここで、最後に挙げられている2のラジカルは、それぞれ、残りのものから独立して、そのアルキル部分が酸素又は硫黄で中断されていてもよい]を表すか、又は、フェニル若しくはベンジル [ここで、最後に挙げられている2のラジカルは、それぞれ、残りのものから独立して、置換されていないか、又は、ハロゲン、シアノ、 (C_1-C_4) -アルキル、 (C_2-C_4) -アルケニル、 (C_2-C_4) -アルキニル、 (C_3-C_6) -シクロアルキル、 (C_1-C_4) -ハロアルキル及び (C_3-C_6) -ハロシクロアルキルからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されている]を表し；

40

R^{68} は、 (C_1-C_8) -アルキル、 (C_1-C_8) -ハロアルキル、 (C_3-C_6) -シクロアルキル、 (C_3-C_6) -ハロシクロアルキル、 (C_2-C_8) -アルケニル、 (C_2-C_8) -ハロアルケニル又は (C_2-C_4) -アルキニルを表し；

R^{71} は、 (C_1-C_6) -アルキル、 (C_1-C_6) -ハロアルキルを表すか、又は、フェニル若しくはベンジル [ここで、最後に挙げられている2のラジカルは、それぞれ、残りのものから独立して、置換されていないか、又は、ハロゲン、シアノ、 (C_1-C_4) -アルキル、 (C_2-C_4) -アルケニル、 (C_2-C_4) -アルキニル、 (C_3-C_6) -シクロアルキル、 (C_1-C_4) -ハロアルキル及び (C_3-C_6) -ハロシク

50

ロアルキルからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されている]を表し;

Het¹、Het²、Het³、Het⁴、Het⁵、Het⁶、Het⁷、Het⁸、Het⁹、Het¹⁰、Het¹¹及びHet¹²は、互いに独立して、それぞれ、飽和又は部分的な不飽和のヘテロ環のラジカル[ここで、該ヘテロ環は、3～9個の環原子及び該環の1位に環ヘテロ原子としての少なくとも1個の窒素原子を有し、及び、場合により、N、O及びSからなる群から選択される1個、2個又は3個のさらなる環ヘテロ原子を有し、並びに、該ヘテロ環の該ラジカルはその環の1位にある窒素原子で式(I)で表される化合物の分子の残りの部分に結合しており、並びに、該ヘテロ環は、置換されていないか、又は、ハロゲン、(C₁—C₄)—アルキル、(C₁—C₄)—ハロアルキル、(C₁—C₄)—アルコキシ、(C₁—C₄)—ハロアルコキシ、(C₁—C₄)—アルキルチオ及びオキソからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されている]であり、好ましくは、上記タイプの飽和ヘテロ環のラジカルであり、特に、モルホリノ基、ペリジノ基又はピロリジノ基であり;及び、

m、nは、互いに独立して、それぞれ、0、1、2、3、4又は5を表し、好ましくは0、1、2又は3を表す]

で表される化合物又はその塩を提供する。

【0019】

式(I)において、式「(R¹)_m」は、当該フェニル環における置換基として結合しているmのラジカルR¹を意味し、ここで、mが1より大きい場合、該ラジカルは同一であっても又は異なってもよく、そして、いずれの場合にも詳細に記載されている意味を有する。m=0の場合、当該フェニル環は置換基R¹で置換されていない、即ち、該フェニル環の2～6位の全ての環炭素原子は水素原子に結合している。このことは、同様に、式(R²)_nで表される別のフェニル環の置換基にも当てはまる。

【0020】

基B¹のラジカルに関する式(B1)～(B14)において、式—C(=A¹)—B¹で表される基の中の基B¹は遊離結合を介して当該式中に示されている炭素原子に結合しているが、その遊離結合には、「メチル」ラジカルに関する簡潔な表記法との間違いを避けるために、矢印

【0021】

【化5】



が付けられている。

【0022】

基A²のラジカルに関する式(A1)～(A12)において、式—C(=A²)—B²で表される基の中の基A²は遊離二重結合を介して当該式中に示されている炭素原子に結合しているが、その遊離結合には、式中における「メチレン」ラジカル(「H₂C=」)に関する簡潔な表記法との間違いを避けるために、矢印

【0023】

【化6】



が付けられている。

【0024】

本発明による式(I)で表される化合物は、当該分子(ここで、該分子の立体配置は当該式においては具体的には示されていないか、又は、該分子は明示的には特定されていない)の中の不斉中心又は二重結合に基づいて生じ得る全ての立体異性体及びそれらの混合物を包含している。そのような立体異性体及びその混合物には、ラセミ化合物及び特定の立体異性体が部分的に富化されている混合物が包含される。本発明は、さらにまた、適切な官能基が存在している場合には、全ての互変異性体(例えば、ケト及びエノール互変異性体)並びにそれらの混合物及び塩も包含する。

【0025】

置換されているバレロニトリル骨格の2位及び3位において、式(I)で表される化合物は2つのキラル中心を含んでおり、従って、該化合物は、少なくとも4種類の立体異性体及びそれらの混合物(即ち、2エナンチオマー性エリトロ異性体及び2エナンチオマー性トレオ異性体)で存在する。置換基 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ に応じて、1以上のさらなるキラル中心が存在し得る。

【0026】

従って、本発明は、式(I)で表される化合物のエリトロ／トレオ混合物(ジアステレオマー混合物)も提供する。

【0027】

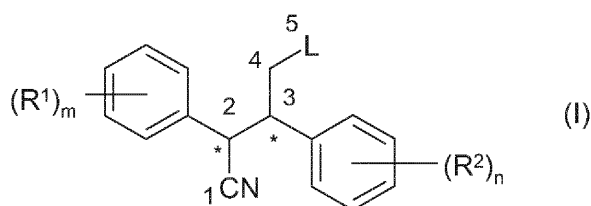
本発明は、さらにまた、式(I)で表される化合物のラセミエリトロ異性体又はラセミトレオ異性体も提供する。

【0028】

本発明は、さらにまた、光学的に活性な(2R、3S)及び(2S、3R)エリトロ異性体並びに過剰な1種類のエナンチオマーを有しているそれらの混合物も提供する(バレロニトリル骨格における位置に1～5の番号が付けられている下記式(I)を参照されたい)。

【0029】

【化7】



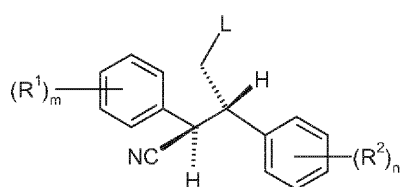
本発明は、さらにまた、光学的に活性な(2R、3R)及び(2S、3S)トレオ異性体並びに過剰な1種類のエナンチオマーを有しているそれらの混合物も提供する。

【0030】

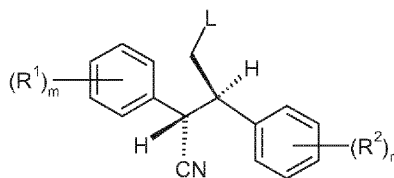
2位と3位における2つのキラル中心に起因して、同一の化学構造の化合物は4種類の立体異性形態〔即ち、それぞれ、立体配置(2R、3S)〔＝エリトロ－1〕及び(2S、3R)〔＝エリトロ－2〕を有する2種類のエリトロエナンチオマー、並びに、それぞれ、立体配置(2S、3S)〔＝トレオ－1〕及び(2R、3R)〔＝トレオ－2〕を有するトレオエナンチオマー〕で存在している；下記スキームを参照されたい：

【0031】

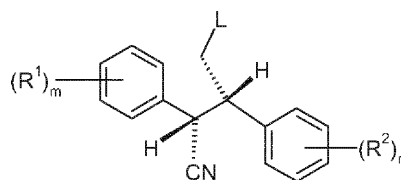
【化8】



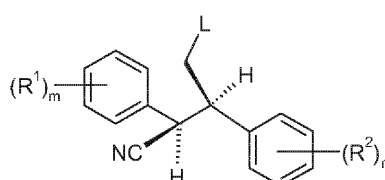
エリトロ-1 (2R, 3S)



エリトロ-2 (2S, 3R)



トレオ-1 (2S, 3S)



トレオ-2 (2R, 3R)

10

20

30

40

50

本発明による化合物（I）は、4種類の立体異性体のジアステレオマー混合物を表しているが、分離されたジアステレオマー性エリトロ形態又はジアステレオマー性トレオ形態も包含している（いずれの場合にも、エリトロエナンチオマー若しくはトレオエナンチオマーのラセミ混合物として、又は、純粋な若しくは立体化学的に富化されたエナンチオマーエリトロ-1、エナンチオマーエリトロ-2、エナンチオマートレオ-1若しくはエナンチオマートレオ-2として）。

【0032】

好ましいのは、式（I）のジアステレオマー混合物（エリトロ／トレオ混合物）である。

【0033】

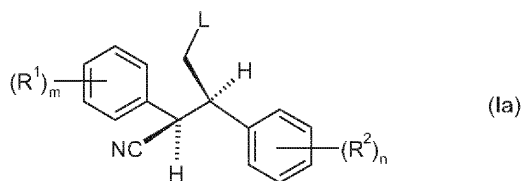
好ましいのは、さらにまた、50：50の比率における上記エナンチオマートレオ-1とエナンチオマートレオ-2の式（I）で表されるラセミトレオ混合物である。

【0034】

さらに好ましいのは、式（Ia）

【0035】

【化9】



トレオ-2 (2R, 3R)

〔式中、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ は、式（I）において定義されているとおりである〕で表される（2R、3R）エナンチオマートレオ-2又はその塩であり、ここで、バレロニトリル誘導体の2位における炭素原子の立体化学的配置は、存在しているトレオエナンチオマーの混合物に基づいて、60～100%（R）〔好ましくは、70～100%（R）、さらに好ましくは、80～100%（R）、特に、90～100%（R）〕の立体化学的純度を有しており、及び、バレロニトリル誘導体の3位における炭素原子の立体化学的配置は、存在しているトレオエナンチオマーの混合物に基づいて、60～100%（R）〔好ましくは、70～100%（R）、さらに好ましくは、80～100%（R）、特に、90～100%（R）〕の立体化学的純度を有している。

【0036】

適切な酸性置換基の場合、式（I）で表される化合物は、塩基との反応（ここで、当該酸性水素は、農業上適切なカチオンで置き換えられる）によって塩を形成することが可能である。

【0037】

塩基性基（例えば、アミノ又はアルキルアミノ）に適切な無機酸又は有機酸を付加することによって、式（I）で表される化合物は塩を形成することが可能である。存在している適切な酸性基（例えば、カルボン酸基）は、プロトン化され得る基（例えば、アミノ基）と分子内塩を形成することが可能である。

【0038】

式（I）で表される化合物は、好ましくは、農業上使用可能な塩の形態で存在し得るが、その際、塩のタイプは重要ではない。一般に、適切な塩は、そのカチオン及びアニオンがそれぞれ化合物（I）の除草活性に悪影響を及ぼすことのないカチオンの塩又は酸の酸付加塩である。

【0039】

適切なカチオンは、特に、アルカリ金属（好ましくは、リチウム、ナトリウム又はカリウム）のイオン、アルカリ土類金属（好ましくは、カルシウム又はマグネシウム）のイオ

10

20

30

40

50

ン及び遷移金属（好ましくは、マンガン、銅、亜鉛又は鉄）のイオンである。使用するカチオンは、さらにまた、アンモニウム又は置換されているアンモニウム〔ここで、1～4個の水素原子は、 (C_1-C_4) －アルキル、ヒドロキシー (C_1-C_4) －アルキル、 (C_1-C_4) －アルコキシ (C_1-C_4) －アルキル、ヒドロキシー (C_1-C_4) －アルコキシ (C_1-C_4) －アルキル、フェニル又はベンジルで置き換えられ得る〕、好ましくは、アンモニウム、ジメチルアンモニウム、ジイソプロピルアンモニウム、テトラメチルアンモニウム、テトラブチルアンモニウム、2－（2－ヒドロキシエター1－オキシ）エター1－イルアンモニウム、ジ（2－ヒドロキシエター1－イル）アンモニウム、トリメチルベンジルアンモニウムであることもできる。さらにまた、ホスホニウムイオン、スルホニウムイオン〔好ましくは、トリ (C_1-C_4) メチルスルホニウム〕又はスルホキソニウムイオン〔好ましくは、トリ (C_1-C_4) メチルスルホキソニウム〕も適している。

10

【0040】

有用な酸付加塩のアニオンは、第1級の塩化物、臭化物、フッ化物、硫酸水素アニオン、硫酸アニオン、リン酸二水素アニオン、リン酸水素アニオン、硝酸アニオン、重炭酸アニオン、炭酸アニオン、ヘキサフルオロケイ酸アニオン、ヘキサフルオロリン酸アニオン、安息香酸アニオン、及び、さらに、 (C_1-C_4) －アルカン酸のアニオン〔好ましくは、ギ酸アニオン、酢酸アニオン、プロピオン酸アニオン、酪酸アニオン又はトリフルオロ酢酸アニオン〕である。

【0041】

20

式(I)において、及び、後続の全ての式において、化学ラジカルは個々の基のメンバーを列挙する代わりの集合語である名称によって言及されているか、又は、個々の化学ラジカルについて具体的に言及している。一般に、当業者にはよく知られている用語が使用されている、及び／又は、特に、以下で例証されている意味を有する用語が使用されている。

【0042】

炭化水素ラジカルは、炭素元素と水素元素に基づいた、脂肪族、脂環式若しくは芳香族単環式の有機ラジカル、又は、置換されていてもよい炭化水素ラジカルの場合には、さらに、二環式若しくは多環式の有機ラジカルであり、そのような炭化水素ラジカルとしては、例えば、ラジカルアルキル、アルケニル、アルキニル、シクロアルキル、シクロアルケニル、アリール、フェニル、ナフチル、インダニル、インデニルなどを挙げることができる；このことは、対応して、複合的な意味における炭化水素ラジカル（例えば、ヒドロカルボノキシラジカル）又はヘテロ原子基を介して結合している別の炭化水素ラジカルにも当てはまる。

30

【0043】

さらに詳細に定義されていない限り、炭化水素ラジカルは、好ましくは、1～20個の炭素原子、さらに好ましくは、1～16個の炭素原子、特に、1～12個の炭素原子を有している。炭化水素ラジカルは、特定のラジカルアルキル、アルコキシ、ハロアルキル、ハロアルコキシ、アルキルアミノ及びアルキルチオにおいては、並びに、対応する不飽和の及び／又は置換されているラジカルにおいても、いずれの場合にも、炭素骨格内では直鎖又は分枝鎖であり得る。

40

【0044】

表現「 (C_1-C_4) －アルキル」は、1～4個の炭素原子を有するアルキルに関する簡単な表記法であり、即ち、メチル、エチル、1－プロピル、2－プロピル、1－ブチル、2－ブチル、2－メチルプロピル又はtert－ブチルラジカルを包含している。より大きな特定されている範囲の炭素原子を有する一般的なアルキルラジカル、例えば、「 (C_1-C_6) －アルキル」は、同様に、より大きな数の炭素原子を有する直鎖又は分枝鎖のアルキルラジカルを包含し、即ち、上記例によれば、5個及び6個の炭素原子を有するアルキルラジカルも包含する。

【0045】

50

具体的に示されていない限り、好ましいのは、低級炭素骨格、例えば、1～6個の炭素原子又は2～6個の炭素原子（不飽和基の場合、ヒドロカルビルラジカルの場合）を有する低級炭素骨格、例えば、アルキル、アルケニル及びアルキニルラジカルなどであり、これらは、複合的なラジカルも包含する。アルキルラジカル（アルコキシ、ハロアルキルなどの組み合わせられた定義の場合も包含する）は、例えば、メチル、エチル、*n*-プロピル、*i*-プロピル、*n*-ブチル、*i*-ブチル、*t*-ブチル、2-ブチル、ペンチル類、ヘキシル類（例えば、*n*-ヘキシル、*i*-ヘキシル及び1, 3-ジメチルブチル）、ヘプチル類（例えば、*n*-ヘプチル、1-メチルヘキシル及び1, 4-ジメチルペンチル）である；アルケニル及びアルキニルラジカルは、上記アルキルラジカルに対応する可能な不飽和ラジカルとして定義される；アルケニルは、例えば、ビニル、アリル、1-メチル-2-プロペニル、2-メチル-2-プロペニル、2-ブテニル、ペンテニル、2-メチルペンテニル又はヘキセニル基、好ましくは、アリル、1-メチルプロパー-2-エン-1-イル、2-メチルプロパー-2-エン-1-イル、ブター-2-エン-1-イル、ブター-3-エン-1-イル、1-メチルブター-3-エン-1-イル又は1-メチルブター-2-エン-1-イルである。

【0046】

アルケニルには、特に、2以上の二重結合を有する直鎖又は分枝鎖の炭化水素ラジカル（例えば、1, 3-ブタジエニル及び1, 4-ペンタジエニル）も包含され、さらに、1以上の累積二重結合を有するアレニル又はクムレニル（例えば、アレニル（1, 2-プロパジエニル）、1, 2-ブタジエニル及び1, 2, 3-ペンタトリエニル）も包含される。

【0047】

アルキニルは、例えば、プロパルギル、ブター-2-イン-1-イル、ブター-3-イン-1-イル、1-メチルブター-3-イン-1-イルなどである。

【0048】

アルキニルには、特に、2以上の三重結合を有するか又は1以上の三重結合と1以上の二重結合を有する直鎖又は分枝鎖の炭化水素ラジカル（例えば、1, 3-ブタトリエニル又は3-ペンテン-1-イン-1-イル）も包含される。

【0049】

3～9員の炭素環式環は、($C_3 - C_9$)-シクロアルキル又は($C_5 - C_9$)-シクロアルケニルである。

【0050】

($C_3 - C_9$)-シクロアルキルは、好ましくは3～9個の炭素原子を有する、飽和炭素環式環系、例えば、シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル、シクロヘプチル、シクロオクチル又はシクロノニルなどである。置換されているシクロアルキルの場合、置換基を有する環式系が包含され、その際、当該置換基は、シクロアルキルラジカル上に二重結合によって結合していてもよい（例えば、アルキリデン基、例えば、メチリデン）。

【0051】

($C_5 - C_9$)-シクロアルケニルは、5～9個の炭素原子を有する非芳香族の部分的な不飽和炭素環式環系、例えば、1-シクロブテニル、2-シクロブテニル、1-シクロペンテニル、2-シクロペンテニル、3-シクロペンテニル、1-シクロヘキセニル、2-シクロヘキセニル、3-シクロヘキセニル、1, 3-シクロヘキサジエニル又は1, 4-シクロヘキサジエニルなどである。置換されているシクロアルケニルの場合、置換されているシクロアルキルに関する説明が、対応して当てはまる。

【0052】

アルキリデンは、例えば、($C_1 - C_{10}$)-アルキリデンの形態においても、二重結合を介して結合している直鎖又は分枝鎖のアルカンのラジカルであり、その際、当該結合部位の位置は固定されていない。分枝鎖アルカンの場合、可能な唯一の位置は、もちろん、2個の水素原子が二重結合によって置き換えられ得る位置である；そのようなラジカル

10

20

30

40

50

は、例えば、 $=CH_2$ 、 $=CH-CH_3$ 、 $=C(CH_3)-CH_3$ 、 $=C(CH_3)-C_2H_5$ 又は $=C(C_2H_5)-C_2H_5$ などである。

【0053】

ハロゲンは、例えば、フッ素、塩素、臭素又はヨウ素である。ハロアルキル、ハロアルケニル及びハロアルキニルは、それぞれ、同一であるか又は異なっているハロゲン原子（好ましくは、フッ素、塩素、臭素及びヨウ素からなる群から選択されるハロゲン原子、特に、フッ素、塩素及び臭素からなる群から選択されるハロゲン原子、極めて特に、フッ素及び塩素からなる群から選択されるハロゲン原子）で部分的に又は完全に置換されているアルキル、アルケニル及びアルキニル、例えば、モノハロアルキル、ペルハロアルキル、 CF_3 、 CHF_2 、 CH_2F 、 CF_3CF_2 、 CH_2FCHCl 、 CCl_3 、 $CHCl_2$ 、 CH_2CH_2Cl などである；ハロアルコキシは、例えば、 OCF_3 、 $OCHF_2$ 、 OCH_2F 、 CF_3CF_2O 、 OCH_2CF_3 及び OCH_2CH_2Cl などである；このことは、対応して、ハロアルケニル及び別のハロゲン置換ラジカル（例えば、ハロシクロアルキル）にも当てはまる。

【0054】

アリールは、単環式、二環式又は多環式の芳香族系、例えば、フェニル、ナフチル、テトラヒドロナフチル、インデニル、インダニル、ペンタレニル及びフルオレニルなどであり、好ましくは、フェニルである。

【0055】

置換されていてもよいアリールには、結合点が当該芳香族系にある多環式系（例えば、テトラヒドロナフチル、インデニル、インダニル、フルオレニル、ビフェニル）も包含される。

【0056】

ヘテロ環式ラジカル（ヘテロシクリル）は、結合点が還元原子に位置している少なくとも1のヘテロ環式環〔＝少なくとも1個の炭素原子がヘテロ原子（好ましくは、N、O、S、P、B、Si、Seからなる群から選択されるヘテロ原子）で置き換えられている炭素環式環〕を含んでおり、ここで、該ヘテロ環式環は、飽和、不飽和又はヘテロ芳香族であり、そして、置換されていないか又は置換されている。

【0057】

特に別途定義されていない限り、それは、好ましくは、当該ヘテロ環式環内に、1個以上（特に、1個、2個又は3個）のヘテロ原子（好ましくは、N、O及びSからなる群から選択されるヘテロ原子）を含んでいる；それは、好ましくは、3～7個の環原子を有する脂肪族ヘテロシクリルラジカルであるか、又は、5個若しくは6個の環原子を有するヘテロ芳香族ラジカルである。該ヘテロ環式ラジカルは、例えば、ヘテロ芳香族ラジカル又はヘテロ芳香族環（ヘテロアリール）、例えば、少なくとも1の環が1個以上のヘテロ原子を含んでいる単環式、二環式又は多環式の芳香族系であり得る。

【0058】

ヘテロシクリルラジカル又はヘテロ環式環が置換されていてもよい場合、それは、別の炭素環式環又はヘテロ環式環に縮合し得る。好ましいのは、ベンゾ縮合ヘテロ環式環又はベンゾ縮合ヘテロ芳香族環である。

【0059】

置換されていてもよいヘテロシクリルには、多環式系（例えば、8-アザ-ビシクロ[3.2.1]オクタニル又は1-アザ-ビシクロ[2.2.1]ヘプチル）も包含される。

【0060】

置換されていてもよいヘテロシクリルには、スピロ環式系（例えば、1-オキサ-5-アザ-スピロ[2.3]ヘキシル）も包含される。

【0061】

それは、好ましくは、N、O及びSからなる群から選択されるヘテロ原子を有しているヘテロ芳香族環のラジカル、例えば、5員環又は6員環のラジカル（例えば、ピリジル、

10

20

30

40

50

ピロリル、チエニル又はフリル)である；

それは、さらにまた、好ましくは、2個、3個又は4個のヘテロ原子を有する対応するヘテロ芳香族環のラジカル(例えば、ピリミジニル、ピリダジニル、ピラジニル、トリアジニル、テトラジニル、チアゾリル、チアジアゾリル、オキサゾリル、イソオキサゾリル、ピラゾリル、イミダゾリル、トリアゾリル又はテトラゾリル)である。

【0062】

ここで、好ましいのは、1～4個のヘテロ原子を有する5員又は6員のヘテロ芳香族環のラジカル(例えば、1, 2, 3-トリアゾリル、1, 2, 4-トリアゾリル、テトラゾリル、イソチアゾリル、1, 2, 3-オキサジアゾリル、1, 2, 4-オキサジアゾリル、1, 3, 4-オキサジアゾリル、1, 2, 5-オキサジアゾリル、1, 2, 3-チアジアゾリル、1, 2, 4-チアジアゾリル、1, 3, 4-チアジアゾリル、1, 2, 5-チアジアゾリル、テトラゾリル、1, 2, 3-トリアジニル、1, 2, 4-トリアジニル、1, 3, 5-トリアジニル、1, 2, 3, 4-テトラジニル、1, 2, 3, 5-テトラジニル、1, 2, 4, 5-テトラジニル、チアゾリル、イソチアゾリル、オキサゾリル、イソオキサゾリル、ピラゾリル、イミダゾリル)である。

【0063】

ここで、さらに好ましいのは、3個の窒素原子を有する5員ヘテロ環のヘテロ芳香族ラジカル(例えば、1, 2, 3-トリアゾール-1-イル、1, 2, 3-トリアゾール-4-イル、1, 2, 3-トリアゾール-5-イル、1, 2, 5-トリアゾール-1-イル、1, 2, 5-トリアゾール-3-イル、1, 3, 4-トリアゾール-1-イル、1, 3, 4-トリアゾール-2-イル、1, 2, 4-トリアゾール-3-イル、1, 2, 4-トリアゾール-5-イル)である；

ここで、さらに好ましいのは、さらにまた、3個の窒素原子を有する6員ヘテロ環のヘテロ芳香族ラジカル(例えば、1, 3, 5-トリアジン-2-イル、1, 2, 4-トリアジン-3-イル、1, 2, 4-トリアジン-5-イル、1, 2, 4-トリアジン-6-イル、1, 2, 3-トリアジン-4-イル、1, 2, 3-トリアジン-5-イル)である；

ここで、さらに好ましいのは、さらにまた、2個の窒素原子と1個の酸素原子を有する5員ヘテロ環のヘテロ芳香族ラジカル(例えば、1, 2, 4-オキサジアゾール-3-イル、1, 2, 4-オキサジアゾール-5-イル、1, 3, 4-オキサジアゾール-2-イル、1, 2, 3-オキサジアゾール-4-イル、1, 2, 3-オキサジアゾール-5-イル、1, 2, 5-オキサジアゾール-3-イル)である；

ここで、さらに好ましいのは、さらにまた、2個の窒素原子と1個の硫黄原子を有する5員ヘテロ環のヘテロ芳香族ラジカル(例えば、1, 2, 4-チアジアゾール-3-イル、1, 2, 4-チアジアゾール-5-イル、1, 3, 4-チアジアゾール-2-イル、1, 2, 3-チアジアゾール-4-イル、1, 2, 3-チアジアゾール-5-イル、1, 2, 5-チアジアゾール-3-イル)である；

ここで、さらに好ましいのは、さらにまた、4個の窒素原子を有する5員ヘテロ環のヘテロ芳香族ラジカル(例えば、1, 2, 3, 4-テトラゾール-1-イル、1, 2, 3, 4-テトラゾール-5-イル、1, 2, 3, 5-テトラゾール-1-イル、1, 2, 3, 5-テトラゾール-4-イル、2H-1, 2, 3, 4-テトラゾール-5-イル、1H-1, 2, 3, 4-テトラゾール-5-イル)である；

ここで、さらに好ましいのは、さらにまた、6員ヘテロ環のヘテロ芳香族ラジカル(例えば、1, 2, 4, 5-テトラジン-3-イル)である；

ここで、さらに好ましいのは、さらにまた、3個の窒素原子と1個の酸素原子又は硫黄原子を有する5員ヘテロ環のヘテロ芳香族ラジカル(例えば、1, 2, 3, 4-オキサトリアゾール-5-イル、1, 2, 3, 5-オキサトリアゾール-4-イル、1, 2, 3, 4-チアトリアゾール-5-イル、1, 2, 3, 5-チアトリアゾール-4-イル)である；

ここで、さらに好ましいのは、さらにまた、6員ヘテロ環のヘテロ芳香族ラジカル(例えば、1, 2, 4, 6-チアトリアジン-1-イル、1, 2, 4, 6-チアトリアジン-

10

20

30

40

50

3-イル、1, 2, 4, 6-チアトリアジン-5-イル)である。

【0064】

さらにまた、好ましくは、ヘテロ環式ラジカル又はヘテロ環式環は、N、O及びSの群から選択される1個のヘテロ原子を有する、部分的に又は完全に水素化されているヘテロ環式ラジカル(例えば、オキシラニル、オキセタニル、オキソラニル(=テトラヒドロフリル)、オキサニル、ピロリニル、ピロリジル又はピペリジル)である。

【0065】

それは、さらにまた、好ましくは、N、O及びSの群から選択される2個のヘテロ原子を有する、部分的に又は完全に水素化されているヘテロ環式ラジカル(例えば、ピペラジニル、ジオキサラニル、オキサゾリニル、イソオキサゾリニル、オキサゾリジニル、イソオキサゾリジニル及びモルホリニル)である。置換されているヘテロ環式ラジカルに関する適切な置換基は、下記記述において特定されている置換基、及び、さらに、付加的に、オキソである。該オキソ基は、例えば、N及びSの場合のように、種々の酸化状態で存在し得るヘテロ環原子上においても存在し得る。

【0066】

ヘテロシクリルの好ましい例は、ピリジル、チエニル、フリル、ピロリル、オキシラニル、2-オキセタニル、3-オキセタニル、オキソラニル(=テトラヒドロフリル)、ピロリジル、ピペリジル(特に、オキシラニル、2-オキセタニル、3-オキセタニル又はオキソラニル)の群から選択される3~6個の環原子を有するヘテロ環式ラジカルであるか、又は、2個若しくは3個のヘテロ原子を有するヘテロ環式ラジカル、例えば、ピリミジニル、ピリダジニル、ピラジニル、トリアジニル、チアゾリル、チアジアゾリル、オキサゾリル、イソオキサゾリル、ピラゾリル、トリアゾリル、ピペラジニル、ジオキサラニル、オキサゾリニル、イソオキサゾリニル、オキサゾリジニル、イソオキサゾリジニル若しくはモルホリニルなどである。

【0067】

好ましいヘテロ環式ラジカルは、さらにまた、ベンゾ縮合ヘテロ芳香族環(例えば、ベンゾフリル、ベンゾイソフリル、ベンゾチオフエニル、ベンゾイソチオフエニル、イソベンゾチオフエニル、インドリル、イソインドリル、インダゾリル、ベンゾイミダゾリル、ベンゾトリアゾリル、ベンゾオキサゾリル、1, 2-ベンゾイソオキサゾリル、2, 1-ベンゾイソオキサゾリル、ベンゾチアゾリル、1, 2-ベンゾイソチアゾリル、2, 1-ベンゾイソチアゾリル、1, 2, 3-ベンゾオキサジアゾリル、2, 1, 3-ベンゾオキサジアゾリル、1, 2, 3-ベンゾチアジアゾリル、2, 1, 3-ベンゾチアジアゾリル、キノリル(キノリニル)、イソキノリル(イソキノリニル)、キノリニル(quinolinyl)、フタラジニル、キナゾリニル、キノキサリニル、ナフチリジニル、ベンゾトリアジニル、プリニル、プテリジニル、インドリジニル、ベンゾ-1, 3-ジオキシリル、4H-ベンゾ-1, 3-ジオキシニル及び4H-ベンゾ-1, 4-ジオキシニル)、並びに、可能である場合には、そのN-オキシド及び塩である。

【0068】

基礎構造がラジカル(=基)のリストから選択される「1以上のラジカル」によって置換されているか又はラジカルの総称的に定義されている群で置換されている場合、これは、いずれの場合にも、複数の同一のラジカル及び/又は構造的に異なっているラジカルによる同時置換も包含する。

【0069】

置換されているラジカル、例えば、置換されているアルキル、アルケニル、アルキニル、シクロアルキル、アリール、フェニル、ベンジル、ヘテロシクリル及びヘテロアリールラジカルなどは、例えば、置換されていない基礎構造から誘導された置換されているラジカルであり、その場合、該置換基は、例えば、ハロゲン、アルコキシ、アルキルチオ、ヒドロキシル、アミノ、ニトロ、カルボキシル、シアノ、アジド、アルコキシカルボニル、アルキルカルボニル、ホルミル、カルバモイル、モノアルキルアミノカルボニル、ジアルキルアミノカルボニル、置換されているアミノ(例えば、アシルアミノ、モノアルキルア

ミノ及びジアルキルアミノ)、アルキルスルフィニル、アルキルスルホニルの群から、並びに、環状ラジカルの場合、さらに、アルキル、ハロアルキル、アルキルチオアルキル、アルコキシアルキル、置換されていてもよいモノアルキルアミノアルキル、置換されていてもよいジアルキルアミノアルキル及びヒドロキシアルキルの群からも選択される、1以上(好ましくは、1、2又は3)のラジカルである;用語「置換されているラジカル」(例えば、置換されているアルキルなど)において、置換基としては、上記飽和炭化水素ラジカルに加えて、対応する不飽和脂肪族ラジカル及び芳香族ラジカル、例えば、置換されていてもよいアルケニル、アルキニル、アルケニルオキシ、アルキニルオキシ、フェニル及びフェノキシなども挙げることができる。環内に脂肪族部分を有する置換されている環状ラジカルの場合、当該環に二重結合によって結合している置換基を有する環式系(例えば、メチリデン又はエチリデンなどのアルキリデン基で置換されている環式系)も包含される。

10

【0070】

用語「(置換基の群=リスト)からなる群からのラジカル(radicals from the group consisting of)」は、使用されている場合にはいつでも、「(・・・)からなる群から選択されるラジカル(radicals selected from the group consisting of)」と同じ意味である。用語「(置換基の群=リスト)からなる群からの1以上のラジカル(one or more radicals from the group consisting of)」は、使用されている場合にはいつでも、「(・・・)からなる群から選択される1以上の同一であるか又は異なっているラジカル(one or more identical or different radicals selected from the group consisting of)」と同じ意味である。

20

【0071】

例として挙げられている置換基(「第1置換基レベル」)は、炭化水素含有部分を含んでいる場合、必用に応じて、例えば第1置換基レベルに関して定義されている置換基のうちの1つによって、その炭化水素含有部分内でさらに置換されることができる(「第2の置換基レベル」)。同様に、さらなる置換基レベルも可能である。用語「置換されているラジカル」は、好ましくは、ちょうど1つ又は2つの置換基レベルを包含する。

【0072】

「親ラジカル」は、ある置換基レベルの置換基が結合しているラジカルのそれぞれの基礎構造を示している。

30

【0073】

上記置換基レベルに関する好ましい置換基は、例えば、アミノ、ヒドロキシル、ハロゲン、ニトロ、シアノ、メルカプト、カルボキシル、カルボンアミド(carbonamide)、SF₅、アミノスルホニル、アルキル、シクロアルキル、アルケニル、シクロアルケニル、アルキニル、モノアルキルアミノ、ジアルキルアミノ、N-アルカノイルアミノ、アルコキシ、アルケニルオキシ、アルキニルオキシ、シクロアルコキシ、シクロアルケニルオキシ、アルコキシカルボニル、アルケニルオキシカルボニル、アルキニルオキシカルボニル、アリールオキシカルボニル、アルカノイル、アルケニルカルボニル、アルキニルカルボニル、アリールカルボニル、アルキルチオ、シクロアルキルチオ、アルケニルチオ、シクロアルケニルチオ、アルキニルチオ、アルキルスルフィニル、アルキルスルホニル、モノアルキルアミノスルホニル、ジアルキルアミノスルホニル、N-アルキルアミノカルボニル、N、N-ジアルキルアミノカルボニル、N-アルカノイルアミノカルボニル、N-アルカノイル-N-アルキルアミノカルボニル、アリール、アリールオキシ、ベンジル、ベンジルオキシ、ベンジルチオ、アリールチオ、アリールアミノ及びベンジリアミノなどである。

40

【0074】

2つの置換基は、一緒になって、飽和若しくは不飽和の炭化水素架橋又は対応する架橋(ここで、該架橋の中の炭素原子、CH基又はCH₂基がヘテロ原子で置き換えられてい

50

る)を形成することもでき、かくして、縮合環(fused-on or fused cycle)を形成することができる。ここで、好ましくは、上記基礎構造に基づくベンゾ縮合系が形成される。

【0075】

置換されていてもよいフェニルは、好ましくは、フェニルであるか、又は、ハロゲン、シアノ、(C₁ - C₄) - アルキル、(C₁ - C₄) - ハロアルキル、(C₁ - C₄) - アルコキシ - (C₁ - C₄) アルキル、(C₁ - C₄) - アルコキシ、(C₁ - C₄) - ハロアルコキシ、(C₁ - C₄) - アルコキシ - (C₁ - C₄) - アルコキシ、(C₁ - C₄) - アルキルチオ及びニトロからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されていないか若しくは置換されているフェニルであり、特に、ハロゲン、(C₁ - C₄) - アルキル、(C₁ - C₄) - ハロアルキル及び(C₁ - C₄) - アルコキシからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されていてもよいフェニルである。

10

【0076】

炭素原子を有しているラジカルの場合、好ましいのは、1～6個の炭素原子(好ましくは、1～4個の炭素原子、特に、1個又は2個の炭素原子)を有しているラジカルである。一般に、ハロゲン[例えば、フッ素及び塩素]、(C₁ - C₄) - アルキル[好ましくは、メチル又はエチル]、(C₁ - C₄) - ハロアルキル[好ましくは、トリフルオロメチル]、(C₁ - C₄) - アルコキシ[好ましくは、メトキシ又はエトキシ]、(C₁ - C₄) - ハロアルコキシ、ニトロ及びシアノの群から選択される置換基が好ましい。ここで、特に好ましいのは、置換基メチル、メトキシ、フッ素及び塩素である。

20

【0077】

置換されているアミノ(例えば、1置換されているアミノ又は2置換されているアミノ)は、N-置換されている(例えば、アルキル、アルコキシ、アシル及びアリーの群から選択される1又は2の同一であるか又は異なっているラジカルでN-置換されている)、置換されているアミノラジカルの群から選択されるラジカルである;好ましくは、モノアルキルアミノ、ジアルキルアミノ、モノアリールアミノ、ジアリールアミノ、アシルアミノ、N-アルキル-N-アリールアミノ、N-アルキル-N-アシルアミノ及びN-ヘテロ環;1～4個の炭素原子を有するアルキルラジカルが好ましい;アリールは、好ましくは、フェニル又は置換されているフェニルである;アシルは、以下で定義されておりであり、好ましくは、(C₁ - C₄) - アルカノイルである。同様のことは、置換されているヒドロキシルアミノ又はヒドラジノにも当てはまる。

30

【0078】

アシルは、慣習的な意味において酸官能基のヒドロキシル基を除去することによって生じる有機酸のラジカルであり、その酸の中の有機ラジカルはヘテロ原子を介して該酸官能基に結合することもできる。アシルの例は、カルボン酸HO-CO-Rの-CO-Rラジカル及びそれから誘導される酸のラジカル、例えば、チオカルボン酸のラジカル、N-置換されていてもよいイミノカルボン酸のラジカル、又は、カルボン酸モノエステルのラジカル、N-置換カルバンミン酸のラジカル、スルホン酸のラジカル、スルフィン酸のラジカル、N-置換スルホンアミド酸のラジカル、ホスホン酸のラジカル又はホスフィン酸のラジカルなどである。

40

【0079】

アシルは、例えば、ホルミル、アルキルカルボニル[例えば、[(C₁ - C₄) - アルキル]カルボニル]、フェニルカルボニル、アルキルオキシカルボニル、フェニルオキシカルボニル、ベンジルオキシカルボニル、アルキルスルホニル、アルキルスルフィニル、N-アルキル-1-イミノアルキル及び有機酸の別のラジカルなどである。該ラジカルは、それぞれ、アルキル部分又はフェニル部分において、例えば、アルキル部分においてハロゲン、アルコキシ、フェニル及びフェノキシの群から選択される1以上のラジカルで、さらに置換され得る;フェニル部分における置換基の例は、置換されているフェニルに関して一般的に上記で既に挙げられている置換基である。

【0080】

50

アシルは、好ましくは、より狭い意味におけるアシルラジカル、即ち、有機ラジカルの炭素原子に酸基が直接結合している有機酸のラジカル、例えば、ホルミル、アルキルカルボニル〔例えば、アセチル又は〔(C₁－C₄)－アルキル〕カルボニル〕、フェニルカルボニル、アルキルスルホニル、アルキルスルフィニル及び有機酸の別のラジカルである。

【0081】

さらに好ましくは、アシルは、1～6個の炭素原子（特に、1～4個の炭素原子）を有しているアルカノイルラジカルである。ここで、(C₁－C₄)－アルカノイルは、1～4個の炭素原子を有するアルカン酸基のOH基を除去した後で形成される該アルカン酸のラジカル、即ち、ホルミル、アセチル、n－プロピオニル、イソプロピオニル、n－ブタノイル、i－ブタノイル、sec－ブタノイル又はtert－ブタノイルである。

10

【0082】

ラジカルの「イル位」は、遊離結合を有している炭素原子を表している。

【0083】

本発明による式（I）で表される化合物及び本発明に従って使用される式（I）で表される化合物並びに／又はそれらの塩は、略して、「化合物（I）」とも称される。

【0084】

本発明は、さらにまた、式（I）に包含される全ての立体異性体及びその混合物も提供する。式（I）で表されるそのような化合物は、一般式（I）の中に独立しては示されていない1以上の不斉炭素原子又は二重結合を含んでいる。その特異的な三次元の形状によって定義される可能な立体異性体（例えば、エナンチオマー、ジアステレオマー、Z－異性体及びE－異性体）は、全て、式（I）に包含され、そして、慣習的な方法によって立体異性体の混合物から得ることができるか、又は、立体化学的に純粋な出発物質の使用と組み合わせた立体選択的な反応によって調製することができる。

20

【0085】

本発明は、さらにまた、水素原子のシフトに起因し得る式（I）で表される化合物の全ての互変異性体（例えば、ケト－エノール互変異性体）も提供する。式（I）で表される化合物は、たとえ、形式的に、式（I）が互いに平衡状態にあるか又は互いに変換可能である個々の互変異性体のうちの1種類のみを表していたとしても、その互変異性体も包含する。

30

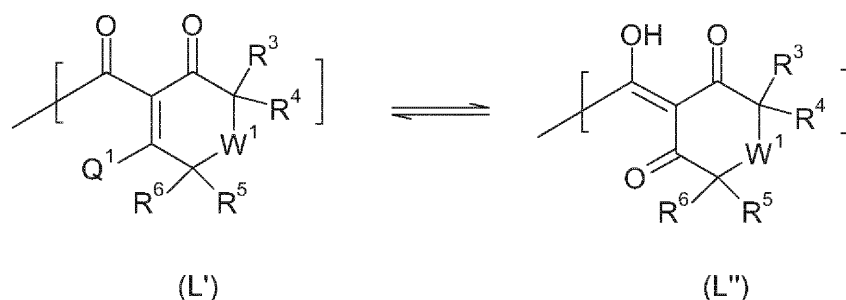
【0086】

例えば、式（I）〔式中、Lは、式（L'）で表されるラジカル〔これは、式－C（＝A¹）－B¹〔式中、A¹は酸素原子を表し、及び、B¹は式（B¹）〔式中、Q¹はOHを表す〕で表されるラジカルを表す〕で表されるLラジカルに対応する〕を表す〕で表される化合物は、式（I）〔式中、Lは、式（L''）で表されるラジカル〔これは、式－C（＝A²）－B²〔式中、A²は式（A¹）で表されるラジカルを表し、及び、B²は基OHを表す〕で表されるLラジカルに対応する〕を表す〕で表される化合物の互変異性体である（スキームを参照されたい）：

【0087】

【化10】

40



かくして、(L')を有する化合物（I）及び(L'')を有する化合物（I）の互変異

50

性体は、両方とも、式 (I) [L は、式 $-C(=A^1)-B^1$ で表されるラジカルを表す] の範囲内及び式 (I) [式中、L は、式 $-C(=A^2)-B^2$ で表されるラジカルを表す] の範囲内に包含される。

【0088】

式 (I) で表される化合物は、さらにまた、それら化合物が純粋な物質として又は適切な場合には別の化合物との混合物として存在し得る全ての物理的形狀も包含し、特に、式 (I) で表される化合物の多形結晶形態及びその塩並びに溶媒付加体 (例えば、水和物) も包含する。

【0089】

第 1 に、高い除草活性、優れた選択性、優れた生産性、優れた製剤可能性及び／又は別の関連する特性を有しているという理由によって、本発明による上記式 (I) [式中、個々のラジカルは、既に特定されているか若しくは以下で特定されている好ましい意味の内の 1 つを有する、又は、特に、既に特定されているか若しくは以下で特定されている好ましい意味の内の 1 以上が組み合わされて存在している] で表される化合物若しくはそれらの塩又は本発明によるそれらの使用は、特に興味深い。

【0090】

式 (I) 中の記号 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ 、L で表される個々の別のラジカル並びに m 及び n の定義、並びに、式 (I) 中のラジカルに対応する下位の意味における記号 A^1 、 A^2 、 B^1 、 B^2 、 R^A 、 R^B 、 $W^1 \sim W^7$ 、 $Q^1 \sim Q^9$ 、M、 $R^3 \sim R^{71}$ 、 R^* 及び R^{**} で表されるラジカル (又は、化学基) の定義とは関係なく、当該記号又は化学ラジカル又は化学基の以下に挙げられている好ましい意味を有している本発明による式 (I) で表される化合物及び本発明によるそれらの使用は、特に興味深い。

【発明を実施するための形態】

【0091】

好ましいのは、化合物 (I) [ここで、

$(R^1)_m$ は、m の置換基 R^1 を表し、

ここで、 $m=1$ の場合、 R^1 は、又は、m が 1 より大きい場合、置換基 R^1 はそれぞれ残りのものから独立して、ハロゲン、シアノ、ニトロ、ヒドロキシ、 (C_1-C_6) -アルキル、 (C_2-C_4) -アルケニル、 (C_2-C_4) -アルキニル、 (C_1-C_6) -アルコキシ、 (C_1-C_6) -アルキルチオ、 (C_1-C_6) -アルキルスルフィニル、 (C_1-C_6) -アルキルスルホニル、 (C_1-C_4) -ハロアルキル、 (C_1-C_4) -ハロアルコキシ、 (C_1-C_4) -ハロアルキルチオ、 (C_1-C_4) -ハロアルキルスルフィニル、 (C_1-C_4) -ハロアルキルスルホニル、 (C_2-C_4) -ハロアルケニル、 (C_2-C_4) -ハロアルキニル、 (C_1-C_4) -アルコキシ- (C_1-C_4) -アルキル、 (C_1-C_4) -ハロアルコキシ- (C_1-C_4) -アルキル、 (C_3-C_6) -シクロアルキル [ここで、該シクロアルキルは、ハロゲン及び (C_1-C_4) -アルキルからなる群から選択される 1 以上のラジカルで置換されていてもよい]、 (C_3-C_6) -シクロアルコキシ [ここで、該シクロアルコキシは、ハロゲン及び (C_1-C_4) -アルキルからなる群から選択される 1 以上のラジカルで置換されていてもよい] を表すか、又は、式 $C(O)OR^{39}$ 、 $C(O)NR^{40}R^{41}$ 、 $C(O)-Het^1$ 、 $NR^{42}R^{43}$ 若しくは Het^2 で表されるラジカルを表し；

又は、いずれの場合にも、環上のオルトに位置している 2 つの基 R^1 は、一緒になって、式 $-Z^1-A^*-Z^2$ [式中、

A^* は、ハロゲン、 (C_1-C_4) -アルキル、 (C_1-C_4) -ハロアルキル、 (C_1-C_4) -アルコキシ及び (C_1-C_4) -ハロアルコキシからなる群から選択される 1 以上のラジカルで置換されていてもよい 1~4 個の炭素原子を有するアルキレン基を表し；

Z^1 は、直接結合、O 又は S を表し；及び、

Z^2 は、直接結合、O 又は S を表す]

で表される基であり、その際、該基 $-Z^1-A^*-Z^2$ は、その基に結合しているフェニ

10

20

30

40

50

ル環の炭素原子と一緒に、縮合した5員又は6員の環を形成し；

$R^{3\ 9}$ は、水素、 $(C_1 - C_4)$ －アルキル、 $(C_1 - C_4)$ －ハロアルキル、 $(C_3 - C_6)$ －シクロアルキル、 $(C_3 - C_6)$ －ハロシクロアルキル、 $(C_2 - C_4)$ －アルケニル、 $(C_2 - C_4)$ －ハロアルケニル、 $(C_2 - C_4)$ －アルキニル又は上記基Mを表し、好ましくは、水素、 $(C_1 - C_4)$ －アルキル又は上記基Mを表し；

$R^{4\ 0}$ 、 $R^{4\ 1}$ 、 $R^{4\ 2}$ 、 $R^{4\ 3}$ 、 $He t^1$ 及び $He t^2$ は、上記意味を有し、好ましくは、

$R^{4\ 0}$ 、 $R^{4\ 1}$ 、 $R^{4\ 2}$ 及び $R^{4\ 3}$ は、互いに独立して、それぞれ、水素若しくは $(C_1 - C_4)$ －アルキル〔ここで、該アルキルは、置換されていないか、又は、ハロゲン、ニトロ、シアノ及びフェニルからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されている〕を表すか、又は、

$(C_3 - C_6)$ －シクロアルキル若しくはフェニル〔ここで、最後に挙げられている2のラジカルは、それぞれ、いずれの場合にも残りのものから独立して、置換されていないか、又は、ハロゲン、 $(C_1 - C_4)$ －アルキル、 $(C_1 - C_4)$ －ハロアルキル、フェニル及びベンジルからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されている〕を表し、特に、水素、 $(C_1 - C_4)$ －アルキル又は $(C_1 - C_4)$ －ハロアルキルを表し；

$He t^1$ 及び $He t^2$ は、互いに独立して、それぞれ、飽和又は部分的不飽和のヘテロ環のラジカル〔ここで、該ヘテロ環は、3～6個の環原子及び該環の1位に環ヘテロ原子としての少なくとも1個の窒素原子を有し、及び、場合により、N、O及びSからなる群から選択される1個、2個又は3個のさらなる環ヘテロ原子を有し、並びに、該ヘテロ環の該ラジカルはその環の1位にある窒素原子で式(I)で表される化合物の分子の残りの部分に結合しており、並びに、該ヘテロ環は、置換されていないか、又は、ハロゲン、 $(C_1 - C_4)$ －アルキル、 $(C_1 - C_4)$ －ハロアルキ及びオキソからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されている〕を表し、好ましくは、上記タイプの飽和ヘテロ環のラジカルを表し、特に、モルホリノ基、ピペリジノ基又はピロリジノ基を表し；及び、

m は、0、1、2、3、4又は5を表し、好ましくは、0、1、2又は3を表す〕である。

【0092】

さらに好ましいのは、化合物(I)〔ここで、

$(R^1)_m$ は、 m の置換基 R^1 を表し、

ここで、 $m=1$ の場合、 R^1 は、又は、 m が1より大きい場合、置換基 R^1 はそれぞれ残りのものから独立して、ハロゲン、シアノ、ニトロ、ヒドロキシ、 $(C_1 - C_4)$ －アルキル、 $(C_1 - C_4)$ －アルコキシ、 $(C_1 - C_4)$ －アルキルチオ、 $(C_1 - C_4)$ －アルキルスルフィニル、 $(C_1 - C_4)$ －アルキルスルホニル、 $(C_1 - C_4)$ －ハロアルキル、 $(C_1 - C_4)$ －ハロアルコキシ、 $(C_1 - C_4)$ －ハロアルキルチオ、 $(C_1 - C_4)$ －ハロアルキルスルフィニル、 $(C_1 - C_4)$ －ハロアルキルスルホニル、 $(C_1 - C_4)$ －アルコキシ－ $(C_1 - C_4)$ －アルキル、 $(C_3 - C_6)$ －シクロアルキルを表すか、又は、式 $C(O)OR^{3\ 9}$ 、 $C(O)NR^{4\ 0}R^{4\ 1}$ 、 $C(O)-He t^1$ 、 $NR^{4\ 2}R^{4\ 3}$ 若しくは $He t^2$ で表されるラジカルを表し；

又は、いずれの場合にも、環上のオルトに位置している2つの基 R^1 は、一緒になって、式 $-Z^1-A^*-Z^2$ 〔式中、

A^* は、ハロゲン、 $(C_1 - C_4)$ －アルキル、 $(C_1 - C_4)$ －ハロアルキル、 $(C_1 - C_4)$ －アルコキシ及び $(C_1 - C_4)$ －ハロアルコキシからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されていてもよい1～4個の炭素原子を有するアルキレン基を表し；

Z^1 は、直接結合、O又はSを表し；及び、

Z^2 は、直接結合、O又はSを表す〕

で表される基であり、その際、該基 $-Z^1-A^*-Z^2$ は、その基に結合しているフェニル環の炭素原子と一緒に、縮合した5員又は6員の環を形成し；

R^{39} は、水素、 $(C_1 - C_4)$ - アルキル又は上記基Mを表し；

R^{40} 、 R^{41} 、 R^{42} 及び R^{43} は、互いに独立して、それぞれ、水素、 $(C_1 - C_4)$ - アルキル、 $(C_1 - C_4)$ - ハロアルキル、ベンジル、 $(C_3 - C_6)$ - シクロアルキル又はフェニルを表し、特に、水素、メチル又はエチルを表し；

Het^1 及び Het^2 は、互いに独立して、それぞれ、モルホリノ基、ピペリジノ基又はピロリジノ基を表し；及び、

m は、0、1、2、3、4 又は 5 を表し、好ましくは、0、1、2 又は 3 を表す] である。

【0093】

ここで、さらに好ましいのは、化合物 (I) [ここで、

$(R^1)_m$ は、m の置換基 R^1 を表し、

ここで、m = 1 の場合、 R^1 は、又は、m が 1 より大きい場合、置換基 R^1 はそれぞれ残りのものから独立して、ハロゲン、シアノ、ニトロ、メチル、エチル、メトキシ、エトキシ、メチルチオ、エチルチオ、 $(C_1 - C_2)$ - アルキルスルフィニル、 $(C_1 - C_2)$ - アルキルスルホニル、 $(C_1 - C_2)$ - ハロアルキル、 $(C_1 - C_2)$ - ハロアルコキシ、 $(C_1 - C_2)$ - ハロアルキルチオ、 $(C_1 - C_2)$ - ハロアルキルスルフィニル、 $(C_1 - C_2)$ - ハロアルキルスルホニル又は $(C_1 - C_2)$ - アルコキシ - $(C_1 - C_2)$ - アルキルを表し；

特に、置換基 R^1 はそれぞれ残りのものから独立して、ハロゲン（例えば、フッ素、塩素、臭素又はヨウ素）、又は、シアノ、ニトロ、メチル、メトキシ、メチルチオ、メチルスルフィニル、メチルスルホニル、トリフルオロメチル、トリフルオロメトキシ、トリフルオロアルキルチオ、トリフルオロメチルスルフィニル若しくはトリフルオロメチルスルホニルを表し、特に、ハロゲン（例えば、フッ素、塩素又は臭素）を表し；及び、

m は、0、1、2、3、4 又は 5 を表し、好ましくは、0、1、2、3 又は 4 を表し、特に、0、1、2 又は 3 を表す] である。

【0094】

さらに好ましいのは、式 (I) [式中、

m は、0 (= 数字ゼロ、即ち、置換基 R^1 は存在していない、即ち、該環の全ての遊離結合は水素で占められている) であるか、又は、好ましくは、

$(R^1)_m$ は、2-ブロモ、3-ブロモ、4-ブロモ、2-クロロ、3-クロロ、4-クロロ、2-フルオロ、3-フルオロ、4-フルオロ、2-シアノ、3-シアノ、4-シアノ、2-メチル、3-メチル、4-メチル、2-エチル、3-エチル、4-エチル、2- CF_3 、3- CF_3 、4- CF_3 、2-メトキシ、3-メトキシ、4-メトキシ、2-エトキシ、3-エトキシ、4-エトキシ、2-メチルチオ、3-メチルチオ、4-メチルチオ、2-メチルスルフィニル、3-メチルスルフィニル、4-メチルスルフィニル、2-メチルスルホニル、3-メチルスルホニル、4-メチルスルホニル、2-ニトロ、3-ニトロ、4-ニトロ、2, 3-ジメチル、2, 4-ジメチル、2, 5-ジメチル、2, 6-ジメチル、3, 4-ジメチル、3, 5-ジメチル、2, 3-ジフルオロ、2, 4-ジフルオロ、2, 5-ジフルオロ、2, 6-ジフルオロ、3, 4-ジフルオロ、3, 5-ジフルオロ、2, 3-ジクロロ、2, 4-ジクロロ、2, 5-ジクロロ、2, 6-ジクロロ、3, 4-ジクロロ、3, 5-ジクロロ、(2-Cl-3-F)、(2-Cl-4-F)、(2-Cl-5-F)、(2-Cl-6-F)、(3-Cl-2-F)、(3-Cl-4-F)、(3-Cl-5-F)、(3-Cl-6-F)、(4-Cl-2-F)、(4-Cl-3-F)、2, 3, 4-トリフルオロ、2, 3, 5-トリフルオロ、2, 3, 6-トリフルオロ、2, 4, 6-トリフルオロ、3, 4, 5-トリフルオロ、2, 3, 4-トリクロロ、2, 3, 5-トリクロロ、2, 3, 6-トリクロロ、2, 4, 6-トリクロロ、3, 4, 5-トリクロロであるか、又は、(4-Br-3-F)、(3-Br-4-F)、(3-Br-5-F)、(4-Br-3-Cl)、(3-Br-4-Cl)、(4-CN-3-F)、(3-CN-4-F)、(3-CN-5-F)、(4-CN-3-Cl) 若しくは (3-CN-4-Cl) であり、ここで、上記ラジカル番号付けは、該フェ

10

20

30

40

50

ニル-1-イルラジカル〔ここで、バレロニトリル骨格の2位に結合している炭素原子は、該環における1位である〕における上記ラジカルの位置を示している〕で表される化合物又はその塩である。

【0095】

さらに好ましいのは、式(I)〔式中、

(R¹)_mは、3-ブロモ、4-ブロモ、3-クロロ、4-クロロ、3-フルオロ、4-フルオロ、2-シアノ、3-シアノ、4-シアノ、2, 5-ジフルオロ、3, 4-ジフルオロ、3, 5-ジフルオロ、3, 4-ジクロロ、3, 5-ジクロロ、(3-Cl-4-F)、(3-Cl-5-F)、(4-Cl-3-F)、(3-Br-4-F)、(4-Br-3-F)、3, 4, 5-トリフルオロ、3, 4, 5-トリクロロを表すか、又は、(4-Br-3-F)、(3-Br-4-F)、(3-Br-5-F)、(4-Br-3-Cl)、(3-Br-4-Cl)、(4-CN-3-F)、(3-CN-4-F)、(3-CN-5-F)、(4-CN-3-Cl)若しくは(3-CN-4-Cl)を表す〕で表される化合物又はその塩である。

10

【0096】

ここで、特に好ましいのは、以下のものである：

式(I)〔式中、(R¹)_mは3-クロロである〕で表される化合物又はその塩；

式(I)〔式中、(R¹)_mは4-クロロである〕で表される化合物又はその塩；

式(I)〔式中、(R¹)_mは3-フルオロである〕で表される化合物又はその塩；

式(I)〔式中、(R¹)_mは4-フルオロである〕で表される化合物又はその塩；

式(I)〔式中、(R¹)_mは3-シアノである〕で表される化合物又はその塩；

式(I)〔式中、(R¹)_mは(3-CN-4-F)である〕で表される化合物又はその塩；

20

式(I)〔式中、(R¹)_mは(3-Br-4-F)である〕で表される化合物又はその塩；

式(I)〔式中、(R¹)_mは3, 4-ジフルオロである〕で表される化合物又はその塩；

式(I)〔式中、(R¹)_mは3, 4-ジクロロである〕で表される化合物又はその塩；

式(I)〔式中、(R¹)_mは3, 5-ジフルオロである〕で表される化合物その塩；

30

式(I)〔式中、(R¹)_mは3, 5-ジクロロである〕で表される化合物又はその塩；

式(I)〔式中、(R¹)_mは(3-Cl-4-F)である〕で表される化合物又はその塩；

式(I)〔式中、(R¹)_mは(3-Cl-5-F)である〕で表される化合物又はその塩；

式(I)〔式中、(R¹)_mは(4-Cl-3-F)である〕で表される化合物又はその塩。

【0097】

好ましいのは、さらにまた、化合物(I)〔ここで、

40

(R²)_nは、nの置換基R²を表し、

ここで、n=1の場合、R²は、又は、nが1より大きい場合、置換基R²はそれぞれ残りのものから独立して、ハロゲン、シアノ、ニトロ、ヒドロキシ、(C₁-C₆)-アルキル、(C₂-C₄)-アルケニル、(C₂-C₄)-アルキニル、(C₁-C₆)-アルコキシ、(C₁-C₆)-アルキルチオ、(C₁-C₆)-アルキルスルフィニル、(C₁-C₆)-アルキルスルホニル、(C₁-C₄)-ハロアルキル、(C₁-C₄)-ハロアルコキシ、(C₁-C₄)-ハロアルキルチオ、(C₁-C₄)-ハロアルキルスルフィニル、(C₁-C₄)-ハロアルキルスルホニル、(C₂-C₄)-ハロアルケニル、(C₂-C₄)-ハロアルキニル、(C₁-C₄)-アルコキシ-(C₁-C₄)-アルキル、(C₁-C₄)-ハロアルコキシ-(C₁-C₄)-アルキル、(C₃-C₆

50

) シクロアルキル [ここで、該シクロアルキルは、ハロゲン及び (C₁ - C₄) - アルキルからなる群から選択される 1 以上のラジカルで置換されていてもよい]、(C₃ - C₆) - シクロアルコキシ [ここで、該シクロアルコキシは、ハロゲン及び (C₁ - C₄) - アルキルからなる群から選択される 1 以上のラジカルで置換されていてもよい] を表すか、又は、式 C(O)OR^{4 4}、C(O)NR^{4 5}R^{4 6}、C(O)-Het³、NR^{4 7}R^{4 8} 若しくは Het⁴ で表されるラジカルを表し；

又は、いずれの場合にも、環上のオルトに位置している 2 つの基 R² は、一緒になって、式 -Z³-A^{**}-Z⁴ [式中、

A^{**} は、ハロゲン、(C₁ - C₄) - アルキル、(C₁ - C₄) - ハロアルキル、(C₁ - C₄) - アルコキシ及び (C₁ - C₄) - ハロアルコキシからなる群から選択される 1 以上のラジカルで置換されていてもよい 1 ~ 4 個の炭素原子を有するアルキレン基を表し；

Z³ は、直接結合、O 又は S を表し；及び、

Z⁴ は、直接結合、O 又は S を表す]

で表される基であり、その際、該基 -Z³-A^{**}-Z⁴ は、その基に結合しているフェニル環の炭素原子と一緒に、縮合した 5 員又は 6 員の環を形成し；

R^{4 4} は、水素、(C₁ - C₄) - アルキル、(C₁ - C₄) - ハロアルキル、(C₃ - C₆) - シクロアルキル、(C₃ - C₆) - ハロシクロアルキル、(C₂ - C₄) - アルケニル、(C₂ - C₄) - ハロアルケニル、(C₂ - C₄) - アルキニル又は上記基 M を表し；

R^{4 5}、R^{4 6}、R^{4 7}、R^{4 8}、Het³ 及び Het⁴ は、上記意味を有し、好ましくは、

R^{4 5}、R^{4 6}、R^{4 7} 及び R^{4 8} は、互いに独立して、それぞれ、水素若しくは (C₁ - C₄) - アルキル [ここで、該アルキルは、置換されていないか、又は、ハロゲン、ニトロ、シアノ及びフェニルからなる群から選択される 1 以上のラジカルで置換されている] を表すか、又は、

(C₃ - C₆) - シクロアルキル若しくはフェニル [ここで、最後に挙げられている 2 のラジカルは、それぞれ、いずれの場合にも残りのものから独立して、置換されていないか、又は、ハロゲン、(C₁ - C₄) - アルキル、(C₁ - C₄) - ハロアルキル、フェニル及びベンジルからなる群から選択される 1 以上のラジカルで置換されている] を表し；

Het³ 及び Het⁴ は、互いに独立して、それぞれ、飽和又は部分的不飽和のヘテロ環のラジカル [ここで、該ヘテロ環は、3 ~ 6 個の環原子及び該環の 1 位に環ヘテロ原子としての少なくとも 1 個の窒素原子を有し、及び、場合により、N、O 及び S からなる群から選択される 1 個、2 個又は 3 個のさらなる環ヘテロ原子を有し、並びに、該ヘテロ環の該ラジカルはその環の 1 位にある窒素原子で式 (I) で表される化合物の分子の残りの部分に結合しており、並びに、該ヘテロ環は、置換されていないか、又は、ハロゲン、(C₁ - C₄) - アルキル、(C₁ - C₄) - ハロアルキ及びオキソからなる群から選択される 1 以上のラジカルで置換されている] を表し、好ましくは、上記タイプの飽和ヘテロ環のラジカルを表し、特に、モルホリノ基、ピペリジノ基又はピロリジノ基を表し；及び、

n は、0、1、2、3、4 又は 5 を表し、好ましくは、0、1、2 又は 3 を表す] である。

【0098】

ここで、さらに好ましいのは、化合物 (I) [ここで、

(R²)_n は、n の置換基 R² を表し、

ここで、n = 1 の場合、R² は、又は、n が 1 より大きい場合、置換基 R² はそれぞれ互いに独立して、ハロゲン、シアノ、ニトロ、ヒドロキシ、(C₁ - C₄) - アルキル、(C₁ - C₄) - アルコキシ、(C₁ - C₄) - アルキルチオ、(C₁ - C₄) - アルキルスルフィニル、(C₁ - C₄) - アルキルスルホニル、(C₁ - C₄) - ハロアルキル、(C₁ - C₄) - ハロアルコキシ、(C₁ - C₄) - ハロアルキルチオ、(C₁ - C₄)

ーハロアルキルスルフィニル、 $(C_1 - C_4)$ ーハロアルキルスルホニル、 $(C_1 - C_4)$ ーアルコキシー $(C_1 - C_4)$ ーアルキル、 $(C_3 - C_6)$ ーシクロアルキルを表すか、又は、式 $C(O)OR^{44}$ 、 $C(O)NR^{45}R^{46}$ 、 $C(O)-Het^3$ 、 $NR^{47}R^{48}$ 若しくは Het^4 で表されるラジカルを表し；

又は、いずれの場合にも、環上のオルトに位置している2つの基 R^2 は、一緒になって、式 $-Z^3-A^{**}-Z^4$ 〔式中、

A^{**} は、ハロゲン、 $(C_1 - C_4)$ ーアルキル、 $(C_1 - C_4)$ ーハロアルキル、 $(C_1 - C_4)$ ーアルコキシ及び $(C_1 - C_4)$ ーハロアルコキシからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されていてもよい1～4個の炭素原子を有するアルキレン基を表し；

Z^3 は、直接結合、O又はSを表し；及び、

Z^4 は、直接結合、O又はSを表す]

で表される基であり、その際、該基 $-Z^3-A^{**}-Z^4$ は、その基に結合しているフェニル環の炭素原子と一緒に、縮合した5員又は6員の環を形成し；

R^{44} は、水素、 $(C_1 - C_4)$ ーアルキル又は上記基Mを表し；

R^{45} 、 R^{46} 、 R^{47} 、 R^{48} 、 Het^3 及び Het^4 は、上記意味を有し、好ましくは、

R^{45} 、 R^{46} 、 R^{47} 及び R^{48} は、互いに独立して、それぞれ、水素、 $(C_1 - C_4)$ ーアルキル、 $(C_1 - C_4)$ ーハロアルキル、ベンジル、 $(C_3 - C_6)$ ーシクロアルキル又はフェニルを表し；

Het^3 及び Het^4 は、互いに独立して、それぞれ、モルホリノ基、ピペリジノ基又はピロリジノ基を表し；及び、

n は、0、1、2、3、4又は5を表し、好ましくは、0、1、2、3又は4を表し、特に、0、1、2又は3を表す〕である。

【0099】

ここで、さらに好ましいのは、化合物(I)〔ここで、

$(R^2)_n$ は、 n の置換基 R^2 を表し、

ここで、 $n=1$ の場合、 R^2 は、又は、 n が1より大きい場合、置換基 R^2 はそれぞれ残りのものから独立して、ハロゲン、シアノ、ニトロ、メチル、エチル、メトキシ、エトキシ、メチルチオ、エチルチオ、 $(C_1 - C_2)$ ーアルキルスルフィニル、 $(C_1 - C_2)$ ーアルキルスルホニル、 $(C_1 - C_2)$ ーハロアルキル、 $(C_1 - C_2)$ ーハロアルコキシ、 $(C_1 - C_2)$ ーハロアルキルチオ、 $(C_1 - C_2)$ ーハロアルキルスルフィニル、 $(C_1 - C_2)$ ーハロアルキルスルホニル又は $(C_1 - C_2)$ ーアルコキシー $(C_1 - C_2)$ ーアルキルを表し；

特に、置換基 R^2 はそれぞれ残りのものから独立して、ハロゲン(例えば、フッ素、塩素、臭素又はヨウ素)、又は、シアノ、ニトロ、メチル、メトキシ、メチルチオ、メチルスルフィニル、メチルスルホニル、トリフルオロメチル、トリフルオロメトキシ、トリフルオロアルキルチオ、トリフルオロメチルスルフィニル若しくはトリフルオロメチルスルホニルを表し、特に、ハロゲン(例えば、フッ素、塩素又は臭素)を表し；及び、

n は、0、1、2、3、4又は5を表し、好ましくは、0、1、2、3又は4を表し、特に、0、1、2又は3を表す〕である。

【0100】

さらに好ましいのは、式(I)〔式中、

n は、0(＝数字ゼロ、即ち、置換基 R^2 は存在していない、即ち、該環の全ての遊離結合は水素で占められている)であるか、又は、好ましくは、

$(R^2)_n$ は、2ーブromo、3ーブromo、4ーブromo、2ークロロ、3ークロロ、4ークロロ、2ーフルオロ、3ーフルオロ、4ーフルオロ、2ーシアノ、3ーシアノ、4ーシアノ、2ーメチル、3ーメチル、4ーメチル、2ーエチル、3ーエチル、4ーエチル、2ー CF_3 、3ー CF_3 、4ー CF_3 、2ーメトキシ、3ーメトキシ、4ーメトキシ、2ーエトキシ、3ーエトキシ、4ーエトキシ、2ーメチルチオ、3ーメチルチオ、4ーメチル

10

20

30

40

50

チオ、2-メチルスルフィニル、3-メチルスルフィニル、4-メチルスルフィニル、2-メチルスルホニル、3-メチルスルホニル、4-メチルスルホニル、2-ニトロ、3-ニトロ、4-ニトロ、2, 3-ジメチル、2, 4-ジメチル、2, 5-ジメチル、2, 6-ジメチル、3, 4-ジメチル、3, 5-ジメチル、2, 3-ジフルオロ、2, 4-ジフルオロ、2, 5-ジフルオロ、2, 6-ジフルオロ、3, 4-ジフルオロ、3, 5-ジフルオロ、2, 3-ジクロロ、2, 4-ジクロロ、2, 5-ジクロロ、2, 6-ジクロロ、3, 4-ジクロロ、3, 5-ジクロロ、(2-C1-3-F)、(2-C1-4-F)、(2-C1-5-F)、(2-C1-6-F)、(3-C1-2-F)、(3-C1-4-F)、(3-C1-5-F)、(3-C1-6-F)、(4-C1-2-F)、(4-C1-3-F)、2, 3, 4-トリフルオロ、2, 3, 5-トリフルオロ、2, 3, 6-トリフルオロ、2, 4, 6-トリフルオロ、3, 4, 5-トリフルオロ、2, 3, 4-トリクロロ、2, 3, 5-トリクロロ、2, 3, 6-トリクロロ、2, 4, 6-トリクロロ、3, 4, 5-トリクロロであるか、又は、2-ニトロ、3-ニトロ、4-ニトロ、2, 5-ジシアノ、2, 6-ジシアノ、(4-Br-2-F)、(4-Br-3-F)、(4-CN-3-F)、(4-ニトロ-3-F)、(4-メトキシ-3-F)、(3-シアノ-4-F)、(3-ニトロ-4-F)、(3-シアノ-4-C1)、(3-ニトロ-4-C1)若しくは(5-シアノ-2-F)であり、ここで、上記ラジカル番号付けは、該フェニル-1-イルラジカル[ここで、パレロニトリル骨格の3位に結合している炭素原子は、該環における1位である]における上記ラジカル位置を示している]で表される化合物又はその塩である。

10

20

【0101】

さらに好ましいのは、式(I)〔式中、

(R²)_nは、2-ブロモ、3-ブロモ、4-ブロモ、2-クロロ、3-クロロ、4-クロロ、2-フルオロ、3-フルオロ、4-フルオロ、2-ニトロ、3-ニトロ、4-ニトロ、2-メトキシ、3-メトキシ、4-メトキシ、2, 3-ジフルオロ、2, 4-ジフルオロ、2, 5-ジフルオロ、2, 6-ジフルオロ、3, 4-ジフルオロ、3, 5-ジフルオロ、2, 3-ジクロロ、2, 4-ジクロロ、2, 5-ジクロロ、2, 6-ジクロロ、3, 4-ジクロロ、3, 5-ジクロロ、(2-C1-3-F)、(2-C1-4-F)、(2-C1-5-F)、(2-C1-6-F)、(3-C1-2-F)、(3-C1-4-F)、(3-C1-5-F)、(3-C1-6-F)、(4-C1-2-F)、(4-C1-3-F)、2, 3, 4-トリフルオロ、2, 3, 5-トリフルオロ、2, 3, 6-トリフルオロ、2, 4, 6-トリフルオロ、3, 4, 5-トリフルオロ、2, 3, 4-トリクロロ、2, 3, 5-トリクロロ、2, 3, 6-トリクロロ、2, 4, 6-トリクロロ、3, 4, 5-トリクロロであるか、又は、2-ニトロ、3-ニトロ、4-ニトロ、2, 5-ジシアノ、2, 6-ジシアノ、(4-Br-2-F)、(4-Br-3-F)、(4-CN-3-F)、(4-NO₂-3-F)、(4-OMe-3-F)、(3-CN-4-F)、(3-NO₂-4-F)、(3-CN-4-C1)、(3-NO₂-4-C1)若しくは(5-CN-2-F)である]で表される化合物又はその塩である。

30

【0102】

さらに好ましいのは、さらにまた、式(I)〔式中、

(R²)_nは、3-クロロ、4-クロロ、2-フルオロ、3-フルオロ、4-フルオロ、2, 3-ジフルオロ、2, 4-ジフルオロ、2, 5-ジフルオロ、2, 6-ジフルオロ、3, 4-ジフルオロ、3, 5-ジフルオロ、3, 4-ジクロロ、3, 5-ジクロロ、(3-C1-2-F)、(3-C1-4-F)、(3-C1-5-F)、(3-C1-6-F)、(4-C1-2-F)、(4-C1-3-F)である]で表される化合物又はその塩である。

40

【0103】

ここで、特に好ましいのは、以下のものである：

式(I)〔式中、(R²)_nは3-クロロである]で表される化合物又はその塩；

式(I)〔式中、(R²)_nは4-クロロである]で表される化合物又はその塩；

50

式 (I) [式中、 $(R^2)_n$ は 2-フルオロである] で表される化合物又はその塩；
 式 (I) [式中、 $(R^2)_n$ は 3-フルオロである] で表される化合物又はその塩；
 式 (I) [式中、 $(R^2)_n$ は 4-フルオロである] で表される化合物又はその塩；
 式 (I) [式中、 $(R^2)_n$ は 2, 3-ジフルオロである] で表される化合物又はその塩；
 式 (I) [式中、 $(R^2)_n$ は 2, 4-ジフルオロである] で表される化合物又はその塩；
 式 (I) [式中、 $(R^2)_n$ は 2, 5-ジフルオロである] で表される化合物又はその塩；
 式 (I) [式中、 $(R^2)_n$ は 2, 6-ジフルオロである] で表される化合物又はその塩；
 式 (I) [式中、 $(R^2)_n$ は 3, 4-ジフルオロである] で表される化合物又はその塩；
 式 (I) [式中、 $(R^2)_n$ は 3, 5-ジフルオロである] で表される化合物又はその塩；
 式 (I) [式中、 $(R^2)_n$ は (3-Cl-2-F) である] で表される化合物又はその塩；
 式 (I) [式中、 $(R^2)_n$ は (3-Cl-4-F) である] で表される化合物又はその塩；
 式 (I) [式中、 $(R^2)_n$ は (3-Cl-5-F) である] で表される化合物又はその塩；
 式 (I) [式中、 $(R^2)_n$ は (3-Cl-6-F) である] で表される化合物又はその塩；
 式 (I) [式中、 $(R^2)_n$ は (4-Cl-2-F) である] で表される化合物又はその塩；
 式 (I) [式中、 $(R^2)_n$ は (4-Cl-3-F) である] で表される化合物又はその塩。

10

20

【0104】

さらに好ましいのは、以下のものである：

式 (I) [式中、 $m=0$ であり、及び、 $(R^2)_n$ は 3-クロロ、4-クロロ、2-フルオロ、3-フルオロ、4-フルオロ、2, 3-ジフルオロ、2, 4-ジフルオロ、2, 5-ジフルオロ、2, 6-ジフルオロ、3, 4-ジフルオロ、3, 5-ジフルオロ、(3-Cl-2-F)、(3-Cl-4-F)、(3-Cl-5-F)、(3-Cl-6-F)、(4-Cl-2-F) 又は (4-Cl-3-F) である] で表される化合物又はその塩；
 式 (I) [式中、 $(R^1)_m$ は 3-クロロであり、及び、 $(R^2)_n$ は 3-クロロ、4-クロロ、2-フルオロ、3-フルオロ、4-フルオロ、2, 3-ジフルオロ、2, 4-ジフルオロ、2, 5-ジフルオロ、2, 6-ジフルオロ、3, 4-ジフルオロ、3, 5-ジフルオロ、(3-Cl-2-F)、(3-Cl-4-F)、(3-Cl-5-F)、(3-Cl-6-F)、(4-Cl-2-F) 又は (4-Cl-3-F) である] で表される化合物又はその塩；
 式 (I) [式中、 $(R^1)_m$ は 4-クロロであり、及び、 $(R^2)_n$ は 3-クロロ、4-クロロ、2-フルオロ、3-フルオロ、4-フルオロ、2, 3-ジフルオロ、2, 4-ジフルオロ、2, 5-ジフルオロ、2, 6-ジフルオロ、3, 4-ジフルオロ、3, 5-ジフルオロ、(3-Cl-2-F)、(3-Cl-4-F)、(3-Cl-5-F)、(3-Cl-6-F)、(4-Cl-2-F) 又は (4-Cl-3-F) である] で表される化合物又はその塩；
 式 (I) [式中、 $(R^1)_m$ は 3-フルオロであり、及び、 $(R^2)_n$ は 3-クロロ、4-クロロ、2-フルオロ、3-フルオロ、4-フルオロ、2, 3-ジフルオロ、2, 4-ジフルオロ、2, 5-ジフルオロ、2, 6-ジフルオロ、3, 4-ジフルオロ、3, 5-ジフルオロ、(3-Cl-2-F)、(3-Cl-4-F)、(3-Cl-5-F)、(3-Cl-6-F)、(4-Cl-2-F) 又は (4-Cl-3-F) である] で表される化合物又はその塩；

30

40

50

ージフルオロ、(3-C1-2-F)、(3-C1-4-F)、(3-C1-5-F)、
(3-C1-6-F)、(4-C1-2-F)又は(4-C1-3-F)である]で表さ
れる化合物又はその塩;

式(I)〔式中、(R¹)_mは(3-CN-4-F)であり、及び、(R²)_nは3-
クロロ、4-クロロ、2-フルオロ、3-フルオロ、4-フルオロ、2, 3-ジフルオロ
、2, 4-ジフルオロ、2, 5-ジフルオロ、2, 6-ジフルオロ、3, 4-ジフルオロ
、3, 5-ジフルオロ、(3-C1-2-F)、(3-C1-4-F)、(3-C1-5-
-F)、(3-C1-6-F)、(4-C1-2-F)又は(4-C1-3-F)である
〕で表される化合物又はその塩;

式(I)〔式中、(R¹)_mは(3-Br-4-F)であり、及び、(R²)_nは3-
クロロ、4-クロロ、2-フルオロ、3-フルオロ、4-フルオロ、2, 3-ジフルオロ
、2, 4-ジフルオロ、2, 5-ジフルオロ、2, 6-ジフルオロ、3, 4-ジフルオロ
、3, 5-ジフルオロ、(3-C1-2-F)、(3-C1-4-F)、(3-C1-5-
-F)、(3-C1-6-F)、(4-C1-2-F)又は(4-C1-3-F)である
〕で表される化合物又はその塩;

式(I)〔式中、(R¹)_mは4-フルオロであり、及び、(R²)_nは3-クロロ、
4-クロロ、2-フルオロ、3-フルオロ、4-フルオロ、2, 3-ジフルオロ、2, 4-
ジフルオロ、2, 5-ジフルオロ、2, 6-ジフルオロ、3, 4-ジフルオロ、3, 5-
ジフルオロ、(3-C1-2-F)、(3-C1-4-F)、(3-C1-5-F)、
(3-C1-6-F)、(4-C1-2-F)又は(4-C1-3-F)である]で表さ
れる化合物又はその塩;

式(I)〔式中、(R¹)_mは3-シアノであり、及び、(R²)_nは3-クロロ、4-
クロロ、2-フルオロ、3-フルオロ、4-フルオロ、2, 3-ジフルオロ、2, 4-
ジフルオロ、2, 5-ジフルオロ、2, 6-ジフルオロ、3, 4-ジフルオロ、3, 5-
ジフルオロ、(3-C1-2-F)、(3-C1-4-F)、(3-C1-5-F)、(
3-C1-6-F)、(4-C1-2-F)又は(4-C1-3-F)である]で表され
る化合物又はその塩;

式(I)〔式中、(R¹)_mは3, 4-ジフルオロであり、及び、(R²)_nは3-クロ
ロ、4-クロロ、2-フルオロ、3-フルオロ、4-フルオロ、2, 3-ジフルオロ、
2, 4-ジフルオロ、2, 5-ジフルオロ、2, 6-ジフルオロ、3, 4-ジフルオロ、
3, 5-ジフルオロ、(3-C1-2-F)、(3-C1-4-F)、(3-C1-5-
-F)、(3-C1-6-F)、(4-C1-2-F)又は(4-C1-3-F)である〕
で表される化合物又はその塩;

式(I)〔式中、(R¹)_mは3, 4-ジクロロであり、及び、(R²)_nは3-クロ
ロ、4-クロロ、2-フルオロ、3-フルオロ、4-フルオロ、2, 3-ジフルオロ、2
、4-ジフルオロ、2, 5-ジフルオロ、2, 6-ジフルオロ、3, 4-ジフルオロ、3
、5-ジフルオロ、(3-C1-2-F)、(3-C1-4-F)、(3-C1-5-F
)、(3-C1-6-F)、(4-C1-2-F)又は(4-C1-3-F)である〕で
表される化合物又はその塩;

式(I)〔式中、(R¹)_mは3, 5-ジフルオロであり、及び、(R²)_nは3-クロ
ロ、4-クロロ、2-フルオロ、3-フルオロ、4-フルオロ、2, 3-ジフルオロ、
2, 4-ジフルオロ、2, 5-ジフルオロ、2, 6-ジフルオロ、3, 4-ジフルオロ、
3, 5-ジフルオロ、(3-C1-2-F)、(3-C1-4-F)、(3-C1-5-
-F)、(3-C1-6-F)、(4-C1-2-F)又は(4-C1-3-F)である〕
で表される化合物又はその塩;

式(I)〔式中、(R¹)_mは3, 5-ジクロロであり、及び、(R²)_nは3-クロ
ロ、4-クロロ、2-フルオロ、3-フルオロ、4-フルオロ、2, 3-ジフルオロ、2
、4-ジフルオロ、2, 5-ジフルオロ、2, 6-ジフルオロ、3, 4-ジフルオロ、3
、5-ジフルオロ、(3-C1-2-F)、(3-C1-4-F)、(3-C1-5-F
)、(3-C1-6-F)、(4-C1-2-F)又は(4-C1-3-F)である〕で

10

20

30

40

50

表される化合物又はその塩；

式 (I)〔式中、 $(R^1)_m$ は (3-C1-4-F) であり、及び、 $(R^2)_n$ は 3-クロロ、4-クロロ、2-フルオロ、3-フルオロ、4-フルオロ、2, 3-ジフルオロ、2, 4-ジフルオロ、2, 5-ジフルオロ、2, 6-ジフルオロ、3, 4-ジフルオロ、3, 5-ジフルオロ、(3-C1-2-F)、(3-C1-4-F)、(3-C1-5-F)、(3-C1-6-F)、(4-C1-2-F) 又は (4-C1-3-F) である〕で表される化合物又はその塩；

式 (I)〔式中、 $(R^1)_m$ は (4-C1-3-F) であり、及び、 $(R^2)_n$ は 3-クロロ、4-クロロ、2-フルオロ、3-フルオロ、4-フルオロ、2, 3-ジフルオロ、2, 4-ジフルオロ、2, 5-ジフルオロ、2, 6-ジフルオロ、3, 4-ジフルオロ、3, 5-ジフルオロ、(3-C1-2-F)、(3-C1-4-F)、(3-C1-5-F)、(3-C1-6-F)、(4-C1-2-F) 又は (4-C1-3-F) である〕で表される化合物又はその塩。

10

【0105】

さらに好ましいのは、さらにまた、以下のものである：

式 (I)〔式中、 $n=0$ であり、及び、 $(R^1)_m$ は 3-クロロ、4-クロロ、3-フルオロ、4-フルオロ、3-シアノ、3, 4-ジフルオロ、3, 5-ジフルオロ、3, 4-ジクロロ、3, 5-ジクロロ、(3-C1-4-F)、(3-C1-5-F) 若しくは (4-C1-3-F) であるか、又は、(3-CN-4-F)、(3-Br-4-F) である〕で表される化合物又はその塩；

20

式 (I)〔式中、 $(R^2)_n$ は 3-クロロであり、及び、 $(R^1)_m$ は 3-クロロ、4-クロロ、3-フルオロ、4-フルオロ、3-シアノ、3, 4-ジフルオロ、3, 5-ジフルオロ、3, 4-ジクロロ、3, 5-ジクロロ、(3-C1-4-F)、(3-C1-5-F) 若しくは (4-C1-3-F) であるか、又は、(3-CN-4-F)、(3-Br-4-F) である〕で表される化合物又はその塩；

