(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2014-0101860
(43) 공개일자 2014년08월20일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C07D 213/75 (2006.01) *C07D 211/94* (2006.01)
A01N 43/40 (2006.01)
(21) 출원번호 10-2014-7019205
(22) 출원일자(국제) 2012년12월13일
심사청구일자 없음
(85) 번역문제출일자 2014년07월10일
(86) 국제출원번호 PCT/EP2012/075462
(87) 국제공개번호 WO 2013/087800
국제공개일자 2013년06월20일
(30) 우선권주장
1121539.9 2011년12월14일 영국(GB)

(71) 출원인
신젠타 파티서페이션즈 아게
스위스 4058 바젤 슈바르츠발달레 215
(72) 발명자
종 피에르 조제프 마르셀
스위스 체하-4332 슈타인 샤프하우저슈트라쎄 신젠타 크롭 프로텍티온 뮌히빌렌 아게
라이프너 외르크
스위스 체하-4332 슈타인 샤프하우저슈트라쎄 신젠타 크롭 프로텍티온 뮌히빌렌 아게
(뒷면에 계속)
(74) 대리인
장훈

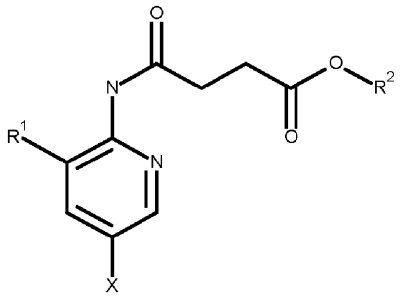
전체 청구항 수 : 총 8 항

(54) 발명의 명칭 **식물 생장 조절 화합물**

(57) 요 약

본 발명은 신규한 화학식 I의 비스테로이드성 브라시노스테로이드 모방 유도체, 이의 제조를 위한 방법 및 중간체, 이를 포함하는 식물 생장 조절제 조성물 및 식물 생장을 제어하고/제어하거나 종자의 발아를 촉진하기 위해 이를 사용하는 방법에 관한 것이다.

[화학식 I]



(72) 발명자

라시아 마틸드 드니스

스위스 체하-4332 슈타인 샤프하우저슈트라쎄 신젠타 크롭 프로텍티온 뮌히빌렌 아게

드 메스마에케 알랭

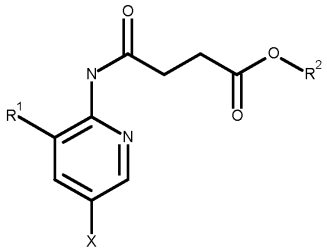
스위스 체하-4332 슈타인 샤프하우저슈트라쎄 신젠타 크롭 프로텍티온 뮌히빌렌 아게

특허청구의 범위

청구항 1

화학식 I의 화합물, 또는 이의 염 또는 N-옥사이드.

[화학식 I]



(상기 식에서

R^1은 H, C_1-C_2알킬, 하나 이상의 할로겐, 하이드록실 또는 아민으로 치환된 C_2알킬이고;

X는 할로겐이며;

R^2는 C_4-C_9알킬; 하나 이상의 할로겐, 하이드록실 또는 아민으로 치환된 C_4-C_9알킬; 하나 이상의 할로겐으로 치환된 메틸; 2개 초과의 할로겐으로 치환된 C_2-C_3알킬; 시아노, 니트로, C_1-C_6알콕시, C_1-C_6할로알콕시, C_1-C_6알킬티오, C_1-C_6할로알킬티오, C_1-C_6알킬설피닐, C_1-C_6할로알킬설피닐, C_1-C_6알킬설포닐, C_1-C_6할로알킬설포닐, C_2-C_6알케닐, C_2-C_6할로알케닐, C_2-C_6알키닐, C_2-C_6할로알키닐, C_3-C_6사이클로알킬, C_4-C_6알킬사이클로알킬, 아릴, 1개 내지 5개의 치환기 R^3으로 치환된 아릴, 헤테로아릴, 1개 내지 5개의 치환기 R^3으로 치환된 헤테로아릴, 헤테로사이클릴 또는 1개 내지 5개의 치환기 R^3으로 치환된 헤테로사이클릴; C_3-C_7사이클로알킬 또는 1개 내지 5개의 치환기 R^4로 치환된 C_3-C_7사이클로알킬; 아릴 또는 1개 내지 5개의 치환기 R^3으로 치환된 아릴; 헤테로아릴 또는 1개 내지 5개의 치환기 R^3으로 치환된 헤테로아릴; 또는 헤테로사이클릴 또는 1개 내지 5개의 치환기 R^3으로 치환된 헤테로사이클릴 중 하나 이상으로 치환된 C_1-C_9알킬이고;

각각의 R^3은 독립적으로 시아노, 니트로, 아미노, 하이드록시, 할로겐, C_1-C_6알킬, C_1-C_6할로알킬, C_1-C_4알콕시-C_1-C_4-알킬, C_2-C_6알케닐, C_2-C_6할로알케닐, C_2-C_6알키닐, C_2-C_6할로알키닐, C_3-C_6사이클로알킬, C_3-C_6할로사이클로알킬, C_1-C_6알콕시, C_1-C_6할로알콕시, C_1-C_4알콕시-C_1-C_4-알콕시, C_1-C_6알킬티오, C_1-C_6할로알킬티오, C_1-C_6알킬설피닐, C_1-C_6할로알킬설피닐, C_1-C_6알킬설포닐, C_1-C_6할로알킬설포닐, *N*-C_1-C_6알킬아미노, *N*,*N*-디-(C_1-C_6알킬)아미노, *N*,*N*-디-(C_1-C_6알킬)아미노카르보닐, *N*,*N*-디-(C_1-C_6알킬)아미노설포닐, C_1-C_6알킬카르보닐, C_1-C_6알킬카르보닐옥시, C_1-C_6알콕시카르보닐, 또는 C_1-C_6알킬카르보닐아미노이며;

각각의 R^4는 독립적으로 시아노, 할로겐, C_1-C_4알킬, C_1-C_4할로알킬, C_1-C_4알콕시, 또는 C_1-C_4알킬티오임)

청구항 2

제1항에 있어서,

R^1 은 H 또는 메틸이고;

X는 Cl, Br 또는 I이며;

R^2는 C_4-C_9알킬;

하나 이상의 할로겐, 하이드록실 또는 아민으로 치환된 C_4-C_9알킬;

또는 시아노, C_1-C_6알콕시, C_1-C_6알킬티오, C_2-C_6 알케닐, C_2-C_6알키닐, C_1-C_6알킬설피닐, C_1-C_6알킬설포닐, C_3-C_6사이클로알킬, C_4-C_6알킬사이클로알킬, 아릴, 1개 내지 5개의 치환기 R^3으로 치환된 아릴, 헤테로아릴, 1개 내지 5개의 치환기 R^3으로 치환된 헤테로아릴, 헤테로사이클릴 또는 1개 내지 5개의 치환기 R^3으로 치환된 헤테로사이클릴 중 하나 이상으로 치환된 C_1-C_9알킬이고;

각각의 R^3은 독립적으로 시아노, 니트로, 아미노, 하이드록시, 할로겐, C_1-C_6알킬, C_1-C_6할로알킬, C_1-C_4알콕시-C_1-C_4-알킬, C_2-C_6알케닐, C_2-C_6할로알케닐, C_2-C_6알키닐, C_2-C_6할로알키닐, C_3-C_6사이클로알킬, C_3-C_6할로사이클로알킬, C_1-C_6알콕시, C_1-C_6할로알콕시, C_1-C_4알콕시-C_1-C_4-알콕시, C_1-C_6알킬티오, C_1-C_6할로알킬티오, C_1-C_6알킬설피닐, C_1-C_6할로알킬설피닐, C_1-C_6알킬설포닐, C_1-C_6할로알킬설포닐, *N*-C_1-C_6알킬아미노, *N*,*N*-디-(C_1-C_6알킬)아미노, *N*,*N*-디-(C_1-C_6알킬)아미노카르보닐, *N*,*N*-디-(C_1-C_6알킬)아미노설포닐, C_1-C_6알킬카르보닐, C_1-C_6알킬카르보닐옥시, C_1-C_6알콕시카르보닐, 또는 C_1-C_6알킬카르보닐아미노인 화합물.

청구항 3

제1항 또는 제2항에 있어서, R^2는 C_4-C_9알킬; 하나 이상의 할로겐, 하이드록실 또는 아민으로 치환된 C_4-C_9알킬; 또는 C_1-C_6알콕시, C_1-C_6알킬티오, C_2-C_6 알케닐 또는 C_2-C_6알키닐로 치환된 C_1-C_9알킬인 화합물.

청구항 4

제1항 내지 제3항 중 어느 한 항에 따른 화합물 및 농업적으로 허용가능한 제형 애주번트를 포함하는 식물 생장 조절제 또는 종자 발아 촉진 조성물.

청구항 5

서식지(locus)에서 식물의 생장을 조절하는 방법으로서, 상기 방법은 제1항 내지 제3항 중 어느 한 항에 따른 화합물 또는 제4항에 따른 조성물의 식물 생장 조절량을 서식지에 적용하는 단계를 포함하는 방법.

청구항 6

제1항 내지 제3항 중 어느 한 항에 따른 화합물 또는 제4항에 따른 조성물의 종자 발아 촉진량을 종자를 함유하는 서식지 또는 종자에 적용하는 단계를 포함하는, 종자의 발아를 촉진하는 방법.

청구항 7

제1항 내지 제3항 중 어느 한 항에 따른 화합물 또는 제4항에 따른 조성물의 종자 발아 촉진량을 종자를 함유하는 서식지에 적용하는 단계, 종자가 발아되도록 하는 단계, 및 그 다음 발아 후 제초제를 서식지에 적용하는 단계를 포함하는, 잡초 방제를 위한 방법.

청구항 8

식물 생장 조절제 또는 종자 발아 촉진제로서 화학식 I의 화합물의 용도.

명 세 서

기 술 분 야

[0001] 본 발명은 신규한 비스테로이드성 브라시노스테로이드 모방 유도체, 이의 제조를 위한 방법 및 중간체, 이를 포함하는 식물 생장 조절제 조성물 및 식물 생장을 제어하고/제어하거나 종자의 발아를 촉진하기 위해 이를 사용하는 방법에 관한 것이다.

배 경 기 술

[0002] 브라시노스테로이드 신호전달 경로에 작용하는 다양한 화학적 유도체가, 예를 들어 문헌[Bioorg. Med. Chem. (1998), 6, p.1975]; [Bioorg. Med. Chem. Let. (1999), 9, p.425]; [J. Agric. Food Chem. (2002), 50, p. 3486]; [Planta (2001), 213, p.716]; WO 제2008/049729호, WO 제2009/109570호 및 [Chemistry & Biology (2009), 16, p.594-604]에 기재되었다. 브라시노스테로이드 및 이의 유사체는 유용한 식물 생장 조절 특성을 갖는 것으로 기재되었다.

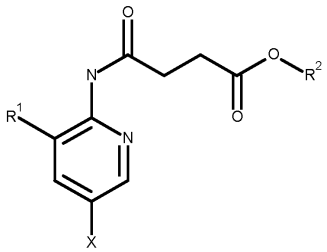
[0003] 이제 놀랍게도 특정한 새로운 비스테로이드성 브라시노스테로이드 모방 유도체가 식물 생장을 제어하고/제어하거나 종자의 발아를 촉진하는데 유용한 특성을 가진다는 것이 밝혀졌다. 바람직하게, 새로운 화합물은 더 빠른 생장, 더 빠른 발아, 더 조기의 발아 및/또는 감소된 독성과 같은 개선된 식물 생장 특성을 가질 수 있다. 본 화합물은 기타 다른 이점을 제공할 수 있는데, 예를 들어 용해도를 향상시키거나 또는 더 유리하게 제형화될 수 있거나, 식물에 대해 더 효율적인 전달을 제공하거나, 식물 내로 개선된 흡수를 제공하거나, 또는 더 용이하게 생분해될 수 있다.

