

(19) 日本国特許庁 (JP)

(12) 特 許 公 報 (B2)

(11) 特許番号

特許第6546202号
(P6546202)

(45) 発行日 令和1年7月17日 (2019.7.17)

(24) 登録日 令和1年6月28日 (2019.6.28)

(51) Int. Cl.

F I

C O 7 C 233/78	(2006.01)	C O 7 C 233/78	C S P
C O 7 C 255/19	(2006.01)	C O 7 C 255/19	
C O 7 C 255/46	(2006.01)	C O 7 C 255/46	
C O 7 C 243/38	(2006.01)	C O 7 C 243/38	
C O 7 C 317/44	(2006.01)	C O 7 C 317/44	

請求項の数 12 (全 220 頁) 最終頁に続く

(21) 出願番号	特願2016-571379 (P2016-571379)
(86) (22) 出願日	平成27年6月8日 (2015.6.8)
(65) 公表番号	特表2017-521382 (P2017-521382A)
(43) 公表日	平成29年8月3日 (2017.8.3)
(86) 国際出願番号	PCT/US2015/034648
(87) 国際公開番号	W02015/191430
(87) 国際公開日	平成27年12月17日 (2015.12.17)
審査請求日	平成30年4月25日 (2018.4.25)
(31) 優先権主張番号	62/009, 448
(32) 優先日	平成26年6月9日 (2014.6.9)
(33) 優先権主張国	米国 (US)

(73) 特許権者	501035309
	ダウ アグロサイエンシズ エルエルシー
	アメリカ合衆国 インディアナ州 46268, インディアナポリス, ジオンスヴィレ ロード, 9330
(74) 代理人	110000741
	特許業務法人小田島特許事務所
(72) 発明者	レブレ, ポール・ルネ
	アメリカ合衆国インディアナ州46268 インディアナポリス・ザイオンズビルロード9330

最終頁に続く

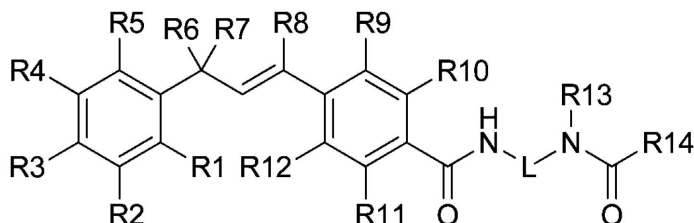
(54) 【発明の名称】 農薬組成物およびそれに関する方法

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項 1】

下記式で表される化合物。

【化 1】



上式中：

(a) R1、R2、R3、R4およびR5は、それぞれ独立に、H、F、Cl、Br、I、CN、(C₁–C₆) アルキル、(C₁–C₆) ハロアルキル、(C₁–C₆) アルコキシ若しくは(C₁–C₆) ハロアルコキシであり；(b) R6は(C₁–C₆) ハロアルキルであり；

(c) R7はHであり；

(d) R8はH、(C₁–C₆) アルキル若しくは(C₁–C₆) ハロアルキルであり；(e) R9はH、F、Cl、Br、I、(C₁–C₆) アルキル若しくは(C₁–C₆) ハロ

アルキルであり；

(f) R 1 0 は F、C l、B r、I、(C₁－C₆) アルキル若しくは(C₁－C₆) ハロアルキルであり；

(g) R 1 1 および R 1 2 は、それぞれ独立に、H、F、C l、B r、I、(C₁－C₆) アルキル若しくは C₁－C₆ ハロアルキルであり；

(h) L は

(1) 2 個の窒素原子を結合する結合、または

(2) 1 個若しくはそれ以上の置換基で場合によっては置換されている(C₁－C₆) アルキレンであって、かつ、置換されている場合の各置換基は、OH、(C₁－C₆) アルコキシ、S (C₁－C₆) アルキル、および N (C₁－C₆ アルキル)₂ から独立に選択され、各前記アルキル若しくはアルコキシは H、F、C l、B r および I から独立に選択される 1 個若しくはそれ以上の置換基で場合によって置換されている、(C₁－C₆) アルキレンであり；

(i) R 1 3 は

(1) H、または

(2) (C₁－C₆) アルキルであり；ならびに

(j) R 1 4 は、(C₁－C₈) アルキル、(C₁－C₈) ハロアルキル、(C₃－C₈) シクロアルキル、(C₂－C₈) アルケニル若しくは(C₂－C₈) アルキニルから独立に選択され、ここで各前記アルキル、ハロアルキル、シクロアルキル、アルケニルは、F、C l、B r、I、CN、NO₂、S (C₁－C₆) アルキル、S (O) (C₁－C₆) アルキルおよび S (O)₂ (C₁－C₆) アルキルから選択される 1 個若しくはそれ以上の置換基で場合によって置換されている。

【請求項 2】

(a) R 1 が H であり；

(b) R 2 が H、F、C l 若しくは B r であり；

(c) R 3 が H、F、C l 若しくは B r であり；

(d) R 4 が H、F、C l 若しくは B r であり；

(e) R 5 が H であり；

(f) R 6 が (C₁－C₈) ハロアルキルであり；

(g) R 7 が H であり；

(h) R 8 が H であり；

(i) R 9 が H であり；

(j) R 1 0 が、F、C l、B r、I、(C₁－C₆) アルキルおよび(C₁－C₆) ハロアルキルよりなる群から選択され；

(k) R 1 1 が H であり；

(l) R 1 2 が H であり；

(m) L が

(1) 2 個の窒素原子を結合する結合、または

(2) (C₁－C₆) アルキレン

であり；

(n) R 1 3 が

(1) H、若しくは

(2) (C₁－C₈) アルキル

であり；

(o) R 1 4 が、(C₁－C₈) アルキル、(C₁－C₈) ハロアルキル、(C₃－C₈) シクロアルキル、(C₂－C₈) アルケニル若しくは(C₂－C₈) アルキニルから独立に選択され、ここで各前記アルキル、シクロアルキル、アルケニルが、F、C l、B r、I、CN、NO₂、S (C₁－C₆) アルキル、S (O) (C₁－C₆) アルキルおよび S (O)₂ (C₁－C₆) アルキルから選択される 1 個若しくはそれ以上の置換基で場合によって置換されている、

請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 3】

- (a) R 1 が H であり；
- (b) R 2 が C l 若しくは B r であり；
- (c) R 3 が H、F、C l 若しくは B r であり；
- (d) R 4 が C l 若しくは B r であり；
- (e) R 5 が H であり；
- (f) R 6 が (C₁ - C₈) ハロアルキルであり；
- (g) R 7 が H であり；
- (h) R 8 が H であり；
- (i) R 9 が H であり；
- (j) R 10 が B r、(C₁ - C₈) アルキル若しくは (C₁ - C₈) ハロアルキルであり；
- (k) R 11 が H であり；
- (l) R 12 が H であり；
- (m) L が
 - (1) 2 個の窒素原子を結合する結合、若しくは
 - (2) (C₁ - C₆) アルキレン

10

であり；

- (n) R 13 が
 - (1) H、若しくは
 - (2) (C₁ - C₈) アルキル

20

であり；

(o) R 14 が、(C₁ - C₈) アルキル、(C₁ - C₈) ハロアルキル、(C₃ - C₈) シクロアルキル若しくは (C₂ - C₈) アルケニルであり、ここで各前記アルキル若しくはシクロアルキルが CN、SCH₃、S(O)CH₃若しくは S(O)₂CH₃で場合によって置換されている、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 4】

R 6 が CF₃ である、請求項 1 ～ 3 のいずれかに記載の化合物。

【請求項 5】

R 10 が B r、CH₃ もしくは CF₃ である、請求項 1 ～ 4 のいずれかに記載の化合物

30

【請求項 6】

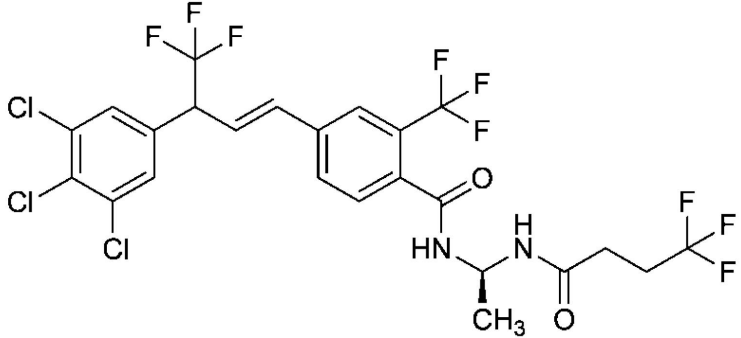
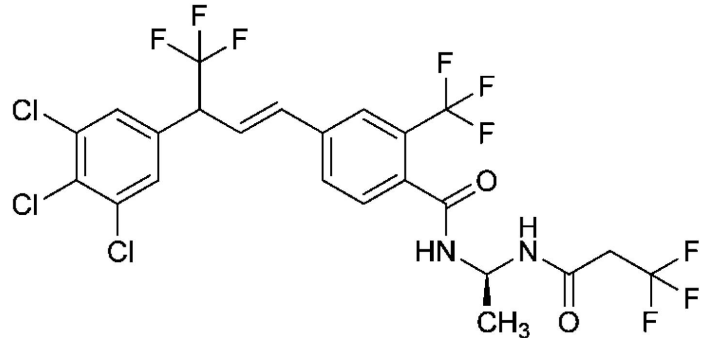
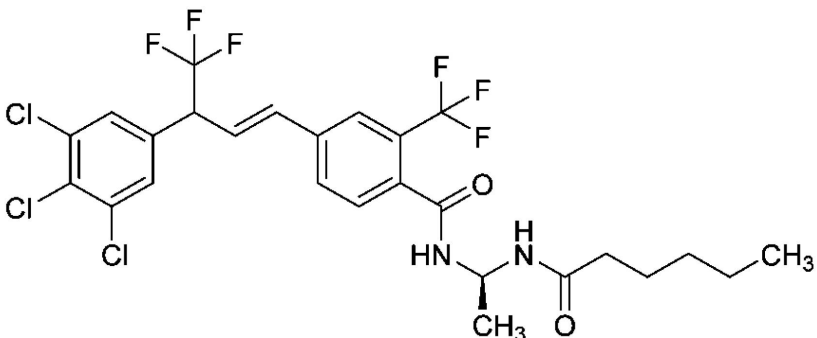
R 14 が、CF₃、CH₂CF₃、CH₂CH₂CF₃、CH₂CH₂CH₂CF₃、CH₂CH₂CH(CH₂CF₃)CH₃、CH(CH₃)CH₂CF₃、C(CH₃)₂CF₃、C(CH₃)₂CH₂CF₃、CH₃、CH₂CH₃、CH₂CH₂CH₃、CH₂CH₂CH₂CH₃、CH₂CH₂CH₂CH₂CH₃、CH(CH₃)₂、CH₂CH(CH₃)₂、CH₂CH₂CH(CH₃)₂、C(CH₃)₃、CH₂C(CH₃)₃、CH₂CH₂C(CH₃)₃、CH₂CH₂CH₂C(CH₃)₃、シクロプロピル、CH=CH₂、CH=CH(CH₃)、CH=C(CH₃)₂、CH₂CH=CH₂、CH₂CH=CH(CH₃)、C(CH₃)=CH₂、C(CH₃)=CH(CH₃)、C≡CH、CH₂C≡CH、CH₂CN、CH₂CH₂CN、CH₂SCH₃、CH₂CH₂SCH₃、CH₂S(O)CH₃、CH₂CH₂S(O)CH₃、CH₂S(O)₂CH₃、CH₂CH₂S(O)₂CH₃である、請求項 1 ～ 5 のいずれか 1 つに記載の化合物。

40

【請求項 7】

以下の化学構造式で表される化合物から選択される化合物。

【表 1 - 1】

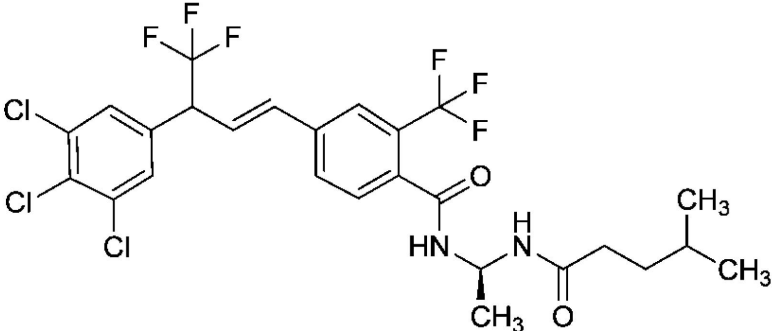
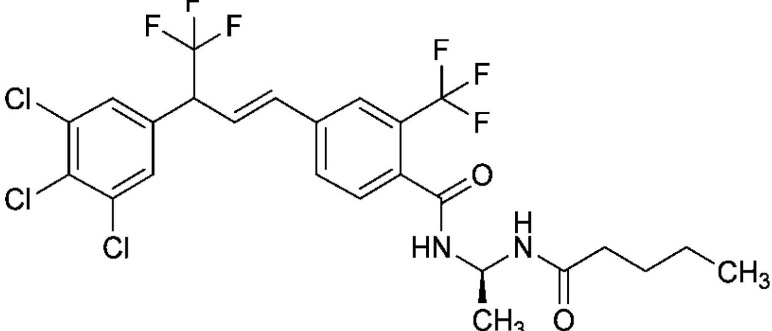
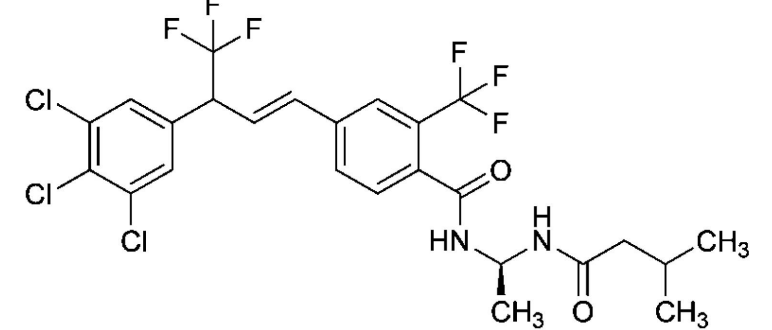
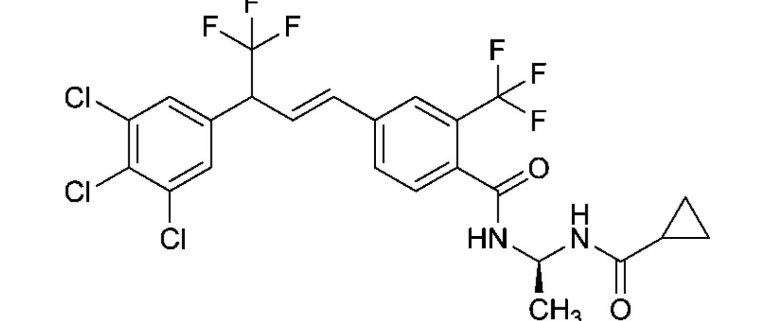
番号	構造
F1	 <chem>Clc1cc(Cl)c(Cl)cc1C(F)(F)C/C=C/c2ccc(cc2C(F)(F)F)NC[C@H](C)NC(=O)CC(F)(F)F</chem>
F2	 <chem>Clc1cc(Cl)c(Cl)cc1C(F)(F)C/C=C/c2ccc(cc2C(F)(F)F)NC[C@H](C)NC(=O)CC(F)(F)F</chem>
F3	 <chem>Clc1cc(Cl)c(Cl)cc1C(F)(F)C/C=C/c2ccc(cc2C(F)(F)F)NC[C@H](C)NC(=O)CCCCC</chem>

10

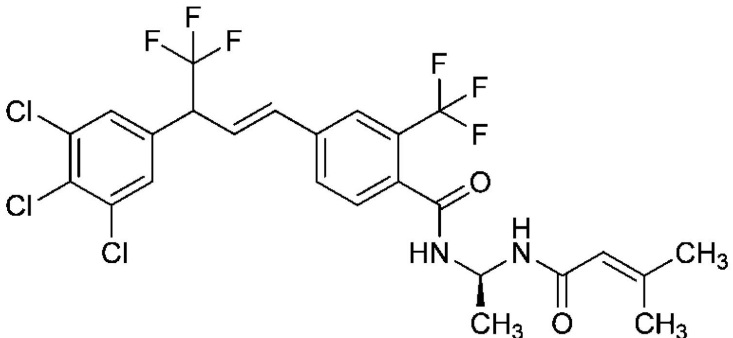
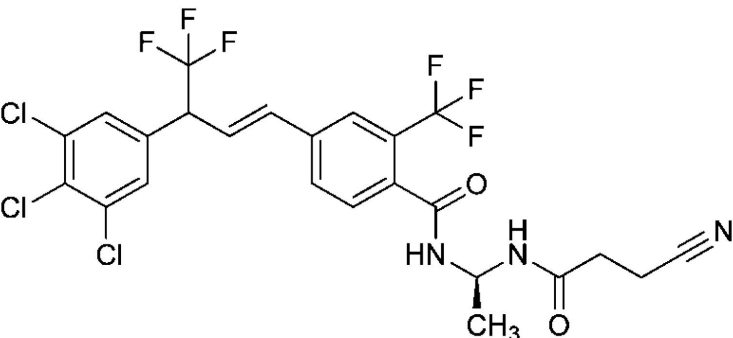
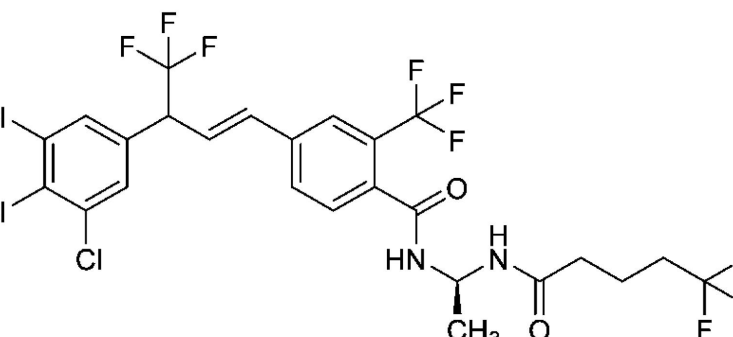
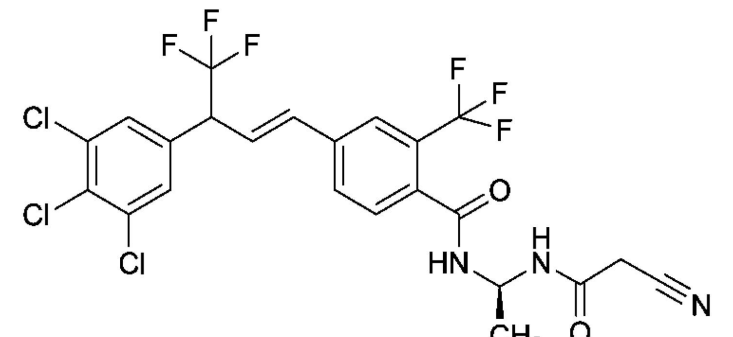
20

30

【表 1 - 2】

F4		10
F5		20
F6		30
F7		40

【表 1 - 3】

F8	
F9	
F10	
F11	

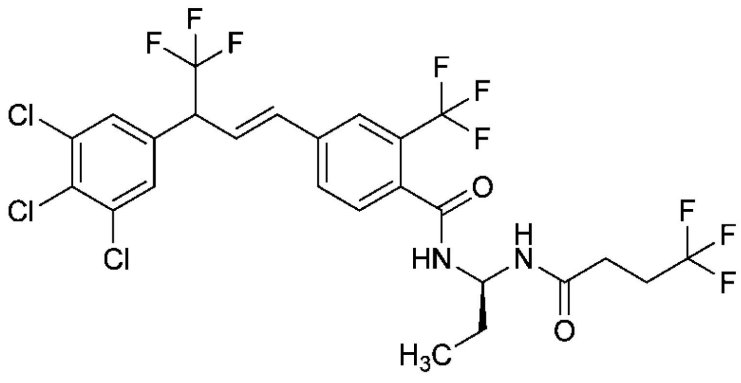
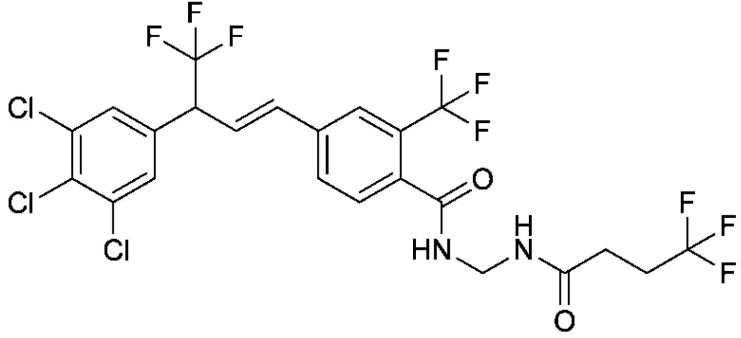
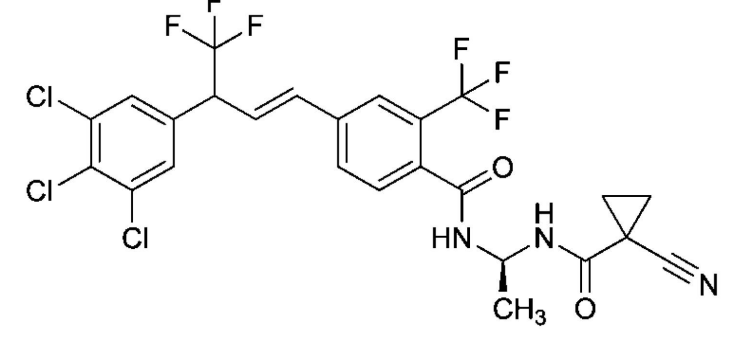
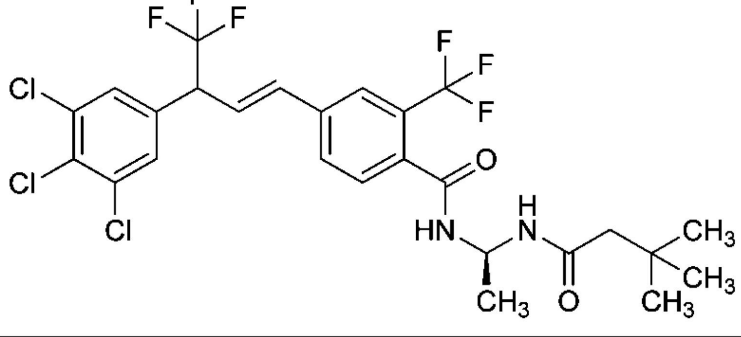
10

20

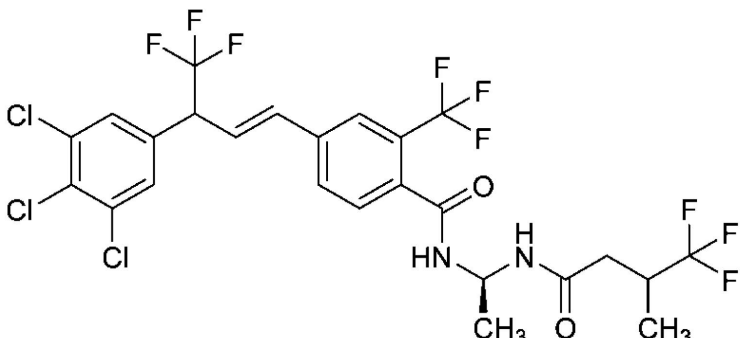
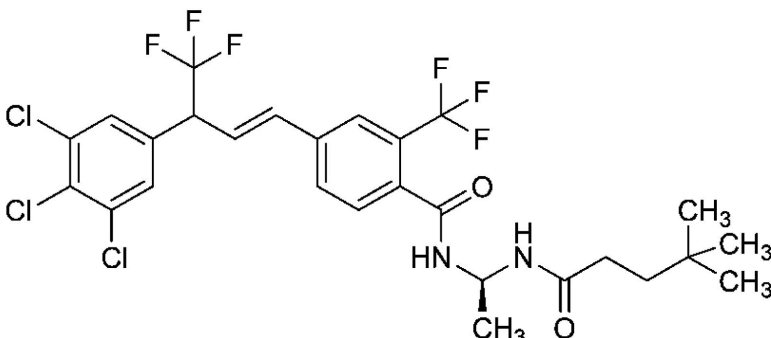
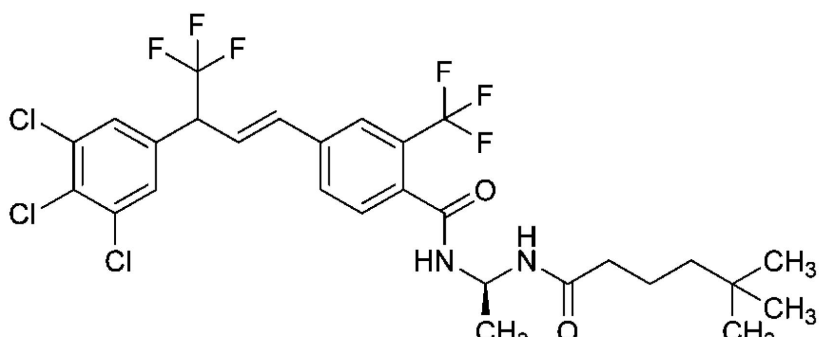
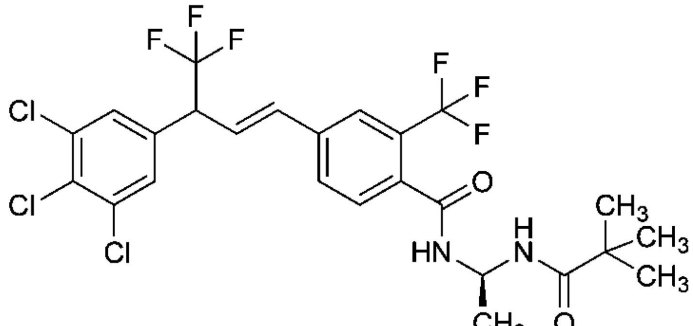
30

40

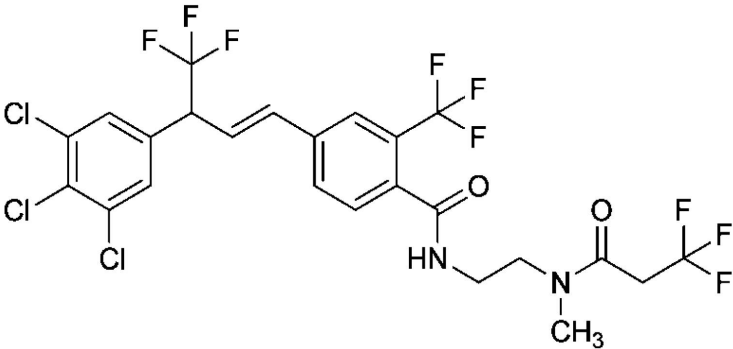
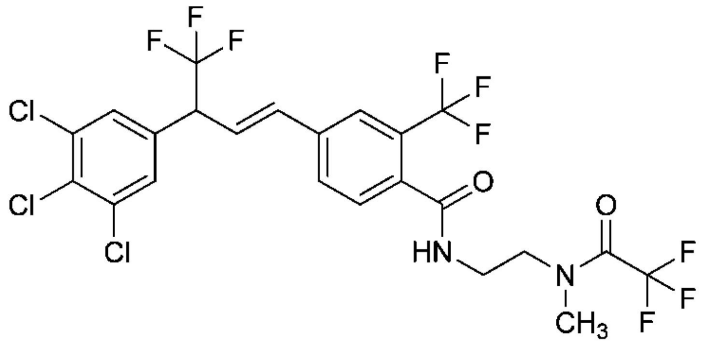
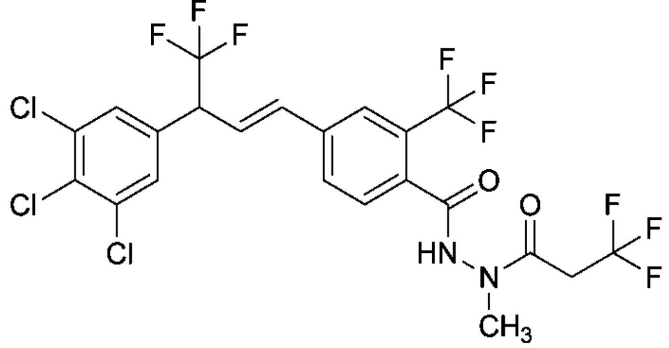
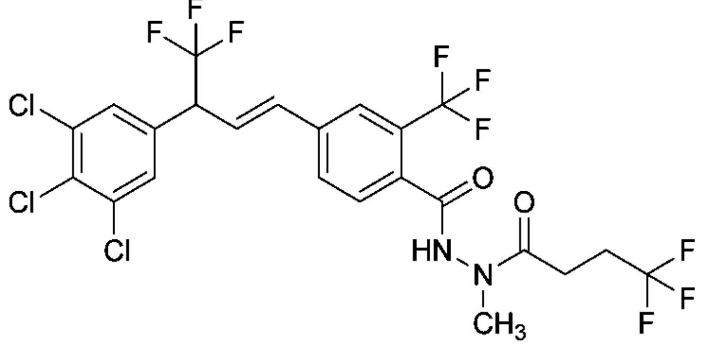
【表 1 - 4】

F12	 <chem>Clc1cc(Cl)c(Cl)cc1C(F)(F)F/C=C/c2ccc(cc2C(F)(F)F)NC(=O)N[C@H](C)C(=O)NCC(F)(F)F</chem>	10
F13	 <chem>Clc1cc(Cl)c(Cl)cc1C(F)(F)F/C=C/c2ccc(cc2C(F)(F)F)NC(=O)NCCNCC(=O)NCC(F)(F)F</chem>	20
F14	 <chem>Clc1cc(Cl)c(Cl)cc1C(F)(F)F/C=C/c2ccc(cc2C(F)(F)F)NC(=O)N[C@H](C)C(=O)NCC1CC1C#N</chem>	30
F15	 <chem>Clc1cc(Cl)c(Cl)cc1C(F)(F)F/C=C/c2ccc(cc2C(F)(F)F)NC(=O)N[C@H](C)C(=O)NCC(C)C(C)C</chem>	40

【表 1 - 5】

F16	 Chemical structure of compound F16: A bis-phenol derivative. The left phenyl ring is substituted with three chlorine atoms (2,4,6-trichloro). The right phenyl ring is substituted with two fluorine atoms (2,6-difluoro). The two rings are connected via a trans-vinyl bridge. Each ring also has a trifluoromethyl group at the para position relative to the bridge. The right ring is further substituted with an amide group (-NH-CH(CH₃)-NH-CO-CH₂-CH(CH₃)-CF₃).	10
F17	 Chemical structure of compound F17: Similar to F16, but the amide side chain is -NH-CH(CH₃)-NH-CO-CH₂-CH₂-C(CH₃)₃.	20
F18	 Chemical structure of compound F18: Similar to F16, but the amide side chain is -NH-CH(CH₃)-NH-CO-(CH₂)₄-C(CH₃)₃.	30
F19	 Chemical structure of compound F19: Similar to F16, but the amide side chain is -NH-CH(CH₃)-NH-CO-C(CH₃)₃.	40

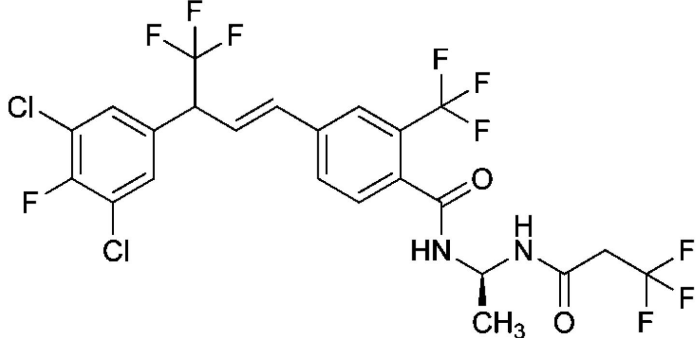
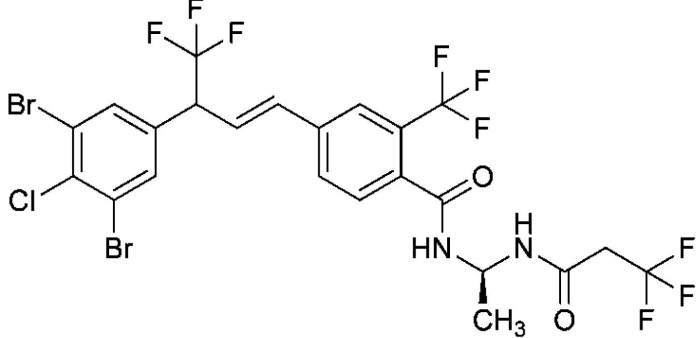
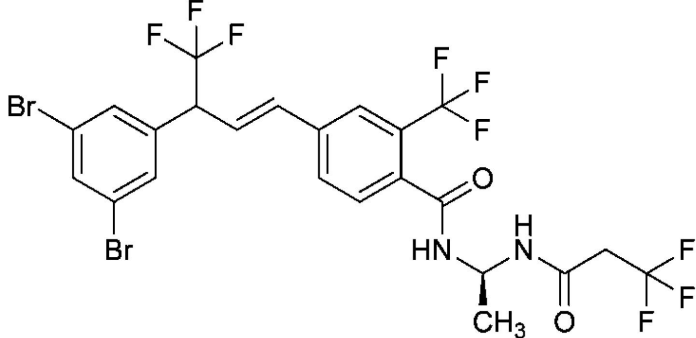
【表 1 - 6】

F20		10
F21		20
F22		30
F23		40

【請求項 8】

以下の化学構造式で表される化合物から選択される化合物。

【表 2 - 1】

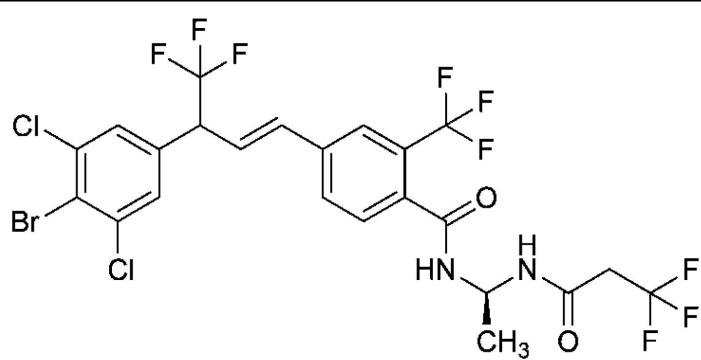
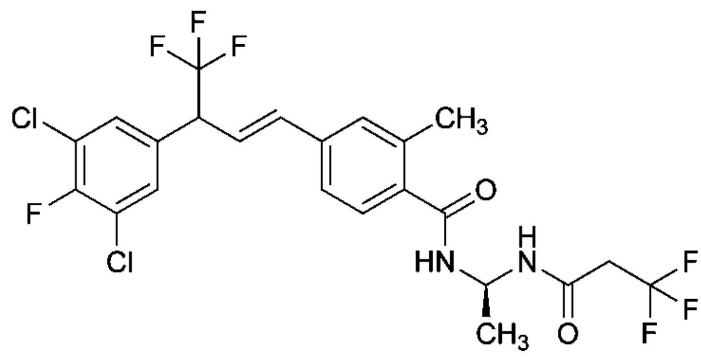
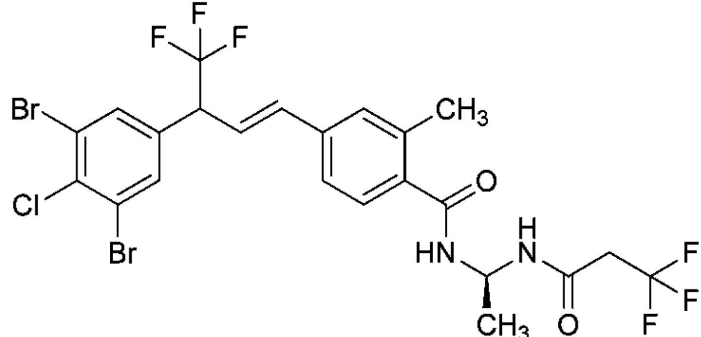
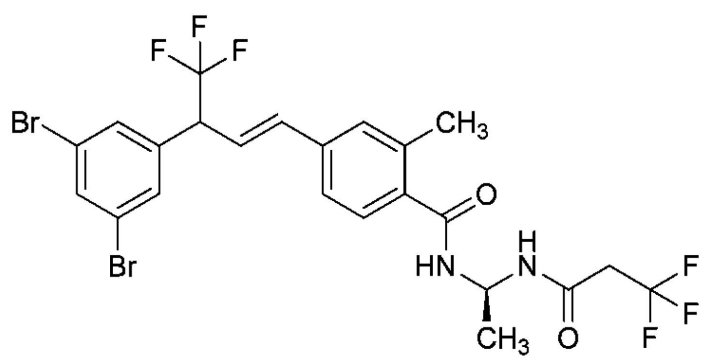
番号	構造
P1	 <chem>Clc1cc(Cl)c(C(F)(F)F)cc1/C=C/c2ccc(cc2C(F)(F)F)NC(=O)N[C@H](C)C(=O)NCC(F)(F)F</chem>
P2	 <chem>BrC1=CC(Br)=C(C(F)(F)F)C=C1/C=C/c2ccc(cc2C(F)(F)F)NC(=O)N[C@H](C)C(=O)NCC(F)(F)F</chem>
P3	 <chem>BrC1=CC(Br)=C(C(F)(F)F)C=C1/C=C/c2ccc(cc2C(F)(F)F)NC(=O)N[C@H](C)C(=O)NCC(F)(F)F</chem>

10

20

30

【表 2 - 2】

P4	
P5	
P6	
P7	

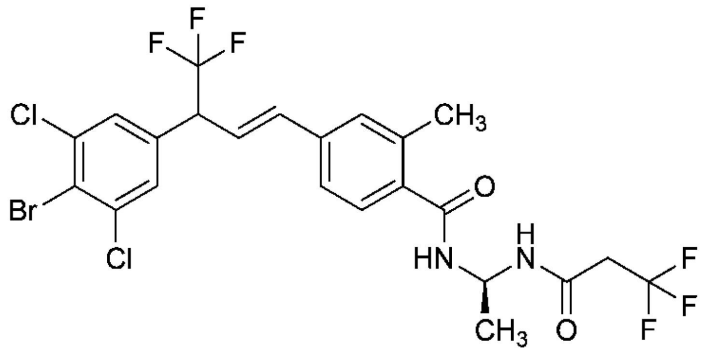
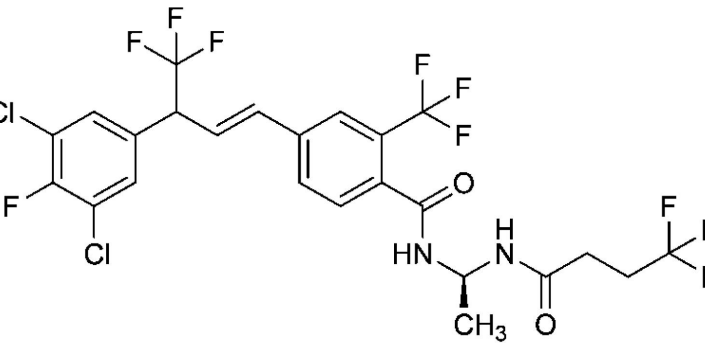
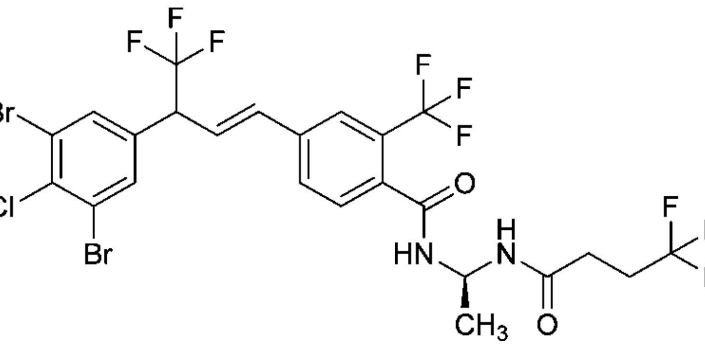
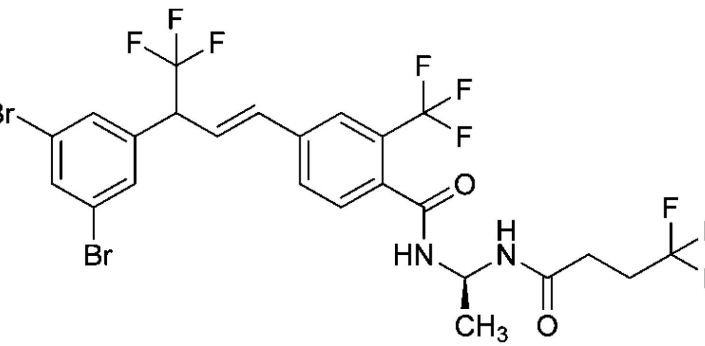
10

20

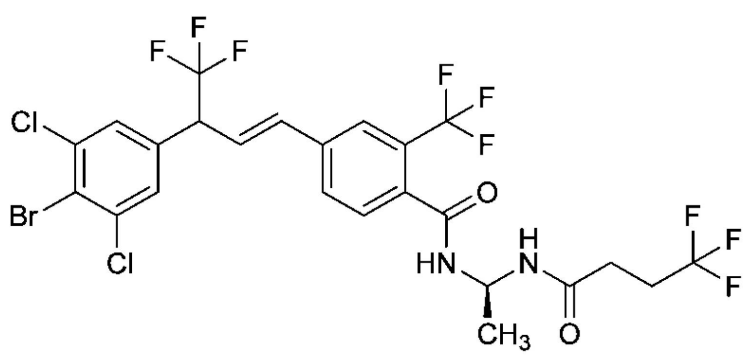
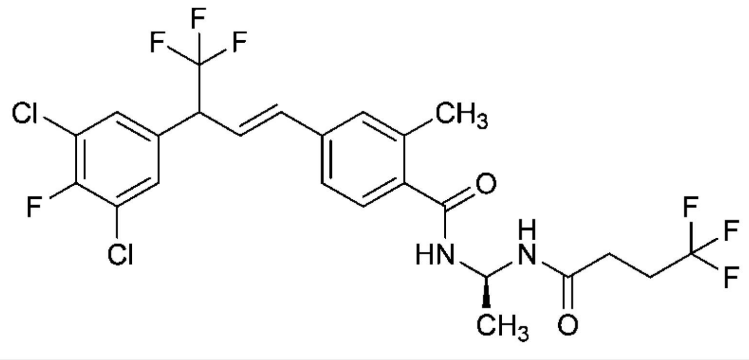
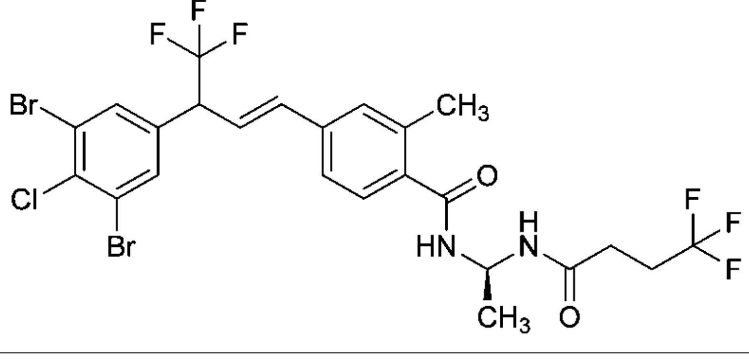
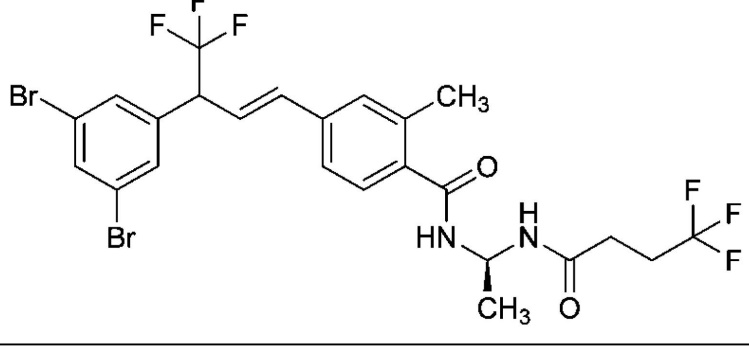
30

40

【表 2 - 3】

P8		10
P9		20
P10		30
P11		40

【表 2 - 4】

P12	 Chemical structure of compound P12: A molecule featuring a central trans-vinyl bridge. The left side of the bridge is attached to a 2,4-dichloro-6-bromophenyl ring, which is further substituted with a trifluoromethyl group. The right side of the bridge is attached to a 4-(trifluoromethyl)phenyl ring, which is also substituted with a trifluoromethyl group. The right side of the molecule contains a chiral amide linkage, specifically a (S)-1-((4-(trifluoromethyl)phenyl)carbamoyl)propan-2-yl group, which is further substituted with a trifluoromethyl group.
P13	 Chemical structure of compound P13: A molecule featuring a central trans-vinyl bridge. The left side of the bridge is attached to a 2,4-dichloro-6-fluorophenyl ring, which is further substituted with a trifluoromethyl group. The right side of the bridge is attached to a 4-methylphenyl ring, which is also substituted with a trifluoromethyl group. The right side of the molecule contains a chiral amide linkage, specifically a (S)-1-((4-methylphenyl)carbamoyl)propan-2-yl group, which is further substituted with a trifluoromethyl group.
P14	 Chemical structure of compound P14: A molecule featuring a central trans-vinyl bridge. The left side of the bridge is attached to a 2,4-dibromo-6-chlorophenyl ring, which is further substituted with a trifluoromethyl group. The right side of the bridge is attached to a 4-methylphenyl ring, which is also substituted with a trifluoromethyl group. The right side of the molecule contains a chiral amide linkage, specifically a (S)-1-((4-methylphenyl)carbamoyl)propan-2-yl group, which is further substituted with a trifluoromethyl group.
P15	 Chemical structure of compound P15: A molecule featuring a central trans-vinyl bridge. The left side of the bridge is attached to a 3,5-dibromophenyl ring, which is further substituted with a trifluoromethyl group. The right side of the bridge is attached to a 4-methylphenyl ring, which is also substituted with a trifluoromethyl group. The right side of the molecule contains a chiral amide linkage, specifically a (S)-1-((4-methylphenyl)carbamoyl)propan-2-yl group, which is further substituted with a trifluoromethyl group.

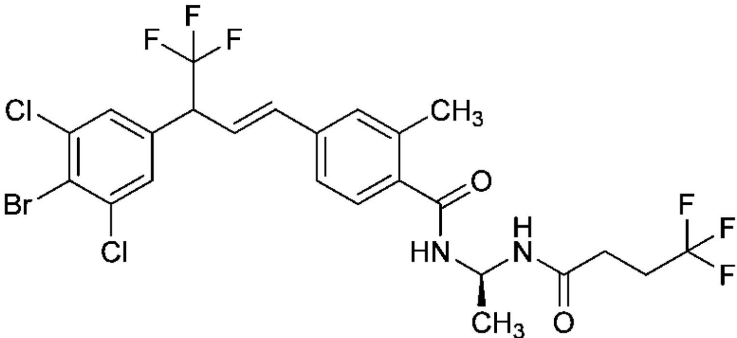
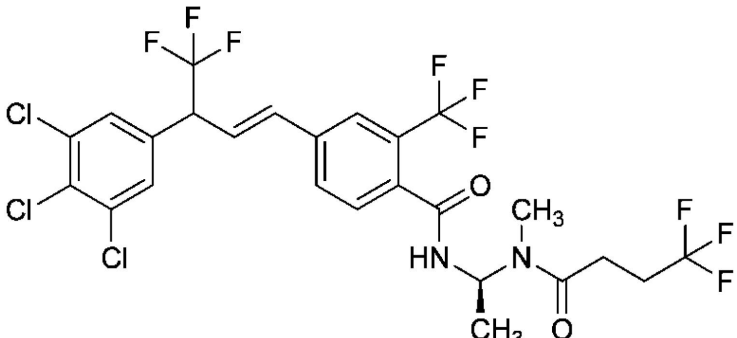
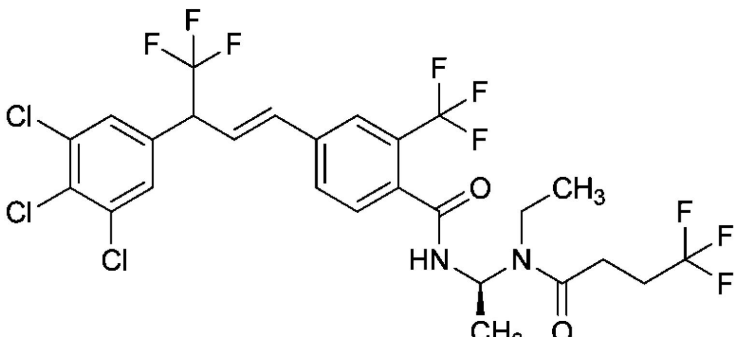
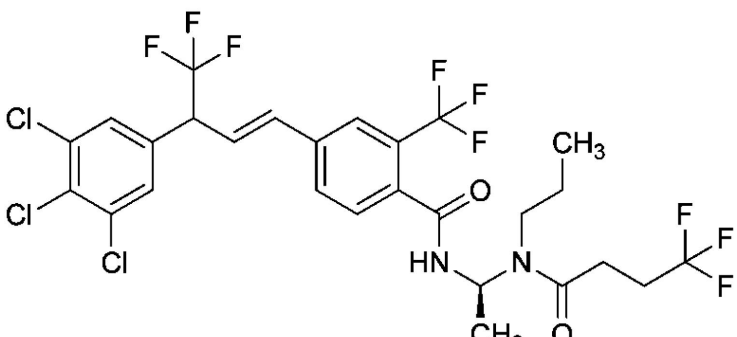
10

20

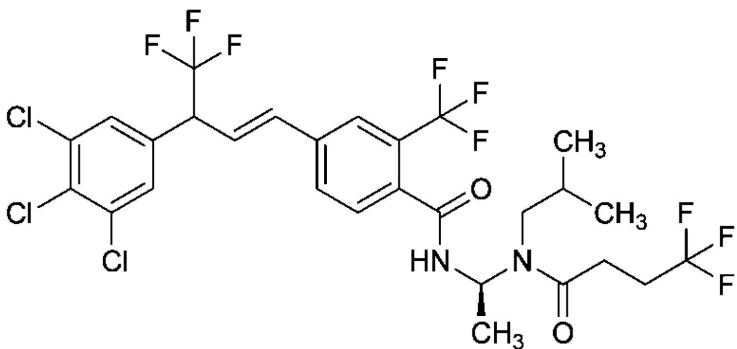
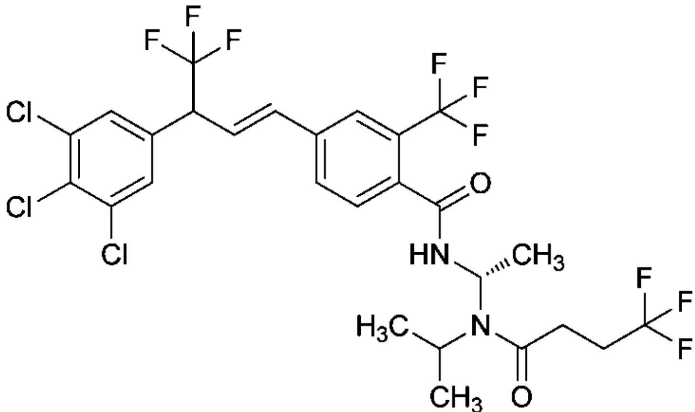
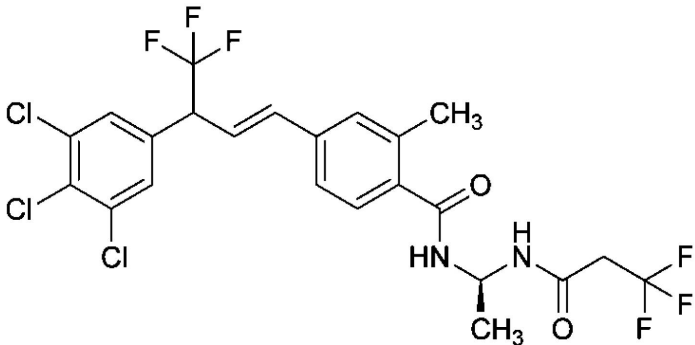
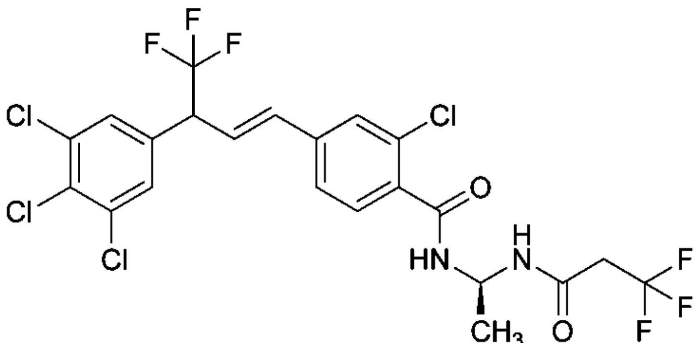
30

40

【表 2 - 5】

P16		10
P17		20
P18		30
P19		40

【表 2 - 6】

P20	
P21	
P22	
P23	

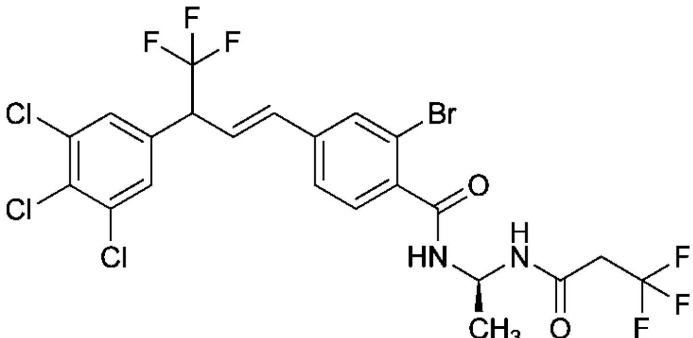
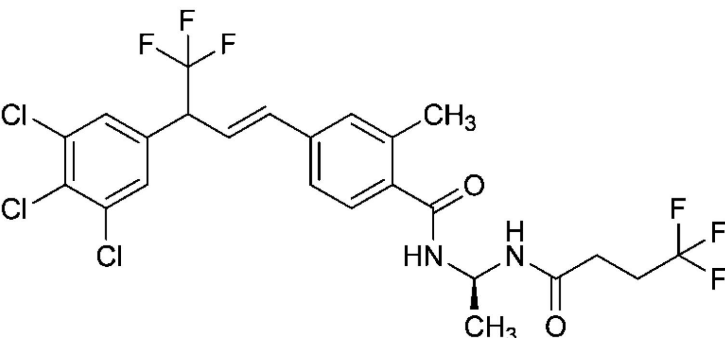
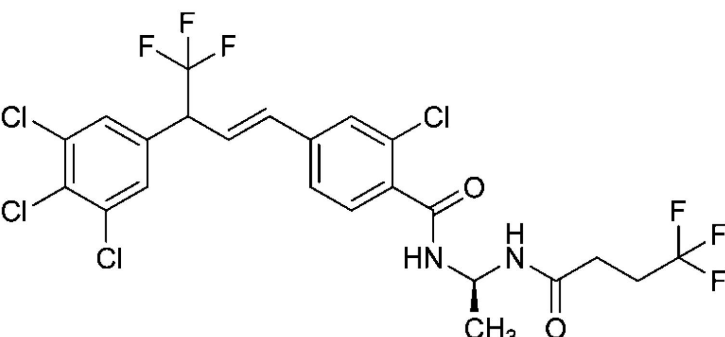
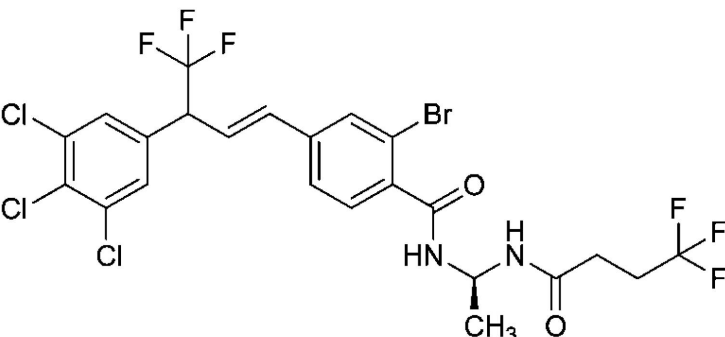
10

20

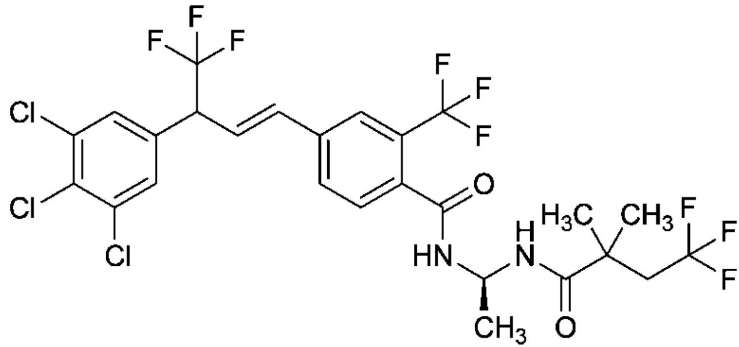
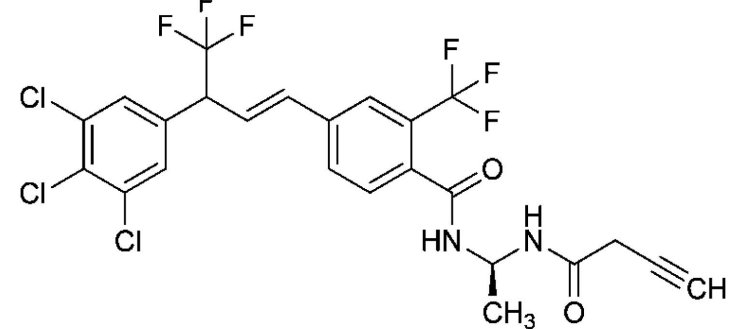
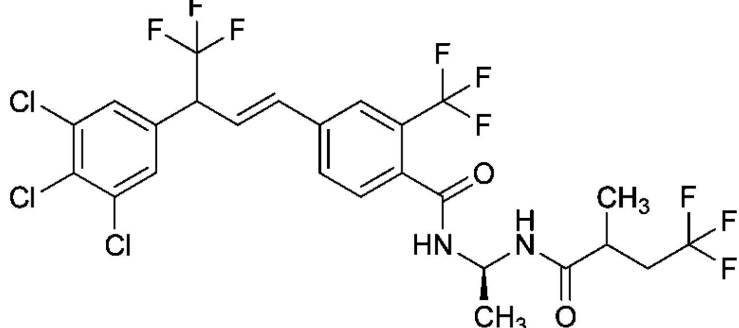
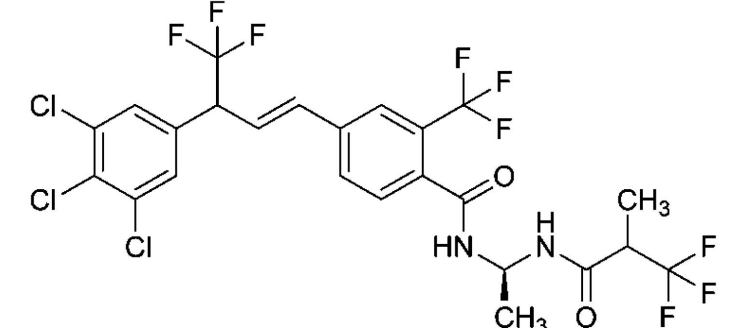
30

40

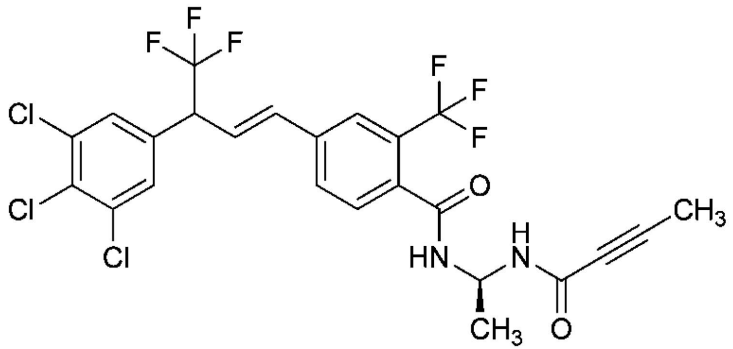
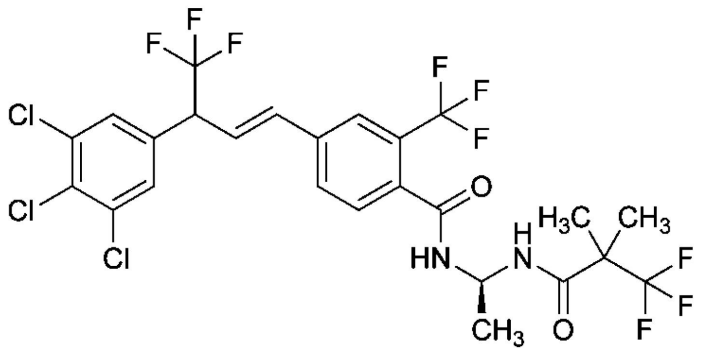
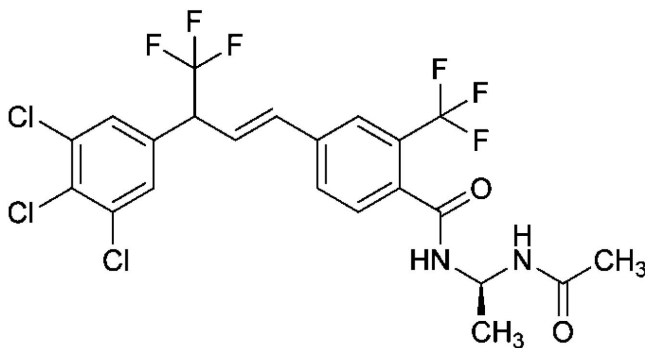
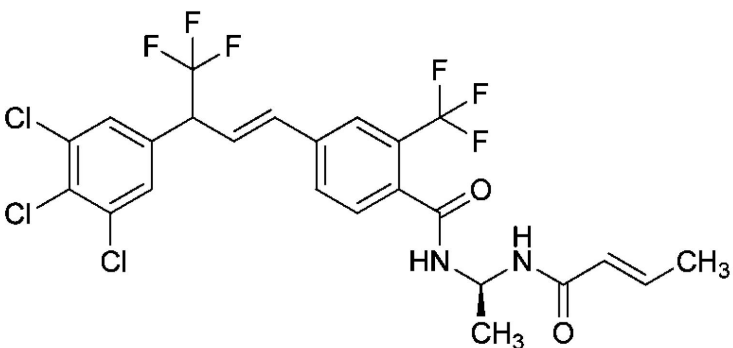
【表 2 - 7】

P24		10
P25		20
P26		30
P27		40

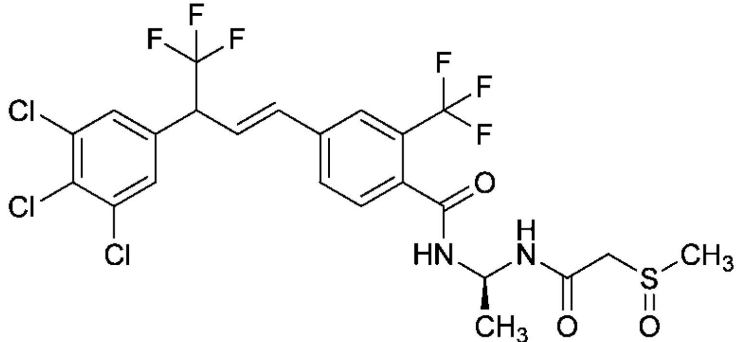
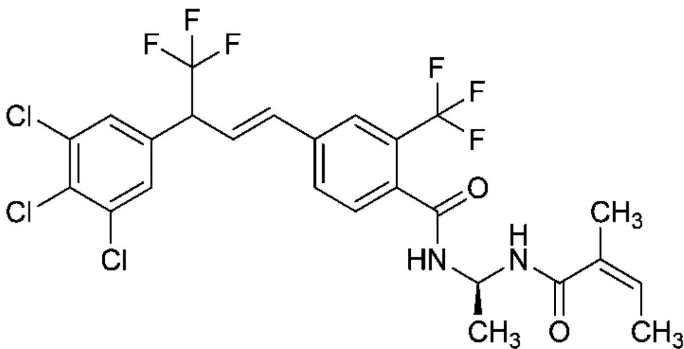
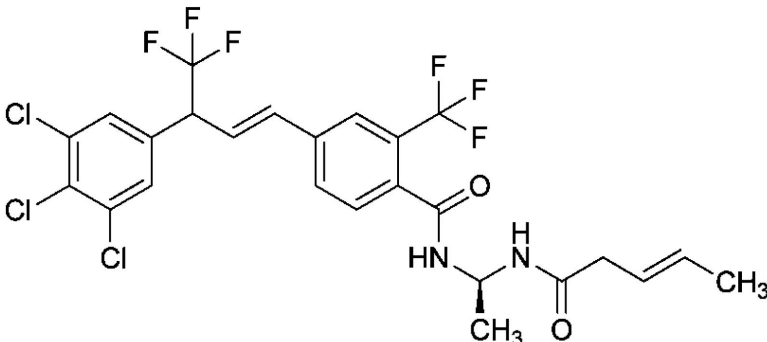
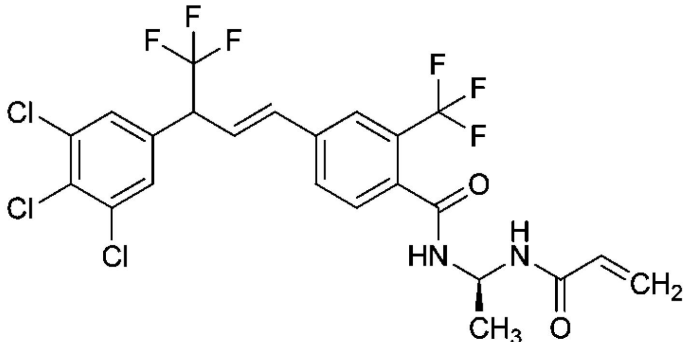
【表 2 - 8】

P28		10
P29		20
P30		30
P31		40

【表 2 - 9】

P32		10
P33		20
P34		30
P35		40

【表 2 - 1 0】

P36	
P37	
P38	
P39	

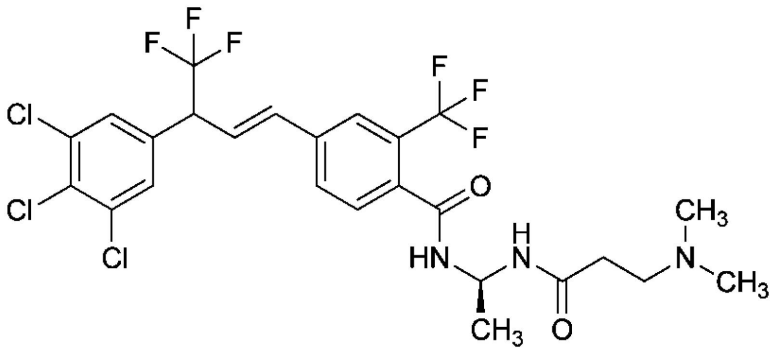
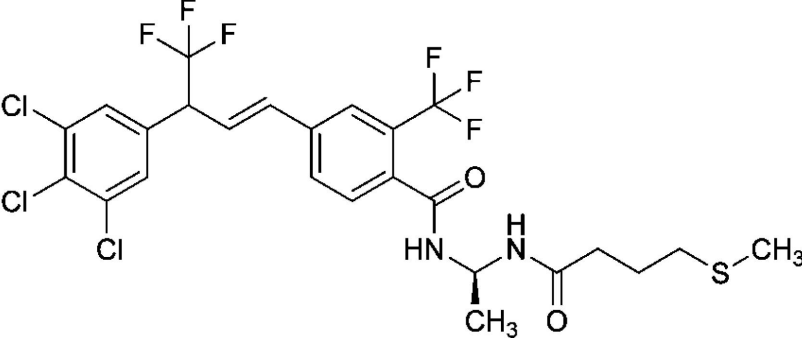
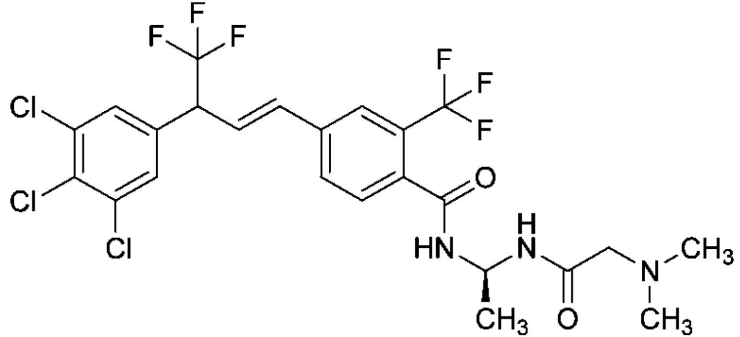
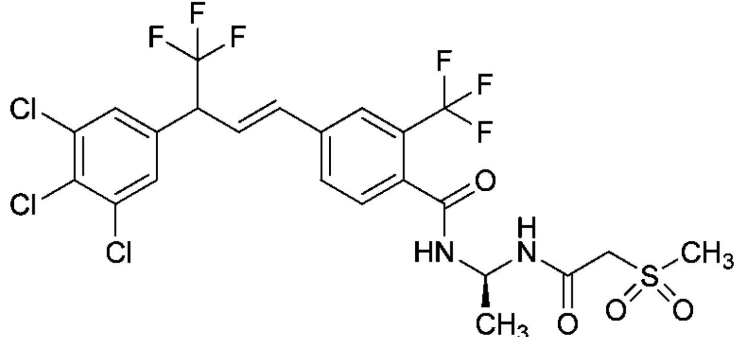
10

20

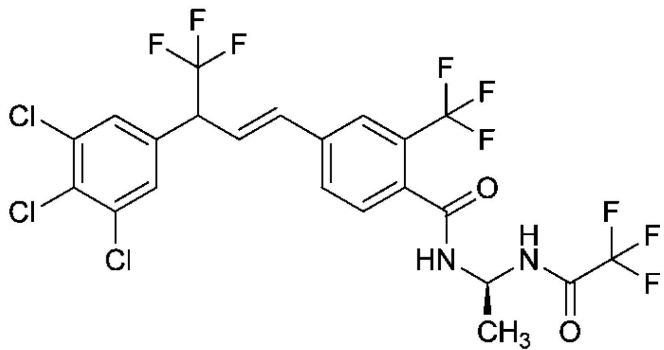
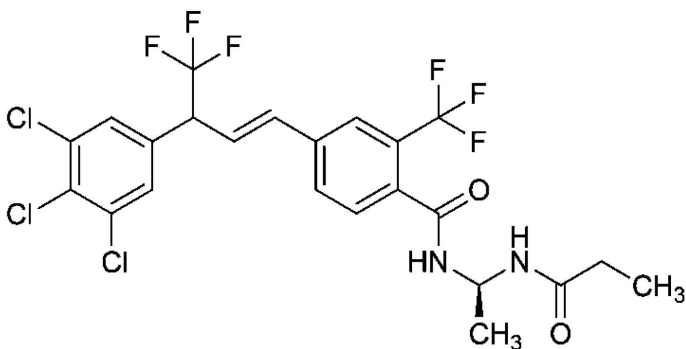
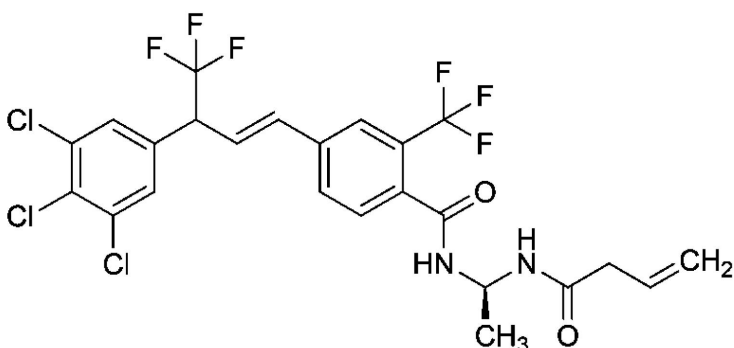
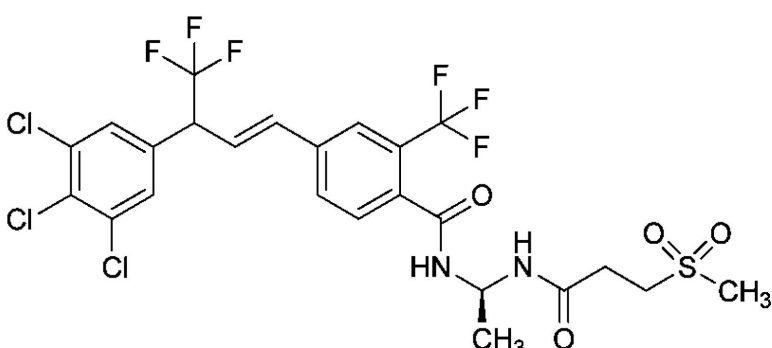
30

40

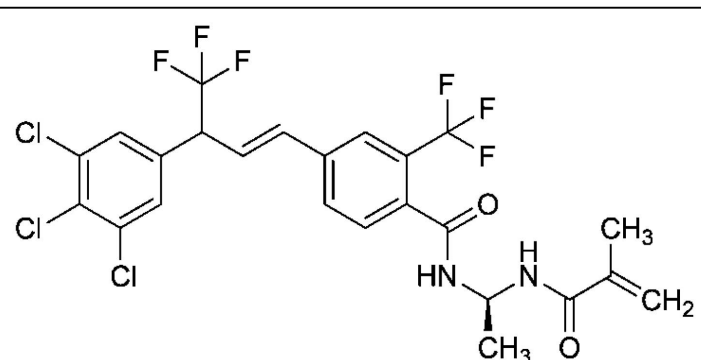
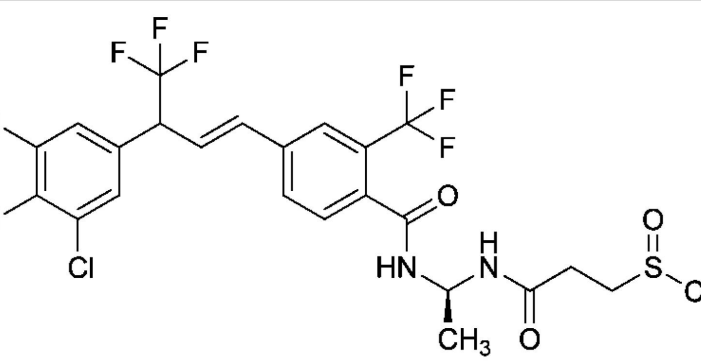
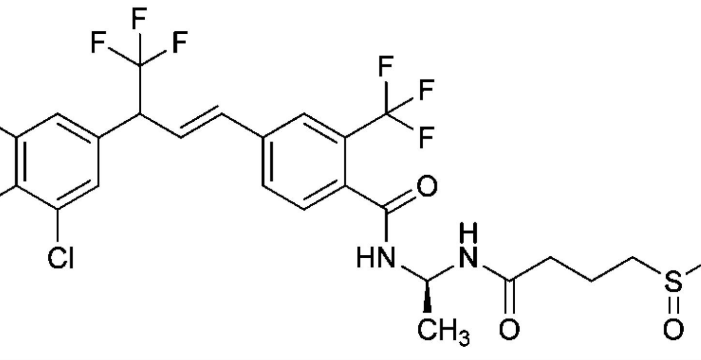
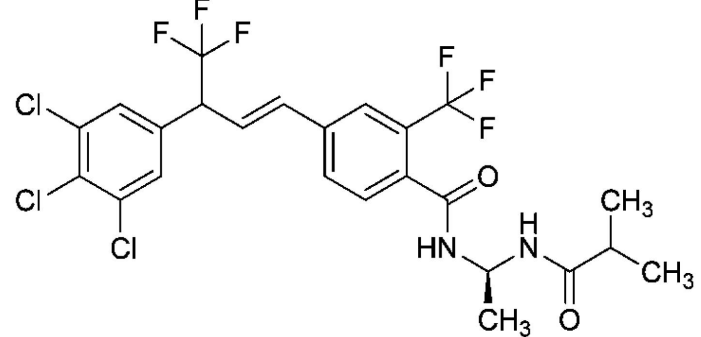
【表 2 - 1 1】

P40		10
P41		20
P42		30
P43		40

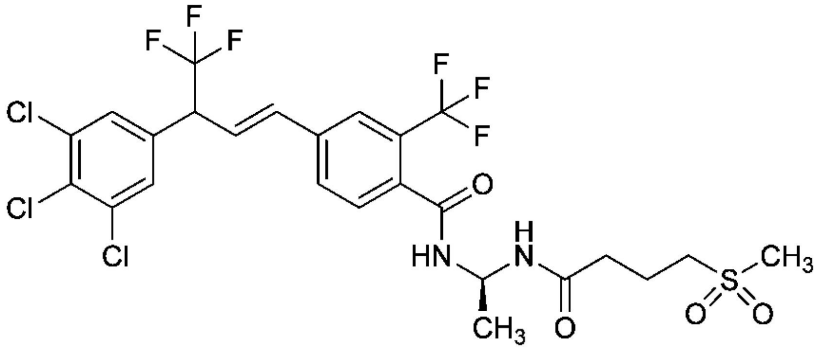
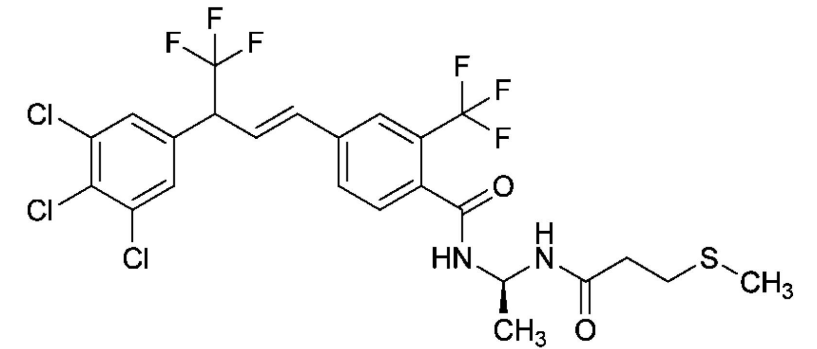
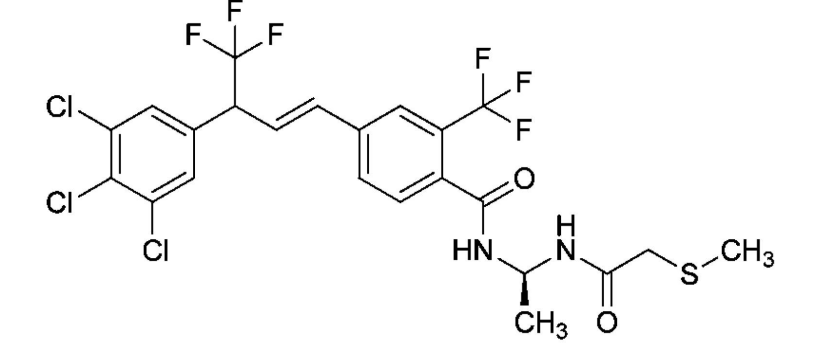
【表 2 - 1 2】

P44		10
P45		20
P46		30
P47		40

【表 2 - 1 3】

P48		10
P49		20
P50		30
P51		40

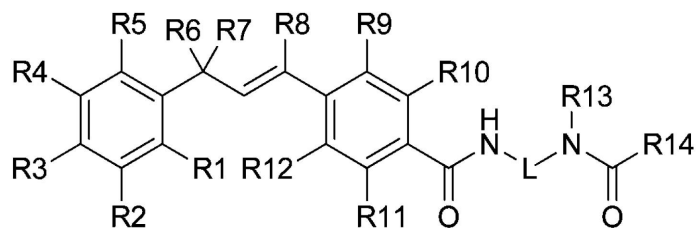
【表 2 - 1 4】

P52		10
P53		20
P54		30

【請求項 9】

下記式で表される化合物のいずれか 1 つの化合物及び担体を含んでなる農薬組成物。

【化 1】



上式中：

- (a) R 1、R 2、R 3、R 4 および R 5 は、それぞれ独立に、H、F、Cl、Br、I、CN、(C₁ - C₆) アルキル、(C₁ - C₆) ハロアルキル、(C₁ - C₆) アルコキシ若しくは (C₁ - C₆) ハロアルコキシであり；
- (b) R 6 は (C₁ - C₆) ハロアルキルであり；
- (c) R 7 は H であり；

(d) R₈はH、(C₁–C₆)アルキル若しくは(C₁–C₆)ハロアルキルであり；

(e) R₉はH、F、Cl、Br、I、(C₁–C₆)アルキル若しくは(C₁–C₆)ハロアルキルであり；

(f) R₁₀はF、Cl、Br、I、(C₁–C₆)アルキル若しくは(C₁–C₆)ハロアルキルであり；

(g) R₁₁およびR₁₂は、それぞれ独立に、H、F、Cl、Br、I、(C₁–C₆)アルキル若しくはC₁–C₆ハロアルキルであり；

(h) Lは

(1) 2個の窒素原子を結合する結合、または

(2) 1個若しくはそれ以上の置換基で場合によっては置換されている(C₁–C₆)アルキレンであって、かつ、置換されている場合の各置換基は、OH、(C₁–C₆)アルコキシ、S(C₁–C₆)アルキル、およびN(C₁–C₆アルキル)₂から独立に選択され、各前記アルキル若しくはアルコキシはH、F、Cl、BrおよびIから独立に選択される1個若しくはそれ以上の置換基で場合によって置換されている、(C₁–C₆)アルキレンであり；

(i) R₁₃は

(1) H、または

(2) (C₁–C₆)アルキルであり；ならびに

(j) R₁₄は、

(1) (C₁–C₈)アルキル、(C₁–C₈)ハロアルキル、から独立に選択され、ここで各前記アルキル、ハロアルキルは、F、Cl、Br、I、CN、NO₂、S(C₁–C₆)アルキル、S(O)(C₁–C₆)アルキルおよびS(O)₂(C₁–C₆)アルキルから選択される1個若しくはそれ以上の置換基で置換されている、

(2) (C₃–C₈)シクロアルキル、(C₂–C₈)アルケニル若しくは(C₂–C₈)アルキニルから独立に選択され、ここで各前記シクロアルキル、アルケニルは、F、Cl、Br、I、CN、NO₂、S(C₁–C₆)アルキル、S(O)(C₁–C₆)アルキルおよびS(O)₂(C₁–C₆)アルキルから選択される1個若しくはそれ以上の置換基で場合によって置換されている。

【請求項10】

アセチルコリンエステラーゼ(AChE)阻害剤；GABA作動性クロライドチャンネルアンタゴニスト；ナトリウムチャンネル調節物質；ニコチン性アセチルコリン(nAChR)アゴニスト；ニコチン性アセチルコリン受容体(nAChR)アロステリック活性化物質；クロライドチャンネル活性化物質；幼若ホルモン模倣物；雑多な非特異的(多部位)阻害剤；選択的同翅類摂食阻害剤；ダニ成長阻害剤；昆虫中腸膜の微生物性攪乱物質；ミトコンドリアATP合成酵素の阻害剤；プロトン勾配の破壊を介する酸化的リン酸化の脱共役剤；ニコチン性アセチルコリン受容体(nAChR)チャンネル阻害剤；キチン生合成の阻害剤、タイプ0；キチン生合成の阻害剤、タイプ1；マウンティング破壊物質、双翅類；エクジソン受容体アゴニスト；オクトパミン受容体アゴニスト；ミトコンドリア複合体I I I電子伝達阻害剤；ミトコンドリア複合体I電子伝達阻害剤；電位依存性ナトリウムチャンネル阻害剤；アセチルCoAカルボキシラーゼの阻害剤；ミトコンドリア複合体I V電子伝達阻害剤；ミトコンドリア複合体I I I電子伝達阻害剤；およびリアノジン受容体調節物質から選択される作用様式を有する1種若しくはそれ以上の化合物をさらに含んでなる、請求項9に記載の農薬組成物。

【請求項11】

臭化(3-エトキシプロピル)水銀、1,2-ジクロロプロパン、1,3-ジクロロプロペン、1-メチルシクロプロペン、1-ナフトール、2-(オクチルチオ)エタノール、2,3,5-トリヨード安息香酸、2,3,6-TBA、2,3,6-TBAジメチルアンモニウム塩、2,3,6-TBAリチウム塩、2,3,6-TBAカリウム塩、2,3,6-TBAナトリウム塩、2,4,5-T、2,4,5-T2-ブトキシプロピル、2,4,5-T2-エチルヘキシル、2,4,5-T3-ブトキシプロピル、2,4,5

