

(12) 特許協力条約に基づいて公開された国際出願

(19) 世界知的所有権機関
国際事務局

(43) 国際公開日
2015年6月18日(18.06.2015)



(10) 国際公開番号
WO 2015/087857 A1

(51) 国際特許分類:

C07C 257/18 (2006.01) C07C 311/51 (2006.01)
A01N 37/52 (2006.01) C07C 323/60 (2006.01)
A01N 47/44 (2006.01) C07D 213/64 (2006.01)
A01P 3/00 (2006.01) C07D 233/22 (2006.01)
C07C 279/12 (2006.01) C07D 239/06 (2006.01)
C07C 279/24 (2006.01) C07D 261/20 (2006.01)
C07C 311/18 (2006.01) C07D 307/81 (2006.01)
C07C 311/19 (2006.01)

(21) 国際出願番号: PCT/JP2014/082511

(22) 国際出願日: 2014年12月9日(09.12.2014)

(25) 国際出願の言語: 日本語

(26) 国際公開の言語: 日本語

(30) 優先権データ:

特願 2013-254973 2013年12月10日(10.12.2013) JP
特願 2014-084016 2014年4月15日(15.04.2014) JP
特願 2014-194454 2014年9月24日(24.09.2014) JP

(71) 出願人: 日本曹達株式会社(NIPPON SODA CO., LTD.) [JP/JP]; 〒1008165 東京都千代田区大手町二丁目2番1号 Tokyo (JP).

(72) 発明者: 井堀 洋一(IHORI Yoichi); 〒2500280 神奈川県小田原市高田345 日本曹達株式会社小田原研究所内 Kanagawa (JP). 椎木 康介(SHINOKI Yasuyuki); 〒2500280 神奈川県小田原市高

田345 日本曹達株式会社 小田原研究所内 Kanagawa (JP). 井上 修治(INOUE Shuji); 〒2500280 神奈川県小田原市高田345 日本曹達株式会社 小田原研究所内 Kanagawa (JP). 西村 聡(NISHIMURA Satoshi); 〒2500280 神奈川県小田原市高田345 日本曹達株式会社 小田原研究所内 Kanagawa (JP). 牧田 悟(MAKITA Satoru); 〒2500280 神奈川県小田原市高田345 日本曹達株式会社 小田原研究所内 Kanagawa (JP). 田中 哲也(TANAKA Tetsuya); 〒2500280 神奈川県小田原市高田345 日本曹達株式会社 小田原研究所内 Kanagawa (JP). 柴山 耕太郎(SHIBAYAMA Kotaro); 〒2500280 神奈川県小田原市高田345 日本曹達株式会社 小田原研究所内 Kanagawa (JP). 姜 昌慶(KANG Chang-Kyung); 〒2500280 神奈川県小田原市高田345 日本曹達株式会社 小田原研究所内 Kanagawa (JP).

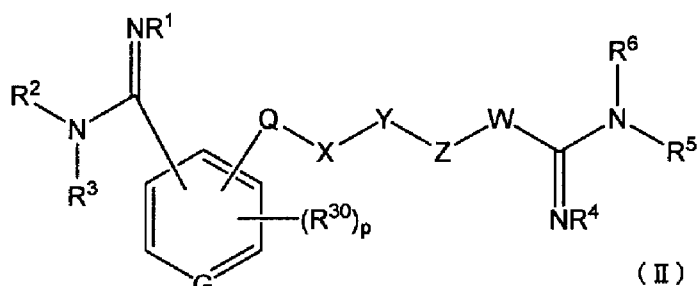
(74) 代理人: 志賀 正武, 外(SHIGA Masatake et al.); 〒1006620 東京都千代田区丸の内一丁目9番2号 Tokyo (JP).

(81) 指定国 (表示のない限り、全ての種類の国内保護が可能): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, JP, KE, KG, KN, KP, KR, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX,

[続葉有]

(54) Title: ARYL AMIDINE COMPOUND AND BACTERICIDAL AGENT

(54) 発明の名称: アリールアミジン化合物および殺菌剤



(57) Abstract: Provided is an aryl amidine compound that has excellent bactericidal activity, is highly safe, can be synthesized in an industrially advantageous manner, and is represented by formula (II) or the like. Also provided is a bactericidal agent or plant disease controlling agent that contains the aryl amidine compound as an active ingredient. In the formula, G indicates a carbon atom or a nitrogen atom, Q indicates a single bond, -O-, -S-, -SO-, -SO₂-, -N(R⁹)-, or the like, X and Z each independently indicate an alkylene group or the like, Y indicates -N(-A-R⁷)- or the like, W indicates a single bond or -N(R⁸)-, R¹-R⁶ each independently indicate a hydrogen atom, a hydrocarbon group, a heterocyclyl group, or the like, R³⁰ indicates a C1-6 alkyl group, and p is any integer from 0 to 4.

(57) 要約: 殺菌活性に優れ、安全性に優れ、且つ工業的に有利に合成できる、式(II)などで表されるアリールアミジン化合物、ならびにこれを有効成分として含有する殺菌剤または植物病害防除剤を提供する。式中、Gは、炭素原子または窒素原子を示し、Qは、単結合、-O-、-S-、-SO-、-SO₂-、または-N(R⁹)-などを示し、XおよびZはそれぞれ独立にアルキレン基などを示し、Yは-N(-A-R⁷)-などを示し、Wは、単結合または-N(R⁸)-を示し、R¹-R⁶はそれぞれ独立に水素原子、炭化水素基、ヘテロシクリル基などを示し、R³⁰は、C1~6アルキル基などを示し、pは、0~4のいずれかの整数である。



MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, ZA, ZM, ZW.

- (84) 指定国 (表示のない限り、全ての種類の広域保護が可能): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), ユーラシア (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), ヨー

ロッパ (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

添付公開書類:

— 国際調査報告 (条約第 21 条(3))

明 細 書

発明の名称：アリールアミジン化合物および殺菌剤

技術分野

[0001] 本発明は、アリールアミジン化合物および殺菌剤に関する。より詳細に、本発明は、優れた殺菌活性を有し、安全性に優れ、且つ工業的に有利に合成できる新規なアリールアミジン化合物、ならびに該アリールアミジン化合物を有効成分として含有する殺菌剤または植物病害防除剤に関する。また、前記アリールアミジン化合物を製造するための中間体に関する。

本願は、2013年12月10日に日本に出願された特願2013-254973号、2014年4月15日に日本に出願された特願2014-084016号、2014年9月24日に日本に出願された特願2014-194454号に基づき優先権を主張し、その内容をここに援用する。

背景技術

[0002] 特許文献1、2または3は、ある種のアリールアミジン化合物が真菌や植物病害菌の防除効果を有すると述べている。そして該アリールアミジン化合物を有効成分として含有する抗真菌剤や植物病害防除剤などを提案している。また、該アリールアミジン化合物の合成に適した中間体を開示している。

先行技術文献

特許文献

[0003] 特許文献1：WO2013/062024A1

特許文献2：WO2006/011499A1

特許文献3：WO2007/074868A1

発明の概要

発明が解決しようとする課題

[0004] 本発明の課題は、殺菌活性に優れ、安全性に優れ、且つ工業的に有利に合成できる新規なアリールアミジン化合物を提供すること、該アリールアミジン化合物を有効成分として含有する殺菌剤または植物病害防除剤を提供する

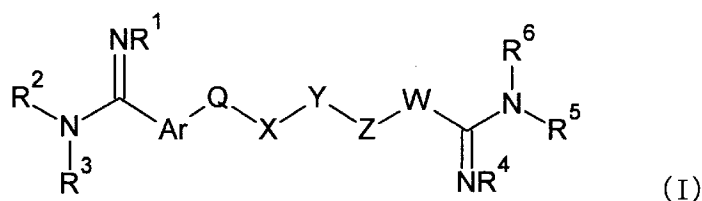
こと、並びに前記アリールアミジン化合物を製造するための中間体を提供することである。

課題を解決するための手段

[0005] 本発明は、以下の態様を包含する。

(1) 式 (I) で表される化合物またはその塩。

[0006] [化1]



[0007] (式 (I) 中、

Arは、無置換の若しくは置換基を有する二価の芳香族炭化水素残基、または無置換の若しくは置換基を有する二価の複素環式化合物残基を示し、

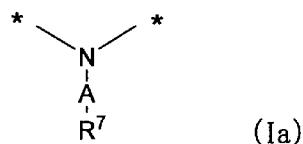
Qは、単結合、無置換の若しくは置換基を有するフェニレン、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 、 $-\text{O}-$ 、 $-\text{S}-$ 、 $-\text{SO}-$ 、 $-\text{SO}_2-$ 、または $-\text{N}(\text{R}^9)-$ を示す。R⁹は、水素原子、無置換の若しくは置換基を有する炭化水素基、無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリル基、ヒドロキシル基、無置換の若しくは置換基を有するアルコキシ基、無置換の若しくは置換基を有するアルコシカルボニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールオキシ基、無置換の若しくは置換基を有するアミノ基、無置換の若しくは置換基を有するアルキルスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリルスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するアルキルカルボニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールカルボニル基、または無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリルカルボニル基を示す。

XおよびZは、それぞれ独立に、無置換の若しくは置換基を有するアルキレン基、無置換の若しくは置換基を有するアルケニレン基、無置換の若しくは置換基を有するアルキニレン基、 $-\text{T}^a-\text{O}-\text{T}^b-$ 、または $-\text{T}^a-\text{N}(\text{R}^2)-$

o) $-T^b-$ を示す。 T^a および T^b は、それぞれ独立に、無置換の若しくは置換基を有するアルキレン基を示し、 R^{20} は、水素原子、無置換の若しくは置換基を有する炭化水素基、無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリル基、ヒドロキシル基、無置換の若しくは置換基を有するアルコキシ基、無置換の若しくは置換基を有するアルコシカルボニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールオキシ基、無置換の若しくは置換基を有するアミノ基、無置換の若しくは置換基を有するアルキルスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリルスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するアルキルカルボニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールカルボニル基、または無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリルカルボニル基を示す。

Yは、 $-C(=O)-NH-$ 、 $-NH-C(=O)-$ 、または式 (Ia)

[0008] [化2]



[0009] (式 (Ia) 中、Aは、単結合、 $-C(=O)-$ 、または $-SO_2-$ を示し、 R^7 は、水素原子、無置換の若しくは置換基を有する炭化水素基、無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリル基、ヒドロキシル基、無置換の若しくは置換基を有するアルコキシ基、無置換の若しくは置換基を有するアリールオキシ基、または無置換の若しくは置換基を有するアミノ基を示す。)を示し、

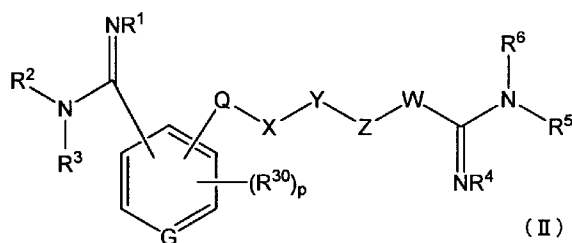
Wは、単結合、または $-N(R^8)-$ を示す。 R^8 は、水素原子、無置換の若しくは置換基を有する炭化水素基、無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリル基、ヒドロキシル基、無置換の若しくは置換基を有するアルコキシ基、無置換の若しくは置換基を有するアルコシカルボニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールオキシ基、無置換の若しくは置換基を有するアミノ基、無置換の若しくは置換基を有するアルキルスルホニル基、無置換

の若しくは置換基を有するアリールスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリルスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するアルキルカルボニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールカルボニル基、または無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリルカルボニル基を示す。

$R^1 \sim R^6$ は、それぞれ独立に、水素原子、無置換の若しくは置換基を有する炭化水素基、無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリル基、ヒドロキシ基、無置換の若しくは置換基を有するアルコキシ基、無置換の若しくは置換基を有するアルコキシカルボニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールオキシ基、無置換の若しくは置換基を有するアミノ基、無置換の若しくは置換基を有するアルキルスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリルスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するアルキルカルボニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールカルボニル基、または無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリルカルボニル基を示す。 R^1 と R^2 、 R^2 と R^3 、 R^4 と R^5 、または R^5 と R^6 とが一緒になって結合して、4～8員環を形成していてもよい。 $R^1 \sim R^3$ いずれかひとつと A_r が一緒になって結合して、4～8員環を形成していてもよい。)

(2) 式(II)で表される化合物またはその塩。

[0010] [化3]



[0011] (式(II)中、

Gは、炭素原子または窒素原子を示し、

Qは、単結合、無置換の若しくは置換基を有するフェニレン、 $-CH=CH-$

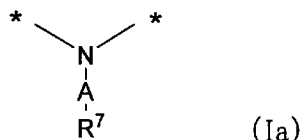
H—、—C≡C—、—O—、—S—、—SO—、—SO₂—、または—N(R⁹)—を示す。R⁹は、水素原子、無置換の若しくは置換基を有する炭化水素基、無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリル基、ヒドロキシル基、無置換の若しくは置換基を有するアルコキシ基、無置換の若しくは置換基を有するアルコキシカルボニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールオキシ基、無置換の若しくは置換基を有するアミノ基、無置換の若しくは置換基を有するアルキルスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリルスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するアルキルカルボニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールカルボニル基、または無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリルカルボニル基を示す。

XおよびZは、それぞれ独立に、無置換の若しくは置換基を有するアルキレン基、無置換の若しくは置換基を有するアルケニレン基、無置換の若しくは置換基を有するアルキニレン基、—T^a—O—T^b—、または—T^a—N(R²⁰)—T^b—を示す。T^aおよびT^bは、それぞれ独立に、無置換の若しくは置換基を有するアルキレン基を示し、R²⁰は、水素原子、無置換の若しくは置換基を有する炭化水素基、無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリル基、ヒドロキシル基、無置換の若しくは置換基を有するアルコキシ基、無置換の若しくは置換基を有するアルコキシカルボニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールオキシ基、無置換の若しくは置換基を有するアミノ基、無置換の若しくは置換基を有するアルキルスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリルスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するアルキルカルボニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールカルボニル基、または無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリルカルボニル基を示す。

Yは、—C(=O)—NH—、—NH—C(=O)—、または式(Ia)

[0012]

[化4]



[0013] (式 (Ia) 中、A は、単結合、 $-\text{C}(=\text{O})-$ 、または $-\text{SO}_2-$ を示し、 R^7 は、水素原子、無置換の若しくは置換基を有する炭化水素基、無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリル基、ヒドロキシル基、無置換の若しくは置換基を有するアルコキシ基、無置換の若しくは置換基を有するアリールオキシ基、または無置換の若しくは置換基を有するアミノ基を示す。) で示される基を示す。

W は、単結合、または $-\text{N}(\text{R}^8)-$ を示す。 R^8 は、水素原子、無置換の若しくは置換基を有する炭化水素基、無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリル基、ヒドロキシル基、無置換の若しくは置換基を有するアルコキシ基、無置換の若しくは置換基を有するアルコキシカルボニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールオキシ基、無置換の若しくは置換基を有するアミノ基、無置換の若しくは置換基を有するアルキルスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリルスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するアルキルカルボニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールカルボニル基、または無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリルカルボニル基を示す。

$\text{R}^1 \sim \text{R}^6$ は、それぞれ独立に、水素原子、無置換の若しくは置換基を有する炭化水素基、無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリル基、ヒドロキシル基、無置換の若しくは置換基を有するアルコキシ基、無置換の若しくは置換基を有するアルコキシカルボニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールオキシ基、または無置換の若しくは置換基を有するアミノ基、無置換の若しくは置換基を有するアルキルスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するヘテロ

シクリルスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するアルキルカルボニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールカルボニル基、または無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリルカルボニル基を示す。R¹とR²、R²とR³、R⁴とR⁵、またはR⁵とR⁶とが一緒になって結合して、4～8員環を形成していてもよい。

R³⁰は、C 1～6アルキル基、C 3～8シクロアルキル基、C 6～10アリール基、3～6員ヘテロシクリル基、ヒドロキシル基、C 1～6アルコキシ基、C 6～10アリールオキシ基、カルボキシル基、ハロゲノ基、C 1～6ハロアルキル基、C 6～10ハロアリール基、C 1～6ハロアルコキシ基、アミノ基（NH₂で表される基）、C 1～6アルキル置換アミノ基、C 6～10アリールアミノ基、C 1～7アシルアミノ基、C 1～6アルコキシカルボニルアミノ基、C 1～6アルキルチオ基、C 6～10アリールチオ基、ヘテロアリールチオ基、C 7～11アラルキルチオ基、C 1～6アルキルスルフィニル基、C 6～10アリールスルフィニル基、ヘテロアリールスルフィニル基、C 7～11アラルキルスルフィニル基、C 1～6アルキルスルホニル基、C 6～10アリールスルホニル基、ヘテロシクリルスルホニル基、シアノ基、ニトロ基を示す。R¹～R³いずれかひとつとR³⁰が一緒になって結合して、4～8員環を形成していてもよい。

pは、R³⁰の個数を示し、0～4のいずれかの整数である。）

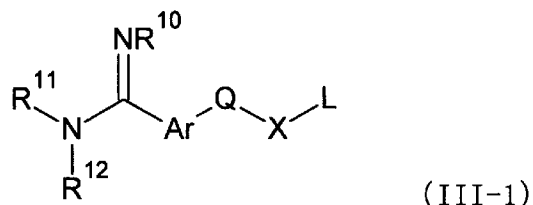
(3) 前記(1)または(2)に記載の化合物またはその塩から選ばれる少なくとも一つを有効成分として含有する殺菌剤。

(4) 前記(1)または(2)に記載の化合物またはその塩から選ばれる少なくとも一つを含有する植物病害防除剤。

(5) 式(III-1)で表される化合物。

[0014]

[化5]



[0015] (式 (III-1) 中、

L は、脱離基を示し、

Q は、単結合、無置換の若しくは置換基を有するフェニレン、 ---CH=CH--- 、 $\text{---C}\equiv\text{C---}$ 、 ---O--- 、 ---S--- 、 ---SO--- 、 $\text{---SO}_2\text{---}$ 、または $\text{---N(R}^9\text{)---}$ を示す。

R⁹は、水素原子、無置換の若しくは置換基を有する炭化水素基、無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリル基、ヒドロキシル基、無置換の若しくは置換基を有するアルコキシ基、無置換の若しくは置換基を有するアルコキシカルボニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリアルオキシ基、無置換の若しくは置換基を有するアミノ基、無置換の若しくは置換基を有するアルキルスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリアルスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリルスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するアルキルカルボニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリアルカルボニル基、または無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリルカルボニル基を示す。

Ar は、無置換の若しくは置換基を有する二価の芳香族炭化水素残基、または無置換の若しくは置換基を有する二価の複素環式化合物残基を示し、

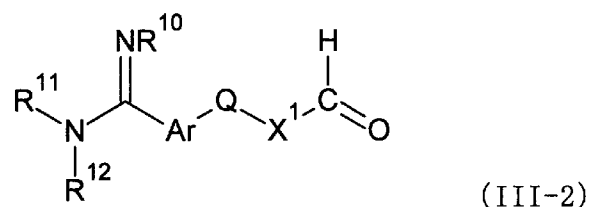
X は、無置換の若しくは置換基を有するアルキレン基、無置換の若しくは置換基を有するアルケニレン基、無置換の若しくは置換基を有するアルキニレン基、 $\text{---T}^a\text{---O---T}^b\text{---}$ 、または $\text{---T}^a\text{---N(R}^{20}\text{)---T}^b\text{---}$ を示し、T^aおよびT^bは、それぞれ独立に、無置換の若しくは置換基を有するアルキレン基を示し、R²⁰は、水素原子、無置換の若しくは置換基を有する炭化水素基、無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリル基、ヒドロキシル基、無置

換の若しくは置換基を有するアルコキシ基、無置換の若しくは置換基を有するアルコキシカルボニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールオキシ基、無置換の若しくは置換基を有するアミノ基、無置換の若しくは置換基を有するアルキルスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリルスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するアルキルカルボニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールカルボニル基、または無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリルカルボニル基を示す。

$R^{10} \sim R^{12}$ は、それぞれ独立に、水素原子または t -ブトキシカルボニル基を示す。ただし、 $R^{10} \sim R^{12}$ のうち1つ以上が、 t -ブトキシカルボニル基である。）

(6) 式 (III-2) で表される化合物。

[0016] [化6]



[0017] (式 (III-2) 中、

Ar は、無置換の若しくは置換基を有する二価の芳香族炭化水素残基、または無置換の若しくは置換基を有する二価の複素環式化合物残基を示し、

Q は、単結合、無置換の若しくは置換基を有するフェニレン、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 、 $-\text{O}-$ 、 $-\text{S}-$ 、 $-\text{SO}-$ 、 $-\text{SO}_2-$ 、または $-\text{N}(\text{R}^9)-$ を示す。 R^9 は、水素原子、無置換の若しくは置換基を有する炭化水素基、無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリル基、ヒドロキシル基、無置換の若しくは置換基を有するアルコキシ基、無置換の若しくは置換基を有するアルコキシカルボニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールオキシ基、無置換の若しくは置換基を有するアミノ基、無置換の若しくは置換基を有するアルキルスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリー

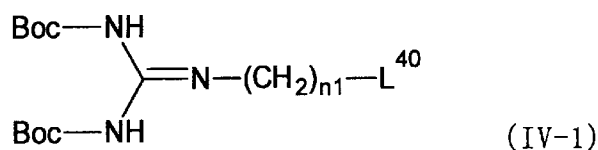
ルスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリルスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するアルキルカルボニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールカルボニル基、または無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリルカルボニル基を示す。

X^1 は、無置換の若しくは置換基を有するアルキレン基、無置換の若しくは置換基を有するアルケニレン基、無置換の若しくは置換基を有するアルキニレン基、 $-T^a-O-T^b-$ 、または $-T^a-N(R^{20})-T^b-$ を示し、 T^a および T^b は、それぞれ独立に、無置換の若しくは置換基を有するアルキレン基を示し、 R^{20} は、水素原子、無置換の若しくは置換基を有する炭化水素基、無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリル基、ヒドロキシ基、無置換の若しくは置換基を有するアルコキシ基、無置換の若しくは置換基を有するアルコキシカルボニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールオキシ基、無置換の若しくは置換基を有するアミノ基、無置換の若しくは置換基を有するアルキルスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリルスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するアルキルカルボニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールカルボニル基、または無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリルカルボニル基を示す。

$R^{10} \sim R^{12}$ は、それぞれ独立に、水素原子または t -ブトキシカルボニル基を示す。ただし、 $R^{10} \sim R^{12}$ のうち1つ以上が、 t -ブトキシカルボニル基である。）

(7) 式(IV-1)または式(IV-2)で表される化合物。

[0018] [化7]

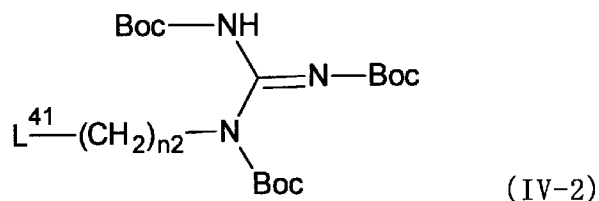


[0019] (式(IV-1)中、

L^{40} は、脱離基またはアルデヒドを示し、

Bocは、t-ブトキシカルボニル基を示し、
n1は、2、3、または6～10の整数を示す。）

[0020] [化8]



[0021] (式 (IV-2) 中、

L⁴¹は、脱離基またはアルデヒドを示し、
Bocは、t-ブトキシカルボニル基を示し、
n2は、2、3、または5～10の整数を示す。）

発明の効果

[0022] 本発明に係る第一の実施形態のアリールアミジン化合物（式 (I) または式 (II) で表される化合物またはその塩）は、殺菌活性に優れ、安全性に優れ、且つ工業的に有利に合成することができる。当該アリールアミジン化合物を有効成分として含有する殺菌剤若しくは植物病害防除剤は、リンゴ黒星病、キュウリ灰色かび病、コムギうどんこ病、トマト疫病、コムギ赤さび病などの植物病害の防除価に特に優れている。

本発明に係る第二の実施形態のアリールアミジン化合物（式 (III-1) または式 (III-2) で表される化合物）及びグアニジン化合物（式 (IV-1) または式 (IV-2) で表される化合物）は、本発明の第一の実施形態のアリールアミジン化合物（式 (I) または式 (II) で表される化合物またはその塩）を安価に製造するための中間体として有用である。

発明を実施するための形態

[0023] まず、本発明において、「無置換の」の用語は、母核となる基のみであることを意味する。「置換基を有する」との記載がなく母核となる基の名称のみで記載しているときは、別段の断りがない限り「無置換の」の意味である

。

一方、「置換基を有する」の用語は、母核となる基のいずれかの水素原子が、母核と同一または異なる構造の基で置換されていることを意味する。従って、「置換基」は、母核となる基に結合した他の基である。置換基は1つであってもよいし、2つ以上であってもよい。2つ以上の置換基は同一であってもよいし、異なるものであってもよい。

「C 1～6」などの用語は、母核となる基の炭素原子数が1～6個などであることを表している。この炭素原子数には、置換基の中にある炭素原子の数を含まない。例えば、置換基としてエトキシ基を有するブチル基は、C 2 アルコキシC 4 アルキル基に分類する。

[0024] 「置換基」は化学的に許容され、本発明の効果を有する限りにおいて特に制限されない。以下に「置換基」となり得る基を例示する。

メチル基、エチル基、n-プロピル基、i-プロピル基、n-ブチル基、s-ブチル基、i-ブチル基、t-ブチル基、n-ペンチル基、n-ヘキシル基などのC 1～6 アルキル基；

ビニル基、1-プロペニル基、2-プロペニル基（アリル基）、1-ブテニル基、2-ブテニル基、3-ブテニル基、1-メチルー2-プロペニル基、2-メチルー2-プロペニル基などのC 2～6 アルケニル基；

エチニル基、1-プロピニル基、2-プロピニル基、1-ブチニル基、2-ブチニル基、3-ブチニル基、1-メチルー2-プロピニル基などのC 2～6 アルキニル基；

シクロプロピル基、シクロブチル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基などのC 3～8 シクロアルキル基；

2-シクロペンテニル基、3-シクロヘキセニル基、4-シクロオクテニル基などのC 4～8 シクロアルケニル基；

[0025] フェニル基、ナフチル基などのC 6～10 アリール基；

ベンジル基、フェネチル基などのC 7～11 アラルキル基；

3～6 員ヘテロシクリル基；

ホルミル基、アセチル基、プロピオニル基、ベンゾイル基、シクロヘキシルカルボニル基などのC 1～7 アシル基；

[0026] ヒドロキシル基；

メトキシ基、エトキシ基、n-プロポキシ基、i-プロポキシ基、n-ブトキシ基、s-ブトキシ基、i-ブトキシ基、t-ブトキシ基などのC 1～6 アルコキシ基；

ビニルオキシ基、アリルオキシ基、プロペニルオキシ基、ブテニルオキシ基などのC 2～6 アルケニルオキシ基；

エチニルオキシ基、プロパルギルオキシ基などのC 2～6 アルキニルオキシ基；

フェノキシ基、ナフトキシ基などのC 6～10 アリールオキシ基；

ベンジルオキシ基、フェネチルオキシ基などのC 7～11 アラルキルオキシ基；

[0027] ホルミルオキシ基、アセチルオキシ基、プロピオニルオキシ基、ベンゾイルオキシ基、シクロヘキシルカルボニルオキシ基などのC 1～7 アシルオキシ基；

メトキシカルボニル基、エトキシカルボニル基、n-プロポキシカルボニル基、i-プロポキシカルボニル基、n-ブトキシカルボニル基、t-ブトキシカルボニル基などのC 1～6 アルコキシカルボニル基；

メトキシカルボニルオキシ基、エトキシカルボニルオキシ基、n-プロポキシカルボニルオキシ基、i-プロポキシカルボニルオキシ基、n-ブトキシカルボニルオキシ基、t-ブトキシカルボニルオキシ基などのC 1～6 アルコキシカルボニルオキシ基；

カルボキシル基；

[0028] フルオロ基、クロロ基、ブロモ基、イオド基などのハロゲノ基；

クロロメチル基、クロロエチル基、トリフルオロメチル基、1, 2-ジクロロ-n-プロピル基、1-フルオロ-n-ブチル基、パーフルオロ-n-ペンチル基などのC 1～6 ハロアルキル基；

2-クロロ-1-プロペニル基、2-フルオロ-1-ブテニル基などのC 2～6ハロアルケニル基；

4, 4-ジクロロ-1-ブチニル基、4-フルオロ-1-ペンチニル基、5-ブロモ-2-ペンチニル基などのC 2～6ハロアルキニル基；

4-クロロフェニル基、4-フルオロフェニル基、2, 4-ジクロロフェニル基などのC 6～10ハロアリール基；

トリフルオロメトキシ基、2-クロロ-n-プロポキシ基、2, 3-ジクロロブトキシ基などのC 1～6ハロアルコキシ基；

2-クロロプロペニルオキシ基、3-ブロモブテニルオキシ基などのC 2～6ハロアルケニルオキシ基；

4-フルオロフェニルオキシ基、4-クロロ-1-ナフトキシ基などのC 6～10ハロアリールオキシ基；

クロロアセチル基、トリフルオロアセチル基、トリクロロアセチル基、4-クロロベンゾイル基などのC 1～7ハロアシル基；

[0029] アミノ基（NH₂で表される基）；

メチルアミノ基、ジメチルアミノ基、ジエチルアミノ基などのC 1～6アルキル置換アミノ基；

アニリノ基、ナフチルアミノ基などのC 6～10アリールアミノ基；

ベンジルアミノ基、フェネチルアミノ基などのC 7～11アラルキルアミノ基；

ホルミルアミノ基、アセチルアミノ基、プロパノイルアミノ基、ブチリルアミノ基、i-プロピルカルボニルアミノ基、ベンゾイルアミノ基などのC 1～7アシルアミノ基；

メトキシカルボニルアミノ基、エトキシカルボニルアミノ基、n-プロポキシカルボニルアミノ基、i-プロポキシカルボニルアミノ基などのC 1～6アルコキシカルボニルアミノ基；

アミノカルボニル基、ジメチルアミノカルボニル基、フェニルアミノカルボニル基、N-フェニル-N-メチルアミノカルボニル基などの無置換若し

くは置換基を有するアミノカルボニル基；

イミノメチル基、（１－イミノ）エチル基、（１－イミノ）－*n*－プロピル基などのイミノＣ１～６アルキル基；

N－ヒドロキシーイミノメチル基、（１－（N－ヒドロキシ）－イミノ）エチル基、（１－（N－ヒドロキシ）－イミノ）プロピル基、N－メトキシーイミノメチル基、（１－（N－メトキシ）－イミノ）エチル基などの無置換の若しくは置換基を有するN－ヒドロキシイミノＣ１～６アルキル基；

[0030] メルカプト基；

メチルチオ基、エチルチオ基、*n*－プロピルチオ基、*i*－プロピルチオ基、*n*－ブチルチオ基、*i*－ブチルチオ基、*s*－ブチルチオ基、*t*－ブチルチオ基などのＣ１～６アルキルチオ基；

フェニルチオ基、ナフチルチオ基などのＣ６～１０アリールチオ基；

チアゾリルチオ基、ピリジルチオ基などのヘテロアリールチオ基；

ベンジルチオ基、フェネチルチオ基などのＣ７～１１アラルキルチオ基；

メチルスルフィニル基、エチルスルフィニル基、*t*－ブチルスルフィニル基などのＣ１～６アルキルスルフィニル基；

フェニルスルフィニル基などのＣ６～１０アリールスルフィニル基；

チアゾリルスルフィニル基、ピリジルスルフィニル基などのヘテロアリールスルフィニル基；

ベンジルスルフィニル基、フェネチルスルフィニル基などのＣ７～１１アラルキルスルフィニル基；

メチルスルホニル基、エチルスルホニル基、*t*－ブチルスルホニル基などのＣ１～６アルキルスルホニル基；

フェニルスルホニル基などのＣ６～１０アリールスルホニル基；

チアゾリルスルホニル基、ピリジルスルホニル基などのヘテロアリールスルホニル基；

ベンジルスルホニル基、フェネチルスルホニル基などのＣ７～１１アラルキルスルホニル基；

アミノカルボニルオキシ基；

エチルアミノカルボニルオキシ基、ジメチルアミノカルボニルオキシ基などのC 1～6 アルキル置換アミノカルボニルオキシ基；

[0031] トリメチルシリル基、トリエチルシリル基、t-ブチルジメチルシリル基などのトリC 1～6 アルキル置換シリル基；

トリフェニルシリル基などのトリアリール置換シリル基；

シアノ基；ニトロ基；オキソ基

また、これらの「置換基」は、当該置換基中のいずれかの水素原子が、異なる構造の基で置換されていてもよい。

[0032] また、上記の「3～6員ヘテロシクリル基」とは、窒素原子、酸素原子および硫黄原子からなる群から選ばれる1～4個のヘテロ原子を環の構成原子として含むものである。ヘテロシクリル基は、単環および多環のいずれであってもよい。多環ヘテロシクリル基は、少なくとも一つの環がヘテロ環であれば、残りの環が飽和脂環、不飽和脂環または芳香環のいずれであってもよい。「3～6員ヘテロシクリル基」としては、3～6員飽和ヘテロシクリル基、5～6員ヘテロアリール基、5～6員部分不飽和ヘテロシクリル基などを挙げることができる。

[0033] 3～6員飽和ヘテロシクリル基としては、アジリジニル基、エポキシ基、ピロリジニル基、テトラヒドロフラニル基、チアゾリジニル基、ピペリジニル基、ピペラジニル基、モルホリニル基、ジオキサラニル基、ジオキサニル基などを挙げることができる。

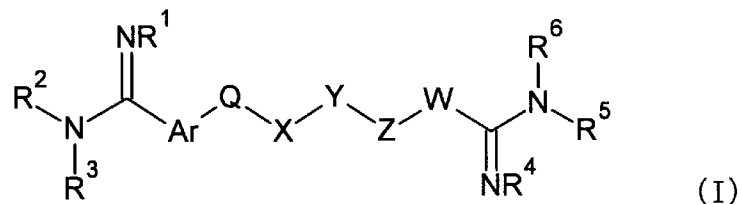
[0034] 5員ヘテロアリール基としては、ピロリル基、フリル基、チエニル基、イミダゾリル基、ピラゾリル基、オキサゾリル基、イソオキサゾリル基、チアゾリル基、イソチアゾリル基、トリアゾリル基、オキサジアゾリル基、チアジアゾリル基、テトラゾリル基などを挙げることができる。

6員ヘテロアリール基としては、ピリジニル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、ピリダニジニル基、トリアジニル基などを挙げることができる。

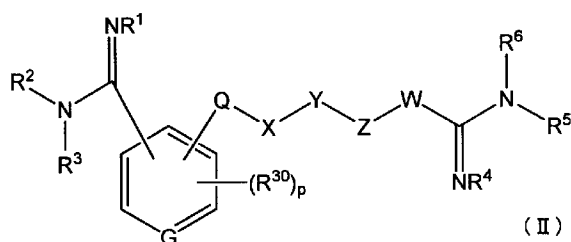
[0035] 実施形態1 《殺菌剤などの有効成分となり得るアリールアミジン化合物》

本発明の実施形態 1 に係るアリールアミジン化合物は、式 (I) で表される化合物（以下、化合物 (I) と表記することがある。）またはその塩、好ましくは式 (II) で表わされる化合物（以下、化合物 (II) と表記することがある。）またはその塩である。

[0036] [化9]



[0037] [化10]



[0038] 式 (I) 中の A r は、無置換の若しくは置換基を有する二価の芳香族炭化水素残基、または無置換の若しくは置換基を有する二価の複素環式化合物残基を示す。

「二価の芳香族炭化水素残基」は、芳香族炭化水素中の水素原子 2 個が抜けて形成される基である。芳香族炭化水素は単環および多環のいずれであってもよい。多環の芳香族炭化水素は、少なくとも一つの環が芳香環であれば、残りの環が飽和脂環、不飽和脂環または芳香環のいずれであってもよい。

「芳香族炭化水素」としては、ベンゼン、ナフタレン、アズレン、インデン、インダン、テトラリンなどを挙げることができる。これらのうち、ベンゼン又はナフタレンが好ましく、ベンゼンがより好ましい。

[0039] 「二価の複素環式化合物残基」は複素環式化合物中の水素原子 2 個が抜けて形成される基である。複素環式化合物は単環の複素環式化合物および多環の複素環式化合物のいずれであってもよい。単環の複素環式化合物としては

、五員環の複素環式化合物、六員環の複素環式化合物などを挙げることができる。多環の複素環式化合物は、少なくとも一つの環が複素環であれば、残りの環が飽和脂環、不飽和脂環または芳香環のいずれであってもよい。

「複素環式化合物」は、窒素原子、酸素原子および硫黄原子からなる群から選ばれる1～4個のヘテロ原子を環の構成原子として含む環状化合物である。

「単環の複素環式化合物」としては、イミダゾール、ピラゾール、オキサゾール、チアゾール、トリアゾール、テトラゾール、ピロール、フラン、チオフェンなどの五員芳香族複素環式化合物や、ピリジン、ピラジン、ピリミジン、ピリダジン、トリアジンなどの六員芳香族複素環式化合物や、ピロリジン、テトラヒドロフラン、テトラヒドロチオフェン、チアゾリンなどの五員飽和複素環式化合物や、ピペリジン、テトラヒドロピラン、テトラヒドロチオピランなどの六員飽和複素環式化合物や、ピロリン、イミダゾリン、ピラゾリン、オキサゾリン、イソオキサゾリンなどの五員部分不飽和複素環式化合物などを挙げることができる。

「多環の複素環式化合物」としては、ベンゾフラン、ベンゾチオフェン、インドール、イソインドール、ベンズイミダゾール、プリン、キノリン、イソキノリン、キノキサリン、シンノリン、プテリジン、クロメン、イソクロメンなどを挙げることができる。

これらの中でも、六員芳香族複素環式化合物又は多環の複素環式化合物が好ましく、ピリジンまたはベンゾフランがより好ましい。

[0040] 「二価の芳香族炭化水素残基」および「二価の複素環式化合物残基」上の置換基としては、C1～6アルキル基、C3～8シクロアルキル基、C6～10アリール基、3～6員ヘテロシクリル基、ヒドロキシル基、C1～6アルコキシ基、C6～10アリールオキシ基、カルボキシル基、ハロゲノ基、C1～6ハロアルキル基、C6～10ハロアリール基、C1～6ハロアルコキシ基、アミノ基（NH₂で表される基）、C1～6アルキル置換アミノ基、C6～10アリールアミノ基、C1～7アシルアミノ基、C1～6アルコキ

シカルボニルアミノ基、C 1～6 アルキルチオ基、C 6～10 アリールチオ基、ヘテロアリールチオ基、C 7～11 アラルキルチオ基、C 1～6 アルキルスルフィニル基、C 6～10 アリールスルフィニル基、ヘテロアリールスルフィニル基、C 7～11 アラルキルスルフィニル基、C 1～6 アルキルスルホニル基、C 6～10 アリールスルホニル基、ヘテロアリールスルホニル基、シアノ基、ニトロ基などが好ましい。これらの中でも、C 1～6 アルキル基、C 1～6 アルコキシ基、ハロゲノ基、又は、シアノ基がより好ましい。

[0041] 式 (I) または式 (II) 中の Q は、単結合、無置換の若しくは置換基を有するフェニレン、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 、 $-\text{O}-$ 、 $-\text{S}-$ 、 $-\text{SO}-$ 、 $-\text{SO}_2-$ 、または $-\text{N}(\text{R}^9)-$ を示す。これらの中でも、Q は、単結合、無置換の若しくは置換基を有するフェニレン、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 、 $-\text{O}-$ 、または $-\text{S}-$ であることが好ましい。

[0042] 「置換基を有するフェニレン」の置換基としては、C 1～6 アルキル基、C 3～8 シクロアルキル基、C 6～10 アリール基、3～6 員ヘテロシクリル基、ヒドロキシル基、C 1～6 アルコキシ基、C 6～10 アリールオキシ基、カルボキシル基、ハロゲノ基、C 1～6 ハロアルキル基、C 6～10 ハロアリール基、C 1～6 ハロアルコキシ基、アミノ基 (NH_2 で表される基)、C 1～6 アルキル置換アミノ基、C 6～10 アリールアミノ基、C 1～7 アシルアミノ基、C 1～6 アルコキシカルボニルアミノ基、C 1～6 アルキルチオ基、C 6～10 アリールチオ基、ヘテロアリールチオ基、C 7～11 アラルキルチオ基、C 1～6 アルキルスルフィニル基、C 6～10 アリールスルフィニル基、ヘテロアリールスルフィニル基、C 7～11 アラルキルスルフィニル基、C 1～6 アルキルスルホニル基、C 6～10 アリールスルホニル基、ヘテロアリールスルホニル基、シアノ基、ニトロ基などが好ましい。

[0043] R^9 は、水素原子、無置換の若しくは置換基を有する炭化水素基、無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリル基、ヒドロキシル基、無置換の若し

くは置換基を有するアルコキシ基、無置換の若しくは置換基を有するアルコキシカルボニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールオキシ基、無置換の若しくは置換基を有するアミノ基、無置換の若しくは置換基を有するアルキルスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリルスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するアルキルカルボニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールカルボニル基、または無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリルカルボニル基を示す。

[0044] 無置換の若しくは置換基を有する炭化水素基は、炭化水素化合物中の水素原子1個が抜けて形成される基である。炭化水素化合物としては、メタン、エタン、プロパン、ブタン、ペンタン、ヘキサン、ヘプタンなどの飽和炭化水素化合物、エチレン、アセチレン、プロピレンなどの不飽和炭化水素化合物、シクロペンタン、シクロヘキサン、シクロヘキセンなどの脂環式炭化水素化合物、ベンゼン、ナフタレンなどの芳香族炭化水素化合物などを挙げることができる。

[0045] 無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリル基は、複素環式化合物中の水素原子1個が抜けて形成される基である。ヘテロシクリル基としては、アジリジニル基、エポキシ基、ピロリジニル基、テトラヒドロフラン基、チアゾリジニル基、ピペリジル基、ピペラジニル基、モルホリニル基、ジオキサニル基、ジオキサニル基；ピロリル基、フリル基、チエニル基、イミダゾリル基、ピラゾリル基、オキサゾリル基、イソオキサゾリル基、チアゾリル基、イソチアゾリル基、トリアゾリル基、オキサジアゾリル基、チアジアゾリル基、テトラゾリル基、ピリジル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、ピリダニル基、トリアジニル基などを挙げることができる。

[0046] 無置換の若しくは置換基を有するアルコキシ基としては、メトキシ基、エトキシ基、*n*-プロポキシ基、*i*-プロポキシ基、*n*-ブトキシ基、*s*-ブトキシ基、*i*-ブトキシ基、*t*-ブトキシ基などを挙げることができる。

無置換の若しくは置換基を有するアルコキシカルボニル基としては、メト

キシカルボニル基、エトキシカルボニル基、*n*-プロポキシカルボニル基、*i*-プロポキシカルボニル基、*n*-ブトキシカルボニル基、*s*-ブトキシカルボニル基、*i*-ブトキシカルボニル基、*t*-ブトキシカルボニル基などを挙げることができる。

[0047] 無置換の若しくは置換基を有するアリールオキシ基としては、フェノキシ基、ナフトキシ基などを挙げることができる。

[0048] 無置換の若しくは置換基を有するアミノ基としては、アミノ基（NH₂で表される基）、メチルアミノ基、ジメチルアミノ基、ジエチルアミノ基などのC 1～6アルキル置換アミノ基；アニリノ基、ナフチルアミノ基などのC 6～10アリールアミノ基；ベンジルアミノ基、フェネチルアミノ基などのC 7～11アラルキルアミノ基；ホルミルアミノ基、アセチルアミノ基、プロパノイルアミノ基、ブチリルアミノ基、*i*-プロピルカルボニルアミノ基、ベンゾイルアミノ基などのC 1～7アシルアミノ基；メトキシカルボニルアミノ基、エトキシカルボニルアミノ基、*n*-プロポキシカルボニルアミノ基、*i*-プロポキシカルボニルアミノ基などのC 1～6アルコキシカルボニルアミノ基などを挙げることができる。