발명의 내용

과제의 해결 수단

[0004] 본 발명에 따르면, 화학식 I의 화합물, 또는 이의 염 또는 N-옥사이드가 제공되며,

[0005] [화학식 I]

[0006] 

[0007] 상기 식에서

[0008] R^1은 H, C_1-C_2알킬, 하나 이상의 할로겐, 하이드록실 또는 아민으로 치환된 C_2알킬이고;

[0009] X는 할로겐이며;

[0010] R^2는 C_4-C_9알킬;

[0011] 하나 이상의 할로겐, 하이드록실 또는 아민으로 치환된 C_4-C_9알킬;

[0012] 하나 이상의 할로겐으로 치환된 메틸;

[0013] 2개 초과의 할로겐으로 치환된 C_2-C_3알킬;

[0014] 시아노, 니트로, C_1-C_6알콕시, C_1-C_6할로알콕시, C_1-C_6알킬티오, C_1-C_6할로알킬티오, C_1-C_6알킬설피닐, C_1-C_6할로알킬설피닐, C_1-C_6알킬설포닐, C_1-C_6할로알킬설포닐, C_2-C_6알케닐, C_2-C_6할로알케닐, C_2-C_6알키닐, C_2-C_6할로알키닐, C_3-C_6사이클로알킬, C_4-C_6알킬사이클로알킬, 아릴, 1개 내지 5개의 치환기 R^3으로 치환된 아릴, 헤테로아릴, 1개 내지 5개의 치환기 R^3으로 치환된 헤테로아릴, 헤테로사이클릴 또는 1개 내지 5개의 치환기 R^3으로 치환된 헤테로사이클릴 중 하나 이상으로 치환된 C_1-C_9알킬;

[0015] C_3-C_7사이클로알킬 또는 1개 내지 5개의 치환기 R^4로 치환된 C_3-C_7사이클로알킬;

[0016] 아릴 또는 1개 내지 5개의 치환기 R^3으로 치환된 아릴;

[0017] 헤테로아릴 또는 1개 내지 5개의 치환기 R^3으로 치환된 헤테로아릴; 또는

[0018] 헤테로사이클릴 또는 1개 내지 5개의 치환기 R^3으로 치환된 헤테로사이클릴이고;

[0019] 각각의 R^3은 독립적으로 시아노, 니트로, 아미노, 하이드록시, 할로겐, C_1-C_6알킬, C_1-C_6할로알킬, C_1-C_4알콕시-C_1-C_4-알킬, C_2-C_6알케닐, C_2-C_6할로알케닐, C_2-C_6알키닐, C_2-C_6할로알키닐, C_3-C_6사이클로알킬, C_3-C_6할로사이클로알킬, C_1-C_6알콕시, C_1-C_6할로알콕시, C_1-C_4알콕시-C_1-C_4-알콕시, C_1-C_6알킬티오, C_1-C_6할로알킬티오, C_1-C_6알킬설피닐, C_1-C_6할로알킬설피닐, C_1-C_6알킬설포닐, C_1-C_6할로알킬설포닐, *N*-C_1-C_6알킬아미노, *N*,*N*-디-(C_1-C_6알킬)아미노, *N*,*N*-디-(C_1-C_6알킬)아미노카르보닐, *N*,*N*-디-(C_1-C_6알킬)아미노설포닐, C_1-C_6알킬카르보닐, C_1-C_6알킬카르보닐옥시, C_1-C_6알콕시카르보닐, 또는 C_1-C_6알킬카르보닐아미노이고;

[0020] 각각의 R^4는 독립적으로 시아노, 할로겐, C_1-C_4알킬, C_1-C_4할로알킬, C_1-C_4알콕시, 또는 C_1-C_4알킬티오이다.

[0021] 화학식 I의 화합물은 상이한 기하학적 이성질체 또는 광학 이성질체(부분입체 이성질체 및 거울상 이성질체) 또는 호변 이성질체 형태로 존재할 수 있다. 본 발명은 이와 같은 모든 이성질체 및 호변 이성질체와 모든 비율의 이의 혼합물뿐만 아니라 중수소화된 화합물과 같은 동위원소 형태를 포괄한다. 본 발명은 또한 화학식 I의 화합물의 모든 염, N-옥사이드, 및 준금속(metalloidic) 착물을 포괄한다.

[0022] 각각의 알킬 모이어티(moiety)는 단독으로 또는 더 큰 기(예를 들어, 알콕시, 알콕시-카르보닐, 알킬카르보닐, 알킬아미노카르보닐, 디알킬아미노카르보닐)의 부분으로서 직쇄 또는 분지쇄이며, 예를 들어 메틸, 에틸, *n*-프로필, *n*-부틸, *n*-펜틸, *n*-헥실, *이소*-프로필, *n*-부틸, *sec*-부틸, *이소*-부틸, *tert*-부틸 또는 *neo*-펜틸이 있다. 알킬기는 바람직하게 C_1 내지 C_6 알킬기, 더 바람직하게는 C_1-C_4 알킬기, 가장 바람직하게는 C_1-C_3 알킬기이다.

[0023] 각각의 알케닐 모이어티(moiety)는 단독으로 또는 더 큰 기(예를 들어, 알콕시, 알콕시카르보닐, 알킬카르보닐, 알킬아미노카르보닐, 디알킬아미노카르보닐)의 부분으로서 적어도 하나의 탄소-탄소 이중 결합을 가지며, 예를 들어 비닐, 알릴이 있다. 알케닐기는 바람직하게 C_2 내지 C_6알케닐기, 더 바람직하게는 C_1-C_4알케닐기, 그리고 가장 바람직하게는 C_2-C_4알케닐기이다.

[0024] 각각의 알키닐 모이어티는 단독으로 또는 더 큰 기(예를 들어, 알콕시, 알콕시카르보닐, 알킬카르보닐, 알킬아미노카르보닐, 디알킬아미노카르보닐)의 부분으로서 적어도 하나의 탄소-탄소 삼중 결합을 가지고, 예를 들어 에티닐, 프로파르길이 있다. 알키닐기는 바람직하게 C_2 내지 C_6알키닐기, 더 바람직하게는 C_1-C_4알키닐기, 그리고 가장 바람직하게는 C_2-C_4알키닐기이다. 본원에서 사용되는 바와 같은 용어 "알키닐"은, 달리 나타내지 않는다면, 적어도 하나의 탄소-탄소 삼중 결합을 가지는 알킬 모이어티를 포함하며, 알킬은 상기 정의된 바와 같다.

[0025] 할로겐은 불소, 염소, 브롬 또는 요오드이다.

[0026] 할로알킬기는 (단독으로 또는 더 큰 기, 예를 들어 할로알콕시 또는 할로알킬티오의 부분으로서) 1개 이상의 동일하거나 상이한 할로겐 원자로 치환된 알킬기이며, 예를 들어 $-CF_3$, $-CF_2Cl$, $-CH_2CF_3$ 또는 $-CH_2CHF_2$가 있다.

[0027] 하이드록시알킬기는 1개 이상의 하이드록실기로 치환된 알킬기이며, 예를 들어 $-CH_2OH$, $-CH_2CH_2OH$ 또는 $-CH(OH)CH_3$이 있다.

[0028] 본 명세서의 내용에서, 용어 "아릴"은 모노-, 바이- 또는 트리사이클릭일 수 있는 고리 시스템을 말한다. 이와 같은 고리의 예로는 페닐, 나프탈레닐, 안트라세닐, 인데닐 또는 페난트레닐을 포함한다. 바람직한 아릴기는 페닐이다.

[0029] 달리 나타내지 않는다면, 자체로 또는 다른 치환기의 일부로서, 알케닐 및 알키닐은 직쇄 또는 분지쇄일 수 있으며, 바람직하게는 탄소 원자를 2개 내지 6개, 바람직하게는 2개 내지 4개, 더 바람직하게는 2개 내지 3개 함유할 수 있고, 경우에 따라 (*E*)-배열 또는 (*Z*)-배열 중 하나로 존재할 수 있다. 예로는 비닐, 알릴 및 프로파르길을 포함한다.

[0030] 달리 나타내지 않는다면, 사이클로알킬은 모노 또는 바이사이클릭일 수 있으며, 하나 이상의 C_1-C_6알킬기로 선택

적으로 치환될 수 있고, 바람직하게는 탄소 원자를 3개 내지 7개, 더 바람직하게는 탄소 원자를 3개 내지 6개 함유한다. 사이클로알킬의 예로는 사이클로프로필, 1-메틸사이클로프로필, 2-메틸사이클로프로필, 사이클로부틸, 사이클로펜틸 및 사이클로헥실을 포함한다.

[0031] 용어 "헤테로아릴"은 적어도 1개의 헤테로원자를 함유하며 단일 고리 또는 2개 이상 융합된 고리로 이루어진 방향족 고리 시스템을 말한다. 바람직하게 단일 고리는 3개까지, 이고리 시스템은 4개까지의 헤테로원자를 함유할 것이며, 상기 헤테로원자는 바람직하게 질소, 산소 및 황으로부터 선택될 것이다. 이와 같은 기의 예로는 피리딜, 피리다지닐, 피리미디닐, 피라지닐, 푸라닐, 티오페닐, 옥사졸릴, 이속사졸릴, 옥사디아졸릴, 티아졸릴, 이소티아졸릴, 티아디아졸릴, 피롤릴, 피라졸릴, 이미다졸릴, 트리아졸릴 및 테트라졸릴을 포함한다. 바람직한 헤테로아릴기는 피리딘이다.

[0032] 용어 "헤테로사이클릴"은 헤테로아릴, 포화 유사체와, 추가로 이의 불포화 또는 부분적 불포화 유사체, 예를 들어 4,5,6,7-테트라하이드로-벤조티오페닐, 9H-플루오레닐, 3,4-디하이드로-2H-벤조-1,4-디옥세피닐, 2,3-디하이드로-벤조푸라닐, 피페리디닐, 1,3-디옥솔라닐, 1,3-디옥사닐, 4,5-디하이드로-이속사졸릴, 테트라하이드로푸라닐 및 몰포리닐을 포함하는 것으로 정의된다. 추가로, 용어 "헤테로사이클릴"은 탄소 및 수소 원자 및 적어도 하나의 헤테로원자, 바람직하게는 질소, 산소 및 황으로부터 선택된 1개 내지 4개의 헤테로원자를 포함하는 비방향족 모노사이클릭 또는 폴리사이클릭 고리, 예를 들어 옥시란 또는 티에탄인 것으로 정의되는 "헤테로사이클로알킬"을 포함하는 것으로 정의된다.

[0033] 화학식 I의 화합물의 R^1, R^2 및 X의 바람직한 값은 임의의 조합으로 이하에 제시되는 바와 같다:

[0034] R^1은 H 또는 메틸이고;

[0035] X는 Cl, Br 또는 I이며;

[0036] R^2는 C_4-C_9알킬;

[0037] 하나 이상의 할로겐, 하이드록실 또는 아민으로 치환된 C_4-C_9알킬;

[0038] 또는 시아노, C_1-C_6알콕시, C_1-C_6알킬티오, C_2-C_6 알케닐, C_2-C_6알키닐, C_1-C_6알킬설피닐, C_1-C_6알킬설포닐, C_3-C_6사이클로알킬, C_4-C_6알킬사이클로알킬, 아릴, 1개 내지 5개의 치환기 R^3으로 치환된 아릴, 헤테로아릴, 1개 내지 5개의 치환기 R^3으로 치환된 헤테로아릴, 헤테로사이클릴 또는 1개 내지 5개의 치환기 R^3으로 치환된 헤테로사이클릴 중 하나 이상으로 치환된 C_1-C_9알킬이다.