式 (I)〔式中、 $(R^2)_n$ は 4-クロロであり、及び、 $(R^1)_m$ は 3-クロロ、4-クロロ、3-フルオロ、4-フルオロ、3-シアノ、3, 4-ジフルオロ、3, 5-ジフルオロ、3, 4-ジクロロ、3, 5-ジクロロ、(3-C1-4-F)、(3-C1-5-F) 若しくは (4-C1-3-F) であるか、又は、(3-CN-4-F)、(3-Br-4-F) である〕で表される化合物又はその塩；

30

式 (I)〔式中、 $(R^2)_n$ は 3-フルオロであり、及び、 $(R^1)_m$ は 3-クロロ、4-クロロ、3-フルオロ、4-フルオロ、3-シアノ、3, 4-ジフルオロ、3, 5-ジフルオロ、3, 4-ジクロロ、3, 5-ジクロロ、(3-C1-4-F)、(3-C1-5-F) 若しくは (4-C1-3-F) であるか、又は、(3-CN-4-F)、(3-Br-4-F) である〕で表される化合物又はその塩；

式 (I)〔式中、 $(R^2)_n$ は 4-フルオロであり、及び、 $(R^1)_m$ は 3-クロロ、4-クロロ、3-フルオロ、4-フルオロ、3-シアノ、3, 4-ジフルオロ、3, 5-ジフルオロ、3, 4-ジクロロ、3, 5-ジクロロ、(3-C1-4-F)、(3-C1-5-F) 若しくは (4-C1-3-F) であるか、又は、(3-CN-4-F)、(3-Br-4-F) である〕で表される化合物又はその塩；

40

式 (I)〔式中、 $(R^2)_n$ は 2, 3-ジフルオロであり、及び、 $(R^1)_m$ は 3-クロロ、4-クロロ、3-フルオロ、4-フルオロ、3-シアノ、3, 4-ジフルオロ、3, 5-ジフルオロ、3, 4-ジクロロ、3, 5-ジクロロ、(3-C1-4-F)、(3-C1-5-F) 若しくは (4-C1-3-F) であるか、又は、(3-CN-4-F)、(3-Br-4-F) である〕で表される化合物又はその塩；

式 (I)〔式中、 $(R^2)_n$ は 2, 4-ジフルオロであり、及び、 $(R^1)_m$ は 3-クロロ、4-クロロ、3-フルオロ、4-フルオロ、3-シアノ、3, 4-ジフルオロ、3, 5-ジフルオロ、3, 4-ジクロロ、3, 5-ジクロロ、(3-C1-4-F)、(3-C1-5-F) 若しくは (4-C1-3-F) であるか、又は、(3-CN-4-F)、(3-Br-4-F) である〕で表される化合物又はその塩；

50

10

20

30

40

50

【0106】

さらに好ましいのは、式 (I) [式中、 $m = 1$ である] で表される化合物又はその塩である。

【0107】

さらに好ましいのは、式 (I) [式中、 $m = 1$ であり、及び、 R^2 はハロゲン (例えば、フッ素又は塩素) である] で表される化合物又はその塩である。

【0108】

さらに好ましいのは、式 (I) [式中、 $m = 2$ 又は 3 (特に、 2) である] で表される化合物又はその塩である。

【0109】

さらに好ましいのは、式 (I) [式中、 $m = 2$ であり、及び、各 R^2 はハロゲン (好ましくは、フッ素又は塩素、特に、フッ素) からなる群から選択される] で表される化合物又はその塩である。

【0110】

一般に、個々の基又は基 (R^1)_m 及び/若しくは (R^2)_n の組合せに関して上記意味を有している化合物の中で、好ましいのは、当該化合物の中の残りの基又は基の組合せが好ましいものとして上記で挙げられている意味に従って定義されている化合物である。

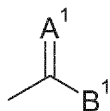
【0111】

好ましいのは、さらにまた、化合物 (I) [ここで、

L は、式

【0112】

【化11】



で表されるラジカルを表し；

A^1 は、酸素、硫黄又は $=N-R^A$ (好ましくは、酸素) を表し；

B^1 は、上記式 (B1) ~ (B14) で表されるラジカルを表し；

R^A は、上記意味を有し、好ましくは、水素、ヒドロキシ、 (C_1-C_4) -アルコキシ、 (C_1-C_4) -アルキル、 (C_1-C_4) -ハロアルキル、フェニル [ここで、該フェニルは、置換されていないか、又は、ハロゲン、 (C_1-C_4) -アルキル、 (C_1-C_4) -ハロアルキル、 (C_1-C_4) -アルコキシ、 (C_1-C_4) -ハロアルコキシからなる群から選択される 1 以上のラジカルで置換されている] 若しくはベンジル [ここで、該ベンジルは、そのフェニル部分において、置換されていないか、又は、ハロゲン、 (C_1-C_4) -アルキル、 (C_1-C_4) -ハロアルキル、 (C_1-C_4) -アルコキシ、 (C_1-C_4) -ハロアルコキシからなる群から選択される 1 以上のラジカルで置換されている] を表すか、又は、 $-NR^*R^{**}$ [ここで、 R^* 、 R^{**} は、互いに独立して、それぞれ、H、 (C_1-C_4) -アルキル、 (C_2-C_4) -アルケニル、 (C_2-C_4) -アルキニル、 (C_1-C_4) -アルコキシ- (C_1-C_4) -アルキル、 (C_1-C_4) -アルカノイル、 $[(C_1-C_4)$ -ハロアルキル]カルボニル、 $[(C_1-C_4)$ -アルコキシ]カルボニル、 $[(C_1-C_4)$ -ハロアルコキシ]カルボニル、 (C_3-C_6) -シクロアルキル、 (C_3-C_6) -シクロアルキル- (C_1-C_4) -アルキル、フェニル、フェニル- (C_1-C_4) -アルキル [ここで、最後に挙げられている 4 のラジカルは、それぞれ、その環において、置換されていないか、又は、ハロゲン、 (C_1-C_4) -アルキル、 (C_1-C_4) -ハロアルキル、 (C_1-C_4) -アルコキシ若しくは (C_1-C_4) -ハロアルコキシからなる群から選択される 1 以上のラジカルで置換されており、又は、シクロアルキルの場合には、オキソでも置換されている] を表すか、又は、 R^* と R^{**} は、その窒素原子と一緒に、3~6 員の (好ましくは、飽和の) ヘテロ環 [ここで、該ヘテロ環は、その窒素原子に加えて、N、O 及び S からなる群から

10

20

30

40

50

選択される 1 個又は 2 個のさらなる環ヘテロ原子を含むことができ、及び、該ヘテロ環は、置換されていなくてもよい、又は、 $(C_1 - C_4)$ - アルキル、 $(C_1 - C_4)$ - ハロアルキル及びオキソからなる群から選択される 1 以上のラジカルで置換されていてもよい] を表す] を表し；

特に、 R^A は、水素、 $(C_1 - C_4)$ - アルキル、フェニル、ベンジル又は $-NR^*R^{**}$ [ここで、 R^* 、 R^{**} は、互いに独立して、それぞれ、H 又は $(C_1 - C_4)$ - アルキルを表す] を表し；

$(R^1)_m$ 、 $(R^2)_n$ 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^9 、 R^{10} 、 R^{11} 、 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} 、 R^{16} 、 R^{17} 、 R^{18} 、 R^{19} 、 R^{20} 、 R^{21} 、 R^{22} 、 R^{23} 、 R^{24} 、 R^{25} 、 R^{26} 、 R^{27} 、 R^{28} 、 R^{29} 、 R^{30} 、 R^{31} 及び R^{32} は、上記で記載されている意味又は好ましい意味を有し；

W^1 及び W^6 は、互いに独立して、それぞれ、二価基酸素、硫黄を表すか、又は、式 NH 、 $N - [(C_1 - C_4) - \text{アルキル}]$ 、 $C=O$ 、 $S=O$ 、 SO_2 若しくは $CR^{35}R^{36}$ で表される基を表し；

W^2 、 W^3 、 W^4 、 W^5 及び W^7 は、互いに独立して、それぞれ、式 O 、 S 、 NH 、 $N - [(C_1 - C_4) - \text{アルキル}]$ 、 $C=O$ 、 $S=O$ 又は SO_2 で表される二価基を表し；

Q^1 、 Q^2 、 Q^3 、 Q^4 、 Q^5 、 Q^6 、 Q^7 、 Q^8 及び Q^9 は、互いに独立して、それぞれ、ヒドロキシ、チオ、ハロゲンを表すか、又は、式 OR^{37} 、 SR^{38} 、 SM 若しくは OM で表される基を表し；

M は、カチオンの等価物を表し；

R^{35} 及び R^{36} は、互いに独立して、それぞれ、 R^3 に関して定義されているとおりであり、又は、好ましくは、互いに独立して、 H 、 $(C_1 - C_4)$ - アルキル若しくは $(C_1 - C_4)$ - ハロアルキルを表し、好ましくは、 H 又は $(C_1 - C_2)$ - アルキルを表し、特に、 H 、メチル又はエチルを表し；

R^{37} 、 R^{38} 、 R^{66} 、 R^{67} 、 R^{68} 、 R^{69} 、 R^{70} 、 R^{71} 、 Het^{12} 及び M は、上記で記載されている意味を有し、好ましくは、

R^{37} 及び R^{38} は、互いに独立して、それぞれ、 $(C_1 - C_6)$ - アルキル、 $(C_1 - C_6)$ - ハロアルキル、 $(C_1 - C_4)$ - アルコキシ $(C_1 - C_4)$ - アルキル、 $(C_3 - C_6)$ - シクロアルキル [ここで、該シクロアルキルは、置換されていないか、又は、ハロゲン、 $(C_1 - C_4)$ - アルキル及び $(C_1 - C_4)$ - アルコキシからなる群から選択される 1 以上のラジカルで置換されている]、フェニル [ここで、該フェニルは、置換されていないか、又は、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシ、ニトロ、 $(C_1 - C_4)$ - アルキル、 $(C_1 - C_4)$ - ハロアルキル及び $(C_1 - C_4)$ - アルコキシからなる群から選択される 1 以上のラジカルで置換されている] を表すか、又は、式 $-C(O)R^{67}$ 、 $-C(O)OR^{68}$ 、 $-C(O)NR^{69}R^{70}$ 、 $-C(O)Het^{12}$ 若しくは $-SO_2R^{71}$ で表される基を表し；

特に、 R^{37} 及び R^{38} は、互いに独立して、それぞれ、 $(C_1 - C_6)$ - アルキル、 $(C_1 - C_4)$ - ハロアルキル、 $(C_3 - C_6)$ - シクロアルキル、 $(C_3 - C_6)$ - ハロシクロアルキル、フェニル [ここで、該フェニルは、置換されていないか、又は、ハロゲン及び $(C_1 - C_4)$ - アルキルからなる群から選択される 1 以上のラジカルで置換されている] を表すか、又は、式 $-C(O)R^{67}$ 、 $-C(O)OR^{68}$ 、 $-C(O)NR^{69}R^{70}$ 、 $-C(O)Het^{12}$ 若しくは $-SO_2R^{71}$ で表される基を表し；

R^{67} は、水素、 $(C_1 - C_6)$ - アルキル、 $(C_1 - C_4)$ - ハロアルキル、フェニル又はベンジル [ここで、最後に挙げられている 2 のラジカルは、それぞれ、残りのものから独立して、置換されていないか、又は、ハロゲン、シアノ、 $(C_1 - C_4)$ - アルキル及び $(C_1 - C_4)$ - ハロアルキルからなる群から選択される 1 以上のラジカルで置換されている] を表し、特に、 H 又は $(C_1 - C_4)$ - アルキルを表し；

R^{68} は、 $(C_1 - C_6)$ - アルキル又は $(C_1 - C_4)$ - ハロアルキルであり、特に、 $(C_1 - C_4)$ - アルキルであり；

R^{69} 及び R^{70} は、互いに独立して、それぞれ、水素、 $(C_1 - C_4)$ - アルキル、

ベンジル、 (C_3-C_6) -シクロアルキル又はフェニル〔ここで、最後に挙げられている2のラジカルは、それぞれ、残りのものから独立して、置換されていないか、又は、ハロゲン、ニトロ、シアノ、 (C_1-C_4) -アルキル及び (C_1-C_4) -ハロアルキルからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されている〕を表し、特に、互いに独立して、それぞれ、H又は (C_1-C_3) -アルキルを表し；

R^{7-1} は、 (C_1-C_4) -アルキル、 (C_1-C_4) -ハロアルキル、フェニル又はベンジル〔ここで、最後に挙げられている2のラジカルは、それぞれ、残りのものから独立して、置換されていないか、又は、ハロゲン、シアノ、 (C_1-C_4) -アルキル、 (C_2-C_4) -アルケニル及び (C_1-C_4) -ハロアルキルからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されている〕を表し、特に、 (C_1-C_4) -アルキル、 (C_1-C_4) -ハロアルキル、ベンジル又はフェニル〔ここで、該フェニルは、置換されていないか、又は、ハロゲン、 (C_1-C_4) -アルキル及び (C_1-C_4) -ハロアルキルからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されている〕を表し；

Het^{1-2} は、飽和又は部分的不飽和のヘテロ環のラジカル〔ここで、該ヘテロ環は、3～6個の環原子及び該環の1位に環ヘテロ原子としての少なくとも1個の窒素原子を有し、及び、場合により、N、O及びSからなる群から選択される1個、2個又は3個のさらなる環ヘテロ原子を有し、並びに、該ヘテロ環の該ラジカルはその環の1位にある窒素原子で式(I)で表される化合物の分子の残りの部分に結合しており、並びに、該ヘテロ環は、置換されていないか、又は、ハロゲン、 (C_1-C_4) -アルキル、 (C_1-C_4) -ハロアルキル、 (C_1-C_4) -アルコキシ、 (C_1-C_4) -ハロアルコキシ、 (C_1-C_4) -アルキルチオ及びオキソからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されており、特に、置換されていないか、又は、 (C_1-C_4) -アルキル及び (C_1-C_4) -ハロアルキルからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されている〕を表し、特に、モルホリノ基、ピペリジノ基又はピロリジノ基を表し；及び、

Mは、カチオンの等価物、好ましくは、金属イオン等価物、アンモニウムイオン〔ここで、該アンモニウムイオンは、 (C_1-C_4) -アルキル、 (C_3-C_6) -シクロアルキル、フェニル、 (C_3-C_6) -シクロアルキル- (C_1-C_4) -アルキル及びフェニル- (C_1-C_4) -アルキルからなる群から選択される1～4の同一であるか又は異なっているラジカルで置換されていてもよく、特に、 (C_1-C_4) -アルキルからなる群から選択される1～4の同一であるか又は異なっているラジカルで置換されていてもよい〕又は第三級スルホニウムイオン〔ここで、該第三級スルホニウムイオンは、好ましくは、 (C_1-C_4) -アルキル、 (C_3-C_6) -シクロアルキル、フェニル、 (C_3-C_6) -シクロアルキル- (C_1-C_4) -アルキル及びフェニル- (C_1-C_4) -アルキルからなる群から選択される3の同一であるか又は異なっているラジカルで置換されており、特に、 (C_1-C_4) -アルキルからなる群から選択される3の同一であるか又は異なっているラジカルで置換されている〕を表す〕である。

【0113】

好ましいのは、さらにまた、化合物(I)〔ここで、

B^1 は、上記式(B1)～(B14)で表されるラジカルを表し；

R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^9 、 R^{10} 、 R^{11} 、 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} 、 R^{16} 、 R^{17} 、 R^{18} 、 R^{19} 及び R^{20} は、互いに独立して、それぞれ、H、ハロゲン、シアノ、ニトロ、ヒドロキシ、 (C_1-C_4) -アルキル、 (C_1-C_4) -ハロアルキル、 (C_3-C_6) -シクロアルキル、 (C_1-C_4) -アルコキシ又は (C_1-C_4) -ハロアルコキシを表し、特に、H又は (C_1-C_4) -アルキルを表し；又は、

式(B1)で表される基の中の R^3 と R^5 は、一緒になって、上記で定義されている二価架橋を表し；

R^{21} は、H、 (C_1-C_4) -アルキル、 (C_1-C_4) -ハロアルキル、 (C_3-C_6) -シクロアルキル、 (C_3-C_6) -ハロシクロアルキルを表すか、又は、基C(O)OR⁵⁴、C(O)NR⁵⁵R⁵⁶、C(O)Het⁷、NR⁵⁷R⁵⁸若しくはH

e t⁸を表し、好ましくは、(C₁ - C₄) - アルキル、(C₁ - C₄) - ハロアルキル、(C₃ - C₆) - シクロアルキル又は基C(O)OR^{5 4}を表し；

R^{2 2}は、H、(C₁ - C₄) - アルキル、(C₁ - C₄) - ハロアルキル、(C₃ - C₆) - シクロアルキル、(C₃ - C₆) - ハロシクロアルキル、(C₁ - C₄) - アルキルチオ、(C₁ - C₄) - アルキルスルホニルを表すか、又は、式C(O)OR^{5 9}、C(O)NR^{6 0}R^{6 1}、C(O)Het⁹、NR^{6 2}R^{6 3}若しくはHet^{1 0}で表される基を表し、好ましくは、(C₁ - C₄) - アルキル、(C₁ - C₄) - ハロアルキル、(C₃ - C₆) - シクロアルキル、(C₁ - C₄) - アルキルスルホニル又は基C(O)OR^{5 9}を表し；

R^{2 3}及びR^{2 9}は、互いに独立して、それぞれ、H、(C₁ - C₄) - アルキル、(C₁ - C₄) - ハロアルキル、(C₃ - C₆) - シクロアルキル、(C₃ - C₆) - ハロシクロアルキル、(C₁ - C₄) - アルコキシ又は(C₁ - C₄) - ハロアルコキシを表し、好ましくは、H、(C₁ - C₄) - アルキル、(C₁ - C₄) - ハロアルキル、(C₃ - C₆) - シクロアルキル [例えば、シクロプロピル]、(C₁ - C₄) - アルコキシ又は(C₁ - C₂) - ハロアルコキシを表し；

R^{2 4}及びR^{3 0}は、互いに独立して、それぞれ、H、ハロゲン、シアノ、(C₁ - C₄) - アルキル、(C₁ - C₄) - ハロアルキル、(C₃ - C₆) - シクロアルキル、(C₁ - C₄) - アルコキシ又は(C₁ - C₄) - ハロアルコキシを表し、好ましくは、H、ハロゲン、シアノ、(C₁ - C₄) - アルキル、(C₁ - C₄) - ハロアルキル、(C₃ - C₆) - シクロアルキル [例えば、シクロプロピル]、(C₁ - C₄) - アルコキシ又は(C₁ - C₂) - ハロアルコキシを表し；

R^{2 5}、R^{2 6}、R^{3 1}及びR^{3 2}は、互いに独立して、それぞれ、H、(C₁ - C₄) - アルキル、(C₁ - C₄) - ハロアルキル、(C₁ - C₄) - アルコキシ、(C₁ - C₄) - ハロアルコキシ、(C₁ - C₄) - アルコキシ - (C₁ - C₄) - アルキル、(C₁ - C₄) - ハロアルコキシ - (C₁ - C₄) - アルキル、(C₃ - C₆) - シクロアルキル、(C₃ - C₆) - シクロアルコキシ、(C₂ - C₆) - アルケニル、(C₂ - C₆) - アルキニル、(C₂ - C₆) - アルキルチオ、(C₁ - C₄) - アルキルスルホニル、NR^{6 4}R^{6 5}又はHet^{1 1}を表し、好ましくは、H、(C₁ - C₄) - アルキル、(C₁ - C₄) - ハロアルキル、(C₁ - C₄) - アルコキシ、(C₁ - C₄) - ハロアルコキシ、(C₁ - C₂) - アルコキシ - (C₁ - C₂) - アルキル、(C₁ - C₂) - ハロアルコキシ - (C₁ - C₂) - アルキル又は(C₃ - C₆) - シクロアルキル [例えば、シクロプロピル]を表し；

R^{2 7}は、H、(C₁ - C₄) - アルキル、(C₁ - C₄) - ハロアルキル又は(C₃ - C₆) - シクロアルキル [例えば、シクロプロピル]を表し、好ましくは、H又は(C₁ - C₃) - アルキルを表し；

R^{2 8}は、H、(C₁ - C₄) - アルキル、(C₁ - C₄) - ハロアルキルを表すか、又は、式C(O)OR^{6 6}で表されるラジカルを表し、好ましくは、H又は(C₁ - C₃) - アルキルを表し；

R^{5 4}、R^{5 9}及びR^{6 6}は、互いに独立して、それぞれ、H、(C₁ - C₄) - アルキル、(C₁ - C₄) - ハロアルキル、(C₃ - C₆) - シクロアルキル、(C₂ - C₄) - アルケニル、(C₂ - C₄) - アルキニル又は上記基Mを表し、好ましくは、H又は(C₁ - C₃) - アルキルを表し；

R^{5 5}、R^{5 6}、R^{5 7}、R^{5 8}、R^{6 0}、R^{6 1}、R^{6 2}、R^{6 3}、R^{6 4}及びR^{6 5}は、互いに独立して、それぞれ、H、(C₁ - C₄) - アルキル [ここで、該アルキルは、置換されていないか、又は、ハロゲン、ニトロ、シアノ及びフェニル (ここで、該フェニルは、置換されていないか、又は、ハロゲン、ニトロ、シアノ、(C₁ - C₄) - アルキル及び(C₁ - C₄) - ハロアルキルからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されている) からなる群から選択される1以上のラジカルで置換されている]を表すか、又は、

(C₃ - C₆) - シクロアルキル [ここで、該シクロアルキルは、置換されていないか、

10

20

30

40

50

又は、ハロゲン、 (C_1-C_4) -アルキル及び (C_1-C_4) -ハロアルキルからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されている]を表すか、又は、フェニル[ここで、該フェニルは、置換されていないか、又は、ハロゲン、ニトロ、シアノ、 (C_1-C_4) -アルキル及び (C_1-C_4) -ハロアルキルからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されている]を表し；

Het⁷、Het⁸、Het⁹、Het¹⁰及びHet¹¹は、互いに独立して、それぞれ、飽和又は部分的不飽和のヘテロ環のラジカル[ここで、該ヘテロ環は、3～6個の環原子及び該環の1位に環ヘテロ原子としての少なくとも1個の窒素原子を有し、及び、場合により、N、O及びSからなる群から選択される1個、2個又は3個のさらなる環ヘテロ原子を有し、並びに、該ヘテロ環の該ラジカルはその環の1位にある窒素原子で式(I)で表される化合物の分子の残りの部分に結合しており、並びに、該ヘテロ環は、置換されていないか、又は、ハロゲン、 (C_1-C_4) -アルキル、 (C_1-C_4) -ハロアルキル、 (C_1-C_4) -アルコキシ、 (C_1-C_4) -ハロアルコキシ、 (C_1-C_4) -アルキルチオ及びオキソからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されており、特に、置換されていないか、又は、 (C_1-C_4) -アルキル及び (C_1-C_4) -ハロアルキルからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されている]を表し、特に、モルホリノ基、ピペリジノ基又はピロリジノ基を表す]である。

10

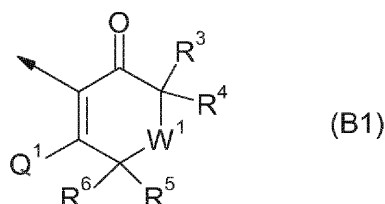
【0114】

ここで、好ましいのは、化合物(I)[ここで、B¹は、ラジカル(B1)

【0115】

20

【化12】



を表し；

ここで、

W¹、Q¹、R³、R⁴、R⁵及びR⁶は、上記で記載されている意味又は好ましい意味を有し、好ましくは、

30

W¹は、式O、S、NH、N- $[(C_1-C_4)$ -アルキル]、C=O、S=O、SO₂又はCR³⁵R³⁶で表される二価基を表し、特に、式O、S、C=O又はCR³⁵R³⁶で表される二価基を表し、

ここで、R³⁵及びR³⁶は、互いに独立して、それぞれ、水素、 (C_1-C_4) -アルキル又は (C_1-C_4) -ハロアルキルを表し；

特に、W¹は、二価基C(O)、CH₂、CH(CH₃)又はC(CH₃)₂を表し；

Q¹は、ヒドロキシ、チオ、ハロゲンを表すか、又は、式OR³⁷、SR³⁸、SM若しくはOMで表される基を表し、特に、ヒドロキシを表し；

R³、R⁴、R⁵及びR⁶は、互いに独立して、それぞれ、H、ハロゲン、シアノ、ニトロ、ヒドロキシ、 (C_1-C_4) -アルキル、 (C_1-C_4) -ハロアルキル、 (C_1-C_4) -アルコキシ又は (C_1-C_4) -ハロアルコキシを表し、特に、H又は (C_1-C_4) -アルキルを表し；又は、

40

R³とR⁵は一緒に、式-CH₂CH₂-、-CH₂CH₂CH₂-、-CH(CH₃)CH₂-、-C(CH₃)₂CH₂-、-CH₂CH(CH₃)-、-CH₂C(CH₃)₂-、-C(CH₃)CH(CH₃)-、-CH₂CH₂CH₂-、-CH=CH-、-CH=CHCH₂-、-CH₂CH=CH-、-OCH₂-、-CH₂O-、-OCH₂CH₂-、-CH₂OCH₂-、-CH₂CH₂O-又は-OCH₂O-で表される二価架橋を表し、特に、式-CH₂CH₂-又は-CH=CH-で表される二価架橋を表し；

50

R^{37} 、 R^{38} 、 R^{67} 、 R^{68} 、 R^{69} 、 R^{70} 、 R^{71} 、 Het^{12} 及び M は、上記意味を有し、好ましくは、

R^{37} 及び R^{38} は、互いに独立して、それぞれ、 (C_1-C_6) －アルキル、 (C_1-C_6) －ハロアルキル、 (C_1-C_4) －アルコキシ－ (C_1-C_4) －アルキル、 (C_3-C_6) －シクロアルキル [ここで、該シクロアルキルは、置換されていないか、又は、ハロゲン、 (C_1-C_4) －アルキル及び (C_1-C_4) －アルコキシからなる群から選択される 1 以上のラジカルで置換されている]、フェニル [ここで、該フェニルは、置換されていないか、又は、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシ、ニトロ、 (C_1-C_4) －アルキル、 (C_1-C_4) －ハロアルキル及び (C_1-C_4) －アルコキシからなる群から選択される 1 以上のラジカルで置換されている] を表すか、又は、式 $-C(O)R^{67}$ 、 $-C(O)OR^{68}$ 、 $-C(O)NR^{69}R^{70}$ 、 $-C(O)Het^{12}$ 若しくは $-SO_2R^{71}$ で表される基を表し；

特に、 R^{37} 及び R^{38} は、互いに独立して、それぞれ、 (C_1-C_6) －アルキル、 (C_1-C_4) －ハロアルキル、 (C_3-C_6) －シクロアルキル、 (C_3-C_6) －ハロシクロアルキル、フェニル [ここで、該フェニルは、置換されていないか、又は、ハロゲン及び (C_1-C_4) －アルキルからなる群から選択される 1 以上のラジカルで置換されている] を表すか、又は、式 $-C(O)R^{67}$ 、 $-C(O)OR^{68}$ 、 $-C(O)NR^{69}R^{70}$ 、 $-C(O)Het^{12}$ 若しくは $-SO_2R^{71}$ で表される基を表し；

さらに好ましくは、 R^{37} 及び R^{38} は、互いに独立して、それぞれ、 (C_1-C_4) －アルキル、フェニル [ここで、該フェニルは、置換されていないか、又は、ハロゲン及び (C_1-C_4) －アルキルからなる群から選択される 1 以上のラジカルで置換されている] を表すか、又は、式 $-C(O)R^{67}$ 、 $-C(O)OR^{68}$ 若しくは $-SO_2R^{71}$ で表される基を表し；

R^{67} は、水素、 (C_1-C_6) －アルキル、 (C_1-C_4) －ハロアルキル、フェニル又はベンジル [ここで、最後に挙げられている 2 のラジカルは、それぞれ、残りのものから独立して、置換されていないか、又は、ハロゲン、シアノ、 (C_1-C_4) －アルキル及び (C_1-C_4) －ハロアルキルからなる群から選択される 1 以上のラジカルで置換されている] を表し、特に、 H 又は (C_1-C_4) －アルキルを表し、例えば、 H 、メチル、エチル、 n －プロピル、イソプロピル、 n －ブチル、 sec －ブチル、イソブチル又は t －ブチルを表し；

R^{68} は、 (C_1-C_6) －アルキル又は (C_1-C_4) －ハロアルキルであり、特に、 (C_1-C_4) －アルキルであり；

R^{69} 及び R^{70} は、互いに独立して、それぞれ、水素、 (C_1-C_4) －アルキル、ベンジル、 (C_3-C_6) －シクロアルキル又はフェニル [ここで、最後に挙げられている 2 のラジカルは、それぞれ、残りのものから独立して、置換されていないか、又は、ハロゲン、ニトロ、シアノ、 (C_1-C_4) －アルキル及び (C_1-C_4) －ハロアルキルからなる群から選択される 1 以上のラジカルで置換されている] を表し、又は、特に、互いに独立して、それぞれ、 H 又は (C_1-C_3) －アルキルを表し；

R^{71} は、 (C_1-C_4) －アルキル、 (C_1-C_4) －ハロアルキル、フェニル又はベンジル [ここで、最後に挙げられている 2 のラジカルは、それぞれ、残りのものから独立して、置換されていないか、又は、ハロゲン、シアノ、 (C_1-C_4) －アルキル、 (C_2-C_4) －アルケニル及び (C_1-C_4) －ハロアルキルからなる群から選択される 1 以上のラジカルで置換されている] を表し、特に、 (C_1-C_4) －アルキル、 (C_1-C_4) －ハロアルキル、ベンジル又はフェニル [ここで、該フェニルは、置換されていないか、又は、ハロゲン、 (C_1-C_4) －アルキル及び (C_1-C_4) －ハロアルキルからなる群から選択される 1 以上のラジカルで置換されている] を表し；

Het^{12} は、モルホリノ基、ピペリジノ基又はピロリジノ基を表し；及び、

M は、カチオンの等価物、好ましくは、金属イオン等価物、アンモニウムイオン [ここで、該アンモニウムイオンは、 (C_1-C_4) －アルキル、 (C_3-C_6) －シクロアルキル、フェニル、 (C_3-C_6) －シクロアルキル－ (C_1-C_4) －アルキル及びフェ

ニル- (C_1-C_4)-アルキルからなる群から選択される1~4の同一であるか又は異なっているラジカルで置換されていてもよく、特に、(C_1-C_4)-アルキルからなる群から選択される1~4の同一であるか又は異なっているラジカルで置換されていてもよい]又は第三級スルホニウムイオン[ここで、該第三級スルホニウムイオンは、好ましくは、(C_1-C_4)-アルキル、(C_3-C_6)-シクロアルキル、フェニル、(C_3-C_6)-シクロアルキル- (C_1-C_4)-アルキル及びフェニル- (C_1-C_4)-アルキルからなる群から選択される3の同一であるか又は異なっているラジカルで置換されており、特に、(C_1-C_4)-アルキルからなる群から選択される3の同一であるか又は異なっているラジカルで置換されている]を表す]である。

【0116】

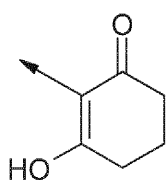
10

式(B1)で表される好ましいラジカル B^1 の例は、式(B1-1)~(B1-11)

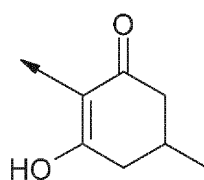
:

【0117】

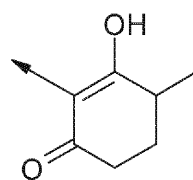
【化13】



(B1-1)

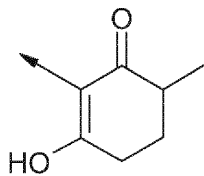


(B1-2)

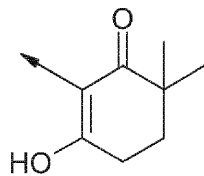


(B1-3)

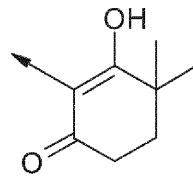
20



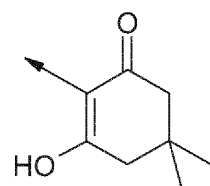
(B1-4)



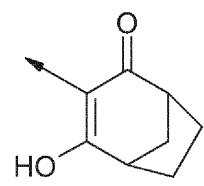
(B1-5)



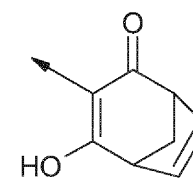
(B1-6)



(B1-7)

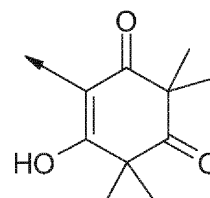


(B1-8)

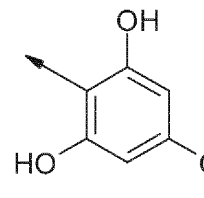


(B1-9)

30



(B1-10)



(B1-11)

40

で表されるラジカルである。

【0118】

式(B1-1)~(B1-11)において、該環系の置換基「メチル」は、慣習的な簡潔な表記法では、環炭素原子から延びている線として示されている。この表記法は、ラジカル B^1 に関する以下の式でも使用されている。

【0119】

式(B1-11)は、互変異性体も包含しており、ここで、左側に描かれている互変異

50

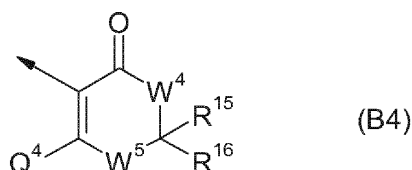
性体は、熱化学的により安定な互変異性体であり、他方、右側に描かれている互変異性体は、形式的には、 $Q^1 = OH$ 且つ $W^1 = C(O)$ である場合の一般式 (B¹) に正確に対応している。

【0120】

ここで、好ましいのは、化合物 (I) [ここで、B¹ は、ラジカル (B4)]

【0121】

【化14】



10

を表し；

ここで、

W^4 、 W^5 、 Q^4 、 R^{15} 及び R^{16} は、上記で記載されている意味又は好ましい意味を有し、好ましくは、

W^4 及び W^5 は、それぞれ、互いに独立して、式 O、S、NH、N-[(C₁-C₄)-アルキル]、C=O、S=O 又は SO₂ で表される二価基を表し、特に、式 O 又は S で表される二価基を表し、特に、O を表し；

20

Q^4 は、ヒドロキシ、チオ、ハロゲンを表すか、又は、式 OR³⁷、SR³⁸、SM 若しくは OM で表される基を表し、特に、ヒドロキシを表し；

R^{15} 及び R^{16} は、互いに独立して、それぞれ、H、ハロゲン、シアノ、ニトロ、ヒドロキシ、(C₁-C₄)-アルキル、(C₁-C₄)-ハロアルキル、(C₁-C₄)-アルコキシ又は (C₁-C₄)-ハロアルコキシを表し、特に、水素又は (C₁-C₄)-アルキルを表し；

R^{37} 、 R^{38} 及び M は、上記意味を有し、好ましくは、

R^{37} 及び R^{38} は、互いに独立して、それぞれ、(C₁-C₄)-アルキル、(C₁-C₄)-ハロアルキル、(C₁-C₄)-アルコキシ- (C₁-C₄)-アルキル、(C₃-C₆)-シクロアルキル [ここで、該シクロアルキルは、置換されていないか、又は、ハロゲン、(C₁-C₄)-アルキル及び (C₁-C₄)-アルコキシからなる群から選択される 1 以上のラジカルで置換されている]、フェニル [ここで、該フェニルは、置換されていないか、又は、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシ、ニトロ、(C₁-C₄)-アルキル、(C₁-C₄)-ハロアルキル及び (C₁-C₄)-アルコキシからなる群から選択される 1 以上のラジカルで置換されている] を表すか、又は、式 -C(O)R⁶⁷、-C(O)OR⁶⁸、-C(O)NR⁶⁹R⁷⁰、-C(O)Het¹² 若しくは -SO₂R⁷¹ で表される基を表し；

30

特に、 R^{37} 及び R^{38} は、互いに独立して、それぞれ、(C₁-C₆)-アルキル、(C₁-C₄)-ハロアルキル、(C₃-C₆)-シクロアルキル、(C₃-C₆)-ハロシクロアルキル、フェニル [ここで、該フェニルは、置換されていないか、又は、ハロゲン及び (C₁-C₄)-アルキルからなる群から選択される 1 以上のラジカルで置換されている] を表すか、又は、式 -C(O)R⁶⁷、-C(O)OR⁶⁸、-C(O)NR⁶⁹R⁷⁰、-C(O)Het¹² 若しくは -SO₂R⁷¹ で表される基を表し；

40

さらに好ましくは、 R^{37} 及び R^{38} は、互いに独立して、それぞれ、(C₁-C₄)-アルキル、フェニル [ここで、該フェニルは、置換されていないか、又は、ハロゲン及び (C₁-C₄)-アルキルからなる群から選択される 1 以上のラジカルで置換されている] を表すか、又は、式 -C(O)R⁶⁷、-C(O)OR⁶⁸ 若しくは -SO₂R⁷¹ で表される基を表し；

R^{67} 、 R^{68} 、 R^{69} 、 R^{70} 、 R^{71} 、Het¹² 及び M は、上記意味を有し、好ましくは、

50

R^{67} は、水素、 (C_1-C_6) －アルキル、 (C_1-C_4) －ハロアルキル、フェニル又はベンジル〔ここで、最後に挙げられている2のラジカルは、それぞれ、残りのものから独立して、置換されていないか、又は、ハロゲン、シアノ、 (C_1-C_4) －アルキル及び (C_1-C_4) －ハロアルキルからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されている〕を表し、特に、H又は (C_1-C_4) －アルキルを表し；

R^{68} は、 (C_1-C_6) －アルキル又は (C_1-C_4) －ハロアルキルを表し、特に、 (C_1-C_4) －アルキルを表し；

R^{69} 及び R^{70} は、互いに独立して、それぞれ、水素、 (C_1-C_4) －アルキル、ベンジル、 (C_3-C_6) －シクロアルキル若しくはフェニル〔ここで、最後に挙げられている2のラジカルは、それぞれ、残りのものから独立して、置換されていないか、又は、ハロゲン、ニトロ、シアノ、 (C_1-C_4) －アルキル及び (C_1-C_4) －ハロアルキルからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されている〕を表し、又は、特に、互いに独立して、それぞれ、H又は (C_1-C_3) －アルキルを表し；

R^{71} は、 (C_1-C_4) －アルキル、 (C_1-C_4) －ハロアルキル、フェニル又はベンジル〔ここで、最後に挙げられている2のラジカルは、それぞれ、残りのものから独立して、置換されていないか、又は、ハロゲン、シアノ、 (C_1-C_4) －アルキル、 (C_2-C_4) －アルケニル及び (C_1-C_4) －ハロアルキルからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されている〕を表し、特に、 (C_1-C_4) －アルキル、 (C_1-C_4) －ハロアルキル、ベンジル又はフェニル〔ここで、該フェニルは、置換されていないか、又は、ハロゲン、 (C_1-C_4) －アルキル及び (C_1-C_4) －ハロアルキルからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されている〕を表し；

Het¹²は、モルホリノ基、ピペリジノ基又はピロリジノ基を表し；及び、

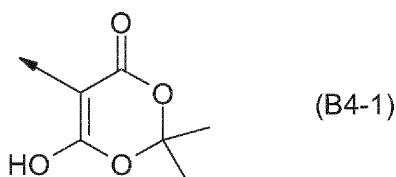
Mは、カチオンの等価物、好ましくは、金属イオン等価物、アンモニウムイオン〔ここで、該アンモニウムイオンは、 (C_1-C_4) －アルキル、 (C_3-C_6) －シクロアルキル、フェニル、 (C_3-C_6) －シクロアルキル－ (C_1-C_4) －アルキル及びフェニル－ (C_1-C_4) －アルキルからなる群から選択される1～4の同一であるか又は異なっているラジカルで置換されていてもよく、特に、 (C_1-C_4) －アルキルからなる群から選択される1～4の同一であるか又は異なっているラジカルで置換されていてもよい〕又は第三級スルホニウムイオン〔ここで、該第三級スルホニウムイオンは、好ましくは、 (C_1-C_4) －アルキル、 (C_3-C_6) －シクロアルキル、フェニル、 (C_3-C_6) －シクロアルキル－ (C_1-C_4) －アルキル及びフェニル－ (C_1-C_4) －アルキルからなる群から選択される3の同一であるか又は異なっているラジカルで置換されており、特に、 (C_1-C_4) －アルキルからなる群から選択される3の同一であるか又は異なっているラジカルで置換されている〕を表す〕である。

【0122】

式(B4)で表される好ましいラジカルB¹の例は、式(B4-1)：

【0123】

【化15】



で表されるラジカルである。

【0124】

好ましいのは、さらにまた、化合物(I)〔ここで、B¹は、ラジカル(B5)又はラジカル(B6)〕

【0125】

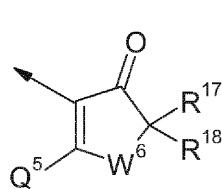
10

20

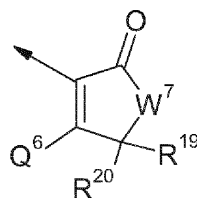
30

40

【化 1 6】



(B5)



(B6)

を表し；

10

ここで、

W^6 、 W^7 、 Q^5 、 Q^6 、 R^{17} 、 R^{18} 、 R^{19} 及び R^{20} は、上記で記載されている意味又は好ましい意味を有し、好ましくは、

W^6 は、式 O、S、NH、N-[(C₁-C₄)-アルキル]、C=O、S=O、SO₂ で表される二価基を表すか、又は、式 CR^{3 5}R^{3 6} で表される基を表し、特に、式 O、S、NH、N-[(C₁-C₄)-アルキル] で表される二価基を表すか、又は、式 CR^{3 5}R^{3 6} で表される基を表し、さらに好ましくは、O、NH、N-CH₃、N-C₂H₅ を表すか、又は、式 CH₂、CH(CH₃)、CH(C₂H₅) 若しくは C(CH₃)₂ で表される基を表し、極めて特に、O 又は CH₂ を表し；

W^7 は、式 O、S、NH、N-[(C₁-C₄)-アルキル]、C=O、S=O 又は SO₂ で表される二価基を表し、特に、式 O、S、NH 又は N-[(C₁-C₄)-アルキル] で表される二価基を表し、特に、O を表し；

20

Q^5 及び Q^6 は、互いに独立して、それぞれ、ヒドロキシ、チオ、ハロゲンを表すか、又は、式 OR^{3 7}、SR^{3 8}、SM 若しくは OM で表される基を表し、特に、ヒドロキシを表し；

R^{17} 、 R^{18} 、 R^{19} 及び R^{20} は、互いに独立して、それぞれ、H、ハロゲン、シアノ、ニトロ、ヒドロキシ、(C₁-C₄)-アルキル、(C₁-C₄)-ハロアルキル、(C₁-C₄)-アルコキシ又は (C₁-C₄)-ハロアルコキシを表し、特に、H 又は (C₁-C₄)-アルキルを表し；

$R^{3 5}$ 及び $R^{3 6}$ は、互いに独立して、それぞれ、水素、(C₁-C₄)-アルキル又は (C₁-C₄)-ハロアルキルを表し、特に、H、メチル又はエチルを表し；

30

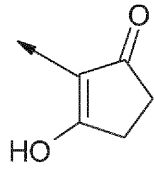
$R^{3 7}$ 、 $R^{3 8}$ 及び M は、上記意味を有し、好ましくは、上記式 (B1) 又は式 (B4) で表される化合物に関して定義されているとおりである。

【0126】

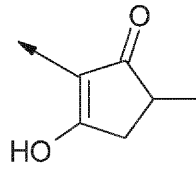
式 (B5) 及び式 (B6) で表される好ましいラジカル B¹ の例は、式 (B5-1)、式 (B5-2)、式 (B5-3)、式 (B5-4)、式 (B5-5)、式 (B5-6)、式 (B5-7)、式 (B5-8)、式 (B5-9)、式 (B6-1)、式 (B6-2)、式 (B6-3)：

【0127】

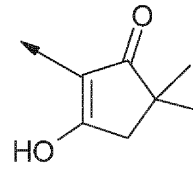
【化 1 7】



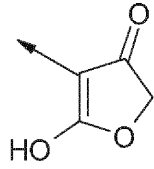
(B5-1)



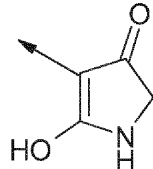
(B5-2)



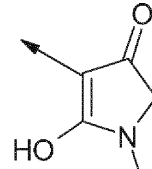
(B5-3)



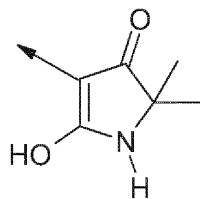
(B5-4)



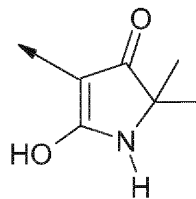
(B5-5)



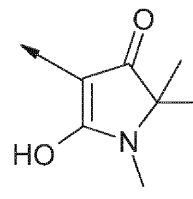
(B5-6)



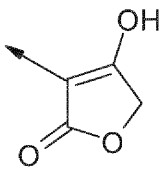
(B5-7)



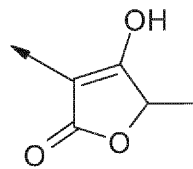
(B5-8)



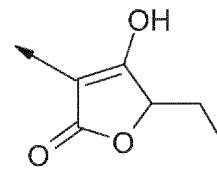
(B5-9)



(B6-1)



(B6-2)



(B6-3)

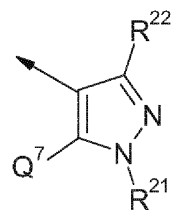
で表されるラジカルである。

【 0 1 2 8】

好ましいのは、さらにまた、化合物 (I) [ここで、 B^1 は、ラジカル (B 7)]

【 0 1 2 9】

【化 1 8】



(B7)

を表し；

ここで、

Q^7 、 R^{21} 及び R^{22} は、上記で記載されている意味又は好ましい意味を有し、好ましくは、

Q^7 は、ヒドロキシ、チオ、ハロゲンを表すか、又は、式 OR^{37} 、 SR^{38} 、SM 若しくは OM で表される基を表し、特に、ヒドロキシを表し；

R^{21} は、水素、 $(C_1 - C_4)$ - アルキル、 $(C_1 - C_4)$ - ハロアルキル、 $(C_3 - C_6)$ - シクロアルキル、 $(C_3 - C_6)$ - ハロシクロアルキルを表すか、又は、基 $C(O)OR^{54}$ 、 $C(O)NR^{55}R^{56}$ 、 $C(O)Het^7$ 、 $NR^{57}R^{58}$ 若しくは

10

20

30

40

50

Het⁸を表し、特に、H、(C₁–C₄)–アルキル、(C₁–C₄)–ハロアルキル又は(C₃–C₆)–シクロアルキル〔例えば、シクロプロピル〕を表し；

R²²は、水素、(C₁–C₄)–アルキル、(C₁–C₄)–ハロアルキル、(C₃–C₆)–シクロアルキル、(C₃–C₆)–ハロシクロアルキル、(C₁–C₄)–アルキルチオ、(C₁–C₄)–アルキルスルホニル、(C₁–C₄)–アルキルスルフィニルを表すか、又は、式C(O)OR⁵⁹、C(O)NR⁶⁰R⁶¹、C(O)Het⁹、NR⁶²R⁶³若しくはHet¹⁰で表される基を表し、特に、H、(C₁–C₄)–アルキル、(C₁–C₄)–ハロアルキル、(C₃–C₆)–シクロアルキル、(C₃–C₆)–ハロシクロアルキル、(C₁–C₄)–アルキルチオ、(C₁–C₄)–アルキルスルホニルを表すか、又は、式C(O)OR⁵⁹で表される基を表し；及び、

10

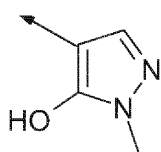
R⁵⁹は、水素、(C₁–C₄)–アルキル、(C₁–C₄)–ハロアルキル、(C₃–C₆)–シクロアルキル、(C₃–C₆)–ハロシクロアルキル、(C₂–C₄)–アルケニル、(C₂–C₄)–ハロアルケニル、(C₂–C₄)–アルキニル又は上記基Mを表し、好ましくは、水素、(C₁–C₃)–アルキル又は上記基Mを表す〕である。

【0130】

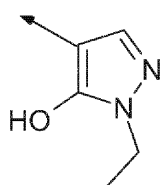
式(B7)で表される好ましいラジカルB¹の例は、式(B7-1)、式(B7-2)、式(B7-3)、式(B7-4)及び式(B7-5)：

【0131】

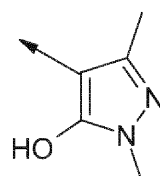
【化19】



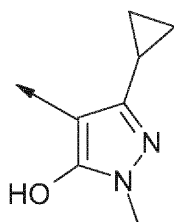
(B7-1)



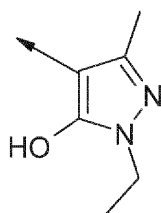
(B7-2)



(B7-3)



(B7-4)



(B7-5)

20

30

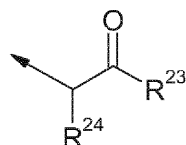
で表されるラジカルである。

【0132】

好ましいのは、さらにまた、化合物(I)〔ここで、B¹は、ラジカル(B8)〕

【0133】

【化20】



(B8)

40

を表し；

ここで、

R²³及びR²⁴は、上記で記載されている意味又は好ましい意味を有し、好ましくは

、

R²³は、水素、(C₁–C₄)–アルキル、(C₁–C₄)–ハロアルキル、(C₃

50

—C₆)—シクロアルキル、(C₃—C₆)—ハロシクロアルキル、(C₁—C₄)—アルコキシ又は(C₁—C₄)—ハロアルコキシを表し、特に、水素、(C₁—C₄)—アルキル、(C₁—C₄)—ハロアルキル、(C₃—C₆)—シクロアルキル、(C₃—C₄)—ハロシクロアルキル、(C₁—C₄)—アルコキシ又は(C₁—C₄)—ハロアルコキシを表し、さらに好ましくは、メチル、エチル、n—プロピル、イソプロピル、n—ブチル、イソブチル、s—ブチル、t—ブチル、メトキシ、エトキシ、n—プロポキシ、イソプロポキシ、n—ブトキシ、イソブトキシ、s—ブトキシ又はt—ブトキシを表し；
 R^{2 4}は、水素、ハロゲン、シアノ、(C₁—C₄)—アルキル、(C₁—C₄)—ハロアルキル、(C₃—C₆)—シクロアルキル〔例えば、シクロプロピル〕、(C₁—C₄)—アルコキシ又は(C₁—C₄)—ハロアルコキシを表し、特に、水素、(C₁—C₃)—アルキル、シアノ又はシクロプロピルを表し、さらに好ましくは、シアノを表す〕である。

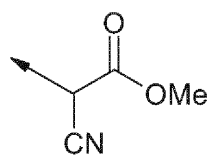
10

【0134】

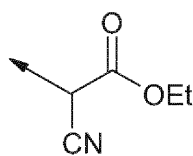
式(B8)で表される好ましいラジカルB¹の例は、式(B8-1)、式(B8-2)、式(B8-3)、式(B8-4)、式(B8-5)及び式(B8-6)：

【0135】

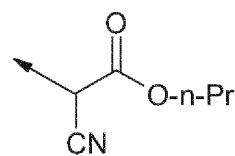
【化21】



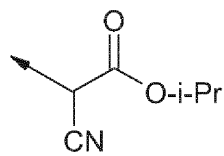
(B8-1)



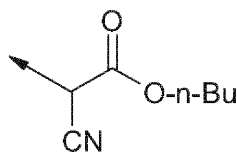
(B8-2)



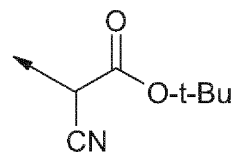
(B8-3)



(B8-4)



(B8-5)



(B8-6)

20

で表されるラジカルである。

【0136】

(B8-1)～(B8-6)に関する式において、及び、同様に、別の例の式においても、OMe=メトキシ、OEt=エトキシ、O-n-Pr=n—プロポキシ、O-i-Pr=イソプロポキシ、O-n-Bu=n—ブトキシ、O-i-Bu=イソブトキシ、O-s-Bu=s e c—ブトキシ、及び、O-t-Bu=t e r t—ブトキシである。

【0137】

式(B8)で表される化合物は、Q⁸=OH又はOM且つR^{2 4}=R^{3 0}且つR^{2 3}=R^{2 9}である場合の式(B11)及び(B12)式で表される化合物の互変異性体である。特に、R^{2 4}及びR^{3 0}がそれぞれCNである場合、平衡状態においては、実質的な比

30

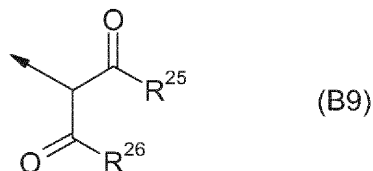
40

【0138】

好ましいのは、さらにまた、化合物(I)〔ここで、B¹は、ラジカル(B9)〕

【0139】

【化 2 2】



を表し；

ここで、

R^{25} 及び R^{26} は、互いに独立して、それぞれ、上記で記載されている意味又は好ましい意味を有し、好ましくは、さらに好ましくは、互いに独立して、それぞれ、水素、 (C_1-C_4) -アルキル、 (C_1-C_4) -ハロアルキル、 (C_1-C_4) -アルコキシ、 (C_1-C_4) -ハロアルコキシ、 (C_1-C_4) -アルコキシ- (C_1-C_4) -アルキル、 (C_1-C_4) -ハロアルコキシ- (C_1-C_4) -アルキル、 (C_3-C_6) -シクロアルキル、 (C_3-C_6) -ハロシクロアルキル、 (C_3-C_6) -シクロアルコキシ、 (C_2-C_6) -アルケニル、 (C_2-C_6) -ハロアルケニル、 (C_2-C_6) -アルキニル、 (C_2-C_6) -ハロアルキニル、 (C_1-C_4) -アルキルチオ、 (C_1-C_4) -アルキルスルホニル、 (C_1-C_4) -アルキルスルフィニル、 NR^{64} 、 R^{65} 又は Het^{11} を表し、さらに好ましくは、

R^{25} は、水素、 (C_1-C_4) -アルキル、 (C_1-C_4) -アルコキシ、 (C_1-C_4) -ハロアルコキシ又は (C_3-C_6) -シクロアルキル [例えば、シクロプロピル] を表し、特に、 (C_1-C_4) -アルコキシを表し；及び、

R^{26} は、水素、 (C_1-C_4) -アルキル、 (C_1-C_4) -アルコキシ、 (C_1-C_4) -ハロアルコキシ又は (C_3-C_6) -シクロアルキル [例えば、シクロプロピル] を表し、特に、 (C_1-C_4) -アルコキシを表す] である。

【0140】

式 (B9) で表される好ましいラジカル B^1 の例は、式 (B9-1)、式 (B9-2)、式 (B9-3)、式 (B9-4)、式 (B9-5)、式 (B9-6)、式 (B9-7)、式 (B9-8) 及び式 (B9-9)：

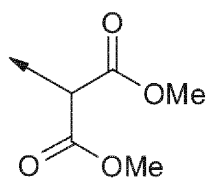
【0141】

10

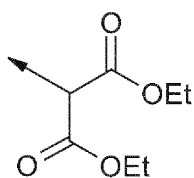
20

30

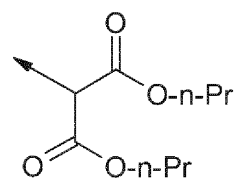
【化 2 3】



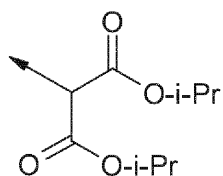
(B9-1)



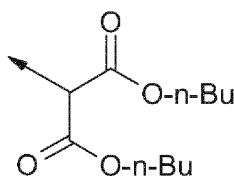
(B9-2)



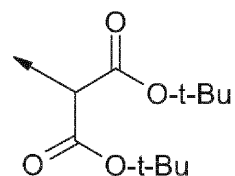
(B9-3)



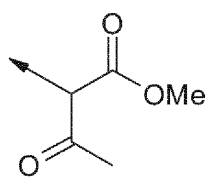
(B9-4)



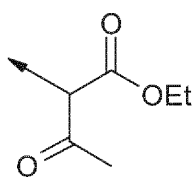
(B9-5)



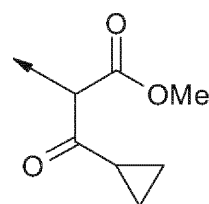
(B9-6)



(B9-7)



(B9-8)



(B9-9)

で表されるラジカルである。

【0142】

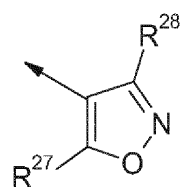
式 (B9) で表される化合物は、 $Q^9 = OH$ 又は OM 且つ $R^{25} = R^{31}$ 且つ $R^{26} = R^{32}$ である場合の式 (B13) 及び式 (B14) で表される化合物の互変異性体である。

【0143】

好ましいのは、さらにまた、化合物 (I) [ここで、 B^1 は、ラジカル (B10)]

【0144】

【化 2 4】



(B10)

を表し；

ここで、

R^{27} 及び R^{28} は、上記で記載されている意味又は好ましい意味を有し、好ましくは、

R^{27} は、H、 $(C_1 - C_4)$ -アルキル、 $(C_1 - C_4)$ -ハロアルキル又は $(C_3 - C_6)$ -シクロアルキル [例えば、シクロプロピル] を表し；

R^{28} は、H、 $(C_1 - C_4)$ -アルキル、 $(C_1 - C_4)$ -ハロアルキルを表すか、又は、式 $C(O)OR^{66}$ で表されるラジカルを表し；及び、

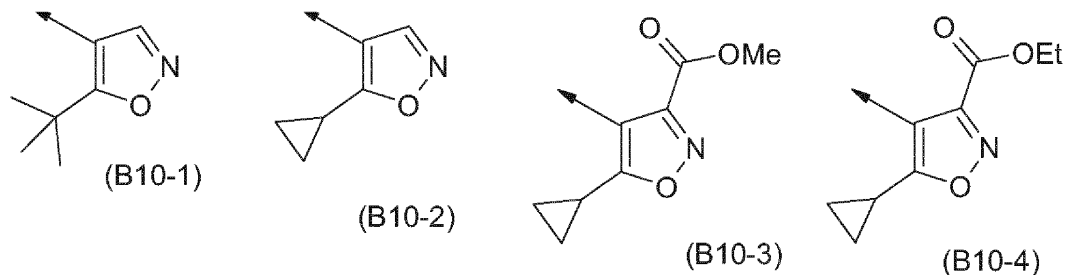
R^{66} は、水素、 $(C_1 - C_4)$ -アルキル、 $(C_1 - C_4)$ -ハロアルキル、 $(C_3 - C_6)$ -シクロアルキル、 $(C_3 - C_6)$ -ハロシクロアルキル、 $(C_2 - C_4)$ -アルケニル、 $(C_2 - C_4)$ -ハロアルケニル、 $(C_2 - C_4)$ -アルキニル又は上記基Mを表し、好ましくは、水素、 $(C_1 - C_3)$ -アルキル又は上記基Mを表す] である。

【0145】

式(B10)で表される好ましいラジカル B^1 の例は、式(B10-1)、式(B10-2)、式(B10-3)及び式(B10-4)：

【0146】

【化25】



10

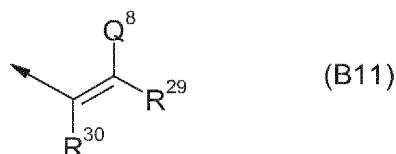
で表されるラジカルである。

【0147】

好ましいのは、さらにまた、化合物(I)〔ここで、 B^1 は、ラジカル(B11)〕

【0148】

【化26】



20

を表し；

ここで、

Q^8 、 R^{29} 及び R^{30} は、上記で記載されている意味又は好ましい意味を有し、好ましくは、

Q^8 は、ヒドロキシ、ハロゲンを表すか、又は、式 OR^{37} 、 SR^{38} 若しくはOMで表される基を表し、特に、ヒドロキシを表し；

R^{29} は、H、 (C_1-C_4) -アルキル、 (C_1-C_4) -ハロアルキル、 (C_3-C_6) -シクロアルキル〔例えば、シクロプロピル〕、 (C_1-C_4) -アルコキシ又は (C_1-C_4) -ハロアルコキシを表し；

R^{30} は、H、ハロゲン、シアノ、 (C_1-C_4) -アルキル、 (C_1-C_4) -ハロアルキル、 (C_3-C_6) -シクロアルキル〔例えば、シクロプロピル〕、 (C_1-C_4) -アルコキシ又は (C_1-C_4) -ハロアルコキシを表す〕である。

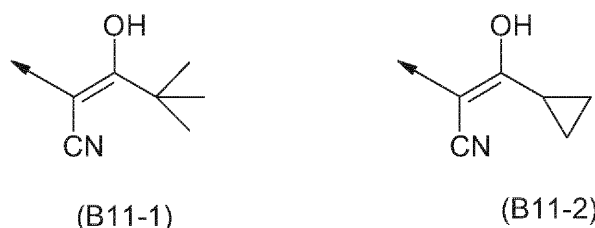
30

【0149】

式(B11)で表される好ましいラジカル B^1 の例は、式(B11-1)及び式(B11-2)：

【0150】

【化27】



40

で表されるラジカルである。

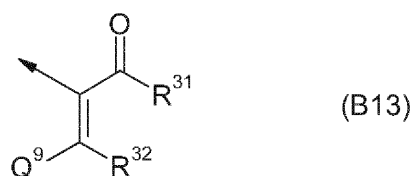
【0151】

好ましいのは、さらにまた、化合物(I)〔ここで、 B^1 は、ラジカル(B13)〕

50

【0152】

【化28】



を表し；

ここで、

Q^9 、 R^{31} 及び R^{32} は、上記で記載されている意味又は好ましい意味を有し、好ましくは、

Q^9 はヒドロキシ、ハロゲンを表すか、又は、式 OR^{37} 、 SR^{38} 若しくは OM で表される基を表し、特に、ヒドロキシを表し；

R^{31} 及び R^{32} は、互いに独立して、それぞれ、H、 (C_1-C_4) -アルキル、 (C_1-C_4) -ハロアルキル、 (C_1-C_4) -アルコキシ、 (C_1-C_4) -ハロアルコキシ、 (C_1-C_4) -アルコキシ- (C_1-C_4) -アルキル、 (C_1-C_4) -ハロアルコキシ- (C_1-C_4) -アルキル、 (C_3-C_6) -シクロアルキル、 (C_3-C_6) -ハロシクロアルキル、 (C_3-C_6) -シクロアルコキシ、 (C_1-C_4) -アルキルチオ、 (C_1-C_4) -アルキルスルホニル、 (C_1-C_4) -アルキルスルフィニル、 $NR^{64}R^{65}$ 又は Het^{11} を表し、特に、H、 (C_1-C_4) -アルキル、 (C_1-C_4) -ハロアルキル、 (C_1-C_4) -アルコキシ、 (C_1-C_4) -ハロアルコキシ、 (C_1-C_4) -アルコキシ- (C_1-C_4) -アルキル、 (C_1-C_4) -ハロアルコキシ- (C_1-C_4) -アルキル、 (C_3-C_6) -シクロアルキル、 (C_3-C_6) -ハロシクロアルキル、 (C_3-C_6) -シクロアルコキシ、 (C_1-C_4) -アルキルチオを表す] である。

【0153】

式 (B13) で表される好ましいラジカル B^1 の例は、式 (B13-1)、式 (B13-2)、式 (B13-3)、式 (B13-4)、式 (B13-5)、式 (B13-6)、式 (B13-7)、式 (B13-8) 及び式 (B13-9)：

【0154】

10

20

30

Chemical structures of compounds B13-1 through B13-9 are shown below:

(B13-1) COC(=O)C(=C(O)C)C(=O)OC

(B13-2) CCOC(=O)C(=C(O)C)C(=O)OCC

(B13-3) CCCCOC(=O)C(=C(O)C)C(=O)OCCCC

(B13-4) CC(C)OC(=O)C(=C(O)C)C(=O)OC(C)C

(B13-5) CCCCOC(=O)C(=C(O)C)C(=O)OCCCC

(B13-6) CC(C)(C)OC(=O)C(=C(O)C)C(=O)OC(C)(C)C

(B13-7) CC(C)=C(O)C(=O)OC

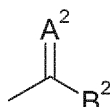
(B13-8) CC(C)=C(O)C(=O)OCC

(B13-9) CC(C)=C(O)C(=O)OC

【 0 1 5 5 】

【 0 1 5 6 】

【化 3 0】



A^2 は、上記式 (A 1) ~ (A 1 2) で表されるラジカルを表し；

R^B 及び R^C は、互いに独立して、上記意味を有し、好ましくは、互いに独立して、水素、ヒドロキシ、(C₁-C₄)-アルコキシ、(C₁-C₄)-アルキル、(C₁-C₄)-ハロアルキル、フェニル〔ここで、該フェニルは、置換されていないか、又は、ハロゲン、(C₁-C₄)-アルキル、(C₁-C₄)-ハロアルキル、(C₁-C₄)-アルコキシ、(C₁-C₄)-ハロアルコキシからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されている〕若しくはベンジル〔ここで、該ベンジルは、そのフェニル部分において、置換されていないか、又は、ハロゲン、(C₁-C₄)-アルキル、(C₁-C₄)-ハロアルキル、(C₁-C₄)-アルコキシ、(C₁-C₄)-ハロアルコキシからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されている〕を表すか、又は、-NR^{*}R^{**}〔ここで、R^{*}、R^{**}は、互いに独立して、それぞれ、H、(C₁-C₄)-アルキル、(C₂-C₄)-アルケニル、(C₂-C₄)-アルキニル、(C₁-C₄)-アルコキシ-(C₁-C₄)-アルキル、(C₁-C₄)-アルカノイル、[(C₁-C₄)-ハロアルキル]カルボニル、[(C₁-C₄)-アルコキシ]カルボニル、[(C₁-C₄)-

—C₄)—ハロアルコキシ]カルボニル、(C₃—C₆)—シクロアルキル、(C₃—C₆)—シクロアルキル—(C₁—C₄)—アルキル、フェニル、フェニル—(C₁—C₄)—アルキル[ここで、最後に挙げられている4のラジカルは、それぞれ、その環において、置換されていないか、又は、ハロゲン、(C₁—C₄)—アルキル、(C₁—C₄)—ハロアルキル、(C₁—C₄)—アルコキシ若しくは(C₁—C₄)—ハロアルコキシからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されており、又は、シクロアルキルの場合には、オキソでも置換されている]を表すか、又は、R^{*}とR^{**}は、その窒素原子と一緒に、3～6員の(好ましくは、飽和の)ヘテロ環[ここで、該ヘテロ環は、その窒素原子に加えて、N、O及びSからなる群から選択される1個又は2個のさらなる環ヘテロ原子を含むことができ、及び、該ヘテロ環は、置換されていなくてもよい]、又は、(C₁—C₄)—アルキル、(C₁—C₄)—ハロアルキル及びオキソからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されていてもよい]を表す]を表し；又は、特に、

R^Bは、水素、ヒドロキシ、(C₁—C₄)—アルコキシ、(C₁—C₄)—アルキル、フェニル、ベンジル又は—NR^{*}R^{**}[ここで、R^{*}、R^{**}は、互いに独立して、それぞれ、H又は(C₁—C₄)—アルキルを表す]を表し；及び、

R^Cは、水素、(C₁—C₄)—アルキル、フェニル又はベンジルを表し；

又は、

基—NR^BR^Cは、式—NH₂、—NHOH、—NHCH₃、—NHCH₃、—N(CH₃)₂、—NH—NH₂又は—NH—N(CH₃)₂で表されるラジカルを表し；

(R¹)_m、(R²)_n、R³、R⁴、R⁵、R⁶、R⁷、R⁸、R⁹、R¹⁰、R¹¹、R¹²、R¹³、R¹⁴、R¹⁵、R¹⁶、R¹⁷、R¹⁸、R¹⁹、R²⁰、R²¹、R²²、R²³、R²⁴、R²⁵及びR²⁶は、上記で記載されている意味又は好ましい意味を有し；

W¹及びW⁶は、互いに独立して、それぞれ、二価酸素、硫黄を表すか、又は、式NH、N—[(C₁—C₄)—アルキル]、C=O、S=O、SO₂若しくはCR³⁵R³⁶で表される基を表し；

W²、W³、W⁴、W⁵及びW⁷は、互いに独立して、それぞれ、式O、S、NH、N—[(C₁—C₄)—アルキル]、C=O、S=O又はSO₂で表される二価基を表し；

R³³、R³⁴及びMは、上記で記載されている意味又は好ましい意味を有し、好ましくは、

R³³及びR³⁴は、互いに独立して、それぞれ、(C₁—C₄)—アルキル、(C₁—C₄)—ハロアルキル、(C₁—C₄)—アルコキシ—(C₁—C₄)—アルキル、(C₃—C₆)—シクロアルキル[ここで、該シクロアルキルは、置換されていないか、又は、ハロゲン、(C₁—C₄)—アルキル及び(C₁—C₄)—アルコキシからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されている]、フェニル[ここで、該フェニルは、置換されていないか、又は、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシ、ニトロ、(C₁—C₄)—アルキル、(C₁—C₄)—ハロアルキル及び(C₁—C₄)—アルコキシからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されている]を表すか、又は、式—C(O)R⁶⁷、—C(O)OR⁶⁸、—C(O)NR⁶⁹R⁷⁰、—C(O)Het¹²若しくは—SO₂R⁷¹で表される基を表し；

特に、R³³及びR³⁴は、互いに独立して、それぞれ、(C₁—C₆)—アルキル、(C₁—C₄)—ハロアルキル、(C₃—C₆)—シクロアルキル、(C₃—C₆)—ハロシクロアルキル、フェニル[ここで、該フェニルは、置換されていないか、又は、ハロゲン及び(C₁—C₄)—アルキルからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されている]を表すか、又は、式—C(O)R⁶⁷、—C(O)OR⁶⁸、—C(O)NR⁶⁹R⁷⁰、—C(O)Het¹²若しくは—SO₂R⁷¹で表される基を表し；

R³⁵及びR³⁶は、互いに独立して、それぞれ、R³に関して定義されているとおりであり、又は、好ましくは、互いに独立して、H、(C₁—C₄)—アルキル若しくは(C₁—C₄)—ハロアルキルを表し、特に、H若しくは(C₁—C₂)—アルキルを表し、特に、H、メチル若しくはエチルを表し；

10

20

30

40

50

R^{67} は、水素、 (C_1-C_6) －アルキル、 (C_1-C_4) －ハロアルキル、フェニル又はベンジル〔ここで、最後に挙げられている2のラジカルは、それぞれ、残りのものから独立して、置換されていないか、又は、ハロゲン、シアノ、 (C_1-C_4) －アルキル及び (C_1-C_4) －ハロアルキルからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されている〕を表し、特に、H又は (C_1-C_4) －アルキルを表し；

R^{68} は、 (C_1-C_6) －アルキル又は (C_1-C_4) －ハロアルキルであり、特に、 (C_1-C_4) －アルキルであり；

R^{69} 及び R^{70} は、互いに独立して、それぞれ、水素、 (C_1-C_4) －アルキル、ベンジル、 (C_3-C_6) －シクロアルキル又はフェニル〔ここで、最後に挙げられている2のラジカルは、それぞれ、残りのものから独立して、置換されていないか、又は、ハロゲン、ニトロ、シアノ、 (C_1-C_4) －アルキル及び (C_1-C_4) －ハロアルキルからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されている〕を表し、又は、特に、互いに独立して、それぞれ、H又は (C_1-C_3) －アルキルを表し；

R^{71} は、 (C_1-C_4) －アルキル、 (C_1-C_4) －ハロアルキル、フェニル又はベンジル〔ここで、最後に挙げられている2のラジカルは、それぞれ、残りのものから独立して、置換されていないか、又は、ハロゲン、シアノ、 (C_1-C_4) －アルキル、 (C_2-C_4) －アルケニル及び (C_1-C_4) －ハロアルキルからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されている〕を表し、特に、 (C_1-C_4) －アルキル、 (C_1-C_4) －ハロアルキル、ベンジル又はフェニル〔ここで、該フェニルは、置換されていないか、又は、ハロゲン、 (C_1-C_4) －アルキル及び (C_1-C_4) －ハロアルキルからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されている〕を表し；

Het^{12} は、飽和又は部分的不飽和のヘテロ環のラジカル〔ここで、該ヘテロ環は、3～6個の環原子及び該環の1位に環ヘテロ原子としての少なくとも1個の窒素原子を有し、及び、場合により、N、O及びSからなる群から選択される1個、2個又は3個のさらなる環ヘテロ原子を有し、並びに、該ヘテロ環の該ラジカルはその環の1位にある窒素原子で式(I)で表される化合物の分子の残りの部分に結合しており、並びに、該ヘテロ環は、置換されていないか、又は、ハロゲン、 (C_1-C_4) －アルキル、 (C_1-C_4) －ハロアルキル、 (C_1-C_4) －アルコキシ、 (C_1-C_4) －ハロアルコキシ、 (C_1-C_4) －アルキルチオ及びオキソからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されており、特に、置換されていないか、又は、 (C_1-C_4) －アルキル及び (C_1-C_4) －ハロアルキルからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されている〕を表し、特に、モルホリノ基、ピペリジノ基又はピロリジノ基を表す〕である。

【0157】

好ましいのは、さらにまた、化合物(I)〔ここで、

A^2 は、上記式(A1)～(A12)で表されるラジカルを表し；

R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^9 、 R^{10} 、 R^{11} 、 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} 、 R^{16} 、 R^{17} 、 R^{18} 、 R^{19} 及び R^{20} は、互いに独立して、それぞれ、H、ハロゲン、シアノ、ニトロ、ヒドロキシ、 (C_1-C_4) －アルキル、 (C_1-C_4) －ハロアルキル、 (C_3-C_6) －シクロアルキル、 (C_1-C_4) －アルコキシ又は (C_1-C_4) －ハロアルコキシを表し、特に、H又は (C_1-C_4) －アルキルを表し；又は、

式(A1)で表される基の中の R^3 と R^5 は、一緒になって、上記で定義されている二価架橋を表し；

R^{21} は、H、 (C_1-C_4) －アルキル、 (C_1-C_4) －ハロアルキル、 (C_3-C_6) －シクロアルキル、 (C_3-C_6) －ハロシクロアルキルを表すか、又は、基C(O)OR⁵⁴、C(O)NR⁵⁵R⁵⁶、C(O)Het⁷、NR⁵⁷R⁵⁸若しくはHet⁸を表し、好ましくは、 (C_1-C_4) －アルキル、 (C_1-C_4) －ハロアルキル、 (C_3-C_6) －シクロアルキル又は基C(O)OR⁵⁴を表し；

R^{22} は、H、 (C_1-C_4) －アルキル、 (C_1-C_4) －ハロアルキル、 (C_3-C_6) －シクロアルキル、 (C_3-C_6) －ハロシクロアルキル、 (C_1-C_4) －アル

キルチオ、 (C_1-C_4) -アルキルスルホニルを表すか、又は、式 $C(O)OR^{59}$ 、 $C(O)NR^{60}R^{61}$ 、 $C(O)Het^9$ 、 $NR^{62}R^{63}$ 若しくは Het^{10} で表される基を表し、好ましくは、 (C_1-C_4) -アルキル、 (C_1-C_4) -ハロアルキル、 (C_3-C_6) -シクロアルキル、 (C_1-C_4) -アルキルスルホニル又は基 $C(O)OR^{59}$ を表し；

R^{23} は、H、 (C_1-C_4) -アルキル、 (C_1-C_4) -ハロアルキル、 (C_3-C_6) -シクロアルキル、 (C_3-C_6) -ハロシクロアルキル、 (C_1-C_4) -アルコキシ又は (C_1-C_4) -ハロアルコキシを表し、好ましくは、H、 (C_1-C_4) -アルキル、 (C_1-C_4) -ハロアルキル、 (C_3-C_6) -シクロアルキル [例えば、シクロプロピル]、 (C_1-C_4) -アルコキシ又は (C_1-C_2) -ハロアルコキシを表し；

10

R^{24} は、H、ハロゲン、シアノ、 (C_1-C_4) -アルキル、 (C_1-C_4) -ハロアルキル、 (C_3-C_6) -シクロアルキル、 (C_1-C_4) -アルコキシ又は (C_1-C_4) -ハロアルコキシを表し、好ましくは、H、ハロゲン、シアノ、 (C_1-C_4) -アルキル、 (C_1-C_4) -ハロアルキル、 (C_3-C_6) -シクロアルキル [例えば、シクロプロピル]、 (C_1-C_4) -アルコキシ又は (C_1-C_2) -ハロアルコキシを表し；

R^{25} 及び R^{26} は、互いに独立して、それぞれ、H、 (C_1-C_4) -アルキル、 (C_1-C_4) -ハロアルキル、 (C_1-C_4) -アルコキシ、 (C_1-C_4) -ハロアルコキシ、 (C_1-C_4) -アルコキシ- (C_1-C_4) -アルキル、 (C_1-C_4) -ハロアルコキシ- (C_1-C_4) -アルキル、 (C_3-C_6) -シクロアルキル、 (C_3-C_6) -シクロアルコキシ、 (C_2-C_6) -アルケニル、 (C_2-C_6) -アルキニル、 (C_1-C_4) -アルキルチオ、 (C_1-C_4) -アルキルスルホニル、 $NR^{64}R^{65}$ 又は Het^{11} を表し、好ましくは、H、 (C_1-C_4) -アルキル、 (C_1-C_4) -ハロアルキル、 (C_1-C_4) -アルコキシ、 (C_1-C_4) -ハロアルコキシ、 (C_1-C_2) -アルコキシ- (C_1-C_2) -アルキル、 (C_1-C_2) -ハロアルコキシ- (C_1-C_2) -アルキル又は (C_3-C_6) -シクロアルキル [例えば、シクロプロピル]を表し；

20

R^{54} 及び R^{59} は、互いに独立して、それぞれ、H、 (C_1-C_4) -アルキル、 (C_1-C_4) -ハロアルキル、 (C_3-C_6) -シクロアルキル、 (C_2-C_4) -アルケニル、 (C_2-C_4) -アルキニル又は上記基Mを表し；

30

R^{55} 、 R^{56} 、 R^{57} 、 R^{58} 、 R^{60} 、 R^{61} 、 R^{62} 、 R^{63} 、 R^{64} 及び R^{65} は、互いに独立して、それぞれ、H、 (C_1-C_4) -アルキル [ここで、該アルキルは、置換されていないか、又は、ハロゲン、ニトロ、シアノ及びフェニル (ここで、該フェニルは、置換されていないか、又は、ハロゲン、ニトロ、シアノ、 (C_1-C_4) -アルキル及び (C_1-C_4) -ハロアルキルからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されている) からなる群から選択される1以上のラジカルで置換されている]を表すか、又は、

(C_3-C_6) -シクロアルキル [ここで、該シクロアルキルは、置換されていないか、又は、ハロゲン、 (C_1-C_4) -アルキル及び (C_1-C_4) -ハロアルキルからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されている]を表すか、又は、フェニル [ここで、該フェニルは、置換されていないか、又は、ハロゲン、ニトロ、シアノ、 (C_1-C_4) -アルキル及び (C_1-C_4) -ハロアルキルからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されている]を表し；

40

Het^7 、 Het^8 、 Het^9 、 Het^{10} 及び Het^{11} は、互いに独立して、それぞれ、飽和又は部分的不飽和のヘテロ環のラジカル [ここで、該ヘテロ環は、3~6個の環原子及び該環の1位に環ヘテロ原子としての少なくとも1個の窒素原子を有し、及び、場合により、N、O及びSからなる群から選択される1個、2個又は3個のさらなる環ヘテロ原子を有し、並びに、該ヘテロ環の該ラジカルはその環の1位にある窒素原子で式(I)で表される化合物の分子の残りの部分に結合しており、並びに、該ヘテロ環は、置換

50

されていないか、又は、ハロゲン、 (C_1-C_4) -アルキル、 (C_1-C_4) -ハロアルキル、 (C_1-C_4) -アルコキシ、 (C_1-C_4) -ハロアルコキシ、 (C_1-C_4) -アルキルチオ及びオキソからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されており、特に、置換されていないか、又は、 (C_1-C_4) -アルキル及び (C_1-C_4) -ハロアルキルからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されている]を表し、特に、モルホリノ基、ピペリジノ基又はピロリジノ基を表す]である。

【0158】

ここで、好ましいのは、化合物(I) [ここで、

A^2 は、ラジカル($A1$)~($A12$)の内の1つを表し；及び、

B^2 は、ヒドロキシ、チオ、ハロゲンを表すか、又は、式 OR^{33} 、 SR^{34} 、 SM 若しくは OM で表される基を表し、特に、ヒドロキシ、ハロゲンを表すか、又は、式 OR^{33} 、 SR^{34} 若しくは OM で表される基を表し、さらに好ましくは、ヒドロキシを表し；

R^{33} 、 R^{34} 及び M は、上記で記載されている意味又は好ましい意味を有し、好ましくは、

R^{33} 及び R^{34} は、互いに独立して、それぞれ、 (C_1-C_6) -アルキル、 (C_1-C_6) -ハロアルキル、 (C_1-C_4) -アルコキシ- (C_1-C_4) -アルキル、 (C_3-C_6) -シクロアルキル [ここで、該シクロアルキルは、置換されていないか、又は、ハロゲン、 (C_1-C_4) -アルキル及び (C_1-C_4) -アルコキシからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されている]、フェニル [ここで、該フェニルは、置換されていないか、又は、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシ、ニトロ、 (C_1-C_4) -アルキル、 (C_1-C_4) -ハロアルキル及び (C_1-C_4) -アルコキシからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されている]を表すか、又は、式 $-C(O)R^{67}$ 、 $-C(O)OR^{68}$ 、 $-C(O)NR^{69}R^{70}$ 、 $-C(O)Het^{12}$ 若しくは $-SO_2R^{71}$ で表される基を表し；

特に、 R^{37} 及び R^{38} は、互いに独立して、それぞれ、 (C_1-C_6) -アルキル、 (C_1-C_4) -ハロアルキル、 (C_3-C_6) -シクロアルキル、 (C_3-C_6) -ハロシクロアルキル、フェニル [ここで、該フェニルは、置換されていないか、又は、ハロゲン及び (C_1-C_4) -アルキルからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されている]を表すか、又は、式 $-C(O)R^{67}$ 、 $-C(O)OR^{68}$ 、 $-C(O)NR^{69}R^{70}$ 、 $-C(O)Het^{12}$ 若しくは $-SO_2R^{71}$ で表される基を表し；

さらに好ましくは、 R^{37} 及び R^{38} は、互いに独立して、それぞれ、 (C_1-C_4) -アルキル、フェニル [ここで、該フェニルは、置換されていないか、又は、ハロゲン及び (C_1-C_4) -アルキルからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されている]を表すか、又は、式 $-C(O)R^{67}$ 、 $-C(O)OR^{68}$ 若しくは $-SO_2R^{71}$ で表される基を表し；

R^{67} は、水素、 (C_1-C_6) -アルキル、 (C_1-C_4) -ハロアルキル、フェニル又はベンジル [ここで、最後に挙げられている2のラジカルは、それぞれ、残りのものから独立して、置換されていないか、又は、ハロゲン、シアノ、 (C_1-C_4) -アルキル及び (C_1-C_4) -ハロアルキルからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されている]を表し、特に、 H 又は (C_1-C_4) -アルキルを表し、例えば、 H 、メチル、エチル、 n -プロピル、イソプロピル、 n -ブチル、 sec -ブチル、イソブチル又は t -ブチルを表し；

R^{68} は、 (C_1-C_6) -アルキル又は (C_1-C_4) -ハロアルキルであり、特に、 (C_1-C_4) -アルキルであり；

R^{69} 及び R^{70} は、互いに独立して、それぞれ、水素、 (C_1-C_4) -アルキル、ベンジル、 (C_3-C_6) -シクロアルキル又はフェニル [ここで、最後に挙げられている2のラジカルは、それぞれ、残りのものから独立して、置換されていないか、又は、ハロゲン、ニトロ、シアノ、 (C_1-C_4) -アルキル及び (C_1-C_4) -ハロアルキルからなる群から選択される1以上のラジカルで置換されている]を表し、又は、特に、互いに独立して、それぞれ、 H 又は (C_1-C_3) -アルキルを表し；

R^{71} は、 (C_1-C_4) -アルキル、 (C_1-C_4) -ハロアルキル、フェニル又はベンジル [ここで、最後に挙げられている 2 のラジカルは、それぞれ、残りのものから独立して、置換されていないか、又は、ハロゲン、シアノ、 (C_1-C_4) -アルキル、 (C_2-C_4) -アルケニル及び (C_1-C_4) -ハロアルキルからなる群から選択される 1 以上のラジカルで置換されている] を表し、特に、 (C_1-C_4) -アルキル、 (C_1-C_4) -ハロアルキル、ベンジル又はフェニル [ここで、該フェニルは、置換されていないか、又は、ハロゲン、 (C_1-C_4) -アルキル及び (C_1-C_4) -ハロアルキルからなる群から選択される 1 以上のラジカルで置換されている] を表し；

Het^{12} は、モルホリノ基、ピペリジノ基又はピロリジノ基を表し；及び、

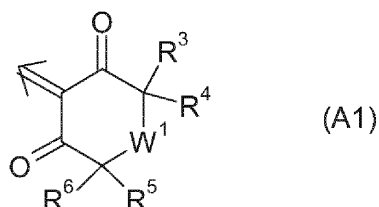
M は、カチオンの等価物、好ましくは、金属イオン等価物、アンモニウムイオン [ここで、該アンモニウムイオンは、 (C_1-C_4) -アルキル、 (C_3-C_6) -シクロアルキル、フェニル、 (C_3-C_6) -シクロアルキル- (C_1-C_4) -アルキル及びフェニル- (C_1-C_4) -アルキルからなる群から選択される 1~4 の同一であるか又は異なっているラジカルで置換されていてもよく、特に、 (C_1-C_4) -アルキルからなる群から選択される 1~4 の同一であるか又は異なっているラジカルで置換されていてもよい] 又は第三級スルホニウムイオン [ここで、該第三級スルホニウムイオンは、好ましくは、 (C_1-C_4) -アルキル、 (C_3-C_6) -シクロアルキル、フェニル、 (C_3-C_6) -シクロアルキル- (C_1-C_4) -アルキル及びフェニル- (C_1-C_4) -アルキルからなる群から選択される 3 の同一であるか又は異なっているラジカルで置換されており、特に、 (C_1-C_4) -アルキルからなる群から選択される 3 の同一であるか又は異なっているラジカルで置換されている] を表す] である。