10

20

30

40

50

-TB、2, 4, 5-Tブトメチル、2, 4, 5-Tブトチル、2, 4, 5-Tブチル、
 2, 4, 5-Tイソブチル、2, 4, 5-Tイソクチル (i s o c t y l)、2, 4, 5-
 -Tイソプロピル、2, 4, 5-Tメチル、2, 4, 5-Tペンチル、2, 4, 5-Tナ
 トリウム塩、2, 4, 5-Tトリエチルアンモニウム塩、2, 4, 5-Tトロラミン、2
 , 4-D、2, 4-D2-ブトキシプロピル、2, 4-D2-エチルヘキシル、2, 4-D
 3-ブトキシプロピル、2, 4-Dアンモニウム塩、2, 4-DB、2, 4-DBブチ
 ル、2, 4-DBジメチルアンモニウム塩、2, 4-DBイソクチル、2, 4-DBカリ
 ウム塩、2, 4-DBナトリウム塩、2, 4-Dブトチル、2, 4-Dブチル、2, 4-D
 ジエチルアンモニウム塩、2, 4-Dジメチルアンモニウム塩、2, 4-Dジオラミン
 、2, 4-Dドデシルアンモニウム塩、2, 4-DEB、2, 4-DEP、2, 4-Dエ
 チル、2, 4-Dヘプチルアンモニウム塩、2, 4-Dイソブチル、2, 4-Dイソクチ
 ル、2, 4-Dイソプロピル、2, 4-Dイソプロピルアンモニウム塩、2, 4-Dリチ
 ウム塩、2, 4-Dメブチル、2, 4-Dメチル、2, 4-Dオクチル、2, 4-Dペン
 チル、2, 4-Dカリウム塩、2, 4-Dプロピル、2, 4-Dナトリウム塩、2, 4-D
 テフリル、2, 4-Dテトラデシルアンモニウム塩、2, 4-Dトリエチルアンモニウ
 ム塩、2, 4-Dトリス (2-ヒドロキシプロピル) アンモニウム塩、2, 4-Dトロラ
 ミン、2 i P、塩化2-メトキシエチル水銀、2-フェニルフェノール、3, 4-DA、
 3, 4-DB、3, 4-DP、4-アミノピリジン、4-CPA、4-CPAジオラミン
 、4-CPAカリウム塩、4-CPAナトリウム塩、4-CPB、4-CPP、4-ヒド
 ロキシフェネチルアルコール、8-ヒドロキシキノリン硫酸塩、8-フェニルマーキュリ
 オキシキノリン (p h e n y l m e r c u r i o x y q u i n o l i n e)、アバメクチ
 ン、アブシジン酸、ACC、アセフェート、アセキノシル、アセタミプリド、アセチオン
 、アセトクロール、アセトホス、アセトプロール、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メチル、アシフルオルフェンナトリウ
 ム塩、アクロニフェン、アクレップ (a c r e p)、アクリナトリン、アクロレイン、ア
 クリロニトリル、アシペタックス、アシペタックス銅、アシペタックス亜鉛、アフィドピ
 ロペン、アラクロール、アラニカルブ、アルベンダゾール、アルジカルブ、アルジモルフ
 、アルドキシカルブ、アルドリン、アレスリン、アリシン、アリドクロール、アロサミジ
 ン、アロキシジム、アロキシジムナトリウム、アリルアルコール、アリキシカルブ、アロ
 ラック、アルファシペルメトリン、アルファエンドスルファン、アメトクトラジン、アメ
 トリジオン、アメトリン、アミブジン、アミカルバゾン、アミカルチアゾール (a m i c
 a r t h i a z o l)、アミジチオン、アミドフルメット、アミドスルフロン、アミノカル
 ブ、アミノシクロピラクロル、アミノシクロピラクロルメチル、アミノシクロピラクロ
 ルカリウム塩、アミノピラリド、アミノピラリドカリウム塩、アミノピラリドトリス (2-
 ヒドロキシプロピル) アンモニウム塩、アミプロホスメチル、アミプロホス、アミスル
 ブロム、アミトン、アミトンシュウ酸塩、アミトラズ、アミトロール、スルファミン酸ア
 ンモニウム、 α -ナフタレン酢酸アンモニウム、アンバム、アンプロピルホス、アナバシ
 ン、硫酸アナバシン、アンシミドール、アニラジン、アニロホス、アニスロン、アントラ
 キノン、アンツー、アホラート、アラマイト、三酸化ヒ素、アソメート、アスピリン、ア
 シュラム、アシュラムカリウム塩、アシュラムナトリウム塩、アチダチオン、アトラトン
 、アトラジン、オーレオフアンギン (a u r e o f u n g i n)、アビグリシン、アビグ
 リシン塩酸塩、アザコナゾール、アザジラクチン、アザフェニジン、アザメチホス、アジ
 ムスルフロン、アジンホスエチル、アジンホスメチル、アジプロトリン、アジチラム、ア
 ズベンゼン、アズシクロチン、アゾトエート、アゾキシストロピン、バクメデシュ (b a
 c h m e d e s h)、バルバン、ヘキサフルオロケイ酸バリウム、多硫化バリウム、バル
 トリン、BCPC、ベフルブタミド、ベナラキシル、ベナラキシルM、ベナゾリン、ベナ
 ゴリンジメチルアンモニウム塩、ベナゾリンエチル、ベナゾリンカリウム塩、ベンカルバ
 ゴン、ベנקロチアズ、ベンダイオカルブ、ベンフルラリン、ベンフラカルブ、ベンフレ
 セート、ベノダニル、ベノミル、ベノキサコル、ベノキサホス、ベンキノックス、ベンス
 ルフロン、ベンスルフロンメチル、ベンスリド、ベンスルタップ、ベントルロン、ベント

10

20

30

40

50

ゾン、ベンタゾンナトリウム塩、ベンチアバリカルブ、ベンチアバリカルブイソプロピル、
 ベンチアゾール、ベントラニル、ベンザドックス、ベンザドックスアンモニウム塩、塩
 化ベンザルコニウム、ベンザマクリル、ベンザマクリルイソブチル、ベンザモルフ、ベン
 ズフェンジゾン、ベンジプラム、ベンゾビシクロン、ベンゾフェナップ、ベンゾフルオル
 、ベンゾヒドロキサム酸、ベンゾビンジフルピル、ベンゾキシメート、ベンゾイルプロッ
 プ、ベンゾイルプロップエチル、ベンズチアズロン、安息香酸ベンジル、ベンジルアデニ
 ン、ベルベリン、ベルベリン塩化物、ベータ・シフルトリン、ベータ・シペルメトリン、
 ベトキサジン、ビシクロピロン、ビフェナゼート、ビフェノックス、ビフェントリン、ビ
 フチュンツイ (b i f u j u n z h i)、ビラナホス、ビラナホスナトリウム塩、ビナパ
 クリル、ビンチンシャオ (b i n g q i n g x i a o)、ビオアレスリン、ビオエタノメ
 トリン (b i o e t h a n o m e t h r i n)、ビオペルメトリン、ビオレスメトリン、
 ビフェニル、ビスアジル、ビスメルチアゾール、ビスピリバック、ビスピリバックナトリ
 ウム塩、ビストリフルロン、ビテルタノール、ビチオノール、ビキサフェン、ブラストサ
 イジンS、ハウ砂、ボルドー液、ハウ酸、ボスカリド、ブラシノリド、ブラシノリドエチ
 ル、ブレビコミン、ブロジファクム、ブロフェンバレレート (b r o f e n v a l e r a
 t e)、ブロフルトリネート (b r o f l u t h r i n a t e)、ブロマシル、ブロマシ
 ルリチウム塩、ブロマシルナトリウム塩、ブロマジオロン、ブロメタリン、ブロメトリン
 (b r o m e t h r i n)、ブロムフェンビンホス、ブロモアセトアミド、ブロモボニル
 、ブロモブチド、ブロモシクレン、ブロモDDT、ブロモフェノキシム、ブロモホス、ブ
 ロモホスエチル、ブロモプロピレート、ブロモタロニル (b r o m o t h a l o n i l)
 、ブロモキシニル、ブロモキシニルブチラート、ヘプタン酸ブロモキシニル、オクタン酸
 ブロモキシニル、ブロモキシニルカリウム塩、ブロムピラゾン、ブロムコナゾール、ブロ
 ノポール、ブカルポラート、ブフェンカルブ、ブミナホス、ブピリメート、ブプロフェジ
 ン、バーガンディー混合物 (B u r g u n d y m i x t u r e)、ブスルファン、ブタ
 カルブ、ブタクロール、ブタフェナシル、ブタミホス、ブタチオホス、ブテナクロール、
 ブテトリン (b u t e t h r i n)、ブチダゾール、ブチオベート、ブチウロン、ブトカ
 ルボキシム、ブトネート、ブトピロノキシム、ブトキシカルボキシム、ブトルアリン、ブ
 トロキシジム、ブツロン、ブチルアミン、ブチレート、カコジル酸、カズサホス、カフェ
 ンストロール、ヒ酸カルシウム、塩素酸カルシウム、カルシウムシアナミド、多硫化カル
 シウム、カルビンホス、カンベンジクロル、カンフェクロル、カンファー、カプタホール
 、キャプタン、カルバモルフ、カーバノレート、カルバリル、カルバスラム、カルベンダ
 ジム、カルベンダジムベンゼンスルホン酸塩、カルベンダジム亜硫酸塩、カルベタミド、
 カルボフラン、二硫化炭素、四塩化炭素、カルボフェノチオン、カルボスルファン、カル
 ボキサゾール、カルボキシド (c a r b o x i d e)、カルボキシム、カルフェントラゾ
 ン、カルフェントラゾンエチル、カルプロバミド、カルタップ、カルタップ塩酸塩、カル
 バクロール、カルボン、CDEA、セロシジン、CEPC、セラルレ、チェシュハント混
 合物 (C h e s h u n t m i x t u r e)、キノメチオナート、キトサン、クロベンチ
 アゾン、クロメトキシフェン、クロラロース、クロランベン、クロランベンアンモニウム
 塩、クロランベンジオラミン、クロランベンメチル、クロランベンメチルアンモニウム塩
 、クロランベンナトリウム塩、クロラミンリン (c h l o r a m i n e p h o s p h o
 r u s)、クロラムフェニコール、クロラニホルメタン、クロラニル、クロラノクリル、
 クロラントラニルプロール、クロラジホップ、クロラジホッププロパルギル、クロラジン
 、クロルベンシド、クロルベンズロン、クロルビシクレン、クロルブロムロン、クロルブ
 ファム、クロルデン、クロルデコン、クロルジメホルム、塩酸クロルジメホルム、クロル
 エンペントリン (c h l o r e m p e n t h r i n)、クロレトキシホス、クロレッツロン
 、クロルフェナック、クロルフェナックアンモニウム塩、クロルフェナックナトリウム塩
 、クロルフェナピル、クロルフェナゾール、クロルフェネトール、クロルフェンプロップ
 、クロルフェンソン、クロルフェンスルフィド、クロルフェンビンホス、クロルフルアズ
 ロン、クロルフルラゾール、クロルフルレン、クロルフルレンメチル、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

10

20

30

40

50

ロルメホス、クロルメコート、クロルメコート塩化物、クロルニジン、クロルニトロフェン、クロロベンジレート、クロロジニトロナフタレン、クロロホルム、クロロメブホルム、クロロメチウロン、クロロネブ、クロロファシノン、クロロファシノンナトリウム塩、クロロピクリン、クロロポン、クロロプロピレート、クロロタロニル、クロロトルロン、クロロクスロン、クロロキシニル、クロルホニウム、クロルホニウム塩化物、クロルホキシム、クロルプラゾホス、クロルプロカルブ、クロルプロファム、クロルピリホス、クロルピリホスメチル、クロルキノックス、クロルスルフロロン、クロルタール、クロルタールジメチル、クロルタールモノメチル、クロルチアミド、クロルチオホス、クロゾリネート、コリン塩化物、クロマフェノジド、シネリン I、シネリン II、シネリン類、シニドンエチル、シンメチリン、シノスルフロロン、シオブチド、シサニリド (cisanilide)、シスメトリン、クラシホス、クレトジム、クリンバゾール、クリオジネート、クロジナホップ、クロジナホッププロパルギル、クロエトカルブ、クロフェンセット、クロフェンセットカリウム塩、クロフェンテジン、クロフィブリン酸、クロホップ、クロホップイソブチル、クロマゾン、クロメプロップ、クロプロップ、クロプロキシジム、クロピラリド、クロピラリドメチル、クロピラリドオラミン (clopyralid-olamine)、クロピラリドカリウム塩、クロピラリドトリス (2-ヒドロキシプロピル) アンモニウム塩、クロキントセット、クロキントセットメキシル、クロランスラム、クロランスラムメチル、クロサンテル、クロチアニジン、クロトリマゾール、クロキシホナック、クロキシホナックナトリウム塩、CMA、コドレルア、コロホネート、酢酸銅、アセト亜ヒ酸銅、ヒ酸銅、塩基性炭酸銅、水酸化銅、ナフテン酸銅、オレイン酸銅、オキシ塩化銅、ケイ酸銅、硫酸銅、クロム酸亜鉛銅 (copper zinc chromate)、クマクロール、クマフリル、クマホス、クマテトラリル、クミトエート、クモキシストロビン、クモキシストロビン、CPMC、CPMF、CPPC、クレダジン、クレゾール、クリミジン、クロタミトン、クロトキシホス、クルホメート、氷晶石、キュウルア、クフラネブ、クミルロン、クプロバム (cuprobam)、酸化第一銅、クルクメノール、シアナミド、シアナトリン、シアナジン、シアノフェンホス、シアノホス、シアントエート、シアントラニリプロール、シアゾファミド、シブトリン、シクラファミド、シクラニリド、シクレトリン、シクロエート、シクロヘキシミド、シクロプラート、シクロプロトリン、シクロピリモレート、シクロスルファミロン、シクロキシジム、シクルロン、シエノピラフェン、シフルフェナミド、シフルメトフェン、シフルトリン、シハロホップ、シハロホップブチル、シハロトリン、シヘキサチン、シミアゾール、シミアゾール塩酸塩、シモキサニル、シオメトリニル、シペンダゾール、シペルメトリン、シペルコート、塩化シペルコート、シフェノトリン、シプラジン、シプラゾール、シプロコナゾール、シプロジニル、シプロフラム、シプロミッド、シプロスルファミド、シロマジン、シチオアート、ダイムロン、ダラポン、ダラポンカルシウム塩、ダラポンマグネシウム塩、ダラポンナトリウム塩、ダミノジッド、タヨウトン (dayoutong)、ダゾメット、ダゾメットナトリウム塩、DBCP、d-カンファー、DCIP、DCPTA、DDT、デバカルブ、デカフェンチン、デカルボフラン、デヒドロ酢酸、デラクロール、デルタメトリン、デメフィオン、デメフィオン-O、デメフィオン-S、ジメトン、ジメトンメチル、ジメトン-O、ジメトン-O-メチル、ジメトン-S、ジメトン-S-メチル、ジメトン-S-メチルスルホン、デスメディファム、デスメトリン、d-ファンシルチュエビンチュツィ (d-fanshiluquebingjuzhi)、ジアフェンチウロン、ジアリホス、ジアレート、ジアミダホス、ケイ藻土、ダイアジノン、フタル酸ジブチル、コハク酸ジブチル、ジカンバ、ジカンバジグリコールアミン、ジカンバジメチルアンモニウム塩、ジカンバジオラミン、ジカンバイソプロピルアンモニウム塩、ジカンバメチル、ジカンバオラミン (dicamba-olamine)、ジカンバカリウム塩、ジカンバナトリウム塩、ジカンバトロラミン、ジカプトン、ジクロベニル、ジクロフェンチオン、ジクロフルアニド、ジクロロン、ジクロラル尿素 (dichloralurea)、ジクロルベンズロン (dichlorobenzuron)、ジクロフルレノール、ジクロフルレノールメチル、ジクロルメート、ジクロルミド、ジクロロフェン、ジクロルプロップ、ジクロルブ

10

20

30

40

50

ロップ 2-エチルヘキシル、ジクロロプロップブトチル、ジクロロプロップジメチルアン
 モニウム塩、ジクロロプロップエチルアンモニウム塩、ジクロロプロップイソクチル、ジ
 クロロプロップメチル、ジクロロプロップ P、ジクロロプロップ P 2-エチルヘキシル、
 ジクロロプロップ P ジメチルアンモニウム塩、ジクロロプロップカリウム塩、ジクロロプ
 ロップ P カリウム塩、ジクロロプロップ P ナトリウム塩、ジクロロプロップナトリウム塩
 、ジクロロボス、ジクロゾリン、ジクロブトラゾール、ジクロシメット、ジクロホップ、
 ジクロホップメチル、ジクロメジン、ジクロメジンナトリウム塩、ジクロラン、ジクロス
 ラム、ジコホル、ジクマロール、ジクレシル、ジクロトホス、ジシクラニル、ジシクロノ
 ン、ディルドリン、ジエノクロル、ジエタムコート、ジエタムコートジクロリド、ジエタ
 チル、ジエタチルエチル、ジエトフェンカルブ、ジエトラート、ジエチルピロカーボネー
 ト、ジエチルトルアミド、ジフェナクム、ジフェノコナゾール、ジフェノペンテン、ジフ
 ェノペンテンエチル、ジフェノキスロン、ジフェンゾコート、ジフェンゾコートメチル硫
 酸塩、ジフェチアロン、ジフロビダジン、ジフルベンズロン、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塩、ジフルメトリム、ジケグラック、ジケ
 グラックナトリウム塩、ジロール、ジマチフ (dimatif)、ジメフルトリン、ジメ
 ホックス、ジメフロン、ジメピペレート、ジメタクロン (dimetachlone)、
 ジメタン (dimetan)、ジメタカルブ (dimethacarb)、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、ジメチリモール、ジ
 メトエート、ジメトモルフ、ジメトリン、ジメチルカルバート、フタル酸ジメチル、ジメ
 チルビンホス、ジメチラン、ジメキサノ、ジミダゾン、ジモキシストロビン、ジネックス
 、ジネックスジクレキシシ、ティンチュンエツォ (dingjunezuo)、ジニコナ
 ザール、ジニコナゾール M、ジニトラミン、ジノブトン、ジノカップ、ジノカップ-4、
 ジノカップ-6、ジノクトン、ジノフェナート、ジノペントン、ジノプロップ、ジノサム
 、ジノセブ、酢酸ジノセブ、ジノセブアンモニウム塩、ジノセブジオラミン (dinos
 eb-diollamine)、ジノセブナトリウム塩、ジノセブトロラミン、ジノスルホ
 ン、ジノテフラン、ジノテルブ、酢酸ジノテルブ、ジノテルボン、ジオフェノラン、ジオ
 キサペンゾホス、ジオキサカルブ、ジオキサチオン、ダイファシノン、ダイファシノンナ
 トリウム塩、ジフェナミド、ジフェニルスルホン、ジフェニルアミン、ジプロパリン、ジ
 プロペトリン、ジピリチオン、ジクワット、ジクワットジプロミド、ディスパール A、ジ
 スル、ジスルフィラム、ジスルホトン、ジスルナトリウム、ジタリムホス、ジチアノン、
 ジチクロホス、ジチオエーテル、ジチオピル、ジウロン、d-リモネン、DMPA、DN
 OC、DNOC アンモニウム塩、DNOC カリウム塩、DNOC ナトリウム塩、ドデモル
 フ、酢酸ドデモルフ、安息香酸ドデモルフ、ドジシン、ドジシン塩酸塩、ドジシンナトリ
 ウム塩、ドジン、ドフェナピン、ドミニカル A、ドラメクチン、ドラゾキシロン、DSM
 A、ズフリン、EBEP、EBP、エクジステロン、エジフェンホス、エグリナジン、エ
 グリナジンエチル、エマメクチン、エマメクチン安息香酸塩、EMPC、エンペントリン
 、エンドスルファン、エンドタール、エンドタール二アンモニウム塩、エンドタール二カ
 リウム塩、エンドタール二ナトリウム塩、エンドチオン、エンドリン、エネストロブリン
 、エノキサストロビン、EPN、エポコレオン、エポフェノナン、エポキシコナゾール、
 エプリノメクチン、エプロナズ、EPTC、エルボン、エルゴカルシフェロール、アルル
 チシャンカオアン (erlujixiancaoan)、エスデパレトリン (esdep
 allethrine)、エスフェンバレレート、エスロプロカルブ、エタセラシル、エ
 タコナゾール、エタホス、エテム (etem)、エタボキサム、エタクロル (ethac
 hlor)、エタルフルラリン、エタメトスルフルロン、エタメトスルフルロンメチル、
 エタプロクロル (ethaprochlor)、エテホン、エチジムロン、エチオフェン
 カルブ、エチオレート、エチオン、エチオジン、エチプロール、エチリモール、エトエー
 トメチル、エトフメセート、エトヘキサジオール、エトプロホス、エトキシフェン、エト
 キシフェンエチル、エトキシキン、エトキシスルフロロン、エチクロゼート、ギ酸エチル、
 α-ナフタレン酢酸エチル、エチル DDD、エチレン、二臭化エチレン、二塩化エチレン
 、エチレンオキシド、エチリシン、エチル水銀 2, 3-ジヒドロキシプロピルメルカプチ

10

20

30

40

50

ド、酢酸エチル水銀、臭化エチル水銀、塩化エチル水銀、リン酸エチル水銀、エチノフェン、エトニプロミド、エトベンザニド、エトフェンプロックス、エトキサゾール、エトリジアゾール、エトリムホス、オイゲノール、E X D、ファモキサドン、ファミフル、フェンアミドン、フェナミノスルフ、フェナミンストロビン、フェナミホス、フェナパニル、フェナリモル、フェナシュラム、フェナザフロル、フェナザキン、フェンブコナゾール、酸化フェンブタスズ、フェンクロラゾール、フェンクロラゾールエチル、フェンクロルホス、フェンクロリム、フェネタカルブ、フェンフルトリン、フェンフラム、フェンヘキサミド、フェニトロパン、フェニトロチオン、フェンチュントン (f e n j u n t o n g)、フェノブカルブ、フェノブロップ、フェノブロップ3-ブトキシプロピル、フェノブロップブトメチル、フェノブロップブトチル、フェノブロップブチル、フェノブロップイソクチル、フェノブロップメチル、フェノブロップカリウム塩、フェノチオカルブ、フェノキサクリム、フェノキサニル、フェノキサブロップ、フェノキサブロップエチル、フェノキサブロップP、フェノキサブロップPエチル、フェノキサスルホン、フェノキシカルブ、フェンピクロニル、フェンピリトリン、フェンプロパトリン、フェンプロピジン、フェンプロピモルフ、フェンピラザミン、フェンピロキシメート、フェンリダゾン、フェンリダゾンカリウム塩、フェンリダゾンプロピル、フェンソン、フェンスルホチオン、フェンテラコール、フェンチアブロップ、フェンチアブロップエチル、フェンチオン、フェンチオン・エチル、フェンチン、酢酸フェンチン、塩化フェンチン、水酸化フェンチン、フェントラザミド、フェントリファニル、フェニユロン、フェニユロンT C A、フェンバレレート、ファーバム、フェリムゾン、硫酸第一鉄、フィプロニル、フランブロップ、フランブロップイソプロピル、フランブロップM、フランブロップメチル、フランブロップMイソプロピル、フランブロップMメチル、フラザスルフロニ、フロクマフェン、フロメトキン、フロニカミド、フロラスラム、フルアクリピリム、フルアジホップ、フルアジホップブチル、フルアジホップメチル、フルアジホップP、フルアジホップPブチル、フルアジナム、フルアゾレート、フルアズロン、フルベンジアミド、フルベンジミン、フルカルバゾン、フルカルバゾンナトリウム塩、フルセトスルフロニ、フルクロラリン、フルコフロニ、フルシクロクスロン、フルシトリネート、フルジオキソニル、フルエネチル、フルエンスルホン、フルフェナセット、フルフェネリム、フルフェニカン、フルフェノクスロン、フルフェノキシストロビン、フルフェンプロックス、フルフェンピル、フルフェンピルエチル、フルフィプロール、フルメトリン、フルメトベル、フルメトラリン、フルメツラム、フルメジン、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、フルモルフ、フルオメツロン、フルピコリド、フルオピラム、フルオルベンシド、フルオリダミド、フルオロアセトアミド、フロロジフェン、フルオログリコフェン、フルオログリコフェンエチル、フルオルイミド、フルオロミジン、フルオロニトロフェン、フルオチウロン、フルオトリマゾール、フルオキサストロビン、フルポキサム、フルプロパシル、フルプロバジン、フルプロパネート、フルプロパネートナトリウム塩、フルピラジフロニ、フルピルスルフロニ、フルピルスルフロニメチル、フルピルスルフロニメチルナトリウム塩、フルキンコナゾール、フルラゾール、フルレノール、フルレノールブチル、フルレノールメチル、フルリドン、フルロクロリドン、フルロキシピル、フルロキシピルブトメチル、フルロキシピルメブチル、フルルプリミドール、フルルスルアミド (f l u r s u l a m i d)、フルルタモン、フルシラゾール、フルスルファミド、フルチアセット、フルチアセットメチル、フルチアニル、フルトラニル、フルトリアホール、フルバリネート、フルキサピロキサド、フルキソフェニム、ホルベット、ホメサフェン、ホメサフェンナトリウム塩、ホノホス、ホラムスルフロニ、ホルクロルフェニユロン、ホルムアルデヒド、ホルメタネート、塩酸ホルメタネート、ホルモチオン、ホルムパラネート、塩酸ホルムパラネート、ホサミン、ホサミンアンモニウム、ホセチル、ホセチルアルミニウム、ホスメチラン、ホスピレート、ホスチアゼート、ホスチエタン、フロンタリン、フベリダゾール、フカオチン (f u c a o j i n g)、フカオミ (f u c a o m i)、フナイヒカオリン (f u n a i h e c a o l i n g)、フフェンチオ尿素 (f u p h e n t h i o u r e a)、フララン (f u r a l a n e)、フララキシル、フラメトリン、

10

20

30

40

50

フラメトピル、フラチオカルブ、フルカルバニル、フルコナゾール、フルコナゾール・シ
 ス、フレトリン (furethrin)、フルフラール、フリラゾール、フルメシクロッ
 クス、フロファネート、フリロキシフェン、ガンマシハロトリン、ガンマHCH、ジェニ
 ット (genit)、ジベレリン酸、ジベレリン類、グリフトル (gliftor)、グ
 ルホシネート、グルホシネートアンモニウム塩、グルホシネートP、グルホシネートPア
 ンモニウム塩、グルホシネートPナトリウム塩、グリオジン、グリオキシム、グリホサー
 ト、グリホサートジアンモニウム塩、グリホサートジメチルアンモニウム塩、グリホサー
 トイソプロピルアンモニウム塩、グリホサートモノアンモニウム塩、グリホサートカリウ
 ム塩、グリホサートセスキナトリウム塩、グリホサートトリメシウム塩、グリホシン、ゴ
 シップルア、グランドルア、グリセオフルビン、グアザチン、酢酸グアザチン、ハラクリ
 ネート、ハラウキシフェン、ハラウキシフェンメチル、ハルフェンブロックス、ハロフェ
 ノジド、ハロサフェン、ハロスルフロン、ハロスルフロンメチル、ハロキシジン、ハロキ
 シホップ、ハロキシホップエトチル、ハロキシホップメチル、ハロキシホップP、ハロキ
 シホップPエトチル、ハロキシホップPメチル、ハロキシホップナトリウム塩、HCH、
 ヘメル (hemel)、ヘンパ、HEOD、ヘプタクロル、ヘプタフルトリン、ヘプテノ
 ホス、ヘプトパルギル、ハービマイシン、ヘテロホス、ヘキサクロロアセトン、ヘキサク
 ロロベンゼン、ヘキサクロロブタジエン、ヘキサクロロフェン、ヘキサコナゾール、ヘキ
 サフルムロン、ヘキサフルラート (hexaflurate)、ヘキサルア、ヘキサミド
 、ヘキサジノン、ヘキシルチオホス、ヘキシチアゾクス、HHDN、ホロスルフ、ファン
 カイウォ (huancaiwo)、ファンカオリン (huangcaoling)、ファン
 チュンツォ (huanjunzuo)、ヒドラメチルノン、ヒドラガフェン、消石灰、
 シアン化水素、ヒドロプレン、ヒメキサゾール、ヒキンカルブ、IAA、IBA、イカリ
 ジン、イマザリル、イマザリルニトラート、硫酸イマザリル、イマザメタベンズ、イマザ
 メタベンズメチル、イマザモックス、イマザモックスアンモニウム塩、イマザピック、イ
 マザピックアンモニウム塩、イマザピル、イマザピルイソプロピルアンモニウム塩、イマ
 ザキン、イマザキンアンモニウム塩、イマザキンメチル、イマザキンナトリウム塩、イマ
 ゼタピル、イマゼタピルアンモニウム塩、イマゾスルフロン、イミベンコナゾール、イミ
 シアホス、イミダクロプリド、イミダクロチズ、イミノクタジン、イミノクタジン酢酸塩
 、イミノクタジンアルベシル酸塩、イミプロトリン、イナベンフィド、インダノファン、
 インダジフラム、インドキサカルブ、イネジン、ヨードボニル、ヨードカルブ、ヨードメ
 タン、ヨードスルフロン、ヨードスルフロンメチル、ヨードスルフロンメチルナトリウム
 塩、ヨーフェンスルフロン、ヨーフェンスルフロンナトリウム塩、アイオキシニル、アイ
 オキシニルオクタノアート、アイオキシニルリチウム塩、アイオキシニルナトリウム塩、
 イパジン、イブコナゾール、イブフェンカルバゾン、イブプロベンホス、イブプロジオン、イ
 ブロバリカルブ、イブリミダム、イブスジェノール、イブセノール、IPSP、イサミド
 ホス、イサゾホス、イソベンザン、イソカルバミド、イソカルボホス、イソシル、イソド
 リン、イソフェンホス、イソフェンホスメチル、イソフェタミド、イソラン、イソメチオ
 ジン、イソノルロン、イソポリネート、イソプロカルブ、イソプロパリン、イソプロチオ
 ラン、イソプロツロン、イソピラザム、イソピリモール、イソチオエート、イソチアニル
 、イソウロン、イソバレジオン、イソキサベン、イソキサクロルトール、イソキサジフェ
 ン、イソキサジフェンエチル、イソキサフルトール、イソキサピリホップ、イソキサチオ
 ン、イベルメクチン、イゾパンホス (izopamfos)、ジャポニルア、ジャポトリ
 ン (japothrin) 類、ジャスモリンI、ジャスモリンII、ジャスモン酸、チア
 ファンチョンツォン (jiahuangchongzong)、チアチツェンシアオリン
 (jiajizengxiaolin)、チアシェンチュンツィ (jiaxiangjunzhi)、チエカオワン (jiecaowan)、チエカオシ (jiecaoxi)、
 ヨードフェンホス、幼若ホルモンI、幼若ホルモンII、幼若ホルモンIII、カデスリ
 ン、カルブチレート、カレタザン、カレタザンカリウム塩、カスガマイシン、カスガマイ
 シン塩酸塩、ケチュンリン (kejunlin)、ケレバン、ケトスピラドックス、ケト
 スピラドックスカリウム、カイネチン、キノプレン、クレソキシムメチル、クイカオシ (

10

20

30

40

50

kuicaoxi)、ラクトフェン、ラムダシハロトリン、ラチルア、ヒ酸鉛、レナシル、レピメクチン、レプトホス、リンデン、リネアチン、リニュロン、リリムホス、リトルア、ルーブルア、ルフェヌロン、ルヴティンチュンツィ(lvdingjunzhi)、ルヴシアンカオリン(lvxiancaolin)、リチダチオン、MAA、マラチオン、マレイン酸ヒドラジド、マロノベン、マルトデキストリン、MAMA、マンカップ、マンゼブ、マンジプロパミド、マンネブ、マトリン、マジドックス、MCPA、MCPA 2-エチルヘキシル、MCPAブトチル、MCPAブチル、MCPAジメチルアンモニウム塩、MCPAジオラミン、MCPAエチル、MCPAイソブチル、MCPAイソクチル、MCPAイソプロピル、MCPAメチル、MCPAオラミン、MCPAカリウム塩、MCPAナトリウム塩、MCPAチオエチル、MCPAトロラミン、MCPB、MCPBエチル、MCPBメチル、MCPBナトリウム塩、メベニル、メカルバム、メカルペンジド、メカルホン、メコプロップ、メコプロップ 2-エチルヘキシル、メコプロップジメチルアンモニウム塩、メコプロップジオラミン、メコプロップエタジル、メコプロップイソクチル、メコプロップメチル、メコプロップP、メコプロップP 2-エチルヘキシル、メコプロップPジメチルアンモニウム塩、メコプロップPイソブチル、メコプロップカリウム塩、メコプロップPカリウム塩、メコプロップナトリウム塩、メコプロップトロラミン、メジメホルム(medimeform)、メジノテルブ、メジノテルブアセタート、メドルア、メフェナセット、メフェンピル、メフェンピルジエチル、メフルイジド、メフルイジドジオラミン、メフルイジドカリウム塩、メガトモ酸、メナゾン、メパニピリム、メペルフルトリン、メフェナート、メホスホラン、メピコート、メピコートクロリド、メピコート五ホウ酸塩、メプロニル、メプチルジノカップ、塩化第二水銀、酸化水銀、塩化第一水銀、メルホス、メソプラジン、メソスルフロニ、メソスルフロニメチル、メソトリオン、メスルフェン、メスルフェンホス、メタフルミゾン、メタラキシル、メタラキシルM、メタアルデヒド、カーバム、カーバムアンモニウム塩、メタミホップ、メタミトロン、カーバムカリウム塩、カーバムナトリウム塩、メタザクロール、メタゾスルフロニ、メタゾキシロン、メトコナゾール、メテパ(metepa)、メトフルラゾン、メタベンズチアズロン、メタクリホス、メタルプロパリン、メタミドホス、メタスルホカルブ、メサゾール、メトフロキサム、メチダチオン、メチオベンカルブ、メチオカルブ、メチオピリスルフロニ(methiopyrisulfuron)、メチオテパ、メチオゾリン、メチウロン、メトクロトホス、メトメトン、メソミル、メトプレニ、メトプロトリン、メトキンブチル、メトトリン、メトキシクロル、メトキシフェノジド、メトキシフェノン、メチルアホラート、臭化メチル、メチルオイゲノール、ヨウ化メチル、イソチオシアン酸メチル、メチルアセトホス(methylacetophos)、メチルクロロホルム、メチルダイムロン、塩化メチレン、安息香酸メチル水銀、メチル水銀ジシアンジアミド、メチル水銀ペンタクロロフェノキシド、メチルネオデカナミド、メチラム、メトベンズロン、メトブロムロン、メトフルトリン、メトラクロール、メトルカルブ、メトミノストロビン、メトスラム、メトキサジアゾン、メトキスロン、メトラフェノン、メトリブジン、メトスルホバックス、メトスルフロニ、メトスルフロニメチル、メビンホス、メキサカルベート、ミエシュアン(mieshuan)、ミルベメクチン、ミルベマイシンオキシム、ミルネブ、ミパホックス、マイレックス、MNAF、モクチュン(moguchun)、モリネート、モロスルタップ(molosultap)、モナリッド、モニソウロン、モノクロロ酢酸、モノクロトホス、モノリニュロン、モノスルフロニ、モノスルフロニエステル、モニュロン、モニュロンTCA、モルファムコート、モルファムコートジクロリド、モロキシジン、モロキシジン塩酸塩、モルホチオン、モルジド(morzid)、モキシダクチン、MSMA、ムスカルア、ミクロブタニル、ミクロゾリン、N-(エチル水銀)-p-トルエンスルホンアニリド、ナーバム、ナフタロホス、ナレッド、ナフタレン、ナフタレンアセトアミド、無水ナフタル酸、ナフトキシ酢酸、ナプロアニリド、ナプロパミド、ナプタラム、ナプタラムナトリウム塩、ナタマイシン、ネブロン、ニクロサミド、ニクロサミドオラミン、ニコスルフロニ、ニコチン、ニフルリジド、ニピラクロフェン、ニテンピラム、ニチアジン、ニトラリン、ニトラピリン、ニトリラカルブ、ニトロフェン、

10

20

30

40

50

ニトロフルオルフェン、ニトロスチレン、ニトロタル・イソプロピル、ノルボルミド、ノ
 ルフルラゾン、ノルニコチン、ノルロン、ノバルロン、ノビフルムロン、ヌアリモール、
 OCH、オクタクロロジプロピルエーテル、オクチリノン、オフラセ、オメトエート、オ
 ルベンカルブ、オルフラルア、オルトジクロロベンゼン、オルトスルファミロン、オリク
 タルア、オリサストロピン、オリザリン、オストール、オストラモン (ost ramon
 e)、オキサベトリニル、オキサジアルギル、オキサジアゾン、オキサジキシル、オキサ
 マート (ox amate)、オキサミル、オキサピラゾン、オキサピラゾンジモラミン (o
 xapyrazone-dimolamine)、オキサピラゾンナトリウム、オキサ
 スルフロン、オキサチアピプロリン、オキサジクロメホン、オキシ銅、オキシリニック
 酸、オキスポコナゾール、オキスポコナゾールフマル酸塩、オキシカルボキシン、オキシ
 ジメトンメチル、オキシデプロホス、オキシジスルホトン、オキシフローフェン、オキシ
 マトリン、オキシテトラサイクリン、オキシテトラサイクリン塩酸塩、パクロブトラゾー
 ル、パイチョンティン (paichongding)、パラジクロロベンゼン、パラフル
 ロン、パラコート、パラコートジクロリド、パラコートジメチル硫酸塩、パラチオン、パ
 ラチオンメチル、パリノール、ペブレート、ペフラゾエート、ペラルゴン酸、ペンコナゾ
 ール、ペンシクロン、ペンディメタリン、ペンフルフェン、ペンフルロン、ペノキススラ
 ム、ペントクロロフェノール、ラウリン酸ペンタクロロフェニル、ペントノクロール、ペ
 ンチオピラド、ペントメトリン (pentmethrin)、ペントキサゾン、ペルフル
 イドン、ペルメトリン、ペトキサミド、フェナマクリル、フェナジンオキシド、フェニソ
 ファム、フェンカプトン、フェンメディファム、フェンメディファムエチル、フェノベン
 ズロン、フェノトリン、フェンプロキシド (phenproxide)、フェントエート
 、フェニルマーキュリ尿素 (phenylmercuriurea)、酢酸フェニル水銀
 、塩化フェニル水銀、ピロカテコールのフェニル水銀誘導体、硝酸フェニル水銀、サリチ
 ル酸フェニル水銀、ホレート、ホサセチム、ホサロン、ホスダイフェン、ホスホラン、ホ
 スホランメチル、ホスグリシン (phosglycin)、ホスメット、ホスニクロル、
 ホスファミドン、ホスフィン、ホスホカルブ、リン、ホスチン (phostin)、ホキ
 シム、ホキシムメチル、フタリド、ピクロラム、ピクロラム 2-エチルヘキシル、ピクロ
 ラムイソクチル、ピクロラムメチル、ピクロラムオラミン、ピクロラムカリウム、ピクロ
 ラムトリエチルアンモニウム塩、ピクロラムトリス (2-ヒドロキシプロピル) アンモニ
 ウム塩、ピコリナフェン、ピコキシストロピン、ピンドン、ピンドンナトリウム塩、ピノ
 キサデン、ピペラリン、ピペロニルブトキシド、ピペロニルシクロネン、ピペロホス、ピ
 プロクタニル、臭化ピプロクタニル、ピプロタール (piprotal)、ピリメタホス
 、ピリミカーブ、ピリミオキシホス、ピリミホスエチル、ピリミホスメチル、プリフェナ
 ート、ポリカルバメート、ポリオキシシン類、ポリオキシリム、ポリオキシリム亜鉛、ポリ
 チアラン (polythialan)、亜ヒ酸カリウム、アジ化カリウム、シアン酸カリ
 ウム、ジベレリン酸カリウム、ナフテン酸カリウム、多硫化カリウム、チオシアン酸カリ
 ウム、 α -ナフタレン酢酸カリウム、pp'-DDT、プラレトリン、プレコセン I、プ
 レコセン II、プレコセン III、プレチラクロール、プリミドホス、プリミスルフロン
 、プリミスルフロンメチル、プロベナゾール、プロクロラズ、プロクロラズマンガン塩、
 プロクロノール、プロシアジン、プロシミドン、プロジアミン、プロフェノホス、プロフ
 ルアゾール、プロフルラリン、プロフルトリン、プロホキシジム、プログリナジン、プロ
 グリナジンエチル、プロヘキサジオン、プロヘキサジオンカルシウム塩、プロヒドロジャ
 スモン、プロマシル、プロメカルブ、プロメトン、プロメトリン、プロムリット、プロパ
 クロール、プロパミジン、プロパミジン二塩酸塩、プロパモカルブ、プロパモカルブ塩酸
 塩、プロパニル、プロパホス、プロパキザホップ、プロパルギット、プロパルトリン、プ
 ロパジン、プロペタムホス、プロファミ、プロピコナゾール、プロピネブ、プロピソクロ
 ール、プロボキスル、プロボキシカルバゾン、プロボキシカルバゾンナトリウム塩、プロ
 ピルイソム (propyl isome)、プロピリスルフロン、プロピザミド、プロキ
 ナジド、プロスレル (prosuler)、プロスルファリン、プロスルホカルブ、プロ
 スルフロン、プロチダチオン、プロチオカルブ、プロチオカルブ塩酸塩、プロチオコナゾ

10

20

30

40

50

50

チアメトキサム、チアプロニル (thiapronil)、チアザフルロン、チアゾピル、チクロホス、チシオフエン、チジアジミン、チジアズロン、チエンカルバゾン、チエンカルバゾンメチル、チフェンスルフロン、チフェンスルフロンメチル、チフルザミド、チオベンカルブ、チオカルボキシム、チオクロルフェンヒム、チオシクラム、チオシクラム塩酸塩、チオシクラムシュウ酸塩、チオジアゾール銅、チオジカルブ、チオフアノックス、チオフルオキシメート (thiofluoximate)、チオヘンパ (thiohempa)、チメロサル、チオメトン、チオナジン、チオフアネート、チオフアネートメチル、チオキノックス、チオセミカルバジド、チオスルタップ、チオスルタップニアンモニウム塩、チオスルタップナトリウム塩、チオスルタップモノナトリウム塩、チオテパ、チウラム、ツリンギエンシン、チアジニル、ティアオチエアン (tiaojiean)、チオカルバジル、チオクロリム、チオキシミド、チルパート、トルクロホスメチル、トルフェンピラド、トルプロカルブ、トリルフルアニド、酢酸トリル水銀、トプラメゾン、トラルコキシジム、トラロシトリン、トラロメトリン、トラロピリル、トランスフルトリン、トランスペルメトリン、トレタミン、トリアコンタノール、トリアジメホン、トリアジメノール、トリアファモン、トリアレート、トリアミホス、トリアペンテノール、トリアラテン、トリアリモール、トリアスルフロン、トリアザメート、トリアズブチル、トリアジフラム、トリアゾホス、トリアゾキシド、トリベニユロン、トリベニユロンメチル、トリブホス、酸化トリブチルスズ、トリカンバ、トリクラミド、トリクロルホン、トリクロロメタホス-3、トリクロロナート、トリクロピル、トリクロピルブトチル、トリクロピルエチル、トリクロピリカルブ、トリクロピルトリエチルアンモニウム塩、トリシクラゾール、トリデモルフ、トリジファン、トリエタジン、トリフェンモルフ、トリフェノホス、トリフロキシストロビン、トリフロキシスルフロン、トリフロキシスルフロンナトリウム塩、トリフルミゾール、トリフルムロン、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メチル、トリホップ、トリホップメチル、トリホブシム、トリホリン、トリヒドロキシトリアジン、トリメドルア、トリメタカルブ、トリメツロン (trimeturon)、トリネキサバック、トリネキサバックエチル、トリブレン、トリプロピンダン、トリプトリド、トリタック (tritac)、トリチコナゾール、トリトスルフロン、トランクコール (trunc-call)、ウニコナゾール、ウニコナゾールP、アーバサイド (urbacide)、ウレデパ、吉草酸エステル、バリダマイシン、バリフェナレート、バロン (valone)、バミドチオン、バンガード (vanguard)、バニリプロール、バーナレート、ビンクロゾリン、ワルファリン、ワルファリンカリウム、ワルファリンナトリウム、シャオチョンリウリン (xiaochongliulin)、シンチュンアン (xinjunan)、シウォチュンアン (xiwojunan)、XM C、キシラクロル、キシレノール類、キシリルカルブ、イシチン (yishijing)、ザリラミド、ゼアチン、ツェンシャオアン (zengxiaoan)、ゼータシベルメトリン、ナフテン酸亜鉛、リン化亜鉛、チアゾール亜鉛、ジネブ、ジラム、ゾラプロホス、ゾキサミド、ツォミファンロン (zuomihunaglong)、 α -クロロヒドリン、 α -エクジソン、 α -ムルチストリアチンおよび α -ナフタレン酢酸の1種若しくはそれ以上をさらに含んでなる、請求項9または10に記載の農薬組成物。

【請求項12】

請求項9～11のいずれか1つに記載の農薬組成物を、病害虫を防除するために、前記病害虫を防除するのに十分な量で、病害虫の棲息し得る場所に適用することを含んでなる方法。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本文書に開示される発明は、農薬（例えばダニ駆除剤、殺虫剤、軟体類駆除剤および殺線虫剤）として有用である分子の製造方法、こうした分子、ならびに病害虫を防除するためのこうした分子の使用方法の分野に関する。

【背景技術】

【0002】

病害虫は毎年世界中で数百万のヒトの死亡を引き起こす。さらに、農業における損失を引き起こす1万種以上の病害虫が存在する。世界の農業損失は毎年合計数十億米ドルに達する。

【0003】

シロアリは全部の種類、私有および公共建造物に対する損傷を引き起こす。世界のシロアリ被害の損失は毎年数十億米ドルに達する。

【0004】

貯蔵食品害虫は貯蔵食品を食べかつ質を落とす。世界の貯蔵食品の損失は毎年数十億米ドルに達するが、しかしより重要には、必要とされる食物を人々から奪う。

10

【0005】

新たな農薬に対する急性の必要性が存在する。ある種の病害虫は現在使用中の農薬に対する耐性を発生しつつある。数百種の病害虫が1種若しくはそれ以上の農薬に耐性である。DDT、カーバメート類および有機リン化合物のようなより古い農薬のいくつかに対する耐性の発生は公知である。しかし、耐性はより新しい農薬のいくつか例えばイミダクロプリドに対してさえ発生している。

【0006】

従って、上の理由を包含する多くの理由上、必要性が新たな農薬に対し存在する。

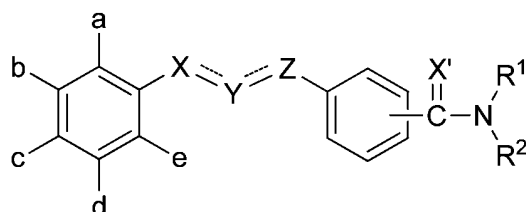
【0007】

DeMasseyらは以下の構造を開示する。より詳細については特許文献1を参照されたい。

20

【0008】

【化1】



30

【先行技術文献】

【特許文献】

【0009】

【特許文献1】第US 2002/0068838号明細書

【発明の概要】

【0010】

[発明の要約]

定義

該定義に示される例は一般に網羅的でなく、そして本文書に開示される発明を制限すると解釈されてはならない。置換基は、それが結合されている特定の分子に関する化学結合則および立体適合性の制約に従うはずであることが理解される。

40

【0011】

「アルケニル」は、炭素および水素よりなる非環式、不飽和（最低1個の炭素-炭素二重結合）、分枝状若しくは非分枝状の置換基、例えばビニル、アリル、ブテニル、ペンテニルおよびヘキセニルを意味している。

【0012】

「アルケニルオキシ」は、炭素-酸素単結合よりさらになるアルケニル、例えばアリルオキシ、ブテニルオキシ、ペンテニルオキシ、ヘキセニルオキシを意味している。

【0013】

「アルコキシ」は、炭素-酸素単結合よりさらになるアルキル、例えばメトキシ、エト

50

キシ、プロポキシ、イソプロポキシ、ブトキシ、イソブトキシおよびtert-ブトキシを意味している。

【0014】

「アルキル」は、炭素および水素よりなる非環式、飽和、分枝状若しくは非分枝状の置換基、例えばメチル、エチル、n-プロピルおよびイソプロピルを表す(C₃)アルキル、n-ブチル、sec-ブチル、イソブチルおよびtert-ブチルを表す(C₄)アルキルを意味している。

【0015】

「アルキニル」は、炭素および水素よりなる非環式、不飽和（最低1個の炭素-炭素三重結合）、分枝状若しくは非分枝状の置換基、例えばエチニル、プロパルギル、ブチニルおよびペンチニルを意味している。

10

【0016】

「アルキニルオキシ」は、炭素-酸素単結合よりさらになるアルキニル、例えばペンチニルオキシ、ヘキシニルオキシ、ヘプチニルオキシおよびオクチニルオキシを意味している。

【0017】

「アリール」は、水素および炭素よりなる環状芳香族置換基、例えばフェニル、ナフチルおよびビフェニルを意味している。

【0018】

「シクロアルケニル」は、炭素および水素よりなる単環若しくは多環不飽和（最低1個の炭素-炭素二重結合）の置換基、例えばシクロブテニル、シクロペンテニル、シクロヘキセニル、ノルボルネニル、ビシクロ[2.2.2]オクテニル、テトラヒドロナフチル、ヘキサヒドロナフチルおよびオクタヒドロナフチルを意味している。

20

【0019】

「シクロアルケニルオキシ」は、炭素-酸素単結合よりさらになるシクロアルケニル、例えばシクロブテニルオキシ、シクロペンテニルオキシ、ノルボルネニルオキシおよびビシクロ[2.2.2]オクテニルオキシを意味している。

【0020】

「シクロアルキル」は、炭素および水素よりなる単環若しくは多環飽和置換基、例えばシクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、ノルボルニル、ビシクロ[2.2.2]オクチルおよびデカヒドロナフチルを意味している。

30

【0021】

「シクロアルコキシ」は、炭素-酸素単結合よりさらになるシクロアルキル、例えばシクロプロピルオキシ、シクロブチルオキシ、シクロペンチルオキシ、ノルボルニルオキシおよびビシクロ[2.2.2]オクチルオキシを意味している。

【0022】

「ハロ」はフルオロ、クロロ、ブロモおよびヨードを意味している。

【0023】

「ハロアルコキシ」は、1個から最大の可能な数までの同一若しくは異なるハロよりさらになるアルコキシ、例えばフルオロメトキシ、トリフルオロメトキシ、2,2-ジフルオロプロポキシ、クロロメトキシ、トリクロロメトキシ、1,1,2,2-テトラフルオロエトキシおよびペンタフルオロエトキシを意味している。

40

【0024】

「ハロアルキル」は、1個から最大の可能な数までの同一若しくは異なるハロよりさらになるアルキル、例えばフルオロメチル、トリフルオロメチル、2,2-ジフルオロプロピル、クロロメチル、トリクロロメチルおよび1,1,2,2-テトラフルオロエチルを意味している。

【0025】

「ヘテロシクリル」は、完全に飽和、部分的に不飽和若しくは完全に不飽和でありうる環状置換基を意味しており、該環状構造は最低1個の炭素および最低1個のヘテロ原子を

50

含有し、前記ヘテロ原子は窒素、イオウ若しくは酸素である。イオウの場合、その原子はスルホキシドおよびスルホンのような他の酸化状態にあることができる。芳香族ヘテロシクリルの例は、限定されるものでないが、ベンゾフラニル、ベンゾイソチアゾリル、ベンゾイソオキサゾリル、ベンゾオキサゾリル、ベンゾチエニル、ベンゾチアゾリル、シンノリニル、フラニル、イミダゾリル、インダゾリル、インドリル、イソインドリル、イソキノリニル、イソチアゾリル、イソオキサゾリル、オキサジアゾリル、オキサゾリニル、オキサゾリル、フタラジニル、ピラジニル、ピラゾリニル、ピラゾリル、ピリダジニル、ピリジリル、ピリミジニル、ピロリル、キナゾリニル、キノリニル、キノキサリニル、テトラゾリル、チアゾリニル、チアゾリル、チエニル、トリアジニルおよびトリアゾリルを挙げることができる。完全に飽和のヘテロシクリルの例は、限定されるものでないが、ピペラジニル、ピペリジニル、モルホリニル、ピロリジニル、オキセタニル、テトラヒドロフラニル、テトラヒドロチエニルおよびテトラヒドロピラニルを挙げることができる。部分的に不飽和のヘテロシクリルの例は、限定されるものでないが、1, 2, 3, 4-テトラヒドロキノリニル、4, 5-ジヒドロ-オキサゾリル、4, 5-ジヒドロ-1H-ピラゾリル、4, 5-ジヒドロ-イソオキサゾリルおよび2, 3-ジヒドロ-[1, 3, 4]-オキサジアゾリルを挙げることができる。

10

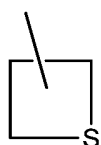
【0026】

付加的な例は以下

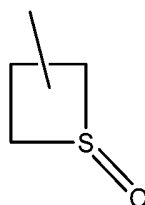
【0027】

【化2】

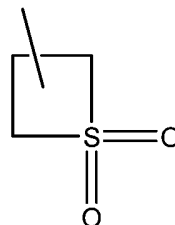
20



チエタニル



チエタニルーオキシド



チエタニルージオキシド

【0028】

30

を包含する。

【発明を実施するための形態】

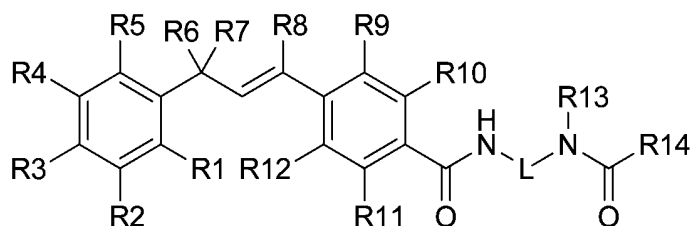
【0029】

[発明の詳細な記述]

本文書は、以下の式（「式1」）：

【0030】

【化3】



40

【0031】

を有する分子を開示し、

式中：

(a) R1、R2、R3、R4およびR5は、それぞれ独立に、H、F、Cl、Br、I、CN、(C₁-C₆)アルキル、(C₁-C₆)ハロアルキル、(C₁-C₆)アルコキシ若しくは(C₁-C₆)ハロアルコキシであり；

50

- (b) R 6 は (C₁ - C₆) ハロアルキルであり；
 (c) R 7 は H であり；
 (d) R 8 は H、(C₁ - C₆) アルキル若しくは (C₁ - C₆) ハロアルキルであり；
 (e) R 9 は H、F、Cl、Br、I、(C₁ - C₆) アルキル若しくは (C₁ - C₆) ハロアルキルであり；
 (f) R 10 は F、Cl、Br、I、(C₁ - C₆) アルキル若しくは (C₁ - C₆) ハロアルキルであり；
 (g) R 11 および R 12 は、それぞれ独立に、H、F、Cl、Br、I、(C₁ - C₆) アルキル若しくは (C₁ - C₆) ハロアルキルであり；
 (h) L は

10

(1) 2 個の窒素原子を結合する結合であるリンカー、または
 (2) 1 個若しくはそれ以上の置換基で場合によっては置換されている (C₁ - C₆) アルキルで、ここで各置換基は、F、Cl、Br、I、CN、OH、オキソ、(C₁ - C₆) アルコキシ、S (C₁ - C₆) アルキル、S (O) (C₁ - C₆) アルキル、S (O)₂ (C₁ - C₆) アルキル、および N ((C₁ - C₆) アルキル)₂ から独立に選択され、ここで、各 (C₁ - C₆) アルキルが独立に選択され、各前記アルキル若しくはアルコキシは H、F、Cl、Br および I から独立に選択される 1 個若しくはそれ以上の置換基を有し
 であり；

(i) R 13 は

20

(1) H、または
 (2) 1 個若しくはそれ以上の置換基で場合によっては置換されている (C₁ - C₆) アルキルで、ここで各置換基は、F、Cl、Br、I、CN、OH、オキソ、(C₁ - C₆) アルコキシ、S (C₁ - C₆) アルキル、S (O) (C₁ - C₆) アルキル、S (O)₂ (C₁ - C₆) アルキル、および N ((C₁ - C₆) アルキル)₂ から独立に選択され、ここで、各 (C₁ - C₆) アルキルが独立に選択され、各前記アルキル若しくはアルコキシは H、F、Cl、Br および I から独立に選択される 1 個若しくはそれ以上の置換基を有し
 であり；ならびに

(j) R 14 は、(C₁ - C₈) アルキル、(C₁ - C₈) ハロアルキル、(C₃ - C₈) シクロアルキル、(C₂ - C₈) アルケニル若しくは (C₂ - C₈) アルキニルから独立に選択され、ここで各前記アルキル、ハロアルキル、シクロアルキル、アルケニルおよびアルキニルは、F、Cl、Br、I、CN、NO₂、OH、オキソ、(C₁ - C₆) アルコキシ、S (C₁ - C₆) アルキル、S (O) (C₁ - C₆) アルキル、S (O)₂ (C₁ - C₆) アルキル、および N ((C₁ - C₆) アルキル)₂ から選択される 1 個若しくはそれ以上の置換基を有し、ここで、各 (C₁ - C₆) アルキルが独立に選択され、各前記アルキル若しくはアルコキシは H、F、Cl、Br および I から独立に選択される 1 個若しくはそれ以上の置換基を有する。

30

【0032】

本発明の別の態様において、R 1 は H である。本態様は、R 2、R 3、R 4、R 5、R 6、R 7、R 8、R 9、R 10、R 11、R 12、R 13、R 14 および L の他の態様と組合せて使用しうる。

40

【0033】

本発明の別の態様において、R 2 は Cl 若しくは Br である。本態様は、R 1、R 3、R 4、R 5、R 6、R 7、R 8、R 9、R 10、R 11、R 12、R 13、R 14 および L の他の態様と組合せて使用しうる。

【0034】

本発明の別の態様において、R 3 は H、F、Cl 若しくは Br である。本態様は、R 1、R 2、R 4、R 5、R 6、R 7、R 8、R 9、R 10、R 11、R 12、R 13、R 14 および L の他の態様と組合せて使用しうる。

【0035】

本発明の別の態様において、R 4 は Cl 若しくは Br である。本態様は、R 1、R 2、

50

R 3、R 5、R 6、R 7、R 8、R 9、R 10、R 11、R 12、R 13、R 14およびLの他の態様と組合せて使用しうる。

【0036】

本発明の別の態様において、R 5はHである。本態様は、R 1、R 2、R 3、R 4、R 6、R 7、R 8、R 9、R 10、R 11、R 12、R 13、R 14およびLの他の態様と組合せて使用しうる。

【0037】

本発明の別の態様において、R 2、R 3およびR 4はC 1である。本態様は、R 1、R 5、R 6、R 7、R 8、R 9、R 10、R 11、R 12、R 13、R 14およびLの他の態様と組合せて使用しうる。

10

【0038】

本発明の別の態様において、R 1およびR 5はHである。本態様は、R 2、R 3、R 4、R 6、R 7、R 8、R 9、R 10、R 11、R 12、R 13、R 14およびLの他の態様と組合せて使用しうる。

【0039】

本発明の別の態様において、R 1およびR 5はHであり、ならびにR 2、R 3およびR 4はC 1である。本態様は、R 6、R 7、R 8、R 9、R 10、R 11、R 12、R 13、R 14およびLの他の態様と組合せて使用しうる。

【0040】

本発明の別の態様において、R 6はCF₃である。本態様は、R 1、R 2、R 3、R 4、R 5、R 7、R 8、R 9、R 10、R 11、R 12、R 13、R 14およびLの他の態様と組合せて使用しうる。

20

【0041】

本発明の別の態様において、R 7はHである。本態様は、R 1、R 2、R 3、R 4、R 5、R 6、R 8、R 9、R 10、R 11、R 12、R 13、R 14およびLの他の態様と組合せて使用しうる。

【0042】

本発明の別の態様において、R 8はHである。本態様は、R 1、R 2、R 3、R 4、R 5、R 6、R 7、R 9、R 10、R 11、R 12、R 13、R 14およびLの他の態様と組合せて使用しうる。

30

【0043】

本発明の別の態様において、R 9はHである。本態様は、R 1、R 2、R 3、R 4、R 5、R 6、R 7、R 8、R 10、R 11、R 12、R 13、R 14およびLの他の態様と組合せて使用しうる。

【0044】

本発明の別の態様において、R 10はBr、CH₃若しくはCF₃である。本態様は、R 1、R 2、R 3、R 4、R 5、R 6、R 7、R 8、R 9、R 11、R 12、R 13、R 14およびLの他の態様と組合せて使用しうる。

【0045】

本発明の別の態様において、R 11はHである。本態様は、R 1、R 2、R 3、R 4、R 5、R 6、R 7、R 8、R 9、R 10、R 12、R 13、R 14およびLの他の態様と組合せて使用しうる。

40

【0046】

本発明の別の態様において、R 12はHである。本態様は、R 1、R 2、R 3、R 4、R 5、R 6、R 7、R 8、R 9、R 10、R 11、R 13、R 14およびLの他の態様と組合せて使用しうる。

【0047】

別の態様において、Lは—CH₂—、—CH(CH₃)—、—CH(CH₂CH₃)—若しくは—CH₂CH₂—である。本態様は、R 1、R 2、R 3、R 4、R 5、R 6、R 7、R 8、R 9、R 10、R 11、R 12、R 13およびR 14の他の態様と組合せて使用しうる。

50

る。

【0048】

本発明の別の態様において、R13はH若しくはCH₃である。本態様は、R1、R2、R3、R4、R5、R6、R7、R8、R9、R10、R11、R12、R14およびLの他の態様と組合せて使用しうる。

【0049】

本発明の別の態様において、R14は、CN、S(C₁–C₆)アルキル、S(O)(C₁–C₆)アルキルおよびS(O)₂(C₁–C₆)アルキルから選択される1個若しくはそれ以上の置換基で置換されている(C₁–C₆)アルキル若しくは(C₃–C₆)シクロアルキルである。本態様は、R1、R2、R3、R4、R5、R6、R7、R8、R9、R10、R11、R12、R13およびLの他の態様と組合せて使用しうる。

10

【0050】

本発明の別の態様において、R14は、CF₃、CH₂CF₃、CH₂CH₂CF₃、CH₂CH₂CH₂CF₃、CH₂CH₂CH(CF₃)CH₃、CH(CH₃)CH₂CF₃、C(CH₃)₂CF₃、C(CH₃)₂CH₂CF₃、CH₃、CH₂CH₃、CH₂CH₂CH₃、CH₂CH₂CH₂CH₃、CH₂CH₂CH₂CH₂CH₃、CH(CH₃)₂、CH₂CH(CH₃)₂、C(CH₃)₃、CH₂C(CH₃)₃、CH₂CH₂C(CH₃)₃、CH₂CH₂CH₂C(CH₃)₃、シクロプロピル、CH=CH₂、CH=CH(CH₃)、CH=C(CH₃)₂、CH₂CH=CH₂、CH₂CH=CH(CH₃)、C(CH₃)=CH₂、C(CH₃)=CH(CH₃)、C≡CH、CH₂C≡CH、CH₂CN、CH₂CH₂CN、CH₂SCH₃、CH₂CH₂SCH₃、CH₂S(O)CH₃、CH₂CH₂S(O)CH₃、CH₂S(O)₂CH₃、CH₂CH₂S(O)₂CH₃である。本態様は、R1、R2、R3、R4、R5、R6、R7、R8、R9、R10、R11、R12、R13およびLの他の態様と組合せて使用しうる。

20

【0051】

本発明の別の態様において：

- (a) R1はHであり；
- (b) R2はH、F、Cl若しくはBrであり；
- (c) R3はH、F、Cl若しくはBrであり；
- (d) R4はH、F、Cl若しくはBrであり；
- (e) R5はHであり；
- (f) R6は(C₁–C₈)ハロアルキルであり；
- (g) R7はHであり；
- (h) R8はHであり；
- (i) R9はHであり；
- (j) R10は、F、Cl、Br、I、(C₁–C₆)アルキルおよび(C₁–C₆)ハロアルキルよりなる群から選択され；
- (k) R11はHであり；
- (l) R12はHであり；
- (m) Lは
 - (1) 2個の窒素原子を結合する結合であるリンカー、若しくは
 - (2) (C₁–C₆)アルキル
 であり；
- (n) R13は
 - (1) H、若しくは
 - (2) (C₁–C₈)アルキル
 であり；

30

40

(o) R14は、(C₁–C₈)アルキル、(C₁–C₈)ハロアルキル、(C₃–C₈)シクロアルキル、(C₂–C₈)アルケニル若しくは(C₂–C₈)アルキニルから独立に選択され、ここで各前記アルキル、ハロアルキル、シクロアルキル、アルケニルおよびアルキニ

50

ルは、F、Cl、Br、I、CN、NO₂、OH、オキソ、(C₁–C₆) アルコキシ、S (C₁–C₆) アルキル、S (O) (C₁–C₆) アルキル、S (O)₂ (C₁–C₆) アルキル、およびN ((C₁–C₆) アルキル)₂から選択される1個若しくはそれ以上の置換基を有し、ここで、各(C₁–C₆) アルキルが独立に選択され、各前記アルキル若しくはアルコキシは、H、F、Cl、BrおよびIから独立に選択される1個若しくはそれ以上の置換基を有する。

【0052】

本発明の別の態様において：

- (a) R₁はHであり；
- (b) R₂はCl若しくはBrであり；
- (c) R₃はH、F、Cl若しくはBrであり；
- (d) R₄はCl若しくはBrであり；
- (e) R₅はHであり；
- (f) R₆は(C₁–C₈) ハロアルキルであり；
- (g) R₇はHであり；
- (h) R₈はHであり；
- (i) R₉はHであり；
- (j) R₁₀はBr、(C₁–C₈) アルキル、(C₁–C₈) ハロアルキルであり；
- (k) R₁₁はHであり；
- (l) R₁₂はHであり；

10

(m) Lは

- (1) 2個の窒素原子を結合する結合であるリンカー、若しくは
- (2) (C₁–C₆) アルキル

20

であり；

(n) R₁₃は

- (1) H、若しくは
- (2) (C₁–C₈) アルキル

であり；

(o) R₁₄は、(C₁–C₈) アルキル、(C₁–C₈) ハロアルキル、(C₃–C₈) シクロアルキル若しくは(C₂–C₈) アルケニルであり、ここで各前記アルキル若しくはシクロアルキルは、CN、SCH₃、S(O)CH₃若しくはS(O)₂CH₃で置換されている。

30

【0053】

臭化ベンジルの製造

R₁、R₂、R₃、R₄、R₅、R₆およびR₇が以前に開示されたとおりであるベンジルアルコール1–3はいくつかの方法で製造しうる。ベンジルアルコール1–3を提供するための、メタノールのような極性プロトン性溶媒中、水性水酸化ナトリウムのような塩基の存在下、約–10℃ないし約10℃でのホウ水素化ナトリウムのような還元剤での、R₁、R₂、R₃、R₄、R₅およびR₆が以前に開示されたとおりであるケトン1–1の処理(スキーム1、段階a)。あるいは、R₁、R₂、R₃、R₄、R₅およびR₇が以前に開示されたとおりであるアルデヒド1–2を、テトラヒドロフランのような極性非プロトン性溶媒中、触媒量のフッ化テトラブチルアンモニウム存在下でトリフルオロトリメチルシランと反応させることができ(スキーム1、段階b)、ベンジルアルコール1–3を提供する。その後、ベンジルアルコール1–3を、ベンジルハロゲン化物1–4、YがBrであり、を提供するための、ジクロロメタンのような非反応性溶媒中約40℃でN-ブロモスクシンイミドのようなハロゲン化試薬および亜リン酸トリエチルとの反応により；若しくは、YがClであるベンジルハロゲン化物1–4を提供するための、トルエンのような炭化水素溶媒中約110℃で塩化チオニルのようなハロゲン化試薬およびピリジンとの反応により、YがBr、Cl若しくはIでありかつR₁、R₂、R₃、R₄、R₅、R₆およびR₇が以前に開示されたとおりであるベンジルハロゲン化物1–4に転

40

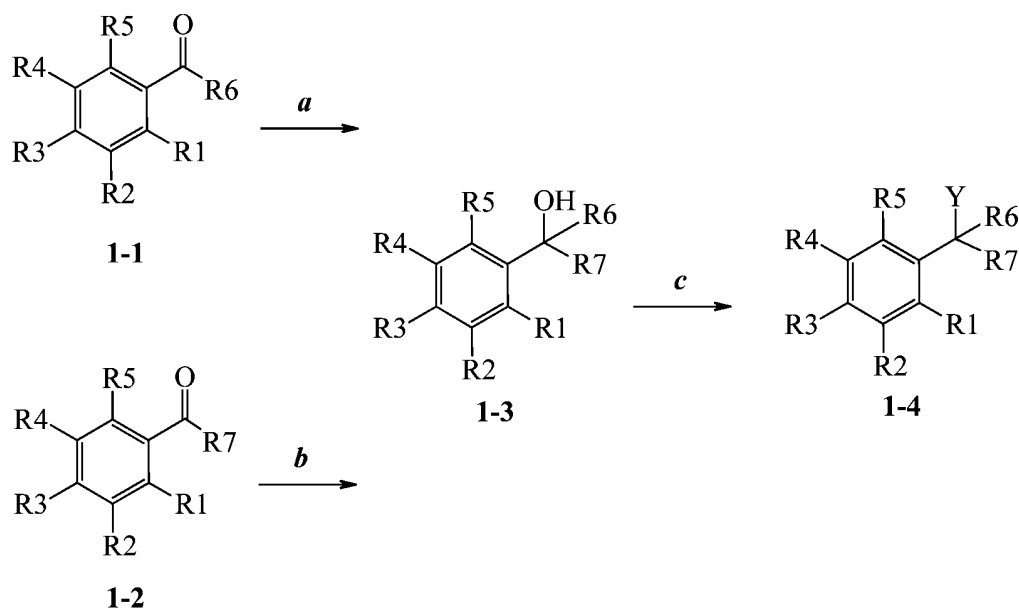
50

化しうる（スキーム 1、段階 c）。

【0054】

【化 4】

スキーム 1



【0055】

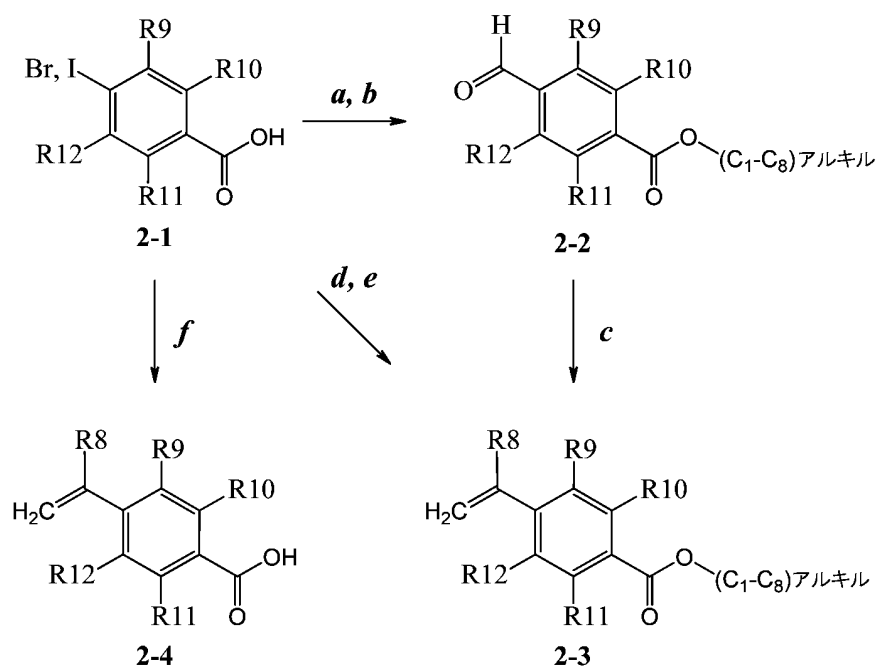
ビニル安息香酸およびエステルの製造

R 9、R 10、R 11 および R 12 が以前に開示されたとおりであるハロ安息香酸 2-1 は、R 8、R 9、R 10、R 11 および R 12 が以前に開示されたとおりであるビニル安息香酸エステル 2-3、若しくは R 8、R 9、R 10、R 11 および R 12 が以前に開示されたとおりであるビニル安息香酸 2-4 に転化しうる。ハロ安息香酸 2-1 を、テトラヒドロフランのような極性非プロトン性溶媒中約 -78℃ の温度で、*n*-ブチルリチウムのような塩基およびジメチルホルムアミドで処理しうる（スキーム 2、段階 a）。生じるホルミル安息香酸を、エチルアルコールのようなアルコールの存在下に硫酸のような酸で処理することができ、ホルミル安息香酸エチルエステル 2-2 を提供する（スキーム 2、段階 b）。ビニル安息香酸エステル 2-3 は、1,4-ジオキサンのような極性非プロトン性溶媒中約周囲温度で、炭酸カリウムのような塩基およびメチルトリフェニルホスホニウムブロミドとの 2-2 の反応を介して到達しうる（スキーム 2、段階 c）。あるいは、ハロ安息香酸 2-1 は、テトラヒドロフランのような極性非プロトン性溶媒中、トリエチルアミンのような塩基および触媒量の 4-（ジメチルアミノ）ピリジンの存在下に約周囲温度で二炭酸ジ-*tert*-ブチルで処理しうる（スキーム 2、段階 d）。生じる安息香酸 *tert*-ブチルエステルを、トルエンのような非反応性溶媒中、テトラキス（トリフェニルホスフィン）パラジウム（0）のようなパラジウム触媒および炭酸カリウムのような塩基の存在下約 110℃ で、無水ビニルボロン酸ピリジン複合体（vinyl boronic anhydride pyridine complex）で処理することができ、

【0056】

【化 5】

スキーム 2



10

20

【0057】

ビニル安息香酸エステル 2-3 を提供する（スキーム 2、段階 e）。

【0058】

ハロ安息香酸 2-1 は、ジメチルスルホキシドのような非反応性溶媒中、[1, 1'-ビス（ジフェニルホスフィノ）フェロセン]ジクロロパラジウム（II）のようなパラジウム触媒および炭酸カリウムのような塩基の存在下、約 80℃ から約 140℃ までの範囲にわたる温度で、トリフルオロホウ酸ビニルと直接反応させることができ、ビニル安息香酸 2-4 を提供する（スキーム 2、段階 f）。

【0059】

ジフェニルアリル安息香酸の製造

ベンジルハロゲン化物 1-4 およびビニル安息香酸エステル 2-3 を、1, 2-ジクロロベンゼンのような溶媒中約 180℃ の温度で塩化銅（I）および 2, 2-ビピリジルと反応させることができ、R₁、R₂、R₃、R₄、R₅、R₆、R₇、R₈、R₉、R₁₀、R₁₁ および R₁₂ が以前に開示されたとおりであるジフェニルアリル安息香酸エステル 3-1 を提供する（スキーム 3、段階 a）。ジフェニルアリル安息香酸エステル 3-1 をその後、R₁、R₂、R₃、R₄、R₅、R₆、R₇、R₈、R₉、R₁₀、R₁₁ および R₁₂ が以前に開示されたとおりであるジフェニルアリル安息香酸 3-2 に転化しうる。1, 4-ジオキサンのような極性非プロトン性溶媒中約 100℃ で約 11N 水性塩酸のような酸でのジフェニルアリル安息香酸エステル 3-1 の処理が、ジフェニルアリル安息香酸 3-2 を提供する（スキーム 3、段階 b）。

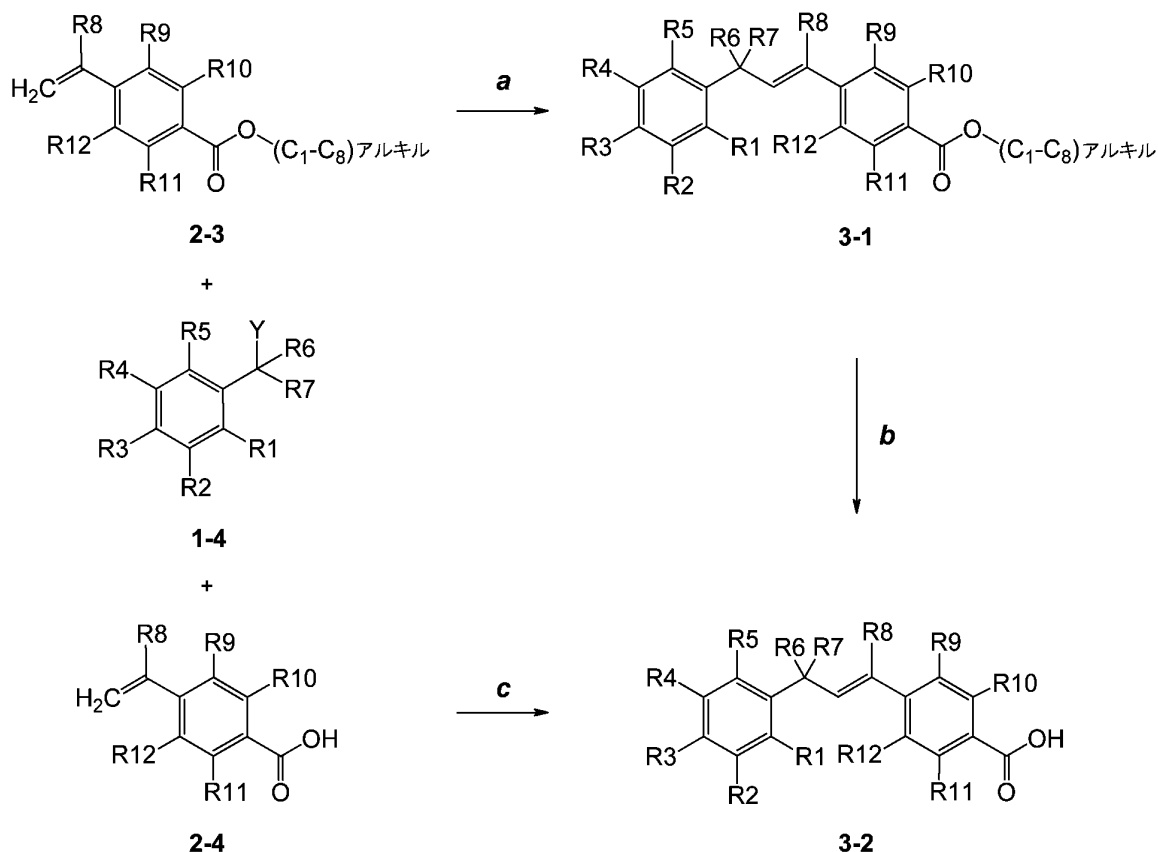
30

40

【0060】

【化 6】

スキーム 3



【0061】

あるいは、ベンジルハロゲン化物 1-4 およびビニル安息香酸 2-4 を、1, 2-ジクロロベンゼン若しくは N-メチルピロリジンのような溶媒中約 60℃ と約 180℃ の間の温度で、塩化銅 (I) および 2, 2-ビピリジルで処理することができ、ジフェニルアリル安息香酸 3-2 を提供する (スキーム 3、段階 c)。

【0062】

ジアシルアミンの製造

R₁、R₂、R₃、R₄、R₅、R₆、R₇、R₈、R₉、R₁₀、R₁₁、R₁₂、R₁₃、R₁₄ および L が以前に開示されたとおりであるジアシルアミン 4-3 は、ジクロロメタン、テトラヒドロフラン、1, 2-ジクロロエタン、ジエチルホルムアミドのような無水非プロトン性溶媒若しくはそれらのいずれかの組合せ中約 0℃ と約 120℃ の間の温度で、重炭酸カリウム、トリエチルアミン、ジイソプロピルエチルアミン若しくは好ましくは 4-メチルモルホリンのような塩基を用いる、R₁₃、R₁₄ および L が以前に開示されたとおりであるアシルアミン塩 4-2、ならびに X が活性化基でありかつ R₁、R₂、R₃、R₄、R₅、R₆、R₇、R₈、R₉、R₁₀、R₁₁ および R₁₂ が以前に開示されたとおりである活性カルボン酸 4-1 での処理により製造しうる (スキーム 4、段階 a)。

【0063】

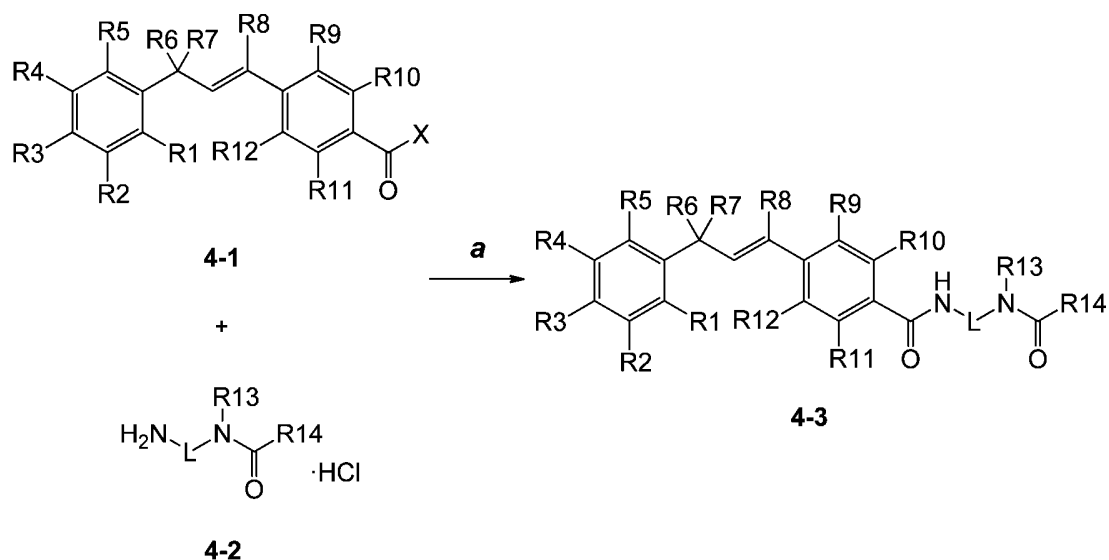
活性カルボン酸 4-1 は、酸塩化物、酸臭化物若しくは酸フッ化物のような酸ハロゲン化物；パラニトロフェニルエステル、ペンタフルオロフェニルエステル、エチル (ヒドロキシイミノ (hydroxyimino)) シアノ酢酸エステル、メチルエステル、エチルエステル、ベンジルエステル、N-ヒドロキシスクシンイミジルエステル、ヒドロキシベンゾトリアゾルー 1-イルエステル若しくはヒドロキシピリジルトリアゾルー 1-イルエステルのようなカルボン酸エステル；O-アシルイソ尿素；酸無水物；またはチオ

エステルでありうる。酸塩化物が最も好ましく、そして、双方が触媒的ジメチルホルムアミドを伴う若しくは伴わない塩化オキサリル若しくは塩化チオニルのような脱水塩素化試薬での処理により、対応するカルボン酸から製造しうる。活性カルボン酸エステル4-1は、1-[ビス(ジメチルアミノ)メチレン]-1H-1,2,3-トリアゾロ[4,5-b]ピリジニウム3-オキシド(oxid)ヘキサフルオロホスファート(HATU)、O-(ベンゾトリアゾル-1-イル)-N,N,N',N'-テトラメチルウロニウムヘキサフルオロホスファート(HBTU)若しくは(1-シアノ-2-エトキシ-2-オキソエチリデンアミノオキシ)ジメチルアミノ-モルホリノ-カルベニウムヘキサフルオロホスファート(COMU)のようなウロニウム塩を用いてカルボン酸からインシトゥーで製造しうる。活性カルボン酸エステル4-1はまた、ベンゾトリアゾル-1-イル-オキシトリピロリジノホスホニウムヘキサフルオロホスファート(PyBop)のようなホスホニウム塩を用いてもカルボン酸からインシトゥーで製造しうる。活性カルボン酸エステル4-1はまた、ヒドロキシベンゾトリアゾール-水合物(HOBT)若しくは1-ヒドロキシ-7-アザベンゾトリアゾール(HOAt)のようなトリアゾールの存在下に、1-(3-ジメチルアミノプロピル)-3-エチルカルボジイミド若しくはジシクロヘキシルカルボジイミドのようなカップリング試薬を用いてもカルボン酸からインシトゥーで製造しうる。O-アシルイソ尿素は、1-(3-ジメチルアミノプロピル)-3-エチルカルボジイミド若しくはジシクロヘキシルカルボジイミドのような脱水するカルボジイミドを用いて製造しうる。

【0064】

【化7】

スキーム4



【0065】

R14がスルフィドを含有するジアシルアミン4-3は、酢酸のようなプロトン性溶媒中1等量の過ホウ酸ナトリウム(スルホキシド)若しくは2等量の過ホウ酸ナトリウム(スルホン)での処理により、対応するスルホキシドおよびスルホンに酸化しうる。好ましくは、該酸化は、1.5等量の過ホウ酸ナトリウムを使用して約40℃ないし約100℃の間の温度で実施することができ、R14がスルホキシド若しくはスルホンを含有するスルホキシドおよびスルホンジアシルアミナル(diacylaminal)のクロマトグラフィーで分離可能な混合物4-3を提供する。

【0066】

あるいは、R1、R2、R3、R4、R5、R6、R7、R8、R9、R10、R11、R12、R14およびLが以前に開示されたとおりであるジアシルアミン5-3は、ジ

クロロメタン、テトラヒドロフラン、1, 2-ジクロロエタン、ジメチルホルムアミドのような無水非プロトン性溶媒若しくはそれらのいずれかの組合せ中約0℃と約120℃の間の温度で、重炭酸カリウム、トリエチルアミン、ジイソプロピルエチルアミン若しくは好ましくは4-メチルモルホリンのような塩基を用いる、Xが活性化基でありかつR14が以前に開示されたとおりである活性カルボン酸5-2での、R1、R2、R3、R4、R5、R6、R7、R8、R9、R10、R11、R12およびLが以前に開示されたとおりであるアシルアミン塩5-1の処理により製造しうる（スキーム5、段階a）。

【0067】

活性カルボン酸5-2は、酸塩化物、酸臭化物若しくは酸フッ化物のような酸ハロゲン化物；パラニトロフェニルエステル、ペンタフルオロフェニルエステル、エチル（ヒドロキシイミノ（hydroxyimino））シアノ酢酸エステル、メチルエステル、エチルエステル、ベンジルエステル、N-ヒドロキシスクシンイミジルエステル、ヒドロキシベンゾトリアゾール-1-イルエステル若しくはヒドロキシピリジルトリアゾール-1-イルエステルのようなカルボン酸エステル；O-アシルイソ尿素；酸無水物；またはチオエステルでありうる。酸塩化物が最も好ましく、そして塩化オキサリル若しくは塩化チオニルのような脱水塩素化試薬での処理により、対応するカルボン酸から製造しうる。活性カルボン酸エステル5-2は、1-[ビス（ジメチルアミノ）メチレン]-1H-1, 2, 3-トリアゾロ[4, 5-b]ピリジニウム3-オキシド（oxid）ヘキサフルオロホスファート（HATU）、O-（ベンゾトリアゾール-1-イル）-N, N, N', N'-テトラメチルウロニウムヘキサフルオロホスファート（HBTU）若しくは（1-シアノ-2-エトキシ-2-オキソエチリデンアミノオキシ）ジメチルアミノ-モルホリノ-カルベニウムヘキサフルオロホスファート（COMU）のようなウロニウム塩を用いてカルボン酸からインシトゥーで製造しうる。活性カルボン酸エステル5-2はまた、ベンゾトリアゾール-1-イル-オキシトリピロリジノホスホニウムヘキサフルオロホスファート（PyBop）のようなホスホニウム塩を用いてもカルボン酸からインシトゥーで製造しうる。活性カルボン酸エステル5-2はまた、ヒドロキシベンゾトリアゾール-1-水和物（HOBt）若しくは1-ヒドロキシ-7-アザベンゾトリアゾール（HOAt）のようなトリアゾールの存在下に、1-（3-ジメチルアミノプロピル）-3-エチルカルボジイミド若しくはジシクロヘキシルカルボジイミドのようなカップリング試薬を用いてもカルボン酸からインシトゥーで製造しうる。O-アシルイソ尿素は、1-（3-ジメチルアミノプロピル）-3-エチルカルボジイミド若しくはジシクロヘキシルカルボジイミドのような脱水するカルボジイミドを用いて製造しうる。