[0049] 無置換の若しくは置換基を有するアルキルスルホニル基としては、メチルスルホニル基、エチルスルホニル基、*n*-プロピルスルホニル基、*i*-プロピルスルホニル基、*n*-ブチルスルホニル基、*s*-ブチルスルホニル基、*i*-ブチルスルホニル基、*t*-ブチルスルホニル基などを挙げることができる。

[0050] 無置換の若しくは置換基を有するアリールスルホニル基としては、フェニルスルホニル基、ナフチルスルホニル基などを挙げることができる。

[0051] 無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリルスルホニル基としては、アジリジニルスルホニル基、エポキシスルホニル基、ピロリジニルスルホニル基、テトラヒドロフランスルホニル基、チアゾリジニルスルホニル基、ピペリジニルスルホニル基、ピペラジニルスルホニル基、モルホリニルスルホニル基、ジオキサニルスルホニル基、ジオキサニルスルホニル基；ピロリ

ルスルホニル基、フリルスルホニル基、チエニルスルホニル基、イミダゾリルスルホニル基、ピラゾリルスルホニル基、オキサゾリルスルホニル基、イソオキサゾリルスルホニル基、チアゾリルスルホニル基、イソチアゾリルスルホニル基、トリアゾリルスルホニル基、オキサジアゾリルスルホニル基、チアジアゾリルスルホニル基、テトラゾリルスルホニル基、ピリジルスルホニル基、ピラジニルスルホニル基、ピリミジニルスルホニル基、ピリダニジルスルホニル基、トリアジニルスルホニル基などを挙げることができる。

[0052] 無置換の若しくは置換基を有するアルキルカルボニル基としては、メチルカルボニル基、エチルカルボニル基、*n*-プロピルカルボニル基、*i*-プロピルカルボニル基、*n*-ブチルカルボニル基、*s*-ブチルカルボニル基、*i*-ブチルカルボニル基、*t*-ブチルカルボニル基などを挙げることができる。

[0053] 無置換の若しくは置換基を有するアリールカルボニル基としては、フェニルカルボニル基、ナフチルカルボニル基などを挙げることができる。

[0054] 無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリルカルボニル基としては、アジリジニルカルボニル基、エポキシカルボニル基、ピロリジニルカルボニル基、テトラヒドロフラニルカルボニル基、チアゾリジニルカルボニル基、ピペリジニルカルボニル基、ピペラジニルカルボニル基、モルホリニルカルボニル基、ジオキサニルカルボニル基、ジオキサニルカルボニル基；ピロリルカルボニル基、フリルカルボニル基、チエニルカルボニル基、イミダゾリルカルボニル基、ピラゾリルカルボニル基、オキサゾリルカルボニル基、イソオキサゾリルカルボニル基、チアゾリルカルボニル基、イソチアゾリルカルボニル基、トリアゾリルカルボニル基、オキサジアゾリルカルボニル基、チアジアゾリルカルボニル基、テトラゾリルカルボニル基、ピリジニルカルボニル基、ピラジニルカルボニル基、ピリミジニルカルボニル基、ピリダニジニルカルボニル基、トリアジニルカルボニル基などを挙げることができる。

[0055] 式 (I) または式 (II) 中の X および Z は、それぞれ独立に、無置換の若しくは置換基を有するアルキレン基、無置換の若しくは置換基を有するアルケ

ニレン基、無置換の若しくは置換基を有するアルキニレン基、 $-T^a-O-T^b-$ 、または $-T^a-N(R^{20})-T^b-$ を示す。 T^a および T^b は、それぞれ独立に、無置換の若しくは置換基を有するアルキレン基を示す。 R^{20} は、水素原子、無置換の若しくは置換基を有する炭化水素基、無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリル基、ヒドロキシル基、無置換の若しくは置換基を有するアルコキシ基、無置換の若しくは置換基を有するアルコキシカルボニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールオキシ基、無置換の若しくは置換基を有するアミノ基、無置換の若しくは置換基を有するアルキルスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリルスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するアルキルカルボニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールカルボニル基、または無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリルカルボニル基を示し、より好ましくは水素原子を示す。

式 (I) または式 (II) 中の X は、C₂～C₁₀アルキレン基であるのが好ましく、C₂～C₆アルキレン基であるのがより好ましい。式 (I) または式 (II) 中の Z は、C₂～C₁₂アルキレン基であるのが好ましく、C₄～C₁₀アルキレン基であるのがより好ましい。

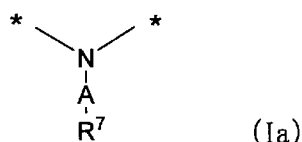
「アルキレン基」としては、メチレン基、エチレン基、プロパン-1, 3-ジイル基（別名：トリメチレン基）、プロパン-1, 2-ジイル基（別名：プロピレン基）、ブタン-1, 4-ジイル基、ブタン-1, 3-ジイル基、ブタン-1, 2-ジイル基、ペンタン-1, 5-ジイル基、ヘキサン-1, 6-ジイル基、ヘプタン-1, 7-ジイル基、オクタン-1, 8-ジイル基などを挙げることができる。

[0056] 「アルキレン基」上の置換基としては、C₁～C₆アルキル基、C₆～C₁₀アリール基、ヒドロキシル基、C₁～C₆アルコキシ基、C₆～C₁₀アリールオキシ基、カルボキシル基、ハロゲノ基、C₁～C₆ハロアルキル基、C₆～C₁₀ハロアリール基、C₁～C₆ハロアルコキシ基、アミノ基（NH₂で表される基）、C₁～C₆アルキル置換アミノ基、C₆～C₁₀アリールアミノ基、C

1～7 アシルアミノ基、C 1～6 アルキルチオ基、C 6～10 アリールチオ基、ヘテロアリールチオ基、C 1～6 アルキルスルフィニル基、C 1～6 アルキルスルホニル基、C 6～10 アリールスルホニル基、ヘテロアリールスルホニル基、シアノ基、オキソ基などが好ましい。

[0057] 式 (I) または式 (II) 中の Y は、 $-C(=O)-NH-$ 、 $-NH-C(=O)-$ 、または式 (Ia) :

[0058] [化11]



[0059] (式 (Ia) 中、A は、単結合、 $-C(=O)-$ 、または $-SO_2-$ を示し、 R^7 は、水素原子、無置換の若しくは置換基を有する炭化水素基、無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリル基、ヒドロキシ基、無置換の若しくは置換基を有するアルコキシ基、無置換の若しくは置換基を有するアリールオキシ基、または無置換の若しくは置換基を有するアミノ基を示す。) で示される基を示す。これらの中でも、Y は、 $-C(=O)-NH-$ 、または式 (Ia) で示される基であることが好ましい。式 (Ia) における A は、単結合又は $-C(=O)-$ であることが好ましく、 R^7 は、水素原子、又は、無置換の若しくは置換基を有する炭化水素基（より好ましくは、C 1～6 アルキル置換アミノ基で置換されていてもよい C 1～6 アルキル基、又はフェニル基を示す）であることがより好ましい。

[0060] 式 (I) または式 (II) 中の W は、単結合、または $-N(R^8)-$ を示し、より好ましくは、 $-N(R^8)-$ を示す。 R^8 は、水素原子、無置換の若しくは置換基を有する炭化水素基、無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリル基、ヒドロキシ基、無置換の若しくは置換基を有するアルコキシ基、無置換の若しくは置換基を有するアルコキシカルボニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールオキシ基、無置換の若しくは置換基を有するアミノ基、無置換の若しくは置換基を有するアルキルスルホニル基、無置換の若しくは

は置換基を有するアリールスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリルスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するアルキルカルボニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールカルボニル基、または無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリルカルボニル基を示し、より好ましくは、水素原子を示す。

[0061] 式 (I) または式 (II) 中の $R^1 \sim R^6$ は、それぞれ独立に、水素原子、無置換の若しくは置換基を有する炭化水素基、無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリル基、ヒドロキシル基、無置換の若しくは置換基を有するアルコキシ基、無置換の若しくは置換基を有するアルコキシカルボニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールオキシ基、または無置換の若しくは置換基を有するアミノ基、無置換の若しくは置換基を有するアルキルスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリルスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するアルキルカルボニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールカルボニル基、または無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリルカルボニル基を示す。これらの中でも、 $R^1 \sim R^6$ は、それぞれ独立に、水素原子、C 1～6 アルキル置換アミノ基で置換されていてもよい C 1～6 アルキル基、C 2～6 アルケニル基、無置換の若しくは置換基を有する C 1～6 アルキルスルホニル基であることがより好ましい。

R^1 と R^2 、 R^2 と R^3 、 R^4 と R^5 、または R^5 と R^6 とが一緒になって結合して、4～8 員環を形成していてもよい。これらの中でも、 R^1 と R^2 とが一緒になって 1, 4, 5, 6-テトラヒドロピリミジン、4, 5-ジヒドロ-1H-イミダゾール、または、イミダゾールを形成しているのが好ましい。

[0062] 式 (II) 中の G は、炭素原子または窒素原子を示す。

[0063] 式 (II) 中の R^{30} は、C 1～6 アルキル基、C 3～8 シクロアルキル基、C 6～10 アリール基、3～6 員ヘテロシクリル基、ヒドロキシル基、C 1～6 アルコキシ基、C 6～10 アリールオキシ基、カルボキシル基、ハロゲン基、C 1～6 ハロアルキル基、C 6～10 ハロアリール基、C 1～6 ハロ

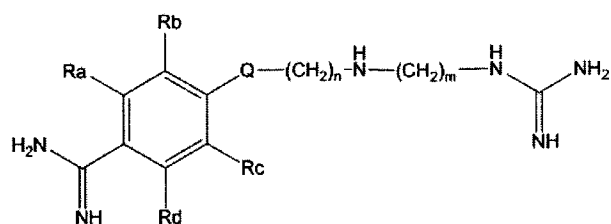
アルコキシ基、アミノ基（ NH_2 で表される基）、 $\text{C}1\sim6$ アルキル置換アミノ基、 $\text{C}6\sim10$ アリールアミノ基、 $\text{C}1\sim7$ アシルアミノ基、 $\text{C}1\sim6$ アルコキシカルボニルアミノ基、 $\text{C}1\sim6$ アルキルチオ基、 $\text{C}6\sim10$ アリールチオ基、ヘテロアリールチオ基、 $\text{C}7\sim11$ アラルキルチオ基、 $\text{C}1\sim6$ アルキルスルフィニル基、 $\text{C}6\sim10$ アリールスルフィニル基、ヘテロアリールスルフィニル基、 $\text{C}7\sim11$ アラルキルスルフィニル基、 $\text{C}1\sim6$ アルキルスルホニル基、 $\text{C}6\sim10$ アリールスルホニル基、ヘテロシクリルスルホニル基、シアノ基、ニトロ基を示す。これらの中でも、 R^{30} は、好ましくは、 $\text{C}1\sim6$ アルキル基、 $\text{C}1\sim6$ アルコキシ基、ハロゲノ基、又は、シアノ基を示す。

式（II）中の $\text{R}^1\sim\text{R}^3$ いずれかひとつと R^{30} が一緒になって結合して、 $4\sim8$ 員環を形成していてもよい。

式（II）中の p は、 R^{30} の個数を示し、 $0\sim4$ のいずれかの整数であり、好ましくは 0 又は 1 であり、より好ましくは 0 である。

[0064] 式（I）または式（II）で表される化合物として具体的に、以下で示す化合物を挙げることができる。

[0065] [化12]



[0066]

[表1]

化合物番号	Ra	Rb	Rc	Rd	Q	n	m
A-1	H	H	H	H	-O-	3	6
A-2	H	H	H	H	-O-	3	7
A-3	H	H	H	H	-O-	3	8
A-4	H	H	H	H	-O-	3	9
A-5	H	H	H	H	-O-	4	7
A-6	H	H	H	H	-O-	4	8
A-7	H	H	H	H	-O-	5	7
A-8	H	H	H	H	-O-	8	3
A-9	H	H	H	H	-S-	3	6
A-10	H	H	H	H	-S-	3	7
A-11	H	H	H	H	-S-	3	8
A-12	H	H	H	H	-S-	3	9
A-13	H	H	H	H	-S-	4	7
A-14	H	H	H	H	-S-	4	8
A-15	H	H	H	H	-S-	5	7
A-16	H	H	H	H	-S-	8	3
A-17	H	H	H	H	単結合	3	6
A-18	H	H	H	H	単結合	3	7
A-19	H	H	H	H	単結合	3	8
A-20	H	H	H	H	単結合	3	9
A-21	H	H	H	H	単結合	4	7
A-22	H	H	H	H	単結合	4	8
A-23	H	H	H	H	単結合	5	7
A-24	H	H	H	H	単結合	8	3
A-25	H	H	H	H	-C=C-	3	6
A-26	H	H	H	H	-C=C-	3	7
A-27	H	H	H	H	-C=C-	3	8
A-28	H	H	H	H	-C=C-	3	9
A-29	H	H	H	H	-C=C-	4	7
A-30	H	H	H	H	-C=C-	4	8
A-31	H	H	H	H	-C=C-	5	7
A-32	H	H	H	H	-C=C-	8	3
A-33	H	H	H	H	-C≡C-	3	6
A-34	H	H	H	H	-C≡C-	3	7
A-35	H	H	H	H	-C≡C-	3	8
A-36	H	H	H	H	-C≡C-	3	9
A-37	H	H	H	H	-C≡C-	4	7
A-38	H	H	H	H	-C≡C-	4	8
A-39	H	H	H	H	-C≡C-	5	7
A-40	H	H	H	H	-C≡C-	8	3
A-41	F	H	H	H	-O-	3	6
A-42	F	H	H	H	-O-	3	7
A-43	F	H	H	H	-O-	3	8
A-44	F	H	H	H	-O-	3	9
A-45	F	H	H	H	-O-	4	7
A-46	F	H	H	H	-O-	4	8
A-47	F	H	H	H	-O-	5	7
A-48	F	H	H	H	-O-	8	3
A-49	F	H	H	H	-S-	3	6
A-50	F	H	H	H	-S-	3	7
A-51	F	H	H	H	-S-	3	8
A-52	F	H	H	H	-S-	3	9
A-53	F	H	H	H	-S-	4	7
A-54	F	H	H	H	-S-	4	8
A-55	F	H	H	H	-S-	5	7
A-56	F	H	H	H	-S-	8	3
A-57	F	H	H	H	単結合	3	6
A-58	F	H	H	H	単結合	3	7
A-59	F	H	H	H	単結合	3	8
A-60	F	H	H	H	単結合	3	9
A-61	F	H	H	H	単結合	4	7
A-62	F	H	H	H	単結合	4	8
A-63	F	H	H	H	単結合	5	7
A-64	F	H	H	H	単結合	8	3
A-65	F	H	H	H	-C=C-	3	6
A-66	F	H	H	H	-C=C-	3	7
A-67	F	H	H	H	-C=C-	3	8
A-68	F	H	H	H	-C=C-	3	9
A-69	F	H	H	H	-C=C-	4	7
A-70	F	H	H	H	-C=C-	4	8
A-71	F	H	H	H	-C=C-	5	7
A-72	F	H	H	H	-C=C-	8	3
A-73	F	H	H	H	-C≡C-	3	6
A-74	F	H	H	H	-C≡C-	3	7
A-75	F	H	H	H	-C≡C-	3	8
A-76	F	H	H	H	-C≡C-	3	9
A-77	F	H	H	H	-C≡C-	4	7
A-78	F	H	H	H	-C≡C-	4	8
A-79	F	H	H	H	-C≡C-	5	7
A-80	F	H	H	H	-C≡C-	8	3
A-81	H	F	H	H	-O-	3	6
A-82	H	F	H	H	-O-	3	7
A-83	H	F	H	H	-O-	3	8
A-84	H	F	H	H	-O-	3	9
A-85	H	F	H	H	-O-	4	7
A-86	H	F	H	H	-O-	4	8
A-87	H	F	H	H	-O-	5	7
A-88	H	F	H	H	-O-	8	3
A-89	H	F	H	H	-S-	3	6
A-90	H	F	H	H	-S-	3	7
A-91	H	F	H	H	-S-	3	8
A-92	H	F	H	H	-S-	3	9
A-93	H	F	H	H	-S-	4	7
A-94	H	F	H	H	-S-	4	8
A-95	H	F	H	H	-S-	5	7
A-96	H	F	H	H	-S-	8	3
A-97	H	F	H	H	単結合	3	6
A-98	H	F	H	H	単結合	3	7
A-99	H	F	H	H	単結合	3	8
A-100	H	F	H	H	単結合	3	9

[0067]

[表2]

化合物番号	Ra	Rb	Rc	Rd	Q	n	m
A-101	H	F	H	H	単結合	4	7
A-102	H	F	H	H	単結合	4	8
A-103	H	F	H	H	単結合	5	7
A-104	H	F	H	H	単結合	8	3
A-105	H	F	H	H	-C=C-	3	6
A-106	H	F	H	H	-C=C-	3	7
A-107	H	F	H	H	-C=C-	3	8
A-108	H	F	H	H	-C=C-	3	9
A-109	H	F	H	H	-C=C-	4	7
A-110	H	F	H	H	-C=C-	4	8
A-111	H	F	H	H	-C=C-	5	7
A-112	H	F	H	H	-C=C-	8	3
A-113	H	F	H	H	-C≡C-	3	6
A-114	H	F	H	H	-C≡C-	3	7
A-115	H	F	H	H	-C≡C-	3	8
A-116	H	F	H	H	-C≡C-	3	9
A-117	H	F	H	H	-C≡C-	4	7
A-118	H	F	H	H	-C≡C-	4	8
A-119	H	F	H	H	-C≡C-	5	7
A-120	H	F	H	H	-C≡C-	8	3
A-121	Cl	H	H	H	-O-	3	7
A-122	Cl	H	H	H	-O-	3	8
A-123	Cl	H	H	H	-O-	4	7
A-124	Cl	H	H	H	-O-	4	8
A-125	Cl	H	H	H	-S-	3	7
A-126	Cl	H	H	H	-S-	3	8
A-127	Cl	H	H	H	-S-	4	7
A-128	Cl	H	H	H	-S-	4	8
A-129	Cl	H	H	H	単結合	3	7
A-130	Cl	H	H	H	単結合	3	8
A-131	Cl	H	H	H	単結合	4	7
A-132	Cl	H	H	H	単結合	4	8
A-133	Cl	H	H	H	-C=C-	3	7
A-134	Cl	H	H	H	-C=C-	3	8
A-135	Cl	H	H	H	-C=C-	4	7
A-136	Cl	H	H	H	-C=C-	4	8
A-137	Cl	H	H	H	-C≡C-	3	7
A-138	Cl	H	H	H	-C≡C-	3	8
A-139	Cl	H	H	H	-C≡C-	4	7
A-140	Cl	H	H	H	-C≡C-	4	8
A-141	H	Cl	H	H	-O-	3	7
A-142	H	Cl	H	H	-O-	3	8
A-143	H	Cl	H	H	-O-	4	7
A-144	H	Cl	H	H	-O-	4	8
A-145	H	Cl	H	H	-S-	3	7
A-146	H	Cl	H	H	-S-	3	8
A-147	H	Cl	H	H	-S-	4	7
A-148	H	Cl	H	H	-S-	4	8
A-149	H	Cl	H	H	単結合	3	7
A-150	H	Cl	H	H	単結合	3	8
A-151	H	Cl	H	H	単結合	4	7
A-152	H	Cl	H	H	単結合	4	8
A-153	H	Cl	H	H	-C=C-	3	7
A-154	H	Cl	H	H	-C=C-	3	8
A-155	H	Cl	H	H	-C=C-	4	7
A-156	H	Cl	H	H	-C=C-	4	8
A-157	H	Cl	H	H	-C≡C-	3	7
A-158	H	Cl	H	H	-C≡C-	3	8
A-159	H	Cl	H	H	-C≡C-	4	7
A-160	H	Cl	H	H	-C≡C-	4	8
A-161	Br	H	H	H	-O-	3	7
A-162	Br	H	H	H	-O-	3	8
A-163	Br	H	H	H	-O-	4	7
A-164	Br	H	H	H	-O-	4	8
A-165	Br	H	H	H	-S-	3	7
A-166	Br	H	H	H	-S-	3	8
A-167	Br	H	H	H	-S-	4	7
A-168	Br	H	H	H	-S-	4	8
A-169	Br	H	H	H	単結合	3	7
A-170	Br	H	H	H	単結合	3	8
A-171	Br	H	H	H	単結合	4	7
A-172	Br	H	H	H	単結合	4	8
A-173	Br	H	H	H	-C=C-	3	7
A-174	Br	H	H	H	-C=C-	3	8
A-175	Br	H	H	H	-C=C-	4	7
A-176	Br	H	H	H	-C=C-	4	8
A-177	Br	H	H	H	-C≡C-	3	7
A-178	Br	H	H	H	-C≡C-	3	8
A-179	Br	H	H	H	-C≡C-	4	7
A-180	Br	H	H	H	-C≡C-	4	8
A-181	H	Br	H	H	-O-	3	7
A-182	H	Br	H	H	-O-	3	8
A-183	H	Br	H	H	-O-	4	7
A-184	H	Br	H	H	-O-	4	8
A-185	H	Br	H	H	-S-	3	7
A-186	H	Br	H	H	-S-	3	8
A-187	H	Br	H	H	-S-	4	7
A-188	H	Br	H	H	-S-	4	8
A-189	H	Br	H	H	単結合	3	7
A-190	H	Br	H	H	単結合	3	8
A-191	H	Br	H	H	単結合	4	7
A-192	H	Br	H	H	単結合	4	8
A-193	H	Br	H	H	-C=C-	3	7
A-194	H	Br	H	H	-C=C-	3	8
A-195	H	Br	H	H	-C=C-	4	7
A-196	H	Br	H	H	-C=C-	4	8
A-197	H	Br	H	H	-C≡C-	3	7
A-198	H	Br	H	H	-C≡C-	3	8
A-199	H	Br	H	H	-C≡C-	4	7
A-200	H	Br	H	H	-C≡C-	4	8

[0068]

[表3]

化合物番号	Ra	Rb	Rc	Rd	Q	n	m
A-201	Me	H	H	H	-O-	3	6
A-202	Me	H	H	H	-O-	3	7
A-203	Me	H	H	H	-O-	3	8
A-204	Me	H	H	H	-O-	3	9
A-205	Me	H	H	H	-O-	4	7
A-206	Me	H	H	H	-O-	4	8
A-207	Me	H	H	H	-O-	5	7
A-208	Me	H	H	H	-O-	8	3
A-209	Me	H	H	H	-S-	3	6
A-210	Me	H	H	H	-S-	3	7
A-211	Me	H	H	H	-S-	3	8
A-212	Me	H	H	H	-S-	3	9
A-213	Me	H	H	H	-S-	4	7
A-214	Me	H	H	H	-S-	4	8
A-215	Me	H	H	H	-S-	5	7
A-216	Me	H	H	H	-S-	8	3
A-217	Me	H	H	H	単結合	3	6
A-218	Me	H	H	H	単結合	3	7
A-219	Me	H	H	H	単結合	3	8
A-220	Me	H	H	H	単結合	3	9
A-221	Me	H	H	H	単結合	4	7
A-222	Me	H	H	H	単結合	4	8
A-223	Me	H	H	H	単結合	5	7
A-224	Me	H	H	H	単結合	8	3
A-225	Me	H	H	H	-C=C-	3	6
A-226	Me	H	H	H	-C=C-	3	7
A-227	Me	H	H	H	-C=C-	3	8
A-228	Me	H	H	H	-C=C-	3	9
A-229	Me	H	H	H	-C=C-	4	7
A-230	Me	H	H	H	-C=C-	4	8
A-231	Me	H	H	H	-C=C-	5	7
A-232	Me	H	H	H	-C=C-	8	3
A-233	Me	H	H	H	-C≡C-	3	6
A-234	Me	H	H	H	-C≡C-	3	7
A-235	Me	H	H	H	-C≡C-	3	8
A-236	Me	H	H	H	-C≡C-	3	9
A-237	Me	H	H	H	-C≡C-	4	7
A-238	Me	H	H	H	-C≡C-	4	8
A-239	Me	H	H	H	-C≡C-	5	7
A-240	Me	H	H	H	-C≡C-	8	3
A-241	H	Me	H	H	-O-	3	6
A-242	H	Me	H	H	-O-	3	7
A-243	H	Me	H	H	-O-	3	8
A-244	H	Me	H	H	-O-	3	9
A-245	H	Me	H	H	-O-	4	7
A-246	H	Me	H	H	-O-	4	8
A-247	H	Me	H	H	-O-	5	7
A-248	H	Me	H	H	-O-	8	3
A-249	H	Me	H	H	-S-	3	6
A-250	H	Me	H	H	-S-	3	7
A-251	H	Me	H	H	-S-	3	8
A-252	H	Me	H	H	-S-	3	9
A-253	H	Me	H	H	-S-	4	7
A-254	H	Me	H	H	-S-	4	8
A-255	H	Me	H	H	-S-	5	7
A-256	H	Me	H	H	-S-	8	3
A-257	H	Me	H	H	単結合	3	6
A-258	H	Me	H	H	単結合	3	7
A-259	H	Me	H	H	単結合	3	8
A-260	H	Me	H	H	単結合	3	9
A-261	H	Me	H	H	単結合	4	7
A-262	H	Me	H	H	単結合	4	8
A-263	H	Me	H	H	単結合	5	7
A-264	H	Me	H	H	単結合	8	3
A-265	H	Me	H	H	-C=C-	3	6
A-266	H	Me	H	H	-C=C-	3	7
A-267	H	Me	H	H	-C=C-	3	8
A-268	H	Me	H	H	-C=C-	3	9
A-269	H	Me	H	H	-C=C-	4	7
A-270	H	Me	H	H	-C=C-	4	8
A-271	H	Me	H	H	-C=C-	5	7
A-272	H	Me	H	H	-C=C-	8	3
A-273	H	Me	H	H	-C≡C-	3	6
A-274	H	Me	H	H	-C≡C-	3	7
A-275	H	Me	H	H	-C≡C-	3	8
A-276	H	Me	H	H	-C≡C-	3	9
A-277	H	Me	H	H	-C≡C-	4	7
A-278	H	Me	H	H	-C≡C-	4	8
A-279	H	Me	H	H	-C≡C-	5	7
A-280	H	Me	H	H	-C≡C-	8	3
A-281	MeO	H	H	H	-O-	3	7
A-282	MeO	H	H	H	-O-	3	8
A-283	MeO	H	H	H	-O-	4	7
A-284	MeO	H	H	H	-O-	4	8
A-285	MeO	H	H	H	-S-	3	7
A-286	MeO	H	H	H	-S-	3	8
A-287	MeO	H	H	H	-S-	4	7
A-288	MeO	H	H	H	-S-	4	8
A-289	MeO	H	H	H	単結合	3	7
A-290	MeO	H	H	H	単結合	3	8
A-291	MeO	H	H	H	単結合	4	7
A-292	MeO	H	H	H	単結合	4	8
A-293	MeO	H	H	H	-C=C-	3	7
A-294	MeO	H	H	H	-C=C-	3	8
A-295	MeO	H	H	H	-C=C-	4	7
A-296	MeO	H	H	H	-C=C-	4	8
A-297	MeO	H	H	H	-C≡C-	3	7
A-298	MeO	H	H	H	-C≡C-	3	8
A-299	MeO	H	H	H	-C≡C-	4	7
A-300	MeO	H	H	H	-C≡C-	4	8

[表4]

化合物番号	Ra	Rb	Rc	Rd	Q	n	m
A-301	H	MeO	H	H	-O-	3	7
A-302	H	MeO	H	H	-O-	3	8
A-303	H	MeO	H	H	-O-	4	7
A-304	H	MeO	H	H	-O-	4	8
A-305	H	MeO	H	H	-S-	3	7
A-306	H	MeO	H	H	-S-	3	8
A-307	H	MeO	H	H	-S-	4	7
A-308	H	MeO	H	H	-S-	4	8
A-309	H	MeO	H	H	単結合	3	7
A-310	H	MeO	H	H	単結合	3	8
A-311	H	MeO	H	H	単結合	4	7
A-312	H	MeO	H	H	単結合	4	8
A-313	H	MeO	H	H	-C=C-	3	7
A-314	H	MeO	H	H	-C=C-	3	8
A-315	H	MeO	H	H	-C=C-	4	7
A-316	H	MeO	H	H	-C=C-	4	8
A-317	H	MeO	H	H	-C≡C-	3	7
A-318	H	MeO	H	H	-C≡C-	3	8
A-319	H	MeO	H	H	-C≡C-	4	7
A-320	H	MeO	H	H	-C≡C-	4	8
A-321	CN	H	H	H	-O-	3	7
A-322	CN	H	H	H	-O-	3	8
A-323	CN	H	H	H	-O-	4	7
A-324	CN	H	H	H	-O-	4	8
A-325	CN	H	H	H	-S-	3	7
A-326	CN	H	H	H	-S-	3	8
A-327	CN	H	H	H	-S-	4	7
A-328	CN	H	H	H	-S-	4	8
A-329	CN	H	H	H	単結合	3	7
A-330	CN	H	H	H	単結合	3	8
A-331	CN	H	H	H	単結合	4	7
A-332	CN	H	H	H	単結合	4	8
A-333	CN	H	H	H	-C=C-	3	7
A-334	CN	H	H	H	-C=C-	3	8
A-335	CN	H	H	H	-C=C-	4	7
A-336	CN	H	H	H	-C=C-	4	8
A-337	CN	H	H	H	-C≡C-	3	7
A-338	CN	H	H	H	-C≡C-	3	8
A-339	CN	H	H	H	-C≡C-	4	7
A-340	CN	H	H	H	-C≡C-	4	8
A-341	H	CN	H	H	-O-	3	7
A-342	H	CN	H	H	-O-	3	8
A-343	H	CN	H	H	-O-	4	7
A-344	H	CN	H	H	-O-	4	8
A-345	H	CN	H	H	-S-	3	7
A-346	H	CN	H	H	-S-	3	8
A-347	H	CN	H	H	-S-	4	7
A-348	H	CN	H	H	-S-	4	8
A-349	H	CN	H	H	単結合	3	7
A-350	H	CN	H	H	単結合	3	8
A-351	H	CN	H	H	単結合	4	7
A-352	H	CN	H	H	単結合	4	8
A-353	H	CN	H	H	-C=C-	3	7
A-354	H	CN	H	H	-C=C-	3	8
A-355	H	CN	H	H	-C=C-	4	7
A-356	H	CN	H	H	-C=C-	4	8
A-357	H	CN	H	H	-C≡C-	3	7
A-358	H	CN	H	H	-C≡C-	3	8
A-359	H	CN	H	H	-C≡C-	4	7
A-360	H	CN	H	H	-C≡C-	4	8
A-361	CF ₃	H	H	H	-O-	3	7
A-362	CF ₃	H	H	H	-O-	3	8
A-363	CF ₃	H	H	H	-O-	4	7
A-364	CF ₃	H	H	H	-O-	4	8
A-365	CF ₃	H	H	H	-S-	3	7
A-366	CF ₃	H	H	H	-S-	3	8
A-367	CF ₃	H	H	H	-S-	4	7
A-368	CF ₃	H	H	H	-S-	4	8
A-369	CF ₃	H	H	H	単結合	3	7
A-370	CF ₃	H	H	H	単結合	3	8
A-371	CF ₃	H	H	H	単結合	4	7
A-372	CF ₃	H	H	H	単結合	4	8
A-373	CF ₃	H	H	H	-C=C-	3	7
A-374	CF ₃	H	H	H	-C=C-	3	8
A-375	CF ₃	H	H	H	-C=C-	4	7
A-376	CF ₃	H	H	H	-C=C-	4	8
A-377	CF ₃	H	H	H	-C≡C-	3	7
A-378	CF ₃	H	H	H	-C≡C-	3	8
A-379	CF ₃	H	H	H	-C≡C-	4	7
A-380	CF ₃	H	H	H	-C≡C-	4	8
A-381	H	CF ₃	H	H	-O-	3	7
A-382	H	CF ₃	H	H	-O-	3	8
A-383	H	CF ₃	H	H	-O-	4	7
A-384	H	CF ₃	H	H	-O-	4	8
A-385	H	CF ₃	H	H	-S-	3	7
A-386	H	CF ₃	H	H	-S-	3	8
A-387	H	CF ₃	H	H	-S-	4	7
A-388	H	CF ₃	H	H	-S-	4	8
A-389	H	CF ₃	H	H	単結合	3	7
A-390	H	CF ₃	H	H	単結合	3	8
A-391	H	CF ₃	H	H	単結合	4	7
A-392	H	CF ₃	H	H	単結合	4	8
A-393	H	CF ₃	H	H	-C=C-	3	7
A-394	H	CF ₃	H	H	-C=C-	3	8
A-395	H	CF ₃	H	H	-C=C-	4	7
A-396	H	CF ₃	H	H	-C=C-	4	8
A-397	H	CF ₃	H	H	-C≡C-	3	7
A-398	H	CF ₃	H	H	-C≡C-	3	8
A-399	H	CF ₃	H	H	-C≡C-	4	7
A-400	H	CF ₃	H	H	-C≡C-	4	8

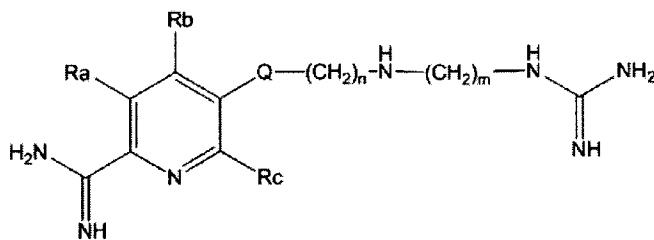
[表5]

化合物番号	Ra	Rb	Rc	Rd	Q	n	m
A-401	OCF ₃	H	H	H	-O-	3	7
A-402	OCF ₃	H	H	H	-O-	3	8
A-403	OCF ₃	H	H	H	-O-	4	7
A-404	OCF ₃	H	H	H	-O-	4	8
A-405	OCF ₃	H	H	H	-S-	3	7
A-406	OCF ₃	H	H	H	-S-	3	8
A-407	OCF ₃	H	H	H	-S-	4	7
A-408	OCF ₃	H	H	H	-S-	4	8
A-409	OCF ₃	H	H	H	単結合	3	7
A-410	OCF ₃	H	H	H	単結合	3	8
A-411	OCF ₃	H	H	H	単結合	4	7
A-412	OCF ₃	H	H	H	単結合	4	8
A-413	OCF ₃	H	H	H	-C=C-	3	7
A-414	OCF ₃	H	H	H	-C=C-	3	8
A-415	OCF ₃	H	H	H	-C=C-	4	7
A-416	OCF ₃	H	H	H	-C=C-	4	8
A-417	OCF ₃	H	H	H	-C≡C-	3	7
A-418	OCF ₃	H	H	H	-C≡C-	3	8
A-419	OCF ₃	H	H	H	-C≡C-	4	7
A-420	OCF ₃	H	H	H	-C≡C-	4	8
A-421	H	OCF ₃	H	H	-O-	3	7
A-422	H	OCF ₃	H	H	-O-	3	8
A-423	H	OCF ₃	H	H	-O-	4	7
A-424	H	OCF ₃	H	H	-O-	4	8
A-425	H	OCF ₃	H	H	-S-	3	7
A-426	H	OCF ₃	H	H	-S-	3	8
A-427	H	OCF ₃	H	H	-S-	4	7
A-428	H	OCF ₃	H	H	-S-	4	8
A-429	H	OCF ₃	H	H	単結合	3	7
A-430	H	OCF ₃	H	H	単結合	3	8
A-431	H	OCF ₃	H	H	単結合	4	7
A-432	H	OCF ₃	H	H	単結合	4	8
A-433	H	OCF ₃	H	H	-C=C-	3	7
A-434	H	OCF ₃	H	H	-C=C-	3	8
A-435	H	OCF ₃	H	H	-C=C-	4	7
A-436	H	OCF ₃	H	H	-C=C-	4	8
A-437	H	OCF ₃	H	H	-C≡C-	3	7
A-438	H	OCF ₃	H	H	-C≡C-	3	8
A-439	H	OCF ₃	H	H	-C≡C-	4	7
A-440	H	OCF ₃	H	H	-C≡C-	4	8
A-441	F	F	H	H	-O-	3	7
A-442	F	F	H	H	-O-	3	8
A-443	F	F	H	H	-O-	4	7
A-444	F	F	H	H	-O-	4	8
A-445	F	F	H	H	-S-	3	7
A-446	F	F	H	H	-S-	3	8
A-447	F	F	H	H	-S-	4	7
A-448	F	F	H	H	-S-	4	8
A-449	F	F	H	H	単結合	3	7
A-450	F	F	H	H	単結合	3	8
A-451	F	F	H	H	単結合	4	7
A-452	F	F	H	H	単結合	4	8
A-453	F	F	H	H	-C=C-	3	7
A-454	F	F	H	H	-C=C-	3	8
A-455	F	F	H	H	-C=C-	4	7
A-456	F	F	H	H	-C=C-	4	8
A-457	F	F	H	H	-C≡C-	3	7
A-458	F	F	H	H	-C≡C-	3	8
A-459	F	F	H	H	-C≡C-	4	7
A-460	F	F	H	H	-C≡C-	4	8
A-461	F	H	F	H	-O-	3	7
A-462	F	H	F	H	-O-	3	8
A-463	F	H	F	H	-O-	4	7
A-464	F	H	F	H	-O-	4	8
A-465	F	H	F	H	-S-	3	7
A-466	F	H	F	H	-S-	3	8
A-467	F	H	F	H	-S-	4	7
A-468	F	H	F	H	-S-	4	8
A-469	F	H	F	H	単結合	3	7
A-470	F	H	F	H	単結合	3	8
A-471	F	H	F	H	単結合	4	7
A-472	F	H	F	H	単結合	4	8
A-473	F	H	F	H	-C=C-	3	7
A-474	F	H	F	H	-C=C-	3	8
A-475	F	H	F	H	-C=C-	4	7
A-476	F	H	F	H	-C=C-	4	8
A-477	F	H	F	H	-C≡C-	3	7
A-478	F	H	F	H	-C≡C-	3	8
A-479	F	H	F	H	-C≡C-	4	7
A-480	F	H	F	H	-C≡C-	4	8
A-481	F	H	H	F	-O-	3	7
A-482	F	H	H	F	-O-	3	8
A-483	F	H	H	F	-O-	4	7
A-484	F	H	H	F	-O-	4	8
A-485	F	H	H	F	-S-	3	7
A-486	F	H	H	F	-S-	3	8
A-487	F	H	H	F	-S-	4	7
A-488	F	H	H	F	-S-	4	8
A-489	F	H	H	F	単結合	3	7
A-490	F	H	H	F	単結合	3	8
A-491	F	H	H	F	単結合	4	7
A-492	F	H	H	F	単結合	4	8
A-493	F	H	H	F	-C=C-	3	7
A-494	F	H	H	F	-C=C-	3	8
A-495	F	H	H	F	-C=C-	4	7
A-496	F	H	H	F	-C=C-	4	8
A-497	F	H	H	F	-C≡C-	3	7
A-498	F	H	H	F	-C≡C-	3	8
A-499	F	H	H	F	-C≡C-	4	7
A-500	F	H	H	F	-C≡C-	4	8

[表6]

化合物番号	Ra	Rb	Rc	Rd	Q	n	m
A-501	H	F	F	H	-O-	3	7
A-502	H	F	F	H	-O-	3	8
A-503	H	F	F	H	-O-	4	7
A-504	H	F	F	H	-O-	4	8
A-505	H	F	F	H	-S-	3	7
A-506	H	F	F	H	-S-	3	8
A-507	H	F	F	H	-S-	4	7
A-508	H	F	F	H	-S-	4	8
A-509	H	F	F	H	単結合	3	7
A-510	H	F	F	H	単結合	3	8
A-511	H	F	F	H	単結合	4	7
A-512	H	F	F	H	単結合	4	8
A-513	H	F	F	H	-C=C-	3	7
A-514	H	F	F	H	-C=C-	3	8
A-515	H	F	F	H	-C=C-	4	7
A-516	H	F	F	H	-C=C-	4	8
A-517	H	F	F	H	-C≡C-	3	7
A-518	H	F	F	H	-C≡C-	3	8
A-519	H	F	F	H	-C≡C-	4	7
A-520	H	F	F	H	-C≡C-	4	8
A-521	Me	F	H	H	-O-	3	7
A-522	Me	F	H	H	-O-	3	8
A-523	Me	F	H	H	-O-	4	7
A-524	Me	F	H	H	-O-	4	8
A-525	Me	F	H	H	-S-	3	7
A-526	Me	F	H	H	-S-	3	8
A-527	Me	F	H	H	-S-	4	7
A-528	Me	F	H	H	-S-	4	8
A-529	Me	F	H	H	単結合	3	7
A-530	Me	F	H	H	単結合	3	8
A-531	Me	F	H	H	単結合	4	7
A-532	Me	F	H	H	単結合	4	8
A-533	Me	F	H	H	-C=C-	3	7
A-534	Me	F	H	H	-C=C-	3	8
A-535	Me	F	H	H	-C=C-	4	7
A-536	Me	F	H	H	-C=C-	4	8
A-537	Me	F	H	H	-C≡C-	3	7
A-538	Me	F	H	H	-C≡C-	3	8
A-539	Me	F	H	H	-C≡C-	4	7
A-540	Me	F	H	H	-C≡C-	4	8
A-541	Me	H	F	H	-O-	3	7
A-542	Me	H	F	H	-O-	3	8
A-543	Me	H	F	H	-O-	4	7
A-544	Me	H	F	H	-O-	4	8
A-545	Me	H	F	H	-S-	3	7
A-546	Me	H	F	H	-S-	3	8
A-547	Me	H	F	H	-S-	4	7
A-548	Me	H	F	H	-S-	4	8
A-549	Me	H	F	H	単結合	3	7
A-550	Me	H	F	H	単結合	3	8
A-551	Me	H	F	H	単結合	4	7
A-552	Me	H	F	H	単結合	4	8
A-553	Me	H	F	H	-C=C-	3	7
A-554	Me	H	F	H	-C=C-	3	8
A-555	Me	H	F	H	-C=C-	4	7
A-556	Me	H	F	H	-C=C-	4	8
A-557	Me	H	F	H	-C≡C-	3	7
A-558	Me	H	F	H	-C≡C-	3	8
A-559	Me	H	F	H	-C≡C-	4	7
A-560	Me	H	F	H	-C≡C-	4	8
A-561	F	Me	H	H	-O-	3	7
A-562	F	Me	H	H	-O-	3	8
A-563	F	Me	H	H	-O-	4	7
A-564	F	Me	H	H	-O-	4	8
A-565	F	Me	H	H	-S-	3	7
A-566	F	Me	H	H	-S-	3	8
A-567	F	Me	H	H	-S-	4	7
A-568	F	Me	H	H	-S-	4	8
A-569	F	Me	H	H	単結合	3	7
A-570	F	Me	H	H	単結合	3	8
A-571	F	Me	H	H	単結合	4	7
A-572	F	Me	H	H	単結合	4	8
A-573	F	Me	H	H	-C=C-	3	7
A-574	F	Me	H	H	-C=C-	3	8
A-575	F	Me	H	H	-C=C-	4	7
A-576	F	Me	H	H	-C=C-	4	8
A-577	F	Me	H	H	-C≡C-	3	7
A-578	F	Me	H	H	-C≡C-	3	8
A-579	F	Me	H	H	-C≡C-	4	7
A-580	F	Me	H	H	-C≡C-	4	8
A-581	F	H	Me	H	-O-	3	7
A-582	F	H	Me	H	-O-	3	8
A-583	F	H	Me	H	-O-	4	7
A-584	F	H	Me	H	-O-	4	8
A-585	F	H	Me	H	-S-	3	7
A-586	F	H	Me	H	-S-	3	8
A-587	F	H	Me	H	-S-	4	7
A-588	F	H	Me	H	-S-	4	8
A-589	F	H	Me	H	単結合	3	7
A-590	F	H	Me	H	単結合	3	8
A-591	F	H	Me	H	単結合	4	7
A-592	F	H	Me	H	単結合	4	8
A-593	F	H	Me	H	-C=C-	3	7
A-594	F	H	Me	H	-C=C-	3	8
A-595	F	H	Me	H	-C=C-	4	7
A-596	F	H	Me	H	-C=C-	4	8
A-597	F	H	Me	H	-C≡C-	3	7
A-598	F	H	Me	H	-C≡C-	3	8
A-599	F	H	Me	H	-C≡C-	4	7
A-600	F	H	Me	H	-C≡C-	4	8