[0039] 더 바람직하게, R^2는 C_4-C_9알킬;

[0040] 하나 이상의 할로겐, 하이드록실 또는 아민으로 치환된 C_4-C_9알킬;

[0041] 또는 C_1-C_6알콕시, C_1-C_6알킬티오, C_2-C_6 알케닐, 또는 C_2-C_6알키닐로 치환된 C_1-C_9알킬이다.

[0042] 일 실시형태에서, R^1은 H이다. 추가 실시형태에서, R^1은 메틸이다.

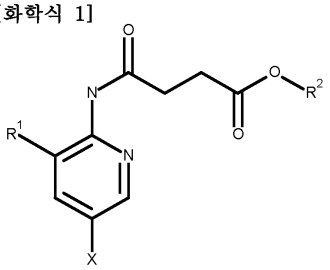
[0043] 일 실시형태에서, X는 Cl이다. 추가 실시형태에서, X는 Br이다. 추가 실시형태에서, X는 I이다.

[0044] 일 실시형태에서, R^2는 C_4-C_9알킬이다. 다른 실시형태에서, R^2는 하나 이상의 할로겐, 하이드록실 또는 아민으로 치환된 C_4-C_9알킬이다. 추가 실시형태에서, R^2는 C_1-C_6알콕시, C_1-C_6알킬티오, C_2-C_6 알케닐 또는 C_2-C_6알키닐로 치환된 C_1-C_9알킬이다.

[0045] 이하의 표 1은 화학식 I의 화합물의 예를 포함하며, 여기서 R_1, R_2 및 X는 정의된 바와 같다.

표 1

[화학식 1]



[0046]

화합물	X	R^1	R^2
1.00	Cl	H	CH_2CCH
1.01	Cl	H	CH_2CHCH_2
1.02	Cl	H	n-C_4H_9

[0047]

1.03	Cl	H	tert-C_4H_9
1.04	Cl	H	sec-C_4H_9
1.05	Cl	H	이소-C_4H_9
1.06	Cl	H	CH_2CN
1.07	Cl	H	CH_2CH_2CN
1.08	Cl	H	CH_2CH_2Ph
1.09	Cl	H	CH_2(4-Py)
1.10	Cl	H	CH_2Ph
1.11	Cl	H	$CH_2CH(CH_2)_2$
1.12	Cl	H	CH_2OCH_3
1.13	Cl	H	$CH_2CH_2OCH_3$
1.14	Cl	H	$CH_2CH(-CH_2-O-)$
1.15	Cl	H	$CH(CH_2)_2$
1.16	Cl	H	$CH(CH_2)_3$
1.17	Cl	H	$CH(-CH_2-CH_2-O-)$
1.18	Cl	H	$CH_2CH_2SCH_3$
1.19	Cl	H	$CH_2CH(CH_2)_4$

[0048]

1.20	Cl	CH_3	CH_2CCH
1.21	Cl	CH_3	CH_2CHCH_2
1.22	Cl	CH_3	$n\text{-}C_4H_9$
1.23	Cl	CH_3	$tert\text{-}C_4H_9$
1.24	Cl	CH_3	$sec\text{-}C_4H_9$
1.25	Cl	CH_3	이소-C_4H_9
1.26	Cl	CH_3	CH_2CN
1.27	Cl	CH_3	CH_2CH_2CN
1.28	Cl	CH_3	CH_2CH_2Ph
1.29	Cl	CH_3	$CH_2(4\text{-}Py)$
1.30	Cl	CH_3	CH_2Ph
1.31	Cl	CH_3	$CH_2CH(CH_2)_2$
1.32	Cl	CH_3	CH_2OCH_3
1.33	Cl	CH_3	$CH_2CH_2OCH_3$
1.34	Cl	CH_3	$CH_2CH(\text{-}CH_2\text{-}O\text{-})$
1.35	Cl	CH_3	$CH(CH_2)_2$
1.36	Cl	CH_3	$CH(CH_2)_3$

[0049]

1.37	Cl	CH_3	$CH(-CH_2-CH_2-O-)$
1.38	Cl	CH_3	$CH_2CH_2SCH_3$
1.39	Cl	CH_3	$CH_2CH(CH_2)_4$
1.40	Br	H	CH_2CCH
1.41	Br	H	CH_2CHCH_2
1.42	Br	H	$n-C_4H_9$
1.43	Br	H	$tert-C_4H_9$
1.44	Br	H	$sec-C_4H_9$
1.45	Br	H	이소-C_4H_9
1.46	Br	H	CH_2CN
1.47	Br	H	CH_2CH_2CN
1.48	Br	H	CH_2CH_2Ph
1.49	Br	H	$CH_2(4-Py)$
1.50	Br	H	CH_2Ph
1.51	Br	H	$CH_2CH(CH_2)_2$
1.52	Br	H	CH_2OCH_3
1.53	Br	H	$CH_2CH_2OCH_3$

[0050]

1.54	Br	H	$CH_2CH(-CH_2-O-)$
1.55	Br	H	$CH(CH_2)_2$
1.56	Br	H	$CH(CH_2)_3$
1.57	Br	H	$CH(-CH_2-CH_2-O-)$
1.58	Br	H	$CH_2CH_2SCH_3$
1.59	Br	H	$CH_2CH(CH_2)_4$
1.60	Br	CH_3	CH_2CCH
1.61	Br	CH_3	CH_2CHCH_2
1.62	Br	CH_3	$n-C_4H_9$
1.63	Br	CH_3	$tert-C_4H_9$
1.64	Br	CH_3	$sec-C_4H_9$
1.65	Br	CH_3	이소-C_4H_9
1.66	Br	CH_3	CH_2CN
1.67	Br	CH_3	CH_2CH_2CN
1.68	Br	CH_3	CH_2CH_2Ph
1.69	Br	CH_3	$CH_2(4-Py)$
1.70	Br	CH_3	CH_2Ph

[0051]

1.71	Br	CH_3	$CH_2CH(CH_2)_2$
1.72	Br	CH_3	CH_2OCH_3
1.73	Br	CH_3	$CH_2CH_2OCH_3$
1.74	Br	CH_3	$CH_2CH(-CH_2-O-)$
1.75	Br	CH_3	$CH(CH_2)_2$
1.76	Br	CH_3	$CH(CH_2)_3$
1.77	Br	CH_3	$CH(-CH_2-CH_2-O-)$
1.78	Br	CH_3	$CH_2CH_2SCH_3$
1.79	Br	CH_3	$CH_2CH(CH_2)_4$
1.80	I	H	CH_2CCH
1.81	I	H	CH_2CHCH_2
1.82	I	H	$n-C_4H_9$
1.83	I	H	$tert-C_4H_9$
1.84	I	H	$sec-C_4H_9$
1.85	I	H	이소-C_4H_9
1.86	I	H	CH_2CN
1.87	I	H	CH_2CH_2CN

[0052]

1.88	I	H	CH_2CH_2Ph
1.89	I	H	CH_2(4-Py)
1.90	I	H	CH_2Ph
1.91	I	H	$CH_2CH(CH_2)_2$
1.92	I	H	CH_2OCH_3
1.93	I	H	$CH_2CH_2OCH_3$
1.94	I	H	$CH_2CH(-CH_2-O-)$
1.95	I	H	$CH(CH_2)_2$
1.96	I	H	$CH(CH_2)_3$
1.97	I	H	$CH(-CH_2-CH_2-O-)$
1.98	I	H	$CH_2CH_2SCH_3$
1.99	I	H	$CH_2CH(CH_2)_4$
2.00	I	CH_3	CH_2CCH
2.01	I	CH_3	CH_2CHCH_2
2.02	I	CH_3	n-C_4H_9
2.03	I	CH_3	tert-C_4H_9
2.04	I	CH_3	sec-C_4H_9

[0053]

2.05	I	CH_3	이소-C_4H_9
2.06	I	CH_3	CH_2CN
2.07	I	CH_3	CH_2CH_2CN
2.08	I	CH_3	CH_2CH_2Ph
2.09	I	CH_3	CH_2(4-Py)
2.10	I	CH_3	CH_2Ph
2.11	I	CH_3	$CH_2CH(CH_2)_2$
2.12	I	CH_3	CH_2OCH_3
2.13	I	CH_3	$CH_2CH_2OCH_3$
2.14	I	CH_3	$CH_2CH(-CH_2-O-)$
2.15	I	CH_3	$CH(CH_2)_2$
2.16	I	CH_3	$CH(CH_2)_3$
2.17	I	CH_3	$CH(-CH_2-CH_2-O-)$
2.18	I	CH_3	$CH_2CH_2SCH_3$
2.19	I	CH_3	$CH_2CH(CH_2)_4$

[0054]

[0055] 본 발명에 따른 화학식 I의 화합물은 그 자체로 식물 생장 조절제 또는 종자 발아 촉진제로서 사용될 수 있지만, 상기 화합물은 일반적으로 제형 애주번트, 예를 들어 운반체, 용매 및 표면 활성제(surface-active agent: SFA)를 사용하여 식물 생장 조절 또는 종자 발아 촉진 조성물로 제형화된다. 따라서, 본 발명은 본원에 기재된 바와 같은 식물 생장 조절 화합물 및 농업적으로 허용가능한 제형 애주번트 또는 운반체를 포함하는 식물 생장 조절제 조성물을 추가로 제공한다. 본 발명은 본원에 기재된 바와 같은 종자 발아 촉진제 화합물 및 농업적으로 허용가능한 제형 애주번트 또는 운반체를 포함하는 종자 발아 촉진제 조성물을 추가로 제공한다. 바람직하게 본 조성물은 본질적으로 화학식 I의 화합물 및 농업적으로 허용가능한 제형 애주번트 또는 운반체로 이루어진다. 대안에서, 본 조성물은 화학식 I의 화합물 및 적어도 하나의 농업적으로 허용가능한 제형 애주번트 또는 운반체로 이루어진다. 일 실시형태에서, 본 발명은 화학식 I의 화합물 및 농업적으로 허용가능한 운반체를 포함하는 조성물 또는 이의 염 또는 N-옥사이드를 제공하며, 화학식 I에서

[0056] R^1은 H, C_1-C_2알킬, 하나 이상의 할로겐, 하이드록실 또는 아민으로 치환된 C_2알킬이고;

[0057] X는 할로겐이며;

[0058] R^2는 C_4-C_9알킬; 하나 이상의 할로겐, 하이드록실 또는 아민으로 치환된 C_4-C_9알킬;

[0059] 하나 이상의 할로겐으로 치환된 메틸; 2개 초과의 할로겐으로 치환된 C_2-C_3알킬; 시아노, 니트로, C_1-C_6알콕시, C_1-C_6할로알콕시, C_1-C_6알킬티오, C_1-C_6할로알킬티오, C_1-C_6알킬설피닐, C_1-C_6할로알킬설피닐, C_1-C_6알킬설포닐, C_1-C_6할로알킬설포닐, C_2-C_6알케닐, C_2-C_6할로알케닐, C_2-C_6알키닐, C_2-C_6할로알키닐, C_3-C_6사이클로알킬, C_4-C_6알킬사이클로알킬, 아릴, 1개 내지 5개의 치환기 R^3으로 치환된 아릴, 헤테로아릴, 1개 내지 5개의 치환기 R^3으로 치

환된 헤테로아릴, 헤테로사이클릴 또는 1개 내지 5개의 치환기 R^3으로 치환된 헤테로사이클릴 중 하나 이상으로 치환된 C_1-C_9알킬이며; C_3-C_7사이클로알킬 또는 1개 내지 5개의 치환기 R^4로 치환된 C_3-C_7사이클로알킬; 아릴 또는 1개 내지 5개의 치환기 R^3으로 치환된 아릴; 헤테로아릴 또는 1개 내지 5개의 치환기 R^3으로 치환된 헤테로아릴; 또는 헤테로사이클릴 또는 1개 내지 5개의 치환기 R^3으로 치환된 헤테로사이클릴이고;

[0060] 각각의 R^3 은 독립적으로 시아노, 니트로, 아미노, 하이드록시, 할로겐, C_1-C_6알킬, C_1-C_6할로알킬, C_1-C_4알콕시-C_1-C_4-알킬, C_2-C_6알케닐, C_2-C_6할로알케닐, C_2-C_6알키닐, C_2-C_6할로알키닐, C_3-C_6사이클로알킬, C_3-C_6할로사이클로알킬, C_1-C_6알콕시, C_1-C_6할로알콕시, C_1-C_4알콕시-C_1-C_4-알콕시, C_1-C_6알킬티오, C_1-C_6할로알킬티오, C_1-C_6알킬설피닐, C_1-C_6할로알킬설피닐, C_1-C_6알킬설포닐, C_1-C_6할로알킬설포닐, *N*-C_1-C_6알킬아미노, *N*,*N*-디-(C_1-C_6알킬)아미노, *N*,*N*-디-(C_1-C_6알킬)아미노카르보닐, *N*,*N*-디-(C_1-C_6알킬)아미노설포닐, C_1-C_6알킬카르보닐, C_1-C_6알킬카르보닐옥시, C_1-C_6알콕시카르보닐, 또는 C_1-C_6알킬카르보닐아미노이며;

[0061] 각각의 R^4는 독립적으로 시아노, 할로겐, C_1-C_4알킬, C_1-C_4할로알킬, C_1-C_4알콕시 또는 C_1-C_4알킬티오이다.