【0068】

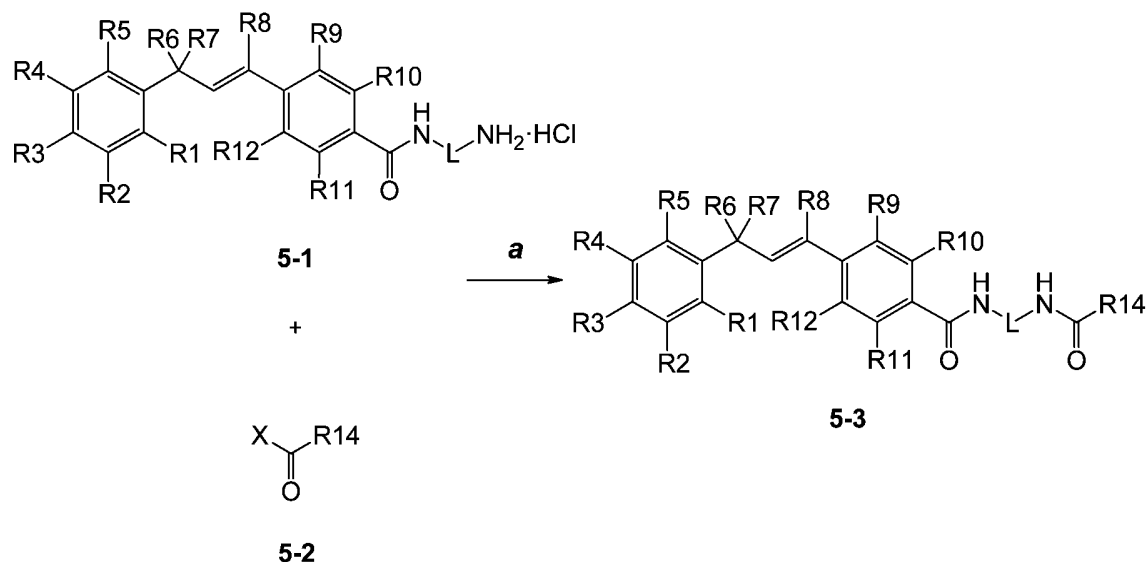
10

20

30

【化 8】

スキーム 5



10

【0069】

20

R 1 4 がスルフィドを含有する活性カルボン酸 5-2 へのカルボン酸前駆体およびカルボン酸は、酢酸のようなプロトン性溶媒中 1 等量の過ホウ酸ナトリウム（スルホキシド）若しくは 2 等量の過ホウ酸ナトリウム（スルホン）での処理により、対応するスルホキシド若しくはスルホンに酸化しうる。好ましくは、該酸化は、1.5 等量の過ホウ酸ナトリウムを使用して約 40℃ないし約 100℃の間の温度で実施することができ、スルホキシドおよびスルホンのクロマトグラフィーで分離可能な混合物を提供する。

【0070】

加えて、ジアルキルアミン 4-3 は、ジメチルホルムアミド、テトラヒドロフラン、アセトン、アセトニトリル、ジメチルスルホキシド若しくはグリムのような極性非プロトン性溶媒中、水素化ナトリウム、炭酸セシウム、酸化銀、水素化カリウム、フッ化テトラブチルアンモニウム若しくは炭酸カリウムのような塩基の存在下、R 1 3 が H でなくかつ以前に開示されたとおりでありおよび Z がハロゲン若しくはスルホネートのような脱離基であるアルキル化試薬 R 1 3-Z（ここで R 1 3-Z は、ヨードメタンのようなアルキルハロゲン化物、若しくはエチルトリフラートのような活性アルコールであり）でアルキルアミン 5-3 を処理することにより製造しうる。あるいは、アルキルアミン 5-3 のアルキル化は、トルエン若しくはジクロロメタンのような有機溶媒中約 0℃からおよび約 120℃の範囲にわたる温度で、水中水酸化ナトリウムのようなアルカリ金属水酸化物塩基、テトラアルキルアンモニウム塩のような相間移動触媒を使用する二相様式で実施しうる（スキーム 6、段階 a）。

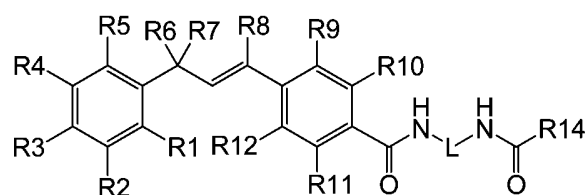
30

【0071】

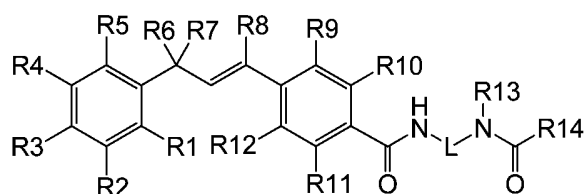
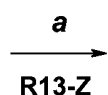
40

【化 9】

スキーム 6



5-3



4-3

【0072】

R14がスルフィドを含有するジアシルアミン5-3は、酢酸のようなプロトン性溶媒中1等量の過ホウ酸ナトリウム（スルホキシド）若しくは2等量の過ホウ酸ナトリウム（スルホン）での処理により、対応するスルホキシドおよびスルホンに酸化しうる。好ましくは、該酸化は、1.5等量の過ホウ酸ナトリウムを使用して約40℃ないし約100℃の間の温度で実施することができ、R14がスルホキシド若しくはスルホンを含有するスルホキシドおよびスルホンジアシルアミンのクロマトグラフィーで分離可能な混合物5-3を提供する。

【0073】

アシルアミン塩5-1前駆体の製造

R1、R2、R3、R4、R5、R6、R7、R8、R9、R10、R11、R12およびLが以前に開示されたとおりであるアミド7-2は、アシルアミン塩5-1の製造で使用する新規中間体である。アミド7-2は、ジクロロメタン、テトラヒドロフラン、1,2-ジクロロエタン、ジメチルホルムアミドのような無水非プロトン性溶媒若しくはそれらのいずれかの組合せ中約0℃と約120℃の間の温度で、Lが以前に開示されたとおりであるα-アミノアミド7-1および活性カルボン酸4-1を、重炭酸カリウム、トリエチルアミン、ジイソプロピルエチルアミン若しくは好ましくは4-メチルモルホリンのような塩基と反応させることにより製造しうる（スキーム7、段階a）。

【0074】

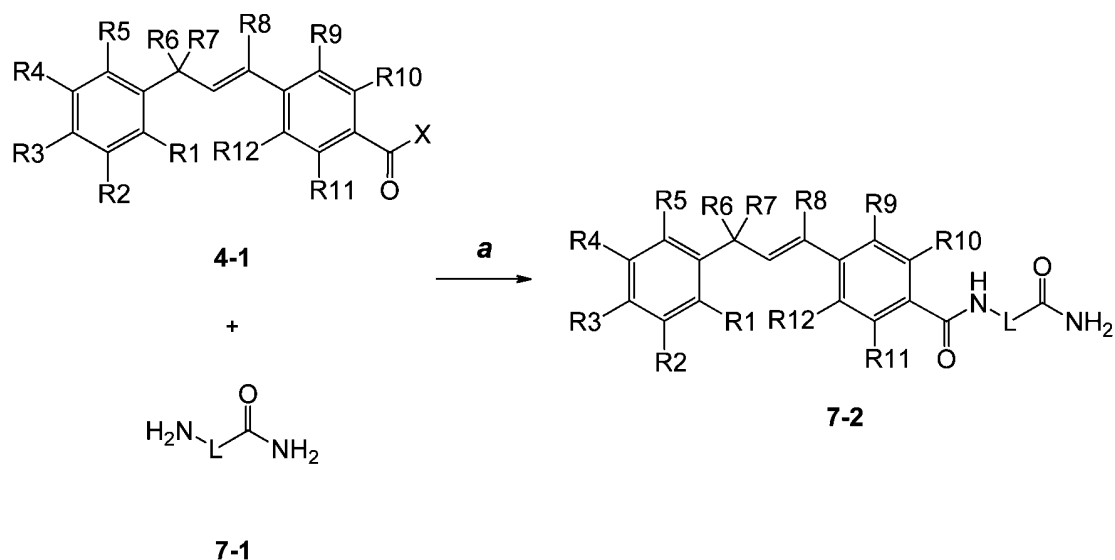
10

20

30

【化 10】

スキーム 7



10

【0075】

20

アシルアミン塩 5-1 の製造

アシルアミン 5-1 は、窒素移動をもたらす一級アミド窒素のナイトレン (nitrene) 様化学種への転化、次いでイソシアネート形成により、アミド 7-2 から製造しうる。塩酸のような水性酸での中間体イソシアネートの加水分解がアシルアミン塩 5-1 を提供しうる (スキーム 8、段階 a)。水性塩酸より弱い酸を使用する場合、陰イオン交換を塩酸での処理により達成することができ、アシルアミン塩 5-1 を提供する。好ましくは、アミド 7-2 を、約 2 部のアセトニトリルおよび約 1 部の脱イオン水よりなる溶媒混合物中約 0℃ と約 120℃ の間の温度で、ヨードベンゼンビス (トリフルオロアセタート) で処理しうる。生じるトリフルオロ酢酸塩を、塩酸の添加次いで揮発物の蒸発により塩化物塩に転化しうる。

30

【0076】

アシルアミン塩 4-2 の製造

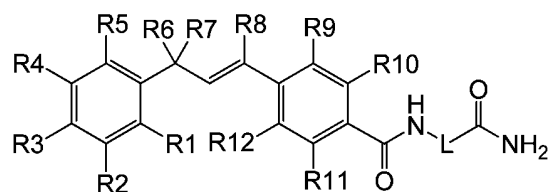
アシルアミン塩 4-2 は、スキーム 9、スキーム 10 およびスキーム 11 に概説される反応に従って製造しうる。X が OH でありかつ R13、R14 および L が以前に開示されたとおりである処理カルボン酸 9-1、若しくは X が以前に記述されたところの活性化基である対応する活性酸 9-1 を、窒素求核試薬と反応させることができ、Y2 が H、N₂、NH tert-ブトキシカルボニル若しくは OH) でありかつ R13、R14 および L が以前に開示されたとおりであるアミドおよびアミド誘導体 9-2 を提供する。結果として生じるアミドおよびアミド誘導体 9-2 は、窒素移動をもたらす対応するナイトレン様化学種の形成および結果として生じるイソシアネートのその後の加水分解により、アシルアミン塩 4-2 に転化しうる。

40

【0077】

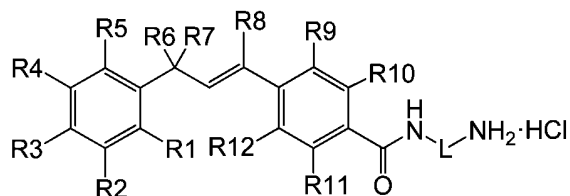
【化 1 1】

スキーム 8



7-2

a



5-1

10

【0078】

20

X、R13、R14およびLが以前に開示されたとおりである活性アミド酸9-1をアンモニアで処理することができ（スキーム9、段階a）、Y2がHであるカルボキサミド9-2を提供する。Y2がHであるカルボキサミド9-2は、約1部のアセトニトリルおよび約1部の脱イオン水よりなる溶媒混合物中約0℃と約120℃の間の温度で、 Hofmann転移次いで塩酸での酸性化を介して、若しくは好ましくはヨードベンゼンビス（トリフルオロアセタート）での処理により、アシルアミン4-2に転化しうる（スキーム9、段階e）。生じるトリフルオロ酢酸塩は、塩酸の添加次いで揮発物の蒸発により塩化物塩に転化しうる。

【0079】

XがOHでありかつR13、R14およびLが以前に開示されたとおりであるアミド酸9-1は、プロトンスポンジ若しくはトリエチルアミンのような塩基の存在下にアジ化ジフェニルホスホリルのようなアジ化物源で処理することができ（スキーム9、段階b）、Y2がN₂であるアシルアジ化物9-2を提供する。あるいは、Xが上述されたとおりである活性アミド酸9-1をアジ化ナトリウムのようなアジ化物源で処理することができ（スキーム9、段階b）、Y2がN₂であるアシルアジ化物9-2を提供する。アシルアジ化物9-2は、クルチウス転位を実現するために、アセトニトリル、トルエン、1,2-ジクロロエタン、テトラヒドロフラン若しくは1,4-ジオキサンのような非プロトン性溶媒中で約40℃ないし約110℃に加熱することができ、単離されないイソシアネートの形成をもたらし、それを水性塩酸で処理することができ、アシルアミン塩4-2を提供する。あるいは、該イソシアネートをtert-ブタノール、パラメトキシベンジルアルコール若しくはベンジルアルコールのようなアルコールで処理することができ、酸不安定性カルバメートを提供し、それを精製後に酸性条件下で分解することができ、アシルアミン塩4-2を提供する（スキーム9、段階f）。

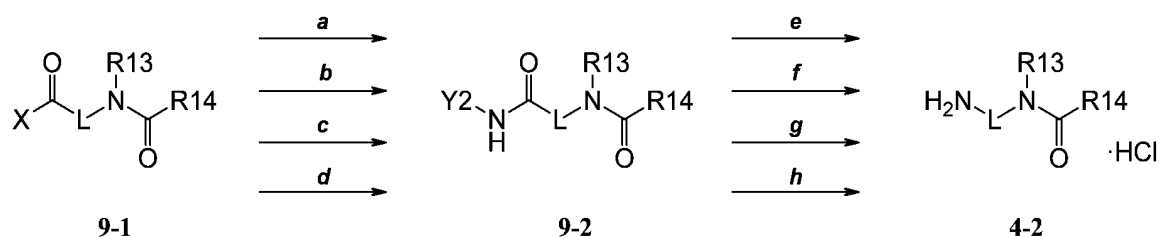
【0080】

30

40

【化 1 2】

スキーム 9



【0081】

X、R13、R14およびLが以前に開示されたとおりである活性アミド酸9-1は、4-メチルモルホリンのような塩基の存在下にカルバジン酸tert-ブチルのような保護されたヒドラジンで処理することができ（スキーム9、段階c）、Y2がNH tert-ブトキシカルボニルである保護されたヒドラジド9-2を提供する。保護されたヒドラジド9-2は、1, 4-ジオキサン若しくはジクロロメタンのような非プロトン性溶媒中の塩酸若しくはトリフルオロ酢酸のような酸での処理により脱保護しうる。Y2がNH₃Clである生じるヒドラジド塩9-2を中和することができ、Y2がNH₂であるヒドラジド9-2を提供する。ヒドラジド9-2をその後、硝酸若しくは亜硝酸イソブチルのような試薬でジアゾ化することができ、イソシアネートを製造し、これをアシルアミン塩4-2に転化しうる（スキーム9、段階g）。

【0082】

X、R13、R14およびLが以前に開示されたとおりである活性アミド酸9-1をヒドロキシルアミンで処理することができ（スキーム9、段階d）、Y2がOHであるヒドロキサム酸9-2を提供する。ヒドロキサム酸9-2は、活性カルボン酸（ここで活性カルボン酸は以前に開示されたとおりであり）でアシル化することができ、Y2がO-アシルであるO-アシルヒドロキサム酸9-2を提供し、これを熱での処理若しくは塩基の添加によりイソシアネートに転化することができ、イソシアネートを製造し、これをアシルアミン塩4-2に転化しうる（スキーム9、段階h）。

【0083】

R13およびLが以前に開示されたとおりであるカルバメート酸10-1は、ジメチルホルムアミド、テトラヒドロフラン、アセトン、アセトニトリル、ジメチルスルホキシド若しくはグリムのような極性非プロトン性溶媒中、水素化ナトリウム、炭酸セシウム、酸化銀、水素化カリウム、フッ化テトラブチルアンモニウム若しくは炭酸カリウムのような塩基の存在下に、R13がHでなくかつ以前に開示されたとおりであり、およびZがハロゲン若しくはスルホネートのような脱離基であるアルキル化試薬R13-Z（ここでR13-Zは、ヨードメタンのようなアルキルハロゲン化物、若しくはエチルトリフラートのような活性アルコールであり）で処理することができる。あるいは、カルバメート酸10-1のアルキル化は、トルエン若しくはジクロロメタンのような有機溶媒中約0℃から約120℃までの範囲にわたる温度で、水中水酸化ナトリウムのようなアルカリ金属水酸化物塩基、テトラアルキルアンモニウム塩のような相間移動触媒を使用する二相様式で実施しうる（スキーム10、段階a）。

【0084】

R13およびLが以前に開示されたとおりである、結果として生じるカルバメート酸10-2は、プロトンスポンジ若しくはトリエチルアミンのような塩基の存在下にアジ化ジフェニルホスホリルのようなアジ化物源で処理することができ（スキーム10、段階b）、アシルアジ化物を提供し、それを順に、クルチウス転位を実現するため、アセトニトリル、トルエン、1, 2-ジクロロエタン、テトラヒドロフラン若しくは1, 4-ジオキサンのような非プロトン性溶媒中約40℃から約110℃まで加熱することができ、イソシアネートの形成をもたらす（スキーム10、段階c）。結果として生じるイソシアネート

10

20

30

40

50

のベンジルアルコールでの処理は差別的に保護されるジカルバメートを提供しうる（スキーム10、段階d）。tert-ブチルカルバメートの脱保護は、1,4-ジオキサン若しくはジクロロメタンのような極性非プロトン性溶媒中約0℃と約65℃の間の温度で、塩酸若しくはトリフルオロ酢酸のような酸での処理により達成することができ、R13およびLが以前に開示されたとおりであるベンジルカルバメートアミン塩10-3を提供する（スキーム10、段階e）。

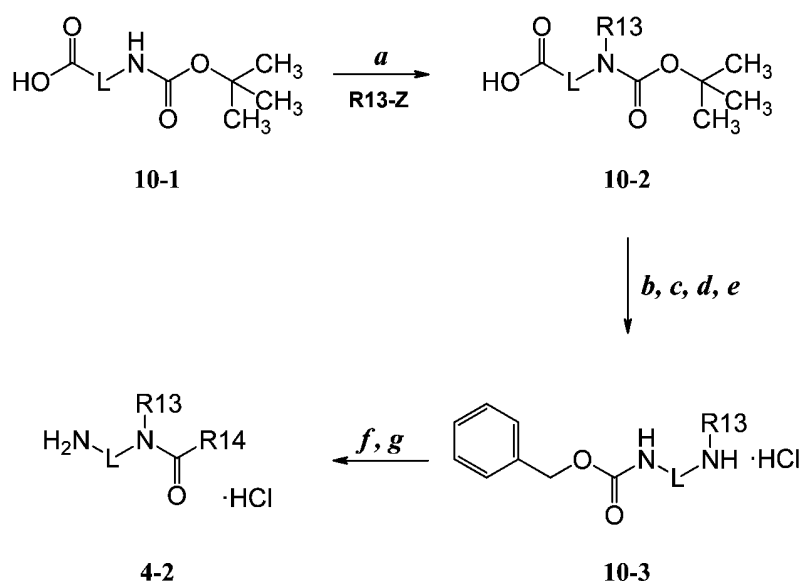
【0085】

ベンジルカルバメートアミン塩10-3は、ジクロロメタン、テトラヒドロフラン、1,2-ジクロロエタン、ジメチルホルムアミドのような無水非プロトン性溶媒若しくはそれらのいずれかの組合せ中約0℃と約120℃の間の温度で、重炭酸カリウム、トリエチルアミン、ジイソプロピルエチルアミン若しくは好ましくは4-メチルモルホリンのような塩基の存在下に、活性カルボン酸5-2で処理することができる（スキーム10、段階f）。結果として生じるカルバメートアシルアミンを、水素の供給源およびパラジウム炭素のような遷移金属触媒で処理することができ、アシルアミン塩4-2を提供する（スキーム10、段階g）。

【0086】

【化13】

スキーム10



【0087】

カルバメート酸10-1は、ジメチルホルムアミド、テトラヒドロフラン、アセトン、アセトニトリル、ジメチルスルホキシド若しくはグリムのような極性非プロトン性溶媒中、水素化ナトリウム、炭酸セシウム、酸化銀、水素化カリウム、フッ化テトラブチルアンモニウム若しくは炭酸カリウムのような塩基の存在下に、R15が(C₁-C₈)アルケニルでありかつZがハロゲン若しくはスルホネートのような脱離基であるアルキル化試薬R15-Z（ここでR15-Zは、臭化アリルのようなアルケニルハロゲン化物、若しくはクロチルトリフラートのような活性アルコールであり）で処理しうる。あるいは、アミドエステル10-1のアルキル化は、トルエン若しくはジクロロメタンのような有機溶媒中約0℃から約100℃までの範囲にわたる温度で、水中水酸化ナトリウムのようなアルカリ金属水酸化物塩基、テトラアルキルアンモニウム塩のような相間移動触媒を使用する二相様式で実施しうる（スキーム11、段階a）。

【0088】

R15およびLが以前に開示されたとおりである、結果として生じるカルバメート酸11-2は、プロトンスポンジ若しくはトリエチルアミンのような塩基の存在下にアジ化ジ

フェニルホスホリルのようなアジ化物源で処理することができ（スキーム 11、段階 b）、アシルアジ化物を提供し、これを順に、クルチウス転位を実現するため、アセトニトリル、トルエン、1, 2-ジクロロエタン、テトラヒドロフラン若しくは 1, 4-ジオキサンのような非プロトン性溶媒中約 40℃ないし約 110℃に加熱することができ、イソシアネートの形成をもたらす（スキーム 11、段階 c）。結果として生じるイソシアネートのベンジルアルコールでの処理は差別的に保護されるジカルバメートを提供しうる（スキーム 11、段階 d）。tert-ブチルカルバメートの脱保護は、1, 4-ジオキサン若しくはジクロロメタンのような極性非プロトン性溶媒中約 0℃と約 65℃の間の温度で、塩酸若しくはトリフルオロ酢酸のような酸での処理により達成することができ、L および R15 が以前に開示されたとおりであるベンジルカルバメートアミナル（aminal）塩 11-3 を提供する（スキーム 11、段階 e）。

10

【0089】

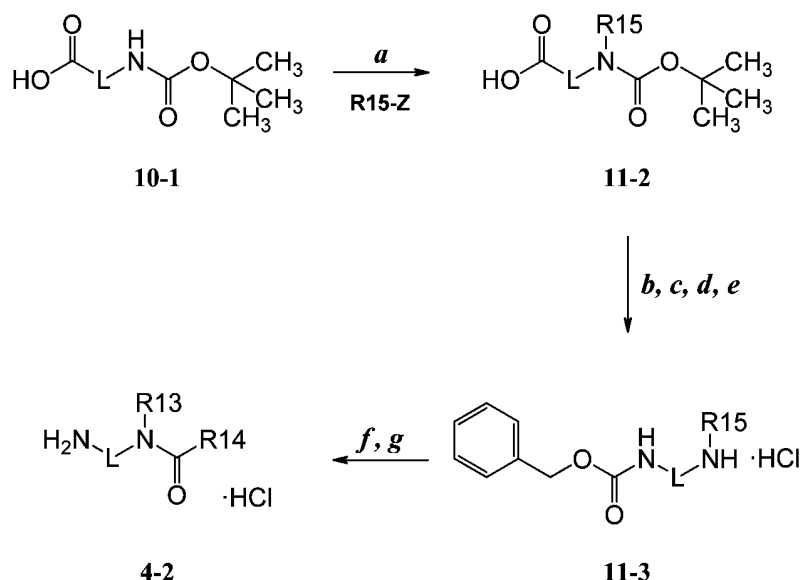
ベンジルカルバメートアミン塩 11-3 は、ジクロロメタン、テトラヒドロフラン、1, 2-ジクロロエタン、ジメチルホルムアミドのような無水非プロトン性溶媒若しくはそれらのいずれかの組合せ中約 0℃と約 120℃の間の温度で、重炭酸カリウム、トリエチルアミン、ジイソプロピルエチルアミン若しくは好ましくは 4-メチルモルホリンのような塩基の存在下に、活性カルボン酸 5-2 で処理しうる（スキーム 11、段階 f）。結果として生じるカルバメートアシルアミナル（acylaminal）を、水素の供給源およびパラジウム炭素のような遷移金属触媒で処理することができ、アシルアミン塩 4-2 を提供する（スキーム 11、段階 g）。

20

【0090】

【化 14】

スキーム 11



30

40

【0091】

アミド酸 9-1 の製造

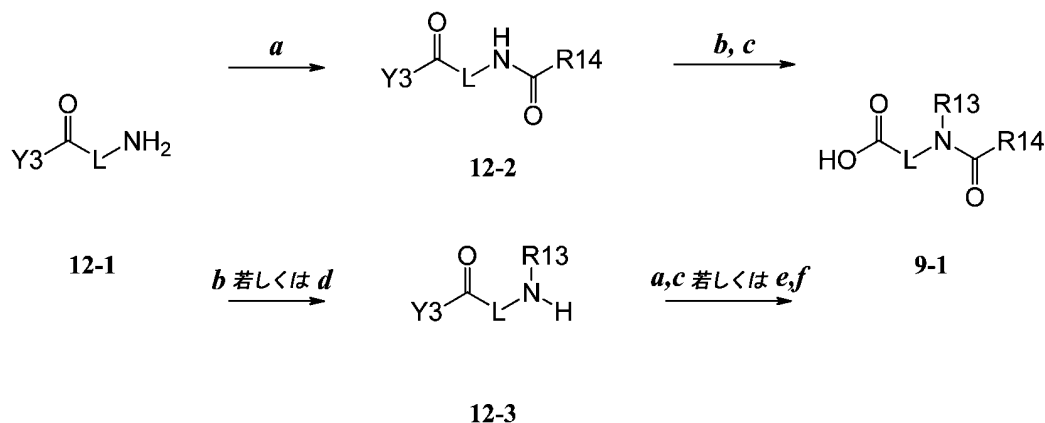
R13 および L が以前に開示されたとおりであるアミドエステル 12-2 は、Y3 が O (C₁-C₈) アルキル若しくは O (C₁-C₈) アルキルフェニルでありかつ L が以前に開示されたとおりであるアミノエステル 12-1 を、ジクロロメタン、テトラヒドロフラン、1, 2-ジクロロエタン、ジメチルホルムアミドのような無水非プロトン性溶媒若しくはそれらのいずれかの組合せ中約 0℃と約 120℃の間の温度で、重炭酸カリウム、トリエチルアミン、ジイソプロピルエチルアミン若しくは好ましくは 4-メチルモルホリンのような塩基を伴い活性カルボン酸 5-2 で処理することにより製造しうる（スキーム 12、段階 a）。

50

【0092】

【化15】

スキーム12



10

【0093】

アミドエステル12-2は、ジメチルホルムアミド、テトラヒドロフラン、アセトン、アセトニトリル、ジメチルスルホキシド若しくはグリムのような極性非プロトン性溶媒中、水素化ナトリウム、炭酸セシウム、酸化銀、水素化カリウム、フッ化テトラブチルアンモニウム若しくは炭酸カリウムのような塩基の存在下で、R13がHでなくかつ以前に開示されたとおりであり、およびZがハロゲン若しくはスルホネートのような脱離基であるアルキル化試薬R13-Z（ここでR13-Zは、ヨードメタンのようなアルキルハロゲン化物、若しくはエチルトリフラートのような活性アルコールであり）で処理しうる。あるいは、アミドエステル12-2のアルキル化は、トルエン若しくはジクロロメタンのような有機溶媒中約0℃から約120℃までの範囲にわたる温度で、水中水酸化ナトリウムのようなアルカリ金属水酸化物塩基、テトラアルキルアンモニウム塩のような相間移動触媒を使用する二相様式で実施しうる（スキーム12、段階b）。

20

【0094】

結果として生じるアルキル化アミドエステルは、Y3がO（C₁-C₈）アルキルである場合、1,4-ジオキサンのような極性非プロトン性溶媒中約100℃で約11N水性塩酸のような酸で処理することができ、アミド酸9-1を提供する。あるいは、アルキル化アミドエステルは、Y3がO-tert-ブチルである場合、1,4-ジオキサン中塩酸で処理しうる。アルキル化アミドエステルは、Y3がO（C₁-C₈）アルキルである場合、1,4-ジオキサン、テトラヒドロフラン、メタノール、水のような極性溶媒若しくはそれらの混合物中0℃と約140℃の間の温度で水酸化リチウムのようなアルカリ塩基で処理することができ、アミド酸9-1を提供する。アルキル化されたアミドエステルは、Y3がO（C₁-C₈）アルキルフェニルである場合、水素の供給源およびパラジウム炭素のような遷移金属触媒で処理することができ、アミド酸9-1を提供する（スキーム12、段階c）。

30

40

【0095】

アミド酸9-1は、上で論考された順序に対する代替順序で製造しうる。段階bは、アミド酸9-1を提供するために段階aおよび段階cが実施される前に最初に実施することができ、Y3がO（C₁-C₈）アルキル若しくはO（C₁-C₈）アルキルフェニルでありかつR13およびLが以前に開示されたとおりである置換アミンエステル12-3を提供する。

【0096】

R13が以前に開示されたとおりである置換アミンエステル12-3は、酢酸のような弱有機酸の存在下のメタノール若しくはエタノールのようなプロトン性溶媒中、ホウ水素化ナトリウム若しくはシアノホウ水素化ナトリウムのような還元剤の存在下で、R16が

50

HでないR16-C(O)H若しくはR16-C(O)(C₁-C₈)アルキルでアミノエステル12-1を処理することにより製造しうる。あるいは、アミンおよびカルボニルの縮合から生じるイミン中間体を、水素の供給源およびパラジウム炭素のような遷移金属触媒により還元することができ、Y3がO(C₁-C₈)アルキルである場合に置換アミノエステル12-3を提供する(スキーム12、段階d)。

【0097】

アミド酸9-1は2段階の順序で製造することができ、最初に、置換アミノエステル12-3を、ジクロロメタン、テトラヒドロフラン、1,2-ジクロロエタン、ジメチルホルムアミドのような無水非プロトン性溶媒若しくはそれらのいずれかの組合せ中約0℃と約120℃の間の温度で、重炭酸カリウム、トリエチルアミン、ジイソプロピルエチルアミン若しくは好ましくは4-メチルモルホリンのような塩基と共に活性カルボン酸5-2で処理する(スキーム12、段階e)。

【0098】

次に、結果として生じるアミドエステルは、Y3がO(C₁-C₈)アルキルである場合、1,4-ジオキサンのような極性非プロトン性溶媒中約100℃で約11N水性塩酸のような酸で処理することができ、アミド酸9-1を提供する。あるいは、アミドエステルは、Y3がtert-ブチルである場合、1,4-ジオキサン中塩酸で処理しうる。アミドエステルは、Y3がO(C₁-C₈)アルキルである場合、1,4-ジオキサン、テトラヒドロフラン、メタノール、水のような極性溶媒若しくはそれらの混合物中0℃と約100℃の間の温度で、水酸化リチウムのようなアルカリ塩基で処理することができ、アミド酸9-1を提供する。最後に、アシル化アミドエステルは、Y3がO(C₁-C₈)アルキルフェニルである場合、水素の供給源およびパラジウム炭素のような遷移金属触媒で処理することができ、アミド酸9-1を提供する(スキーム12、段階f)。

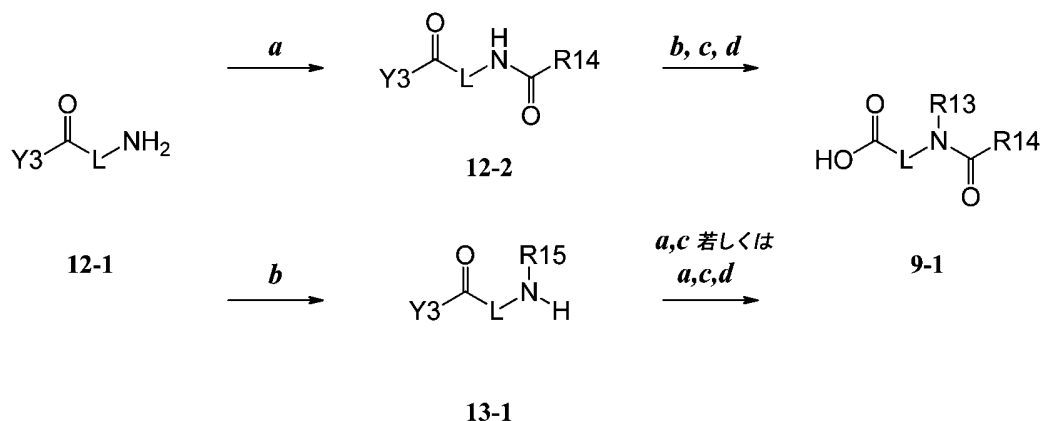
【0099】

アミド酸12-2は、ジクロロメタン、テトラヒドロフラン、1,2-ジクロロエタン、ジメチルホルムアミドのような無水非プロトン性溶媒若しくはそれらのいずれかの組合せ中約0℃と約120℃の間の温度で、重炭酸カリウム、トリエチルアミン、ジイソプロピルエチルアミン若しくは好ましくは4-メチルモルホリンのような塩基を伴い、活性カルボン酸5-2でアミノエステル12-1を処理することにより製造しうる(スキーム13、段階a)。

【0100】

【化16】

スキーム13



【0101】

アミドエステル12-2は、ジメチルホルムアミド、テトラヒドロフラン、アセトン、アセトニトリル、ジメチルスルホキシド若しくはグリムのような極性非プロトン性溶媒中、水素化ナトリウム、炭酸セシウム、酸化銀、水素化カリウム、フッ化テトラブチルアン

モニウム若しくは炭酸カリウムのような塩基の存在下、R 1 5が(C₁–C₈)アルケニルでありかつZがハロゲン若しくはスルホネートのような脱離基であるアルキル化試薬R 1 5–Z（ここでR 1 5–Zは、アルキル臭化物のようなアルキルハロゲン化物、若しくはクロチルトリフラートのような活性アルコールであり）で処理しうる。あるいは、アミドエステル1 2–2のアルキル化は、トルエン若しくはジクロロメタンのような有機溶媒中約0℃から約100℃までの範囲にわたる温度で、水中水酸化ナトリウムのようなアルカリ金属水酸化物塩基、テトラアルキルアンモニウム塩のような相間移動触媒を使用する二相様式で実施しうる（スキーム1 3、段階b）。R 1 5中に存在するアルケンをその後、水素の供給源およびパラジウム炭素のような遷移金属触媒により還元しうる。アルキル化されたアミドエステル中で、Y 3がO（C₁–C₈）アルキルフェニルである場合、アルケンの還元はエステルの付随する還元にもまたつながることができ、アミド酸9–1を提供する（スキーム1 3、段階c）。

10

【0102】

アルキル化アミドエステルは、Y 3がO（C₁–C₈）アルキルである場合、1, 4–ジオキサンのような極性非プロトン性溶媒中約100℃で約11N水性塩酸のような酸で処理することができ、アミド酸9–1を提供する。あるいは、アミドエステルは、Y 3がO t e r t –ブチルである場合、1, 4–ジオキサン中塩酸で処理しうる。アルキル化アミドエステルは、Y 3がO（C₁–C₈）アルキルである場合、1, 4–ジオキサン、テトラヒドロフラン、メタノール、水のような極性溶媒若しくはそれらの混合物中0℃と約100℃の間の温度で水酸化リチウムのようなアルカリ塩基で処理することができ、アミド酸9–1を提供する（スキーム1 0、段階d）。

20

【0103】

アミド酸9–1は、上で論考された順序に対する代替順序で製造しうる。段階bを、9–1を提供するために段階aおよび段階c、若しくは段階a、段階cおよび段階dが実施される前に最初に実施することができ、Y 3がO（C₁–C₈）アルキル若しくはO（C₁–C₈）アルキルフェニルでありかつR 1 5およびLが以前に開示されたとおりである置換アミンエステル1 3–1を提供する。

【実施例】**【0104】**

本実施例は具体的説明の目的上であり、そして本文書に開示される発明をこれらの実施例に開示される態様のみに制限すると解釈されるべきでない。

30

【0105】

商業的供給源から得た出発原料、試薬および溶媒はさらなる精製なしに使用した。無水溶媒はA l d r i c hからS u r e / S e a lTMとして購入し、そして受領されたとおり使用した。融点は、T h o m a s H o o v e r U n i m e l tキャピラリー融点装置、若しくはS t a n f o r d R e s e a r c h S y s t e m sからのO p t i M e l t自動融点装置で得、そして未補正である。分子はI S I S D r a w、C h e m D r a w若しくはA C D N a m e P r o内の命名プログラムに従って命名されたそれらの既知の名称を与えられる。こうしたプログラムが分子に命名することが不可能である場合、分子は慣習的命名規則を使用して命名する。¹H NMRスペクトルデータはppm (δ)でであり、そして、別の方法で述べられない限り、300、400若しくは600MHzで記録し、および¹³C NMRスペクトルデータはppm (δ)でであり、そして75、100若しくは150MHzで記録した。

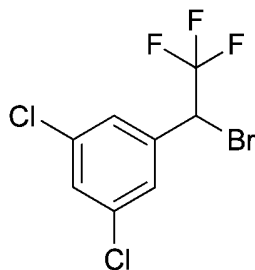
40

【0106】

実施例1： 1–（1–ブロモ–2, 2, 2–トリフルオロエチル）–3, 5–ジクロロベンゼン（C 2）の製造

【0107】

【化 17】



【0108】

10

段階1方法A。1-(3,5-ジクロロフェニル)-2,2,2-トリフルオロエタノール(C1)。0℃のメタノール(100mL)中の1-(3,5-ジクロロフェニル)-2,2,2-トリフルオロエタノール(Rieke Metals、英国から調達された；5.00g、20.5mmol)の攪拌溶液に、ホウ水素化ナトリウム(3.33g、92.5mL)および水性水酸化ナトリウム(1N；10mL)を添加した。該反応混合物を25℃に加熱しかつ2時間攪拌した。反応が薄層クロマトグラフィーにより完了と思われた後に、飽和水性塩化アンモニウムを該反応混合物に添加し、そして該混合物を減圧下に濃縮した。残渣をジエチルエーテルで希釈しかつ水(3×50mL)で洗浄した。有機層を硫酸ナトリウムで乾燥しかつ減圧下に濃縮して、表題化合物を液体(4.00g、79%)：¹H NMR(400MHz、CDCl₃) δ 7.41(m、3H)、5.00(m、1H)、2.74(s、1H)；EIMS m/z 242.97([M-H]⁻)として提供した。

20

【0109】

段階1方法B。1-(3,5-ジクロロフェニル)-2,2,2-トリフルオロエタノール(C1)。テトラヒドロフラン(250mL)中の3,5-ジクロロベンズアルデヒド(10g、57mmol)の攪拌溶液に、トリフルオロメチルトリメチルシラン(9.8g、69mmol)および触媒量のフッ化テトラブチルアンモニウムを添加した。該反応混合物を25℃で8時間攪拌した。反応が薄層クロマトグラフィーにより完了と思われた後に、該反応混合物を塩酸(3N)で希釈しそしてその後16時間攪拌した。該反応混合物を水で希釈しかつ酢酸エチルで抽出した(3回)。合わせられた有機抽出液を塩水で洗浄し、硫酸ナトリウムで乾燥しかつ減圧下に濃縮して、表題化合物を液体(8.4g、60%)として提供した。

30

【0110】

段階2。1-(1-ブロモ-2,2,2-トリフルオロエチル)-3,5-ジクロロベンゼン(C2)。ジクロロメタン(50mL)中の1-(3,5-ジクロロフェニル)-2,2,2-トリフルオロエタノール(C1)(4.00g、16.3mmol)の攪拌溶液に、N-ブロモスクシンイミド(2.90g、16.3mmol)および垂リン酸トリフェニル(5.06g、16.3mmol)を添加し、そして結果として生じる反応混合物を還流で18時間加熱した。反応が薄層クロマトグラフィーにより完了と思われた後に、該反応混合物を25℃に冷却しそして減圧下に濃縮した。溶出液として100%ペンタンを使用するフラッシュカラムクロマトグラフィーによる精製が、表題化合物を液体(2.00g、40%)：¹H NMR(400MHz、CDCl₃) δ 7.41(s、3H)、5.00(m、1H)；EIMS m/z 306([M]⁺)として提供した。

40

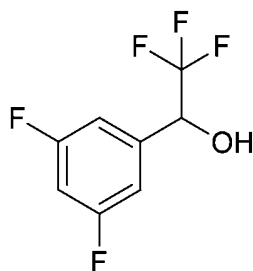
【0111】

以下の化合物は実施例1の段階1方法Aに開示される手順に従って作成した。

1-(3,5-ジフルオロフェニル)-2,2,2-トリフルオロエタノール(C3)

【0112】

【化 18】



【0113】

10

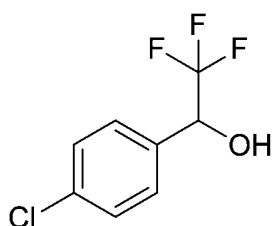
該生成物は無色油状物（0.2 g、75%）： ^1H NMR（400 MHz、 CDCl_3 ） δ 7.05（m、2H）、6.88（m、1H）、5.06（m、1H）、2.66（s、1H）；ESI-MS m/z 212（ $[\text{M}]^+$ ）として単離された。

【0114】

1-（4-クロロフェニル）-2,2,2-トリフルオロエタノール（C4）

【0115】

【化 19】



20

【0116】

該生成物は無色油状物（5.0 g、99%）： ^1H NMR（400 MHz、 CDCl_3 ） δ 7.44–7.38（m、4H）、5.05（m、1H）、2.55（s、1H）；ESI-MS m/z 210（ $[\text{M}]^+$ ）として単離された。

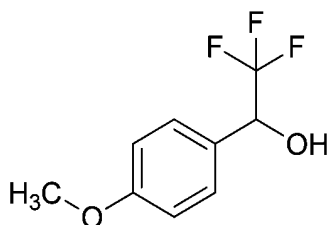
【0117】

2,2,2-トリフルオロ-1-（4-メトキシフェニル）エタノール（C5）

30

【0118】

【化 20】



【0119】

40

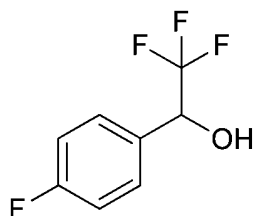
該生成物は淡黄色液体： ^1H NMR（400 MHz、 CDCl_3 ） δ 7.41（d、 $J=8.8$ Hz、2H）、6.95（m、 $J=8.8$ Hz、2H）、5.00（m、1H）、3.82（s、3H）、2.44（s、1H）；ESI-MS m/z 206（ $[\text{M}]^+$ ）として単離された。

【0120】

2,2,2-トリフルオロ-1-（4-フルオロフェニル）エタノール（C6）

【0121】

【化 2 1】



【0 1 2 2】

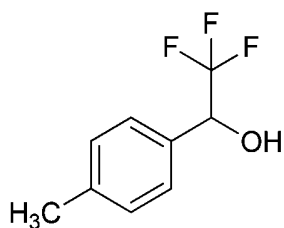
該生成物は無色油状物（5 g、99%）： ^1H NMR（400 MHz、 CDCl_3 ） δ 7.48–7.45（m、2H）、7.13–7.07（m、2H）、5.06（m、1H）、2.53（s、1H）；ESI-MS m/z 194（ $[\text{M}]^+$ ）として単離された。

【0 1 2 3】

2, 2, 2-トリフルオロ-1-（p-トリル）エタノール（C7）

【0 1 2 4】

【化 2 2】



【0 1 2 5】

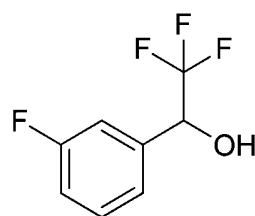
該生成物は無色油状物（5.0 g、99%）： ^1H NMR（400 MHz、 CDCl_3 ） δ 7.37（d、 $J=8.0$ Hz、2H）、7.23（d、 $J=8.0$ Hz、2H）、5.02（m、1H）、2.46（m、1H）、2.37（s、3H）；ESI-MS m/z 190（ $[\text{M}]^+$ ）として単離された。

【0 1 2 6】

2, 2, 2-トリフルオロ-1-（3-フルオロフェニル）エタノール（C8）

【0 1 2 7】

【化 2 3】



【0 1 2 8】

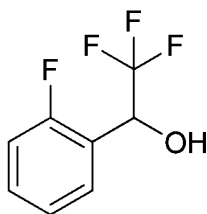
該生成物は無色粘性油状物（2.8 g、93%）： ^1H NMR（400 MHz、 CDCl_3 ） δ 7.41（m、1H）、7.25（m、2H）、7.14（m、1H）、5.06（m、1H）、2.60（s、1H）；ESI-MS m/z 194（ $[\text{M}]^+$ ）として単離された。

【0 1 2 9】

2, 2, 2-トリフルオロ-1-（2-フルオロフェニル）エタノール（C9）

【0 1 3 0】

【化 2 4】



【0131】

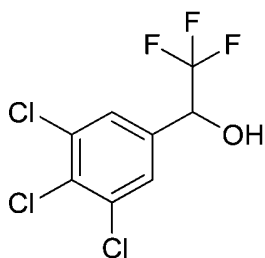
該生成物は無色油状物（2.5 g、99%）： ^1H NMR（400 MHz、 CDCl_3 ） δ 7.40（m、1H）、7.43（m、1H）、7.24（m、1H）、7.13（m、1H）、5.42（m、1H）、2.65（s、1H）；ESI-MS m/z 194（ $[\text{M}]^+$ ）として単離された。

【0132】

以下の化合物は実施例1の段階1方法Bに開示される手順に従って作成した。
2, 2, 2-トリフルオロ-1-（3, 4, 5-トリクロロフェニル）エタノール（C10）

【0133】

【化 2 5】



【0134】

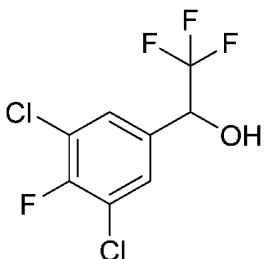
該生成物は淡黄色液体（0.500 g、65%）： ^1H NMR（400 MHz、 CDCl_3 ） δ 7.45（s、2H）、5.00（m、1H）、2.80（s、1H）；ESI-MS m/z 278（ $[\text{M}+\text{H}]^+$ ）；IR（薄膜）3420、1133、718 cm^{-1} として単離された。

【0135】

1-（3, 5-ジクロロ-4-フルオロフェニル）-2, 2, 2-トリフルオロエタノール（C11）

【0136】

【化 2 6】



【0137】

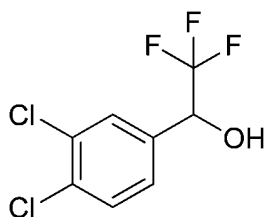
該生成物は淡黄色液体（0.500 g、65%）： ^1H NMR（400 MHz、 CDCl_3 ） δ 7.41（s、2H）、5.00（m、1H）、2.80（s、1H）；ESI-MS m/z 262（ $[\text{M}+\text{H}]^+$ ）；IR（薄膜）3420、1133、718 cm^{-1} として単離された。

【0138】

1-(3,4-ジクロロフェニル)-2,2,2-トリフルオロエタノール (C12)

【0139】

【化27】



10

【0140】

該生成物は淡黄色液体 (0.500 g、65%) : ^1H NMR (400 MHz、 CDCl_3) δ 7.60 (s、1H)、7.51 (m、1H)、7.35 (m、1H)、5.01 (m、1H)、2.60 (s、1H) ; EIMS m/z 244 ($[\text{M}]^+$) として単離された。

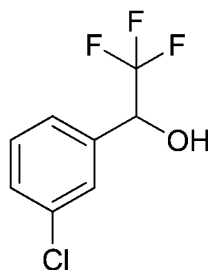
【0141】

1-(3-クロロフェニル)-2,2,2-トリフルオロエタノール (C13)

【0142】

【化28】

20



【0143】

該生成物は無色粘性油状物 (1.5 g、75%) : ^1H NMR (400 MHz、 CDCl_3) δ 7.50 (s、1H)、7.42–7.35 (m、3H)、5.02 (m、1H)、2.65 (br s、1H) として単離された。

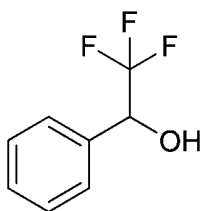
30

【0144】

2,2,2-トリフルオロ-1-フェニルエタノール (C14)

【0145】

【化29】



40

【0146】

該生成物が単離された (10 g、80%) : ^1H NMR (300 MHz、 CDCl_3) δ 7.48 (m、2H)、7.40 (m、3H)、5.02 (m、1H)、2.65 (d、 $J=7.1$ Hz、1H)。

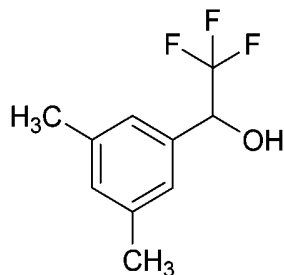
【0147】

1-(3,5-ジメチルフェニル)-2,2,2-トリフルオロエタノール (C15)

【0148】

50

【化 3 0】



【0 1 4 9】

10

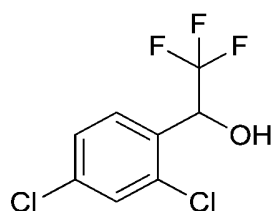
該生成物は灰白色固形物： ^1H NMR (400 MHz、 CDCl_3) δ 7.05 (s、2H)、7.02 (s、1H)、4.95 (m、1H)、2.32 (s、6H)；ESIMS m/z 204 ($[\text{M}]^+$)として単離された。

【0 1 5 0】

1-(2,4-ジクロロフェニル)-2,2,2-トリフルオロエタノール (C16)

【0 1 5 1】

【化 3 1】



20

【0 1 5 2】

該生成物は灰白色粉末 (5.3 g、61%)：mp 49–51 °C； ^1H NMR (400 MHz、 CDCl_3) δ 7.62–7.66 (d、1H)、7.42–7.44 (d、1H)、7.32–7.36 (d、1H)、5.6 (m、1H)、2.7 (s、1H)；ESIMS m/z 244 ($[\text{M}]^+$)として単離された。

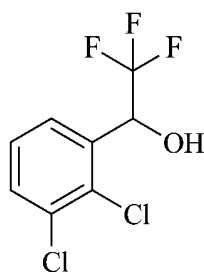
【0 1 5 3】

30

1-(2,3-ジクロロフェニル)-2,2,2-トリフルオロエタノール (C17)

【0 1 5 4】

【化 3 2】



40

【0 1 5 5】

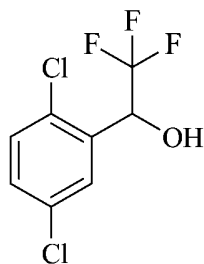
該生成物は淡黄色油状物 (5.2 g、60%)： ^1H NMR (400 MHz、 CDCl_3) δ 7.62–7.64 (d、1H)、7.52–7.54 (m、1H)、7.29–7.33 (t、1H)、5.6–5.76 (m、1H)、2.7 (s、1H)；ESIMS m/z 244 ($[\text{M}]^+$)として単離された。

【0 1 5 6】

1-(2,5-ジクロロフェニル)-2,2,2-トリフルオロエタノール (C19)

【0 1 5 7】

【化 3 3】



【0158】

10

該生成物は黄色油状物（4.1 g、60%）： ^1H NMR（400 MHz、 CDCl_3 ） δ 7.68–7.7（s、1H）、7.3–7.37（m、2H）、5.51–5.6（m、1H）、2.7（s、1H）；ESI MS m/z 244（ $[\text{M}]^+$ ）として単離された。

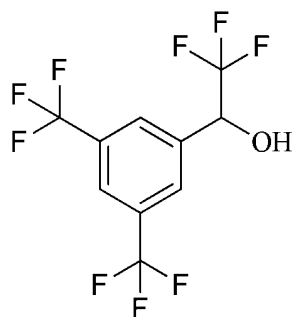
【0159】

1-（3，5-ビス（トリフルオロメチル）フェニル）-2，2，2-トリフルオロエタノール（C20）

【0160】

【化 3 4】

20



【0161】

該生成物が単離された（3.8 g、60%）： ^1H NMR（400 MHz、 CDCl_3 ） δ 7.98（m、3H）、5.25（m、1H）、3.2（br、1H）；ESI MS m/z 312（ $[\text{M}]^+$ ）。

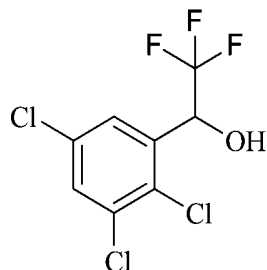
30

【0162】

2，2，2-トリフルオロ-1-（2，3，5-トリクロロフェニル）エタノール（C21）

【0163】

【化 3 5】



40

【0164】

該生成物は白色固形物（4.0 g、60%）：mp 113–115℃； ^1H NMR（400 MHz、 CDCl_3 ） δ 7.62（d、1H）、7.50（d、1H）、5.60–5.70（m、1H）、2.75（s、1H）；ESI MS m/z 278（ $[\text{M}]^+$ ）として単離された。

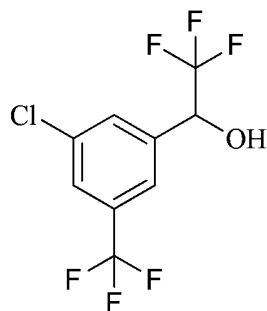
50

【0165】

1-(3-クロロ-5-(トリフルオロメチル)フェニル)-2,2,2-トリフルオロエタノール (C22)

【0166】

【化36】



10

【0167】

該生成物は淡黄色油状物 (2.0 g、50%) : ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.51 (m, 3H)、5.08 (m, 1H)、2.81 (s, 1H) ; ESIMS m/z 278 ($[\text{M}]^+$) として単離された。

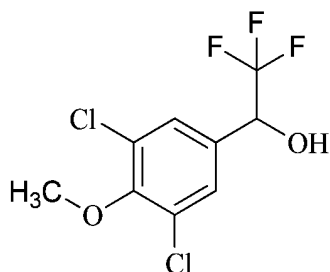
【0168】

1-(3,5-ジクロロ-4-メトキシフェニル)-2,2,2-トリフルオロエタノール (C23)

20

【0169】

【化37】



30

【0170】

該生成物は灰白色固形物 (0.8 g、60%) ; mp 92-95 °C : ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.41 (s, 2H)、5.00 (m, 1H)、3.89 (s, 3H)、2.64 (m, 1H) ; ESIMS m/z 274 ($[\text{M}]^+$) として単離された。

【0171】

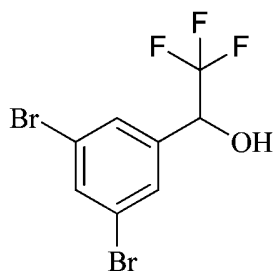
以下の化合物は上の実施例1の段階1方法Bに開示される手順に従って作成した。

1-(3,5-ジブロモフェニル)-2,2,2-トリフルオロエタノール (C24)

【0172】

40

【化38】



【0173】

50

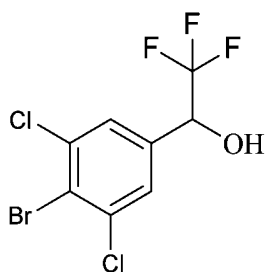
表題分子は無色液体： ^1H NMR (300 MHz、 CDCl_3) δ 7.67 (s、1H)、7.58 (s、2H)、5.08–5.02 (m、1H)、4.42 (bs、1H)；EIMS m/z 333.7 ($[\text{M}]^+$)；IR (薄膜) 3417、2966、1128、531 cm^{-1} として単離された。

【0174】

1-(4-ブロモ-3,5-ジクロロフェニル)-2,2,2-トリフルオロエタノール (C25)

【0175】

【化39】



10

【0176】

該生成物は無色液体： ^1H NMR (300 MHz、 $\text{DMSO}-d_6$) δ 7.75 (s、2H)、7.24 (d、 $J=6.0$ Hz、1H)、5.34–5.29 (m、1H)；EIMS m/z 321.88 ($[\text{M}]^+$)；IR (薄膜) 3420、1706、1267、804、679 cm^{-1} として単離された。

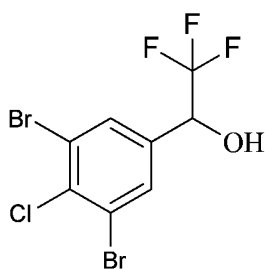
20

【0177】

1-(3,5-ジブロモ-4-クロロフェニル)-2,2,2-トリフルオロエタノール (C26)

【0178】

【化40】



30

【0179】

該生成物は淡黄色ガム状物： ^1H NMR (300 MHz、 $\text{DMSO}-d_6$) δ 7.89 (s、2H)、7.20 (d、 $J=6.0$ Hz、1H) 5.34–5.30 (m、1H)；EIMS m/z 366.0 ($[\text{M}]^+$)として単離された。

【0180】

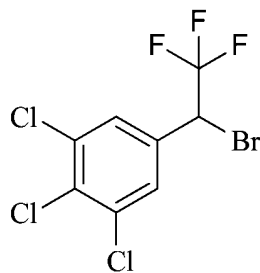
40

以下の化合物は実施例1の段階2に開示される手順に従って作成した。

5-(1-ブロモ-2,2,2-トリフルオロエチル)-1,2,3-トリクロロベンゼン (C27)

【0181】

【化 4 1】



【0182】

10

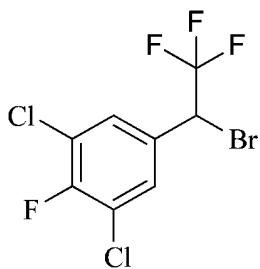
該生成物は無色油状物（0.300 g、60%）： ^1H NMR（400 MHz、 CDCl_3 ） δ 7.59（s、2H）、5.00（m、1H）；EIMS m/z 340（ $[\text{M}]^+$ ）として単離された。

【0183】

5-（1-ブロモ-2,2,2-トリフルオロエチル）-1,3-ジクロロ-2-フルオロベンゼン（ C_{28} ）

【0184】

【化 4 2】



20

【0185】

該生成物は無色油状物（0.320 g、60%）： ^1H NMR（400 MHz、 CDCl_3 ） δ 7.45（s、2H）、5.00（m、1H）；EIMS m/z 324（ $[\text{M}]^+$ ）として単離された。

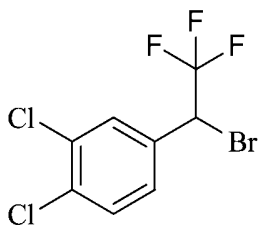
30

【0186】

4-（1-ブロモ-2,2,2-トリフルオロエチル）-1,2-ジクロロベンゼン（ C_{29} ）

【0187】

【化 4 3】



40

【0188】

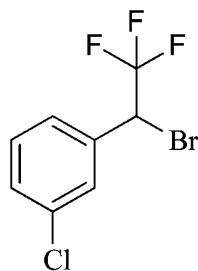
該生成物は無色油状物（0.300 g、60%）： ^1H NMR（400 MHz、 CDCl_3 ） δ 7.63（s、1H）、7.51（m、1H）、7.35（m、1H）、5.01（m、1H）；EIMS m/z 306（ $[\text{M}]^+$ ）として単離された。

【0189】

1-（1-ブロモ-2,2,2-トリフルオロエチル）-3-クロロベンゼン（ C_{30} ）

【0190】

【化 4 4】



【0191】

10

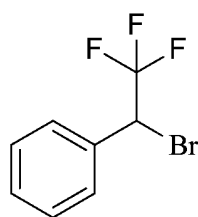
該生成物が単離された (0.14 g、22%) : ^1H NMR (400 MHz、 CDCl_3) δ 7.50 (br s、1H)、7.42–7.35 (m、3H)、5.07 (m、1H)。

【0192】

(1-ブロモ-2, 2, 2-トリフルオロエチル) ベンゼン (C31)

【0193】

【化 4 5】



20

【0194】

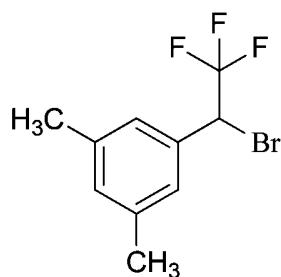
該生成物は液体 (8.0 g、60%) : ^1H NMR (400 MHz、 CDCl_3) δ 7.50 (m、2H)、7.40 (m、3H)、5.00 (q、 $J=7.5$ Hz、1H) として単離された。

【0195】

1-(1-ブロモ-2, 2, 2-トリフルオロエチル)-3, 5-ジメチルベンゼン (C32) 30

【0196】

【化 4 6】



40

【0197】

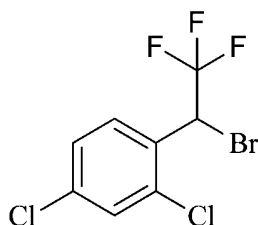
該生成物を単離しかつ粗 (crude) (3.0 g、51%) を続行した。

【0198】

1-(1-ブロモ-2, 2, 2-トリフルオロエチル)-2, 4-ジクロロベンゼン (C33)

【0199】

【化 4 7】



【0 2 0 0】

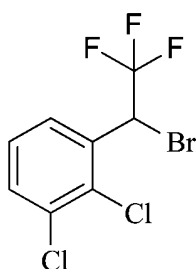
該生成物が単離された (3.2 g、50%) : ^1H NMR (400 MHz、 CDCl_3) δ 7.62–7.72 (m、1H)、7.4–7.42 (m、1H)、7.3–7.38 (m、1H)、5.7–5.8 (m、1H)。 10

【0 2 0 1】

1-(1-ブromo-2,2,2-トリフルオロエチル)-2,3-ジクロロベンゼン (C34)

【0 2 0 2】

【化 4 8】



20

【0 2 0 3】

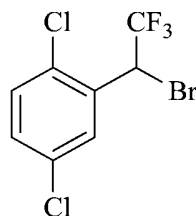
該生成物は油状物 (8.7 g、60%) : ^1H NMR (400 MHz、 CDCl_3) δ 7.62–7.71 (m、1H)、7.44–7.52 (m、1H)、7.27–7.3 (s、1H)、5.81–5.91 (m、1H) として単離された。

【0 2 0 4】

2-(1-ブromo-2,2,2-トリフルオロエチル)-1,4-ジクロロベンゼン (C35) 30

【0 2 0 5】

【化 4 9】



40

【0 2 0 6】

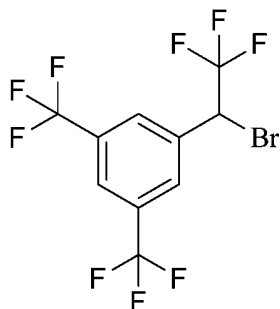
該生成物が単離された (3.0 g、60%) : ^1H NMR (400 MHz、 CDCl_3) δ 7.7–7.78 (m、1H)、7.3–7.4 (m、2H)、5.7–5.8 (m、1H)。

【0 2 0 7】

1-(1-ブromo-2,2,2-トリフルオロエチル)-3,5-ビス(トリフルオロメチル)ベンゼン (C36)

【0 2 0 8】

【化 5 0】



10

【0 2 0 9】

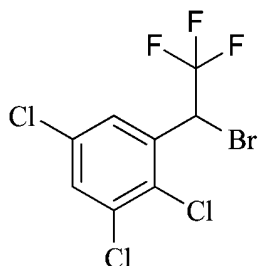
該生成物を製造しかつ粗 (c r u d e) を続行した。

【0 2 1 0】

1-(1-ブロモ-2, 2, 2-トリフルオロエチル)-2, 3, 5-トリクロロベンゼン (C 3 7)

【0 2 1 1】

【化 5 1】



20

【0 2 1 2】

該生成物が単離された (2. 9 g、6 0 %) : ^1H NMR (4 0 0 MHz、 CDCl_3) δ 7. 7 0 (d、1 H)、7. 5 0 (d、1 H)、5. 7 2-5. 8 2 (m、1 H)。

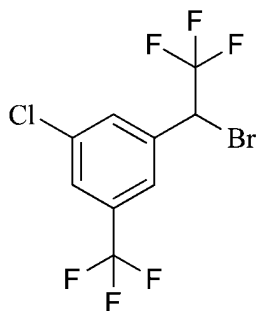
【0 2 1 3】

1-(1-ブロモ-2, 2, 2-トリフルオロエチル)-3-クロロ-5-(トリフルオロメチル)ベンゼン (C 3 8)

30

【0 2 1 4】

【化 5 2】



40

【0 2 1 5】

該生成物は油状物 (2. 0 g、4 0 %) : E S I M S m/z 3 4 2 ($[\text{M}]^+$) として単離された。

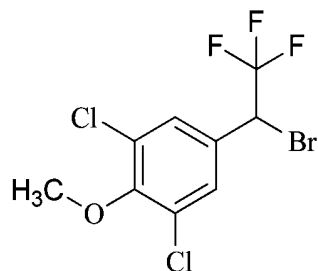
【0 2 1 6】

5-(1-ブロモ-2, 2, 2-トリフルオロエチル)-1, 3-ジクロロ-2-メトキシベンゼン (C 3 9)

【0 2 1 7】

50

【化 5 3】



【0 2 1 8】

10

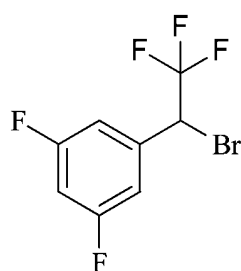
該生成物は無色液体（0.6 g、57%）として単離された。

【0 2 1 9】

1-（1-ブromo-2,2,2-トリフルオロエチル）-3,5-ジフルオロベンゼン（C 4 0）

【0 2 2 0】

【化 5 4】



20

【0 2 2 1】

該生成物が単離された（3.2 g、50%）； ^1H NMR（400 MHz、 CDCl_3 ） δ 7.05（m、2H）、6.86（m、1H）、5.03（q、 $J=7.4$ Hz、1H）。

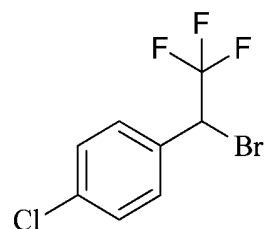
【0 2 2 2】

1-（1-ブromo-2,2,2-トリフルオロエチル）-4-クロロベンゼン（C 4 1）

30

【0 2 2 3】

【化 5 5】



【0 2 2 4】

40

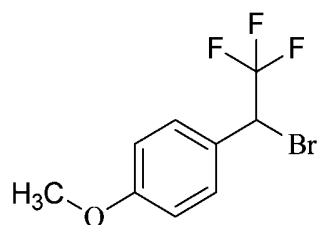
該生成物が単離された（3.0 g、46%）： ^1H NMR（400 MHz、 CDCl_3 ） δ 7.45（d、 $J=8.2$ Hz、2H）、7.37（d、 $J=8.2$ Hz、2H）、5.10（q、 $J=7.2$ Hz、1H）。

【0 2 2 5】

1-（1-ブromo-2,2,2-トリフルオロエチル）-4-メトキシベンゼン（C 4 2）

【0 2 2 6】

【化 5 6】



【0 2 2 7】

該生成物が単離された（3.8 g、62 %）。

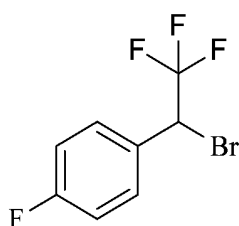
10

【0 2 2 8】

1-（1-ブロモ-2，2，2-トリフルオロエチル）-4-フルオロベンゼン（C 4 3）

【0 2 2 9】

【化 5 7】



20

【0 2 3 0】

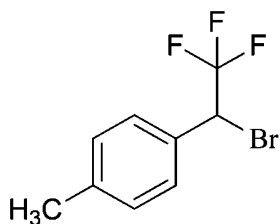
該生成物を製造しかつ粗中間体として続行した。

【0 2 3 1】

1-（1-ブロモ-2，2，2-トリフルオロエチル）-4-メチルベンゼン（C 4 4）

【0 2 3 2】

【化 5 8】



30

【0 2 3 3】

該生成物が単離された（3.0 g、45 %）。

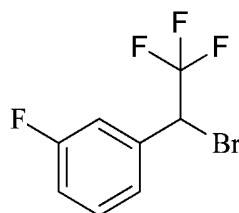
【0 2 3 4】

1-（1-ブロモ-2，2，2-トリフルオロエチル）-3-フルオロベンゼン（C 4 5）

40

【0 2 3 5】

【化 5 9】



【0 2 3 6】

50

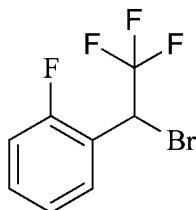
該生成物が単離された（2.0 g、61％）。

【0237】

1-（1-ブロモ-2,2,2-トリフルオロエチル）-2-フルオロベンゼン（C₄H₅BrF₃）

【0238】

【化60】



10

【0239】

該生成物が単離された（2.0 g、61％）：¹H NMR（400 MHz、CDCl₃）δ 7.61（m、1H）、7.40（m、1H）、7.23（m、1H）、7.10（m、1H）、5.40（m、1H）；GCMS m/z 255（[M]⁺）。

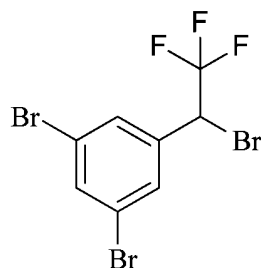
【0240】

1,3-ジブロモ-5-（1-ブロモ-2,2,2-トリフルオロエチル）ベンゼン（C₄H₃Br₃F₃）

20

【0241】

【化61】



30

【0242】

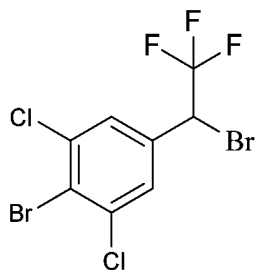
表題分子は無色液体：¹H NMR（300 MHz、CDCl₃）δ 7.71（s、1H）、7.59（s、2H）、5.04-4.97（m、1H）；EIMS m/z 394.6（[M]⁺）；IR（薄膜）1114、535 cm⁻¹として単離された。

【0243】

2-ブロモ-5-（1-ブロモ-2,2,2-トリフルオロエチル）-1,3-ジクロロベンゼン（C₄H₂Br₂F₃）

【0244】

【化62】



40

【0245】

表題分子は無色液体：¹H NMR（400 MHz、DMSO-d₆）δ 7.79（s、2H）、6.27-6.21（m、1H）；EIMS m/z 383.9（[M]⁺）

50

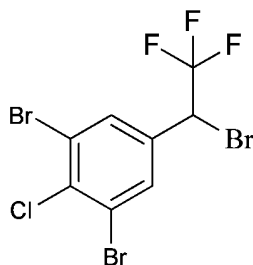
); IR (薄膜) 2924、1114、749、534 cm^{-1} として単離された。

【0246】

1, 3-ジブromo-5-(1-bromo-2, 2, 2-トリフルオロエチル)-2-クロロベンゼン (C49)

【0247】

【化63】



10

【0248】

表題分子は淡黄色液体： ^1H NMR (300 MHz、DMSO- d_6) δ 7.97 (s、2H)、6.27–6.19 (m、1H); EIMS m/z 428.0 ($[\text{M}]^+$)として単離された。

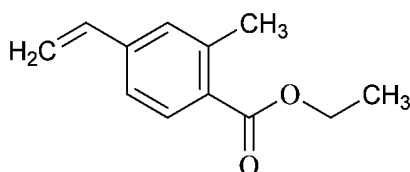
【0249】

実施例3: エチル2-メチル-4-ビニルベンゾエート (C52) の製造

20

【0250】

【化64】



【0251】

段階1。4-ホルミル-2-メチル安息香酸 (C50)。-78℃の無水テトラヒドロフラン (360 mL) 中の4-ブromo-2-メチル安息香酸 (10.0 g、46.4 mmol) の攪拌溶液に、*n*-ブチルリチウム (ヘキサン中1.6 M溶液、58.2 mL、93.0 mmol) およびジメチルホルムアミド (8 mL) を添加した。該反応混合物を-78℃で1時間攪拌し、その後25℃に加温しかつ1時間攪拌した。該反応混合物を塩酸 (1 N) でクエンチしかつ酢酸エチルで抽出した。合わせられた酢酸エチル抽出液を塩水で洗浄し、硫酸ナトリウムで乾燥しかつ減圧下に濃縮した。残渣を*n*-ヘキサンで洗浄して、表題化合物を固形物 (3.00 g、40%): mp 196–198℃; ^1H NMR (400 MHz、DMSO- d_6) δ 13.32 (br s、1H)、10.05 (s、1H)、7.98 (m、1H)、7.84 (m、2H)、2.61 (s、3H); EIMS m/z 163 ($[\text{M}-\text{H}]^-$)として提供した。

30

40

【0252】

段階2。エチル4-ホルミル-2-メチルベンゾエート (C51)。エチルアルコール (30 mL) 中の4-ホルミル-2-メチル安息香酸 (C50) (3.00 g、18.2 mmol) の攪拌溶液に硫酸 (2 mL) を添加し、そして該反応混合物を80℃で18時間加熱した。該反応混合物を25℃に冷却しかつ減圧下に濃縮した。残渣を酢酸エチルで希釈しかつ水で洗浄した。合わせられた酢酸エチル抽出液を塩水で洗浄し、硫酸ナトリウムで乾燥しかつ減圧下に濃縮して、表題化合物を固形物 (2.80 g、80%): ^1H NMR (400 MHz、CDCl₃) δ 10.05 (s、1H)、8.04 (m、1H)、7.75 (m、2H)、4.43 (m、2H)、2.65 (s、3H)、1.42 (m、3H)として提供した。

50

【0253】

段階3。エチル 2-メチル-4-ビニルベンゾエート (C52)。1, 4-ジオキサン (20 mL) 中のエチル 4-ホルミル-2-メチルベンゾエート (C51) (2.8 g、4.0 mmol) の攪拌溶液に、25℃で炭酸カリウム (3.0 g、22 mmol) およびメチルトリフェニルホスホニウムブロミド (7.8 g、22 mmol) を添加した。その後、該反応混合物を100℃で18時間加熱した。反応が薄層クロマトグラフィーにより完了と思われた後に、該反応混合物を25℃に冷却しかつ濾過し、そして濾液を減圧下に濃縮した。粗化合物を、溶出液として25-30%酢酸エチル/ヘキサンを使用するフラッシュカラムクロマトグラフィーにより精製して、表題化合物を固形物 (2.0 g、72%) : ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.86 (m, 1H)、7.27 (m, 2H)、6.68 (dd, $J=17.6, 10.8$ Hz, 1H)、5.84 (d, $J=17.6$ Hz, 1H)、5.39 (d, $J=10.8$ Hz, 1H)、4.39 (m, 2H)、2.60 (s, 3H)、1.40 (m, 3H) ; ESIMS m/z 191 ($[\text{M}-\text{H}]^-$) ; IR (薄膜) 2980、1716、1257 cm^{-1} として提供した。

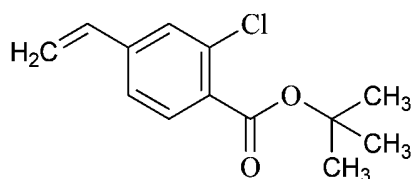
10

【0254】

実施例4: tert-ブチル 2-クロロ-4-ビニルベンゾエート (C54) の製造

【0255】

【化65】



20

【0256】

段階1。tert-ブチル 4-ブロモ-2-クロロベンゾエート (C53)。テトラヒドロフラン (30 mL) 中の4-ブロモ-2-クロロ安息香酸 (5.00 g、21.4 mmol) の攪拌溶液に、二炭酸ジ-tert-ブチル (25.5 g、25.6 mmol)、トリエチルアミン (3.20 g、32.0 mmol) および4-ジメチルアミノピリジン (0.780 g、6.40 mmol) を添加し、そして該反応混合物を25℃で18時間攪拌した。該反応混合物を酢酸エチルで希釈しかつ水で洗浄した。合わせられた有機層を塩水で洗浄し、硫酸ナトリウムで乾燥しかつ減圧下に濃縮した。残渣を、溶出液として2-3%酢酸エチル/ヘキサンを使用するフラッシュカラムクロマトグラフィーにより精製して、表題化合物を液体 (3.20 g、51%) : ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.62 (m, 2H)、7.44 (d, $J=8.4$ Hz, 1H)、1.59 (s, 9H) ; ESIMS m/z 290 ($[\text{M}+\text{H}]^+$) ; IR (薄膜) 1728 cm^{-1} として提供した。

30

【0257】

段階2。tert-ブチル 2-クロロ-4-ビニルベンゾエート (C54)。トルエン (20 mL) 中のtert-ブチル 4-ブロモ-2-クロロベンゾエート (C53) (1.6 g、5.5 mmol) の攪拌溶液に、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0) (0.31 mg、0.27 mmol)、炭酸カリウム (2.3 g、17 mmol) および無水ビニルボロン酸ピリジン複合体 (vinylboronic anhydride pyridine complex) (2.0 g、8.3 mmol) を添加し、そして該反応混合物を還流に16時間加熱した。該反応混合物を濾過し、濾液を水および塩水で洗浄し、硫酸ナトリウムで乾燥しかつ減圧下に濃縮した。溶出液として5-6%酢酸エチル/ヘキサンを使用するフラッシュカラムクロマトグラフィーによる精製が、表題化合物を液体 (0.60 g、46%) : ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.72 (d, $J=8.1$ Hz, 1H)、7.44 (m, 1H)、7.31 (d, $J=8.0$ Hz, 1H)、6.69 (dd, $J=17.6, 10.8$ Hz, 1H)、5.85 (

40

50

d、 $J = 17.6 \text{ Hz}$ 、 1 H ）、 5.40 (d、 $J = 10.8 \text{ Hz}$ 、 1 H)、 1.60 (s、 9 H)；ESIMS m/z 239 ($[\text{M}+\text{H}]^+$)；IR (薄膜) 2931 、 1725 、 1134 cm^{-1} として提供した。

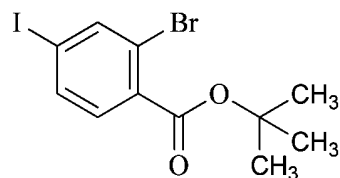
【0258】

以下の化合物は実施例4の段階1に開示される手順に従って作成した。

tert-ブチル 2-ブロモ-4-ヨードベンゾエート (C55)

【0259】

【化66】



10

【0260】

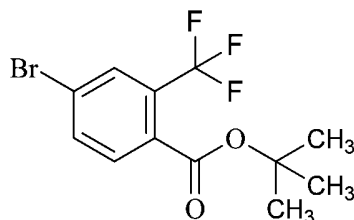
該生成物は無色油状物 (1.2 g 、 50%)： ^1H NMR (400 MHz 、 CDCl_3) δ 8.01 (s、 1 H)、 7.68 (d、 $J = 8.4 \text{ Hz}$ 、 1 H)、 7.41 (d、 $J = 8.0 \text{ Hz}$ 、 1 H)、 1.59 (s、 9 H)；ESIMS m/z 382 ($[\text{M}+\text{H}]^+$)；IR (薄膜) 1727 cm^{-1} として単離された。

【0261】

tert-ブチル 4-ブロモ-2-(トリフルオロメチル)ベンゾエート (C56)

【0262】

【化67】



30

【0263】

該生成物は無色油状物 (1 g 、 52%)： ^1H NMR (400 MHz 、 CDCl_3) δ 7.85 (s、 1 H)、 7.73 (d、 $J = 8.4 \text{ Hz}$ 、 1 H)、 7.62 (d、 $J = 8.4 \text{ Hz}$ 、 1 H)、 1.57 (s、 9 H)；ESIMS m/z 324 ($[\text{M}+\text{H}]^+$)；IR (薄膜) 1725 cm^{-1} として単離された。

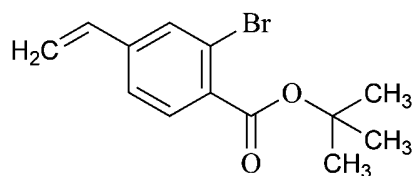
【0264】

以下の化合物は実施例4の段階2に開示される手順に従って作成した。

tert-ブチル 2-ブロモ-4-ビニルベンゾエート (C57)

【0265】

【化68】



40

【0266】

該生成物は無色油状物 (1 g 、 52%)： ^1H NMR (400 MHz 、 CDCl_3) δ 7.68 (m、 2 H)、 7.36 (d、 $J = 8.0 \text{ Hz}$ 、 1 H)、 6.68 (dd、 $J = 17.6$ 、 10.8 Hz 、 1 H)、 5.84 (d、 $J = 17.6 \text{ Hz}$ 、 1 H)、 5.3

50

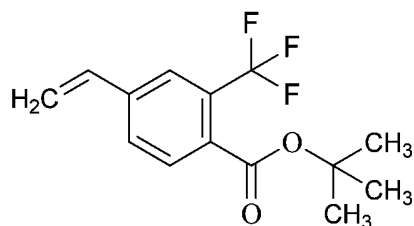
9 (d、 $J=10.8\text{ Hz}$ 、1H)、1.60 (s、9H) ; ESI-MS m/z 282 ($[M+H]^+$) ; IR (薄膜) 2978、1724、1130 cm^{-1} として単離された。

【0267】

tert-ブチル 2-(トリフルオロメチル)-4-ビニルベンゾエート (C58)

【0268】

【化69】



10

【0269】

該生成物は無色油状物 (1.2 g、50%) : ^1H NMR (400 MHz、 CDCl_3) δ 7.71 (d、 $J=6.4\text{ Hz}$ 、2H)、7.59 (d、 $J=7.6\text{ Hz}$ 、1H)、6.77 (dd、 $J=17.6$ 、 10.8 Hz 、1H)、5.89 (d、 $J=17.6\text{ Hz}$ 、1H)、5.44 (d、 $J=10.8\text{ Hz}$ 、1H)、1.58 (s、9H) ; ESI-MS m/z 272 ($[M+H]^+$) ; IR (薄膜) 2982、1727、1159 cm^{-1} として単離された。

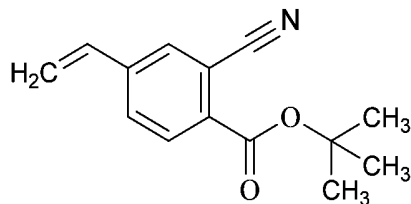
20

【0270】

実施例5 : tert-ブチル 2-シアノ-4-ビニルベンゾエート (C59) の製造

【0271】

【化70】



30

【0272】

ジメチルホルムアミド (20 mL) 中の tert-ブチル 2-ブロモ-4-ビニルベンゾエート (C57) (0.5 g、1.8 mmol) の攪拌溶液にシアン化銅 (I) (0.23 g、2.7 mmol) を添加し、そして該反応混合物を 140 °C で 3 時間加熱した。該反応混合物を 25 °C に冷却し、水で希釈しかつ酢酸エチルで抽出した。合わせられた有機層を塩水で洗浄し、硫酸ナトリウムで乾燥しかつ減圧下に濃縮した。残渣を、溶出液として 15% 酢酸エチル/ヘキサンを使用するフラッシュカラムクロマトグラフィーにより精製して、表題化合物を白色固形物 (0.30 g、72%) : mp 51–53 °C ; ^1H NMR (400 MHz、 CDCl_3) δ 8.03 (s、1H)、7.77 (s、1H)、7.64 (d、 $J=8.4\text{ Hz}$ 、1H)、6.75 (dd、 $J=17.6$ 、 10.8 Hz 、1H)、5.93 (d、 $J=17.6\text{ Hz}$ 、1H)、5.51 (d、 $J=10.8\text{ Hz}$ 、1H)、1.65 (s、9H) ; ESI-MS m/z 230 ($[M+H]^+$) ; IR (薄膜) 2370、1709、1142 cm^{-1} として提供した。

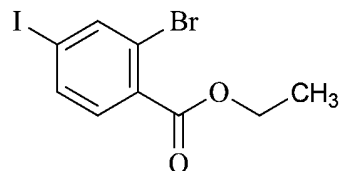
40

【0273】

実施例6 : エチル 2-ブロモ-4-ヨードベンゾエート (C60) の製造

【0274】

【化 7 1】



【0 2 7 5】

エチルアルコール（100 mL）中の4-ヨード-2-ブロモ安息香酸（5.00 g、15.3 mmol）の攪拌溶液に硫酸（5 mL）を添加し、そして該反応混合物を80℃で18時間加熱した。該反応混合物を25℃に冷却しそして減圧下に濃縮した。残渣を酢酸エチル（2×100 mL）で希釈しかつ水（100 mL）で洗浄した。合わせられた酢酸エチル抽出液を塩水で洗浄し、硫酸ナトリウムで乾燥しかつ減圧下に濃縮して、該化合物を淡黄色固形物（5.00 g、92%）：¹H NMR（400 MHz、DMSO-d₆）δ 8.04（d、J=1.2 Hz、1H）、7.71（d、J=7.6 Hz、1H）、7.51（d、J=8.4 Hz、1H）、4.41（q、J=7.2 Hz、2H）、1.41（t、J=7.2 Hz、3H）として提供した。

10

【0 2 7 6】

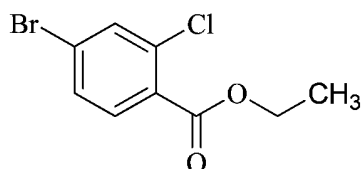
以下の化合物は実施例6に開示される手順に従って作成した。

エチル4-ブロモ-2-クロロベンゾエート（C61）

20

【0 2 7 7】

【化 7 2】



【0 2 7 8】

表題化合物は灰白色固形物（2.0 g、80%）：¹H NMR（400 MHz、DMSO-d₆）δ 8.25（d、J=1.2 Hz、1H）、7.79（d、J=7.6 Hz、1H）、7.65（d、J=8.4 Hz、1H）、4.65（q、J=7.2 Hz、2H）、1.56（t、J=7.2 Hz、3H）として単離された。