[0072] [化13]



[0073]

[表7]

化合物番号	Ra	Rb	Rc	Q	n	m	化合物番号	Ra	Rb	Rc	Q	n	m
B-1	H	H	H	-O-	3	6	B-51	F	H	H	単結合	3	7
B-2	H	H	H	-O-	3	7	B-52	F	H	H	単結合	3	8
B-3	H	H	H	-O-	3	8	B-53	F	H	H	単結合	3	9
B-4	H	H	H	-O-	3	9	B-54	F	H	H	単結合	4	7
B-5	H	H	H	-O-	4	7	B-55	F	H	H	単結合	4	8
B-6	H	H	H	-O-	4	8	B-56	F	H	H	単結合	4	9
B-7	H	H	H	-O-	4	9	B-57	F	H	H	-C=C-	3	6
B-8	H	H	H	-S-	3	6	B-58	F	H	H	-C=C-	3	7
B-9	H	H	H	-S-	3	7	B-59	F	H	H	-C=C-	3	8
B-10	H	H	H	-S-	3	8	B-60	F	H	H	-C=C-	3	9
B-11	H	H	H	-S-	3	9	B-61	F	H	H	-C=C-	4	7
B-12	H	H	H	-S-	4	7	B-62	F	H	H	-C=C-	4	8
B-13	H	H	H	-S-	4	8	B-63	F	H	H	-C=C-	4	9
B-14	H	H	H	-S-	4	9	B-64	F	H	H	-C≡C-	3	6
B-15	H	H	H	単結合	3	6	B-65	F	H	H	-C≡C-	3	7
B-16	H	H	H	単結合	3	7	B-66	F	H	H	-C≡C-	3	8
B-17	H	H	H	単結合	3	8	B-67	F	H	H	-C≡C-	3	9
B-18	H	H	H	単結合	3	9	B-68	F	H	H	-C≡C-	4	7
B-19	H	H	H	単結合	4	7	B-69	F	H	H	-C≡C-	4	8
B-20	H	H	H	単結合	4	8	B-70	F	H	H	-C≡C-	4	9
B-21	H	H	H	単結合	4	9	B-71	H	F	H	-O-	3	6
B-22	H	H	H	-C=C-	3	6	B-72	H	F	H	-O-	3	7
B-23	H	H	H	-C=C-	3	7	B-73	H	F	H	-O-	3	8
B-24	H	H	H	-C=C-	3	8	B-74	H	F	H	-O-	3	9
B-25	H	H	H	-C=C-	3	9	B-75	H	F	H	-O-	4	7
B-26	H	H	H	-C=C-	4	7	B-76	H	F	H	-O-	4	8
B-27	H	H	H	-C=C-	4	8	B-77	H	F	H	-O-	4	9
B-28	H	H	H	-C=C-	4	9	B-78	H	F	H	-S-	3	6
B-29	H	H	H	-C≡C-	3	6	B-79	H	F	H	-S-	3	7
B-30	H	H	H	-C≡C-	3	7	B-80	H	F	H	-S-	3	8
B-31	H	H	H	-C≡C-	3	8	B-81	H	F	H	-S-	3	9
B-32	H	H	H	-C≡C-	3	9	B-82	H	F	H	-S-	4	7
B-33	H	H	H	-C≡C-	4	7	B-83	H	F	H	-S-	4	8
B-34	H	H	H	-C≡C-	4	8	B-84	H	F	H	-S-	4	9
B-35	H	H	H	-C≡C-	4	9	B-85	H	F	H	単結合	3	6
B-36	F	H	H	-O-	3	6	B-86	H	F	H	単結合	3	7
B-37	F	H	H	-O-	3	7	B-87	H	F	H	単結合	3	8
B-38	F	H	H	-O-	3	8	B-88	H	F	H	単結合	3	9
B-39	F	H	H	-O-	3	9	B-89	H	F	H	単結合	4	7
B-40	F	H	H	-O-	4	7	B-90	H	F	H	単結合	4	8
B-41	F	H	H	-O-	4	8	B-91	H	F	H	単結合	4	9
B-42	F	H	H	-O-	4	9	B-92	H	F	H	-C=C-	3	6
B-43	F	H	H	-S-	3	6	B-93	H	F	H	-C=C-	3	7
B-44	F	H	H	-S-	3	7	B-94	H	F	H	-C=C-	3	8
B-45	F	H	H	-S-	3	8	B-95	H	F	H	-C=C-	3	9
B-46	F	H	H	-S-	3	9	B-96	H	F	H	-C=C-	4	7
B-47	F	H	H	-S-	4	7	B-97	H	F	H	-C=C-	4	8
B-48	F	H	H	-S-	4	8	B-98	H	F	H	-C=C-	4	9
B-49	F	H	H	-S-	4	9	B-99	H	F	H	-C≡C-	3	6
B-50	F	H	H	単結合	3	6	B-100	H	F	H	-C≡C-	3	7

[0074]

[表8]

化合物番号	Ra	Rb	Rc	Q	n	m
B-101	H	F	H	-C≡C-	3	8
B-102	H	F	H	-C≡C-	3	9
B-103	H	F	H	-C≡C-	4	7
B-104	H	F	H	-C≡C-	4	8
B-105	H	F	H	-C≡C-	4	9
B-106	H	H	F	-O-	3	6
B-107	H	H	F	-O-	3	7
B-108	H	H	F	-O-	3	8
B-109	H	H	F	-O-	3	9
B-110	H	H	F	-O-	4	7
B-111	H	H	F	-O-	4	8
B-112	H	H	F	-O-	4	9
B-113	H	H	F	-S-	3	6
B-114	H	H	F	-S-	3	7
B-115	H	H	F	-S-	3	8
B-116	H	H	F	-S-	3	9
B-117	H	H	F	-S-	4	7
B-118	H	H	F	-S-	4	8
B-119	H	H	F	-S-	4	9
B-120	H	H	F	単結合	3	6
B-121	H	H	F	単結合	3	7
B-122	H	H	F	単結合	3	8
B-123	H	H	F	単結合	3	9
B-124	H	H	F	単結合	4	7
B-125	H	H	F	単結合	4	8
B-126	H	H	F	単結合	4	9
B-127	H	H	F	-C=C-	3	6
B-128	H	H	F	-C=C-	3	7
B-129	H	H	F	-C=C-	3	8
B-130	H	H	F	-C=C-	3	9
B-131	H	H	F	-C=C-	4	7
B-132	H	H	F	-C=C-	4	8
B-133	H	H	F	-C=C-	4	9
B-134	H	H	F	-C≡C-	3	6
B-135	H	H	F	-C≡C-	3	7
B-136	H	H	F	-C≡C-	3	8
B-137	H	H	F	-C≡C-	3	9
B-138	H	H	F	-C≡C-	4	7
B-139	H	H	F	-C≡C-	4	8
B-140	H	H	F	-C≡C-	4	9
B-141	Cl	H	H	-O-	3	7
B-142	Cl	H	H	-O-	3	8
B-143	Cl	H	H	-O-	4	7
B-144	Cl	H	H	-O-	4	8
B-145	Cl	H	H	-S-	3	7
B-146	Cl	H	H	-S-	3	8
B-147	Cl	H	H	-S-	4	7
B-148	Cl	H	H	-S-	4	8
B-149	Cl	H	H	単結合	3	7
B-150	Cl	H	H	単結合	3	8

化合物番号	Ra	Rb	Rc	Q	n	m
B-151	Cl	H	H	単結合	4	7
B-152	Cl	H	H	単結合	4	8
B-153	Cl	H	H	-C=C-	3	7
B-154	Cl	H	H	-C=C-	3	8
B-155	Cl	H	H	-C=C-	4	7
B-156	Cl	H	H	-C=C-	4	8
B-157	Cl	H	H	-C≡C-	3	7
B-158	Cl	H	H	-C≡C-	3	8
B-159	Cl	H	H	-C≡C-	4	7
B-160	Cl	H	H	-C≡C-	4	8
B-161	H	Cl	H	-O-	3	7
B-162	H	Cl	H	-O-	3	8
B-163	H	Cl	H	-O-	4	7
B-164	H	Cl	H	-O-	4	8
B-165	H	Cl	H	-S-	3	7
B-166	H	Cl	H	-S-	3	8
B-167	H	Cl	H	-S-	4	7
B-168	H	Cl	H	-S-	4	8
B-169	H	Cl	H	単結合	3	7
B-170	H	Cl	H	単結合	3	8
B-171	H	Cl	H	単結合	4	7
B-172	H	Cl	H	単結合	4	8
B-173	H	Cl	H	-C=C-	3	7
B-174	H	Cl	H	-C=C-	3	8
B-175	H	Cl	H	-C=C-	4	7
B-176	H	Cl	H	-C=C-	4	8
B-177	H	Cl	H	-C≡C-	3	7
B-178	H	Cl	H	-C≡C-	3	8
B-179	H	Cl	H	-C≡C-	4	7
B-180	H	Cl	H	-C≡C-	4	8
B-181	H	H	Cl	-O-	3	7
B-182	H	H	Cl	-O-	3	8
B-183	H	H	Cl	-O-	4	7
B-184	H	H	Cl	-O-	4	8
B-185	H	H	Cl	-S-	3	7
B-186	H	H	Cl	-S-	3	8
B-187	H	H	Cl	-S-	4	7
B-188	H	H	Cl	-S-	4	8
B-189	H	H	Cl	単結合	3	7
B-190	H	H	Cl	単結合	3	8
B-191	H	H	Cl	単結合	4	7
B-192	H	H	Cl	単結合	4	8
B-193	H	H	Cl	-C=C-	3	7
B-194	H	H	Cl	-C=C-	3	8
B-195	H	H	Cl	-C=C-	4	7
B-196	H	H	Cl	-C=C-	4	8
B-197	H	H	Cl	-C≡C-	3	7
B-198	H	H	Cl	-C≡C-	3	8
B-199	H	H	Cl	-C≡C-	4	7
B-200	H	H	Cl	-C≡C-	4	8

[0075]

[表9]

化合物番号	Ra	Rb	Rc	Q	n	m	化合物番号	Ra	Rb	Rc	Q	n	m
B-201	Br	H	H	-O-	3	7	B-251	H	H	Br	単結合	4	7
B-202	Br	H	H	-O-	3	8	B-252	H	H	Br	単結合	4	8
B-203	Br	H	H	-O-	4	7	B-253	H	H	Br	-C=C-	3	7
B-204	Br	H	H	-O-	4	8	B-254	H	H	Br	-C=C-	3	8
B-205	Br	H	H	-S-	3	7	B-255	H	H	Br	-C=C-	4	7
B-206	Br	H	H	-S-	3	8	B-256	H	H	Br	-C=C-	4	8
B-207	Br	H	H	-S-	4	7	B-257	H	H	Br	-C≡C-	3	7
B-208	Br	H	H	-S-	4	8	B-258	H	H	Br	-C≡C-	3	8
B-209	Br	H	H	単結合	3	7	B-259	H	H	Br	-C≡C-	4	7
B-210	Br	H	H	単結合	3	8	B-260	H	H	Br	-C≡C-	4	8
B-211	Br	H	H	単結合	4	7	B-261	Me	H	H	-O-	3	7
B-212	Br	H	H	単結合	4	8	B-262	Me	H	H	-O-	3	8
B-213	Br	H	H	-C=C-	3	7	B-263	Me	H	H	-O-	4	7
B-214	Br	H	H	-C=C-	3	8	B-264	Me	H	H	-O-	4	8
B-215	Br	H	H	-C=C-	4	7	B-265	Me	H	H	-S-	3	7
B-216	Br	H	H	-C=C-	4	8	B-266	Me	H	H	-S-	3	8
B-217	Br	H	H	-C≡C-	3	7	B-267	Me	H	H	-S-	4	7
B-218	Br	H	H	-C≡C-	3	8	B-268	Me	H	H	-S-	4	8
B-219	Br	H	H	-C≡C-	4	7	B-269	Me	H	H	単結合	3	7
B-220	Br	H	H	-C≡C-	4	8	B-270	Me	H	H	単結合	3	8
B-221	H	Br	H	-O-	3	7	B-271	Me	H	H	単結合	4	7
B-222	H	Br	H	-O-	3	8	B-272	Me	H	H	単結合	4	8
B-223	H	Br	H	-O-	4	7	B-273	Me	H	H	-C=C-	3	7
B-224	H	Br	H	-O-	4	8	B-274	Me	H	H	-C=C-	3	8
B-225	H	Br	H	-S-	3	7	B-275	Me	H	H	-C=C-	4	7
B-226	H	Br	H	-S-	3	8	B-276	Me	H	H	-C=C-	4	8
B-227	H	Br	H	-S-	4	7	B-277	Me	H	H	-C≡C-	3	7
B-228	H	Br	H	-S-	4	8	B-278	Me	H	H	-C≡C-	3	8
B-229	H	Br	H	単結合	3	7	B-279	Me	H	H	-C≡C-	4	7
B-230	H	Br	H	単結合	3	8	B-280	Me	H	H	-C≡C-	4	8
B-231	H	Br	H	単結合	4	7	B-281	H	Me	H	-O-	3	7
B-232	H	Br	H	単結合	4	8	B-282	H	Me	H	-O-	3	8
B-233	H	Br	H	-C=C-	3	7	B-283	H	Me	H	-O-	4	7
B-234	H	Br	H	-C=C-	3	8	B-284	H	Me	H	-O-	4	8
B-235	H	Br	H	-C=C-	4	7	B-285	H	Me	H	-S-	3	7
B-236	H	Br	H	-C=C-	4	8	B-286	H	Me	H	-S-	3	8
B-237	H	Br	H	-C≡C-	3	7	B-287	H	Me	H	-S-	4	7
B-238	H	Br	H	-C≡C-	3	8	B-288	H	Me	H	-S-	4	8
B-239	H	Br	H	-C≡C-	4	7	B-289	H	Me	H	単結合	3	7
B-240	H	Br	H	-C≡C-	4	8	B-290	H	Me	H	単結合	3	8
B-241	H	H	Br	-O-	3	7	B-291	H	Me	H	単結合	4	7
B-242	H	H	Br	-O-	3	8	B-292	H	Me	H	単結合	4	8
B-243	H	H	Br	-O-	4	7	B-293	H	Me	H	-C=C-	3	7
B-244	H	H	Br	-O-	4	8	B-294	H	Me	H	-C=C-	3	8
B-245	H	H	Br	-S-	3	7	B-295	H	Me	H	-C=C-	4	7
B-246	H	H	Br	-S-	3	8	B-296	H	Me	H	-C=C-	4	8
B-247	H	H	Br	-S-	4	7	B-297	H	Me	H	-C≡C-	3	7
B-248	H	H	Br	-S-	4	8	B-298	H	Me	H	-C≡C-	3	8
B-249	H	H	Br	単結合	3	7	B-299	H	Me	H	-C≡C-	4	7
B-250	H	H	Br	単結合	3	8	B-300	H	Me	H	-C≡C-	4	8

[0076]

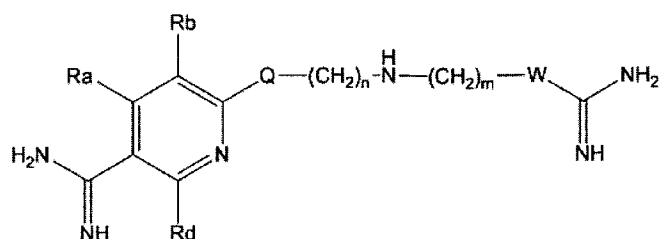
[表10]

化合物番号	Ra	Rb	Rc	Q	n	m	化合物番号	Ra	Rb	Rc	Q	n	m
B-301	H	H	Me	-O-	3	7	B-351	H	MeO	H	単結合	4	7
B-302	H	H	Me	-O-	3	8	B-352	H	MeO	H	単結合	4	8
B-303	H	H	Me	-O-	4	7	B-353	H	MeO	H	-C=C-	3	7
B-304	H	H	Me	-O-	4	8	B-354	H	MeO	H	-C=C-	3	8
B-305	H	H	Me	-S-	3	7	B-355	H	MeO	H	-C=C-	4	7
B-306	H	H	Me	-S-	3	8	B-356	H	MeO	H	-C=C-	4	8
B-307	H	H	Me	-S-	4	7	B-357	H	MeO	H	-C≡C-	3	7
B-308	H	H	Me	-S-	4	8	B-358	H	MeO	H	-C≡C-	3	8
B-309	H	H	Me	単結合	3	7	B-359	H	MeO	H	-C≡C-	4	7
B-310	H	H	Me	単結合	3	8	B-360	H	MeO	H	-C≡C-	4	8
B-311	H	H	Me	単結合	4	7	B-361	H	H	MeO	-O-	3	7
B-312	H	H	Me	単結合	4	8	B-362	H	H	MeO	-O-	3	8
B-313	H	H	Me	-C=C-	3	7	B-363	H	H	MeO	-O-	4	7
B-314	H	H	Me	-C=C-	3	8	B-364	H	H	MeO	-O-	4	8
B-315	H	H	Me	-C=C-	4	7	B-365	H	H	MeO	-S-	3	7
B-316	H	H	Me	-C=C-	4	8	B-366	H	H	MeO	-S-	3	8
B-317	H	H	Me	-C≡C-	3	7	B-367	H	H	MeO	-S-	4	7
B-318	H	H	Me	-C≡C-	3	8	B-368	H	H	MeO	-S-	4	8
B-319	H	H	Me	-C≡C-	4	7	B-369	H	H	MeO	単結合	3	7
B-320	H	H	Me	-C≡C-	4	8	B-370	H	H	MeO	単結合	3	8
B-321	MeO	H	H	-O-	3	7	B-371	H	H	MeO	単結合	4	7
B-322	MeO	H	H	-O-	3	8	B-372	H	H	MeO	単結合	4	8
B-323	MeO	H	H	-O-	4	7	B-373	H	H	MeO	-C=C-	3	7
B-324	MeO	H	H	-O-	4	8	B-374	H	H	MeO	-C=C-	3	8
B-325	MeO	H	H	-S-	3	7	B-375	H	H	MeO	-C=C-	4	7
B-326	MeO	H	H	-S-	3	8	B-376	H	H	MeO	-C=C-	4	8
B-327	MeO	H	H	-S-	4	7	B-377	H	H	MeO	-C≡C-	3	7
B-328	MeO	H	H	-S-	4	8	B-378	H	H	MeO	-C≡C-	3	8
B-329	MeO	H	H	単結合	3	7	B-379	H	H	MeO	-C≡C-	4	7
B-330	MeO	H	H	単結合	3	8	B-380	H	H	MeO	-C≡C-	4	8
B-331	MeO	H	H	単結合	4	7	B-381	CF ₃	H	H	-O-	3	7
B-332	MeO	H	H	単結合	4	8	B-382	CF ₃	H	H	-O-	3	8
B-333	MeO	H	H	-C=C-	3	7	B-383	CF ₃	H	H	-O-	4	7
B-334	MeO	H	H	-C=C-	3	8	B-384	CF ₃	H	H	-O-	4	8
B-335	MeO	H	H	-C=C-	4	7	B-385	CF ₃	H	H	-S-	3	7
B-336	MeO	H	H	-C=C-	4	8	B-386	CF ₃	H	H	-S-	3	8
B-337	MeO	H	H	-C≡C-	3	7	B-387	CF ₃	H	H	-S-	4	7
B-338	MeO	H	H	-C≡C-	3	8	B-388	CF ₃	H	H	-S-	4	8
B-339	MeO	H	H	-C≡C-	4	7	B-389	CF ₃	H	H	単結合	3	7
B-340	MeO	H	H	-C≡C-	4	8	B-390	CF ₃	H	H	単結合	3	8
B-341	H	MeO	H	-O-	3	7	B-391	CF ₃	H	H	単結合	4	7
B-342	H	MeO	H	-O-	3	8	B-392	CF ₃	H	H	単結合	4	8
B-343	H	MeO	H	-O-	4	7	B-393	CF ₃	H	H	-C=C-	3	7
B-344	H	MeO	H	-O-	4	8	B-394	CF ₃	H	H	-C=C-	3	8
B-345	H	MeO	H	-S-	3	7	B-395	CF ₃	H	H	-C=C-	4	7
B-346	H	MeO	H	-S-	3	8	B-396	CF ₃	H	H	-C=C-	4	8
B-347	H	MeO	H	-S-	4	7	B-397	CF ₃	H	H	-C≡C-	3	7
B-348	H	MeO	H	-S-	4	8	B-398	CF ₃	H	H	-C≡C-	3	8
B-349	H	MeO	H	単結合	3	7	B-399	CF ₃	H	H	-C≡C-	4	7
B-350	H	MeO	H	単結合	3	8	B-400	CF ₃	H	H	-C≡C-	4	8

[表11]

化合物番号	Ra	Rb	Rc	Q	n	m	化合物番号	Ra	Rb	Rc	Q	n	m
B-401	H	CF ₃	H	-O-	3	7	B-451	OCF ₃	H	H	単結合	4	7
B-402	H	CF ₃	H	-O-	3	8	B-452	OCF ₃	H	H	単結合	4	8
B-403	H	CF ₃	H	-O-	4	7	B-453	OCF ₃	H	H	-C=C-	3	7
B-404	H	CF ₃	H	-O-	4	8	B-454	OCF ₃	H	H	-C=C-	3	8
B-405	H	CF ₃	H	-S-	3	7	B-455	OCF ₃	H	H	-C=C-	4	7
B-406	H	CF ₃	H	-S-	3	8	B-456	OCF ₃	H	H	-C=C-	4	8
B-407	H	CF ₃	H	-S-	4	7	B-457	OCF ₃	H	H	-C≡C-	3	7
B-408	H	CF ₃	H	-S-	4	8	B-458	OCF ₃	H	H	-C≡C-	3	8
B-409	H	CF ₃	H	単結合	3	7	B-459	OCF ₃	H	H	-C≡C-	4	7
B-410	H	CF ₃	H	単結合	3	8	B-460	OCF ₃	H	H	-C≡C-	4	8
B-411	H	CF ₃	H	単結合	4	7	B-461	H	OCF ₃	H	-O-	3	7
B-412	H	CF ₃	H	単結合	4	8	B-462	H	OCF ₃	H	-O-	3	8
B-413	H	CF ₃	H	-C=C-	3	7	B-463	H	OCF ₃	H	-O-	4	7
B-414	H	CF ₃	H	-C=C-	3	8	B-464	H	OCF ₃	H	-O-	4	8
B-415	H	CF ₃	H	-C=C-	4	7	B-465	H	OCF ₃	H	-S-	3	7
B-416	H	CF ₃	H	-C=C-	4	8	B-466	H	OCF ₃	H	-S-	3	8
B-417	H	CF ₃	H	-C≡C-	3	7	B-467	H	OCF ₃	H	-S-	4	7
B-418	H	CF ₃	H	-C≡C-	3	8	B-468	H	OCF ₃	H	-S-	4	8
B-419	H	CF ₃	H	-C≡C-	4	7	B-469	H	OCF ₃	H	単結合	3	7
B-420	H	CF ₃	H	-C≡C-	4	8	B-470	H	OCF ₃	H	単結合	3	8
B-421	H	H	CF ₃	-O-	3	7	B-471	H	OCF ₃	H	単結合	4	7
B-422	H	H	CF ₃	-O-	3	8	B-472	H	OCF ₃	H	単結合	4	8
B-423	H	H	CF ₃	-O-	4	7	B-473	H	OCF ₃	H	-C=C-	3	7
B-424	H	H	CF ₃	-O-	4	8	B-474	H	OCF ₃	H	-C=C-	3	8
B-425	H	H	CF ₃	-S-	3	7	B-475	H	OCF ₃	H	-C=C-	4	7
B-426	H	H	CF ₃	-S-	3	8	B-476	H	OCF ₃	H	-C=C-	4	8
B-427	H	H	CF ₃	-S-	4	7	B-477	H	OCF ₃	H	-C≡C-	3	7
B-428	H	H	CF ₃	-S-	4	8	B-478	H	OCF ₃	H	-C≡C-	3	8
B-429	H	H	CF ₃	単結合	3	7	B-479	H	OCF ₃	H	-C≡C-	4	7
B-430	H	H	CF ₃	単結合	3	8	B-480	H	OCF ₃	H	-C≡C-	4	8
B-431	H	H	CF ₃	単結合	4	7	B-481	H	H	OCF ₃	-O-	3	7
B-432	H	H	CF ₃	単結合	4	8	B-482	H	H	OCF ₃	-O-	3	8
B-433	H	H	CF ₃	-C=C-	3	7	B-483	H	H	OCF ₃	-O-	4	7
B-434	H	H	CF ₃	-C=C-	3	8	B-484	H	H	OCF ₃	-O-	4	8
B-435	H	H	CF ₃	-C=C-	4	7	B-485	H	H	OCF ₃	-S-	3	7
B-436	H	H	CF ₃	-C=C-	4	8	B-486	H	H	OCF ₃	-S-	3	8
B-437	H	H	CF ₃	-C≡C-	3	7	B-487	H	H	OCF ₃	-S-	4	7
B-438	H	H	CF ₃	-C≡C-	3	8	B-488	H	H	OCF ₃	-S-	4	8
B-439	H	H	CF ₃	-C≡C-	4	7	B-489	H	H	OCF ₃	単結合	3	7
B-440	H	H	CF ₃	-C≡C-	4	8	B-490	H	H	OCF ₃	単結合	3	8
B-441	OCF ₃	H	H	-O-	3	7	B-491	H	H	OCF ₃	単結合	4	7
B-442	OCF ₃	H	H	-O-	3	8	B-492	H	H	OCF ₃	単結合	4	8
B-443	OCF ₃	H	H	-O-	4	7	B-493	H	H	OCF ₃	-C=C-	3	7
B-444	OCF ₃	H	H	-O-	4	8	B-494	H	H	OCF ₃	-C=C-	3	8
B-445	OCF ₃	H	H	-S-	3	7	B-495	H	H	OCF ₃	-C=C-	4	7
B-446	OCF ₃	H	H	-S-	3	8	B-496	H	H	OCF ₃	-C=C-	4	8
B-447	OCF ₃	H	H	-S-	4	7	B-497	H	H	OCF ₃	-C≡C-	3	7
B-448	OCF ₃	H	H	-S-	4	8	B-498	H	H	OCF ₃	-C≡C-	3	8
B-449	OCF ₃	H	H	単結合	3	7	B-499	H	H	OCF ₃	-C≡C-	4	7
B-450	OCF ₃	H	H	単結合	3	8	B-500	H	H	OCF ₃	-C≡C-	4	8

[化14]



[0079] [表12]

化合物番号	Ra	Rb	Rd	Q	n	m
C-1	H	H	H	-O-	3	6
C-2	H	H	H	-O-	3	7
C-3	H	H	H	-O-	3	8
C-4	H	H	H	-O-	3	9
C-5	H	H	H	-O-	4	7
C-6	H	H	H	-O-	4	8
C-7	H	H	H	-O-	4	9
C-8	H	H	H	-S-	3	6
C-9	H	H	H	-S-	3	7
C-10	H	H	H	-S-	3	8
C-11	H	H	H	-S-	3	9
C-12	H	H	H	-S-	4	7
C-13	H	H	H	-S-	4	8
C-14	H	H	H	-S-	4	9
C-15	H	H	H	単結合	3	6
C-16	H	H	H	単結合	3	7
C-17	H	H	H	単結合	3	8
C-18	H	H	H	単結合	3	9
C-19	H	H	H	単結合	4	7
C-20	H	H	H	単結合	4	8
C-21	H	H	H	単結合	4	9
C-22	H	H	H	-C=C-	3	6
C-23	H	H	H	-C=C-	3	7
C-24	H	H	H	-C=C-	3	8
C-25	H	H	H	-C=C-	3	9
C-26	H	H	H	-C=C-	4	7
C-27	H	H	H	-C=C-	4	8
C-28	H	H	H	-C=C-	4	9
C-29	H	H	H	-C≡C-	3	6
C-30	H	H	H	-C≡C-	3	7
C-31	H	H	H	-C≡C-	3	8
C-32	H	H	H	-C≡C-	3	9
C-33	H	H	H	-C≡C-	4	7
C-34	H	H	H	-C≡C-	4	8
C-35	H	H	H	-C≡C-	4	9
C-36	F	H	H	-O-	3	6
C-37	F	H	H	-O-	3	7
C-38	F	H	H	-O-	3	8
C-39	F	H	H	-O-	3	9
C-40	F	H	H	-O-	4	7
C-41	F	H	H	-O-	4	8
C-42	F	H	H	-O-	4	9
C-43	F	H	H	-S-	3	6
C-44	F	H	H	-S-	3	7
C-45	F	H	H	-S-	3	8
C-46	F	H	H	-S-	3	9
C-47	F	H	H	-S-	4	7
C-48	F	H	H	-S-	4	8
C-49	F	H	H	-S-	4	9
C-50	F	H	H	単結合	3	6
C-51	F	H	H	単結合	3	7
C-52	F	H	H	単結合	3	8
C-53	F	H	H	単結合	3	9
C-54	F	H	H	単結合	4	7
C-55	F	H	H	単結合	4	8
C-56	F	H	H	単結合	4	9
C-57	F	H	H	-C=C-	3	6
C-58	F	H	H	-C=C-	3	7
C-59	F	H	H	-C=C-	3	8
C-60	F	H	H	-C=C-	3	9
C-61	F	H	H	-C=C-	4	7
C-62	F	H	H	-C=C-	4	8
C-63	F	H	H	-C=C-	4	9
C-64	F	H	H	-C≡C-	3	6
C-65	F	H	H	-C≡C-	3	7
C-66	F	H	H	-C≡C-	3	8
C-67	F	H	H	-C≡C-	3	9
C-68	F	H	H	-C≡C-	4	7
C-69	F	H	H	-C≡C-	4	8
C-70	F	H	H	-C≡C-	4	9
C-71	H	F	H	-O-	3	6
C-72	H	F	H	-O-	3	7
C-73	H	F	H	-O-	3	8
C-74	H	F	H	-O-	3	9
C-75	H	F	H	-O-	4	7
C-76	H	F	H	-O-	4	8
C-77	H	F	H	-O-	4	9
C-78	H	F	H	-S-	3	6
C-79	H	F	H	-S-	3	7
C-80	H	F	H	-S-	3	8
C-81	H	F	H	-S-	3	9
C-82	H	F	H	-S-	4	7
C-83	H	F	H	-S-	4	8
C-84	H	F	H	-S-	4	9
C-85	H	F	H	単結合	3	6
C-86	H	F	H	単結合	3	7
C-87	H	F	H	単結合	3	8
C-88	H	F	H	単結合	3	9
C-89	H	F	H	単結合	4	7
C-90	H	F	H	単結合	4	8
C-91	H	F	H	単結合	4	9
C-92	H	F	H	-C=C-	3	6
C-93	H	F	H	-C=C-	3	7
C-94	H	F	H	-C=C-	3	8
C-95	H	F	H	-C=C-	3	9
C-96	H	F	H	-C=C-	4	7
C-97	H	F	H	-C=C-	4	8
C-98	H	F	H	-C=C-	4	9
C-99	H	F	H	-C≡C-	3	6
C-100	H	F	H	-C≡C-	3	7

[0080] [表13]

化合物番号	Ra	Rb	Rd	Q	n	m
C-101	H	F	H	-C≡C-	3	8
C-102	H	F	H	-C≡C-	3	9
C-103	H	F	H	-C≡C-	4	7
C-104	H	F	H	-C≡C-	4	8
C-105	H	F	H	-C≡C-	4	9
C-106	H	H	F	-O-	3	6
C-107	H	H	F	-O-	3	7
C-108	H	H	F	-O-	3	8
C-109	H	H	F	-O-	3	9
C-110	H	H	F	-O-	4	7
C-111	H	H	F	-O-	4	8
C-112	H	H	F	-O-	4	9
C-113	H	H	F	-S-	3	6
C-114	H	H	F	-S-	3	7
C-115	H	H	F	-S-	3	8
C-116	H	H	F	-S-	3	9
C-117	H	H	F	-S-	4	7
C-118	H	H	F	-S-	4	8
C-119	H	H	F	-S-	4	9
C-120	H	H	F	単結合	3	6
C-121	H	H	F	単結合	3	7
C-122	H	H	F	単結合	3	8
C-123	H	H	F	単結合	3	9
C-124	H	H	F	単結合	4	7
C-125	H	H	F	単結合	4	8
C-126	H	H	F	単結合	4	9
C-127	H	H	F	-C=C-	3	6
C-128	H	H	F	-C=C-	3	7
C-129	H	H	F	-C=C-	3	8
C-130	H	H	F	-C=C-	3	9
C-131	H	H	F	-C=C-	4	7
C-132	H	H	F	-C=C-	4	8
C-133	H	H	F	-C=C-	4	9
C-134	H	H	F	-C≡C-	3	6
C-135	H	H	F	-C≡C-	3	7
C-136	H	H	F	-C≡C-	3	8
C-137	H	H	F	-C≡C-	3	9
C-138	H	H	F	-C≡C-	4	7
C-139	H	H	F	-C≡C-	4	8
C-140	H	H	F	-C≡C-	4	9
C-141	Cl	H	H	-O-	3	7
C-142	Cl	H	H	-O-	3	8
C-143	Cl	H	H	-O-	4	7
C-144	Cl	H	H	-O-	4	8
C-145	Cl	H	H	-S-	3	7
C-146	Cl	H	H	-S-	3	8
C-147	Cl	H	H	-S-	4	7
C-148	Cl	H	H	-S-	4	8
C-149	Cl	H	H	単結合	3	7
C-150	Cl	H	H	単結合	3	8
C-151	Cl	H	H	単結合	4	7
C-152	Cl	H	H	単結合	4	8
C-153	Cl	H	H	-C=C-	3	7
C-154	Cl	H	H	-C=C-	3	8
C-155	Cl	H	H	-C=C-	4	7
C-156	Cl	H	H	-C=C-	4	8
C-157	Cl	H	H	-C≡C-	3	7
C-158	Cl	H	H	-C≡C-	3	8
C-159	Cl	H	H	-C≡C-	4	7
C-160	Cl	H	H	-C≡C-	4	8
C-161	H	Cl	H	-O-	3	7
C-162	H	Cl	H	-O-	3	8
C-163	H	Cl	H	-O-	4	7
C-164	H	Cl	H	-O-	4	8
C-165	H	Cl	H	-S-	3	7
C-166	H	Cl	H	-S-	3	8
C-167	H	Cl	H	-S-	4	7
C-168	H	Cl	H	-S-	4	8
C-169	H	Cl	H	単結合	3	7
C-170	H	Cl	H	単結合	3	8
C-171	H	Cl	H	単結合	4	7
C-172	H	Cl	H	単結合	4	8
C-173	H	Cl	H	-C=C-	3	7
C-174	H	Cl	H	-C=C-	3	8
C-175	H	Cl	H	-C=C-	4	7
C-176	H	Cl	H	-C=C-	4	8
C-177	H	Cl	H	-C≡C-	3	7
C-178	H	Cl	H	-C≡C-	3	8
C-179	H	Cl	H	-C≡C-	4	7
C-180	H	Cl	H	-C≡C-	4	8
C-181	H	H	Cl	-O-	3	7
C-182	H	H	Cl	-O-	3	8
C-183	H	H	Cl	-O-	4	7
C-184	H	H	Cl	-O-	4	8
C-185	H	H	Cl	-S-	3	7
C-186	H	H	Cl	-S-	3	8
C-187	H	H	Cl	-S-	4	7
C-188	H	H	Cl	-S-	4	8
C-189	H	H	Cl	単結合	3	7
C-190	H	H	Cl	単結合	3	8
C-191	H	H	Cl	単結合	4	7
C-192	H	H	Cl	単結合	4	8
C-193	H	H	Cl	-C=C-	3	7
C-194	H	H	Cl	-C=C-	3	8
C-195	H	H	Cl	-C=C-	4	7
C-196	H	H	Cl	-C=C-	4	8
C-197	H	H	Cl	-C≡C-	3	7
C-198	H	H	Cl	-C≡C-	3	8
C-199	H	H	Cl	-C≡C-	4	7
C-200	H	H	Cl	-C≡C-	4	8

[0081]

[表14]

化合物番号	Ra	Rb	Rd	Q	n	m	化合物番号	Ra	Rb	Rd	Q	n	m
C-201	Br	H	H	-O-	3	7	C-251	H	H	Br	単結合	4	7
C-202	Br	H	H	-O-	3	8	C-252	H	H	Br	単結合	4	8
C-203	Br	H	H	-O-	4	7	C-253	H	H	Br	-C=C-	3	7
C-204	Br	H	H	-O-	4	8	C-254	H	H	Br	-C=C-	3	8
C-205	Br	H	H	-S-	3	7	C-255	H	H	Br	-C=C-	4	7
C-206	Br	H	H	-S-	3	8	C-256	H	H	Br	-C=C-	4	8
C-207	Br	H	H	-S-	4	7	C-257	H	H	Br	-C≡C-	3	7
C-208	Br	H	H	-S-	4	8	C-258	H	H	Br	-C≡C-	3	8
C-209	Br	H	H	単結合	3	7	C-259	H	H	Br	-C≡C-	4	7
C-210	Br	H	H	単結合	3	8	C-260	H	H	Br	-C≡C-	4	8
C-211	Br	H	H	単結合	4	7	C-261	Me	H	H	-O-	3	7
C-212	Br	H	H	単結合	4	8	C-262	Me	H	H	-O-	3	8
C-213	Br	H	H	-C=C-	3	7	C-263	Me	H	H	-O-	4	7
C-214	Br	H	H	-C=C-	3	8	C-264	Me	H	H	-O-	4	8
C-215	Br	H	H	-C=C-	4	7	C-265	Me	H	H	-S-	3	7
C-216	Br	H	H	-C=C-	4	8	C-266	Me	H	H	-S-	3	8
C-217	Br	H	H	-C≡C-	3	7	C-267	Me	H	H	-S-	4	7
C-218	Br	H	H	-C≡C-	3	8	C-268	Me	H	H	-S-	4	8
C-219	Br	H	H	-C≡C-	4	7	C-269	Me	H	H	単結合	3	7
C-220	Br	H	H	-C≡C-	4	8	C-270	Me	H	H	単結合	3	8
C-221	H	Br	H	-O-	3	7	C-271	Me	H	H	単結合	4	7
C-222	H	Br	H	-O-	3	8	C-272	Me	H	H	単結合	4	8
C-223	H	Br	H	-O-	4	7	C-273	Me	H	H	-C=C-	3	7
C-224	H	Br	H	-O-	4	8	C-274	Me	H	H	-C=C-	3	8
C-225	H	Br	H	-S-	3	7	C-275	Me	H	H	-C=C-	4	7
C-226	H	Br	H	-S-	3	8	C-276	Me	H	H	-C=C-	4	8
C-227	H	Br	H	-S-	4	7	C-277	Me	H	H	-C≡C-	3	7
C-228	H	Br	H	-S-	4	8	C-278	Me	H	H	-C≡C-	3	8
C-229	H	Br	H	単結合	3	7	C-279	Me	H	H	-C≡C-	4	7
C-230	H	Br	H	単結合	3	8	C-280	Me	H	H	-C≡C-	4	8
C-231	H	Br	H	単結合	4	7	C-281	H	Me	H	-O-	3	7
C-232	H	Br	H	単結合	4	8	C-282	H	Me	H	-O-	3	8
C-233	H	Br	H	-C=C-	3	7	C-283	H	Me	H	-O-	4	7
C-234	H	Br	H	-C=C-	3	8	C-284	H	Me	H	-O-	4	8
C-235	H	Br	H	-C=C-	4	7	C-285	H	Me	H	-S-	3	7
C-236	H	Br	H	-C=C-	4	8	C-286	H	Me	H	-S-	3	8
C-237	H	Br	H	-C≡C-	3	7	C-287	H	Me	H	-S-	4	7
C-238	H	Br	H	-C≡C-	3	8	C-288	H	Me	H	-S-	4	8
C-239	H	Br	H	-C≡C-	4	7	C-289	H	Me	H	単結合	3	7
C-240	H	Br	H	-C≡C-	4	8	C-290	H	Me	H	単結合	3	8
C-241	H	H	Br	-O-	3	7	C-291	H	Me	H	単結合	4	7
C-242	H	H	Br	-O-	3	8	C-292	H	Me	H	単結合	4	8
C-243	H	H	Br	-O-	4	7	C-293	H	Me	H	-C=C-	3	7
C-244	H	H	Br	-O-	4	8	C-294	H	Me	H	-C=C-	3	8
C-245	H	H	Br	-S-	3	7	C-295	H	Me	H	-C=C-	4	7
C-246	H	H	Br	-S-	3	8	C-296	H	Me	H	-C=C-	4	8
C-247	H	H	Br	-S-	4	7	C-297	H	Me	H	-C≡C-	3	7
C-248	H	H	Br	-S-	4	8	C-298	H	Me	H	-C≡C-	3	8
C-249	H	H	Br	単結合	3	7	C-299	H	Me	H	-C≡C-	4	7
C-250	H	H	Br	単結合	3	8	C-300	H	Me	H	-C≡C-	4	8

[0082]

[表15]