【0159】

ここで、好ましいのは、化合物 (I) [ここで、 A^2 は、ラジカル (A1)]

【0160】

【化31】



を表し；

ここで、

W^1 、 R^3 、 R^4 、 R^5 及び R^6 は、上記で記載されている意味又は好ましい意味を有し、好ましくは、

W^1 は、式 O、S、NH、N- [(C_1-C_4) -アルキル]、C=O、S=O、SO₂ 又は CR³⁵R³⁶ で表される二価基を表し、特に、式 O、S、C=O 又は CR³⁵R³⁶ で表される二価基を表し；

ここで、 R^{35} 及び R^{36} は、互いに独立して、それぞれ、水素、 (C_1-C_4) -アルキル又は (C_1-C_4) -ハロアルキルを表し；

特に、 W^1 は、二価基 C(O)、CH₂、CH(CH₃) 又は C(CH₃)₂ を表し；

R^3 、 R^4 、 R^5 及び R^6 は、互いに独立して、それぞれ、H、ハロゲン、シアノ、ニトロ、ヒドロキシ、 (C_1-C_4) -アルキル、 (C_1-C_4) -ハロアルキル、 (C_1-C_4) -アルコキシ又は (C_1-C_4) -ハロアルコキシを表し、特に、H 又は (C_1-C_4) -アルキルを表し；又は、

R^3 と R^5 は一緒に、式 -CH₂CH₂ -、-CH₂CH₂CH₂ -、-CH(CH₃)CH₂ -、-C(CH₃)₂CH₂ -、-CH₂CH(CH₃) -、-CH₂C(CH₃)₂ -、-C(CH₃)CH(CH₃) -、-CH₂CH₂CH₂ -、-CH=CH -、-CH=CHCH₂ -、-CH₂CH=CH -、-OCH₂ -、-CH₂O -、-OCH₂CH₂ -、-CH₂OCH₂ -、-CH₂CH₂O - 又は -OCH₂O - で表される

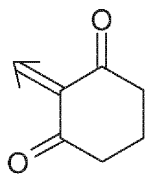
二価架橋を表し、特に、式 $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$ 又は $-\text{CH}=\text{CH}-$ で表される二価架橋を表す] である。

【0161】

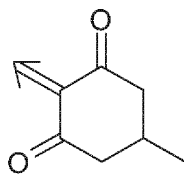
式 (A1) で表される好ましいラジカル A^2 の例は、式 (A1-1) ~ (A1-9) :

【0162】

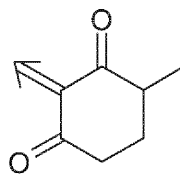
【化32】



(A1-1)

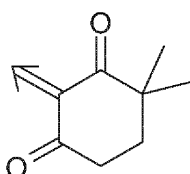


(A1-2)

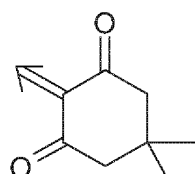


(A1-3)

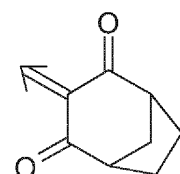
10



(A1-4)

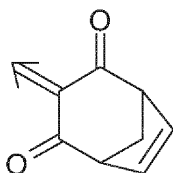


(A1-5)

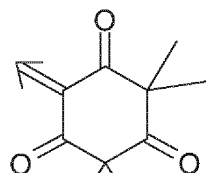


(A1-6)

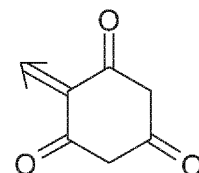
20



(A1-7)



(A1-8)



(A1-9)

で表されるラジカルである。

30

【0163】

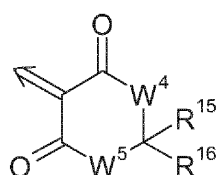
(A1-3) 及び (A1-4) などのように、C-C二重結合に対して非対称的に置換されているラジカル (A1) の場合、一般式 (A1) に包含される対応する二重結合異性体も好ましい。

【0164】

好ましいのは、さらにまた、化合物 (I) [ここで、 A^2 は、ラジカル (A5)]

【0165】

【化33】



(A5)

40

を表し；

ここで、

W^4 、 W^5 、 R^{15} 及び R^{16} は、上記で記載されている意味又は好ましい意味を有し、好ましくは、

W^4 及び W^5 は、それぞれ、互いに独立して、式 O、S、NH、N-[(C₁-C₄)-アルキル]、C=O、S=O 又は SO₂ で表される二価基を表し、特に、式 O 又は S で

50

表される二価基を表し、特に、Oを表し；及び

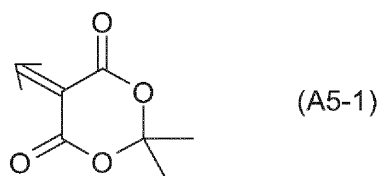
R^{15} 及び R^{16} は、互いに独立して、それぞれ、H、ハロゲン、シアノ、ニトロ、ヒドロキシ、 $(C_1 - C_4)$ -アルキル、 $(C_1 - C_4)$ -ハロアルキル、 $(C_1 - C_4)$ -アルコキシ又は $(C_1 - C_4)$ -ハロアルコキシを表し、特に、水素又は $(C_1 - C_4)$ -アルキルを表す] である。

【0166】

式(A5)で表される好ましいラジカル A^2 の例は、式(A5-1)：

【0167】

【化34】



10

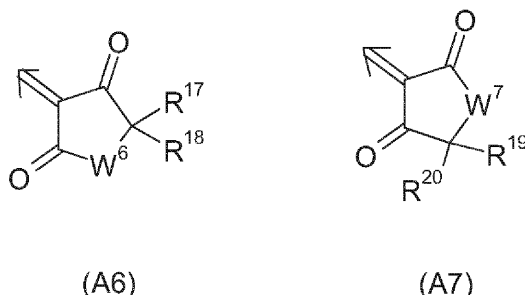
で表されるラジカルである。

【0168】

好ましいのは、さらにまた、化合物(I) [ここで、 A^2 は、ラジカル(A6)又はラジカル(A7)]

【0169】

【化35】



20

を表し；

ここで、

W^6 、 W^7 、 R^{17} 、 R^{18} 、 R^{19} 及び R^{20} は、上記で記載されている意味又は好ましい意味を有し、好ましくは、

W^6 は、式O、S、NH、N- [$(C_1 - C_4)$ -アルキル]、C=O、S=O、SO₂ 又は $CR^{35}R^{36}$ で表される二価基を表し、特に、式O、S、NH、N- [$(C_1 - C_4)$ -アルキル] で表される二価基を表すか、又は、式 $CR^{35}R^{36}$ で表される基を表し、さらに好ましくは、O、NH、N-CH₃、N-C₂H₅ を表すか、又は、式CH₂、CH(CH₃)、CH(C₂H₅) 若しくは C(CH₃)₂ で表される基を表し、極めて特に、O又はCH₂を表し；

ここで、 R^{35} 及び R^{36} は、互いに独立して、それぞれ、水素、 $(C_1 - C_4)$ -アルキル又は $(C_1 - C_4)$ -ハロアルキルを表し；

特に、 W^6 は、二価基CH₂、CH(CH₃) 又は C(CH₃)₂ を表し；

W^7 は、式O、S、NH、N- [$(C_1 - C_4)$ -アルキル]、C=O、S=O 又は SO₂ で表される二価基を表し、特に、式O、S、NH 又は N- [$(C_1 - C_4)$ -アルキル] で表される二価基を表し、特に、Oを表し；及び、

R^{17} 、 R^{18} 、 R^{19} 及び R^{20} は、互いに独立して、それぞれ、H、ハロゲン、シアノ、ニトロ、ヒドロキシ、 $(C_1 - C_4)$ -アルキル、 $(C_1 - C_4)$ -ハロアルキル、 $(C_1 - C_4)$ -アルコキシ又は $(C_1 - C_4)$ -ハロアルコキシを表し、特に、H 又は $(C_1 - C_4)$ -アルキルを表す] である。

【0170】

30

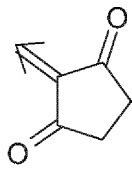
40

50

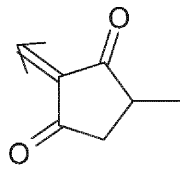
式 (A 6) で表される好ましいラジカル A² の例は、式 (A 6-1) ~ (A 6-11) :

【0171】

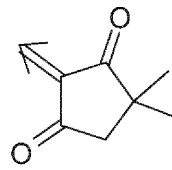
【化36】



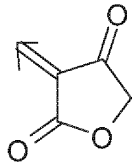
(A6-1)



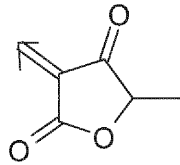
(A6-2)



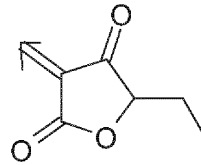
(A6-3)



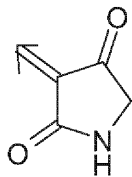
(A6-4)



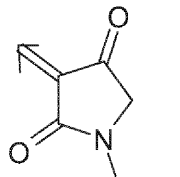
(A6-5)



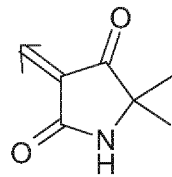
(A6-6)



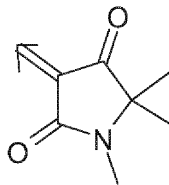
(A6-7)



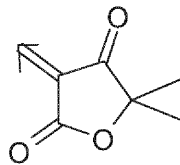
(A6-8)



(A6-9)



(A6-10)



(A6-11)

で表されるラジカルである。

【0172】

式 (A 7) で表される好ましいラジカル A² は、式 (A 7-4) ~ (A 7-11) (式は示されていない) で表される対応するラジカルであり、ここで、該式 (A 7-4) ~ (A 7-11) は、式 (A 6-4) ~ (A 6-11) で表されるラジカルの矢印

【0173】

【化37】



として描かれている二重結合に関する二重結合異性体を表している。

【0174】

(A 6-2) 及び (A 6-3) などのように、C-C二重結合に対して非対称的に置換されているラジカル (A 6) の場合、一般式 (A 6) に包含される対応する二重結合異性体も好ましい。

【0175】

好ましいのは、さらにまた、化合物 (I) [ここで、A² は、ラジカル (A 8) 又はラジカル (A 9)]

【0176】

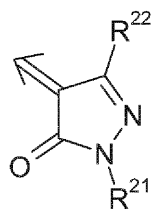
10

20

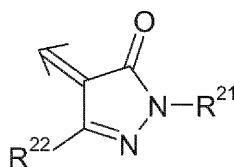
30

40

【化 3 8】



(A8)



(A9)

を表し；
ここで、

R^{21} 及び R^{22} は、上記で記載されている意味又は好ましい意味を有し、好ましくは、

R^{21} は、水素、 (C_1-C_4) -アルキル、 (C_1-C_4) -ハロアルキル、 (C_3-C_6) -シクロアルキル、 (C_3-C_6) -ハロシクロアルキルを表すか、又は、基 $C(O)OR^{54}$ 、 $C(O)NR^{55}R^{56}$ 、 $C(O)Het^7$ 、 $NR^{57}R^{58}$ 若しくは Het^8 を表し、特に、H、 (C_1-C_4) -アルキル、 (C_1-C_4) -ハロアルキル又は (C_3-C_6) -シクロアルキル [例えば、シクロプロピル] を表し；及び、

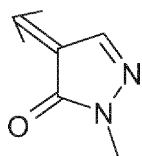
R^{22} は、水素、 (C_1-C_4) -アルキル、 (C_1-C_4) -ハロアルキル、 (C_3-C_6) -シクロアルキル、 (C_3-C_6) -ハロシクロアルキル、 (C_1-C_4) -アルキルチオ、 (C_1-C_4) -アルキルスルホニル、 (C_1-C_4) -アルキルスルフィニルを表すか、又は、式 $C(O)OR^{59}$ 、 $C(O)NR^{60}R^{61}$ 、 $C(O)Het^9$ 、 $NR^{62}R^{63}$ 若しくは Het^{10} で表される基を表し、特に、H、 (C_1-C_4) -アルキル、 (C_1-C_4) -ハロアルキル、 (C_3-C_6) -シクロアルキル、 (C_3-C_6) -ハロシクロアルキル、 (C_1-C_4) -アルキルチオ又は (C_1-C_4) -アルキルスルホニルを表す] である。

【0177】

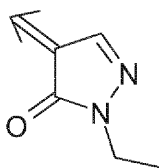
式 (A8) で表される好ましいラジカル A^2 の例は、式 (A8-1) ~ (A8-5)：

【0178】

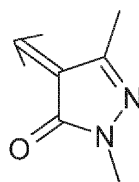
【化 3 9】



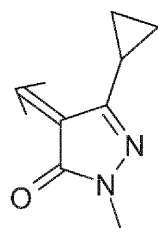
(A8-1)



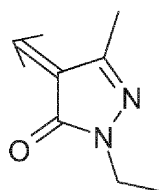
(A8-2)



(A8-3)



(A8-4)



(A8-5)

で表されるラジカルである。

【0179】

式 (A9) で表される好ましいラジカル A^2 は、式 (A9-1) ~ (A9-5) (式は示されていない) で表される対応するラジカルであり、ここで、該式 (A9-1) ~ (A

10

20

30

40

50

9-5) は、式 (A 8-1) ~ (A 8-5) で表されるラジカル of 矢印

【0180】

【化40】



として描かれている二重結合に関する二重結合異性体を表している。

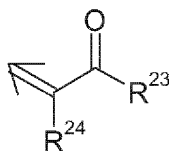
【0181】

好ましいのは、さらにまた、化合物 (I) [ここで、 A^2 は、ラジカル (A 10) 又はラジカル (A 11)]

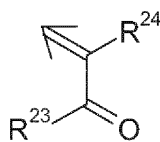
【0182】

【化41】

10



(A10)



(A11)

を表し；

ここで、

20

R^{23} は、H、 (C_1-C_4) -アルキル、 (C_1-C_4) -ハロアルキル、 (C_3-C_6) -シクロアルキル [例えば、シクロプロピル]、 (C_1-C_4) -アルコキシ又は (C_1-C_4) -ハロアルコキシを表し、さらに好ましくは、メチル、エチル、 n -プロピル、イソプロピル、 n -ブチル、イソブチル、 s -ブチル、 t -ブチル、メトキシ、エトキシ、 n -プロポキシ、イソプロポキシ、 n -ブトキシ、イソブトキシ、 s -ブトキシ又は t -ブトキシを表し；及び、

R^{24} は、H、ハロゲン、シアノ、 (C_1-C_4) -アルキル、 (C_1-C_4) -ハロアルキル、 (C_3-C_6) -シクロアルキル [例えば、シクロプロピル]、 (C_1-C_4) -アルコキシ又は (C_1-C_4) -ハロアルコキシを表し、特に、水素、 (C_1-C_3) -アルキル、シアノ又はシクロプロピルを表し、さらに好ましくは、シアノを表す] である。

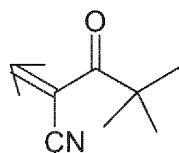
30

【0183】

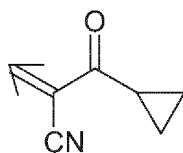
式 (A 10) で表される好ましいラジカル A^2 の例は、式 (A 10-1)、式 (A 10-2)、式 (A 10-3)、式 (A 10-4)、式 (A 10-5)、式 (A 10-6)、式 (A 10-7)、式 (A 10-8) 及び式 (A 10-9)：

【0184】

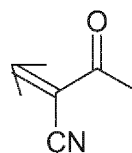
【化 4 2】



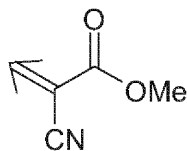
(A10-1)



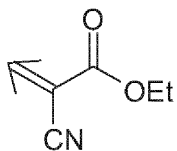
(A10-2)



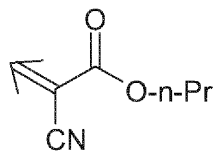
(A10-3)



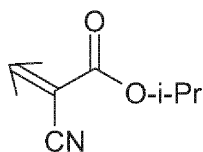
(A10-4)



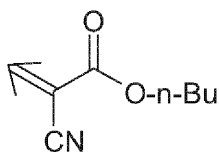
(A10-5)



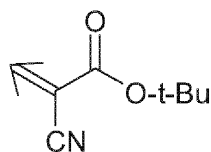
(A10-6)



(A10-7)



(A10-8)



(A10-9)

で表されるラジカルである。

【0185】

式 (A11) で表される好ましいラジカル A^2 は、式 (A11-1) ~ (A11-9) (式は示されていない) で表される対応するラジカルであり、ここで、該式 (A11-1) ~ (A11-9) は、式 (A10-1) ~ (A10-9) で表されるラジカルの矢印

【0186】

【化 4 3】



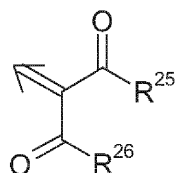
として描かれている二重結合に関する二重結合異性体を表している。

【0187】

好ましいのは、さらにまた、化合物 (I) [ここで、 A^2 は、ラジカル (A12)]

【0188】

【化 4 4】



(A12)

を表し；

ここで、

R^{25} 及び R^{26} は、互いに独立して、それぞれ、H、 (C_1-C_4) -アルキル、 (C_1-C_4) -ハロアルキル、 (C_1-C_4) -アルコキシ、 (C_1-C_4) -ハロアルコキシ、 (C_1-C_4) -アルコキシ- (C_1-C_4) -アルキル、 (C_1-C_4) -ハロアルコキシ- (C_1-C_4) -アルキル、 (C_3-C_6) -シクロアルキル、 (C_3-C_6) -ハロシクロアルキル、 (C_3-C_6) -シクロアルコキシ、 (C_1-C_4) -アルキルチオ、 (C_1-C_4) -アルキルスルホニル、 (C_1-C_4) -アルキルスルフィニル、 $NR^{64}R^{65}$ 又は Het^{11} を表し、特に、H、 (C_1-C_4) -アルキル、 (C_1-C_4) -ハロアルキル、 (C_1-C_4) -アルコキシ、 (C_1-C_4) -ハロアル

10

20

30

40

50

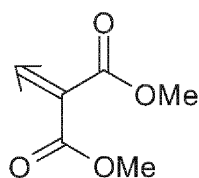
コキシ、 $(C_1 - C_4)$ -アルコキシ- $(C_1 - C_4)$ -アルキル、 $(C_1 - C_4)$ -ハロアルコキシ- $(C_1 - C_4)$ -アルキル、 $(C_3 - C_6)$ -シクロアルキル、 $(C_3 - C_6)$ -ハロシクロアルキル、 $(C_3 - C_6)$ -シクロアルコキシ、 $(C_1 - C_4)$ -アルキルチオを表す]である。

【0189】

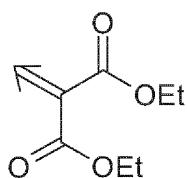
式(A12)で表される好ましいラジカルA²の例は、式(A12-1)～(A12-9)：

【0190】

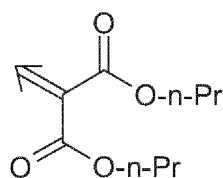
【化45】



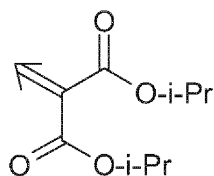
(A12-1)



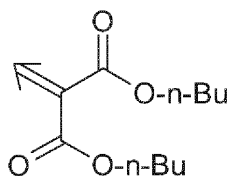
(A12-2)



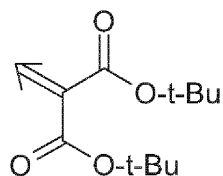
(A12-3)



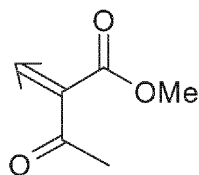
(A12-4)



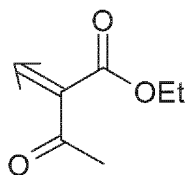
(A12-5)



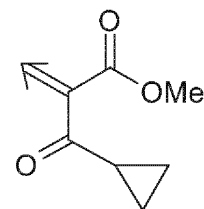
(A12-6)



(A12-7)



(A12-8)



(A12-9)

で表されるラジカルである。

【0191】

(A12-7)、(A12-8)及び(A12-9)などのように、C-C二重結合に対して非対称的に置換されているラジカル(A12)の場合、一般式(A12)に含まれる対応する二重結合異性体も好ましい。

【0192】

本発明による式(I)で表される化合物は、当該分子(ここで、該分子の立体配置は当該式においては具体的には示されていないか、又は、該分子は明示的には特定されていない)の中の不斉中心又は二重結合に基づいて生じ得る全ての立体異性体及びそれらの混合物を包含している。そのような立体異性体及びその混合物には、ラセミ化合物及び特定の立体異性体が部分的に富化されている混合物が包含される。本発明は、さらにまた、適切な官能基が存在している場合には、全ての互変異性体(例えば、ケト及びエノール互変異性体)並びにそれらの混合物及び塩も包含する。

【0193】

本発明は、さらにまた、一般式(I)で表される化合物及び／又はそれらの塩を調製する方法も提供する。これは、既知方法と同様に実施することが可能な調製方法も包含している。

【0194】

(a) 例として、式(I)〔式中、Lは、式C(=A¹)-B¹で表されるラジカル

10

20

30

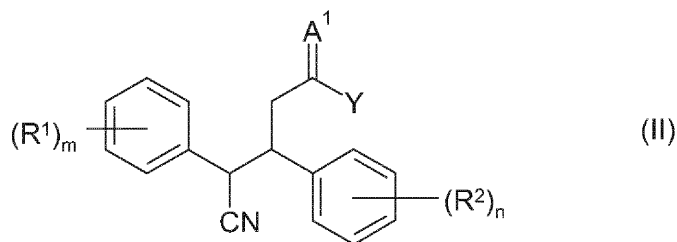
40

50

を表し、 B^1 は、式 (B 1) ~ (B 9) 及び式 (B 1 1) ~ (B 1 4) で表されるラジカルを表し、並びに、 $Q^1 \sim Q^9$ は、それぞれ、OH、SH、SM又はOMを表し、並びに、残りのラジカルは、調製しようとする式 (I) で表される個々の化合物において定義されているとおりである〕で表される化合物及びその塩は、調製方法〔変形態様 (a)〕に従って得られ、ここで、該調製方法〔変形態様 (a)〕は、式 (I I)

【0195】

【化46】



10

〔式中、 A^1 、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ は、式 (I) において定義されているとおりであり、Yは、脱離基（好ましくは、ハロゲン原子、特に、塩素原子）を表す〕

で表される化合物を、式 $H-B^1$ 〔式中、 B^1 は、ラジカル L において定義されているとおりであり、及び、 $Q^1 \sim Q^9$ は、それぞれ、調製しようとする式 (I) で表される化合物において定義されているとおりである〕で表される化合物と直接反応させて、化合物 (I) を生成させるか、又は、O-アルキル化生成物若しくはS-アルキル化生成物を中間体として生成させ、及び、形成されたO-アルキル化中間体若しくはS-アルキル化中間体を転位させてC-アルキル化生成物としての式 (I) で表される化合物を生成させることを特徴とする〔下記スキームを参照されたい。下記スキームでは、化合物 $H-B^1$ に関する例として、式 ($H-B^1*$) で表される反応体が使用されている〕。

20

【0196】

変形態様 (a) によれば、使用するのが好ましい反応体は、式 $H-B^1$ で表される化合物であり、式 (I) 〔式中、基 B^1 の中の $Q^1 \sim Q^9$ は、それぞれ、ラジカル OH 又はラジカル OMを表す〕で表される化合物が調製される。

【0197】

該C-C-アシル化は、1以上の段階からなる塩基が触媒する反応として、既知調製方法と同様に実施することができる。

30

【0198】

水酸化カルシウムなどの塩基を使用する類似した一段階調製方法は、例えば、「B. S. Jensen, Acta Chem. Scand. 1959, Vol. 13, p. 1668」から知られている（化合物 (I-A) の調製に関する下記スキームを参照されたい）。

【0199】

水素化ナトリウムなどの塩基を使用する類似した一段階調製方法は、例えば、Mulroneyら (J. Org. Chem. 75, 2010, 16) 及びYadavら (Chem. Lett. 39, 2010, 280) によって記載されている。該反応は、例えば、適切な極性非プロトン性有機溶媒（例えば、ジメチルホルムアミド又はテトラヒドロフラン）の中で、0~120℃の温度で、実施することができる。

40

【0200】

ルイス酸（例えば、塩化マグネシウム）の存在下でトリエチルアミンなどの有機塩基を使用する類似した一段階調製方法は、例えば、Littleら (J. Org. Chem. 65, 2000, 8096) によって記載されている。該反応は、例えば、適切な有機非プロトン性溶媒（例えば、ジクロロメタン）の中で、0~120℃の温度で、実施することができる。

【0201】

最初に、塩基が触媒するO-アシル化を実施し、次いで、転位を実施する方法に類似し

50

た二段階調製方法は、例えば、EP-A-0186117、WO 2008/125213、WO 2011/012248、EP 0625505及びそれらの中で引用されている文献から知られている；下記スキームを参照されたい。下記スキームは、例として、O-アルキル化生成物（I-Zw）を介した化合物（I-A）の調製を使用しており、ここで、化合物（I-A）は、 B^1 が式（B1）で表されるラジカルを表し且つ Q^1 がラジカルOHを表す化合物（I）に対応している。

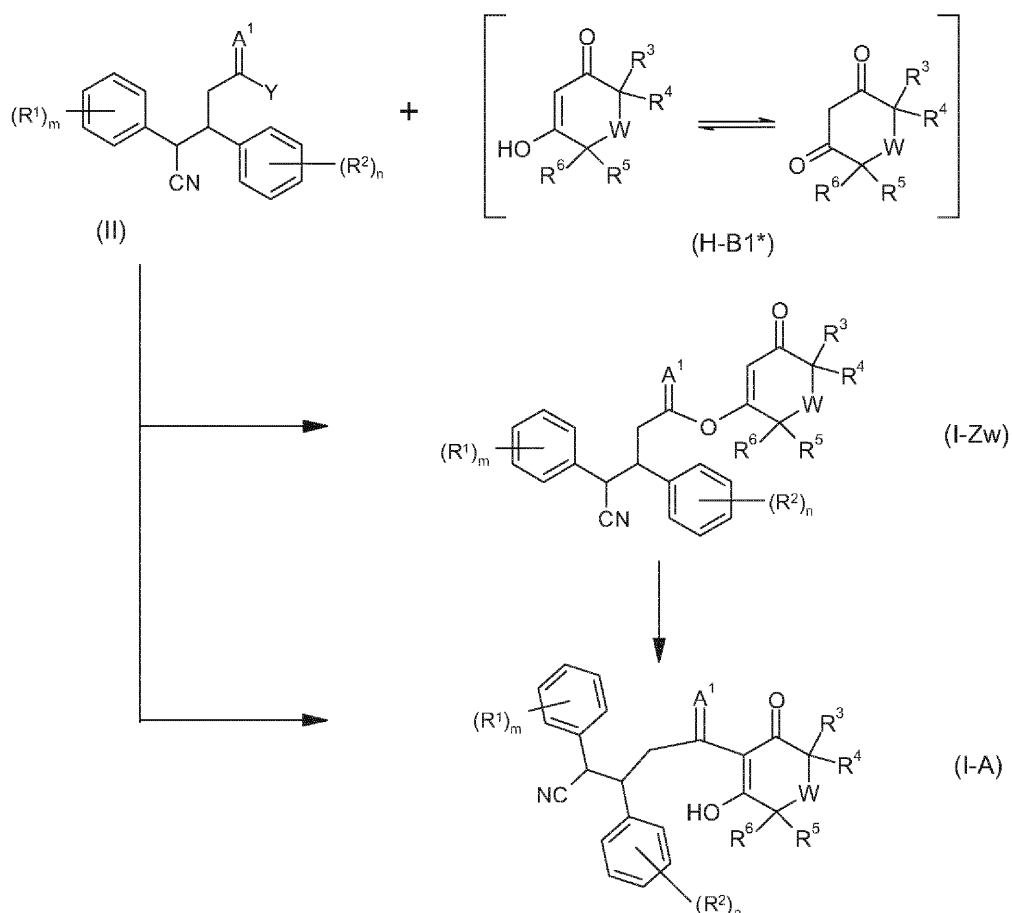
【0202】

スキーム

【0203】

【化47】

スキーム



化合物（I-Zw）又は類似した中間体を転位させることを含んでいる該調製方法は、場合により、転位試薬を用いて実施する。この目的に対して使用されるものは、転位に適した化学物質、例えば、類似した反応から知られている試薬シアン化トリメチルシリル、シアン化カリウム及びアセトンシアノヒドリンである。

【0204】

一般式（I）で表される化合物を調製するための転位プロセスは、好ましくは、1種類以上の希釈剤を用いて実施する。適切な希釈剤は、特に、当該反応条件下において不活性な有機溶媒である。そのようなものとしては、特に、以下のものを挙げることができる：脂肪族、脂環式又は芳香族の場合によりハロゲン化されていてもよい炭化水素類、例えば、ベンジン、ベンゼン、トルエン、キシレン、クロロベンゼン、ジクロロベンゼン、石油エーテル、ヘキサン、シクロヘキサン、ジクロロメタン、クロロホルム、四塩化炭素；エーテル類、例えば、ジエチルエーテル、ジイソプロピルエーテル、ジオキサン、テトラヒドロフラン又はエチレングリコールジメチルエーテル若しくはエチレングリコールジエチ

ルエーテル；ケトン類、例えば、アセトン、ブタノン又はメチルイソブチルケトン；ニトリル類、例えば、アセトニトリル、プロピオニトリル又はブチロニトリル；アミド類、例えば、N，N－ジメチルホルムアミド、N，N－ジメチルアセトアミド、N－メチルホルムアニリド、N－メチルピロリドン又はヘキサメチルリン酸トリアミド；エステル類、例えば、酢酸メチル又は酢酸エチル；スルホキシド類、例えば、ジメチルスルホキシド。

【0205】

該転位プロセスを実施する場合、その反応温度は、比較的広い範囲内で変えることができる。一般に、該プロセスは、0℃～150℃の温度、好ましくは、10℃～120℃の温度で実施する。該転位は、一般に、大気圧下で実施する。しかしながら、該プロセスは、高圧下又は減圧下（一般に、0.1～10バール）で実施することも可能である。

10

【0206】

上記調製方法及び下記調製方法において、場合により、溶媒を使用する。これに関連して、「不活性溶媒」は、いずれの場合にも、特定の反応条件下においては不活性であるが、全ての反応条件下で不活性である必要はない溶媒を意味している。

【0207】

記載されている調製方法は、いずれの場合にも、実験室において慣習的な装置の中で、パイロットプラントの中で、及び、工業用プロセスで商業的な量を調製するためのプラントの中で実施することができるか、又は、代替的に、電子レンジの中で実施することも可能である。

【0208】

20

(b) 式(I)〔式中、Lは、式-C(=A¹)-B¹で表されるラジカルを表し、B¹は、式(B1)～(B7)及び式(B11)～(B14)で表されるラジカルを表し、並びに、基B¹の中のQ¹～Q⁹は、それぞれ、式SH又は式SMで表される基を表し、残りのラジカルは、調製しようとする式(I)で表される個々の化合物において定義されているとおりである〕で表される化合物及びその塩は、例えば、調製方法〔変形態様(b)〕によって得られ、ここで、該調製方法〔変形態様(b)〕は、式(I)〔式中、Lは、式-C(=A¹)-B¹で表されるラジカルであり、ここで、A¹は、式(I)において定義されているとおりであり、及び、B¹は、基B¹の中のQ¹～Q⁹がそれぞれ基OH又は基OMを表していることを除いて、式(I)におけるラジカルB¹と同様に定義される〕で表される化合物を、ハロゲン化剤（好ましくは、ハロゲン化カルボニル、例えば、塩化オキサリルCl-CO-CO-Cl）と反応させて、化合物(I)〔ここで、基B¹の中のQ¹～Q⁹は、それぞれ、ハロゲン原子（好ましくは、塩素原子）を表す〕を生成させ、硫化剤（好ましくは、スルフィド、例えば、硫化二ナトリウム）と反応させ、及び、式(I)で表される所望の化合物を場合により反応混合物から取り出すか又は単離することを特徴とする。そのような方法は、原理上は、当業者には知られており、そして、Na₂Sを用いた求核置換反応に関しては、例えば、「Journal of Heterocyclic Chemistry」、25(3)、901-6；1988に記載されている。

30

【0209】

例えば、該反応は、テトラヒドロフランなどの非プロトン性有機溶媒の中で、適切な場合には還流下で加熱しながら、実施することも可能である；cf. EP 249150。

40

【0210】

(c) 式(I)〔式中、Lは、式-C(=A¹)-B¹で表されるラジカルを表し、B¹は、式(B1)～(B7)及び式(B11)～(B14)で表されるラジカルを表し、並びに、基B¹の中のQ¹～Q⁹は、それぞれ、式OR³⁻⁷で表される基を表し、並びに、残りのラジカルは、調製しようとする式(I)で表される個々の化合物において定義されているとおりである〕で表される化合物及びその塩は、例えば、調製方法〔変形態様(c)〕によって得られ、ここで、該調製方法〔変形態様(c)〕は、式(I)〔式中、Lは、式-C(=A¹)-B¹で表されるラジカルであり、ここで、A¹は、式(I)に

50

において定義されているとおりであり、及び、 B^1 は、基 B^1 の中の $Q^1 \sim Q^9$ がそれぞれ基OH又は基OMを表していることを除いて、式(I)におけるラジカル B^1 と同様に定義される〕で表される化合物を、式 $Y'-R^{37}$ 〔式中、 Y' は、脱離基を表す〕で表される化合物(アルキル化剤、アシル化剤又はアリール化剤)と反応させ、及び、式(I)で表される所望の化合物の場合により反応混合物から取り出すか又は単離することの特徴とする。そのような方法は、原理上は、当業者には知られており、そして、例えば、DO S 2513750(=DE 2513750)に記載されている。

【0211】

ここで、変形態様(c)による反応は、塩基(好ましくは、アミン塩基、例えば、トリエチルアミン)を使用し、例えば、適切な有機非プロトン性溶媒(例えば、ジクロロメタン)の中で、好ましくは、 $0^\circ\text{C} \sim 25^\circ\text{C}$ の温度で、実施することができる；cf. WO 2009115788。

【0212】

(d) 式(I)〔式中、 L は、式 $-C(=A^1)-B^1$ で表されるラジカルを表し、 B^1 は、式(B1)～(B7)及び式(B11)～(B14)で表されるラジカルを表し、並びに、基 B^1 の中の $Q^1 \sim Q^9$ は、それぞれ、式 SR^{38} で表される基を表し、並びに、残りのラジカルは、調製しようとする式(I)で表される個々の化合物において定義されているとおりである〕で表される化合物及びその塩は、例えば、調製方法〔変形態様(d)〕によって得られ、ここで、該調製方法〔変形態様(d)〕は、式(I)〔式中、 L は、式 $-C(=A^1)-B^1$ で表されるラジカルであり、ここで、 A^1 は、式(I)において定義されているとおりであり、及び、 B^1 は、基 B^1 の中の $Q^1 \sim Q^9$ がそれぞれ基SH又は基SMを表していることを除いて、式(I)におけるラジカル B^1 と同様に定義される〕で表される化合物を、式 $Y'R^{38}$ 〔式中、 Y' は、脱離基を表す〕で表される化合物(アルキル化剤、アシル化剤又はアリール化剤)と反応させ、及び、式(I)で表される所望の化合物の場合により反応混合物から取り出すか又は単離することの特徴とする。そのような反応は、原理上は、当業者には知られている。適切な無機塩基又は有機塩基(例えば、炭酸カリウム又はカリウムtert-ブトキシド)の存在下、溶媒(例えば、テトラヒドロフラン)の中で、 $0 \sim 80^\circ\text{C}$ の温度で反応させるのが好ましい；cf. WO 2008113089。

【0213】

(e) 式(I)〔式中、 L は、式 $-C(=A^1)-B^1$ で表されるラジカルを表し、 B^1 は、式(B1)～(B7)及び式(B11)～(B14)で表されるラジカルを表し、並びに、基 B^1 の中の $Q^1 \sim Q^9$ は、それぞれ、式 SR^{38} で表される基を表し、並びに、残りのラジカルは、調製しようとする式(I)で表される個々の化合物において定義されているとおりである〕で表される化合物及びその塩も、例えば、調製方法〔変形態様(e)〕によって得られ、ここで、該調製方法〔変形態様(e)〕は、式(I)〔式中、 L は、式 $-C(=A^1)-B^1$ で表されるラジカルであり、ここで、 A^1 は、式(I)において定義されているとおりであり、及び、 B^1 は、基 B^1 の中の $Q^1 \sim Q^9$ がそれぞれハロゲン原子(好ましくは、塩素原子)を表していることを除いて、式(I)におけるラジカル B^1 と同様に定義される〕で表される化合物を、式 $H-S-R^{38}$ で表されるチオ化合物と反応させ、及び、式(I)で表される所望の化合物の場合により反応混合物から取り出すか又は単離することの特徴とする。そのような方法は、原理上は、当業者には知られており、そして、例えば、WO 2009/018925(例えば、当該文献の第21頁及び調製方法jに関する詳細)及びその中で引用されている文献に記載されている。

【0214】

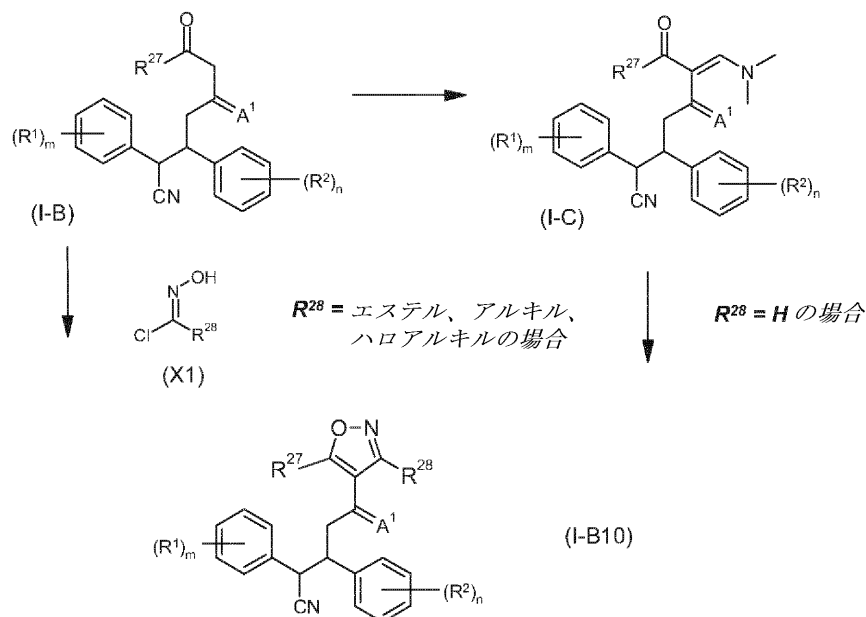
(f) 式(I)〔式中、 L は、式 $-C(=A^1)-B^1$ で表されるラジカルを表し、及び、 B^1 は、式(B10)で表される基を表す〕で表される化合物及びその塩〔=化合物(I-B10)〕も、例えば、調製方法〔変形態様(f)〕によって得られ、ここで、該調製方法〔変形態様(f)〕は、式(I)〔式中、 L は、式 $-C(=A^1)-B^*$ で表されるラジカルを表し、 A^1 は、式(I)において定義されているとおりであり、及び、

B* は、式 $\text{—CH}_2\text{—CO—R}^{27}$ [式中、 R^{27} は、式 (B10) において定義されているとおりである] で表されるラジカルを表す] で表される化合物 [=化合物 (I-B)] を、

【0215】

【化48】

スキーム



N, N-ジメチルホルムアミドジメチルアセタールと反応させて、式 (I-C) で表される化合物を生成させ (スキームを参照されたい)、及び、その化合物 (I-C) を、ヒドロキシルアミン又はその塩との閉環を伴う反応に付して、式 (I-B10) [式中、 $\text{R}^{28} = \text{H}$] で表される化合物を生成させるか、又は、化合物 (I-B) を、式 (X1)

【0216】

【化49】



[式中、 R^{28} は、式 (B10) において定義されているとおりである] で表される化合物との閉環を伴う反応に付して、式 (I-B10) [式中、式 (X1) の中の R^{28} は、 $\text{R}^{28} = \text{H}$ であることを除いて、調製しようとする式 (I-B10) で表される化合物において定義されているとおりである] で表される化合物を生成させることを特徴とする。

【0217】

N, N-ジメチルホルムアミドジメチルアセタールとの上記反応は、EP 636622 の類似した実施例から知られている。ヒドロキシルアミン又はその塩を用いた閉環反応は、例えば、適切な有機極性溶媒 (例えば、エタノール又はアセトニトリル) の中で、適切な場合には、塩基触媒 (好ましくは、有機塩基、例えば、トリエチルアミン) を用いて、 $0^\circ\text{C} \sim 150^\circ\text{C}$ の範囲内にある温度で、好ましくは、室温から当該溶媒の沸点までの範囲にある温度で、実施することができる; cf. EP 636622。

【0218】

(g) 式 (I) [式中、L は、式 $\text{—C(=A}^1\text{)—B}^1$ で表されるラジカルを表し、及び、 B^1 は、式 (B10) で表される基を表す] で表される化合物及びその塩 [=化合物 (I-B10) も、例えば、調製方法 [変形態様 (g)] によって得られ、ここで、該

10

20

30

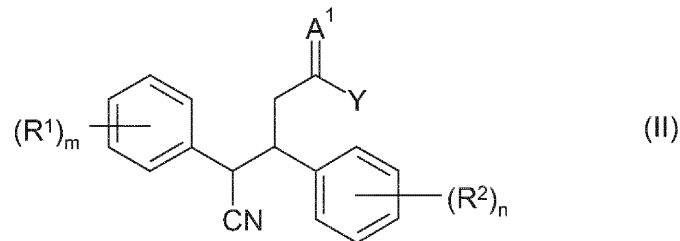
40

50

調製方法〔変形態様 (g)〕は、式 (I I)

【0219】

【化50】



10

〔式中、 A^1 、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ は、式 (I) において定義されているとおりであり、並びに、Yは、脱離基（好ましくは、ハロゲン原子、特に、塩素原子）を表す〕で表される化合物を、場合によりカップリング剤の存在下で、式X- (B10)〔式中、(B10)は、基 B^1 におけるのと同様に定義され、及び、Xは、脱離基（好ましくは、ハロゲン、特に、ヨウ素）である〕で表される化合物と反応させて、式 (I) で表される化合物を生成させる（交差カップリング反応）こと；

又は、

式X'- (B10)〔式中、X'は、金属又は金属誘導体基（好ましくは、Cl-Zn基）を表し、及び、(B10)は、基 B^1 において定義されているとおりである〕で表される活性化された化合物と反応させて、式 (I) で表される化合物を生成させること；

20

【0220】

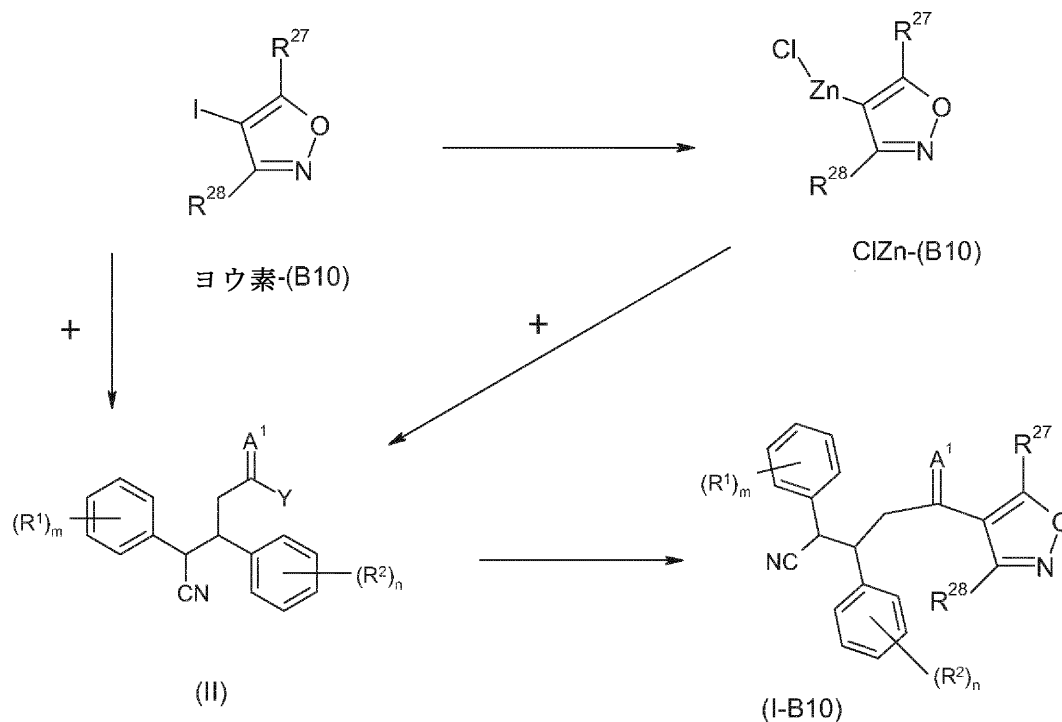
ここで、活性化された化合物X'- (B10)は、例えば、上記式X- (B10)で表される化合物から、金属又は金属塩との反応（例えば、Mg塩及びZn塩との反応）によって、最初に調製することができる（下記スキームを比較されたい）。

【0221】

【化51】

スキーム

30



40

50

(I I) とヨウ素- (B 1 0) 又は類似した中間体の間の交差カップリングのプロセスは、場合により、カップリング試薬を用いて実施する。この目的に対して適しているものは、カップリングに適していることが知られている化学物質、例えば、類似した反応から知られているパラジウム試薬、例えば、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0)である(例えば、「Negishi et al., Tetrahedron Lett. 24, 1983, 5181」と同様)。

【0222】

C 1 Z n- (B^{1 0}) 又は類似した化合物を調製する方法は、適切な金属又は金属誘導体を用いて実施することができる。C 1 Z n- (B^{1 0}) に適しているのは、例えば、ヨウ素- (B^{1 0}) とマグネシウム削りくず及び塩化亜鉛との反応である(「Knöchel et al., Chem. A Eur. J. 15, 2009, 7192」を参照されたい)。

【0223】

一般式(I-B 1 0)で表される化合物を調製するための上記カップリングプロセスは、好ましくは、1種類以上の希釈剤を用いて実施する。適切な希釈剤は、特に、当該反応条件下において不活性な有機溶媒である。そのようなものとしては、特に、以下のものを挙げることができる：脂肪族、脂環式又は芳香族の場合によりハロゲン化されていてもよい炭化水素類、例えば、ベンジン、ベンゼン、トルエン、キシレン、クロロベンゼン、ジクロロベンゼン、石油エーテル、ヘキサン、シクロヘキサン、ジクロロメタン、クロロホルム、四塩化炭素；エーテル類、例えば、ジエチルエーテル、ジイソプロピルエーテル、ジオキサン、テトラヒドロフラン又はエチレングリコールジメチルエーテル若しくはエチレングリコールジエチルエーテル；アミド類、例えば、N, N-ジメチルホルムアミド、N-メチルピロリドン又はヘキサメチルリン酸トリアミド。

【0224】

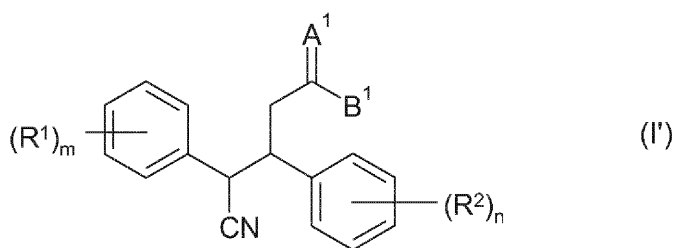
該カップリングプロセスを実施する場合、その反応温度は、比較的広い範囲内で変えることができる。一般に、該プロセスは、0℃～150℃の温度、好ましくは、10℃～120℃の温度で実施する。該カップリングは、一般に、大気圧下で実施する。しかしながら、それは、高圧下又は減圧下(一般に、0.1～10バール)で実施することも可能である。

【0225】

(h) 式(I)〔式中、Lは、式-C(=A²)-B²で表されるラジカルを表し、及び、B²は、式OR^{3 3}又は式SR^{3 4}で表されるラジカルを表す〕で表される化合物及びその塩は、例えば、調製方法〔変形態様(h)〕によって得られ、ここで、該調製方法〔変形態様(h)〕は、式(I')

【0226】

【化52】



〔式中、(R¹)_m及び(R²)_nは、式(I)において定義されているとおりであり、A¹は、ラジカルO又はラジカルSを表し、及び、B¹は、Lがラジカル-C(=A¹)-B¹を表す式(I)に関して上記で定義されている式(B 1)、式(B 2)、式(B 3)、式(B 4)、式(B 5)、式(B 6)、式(B 7)、式(B 8)、式(B 9)、式(B 1 1)、式(B 1 2)、式(B 1 3)又は式(B 1 4)で表されるラジカルを表し、その際、ラジカルB¹の中のQ¹～Q⁹は、それぞれ、OH又はOMを表す〕

で表される化合物を、式 $Y' - B^2$ [式中、 B^2 は、ラジカル L において定義されているとおりであり、及び、 Y' は、脱離基（例えば、塩素）を表す] で表される化合物と反応させて、化合物 (I) [ここで、 B^2 は、ラジカル OR^{33} ($A^1 = O$ である場合) 又はラジカル SR^{34} ($A^1 = S$ である場合) を表し、ここで、化合物 (I) の中の基 $-C (=A^2) -$ は、化合物 (I') の中の基 $-C - B^1$ と比較して、より安定な互変異性体又は好ましくは構造的に固定された互変異性体 [ここで、ラジカル $-C (=A^2) -$ は、互変異性的に、ラジカル $=C (-B^1) -$ に対応する] を表す] を生成させることを特徴とする。

【0227】

ここで、「構造的に固定された互変異性体 (structurally fixed tautomer)」は、ラジカル $-C (=A^2) - B^2$ の中で、基 B^2 が式 OR^{33} 又は式 SR^{34} で表されるラジカルを表す (即ち、OH、OM、SH 又は SM を表さない) ということを意味する。

【0228】

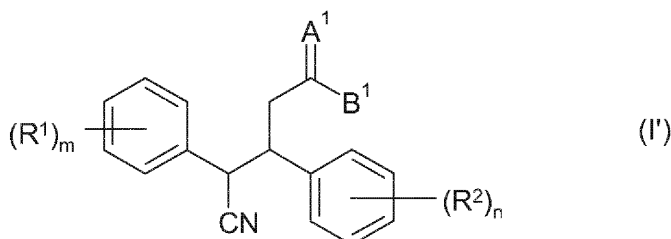
ラジカル R^{33} 又はラジカル R^{34} の意味に応じて、式 $Y' - B^2$ で表される化合物は、アルキル化剤、アシル化剤又はアリール化剤のいずれかである。従って、該反応は、適切な場合には適切な触媒 (酸又は塩基) 又は特定にアリール化触媒の存在下で、類似したアルキル化、アシル化又はアリール化のための条件下で実施することができる。

【0229】

(i) 式 (I) [式中、L は、式 $-C (=A^2) - B^2$ で表されるラジカルを表し、及び、 B^2 は、式 $-NR^B R^C$ で表されるラジカルを表す] で表される化合物及びその塩は、例えば、調製方法 [変形態様 (i)] によって得られ、ここで、該調製方法 [変形態様 (i)] は、式 (I')

【0230】

【化53】



[式中、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ は、式 (I) において定義されているとおりであり、 A^1 は、式 $-NR^B$ で表されるラジカルを表し、及び、 B^1 は、L がラジカル $-C (=A^1) - B^1$ を表す式 (I) に関して上記で定義されている式 (B1)、式 (B2)、式 (B3)、式 (B4)、式 (B5)、式 (B6)、式 (B7)、式 (B8)、式 (B9)、式 (B11)、式 (B12)、式 (B13) 又は式 (B14) で表されるラジカルを表し、その際、ラジカル B^1 の中の $Q^1 \sim Q^9$ は、それぞれ、OH 又は OM を表す]

で表される化合物を、式 $Y' - R^C$ [式中、 R^C は、 B^2 のラジカル $-NR^B R^C$ において定義されているとおりであり、及び、 Y' は、脱離基 (例えば、塩素) を表す] で表される化合物と反応させて、化合物 (I) [ここで、 B^2 は、ラジカル $-NR^B R^C$ を表し、ここで、化合物 (I) の中の基 $-C (=A^2) -$ は、化合物 (I') の中の基 $-C - B^1$ と比較して、より安定な互変異性体又は好ましくは構造的に固定された互変異性体 [ここで、ラジカル $-C (=A^2) -$ は、互変異性的に、ラジカル $=C (-B^1) -$ に対応する] を表す] を生成させることを特徴とする。

【0231】

ここで、「構造的に固定された互変異性体 (structurally fixed tautomer)」は、ラジカル $-C (=A^2) - B^2$ の中で、基 B^2 が式 $-NR^B R^C$ で表されるラジカルを表す (即ち、OH、OM、SH 又は SM を表さない) ということ

を意味する。

【0232】

本発明による式 (I) で表される別の化合物は、既知調製方法と同様にして、本発明による化合物 (I) から誘導体化によって得ることができる。例えば、式 (I) [式中、 A^1 は、式 $=N-OH$ で表されるラジカルを表す] で表されるヒドロキシイミノ化合物は、場合により、化合物 (I) [ここで、 A^1 は酸素原子である] をヒドロキシルアミンと反応させることによって得ることができる。

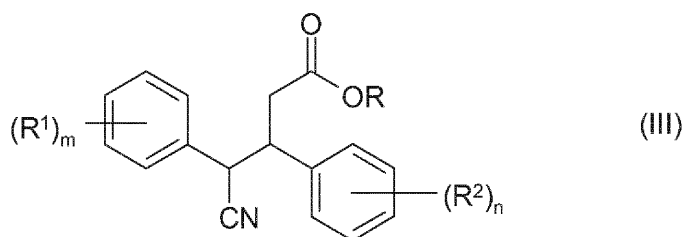
【0233】

本発明による化合物 (I) を変形態様 (a) によって調製するのに使用される、反応性基 $-C(=A^1)-Y$ を有する式 (II) で表される化合物は、対応するカルボン酸又はカルボン酸エステル、即ち、シアノブチレート (III)

10

【0234】

【化54】



20

[ここで、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ は、式 (I) において定義されているとおりであり、並びに、R は、水素又は加水分解可能なラジカルを表す]

から、既知方法と同様にして、誘導体化 (例えば、Y がハロゲン原子を表す場合には、ハロゲン化物を調製すること) によって、調製することができる。

【0235】

反応性基 $-C(=O)-Hal$ [ここで、Hal は、ハロゲン原子 (好ましくは、塩素原子) である] を有する酸ハロゲン化物をカルボン酸又はカルボン酸エステルから調製することは、原理上は、当業者には知られている；塩化チオニルを用いたカルボン酸からの酸塩化物の調製については、「Houben-Weyl, Vol. VIII (1952), pages 359-680」を、又は、塩化オキサリルを用いたカルボン酸からの酸塩化物の調製については、「Heterocycles, 26 (5), 1291-302, 1987」を参照されたい。

30

【0236】

別の反応性基 $-C(=A^1)-Y$ を調製するための類似した調製方法は、知られている。

【0237】

反応性基 $-C(=A^1)-Y$ が式 $-C(=N-R^A)-Hal$ で表される基を表す場合、式 (III) [式中、 A^1 は酸素原子を表す] で表される対応するカルボン酸又はカルボン酸エステルを使用することも可能であり得る。ここで、反応性基 $C(=O)-OR$ を有している化合物を、最初に、還元して官能性アルコール基 $(-CH_2-OH)$ を有する化合物とし、次いで、酸化して官能性アルデヒド基 $(-C(=O)H)$ を有する化合物とし、又は、それらを還元して、直接、官能性アルデヒド基 $(-C(=O)H)$ を有する化合物とする；例えば、「Istvan E. Marko et al. Eur. J. Org. Chem. 2009, 1806」と同様。

40

【0238】

反応性基 $-C(=N-R^A)-Hal$ を有している化合物を調製するために、次いで、官能性アルデヒド基 $(-C(=O)H)$ を有している化合物をハロゲン化することができる；例えば、以下のものと同様に：R. A. Whitney et al. J. Org. Chem. 1988, 53, 4074；S. Kim et al. Che

50

m. Commun. 2007, 4507; Chemistry—An Asian Journal 2008, 3, 1692; Chem. Commun. 2010, 46, 7822。

【0239】

上記式 (I I I) で表されるシアノブチレートのジアステレオマー混合物は、概ね、知られている；例えば、以下のものを参照されたい。EP-A 5341、EP-A 266725、EP-A 270830、JP 04/297454、JP 04/297455、JP 05/058979、WO 2011/003775、WO 2011/003776。

【0240】

引用されている刊行物に記載されている合成経路と同様にして、当該化合物は、有機化学の標準的な調製方法によって調製することができる。

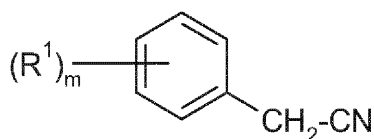
【0241】

例えば、式 (I I I) で表される化合物が得られるが、それは、

(a a) 式 (I V)

【0242】

【化55】



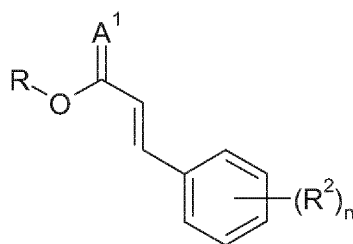
(IV)

20

で表される化合物（「シアノメチルベンゼン類」／「フェニルアセトニトリル類」）を、式 (V)

【0243】

【化56】



(V)

30

で表される化合物（ケイ皮酸誘導体）又はその塩と反応させて、式 (I I I) で表される化合物（ジアステレオマー／ラセミ化合物）を生成させることを特徴とする〔ここで、化合物 (I V) 及び化合物 (V) の中の、A¹、R、R¹、R²、m及びnは、調製しようとする式 (I I I) で表される個々の化合物において定義されているとおりである〕。

【0244】

化合物 (I I I) を調製するのに必要とされる出発物質 (I V) 及び (V) は、引用されている文献から知られているか、又は、引用されている文献と同様にして調製することができる。

40

【0245】

変形態様 (a a) による反応は、例えば、マイケル付加に関して知られている条件と類似した条件下で、マイケル付加に関して知られている方法に従って、実施することができる。該反応は、例えば、-100℃～150℃（好ましくは、-78℃～100℃）の温度で、無機溶媒又は有機溶媒の中で、一般に、塩基又は触媒又は塩基と触媒の両方の存在下で、実施する〔cf. J. Chem. Soc. (1945), p. 438〕。

【0246】

適切な溶媒は、例えば、以下のような有機溶媒である：

50

- ・ 脂肪族炭化水素類、例えば、ペンタン、ヘキサン、シクロヘキサン、又は、石油エーテル；
- ・ 芳香族炭化水素類、例えば、トルエン、*o*-キシレン、*m*-キシレン、又は、*p*-キシレン；
- ・ ハロゲン化炭化水素類、例えば、塩化メチレン、クロロホルム、又は、クロロベンゼン；
- ・ エーテル類、例えば、ジエチルエーテル、ジイソプロピルエーテル、*tert*-ブチルメチルエーテル、ジオキサン、アニソール、及び、テトラヒドロフラン（THF）；
- ・ ニトリル類、例えば、アセトニトリル、又は、プロピオニトリル；
- ・ ケトン類、例えば、アセトン、メチルエチルケトン、ジエチルケトン、及び、*tert*-ブチルメチルケトン、
- ・ アルコール類、例えば、メタノール、エタノール、*n*-プロパノール、イソプロパノール、*n*-ブタノール、及び、*tert*-ブタノール；及び、さらに、
- ・ ジメチルスルホキシド、ジメチルホルムアミド、ジメチルアセトアミド、スルホラン；
- ・ 上記有機溶媒の混合物。

【0247】

個々の場合において、無機溶媒（例えば、水）又は有機溶媒と水の混合物を使用することも適している。

【0248】

好ましい溶媒は、THF及びメタノール、並びに、それらと別の有機溶媒との混合物である。

【0249】

調製方法変形態様（aa）による反応は、好ましくは、塩基の存在下で、例えば、以下のものからなる群から選択される塩基の存在下で、実施する：無機化合物、例えば、アルカリ金属及びアルカリ土類金属の水酸化物、例えば、水酸化リチウム、水酸化ナトリウム、水酸化カリウム若しくは水酸化カルシウム、アルカリ金属及びアルカリ土類金属の酸化物、例えば、酸化リチウム、酸化ナトリウム、酸化カルシウム若しくは酸化マグネシウム、アルカリ金属及びアルカリ土類金属の水素化物、例えば、水素化リチウム、水素化ナトリウム、水素化カリウム若しくは水素化カルシウム、アルカリ金属アミド類、例えば、リチウムアミド、ナトリウムアミド若しくはカリウムアミド、アルカリ金属及びアルカリ土類金属の炭酸塩、例えば、炭酸リチウム、炭酸カリウム若しくは炭酸カルシウム、アルカリ金属重炭酸塩、例えば、重炭酸ナトリウム、又は、有機金属化合物、例えば、好ましくは、アルカリ金属アルキル類、例えば、メチルリチウム、ブチルリチウム若しくはフェニルリチウム、アルキルマグネシウムハロゲン化物、例えば、塩化メチルマグネシウム、又は、アルカリ金属及びアルカリ土類金属のアルコキシド類、例えば、ナトリウムメトキシド、ナトリウムエトキシド、カリウムエトキシド、カリウム*tert*-ブトキシド若しくはジメトキシマグネシウム。

【0250】

使用する塩基は、有機塩基、例えば、以下のものからなる群から選択される有機塩基であることも可能である：第三級脂肪族アミン類、例えば、トリメチルアミン、トリエチルアミン、トリブチルアミン、ジイソプロピルエチルアミン若しくは*N*-メチルピペリジン、又は、芳香族第三級アミン類、例えば、ピリジン若しくは置換されているピリジン類、例えば、コリジン、ルチジン若しくは4-ジメチルアミノピリジン、又は、二環式アミン類、例えば、7-メチル-1, 5, 7-トリアザビシクロ[4. 4. 0]-デカ-5-エン若しくは1, 8-ジアザビシクロ[5. 4. 0]ウンデカ-7-エン（DBU）。

【0251】

好ましい塩基は、例えば、カリウム*tert*-ブトキシド、リチウムビス（トリメチルシリル）アミド又は7-メチル-1, 5, 7-トリアザビシクロ[4. 4. 0]-デカ-5-エンである。

【0252】

塩基の量は、一般に、広い範囲内で変えることができる。例えば、当該塩基を、触媒量で、化学量論的量で、等モル量で、又は、過剰量で使用するのが適切であり得る。好ましくは、液状の有機塩基を、場合により、溶媒としても使用し得る。

【0253】

変形態様 (a a) によるマイケル付加に適している触媒は、酸性触媒、例えば、以下のものからなる群から選択される酸性触媒である：無機酸、例えば、ブレンステッド酸、例えば、フッ化水素酸、塩酸、臭化水素酸、硫酸若しくは過塩素酸、又は、ルイス酸、例えば、三フッ化ホウ素、三塩化アルミニウム、塩化鉄 (I I I)、塩化スズ (I V)、塩化チタン (I V)、スカンジウム (I I I) トリフラート若しくは塩化亜鉛 (I I)、及び

10

、さらに、有機酸、例えば、ギ酸、酢酸、プロピオン酸、シュウ酸、トルエンスルホン酸、ベンゼンスルホン酸、ショウノウスルホン酸、クエン酸若しくはトリフルオロ酢酸。

【0254】

酸性触媒の量は、一般に、広い範囲内で変えることができる。例えば、当該酸を、触媒量で、化学量論的量で、等モル量で、又は、過剰量で使用するのが適切であり得る。好ましくは、液状の酸を、場合により、溶媒としても使用し得る。

【0255】

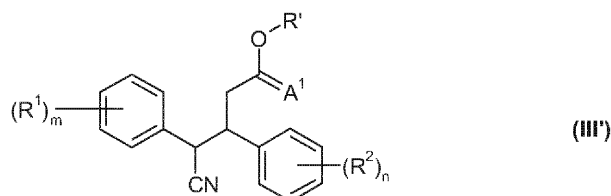
例えば、式 (I I I) で表される化合物は、エステル交換反応によっても得られ、ここで、該エステル交換反応は、

(b b) 式 (I I I')

20

【0256】

【化57】



〔式中、R' は、R に関して可能なラジカル群から選択されるラジカルであるが、調製しようとする化合物 (I I I) 中のラジカル R とは異なっている〕

30

で表される化合物を、式 $R-OH$ 〔式中、R は、式 (I I I) におけるように定義される〕で表される化合物と反応させて、式 (I I I) で表される化合物を生成させることを特徴とする〔ここで、化合物 (I I I') 中の A^1 、 R^1 、 R^2 、m 及び n は、それぞれの場合において調製しようとする式 (I I I) で表される化合物において定義されているとおりである〕。

【0257】

該エステル交換反応 (b b) は、例えば、触媒の存在下、場合により非プロトン性溶媒の存在下で、適切なアルコール $R-OH$ を用いて実施することができる。さらにまた、一般に、化学平衡が所望の生成物の方にシフトする条件 (例えば、モレキュラーシーブの存在下で、実質的に無水条件下で、例えば、大過剰量のアルコール $R-OH$ を使用する) が有利である。

40

【0258】

該反応 (エステル交換反応) は、一般に、 $0^{\circ}C \sim 180^{\circ}C$ (好ましくは、 $20^{\circ}C \sim 100^{\circ}C$) の温度で、ルイス酸又はブレンステッド酸又は酵素の存在下で、実施することができる [c f. J. Org. Chem. 2002, 67, 431]。

【0259】

適切な溶媒は、例えば、以下の有機非プロトン性溶媒である：

- 脂肪族炭化水素類、例えば、ペンタン、ヘキサン、シクロヘキサン、又は、石油エーテル；

- 芳香族炭化水素類、例えば、トルエン、o-キシレン、m-キシレン、又は、p-

50

キシレン；

- ・ ハロゲン化炭化水素類、例えば、塩化メチレン（ジクロロメタン）、クロロホルム、又は、クロロベンゼン；
- ・ エーテル類、例えば、ジエチルエーテル、ジイソプロピルエーテル、*tert*-ブチルメチルエーテル、ジオキサン、アニソール、又は、テトラヒドロフラン（THF）；
- ・ ニトリル類、例えば、アセトニトリル、又は、プロピオニトリル；
- ・ ケトン類、例えば、アセトン、メチルエチルケトン、ジエチルケトン、及び、*tert*-ブチルメチルケトン；
- ・ ジメチルスルホキシド、ジメチルホルムアミド、ジメチルアセトアミド、又は、スルホラン；又は、
- ・ 上記有機溶媒の混合物。

10

【0260】

好ましい溶媒は、アルコールR-OH（これは、同時に、当該エステル交換反応に関する反応相手として使用される）であり、場合により、上記非プロトン性有機溶媒のうちの1種類と組み合わせられてもよい。

【0261】

あるいは、別のエステル類を酸性加水分解又は塩基性加水分解に付して遊離酸（即ち、化合物（I I I'）〔ここで、Rは、いずれの場合にも、Hである〕）とし、次いで、アルコールR-OHを用いてエステル化することにより、二段階で、所望のエステルを別のエステルから得ることも可能である。

20

【0262】

式（I I I'）／R=Hで表される遊離酸からのエステル化は、例えば、慣習的な方法と同様にして、例えば、0℃～120℃（好ましくは、20℃～50℃）の温度で、場合により触媒の存在下で、実質的に無水の媒体の中で又は水（これは、当該エステル化中に形成される水を包含する）が結合するか若しくは除去される条件下で、実施することができる。適切な触媒は、無水の酸又は塩基、好ましくは、有機酸又は有機塩基である；カルボン酸をエステル化するための化学的プロセスに関するハンドブックを参照されたい；さらに、例えば、以下のものも参照されたい：J. Am. Chem. Soc. 2007, 129 (43), 13321；J. Org. Chem. 1984, 49 (22), 4287。

30

【0263】

当該エステル化に適している溶媒は、調製方法変形態様（bb）に関して上記で挙げられている非プロトン性有機溶媒であり、これは、アルコールR-OH（これは、同時に、当該エステル化に関する反応相手として使用される）を包含する。このアルコールR-OHは、場合により、上記非プロトン性有機溶媒のうちの1種類と組み合わせられてもよい。

【0264】

当該エステル化に適している触媒は、無水形態にあるか又は含水量が可能な限り少ない、調製方法変形態様（aa）（マイケル付加）に関して挙げられている塩基又は酸性若しくは塩基性の触媒である。好ましい触媒は、塩基水酸化リチウム、炭酸カリウム又は有機アミン（例えば、ピリジン、置換されているピリジン及びDBU）である。

40

【0265】

式（I I I'）〔式中、R'は、いずれの場合にも、Hではない〕で表される別のエステル類の、エステル化の前に実施されるどのような加水分解も、慣習的な方法と同様にして、例えば、0℃～120℃（好ましくは、20℃～50℃）の温度で、適切な場合には触媒の存在下で、水を含んでいる媒体／溶媒の中で、実施することができる；カルボン酸エステル類を加水分解するための化学的プロセスに関するハンドブックを参照されたい；さらに、例えば、以下のものも参照されたい：J. Am. Chem. Soc. 2007, 129 (43), 13321；J. Org. Chem. 1984, 49 (22), 4287。

50

【0266】

当該加水分解に適している溶媒は、水、又は、水を含んでいる有機溶媒（例えば、上記調製方法変形態様（a a）（マイケル付加）に基づいて挙げられている有機溶媒）であり、好ましくは、水、又は、水を含んでいる極性有機溶媒（例えば、THF）である。

【0267】

当該加水分解に適している触媒は、いずれの場合にも水を含んでいる、上記調製方法変形態様（a a）（マイケル付加）に関して挙げられている酸、塩基又は酸性若しくは塩基性の触媒である。好ましい触媒は、有機溶媒の存在下における、水性の酸及び塩基、特に、塩基（例えば、水酸化リチウム、水酸化ナトリウム、炭酸カリウム、ピリジン、置換されているピリジン及びDBU）である。

10

【0268】

当該エステル化又は当該加水分解のための触媒は、一般に、触媒量で使用する事ができる。一般に、比較的多い量（これは、等モル量及びモル過剰量を包含する）を使用することも可能である。多くの場合、溶媒として使用することも可能である。

【0269】

当該反応混合物は、慣習的な方法で、例えば、水と混合させ、相を分離させ、そして、適切な場合には、粗製生成物をクロマトグラフィー精製に付すことによって、後処理する。中間体及び最終生成物の一部は、無色又は僅かに茶色がかった粘性の油状物で得られ、その油状物は、減圧下及び中程度の高温で、精製するか又は揮発性成分を除去する。

【0270】

20

中間体及び最終生成物が固体として得られる場合、その精製は、再結晶又は温浸によって実施することも可能である。個々の化合物（I I I'）又は化合物（I I I）が上記経路によって得ることができない場合、それらは、別の化合物（I I I'）又は化合物（I I I）を誘導体化することによって調製することができる。

【0271】

式（I）で表される立体化学的に富化された化合物を調製するために、最初にジアステレオマー混合物として得られた化合物（I）を、立体異性体に分離させることができる。

あるいは、所望の立体異性体を化合物（I I I）の段階で分離及び富化させ、その後、光学的に活性な化合物（I）の段階へと至るエナンチオ選択的反応に付することも可能である。

30

【0272】

式（I）及び式（I I I）又は式（I I I'）で表される化合物は、バレロニトリル骨格の2位及び3位又はシアノブチレート骨格の3位及び4位に、2つのキラル中心を含んでおり、そして、置換パターンに応じて、1以上のさらなるキラル中心も含み得る。

【0273】

上記2つのキラル中心に起因して、4種類の立体異性体（即ち、2種類のエリトロエナンチオマー及び2種類のトレオエナンチオマー）が存在する。

【0274】

立体異性体的に富化された好ましいトレオ化合物又はトレオ-2化合物の形態にある本発明による化合物（I）を調製するためには、立体異性体の混合物から適切な方法で、トレオ化合物又は立体異性体（エナンチオマー）トレオ-2を富化させることが必要である。従って、適切な調製方法は、最初に、依然としてエリトロ異性体を含んでいるジアステレオマー混合物（I）からトレオ異性体トレオ-1及びトレオ-2を単離すること、並びに、その後、エナンチオマートレオ-1との混合物からエナンチオマートレオ-2を単離又は富化して光学分割することを含んでいる。

40

【0275】

ラセミ混合物としてのトレオ異性体の単離は、上記で記載されている慣習的な分離及び精製方法（ジアステレオマー分離）と同様に実施することができる。

【0276】

その後、立体化学的に富化されたトレオ-2異性体の形態にある式（I）で表される化

50

化合物を調製するのに適しているのは、類似したケースから当業者には一般に知られている光学分割する方法であり（c f. 立体化学のハンドブック）、例えば、混合物をジアステレオマーに分離するプロセスの後で、例えば、物理学的プロセス〔例えば、結晶化、クロマトグラフプロセス（特に、カラムクロマトグラフィー及び高圧液体クロマトグラフィー）、蒸留（適切な場合には、減圧下での蒸留）、抽出及び別のプロセス〕によって、一般的には、キラル固相上でのクロマトグラフ分離によって、エナンチオマーの残留混合物を分離させることが可能である。予備的な量又は工業規模に適しているのは、ジアステレオマー塩（ここで、該ジアステレオマー塩は、光学的に活性な酸及び適切な場合には酸性基が存在しているという条件の下で光学的に活性な塩基を使用して、ジアステレオマー混合物から得ることができる）の結晶化のようなプロセスである。

10

【0277】

ジアステレオマー塩を結晶化させることによる光学分割に適している光学的に活性な酸は、例えば、ショウノウスルホン酸、ショウノウ酸、プロモショウノウスルホン酸、キナ酸、酒石酸、ジベンゾイル酒石酸及び別の類似した酸である；光学的に活性な適切な塩基は、例えば、キニーネ、シンコニン、キニジン、ブルシン、1-（S）-フェニルエチルアミン、1-（R）-フェニルエチルアミン及び別の類似した塩基である。

【0278】

次いで、殆どの場合、水性溶媒、アルコール性溶媒又は水性-有機溶媒の中で結晶化を実施するが、その際、適切な場合には結晶種を入れた後で、溶解性が低いジアステレオマーが最初に沈澱する。その後、酸性化するか又は塩基を使用することによって、式（I）で表される化合物の一方のエナンチオマーを沈澱した塩から遊離させるか、又は、他方を結晶から遊離させる。

20

【0279】

従って、本発明は、化合物（I）のトレオ-2異性体を調製する方法も提供し、ここで、該調製方法は、化合物（I）を光学分割に付し、及び、その化合物（I）を、存在しているトレオ-2エナンチオマーの混合物に基づいて、60～100%（好ましくは、70～100%、さらに好ましくは、80～100%、特に、90～100%）の立体化学的純度で単離することを特徴とする。上記光学分割法に代わる方法として、立体化学的に純粋な出発物質を用いて開始するエナンチオ選択的プロセスも、原則として、トレオ-2エナンチオマー（I）を調製するのに適している。

30

【0280】

以下の酸は、一般に、式（I）で表される化合物の酸付加塩を調製するのに適している：ハロゲン化水素酸、例えば、塩酸又は臭化水素酸、さらに、リン酸、硝酸、硫酸、単官能性若しくは二官能性のカルボン酸及びヒドロキシカルボン酸、例えば、酢酸、マレイン酸、コハク酸、フマル酸、酒石酸、クエン酸、サリチル酸、ソルビン酸又は乳酸、及び、さらに、スルホン酸、例えば、p-トルエンスルホン酸及び1,5-ナフタレンジスルホン酸。式（I）で表される酸付加化合物は、塩を形成させるための慣習的な方法で、例えば、式（I）で表される化合物を適切な有機溶媒（例えば、メタノール、アセトン、塩化メチレン又はベンゼン）に溶解させ、0～100℃の温度で当該酸を添加することによって、容易に得ることが可能であり、そして、それらの酸付加化合物は、既知方法で、例えば、濾過し、及び、適切な場合には不活性有機溶媒で洗浄することにより精製することによって、単離することができる。

40

【0281】

式（I）で表される化合物の塩基付加塩は、好ましくは、不活性極性溶媒（例えば、水、メタノール又はアセトン）の中で、0～100℃の温度で、調製する。本発明による塩を調製するのに適している塩基の例は、以下のものである：アルカリ金属炭酸塩、例えば、炭酸カリウム、アルカリ金属水酸化物及びアルカリ土類金属水酸化物、例えば、NaOH若しくはKOH、アルカリ金属水素化物及びアルカリ土類金属水素化物、例えば、NaH、アルカリ金属アルコキシド及びアルカリ土類金属アルコキシド、例えば、ナトリウムメトキシド若しくはカリウムtert-ブトキシド、又は、アンモニア、エタノールアミ

50

ン若しくは式 $[NRR'R''R''']^+OH^-$ で表される第4級水酸化アンモニウム。

【0282】

上記調製方法変形態様において言及されている「不活性溶媒」が意味するものは、いずれの場合にも、特定の反応条件下においては不活性であるが、全ての反応条件下で不活性である必要はない溶媒である。

【0283】

上記調製方法によって合成することが可能な式(I)で表される化合物のコレクションは、並行的に調製することも可能であり、その場合、これは、手動で、部分的に自動化で、又は、完全に自動化で、実施することが可能である。これに関連して、生成物及び／若しくは中間体の反応手順、後処理又は精製を自動化することが可能である。概して、これは、例えば、「Annual Reports in Combinatorial Chemistry and Molecular Diversity: Automated Synthesis”, Volume 1, Verlag Escom, 1997」の第69～77頁においてS. H. DeWittによって記載された方法を意味するものと理解される。

【0284】

並行的な反応手順及び後処理に関しては、市販されている一連の機器、例えば、会社「Stem Corporation, Woodrolfe Road, Tollesbury, Essex, CM9 8SE, England」又は「H+P Labortechnik GmbH, Bruckmannring 28, 85764 Oberschleisheim, Germany」などによって提供されている種類の市販されている一連の機器を使用することが可能である。化合物(I)の並行精製又は調製中に生成された中間体の並行精製に関しては、とりわけ、クロマトグラフィー装置、例えば、「ISCO, Inc., 4700 Superior Street, Lincoln, NE 68504, USA」製のクロマトグラフィー装置を利用することが可能である。上記装置は、調製方法の個々の段階が自動化されているモジュール式方法を可能とするが、調製方法の段階の間では手動による操作を行わなければならない。これは、個々の自動化モジュールが例えばロボットによって操作される部分的に又は完全に一体化された自動化システムを用いて回避することができる。このタイプの自動化システムは、例えば、「Zymark Corporation, Zymark Center, Hopkinton, MA 01748, USA」から入手することができる。

【0285】

ここに記載されている方法に加えて、式(I)で表される化合物の調製は、固相担持方法(solid-phase supported method)によって部分的に又は完全に実施することが可能である。この目的のために、当該合成における個々の中間体若しくは全ての中間体、又は、対応する手順に適合させた合成における個々の中間体若しくは全ての中間体を、合成用樹脂に結合させる。固相担持合成方法は、専門的な文献、例えば、「Barry A. Bunin in “The Combinatorial Index”, Academic Press, 1998」に広範囲に記載されている。

【0286】

固相担持合成方法を使用することで、文献から知られている多くのプロトコルを実施することが可能となり、これらは、手動で又は自動化された方法で行うことができる。例えば、「IRORI, 11149 North Torrey Pines Road, La Jolla, CA 92037, USA」製の製品を使用する「ティーバッグ法(teabag method)」(Houghten, US 4,631,211; Houghten et al., Proc. Natl. Acad. Sci., 1985, 82, 5131-5135)を半自動化することができる。固相担持並行合成の自動化は、例えば、「Argonaut Technologies, In

c., 887 Industrial Road, San Carlos, CA 94070, USA」製又は「MultiSynTech GmbH, Wullener Feld 4, 58454 Witten, Germany」製の装置によって、首尾よく実施される。

【0287】

ここに記載されている調製方法で調製することによって、式(I)で表される化合物が、物質コレクション又はライブラリーの形態で生成される。従って、本発明は、式(I)で表される少なくとも2種類の化合物及びそれらの前駆物質を含んでいる、式(I)で表される化合物のライブラリーも提供する。

【0288】

本発明による式(I)で表される化合物(及び/又はそれらの塩)[これらは、上記及び下記において、総合して、「本発明による化合物」、「本発明による化合物(I)」、又は、手短に、「化合物(I)」とも称される]は、広範囲の経済的に重要な単子葉及び双子葉の一年生有害植物に対して優れた除草効力を示す。該活性化合物は、根茎、根株又は別の多年生器官から苗条を生じる、防除が困難な多年生有害植物も、良好に防除する。

【0289】

本発明は、従って、望ましくない植物を防除する方法又は植物の成長を調節する方法、好ましくは、作物植物内において望ましくない植物を防除する方法又は植物の成長を調節する方法にも関し、ここで、該方法においては、本発明による1種類以上の化合物を、該植物(例えば、有害植物、例えば、単子葉雑草若しくは双子葉雑草、又は、望ましくない作物植物)に施用するか、又は、種子(例えば、穀粒、種子、又は、栄養繁殖器官、例えば、塊茎、若しくは、芽を有する苗条部分)に施用するか、又は、当該植物がその中で若しくはその上で生育している土壌(例えば、農耕地又は非農耕地の土壌)に施用するか、又は、当該植物がそこで生育している領域(例えば、耕作領域)に施用する。本発明の化合物は、例えば、播種前(適切な場合には、さらにまた、土壌に混和することによって)、発生前又は発生後に使用することができる。本発明の化合物によって防除することが可能な何種類かの代表的な単子葉雑草植物相及び双子葉雑草植物相の具体的な例を挙げることができるが、そのように列挙されたものは、特定の種に限定されるものではない。

【0290】

以下の属の単子葉有害植物： アエギロプス属(Aegilops)、カモジグサ属(Agropyron)、ヌカボ属(Agrostis)、スズメノテッポウ属(Alopecurus)、セイヨウヌカボ属(Apera)、カラスムギ属(Avena)、ブロードキビ属(Brachiaria)、スズメノチャヒキ属(Bromus)、クリノイガ属(Cenchrus)、ツユクサ属(Commelina)、ギョウギシバ属(Cynodon)、カヤツリグサ属(Cyperus)、タツノツメガヤ属(Dactyloctenium)、メヒシバ属(Digitaria)、ヒエ属(Echinochloa)、ハリイ属(Eleocharis)、オヒシバ属(Eleusine)、スズメガヤ属(Eragrostis)、ナルコヒエ属(Eriochloa)、ウシノケグサ属(Festuca)、テンツキ属(Fimbristylis)、アメリカコナギ属(Heteranthera)、チガヤ属(Imperata)、カモノハシ属(Ischaemum)、アゼガヤ属(Leptochloa)、ドクムギ属(Lolium)、ミズアオイ属(Monochoria)、キビ属(Panicum)、スズメノヒエ属(Paspalum)、クサヨシ属(Phalaris)、アワガエリ属(Phleum)、イチゴツナギ属(Poa)、ツノアイアシ属(Rottboellia)、オモダカ属(Sagittaria)、ホタルイ属(Scirpus)、エノコログサ属(Setaria)、モロコシ属(Sorghum)。

【0291】

以下の属の双子葉雑草： イチビ属(Abutilon)、ヒユ属(Amaranthus)、ブタクサ属(Ambrosia)、アノダ属(Anoda)、カミツレ属(Anthemis)、アフアネス属(Aphanes)、ヨモギ属(Artemisia)、

10

20

30

40

50

ハマアカザ属 (*Atriplex*)、ヒナギク属 (*Bellis*)、センダングサ属 (*Bidens*)、ナズナ属 (*Capsella*)、ヒレアザミ属 (*Carduus*)、カラケツメイ属 (*Cassia*)、ヤグルマギク属 (*Centaurea*)、アカザ属 (*Chenopodium*)、アザミ属 (*Cirsium*)、セイヨウヒルガオ属 (*Convolvulus*)、チョウセンアサガオ属 (*Datura*)、ヌスビトハギ属 (*Desmodium*)、エメキス属 (*Emex*)、エゾスズシロ属 (*Erysimum*)、トウダイグサ属 (*Euphorbia*)、チシマオドリコソウ属 (*Galeopsis*)、コゴメギク属 (*Galinsoga*)、ヤエムグラ属 (*Galium*)、フヨウ属 (*Hibiscus*)、サツマイモ属 (*Ipomoea*)、ホウキギ属 (*Kochia*)、オドリコソウ属 (*Lamium*)、マメグンバイナズナ属 (*Lepidium*)、アゼトウガラシ属 (*Lindernia*)、シカギク属 (*Matricaria*)、ハッカ属 (*Mentha*)、ヤマアイ属 (*Mercurialis*)、ザクロソウ属 (*Mullugo*)、ワスレナグサ属 (*Myosotis*)、ケシ属 (*Papaver*)、アサガオ属 (*Pharbitis*)、オオバコ属 (*Plantago*)、タデ属 (*Polygonum*)、スベリヒユ属 (*Portulaca*)、キンポウゲ属 (*Ranunculus*)、ダイコン属 (*Raphanus*)、イヌガラシ属 (*Rorippa*)、キカシグサ属 (*Rotala*)、ギシギシ属 (*Rumex*)、オカヒジキ属 (*Salsola*)、キオン属 (*Senecio*)、セスバニア属 (*Sesbania*)、キンゴジカ属 (*Sida*)、シロガラシ属 (*Sinapis*)、ナス属 (*Solanum*)、ノゲシ属 (*Sonchus*)、ナガボノウルシ属 (*Sphenoclea*)、ハコベ属 (*Stellaria*)、タンポポ属 (*Taraxacum*)、グンバイナズナ属 (*Thlaspi*)、シャジクソウ属 (*Trifolium*)、イラクサ属 (*Urtica*)、クワガタソウ属 (*Veronica*)、スミレ属 (*Viola*)、オナモミ属 (*Xanthium*)。