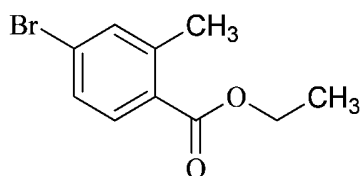
30

【0 2 7 9】

エチル4-ブロモ-2-メチルベンゾエート（C62）

【0 2 8 0】

【化 7 3】



40

【0 2 8 1】

表題化合物は淡黄色液体（3.0 g、83%）：¹H NMR（400 MHz、CDCl₃）δ 7.79（d、J=8.4 Hz、1H）、7.41（s、1H）、7.39（d、J=8.4 Hz、1H）、4.42（q、J=7.2 Hz、2H）、2.60（s、3H）、1.40（t、J=7.2 Hz、3H）；ESI MS m/z 229（[M+H]⁺）；IR（薄膜）1725 cm⁻¹として単離された。

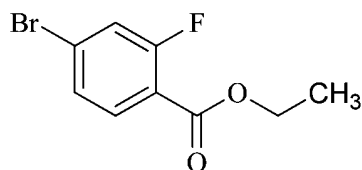
【0 2 8 2】

50

エチル 4-ブロモ-2-フルオロベンゾエート (C 6 3)

【0 2 8 3】

【化 7 4】



【0 2 8 4】

10

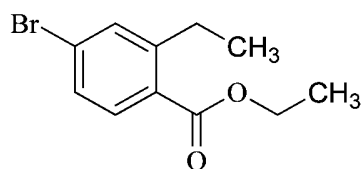
表題化合物は無色液体 (9.0 g、79%) : ^1H NMR (400 MHz、DMSO- d_6) δ 7.84 (t、 $J=8.4$ Hz、1H)、7.76 (d、 $J=2.0$ Hz、1H)、7.58 (d、 $J=1.6$ Hz、1H)、4.34 (q、 $J=7.2$ Hz、2H)、1.32 (t、 $J=7.2$ Hz、3H) ; ESI MS m/z 247 ($[\text{M}+\text{H}]^+$)、IR (薄膜) 1734 cm^{-1} として単離された。

【0 2 8 5】

実施例 7 : エチル 4-ブロモ-2-エチルベンゾエート (C 6 4) の製造

【0 2 8 6】

【化 7 5】



20

【0 2 8 7】

テトラヒドロフラン (16 mL) 中の 4-ブロモ-2-フルオロ安息香酸 (2.0 g、9.2 mmol) の攪拌溶液に、エチルマグネシウムブロミド (テトラヒドロフラン中 1.0 M、32 mL、32.0 mmol) を 0°C で一滴ずつ添加し、そして結果として生じる反応混合物を周囲温度で 18 時間攪拌した。該反応混合物を塩酸 (2 N) でクエンチし、かつ酢酸エチルで抽出した。合わせられた酢酸エチル層を無水硫酸ナトリウムで乾燥し、かつ減圧下に濃縮して、粗 4-ブロモ-2-エチル安息香酸を無色液体として提供し、これを精製なしに次の段階で使用した (0.40 g) : ^1H NMR (400 MHz、 CDCl_3) δ 7.64 (d、 $J=8.4$ Hz、1H)、7.47 (m、1H)、7.43 (m、1H)、2.95 (q、 $J=4.0$ Hz、2H)、1.32 (t、 $J=4.0$ Hz、3H) ; ESI MS m/z 229 ($[\text{M}+\text{H}]^+$)。 30

【0 2 8 8】

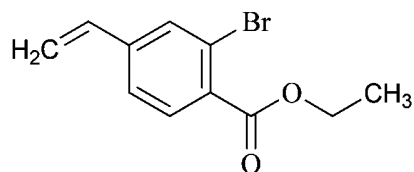
あるいは、表題化合物は、実施例 6 の手順に従って 4-ブロモ-2-エチル安息香酸から合成し、そして無色液体 (0.15 g、68%) : ^1H NMR (400 MHz、DMSO- d_6) δ 7.90 (d、 $J=8.4$ Hz、1H)、7.47 (m、2H)、4.40 (q、 $J=7.2$ Hz、2H)、3.06 (q、 $J=7.6$ Hz、2H)、1.42 (t、 $J=7.2$ Hz、3H)、1.26 (t、 $J=7.6$ Hz、3H) ; ESI MS m/z 227 ($[\text{M}-\text{H}]^-$) ; IR (薄膜) 3443 、 1686 、 568 cm^{-1} として単離された。 40

【0 2 8 9】

実施例 8 : エチル 2-ブロモ-4-ビニルベンゾエート (C 6 5) の製造

【0 2 9 0】

【化 7 6】



【0 2 9 1】

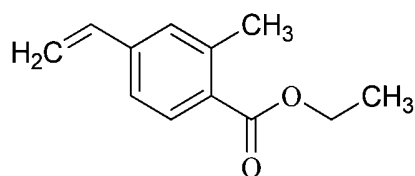
テトラヒドロフラン／水（100 mL、9：1）中のエチル 2-ブロモ-4-ヨードベンゾエート（C60）（5.00 g、14.3 mmol）の攪拌溶液に、ビニルトリフル
 オロホウ酸カリウム（1.89 g、14.3 mmol）、炭酸セシウム（18.3 g、56.1 mmol）およびトリフェニルホスフィン（0.220 g、0.850 mmol）
 を添加した。該反応混合物をアルゴンで20分間脱気し、その後ジクロロパラジウム（I
 I）（0.0500 g、0.280 mmol）を充填した。該反応混合物を還流に16時
 間加熱した。該反応混合物を周囲温度に冷却し、そしてCelite（登録商標）床で濾
 過しかつ酢酸エチルで洗浄した。濾液を再度酢酸エチルで抽出し、そして合わせられた有
 機層を水および塩水で洗浄し、硫酸ナトリウムで乾燥しかつ減圧下に濃縮して粗化合物を
 提供した。該粗化合物を、溶出液として2%酢酸エチル／石油エーテルを使用するフラッ
 シュカラムクロマトグラフィーにより精製して、表題化合物を薄褐色ゴム状物質（2.0
 0 g、56%）：¹H NMR（400 MHz、CDCl₃）δ 7.78（d、J=8.4 Hz、1H）、7.71（d、J=1.2 Hz、1H）、7.51（d、J=8.4 Hz、1H）、6.69（dd、J=17.6、10.8 Hz、1H）、5.86（d、J=17.6 Hz、1H）、5.42（d、J=11.2 Hz、1H）、4.42（q、J=7.2 Hz、2H）、1.43（t、J=3.6 Hz、3H）；ESI MS m/z 255（[M+H]⁺）；IR（薄膜）1729 cm⁻¹として提供した。

【0 2 9 2】

以下の化合物は実施例 8 に開示される手順に従って作成した。
 エチル 2-メチル-4-ビニルベンゾエート（C66）

【0 2 9 3】

【化 7 7】



【0 2 9 4】

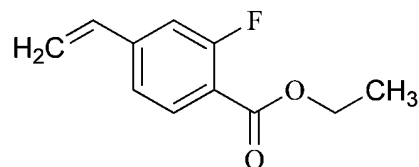
表題化合物は無色液体（0.8 g、80%）：¹H NMR（400 MHz、CDCl₃）δ 7.89（d、J=8.4 Hz、1H）、7.27（m、2H）、6.79（dd、J=17.6、10.8 Hz、1H）、5.86（d、J=17.6 Hz、1H）、5.42（d、J=11.2 Hz、1H）、4.42（q、J=7.2 Hz、2H）、2.60（s、3H）、1.43（t、J=7.2 Hz、3H）；ESI MS m/z 191（[M+H]⁺）；IR（薄膜）1717、1257 cm⁻¹として単離された。

【0 2 9 5】

エチル 2-フルオロ-4-ビニルベンゾエート（C67）

【0 2 9 6】

【化 7 8】



【0 2 9 7】

表題化合物は淡黄色液体 (2.0 g、50%) : ^1H NMR (400 MHz、DMSO- d_6) δ 7.87 (t、 $J=8.0$ Hz、1H)、7.51 (d、 $J=16.0$ Hz、1H)、7.48 (d、 $J=16.0$ Hz、1H)、6.82 (dd、 $J=17.6$ 、10.8 Hz、1H)、6.09 (d、 $J=17.6$ Hz、1H)、5.50 (d、 $J=10.8$ Hz、1H)、4.35 (q、 $J=7.2$ Hz、2H)、1.35 (t、 $J=7.2$ Hz、3H) ; ESIMS m/z 195 ($[\text{M}+\text{H}]^+$) ; IR (薄膜) 1728 cm^{-1} として単離された。

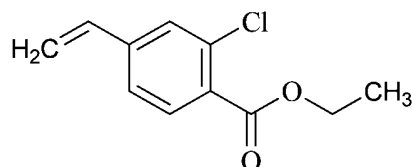
10

【0 2 9 8】

実施例 9 : エチル 2-クロロ-4-ビニルベンゾエート (C68) の製造

【0 2 9 9】

【化 7 9】



20

【0 3 0 0】

ジメチルスルホキシド (20 mL) 中のエチル 2-クロロ-4-ブロモベンゾエート (C61) (2.00 g、7.63 mmol) の攪拌溶液に、ビニルトリフルオロホウ酸カリウム (3.06 g、22.9 mmol) および炭酸カリウム (3.16 g、22.9 mmol) を添加した。該反応混合物をアルゴンで30分間脱気した。ビストリフェニルホスフィン (ジフェニルホスフィノフェロセン) パラジウム (II) ジクロリド (0.270 g、0.380 mmol) を添加し、そして該反応混合物を80℃に1時間加熱した。該反応混合物を水 (100 mL) で希釈し、酢酸エチル (2×50 mL) で抽出し、塩水で洗浄し、硫酸ナトリウムで乾燥しかつ減圧下に濃縮して、該化合物を褐色ゴム状物質 (1.10 g、69%) : ^1H NMR (400 MHz、 CDCl_3) δ 7.81 (d、 $J=8.4$ Hz、1H)、7.46 (s、1H)、7.33 (d、 $J=8.4$ Hz、1H)、6.70 (dd、 $J=17.6$ 、11.2 Hz、1H)、5.87 (d、 $J=17.6$ Hz、1H)、5.42 (d、 $J=10.8$ Hz、1H)、4.41 (q、 $J=7.2$ Hz、2H)、1.43 (t、 $J=7.2$ Hz、3H) ; ESIMS m/z 211 ($[\text{M}+\text{H}]^+$) ; IR (薄膜) 1729、886 cm^{-1} として得た。

30

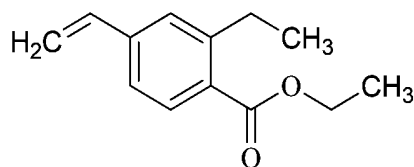
40

【0 3 0 1】

以下の化合物は実施例 9 に開示される手順に従って作成した。
エチル 2-エチル-4-ビニルベンゾエート (C69)

【0 3 0 2】

【化 8 0】



【0 3 0 3】

表題化合物は無色液体（1.0 g、66%）： ^1H NMR（300 MHz、 CDCl_3 ） δ 7.85（m、1H）、7.29（m、2H）、6.76（d、 $J=10.8$ Hz、1H）、5.86（d、 $J=17.6$ Hz、1H）、5.36（d、 $J=10.5$ Hz、1H）、4.41（q、 $J=7.2$ Hz、2H）、3.10（q、 $J=7.2$ Hz、2H）、1.40（t、 $J=7.2$ Hz、3H）、1.30（t、 $J=7.2$ Hz、3H）；ESI-MS m/z 205（ $[\text{M}+\text{H}]^+$ ）；IR（薄膜）1720、1607、1263 cm^{-1} として単離された。

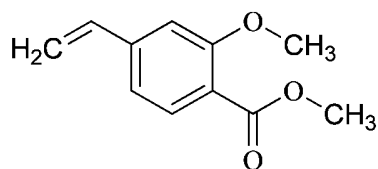
10

【0 3 0 4】

メチル 2-メトキシ-4-ビニルベンゾエート（C70）

【0 3 0 5】

【化 8 1】



20

【0 3 0 6】

表題化合物は淡黄色液体（1.2 g、75%）： ^1H NMR（400 MHz、 CDCl_3 ） δ 7.79（d、 $J=8.0$ Hz、1H）、7.04（d、 $J=1.2$ Hz、1H）、6.97（s、1H）、6.74（dd、 $J=11.2$ 、11.2 Hz、1H）、5.86（d、 $J=17.6$ Hz、1H）、5.39（d、 $J=17.6$ Hz、1H）、3.93（s、3H）、3.91（s、3H）；ESI-MS m/z 193（ $[\text{M}+\text{H}]^+$ ）；IR（薄膜）1732 cm^{-1} として単離された。

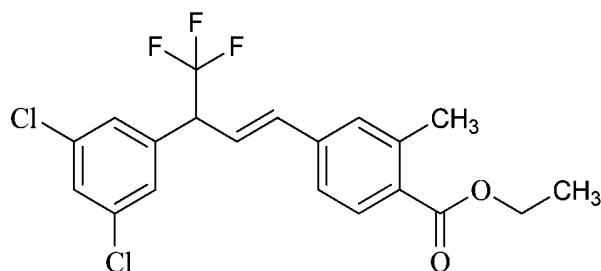
30

【0 3 0 7】

実施例 10：（E）-エチル 4-（3-（3,5-ジクロロフェニル）-4,4,4-トリフルオロブト-1-エニル）-2-メチルベンゾエート（C71）の製造

【0 3 0 8】

【化 8 2】



40

【0 3 0 9】

1,2-ジクロロベンゼン（25 mL）中のエチル 2-メチル-4-ビニルベンゾエート（C66）（2.00 g、10.5 mmol）の攪拌溶液に、1-（1-ブromo-2,2-トリフルオロエチル）-3,5-ジクロロベンゼン（C2）（6.44 g、21.0 mmol）、塩化銅（I）（0.208 g、21.0 mmol）および 2,2'-ビ

50

ピリジル (0.650 g、4.10 mmol) を添加した。該反応混合物をアルゴンで 30 分間脱気し、そしてその後 180 °C で 24 時間攪拌した。反応が薄層クロマトグラフィーにより完了と思われた後に、該反応混合物を 25 °C に冷却しかつ濾過し、そして濾液を減圧下に濃縮した。溶出液として 25–30 % 酢酸エチル/石油エーテルを使用するフラッシュカラムクロマトグラフィーによる精製が、表題化合物を固形物 (1.70 g、40 %) : ^1H NMR (400 MHz、 CDCl_3) δ 7.91 (d、 $J=8.0$ Hz、1 H)、7.37 (m、1 H)、7.27–7.24 (m、4 H)、6.59 (d、 $J=16.0$ Hz、1 H)、6.59 (dd、 $J=16.0$ 、8.0 Hz、1 H)、4.38 (q、 $J=7.2$ Hz、2 H)、4.08 (m、1 H)、2.62 (s、3 H)、1.42 (t、 $J=7.2$ Hz、3 H) ; ESI-MS m/z 415 ($[\text{M}-\text{H}]^-$) ; IR (薄膜) 1717、1255、1114 cm^{-1} として提供した。

10

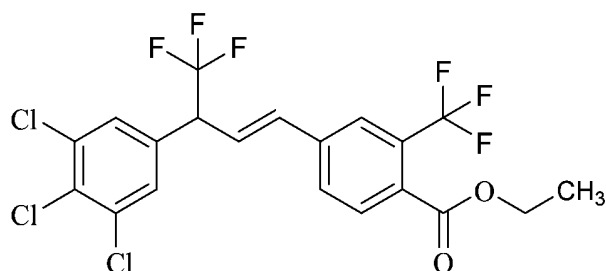
【0310】

以下の化合物は実施例 10 に開示される手順に従って作成した。

(E)-エチル 4-(4,4,4-トリフルオロ-3-(3,4,5-トリクロロフェニル)ブト-1-エニル)-2-(トリフルオロメチル)ベンゾエート (C72)

【0311】

【化 83】



20

【0312】

該生成物は淡褐色ゴム状液体 (0.500 g、40 %) : ^1H NMR (400 MHz、 CDCl_3) δ 7.79 (d、 $J=8.0$ Hz、1 H)、7.71 (m、1 H)、7.61 (d、 $J=7.6$ Hz、1 H)、7.42 (s、2 H)、6.70 (d、 $J=16.0$ Hz、1 H)、6.57 (dd、 $J=16.0$ 、8.0 Hz、1 H)、4.42 (q、 $J=7.2$ Hz、2 H)、4.19 (m、1 H)、1.40 (t、 $J=7.6$ Hz、3 H) ; ESI-MS m/z 503 ($[\text{M}-\text{H}]^-$) ; IR (薄膜) 1730、1201、1120、749 cm^{-1} として単離された。

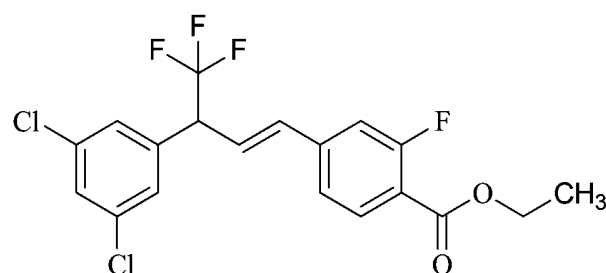
30

【0313】

(E)-エチル 4-(3-(3,5-ジクロロフェニル)-4,4,4-トリフルオロブト-1-エニル)-2-フルオロベンゾエート (C73)

【0314】

【化 84】



40

【0315】

^1H NMR (400 MHz、 CDCl_3) δ 7.38 (s、1 H)、7.26 (s、3 H)、7.21 (d、 $J=8.4$ Hz、1 H)、7.16 (d、 $J=11.6$ Hz、1 H)、6.59 (d、 $J=16.0$ Hz、1 H)、6.47 (dd、 $J=$ 、16.0、8

50

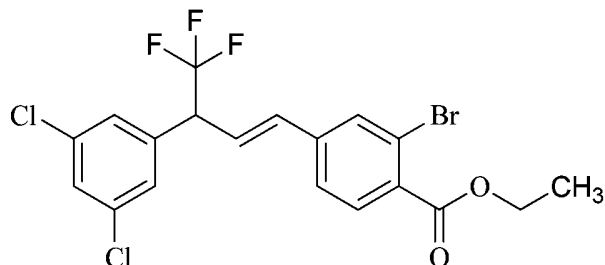
. 0 Hz、1 H)、4. 41 (q、J=6. 8 Hz、2 H)、4. 18 (m、1 H)、1. 41 (t、J=6. 8 Hz、3 H) ; E S I M S m/z 419 ($[M-H]^-$) ; I R (薄膜) 1723、1115、802 cm^{-1} 。

【0316】

(E)-エチル4-(3-(3,5-ジクロロフェニル)-4,4,4-トリフルオロブト-1-エニル)-2-ブロモベンゾエート (C74)

【0317】

【化85】



10

【0318】

^1H NMR (400 MHz、 $CDCl_3$) δ 7. 79 (d、J=8. 0 Hz、1 H)、7. 67 (s、1 H)、7. 38 (m、2 H)、7. 26 (m、2 H)、6. 56 (d、J=16. 0 Hz、1 H)、6. 45 (dd、J=16. 0、7. 6 Hz、1 H)、4. 42 (q、J=7. 2 Hz、2 H)、4. 39 (m、1 H)、1. 42 (t、J=7. 2 Hz、3 H) ; E S I M S m/z 481 ($[M-H]^-$) ; I R (薄膜) 1727、1114、801、685 cm^{-1} 。

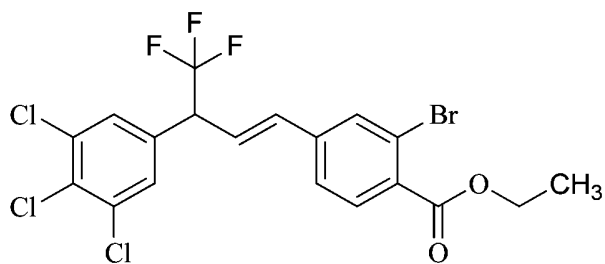
20

【0319】

(E)-エチル2-ブロモ-4-(4,4,4-トリフルオロ-3-(3,4,5-トリクロロフェニル)ブト-1-エニル)ベンゾエート (C75)

【0320】

【化86】



30

【0321】

^1H NMR (400 MHz、 $CDCl_3$) δ 7. 79 (d、J=8. 0 Hz、1 H)、7. 67 (d、J=1. 6 Hz、1 H)、7. 40 (s、2 H)、7. 36 (d、J=1. 6 Hz、1 H)、6. 56 (d、J=16. 0 Hz、1 H)、6. 44 (dd、J=16. 0、7. 6 Hz、1 H)、4. 42 (q、J=6. 8 Hz、2 H)、4. 15 (m、1 H)、1. 42 (t、J=6. 8 Hz、3 H) ; E S I M S m/z 515 ($[M-H]^-$) ; I R (薄膜) 1726、1115、808、620 cm^{-1} 。

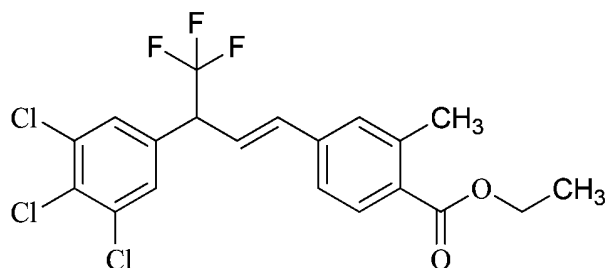
40

【0322】

(E)-エチル2-メチル-4-(4,4,4-トリフルオロ-3-(3,4,5-トリクロロフェニル)ブト-1-エニル)ベンゾエート (C76)

【0323】

【化 8 7】



【0 3 2 4】

10

表題化合物は薄褐色ゴム状物質： ^1H NMR (400 MHz、 CDCl_3) δ 7.90 (d、 $J=8.8\text{ Hz}$ 、1H)、7.34 (d、 $J=6.0\text{ Hz}$ 、2H)、7.25 (d、 $J=7.2\text{ Hz}$ 、2H)、6.59 (d、 $J=16.0\text{ Hz}$ 、1H)、6.42 (dd、 $J=16.0$ 、 8.0 Hz 、1H)、4.38 (q、 $J=7.2\text{ Hz}$ 、2H)、4.19 (m、1H)、2.63 (s、3H)、1.41 (t、 $J=7.2\text{ Hz}$ 、3H) として単離された。

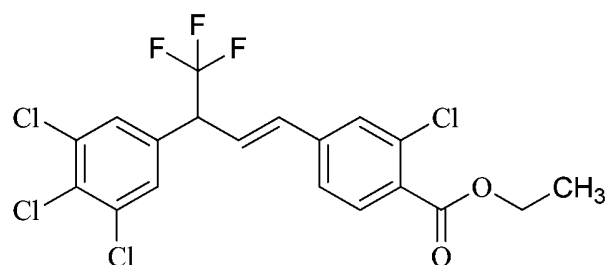
【0 3 2 5】

(E)-エチル 2-クロロ-4-(4,4,4-トリフルオロ-3-(3,4,5-トリクロロフェニル)ブト-1-エニル)ベンゾエート (C77)

【0 3 2 6】

20

【化 8 8】



【0 3 2 7】

30

^1H NMR (400 MHz、 CDCl_3) δ 7.87 (d、 $J=8.0\text{ Hz}$ 、1H)、7.46 (d、 $J=1.6\text{ Hz}$ 、1H)、7.40 (s、2H)、7.31 (d、 $J=1.6\text{ Hz}$ 、1H)、6.57 (d、 $J=16.0\text{ Hz}$ 、1H)、6.44 (dd、 $J=16.0\text{ Hz}$ 、 8.0 Hz 、1H)、4.42 (q、 $J=6.8\text{ Hz}$ 、2H)、4.15 (m、1H)、1.42 (t、 $J=6.8\text{ Hz}$ 、3H)；ESI MS m/z 471 ($[\text{M}-\text{H}]^-$)；IR (薄膜) 1726、1115、809、3072 cm^{-1} 。

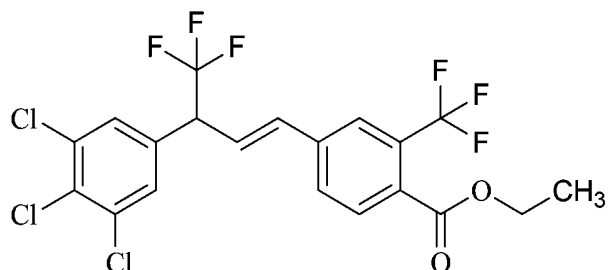
【0 3 2 8】

(E)-エチル 4-(4,4,4-トリフルオロ-3-(3,4,5-トリクロロフェニル)ブト-1-エニル)-2-(トリフルオロメチル)ベンゾエート (C78)

【0 3 2 9】

40

【化 8 9】



【0 3 3 0】

50

表題化合物は淡褐色液体 (1.0 g、46.3%) : ^1H NMR (400 MHz、 CDCl_3) δ 7.79 (d、 $J=8.0$ Hz、1H)、7.71 (s、1H)、7.61 (d、 $J=7.6$ Hz、1H)、7.41 (s、2H) 6.65 (d、 $J=16.0$ Hz、1H)、6.49 (dd、 $J=16.0$ 、8.0 Hz、1H)、4.42 (q、 $J=7.6$ Hz、2H)、4.15 (m、1H)、1.42 (t、 $J=7.6$ Hz、3H) ; ESIMS m/z 503 ($[\text{M}-\text{H}]^-$) ; IR (薄膜) 1730、1202、1120、750 cm^{-1} として単離された。

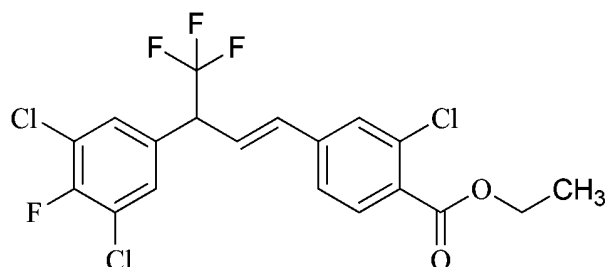
【0331】

(E)-エチル 2-クロロ-4-(3-(3,5-ジクロロ-4-フルオロフェニル)-4,4,4-トリフルオロブト-1-エニル)ベンゾエート (C79)

10

【0332】

【化90】



20

【0333】

^1H NMR (400 MHz、 CDCl_3) δ 7.85 (d、 $J=6.0$ Hz、1H)、7.46 (d、 $J=1.8$ Hz、2H)、7.34 (m、1H)、7.24 (m、1H)、6.57 (d、 $J=16.2$ Hz、1H)、6.45 (dd、 $J=16.2$ 、7.2 Hz、1H)、4.43 (q、 $J=7.2$ Hz、2H)、4.13 (m、1H)、1.41 (t、 $J=7.2$ Hz、3H) ; ESIMS m/z 455 ($[\text{M}+\text{H}]^+$) ; IR (薄膜) 1728、1115、817 cm^{-1} 。

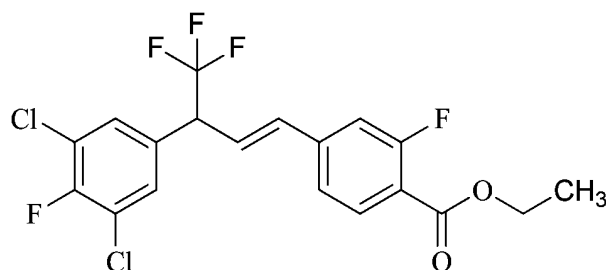
【0334】

(E)-エチル 2-フルオロ-4-(3-(3,5-ジクロロ-4-フルオロフェニル)-4,4,4-トリフルオロブト-1-エニル)ベンゾエート (C80)

30

【0335】

【化91】



40

【0336】

^1H NMR (400 MHz、 CDCl_3) δ 7.93 (t、 $J=7.6$ Hz、1H)、7.34 (d、 $J=5.6$ Hz、2H)、7.21 (d、 $J=8.0$ Hz、1H)、7.16 (d、 $J=11.6$ Hz、1H)、6.59 (d、 $J=16.0$ Hz、1H)、6.49 (dd、 $J=16.0$ 、7.6 Hz、1H)、4.42 (q、 $J=7.6$ Hz、2H)、4.13 (m、1H)、1.41 (t、 $J=7.6$ Hz、3H) ; ESIMS m/z 436.81 ($[\text{M}-\text{H}]^-$) ; IR (薄膜) 1725 cm^{-1} 。

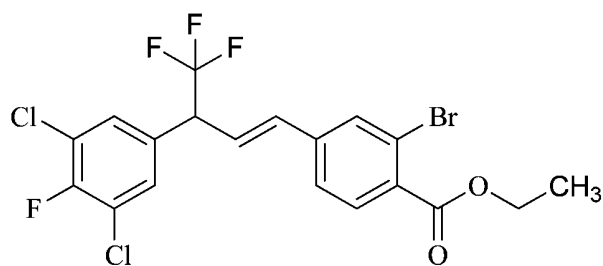
【0337】

(E)-エチル 2-ブロモ-4-(3-(3,5-ジクロロ-4-フルオロフェニル)-4,4,4-トリフルオロブト-1-エニル)ベンゾエート (C81)

50

【0338】

【化92】



10

【0339】

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.94 (d, $J=8.0$ Hz, 1H)、7.67 (s, 1H)、7.36 (m, 3H)、6.56 (d, $J=15.6$ Hz, 1H)、6.44 (dd, $J=15.6$ 、8.0 Hz, 1H)、4.42 (q, $J=6.8$ Hz, 2H)、4.10 (m, 1H)、1.42 (t, $J=6.8$ Hz, 3H); ESI MS m/z 499 ($[\text{M}-\text{H}]^-$); IR (薄膜) 1726、1114、820、623 cm^{-1} 。

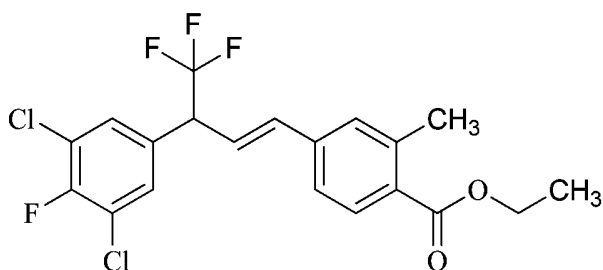
【0340】

(E)-エチル2-メチル-4-(3-(3,5-ジクロロ-4-フルオロフェニル)-4,4,4-トリフルオロブト-1-エニル)ベンゾエート (C82)

20

【0341】

【化93】



30

【0342】

表題化合物は褐色半固形物： ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.90 (d, $J=8.8$ Hz, 1H)、7.34 (d, $J=6.0$ Hz, 2H)、7.25 (d, $J=7.2$ Hz, 2H)、6.59 (d, $J=16.0$ Hz, 1H)、6.42 (dd, $J=16.0$ Hz, 8.0 Hz, 1H)、4.38 (q, $J=7.2$ Hz, 2H)、4.19 (m, 1H)、2.63 (s, 3H)、1.41 (t, $J=7.2$ Hz, 3H); ESI MS m/z 433 ($[\text{M}-\text{H}]^-$); IR (薄膜) 1715 cm^{-1} として単離された。

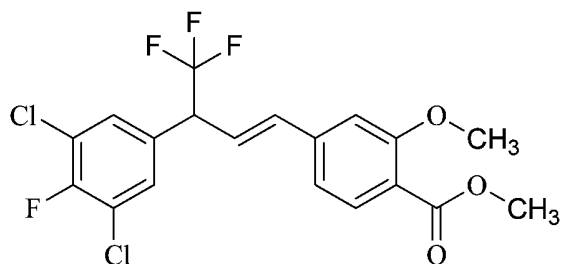
【0343】

(E)-メチル2-メトキシ-4-(3-(3,5-ジクロロ-4-フルオロフェニル)-4,4,4-トリフルオロブト-1-エニル)ベンゾエート (C83)

40

【0344】

【化 9 4】



【0 3 4 5】

10

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.80 (d, $J=8.4$ Hz, 1H)、7.35 (d, $J=6.0$ Hz, 2H)、7.03 (d, $J=1.2$ Hz, 1H)、6.92 (s, 1H)、6.59 (d, $J=15.6$ Hz, 1H)、6.42 (dd, $J=15.6$ 、8.0 Hz, 1H)、4.13 (m, 1H)、3.93 (s, 3H)、3.88 (s, 3H); ESIMS m/z 437 ($[\text{M}+\text{H}]^+$); IR (薄膜) 1724 cm^{-1} 。

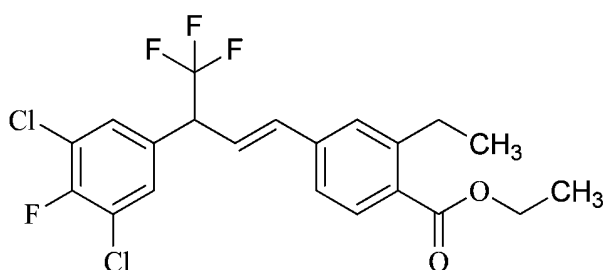
【0 3 4 6】

(E)-エチル 2-エチル-4-(3-(3,5-ジクロロ-4-フルオロフェニル)-4,4,4-トリフルオロブト-1-エニル)ベンゾエート (C84)

【0 3 4 7】

20

【化 9 5】



【0 3 4 8】

30

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.85 (d, $J=8.0$ Hz, 1H)、7.35 (d, $J=9.6$ Hz, 2H)、7.26 (m, 1H)、7.24 (m, 1H)、6.60 (d, $J=15.6$ Hz, 1H)、6.42 (dd, $J=15.6$ 、8.0 Hz, 1H)、4.38 (q, $J=7.2$ Hz, 2H)、4.14 (m, 1H)、3.01 (q, $J=7.6$ Hz, 2H)、1.41 (t, $J=7.2$ Hz, 3H)、1.26 (t, $J=7.6$ Hz, 3H); ESIMS m/z 447 ($[\text{M}-\text{H}]^-$); IR (薄膜) 1715、1115、817 cm^{-1} 。

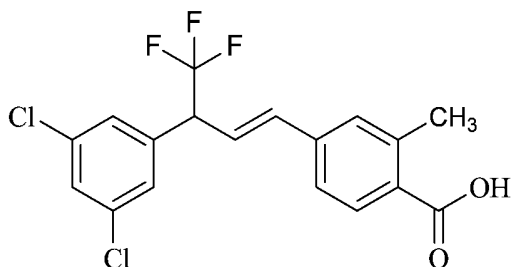
【0 3 4 9】

実施例 11: (E)-4-(3-(3,5-ジクロロフェニル)-4,4,4-トリフルオロブト-1-エニル)-2-メチル安息香酸 (C85) の製造

40

【0 3 5 0】

【化 9 6】



50

【0351】

1, 4-ジオキサン (10 mL) 中の (E)-エチル 4-(3-(3, 5-ジクロロフェニル)-4, 4, 4-トリフルオロブト-1-エニル)-2-メチルベンゾエート (C71) (1.7 g, 4.0 mmol) の攪拌溶液に塩酸 (11 N, 30 mL) を添加し、そして該反応混合物を 100 °C で 48 時間加熱した。該反応混合物を 25 °C に冷却しかつ減圧下に濃縮した。残渣を水で希釈しかつクロロホルムで抽出した。合わせられた有機層を硫酸ナトリウムで乾燥しかつ減圧下に濃縮した。該粗化合物を n-ヘキサンで洗浄して、表題化合物を白色固形物 (0.70 g, 50%) : mp 142-143 °C ; ^1H NMR (400 MHz, DMSO- d_6) δ 12.62 (br s, 1H)、7.81 (d, J=8.0 Hz, 1H)、7.66 (s, 3H)、7.52-7.44 (m, 2H)、6.89 (dd, J=16.0, 8.0 Hz, 1H)、6.78-6.74 (d, J=16.0 Hz, 1H)、4.84 (m, 1H)、2.50 (s, 3H) ; ESIMS m/z 387 ($[\text{M}-\text{H}]^-$) ; IR (薄膜) 3448、1701、1109、777 cm^{-1} として提供した。

10

【0352】

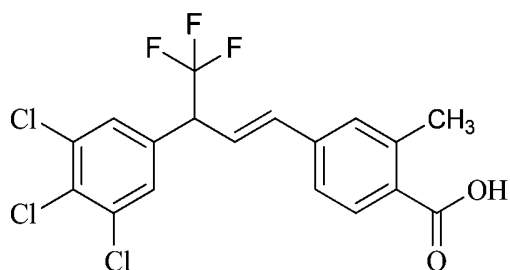
以下の化合物は実施例 11 に開示される手順に従って作成した。

(E)-2-メチル-4-(4, 4, 4-トリフルオロ-3-(3, 4, 5-トリクロロフェニル)ブト-1-エニル)安息香酸 (C86)

【0353】

【化97】

20



【0354】

該生成物は淡褐色ゴム状液体 (1 g, 46%) : ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.97 (d, J=8.0 Hz, 1H)、7.77 (s, 1H)、7.65 (m, 1H)、7.41 (s, 2H)、6.68 (d, J=16.0 Hz, 1H)、6.53 (dd, J=16.0, 8.0 Hz, 1H)、4.16 (m, 1H)、2.50 (s, 3H) ; ESIMS m/z 423 ($[\text{M}-\text{H}]^-$) として単離された。

30

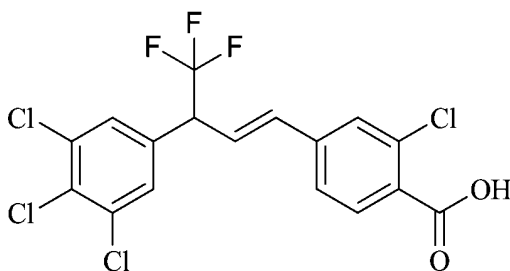
【0355】

(E)-2-クロロ-4-(4, 4, 4-トリフルオロ-3-(3, 4, 5-トリクロロフェニル)ブト-1-エニル)安息香酸 (C87)

【0356】

【化98】

40



【0357】

該生成物は灰白色半固形物 (1 g, 45%) : ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.99 (d, J=8.4 Hz, 1H)、7.50 (m, 1H)、7.40 (s,

50

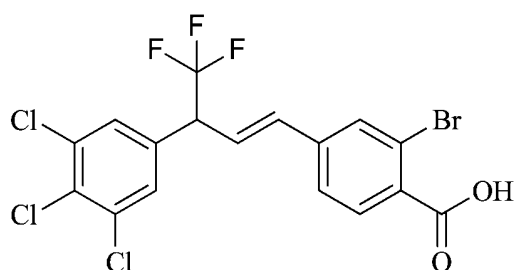
1 H)、7.36 (m、2 H)、6.59 (d、 $J=15.6$ Hz、1 H)、6.48 (dd、 $J=15.6$ 、7.6 Hz、1 H)、4.14 (m、1 H)；ESI MS m/z 443 ($[M-H]^-$)；IR (薄膜) 3472、1704、1113、808 cm^{-1} として単離された。

【0358】

(E)-2-ブromo-4-(4,4,4-トリフルオロ-3-(3,4,5-トリクロロフェニル)プロ-1-エニル)安息香酸 (C88)

【0359】

【化99】



10

【0360】

該生成物は褐色固形物 (1 g、45%)：mp 70-71 °C； ^1H NMR (400 MHz、 $CDCl_3$) δ 7.99 (d、 $J=8.0$ Hz、1 H)、7.72 (s、1 H)、7.40 (m、3 H)、6.58 (d、 $J=16.0$ Hz、1 H)、6.48 (dd、 $J=16.0$ 、8.0 Hz、1 H)、4.14 (m、1 H)；ESI MS m/z 485 ($[M-H]^-$)；IR (薄膜) 3468、1700 cm^{-1} として単離された。

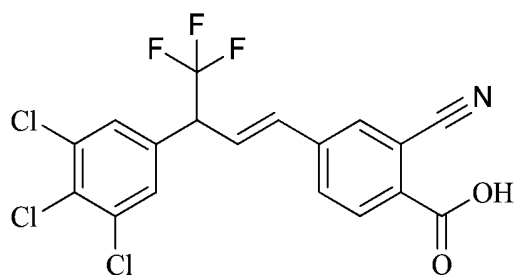
20

【0361】

(E)-2-シアノ-4-(4,4,4-トリフルオロ-3-(3,4,5-トリクロロフェニル)プロ-1-エニル)安息香酸 (C89)

【0362】

【化100】



30

【0363】

該生成物は灰白色固形物 (0.500 g、45%)：mp 100-101 °C； ^1H NMR (400 MHz、 $CDCl_3$) δ 7.90 (s、1 H)、7.85 (d、 $J=7.6$ Hz、1 H)、7.72 (d、 $J=8.0$ Hz、1 H)、7.65 (br s、1 H)、7.42 (s、2 H)、6.73 (d、 $J=16.0$ Hz、1 H)、6.58 (dd、 $J=16.0$ 、8.0 Hz、1 H)、4.19 (m、1 H)；ESI MS m/z 432 ($[M-H]^-$) として単離された。

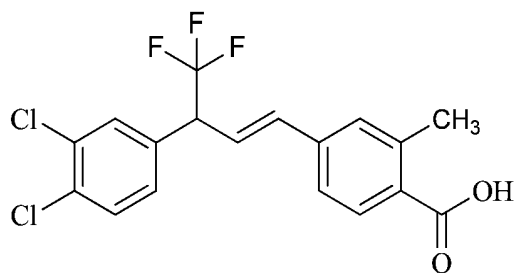
40

【0364】

(E)-4-(3-(3,4-ジクロロフェニル)-4,4,4-トリフルオロプロ-1-エニル)-2-メチル安息香酸 (C90)

【0365】

【化 101】



【0366】

10

該生成物は淡褐色液体 (0.500 g、46%) : ^1H NMR (400 MHz、 CDCl_3) δ 8.03 (m、1H)、7.49 (m、2H)、7.29 (m、1H)、7.22 (m、2H)、6.73 (d、 $J=16.0$ Hz、1H)、6.58 (dd、 $J=16.0$ 、7.8 Hz、1H)、4.16 (m、1H)、2.64 (s、3H) ; ESI MS m/z 387 ($[\text{M}-\text{H}]^-$) ; IR (薄膜) 3428、1690、1113、780 cm^{-1} として単離された。

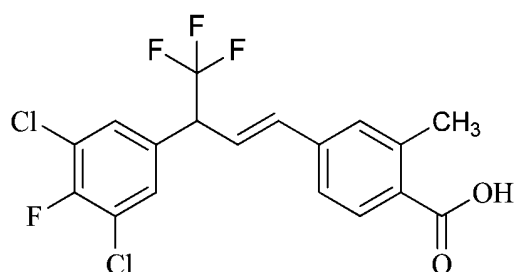
【0367】

(E)-4-(3-(3,5-ジクロロ-4-フルオロフェニル)-4,4,4-トリフルオロブト-1-エニル)-2-メチル安息香酸 (C91)

【0368】

20

【化 102】



【0369】

30

該生成物は白色固形物 (500 mg、50%) : mp 91-93 $^{\circ}\text{C}$; ^1H NMR (400 MHz、 CDCl_3) δ 8.02 (d、 $J=8.0$ Hz、1H)、7.35 (d、 $J=5.6$ Hz、1H)、7.30 (m、3H)、6.61 (d、 $J=16.0$ Hz、1H)、6.48 (dd、 $J=16.0$ 、8.0 Hz、1H)、4.13 (m、1H)、2.65 (s、3H) ; ESI MS m/z 407 ($[\text{M}-\text{H}]^-$)として単離された。

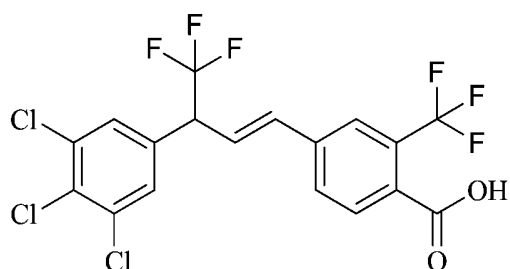
【0370】

(E)-4-(4,4,4-トリフルオロ-3-(3,4,5-トリクロロフェニル)ブト-1-エニル)-2-(トリフルオロメチル)安息香酸 (C92)

【0371】

40

【化 103】



【0372】

50

該生成物は白色固形物（500mg、45%）：mp 142–143℃；¹H NMR（400MHz、CDCl₃）δ 7.97（d、J=8.0Hz、1H）、7.77（s、1H）、7.65（m、1H）、7.41（s、2H）、6.68（d、J=16.0Hz、1H）、6.53（dd、J=16.0、8.0Hz、1H）、4.16（m、1H）；ESI MS m/z 475（[M-H]⁻）として単離された。

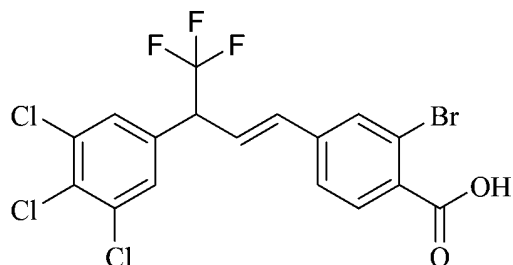
【0373】

（E）-2-ブromo-4-（4,4,4-トリフルオロ-3-（3,4,5-トリクロロフェニル）ブト-1-エニル）安息香酸（C93）

【0374】

【化104】

10



【0375】

表題化合物は褐色固形物（0.8g、28%）：¹H NMR（400MHz、CDCl₃）δ 13.42（br、1H）、7.98（d、J=1.5Hz、1H）、7.94（m、2H）、7.75（d、J=8.1Hz、1H）、7.65（m、1H）、7.06（dd、J=15.9、9.0Hz、1H）、6.80（d、J=15.9Hz、1H）、4.91（m、1H）；ESI MS m/z 485（[M-H]⁻）；IR（薄膜）3469、1700 cm⁻¹として単離された。

20

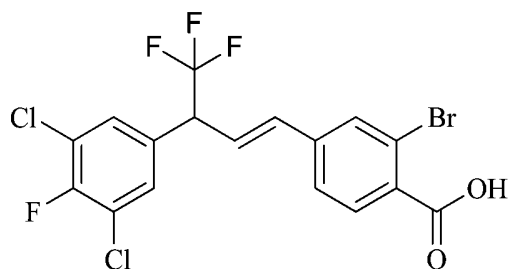
【0376】

（E）-2-ブromo-4-（3-（3,5-ジクロロ-4-フルオロフェニル）-4,4,4-トリフルオロブト-1-エニル）安息香酸（C94）

【0377】

【化105】

30



【0378】

表題化合物は黄色液体（0.3g、粗）：¹H NMR（300MHz、CDCl₃）δ 7.79（d、J=8.1Hz、1H）、7.67（s、1H）、7.34（m、3H）、6.56（d、J=15.9Hz、1H）、6.45（dd、J=15.9、7.6Hz、1H）、4.43（m、1H）；ESI MS m/z 471（[M-H]⁻）として単離された。

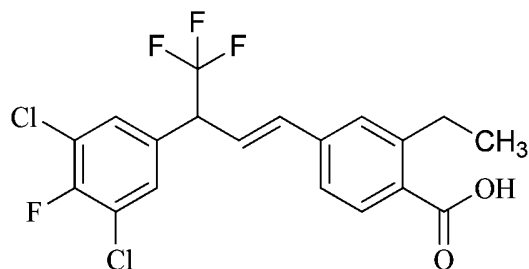
40

【0379】

（E）-4-（3-（3,5-ジクロロ-4-フルオロフェニル）-4,4,4-トリフルオロブト-1-エニル）-2-エチル安息香酸（C95）

【0380】

【化106】



【0381】

10

表題化合物は褐色ゴム状物質（0.2 g、粗）： ^1H NMR（300 MHz、DMSO- d_6 ） δ 12.5（br、1H）、7.85（d、 $J=6.3$ Hz、2H）、7.75（d、 $J=8.1$ Hz、1H）、7.52（m、2H）、6.96（dd、 $J=8.7$ 、8.7 Hz、1H）、6.78（d、 $J=15.6$ Hz、1H）、4.80（m、1H）、4.06（q、 $J=7.2$ Hz、2H）、1.33（t、 $J=7.2$ Hz、3H）；ESI-MS m/z 419（ $[\text{M}-\text{H}]^-$ ）として単離された。

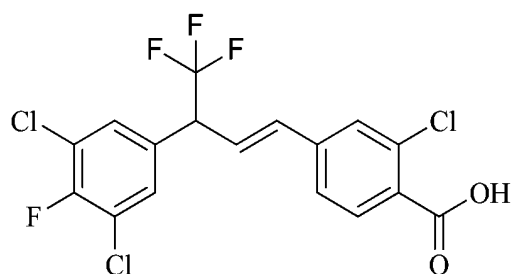
【0382】

（E）-2-クロロ-4-（3-（3，5-ジクロロ-4-フルオロフェニル）-4，4，4-トリフルオロブト-1-エニル）安息香酸（C96）

【0383】

20

【化107】



【0384】

30

表題化合物は黄色液体（0.7 g、95%）： ^1H NMR（300 MHz、 CDCl_3 ） δ 7.85（d、 $J=6.0$ Hz、1H）、7.46（d、 $J=1.8$ Hz、1H）、7.41（s、3H）、6.57（d、 $J=16.0$ Hz、1H）、6.45（dd、 $J=16.0$ 、8.0 Hz、1H）、4.16（m、1H）；ESI-MS m/z 455（ $[\text{M}+\text{H}]^+$ ）；IR（薄膜）1728、1115、817 cm^{-1} として単離された。

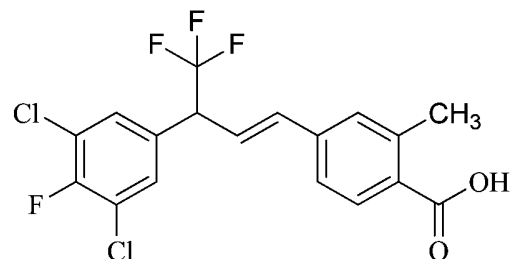
【0385】

（E）-4-（3-（3，5-ジクロロ-4-フルオロフェニル）-4，4，4-トリフルオロブト-1-エニル）-2-メチル安息香酸（C97）

【0386】

40

【化108】



【0387】

50

表題化合物は薄褐色ゴム状物質（0.7 g、38%）：mp 91–93℃；¹H NMR（400 MHz、CDCl₃）δ 8.02（d、J = 8.0 Hz、1H）、7.35（d、J = 5.6 Hz、1H）、7.30（m、3H）、6.10（d、J = 16.0 Hz、1H）、6.46（dd、J = 16.0、8.0 Hz、1H）、4.03（m、1H）、2.65（s、3H）；ESI-MS m/z 407（[M–H][–]）として単離された。

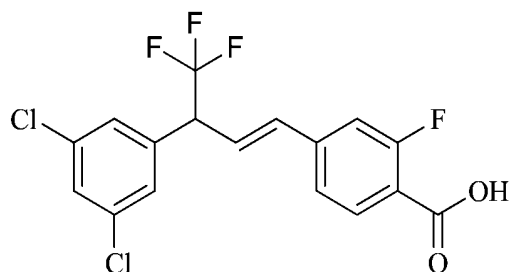
【0388】

(E)–4–(3–(3,5–ジクロロフェニル)–4,4,4–トリフルオロブト–1–エニル)–2–フルオロ安息香酸（C98）

【0389】

10

【化109】



【0390】

20

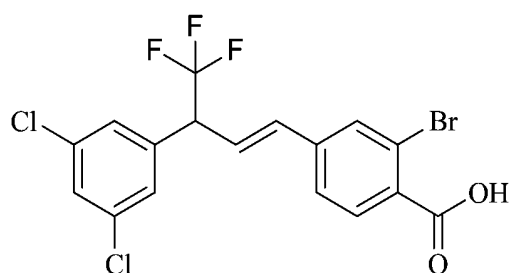
表題化合物は薄褐色液体（0.3 g、粗）：ESI-MS m/z 393（[M–H][–]）として単離された。

【0391】

(E)–2–ブロモ–4–(3–(3,5–ジクロロフェニル)–4,4,4–トリフルオロブト–1–エニル)安息香酸（C99）

【0392】

【化110】



30

【0393】

表題化合物は薄褐色液体（0.35 g、粗）：ESI-MS m/z 452（[M–H][–]）として単離された。

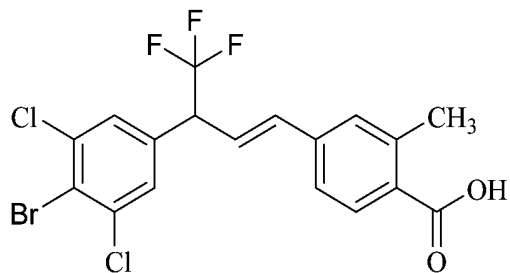
【0394】

(E)–4–(3–(4–ブロモ–3,5–ジクロロフェニル)–4,4,4–トリフルオロブト–1–エン–1–イル)–2–メチル安息香酸（CA1）

40

【0395】

【化 1 1 1】



【0 3 9 6】

10

表題化合物は濃褐色ガラス状物（0.900 g、80%）： ^1H NMR（500 MHz、 CDCl_3 ） δ 8.05（d、 $J=8.1\text{ Hz}$ 、1H）、7.40（s、2H）、7.30（dd、 $J=8.2$ 、 1.7 Hz 、1H）、7.28（d、 $J=1.6\text{ Hz}$ 、1H）、6.60（d、 $J=15.8\text{ Hz}$ 、1H）、6.44（dd、 $J=15.9$ 、 8.0 Hz 、1H）、4.11（p、 $J=8.6\text{ Hz}$ 、1H）、2.66（s、3H）； ^{19}F NMR（471 MHz、 CDCl_3 ） δ -68.63（d、 $J=8.8\text{ Hz}$ ）；ESI MS m/z 466（ $[\text{M}-\text{H}]^-$ ）として単離された。

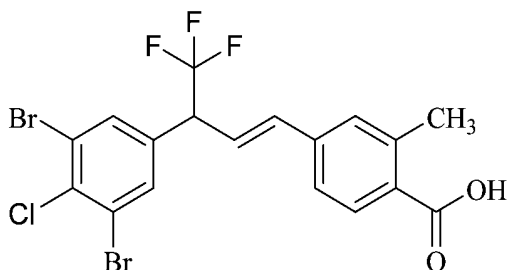
【0 3 9 7】

（E）-4-（3-（3，5-ジブロモ-4-クロロフェニル）-4，4，4-トリフルオロブト-1-エン-1-イル）-2-メチル安息香酸（CA2）

20

【0 3 9 8】

【化 1 1 2】



30

【0 3 9 9】

表題化合物は黄色ガラス状物（0.900 g、68%）： ^1H NMR（500 MHz、 CDCl_3 ） δ 8.05（d、 $J=8.1\text{ Hz}$ 、1H）、7.62（s、2H）、7.30（dd、 $J=8.3$ 、 1.7 Hz 、1H）、7.28（d、 $J=1.5\text{ Hz}$ 、1H）、6.60（d、 $J=15.8\text{ Hz}$ 、1H）、6.43（dd、 $J=15.9$ 、 8.0 Hz 、1H）、4.10（p、 $J=8.6\text{ Hz}$ 、1H）、2.67（s、3H）； ^{19}F NMR（471 MHz、 CDCl_3 ） δ -68.63（d、 $J=8.8\text{ Hz}$ ）；ESI MS m/z 510（ $[\text{M}-\text{H}]^-$ ）として単離された。

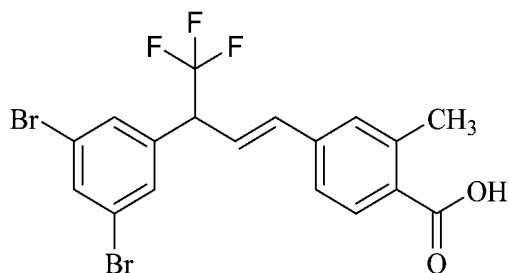
【0 4 0 0】

（E）-4-（3-（3，5-ジブロモフェニル）-4，4，4-トリフルオロブト-1-エン-1-イル）-2-メチル安息香酸（CA3）

40

【0 4 0 1】

【化 1 1 3】



【0 4 0 2】

10

表題化合物は赤色固形物（16.2 g、82%）： ^1H NMR（400 MHz、 CDCl_3 ） δ 8.05（d、 $J=8.1$ Hz、1H）、7.68（t、 $J=1.7$ Hz、1H）、7.47（d、 $J=1.7$ Hz、2H）、7.33–7.26（m、2H）、6.60（d、 $J=15.8$ Hz、1H）、6.45（dd、 $J=15.9$ 、8.0 Hz、1H）、4.10（p、 $J=8.7$ Hz、1H）、2.67（s、3H）； ^{19}F NMR（376 MHz、 CDCl_3 ） δ -68.54；ESI MS m/z 477（ $[\text{M}-\text{H}]^-$ ）として単離された。

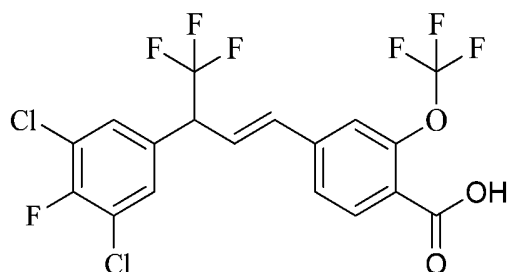
【0 4 0 3】

実施例 12：（E）-4-（3-（3，5-ジクロロ-4-フルオロフェニル）-4，4，4-トリフルオロブト-1-エニル）-2-（トリフルオロメトキシ）安息香酸（C 101）の製造

20

【0 4 0 4】

【化 1 1 4】



30

【0 4 0 5】

段階 1。2-（トリフルオロメトキシ）-4-ビニル安息香酸（C 100）：ジメチルスルホキシド（20 mL）中の 4-ブromo-2-（トリフルオロメトキシ）安息香酸（1.00 g、3.67 mmol）の攪拌溶液に、ビニルトリフルオロホウ酸カリウム（1.47 g、11.0 mmol）および炭酸カリウム（1.52 g、11.0 mmol）を添加した。該反応混合物をアルゴンで 30 分間脱気した。ビストリフェニルホスフィン（ジフェニルホスフィノフェロセン）パラジウム（II）ジクロリド（0.130 g、0.180 mmol）を添加し、そして該反応混合物を 80 °C に 1 時間加熱した。該反応混合物を水（100 mL）で希釈し、酢酸エチル（2 × 50 mL）で抽出し、塩水で洗浄し、硫酸ナトリウムで乾燥した。減圧下の濃縮が粗化合物を提供し、これをフラッシュカラムクロマトグラフィーにより精製して、該生成物を淡黄色ゴム状物質（0.400 g、47%）： ^1H NMR（400 MHz、 CDCl_3 ） δ 8.05（d、 $J=8.1$ Hz、1H）、7.44（d、 $J=1.8$ Hz、1H）、7.35（s、1H）、6.78（dd、 $J=17.4$ 、11.1 Hz、1H）、5.92（d、 $J=17.4$ Hz、1H）、5.51（d、 $J=10.8$ Hz、1H）；ESI MS m/z 233（ $[\text{M}+\text{H}]^+$ ）として提供した。

40

【0 4 0 6】

段階 2。（E）-4-（3-（3，5-ジクロロ-4-フルオロフェニル）-4，4，4-トリフルオロブト-1-エニル）-2-（トリフルオロメトキシ）安息香酸（C 10

50

1) : 1 Nメチルピロリジン (5.0 mL) 中の 2-(トリフルオロメトキシ)-4-ビニル安息香酸 (0.356 g、1.53 mmol) の攪拌溶液に、1-(1-ブロモ-2, 2-トリフルオロエチル)-3, 5-ジクロロ4-フルオロベンゼン (1.0 g、3.07 mmol)、塩化銅 (I) (CuCl ; 0.03 g、0.307 mmol) および 2, 2-ビピリジル (0.095 g、0.614 mmol) を添加した。該反応混合物を 150 °C で 1 h 攪拌した。反応が TLC により完了した後に、該反応混合物を水 (100 mL) で希釈しかつ酢酸エチル (2 × 50 mL) で抽出した。合わせられた有機層を塩水で洗浄し、硫酸ナトリウムで乾燥しかつ減圧下に濃縮して粗化合物を得、これをフラッシュカラムクロマトグラフィーにより精製して、該生成物を淡黄色ゴム状物質 (0.3 g、21%) : ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 8.08 (d, $J=8.0$ Hz、1H)、7.45 (d, $J=1.6$ Hz、1H)、7.35 (s、3H)、6.63 (d, $J=16.0$ Hz、1H)、6.50 (dd, $J=16.0$ 、8.0 Hz、1H)、4.15 (m、1H) ; ESI-MS m/z 474.81 ($[\text{M}-\text{H}]^-$) として提供した。

10

【0407】

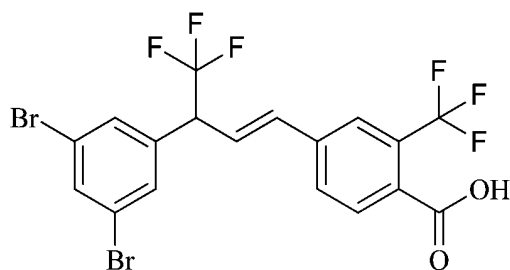
以下の分子は実施例 12 の段階 2 に開示される手順に従って作成した。

(E)-4-(3-(3, 5-ジブロモフェニル)-4, 4, 4-トリフルオロブト-1-エン-1-イル)-2-(トリフルオロメチル)安息香酸 (C102)

【0408】

【化115】

20



【0409】

表題分子は褐色固形物 : ^1H NMR (300 MHz, $\text{DMSO}-d_6$) δ 13.5 (bs、1H)、8.03 (s、1H)、7.95-7.85 (m、4H)、7.81 (d、 $J=7.8$ Hz、1H)、7.14 (dd、 $J=15.6$ 、9.6 Hz、1H)、6.90 (d、 $J=15.9$ Hz、1H)、4.86-4.79 (m、1H) ; ESI-MS m/z 529 ($[\text{M}-\text{H}]^+$) ; IR (薄膜) 3437、1707、1153、555 cm^{-1} として単離された。

30

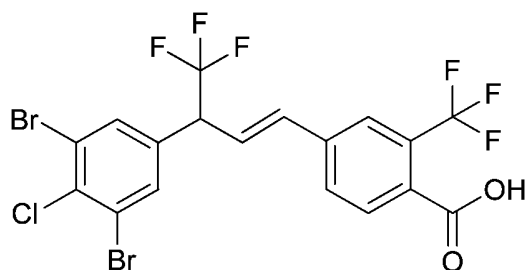
【0410】

(E)-4-(3-(3, 5-ジブロモ-4-クロロフェニル)-4, 4, 4-トリフルオロブト-1-エン-1-イル)-2-(トリフルオロメチル)安息香酸 (C103)

【0411】

【化116】

40



【0412】

褐色ガム状物 : ^1H NMR (300 MHz, $\text{DMSO}-d_6$) δ 、13.36 (bs、

50

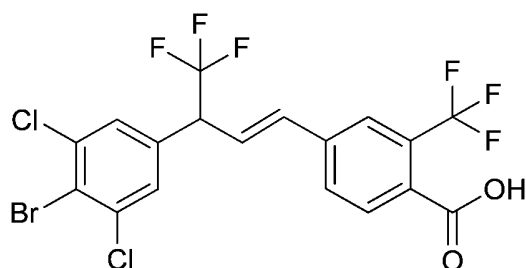
1 H) 8.05 (s, 2H)、7.95 (d, $J=8.1$ Hz, 1H)、7.87–7.67 (m, 2H)、7.14 (dd, $J=9.0, 15.6$ Hz, 1H)、6.96 (d, $J=15.6$ Hz, 1H)、4.88–4.82 (m, 1H); ESI/MS m/z 565 ($[M+H]^+$)として単離された。

【0413】

(E)–4–(3–(4–ブromo–3, 5–ジクロロフェニル)–4, 4, 4–トリフルオロブト–1–エン–1–イル)–2–(トリフルオロメチル)安息香酸 (C104)

【0414】

【化117】



10

【0415】

褐色ガム状物： ^1H NMR (300 MHz, DMSO- d_6) δ 13.6 (bs, 1H) 8.03 (s, 1H)、7.95 (d, $J=8.4$ Hz, 1H)、7.88 (s, 2H)、7.81 (d, $J=8.1$ Hz, 1H)、7.13 (dd, $J=16.2, 7.5$ Hz, 1H)、6.91 (d, $J=15.9$ Hz, 1H)、4.89–4.83 (m, 1H); ESI/MS m/z 532 ($[M+H]^+$)として単離された。

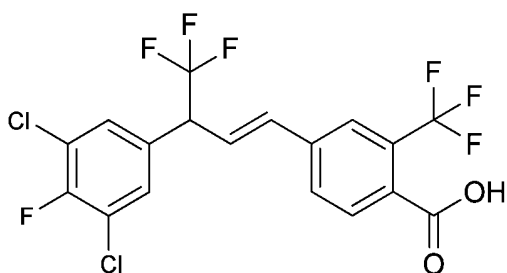
20

【0416】

(E)–4–(3–(3, 5–ジクロロ–4–フルオロフェニル)–4, 4, 4–トリフルオロブト–1–エン–1–イル)–2–(トリフルオロメチル)安息香酸 (C105)

【0417】

【化118】



30

【0418】

表題分子は灰白色固形物： $m.p.$ 140–143 °C; ^1H NMR (400 MHz, DMSO- d_6) δ 13.60 (bs, 1H)、8.02 (s, 1H)、7.94–7.90 (m, 1H)、7.88–7.86 (m, 2H)、7.81–7.79 (m, 1H)、7.12 (dd, $J=15.6, 8.8$ Hz, 1H)、6.89 (d, $J=15.6$ Hz, 1H)、4.86–4.81 (m, 2H); ESI/MS m/z 459 ($[M-H]^-$)として単離された。

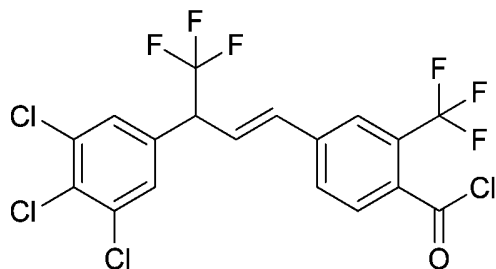
40

【0419】

実施例13：(E)–4–(4, 4, 4–トリフルオロ–3–(3, 4, 5–トリクロロフェニル)ブト–1–エン–1–イル)–2–(トリフルオロメチル)ベンゾイルクロリド (C106)の製造

【0420】

【化 1 1 9】



【0 4 2 1】

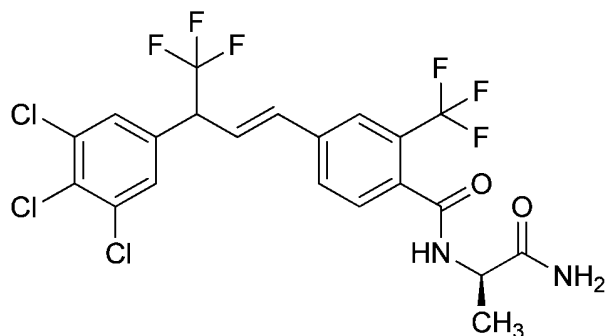
乾燥チューブ、磁気攪拌子および (E) - 4 - (4, 4, 4 - トリフルオロ - 3 - (3, 4, 5 - トリクロロフェニル) ブト - 1 - エニル) - 2 - (トリフルオロメチル) 安息香酸 (C 9 2) (8. 7 0 g、1 8. 2 m m o l) を装備された丸底フラスコ (5 0 0 m L) にジクロロメタン (3 0 m L) を添加した。この攪拌された溶液に二塩化オキサリル (3. 1 2 m L、3 6. 4 m m o l) を添加し、そして該反応を 6 5 時間攪拌するままにした。該溶液を減圧下に濃縮し、そして生じる赤色油状物をシクロヘキサンで希釈しかつ減圧下に濃縮した。生じる赤色油状物を 4 0 °C 真空オーブンに 1 8 時間入れ、表題化合物を赤色ガム状物 (8. 2 8 g、9 2 %) : ^1H NMR (4 0 0 M H z、C D C l₃) δ 8. 0 5 (d、J = 8. 2 H z、1 H)、7. 8 3 - 7. 7 5 (m、1 H)、7. 7 0 (d d、J = 8. 2、1. 7 H z、1 H)、7. 4 2 (s、2 H)、6. 6 7 (d、J = 1 6. 0 H z、1 H)、6. 5 5 (d d、J = 1 5. 9、7. 6 H z、1 H)、4. 1 6 (p、J = 8. 5 H z、1 H) ; ^{19}F NMR (3 7 6 M H z、C D C l₃) δ - 5 9. 5 9、- 6 8. 4 7 ; ^{13}C NMR (1 0 1 M H z、C D C l₃) δ 1 6 5. 6 2、1 4 0. 3 9、1 3 5. 0 1、1 3 4. 0 3、1 3 3. 6 8 (q、J = 1. 8 H z)、1 3 3. 1 8 (q、J = 1. 8 H z)、1 3 2. 2 9、1 3 2. 2 0、1 2 9. 6 3、1 2 9. 1 3 (q、J = 3 3. 4 H z)、1 2 9. 0 9、1 2 6. 3 2 (q、J = 2. 4 H z)、1 2 5. 6 7 (q、J = 2 8 1. 4 H z)、1 2 5. 2 8 (q、J = 5. 6 H z)、1 2 2. 4 5 (q、J = 2 7 4. 1 H z)、5 2. 3 8 (q、J = 2 8. 9 H z) として提供した。

【0 4 2 2】

実施例 1 4 : N - ((R) - 1 - アミノ - 1 - オキソプロパン - 2 - イル) - 4 - ((E) - 4, 4, 4 - トリフルオロ - 3 - (3, 4, 5 - トリクロロフェニル) ブト - 1 - エン - 1 - イル) - 2 - (トリフルオロメチル) ベンズアミド (C 1 0 7) の製造

【0 4 2 3】

【化 1 2 0】



【0 4 2 4】

磁気攪拌子および (E) - 4 - (4, 4, 4 - トリフルオロ - 3 - (3, 4, 5 - トリクロロフェニル) ブト - 1 - エン - 1 - イル) - 2 - (トリフルオロメチル) ベンゾイルクロリド (C 1 0 6) (0. 9 8 0 g、1. 9 8 m m o l) を含有するバイアル (3 0 m L) に、1, 2 - ジクロロエタン (7. 9 m L) を添加して褐色溶液を生じた。(R) -

2-アミノプロパンアミド塩酸塩 (0.295 g、2.37 mmol) および 4-メチル
 モルホリン (0.652 mL、5.93 mmol) を添加し、そしてバイアルに蓋をし
 かつ一夜攪拌するままにした。該反応を酢酸エチル (100 mL) およびクエン酸 (5%、
 100 mL) で希釈した。層を分離し、そして有機層を追加のクエン酸 (5%、100 mL)、
 水 (100 mL)、飽和水性重炭酸ナトリウム (100 mL) および塩水 (20 mL)
 で洗浄した。有機層を硫酸ナトリウムで乾燥し、濾過しかつ濃縮して赤色／褐色油状
 物を生じた。該油状物を、溶出液として 0-100% 酢酸エチル／ヘキサンを使用するフ
 ラッシュカラムクロマトグラフィーにより精製した。表題化合物をベージュ色固形物 (0.
 479 g、44%) : ^1H NMR (400 MHz、 CDCl_3) δ 7.68 (s、1
 H)、7.58 (dd、 $J=8.0$ 、1.7 Hz、1H)、7.51 (d、 $J=8.0$ Hz、1H)、7.42 (s、2H)、6.73 (d、 $J=7.4$ Hz、1H)、6.62
 (d、 $J=15.9$ Hz、1H)、6.52 (s、1H)、6.44 (dd、 $J=15.9$ 、7.8 Hz、1H)、5.64 (s、1H)、4.78 (p、 $J=7.1$ Hz、1H)、
 4.21 (m、1H)、1.50 (d、 $J=6.9$ Hz、3H) ; ^{19}F NMR (376 MHz、 CDCl_3) δ -59.02、-68.56 ; ESI-MS m/z 549
 ($[\text{M}+\text{H}]^+$) として単離した。

10

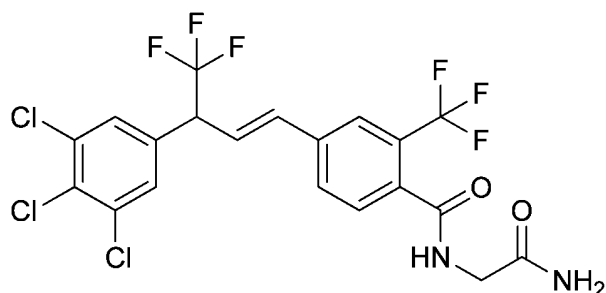
【0425】

実施例 15 : (E)-N-(2-アミノ-2-オキソエチル)-4-(4,4,4-トリ
 フルオロ-3-(3,4,5-トリクロロフェニル)ブト-1-エン-1-イル)-2-
 -(トリフルオロメチル)ベンズアミド (C108) の製造

20

【0426】

【化121】



30

【0427】

磁気攪拌子を装備されたバイアル (30 mL) 中に、2-アミノアセトアミド塩酸塩 (0.
 555 g、5.02 mmol)、(E)-4-(4,4,4-トリフルオロ-3-(3,4,5-トリクロロフェニル)ブト-1-エン-1-イル)-2-(トリフルオロメ
 チル)安息香酸 (C106) (2.00 g、4.19 mmol)、(1-シアノ-2-エ
 トキシ-2-オキソエチリデンアミノオキシ)ジメチルアミノ-モルホリノ-カルベニウ
 ムヘキサフルオロホスファート (2.15 g、5.02 mmol) および 1,2-ジクロ
 ロエタン (15 mL) を添加した。4-メチルモルホリン (1.38 mL、12.6 mmol)
 をこの褐色溶液に添加し、そして該反応に蓋をしかつ一夜攪拌するままとした。該
 反応を酢酸エチル (150 mL) および (100 mL) で希釈した。層を分離し、そして
 有機層を追加の塩酸 (1 M、100 mL)、水 (100 mL)、飽和水性重炭酸ナトリウ
 ム (100 mL) および塩水 (20 mL) で洗浄した。有機層を硫酸マグネシウムで乾燥
 し、濾過しかつ濃縮して赤色／褐色油状物を生じた。該油状物を、0-100% 酢酸エチ
 ル／ヘキサンを使用するフラッシュカラムクロマトグラフィーにより精製した。表題化
 合物をベージュ色固形物 (1.62、72%) : ^1H NMR (400 MHz、 CDCl_3)
 δ 7.72-7.67 (m、1H)、7.61 (dd、 $J=8.0$ 、1.7 Hz、1H)、7.55 (d、 $J=8.0$ Hz、1H)、7.42 (s、2H)、6.71 (t、 J
 $=5.1$ Hz、1H)、6.63 (d、 $J=15.9$ Hz、1H)、6.45 (dd、 J
 $=15.9$ 、7.8 Hz、1H)、6.24 (s、1H)、5.56 (s、1H)、4.

40

50

1.9 (d, $J = 5.0$ Hz, 2H), 4.16–4.08 (m, 1H); ^{19}F NMR (376 MHz, CDCl_3) δ –59.15, –68.56; ESIMS m/z 535 ($[\text{M}+\text{H}]^+$)として単離した。

【0428】

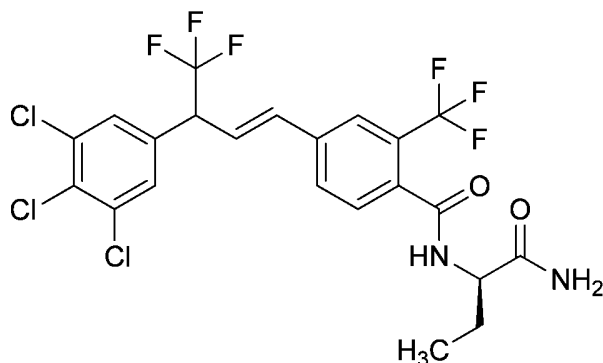
以下の化合物は実施例15の手順に従って製造した。

N-((R)-1-アミノ-1-オキソブタン-2-イル)-4-((E)-4,4,4-トリフルオロ-3-(3,4,5-トリクロロフェニル)ブト-1-エン-1-イル)-2-(トリフルオロメチル)ベンズアミド (C109)

【0429】

【化122】

10



20

【0430】

表題化合物は、2-アミノアセトアミド塩酸塩の代わりに (R)-2-アミノブタンアミド塩酸塩を用いて製造した (2.87, 71%) : ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.70–7.65 (m, 1H), 7.57 (dd, $J = 8.0, 1.7$ Hz, 1H), 7.50 (d, $J = 8.0$ Hz, 1H), 7.42 (s, 2H), 6.74 (dd, $J = 7.8, 1.4$ Hz, 1H), 6.62 (d, $J = 15.9$ Hz, 1H), 6.57–6.49 (m, 1H), 6.44 (dd, $J = 15.9, 7.8$ Hz, 1H), 5.72 (s, 1H), 4.71 (dt, $J = 7.7, 6.3$ Hz, 1H), 4.19–4.05 (m, 1H), 1.99 (ddd, $J = 13.7, 7.4, 6.1$ Hz, 1H), 1.85–1.70 (m, 1H), 1.01 (t, $J = 7.4$ Hz, 3H); ^{19}F NMR (376 MHz, CDCl_3) δ –59.11, –68.57; ESIMS m/z 561 ($[\text{M}-\text{H}]^-$).