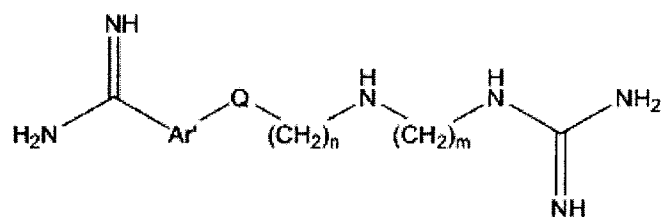
化合物番号	Ra	Rb	Rd	Q	n	m
C-301	H	H	Me	-O-	3	7
C-302	H	H	Me	-O-	3	8
C-303	H	H	Me	-O-	4	7
C-304	H	H	Me	-O-	4	8
C-305	H	H	Me	-S-	3	7
C-306	H	H	Me	-S-	3	8
C-307	H	H	Me	-S-	4	7
C-308	H	H	Me	-S-	4	8
C-309	H	H	Me	単結合	3	7
C-310	H	H	Me	単結合	3	8
C-311	H	H	Me	単結合	4	7
C-312	H	H	Me	単結合	4	8
C-313	H	H	Me	-C=C-	3	7
C-314	H	H	Me	-C=C-	3	8
C-315	H	H	Me	-C=C-	4	7
C-316	H	H	Me	-C=C-	4	8
C-317	H	H	Me	-C≡C-	3	7
C-318	H	H	Me	-C≡C-	3	8
C-319	H	H	Me	-C≡C-	4	7
C-320	H	H	Me	-C≡C-	4	8
C-321	MeO	H	H	-O-	3	7
C-322	MeO	H	H	-O-	3	8
C-323	MeO	H	H	-O-	4	7
C-324	MeO	H	H	-O-	4	8
C-325	MeO	H	H	-S-	3	7
C-326	MeO	H	H	-S-	3	8
C-327	MeO	H	H	-S-	4	7
C-328	MeO	H	H	-S-	4	8
C-329	MeO	H	H	単結合	3	7
C-330	MeO	H	H	単結合	3	8
C-331	MeO	H	H	単結合	4	7
C-332	MeO	H	H	単結合	4	8
C-333	MeO	H	H	-C=C-	3	7
C-334	MeO	H	H	-C=C-	3	8
C-335	MeO	H	H	-C=C-	4	7
C-336	MeO	H	H	-C=C-	4	8
C-337	MeO	H	H	-C≡C-	3	7
C-338	MeO	H	H	-C≡C-	3	8
C-339	MeO	H	H	-C≡C-	4	7
C-340	MeO	H	H	-C≡C-	4	8
C-341	H	MeO	H	-O-	3	7
C-342	H	MeO	H	-O-	3	8
C-343	H	MeO	H	-O-	4	7
C-344	H	MeO	H	-O-	4	8
C-345	H	MeO	H	-S-	3	7
C-346	H	MeO	H	-S-	3	8
C-347	H	MeO	H	-S-	4	7
C-348	H	MeO	H	-S-	4	8
C-349	H	MeO	H	単結合	3	7
C-350	H	MeO	H	単結合	3	8
C-351	H	MeO	H	単結合	4	7
C-352	H	MeO	H	単結合	4	8
C-353	H	MeO	H	-C=C-	3	7
C-354	H	MeO	H	-C=C-	3	8
C-355	H	MeO	H	-C=C-	4	7
C-356	H	MeO	H	-C=C-	4	8
C-357	H	MeO	H	-C≡C-	3	7
C-358	H	MeO	H	-C≡C-	3	8
C-359	H	MeO	H	-C≡C-	4	7
C-360	H	MeO	H	-C≡C-	4	8
C-361	H	H	MeO	-O-	3	7
C-362	H	H	MeO	-O-	3	8
C-363	H	H	MeO	-O-	4	7
C-364	H	H	MeO	-O-	4	8
C-365	H	H	MeO	-S-	3	7
C-366	H	H	MeO	-S-	3	8
C-367	H	H	MeO	-S-	4	7
C-368	H	H	MeO	-S-	4	8
C-369	H	H	MeO	単結合	3	7
C-370	H	H	MeO	単結合	3	8
C-371	H	H	MeO	単結合	4	7
C-372	H	H	MeO	単結合	4	8
C-373	H	H	MeO	-C=C-	3	7
C-374	H	H	MeO	-C=C-	3	8
C-375	H	H	MeO	-C=C-	4	7
C-376	H	H	MeO	-C=C-	4	8
C-377	H	H	MeO	-C≡C-	3	7
C-378	H	H	MeO	-C≡C-	3	8
C-379	H	H	MeO	-C≡C-	4	7
C-380	H	H	MeO	-C≡C-	4	8
C-381	CF ₃	H	H	-O-	3	7
C-382	CF ₃	H	H	-O-	3	8
C-383	CF ₃	H	H	-O-	4	7
C-384	CF ₃	H	H	-O-	4	8
C-385	CF ₃	H	H	-S-	3	7
C-386	CF ₃	H	H	-S-	3	8
C-387	CF ₃	H	H	-S-	4	7
C-388	CF ₃	H	H	-S-	4	8
C-389	CF ₃	H	H	単結合	3	7
C-390	CF ₃	H	H	単結合	3	8
C-391	CF ₃	H	H	単結合	4	7
C-392	CF ₃	H	H	単結合	4	8
C-393	CF ₃	H	H	-C=C-	3	7
C-394	CF ₃	H	H	-C=C-	3	8
C-395	CF ₃	H	H	-C=C-	4	7
C-396	CF ₃	H	H	-C=C-	4	8
C-397	CF ₃	H	H	-C≡C-	3	7
C-398	CF ₃	H	H	-C≡C-	3	8
C-399	CF ₃	H	H	-C≡C-	4	7
C-400	CF ₃	H	H	-C≡C-	4	8

[0083]

[表16]

化合物番号	Ra	Rb	Rd	Q	n	m
C-401	H	CF ₃	H	-O-	3	7
C-402	H	CF ₃	H	-O-	3	8
C-403	H	CF ₃	H	-O-	4	7
C-404	H	CF ₃	H	-O-	4	8
C-405	H	CF ₃	H	-S-	3	7
C-406	H	CF ₃	H	-S-	3	8
C-407	H	CF ₃	H	-S-	4	7
C-408	H	CF ₃	H	-S-	4	8
C-409	H	CF ₃	H	単結合	3	7
C-410	H	CF ₃	H	単結合	3	8
C-411	H	CF ₃	H	単結合	4	7
C-412	H	CF ₃	H	単結合	4	8
C-413	H	CF ₃	H	-C=C-	3	7
C-414	H	CF ₃	H	-C=C-	3	8
C-415	H	CF ₃	H	-C=C-	4	7
C-416	H	CF ₃	H	-C=C-	4	8
C-417	H	CF ₃	H	-C≡C-	3	7
C-418	H	CF ₃	H	-C≡C-	3	8
C-419	H	CF ₃	H	-C≡C-	4	7
C-420	H	CF ₃	H	-C≡C-	4	8
C-421	H	H	CF ₃	-O-	3	7
C-422	H	H	CF ₃	-O-	3	8
C-423	H	H	CF ₃	-O-	4	7
C-424	H	H	CF ₃	-O-	4	8
C-425	H	H	CF ₃	-S-	3	7
C-426	H	H	CF ₃	-S-	3	8
C-427	H	H	CF ₃	-S-	4	7
C-428	H	H	CF ₃	-S-	4	8
C-429	H	H	CF ₃	単結合	3	7
C-430	H	H	CF ₃	単結合	3	8
C-431	H	H	CF ₃	単結合	4	7
C-432	H	H	CF ₃	単結合	4	8
C-433	H	H	CF ₃	-C=C-	3	7
C-434	H	H	CF ₃	-C=C-	3	8
C-435	H	H	CF ₃	-C=C-	4	7
C-436	H	H	CF ₃	-C=C-	4	8
C-437	H	H	CF ₃	-C≡C-	3	7
C-438	H	H	CF ₃	-C≡C-	3	8
C-439	H	H	CF ₃	-C≡C-	4	7
C-440	H	H	CF ₃	-C≡C-	4	8
C-441	OCF ₃	H	H	-O-	3	7
C-442	OCF ₃	H	H	-O-	3	8
C-443	OCF ₃	H	H	-O-	4	7
C-444	OCF ₃	H	H	-O-	4	8
C-445	OCF ₃	H	H	-S-	3	7
C-446	OCF ₃	H	H	-S-	3	8
C-447	OCF ₃	H	H	-S-	4	7
C-448	OCF ₃	H	H	-S-	4	8
C-449	OCF ₃	H	H	単結合	3	7
C-450	OCF ₃	H	H	単結合	3	8
C-451	OCF ₃	H	H	単結合	4	7
C-452	OCF ₃	H	H	単結合	4	8
C-453	OCF ₃	H	H	-C=C-	3	7
C-454	OCF ₃	H	H	-C=C-	3	8
C-455	OCF ₃	H	H	-C=C-	4	7
C-456	OCF ₃	H	H	-C=C-	4	8
C-457	OCF ₃	H	H	-C≡C-	3	7
C-458	OCF ₃	H	H	-C≡C-	3	8
C-459	OCF ₃	H	H	-C≡C-	4	7
C-460	OCF ₃	H	H	-C≡C-	4	8
C-461	H	OCF ₃	H	-O-	3	7
C-462	H	OCF ₃	H	-O-	3	8
C-463	H	OCF ₃	H	-O-	4	7
C-464	H	OCF ₃	H	-O-	4	8
C-465	H	OCF ₃	H	-S-	3	7
C-466	H	OCF ₃	H	-S-	3	8
C-467	H	OCF ₃	H	-S-	4	7
C-468	H	OCF ₃	H	-S-	4	8
C-469	H	OCF ₃	H	単結合	3	7
C-470	H	OCF ₃	H	単結合	3	8
C-471	H	OCF ₃	H	単結合	4	7
C-472	H	OCF ₃	H	単結合	4	8
C-473	H	OCF ₃	H	-C=C-	3	7
C-474	H	OCF ₃	H	-C=C-	3	8
C-475	H	OCF ₃	H	-C=C-	4	7
C-476	H	OCF ₃	H	-C=C-	4	8
C-477	H	OCF ₃	H	-C≡C-	3	7
C-478	H	OCF ₃	H	-C≡C-	3	8
C-479	H	OCF ₃	H	-C≡C-	4	7
C-480	H	OCF ₃	H	-C≡C-	4	8
C-481	H	H	OCF ₃	-O-	3	7
C-482	H	H	OCF ₃	-O-	3	8
C-483	H	H	OCF ₃	-O-	4	7
C-484	H	H	OCF ₃	-O-	4	8
C-485	H	H	OCF ₃	-S-	3	7
C-486	H	H	OCF ₃	-S-	3	8
C-487	H	H	OCF ₃	-S-	4	7
C-488	H	H	OCF ₃	-S-	4	8
C-489	H	H	OCF ₃	単結合	3	7
C-490	H	H	OCF ₃	単結合	3	8
C-491	H	H	OCF ₃	単結合	4	7
C-492	H	H	OCF ₃	単結合	4	8
C-493	H	H	OCF ₃	-C=C-	3	7
C-494	H	H	OCF ₃	-C=C-	3	8
C-495	H	H	OCF ₃	-C=C-	4	7
C-496	H	H	OCF ₃	-C=C-	4	8
C-497	H	H	OCF ₃	-C≡C-	3	7
C-498	H	H	OCF ₃	-C≡C-	3	8
C-499	H	H	OCF ₃	-C≡C-	4	7
C-500	H	H	OCF ₃	-C≡C-	4	8

[化15]

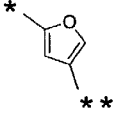
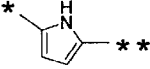
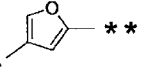
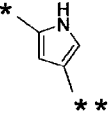
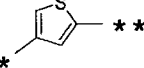
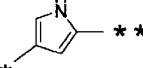


[0085] [表17]

化合物番号	Ar'	Q	n	m	化合物番号	Ar'	Q	n	m
D-1		-O-	2	7	D-49		-O-	3	6
D-2			2	8	D-50			3	7
D-3			3	6	D-51			3	8
D-4			3	7	D-52			3	9
D-5			3	8	D-53			4	7
D-6			3	9	D-54			4	8
D-7			4	7	D-55			4	9
D-8			4	8	D-56		単結合	3	6
D-9			4	9	D-57			3	7
D-10		単結合	2	7	D-58			3	8
D-11			2	8	D-59			3	9
D-12			3	6	D-60			4	7
D-13			3	7	D-61			4	8
D-14			3	8	D-62			4	9
D-15			3	9	D-63		-S-	3	6
D-16		-S-	4	7	D-64			3	7
D-17			4	8	D-65			3	8
D-18			4	9	D-66		-O-	3	9
D-19		-S-	2	7	D-67			4	7
D-20			2	8	D-68			4	8
D-21			3	6	D-69			4	9
D-22			3	7	D-70		-O-	3	6
D-23			3	8	D-71			3	7
D-24			3	9	D-72			3	8
D-25		-O-	4	7	D-73		単結合	3	9
D-26			4	8	D-74			4	7
D-27			4	9	D-75			4	8
D-28		-O-	3	6	D-76			4	9
D-29			3	7	D-77		単結合	3	6
D-30			3	8	D-78			3	7
D-31			3	9	D-79			3	8
D-32			4	7	D-80			3	9
D-33		単結合	4	8	D-81		-S-	4	7
D-34			4	9	D-82			4	8
D-35			3	6	D-83			4	9
D-36			3	7	D-84			3	6
D-37			3	8	D-85			3	7
D-38			3	9	D-86			3	8
D-39		-S-	4	7	D-87			3	9
D-40			4	8	D-88			4	7
D-41			4	9	D-89			4	8
D-42			3	6	D-90			4	9
D-43			3	7					
D-44			3	8					
D-45			3	9					
D-46			4	7					
D-47			4	8					
D-48			4	9					

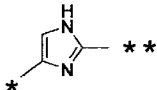
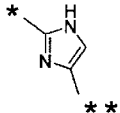
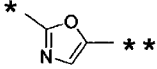
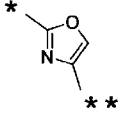
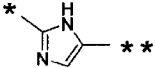
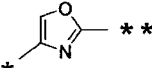
[0086]

[表18]

化合物番号	Ar'	Q	n	m	化合物番号	Ar'	Q	n	m
D-91		-O-	3	6	D-154		-O-	3	6
D-92			3	7	D-155			3	7
D-93			3	8	D-156			3	8
D-94			3	9	D-157			3	9
D-95			4	7	D-158			4	7
D-96		単結合	4	8	D-159		単結合	4	8
D-97			4	9	D-160			4	9
D-98			3	6	D-161			3	6
D-99			3	7	D-162			3	7
D-100			3	8	D-163			3	8
D-101			3	9	D-164			3	9
D-102			4	7	D-165			4	7
D-103		-S-	4	8	D-166			4	8
D-104			4	9	D-167			4	9
D-105			3	6	D-168		-S-	3	6
D-106			3	7	D-169			3	7
D-107			3	8	D-170			3	8
D-108			3	9	D-171			3	9
D-109			4	7	D-172			4	7
D-110			4	8	D-173			4	8
D-111			4	9	D-174			4	9
D-112		-O-	3	6	D-175		-O-	3	6
D-113			3	7	D-176			3	7
D-114			3	8	D-177			3	8
D-115			3	9	D-178			3	9
D-116			4	7	D-179			4	7
D-117		単結合	4	8	D-180			4	8
D-118			4	9	D-181			4	9
D-119			3	6	D-182		単結合	3	6
D-120			3	7	D-183			3	7
D-121			3	8	D-184			3	8
D-122			3	9	D-185			3	9
D-123			4	7	D-186			4	7
D-124		-S-	4	8	D-187			4	8
D-125			4	9	D-188			4	9
D-126			3	6	D-189		-S-	3	6
D-127			3	7	D-190			3	7
D-128			3	8	D-191			3	8
D-129			3	9	D-192			3	9
D-130			4	7	D-193			4	7
D-131			4	8	D-194			4	8
D-132			4	9	D-195			4	9
D-133		-O-	3	6	D-196		-O-	3	6
D-134			3	7	D-197			3	7
D-135			3	8	D-198			3	8
D-136			3	9	D-199			3	9
D-137			4	7	D-200			4	7
D-138		単結合	4	8	D-201			4	8
D-139			4	9	D-202			4	9
D-140			3	6	D-203		単結合	3	6
D-141			3	7	D-204			3	7
D-142			3	8	D-205			3	8
D-143			3	9	D-206			3	9
D-144			4	7	D-207			4	7
D-145		-S-	4	8	D-208			4	8
D-146			4	9	D-209			4	9
D-147			3	6	D-210		-S-	3	6
D-148			3	7	D-211			3	7
D-149			3	8	D-212			3	8
D-150			3	9	D-213			3	9
D-151			4	7	D-214			4	7
D-152			4	8	D-215			4	8
D-153			4	9	D-216			4	9

[0087]

[表19]

化合物番号	Ar'	Q	n	m	化合物番号	Ar'	Q	n	m
D-217		-O-	3	6	D-280		-O-	3	6
D-218			3	7	D-281			3	7
D-219			3	8	D-282			3	8
D-220			3	9	D-283			3	9
D-221			4	7	D-284			4	7
D-222		単結合	4	8	D-285		単結合	4	8
D-223			4	9	D-286			4	9
D-224			3	6	D-287			3	6
D-225			3	7	D-288			3	7
D-226			3	8	D-289			3	8
D-227			3	9	D-290			3	9
D-228			4	7	D-291			4	7
D-229		-S-	4	8	D-292			4	8
D-230			4	9	D-293			4	9
D-231			3	6	D-294		-S-	3	6
D-232			3	7	D-295			3	7
D-233			3	8	D-296			3	8
D-234			3	9	D-297			3	9
D-235			4	7	D-298			4	7
D-236			4	8	D-299			4	8
D-237			4	9	D-300			4	9
D-238		-O-	3	6	D-301		-O-	3	6
D-239			3	7	D-302			3	7
D-240			3	8	D-303			3	8
D-241			3	9	D-304			3	9
D-242			4	7	D-305			4	7
D-243		単結合	4	8	D-306		単結合	4	8
D-244			4	9	D-307			4	9
D-245			3	6	D-308			3	6
D-246			3	7	D-309			3	7
D-247			3	8	D-310			3	8
D-248			3	9	D-311			3	9
D-249		-S-	4	7	D-312		-S-	4	7
D-250			4	8	D-313			4	8
D-251			4	9	D-314			4	9
D-252			3	6	D-315			3	6
D-253			3	7	D-316			3	7
D-254			3	8	D-317			3	8
D-255			3	9	D-318			3	9
D-256			4	7	D-319			4	7
D-257			4	8	D-320			4	8
D-258			4	9	D-321			4	9
D-259		-O-	3	6	D-322		-O-	3	6
D-260			3	7	D-323			3	7
D-261			3	8	D-324			3	8
D-262			3	9	D-325			3	9
D-263			4	7	D-326			4	7
D-264		単結合	4	8	D-327		単結合	4	8
D-265			4	9	D-328			4	9
D-266			3	6	D-329			3	6
D-267			3	7	D-330			3	7
D-268			3	8	D-331			3	8
D-269			3	9	D-332			3	9
D-270		-S-	4	7	D-333		-S-	4	7
D-271			4	8	D-334			4	8
D-272			4	9	D-335			4	9
D-273			3	6	D-336			3	6
D-274			3	7	D-337			3	7
D-275			3	8	D-338			3	8
D-276			3	9	D-339			3	9
D-277			4	7	D-340			4	7
D-278			4	8	D-341			4	8
D-279			4	9	D-342			4	9

[0088]

[表20]

化合物番号	Ar'	Q	n	m	化合物番号	Ar'	Q	n	m
D-343		-O-	3	6	D-406		-O-	3	6
D-344			3	7	D-407			3	7
D-345			3	8	D-408			3	8
D-346			3	9	D-409			3	9
D-347			4	7	D-410			4	7
D-348		単結合	4	8	D-411		単結合	4	8
D-349			4	9	D-412			4	9
D-350			3	6	D-413			3	6
D-351			3	7	D-414			3	7
D-352			3	8	D-415			3	8
D-353			3	9	D-416			3	9
D-354		-S-	4	7	D-417			4	7
D-355			4	8	D-418			4	8
D-356			4	9	D-419			4	9
D-357			3	6	D-420		-S-	3	6
D-358			3	7	D-421			3	7
D-359			3	8	D-422			3	8
D-360			3	9	D-423			3	9
D-361			4	7	D-424			4	7
D-362			4	8	D-425			4	8
D-363			4	9	D-426			4	9
D-364		-O-	3	6	D-427		-O-	3	6
D-365			3	7	D-428			3	7
D-366			3	8	D-429			3	8
D-367			3	9	D-430			3	9
D-368			4	7	D-431		単結合	4	7
D-369		単結合	4	8	D-432			4	8
D-370			4	9	D-433			4	9
D-371			3	6	D-434			3	6
D-372			3	7	D-435			3	7
D-373			3	8	D-436			3	8
D-374			3	9	D-437			3	9
D-375		-S-	4	7	D-438			4	7
D-376			4	8	D-439			4	8
D-377			4	9	D-440		-S-	4	9
D-378			3	6	D-441			3	6
D-379			3	7	D-442			3	7
D-380			3	8	D-443			3	8
D-381			3	9	D-444			3	9
D-382			4	7	D-445			4	7
D-383			4	8	D-446			4	8
D-384			4	9	D-447			4	9
D-385		-O-	3	6	D-448		-O-	3	6
D-386			3	7	D-449			3	7
D-387			3	8	D-450			3	8
D-388			3	9	D-451			3	9
D-389			4	7	D-452		単結合	4	7
D-390		単結合	4	8	D-453			4	8
D-391			4	9	D-454			4	9
D-392			3	6	D-455			3	6
D-393			3	7	D-456			3	7
D-394			3	8	D-457			3	8
D-395			3	9	D-458			3	9
D-396		-S-	4	7	D-459			4	7
D-397			4	8	D-460		-S-	4	8
D-398			4	9	D-461			4	9
D-399			3	6	D-462			3	6
D-400			3	7	D-463			3	7
D-401			3	8	D-464			3	8
D-402			3	9	D-465			3	9
D-403			4	7	D-466			4	7
D-404			4	8	D-467			4	8
D-405			4	9	D-468			4	9

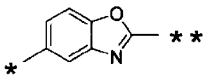
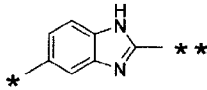
[0089]

[表21]

化合物番号	Ar'	Q	n	m	化合物番号	Ar'	Q	n	m
D-469		-O-	3	6	D-532		-O-	3	6
D-470			3	7	D-533			3	7
D-471			3	8	D-534			3	8
D-472			3	9	D-535			3	9
D-473			4	7	D-536		単結合	4	7
D-474		単結合	4	8	D-537			4	8
D-475			4	9	D-538			4	9
D-476			3	6	D-539			3	6
D-477			3	7	D-540			3	7
D-478			3	8	D-541			3	8
D-479			3	9	D-542			3	9
D-480			4	7	D-543		-S-	4	7
D-481		-S-	4	8	D-544			4	8
D-482			4	9	D-545			4	9
D-483			3	6	D-546			3	6
D-484			3	7	D-547			3	7
D-485			3	8	D-548			3	8
D-486			3	9	D-549			3	9
D-487			4	7	D-550			4	7
D-488			4	8	D-551			4	8
D-489			4	9	D-552			4	9
D-490		-O-	3	6	D-553		-O-	3	6
D-491			3	7	D-554			3	7
D-492			3	8	D-555			3	8
D-493			3	9	D-556			3	9
D-494			4	7	D-557		単結合	4	7
D-495		単結合	4	8	D-558			4	8
D-496			4	9	D-559			4	9
D-497			3	6	D-560			3	6
D-498			3	7	D-561			3	7
D-499			3	8	D-562			3	8
D-500			3	9	D-563			3	9
D-501			4	7	D-564		-S-	4	7
D-502		-S-	4	8	D-565			4	8
D-503			4	9	D-566			4	9
D-504			3	6	D-567			3	6
D-505			3	7	D-568			3	7
D-506			3	8	D-569			3	8
D-507			3	9	D-570			3	9
D-508			4	7	D-571			4	7
D-509			4	8	D-572			4	8
D-510			4	9	D-573			4	9
D-511		-O-	3	6	D-574		-O-	3	6
D-512			3	7	D-575			3	7
D-513			3	8	D-576			3	8
D-514			3	9	D-577			3	9
D-515			4	7	D-578		単結合	4	7
D-516		単結合	4	8	D-579			4	8
D-517			4	9	D-580			4	9
D-518			3	6	D-581			3	6
D-519			3	7	D-582			3	7
D-520			3	8	D-583			3	8
D-521			3	9	D-584		-S-	3	9
D-522		-S-	4	7	D-585			4	7
D-523			4	8	D-586			4	8
D-524			4	9	D-587			4	9
D-525			3	6	D-588			3	6
D-526			3	7	D-589			3	7
D-527			3	8	D-590			3	8
D-528			3	9	D-591			3	9
D-529			4	7	D-592			4	7
D-530			4	8	D-593			4	8
D-531			4	9	D-594			4	9

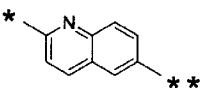
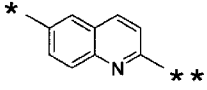
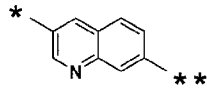
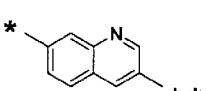
[0090]

[表22]

化合物番号	Ar'	Q	n	m	化合物番号	Ar'	Q	n	m
D-595		-O-	3	6	D-616		-O-	3	6
D-596			3	7	D-617			3	7
D-597			3	8	D-618			3	8
D-598			3	9	D-619			3	9
D-599			4	7	D-620			4	7
D-600			4	8	D-621			4	8
D-601		単結合	4	9	D-622			4	9
D-602			3	6	D-623		単結合	3	6
D-603			3	7	D-624			3	7
D-604			3	8	D-625			3	8
D-605			3	9	D-626			3	9
D-606			4	7	D-627			4	7
D-607		-S-	4	8	D-628		-S-	4	8
D-608			4	9	D-629			4	9
D-609			3	6	D-630			3	6
D-610			3	7	D-631			3	7
D-611			3	8	D-632			3	8
D-612			3	9	D-633			3	9
D-613			4	7	D-634			4	7
D-614			4	8	D-635			4	8
D-615			4	9	D-636			4	9

[0091]

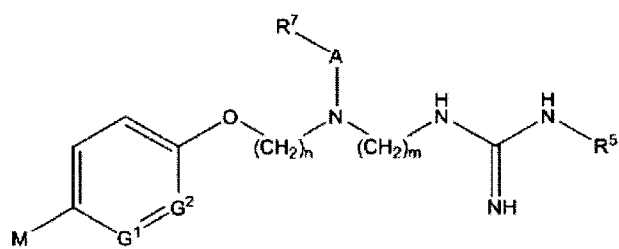
[表23]

化合物番号	Ar'	Q	n	m	化合物番号	Ar'	Q	n	m
D-637		-O-	2	7	D-691		-O-	2	7
D-638			2	8	D-692			2	8
D-639			3	6	D-693			3	6
D-640			3	7	D-694			3	7
D-641			3	8	D-695			3	8
D-642			3	9	D-696			3	9
D-643			4	7	D-697			4	7
D-644			4	8	D-698			4	8
D-645			4	9	D-699			4	9
D-646		単結合	2	7	D-700		単結合	2	7
D-647			2	8	D-701			2	8
D-648			3	6	D-702			3	6
D-649			3	7	D-703			3	7
D-650			3	8	D-704			3	8
D-651			3	9	D-705			3	9
D-652			4	7	D-706			4	7
D-653			4	8	D-707			4	8
D-654			4	9	D-708			4	9
D-655		-S-	2	7	D-709		-S-	2	7
D-656			2	8	D-710			2	8
D-657			3	6	D-711			3	6
D-658			3	7	D-712			3	7
D-659			3	8	D-713			3	8
D-660			3	9	D-714			3	9
D-661			4	7	D-715			4	7
D-662			4	8	D-716			4	8
D-663			4	9	D-717			4	9
D-664		-O-	2	7	D-718		-O-	2	7
D-665			2	8	D-719			2	8
D-666			3	6	D-720			3	6
D-667			3	7	D-721			3	7
D-668			3	8	D-722			3	8
D-669			3	9	D-723			3	9
D-670			4	7	D-724			4	7
D-671			4	8	D-725			4	8
D-672			4	9	D-726			4	9
D-673		単結合	2	7	D-727		単結合	2	7
D-674			2	8	D-728			2	8
D-675			3	6	D-729			3	6
D-676			3	7	D-730			3	7
D-677			3	8	D-731			3	8
D-678			3	9	D-732			3	9
D-679			4	7	D-733			4	7
D-680			4	8	D-734			4	8
D-681			4	9	D-735			4	9
D-682		-S-	2	7	D-736		-S-	2	7
D-683			2	8	D-737			2	8
D-684			3	6	D-738			3	6
D-685			3	7	D-739			3	7
D-686			3	8	D-740			3	8
D-687			3	9	D-741			3	9
D-688			4	7	D-742			4	7
D-689			4	8	D-743			4	8
D-690			4	9	D-744			4	9

[0092] 表中*は、アミノ基との結合位置を意味し、**はQとの結合位置を意味する。

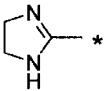
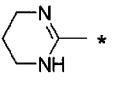
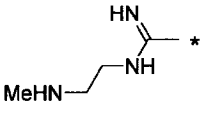
[0093]

[化16]



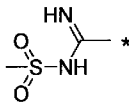
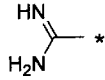
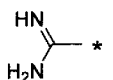
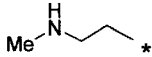
[0094]

[表24]

化合物番号	M	A	R ⁷	R ⁵	G ¹	G ²	n	m
H-1		単結合	H	H	N	CH	3	7
H-2		単結合	H	H	N	CH	3	8
H-3		単結合	H	H	N	CH	3	9
H-4		単結合	H	H	N	CH	4	7
H-5		単結合	H	H	N	CH	4	8
H-6		単結合	H	H	N	CH	4	9
H-7		単結合	H	H	CH	N	3	7
H-8		単結合	H	H	CH	N	3	8
H-9		単結合	H	H	CH	N	3	9
H-10		単結合	H	H	CH	N	4	7
H-11		単結合	H	H	CH	N	4	8
H-12		単結合	H	H	CH	N	4	9
H-13		単結合	H	H	CH	CH	3	7
H-14		単結合	H	H	CH	CH	3	8
H-15		単結合	H	H	CH	CH	3	9
H-16		単結合	H	H	CH	CH	4	7
H-17		単結合	H	H	CH	CH	4	8
H-18		単結合	H	H	CH	CH	4	9
H-19		単結合	H	H	N	CH	3	7
H-20		単結合	H	H	N	CH	3	8
H-21		単結合	H	H	N	CH	3	9
H-22		単結合	H	H	N	CH	4	7
H-23		単結合	H	H	N	CH	4	8
H-24		単結合	H	H	N	CH	4	9
H-25		単結合	H	H	CH	N	3	7
H-26		単結合	H	H	CH	N	3	8
H-27		単結合	H	H	CH	N	3	9
H-28		単結合	H	H	CH	N	4	7
H-29		単結合	H	H	CH	N	4	8
H-30		単結合	H	H	CH	N	4	9
H-31		単結合	H	H	CH	CH	3	7
H-32		単結合	H	H	CH	CH	3	8
H-33		単結合	H	H	CH	CH	3	9
H-34		単結合	H	H	CH	CH	4	7
H-35		単結合	H	H	CH	CH	4	8
H-36		単結合	H	H	CH	CH	4	9
H-37		単結合	H	H	N	CH	3	7
H-38		単結合	H	H	N	CH	3	8
H-39		単結合	H	H	N	CH	3	9
H-40		単結合	H	H	N	CH	4	7
H-41		単結合	H	H	N	CH	4	8
H-42		単結合	H	H	N	CH	4	9
H-43		単結合	H	H	CH	N	3	7
H-44		単結合	H	H	CH	N	3	8
H-45		単結合	H	H	CH	N	3	9
H-46		単結合	H	H	CH	N	4	7
H-47		単結合	H	H	CH	N	4	8
H-48		単結合	H	H	CH	N	4	9
H-49		単結合	H	H	CH	CH	3	7
H-50		単結合	H	H	CH	CH	3	8
H-51		単結合	H	H	CH	CH	3	9
H-52		単結合	H	H	CH	CH	4	7
H-53		単結合	H	H	CH	CH	4	8
H-54		単結合	H	H	CH	CH	4	9

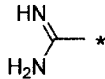
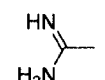
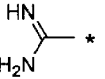
[0095]

[表25]

化合物番号	M	A	R ⁷	R ⁵	G ¹	G ²	n	m
H-55		単結合	H	H	N	CH	3	7
H-56		単結合	H	H	N	CH	3	8
H-57		単結合	H	H	N	CH	3	9
H-58		単結合	H	H	N	CH	4	7
H-59		単結合	H	H	N	CH	4	8
H-60		単結合	H	H	N	CH	4	9
H-61		単結合	H	H	CH	N	3	7
H-62		単結合	H	H	CH	N	3	8
H-63		単結合	H	H	CH	N	3	9
H-64		単結合	H	H	CH	N	4	7
H-65		単結合	H	H	CH	N	4	8
H-66		単結合	H	H	CH	N	4	9
H-67		単結合	H	H	CH	CH	3	7
H-68		単結合	H	H	CH	CH	3	8
H-69		単結合	H	H	CH	CH	3	9
H-70		単結合	H	H	CH	CH	4	7
H-71		単結合	H	H	CH	CH	4	8
H-72		単結合	H	H	CH	CH	4	9
H-73		単結合	Me	H	N	CH	3	7
H-74		単結合	Me	H	N	CH	3	8
H-75		単結合	Me	H	N	CH	3	9
H-76		単結合	Me	H	N	CH	4	7
H-77		単結合	Me	H	N	CH	4	8
H-78		単結合	Me	H	N	CH	4	9
H-79		単結合	Me	H	CH	N	3	7
H-80		単結合	Me	H	CH	N	3	8
H-81		単結合	Me	H	CH	N	3	9
H-82		単結合	Me	H	CH	N	4	7
H-83		単結合	Me	H	CH	N	4	8
H-84		単結合	Me	H	CH	N	4	9
H-85		単結合	Me	H	CH	CH	3	7
H-86		単結合	Me	H	CH	CH	3	8
H-87		単結合	Me	H	CH	CH	3	9
H-88		単結合	Me	H	CH	CH	4	7
H-89		単結合	Me	H	CH	CH	4	8
H-90		単結合	Me	H	CH	CH	4	9
H-91		単結合		H	N	CH	3	7
H-92		単結合		H	N	CH	3	8
H-93		単結合		H	N	CH	3	9
H-94		単結合		H	N	CH	4	7
H-95		単結合		H	N	CH	4	8
H-96		単結合		H	N	CH	4	9
H-97		単結合		H	CH	N	3	7
H-98		単結合		H	CH	N	3	8
H-99		単結合		H	CH	N	3	9
H-100		単結合		H	CH	N	4	7
H-101		単結合		H	CH	N	4	8
H-102		単結合		H	CH	N	4	9
H-103		単結合		H	CH	CH	3	7
H-104		単結合		H	CH	CH	3	8
H-105		単結合		H	CH	CH	3	9
H-106		単結合		H	CH	CH	4	7
H-107		単結合		H	CH	CH	4	8
H-108		単結合		H	CH	CH	4	9

[0096]

[表26]

化合物番号	M	A	R ⁷	R ⁵	G ¹	G ²	n	m
H-109		-C(=O)-	Me	H	N	CH	3	7
H-110		-C(=O)-	Me	H	N	CH	3	8
H-111		-C(=O)-	Me	H	N	CH	3	9
H-112		-C(=O)-	Me	H	N	CH	4	7
H-113		-C(=O)-	Me	H	N	CH	4	8
H-114		-C(=O)-	Me	H	N	CH	4	9
H-115		-C(=O)-	Me	H	CH	N	3	7
H-116		-C(=O)-	Me	H	CH	N	3	8
H-117		-C(=O)-	Me	H	CH	N	3	9
H-118		-C(=O)-	Me	H	CH	N	4	7
H-119		-C(=O)-	Me	H	CH	N	4	8
H-120		-C(=O)-	Me	H	CH	N	4	9
H-121		-C(=O)-	Me	H	CH	CH	3	7
H-122		-C(=O)-	Me	H	CH	CH	3	8
H-123		-C(=O)-	Me	H	CH	CH	3	9
H-124		-C(=O)-	Me	H	CH	CH	4	7
H-125		-C(=O)-	Me	H	CH	CH	4	8
H-126		-C(=O)-	Me	H	CH	CH	4	9
H-127		-C(=O)-	Ph	H	N	CH	3	7
H-128		-C(=O)-	Ph	H	N	CH	3	8
H-129		-C(=O)-	Ph	H	N	CH	3	9
H-130		-C(=O)-	Ph	H	N	CH	4	7
H-131		-C(=O)-	Ph	H	N	CH	4	8
H-132		-C(=O)-	Ph	H	N	CH	4	9
H-133		-C(=O)-	Ph	H	CH	N	3	7
H-134		-C(=O)-	Ph	H	CH	N	3	8
H-135		-C(=O)-	Ph	H	CH	N	3	9
H-136		-C(=O)-	Ph	H	CH	N	4	7
H-137		-C(=O)-	Ph	H	CH	N	4	8
H-138		-C(=O)-	Ph	H	CH	N	4	9
H-139		-C(=O)-	Ph	H	CH	CH	3	7
H-140		-C(=O)-	Ph	H	CH	CH	3	8
H-141		-C(=O)-	Ph	H	CH	CH	3	9
H-142		-C(=O)-	Ph	H	CH	CH	4	7
H-143		-C(=O)-	Ph	H	CH	CH	4	8
H-144		-C(=O)-	Ph	H	CH	CH	4	9
H-145		-SO ₂ -	Me	H	N	CH	3	7
H-146		-SO ₂ -	Me	H	N	CH	3	8
H-147		-SO ₂ -	Me	H	N	CH	3	9
H-148		-SO ₂ -	Me	H	N	CH	4	7
H-149		-SO ₂ -	Me	H	N	CH	4	8
H-150		-SO ₂ -	Me	H	N	CH	4	9
H-151		-SO ₂ -	Me	H	CH	N	3	7
H-152		-SO ₂ -	Me	H	CH	N	3	8
H-153		-SO ₂ -	Me	H	CH	N	3	9
H-154		-SO ₂ -	Me	H	CH	N	4	7
H-155		-SO ₂ -	Me	H	CH	N	4	8
H-156		-SO ₂ -	Me	H	CH	N	4	9
H-157		-SO ₂ -	Me	H	CH	CH	3	7
H-158		-SO ₂ -	Me	H	CH	CH	3	8
H-159		-SO ₂ -	Me	H	CH	CH	3	9
H-160		-SO ₂ -	Me	H	CH	CH	4	7
H-161		-SO ₂ -	Me	H	CH	CH	4	8
H-162		-SO ₂ -	Me	H	CH	CH	4	9

[0097]

[表27]

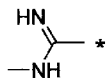
化合物番号	M	A	R ⁷	R ⁶	G ¹	G ²	n	m
H-163		-SO ₂ -	2-NO ₂ -Ph	H	N	CH	3	7
H-164		-SO ₂ -	2-NO ₂ -Ph	H	N	CH	3	8
H-165		-SO ₂ -	2-NO ₂ -Ph	H	N	CH	3	9
H-166		-SO ₂ -	2-NO ₂ -Ph	H	N	CH	4	7
H-167		-SO ₂ -	2-NO ₂ -Ph	H	N	CH	4	8
H-168		-SO ₂ -	2-NO ₂ -Ph	H	N	CH	4	9
H-169		-SO ₂ -	2-NO ₂ -Ph	H	CH	N	3	7
H-170		-SO ₂ -	2-NO ₂ -Ph	H	CH	N	3	8
H-171		-SO ₂ -	2-NO ₂ -Ph	H	CH	N	3	9
H-172		-SO ₂ -	2-NO ₂ -Ph	H	CH	N	4	7
H-173		-SO ₂ -	2-NO ₂ -Ph	H	CH	N	4	8
H-174		-SO ₂ -	2-NO ₂ -Ph	H	CH	N	4	9
H-175		-SO ₂ -	2-NO ₂ -Ph	H	CH	CH	3	7
H-176		-SO ₂ -	2-NO ₂ -Ph	H	CH	CH	3	8
H-177		-SO ₂ -	2-NO ₂ -Ph	H	CH	CH	3	9
H-178		-SO ₂ -	2-NO ₂ -Ph	H	CH	CH	4	7
H-179		単結合	H	Me	N	CH	4	8
H-180		単結合	H	Me	N	CH	4	9
H-181		単結合	H	Me	N	CH	3	7
H-182		単結合	H	Me	N	CH	3	8
H-183		単結合	H	Me	N	CH	3	9
H-184		単結合	H	Me	N	CH	4	7
H-185		単結合	H	Me	N	CH	4	8
H-186		単結合	H	Me	N	CH	4	9
H-187		単結合	H	Me	CH	N	3	7
H-188		単結合	H	Me	CH	N	3	8
H-189		単結合	H	Me	CH	N	3	9
H-190		単結合	H	Me	CH	N	4	7
H-191		単結合	H	Me	CH	N	4	8
H-192		単結合	H	Me	CH	N	4	9
H-193		単結合	H	Me	CH	CH	3	7
H-194		単結合	H	Me	CH	CH	3	8
H-195		単結合	H	Me	CH	CH	3	9
H-196		単結合	H	Me	CH	CH	4	7
H-197		単結合	H		N	CH	4	8
H-198		単結合	H		N	CH	4	9
H-199		単結合	H		N	CH	3	7
H-200		単結合	H		N	CH	3	8
H-201		単結合	H		N	CH	3	9
H-202		単結合	H		N	CH	4	7
H-203		単結合	H		CH	N	4	8
H-204		単結合	H		CH	N	4	9
H-205		単結合	H		CH	N	3	7
H-206		単結合	H		CH	N	3	8
H-207		単結合	H		CH	N	3	9
H-208		単結合	H		CH	N	4	7
H-209		単結合	H		CH	CH	4	8
H-210		単結合	H		CH	CH	4	9
H-211		単結合	H		CH	CH	3	7
H-212		単結合	H		CH	CH	3	8
H-213		単結合	H		CH	CH	3	9
H-214		単結合	H		CH	CH	4	7
H-215		単結合	H		CH	CH	4	8
H-216		単結合	H		CH	CH	4	9

[表28]

化合物番号	M	A	R ⁷	R ⁵	G ¹	G ²	n	m
H-217		単結合	H		N	CH	3	7
H-218		単結合	H		N	CH	3	8
H-219		単結合	H		N	CH	3	9
H-220		単結合	H		N	CH	4	7
H-221		単結合	H		N	CH	4	8
H-222		単結合	H		N	CH	4	9
H-223		単結合	H		CH	N	3	7
H-224		単結合	H		CH	N	3	8
H-225		単結合	H		CH	N	3	9
H-226		単結合	H		CH	N	4	7
H-227		単結合	H		CH	N	4	8
H-228		単結合	H		CH	N	4	9
H-229		単結合	H		CH	CH	3	7
H-230		単結合	H		CH	CH	3	8
H-231		単結合	H		CH	CH	3	9
H-232		単結合	H		CH	CH	4	7
H-233		単結合	H		CH	CH	4	8
H-234		単結合	H		CH	CH	4	9
H-235		単結合	H		N	CH	3	7
H-236		単結合	H		N	CH	3	8
H-237		単結合	H		N	CH	3	9
H-238		単結合	H		N	CH	4	7
H-239		単結合	H		N	CH	4	8
H-240		単結合	H		N	CH	4	9
H-241		単結合	H		CH	N	3	7
H-242		単結合	H		CH	N	3	8
H-243		単結合	H		CH	N	3	9
H-244		単結合	H		CH	N	4	7
H-245		単結合	H		CH	N	4	8
H-246		単結合	H		CH	N	4	9
H-247		単結合	H		CH	CH	3	7
H-248		単結合	H		CH	CH	3	8
H-249		単結合	H		CH	CH	3	9
H-250		単結合	H		CH	CH	4	7
H-251		単結合	H		CH	CH	4	8
H-252		単結合	H		CH	CH	4	9
H-253		単結合	H	H	N	CH	3	7
H-254		単結合	H	H	N	CH	3	8
H-255		単結合	H	H	N	CH	3	9
H-256		単結合	H	H	N	CH	4	7
H-257		単結合	H	H	N	CH	4	8
H-258		単結合	H	H	N	CH	4	9
H-259		単結合	H	H	CH	N	3	7
H-260		単結合	H	H	CH	N	3	8
H-261		単結合	H	H	CH	N	3	9
H-262		単結合	H	H	CH	N	4	7
H-263		単結合	H	H	CH	N	4	8
H-264		単結合	H	H	CH	N	4	9
H-265		単結合	H	H	CH	CH	3	7
H-266		単結合	H	H	CH	CH	3	8
H-267		単結合	H	H	CH	CH	3	9
H-268		単結合	H	H	CH	CH	4	7
H-269		単結合	H	H	CH	CH	4	8
H-270		単結合	H	H	CH	CH	4	9

[0099]

[表29]

化合物番号	M	A	R ⁷	R ⁵	G ¹	G ²	n	m
H-271		単結合	H	H	N	CH	3	7
H-272		単結合	H	H	N	CH	3	8
H-273		単結合	H	H	N	CH	3	9
H-274		単結合	H	H	N	CH	4	7
H-275		単結合	H	H	N	CH	4	8
H-276		単結合	H	H	N	CH	4	9
H-277		単結合	H	H	CH	N	3	7
H-278		単結合	H	H	CH	N	3	8
H-279		単結合	H	H	CH	N	3	9
H-280		単結合	H	H	CH	N	4	7
H-281		単結合	H	H	CH	N	4	8
H-282		単結合	H	H	CH	N	4	9
H-283		単結合	H	H	CH	CH	3	7
H-284		単結合	H	H	CH	CH	3	8
H-285		単結合	H	H	CH	CH	3	9
H-286		単結合	H	H	CH	CH	4	7
H-287		単結合	H	H	CH	CH	4	8
H-288		単結合	H	H	CH	CH	4	9

[0100] 表中*は結合位置を示す。

[0101] 本発明に係る化合物 (I) または化合物 (II) には、水和物、各種溶媒和物や結晶多形などが含まれる。さらに、本発明に係る化合物 (I) または化合物 (II) は、不斉炭素原子、二重結合などに基づく立体異性体、互変異性体およびそれらの混合物を包含する。