[0062] 추가 실시형태에서, 본 발명은 화학식 I의 화합물 및 농업적으로 허용가능한 운반체를 포함하는 조성물을 제공하며, 화학식 I에서;

[0063] R^1은 H 또는 메틸이고;

[0064] X는 Cl, Br 또는 I이며;

[0065] R^2는 C_4-C_9알킬; 하나 이상의 할로겐, 하이드록실 또는 아민으로 치환된 C_4-C_9알킬; 또는 시아노, C_1-C_6알콕시, C_1-C_6알킬티오, C_2-C_6 알케닐, C_2-C_6알키닐, C_1-C_6알킬설피닐, C_1-C_6알킬설포닐, C_3-C_6사이클로알킬, C_4-C_6알킬사이클로알킬, 아릴, 1개 내지 5개의 치환기 R^3으로 치환된 아릴, 헤테로아릴, 1개 내지 5개의 치환기 R^3으로 치환된 헤테로아릴, 헤테로사이클릴 또는 1개 내지 5개의 치환기 R^3으로 치환된 헤테로사이클릴 중 하나 이상으로 치환된 C_1-C_9알킬이고;

[0066] 각각의 R^3 은 독립적으로 시아노, 니트로, 아미노, 하이드록시, 할로겐, C_1-C_6알킬, C_1-C_6할로알킬, C_1-C_4알콕시-C_1-C_4-알킬, C_2-C_6알케닐, C_2-C_6할로알케닐, C_2-C_6알키닐, C_2-C_6할로알키닐, C_3-C_6사이클로알킬, C_3-C_6할로사이클로알킬, C_1-C_6알콕시, C_1-C_6할로알콕시, C_1-C_4알콕시-C_1-C_4-알콕시, C_1-C_6알킬티오, C_1-C_6할로알킬티오, C_1-C_6알킬설피닐, C_1-C_6할로알킬설피닐, C_1-C_6알킬설포닐, C_1-C_6할로알킬설포닐, *N*-C_1-C_6알킬아미노, *N*,*N*-디-(C_1-C_6알킬)아미노, *N*,*N*-디-(C_1-C_6알킬)아미노카르보닐, *N*,*N*-디-(C_1-C_6알킬)아미노설포닐, C_1-C_6알킬카르보닐, C_1-C_6알킬카르보닐옥시, C_1-C_6알콕시카르보닐 또는 C_1-C_6알킬카르보닐아미노이다.

[0067] 본 조성물은 또한 즉시 사용가능한 조성물로 제조될 수 있지만, 사용 전에 희석하는 농축물의 형태일 수 있다. 최종 희석물은 통상적으로 물을 사용하여 제조되지만, 물 대신, 또는 물에 추가적으로, 예를 들어 액체 비료, 미량영양소, 생물학적 유기체, 오일 또는 용매를 사용하여 제조될 수 있다.

[0068] 본 조성물은 일반적으로 화학식 I의 화합물 0.1중량% 내지 99중량%, 특히 0.1중량% 내지 95중량%, 그리고 제형 애주번트 1중량% 내지 99.9중량%(바람직하게 표면활성 물질을 0중량% 내지 25중량% 포함함)를 포함한다.

[0069] 본 조성물은 수많은 제형 유형으로부터 선택될 수 있으며, 다수의 제형 유형이 문헌[Manual on Development and Use of FAO Specifications for Plant Protection Products, 5th Edition, 1999]으로부터 알려져 있다. 이들은 분제(DP), 수용제(SP), 입상 수용제(SG), 입상 수화제(WG), 수화제(WP), 입제(GR)(완효성 또는 속효성), 액제(SL), 오일제(OL), 극미량액(UL), 유제(EC), 분산성 액제(DC), 에멀젼(수중유(EW) 및 유중수(EO) 둘 다 포함함), 미탁제(ME), 액상 수화제(SC), 에어로졸, 캡슐 현탁제(CS) 및 종자 처리 제형을 포함한다. 임의의 경우에 선택된 제형 유형은 예상되는 특정 목적 및 화학식 I의 화합물의 물리적, 화학적 및 생물학적 특성에 좌우될 것이다.

[0070] 분제(DP)는 화학식 I의 화합물을 하나 이상의 고체 희석제(예를 들어, 천연 점토, 카올린, 피로필라이트, 벤토나이트, 알루미나, 몬모릴로나이트, 키젤구르, 백악, 규조토, 인산칼슘, 탄산칼슘 및 탄산마그네슘, 황, 석회, 곡분, 활석 및 기타 다른 유기 및 무기 고체 운반체)와 혼합하고 상기 혼합물을 기계적으로 미세 분말로 분쇄함으로써 제조될 수 있다.

[0071] 수용제(SP)는 화학식 I의 화합물을 하나 이상의 수용성 무기 염(예를 들어, 중탄산나트륨, 탄산나트륨 또는 황산마그네슘) 또는 하나 이상의 수용성 유기 고체(예를 들어, 다당류) 및 선택적으로 하나 이상의 습윤제, 하나 이상의 분산제 또는 상기 제제의 혼합물과 혼합하여 수분산성/수용성을 개선시킴으로써 제조될 수 있다. 그 다음에 상기 혼합물을 미세 분말로 분쇄한다. 유사한 조성물이 또한 과립화되어 입상 수용제(SG)를 형성할 수 있다.

[0072] 수화제(WP)는 화학식 I의 화합물을 하나 이상의 고체 희석제 또는 운반체, 하나 이상의 습윤제, 바람직하게는 하나 이상의 분산제, 선택적으로 하나 이상의 현탁제와 혼합하여 액체 내 분산을 용이하게 함으로써 제조될 수 있다. 그 다음에 상기 혼합물을 미세 분말로 분쇄한다. 유사한 조성물이 또한 과립화되어 입상 수화제(WG)를 형성할 수 있다.

[0073] 입제(GR)는 화학식 I의 화합물, 및 하나 이상의 분말상 고체 희석제 또는 운반체의 혼합물을 과립화함으로써, 또는 다공성 입상 물질(예를 들어, 부석, 애타풀자이트 점토, 풀러토, 키젤구르, 규조토 또는 분쇄 옥수수대)에 화학식 I의 화합물(또는 적당한 제제 중 이의 용액)을 흡수시켜 사전형성된 블랭크 입제로부터 형성하거나, 또는 화학식 I의 화합물(또는 적당한 제제 중 이의 용액)을 경질의 코어 물질(예를 들어, 모래, 규산염, 무기 탄산염, 황산염 또는 인산염) 상에 흡착시키고, 필요하다면 이를 건조시킴으로써 형성될 수 있다. 흡수 또는 흡착을 돕는데 보통 사용되는 제제로는 용매(예를 들어, 지방족 및 방향족 석유 용매, 알코올, 에테르, 케톤 및 에스테르) 및 점착제(예를 들어, 폴리비닐 아세테이트, 폴리비닐 알코올, 덱스트린, 당 및 식물성 오일)를 포함한다. 하나 이상의 기타 다른 첨가제가 또한 입제 중에 포함될 수 있다(예를 들어, 유화제, 습윤제 또는 분산제).

[0074] 분산성 액제(DC)는 화학식 I의 화합물을 물 또는 유기 용매, 예를 들어 케톤, 알코올 또는 글리콜 에테르 중에 용해시킴으로써 제조될 수 있다. 이러한 용액은 (예를 들어, 물 희석을 개선시키거나 또는 분무 탱크에서 결정화를 방지하기 위하여) 표면 활성제를 함유할 수 있다.

[0075] 유제(EC) 또는 수중유 에멀젼(EW)은 유기 용매(선택적으로 하나 이상의 습윤제, 하나 이상의 유화제 또는 상기 제제의 혼합물을 함유함) 중에 화학식 I의 화합물을 용해시킴으로써 제조될 수 있다. EC에서의 사용에 적당한 유기 용매로는 방향족 탄화수소(예를 들어, SOLVESSO 100, SOLVESSO 150 및 SOLVESSO 200에 의해 예시되는 알킬벤젠 또는 알킬나프탈렌; SOLVESSO는 등록상표임), 케톤(예를 들어, 사이클로헥사논 또는 메틸사이클로헥사논) 및 알코올(예를 들어, 벤질 알코올, 푸르푸릴 알코올 또는 부탄올), N-알킬피롤리돈(예를 들어, N-메틸피롤리돈 또는 N-옥틸피롤리돈), 지방산의 디메틸아미드(예를 들어, C_8-C_{10} 지방산 디메틸아미드) 및 염소화 탄화수소를 포함한다. EC 제품은 물에 첨가시 자발적으로 유화하여, 적절한 장비를 통해 분무 적용을 가능하게 하는 충분한 안정성을 가지는 에멀젼을 생성할 수 있다.

[0076] EW의 제조는 액체(실온에서 액체가 아닌 경우, 적당한 온도, 통상적으로는 70℃ 미만에서 용융될 수 있음)로서 또는 (적절한 용매 중에 상기 화합물을 용해시킴으로써) 용액으로 화학식 I의 화합물을 수득하는 단계, 및 그 다음 생성된 액체 또는 용액을 하나 이상의 SFA를 함유하는 물 중에 고전단하에서 유화시켜 에멀젼을 생성하는 단계를 포함한다. EW에서의 사용에 적당한 용매로는 식물성 오일, 염소화 탄화수소(예를 들어, 클로로벤젠), 방향족 용매(예를 들어, 알킬벤젠 또는 알킬나프탈렌) 및 수용성이 낮은 기타 다른 적절한 유기 용매를 포함한다.

[0077] 미탁제(ME)는 물을 하나 이상의 용매와 하나 이상의 SFA의 배합물과 혼합하여 열역학적으로 안정적인 등방성 액체 제형을 자발적으로 생성함으로써 제조될 수 있다. 화학식 I의 화합물은 초기에 물 또는 용매/SFA 배합물 중에 존재한다. ME에서의 사용에 적당한 용매로는 EC 또는 EW에서의 사용에 대하여 앞서 기재한 것들을 포함한다. ME는 수중유 또는 유중수 시스템(어떤 시스템이 존재 하는 지는 전도도 측정에 의해 결정될 수 있음)일 수 있고, 동일한 제형에서 수용성 및 유용성 살충제를 혼합하는데 적당할 수 있다. ME는 미탁제로서 남거나 또는 통상적인 수중유 에멀젼을 형성하여 물로 희석하는데 적당하다.