30

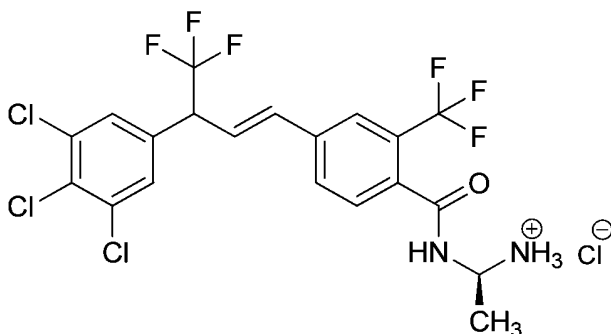
【0431】

実施例16: N-((R)-1-アミノエチル)-4-((E)-4,4,4-トリフルオロ-3-(3,4,5-トリクロロフェニル)ブト-1-エン-1-イル)-2-(トリフルオロメチル)ベンズアミド塩酸塩 (C110) の製造

【0432】

【化123】

40



【0433】

50

磁気攪拌翼およびN-((R)-1-アミノ-1-オキソプロパン-2-イル)-4-((E)-4,4,4-トリフルオロ-3-(3,4,5-トリクロロフェニル)ブト-1-エン-1-イル)-2-(トリフルオロメチル)ベンズアミド(C107)(0.050g、0.091mmol)を含有するアルミニウム箔に包まれたバイアル(5mL)に、アセトニトリル(0.400mL)および水(0.200mL)を添加して淡ベージュ色溶液を生じた。[I, I-ビス(トリフルオロアセトキシ)ヨード]ベンゼン(0.039g、0.091mmol、J. Org. Chem.、1984、49、4272-4276に記述されるとおり新たに製造された)を添加し、そして該反応を2.5時間攪拌するままにした。該粗反応混合物をCelite(登録商標)(5g)に吸着させ、そして溶出液として10-100%アセトニトリル/水を使用する逆相クロマトグラフィー(C-18)により精製した。表題化合物は灰白色固形物(0.031g、66%)：¹H NMR(400MHz、DMSO-d₆) δ 9.49(d、J=7.3Hz、1H)、8.44(s、3H)、8.05(s、1H)、7.97(dt、J=8.4、1.8Hz、1H)、7.94(s、2H)、7.61(d、J=8.0Hz、1H)、7.10(dd、J=15.8、9.1Hz、1H)、6.90(d、J=15.8Hz、1H)、5.13(p、J=6.6Hz、1H)、4.90(p、J=9.4Hz、1H)、1.45(d、J=6.5Hz、3H)；¹⁹F NMR(376MHz、DMSO-d₆) δ -57.73、-67.93；ESI MS m/z 519([M-H]⁻)として単離された。

10

【0434】

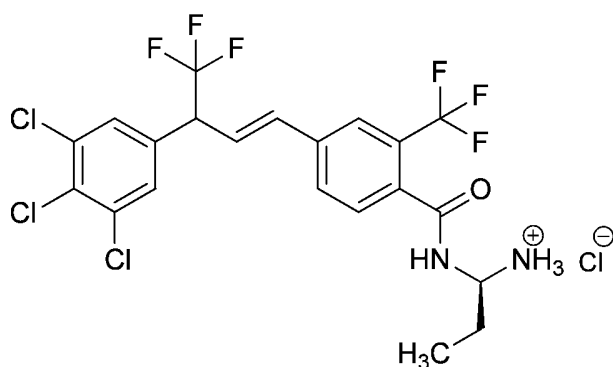
20

以下の化合物は実施例16の手順に従って製造した。

N-((R)-1-アミノプロピル)-4-((E)-4,4,4-トリフルオロ-3-(3,4,5-トリクロロフェニル)ブト-1-エン-1-イル)-2-(トリフルオロメチル)ベンズアミド塩酸塩(C111)

【0435】

【化124】



30

【0436】

表題化合物は、N-((R)-1-アミノ-1-オキソプロパン-2-イル)-4-((E)-4,4,4-トリフルオロ-3-(3,4,5-トリクロロフェニル)ブト-1-エン-1-イル)-2-(トリフルオロメチル)ベンズアミド(C107)の代わりにN-((R)-1-アミノ-1-オキソブタン-2-イル)-4-((E)-4,4,4-トリフルオロ-3-(3,4,5-トリクロロフェニル)ブト-1-エン-1-イル)-2-(トリフルオロメチル)ベンズアミド(C109)を用いて製造した(0.910g、30%)：¹H NMR(400MHz、DMSO-d₆) δ 9.39(dd、J=8.2、1.4Hz、1H)、8.57-8.43(m、3H)、8.05(t、J=1.7Hz、1H)、7.98(dd、J=8.1、1.9Hz、1H)、7.93(s、2H)、7.61(d、J=8.0Hz、1H)、7.09(dd、J=15.8、9.1Hz、1H)、6.89(d、J=15.7Hz、1H)、4.91(m、2H)、1.81(m、2H)、0.93(t、J=7.3Hz、3H)；¹⁹F NMR(376M

40

50

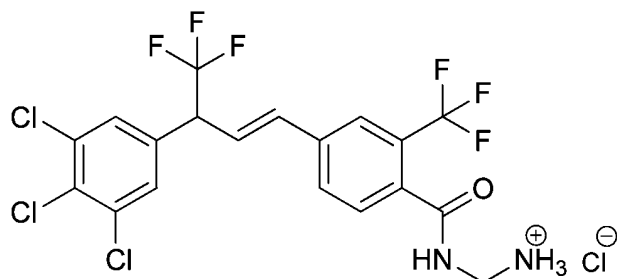
^1H NMR ($\text{DMSO}-d_6$) δ -57.80、-67.93; ESI-MS m/z 533 ($[\text{M}-\text{H}]^-$)

【0437】

(E)-N-(アミノメチル)-4-(4,4,4-トリフルオロ-3-(3,4,5-トリクロロフェニル)ブト-1-エン-1-イル)-2-(トリフルオロメチル)ベンズアミド塩酸塩 (C112)

【0438】

【化125】



10

【0439】

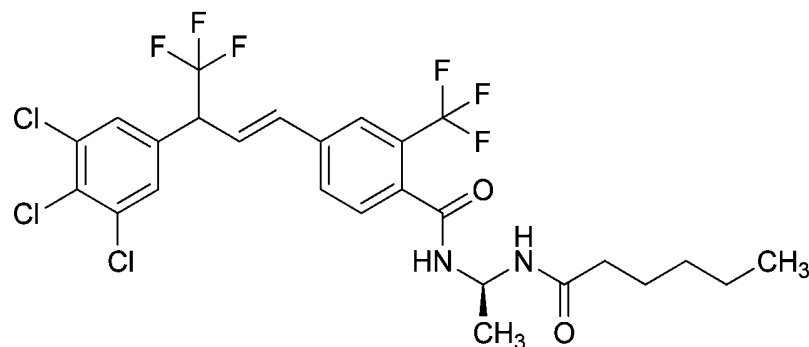
表題化合物は、(E)-N-(2-アミノ-2-オキソエチル)-4-(4,4,4-トリフルオロ-3-(3,4,5-トリクロロフェニル)ブト-1-エン-1-イル)-2-(トリフルオロメチル)ベンズアミド (C108) を N-((R)-1-アミノ-1-オキソプロパン-2-イル)-4-((E)-4,4,4-トリフルオロ-3-(3,4,5-トリクロロフェニル)ブト-1-エン-1-イル)-2-(トリフルオロメチル)ベンズアミド (C107) の代わりに使用して製造した (0.710 g、50%) : ^1H NMR (400 MHz, $\text{DMSO}-d_6$) δ 9.27 (t, $J=6.0$ Hz, 1H)、8.03 (d, $J=1.6$ Hz, 1H)、7.95 (dd, $J=8.2, 1.9$ Hz, 1H)、7.93 (s, 2H)、7.57 (d, $J=8.0$ Hz, 1H)、7.09 (dd, $J=15.8, 9.1$ Hz, 1H)、6.89 (d, $J=15.7$ Hz, 1H)、6.52 (s, 3H)、4.88 (p, $J=9.3$ Hz, 1H)、4.26 (d, $J=6.0$ Hz, 2H); ^{19}F NMR (376 MHz, $\text{DMSO}-d_6$) δ -57.74、-67.95; ESI-MS m/z 505 ($[\text{M}-\text{H}]^-$)。 20 30

【0440】

実施例17: N-((R)-1-ヘキサナムイドエチル)-4-((E)-4,4,4-トリフルオロ-3-(3,4,5-トリクロロフェニル)ブト-1-エン-1-イル)-2-(トリフルオロメチル)ベンズアミド (F3) の製造

【0441】

【化126】



40

【0442】

磁気攪拌翼を装備されたバイアル (4 mL) 中に、無水ジクロロメタン (1.5 mL)、N-((R)-1-アミノエチル)-4-((E)-4,4,4-トリフルオロ-3-

50

(3, 4, 5-トリクロロフェニル)ブト-1-エン-1-イル)-2-(トリフルオロメチル)ベンズアミド塩酸塩 (C110) (0.100 g、0.180 mmol) および塩化ヘキサノイル (0.0380 mL、0.270 mmol) を入れた。この溶液に4-メチルモルホリン (0.0500 mL、0.450 mmol) を添加した。生じる懸濁液を一夜攪拌した。該反応混合物を酢酸エチル (20 mL) およびクエン酸 (5%、20 mL) で希釈した。層を分離し、そして水層を追加の酢酸エチルで抽出した。合わせられた有機層を硫酸ナトリウムで乾燥し、濾過しかつ濃縮した。生じる物質を、溶出液として0-100% 酢酸エチル/ヘキサンを使用するフラッシュカラムクロマトグラフィーにより精製した。表題化合物が灰白色泡状物 (0.0860 g、78%) として単離された。

【0443】

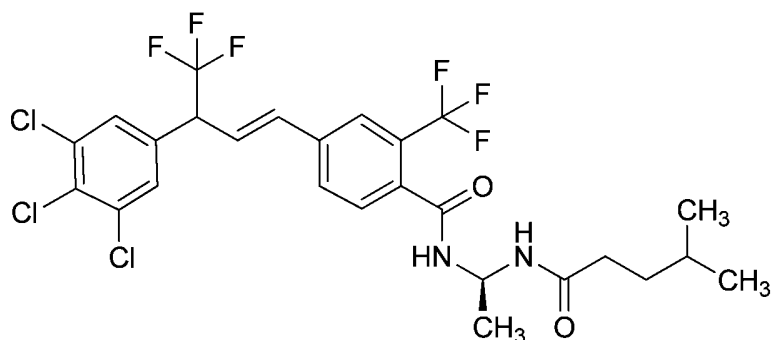
10

以下の化合物は実施例17の手順に従って製造した。

N-((R)-1-(4-メチルペンタンアミド)エチル)-4-((E)-4, 4, 4-トリフルオロ-3-(3, 4, 5-トリクロロフェニル)ブト-1-エン-1-イル)-2-(トリフルオロメチル)ベンズアミド (F4)

【0444】

【化127】



20

【0445】

表題化合物は塩化4-メチルペンタノイルを使用して製造し、そして灰白色泡状物/ガラス状物 (0.037 g、34%) として単離された。

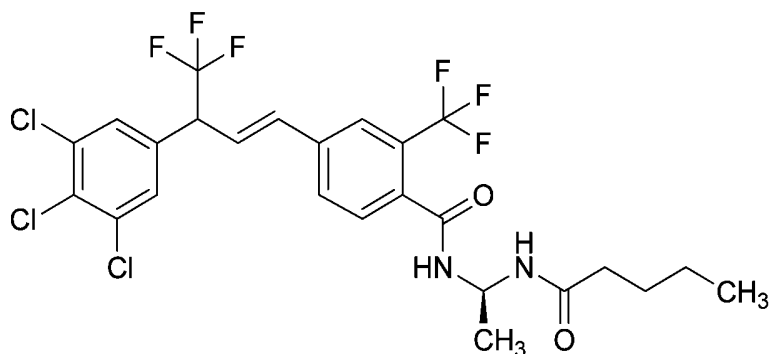
【0446】

30

N-((R)-1-ペンタンアミドエチル)-4-((E)-4, 4, 4-トリフルオロ-3-(3, 4, 5-トリクロロフェニル)ブト-1-エン-1-イル)-2-(トリフルオロメチル)ベンズアミド (F5)

【0447】

【化128】



40

【0448】

表題化合物は塩化ペンタノイルを使用して製造し、そして灰白色泡状物/固形物 (0.028 g、26%) として単離された。

【0449】

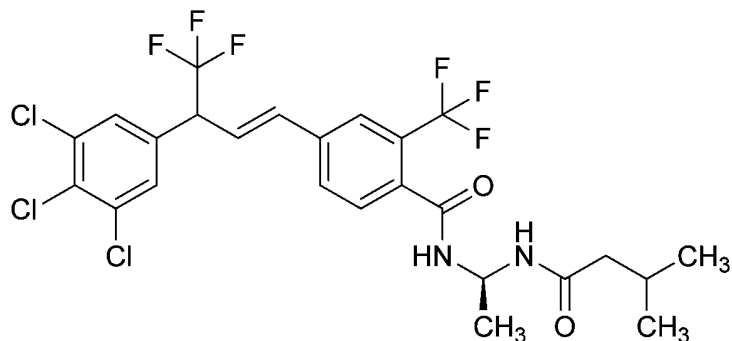
N-((R)-1-(3-メチルブタンアミド)エチル)-4-((E)-4, 4, 4-

50

トリフルオロ-3-(3,4,5-トリクロロフェニル)ブト-1-エン-1-イル)-
2-(トリフルオロメチル)ベンズアミド(F6)

【0450】

【化129】



10

【0451】

表題化合物は塩化3-メチルブタノイルを使用して製造し、そして灰白色泡状物(0.038g、35%)として単離された。

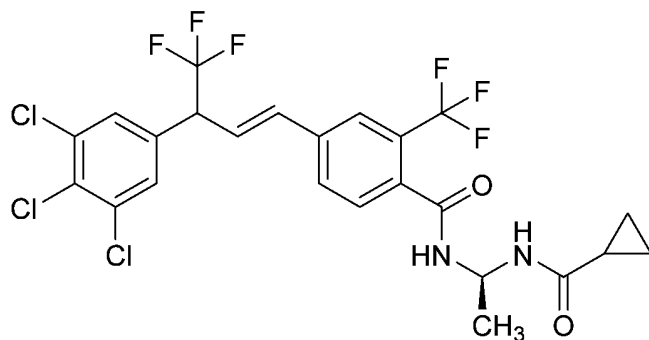
【0452】

N-((R)-1-(シクロプロパンカルボキサミド)エチル)-4-((E)-4,4,4-トリフルオロ-3-(3,4,5-トリクロロフェニル)ブト-1-エン-1-イル)-2-(トリフルオロメチル)ベンズアミド(F7)

20

【0453】

【化130】



30

【0454】

表題化合物は塩化シクロプロパンカルボニルを使用して製造し、そして無色ガラス状物／泡状物(0.145g、55%)として単離された。

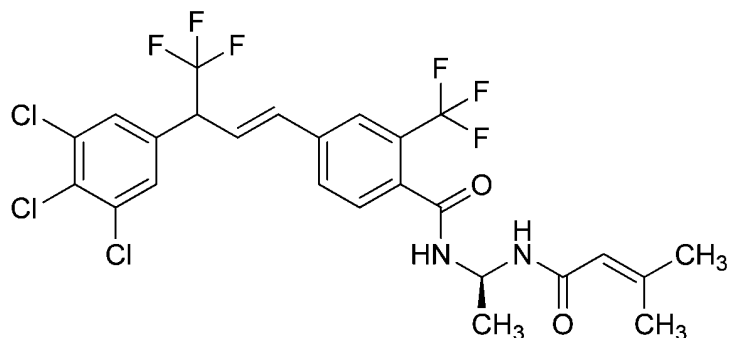
【0455】

N-((R)-1-(3-メチルブト-2-エンアミド)エチル)-4-((E)-4,4,4-トリフルオロ-3-(3,4,5-トリクロロフェニル)ブト-1-エン-1-イル)-2-(トリフルオロメチル)ベンズアミド(F8)

40

【0456】

【化 1 3 1】



10

【0 4 5 7】

表題化合物は塩化 3-メチルブト-2-エノイルを使用して製造し、そして無色ガラス状物／泡状物（0.096 g、55%）として単離された。

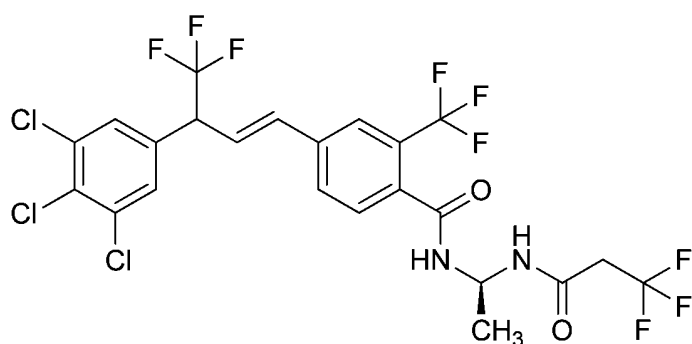
【0 4 5 8】

実施例 18： 4-（（E）-4,4,4-トリフルオロ-3-（3,4,5-トリクロロフェニル）ブト-1-エン-1-イル）-2-（トリフルオロメチル）-N-（（R）-1-（3,3,3-トリフルオロプロパンアミド）エチル）ベンズアミド（F2）の製造

【0 4 5 9】

20

【化 1 3 2】



30

【0 4 6 0】

磁気攪拌翼を装備されたバイアル（5 mL）中に、N-（（R）-1-アミノエチル）-4-（（E）-4,4,4-トリフルオロ-3-（3,4,5-トリクロロフェニル）ブト-1-エン-1-イル）-2-（トリフルオロメチル）ベンズアミド塩酸塩（C110）（0.117 g、0.210 mmol）および 1,2-ジクロロエタン（3 mL）を入れた。塩化 3,3,3-トリフルオロプロパノイル（0.0390 g、0.266 mmol）を添加し、そして 2 分後に 4-メチルモルホリン（0.0690 mL、0.631 mmol）を添加した。該反応を 2 分の期間にわたり 5 回ボルテックス攪拌した。第二のボルテックス後に溶液が濁った。該反応を追加の 1.5 時間攪拌するままにした。溶出液として 0-100% 酢酸エチル／ヘキサンを使用するフラッシュカラムクロマトグラフィーによる精製。表題化合物を灰白色固形物（0.060 g、46%）として単離した。

40

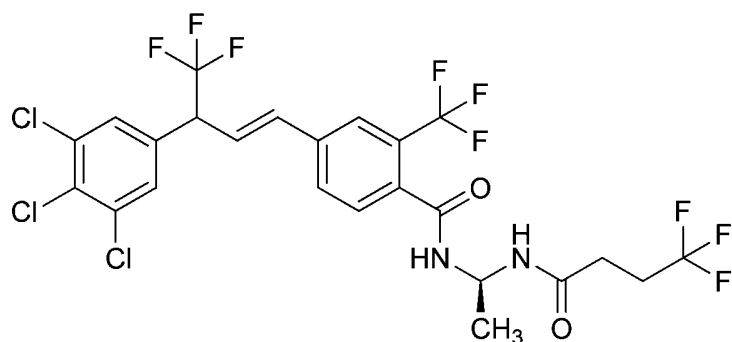
【0 4 6 1】

以下の化合物は実施例 18 の手順に従って製造した。

4-（（E）-4,4,4-トリフルオロ-3-（3,4,5-トリクロロフェニル）ブト-1-エン-1-イル）-N-（（R）-1-（4,4,4-トリフルオロブタンアミド）エチル）-2-（トリフルオロメチル）ベンズアミド（F1）

【0 4 6 2】

【化 1 3 3】



10

【0 4 6 3】

表題化合物は塩化 4, 4, 4-トリフルオロブタノイルを使用して製造し、そして灰白色固形物 (0.066 g、65%) として単離された。

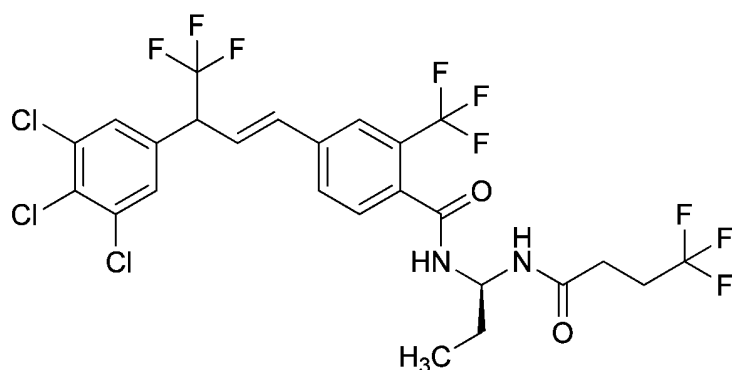
【0 4 6 4】

4-((E)-4, 4, 4-トリフルオロ-3-(3, 4, 5-トリクロロフェニル)ブト-1-エン-1-イル)-N-((R)-1-(4, 4, 4-トリフルオロブタンアミド)プロピル)-2-(トリフルオロメチル)ベンズアミド (F 1 2)

【0 4 6 5】

【化 1 3 4】

20



30

【0 4 6 6】

表題化合物は、N-((R)-1-アミノプロピル)-4-((E)-4, 4, 4-トリフルオロ-3-(3, 4, 5-トリクロロフェニル)ブト-1-エン-1-イル)-2-(トリフルオロメチル)ベンズアミド塩酸塩 (C 1 1 1) および塩化 4, 4, 4-トリフルオロブタノイルを使用して製造し、そして白色固形物 (0.084 g、49%) として単離された。

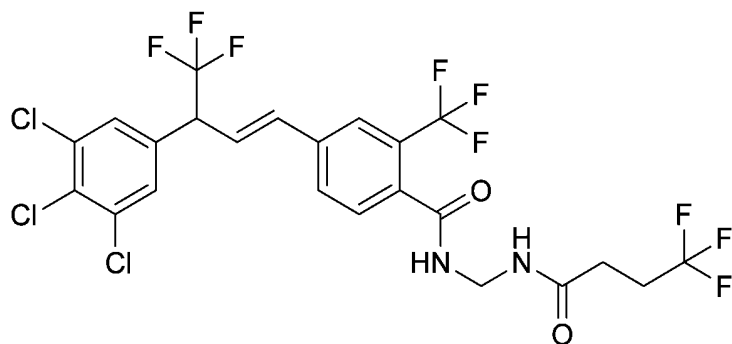
【0 4 6 7】

(E)-4-(4, 4, 4-トリフルオロ-3-(3, 4, 5-トリクロロフェニル)ブト-1-エン-1-イル)-N-((4, 4, 4-トリフルオロブタンアミド)メチル)-2-(トリフルオロメチル)ベンズアミド (F 1 3)

40

【0 4 6 8】

【化 1 3 5】



10

【0 4 6 9】

表題化合物は (E) - N - (アミノメチル) - 4 - (4, 4, 4 - トリフルオロ - 3 - (3, 4, 5 - トリクロロフェニル) ブト - 1 - エン - 1 - イル) - 2 - (トリフルオロメチル) ベンズアミド塩酸塩 (C 1 1 2) および塩化 4, 4, 4 - トリフルオロブタノイルを使用して製造し、そして淡黄色固形物 (0. 0 4 0 g、2 0 %) として単離された。

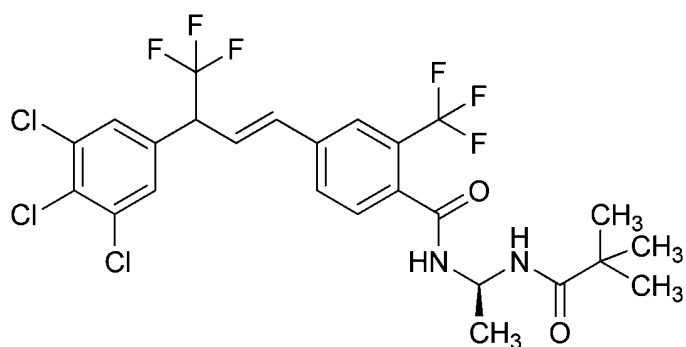
【0 4 7 0】

N - ((S) - 1 - ピバルアミドエチル) - 4 - ((E) - 4, 4, 4 - トリフルオロ - 3 - (3, 4, 5 - トリクロロフェニル) ブト - 1 - エン - 1 - イル) - 2 - (トリフルオロメチル) ベンズアミド (F 1 9)

20

【0 4 7 1】

【化 1 3 6】



30

【0 4 7 2】

表題化合物は塩化ピバロイルを使用して製造し、そして白色固形物 (0. 1 0 4 g、6 4 %) として単離された。

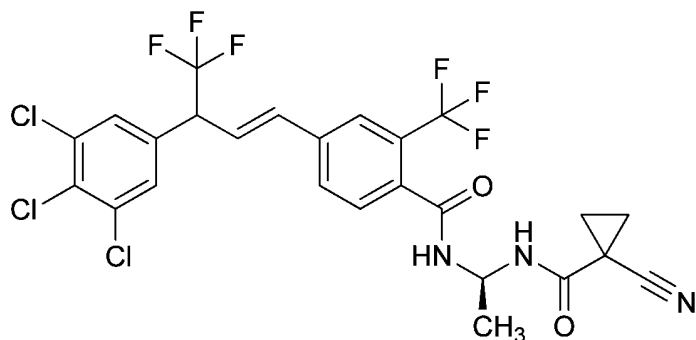
【0 4 7 3】

実施例 1 9 : N - ((S) - 1 - (1 - シアノシクロプロパンカルボキサミド) エチル) - 4 - ((E) - 4, 4, 4 - トリフルオロ - 3 - (3, 4, 5 - トリクロロフェニル) ブト - 1 - エン - 1 - イル) - 2 - (トリフルオロメチル) ベンズアミド (F 1 4) の製造

40

【0 4 7 4】

【化 1 3 7】



10

【0 4 7 5】

磁気攪拌翼を装備されたバイアル（5 mL）中に、1-シアノシクロプロパンカルボン酸（0.052 g、0.47 mmol）および1,2-ジクロロエタン（1.3 mL）を入れた。塩化オキサリル（0.040 mL、0.47 mmol）およびジメチルホルムアミド（約1滴）を添加し、そして該反応を室温で3時間攪拌するままにした。N-（（R）-1-アミノエチル）-4-（（E）-4,4,4-トリフルオロ-3-（3,4,5-トリクロロフェニル）ブト-1-エン-1-イル）-2-（トリフルオロメチル）ベンズアミド塩酸塩（C110）（0.15 g、0.27 mmol）および4-メチルモルホリン（0.089 mL、0.81 mmol）を添加し、そして該反応に蓋をし、ボルテックス攪拌しかつ攪拌するままにした。溶出液として0-100%酢酸エチル／ヘキサンを使用するフラッシュカラムクロマトグラフィーによる精製。表題化合物を無色泡状物（0.135 g、82%）として単離した。

20

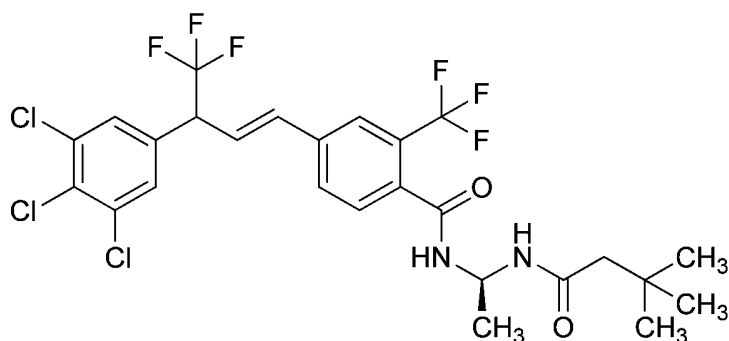
【0 4 7 6】

以下の化合物は実施例19の手順に従って製造した。

N-（（R）-1-（3,3-ジメチルブタンアミド）エチル）-4-（（E）-4,4,4-トリフルオロ-3-（3,4,5-トリクロロフェニル）ブト-1-エン-1-イル）-2-（トリフルオロメチル）ベンズアミド（F15）

【0 4 7 7】

【化 1 3 8】



30

40

【0 4 7 8】

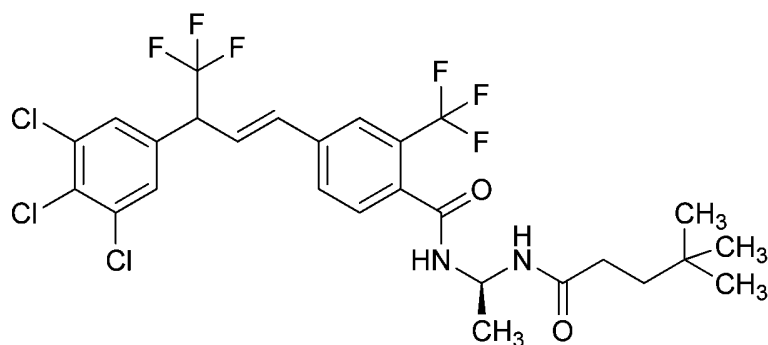
表題化合物は3,3-ジメチルブタン酸を使用して製造し、そして無色ガラス状物（0.109 g、65%）として単離された。

【0 4 7 9】

N-（（R）-1-（4,4-ジメチルペンタンアミド）エチル）-4-（（E）-4,4,4-トリフルオロ-3-（3,4,5-トリクロロフェニル）ブト-1-エン-1-イル）-2-（トリフルオロメチル）ベンズアミド（F17）

【0 4 8 0】

【化 1 3 9】



10

【0 4 8 1】

表題化合物は4, 4-ジメチルペンタン酸を使用して製造し、そして無色泡状物(0. 104 g、61%)として単離された。

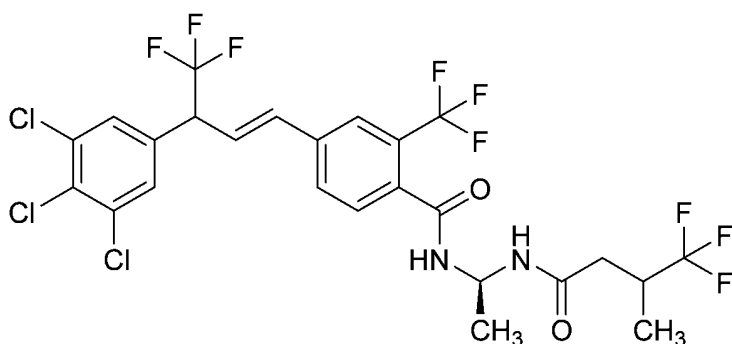
【0 4 8 2】

4-((E)-4, 4, 4-トリフルオロ-3-(3, 4, 5-トリクロロフェニル)ブト-1-エン-1-イル)-N-((1R)-1-(4, 4, 4-トリフルオロ-3-メチルブタンアミド)エチル)-2-(トリフルオロメチル)ベンズアミド(F16)

【0 4 8 3】

【化 1 4 0】

20



30

【0 4 8 4】

表題化合物は4, 4, 4-トリフルオロ-3-メチルブタン酸を使用して製造し、そして白色固形物(0. 105 g、59%)として単離された。

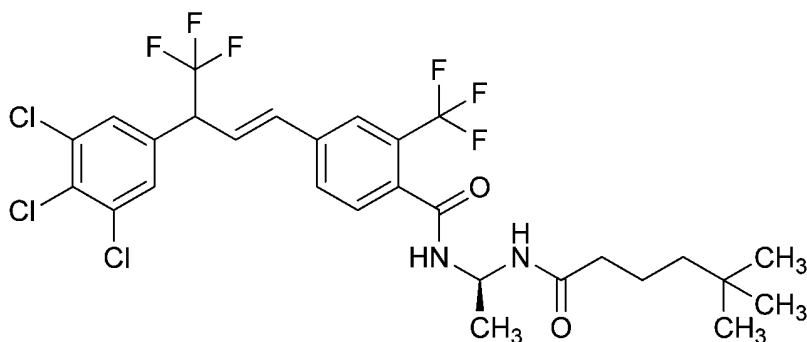
【0 4 8 5】

N-((R)-1-(5, 5-ジメチルヘキサンアミド)エチル)-4-((E)-4, 4, 4-トリフルオロ-3-(3, 4, 5-トリクロロフェニル)ブト-1-エン-1-イル)-2-(トリフルオロメチル)ベンズアミド(F18)

【0 4 8 6】

【化 1 4 1】

40



【0 4 8 7】

50

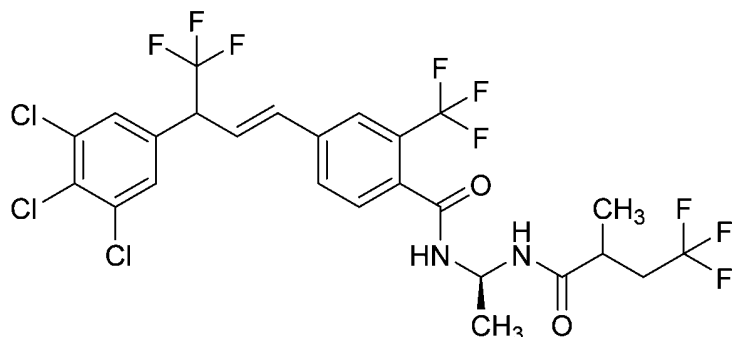
表題化合物は5, 5-ジメチルヘキサン酸を使用して製造し、そして白色固形物 (0. 100 g、57%) として単離された。

【0488】

N-((R)-1-(4, 4, 4-トリフルオロ-2-メチルブタンアミド)エチル)-4-((E)-4, 4, 4-トリフルオロ-3-(3, 4, 5-トリクロロフェニル)ブト-1-エン-1-イル)-2-(トリフルオロメチル)ベンズアミド (P30)

【0489】

【化142】



10

【0490】

無色ガラス状物 (0. 096 g、24%) として単離された。

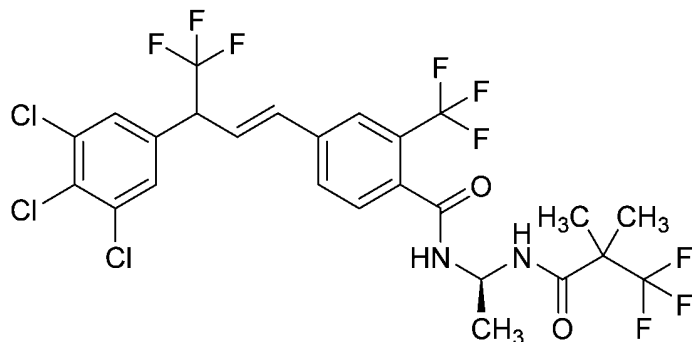
20

【0491】

N-((S)-1-(3, 3, 3-トリフルオロ-2, 2-ジメチルプロパンアミド)エチル)-4-((E)-4, 4, 4-トリフルオロ-3-(3, 4, 5-トリクロロフェニル)ブト-1-エン-1-イル)-2-(トリフルオロメチル)ベンズアミド (P33)

【0492】

【化143】



30

【0493】

白色固形物 (0. 101 g、51%) として単離された。

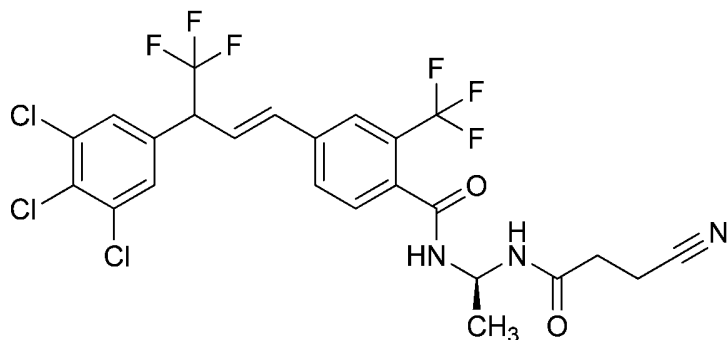
【0494】

実施例20: N-((R)-1-(3-シアノプロパンアミド)エチル)-4-((E)-4, 4, 4-トリフルオロ-3-(3, 4, 5-トリクロロフェニル)ブト-1-エン-1-イル)-2-(トリフルオロメチル)ベンズアミド (F9) の製造

【0495】

40

【化 1 4 4】



10

【0 4 9 6】

攪拌翼を装備されたバイアル（4 mL）中に、3-シアノプロパン酸（0.080 g、0.81 mmol）、（1-シアノ-2-エトキシ-2-オキソエチリデンアミノオキシ）ジメチルアミノ-モルホリノ-カルベニウムヘキサフルオロホスファート（0.37 g、0.86 mmol）および4-メチルモルホリン（0.14 g、1.3 mmol）を入れた。ジメチルホルムアミド（1 mL）を添加し、そして該反応を室温で5分間攪拌した。N-（（R）-1-アミノエチル）-4-（（E）-4,4,4-トリフルオロ-3-（3,4,5-トリクロロフェニル）ブト-1-エン-1-イル）-2-（トリフルオロメチル）ベンズアミド塩酸塩（C110）（0.30 g、0.54 mmol）をジメチルホルムアミド（0.5 mL）に溶解し、そして一滴ずつ添加した。該混合物をその後室温で一晩攪拌した。生じる溶液を酢酸エチル（約20 mL）で希釈しかつ水で洗浄した。有機層を硫酸ナトリウムで乾燥し、濾過しかつ濃縮した。生じる物質を、溶出液として35%酢酸エチル/ヘキサンを使用するフラッシュカラムクロマトグラフィーを介して精製して、表題化合物を褐色ガラス状物/泡状物（0.073 g、23%）として提供した。

20

【0 4 9 7】

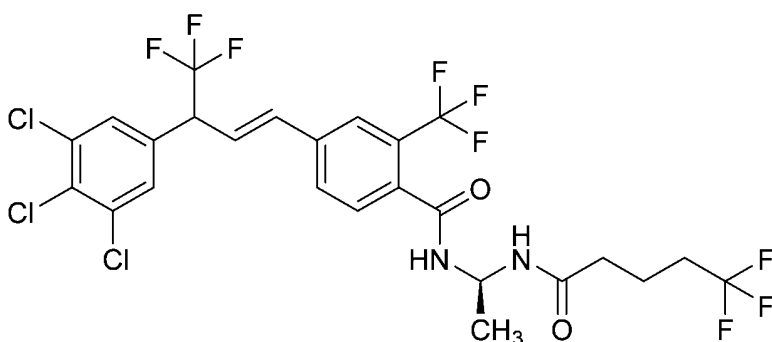
以下の化合物は実施例20の手順に従って製造した。

4-（（E）-4,4,4-トリフルオロ-3-（3,4,5-トリクロロフェニル）ブト-1-エン-1-イル）-2-（トリフルオロメチル）-N-（（R）-1-（5,5,5-トリフルオロペンタンアミド）エチル）ベンズアミド（F10）

30

【0 4 9 8】

【化 1 4 5】



40

【0 4 9 9】

表題化合物は5,5,5-トリフルオロペンタン酸を使用して製造し、そして無色ガラス状物/泡状物（0.173 g、49%）として単離された。

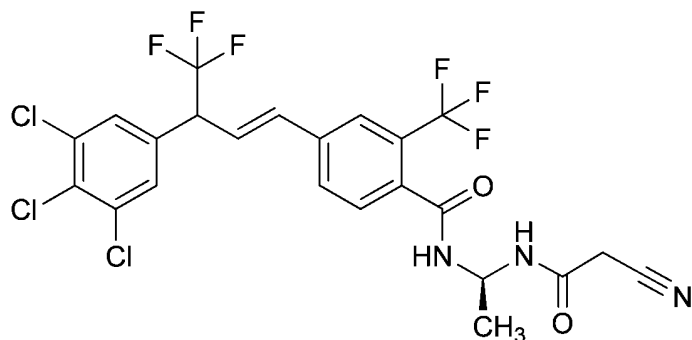
【0 5 0 0】

N-（（R）-1-（2-シアノアセトアミド）エチル）-4-（（E）-4,4,4-トリフルオロ-3-（3,4,5-トリクロロフェニル）ブト-1-エン-1-イル）-2-（トリフルオロメチル）ベンズアミド（F11）

【0 5 0 1】

50

【化 1 4 6】



10

【0 5 0 2】

表題化合物は2-シアノ酢酸を使用して製造し、そして灰白色泡状物／ガラス状物（0.132 g、42%）として単離された。

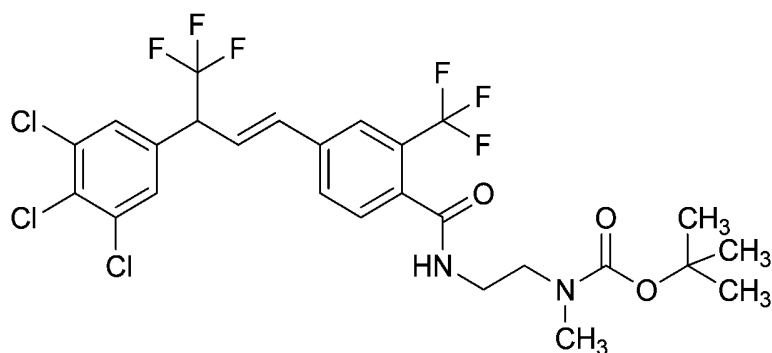
【0 5 0 3】

実施例 21： (E)-tert-ブチルメチル（2-（4-（4，4，4-トリフルオロ-3-（3，4，5-トリクロロフェニル）ブト-1-エン-1-イル）-2-（トリフルオロメチル）ベンスアミド）エチル）カルバメート（C 1 1 3）の製造

【0 5 0 4】

【化 1 4 7】

20



30

【0 5 0 5】

丸底フラスコ（250 mL）中に、(E)-4-（4，4，4-トリフルオロ-3-（3，4，5-トリクロロフェニル）ブト-1-エン-1-イル）-2-（トリフルオロメチル）安息香酸（C 9 2）（0.75 g、1.6 mmol）、tert-ブチル（2-アミノエチル）（メチル）カルバメート（0.56 mL、3.1 mmol）、1H-ベンゾ[d][1,2,3]トリアゾルー1-オール水和物（0.24 g、1.6 mmol）および2-（1H-ベンゾ[d][1,2,3]トリアゾルー1-イル）-1,1,3,3-テトラメチルウロニウムヘキサフルオロホスファート（V）（0.60 g、1.6 mmol）ならびにアセトニトリル（27 mL）を窒素下で添加した。N-エチル-N-イソプロピルプロパン-2-アミン（0.55 mL、3.1 mmol）をその後一滴ずつ添加し、そして該反応を室温で一夜撹拌させた。該反応混合物をその後シリカゲルフリットで濾過し、濃縮し、溶出液として酢酸エチル／ヘキサンを使用するフラッシュカラムクロマトグラフィーにより精製して、表題化合物を薄褐色泡状物（0.40 g、38%）：¹H

40

NMR（400 MHz、CDCl₃）δ 7.66（s、1H）、7.57-7.46（m、2H）、7.42（s、2H）、6.74（s、1H）、6.61（d、J=15.9 Hz、1H）、6.42（dd、J=15.9、7.8 Hz、1H）、4.12（p、J=8.4 Hz、1H）、3.60（dt、J=6.1、4.7 Hz、2H）、3.48（d、J=6.2 Hz、2H）、2.92（s、3H）、1.40（s、9H）；¹⁹F NMR（376 MHz、CDCl₃）δ -59.31、-68.58；ESI MS m/z 633（[M-H]⁻）として提供した。

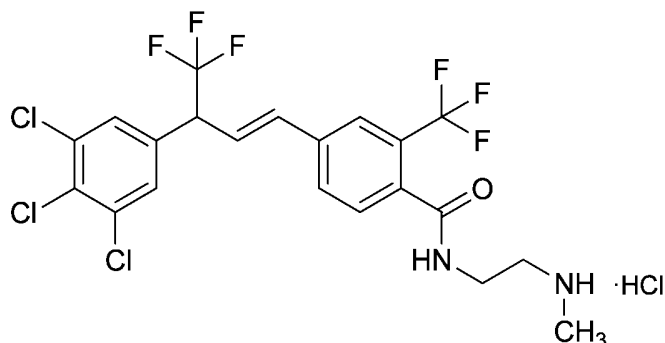
50

【0506】

実施例22： (E)-N-(2-(メチルアミノ)エチル)-4-(4,4,4-トリフルオロ-3-(3,4,5-トリクロロフェニル)ブト-1-エン-1-イル)-2-(トリフルオロメチル)ベンズアミド塩酸塩(C114)の製造

【0507】

【化148】



10

【0508】

窒素下丸底フラスコ(100mL)中に、(E)-tert-ブチルメチル(2-(4-(4,4,4-トリフルオロ-3-(3,4,5-トリクロロフェニル)ブト-1-エン-1-イル)-2-(トリフルオロメチル)ベンズアミド)エチル)カルバメート(C113)(0.770g、1.22mmol)およびジクロロメタン(1.39mL)を添加した。塩酸(ジオキサン中4M)(1.39mL)をその後該溶液に一滴ずつ添加し、そして該溶液を室温で一夜攪拌させた。該反応を濃縮して、表題化合物を褐色泡状物(0.500g、51%)：¹H NMR(400MHz、MeOH-d₄) δ 7.90-7.81(m、2H)、7.70(s、2H)、7.63(d、J=8.0Hz、1H)、6.91-6.75(m、2H)、4.64-4.50(m、1H)、3.66(s、4H)、2.78(s、3H)(NHは観察されない)；¹⁹F NMR(376MHz、MeOH-d₄) δ -60.51、-70.47；ESI-MS m/z 533([M-H]⁻)として提供した。

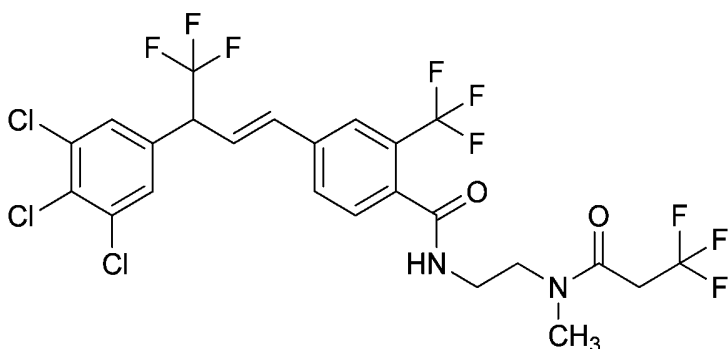
20

【0509】

実施例23： (E)-4-(4,4,4-トリフルオロ-3-(3,4,5-トリクロロフェニル)ブト-1-エン-1-イル)-N-(2-(3,3,3-トリフルオロ-N-メチルプロパンアミド)エチル)-2-(トリフルオロメチル)ベンズアミド(F20)の製造

【0510】

【化149】



40

【0511】

丸底フラスコ(100mL)中に、1H-ベンゾ[d][1,2,3]トリアゾル-1-オール水和物(0.040g、0.26mmol)、2-(1H-ベンゾ[d][1,2,3]トリアゾル-1-イル)-1,1,3,3-テトラメチルウロニウムヘキサフル

50

オロホスファート (V) (0.10 g、0.26 mmol)、(E)-N-(2-(メチルアミノ)エチル)-4-(4,4,4-トリフルオロ-3-(3,4,5-トリクロロフェニル)ブト-1-エン-1-イル)-2-(トリフルオロメチル)ベンズアミド塩酸塩 (C114) (0.15 g、0.26 mmol)、3,3,3-トリフルオロプロパン酸 (0.046 mL、0.53 mmol) およびアセトニトリル (4.5 mL) を窒素下で添加した。これにその後次いでN-エチル-N-イソプロピルプロパン-2-アミン (0.14 mL、0.79 mmol) を一滴ずつ添加した。生じる溶液を室温で一夜攪拌させた。該反応混合物をシリカゲルフリットで濾過し、濃縮しそしてその後フラッシュカラムクロマトグラフィーを介して精製して、表題化合物を褐色ガラス状物 (0.094 g、50%) として提供した。

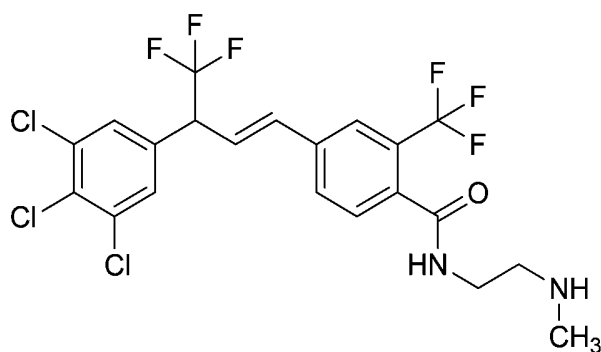
10

【0512】

実施例 24: (E)-N-(2-(メチルアミノ)エチル)-4-(4,4,4-トリフルオロ-3-(3,4,5-トリクロロフェニル)ブト-1-エン-1-イル)-2-(トリフルオロメチル)ベンズアミド (C115) の製造

【0513】

【化150】



20

【0514】

(E)-N-(2-(メチルアミノ)エチル)-4-(4,4,4-トリフルオロ-3-(3,4,5-トリクロロフェニル)ブト-1-エン-1-イル)-2-(トリフルオロメチル)ベンズアミド塩酸塩 (C114) (0.60 g、1.1 mmol) を含有する丸底フラスコ (100 mL) 中に、ジクロロメタン (20 mL) 次いで飽和重炭酸ナトリウム (10 mL) を添加した。この混合物を10分間攪拌させた。該溶液をジクロロメタンで抽出した。合わせられた有機層を乾燥し、濃縮し、そして溶出液としてメタノール/ジクロロメタンを使用するフラッシュカラムクロマトグラフィーにより精製して、表題化合物を黄色泡状物 (0.30 g、51%) : ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.65 (s, 1H)、7.55 (d, $J=7.9$ Hz, 1H)、7.42 (d, $J=3.3$ Hz, 3H)、6.61 (d, $J=15.9$ Hz, 1H)、6.42 (dd, $J=15.9$ 、7.9 Hz, 1H)、4.12 (p, $J=8.7$ Hz, 1H)、3.59 (q, $J=5.4$ Hz, 2H)、2.88 (t, $J=5.5$ Hz, 2H)、2.47 (s, 3H) (NHは観察されない) ; ^{19}F NMR (376 MHz, CDCl_3) δ -59.11、-68.60 ; ESI-MS m/z 535 ($[\text{M}+\text{H}]^+$) として提供した。

30

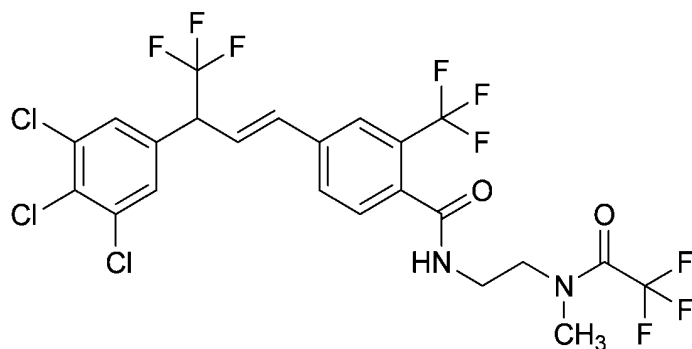
40

【0515】

実施例 25: (E)-4-(4,4,4-トリフルオロ-3-(3,4,5-トリクロロフェニル)ブト-1-エン-1-イル)-N-(2-(2,2,2-トリフルオロ-N-メチルアセトアミド)エチル)-2-(トリフルオロメチル)ベンズアミド (F21) の製造

【0516】

【化 1 5 1】



10

【0 5 1 7】

丸底フラスコ（100 mL）中に、（E）-N-（2-（メチルアミノ）エチル）-4-（4,4,4-トリフルオロ-3-（3,4,5-トリクロロフェニル）ブト-1-エン-1-イル）-2-（トリフルオロメチル）ベンズアミド（C115）（0.125 g、0.234 mmol）、テトラヒドロフラン（0.781 mL）およびジクロロメタン（0.781 mL）を窒素下に添加した。これに次いで無水トリフルオロ酢酸（0.0350 mL、0.246 mmol）を一滴ずつ添加した。該反応をその後室温で18時間攪拌させた。該混合物をジクロロメタンで希釈し、濃縮し、そして溶出液として酢酸エチル／ヘキサンを使用するフラッシュカラムクロマトグラフィーを介して精製して、表題化合物を非常に薄い黄色のガラス状物／泡状物（0.0720 g、46%）として提供した。

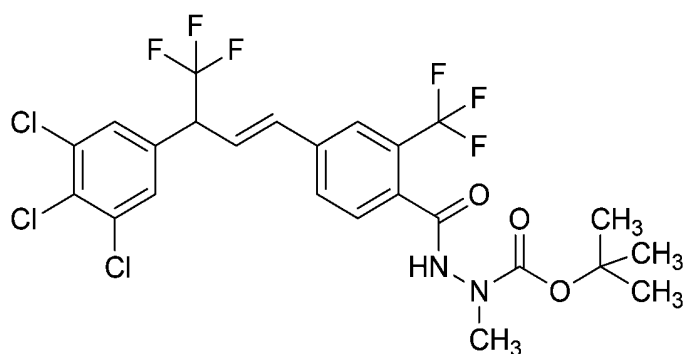
20

【0 5 1 8】

実施例 26：（E）-tert-ブチル 1-メチル-2-（4-（4,4,4-トリフルオロ-3-（3,4,5-トリクロロフェニル）ブト-1-エン-1-イル）-2-（トリフルオロメチル）ベンゾイル）ヒドラジンカルボキシレート（C116）の製造

【0 5 1 9】

【化 1 5 2】



30

【0 5 2 0】

N-エチル-N-イソプロピルプロパン-2-アミン（1.21 mL、7.08 mmol）、ベンゾトリアゾル-1-イル-オキシトリピロジノホスホニウムヘキサフルオロホスファート（1.35 g、2.60 mmol）、tert-ブチル N-アミノ-N-メチルカルバメート（0.380 g、2.60 mmol）に、ジクロロメタン（5 mL）中の（E）-4-（4,4,4-トリフルオロ-3-（3,4,5-トリクロロフェニル）ブト-1-エン-1-イル）-2-（トリフルオロメチル）安息香酸（C92）（1.00 g、2.36 mmol）を添加した。該反応を室温で12時間攪拌した。該反応混合物を水中に注ぎそしてジクロロメタン（20 mL）で抽出した。分離された有機層を水、塩水で洗浄し、硫酸ナトリウムで乾燥し、濾過しかつ濃縮した。残渣を、溶出液として30%酢酸エチル／石油エーテルを使用するフラッシュカラムクロマトグラフィーを介して精製して、表題化合物を無色液体（0.750 g、49%）：IR（薄膜）3418、2928、1714、1160、865 cm^{-1} ； ^1H NMR（400 MHz、DMSO-

40

50

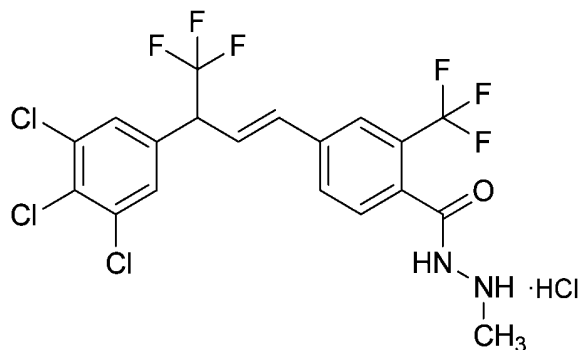
d_6) δ 10.4 (s, 1H)、7.89 (s, 2H)、7.48–7.43 (m, 2H)、7.33 (d, $J=8.0$ Hz, 1H)、6.90 (dd, $J=15.6$, 8.8 Hz, 1H)、6.76 (d, $J=15.6$ Hz, 1H)、4.86–4.82 (m, 1H)、2.38 (s, 3H)、1.45 (s, 9H); ESIMS m/z 603 ($[M-H]^-$)として提供した。

【0521】

実施例27: (E)-N'-メチル-4-(4,4,4-トリフルオロ-3-(3,4,5-トリクロロフェニル)ブト-1-エン-1-イル)-2-(トリフルオロメチル)ベンゾヒドラジド塩酸塩 (C117) の製造

【0522】

【化153】



【0523】

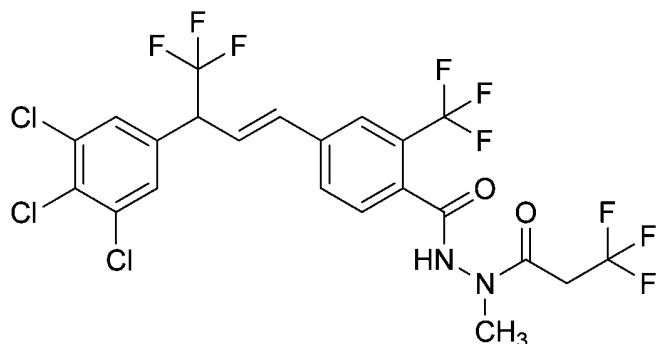
ジオキサン (10 mL) 中の (E)-tert-ブチル 1-メチル-2-(4-(4,4,4-トリフルオロ-3-(3,4,5-トリクロロフェニル)ブト-1-エン-1-イル)-2-(トリフルオロメチル)ベンゾイル)ヒドラジンカルボキシレート (C116) (1.0 g, 1.7 mmol) に塩酸 (ジオキサン中 4 M) (10 mL) を添加した。該溶液を室温で 2 時間攪拌させた。該反応を濃縮し、ペンタンで洗浄し、濾過しかつ乾燥して、表題化合物を黄色固形物 (0.80 g, 89%) : ^1H NMR (300 MHz, DMSO- d_6) δ 11.30 (bs, 2H)、8.09 (bs, 1H)、7.97 (d, $J=6.6$ Hz, 2H)、7.92 (s, 1H)、7.65 (d, $J=8.4$ Hz, 2H)、7.14 (dd, $J=15.9$, 8.7 Hz, 1H)、6.91 (d, $J=15.9$ Hz, 1H)、4.90 (t, $J=6.9$ Hz, 1H)、2.73 (bs, 3H); ESIMS m/z 505 ($[M+H]^+$)として提供した。

【0524】

実施例28: (E)-N'-メチル-4-(4,4,4-トリフルオロ-3-(3,4,5-トリクロロフェニル)ブト-1-エン-1-イル)-2-(トリフルオロメチル)-N-(3,3,3-トリフルオロプロパノイル)ベンゾヒドラジド (F22) の製造

【0525】

【化154】



【0526】

N-エチル-N-イソプロピルプロパン-2-アミン (0.14 mL、0.83 mmol)、ベンゾトリアゾル-1-イル-オキシトリピロジノホスホニウムヘキサフルオロホスファート (0.16 g、0.30 mmol) に、ジクロロメタン (5 mL) 中の (E)-N'-メチル-4-(4,4,4-トリフルオロ-3-(3,4,5-トリクロロフェニル)ブト-1-エン-1-イル)-2-(トリフルオロメチル)ベンゾヒドラジド塩酸塩 (C117) (0.15 g、0.28 mmol) および 3,3,3-トリフルオロプロパン酸 (0.046 mL、0.53 mmol) を添加した。該反応を室温で6時間攪拌した。該反応混合物をその後ジクロロメタンで希釈しかつ水で洗浄した。有機層を硫酸ナトリウムで乾燥し、濾過しかつ濃縮した。残渣を、溶出液として20%酢酸エチル/石油エーテルを使用するフラッシュカラムクロマトグラフィーを介して精製して、表題化合物を淡黄色ガム状物 (0.15 g、86%) として提供した。

10

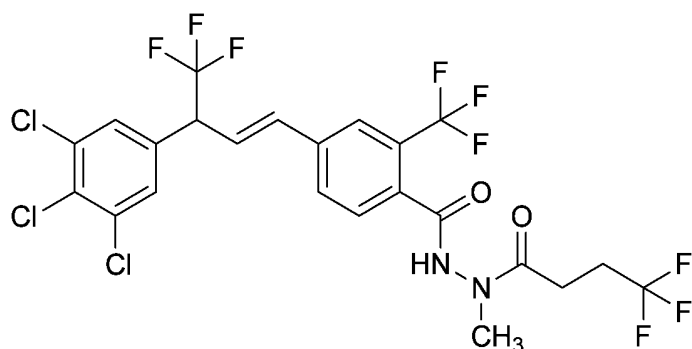
【0527】

以下の化合物は実施例28の手順に従って製造した。

(E)-N'-メチル-4-(4,4,4-トリフルオロ-3-(3,4,5-トリクロロフェニル)ブト-1-エン-1-イル)-N-(4,4,4-トリフルオロブタノイル)-2-(トリフルオロメチル)ベンゾヒドラジド (F23)

【0528】

【化155】



20

【0529】

表題化合物は4,4,4-トリフルオロブタン酸を使用して製造し、そして淡黄色ガム状物 (0.21 g、91%) として単離された。

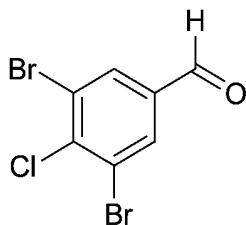
30

【0530】

実施例29: 3,5-ジブロモ-4-クロロベンズアルデヒド (C121) の製造

【0531】

【化156】



40

【0532】

段階1。メチル4-アミノ-3,5-ジブロモベンズエート (C118): 濃硫酸 (1.35 mL、25.5 mmol) をメタノール (50 mL) 中の4-アミノ-3,5-ジブロモ安息香酸 (5.00 g、17.0 mmol) の攪拌溶液に周囲温度で一滴ずつ添加し、そして該反応混合物をその後80℃で8時間攪拌した。該反応混合物を周囲温度に冷まさせ、揮発物を蒸発させ、氷水を残渣に添加しそして酢酸エチルで抽出した。有機層を水性重炭酸ナトリウム溶液次いで塩水および水で洗浄し、乾燥し (硫酸ナトリウム)、濾過しかつ濃縮して、表題化合物を灰白色固形物 (5.00 g、95%): ¹H NMR (

50

300 MHz、DMSO- d_6) δ 7.91 (s, 2H)、6.20 (bs, 2H)、3.78 (s, 3H); ESIMS m/z 307 ($[M]^+$); IR (薄膜) 3312、2953、1726、595 cm^{-1} として提供した。

【0533】

段階2。メチル3, 5-ジブromo-4-クロロベンゾエート (C119): アセトニトリル (30 mL) 中の塩化銅 (II) (2.82 g、21.0 mmol) を80℃で30分間攪拌した。亜硝酸tert-ブチル (2.70 mL、23.0 mmol) をその後同一温度で一滴ずつ添加し、そして該混合物を別の10分間攪拌した。アセトニトリル (30 mL) 中のメチル4-アミノ-3, 5-ジブromoベンゾエート (C118) (5.00 g、16.0 mmol) を該反応混合物に一滴ずつ添加し、そして80℃で30分間攪拌した。該反応混合物を周囲温度に冷まさせ、そして水性アンモニア溶液 (20 mL) を該反応混合物に添加し、次いで石油エーテルで抽出した。有機層を塩水次いで水で洗浄し、乾燥し (硫酸ナトリウム)、濾過しかつ濃縮して、表題化合物を灰白色固形物 (4.50 g、84%) : ^1H NMR (300 MHz、DMSO- d_6) δ 8.21 (s, 2H)、3.94 (s, 3H); ESIMS m/z 326 ($[M]^+$); IR (薄膜) 1732、746 cm^{-1} として提供した。

【0534】

段階3。(3, 5-ジブromo-4-クロロフェニル) メタノール (C120): ホウ水素化ナトリウム (1.53 g、40.7 mmol) を、0℃のメタノール (50 mL) 中のメチル3, 5-ジブromo-4-クロロベンゾエート (C119) (4.45 g、13.6 mmol) の攪拌溶液に一部分ずつ添加した。該反応混合物をその後周囲温度で8時間攪拌した。揮発物を蒸発させ、そして残渣をジクロロメタンで希釈しかつ塩水次いで水で洗浄した。有機層を乾燥し (硫酸ナトリウム)、濾過しかつ濃縮して、表題化合物を灰白色固形物 (3.30 g、80%) : ^1H NMR (300 MHz、DMSO- d_6) δ 7.71 (s, 2H)、5.49 (bs, 1H)、4.48 (d, $J=4.5$ Hz, 2H); ESIMS m/z 298 ($[M]^+$); IR (薄膜) 3460、747、534 cm^{-1} として提供した。

【0535】

段階4。3, 5-ジブromo-4-クロロベンズアルデヒド (C121): クロロクロム酸ピリジニウム (3.44 g、15.9 mmol) を、周囲温度でクロロホルム (40 mL) 中の (3, 5-ジブromo-4-クロロフェニル) メタノール (C120) (3.2 g、11.0 mmol) の攪拌溶液に一部分で添加し、そして該反応混合物を一夜攪拌した。該反応混合物をCelite (登録商標) で濾過し、Celite (登録商標) パッドをクロロホルムで洗浄しそして濾液を濃縮して、表題化合物を灰白色固形物 (2.00 g、62%) : mp 110–113℃; ^1H NMR (300 MHz、DMSO- d_6) δ 9.93 (s, 1H)、8.27 (s, 2H); ESIMS m/z 297 ($[M]^+$)として提供した。

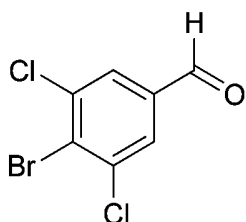
【0536】

以下の化合物は実施例29の手順に従って製造した。

4-ブromo-3, 5-ジクロロベンズアルデヒド (C125)

【0537】

【化157】



【0538】

段階 1。メチル 4-アミノ-3, 5-ジクロロベンゾエート (C 1 2 2)

表題化合物は白色固形物 (7. 5 g、70%) : ^1H NMR (300 MHz、DMSO- d_6) δ 8. 05 (s、2H)、3. 96 (s、3H) ; ESIMS m/z 282 ($[\text{M}]^+$) ; IR (KBr) : 1733、762、514 cm^{-1} として単離された。

段階 2。メチル 4-ブロモ-3, 5-ジクロロベンゾエート (C 1 2 3)

表題化合物は灰白色固形物 (7. 5 g、77%) : ^1H NMR (300 MHz、DMSO- d_6) δ 8. 02 (s、2H)、3. 94 (s、3H) ; ESIMS m/z 282 ($[\text{M}]^+$) ; IR (薄膜) 1733、762、514 cm^{-1} として単離された。

段階 3。(4-ブロモ-3, 5-ジクロロフェニル) メタノール (C 1 2 4)

表題化合物は灰白色固形物として単離され、これを精製なしに次の段階に使用した。

段階 4。4-ブロモ-3, 5-ジクロロベンズアルデヒド (C 1 2 5)

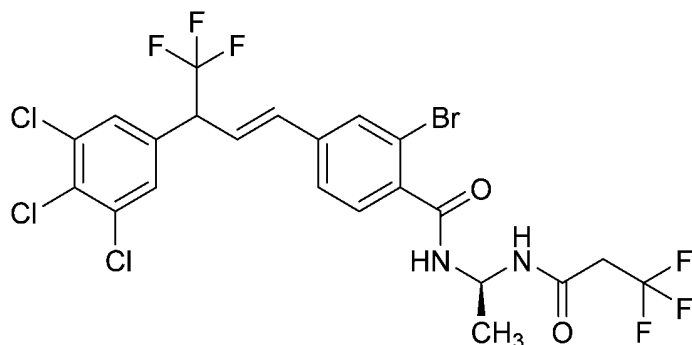
表題化合物は灰白色固形物 (3. 5 g、67%) : mp 125-128°C ; ^1H NMR (300 MHz、DMSO- d_6) δ 9. 96 (s、1H)、8. 10 (s、2H) ; ESIMS m/z 252 ($[\text{M}]^+$)として単離された。

【0539】

実施例 30 : 4-((E)-3-(3, 5-ジクロロ-4-フルオロフェニル)-4, 4, 4-トリフルオロブト-1-エン-1-イル)-2-(トリフルオロメチル)-N-((R)-1-(3, 3, 3-トリフルオロプロパンアミド) エチル) ベンズアミド (P 24) の製造

【0540】

【化158】



【0541】

窒素雰囲気下のバイアル (50 mL) に、(E)-2-ブロモ-4-(4, 4, 4-トリフルオロ-3-(3, 4, 5-トリクロロフェニル)ブト-1-エン-1-イル)安息香酸 (C 8 8) (0. 306 g、0. 626 mmol) および 1, 2-ジクロロエタン (2 mL) を添加した。塩化オキサリル (0. 100 mL、1. 17 mmol) および N, N-ジメチルホルムアミド (0. 00400 mL、0. 0510 mmol) を添加し、そして生じる懸濁液を 1 時間攪拌した。該反応混合物を濃縮していかなる過剰の塩化オキサリルも除去した。生じる橙色油状物を 1, 2-ジクロロエタン (5 mL) で希釈し、そして (S)-N-(1-アミノエチル)-3, 3, 3-トリフルオロプロパンアミド塩酸塩 (CA 5) (0. 168 g、0. 814 mmol) を含有するバイアル (25 mL) に添加した。該反応混合物をボルテックス攪拌し、そして 4-メチルモルホリン (0. 172 mL、1. 57 mmol) を添加した。該反応バイアルに蓋をし、そして 1 分の期間にわたり数回ボルテックス攪拌した。該反応混合物を、時々ボルテックス攪拌を伴い 1 時間攪拌させた。該反応混合物を窒素ガス流下で濃縮し、N, N-ジメチルホルムアミド : 水 (5 : 1、3. 2 mL) に溶解し、そして溶出液として 5-95% アセトニトリル (0. 1% 酢酸) および水 (0. 1% 酢酸) を使用する調製の C-18 逆相 HPLC 精製を介して部分的に精製した。得られた物質を、遊離塩基の形態 (IRA-67 遊離塩基) の過剰の Amberlite IRA-65 弱陰イオン交換樹脂を含有するメタノールに溶解し

、そして該混合物をボルテックス攪拌しかつ1時間静置するままにした。該混合物を重力濾過しそして樹脂を過剰のメタノールで洗浄した。濾液を濃縮して、所望の化合物を白色固形物(0.172 g、39%)として提供した。

【0542】

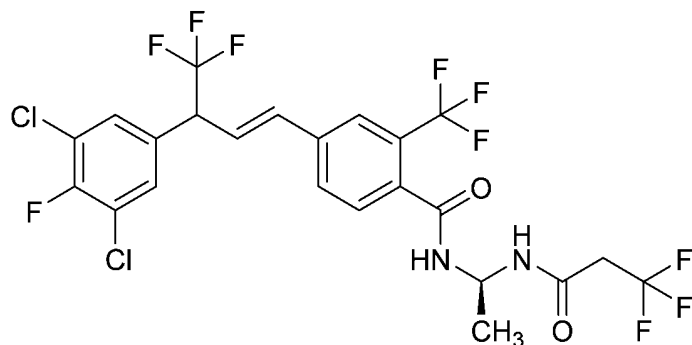
以下の化合物は実施例30の手順に従って製造した。

4-((E)-3-(3,5-ジクロロ-4-(トリフルオロメチル)フェニル)-4,4,4-トリフルオロブト-1-エン-1-イル)-2-(トリフルオロメチル)-N-((R)-1-(3,3,3-トリフルオロプロパンアミド)エチル)ベンズアミド(P1)

【0543】

【化159】

10



20

【0544】

琥珀色ガラス状物(0.041 g、10%)として単離された。

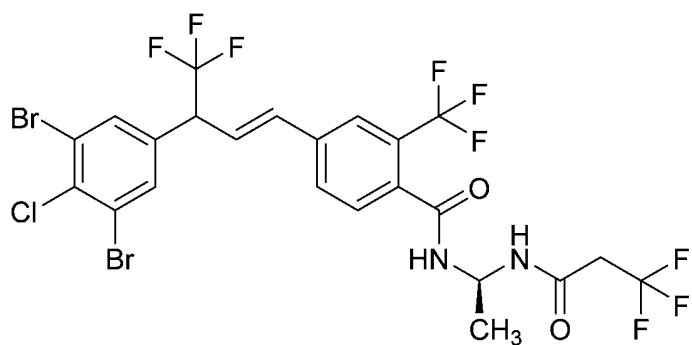
【0545】

4-((E)-3-(3,5-ジブロモ-4-クロロフェニル)-4,4,4-トリフルオロブト-1-エン-1-イル)-2-(トリフルオロメチル)-N-((R)-1-(3,3,3-トリフルオロプロパンアミド)エチル)ベンズアミド(P2)

【0546】

【化160】

30



【0547】

琥珀色ガラス状物(0.223 g、55%)として単離された。

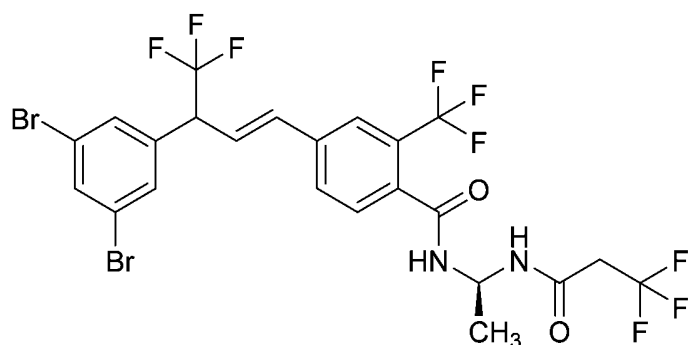
40

【0548】

4-((E)-3-(3,5-ジブロモフェニル)-4,4,4-トリフルオロブト-1-エン-1-イル)-2-(トリフルオロメチル)-N-((R)-1-(3,3,3-トリフルオロプロパンアミド)エチル)ベンズアミド(P3)

【0549】

【化 1 6 1】



10

【0 5 5 0】

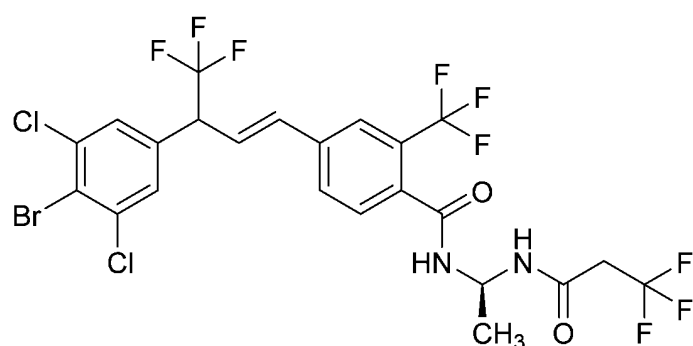
褐色無定形固形物（0.226 g、52%）として単離された。

【0 5 5 1】

4-((E)-3-(4-bromo-3,5-dichlorophenyl)-4,4,4-trifluorobut-1-en-1-yl)-2-(trifluoromethyl)-N-((R)-1-(3,3,3-trifluoropropylamido)ethyl)benzamide (P4)

【0 5 5 2】

【化 1 6 2】



20

【0 5 5 3】

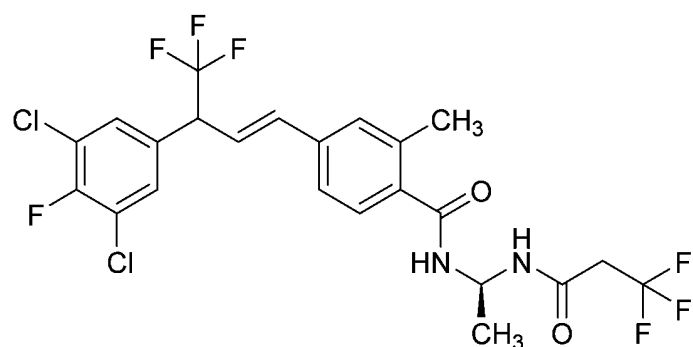
褐色無定形固形物（0.226 g、52%）として単離された。

【0 5 5 4】

4-((E)-3-(3,5-dichloro-4-fluorophenyl)-4,4,4-trifluorobut-1-en-1-yl)-2-methyl-N-((R)-1-(3,3,3-trifluoropropylamido)ethyl)benzamide (P5)

【0 5 5 5】

【化 1 6 3】



40

【0 5 5 6】

淡黄色ガラス状物（0.215 g、49%）として単離された。

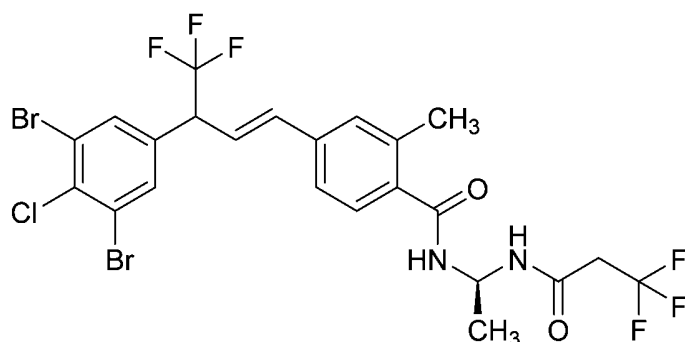
【0 5 5 7】

50

4-((E)-3-(3,5-ジブromo-4-クロロフェニル)-4,4,4-トリフルオロブト-1-エン-1-イル)-2-メチル-N-((R)-1-(3,3,3-トリフルオロプロパンアミド)エチル)ベンズアミド (P6)

【0558】

【化164】



10

【0559】

淡橙色ガラス状物 (0.211 g、49%) として単離された。

【0560】

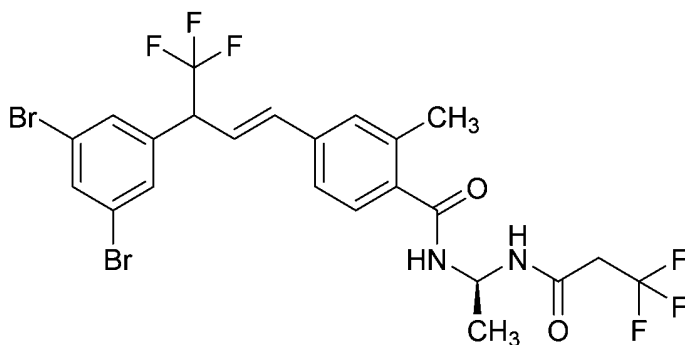
4-((E)-3-(3,5-ジブromoフェニル)-4,4,4-トリフルオロブト-1-エン-1-イル)-2-メチル-N-((R)-1-(3,3,3-トリフルオロプロ

20

パンアミド)エチル)ベンズアミド (P7)

【0561】

【化165】



30

【0562】

褐色無定形固形物 (0.226 g、54%) として単離された。

【0563】

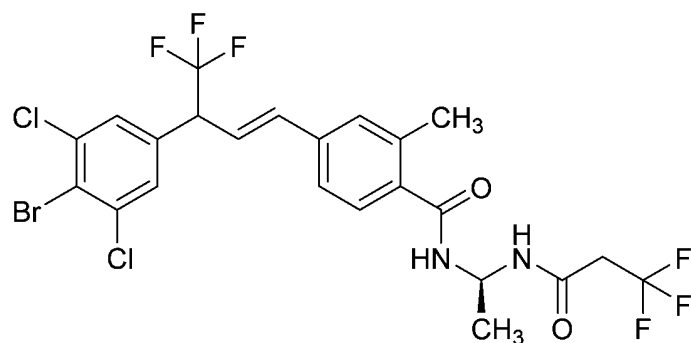
4-((E)-3-(4-bromo-3,5-ジクロロフェニル)-4,4,4-トリフルオロブト-1-エン-1-イル)-2-メチル-N-((R)-1-(3,3,3-トリフルオロプロ

パンアミド)エチル)ベンズアミド (P8)

【0564】

40

【化 1 6 6】



10

【0 5 6 5】

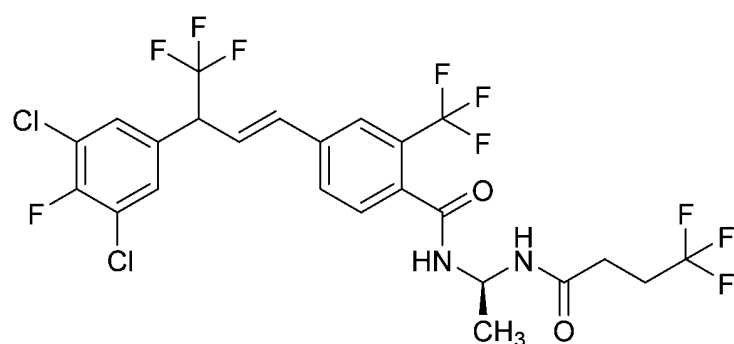
淡黄色固形物（0.148 g、35%）として単離された。

【0 5 6 6】

4-((E)-3-(3,5-dibromo-4-chlorophenyl)-4,4,4-trifluorobut-1-en-1-yl)-N-((R)-1-(4-methyl-2-((trifluoromethyl)amino)benzoyl)pyrrolidin-2-yl)pyrrolidine-2-carboxamide (P9)

【0 5 6 7】

【化 1 6 7】



20

【0 5 6 8】

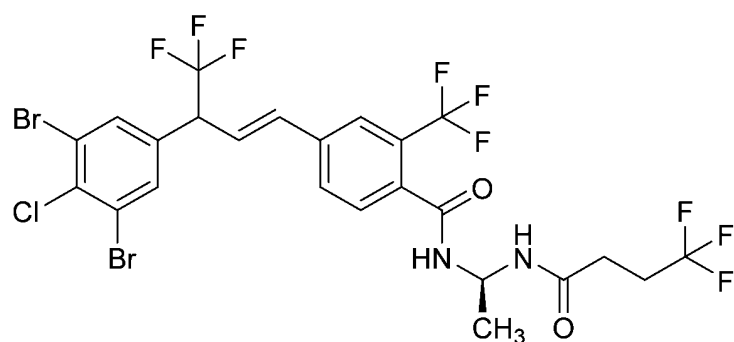
無色ガラス状物（0.036 g、8%）として単離された。

【0 5 6 9】

4-((E)-3-(3,5-dibromo-4-chlorophenyl)-4,4,4-trifluorobut-1-en-1-yl)-N-((R)-1-(4-methyl-2-((trifluoromethyl)amino)benzoyl)pyrrolidin-2-yl)pyrrolidine-2-carboxamide (P10)

【0 5 7 0】

【化 1 6 8】



40

【0 5 7 1】

淡黄色ガラス状物（0.171 g、39%）として単離された。

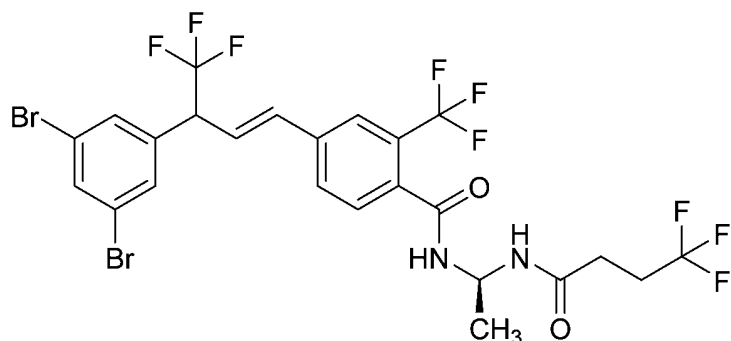
【0 5 7 2】

50

4-((E)-3-(3,5-ジブロモフェニル)-4,4,4-トリフルオロブト-1-エン-1-イル)-N-((R)-1-(4,4,4-トリフルオロブタンアミド)エチル)-2-(トリフルオロメチル)ベンズアミド (P11)

【0573】

【化169】



10

【0574】

琥珀色ガラス状物 (0.181 g、39%) として単離された。

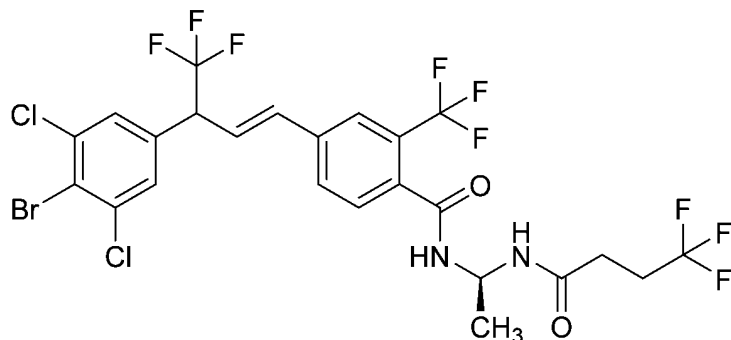
【0575】

4-((E)-3-(4-bromo-3,5-dichlorophenyl)-4,4,4-trifluorobut-1-en-1-yl)-N-((R)-1-(4,4,4-trifluorobutyl)ethyl)-2-(trifluoromethyl)benzamide (P12)

20

【0576】

【化170】



30

【0577】

橙色ガラス状物 (0.135 g、29%) として単離された。

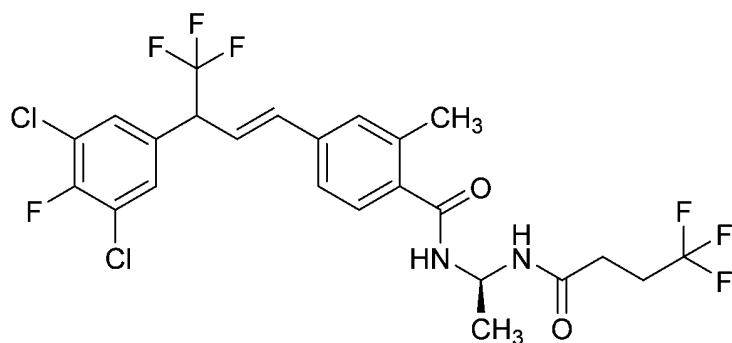
【0578】

4-((E)-3-(3,5-dichloro-4-fluorophenyl)-4,4,4-trifluorobut-1-en-1-yl)-N-methyl-N-((R)-1-(4,4,4-trifluorobutyl)ethyl)benzamide (P13)

【0579】

40

【化 1 7 1】



10

【0 5 8 0】

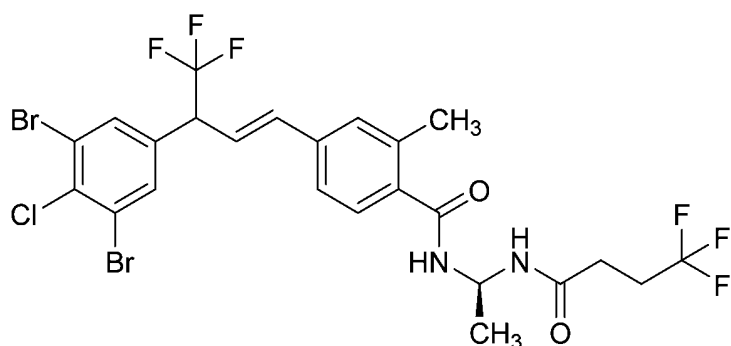
薄黄色固形物（0.197 g、42%）として単離された。

【0 5 8 1】

4-((E)-3-(3,5-ジブromo-4-クロロフェニル)-4,4,4-トリフルオロブト-1-エン-1-イル)-2-メチル-N-((R)-1-(4,4,4-トリフルオロブタンアミド)エチル)ベンズアミド (P14)

【0 5 8 2】

【化 1 7 2】



20

【0 5 8 3】

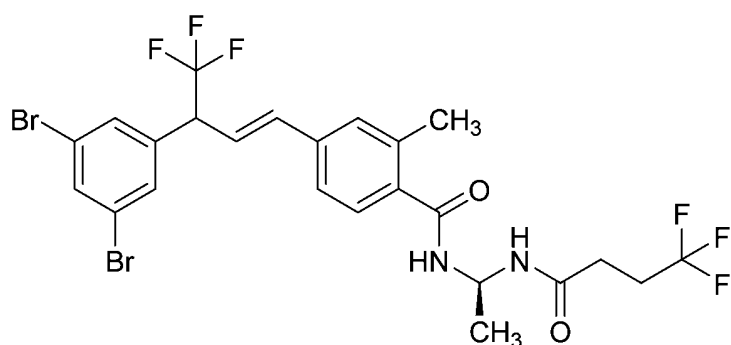
白色固形物（0.104 g、16%）として単離された。

【0 5 8 4】

4-((E)-3-(3,5-ジブromoフェニル)-4,4,4-トリフルオロブト-1-エン-1-イル)-2-メチル-N-((R)-1-(4,4,4-トリフルオロブタンアミド)エチル)ベンズアミド (P15)

【0 5 8 5】

【化 1 7 3】



40

【0 5 8 6】

ベージュ色固形物（0.150 g、33%）として単離された。

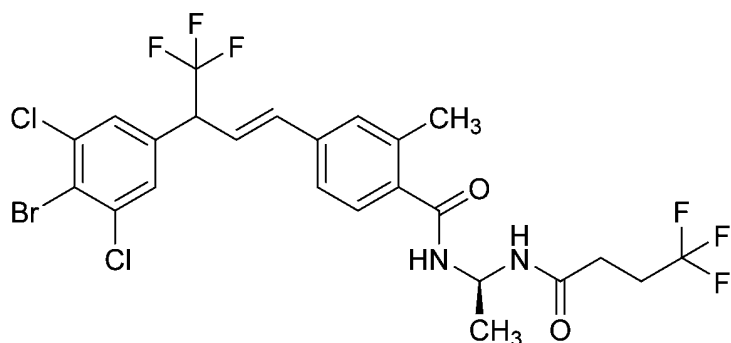
【0 5 8 7】

50

4-((E)-3-(4-bromo-3,5-dichlorophenyl)-4,4,4-trifluorobut-1-en-1-yl)-2-methyl-N-((R)-1-(4,4,4-trifluorobutyl)ethyl)benzamide (P16)

【0588】

【化174】



10

【0589】

白色固形物 (0.122 g、20%) として単離された。

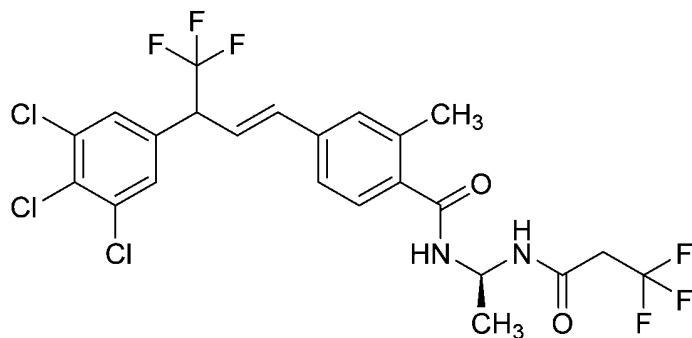
【0590】

2-methyl-4-((E)-4,4,4-trifluoro-3-(3,4,5-trichlorophenyl)but-1-en-1-yl)-N-((R)-1-(3,3,3-trifluorobutyl)ethyl)benzamide (P22)

20

【0591】

【化175】



30

【0592】

ベージュ色固形物 (0.241 g、52%) として単離された。

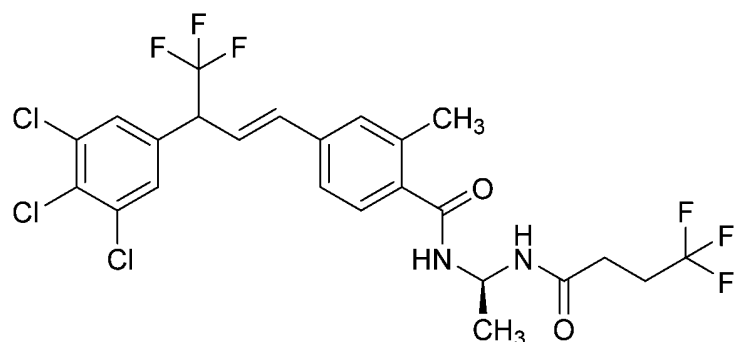
【0593】

2-methyl-4-((E)-4,4,4-trifluoro-3-(3,4,5-trichlorophenyl)but-1-en-1-yl)-N-((R)-1-(4,4,4-trifluorobutyl)ethyl)benzamide (P25)

【0594】

40

【化 1 7 6】



10

【0 5 9 5】

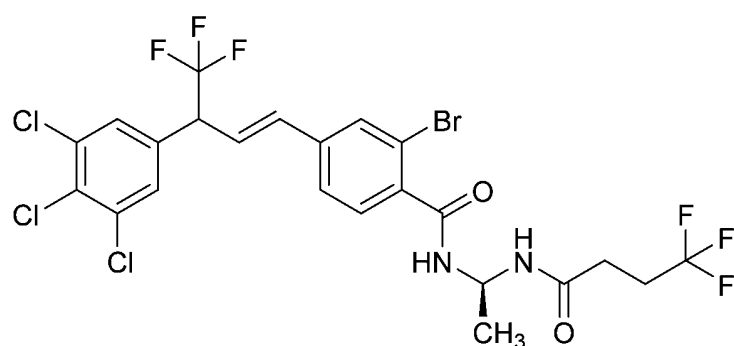
ベージュ色固形物（0.157 g、32%）として単離された。

【0 5 9 6】

2-ブロモ-4-((E)-4,4,4-トリフルオロ-3-(3,4,5-トリクロロフェニル)ブト-1-エン-1-イル)-N-((R)-1-(4,4,4-トリフルオロブタンアミド)エチル)ベンズアミド (P 2 7)

【0 5 9 7】

【化 1 7 7】



20

【0 5 9 8】

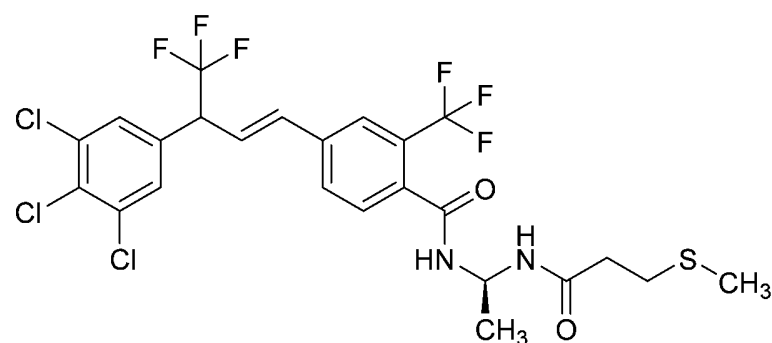
淡黄色固形物（0.110 g、24%）として単離された。

【0 5 9 9】

N-((R)-1-(3-(メチルチオ)プロパンアミド)エチル)-4-((E)-4,4,4-トリフルオロ-3-(3,4,5-トリクロロフェニル)ブト-1-エン-1-イル)-2-(トリフルオロメチル)ベンズアミド (P 5 3)