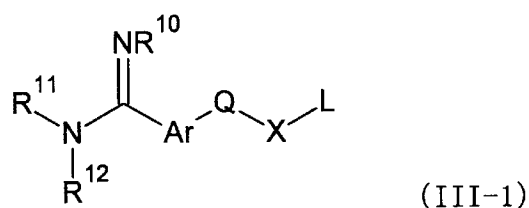
[0102] 本発明に係る化合物 (I) または (II) の塩は、農園芸学的に許容される塩であれば、特に制限されない。例えば、塩酸、硫酸などの無機酸の塩；酢酸、乳酸などの有機酸の塩；リチウム、ナトリウム、カリウムなどのアルカリ金属の塩；カルシウム、マグネシウムなどのアルカリ土類金属の塩；鉄、銅などの遷移金属の塩；アンモニア、トリエチルアミン、トリブチルアミン、ピリジン、ヒドラジンなどの有機塩基の塩などを挙げることができる。化合物 (I) または (II) の塩は、化合物 (I) または (II) から公知の手法によって得ることができる。

[0103] 本発明の実施形態 1 に係るアリールアミジン化合物は、その製造方法によって特に限定されない。本発明の実施形態 1 に係るアリールアミジン化合物は、例えば、特許文献 1～3 などに記載されている公知の方法や、他の公知の方法を組み合わせることにより合成することができる。

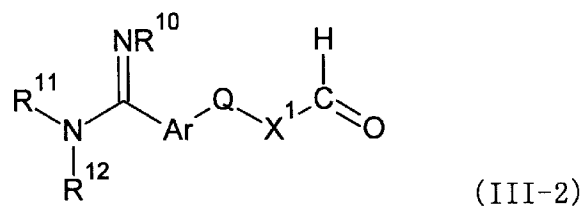
本発明の実施形態 1 に係るアリールアミジン化合物の製造に好適な方法と

して、下記式 (III-1) で示される化合物（以下、アリアルアミジン化合物 (III-1) と称する）、下記式 (III-2) で示される化合物（以下、アリアルアミジン化合物 (III-2) と称する）、下記式 (IV-1) で示される化合物（以下、グアニジン化合物 (IV-1) と称する）、または下記式 (IV-2) で示される化合物（以下、グアニジン化合物 (IV-2) と称する）を経由する製造方法を挙げることができる。アリアルアミジン化合物 (III-1)、アリアルアミジン化合物 (III-2)、グアニジン化合物 (IV-1) またはグアニジン化合物 (IV-2) を経由することにより本発明の実施形態 1 に係るアリアルアミジン化合物を純度良く製造することができる。

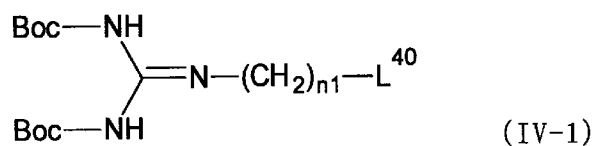
[0104] [化17]



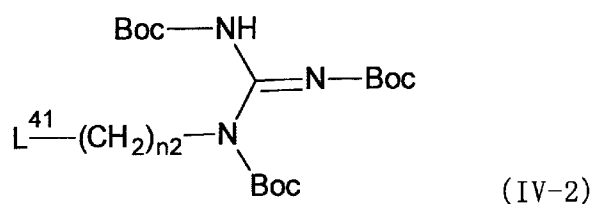
[0105] [化18]



[0106] [化19]



[0107] [化20]



[0108] 実施形態2 《製造中間体》

本発明の実施形態2に係るアリールアミジン化合物(III-1)は、式(III-1)で表される化合物である。本発明の実施形態2に係るアリールアミジン化合物(III-2)は式(III-2)で表される化合物である。

[0109] 式(III-1)および式(III-2)中の A_r 及びQは、式(I)中の A_r 及びQと同様である。

[0110] 式(III-1)および式(III-2)中の R^{10} 、 R^{11} 、 R^{12} は、それぞれ独立して水素原子または α -ブトキシカルボニル基を示す。ただし、 R^{10} 、 R^{11} 、 R^{12} のうち1つ以上が α -ブトキシカルボニル基である。

[0111] 式(III-1)中のXは、式(I)中のXと同様である。

式(III-2)中の X^1 は、式(I)中のXと同様である。

[0112] 式(III-1)中のLは、脱離基を示す。脱離基としては、例えば、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子等のハロゲン原子；メチルスルホニルオキシ基等のアルキルスルホニルオキシ基；4-メチルフェニルスルホニルオキシ基等のアリールスルホニルオキシ基；トリフルオロメチルスルホニルオキシ基等のハロアルキルスルホニルオキシ基；などを挙げることができる。これらのうち、Lは、ハロゲン原子であるのが好ましい。

本発明に係る化合物(III-1)または化合物(III-2)には、不斉炭素原子、二重結合などに基づく立体異性体、互変異性体およびそれらの混合物を包含する。

[0113] 《合成方法》

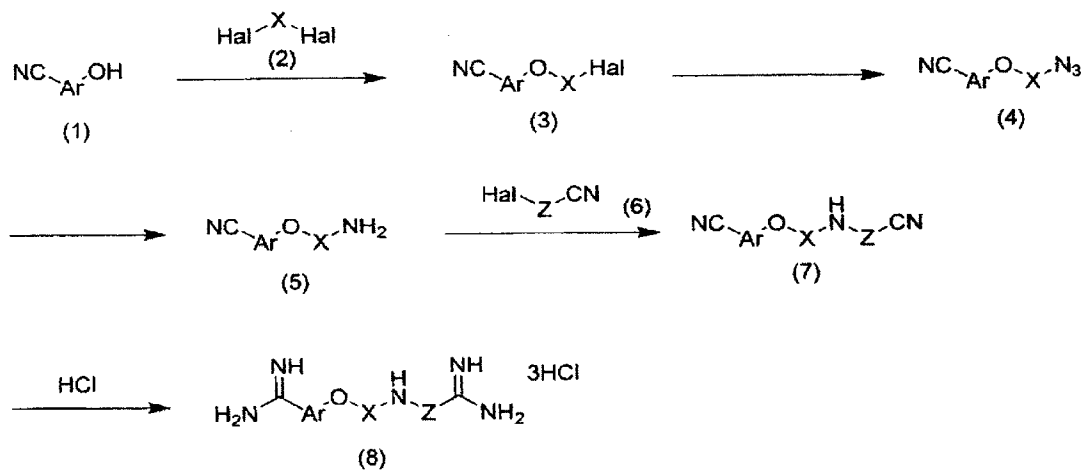
本発明の実施形態1に係るアリールアミジン化合物の合成方法ならびに本発明の実施形態2に係る化合物の合成方法を具体的に例示する。

[0114] 合成方法1

化合物(1)とジハロゲン化合物(2)を反応させて化合物(3)を得た後、化合物(3)とアジド化合物を反応させて化合物(4)を得ることができる。化合物(4)のアジド基を還元することにより、アミノ基を有する化合物(5)を得ることができる。化合物(5)のアミノ基と化合物(6)を

反応させることにより、シアノ基を有する化合物（７）を得ることができる。化合物（７）を塩酸などで酸処理することにより、本発明に係るアリールアミジン化合物（８）を得ることができる。

[0115] [1721]



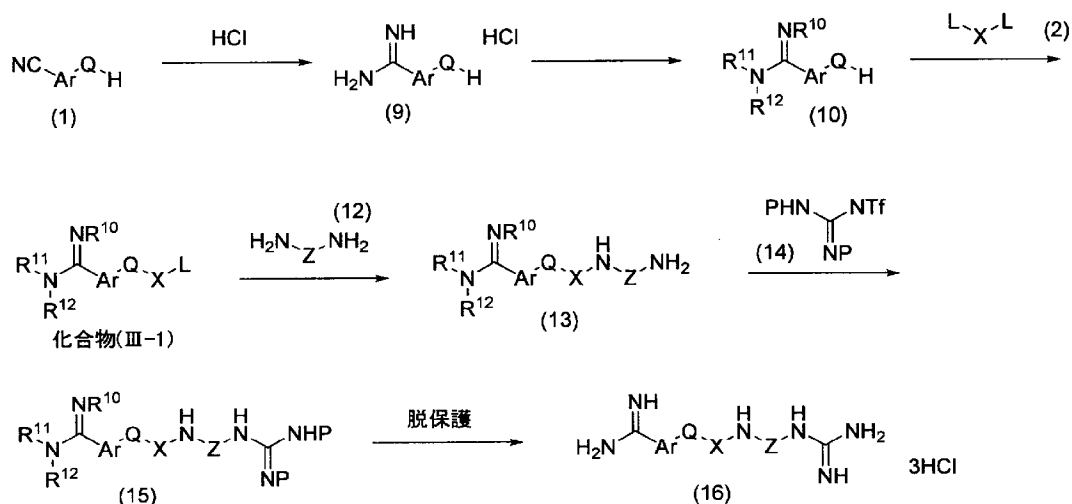
[0116] 式中、A r、X、Zは前記式(I)に記載されたA r、X、Zと同じものを示し、H a lはハロゲン原子を示す。

[0117] 合成方法2 (化合物(III-1)を経由する合成方法)

化合物（１）を塩酸等の酸で処理し、アミジン化合物（９）を得た後、アミジノ基をｔ-ブトキシカルボニル基で保護して化合物（１０）を得ることができる。化合物（１０）と化合物（２）を反応させて化合物（III-1）を得た後、ジアミン化合物（１２）と反応させて化合物（１３）を得ることができる。得られた化合物（１３）と化合物（１４）を反応させて化合物（１５）を得た後、保護基Pを脱保護して本発明に係るアリールアミジン化合物（１６）を得ることができる。

[0118]

[化22]



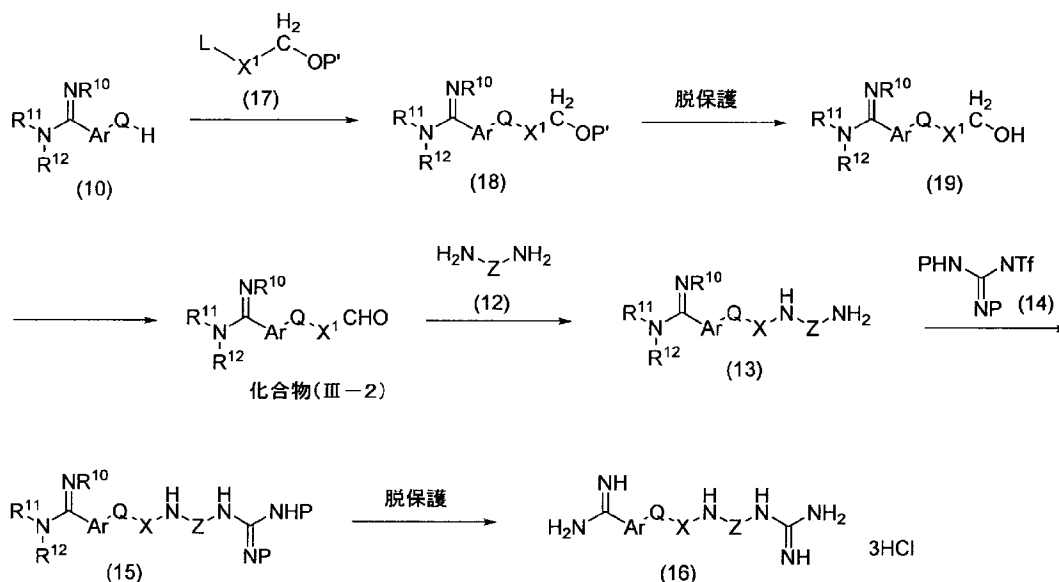
[0119] 式中、Ar、X、Z、Qは前記式(I)に記載されたAr、X、Z、Qと同じものを示し、L、R¹⁰、R¹¹、R¹²は式(III-1)に記載されたL、R¹⁰、R¹¹、R¹²と同じものを示し、Pは保護基を示す。Tfはトリフルオロメタンスルホニル基を示す。

[0120] 合成方法3 (化合物(III-2)を経由する合成方法)

前記化合物(10)と化合物(17)を反応させて化合物(18)を得た後、アルコールの保護基を脱保護することにより、化合物(19)を得ることができる。化合物(19)のアルコールを酸化することにより、化合物(III-2)を得ることができる。得られた化合物(III-2)と化合物(12)を還元的アミノ化反応に付し、化合物(13)を得ることができる。前記と同様に化合物(13)から、本発明に係るアリールアミジン化合物(16)を得ることができる。

[0121]

[化23]



[0122] 式中、Ar、L、R¹⁰、R¹¹、R¹²は、式(III-1)に記載された、Ar、L、R¹⁰、R¹¹、R¹²と同じものを示し、X¹は、式(III-1)に記載された、X¹と同じものを示す。また、P、P'は保護基を示す。Tfはトリフルオロメタンスルホニル基を示す。

[0123] 本発明の実施形態2に係るグアニジン化合物(IV-1)は式(IV-1)で表される化合物である。本発明の実施形態2に係るグアニジン化合物(IV-2)は式(IV-2)で表される化合物である。

[0124] 式(IV-1)および式(IV-2)中のL⁴⁰およびL⁴¹は、脱離基またはアルデヒドを示す。脱離基としては、例えば、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子等のハロゲン原子；メチルスルホニルオキシ基等のアルキルスルホニルオキシ基；4-メチルフェニルスルホニルオキシ基等のアリールスルホニルオキシ基；トリフルオロメチルスルホニルオキシ基等のハロアルキルスルホニルオキシ基；などを挙げることができる。これらのうち、L⁴⁰およびL⁴¹は、ハロゲン原子であるのが好ましい。

[0125] 式(IV-1)および式(IV-2)中のBocは、t-ブトキシカルボニル基を示す。

[0126] 式(IV-1)中のn1は、2、3、または6～10の整数を示す。

[0127] 式 (IV-2) 中の n_2 は、2、3、または5～10の整数を示し、好ましくは5～10の整数を示す。

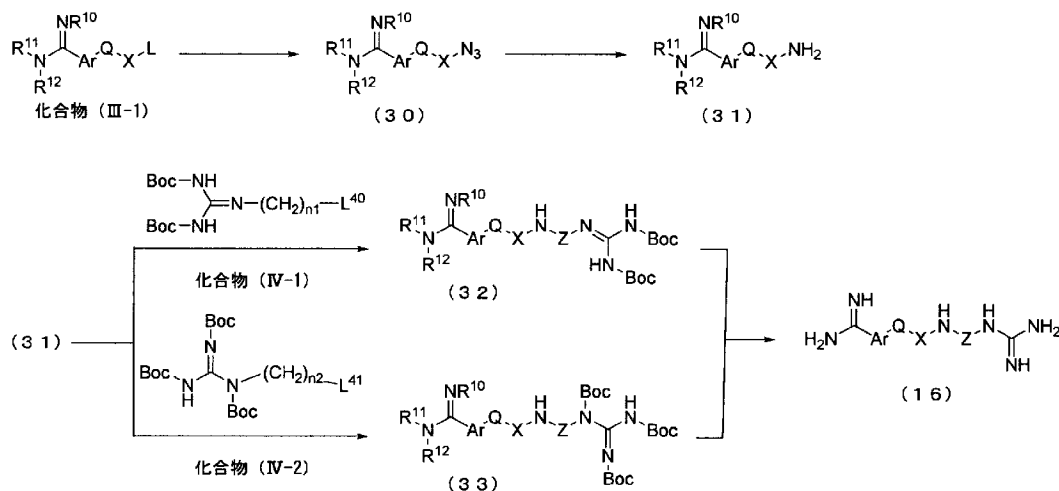
[0128] 合成方法4 (化合物 (IV-1) または化合物 (IV-2) を経由する合成方法)

前記化合物 (III-1) とアジド化合物を反応させて化合物 (30) を得ることができる。化合物 (30) のアジド基を還元することにより、アミノ基を有する化合物 (31) を得ることができる。

化合物 (IV-1) の L^{40} と化合物 (31) のアミノ基を求核置換反応させるか、または化合物 (IV-1) の L^{40} と化合物 (31) のアミノ基を還元的アミノ化反応させることにより、化合物 (32) を得ることができる。最後に塩酸などの酸性条件下、化合物 (32) の保護基を脱保護することにより、本発明に係るアリールアミジン化合物 (16) を得ることができる。

また、化合物 (IV-2) の L^{41} と化合物 (31) のアミノ基を求核置換反応させるか、または化合物 (IV-2) の L^{41} と化合物 (31) のアミノ基を還元的アミノ化反応させることにより、化合物 (33) を得ることができる。最後に塩酸などの酸性条件下、化合物 (33) の保護基を脱保護することにより、本発明に係るアリールアミジン化合物 (16) を得ることができる。

[0129] [化24]



[0130] 式中、Ar、X、ZおよびQは前記式 (I) に記載されたAr、X、ZおよびQと同じものを示し、L、 R^{10} 、 R^{11} および R^{12} は式 (III-1) に記載されたL、 R^{10} 、 R^{11} および R^{12} と同じものを示し、 L^{40} および n_1 は前記式 (IV-1)

に記載された L^{40} および $n1$ と同じものを示し、 L^{41} および $n2$ は前記式(IV-2)に記載された L^{41} および $n2$ と同じものを示し、 Boc は t -ブトキシカルボニル基を示す。

[0131] 合成反応終了後は、有機合成化学における通常の後処理操作、および、必要により従来公知の分離精製手段を施すことによって、目的物を効率よく単離することができる。

目的物の構造は、 1H -NMRスペクトル、IRスペクトル、マスマスペクトルの測定や、元素分析などにより、同定・確認することができる。

[0132] 実施形態3 《殺菌剤、植物病害防除剤》

本発明に係る殺菌剤若しくは植物病害防除剤は、化合物(I)若しくは(II)またはその塩からなる群から選ばれる少なくとも1つを含有するものである。

本発明の殺菌剤若しくは植物病害防除剤に含有されるアリールアミジン化合物の量は、製剤全体に対して、好ましくは0.01~90重量%、より好ましくは0.05~85重量%である。

[0133] 本発明の殺菌剤若しくは植物病害防除剤は、農薬としてとり得る形態、即ち、水和剤、粒剤、粉剤、乳剤、水溶剤、懸濁剤、顆粒水和剤などの農薬製剤の形態で使用する事ができる。

固体の製剤に用いられる添加剤および担体としては、大豆粉、小麦粉などの植物性粉末、珪藻土、燐灰石、石こう、タルク、ベントナイト、パイロフィライト、クレーなどの鉱物性微粉末、安息香酸ソーダ、尿素、芒硝などの有機および無機化合物などを挙げることができる。

液体の製剤に用いられる溶剤としては、ケロシン、キシレンおよび石油系の芳香族炭化水素、シクロヘキサン、シクロヘキサノン、ジメチルホルムアミド、ジメチルスルホキシド、アルコール、アセトン、トリクロロエチレン、メチルイソブチルケトン、鉱物油、植物油、水などを挙げることができる。

[0134] さらに、これらの製剤において均一かつ安定な形態をとるために、必要に

応じ界面活性剤を添加することができる。

添加することができる界面活性剤は特に限定されない。例えば、ポリオキシエチレンが付加したアルキルフェニルエーテル、ポリオキシエチレンが付加したアルキルエーテル、ポリオキシエチレンが付加した高級脂肪酸エステル、ポリオキシエチレンが付加したソルビタン高級脂肪酸エステル、ポリオキシエチレンが付加したトリスチリルフェニルエーテルなどの非イオン性界面活性剤、ポリオキシエチレンが付加したアルキルフェニルエーテルの硫酸エステル塩、アルキルベンゼンスルホン酸塩、高級アルコールの硫酸エステル塩、アルキルナフタレンスルホン酸塩、ポリカルボン酸塩、リグニンスルホン酸塩、アルキルナフタレンスルホン酸塩のホルムアルデヒド縮合物、イソブチレンー無水マレイン酸共重合体などを挙げるができる。

[0135] このようにして得られる、水和剤、乳剤、フロアブル剤、水溶剤、若しくは顆粒水和剤は水で所定の濃度に希釈して、溶解液、懸濁液あるいは乳濁液として植物に散布する方法で使用される。また、粉剤・粒剤はそのまま植物に散布する方法で使用される。

[0136] 本発明の殺菌剤若しくは植物病害防除剤は、花卉、芝、牧草を含む農園芸作物の栽培に際し発生する種々の病害の防除に、種子処理、茎葉散布、土壌施用または水面施用などにより使用することができる。

[0137] 本発明の殺菌剤若しくは植物病害防除剤の施用量は、気象条件、製剤形態、施用時期、施用方法、施用場所、防除対象病害、対象作物などにより異なるが、通常1ヘクタール当たり有効成分量にして好ましくは1～1,000g、より好ましくは10～100gである。

水和剤、乳剤、懸濁剤、水溶剤、顆粒水和剤などを水で希釈して施用する場合、その施用濃度は好ましくは1～1,000ppm、より好ましくは10～250ppmである。

[0138] 本発明の殺菌剤若しくは植物病害防除剤は、広範囲の種類の糸状菌、例えば、藻菌類 (Oomycetes)、子のう (嚢) 菌類 (Ascomycetes)、不完全菌類 (Deuteromycetes)、担子菌類 (Basidiomycetes) に属する菌に対し優れた

殺菌力を有する。

本発明の殺菌剤若しくは植物病害防除剤の適用が好ましい病害としては、リンゴの黒星病、キュウリの灰色かび病、コムギのうどんこ病、トマトの疫病、コムギの赤さび病、水稻のいもち病、キュウリのつる割病などを挙げることができる。

本発明の殺菌剤若しくは植物病害防除剤は薬害が少なく、魚類や温血動物への毒性が低く、安全性の高い薬剤である。

[0139] 本発明の殺菌剤若しくは植物病害防除剤には、他の殺菌剤や殺虫・殺ダニ剤、殺線虫剤、殺土壌害虫剤、駆虫剤、植物生長調節剤、共力剤等と混合または併用することもできる。

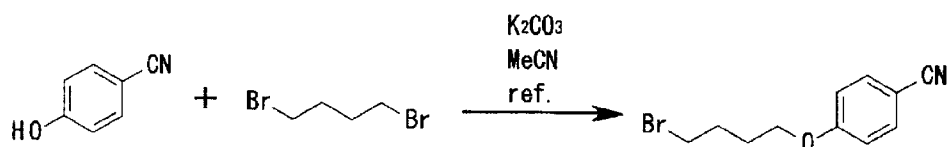
実施例

[0140] 以下、実施例を挙げて本発明をより具体的に説明する。なお、本発明は以下の実施例によって制限を受けるものではなく、本発明の趣旨に適合し得る範囲で適宜に変更を加えて実施することが勿論可能であり、それらはいずれも本発明の技術的範囲に包含される。

[0141] 実施例 1

(工程 1) 4-(4-ブロモブトキシ)ベンゾニトリルの合成

[0142] [化25]

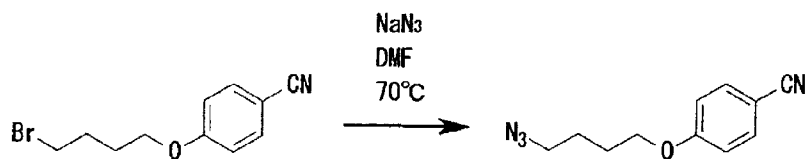


[0143] 4-シアノフェノール 5 g をアセトニトリル 70 mL に溶解させ、これに室温で炭酸カリウム 6.39 g と 1,4-ジブロモブタン 45.3 g を加えた。反応混合物を加熱還流させ、同温で 5 時間攪拌した。反応混合物を室温に冷却し、それに水を加え、酢酸エチルで抽出した。有機層を無水硫酸マグネシウムで乾燥させ、ろ過し、減圧濃縮した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製し、4-(4-ブロモブトキシ)ベンゾ

ニトリルを 9.53 g、収率 89.3% で得た。

[0144] (工程 2) 4-(4-アジドブトキシ)ベンゾニトリルの合成

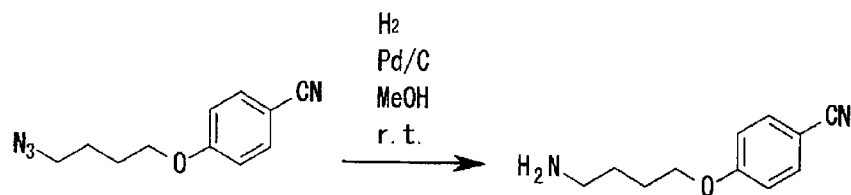
[0145] [化26]



[0146] 4-(4-ブロモブトキシ)ベンゾニトリル 8 g を N, N-ジメチルホルムアミド 80 mL に溶解させ、これに室温でアジ化ナトリウム 8.19 g を加えた。反応混合物を 70°C に昇温し、同温で 4 時間攪拌した。反応混合物を室温に冷却し、それに水を加え、酢酸エチルで抽出した。有機層を無水硫酸マグネシウムで乾燥させ、ろ過し、減圧濃縮した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製し、4-(4-アジドブトキシ)ベンゾニトリル 6.85 g を得た。

[0147] (工程 3) 4-(4-アミノブトキシ)ベンゾニトリルの合成

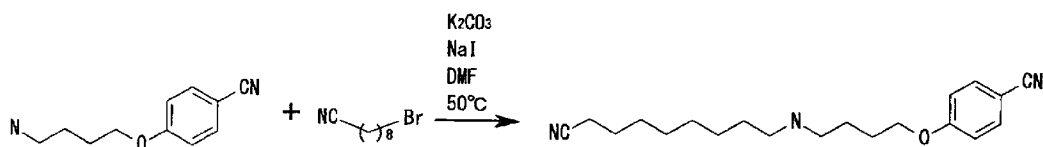
[0148] [化27]



[0149] 4-(4-アジドブトキシ)ベンゾニトリル 3 g をメタノール 30 mL に溶解させ、これに室温でパラジウム炭素 300 mg を加え、反応系内を水素で置換し、室温で 6 時間攪拌した。反応混合物をセライト（登録商標：Celite Corporation 製）で濾過し、残渣を酢酸エチルで洗浄した。この濾液を減圧濃縮し、4-(4-アミノブトキシ)ベンゾニトリルを 928.8 mg、収率 35.2% で得た。

[0150] (工程 4) 4-[4-(8-シアノオクチルアミノ)ブトキシ]ベンゾニトリルの合成

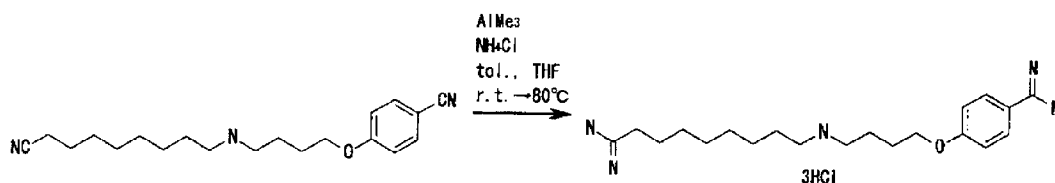
[0151] [化28]



[0152] 4-(4-アミノブトキシ)ベンゾニトリル 366 mg を N,N-ジメチルホルムアミド 10 mL に溶解させ、これに室温で 9-ブロモノナンニトリル 420 mg、炭酸カリウム 796 mg、およびヨウ化ナトリウム 287 mg を加えた。反応混合物を 50℃ に昇温し、50℃ で 4 時間攪拌した。反応混合物を室温に冷却し、水を加え、酢酸エチルで抽出した。有機層を無水硫酸ナトリウムで乾燥させ、ろ過し、減圧濃縮した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製し、4-[4-(8-シアノオクチルアミノ)ブトキシ]ベンゾニトリルを 295.7 mg、収率 47.0% で得た。

[0153] (工程 5) 4-[4-[(9-アミノ-9-イミノ-ノニル)アミノ]ブトキシ]ベンズアミジン三塩酸塩の合成

[0154] [化29]



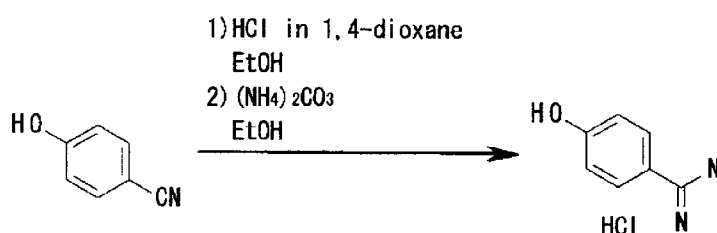
[0155] 塩化アンモニウム 210 mg をトルエン 5 mL に懸濁させ、これに室温で 2 M のトリメチルアルミニウムトルエン溶液 1.85 mL を加え、室温で 30 分間攪拌した。そして反応混合物に室温でトルエン 6 mL とテトラヒドロフラン 6 mL に溶解させた 4-[4-(8-シアノオクチルアミノ)ブトキシ]ベンゾニトリル 451 mg を加えた。反応混合物を 80℃ に昇温し、80℃ で一晩攪拌した。反応混合物を室温に冷却した。その後、室温でシリカゲル 7 g とテトラヒドロフラン 15 mL を加えて 1 時間攪拌した。反応混合物をセライト (登録商標: Celite Corporation 製) でろ過し、減圧濃縮した。得

られた残渣からGPCにより目的物のフリー体を精製した。フリー体をメタノール3 mLに溶解させ、これに室温で4 Nの塩化水素ジオキサン溶液0.5 mLを加え、室温で一時間攪拌した。反応混合物を減圧濃縮し、4-[4-(9-アミノ-9-イミノ-ノニル)アミノ]ブトキシ]ベンズアミジン三塩酸塩(化合物番号: 1)を53.1 mg、収率10.4%で得た。

[0156] 実施例 2

(工程 1) 4-アミノフェノール塩酸塩の合成

[0157] [化30]



[0158] 4-シアノフェノール1 gをエタノール2 mLに溶解させ、これに室温で4 M塩化水素ジオキサン溶液14 mLを加え、同温で一週間攪拌した。反応混合物を減圧濃縮し、得られた残渣をエタノール25 mLに溶解させ、これに室温で炭酸アンモニウム3.23 gを加えた。同温で一晩攪拌し、反応混合物を減圧濃縮し、4-アミノフェノール塩酸塩を収率約100%で得た。

[0159] (工程 2) t-ブチル N-(4-ヒドロキシベンゼンカルボキシイミド)カルバメートの合成

[0160] [化31]

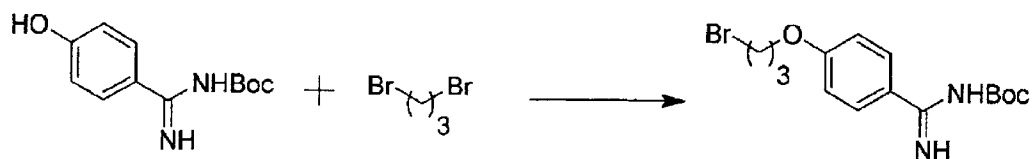


[0161] 4-アミノフェノール塩酸塩500 mgをN,N-ジメチルホルムアミド7 mLに溶解させ、これに室温でトリエチルアミン880 mLと二炭酸ジ-t-ブチル1.39 gを加えた。同温で一晩攪拌させた。その後、反応混合物に水を加え、ろ過を行った。得られた残渣をエタノール12 mLに溶解さ

せ、これに室温で10%水酸化ナトリウム水溶液10 mLを加え、同温で1.5時間攪拌した。反応混合物を減圧濃縮し、水を加え、酢酸エチルで抽出した。有機層を無水硫酸ナトリウムで乾燥し、ろ過し、減圧濃縮し、*t*-ブチル N-(4-ヒドロキシベンゼンカルボキシイミドイル)カルバメートを538 mg、収率78.7%で得た。

[0162] (工程3) *t*-ブチル N-[4-(3-ブロモプロポキシ)ベンゼンカルボキシイミドイル]カルバメートの合成

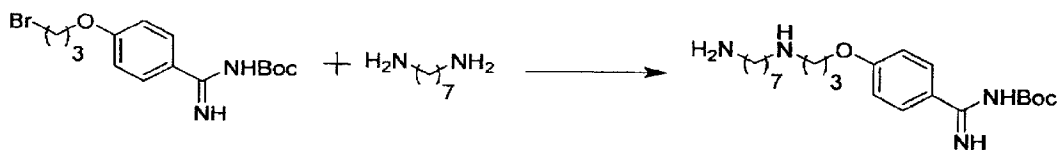
[0163] [化32]



[0164] *t*-ブチル N-(4-ヒドロキシベンゼンカルボキシイミドイル)カルバメート300 mgをアセトニトリル4 mLに溶解させ、これに室温で炭酸カリウム176 mgとジブロモプロパン1.28 gを加えた。反応混合物を加熱還流させ、同温で4時間攪拌した。反応混合物を室温に冷却し、水を加え、酢酸エチルで抽出した。有機層を無水硫酸ナトリウムで乾燥し、ろ過し、減圧濃縮した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製し、*t*-ブチル N-[4-(3-ブロモプロポキシ)ベンゼンカルボキシイミドイル]カルバメートを287.7 mg、収率63.3%で得た。

[0165] (工程4) *t*-ブチル N-[4-[3-(7-アミノヘプチルアミノ)プロポキシ]ベンゼンカルボキシイミドイル]カルバメートの合成

[0166] [化33]

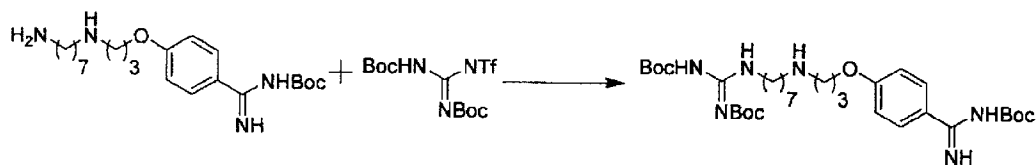


[0167] *t*-ブチル N-[4-(3-ブロモプロポキシ)ベンゼンカルボキシイミドイル]カルバメート700 mgをN,N-ジメチルホルムアミド7 mLに溶解させ、これに室温で炭酸カリウム541 mgとジアミノヘプタン510 m

しを加え、同温で5時間攪拌した。反応混合物に水を加え、酢酸エチルで抽出した。有機層を無水硫酸ナトリウムで乾燥させ、ろ過し、その後、減圧濃縮した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製し、*t*-ブチル *N*-[4-[3-(7-アミノヘプチルアミノ)プロポキシ]ベンゼンカルボキシイミドイル]カルバメートを521 mg、収率65.4%で得た。

[0168] (工程5) *t*-ブチル *N*-[4-[3-[7-[[*N*, *N'*-ビス(*t*-ブトキシカルボニル)カルバミイミドイル]アミノ]ヘプチルアミノ]プロポキシ]ベンゼンカルボキシイミドイル]カルバメートの合成

[0169] [化34]



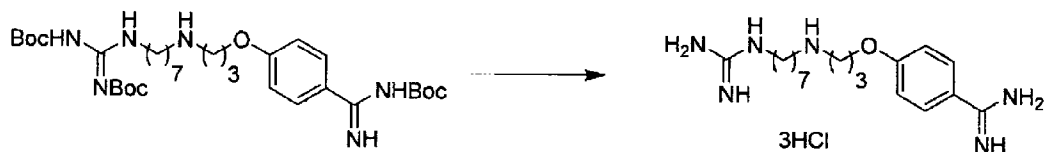
[0170] *t*-ブチル *N*-[4-[3-(7-アミノヘプチルアミノ)プロポキシ]ベンゼンカルボキシイミドイル]カルバメート521 mgをアセトニトリル8 mLに溶解させ、これに室温でジイソプロピルエチルアミン248 mgとGoodman試薬(1, 3-ビス(*t*-ブトキシカルボニル)-2-(トリフルオロメチルスルホニル)グアニジン)704 mgを加え、同温で4時間攪拌させた。反応混合物に水を加え、酢酸エチルで抽出した。有機層を無水硫酸ナトリウムで乾燥させ、ろ過し、減圧濃縮した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製し、*t*-ブチル *N*-[4-[3-[7-[[*N*, *N'*-ビス(*t*-ブトキシカルボニル)カルバミイミドイル]アミノ]ヘプチルアミノ]プロポキシ]ベンゼンカルボキシイミドイル]カルバメート(化合物番号: 2)を396.5 mg、収率49.2%で得た。

[0171] 実施例3

4-[3-(7-グアニジノヘプチルアミノ)プロポキシ]ベンズアミジン三塩酸塩の合成

[0172]

[化35]



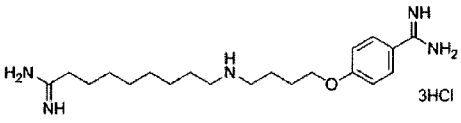
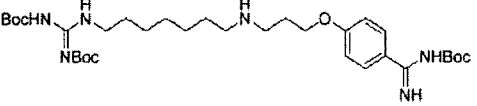
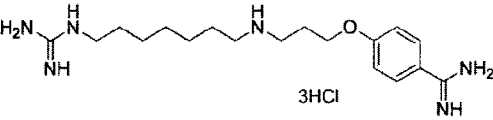
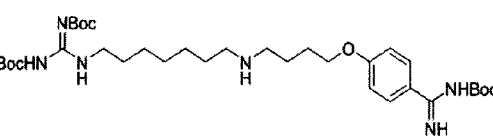
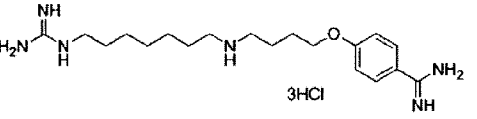
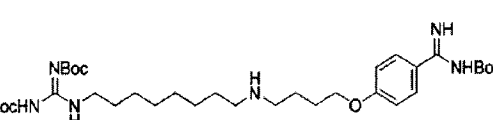
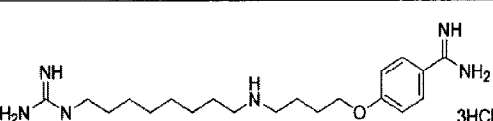
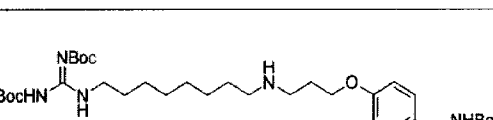
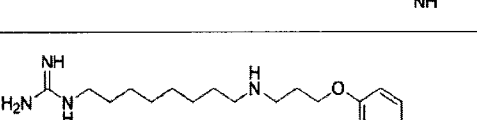
[0173] t -ブチル N -[4-[3-[7-[[N , N' -ビス(t -ブトキシカルボニル)カルバミイミドイル]アミノ]ヘプチルアミノ]プロポキシ]ベンゼンカルボキシイミドイル]カルバメート 396 mg をジクロロメタン 4 mL に溶解させ、これに室温で水 0.4 mL とトリフルオロ酢酸 4 mL を加え、同温で一晩攪拌した。反応混合物を減圧濃縮した。得られた残渣をメタノールとジクロロメタン (1 : 2) 混合溶媒 3 mL に溶解させ、これに室温で 10% 水酸化ナトリウム水溶液 4 mL を加え、同温で 1.5 時間攪拌した。反応混合物に水を加え、メタノールとジクロロメタン (1 : 2) 混合溶媒で抽出した。有機層を無水硫酸ナトリウムで乾燥させ、ろ過し、減圧濃縮した。得られた残渣をメタノール 3 mL に溶解させた。この溶液に室温で 4 N 塩化水素ジオキサン溶液 0.5 mL を加え、同温で 1 時間攪拌した。反応混合物を減圧濃縮し、4-[3-(7-グアニジノヘプチルアミノ)プロポキシ]ベンズアミジン 三塩酸塩 (化合物番号 : 3) を 216.4 mg、収率 77.4% で得た。

[0174] 実施例 4 ~ 22

実施例 2 または 3 と同様の手法にて、本発明に係る化合物を合成した。合成した化合物の一部について、その構造を下記表に示す。

[0175]

[表30]

化合物 番号	構造	NMR測定データ
1		$^1\text{H-NMR}(\text{MeOH-d}_4)$ 7.66–7.64 (m, 2H), 7.08–7.04 (m, 2H), 4.61–4.58 (m, 2H), 4.18–4.16 (m, 2H), 3.35–3.20 (m, 2H), 1.97–1.95 (m, 4H), 1.68–1.53 (m, 4H), 1.41–1.36 (m, 8H)
2		$^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)$ 8.31–8.28 (m, 1H, NH), 7.86 (d, 2H), 6.92 (d, 2H), 4.09 (t, 2H), 3.37 (dd, 2H), 2.80 (t, 2H), 2.61 (t, 2H), 2.02–1.95 (m, 2H), 1.60–1.55 (m, 4H), 1.50–1.49 (m, 27H), 1.26–1.22 (m, 6H)
3		$^1\text{H-NMR}(\text{MeOH-d}_4)$ 9.21–9.14 (m, 1H, NH), 8.64–8.57 (m, 1H, NH), 7.82 (d, 2H), 7.17 (d, 2H), 4.24 (t, 2H), 3.24 (t, 2H), 3.17 (t, 2H), 2.27–2.20 (m, 2H), 1.78–1.70 (m, 2H), 1.65–1.56 (m, 2H), 1.46–1.40 (m, 6H)
4		$^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)$ 11.22–11.18 (m, 1H, NH), 8.33–8.28 (m, 1H, NH), 7.84 (d, 2H), 6.90 (d, 2H), 4.02 (d, 2H), 3.39 (dd, 2H), 2.67 (t, 2H), 2.60 (t, 2H), 1.87–1.80 (m, 2H), 1.71–1.67 (m, 2H), 1.59–1.54 (m, 4H), 1.50–1.47 (m, 27H), 1.37–1.30 (m, 6H)
5		$^1\text{H-NMR}(\text{MeOH-d}_4)$ 9.08–9.03 (m, 1H, NH), 8.61–8.54 (m, 1H, NH), 7.79 (d, 2H), 7.14 (d, 2H), 4.18–4.14 (m, 2H), 3.18 (t, 2H), 3.13–3.06 (m, 2H), 3.05–2.99 (m, 2H), 1.97–1.88 (m, 4H), 1.77–1.67 (m, 2H), 1.65–1.55 (m, 2H), 1.51–1.40 (m, 6H)
6		$^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)$ 8.32–8.29 (m, 1H, NH), 7.82 (d, 2H), 6.90 (d, 2H), 4.02 (t, 2H), 3.37 (dd, 2H), 2.79 (t, 2H), 2.71 (t, 2H), 1.88–1.78 (m, 4H), 1.55–1.50 (m, 4H), 1.49–1.48 (m, 27H), 1.26–1.22 (m, 8H)
7		$^1\text{H-NMR}(\text{MeOH-d}_4)$ 9.11–9.05 (m, 1H, NH), 8.61–8.55 (m, 1H, NH), 7.81 (d, 2H), 7.17 (d, 2H), 4.26–4.20 (m, 2H), 3.27–3.15 (m, 4H), 3.08–3.00 (m, 2H), 2.29–2.22 (m, 2H), 1.78–1.69 (m, 2H), 1.64–1.55 (m, 2H), 1.45–1.24 (m, 8H)
8		$^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)$ 11.52–11.48 (m, 1H, NH), 8.31–8.27 (m, 1H, NH), 7.85 (d, 2H), 6.91 (d, 2H), 4.08 (t, 2H), 3.38 (dd, 2H), 2.80 (t, 2H), 2.61 (t, 2H), 2.01–1.98 (m, 2H), 1.56–1.53 (m, 4H), 1.50–1.49 (m, 27H), 1.33–1.25 (m, 8H)
9		$^1\text{H-NMR}(\text{MeOH-d}_4)$ 7.79 (d, 2H), 7.14 (d, 2H), 4.18–4.08 (m, 2H), 3.20–3.15 (m, 2H), 3.13–3.06 (m, 2H), 3.05–2.98 (m, 2H), 1.96–1.87 (m, 2H), 1.74–1.66 (m, 2H), 1.64–1.54 (m, 2H), 1.50–1.42 (m, 8H)

[0176]

[表31]