【0292】

本発明の化合物が発芽前に土壌表面に施用される場合、雑草の実生の出芽が完全に防止されるか、又は、雑草は、子葉期に達するまで成長するが、その後成長を停止し、そして最終的には、3～4週間経過した後、完全に枯死する。

【0293】

該活性化合物が植物の緑色の部分に発生後施用される場合は、その処理の後で成長は停止し、そして、当該有害植物は、施用時点における成長段階にとどまるか、又は、一定期間の後、完全に枯死し、その結果、作物植物にとって有害である雑草との競合が、極めて早期に持続的に排除される。

【0294】

本発明の化合物は単子葉雑草及び双子葉雑草に対して優れた除草活性を示すが、経済的に重要な作物の作物植物、例えば、ラッカセイ属 (*Arachis*)、フダンソウ属 (*Beta*)、アブラナ属 (*Brassica*)、キュウリ属 (*Cucumis*)、カボチャ属 (*Cucurbita*)、ヒマワリ属 (*Helianthus*)、ニンジン属 (*Daucus*)、ダイズ属 (*Glycine*)、ワタ属 (*Gossypium*)、サツマイモ属 (*Ipomoea*)、アキノノゲシ属 (*Lactuca*)、アマ属 (*Linum*)、トマト属 (*Lycopersicon*)、ススキ属 (*Miscanthus*)、タバコ属 (*Nicotiana*)、インゲンマメ属 (*Phaseolus*)、エンドウ属 (*Pisum*)、ナス属 (*Solanum*)、ソラマメ属 (*Vicia*) の双子葉作物の作物植物、又は、ネギ属 (*Allium*)、アナナス属 (*Ananas*)、クサスギカズラ属 (*Asparagus*)、カラスムギ属 (*Avena*)、オオムギ属 (*Hordeum*)、イネ属 (*Oryza*)、キビ属 (*Panicum*)、サトウキビ属 (*Saccharum*)、ライムギ属 (*Secale*)、モロコシ属 (*Sorghum*)、ライコムギ属 (*Triticale*)、コムギ属 (*Triticum*)、トウモロコシ属 (*Zea*) [特に、トウモロコシ属 (*Zea*)、及び、コムギ属 (*Triticum*)] の単子葉植物の作物植物は、本発明の個々の化合物の構造及びその施用量に応じて、ほんの僅かにしか損傷を受けないか、又は、全く損傷を受けない。このような理由で、本発明の化合物は、農業上有用な

植物又は観賞植物などの作物植物における望ましくない植物の成長を選択的に制御するのに非常に適している。

【0295】

さらに、本発明の化合物は（それらの個々の構造及び使用される施用量に応じて）、作物植物において優れた成長調節特性を有する。それらは、植物の代謝を調節するために介入し、従って、植物の成分に対して制御された影響を及ぼすために、又は、例えば乾燥及び成長阻害を誘発することによって、収穫を促進するために、使用することができる。さらに、それらは、プロセス中に植物を枯死させることなく植物の望ましくない成長を全体的に制御及び阻害するのにも適している。植物の成長を阻害することは、例えばそれによって倒伏が低減され得るか又は完全に防止され得るので、多くの種類の単子葉作物及び双子葉作物において重要な役割を果たす。

10

【0296】

本発明の活性化化合物は、その除草特性及び植物成長調節特性によって、遺伝子組換え植物又は慣習的な突然変異誘発によって改質された植物の作物の中の有害な植物を防除するために用いることもできる。一般に、トランスジェニック植物は、特定の有利な特性に関して、例えば、特定の殺有害生物剤（特に、特定の除草剤）に対する抵抗性、植物病害又は植物病害を引き起こす生物（例えば、特定の昆虫類又は微生物、例えば、菌類、細菌類又はウイルス類）に対する抵抗性などに関して、注目すべきである。別の特別な特性は、例えば、収穫物の、量、質、貯蔵性、組成及び特定の成分などに関する。かくして、デンプン含有量が増大されているか若しくはデンプンの質が変性されているトランスジェニック植物又は収穫物が異なる脂肪酸組成を有するトランスジェニック植物が知られている。

20

【0297】

トランスジェニック作物を目的として、本発明の化合物及び／又はその塩は、有用な植物及び観賞植物（例えば、穀類、例えば、コムギ、オオムギ、ライムギ、カラスムギ、アワ、イネ及びトウモロコシ、又は、テンサイ、ワタ、ダイズ、ナタネ、ジャガイモ、トマト、エンドウ及び他の野菜類の作物）の経済的に重要なトランスジェニック作物において使用するのが好ましい。

【0298】

本発明の化合物は、除草剤として、当該除草剤の植物毒性効果に対して抵抗性であるか又は組換え手段によって抵抗性にされた有用な植物の作物において、使用するのが好ましい。

30

【0299】

本発明の活性化化合物は、その除草特性及び植物成長調節特性によって、既知遺伝子組換え植物又はまだ開発されていない遺伝子組換え植物の作物の中の有害な植物を防除するために用いることもできる。概して、トランスジェニック植物は、とりわけ有利な特性によって、例えば、特定の殺有害生物剤（主に、特定の除草剤）に対する抵抗性、植物病害又は植物病害の原因微生物（例えば、特定の昆虫類又は微生物、例えば、菌類、細菌類又はウイルス類）に対する抵抗性によって、区別される。別の特別な特性は、例えば、収穫物の量、質、貯蔵性、組成及び特定の成分に関する。かくして、デンプン含有量が増大されているか若しくはデンプンの質が変性されているトランスジェニック植物、又は、収穫物が異なった脂肪酸組成を有しているトランスジェニック植物が、知られている。別の特定の特性は、非生物的なストレス（例えば、熱、低温、渇水、塩分及び紫外線）に対する耐性又は抵抗性であり得る。

40

【0300】

本発明による式（I）で表される化合物又はそれらの塩は、有用な植物及び観賞植物（例えば、穀物、例えば、コムギ、オオムギ、ライムギ、カラスムギ、モロコシ及びアワ、イネ、キャッサバ並びにトウモロコシ、又は、テンサイ、ワタ、ダイズ、ナタネ、ジャガイモ、トマト、エンドウ及び他の野菜類の作物）の経済的に重要なトランスジェニック作物において使用するのが好ましい。

【0301】

50

本発明による式（I）で表される化合物は、除草剤として、当該除草剤の植物毒性効果に対して抵抗性であるか又は組換え手段によって抵抗性にされた有用な植物の作物の中で使用するのが好ましい。

【0302】

既存の植物と比較して改質された特性を有する新規植物を生成させる慣習的な方法は、例えば、従来の育種法及び突然変異体の生成である。別法として、改変された特性を有する新規植物は、組換え法を用いて生成させることができる（例えば、EP-A-0221044、EP-A-0131624を参照されたい）。例えば、以下のことは、いくつかの場合において記載されている：

- ・ 植物体内で合成されるデンプンを改質することを目的とする作物植物の組換え修飾（例えば、WO 92/011376、WO 92/014827、WO 91/019806）；
- ・ グルホシネートタイプの特定の除草剤に対して抵抗性を示すトランスジェニック作物植物（c f. ．例えば、EP-A-0242236、EP-A-242246）、又は、グリホセートタイプの特定の除草剤に対して抵抗性を示すトランスジェニック作物植物（WO 92/00377）、又は、スルホニル尿素タイプの特定の除草剤に対して抵抗性を示すトランスジェニック作物植物（EP-A-0257993、US-A-5013659）；
- ・ 植物を特定の害虫に対して抵抗性を示すようにするバシルス・ツリンギエンシス毒素（Bt毒素）を産生することができるトランスジェニック作物植物（例えば、ワタ）（EP-A-0142924、EP-A-0193259）；
- ・ 改変された脂肪酸組成を有するトランスジェニック作物植物（WO 91/13972）；
- ・ 耐病性を向上させる新規成分又は二次代謝産物（例えば、新規フィトアレキシンなど）を有する遺伝子組換え作物植物（EP A309862、EP A0464461）；
- ・ より多い収穫量及びより高いストレス耐性を特徴とする、光呼吸が低下した遺伝子組換え植物（EP A0305398）；
- ・ 薬学的に又は診断的に重要なタンパク質を産生するトランスジェニック作物植物（「分子ファーミング（molecular pharming）」）；
- ・ より多い収穫量又はより優れた品質によって区別されるトランスジェニック作物植物；
- ・ 例えば上記で記載した新規特性の組み合わせによって区別される、トランスジェニック作物（「遺伝子スタッキング」）。

【0303】

改質された特性を有する新規トランスジェニック植物を産生させることができる多くの分子生物学的技術は、原則として知られている；例えば、以下のものを参照されたい：「I. Potrykus and G. Spangenberg (eds.) Gene Transfer to Plants, Springer Lab Manual (1995), Springer Verlag Berlin, Heidelberg」、又は、「Christou, “Trends in Plant Science” 1 (1996) 423-431」。

【0304】

そのような組換え操作のために、突然変異誘発又はDNA配列の組換えによる配列変更を可能にする核酸分子をプラスミドの中に導入することができる。例えば、塩基置換を実施することが可能であり、部分配列を除去することが可能であり、又は、標準的な方法を用いて天然配列若しくは合成配列を加えることができる。DNA断片を互いに連結するために、その断片にアダプター又はリンカーを結合させることができる；例えば、以下のものを参照されたい：「Sambrook et al., 1989, Molecular Cloning, A Laboratory Manual, 2nd ed. 50

Cold Spring Harbor Laboratory Press, Cold Spring Harbor, NY」、又は、「Winnacker “Gene und Klonen”, VCH Weinheim 2nd edition 1996」。

【0305】

遺伝子産物の活性が低下した植物細胞の生成は、例えば、少なくとも1の適切なアンチセンスRNAを発現させることによって、又は、コサプレッション効果を達成するためのセンスRNAを発現させることによって、又は、前記遺伝子産物の転写産物を特異的に切断する少なくとも1の適切に構築されたリボザイムを発現させることによって、達成することができる。

10

【0306】

この目的のために、最初に、存在し得る全てのフランキング配列を含む、遺伝子産物の全コード配列を含んでいるDNA分子、又は、コード配列の一部（この場合、これらの部分は、細胞内においてアンチセンス効果をもたらすのに十分なほど長くなければならない）だけを含んでいるDNA分子を使用することが可能である。さらにまた、遺伝子産物のコード配列と高度に相同性を有するが、それらと完全に同一なわけではないDNA配列を用いることもできる。

【0307】

植物体内で核酸分子を発現させる場合、合成されたタンパク質は、植物細胞の任意の望ましい区画内に局在化させ得る。しかしながら、特定の区画内に局在化させるためには、例えば、特定の区画内に局在化することを保証するDNA配列をコード領域に連結させることが可能である。そのような配列は、当業者に知られている（例えば、以下のものを参照されたい：「Braun et al., EMBO J. 11 (1992), 3219-3227」、「Wolter et al., Proc. Natl. Acad. Sci. USA 85 (1988), 846-850」、「Sonnwald et al., Plant J. 1 (1991), 95-106」）。さらにまた、そのような核酸分子は、植物細胞の細胞小器官内で発現させることもできる。

20

【0308】

トランスジェニック植物細胞は、完全な植物を生じさせるための既知技術によって再生させることができる。原則として、トランスジェニック植物は、任意の望ましい植物種の植物、即ち、単子葉植物及び双子葉植物の両方であることができる。

30

【0309】

かくして、相同性の（＝天然の）遺伝子若しくは遺伝子配列の過剰発現、抑制若しくは阻害又は非相同性の（＝外来の）遺伝子若しくは遺伝子配列の発現によって、その特性が変更されているトランスジェニック植物を得ることができる。

【0310】

本発明による化合物（I）は、成長調節剤（例えば、ジカンバ）に対して抵抗性を示すトランスジェニック作物の中で、又は、必須植物酵素（例えば、アセト乳酸シンターゼ（ALS）、EPSPシンターゼ、グルタミンシンターゼ（GS）又はヒドロキシフェニルピルビン酸ジオキシゲナーゼ（HPPD））を阻害する除草剤に対して抵抗性を示すトランスジェニック作物の中で、又は、スルホニル尿素類、グリホセート、グルホシネート若しくはベンゾイルイソオキサゾール類及び類似した活性化化合物の群から選択される除草剤に対して抵抗性を示すトランスジェニック作物の中で、使用するのが好ましい。

40

【0311】

本発明による活性化化合物をトランスジェニック作物の中で使用する際には、別の作物の中で観察される有害な植物に対する効果が生じるのみではなく、多くの場合、特定のトランスジェニック作物の中における施用に対して特異的な効果、例えば、防除可能な雑草の改変されたスペクトル又は特に拡大されたスペクトル、当該施用に使用し得る改変された施用量、好ましくは、そのトランスジェニック作物が抵抗性を示す除草剤との良好な組合

50

せ可能性、並びに、そのトランスジェニック作物植物の成長及び収穫量に対する影響なども生じる。

【0312】

本発明は、従って、本発明による式（I）で表される化合物及び／又はその塩の、有用な植物の作物又は観賞植物の中の（場合により、トランスジェニック作物植物の中の）有害な植物を防除するための除草剤としての使用にも関する。

【0313】

好ましいのは、穀類（例えば、コムギ、オオムギ、ライムギ、カラスムギ、アワ及びイネ）における発生前方法又は発生後方法による使用、特に、コムギにおける発生後方法による使用である。

10

【0314】

好ましいのは、さらにまた、トウモロコシにおける発生前方法又は発生後方法による使用、特に、トウモロコシにおける発生前方法による使用である。

【0315】

好ましいのは、さらにまた、ダイズにおける発生前方法又は発生後方法による使用、特に、ダイズにおける発生後方法による使用である。

【0316】

有害な植物を防除するための、又は、植物の成長を調節するための、本発明による使用には、植物の表面上又は植物体内又は土壤中への施用後まで前駆物質（「プロドラッグ」）から式（I）で表される活性化合物又はその塩が形成されない場合も包含される。

20

【0317】

本発明は、さらにまた、有害な植物を防除するための又は植物の成長を調節するための方法（施用方法）も提供し、ここで、該方法は、有効量の式（I）で表される1種類以上の化合物又はその塩を植物（有害な植物、適切な場合には有用な植物と一緒に存在している有害な植物）の表面上に施用すること、植物の種子に施用すること、植物がその中で若しくはその上で成育する土壤に施用すること、又は、耕作されている領域に施用することを含む。

【0318】

本発明による化合物（I）は、慣習的な製剤における水和剤、乳剤、散布可能溶液剤、散粉性製品（*dusting product*）又は顆粒剤の形態で 사용할ことができる。従って、本発明は、さらにまた、式（I）で表される化合物及び／又はその塩を含んでいる除草性組成物及び植物成長調節性組成物も提供する。

30

【0319】

式（I）で表される化合物及び／又はその塩は、必要とされる生物学的及び／又は物理化学的パラメータに応じて、さまざまな方法で製剤することができる。可能な製剤としては、例えば、以下のものを挙げることができる：水和剤（WP）、水溶性（*water-soluble powders*）（SP）、水溶性濃厚剤（*water-soluble concentrates*）、乳剤（EC）、エマルジョン剤（EW）、例えば、水中油型エマルジョン剤及び油中水型エマルジョン剤、散布可能溶液剤（*sprayable solutions*）、懸濁製剤（SC）、油性分散液剤又は水性分散液剤、油混和性溶液剤、カプセル懸濁製剤（*capsule suspensions*）（CS）、散粉性製品（*dusting products*）（DP）、種子粉衣性製品（*seed-dressing products*）、ばらまき用顆粒剤及び土壤施用用顆粒剤、微粒子の形態にある顆粒剤（GR）、散布可能粒剤（*sprayable granules*）、被覆粒剤（*coated granules*）及び含浸粒剤（*adsorption granules*）、顆粒水和剤（WG）、水溶性粒剤（SG）、ULV製剤、マイクロカプセル剤、並びに、蠟剤（*waxes*）。

40

【0320】

これらの個々の製剤型は原則として知られており、そして、例えば、以下のものに記載されている：「Winnacker-Kuchler, “Chemische Tec

50

hnologie” [Chemical technology], volume 7, C. Hanser Verlag Munich, 4th ed. 1986」
、「Wade van Valkenburg, “Pesticide formulations”, Marcel Dekker, N. Y., 1973」
、「K. Martens, “Spray Drying” Handbook, 3rd ed. 1979, G. Goodwin Ltd. London」。

【0321】

不活性物質、界面活性剤、溶媒及びさらなる添加剤などの欠くことのできない製剤助剤も知られており、そして、例えば、以下のものに記載されている：「Watkins, “Handbook of Insecticide Dust Diluents and Carriers”, 2nd Ed., Darland Books, Caldwell N. J.」
、「H. v. Olphen, “Introduction to Clay Colloid Chemistry”; 2nd Ed., J. Wiley & Sons, N. Y.」
、「C. Marsden, “Solvents Guide”; 2nd Ed., Interscience, N. Y. 1963」
、「McCutcheon’s “Detergents and Emulsifiers Annual”, MC Publ. Corp., Ridgewood N. J.」
、「Sisley and Wood, “Encyclopedia of Surface Active Agents”, Chem. Publ. Co. Inc., N. Y. 1964」
、「Schonfeldt, “Grenzflächenaktive Äthylenoxidaddukte” [Interface-active Ethylene Oxide Adducts], Wiss. Verlagsgesell., Stuttgart 1976」
、「Winnacker-Kuchler, “Chemische Technologie”, volume 7, C. Hanser Verlag Munich, 4th ed. 1986」。

【0322】

水和剤は、水中で均質に分散させることが可能な調製物であり、そして、活性化合物に加えて、希釈剤又は不活性物質とは別に、さらに、イオン性及び／又は非イオン性のタイプの界面活性剤（湿潤剤、分散剤）、例えば、ポリオキシエチル化アルキルフェノール、ポリオキシエチル化脂肪族アルコール、ポリオキシエチル化脂肪族アミン、脂肪族アルコールポリグリコールエーテルスルフェート、アルカンスルホネート、アルキルベンゼンスルホネート、リグノスルホン酸ナトリウム、2, 2'-ジナフチルメタン-6, 6'-ジスルホン酸ナトリウム、ジブチルナフタレンスルホン酸ナトリウム又はナトリウムオレオイルメチルタウリネートなども含んでいる。水和剤を調製するためには、例えば、ハンマーミル、プロワミル及びエアージェットミルなどの慣習的な装置の中で、該除草活性化合物を微粉碎し、そして、同時に又はその後で、製剤補助剤と混合させる。

【0323】

乳剤は、該活性化合物を有機溶媒（例えば、ブタノール、シクロヘキサノン、ジメチルホルムアミド、キシレン又は比較的沸点が高い芳香族物質若しくは炭化水素）又はそのような有機溶媒の混合物の中に溶解させ、イオン性及び／又は非イオン性のタイプの1種類以上の界面活性剤（乳化剤）を添加することによって製造する。使用される乳化剤は、例えば、以下のものであり得る：アルキルアリールスルホン酸カルシウム塩、例えば、ドデシルベンゼンスルホン酸カルシウム、又は、非イオン性乳化剤、例えば、脂肪酸ポリグリコールエステル、アルキルアリールポリグリコールエーテル、脂肪族アルコールポリグリコールエーテル、プロピレンオキシド-エチレンオキシド縮合物、アルキルポリエーテル、ソルビタンエステル、例えば、ソルビタン脂肪酸エステル、又は、ポリオキシエチレンソルビタンエステル、例えば、ポリオキシエチレンソルビタン脂肪酸エステル。

【0324】

散粉性製品（dusting product）は、該活性化合物を微粉碎された（f

10

20

30

40

50

inely distributed) 固形物質 (例えば、タルク、自然粘土、例えば、カオリン、ベントナイト及び葉ろう石、又は、珪藻土) と一緒に粉碎することによって得られる。

【0325】

懸濁剤は、水性又は油性であることができる。それらは、例えば、商業用ビーズミルを用いて、そして、場合により界面活性剤 (例えば、別の製剤型に関して既に上記で挙げられている界面活性剤) を添加して、湿式粉碎することによって製造することができる。

【0326】

エマルジョン剤、例えば、水中油型エマルジョン剤 (EW) は、例えば、水性有機溶媒を使用し、そして、場合により界面活性剤 (例えば、別の製剤型に関して既に上記で挙げられている界面活性剤) を使用して、攪拌機、コロイドミル及び／又はスタティックミキサーを用いて調製することができる。

10

【0327】

顆粒剤は、顆粒状の吸着性不活性物質の表面上に該活性化合物を噴霧することによって、又は、担体物質 (例えば、砂、カオリナイト) 若しくは顆粒状の不活性物質の表面上に接着剤 (例えば、ポリビニルアルコール、ポリアクリル酸ナトリウム) 若しくは鉱油を用いて活性化合物濃厚物を塗布することによって、製造することができる。さらにまた、肥料顆粒を製造するための慣習的な方法で (必用に応じて、肥料との混合物として)、適切な活性化合物を造粒することも可能である。

【0328】

20

顆粒水和剤は、一般に、噴霧乾燥、流動床造粒、パン造粒、高速ミキサーを用いた混合、及び、固形不活性物質を用いない押出などの、慣習的な方法によって製造する。

【0329】

パン粒剤、流動床粒剤、押出粒剤及び噴霧粒剤の製造に関しては、例えば、「“Spray-Drying Handbook” 3rd ed. 1979, G. Goodwin Ltd., London」、「J. E. Browning, “Agglomeration”, Chemical and Engineering 1967, pages 147 ff.」、「“Perry’s Chemical Engineer’s Handbook”, 5th Ed., McGraw-Hill, New York 1973, pp. 8-57.」に記載されている方法を参照されたい。

30

【0330】

作物保護剤の製剤に関するさらなる詳細については、例えば、「G. C. Klingman, “Weed Control as a Science”, John Wiley and Sons, Inc., New York, 1961, pages 81-96」及び「J. D. Freyer, S. A. Evans, “Weed Control Handbook”, 5th ed., Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1968, pages 101-103」を参照されたい。

【0331】

40

該農薬剤は、一般に、0.1～99重量% (特に、0.1～95重量%) の式 (I) で表される化合物及び／又はその塩を含有する。

【0332】

水和剤では、該活性化合物の濃度は、例えば、約10～90重量%であり、100重量%までの残余は、慣習的な製剤成分からなる。乳剤の場合、該活性化合物の濃度は、約1～90重量%、好ましくは、5～80重量%であり得る。粉剤のタイプの製剤は、1～30重量%の活性化合物、好ましくは、通常、5～20重量%の活性化合物を含み；散布可能溶液剤は、約0.05～80重量%、好ましくは、2～50重量%の活性化合物を含む。顆粒水和剤の場合は、該活性化合物の含有量は、その活性化合物が液体形態で存在しているか又は固体形態で存在しているかに部分的に依存し、及び、どのような造粒助剤、増

50

量剤などが使用されるかに部分的に左右される。顆粒水和剤では、活性化合物の含有量は、例えば、1～95重量%、好ましくは、10～80重量%である。

【0333】

さらに、活性化合物の上記製剤は、場合により、それぞれの慣習的な粘着性付与剤、湿潤剤、分散剤、乳化剤、浸透剤、防腐剤、不凍剤、並びに、溶媒、増量剤、担体、並びに、色素、消泡剤、蒸発抑制剤、並びに、pH及び粘度に影響を及ぼす作用剤を含有する。製剤補助剤の例は、とりわけ、「Chemistry and Technology of Agrochemical Formulations', ed. D. A. Knowles, Kluwer Academic Publishers (1998)」に記載されている。

10

【0334】

式(I)で表される化合物又はその塩は、それだけで使用することができるか、又は、別の殺有害生物活性化合物(例えば、殺虫剤、殺ダニ剤、殺線虫剤、除草剤、殺菌剤)、薬害軽減剤、肥料及び/又は成長調節剤と組み合わせられた調製物(製剤)の形態で、例えば、完成された製剤として若しくはタンクミックスとして、使用することができる。そのような組合せ製剤は、組み合わせようとする活性化合物の物理的特性及び安定性を考慮しながら、上記製剤に基づいて調製することが可能である。

【0335】

混合製剤の中で又はタンクミックスの中で本発明による化合物と組合せて使用することが可能な活性化合物は、例えば、「Weed Research 26 (1986) 441-445」又は「The Pesticide Manual', 15th edition, The British Crop Protection Council and the Royal Soc. of Chemistry, 2006」及びそれらの中で引用されている文献に記載されている、例えば、アセト乳酸シンターゼ、アセチル-CoAカルボキシラーゼ、セルロースシンターゼ、エノールピルビンシキミ酸-3-リン酸シンターゼ、グルタミンシンターゼ、p-ヒドロキシフェニルピルビン酸ジオキシゲナーゼ、フィトエンデサチュラーゼ、光化学系I、光化学系II、プロトポルフィリノーゲンオキシダーゼなどを阻害することに基づく、例えば、既知活性化合物である。本発明による化合物と組み合わせることが可能な既知除草剤又は既知植物成長調節剤は、例えば、以下の活性化合物(ここで、該化合物は、国際標準化機構(ISO)による「一般名」で示されているか、又は、化学名で示されているか、又は、コード番号で示されている)であり、そして、それらは、常に、酸、塩、エステル及び異性体(例えば、立体異性体及び光学異性体)などの全ての使用形態を包含する。この場合、1種類の使用形態、又は、場合により、2種類以上の使用形態が、例として挙記されている：

20

アセトクロル、アシベンゾラル、アシベンゾラル-S-メチル、アシフルオルフェン、アシフルオルフェン-ナトリウム、アクロニフェン、アラクロール、アリドクロール、アロキシジム、アロキシジム-ナトリウム、アメトリン、アミカルバゾン、アミドクロル、アミドスルフロン、アミノシクロピラクロル、アミノシクロピラクロル-カリウム、アミノシクロピラクロル-メチル、アミノピラリド、アミトロール、スルファミン酸アンモニウム、アンシミドール、アニロホス、アスラム、アトラジン、アザフェニジン、アジムスルフロン、アジプロトリン、ベフルブタミド、ベナゾリン、ベナゾリン-エチル、ベンカルバゾン、ベンフルラリン、ベンフレセート、ベンスリド、ベンスルフロン、ベンスルフロン-メチル、ベントゾン、ベンズフェンジゾン、ベンゾビシクロン、ベンゾフェナップ、ベンゾフルオル、ベンゾイルプロップ、ビシクロピロン、ビフェノックス、ビラナホス、ビラナホス-ナトリウム、ビスピリバック、ビスピリバック-ナトリウム、ブロマシル、ブロモブチド、ブロモフェノキシム、ブロモキシニル、ブロムロン、ブミナホス、ブソキシノン(busoxinone)、ブタクロール、ブタフェナシル、ブタミホス、ブテナクロール、ブトラリン、ブトロキシジム、ブチレート、カフェンストロール、カルベタミド、カルフェントラゾン、カルフェントラゾン-エチル、クロメトキシフェン、クロランベン、クロラジホップ、クロラジホップ-ブチル、クロルブロムロン、クロルブファム、

30

40

50

クロルフェナク、クロルフェナク－ナトリウム、クロルフェンブロップ、クロルフルレノール、クロルフルレノール－メチル、クロリダゾン、クロリムロン、クロリムロン－エチル、クロルメコート－クロリド、クロルニトロフェン、クロロフタリム、クロルタールジメチル、クロロトルロン、クロルスルフロン、シニドン、シニドン－エチル、シンメトリン、シノスルフロン、クレトジム、クロジナホップ、クロジナホップ－プロパルギル、クロフェンセット、クロフェンセット－カリウム、クロマゾン、クロメブロップ、クロブロップ、クロピラリド、クロランスラム、クロランスラム－メチル、クミルロン、シアナミド、シアナジン、シクラニリド、シクロエート、シクロスルファミロン、シクロキシジム、シクルロン、シハロホップ、シハロホップ－ブチル、シベルコート、シブラジン、シプラゾール、2, 4-D、2, 4-DB、ダイムロン (daimuron) / ダイムロン (dymron)、ダラボン、ダミノジド、ダゾメット、n-デカノール、デスメジファミン、デスメトリン、デトシル－ピラゾレート (DTP)、ダイアレート、ジカンバ、ジクロベニル、ジクロルブロップ、ジクロルブロップ－P、ジクロホップ、ジクロホップ－メチル、ジクロホップ－P－メチル、ジクロスラム、ジエタチル、ジエタチル－エチル、ジフェノクスロン、ジフェンゾコート、ジフルフェニカン、ジフルフェンゾピル、ジフルフェンゾピル－ナトリウム、ジケグラック－ナトリウム、ジメフロン、ジメピペレート、ジメタクロール、ジメタメトリン、ジメテナミド、ジメテナミド－P、ジメチピン、ジメトラスルフロン、ジニトラミン、ジノセブ、ジノテルブ、ジフェナミド、ジプロペトリン、ジクワット、ジクワット－ジプロミド、ジチオピル、ジウロン、DNOC、エグリナジン－エチル、エンドタール、EPTC、エスプロカルブ、エタルフルラリン、エタメトスルフロン、エタメトスルフロン－メチル、エテホン、エチジムロン、エチオジン、エトフメセート、エトキシフェン、エトキシフェン－エチル、エトキシスルフロン、エトベンザニド、F-5331、即ち、N-[2-クロロ-4-フルオロ-5-[4-(3-フルオロプロピル)-4, 5-ジヒドロ-5-オキソ-1H-テトラゾール-1-イル]フェニル]エタンスルホンアミド、F-7967、即ち、3-[7-クロロ-5-フルオロ-2-(トリフルオロメチル)-1H-ベンゾイミダゾール-4-イル]-1-メチル-6-(トリフルオロメチル)ピリミジン-2, 4(1H, 3H)-ジオン、フェノブロップ、フェノキサブロップ、フェノキサブロップ－P、フェノキサブロップ－エチル、フェノキサブロップ－P－エチル、フェノキサスルホン、フェントラザミド、フェヌロン、フラムブロップ、フラムブロップ－M－イソプロピル、フラムブロップ－M－メチル、フラザスルフロン、フロラスラム、フルアジホップ、フルアジホップ－P、フルアジホップ－ブチル、フルアジホップ－P－ブチル、フルアゾレート、フルカルバゾン、フルカルバゾン－ナトリウム、フルセトスルフロン、フルクロラリン、フルフェナセット (チアフルアミド)、フルフェンピル、フルフェンピル－エチル、フルメトラリン、フルメツラム、フルミクロラック、フルミクロラック－ペンチル、フルミオキサジン、フルミプロピン、フルオメツロン、フルオロジフェン、フルオログリコフェン、フルオログリコフェン－エチル、フルポキサム、フルプロパシル、フルプロパネート、フルピルスルフロン、フルピルスルフロン－メチル－ナトリウム、フルレノール、フルレノール－ブチル、フルリドン、フルロクロリドン、フルロキシピル、フルロキシピル－メブチル、フルルプリミドール、フルルタモン、フルチアセット、フルチアセット－メチル、フルチアミド、ホメサフェン、ホラムスルフロン、ホルクロルフェニユロン、ホサミン、フリルオキシフェン (furyloxyfen)、ジベレリン酸、グルホシネート、グルホシネート－アンモニウム、グルホシネート－P、グルホシネート－P－アンモニウム、グルホシネート－P－ナトリウム、グリホセート、グリホセート－イソプロピルアンモニウム、H-9201、即ち、O-(2, 4-ジメチル-6-ニトロフェニル) O-エチル イソプロピルホスホルアミドチオエート、ハロサフェン (halosafen)、ハロスルフロン、ハロスルフロン－メチル、ハロキシホップ、ハロキシホップ－P、ハロキシホップ－エトキシエチル、ハロキシホップ－P－エトキシエチル、ハロキシホップ－メチル、ハロキシホップ－P－メチル、ヘキサジノン、HW-02、即ち、1-(ジメトキシホスホリル)エチル (2, 4-ジクロロフェノキシ)アセテート、イマザメタベンズ、イマザメタベンズ－メチル、イマザ

10

20

30

40

50

モックス、イマザモックスーアンモニウム、イマザピック、イマザピル、イマザピルーイ
 ソプロピルアンモニウム、イマザキン、イマザキンーアンモニウム、イマゼタピル、イマ
 ゼタピルーアンモニウム、イマゾスルフロン、イナベンフィド、インダノファン、インダ
 ジフラム、インドール酢酸（IAA）、4-インドール-3-イル酪酸（IBA）、ヨー
 ドスルフロン、ヨードスルフロンーメチルーナトリウム、イオフェンスルフロン（i o f
 e n s u l p h u r o n）、イオフェンスルフロンーナトリウム、アイオキシニル、イブ
 フェンカルバゾン、イソカルバミド、イソプロパリン、イソプロツロン、イソウロン、イ
 ソキサベン、イソキサクロルトール、イソキサフルトール、イソキサピリホップ、KU H
 -043、即ち、3-（{ [5-（ジフルオロメチル）-1-メチル-3-（トリフルオ
 ロメチル）-1H-ピラゾール-4-イル] メチル} スルホニル）-5, 5-ジメチルー
 4, 5-ジヒドロ-1, 2-オキサゾール、カルブチレート、ケトスピラドックス（k e t
 o s p i r a d o x）、ラクトフェン、レナシル、リニュロン、マレイン酸ヒドラジド
 、MCPA、MCPB、MCPBーメチル、MCPBーエチル、MCPBーナトリウム、
 メコプロップ、メコプロップーナトリウム、メコプロップーブトチル、メコプロップーP
 ーブトチル、メコプロップーP-ジメチルアンモニウム、メコプロップーP-2-エチル
 ヘキシル、メコプロップーP-カリウム、メフェナセット、メフルイジド、メピコートー
 クロリド、メソスルフロン、メソスルフロンーメチル、メソトリオン、メタベンズチアズ
 ロン、メタム、メタミホップ、メタミトロン、メタザクロール、メタゾスルフロン（m e t
 a z a s u l f u r o n）、メタゾール、メチオピルスルフロン（m e t h i o p y r
 s u l f u r o n）、メチオゾリン、メトキシフェノン、メチルダイムロン、1-メチル
 シクロプロペン、イソチオシアン酸メチル、メトベンズロン、メトブロムロン、メトラク
 ロール、S-メトラクロール、メトスラム、メトクスロン、メトリブジン、メトスルフロ
 ン、メトスルフロンーメチル、モリネート、モナリド、モノカルバミド、モノカルバミド
 硫酸二水素塩、モノリニュロン、モノスルフロン、モノスルフロンエステル、モニュロン
 、MT 128、即ち、6-クロロ-N-〔（2E）-3-クロロプロパー2-エン-1
 -イル〕-5-メチル-N-フェニルピリダジン-3-アミン、MT-5950、即ち、
 N-〔3-クロロ-4-（1-メチルエチル）フェニル〕-2-メチルペンタンアミド、
 NGGC-011、ナプロアニリド、ナプロバミド、ナプタラム、NC-310、即ち、
 4-（2, 4-ジクロロベンゾイル）-1-メチル-5-ベンジルオキシピラゾール、ネ
 ブロン、ニコスルフロン、ニピラクロフェン、ニトラリン、ニトロフェン、ニトロフェノ
 ラトーナトリウム（異性体混合物）、ニトロフルオルフェン、ノナン酸、ノルフルラゾン
 、オルベンカルブ、オルソスルファムロン、オリザリン、オキサジアルギル、オキサジア
 ゾン、オキサスルフロン、オキサジクロメフォン、オキシフルオルフェン、パクロブトラ
 ザール、パラコート、パラコートジクロリド、ペラルゴン酸（ノナン酸）、ペンジメタリ
 ン、ペンドラリン（p e n d r a l i n）、ペノキススラム、ペンタノクロル、ペントキ
 サゾン、ペルフルイドン、ペトキサミド、フェニソファム、フェンメジファム、フェンメ
 ジファムーエチル、ピクロラム、ピコリナフェン、ピノキサデン、ピペロホス、ピリフェ
 ノップ、ピリフェノップーブチル、プレチラクロール、プリミスルフロン、プリミスルフ
 ロンーメチル、プロベナゾール、プロフルアゾール、プロシアジン、プロジアミン、プリ
 フルラリン（p r i f l u r a l i n e）、プロホキシジム、プロヘキサジオン、プロヘ
 キサジオンーカルシウム、プロヒドロジャスモン、プロメトン、プロメトリン、プロバク
 ロール、プロパニル、プロパキサホップ、プロバジン、プロファム、プロピソクロール、
 プロボキシカルバゾン、プロボキシカルバゾンーナトリウム、プロピリスルフロン、プロ
 ピザミド、プロスルファリン、プロスルホカルブ、プロスルフロン、プリナクロール、ピ
 ラクロニル、ピラフルフェン、ピラフルフェンーエチル、ピラスルホトール、ピラゾリネ
 ート（ピラゾレート）、ピラゾスルフロン、ピラゾスルフロンーエチル、ピラゾキシフェ
 ン、ピリバムベンズ（p y r i b a m b e n z）、ピリバムベンズーイソプロピル、ピリ
 バムベンズープロピル、ピリベンゾキシム、ピリブチカルブ、ピリダフォル、ピリデート
 、ピリフタリド、ピリミノバック、ピリミノバックーメチル、ピリミスルファン、ピリチ
 オバック、ピリチオバックーナトリウム、ピロキサスルホン、ピロキシスラム、キンクロ

10

20

30

40

50

ラック、キンメラック、キノクラミン、キザロホップ、キザロホップーエチル、キザロホップーP、キザロホップーPーエチル、キザロホップーPーテフリル、リムスルフロン、サフルフェナシル、セクブメトン、セトキシジム、シデュロン、シマジン、シメトリン、SN-106279、即ち、(2R)-2-{[7-[2-クロロ-4-(トリフルオロメチル)フェノキシ]-2-ナフチル]オキシ}プロパン酸メチル、スルコトリオン、スルファレート(CDEC)、スルフェントラゾン、スルホメツロン、スルホメツロンーメチル、スルホセート(グリホセートートリメシウム)、スルホスルフロン、SW-065、SYN-523、SYP-249、即ち、1-エトキシ-3-メチル-1-オキソブター3-エン-2-イル 5-[2-クロロ-4-(トリフルオロメチル)フェノキシ]-2-ニトロベンゾエート、SYP-300、即ち、1-[7-フルオロ-3-オキソ-4-

10

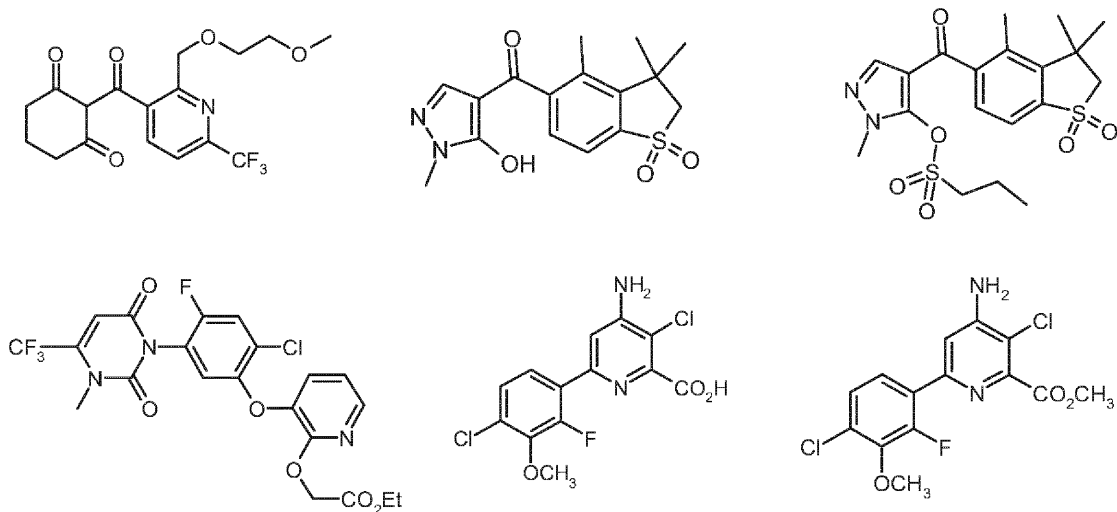
(プロパー-2-イン-1-イル)-3, 4-ジヒドロ-2H-1, 4-ベンゾオキサジン-6-イル]-3-プロピル-2-チオキソイミダゾリジン-4, 5-ジオン、テブタム、テブチウロン、テクナゼン、テフリルトリオン、テンボトリオン、テブラロキシジム、テルバシル、テルブカルブ、テルブクロル、テルブメトン、テルブチラジン、テルブトリン、テニルクロール、チアフルアミド(thiafluamide)、チアザフルロン、チアゾピル、チジアジミン、チジアズロン、チエンカルバゾン、チエンカルバゾンーメチル、チフェンスルフロン、チフェンスルフロンーメチル、チオベンカルブ、チオカルバジル、トプラメゾン、トラルコキシジム、トリアファモン(triafamone)、トリアラート、トリアスルフロン、トリアジフラム、トリアゾフェナミド、トリベヌロン、トリベヌロンーメチル、トリクロロ酢酸(TCA)、トリクロピル、トリジファン、トリエタジン、トリフロキシスルフロン、トリフロキシスルフロンーナトリウム、トリフルラリン、トリフルスルフロン、トリフルスルフロンーメチル、トリメツロン、トリネキサパック、トリネキサパッカーエチル、トリトスルフロン(tritosulfuron)、チトデフ(tsitodef)、ウニコナゾール、ウニコナゾールーP、ベルノレート、ZJ-0862、即ち、3, 4-ジクロロ-N-{2-[(4, 6-ジメトキシピリミジン-2-イル)オキシ]ベンジル}アニリン、及び、以下の化合物：

20

【0336】

【化58】

30



40

特に興味深いのは、有用な植物の作物及び観賞植物の中の有害な植物を選択的に防除することである。本発明による化合物(I)が多くの種類の作物において極めて良好な選択性から十分な選択性までを有していることが既に実証されているが、原則として、一部の作物において、及び、特に、選択性が劣る別の除草剤との混合物の場合にも、作物植物に対する薬害が生じ得る。これに関連して、式(I)で表される化合物又は式(I)で表される化合物と別の除草剤又は殺有害生物剤及び薬害軽減剤を含んでいる本発明による化合

50

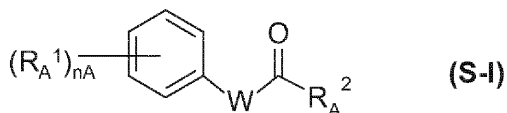
物（I）の組合せは、特に興味深い。薬害軽減剤は、解毒効果を示す量で使用されるが、そのような薬害軽減剤は、例えば、経済上重要な作物〔例えば、穀類（例えば、コムギ、オオムギ、ライムギ、トウモロコシ、イネ、アワ）、テンサイ、サトウキビ、ナタネ、ワタ及びダイズ、好ましくは、穀類〕において使用される、除草剤／殺有害生物剤の副次的な植物毒性効果を低減させる。以下の化合物の群は、例えば、化合物（I）及び化合物（I）とさらなる殺有害生物剤との組合せのための薬害軽減剤として、適している。

【0337】

（A） 式（S-I）

【0338】

【化59】



〔式中、記号及び添え字は、以下の意味を有する：

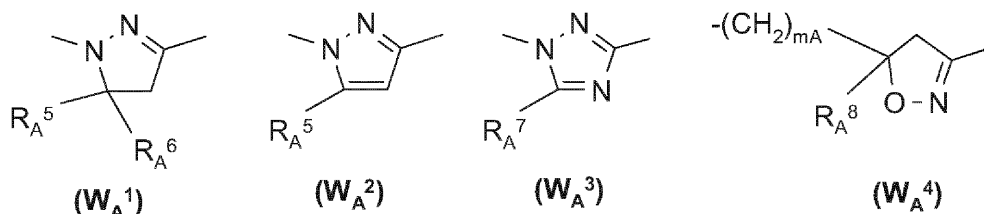
n_A は、0～5の自然数、好ましくは、0～3の自然数であり；

R_A^1 は、ハロゲン、 $(C_1 - C_4)$ -アルキル、 $(C_1 - C_4)$ -アルコキシ、ニトロ又は $(C_1 - C_4)$ -ハロアルキルであり；

W_A は、N又はOのタイプの1～3個の環ヘテロ原子を有する部分的不飽和又は芳香族の5員ヘテロ環からなる群から選択される置換されていないか又は置換されている二価ヘテロ環式ラジカル（ここで、該環中には、少なくとも1個の窒素原子及び最大で1個の酸素原子が存在している）であり、好ましくは、 $(W_A^1) \sim (W_A^4)$

【0339】

【化60】



からなる群から選択されるラジカルであり；

m_A は、0又は1であり；

R_A^2 は、 OR_A^3 、 SR_A^3 若しくは $NR_A^3 R_A^4$ であるか、又は、少なくとも1個の窒素原子と最大で3個までのヘテロ原子（好ましくは、O及びSからなる群から選択されるヘテロ原子）を有する飽和若しくは不飽和の3～7員のヘテロ環（ここで、該ヘテロ環は、（S-I）内のカルボニル基に窒素原子を介して結合しており、そして、該ヘテロ環は、置換されていないか、又は、 $(C_1 - C_4)$ -アルキル、 $(C_1 - C_4)$ -アルコキシ若しくは置換されていてもよいフェニルからなる群から選択されるラジカルで置換されている）であり、好ましくは、式 OR_A^3 、式 NHR_A^4 又は式 $N(CH_3)_2$ で表されるラジカルであり、特に、式 OR_A^3 で表されるラジカルであり；

R_A^3 は、水素であるか、又は、置換されていないか若しくは置換されている（好ましくは、合計で1～18個の炭素原子を有する）脂肪族ヒドロカルビルラジカルであり；

R_A^4 は、水素、 $(C_1 - C_6)$ -アルキル、 $(C_1 - C_6)$ -アルコキシであるか、又は、置換されているか若しくは置換されていないフェニルであり；

R_A^5 は、H、 $(C_1 - C_8)$ -アルキル、 $(C_1 - C_8)$ -ハロアルキル、 $(C_1 - C_4)$ -アルコキシ $(C_1 - C_8)$ -アルキル、シアノ又は $COOR_A^9$ （ここで、 R_A^9 は、水素、 $(C_1 - C_8)$ -アルキル、 $(C_1 - C_8)$ -ハロアルキル、 $(C_1 - C_4)$ -アルコキシ $(C_1 - C_4)$ -アルキル、 $(C_1 - C_6)$ -ヒドロキシアルキル、 $(C_3 - C_{12})$ -シクロアルキル又はトリ $(C_1 - C_4)$ -アルキルシリルである）で

10

20

30

40

50

あり；

R_A^6 、 R_A^7 、 R_A^8 は、同一であるか又は異なっていて、そして、水素、 $(C_1 - C_8)$ －アルキル、 $(C_1 - C_8)$ －ハロアルキル、 $(C_3 - C_{12})$ －シクロアルキルであるか、又は、置換されているか若しくは置換されていないフェニルである]

で表される化合物；

好ましくは：

(a) ジクロロフェニルピラゾリン－3－カルボン酸のタイプの化合物、好ましくは、以下のような化合物：1－(2, 4－ジクロロフェニル)－5－(エトキシカルボニル)－5－メチル－2－ピラゾリン－3－カルボン酸エチル (S1-1) (「メフェンピルジエチル」；「Pestic. Man.」を参照されたい) 及び関連化合物（これらは、WO 91/07874に記載されている）；

10

(b) ジクロロフェニルピラゾールカルボン酸の誘導体、好ましくは、以下のような化合物：1－(2, 4－ジクロロフェニル)－5－メチルピラゾール－3－カルボン酸エチル (S1-2)、1－(2, 4－ジクロロフェニル)－5－イソプロピルピラゾール－3－カルボン酸エチル (S1-3)、1－(2, 4－ジクロロフェニル)－5－(1, 1－ジメチルエチル)ピラゾール－3－カルボン酸エチル (S1-4)、1－(2, 4－ジクロロフェニル)－5－フェニルピラゾール－3－カルボン酸エチル (S1-5) 及び関連化合物（これらは、EP-A-333131及びEP-A-269806に記載されている）；

(c) トリアゾールカルボン酸のタイプの化合物、好ましくは、以下のような化合物：フェンクロラゾール（－エチル）、即ち、1－(2, 4－ジクロロフェニル)－5－トリクロロメチル－(1H)－1, 2, 4－トリアゾール－3－カルボン酸エチル (S1-6) 及び関連化合物（これらは、EP-A-174562及びEP-A-346620に記載されている）；

20

(d) 5－ベンジル－2－イソオキサゾリン－3－カルボン酸、5－フェニル－2－イソオキサゾリン－3－カルボン酸又は5, 5－ジフェニル－2－イソオキサゾリン－3－カルボン酸のタイプの化合物、好ましくは、以下のような化合物：5－(2, 4－ジクロロベンジル)－2－イソオキサゾリン－3－カルボン酸エチル (S1-7) 若しくは5－フェニル－2－イソオキサゾリン－3－カルボン酸エチル (S1-8) 及び関連化合物（これらは、WO 91/08202に記載されている）、又は、5, 5－ジフェニル－2－イソオキサゾリンカルボン酸エチル (S1-9) (「イソキサジフェン－エチル」) 若しくは5, 5－ジフェニル－2－イソオキサゾリンカルボン酸n－プロピル (S1-10) 若しくは5－(4－フルオロフェニル)－5－フェニル－2－イソオキサゾリン－3－カルボン酸エチル (S1-11) (これらは、特許出願WO-A-95/07897に記載されている)。

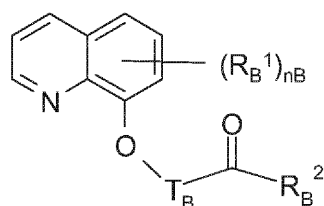
30

【0340】

(B) 式 (S-II)

【0341】

【化61】



(S-II)

〔式中、記号及び添え字は、以下の意味を有する：

R_B^1 は、ハロゲン、 $(C_1 - C_4)$ －アルキル、 $(C_1 - C_4)$ －アルコキシ、ニトロ又は $(C_1 - C_4)$ －ハロアルキルであり；

n_B は、0～5の自然数、好ましくは、0～3の自然数であり；

40

50

R_B^2 は、 OR_B^3 、 SR_B^3 若しくは $NR_B^3 R_B^4$ であるか、又は、少なくとも 1 個の窒素原子と最大で 3 個までのヘテロ原子（好ましくは、O 及び S からなる群から選択されるヘテロ原子）を有する飽和若しくは不飽和の 3～7 員のヘテロ環（ここで、該ヘテロ環は、(S-I I) 内のカルボニル基に窒素原子を介して結合しており、そして、該ヘテロ環は、置換されていないか、又は、 (C_1-C_4) -アルキル、 (C_1-C_4) -アルコキシ若しくは置換されていてもよいフェニルからなる群から選択されるラジカルで置換されている）であり、好ましくは、式 OR_B^3 、式 NHR_B^4 又は式 $N(CH_3)_2$ で表されるラジカルであり、特に、式 OR_B^3 で表されるラジカルであり；

R_B^3 は、水素であるか、又は、置換されていないか若しくは置換されている（好ましくは、合計で 1～18 個の炭素原子を有する）脂肪族ヒドロカルビルラジカルであり；

R_B^4 は、水素、 (C_1-C_6) -アルキル、 (C_1-C_6) -アルコキシであるか、又は、置換されているか若しくは置換されていないフェニルであり；

T_B は、 (C_1) 又は (C_2) -アルカンジイル鎖（ここで、該アルカンジイル鎖は、置換されていないか、又は、1 若しくは 2 の (C_1-C_4) -アルキルラジカルで置換されているか、又は、 $[(C_1-C_3)$ -アルコキシ] カルボニルで置換されている）である〕で表されるキノリン誘導体；

好ましくは：

(a) 8-キノリンオキシ酢酸のタイプの化合物 (S2)、好ましくは、(5-クロロ-8-キノリンオキシ) 酢酸 1-メチルヘキシル（一般名「クロキントセット-メキシル」）(S2-1)（「Pestic. Man.」を参照されたい）、(5-クロロ-8-キノリンオキシ) 酢酸 1, 3-ジメチル-ブター-1-イル (S2-2)、(5-クロロ-8-キノリンオキシ) 酢酸 4-アリルオキシブチル (S2-3)、(5-クロロ-8-キノリンオキシ) 酢酸 1-アリルオキシプロパー-2-イル (S2-4)、(5-クロロ-8-キノリンオキシ) 酢酸エチル (S2-5)、(5-クロロ-8-キノリンオキシ) 酢酸メチル (S2-6)、(5-クロロ-8-キノリンオキシ) 酢酸アリル (S2-7)、(5-クロロ-8-キノリンオキシ) 酢酸 2-(2-プロピリデンイミノオキシ)-1-エチル (S2-8)、(5-クロロ-8-キノリンオキシ) 酢酸 2-オキソ-プロパー-1-イル (S2-9) 及び関連化合物（これらは、EP-A-86750、EP-A-94349 及び EP-A-191736 又は EP-A-0492366 に記載されている）、並びに、さらに、それらの水和物及び塩（これらは、WO-A-2002/34048 に記載されている）；

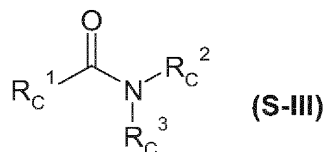
(b) (5-クロロ-8-キノリンオキシ) マロン酸のタイプの化合物、好ましくは、以下のような化合物：(5-クロロ-8-キノリンオキシ) マロン酸ジエチル、(5-クロロ-8-キノリンオキシ) マロン酸ジアリル、(5-クロロ-8-キノリンオキシ) マロン酸メチルエチル及び関連化合物（これらは、EP-A-0582198 に記載されている）。

【0342】

(C) 式 (S-I I I)

【0343】

【化62】



〔式中、記号及び添え字は、以下の意味を有する：

R_C^1 は、 (C_1-C_4) -アルキル、 (C_1-C_4) -ハロアルキル、 (C_2-C_4) -アルケニル、 (C_2-C_4) -ハロアルケニル、 (C_3-C_7) -シクロアルキルであり、好ましくは、ジクロロメチルであり；

R_C^2 、 R_C^3 は、同一であるか若しくは異なっていて、そして、水素、 (C_1-C_4)

10

20

30

40

50

)-アルキル、(C₂-C₄)-アルケニル、(C₂-C₄)-アルキニル、(C₁-C₄)-ハロアルキル、(C₂-C₄)-ハロアルケニル、(C₁-C₄)-アルキルカルバモイル-(C₁-C₄)-アルキル、(C₂-C₄)-アルケニルカルバモイル-(C₁-C₄)-アルキル、(C₁-C₄)-アルコキシ-(C₁-C₄)-アルキル、ジオキサソラニル-(C₁-C₄)-アルキル、チアゾリル、フリル、フリルアルキル、チエニル、ピペリジルであるか、又は、置換されているか若しくは置換されていないフェニルであるか、又は、R_C²とR_C³は一緒に、置換されているか若しくは置換されていないヘテロ環式環（好ましくは、オキサゾリジン環、チアゾリジン環、ピペリジン環、モルホリン環、ヘキサヒドロピリミジン環又はベンゾオキサジン環）を形成している]

で表される化合物；

10

好ましくは：

発生前薬害軽減剤（土壌作用性薬害軽減剤）としてしばしば使用されるジクロロアセトアミドのタイプの活性化化合物、例えば、

「ジクロロミド」（「Pestic. Man.」を参照されたい）（= N, N-ジアリル-2, 2-ジクロロアセトアミド）；

「R-29148」（= 3-ジクロロアセチル-2, 2, 5-トリメチル-1, 3-オキサゾリジン； 供給元：Stauffer）；

「R-28725」（= 3-ジクロロアセチル-2, 2-ジメチル-1, 3-オキサゾリジン； 供給元：Stauffer）；

「ベノキサコール」（「Pestic. Man.」を参照されたい）（= 4-ジクロロアセチル-3, 4-ジヒドロ-3-メチル-2H-1, 4-ベンゾオキサジン）；

20

「PPG-1292」（= N-アリル-N-[(1, 3-ジオキサラン-2-イル)メチル]ジクロロアセトアミド； 供給元：PPG Industries）；

「DKA-24」（= N-アリル-N-[(アリルアミノカルボニル)メチル]ジクロロアセトアミド； 供給元：Sagro-Chem）；

「AD-67」又は「MON 4660」（= 3-ジクロロアセチル-1-オキサ-3-アザスピロ[4, 5]デカン； 供給元：Nitrokemia、又は、供給元：Monsanto）；

「TI-35」（= 1-ジクロロアセチルアゼパン； 供給元：TRI-Chemical RT）；

30

「ジクロノン（diclonon）」（ジシクロノン）又は「BAS 145138」又は「LAB 145138」（= 3-ジクロロアセチル-2, 5, 5-トリメチル-1, 3-ジアザビシクロ[4. 3. 0]ノナン； 供給元：BASF）；

「フリラゾール」又は「MON 13900」（「Pestic. Man.」を参照されたい）（= (RS)-3-ジクロロアセチル-5-(2-フリル)-2, 2-ジメチルオキサゾリジン）。

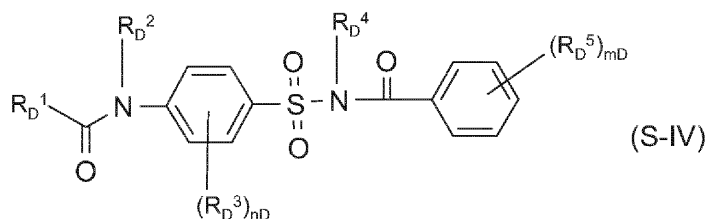
【0344】

(D) 式 (S-IV)

【0345】

【化63】

40



[式中、

R_D¹は、水素、炭化水素ラジカル、ヒドロカルボノキシラジカル、ヒドロカルボンチオラジカル又はヘテロシクリルラジカル（ここで、該ヘテロシクリルラジカルは、好まし

50

くは、炭素原子を介して結合している) [ここで、最後に挙げられている4のラジカルは、それぞれ、置換されていないか、又は、ハロゲン、シアノ、ニトロ、アミノ、ヒドロキシル、カルボキシル、ホルミル、カルボンアミド、スルホンアミド及び式 $-Z^a-R^a$ で表されるラジカルからなる群から選択される1以上の同一であるか又は異なっているラジカルで置換されており、ここで、各炭化水素部分は、好ましくは、1~20個の炭素原子を有しており、及び、置換基を含んでいる炭素含有ラジカル R_D^1 は、好ましくは、1~30個の炭素原子を有している]であり；

R_D^2 は、水素又は (C_1-C_4) -アルキルであり、好ましくは、水素であり；又は、

R_D^1 及び R_D^2 は式 $-CO-N-$ で表される基と一緒に、3~8員の飽和若しくは不飽和の環のラジカルであり； 10

R_D^3 は、同一であるか又は異なっており、そして、ハロゲン、シアノ、ニトロ、アミノ、ヒドロキシル、カルボキシル、ホルミル、 $CONH_2$ 、 SO_2NH_2 又は式 $-Z^b-R^b$ で表されるラジカルであり；

R_D^4 は、水素又は (C_1-C_4) -アルキルであり、好ましくは、Hであり；

R_D^5 は、同一であるか又は異なっており、そして、ハロゲン、シアノ、ニトロ、アミノ、ヒドロキシル、カルボキシル、 CHO 、 $CONH_2$ 、 SO_2NH_2 又は式 $-Z^c-R^c$ で表されるラジカルであり；

R^a は、炭化水素ラジカル又はヘテロシクリルラジカル [ここで、最後に挙げられている2のラジカルは、それぞれ、置換されていないか、又は、ハロゲン、シアノ、ニトロ、アミノ、ヒドロキシル、モノー $[(C_1-C_4)$ -アルキル]アミノ、ジー $[(C_1-C_4)$ -アルキル]アミノ又はアルキルラジカル (ここで、複数の隣接していない CH_2 基、好ましくは、2又は3の隣接していない CH_2 基は、いずれの場合にも、酸素原子で置き換えられる) からなる群から選択される1以上の同一であるか又は異なっているラジカルで置換されている]であり； 20

R^b 、 R^c は、同一であるか又は異なっており、そして、炭化水素ラジカル又はヘテロシクリルラジカル [ここで、最後に挙げられている2のラジカルは、それぞれ、置換されていないか、又は、ハロゲン、シアノ、ニトロ、アミノ、ヒドロキシル、ホスホリル、ハロー (C_1-C_4) -アルコキシ、モノー $[(C_1-C_4)$ -アルキル]アミノ、ジー $[(C_1-C_4)$ -アルキル]アミノ又はアルキルラジカル (ここで、複数の隣接していない CH_2 基、好ましくは、2又は3の隣接していない CH_2 基は、いずれの場合にも、酸素原子で置き換えられる) からなる群から選択される1以上の同一であるか又は異なっているラジカルで置換されている]であり； 30

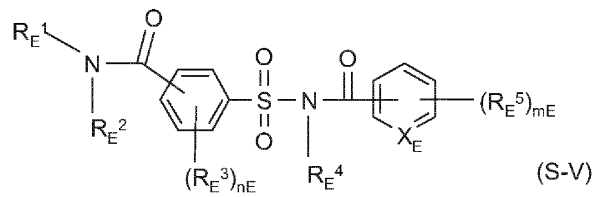
Z^a は、式 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-CO-$ 、 $-CS-$ 、 $-CO-O-$ 、 $-CO-S-$ 、 $-O-CO-$ 、 $-S-CO-$ 、 $-SO-$ 、 $-SO_2-$ 、 $-NR^*-$ 、 $-CO-NR^*-$ 、 $-NR^*-CO-$ 、 $-SO_2-NR^*-$ 又は $-NR^*-SO_2-$ で表される二価基 [ここで、当該二価基の右側に示されている結合がラジカル R^a に結合しており、及び、最後に挙げられている5のラジカルの中の R^* は、互いに独立して、それぞれ、H、 (C_1-C_4) -アルキル又はハロー (C_1-C_4) -アルキルである]であり；

Z^b 、 Z^c は、互いに独立して、直接結合であるか、又は、式 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-CO-$ 、 $-CS-$ 、 $-CO-O-$ 、 $-CO-S-$ 、 $-O-CO-$ 、 $-S-CO-$ 、 $-SO-$ 、 $-SO_2-$ 、 $-NR^*-$ 、 $-SO_2-NR^*-$ 、 $-NR^*-SO_2-$ 、 $-CO-NR^*-$ 若しくは $-NR^*-CO-$ で表される二価基 [ここで、当該二価基の右側に示されている結合がラジカル R^b 又は R^c に結合しており、及び、最後に挙げられている5のラジカルの中の R^* は、互いに独立して、それぞれ、H、 (C_1-C_4) -アルキル又はハロー (C_1-C_4) -アルキルである]であり； 40

n_D は、0~4の整数、好ましくは、0、1又は2、特に好ましくは、0又は1であり；及び、

m_D は、0~5の整数、好ましくは、0、1、2又は3、特に、0、1又は2である]で表されるN-アシルスルホンアミド及びその塩； 50

(E) 式 (S-V)
 【0346】
 【化64】



〔式中、

X_E は、CH又はNであり；

R_E^1 は、水素、ヘテロシクリル又は炭化水素ラジカル〔ここで、最後に挙げられている2のラジカルは、ハロゲン、シアノ、ニトロ、アミノ、ヒドロキシル、カルボキシル、CHO、CONH₂、SO₂NH₂及びZ^a-R^aからなる群から選択される1以上の同一であるか又は異なっているラジカルで置換されていてもよい〕であり；

R_E^2 は、水素、ヒドロキシ、(C₁-C₆)-アルキル、(C₂-C₆)-アルケニル、(C₂-C₆)-アルキニル、(C₁-C₆)-アルコキシ、(C₂-C₆)-アルケニルオキシ〔ここで、最後に挙げられている5のラジカルは、それぞれ、ハロゲン、ヒドロキシ、(C₁-C₄)-アルキル、(C₁-C₄)-アルコキシ及び(C₁-C₄)-アルキルチオからなる群から選択される1以上の同一であるか又は異なっているラジカルで置換されていてもよい〕であり；又は、

R_E^1 と R_E^2 は、それらを保持している窒素原子と一緒に、3～8員の飽和又は不飽和の環であり；

R_E^3 は、ハロゲン、シアノ、ニトロ、アミノ、ヒドロキシル、カルボキシル、CHO、CONH₂、SO₂NH₂又はZ^b-R^bであり；

R_E^4 は、水素、(C₁-C₄)-アルキル、(C₂-C₄)-アルケニル又は(C₂-C₄)-アルキニルであり；

R_E^5 は、ハロゲン、シアノ、ニトロ、アミノ、ヒドロキシル、カルボキシル、ホスホリル、CHO、CONH₂、SO₂NH₂又はZ^c-R^cであり；

R^aは、(C₂-C₂₀)-アルキルラジカル〔ここで、該アルキルラジカルは炭素は、酸素原子によって1回又は2回以上中断されている〕、ヘテロシクリル又は炭化水素ラジカル〔ここで、最後に挙げられている2のラジカルは、ハロゲン、シアノ、ニトロ、アミノ、ヒドロキシル、モノー〔(C₁-C₄)-アルキル〕-アミノ及びジ-〔(C₁-C₄)-アルキル〕-アミノからなる群から選択される1以上の同一であるか又は異なっているラジカルで置換されていてもよい〕であり；

R^b、R^cは、同一であるか又は異なっており、そして、(C₂-C₂₀)-アルキルラジカル〔ここで、該アルキルラジカルは炭素は、酸素原子によって1回又は2回以上中断されている〕、ヘテロシクリル又は炭化水素ラジカル〔ここで、最後に挙げられている2のラジカルは、ハロゲン、シアノ、ニトロ、アミノ、ヒドロキシル、ホスホリル、(C₁-C₄)-ハロアルコキシ、モノ〔(C₁-C₄)-アルキル〕-アミノ及びジ〔(C₁-C₄)-アルキル〕-アミノからなる群から選択される1以上の同一であるか又は異なっているラジカルで置換されていてもよい〕であり；

Z^aは、O、S、CO、CS、C(O)O、C(O)S、SO、SO₂、NR^d、C(O)NR^d及びSO₂NR^dからなる群から選択される二価単位であり；

Z^b、Z^cは、同一であるか又は異なっておりそして、直接結合であるか、又は、O、S、CO、CS、C(O)O、C(O)S、SO、SO₂、NR^d、SO₂NR^d及びC(O)NR^dからなる群から選択される二価単位であり；

R^dは、水素、(C₁-C₄)-アルキル又は(C₁-C₄)-ハロアルキルであり；

n_Eは、0～4の整数であり；及び、

m_Eは、XがCHである場合は、0～5の整数であり、及び、XがNである場合は、0

10

20

30

40

50

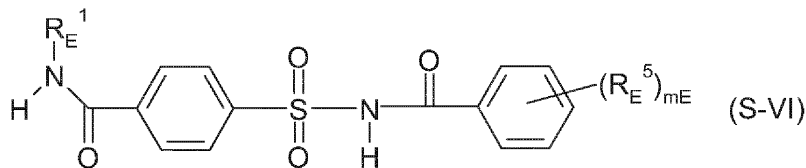
～4の整数である]

で表されるアシルスルファモイルベンズアミド、及び、さらに、適切な場合には、その塩の形態にあるアシルスルファモイルベンズアミド；

これらの中で、好ましいのは、例えば、下記式（S-VI）

【0347】

【化65】



10

で表されるアシルスルファモイルベンズアミド（これは、例えば、WO 99/16744から知られている）のタイプの化合物（さらに、それらの塩の形態にある化合物）である：

例えば、上記式において、

R_E^1 = シクロプロピル、及び、 R_E^5 = 2-OMe（「シプロスルファミド」、S3-1）；

R_E^1 = シクロプロピル、及び、 R_E^5 = 5-Cl-2-OMe（S3-2）；

R_E^1 = エチル、及び、 R_E^5 = 2-OMe（S3-3）；

R_E^1 = イソプロピル、及び、 R_E^5 = 5-Cl-2-OMe（S3-4）；並びに、

R_E^1 = イソプロピル、及び、 R_E^5 = 2-OMe（S3-5）

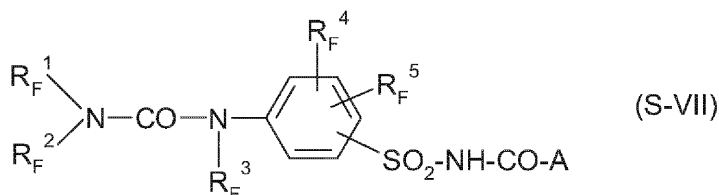
であるもの。

【0348】

（F）式（S-VII）

【0349】

【化66】



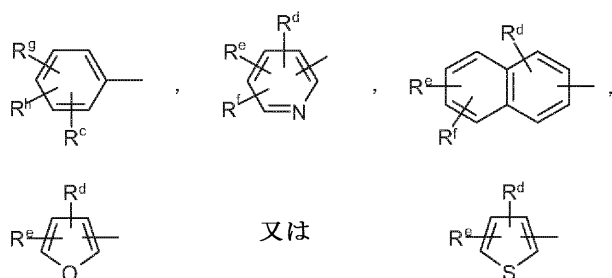
30

〔式中、

Aは、

【0350】

【化67】



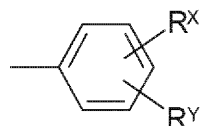
40

からなる群から選択されるラジカルであり；

R_F^1 及び R_F^2 は、互いに独立して、水素、 $(C_1 - C_8)$ - アルキル、 $(C_3 - C_8)$ - シクロアルキル、 $(C_3 - C_6)$ - アルケニル、 $(C_3 - C_6)$ - アルキニル、

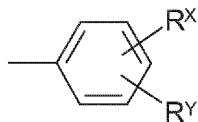
【0351】

【化 6 8】

又は、(C₁-C₄)-アルコキシによって、又は、

【0 3 5 2】

【化 6 9】

置換されている (C₁-C₄)-アルコキシ、又は、

10

であり；

R_F¹ と R_F² は一緒に、(C₄-C₆)-アルキレン橋、及び、酸素、硫黄、SO、SO₂、NH又は-N(C₁-C₄-アルキル)-で中断されている(C₄-C₆)-アルキレン橋であり；

R_F³ は、水素又は(C₁-C₄)-アルキルであり；

R_F⁴ 及び R_F⁵ は、互いに独立して、水素、ハロゲン、シアノ、ニトロ、トリフルオロメチル、C₁-C₄-アルキル、C₁-C₄-アルコキシ、C₁-C₄-アルキルチオ、C₁-C₄-アルキルスルフィニル、C₁-C₄-アルキルスルホニル、-COOR^j、-CONR^kR^m、-CORⁿ、-SO₂NR^kR^m若しくは-O-SO₂-C₁-C₄-アルキルであるか、又は、R^aとR^bと一緒に、(C₃-C₄)-アルキレン橋[ここで、該アルキレン橋は、ハロゲン又はC₁-C₄-アルキルで中断されていてもよい]若しくは(C₃-C₄)-アルケニレン橋[ここで、該アルケニレン橋は、ハロゲン又は(C₁-C₄)-アルキルで中断されていてもよい]若しくはC₄-アルカジエニレン橋[ここで、該アルカジエニレン橋は、ハロゲン又は(C₁-C₄)-アルキルで中断されていてもよい]であり；並びに、

20

R^g 及び R^h は、互いに独立して、水素、ハロゲン、C₁-C₄-アルキル、トリフルオロメチル、メトキシ、メチルチオ又は-COOR^jであり；ここで、

R^c は、水素、ハロゲン、(C₁-C₄)-アルキル又はメトキシであり；

30

R^d は、水素、ハロゲン、ニトロ、(C₁-C₄)-アルキル、(C₁-C₄)-アルコキシ、(C₁-C₄)-アルキルチオ、(C₁-C₄)-アルキルスルフィニル、(C₁-C₄)-アルキルスルホニル、-COOR^j又は-CONR^kR^mであり；

R^e は、水素、ハロゲン、C₁-C₄-アルキル、-COOR^j、トリフルオロメチル若しくはメトキシであるか、又は、R^dとR^eと一緒に、(C₃-C₄)-アルキレン橋であり；

R^f は、水素、ハロゲン又は(C₁-C₄)-アルキルであり；

R^x 及び R^y は、互いに独立して、水素、ハロゲン、(C₁-C₄)-アルキル、(C₁-C₄)-アルコキシ、(C₁-C₄)-アルキルチオ、-COOR⁴、トリフルオロメチル、ニトロ又はシアノであり；

40

R^j、R^k 及び R^m は、互いに独立して、水素又は(C₁-C₄)-アルキルであり；

R^k 及び R^m は一緒に、(C₄-C₆)-アルキレン橋であるか、又は、酸素、NH若しくは-N(C₁-C₄-アルキル)-で中断されている(C₄-C₆)-アルキレン橋であり；及び、

Rⁿ は、(C₁-C₄)-アルキル、フェニルであるか、又は、ハロゲン、(C₁-C₄)-アルキル、メトキシ、ニトロ若しくはトリフルオロメチルで置換されているフェニルである]

で表されるN-アシルスルファモイルフェニル尿素(これは、例えば、EP-A-365484から知られている)のタイプの化合物；

これらの中で、好ましいものは、以下のものである；

50

1－[4－(N－2－メトキシベンゾイルスルファモイル)フェニル]－3－メチル尿素；

1－[4－(N－2－メトキシベンゾイルスルファモイル)フェニル]－3，3－ジメチル尿素；

1－[4－(N－4，5－ジメチルベンゾイルスルファモイル)フェニル]－3－メチル尿素；

1－[4－(N－ナフトイルスルファモイル)フェニル]－3，3－ジメチル尿素；
(これらは、立体異性体及び農業において慣習的な塩を包含する)。

【0353】

(G) ヒドロキシ芳香族化合物及び芳香族－脂肪族カルボン酸誘導体の類から選択される活性化合物、例えば、3，4，5－トリアセトキシ安息香酸エチル、3，5－ジメトキシ－4－ヒドロキシ安息香酸、3，5－ジヒドロキシ安息香酸、4－ヒドロキシサリチル酸、4－フルオロサリチル酸、1，2－ジヒドロ－2－オキソ－6－トリフルオロメチルピリジン－3－カルボキサミド、2－ヒドロキシケイ皮酸、2，4－ジクロロケイ皮酸
(これらは、WO 2004084631、WO 2005015994、WO 2006007981、WO 2005016001に記載されている)。

10

【0354】

(H) 1，2－ジヒドロキノキサリン－2－オン類の類から選択される活性化合物、例えば、1－メチル－3－(2－チエニル)－1，2－ジヒドロキノキサリン－2－オン、1－メチル－3－(2－チエニル)－1，2－ジヒドロキノキサリン－2－チオン、1－(2－アミノエチル)－3－(2－チエニル)－1，2－ジヒドロキノキサリン－2－オン塩酸塩、1－(2－メチルスルホニルアミノエチル)－3－(2－チエニル)－1，2－ジヒドロキノキサリン－2－オン(これらは、WO 2005112630に記載されている)。

20

【0355】

(I) 有害な植物に対する除草作用に加えてイネなどの作物植物に対する薬害軽減作用も有している活性化合物、例えば、

「ジメピレート」又は「MY－93」(「Pestic. Man.」を参照されたい)
(= S－1－メチル－1－フェニルエチル ピペリジン－1－チオカルボキシレート)
(これは、除草剤モリネートに起因する損傷に対するイネ用の薬害軽減剤として知られている)；

30

「ダイムロン」又は「SK 23」(「Pestic. Man.」を参照されたい)
(= 1－(1－メチル－1－フェニルエチル)－3－p－トリル－尿素)(これは、除草剤イマゾスルフロンに起因する損傷に対するイネ用の薬害軽減剤として知られている)；

「クミルロン」=「JC－940」(= 3－(2－クロロフェニルメチル)－1－(1－メチル－1－フェニルエチル)尿素；JP－A－60087254を参照されたい)
(これは、ある種の除草剤に起因する損傷に対するイネ用の薬害軽減剤として知られている)；

「メトキシフェノン」又は「NK 049」(= 3，3'－ジメチル－4－メトキシベンゾフェノン)(これは、ある種の除草剤に起因する損傷に対するイネ用の薬害軽減剤として知られている)；

40

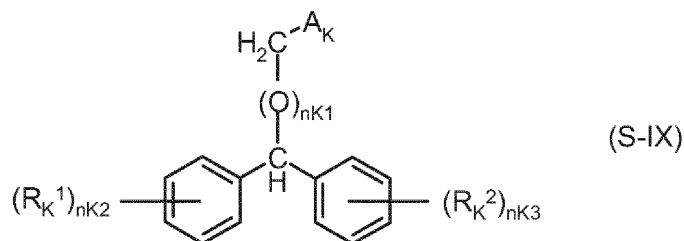
「CSB」(= 1－ブromo－4－(クロロメチルスルホニル)ベンゼン)〔CAS Reg. No. 54091-06-4；供給元 Kumiai〕(これは、ある種の除草剤に起因する損傷に対するイネ用の薬害軽減剤として知られている)。

【0356】

(K) 式(S－IX)

【0357】

【化 7 0】



〔式中、記号及び添え字は、以下の意味を有する：

R_K^1 、 R_K^2 は、互いに独立して、ハロゲン、 $(C_1 - C_4)$ - アルキル、 $(C_1 - C_4)$ - アルコキシ、 $(C_1 - C_4)$ - ハロアルキル、 $(C_1 - C_4)$ - アルキルアミノ、ジ $(C_1 - C_4)$ - アルキルアミノ又はニトロであり；

A_K は、 $COOR_K^3$ 又は $COOR_K^4$ であり；

R_K^3 、 R_K^4 は、互いに独立して、水素、 $(C_1 - C_4)$ - アルキル、 $(C_2 - C_6)$ - アルケニル、 $(C_2 - C_4)$ - アルキニル、シアノアルキル、 $(C_1 - C_4)$ - ハロアルキル、フェニル、ニトロフェニル、ベンジル、ハロベンジル、ピリジニルアルキル及びアルキルアンモニウムであり；

n_K^1 は、0 又は 1 であり；及び、

n_K^2 、 n_K^3 は、互いに独立して、0、1 又は 2 である〕

で表される化合物（これは、WO-A-1998/38856 に記載されている）；

好ましくは：

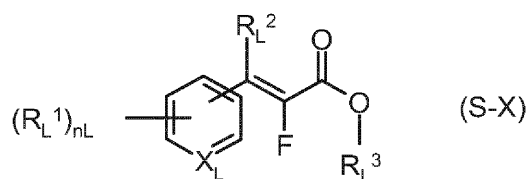
（ジフェニルメトキシ）酢酸メチル（CAS Reg. No. : 41858-19-9）。

【0358】

(L) 式 (S-X)

【0359】

【化 7 1】



〔式中、記号及び添え字は、以下の意味を有する：

X_L は、CH 又は N であり；

n_L は、 $X_L = N$ である場合、0～4 の整数であり；及び、

n_L は、 $X_L = CH$ である場合、0～5 の整数であり；

R_L^1 は、ハロゲン、 $(C_1 - C_4)$ - アルキル、 $(C_1 - C_4)$ - ハロアルキル、 $(C_1 - C_4)$ - アルコキシ、 $(C_1 - C_4)$ - ハロアルコキシ、ニトロ、 $(C_1 - C_4)$ - アルキルチオ、 $(C_1 - C_4)$ - アルキルスルホニル、 $(C_1 - C_4)$ - アルコキシカルボニル、置換されていてもよいフェニル、置換されていてもよいフェノキシであり；

R_L^2 は、水素又は $(C_1 - C_4)$ - アルキルであり；

R_L^3 は、水素、 $(C_1 - C_8)$ - アルキル、 $(C_1 - C_4)$ - アルケニル、 $(C_1 - C_4)$ - アルキニル又はアリール（ここで、上記炭素含有ラジカルは、それぞれ、置換されていないか、又は、ハロゲン及びアルコキシからなる群から選択される 1 以上の（好ましくは、最大で 3 までの）同一であるか又は異なっているラジカルで置換されている）である〕

で表される化合物又はその塩（これは、WO A-98/27049 に記載されている）。

【0360】

10

20

30

40

50

(M) 3-(5-テトラゾリルカルボニル)-2-キノロン類の類から選択される活性化合物、例えば、1,2-ジヒドロ-4-ヒドロキシ-1-エチル-3-(5-テトラゾリルカルボニル)-2-キノロン(CAS Reg. No.: 219479-18-2)、1,2-ジヒドロ-4-ヒドロキシ-1-メチル-3-(5-テトラゾリルカルボニル)-2-キノロン(CAS Reg. No.: 95855-00-8)(これらは、WO-A-1999000020に記載されている)。

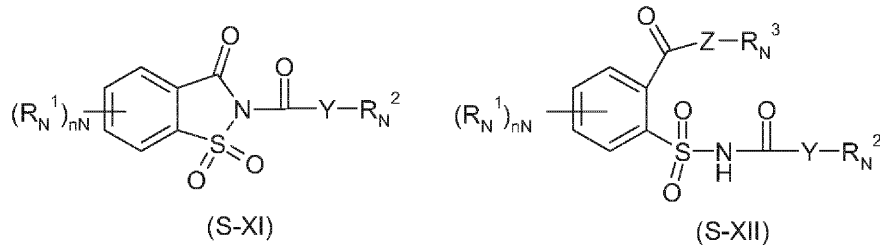
【0361】

(N) 式(S-XI)又は式(S-XII)

【0362】

【化72】

10



〔式中、

R_N^1 は、ハロゲン、 (C_1-C_4) -アルキル、メトキシ、ニトロ、シアノ、 CF_3 又は OCF_3 であり；

20

Y、Zは、互いに独立して、O又はSであり；

n_N は、0～4の整数であり；

R_N^2 は、 (C_1-C_{16}) -アルキル、 (C_2-C_6) -アルケニル、 (C_3-C_6) -シクロアルキル、アリール、ベンジル、ハロベンジルであり；

R_N^3 は、水素、 (C_1-C_6) -アルキルである〕

で表される化合物(これらは、WO-A-2007023719及びWO-A-2007023764に記載されている)。

【0363】

(O) 以下のものからなる群から選択される1種類以上の化合物：

1,8-ナフタル酸無水物、O,O-ジエチル S-2-エチルチオエチル ホスホロジチオエート(ジスルホトン)、メチルカルバミン酸4-クロロフェニル(メフェネート(mephenate))、O,O-ジエチル O-フェニル ホスホロジチオエート(ジエトレート(dietholate))、4-カルボキシ-3,4-ジヒドロ-2H-1-ベンゾピラン-4-酢酸(CL-304415; CAS Reg. No.: 31541-57-8)、2-プロペニル 1-オキサ-4-アザスピロ[4.5]デカン-4-カルボジチオエート(MG-838; CAS Reg. No.: 133993-74-5)、[(3-オキソ-1H-2-ベンゾチオピラン-4(3H)-イリデン)メトキシ]酢酸メチル(WO A98/13361; CAS Reg. No.: 205121-04-6)、シアノメトキシイミノ(フェニル)アセトニトリル(シオメトリニル)、1,3-ジオキサラン-2-イルメトキシイミノ(フェニル)アセトニトリル(オキサベトリニル)、4'-クロロ-2,2,2-トリフルオロアセトフェノン O-1,3-ジオキサラン-2-イルメチルオキシム(フルキソフェニム)、4,6-ジクロロ-2-フェニルピリミジン(フェンクロリム)、2-クロロ-4-トリフルオロメチル-1,3-チアゾール-5-カルボン酸ベンジル(フルラゾール)、2-ジクロロメチル-2-メチル-1,3-ジオキサラン(MG-191)[これらは、いずれの場合にも、可能な立体異性体を包含しており、及び、農業上慣習的な塩も包含している]。

30

40

【0364】

除草剤(混合物)と薬害軽減剤の重量比は、一般に、除草剤の施用量と当該薬害軽減剤の効力に依存し、そして、広い範囲内で、例えば、200:1～1:200の範囲内で、好ましくは、100:1～1:100の範囲内で、特に、20:1～1:20の範囲内で

50

、さまざまであり得る。化合物（I）又はその混合物と同様に、上記薬害軽減剤も、さらなる除草剤／殺有害生物剤と一緒に製剤することが可能であり、そして、除草剤を含んでいる完成された製剤又はタンクミックスとして供給及び使用することができる。

【0365】

施用に際しては、市販されている形態で存在している除草剤製剤又は除草剤／薬害軽減剤製剤を、適切な場合には、慣習的な方法で希釈する。例えば、水和剤、乳剤、分散製剤（dispersion）及び顆粒水和剤の場合には、水を用いて希釈する。粉剤、土壤施用用粒剤又はばらまき用粒剤の形態にある調製物及び散布可能溶液剤（sprayable solution）は、通常、施用の前に別の不活性物質でさらに希釈することはない。

10

【0366】

式（I）で表される化合物及び／又はそれらの塩の必要とされる施用量は、外部条件（例えば、とりわけ、温度、湿度及び使用する除草剤の種類など）に応じて変わる。それは、広い範囲内でさまざまであり得る。有害な植物を防除するために除草剤を施用する場合、それは、例えば、0.001～10.0 kg/haの範囲内又はそれ以上の活性物質、好ましくは、0.005～5 kg/haの範囲内の活性物質、特に、0.01～1 kg/haの範囲内の活性物質である。このことは、発生前施用と発生後施用の両方に当てはまる。

【0367】

上記で記載されているような作物植物（好ましくは、穀類植物、例えば、コムギ、オオムギ、ライムギ、ライコムギ、アワ、イネ又はトウモロコシ）のための植物成長調節剤として、例えば、稈安定剤（culm stabilizer）として、使用する場合、その施用量は、例えば、0.001～2 kg/hの範囲内又はそれ以上の活性物質、好ましくは、0.005～1 kg/hの範囲内の活性物質、特に、10～500 g/haの範囲内の活性物質、極めて特に、20～250 g/haの範囲内の活性物質である。（このことが記載されるべきか、チェックされたい）。このことは、発生前方法による施用と発生後方法による施用の両方に当てはまるが、発生後処理が一般に好ましい。

20

【0368】

稈安定剤としての施用は、植物の成育の様々な段階で実施することができる。好ましいのは、例えば、分げつ相（tillering phase）の後の縦成長の初めにおける施用である。