【0 6 0 0】

【化 1 7 8】



40

【0 6 0 1】

白色泡状物（0.225 g、36%）として単離された。

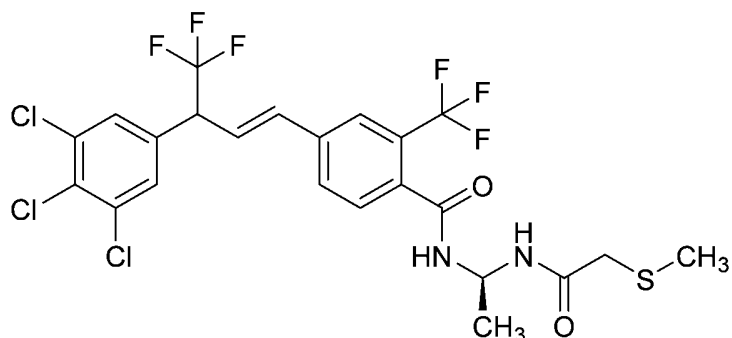
【0 6 0 2】

50

N-((S)-1-(2-(メチルチオ)アセトアミド)エチル)-4-(4,4,4-トリフルオロ-3-(3,4,5-トリクロロフェニル)ブト-1-エン-1-イル)-2-(トリフルオロメチル)ベンズアミド (P54)

【0603】

【化179】



10

【0604】

白色泡状物 (0.353 g、55%) として単離された。

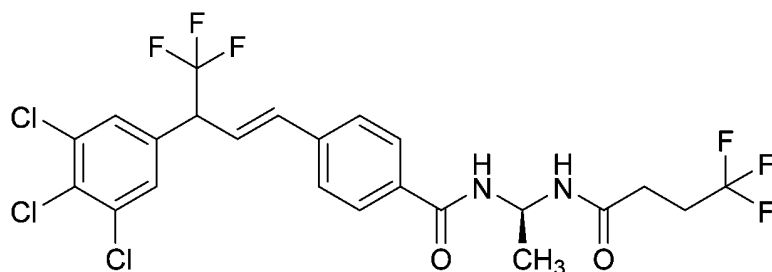
【0605】

4-(4-(E)-4,4,4-トリフルオロ-3-(3,4,5-トリクロロフェニル)ブト-1-エン-1-イル)-N-((R)-1-(4,4,4-トリフルオロブタンアミド)エチル)ベンズアミド (FC1)

20

【0606】

【化180】



30

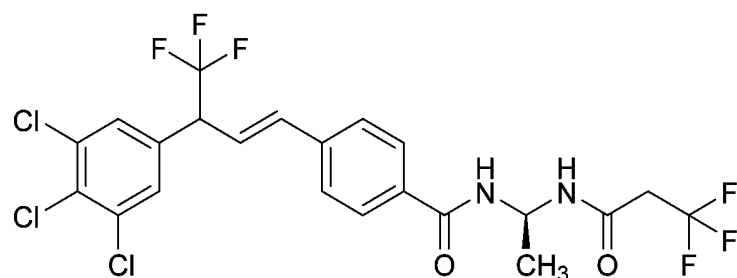
【0607】

黄色泡状物 (0.0423 g、40%、およそ30%純粋) として単離された。

4-(4-(E)-4,4,4-トリフルオロ-3-(3,4,5-トリクロロフェニル)ブト-1-エン-1-イル)-N-((R)-1-(3,3,3-トリフルオロプロパンアミド)エチル)ベンズアミド (FC2)

【0608】

【化181】



40

【0609】

白色固形物 (0.052 g、47%) として単離された。

【0610】

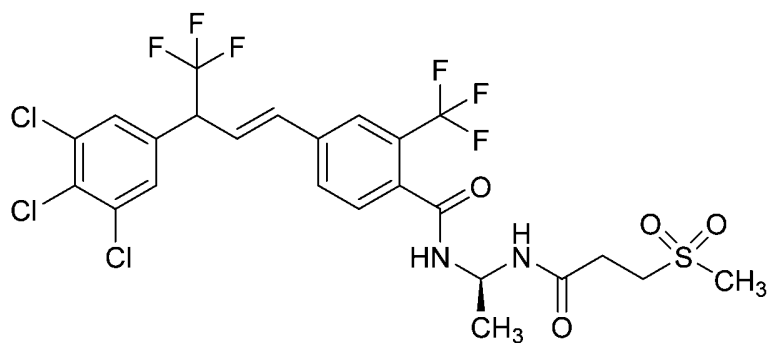
実施例31: N-((R)-1-(3-(メチルスルホニル)プロパンアミド)エチル

50

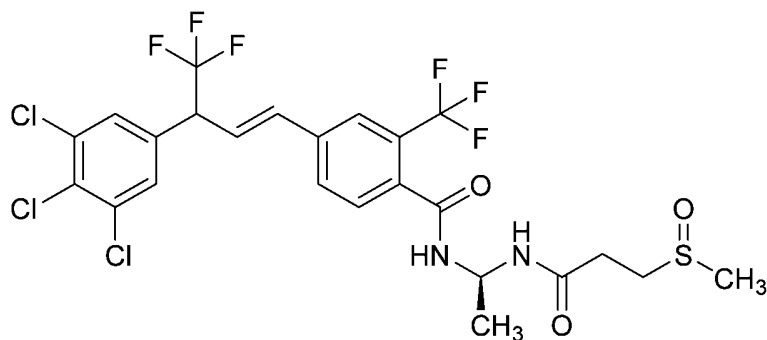
)-4-((E)-4,4,4-トリフルオロ-3-(3,4,5-トリクロロフェニル)ブト-1-エン-1-イル)-2-(トリフルオロメチル)ベンズアミド (P47) および N-((1R)-1-(3-(メチルスルフィニル)プロパンアミド)エチル)-4-((E)-4,4,4-トリフルオロ-3-(3,4,5-トリクロロフェニル)ブト-1-エン-1-イル)-2-(トリフルオロメチル)ベンズアミド (P49) の製造

【0611】

【化182】



P47



P49

【0612】

バイアル (25 mL) に、N-((R)-1-(3-(メチルチオ)プロパンアミド)エチル)-4-((E)-4,4,4-トリフルオロ-3-(3,4,5-トリクロロフェニル)ブト-1-エン-1-イル)-2-(トリフルオロメチル)ベンズアミド (P53) (0.150 g、0.241 mmol)、過ホウ酸ナトリウム四水和物 (0.0557 g、0.362 mmol) および酢酸 (5 mL) を添加した。バイアルに蓋をし、そして該反応を 55℃ で一夜攪拌かつ加熱した。該反応混合物を窒素ガス流下で濃縮した。溶出液として 20-100% 酢酸エチル/ヘキサン次いで 0-40% メタノール/ジクロロメタンを使用するフラッシュカラムクロマトグラフィーによる精製が、表題化合物 (P47) を無色ガラス状物 (0.0630 g、72%) としておよび (P49) を無色ガラス状物 (0.0360 g、42%) として提供した。

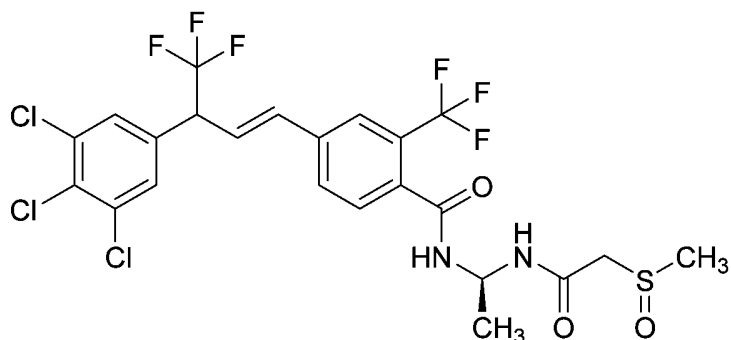
【0613】

以下の化合物は実施例 31 の手順に従って製造した。

N-((1S)-1-(2-(メチルスルフィニル)アセトアミド)エチル)-4-((E)-4,4,4-トリフルオロ-3-(3,4,5-トリクロロフェニル)ブト-1-エン-1-イル)-2-(トリフルオロメチル)ベンズアミド (P36)

【0614】

【化 1 8 3】



10

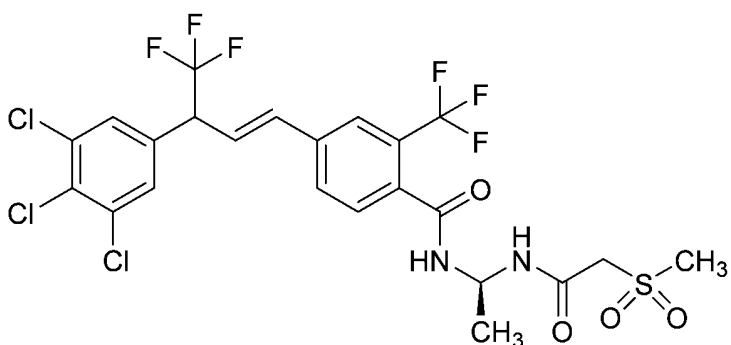
【0 6 1 5】

無色ガラス状物（0.054 g、34%）として単離された。

N-（（S）-1-（2-（メチルスルホニル）アセトアミド）エチル）-4-（（E）-4,4,4-トリフルオロ-3-（3,4,5-トリクロロフェニル）ブト-1-エン-1-イル）-2-（トリフルオロメチル）ベンズアミド（P43）

【0 6 1 6】

【化 1 8 4】



20

【0 6 1 7】

無色ガラス状物（0.138 g、85%）として単離された。

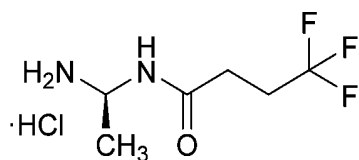
30

【0 6 1 8】

実施例 32：（S）-N-（1-アミノエチル）-4,4,4-トリフルオロブタンアミド塩酸塩（CA4）の製造

【0 6 1 9】

【化 1 8 5】



40

【0 6 2 0】

（S）-N-（1-アミノ-1-オキソプロパン-2-イル）-4,4,4-トリフルオロブタンアミド（CA6）（3.00 g、14.1 mmol）を水（21 mL）およびアセトニトリル（21 mL）に溶解し、その後[I, I-ビス（トリフルオロアセトキシ）ヨード]ベンゼン（6.08 g、14.1 mmol）を添加した。該反応混合物をアルミニウム箔に包まれたフラスコ中で一夜攪拌した。該反応混合物をその後塩酸（1 N、35 mL）およびジエチルエーテル（35 mL）中に注いだ。有機層を分離し、そして水層をイソプロパノールと共沸させた（2×125 mL）。溶出液として20%アセトニトリル／水を使用する逆相フラッシュカラムクロマトグラフィーによる精製が、表題化合物を

50

白色の高度に吸湿性の固形物（1.50 g、48%）： ^1H NMR（400 MHz、 $\text{DMSO}-d_6$ ） δ 9.11（d、 $J=7.4$ Hz、1H）、8.36（s、3H）、4.94（p、 $J=6.6$ Hz、1H）、2.66–2.32（m、4H）、1.40（d、 $J=6.5$ Hz、3H）； ^{19}F NMR（376 MHz、 $\text{DMSO}-d_6$ ） δ –65.19；ESI MS m/z 185（ $[\text{M}+\text{H}]^+$ ）として提供した。

【0621】

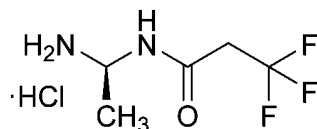
以下の化合物は実施例32の手順に従って製造した。

（S）-N-（1-アミノエチル）-3,3,3-トリフルオロプロパンアミド塩酸塩（CA5）

【0622】

10

【化186】



【0623】

灰白色固形物（2.8 g、90%）：mp 125°C（分解）； ^1H NMR（400 MHz、 $\text{DMSO}-d_6$ ） δ 9.47（d、 $J=7.3$ Hz、1H）、8.48（s、3H）、4.96（p、 $J=6.6$ Hz、1H）、3.44（m、2H）、1.42（d、 $J=6.5$ Hz、3H）； ^{19}F NMR（376 MHz、 $\text{DMSO}-d_6$ ） δ –61.28として単離された。

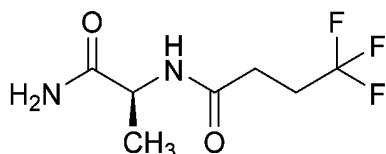
20

【0624】

実施例33：（S）-N-（1-アミノ-1-オキソプロパン-2-イル）-4,4,4-トリフルオロブタンアミド（CA6）の製造

【0625】

【化187】



30

【0626】

丸底フラスコ（500 mL）に、重炭酸ナトリウム（飽和溶液、54.6 mL、60.1 mmol）および（S）-2-アミノプロパンアミド塩酸塩（3.74 g、30.0 mmol）を添加した。該溶液を、気体発生が終了するまで攪拌させ、その時間の後にトリフルオロエタノール（54.6 mL）を添加した。塩化3,3,3-トリフルオロプロパノイル（2.81 mL、27.3 mmol）を小部分で添加した（気体発生）。添加速度はガス発生の速度により決定した。添加が完了した後に該反応混合物を室温で一夜空気に開放して攪拌するままにした。塩酸（2 M、約15 mL）を気体発生が終了するまで添加しそして該溶液を濃縮した。生じるスラリーを酢酸エチルおよび水で希釈し、層を分離し、そして水層を酢酸エチル（3×100 mL）で抽出した。生じる有機層を硫酸ナトリウムで乾燥し、濾過しかつ濃縮して、表題化合物を白色固形物（3.30 g、55%）： ^1H NMR（300 MHz、 $\text{DMSO}-d_6$ ） δ 8.15（d、 $J=7.6$ Hz、1H）、7.33（s、1H）、6.98（s、1H）、4.21（p、 $J=7.2$ Hz、1H）、2.49–2.34（m、4H）、1.19（d、 $J=7.1$ Hz、3H）； ^{19}F NMR（376 MHz、 $\text{DMSO}-d_6$ ） δ –61.46；ESI MS m/z 197（ $[\text{M}-\text{H}]^-$ ）として提供した。

40

【0627】

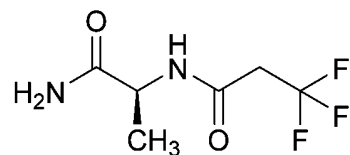
以下の化合物は実施例33の手順に従って製造した。

50

(S)-N-(1-アミノ-1-オキソプロパン-2-イル)-3,3,3-トリフルオ
ロプロパンアミド (CA7)

【0628】

【化188】



【0629】

10

白色固形物 (1.5 g、39%) : ^1H NMR (400 MHz、DMSO- d_6) δ 8.38 (d、 $J=7.6$ Hz、1H)、7.43 (s、1H)、7.04 (s、1H)、4.25 (p、 $J=7.1$ Hz、1H)、3.32 (q、 $J=11.3$ Hz、2H)、1.20 (d、 $J=7.1$ Hz、3H) ; ^{19}F NMR (376 MHz、DMSO- d_6) δ -65.18として単離された。

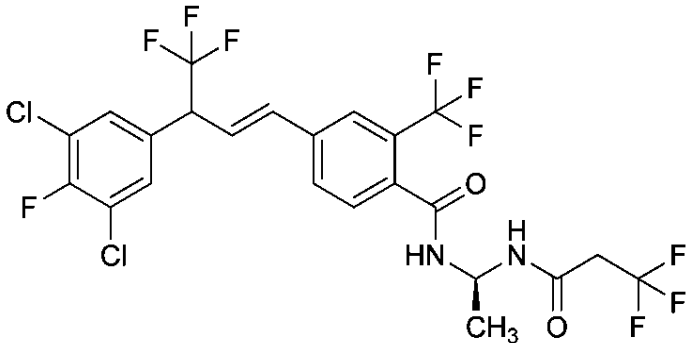
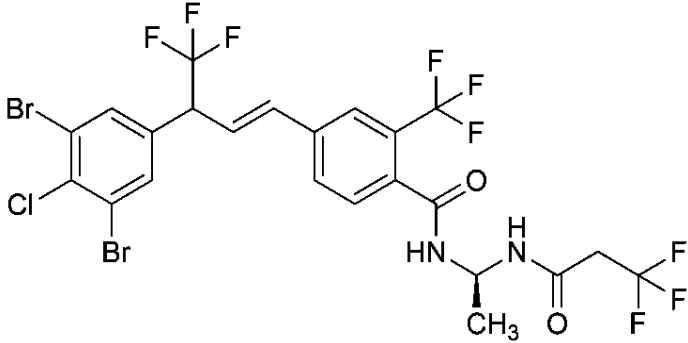
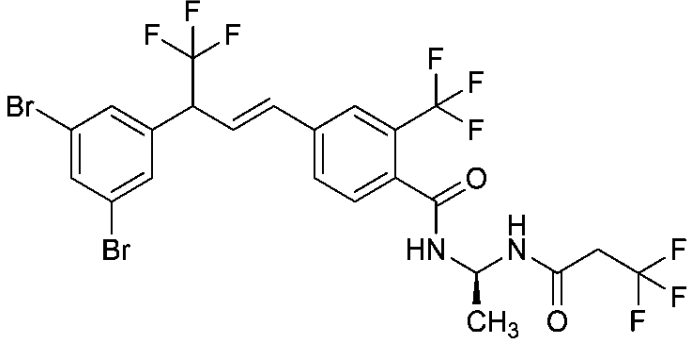
【0630】

以下の予言的分子は上に開示される手順に従って作成し得る：

【0631】

【表 1 - 1】

表 1. P 系列の化合物の構造および製造方法

番号	構造	製造法 従った実施 例若しくは スキーム:
P1		実施例 18
P2		実施例 18
P3		実施例 18

【表 1 - 2】

P4		実施例 18	10
P5		実施例 18	20
P6		実施例 18	30
P7		実施例 18	40

【 0 6 3 3 】

【表 1 - 3】

P8		実施例 18	10
P9		実施例 18	20
P10		実施例 18	30
P11		実施例 18	40

【 0 6 3 4】

【表 1 - 4】

P12		実施例 18
P13		実施例 18
P14		実施例 18
P15		実施例 18

【 0 6 3 5 】

【表 1 - 5】

P16		実施例 18
P17		スキーム 4
P18		スキーム 4
P19		スキーム 4

【 0 6 3 6 】

【表 1 - 6】

P20		スキーム 4
P21		スキーム 4
P22		実施例 18
P23		実施例 18

【 0 6 3 7 】

【表 1 - 7】

P24		実施例 18	10
P25		実施例 18	20
P26		実施例 18	30
P27		実施例 18	40

【 0 6 3 8 】

P28		実施例 18、 19、20 若しくは 21
P29		実施例 18、 19、20 若しくは 21
P30		実施例 18、 19、20 若しくは 21
P31		実施例 18、 19、20 若しくは 21

【 0 6 3 9 】

【表 1 - 9】

P32		実施例 18、 19、20 若しくは 21	10
P33		実施例 18、 19、20 若しくは 21	20
P34		実施例 18、 19、20 若しくは 21	30
P35		実施例 18、 19、20 若しくは 21	40

【 0 6 4 0 】

【表 1 - 1 0】

P36		実施例 18、 19、20 若しく は 21	10
P37		実施例 18、 19、20 若しく は 21	20
P38		実施例 18、 19、20 若しく は 21	30
P39		実施例 18、 19、20 若しく は 21	40

【 0 6 4 1】

【表 1 - 1 1】

P40		実施例 18、 19、20 若しくは 21	10
P41		実施例 18、 19、20 若しくは 21	20
P42		実施例 18、 19、20 若しくは 21	30
P43		実施例 18、 19、20 若しくは 21	40

【 0 6 4 2 】

【表 1 - 1 2】

P44		実施例 18、 19、20 若しく は 21	10
P45		実施例 18、 19、20 若しく は 21	20
P46		実施例 18、 19、20 若しく は 21	30
P47		実施例 18、 19、20 若しく は 21	40

【 0 6 4 3 】

【表 1 - 1 3】

P48		実施例 18、 19、20 若しくは 21	10
P49		実施例 18、 19、20 若しくは 21	20
P50		実施例 18、 19、20 若しくは 21	30
P51		実施例 18、 19、20 若しくは 21	40

【 0 6 4 4 】

【表 1 - 1 4】

P52		実施例 18、 19、20 若しくは 21	10
P53		実施例 18、 19、20 若しくは 21	20
P54		実施例 18、 19、20 若しくは 21	30

【 0 6 4 5】

実施例 A：シロイチモジヨトウ（「BAW」）およびイラクサギンウワバ（「CL」）でのバイオアッセイ

BAWは、その集団を減少させるための有効な寄生生物、疾患若しくは捕食生物をほとんど有しない。BAWは多くの雑草、樹木、草、マメおよび農作物にはびこる。多様な場所で、それは、他の植物のなかでもアスパラガス、ワタ、トウモロコシ、ダイズ、タバコ、アルファルファ、サトウダイコン、コショウ、トマト、ジャガイモ、タマネギ、エンドウ（peas）、ヒマワリおよび柑橘類に対する経済的関心事である。CEWはトウモロコシおよびトマトを攻撃することが既知であるが、しかし、それは、他の植物のなかでもアーティチョーク、アスパラガス、キャベツ、カンタロープ、コラード、ササゲ、キュウリ、ナス、レタス、ライマメ、メロン、オクラ、エンドウ（peas）、コショウ、ジャガイモ、カボチャ（pumpkin）、サヤマメ（snap beans）、ハウレンソウ、カボチャ（squash）、サツマイモおよびスイカもまた攻撃する。CEWはある種の殺虫剤に対し耐性であることもまた知られている。CLは広範な栽培植物および雑草を常食とする。それは容易にアブラナ科植物を常食とし、そしてブロッコリー、キャベツ、カリフラワー、ハクサイ、コラード、ケール、カラシ、ラディッシュ、ルタバガ、カブおよびクレソンに損傷を与えることが報告されている。損傷される他の野菜作物は、ビート、カンタロープ、セロリ、キュウリ、ライマメ、レタス、アメリカボウフウ、エンドウ

10

20

30

40

50

(p e a)、コショウ、ジャガイモ、サヤマメ (s n a p b e a n)、ホウレンソウ、カボチャ (s q u a s h)、サツマイモ、トマトおよびスイカを包含する。C Lもまたある種の殺虫剤に対し耐性であることが知られている。結果、上の要因により、これら病害虫の防除が重要である。さらに、これら病害虫を防除する分子は他の病害虫の防除において有用である。

【0646】

本文書に開示されるある種の分子を、以下の実施例に記述される手順を使用してB A WおよびC E WならびにC Lに対し試験した。結果の報告において、「B A WおよびC L評価の表」を使用した(表の節を参照されたい)。

【0647】

B A W (シロイチモジヨトウ (S p o d o p t e r a e x i g u a))でのバイオアッセイ

B A Wでのバイオアッセイは128ウェルダイエットトレイアッセイを使用して実施した。1ないし5匹の第二齢B A W幼虫を、(50 μ Lの90:10 アセトン-水混合物に溶解された) 50 μ g / c m²の試験化合物が(8ウェルのそれぞれに)適用されかつその後乾燥させられていた、1 mLの人工餌で事前に満たされていたダイエットトレイの各ウェル(3 mL)中に置いた。トレイを透明な自己接着性カバーで覆いかつ25℃、14:10の明-暗で5ないし7日間保持した。死亡パーセントを各ウェル中の幼虫について記録し; 8ウェル中の活性をその後平均した。結果は「表A B C:アッセイ結果(F)」、「表A B C D:アッセイ結果(C)」および「表A B C D E:アッセイ結果(P)」と題された表に示す(表の節を参照されたい)。

【0648】

C L (イラクサギンウワバ (T r i c h o p l u s i a n i))でのバイオアッセイ

C Lでのバイオアッセイは128ウェルダイエットトレイアッセイを使用して実施した。1ないし5匹の第二齢C L幼虫を、(50 μ Lの90:10 アセトン-水混合物に溶解された) 50 μ g / c m²の試験化合物が(8ウェルのそれぞれに)適用されかつその後乾燥させられていた、1 mLの人工餌で事前に満たされていたダイエットトレイの各ウェル(3 mL)中に置いた。トレイを透明な自己接着性カバーで覆いかつ25℃、14:10の明-暗で5ないし7日間保持した。死亡パーセントを各ウェル中の幼虫について記録し; 8ウェル中の活性をその後平均した。結果は「表A B C:アッセイ結果(F)」、「表A B C D:アッセイ結果(C)」および「表A B C D E:アッセイ結果(P)」と題された表に示す(表の節を参照されたい)。

【0649】

実施例B:モモアカアブラムシ(「G P A」)(モモアカアブラムシ (M y z u s p e r s i c a e))でのバイオアッセイ。

【0650】

G P Aはモモの木のも最も重大なアブラムシ病害虫であり、低下された成長、葉のしぼみおよび多様な組織の死を引き起こす。それがナス科のナス属植物/ジャガイモのメンバーへのジャガイモウイルスYおよびジャガイモ葉巻き病ウイルスのような植物ウイルス、ならびに多くの他の食用作物への多様なモザイクウイルスの輸送の媒介物として作用するため、それはまた危険でもある。G P Aは、他の植物のなかでもブロッコリー、ゴボウ、キャベツ、ニンジン、カリフラワー、ダイコン、ナス、サヤインゲン (g r e e n b e a n s)、レタス、マカダミア、パパイヤ、コショウ、サツマイモ、トマト、ミズガラシおよびズッキーニのような植物を攻撃する。G P Aはまた、カーネーション、キク、ハボタン (f l o w e r i n g w h i t e c a b b a g e)、ポインセチアおよびバラのような多くの観賞作物も攻撃する。G P Aは多くの殺虫剤に対する耐性を発生している。

【0651】

本文書に開示されるある種の分子を、以下の実施例に記述される手順を使用してG P Aに対し試験した。結果の報告において、「G P AおよびY F M評価の表」を使用した(表の節を参照されたい)。

【0652】

2～3枚の小（3～5 cm）本葉をもつ3インチ鉢中で生育されたキャベツ種苗を試験支持体として使用した。種苗に、化学物質適用1日前に20～50匹のGPA（無翅成虫および若虫段階）をはびこらせた。個別の種苗を含む4個の鉢を各処理に使用した。試験化合物（2 mg）を2 mLのアセトン／MeOH（1：1）溶媒に溶解して1000 ppmの試験化合物のストック溶液を形成した。ストック溶液を水中0.025% Tween 20で5倍希釈して200 ppmの試験化合物の溶液を得た。携帯式吸引器型噴霧器を、液体流出までキャベツ葉の両側に溶液を噴霧するために使用した。参照植物（溶媒確認）は、20容量%のアセトン／MeOH（1：1）溶媒のみを含有する希釈液を噴霧した。処理された植物は、等級分類する前におよそ25℃および周囲相対湿度（RH）で保持室に3日間保持した。評価は植物あたりの生存アブラムシの数を顕微鏡下で計数することにより実施した。防除パーセントを、後に続くところのAbbottの補正式（W. S. Abbott, “A Method of Computing the Effectiveness of an Insecticide” J. Econ. Entomol. 18（1925）、pp. 265–267）を使用することにより測定した。補正防除 $\% = 100 \times (X - Y) / X$ 式中X＝溶媒確認植物上の生存アブラムシの数、およびY＝処理された植物上の生存アブラムシの数。結果は「表ABC：アッセイ結果（F）」および「表ABCD：アッセイ結果（C）」と題された表に示す（表の節を参照されたい）。

10

【0653】

実施例C：ネッタイシマカ「YFM」（ネッタイシマカ（Aedes aegypti））でのバイオアッセイ

20

YFMは日中ヒトを餌にすることを好み、そして最も頻繁にはヒト住居地中若しくはその近くで見出される。YFMは数種の疾患を伝播するための媒介物である。それはデング熱および黄熱病のウイルスを蔓延させ得る蚊である。黄熱病はマラリアの後の第二の最も危険な蚊に運ばれる疾患である。黄熱病は急性ウイルス性出血性疾患であり、そして治療を伴わない重度に冒された人の50%までが黄熱病で死亡することができる。毎年、世界で推定される20万症例の黄熱病が存在し、3万の死亡を引き起こす。デング熱はやっかいなウイルス性疾患であり；それが生じ得る強い痛みのため、それはときに「骨折熱」若しくは「心臓破り熱」と呼ばれる。デング熱は1年に約2万の人々を殺す。結果、上の要因によりこの病虫害の防除が重要である。さらに、吸引力病虫害として知られるこの病虫害（YFM）を防除する分子は、ヒトおよび動物の疾病を引き起こす他の病虫害の防除において有用である。

30

【0654】

本文書に開示されるある種の分子を、以下の段落に記述される手順を使用してYFMに対し試験した。結果の報告において、「GPAおよびYFM評価の表」を使用した（表の節を参照されたい）。

【0655】

100 μLのジメチルスルホキシド（DMSO）に溶解された400 μgの分子を含有する（4000 ppmの溶液に同等）マスタープレートを使用する。集成された分子のマスタープレートはウェルあたり15 μLを含有する。このプレートに、135 μLの90：10 水：アセトン混合物を各ウェルに添加する。ロボット（Biomek（登録商標）NXPLaboratory Automation Workstation）を、マスタープレートから空の96ウェル浅型プレート（「嬢」プレート）に15 μLの吸引を分注するようプログラムする。マスターあたり創成される6個の複製物（「嬢」プレート）が存在する。創成される嬢プレートにその後直ちにYFM幼虫をはびこらせる。プレートを処理するはずである前の日に、蚊の卵を肝粉末を含有するMillipore水中に置いて孵化を開始させる（4 gを400 mL中に）。嬢プレートをロボットを使用して創成した後に、それらに220 μLの肝粉末／幼虫の蚊の混合物（約1日齢幼虫）をはびこらせる。プレートに蚊の幼虫をはびこらせた後に、非蒸発性蓋を使用してプレートを

40

50

覆い乾燥を低減する。プレートは等級分類する前に3日間室温で保持する。3日後に各ウェルを観察し、そして死亡率に基づき点数を付ける。結果は「表A B C：アッセイ結果（F）」および「表A B C D：アッセイ結果（C）」と題される表に示す（表の節を参照されたい）。

【0656】

農業的に許容できる酸付加塩、塩誘導体、溶媒和物、エステル誘導体、多形、同位体および放射性核種

式1の分子は農業的に許容できる酸付加塩に配合しうる。制限しない例として、アミン官能性は、塩酸、臭化水素酸、硫酸、リン酸、酢酸、安息香酸、クエン酸、マロン酸、サリチル酸、リンゴ酸、フマル酸、シュウ酸、コハク酸、酒石酸、乳酸、グルコン酸、アスコルビン酸、マレイン酸、アスパラギン酸、ベンゼンスルホン酸、メタンスルホン酸、エタンスルホン酸、ヒドロキシメタンスルホン酸およびヒドロキシエタンスルホン酸と塩を形成し得る。加えて、制限しない例として、酸官能性は、アルカリ若しくはアルカリ土類金属に由来するものならびにアンモニアおよびアミンに由来するものを包含する塩を形成し得る。好ましい陽イオンの例はナトリウム、カリウムおよびマグネシウムを包含する。

10

【0657】

式1の分子は塩誘導体に配合しうる。制限しない例として、塩誘導体は、遊離塩基を十分な量の所望の酸と接触させて塩を生じさせることにより製造し得る。遊離塩基は、希薄水性水酸化ナトリウム（NaOH）、炭酸カリウム、アンモニアおよび重炭酸ナトリウムのような適する希薄水性塩基溶液で塩を処理することにより再生させうる。一例として、多くの場合、2，4-Dのような農薬は、それをそのジメチルアミン塩に転化することにより、より水溶性にされる。

20

【0658】

式1の分子は溶媒との安定な複合体に配合することができ、その結果複合体形成されない溶媒が除去された後に複合体が無傷のまま留まる。これら複合体はしばしば「溶媒和物」と称される。しかしながら、溶媒としての水と安定な水和物を形成することがとりわけ望ましい。

【0659】

式1の分子はエステル誘導体にすることができる。これらエステル誘導体はその場合、本文書に開示される本発明が適用されると同一の様式で適用し得る。

30

【0660】

式1の分子は多様な結晶多形として作成しうる。同一分子の異なる結晶多形若しくは構造は大きく異なる物理特性および生物学的性能を有し得るため、多形は農薬の開発で重要である。

【0661】

式1の分子は多様な同位体を用いて作成しうる。 ^1H の代わりに ^2H （重水素としてもまた知られる）を有する分子がとりわけ重要である。

【0662】

式1の分子は多様な放射性核種を用いて作成しうる。 ^{14}C を有する分子がとりわけ重要である。

40

【0663】

立体異性体

式1の分子は1種若しくはそれ以上の立体異性体として存在しうる。従って、ある種の分子はラセミ混合物として製造し得る。1種の立体異性体が他の立体異性体より活性でありうるということが当業者により認識されるであろう。個々の立体異性体は、既知の選択的合成手順により、分割された出発原料を使用する慣習的合成手順により、若しくは慣習的分割手順により得ることができる。本文書に開示されるある種の分子は2種若しくはそれ以上の異性体として存在し得る。多様な異性体は幾何異性体、ジアステレオマーおよび鏡像異性体を包含する。従って、本文書に開示される分子は、幾何異性体、ラセミ混合物、個別の立体異性体および光学活性の混合物を包含する。1種の異性体が他者より活性でありう

50

ることが当業者により認識されるであろう。本開示に開示される構造は明快さのためただ1つの幾何学的形態で描かれるが、しかし該分子の全部の幾何学的形態を表すことを意図している。

【0664】

組合せ

式1の分子は、ダニ駆除、殺藻、殺鳥、殺菌、防カビ、除草、殺虫、軟体類駆除、殺線虫、殺鼠若しくは殺ウイルス特性を有する1種若しくはそれ以上の化合物と組合せで（1種の組成混合物中で、または同時若しくは逐次適用でのような）もまた使用しうる。加えて、式1の分子は、摂食阻害剤、鳥類忌避剤、化学殺菌剤、除草剤毒性緩和剤、昆虫誘引物質、昆虫忌避剤、哺乳動物忌避剤、交信攪乱剤、植物活性化物質、植物成長調節剤若しくは共力剤である化合物と組合せで（1種の組成混合物中で、または同時若しくは逐次適用でのような）もまた使用しうる。式1の分子とともに使用しうる上の群のこうした化合物の例は、臭化（3-エトキシプロピル）水銀、1, 2-ジクロロプロパン、1, 3-ジクロロプロペン、1-メチルシクロプロペン、1-ナフトール、2-（オクチルチオ）エタノール、2, 3, 5-トリヨード安息香酸、2, 3, 6-TBA、2, 3, 6-TBAジメチルアンモニウム塩、2, 3, 6-TBALiチウム塩、2, 3, 6-TBAカリウム塩、2, 3, 6-TBANaナトリウム塩、2, 4, 5-T、2, 4, 5-T2-ブトキシプロピル、2, 4, 5-T2-エチルヘキシル、2, 4, 5-T3-ブトキシプロピル、2, 4, 5-TB、2, 4, 5-Tブトメチル、2, 4, 5-Tブトチル、2, 4, 5-Tブチル、2, 4, 5-Tイソブチル、2, 4, 5-Tイソクチル（isooctyl）、2, 4, 5-Tイソプロピル、2, 4, 5-Tメチル、2, 4, 5-Tペンチル、2, 4, 5-Tナトリウム塩、2, 4, 5-Tトリエチルアンモニウム塩、2, 4, 5-Tトロラミン、2, 4-D、2, 4-D2-ブトキシプロピル、2, 4-D2-エチルヘキシル、2, 4-D3-ブトキシプロピル、2, 4-Dアンモニウム塩、2, 4-DB、2, 4-DBブチル、2, 4-DBジメチルアンモニウム塩、2, 4-DBイソクチル、2, 4-DBカリウム塩、2, 4-DBナトリウム塩、2, 4-Dブトチル、2, 4-Dブチル、2, 4-Dジエチルアンモニウム塩、2, 4-Dジメチルアンモニウム塩、2, 4-Dジオラミン、2, 4-Dドデシルアンモニウム塩、2, 4-DEB、2, 4-DEP、2, 4-Dエチル、2, 4-Dヘブチルアンモニウム塩、2, 4-Dイソブチル、2, 4-Dイソクチル、2, 4-Dイソプロピル、2, 4-Dイソプロピルアンモニウム塩、2, 4-Dリチウム塩、2, 4-Dメブチル、2, 4-Dメチル、2, 4-Dオクチル、2, 4-Dペンチル、2, 4-Dカリウム塩、2, 4-Dプロピル、2, 4-Dナトリウム塩、2, 4-Dテフリル、2, 4-Dテトラデシルアンモニウム塩、2, 4-Dトリエチルアンモニウム塩、2, 4-Dトリス（2-ヒドロキシプロピル）アンモニウム塩、2, 4-Dトロラミン、2 i P、塩化2-メトキシエチル水銀、2-フェニルフェノール、3, 4-DA、3, 4-DB、3, 4-DP、4-アミノピリジン、4-CPA、4-CPAカリウム塩、4-CPANaナトリウム塩、4-CPB、4-CP P、4-ヒドロキシフェネチルアルコール、8-ヒドロキシキノリン硫酸塩、8-フェニルマーキュリオキシキノリン（phenylmercurioxyquinoline）、アバメクチン、アブシジン酸、ACC、アセフェート、アセキノシル、アセタミプリド、アセチオン、アセトクロール、アセトホス、アセトプロール、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メチル、アシフルオルフェンナトリウム塩、アクロニフェン、アクレップ（acrep）、アクリナトリン、アクロレイン、アクリロニトリル、アシペタックス、アシペタックス銅、アシペタックス亜鉛、アラクロール、アラニカルブ、アルベンダゾール、アルジカルブ、アルジモルフ、アルドキシカルブ、アルドリン、アレスリン、アリシン、アリドクロール、アロサミジン、アロキシジウム、アロキシジウムナトリウム、アリルアルコール、アリキシカルブ、アロラック、アルファシペルメトリン、アルファエンドスルファン、アメトクトラジン、アメトリジオン、アメトリン、アミブジン、アミカルバゾン、アミカルチアゾール（amicarthiazol）、アミジチオン、アミドフルメット、アミドスルフロン、アミノカルブ、アミノシクロピラクロル、ア

10

20

30

40

50

ミノシクロピラクロルメチル、アミノシクロピラクロルカリウム塩、アミノピラリド、ア
 ミノピラリドカリウム塩、アミノピラリドトリス（２－ヒドロキシプロピル）アンモニウ
 ム塩、アミプロホスメチル、アミプロホス、アミスルブロン、アミトン、アミトンシュウ
 酸塩、アミトラズ、アミトロール、スルファミン酸アンモニウム、 α -ナフタレン酢酸ア
 ンモニウム、アンバム、アンプロピルホス、アナバシン、アンシミドール、アニラジン、
 アニロホス、アニスロン、アントラキノ、アンツ、アホラート、アラマイト、三酸化
 ヒ素、アソメート、アスピリン、アシュラム、アシュラムカリウム塩、アシュラムナトリ
 ウム塩、アチダチオン、アトラトン、アトラジン、オーレオファンギン（aureofun
 g i n）、アビグリシン、アビグリシン塩酸塩、アザコナゾール、アザジラクチン、ア
 ザフェニジン、アザメチホス、アジスルフロ、アジンホスエチル、アジンホスメチル
 、アジプロトリン、アジチラム、アゾベンゼン、アゾシクロチン、アゾトエート、アゾキ
 シストロビン、バクメデシュ（bachmedesh）、バルバン、ヘキサフルオロケイ
 酸バリウム、多硫化バリウム、バルトリン、BCPC、ベフルブタミド、ベナラキシル、
 ベナラキシルM、ベナゾリン、ベナゾリンジメチルアンモニウム塩、ベナゾリンエチル、
 ベナゾリンカリウム塩、ベンカルバゾン、ベンクロチアズ、ベンダイオカルブ、ベンフル
 ラリン、ベンフラカルブ、ベンフレセート、ベノダニル、ベノミル、ベノキサコル、ベノ
 キサホス、ベンキノックス、ベンスルフロ、ベンスルフロメチル、ベンスリド、ベンス
 ルスタップ、ベントラル、ベントラジン、ベントラジンナトリウム塩、ベンチアバリカルブ
 、ベンチアバリカルブイソプロピル、ベンチアゾール、ベントラニル、ベンザドックス、
 ベンザドックスアンモニウム塩、塩化ベンザルコニウム、ベンザマクリル、ベンザマクリ
 ルイソブチル、ベンザモルフ、ベンズフェンジゾン、ベンジプラム、ベンゾビシクロ、
 ベンゾフェナップ、ベンゾフルオル、ベンゾヒドロキサム酸、ベンゾキシメート、ベンゾ
 イルプロップ、ベンゾイルプロップエチル、ベンズチアズロン、安息香酸ベンジル、ベン
 ジルアデニン、ベルベリン、ベルベリン塩化物、ベータ・シフルトリン、ベータ・シペル
 メトリン、ベトキサジン、ビシクロピロン、ビフェナゼート、ビフェノックス、ビフェン
 トリン、ビフチュンツィ（bifujunzhi）、ビラナホス、ビラナホスナトリウム
 塩、ビナパクリル、ビンチンシアオ（bingqingxiao）、ビオアレスリン、ビ
 オエタノメトリン（bioethanomethrin）、ビオベルメトリン、ビオレス
 メトリン、ビフェニル、ビスアジル、ビスメルチアゾール、ビスピリバック、ビスピリバ
 ックナトリウム塩、ビストリフルロン、ビテルタノール、ビチオノール、ビキサフェン、
 ブラストサイジンS、ハウ砂、ボルドー液、ホウ酸、ボスカリド、ブラシノリド、ブラシ
 ノリドエチル、ブレビコミン、プロジファクム、プロフェンバレレート（brofenv
 a l e r a t e）、プロフルトリネート（brofluthrinat e）、プロマシル
 、プロマシルリチウム塩、プロマシルナトリウム塩、プロマジオロン、プロメタリン、ブ
 ロメトリン（bromethrin）、ブロンフェンビンホス、プロモアセトアミド、プロ
 モボニル、プロモブチド、プロモシクレン、プロモDDT、プロモフェノキシム、プロ
 モホス、プロモホスエチル、プロモプロピレート、プロモタロニル（bromothal
 o n i l）、プロモキシニル、プロモキシニルブチラート、ヘプタン酸プロモキシニル、
 オクタン酸プロモキシニル、プロモキシニルカリウム塩、ブロンピラゾン、ブロンコナゾ
 ール、ブロンポール、ブカルボラート、ブフェンカルブ、ブミナホス、ブピリメート、ブ
 プロフェジン、バーガンディー混合物（Burgundy mixture）、ブスルフ
 ザン、ブタカルブ、ブタクロール、ブタフェナシル、ブタミホス、ブタチオホス、ブテナ
 クロール、ブテトリン（butethrin）、ブチダゾール、ブチオベート、ブチウロ
 ン、ブトカルボキシム、ブトネート、ブトピロノキシム、ブトキシカルボキシム、ブトル
 アリン、ブトロキシジム、ブツロン、ブチルアミン、ブチレート、カコジル酸、カズサホ
 ス、カフェンストロール、ヒ酸カルシウム、塩素酸カルシウム、カルシウムシアナミド、
 多硫化カルシウム、カルビンホス、カンベンジクロル、カンフェクロル、カンファー、カ
 プタホル、キャプタン、カルバモルフ、カーバノレート、カルバリル、カルバスラム、
 カルベンダジム、カルベンダジムベンゼンスルホン酸塩、カルベンダジム亜硫酸塩、カル
 ベタミド、カルボフラン、二硫化炭素、四塩化炭素、カルボフェノチオン、カルボスルフ

10

20

30

40

50

アン、カルボキサゾール、カルボキシド (carboxide)、カルボキシン、カルフ
 エントラゾン、カルフェントラゾンエチル、カルプロパミド、カルタップ、カルタップ塩
 酸塩、カルバクロール、カルボン、CDEA、セロシジン、CEPC、セラルレ、チェシ
 ュハント混合物 (Cheshunt mixture)、キノメチオナート、キトサン、
 クロベンチアゾン、クロメトキシフェン、クロラロース、クロランベン、クロランベンア
 ンモニウム塩、クロランベンジオラミン、クロランベンメチル、クロランベンメチルアン
 モニウム塩、クロランベンナトリウム塩、クロラミンリン (chloramine ph
 osphorus)、クロラムフェニコール、クロラニホルメタン、クロラニル、クロラ
 ノクリル、クロラントラニリプロール、クロラジホップ、クロラジホッププロパルギル、
 クロラジン、クロルベンシド、クロルベンズロン、クロルビシクレン、クロルブロムロン
 、クロルブファム、クロルデン、クロルデコン、クロルジメホルム、塩酸クロルジメホル
 ム、クロルエンペントリン (chlorempenthrin)、クロレトキシホス、ク
 ロレツロン、クロルフェナック、クロルフェナックアンモニウム塩、クロルフェナックナ
 トリウム塩、クロルフェナビル、クロルフェナゾール、クロルフェネトール、クロルフェ
 ンプロップ、クロルフェンソン、クロルフェンスルフィド、クロルフェンビンホス、クロ
 ルフルアズロン、クロルフルラゾール、クロルフルレン、クロルフルレンメチル、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、クロルメホス、クロルメコート、クロルメコート塩化物、クロルニジン、クロル
 ニトロフェン、クロロベンジレート、クロロジニトロナフタレン、クロロホルム、クロロ
 メブホルム、クロロメチウロン、クロロネブ、クロロファシノン、クロロファシノンナト
 リウム塩、クロロピクリン、クロロポン、クロロプロピレート、クロロタロニル、クロロ
 トルロン、クロロクスロン、クロロキシニル、クロルホニウム、クロルホニウム塩化物、
 クロルホキシム、クロルプラゾホス、クロルプロカルブ、クロルプロファム、クロルピリ
 ホス、クロルピリホスメチル、クロルキノックス、クロルスルフロン、クロルタール、ク
 ロルタールジメチル、クロルタールモノメチル、クロルチアミド、クロルチオホス、クロ
 ゴリネート、コリン塩化物、クロマフェノジド、シネリン I、シネリン II、シネリン類
 、シニドンエチル、シンメチリン、シノスルフロン、シオブチド、シサニリド (cisa
 nilide)、シスメトリン、クレトジム、クリンバゾール、クリオジネート、クロジ
 ナホップ、クロジナホッププロパルギル、クロエトカルブ、クロフェンセット、クロフェ
 ンセットカリウム塩、クロフェンテジン、クロフィブリン酸、クロホップ、クロホップイ
 ソブチル、クロマゾン、クロメプロップ、クロブロップ、クロブロキシジム、クロピラリ
 ド、クロピラリドメチル、クロピラリドオラミン (clopyralid-olamine)、
 クロピラリドカリウム塩、クロピラリドトリス (2-ヒドロキシプロピル) アンモ
 ニウム塩、クロキントセット、クロキントセットメキシル、クロランスラム、クロランス
 ラムメチル、クロサンテル、クロチアニジン、クロトリマゾール、クロキシホナック、ク
 ロキシホナックナトリウム塩、CMA、コドレルア、コロホネート、酢酸銅、アセト亜ヒ
 酸銅、ヒ酸銅、塩基性炭酸銅、水酸化銅、ナフテン酸銅、オレイン酸銅、オキシ塩化銅、
 ケイ酸銅、硫酸銅、クロム酸亜鉛銅 (copper zinc chromate)、ク
 マクロール、クマフリル、クマホス、クマテトラリル、クミトエート、クモキシストロピ
 ン、CPMC、CPMF、CPPC、クレダジン、クレゾール、クリミジン、クロタミト
 ン、クロトキシホス、クルホメート、氷晶石、キュウルア、クフラネブ、クミルロン、ク
 プロバム (cuprobam)、酸化第一銅、クルクメノール、シアナミド、シアナトリ
 ン、シアナジン、シアノフェンホス、シアノホス、シアントエート、シアントラニリプロ
 ール、シアゾファミド、シブトリン、シクラフラミド、シクラニリド、シクレトリン、シ
 クロエート、シクロヘキシミド、シクロプラート、シクロプロトリン、シクロスルファム
 ロン、シクロキサプリド、シクロキシジム、シクルロン、シエノピラフェン、シフルフェ
 ナミド、シフルメトフェン、シフルトリン、シハロホップ、シハロホップブチル、シハロ
 トリン、シヘキサチン、シミアゾール、シミアゾール塩酸塩、シモキサニル、シオメトリ
 ニル、シペンダゾール、シペルメトリン、シペルコート、塩化シペルコート、シフェノト
 リン、シブラジン、シブラゾール、シプロコナゾール、シプロジニル、シプロフラム、シ

10

20

30

40

50

プロミッド、シブロスルファミド、シロマジン、シチオアート、ダイムロン、ダラボン、
 ダラボンカルシウム塩、ダラボンマグネシウム塩、ダラボンナトリウム塩、ダミノジッド
 、タヨウトン (day out ong)、ダゾメット、ダゾメットナトリウム塩、DBCP
 、d-カンファー、DCIP、DCPTA、DDT、デバカルブ、デカフェンチン、デカル
 ボフラン、デヒドロ酢酸、デラクロール、デルタメトリン、デメフィオン、デメフィオ
 ン-O、デメフィオン-S、ジメトン、ジメトンメチル、ジメトン-O、ジメトン-O-
 メチル、ジメトン-S、ジメトン-S-メチル、ジメトン-S-メチルスルホン、デスメ
 ディファム、デスメトリン、d-ファンシルチュエビンチュツィ (d-fanshilu
 quebingjuzhi)、ジアフェンチウロン、ジアリホス、ジアレート、ジアミダ
 ホス、ケイ藻土、ダイアジノン、フタル酸ジブチル、コハク酸ジブチル、ジカンバ、ジカ
 ンバジグリコールアミン、ジカンバジメチルアンモニウム塩、ジカンバジオラミン、ジカ
 ンバイソプロピルアンモニウム塩、ジカンバメチル、ジカンバオラミン (dicamba-
 olamine)、ジカンバカリウム塩、ジカンバナトリウム塩、ジカンバトロラミン
 、ジカプトン、ジクロベニル、ジクロフェンチオン、ジクロフルアニド、ジクロン、ジク
 ロラル尿素 (dichloralurea)、ジクロルベンズロン (dichlorbenzuron)、ジクロフルレノール、ジクロフルレノールメチル、ジクロルメート、ジ
 クロルミド、ジクロロフェン、ジクロルプロップ、ジクロルプロップ2-エチルヘキシル
 、ジクロルプロップブトチル、ジクロルプロップジメチルアンモニウム塩、ジクロルプロ
 ップエチルアンモニウム塩、ジクロルプロップイソクチル、ジクロルプロップメチル、ジ
 クロルプロップP、ジクロルプロップP2-エチルヘキシル、ジクロルプロップPジメチ
 ルアンモニウム塩、ジクロルプロップカリウム塩、ジクロルプロップナトリウム塩、ジク
 ロルボス、ジクロゾリン、ジクロブトラゾール、ジクロシメット、ジクロホップ、ジクロ
 ホップメチル、ジクロメジン、ジクロメジンナトリウム塩、ジクロラン、ジクロスラム、
 ジコホル、ジクマロール、ジクレシル、ジクロトホス、ジシクラニル、ジシクロノン、デ
 ィルドリン、ジエノクロル、ジエタムコート、ジエタムコートジクロリド、ジエタチル、
 ジエタチルエチル、ジエトフェンカルブ、ジエトラート、ジエチルピロカーボネート、ジ
 エチルトルアミド、ジフェナクム、ジフェノコナゾール、ジフェノペンテン、ジフェノペ
 ンテンエチル、ジフェノキスロン、ジフェンゾコート、ジフェンゾコートメチル硫酸塩、
 ジフェチアロン、ジフロビダジン、ジフルベンズロン、ジフルフェニカン、ジフルフェン
 ゴピル、ジフルフェンゴピルナトリウム塩、ジフルメトリム、ジケグラック、ジケグラッ
 クナトリウム塩、ジロール、ジマチフ (dimatif)、ジメフルトリン、ジメホック
 ス、ジメフロン、ジメピペレート、ジメタクロン (dimetachlone)、ジメタ
 ン (dimetan)、ジメタカルブ (dimethacarb)、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、ジメチリモール、ジメトエ
 ート、ジメトモルフ、ジメトリン、ジメチルカルバート、フタル酸ジメチル、ジメチルピ
 ンホス、ジメチラン、ジメキサノ、ジミダゾン、ジモキシストロビン、ジネックス、ジネ
 ックスジクレキシム、ティンチュンエツォ (dingjunezuo)、ジニコナゾール
 、ジニコナゾールM、ジニトラミン、ジノブトン、ジノカップ、ジノカップ-4、ジノカ
 ップ-6、ジノクトン、ジノフェナート、ジノペントン、ジノプロップ、ジノサム、ジノ
 セブ、酢酸ジノセブ、ジノセブアンモニウム塩、ジノセブジオラミン (dinoseb-
 diolamine)、ジノセブナトリウム塩、ジノセブトロラミン、ジノスルホン、ジ
 ノテフラン、ジノテルブ、酢酸ジノテルブ、ジノテルボン、ジオフェノラン、ジオキサベ
 ンゾホス、ジオキサカルブ、ジオキサチオン、ダイファシノン、ダイファシノンナトリウ
 ム塩、ジフェナミド、ジフェニルスルホン、ジフェニルアミン、ジプロパリン、ジプロペ
 トリン、ジピリチオン、ジクワット、ジクワットジプロミド、ディスパールA、ジスル、
 ジスルフィラム、ジスルホトン、ジスルナトリウム、ジタリムホス、ジチアノン、ジチク
 ロホス、ジチオエーテル、ジチオピル、ジウロン、d-リモネン、DMPA、DNOC、
 DNOCアンモニウム塩、DNOCカリウム塩、DNOCナトリウム塩、ドデモルフ、酢
 酸ドデモルフ、安息香酸ドデモルフ、ドジシン、ドジシン塩酸塩、ドジシンナトリウム塩
 、ドジン、ドフェナピン、ドミニカルA、ドラメクチン、ドラゾキシロン、DSMA、ズ

10

20

30

40

50

フリン、E B E P、E B P、エクジステロン、エジフェンホス、エグリナジン、エグリナ
 ジンエチル、エマメクチン、エマメクチン安息香酸塩、E M P C、エンペントリン、エン
 ドスルファン、エンドタール、エンドタールニアンモニウム塩、エンドタールニカリウム
 塩、エンドタールニナトリウム塩、エンドチオン、エンドリン、エネストロブリン、E P
 N、エポコレオン、エポフェノナン、エポキシコナゾール、エプリノメクチン、エプロナ
 ズ、E P T C、エルボン、エルゴカルシフェロール、アルルチシアンカオアン (e r l u
 j i x i a n c a o a n)、エスデパレトリン (e s d e p a l l e t h r i n e)、エ
 スフェンバレレート、エスロプロカルブ、エタセラシル、エタコナゾール、エタホス、エ
 テム (e t e m)、エタボキサム、エタクロル (e t h a c h l o r)、エタルフルラリ
 ン、エタメトスルフルロン、エタメトスルフルロンメチル、エタプロクロル (e t h a p
 r o c h l o r)、エテホン、エチジムロン、エチオフェンカルブ、エチオレート、エチ
 オン、エチオジン、エチプロール、エチリモール、エトエートメチル、エトフメセート、
 エトヘキサジオール、エトプロホス、エトキシフェン、エトキシフェンエチル、エトキシ
 キン、エトキシスルフロロン、エチクロゼート、ギ酸エチル、 α -ナフタレン酢酸エチル、
 エチルDDD、エチレン、二臭化エチレン、二塩化エチレン、エチレンオキシド、エチリ
 シン、エチル水銀2, 3-ジヒドロキシプロピルメルカプチド、酢酸エチル水銀、臭化エ
 チル水銀、塩化エチル水銀、リン酸エチル水銀、エチノフェン、エトニプロミド、エトベ
 ンザニド、エトフェンブロックス、エトキサゾール、エトリジアゾール、エトリムホス、
 オイゲノール、E X D、ファモキサドン、ファムフル、フェンアミドン、フェナミノス
 ルフ、フェナミホス、フェナパニル、フェナリモル、フェナシュラム、フェナザフロル、
 フェナザキン、フェンブコナゾール、酸化フェンブタスズ、フェンクロラゾール、フェン
 クロラゾールエチル、フェンクロルホス、フェンクロリム、フェネタカルブ、フェンフル
 トリン、フェンフラム、フェンヘキサミド、フェニトロパン、フェニトロチオン、フェン
 チュントン (f e n j u n t o n g)、フェノブカルブ、フェノブロップ、フェノブロッ
 プ3-ブトキシプロピル、フェノブロップブトメチル、フェノブロップブトチル、フェノ
 ブロップブチル、フェノブロップイソクチル、フェノブロップメチル、フェノブロップカ
 リウム塩、フェノチオカルブ、フェノキサクリム、フェノキサニル、フェノキサブロップ
 、フェノキサブロップエチル、フェノキサブロップP、フェノキサブロップPエチル、フェ
 ノキサスルホン、フェノキシカルブ、フェンピクロニル、フェンピリトリン、フェンブ
 ロパトリン、フェンブプロピジン、フェンブプロピモルフ、フェンピラザミン、フェンピロキ
 シメート、フェンリダゾン、フェンリダゾンカリウム塩、フェンリダゾンプロピル、フェ
 ンソン、フェンスルホチオン、フェンテラコール、フェンチアブロップ、フェンチアプロ
 ップエチル、フェンチオン、フェンチオン・エチル、フェンチン、酢酸フェンチン、塩化
 フェンチン、水酸化フェンチン、フェントラザミド、フェントリファニル、フェニユロン
 、フェニユロンT C A、フェンバレレート、ファーバム、フェリムゾン、硫酸第一鉄、フ
 イプロニル、フランブロップ、フランブロップイソプロピル、フランブロップM、フラン
 ブロップメチル、フランブロップMイソプロピル、フランブロップMメチル、フラザスル
 フロン、フロクマフェン、フロメトキン、フロニカミド、フロラスラム、フルアクリピリ
 ム、フルアジホップ、フルアジホップブチル、フルアジホップメチル、フルアジホップP
 、フルアジホップPブチル、フルアジナム、フルアゾレート、フルアズロン、フルベンジ
 アミド、フルベンジミン、フルカルバゾン、フルカルバゾンナトリウム塩、フルセトスル
 フロン、フルクロラルイン、フルコフロン、フルシクロクソロン、フルシトリネート、フル
 ジオキソニル、フルエネチル、フルエンズルホン、フルフェナセット、フルフェネリム、
 フルフェニカン、フルフェノクスロン、フルフェンブロックス、フルフェンピル、フルフ
 ェンピルエチル、フルフィプロール、フルメトリン、フルメトベル、フルメトラリン、フル
 メツラム、フルメジン、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、フルモルフ、フルオメツロン、フルピコリド、フルオピラム、フル
 オルベンシド、フルオリダミド、フルオロアセトアミド、フロロジフェン、フルオログ
 リコフェン、フルオログリコフェンエチル、フルオリイミド、フルオロミジン、フルオロ
 ニトロフェン、フルオチウロン、フルオトリマゾール、フルオキサストロビン、フルボキ

10

20

30

40

50

サム、フルプロパシル、フルプロパジン、フルプロパネート、フルプロパネートナトリウム塩、フルピラジフロン、フルピルスルフロン、フルピルスルフロンメチル、フルピルスルフロンメチルナトリウム塩、フルキンコナゾール、フルラゾール、フルレノール、フルレノールブチル、フルレノールメチル、フルリドン、フルクロリドン、フルロキシピル、フルロキシピルブトメチル、フルロキシピルメブチル、フルルプリミドール、フルルスルアミド (flursulamid)、フルルタモン、フルシラゾール、フルスルファミド、フルチアセット、フルチアセットメチル、フルチアニル、フルトラニル、フルトリアホール、フルバリネート、フルキサピロキサド、フルキソフェニム、ホルベット、ホメサフェン、ホメサフェンナトリウム塩、ホノホス、ホラムスルフロン、ホルクロルフェニユロン、ホルムアルデヒド、ホルメタネート、塩酸ホルメタネート、ホルモチオン、ホルムパラネート、塩酸ホルムパラネート、ホサミン、ホサミンアンモニウム、ホセチル、ホセチルアルミニウム、ホスメチラン、ホスピレート、ホスチアゼート、ホスチエタン、フロンタリン、フベリダゾール、フカオチン (fucaojing)、フカオミ (fucaomi)、フナイヒカオリン (funaihecaoling)、フフェンチオ尿素 (fuphenthiourea)、フララン (furalane)、フララキシル、フラメトリン、フラメトピル、フラチオカルブ、フルカルバニル、フルコナゾール、フルコナゾール・シス、フレトリン (furethrin)、フルフラール、フリラゾール、フルメシクロックス、フロファネート、フリロキシフェン、ガンマシハロトリン、ガンマHCH、ジェニット (genit)、ジベレリン酸、ジベレリン類、グリフトル (gliftor)、グルホシネート、グルホシネートアンモニウム塩、グルホシネートP、グルホシネートPアンモニウム塩、グルホシネートPナトリウム塩、グリオジン、グリオキシム、グリホサート、グリホサートジアンモニウム塩、グリホサートジメチルアンモニウム塩、グリホサートイソプロピルアンモニウム塩、グリホサートモノアンモニウム塩、グリホサートカリウム塩、グリホサートセスキナトリウム塩、グリホサートトリメシウム塩、グリホシン、ゴシップルア、グランドルア、グリセオフルビン、グアザチン、酢酸グアザチン、ハラクリネート、ハルフェンブロックス、ハロフェノジド、ハロサフェン、ハロスルフロン、ハロスルフロンメチル、ハロキシジン、ハロキシホップ、ハロキシホップエトチル、ハロキシホップメチル、ハロキシホップP、ハロキシホップPエトチル、ハロキシホップPメチル、ハロキシホップナトリウム塩、HCH、ヘメル (heme1)、ヘンパ、HEOD、ヘプタクロル、ヘプテノホス、ヘプトパルギル、ヘテロホス、ヘキサクロロアセトン、ヘキサクロロベンゼン、ヘキサクロロブタジエン、ヘキサクロロフェン、ヘキサコナゾール、ヘキサフルムロン、ヘキサフルラート (hexaflurate)、ヘキサルア、ヘキサミド、ヘキサジノン、ヘキシルチオホス、ヘキシチアゾクス、HHDN、ホロスルフ、ファンカイウォ (huancaiwo)、ファンカオリン (huangcaoling)、ファンチュンツォ (huanjunzuo)、ヒドラメチルノン、ヒドラガフェン、消石灰、シアン化水素、ヒドロブレン、ヒメキサゾール、ヒキンカルブ、IAA、IBA、イカリジン、イマザリル、イマザリルニトラート、硫酸イマザリル、イマザメタベンズ、イマザメタベンズメチル、イマザモックス、イマザモックスアンモニウム塩、イマザピック、イマザピックアンモニウム塩、イマザピル、イマザピルイソプロピルアンモニウム塩、イマザキン、イマザキンアンモニウム塩、イマザキンメチル、イマザキンナトリウム塩、イマゼタピル、イマゼタピルアンモニウム塩、イマゾスルフロン、イミベンコナゾール、イミシアホス、イミダクロプリド、イミダクロチズ、イミノクタジン、イミノクタジン酢酸塩、イミノクタジンアルベシル酸塩、イミプロトリン、イナベンフィド、インダノファン、インダジフラム、インドキサカルブ、イネジン、ヨードボニル、ヨードカルブ、ヨードメタン、ヨードスルフロン、ヨードスルフロンメチル、ヨードスルフロンメチルナトリウム塩、ヨーフェンスルフロン、ヨーフェンスルフロンナトリウム塩、アイオキシニル、アイオキシニルオクタノアート、アイオキシニルリチウム塩、アイオキシニルナトリウム塩、イパジン、イブコナゾール、イブフェンカルバゾン、イプロベンホス、イプロジオン、イプロバリカルブ、イプリミダム、イプスジェノール、イプセノール、IPSP、イサミドホス、イサゾホス、イソベンザン、イソカルバミド、イソカルボホス、イソシ

10

20

30

40

50

ル、イソドリン、イソフェンホス、イソフェンホスメチル、イソラン、イソメチオジン、
 イソノルロン、イソポリネート、イソプロカルブ、イソプロパリン、イソプロチオラン、
 イソプロツロン、イソピラザム、イソピリモール、イソチオエート、イソチアニル、イソ
 ウロン、イソバレジオン、イソキサベン、イソキサクロルトール、イソキサジフェン、イ
 ソキサジフェンエチル、イソキサフルトール、イソキサピリホップ、イソキサチオン、イ
 ベルメクチン、イゾパンホス (izopamfos)、ジャポニルア、ジャポトリン (j
 apothrin) 類、ジャスモリン I、ジャスモリン II、ジャスモン酸、チアフアン
 チョンツォン (jiahuangchongzong)、チアチツェンシアオリン (ji
 ajizengxiaolin)、チアシャンチュンツィ (jiaxiangjunzhi)
 i)、チエカオワン (jiecaowan)、チエカオシ (jiecaoxi)、ヨード
 フェンホス、幼若ホルモン I、幼若ホルモン II、幼若ホルモン III、カデスリン、カル
 ブチレート、カレタザン、カレタザンカリウム塩、カスガマイシン、カスガマイシン塩
 酸塩、ケチュンリン (kejunlin)、ケレバン、ケトスピラドックス、ケトスピラ
 ドックスカリウム、カイネチン、キノブレン、クレソキシムメチル、クイカオシ (kui
 caoxi)、ラクトフェン、ラムダシハロトリン、ラチルア、ヒ酸鉛、レナシル、レピ
 メクチン、レプトホス、リンデン、リネアチン、リニュロン、リリムホス、リトルア、ル
 ープルア、ルフェヌロン、ルヴティンチュンツィ (lvdingjunzhi)、ルヴシ
 ャンカオリン (lvxiancaolin)、リチダチオン、MAA、マラチオン、マレ
 イン酸ヒドラジド、マロノベン、マルトデキストリン、MAMA、マンカップ、マンゼ
 ブ、マンジプロパミド、マンネブ、マトリン、マジドックス、MCPA、MCPA 2-エ
 チルヘキシル、MCPA ブトチル、MCPA ブチル、MCPA ジメチルアンモニウム塩、
 MCPA ジオラミン、MCPA エチル、MCPA イソブチル、MCPA イソクチル、MC
 PA イソプロピル、MCPA メチル、MCPA オラミン、MCPA カリウム塩、MCPA
 ナトリウム塩、MCPA チオエチル、MCPA トロラミン、MCPB、MCPB エチル、
 MCPB メチル、MCPB ナトリウム塩、メベニル、メカルバム、メカルビンジド、メカ
 ルホン、メコプロップ、メコプロップ 2-エチルヘキシル、メコプロップジメチルアンモ
 ニウム塩、メコプロップジオラミン、メコプロップエタジル、メコプロップイソクチル、
 メコプロップメチル、メコプロップ P、メコプロップ P 2-エチルヘキシル、メコプロッ
 プ P ジメチルアンモニウム塩、メコプロップ P イソブチル、メコプロップカリウム塩、メ
 コプロップ P カリウム塩、メコプロップナトリウム塩、メコプロップトロラミン、メジメ
 ホルム (medimeform)、メジノテルブ、メジノテルブアセタート、メドルア、
 メフェナセット、メフェンピル、メフェンピルジエチル、メフルイジド、メフルイジドジ
 オラミン、メフルイジドカリウム塩、メガトモ酸、メナゾン、メバニピリム、メベルフル
 トリン、メフェナート、メホスホラン、メピコート、メピコートクロリド、メピコート五
 ホウ酸塩、メプロニル、メブチルジノカップ、塩化第二水銀、酸化水銀、塩化第一水銀、
 メルホス、メソプラジン、メソスルフロソ、メソスルフロソメチル、メソトリオン、メス
 ルフェン、メスルフェンホス、メタフルミゾソ、メタラキシル、メタラキシル M、メタア
 ルデヒド、カーバム、カーバムアンモニウム塩、メタミホップ、メタミトロン、カーバム
 カリウム塩、カーバムナトリウム塩、メタザクロール、メタゾスルフロソ、メタゾキシロ
 ソ、メトコナゾール、メテパ (metepa)、メトフルラゾソ、メタベンズチアズロソ
 、メタクリホス、メタルプロパリン、メタミドホス、メタスルホカルブ、メサゾール、メ
 トフロキサム、メチダチオン、メチオベンカルブ、メチオカルブ、メチオピリスルフロソ
 (methiopyrisulfuron)、メチオテパ、メチオゾリン、メチウロソ、
 メトクロトホス、メトメトソ、メソミル、メトブレン、メトプロトリソ、メトキンブチル
 、メトトリソ、メトキシクロル、メトキシフェノジド、メトキシフェノソ、メチルアホラ
 ート、臭化メチル、メチルオイゲノール、ヨウ化メチル、イソチオシアン酸メチル、メチ
 ルアセトホス (methylacetophos)、メチルクロロホルム、メチルダイム
 ロソ、塩化メチレン、安息香酸メチル水銀、メチル水銀ジシアンジアミド、メチル水銀ペ
 ンタクロロフェノキシド、メチルネオデカナミド、メチラム、メトベンズロソ、メトブロ
 ムロソ、メトフルトリソ、メトラクロール、メトルカルブ、メトミノストロビン、メトス

10

20

30

40

50

ラム、メトキサジアゾン、メトキスロン、メトラフェノン、メトリブジン、メトスルホバ
 ックス、メトスルフロン、メトスルフロンメチル、メビンホス、メキサカルベート、ミエ
 シュアン (m i e s h u a n)、ミルベメクチン、ミルベマイシンオキシム、ミルネブ、
 ミパホックス、マイレックス、MNAF、モクチュン (m o g u c h u n)、モリネート
 、モロスルタップ (m o l o s u l t a p)、モナリッド、モニソウロン、モノクロロ酢
 酸、モノクロトホス、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、モニュロンTCA、モルファムコート、モルファムコートジクロリド、モロキシ
 ジン、モロキシジン塩酸塩、モルホチオン、モルジド (m o r z i d)、モキシデクチン
 、MSMA、ムスカルア、ミクロブタニル、ミクロゾリン、N- (エチル水銀) -p-
 ルエンスルホンアニリド、ナーバム、ナフタロホス、ナレッド、ナフタレン、ナフタレン
 アセトアミド、無水ナフタル酸、ナフトキシ酢酸、ナプロアニリド、ナプロパミド、ナプ
 タラム、ナプタラムナトリウム塩、ナタマイシン、ネブロン、ニクロサミド、ニクロサミ
 ドオラミン、ニコスルフロン、ニコチン、ニフルリジッド、ニピラクロフェン、ニテンピ
 ラム、ニチアジン、ニトラリン、ニトラピリン、ニトリラカルブ、ニトロフェン、ニトロ
 フルオルフェン、ニトロスチレン、ニトロタル・イソプロピル、ノルボルミド、ノルフル
 ラゾン、ノルニコチン、ノルロン、ノバルロン、ノビフルムロン、ヌアリモール、OCH
 、オクタクロロジプロピルエーテル、オクチリノン、オフラセ、オメトエート、オルベン
 カルブ、オルフラルア、オルトジクロロベンゼン、オルトスルファムロン、オリクタルア
 、オリサストロビン、オリザリン、オストール、オストラモン (o s t r a m o n e)、
 オキサベトリニル、オキサジアアルギル、オキサジアゾン、オキサジキシル、オキサマート
 (o x a m a t e)、オキサミル、オキサピラゾン、オキサピラゾンジモラミン (o x a
 p y r a z o n e - d i m o l a m i n e)、オキサピラゾンナトリウム、オキサスルフ
 ロン、オキサジクロメホン、オキシ銅、オキシソリニック酸、オキスポコナゾール、オキ
 スポコナゾールフマル酸塩、オキシカルボキシ、オキシジメトンメチル、オキシデプロ
 ホス、オキシジスルホトン、オキシフローフェン、オキシマトリン、オキシテトラサイク
 リン、オキシテトラサイクリン塩酸塩、パクロブトラゾール、パイチョンティン (p a i
 c h o n g d i n g)、パラジクロロベンゼン、パラフルロン、パラコート、パラコート
 ジクロリド、パラコートジメチル硫酸塩、パラチオン、パラチオンメチル、パリノール、
 ペブレート、ペフラゾエート、ペラルゴン酸、ペンコナゾール、ペンシクロン、ペンディ
 メタリン、ペンフルフェン、ペンフルロン、ペノキスラム、ペンタクロロフェノール、
 ペンタノクロール、ペンチオピラド、ペントメトリン (p e n t m e t h r i n)、ペン
 トキサゾン、ペルフルイドン、ペルメトリン、ペトキサミド、フェナマクリル、フェナジ
 ンオキシド、フェニソファム、フェンカプトン、フェンメディファム、フェンメディファ
 ムエチル、フェノベンズロン、フェノトリン、フェンプロキシド (p h e n p r o x i d
 e)、フェントエート、フェニルマーキュリ尿素 (p h e n y l m e r c u r i u r e a)
 、酢酸フェニル水銀、塩化フェニル水銀、ピロカテコールのフェニル水銀誘導体、硝酸
 フェニル水銀、サリチル酸フェニル水銀、ホレート、ホサセチム、ホサロン、ホスダイフ
 ェン、ホスホラン、ホスホランメチル、ホスグリシン (p h o s g l y c i n)、ホスメ
 ット、ホスニクロル、ホスファミドン、ホスフィン、ホスホカルブ、リン、ホスチン (
 p h o s t i n)、ホキシム、ホキシムメチル、フタリド、ピクロラム、ピクロラム2-
 エチルヘキシル、ピクロラムイソクチル、ピクロラムメチル、ピクロラムオラミン、ピク
 ロラムカリウム、ピクロラムトリエチルアンモニウム塩、ピクロラムトリス (2-ヒドロ
 キシプロピル) アンモニウム塩、ピコリナフェン、ピコキシストロビン、ピンドン、ピン
 ドンナトリウム塩、ピノキサデン、ピペラリン、ピペロニルブトキシド、ピペロニルシク
 ロネン、ピペロホス、ピプロクタニル、臭化ピプロクタニル、ピプロタール (p i p r o
 t a l)、ピリメタホス、ピリミカーブ、ピリミオキシホス、ピリミホスエチル、ピリミ
 ホスメチル、プリフェナート、ポリカルバメート、ポリオキシシン類、ポリオキシソリム、ポ
 リオキシソリム亜鉛、ポリチアラン (p o l y t h i a l a n)、亜ヒ酸カリウム、アジ化
 カリウム、シアン酸カリウム、ジベレリン酸カリウム、ナフテン酸カリウム、多硫化カリ
 ウム、チオシアン酸カリウム、 α -ナフタレン酢酸カリウム、pp'-DDT、プラレト

10

20

30

40

50

リン、プレコセン I、プレコセン II、プレコセン III、プレチラクロール、プリミド
 ホス、プリミスルフロソ、プリミスルフロソメチル、プロベナゾール、プロクロラズ、プロ
 クロラズマンガン塩、プロクロノール、プロシアジン、プロシミドン、プロジアミン、
 プロフェノホス、プロフルアゾール、プロフルラリン、プロフルトリソ、プロホキシジ
 ム、プログリナジン、プログリナジンエチル、プロヘキサジオソ、プロヘキサジオソカルシ
 ウム塩、プロヒドロジャソモン、プロマシル、プロメカルブ、プロメトソ、プロメトリソ
 、プロムリット、プロパクロール、プロパミジン、プロパミジン二塩酸塩、プロパモカル
 ブ、プロパモカルブ塩酸塩、プロパニル、プロパホス、プロパキサホップ、プロパルギッ
 ト、プロパルトリソ、プロパジン、プロベタムホス、プロファミ、プロピコナゾール、プロ
 ピネブ、プロピソクロール、プロポキスル、プロポキシカルバゾソ、プロポキシカルバ
 ゾソナトリウム塩、プロピルイソソ (propyl isome)、プロピリスルフロソ
 、プロピザミド、プロキナジド、プロスレル (prosuler)、プロスルファミソ、
 プロスルホカルブ、プロスルフロソ、プロチダチオソ、プロチオカルブ、プロチオカルブ
 塩酸塩、プロチオコナゾール、プロチオホス、プロトエート、プロトリフェンブト、プロ
 キサソ、プロキサソナトリウム塩、プリナクロール、ピダソソ、ピメトロジン、ピラカル
 ボリド、ピラクロホス、ピラクロニル、ピラクロストロピン、ピラフルフェソ、ピラフル
 フェソエチル、ピラフルプロール、ピラマト (pyramat)、ピラメトストロピン、
 ピラオキシストロピン、ピラスルホトール、ピラゾリネート、ピラゾホス、ピラゾスル
 フロソ、ピラゾスルフロソエチル、ピラゾチオソ、ピラゾキシフェソ、ピレスメトリソ、ピ
 レトリソ I、ピレトリソ II、ピレトリソ類、ピリバムベンズイソプロピル (pyrib
 ambenz-isopropyl)、ピリバムベンズプロピル (pyribambenz-propyl)、ピリベンカルブ、
 ピリベンゾキシソ、ピリブチカルブ、ピリクロル
 、ピリダベン、ピリダフォル、ピリダリル、ピリダフェソチオソ、ピリデート、ピリジニ
 トリル、ピリフェノックス、ピリフルキナゾソ、ピリフタリド、ピリメタニル、ピリミジ
 フェソ、ピリミノバック、ピリミノバックメチル、ピリミスルファミソ、ピリミテート、ピ
 リニューロソ、ピリオフェソソ、ピリプロール、ピリプロパノール (pyripropanol)、
 ピリプロキシフェソ、ピリチオバック、ピリチオバックナトリウム塩、ピロラン
 (pyrolan)、ピロキロソ、ピロキサスルホソ、ピロキススラム、ピロキシクロル
 、ピロキシフル、ニガキ、キナセトール、キナセトールスルフェート、キナルホス、キナ
 ルホソメチル、キナザミド、キンクロラック、キンコナゾール、キンメラック、キノクラ
 ミソ、キノナミド、キノチオソ、キノキシフェソ、キンチオホス、キソトゼソ、キサロホ
 ップ、キサロホップエチル、キサロホップ P、キサロホップ Pエチル、キサロホップ Pテ
 フリル、チュウエンツィ (quwenzhi)、チュイソティソ (quyingding)
 、ラベンザゾール、ラフォキサニド、レベミド、レスメトリソ、ロデタニル、ロドジャ
 ポソニ III、リバピリソ、リムスルフロソ、ロテソソ、リアニア、サフルフェナシル、
 サイチュソマオ (saijunmao)、サイセソソソ (saisentong)、サリ
 チルアニリド、サソギナリソ、サソトソソ、シュラーダソ、シリロシド、セブチラジン、
 セクブメトソ、セダキサソ、セラメクチソ、セミアミトラズ、セミアミトラズ塩化物、セ
 サメックス、セサモリソ、セトキシジソ、シュアソチアアソカオリソ (shuangji
 aancaolin)、シデュロソ、シグルール、シラフルオフェソ、シラトラン、シリ
 カゲル、シルチオファミソ、シマジソ、シメコナゾール、シメトソ、シメトリソ、シソソ
 フェソ、SMA、エソメトラクロール、亜ヒ酸ナトリウム、アジ化ナトリウム、塩素酸ナト
 リウム、フッ化ナトリウム、フルオロ酢酸ナトリウム、ヘキサフルオロケイ酸ナトリウム
 、ナフテン酸ナトリウム、ナトリウムオソソフェニルフェソキシド、ナトリウムペンタク
 ロロフェソキシド、多硫化ナトリウム、チオシアソ酸ナトリウム、 α -ナフタレン酢酸ナ
 トリウム、ソファミド、スピネトラソ、スピソサド、スピロジクロフェソ、スピロメシ
 フェソ、スピロテトラマト、スピロキサミソ、ストレプトマイシソ、ストレプトマイシ
 セスキ硫酸塩、ストリキニーネ、スルカトール、スルコフロソ、スルコフロソナトリウム、
 スルコトリオソ、スルファミレート、スルフェソトラゾソ、スルフィラム、スルフルラミド
 、スルホメツロソ、スルホメツロソメチル、スルホスルフロソ、スルホテップ、スルホキ

10

20

30

40

50

サフロル、スルホキシド、スルホキシム、イオウ、硫酸、フッ化スルフリル、スルグリカ
 ピン、スルプロホス、スルトロペン、スウェップ、タウフルバリネート、タブロン (t a
 v r o n)、タジムカルブ、T C A、T C Aアンモニウム塩、T C Aカルシウム塩、T C
 Aエタジル、T C Aマグネシウム塩、T C Aナトリウム塩、T D E、テブコナゾール、テ
 ブフェノジド、テブフェンピラド、テブフロキン、テブピリムホス、テブタム、テブチウ
 ロン、テクロフタラム、テクナゼン、テコラム (t e c o r a m)、テフルベンズロン、
 テフルトリン、テフルリトリオン、テムボトリオン、テムホス、テパ、T E P P、テブラ
 ロキシジム、テラレトリン、ターバシル、テルブカルブ、テルブクロル、テルブホス、テ
 ルブメトン、テルブチラジン、テルブトリン、テトシクラシス、テトラクロロエタン、テ
 トラクロロビンホス、テトラコナゾール、テトラジホン、テトラフルロン、テトラメスリ
 ン、テトラメチルフルトリン、テトラミン、テトラナクチン (t e t r a n a c t i n)
 、テトラスル、硫酸タリウム、テニルクロール、シータシペルメトリン、チアベンダゾー
 ル、チアクロプリド、チアジフルオール、チアメトキサム、チアプロニル (t h i a p r
 o n i l)、チアザフルロン、チアゾピル、チクロホス、チシオフエン、チジアジミン、
 チジアズロン、チエンカルバゾン、チエンカルバゾンメチル、チフェンスルフロン、チフ
 ェンスルフロンメチル、チフルザミド、チオベンカルブ、チオカルボキシム、チオクロル
 フェンヒム、チオシクラム、チオシクラム塩酸塩、チオシクラムシュウ酸塩、チオジアゾ
 ール銅、チオジカルブ、チオファノックス、チオフルオキシメート (t h i o f l u o x
 i m a t e)、チオヘンパ (t h i o h e m p a)、チメロサール、チオメトン、チオナ
 ジン、チオファネート、チオファネートメチル、チオキノックス、チオセミカルバジド、
 チオスルタップ、チオスルタップニアンモニウム塩、チオスルタップナトリウム塩、チオ
 スルタップモノナトリウム塩、チオテパ、チウラム、ツリンギエンシン、チアジニル、テ
 ィアオチエアン (t i a o j i e a n)、チオカルバジル、チオクロリム、チオキシミド
 、チルパート、トルクロホスメチル、トルフェンピラド、トリルフルアニド、酢酸トリル
 水銀、トブラメゾン、トラルコキシジム、トラロシトリン、トラロメトリン、トラロピリ
 ル、トランスフルトリン、トランスペルメトリン、トレタミン、トリアコンタノール、ト
 リアジメホン、トリアジメノール、トリアファモン、トリアレート、トリアミホス、トリ
 アペンテノール、トリアラテン、トリアリモール、トリアスルフロン、トリアザメート、
 トリアズブチル、トリアジフラム、トリアゾホス、トリアゾキシド、トリベニユロン、ト
 リベニユロンメチル、トリブホス、酸化トリブチルスズ、トリカンバ、トリクラミド、ト
 リクロロホン、トリクロロメタホスー3、トリクロロナート、トリクロピル、トリクロピ
 ルブトチル、トリクロピルエチル、トリクロピルトリエチルアンモニウム塩、トリシクラ
 ゴール、トリデモルフ、トリジファン、トリエタジン、トリフェンモルフ、トリフェノホ
 ス、トリフロキシストロピン、トリフロキシスルフロン、トリフロキシスルフロンナトリ
 ウム塩、トリフルミゾール、トリフルムロン、トリフルラリン、トリフルスルフロン、ト
 リフルスルフロンメチル、トリホップ、トリホップメチル、トリホブシム、トリホリン、
 トリヒドロキシトリアジン、トリメドルア、トリメタカルブ、トリメツロン (t r i m e
 t u r o n)、トリネキサバック、トリネキサバックエチル、トリブレン、トリプロピン
 ダン、トリプトリド、トリタック (t r i t a c)、トリチコナゾール、トリトスルフロ
 ン、トランクコール (t r u n c - c a l l)、ウニコナゾール、ウニコナゾールP、ア
 ーバサイド (u r b a c i d e)、ウレデパ、吉草酸エステル、バリダマイシン、バリフ
 ェナレート、バロン (v a l o n e)、バミドチオン、バンガード (v a n g a r d)、
 バニリプロール、バーナレート、ピンクロゾリン、ワルファリン、ワルファリンカリウム
 、ワルファリンナトリウム、シャオチョンリウリン (x i a o c h o n g l i u l i n)
 、シンチュンアン (x i n j u n a n)、シウォチュンアン (x i w o j u n a n)、X
 M C、キシラクロル、キシレノール類、キシリルカルブ、イシチン (y i s h i j i n g)
)、ザリラミド、ゼアチン、ツェンシャオアン (z e n g x i a o a n)、ゼータシペル
 メトリン、ナフテン酸亜鉛、リン化亜鉛、チアゾール亜鉛、ジネブ、ジラム、ゾラプロホ
 ス、ゾキサミド、ツォミファンロン (z u o m i h u n a g l o n g)、 α -クロロヒド
 リン、 α -エクジソン、 α -ムルチストリアチンおよび α -ナフタレン酢酸である。さら

10

20

30

40

50

なる情報については、alanwood.netに配置されている“COMPENDIUM OF PESTICIDE COMMON NAMES”を参照されたい。また、“THE PESTICIDE MANUAL”第14版、C D S Tomlinにより編、British Crop Production Councilによる版権2006年、またはその以前若しくはより最近の版も参照されたい。

【0665】

生物農薬

式1の分子は、1種若しくはそれ以上の生物農薬と（配合混合物または同時若しくは逐次適用におけるように）組合せでもまた使用しうる。「生物農薬」という用語は、化学的農薬と類似の様式で適用される微生物の生物学的病害虫防除剤に使用される。普遍的にこれらは細菌性であるが、しかし、トリコデルマ属（Trichoderma）スピーシーズおよびアンペロミセス キスカリス（Ampelomyces quisqualis）（ブドウうどんこ病の防除剤）を包含する真菌性防除剤の例もまた存在する。放線菌（Bacillus subtilis）は植物病原体を防除するのに使用される。雑草およびげっ歯類もまた微生物の剤で防除されている。1つの公知の殺虫剤の例は、チョウ目、コウチュウ目およびハエ目の細菌性疾患、バチルス チューリングゲンシス（Bacillus thuringiensis）である。それは他の生物体に対する影響をほとんど有しないため、それは合成農薬より環境に優しいと考えられている。生物学的殺虫剤は、

1. 昆虫病原性糸状菌（例えば黒きょう病菌（Metarhizium anisopliae））；
 2. 昆虫病原性線虫（例えばステイネルネマ フェルチアエ（Steinernema feltiae））；および
 3. 昆虫病原性ウイルス（例えばコドリガ（Cydia pomonella）顆粒ウイルス）
- に基づく製品を包含する。