化合物 番号	構造	NMR測定データ、屈折率
10		$^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)$ 7.83 (d, 2H), 6.90 (d, 2H), 4.04 (t, 2H), 3.49 (t, 2H), 2.14-1.90 (m, 4H), 1.55 (s, 9H)
11		$^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)$ 7.83 (d, 2H), 6.92 (dd, 2H), 4.15 (t, 2H), 3.60 (t, 2H), 2.33 (tt, 2H), 1.55 (s, 9H)
12		$^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)$ 7.84 (d, 2H), 6.91 (d, 2H), 4.09 (t, 2H), 3.37 (dt, 2H), 2.79 (t, 2H), 2.61 (t, 2H), 1.97 (tt, 2H), 1.55 (s, 9H), 1.50 (s, 9H), 1.49 (s, 9H), 1.48-1.45 (m, 4H), 1.39-1.30 (m, 4H)
13		$^1\text{H-NMR}(\text{MeOH-d}_4)$ 9.09-9.01 (m, 1H), 8.63-8.54 (m, 1H), 7.80 (d, 2H), 7.16 (d, 2H), 4.23 (dd, 2H), 3.20-3.10 (m, 4H), 3.08-3.03 (m, 2H), 2.28-2.19 (m, 2H), 1.80-1.70 (m, 2H), 1.65-1.56 (m, 2H), 1.49-1.36 (m, 4H)
14		$^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)$ 7.83 (d, 2H), 6.90 (d, 2H), 3.99 (t, 2H), 3.40 (t, 2H), 1.86 (tt, 2H), 1.79 (tt, 2H), 1.55 (s, 9H), 1.50-1.34 (m, 8H)
15		$^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)$ 7.83 (d, 2H), 6.90 (d, 2H), 3.99 (t, 2H), 3.52-3.44 (m, 2H), 2.67 (t, 2H), 2.57 (t, 2H), 1.83-1.70 (m, 4H), 1.52-1.46 (m, 31H), 1.38-1.30 (m, 6H)
16		$^1\text{H-NMR}(\text{MeOH-d}_4)$ 7.77 (d, 2H), 7.11 (d, 2H), 4.09 (t, 2H), 3.32-3.27 (m, 2H), 3.10-3.00 (m, 4H), 1.98 (tt, 2H), 1.86-1.78 (m, 2H), 1.76-1.68 (m, 2H), 1.56-1.47 (m, 2H), 1.46-1.38 (m, 6H)
17		$^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)$ 7.46-7.42 (m, 1H), 7.40-7.34 (m, 2H), 7.08-7.02 (m, 1H), 4.16 (t, 2H), 3.60 (t, 2H), 2.33 (tt, 2H), 1.56 (s, 9H)
18		$^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)$ 7.44-7.30 (m, 3H), 7.06-7.00 (m, 1H), 4.09 (t, 2H), 3.37 (dd, 2H), 2.79 (t, 2H), 2.61 (t, 2H), 1.97 (tt, 2H), 1.52-1.44 (m, 31H), 1.35-1.26 (m, 8H)
19		$n_D^{20} = 1.5325$
20		$^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)$ 7.43-7.40 (m, 1H), 7.37-7.30 (m, 2H), 7.06-7.00 (m, 1H), 4.05 (t, 2H), 3.49 (t, 2H), 2.11-2.03 (m, 2H), 2.00-1.90 (m, 2H), 1.55 (s, 9H)
21		$^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)$ 7.42-7.30 (m, 3H), 7.06-7.00 (m, 1H), 4.03 (t, 2H), 3.39 (dd, 2H), 2.67 (t, 2H), 2.60 (t, 2H), 1.82 (tt, 2H), 1.66 (tt, 2H), 1.52-1.44 (m, 31H), 1.38-1.29 (m, 6H)
22		$^1\text{H-NMR}(\text{MeOH-d}_4)$ 7.58-7.50 (m, 1H), 7.43-7.30 (m, 3H), 4.26-4.19 (m, 2H), 3.27-3.20 (m, 2H), 3.20-3.12 (m, 2H), 3.09-3.00 (m, 2H), 2.29-2.19 (m, 2H), 1.80-1.68 (m, 2H), 1.66-1.53 (m, 2H), 1.50-1.35 (m, 8H)

[0177] 表中、Bocは、*t*-ブトキシカルボニル基を意味する。

[0178] 実施例 23

(工程 1) 6-(4-ブロモブトキシ)ニコチノニトリルの合成

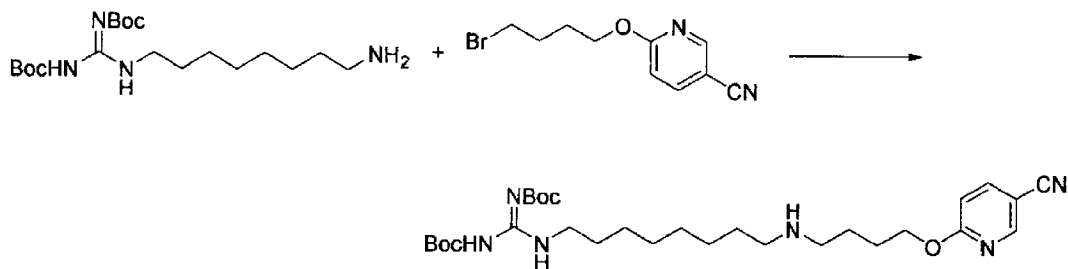
[0179] [化36]



[0180] 6-(4-ヒドロキシブトキシ)ニコチノニトリル 1.1 g をジクロロメタン 25 mL に溶解した後に、室温で四臭化炭素 2.9 g とトリフェニルフォスフィン 2.3 g を加えた。17 時間攪拌した後に溶媒を減圧留去した。シリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製し、6-(4-ブロモブトキシ)ニコチノニトリル 1.0 g を得た。融点 41-43℃。

[0181] (工程 2) *t*-ブチル N-[N-*t*-ブトキシカルボニル-N'-[8-[4-[5-シアノ-2-ピリジル)オキシ]ブチルアミノ]オクチル]カルバイミドイル]カルバメートの合成

[0182] [化37]



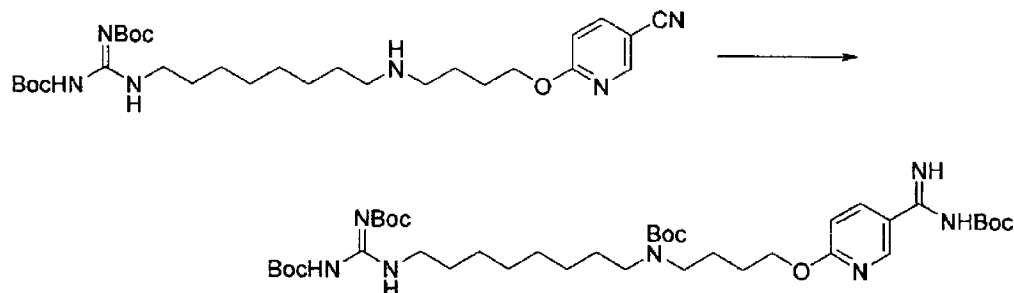
[0183] 6-(4-ブロモブトキシ)ニコチノニトリル 0.26 g と、*t*-ブチル N-[(8-アミノオクチルアミノ) - (*t*-ブトキシカルボニルアミノ)メチレン]カルバメート 0.42 g をジメチルホルムアミド 3 mL に溶解した。炭酸カリウム 0.21 g を加えて 17 時間攪拌した。溶媒を減圧留去した後にシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製し、*t*-ブチル N-[N-*t*-ブトキシカルボニル-N'-[8-[4-[5-シアノ-2-ピリジル)オキシ]ブチルアミノ]オクチル]カルバイミドイル]カルバメート 0.18 g

を得た。

$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) : 8.45 (s, 1H), 7.76 (d, 1H), 6.77 (d, 1H), 4.36 (t, 2H), 3.37 (m, 2H), 2.65 (t, 2H), 2.56 (t, 2H), 1.80 (m, 2H), 1.44–1.62 (m, 24H), 1.28–1.32 (m, 8H).

[0184] (工程3) t-ブチル N-[8-[[N, N'-ビス(t-ブトキシカルボニル)カルバイミドイル]アミノ]オクチル]-N-[4-[[5-(N-t-ブトキシカルボニルカルバイミドイル)-2-ピリジル]オキシ]ブチル]カルバメートの合成

[0185] [化38]



[0186] t-ブチル N-[N-t-ブトキシカルボニル-N'-[8-[4-[(5-シアノ-2-ピリジル)オキシ]ブチルアミノ]オクチル]カルバイミドイル]カルバメート 0.18 g をテトラヒドロフラン 3 mL に溶解して、氷冷下にリチウムビス(トリメチルシリル)アミド (1.3 M テトラヒドロフラン溶液) 2 mL を添加した。室温で 24 時間攪拌した後に飽和塩化アンモニウム水溶液で反応を停止した。ジクロロメタン、メタノールの混合溶媒で抽出した後、有機層を濃縮した。得られた混合物をジメチルホルムアミド 3 mL に溶解した後にトリエチルアミン 0.32 g、ジ-t-ブチルジカーボネート 0.35 g を加えた。室温で 28 時間攪拌した後に反応液に水を加えて、酢酸エチルで抽出した。溶媒を減圧留去した後にシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製し、t-ブチル N-[8-[[N, N'-ビス(t-ブトキシカルボニル)カルバイミドイル]アミノ]オクチル]-N-[4-[[5-(N-t-ブトキシカルボニルカルバイミドイル)-2-ピリジル]オキシ]ブチル]カ

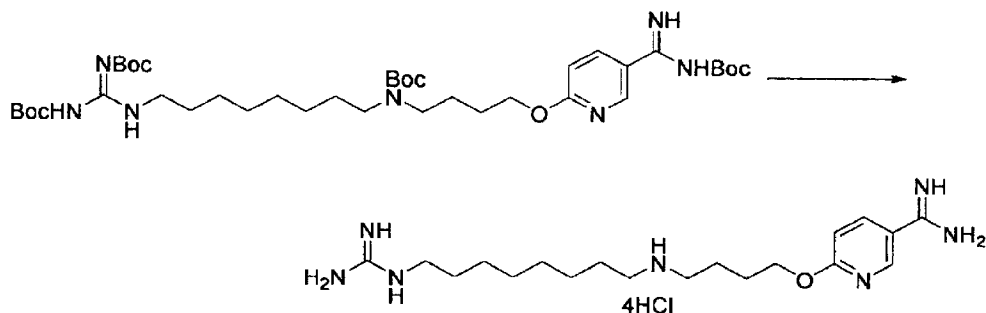
ルバメート（化合物番号：23）0.06 gを得た。

$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) : δ 11.48 (s, 1H), 8.60 (s, 1H), 8.28 (s, 1H), 8.12 (d, 1H), 6.72 (d, 1H), 4.33 (t, 2H), 3.35 (br, 2H), 3.10–3.17 (m, 4H), 1.62–1.75 (m, 8H), 1.42–1.53 (m, 36H), 1.20–1.30 (m, 8H).

[0187] 実施例 24

6-(4-((8-グアニジノオクチル)アミノ)ブトキシ)ニコチンイミドアミド 四塩酸塩の合成

[0188] [化39]



[0189] t-ブチル N-[8-[[N, N'-ビス(t-ブトキシカルボニル)カルバイミドイル]アミノ]オクチル]-N-[4-[[5-(N-t-ブトキシカルボニルカルバイミドイル)-2-ピリジル]オキシ]ブチル]カルバメート 0.06 g をジクロロメタン 5 mL に溶解してトリフルオロ酢酸 1 mL を添加した。室温で 16 時間攪拌した後に溶媒留去した後にメタノール 5 mL に溶解した。室温で塩化水素 (4 M ジオキサン溶液) 3 mL を加えた後に 3 時間攪拌した。溶媒を減圧留去することで 6-(4-((8-グアニジノオクチル)アミノ)ブトキシ)ニコチンイミドアミド塩酸塩 (化合物番号：24) 25 mg を得た。

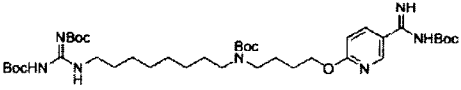
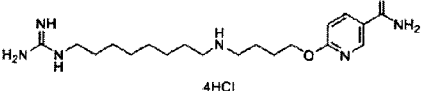
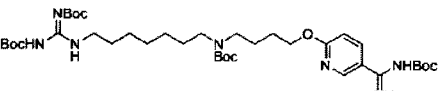
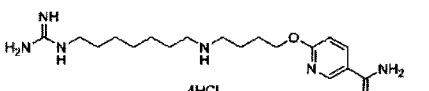
$^1\text{H NMR}$ ($\text{MeOH}-d_4$) : δ 8.64 (s, 1H), 8.07 (d, 1H), 6.97 (d, 1H), 4.46 (br, 2H), 3.00–3.17 (m, 6H), 1.85–1.95 (m, H), 1.59–1.70 (m,

, 4 H), 1.35–1.40 (m, 8 H).

[0190] 実施例 25、26

実施例 23 または 24 と同様の手法にて、本発明に係る化合物を合成した。合成した化合物の一部について、その構造を下記表に示す。

[0191] [表32]

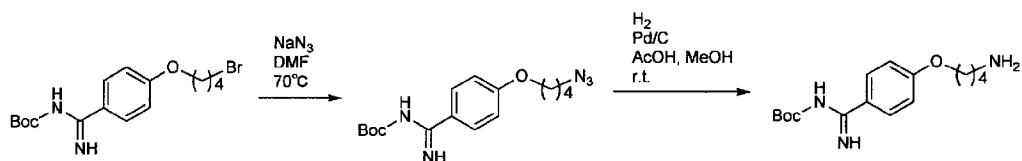
化合物番号	構造	NMR測定データ
23		$^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)$ 11.48 (s, 1H), 8.60 (s, 1H), 8.28 (s, 1H), 8.12 (d, 1H), 6.72 (d, 1H), 4.33 (t, 2H), 3.35 (br, 2H), 3.10–3.17 (m, 4H), 1.62–1.75 (m, 8H), 1.42–1.53 (m, 36H), 1.20–1.30 (m, 8H)
24		$^1\text{H-NMR}(\text{MeOH-d}_4)$ 8.64 (s, 1H), 8.07 (d, 1H), 6.97 (d, 1H), 4.46 (br, 2H), 3.00–3.17 (m, 6H), 1.85–1.95 (m, 6H), 1.59–1.70 (m, 4H), 1.35–1.40 (m, 8H)
25		$^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3)$ 11.44 (s, 1H), 8.59 (s, 1H), 8.25 (s, 1H), 8.10 (d, 1H), 6.66 (d, 1H), 4.29 (t, 2H), 3.31 (br, 2H), 3.10–3.17 (m, 4H), 1.59–1.72 (m, 8H), 1.39–1.49 (m, 36H), 1.20–1.25 (m, 6H)
26		$^1\text{H-NMR}(\text{MeOH-d}_4)$ 8.72 (s, 1H), 8.31 (d, 1H), 7.26 (d, 1H), 4.50 (br, 2H), 2.98–3.14 (m, 6H), 1.85–1.94 (m, 4H), 1.55–1.70 (m, 4H), 1.35–1.40 (m, 8H)

[0192] 表中、Boc は、t-ブトキシカルボニル基を意味する。

[0193] 実施例 27

(工程 1) t-ブチル N-[4-(4-アミノブトキシ)ベンゼンカルボキシイミドイル]カルバメートの合成

[0194] [化40]



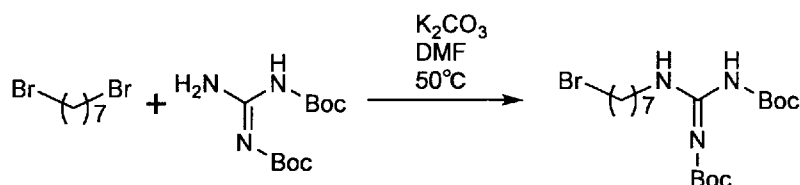
[0195] t-ブチル N-[4-(3-ブロモブトキシ)ベンゼンカルボキシイミドイル]カルバメート 4 g をジメチルホルムアミド 40 mL に溶解させ、室温で

アジ化ナトリウム 2.8 g を加えた。反応混合物を 70℃ に加熱し、同温で 5 時間攪拌した。反応混合物を室温に冷却後、水を加え、酢酸エチルで抽出した。有機層を無水硫酸ナトリウムで乾燥し、ろ過、減圧濃縮を行った。得られた残渣を酢酸エチル 30 mL に溶解させ、室温で 10% パラジウム炭素 300 mg を加えた。反応系内を水素ガスで置換し、室温で 14 時間攪拌した。室温で反応混合物にメタノール 20 mL を加え、同温で 4 時間攪拌した。反応混合物をセライト（登録商標：Celite Corporation 製）でろ過後、減圧濃縮し、得られた残渣をシリカゲルクロマトグラフィーにより精製し、*t*-ブチル N-[4-(4-アミノブトキシ)ベンゼンカルボキシイミドイル]カルバメートを 1.099 g、収率 33.2% で得た。

$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) : $\delta = 1.55$ (s, 8H), 1.90–1.76 (m, 4H), 2.98 (t, 2H), 4.02 (t, 2H), 6.90 (d, 2H), 7.83 (d, 2H).

[0196] (工程 2) *t*-ブチル N-[N'-(7-ブロモヘプチル)-N-*t*-ブトキシカルボニル-カルバイミドイル]カルバメートの合成

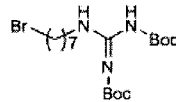
[0197] [化 41]



[0198] 1,7-ジブロモヘプタン 1 g をジメチルホルムアミド 15 mL に溶解させ、室温で炭酸カリウム 640 mg と *t*-ブチル N-(N-*t*-ブトキシカルボニルカルバイミドイル)カルバメート 2.98 g を加えた。反応混合物を 50℃ に過熱し、同温で 4 時間攪拌した。反応混合物を室温に冷却後、水を加え、酢酸エチルで抽出した。有機層を無水硫酸ナトリウムで乾燥し、ろ過、減圧濃縮を行った。得られた残渣をシリカゲルクロマトグラフィーにより精製し、*t*-ブチル N-[N'-(7-ブロモヘプチル)-N-*t*-ブトキシカルボニル-カルバイミドイル]カルバメート（化合物番号：27）を

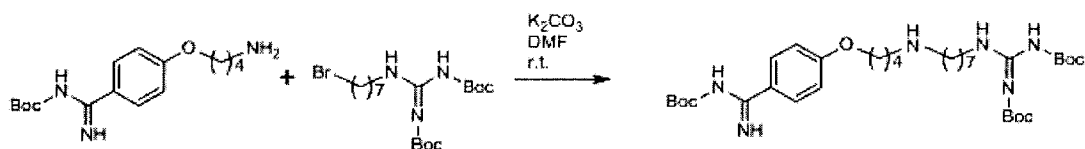
1.344 g、収率80.0%で得た。

[0199] [表33]

化合物 番号	構造	NMRデータ
27		$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) : $\delta = 1.40 - 1.24$ (m, 4H), 1.48 - 1.44 (m, 2H), 1.80 (s, 18H), 1.58 - 1.54 (m, 2H), 1.86 (tt, 2H), 3.41 (t, 2 H), 3.89 (t, 2H).

[0200] (工程3) t-ブチル N-[4-[4-[7-[ビス(t-ブトキシカルボニルアミノ)メチレンアミノ]ヘプチルアミノ]ブトキシ]ベンゼンカルボキシイミドイル]カルバメートの合成

[0201] [化42]

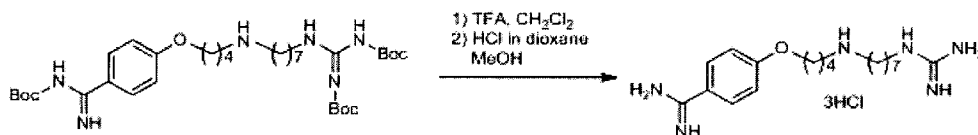


[0202] t-ブチル N-[4-(4-アミノブトキシ)ベンゼンカルボキシイミドイル]カルバメート1.099 gをジメチルホルムアミド15 mLに溶解させ、室温で炭酸カリウム510 mgとt-ブチル N-[N'-(7-ブロモヘプチル)-N-t-ブトキシカルボニル-カルバイミドイル]カルバメート1.34 gを加え、同温で5時間攪拌した。反応混合物に水を加え、酢酸エチルで抽出した。有機層を無水硫酸ナトリウムで乾燥し、ろ過、減圧濃縮を行った。得られた残渣をシリカゲルクロマトグラフィーにより精製し、t-ブチル N-[4-[4-[7-[ビス(t-ブトキシカルボニルアミノ)メチレンアミノ]ヘプチルアミノ]ブトキシ]ベンゼンカルボキシイミドイル]カルバメート(化合物番号: 4)を558 mg、収率27.3%で得た。

$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) : $\delta = 1.34 - 2.20$ (m, 6H), 1.49 (s, 9H), 1.51 (s, 9H), 1.72 - 1.60 (m, 6H), 1.90 - 1.80 (m, 2H), 2.59 (t, 2H), 2.67 (t, 2H), 3.88 (t, 2H), 4.02 (t, 2H), 6.90 (d, 2H), 7.84 (d, 2H).

[0203] (工程4) 4-[4-(7-グアニジノヘプチルアミノ)ブトキシ]ベンズ
アミジン 三塩酸塩の合成

[0204] [化43]

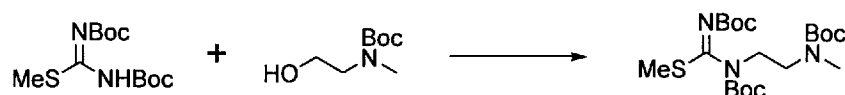


[0205] t-ブチル N-[4-[4-[7-[ビス(t-ブトキシカルボニルアミノ)メチレンアミノ]ヘプチルアミノ]ブトキシ]ベンゼンカルボキシイミドイル]カルバメート 558 mg をジクロロメタン 5 mL に溶解させ、室温でトリフルオロ酢酸 5 mL を加え、同温で一晩攪拌した。反応混合物を減圧濃縮し、得られた残渣をメタノール 5 mL に溶解させ、室温で 4 M 塩化水素ジオキサン溶液 5 mL を加えた。同温で 2 時間攪拌し、反応混合物を減圧濃縮する事で 4-[4-(7-グアニジノヘプチルアミノ)ブトキシ]ベンズアミジン 三塩酸塩 (化合物番号: 5) を 390 mg、収率 98.2% で得た。

[0206] 合成例 1

t-ブチル N-[2-[t-ブトキシカルボニル-N-t-ブトキシカルボニル-C-メチルスルファニル-カルボイミドイル]アミノ]エチル-N-メチルカルバメートの合成

[0207] [化44]



[0208] 1,3-ビス(t-ブトキシカルボニル)-2-メチルチオシュードウレア (2.38 g)、N-t-ブトキシカルボニル-N-メチル-2-アミノエタノール (2.02 g) およびトリフェニルホスフィン (3.33 g) のテトラヒドロフラン (30 mL) 溶液に、0℃にてジイソプロピルアゾジカルボキシレート (1.9 M、6.5 mL) を滴下した。その後、加熱還流

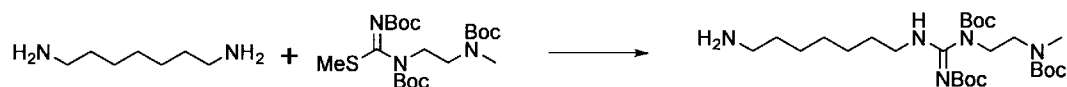
下、一終夜攪拌した。室温まで冷却後、反応溶液を減圧濃縮した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製し、表題化合物を3.56 g (収率97%) 得た。

$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) : 1.46 (s, 9H)、1.49 (s, 9H)、1.51 (s, 9H)、2.38 (s, 3H)、2.90 (s, 3H)、3.35–3.55 (m, 2H)、3.57–3.71 (m, 2H) .

[0209] 合成例2

t-ブチル N-[N-(7-アミノヘプチル)-N'-t-ブトキシカルボニル-カルバイミドイル]-N-[2-[t-ブトキシカルボニル(メチル)アミノ]エチル]カルバメートの合成

[0210] [化45]



[0211] 合成例1で得られたt-ブチル N-[N-(7-アミノヘプチル)-N'-t-ブトキシカルボニル-カルバイミドイル]-N-[2-[t-ブトキシカルボニル(メチル)アミノ]エチル]カルバメート1 gのテトラヒドロフラン(10 mL)溶液に、室温にて1,7-ジアミノヘプタン(1.05 g)のテトラヒドロフラン(8 mL)溶液を滴下した。50℃にて攪拌後、反応溶液を減圧濃縮した。残渣をアミノシリカを用いたカラムクロマトグラフィーにより精製し、表題化合物を1.14 g (収率97%) 得た。

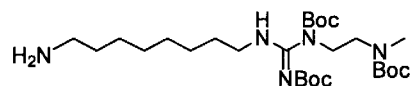
$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) : 1.26–1.74 (m, 37H)、2.68 (t, 2H)、2.88 (s, 3H)、3.06–3.33 (m, 2H)、3.38 (t, 2H)、3.55–3.92 (m, 2H) .

[0212] 合成例3

合成例2と同様の方法で、以下の化合物を合成した。

t-ブチル N-[N-(8-アミノオクチル)-N'-t-ブトキシカルボニル-カルバイミドイル]-N-[2-[t-ブトキシカルボニル(メチル)アミノ]エチル]カルバメート

[0213] [化46]



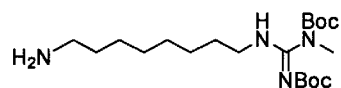
$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) : 1.12–1.76 (m, 39H)、2.67 (t, 2H)、2.88 (s, 3H)、3.06–3.33 (m, 2H)、3.38 (t, 2H)、3.55–3.89 (m, 2H) .

[0214] 合成例4

合成例2と同様の方法で、以下の化合物を合成した。

t-ブチル N- [N- (7-アミノヘプチル) -N'-t-ブトキシカルボニル-カルバイミドイル] -N-メチル-カルバメート

[0215] [化47]



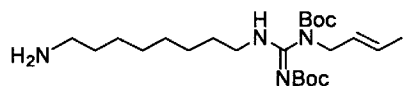
[0216] $^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) : 1.25–1.65 (m, 30H)、2.68 (t, 2H)、3.12 (s, 3H)、3.21 (dd, 2H) .

[0217] 合成例5

合成例2と同様の方法で、以下の化合物を合成した。

t-ブチル N- [N- (7-アミノヘプチル) -N'-t-ブトキシカルボニル-カルバイミドイル] -N- (2-ブテニル) カルバメート (E/Z = 5/1)

[0218] [化48]

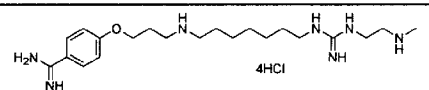
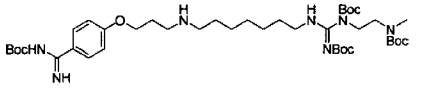
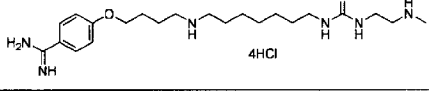
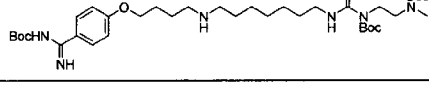
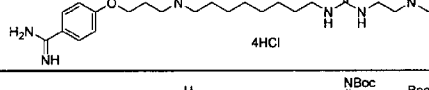
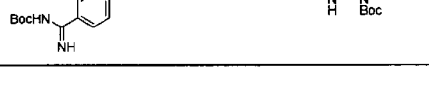
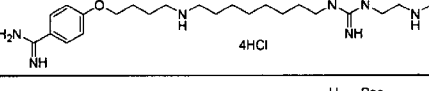
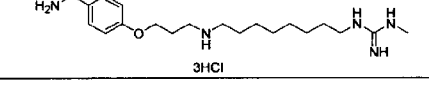
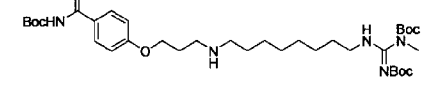
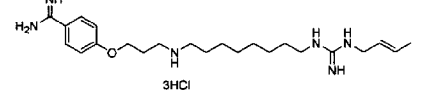
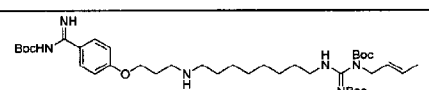


[0219] $^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) : 1.19–1.74 (m, 33H)、2.68 (t, 2H)、3.21 (dd, 2H)、4.17 (d, 1.7H, E-isomer)、4.31 (d, 0.3H, Z-isomer)、5.38–5.76 (m, 2H) .

[0220] 実施例 28～39

合成例 2～5 で得られた化合物を用いて、実施例 23 または 24 と同様の手法にて、本発明に係る化合物を合成した。合成した化合物の一部について、その構造を表に示す。

[0221] [表34]

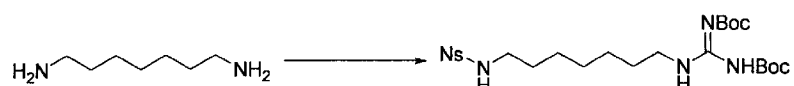
化合物番号	構造	NMRデータ
28		¹ HNMR(CD ₃ OD) 1.37–1.52 (m, 6H), 1.56–1.83 (m, 4H), 2.18–2.32 (m, 2H), 2.76 (s, 3H), 3.06 (t, 2H), 3.19–3.28 (m, 6H), 3.62 (t, 2H), 4.24 (t, 2H), 7.17 (d, 2H), 7.81 (d, 2H).
29		¹ HNMR(CDCl ₃) 1.26–1.68 (m, 46H), 2.02–2.23 (m, 2H), 2.71 (t, 2H), 2.82–2.99 (m, 5H), 3.10–3.32 (m, 2H), 3.38 (t, 2H), 3.60–3.87 (m, 2H), 4.10 (t, 2H), 6.90 (d, 2H), 7.84 (d, 2H).
30		¹ HNMR(CD ₃ OD) 1.32–1.53 (m, 6H), 1.54–1.83 (m, 4H), 1.83–2.02 (m, 4H), 2.76 (s, 3H), 2.92–3.15 (m, 4H), 3.15–3.27 (m, 4H), 3.53–3.77 (m, 2H), 4.02–4.27 (m, 2H), 7.15 (d, 2H), 7.81 (d, 2H).
31		¹ HNMR(CDCl ₃) 1.23–1.65 (m, 46H), 1.65–1.78 (m, 2H), 1.78–1.93 (m, 2H), 2.63 (t, 2H), 2.70 (t, 2H), 2.88 (s, 3H), 3.09–3.32 (m, 2H), 3.38 (t, 2H), 3.60–3.85 (m, 2H), 4.01 (t, 2H), 6.89 (d, 2H), 7.83 (d, 2H).
32		¹ HNMR(CD ₃ OD) 1.30–1.52 (m, 8H), 1.53–1.85 (m, 4H), 2.14–2.34 (m, 2H), 2.76 (s, 3H), 2.95–3.12 (m, 2H), 3.14–3.27 (m, 6H), 3.53–3.71 (m, 2H), 4.12–4.35 (m, 2H), 7.17 (d, 2H), 7.81 (d, 2H).
33		¹ HNMR(CDCl ₃) 1.21–1.67 (m, 48H), 1.96–2.09 (m, 2H), 2.64 (t, 2H), 2.83 (t, 2H), 2.88 (s, 3H), 3.09–3.33 (m, 2H), 3.38 (t, 2H), 3.61–3.89 (m, 2H), 4.09 (t, 2H), 6.91 (d, 2H), 7.84 (d, 2H).
34		¹ HNMR(CD ₃ OD) 1.32–1.51 (m, 8H), 1.53–1.82 (m, 4H), 1.85–2.00 (m, 4H), 2.76 (s, 3H), 2.94–3.16 (m, 4H), 3.16–3.27 (m, 4H), 3.55–3.70 (m, 2H), 4.09–4.20 (m, 2H), 7.14 (d, 2H), 7.80 (d, 2H).
35		¹ HNMR(CDCl ₃) 1.22–1.63 (m, 48H), 1.68 (dt, 2H), 1.84 (dt, 2H), 2.61 (t, 2H), 2.69 (t, 2H), 2.88 (s, 3H), 3.12–3.33 (m, 2H), 3.38 (t, 2H), 3.60–3.84 (m, 2H), 4.01 (t, 2H), 6.89 (d, 2H), 7.83 (d, 2H).
36		¹ HNMR(CD ₃ OD) 1.25–1.42 (m, 8H), 1.42–1.53 (m, 2H), 1.53–1.65 (m, 2H), 2.05–2.21 (m, 2H), 2.83 (s, 3H), 3.07 (t, 2H), 3.15 (t, 2H), 4.13–4.29 (m, 4H), 7.13 (d, 2H), 7.78 (d, 2H).
37		¹ HNMR(CDCl ₃) 1.24–1.37 (m, 8H), 1.47 (s, 9H), 1.50 (s, 9H), 1.52–1.65 (m, 13H), 2.05–2.19 (m, 2H), 3.04–3.29 (m, 7H), 4.08 (t, 2H), 4.25 (t, 2H), 6.91 (d, 2H), 7.84 (d, 2H).
38		E/Z=5/1 mixture ¹ HNMR(CD ₃ OD) 1.23–1.40 (m, 8H), 1.40–1.50 (m, 2H), 1.51–1.62 (m, 2H), 1.67–1.72 (m, 3H), 1.74–1.92 (m, 4H), 3.05 (t, 2H), 3.15 (t, 2H), 3.68–3.76 (m, 1.7H, E-isomer), 3.84 (d, 0.3H, Z-isomer), 4.03–4.15 (m, 4H), 5.40–5.52 (m, 1H), 5.65–5.78 (m, 1H), 7.12 (d, 2H), 7.78 (d, 2H).
39		E/Z=5/1 mixture ¹ HNMR(CDCl ₃) 1.20–1.38 (m, 8H), 1.41–1.72 (m, 34H), 1.73–1.94 (m, 4H), 3.06–3.27 (m, 4H), 4.02 (t, 2H), 4.08–4.23 (m, 3.7H, 2H+1.7H (E-isomer)), 4.30 (d, 0.3H, Z-isomer), 5.39–5.76 (m, 2H), 6.90 (d, 2H), 7.84 (d, 2H).

[0222] 表中Bocは、*t*-ブトキシカルボニル基を意味する。

[0223] 実施例40

(工程1) *t*-ブチル N-[(*t*-ブトキシカルボニルアミノ) - [7-[(2-ニトロフェニル) スルホニルアミノ] ヘプチルアミノ] メチレン] カルバメートの合成

[0224] [化49]



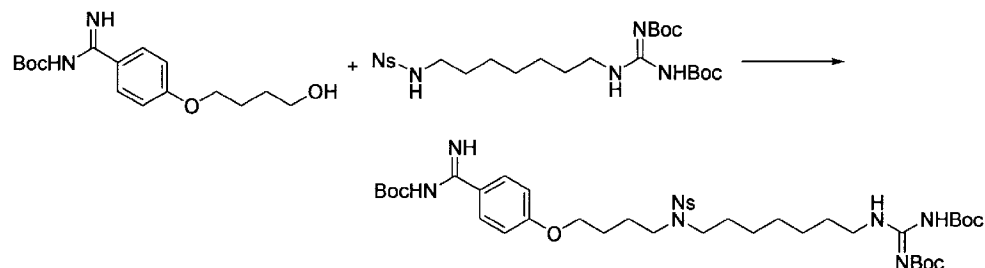
[0225] 1, 7-ジアミノヘプタン (3.9 g) のエタノール (30 mL) 溶液に、0℃に2-ニトロベンゼンスルホニルクロリド (2.2 g) のエタノール (30 mL) 溶液を滴下した。0℃にて3時間攪拌後、反応溶媒を留去した後に水を加えて、酢酸エチルで抽出した。有機層を濃縮後、テトラヒドロフラン (30 mL) に溶解して、1, 3-ビス (*t*-ブトキシカルボニル) - 2-メチルイソチオウレア (3.5 g) を添加した。室温で3.5時間攪拌後、溶媒留去した後に、シリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製し、表題化合物 (3.3 g) を得た。

$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) : 1.26–1.32 (m, 6H)、1.46–1.65 (m, 22H)、3.10 (m, 2H)、3.37 (m, 2H)、7.74–7.78 (m, 2H)、7.87 (m, 1H)、8.14 (m, 1H)。

[0226] (工程2) *t*-ブチル N-[4-[4-[7-[[N, N'-ビス (*t*-ブトキシカルボニル) カルバイミドイル] アミノ] ヘプチル- (2-ニトロフェニル) スルホニル-アミノ] ブトキシ] ベンゼンカルボキシイミドイル] カルバメートの合成

[0227]

[化50]



[0228] 工程1で得られた t -ブチル N -[$(t$ -ブトキシカルボニルアミノ)-[7-[$(2$ -ニトロフェニル)スルホニルアミノ]ヘプチルアミノ]メチレン]カルバメート (0.15 g) をテトラヒドロフラン (3 mL) に溶解した。 N -[$(t$ -ブトキシカルボニルアミノ)-[7-[$(2$ -ニトロフェニル)スルホニルアミノ]ヘプチルアミノ]メチレン]カルバメート (0.31 g) を加えた後に、 0°C でトリフェニルホスフィン (0.14 g)、ジエチルアゾジカルボキシレート (2.2 M トルエン溶液、0.25 mL) を添加した。室温で17時間攪拌した後、反応溶媒を留去した。残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製し、表題化合物 (化合物番号: 40、0.17 g) を得た。

[0229] [表35]

化合物番号	構造	NMRデータ
40		$^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3)$ 1.22-1.25(m, 6H), 1.47-1.55(m, 31H), 1.68-1.75(m, 4H), 3.24-3.35(m, 6H), 3.97(m, 2H), 6.85(d, 2H), 7.59-7.65(m, 3H), 7.84(d, 2H), 7.99(s, 1H).

[0230] (工程3) t -ブチル N -[4-[4-[7-[$[N, N'$ -ビス(t -ブトキシカルボニル)カルバイミドイル]アミノ]ヘプチルアミノ]ブトキシ]ベンゼンカルボキシイミドイル]カルバメートの合成

[0231] [化51]

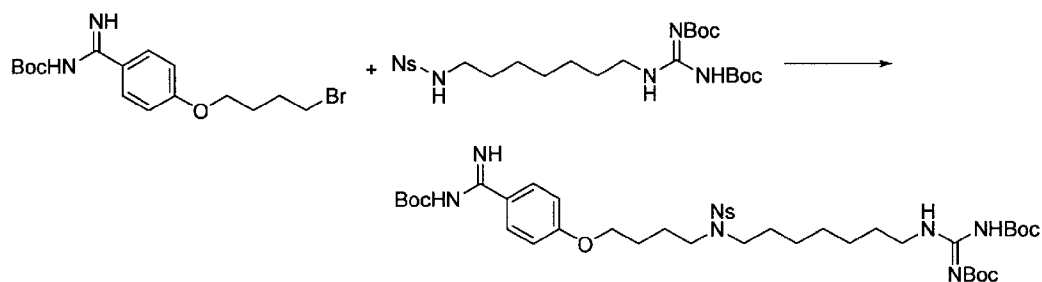


[0232] 工程2で得られた *t*-ブチル N-[4-[4-[7-[[N, N'-ビス(*t*-ブトキシカルボニル)カルバイミドイル]アミノ]ヘプチルー(2-ニトロフェニル)スルホニルーアミノ]ブトキシ]ベンゼンカルボキシイミドイル]カルバメート (0.85 g) をアセトニトリル (5 mL) に溶解した後に、炭酸カリウム (0.41 g)、チオフェノール (0.33 g) を添加した。室温で18時間攪拌した後に、反応溶媒を留去した。残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製し、表題化合物 (化合物番号: 4、0.64 g) を得た。

[0233] 実施例40-2

t-ブチル N-[4-[4-[7-[[N, N'-ビス(*t*-ブトキシカルボニル)カルバイミドイル]アミノ]ヘプチルー(2-ニトロフェニル)スルホニルーアミノ]ブトキシ]ベンゼンカルボキシイミドイル]カルバメートの合成

[0234] [化52]



[0235] *t*-ブチル ((4-(4-ブプロモブトキシ)フェニル)(イミノ)メチル)カルバメート (0.41 g) と、実施例40工程1で得られた *t*-ブチル N-[(*t*-ブトキシカルボニルアミノ) - [7 - [(2 - ニトロフェニル) スルホニルアミノ] ヘプチルアミノ] メチレン] カルバメート (0.56 g) をジメチルホルムアミド (3 mL) に溶解した。炭酸カリウム (0.17 g) を加えて室温で17時間攪拌した。シリカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製し、表題化合物 (化合物番号: 40、0.68 g) を得た。

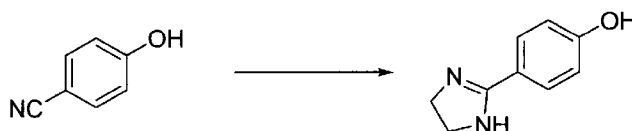
$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) : 1.22–1.25 (m, 6H)、1.47–1.

5.5 (m, 3H)、1.68–1.75 (m, 4H)、3.24–3.35 (m, 6H)、3.97 (m, 2H)、6.85 (d, 2H)、7.59–7.65 (m, 3H)、7.84 (d, 2H)、7.99 (s, 1H).

[0236] 合成例 6

(工程 1) 4-(4,5-ジヒドロ-1H-イミダゾール-2-イル)フェノールの合成

[0237] [化53]



[0238] 4-ヒドロキシベンゾニトリル (1.5 g) をエチレンジアミン (15 mL) に溶解させ、室温で五硫化ニリン (1.68 g) を加えた。反応混合物を 120℃ に昇温し、同温で一晩攪拌した。反応混合物を室温まで冷却後、水を加え、析出した結晶をろ取し、表題化合物を 2.02 g (定量的) 得た。

$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) : 3.55–3.62 (m, 4H)、6.71 (d, 2H)、7.61 (d, 2H)。

[0239] (工程 2) t-ブチル 2-(4-t-ブトキシカルボニルオキシフェニル)-4,5-ジヒドロイミダゾール-1-カルボキシレートの合成

[0240] [化54]



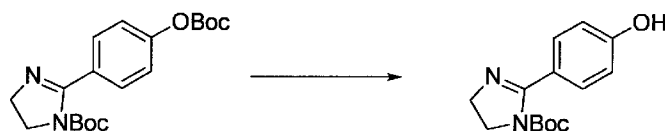
[0241] 工程 1 で得られた 4-(4,5-ジヒドロ-1H-イミダゾール-2-イル)フェノール (1 g) をジメチルホルムアミド (10 mL) に溶解させ、室温でトリエチルアミン (1.87 g)、ジ-t-ブチルジカーボネート (3.36 g) を加え、同温で一晩攪拌した。反応混合物に水を加え、クロロホルムで抽出した。有機層を無水硫酸ナトリウムで乾燥し、ろ過後、減圧濃

縮した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製し、表題化合物を2.00g（収率89.7%）得た。

$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) : 1.27 (s, 9H)、1.56 (s, 9H)、3.92–4.02 (m, 4H)、7.18 (d, 2H)、7.52 (d, 2H) .

[0242] (工程3) t-ブチル 2-(4-ヒドロキシフェニル)-4,5-ジヒドロイミダゾール-1-カルボキシレート

[0243] [化55]

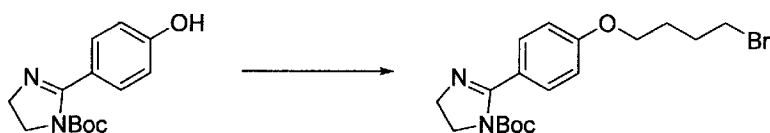


[0244] 工程2で得られたt-ブチル 2-(4-t-ブトキシカルボニルオキシフェニル)-4,5-ジヒドロイミダゾール-1-カルボキシレート(2.00g)をメタノール(15mL)に溶解させ、室温で10%水酸化ナトリウム水溶液(7mL)を加えた。同温で4時間攪拌させ、反応混合物を減圧濃縮した。得られた残渣に水を加え、酢酸エチルで抽出した。有機層を無水硫酸ナトリウムで乾燥し、ろ過後、減圧濃縮し、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製し、表題化合物を825mg（収率57.3%）得た。

$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) : 1.31 (s, 9H)、3.91 (ddd, 2H)、3.98 (ddd, 2H)、6.65 (d, 2H)、7.32 (d, 2H) .