30

【0369】

代替的に、植物成長調節剤としての施用は、種子を処理することによって行うのも可能であり、ここで、種子の処理には、種子を粉衣又はコーティングするためのさまざまな技術が包含される。ここで、その施用量は、特定の技術に依存し、そして、予備試験によって決定することができる。

【0370】

典型的な方法において、一般式（I）で表される化合物の幾つかの合成実施例について、以下に記載する。該実施例においては、量（百分率を包含する）は、特に別途示されていない限り、重量を示している。

40

【0371】

記号「>」及び「<」は、それぞれ、「・・・よりも大きい」及び「・・・よりも小さい」を意味している。記号「≥」は「・・・以上」を意味し、記号「≤」は「・・・以下」を意味している。

【0372】

本明細書の記述及び実施例に関連して、用語「R」及び「S」が、式（I）で表される立体異性体のキラル中心の絶対配置に関して与えられている場合、このRS命名法は、特に異なって定義されていない限り、カーン－インゴールド－プレローグ則に従う。

【実施例】

【0373】

50

(A) 合成実施例

実施例 A 1: 5-(2,6-ジオキソシクロヘキシル)-2-(3-フルオロフェニル)-3-(4-フルオロフェニル)-5-オキソペンタンニトリル [表 2、実施例 I a 20] のエリトロ/トレオジアステレオマー混合物の調製

段階 1: 4-シアノ-4-(3-フルオロフェニル)-3-(4-フルオロフェニル)ブタン酸メチル

保護ガス (Ar) 下、15.0 mL のトルエンの中の 0.820 g (4.55 mmol) の 3-(4-フルオロフェニル)アクリル酸メチルに 0.767 g (5.0 mmol) の (3-フルオロフェニル)アセトニトリル及び 0.1 mL のナトリウムメトキシド溶液 (メタノール中 30%) を添加し、その混合物を密閉容器内で 65℃ で 15 時間撹拌した。その溶媒を減圧下で除去し、残渣を取って酢酸エチルの中に入れ、その混合物をいずれの場合にも 25 mL の水で 2 回洗浄した。その有機相を合して硫酸ナトリウムで脱水し、溶媒を減圧下で除去した。その残渣をシリカゲルクロマトグラフィー (酢酸エチル/ヘプタン = 20:80) に付して、0.950 g (理論値の 57%) のジアステレオ異性の 4-シアノ-4-(3-フルオロフェニル)-3-(4-フルオロフェニル)ブタン酸メチル [エリトロ:トレオ = 54:46 (CDCl₃ 中の ¹H-NMR の 3.66 ppm 及び 3.56 ppm におけるメチル一重項の積分に基づく)] を得た。

段階 2: 4-シアノ-3-(4-フルオロフェニル)-4-(3-フルオロフェニル)ブタン酸

保護ガス (Ar) 下、50.0 mL のメタノールの中の 1.75 g (5.55 mmol) の 4-シアノ-4-(3-フルオロフェニル)-3-(4-フルオロフェニル)ブタン酸メチルに 10 mL の 2 モル水酸化ナトリウム水溶液を添加し、その混合物を 25℃ で 8 時間撹拌した。メタノールを減圧下で除去した。その残渣を濃塩酸を用いて酸性化し (pH = 3)、いずれの場合にも 15 mL のジクロロメタンで 3 回抽出した。その有機相を合して硫酸ナトリウムで脱水し、溶媒を減圧下で除去した。これにより、1.62 g (理論値の 96.9%) の標題化合物が無色の結晶の形態 [エリトロ:トレオ = 49:51 (CDCl₃ 中の ¹H-NMR の 2.60 ppm 及び 2.85 ppm における多重項の比較)] で得られた。

【0374】

段階 3: 4-シアノ-4-(3-フルオロフェニル)-3-(4-フルオロフェニル)ブタン酸 3-オキソシクロヘキサ-1-エン-1-イル

0.452 g (1.5 mmol) の 4-シアノ-3-(4-フルオロフェニル)-4-(3-フルオロフェニル)ブタン酸に 1.79 g (15 mmol) の塩化チオニルを添加し、その混合物を 80℃ で 1.5 時間撹拌した。過剰な塩化チオニルを減圧下で除去した。このようにして濃縮された反応混合物 (これは、酸塩化物を含んでいる) を 3 mL のジクロロメタンに溶解させ、そして、0℃ で、ジクロロメタン (10 mL) の中の 0.252 g (2.25 mmol) の 1,3-シクロヘキサジオンと 0.304 g (3 mmol) のトリエチルアミンの混合物に滴下して加えた (約 30 分)。25℃ で 3 時間撹拌した後、溶媒を減圧下で除去し、その残渣を取って酢酸エチルの中に入れ、その混合物をいずれの場合にも 25 mL の水で 2 回洗浄した。その有機相を合して硫酸ナトリウムで脱水し、溶媒を減圧下で除去した。

【0375】

得られた粗製生成物は、段階 4 においてさらに反応させた。

【0376】

段階 4: 5-(2,6-ジオキソシクロヘキシル)-2-(3-フルオロフェニル)-3-(4-フルオロフェニル)-5-オキソペンタンニトリル

5.0 mL のアセトニトリルの中の 0.593 g (1.50 mmol) の 4-シアノ-4-(3-フルオロフェニル)-3-(4-フルオロフェニル)ブタン酸 3-オキソシクロヘキサ-1-エン-1-イルに 0.013 g (0.15 mmol) のアセトシアノヒドリン及び 0.273 g (2.0 mmol) のトリエチルアミンを添加し、その混合物を密

10

20

30

40

50

閉容器内で25℃で一晩攪拌した。溶媒を減圧下で除去し、その残渣を取って酢酸エチルの中に入れ、その混合物をいずれの場合にも25mLの水で2回洗浄した。その有機相を合して硫酸ナトリウムで脱水し、溶媒を減圧下で除去した。固相[Nucleodur C18、HTec C18、10μm、(250×50)-mmカラム]での分取クロマトグラフィー[(90mL/分 アセトニトリル/水(トリフルオロ酢酸 0.05%)]に付して、5-(2,6-ジオキソシクロヘキシル)-2-(3-フルオロフェニル)-3-(4-フルオロフェニル)-5-オキソペンタニトリルのエリトロ/トレオジアステレオマー混合物[エリトロ:トレオ=63:37(CDC1₃中の¹H-NMRの4.30ppm及び4.03ppmにおける二重項の積分に基づく)](0.267g(理論値の45%))を得た。

10

CDC1₃中の¹H-NMR

エリトロ:17.47(s, 1H), 4.30(d, 1H);

トレオ:17.46(s, 1H), 4.03(d, 1H);

質量スペクトル:分子ピーク 394[M-1]⁺;

HPLCにおける保持時間:1.58分。

【0377】

実施例A2: 2-[3-(4-クロロフェニル)-4-シアノ-4-(3-フルオロフェニル)ブタノイル]-3-オキソシクロヘキサ-1-エン-1-イル 2,2-ジメチルプロパノエートのジアステレオマー混合物[表2、実施例Iaa32]

3.0mLのジクロロメタンの中の0.180g(0.43mmol)の5-(2,6-ジオキソシクロヘキシル)-2-(3-フルオロフェニル)-3-(4-クロロフェニル)-5-オキソペンタニトリルに、0.091g(0.656mmol)のトリエチルアミンを添加し、及び、0℃で、0.069g(0.568mmol)の2,2-ジメチルプロパノイルクロリドを添加し、その混合物を密閉容器内で25℃で3時間攪拌した。溶媒を減圧下で除去し、その残渣を取って酢酸エチルの中に入れ、その混合物をいずれの場合にも25mLの水で2回洗浄した。その有機相を合して硫酸ナトリウムで脱水し、溶媒を減圧下で除去した。固相[Nucleodur C18、HTec C18、10μm、(250×50)-mmカラム]での分取クロマトグラフィー[(90mL/分 アセトニトリル/水(トリフルオロ酢酸 0.05%)]に付して、2-[3-(4-クロロフェニル)-4-シアノ-4-(3-フルオロフェニル)ブタノイル]-3-オキソシクロヘキサ-1-エン-1-イル 2,2-ジメチルプロパノエートのエリトロ/トレオジアステレオマー混合物[エリトロ:トレオ=70:30(CDC1₃中の¹H-NMRの1.15ppm及び1.06ppmにおけるtert-ブチル重項の積分に基づく)](114mg(理論値の8%))を得た。

20

30

【0378】

実施例A3: 2,6-ジシアノ-6-(3-フルオロフェニル)-5-(4-フルオロフェニル)-3-オキソヘキサ酸メチルのジアステレオマー混合物[表26、実施例IB8aa1]

段階1: 4-シアノ-4-(3-フルオロフェニル)-3-(4-フルオロフェニル)ブタン酸メチル

40

保護ガス(Ar)下、15.0mLのトルエンの中の0.820g(4.55mmol)の3-(4-フルオロフェニル)アクリル酸メチルに0.767g(5.0mmol)の(3-フルオロフェニル)アセトニトリル及び0.1mLのナトリウムメトキシド溶液(メタノール中30%)を添加し、その混合物を密閉容器内で65℃で15時間攪拌した。溶媒を減圧下で除去し、その残渣を取って酢酸エチルの中に入れ、その混合物をいずれの場合にも25mLの水で2回洗浄した。その有機相を合して硫酸ナトリウムで脱水し、溶媒を減圧下で除去した。その残渣をシリカゲルクロマトグラフィー(酢酸エチル/ヘプタン=20:80)に付して、4-シアノ-(3-フルオロフェニル)-3-(4-フルオロフェニル)ブタン酸メチルのエリトロ/トレオジアステレオマー混合物[エリトロ:トレオ=54:46(CDC1₃中の¹H-NMRの3.66ppm及び3.56ppm

50

におけるメチルー重項の積分に基づく)〕 (0.950 g (理論値の57%))を得た。

【0379】

段階2: 4-シアノ-3-(4-フルオロフェニル)-4-(3-フルオロフェニル)ブタン酸

保護ガス(Ar)下、50.0 mLのメタノールの中の1.75 g (5.55 mmol)の4-シアノ-3-(4-フルオロフェニル)-4-(3-フルオロフェニル)ブタン酸メチル(実施例A1)に10 mLの2モル水酸化ナトリウム水溶液を添加し、その混合物を25℃で8時間攪拌した。メタノールを減圧下で除去した。その残渣を濃塩酸を用いて酸性化し(pH=3)、いずれの場合にも15 mLのジクロロメタンで3回抽出した。その有機相を合して硫酸ナトリウムで脱水し、溶媒を減圧下で除去した。これにより、1.62 g (理論値の96.9%)の標題化合物が無色の結晶の形態〔エリトロ:トレオ=49:51(CDC1₃中の¹H-NMRの2.60 ppm及び2.85 ppmにおける多重項の比較に基づく)〕で得られた。

【0380】

段階3: 2,6-ジシアノ-6-(3-フルオロフェニル)-5-(4-フルオロフェニル)-3-オキソヘキサン酸メチル

0.603 g (2.0 mmol)の4-シアノ-3-(4-フルオロフェニル)-4-(3-フルオロフェニル)ブタン酸に1.79 g (20 mmol)の塩化チオニルを添加し、その混合物を80℃で1.5時間攪拌した。過剰な塩化チオニルを減圧下で除去した(残渣=酸塩化物)。0.297 g (3.00 mmol)のシアノ酢酸メチル、0.012 g (0.1 mmol)の4-ジメチルアミノピリジン及び該酸塩化物をジクロロメタン(5 mL)に溶解させ、それを、10 mLのジクロロメタンの中の0.405 g (4.00 mmol)のトリエチルアミンに添加し、その混合物を25℃で2時間攪拌した。次いで、50 mLの酢酸エチルを添加し、その混合物をそれぞれ25 mLの水で2回抽出した。その有機相を合して硫酸ナトリウムで脱水し、溶媒を減圧下で除去した。固相[Nucleodur C18, HTec C18, 10 µm, (250×50)-mmカラム]での分取クロマトグラフィー〔(90 mL/分 アセトニトリル/水(トリフルオロ酢酸 0.05%))〕に付して、2,6-ジシアノ-6-(3-フルオロフェニル)-5-(4-フルオロフェニル)-3-オキソヘキサン酸メチルのエリトロ/トレオジアステレオマー混合物〔エリトロ:トレオ=52:48(CDC1₃中の¹H-NMRの4.09 ppm及び3.99 ppmにおける二重項の積分に基づく)〕 (0.019 g (理論値の8%))を得た。

【0381】

実施例A4: 2-アセチル-6-シアノ-6-(3-フルオロフェニル)-5-(4-フルオロフェニル)-3-オキソヘキサン酸メチルのジアステレオマー [表27、実施例IBXaa20]

段階1: 4-シアノ-4-(3-フルオロフェニル)-3-(4-フルオロフェニル)ブタン酸メチル

保護ガス(Ar)下、15.0 mLのトルエンの中の0.820 g (4.55 mmol)の3-(4-フルオロフェニル)アクリル酸メチルに0.767 g (5.0 mmol)の(3-フルオロフェニル)アセトニトリル及び0.1 mLのナトリウムメトキシド溶液(メタノール中30%)を添加し、その混合物を密閉容器内で65℃で15時間攪拌した。その溶媒を減圧下で除去し、残渣を取って酢酸エチルの中に入れ、その混合物をいずれの場合にも25 mLの水で2回洗浄した。その有機相を合して硫酸ナトリウムで脱水し、溶媒を減圧下で除去した。その残渣をシリカゲルクロマトグラフィー(酢酸エチル/ヘプタン=20:80)に付して、4-シアノ-(3-フルオロフェニル)-3-(4-フルオロフェニル)ブタン酸メチルのエリトロ/トレオジアステレオマー混合物〔エリトロ:トレオ=54:46(CDC1₃中の¹H-NMRの3.66 ppm及び3.56 ppmにおけるメチルー重項の積分に基づく)〕 (0.950 g (理論値の57%))を得た。

段階2: 4-シアノ-3-(4-フルオロフェニル)-4-(3-フルオロフェニル)

ブタン酸

保護ガス (Ar) 下、50.0 mL のメタノールの中の 1.75 g (5.55 mmol) の 4-シアノ-3-(4-フルオロフェニル)-4-(3-フルオロフェニル)ブタン酸メチル (実施例 A1) に 10 mL の 2 モル水酸化ナトリウム水溶液を添加し、その混合物を 25℃ で 8 時間攪拌した。メタノールを減圧下で除去した。その残渣を濃塩酸を用いて酸性化し (pH = 3)、いずれの場合にも 15 mL のジクロロメタンで 3 回抽出した。その有機相を合して硫酸ナトリウムで脱水し、溶媒を減圧下で除去した。これにより、1.62 g (理論値の 96.9%) の標題化合物が無色の結晶の形態 [エリトロ：トレオ = 49：51 (CDCl₃ 中の ¹H-NMR の 2.60 ppm 及び 2.85 ppm における多重項の比較に基づく)] で得られた。

10

【0382】

段階 3： 2-アセチル-6-シアノ-6-(3-フルオロフェニル)-5-(4-フルオロフェニル)-3-オキソヘキサン酸メチル

0.603 g (2.0 mmol) の 4-シアノ-3-(4-フルオロフェニル)-4-(3-フルオロフェニル)ブタン酸に 2.379 g (20 mmol) の塩化チオニルを添加し、その混合物を 80℃ で 1.5 時間攪拌した。過剰な塩化チオニルを減圧下で除去し、それにより、当該酸塩化物が残渣として得られた。0℃ で、ジクロロメタン (5 mL) の中の 0.190 g (2.00 mmol) の塩化マグネシウムと 0.464 g (4.00 mmol) の 3-オキソブタン酸メチルに 0.316 g (4.00 mmol) のピリジンを添加し、次いで、ジクロロメタン (5 mL) に溶解させた該酸塩化物を添加し、その混合物を 25℃ で 1 時間攪拌した。その残渣を取って酢酸エチルの中に入れ、いずれの場合にも 25 mL の水で 2 回洗浄した。その有機相を合して硫酸ナトリウムで脱水し、溶媒を減圧下で除去した。固相 [Nucleodur C18、HTec C18、10 µm、(250 × 50)-mm カラム] での分取クロマトグラフィー [(90 mL/分 アセトニトリル/水 (トリフルオロ酢酸 0.05%)] に付して、2-アセチル-6-シアノ-6-(3-フルオロフェニル)-5-(4-フルオロフェニル)-3-オキソヘキサン酸メチルのエリトロ/トレオジアステレオマー混合物 [エリトロ：トレオ = 53：47 (CDCl₃ 中の ¹H-NMR の 17.74 ppm 及び 17.62 ppm における一重項の積分に基づく)] (0.422 g (理論値の 52%)) を得た。

20

【0383】

実施例 A5： 2-(3,4-ジフルオロフェニル)-3-(3-フルオロフェニル)-5-(5-メチル-1,2-オキサゾール-4-イル)-5-オキソペンタノニトリル (表 35 を参照されたい、化合物番号 IB10ga6)

30

段階 1： 4-シアノ-4-(3,4-ジフルオロフェニル)-3-(3-フルオロフェニル)ブタン酸メチル

保護ガス (Ar) 下、25.0 mL のトルエンの中の 4.099 g (22.7 mmol) の 3-(3-フルオロフェニル)アクリル酸メチルに 3.828 g (25.0 mmol) の (3,4-ジフルオロフェニル)アセトニトリル及び 0.281 mg のカリウム tert-ブトキシドを添加し、その混合物を密閉容器内で 65℃ で 5 時間攪拌した。溶媒を減圧下で除去し、その残渣を取って酢酸エチルの中に入れ、その混合物をいずれの場合にも 25 mL の水で 2 回洗浄した。その有機相を合して硫酸ナトリウムで脱水し、溶媒を減圧下で除去した。その残渣をシリカゲルクロマトグラフィー (酢酸エチル/ヘプタン = 20：80) に付して、7.3 g (理論値の 87%) のジアステレオ異性の 4-シアノ-4-(3,4-ジフルオロフェニル)-3-(3-フルオロフェニル)ブタン酸メチル [エリトロ：トレオ = 65：35 (CDCl₃ 中の ¹H-NMR の 3.68 ppm 及び 3.59 ppm におけるメチル一重項の積分に基づく)] を得た。

40

【0384】

段階 2： 4-シアノ-4-(3,4-フルオロフェニル)-3-(3-フルオロフェニル)ブタン酸

保護ガス (Ar) 下、95.0 mL のメタノールの中の 4.7 g (14.1 mmol)

50

の4-シアノ-4-(3,4-ジフルオロフェニル)-3-(3-フルオロフェニル)ブタン酸メチルに23.5 mLの2モル水酸化ナトリウム水溶液を添加し、その混合物を25℃で一晩攪拌した。メタノールを減圧下で除去した。その残渣を濃塩酸を用いて酸性化し(pH=3)、いずれの場合にも100 mLのジクロロメタンで3回抽出した。その有機相を合して硫酸ナトリウムで脱水し、溶媒を減圧下で除去した。これにより、4.50 g(理論値の99.9%)の標題化合物が無色の結晶の形態〔エリトロ：トレオ=52：48(CDCI₃中の¹H-NMRの4.34 ppm及び4.04 ppmにおける二重項の比較)〕で得られた。

【0385】

段階3：2-(3,4-ジフルオロフェニル)-3-(3-フルオロフェニル)-5-(5-メチル-1,2-オキサゾール-4-イル)-5-オキソペンタノニトリル

10

磁気攪拌棒と隔壁を有しているアルゴンが充填された乾燥Schlenk管の中のTHF(5 mL)に、マグネシウム削りくず(291 mg、11.9 mmol)、塩化亜鉛(717 mg、5.26 mmol)及び塩化リチウム(254 mg、5.98 mmol)を最初に装入し、DIBAL-H(0.2 mL、THF中1 M)を添加することによって活性化させた。5分間攪拌した後、無水THF(3 mL)中の4-ヨード-5-メチル-1,2-オキサゾール(1.0 g、4.78 mmol)を20℃で滴下して加えた。その後、その反応混合物を25℃でさらに30分間攪拌した。次いで、得られた粗製溶液は、下記酸塩化物とともに反応させる。

【0386】

20

1.83 g(5.75 mmol)の4-シアノ-4-(3,4-ジフルオロフェニル)-3-(3-フルオロフェニル)ブタン酸に6.84 g(57.5 mmol)の塩化チオニルを添加し、その混合物を80℃で1.5時間攪拌した。過剰な塩化チオニルを減圧下で除去した。このようにして濃縮された反応混合物(これは、酸塩化物を含んでいる)を3 mLのジクロロメタンに溶解させ、そして、-10℃で、上記粗製溶液に滴下して加え(約30分)、次いで、25℃でさらに2時間攪拌した。溶媒を減圧下で除去し、その残渣を取って酢酸エチルの中に入れ、その混合物をいずれの場合にも25 mLの水で2回洗浄した。その有機相を合して硫酸ナトリウムで脱水し、溶媒を減圧下で除去した。その残渣をシリカゲルクロマトグラフィー(酢酸エチル/ヘプタン=20：80)に付して、ジアステレオ異性の2-(3,4-ジフルオロフェニル)-3-(3-フルオロフェニル)-5-(5-メチル-1,2-オキサゾール-4-イル)-5-オキソペンタノニトリルの混合物〔エリトロ：トレオ=63：37(CDCI₃中の¹H-NMRの8.54 ppm及び8.48 ppmにおけるメチル-重項の積分に基づく)〕(810 mg(理論値の44%))を得た。

30

【0387】

NMR(エリトロ)：8.54(s, 1H), 7.22(m, 1H), 7.09(m, 1H), 6.98(m, 2H), 6.82(m, 3H), 4.51(d, 1H), 3.71(m, 1H), 3.50(dd, 1H), 3.27(dd, 1H), 2.75(s, 3H)；

MS：385[M+1]⁺；HPLC(rt)：1.57分。

40

【0388】

実施例番号IB10ga6：

NMR(トレオ)：8.48(s, 1H), 7.27(m, 1H), 7.12(m, 1H), 6.96(m, 5H), 4.13(d, 1H), 3.82(m, 1H), 3.39(dd, 1H), 3.23(dd, 1H), 2.65(s, 3H)；

MS：385[M+1]⁺；HPLC(rt)：1.57分。

【0389】

下記表に記載されている化合物は、適切な場合にはさらに上記に記載されている一般的な方法も付加的に使用して、上記実施例に従って得られるか又は上記実施例と同様にして得られる。

50

【0390】

下記表において：

【0391】

【表1】

H	=	水素 (原子)	
Me	=	メチル又は CH_3	
Et	=	エチル	
n-Pr	=	n-プロピル	10
i-Pr	=	イソプロピル	
n-Bu	=	n-ブチル	
i-Bu	=	イソブチル	
rt	=	保持時間	
F, Cl, Br, I	=	慣習的な化学原子記号に従い、それぞれ、 フッ素、塩素、臭素及びヨウ素	20
MeO 又は OMe	=	メトキシ	
CN	=	シアノ	
NO_2	=	ニトロ	
Ph	=	フェニル	

該フェニル環における置換基の位置は、例えば、位置2においては、当該ラジカル of 記号又は略語に対する接頭語として示されている、例えば、

【0392】

【表2】

2-Cl	=	2-クロロ
2-Me	=	2-メチル

二置換又は三置換されている置換パターンに関する置換基の位置の数は、接頭辞として同様に示されている、例えば、

【0393】

【表3】

3,5-Me ₂	=	3,5-ジメチル (例えば、フェニル環における置換として)	40
2,3-Cl ₂	=	2,3-ジクロロ (例えば、フェニル環における置換として)	
3,4-F ₂	=	3,4-ジフルオロ (例えば、フェニル環における置換として)	

別の略語は、上記で示されている例と同じように理解される。

【0394】

【表 4】

$"(R^1)_m = "H" =$ 置換されていない環 ($m = 0$)

$"(R^2)_n = "H" =$ 置換されていない環 ($n = 0$)

さらに、慣習的な化学記号及び化学式も、例えば、以下のように適用される：メチレンに対しては CH_2 、又は、トリフルオロメチルに対しては CF_3 、又は、ヒドロキシルに対しては OH 。同様に、複合的な意味は、上記略語で構成されるものとして定義される。

【0395】

表 1： 本発明による一般式 (I) で表される化合物についての下記表に関する基 Q、10
基 $(R^1)_m$ 及び基 $(R^2)_n$ の構造的組合せの定義

【0396】

【表 5】

No.	Q	(R ¹) _m	(R ²) _n
1	OH	3-F	4-Cl
2	OH	3-F	3-F
3	OH	3,4-F ₂	4-Cl
4	OH	3-F	4-Br
5	OH	3-Cl	3-F
6	OH	3,4-F ₂	3-F
7	OH	H	3-Br
8	OH	4-F	3-F
9	OH	3-F	3-Cl
10	OH	3,4-F ₂	3-Cl
11	OH	3-Br	3-F
12	OH	2,5-F ₂	3-F
13	OH	3-F	2-F
14	OH	3,4,5-F ₃	4-Cl
15	OH	4-F	3-Cl
16	OH	3,4-F ₂	3-F, 4-Cl
17	OH	3,4-F ₂	2-F
18	OH	3-F	2,3-F ₂
19	OH	4-F	3,5-F ₂
20	OH	3-F	4-F
21	OH	3,4-F ₂	3-Cl, 5-F
22	OH	3-F	3-Cl, 5-F
23	OH	3-F	2,5-F ₂
24	OH	3,4-F ₂	2,3-F ₂
25	OH	3,4-F ₂	2,5-F ₂
26	OH	3-Cl	3-Cl, 5-F
27	OH	3-F, 4-Cl	3-Cl
28	OH	3,4-F ₂	3-NO ₂
29	OH	3,4-F ₂	H
30	OH	3-Cl, 4-F	3-F
31	OH	3,4-F ₂	4-OMe
32	O-C(O)-t-Bu	3-F	4-Cl
33	O-C(O)Me	3-F	4-Cl
34	SPh	3-F	4-Cl
35	SMe	3-F	4-Cl
36	OSO ₂ (4-Me-Ph)	3-F	4-Cl
37	Cl	3-F	4-Cl

10

20

30

40

No.	Q	(R ¹) _m	(R ²) _n
38	O-CO ₂ Me	3-F	4-Cl
39	O-C(O)-t-Bu	3-F	3-F
40	O-C(O)Me	3-F	3-F
41	SPh	3-F	3-F
42	SMe	3-F	3-F
43	OSO ₂ (4-Me-Ph)	3-F	3-F
44	Cl	3-F	3-F
45	O-CO ₂ Me	3-F	3-F
46	O-C(O)-t-Bu	3,4-F ₂	3-F
47	O-C(O)Me	3,4-F ₂	3-F
48	O-C(O)Et	3,4-F ₂	3-F
49	SMe	3,4-F ₂	3-F
50	OSO ₂ (4-Me-Ph)	3,4-F ₂	3-F
51	Cl	3,4-F ₂	3-F
52	CO ₂ Me	3,4-F ₂	3-F
53	O-C(O)-t-Bu	3,4-F ₂	3-Cl
54	O-C(O)Me	3,4-F ₂	3-Cl
55	SPh	3,4-F ₂	3-Cl
56	SMe	3,4-F ₂	3-Cl
57	OSO ₂ (4-Me-Ph)	3,4-F ₂	3-Cl
58	Cl	3,4-F ₂	3-Cl
59	O-CO ₂ Me	3,4-F ₂	3-Cl
60	O-C(O)-t-Bu	3-Br	3-F
61	O-C(O)Me	2,5-F ₂	3-F
62	SPh	3-F	2-F
63	O-C(O)-t-Bu	3,4,5-F ₃	4-Cl
64	O-C(O)Me	4-F	3-Cl
65	SPh	3,4-F ₂	3-F, 4-Cl
66	O-C(O)-t-Bu	3,4-F ₂	2-F
67	O-C(O)Me	3-F	2,3-F ₂
68	SPh	4-F	3,5-F ₂
69	O-C(O)-t-Bu	3-F	4-F
70	O-C(O)Me	3,4-F ₂	3-Cl, 5-F
71	SPh	3-F	3-Cl, 5-F
72	O-C(O)-t-Bu	3-F	2,5-F ₂
73	O-C(O)Me	3,4-F ₂	2,3-F ₂
74	SPh	3,4-F ₂	2,5-F ₂
75	O-C(O)-t-Bu	3-Cl	3-Cl, 5-F

10

20

30

40

No.	Q	(R ¹) _m	(R ²) _n
76	O-C(O)Me	3-F, 4-Cl	3-Cl
77	SPh	3,4-F ₂	3-NO ₂
78	O-C(O)-t-Bu	3,4-F ₂	H
79	O-C(O)Me	3-Cl, 4-F	3-F
80	SPh	3,4-F ₂	4-OMe
81	OH	3-F	H
82	OH	3-F	2,4-F ₂
83	OH	3-F	2,6-F ₂
84	OH	3-F	3,4-F ₂
85	OH	3-F	3,5-F ₂
86	OH	3-F	2-Cl
87	OH	3-F	2,3-Cl ₂
88	OH	3-F	2,4-Cl ₂
89	O-C(O)-t-Bu	3-F	2,5-Cl ₂
90	SPh	3-F	2,6-Cl ₂
91	OH	3-F	3,4-Cl ₂
92	OH	3-F	3,5-Cl ₂
93	O-C(O)-t-Bu	3,4-F ₂	4-F
94	OH	3,4-F ₂	2,4-F ₂
95	OH	3,4-F ₂	2,6-F ₂
96	OH	3,4-F ₂	3,4-F ₂
97	OH	3,4-F ₂	3,5-F ₂
98	SPh	3,4-F ₂	2-Cl
99	O-C(O)-t-Bu	3,4-F ₂	2,3-Cl ₂
100	OH	3,4-F ₂	2,4-Cl ₂
101	O-C(O)-t-Bu	3,4-F ₂	2,5-Cl ₂
102	OH	3,4-F ₂	2,6-Cl ₂
103	SPh	3,4-F ₂	3,4-Cl ₂
104	OH	3,4-F ₂	3-Br
105	OH	3-Cl	3-NO ₂
106	OH	3-Cl	4-NO ₂
107	OH	3-Cl	4-CN
108	OH	3-Cl	2-Br
109	O-C(O)-t-Bu	3-Cl	2,4-F ₂
110	OH	3-Br	2,5-F ₂
111	OH	3-Cl	2,6-F ₂
112	O-C(O)-t-Bu	3-Cl	3,4-F ₂
113	OH	3-Br	3,5-F ₂

10

20

30

40

No.	Q	(R ¹) _m	(R ²) _n
114	OH	3-Cl	2-Cl
115	OH	3-Br	3-Cl
116	SPh	3-Cl	4-Cl
117	OH	3-Br	2,3-Cl ₂
118	OH	3-Br	2,4-Cl ₂
119	OH	3-Cl	2,5-Cl ₂
120	SPh	3-Cl	2,6-Cl ₂
121	SPh	3-Cl	3,4-Cl ₂
122	OH	3-Cl	3,5-Cl ₂
123	O-C(O)Me	3,4-Cl ₂	H
124	O-C(O)Me	3,4-Cl ₂	2-F
125	O-C(O)Me	3,4-Cl ₂	3-F
126	O-C(O)Me	3,4-Cl ₂	4-F
127	O-C(O)Me	3,4-Cl ₂	2,3-F ₂
128	O-C(O)Me	3,4-Cl ₂	2,4-F ₂
129	OH	3,4-Cl ₂	2,5-F ₂
130	O-C(O)Me	3,4-Cl ₂	2,6-F ₂
131	O-C(O)-t-Bu	3,4-Cl ₂	3,4-F ₂
132	O-C(O)Et	3,4-Cl ₂	3,5-F ₂
133	O-C(O)Et	3,4-Cl ₂	2-Cl
134	O-C(O)Et	3,4-Cl ₂	3-Cl
135	O-C(O)-t-Bu	3,4-Cl ₂	4-Cl
136	SPh	3,4-Cl ₂	2,3-Cl ₂
137	O-C(O)-t-Bu	3,4-Cl ₂	2,4-Cl ₂
138	O-C(O)Me	3,4-Cl ₂	2,5-Cl ₂
139	O-C(O)Et	3,4-Cl ₂	2,6-Cl ₂
140	O-C(O)Me	3,4-Cl ₂	3,4-Cl ₂
141	O-C(O)Me	3,4-Cl ₂	3,5-Cl ₂
142	O-C(O)Et	3-Cl, 4-F	H
143	SMe	3-Cl, 4-F	2-F
144	O-C(O)Me	3-Cl, 4-F	4-F
145	O-C(O)Et	3-Cl, 4-F	2,3-F ₂
146	O-C(O)-t-Bu	3-Cl, 4-F	2,4-F ₂
147	O-C(O)Me	3-Cl, 4-F	2,5-F ₂
148	SPh	3-Cl, 4-F	2,6-F ₂
149	O-C(O)Et	3-Cl, 4-F	3,4-F ₂
150	OSO ₂ (4-Me-Ph)	3-Cl, 4-F	3,5-F ₂
151	O-C(O)Me	3-Cl, 4-F	2-Cl

10

20

30

40

No.	Q	(R ¹) _m	(R ²) _n
152	OH	3-Cl, 4-F	3-Br
153	O-C(O)Me	3-Cl, 4-F	4-Cl
154	O-C(O)Me	3-Cl, 4-F	2,3-Cl ₂
155	O-C(O)Et	3-Cl, 4-F	2,4-Cl ₂
156	O-C(O)Me	3-Cl, 4-F	2,5-Cl ₂
157	O-C(O)Me	3-Cl, 4-F	2,6-Cl ₂
158	O-C(O)Et	3-Cl, 4-F	3,4-Cl ₂
159	O-C(O)Me	3-Cl, 4-F	3,5-Cl ₂
160	O-C(O)Me	3-Cl, 4-F	H
161	O-C(O)Et	3-F, 4-Cl	2-F
162	O-C(O)Me	3-F, 4-Cl	3-F
163	O-C(O)Me	3-F, 4-Cl	4-F
164	OH	3-F, 4-Cl	2,3-F ₂
165	O-C(O)Et	3-F, 4-Cl	2,4-F ₂
166	SPh	3-F, 4-Cl	2,5-F ₂
167	O-C(O)Me	3-F, 4-Cl	2,6-F ₂
168	O-C(O)Me	3-F, 4-Cl	3,4-F ₂
169	OH	3-F, 4-Cl	3,5-F ₂
170	O-C(O)Me	3-F, 4-Cl	2-Cl
171	O-C(O)Et	3-F, 4-Cl	4-Cl
172	SPh	3-F, 4-Cl	2,3-Cl ₂
173	SPh	3-F, 4-Cl	2,4-Cl ₂
174	SPh	3-F, 4-Cl	2,5-Cl ₂
175	SPh	3-F, 4-Cl	2,6-Cl ₂
176	SPh	3-F, 4-Cl	3,4-Cl ₂
177	SPh	3-F, 4-Cl	3,5-Cl ₂
178	O-C(O)-i-Pr	3-F	2,6-F ₂
179	O-C(O)Me	3-F	2,6-F ₂
180	SEt	3-F	2,6-F ₂
181	OH	3,4-F ₂	3,4-Cl ₂
182	OH	3,4-F ₂	3,5-Cl ₂
183	OH	3-Cl	H
184	OH	3-Cl	2-F
185	OH	3-Cl	4-F
186	OH	3-Cl	2,3-F ₂
187	OH	3-Cl	2,4-F ₂
188	OH	3-Cl	2,5-F ₂
189	O-C(O)-t-Bu	3-Cl	2,6-F ₂

10

20

30

40

No.	Q	(R ¹) _m	(R ²) _n
190	OH	3-Cl	3,4-F ₂
191	OH	3-Cl	3,5-F ₂
192	SPh	3-Cl	2-Cl
193	OH	3-Cl	3-Cl
194	OH	3-Cl	4-Cl
195	OH	3-Cl	2,3-Cl ₂
196	OH	3-Cl	2,4-Cl ₂
197	O-C(O)-t-Bu	3-Cl	2,5-Cl ₂
198	OH	3-Cl	2,6-Cl ₂
199	O-C(O)-t-Bu	3-Cl	3,4-Cl ₂
200	O-C(O)Me	3-Cl	3,5-Cl ₂
201	OH	3,4-Cl ₂	H
202	OH	3,4-Cl ₂	2-F
203	OH	3,4-Cl ₂	3-F
204	OH	3,4-Cl ₂	4-F
205	O-C(O)-t-Bu	3,4-Cl ₂	2,3-F ₂
206	O-C(O)Me	3,4-Cl ₂	2,4-F ₂
207	SPh	3,4-Cl ₂	2,5-F ₂
208	OH	3,4-Cl ₂	2,6-F ₂
209	OSO ₂ (4-Me-Ph)	3,4-Cl ₂	3,4-F ₂
210	OH	3,4-Cl ₂	3,5-F ₂
211	OH	3,4-Cl ₂	2-Cl
212	OH	3,4-Cl ₂	3-Cl
213	OH	3,4-Cl ₂	4-Cl
214	O-C(O)-t-Bu	3,4-Cl ₂	2,3-Cl ₂
215	OH	3,4-Cl ₂	2,4-Cl ₂
216	OH	3,4-Cl ₂	2,5-Cl ₂
217	OH	3,4-Cl ₂	2,6-Cl ₂
218	OH	3,4-Cl ₂	3,4-Cl ₂
219	OH	3,4-Cl ₂	3,5-Cl ₂
220	OH	3-Cl, 4-F	H
221	OH	3-Cl, 4-F	2-F
222	OH	3-Cl, 4-F	4-F
223	OH	3-Cl, 4-F	2,3-F ₂
224	OH	3-Cl, 4-F	2,4-F ₂
225	OH	3-Cl, 4-F	2,5-F ₂
226	OH	3-Cl, 4-F	2,6-F ₂
227	OH	3-Cl, 4-F	3,4-F ₂

10

20

30

40

No.	Q	(R ¹) _m	(R ²) _n
228	OH	3-Cl, 4-F	3,5-F ₂
229	OH	3-Cl, 4-F	2-Cl
230	OH	3-Cl, 4-F	3-Cl
231	OH	3-Cl, 4-F	4-Cl
232	OH	3-Cl, 4-F	2,3-Cl ₂
233	OH	3-Cl, 4-F	2,4-Cl ₂
234	OH	3-Cl, 4-F	2,5-Cl ₂
235	OH	3-Cl, 4-F	2,6-Cl ₂
236	OH	3-Cl, 4-F	3,4-Cl ₂
237	OH	3-Cl, 4-F	3,5-Cl ₂
238	OH	3-Cl, 4-F	H
239	OH	3-F, 4-Cl	2-F
240	OH	3-F, 4-Cl	3-F
241	OH	3-F, 4-Cl	4-F
242	SPh	3-F, 4-Cl	2,3-F ₂
243	OH	3-F, 4-Cl	2,4-F ₂
244	OH	3-F, 4-Cl	2,5-F ₂
245	OH	3-F, 4-Cl	2,6-F ₂
246	OH	3-F, 4-Cl	3,4-F ₂
247	OH	3-F, 4-Cl	3,5-F ₂
248	OH	3-F, 4-Cl	2-Cl
249	OH	3-F, 4-Cl	4-Cl
250	SPh	3-F, 4-Cl	2,3-Cl ₂
251	OH	3-F, 4-Cl	2,4-Cl ₂
252	OH	3-F, 4-Cl	2,5-Cl ₂
253	OH	3-F, 4-Cl	2,6-Cl ₂
254	OH	3-F, 4-Cl	3,4-Cl ₂
255	OH	3-F, 4-Cl	3,5-Cl ₂
256	SPh	3-F	2,6-F ₂
257	O-C(O)-t-Bu	3-F	2,6-F ₂
258	SMe	3-F	2,6-F ₂
259	O-C(O)Et	3,4-F ₂	2,6-F ₂
260	O-C(O)-t-Bu	3,4-F ₂	2,6-F ₂
261	O-C(O)Me	3,4-F ₂	2,6-F ₂
262	SPh	3,4-F ₂	2,6-F ₂
263	SMe	3,4-F ₂	2,6-F ₂
264	OSO ₂ (4-Me-Ph)	3,4-F ₂	2,6-F ₂
265	Cl	3,4-F ₂	2,6-F ₂

10

20

30

40

No.	Q	(R ¹) _m	(R ²) _n
266	O-CO ₂ Me	3,4-F ₂	2,6-F ₂
267	OH	3-CN	H
268	OH	3-CN	2,5-F ₂
269	OH	3-CN	2,6-F ₂
270	OH	3-CN	2,3-F ₂
271	OH	3-CN	2,4-F ₂
272	OH	3-CN	3,4-F ₂
273	OH	3-CN	3,5-F ₂
274	OH	3-CN	4-Cl
275	OH	3-CN	3-Cl
276	OH	3-CN	2-Cl
277	OH	3-CN	4-F
278	OH	3-CN	3-F
279	OH	3-CN	2-F
280	OH	2-CN	3-F
281	OH	2-CN	4-F
282	OH	2-CN	4-Cl
283	OH	3-NO ₂	H
284	OH	3-NO ₂	2,5-F ₂
285	OH	3-NO ₂	2,6-F ₂
286	OH	3-NO ₂	2,3-F ₂
287	OH	3-NO ₂	2,4-F ₂
288	OH	3-NO ₂	3,4-F ₂
289	OH	3-NO ₂	3,5-F ₂
290	OH	3-NO ₂	4-Cl
291	OH	3-NO ₂	3-Cl
292	OH	3-NO ₂	2-Cl
293	OH	3-NO ₂	4-F
294	OH	3-NO ₂	3-F
295	OH	3-NO ₂	2-F
296	OH	H	2,6-F ₂
297	OH	H	3,4-F ₂
298	OH	H	3,5-F ₂
299	OH	H	2,3-F ₂
300	OH	H	2,4-F ₂
301	OH	H	2,5-F ₂
302	OH	H	2-Cl
303	OH	H	3-Cl

10

20

30

40

No.	Q	(R ¹) _m	(R ²) _n
304	OH	H	4-Cl
305	OH	H	2-F
306	OH	H	3-F
307	OH	H	4-F
308	OH	H	2,3-Cl ₂
309	OH	H	2,4-Cl ₂
310	OH	H	2,5-Cl ₂
311	OH	H	2,6-Cl ₂
312	OH	H	3,4-Cl ₂
313	OH	H	3,5-Cl ₂
314	O-C(O)Et	3-CN	2,5-F ₂
315	O-C(O)-t-Bu	3-CN	2,5-F ₂
316	O-C(O)Me	3-CN	2,5-F ₂
317	SPh	3-CN	2,5-F ₂
318	SMe	3-CN	2,5-F ₂
319	OSO ₂ (4-Me-Ph)	3-CN	2,5-F ₂
320	Cl	3-CN	2,5-F ₂
321	O-CO ₂ Me	3-CN	2,5-F ₂
322	O-C(O)Et	3-CN	2,6-F ₂
323	O-C(O)-t-Bu	3-CN	2,6-F ₂
324	O-C(O)Me	3-CN	2,6-F ₂
325	SPh	3-CN	2,6-F ₂
326	SMe	3-CN	2,6-F ₂
327	OSO ₂ (4-Me-Ph)	3-CN	2,6-F ₂
328	Cl	3-CN	2,6-F ₂
329	O-CO ₂ Me	3-CN	2,6-F ₂
330	O-C(O)Et	3-CN	2,3-F ₂
331	O-C(O)-t-Bu	3-CN	2,3-F ₂
332	O-C(O)Me	3-CN	2,3-F ₂
333	SPh	3-CN	2,3-F ₂
334	SMe	3-CN	2,3-F ₂
335	OSO ₂ (4-Me-Ph)	3-CN	2,3-F ₂
336	Cl	3-CN	2,3-F ₂
337	O-CO ₂ Me	3-CN	2,3-F ₂
338	O-C(O)Et	3-CN	2,4-F ₂
339	O-C(O)-t-Bu	3-CN	2,4-F ₂
340	O-C(O)Me	3-CN	2,4-F ₂
341	SPh	3-CN	2,4-F ₂

10

20

30

40

No.	Q	(R ¹) _m	(R ²) _n
342	SMe	3-CN	2,4-F ₂
343	OSO ₂ (4-Me-Ph)	3-CN	2,4-F ₂
344	Cl	3-CN	2,4-F ₂
345	O-CO ₂ Me	3-CN	2,4-F ₂
346	O-C(O)Et	3-CN	2,4-F ₂
347	O-C(O)-t-Bu	3-CN	2,4-F ₂
348	O-C(O)Me	3-CN	2,4-F ₂
349	SPh	3-CN	2,4-F ₂
350	SMe	3-CN	2,4-F ₂
351	OSO ₂ (4-Me-Ph)	3-CN	2,4-F ₂
352	Cl	3-CN	2,4-F ₂
353	O-CO ₂ Me	3-CN	2,4-F ₂
354	O-C(O)Et	3-CN	4-Cl
355	O-C(O)-t-Bu	3-CN	4-Cl
356	O-C(O)Me	3-CN	4-Cl
357	SPh	3-CN	4-Cl
358	SMe	3-CN	4-Cl
359	OSO ₂ (4-Me-Ph)	3-CN	4-Cl
360	Cl	3-CN	4-Cl
361	O-CO ₂ Me	3-CN	4-Cl
362	O-C(O)Et	3-CN	3-Cl
363	O-C(O)-t-Bu	3-CN	3-Cl
364	O-C(O)Me	3-CN	3-Cl
365	SPh	3-CN	3-Cl
366	SMe	3-CN	3-Cl
367	OSO ₂ (4-Me-Ph)	3-CN	3-Cl
368	Cl	3-CN	3-Cl
369	O-CO ₂ Me	3-CN	3-Cl
370	O-C(O)Et	3-CN	4-F
371	O-C(O)-t-Bu	3-CN	4-F
372	O-C(O)Me	3-CN	4-F
373	SPh	3-CN	4-F
374	SMe	3-CN	4-F
375	OSO ₂ (4-Me-Ph)	3-CN	4-F
376	Cl	3-CN	4-F
377	O-CO ₂ Me	3-CN	4-F
378	O-C(O)Et	3-CN	3-F
379	O-C(O)-t-Bu	3-CN	3-F

10

20

30

40

No.	Q	(R ¹) _m	(R ²) _n
380	O-C(O)Me	3-CN	3-F
381	SPh	3-CN	3-F
382	SMe	3-CN	3-F
383	OSO ₂ (4-Me-Ph)	3-CN	3-F
384	Cl	3-CN	3-F
385	O-CO ₂ Me	3-CN	3-F
386	O-C(O)Et	3-NO ₂	2,5-F ₂
387	O-C(O)-t-Bu	3-NO ₂	2,5-F ₂
388	O-C(O)Me	3-NO ₂	2,5-F ₂
389	SPh	3-NO ₂	2,5-F ₂
390	SMe	3-NO ₂	2,5-F ₂
391	OSO ₂ (4-Me-Ph)	3-NO ₂	2,5-F ₂
392	Cl	3-NO ₂	2,5-F ₂
393	O-CO ₂ Me	3-NO ₂	2,5-F ₂
394	O-C(O)Et	3-NO ₂	2,6-F ₂
395	O-C(O)-t-Bu	3-NO ₂	2,6-F ₂
396	O-C(O)Me	3-NO ₂	2,6-F ₂
397	SPh	3-NO ₂	2,6-F ₂
398	SMe	3-NO ₂	2,6-F ₂
399	OSO ₂ (4-Me-Ph)	3-NO ₂	2,6-F ₂
400	Cl	3-NO ₂	2,6-F ₂
401	O-CO ₂ Me	3-NO ₂	2,6-F ₂
402	O-C(O)Et	3-NO ₂	2,3-F ₂
403	O-C(O)-t-Bu	3-NO ₂	2,3-F ₂
404	O-C(O)Me	3-NO ₂	2,3-F ₂
405	SPh	3-NO ₂	2,3-F ₂
406	SMe	3-NO ₂	2,3-F ₂
407	OSO ₂ (4-Me-Ph)	3-NO ₂	2,3-F ₂
408	Cl	3-NO ₂	2,3-F ₂
409	O-CO ₂ Me	3-NO ₂	2,3-F ₂
410	O-C(O)Et	3-NO ₂	2,4-F ₂
411	O-C(O)-t-Bu	3-NO ₂	2,4-F ₂
412	O-C(O)Me	3-NO ₂	2,4-F ₂
413	SPh	3-NO ₂	2,4-F ₂
414	SMe	3-NO ₂	2,4-F ₂
415	OSO ₂ (4-Me-Ph)	3-NO ₂	2,4-F ₂
416	Cl	3-NO ₂	2,4-F ₂
417	O-CO ₂ Me	3-NO ₂	2,4-F ₂

10

20

30

40

No.	Q	(R ¹) _m	(R ²) _n
418	O-C(O)Et	3-NO ₂	2,4-F ₂
419	O-C(O)-t-Bu	3-NO ₂	2,4-F ₂
420	O-C(O)Me	3-NO ₂	2,4-F ₂
421	SPh	3-NO ₂	2,4-F ₂
422	SMe	3-NO ₂	2,4-F ₂
423	OSO ₂ (4-Me-Ph)	3-NO ₂	2,4-F ₂
424	Cl	3-NO ₂	2,4-F ₂
425	O-CO ₂ Me	3-NO ₂	2,4-F ₂
426	O-C(O)Et	3-NO ₂	4-Cl
427	O-C(O)-t-Bu	3-NO ₂	4-Cl
428	O-C(O)Me	3-NO ₂	4-Cl
429	SPh	3-NO ₂	4-Cl
430	SMe	3-NO ₂	4-Cl
431	OSO ₂ (4-Me-Ph)	3-NO ₂	4-Cl
432	Cl	3-NO ₂	4-Cl
433	O-CO ₂ Me	3-NO ₂	4-Cl
434	O-C(O)Et	3-NO ₂	3-Cl
435	O-C(O)-t-Bu	3-NO ₂	3-Cl
436	O-C(O)Me	3-NO ₂	3-Cl
437	SPh	3-NO ₂	3-Cl
438	SMe	3-NO ₂	3-Cl
439	OSO ₂ (4-Me-Ph)	3-NO ₂	3-Cl
440	Cl	3-NO ₂	3-Cl
441	O-CO ₂ Me	3-NO ₂	3-Cl
442	O-C(O)Et	3-NO ₂	4-F
443	O-C(O)-t-Bu	3-NO ₂	4-F
444	O-C(O)Me	3-NO ₂	4-F
445	SPh	3-NO ₂	4-F
446	SMe	3-NO ₂	4-F
447	OSO ₂ (4-Me-Ph)	3-NO ₂	4-F
448	Cl	3-NO ₂	4-F
449	O-CO ₂ Me	3-NO ₂	4-F
450	O-C(O)Et	3-NO ₂	3-F
451	O-C(O)-t-Bu	3-NO ₂	3-F
452	O-C(O)Me	3-NO ₂	3-F
453	SPh	3-NO ₂	3-F
454	SMe	3-NO ₂	3-F
455	OSO ₂ (4-Me-Ph)	3-NO ₂	3-F

10

20

30

40

No.	Q	(R ¹) _m	(R ²) _n
456	Cl	3-NO ₂	3-F
457	O-CO ₂ Me	3-NO ₂	3-F
458	Me	3-CN, 4-F	3-F
459	Me	3-CN, 4-F	3-Cl
460	Me	3-CN, 4-F	3-CN
461	Me	3-CN, 4-F	4-F
462	Me	3-CN, 4-F	4-Cl
463	Me	3-CN, 4-F	2,5-F ₂
464	Me	3-CN, 4-F	2,6-F ₂
465	H	3-CN, 4-F	3-F
466	H	3-CN, 4-F	3-Cl
467	H	3-CN, 4-F	3-CN
468	H	3-CN, 4-F	4-F
469	H	3-CN, 4-F	4-Cl
470	H	3-CN, 4-F	2,5-F ₂
471	H	3-CN, 4-F	2,6-F ₂
472	Me	3-Br, 4-F	3-F
473	Me	3-Br, 4-F	3-Cl
474	Me	3-Br, 4-F	3-CN
475	Me	3-Br, 4-F	4-F
476	Me	3-Br, 4-F	4-Cl
477	Me	3-Br, 4-F	2,5-F ₂
478	Me	3-Br, 4-F	2,6-F ₂
479	H	3-Br, 4-F	3-F
480	H	3-Br, 4-F	3-Cl
481	H	3-Br, 4-F	3-CN
482	H	3-Br, 4-F	4-F
483	H	3-Br, 4-F	4-Cl
484	H	3-Br, 4-F	2,5-F ₂
485	H	3-Br, 4-F	2,6-F ₂
486	Me	3-F, 4-CN	3-F
487	Me	3-F, 4-CN	3-Cl
488	Me	3-F, 4-CN	3-CN
489	Me	3-F, 4-CN	4-F
490	Me	3-F, 4-CN	4-Cl
491	Me	3-F, 4-CN	2,5-F ₂
492	Me	3-F, 4-CN	2,6-F ₂
493	H	3-F, 4-CN	3-F

10

20

30

40

No.	Q	(R ¹) _m	(R ²) _n
494	H	3-F, 4-CN	3-Cl
495	H	3-F, 4-CN	3-CN
496	H	3-F, 4-CN	4-F
497	H	3-F, 4-CN	4-Cl
498	H	3-F, 4-CN	2,5-F ₂
499	H	3-F, 4-CN	2,6-F ₂

下記表 2 ～ 表 2 4 f における実施例の定義：

10

参照することを目的として、以下の表 2 ～ 表 2 4 f において個々の化合物に対して特定の番号（＝実施例番号）が割り当てられており、その際、当該実施例番号は、各表に割り当てられている化学式の番号と「列番号」（列番号）〔この列番号は、表 1 の第 1 カラムの列に記載されている番号と同じ番号を示している〕で構成されている。かくして、実施例番号「（式番号）（列番号）」の化学構造は、個々の表の上の式、式番号及び表 1 の列番号によって明瞭に定義される。例えば：

表 2 の実施例番号「I a a 1」は、式（I a）〔式中、A¹＝O〔＝式（I a a）〕、並びに、Q＝OH、(R¹)_m＝3－F 及び (R²)_n＝4－Cl（これらは、表 1 の列 1 に従って定義される）〕で表される化合物又はその互変異性体である。

【0397】

20

表 2 の実施例番号「I a d 2 0 4」は、式（I a）〔式中、A¹＝N－OH〔＝式（I a d）〕、並びに、Q＝OH、(R¹)_m＝3，4－Cl₂ 及び (R²)_n＝4－F（これらは、表 1 の列 2 0 4 に従って定義される）〕で表される化合物又はその互変異性体である。

【0398】

このことは、ラセミ化合物の又は光学活性なトレオ立体異性体若しくはエリトロ立体異性体の割り当てにも同様に当てはまる。例えば、参照することを目的として、表 2 a の化合物に特定の番号（＝実施例番号）が割り当てられており、その際、番号「トレオー I a a（列番号）」は、式（トレオー 1－I a a）と式（トレオー 2－I a a）〔ここで、これらの式は、それぞれ、表 1 の列番号に従う基 Q、(R¹)_m 及び (R²)_n の構造的組合せを有している〕で表される化学構造を有するトレオエナンチオマーのラセミ混合物を示している。

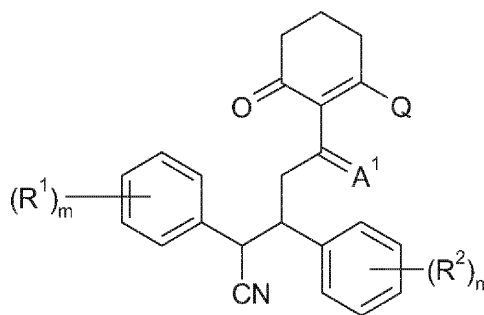
30

【0399】

表 2： 式（I a）、（I a a）、（I a b）、（I a c）、（I a d）、（I a e）、（I a f）、（I a g）及び（I a h）〔式中、Q、(R¹)_m 及び (R²)_n は、それぞれ、表 1 中で定義されているとおりである〕で表される化合物：

【0400】

【化 7 3】



(Ia)

(Iaa) A¹は、(=O)

(Iab) A¹は、(=S)

(Iac) A¹は、(=N-CH₃)

(Iad) A¹は、(=N-OH)

(Iae) A¹は、(=N-OCH₃)

(Iaf) A¹は、(=N-NH₂)

(Iag) A¹は、[N-N(CH₃)₂]

(Iah) A¹は、(=N-ベンジル)

10

表 2、エリトロ／トレオ混合物（比率 70：30～30：70）の例：

式 (I a a) ～ (I a h) で表される化合物の例は、いずれの場合にもエリトロ／トレオラセミ混合物（比率 70：30～30：70）の形態にあるそれぞれの式 (I a a) ～ (I a h) [式中、Q、(R¹)ₘ及び(R²)ₙの意味は、表 1 の列番号に従って定義される] で表される化合物である。個々の化合物は、括弧無しで「(式) (列番号)」の番号が付けられている。例えば、I a a 50＝式 (I a a) [式中、表 1 の列 50 に従って、Q＝OSO₂(4-Me-Ph)、(R¹)ₘ＝3, 4-ジフルオロ、及び、(R²)ₙ＝3-フルオロ] で表される化合物。

20

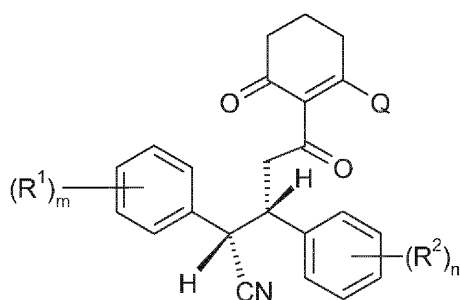
【0401】

表 2 a ～ 2 f：式 (トレオー I a a) 及び式 (トレオー 2-I a a) [式中、Q、(R¹)ₘ及び(R²)ₙは、それぞれ、表 1 中で定義されているとおりである] で表される化合物：

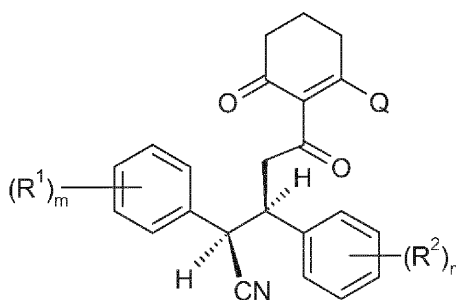
【0402】

【化 7 4】

30



(トレオ-1-1aa)



(トレオ-2-1aa)

40

(トレオ-1aa) = (トレオ-1-1aa) + (トレオ-2-1aa) (50:50) = (ラセミ化合物)

表 2 a (トレオラセミ化合物)、例：

トレオ異性体のラセミ混合物の形態にある式 (I a a) [=式 (トレオー I a a)] [式中、基 Q、(R¹)ₘ及び(R²)ₙの構造的組合せは、表 1 の列番号に従って定義される] で表される化合物。

【0403】

数え方は、「トレオー I a a (列番号)」である。

【0404】

50

表 2 b (光学的に活性なトレオー 2 化合物)、例:

式 (トレオー 2 - I a a) [式中、基 Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表 1 の列番号に従って定義される] で表される化学構造を有する、富化された形態 [= (2 R, 3 R) 形態が 90 % e e を超えている] にある光学的に活性なトレオー 2 エナンチオマー。

【0405】

数え方は、「トレオー 2 - I a a (列番号)」である。

【0406】

表 2 c (光学的に活性なトレオー 1 エナンチオマー)、例:

式 (トレオー 1 - I a a) [式中、基 Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表 1 の列番号に従って定義される] で表される化学構造を有する、富化された形態 [= (2 S, 3 S) 形態が 90 % e e を超えている] にある光学的に活性なトレオー 1 エナンチオマー。

【0407】

ここで、個々のエナンチオマーには、番号「トレオー 1 - I a a (列番号)」が割り当てられる。例えば、番号「トレオー 1 - I a a 5」は、式 (トレオー 1 - I a a) [式中、Q = OH、 $(R^1)_m = 3 - F$ 、及び、 $(R^2)_n = 4 - Br$] で表される化合物を示している。

【0408】

表 2 d (エリトロラセミ化合物)、例:

エリトロ異性体のラセミ混合物の形態にある式 (I a a) [=式 (エリトロ - I a a)] [式中、基 Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表 1 の列番号に従って定義される] で表される化合物。

【0409】

数え方は、「エリトロ - I a a (列番号)」である。

【0410】

表 2 e (エリトロ - 1 エナンチオマー)、例:

エリトロ - 1 の形態にある式 (I a a) [=式 (エリトロ - 1 - I a a)] [式中、基 Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表 1 の列番号に従って定義される] で表される化学構造を有する、富化された形態 [= (2 R, 3 S) 形態が 90 % e e を超えている] にある光学的に活性なエリトロ - 1 エナンチオマー。

【0411】

数え方は、「エリトロ - 1 - I a a (列番号)」である。

【0412】

表 2 f (エリトロ - 2 エナンチオマー)、例:

エリトロ - 2 の形態にある式 (I a a) [=式 (エリトロ - 2 - I a a)] [式中、基 Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表 1 の列番号に従って定義される] で表される化学構造を有する、富化された形態 [= (2 S, 3 R) 形態が 90 % e e を超えている] にある光学的に活性なエリトロ - 2 エナンチオマー。

【0413】

数え方は、「エリトロ - 2 - I a a (列番号)」である。

【0414】

表 3: 式 (I b)、(I b a)、(I b b)、(I b c)、(I b d)、(I b e)、(I b f)、(I b g) 及び (I b h) [式中、Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ は、それぞれ、表 1 中で定義されているとおりである] で表される化合物:

【0415】

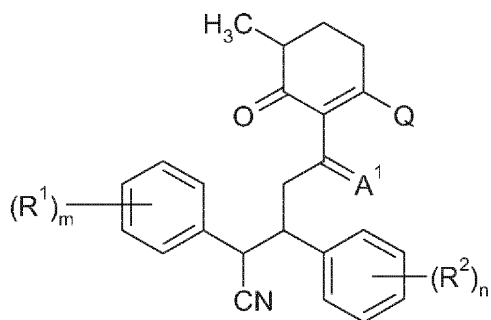
10

20

30

40

【化 7 5】



(Ib)

(Iba) A¹は、(=O)

(Ibb) A¹は、(=S)

(Ibc) A¹は、(=N-CH₃)

(Ibd) A¹は、(=N-OH)

(Ibe) A¹は、(=N-OCH₃)

(Ibf) A¹は、(=N-NH₂)

(Ibg) A¹は、[=N-N(CH₃)₂]

(Ibh) A¹は、(=N-ベンジル)

10

表 3、エリトロ／トレオ混合物（比率 70：30～30：70）の例：

その例は、いずれの場合にもエリトロ／トレオラセミ混合物（比率 70：30～30：70）の形態にあるそれぞれの式（Iaa）～（Iah）〔式中、Q、(R¹)ₘ及び(R²)ₙの意味は、表 1 の列番号に従って定義される〕で表される化合物である。個々の化合物は、括弧無しで「(式) (列番号)」の番号が付けられている。

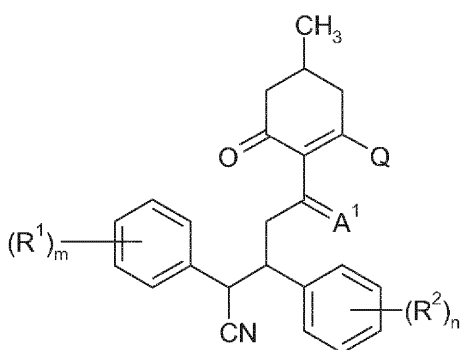
20

【0416】

表 4： 式（Ic）、（Ica）、（Icb）、（Icc）、（Icd）、（Ice）、（Icf）、（Icg）及び（Ich）〔式中、Q、(R¹)ₘ及び(R²)ₙは、それぞれ、表 1 中で定義されているとおりである〕で表される化合物：

【0417】

【化 7 6】



(Ic)

(Ica) A¹は、(=O)

(Icb) A¹は、(=S)

(Icc) A¹は、(=N-CH₃)

(Icd) A¹は、(=N-OH)

(Ice) A¹は、(=N-OCH₃)

(Icf) A¹は、(=N-NH₂)

(Icg) A¹は、[=N-N(CH₃)₂]

(Ich) A¹は、(=N-ベンジル)

30

表 4、エリトロ／トレオ混合物（比率 70：30～30：70）の例：

その例は、いずれの場合にもエリトロ／トレオラセミ混合物（比率 70：30～30：70）の形態にあるそれぞれの式（Ica）～（Ich）〔式中、Q、(R¹)ₘ及び(R²)ₙの意味は、表 1 の列番号に従って定義される〕で表される化合物である。個々の化合物は、括弧無しで「(式) (列番号)」の番号が付けられている。

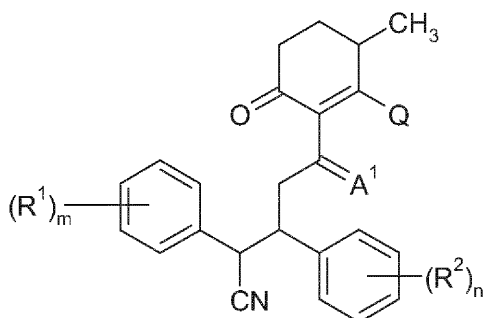
40

【0418】

表 5： 式（Id）、（Ida）、（Idb）、（Idc）、（Idd）、（Ide）、（Idf）、（Idg）及び（Idh）〔式中、Q、(R¹)ₘ及び(R²)ₙは、それぞれ、表 1 中で定義されているとおりである〕で表される化合物：

【0419】

【化 7 7】



(Id)

(Ida) A¹は、(=O)

(Idb) A¹は、(=S)

(Idc) A¹は、(=N-CH₃)

(Idd) A¹は、(=N-OH)

(Ide) A¹は、(=N-OCH₃)

(Idf) A¹は、(=N-NH₂)

(Idg) A¹は、[N-N(CH₃)₂]

(Idh) A¹は、(=N-ベンジル)

10

表 5、エリトロ／トレオ混合物（比率 70：30～30：70）の例：

その例は、いずれの場合にもエリトロ／トレオラセミ混合物（比率 70：30～30：70）の形態にあるそれぞれの式 (Ida)～(Idh)〔式中、Q、(R¹)ₘ及び(R²)ₙの意味は、表 1 の列番号に従って定義される〕で表される化合物である。個々の化合物は、括弧無しで「(式) (列番号)」の番号が付けられている。

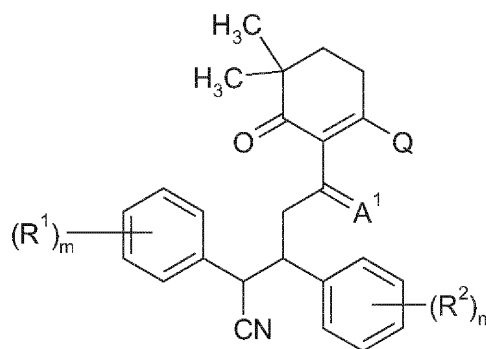
【0420】

20

表 6： 式 (Ie)、(Iea)、(Ieb)、(Iec)、(Ied)、(Iee)、(Ief)、(Ieg) 及び (Ieh)〔式中、Q、(R¹)ₘ及び(R²)ₙは、それぞれ、表 1 中で定義されているとおりである〕で表される化合物：

【0421】

【化 7 8】



(Ie)

(Iea) A¹は、(=O)

(Ieb) A¹は、(=S)

(Iec) A¹は、(=N-CH₃)

(Ied) A¹は、(=N-OH)

(Iee) A¹は、(=N-OCH₃)

(Ief) A¹は、(=N-NH₂)

(Ieg) A¹は、[N-N(CH₃)₂]

(Ieh) A¹は、(=N-ベンジル)

30

表 6、エリトロ／トレオ混合物（比率 70：30～30：70）の例：

その例は、いずれの場合にもエリトロ／トレオラセミ混合物（比率 70：30～30：70）の形態にあるそれぞれの式 (Iea)～(Ieh)〔式中、Q、(R¹)ₘ及び(R²)ₙの意味は、表 1 の列番号に従って定義される〕で表される化合物である。個々の化合物は、括弧無しで「(式) (列番号)」の番号が付けられている。

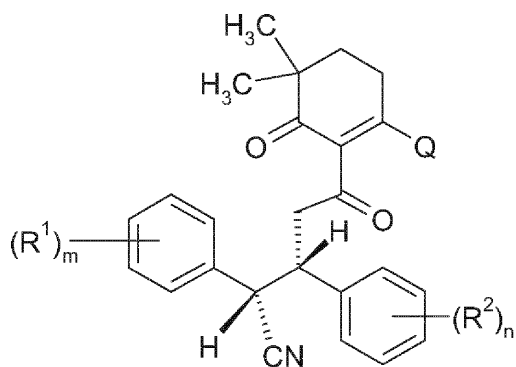
【0422】

40

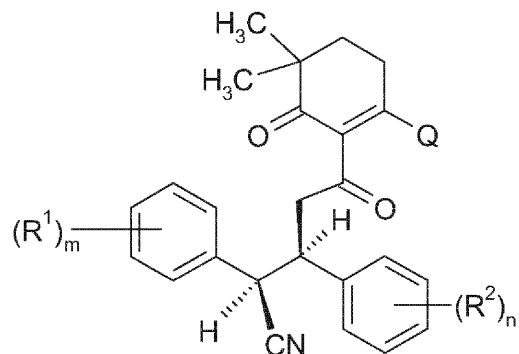
表 6 a～6 f： 式 (トレオー Iea) 及び式 (トレオー 2-Iea)〔式中、Q、(R¹)ₘ及び(R²)ₙは、それぞれ、表 1 中で定義されているとおりである〕で表される化合物：

【0423】

【化 7 9】



(トレオ-1-lea)



(トレオ-2-lea)

10

(トレオ-lea) = (トレオ-1-lea) + (トレオ-2-lea) (50:50) = (ラセミ化合物)

表 6 a (ラセミ化合物)、例：

トレオ異性体のラセミ混合物の形態にある式 (I e a) [=式 (トレオ-I e a)] [式中、基 Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表 1 の列番号に従って定義される] で表される化合物。個々の化合物は、「トレオ-I e a (列番号)」の番号が付けられている。

20

【0 4 2 4】

表 6 b (光学的に活性なトレオ-2 エナンチオマー)、例：

式 (トレオ-2-I e a) [式中、基 Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表 1 の列番号に従って定義される] で表される化学構造を有する、富化された形態 [= (2 R, 3 R) 形態が 90 % e e を超えている] にある光学的に活性なトレオ-2 エナンチオマー。個々の化合物は、「トレオ-2-I e a (列番号)」の番号が付けられている。

【0 4 2 5】

30

表 6 c (光学的に活性なトレオ-1 エナンチオマー)、例：

式 (トレオ-1-I e a) [式中、基 Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表 1 の列番号に従って定義される] で表される化学構造を有する、富化された形態 [= (2 S, 3 S) 形態が 90 % e e を超えている] にある光学的に活性なトレオ-1 エナンチオマー。個々の化合物は、「トレオ-1-I e a (列番号)」の番号が付けられている。

【0 4 2 6】

表 6 d (エリトロラセミ化合物)、例：

エリトロ異性体のラセミ混合物の形態にある式 (I e a) [=式 (エリトロ-I e a)] [式中、基 Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表 1 の列番号に従って定義される] で表される化合物。個々の化合物は、「エリトロ-I e a (列番号)」の番号が付けられている。

40

【0 4 2 7】

表 6 e (エリトロ-1 エナンチオマー)、例：

エリトロ-1 の形態にある式 (I e a) [=式 (エリトロ-1-I e a)] [式中、基 Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表 1 の列番号に従って定義される] で表される化学構造を有する、富化された形態 [= (2 R, 3 S) 形態が 90 % e e を超えている] にある光学的に活性なエリトロ-1 エナンチオマー。個々の化合物は、「エリトロ-1-I e a (列番号)」の番号が付けられている。

【0 4 2 8】

50

表 6 f (エリトロ-2 エナンチオマー)、例：

エリトロ-2 の形態にある式 (I e a) [=式 (エリトロ-2-I e a)] [式中、基 Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表 1 の列番号に従って定義される] で表される化学構造を有する、富化された形態 [= (2 S, 3 R) 形態が 90 % e e を超えている] にある光学的に活性なエリトロ-2 エナンチオマー。個々の化合物は、「エリトロ-2-I e a (列番号)」の番号が付けられている。

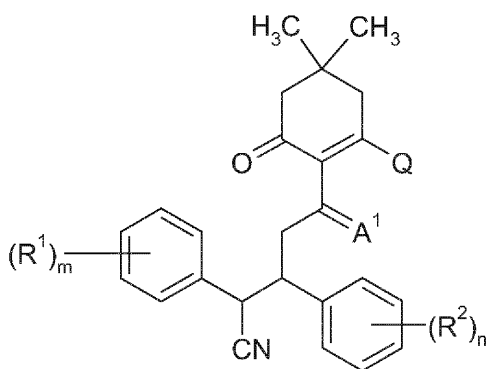
【0429】

表 7： 式 (I f)、(I f a)、(I f b)、(I f c)、(I f d)、(I f e)、(I f f)、(I f g) 及び (I f h) [式中、Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ は、それぞれ、表 1 中で定義されているとおりである] で表される化合物：

10

【0430】

【化 80】



(If)

(Ifa) A^1 は、(=O)

(Ifb) A^1 は、(=S)

(Ifc) A^1 は、(=N-CH₃)

(Ifd) A^1 は、(=N-OH)

(Ife) A^1 は、(=N-OCH₃)

20

(If f) A^1 は、(=N-NH₂)

(Ifg) A^1 は、[N-N(CH₃)₂]

(Ifh) A^1 は、(=N-ベンジル)

表 7、エリトロ/トレオ混合物 (比率 70 : 30 ~ 30 : 70) の例：

その例は、いずれの場合にもエリトロ/トレオラセミ混合物 (比率 70 : 30 ~ 30 : 70) の形態にあるそれぞれの式 (I f a) ~ (I f h) [式中、Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の意味は、表 1 の列番号に従って定義される] で表される化合物である。個々の化合物は、括弧無しで「(式) (列番号)」の番号が付けられている。

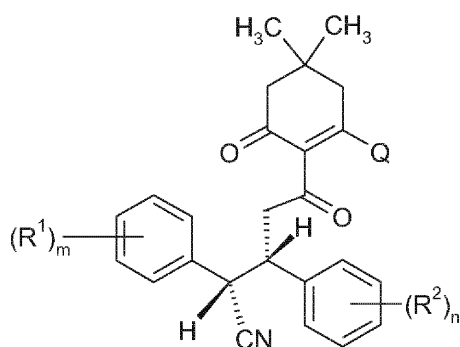
30

【0431】

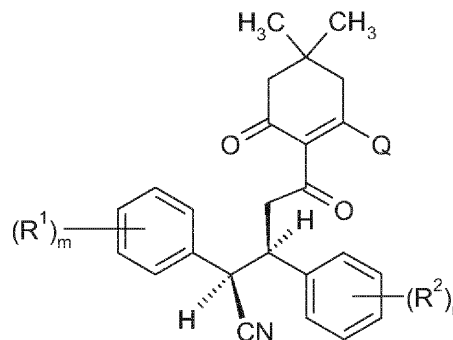
表 7 a ~ 7 f： 式 (トレオ-I f a) 及び式 (トレオ-2-I f a) [式中、Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ は、それぞれ、表 1 中で定義されているとおりである] で表される化合物：

【0432】

【化 8 1】



(トレオ-1-Ifa)



(トレオ-2-Ifa)

10

(トレオ-Ifa) = (トレオ-1-Ifa) + (トレオ-2-Ifa) (50:50) = (ラセミ化合物)

表 7 a (トレオラセミ化合物)、例：

トレオ異性体のラセミ混合物の形態にある式 (I f a) [=式 (トレオ- I f a)] [式中、基 Q、(R¹)_m 及び (R²)_n の構造的組合せは、表 1 の列番号に従って定義される] で表される化合物。個々の化合物は、「トレオ- 2 - I f a (列番号)」の番号が付けられている。

20

【0 4 3 3】

表 7 b (光学的に活性なトレオ- 2 化合物)、例：

式 (トレオ- 2 - I f a) [式中、基 Q、(R¹)_m 及び (R²)_n の構造的組合せは、表 1 の列番号に従って定義される] で表される化学構造を有する、富化された形態 [= (2 R, 3 R) 形態が 90 % e e を超えている] にある光学的に活性なトレオ- 2 エナンチオマー。個々の化合物は、「トレオ- 2 - I f a (列番号)」の番号が付けられている。

【0 4 3 4】

表 7 c (光学的に活性なトレオ- 1 エナンチオマー)、例：

式 (トレオ- 1 - I f a) [式中、基 Q、(R¹)_m 及び (R²)_n の構造的組合せは、表 1 の列番号に従って定義される] で表される化学構造を有する、富化された形態 [= (2 S, 3 S) 形態が 90 % e e を超えている] にある光学的に活性なトレオ- 1 エナンチオマー。個々の化合物は、「トレオ- 1 - I f a (列番号)」の番号が付けられている。

30

【0 4 3 5】

表 7 d (エリトロラセミ化合物)、例：

エリトロ異性体のラセミ混合物の形態にある式 (I f a) [=式 (エリトロ- I f a)] [式中、基 Q、(R¹)_m 及び (R²)_n の構造的組合せは、表 1 の列番号に従って定義される] で表される化合物。個々の化合物は、「エリトロ- I f a (列番号)」の番号が付けられている。

40

【0 4 3 6】

表 7 e (エリトロ- 1 エナンチオマー)、例：

エリトロ- 1 の形態にある式 (I f a) [=式 (エリトロ- 1 - I f a)] [式中、基 Q、(R¹)_m 及び (R²)_n の構造的組合せは、表 1 の列番号に従って定義される] で表される化学構造を有する、富化された形態 [= (2 R, 3 S) 形態が 90 % e e を超えている] にある光学的に活性なエリトロ- 1 エナンチオマー。個々の化合物は、「エリトロ- 1 - I f a (列番号)」の番号が付けられている。

【0 4 3 7】

表 7 f (エリトロ- 2 エナンチオマー)、例：

50

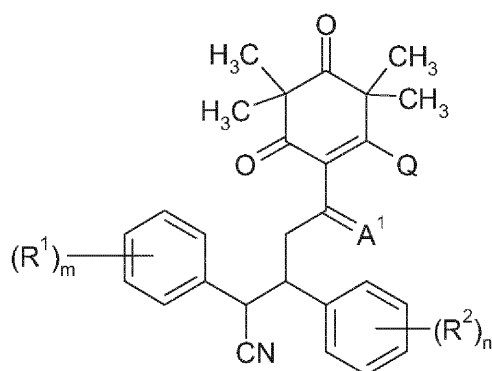
エリトロ-2の形態にある式(I f a) [=式(エリトロ-2-I f a)] [式中、基Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表1の列番号に従って定義される]で表される化学構造を有する、富化された形態 [= (2S, 3R) 形態が90% eeを超えている]にある光学的に活性なエリトロ-2エナンチオマー。個々の化合物は、「エリトロ-2-I f a (列番号)」の番号が付けられている。

【0438】

表8： 式(I g)、(I g a)、(I g b)、(I g c)、(I g d)、(I g e)、(I g f)、(I g g)及び(I g h) [式中、Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ は、それぞれ、表1中で定義されているとおりである]で表される化合物：

【0439】

【化82】



(I g)

I g a) A¹は、(=O)

(I g b) A¹は、(=S)

(I g c) A¹は、(=N-CH₃)

(I g d) A¹は、(=N-OH)

(I g e) A¹は、(=N-OCH₃)

(I g f) A¹は、(=N-NH₂)

(I g g) A¹は、[N-N(CH₃)₂]

(I g h) A¹は、(=N-ベンジル)

表8、エリトロ/トレオ混合物(比率 70:30~30:70)の例：

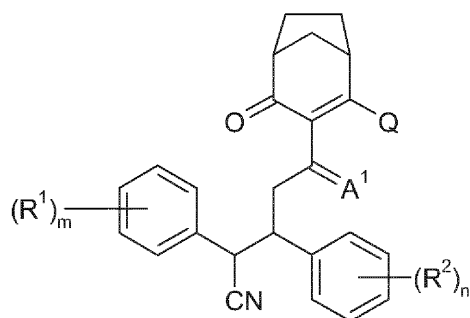
その例は、いずれの場合にもエリトロ/トレオラセミ混合物(比率 70:30~30:70)の形態にあるそれぞれの式(I g a)~(I g h) [式中、Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の意味は、表1の列番号に従って定義される]で表される化合物である。個々の化合物は、括弧無しで「(式)(列番号)」の番号が付けられている。

【0440】

表9： 式(I h)、(I h a)、(I h b)、(I h c)、(I h d)、(I h e)、(I h f)、(I h g)及び(I h h) [式中、Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ は、それぞれ、表1中で定義されているとおりである]で表される化合物：

【0441】

【化83】



(I h)

I h a) A¹は、(=O)

(I h b) A¹は、(=S)

(I h c) A¹は、(=N-CH₃)

(I h d) A¹は、(=N-OH)

(I h e) A¹は、(=N-OCH₃)

(I h f) A¹は、(=N-NH₂)

(I h g) A¹は、[N-N(CH₃)₂]

(I h h) A¹は、(=N-ベンジル)

表9、エリトロ/トレオ混合物(比率 70:30~30:70)の例：

その例は、いずれの場合にもエリトロ/トレオラセミ混合物(比率 70:30~30:70)

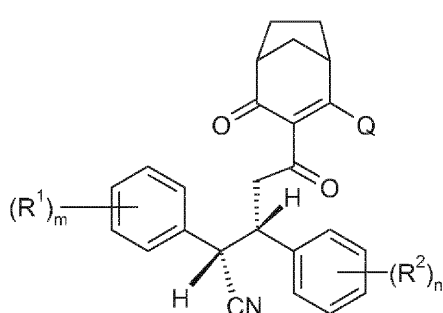
：70)の形態にあるそれぞれの式(Iha)～(Ihh)〔式中、Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の意味は、表1の列番号に従って定義される〕で表される化合物である。個々の化合物は、括弧無しで「(式)(列番号)」の番号が付けられている。

【0442】

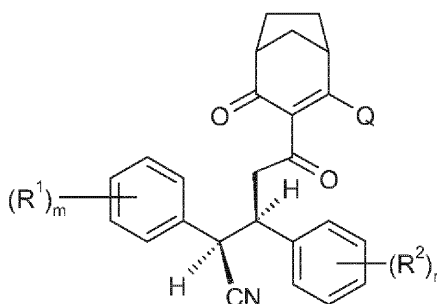
表9a～9f：式(トレオ-Iha)及び式(トレオ-2-Iha)〔式中、Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ は、それぞれ、表1中で定義されているとおりである〕で表される化合物：

【0443】

【化84】



(トレオ-1-Iha)



(トレオ-2-Iha)

(トレオ-Iha) = (トレオ-1-Iha) + (トレオ-2-Iha) (50:50) = (ラセミ化合物)

表9a (トレオラセミ化合物)、例：

トレオ異性体のラセミ混合物の形態にある式(Iha) [=式(トレオ-Iha)] 〔式中、基Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表1の列番号に従って定義される〕で表される化合物。個々の化合物は、「トレオ-2-Iha (列番号)」の番号が付けられている。

【0444】

表9b (光学的に活性なトレオ-2化合物)、例：

式(トレオ-2-Iha)〔式中、基Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表1の列番号に従って定義される〕で表される化学構造を有する、富化された形態〔=(2R, 3R)形態が90%eeを超えている〕にある光学的に活性なトレオ-2エナンチオマー。個々の化合物は、「トレオ-2-Iha (列番号)」の番号が付けられている。

【0445】

表9c (光学的に活性なトレオ-1エナンチオマー)、例：

式(トレオ-1-Iha)〔式中、基Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表1の列番号に従って定義される〕で表される化学構造を有する、富化された形態〔=(2S, 3S)形態が90%eeを超えている〕にある光学的に活性なトレオ-1エナンチオマー。個々の化合物は、「トレオ-1-Iha (列番号)」の番号が付けられている。

【0446】

表9d (エリトロラセミ化合物)、例：

エリトロ異性体のラセミ混合物の形態にある式(Iha) [=式(エリトロ-Iha)] 〔式中、基Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表1の列番号に従って定義される〕で表される化合物。個々の化合物は、「エリトロ-Iha (列番号)」の番号が付けられている。

【0447】

表9e (エリトロ-1エナンチオマー)、例：

エリトロ-1の形態にある式(Iha) [=式(エリトロ-1-Iha)] [式中、基Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表1の列番号に従って定義される]で表される化学構造を有する、富化された形態 [= (2R, 3S) 形態が90% eeを超えている]にある光学的に活性なエリトロ-1エナンチオマー。個々の化合物は、「エリトロ-1-Iha (列番号)」の番号が付けられている。

【0448】

表9f (エリトロ-2エナンチオマー)、例：

エリトロ-2の形態にある式(Iha) [=式(エリトロ-2-Iha)] [式中、基Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表1の列番号に従って定義される]で表される化学構造を有する、富化された形態 [= (2S, 3R) 形態が90% eeを超えている]にある光学的に活性なエリトロ-2エナンチオマー。個々の化合物は、「エリトロ-2-Iha (列番号)」の番号が付けられている。

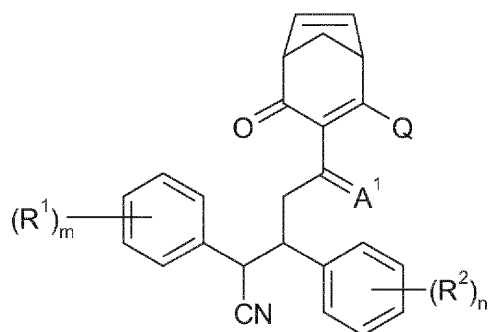
10

【0449】

表10： 式(Ii)、(Iia)、(Iib)、(Iic)、(Iid)、(Iie)、(Iif)、(Iig)及び(Iih) [式中、Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ は、それぞれ、表1中で定義されているとおりである]で表される化合物：

【0450】

【化85】



(li)

(lia) A^1 は、(=O)

(lib) A^1 は、(=S)

(lic) A^1 は、(=N-CH₃)

(lid) A^1 は、(=N-OH)

(lie) A^1 は、(=N-OCH₃)

(lif) A^1 は、(=N-NH₂)

(lig) A^1 は、[=N-N(CH₃)₂]

(lih) A^1 は、(=N-ベンジル)

20

30

表10、エリトロ/トレオ混合物 (比率 70:30~30:70) の例：

その例は、いずれの場合にもエリトロ/トレオラセミ混合物 (比率 70:30~30:70) の形態にあるそれぞれの式(Iia)~(Iih) [式中、Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の意味は、表1の列番号に従って定義される]で表される化合物である。個々の化合物は、括弧無しで「(式) (列番号)」の番号が付けられている。