【0666】

昆虫病原性生物体の他の例は、限定されるものでないが、バキュロウイルス、細菌および他の原核生物体、真菌、原生動物ならびに微胞子虫類を挙げることができる。生物学的に派生される殺虫剤は、限定されるものでないがロテノン、ベラトリジン、ならびに微生物毒素；昆虫耐性（tolerant）すなわち耐性（resistant）植物変種；および殺虫剤を産生する若しくは昆虫耐性特性を遺伝子操作された生物体に運搬するのいずれかのために組換えDNA技術により改変されている生物体を挙げることができる。一態様において、式1の分子は、種子処理および土壌改良の領域で1種若しくはそれ以上の生物農薬とともに使用しうる。The Manual of Biocontrol Agentsは、入手可能な生物学的殺虫剤（および他の生物学に基づく防除）製品の総説を与える。Copping L. G.（編）（2004）.The Manual of Biocontrol Agents（以前はthe Biopesticide Manual）第3版。British Crop Production Council（BCPC）、英国サリー州ファーマム。

【0667】

他の有効成分

式1の分子は、以下：

1. 3-（4-クロロ-2，6-ジメチルフェニル）-4-ヒドロキシ-8-オキサ-1-アザスピロ〔4，5〕デス-3-エン-2-オン；
2. 3-（4'-クロロ-2，4-ジメチル〔1，1'-ビフェニル〕-3-イル）-4-ヒドロキシ-8-オキサ-1-アザスピロ〔4，5〕デス-3-エン-2-オン；
3. 4-〔〔（6-クロロ-3-ピリジニル）メチル〕メチルアミノ〕-2（5H）-フランオン；
4. 4-〔〔（6-クロロ-3-ピリジニル）メチル〕シクロプロピルアミノ〕-2（5

H) -フラノン；

5. 3-クロロ-N2-[(1S) -1-メチル-2-(メチルスルホニル)エチル]-N1-[2-メチル-4-[1, 2, 2, 2-テトラフルオロ-1-(トリフルオロメチル)エチル]フェニル]-1, 2-ベンゼンジカルボキサミド；

6. 2-シアノ-N-エチル-4-フルオロ-3-メトキシ-ベネンスルホンアミド (benenesulfonamide)；

7. 2-シアノ-N-エチル-3-メトキシ-ベンゼンスルホンアミド；

8. 2-シアノ-3-ジフルオロメトキシ-N-エチル-4-フルオロ-ベンゼンスルホンアミド；

9. 2-シアノ-3-フルオロメトキシ-N-エチル-ベンゼンスルホンアミド；

10. 2-シアノ-6-フルオロ-3-メトキシ-N, N-ジメチル-ベンゼンスルホンアミド；

11. 2-シアノ-N-エチル-6-フルオロ-3-メトキシ-N-メチル-ベンゼンスルホンアミド；

12. 2-シアノ-3-ジフルオロメトキシ-N, N-ジメチルベンゼンスルホンアミド；

13. 3-(ジフルオロメチル)-N-[2-(3, 3-ジメチルブチル)フェニル]-1-メチル-1H-ピラゾール-4-カルボキサミド；

14. N-エチル-2, 2-ジメチルプロピオンアミド-2-(2, 6-ジクロロ- α , α -トリフルオロ-p-トリル)ヒドラゾン；

15. N-エチル-2, 2-ジクロロ-1-メチルシクロプロパン-カルボキサミド-2-(2, 6-ジクロロ- α , α -トリフルオロ-p-トリル)ヒドラゾンニコチン；

16. O-{(E)-[2-(4-クロロフェニル)-2-シアノ-1-(2-トリフルオロメチルフェニル)-ビニル]}S-メチルチオカーボネート；

17. (E)-N1-[(2-クロロ-1, 3-チアゾル-5-イルメチル)]-N2-シアノ-N1-メチルアセトアミジン；

18. 1-(6-クロロピリジン-3-イルメチル)-7-メチル-8-ニトロ-1, 2, 3, 5, 6, 7-ヘキサヒドロ-イミダゾ [1, 2-a]ピリジン-5-オール；

19. 4-[4-クロロフェニル-(2-ブチリジン-ヒドラゾノ)メチル]フェニルメシレート；および

20. N-エチル-2, 2-ジクロロ-1-メチルシクロプロパンカルボキサミド-2-(2, 6-ジクロロ- α , α -トリフルオロ-p-トリル)ヒドラゾン

の1種若しくはそれ以上と(配合混合物または同時若しくは逐次適用におけるように)組合せでもまた使用しうる。

【0668】

共力混合物

式1の分子は、式1の分子の作用様式と比較したこうした化合物の作用様式が同一、類似若しくは異なる共力混合物を形成するようにある種の活性化合物とともに使用しうる。作用様式の例は、限定されるものでないが：アセチルコリンエステラーゼ阻害剤；ナトリウムチャンネル調節物質；キチン生合成阻害剤；GABAおよびグルタミン酸作動性クロライドチャンネルアンタゴニスト；GABAおよびグルタミン酸作動性クロライドチャンネルアゴニスト；アセチルコリン受容体アゴニスト；アセチルコリン受容体アンタゴニスト；MET I阻害剤；Mg刺激性ATPアーゼ阻害剤；ニコチン性アセチルコリン受容体；中腸膜攪乱物質；酸化的リン酸化攪乱物質、ならびにリアノジン受容体(RyRs)を挙げることができる。一般に、別の化合物との共力混合物中の式1の分子の重量比は、約10：1から約1：10まで、別の態様においては約5：1から約1：5まで、および別の態様においては約3：1から、ならびに別の態様においては約1：1である。

【0669】

製剤

農薬はその純粋な形態で適用にまれに適する。農薬を必要とされる濃度でかつ適切な形

10

20

30

40

50

態で使用して適用、取り扱い、輸送、貯蔵の容易さおよび最大農薬活性を可能にすることができるよう、他の物質を添加することが通常必要である。かように、農薬は、例えば餌、CE剤、粉剤、乳剤、燻蒸剤、ゲル剤、粒剤、微小被包化、種子処理、SC剤、SE剤、錠剤、水溶性液体、水和性顆粒剤若しくはドライフロアブル剤、水和剤、および超低容量溶液に調合される。製剤の種類についてのさらなる情報については、Crop Life Internationalによる“Catalogue of Pesticide Formulation Types and International Coding System”技術モノグラフ第2号、第5版(2002)を参照されたい。

【0670】

農薬は、こうした農薬の濃縮製剤から調製される水性懸濁液若しくは乳剤として最もしばしば適用される。こうした水溶解性、水に懸濁可能若しくは乳化可能な製剤は、水和剤若しくは水和性顆粒剤として通常知られる固形物、または乳剤として通常知られる液体、あるいは水性懸濁液のいずれでもある。水和性顆粒剤を形成するよう固めることができる水和剤は、農薬、担体および界面活性剤の緊密な混合物を含んでなる。農薬の濃度は通常約10%から約90重量%までである。担体は、通常、アタパルジャイト粘土、モンモリロナイト粘土、ケイ藻土若しくは精製ケイ酸塩のなかから選択される。水和剤の約0.5%から約10%までを含んでなる効果的な界面活性剤は、スルホン酸化リグニン、縮合ナフタレンスルホネート、ナフタレンスルホネート、アルキルベンゼンスルホネート、アルキルサルフェート、およびアルキルフェノールのエチレンオキシド付加物のような非イオン性界面活性剤のなかに見出される。

【0671】

農薬の乳剤は、水と混合可能な溶媒若しくは水と混合不可能な有機溶媒および乳化剤の混合物のいずれかである担体に溶解された液体1リットルあたり約50から約500グラムまでのような便宜的濃度の農薬を含んでなる。有用な有機溶媒は、芳香族物質(aromatics)、とりわけキシレン、および石油画分、とりわけ、重質芳香族ナフサのような石油の高沸点ナフタレンおよびオレフィン部分を包含する。ロジン誘導体を包含するテルペン溶媒、シクロヘキサノンのような脂肪族ケトン、および2-エトキシエタノールのような複合アルコールのような他の有機溶媒もまた使用しうる。乳剤の適する乳化剤は慣習的な陰イオン性および非イオン性界面活性剤から選択される。

【0672】

水性懸濁液は、約5%から約50重量%までの範囲の濃度で水性担体に分散された水不溶性農薬の懸濁液を含んでなる。懸濁液は、農薬を微細に粉碎すること、ならびにそれを水および界面活性剤から構成される担体に活発に混合することにより製造する。無機塩および合成若しくは天然のガムのような成分もまた、水性担体の密度および粘度を増大させるために添加してもよい。水性混合物を調製することおよびサンドミル、ボールミル若しくはピストン型ホモジェナイザーのような器具中でそれを均質化することにより、農薬を同時に粉碎および混合することがしばしば最も効果的である。

【0673】

農薬は土壌への適用にとりわけ有用である顆粒状組成物としてもまた適用しうる。顆粒状組成物は通常、粘土若しくは類似の物質を含んでなる担体に分散された約0.5%から約10重量%までの農薬を含有する。こうした組成物は通常、農薬を適する溶媒に溶解すること、および約0.5から約3mmまでの範囲の適切な粒子径に前成形されている顆粒状担体にそれを塗布することにより製造する。こうした組成物は、担体および化合物のドウ若しくはペーストを作成すること、ならびに粉碎および乾燥して所望の顆粒粒子径を得ることによってもまた調合しうる。

【0674】

農薬を含有する粉剤は、粉末の形態の農薬をカオリン粘土、粉碎火山岩などのような適する微粉農業担体と緊密に混合することにより製造する。粉剤は適しては約1%から約10%までの農薬を含有し得る。それらは種子粉衣として若しくはダストブロー機械を用いる茎葉散布として適用し得る。

【0675】

農業化学で広範に使用されている適切な有機溶媒、通常は噴霧油のような石油中の溶液の形態の農薬を適用することが等しく实际的である。

【0676】

農薬はエアゾル組成物の形態でもまた適用し得る。こうした組成物中で、農薬は圧力を発生させる噴射剤混合物である担体に溶解若しくは分散されている。エアゾル組成物は、該混合物がそれから霧化バルブを通して分注される容器に包装される。

【0677】

農薬餌は農薬を食物若しくは誘引物質または双方と混合する場合に形成される。害虫が該餌を食べる場合にそれらは該農薬もまた消費する。餌は顆粒、ゲル、流動可能な粉末、液体若しくは固体の形態をとりうる。それらは害虫の潜伏場所で使用し得る。

10

【0678】

燻蒸剤は、比較的高い蒸気圧を有しかつこれゆえに土壌若しくは閉鎖空間中で害虫を殺すのに十分な濃度のガスとして存在し得る農薬である。燻蒸剤の毒性はその濃度および曝露時間に比例する。それらは拡散のための良好な能力を特徴とし、そして害虫の呼吸器系に浸透するか若しくは害虫のクチクラを通して吸収されることにより作用する。燻蒸剤は、ガスを通さないシートの下、ガス封止室若しくは建物の中、または特殊なチャンパー中で、貯蔵食品害虫を防除するために適用される。

【0679】

農薬は、農薬の粒子若しくは液滴を多様な種類のプラスチックポリマー中に懸濁することにより微小被包化し得る。ポリマーの化学を変えることにより、若しくは処理において因子を変えることにより、多様な大きさ、溶解性、壁厚および浸透性の程度のマイクロカプセルを形成し得る。これらの因子は中の有効成分が放出される速度を左右し、それは順に製品の残余の性能、作用の速度およびにおいに影響を及ぼす。

20

【0680】

油剤濃縮物は、溶液中に農薬を保持することができる溶媒に農薬を溶解することにより作成する。農薬の油溶液は、通常、農薬作用を有する溶媒それら自身、および農薬の取り込みの速度を増大させる外皮の蠟性被覆の溶解により、他の製剤より迅速な害虫の消滅および死滅を提供する。油剤の他の利点は、より良好な貯蔵安定性、隙間のより良好な浸透および脂性表面へのより良好な付着を包含する。

30

【0681】

別の態様はEW剤であり、ここで、該エマルションは、それぞれ層状の液晶コーティングを提供されかつ水層に分散されている油性小球を含んでなり、各油性小球は農業で活性である最低1種の化合物を含んでなり、かつ：（1）最低1種の非イオン性親油性界面活性剤、（2）最低1種の非イオン性親水性界面活性剤、および（3）最低1種のイオン性界面活性剤、を含んでなるモノラメラ若しくはオリゴラメラの層で個別に被覆されており、該小球は800ナノメートル未満の平均粒子径を有する。該態様に関するさらなる情報は、特許出願番号第11/495,228号を有する2007年2月1日公開の米国特許公開第20070027034号明細書に開示されている。使用の容易さのため、本態様を「OIWE」と称することができる。

40

【0682】

さらなる情報については、D. Dentによる“*Insect Pest Management*”第2版、版權 CAB International (2000)を参照されたい。加えて、より詳細な情報については、Arnold Mallisによる“*Handbook of Pest Control—The Behavior, Life History, and Control of Household Pests*”、第9版、GIE Media Incによる版權 2004年を参照されたい。

【0683】

他の製剤成分

一般に、式1に開示される分子が製剤中で使用される場合、こうした製剤は他の成分も

50

また含有し得る。これらの成分は、限定されるものでないが（これは網羅的でなくかつ相互に排除しない一覧である）湿潤剤、展着剤、粘着剤、浸透剤、緩衝剤、封鎖剤、ドリフト低減剤、適合性剤、消泡剤、清浄剤および乳化剤を挙げることができる。数種の成分を直ちに記述する。

【0684】

湿潤剤は、液体に添加される場合に、液体とそれが広がっている表面の間の界面張力を低下させることにより液体の広がりすなわち浸透力を増大させる物質である。湿潤剤は農薬製剤で2種の主要な機能、すなわち、加工および製造の間に水中への粉末の湿潤の速度を増大させて可溶性液体の濃縮物若しくはSC剤を作成するため；ならびに、噴霧タンク中での製品の水との混合の間に、水和剤の湿潤時間を短縮しかつ水和性顆粒剤中への水の浸透を改良するために使用される。水和剤、SC剤および水和性顆粒剤の製剤で使用される湿潤剤の例は：ラウリル硫酸ナトリウム；ジオクチルスルホコハク酸ナトリウム；アルキルフェノールエトキシレート；および脂肪アルコールエトキシレートである。

【0685】

分散助剤は、粒子表面上に吸着しそして粒子の分散の状態を保存するのを助けかつそれらが再凝集することを予防する物質である。分散助剤は、製造の間に分散および懸濁を促進するため、ならびに粒子が噴霧タンク中で水に再分散することを確実にするために農薬製剤に添加される。それらは水和剤、SC剤および水和性顆粒中で広範に使用されている。分散助剤として使用される界面活性剤は、粒子表面上に強く吸着しかつ粒子の再凝集に対する荷電若しくは立体障壁を提供する能力を有する。最も普遍的に使用される界面活性剤は陰イオン性、非イオン性、若しくは該2種類の混合物である。水和剤の製剤について、最も普遍的な分散助剤はリグノスルホン酸ナトリウムである。SC剤について、非常に良好な吸着および安定化は、ナフタレンスルホン酸ナトリウムホルムアルデヒド縮合物のような多価電解質を使用して得られる。トリスチリルフェノールエトキシレートホスフェートエステルもまた使用される。アルキルアリールエチレンオキシド縮合物およびEO-POブロックコポリマーのような非イオン性物（non-ionic）は、ときに、SC剤のための分散助剤として陰イオン性物（anionic）と組合せられる。近年、新たな種類の非常に高分子量のポリマー界面活性剤が分散助剤として開発された。これらは非常に長い疎水性「バックボーン」、および「クシ」界面活性剤の「歯」を形成する多数のエチレンオキシド鎖を有する。これら高分子量ポリマーは、疎水性バックボーンが粒子表面上に多くのアンカリング点を有するため、SC剤に非常に良好な長期安定性を与えることができる。農薬製剤で使用される分散助剤の例は：リグノスルホン酸ナトリウム；ナフタレンスルホン酸ナトリウムホルムアルデヒド縮合物；トリスチリルフェノールエトキシレートホスフェートエステル；脂肪アルコールエトキシレート；アルキルエトキシレート；EO-POブロックコポリマー；およびグラフトコポリマーである。

【0686】

乳化剤は、1液層の液滴の別の液層中の懸濁剤を安定化する物質である。乳化剤なしでは該2種の液体は2個の混合不可能な液層に分離するであろう。最も普遍的に使用される乳化剤ブレンドは、12若しくはそれ以上のエチレンオキシド単位をもつアルキルフェノール若しくは脂肪アルコールおよびドデシルベンゼンスルホン酸の油溶性カルシウム塩を含有する。8から18までの親水-親油バランス（「HLB」）値の範囲が、通常、良好な安定なエマルジョンを提供することができる。エマルジョンの安定性はときに、少量のEO-POブロックコポリマー界面活性剤の添加により改良することができる。

【0687】

可溶化剤は、臨界ミセル濃度より上の濃度で水中でミセルを形成することができる界面活性剤である。ミセルはその後、ミセルの疎水性部分の内側の水不溶性物質を溶解若しくは可溶化することが可能である。可溶化に通常使用される界面活性剤の種類は、非イオン性物、ソルビタンモノオレエート、ソルビタンモノオレエートエトキシレート、およびメチルオレエートエステルである。

【0688】

界面活性剤は、ときに、標的に対する農薬の生物学的性能を改良するための噴霧タンク混合物への補助物質として、単独でまたは鉱物若しくは植物油のような他の添加物とともにのいずれでも使用される。生物増強に使用される界面活性剤の種類は一般に農薬の性質および作用様式に依存する。しかしながら、それらはしばしば：アルキルエトキシレート；直鎖状脂肪アルコールエトキシレート；脂肪アミンエトキシレートのような非イオン性物である。

【0689】

農業製剤中の担体若しくは希釈剤は、必要とされる濃度の製品を生じるように農薬に添加される物質である。担体は通常高吸収能力をもつ物質である一方、希釈剤は通常低吸収能力をもつ物質である。担体および希釈剤は、粉剤、水和剤、粒剤および水和性顆粒剤の製剤で使用される。

10

【0690】

有機溶媒は、主に、乳剤の製剤、EW剤、SE剤および超低容量製剤、ならびにより小さい程度まで顆粒状製剤で使用される。ときに溶媒の混合物が使用される。溶媒の第一の主な群はケロセン若しくは精製パラフィンのような脂肪パラフィン油である。第二の主な群（および最も普遍的なもの）は、キシレン、ならびにC9およびC10芳香族溶媒のより高分子量の画分のような芳香族溶媒を含んでなる。塩素化炭化水素は、製剤が水中に乳化される場合に農薬の結晶化を予防するための補助溶媒として有用である。アルコールが溶解力を増大するための補助溶媒としてときに使用される。他の溶媒は、植物油、種子油、ならびに植物および種子油のエステルを包含しうる。

20

【0691】

増粘剤若しくはゲル化剤は、主に、SC剤、エマルジョン製剤およびSE剤の製剤中で、液体のレオロジーすなわち流動特性を改変するため、ならびに分散された粒子若しくは液滴の分離および沈殿を予防するために使用される。増粘剤、ゲル化剤および沈殿防止剤は、一般に2種のカテゴリー、すなわち水不溶性微粒子および水溶性ポリマーに入る。粘土およびシリカを使用してSC剤の製剤を製造することが可能である。これらの種類の物質の例は、限定されるものでないが、モントモリロナイト、ベントナイト、ケイ酸アルミニウムマグネシウムおよびアタパルジャイトを挙げることができる。水溶性多糖が増粘ゲル化剤として長年使用されている。最も普遍的に使用される多糖の種類は、種子および海藻の天然の抽出物であるか、若しくはセルロースの合成誘導体である。これらの種類の物質の例は、限定されるものでないが、グアールガム；ローカストビーングラム；カラギーナン；アルギン酸塩；メチルセルロース；カルボキシメチルセルロースナトリウム（SCMC）；ヒドロキシエチルセルロース（HEC）を挙げることができる。他の種類の沈殿防止剤は、化工デンプン、ポリアクリレート、ポリビニルアルコールおよびポリエチレンオキシドに基づく。別の良好な沈殿防止剤はキサンタンガムである。

30

【0692】

微生物は調合された製品の損傷を引き起こし得る。従って、保存剤を、それらの影響を排除若しくは低減するのに使用する。こうした剤の例は、限定されるものでないが：プロピオン酸およびそのナトリウム塩；ソルビン酸およびそのナトリウム若しくはカリウム塩；安息香酸およびそのナトリウム塩；p-ヒドロキシ安息香酸ナトリウム塩；p-ヒドロキシ安息香酸メチル；ならびに1, 2-ベンズイソチアゾリン-3-オン（BIT）を挙げることができる。

40

【0693】

界面活性剤の存在は、しばしば、水に基づく製剤が製造および噴霧タンクによる適用での混合操作の間に発泡することを引き起こす。発泡する傾向を減少させるため、消泡剤を、しばしば製造段階の間若しくは瓶に充填する前のいずれかに添加する。一般に2種類の消泡剤すなわちシリコーンおよびシリコーン以外が存在する。シリコーンは通常ジメチルポリシロキサン（シリコーン）の水性乳剤である一方、シリコーン以外の消泡剤は、オクタノールおよびノナノールのような水不溶性の油若しくはシリカである。双方の場合で、消泡剤の機能は空気と水の界面から界面活性剤を追い出すことである。

50

【0694】

「環境に優しい」剤（例えば補助物質、界面活性剤、溶媒）は、作物保護製剤の全体的環境フットプリントを低減し得る。環境に優しい剤は、生物分解性であり、そして一般に天然のかつ／若しくは持続可能な供給源、例えば植物および動物供給源由来である。特定の例は：植物油、種子油、およびそれらのエステル、またアルコキシル化アルキルポリグルコシドである。

【0695】

さらなる情報については、D. A. Knowlesにより編集された“Chemistry and Technology of Agrochemical Formulations”、Kluwer Academic Publishersによる版權 1998年を参照されたい。A. S. Perry、I. Yamamoto、I. IshayaおよびR. Perryによる“Insecticides in Agriculture and Environment—Retrospects and Prospects”、Springer-Verlagによる版權 1998年もまた参照されたい。

【0696】

病害虫

全般として、式1の分子は、病害虫、例えば甲虫、ハサミムシ、ゴキブリ、ハエ、アブラムシ、カイガラムシ、コナジラミ、ヨコバイ、アリ、ハチ、シロアリ、ガ、チョウ、シラミ、直翅類昆虫（grasshoppers）、飛蝗（locusts）、コオロギ、ノミ、アザミウマ、シミ、ダニ、マダニ、線虫類およびコムカデ類を防除するのに使用しうる。

【0697】

別の態様において、式1の分子は線形動物門および／若しくは節足動物門の病害虫を防除するのに使用しうる。

【0698】

別の態様において、式1の分子は鋏角亜門、多足亜門および／若しくは六脚亜門の病害虫を防除するのに使用しうる。

【0699】

別の態様において、式1の分子はクモ綱、コムカデ綱および／若しくは昆虫綱の病害虫を防除するのに使用しうる。

【0700】

別の態様において、式1の分子はシラミ目の病害虫を防除するのに使用しうる。特定の属の網羅的でない一覧は、限定されるものでないが、ブタジラミ属（Haematopinus）スピーシーズ、ホプロプレウラ属（Hoplopleura）スピーシーズ、ケモノホソジラミ属（Linognathus）スピーシーズ、シラミ属（Pediculus）スピーシーズおよびイエネズミジラミ属（Polyplox）スピーシーズを挙げることができる。特定の種の網羅的でない一覧は、限定されるものでないがウマジラミ（Haematopinus asini）、ブタジラミ（Haematopinus suis）、イヌジラミ（Linognathus setosus）、ヒツジジラミ（Linognathus ovillus）、アタマジラミ（Pediculus humanus capitis）、コロモジラミ（Pediculus humanus humanus）およびケジラミ（Pthirus pubis）を挙げることができる。

【0701】

別の態様において、式1の分子はコウチュウ目の病害虫を防除するのに使用しうる。特定の属の網羅的でない一覧は、限定されるものでないが、ミツバメゾウムシ属（Acanthoscelides）スピーシーズ、アグリオテス属（Agriotes）スピーシーズ、アントノムス属（Anthonomus）スピーシーズ、ホソクチゾウムシ属（Apion）スピーシーズ、カンショコガネ属（Apogonia）スピーシーズ、ウリハムシ属（Aulacophora）スピーシーズ、ブルクス属（Bruchus）スピー

10

20

30

40

50

ーシイズ、セロステルナ属 (Cerosterna) スピーシイズ、セロトマ属 (Cerotoma) スピーシイズ、サルゾウムシ属 (Ceutorhynchus) スピーシイズ、カエトクネマ属 (Chaetocnema) スピーシイズ、コラスピス属 (Colaspis) スピーシイズ、クテニセラ属 (Ctenicera) スピーシイズ、シギゾウムシ属 (Curculio) スピーシイズ、コガネカブト属 (Cyclocephala) スピーシイズ、ディアブロティカ属 (Diabrotica) スピーシイズ、タコゾウムシ属 (Hypera) スピーシイズ、イプス属 (Ips) スピーシイズ、リクツス属 (Lyctus) スピーシイズ、メガスケリス属 (Megascelis) スピーシイズ、チビケシキスイ属 (Meligethes) スピーシイズ、オチオリンクス属 (Otiorrhynchus) スピーシイズ、パントモルス属 (Pantomorus) スピーシイズ、フィロファガ属 (Phyllophaga) スピーシイズ、キスジノミハムシ属 (Phyllotreta) スピーシイズ、リゾトログス属 (Rhizotrogus) スピーシイズ、リンキテス属 (Rhynchites) スピーシイズ、リンコフォルス属 (Rhynchophorus) スピーシイズ、スコリツス属 (Scolytus) スピーシイズ、スフェノフォルス属 (Sphenophorus) スピーシイズ、コクゾウムシ属 (Sitophilus) スピーシイズおよびトリボリウム属 (Tribolium) スピーシイズを挙げることができる。特定の種の網羅的でない一覧は、限定されるものでないが、インゲンマメゾウムシ (Acanthoscelides obtectus)、アオナガタマムシ (Agrius planipennis)、ツヤハダゴマダラカミキリ (Anoplophora glabripennis)、ワタミハナゾウムシ (Anthonomus grandis)、アタエニウス スプレツルス (Ataenius spretulus)、アトマリア リネアリス (Atomaria linearis)、ボチノデレス プンクチベントリス (Bothynoderes punctiventris)、エンドウゾウムシ (Bruchus pisorum)、ヨツモンマメゾウムシ (Callosobruchus maculatus)、クリヤケシキスイ (Carpophilus hemipterus)、カッシダ ビッタタ (Cassida vittata)、セロトマ トリフルカタ (Cerotoma trifurcata)、キャベツサヤゾウムシ (Ceutorhynchus assimilis)、セウトリンクス ナピ (Ceutorhynchus napi)、コノデルス スカラリス (Conoderus scalaris)、コノデルス スチグモス (Conoderus stigmaticus)、スモモゾウムシ (Conotrachelus nenuphar)、コチニス ニチダ (Cotinis nitida)、クリオセリス アスパラギ (Crioceris asparagi)、サビカクムネチビヒラタムシ (Cryptolestes ferrugineus)、カクムネチビヒラタムシ (Cryptolestes pusillus)、トルコカクムネチビヒラタムシ (Cryptolestes turcicus)、シリンドロコプツルス アドスペルス (Cylindrocopturus adspersus)、デポラウス マルギナツス (Deporaus marginatus)、オビカツオブシムシ (Dermeestes lardarius)、ハラジロカツオブシムシ (Dermeestes maculatus)、インゲンテントウ (Epilachna varivestis)、ファウスチヌス クバエ (Faustinus cubae)、ヒロビウス パレス (Hyllobius pales)、アルファルフアタコゾウムシ (Hypera postica)、コーヒーミノキクイムシ (Hypothenemus hampei)、タバコシバンムシ (Lasioderma serricorne)、コロラドハムシ (Leptinotarsa decemlineata)、リオゲニス フスクス (Liogenys fuscus)、リオゲニス スツラリス (Liogenys suturalis)、イネミズゾウムシ (Lissorhoptus oryzophilus)、マエコラスピス ジョリベチ (Maecolaspis joliveti)、メラノツス コムニス (Melanotus communis)、メリゲテス アエネウス (Meligethes aeneus)、ヨーロッパコフキコガネ (Melolontha m

10

20

30

40

50

elolontha)、オベレア ブレビス (Oberia brevis)、オベレア
リネアリス (Oberia linearis)、サイカブト (Oryctes rhinoceros)、オオメノコギリヒラタムシ (Oryzaephilus mercator)、ノコギリヒラタムシ (Oryzaephilus surinamensis)、クビアカクビホソハムシ (Oulema melanopus)、イネクビホソハムシ (Oulema oryzae)、フィロファガ クヤバナ (Phyllophaga cuyabana)、マメコガネ (Popillia japonica)、オオコナナガシンクイ (Prostephanus truncatus)、コナナガシンクイムシ (Rhyzopertha dominica)、アカアシチビコフキゾウムシ (Sitona lineatus)、グラナリアコクゾウムシ (Sitophilus granarius)、コクゾウムシ (Sitophilus oryzae)、コクゾウムシ (Sitophilus zeamais)、ジンサンシバンムシ (Stegobium paniceum)、コクヌストモドキ (Tribolium castaneum)、ヒラタコクヌストモドキ (Tribolium confusum)、キマダラカツオブシムシ (Trogoderma variabile) およびザブルス テネブリオイデス (Zabrus tenebrioides) を挙げることができる。

【0702】

別の態様において、式1の分子はハサミムシ目の害虫を防除するのに使用しうる。

【0703】

別の態様において、式1の分子はゴキブリ目の害虫を防除するのに使用しうる。特定の種の網羅的でない一覧は、限定されるものでないがチャバネゴキブリ (Blattella germanica)、トウヨウゴキブリ (Blatta orientalis)、パルコブラッタ ペンシルバニカ (Parcoblatta pennsylvanica)、ワモンゴキブリ (Periplaneta americana)、コワモンゴキブリ (Periplaneta australasiae)、トビイロゴキブリ (Periplaneta brunnea)、クロゴキブリ (Periplaneta fuliginosa)、オガサワラゴキブリ (Pycnoscelus surinamensis) およびチャオビゴキブリ (Supella longipalpa) を挙げることができる。

【0704】

別の態様において、式1の分子はハエ目の害虫を防除するのに使用しうる。特定の属の網羅的でない一覧は、限定されるものでないがヤブカ属 (Aedes) スピーシーズ、アグロミザ属 (Agromyza) スピーシーズ、アナストレファ属 (Anastrepha) スピーシーズ、ハマダラカ属 (Anopheles) スピーシーズ、バクトロセラ属 (Bactrocera) スピーシーズ、セラチチス属 (Ceratitis) スピーシーズ、メクラアブ属 (Chrysops) スピーシーズ、コクリオミイヤ属 (Cochliomyia) スピーシーズ、コンタリニア属 (Contarinia) スピーシーズ、イエカ属 (Culex) スピーシーズ、ダシネウラ属 (Dasineura) スピーシーズ、デリア属 (Delia) スピーシーズ、ショウジョウバエ属 (Drosophila) スピーシーズ、ヒメイェバエ属 (Fannia) スピーシーズ、ヒレミイヤ属 (Hylemyia) スピーシーズ、リリオミザ属 (Liriomyza) スピーシーズ、イエバエ属 (Musca) スピーシーズ、フォルビア属 (Phorbia) スピーシーズ、アブ属 (Tabanus) スピーシーズおよびガガンボ属 (Tipula) スピーシーズを挙げることができる。特定の種の網羅的でない一覧は、限定されるものでないが、ムラサキウマゴヤシハモグリムシ (Agromyza frontella)、カリブミバエ (Anastrepha suspensa)、メキシコミバエ (Anastrepha ludens)、アナストレファ オブリカ (Anastrepha obliqua)、ウリミバエ (Bactrocera cucurbitae)、ミカンコミバエ (Bactrocera dorsalis)、バクトロセラ インバデンス (Bactrocera invadens)、モモミバエ (Bactrocera zonata)、チチ

10

20

30

40

50

ユウカイミバエ (Ceratitis capitata)、ダイコンタマバエ (Dasineura brassicae)、タネバエ (Delia platura)、ヒメイエバエ (Fannia canicularis)、コブアシヒメイエバエ (Fannia scalaris)、ウマバエ (Gasterophilus intestinalis)、グラシリャ ペルセアエ (Gracillia perseae)、ノサシバエ (Haematobia irritans)、キスジウシバエ (Hypoderma lineatum)、アブラナハモグリバエ (Liriomyza brassicae)、ヒツジシラミバエ (Melophagus ovinus)、ムスカ アウツムナリス (Musca autumnalis)、イエバエ (Musca domestica)、ヒツジバエ (Oestrus ovis)、オスシネラ フリット (Oscinella frit)、テンサイハモグリバエ (Pegomya betae)、ニンジンサビバエ (Psila rosae)、ヨーロッパオウトウミバエ (Rhagoletis cerasi)、リンゴミバエ (Rhagoletis pomonella)、ラゴレチス メンダックス (Rhagoletis mendax)、ムギアカタマバエ (Sitodiplosis mosellana) およびサシバエ (Stomoxys calcitrans) を挙げることができる。

【0705】

別の態様において、式1の分子はカメムシ目の害虫を防除するのに使用しうる。特定の属の網羅的でない一覧は、限定されるものでないが、アデルゲス属 (Adelges) スピーシーズ、アウラカスピス属 (Aulacaspis) スピーシーズ、アフロフォラ属 (Aphrophora) スピーシーズ、ワタアブラムシ属 (Aphis) スピーシーズ、ベミシア属 (Bemisia) スピーシーズ、ロウムシ属 (Ceroplastes) スピーシーズ、キオナスピス属 (Chionaspis) スピーシーズ、トビイロマルカイガラムシ属 (Chrysomphalus) スピーシーズ、カタカイガラムシ属 (Coccus) スピーシーズ、ミドリヒメヨコバイ属 (Empoasca) スピーシーズ、レピドサフェス属 (Lepidosaphes) スピーシーズ、ラギノトムス属 (Lagynotomus) スピーシーズ、マキバカスミカメ属 (Lygus) スピーシーズ、マクロシフム属 (Macrosiphum) スピーシーズ、ツマグロヨコバイ属 (Nephotettix) スピーシーズ、ネザラ属 (Nezara) スピーシーズ、フィラエヌス属 (Philaenus) スピーシーズ、オオマダラカスミカメ属 (Phytocoris) スピーシーズ、ピエゾドルス属 (Piezodorus) スピーシーズ、ミカンコナカイガラムシ属 (Planococcus) スピーシーズ、クワコナカイガラムシ属 (Pseudococcus) スピーシーズ、ロパロシフム属 (Rhopalosiphum) スピーシーズ、ハンエンカタカイガラムシ属 (Saissetia) スピーシーズ、テリオアフィス属 (Therioaphis) スピーシーズ、トウメイエラ属 (Toumeyella) スピーシーズ、トキソプテラ属 (Toxoptera) スピーシーズ、トリアレウロデス属 (Triaeuroides) スピーシーズ、サシガメ属 (Triatoma) スピーシーズおよびヤノネカイガラムシ属 (Unaspis) スピーシーズを挙げることができる。特定の種の網羅的でない一覧は、限定されるものでないが、アクロステルヌム ヒラレ (Acrosternum hilare)、エンドウヒゲナガアブラムシ (Acyrtosiphon pisum)、タマナコナジラミ (Aleyrodes proleptella)、スパイラルリングコナジラミ (Aleurodicus dispersus)、ミカンワタコナジラミ (Aleurothrixus floccosus)、フタテンミドリヒメヨコバイ (Amrasca biguttula biguttula)、アカマルカイガラムシ (Aonidiella aurantii)、ワタアブラムシ (Aphis gossypii)、ダイズアブラムシ (Aphis glycines)、ヨーロッパリンゴアブラムシ (Aphis pomi)、ジャガイモヒゲナガアブラムシ (Aulacorthum solani)、シルバーリーフコナジラミ (Bemisia argentifolii)、タバココナジラミ (Bemisia tabaci)、アメリカコバネナガカメムシ (Blissus leucopt

10

20

30

40

50

erus)、ブラキコリネラ アスパラギ (Brachycorynella aspara-
ragi)、ブレベンニア レヒ (Brevennia rehi)、ダイコンアブラム

シ (Brevicoryne brassicae)、カロコリス ノルベギクス (Ca-
locoris norvegicus)、ルビーロウカイガラムシ (Ceroplas-
tes rubens)、タイワントコジラミ (Cimex hemipterus)、

トコジラミ (Cimex lectularius)、ダグベルツス ファスシアツス (Dagbertus fasciatus)、ディケロプス フルカツス (Dichel-
ops furcatus)、ロシアコムギアブラムシ (Diuraphis noxi-
a)、ミカンキジラミ (Diaphorina citri)、オオバコアブラムシ (Dysaphis plantaginea)、ジスデルクス スツレルス (Dysder-
cus suturellus)、エデッサ メディタブンダ (Edessa medi-
tabunda)、リンゴワタムシ (Eriosoma lanigerum)、エウリ

ガスター マウラ (Eurygaster maura)、エウスキスツス ヘロス (Eus-
chistus heros)、エウスキスツス セルプス (Euschistus
servus)、ヘロベルチス アントニイ (Helopeltis antonii)、

ヘロベルチス テイボラ (Helopeltis theivora)、ワタフキカ

イガラムシ (Icerya purchasi)、イディオスコプス ニチズルス (Id-
ioscopus nitidulus)、ヒメトビウンカ (Laodelphax s-
triatellus)、タイワンクモヘリカメムシ (Leptocorisa ora-
torius)、クモヘリカメムシ (Leptocorisa varicornis)

、リグス ヘスペルス (Lygus hesperus)、マコネリコッカス ヒルスツ

ス (Maconelllicoccus hirsutus)、チューリップヒゲナガアブ

ラムシ (Macrosiphum euphorbiae)、ムギヒゲナガアブラムシ (Macrosiphum granarium)、バラアブラムシ (Macrosiphum rosae)、ヨツテンヨコバイ (Macrosteles quadrilineatus)、マハナルバ フリムビオラタ (Mahanarva frimbolata)、ムギウスイロアブラムシ (Metopolophium dirhodum)、ミクチス ロンギコルニス (Mictis longicornis)、モモアカアブラムシ (Myzus persicae)、ツマグロヨコバイ (Nephotettix cinctipes)、ネウロコルプス ロンギロストリス (Neurocolpus longirostris)、ミナミアオカメムシ (Nezara viridula)、トビイロウンカ (Nilaparvata lugens)、マルクロホシカイガラムシ (Parlatoria pergandii)、ヒメクロカイガラムシ (Parlatoria ziziphi)、トウモロコシウンカ (Peregrinus maidis)、ブドウネアブラムシ (Phylloxera vitifoliae)、フィソケルメス ピセアエ (Physokermes piceae)、フィトコリス カリフォルニクス (Phytocoris californicus)、フィトコリス レラチプス (Phytocoris relativus)、ピエゾドルス グイルジニイ (Piezodorus guildinii)、ポエシロカプスス リネアツス (Poecilolocapsus lineatus)、プサルス バシニコラ (Psallus vaccinicola)、プセウダシスタ ペルセアエ (Pseudacysta perseae)、パインアップルコナカイガラムシ (Pseudococcus brevipes)、ナシマルカイガラムシ (Quadraspidiotus perniciosus)、トウモロコシアブラムシ (Rhopalosiphum maidis)、ムギクビレアブラムシ (Rhopalosiphum padi)、オリーブカタカイガラムシ (Saissetia oleae)、スカプトコリス カスタネア (Scaptocoris castanea)、ムギミドリアブラムシ (Schizaphis graminum)、ムギヒゲナガアブラムシ (Sitobion avenae)、セジロウンカ (Sogatella furcifera)、オンシツコナジラミ (Trialeurodes vaporariorum)、トリアレウロデス アブチロネウ

10

20

30

40

50

ス (Trialeurodes abutiloneus)、ヤノネカイガラムシ (Unaspis yanonensis) およびズリア エントレリアナ (Zulia entrerriana) を挙げることができる。

【0706】

別の態様において、式1の分子はハチ目の病害虫を防除するのに使用しうる。特定の属の網羅的でない一覧は、限定されるものでないが、トガリハキリアリ属 (Acromyrmex) スピーシーズ、ハキリアリ属 (Atta) スピーシーズ、オオアリ属 (Camponotus) スピーシーズ、ジプリオン属 (Diprion) スピーシーズ、ヤマアリ属 (Formica) スピーシーズ、ヒメアリ属 (Monomorium) スピーシーズ、ネオジプリオン属 (Neodiprion) スピーシーズ、シュウカクアリ属 (Pogonomyrmex) スピーシーズ、アシナガバチ属 (Polistes) スピーシーズ、トフシアリ属 (Solenopsis) スピーシーズ、クロスズメバチ属 (Vesputula) スピーシーズおよびクマバチ属 (Xylocopa) スピーシーズを挙げることができる。特定の種の網羅的でない一覧は、限定されるものでないがカブラハバチ (Athalia rosae)、テキサスハキリアリ (Atta texana)、アルゼンチンアリ (Iridomyrmex humilis)、モノモリウム ミニムム (Monomorium minimum)、イエヒメアリ (Monomorium pharaonis)、ヒアリ (Solenopsis invicta)、アカカミアリ (Solenopsis geminata)、ソレノプシス モレスタ (Solenopsis molesta)、ソレノプシス リクテリ (Solenopsis richter)、ソレノプシス キシロニ (Solenopsis xyloni) およびタピノマセシレ (Tapinoma sessile) を挙げることができる。

【0707】

別の態様において、式1の分子はシロアリ目の病害虫を防除するのに使用しうる。特定の属の網羅的でない一覧は、限定されるものでないが、イエシロアリ属 (Coptotermes) スピーシーズ、コルニテルメス属 (Cornitermes) スピーシーズ、ダイコクシロアリ属 (Cryptotermes) スピーシーズ、ヘテロテルメス属 (Heterotermes) スピーシーズ、カロテルメス属 (Kaloterme) スピーシーズ、インシシテルメス属 (Incisitermes) スピーシーズ、マクロテルメス属 (Macrotermes) スピーシーズ、マルギニテルメス属 (Marginitermes) スピーシーズ、ミクロセロテルメス属 (Microcerotermes) スピーシーズ、プロコルニテルメス属 (Procornitermes) スピーシーズ、ヤマトシロアリ属 (Reticulitermes) スピーシーズ、ツチミゾガラシシロアリ属 (Schedorhinotermes) スピーシーズおよびアメリカオオシロアリ属 (Zootermopsis) スピーシーズを挙げることができる。特定の種の網羅的でない一覧は、限定されるものでないがコプトテルメス クルビグナツス (Coptotermes curvignathus)、コプトテルメス フレンキ (Coptotermes frenchi)、イエシロアリ (Coptotermes formosanus)、ヘテロテルメス アウレウス (Heterotermes aureus)、ミクロテルメス オベシ (Microtermes obesi)、レチクリテルメス バニウレンシス (Reticulitermes banyulensis)、レチクリテルメス グラッセイ (Reticulitermes grassei)、キアシシロアリ (Reticulitermes flavipes)、レチクリテルメス ハゲニ (Reticulitermes hageni)、レチクリテルメス ヘスペルス (Reticulitermes hesperus)、レチクリテルメス サントネンシス (Reticulitermes santonensis)、ヤマトシロアリ (Reticulitermes speratus)、レチクリテルメス チビアリス (Reticulitermes tibialis) およびレチクリテルメス ビルギニクス (Reticulitermes virginicus) を挙げることができる。

【0708】

10

20

30

40

50

別の態様において、式1の分子はチョウ目の病害虫を防除するのに使用しうる。特定の属の網羅的でない一覧は、限定されるものでないが、コカクモンハマキ属 (Adoxophyes) スピーシーズ、ヤガ属 (Agrotis) スピーシーズ、アルギロタエニア属 (Argyrotaenia) スピーシーズ、カコエシア属 (Cacoecia) スピーシーズ、ハマキホソガ属 (Caloptilia) スピーシーズ、キロ属 (Chilo) スピーシーズ、クリソデイクシス属 (Chrysodeixis) スピーシーズ、モンキチョウ属 (Colias) スピーシーズ、クランプス属 (Crambus) スピーシーズ、ジアファニア属 (Diaphania) スピーシーズ、ジアトラエ属 (Diatraea) スピーシーズ、エアリアス属 (Earias) スピーシーズ、エフェスチア属 (Ephestia) スピーシーズ、エピメシス属 (Epimecis) スピーシーズ、フェルチア属 (Feltia) スピーシーズ、ゴルチナ属 (Gortyna) スピーシーズ、ヘリコベルパ属 (Helicoverpa) スピーシーズ、ヘリオティス属 (Heliothis) スピーシーズ、インダルベラ属 (Indarbela) スピーシーズ、リトコレチス属 (Lithocolletis) スピーシーズ、ロクサグロチス属 (Loxagrotis) スピーシーズ、オビカレハ属 (Malacosoma) スピーシーズ、ペリドロマ属 (Peridroma) スピーシーズ、キンモンホソガ属 (Phyllonorycter) スピーシーズ、キョトウ属 (Pseudaletia) スピーシーズ、セサミア属 (Sesamia) スピーシーズ、スポドプテラ属 (Spodoptera) スピーシーズ、シナンテドン属 (Synanthedon) スピーシーズおよびスガ属 (Yponomeuta) スピーシーズを挙げることができる。特定の種の網羅的でない一覧は、限定されるものでないが、シラホシアシブトクチバ (Achaea janata)、リンゴコカクモンハマキ (Adoxophyes orana)、タマナヤガ (Agrotis ipsilon)、アラバマ アルギラセア (Alabama argillacea)、アモルビア クネアナ (Amorbia cuneana)、アミエロイス トランシテラ (Amyelois transitella)、アナカンプトデス デフェクタリア (Anacamptodes defectaria)、モモキバガ (Anarsia lineatella)、ヒメアカキリバ (Anomis sabulifera)、アンチカルシア ゲンマタリス (Anticarsia gemmatalis)、アルキプス アルギロスピラ (Archips argyrospila)、アルキプス ロサナ (Archips rosana)、ミカンコハマキ (Argyrotaenia citrana)、ガンマキンウワバ (Autographa gamma)、ボナゴタ クラナオデス (Bonagota cranaodes)、ユウレイセセリ (Borbo cinnara)、ブックラトリクス ツルベリエラ (Bucculatrix thurberiella)、カプア レチクラナ (Capua reticulana)、モモシンクイガ (Carposina niponensis)、ニカメイガ (Chilo suppressalis)、キロ ポリクリスス (Chilo polychrysus)、クルマチア トランスベルサ (Chlumetia transversa)、ハスオビハマキ (Choristoneura rosaceana)、コブノメイガ (Cnaphalocrocis medinalis)、ココアツマキホソガ (Conopomorpha cramerella)、オオボクトウ (Cossus cossus)、シディア カリヤナ (Cydia caryana)、スモモヒメハマキ (Cydia funebrana)、シディア モレスタ (Cydia molesta)、エンドウシンクイ (Cydia nigricana)、コドリング (Cydia pomonella)、ダルナ ジズクタ (Darna diducta)、ジアトラエ サッカラリス (Diatraea saccharalis)、ジアトラエ グランジオセラ (Diatraea grandiosella)、ミスジアオリング (Earias insulana)、クサオビリング (Earias vittella)、エクジトロファ アウランチアヌム (Ecdytolopha aurantianum)、モロコシマダラメイガ (Elasmopalpus lignosellus)、スジマダラメイガ (Ephestia cautella)、チャマダラメイガ (Ep

10

20

30

40

50

hestia elutella)、スジコナマダラメイガ (Ephesia kuehniella)、エピノチア アポレマ (Epinotia aporema)、リンゴウスチャイロハマキ (Epiphyas postvittana)、バナナセセリ (Erionota thrax)、ブドウホソハマキ (Eupoecilia ambiguella)、エウクソア アウキシリアリス (Euxoa auxiliaris)、ナシヒメシンクイ (Grapholita molesta)、マエウスキノメイガ (Hedylepta indicata)、オオタバコガ (Helicoverpa armigera)、アメリカタバコガ (Helicoverpa zea)、ニセアメリカタバコガ (Heliothis virescens)、ハイマダラノメイガ (Hel lula undalis)、ケイフェリア リコペルシセラ (Keiferia lycopersicella)、ナスノメイガ (Leucinodes orbonalis)、レウコプテラ コフェエラ (Leucoptera coffeella)、レウコプテラ マリフォルエラ (Leucoptera malifoliella)、ロベシア ボトラナ (Lobesia botrana)、ロクサグロチス アルビコスタ (Loxagrotis albicosta)、マイマイガ (Lymantria dispar)、モモハモグリガ (Lyonetia clerkella)、マハセナ コルベッチ (Mahasena corbeti)、ヨトウガ (Mamestra brassicae)、マメノメイガ (Maruca testulalis)、メチサ プラナ (Metisa plana)、アメリカキヨトウ (Mythimna unipuncta)、ネオレウシノデス エレガンタリス (Neoleucinodes elegantalis)、ニンフラ デプンクタリス (Nymphula depunctalis)、ナミスジフユナミシャク (Operophtera brumata)、ヨーロッパアワノメイガ (Ostrinia nubilalis)、オキシジア ベスリア (Oxydia vesulia)、パンデミス セラサナ (Pandemis cerasana)、トビハマキ (Pandemis heparana)、アフリカオナシアゲハ (Papilio demodocus)、ワタアカミムシガ (Pectinophora gossypiella)、ニセタマナヤガ (Peridroma saucia)、ベリレウコプテラ コフェエラ (Perileucoptera coffeella)、ジャガイモキバガ (Phthorimaea operculella)、ミカンコハモグリ (Phyllocnistis citrella)、モンシロチョウ (Pieris rapae)、ブラチペナ スカブラ (Plathypena scabra)、ノシメマダラメイガ (Plodia interpunctella)、コナガ (Plutella xylostella)、ブドウヒメハマキ (Polychrosis viteana)、プライス エンドカルパ (Prays endocarpa)、プライス オレアエ (Prays oleae)、アワヨトウ (Pseudaletia unipuncta)、ダイズシャクトリムシ (Pseudoplusia includens)、ラキプルシア ヌ (Rachiplusia nu)、イッテンオオメイガ (Scirpophaga incertulas)、イネヨトウ (Sesamia inferens)、セサミア ノナグリオイデス (Sesamia nonagrioides)、セトラ ニテンス (Setora nitens)、バクガ (Sitotroga cerealella)、テングハマキ (Sparganothis pillariana)、シロイチモジヨトウ (Spodoptera exigua)、ツマジロクサヨトウ (Spodoptera frugiperda)、スポドプテラ エリダニア (Spodoptera eridania)、テクラ バシリデス (Thecla basilides)、コイガ (Tineola bisselliella)、イラクサギンウワバ (Trichoplusia ni)、トマトキバガ (Tuta absoluta)、コーヒーゴマフボクトウ (Zeuzera coffeae) およびゴマフボクトウ (Zeuzera pyrina) を挙げることができる。

【0709】

別の態様において、式1の分子はハジラミ目の病害虫を防除するのに使用しうる。特定

10

20

30

40

50

の属の網羅的でない一覧は、限定されるものでないが、アナチコーラ属 (Anaticola) スピーシーズ、ボビコーラ属 (Bovicola) スピーシーズ、ケロピステス属 (Chelopistes) スピーシーズ、ゴニオデス属 (Goniodes) スピーシーズ、メナカンツス属 (Menacanthus) スピーシーズおよびケモノハジラミ属 (Trichodectes) スピーシーズを挙げることができる。特定の種の網羅的でない一覧は、限定されるものでないがウシハジラミ (Bovicola bovis)、ヤギハジラミ (Bovicola caprae)、ヒツジハジラミ (Bovicola ovis)、ツノハジラミ (Chelopistes meleagridis)、カクアゴハジラミ (Goniodes dissimilis)、マルハジラミ (Goniodes gigas)、フクロマルハジラミ (Menacanthus stramineus)、ニワトリハジラミ (Menopon gallinae) およびイヌハジラミ (Trichodectes canis) を挙げることができる。

10

【0710】

別の態様において、式1の分子はバッタ目の害虫を防除するのに使用しうる。特定の属の網羅的でない一覧は、限定されるものでないが、メラノプルス属 (Melanoplus) スピーシーズおよびプテロフィラ属 (Pterophylla) スピーシーズを挙げることができる。特定の種の網羅的でない一覧は、限定されるものでないが、モルモンキリギリス (Anabrus simplex)、ケラ (Gryllotalpa africana)、グリロタルパ アウストラリス (Gryllotalpa australis)、グリロタルパ ブラキプテラ (Gryllotalpa brachyptera)、グリロタルパ ヘキサダクトラ (Gryllotalpa hexadactyla)、トノサマバッタ (Locusta migratoria)、ミクロセントルム レチネルベ (Microcentrum retinerve)、サバクトビバッタ (Schistocerca gregaria) およびスクデリア フルカタ (Scudderia furcata) を挙げることができる。

20

【0711】

別の態様において、式1の分子はノミ目の害虫を防除するのに使用しうる。特定の種の網羅的でない一覧は、限定されるものでないが、スズメトリノミ (Ceratophyllus gallinae)、セラトフィルス ニゲル (Ceratophyllus niger)、イヌノミ (Ctenocephalides canis)、ネコノミ (Ctenocephalides felis) およびヒトノミ (Pulex irritans) を挙げることができる。

30

【0712】

別の態様において、式1の分子はアザミウマ目の害虫を防除するのに使用しうる。特定の属の網羅的でない一覧は、限定されるものでないが、カリオトリプス属 (Caliothrips) スピーシーズ、フランクリニエラ属 (Frankliniella) スピーシーズ、シルトトリプス属 (Scirtothrips) スピーシーズおよびトリプス属 (Thrips) スピーシーズを挙げることができる。特定の種の網羅的でない一覧は、限定されるものでないが、ウスグロアザミウマ (Frankliniella fusca)、ミカンキイロアザミウマ (Frankliniella occidentalis)、フランクリニエラ スクルトゼイ (Frankliniella schultzei)、フランクリニエラ ウィリアムシ (Frankliniella williamsi)、クロトンアザミウマ (Heliothrips haemorrhoidalis)、リピフォロトリプス クルエンタツス (Rhipiphorothrips cruentatus)、スシルトトリプス シトリ (Scirtothrips citri)、チャノキイロアザミウマ (Scirtothrips dorsalis) およびタエニオトリプス ロバランテナリス (Taeniothrips rhopalantennalis)、ハナアザミウマ (Thrips hawaiiensis)、クロゲハナアザミウマ (Thrips nigropilosus)、トリプス オリエンタリス (Thrips orientalis)、ネギアザミウマ (Thrips ta

40

50

b a c i) を挙げることができる。

【0713】

別の態様において、式1の分子はシミ目の病害虫を防除するのに使用しうる。特定の属の網羅的でない一覧は、限定されるものでないがセイヨウシミ属 (L e p i s m a) スピーシーズおよびマダラシミ属 (T h e r m o b i a) スピーシーズを挙げることができる。

【0714】

別の態様において、式1の分子はダニ目の病害虫を防除するのに使用しうる。特定の属の網羅的でない一覧は、限定されるものでないが、コナダニ属 (A c a r u s) スピーシーズ、アクロプス属 (A c u l o p s) スピーシーズ、ウシマダニ属 (B o o p h i l u s) スピーシーズ、ニキビダニ属 (D e m o d e x) スピーシーズ、カクマダニ属 (D e r m a c e n t o r) スピーシーズ、エピトリメルス属 (E p i t r i m e r u s) スピーシーズ、エリオフィエス属 (E r i o p h y e s) スピーシーズ、マダニ属 (I x o d e s) スピーシーズ、ツメハダニ属 (O l i g o n y c h u s) スピーシーズ、マルハダニ属 (P a n o n y c h u s) スピーシーズ、ネダニ属 (R h i z o g l y p h u s) スピーシーズおよびナミハダニ属 (T e t r a n y c h u s) スピーシーズを挙げることができる。特定の種の網羅的でない一覧は、限定されるものでないが、アカリنداニ (A c a r a p i s w o o d i)、アシフトコナダニ (A c a r u s s i r o)、アセリアマンギフェラエ (A c e r i a m a n g i f e r a e)、トマトサビダニ (A c u l o p s l y c o p e r s i c i)、ミカンサビダニ (A c u l u s p e l e k a s s i)、リンゴサビダニ (A c u l u s s c h l e c h t e n d a l i)、マダニ (A m b l y o m m a a m e r i c a n u m)、チャノヒメハダニ (B r e v i p a l p u s o b o v a t u s)、ミナミヒメハダニ (B r e v i p a l p u s p h o e n i c i s)、アメリカイヌカクマダニ (D e r m a c e n t o r v a r i a b i l i s)、ヤケヒョウヒダニ (D e r m a t o p h a g o i d e s p t e r o n y s s i n u s)、エオテトラニクス カルピニ (E o t e t r a n y c h u s c a r p i n i)、ネコシヨウヒゼンダニ (N o t o e d r e s c a t i)、マンゴーツメハダニ (O l i g o n y c h u s c o f f e a e)、チビコブツメハダニ (O l i g o n y c h u s i l i c i s)、ミカンハダニ (P a n o n y c h u s c i t r i)、リンゴハダニ (P a n o n y c h u s u l m i)、フィロコプトルタ オレイボラ (P h y l l o c o p t r u t a o l e i v o r a)、チャノホコリダニ (P o l y p h a g o t a r s o n e m u s l a t u s)、クリイロコイタマダニ (R h i p i c e p h a l u s s a n g u i n e u s)、ヒゼンダニ (S a r c o p t e s s c a b i e i)、テゴロフス ペルセアフロラエ (T e g o l o p h u s p e r s e a f l o r a e)、ナミハダニ (T e t r a n y c h u s u r t i c a e) およびミツバチヘギイタダニ (V a r r o a d e s t r u c t o r) を挙げることができる。

【0715】

別の態様において、式1の分子はコムカデ目の病害虫を防除するのに使用しうる。特定の種の網羅的でない一覧は、限定されるものでないがミゾコムカデ (S c u t i g e r e l l a i m m a c u l a t a) を挙げることができる。

【0716】

別の態様において、式1の分子は線形動物門の病害虫を防除するのに使用しうる。特定の属の網羅的でない一覧は、限定されるものでないが、アフェレンコイデス属 (A p h e l e n c h o i d e s) スピーシーズ、ベロノライムス属 (B e l o n o l a i m u s) スピーシーズ、クリコネメラ属 (C r i c o n e m e l l a) スピーシーズ、ジチレンクス属 (D i t y l e n c h u s) スピーシーズ、ヘテロデラ属 (H e t e r o d e r a) スピーシーズ、ヒルスクマニエラ属 (H i r s c h m a n n i e l l a) スピーシーズ、ホプロライムス属 (H o p l o l a i m u s) スピーシーズ、ネコブセンチュウ属 (M e l o i d o g y n e) スピーシーズ、ネグサレセンチュウ属 (P r a t y l e n c h u s) スピーシーズおよびバナナネモグリセンチュウ属 (R a d o p h o l u s) スピーシー

10

20

30

40

50

ズを挙げることができる。特定の種の網羅的でない一覧は、限定されるものでないが、犬糸状虫 (*Dirofilaria immitis*)、トウモロコシシストセンチュウ (*Heterodera zeae*)、サツマイモネコブセンチュウ (*Meloidogyne incognita*)、ジャワネコブセンチュウ (*Meloidogyne javanica*)、回旋糸状虫 (*Onchocerca volvulus*)、バナナネモグリセンチュウ (*Radopholus similis*) およびニセフクロセンチュウ (*Rotylenchulus reniformis*) を挙げることができる。

【0717】

付加的な情報については、Arnold Mallisによる“HANDBOOK OF PEST CONTROL—THE BEHAVIOR, LIFE HISTORY, AND CONTROL OF HOUSEHOLD PESTS”、第9版、GIE Media Incによる著作権 2004年を参照されたい。

10

【0718】

適用

式1の分子は、一般に、防除を提供するために1ヘクタールあたり約0.01グラムから1ヘクタールあたり約5000グラムまでの量で使用する。1ヘクタールあたり約0.1グラムから1ヘクタールあたり約500グラムまでの量が一般に好ましく、および、1ヘクタールあたり約1グラムから1ヘクタールあたり約50グラムまでの量が一般により好ましい。

【0719】

20

式1の分子が適用される区域は、病害虫が生息している（若しくは生息しているかもしれない、またはそれにより横断される）いかなる区域、例えば：作物、樹木、果実、穀類、かいば、匍匐植物、芝および観賞用植物が成長している場所；家畜が住んでいる場所；（穀類が貯蔵される場所のような）建物の内部若しくは外側表面、（含浸された木材のような）建築で使用する建設材料、ならびに建物の周囲の土壌でもあり得る。式1の分子を使用するための特定の作付け区域は、リンゴ、トウモロコシ、ヒマワリ、ワタ、ダイズ、キャノーラ、小麦、米、モロコシ、大麦、オート麦、ジャガイモ、オレンジ、アルファルファ、レタス、イチゴ、トマト、コショウ、アブラナ科植物、セイヨウナシ、タバコ、アーモンド、サトウダイコン、豆類およびその他の高価な作物が成長している若しくはそれらの種子が播かれる予定である区域を包含する。多様な植物を栽培する場合は式1の分子とともに硫酸アンモニウムを使用することもまた有利である。

30

【0720】

病害虫を防除することは、一般に、病害虫の集団、病害虫の活動性若しくはその双方が1区域で低下されることを意味している。これは：病害虫集団が1区域から駆逐される場合；病害虫が1区域中若しくはその周囲で行動能力を奪われる場合；または病害虫が1区域中若しくはその周囲で全体的に若しくは部分的に根絶される場合に発生し得る。もちろんこれらの結果の組合せが発生し得る。一般に、病害虫の集団、活動性若しくは双方は、望ましくは50パーセント以上、好ましくは90パーセント以上低下される。一般に、該区域はヒトの中若しくは上でなく；結果、該場所は一般にヒト以外の区域である。

【0721】

40

式1の分子は、単独で若しくは植物の活力を高めるため（例えば、より良好な根系を成長させるため、ストレスの多い生育条件により良好に耐えるため）の他の化合物と、混合物中で使用されても、同時に若しくは順次適用されてもよい。こうした他の化合物は、例えば植物のエチレン受容体を調節する化合物、中でも注目すべきは（1-MCPとしてもまた知られる）1-メチルシクロプロペンである。さらに、こうした分子は、成長している植物が貴重な農業産物を産生し始める前のような、病害虫の活動性が低い時間の間に使用しうる。こうした時間は、病害虫圧が通常低い早期の植え付け期を包含する。

【0722】

式1の分子は、病害虫を防除するために植物の葉および結実部分に適用し得る。該分子は病害虫と直接接触することができるか、または農薬を含有する葉、果実体を食べる若し

50

くは樹液を抽出する場合に病虫害が農薬を消費することができるかのいずれかである。式1の分子は土壤に適用することもまたでき、そしてこの様式で適用される場合、根および幹を食物とする病虫害を防除し得る。根は分子を吸収して植物の葉部分にそれを取り込んで、地面より上を咀嚼するおよび樹液を食物とする病虫害を防除し得る。

【0723】

一般に、餌を用いて、該餌は、例えばシロアリが該餌と接触し得かつ／若しくはそれに引きつけられ得る地中に置かれる。餌は、例えばアリ、シロアリ、ゴキブリおよびハエが該餌と接触し得かつ／若しくはそれに引きつけられ得る建物の表面（水平、垂直若しくは傾斜表面）にもまた塗布し得る。餌は式1の分子を含み得る。

【0724】

式1の分子はカプセルの内側に被包化し得るか若しくはその表面上に置くことができる。カプセルの大きさはナノメートルサイズ（直径が約100～900ナノメートル）からマイクロメートルサイズ（直径が約10～900ミクロン）までの範囲にあることができる。

【0725】

ある種の農薬に抵抗する一部の病虫害の卵の独特の能力のため、式1の分子の反復適用が、新たに発生される幼虫を防除するのに望ましいことがある。

【0726】

植物中の農薬の全身性の動きを利用して、式1の分子を植物の異なる部分に適用することにより（例えば1領域を噴霧することにより）該植物の一部分の病虫害を防除しうる。例えば、葉を食物とする昆虫の防除は、細流灌漑若しくは畝間散布により、土壤を例えば植え付け前若しくは後の土壤灌注で処理することにより、または植物の種子を播種前に処理することにより、達成し得る。

【0727】

種子処理は、特殊化された特徴を発現するよう遺伝子操作された植物がそれから発芽することができるものを包含する全部の種類の種子に適用し得る。代表的な例は、バチルス チューリングエンシス (*Bacillus thuringiensis*) のような無脊椎動物病虫害に対し毒性のタンパク質若しくは他の殺虫性毒素を発現するもの、「ラウンドアップレディー」種子のような除草剤耐性を発現するもの、または、殺虫性毒素、除草剤耐性、栄養強化、干魃耐性、若しくはいずれかの他の有益な特徴を発現する「スタック」外来遺伝子をもつものを包含する。さらに、式1の分子でのこうした種子処理は、ストレスの多い生育条件をより良好に耐える植物の能力をさらに高めうる。これはより健康でより活発な植物をもたらし、それは収穫時のより高収量につながり得る。一般に、100,000種子あたり約1グラムないし約500グラムの式1の分子が良好な利益を提供すると期待され、100,000種子あたり約10グラムから約100グラムまでの量がより良好な利益を提供すると期待され、そして、100,000種子あたり約25グラムから約75グラムまでの量がなおより良好な利益を提供すると期待される。

【0728】

式1の分子を、バチルス チューリングエンシス (*Bacillus thuringiensis*) 若しくは他の殺虫性毒素のような特殊化された特徴を発現するよう遺伝子操作された植物、または除草剤耐性を発現するもの、あるいは殺虫性毒素、除草剤耐性、栄養強化、若しくはいずれかの他の有益な特徴を発現する「スタック」外来遺伝子をもつものの上、中若しくは周囲で使用しうるということが、容易に明らかであるはずである。

【0729】

式1の分子は、獣医学の領域ですなわちヒト以外の動物飼育の分野において内寄生生物および外寄生生物を防除するのに使用しうる。式1の分子は、例えば錠剤、カプセル剤、飲料、顆粒剤の形態での経口投与による、例えば液浸すること、噴霧すること、注ぐこと（pouring on）、しみをつけること（spotting on）および散布することの形態の皮膚適用による、ならびに例えば注入の形態の非経口投与によるように適用される。

10

20

30

40

50

【0730】

式1の分子は、家畜飼育、例えば畜牛、ヒツジ、ブタ、ニワトリおよびガチョウでもまた有利に使用しうる。それらはウマ、イヌおよびネコのような愛玩動物でもまた有利に使用しうる。防除すべき特定の病害虫はこうした動物にとって煩わしいノミおよびダニとなろう。適する製剤は飲用水若しくは飼料とともに動物に経口投与される。適する投薬量および製剤は種に依存する。

【0731】

式1の分子は、上で列挙された動物におけるとりわけ腸の寄生虫を防除するためにもまた使用しうる。

【0732】

10

式1の分子はヒトの保健のための治療方法でもまた使用しうる。こうした方法は、限定されるものでないが、例えば錠剤、カプセル剤、飲料、顆粒剤の形態の経口投与および皮膚適用によるを挙げることができる。

【0733】

世界中の病害虫は、(こうした病害虫にとって)新たな環境に移動されており、そしてその後こうした新たな環境で新たな侵入生物種となっている。式1の分子は、こうした新たな環境でこうした新たな侵入生物種を防除するためにそれらにもまた使用しうる。

【0734】

式1の分子は、作物のような植物が成長している(例えば植え付け前、植え付け、収穫前)、およびこうした植物を商業的に損傷し得る(実際の存在がなくとも)低レベルの病害虫が存在する区域でもまた使用しうる。こうした区域でのこうした分子の使用は、該区域で栽培されている植物に利益を与えるためである。こうした利益は、限定されるものでないが、植物の健康状態を改良すること、植物の収量を改良すること(例えば増大されたバイオマスおよび/若しくは貴重な成分の増大された含量)、植物の活力を改良すること(例えば改良された植物成長および/若しくはより緑色の葉)、植物の質を改良すること(例えばある種の成分の改良された含量若しくは組成)、ならびに該植物の非生物学的および/若しくは生物学的ストレスに対する耐性を改良することを挙げることができる。

20

【0735】

農薬が使用若しくは商業的に販売され得る前に、こうした農薬は多様な政府当局(地方、地域、州、国および国際的)による非常に長い評価過程を受ける。大量のデータ要件が規制当局により指定され、そして、しばしば、ワールドワイドウェブへの接続を伴うコンピュータを使用して、製品登録者による若しくは製品登録者の代理の第三者によるデータ生成および提出により対処されなければならない。これらの政府当局がその後こうしたデータを審査し、そして安全性の確認が結論づけられる場合は、潜在的使用者若しくは販売者に製品登録承認を提供する。その後、製品登録が賦与されかつ裏付けられている場所で、こうした使用者若しくは販売者はこうした農薬を使用若しくは販売してよい。

30

【0736】

式1の分子は病害虫に対するその有効性を確認するため試験し得る。さらに、作用様式研究を、前記分子が他の農薬と異なる作用様式を有するかどうかを確認するために実施し得る。その後、こうした取得されたデータを第三者にインターネットによるように流布し得る。

40

【0737】

本文書の見出しは便宜性のみのためであり、そしてそのいかなる部分も解釈するために使用してはならない。

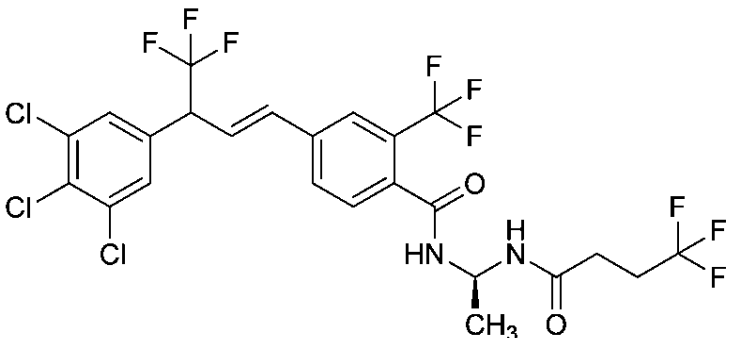
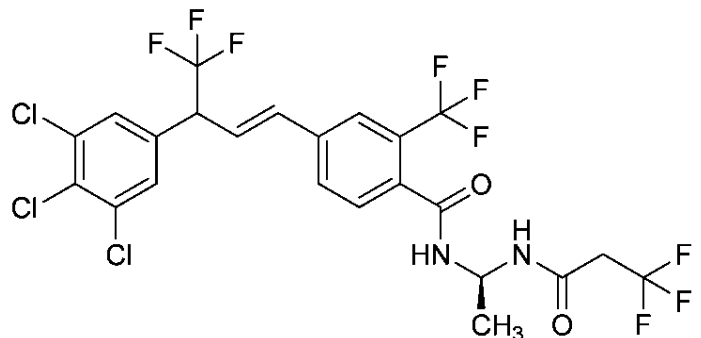
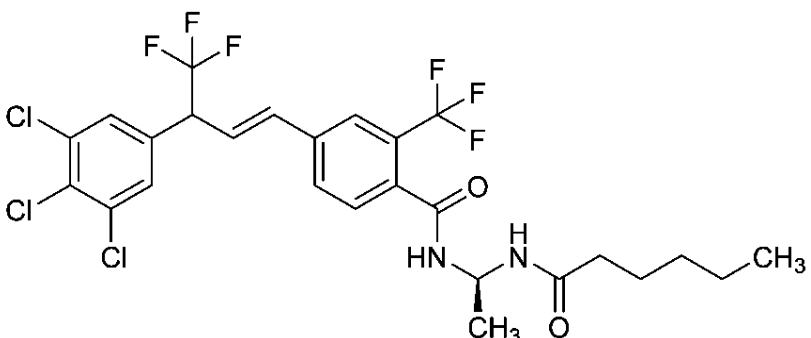
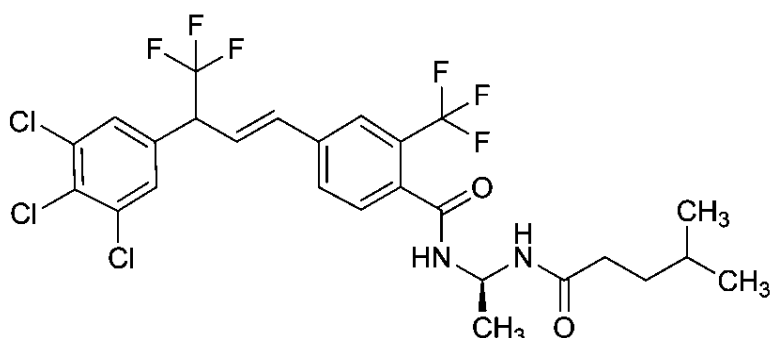
【0738】

表の節

【0739】

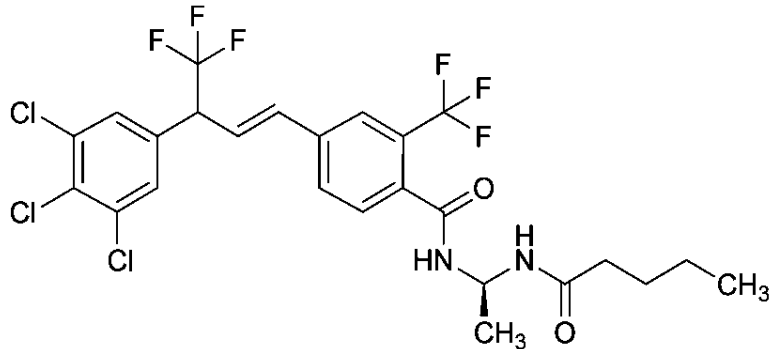
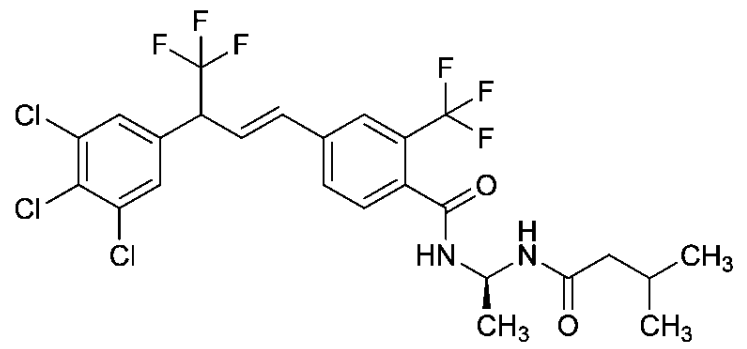
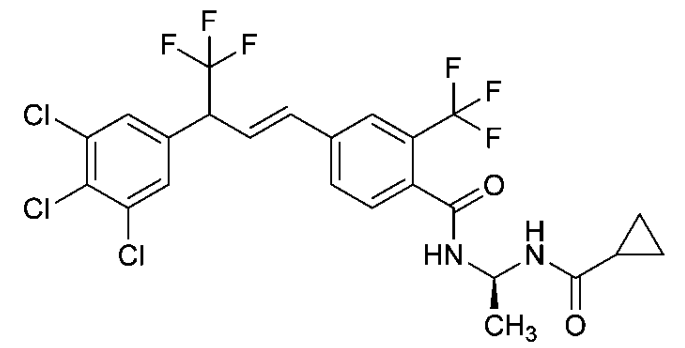
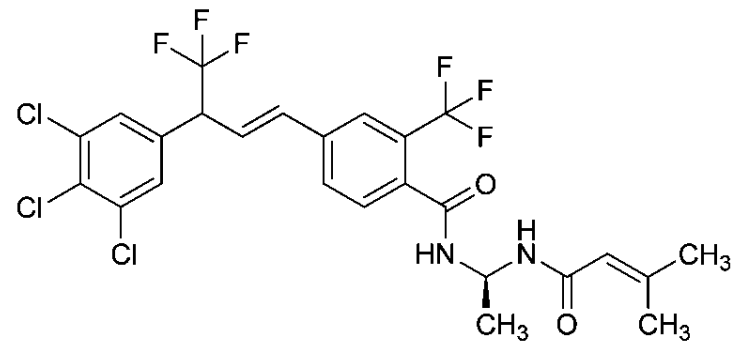
【表 2 - 1】

表 2. F 系列の化合物の構造および製造方法

番号	構造	製造法 従った実施例
F1		18
F2		18
F3		17
F4		17

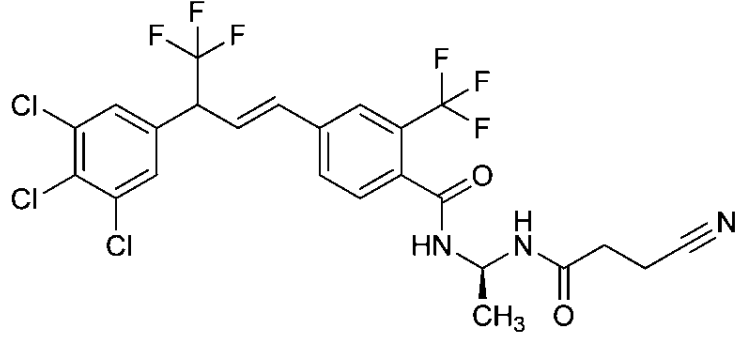
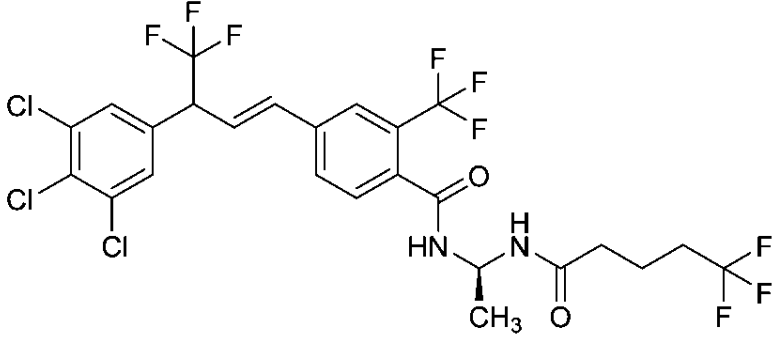
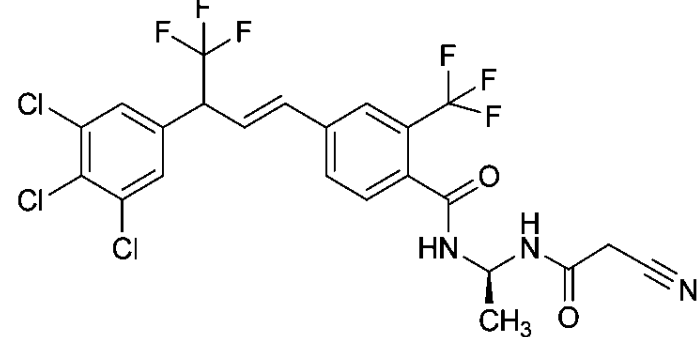
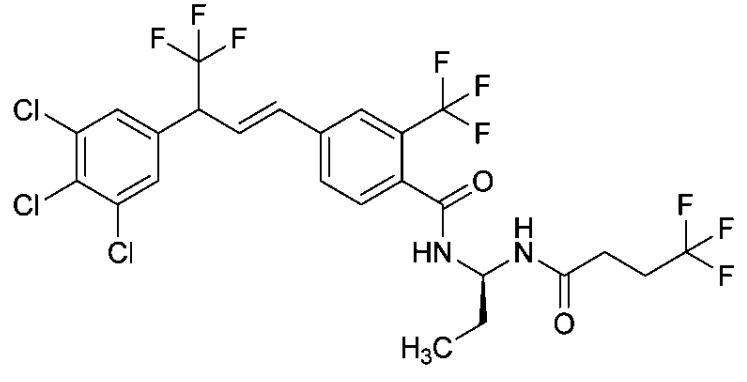
【 0 7 4 0 】

【表 2 - 2】

F5		17
F6		17
F7		17
F8		17

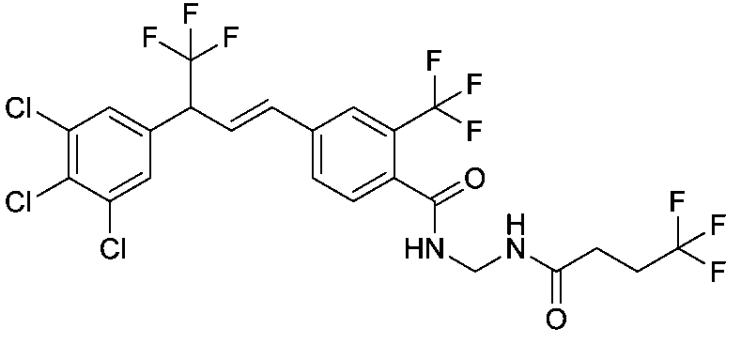
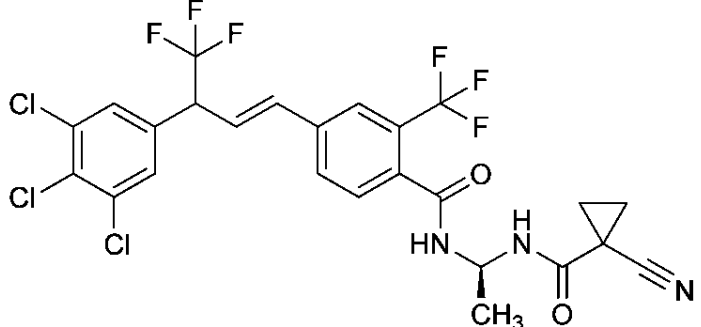
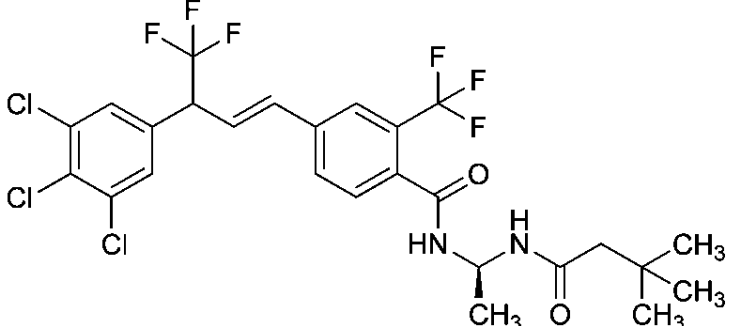
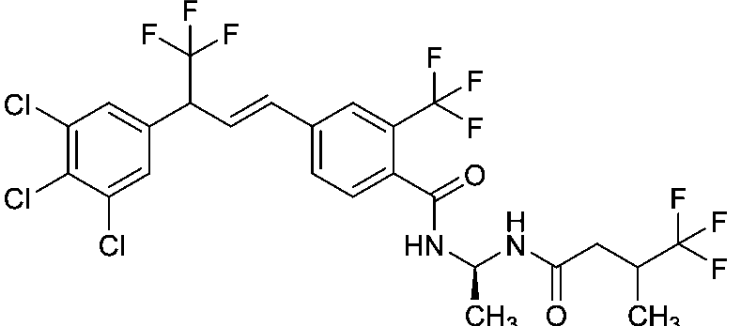
【 0 7 4 1】

【表 2 - 3】

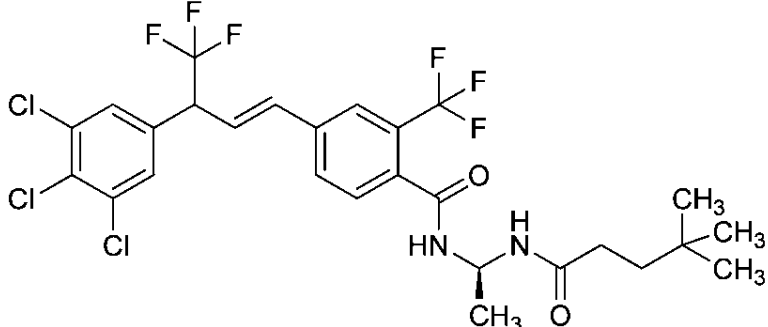
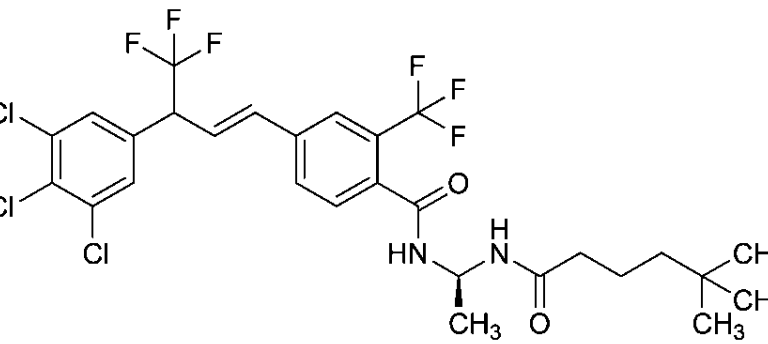
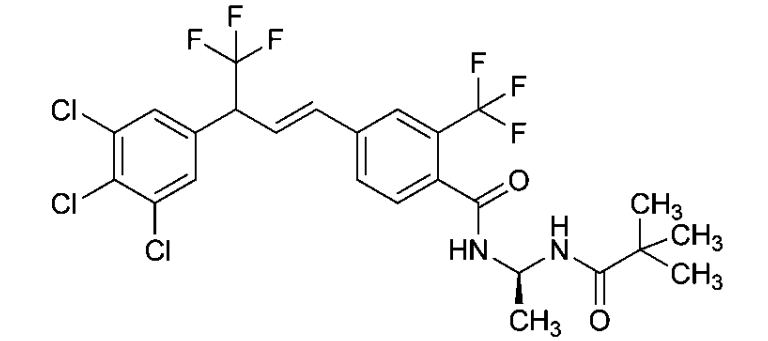
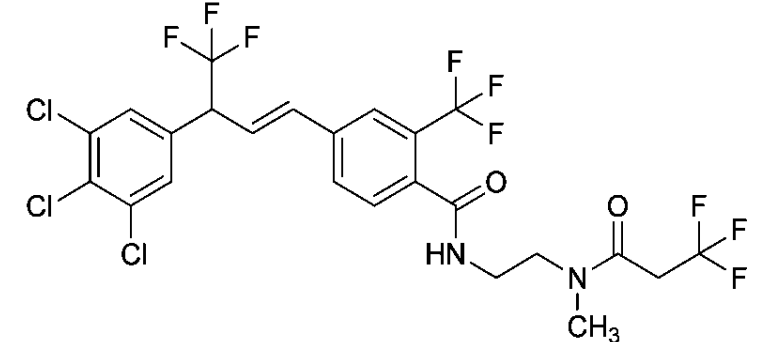
F9		20
F10		20
F11		20
F12		18