[0245] (工程4) t-ブチル 2-[4-(4-ブロモブトキシ)フェニル]-4,5-ジヒドロイミダゾール-1-カルボキシレートの合成

[0246] [化56]



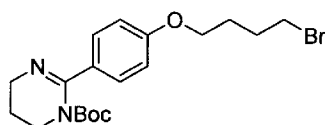
[0247] 工程3で得られたt-ブチル 2-(4-ヒドロキシフェニル)-4,5-ジヒドロイミダゾール-1-カルボキシレート(300g)をジメチルホルムアミド(5mL)に溶解させ、0℃で水素化ナトリウム(52mg)を加えた。同温で15分攪拌後、1,6-ジブロモブタン(1.23g)を加えた。反応混合物を室温まで昇温し、同温で5時間攪拌した。反応混合物に水を加え、酢酸エチルで抽出した。有機層を無水硫酸ナトリウムで乾燥し、ろ過後、減圧濃縮した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製し、表題化合物を493mg(定量的)得た。

$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3): 1.32 (s, 9H)、1.90–1.98 (m, 2H)、2.12–2.04 (m, 2H)、3.49 (t, 2H)、3.91 (ddd, 2H)、4.00–3.95 (m, 2H)、4.02 (t, 2H)、6.86 (d, 2H)、7.47 (d, 2H)。

[0248] 合成例7

t-ブチル 2-[4-(4-ブロモブトキシ)フェニル]-4,5-ジヒドロイミダゾール-1-カルボキシレートの合成

[0249] [化57]



[0250] 4-(4,5-ジヒドロ-1H-イミダゾール-2-イル)フェノールを用いた以外は、合成例6と同様にして表題化合物を得た。

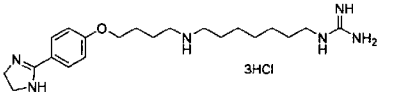
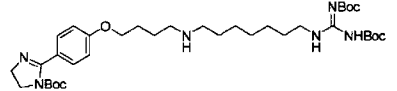
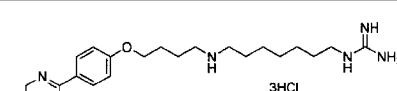
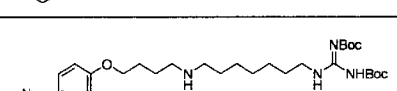
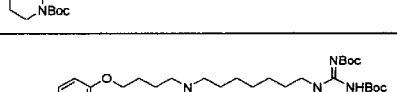
$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3): 1.16 (s, 9H)、1.89–2.00 (m, 2H)、2.04–2.12 (m, 2H)、3.49 (t, 2H)、3.59 (t, 2H)、3.69 (t, 2H)、4.02 (t, 2H)、6.87 (d, 2H)、7.42 (d, 2H)。

[0251] 実施例41～45

合成例6、7で得られた化合物を用いて、実施例2、3、40と同様の手法にて、本発明に係る化合物を合成した。合成した化合物の一部について、

その構造を表に示す。

[0252] [表36]

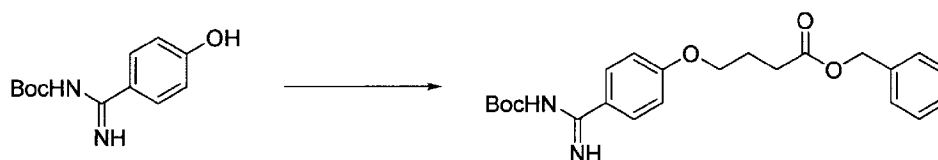
化合物 番号	構造	NMR
41		$^1\text{H NMR (CD}_3\text{OD)}$ 1.40–1.45 (m, 6H), 1.60–1.65 (m, 2H), 1.69–1.75 (m, 2H), 1.89–1.99 (m, 4H), 2.99–3.04 (m, 2H), 3.06–3.14 (m, 2H), 3.17 (t, 2H), 4.06 (s, 4H), 4.14–4.20 (m, 2H), 7.16 (d, 2H), 7.83 (d, 2H).
42		$^1\text{H NMR (CDCl}_3)$ 1.31 (s, 9H), 1.32–1.35 (m, 6H), 1.49 (s, 18H), 1.55–1.60 (m, 2H), 1.64–1.70 (m, 2H), 1.79–1.88 (m, 2H), 2.60 (t, 2H), 2.67 (t, 2H), 3.34–3.42 (m, 2H), 3.90–3.94 (m, 2H), 3.95–4.01 (m, 4H), 6.85 (d, 2H), 7.47 (d, 2H).
43		$^1\text{H NMR (CD}_3\text{OD)}$ 1.38–1.48 (m, 6H), 1.56–1.66 (m, 2H), 1.68–1.80 (m, 2H), 1.88–1.96 (m, 4H), 2.06–2.14 (m, 2H), 3.00–3.04 (m, 2H), 3.06–3.14 (m, 2H), 3.16–3.22 (m, 2H), 3.55–3.60 (m, 4H), 4.14 (dd, 2H), 7.12 (d, 2H), 7.66 (d, 2H).
44		$^1\text{H NMR (CDCl}_3)$ 1.14–1.16 (m, 8H), 1.48–1.52 (m, 18H), 1.60–1.76 (m, 13H), 1.80–1.84 (m, 2H), 1.88–1.96 (m, 2H), 2.61 (t, 2H), 2.69 (t, 2H), 3.40 (dd, 2H), 3.59 (t, 2H), 3.69 (t, 2H), 3.99 (t, 2H), 6.85 (d, 2H), 7.41 (d, 2H).
45		$^1\text{H NMR (CDCl}_3)$ 1.15–1.18 (m, 8H), 1.48–1.52 (m, 18H), 1.56–1.60 (m, 11H), 1.70–1.82 (m, 4H), 1.88–1.96 (m, 2H), 3.29 (t, 2H), 3.34–3.40 (m, 4H), 3.59 (t, 2H), 3.69 (t, 2H), 3.96 (d, 2H), 6.82 (d, 2H), 7.41 (d, 2H), 7.60–7.72 (m, 3H), 8.01 (dd, 1H).

[0253] 表中B o c は、*t*－ブトキシカルボニル基を意味する。

[0254] 実施例 4 6

(工程 1) ベンジル 4－(4－(N－(*t*－ブトキシカルボニル)カルバイミドイル)フェノキシ)ブタノエートの合成

[0255] [化58]



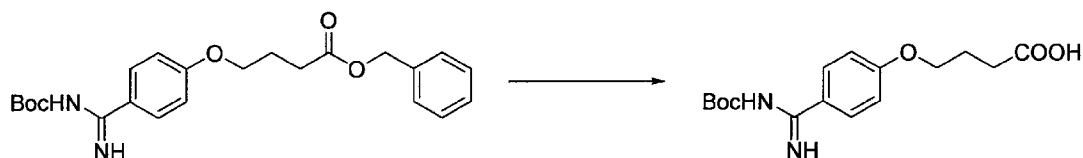
[0256] *t*－ブチル ((4－ヒドロキシフェニル) (イミノ) メチル) カルバメート (1.2 g) をアセトニトリル (15 mL) に溶解した後に、ベンジル 4－ブロモブタノエート (1.4 g) および炭酸カリウム (0.83 g) を加えた。60℃で9時間攪拌した後に、ろ過を行い、溶媒を減圧留去した。残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製し、表題化合物 (1.7 g) を得た。

$^1\text{H NMR (CDCl}_3)$: 1.54 (s, 9H)、2.13 (m, 2H)、2

. 57 (t, 2H)、4.03 (t, 2H)、5.12 (s, 2H)、6.86 (d, 2H)、7.34 (m, 5H)、7.81 (d, 2H).

[0257] (工程2) 4-(4-(N-(t-ブトキシカルボニル)カルバイミドイル)フェノキシ)ブタン酸

[0258] [化59]

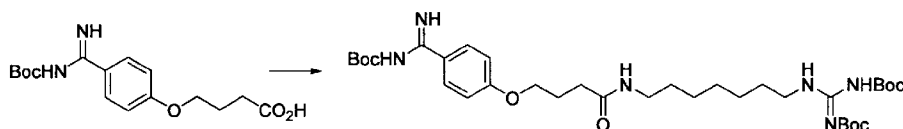


[0259] 工程1で得られたベンジル 4-(4-(N-(t-ブトキシカルボニル)カルバイミドイル)フェノキシ)ブタノエート (1.7 g) を酢酸エチル (20 mL) に溶解した後に、10%パラジウムカーボン (0.2 g) を加えた。水素雰囲気下として、室温で一昼夜攪拌した後に、セライト (登録商標: Celite Corporation製) でろ過をした。溶媒を減圧留去した後に、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製し、表題化合物 (1.4 g) を得た。

$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3): 1.44 (s, 9H)、1.94 (m, 2H)、2.39 (t, 2H)、4.05 (t, 2H)、6.99 (d, 2H)、7.93 (d, 2H).

[0260] (工程3) t-ブチル N-[4-[4-[7-[[N, N'-ビス(t-ブトキシカルボニル)カルバイミドイル] アミノ] ヘプチルアミノ] -4-オキソ-ブトキシ] ベンゼンカルボキシイミドイル] カルバメートの合成

[0261] [化60]



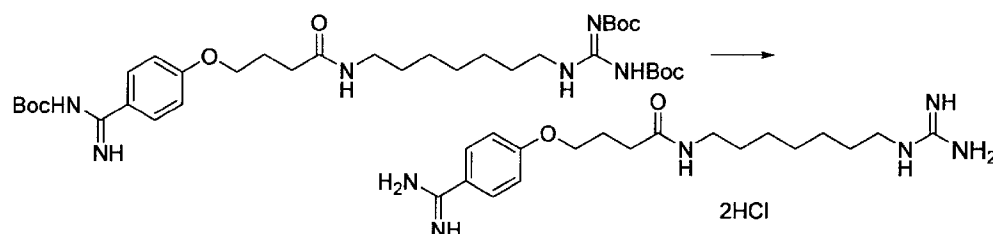
[0262] 工程2で得られた4-(4-(N-(t-ブトキシカルボニル)カルバイミドイル)フェノキシ)ブタン酸 (0.32 g) をジメチルホルムアミド (5 mL) に溶解した後に、ジイソプロピルエチルアミン (0.15 g) と {

{ [(1-シアノ-2-エトキシ-2-オキソエチリデン) アミノ] オキシ } - 4-モルホリノメチレン} ジメチルアンモニウムヘキサフルオロリン酸塩 (0.47 g) と *t*-ブチル N-[(7-アミノヘプチルアミノ) - (*t*-ブトキシカルボニルアミノ) メチレン] カルバメート (0.41 g) を加えた。室温にて1昼夜攪拌した後に、溶媒を減圧留去した。残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製し、表題化合物 (化合物番号: 47、0.38 g) を得た。

[0263] 実施例 47

4-(4-カルバイミドイルフェノキシ) - N-(7-グアニジノヘプチル) ブタンアミド 2塩酸塩の合成

[0264] [化61]



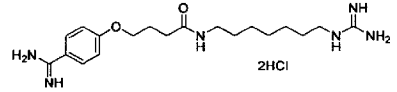
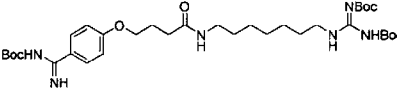
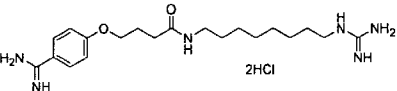
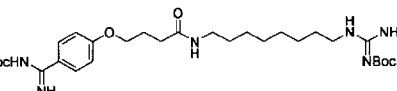
[0265] 実施例 46 で得られた *t*-ブチル N-[4-[4-[7-[[N, N'-ビス(*t*-ブトキシカルボニル)カルバイミドイル]アミノ]ヘプチルアミノ]-4-オキソブトキシ]ベンゼンカルボキシイミドイル]カルバメート (0.38 g) をジクロロメタン (5 mL) に溶解して、トリフルオロ酢酸 (1.5 mL) を加えた。室温で一昼夜攪拌した後に、溶媒を減圧留去した。メタノール (3 mL)、塩化水素 (4 M ジオキサン溶液、3 mL) を加え、室温で 2.5 時間攪拌した後に、溶媒を減圧留去することで、表題化合物 (化合物番号: 46、0.25 g) を得た。

[0266] 実施例 48、49

実施例 46、47 と同様の手法にて、本発明に係る化合物を合成した。合成した化合物の一部について、その構造を表に示す。

[0267]

[表37]

化合物 番号	構造	NMRデータ
46		$^1\text{H NMR}(\text{CD}_3\text{OD})$ 1.30–1.38 (m, 6H), 1.50–1.60 (m, 4H), 2.30 (br, 2H), 2.50 (m, 2H), 3.14–3.25 (m, 4H), 4.12 (t, 2H), 7.11 (d, 2H), 7.78 (d, 2H).
47		$^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3)$ 1.23–1.28 (m, 6H), 1.48–1.56 (m, 31H), 2.13 (m, 2H), 2.37 (m, 2H), 3.21 (m, 2H), 3.32 (m, 2H), 4.03 (m, 2H), 6.89 (d, 2H), 7.89 (d, 2H).
48		$^1\text{H NMR}(\text{CD}_3\text{OD})$ 1.28–1.38 (m, 8H), 1.49–1.57 (m, 4H), 2.11 (m, 2H), 2.43 (m, 2H), 3.17–3.20 (m, 4H), 4.13 (t, 2H), 7.13 (d, 2H), 7.79 (d, 2H).
49		$^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3)$ 1.23–1.30 (m, 8H), 1.48–1.62 (m, 31H), 2.12 (m, 2H), 2.36 (m, 2H), 3.23 (m, 2H), 3.33 (m, 2H), 4.23 (m, 2H), 6.88 (d, 2H), 7.84 (d, 2H).

[0268] 表中B o cは、t-ブトキシカルボニル基を意味する。

[0269] 実施例50

t-ブチル N- [4- [4- [アセチル- [7- [[N, N'-ビス (t-ブトキシカルボニル) カルバイミドイル] アミノ] ヘプチル] アミノ] ブトキシ] ベンゼンカルボキシイミドイル] カルバメートの合成

[0270] [化62]



[0271] 実施例40工程3で得られたt-ブチル N- [4- [4- [7- [[N, N'-ビス (t-ブトキシカルボニル) カルバイミドイル] アミノ] ヘプチルアミノ] ブトキシ] ベンゼンカルボキシイミドイル] カルバメート (100 mg) をジクロロメタン (3 mL) に溶解させ、室温でトリエチルアミン (39 mg)、無水酢酸 (16 mg) を加え、同温で3時間攪拌した。反応混合物に水を加え、クロロホルムで抽出した。有機層を無水硫酸ナトリウムで乾燥し、ろ過後、減圧濃縮し、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製し、表題化合物 (化合物番号: 51) を90 mg (

収率 85.7%) 得た。

[0272] 実施例 51 ~ 53

実施例 50 および実施例 3 と同様の手法にて、本発明に係る化合物を合成した。合成した化合物の一部について、その構造を表に示す。

[0273] [表38]

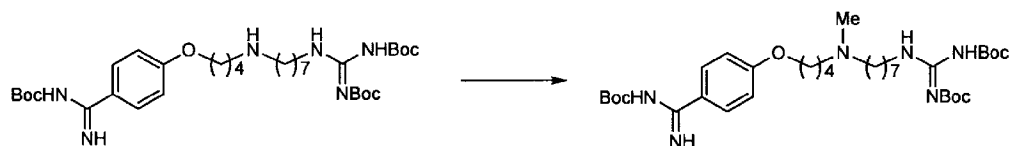
化合物番号	構造	NMRデータ
50		¹ HNMR(CD ₃ OD) 1.28-1.44 (m, 6H), 1.52-1.68 (m, 4H), 1.72-1.90 (m, 4H), 2.11 (s, 3H), 3.12-3.20 (m, 2H), 3.34-3.39 (m, 2H), 3.39-3.46 (m, 2H), 4.13 (tt, 2H), 7.13 (dd, 2H), 7.78 (dd, 2H).
51		¹ HNMR(CDCl ₃) 1.24-1.36 (m, 6H), 1.49-1.58 (m, 31H), 1.69-1.86 (m, 4H), 2.08 (s, 3H), 3.19-3.24 (m, 2H), 3.28-3.34 (m, 2H), 3.35-3.42 (m, 2H), 4.00-4.06 (m, 2H), 6.90 (dd, 2H), 7.86 (dd, 2H).
52		¹ HNMR(CD ₃ OD) 1.08-1.20 (m, 4H), 1.25-1.30 (m, 2H), 1.38-1.52 (m, 4H), 1.54-1.66 (m, 4H), 1.70-1.78 (m, 2H), 1.86-1.95 (m, 2H), 3.10-3.20 (m, 2H), 3.52-3.62 (m, 2H), 3.86-3.93 (m, 1H), 4.16-4.21 (m, 1H), 7.02 (d, 2H), 7.14 (d, 2H), 7.33-7.40 (m, 4H), 7.44-7.48 (m, 1H), 7.75-7.80 (m, 2H).
53		¹ HNMR(CDCl ₃) 1.15-1.25 (m, 2H), 1.34-1.40 (m, 2H), 1.50-1.60 (m, 33H), 1.63-1.70 (m, 2H), 1.83-1.93 (m, 2H), 3.15-3.25 (m, 3H), 3.25-3.61 (m, 2H), 3.80-3.90 (m, 1H), 4.05-4.13 (m, 1H), 6.76-6.98 (m, 2H), 7.34-7.42 (m, 4H), 7.84-7.90 (m, 2H), 8.23-8.35 (m, 1H).

[0274] 表中 Boc は、*t*-ブトキシカルボニル基を意味する。

[0275] 実施例 54

t-ブチル N-[4-[4-[7-[[N, N'-ビス(*t*-ブトキシカルボニル)カルバイミドイル]アミノ]ヘプチル-メチル-アミノ]ブトキシ]ベンゼンカルボキシイミドイル]カルバメートの合成

[0276] [化63]



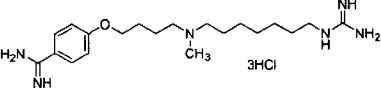
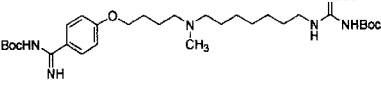
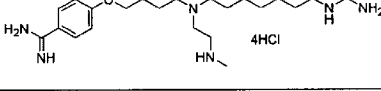
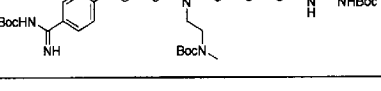
[0277] 実施例 40 工程 3 で得られた *t*-ブチル N-[4-[4-[7-[[N, N'-ビス(*t*-ブトキシカルボニル)カルバイミドイル]アミノ]ヘプチルアミノ]ブトキシ]ベンゼンカルボキシイミドイル]カルバメート (2.24 mg) をジクロロメタン (5 mL) に溶解させ、0℃でホルマリン溶液 (10 mg) を加えた。室温まで昇温した後、同温で 1 時間攪拌した。0℃

まで冷却した後、同温でアセトキシ水素化ホウ素ナトリウム（178mg）を加えた。室温まで昇温した後、6時間攪拌した。反応混合物に水を加え、酢酸エチルで抽出した。有機層を無水硫酸ナトリウムで乾燥し、ろ過後、減圧濃縮した。残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製し、表題化合物（化合物番号：55）を119mg（収率52.2%）得た。

[0278] 実施例55～57

実施例54および実施例3と同様の手法にて、本発明に係る化合物を合成した。合成した化合物の一部について、その構造を表に示す。

[0279] [表39]

化合物番号	構造	NMRデータ
54		¹ HNMR (CD ₃ OD) 1.40–1.45 (m, 6H), 1.56–1.64 (m, 2H), 1.72–1.84 (m, 2H), 1.90–2.02 (m, 4H), 2.88 (s, 3H), 3.16–3.24 (m, 4H), 4.17 (dd, 2H), 7.15 (d, 2H), 7.79 (d, 2H).
55		¹ HNMR (CDCl ₃) 1.22–1.36 (m, 6H), 1.40–1.46 (m, 2H), 1.47–1.52 (m, 2H), 1.61–1.68 (m, 2H), 1.78–1.85 (m, 2H), 2.21 (s, 3H), 2.30 (t, 2H), 2.38 (t, 2H), 3.36 (dd, 2H), 4.02 (t, 2H), 6.92 (d, 2H), 7.84 (d, 2H).
56		¹ HNMR (CD ₃ OD) 1.40–1.50 (m, 6H), 1.56–1.66 (m, 2H), 1.76–1.90 (m, 2H), 1.92–2.00 (m, 2H), 2.00–2.12 (m, 2H), 2.81 (s, 3H), 3.19 (t, 2H), 3.30–3.40 (m, 4H), 3.54–3.62 (m, 4H), 4.20 (t, 2H), 7.16 (d, 2H), 7.80 (d, 2H).
57		¹ HNMR (CDCl ₃) 1.22–1.34 (m, 6H), 1.44–1.56 (m, 4H), 1.76–1.86 (m, 2H), 2.41 (t, 2H), 2.46–2.60 (m, 4H), 2.87 (s, 3H), 3.20–3.30 (m, 2H), 3.34–3.42 (m, 2H), 4.01 (t, 2H), 6.90 (d, 2H), 7.85 (d, 2H).

[0280] 表中Bocは、t-ブトキシカルボニル基を意味する。

[0281] 合成例8

(工程1) 4-(4-(t-ブチルジメチルシリル)オキシ)ブトキシ-3-クロロベンズニトリルの合成

[0282] [化64]



[0283] 4-(4-(t-ブチルジメチルシリル)オキシ)ブタン-1-オール (4.5g) をジメチルホルムアミド (60mL) に溶解した後に、0℃で水素化

ナトリウム (0.96 g) を加えた。30分攪拌後、3-クロロ-4-フルオロベンゾニトリル (3.1 g) を加えて、室温で18時間攪拌した。飽和塩化アンモニウム水溶液を加えて反応を停止した後に、酢酸エチルで抽出した。有機層を濃縮した後に、シリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製し、表題化合物 (3.0 g) を得た。

$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) : 0.040 (s, 6H)、0.88 (s, 9H)、1.71 (m, 2H)、1.93 (m, 2H)、3.69 (t, 2H)、4.11 (t, 2H)、6.94 (d, 1H)、7.51 (d, 1H)、7.64 (s, 1H)。

[0284] (工程2) t-ブチル ((3-クロロ-4-(4-ヒドロキシブトキシ)フェニル) (イミノ) メチル) カルバメートの合成

[0285] [化65]



[0286] 工程1にて得られた4-(4-(t-ブチルジメチルシリル)オキシ)ブトキシ)-3-クロロベンゾニトリル (3.3 g) をテトラヒドロフラン (20 mL) に溶解して、室温でリチウムジイソプロピルアミド (1.3 M テトラヒドロフラン溶液、10 mL) を滴下した。19時間攪拌後、室温にてリチウムジイソプロピルアミド (1.3 M テトラヒドロフラン溶液、5 mL) を滴下して、21時間攪拌した。反応溶液に塩化水素 (4 M ジオキサン溶液、20 mL)、メタノール 20 mL を加えて1.5時間攪拌した。溶媒留去した残渣をジメチルホルムアミド (20 mL) に溶解した後に、トリエチルアミン (5.0 g)、ジ-t-ブチルジカーボネート (3.2 g) を添加した。室温で3.5時間攪拌した後に、水を加えて酢酸エチルで抽出した。有機層の溶媒を減圧留去した後にシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製し、表題化合物 (1.1 g) を得た。

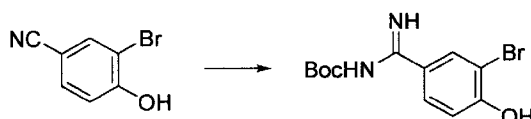
$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) : 1.52 (s, 9H)、1.78 (m, 2H)、

1. 95 (m, 2 H)、4. 73 (m, 2 H)、4. 09 (m, 2 H)、
6. 88 (d, 1 H)、7. 73 (d, 1 H)、7. 92 (s, 1 H) .

[0287] 合成例 9

(工程 1) t-ブチル ((3-ブロモ-4-ヒドロキシフェニル) (イミノ) メチル) カルバメートの合成

[0288] [化66]

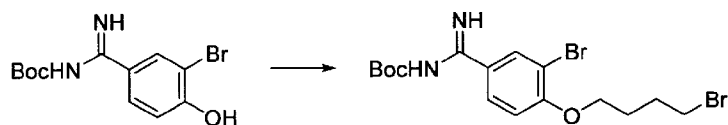


[0289] 3-ブロモ-4-ヒドロキシベンゾニトリル (5. 2 g) をメタノール (60 mL) に溶解した後、0℃にて塩酸ガスを吹き込んだ。一昼夜攪拌した後に溶媒を減圧留去した後、メタノール (30 mL)、アンモニア (7 Mメタノール溶液、15 mL) を加えて48時間攪拌した。溶媒を減圧留去した後に、ジメチルホルムアミド (60 mL) を加えてからトリエチルアミン (7. 9 g)、ジ-tert-ブチルジカーボネート (14. 2 g) を添加した。室温にて一昼夜攪拌した後に、10%水酸化ナトリウム水溶液を加えて、3時間攪拌した。酢酸エチルで抽出後、有機層を濃縮し、表題化合物 (4. 4 g) を得た。

$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) : 1. 50 (s, 9 H)、7. 10 (d, 1 H)、
7. 62 (d, 1 H)、7. 98 (s, 1 H) .

[0290] (工程 2) t-ブチル ((3-ブロモ-4-(4-ブロモブトキシ) フェニル) (イミノ) メチル) カルバメート

[0291] [化67]



[0292] 工程 1 で得られた t-ブチル ((3-ブロモ-4-ヒドロキシフェニル) (イミノ) メチル) カルバメート (4. 4 g) をアセトニトリル (50 mL)

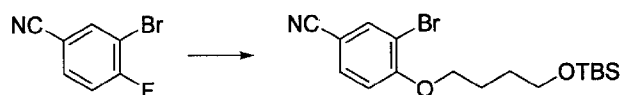
L) に溶解した後に、1, 4-ジブロモブタン (9.1 g)、炭酸カリウム (2.3 g) を加えた。60℃で8時間攪拌後にセライト (登録商標: Celite Corporation製) でろ過をして、溶媒を減圧留去した。残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製し、表題化合物 (2.2 g) を得た。

$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) : 1.44 (s, 9H)、2.03 (m, 2H)、2.12 (m, 2H)、3.52 (t, 2H)、4.10 (m, 2H)、6.86 (d, 1H)、7.78 (d, 1H)、8.09 (s, 1H)。

[0293] 合成例 10

(工程1) 3-ブromo-4-(4-(t-ブチルジメチルシリル)オキシ)ブトキシ)ベンゾニトリルの合成

[0294] [化68]



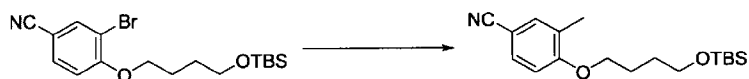
[0295] 4-(4-(t-ブチルジメチルシリル)オキシ)ブタン-1-オール (2.0 g) をテトラヒドロフラン (30 mL) に溶解した後に、0℃で水素化ナトリウム (0.48 g) を加えた。30分攪拌後、3-ブromo-4-フルオロベンゾニトリル (2.2 g) を加えて、室温で4時間攪拌した。飽和塩化アンモニウム水溶液を加えて反応を停止した後に、酢酸エチルで抽出した。有機層を濃縮した後、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製し、表題化合物 (3.4 g) を得た。

$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) : 0.040 (s, 6H)、0.88 (s, 9H)、1.72 (m, 2H)、1.93 (m, 2H)、3.69 (t, 2H)、4.11 (t, 2H)、6.89 (d, 1H)、7.55 (d, 1H)、7.81 (s, 1H)。

[0296] (工程2) 4-(4-(t-ブチルジメチルシリル)オキシ)ブトキシ)-3-メチルベンゾニトリルの合成

[0297]

[化69]

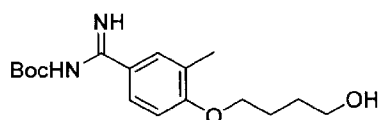


[0298] 工程1で得られた3-ブロモ-4-(4-(tert-ブチルジメチルシリル)オキシ)ブトキシ)ベンゾニトリル(3.3g)をジオキサン(25mL)、水(5mL)に溶解した後に、炭酸カリウム(1.4g)、トリメチルボロキシシン(1.6g)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0)(0.50g)を加えた。24時間加熱還流した後に酢酸エチルで抽出した。有機層を濃縮後にシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製し、表題化合物(2.4g)を得た。

$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3): 0.040 (s, 6H)、0.88 (s, 9H)、1.71 (m, 2H)、1.88 (m, 2H)、2.20 (s, 3H)、3.67 (t, 2H)、4.03 (t, 2H)、6.81 (d, 1H)、7.39 (s, 1H)、7.45 (d, 1H)。

[0299] (工程3) tert-ブチル ((4-(4-ヒドロキシブトキシ)-3-メチルフェニル)(イミノ)メチル)カルバメートの合成

[0300] [化70]



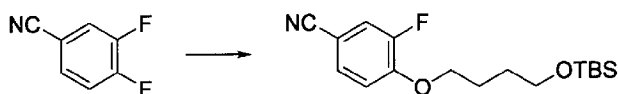
[0301] 工程2で得られた4-(4-(tert-ブチルジメチルシリル)オキシ)ブトキシ)-3-メチルベンゾニトリルを用いて、合成例8工程2と同様の手法にて、表題化合物を合成した。

$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3): 1.54 (s, 9H)、1.77 (m, 2H)、1.91 (m, 2H)、2.22 (s, 3H)、3.72 (m, 2H)、4.03 (t, 2H)、6.79 (d, 1H)、7.66 (d, 1H)、7.69 (s, 1H)。

[0302] 合成例11

(工程1) 4-(4-((t-ブチルジメチルシリル)オキシ)ブトキシ)-3-フルオロベンゾニトリルの合成

[0303] [化71]

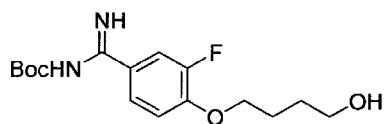


[0304] 4-(4-((t-ブチルジメチルシリル)オキシ)ブタン-1-オール (4.5 g) をジメチルホルムアミド (60 mL) に溶解した後に、0℃で水素化ナトリウム (0.96 g) を加えた。30分攪拌後、3,4-ジフルオロベンゾニトリル (2.8 g) を加えて、室温で18時間攪拌した。飽和塩化アンモニウム水溶液を加えて反応を停止した後に、酢酸エチルで抽出した。有機層を濃縮した後に、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製し、表題化合物 (3.6 g) を得た。

$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) : 0.040 (s, 6H)、0.88 (s, 9H)、1.69 (m, 2H)、1.91 (m, 2H)、3.68 (t, 2H)、4.11 (t, 2H)、6.99 (m, 1H)、7.33 (m, 1H)、7.38 (d, 1H)。

[0305] (工程2) t-ブチル ((3-フルオロ-4-(4-ヒドロキシブトキシ)フェニル) (イミノ) メチル) カルバメート

[0306] [化72]



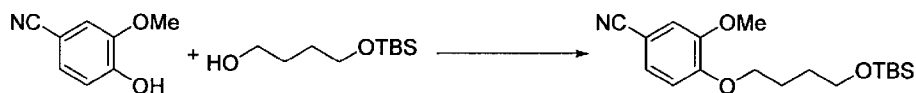
[0307] 工程1で得られた4-(4-((t-ブチルジメチルシリル)オキシ)ブトキシ)-3-フルオロベンゾニトリルを用いて、合成例8工程2と同様の手法にて、表題化合物を合成した。

$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) : 1.52 (s, 9H)、1.75 (m, 2H)、1.93 (m, 2H)、3.71 (t, 2H)、4.09 (t, 2H)、6.94 (m, 1H)、7.59 (m, 1H)、7.65 (d, 1H)。

[0308] 合成例 1 2

(工程 1) 4-(4-(t-ブチルジメチルシリル)オキシ)ブトキシ)-3-メトキシベンゾニトリルの合成

[0309] [化73]

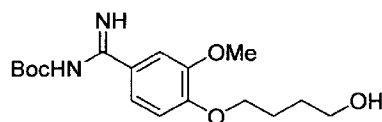


[0310] 4-ヒドロキシ-3-メトキシベンゾニトリル (1.49 g)、4-(t-ブチルジメチルシリル)オキシ)ブタン-1-オール (2.2 g) をテトラヒドロフラン (30 mL) に溶解した後に、0℃にてトリフェニルフォスフィン (3.9 g)、ジエチルアゾジカルボキシレート (2.2 M トルエン溶液、7.5 mL) を加えた。室温にて1時間攪拌後、溶媒を減圧留去した。残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製し、表題化合物 (3.3 g) を得た。

$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) : 0.033 (s, 6H)、0.87 (s, 9H)、1.67 (m, 2H)、1.92 (m, 2H)、3.67 (t, 2H)、3.86 (s, 3H)、4.08 (t, 2H)、6.87 (d, 1H)、7.05 (s, 1H)、7.23 (d, 1H) .

[0311] (工程 2) t-ブチル((4-(4-ヒドロキシブトキシ)-3-メトキシフェニル)(イミノ)メチル)カルバメート

[0312] [化74]



[0313] 工程 1 で得られた 4-(4-(t-ブチルジメチルシリル)オキシ)ブトキシ)-3-メトキシベンゾニトリルを用いて、合成例 8 工程 2 と同様の手法にて、表題化合物を合成した。

$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) : 1.53 (s, 9H)、1.75 (m, 2H)、1.95 (m, 2H)、3.72 (m, 2H)、3.91 (s, 3H)、4

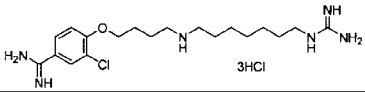
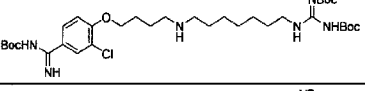
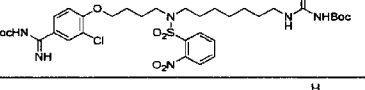
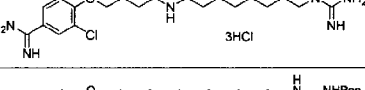
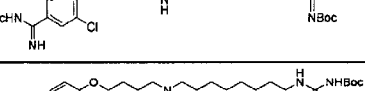
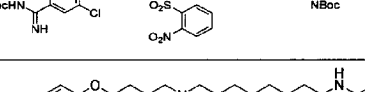
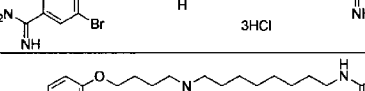
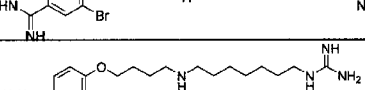
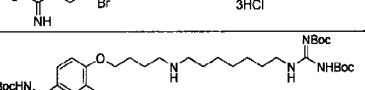
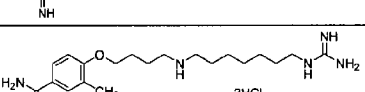
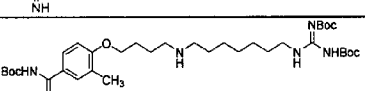
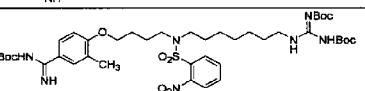
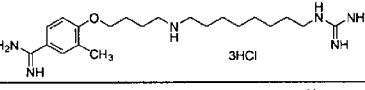
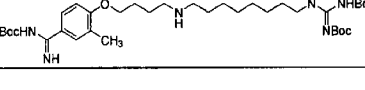
. 07 (m, 2 H)、6. 83 (d, 1 H)、7. 32 (d, 1 H)、7. 47 (s, 1 H) .

[0314] 実施例 58～86

合成例 8～12 で得られた化合物などを用い、実施例 40 または 40-2 と同様の手法にて、本発明に係る化合物を合成した。合成した化合物の一部について、その構造を表に示す。

[0315]

[表40]

化合物 番号	構造	NMRデータ
58		$^1\text{H NMR}(\text{CD}_3\text{OD})$ 1.38–1.46 (m, 6H), 1.60 (m, 2H), 1.73 (m, 2H), 1.93–2.00 (m, 4H), 3.02 (m, 2H), 3.12–3.20 (m, 4H), 4.26 (br, 2H), 7.31 (d, 1H), 7.79 (d, 1H), 7.91 (s, 1H).
59		$^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3)$ 1.25–1.29 (m, 6H), 1.48–1.55 (m, 27H), 1.60–1.89 (m, 8H), 2.64 (t, 2H), 2.73 (t, 2H), 3.35 (m, 2H), 4.08 (t, 2H), 6.94 (t, 1H), 7.60 (m, 1H), 7.65 (d, 1H).
60		$^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3)$ 1.13–1.20 (m, 6H), 1.50–1.56 (m, 31H), 1.78–1.89 (m, 4H), 3.25–3.29 (m, 4H), 3.42 (m, 2H), 4.11 (m, 2H), 6.91 (d, 1H), 7.62–7.67 (m, 3H), 7.78 (d, 1H), 7.99–8.03 (m, 2H).
61		$^1\text{H NMR}(\text{CD}_3\text{OD})$ 1.38–1.46 (m, 8H), 1.60 (m, 2H), 1.72 (m, 2H), 1.92–2.00 (m, 4H), 3.01 (t, 2H), 3.12–3.19 (m, 4H), 4.26 (br, 2H), 7.31 (d, 1H), 7.79 (d, 1H), 7.91 (s, 1H).
62		$^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3)$ 1.25–1.30 (m, 8H), 1.48–1.60 (m, 31H), 1.70 (m, 2H), 1.88 (m, 2H), 2.59 (t, 2H), 2.69 (t, 2H), 3.37 (m, 2H), 4.08 (t, 2H), 6.90 (d, 1H), 7.73 (d, 1H), 7.94 (s, 1H).
63		$^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3)$ 1.13–1.20 (m, 8H), 1.47–1.56 (m, 31H), 1.78–1.85 (m, 4H), 3.26–3.40 (m, 6H), 4.10 (m, 2H), 6.90 (d, 1H), 7.61–7.68 (m, 3H), 7.78 (d, 1H), 7.98–8.01 (m, 2H).
64		$^1\text{H NMR}(\text{CD}_3\text{OD})$ 1.37–1.42 (m, 8H), 1.57–1.60 (m, 2H), 1.70–1.72 (m, 2H), 1.95–2.00 (m, 4H), 3.02 (m, 2H), 3.15–3.19 (m, 4H), 4.25 (br, 2H), 7.27 (d, 1H), 7.82 (d, 1H), 8.08 (s, 1H).
65		$^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3)$ 1.25–1.30 (m, 8H), 1.42–1.58 (m, 31H), 1.71 (m, 2H), 1.89 (m, 2H), 2.59 (t, 2H), 2.69 (t, 2H), 3.36 (m, 2H), 4.08 (m, 2H), 6.86 (d, 1H), 7.78 (d, 1H), 8.11 (s, 1H).
66		$^1\text{H NMR}(\text{CD}_3\text{OD})$ 1.40–1.45 (m, 6H), 1.57–1.62 (m, 2H), 1.72–1.76 (m, 2H), 1.97–2.00 (m, 4H), 3.02 (br, 2H), 3.16–3.19 (m, 4H), 4.26 (br, 2H), 7.28 (d, 1H), 7.84 (d, 1H), 8.08 (s, 1H).
67		$^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3)$ 1.30–1.34 (m, 6H), 1.48–1.76 (m, 33H), 1.87 (m, 2H), 2.67 (t, 2H), 2.75 (t, 2H), 3.38 (m, 2H), 4.06 (t, 2H), 7.20 (d, 1H), 8.21 (s, 1H), 8.36 (d, 1H).
68		$^1\text{H NMR}(\text{CD}_3\text{OD})$ 1.40–1.44 (m, 6H), 1.58 (m, 2H), 1.70 (m, 2H), 1.90–1.95 (m, 4H), 2.28 (s, 3H), 3.00 (t, 2H), 3.09 (m, 2H), 3.17 (t, 2H), 4.17 (m, 2H), 7.12 (d, 1H), 7.63 (s, 1H), 7.70 (d, 1H).
69		$^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3)$ 1.26–1.32 (m, 8H), 1.49–1.60 (m, 31H), 1.70 (m, 2H), 1.91 (m, 2H), 2.62 (t, 2H), 2.71 (t, 2H), 3.37 (t, 2H), 3.94 (s, 3H), 4.07 (t, 2H), 6.87 (d, 1H), 7.37 (d, 1H), 7.50 (s, 1H).
70		$^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3)$ 1.25–1.30 (m, 6H), 1.48–1.58 (m, 31H), 1.72–1.83 (m, 4H), 2.20 (s, 3H), 3.25–3.38 (m, 6H), 3.98 (m, 2H), 6.78 (d, 1H), 7.59–7.73 (m, 5H), 7.99 (d, 1H).
71		$^1\text{H NMR}(\text{CD}_3\text{OD})$ 1.35–1.40 (m, 8H), 1.56 (m, 2H), 1.68 (m, 2H), 1.92–1.95 (m, 4H), 2.28 (s, 3H), 2.99 (t, 2H), 3.08 (m, 2H), 3.13 (t, 2H), 4.13 (m, 2H), 7.10 (d, 1H), 7.62 (s, 1H), 7.67 (d, 1H).
72		$^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3)$ 1.25–1.35 (m, 8H), 1.48–1.55 (m, 31H), 1.72 (m, 2H), 1.85 (m, 2H), 2.21 (s, 3H), 2.62 (t, 2H), 2.70 (t, 2H), 3.36 (m, 2H), 4.05 (t, 2H), 6.78 (d, 1H), 7.68 (d, 1H), 7.71 (s, 1H).