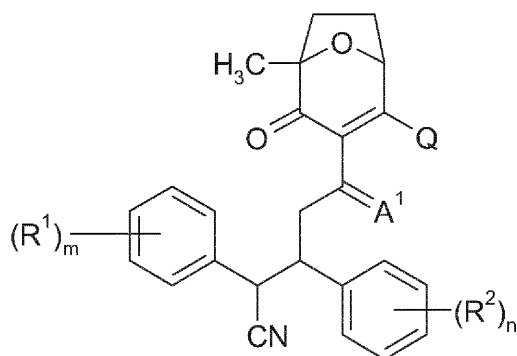
【0451】

表11： 式(Ik)、(Ika)、(Ikb)、(Ikc)、(Ikd)、(Ike)、(Ikf)、(Ikg)及び(Ikh) [式中、Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ は、それぞれ、表1中で定義されているとおりである]で表される化合物：

40

【0452】

【化 8 6】



(Ik)

(Ika) A¹ は、(=O)

(Ikb) A¹ は、(=S)

(Ikc) A¹ は、(=N-CH₃)

(Ikd) A¹ は、(=N-OH)

(Ike) A¹ は、(=N-OCH₃)

(Ilf) A¹ は、(=N-NH₂)

(Ilg) A¹ は、[=N-N(CH₃)₂]

(Ikh) A¹ は、(=N-ベンジル)

10

表 1 1、エリトロ／トレオ混合物（比率 70：30～30：70）の例：

その例は、いずれの場合にもエリトロ／トレオラセミ混合物（比率 70：30～30：70）の形態にあるそれぞれの式 (Ika)～(Ikh)〔式中、Q、(R¹)ₘ 及び (R²)ₙ の意味は、表 1 の列番号に従って定義される〕で表される化合物である。個々の化合物は、括弧無しで「(式) (列番号)」の番号が付けられている。

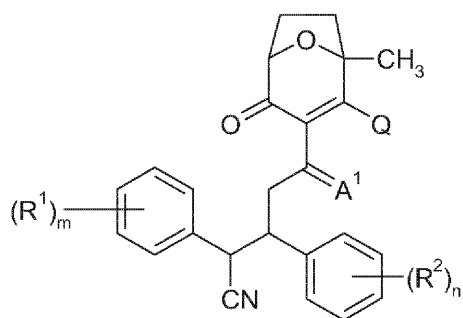
20

【0 4 5 3】

表 1 2： 式 (IL)、(ILa)、(ILb)、(ILc)、(ILd)、(ILE)、(ILf)、(ILg) 及び (ILh)〔式中、Q、(R¹)ₘ 及び (R²)ₙ は、それぞれ、表 1 中で定義されているとおりである〕で表される化合物：

【0 4 5 4】

【化 8 7】



(IL)

(ILa) A¹ は、(=O)

(ILb) A¹ は、(=S)

(ILc) A¹ は、(=N-CH₃)

(ILd) A¹ は、(=N-OH)

(ILE) A¹ は、(=N-OCH₃)

(ILf) A¹ は、(=N-NH₂)

(ILg) A¹ は、[=N-N(CH₃)₂]

(ILh) A¹ は、(=N-ベンジル)

30

表 1 2、エリトロ／トレオ混合物（比率 70：30～30：70）の例：

その例は、いずれの場合にもエリトロ／トレオラセミ混合物（比率 70：30～30：70）の形態にあるそれぞれの式 (ILa)～(ILh)〔式中、Q、(R¹)ₘ 及び (R²)ₙ の意味は、表 1 の列番号に従って定義される〕で表される化合物である。個々の化合物は、括弧無しで「(式) (列番号)」の番号が付けられている。

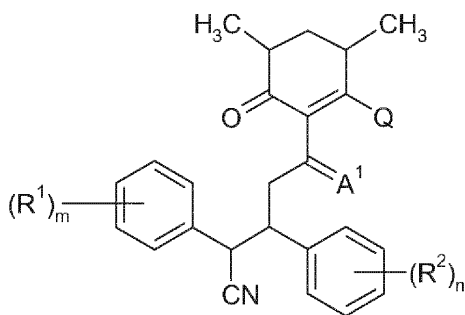
40

【0 4 5 5】

表 1 3： 式 (Im)、(Ima)、(Imb)、(Imc)、(Imd)、(Ime)、(Imf)、(Img) 及び (Imh)〔式中、Q、(R¹)ₘ 及び (R²)ₙ は、それぞれ、表 1 中で定義されているとおりである〕で表される化合物：

【0 4 5 6】

【化 8 8】



(Im)

(Ima) A¹ は、(=O)

(Imb) A¹ は、(=S)

(Imc) A¹ は、(=N-CH₃)

(Imd) A¹ は、(=N-OH)

(Ime) A¹ は、(=N-OCH₃)

(Imf) A¹ は、(=N-NH₂)

(Img) A¹ は、[=N-N(CH₃)₂]

(Imh) A¹ は、(=N-ベンジル)

10

表 1 3、エリトロ／トレオ混合物（比率 70：30～30：70）の例：

その例は、いずれの場合にもエリトロ／トレオラセミ混合物（比率 70：30～30：70）の形態にあるそれぞれの式 (Ima)～(Imh)〔式中、Q、(R¹)ₘ 及び (R²)ₙ の意味は、表 1 の列番号に従って定義される〕で表される化合物である。個々の化合物は、括弧無しで「(式) (列番号)」の番号が付けられている。

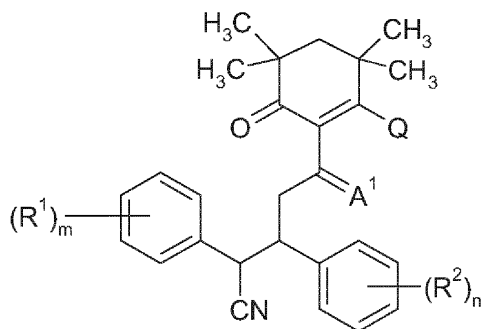
【0457】

20

表 1 4： 式 (In)、(Ina)、(Inb)、(Inc)、(Ind)、(Ine)、(Inf)、(Ing) 及び (Inh)〔式中、Q、(R¹)ₘ 及び (R²)ₙ は、それぞれ、表 1 中で定義されているとおりである〕で表される化合物：

【0458】

【化 8 9】



(In)

(Ina) A¹ は、(=O)

(Inb) A¹ は、(=S)

(Inc) A¹ は、(=N-CH₃)

(Ind) A¹ は、(=N-OH)

(Ine) A¹ は、(=N-OCH₃)

(Inf) A¹ は、(=N-NH₂)

(Ing) A¹ は、[=N-N(CH₃)₂]

(Inh) A¹ は、(=N-ベンジル)

30

表 1 4、エリトロ／トレオ混合物（比率 70：30～30：70）の例：

その例は、いずれの場合にもエリトロ／トレオラセミ混合物（比率 70：30～30：70）の形態にあるそれぞれの式 (Ina)～(Inh)〔式中、Q、(R¹)ₘ 及び (R²)ₙ の意味は、表 1 の列番号に従って定義される〕で表される化合物である。個々の化合物は、括弧無しで「(式) (列番号)」の番号が付けられている。

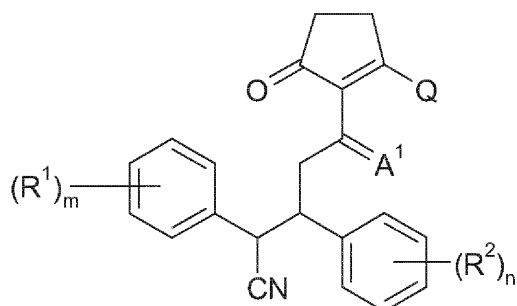
【0459】

40

表 1 5： 式 (Io)、(Ioa)、(Iob)、(Ioc)、(Iod)、(Io e)、(Io f)、(Io g) 及び (Io h)〔式中、Q、(R¹)ₘ 及び (R²)ₙ は、それぞれ、表 1 中で定義されているとおりである〕で表される化合物：

【0460】

【化 9 0】



(lo)

(loa) A¹は、(=O)(lob) A¹は、(=S)(loc) A¹は、(=N-CH₃)(lod) A¹は、(=N-OH)(loe) A¹は、(=N-OCH₃)(lof) A¹は、(=N-NH₂)(log) A¹は、[=N-N(CH₃)₂](loh) A¹は、(=N-ベンジル)

10

表 15、エリトロ／トレオ混合物（比率 70：30～30：70）の例：

その例は、いずれの場合にもエリトロ／トレオラセミ混合物（比率 70：30～30：70）の形態にあるそれぞれの式（Ioa）～（Ioh）〔式中、Q、（R¹）_m及び（R²）_nの意味は、表 1 の列番号に従って定義される〕で表される化合物である。個々の化合物は、括弧無しで「（式）（列番号）」の番号が付けられている。

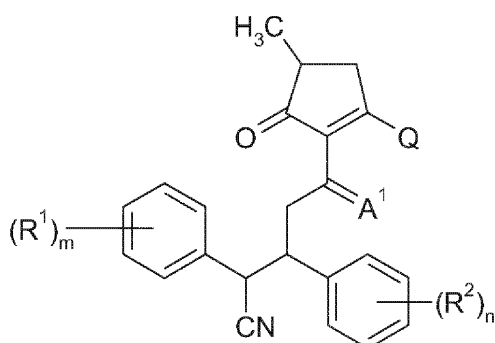
20

【0461】

表 16： 式（Ipa）、（Ipb）、（Ipc）、（Ipd）、（Ipe）、（Ipf）、（Ipg）及び（Iph）〔式中、Q、（R¹）_m及び（R²）_nは、それぞれ、表 1 中で定義されているとおりである〕で表される化合物：

【0462】

【化 9 1】



(lp)

(lpa) A¹は、(=O)(lpb) A¹は、(=S)(lpc) A¹は、(=N-CH₃)(lpd) A¹は、(=N-OH)(lpe) A¹は、(=N-OCH₃)(lpf) A¹は、(=N-NH₂)(lpg) A¹は、[=N-N(CH₃)₂](lph) A¹は、(=N-ベンジル)

30

表 16、エリトロ／トレオ混合物（比率 70：30～30：70）の例：

その例は、いずれの場合にもエリトロ／トレオラセミ混合物（比率 70：30～30：70）の形態にあるそれぞれの式（Ipa）～（Iph）〔式中、Q、（R¹）_m及び（R²）_nの意味は、表 1 の列番号に従って定義される〕で表される化合物である。個々の化合物は、括弧無しで「（式）（列番号）」の番号が付けられている。

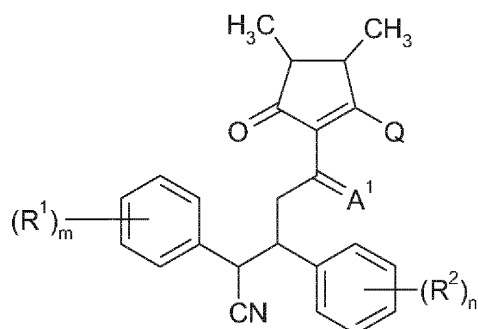
40

【0463】

表 17： 式（Iqa）、（Iqb）、（Iqc）、（Iqd）、（Iqe）、（Iqf）、（Iqg）及び（Iqh）〔式中、Q、（R¹）_m及び（R²）_nは、それぞれ、表 1 中で定義されているとおりである〕で表される化合物：

【0464】

【化 9 2】



(Iq)

(Iqa) A¹は、(=O)

(Iqb) A¹は、(=S)

(Iqc) A¹は、(=N-CH₃)

(Iqd) A¹は、(=N-OH)

(Iqe) A¹は、(=N-OCH₃)

(Iqf) A¹は、(=N-NH₂)

(Iqg) A¹は、[=N-N(CH₃)₂]

(Iqh) A¹は、(=N-ベンジル)

10

表 17、エリトロ／トレオ混合物（比率 70：30～30：70）の例：

その例は、いずれの場合にもエリトロ／トレオラセミ混合物（比率 70：30～30：70）の形態にあるそれぞれの式 (Iqa)～(Iqh)〔式中、Q、(R¹)ₘ及び(R²)ₙの意味は、表 1 の列番号に従って定義される〕で表される化合物である。個々の化合物は、括弧無しで「(式) (列番号)」の番号が付けられている。

【0465】

20

表 18： 式 (Ir)、(Ira)、(Irb)、(Irc)、(Ird)、(Ire)、(Irf)、(Irg) 及び (Irh)〔式中、Q、(R¹)ₘ及び(R²)ₙは、それぞれ、表 1 中で定義されているとおりである〕で表される化合物：

【0466】

【化 9 3】

(Ir)

(Ira) A¹は、(=O)

(Irb) A¹は、(=S)

(Irc) A¹は、(=N-CH₃)

(Ird) A¹は、(=N-OH)

(Ire) A¹は、(=N-OCH₃)

(Irf) A¹は、(=N-NH₂)

(Irg) A¹は、[=N-N(CH₃)₂]

(Irh) A¹は、(=N-ベンジル)

30

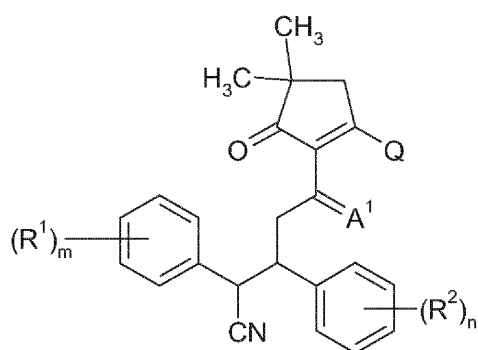


表 18、エリトロ／トレオ混合物（比率 70：30～30：70）の例：

その例は、いずれの場合にもエリトロ／トレオラセミ混合物（比率 70：30～30：70）の形態にあるそれぞれの式 (Ira)～(Irh)〔式中、Q、(R¹)ₘ及び(R²)ₙの意味は、表 1 の列番号に従って定義される〕で表される化合物である。個々の化合物は、括弧無しで「(式) (列番号)」の番号が付けられている。

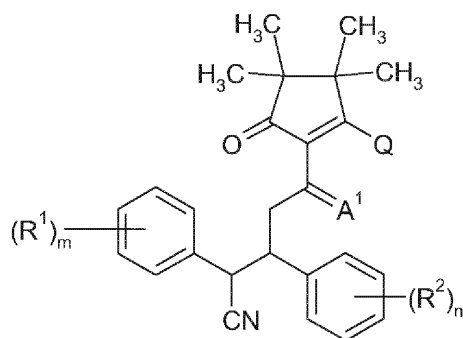
【0467】

40

表 19： 式 (Is)、(Isa)、(Isb)、(Is c)、(Is d)、(Is e)、(Is f)、(Is g) 及び (Is h)〔式中、Q、(R¹)ₘ及び(R²)ₙは、それぞれ、表 1 中で定義されているとおりである〕で表される化合物：

【0468】

【化 9 4】



(Is)

(Isa) A¹は、(=O)(Isb) A¹は、(=S)(Isd) A¹は、(=N-CH₃)(Isd) A¹は、(=N-OH)(Ise) A¹は、(=N-OCH₃)(Isf) A¹は、(=N-NH₂)(Isf) A¹は、[N-N(CH₃)₂](Isf) A¹は、(=N-ベンジル)

10

表 19、エリトロ／トレオ混合物（比率 70：30～30：70）の例：

その例は、いずれの場合にもエリトロ／トレオラセミ混合物（比率 70：30～30：70）の形態にあるそれぞれの式（Isa）～（Isf）〔式中、Q、（R¹）_m及び（R²）_nの意味は、表1の列番号に従って定義される〕で表される化合物である。個々の化合物は、括弧無しで「（式）（列番号）」の番号が付けられている。

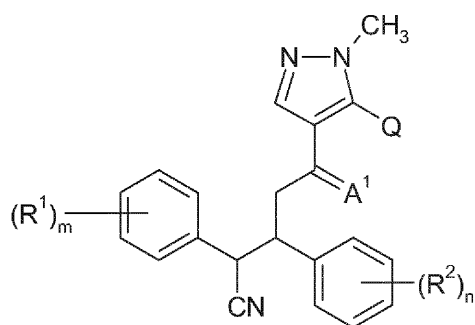
【0469】

表 20： 式（It）、（Ita）、（Itb）、（Itc）、（Itf）、（Ite）、（Itg）及び（Itf）〔式中、Q、（R¹）_m及び（R²）_nは、それぞれ、表1中で定義されているとおりである〕で表される化合物：

20

【0470】

【化 9 5】



(It)

(Ita) A¹は、(=O)(Itb) A¹は、(=S)(Itc) A¹は、(=N-CH₃)(Itf) A¹は、(=N-OH)(Ite) A¹は、(=N-OCH₃)(Itf) A¹は、(=N-NH₂)(Itg) A¹は、[N-N(CH₃)₂](Itf) A¹は、(=N-ベンジル)

30

表 20、エリトロ／トレオ混合物（比率 70：30～30：70）の例：

その例は、いずれの場合にもエリトロ／トレオラセミ混合物（比率 70：30～30：70）の形態にあるそれぞれの式（Ita）～（Itf）〔式中、Q、（R¹）_m及び（R²）_nの意味は、表1の列番号に従って定義される〕で表される化合物である。個々の化合物は、括弧無しで「（式）（列番号）」の番号が付けられている。

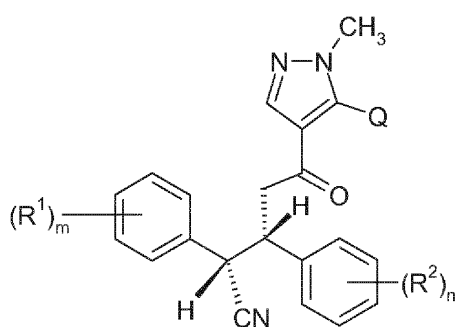
40

【0471】

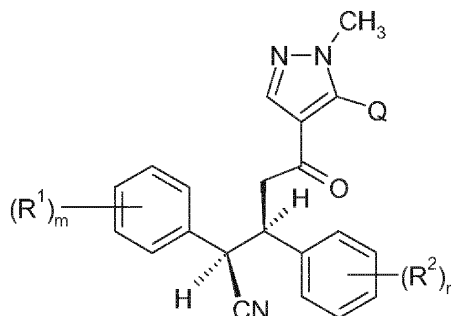
表 20a～20f： 式（トレオーIta）及び式（トレオー2-Ita）〔式中、Q、（R¹）_m及び（R²）_nは、それぞれ、表1中で定義されているとおりである〕で表される化合物：

【0472】

【化 9 6】



(トレオ-1-lta)



(トレオ-2-lta)

(トレオ-lta) = (トレオ-1-lta) + (トレオ-2-lta) (50:50) = (ラセミ化合物)

表 2 0 a (トレオラセミ化合物)、例：

トレオ異性体のラセミ混合物の形態にある式 (I t a) [=式 (トレオー I t a)] [式中、基 Q、(R¹)_m 及び (R²)_n の構造的組合せは、表 1 の列番号に従って定義される] で表される化合物。個々の化合物は、「トレオー I t a (列番号)」の番号が付けられている。

【0 4 7 3】

表 2 0 b (光学的に活性なトレオー 2 化合物)、例：

式 (トレオー 2 - I t a) [式中、基 Q、(R¹)_m 及び (R²)_n の構造的組合せは、表 1 の列番号に従って定義される] で表される化学構造を有する、富化された形態 [= (2 R, 3 R) 形態が 9 0 % e e を超えている] にある光学的に活性なトレオー 2 エナンチオマー。個々の化合物は、「トレオー 2 - I t a (列番号)」の番号が付けられている。

【0 4 7 4】

表 2 0 c (光学的に活性なトレオー 1 エナンチオマー)、例：

式 (トレオー 1 - I t a) [式中、基 Q、(R¹)_m 及び (R²)_n の構造的組合せは、表 1 の列番号に従って定義される] で表される化学構造を有する、富化された形態 [= (2 S, 3 S) 形態が 9 0 % e e を超えている] にある光学的に活性なトレオー 1 エナンチオマー。個々の化合物は、「トレオー 1 - I t a (列番号)」の番号が付けられている。

【0 4 7 5】

表 2 0 d (エリトロラセミ化合物)、例：

エリトロ異性体のラセミ混合物の形態にある式 (I t a) [=式 (エリトロー I t a)] [式中、基 Q、(R¹)_m 及び (R²)_n の構造的組合せは、表 1 の列番号に従って定義される] で表される化合物。個々の化合物は、「エリトロー I t a (列番号)」の番号が付けられている。

【0 4 7 6】

表 2 0 e (エリトロー 1 エナンチオマー)、例：

エリトロー 1 の形態にある式 (I t a) [=式 (エリトロー 1 - I t a)] [式中、基 Q、(R¹)_m 及び (R²)_n の構造的組合せは、表 1 の列番号に従って定義される] で表される化学構造を有する、富化された形態 [= (2 R, 3 S) 形態が 9 0 % e e を超えている] にある光学的に活性なエリトロー 1 エナンチオマー。個々の化合物は、「エリトロー 1 - I t a (列番号)」の番号が付けられている。

【0 4 7 7】

表 2 0 f (エリトロー 2 エナンチオマー)、例：

10

20

30

40

50

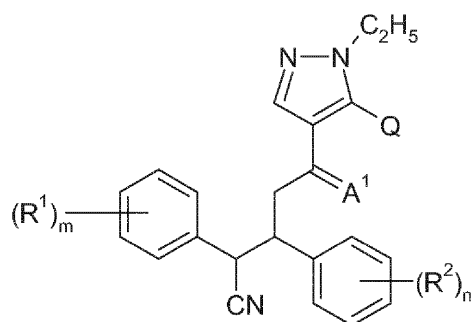
エリトロ-2の形態にある式(I t a) [=式(エリトロ-2-I t a)] [式中、基Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表1の列番号に従って定義される]で表される化学構造を有する、富化された形態 [= (2 S, 3 R) 形態が90% eeを超えている]にある光学的に活性なエリトロ-2エナンチオマー。個々の化合物は、「エリトロ-2-I t a (列番号)」の番号が付けられている(表20bと同様)。

【0478】

表21: 式(I u)、(I u a)、(I u b)、(I u c)、(I u d)、(I u e)、(I u f)、(I u g)及び(I u h) [式中、Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ は、それぞれ、表1中で定義されているとおりである]で表される化合物:

【0479】

【化97】



(Iu)

(Iu a) A¹は、(=O)

(Iu b) A¹は、(=S)

(Iu c) A¹は、(=N-CH₃)

(Iu d) A¹は、(=N-OH)

(Iu e) A¹は、(=N-OCH₃)

(Iu f) A¹は、(=N-NH₂)

(Iu g) A¹は、[=N-N(CH₃)₂]

(Iu h) A¹は、(=N-ベンジル)

表21、エリトロ/トレオ混合物(比率 70:30~30:70)の例:

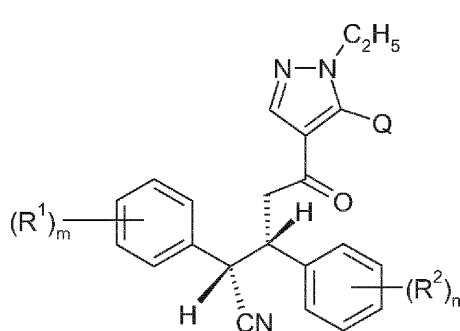
その例は、いずれの場合にもエリトロ/トレオラセミ混合物(比率 70:30~30:70)の形態にあるそれぞれの式(I u a)~(I u h) [式中、Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の意味は、表1の列番号に従って定義される]で表される化合物である。個々の化合物は、括弧無しで「(式)(列番号)」の番号が付けられている。

【0480】

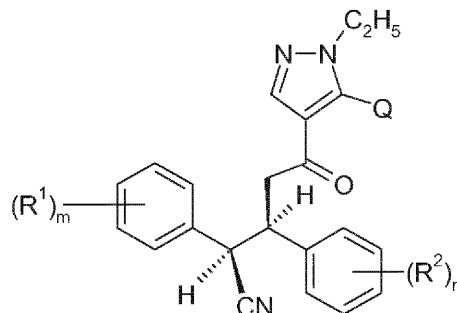
表21 a~21 f: 式(トレオ-I u a)及び式(トレオ-2-I u a) [式中、Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ は、それぞれ、表1中で定義されているとおりである]で表される化合物:

【0481】

【化98】



(トレオ-1-lua)



(トレオ-2-lua)

(トレオ-lua) = (トレオ-1-lua) + (トレオ-2-lua) (50:50) = (ラセミ化合物)

表21 a (トレオラセミ化合物)、例:

トレオ異性体のラセミ混合物の形態にある式 (I u a) [=式 (トレオー I u a)] [式中、基 Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表 1 の列番号に従って定義される] で表される化合物。個々の化合物は、「トレオー I u a (列番号)」の番号が付けられている。

【0482】

表 2 1 b (光学的に活性なトレオー 2 化合物)、例：

式 (トレオー 2 - I u a) [式中、基 Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表 1 の列番号に従って定義される] で表される化学構造を有する、富化された形態 [= (2 R, 3 R) 形態が 90 % e e を超えている] にある光学的に活性なトレオー 2 エナンチオマー。個々の化合物は、「トレオー 2 - I u a (列番号)」の番号が付けられている。

10

【0483】

表 2 1 c (光学的に活性なトレオー 1 エナンチオマー)、例：

式 (トレオー 1 - I u a) [式中、基 Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表 1 の列番号に従って定義される] で表される化学構造を有する、富化された形態 [= (2 S, 3 S) 形態が 90 % e e を超えている] にある光学的に活性なトレオー 1 エナンチオマー。個々の化合物は、「トレオー 1 - I u a (列番号)」の番号が付けられている。

【0484】

表 2 1 d (エリトロラセミ化合物)、例：

エリトロ異性体のラセミ混合物の形態にある式 (I u a) [=式 (エリトロー I u a)] [式中、基 Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表 1 の列番号に従って定義される] で表される化合物。個々の化合物は、「エリトロー I u a (列番号)」の番号が付けられている。

20

【0485】

表 2 1 e (エリトロー 1 エナンチオマー)、例：

エリトロー 1 の形態にある式 (I u a) [=式 (エリトロー 1 - I u a)] [式中、基 Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表 1 の列番号に従って定義される] で表される化学構造を有する、富化された形態 [= (2 R, 3 S) 形態が 90 % e e を超えている] にある光学的に活性なエリトロー 1 エナンチオマー。個々の化合物は、「エリトロー 1 - I u a (列番号)」の番号が付けられている。

30

【0486】

表 2 1 f (エリトロー 2 エナンチオマー)、例：

エリトロー 2 の形態にある式 (I u a) [=式 (エリトロー 2 - I u a)] [式中、基 Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表 1 の列番号に従って定義される] で表される化学構造を有する、富化された形態 [= (2 S, 3 R) 形態が 90 % e e を超えている] にある光学的に活性なエリトロー 2 エナンチオマー。個々の化合物は、「エリトロー 2 - I u a (列番号)」の番号が付けられている。

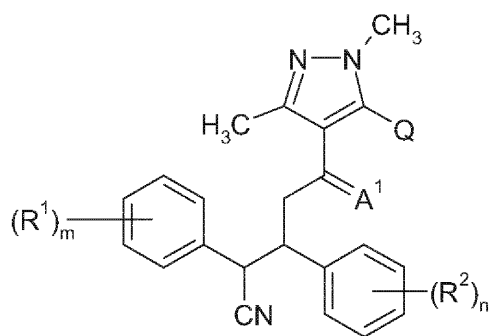
【0487】

表 2 2： 式 (I v)、(I v a)、(I v b)、(I v c)、(I v d)、(I v e)、(I v f)、(I v g) 及び (I v h) [式中、Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ は、それぞれ、表 1 中で定義されているとおりである] で表される化合物：

40

【0488】

【化 9 9】



(iv)

(Iva) A¹ は、(=O)

(Ivb) A¹ は、(=S)

(Ivc) A¹ は、(=N-CH₃)

(Ivd) A¹ は、(=N-OH)

(Ive) A¹ は、(=N-OCH₃)

(Ivf) A¹ は、(=N-NH₂)

(Ivg) A¹ は、[N-N(CH₃)₂]

(Ivh) A¹ は、(=N-ベンジル)

10

表 2 2、エリトロ／トレオ混合物（比率 70：30～30：70）の例：

その例は、いずれの場合にもエリトロ／トレオラセミ混合物（比率 70：30～30：70）の形態にあるそれぞれの式 (Iva)～(Ivh)〔式中、Q、(R¹)ₘ 及び (R²)ₙ の意味は、表 1 の列番号に従って定義される〕で表される化合物である。個々の化合物は、括弧無しで「(式) (列番号)」の番号が付けられている。

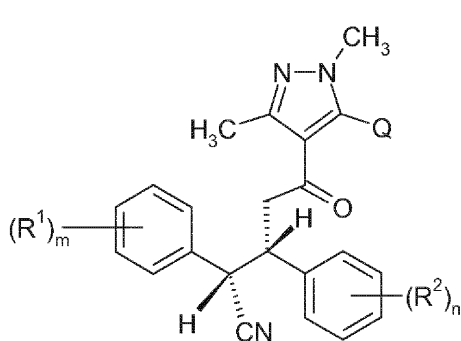
【0489】

20

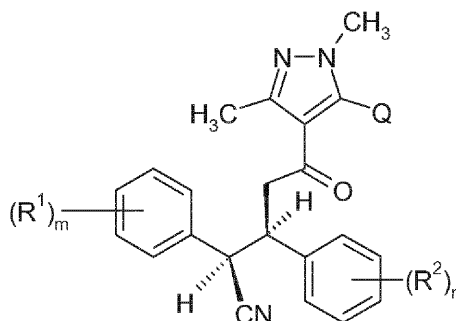
表 2 2 a～2 2 f：式 (トレオ-Iva) 及び式 (トレオ-2-Iva)〔式中、Q、(R¹)ₘ 及び (R²)ₙ は、それぞれ、表 1 中で定義されているとおりである〕で表される化合物：

【0490】

【化 100】



(トレオ-1-Iva)



(トレオ-2-Iva)

30

(トレオ-Iva) = (トレオ-1-Iva) + (トレオ-2-Iva) (50:50) = (ラセミ化合物)

40

表 2 2 a (トレオラセミ化合物)、例：

トレオ異性体のラセミ混合物の形態にある式 (Iva) [=式 (トレオ-Iva)]〔式中、基 Q、(R¹)ₘ 及び (R²)ₙ の構造的組合せは、表 1 の列番号に従って定義される〕で表される化合物。個々の化合物は、「トレオ-Iva (列番号)」の番号が付けられている。

【0491】

表 2 2 b (光学的に活性なトレオ-2 化合物)、例：

式 (トレオ-2-Iva)〔式中、基 Q、(R¹)ₘ 及び (R²)ₙ の構造的組合せは、表 1 の列番号に従って定義される〕で表される化学構造を有する、富化された形態〔=(2R, 3R) 形態が 90% ee を超えている〕にある光学的に活性なトレオ-2 エナン

50

チオマー。個々の化合物は、「トレオー 2-I v a (列番号)」の番号が付けられている。

【0492】

表 22 c (光学的に活性なトレオー 1 エナンチオマー)、例：

式 (トレオー 1-I v a) [式中、基 Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表 1 の列番号に従って定義される] で表される化学構造を有する、富化された形態 [= (2 S, 3 S) 形態が 90% e e を超えている] にある光学的に活性なトレオー 1 エナンチオマー。個々の化合物は、「トレオー 1-I v a (列番号)」の番号が付けられている。

【0493】

表 22 d (エリトロラセミ化合物)、例：

エリトロ異性体のラセミ混合物の形態にある式 (I v a) [=式 (エリトロ-I v a)] [式中、基 Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表 1 の列番号に従って定義される] で表される化合物。個々の化合物は、「エリトロ-I v a (列番号)」の番号が付けられている。

【0494】

表 22 e (エリトロ-1 エナンチオマー)、例：

エリトロ-1 の形態にある式 (I v a) [=式 (エリトロ-1-I v a)] [式中、基 Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表 1 の列番号に従って定義される] で表される化学構造を有する、富化された形態 [= (2 R, 3 S) 形態が 90% e e を超えている] にある光学的に活性なエリトロ-1 エナンチオマー。個々の化合物は、「エリトロ-1-I v a (列番号)」の番号が付けられている。

【0495】

表 22 f (エリトロ-2 エナンチオマー)、例：

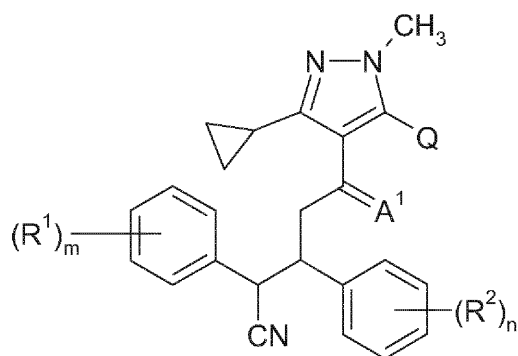
エリトロ-2 の形態にある式 (I v a) [=式 (エリトロ-2-I v a)] [式中、基 Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表 1 の列番号に従って定義される] で表される化学構造を有する、富化された形態 [= (2 S, 3 R) 形態が 90% e e を超えている] にある光学的に活性なエリトロ-2 エナンチオマー。個々の化合物は、「エリトロ-2-I v a (列番号)」の番号が付けられている。

【0496】

表 23： 式 (I w)、(I w a)、(I w b)、(I w c)、(I w d)、(I w e)、(I w f)、(I w g) 及び (I w h) [式中、Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ は、それぞれ、表 1 中で定義されているとおりである] で表される化合物：

【0497】

【化 101】



(I w)

(I w a) A^1 は、(=O)

(I w b) A^1 は、(=S)

(I w c) A^1 は、(=N-CH₃)

(I w d) A^1 は、(=N-OH)

(I w e) A^1 は、(=N-OCH₃)

(I w f) A^1 は、(=N-NH₂)

(I w g) A^1 は、[N-N(CH₃)₂]

(I w h) A^1 は、(=N-ベンジル)

表 23、エリトロ／トレオ混合物（比率 70：30～30：70）の例：

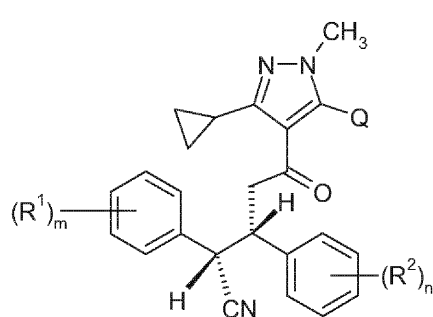
その例は、いずれの場合にもエリトロ／トレオラセミ混合物（比率 70：30～30：70）の形態にあるそれぞれの式（Iwa）～（Iwh）〔式中、Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の意味は、表 1 の列番号に従って定義される〕で表される化合物である。個々の化合物は、括弧無しで「（式）（列番号）」の番号が付けられている。

【0498】

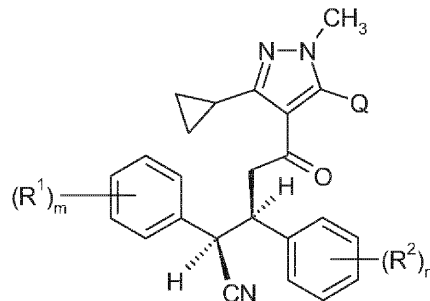
表 23a～23f：式（トレオ-Iwa）及び式（トレオ-2-Iwa）〔式中、Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ は、それぞれ、表 1 中で定義されているとおりである〕で表される化合物：

【0499】

【化102】



（トレオ-1-Iwa）



（トレオ-2-Iwa）

（トレオ-Iwa）=（トレオ-1-Iwa）+（トレオ-2-Iwa）(50:50) =（ラセミ化合物）

表 23a（トレオラセミ化合物）、例：

トレオ異性体のラセミ混合物の形態にある式（Iwa）〔=式（トレオ-Iwa）〕〔式中、基Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表 1 の列番号に従って定義される〕で表される化合物。個々の化合物は、「トレオ-Iwa（列番号）」の番号が付けられている。

【0500】

表 23b（光学的に活性なトレオ-2化合物）、例：

式（トレオ-2-Iwa）〔式中、基Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表 1 の列番号に従って定義される〕で表される化学構造を有する、富化された形態〔=（2R，3R）形態が90％eeを超えている〕にある光学的に活性なトレオ-2エナンチオマー。個々の化合物は、「トレオ-2-Iwa（列番号）」の番号が付けられている。

表 23c（光学的に活性なトレオ-1エナンチオマー）、例：

式（トレオ-1-Iwa）〔式中、基Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表 1 の列番号に従って定義される〕で表される化学構造を有する、富化された形態〔=（2S，3S）形態が90％eeを超えている〕にある光学的に活性なトレオ-1エナンチオマー。個々の化合物は、「トレオ-1-Iwa（列番号）」の番号が付けられている。

【0501】

表 23d（エリトロラセミ化合物）、例：

エリトロ異性体のラセミ混合物の形態にある式（Iwa）〔=式（エリトロ-Iwa）〕〔式中、基Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表 1 の列番号に従って定義される〕で表される化合物。個々の化合物は、「エリトロ-Iwa（列番号）」の番号が付けられている。

【0502】

表 23e（エリトロ-1エナンチオマー）、例：

エリトロ-1の形態にある式(Iwa) [=式(エリトロ-1-Iwa)] [式中、基Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表1の列番号に従って定義される]で表される化学構造を有する、富化された形態 [= (2R, 3S) 形態が90% eeを超えている]にある光学的に活性なエリトロ-1エナンチオマー。個々の化合物は、「エリトロ-1-Iwa (列番号)」の番号が付けられている。

【0503】

表23f (エリトロ-2エナンチオマー)、例：

エリトロ-2の形態にある式(Iwa) [=式(エリトロ-2-Iwa)] [式中、基Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表1の列番号に従って定義される]で表される化学構造を有する、富化された形態 [= (2S, 3R) 形態が90% eeを超えている]にある光学的に活性なエリトロ-2エナンチオマー。個々の化合物は、「エリトロ-2-Iwa (列番号)」の番号が付けられている。

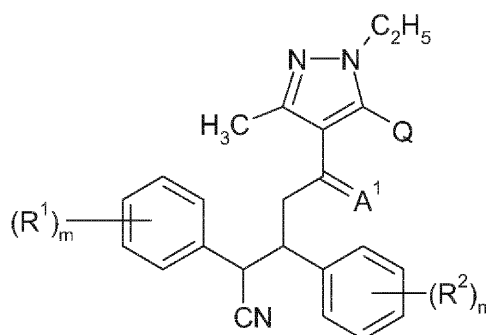
10

【0504】

表24： 式(Ix)、(Ixa)、(Ixb)、(Ixc)、(Ixd)、(Ixe)、(Ixf)、(Ixg)及び(Ixh) [式中、Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ は、それぞれ、表1中で定義されているとおりである]で表される化合物：

【0505】

【化103】



(Ix)

(Ixa) A^1 は、(=O)

(Ixb) A^1 は、(=S)

(Ixc) A^1 は、(=N-CH₃)

(Ixd) A^1 は、(=N-OH)

(Ixe) A^1 は、(=N-OCH₃)

(Ixf) A^1 は、(=N-NH₂)

(Ixg) A^1 は、[=N-N(CH₃)₂]

(Ixh) A^1 は、(=N-ベンジル)

20

30

表24、エリトロ/トレオ混合物 (比率 70:30~30:70) の例：

その例は、いずれの場合にもエリトロ/トレオラセミ混合物 (比率 70:30~30:70) の形態にあるそれぞれの式(Ixa)~(Ixh) [式中、Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の意味は、表1の列番号に従って定義される]で表される化合物である。個々の化合物は、括弧無しで「(式) (列番号)」の番号が付けられている。

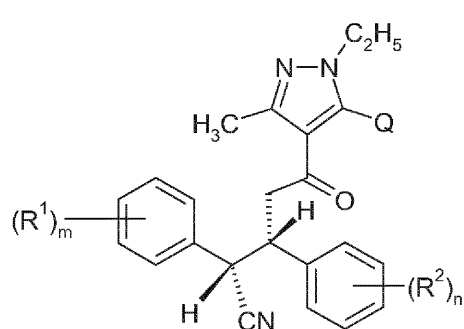
【0506】

表24a~24f： 式(トレオ-Ixa)及び式(トレオ-2-Ixa) [式中、Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ は、それぞれ、表1中で定義されているとおりである]で表される化合物：

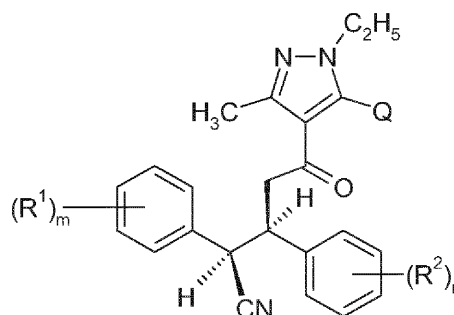
40

【0507】

【化 1 0 4】



(トレオ・1-1xa)



(トレオ・2-1xa)

(トレオ・1xa) = (トレオ・1-1xa) + (トレオ・2-1xa) (50:50) = (ラセミ化合物)

表 2 4 a (トレオラセミ化合物)、例：

トレオ異性体のラセミ混合物の形態にある式 (I x a) [=式 (トレオー I x a)] [式中、基 Q、(R¹)_m 及び (R²)_n の構造的組合せは、表 1 の列番号に従って定義される] で表される化合物。個々の化合物は、「トレオー I x a (列番号)」の番号が付けられている。

【0 5 0 8】

表 2 4 b (光学的に活性なトレオー 2 化合物)、例：

式 (トレオー 2 - I x a) [式中、基 Q、(R¹)_m 及び (R²)_n の構造的組合せは、表 1 の列番号に従って定義される] で表される化学構造を有する、富化された形態 [= (2 R, 3 R) 形態が 9 0 % e e を超えている] にある光学的に活性なトレオー 2 エナンチオマー。個々の化合物は、「トレオー 2 - I x a (列番号)」の番号が付けられている。

【0 5 0 9】

表 2 4 c (光学的に活性なトレオー 1 エナンチオマー)、例：

式 (トレオー 1 - I x a) [式中、基 Q、(R¹)_m 及び (R²)_n の構造的組合せは、表 1 の列番号に従って定義される] で表される化学構造を有する、富化された形態 [= (2 S, 3 S) 形態が 9 0 % e e を超えている] にある光学的に活性なトレオー 1 エナンチオマー。個々の化合物は、「トレオー 1 - I x a (列番号)」の番号が付けられている。

【0 5 1 0】

表 2 4 d (エリトロラセミ化合物)、例：

エリトロ異性体のラセミ混合物の形態にある式 (I x a) [=式 (エリトロー I x a)] [式中、基 Q、(R¹)_m 及び (R²)_n の構造的組合せは、表 1 の列番号に従って定義される] で表される化合物。個々の化合物は、「エリトロー I x a (列番号)」の番号が付けられている。

【0 5 1 1】

表 2 4 e (エリトロー 1 エナンチオマー)、例：

エリトロー 1 の形態にある式 (I x a) [=式 (エリトロー 1 - I x a)] [式中、基 Q、(R¹)_m 及び (R²)_n の構造的組合せは、表 1 の列番号に従って定義される] で表される化学構造を有する、富化された形態 [= (2 R, 3 S) 形態が 9 0 % e e を超えている] にある光学的に活性なエリトロー 1 エナンチオマー。個々の化合物は、「エリトロー 1 - I x a (列番号)」の番号が付けられている。

【0 5 1 2】

表 2 4 f (エリトロー 2 エナンチオマー)、例：

10

20

30

40

50

エリトロ-2の形態にある式(I x a) [=式(エリトロ-2-I x a)] [式中、基Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表1の列番号に従って定義される]で表される化学構造を有する、富化された形態 [= (2 S, 3 R) 形態が90% eeを超えている] にある光学的に活性なエリトロ-2エナンチオマー。個々の化合物は、「エリトロ-2-I w a (列番号)」の番号が付けられている。

【0513】

表25： 本発明による一般式(I)で表される化合物についての下記表に関する基 $(R^1)_m$ 及び基 $(R^2)_n$ の構造的組合せの定義

【0514】

【表 6】

No.	(R ¹) _m	(R ²) _n
1	3-F	4-Cl
2	3-F	3-F
3	3,4-F ₂	4-Cl
4	3-F	4-Br
5	3-Cl	3-F
6	3,4-F ₂	3-F
7	H	3-F
8	4-F	3-F
9	3-F	3-Cl
10	3,4-F ₂	3-Cl
11	3-Br	3-F
12	2,5-F ₂	3-F
13	3-F	2-F
14	3,4,5-F ₃	4-Cl
15	4-F	3-Cl
16	3,4-F ₂	3-F, 4-Cl
17	3,4-F ₂	2-F
18	3-F	2,3-F ₂
19	4-F	3,5-F ₂
20	3-F	4-F
21	3,4-F ₂	3-Cl, 5-F
22	3-F	3-Cl, 5-F
23	3-F	2,5-F ₂
24	3,4-F ₂	2,3-F ₂
25	3,4-F ₂	2,5-F ₂
26	3-Cl	3-Cl, 5-F
27	3-F, 4-Cl	3-Cl
28	3,4-F ₂	3-NO ₂
29	3,4-F ₂	H
30	3-Cl, 4-F	3-F
31	3,4-F ₂	4-OMe
32	3-F	H
33	3-F	2,4-F ₂
34	3-F	2,6-F ₂
35	3-F	3,4-F ₂
36	3-F	3,5-F ₂
37	3-F	2-Cl

10

20

30

40

No.	$(R^1)_m$	$(R^2)_n$
38	3-F	2,3-Cl ₂
39	3-F	2,4-Cl ₂
40	3-F	3,4-Cl ₂
41	3-F	3,5-Cl ₂
42	3,4-F ₂	2,4-F ₂
43	3,4-F ₂	2,6-F ₂
44	3,4-F ₂	3,4-F ₂
45	3,4-F ₂	3,5-F ₂
46	3,4-F ₂	2,4-Cl ₂
47	3,4-F ₂	2,6-Cl ₂
48	3,4-F ₂	3,5-Cl ₂
49	3-Cl	H
50	3-Cl	2-F
51	3-Cl	4-F
52	3-Cl	2,3-F ₂
53	3-Cl	2,5-F ₂
54	3-Cl	2,6-F ₂
55	3-Cl	3,5-F ₂
56	3-Cl	2-Cl
57	3-Cl	3-Cl
58	3-Cl	2,3-Cl ₂
59	3-Cl	2,4-Cl ₂
60	3-Cl	2,5-Cl ₂
61	3-Cl	3,5-Cl ₂
62	3,4-Cl ₂	2,5-F ₂
63	3-Cl, 4-F	3-Cl
64	3-F, 4-Cl	2,3-F ₂
65	3-F, 4-Cl	3,5-F ₂
66	3,4-F ₂	3,4-Cl ₂
67	3,4-F ₂	3,5-Cl ₂
68	3-Cl	H
69	3-Cl	2,4-F ₂
70	3-Cl	3,4-F ₂
71	3-Cl	4-Cl
72	3-Cl	2,6-Cl ₂
73	3,4-Cl ₂	H
74	3,4-Cl ₂	2-F
75	3,4-Cl ₂	3-F

10

20

30

40

No.	(R ¹) _m	(R ²) _n
76	3,4-Cl ₂	4-F
77	3,4-Cl ₂	2,6-F ₂
78	3,4-Cl ₂	3,5-F ₂
79	3,4-Cl ₂	2-Cl
80	3,4-Cl ₂	3-Cl
81	3,4-Cl ₂	4-Cl
82	3,4-Cl ₂	2,4-Cl ₂
83	3,4-Cl ₂	2,5-Cl ₂
84	3,4-Cl ₂	2,6-Cl ₂
85	3,4-Cl ₂	3,4-Cl ₂
86	3,4-Cl ₂	3,5-Cl ₂
87	3-Cl, 4-F	H
88	3-Cl, 4-F	2-F
89	3-Cl, 4-F	4-F
90	3-Cl, 4-F	2,3-F ₂
91	3-Cl, 4-F	2,4-F ₂
92	3-Cl, 4-F	2,5-F ₂
93	3-Cl, 4-F	2,6-F ₂
94	3-Cl, 4-F	3,4-F ₂
95	3-Cl, 4-F	3,5-F ₂
96	3-Cl, 4-F	2-Cl
97	3-Cl, 4-F	3-Cl
98	3-Cl, 4-F	4-Cl
99	3-Cl, 4-F	2,3-Cl ₂
100	3-Cl, 4-F	2,4-Cl ₂
101	3-Cl, 4-F	2,5-Cl ₂
102	3-Cl, 4-F	2,6-Cl ₂
103	3-Cl, 4-F	3,4-Cl ₂
104	3-Cl, 4-F	3,5-Cl ₂
105	3-Cl, 4-F	H
106	3-F, 4-Cl	2-F
107	3-F, 4-Cl	3-F
108	3-F, 4-Cl	4-F
109	3-F, 4-Cl	2,4-F ₂
110	3-F, 4-Cl	2,5-F ₂
111	3-F, 4-Cl	2,6-F ₂
112	3-F, 4-Cl	3,4-F ₂
113	3-F, 4-Cl	2-Cl

10

20

30

40

No.	(R ¹) _m	(R ²) _n
114	3-F, 4-Cl	4-Cl
115	3-F, 4-Cl	2,4-Cl ₂
116	3-F, 4-Cl	2,5-Cl ₂
117	3-F, 4-Cl	2,6-Cl ₂
118	3-F, 4-Cl	3,4-Cl ₂
119	3-F, 4-Cl	3,5-Cl ₂
120	3-CN	H
121	3-CN	2,5-F ₂
122	3-CN	2,6-F ₂
123	3-CN	2,3-F ₂
124	3-CN	2,4-F ₂
125	3-CN	3,4-F ₂
126	3-CN	3,5-F ₂
127	3-CN	4-Cl
128	3-CN	3-Cl
129	3-CN	2-Cl
130	3-CN	4-F
131	3-CN	3-F
132	3-CN	2-F
133	2-CN	3-F
134	2-CN	4-F
135	2-CN	4-Cl
136	3-NO ₂	H
137	3-NO ₂	2,5-F ₂
138	3-NO ₂	2,6-F ₂
139	3-NO ₂	2,3-F ₂
140	3-NO ₂	2,4-F ₂
141	3-NO ₂	3,4-F ₂
142	3-NO ₂	3,5-F ₂
143	3-NO ₂	4-Cl
144	3-NO ₂	3-Cl
145	3-NO ₂	2-Cl
146	3-NO ₂	4-F
147	3-NO ₂	3-F
148	3-NO ₂	2-F
149	H	2,6-F ₂
150	H	3,4-F ₂
151	H	3,5-F ₂

10

20

30

40

No.	(R ¹) _m	(R ²) _n
152	H	2,3-F ₂
153	H	2,4-F ₂
154	H	2,5-F ₂
155	H	2-Cl
156	H	3-Cl
157	H	4-Cl
158	H	2-F
159	H	4-F
160	H	2,3-Cl ₂
161	H	2,4-Cl ₂
162	H	2,5-Cl ₂
163	H	2,6-Cl ₂
164	H	3,4-Cl ₂
165	H	3,5-Cl ₂
166	3-CN, 4-F	3-F
167	3-CN, 4-F	3-Cl
168	3-CN, 4-F	3-CN
169	3-CN, 4-F	4-F
170	3-CN, 4-F	4-Cl
171	3-CN, 4-F	2,5-F ₂
172	3-CN, 4-F	2,6-F ₂
173	3-CN, 4-F	3-F
174	3-CN, 4-F	3-Cl
175	3-CN, 4-F	3-CN
176	3-CN, 4-F	4-F
177	3-CN, 4-F	4-Cl
178	3-CN, 4-F	2,5-F ₂
179	3-CN, 4-F	2,6-F ₂
180	3-Br, 4-F	3-F
181	3-Br, 4-F	3-Cl
182	3-Br, 4-F	3-CN
183	3-Br, 4-F	4-F
184	3-Br, 4-F	4-Cl
185	3-Br, 4-F	2,5-F ₂
186	3-Br, 4-F	2,6-F ₂
187	3-Br, 4-F	3-F
188	3-Br, 4-F	3-Cl
189	3-Br, 4-F	3-CN

10

20

30

40

No.	(R ¹) _m	(R ²) _n
190	3-Br, 4-F	4-F
191	3-Br, 4-F	4-Cl
192	3-Br, 4-F	2,5-F ₂
193	3-Br, 4-F	2,6-F ₂
194	3-F, 4-CN	3-F
195	3-F, 4-CN	3-Cl
196	3-F, 4-CN	3-CN
197	3-F, 4-CN	4-F
198	3-F, 4-CN	4-Cl
199	3-F, 4-CN	2,5-F ₂
200	3-F, 4-CN	2,6-F ₂
201	3-F, 4-CN	3-F
202	3-F, 4-CN	3-Cl
203	3-F, 4-CN	3-CN
204	3-F, 4-CN	4-F
205	3-F, 4-CN	4-Cl
206	3-F, 4-CN	2,5-F ₂
207	3-F, 4-CN	2,6-F ₂

10

20

参照することを目的として、以下の表 2 6 ～ 表 3 5 において個々の化合物に対して特定の番号（＝実施例番号）が割り当てられており、その際、当該実施例番号は、各表に割り当てられている化学式の番号と「列番号」（列番号）〔この列番号は、表 2 5 の第 1 カラムの列に記載されている番号と同じ番号を示している〕で構成されている。かくして、実施例番号「（式番号）（列番号）」の化学構造は、個々の表の上の式、式番号及び表 2 5 の列番号によって明瞭に定義される。例えば：

表 2 6 の実施例番号「I B 8 a a 1」は、式（I B 8）〔式中、R＝メチル及び A¹＝O〔＝式（I B 8 a a）〕；式（I B 8）に関する下位式の下記表を参照されたい〕、並びに、(R¹)_m＝3－F 及び (R²)_n＝4－Cl は、表 2 5 の列 1 に従って定義される〕で表される化合物又はその互変異性体である。

30

【0 5 1 5】

表 2 6 の実施例番号「I B 8 a f 1 3 6」は、式（I B 8）〔式中、R＝メチル及び A¹＝N－NH₂〔＝式（I B 8 a f）〕、並びに、(R¹)_m＝3－NO₂ 及び (R²)_n＝H（n＝0、置換されていない）は、表 2 5 の列 1 3 6 に従って定義される〕で表される化合物又はその互変異性体である。

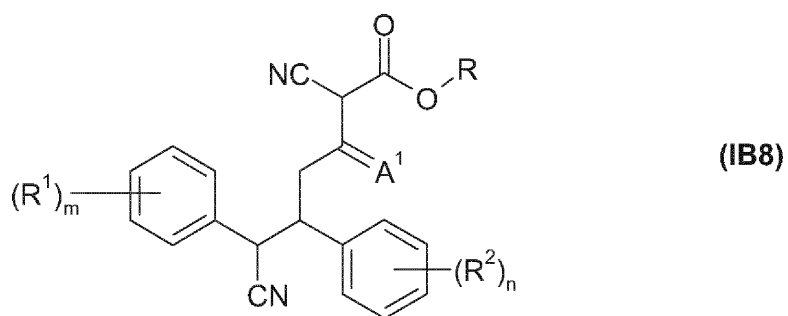
【0 5 1 6】

表 2 6： 式（I B 8）〔式中、(R¹)_m 及び (R²)_n は、それぞれ、表 2 5 中で定義されているとおりである〕で表される化合物：

40

【0 5 1 7】

【化 1 0 5】



10

固定されたラジカル R 及び A¹ を有している式 (I B 8) に関する下位式の定義：
【 0 5 1 8 】

【表 7】

(IB8) に関する下位式	R	A ¹
(IB8a)	CH ₃	A ¹
(IB8aa)	CH ₃	O
(IB8ab)	CH ₃	S
(IB8ac)	CH ₃	=N-CH ₃
(IB8ad)	CH ₃	=N-OH
(IB8ae)	CH ₃	=N-OCH ₃
(IB8af)	CH ₃	=N-NH ₂
(IB8ag)	CH ₃	=N-N(CH ₃) ₂
(IB8ah)	CH ₃	=N-CH ₂ -C ₆ H ₅
(IB8b)	C ₂ H ₅	A ¹
(IB8ba)	C ₂ H ₅	O
(IB8bb)	C ₂ H ₅	S
(IB8bc)	C ₂ H ₅	=N-CH ₃
(IB8bd)	C ₂ H ₅	=N-OH
(IB8be)	C ₂ H ₅	=N-OCH ₃
(IB8bf)	C ₂ H ₅	=N-NH ₂
(IB8bg)	C ₂ H ₅	=N-N(CH ₃) ₂
(IB8bh)	C ₂ H ₅	=N-CH ₂ -C ₆ H ₅
(IB8c)	n-C ₃ H ₇	A ¹
(IB8ca)	n-C ₃ H ₇	O
(IB8cb)	n-C ₃ H ₇	S
(IB8cc)	n-C ₃ H ₇	=N-CH ₃
(IB8cd)	n-C ₃ H ₇	=N-OH
(IB8ce)	n-C ₃ H ₇	=N-OCH ₃
(IB8cf)	n-C ₃ H ₇	=N-NH ₂
(IB8cg)	n-C ₃ H ₇	=N-N(CH ₃) ₂
(IB8ch)	n-C ₃ H ₇	=N-CH ₂ -C ₆ H ₅
(IB8d)	i-C ₃ H ₇	A ¹
(IB8da)	i-C ₃ H ₇	O
(IB8db)	i-C ₃ H ₇	S
(IB8dc)	i-C ₃ H ₇	=N-CH ₃

10

20

30

40

(IB8) に関する下位式	R	A ¹
(IB8dd)	i-C ₃ H ₇	=N-OH
(IB8de)	i-C ₃ H ₇	=N-OCH ₃
(IB8df)	i-C ₃ H ₇	=N-NH ₂
(IB8dg)	i-C ₃ H ₇	=N-N(CH ₃) ₂
(IB8dh)	i-C ₃ H ₇	=N-CH ₂ -C ₆ H ₅

10

表 26、エリトロ／トレオ混合物（比率 70：30～30：70）の例：

その例は、いずれの場合にもエリトロ／トレオラセミ混合物（比率 70：30～30：70）の形態にあるそれぞれの式（IB8aa）～（IB8ah）、式（IB8ba）～（IB8bh）、式（IB8ca）～（IB8ch）及び式（IB8da）～（IB8dh）〔式中、（R¹）_m及び（R²）_nの意味は、表25の列番号に従って定義される〕で表される化合物である。個々の化合物は、括弧無しで「（式）（列番号）」の番号が付けられている。

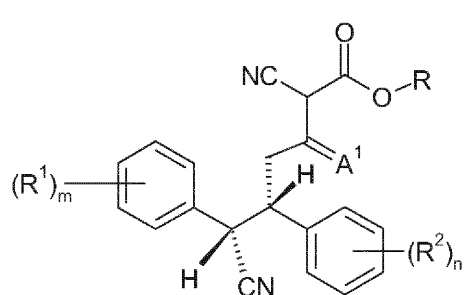
【0519】

表 26a～26f： 式（トレオーIB8）、式（トレオー1-IB8）及び式（トレオー2-IB8）〔式中、（R¹）_m及び（R²）_nは、それぞれ、表25中で定義され

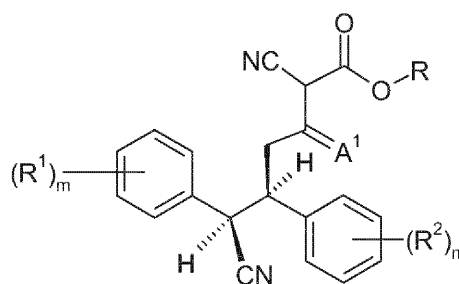
20

【0520】

【化106】



(トレオ-1-IB8)



(トレオ-2-IB8)

(トレオ-IB8) = (トレオ-1-IB8) + (トレオ-2-IB8) (50:50) = (ラセミ化合物)

30

固定されたラジカルR及びA¹を有している式トレオー（IB8）、式トレオー1-（IB8）及び式トレオー2-（IB8）に関する下位式の定義：

【0521】

【表 8】

下位式	R	A ¹	立体化学
トレオ-(IB8a)	CH ₃	A ¹	(2S,3S)/(2R,3R), ラセミ体
トレオ-1-(IB8a)	CH ₃	A ¹	(2S,3S), 光学活性
トレオ-2-(IB8a)	CH ₃	A ¹	(2R,3R), 光学活性
トレオ-(IB8aa)	CH ₃	O	(2S,3S)/(2R,3R), ラセミ体
トレオ-1-(IB8aa)	CH ₃	O	(2S,3S), 光学活性
トレオ-2-(IB8aa)	CH ₃	O	(2R,3R), 光学活性
トレオ-(IB8b)	C ₂ H ₅	A ¹	(2S,3S)/(2R,3R), ラセミ体
トレオ-1-(IB8b)	C ₂ H ₅	A ¹	(2S,3S), 光学活性
トレオ-2-(IB8b)	C ₂ H ₅	A ¹	(2R,3R), 光学活性
トレオ-(IB8ba)	C ₂ H ₅	O	(2S,3S)/(2R,3R), ラセミ体
トレオ-1-(IB8ba)	C ₂ H ₅	O	(2S,3S), 光学活性
トレオ-2-(IB8ba)	C ₂ H ₅	O	(2R,3R), 光学活性
トレオ-(IB8c)	n-C ₃ H ₇	A ¹	(2S,3S)/(2R,3R), ラセミ体
トレオ-1-(IB8c)	n-C ₃ H ₇	A ¹	(2S,3S), 光学活性
トレオ-2-(IB8c)	n-C ₃ H ₇	A ¹	(2R,3R), 光学活性
トレオ-(IB8ca)	n-C ₃ H ₇	O	(2S,3S)/(2R,3R), ラセミ体
トレオ-1-(IB8ca)	n-C ₃ H ₇	O	(2S,3S), 光学活性
トレオ-2-(IB8ca)	n-C ₃ H ₇	O	(2R,3R), 光学活性
トレオ-(IB8d)	i-C ₃ H ₇	A ¹	(2S,3S)/(2R,3R), ラセミ体
トレオ-1-(IB8d)	i-C ₃ H ₇	A ¹	(2S,3S), 光学活性
トレオ-2-(IB8d)	i-C ₃ H ₇	A ¹	(2R,3R), 光学活性
トレオ-(IB8da)	i-C ₃ H ₇	O	(2S,3S)/(2R,3R), ラセミ体
トレオ-1-(IB8da)	i-C ₃ H ₇	O	(2S,3S), 光学活性
トレオ-2-(IB8da)	i-C ₃ H ₇	O	(2R,3R), 光学活性

表 2 6 a (トレオラセミ化合物)、例：

式トレオー (I B 8 a a)、式トレオー (I B 8 b a)、式トレオー (I B 8 c a) 及び式トレオー (I B 8 d a) [式中、基 (R¹)_m 及び (R²)_n の構造的組合せは、表 2 5 の列番号に従って定義される] で表され、いずれの場合にもトレオ異性体のラセミ混合物の形態にある化合物。個々の化合物は、「トレオー I B 8 a a (列番号)」、「トレオー I B 8 b a (列番号)」、「トレオー I B 8 c a (列番号)」及び「トレオー I B 8 d a (列番号)」の番号が付けられている。

【0 5 2 2】

表 2 6 b (光学的に活性なトレオー 2 化合物)、例：

式トレオー 2- (I B 8 a a)、式トレオー 2- (I B 8 b a)、式トレオー 2- (I B 8 c a) 及び式トレオー 2- (I B 8 d a) [式中、基 (R¹)_m 及び (R²)_n の構

10

20

30

40

50

造的組合せは、表 2 5 の列番号に従って定義される〕で表され、いずれの場合にも立体化学的に富化された形態 [= (2 R, 3 R) 形態が 90 % e e を超えている] にある化合物。個々の化合物は、「トレオー 2 - I B 8 a a (列番号)」、「トレオー 2 - I B 8 b a (列番号)」、「トレオー 2 - I B 8 c a (列番号)」及び「トレオー 2 - I B 8 d a (列番号)」の番号が付けられている。

【0523】

表 2 6 c (光学的に活性なトレオー 1 エナンチオマー)、例：

式トレオー 1 - (I B 8 a a)、式トレオー 1 - (I B 8 b a)、式トレオー 1 - (I B 8 c a) 及び式トレオー 1 - (I B 8 d a) [式中、基 (R^1)_m 及び (R^2)_n の構造的組合せは、表 2 5 の列番号に従って定義される] で表され、いずれの場合にも立体化学的に富化された形態 [= (2 S, 3 S) 形態が 90 % e e を超えている] にある光学的に活性なエナンチオマー性化合物。個々の化合物は、「トレオー 1 - I B 8 a a (列番号)」、「トレオー 1 - I B 8 b a (列番号)」、「トレオー 1 - I B 8 c a (列番号)」及び「トレオー 1 - I B 8 d a (列番号)」の番号が付けられている。

10

【0524】

表 2 6 d (エリトロラセミ化合物)、例：

式エリトロ - (I B 8 a a)、式エリトロ - (I B 8 b a)、式エリトロ - (I B 8 c a) 及び式エリトロ - (I B 8 d a) [式中、基 (R^1)_m 及び (R^2)_n の構造的組合せは、表 2 5 の列番号に従って定義される] で表され、いずれの場合にもエリトロ異性体のラセミ混合物の形態にある化合物。個々の化合物は、「エリトロ - I B 8 a a (列番号)」、「エリトロ - I B 8 b a (列番号)」、「エリトロ - I B 8 c a (列番号)」及び「エリトロ - I B 8 d a (列番号)」の番号が付けられている。

20

【0525】

表 2 6 e (エリトロ - 1 エナンチオマー)、例：

式エリトロ - 1 - (I B 8 a a)、式エリトロ - 1 - (I B 8 b a)、式エリトロ - 1 - (I B 8 c a) 及び式エリトロ - 1 - (I B 8 d a) [式中、基 (R^1)_m 及び (R^2)_n の構造的組合せは、表 2 5 の列番号に従って定義される] で表され、いずれの場合にも立体化学的に富化された形態 [= (2 R, 3 S) 形態が 90 % e e を超えている] にある光学的に活性なエナンチオマー性化合物。個々の化合物は、「エリトロ - 1 - I B 8 a a (列番号)」、「エリトロ - 1 - I B 8 b a (列番号)」、「エリトロ - 1 - I B 8 c a (列番号)」及び「エリトロ - 1 - I B 8 d a (列番号)」の番号が付けられている。

30

【0526】

表 2 6 f (エリトロ - 2 エナンチオマー)、例：

式エリトロ - 2 - (I B 8 a a)、式エリトロ - 2 - (I B 8 b a)、式エリトロ - 2 - (I B 8 c a) 及び式エリトロ - 2 - (I B 8 d a) [式中、基 (R^1)_m 及び (R^2)_n の構造的組合せは、表 2 5 の列番号に従って定義される] で表され、いずれの場合にも立体化学的に富化された形態 [= (2 S, 3 R) 形態が 90 % e e を超えている] にある光学的に活性なエナンチオマー性化合物。個々の化合物は、「エリトロ - 2 - I B 8 a a (列番号)」、「エリトロ - 2 - I B 8 b a (列番号)」、「エリトロ - 2 - I B 8 c a (列番号)」及び「エリトロ - 2 - I B 8 d a (列番号)」の番号が付けられている。

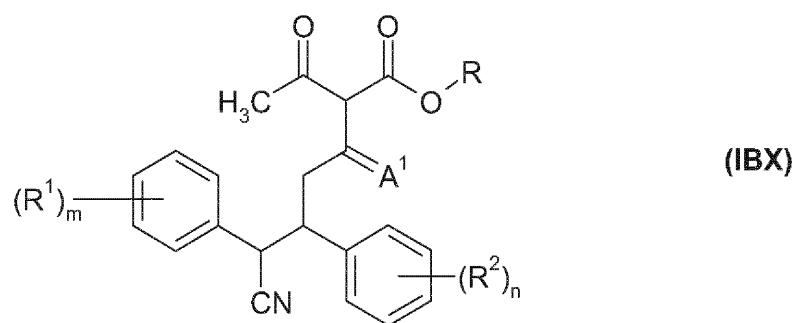
40

【0527】

表 2 7： 式 (I B X) [式中、(R^1)_m 及び (R^2)_n は、それぞれ、表 2 5 中で定義されているとおりである] で表される化合物：

【0528】

【化 1 0 7】



固定されたラジカル R 及び A¹ を有している式 (I B X) に関する下位式の定義：
【 0 5 2 9 】

【表 9】

(IBX) に関する下位式	R	A ¹
(IBXa)	CH ₃	A ¹
(IBXaa)	CH ₃	O
(IBXab)	CH ₃	S
(IBXac)	CH ₃	=N-CH ₃
(IBXad)	CH ₃	=N-OH
(IBXae)	CH ₃	=N-OCH ₃
(IBXaf)	CH ₃	=N-NH ₂
(IBXag)	CH ₃	=N-N(CH ₃) ₂
(IBXah)	CH ₃	=N-CH ₂ -C ₆ H ₅
(IBXb)	C ₂ H ₅	A ¹
(IBXba)	C ₂ H ₅	O
(IBXbb)	C ₂ H ₅	S
(IBXbc)	C ₂ H ₅	=N-CH ₃
(IBXbd)	C ₂ H ₅	=N-OH
(IBXbe)	C ₂ H ₅	=N-OCH ₃
(IBXbf)	C ₂ H ₅	=N-NH ₂
(IBXbg)	C ₂ H ₅	=N-N(CH ₃) ₂
(IBXbh)	C ₂ H ₅	=N-CH ₂ -C ₆ H ₅
(IBXc)	n-C ₃ H ₇	A ¹
(IBXca)	n-C ₃ H ₇	O
(IBXcb)	n-C ₃ H ₇	S
(IBXcc)	n-C ₃ H ₇	=N-CH ₃
(IBXcd)	n-C ₃ H ₇	=N-OH
(IBXce)	n-C ₃ H ₇	=N-OCH ₃
(IBXcf)	n-C ₃ H ₇	=N-NH ₂
(IBXcg)	n-C ₃ H ₇	=N-N(CH ₃) ₂
(IBXch)	n-C ₃ H ₇	=N-CH ₂ -C ₆ H ₅
(IBXd)	i-C ₃ H ₇	A ¹
(IBXda)	i-C ₃ H ₇	O
(IBXdb)	i-C ₃ H ₇	S
(IBXdc)	i-C ₃ H ₇	=N-CH ₃

10

20

30

40

(IBX) に関する下位式	R	A ¹
(IBXdd)	i-C ₃ H ₇	=N-OH
(IBXde)	i-C ₃ H ₇	=N-OCH ₃
(IBXdf)	i-C ₃ H ₇	=N-NH ₂
(IBXdg)	i-C ₃ H ₇	=N-N(CH ₃) ₂
(IBXdh)	i-C ₃ H ₇	=N-CH ₂ -C ₆ H ₅

10

表 27、エリトロ／トレオ混合物（比率 70：30～30：70）の例：

その例は、いずれの場合にもエリトロ／トレオラセミ混合物（比率 70：30～30：70）の形態にあるそれぞれの式（IBXaa）～（IBXah）、式（IBXba）～（IBXbh）、式（IBXca）～（IBXch）及び式（IBXda）～（IBXdh）〔式中、（R¹）_m及び（R²）_nの意味は、表 25 の列番号に従って定義される〕で表される化合物である。個々の化合物は、括弧無しで「（式）（列番号）」の番号が付けられている。

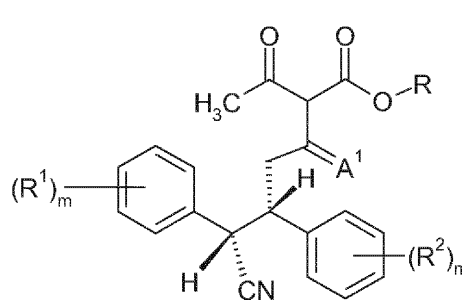
【0530】

表 27a～27f： 式（トレオ-IBX）、式（トレオ-1-IBX）及び式（トレオ-2-IBX）〔式中、（R¹）_m及び（R²）_nは、それぞれ、表 25 中で定義されているとおりである〕で表される化合物：

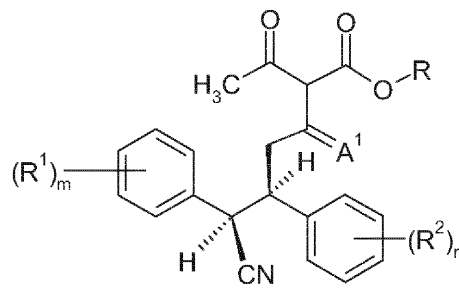
20

【0531】

【化108】



(トレオ-1-IBX)



(トレオ-2-IBX)

(トレオ-IBX) = (トレオ-1-IBX) + (トレオ-2-IBX) (50:50) = (ラセミ化合物)

30

固定されたラジカル R 及び A¹ を有している式トレオ（IBX）、式トレオ-1-（IBX）及び式トレオ-2-（IBX）に関する下位式の定義：

【0532】

【表 10】

下位式	R	A ¹	立体化学
トレオ-(IBXa)	CH ₃	A ¹	(2S,3S)/(2R,3R), ラセミ体
トレオ-1-(IBXa)	CH ₃	A ¹	(2S,3S), 光学活性
トレオ-2-(IBXa)	CH ₃	A ¹	(2R,3R), 光学活性
トレオ-(IBXaa)	CH ₃	O	(2S,3S)/(2R,3R), ラセミ体
トレオ-1-(IBXaa)	CH ₃	O	(2S,3S), 光学活性
トレオ-2-(IBXaa)	CH ₃	O	(2R,3R), 光学活性
トレオ-(IBXb)	C ₂ H ₅	A ¹	(2S,3S)/(2R,3R), ラセミ体
トレオ-1-(IBXb)	C ₂ H ₅	A ¹	(2S,3S), 光学活性
トレオ-2-(IBXb)	C ₂ H ₅	A ¹	(2R,3R), 光学活性
トレオ-(IBXba)	C ₂ H ₅	O	(2S,3S)/(2R,3R), ラセミ体
トレオ-1-(IBXba)	C ₂ H ₅	O	(2S,3S), 光学活性
トレオ-2-(IBXba)	C ₂ H ₅	O	(2R,3R), 光学活性
トレオ-(IBXc)	n-C ₃ H ₇	A ¹	(2S,3S)/(2R,3R), ラセミ体
トレオ-1-(IBXc)	n-C ₃ H ₇	A ¹	(2S,3S), 光学活性
トレオ-2-(IBXc)	n-C ₃ H ₇	A ¹	(2R,3R), 光学活性
トレオ-(IBXca)	n-C ₃ H ₇	O	(2S,3S)/(2R,3R), ラセミ体
トレオ-1-(IBXca)	n-C ₃ H ₇	O	(2S,3S), 光学活性
トレオ-2-(IBXca)	n-C ₃ H ₇	O	(2R,3R), 光学活性
トレオ-(IBXd)	i-C ₃ H ₇	A ¹	(2S,3S)/(2R,3R), ラセミ体
トレオ-1-(IBXd)	i-C ₃ H ₇	A ¹	(2S,3S), 光学活性
トレオ-2-(IBXd)	i-C ₃ H ₇	A ¹	(2R,3R), 光学活性
トレオ-(IBXda)	i-C ₃ H ₇	O	(2S,3S)/(2R,3R), ラセミ体
トレオ-1-(IBXda)	i-C ₃ H ₇	O	(2S,3S), 光学活性
トレオ-2-(IBXda)	i-C ₃ H ₇	O	(2R,3R), 光学活性

表 27a (トレオラセミ化合物)、例：

式トレオー (IBXaa)、式トレオー (IBXba)、式トレオー (IBXca) 及び式トレオー (IBXda) [式中、基 (R¹)_m 及び (R²)_n の構造的組合せは、表 25 の列番号に従って定義される] で表され、いずれの場合にもトレオ異性体のラセミ混合物の形態にある化合物。個々の化合物は、「トレオー IBXaa (列番号)」、「トレオー IBXba (列番号)」、「トレオー IBXca (列番号)」及び「トレオー IBXda (列番号)」の番号が付けられている。

【0533】

表 27b (光学的に活性なトレオー 2 化合物)、例：

式トレオー 2- (IBXaa)、式トレオー 2- (IBXba)、式トレオー 2- (IBXca) 及び式トレオー 2- (IBXda) [式中、基 (R¹)_m 及び (R²)_n の構

10

20

30

40

50

造的組合せは、表 2 5 の列番号に従って定義される〕で表され、いずれの場合にも立体化学的に富化された形態 [= (2 R, 3 R) 形態が 9 0 % e e を超えている] にある化合物。個々の化合物は、「トレオー 2 - I B X a a (列番号)」、「トレオー 2 - I B X b a (列番号)」、「トレオー 2 - I B X c a (列番号)」及び「トレオー 2 - I B X d a (列番号)」の番号が付けられている。

【0 5 3 4】

表 2 7 c (光学的に活性なトレオー 1 エナンチオマー)、例：

式トレオー 1 - (I B X a a)、式トレオー 1 - (I B X b a)、式トレオー 1 - (I B X c a) 及び式トレオー 1 - (I B X d a) [式中、基 (R^1)_m 及び (R^2)_n の構造的組合せは、表 2 5 の列番号に従って定義される] で表され、いずれの場合にも立体化学的に富化された形態 [= (2 S, 3 S) 形態が 9 0 % e e を超えている] にある光学的に活性なエナンチオマー性化合物。個々の化合物は、「トレオー 1 - I B X a a (列番号)」、「トレオー 1 - I B X b a (列番号)」、「トレオー 1 - I B X c a (列番号)」及び「トレオー 1 - I B X d a (列番号)」の番号が付けられている。

10

【0 5 3 5】

表 2 7 d (エリトロラセミ化合物)、例：

式エリトロ (I B X a a)、式エリトロ (I B X b a)、式エリトロ (I B X c a) 及び式エリトロ (I B X d a) [式中、基 (R^1)_m 及び (R^2)_n の構造的組合せは、表 2 5 の列番号に従って定義される] で表され、いずれの場合にもトレオ異性体のラセミ混合物の形態にある化合物。個々の化合物は、「エリトロ I B X a a (列番号)」、「エリトロ I B X b a (列番号)」、「エリトロ I B X c a (列番号)」及び「エリトロ I B X d a (列番号)」の番号が付けられている。

20

【0 5 3 6】

表 2 7 e (エリトロ 1 エナンチオマー)、例：

式エリトロ 1 - (I B X a a)、式エリトロ 1 - (I B X b a)、式エリトロ 1 - (I B X c a) 及び式エリトロ 1 - (I B X d a) [式中、基 (R^1)_m 及び (R^2)_n の構造的組合せは、表 2 5 の列番号に従って定義される] で表され、いずれの場合にも立体化学的に富化された形態 [= (2 R, 3 S) 形態が 9 0 % e e を超えている] にある光学的に活性なエナンチオマー性化合物。個々の化合物は、「エリトロ 1 - I B X a a (列番号)」、「エリトロ 1 - I B X b a (列番号)」、「エリトロ 1 - I B X c a (列番号)」及び「エリトロ 1 - I B X d a (列番号)」の番号が付けられている。

30

【0 5 3 7】

表 2 7 f (エリトロ 2 エナンチオマー)、例：

式エリトロ 2 - (I B X a a)、式エリトロ 2 - (I B X b a)、式エリトロ 2 - (I B X c a) 及び式エリトロ 2 - (I B X d a) [式中、基 (R^1)_m 及び (R^2)_n の構造的組合せは、表 2 5 の列番号に従って定義される] で表され、いずれの場合にも立体化学的に富化された形態 [= (2 S, 3 R) 形態が 9 0 % e e を超えている] にある光学的に活性なエナンチオマー性化合物。個々の化合物は、「エリトロ 2 - I B X a a (列番号)」、「エリトロ 2 - I B X b a (列番号)」、「エリトロ 2 - I B X c a (列番号)」及び「エリトロ 2 - I B X d a (列番号)」の番号が付けられている。

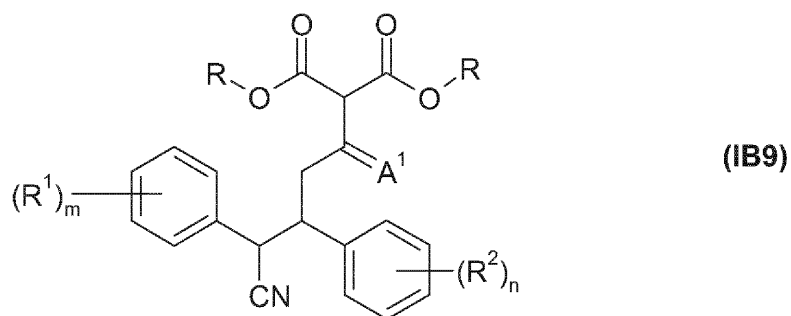
40

【0 5 3 8】

表 2 8： 式 (I B 9) [式中、(R^1)_m 及び (R^2)_n は、それぞれ、表 2 5 中で定義されているとおりである] で表される化合物：

【0 5 3 9】

【化 1 0 9】



固定されたラジカル R 及び A¹ を有している式 (I B 9) に関する下位式の定義：
【 0 5 4 0 】

【表 1 1】

(IB9) に関する下位式	R	A ¹
(IB9a)	CH ₃	A ¹
(IB9aa)	CH ₃	O
(IB9ab)	CH ₃	S
(IB9ac)	CH ₃	=N-CH ₃
(IB9ad)	CH ₃	=N-OH
(IB9ae)	CH ₃	=N-OCH ₃
(IB9af)	CH ₃	=N-NH ₂
(IB9ag)	CH ₃	=N-N(CH ₃) ₂
(IB9ah)	CH ₃	=N-CH ₂ -C ₆ H ₅
(IB9b)	C ₂ H ₅	A ¹
(IB9ba)	C ₂ H ₅	O
(IB9bb)	C ₂ H ₅	S
(IB9bc)	C ₂ H ₅	=N-CH ₃
(IB9bd)	C ₂ H ₅	=N-OH
(IB9be)	C ₂ H ₅	=N-OCH ₃
(IB9bf)	C ₂ H ₅	=N-NH ₂
(IB9bg)	C ₂ H ₅	=N-N(CH ₃) ₂
(IB9bh)	C ₂ H ₅	=N-CH ₂ -C ₆ H ₅
(IB9c)	n-C ₃ H ₇	A ¹
(IB9ca)	n-C ₃ H ₇	O
(IB9cb)	n-C ₃ H ₇	S
(IB9cc)	n-C ₃ H ₇	=N-CH ₃
(IB9cd)	n-C ₃ H ₇	=N-OH
(IB9ce)	n-C ₃ H ₇	=N-OCH ₃
(IB9cf)	n-C ₃ H ₇	=N-NH ₂
(IB9cg)	n-C ₃ H ₇	=N-N(CH ₃) ₂
(IB9ch)	n-C ₃ H ₇	=N-CH ₂ -C ₆ H ₅
(IB9d)	i-C ₃ H ₇	A ¹
(IB9da)	i-C ₃ H ₇	O
(IB9db)	i-C ₃ H ₇	S
(IB9dc)	i-C ₃ H ₇	=N-CH ₃

10

20

30

40

(IB9) に関する下位式	R	A ¹
(IB9dd)	i-C ₃ H ₇	=N-OH
(IB9de)	i-C ₃ H ₇	=N-OCH ₃
(IB9df)	i-C ₃ H ₇	=N-NH ₂
(IB9dg)	i-C ₃ H ₇	=N-N(CH ₃) ₂
(IB9dh)	i-C ₃ H ₇	=N-CH ₂ -C ₆ H ₅

表 27、エリトロ／トレオ混合物（比率 70：30～30：70）の例：

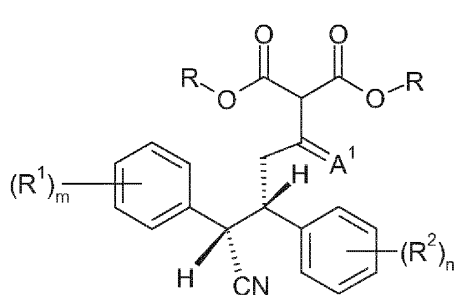
その例は、いずれの場合にもエリトロ／トレオラセミ混合物（比率 70：30～30：70）の形態にあるそれぞれの式（IB9aa）～（IB9ah）、式（IB9ba）～（IB9bh）、式（IB9ca）～（IB9ch）及び式（IB9da）～（IB9dh）〔式中、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の意味は、表25の列番号に従って定義される〕で表される化合物である。個々の化合物は、括弧無しで「（式）（列番号）」の番号が付けられている。

【 0 5 4 1 】

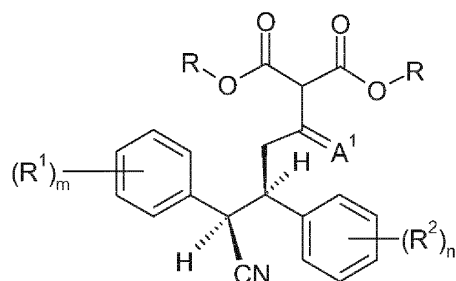
表 28 a ~ 28 f : 式 (トレオ-IB9)、式 (トレオ-1-IB9) 及び式 (トレオ-2-IB9) [式中、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ は、それぞれ、表 25 中で定義されているとおりである] で表される化合物:

【 0 5 4 2 】

【化 1 1 0】



(トレオ-1-IB9)



(トレオ-2-IB9)

$$(\text{トレオ-I}B9) = (\text{トレオ-1-I}B9) + (\text{トレオ-2-I}B9) (50:50) = (\text{ラセミ化合物})$$

固定されたラジカル R 及び A^1 を有している式トレオー (I B 9)、式トレオー 1 - (I B 9) 及び式トレオー 2 - (I B 9) に関する下位式の定義:

【 0 5 4 3 】

【表 1 2】

下位式	R	A ¹	立体化学
トレオ-(IB9a)	CH ₃	A ¹	(2S,3S)/(2R,3R), ラセミ体
トレオ-1-(IB9a)	CH ₃	A ¹	(2S,3S), 光学活性
トレオ-2-(IB9a)	CH ₃	A ¹	(2R,3R), 光学活性
トレオ-(IB9aa)	CH ₃	O	(2S,3S)/(2R,3R), ラセミ体
トレオ-1-(IB9aa)	CH ₃	O	(2S,3S), 光学活性
トレオ-2-(IB9aa)	CH ₃	O	(2R,3R), 光学活性
トレオ-(IB9b)	C ₂ H ₅	A ¹	(2S,3S)/(2R,3R), ラセミ体
トレオ-1-(IB9b)	C ₂ H ₅	A ¹	(2S,3S), 光学活性
トレオ-2-(IB9b)	C ₂ H ₅	A ¹	(2R,3R), 光学活性
トレオ-(IB9ba)	C ₂ H ₅	O	(2S,3S)/(2R,3R), ラセミ体
トレオ-1-(IB9ba)	C ₂ H ₅	O	(2S,3S), 光学活性
トレオ-2-(IB9ba)	C ₂ H ₅	O	(2R,3R), 光学活性
トレオ-(IB9c)	n-C ₃ H ₇	A ¹	(2S,3S)/(2R,3R), ラセミ体
トレオ-1-(IB9c)	n-C ₃ H ₇	A ¹	(2S,3S), 光学活性
トレオ-2-(IB9c)	n-C ₃ H ₇	A ¹	(2R,3R), 光学活性
トレオ-(IB9ca)	n-C ₃ H ₇	O	(2S,3S)/(2R,3R), ラセミ体
トレオ-1-(IB9ca)	n-C ₃ H ₇	O	(2S,3S), 光学活性
トレオ-2-(IB9ca)	n-C ₃ H ₇	O	(2R,3R), 光学活性
トレオ-(IB9d)	i-C ₃ H ₇	A ¹	(2S,3S)/(2R,3R), ラセミ体
トレオ-1-(IB9d)	i-C ₃ H ₇	A ¹	(2S,3S), 光学活性
トレオ-2-(IB9d)	i-C ₃ H ₇	A ¹	(2R,3R), 光学活性
トレオ-(IB9da)	i-C ₃ H ₇	O	(2S,3S)/(2R,3R), ラセミ体
トレオ-1-(IB9da)	i-C ₃ H ₇	O	(2S,3S), 光学活性
トレオ-2-(IB9da)	i-C ₃ H ₇	O	(2R,3R), 光学活性

表 2 8 a (トレオラセミ化合物)、例：

式トレオー (I B 9 a a)、式トレオー (I B 9 b a)、式トレオー (I B 9 c a) 及び式トレオー (I B 9 d a) [式中、基 (R¹)_m 及び (R²)_n の構造的組合せは、表 2 5 の列番号に従って定義される] で表され、いずれの場合にもトレオ異性体のラセミ混合物の形態にある化合物。個々の化合物は、「トレオー I B 9 a a (列番号)」、「トレオー I B 9 b a (列番号)」、「トレオー I B 9 c a (列番号)」及び「トレオー I B 9 d a (列番号)」の番号が付けられている。

【0 5 4 4】

表 2 8 b (光学的に活性なトレオー 2 化合物)、例：

式トレオー 2- (I B 9 a a)、式トレオー 2- (I B 9 b a)、式トレオー 2- (I B 9 c a) 及び式トレオー 2- (I B 9 d a) [式中、基 (R¹)_m 及び (R²)_n の構

10

20

30

40

50

造的組合せは、表 2 5 の列番号に従って定義される〕で表され、いずれの場合にも立体化学的に富化された形態 [= (2 R, 3 R) 形態が 90 % e e を超えている] にある化合物。個々の化合物は、「トレオー 2 - I B 9 a a (列番号)」、「トレオー 2 - I B 9 b a (列番号)」、「トレオー 2 - I B 9 c a (列番号)」及び「トレオー 2 - I B 9 d a (列番号)」の番号が付けられている。

【0545】

表 2 8 c (光学的に活性なトレオー 1 エナンチオマー)、例：

式トレオー 1 - (I B 9 a a)、式トレオー 1 - (I B 9 b a)、式トレオー 1 - (I B 9 c a) 及び式トレオー 1 - (I B 9 d a) [式中、基 (R^1)_m 及び (R^2)_n の構造的組合せは、表 2 5 の列番号に従って定義される] で表され、いずれの場合にも立体化学的に富化された形態 [= (2 S, 3 S) 形態が 90 % e e を超えている] にある光学的に活性なエナンチオマー性化合物。個々の化合物は、「トレオー 1 - I B 9 a a (列番号)」、「トレオー 1 - I B 9 b a (列番号)」、「トレオー 1 - I B 9 c a (列番号)」及び「トレオー 1 - I B 9 d a (列番号)」の番号が付けられている。

10

【0546】

表 2 8 d (エリトロラセミ化合物)、例：

式エリトロ - (I B 9 a a)、式エリトロ - (I B 9 b a)、式エリトロ - (I B 9 c a) 及び式エリトロ - (I B 9 d a) [式中、基 (R^1)_m 及び (R^2)_n の構造的組合せは、表 2 5 の列番号に従って定義される] で表され、いずれの場合にもトレオ異性体のラセミ混合物の形態にある化合物。個々の化合物は、「エリトロ - I B 9 a a (列番号)」、「エリトロ - I B 9 b a (列番号)」、「エリトロ - I B 9 c a (列番号)」及び「エリトロ - I B 9 d a (列番号)」の番号が付けられている。

20

【0547】

表 2 8 e (エリトロ - 1 エナンチオマー)、例：

式エリトロ - 1 - (I B 9 a a)、式エリトロ - 1 - (I B 9 b a)、式エリトロ - 1 - (I B 9 c a) 及び式エリトロ - 1 - (I B 9 d a) [式中、基 (R^1)_m 及び (R^2)_n の構造的組合せは、表 2 5 の列番号に従って定義される] で表され、いずれの場合にも立体化学的に富化された形態 [= (2 R, 3 S) 形態が 90 % e e を超えている] にある光学的に活性なエナンチオマー性化合物。個々の化合物は、「エリトロ - 1 - I B 9 a a (列番号)」、「エリトロ - 1 - I B 9 b a (列番号)」、「エリトロ - 1 - I B 9 c a (列番号)」及び「エリトロ - 1 - I B 9 d a (列番号)」の番号が付けられている。

30

【0548】

表 2 8 f (エリトロ - 2 エナンチオマー)、例：

式エリトロ - 2 - (I B 9 a a)、式エリトロ - 2 - (I B 9 b a)、式エリトロ - 2 - (I B 9 c a) 及び式エリトロ - 2 - (I B 9 d a) [式中、基 (R^1)_m 及び (R^2)_n の構造的組合せは、表 2 5 の列番号に従って定義される] で表され、いずれの場合にも立体化学的に富化された形態 [= (2 S, 3 R) 形態が 90 % e e を超えている] にある光学的に活性なエナンチオマー性化合物。個々の化合物は、「エリトロ - 2 - I B 9 a a (列番号)」、「エリトロ - 2 - I B 9 b a (列番号)」、「エリトロ - 2 - I B 9 c a (列番号)」及び「エリトロ - 2 - I B 9 d a (列番号)」の番号が付けられている。

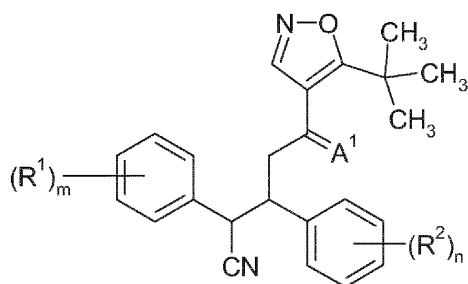
40

【0549】

表 2 9： 式 (I B 10 a)、式 (I B 10 a a)、式 (I B 10 a b)、式 (I B 10 a c)、式 (I B 10 a d)、式 (I B 10 a e)、式 (I B 10 a f)、式 (I B 10 a g) 及び式 (I B 10 a h) [式中、(R^1)_m 及び (R^2)_n は、それぞれ、表 2 5 中で定義されているとおりである] で表される化合物：

【0550】

【化 1 1 1】



(IB10a)

(IB10aa) A¹は、(=O)(IB10ab) A¹は、(=S)(IB10ac) A¹は、(=N-CH₃)(IB10ad) A¹は、(=N-OH)(IB10ae) A¹は、(=N-OCH₃)(IB10af) A¹は、(=N-NH₂)(IB10ag) A¹は、[=N-N(CH₃)₂](IB10ah) A¹は、(=N-ベンジル)

10

表 2 9、エリトロ／トレオ混合物（比率 70：30～30：70）の例：

その例は、いずれの場合にもエリトロ／トレオラセミ混合物（比率 70：30～30：70）の形態にあるそれぞれの式（IB10aa）～（IB10ah）〔式中、(R¹)_m及び(R²)_nの意味は、表 2 5の列番号に従って定義される〕で表される化合物である。個々の化合物は、括弧無しで「(式) (列番号)」の番号が付けられている。

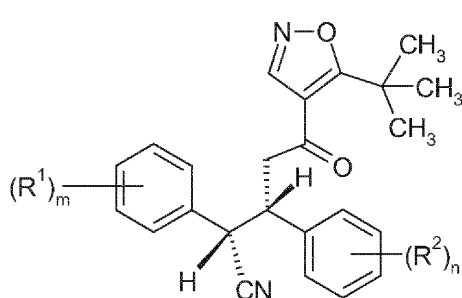
【0551】

表 2 9 a～2 9 f：式（トレオー IB10aa）及び式（トレオー 2－IB10aa）〔式中、(R¹)_m及び(R²)_nは、それぞれ、表 2 5 中で定義されているとおりである〕で表される化合物：

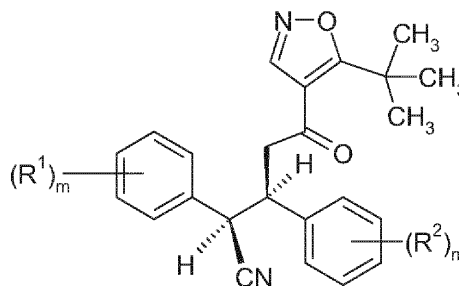
20

【0552】

【化 1 1 2】



(トレオ-1-IB10aa)



(トレオ-2-IB10aa)

30

(トレオ-IB10aa) = (トレオ-1-IB10aa) + (トレオ-2-IB10aa) (50:50) = (ラセミ化合物)

表 2 9 a（トレオラセミ化合物）、例：

トレオ異性体のラセミ混合物の形態にある式（IB10aa）〔=式（トレオー IB10aa）〕〔式中、基 Q、(R¹)_m及び(R²)_nの構造的組合せは、表 2 5の列番号に従って定義される〕で表される化合物。個々の化合物は、「トレオー IB10aa（列番号）」の番号が付けられている。

40

【0553】

表 2 9 b（光学的に活性なトレオー 2 化合物）、例：

式（トレオー 2－IB10aa）〔式中、基 Q、(R¹)_m及び(R²)_nの構造的組合せは、表 2 5の列番号に従って定義される〕で表される化学構造を有する、富化された形態〔=(2R, 3R)形態が90% eeを超えている〕にある光学的に活性なトレオー 2 エナンチオマー。個々の化合物は、「トレオー 2－IB10aa（列番号）」の番号が付けられている。

50

【0554】

表29c（光学的に活性なトレオ-1エナンチオマー）、例：

式（トレオ-1-IB10aa）〔式中、基Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表25の列番号に従って定義される〕で表される化学構造を有する、富化された形態〔=（2S, 3S）形態が90% eeを超えている〕にある光学的に活性なトレオ-1エナンチオマー。個々の化合物は、「トレオ-1-IB10aa（列番号）」の番号が付けられている。

【0555】

表29d（エリトロラセミ化合物）、例：

エリトロ異性体のラセミ混合物の形態にある式（IB10aa）〔=式（エリトロ-IB10aa）〕〔式中、基Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表25の列番号に従って定義される〕で表される化合物。個々の化合物は、「エリトロ-IB10aa（列番号）」の番号が付けられている。

【0556】

表29e（エリトロ-1エナンチオマー）、例：

エリトロ-1の形態にある式（IB10aa）〔=式（エリトロ-1-IB10aa）〕〔式中、基Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表25の列番号に従って定義される〕で表される化学構造を有する、富化された形態〔=（2R, 3S）形態が90% eeを超えている〕にある光学的に活性なエリトロ-1エナンチオマー。個々の化合物は、「エリトロ-1-IB10aa（列番号）」の番号が付けられている。

【0557】

表29f（エリトロ-2エナンチオマー）、例：

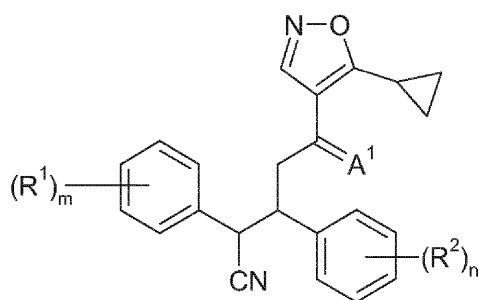
エリトロ-2の形態にある式（IB10aa）〔=式（エリトロ-2-IB10aa）〕〔式中、基Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表25の列番号に従って定義される〕で表される化学構造を有する、富化された形態〔=（2S, 3R）形態が90% eeを超えている〕にある光学的に活性なエリトロ-2エナンチオマー。数え方は、「エリトロ-2-IB10aa（列番号）」である。

【0558】

表30： 式（IB10b）、式（IB10ba）、式（IB10bb）、式（IB10bc）、式（IB10bd）、式（IB10be）、式（IB10bf）、式（IB10bg）及び式（IB10bh）〔式中、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ は、それぞれ、表25中で定義されているとおりである〕で表される化合物。

【0559】

【化113】



(IB10b)

(IB10ba) A^1 は、(=O)

(IB10bb) A^1 は、(=S)

(IB10bc) A^1 は、(=N-CH₃)

(IB10bd) A^1 は、(=N-OH)

(IB10be) A^1 は、(=N-OCH₃)

(IB10bf) A^1 は、(=N-NH₂)

(IB10bg) A^1 は、[N-N(CH₃)₂]

(IB10bh) A^1 は、(=N-ベンジル)

表30、エリトロ／トレオ混合物（比率 70：30～30：70）の例：

その例は、いずれの場合にもエリトロ／トレオラセミ混合物（比率 70：30～30：70）の形態にあるそれぞれの式（IB10ba）～（IB10bh）〔式中、 (R^1)

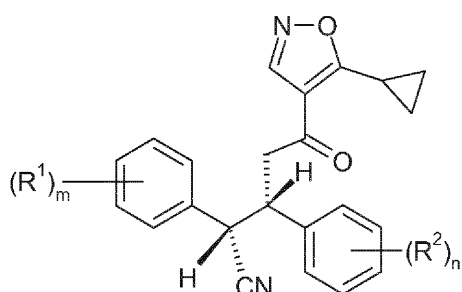
)_m 及び (R²)_n の意味は、表 25 の列番号に従って定義される] で表される化合物である。個々の化合物は、括弧無しで「(式) (列番号)」の番号が付けられている。

【0560】

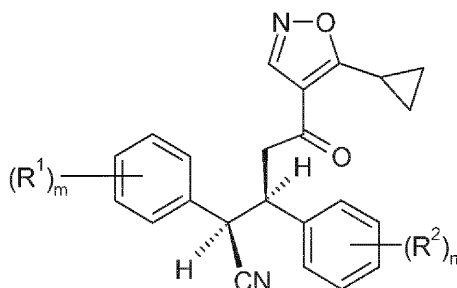
表 30 a ~ 30 f : 式 (トレオ-IB10ba) 及び式 (トレオ-2-IB10ba) [式中、(R¹)_m 及び (R²)_n は、それぞれ、表 25 中で定義されているとおりである] で表される化合物:

【0561】

【化114】



(トレオ-1-IB10ba)



(トレオ-2-IB10ba)

(トレオ-IB10ba) = (トレオ-1-IB10ba) + (トレオ-2-IB10ba) (50:50) = (ラセミ化合物)

表 30 a (トレオラセミ化合物)、例:

トレオ異性体のラセミ混合物の形態にある式 (IB10ba) [=式 (トレオ-IB10ba)] [式中、基 Q、(R¹)_m 及び (R²)_n の構造的組合せは、表 25 の列番号に従って定義される] で表される化合物。個々の化合物は、「トレオ-IB10ba (列番号)」の番号が付けられている。

【0562】

表 30 b (光学的に活性なトレオ-2 化合物)、例:

式 (トレオ-2-IB10ba) [式中、基 Q、(R¹)_m 及び (R²)_n の構造的組合せは、表 25 の列番号に従って定義される] で表される化学構造を有する、富化された形態 [= (2R, 3R) 形態が 90% ee を超えている] にある光学的に活性なトレオ-2 エナンチオマー。個々の化合物は、「トレオ-2-IB10ba (列番号)」の番号が付けられている。

【0563】

表 30 c (光学的に活性なトレオ-1 エナンチオマー)、例:

式 (トレオ-1-IB10ba) [式中、基 Q、(R¹)_m 及び (R²)_n の構造的組合せは、表 25 の列番号に従って定義される] で表される化学構造を有する、富化された形態 [= (2S, 3S) 形態が 90% ee を超えている] にある光学的に活性なトレオ-1 エナンチオマー。個々の化合物は、「トレオ-1-IB10ba (列番号)」の番号が付けられている。

【0564】

表 30 d (エリトロラセミ化合物)、例:

エリトロ異性体のラセミ混合物の形態にある式 (IB10ba) [=式 (エリトロ-IB10ba)] [式中、基 Q、(R¹)_m 及び (R²)_n の構造的組合せは、表 25 の列番号に従って定義される] で表される化合物。個々の化合物は、「エリトロ-IB10ba (列番号)」の番号が付けられている。

【0565】

表 30 e (エリトロ-1 エナンチオマー)、例:

エリトロ-1 の形態にある式 (IB10ba) [=式 (エリトロ-1-IB10ba)]

10

20

30

40

50

〕〔式中、基Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表25の列番号に従って定義される〕で表される化学構造を有する、富化された形態〔 $(2R, 3S)$ 形態が90%以上を超えている〕にある光学的に活性なエリトロ-1エナンチオマー。個々の化合物は、「エリトロ-1-IB10ba (列番号)」の番号が付けられている。

【0566】

表30f (エリトロ-2エナンチオマー)、例：

エリトロ-2の形態にある式 (IB10ba) 〔=式 (エリトロ-2-IB10ba) 〕〔式中、基Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表25の列番号に従って定義される〕で表される化学構造を有する、富化された形態〔 $(2S, 3R)$ 形態が90%以上を超えている〕にある光学的に活性なエリトロ-2エナンチオマー。個々の化合物は、「エリトロ-2-IB10ba (列番号)」の番号が付けられている。

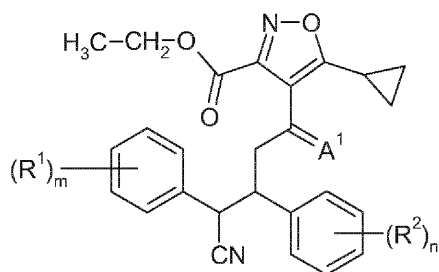
10

【0567】

表31： 式 (IB10c)、式 (IB10ca)、式 (IB10cb)、式 (IB10cc)、式 (IB10cd)、式 (IB10ce)、式 (IB10cf)、式 (IB10cg) 及び式 (IB10ch) 〔式中、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ は、それぞれ、表25中で定義されているとおりである〕で表される化合物：

【0568】

【化115】



(IB10c)

(IB10ca) A^1 は、 $(=O)$

(IB10cb) A^1 は、 $(=S)$

(IB10cc) A^1 は、 $(=N-CH_3)$

(IB10cd) A^1 は、 $(=N-OH)$

(IB10ce) A^1 は、 $(=N-OCH_3)$

(IB10cf) A^1 は、 $(=N-NH_2)$

(IB10cg) A^1 は、 $(=N-N(CH_3)_2)$

(IB10ch) A^1 は、 $(=N-ベンジル)$

20

30

表31、エリトロ/トレオ混合物 (比率 70:30~30:70) の例：

その例は、いずれの場合にもエリトロ/トレオラセミ混合物 (比率 70:30~30:70) の形態にあるそれぞれの式 (IB10ca) ~ (IB10ch) 〔式中、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の意味は、表25の列番号に従って定義される〕で表される化合物である。個々の化合物は、括弧無しで「(式) (列番号)」の番号が付けられている。

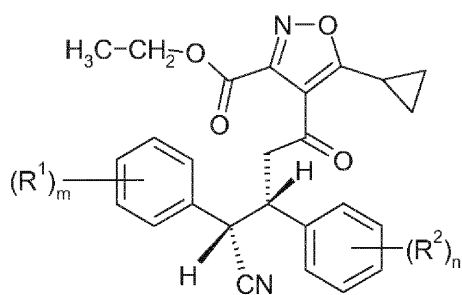
【0569】

表31a~31f： 式 (トレオ-IB10ca) 及び式 (トレオ-2-IB10ca) 〔式中、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ は、それぞれ、表25中で定義されているとおりである〕で表される化合物：

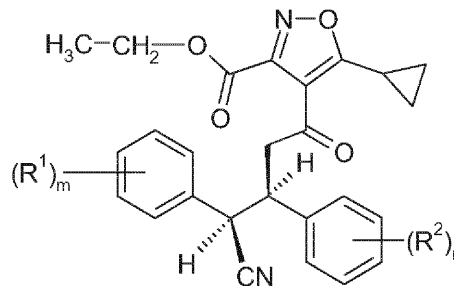
【0570】

40

【化 1 1 6】



(トレオ-1-IB10ca)



(トレオ-2-IB10ca)

(トレオ-IB10ca) = (トレオ-1-IB10ca) + (トレオ-2-IB10ca) (50:50) = (ラセミ化合物)

表 3 1 a (トレオラセミ化合物)、例：

トレオ異性体のラセミ混合物の形態にある式 (IB10ca) [=式 (トレオ-IB10ca)] [式中、基 Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表 2 5 の列番号に従って定義される] で表される化合物。個々の化合物は、「トレオ-IB10ca (列番号)」の番号が付けられている。

【0 5 7 1】

表 3 1 b (光学的に活性なトレオ-2 化合物)、例：

式 (トレオ-2-IB10ca) [式中、基 Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表 2 5 の列番号に従って定義される] で表される化学構造を有する、富化された形態 [= (2R, 3R) 形態が 90% ee を超えている] にある光学的に活性なトレオ-2 エナンチオマー。個々の化合物は、「トレオ-2-IB10ca (列番号)」の番号が付けられている。

【0 5 7 2】

表 3 1 c (光学的に活性なトレオ-1 エナンチオマー)、例：

式 (トレオ-1-IB10ca) [式中、基 Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表 2 5 の列番号に従って定義される] で表される化学構造を有する、富化された形態 [= (2S, 3S) 形態が 90% ee を超えている] にある光学的に活性なトレオ-1 エナンチオマー。個々の化合物は、「トレオ-1-IB10ca (列番号)」の番号が付けられている。

【0 5 7 3】

表 3 1 d (エリトロラセミ化合物)、例：

エリトロ異性体のラセミ混合物の形態にある式 (IB10ca) [=式 (エリトロ-IB10ca)] [式中、基 Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表 2 5 の列番号に従って定義される] で表される化合物。個々の化合物は、「エリトロ-IB10ca (列番号)」の番号が付けられている。

【0 5 7 4】

表 3 1 e (エリトロ-1 エナンチオマー)、例：

エリトロ-1 の形態にある式 (IB10ca) [=式 (エリトロ-1-IB10ca)] [式中、基 Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表 2 5 の列番号に従って定義される] で表される化学構造を有する、富化された形態 [= (2R, 3S) 形態が 90% ee を超えている] にある光学的に活性なエリトロ-1 エナンチオマー。個々の化合物は、「エリトロ-1-IB10ca (列番号)」の番号が付けられている。

【0 5 7 5】

表 3 1 f (エリトロ-2 エナンチオマー)、例：

エリトロ-2 の形態にある式 (IB10ca) [=式 (エリトロ-2-IB10ca)]

10

20

30

40

50

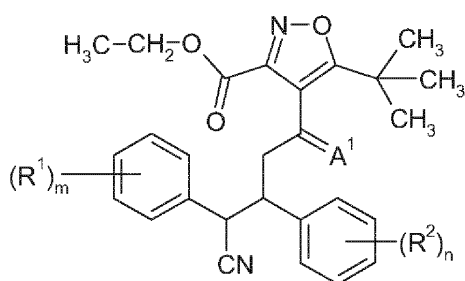
〕〔式中、基Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表25の列番号に従って定義される〕で表される化学構造を有する、富化された形態〔 $(2S, 3R)$ 形態が90%以上を超えている〕にある光学的に活性なエリトロ-2エナンチオマー。個々の化合物は、「エリトロ-2-IB10ca (列番号)」の番号が付けられている。

【0576】

表32： 式(1B10d)、式(1B10da)、式(1B10db)、式(1B10dc)、式(1B10dd)、式(1B10de)、式(1B10df)、式(1B10dg)及び式(1B10dh)〔式中、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ は、それぞれ、表25中で定義されているとおりである〕で表される化合物：

【0577】

【化117】



(IB10d)

(IB10da) A^1 は、 $(=O)$

(IB10db) A^1 は、 $(=S)$

(IB10dc) A^1 は、 $(=N-CH_3)$

(IB10dd) A^1 は、 $(=N-OH)$

(IB10de) A^1 は、 $(=N-OCH_3)$

(IB10df) A^1 は、 $(=N-NH_2)$

(IB10dg) A^1 は、 $(=N-N(CH_3)_2)$

(IB10dh) A^1 は、 $(=N-ベンジル)$

表32、エリトロ/トレオ混合物 (比率 70:30~30:70) の例：

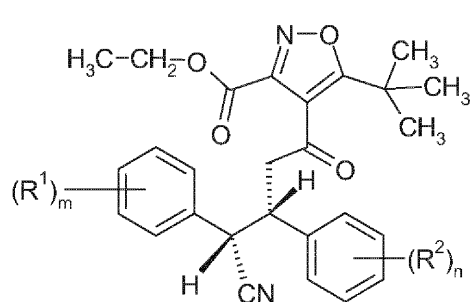
その例は、いずれの場合にもエリトロ/トレオラセミ混合物 (比率 70:30~30:70) の形態にあるそれぞれの式(1B10da)~(1B10dh)〔式中、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の意味は、表25の列番号に従って定義される〕で表される化合物である。個々の化合物は、括弧無しで「(式) (列番号)」の番号が付けられている。

【0578】

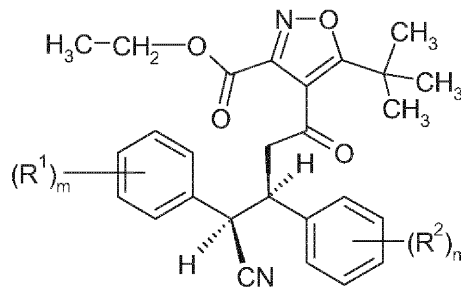
表32a~32f： 式(トレオ-1B10da)及び式(トレオ-2-1B10da)〔式中、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ は、それぞれ、表25中で定義されているとおりである〕で表される化合物：

【0579】

【化118】



(トレオ-1-IB10da)



(トレオ-2-IB10da)

(トレオ-IB10da) = (トレオ-1-IB10da) + (トレオ-2-IB10da) (50:50) = (ラセミ化合物)

表32a (トレオラセミ化合物)、例：

10

20

30

40

50

トレオ異性体のラセミ混合物の形態にある式 (I B 1 0 d a) [=式 (トレオー I B 1 0 d a)] [式中、基 Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表 2 5 の列番号に従って定義される] で表される化合物。個々の化合物は、「トレオー I B 1 0 d a (列番号)」の番号が付けられている。

【0580】

表 3 2 b (光学的に活性なトレオー 2 化合物)、例：

式 (トレオー 2 - I B 1 0 d a) [式中、基 Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表 2 5 の列番号に従って定義される] で表される化学構造を有する、富化された形態 [= (2 R, 3 R) 形態が 9 0 % e e を超えている] にある光学的に活性なトレオー 2 エナンチオマー。個々の化合物は、「トレオー 2 - I B 1 0 d a (列番号)」の番号が

10

【0581】

表 3 2 c (光学的に活性なトレオー 1 エナンチオマー)、例：

式 (トレオー 1 - I B 1 0 d a) [式中、基 Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表 2 5 の列番号に従って定義される] で表される化学構造を有する、富化された形態 [= (2 S, 3 S) 形態が 9 0 % e e を超えている] にある光学的に活性なトレオー 1 エナンチオマー。個々の化合物は、「トレオー 1 - I B 1 0 d a (列番号)」の番号が付けられている。

【0582】

表 3 2 d (エリトロラセミ化合物)、例：

20

エリトロ異性体のラセミ混合物の形態にある式 (I B 1 0 d a) [=式 (エリトロー I B 1 0 d a)] [式中、基 Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表 2 5 の列番号に従って定義される] で表される化合物。個々の化合物は、「エリトロー I B 1 0 d a (列番号)」の番号が付けられている。

【0583】

表 3 2 e (エリトロー 1 エナンチオマー)、例：

エリトロー 1 の形態にある式 (I B 1 0 d a) [=式 (エリトロー 1 - I B 1 0 d a)] [式中、基 Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表 2 5 の列番号に従って定義される] で表される化学構造を有する、富化された形態 [= (2 R, 3 S) 形態が 9 0 % e e を超えている] にある光学的に活性なエリトロー 1 エナンチオマー。個々の化合物は、「エリトロー 1 - I B 1 0 d a (列番号)」の番号が付けられている。

30

【0584】

表 3 2 f (エリトロー 2 エナンチオマー)、例：

エリトロー 2 の形態にある式 (I B 1 0 d a) [=式 (エリトロー 2 - I B 1 0 d a)] [式中、基 Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表 2 5 の列番号に従って定義される] で表される化学構造を有する、富化された形態 [= (2 S, 3 R) 形態が 9 0 % e e を超えている] にある光学的に活性なエリトロー 2 エナンチオマー。個々の化合物は、「エリトロー 2 - I B 1 0 d a (列番号)」の番号が付けられている。

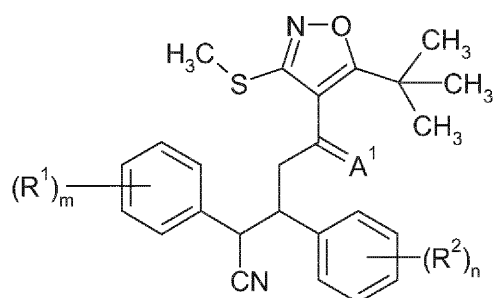
【0585】

表 3 3： 式 (I B 1 0 e)、式 (I B 1 0 e a)、式 (I B 1 0 e b)、式 (I B 1 0 e c)、式 (I B 1 0 e d)、式 (I B 1 0 e e)、式 (I B 1 0 e f)、式 (I B 1 0 e g) 及び式 (I B 1 0 e h) [式中、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ は、それぞれ、表 2 5 中で定義されているとおりである] で表される化合物：

40

【0586】

【化 1 1 9】



(IB10e)

(IB10ea) A¹は、(=O)

(IB10eb) A¹は、(=S)

(IB10ec) A¹は、(=N-CH₃)

(IB10ed) A¹は、(=N-OH)

(IB10ee) A¹は、(=N-OCH₃)

(IB10ef) A¹は、(=N-NH₂)

(IB10eg) A¹は、[N-N(CH₃)₂]

(IB10eh) A¹は、(=N-ベンジル)

表 3 3、エリトロ／トレオ混合物（比率 70：30～30：70）の例：

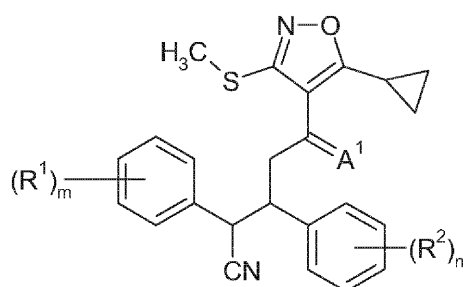
その例は、いずれの場合にもエリトロ／トレオラセミ混合物（比率 70：30～30：70）の形態にあるそれぞれの式（IB10ea）～（IB10eh）〔式中、(R¹)ₘ及び(R²)ₙの意味は、表 2 5 の列番号に従って定義される〕で表される化合物である。個々の化合物は、括弧無しで「(式) (列番号)」の番号が付けられている。

【0587】

表 3 4： 式（IB10f）、式（IB10fa）、式（IB10fb）、式（IB10fc）、式（IB10fd）、式（IB10fe）、式（IB10ff）、式（IB10fg）及び式（IB10fh）〔式中、(R¹)ₘ及び(R²)ₙは、それぞれ、表 2 5 中で定義されているとおりである〕で表される化合物：

【0588】

【化 1 2 0】



(IB10f)

(IB10fa) A¹は、(=O)

(IB10fb) A¹は、(=S)

(IB10fc) A¹は、(=N-CH₃)

(IB10fd) A¹は、(=N-OH)

(IB10fe) A¹は、(=N-OCH₃)

(IB10ff) A¹は、(=N-NH₂)

(IB10fg) A¹は、[N-N(CH₃)₂]

(IB10fh) A¹は、(=N-ベンジル)

表 3 4、エリトロ／トレオ混合物（比率 70：30～30：70）の例：

その例は、いずれの場合にもエリトロ／トレオラセミ混合物（比率 70：30～30：70）の形態にあるそれぞれの式（IB10fa）～（IB10fh）〔式中、(R¹)ₘ及び(R²)ₙの意味は、表 2 5 の列番号に従って定義される〕で表される化合物である。個々の化合物は、括弧無しで「(式) (列番号)」の番号が付けられている。

【0589】

表 3 5： 式（IB10g）、式（IB10ga）、式（IB10gb）、式（IB10gc）、式（IB10gd）、式（IB10ge）、式（IB10gf）、式（IB10gg）及び式（IB10gh）〔式中、(R¹)ₘ及び(R²)ₙは、それぞれ、表 2 5 中で定義されているとおりである〕で表される化合物：

【0590】

10

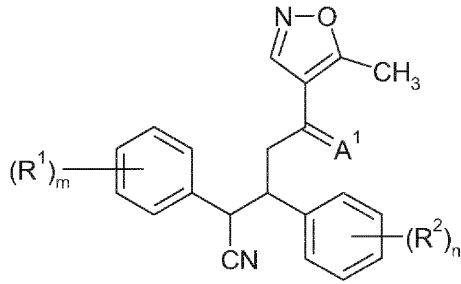
20

30

40

50

【化 1 2 1】



(IB10g)

(IB10ga) A¹ は、(=O)(IB10gb) A¹ は、(=S)(IB10gc) A¹ は、(=N-CH₃)(IB10gd) A¹ は、(=N-OH)(IB10ge) A¹ は、(=N-OCH₃)(IB10gf) A¹ は、(=N-NH₂)(IB10gg) A¹ は、[=N-N(CH₃)₂](IB10gh) A¹ は、(=N-ベンジル)

10

表 3 5、エリトロ／トレオ混合物（比率 70：30～30：70）の例：

その例は、いずれの場合にもエリトロ／トレオラセミ混合物（比率 70：30～30：70）の形態にあるそれぞれの式（IB10ga）～（IB10gh）〔式中、(R¹)_m 及び (R²)_n の意味は、表 2 5 の列番号に従って定義される〕で表される化合物である。個々の化合物は、括弧無しで「（式）（列番号）」の番号が付けられている。

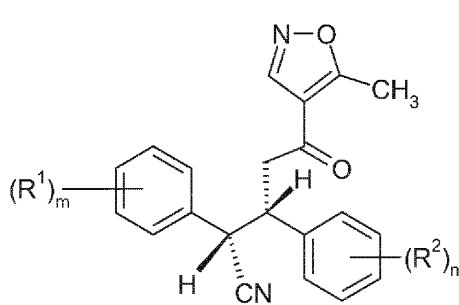
【0 5 9 1】

表 3 5 a～3 5 f：式（トレオー IB10ga）及び式（トレオー 2－IB10ga）〔式中、(R¹)_m 及び (R²)_n は、それぞれ、表 2 5 中で定義されているとおりである〕で表される化合物：

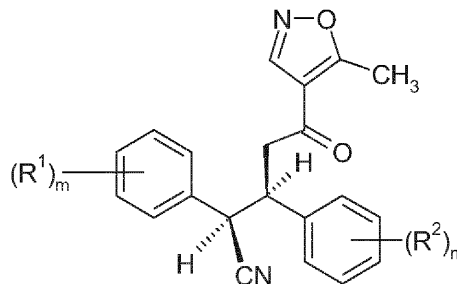
20

【0 5 9 2】

【化 1 2 2】



(トレオ・1-IB10ga)



(トレオ・2-IB10ga)

30

(トレオ・IB10ga) = (トレオ・1-IB10ga) + (トレオ・2-IB10ga) (50:50) = (ラセミ化合物)

表 3 5 a（トレオラセミ化合物）、例：

トレオ異性体のラセミ混合物の形態にある式（IB10ga）〔＝式（トレオー IB10ga）〕〔式中、基 Q、(R¹)_m 及び (R²)_n の構造的組合せは、表 2 5 の列番号に従って定義される〕で表される化合物。個々の化合物は、「トレオー IB10ga（列番号）」の番号が付けられている。

40

【0 5 9 3】

表 3 5 b（光学的に活性なトレオー 2 化合物）、例：

式（トレオー 2－IB10ga）〔式中、基 Q、(R¹)_m 及び (R²)_n の構造的組合せは、表 2 5 の列番号に従って定義される〕で表される化学構造を有する、富化された形態〔＝(2R, 3R) 形態が 90% ee を超えている〕にある光学的に活性なトレオー 2 エナンチオマー。個々の化合物は、「トレオー 2－IB10ga（列番号）」の番号が付けられている。

50

【0594】

表35c（光学的に活性なトレオール1エナンチオマー）、例：

式（トレオール1-IB10ga）〔式中、基Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表25の列番号に従って定義される〕で表される化学構造を有する、富化された形態〔=（2S, 3S）形態が90%eeを超えている〕にある光学的に活性なトレオール1エナンチオマー。個々の化合物は、「トレオール1-IB10ga（列番号）」の番号が付けられている。

【0595】

表35d（エリトロラセミ化合物）、例：

エリトロ異性体のラセミ混合物の形態にある式（IB10ga）〔=式（エリトロ-IB10ga）〕〔式中、基Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表25の列番号に従って定義される〕で表される化合物。個々の化合物は、「エリトロ-IB10ga（列番号）」の番号が付けられている。

10

【0596】

表35e（エリトロ-1エナンチオマー）、例：

エリトロ-1の形態にある式（IB10ga）〔=式（エリトロ-1-IB10ga）〕〔式中、基Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表25の列番号に従って定義される〕で表される化学構造を有する、富化された形態〔=（2R, 3S）形態が90%eeを超えている〕にある光学的に活性なエリトロ-1エナンチオマー。個々の化合物は、「エリトロ-1-IB10ga（列番号）」の番号が付けられている。

20

【0597】

表35f（エリトロ-2エナンチオマー）、例：

エリトロ-2の形態にある式（IB10ga）〔=式（エリトロ-2-IB10ga）〕〔式中、基Q、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表25の列番号に従って定義される〕で表される化学構造を有する、富化された形態〔=（2S, 3R）形態が90%eeを超えている〕にある光学的に活性なエリトロ-2エナンチオマー。個々の化合物は、「エリトロ-2-IB10ga（列番号）」の番号が付けられている。

表36： 本発明による一般式（I）で表される化合物についての下記表に関する基 B^2 、基 $(R^1)_m$ 及び基 $(R^2)_n$ の構造的組合せの定義

【0598】

30

【表 1 3】

実施例	B ²	(R ¹) _m	(R ²) _n
1	O-C(O)Et	3-F	4-Cl
2	O-C(O)Et	3-F	3-F
3	O-C(O)-i-Pr	3,4-F ₂	4-Cl
4	O-C(O)Me	3-F	4-Br
5	NHOH	3-Cl	3-F
6	NHOH	3,4-F ₂	3-F
7	NHOH	H	3-F
8	NHOMe	4-F	3-F
9	NHOMe	3-F	3-Cl
10	NHOH	3,4-F ₂	3-Cl
11	NHNMe ₂	3-Br	3-F
12	O-C(O)Me	2,5-F ₂	3-F
13	O-C(O)Me	3-F	2-F
14	O-C(O)Me	3,4,5-F ₃	4-Cl
15	OSO ₂ Me	4-F	3-Cl
16	OSO ₂ Me	3,4-F ₂	3-F, 4-Cl
17	O-C(O)Me	3,4-F ₂	2-F
18	O-C(O)Me	3-F	2,3-F ₂
19	SMe	4-F	3,5-F ₂
20	NHOH	3-F	4-F
21	NHOMe	3,4-F ₂	3-Cl, 5-F
22	OCH ₂ OMe	3-F	3-Cl, 5-F
23	OSO ₂ (4-Me-Ph)	3-F	2,5-F ₂
24	O-C(O)Me	3,4-F ₂	2,3-F ₂
25	O-C(O)Me	3,4-F ₂	2,5-F ₂
26	SMe	3-Cl	3-Cl, 5-F
27	OSO ₂ Me	3-F, 4-Cl	3-Cl
28	O-C(O)Et	3,4-F ₂	3-NO ₂
29	O-C(O)Me	3,4-F ₂	H
30	NHOMe	3-Cl, 4-F	3-F
31	NHOH	3,4-F ₂	4-OMe
32	O-C(O)-t-Bu	3-F	4-Cl
33	O-C(O)Me	3-F	4-Cl
34	OCH ₂ OMe	3-F	4-Cl
35	SMe	3-F	4-Cl
36	OSO ₂ (4-Me-Ph)	3-F	4-Cl
37	Cl	3-F	4-Cl

10

20

30

40

実施例	B ²	(R ¹) _m	(R ²) _n
38	OCO ₂ Me	3-F	4-Cl
39	NHOMe	3-F	4-Cl
40	NHOH	3-F	4-Cl
41	O-C(O)-t-Bu	3-F	3-F
42	O-C(O)Me	3-F	3-F
43	OCH ₂ Ph	3-F	3-F
44	SMe	3-F	3-F
45	OSO ₂ (4-Me-Ph)	3-F	3-F
46	Cl	3-F	3-F
47	OCO ₂ Me	3-F	3-F
48	O-C(O)-t-Bu	3,4-F ₂	3-F
49	O-C(O)Me	3,4-F ₂	3-F
50	O-C(O)Et	3,4-F ₂	3-F
51	OSO ₂ Me	3,4-F ₂	3-F
52	OCH ₂ OMe	3,4-F ₂	3-F
53	OSO ₂ (4-Me-Ph)	3,4-F ₂	3-F
54	Cl	3,4-F ₂	3-F
55	OCO ₂ Me	3,4-F ₂	3-F
56	NHOMe	3,4-F ₂	3-F
57	O-C(O)-t-Bu	3,4-F ₂	3-Cl
58	O-C(O)Me	3,4-F ₂	3-Cl
59	O-C(O)Et	3,4-F ₂	3-Cl
60	OCH ₂ OMe	3,4-F ₂	3-Cl
61	SMe	3,4-F ₂	3-Cl
62	OSO ₂ (4-Me-Ph)	3,4-F ₂	3-Cl
63	Cl	3,4-F ₂	3-Cl
64	OCO ₂ Me	3,4-F ₂	3-Cl
65	NHOMe	3,4-F ₂	3-Cl
66	O-C(O)-t-Bu	3-Br	3-F
67	O-C(O)Me	2,5-F ₂	3-F
68	SPh	3-F	2-F
69	O-C(O)-t-Bu	3,4,5-F ₃	4-Cl
70	O-C(O)Me	4-F	3-Cl
71	SO ₂ Ph	3,4-F ₂	3-F, 4-Cl
72	O-C(O)-t-Bu	3,4-F ₂	2-F
73	O-C(O)Me	3-F	2,3-F ₂
74	NHNH ₂	4-F	3,5-F ₂
75	O-C(O)-t-Bu	3-F	4-F

10

20

30

40

実施例	B ²	(R ¹) _m	(R ²) _n
76	O-C(O)Me	3,4-F ₂	3-Cl, 5-F
77	NHNHMe	3-F	3-Cl, 5-F
78	O-C(O)-t-Bu	3-F	2,5-F ₂
79	O-C(O)Me	3,4-F ₂	2,3-F ₂
80	SPh	3,4-F ₂	2,5-F ₂
81	O-C(O)-t-Bu	3-Cl	3-Cl, 5-F
82	O-C(O)Me	3-F, 4-Cl	3-Cl
83	NHOMe	3,4-F ₂	3-NO ₂
84	O-C(O)-t-Bu	3,4-F ₂	H
85	O-C(O)Me	3-Cl, 4-F	3-F
86	SPh	3,4-F ₂	4-OMe
87	O-C(O)Et	3-F	H
88	O-C(O)Et	3-F	2,4-F ₂
89	O-C(O)Et	3-F	2,6-F ₂
90	O-C(O)Et	3-F	3,4-F ₂
91	O-C(O)-i-Pr	3-F	3,5-F ₂
92	NHOMe	3-F	2-Cl
93	NHOH	3-F	2,3-Cl ₂
94	NHOH	3-F	2,4-Cl ₂
95	O-C(O)-t-Bu	3-F	2,5-Cl ₂
96	SMe	3-F	2,6-Cl ₂
97	NHOMe	3-F	3,4-Cl ₂
98	O-C(O)Et	3-F	3,5-Cl ₂
99	O-C(O)-t-Bu	3,4-F ₂	4-F
100	O-C(O)Me	3,4-F ₂	2,4-F ₂
101	O-C(O)-i-Pr	3,4-F ₂	2,6-F ₂
102	NHOMe	3,4-F ₂	3,4-F ₂
103	NHOH	3,4-F ₂	3,5-F ₂
104	SPh	3,4-F ₂	2-Cl
105	O-C(O)-t-Bu	3,4-F ₂	2,3-Cl ₂
106	O-C(O)-i-Pr	3,4-F ₂	2,4-Cl ₂
107	O-C(O)-t-Bu	3,4-F ₂	2,5-Cl ₂
108	O-C(O)Et	3,4-F ₂	2,6-Cl ₂
109	NHNH ₂	3,4-F ₂	3,4-Cl ₂
110	NHCH ₂ Ph	3,4-F ₂	3,5-Cl ₂
111	O-C(O)-i-Pr	3-Cl	H
112	O-C(O)-i-Pr	3-Cl	2-F
113	OSO ₂ Me	3-Cl	4-F

10

20

30

40

実施例	B ²	(R ¹) _m	(R ²) _n
114	OSO ₂ Me	3-Cl	2,3-F ₂
115	O-C(O)-t-Bu	3-Cl	2,4-F ₂
116	NHOMe	3-Cl	2,5-F ₂
117	NHCH ₂ Ph	3-Cl	2,6-F ₂
118	O-C(O)-t-Bu	3-Cl	3,4-F ₂
119	OCH ₂ OMe	3-Cl	3,5-F ₂
120	OSO ₂ Me	3-Cl	2-Cl
121	NHOMe	3-Cl	3-Cl
122	SPh	3-Cl	4-Cl
123	O-C(O)-i-Pr	3-Cl	2,3-Cl ₂
124	O-C(O)-i-Pr	3-Cl	2,4-Cl ₂
125	SMe	3-Cl	2,5-Cl ₂
126	OSO ₂ Ph	3-Cl	2,6-Cl ₂
127	SPh	3-Cl	3,4-Cl ₂
128	OCH ₂ OMe	3-Cl	3,5-Cl ₂
129	O-C(O)-i-Pr	3,4-Cl ₂	H
130	O-C(O)Me	3,4-Cl ₂	2-F
131	O-C(O)Me	3,4-Cl ₂	3-F
132	O-C(O)Et	3,4-Cl ₂	4-F
133	O-C(O)Me	3,4-Cl ₂	2,3-F ₂
134	O-C(O)Et	3,4-Cl ₂	2,4-F ₂
135	O-C(O)Et	3,4-Cl ₂	2,5-F ₂
136	O-C(O)Me	3,4-Cl ₂	2,6-F ₂
137	NHOMe	3,4-Cl ₂	3,4-F ₂
138	O-C(O)Et	3,4-Cl ₂	3,5-F ₂
139	O-C(O)-i-Pr	3,4-Cl ₂	2-Cl
140	O-C(O)Et	3,4-Cl ₂	3-Cl
141	O-C(O)-t-Bu	3,4-Cl ₂	4-Cl
142	SPh	3,4-Cl ₂	2,3-Cl ₂
143	O-C(O)-t-Bu	3,4-Cl ₂	2,4-Cl ₂
144	O-C(O)Me	3,4-Cl ₂	2,5-Cl ₂
145	O-C(O)Et	3,4-Cl ₂	2,6-Cl ₂
146	O-C(O)Me	3,4-Cl ₂	3,4-Cl ₂
147	O-C(O)Me	3,4-Cl ₂	3,5-Cl ₂
148	O-C(O)Et	3-Cl, 4-F	H
149	SMe	3-Cl, 4-F	2-F
150	O-C(O)Me	3-Cl, 4-F	4-F
151	O-C(O)Et	3-Cl, 4-F	2,3-F ₂

10

20

30

40

実施例	B ²	(R ¹) _m	(R ²) _n
152	O-C(O)-t-Bu	3-Cl, 4-F	2,4-F ₂
153	O-C(O)Me	3-Cl, 4-F	2,5-F ₂
154	OSO ₂ Me	3-Cl, 4-F	2,6-F ₂
155	O-C(O)Et	3-Cl, 4-F	3,4-F ₂
156	OSO ₂ (4-Me-Ph)	3-Cl, 4-F	3,5-F ₂
157	O-C(O)Me	3-Cl, 4-F	2-Cl
158	OCH ₂ OMe	3-Cl, 4-F	3-Cl
159	O-C(O)Me	3-Cl, 4-F	4-Cl
160	O-C(O)Me	3-Cl, 4-F	2,3-Cl ₂
161	O-C(O)Et	3-Cl, 4-F	2,4-Cl ₂
162	O-C(O)Me	3-Cl, 4-F	2,5-Cl ₂
163	O-C(O)-i-Pr	3-Cl, 4-F	2,6-Cl ₂
164	O-C(O)Et	3-Cl, 4-F	3,4-Cl ₂
165	O-C(O)Me	3-Cl, 4-F	3,5-Cl ₂
166	O-C(O)Me	3-Cl, 4-F	H
167	NHOH	3-F, 4-Cl	2-F
168	O-C(O)Me	3-F, 4-Cl	3-F
169	O-C(O)Me	3-F, 4-Cl	4-F
170	NHOMe	3-F, 4-Cl	2,3-F ₂
171	O-C(O)Et	3-F, 4-Cl	2,4-F ₂
172	SPh	3-F, 4-Cl	2,5-F ₂
173	O-C(O)Me	3-F, 4-Cl	2,6-F ₂
174	O-C(O)Me	3-F, 4-Cl	3,4-F ₂
175	O-C(O)Et	3-F, 4-Cl	3,5-F ₂
176	O-C(O)Me	3-F, 4-Cl	2-Cl
177	O-C(O)Et	3-F, 4-Cl	4-Cl
178	SPh	3-F, 4-Cl	2,3-Cl ₂
179	NHOMe	3-F, 4-Cl	2,4-Cl ₂
180	NHOMe	3-F, 4-Cl	2,5-Cl ₂
181	O-C(O)-i-Pr	3-F, 4-Cl	2,6-Cl ₂
182	SMe	3-F, 4-Cl	3,4-Cl ₂
183	SPh	3-F, 4-Cl	3,5-Cl ₂
184	O-C(O)Et	3-F	2,5-F ₂
185	O-C(O)Me	3-F	2,6-F ₂
186	SPh	3-F	2,6-F ₂
187	NHNNH ₂	3,4-F ₂	3,4-Cl ₂
188	NHCH ₂ Ph	3,4-F ₂	3,5-Cl ₂
189	SPh	3-F	2,6-F ₂

10

20

30

40

実施例	B ²	(R ¹) _m	(R ²) _n
190	O-C(O)-t-Bu	3-F	2,6-F ₂
191	SMe	3-F	2,6-F ₂
192	O-C(O)Et	3,4-F ₂	2,6-F ₂
193	O-C(O)-t-Bu	3,4-F ₂	2,6-F ₂
194	O-C(O)Me	3,4-F ₂	2,6-F ₂
195	SPh	3,4-F ₂	2,6-F ₂
196	SMe	3,4-F ₂	2,6-F ₂
197	OSO ₂ (4-Me-Ph)	3,4-F ₂	2,6-F ₂
198	Cl	3,4-F ₂	2,6-F ₂
199	OCO ₂ Me	3,4-F ₂	2,6-F ₂
200	OCH ₂ OMe	3,4-F ₂	2,6-F ₂
201	O-C(O)Et	H	2,6-F ₂
202	O-C(O)Et	H	3,4-F ₂
203	O-C(O)Me	H	3,5-F ₂
204	NHOMe	H	2-Cl
205	NHOH	H	3-Cl
206	O-C(O)Et	H	4-Cl
207	SMe	H	2,3-Cl ₂
208	SPh	H	2,4-Cl ₂
209	NHCH ₂ Ph	H	2,5-Cl ₂
210	O-C(O)Et	H	2,6-Cl ₂
211	OCH ₂ OMe	H	3,4-Cl ₂
212	OCH ₂ OMe	H	3,5-Cl ₂
213	O-C(O)Et	3-CN	2,5-F ₂
214	O-C(O)-t-Bu	3-CN	2,5-F ₂
215	O-C(O)Me	3-CN	2,5-F ₂
216	NHOMe	3-CN	2,5-F ₂
217	SMe	3-CN	2,5-F ₂
218	OSO ₂ (4-Me-Ph)	3-CN	2,5-F ₂
219	Cl	3-CN	2,5-F ₂
220	OCO ₂ Me	3-CN	2,5-F ₂
221	O-C(O)Et	3-CN	2,6-F ₂
222	NHOMe	3-CN	2,6-F ₂
223	O-C(O)Me	3-CN	2,6-F ₂
224	NHOH	3-CN	2,6-F ₂
225	SMe	3-CN	2,6-F ₂
226	OSO ₂ (4-Me-Ph)	3-CN	2,6-F ₂
227	Cl	3-CN	2,6-F ₂

10

20

30

40

実施例	B ²	(R ¹) _m	(R ²) _n
228	OCO ₂ Me	3-CN	2,6-F ₂
229	O-C(O)Et	3-CN	2,3-F ₂
230	O-C(O)-t-Bu	3-CN	2,3-F ₂
231	O-C(O)Me	3-CN	2,3-F ₂
232	SPh	3-CN	2,3-F ₂
233	SMe	3-CN	2,3-F ₂
234	NHOH	3-CN	2,3-F ₂
235	Cl	3-CN	2,3-F ₂
236	OCO ₂ Me	3-CN	2,3-F ₂
237	O-C(O)Et	3-CN	2,4-F ₂
238	NHNH ₂	3-CN	2,4-F ₂
239	O-C(O)Me	3-CN	2,4-F ₂
240	NHNH ₂	3-CN	2,4-F ₂
241	SMe	3-CN	2,4-F ₂
242	OSO ₂ (4-Me-Ph)	3-CN	2,4-F ₂
243	Cl	3-CN	2,4-F ₂
244	OCO ₂ Me	3-CN	2,4-F ₂
245	O-C(O)Et	3-CN	2,4-F ₂
246	O-C(O)-t-Bu	3-CN	2,4-F ₂
247	O-C(O)Me	3-CN	2,4-F ₂
248	SPh	3-CN	2,4-F ₂
249	SMe	3-CN	2,4-F ₂
250	OSO ₂ (4-Me-Ph)	3-CN	2,4-F ₂
251	Cl	3-CN	2,4-F ₂
252	OCO ₂ Me	3-CN	2,4-F ₂
253	O-C(O)Et	3-CN	4-Cl
254	NHOMe	3-CN	4-Cl
255	O-C(O)Me	3-CN	4-Cl
256	NHOMe	3-CN	4-Cl
257	SMe	3-CN	4-Cl
258	OSO ₂ (4-Me-Ph)	3-CN	4-Cl
259	Cl	3-CN	4-Cl
260	OCO ₂ Me	3-CN	4-Cl
261	O-C(O)Et	3-CN	3-Cl
262	NHOMe	3-CN	3-Cl
263	O-C(O)Me	3-CN	3-Cl
264	NHOH	3-CN	3-Cl
265	SMe	3-CN	3-Cl

10

20

30

40

実施例	B ²	(R ¹) _m	(R ²) _n
266	OSO ₂ (4-Me-Ph)	3-CN	3-Cl
267	Cl	3-CN	3-Cl
268	OCO ₂ Me	3-CN	3-Cl
269	O-C(O)Et	3-CN	4-F
270	NHOMe	3-CN	4-F
271	O-C(O)Me	3-CN	4-F
272	NHOMe	3-CN	4-F
273	SMe	3-CN	4-F
274	OSO ₂ (4-Me-Ph)	3-CN	4-F
275	Cl	3-CN	4-F
276	OCO ₂ Me	3-CN	4-F
277	O-C(O)Et	3-CN	3-F
278	NHOMe	3-CN	3-F
279	O-C(O)Me	3-CN	3-F
280	NHOH	3-CN	3-F
281	SMe	3-CN	3-F
282	OSO ₂ (4-Me-Ph)	3-CN	3-F
283	Cl	3-CN	3-F
284	OCO ₂ Me	3-CN	3-F
285	O-C(O)Et	3-NO ₂	2,5-F ₂
286	NHCH ₂ Ph	3-NO ₂	2,5-F ₂
287	O-C(O)Me	3-NO ₂	2,5-F ₂
288	NHOMe	3-NO ₂	2,5-F ₂
289	SMe	3-NO ₂	2,5-F ₂
290	OSO ₂ (4-Me-Ph)	3-NO ₂	2,5-F ₂
291	Cl	3-NO ₂	2,5-F ₂
292	OCO ₂ Me	3-NO ₂	2,5-F ₂
293	O-C(O)Et	3-NO ₂	2,6-F ₂
294	O-C(O)-t-Bu	3-NO ₂	2,6-F ₂
295	O-C(O)Me	3-NO ₂	2,6-F ₂
296	NHOMe	3-NO ₂	2,6-F ₂
297	SMe	3-NO ₂	2,6-F ₂
298	NHOH	3-NO ₂	2,6-F ₂
299	Cl	3-NO ₂	2,6-F ₂
300	OCO ₂ Me	3-NO ₂	2,6-F ₂
301	O-C(O)Et	3-NO ₂	2,3-F ₂
302	O-C(O)-t-Bu	3-NO ₂	2,3-F ₂
303	O-C(O)Me	3-NO ₂	2,3-F ₂

10

20

30

40

実施例	B ²	(R ¹) _m	(R ²) _n
304	SPh	3-NO ₂	2,3-F ₂
305	SMe	3-NO ₂	2,3-F ₂
306	OSO ₂ (4-Me-Ph)	3-NO ₂	2,3-F ₂
307	Cl	3-NO ₂	2,3-F ₂
308	OCO ₂ Me	3-NO ₂	2,3-F ₂
309	O-C(O)Et	3-NO ₂	2,4-F ₂
310	O-C(O)-t-Bu	3-NO ₂	2,4-F ₂
311	O-C(O)Me	3-NO ₂	2,4-F ₂
312	NHOMe	3-NO ₂	2,4-F ₂
313	SMe	3-NO ₂	2,4-F ₂
314	OSO ₂ (4-Me-Ph)	3-NO ₂	2,4-F ₂
315	Cl	3-NO ₂	2,4-F ₂
316	OCO ₂ Me	3-NO ₂	2,4-F ₂
317	O-C(O)Et	3-NO ₂	2,4-F ₂
318	O-C(O)-t-Bu	3-NO ₂	2,4-F ₂
319	O-C(O)Me	3-NO ₂	2,4-F ₂
320	SPh	3-NO ₂	2,4-F ₂
321	SMe	3-NO ₂	2,4-F ₂
322	OSO ₂ (4-Me-Ph)	3-NO ₂	2,4-F ₂
323	Cl	3-NO ₂	2,4-F ₂
324	OCO ₂ Me	3-NO ₂	2,4-F ₂
325	O-C(O)Et	3-NO ₂	4-Cl
326	NHOMe	3-NO ₂	4-Cl
327	O-C(O)Me	3-NO ₂	4-Cl
328	SPh	3-NO ₂	4-Cl
329	SMe	3-NO ₂	4-Cl
330	NHOH	3-NO ₂	4-Cl
331	Cl	3-NO ₂	4-Cl
332	OCO ₂ Me	3-NO ₂	4-Cl
333	O-C(O)Et	3-NO ₂	3-Cl
334	O-C(O)-t-Bu	3-NO ₂	3-Cl
335	O-C(O)Me	3-NO ₂	3-Cl
336	SPh	3-NO ₂	3-Cl
337	SMe	3-NO ₂	3-Cl
338	NHOMe	3-NO ₂	3-Cl
339	Cl	3-NO ₂	3-Cl
340	OCO ₂ Me	3-NO ₂	3-Cl
341	O-C(O)Et	3-NO ₂	4-F

10

20

30

40

実施例	B ²	(R ¹) _m	(R ²) _n
342	O-C(O)-t-Bu	3-NO ₂	4-F
343	O-C(O)Me	3-NO ₂	4-F
344	SPh	3-NO ₂	4-F
345	SMe	3-NO ₂	4-F
346	NHOMe	3-NO ₂	4-F
347	Cl	3-NO ₂	4-F
348	OCO ₂ Me	3-NO ₂	4-F
349	O-C(O)Et	3-NO ₂	3-F
350	NHOMe	3-NO ₂	3-F
351	O-C(O)Me	3-NO ₂	3-F
352	SPh	3-NO ₂	3-F
353	SMe	3-NO ₂	3-F
354	NHOH	3-NO ₂	3-F
355	Cl	3-NO ₂	3-F
356	OCO ₂ Me	3-NO ₂	3-F
357	O-C(O)Et	3-CN, 4-F	2,6-F ₂
358	NHOMe	3-CN, 4-F	2,6-F ₂
359	O-C(O)Me	3-CN, 4-F	2,6-F ₂
360	SPh	3-CN, 4-F	2,6-F ₂
361	SMe	3-CN, 4-F	2,6-F ₂
362	NHOH	3-CN, 4-F	2,6-F ₂
363	Cl	3-CN, 4-F	2,6-F ₂
364	OCO ₂ Me	3-CN, 4-F	2,6-F ₂
365	O-C(O)Me	3-CN, 4-F	3-Cl
366	O-C(O)Me	3-CN, 4-F	3-CN
367	O-C(O)Me	3-CN, 4-F	4-F
368	O-C(O)Me	3-CN, 4-F	4-Cl
369	O-C(O)Me	3-CN, 4-F	2,5-F ₂
370	O-C(O)Me	3-CN, 4-F	2,6-F ₂
371	O-C(O)Et	3-Br, 4-F	2,6-F ₂
372	NHOMe	3-Br, 4-F	2,6-F ₂
373	O-C(O)Me	3-Br, 4-F	2,6-F ₂
374	SPh	3-Br, 4-F	2,6-F ₂
375	SMe	3-Br, 4-F	2,6-F ₂
376	NHOH	3-Br, 4-F	2,6-F ₂
377	Cl	3-Br, 4-F	2,6-F ₂
378	OCO ₂ Me	3-Br, 4-F	2,6-F ₂
379	O-C(O)Me	3-Br, 4-F	3-Cl

10

20

30

40

実施例	B ²	(R ¹) _m	(R ²) _n
380	O-C(O)Me	3-Br, 4-F	3-CN
381	O-C(O)Me	3-Br, 4-F	4-F
382	O-C(O)Me	3-Br, 4-F	4-Cl
383	O-C(O)Me	3-Br, 4-F	2,5-F ₂
384	O-C(O)Me	3-Br, 4-F	2,6-F ₂
385	O-C(O)Et	3-F, 4-CN	3-F
386	NHOMe	3-F, 4-CN	3-Cl
387	O-C(O)Me	3-F, 4-CN	3-CN
388	SPh	3-F, 4-CN	4-F
389	SMe	3-F, 4-CN	4-Cl
390	NHOH	3-F, 4-CN	2,5-F ₂
391	Cl	3-F, 4-CN	2,6-F ₂
392	OCO ₂ Me	3-F, 4-CN	3-F
393	O-C(O)Me	3-F, 4-CN	3-Cl
394	O-C(O)Me	3-F, 4-CN	3-CN
395	O-C(O)Me	3-F, 4-CN	4-F
396	O-C(O)Me	3-F, 4-CN	4-Cl
397	O-C(O)Me	3-F, 4-CN	2,5-F ₂
398	O-C(O)Me	3-F, 4-CN	2,6-F ₂

参照することを目的として、以下の表 3 7～表 4 2 f において個々の化合物に対して特定の番号（＝実施例番号）が割り当てられており、その際、当該実施例番号は、各表に割り当てられている化学式の番号と「列番号」（列番号）〔この列番号は、表 3 6 の第 1 カラムの列に記載されている番号と同じ番号を示している〕で構成されている。かくして、実施例番号「（式番号）（列番号）」の化学構造は、個々の表の上の式、式番号及び表 3 6 の列番号によって明瞭に定義される。例えば：

表 3 7 の実施例番号「I A 5 a 1」は、式（I A 5 a）〔式中、B²＝－O－C（O）－Et、（R¹）_m＝3－F 及び（R²）_n＝4－Cl（これらは、表 3 6 の列 1 に従って定義される）〕で表される化合物又はその互変異性体である。

【0 5 9 9】

表 3 8 の実施例番号「I A 1 2 a b 3 4 4」は、式（I A 1 2 a）〔式中、R＝エチル〔＝下位式（I A 1 2 a b）〕、並びに、B²＝フェニルチオ、（R¹）_m＝3－NO₂ 及び（R²）_n＝4－F（これらは、表 3 6 の列 3 4 4 に従って定義される）〕で表される化合物又はその互変異性体である。

【0 6 0 0】

表 3 7： 式（I A 5 a）〔式中、B²、（R¹）_m 及び（R²）_n は、表 3 6 中で定義されているとおりである〕で表される化合物：

【0 6 0 1】

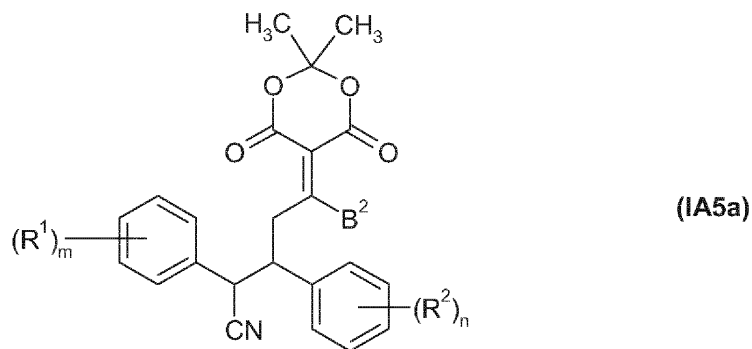
10

20

30

40

【化 1 2 3】



10

表 3 7、例：

その例は、いずれの場合にもエリトロ／トレオラセミ混合物（比率 70：30～30：70）の形態にある式（IA5a）〔式中、 B^2 、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の意味は、表 3 6 の列番号に従って定義される〕で表される該化合物である。個々の化合物は、括弧無しで「（式）（列番号）」の番号が付けられている。

【0 6 0 2】

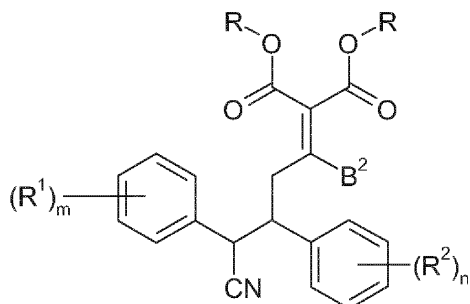
表 3 8： 式（IA12a）、式（IA12aa）、式（IA12ab）、式（IA12ac）及び式（IA12ad）〔式中、 B^2 、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ は、表 3 6 中

20

で定義されているとおりである〕で表される化合物：

【0 6 0 3】

【化 1 2 4】



(IA12a)

(IA12aa) R は、メチル

(IA12ab) R は、エチル

(IA12ac) R は、n-プロピル

(IA12ad) R は、i-プロピル

30

表 3 8、エリトロ／トレオ混合物（比率 70：30～30：70）の例：

その例は、いずれの場合にもエリトロ／トレオラセミ混合物（比率 70：30～30：70）の形態にある式（IA12aa）～（IA12ad）〔式中、 B^2 、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の意味は、表 3 6 の列番号に従って定義される〕で表される化合物である。個々の化合物は、括弧無しで「（式）（列番号）」の番号が付けられている。

【0 6 0 4】

表 3 8 a～3 8 f： 式（トレオ-IA12aa）、式（トレオ-IA12ab）、式（トレオ-IA12ac）、式（トレオ-IA12ad）、式（トレオ-2-IA12aa）、式（トレオ-2-IA12ab）、式（トレオ-2-IA12ac）及び式（トレオ-2-IA12ad）〔式中、 B^2 、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ は、それぞれ、表 3 6 中で定義されているとおりである〕で表される化合物：

40

【0 6 0 5】

(トレオ-2-IA12aa) R = OCH₃
 (トレオ-2-IA12ab) R = OC₂H₅
 (トレオ-2-IA12ac) R = n-C₃H₇
 (トレオ-2-IA12ad) R = i-C₃H₇

10

表 3 8 a (トレオラセミ化合物)、例：
式トレオー (I A 1 2 a a)、式トレオー (I A 1 2 a b)、式トレオー (I A 1 2 a c) 及び式トレオー (I A 1 2 a d) [式中、基 B^2 、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表 3 6 の列番号に従って定義される] で表され、いずれの場合にもトレオ異性体のラセミ混合物の形態にある化合物。個々の化合物は、「トレオー I A 1 2 a a (列番号)」、「トレオー I A 1 2 a b (列番号)」、「トレオー I A 1 2 a c (列番号)」及び「トレオー I A 1 2 a d (列番号)」の番号が付けられている。

30

式トレオー２－（ＩＡ１２ａａ）、式トレオー２－（ＩＡ１２ａｂ）、式トレオー２－（ＩＡ１２ａｃ）又は式トレオー２－（ＩＡ１２ａｄ）〔式中、基 B^2 、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表３６の列番号に従って定義される〕で表される化学構造を有する、富化された形態〔＝（２Ｒ，３Ｒ）形態が９０％ｅｅを超えている〕にある光学的に活性なトレオー２エナンチオマー。個々の化合物は、「トレオー２－ＩＡ１２ａａ（列番号）」、「トレオー２－ＩＡ１２ａｂ（列番号）」、「トレオー２－ＩＡ１２ａｃ（列番号）」及び「トレオー２－ＩＡ１２ａｄ（列番号）」の番号が付けられている。

40

式トレオー１－（ＩＡ１２ａａ）、式トレオー１－（ＩＡ１２ａｂ）、式トレオー１－（ＩＡ１２ａｃ）又は式トレオー１－（ＩＡ１２ａｄ）〔式中、基 B^2 、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表３６の列番号に従って定義される〕で表される化学構造を有する、富化された形態〔＝（２Ｓ，３Ｓ）形態が９０％ｅｅを超えている〕にある光学的に活性なトレオー１エナンチオマー。個々の化合物は、「トレオー１－ＩＡ１２ａａ（列番号）」、「トレオー１－ＩＡ１２ａｂ（列番号）」、「トレオー１－ＩＡ１２ａｃ（列番号）」及び「トレオー１－ＩＡ１２ａｄ（列番号）」の番号が付けられている。

表 38 d (エリトロラセミ化合物)、例：

式エリトロ- (I A 1 2 a a)、式エリトロ- (I A 1 2 a b)、式エリトロ- (I A

12ac) 及び式エリトロ- (IA12ad) [式中、基 B^2 、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表36の列番号に従って定義される] で表され、いずれの場合にもエリトロ異性体のラセミ混合物の形態にある化合物。個々の化合物は、「エリトロ-IA12aa (列番号)」、「エリトロ-IA12ab (列番号)」、「エリトロ-IA12ac (列番号)」及び「エリトロ-IA12ad (列番号)」の番号が付けられている。

【0609】

表38e (エリトロ-1エナンチオマー)、例：

式エリトロ-1- (IA12aa)、式エリトロ-1- (IA12ab)、式エリトロ-1- (IA12ac) 又は式エリトロ-1- (IA12ad) [式中、基 B^2 、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表36の列番号に従って定義される] で表される化学構造を有する、富化された形態 [= (2R, 3S) 形態が90% eeを超えている] にある光学的に活性なエリトロ-2エナンチオマー。個々の化合物は、「エリトロ-1-IA12aa (列番号)」、「エリトロ-1-IA12ab (列番号)」、「エリトロ-1-IA12ac (列番号)」及び「エリトロ-1-IA12ad (列番号)」の番号が付けられている。

10

【0610】

表38f (エリトロ-2エナンチオマー)、例：

式エリトロ-2- (IA12aa)、式エリトロ-2- (IA12ab)、式エリトロ-2- (IA12ac) 又は式エリトロ-2- (IA12ad) [式中、基 B^2 、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表36の列番号に従って定義される] で表される化学構造を有する、富化された形態 [= (2S, 3R) 形態が90% eeを超えている] にある光学的に活性なエリトロ-2エナンチオマー。個々の化合物は、「エリトロ-2-IA12aa (列番号)」、「エリトロ-2-IA12ab (列番号)」、「エリトロ-2-IA12ac (列番号)」及び「エリトロ-2-IA12ad (列番号)」の番号が付けられている。

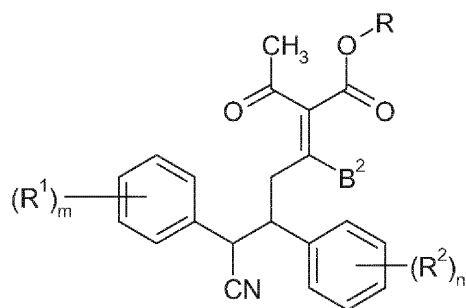
20

【0611】

表39： 式 (IA10a)、式 (IA10aa)、式 (IA10ab)、式 (IA10ac) 及び式 (IA10ad) [式中、 B^2 、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ は、表36中で定義されているとおりである] で表される化合物：

【0612】

【化126】



(IA10a)

(IA10aa) R は、メチル

(IA10ab) R は、エチル

(IA10ac) R は、n-プロピル

(IA10ad) R は、i-プロピル

30

40

表39、エリトロ/トレオ混合物 (比率 70:30~30:70) の例：

その例は、いずれの場合にもエリトロ/トレオラセミ混合物 (比率 70:30~30:70) の形態にある式 (IA10aa) ~ (IA10ad) [式中、 B^2 、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の意味は、表36の列番号に従って定義される] で表される化合物である。個々の化合物は、括弧無しで「(式) (列番号)」の番号が付けられている。

【0613】

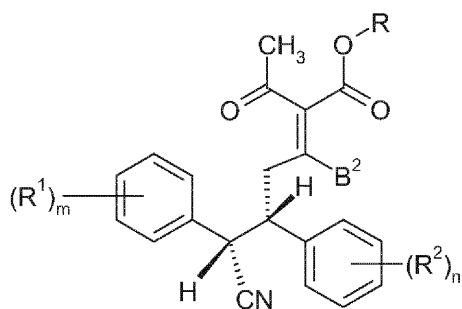
表39a~39f： 式 (トレオ-IA10aa)、式 (トレオ-IA10ab)、式 (トレオ-IA10ac)、式 (トレオ-IA10ad)、式 (トレオ-2-IA10aa)、式 (トレオ-2-IA10ab)、式 (トレオ-2-IA10ac) 及び式 (トレオ-2-IA10ad) [式中、 B^2 、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ は、それぞれ、表36

50

中で定義されているとおりである〕で表される化合物：

【0614】

【化127】

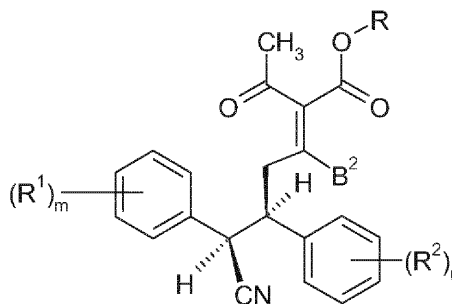


(トレオ-1-IA10aa) R = OCH₃

(トレオ-1-IA10ab) R = OC₂H₅

(トレオ-1-IA10ac) R = n-C₃H₇

(トレオ-1-IA10ad) R = i-C₃H₇



(トレオ-2-IA10aa) R = OCH₃

(トレオ-2-IA10ab) R = OC₂H₅

(トレオ-2-IA10ac) R = n-C₃H₇

(トレオ-2-IA10ad) R = i-C₃H₇

(トレオ-IA10aa) = (トレオ-1-IA10aa) + (トレオ-2-IA10aa) (50:50) = (ラセミ化合物)

(トレオ-IA10ab) = (トレオ-1-IA10ab) + (トレオ-2-IA10ab) (50:50) = (ラセミ化合物)

(トレオ-IA10ac) = (トレオ-1-IA10ac) + (トレオ-2-IA10ac) (50:50) = (ラセミ化合物)

(トレオ-IA10ad) = (トレオ-1-IA10ad) + (トレオ-2-IA10ad) (50:50) = (ラセミ化合物)

表39a (トレオラセミ化合物)、例：

式トレオー (IA10aa)、式トレオー (IA10ab)、式トレオー (IA10ac) 及び式トレオー (IA10ad)〔式中、基 B²、(R¹)_m 及び (R²)_n の構造的組合せは、表36の列番号に従って定義される〕で表され、いずれの場合にもトレオ異性体のラセミ混合物の形態にある化合物。個々の化合物は、「トレオー IA10aa (列番号)」、「トレオー IA10ab (列番号)」、「トレオー IA10ac (列番号)」及び「トレオー IA10ad (列番号)」の番号が付けられている。

【0615】

表39b (光学的に活性なトレオ-2エナンチオマー)、例：

式トレオ-2- (IA10aa)、式トレオ-2- (IA10ab)、式トレオ-2- (IA10ac) 又は式トレオ-2- (IA10ad)〔式中、基 B²、(R¹)_m 及び (R²)_n の構造的組合せは、表36の列番号に従って定義される〕で表される化学構造を有する、富化された形態〔= (2R, 3R) 形態が90% eeを超えている〕にある光学的に活性なトレオ-2エナンチオマー。個々の化合物は、「トレオ-2- IA10aa (列番号)」、「トレオ-2- IA10ab (列番号)」、「トレオ-2- IA10ac (列番号)」及び「トレオ-2- IA10ad (列番号)」の番号が付けられている。

【0616】

表39c、例 (光学的に活性なトレオ-1エナンチオマー)：

式トレオ-1- (IA10aa)、式トレオ-1- (IA10ab)、式トレオ-1- (IA10ac) 又は式トレオ-1- (IA10ad)〔式中、基 B²、(R¹)_m 及び (R²)_n の構造的組合せは、表36の列番号に従って定義される〕で表される化学構造を有する、富化された形態〔= (2S, 3S) 形態が90% eeを超えている〕にある光学的に活性なトレオ-1エナンチオマー。個々の化合物は、「トレオ-1- IA10aa (列番号)」、「トレオ-1- IA10ab (列番号)」、「トレオ-1- IA10ac (列番号)」及び「トレオ-1- IA10ad (列番号)」の番号が付けられている。

【0617】

表 3 9 d (エリトロラセミ化合物)、例：

式エリトロー (I A 1 0 a a)、式エリトロー (I A 1 0 a b)、式エリトロー (I A 1 0 a c) 及び式エリトロー (I A 1 0 a d) [式中、基 B^2 、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表 3 6 の列番号に従って定義される] で表され、いずれの場合にもエリトロ異性体のラセミ混合物の形態にある化合物。個々の化合物は、「エリトロー I A 1 0 a a (列番号)」、「エリトロー I A 1 0 a b (列番号)」、「エリトロー I A 1 0 a c (列番号)」及び「エリトロー I A 1 0 a d (列番号)」の番号が付けられている。

【0 6 1 8】

表 3 9 e (エリトロー 1 エナンチオマー)、例：

式エリトロー 1 (I A 1 0 a a)、式エリトロー 1 (I A 1 0 a b)、式エリトロー 1 (I A 1 0 a c) 又は式エリトロー 1 (I A 1 0 a d) [式中、基 B^2 、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表 3 6 の列番号に従って定義される] で表される化学構造を有する、富化された形態 [= (2 R, 3 S) 形態が 9 0 % e e を超えている] にある光学的に活性なエリトロー 2 エナンチオマー。個々の化合物は、「エリトロー 1 (I A 1 0 a a (列番号))」、「エリトロー 1 (I A 1 0 a b (列番号))」、「エリトロー 1 (I A 1 0 a c (列番号))」及び「エリトロー 1 (I A 1 0 a d (列番号))」の番号が付けられている。

【0 6 1 9】

表 3 9 f (エリトロー 2 エナンチオマー)、例：

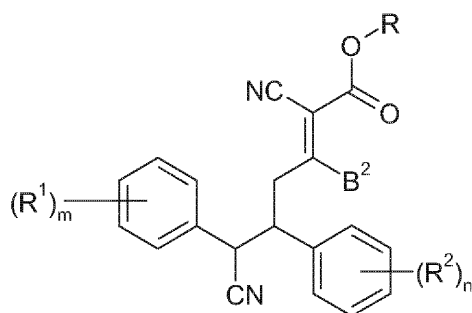
式エリトロー 2 (I A 1 0 a a)、式エリトロー 2 (I A 1 0 a b)、式エリトロー 2 (I A 1 0 a c) 又は式エリトロー 2 (I A 1 0 a d) [式中、基 B^2 、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表 3 6 の列番号に従って定義される] で表される化学構造を有する、富化された形態 [= (2 S, 3 R) 形態が 9 0 % e e を超えている] にある光学的に活性なエリトロー 2 エナンチオマー。個々の化合物は、「エリトロー 2 (I A 1 0 a a (列番号))」、「エリトロー 2 (I A 1 0 a b (列番号))」、「エリトロー 2 (I A 1 0 a c (列番号))」及び「エリトロー 2 (I A 1 0 a d (列番号))」の番号が付けられている。

【0 6 2 0】

表 4 0： 式 (I A 1 0 b)、式 (I A 1 0 b a)、式 (I A 1 0 b b)、式 (I A 1 0 b c) 及び式 (I A 1 0 b d) [式中、 B^2 、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ は、表 3 6 中で定義されているとおりである] で表される化合物：

【0 6 2 1】

【化 1 2 8】



(IA10b)

(IA10ba) R は、メチル

(IA10bb) R は、エチル

(IA10bc) R は、n-プロピル

(IA10bd) R は、i-プロピル

表 4 0、エリトロ／トレオ混合物 (比率 7 0 : 3 0 ~ 3 0 : 7 0) の例：

その例は、いずれの場合にもエリトロ／トレオラセミ混合物 (比率 7 0 : 3 0 ~ 3 0 : 7 0) の形態にある式 (I A 1 0 b a) ~ (I A 1 0 b d) [式中、 B^2 、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の意味は、表 3 6 の列番号に従って定義される] で表される化合物である。個々の化合物は、括弧無しで「(式) (列番号)」の番号が付けられている。

【0 6 2 2】

表 4 0 a ~ 4 0 f： 式 (トレオー I A 1 0 b a)、式 (トレオー I A 1 0 b b)、式

10

20

30

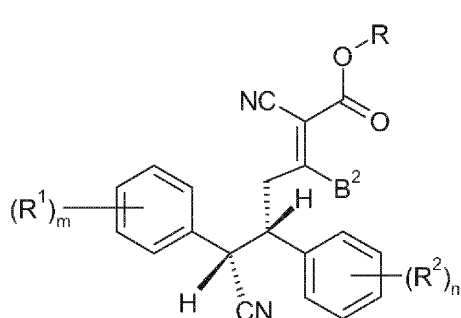
40

50

(トレオ-IA10bc)、式(トレオ-IA10bd)、式(トレオ-2-IA10ba)、式(トレオ-2-IA10bb)、式(トレオ-2-IA10bc)及び式(トレオ-2-IA10bd)〔式中、 B^2 、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ は、それぞれ、表36中で定義されているとおりである〕で表される化合物：

【0623】

【化129】

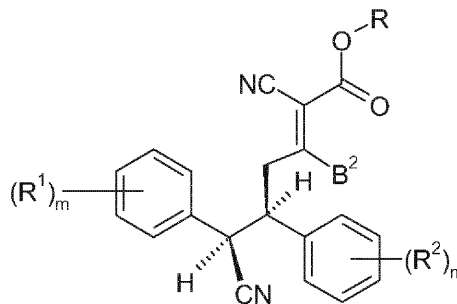


(トレオ-1-IA10ba) $R = OCH_3$

(トレオ-1-IA10bb) $R = OC_2H_5$

(トレオ-1-IA10bc) $R = n-C_3H_7$

(トレオ-1-IA10bd) $R = i-C_3H_7$



(トレオ-2-IA10ba) $R = OCH_3$

(トレオ-2-IA10bb) $R = OC_2H_5$

(トレオ-2-IA10bc) $R = n-C_3H_7$

(トレオ-2-IA10bd) $R = i-C_3H_7$

(トレオ-IA10ba) = (トレオ-1-IA10ba) + (トレオ-2-IA10ba) (50:50) = (ラセミ化合物)

(トレオ-IA10bb) = (トレオ-1-IA10bb) + (トレオ-2-IA10bb) (50:50) = (ラセミ化合物)

(トレオ-IA10bc) = (トレオ-1-IA10bc) + (トレオ-2-IA10bc) (50:50) = (ラセミ化合物)

(トレオ-IA10bd) = (トレオ-1-IA10bd) + (トレオ-2-IA10bd) (50:50) = (ラセミ化合物)

表40a (トレオラセミ化合物)、例：

式トレオ-IA10ba)、式トレオ-IA10bb)、式トレオ-IA10bc)及び式トレオ-IA10bd)〔式中、基 B^2 、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表36の列番号に従って定義される〕で表され、いずれの場合にもトレオ異性体のラセミ混合物の形態にある化合物。個々の化合物は、「トレオ-IA10ba (列番号)」、「トレオ-IA10bb (列番号)」、「トレオ-IA10bc (列番号)」及び「トレオ-IA10bd (列番号)」の番号が付けられている。