【 0 7 4 2 】

【表 2 - 4】

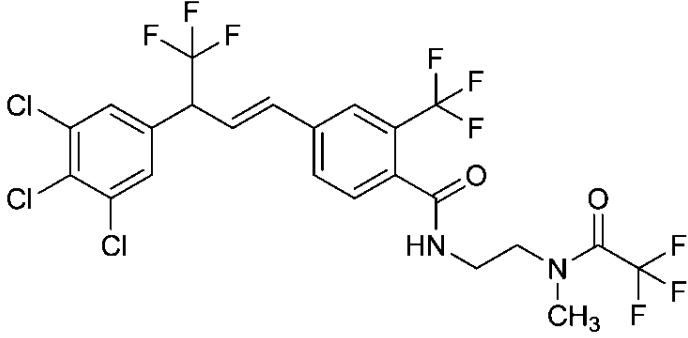
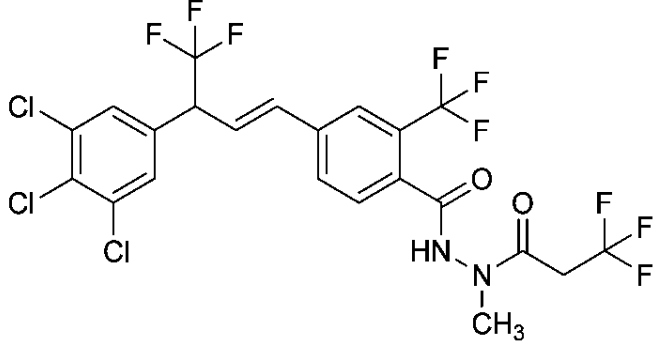
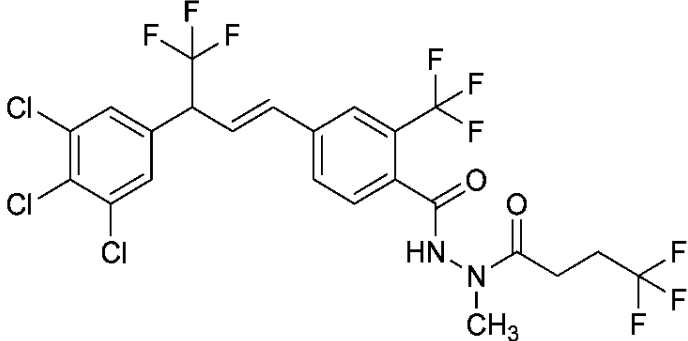
F13		18
F14		19
F15		19
F16		19

【 0 7 4 3】

F17		19
F18		19
F19		18
F20		23

【 0 7 4 4 】

【表 2 - 6】

F21		25
F22		28
F23		28

【 0 7 4 5】

【表 3 - 1】

表 3 : 表 2 の化合物の分析データ

番号	質量 (<i>m/z</i>)	¹ H NMR	¹⁹ F NMR
F1	ESIMS <i>m/z</i> 643 ([M-H] ⁻)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.79 – 7.69 (m, 1H), 7.61 (d, <i>J</i> = 8.1 Hz, 1H), 7.55 (d, <i>J</i> = 5.4 Hz, 1H), 7.45 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.40 (s, 2H), 7.34 (d, <i>J</i> = 7.9 Hz, 1H), 6.55 (dd, <i>J</i> = 16.0, 4.5 Hz, 1H), 6.39 (ddd, <i>J</i> = 15.9, 8.0, 2.6 Hz, 1H), 5.64 (h, <i>J</i> = 7.5 Hz, 1H), 4.10 (pd, <i>J</i> = 8.7, 3.0 Hz, 1H), 2.44 – 2.00 (m, 4H), 1.51 (d, <i>J</i> = 6.7 Hz, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -59.34, -66.97, -68.61.
F2	ESIMS <i>m/z</i> 629 ([M-H] ⁻)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.27 (d, <i>J</i> = 17.8 Hz, 2H), 7.43 – 7.33 (m, 3H), 7.28 (d, <i>J</i> = 8.3 Hz, 1H), 7.17 (dd, <i>J</i> = 7.8, 3.2 Hz, 1H), 6.53 – 6.43 (m, 1H), 6.33 (ddd, <i>J</i> = 15.9, 8.0, 5.0 Hz, 1H), 5.89 (dq, <i>J</i> = 13.8, 6.2 Hz, 1H), 4.07 (hept, <i>J</i> = 8.3 Hz, 1H), 3.04 (p, <i>J</i> = 11.2 Hz, 1H), 2.87 (p, <i>J</i> = 10.5 Hz, 1H), 1.41 (d, <i>J</i> = 6.4 Hz, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -59.63, -63.29, -68.60
F3	ESIMS <i>m/z</i> 617 ([M-H] ⁻)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.69 – 7.63 (m, 1H), 7.57 (dd, <i>J</i> = 8.0, 1.7 Hz, 1H), 7.47 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.41 (s, 2H), 6.91 (d, <i>J</i> = 7.4 Hz, 1H), 6.66 – 6.55 (m, 2H), 6.42 (dd, <i>J</i> = 15.9, 7.8 Hz, 1H), 5.42 (h, <i>J</i> = 7.0 Hz, 1H), 4.12 (p, <i>J</i> = 8.4 Hz, 1H), 2.16 (dd, <i>J</i> = 8.3, 6.9 Hz, 2H), 1.68 (d, <i>J</i> = 6.7 Hz, 3H), 1.62 (q, <i>J</i> = 7.5 Hz, 2H), 1.38 – 1.22 (m, 4H), 0.93 – 0.85 (m, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -59.06, -68.57

【 0 7 4 7 】

F4	ESIMS <i>m/z</i> 617 ([M-H] ⁻)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.68 (d, <i>J</i> = 12.0 Hz, 1H), 7.64 – 7.54 (m, 1H), 7.47 (d, <i>J</i> = 7.9 Hz, 1H), 7.41 (s, 2H), 6.86 (d, <i>J</i> = 7.4 Hz, 1H), 6.62 (dd, <i>J</i> = 15.9, 7.5 Hz, 1H), 6.55 (d, <i>J</i> = 7.6 Hz, 1H), 6.43 (dd, <i>J</i> = 15.9, 7.9 Hz, 1H), 5.42 (q, <i>J</i> = 7.2 Hz, 1H), 4.12 (p, <i>J</i> = 8.5 Hz, 1H), 2.22 – 2.13 (m, 2H), 1.69 (d, <i>J</i> = 6.8 Hz, 3H), 1.63 – 1.41 (m, 3H), 0.90 (d, <i>J</i> = 6.4 Hz, 6H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -57.81, -67.95
F5	ESIMS <i>m/z</i> 603 ([M-H] ⁻)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.66 (s, 1H), 7.57 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.45 (d, <i>J</i> = 27.1 Hz, 3H), 6.85 (d, <i>J</i> = 7.3 Hz, 1H), 6.66 – 6.50 (m, 2H), 6.43 (dd, <i>J</i> = 15.9, 7.8 Hz, 1H), 5.42 (q, <i>J</i> = 7.2 Hz, 1H), 4.12 (p, <i>J</i> = 8.6 Hz, 1H), 2.22 – 2.13 (m, 2H), 1.69 (d, <i>J</i> = 6.8 Hz, 3H), 1.64 – 1.55 (m, 2H), 1.42 – 1.23 (m, 2H), 0.92 (t, <i>J</i> = 7.3 Hz, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -57.81, -67.95
F6	ESIMS <i>m/z</i> 603 ([M-H] ⁻)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.66 (d, <i>J</i> = 1.5 Hz, 1H), 7.57 (d, <i>J</i> = 7.9 Hz, 1H), 7.47 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.41 (s, 2H), 6.88 (d, <i>J</i> = 7.4 Hz, 1H), 6.61 (d, <i>J</i> = 15.9 Hz, 1H), 6.54 (d, <i>J</i> = 7.6 Hz, 1H), 6.43 (dd, <i>J</i> = 15.9, 7.8 Hz, 1H), 5.44 (p, <i>J</i> = 7.0 Hz, 1H), 4.12 (p, <i>J</i> = 8.6 Hz, 1H), 2.17 – 2.00 (m, 2H), 1.69 (d, <i>J</i> = 6.8 Hz, 3H), 0.95 (d, <i>J</i> = 6.2 Hz, 7H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -57.81, -67.95

40

【表 3 - 3】

F7	ESIMS m/z 589 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.66 (d, J = 1.6 Hz, 1H), 7.57 (dd, J = 8.0, 1.7 Hz, 1H), 7.47 (d, J = 8.0 Hz, 1H), 7.41 (s, 2H), 6.92 (d, J = 7.4 Hz, 1H), 6.79 (d, J = 7.6 Hz, 1H), 6.61 (d, J = 15.9 Hz, 1H), 6.42 (dd, J = 15.9, 7.8 Hz, 1H), 5.43 (h, J = 6.9 Hz, 1H), 4.12 (p, J = 8.5 Hz, 1H), 1.69 (d, J = 6.8 Hz, 3H), 1.36 (tt, J = 7.8, 4.5 Hz, 1H), 0.93 (dt, J = 4.6, 3.2 Hz, 2H), 0.77 (dt, J = 7.9, 3.4 Hz, 2H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -59.06, -68.57	10
F8	ESIMS m/z 603 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.72 – 7.63 (m, 1H), 7.63 – 7.52 (m, 1H), 7.48 (d, J = 7.9 Hz, 1H), 7.41 (d, J = 1.2 Hz, 2H), 6.95 (d, J = 7.4 Hz, 1H), 6.62 (dd, J = 15.9, 9.0 Hz, 1H), 6.43 (ddd, J = 16.0, 10.0, 7.9 Hz, 2H), 5.57 – 5.52 (m, 1H), 5.46 (h, J = 7.0 Hz, 1H), 4.13 (p, J = 8.5 Hz, 1H), 2.13 (d, J = 1.3 Hz, 3H), 1.85 (d, J = 1.4 Hz, 3H), 1.70 (d, J = 6.8 Hz, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ 回転異性体 -59.04 & -59.08, -68.57	20
F9	ESIMS m/z 602 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.67 (s, 1H), 7.59 (d, J = 7.9 Hz, 1H), 7.50 (d, J = 8.0 Hz, 1H), 7.41 (s, 2H), 6.75 (t, J = 7.4 Hz, 2H), 6.61 (d, J = 15.9 Hz, 1H), 6.43 (dd, J = 15.9, 7.8 Hz, 1H), 5.44 (q, J = 7.2 Hz, 1H), 4.17 – 4.07 (m, 1H), 2.67 (td, J = 7.1, 1.0 Hz, 2H), 2.55 (t, J = 6.9 Hz, 2H), 1.70 (d, J = 6.8 Hz, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -59.02, -68.56	30 40

【表 3 - 4】

F10	ESIMS m/z 659 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.66 (s, 1H), 7.57 (d, J = 8.0 Hz, 1H), 7.46 (d, J = 7.9 Hz, 1H), 7.41 (s, 2H), 6.90 (s, 1H), 6.72 (d, J = 7.9 Hz, 1H), 6.61 (d, J = 15.9 Hz, 1H), 6.43 (dd, J = 15.9, 7.8 Hz, 1H), 5.43 (h, J = 7.0 Hz, 1H), 4.12 (p, J = 8.5 Hz, 1H), 2.30 – 2.22 (m, 2H), 2.20 – 2.02 (m, 2H), 1.89 (p, J = 7.4 Hz, 2H), 1.68 (d, J = 6.8 Hz, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -59.06, -66.23, -68.57
F11	ESIMS m/z 588 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.66 (s, 1H), 7.57 (d, J = 8.0 Hz, 1H), 7.47 (d, J = 8.0 Hz, 1H), 7.41 (s, 2H), 7.34 (d, J = 7.4 Hz, 1H), 6.88 (d, J = 7.6 Hz, 1H), 6.61 (d, J = 16.0 Hz, 1H), 6.44 (dd, J = 15.9, 7.8 Hz, 1H), 5.51 (h, J = 6.9 Hz, 1H), 4.19 – 4.06 (m, 1H), 3.37 (s, 2H), 1.69 (d, J = 6.8 Hz, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -58.97, -68.55
F12	ESIMS m/z 659 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.71 (d, J = 7.6 Hz, 1H), 8.31 (d, J = 7.7 Hz, 1H), 7.99 (d, J = 1.6 Hz, 1H), 7.95 – 7.86 (m, 3H), 7.45 (d, J = 7.9 Hz, 1H), 7.05 (dd, J = 15.8, 9.1 Hz, 1H), 6.86 (d, J = 15.7 Hz, 1H), 5.39 (p, J = 7.3 Hz, 1H), 4.86 (p, J = 9.4 Hz, 1H), 2.50 (dt, J = 3.7, 1.9 Hz, 2H), 2.43 – 2.28 (m, 2H), 1.68 (dq, J = 11.6, 6.7 Hz, 2H), 0.88 (t, J = 7.4 Hz, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -57.83, -65.19, -67.95

10

20

30

40

【表 3 - 5】

F13	ESIMS m/z 629 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 9.13 (t, <i>J</i> = 5.9 Hz, 1H), 8.78 (t, <i>J</i> = 6.0 Hz, 1H), 7.98 (d, <i>J</i> = 1.6 Hz, 1H), 7.93 (s, 2H), 7.89 (dd, <i>J</i> = 8.0, 1.8 Hz, 1H), 7.45 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.06 (dd, <i>J</i> = 15.8, 9.1 Hz, 1H), 6.86 (d, <i>J</i> = 15.8 Hz, 1H), 4.85 (q, <i>J</i> = 9.4 Hz, 1H), 4.54 (t, <i>J</i> = 5.9 Hz, 2H), 2.61 - 2.28 (m, 4H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -57.82, -65.21, -67.95	10
F14	ESIMS m/z 612 ([M-H] ⁻)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.70 (d, <i>J</i> = 7.3 Hz, 1H), 8.28 (d, <i>J</i> = 7.6 Hz, 1H), 8.00 (d, <i>J</i> = 1.6 Hz, 1H), 7.93 (s, 2H), 7.92 - 7.87 (m, 1H), 7.53 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.06 (dd, <i>J</i> = 15.7, 9.1 Hz, 1H), 6.87 (d, <i>J</i> = 15.7 Hz, 1H), 5.65 (h, <i>J</i> = 6.8 Hz, 1H), 4.85 (q, <i>J</i> = 9.5 Hz, 1H), 1.62 - 1.43 (m, 4H), 1.36 (d, <i>J</i> = 6.5 Hz, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -57.78, -67.93	20
F15	ESIMS m/z 617 ([M-H] ⁻)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.72 (d, <i>J</i> = 7.4 Hz, 1H), 8.05 (d, <i>J</i> = 7.5 Hz, 1H), 7.98 (d, <i>J</i> = 1.7 Hz, 1H), 7.93 (s, 2H), 7.92 - 7.85 (m, 1H), 7.45 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.05 (dd, <i>J</i> = 15.7, 9.1 Hz, 1H), 6.86 (d, <i>J</i> = 15.7 Hz, 1H), 5.58 (h, <i>J</i> = 6.8 Hz, 1H), 4.86 (p, <i>J</i> = 9.4 Hz, 1H), 1.97 (d, <i>J</i> = 2.7 Hz, 2H), 1.31 (d, <i>J</i> = 6.5 Hz, 3H), 0.97 (s, 9H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -57.81, -67.96	30

【 0 7 5 0 】

【表 3 - 6】

F16	ESIMS m/z 657 ([M-H] ⁻)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) ジアステレオマーの混合物 δ 8.89 - 8.72 (m, 1H), 8.53 - 8.41 (m, 1H), 8.01 - 7.96 (m, 1H), 7.93 (s, 2H), 7.92 - 7.86 (m, 1H), 7.51 - 7.42 (m, 1H), 7.06 (dd, <i>J</i> = 15.8, 9.1 Hz, 1H), 6.87 (d, <i>J</i> = 15.7 Hz, 1H), 5.68 - 5.50 (m, 1H), 4.86 (p, <i>J</i> = 9.4 Hz, 1H), 2.88 - 2.70 (m, 1H), 2.46 - 2.38 (m, 1H), 2.22 - 2.11 (m, 1H), 1.39 - 1.28 (m, 3H), 1.11 - 1.03 (m, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) , ジアステレオマーの混合物 δ -57.84, -67.96, -72.25, -72.26
F17	ESIMS m/z 631 ([M-H] ⁻)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.70 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 1H), 8.16 (d, <i>J</i> = 7.5 Hz, 1H), 7.98 (d, <i>J</i> = 1.8 Hz, 1H), 7.96 - 7.86 (m, 3H), 7.45 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.05 (dd, <i>J</i> = 15.8, 9.1 Hz, 1H), 6.86 (d, <i>J</i> = 15.7 Hz, 1H), 5.55 (h, <i>J</i> = 6.7 Hz, 1H), 4.86 (p, <i>J</i> = 9.4 Hz, 1H), 2.11 - 2.00 (m, 2H), 1.47 - 1.37 (m, 2H), 1.31 (d, <i>J</i> = 6.5 Hz, 3H), 0.86 (s, 9H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -57.80, -67.95
F18	ESIMS m/z 647 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.71 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 1H), 8.12 (d, <i>J</i> = 7.5 Hz, 1H), 8.00 - 7.95 (m, 1H), 7.92 (s, 2H), 7.88 (dd, <i>J</i> = 7.9, 1.6 Hz, 1H), 7.45 (d, <i>J</i> = 7.9 Hz, 1H), 7.05 (dd, <i>J</i> = 15.8, 9.1 Hz, 1H), 6.86 (d, <i>J</i> = 15.7 Hz, 1H), 5.56 (h, <i>J</i> = 6.7 Hz, 1H), 4.86 (p, <i>J</i> = 9.5 Hz, 1H), 2.04 (t, <i>J</i> = 7.4 Hz, 2H), 1.46 (dtd, <i>J</i> = 9.7, 7.5, 4.5 Hz, 2H), 1.32 (d, <i>J</i> = 6.5 Hz, 3H), 1.18 - 1.09 (m, 2H), 0.85 (s, 9H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -57.78, -67.95

【表 3 - 7】

F19	ESIMS m/z 603 ([M-H] ⁻)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.57 (d, <i>J</i> = 7.3 Hz, 1H), 7.99 (d, <i>J</i> = 1.6 Hz, 1H), 7.92 (s, 2H), 7.89 (dd, <i>J</i> = 8.1, 1.6 Hz, 1H), 7.58 (d, <i>J</i> = 7.7 Hz, 1H), 7.48 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.05 (dd, <i>J</i> = 15.8, 9.1 Hz, 1H), 6.86 (d, <i>J</i> = 15.7 Hz, 1H), 5.59 (h, <i>J</i> = 6.8 Hz, 1H), 4.86 (p, <i>J</i> = 9.4 Hz, 1H), 1.34 (d, <i>J</i> = 6.5 Hz, 3H), 1.10 (s, 9H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -57.76, -67.95	10
F20	ESIMS m/z 643 ([M-H] ⁻)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.71 - 7.63 (m, 1H), 7.65 - 7.53 (m, 1H), 7.47 (d, <i>J</i> = 7.9 Hz, 1H), 7.41 (s, 2H), 6.66 - 6.56 (m, 1H), 6.42 (dd, <i>J</i> = 16.0, 7.8 Hz, 1H), 6.42 (s, 1H), 4.12 (p, <i>J</i> = 8.8 Hz, 1H), 3.73 - 3.63 (m, 4H), 3.22 (q, <i>J</i> = 9.9 Hz, 2H), 3.13 (s, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -59.32, -62.60, -68.59	20
F21	ESIMS m/z 629 ([M-H] ⁻)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.67 (d, <i>J</i> = 1.6 Hz, 1H), 7.59 (dd, <i>J</i> = 7.9, 1.7 Hz, 1H), 7.45 (d, <i>J</i> = 7.9 Hz, 1H), 7.41 (s, 2H), 6.66 - 6.57 (m, 1H), 6.43 (dd, <i>J</i> = 15.9, 7.9 Hz, 1H), 6.18 (s, 1H), 4.12 (p, <i>J</i> = 8.8 Hz, 1H), 3.72 (d, <i>J</i> = 3.2 Hz, 4H), 3.25 (q, <i>J</i> = 1.5 Hz, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -59.22, -68.59, -69.88	30
F22	ESIMS m/z 615 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 11.05 (bs, 1H), 8.11 (s, 1H), 7.98 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 1H), 7.92 (s, 2H), 7.79 (s, <i>J</i> = 7.6 Hz, 1H), 7.15 (dd, <i>J</i> = 16.4, 9.6 Hz, 1H), 6.92 (d, <i>J</i> = 16.0 Hz, 1H), 4.90 - 4.83 (m, 1H), 3.10 (s, 3H), 2.50 (s, 2H)	IR (薄膜) 3256, 1698, 1114, 749 (cm ⁻¹)	40

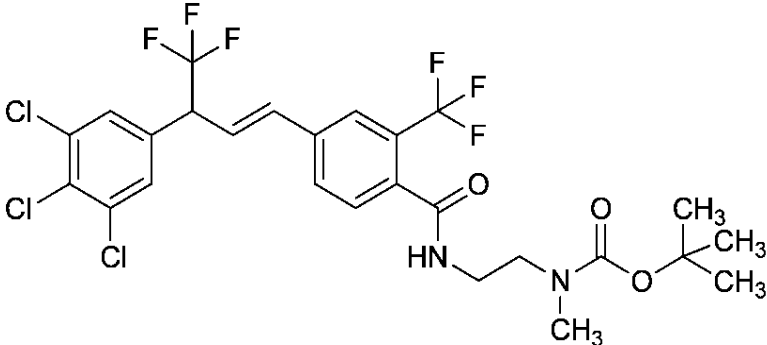
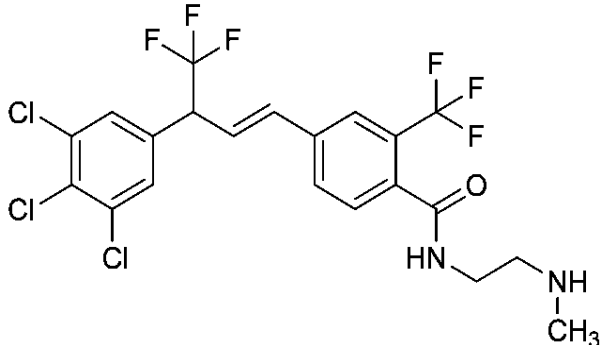
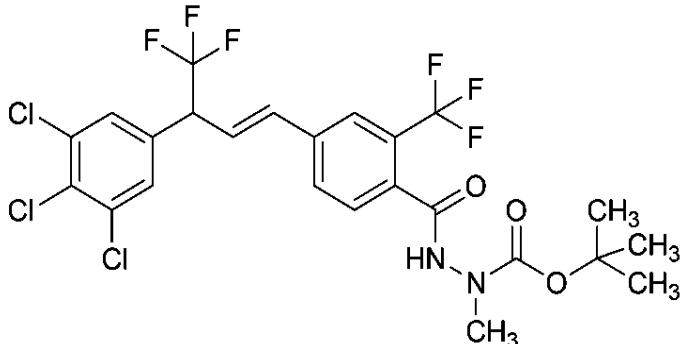
【表 3 - 8】

F23	ESIMS m/z 629 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 11.01 (bs, 1H), 8.10 (s, 1H), 7.99 (d, J = 8.4 Hz, 1H), 7.92 (s, 2H), 7.68 (s, J = 8.0 Hz, 1H), 7.15 (dd, J = 15.6, 8.8 Hz, 1H), 6.92 (d, J = 15.6 Hz, 1H), 4.90 - 4.83 (m, 1H), 3.11 (s, 3H), 2.97 (s, 1H), 2.67 - 2.58 (m, 3H)	IR (薄膜) 3436, 1689, 1275, 750 (cm ⁻¹)
------------	---	---	--

【 0 7 5 3 】

【表 4】

表 4. C系列の化合物の構造および製造方法

番号	構造	製造法 従った実施例
C113		21
C115		24
C116		26

10

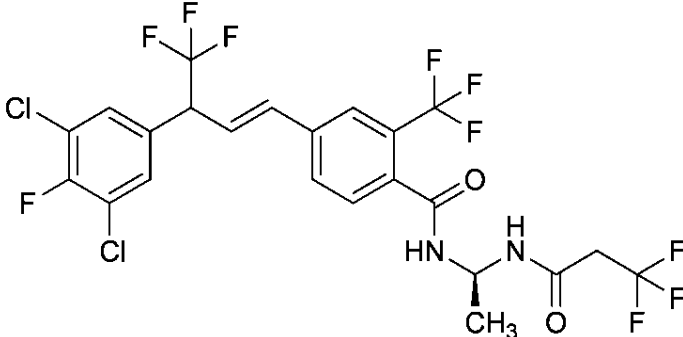
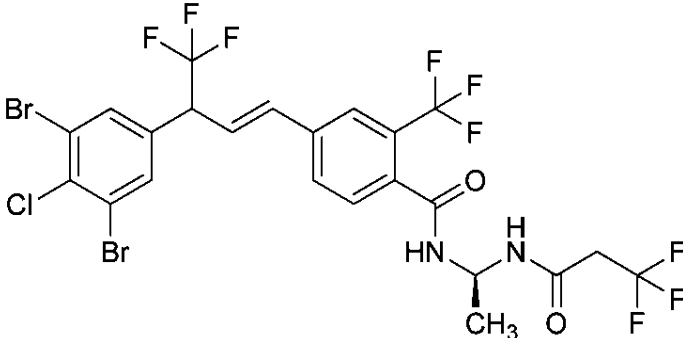
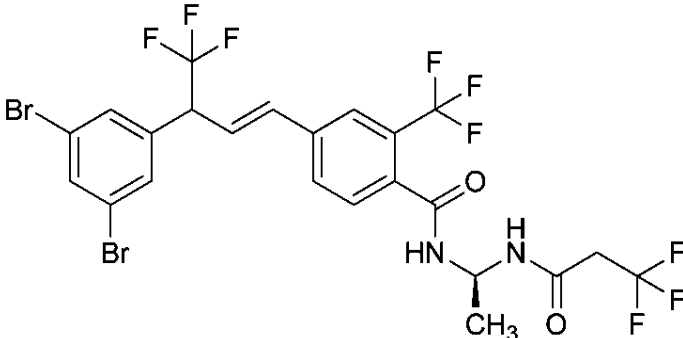
20

30

【 0 7 5 4 】

【表 5 - 1】

表 5. 例示される P 系列の化合物の構造および製造方法

番号	構造	製造法 従った実施例実 施例:
P1		30
P2		30
P3		30

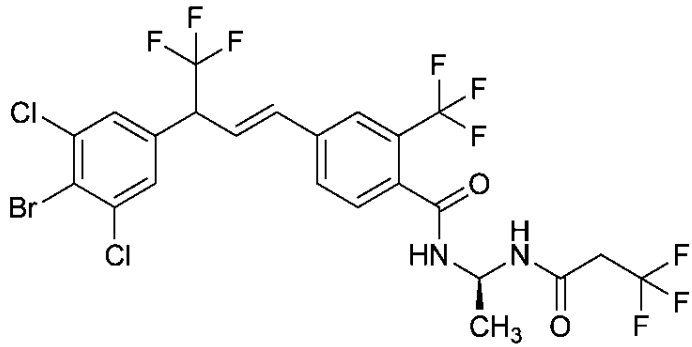
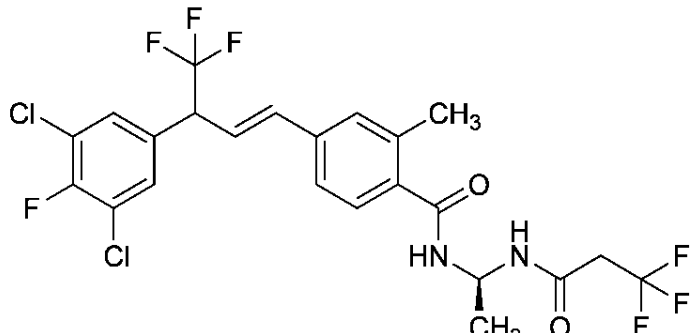
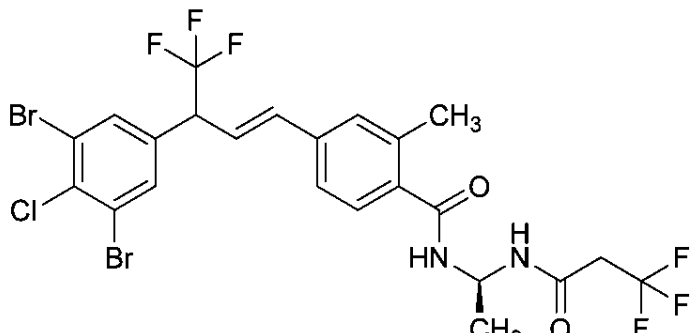
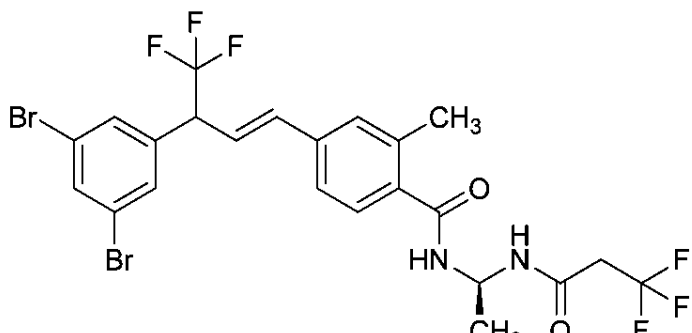
10

20

30

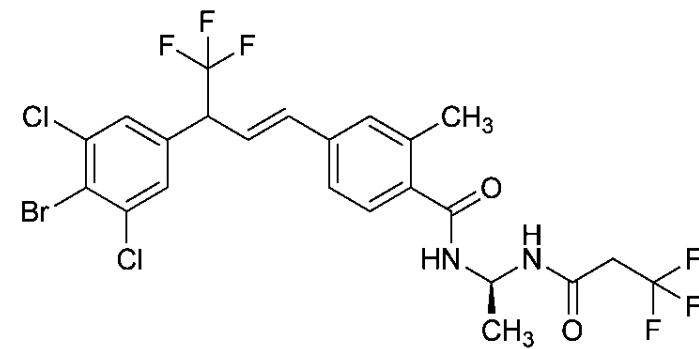
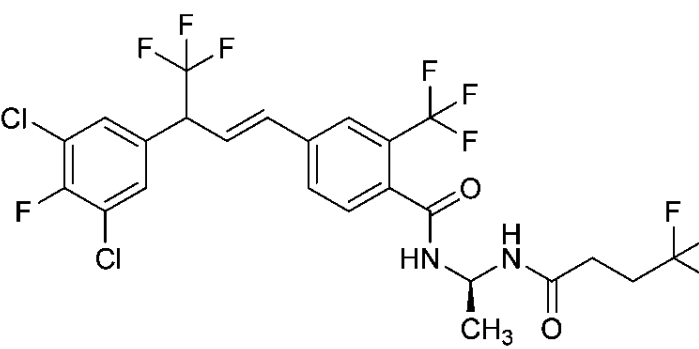
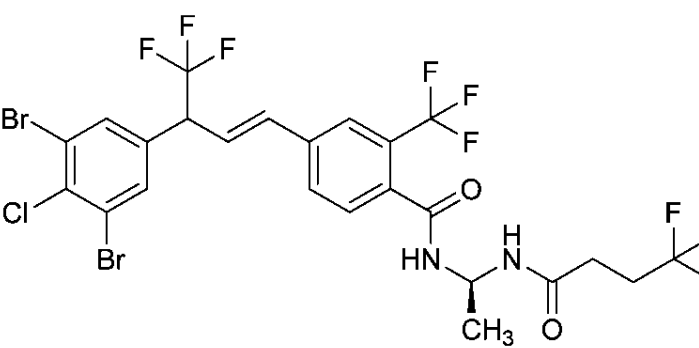
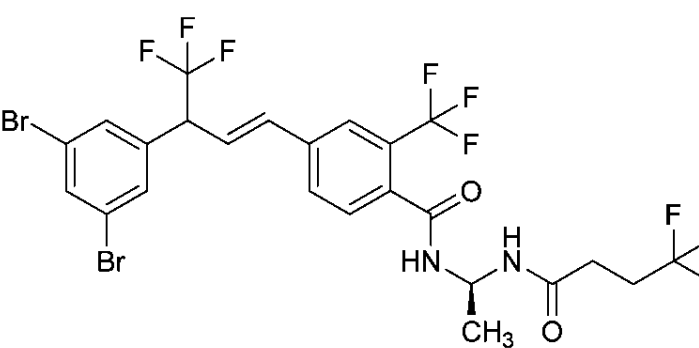
【 0 7 5 5 】

【表 5 - 2】

P4		30
P5		30
P6		30
P7		30

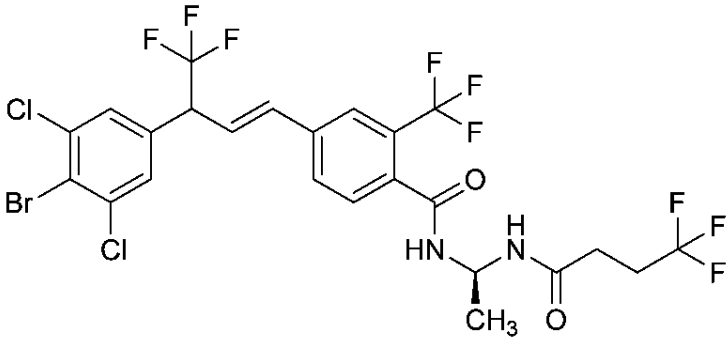
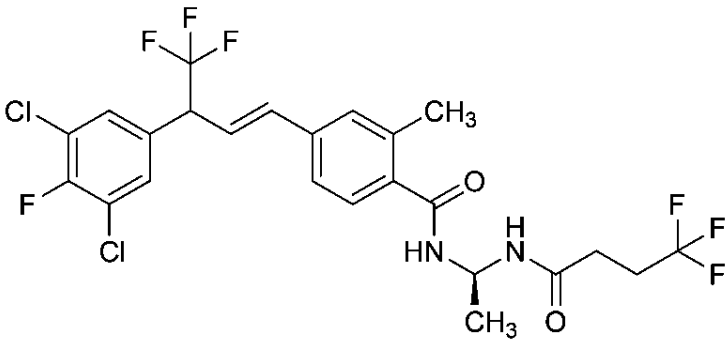
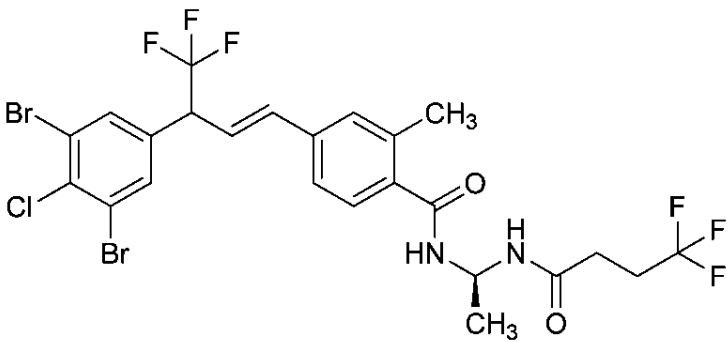
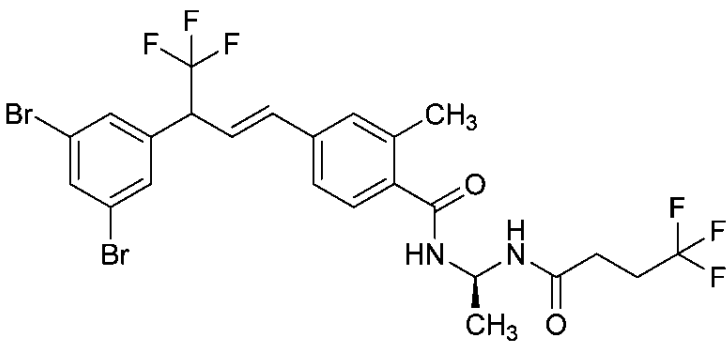
【 0 7 5 6】

【表 5 - 3】

P8		30
P9		30
P10		30
P11		30

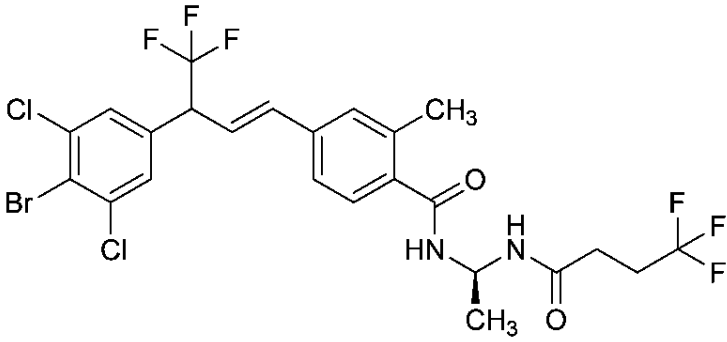
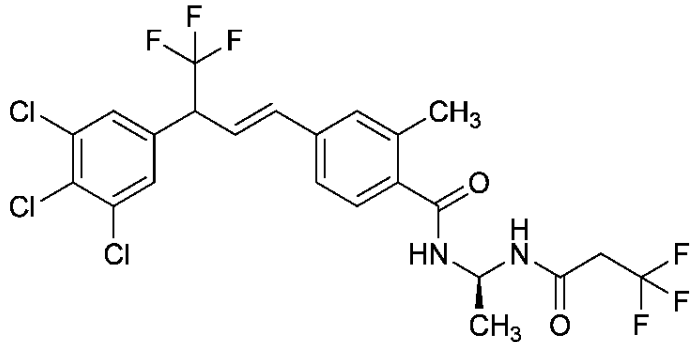
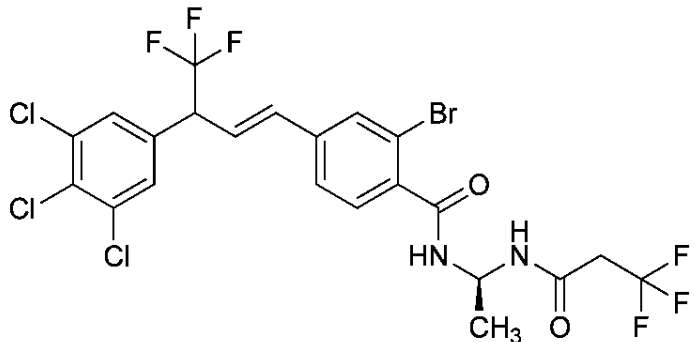
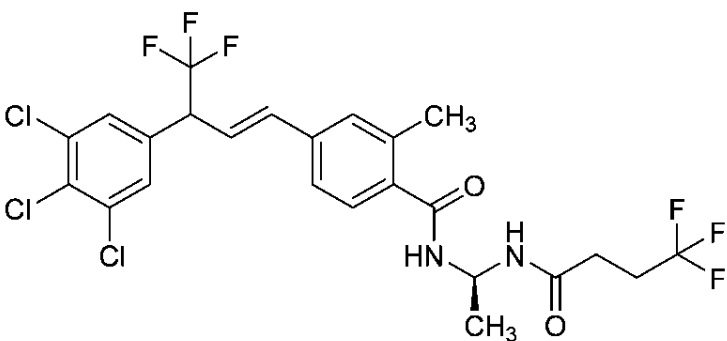
【 0 7 5 7】

【表 5 - 4】

P12		30
P13		30
P14		30
P15		30

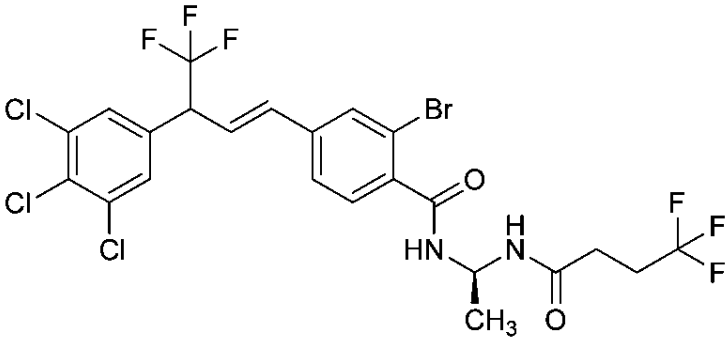
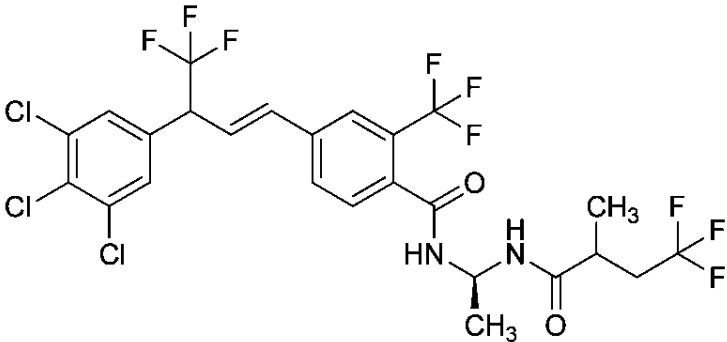
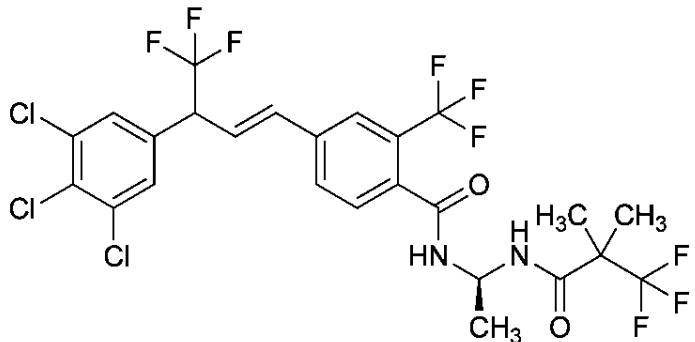
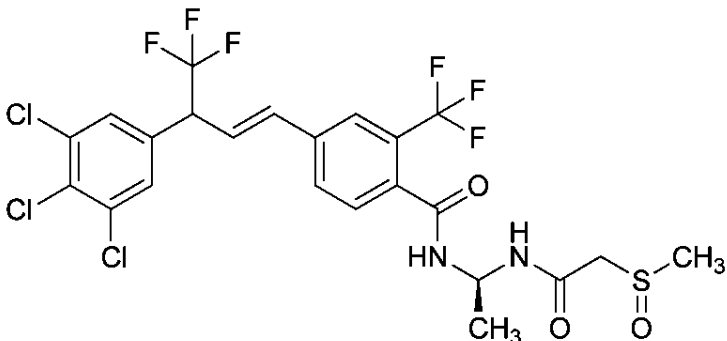
【 0 7 5 8】

【表 5 - 5】

P16		30
P22		30
P24		30
P25		30

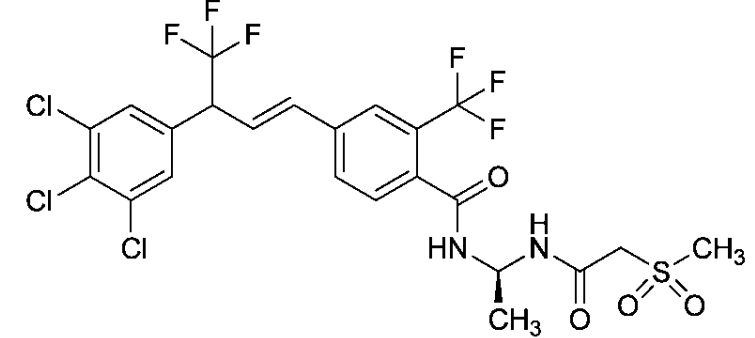
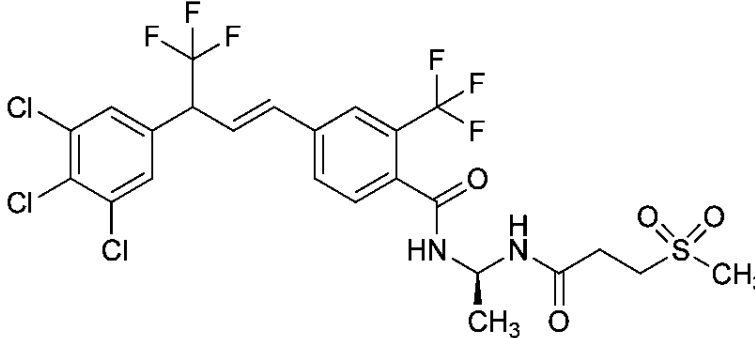
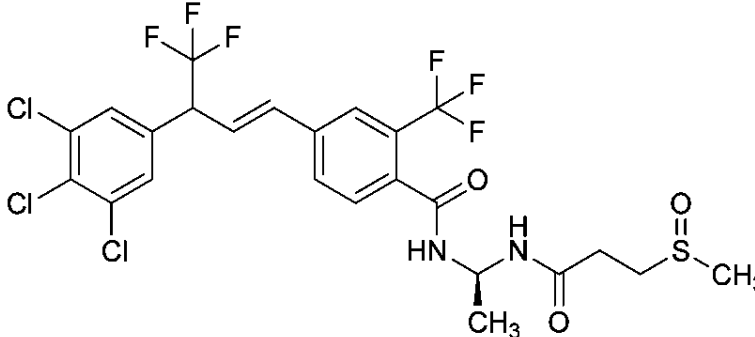
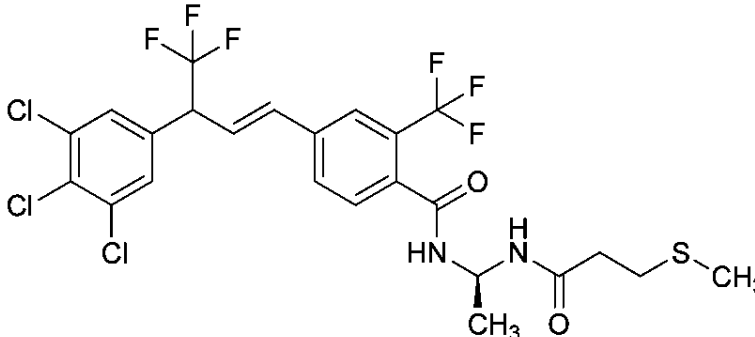
【 0 7 5 9】

【表 5 - 6】

P27		30
P30		19
P33		19
P36		31

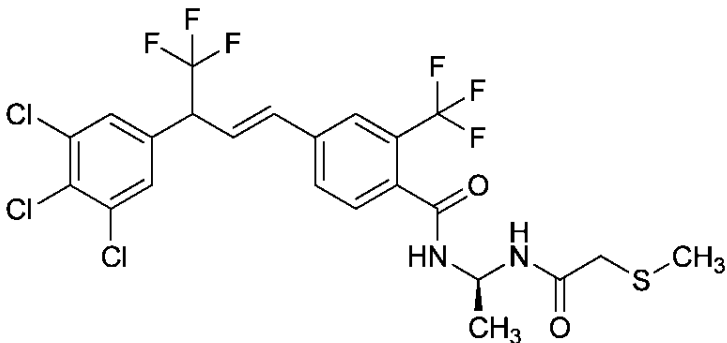
【 0 7 6 0】

【表 5 - 7】

P43		31
P47		31
P49		31
P53		30

【 0 7 6 1】

【表 5－8】

P54		30
------------	--	-----------

10

【 0 7 6 2 】

【表 6 - 1】

表 6 : 表 5 の化合物の分析データ

番号	質量 (m/z)	^1H NMR	^{19}F NMR/IR
P1	HRMS-ESI $[\text{M}+\text{H}]^+$ $\text{C}_{23}\text{H}_{16}\text{Cl}_2\text{F}_{10}\text{N}_2\text{O}_2$ の計算値, 613.0502; 実測値, 613.0494	^1H NMR (500 MHz, $\text{DMSO}-d_6$) δ 8.90 (d, J = 7.3 Hz, 1H), 8.65 (d, J = 7.4 Hz, 1H), 8.02 - 7.97 (m, 1H), 7.89 (dd, J = 10.3, 7.1 Hz, 3H), 7.45 (d, J = 7.9 Hz, 1H), 7.05 (dd, J = 15.8, 9.2 Hz, 1H), 6.86 (d, J = 15.7 Hz, 1H), 5.58 (h, J = 6.8 Hz, 1H), 4.83 (p, J = 9.4 Hz, 1H), 3.27 (q, J = 11.3 Hz, 2H), 1.35 (d, J = 6.5 Hz, 3H)	IR (薄膜) 1678 cm^{-1}
P2	HRMS-ESI $[\text{M}+\text{H}]^+$ $\text{C}_{23}\text{H}_{17}\text{Br}_2\text{ClF}_9\text{N}_2\text{O}_2$ の計算 値, 718.9176; 実測値, 718.9181	^1H NMR (500 MHz, $\text{DMSO}-d_6$) δ 8.89 (d, J = 7.4 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 7.4 Hz, 1H), 8.06 (s, 2H), 8.01 - 7.97 (m, 1H), 7.93 - 7.87 (m, 1H), 7.45 (d, J = 8.0 Hz, 1H), 7.06 (dd, J = 15.8, 9.2 Hz, 1H), 6.85 (d, J = 15.7 Hz, 1H), 5.57 (h, J = 6.8 Hz, 1H), 4.84 (p, J = 9.4 Hz, 1H), 3.27 (q, J = 11.3 Hz, 2H), 1.35 (d, J = 6.5 Hz, 3H)	IR (薄膜) 1675 cm^{-1}
P3	HRMS-ESI $[\text{M}+\text{H}]^+$ $\text{C}_{23}\text{H}_{17}\text{Br}_2\text{F}_9\text{N}_2\text{O}_2$ の計算値, 684.9567; 実測値, 684.9570	^1H NMR (500 MHz, $\text{DMSO}-d_6$) δ 8.90 (d, J = 7.4 Hz, 1H), 8.64 (d, J = 7.4 Hz, 1H), 8.01 - 7.97 (m, 1H), 7.93 - 7.88 (m, 2H), 7.85 (d, J = 1.7 Hz, 2H), 7.45 (d, J = 7.9 Hz, 1H), 7.06 (dd, J = 15.8, 9.2 Hz, 1H), 6.86 (d, J = 15.7 Hz, 1H), 5.58 (h, J = 6.8 Hz, 1H), 4.82 (p, J = 9.5 Hz, 1H), 3.27 (q, J = 11.3 Hz, 2H), 1.35 (d, J = 6.5 Hz, 3H)	IR (薄膜) 1677 cm^{-1}

【表 6 - 2】

P4	HRMS-ESI [M+H] ⁺ $C_{24}H_{18}Br_2ClF_9N_2O_2$ の計算 値, 674.9679; 実測値, 674.9681	¹ H NMR (500 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.89 (d, <i>J</i> = 7.4 Hz, 1H), 8.63 (d, <i>J</i> = 7.4 Hz, 1H), 8.01 - 7.97 (m, 1H), 7.92 - 7.84 (m, 3H), 7.45 (d, <i>J</i> = 7.9 Hz, 1H), 7.05 (dd, <i>J</i> = 15.8, 9.1 Hz, 1H), 6.86 (d, <i>J</i> = 15.7 Hz, 1H), 5.57 (h, <i>J</i> = 6.8 Hz, 1H), 4.85 (p, <i>J</i> = 9.2 Hz, 1H), 3.27 (q, <i>J</i> = 11.5 Hz, 2H), 1.35 (d, <i>J</i> = 6.6 Hz, 3H)	IR (薄膜) 1675 cm ⁻¹	10
P5	HRMS-ESI [M+H] ⁺ $C_{23}H_{19}Cl_2F_7N_2O_2$ の計算値, 559.0785; 実測値, 559.0794	¹ H NMR (500 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.62 - 8.54 (m, 2H), 7.84 (d, <i>J</i> = 6.3 Hz, 2H), 7.45 (d, <i>J</i> = 1.8 Hz, 1H), 7.40 (dd, <i>J</i> = 8.0, 1.7 Hz, 1H), 7.29 (d, <i>J</i> = 7.9 Hz, 1H), 6.84 (dd, <i>J</i> = 15.7, 9.1 Hz, 1H), 6.72 (d, <i>J</i> = 15.7 Hz, 1H), 5.60 (h, <i>J</i> = 6.8 Hz, 1H), 4.80 (p, <i>J</i> = 9.4 Hz, 1H), 3.27 (q, <i>J</i> = 11.3 Hz, 2H), 2.33 (s, 3H), 1.35 (d, <i>J</i> = 6.5 Hz, 3H)	IR (薄膜) 1672 cm ⁻¹	20
P6	HRMS-ESI [M+H] ⁺ $C_{23}H_{19}BrCl_2F_6N_2O_2$ の計算 値, 732.9332; 実測値, 732.9342	¹ H NMR (500 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.60 (d, <i>J</i> = 7.5 Hz, 1H), 8.57 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 1H), 7.85 (s, 2H), 7.45 (d, <i>J</i> = 1.7 Hz, 1H), 7.40 (dd, <i>J</i> = 8.0, 1.7 Hz, 1H), 7.29 (d, <i>J</i> = 7.8 Hz, 1H), 6.83 (dd, <i>J</i> = 15.7, 9.0 Hz, 1H), 6.72 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 5.60 (h, <i>J</i> = 6.8 Hz, 1H), 4.81 (p, <i>J</i> = 9.4 Hz, 1H), 3.26 (q, <i>J</i> = 11.3 Hz, 2H), 2.33 (s, 3H), 1.35 (d, <i>J</i> = 6.5 Hz, 3H)	IR (薄膜) 1672 cm ⁻¹	30 40

【表 6 - 3】

P7	HRMS-ESI [M+H] ⁺ C ₂₃ H ₂₁ Br ₂ F ₆ N ₂ O ₂ の計算値, 630.9850; 実測値, 630.9858	¹ H NMR (500 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.59 (d, <i>J</i> = 7.5 Hz, 1H), 8.56 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 1H), 7.89 (t, <i>J</i> = 1.7 Hz, 1H), 7.82 (d, <i>J</i> = 1.7 Hz, 2H), 7.47 - 7.43 (m, 1H), 7.40 (dd, <i>J</i> = 8.0, 1.7 Hz, 1H), 7.29 (d, <i>J</i> = 7.8 Hz, 1H), 6.83 (dd, <i>J</i> = 15.7, 9.1 Hz, 1H), 6.72 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 5.60 (h, <i>J</i> = 6.8 Hz, 1H), 4.79 (p, <i>J</i> = 9.5 Hz, 1H), 3.27 (q, <i>J</i> = 11.3 Hz, 2H), 2.33 (s, 3H), 1.35 (d, <i>J</i> = 6.5 Hz, 3H)	IR (薄膜) 1656 cm ⁻¹	10
P8	HRMS-ESI [M+H] ⁺ C ₂₃ H ₂₀ Br ₂ ClF ₆ N ₂ O ₂ の計算 値, 664.9458; 実測値, 664.9465	¹ H NMR (500 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.60 (d, <i>J</i> = 7.5 Hz, 1H), 8.57 (d, <i>J</i> = 7.3 Hz, 1H), 8.03 (s, 2H), 7.45 (d, <i>J</i> = 1.8 Hz, 1H), 7.41 (dd, <i>J</i> = 8.1, 1.7 Hz, 1H), 7.29 (d, <i>J</i> = 7.9 Hz, 1H), 6.84 (dd, <i>J</i> = 15.7, 9.1 Hz, 1H), 6.72 (d, <i>J</i> = 15.7 Hz, 1H), 5.60 (h, <i>J</i> = 6.8 Hz, 1H), 4.81 (p, <i>J</i> = 9.5 Hz, 1H), 3.27 (q, <i>J</i> = 11.3 Hz, 2H), 2.33 (s, 3H), 1.35 (d, <i>J</i> = 6.5 Hz, 3H)	IR (薄膜) 1673 cm ⁻¹	20 30
P9	HRMS-ESI [M+H] ⁺ C ₂₄ H ₁₈ Cl ₂ F ₁₀ N ₂ O ₂ の計算値, 627.0658; 実測値, 627.0662	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.78 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 1H), 8.41 (d, <i>J</i> = 7.5 Hz, 1H), 8.00 - 7.96 (m, 1H), 7.91 - 7.85 (m, 3H), 7.46 (d, <i>J</i> = 7.9 Hz, 1H), 7.05 (dd, <i>J</i> = 15.8, 9.1 Hz, 1H), 6.86 (d, <i>J</i> = 15.8 Hz, 1H), 5.58 (h, <i>J</i> = 6.7 Hz, 1H), 4.84 (p, <i>J</i> = 9.4 Hz, 1H), 2.58 - 2.28 (m, 4H), 1.33 (d, <i>J</i> = 6.5 Hz, 3H)	IR (薄膜) 1667 cm ⁻¹	40

【表 6 - 4】

P10	HRMS-ESI [M+H] ⁺ $C_{24}H_{18}Br_2ClF_9N_2O_2$ の計算 値, 732.9332; 実測値, 732.9342	¹ H NMR (500 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.77 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 1H), 8.40 (d, <i>J</i> = 7.5 Hz, 1H), 8.06 (s, 2H), 7.98 (d, <i>J</i> = 1.7 Hz, 1H), 7.92 - 7.85 (m, 1H), 7.45 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.05 (dd, <i>J</i> = 15.8, 9.2 Hz, 1H), 6.86 (d, <i>J</i> = 15.7 Hz, 1H), 5.57 (h, <i>J</i> = 6.7 Hz, 1H), 4.84 (p, <i>J</i> = 9.4 Hz, 1H), 2.52 - 2.29 (m, 4H), 1.33 (d, <i>J</i> = 6.5 Hz, 3H)	IR (薄膜) 1665 cm ⁻¹	10
P11	HRMS-ESI [M+H] ⁺ $C_{24}H_{19}Br_2F_9N_2O_2$ の計算値, 698.9723; 実測値, 698.9721	¹ H NMR (500 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.78 (d, <i>J</i> = 7.1 Hz, 1H), 8.41 (d, <i>J</i> = 7.4 Hz, 1H), 7.98 (d, <i>J</i> = 1.6 Hz, 1H), 7.93 - 7.87 (m, 2H), 7.86 (d, <i>J</i> = 1.7 Hz, 2H), 7.45 (d, <i>J</i> = 7.9 Hz, 1H), 7.05 (dd, <i>J</i> = 15.8, 9.2 Hz, 1H), 6.86 (d, <i>J</i> = 15.7 Hz, 1H), 5.58 (h, <i>J</i> = 6.8 Hz, 1H), 4.82 (p, <i>J</i> = 9.5 Hz, 1H), 2.57 - 2.28 (m, 4H), 1.33 (d, <i>J</i> = 6.5 Hz, 3H)	IR (薄膜) 1665 cm ⁻¹	20
P12	HRMS-ESI [M+H] ⁺ $C_{24}H_{19}BrCl_2F_9N_2O_2$ の計算 値, 688.9836; 実測値, 688.9845	¹ H NMR (500 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.78 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 1H), 8.41 (d, <i>J</i> = 7.5 Hz, 1H), 8.00 - 7.96 (m, 1H), 7.88 (s, 3H), 7.46 (d, <i>J</i> = 7.9 Hz, 1H), 7.05 (dd, <i>J</i> = 15.7, 9.1 Hz, 1H), 6.86 (d, <i>J</i> = 15.7 Hz, 1H), 5.58 (h, <i>J</i> = 6.8 Hz, 1H), 4.85 (p, <i>J</i> = 9.4 Hz, 1H), 2.54 - 2.29 (m, 4H), 1.33 (d, <i>J</i> = 6.5 Hz, 3H)	IR (薄膜) 1666 cm ⁻¹	30 40

【表 6 - 5】

P13	HRMS-ESI [M+H] ⁺ $C_{24}H_{21}Cl_2F_7N_2O_2$ の計算値, 573.0941; 実測値, 573.0911	¹ H NMR (500 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.47 (d, <i>J</i> = 7.3 Hz, 1H), 8.35 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 1H), 7.84 (d, <i>J</i> = 6.2 Hz, 2H), 7.45 (d, <i>J</i> = 1.8 Hz, 1H), 7.42 - 7.37 (m, 1H), 7.29 (d, <i>J</i> = 7.8 Hz, 1H), 6.84 (dd, <i>J</i> = 15.7, 9.1 Hz, 1H), 6.72 (d, <i>J</i> = 15.7 Hz, 1H), 5.61 (h, <i>J</i> = 6.7 Hz, 1H), 4.80 (p, <i>J</i> = 9.4 Hz, 1H), 2.58 - 2.21 (m, 7H), 1.33 (d, <i>J</i> = 6.5 Hz, 3H)	IR (薄膜) 1655 cm ⁻¹	10
P14	HRMS-ESI [M+H] ⁺ $C_{24}H_{18}Br_2ClF_9N_2O_2$ の計算 値, 678.9615; 実測値, 678.9623	¹ H NMR (500 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.46 (d, <i>J</i> = 7.3 Hz, 1H), 8.33 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 1H), 8.03 (s, 2H), 7.44 (d, <i>J</i> = 1.7 Hz, 1H), 7.39 (dd, <i>J</i> = 8.0, 1.7 Hz, 1H), 7.29 (d, <i>J</i> = 7.8 Hz, 1H), 6.83 (dd, <i>J</i> = 15.7, 9.1 Hz, 1H), 6.72 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 5.60 (h, <i>J</i> = 6.8 Hz, 1H), 4.81 (p, <i>J</i> = 9.5 Hz, 1H), 2.49 - 2.42 (m, 2H), 2.42 - 2.28 (m, 5H), 1.33 (d, <i>J</i> = 6.5 Hz, 3H)	IR (薄膜) 1660 cm ⁻¹	20 30
P15	HRMS-ESI [M+H] ⁺ $C_{24}H_{22}Br_2F_6N_2O_2$ の計算値, 645.0006; 実測値, 645.0004	¹ H NMR (500 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.48 (d, <i>J</i> = 7.3 Hz, 1H), 8.35 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 1H), 7.89 (t, <i>J</i> = 1.8 Hz, 1H), 7.82 (d, <i>J</i> = 1.8 Hz, 2H), 7.45 (d, <i>J</i> = 1.7 Hz, 1H), 7.41 - 7.37 (m, 1H), 7.29 (d, <i>J</i> = 7.9 Hz, 1H), 6.82 (dd, <i>J</i> = 15.7, 9.1 Hz, 1H), 6.72 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 5.61 (h, <i>J</i> = 6.7 Hz, 1H), 4.79 (p, <i>J</i> = 9.5 Hz, 1H), 2.56 - 2.28 (m, 7H), 1.33 (d, <i>J</i> = 6.5 Hz, 3H)	IR (薄膜) 1660 cm ⁻¹	40

【表 6 - 6】

P16	HRMS-ESI [M+H] ⁺ $C_{24}H_{21}BrCl_2F_6N_2O_2$ の計算 値, 632.0118; 実測値, 635.0128	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.47 (d, <i>J</i> = 7.3 Hz, 1H), 8.34 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 1H), 7.85 (s, 2H), 7.50 – 7.42 (m, 1H), 7.40 (dd, <i>J</i> = 7.9, 1.7 Hz, 1H), 7.29 (d, <i>J</i> = 7.9 Hz, 1H), 6.83 (dd, <i>J</i> = 15.7, 8.9 Hz, 1H), 6.72 (d, <i>J</i> = 15.7 Hz, 1H), 5.60 (h, <i>J</i> = 6.8 Hz, 1H), 4.82 (p, <i>J</i> = 9.4 Hz, 1H), 2.61 – 2.22 (m, 7H), 1.33 (d, <i>J</i> = 6.5 Hz, 3H)	IR (薄膜) 1660 cm ⁻¹	10
P22	HRMS-ESI [M+H] ⁺ $C_{23}H_{20}Cl_3F_6N_2O_2$ の計算値, 577.0463; 実測値, 577.0470	¹ H NMR (500 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.59 (d, <i>J</i> = 7.5 Hz, 1H), 8.56 (d, <i>J</i> = 7.3 Hz, 1H), 7.89 (s, 2H), 7.45 (d, <i>J</i> = 1.8 Hz, 1H), 7.40 (dd, <i>J</i> = 8.0, 1.7 Hz, 1H), 7.29 (d, <i>J</i> = 7.9 Hz, 1H), 6.84 (dd, <i>J</i> = 15.7, 9.1 Hz, 1H), 6.73 (d, <i>J</i> = 15.7 Hz, 1H), 5.60 (h, <i>J</i> = 6.8 Hz, 1H), 4.83 (p, <i>J</i> = 9.4 Hz, 1H), 3.26 (q, <i>J</i> = 11.3 Hz, 2H), 2.33 (s, 3H), 1.35 (d, <i>J</i> = 6.5 Hz, 3H)	IR (薄膜) 1671 cm ⁻¹	20
P24	HRMS-ESI [M+H] ⁺ $C_{22}H_{17}BrCl_3F_6N_2O_2$ の計算 値, 640.9414; 実測値, 640.9414	¹ H NMR (500 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.84 (dd, <i>J</i> = 7.6, 1.6 Hz, 1H), 8.63 (d, <i>J</i> = 7.6 Hz, 1H), 7.89 (s, 2H), 7.63 (d, <i>J</i> = 8.2 Hz, 1H), 7.58 – 7.50 (m, 2H), 6.90 (dd, <i>J</i> = 15.7, 9.1 Hz, 1H), 6.76 (d, <i>J</i> = 15.7 Hz, 1H), 5.64 (h, <i>J</i> = 6.8 Hz, 1H), 4.84 (p, <i>J</i> = 9.3 Hz, 1H), 3.29 (q, <i>J</i> = 11.3 Hz, 2H), 1.38 (d, <i>J</i> = 6.5 Hz, 3H)	IR (薄膜) 1675 cm ⁻¹	30 40

【表 6 - 7】

P25	HRMS-ESI [M+H] ⁺ $C_{24}H_{21}Cl_3F_6N_2O_2$ の計算値, 589.0646; 実測値, 589.0657	¹ H NMR (500 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.47 (d, <i>J</i> = 7.3 Hz, 1H), 8.34 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 1H), 7.89 (s, 2H), 7.45 (d, <i>J</i> = 1.7 Hz, 1H), 7.43 - 7.37 (m, 1H), 7.29 (d, <i>J</i> = 7.8 Hz, 1H), 6.84 (dd, <i>J</i> = 15.7, 9.1 Hz, 1H), 6.73 (d, <i>J</i> = 15.7 Hz, 1H), 5.60 (h, <i>J</i> = 6.7 Hz, 1H), 4.83 (p, <i>J</i> = 9.4 Hz, 1H), 2.56 - 2.28 (m, 7H), 1.33 (d, <i>J</i> = 6.5 Hz, 3H)	IR (薄膜) 1656 cm ⁻¹
P27	HRMS-ESI [M+H] ⁺ $C_{23}H_{19}BrCl_3F_6N_2O_2$ の計算 値, 654.9571; 実測値, 654.9582	¹ H NMR (500 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.70 (dd, <i>J</i> = 7.2, 1.9 Hz, 1H), 8.37 (d, <i>J</i> = 7.6 Hz, 1H), 7.89 (s, 2H), 7.62 (d, <i>J</i> = 8.3 Hz, 1H), 7.55 (t, <i>J</i> = 1.9 Hz, 1H), 7.52 (ddd, <i>J</i> = 8.0, 5.3, 2.2 Hz, 1H), 6.89 (ddd, <i>J</i> = 15.8, 9.1, 1.8 Hz, 1H), 6.75 (d, <i>J</i> = 15.6 Hz, 1H), 5.62 (h, <i>J</i> = 6.7 Hz, 1H), 4.83 (p, <i>J</i> = 9.5 Hz, 1H), 2.56 - 2.43 (m, 2H), 2.42 - 2.29 (m, 2H), 1.35 (d, <i>J</i> = 6.5 Hz, 3H)	IR (薄膜) 1666 cm ⁻¹

10

20

30

【 0 7 6 9 】

【表 6 - 8】

P30	ESIMS 657 ([M-H] ⁻)	ジアステレオマーの混合物: ¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.67 - 7.63 (m, 1H), 7.59 - 7.51 (m, 1H), 7.46 - 7.40 (m, 3H), 7.18 - 7.04 (m, 2H), 6.61 (d, <i>J</i> = 15.9 Hz, 1H), 6.42 (dd, <i>J</i> = 16.0, 7.9 Hz, 1H), 5.40 (hept, <i>J</i> = 7.0 Hz, 1H), 4.12 (p, <i>J</i> = 8.6 Hz, 1H), 2.71 - 2.45 (m, 2H), 2.20 - 1.97 (m, 1H), 1.71 - 1.61 (m, 3H), 1.24 - 1.19 (m, 3H)	ジアステレオマーの混合物: (メジャー) ¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -59.09, -64.97, -68.59; (マイナー) ¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -59.11, -64.96, -68.60	10 20
P33	ESIMS 657 ([M-H] ⁻)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.64 (d, <i>J</i> = 1.7 Hz, 1H), 7.55 (dd, <i>J</i> = 8.0, 1.7 Hz, 1H), 7.45 - 7.40 (m, 3H), 7.30 (d, <i>J</i> = 7.3 Hz, 1H), 7.23 (d, <i>J</i> = 7.5 Hz, 1H), 6.61 (d, <i>J</i> = 15.9 Hz, 1H), 6.42 (dd, <i>J</i> = 15.9, 7.9 Hz, 1H), 5.46 (h, <i>J</i> = 7.0 Hz, 1H), 4.20 - 4.03 (m, 1H), 1.66 (d, <i>J</i> = 6.7 Hz, 3H), 1.38 (s, 6H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -59.12, -68.60, -74.48	30
P36	HRMS-ESI [M+H] ⁺ C ₂₃ H ₁₉ Cl ₃ F ₆ N ₂ O ₃ S の計算値, 625.0132; 実測値, 625.0136	¹ H NMR (500 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.92 - 8.86 (m, 1H), 8.64 - 8.56 (m, 1H), 7.99 (s, 1H), 7.91 (d, <i>J</i> = 16.8 Hz, 3H), 7.50 - 7.45 (m, 1H), 7.06 (dd, <i>J</i> = 15.7, 9.1 Hz, 1H), 6.87 (d, <i>J</i> = 15.7 Hz, 1H), 5.65 - 5.56 (m, 1H), 4.86 (p, <i>J</i> = 9.4 Hz, 1H), 3.74 - 3.59 (m, 2H), 2.65 - 2.61 (m, 3H), 1.39 - 1.31 (m, 3H)	IR (薄膜) 1671 cm ⁻¹	40

【表 6 - 9】

P43	HRMS-ESI [M+H] ⁺ <chem>C23H19Cl3F6N2O4S</chem> の計算値, 641.0082; 実測値, 641.0089	¹ H NMR (500 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.93 (d, <i>J</i> = 7.5 Hz, 1H), 8.72 (d, <i>J</i> = 7.4 Hz, 1H), 8.03 - 7.96 (m, 1H), 7.91 (d, <i>J</i> = 14.8 Hz, 3H), 7.47 (d, <i>J</i> = 7.9 Hz, 1H), 7.06 (dd, <i>J</i> = 15.8, 9.1 Hz, 1H), 6.87 (d, <i>J</i> = 15.7 Hz, 1H), 5.60 (h, <i>J</i> = 6.8 Hz, 1H), 4.86 (p, <i>J</i> = 9.4 Hz, 1H), 4.15 (d, <i>J</i> = 14.2 Hz, 1H), 4.06 - 4.02 (m, 1H), 3.12 (s, 3H), 1.35 (d, <i>J</i> = 6.5 Hz, 3H)	IR (薄膜) 1677 cm ⁻¹	10
P47	HRMS-ESI [M+H] ⁺ <chem>C24H21Cl3F6N2O4S</chem> の計算値, 655.0238; 実測値, 655.026	¹ H NMR (500 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.77 (d, <i>J</i> = 7.1 Hz, 1H), 8.46 (d, <i>J</i> = 7.4 Hz, 1H), 7.98 (d, <i>J</i> = 1.7 Hz, 1H), 7.94 - 7.86 (m, 3H), 7.47 (d, <i>J</i> = 7.9 Hz, 1H), 7.05 (dd, <i>J</i> = 15.8, 9.1 Hz, 1H), 6.86 (d, <i>J</i> = 15.7 Hz, 1H), 5.58 (h, <i>J</i> = 6.7 Hz, 1H), 4.86 (p, <i>J</i> = 9.4 Hz, 1H), 3.35 - 3.29 (m, 2H), 2.98 (s, 3H), 2.63 - 2.52 (m, 2H), 1.33 (d, <i>J</i> = 6.5 Hz, 3H)	IR (薄膜) 1670 cm ⁻¹	20 30
P49	HRMS-ESI [M+H] ⁺ <chem>C24H21Cl3F6N2O3S</chem> の計算値, 639.0289; 実測値, 639.0299	¹ H NMR (500 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.80 - 8.74 (m, 1H), 8.45 - 8.39 (m, 1H), 7.99 - 7.97 (m, 1H), 7.90 (d, <i>J</i> = 22.0 Hz, 3H), 7.47 (d, <i>J</i> = 7.9 Hz, 1H), 7.05 (dd, <i>J</i> = 15.7, 9.1 Hz, 1H), 6.87 (d, <i>J</i> = 15.7 Hz, 1H), 5.58 (h, <i>J</i> = 6.7 Hz, 1H), 4.86 (p, <i>J</i> = 9.4 Hz, 1H), 3.06 - 2.97 (m, 1H), 2.81 (ddt, <i>J</i> = 11.3, 7.1, 5.5 Hz, 1H), 2.53 (s, 3H), 2.52 - 2.51 (m, 2H), 1.33 (d, <i>J</i> = 6.5 Hz, 3H)		40

【表 6 - 1 0】

P53	HRMS-ESI [M+H] ⁺ C ₂₄ H ₂₁ Cl ₃ F ₆ N ₂ O ₂ S の計算値, 623.034; 実測値 623.0342	¹ H NMR (500 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.74 (d, <i>J</i> = 7.2 Hz, 1H), 8.27 (d, <i>J</i> = 7.5 Hz, 1H), 7.98 (d, <i>J</i> = 1.9 Hz, 1H), 7.92 (s, 2H), 7.89 (d, <i>J</i> = 7.8 Hz, 1H), 7.46 (d, <i>J</i> = 7.9 Hz, 1H), 7.05 (dd, <i>J</i> = 15.7, 9.1 Hz, 1H), 6.86 (d, <i>J</i> = 15.7 Hz, 1H), 5.57 (h, <i>J</i> = 6.8 Hz, 1H), 4.86 (p, <i>J</i> = 9.4 Hz, 1H), 2.65 (t, <i>J</i> = 7.0 Hz, 2H), 2.45 - 2.31 (m, 2H), 2.06 (s, 3H), 1.32 (d, <i>J</i> = 6.5 Hz, 3H)	IR (薄膜) 1662 cm ⁻¹
P54	HRMS-ESI [M+H] ⁺ C ₂₃ H ₁₉ Cl ₃ F ₆ N ₂ O ₂ S の計算値; 609.0183; 実測 値,609.0188	¹ H NMR (500 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.81 (d, <i>J</i> = 7.4 Hz, 1H), 8.30 (d, <i>J</i> = 7.6 Hz, 1H), 8.01 - 7.97 (m, 1H), 7.94 - 7.87 (m, 3H), 7.47 (d, <i>J</i> = 7.9 Hz, 1H), 7.05 (dd, <i>J</i> = 15.7, 9.1 Hz, 1H), 6.86 (d, <i>J</i> = 15.7 Hz, 1H), 5.59 (h, <i>J</i> = 6.8 Hz, 1H), 4.86 (p, <i>J</i> = 9.4 Hz, 1H), 3.09 (s, 2H), 2.10 (s, 3H), 1.34 (d, <i>J</i> = 6.5 Hz, 3H).	IR (薄膜) 1664 cm ⁻¹

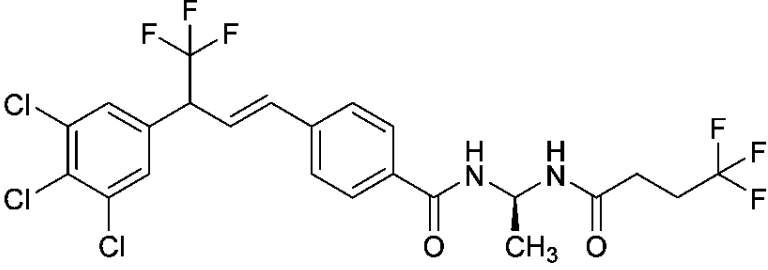
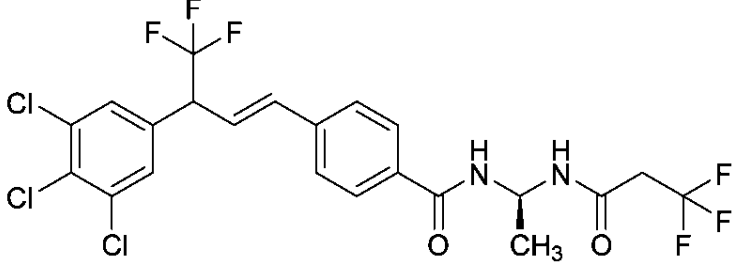
10

20

30

【表 7】

表 7. F C 系列の化合物の構造および製造方法

番号	構造	製造法 従った実施 例:
FC1		30
FC2		30

10

20

【 0 7 7 3 】

【表 8】

表 8 : 表 7 の化合物の分析データ

番号	質量 (m/z)	^1H NMR	^{19}F NMR/IR
FC1	HRMS-ESI $[\text{M}+\text{H}]^+$ $\text{C}_{23}\text{H}_{20}\text{Cl}_3\text{F}_6\text{N}_2\text{O}_2$ の計算値; 575.0489; 実測値, 575.0490	回転異性体: ^1H NMR (400 MHz, $\text{DMSO}-d_6$) δ 8.63 (d, $J = 7.2$ Hz, 1H), 8.29 (d, $J = 7.1$ Hz, 1H), 7.88 (s, 2H), 7.82 (d, $J = 8.4$ Hz, 2H), 7.63 (d, $J = 8.4$ Hz, 2H), 6.93 – 6.88 (m, 1H), 6.77 (d, $J = 15.7$ Hz, 1H), 5.63 (h, $J = 6.7$ Hz, 1H), 4.82 (h, $J = 9.2$ Hz, 1H), 2.47 – 2.39 (m, 1H), 2.39 – 2.27 (m, 2H), 1.33 (d, $J = 6.5$ Hz, 3H)	回転異性体: ^{19}F NMR (376 MHz, CDCl_3) δ -66.76, -68.68
FC2	HRMS-ESI $[\text{M}+\text{H}]^+$ $\text{C}_{22}\text{H}_{18}\text{Cl}_3\text{F}_6\text{N}_2\text{O}_2$ の計算値; 561.0333; 実測値, 561.0330	回転異性体: ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 8.51 (d, $J = 8.1$ Hz, 1H), 8.37 (d, $J = 7.9$ Hz, 1H), 7.76 (d, $J = 8.1$ Hz, 2H), 7.37 (d, $J = 2.4$ Hz, 2H), 7.33 – 7.28 (m, 2H), 6.64 – 6.51 (m, 1H), 6.41 – 6.29 (m, 1H), 6.09 (q, $J = 8.3, 7.7$ Hz, 1H), 4.17 – 3.97 (m, 1H), 3.20 – 3.10 (m, 2H), 1.54 (d, $J = 6.5$ Hz, 3H)	^{19}F NMR (376 MHz, CDCl_3) δ -62.90, -65.78, -68.73

【 0 7 7 4 】

【表 9】

BAW および CL 評価の表	
%防除 (すなわち死亡率)	評価
50-100	A
0 以上 - 50 未満	B
試験されない	C
このバイオアッセイでは活性は示されない	D

10

GPA および YFM 評価の表	
%防除 (すなわち死亡率)	評価
80-100	A
0 以上 - 80 未満	B
試験されない	C
このバイオアッセイでは活性は示されない	D

20

【 0 7 7 5 】

【表 1 0】

表ABC：アッセイ結果（F）

番号	昆虫種			
	BAW	CL	GPA	YFM
F1	A	A	C	C
F2	A	A	D	A
F3	A	A	C	A
F4	A	A	C	A
F5	A	A	C	A
F6	A	A	C	A
F7	A	A	C	A
F8	A	A	C	A
F9	A	A	C	A
F10	A	A	C	A
F11	A	A	C	A
F12	A	A	C	A
F13	A	A	C	C
F14	A	A	C	A
F15	A	A	C	A
F16	A	A	C	A
F17	A	A	C	A
F18	A	A	C	A
F19	A	A	C	A
F20	A	A	C	A
F21	A	A	C	B
F22	A	A	C	A
F23	A	A	C	A

10

20

30

40

【0 7 7 6】

【表 1 1】

表ABCD：アッセイ結果（C）

番号	昆虫種			
	BAW	CL	GPA	YFM
C113	A	A	D	A
C115	A	D	C	C
C116	A	A	C	A

【0 7 7 7】

【表 1 2 - 1】

表ABCDE : アッセイ結果 (P)

番号	昆虫種			
	BAW	CL	GPA	YFM
P1	A	A	C	C
P2	A	A	C	A
P3	A	A	C	B
P4	A	A	C	A
P5	A	A	C	A
P6	A	A	C	A
P7	A	A	C	A
P8	A	A	C	C
P9	A	A	C	C
P10	A	A	C	A
P11	A	A	C	A
P12	A	A	C	A
P13	A	A	C	A
P14	A	A	C	A
P15	A	A	C	C
P16	A	A	C	C
P22	A	A	C	C
P24	A	A	C	D
P25	A	A	C	C
P27	A	A	C	B
P30	A	A	C	C
P33	A	A	C	A
P36	A	A	D	C

10

20

30

40

【表 1 2 - 2】

P43	A	A	C	C
P47	A	A	C	C
P49	A	A	B	C
P53	A	A	C	C
P54	A	A	C	C

10

【0 7 7 9】

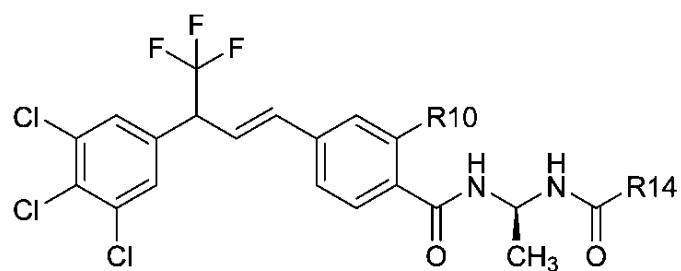
データ

BAWおよびCLでのバイオアッセイは、以下の濃度：5、0.5および0.05 $\mu\text{g}/\text{cm}^2$ を使用して、実施例A：シロイチモジヨトウ（「BAW」）およびイラクサギンウワバ（「CL」）でのバイオアッセイに概説される手順に従って実施した。該結果を表CD1に示す。

【0 7 8 0】

【表 1 3】

表CD 1



10

番号	R10	R14	5 μg/cm ²		0.5 μg/cm ²		0.05 μg/cm ²	
			BAW	CL	BAW	CL	BAW	CL
FC1[†]	H	CH₂CH₂CF₃	13*	71	0	0	0	0
P25	CH ₃	CH ₂ CH ₂ CF ₃	100	100	100	100	100	100
P27	Br	CH ₂ CH ₂ CF ₃	7	100	0	7	0	0
F1	CF ₃	CH ₂ CH ₂ CF ₃	100	100	100	100	100	97
FC2	H	CH₂CF₃	0	0	0	0	0	0
P22	CH ₃	CH ₂ CF ₃	100	100	100	100	25	63
P24	Br	CH ₂ CF ₃	87	100	7	19	0	6
F2	CF ₃	CH ₂ CF ₃	100	100	100	100	100	100

20

30

[†]化合物 30%純粋。*防除% (すなわち死亡率)

フロントページの続き

(51)Int.Cl.		F I	
C 0 7 C 323/52	(2006.01)	C 0 7 C 323/52	
A 0 1 P 9/00	(2006.01)	A 0 1 P 9/00	
A 0 1 P 7/04	(2006.01)	A 0 1 P 7/04	
A 0 1 P 7/02	(2006.01)	A 0 1 P 7/02	
A 0 1 N 37/26	(2006.01)	A 0 1 N 37/26	
A 0 1 N 37/34	(2006.01)	A 0 1 N 37/34	1 0 1
A 0 1 N 37/20	(2006.01)	A 0 1 N 37/34	1 0 3
A 0 1 N 37/28	(2006.01)	A 0 1 N 37/20	
A 0 1 N 47/12	(2006.01)	A 0 1 N 37/28	
A 0 1 N 37/36	(2006.01)	A 0 1 N 47/12	Z
A 0 1 N 41/10	(2006.01)	A 0 1 N 37/36	
A 0 1 P 5/00	(2006.01)	A 0 1 N 41/10	Z
		A 0 1 P 5/00	

- (72)発明者 ハンター, ジェームズ・イー
アメリカ合衆国インディアナ州46268インディアナポリス・ザイオンズビルロード9330
- (72)発明者 ワトソン, ジェラルド・ビー
アメリカ合衆国インディアナ州46268インディアナポリス・ザイオンズビルロード9330
- (72)発明者 ロー, ウィリアム・シー
アメリカ合衆国インディアナ州46268インディアナポリス・ザイオンズビルロード9330
- (72)発明者 ハーバート, ジョン
アメリカ合衆国インディアナ州46268インディアナポリス・ザイオンズビルロード9330

審査官 前田 憲彦

- (56)参考文献 国際公開第2012/177813 (WO, A1)
特許第6405318 (JP, B2)
特表2002-507978 (JP, A)
特開2007-308471 (JP, A)

- (58)調査した分野(Int.Cl., DB名)
C 0 7 C 233/00
A 0 1 N 37/00
A 0 1 N 41/00
A 0 1 N 47/00
C 0 7 C 243/00
C 0 7 C 255/00
C 0 7 C 317/00
C 0 7 C 323/00
CAplus/REGISTRY (STN)