[0078] 액상 수화제(SC)는 화학식 I의 화합물의 미분된 불용성 고체 입자의 수성 또는 비수성 현탁물을 포함할 수 있다. SC는 적당한 매질 중에, 선택적으로 하나 이상의 분산제와 함께 화학식 I의 고체 화합물을 볼 밀링 또는 비드 밀링하여 화합물의 미세 입자 현탁물을 생성함으로써 제조될 수 있다. 하나 이상의 습윤제가 조성물에 포함될 수 있고, 현탁제가 포함되어 입자가 침전하는 속도를 감소시킬 수 있다. 대안적으로, 화학식 I의 화합물은

건식 밀링하고 앞서 기재한 제제를 함유하는 물에 첨가하여 원하는 최종 생성물을 생성할 수 있다.

[0079] 에어로졸 제형은 화학식 I의 화합물과 적당한 추진제(예를 들어, *n*-부탄)를 포함한다. 화학식 I의 화합물은 또한 적당한 매질(예를 들어, 물 또는 *n*-프로판올과 같은 수혼화성 액체) 중에 용해 또는 분산되어 비가압 수동 분무 펌프에서의 사용을 위한 조성물을 제공할 수 있다.

[0080] 캡슐 현탁제(CS)는 오일 액적의 수성 분산액이 수득되도록 EW 제형의 제조와 유사하지만 추가적인 중합 단계가 있는 방식으로 제조될 수 있으며, 각각의 오일 액적은 중합체 쉘에 의해 캡슐화되고 화학식 I의 화합물과 선택적으로는 이에 대한 운반체 또는 희석제를 함유한다. 중합체성 쉘은 계면 중축합 반응에 의해 또는 코아세르베이션 과정에 의해 생성될 수 있다. 조성물은 화학식 I의 화합물의 방출 조절을 제공할 수 있으며 상기 조성물은 종자 처리에 사용될 수 있다. 화학식 I의 화합물은 또한 생분해성 중합체 매트릭스로 제형화되어 화합물의 완효성 방출 조절을 제공할 수 있다.

[0081] 본 조성물은 예를 들어 표면 상에서의 습윤, 정체 또는 분포; 처리된 표면 상에서의 비에 대한 저항성; 또는 화학식 I의 화합물의 흡수성 또는 이동성을 개선시킴으로써 조성물의 생물학적 성능을 개선시키기 위한 첨가제를 하나 이상 포함할 수 있다. 이와 같은 첨가제로는 표면 활성제(SFA), 오일, 예를 들어 임의의 미네랄 오일 또는 천연 식물 오일(예를 들어, 대두 및 유채씨 오일)을 주성분으로 하는 살포 첨가제, 그리고 이러한 첨가제와 기타 다른 생체능 강화 애주번트(bio-enhancing adjuvant)(화학식 I의 화합물의 작용을 돕거나 변경할 수 있는 성분)의 배합물을 포함한다.

[0082] 습윤제, 분산제 및 유화제는 양이온성, 음이온성, 양쪽성 또는 비이온성 유형의 SFA일 수 있다.

[0083] 양이온성 유형의 적당한 SFA로는 4급 암모늄 화합물(예를 들어, 세틸트리메틸 암모늄 브로마이드), 이미다졸린 및 아민 염을 포함한다.

[0084] 적당한 음이온성 SFA로는 지방산의 알칼리 금속 염, 황산의 지방족 모노에스테르의 염(예를 들어, 소듐 라우릴 설페이트), 설포네이트화 방향족 화합물의 염(예를 들어, 소듐 도데실벤젠설포네이트, 칼슘 도데실벤젠설포네이트, 부틸나프탈렌 설포네이트 및 소듐 디-*이*소프로필나프탈렌 설포네이트 및 트리-*이*소프로필-나프탈렌 설포네이트의 혼합물), 에테르 설페이트, 알코올 에테르 설페이트(예를 들어, 소듐 라우레스-3-설페이트), 에테르 카르복실레이트(예를 들어, 소듐 라우레스-3-카르복실레이트), 포스페이트 에스테르(하나 이상의 지방 알코올 및 인산(주로 모노-에스테르) 또는 오산화인(주로 디-에스테르)간의 반응, 예를 들어 라우릴 알코올과 테트라인산 간의 반응으로부터의 생성물; 추가적으로 이들 생성물은 에톡실화될 수 있음), 설포석신아메이트, 파라핀 또는 올레핀 설포네이트, 타우레이트 및 리그노설포네이트를 포함한다.

[0085] 양쪽성 유형의 적당한 SFA로는 베타인, 프로피오네이트 및 글리시네이트를 포함한다.

[0086] 비이온성 유형의 적당한 SFA로는 알킬렌 옥사이드, 예를 들어 에틸렌 옥사이드, 프로필렌 옥사이드, 부틸렌 옥사이드 또는 이의 혼합물과 지방 알코올(예를 들어, 올레일 알코올 또는 세틸 알코올) 또는 알킬페놀(예를 들어, 옥틸페놀, 노닐페놀 또는 옥틸크레졸)과의 축합 생성물; 장쇄 지방산 또는 헥시톨 무수물로부터 유래된 부분 에스테르; 상기 부분 에스테르와 에틸렌 옥사이드의 축합 생성물; 블록 중합체(에틸렌 옥사이드 및 프로필렌 옥사이드를 포함함); 알카놀아미드; 단순 에스테르(예를 들어, 지방산 폴리에틸렌 글리콜 에스테르); 아민 옥사이드(예를 들어, 라우릴 디메틸 아민 옥사이드); 및 레시틴을 포함한다.

[0087] 적당한 현탁제로는 친수성 콜로이드(예를 들어, 다당류, 폴리비닐피롤리돈 또는 소듐 카르복시메틸셀룰로오스) 및 팽윤성 점토(예를 들어, 벤토나이트 또는 애타풀자이트)를 포함한다.

[0088] 본 발명은 또한 서식지(locus)내 식물의 생장을 조절하는 방법을 추가로 제공하는데, 이 방법은 본 발명에 따르는 조성물의 식물 생장 조절량을 서식지에 적용하는 것을 포함한다. 바람직하게 본 조성물은 식물의 잎에 분무 적용함으로써 적용된다.

[0089] 본 발명은 또한 본 발명에 따르는 조성물의 종자 발아 촉진량을 종자, 또는 종자를 함유하는 서식지에 적용하는 것을 포함하는, 종자의 발아를 촉진하는 방법을 제공한다.

[0090] 적용은 일반적으로 조성물을 분무함으로써, 통상적으로는 면적이 큰 경우 분무기가 장착되어 있는 트랙터에 의해 분무함으로써 수행되지만, 기타 다른 방법, 예를 들어 살분법(분말의 경우), 점적법 또는 관주법(drench)이 또한 사용될 수 있다. 대안적으로, 조성물은 식재 전 또는 식재 때에 고랑에 또는 종자에 직접 적용될 수 있다.

[0091] 본 발명의 화학식 I의 화합물 또는 조성물은 식물, 식물의 일부, 식물 기관, 식물 번식 물질 또는 이를 둘러싸

고 있는 지역에 적용될 수 있다.

[0092] 일 실시형태에서, 본 발명은 발아를 촉진하고/촉진하거나 식물 생장을 조절하기에 효과적인 양으로 식물 번식 물질에 본 발명의 조성물을 적용하는 것을 포함하는, 식물 번식 물질을 처리하는 방법에 관한 것이다. 본 발명은 또한 본 발명의 화학식 I의 화합물 또는 조성물로 처리된 식물 번식 물질에 관한 것이다. 바람직하게, 상기 식물 번식 물질은 종자이다.

[0093] 용어 "식물 번식 물질"은 종자와 같은, 식물의 모든 발아 부분을 나타내는 것으로, 이는 종자 및 식물 생장 관련 식물 물질, 예를 들어 꺾꽂이 순(cutting) 및 괴경의 증식에 사용될 수 있다. 특히, 종자, 뿌리, 열매, 괴경, 구근, 및 근경이 언급될 수 있다.

[0094] 활성 성분을 식물 번식 물질, 특히 종자에 적용하는 방법은 당업계에 알려져 있으며, 번식 물질의 분의, 코팅, 펠렛팅 및 침지 적용 방법을 포함한다. 상기 처리는 종자의 수확과 종자의 파종간의 임의의 때나 또는 파종 과정 중에 종자에 적용될 수 있다. 종자는 또한 상기 처리 전 또는 후에 전처리될 수 있다. 화학식 I의 화합물은, 시간이 경과함에 따라 화합물이 방출되도록 하는 방출 조절 코팅 또는 기술과 함께 선택적으로 적용될 수 있다.

[0095] 본 발명의 조성물은 발아 전 또는 발아 후 적용될 수 있다. 적당하게, 조성물이 농작물의 생장을 조절하는데 사용되는 경우, 발아 전 또는 발아 후 적용될 수 있지만, 바람직하게는 작물의 발아 후 적용될 수 있다. 조성물이 종자의 발아를 촉진하는데 사용되는 경우, 발아 전 적용될 수 있다.

[0096] 화학식 I의 화합물의 적용율은 넓은 한도 내에서 변화될 수 있으며, 토양의 특성, 적용 방법(발아 전 또는 발아 후; 종자 분의; 종자 고랑에 적용; 경작지 적용이 아닌 경우 등), 농작물, 우세한 기후 조건, 및 적용 방법, 적용 시기 및 표적 작물에 의해 지배되는 기타 다른 인자에 좌우될 수 있다. 엽면 또는 관주 적용의 경우, 본 발명에 따르는 화학식 I의 화합물은 일반적으로 0.001g/ha 내지 2000g/ha, 특히 0.01g/ha 내지 400g/ha의 비율로 적용된다. 종자 처리의 경우, 적용율은 일반적으로 종자 100kg 당 0.0005g 내지 150g 사이이다.

[0097] 본 발명에 따르는 조성물이 사용될 수 있는 식물로는 작물, 예를 들어 곡물(예를 들어, 밀, 보리, 호밀, 귀리); 비트(예를 들어, 사탕무 또는 사료용 무(fodder beet)); 과일(예를 들어, 이과류, 핵과류 또는 연실류(soft fruit), 예를 들어 사과, 배, 자두, 복숭아, 아몬드, 체리, 딸기, 라스베리 또는 블랙베리); 콩과 작물(예를 들어, 콩(bean), 편두, 완두 또는 대두); 유지 식물(예를 들어, 평지, 머스타드, 양귀비, 올리브, 해바라기, 코코넛, 피마자, 코코아 또는 땅콩); 오이 식물(예를 들어, 호박, 오이 또는 멜론); 섬유 식물(예를 들어, 목화, 아마, 대마 또는 황마); 감귤류(예를 들어, 오렌지, 레몬, 자몽 또는 만다린 귤); 채소류(예를 들어, 시금치, 상추, 아스파라거스, 양배추, 당근, 양파, 토마토, 감자, 조롱박 또는 파프리카); 녹나무과(예를 들어, 아보카도, 계피 또는 장뇌); 옥수수; 쌀; 담배; 견과류; 커피; 사탕수수; 차; 포도 나무; 홉; 두리안; 바나나; 천연 고무 식물; 잔디 또는 관상용 식물(예를 들어, 꽃, 관목, 활엽수 또는 상록수 예를 들어 침엽수)을 포함한다. 상기 목록이 어떤 제한을 나타내는 것은 아니다.

[0098] 본 발명은 또한 비 농작물의 생장을 조절하거나, 종자의 발아를 촉진하는데, 예를 들어, 발아가 동시에 일어나게 함으로써 잡초 방제를 용이하게 하는데 사용될 수 있다.