【0624】

表40b (光学的に活性なトレオ-2エナンチオマー)、例：

式トレオ-2-IA10ba)、式トレオ-2-IA10bb)、式トレオ-2-IA10bc)又は式トレオ-2-IA10bd)〔式中、基 B^2 、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表36の列番号に従って定義される〕で表される化学構造を有する、富化された形態〔=(2R, 3R)形態が90% eeを超えている〕にある光学的に活性なトレオ-2エナンチオマー。個々の化合物は、「トレオ-2-IA10ba (列番号)」、「トレオ-2-IA10bb (列番号)」、「トレオ-2-IA10bc (列番号)」及び「トレオ-2-IA10bd (列番号)」の番号が付けられている。

表40c、例 (光学的に活性なトレオ-1エナンチオマー)：

式トレオ-1-IA10ba)、式トレオ-1-IA10bb)、式トレオ-1-IA10bc)又は式トレオ-1-IA10bd)〔式中、基 B^2 、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表36の列番号に従って定義される〕で表される化学構造を有する、富化された形態〔=(2S, 3S)形態が90% eeを超えている〕にある光学的に活性なトレオ-1エナンチオマー。個々の化合物は、「トレオ-1-IA10ba (列番号)」、「トレオ-1-IA10bb (列番号)」、「トレオ-1-IA10bc (列番号)」及び「トレオ-1-IA10bd (列番号)」の番号が付けられている。

(列番号)」及び「トレオー１－ＩＡ１０ｂｄ（列番号）」の番号が付けられている。

【０６２５】

表４０ｄ（エリトロラセミ化合物）、例：

式エリトロー（ＩＡ１０ｂａ）、式エリトロー（ＩＡ１０ｂｂ）、式エリトロー（ＩＡ１０ｂｃ）及び式エリトロー（ＩＡ１０ｂｄ）〔式中、基 B^2 、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表３６の列番号に従って定義される〕で表され、いずれの場合にもエリトロ異性体のラセミ混合物の形態にある化合物。個々の化合物は、「エリトローＩＡ１０ｂａ（列番号）」、「エリトローＩＡ１０ｂｂ（列番号）」、「エリトローＩＡ１０ｂｃ（列番号）」及び「エリトローＩＡ１０ｂｄ（列番号）」の番号が付けられている。

【０６２６】

表４０ｅ（エリトロー１エナンチオマー）、例：

式エリトロー１－（ＩＡ１０ｂａ）、式エリトロー１－（ＩＡ１０ｂｂ）、式エリトロー１－（ＩＡ１０ｂｃ）又は式エリトロー１－（ＩＡ１０ｂｄ）〔式中、基 B^2 、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表３６の列番号に従って定義される〕で表される化学構造を有する、富化された形態〔＝（２Ｒ，３Ｓ）形態が９０％ｅｅを超えている〕にある光学的に活性なエリトロー２エナンチオマー。個々の化合物は、「エリトロー１－ＩＡ１０ｂａ（列番号）」、「エリトロー１－ＩＡ１０ｂｂ（列番号）」、「エリトロー１－ＩＡ１０ｂｃ（列番号）」及び「エリトロー１－ＩＡ１０ｂｄ（列番号）」の番号が付けられている。

【０６２７】

表４０ｆ（エリトロー２エナンチオマー）、例：

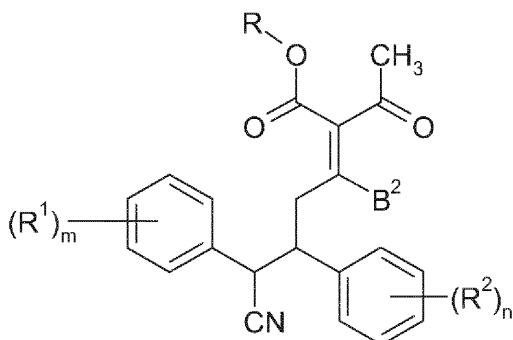
式エリトロー２－（ＩＡ１０ｂａ）、式エリトロー２－（ＩＡ１０ｂｂ）、式エリトロー２－（ＩＡ１０ｂｃ）又は式エリトロー２－（ＩＡ１０ｂｄ）〔式中、基 B^2 、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表３６の列番号に従って定義される〕で表される化学構造を有する、富化された形態〔＝（２Ｓ，３Ｒ）形態が９０％ｅｅを超えている〕にある光学的に活性なエリトロー２エナンチオマー。個々の化合物は、「エリトロー２－ＩＡ１０ｂａ（列番号）」、「エリトロー２－ＩＡ１０ｂｂ（列番号）」、「エリトロー２－ＩＡ１０ｂｃ（列番号）」及び「エリトロー２－ＩＡ１０ｂｄ（列番号）」の番号が付けられている。

【０６２８】

表４１： 式（ＩＡ１１ａ）、式（ＩＡ１１ａａ）、式（ＩＡ１１ａｂ）、式（ＩＡ１１ａｃ）及び式（ＩＡ１１ａｄ）〔式中、 B^2 、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ は、表３６中で定義されているとおりである〕で表される化合物：

【０６２９】

【化１３０】



(IA11a)

(IA11aa) R は、メチル

(IA11ab) R は、エチル

(IA11ac) R は、n-プロピル

(IA11ad) R は、i-プロピル

表４１、エリトロ／トレオ混合物（比率 ７０：３０～３０：７０）の例：

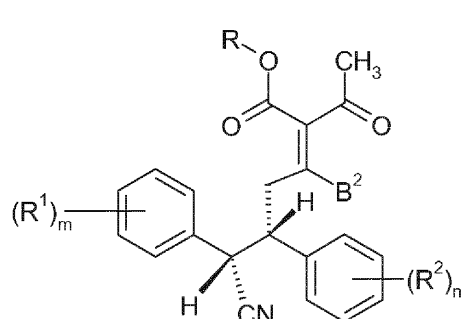
その例は、いずれの場合にもエリトロ／トレオラセミ混合物（比率 ７０：３０～３０：７０）の形態にある式（ＩＡ１１ａａ）～（ＩＡ１１ａｄ）〔式中、 B^2 、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の意味は、表３６の列番号に従って定義される〕で表される化合物である。個々の化合物は、括弧無しで「（式）（列番号）」の番号が付けられている。

【0630】

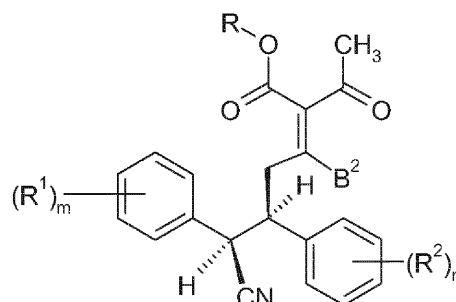
表41a～41f：式(トレオ-IA11aa)、式(トレオ-IA11ab)、式(トレオ-IA11ac)、式(トレオ-IA11ad)、式(トレオ-2-IA11aa)、式(トレオ-2-IA11ab)、式(トレオ-2-IA11ac)及び式(トレオ-2-IA11ad)〔式中、 B^2 、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ は、それぞれ、表36中で定義されているとおりである〕で表される化合物：

【0631】

【化131】



(トレオ-1-IA11aa) $R = OCH_3$
 (トレオ-1-IA11ab) $R = OC_2H_5$
 (トレオ-1-IA11ac) $R = n-C_3H_7$
 (トレオ-1-IA11ad) $R = i-C_3H_7$



(トレオ-2-IA11aa) $R = OCH_3$
 (トレオ-2-IA11ab) $R = OC_2H_5$
 (トレオ-2-IA11ac) $R = n-C_3H_7$
 (トレオ-2-IA11ad) $R = i-C_3H_7$

(トレオ-IA11aa) = (トレオ-1-IA11aa) + (トレオ-2-IA11aa) (50:50) = (ラセミ化合物)

(トレオ-IA11ab) = (トレオ-1-IA11ab) + (トレオ-2-IA11ab) (50:50) = (ラセミ化合物)

(トレオ-IA11ac) = (トレオ-1-IA11ac) + (トレオ-2-IA11ac) (50:50) = (ラセミ化合物)

(トレオ-IA11ad) = (トレオ-1-IA11ad) + (トレオ-2-IA11ad) (50:50) = (ラセミ化合物)

表41a (トレオラセミ化合物)、例：

式トレオ- (IA11aa)、式トレオ- (IA11ab)、式トレオ- (IA11ac) 及び式トレオ- (IA11ad) 〔式中、基 B^2 、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表36の列番号に従って定義される〕で表され、いずれの場合にもトレオ異性体のラセミ混合物の形態にある化合物。個々の化合物は、「トレオ-IA11aa (列番号)」、「トレオ-IA11ab (列番号)」、「トレオ-IA11ac (列番号)」及び「トレオ-IA11ad (列番号)」の番号が付けられている。

【0632】

表41b (光学的に活性なトレオ-2エナンチオマー)、例：

式トレオ-2- (IA11aa)、式トレオ-2- (IA11ab)、式トレオ-2- (IA11ac) 又は式トレオ-2- (IA11ad) 〔式中、基 B^2 、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表36の列番号に従って定義される〕で表される化学構造を有する、富化された形態〔= (2R, 3R) 形態が90% eeを超えている〕にある光学的に活性なトレオ-2エナンチオマー。個々の化合物は、「トレオ-2-IA11aa (列番号)」、「トレオ-2-IA11ab (列番号)」、「トレオ-2-IA11ac (列番号)」及び「トレオ-2-IA11ad (列番号)」の番号が付けられている。

【0633】

表41c、例 (光学的に活性なトレオ-1エナンチオマー)：

式トレオ-1- (IA11aa)、式トレオ-1- (IA11ab)、式トレオ-1- (IA11ac) 又は式トレオ-1- (IA11ad) 〔式中、基 B^2 、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表36の列番号に従って定義される〕で表される化学構造

を有する、富化された形態 [= (2 S, 3 S) 形態が 90 % e e を超えている] にある光学的に活性なトレオ-1 エナンチオマー。個々の化合物は、「トレオ-1-IA11aa (列番号)」、「トレオ-1-IA11ab (列番号)」、「トレオ-1-IA11ac (列番号)」及び「トレオ-1-IA11ad (列番号)」の番号が付けられている。

【0634】

表41d (エリトロラセミ化合物)、例：

式エリトロ- (IA11aa)、式エリトロ- (IA11ab)、式エリトロ- (IA11ac) 及び式エリトロ- (IA11ad) [式中、基 B^2 、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表36の列番号に従って定義される] で表され、いずれの場合にもエリトロ異性体のラセミ混合物の形態にある化合物。個々の化合物は、「エリトロ-IA11aa (列番号)」、「エリトロ-IA11ab (列番号)」、「エリトロ-IA11ac (列番号)」及び「エリトロ-IA11ad (列番号)」の番号が付けられている。

10

【0635】

表41e (エリトロ-1 エナンチオマー)、例：

式エリトロ-1- (IA11aa)、式エリトロ-1- (IA11ab)、式エリトロ-1- (IA11ac) 又は式エリトロ-1- (IA11ad) [式中、基 B^2 、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表36の列番号に従って定義される] で表される化学構造を有する、富化された形態 [= (2 R, 3 S) 形態が 90 % e e を超えている] にある光学的に活性なエリトロ-2 エナンチオマー。個々の化合物は、「エリトロ-1-IA11aa (列番号)」、「エリトロ-1-IA11ab (列番号)」、「エリトロ-1-IA11ac (列番号)」及び「エリトロ-1-IA11ad (列番号)」の番号が付けられている。

20

【0636】

表41f (エリトロ-2 エナンチオマー)、例：

式エリトロ-2- (IA11aa)、式エリトロ-2- (IA11ab)、式エリトロ-2- (IA11ac) 又は式エリトロ-2- (IA11ad) [式中、基 B^2 、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表36の列番号に従って定義される] で表される化学構造を有する、富化された形態 [= (2 S, 3 R) 形態が 90 % e e を超えている] にある光学的に活性なエリトロ-2 エナンチオマー。個々の化合物は、「エリトロ-2-IA11aa (列番号)」、「エリトロ-2-IA11ab (列番号)」、「エリトロ-2-IA11ac (列番号)」及び「エリトロ-2-IA11ad (列番号)」の番号が付けられている。

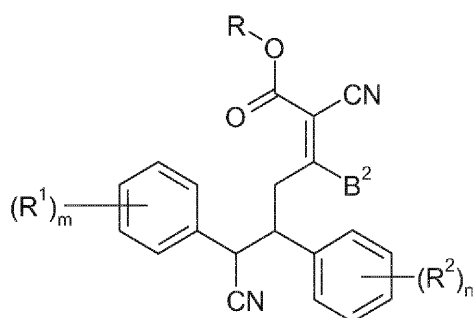
30

【0637】

表42： 式 (IA11b)、式 (IA11ba)、式 (IA11bb)、式 (IA11bc) 及び式 (IA11bd) [式中、 B^2 、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ は、表35中で定義されているとおりである] で表される化合物：

【0638】

【化132】



(IA11b)

40

(IA11ba) R は、メチル

(IA11bb) R は、エチル

(IA11bc) R は、n-プロピル

(IA11bd) R は、i-プロピル

表42、エリトロ/トレオ混合物 (比率 70 : 30 ~ 30 : 70) の例：

その例は、いずれの場合にもエリトロ/トレオラセミ混合物 (比率 70 : 30 ~ 30

50

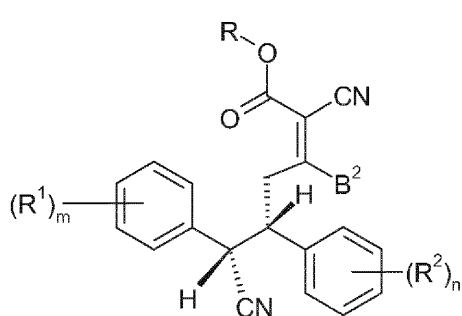
：70)の形態にある式 (IA11ba) ~ (IA11bd) [式中、 B^2 、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の意味は、表36の列番号に従って定義される]で表される化合物である。個々の化合物は、括弧無しで「(式) (列番号)」の番号が付けられている。

【0639】

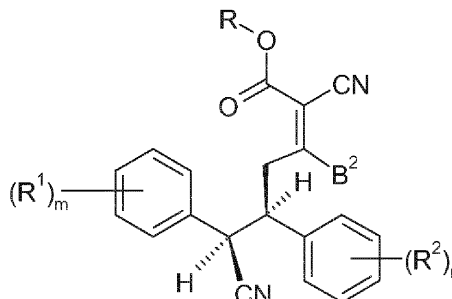
表42a~42f：式 (トレオ-IA11ba)、式 (トレオ-IA11bb)、式 (トレオ-IA11bc)、式 (トレオ-IA11bd)、式 (トレオ-2-IA11ba)、式 (トレオ-2-IA11bb)、式 (トレオ-2-IA11bc) 及び式 (トレオ-2-IA11bd) [式中、 B^2 、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ は、それぞれ、表36中で定義されているとおりである]で表される化合物：

【0640】

【化133】



(トレオ-1-IA11ba) $R = OCH_3$
 (トレオ-1-IA11bb) $R = OC_2H_5$
 (トレオ-1-IA11bc) $R = n-C_3H_7$
 (トレオ-1-IA11bd) $R = i-C_3H_7$



(トレオ-2-IA11ba) $R = OCH_3$
 (トレオ-2-IA11bb) $R = OC_2H_5$
 (トレオ-2-IA11bc) $R = n-C_3H_7$
 (トレオ-2-IA11bd) $R = i-C_3H_7$

(トレオ-IA11ba) = (トレオ-1-IA11ba) + (トレオ-2-IA11ba) (50:50) = (ラセミ化合物)

(トレオ-IA11bb) = (トレオ-1-IA11bb) + (トレオ-2-IA11bb) (50:50) = (ラセミ化合物)

(トレオ-IA11bc) = (トレオ-1-IA11bc) + (トレオ-2-IA11bc) (50:50) = (ラセミ化合物)

(トレオ-IA11bd) = (トレオ-1-IA11bd) + (トレオ-2-IA11bd) (50:50) = (ラセミ化合物)

参照することを目的として、表42aの化合物に対して特定の番号 (= 実施例番号) が割り当てられており、その際、番号「トレオ-IA11ba (列番号)」、「トレオ-IA11bb (列番号)」、「トレオ-IA11bc (列番号)」及び「トレオ-IA11bd (列番号)」は、それぞれ、式 (トレオ-1-IA11ba) 及び (トレオ-2-IA11ba)、式 (トレオ-1-IA11bb) 及び (トレオ-2-IA11bb)、式 (トレオ-1-IA11bc) 及び (トレオ-2-IA11bc) 並びに式 (トレオ-1-IA11bd) 及び (トレオ-2-IA11bd) [これらは、それぞれ、表36の列番号に従う基 B^2 、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せを有している]で表される化学構造を有するトレオエナンチオマーのラセミ化合物を示している。

【0641】

対応して、表42bにおいては、番号「トレオ-2-IA11ba (列番号)」、「トレオ-2-IA11bb (列番号)」、「トレオ-2-IA11bc (列番号)」又は「トレオ-2-IA11bd (列番号)」は、それぞれ、式「(トレオ-2-IA11ba (列番号))」、式「(トレオ-2-IA11bb (列番号))」、式「(トレオ-2-IA11bc (列番号))」及び「(トレオ-2-IA11bd (列番号))」[これらは、それぞれ、表36の列番号に従う基 B^2 、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せを有している]で表される化学構造を有する、富化された形態 [= (2R, 3R) 形態が90% eeを超えている]にある光学的に活性なトレオ-2エナンチオマーを示している。

【0642】

表42a (トレオラセミ化合物)、例：

式トレオー (IA11ba)、式トレオー (IA11bb)、式トレオー (IA11bc) 及び式トレオー (IA11bd) [式中、基 B^2 、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表36の列番号に従って定義される] で表され、いずれの場合にもトレオ異性体のラセミ混合物の形態にある化合物。個々の化合物は、「トレオーIA11ba (列番号)」、「トレオーIA11bb (列番号)」、「トレオーIA11bc (列番号)」及び「トレオーIA11bd (列番号)」の番号が付けられている。

【0643】

表42b (光学的に活性なトレオー2エナンチオマー)、例：

10

式トレオー2- (IA11ba)、式トレオー2- (IA11bb)、式トレオー2- (IA11bc) 又は式トレオー2- (IA11bd) [式中、基 B^2 、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表36の列番号に従って定義される] で表される化学構造を有する、富化された形態 [= (2R, 3R) 形態が90% eeを超えている] にある光学的に活性なトレオー2エナンチオマー。個々の化合物は、「トレオー2-IA11ba (列番号)」、「トレオー2-IA11bb (列番号)」、「トレオー2-IA11bc (列番号)」及び「トレオー2-IA11bd (列番号)」の番号が付けられている。

【0644】

表42c、例 (光学的に活性なトレオー1エナンチオマー)：

20

式トレオー1- (IA11ba)、式トレオー1- (IA11bb)、式トレオー1- (IA11bc) 又は式トレオー1- (IA11bd) [式中、基 B^2 、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表36の列番号に従って定義される] で表される化学構造を有する、富化された形態 [= (2S, 3S) 形態が90% eeを超えている] にある光学的に活性なトレオー1エナンチオマー。個々の化合物は、「トレオー1-IA11ba (列番号)」、「トレオー1-IA11bb (列番号)」、「トレオー1-IA11bc (列番号)」及び「トレオー1-IA11bd (列番号)」の番号が付けられている。

【0645】

表42d (エリトロラセミ化合物)、例：

式エリトロ- (IA11ba)、式エリトロ- (IA11bb)、式エリトロ- (IA11bc) 及び式エリトロ- (IA11bd) [式中、基 B^2 、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表36の列番号に従って定義される] で表され、いずれの場合にもエリトロ異性体のラセミ混合物の形態にある化合物。個々の化合物は、「エリトロ-IA11ba (列番号)」、「エリトロ-IA11bb (列番号)」、「エリトロ-IA11bc (列番号)」及び「エリトロ-IA11bd (列番号)」の番号が付けられている。

30

【0646】

表42e (エリトロ1エナンチオマー)、例：

式エリトロ1- (IA11ba)、式エリトロ1- (IA11bb)、式エリトロ1- (IA11bc) 又は式エリトロ1- (IA11bd) [式中、基 B^2 、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表36の列番号に従って定義される] で表される化学構造を有する、富化された形態 [= (2R, 3S) 形態が90% eeを超えている] にある光学的に活性なエリトロ2エナンチオマー。個々の化合物は、「エリトロ1-IA11ba (列番号)」、「エリトロ1-IA11bb (列番号)」、「エリトロ1-IA11bc (列番号)」及び「エリトロ1-IA11bd (列番号)」の番号が付けられている。

40

【0647】

表42f (エリトロ2エナンチオマー)、例：

式エリトロ2- (IA11ba)、式エリトロ2- (IA11bb)、式エリトロ2- (IA11bc) 又は式エリトロ2- (IA11bd) [式中、基 B^2 、 $(R^1)_m$ 及び $(R^2)_n$ の構造的組合せは、表36の列番号に従って定義される] で表される化学構造を有する、富化された形態 [= (2S, 3R) 形態が90% eeを超えている]

50

にある光学的に活性なエリトロ-2 エナンチオマー。個々の化合物は、「エリトロ-2-I A 1 1 b a (列番号)」、「エリトロ-2-I A 1 1 b b (列番号)」、「エリトロ-2-I A 1 1 b c (列番号)」及び「エリトロ-2-I A 1 1 b d (列番号)」の番号が付けられている。

【0648】

表1～42fの実施例に関する選択された物理データ：

試験方法：

(1) ^1H -NMRデータ (400 MHz、 CDCl_3)；特有の化学シフト [ppm] が当該実施例に関して示されている；

(2) MS＝質量スペクトル (四重極測定機を用いて測定)；[エレクトロスプレーイオン化 (+)、質量範囲 100–1000]；分子ピークM又は [M+H]⁺又は [M–1]⁺又は [M–2]⁺又は [M+1]⁺が当該実施例に関して示されている；

(3) HPLC＝高性能液体クロマトグラフィー；[カラム：Zorbax Eclipse、50×3.0、C18 1.8 μm 、移動相：水+0.06%ギ酸/アクリロニトリル+0.06%ギ酸、勾配：90：10、2分後、5：95；検出器：DAD (210–400 nm)]；保持時間 (rt) が当該実施例に関して示されている；

(4) HPLCキラル＝キラルカラムにおけるHPLC；[カラム：Chiralpak IC、250×4.6 mm、5 μm DAIC 83325；検出器波長：210 nm]；カラム温度、流量及び移動相が当該実施例に関して示されている。

【0649】

実施例に関するデータ：

実施例番号 I a a 1 (エリトロ/トレオ異性体混合物 62：38)：

NMR (トレオ)：17.41 (s, 1H), 4.02 (d, 1H)；NMR (エリトロ)：17.44 (s, 1H), 4.29 (d, 1H)；MS：412 [M+H]⁺；HPLC (rt)：1.67分

実施例番号 I B 9 a a 6 (エリトロ/トレオ異性体混合物 54：46)：

NMR (トレオ)：13.54 (s, 1H)；NMR (エリトロ)：13.64 (s, 1H)；MS：432 [M–1]⁺；HPLC (rt)：1.53分

実施例番号 I B 9 a a 1 (エリトロ/トレオ異性体混合物 53：47)：

NMR (トレオ)：13.50 (s, 1H)；NMR (エリトロ)：13.61 (s, 1H)；MS：430 [M–1]⁺；HPLC (rt)：1.59分

実施例番号 I B 9 a a 10 (エリトロ/トレオ異性体混合物 60：40)：

NMR (トレオ)：13.54 (s, 1H)；NMR (エリトロ)：13.63 (s, 1H)；MS：448 [M–2]⁺；HPLC (rt)：1.85分

実施例番号 I B 9 a a 20 (エリトロ/トレオ異性体混合物 63：37)：

NMR (トレオ)：17.46 (s, 1H), 4.03 (d, 1H)；NMR (エリトロ)：17.47 (s, 1H), 4.30 (d, 1H)；MS：394 [M–1]⁺；HPLC (rt)：1.58分

実施例番号 I B 8 a a 10 (エリトロ/トレオ異性体混合物 57：43)：

NMR (トレオ)：13.56 (広幅 s, 1H), 3.99 (d, 1H), 3.83 (s, 3H)；NMR (エリトロ)：13.56 (広幅 s, 1H), 4.09 (d, 1H), 3.85 (s, 3H)；MS：417 [M+1]⁺；HPLC (rt)：1.53分

実施例番号 I B 8 a a 1 (エリトロ/トレオ異性体混合物 52：48)：

NMR (トレオ)：13.52 (広幅 s, 1H), 4.00 (d, 1H), 3.82 (s, 3H)；NMR (エリトロ)：13.58 (広幅 s, 1H), 4.09 (d, 1H), 3.84 (s, 3H)；MS：383 [M+1]⁺；HPLC (rt)：1.44分

実施例番号 I B 8 a a 43 (エリトロ/トレオ異性体混合物 59：41)：

NMR (エリトロ)：13.46 (広幅 s, 1H), 3.81 (s, 3H)；NMR (トレオ)：13.55 (広幅 s, 1H), 3.84 (s, 3H)；MS：419 [M+1]⁺；HPLC (rt)：1.46分

実施例番号 I B 9 a a 2 0 (エリトロ／トレオ異性体混合物 59:41):

NMR (トレオ): 13.51 (s, 1H); NMR (エリトロ): 13.62 (s, 1H); MS: 414 [M-1]⁺; HPLC (rt): 1.51分

実施例番号 I B X a a 2 0 (エリトロ／トレオ異性体混合物 53:47):

NMR (トレオ): 17.62 (s, 1H), 4.04 (d, 1H), 3.82 (s, 3H), 2.30 (s, 3H); NMR (エリトロ): 17.74 (s, 1H), 4.30 (d, 1H), 3.83 (s, 3H), 2.36 (s, 3H); MS: 398 [M-1]⁺; HPLC (rt): 1.65分

実施例番号 I B 8 a a 6 (エリトロ／トレオ異性体混合物 57:43):

NMR (トレオ): 17.62 (s, 1H), 4.04 (d, 1H), 3.82 (s, 3H), 2.30 (s, 3H); NMR (エリトロ): 13.62 (広幅 s, 1H), 4.10 (d, 1H), 3.85 (s, 3H); MS: 399 [M-1]⁺; HPLC (rt): 1.45分

実施例番号 I B 9 a a 2 5 (エリトロ／トレオ異性体混合物 63:37):

NMR (トレオ): 13.38 (s, 1H); NMR (エリトロ): 13.41 (s, 1H); MS: 430 [M-1]⁺; HPLC (rt): 1.58分

実施例番号 I A 1 2 a 5 7 (エリトロ／トレオ異性体混合物 63:37):

NMR (トレオ): 3.99 (d, 1H), 3.76 (s, 3H), 3.67 (s, 3H), 1.11 (s, 9H); NMR (エリトロ): 4.30 (d, 1H), 3.84 (s, 3H), 3.73 (s, 3H), 1.17 (s, 9H);

実施例番号 I a a 9 5 (エリトロ／トレオ異性体混合物 57:43):

NMR (トレオ): 17.27 (s, 1H); NMR (エリトロ): 17.35 (s, 1H); MS: 430 [M-1]⁺; HPLC (rt): 1.59分

実施例番号 I B 9 a a 2 3 (エリトロ／トレオ異性体混合物 58:42):

NMR (トレオ): 13.43 (s, 1H); NMR (エリトロ): 13.53 (s, 1H); MS: 432 [M-1]⁺; HPLC (rt): 1.50分

実施例番号 I a a 2 3 (エリトロ／トレオ異性体混合物 52:48):

NMR (トレオ): 17.26 (s, 1H); NMR (エリトロ): 17.31 (s, 1H); MS: 414 [M+1]⁺; HPLC (rt): 1.58分

実施例番号 I a a 1 0 (エリトロ／トレオ異性体混合物 61:39):

NMR (トレオ): 17.36 (s, 1H), 4.01 (d, 1H); NMR (エリトロ): 17.38 (s, 1H), 4.28 (d, 1H); MS: 430 [M+1]⁺; HPLC (rt): 1.68分

実施例番号 I B 9 b a 6 (エリトロ／トレオ異性体混合物 57:43):

NMR (トレオ): 13.53 (s, 1H); NMR (エリトロ): 13.63 (s, 1H); MS: 460 [M-1]⁺; HPLC (rt): 1.67分

実施例番号 I B X a a 6 (エリトロ／トレオ異性体混合物 57:43):

NMR (トレオ): 17.59 (s, 1H), 4.02 (d, 1H), 3.83 (s, 3H), 2.31 (s, 3H); NMR (エリトロ): 17.67 (s, 1H), 4.30 (d, 1H), 3.83 (s, 3H), 2.36 (s, 3H); MS: 416 [M-1]⁺; HPLC (rt): 1.67分

実施例番号 I a a 3 2 (エリトロ／トレオ異性体混合物 70:30):

NMR (トレオ): 4.08 (d, 1H), 1.06 (s, 9H); NMR (エリトロ): 4.35 (d, 1H), 1.15 (s, 9H)

実施例番号 I A 1 2 a a 2 3 (エリトロ／トレオ異性体混合物 50:50):

NMR (トレオ): 4.05 (d, 1H), 2.47 (s, 3H); NMR (エリトロ): 4.17 (d, 1H), 2.50 (s, 3H); MS: 588 [M+1]⁺; HPLC (rt): 1.71分

実施例番号 I A 1 2 a b 5 3 (エリトロ／トレオ異性体混合物 50:50):

NMR (トレオ): 2.47 (s, 3H); NMR (エリトロ): 2.49 (s, 3H)

10

20

30

40

50

; MS: 616 [M+1]⁺; HPLC (rt): 1.85分

実施例番号 I o a 9 5 (エリトロ／トレオ異性体混合物 50:50):

NMR (トレオ): 13.8 (広幅 s, 1H), 3.80 (d, 1H); NMR (エリトロ): 13.8 (広幅 s, 1H), 4.18 (d, 1H); MS: 416 [M+1]⁺; HPLC (rt): 1.39分

実施例番号 I a a 5 3 (エリトロ／トレオ異性体混合物 60:34):

NMR (トレオ): 4.07 (d, 1H), 1.08 (s, 9H); NMR (エリトロ): 4.35 (d, 1H), 1.16 (s, 9H)

実施例番号 I A 1 2 a a 1 9 3 (エリトロ／トレオ異性体混合物 57:43):

NMR (トレオ): 3.74 (s, 3H), 3.67 (s, 3H), 1.15 (s, 9H); NMR (エリトロ): 3.78 (s, 3H), 3.68 (s, 3H), 1.19 (s, 9H);

実施例番号 I A 1 2 a a 1 (エリトロ／トレオ異性体混合物 67:33):

NMR (トレオ): 4.01 (d, 1H), 3.73 (s, 3H), 3.66 (s, 3H), 1.11 (s, 9H); NMR (エリトロ): 4.31 (d, 1H), 3.83 (s, 3H), 3.73 (s, 3H), 1.17 (s, 9H)

実施例番号 I A 1 2 a a 7 8 (エリトロ／トレオ異性体混合物 66:34):

NMR (トレオ): 4.11 (d, 1H), 3.79 (s, 3H), 3.66 (s, 3H), 1.14 (s, 9H); NMR (エリトロ): 4.30 (d, 1H), 3.81 (s, 3H), 3.71 (s, 3H), 1.19 (s, 9H)

実施例番号 I A 1 2 a a 4 8 (エリトロ／トレオ異性体混合物 66:34):

NMR (トレオ): 3.99 (d, 1H), 3.74 (s, 3H), 3.67 (s, 3H), 1.11 (s, 9H); NMR (エリトロ): 4.31 (d, 1H), 3.84 (s, 3H), 3.73 (s, 3H), 1.17 (s, 9H)

実施例番号 I o a 6 (エリトロ／トレオ異性体混合物 59:41):

NMR (トレオ): 14.0 (広幅 s, 1H), 4.03 (d, 1H); NMR (エリトロ): 14.0 (広幅 s, 1H), 4.30 (d, 1H); MS: 400 [M+1]⁺; HPLC (rt): 1.40分

実施例番号 トレオー I A 1 2 a a 5 7 (トレオラセミ化合物)

NMR (トレオ): 3.99 (d, 1H), 3.76 (s, 3H), 3.67 (s, 3H), 3.39 (m, 3H), 1.11 (s, 9H); HPLCキラル: 流量: 1 mL/分; カラム温度: 30°C; 移動相: A = n-ヘプタン (80), B = イソプロパノール (20); 保持時間: トレオ1: 10.751分, トレオ2: 10.801分

実施例番号 エリトロー 2-I A 1 2 a a 5 7 (光学的に活性なエリトロー 2 エナンチオマー)

NMR (エリトロ): 4.30 (d, 1H), 3.84 (s, 3H), 3.73 (s, 3H), 3.35 (m, 1H), 3.21 (m, 1H), 3.07 (m, 1H), 1.17 (s, 9H); HPLCキラル: 流量: 1 mL/分; カラム温度: 30°C; 移動相: A = n-ヘプタン (80), B = イソプロパノール (20); 保持時間: 7.481分

実施例番号 エリトロー 1-I A 1 2 a a 5 7 (光学的に活性なエリトロー 1 エナンチオマー)

NMR (エリトロ): 4.30 (d, 1H), 3.84 (s, 3H), 3.73 (s, 3H), 3.35 (m, 1H), 3.21 (m, 1H), 3.07 (m, 1H), 1.17 (s, 9H); HPLCキラル: 流量: 1 mL/分; カラム温度: 30°C; 移動相: A = n-ヘプタン (80), B = イソプロパノール (20); 保持時間: 6.036分

実施例番号 I B X a a 1 0 (エリトロ／トレオ異性体混合物 58:42):

NMR (トレオ): 17.59 (s, 1H), 4.02 (d, 1H), 3.83 (s, 3H), 2.29 (s, 3H); NMR (エリトロ): 17.67 (s, 1H), 4.29 (d, 1H), 3.84 (s, 3H), 2.36 (s, 3H); MS: 432 [M+1]⁺; HPLC (rt): 1.74分

10

20

30

40

50

実施例番号 I B X a a 4 3 (エリトロ／トレオ異性体混合物 73:27):

NMR (トレオ): 17.54 (s, 1H), 4.18 (d, 1H), 3.79 (s, 3H), 2.32 (s, 3H); NMR (エリトロ): 17.59 (s, 1H), 4.30 (d, 1H), 3.88 (s, 3H), 2.35 (s, 3H); MS: 434 [M+1]⁺; HPLC (rt): 1.66分

実施例番号 I a a 8 3 (エリトロ／トレオ異性体混合物 61:39):

NMR (トレオ): 17.26 (s, 1H); NMR (エリトロ): 17.37 (s, 1H); MS: 414 [M+1]⁺; HPLC (rt): 1.57分

実施例番号 I e a 6 (エリトロ／トレオ異性体混合物 58:42):

NMR (トレオ): 17.89 (m, 1H), 17.29 (s, 1H); NMR (エリトロ): 17.92 (m, 1H), 17.31 (s, 1H); MS: 442 [M+1]⁺; HPLC (rt): 1.79分

実施例番号 I c a 6 (エリトロ／トレオ異性体混合物 64:36):

NMR (トレオ): 17.35 (広幅 s, 1H), 4.01 (d, 1H); NMR (エリトロ): 17.36 (広幅 s, 1H), 4.29 (d, 1H); MS: 428 [M+1]⁺; HPLC (rt): 1.70分

実施例番号 トレオー I A 1 2 a a 4 8 (トレオラセミ化合物)

NMR (トレオ): 3.99 (d, 1H), 3.75 (s, 3H), 3.67 (s, 3H), 3.39 (m, 3H), 1.11 (s, 9H); HPLCキラル: 流量: 0.6 mL/分; カラム温度: 25℃; 移動相: A=n-ヘプタン (90), B=イソプロパノール (10); 保持時間: トレオー1: 34.839分, トレオー2: 36.287分

実施例番号 エリトロー I A 1 2 a a 4 8 (エリトロラセミ化合物)

NMR (エリトロ): 4.31 (d, 1H), 3.84 (s, 3H), 3.73 (s, 3H), 3.39 (m, 1H), 3.23 (m, 1H), 3.08 (m, 1H), 1.17 (s, 9H); HPLCキラル: 流量: 0.6 mL/分; カラム温度: 25℃; 移動相: A=n-ヘプタン (90), B=イソプロパノール (10); 保持時間: エリトロ1: 14.380分, エリトロ2: 17.766分

実施例番号 I f a 6 (エリトロ／トレオ異性体混合物 64:36):

NMR (トレオ): 17.41 (s, 1H), 4.00 (d, 1H), 1.06 (s, 3H), 1.03 (s, 3H); NMR (エリトロ): 17.42 (s, 1H), 4.29 (d, 1H), 1.08 (s, 3H), 1.05 (s, 3H); MS: 442 [M+1]⁺; HPLC (rt): 1.75分

実施例番号 トレオー I a a 4 6 (トレオラセミ化合物)

NMR (トレオ): 4.35 (d, 1H), 1.16 (s, 9H); HPLCキラル: 流量: 1 mL/分; カラム温度: 25℃; 移動相: A=n-ヘプタン (80), B=イソプロパノール (20); 保持時間: トレオ1: 13.092分, トレオ2: 13.876分

実施例番号 エリトロー I a a 4 6 (エリトロラセミ化合物)

NMR (トレオ): 4.08 (d, 1H), 1.09 (s, 9H); HPLCキラル: 流量: 1 mL/分; カラム温度: 25℃; 移動相: A=n-ヘプタン (80), B=イソプロパノール (20); 保持時間: エリトロ1: 10.151分, エリトロ2: 10.355分

実施例番号 I v a 6 (エリトロ／トレオ異性体混合物 62:38):

NMR (トレオ): 4.17 (d, 1H), 3.55 (s, 3H), 2.40 (s, 3H); NMR (エリトロ): 4.52 (d, 1H), 3.59 (s, 3H), 2.44 (s, 3H); MS: 414 [M+1]⁺; HPLC (rt): 1.24分

実施例番号 I t a 6 (エリトロ／トレオ異性体混合物 66:34):

NMR (トレオ): 7.60 (s, 1H), 4.15 (d, 1H), 3.62 (s, 3H); NMR (エリトロ): 7.66 (s, 1H), 4.45 (d, 1H), 3.66 (s, 3H); MS: 400 [M+1]⁺; HPLC (rt): 1.31分

実施例番号 I A 1 2 a a 5 0 (エリトロ／トレオ異性体混合物 57:43):

NMR (トレオ): 2.15 (q, 2H), 1.03 (t, 3H); NMR (エリトロ): 2.36 (q, 2H), 1.13 (t, 3H);

実施例番号 I B 9 a a 4 9 (エリトロ／トレオ異性体混合物 59:41):

NMR (トレオ): 1.91 (s, 3H); NMR (エリトロ): 2.12 (s, 3H);

実施例番号 I e a 9 5 (エリトロ／トレオ異性体混合物 58:42):

NMR (トレオ): 17.20 (m, 1H); NMR (エリトロ): 17.83 (m, 1H); MS: 460 [M+1]⁺; HPLC (rt): 1.78分

実施例番号 トレオー I v a 4 8 (トレオラセミ化合物)

NMR (トレオ): 4.17 (d, 1H), 3.85 (m, 1H), 3.59 (s, 3H), 2.78 (q, 2H), 2.36 (s, 3H), 1.33 (t, 3H)

実施例番号 エリトロー I v a 4 8 (エリトロラセミ化合物)

NMR (トレオ): 6.72 ? 7.20 (m, 7H), 4.50 (d, 1H), 3.71 (m, 1H), 3.62 (s, 3H), 3.41 (m, 1H), 3.11 (m, 1H), 2.79 (q, 2H), 2.47 (s, 3H), 1.33 (t, 3H)

実施例番号 I f a 9 5 (エリトロ／トレオ異性体混合物 61:39):

NMR (トレオ): 17.30 (s, 1H), 2.47 (s, 3H), 2.30 (s, 3H); NMR (エリトロ): 17.39 (s, 1H), 2.51 (s, 3H), 2.37 (s, 3H); MS: 460 [M+1]⁺; HPLC (rt): 1.74分

実施例番号 I t a 9 5 (エリトロ／トレオ異性体混合物 73:27):

NMR (トレオ): 7.80 (s, 1H), 4.17 (d, 1H), 3.67 (s, 3H), 2.72 (q, 2H), 1.30 (t, 3H); NMR (エリトロ): 7.90 (s, 1H), 4.45 (d, 1H), 3.71 (s, 3H), 2.80 (q, 2H), 1.35 (t, 3H);

実施例番号 I v a 6 (エリトロ／トレオ異性体混合物 51:49):

NMR (トレオ): 4.18 (d, 1H), 2.35 (s, 3H); NMR (エリトロ): 4.38 (d, 1H), 2.45 (s, 3H); MS: 432 [M+1]⁺; HPLC (rt): 1.67分

実施例番号 I c a 9 5 (エリトロ／トレオ異性体混合物 58:42):

NMR (トレオ): 17.23 (m, 1H); NMR (エリトロ): 17.31 (m, 1H); MS: 446 [M+1]⁺; HPLC (rt): 1.22分

実施例番号 I g a 9 5 (エリトロ／トレオ異性体混合物 57:43):

NMR (トレオ): 17.62 (s, 1H); NMR (エリトロ): 17.69 (s, 1H); MS: 502 [M+1]⁺; HPLC (rt): 1.68分

実施例番号 I v a 2 5 9 (エリトロ／トレオ異性体混合物 52:48):

NMR (トレオ): 4.29-4.37 (m, 1H), 4.13 (d, 1H), 3.59 (s, 3H), 2.80 (q, 2H), 2.37 (s, 3H), 1.35 (t, 3H); NMR (エリトロ): 4.37 (d, 1H), 3.60 (s, 3H), 2.80 (q, 2H), 2.42 (s, 3H), 1.35 (t, 3H);

実施例番号 I a a 6 (エリトロ／トレオ異性体混合物 61:39):

NMR (トレオ): 17.38 (s, 1H), 4.01 (d, 1H); NMR (エリトロ): 17.39 (s, 1H), 4.30 (d, 1H); MS: 413 [M+1]⁺; HPLC (rt): 1.52分

実施例番号 I B 9 a a 4 3 (エリトロ／トレオ異性体混合物 62:38):

NMR (トレオ): 13.37 (s, 1H); NMR (エリトロ): 13.41 (s, 1H); MS: 450 [M+1]⁺; HPLC (rt): 1.51分

実施例番号 トレオー 2 - I B 8 a a 4 3 (トレオラセミ化合物)

NMR (トレオ): 13.55 (s, 1H), 7.17 (m, 1H), 7.02 (m, 2H), 6.92 (m, 1H), 6.77 (t, 2H), 4.23 (d, 1H), 4.19

10

20

30

40

50

(m, 1H), 3.84 (s, 3H), 3.47 (m, 2H); MS: 419 [M+1]⁺; HPLC (rt): 1.51分; 旋光: $[\alpha]_D^{20} = -52.295$ (CHCl₃ 中) (濃度 = 2.157 g/mL);

実施例番号 I o a 8 3 (エリトロ／トレオ異性体混合物 53:47):

NMR (トレオ): 13.8 (広幅 s, 1H), 6.72 (t, 1H); NMR (エリトロ): 13.8 (広幅 s, 1H), 6.89 (t, 1H); MS: 400 [M+1]⁺; HPLC (rt): 1.39分

実施例番号 I o a 2 9 (エリトロ／トレオ異性体混合物 60:40):

NMR (トレオ): 13.8 (広幅 s, 1H), 4.27 (d, 1H); NMR (エリトロ): 13.8 (広幅 s, 1H), 4.01 (d, 1H); MS: 382 [M+1]⁺; HPLC (rt): 1.43分

10

実施例番号 I o a 2 4 (エリトロ／トレオ異性体混合物 60:40):

NMR (トレオ): 13.8 (広幅 s, 1H), 4.36 (d, 1H); NMR (エリトロ): 13.8 (広幅 s, 1H), 4.71 (d, 1H); MS: 418 [M+1]⁺; HPLC (rt): 1.44分

実施例番号 I o a 3 (エリトロ／トレオ異性体混合物 60:40):

NMR (トレオ): 13.8 (広幅 s, 1H), 4.26 (d, 1H); NMR (エリトロ): 13.8 (広幅 s, 1H), 3.99 (d, 1H); MS: 416 [M+1]⁺; HPLC (rt): 1.54分

実施例番号 I o a 1 7 (エリトロ／トレオ異性体混合物 58:42):

NMR (トレオ): 13.8 (広幅 s, 1H), 4.22 (d, 1H); NMR (エリトロ): 13.8 (広幅 s, 1H), 4.00 (d, 1H); MS: 400 [M+1]⁺; HPLC (rt): 1.54分

20

実施例番号 I o a 2 (エリトロ／トレオ異性体混合物 58:42):

NMR (トレオ): 13.8 (広幅 s, 1H), 4.27 (d, 1H); NMR (エリトロ): 13.8 (広幅 s, 1H), 4.04 (d, 1H); MS: 382 [M+1]⁺; HPLC (rt): 1.40分

実施例番号 I o a 9 (エリトロ／トレオ異性体混合物 63:37):

NMR (トレオ): 13.8 (広幅 s, 1H), 4.25 (d, 1H); NMR (エリトロ): 13.8 (広幅 s, 1H), 4.03 (d, 1H); MS: 398 [M+1]⁺; HPLC (rt): 1.49分

30

実施例番号 I o a 2 0 (エリトロ／トレオ異性体混合物 63:37):

NMR (トレオ): 13.8 (広幅 s, 1H), 4.26 (d, 1H); NMR (エリトロ): 13.8 (広幅 s, 1H), 4.02 (d, 1H); MS: 382 [M+1]⁺; HPLC (rt): 1.40分

実施例番号 I o a 1 (エリトロ／トレオ異性体混合物 63:37):

NMR (トレオ): 13.8 (広幅 s, 1H), 4.26 (d, 1H); NMR (エリトロ): 13.8 (広幅 s, 1H), 4.03 (d, 1H); MS: 398 [M+1]⁺; HPLC (rt): 1.50分

実施例番号 I c a 8 3 (エリトロ／トレオ異性体混合物 63:37):

NMR (トレオ): 6.70 (t, 2H); NMR (エリトロ): 6.88 (t, 2H); MS: 428 [M+1]⁺; HPLC (rt): 1.68分

40

実施例番号 I f a 8 3 (エリトロ／トレオ異性体混合物 64:36):

NMR (トレオ): 6.70 (t, 2H); NMR (エリトロ): 6.88 (t, 2H); MS: 442 [M+1]⁺; HPLC (rt): 1.74分

実施例番号 I e a 8 3 (エリトロ／トレオ異性体混合物 67:33):

NMR (トレオ): 6.70 (t, 2H); NMR (エリトロ): 6.88 (t, 2H); MS: 442 [M+1]⁺; HPLC (rt): 1.79分

実施例番号 I c a 2 9 (エリトロ／トレオ異性体混合物 63:37):

NMR (トレオ): 4.01 (m, 1H); NMR (エリトロ): 4.30 (m, 1H)

50

; MS : 410 [M+1] + ; HPLC (rt) : 1.73分
実施例番号 I f a 2 9 (エリトロ／トレオ異性体混合物 62 : 38) :
NMR (トレオ) : 4.01 (d, 1H) ; NMR (エリトロ) : 4.30 (m, 1H)
; MS : 424 [M+1] + ; HPLC (rt) : 1.79分
実施例番号 I e a 2 9 (エリトロ／トレオ異性体混合物 61 : 39) :
NMR (トレオ) : 4.01 (d, 1H) ; NMR (エリトロ) : 4.31 (dd, 1H)
; MS : 424 [M+1] + ; HPLC (rt) : 1.83分
実施例番号 I a a 2 9 (エリトロ／トレオ異性体混合物 62 : 38) :
NMR (トレオ) : 4.01 (d, 1H) ; NMR (エリトロ) : 4.31 (m, 1H)
; MS : 396 [M+1] + ; HPLC (rt) : 1.63分
実施例番号 I c a 3 (エリトロ／トレオ異性体混合物 62 : 38) :
NMR (トレオ) : 3.98 (dd, 1H) ; NMR (エリトロ) : 4.29 (d, 1H)
; MS : 444 [M+1] + ; HPLC (rt) : 1.82分
実施例番号 I f a 3 (エリトロ／トレオ異性体混合物 62 : 38) :
NMR (トレオ) : 3.99 (dd, 1H) ; NMR (エリトロ) : 4.29 (d, 1H)
; MS : 458 [M+1] + ; HPLC (rt) : 1.88分
実施例番号 I e a 3 (エリトロ／トレオ異性体混合物 64 : 36) :
NMR (トレオ) : 4.00 (dd, 1H) ; NMR (エリトロ) : 4.31 (dd, 1H)
; MS : 458 [M+1] + ; HPLC (rt) : 1.91分
実施例番号 I a a 3 (エリトロ／トレオ異性体混合物 64 : 36) :
NMR (トレオ) : 4.00 (d, 1H) ; NMR (エリトロ) : 4.29 (d, 1H)
; MS : 430 [M+1] + ; HPLC (rt) : 1.73分
実施例番号 I c a 2 5 (エリトロ／トレオ異性体混合物 63 : 37) :
NMR (トレオ) : 4.08 (m, 1H) ; NMR (エリトロ) : 4.34 (d, 1H)
; MS : 446 [M+1] + ; HPLC (rt) : 1.73分
実施例番号 I f a 2 5 (エリトロ／トレオ異性体混合物 64 : 36) :
NMR (トレオ) : 4.08 (m, 1H), 2.35 (s, 2H) ; NMR (エリトロ)
: 4.34 (d, 1H), 2.51 (s, 2H) ; MS : 460 [M+1] + ; HPLC
(rt) : 1.78分
実施例番号 I e a 2 5 (エリトロ／トレオ異性体混合物 59 : 41) :
NMR (トレオ) : 4.08 (m, 1H), 2.51 (m, 2H) ; NMR (エリトロ)
: 4.34 (d, 1H), 2.68 (m, 2H) ; MS : 460 [M+1] + ; HPLC
(rt) : 1.82分
実施例番号 I c a 1 7 (エリトロ／トレオ異性体混合物 54 : 46) :
NMR (トレオ) : 4.09 (m, 1H), 2.55 (m, 2H) ; NMR (エリトロ)
: 4.36 (d, 1H), 2.65 (m, 2H) ; MS : 428 [M+1] + ; HPLC
(rt) : 1.72分
実施例番号 I f a 1 7 (エリトロ／トレオ異性体混合物 57 : 43) :
NMR (トレオ) : 2.48 (s, 2H) ; NMR (エリトロ) : 4.36 (d, 1H)
, 2.52 (s, 2H) ; MS : 442 [M+1] + ; HPLC (rt) : 1.78分
実施例番号 I e a 1 7 (エリトロ／トレオ異性体混合物 56 : 44) :
NMR (トレオ) : 2.51 (s, 2H) ; NMR (エリトロ) : 2.66 (s, 2H)
; MS : 443 [M+2] + ; HPLC (rt) : 1.82分
実施例番号 I a a 1 7 (エリトロ／トレオ異性体混合物 51 : 49) :
NMR (トレオ) : 2.48 (m, 2H) ; NMR (エリトロ) : 4.36 (d, 1H)
, 2.63 (m, 2H) ; MS : 414 [M+1] + ; HPLC (rt) : 1.63分
実施例番号 I c a 2 3 (エリトロ／トレオ異性体混合物 54 : 46) :
NMR (トレオ) : 4.12 (d, 1H), 2.53 (m, 2H) ; NMR (エリトロ)
: 4.32 (d, 1H), 2.67 (m, 2H) ; MS : 428 [M+1] + ; HPLC
(rt) : 1.70分

10

20

30

40

50

実施例番号 I f a 2 3 (エリトロ／トレオ異性体混合物 5 6 : 4 4) :

NMR (トレオ) : 4. 1 3 (d, 1H), 2. 4 9 (s, 2H) ; NMR (エリトロ) : 4. 3 3 (d, 1H), 2. 5 1 (s, 2H) ; MS : 4 4 2 [M+1] + ; HPLC (rt) : 1. 7 6 分

実施例番号 I e a 2 3 (エリトロ／トレオ異性体混合物 6 0 : 4 0) :

NMR (トレオ) : 2. 5 1 (m, 2H) ; NMR (エリトロ) : 2. 6 8 (m, 2H) ; MS : 4 4 2 [M+1] + ; HPLC (rt) : 1. 7 9 分

実施例番号 I c a 2 (エリトロ／トレオ異性体混合物 6 5 : 3 5) :

NMR (トレオ) : 4. 0 3 (dd, 1H) ; NMR (エリトロ) : 4. 3 0 (d, 1H) ; MS : 4 1 0 [M+1] + ; HPLC (rt) : 1. 7 0 分

10

実施例番号 I e a 2 (エリトロ／トレオ異性体混合物 6 0 : 4 0) :

NMR (トレオ) : 4. 0 2 (d, 1H), 2. 4 8 (s, 2H) ; NMR (エリトロ) : 4. 3 1 (d, 1H), 2. 5 2 (s, 2H) ; MS : 4 2 4 [M+1] + ; HPLC (rt) : 1. 7 6 分

実施例番号 I e a 9 (エリトロ／トレオ異性体混合物 6 2 : 3 8) :

NMR (トレオ) : 4. 0 3 (dd, 1H), 2. 5 1 (m, 2H) ; NMR (エリトロ) : 4. 3 1 (dd, 1H), 2. 6 7 (m, 2H) ; MS : 4 4 0 [M+1] + ; HPLC (rt) : 1. 8 7 分

実施例番号 I f a 9 (エリトロ／トレオ異性体混合物 6 2 : 3 8) :

NMR (トレオ) : 4. 0 3 (d, 1H), 2. 4 9 (s, 2H) ; NMR (エリトロ) : 4. 2 9 (d, 1H), 2. 5 2 (s, 2H) ; MS : 4 4 0 [M+1] + ; HPLC (rt) : 1. 8 3 分

20

実施例番号 I a a 9 (エリトロ／トレオ異性体混合物 6 0 : 4 0) :

NMR (トレオ) : 4. 0 3 (d, 1H), 2. 4 8 (m, 2H) ; NMR (エリトロ) : 4. 2 9 (d, 1H), 2. 6 4 (m, 2H) ; MS : 4 1 2 [M+1] + ; HPLC (rt) : 1. 6 8 分

実施例番号 I c a 2 0 (エリトロ／トレオ異性体混合物 6 4 : 3 6) :

NMR (トレオ) : 4. 0 2 (dd, 1H), 2. 5 4 (m, 2H) ; NMR (エリトロ) : 4. 2 9 (d, 1H), 2. 6 6 (m, 2H) ; MS : 4 1 0 [M+1] + ; HPLC (rt) : 1. 7 1 分

30

実施例番号 I f a 2 0 (エリトロ／トレオ異性体混合物 6 4 : 3 6) :

NMR (トレオ) : 4. 0 2 (d, 1H), 2. 4 8 (s, 2H) ; NMR (エリトロ) : 4. 3 0 (d, 1H), 2. 5 2 (s, 2H) ; MS : 4 2 4 [M+1] + ; HPLC (rt) : 1. 7 6 分

実施例番号 I e a 2 0 (エリトロ／トレオ異性体混合物 5 9 : 4 1) :

NMR (トレオ) : 4. 0 2 (dd, 1H), 2. 5 1 (m, 2H) ; NMR (エリトロ) : 4. 3 2 (dd, 1H), 2. 6 8 (m, 2H) ; MS : 4 2 4 [M+1] + ; HPLC (rt) : 1. 8 1 分

実施例番号 I c a 1 (エリトロ／トレオ異性体混合物 6 3 : 3 7) :

NMR (トレオ) : 4. 0 2 (dd, 1H) ; NMR (エリトロ) : 4. 2 9 (d, 1H) ; MS : 4 2 6 [M+1] + ; HPLC (rt) : 1. 7 9 分

40

実施例番号 I f a (エリトロ／トレオ異性体混合物 6 2 : 3 8) :

NMR (トレオ) : 4. 0 1 (d, 1H), 2. 4 8 (s, 2H) ; NMR (エリトロ) : 4. 2 9 (d, 1H), 2. 5 2 (s, 2H) ; MS : 4 4 0 [M+1] + ; HPLC (rt) : 1. 8 5 分

実施例番号 I e a 1 (エリトロ／トレオ異性体混合物 6 8 : 3 2) :

NMR (トレオ) : 4. 0 2 (dd, 1H), 2. 5 0 (m, 2H) ; NMR (エリトロ) : 4. 3 2 (dd, 1H), 2. 6 7 (m, 2H) ; MS : 4 4 0 [M+1] + ; HPLC (rt) : 1. 8 9 分

実施例番号 I g a 9 5 (エリトロ／トレオ異性体混合物 6 8 : 3 2) :

50

NMR (トレオ) : 4. 02 (dd, 1H), 2. 50 (m, 2H) ; NMR (エリトロ) : 4. 32 (dd, 1H), 2. 67 (m, 2H) ; MS : 502 [M+1] + ; HPLC (rt) : 1. 83分

実施例番号 I v a 8 3 (エリトロ／トレオ異性体混合物 51 : 49) :

NMR (トレオ) : 4. 21 (d, 1H), 3. 53 (s, 3H), 2. 31 (s, 3H) ; NMR (エリトロ) : 3. 53 (s, 3H), 2. 45 (s, 3H) ; MS : 414 [M+1] + ; HPLC (rt) : 1. 20分

実施例番号 I v a 2 4 (エリトロ／トレオ異性体混合物 64 : 36) :

NMR (トレオ) : 3. 58 (s, 3H), 2. 45 (s, 3H) ; NMR (エリトロ) : 4. 55 (d, 1H), 3. 54 (s, 3H), 2. 31 (s, 3H) ; MS : 432 [M+1] + ; HPLC (rt) : 1. 27分

10

実施例番号 I v a 3 (エリトロ／トレオ異性体混合物 72 : 28) :

NMR (トレオ) : 4. 17 (d, 1H), 3. 54 (s, 3H), 2. 39 (s, 3H) ; NMR (エリトロ) : 4. 51 (d, 1H), 3. 59 (s, 3H), 2. 44 (s, 3H) ; MS : 430 [M+1] + ; HPLC (rt) : 1. 36分

実施例番号 I v a 1 7 (エリトロ／トレオ異性体混合物 72 : 28) :

NMR (トレオ) : 4. 24 (d, 1H), 3. 51 (s, 3H), 2. 42 (s, 3H) ; NMR (エリトロ) : 4. 55 (d, 1H), 3. 55 (s, 3H), 2. 41 (s, 3H) ; MS : 414 [M+1] + ; HPLC (rt) : 1. 25分

実施例番号 I v a 2 (エリトロ／トレオ異性体混合物 71 : 29) :

20

NMR (トレオ) : 4. 19 (d, 1H), 3. 54 (s, 3H), 2. 40 (s, 3H) ; NMR (エリトロ) : 4. 51 (d, 1H), 3. 59 (s, 3H), 2. 44 (s, 3H) ; MS : 397 [M+2] + ; HPLC (rt) : 1. 22分

実施例番号 I v a 9 (エリトロ／トレオ異性体混合物 71 : 29) :

NMR (トレオ) : 4. 19 (d, 1H), 3. 54 (s, 3H), 2. 40 (s, 3H) ; NMR (エリトロ) : 4. 51 (d, 1H), 3. 58 (s, 3H), 2. 44 (s, 3H) ; MS : 412 [M+1] + ; HPLC (rt) : 1. 26分

実施例番号 I v a 2 0 (エリトロ／トレオ異性体混合物 71 : 29) :

NMR (トレオ) : 4. 19 (d, 1H), 3. 54 (s, 3H), 2. 39 (s, 3H) ; NMR (エリトロ) : 4. 50 (d, 1H), 3. 59 (s, 3H), 2. 44 (s, 3H) ; MS : 397 [M+2] + ; HPLC (rt) : 1. 22分

30

実施例番号 I v a 1 (エリトロ／トレオ異性体混合物 71 : 29) :

NMR (トレオ) : 4. 18 (d, 1H), 3. 53 (s, 3H), 2. 38 (s, 3H) ; NMR (エリトロ) : 4. 51 (d, 1H), 3. 58 (s, 3H), 2. 43 (s, 3H) ; MS : 412 [M+1] + ; HPLC (rt) : 1. 32分

実施例番号 I B 1 0 g a 6 (エリトロ／トレオ異性体混合物 62 : 38) :

NMR (トレオ) : 8. 48 (s, 1H), 7. 27 (m, 1H), 7. 12 (m, 1H), 6. 96 (m, 5H), 4. 13 (d, 1H), 3. 82 (m, 1H), 3. 39 (dd, 1H), 3. 23 (dd, 1H), 2. 65 (s, 3H) ; MS : 385 [M+1] + ; HPLC (rt) : 1. 57分 ; NMR (エリトロ) : 8. 54 (s, 1H), 7. 22 (m, 1H), 7. 09 (m, 1H), 6. 98 (m, 2H), 6. 82 (m, 3H), 4. 51 (d, 1H), 3. 71 (m, 1H), 3. 50 (dd, 1H), 3. 27 (dd, 1H), 2. 75 (s, 3H) ; MS : 385 [M+1] + ; HPLC (rt) : 1. 57分

40

実施例番号 エリトロ-2-I B 1 0 g a 6 (光学的に活性なエリトロ-2異性体)

NMR (エリトロ) : 8. 54 (s, 1H), 7. 22 (m, 1H), 7. 09 (m, 1H), 6. 98 (m, 2H), 6. 82 (m, 3H), 4. 51 (d, 1H), 3. 71 (m, 1H), 3. 50 (dd, 1H), 3. 27 (dd, 1H), 2. 75 (s, 3H) ; MS : 385 [M+1] + ; HPLC (rt) : 1. 57分

実施例番号 エリトロ-1-I B 1 0 g a 6 (光学的に活性なエリトロ-1異性体)

50

NMR (エリトロ) : 8.54 (s, 1H), 7.22 (m, 1H), 7.09 (m, 1H), 6.98 (m, 2H), 6.82 (m, 3H), 4.51 (d, 1H), 3.71 (m, 1H), 3.50 (dd, 1H), 3.27 (dd, 1H), 2.75 (s, 3H); MS: 385 [M+1]⁺; HPLC (rt): 1.57分

実施例番号トレオ-2-IB10ga6 (光学的に活性なトレオ-2異性体):

NMR (トレオ) : 8.48 (s, 1H), 7.27 (m, 1H), 7.12 (m, 1H), 6.96 (m, 5H), 4.13 (d, 1H), 3.82 (m, 1H), 3.39 (dd, 1H), 3.23 (dd, 1H), 2.65 (s, 3H); MS: 385 [M+1]⁺; HPLC (rt): 1.57分

実施例番号IA12aa194 (エリトロ/トレオ異性体混合物 80:20):

NMR (トレオ) : 4.24 (d, 1H), 2.04 (s, 3H); NMR (エリトロ) : 4.16 (d, 1H), 2.02 (s, 3H); MS: 452 [M-42]⁺; HPLC (rt): 1.57分

実施例番号エリトロ-IA12aa49:

NMR (エリトロ) : 4.33 (d, 1H), 3.87 (s, 3H), 3.76 (s, 3H), 2.12 (s, 3H); MS: 434 [M-42]⁺; HPLC (rt): 1.57分

実施例番号トレオ-1-IA12aa49:

NMR (トレオ1) : 3.95 (d, 1H), 3.75 (s, 3H), 3.96 (s, 3H), 1.91 (s, 3H); MS: 434 [M-42]⁺; HPLC (rt): 1.57分

実施例番号トレオ-2-IB12aa49:

NMR (トレオ2) : 3.95 (d, 1H), 3.75 (s, 3H), 3.96 (s, 3H), 1.91 (s, 3H); MS: 434 [M-42]⁺; HPLC (rt): 1.57分。

【0650】

(B) 製剤実施例

(a) 粉剤は、10重量部の式(I)で表される化合物と90重量部の不活性物質としてのタルクを混合させ、及び、その混合物をハンマーミルの中で粉碎することによって得られる。

(b) 水中で容易に分散可能な水和剤は、25重量部の式(I)で表される化合物と64重量部の不活性物質としてのカオリン含有石英と10重量部のリグノスルホン酸カリウムと1重量部の湿潤剤及び分散剤としてのナトリウムオレオイルメチルタウレートを混合させ、並びに、その混合物をピンディスクミル (pinned-disk mill) の中で摩砕することによって得られる。

(c) 水中で容易に分散可能な分散製剤 (dispersion concentrate) は、20重量部の式(I)で表される化合物を6重量部のアルキルフェノールポリグリコールエーテル ((登録商標) Triton X 207) 及び3重量部のイソトリデカノールポリグリコールエーテル (8EO) 及び71重量部のパラフィン系鉱油 (例えば、約255℃から277℃を超える沸点範囲) と混合させ、並びに、その混合物をボールミルの中で5ミクロン未満の粉末度になるまで摩砕することによって得られる。

(d) 乳剤は、15重量部の式(I)で表される化合物と75重量部の溶媒としてのシクロヘキサノンと10重量部の乳化剤としてのオキシエチル化ノニルフェノールから得られる。

(e) 顆粒水和剤は、
75重量部の式(I)で表される化合物、
10重量部のリグノスルホン酸カルシウム、
5重量部のラウリル硫酸ナトリウム、
3重量部のポリビニルアルコール、及び、
7重量部のカオリン

10

20

30

40

50

を混合させ、その混合物をピンディスクミルの中で摩砕し、並びに、得られた粉末を流動床の中で造粒液としての水を散布施用することにより造粒することによって得られる。

(f) 顆粒水和剤は、さらにまた、コロイドミル上で、

25重量部の式(I)で表される化合物、

5重量部の2, 2'-ジナフチルメタン-6, 6'-ジスルホン酸ナトリウム、

2重量部のナトリウムオレオイルメチルタウリネート、

1重量部のポリビニルアルコール、

17重量部の炭酸カルシウム、及び、

50重量部の水

を均質化及び前粉碎し、次いで、その混合物をビーズミルの中で摩砕し、並びに、得られた懸濁液を噴霧塔の中で単一物質ノズル(single substance nozzle)を用いて噴霧及び乾燥することによっても得られる。

10

【0651】

(C) 生物学的実施例

1. 発生前除草作用

木質繊維製ポット内の砂壤土に单子葉及び双子葉の雑草植物及び作物植物の種子を配置し、土壌で被覆した。次いで、その被覆した土壌の表面に、水和剤(WP)の形態に製剤された本発明による式(I)で表される化合物を、0.2%の湿潤剤が添加された600 L/ha(変換)の散布水量の水性懸濁液又は水性エマルジョンとして施用した。

【0652】

20

処理後、ポットを温室内に置き、その被験植物にとって良好な成育条件下に維持した。3週間経過した後、未処理対照と比較して、該調製物の効果を百分率として視覚的に評価した。例えば、100%の活性=「植物が枯死した」、50%の除草活性又はダメージ=「植物が50%低減した」又は「植物の質量が50%低減した」、0%の活性=「対照植物と同様」。

【0653】

本発明による化合物(I)、例えば、上記表1~表42fの化合物番号IA12a57、IA12aa1、IA12aa193、IA12aa23、IA12aa48、IA12aa50、IA12aa78、IA12ab53、Iaa1、Iaa10、Iaa20、Iaa23、Iaa32、Iaa53、Iaa6、Iaa83、Iaa95、IB8aa1、IB8aa10、IB8aa43、IB8aa6、IB9aa1、IB9aa10、IB9aa20、IB9aa23、IB9aa25、IB9aa43、IB9aa49、IB9aa6、IB9ba6、IBXaa10、IBXaa20、IBXaa43、IBXaa6、Ica6、Ica95、Iea6、Iea95、Ifa6、Ifa95、Iga95、Ioa6、Ioa95、Ita6、Ita95、Iva259、Iva6、Iva6、エリトロ-1-IB10ga6、エリトロ-2-IB10ga6、エリトロ-IA12aa49、IA12aa194、Iaa17、Iaa29、Iaa3、Ica83、Iaa9、IB10ga6、トレオ-2-IB8aa43、Ica1、Ica17、Ica2、Ica20、Ica23、Ica25、Ica29、Ica3、Iea1、Iea17、Iea2、Iea20、Iea23、Iea25、Iea29、Iea3、Iea83、Iea9、Ifa1、Ifa17、Ifa20、Ifa23、Ifa25、Ifa29、Ifa3、Ifa83、Ifa9、Iga95、Ioa1、Ioa17、Ioa2、Ioa20、Ioa24、Ioa29、Ioa3、Ioa83、Ioa9、Iva1、Iva17、Iva2、Iva20、Iva24、Iva3、Iva83、Iva9、トレオ-1-IA12aa49、トレオ-2-IB10ga6及びトレオ-2-IB12aa49は、エリトロ/トレオ混合物として、又は、トレオラセミ化合物若しくはトレオ-2エナンチオマーとして、発生前方法で施用された場合、1ヘクタール当たり320g以下の活性物質の施与量で、複数種の有害植物に対して優れた除草効力(70%~100%の活性)を示す。

30

40

【0654】

50

例えば、化合物番号 I a a 2 0、I a a 2 3、I a a 5 3、I a a 9 5、I o a 9 5、I A 1 2 a a 7 8、I B 9 a a 6、I B 9 b a 6、I B 9 a a 1 0、I B 9 a a 2 3、I B 9 a a 2 5、I B 9 a a 4 3、トレオー２－I B 8 a a 4 3、トレオー１－I A 1 2 a a 4 9、I A 1 2 a a 1 9 4、I a a 1 7、I f a 1、I v a 2 0 及び I c a 2 0 は、1 ヘクタール当たり 0. 3 2 k g の活性物質の施用量で発生前方法によって施用された場合、サンシキスミレ (*Viola tricolor*) などの有害な植物に対して極めて優れた活性 (90-100%) を示す。

【0655】

例えば、化合物番号 I A 1 2 a a 7 8、I B 9 a a 6、I B 9 a a 2 5、I B 9 a a 4 3、I B 9 b a 6、トレオー２－I B 8 a a 4 3、I V a 9 及び I A 1 2 a a 1 9 4 も、1 ヘクタール当たり 0. 3 2 k g の活性物質の施用量で発生前方法によって施用された場合、ハコベ (*Stellaria media*) などの有害な植物に対して極めて優れた活性 (90-100%) を示す。

10

【0656】

例えば、化合物番号 I a a 9 5、I A 1 2 a a 7 8、I B 9 a a 6、I B 9 a a 1 0、I B 9 a a 2 5、トレオー２－I B 8 a a 4 3、I B 9 a a 4 3 及び I B 9 b a 6 も、1 ヘクタール当たり 0. 3 2 k g の活性物質の施用量で発生前方法によって施用された場合、ハコベ (*Stellaria media*) などの有害な植物に対して極めて優れた活性 (80-100%) を示す。

【0657】

20

例えば、化合物番号 I a a 2 3、I a a 5 3、I B 9 a a 1、I B 9 a a 1 0、I B 9 a a 2 5、I B 9 a a 2 3、I B 9 a a 4 3、I o a 9 5、I o a 2、I e a 1、I o a 9、トレオー２－I B 8 a a 4 3、トレオー１－I A 1 2 a a 4 9 及び I A 1 2 a a 1 9 4 も、1 ヘクタール当たり 0. 3 2 k g の活性物質の施用量で発生前方法によって施用された場合、ソバカズラ (*Polygonum convolvulus*) などの有害な植物に対して極めて優れた活性 (80-100%) を示す。

【0658】

例えば、化合物番号 I a a 9 5、I B 9 a a 6、I B 9 a a 1 0、I B 9 a a 2 5、I B 9 a a 1、I B 9 a a 4 3、I e a 2 9、トレオー２－I B 8 a a 4 3、トレオー１－I A 1 2 a a 4 9 及び I A 1 2 a a 1 9 4 も、1 ヘクタール当たり 0. 3 2 k g の活性物質の施用量で発生前方法によって施用された場合、アオゲイトウ (*Amarantus retroflexus*) などの有害な植物に対して極めて優れた活性 (80-100%) を示す。

30

【0659】

例えば、化合物番号 I a a 2 3、I a a 9 5、I B 9 a a 2 3、I B 9 a a 2 5、I B 9 a a 6、I B 9 b a 6 及び I B 9 a a 4 3 も、1 ヘクタール当たり 0. 3 2 k g の活性物質の施用量で発生前方法によって施用された場合、エノコログサ (*Setaria viridis*) などの有害な植物に対して極めて優れた活性 (80-100%) を示す。

【0660】

例えば、化合物番号 I a a 9 5、I B 9 a a 2 5、I B 9 a a 1、I B 9 a a 4 3、I c a 2、トレオー２－I B 8 a a 4 3、トレオー１－I A 1 2 a a 4 9 及び I A 1 2 a a 1 9 4 も、1 ヘクタール当たり 0. 3 2 k g の活性物質の施用量で発生前方法によって施用された場合、ノスズメノテッポウ (*Alopecurus myosuroides*) などの有害な植物に対して極めて優れた活性 (80-100%) を示す。

40

【0661】

例えば、化合物番号 I o a 8 3 及びトレオー１－I A 1 2 a a 4 9 も、1 ヘクタール当たり 0. 3 2 k g の活性物質の施用量で発生前方法によって施用された場合、イチビ (*Abutilon theophrasti*) などの有害な植物に対して極めて優れた活性 (80-100%) を示す。

【0662】

50

例えば、化合物番号 I c a 2、I e a 2 3、I a a 1 7、I A 1 2 a a 1 9 4 及びトレオー 1-I A 1 2 a a 4 9 も、1 ヘクタール当たり 0. 3 2 k g の活性物質の施用量で発生前方法によって施用された場合、オオイヌノフグリ (*Veronica persica*) などの有害な植物に対して極めて優れた活性 (8 0-1 0 0 %) を示す。

【0 6 6 3】

例えば、化合物番号 I c a 1 7、I v a 2 5 及びトレオー 1-I A 1 2 a a 4 9 も、1 ヘクタール当たり 0. 3 2 k g の活性物質の施用量で発生前方法によって施用された場合、オオイヌノフグリ (*Veronica persica*) などの有害な植物に対して極めて優れた活性 (8 0-1 0 0 %) を示す。

【0 6 6 4】

2. 発生後除草作用

木質繊維製ポット内の砂壤土に単子葉及び双子葉の雑草及び作物植物の種子を配置し、土壌で被覆し、温室内で良好な成育条件下で栽培した。播種後 2~3 週間経過した後、被験植物を 1 葉期で処理した。該処理においては、水和剤 (W P) の形態に製剤された本発明による式 (I) で表される化合物を、0. 2 % の湿潤剤が添加された 6 0 0 L / h a (変換) の散布水量の水性懸濁液又は水性エマルジョンとして当該植物の緑色の部分に噴霧することによって施用した。被験植物を温室内の最適な成育条件下に約 3 週間維持した後、未処理対照と比較して、該調製物の活性を百分率 (%) として視覚的に評価した。例えば、1 0 0 % の活性 = 「植物が枯死した」、5 0 % の除草活性又はダメージ = 「植物が 5 0 % 低減した」又は「植物の質量が 5 0 % 低減した」、0 % の活性 = 「対照植物と同様」。

【0 6 6 5】

結果によって示されているように、本発明による式 (I) で表される化合物、例えば、上記表 1~表 4 2 f の化合物番号 I A 1 2 a 5 7、I A 1 2 a a 1、I A 1 2 a a 1 9 3、I A 1 2 a a 2 3、I A 1 2 a a 4 8、I A 1 2 a a 5 0、I A 1 2 a a 7 8、I A 1 2 a b 5 3、I a a 1、I a a 1 0、I a a 2 0、I a a 2 3、I a a 3 2、I a a 5 3、I a a 6、I a a 8 3、I a a 9 5、I B 8 a a 1、I B 8 a a 1 0、I B 8 a a 4 3、I B 8 a a 6、I B 9 a a 1、I B 9 a a 1 0、I B 9 a a 2 0、I B 9 a a 2 3、I B 9 a a 2 5、I B 9 a a 4 3、I B 9 a a 4 9、I B 9 a a 6、I B 9 b a 6、I B X a a 1 0、I B X a a 2 0、I B X a a 4 3、I B X a a 6、I c a 6、I c a 9 5、I e a 6、I e a 9 5、I f a 6、I f a 9 5、I g a 9 5、I o a 6、I o a 9 5、I t a 6、I t a 9 5、I v a 2 5 9、I v a 6、I v a 6、エリトロ-1-I B 1 0 g a 6、エリトロ-2-I B 1 0 g a 6、エリトロ-I A 1 2 a a 4 9、I A 1 2 a a 1 9 4、I a a 1 7、I a a 2 9、I a a 3、I c a 8 3、I a a 9、I B 1 0 g a 6、トレオー 2-I B 8 a a 4 3、I c a 1、I c a 1 7、I c a 2、I c a 2 0、I c a 2 3、I c a 2 5、I c a 2 9、I c a 3、I e a 1、I e a 1 7、I e a 2、I e a 2 0、I e a 2 3、I e a 2 5、I e a 2 9、I e a 3、I e a 8 3、I e a 9、I f a 1、I f a 1 7、I f a 2 0、I f a 2 3、I f a 2 5、I f a 2 9、I f a 3、I f a 8 3、I f a 9、I g a 9 5、I o a 1、I o a 1 7、I o a 2、I o a 2 0、I o a 2 4、I o a 2 9、I o a 3、I o a 8 3、I o a 9、I v a 1、I v a 1 7、I v a 2、I v a 2 0、I v a 2 4、I v a 3、I v a 8 3、I v a 9、トレオー 1-I A 1 2 a a 4 9、トレオー 2-I B 1 0 g a 6 及びトレオー 2-I B 1 2 a a 4 9 は、エリトロ/トレオ混合物として、又は、トレオラセミ化合物若しくはトレオー 2 エナンチオマーとして、発生後方法で施用された場合、1 ヘクタール当たり 3 2 0 g 以下の活性物質の施与量で、複数種の有害植物に対して優れた除草効力 (7 0 % ~ 1 0 0 % の活性) を示す。

【0 6 6 6】

ここで、例えば、化合物番号 I B 9 a a 6、I a a 1、I a a 2 0、I B 9 b a 6、I B 9 a a 1 0、I B 9 a a 1、I B 9 a a 2 3、I B 9 a a 2 5、I B 9 a a 4 3、I a a 1 0、I a a 2 3、I a a 9 5、I o a 9 5、I e a 9、I f a 9、I a a 2 9、トレオー 2-I B 8 a a 4 3 及び I A 1 2 a a 1 9 4 は、1 ヘクタール当たり 0. 3 2 k g の

10

20

30

40

50

活性物質の施用量で発生後方法によって施用された場合、ソバカズラ (*Polygonum convolvulus galii*) などの有害な植物に対して極めて優れた活性 (90-100%) を示す。

【0667】

ここで、例えば、化合物番号 IB9aa6、Iaa1、Iaa20、Iaa23、IB9aa1、IB9ba6、IB9aa10、IB9aa23、IB9aa25、IB9aa43及びIaa10も、1ヘクタール当たり0.32kgの活性物質の施用量で発生後方法によって施用された場合、ヒメハイクワガタ (*Veronica repens*) などの有害な植物に対して極めて優れた活性 (80-100%) を示す。

【0668】

ここで、例えば、化合物番号 Iaa95、Iaa23、IB9aa1、IB9aa10、IB9aa23、IB9aa43、IB9aa25、IB9aa6、Iaa10、Iaa17、Ica83、トレオー2-IB8aa43及びIA12aa194も、1ヘクタール当たり0.32kgの活性物質の施用量で発生後方法によって施用された場合、サンシキスミレ (*Viola tricolor*) などの有害な植物に対して極めて優れた活性 (80-100%) を示す。

【0669】

ここで、例えば、化合物番号 Iaa23、IB9aa1、Iaa1、IB9aa23、IB9aa43及びIB9aa25も、1ヘクタール当たり0.32kgの活性物質の施用量で発生後方法によって施用された場合、イチビ (*Abutilon theophrasti*) などの有害な植物に対して極めて優れた活性 (80-100%) を示す。

【0670】

ここで、例えば、化合物番号 IB9ba6、IB9aa43、IB9aa6、IB9aa23、IB9aa25、Ifa20、Ica20、Iva2、Ioa2、Iea2、Ica2、トレオー2-IB8aa43及びIva17も、1ヘクタール当たり0.32kgの活性物質の施用量で発生後方法によって施用された場合、エノコログサ (*Setaria viridis*) などの有害な植物に対して極めて優れた活性 (80-100%) を示す。

【0671】

ここで、例えば、化合物番号 IB9aa43、IB9aa1、IB9ba6、IB9aa23、IB9aa6、トレオー2-IB8aa43及びIB9aa25も、1ヘクタール当たり0.32kgの活性物質の施用量で発生後方法によって施用された場合、ネズミムギ (*Lolium multiflorum*) などの有害な植物に対して極めて優れた活性 (80-100%) を示す。

【0672】

ここで、例えば、化合物番号 IB9aa1、IB9ba6、IB9aa43、IB9aa25、IB9aa6、Iaa95、Iaa23、Ioa95、IB9aa23、Iva1、Iea1、Ica1、Iea20、Ica20、Iva9、Ioa9、Ioa2、Iea2、Iea23、Ica23、Iva17、Ioa17、Ioa83、Ica83、トレオー2-IB8aa43、トレオー1-IA12aa49及びIA12aa194も、1ヘクタール当たり0.32kgの活性物質の施用量で発生後方法によって施用された場合、イヌビエ (*Echinochloa crus-galli*) などの有害な植物に対して極めて優れた活性 (80-100%) を示す。

【0673】

ここで、例えば、化合物番号 IB9aa1、IB9ba6、IB9aa43、IB9aa25、IB9aa6、IB9aa10、Iaa95、Iaa23、Ioa95、トレオー2-IB8aa43及びIB9aa23も、1ヘクタール当たり0.32kgの活性物質の施用量で発生後方法によって施用された場合、カラスムギ (*Avena fatua*) などの有害な植物に対して極めて優れた活性 (80-100%) を示す。

【0674】

10

20

30

40

50

ここで、例えば、化合物番号 I B 9 a a 1、I B 9 b a 6、I B 9 a a 4 3、I B 9 a a 2 5、I o a 9 5、トレオー 2－I B 8 a a 4 3 及び I B 9 a a 2 3 も、1 ヘクタール当たり 0. 3 2 k g の活性物質の施用量で発生後方法によって施用された場合、ノスズメノテッポウ (*A l o p e c u r u s m y o s u r o i d e s*) などの有害な植物に対して極めて優れた活性 (8 0－1 0 0 %) を示す。

【0 6 7 5】

ここで、例えば、化合物番号 I a a 9、I e a 9、I f a 9、I v a 2、I o a 2、I e a 2、I a a 1 7、I v a 2 4、I o a 2 4、I a a 2 9、I c a 2 9、I A 1 2 a a 1 9 4 及び I B 1 0 g a 6 も、1 ヘクタール当たり 0. 3 2 k g の活性物質の施用量で発生後方法によって施用された場合、オオイヌノフグリ (*V e r o n i c a p e r s i c*

10

【0 6 7 6】

3. 除草作用及び作物植物適合性

3. 1 温室内でのさらなる試験において、ポット内の砂壤土に作物植物の種子を配置し、土壌で被覆し、良好な成育条件下で栽培し、そして、発生前方法によって処理し、セクション 1 における有害植物と同様に評価する。結果は、本発明による化合物が、発生前方法によって施用された場合、活性化合物の高い薬量においてさえ、ダイズ、ワタ、ナタネ、テンサイ及びジャガイモなどの双子葉植物の作物に対して全く損傷を与えないということを示している。さらに、一部の物質は、オオムギ、コムギ、ライムギ、モロコシ／アワ、トウモロコシ又はイネなどのイネ科作物に対しても損傷を与えない。

20

フロントページの続き

(51)Int.Cl.

F I

A 0 1 N 43/56 (2006.01)	A 0 1 N 43/56 C
A 0 1 N 43/80 (2006.01)	A 0 1 N 43/80 1 0 1
C 0 7 C 255/41 (2006.01)	C 0 7 C 255/41
C 0 7 D 493/08 (2006.01)	C 0 7 D 493/08 B
C 0 7 D 231/16 (2006.01)	C 0 7 D 231/16
C 0 7 D 231/18 (2006.01)	C 0 7 D 231/18
C 0 7 D 231/20 (2006.01)	C 0 7 D 231/20
C 0 7 D 261/18 (2006.01)	C 0 7 D 261/18
C 0 7 D 261/10 (2006.01)	C 0 7 D 261/10
C 0 7 D 261/08 (2006.01)	C 0 7 D 261/08
C 0 7 D 319/06 (2006.01)	C 0 7 D 319/06

(74)代理人 100124855

弁理士 坪倉 道明

(74)代理人 100129713

弁理士 重森 一輝

(74)代理人 100137213

弁理士 安藤 健司

(74)代理人 230105223

弁護士 城山 康文

(72)発明者 モスリン, マルク

ドイツ国、6 5 9 3 3・フランクフルト・アム・マイン、バルトシユールシユトラーセ・1 0 3

(72)発明者 ヤコビ, ハラルド

ドイツ国、6 0 5 9 8・フランクフルト、グローセル・ハーゼンブフアド・8 0

(72)発明者 アンゲルマン, アルフレッド

ドイツ国、6 5 8 3 0・クリフテル・フンボルトシユトラーセ・5

(72)発明者 ガッツヴァイラー, エルマー

ドイツ国、6 1 2 3 1・バート・ナウハイム、アム・ナウハイマー・バツハ・2 2

(72)発明者 ホイザー・ハーン, イゾルデ

ドイツ国、5 1 3 7 5・レーバークーゼン、ドューンフエルダー・シユトラーセ・2 2

(72)発明者 ハインマン, イネス

ドイツ国、6 5 7 1 9・ホフハイム、ユビールシユトラーセ・1 3

(72)発明者 ロジンガー, クリストファー・ヒュー

ドイツ国、6 5 7 1 9・ホフハイム、アム・ホツホフエルド・3 3

(72)発明者 レーア, シュテファン

フランス国、6 9 0 0 6・リヨン、リユー・ビュゲ・9

(72)発明者 シュナツテラー, シュテファン

ドイツ国、6 5 7 9 5・ハタースハイム、シラーリング・1 0

審査官 伊藤 幸司

(56)参考文献 特開平0 5－0 5 8 9 7 9 (J P, A)

国際公開第2 0 1 1／0 7 3 1 4 3 (W O, A 1)

特開2 0 0 6－2 7 3 7 9 5 (J P, A)

特開2 0 0 7－3 0 2 5 9 9 (J P, A)

(58)調査した分野(Int.Cl., D B名)

C07C

C07D

A01N

CAPLUS/REGISTRY (STN)