[0099] 작물은 또한 통상적인 육종 방법에 의해 또는 유전자 조작에 의해 변형된 작물들을 포함하는 것으로 이해되어야 한다. 예를 들어, 본 발명은 제초제 또는 제초제 군(예를 들어, ALS-억제제, GS-억제제, EPSPS-억제제, PPO-억제제, ACCase-억제제 및 HPPD-억제제)에 대해 내성을 나타내게 한 작물과 함께 사용될 수 있다. 통상적인 육종 방법에 의해 이미다졸리논, 예를 들어 이마자목스에 내성을 나타내게 한 작물의 한 예로는 Clearfield® 여름 유채(카놀라)가 있다. 유전자 조작 방법에 의해 제초제에 내성을 나타내게 한 작물의 예로는 예를 들어 상표명 RoundupReady® 및 LibertyLink®로 상업적으로 입수가능한 글리포세이트 저항성 및 글루포시네이트 저항성 옥수수 변종을 포함한다. 농작물을 HPPD-억제제에 대해 내성을 나타내게 하는 방법은 예를 들어 WO 제0246387호로부터 알려져 있으며, 예를 들어 상기 농작물은 박테리아, 더 구체적으로는 슈도모나스 플루오레센스(*Pseudomonas fluorescens*) 또는 슈와넬라 콜웰리아나(*Shewanella colwelliana*)로부터, 또는 식물, 더 구체적으로는 외떡잎 식물, 또는 훨씬 더 구체적으로는 보리, 옥수수, 밀, 쌀, 브라치아리아(*Brachiaria*), 첸취러스(*Chenchrus*), 롤리움(*Lolium*), 페츄카(*Festuca*), 세타리아(*Setaria*), 엘레우신(*Eleusine*), 소검(*Sorghum*) 또는 아베나(*Avena*) 종으로부터 유래되는 HPPD-억제제 저항성 HPPD 효소를 암호화하는 DNA 서열을 포함하는 폴리뉴클레오티드에 대해 유전자 이식된 것이다.

[0100] 작물은 또한 유전자 조작 방법에 의해 해로운 곤충에 대한 저항성을 나타내게 한 것, 예를 들어 Bt 옥수수(옥수

수들명나방에 대한 저항성), Bt 목화(목화 바구미에 대한 저항성) 및 또한 Bt 감자(콜로라도 감자잎벌레에 대한 저항성)로서 이해되어야 한다. Bt 옥수수의 예로는 NK®(Syngenta Seeds)의 Bt 176 옥수수 잡종이 있다. Bt 독소는 바실러스 투린지엔시스(*Bacillus thuringiensis*) 토양 박테리아에 의해 천연적으로 형성되는 단백질이다. 독소, 또는 이와 같은 독소를 합성할 수 있는 유전자 이식 식물의 예는 EP-A-451,878호, EP-A-374,753호, WO 제93/07278호, WO 제95/34656호, WO 제03/052073호 및 EP-A-427,529호에 기재되어 있다. 살곤충 저항성을 암호화하고 하나 이상의 독소를 발현하는 하나 이상의 유전자를 포함하는 유전자 이식 식물의 예로는 KnockOut®(옥수수), Yield Gard®(옥수수), NuCOTIN33B®(목화), Bollgard®(목화), NewLeaf®(감자), NatureGard® 및 Protexcta®가 있다. 작물 식물 또는 이의 종자 물질은 제초제에 대한 저항성이면서, 동시에 곤충 섭식에 대한 저항성일 수 있다("스택트(stacked)" 유전자 이식 사건). 예를 들어, 종자는 살곤충 Cry3 단백질을 발현하는 능력을 가질 수 있는 한편, 동시에 글리포세이트에 대하여 내성이다.

[0101] 작물은 또한 통상적인 육종 방법 또는 유전자 조작에 의해 얻어지는 것을 포함하는 것으로 이해되어야 하며, 이른바 품질특성(output trait)(예를 들어, 개선된 저장 안정성, 더 높은 영양가 및 개선된 향미)을 포함한다.

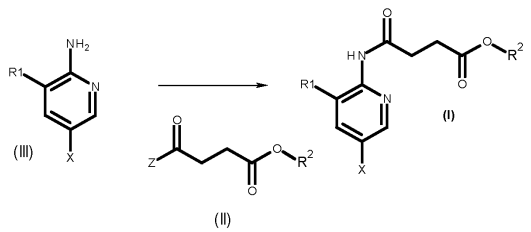
[0102] 본 발명의 화합물은 에스테르 또는 산의 형태일 수 있는데, 이 중 하나는 식물 생장 조절 특성을 가질 수 있다. WO 제2009/109570호에서 제안된 바와 같이, 화학식 I의 화합물의 에스테르 형태는 산 형태로 식물 내에서 가수분해될 수 있는 것으로 생각된다. 이는 에스테르화된 화합물이, 이론에 의해 구속되지 않고, 예를 들어 잎 조직을 통해 식물에 의해 더 용이하게 취해지는 경우 특히 이점이 있을 수 있다.

[0103] 본 발명의 화합물 및 조성물은 살곤충제, 살진균제, 제초제, 식물 생장 조절제, 수확량 향상 화합물, 영양분 및 생물학적 제제를 포함하여 농업에서 사용을 위한 기타 다른 활성 성분 또는 제품과 조합되어 적용될 수 있다. 적당한 혼합 상대의 예는 문헌[Pesticide Manual, 15th edition (British Crop Protection Council에 의해 발행됨)]에서 찾을 수 있다. 이와 같은 혼합물은 식물에 적용될 수 있으며, 동시에(예를 들어, 사전제형화된 혼합물 또는 탱크 믹스로서) 또는 적당한 기간에 순차적으로 식물 번식 물질 또는 식물 생장 서식지에 적용될 수 있다. 본 발명과 함께 살충제의 공동 적용은 농부가 수확을 위해 생산물에 적용하는 소모시간을 최소화하는 추가 이점을 가진다.

[0104] 본 발명의 추가 양태에서, 본 발명의 화합물 또는 조성물은 수확량 향상 효과를 가지는 하나 이상의 기타 다른 화합물과 조합되어 적용될 수 있다. 이와 같은 화합물은 미량영양소, 당류, 아미노산, 플라보노이드, 퀴닌 및 식물 활성제/생장 자극제를 포함한다. 예를 들어, 이와 같은 화합물은 천연 또는 합성 호르몬, 옥신(auxin), 브라시노스테로이드, 지베렐린, 아브시스산, 사이토키닌, 자스모네이트, 스트리고락톤, 살리실산, 에틸렌, 1-메틸사이클로프로펜, 트리넥사팍-에틸 또는 이들의 유도체를 포함한다. 이와 같은 화합물은 또한 수확량 향상 효과를 가지는 살충제, 예를 들어 스트로빌루린(아족시스트로빈, 피라클로스트로빈을 포함함), 및 네오니코티노이드(티아메톡삼 및 이미다클로프리드를 포함함)를 포함한다.

[0105] 본 발명의 화합물은 다음의 방법에 의해 만들어질 수 있다.

[0106] 반응식 1

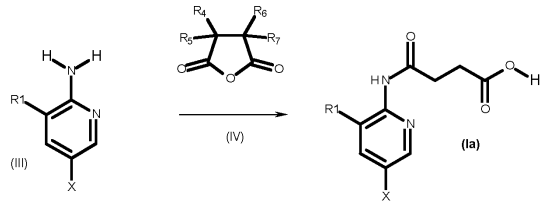


[0107]

[0108] 화학식 I의 화합물은 화학식 II의 화합물(여기서, Z는 할로겐, 예를 들어 염소임)의 반응에 의한 아실화를 통해 화학식 III의 화합물로부터 제조될 수 있으며, 이와 같은 반응은 보통 염기의 존재 하에서, 그리고 선택적으로 선택적으로 친핵성 촉매의 존재 하에서 수행된다. 대안적으로, 유기 용매, 바람직하게는 에틸 아세테이트, 및 수성 용매, 바람직하게는 탄산수소나트륨 용액을 포함하는 2상 시스템에서 반응을 수행할 수 있다.

[0109] 화학식 II의 화합물은 벤질 석시닐 클로라이드와 같이 상업적으로 입수가능하거나, 또는 당업자에게 공지된 방법에 의해 만들어질 수 있다.

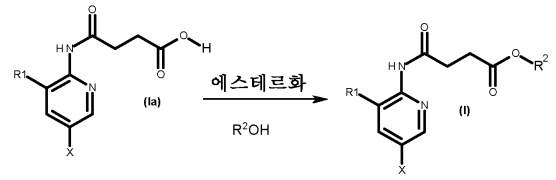
[0110] 반응식 2



[0111]

[0112] 화학식 Ia의 화합물은 테트라하이드로푸란과 같은 용매 중에서 석시닐 무수물과 같은 화학식 IV의 무수 유도체를 이용한 처리에 의해 화학식 III의 화합물을 처리함으로써 만들어질 수 있다. 반응은 바람직하게 -20℃ 내지 +120℃, 더 바람직하게는 20℃ 내지 120℃의 온도에서 수행된다.

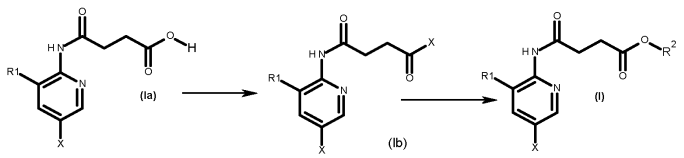
[0113] 반응식 3



[0114]

[0115] 화학식 I의 화합물은 알코올 유도체(R^2OH)의 존재 하에서 에스테르화를 통해 화학식 Ia의 화합물의 처리에 의해 만들어질 수 있다. 에스테르화 반응은 황산 또는 염산의 존재 하에서와 같은 산성 조건 하에서 그리고 예를 들어 알코올 유도체(R^2OH)와 같은 적당한 용매 중에서 수행될 수 있다. 대안적으로, 이 반응은, 예를 들어 디사이클로헥실카르보디이미드와 같은 커플링 방법을 사용하여 편리하게 수행될 수 있다. 이들 반응은 당업자에게 공지되어 있으며, 예를 들어 문헌["Synthetic Organic Methodology: Comprehensive Organic Transformations. A Guide to Functional Group Preparations." Larock, R. C. 1989, p. 966-972, Publisher: (VCH, Weinheim, Fed. Rep. Ger.)]에 검토되어 있다.

[0116] 반응식 4

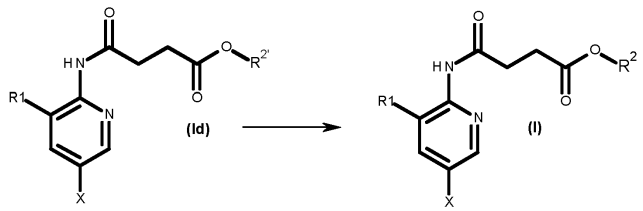


[0117]

[0118] 대안적으로, 화학식 I의 화합물은 에스테르를 형성하기 위해 아실레이트 알코올 유도체로의 아실화 반응을 통해 화학식 Ib의 화합물로부터 제조될 수 있다. 아실화 반응은 염기성 조건 하(예를 들어, 피리딘, 트리에틸아민, 4-(디메틸아미노)피리딘 또는 디이소프로필에틸아민의 존재 하), 그리고 예를 들어 테트라하이드로푸란과 같은 적당한 용매 중에서, 선택적으로 친핵성 촉매의 존재 하에서 수행될 수 있다. 반응은 -120℃ 내지 +130℃, 바람직하게는 -100℃ 내지 100℃의 온도에서 수행된다. 대안적으로, 반응은 유기 용매, 바람직하게는 에틸 아세테이트, 및 수성 용매, 바람직하게는 포화 중탄산나트륨 용액을 포함하는 2상 시스템에서 수행될 수 있다.

[0119] 화학식 Ib의 화합물은 디클로로메탄과 같은 용매 중에서 염화티오닐 또는 염화옥살릴을 이용한 처리와 같은 표준 조건 하에서 화학식 Ia의 화합물로부터 제조될 수 있다. 반응은 바람직하게 -20℃ 내지 +100℃, 더 바람직하게는 0℃ 내지 50℃의 온도, 특히 주위 온도에서 수행된다.

[0120] 반응식 5



[0121]

[0122] 대안적으로, 화학식 I의 화합물은 알코올 유도체(R^2OH)의 존재 하에서 에스테르교환반응을 통해 화학식 Ib의 화합물(R2'는 메틸과 같은 알킬 유도체임)로부터 제조될 수 있다. 에스테르교환반응은 당업자에게 잘 공지되어 있으며, 예를 들어 문헌["Synthetic Organic Methodology: Comprehensive Organic Transformations. A Guide to Functional Group Preparations." Larock, R. C. 1989, p. 985-987, Publisher: (VCH, Weinheim, Fed. Rep. Ger.)] 또는 [March's Advanced Organic Chemistry: Reactions, Mechanisms, and Structure, 5th Edition, Smith, Michael B.; March, Jerry.UK. 2000, Publisher: (John Wiley & Sons, Ltd., Chichester, UK) p 486-487]에 검토되어 있다. 철(III).베타.-디케토네이트 종을 사용하는 다른 예는 문헌["Transesterification catalyzed by iron (III) .beta.-diketonate species." Weng, Shiue-Shien; Ke, Chih-Shueh; Chen, Fong-Kuang; Lyu, You-Fu; Lin, Guan-Ying. Tetrahedron 2011, 67(9), 1640-1648]에 기재되어 있다.

[0123] 실시예

[0124] 다음의 HPLC-MS 방법을 화합물 A20 내지 A40의 분석을 위해 사용하였다:

[0125] Waters로부터의 ACQUITY SQD 질량 분석기(단일 사중극자 질량 분석기)

[0126] 이온화 방법: 전기분무

[0127] 극성: 양이온

[0128] 모세관(kV) 3.00, 콘(Cone)(V) 20.00, 추출기(V) 3.00, 공급원 온도(℃) 150, 탈용매화 온도(℃) 400, 콘 기체 유속(L/Hr) 60, 탈용매화 기체 유속(L/Hr) 700

[0129] 질량 범위: 100Da 내지 800Da

[0130] DAD 파장 범위(nm): 210 내지 400

[0131] 다음의 HPLC 구배 조건을 이용한 방법 Waters ACQUITY UPLC

[0132] (용매 A: 물/메탄올 9:1,0.1% 포름산, 및 용매 B: 아세토니트릴,0.1% 포름산)

[0133]

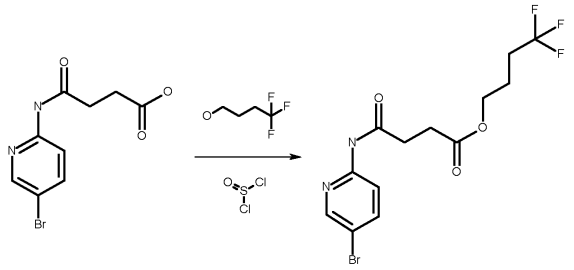
시간(분)	A(%)	B(%)	유동 속도(ml/분)
0	100	0	0.75
2.5	0	100	0.75
2.8	0	100	0.75
3.0	100	0	0.75

[0138] 컬럼 유형: Waters ACQUITY UPLC HSS T3; 컬럼 길이: 30mm; 컬럼의 내부 직경: 2.1mm; 입자 크기: 1.8마이크론; 온도: 60℃.

[0139] 다음의 약어가 본 섹션 전체에 걸쳐서 사용된다: s = 일중항; bs = 넓은 일중항; d = 이중항; dd = 이중 이중항; dt = 이중 삼중항; t = 삼중항, tt = 삼중 삼중항, q = 사중항, m = 다중항; Me = 메틸; Et = 에틸; Pr = 프로필; Bu = 부틸; M.p. = 융점; RT = 체류시간; MH^+ = 분자 양이온(즉, 측정된 분자량).

[0140] 최종 생성물의 합성:

[0141] **실시예 I**: 4,4,4-트리플루오로부틸 4-[(5-브로모-2-피리딜)아미노]-4-옥소-부타노에이트 **A1**의 합성

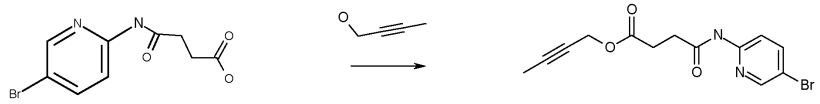


[0142]

[0143] 염화티오닐(상업적으로 입수가능함, 3당량, 2mmol)을 4, 4, 4-트리플루오로부탄-1-올(2mL)에 적가하였다. 발열 첨가가 끝났을 때, 반응물을 5분 동안 교반시켰고, 4-[(5-브로모-2-피리딜)아미노]-4-옥소-부타논산(상업적으로 입수가능함, 0.2 g, 0.7mmol)을 첨가하였다. 용액을 70℃에서 2시간 동안 교반시켰다. 반응물을 냉각시켰고, 물의 첨가에 의해 퀀칭시켰다. 수층을 에틸 아세테이트로 추출하였고, 탄산수소나트륨의 포화 용액으로 세척하였다. 분리시킨 후, 유기상을 건조시켰고, 진공 하에서 농축시켜 4,4,4-트리플루오로부틸 4-[(5-브로모-2-피리딜)아미노]-4-옥소-부타노에이트 **A1**(0.22 g, 80%)을 제공하였다. Mp= 118℃~119℃, ^{1}H NMR (400 MHz, $CDCl_3$) δ 8.32 (m, 2H), 8.12 (d, 1H), 7.78(dd, 1H), 4.20 (m, 2H), 2.74 (m, 4H), 2.20 (m, 2H), 1.92 (m, 2H) ppm.

[0144] 표 A로부터의 화합물 **A2** 내지 화합물 **A19**를 적절한 알코올을 사용하여 동일한 방법에 의해 제조하였다.

[0145] **실시예 II**: 부트-2-이닐 4-[(5-브로모-2-피리딜)아미노]-4-옥소-부타노에이트 **A20**의 합성



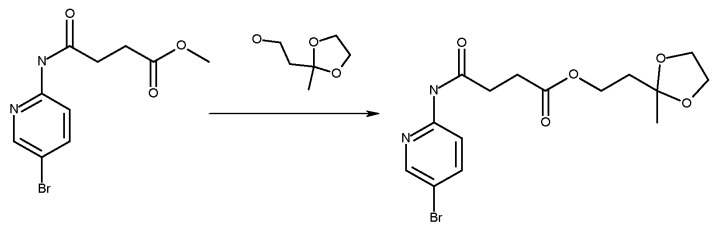
[0146]

[0147] 4-[(5-브로모-2-피리딜) 아미노]-4-옥소-부타논산(상업적으로 입수가능함, 560mg)의 저장 용액을 28.7mL THF 중에서 제조한다. 0.7mL의 이 용액을 각 바이알에 제공하였다. 그 다음에 매우 과량의 알코올을 첨가하였고, A1u24 받침대에서 분배하였다(액체에 대해: 0.3mL, 고체에 대해: 0.3mL THF 내로 용해시킨 10당량). 본 실시예에서, 0.3mL의 부트-2-인-1-올을 바이알에 첨가하였다. 바이알을 0℃로 냉각시키고, 염화티오닐을 멀티피펫(20uL)을 이용하여 첨가한다. 바이알을 실온에서 20분 동안 교반시킨다.

[0148] 용매를 증발시켰고, 물(2ML)과 에틸아세테이트(2mL)의 혼합물을 첨가하였다. 상을 분리시키고, 수층을 에틸아세테이트(2mL)로 추출하였다(x2). 유기상을 수집하였고, 진공 하에서 농축하였다. 샘플을 정제를 위해 96DPW에서 0.8mL DMF 중에 용해시켰다. HPLC에 의해 샘플을 정제하였고 LC-MS에 의해 분석하였다.

[0149] 표 A로부터의 화합물 **A21** 내지 화합물 **A40**을 적절한 알코올을 사용하여 동일한 방법에 의해 동시에 제조하였다.

[0150] **실시예 III**: 2-(2-메틸-1,3-디옥솔란-2-일)에틸 4-[(5-브로모-2-피리딜) 아미노]-4-옥소-부타노에이트 **A43**의 합성



[0151]

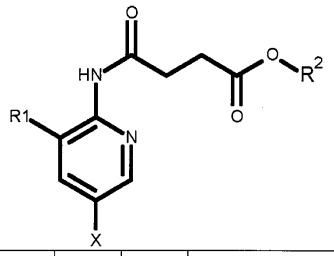
[0152] 50mL, 아르곤 분위기 하 실온에서 3목 둥근 바닥 플라스크에 철 트리스(아세토네이트)(0.1mmol, 0.1mmol, 0.05, 0.007mL), 1,3-디옥솔란-2-에탄올, 2-메틸-(2mL), 탄산나트륨(0.1mmol, 0.004mL), 헵탄(20mL) 및 메틸 4-[(5-브로모-2-피리딜)아미노]-4-옥소-부타노에이트(2mmol)를 넣었다. 생성된 혼합물을 Dean-Stark 장치(10mL 헵탄으로 채움)에 의한 메탄올을 제거하면서 환류로 가열하였고, 반응 진행을 TLC에 의해 모니터링하였다(24시간). 반응물은 더 차가웠고, 포화 NH4Cl 수용액(10mL)의 첨가에 의해 퀀칭시킨 다음, 40mL 에틸 아세테이트

(3x)로 추출하였다. 합한 유기층을 건조시켰고(무수 MgSO4), 여과시켰으며, 증발시켜 미정제 생성물을 제공하였다(진한 갈색 오일; 1.90g). 잔류물을 EtOH 중에 용해시켰고, 생성물이 침전될 때까지 물을 첨가하였다. 그 후에, 생성물을 여과시켰고, 건조시켜 2-(2-메틸-1,3-디옥솔란-2-일)에틸 4-[(5-브로모-2-피리딜) 아미노]-4-옥소-부타노에이트 **A43**(0.18 g, 23.5%)을 제공하였다. Mp= 97℃~98℃.

[0153] 표 A로부터의 화합물 **A41**, 화합물 **A42** 및 화합물 **A44**를 적절한 알코올을 사용하여 동일한 방법에 의해 제조하였다.

[0154] 표 A: 화학식 I의 화합물

[0155] [화학식 I]



화합물	X	R^1	R^2	NMR H^1
A1	Br	H	$(CH_2)_3CF_3$	^1H NMR (400 MHz, $CDCl_3$) δ 8.32 (m, 2H), 8.12 (d, 1H), 7.78(dd, 1H), 4.20 (m, 2H), 2.74 (m, 4H), 2.20 (m, 2H), 1.92 (m, 2H) ppm
A2	Br	H	$(CH_2)_3CH_3$	^1H NMR (400 MHz, $CDCl_3$) δ 8.32 (m, 2H), 8.12 (d, 1H), 7.78(d, 1H), 4.12 (m, 2H), 2.74 (m, 4H), 1.62 (m, 2H), 1.38 (m, 2H), 0.9 (t, 3H) ppm
A3	Br	H	$CH(CH_3)(CH_2)_2CH_3$	^1H NMR (400 MHz, $CDCl_3$) δ 8.44 (sb, 1H), 8.32 (s, 1H), 8.12 (d, 1H), 7.78(dd, 1H), 4.95 (m, 1H), 2.72 (m, 4H), 1.30-1.60 (m, 4H), 1.20 (m, 3H), 0.9 (t, 3H) ppm
A4	Br	H	CH_2CCH	^1H NMR (400 MHz, $CDCl_3$) δ 8.32 (s, 1H), 8.10 (m, 2H), 7.78 (d, 1H), 4.72 (m, 2H), 2.77 (m, 4H), 2.47 (m, 1H).
A5	Br	H	CH_2CHCH_2	^1H NMR (400 MHz, $CDCl_3$) δ 8.34 (s, 1H), 8.22 (sb, 1H), 8.12 (d, 1H), 7.78 (d, 1H), 5.91 (m, 1H), 5.29 (m, 2H), 4.62 (m, 2H), 2.75 (m, 4H).

[0156]

A6	Br	H	$(CH_2)_2CHCH_2$	^1H NMR (400 MHz, $CDCl_3$) δ 8.31 (s, 1H), 8.12 (m, 2H), 7.78 (d, 1H), 5.78 (m, 1H), 5.08 (m, 2H), 4.17 (m, 2H), 2.72 (m, 4H), 2.48 (m, 2H).
A7	Br	H	$(CH_2)_2SCH_3$	^1H NMR (400 MHz, $CDCl_3$) δ 8.38 (sb, 1H), 8.42 (s, 1H), 8.12 (d, 1H), 7.78 (d, 1H), 4.30 (t, 2H), 2.75 (m, 4H), 2.12 (s, CH_3).
A8	Br	H	CH_2CF_3	^1H NMR (400 MHz, $CDCl_3$) δ 8.34 (s, 1H), 8.18 (sb, 1H), 8.08 (d, 1H), 7.80 (d, 1H), 4.52 (m, 2H), 2.88 (m, 2H), 2.74 (m, 2H).
A9	Br	H	CH_2CHCl_2	^1H NMR (400 MHz, $CDCl_3$) δ 8.32 (s, 1H), 8.12 (d, 1H), 8.04 (sb, 1H), 7.78(d, 1H), 5.84 (t, 1H), 4.48 (d, 2H), 2.84 (m, 2H), 2.72 (m, 2H).
A10	Br	H	$(CH_2)_2OCH_3$	^1H NMR (400 MHz, $CDCl_3$) δ 8.34 (s, 1H), 8.28 (sb, 1H), 8.12(d, 1H), 7.78(d, 1H), 4.28 (m, 2H), 3.60 (m, 2H), 3.38 (s, 3H), 2.80 (m, 2H), 2.68 (m, 2H).
A11	Cl	H	$(CH_2)_2CHCH_2$	^1H NMR (400 MHz, $CDCl_3$) δ 8.20 (m, 3H), 7.64 (dd, 1H), 5.75 (m, 1H), 5.08 (m, 2H), 4.16 (m, 2H), 2.72 (m, 4H), 2.40 (m, 2H).
A12	Cl	H	CH_2CHCH_2	^1H NMR (400 MHz, $CDCl_3$) δ 8.18 (m, 3H), 7.63 (dd, 1H), 5.90 (m, 1H), 5.33 (d, 1H), 5.22 (d, 1H), 4.62 (d, 2H), 2.75 (m, 4H).
A13	Cl	H	$(CH_2)_2OCH_3$	^1H NMR (400 MHz, $CDCl_3$) δ 8.51 (sb, 1H), 8.22 (d, 1H), 8.17 (d, 1H), 7.65 (dd, 1H), 4.28 (t, 2H), 3.61 (t, 2H), 2.74 (m, 4H).

[0157]

A14	I	H	CH_2CF_3	^1H NMR (400 MHz, $CDCl_3$) δ 8.38 (s, 1H), 7.95 (m, 3H), 4.44 (m, 2H), 2.72 (m, 4H).		
A15	Br	H	$CH((CH_2)_4)$	^1H NMR (400 MHz, $CDCl_3$) δ 8.58 (sb, 1H), 8.14 (d, 1H), 7.78 (d, 1H), 5.69 (m, 1H), 2.70 (s, 4H), 1.86-1.65 (m, 8H).		
A16	Br	H	1-propyl(4-메틸pyrazol)	^1H NMR (400 MHz, $CDCl_3$) δ 8.32 (s, 1H), 8.12 (m, 2H), 7.78 (m, 1H), 7.30 (s, 1H), 7.10 (s, 1H), 4.14 (m, 2H), 3.86 (s, 3H), 2.71 (m, 4H), 2.52 (m, 2H), 1.88 (m, 2H).		
A17	Br	H	$CH((CH_2)_3)$	^1H NMR (400 MHz, $CDCl_3$) δ 8.32 (s, 1H), 8.12 (d, 1H), 8.08 (sb, 1H), 7.78 (d, 1H), 5.01 (m, 1H), 2.70 (m, 4H), 2.34 (m, 2H), 2.08(m, 2H), 1.80 (m, 1H), 1.62 (m, 1H).		
A18	Cl	H	CH_2Ph	^1H NMR (400 MHz, $CDCl_3$) δ 8.24 (s, 1H), 8.18 (d, 1H), 8.04 (sb, 1H), 7.64 (m, 1H), 7.32-7.25 (m, 5H), 5.14 (s, 2H), 2.82-2.70 (m, 4H)		
A19	Br	H	CH_2Ph	^1H NMR (400 MHz, $CDCl_3$) δ 8.32 (s, 1H), 8.12 (d, 1H), 8.04 (sb, 1H), 7.78 (m, 1H), 7.32-7.25 (m, 5H), 5.04 (s, 2H), 2.82-2.68 (m, 4H)		
	X	**R1**	**R2**	RT	M (계산치)	(M+H)+ (측정치)
A20	Br	H	CH_2CCCH_3	1.31	324.01	325.16
A21	Br	H	$(CH_2)_2Ph$	1.60	376.04	377.21
A22	Br	H	$CH_2CH(CH_2OCH_2CH_2)$	1.15	356.03	357.20
A23	Br	H	$CH_2CHCH(CH_2)$	1.83	368.07	369.24

[0158]

A24	Br	H	$CH_2CH_2CCCH_2CH_3$	1.45	352.04	353.20
A25	Br	H	$CH_2CH_2C(O)OCH_2CH_2OCH(CH_3)_2$	1.35	358.05	359.21
A26	Br	H	$CH(CH_2CH_2OCH_2CH_2)$	1.16	356.03	357.19
A27	Br	H	$CH_2CH_2CCC(CH_3)_3$	1.77	380.07	381.24
A28	Br	H	$CH_2CH_2S(O)_2CH_3$	0.94	377.98	379.16
A29	Br	H	$CH(CH_2OCH_2CH_2)$	1.08	342.02	343.18
A30	Br	H	CH_2CH_2Br	1.31	377.92	379.08
A31	Br	H	$CH(CH_2CH_2C((H)(CH_3)_3)CH_2CH_2)$	2.09	410.12	411.29
A32	Br	H	$CH(CH_2CH_2C((H)(CH_2CH_3))CH_2CH_2)$	1.91	382.08	383.35
A33	Br	H	$CH_2CH_2SCH_2CH_3$	1.44	360.01	361.18
A34	Br	H	$CH(CH_2CH_2CH_2CH_2CH_2)$	1.64	354.05	355.23
A35	Br	H	$CH_2CH_2SCH(CH_3)_2$	1.56	374.02	375.21
A36	Br	H	$CH_2(3\text{-}CF_3Ph)$	1.71	430.01	431.22
A37	Br	H	$CH_2(4\text{-}OCF_3Ph)$	1.76	446.00	447.21
A38	Br	H	$CH(CH_2SCH_2CH_2)$	1.33	357.99	359.30
A39	Br	H	$CH_2CHC(CH_3)_2$	1.53	340.04	341.20
A40	Br	H	$CH_2CH(SCH_2CH_2S)$	1.41	389.97	391.16

[0159]

화합물	X	R1	R2	NMR H[1]
A41	Br	H	$(CH_2)_3$(2-피리딜)	^{1}H NMR (400 MHz, $CDCl_3$) δ 8.52 (s, 1H), 8.32 (s, 1H), 8.18 (sb, 1H), 8.12(d, 1H), 7.78(d, 1H), 7.58(m, 1H), 7.12(m, 2H), 4.18 (m, 2H), 3.28 (m, 2H), 2.72 (m, 4H), 2.10 (m, 2H).
A42	Br	H	CH_2(2,5-$(CH_3O)_2$Ph)	^{1}H NMR (400 MHz, $CDCl_3$) δ 8.31 (s, 1H), 8.12 (sb, 1H), 8.10 (d, 1H), 7.78 (d, 1H), 6.90 (s, 1H), 6.80 (m, 2H), 5.18 (s, 2H), 3.78(s, 3H) , 3.76(s, 3H), 2.82 (m, 2H), 2.72 (m, 2H).
A43	Br	H	$CH_2CH_2C((CH_3)(O(CH_2)_2O))$	^{1}H NMR (400 MHz, $CDCl_3$) δ 8.33 (s, 1H), 8.24 (sb, 1H), 8.11 (d, 1H), 7.78(d, 1H), 4.24 (t, 2H), 3.93 (m, 4H), 2.72 (m, 4H), 2.02(t, 2H), 1.33 (s, 3H).
A44	Br	H	CH_2(6-CH_3-피리딜-2)	^{1}H NMR (400 MHz, $CDCl_3$) δ 8.30 (s, 1H), 8.12 (m, 2H), 7.78 (d, 1H), 7.75(t, 1H), 7.15 (d, 1H), 7.08 (d, 1H), 5.22 (s, 2H), 2.88 (m, 2H), 2.74 (m, 2H), 2.53 (s, 3H).

[0160]

[0161] 생물학적 실시예

[0162] 본 발명의 화합물의 활성을 분석하기 위해 2회의 생물학적 분석을 진행하였다. 제1 분석에서, 화합물의 활성을 두번째 잎의 잎자루의 신장에 대한 효과를 기반으로 콩에서 정량화하였다. 제2 분석에서, 밀의 뿌리 생장에 대한 화합물의 효과를 결정하였다.

[0163] **실시예 B1: 콩 분석**

[0164] 변종 풀비오(Fulvio)의 강낭콩(파세올루스 불가리스(*Phaseolus vulgaris*))을 추가적인 비료 없이 사양토에서 0.5리터 포트에 파종하였다. 식물은 온실 조건 하 22℃/18℃(낮/밤) 및 80% 상대 습도에서 생장시켰고, 빛을 25kLux초과로 보충하였다. 두번째 절간이 2mm 내지 5mm 길이가 되었을 때, 식물을 파종 후 11일째에 시험 화합물로 처리하였다. 적용 전, 화합물을 디메틸설폭사이드 중에 각각 용해시켰고, 물 및 에탄올의 혼합물(1:1 부피비) 중에 희석시켰다. 두번째 절간의 기저로부터 포엽을 이탈한 후 만들어진 상처에 대해 5마이크로리터의 시험 화합물을 피펫팅하였다. 화합물의 활성을 정량화하기 위해 적용 후 14일째에, 두번째 잎의 잎자루의 길이(잎자루의 기저로부터 첫번째 소엽의 기저까지 측정함)를 측정하였다.

[0165] 화합물 A4, A6, A8, A9, A10, A13, A16, A22는 두번째 잎의 잎자루 길이의 적어도 5% 증가를 제공하였다.

[0166] **실시예 B2: 밀 분석**

[0167] 시험 화합물을 적은 부피의 디메틸 설폭사이드 중에 용해시켰고, 물을 이용하여 적절한 농도로 희석시켰다. 변종 아리나(Arina)의 밀(트리티컴 아에스티붐(Triticum aestivum)) 종자를 5ml의 적절한 화합물 용액을 함유하는 미니파우치(10.5 × 9.0 cm)에 파종하였다. 미니파우치를 17℃에서 3일 동안 저장하여 종자가 발아될 수 있게 하였다. 그 다음에 식물을 5℃에 저장하였다. 파종/적용 후 12일째에, 식물을 미니파우치로부터 제거하였고, 스캐닝하였다. 식물(뿌리 및 싹) 영역 및 뿌리의 곱슬곱슬함(곱슬곱슬함은 브라시노스테로이드형 활성의 지표임)을 측정함으로써 화합물의 효과를 정량화하였다.

[0168] 화합물 A4, A5, A8, A9, A10, A12, A13은 식물(뿌리 및 싹) 영역의 적어도 15% 감소를 제공하였고, 곱슬곱슬한 뿌리 표현형을 나타내었다.