[0316]

[表41]

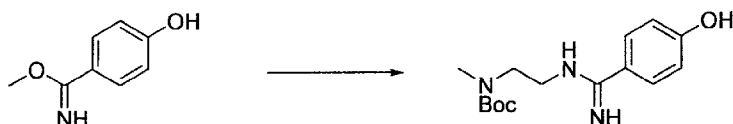
化合物 番号	構造	NMRデータ
73		$^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3)$ 1.25–1.29 (m, 8H), 1.48–1.58 (m, 31H), 1.75–1.82 (m, 4H), 2.19 (s, 3H), 3.25–3.38 (m, 6H), 3.99 (m, 2H), 6.78 (d, 1H), 7.61–7.73 (m, 5H), 7.99 (d, 1H).
74		$^1\text{H NMR}(\text{CD}_3\text{OD})$ 1.40–1.45 (m, 6H), 1.62 (m, 2H), 1.73 (m, 2H), 1.90–1.99 (m, 4H), 3.02 (t, 2H), 3.12–3.20 (m, 4H), 4.25 (br, 2H), 7.35 (t, 1H), 7.63–7.67 (m, 2H).
75		$^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3)$ 1.26–1.32 (m, 6H), 1.49–1.60 (m, 31H), 1.71 (m, 2H), 1.91 (m, 2H), 2.60 (t, 2H), 2.69 (t, 2H), 3.39 (m, 2H), 4.10 (t, 2H), 6.92 (d, 1H), 7.77 (d, 1H), 7.96 (s, 1H).
76		$^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3)$ 1.18–1.25 (m, 6H), 1.48–1.58 (m, 31H), 1.75–1.82 (m, 4H), 3.24–3.38 (m, 6H), 4.07 (m, 2H), 6.93 (t, 1H), 7.61–7.70 (m, 5H), 7.79 (d, 1H).
77		$^1\text{H NMR}(\text{CD}_3\text{OD})$ 1.38–1.45 (m, 8H), 1.60 (m, 2H), 1.71 (m, 2H), 1.90–1.99 (m, 4H), 3.01 (t, 2H), 3.11–3.17 (m, 4H), 4.24 (br, 2H), 7.33 (t, 1H), 7.63–7.67 (m, 2H).
78		$^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3)$ 1.24–1.32 (m, 8H), 1.48–1.54 (m, 31H), 1.60–1.72 (m, 6H), 1.88 (m, 2H), 2.60 (t, 2H), 2.69 (t, 2H), 3.35 (m, 2H), 4.07 (t, 2H), 6.94 (t, 1H), 7.58 (m, 1H), 7.68 (d, 1H).
79		$^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3)$ 1.25–1.30 (m, 8H), 1.47–1.57 (m, 31H), 1.73–1.83 (m, 4H), 3.26–3.38 (m, 6H), 4.12 (m, 2H), 6.93 (t, 1H), 7.61–7.70 (m, 5H), 7.98 (d, 1H).
80		$^1\text{H NMR}(\text{CD}_3\text{OD})$ 1.39–1.42 (m, 6H), 1.58 (m, 2H), 1.71 (m, 2H), 1.90–1.94 (m, 4H), 2.99 (m, 2H), 3.11–3.15 (m, 4H), 3.90 (s, 3H), 4.14 (m, 2H), 7.13 (d, 1H), 7.37 (s, 1H), 7.44 (d, 1H).
81		$^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3)$ 1.26–1.32 (m, 6H), 1.49–1.62 (m, 31H), 1.71 (m, 2H), 1.90 (m, 2H), 2.63 (t, 2H), 2.72 (br, 2H), 3.38 (m, 2H), 3.94 (s, 3H), 4.08 (m, 2H), 6.87 (d, 1H), 7.37 (d, 1H), 7.51 (s, 1H).
82		$^1\text{H NMR}(\text{CD}_3\text{OD})$ 1.37–1.42 (m, 8H), 1.57 (m, 2H), 1.71 (m, 2H), 1.90–1.94 (m, 4H), 3.02 (m, 2H), 3.15–3.22 (m, 4H), 3.91 (s, 3H), 4.16 (m, 2H), 7.15 (d, 1H), 7.39 (s, 1H), 7.45 (d, 1H).
83		$^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3)$ 1.26–1.32 (m, 8H), 1.49–1.60 (m, 31H), 1.70 (m, 2H), 1.91 (m, 2H), 2.62 (t, 2H), 2.71 (t, 2H), 3.37 (t, 2H), 3.94 (s, 3H), 4.07 (t, 2H), 6.87 (d, 1H), 7.37 (d, 1H), 7.50 (s, 1H).
84		$^1\text{H NMR}(\text{CD}_3\text{OD})$ 1.40–1.46 (m, 6H), 1.61 (m, 2H), 1.74 (m, 2H), 1.99–2.05 (m, 4H), 3.04 (m, 2H), 3.15–3.20 (m, 4H), 4.35 (br, 2H), 7.45 (d, 1H), 8.09 (d, 1H), 8.16 (s, 1H).
85		$^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3)$ 1.25–1.31 (m, 6H), 1.46–1.55 (m, 31H), 1.65 (m, 2H), 1.88 (m, 2H), 2.56 (t, 2H), 2.66 (t, 2H), 3.33 (m, 2H), 4.07 (m, 2H), 6.95 (d, 1H), 8.08 (d, 1H), 8.14 (s, 1H).
86		$^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3)$ 1.15–1.20 (m, 6H), 1.48–1.57 (m, 31H), 1.80–1.90 (m, 4H), 3.24–3.28 (m, 4H), 3.42 (m, 2H), 4.14 (m, 2H), 6.98 (d, 1H), 7.61–7.69 (m, 3H), 7.97 (d, 1H), 8.10 (d, 1H), 8.23 (s, 1H).

[0317] 表中Bocは、t-ブトキシカルボニル基を意味する。

[0318] 合成例 13

(工程1) t-ブチル N-[2-[(4-ヒドロキシベンゼンカルボイミ
ドイル)アミノ]エチル]-N-メチルカルバメートの合成

[0319] [化75]

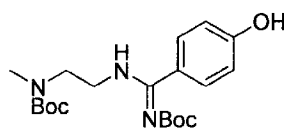


[0320] メチル 4-ヒドロキシベンゼンカルボイミデート (1 g) をメタノール (20 mL) に溶解させ、0℃でトリエチルアミン (4 mL)、*t*-ブチル *N*-(2-アミノエチル)-*N*-メチル-カルバメート (1.11 g) を加えた。反応混合物を室温まで昇温し、同温で一晩攪拌した。反応混合物を減圧濃縮し、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製し、表題化合物を1.01 g (収率65.2%) 得た。

$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) : 1.42 (s, 9H)、2.79 (s, 3H)、3.30–3.50 (m, 4H)、6.50–6.64 (m, 2H)、7.30–7.39 (m, 2H) .

[0321] (工程2) *t*-ブチル *N*-[2-[*t*-ブトキシカルボニル-(4-ヒドロキシベンゼンカルボイミドイル)アミノ]エチル]-*N*-メチル-カルバメートの合成

[0322] [化76]



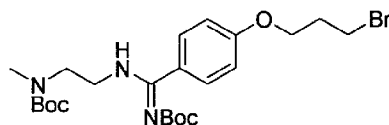
[0323] 工程1で得られた *t*-ブチル *N*-[2-[(4-ヒドロキシベンゼンカルボイミドイル)アミノ]エチル]-*N*-メチル-カルバメートを用いて合成例6工程2と同様の手法で表題化合物を得た。

$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) : 1.40–1.50 (m, 18H)、2.92 (s, 3H)、3.46–3.60 (m, 4H)、6.50–6.62 (m, 2H)、7.20 (d, 2H) .

[0324] (工程3) *t*-ブチル *N*-[4-(4-ブロモブトキシ)ベンゼンカルボキシイミドイル]-*N*-[2-[*t*-ブトキシカルボニル(メチル)アミノ]

〕エチル〕カルバメートの合成

[0325] [化77]



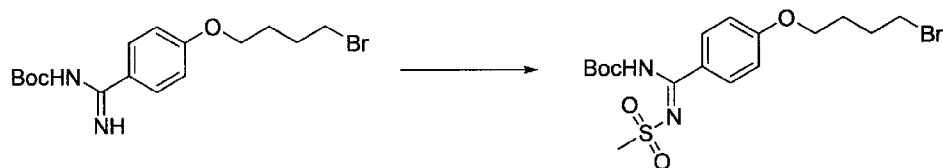
[0326] 工程2で得られたt-ブチル N-〔2-〔t-ブトキシカルボニル-4-ヒドロキシベンゼンカルボイミドイル〕アミノ〕エチル〕-N-メチルカルバメートを用いて合成例9工程2と同様の手法で表題化合物を得た。

$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) : 1.17 (s, 9H)、1.45 (s, 9H)、1.92–2.00 (m, 2H)、2.03–2.12 (m, 2H)、2.90 (s, 3H)、3.48 (t, 2H)、3.92–4.06 (m, 4H)、6.85 (d, 2H)、7.30–7.42 (m, 2H)。

[0327] 合成例14

(工程1) t-ブチル ((4-(4-ブロモブトキシ)フェニル)(メチルスルホニル)イミノ)メチルカルバメートの合成

[0328] [化78]



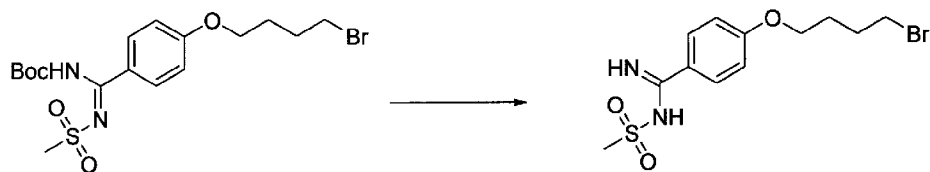
[0329] t-ブチル ((4-(4-ブロモブトキシ)フェニル)(イミノ)メチル)カルバメート (0.45 g) をジクロロメタン (5 mL) に溶解した後に、トリエチルアミン (0.18 g)、メシルクロリド (0.16 g) を加えた。室温で一昼夜攪拌した後に、溶媒を減圧留去した。残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製し、表題化合物 (0.32 g) を得た。

$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) : 1.42 (s, 9H)、1.97 (m, 2H)、2.03 (m, 2H)、3.12 (s, 3H)、3.48 (t, 2H)、4.04 (t, 2H)、6.89 (d, 2H)、7.56 (d, 2H)。

[0330] (工程2) 4-(4-ブロモブトキシ)-N-(メチルスルホニル)ベンズ

イミダミドの合成

[0331] [化79]



[0332] 工程1で得られたt-ブチル ((4-(4-ブロモブトキシ)フェニル) ((メチルスルホニル)イミノ)メチル)カルバメート (0.32 g) をジクロロメタン (3 mL) に溶解した後にトリフルオロ酢酸 (1 mL) を加えた。室温で17時間攪拌した後に、溶媒を減圧留去した。残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製し、表題化合物 (0.22 g) を得た。

$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) : 1.97 (m, 2H)、2.06 (m, 2H)、3.09 (s, 3H)、3.48 (t, 2H)、4.05 (t, 2H)、6.92 (d, 2H)、7.76 (d, 2H)。

[0333] 実施例87～90

合成例13、14で得られた化合物を用い、実施例40または40-2と同様の手法にて、本発明に係る化合物を合成した。合成した化合物の一部について、その構造を表に示す。

[0334] [表42]

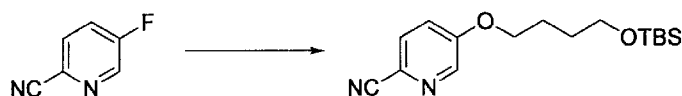
化合物番号	構造	NMRデータ
87		$^1\text{H NMR}$ (CD_3OD) 1.38-1.48 (m, 6H), 1.56-1.65 (m, 2H), 1.68-1.78 (m, 2H), 1.88-1.96 (m, 4H), 2.81 (s, 3H), 3.02 (dd, 2H), 3.06-3.14 (m, 2H), 3.15-3.22 (m, 2H), 3.43 (t, 2H), 3.84 (t, 2H), 4.14-4.20 (m, 2H), 7.15 (d, 2H), 7.84 (d, 2H)
88		$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) 1.14-1.20 (m, 6H), 1.42-1.52 (m, 29H), 1.54-1.60 (m, 2H), 1.62-1.72 (m, 2H), 1.80-1.90 (m, 2H), 2.60 (t, 2H), 2.67 (t, 2H), 2.91 (s, 3H), 3.41 (dd, 2H), 3.52-3.62 (m, 2H), 3.92-4.04 (m, 4H), 6.80-6.92 (m, 2H), 7.30-7.42 (m, 2H)
89		$^1\text{H NMR}$ (CD_3OD) 1.38-1.45 (m, 6H), 1.55-1.62 (m, 2H), 1.65-1.71 (m, 2H), 1.87-1.92 (m, 4H), 2.99 (t, 2H), 3.07 (m, 2H), 3.12 (s, 3H), 3.15 (t, 2H), 4.12 (m, 2H), 7.03 (d, 2H), 7.85 (d, 2H)
90		$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) 1.26-1.30 (m, 6H), 1.48-1.68 (m, 24H), 1.84 (m, 2H), 2.58 (t, 2H), 2.66 (t, 2H), 3.08 (s, 3H), 3.36 (m, 2H), 4.02 (t, 2H), 6.91 (d, 2H), 7.78 (d, 2H)

[0335] 表中Bocは、t-ブトキシカルボニル基を意味する。

[0336] 合成例15

(工程 1) 5-(4-((t-ブチルジメチルシリル)オキシ)ブトキシ)ピコリノニトリルの合成

[0337] [化80]

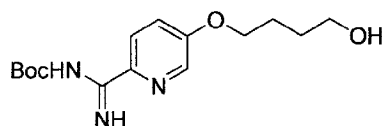


[0338] 4-((t-ブチルジメチルシリル)オキシ)ブタン-1-オール (3.4 g) をジメチルホルムアミド (45 mL) に溶解した後に、0℃で水素化ナトリウム (0.72 g) を加えた。30分攪拌後、5-フルオロピコリノニトリル (1.8 g) を加えて、室温で一昼夜攪拌した。飽和塩化アンモニウム水溶液を加えて反応を停止した後に、酢酸エチルで抽出した。有機層を濃縮した後に、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製し、表題化合物 (1.1 g) を得た。

$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) : 0.040 (s, 6H)、0.88 (s, 9H)、1.67 (m, 2H)、1.90 (m, 2H)、3.67 (m, 2H)、4.09 (m, 2H)、7.20 (d, 1H)、7.62 (d, 1H)、8.34 (s, 1H)。

[0339] (工程 2) t-ブチル ((5-(4-ヒドロキシブトキシ)ピリジン-2-イル) (イミノ) メチル) カルバメート

[0340] [化81]

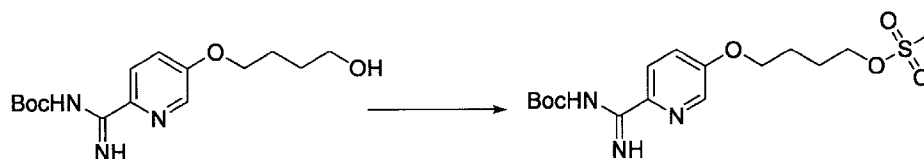


[0341] 工程 1 で得られた 5-(4-((t-ブチルジメチルシリル)オキシ)ブトキシ)ピコリノニトリルを用いて合成例 8 工程 2 と同様の手法で表題化合物を得た。

$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) : 1.55 (s, 9H)、1.97-2.09 (m, 4H)、3.49 (t, 2H)、4.09 (t, 2H)、7.22 (d, 1H)、8.22 (s, 1H)、8.40 (d, 1H)。

[0342] (工程3) 4-((6-(N-(t-ブトキシカルボニル)カルバイミドイル)ピリジン-3-イル)オキシ)ブチル メタンスルホネートの合成

[0343] [化82]

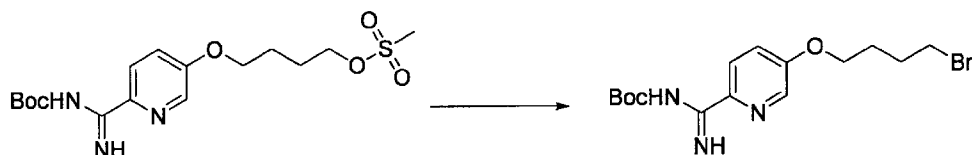


[0344] t-ブチル ((5-(4-ヒドロキシブトキシ)ピリジン-2-イル)(イミノ)メチル)カルバメート (0.8 g) をジクロロメタン (12 mL) に溶解して、0℃にてトリエチルアミン (0.78 g)、塩化メタンスルホニル (0.40 g) を加えた。溶媒を減圧留去した後に、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製し、表題化合物 (0.85 g) を得た。

$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) : 1.55–1.60 (m, 11H)、1.97 (m, 2H)、3.01 (s, 3H)、4.09 (m, 2H)、4.30 (m, 2H)、7.21 (dd, 1H)、8.22 (d, 1H)、8.38 (d, 1H) .

[0345] (工程4) t-ブチル ((5-(4-ブロモブトキシ)ピリジン-2-イル)(イミノ)メチル)カルバメートの合成

[0346] [化83]



[0347] 工程3で得られた4-((6-(N-(t-ブトキシカルボニル)カルバイミドイル)ピリジン-3-イル)オキシ)ブチル メタンスルホネート (0.85 g) をアセトニトリル (10 mL) に溶解して室温で臭化リチウム (0.38 g) を加えた。40℃で4時間攪拌後に溶媒を減圧留去した。残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製し、表題化合物 (0.49 g) を得た。

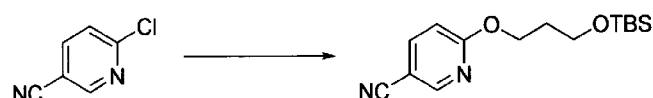
$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) : 1.55 (s, 9H)、1.97–2.09 (m

, 4 H)、3.49 (t, 2 H)、4.09 (t, 2 H)、7.22 (d, 1 H)、8.22 (s, 1 H)、8.40 (d, 1 H)。

[0348] 合成例 16

(工程 1) 6-(3-((t-ブチルジメチルシリル)オキシ)プロポキシ)ニコチノニトリルの合成

[0349] [化84]

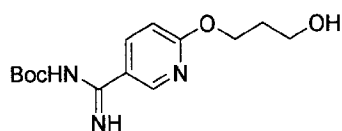


[0350] 3-((t-ブチルジメチルシリル)オキシ)プロパン-1-オール (1.9 g) をテトラヒドロフラン (30 mL) に溶解した後に、0℃で水素化ナトリウム (0.48 g) を加えた。30分攪拌後、6-クロロニコチノニトリル (1.5 g) を加えて、室温で一昼夜攪拌した。飽和塩化アンモニウム水溶液を加えて反応を停止した後に、酢酸エチルで抽出した。有機層を濃縮した後に、シリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製し、表題化合物 (2.7 g) を得た。

$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) : 0.022 (s, 6 H)、0.87 (s, 9 H)、1.98 (m, 2 H)、3.75 (t, 2 H)、4.45 (t, 2 H)、6.77 (d, 1 H)、7.75 (d, 1 H)、8.46 (s, 1 H)。

[0351] (工程 2) t-ブチル ((6-(3-ヒドロキシプロポキシ)ピリジン-3-イル) (イミノ) メチル) カルバメート

[0352] [化85]



[0353] 工程 1 で得られた 6-(3-((t-ブチルジメチルシリル)オキシ)プロポキシ)ニコチノニトリルを用いて合成例 8 工程 2 と同様の手法で表題化合物を得た。

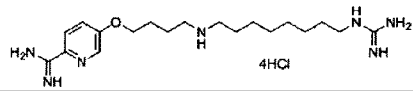
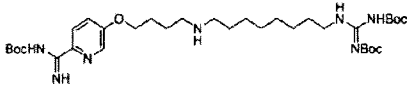
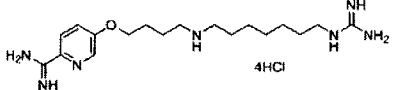
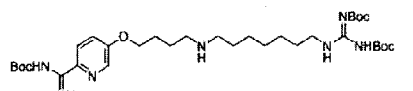
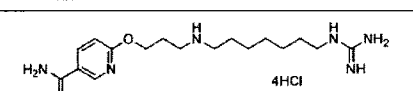
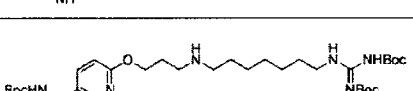
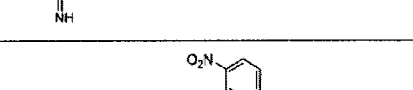
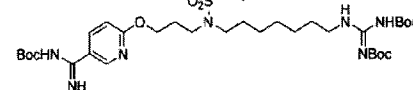
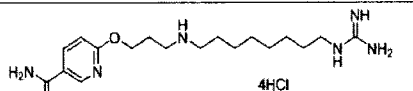
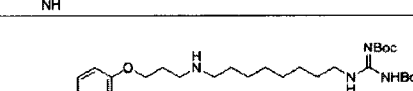
$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) : 1.53 (s, 9 H)、1.99 (m, 2 H)、

3. 70 (t, 2H)、4. 54 (t, 2H)、6. 75 (d, 1H)、8. 12 (d, 1H)、8. 57 (s, 1H)。

[0354] 実施例 91～100

合成例 15、16 で得られた化合物を用い、実施例 40 または 40-2 と同様の手法にて、本発明に係る化合物を合成した。合成した化合物の一部について、その構造を表に示す。

[0355] [表43]

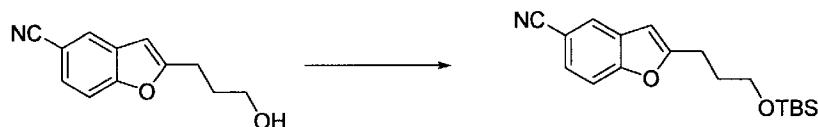
化合物番号	構造	NMRデータ
91		$^1\text{H NMR}(\text{CD}_3\text{OD})$ 1.35–1.40 (m, 8H), 1.58 (br, 2H), 1.71 (br, 2H), 1.91–1.95 (m, 4H), 2.95–3.00 (m, 2H), 3.10 (br, 2H), 3.15 (t, 2H), 4.23 (br, 2H), 7.61 (d, 1H), 8.18 (d, 1H), 8.46 (s, 1H).
92		$^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3)$ 1.25–1.31 (m, 8H), 1.48–1.59 (m, 31H), 1.68 (m, 2H), 1.85 (m, 2H), 2.60 (t, 2H), 2.68 (t, 2H), 3.38 (m, 2H), 4.06 (t, 2H), 7.25 (d, 1H), 8.21 (s, 1H), 8.37 (d, 1H).
93		$^1\text{H NMR}(\text{CD}_3\text{OD})$ 1.38–1.43 (m, 6H), 1.55–1.61 (m, 2H), 1.70–1.75 (m, 2H), 1.92–1.96 (m, 4H), 3.08 (t, 2H), 3.09 (br, 2H), 3.16 (t, 2H), 4.24 (br, 2H), 7.61 (d, 1H), 8.19 (d, 1H), 8.46 (s, 1H).
94		$^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3)$ 1.30–1.34 (m, 6H), 1.48–1.76 (m, 33H), 1.87 (m, 2H), 2.67 (t, 2H), 2.75 (t, 2H), 3.38 (m, 2H), 4.06 (t, 2H), 7.20 (d, 1H), 8.21 (s, 1H), 8.36 (d, 1H).
95		$^1\text{H NMR}(\text{CD}_3\text{OD})$ 1.40–1.45 (m, 6H), 1.60 (m, 2H), 1.74 (m, 2H), 2.24 (m, 2H), 3.04 (t, 2H), 3.16–3.24 (m, 4H), 4.54 (t, 2H), 7.02 (d, 1H), 8.10 (d, 1H), 8.65 (s, 1H).
96		$^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3)$ 1.24–1.29 (m, 6H), 1.48–1.70 (m, 31H), 2.03 (m, 2H), 2.65 (t, 2H), 2.81 (t, 2H), 3.35 (m, 2H), 4.42 (t, 2H), 6.74 (d, 1H), 8.12 (d, 1H), 8.61 (s, 1H).
97		$^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3)$ 1.15–1.26 (m, 6H), 1.47–1.68 (m, 33H), 3.27–3.31 (m, 4H), 3.45 (t, 2H), 4.31 (m, 2H), 6.71 (d, 1H), 7.55–7.63 (m, 3H), 7.98 (d, 1H), 8.13 (d, 1H), 8.64 (s, 1H).
98		$^1\text{H NMR}(\text{CD}_3\text{OD})$ 1.38–1.45 (m, 8H), 1.59 (m, 2H), 1.73 (m, 2H), 2.24 (m, 2H), 3.04 (t, 2H), 3.15–3.23 (m, 4H), 4.53 (t, 2H), 7.02 (d, 1H), 8.09 (d, 1H), 8.65 (s, 1H).
99		$^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3)$ 1.24–1.31 (m, 8H), 1.48–1.59 (m, 31H), 1.98 (m, 2H), 2.61 (t, 2H), 2.77 (t, 2H), 3.35 (m, 2H), 4.41 (t, 2H), 6.73 (d, 1H), 8.12 (d, 1H), 8.61 (s, 1H).
100		$^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3)$ 1.15–1.25 (m, 8H), 1.46–1.70 (m, 33H), 3.27–3.46 (m, 6H), 4.33 (m, 2H), 6.70 (m, 1H), 7.58–7.63 (m, 3H), 7.98 (d, 1H), 8.13 (d, 1H), 8.62 (s, 1H).

[0356] 表中Bocは、*t*-ブトキシカルボニル基を意味する。

[0357] 合成例 17

(工程1) 2-(3-((*t*-ブチルジメチルシリル)オキシ)プロピル)ベンゾフラン-5-カルボニトリルの合成

[0358] [化86]

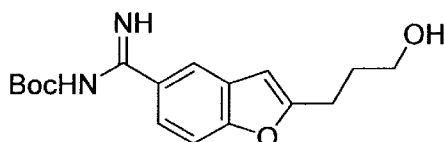


[0359] 2-(3-ヒドロキシプロピル)ベンゾフラン-5-カルボニトリル (8.3 g) をジメチルホルムアミド (20 mL) に溶解した後に、イミダゾール (6.8 g)、塩化 *t*-ブチルジメチルシリル (7.2 g) を加えた。室温で1時間攪拌した後に、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製し、表題化合物 (11.5 g) を得た。

$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) : 0.043 (s, 6H)、0.89 (s, 9H)、1.95 (m, 2H)、2.87 (m, 2H)、3.68 (t, 2H)、6.44 (s, 1H)、7.44–7.48 (m, 2H)、7.80 (s, 1H)。

[0360] (工程2) *t*-ブチル ((2-(3-ヒドロキシプロピル)ベンゾフラン-5-イル)(イミノ)メチル)カルバメートの合成

[0361] [化87]



[0362] 工程1で得られた2-(3-((*t*-ブチルジメチルシリル)オキシ)プロピル)ベンゾフラン-5-カルボニトリルを用いて合成例8工程2と同様の手法で表題化合物を得た。

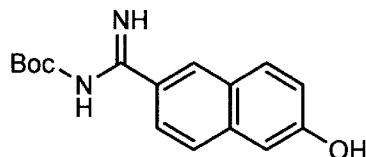
$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) : 1.55 (s, 9H)、2.01 (m, 2H)、2.89 (m, 2H)、3.74 (m, 2H)、6.43 (s, 1H)、7

. 4 1 (d, 1 H)、7. 7 0 (d, 1 H)、8. 0 5 (s, 1 H) .

[0363] 合成例 1 8

(工程 1) t-ブチル N-(6-ヒドロキシナフタレン-2-カルボイミドイル) カルバメートの合成

[0364] [化88]

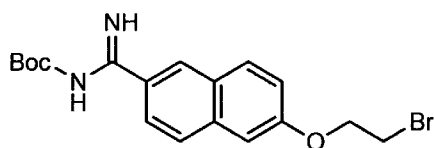


[0365] 6-ヒドロキシ-2-ナフトニトリルを用いて合成例 9 工程 1 と同様の手法を用いて表題化合物を合成した。

$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) : 1. 5 4 (s, 9 H)、7. 1 1–7. 1 6 (m, 2 H)、7. 7 0 (d, 1 H)、7. 7 9 (dd, 1 H)、7. 8 3 (d, 1 H)、8. 2 6–8. 3 1 (m, 1 H) .

[0366] (工程 2) t-ブチル N-[6-(2-ブロモエトキシ)ナフタレン-2-カルボキシイミドイル] カルバメートの合成

[0367] [化89]



[0368] 工程 1 で得られた t-ブチル N-(6-ヒドロキシナフタレン-2-カルボイミドイル) カルバメートを用いて合成例 9 工程 2 と同様の手法で表題化合物を得た。

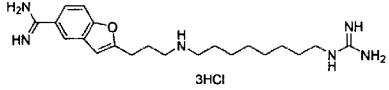
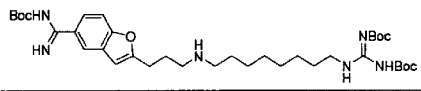
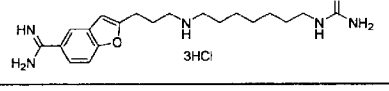
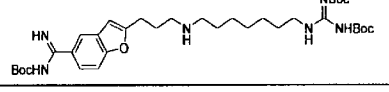
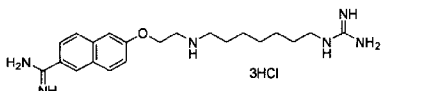
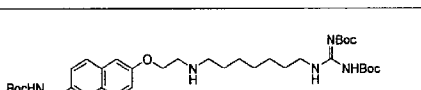
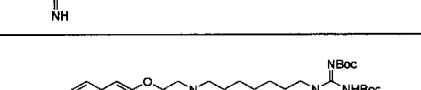
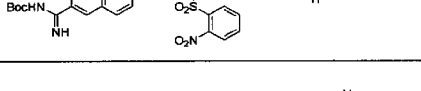
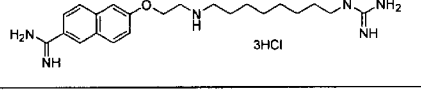
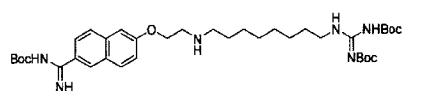
$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) : 1. 5 6 (s, 9 H)、3. 7 2 (t, 2 H)、4. 4 3 (t, 2 H)、7. 1 4 (d, 1 H)、7. 2 3 (dd, 1 H)、7. 7 5 (d, 2 H)、7. 8 2–7. 9 0 (m, 2 H)、8. 3 8 (s, 1 H) .

[0369] 実施例 1 0 1～1 1 0

合成例 1 7、1 8 で得られた化合物を用い、実施例 4 0 または 4 0-2 と

同様の手法にて、本発明に係る化合物を合成した。合成した化合物の一部について、その構造を表に示す。

[0370] [表44]

化合物番号	構造	NMRデータまたは融点
101		融点 188-191 °C
102		¹ HNMR (CDCl ₃) 1.24-1.28 (m, 8H), 1.40-1.56 (m, 40H), 1.95 (m, 2H), 2.78 (m, 2H), 3.15 (br, 2H), 3.27 (br, 2H), 3.85 (m, 2H), 6.44 (s, 1H), 7.41 (d, 1H), 7.77 (d, 1H), 8.11 (s, 1H).
103		融点 115-120 °C
104		¹ HNMR (CDCl ₃) 1.25-1.30 (m, 6H), 1.48-1.69 (m, 31H), 1.95 (m, 2H), 2.61 (m, 2H), 2.71 (m, 2H), 2.82 (m, 2H), 3.36 (m, 2H), 6.42 (s, 1H), 7.39 (d, 1H), 7.72 (d, 1H), 8.05 (s, 1H).
105		¹ HNMR (CD ₃ OD) 1.40-1.52 (m, 6H), 1.56-1.68 (m, 2H), 1.74-1.86 (m, 2H), 3.12-3.22 (m, 4H), 3.57 (dd, 2H), 4.41 (dd, 2H), 7.42 (dd, 1H), 7.50 (d, 1H), 7.80 (dd, 1H), 8.03 (d, 2H), 8.38 (d, 1H).
106		¹ HNMR (CDCl ₃) 1.30-1.38 (m, 6H), 1.48-1.52 (m, 18H), 1.56-1.62 (m, 13H), 2.70 (dd, 2H), 3.08 (dd, 2H), 3.39 (dd, 2H), 4.21 (t, 2H), 7.14-7.23 (m, 2H), 7.74 (d, 1H), 7.81-7.88 (m, 2H), 8.38-8.42 (m, 1H).
107		¹ HNMR (CDCl ₃) 1.18-1.26 (m, 6H), 1.48-1.52 (m, 18H), 1.56-1.62 (m, 13H), 3.29 (dd, 2H), 3.42 (dd, 2H), 3.80 (dd, 2H), 4.28 (dd, 2H), 7.02-7.11 (m, 2H), 7.60-7.70 (m, 3H), 7.74 (d, 1H), 7.80 (d, 1H), 7.89 (dd, 1H), 8.02-8.08 (m, 1H), 8.25-8.30 (m, 1H).
108		¹ HNMR (CD ₃ OD) 1.36-1.50 (m, 8H), 1.55-1.64 (m, 2H), 1.75-1.84 (m, 2H), 3.12-3.20 (m, 4H), 3.56 (dd, 2H), 4.49 (dd, 2H), 7.42 (dd, 1H), 7.51 (d, 1H), 7.80 (d, 1H), 8.03 (d, 2H), 8.38-8.42 (m, 1H).
109		¹ HNMR (CDCl ₃) 1.26-1.38 (m, 8H), 1.48-1.52 (m, 18H), 1.56-1.62 (m, 11H), 2.68 (t, 2H), 3.08 (t, 2H), 3.37 (dd, 2H), 4.21 (t, 2H), 7.14-7.22 (m, 2H), 7.75 (d, 1H), 7.82 (d, 1H), 7.88 (dd, 1H), 8.36-8.40 (m, 1H).
110		¹ HNMR (CDCl ₃) 1.37-1.48 (m, 8H), 1.54-1.65 (m, 2H), 1.66-1.76 (m, 2H), 2.00-2.08 (m, 2H), 2.65 (t, 2H), 3.03 (dd, 2H), 3.17 (dd, 4H), 7.06-7.10 (m, 2H), 7.61 (d, 2H), 7.72-7.76 (m, 2H), 7.80 (d, 1H), 7.89 (dd, 1H), 8.02-8.08 (m, 1H), 8.25-8.30 (m, 1H).

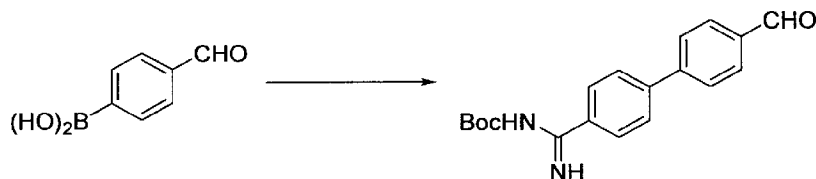
[0371] 表中Bocは、*t*-ブトキシカルボニル基を意味する。

[0372] 実施例 111

(工程1) *t*-ブチル N-[4-(4-ホルミルフェニル)ベンゼンカルボイミドイル]カルバメートの合成

[0373]

[化90]

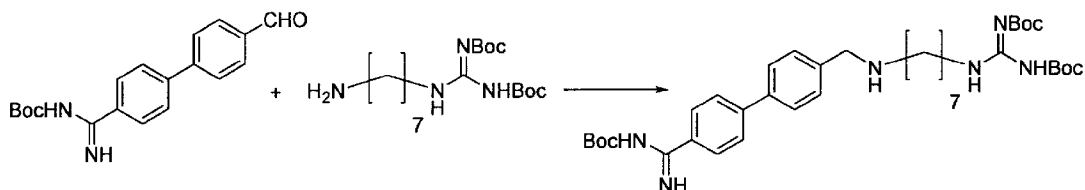


[0374] t-ブチル N-(4-ブロモベンゼンカルボイミドイル)カルバメート (500 mg) をトルエン (3 mL) に溶解させ、室温にてエタノール (2 mL)、水 (1 mL) を加えた。さらに同温で (4-ホルミルフェニル) ボロン酸 (250 mg)、炭酸カリウム (692 mg)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0) (193 mg) を加えた。反応混合物を 80℃ に昇温し、同温で 6 時間攪拌した。反応混合物を室温まで冷却し、水を加え、酢酸エチルで抽出した。有機層を無水硫酸ナトリウムで乾燥し、ろ過後、減圧濃縮した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製し、表題化合物を 350 mg (収率 64.6%) 得た。

 $^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) : 7.70 (d, 2H)、7.78 (d, 2H)、
8.02–7.96 (m, 4H).

[0375] (工程2) t-ブチル N-[4-[4-[7-[N, N'-ビス(t-ブトキシカルボニル)カルバイミドイル]アミノ]ヘプチルアミノ]メチル]フェニル]ベンゼンカルボキシイミドイル]カルバメートの合成

[0376] [化91]



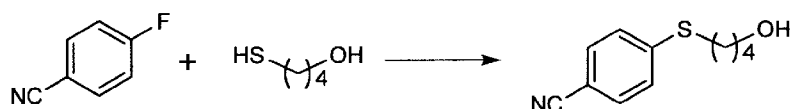
[0377] 工程1で得られた t-ブチル N-[4-(4-ホルミルフェニル)ベンゼンカルボイミドイル]カルバメート (115 mg) をメタノール (3 mL) に溶解させ、室温で t-ブチル N-[(7-アミノヘプチルアミノ)-(t-ブトキシカルボニルアミノ)メチレン]カルバメート (100 mg) を加えた。同温で1時間攪拌後、水素化ホウ素ナトリウム (10.7 mg)

を加え、同温で3時間攪拌した。反応混合物を減圧濃縮後、水を加え、酢酸エチルで抽出した。有機層を無水硫酸ナトリウムで乾燥し、ろ過後、減圧濃縮した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製し、表題化合物（化合物番号：112）を133mg（収率63.6%）得た。

[0378] 合成例19

（工程1）4-（4-ヒドロキシブチルスルファニル）ベンゾニトリルの合成

[0379] [化92]

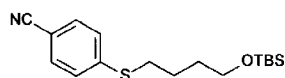


[0380] 4-フルオロベンゾニトリル（950mg）をアセトニトリル（10mL）に溶解させ、室温で炭酸カリウム（1.3g）、4-スルファニルブタン-1-オール（1g）を加え、同温で5時間攪拌した。反応混合物に水を加え、酢酸エチルで抽出した。有機層を無水硫酸ナトリウムで乾燥し、ろ過後、減圧濃縮し、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製し、表題化合物を660mg（収率40.5%）得た。

$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) : 1.70–1.86 (m, 4H)、3.03 (dd, 2H)、3.70 (dd, 2H)、7.30 (d, 2H)、7.52 (d, 2H)。

[0381] （工程2）4-〔4-〔t-ブチル（ジメチル）シリル〕オキシブチルスルファニル〕ベンゾニトリルの合成

[0382] [化93]



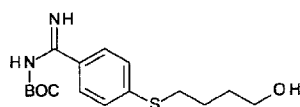
[0383] 4-（4-ヒドロキシブチルスルファニル）ベンゾニトリル（660mg）をジクロロメタン（8mL）に溶解させ、0℃でトリエチルアミン（65

9 mg)、塩化 *t*-ブチルジメチルシリル (590 mg)、4-ジメチルアミノピリジン (40 mg) を加えた。反応混合物を室温まで昇温し、同温で4時間攪拌した。反応混合物に水を加え、クロロホルムで抽出した。有機層を無水硫酸ナトリウムで乾燥し、ろ過後、減圧濃縮し、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製し、表題化合物を978 mg (収率93.4%) 得た。

$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) : 0.00 (s, 6H)、0.84 (s, 9H)、1.59–1.69 (m, 2H)、1.70–1.85 (m, 2H)、2.94–3.03 (m, 2H)、3.59–3.65 (m, 2H)、7.24 (d, 2H)、7.47 (d, 2H) .

[0384] (工程3) *t*-ブチル *N*-[4-(4-ヒドロキシブチルスルファニル)ベンゼンカルボキシイミドイル] カルバメートの合成

[0385] [化94]

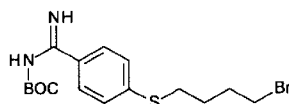


[0386] 工程2で得られた4-[4-[*t*-ブチル(ジメチル)シリル]オキシブチルスルファニル]ベンゾニトリルを用いて合成例8工程2と同様の手法で表題化合物を得た。

$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) : 1.55 (s, 9H)、1.68–1.82 (m, 4H)、3.01 (dd, 2H)、3.67 (dd, 2H)、7.30 (d, 2H)、7.76 (d, 2H) .

[0387] (工程4) *t*-ブチル *N*-[4-(4-ブロモブチルスルファニル)ベンゼンカルボキシイミドイル] カルバメートの合成

[0388] [化95]



[0389] 工程3で得られた *t*-ブチル *N*-[4-(4-ヒドロキシブチルスル

アニル) ベンゼンカルボキシイミドイル] カルバメートを用いて合成例 1 5 工程 3、4 と同様の手法で表題化合物を得た。

$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) : 1. 54 (s, 9H)、1. 80–1. 92 (m, 2H)、1. 98–2. 08 (m, 2H)、3. 01 (dd, 2H)、3. 44 (dd, 2H)、7. 26–7. 36 (m, 2H)、7. 71–7. 80 (m, 2H) .

[0390] 合成例 2 0

(工程 1) 4 – ((3 – ((t – ブチルジメチルシリル) オキシ) プロポキシ) メチル) ベンゾニトリルの合成

[0391] [化96]

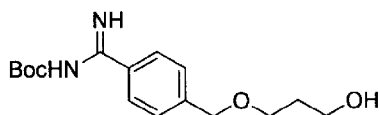


[0392] 3 – ((t – ブチルジメチルシリル) オキシ) プロパン – 1 – オール (1. 1 g) をテトラヒドロフラン (18 mL) に溶解した後に、0℃で水素化ナトリウム (0. 26 g) を加えた。15分攪拌後、4 – (ブロモメチル) ベンゾニトリル (0. 98 g) を加えて、室温で17時間攪拌した。飽和塩化アンモニウム水溶液を加えて反応を停止した後に、酢酸エチルで抽出した。有機層を濃縮した後に、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製し、表題化合物 (1. 2 g) を得た。

$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) : 0. 030 (s, 6H)、0. 87 (s, 9H)、1. 82 (m, 2H)、3. 58 (t, 2H)、3. 71 (t, 2H)、4. 54 (s, 2H)、7. 42 (d, 2H)、7. 61 (d, 2H) .

[0393] (工程 2) t – ブチル ((4 – ((3 – ヒドロキシプロポキシ) メチル) フェニル) (イミノ) メチル) カルバメートの合成

[0394] [化97]



[0395] 工程 1 で得られた 4 - ((3 - ((t - ブチルジメチルシリル) オキシ) プロポキシ) メチル) ベンゾニトリルを用いて合成例 8 工程 2 と同様の手法で表題化合物を得た。

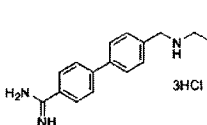
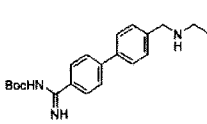
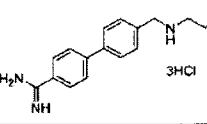
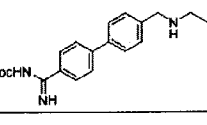
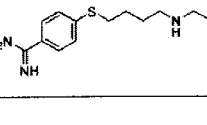
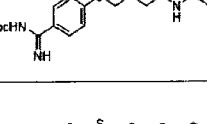
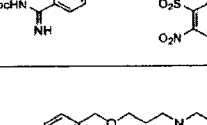
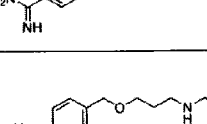
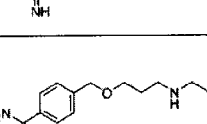
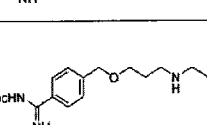
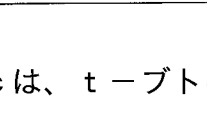
$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) : 1. 5 4 (s, 9 H)、1. 8 7 (m, 2 H)、3. 6 5 (t, 2 H)、3. 7 7 (m, 2 H)、4. 5 5 (s, 2 H)、7. 3 7 (d, 2 H)、7. 8 2 (d, 2 H) .

[0396] 実施例 1 1 2 ~ 1 2 1

実施例 1 1 1 と同様の手法にて、本発明に係る化合物を合成した。また、合成例 1 9、2 0 で得られた化合物を用い、実施例 4 0 または 4 0 - 2 と同様の手法にて、本発明に係る化合物を合成した。合成した化合物の一部について、その構造を表に示す。

[0397]

[表45]

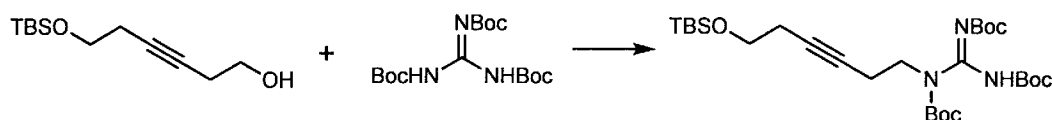
化合物 番号	構造	NMRデータ
111		$^1\text{H NMR}(\text{CD}_3\text{OD})$ 1.36–1.40 (m, 4H), 1.42–1.46 (m, 2H), 1.56–1.66 (m, 2H), 1.74–1.82 (m, 2H), 3.08–3.14 (m, 2H), 3.16–3.24 (m, 2H), 4.28 (s, 2H), 7.66 (d, 2H), 7.83 (d, 2H), 7.92–7.93 (m, 4H).
112		$^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3)$ 1.28–1.36 (m, 6H), 1.47–1.54 (m, 27H), 1.60–1.76 (m, 4H), 2.65 (t, 2H), 3.39 (dd, 2H), 3.85 (s, 2H), 7.42 (d, 2H), 7.58 (d, 2H), 7.65 (d, 2H), 7.93 (d, 2H).
113		$^1\text{H NMR}(\text{CD}_3\text{OD})$ 1.30–1.34 (m, 2H), 1.38–1.48 (m, 6H), 1.54–1.66 (m, 2H), 1.70–1.80 (m, 2H), 3.04–3.12 (m, 2H), 3.14–3.22 (m, 2H), 4.27 (s, 2H), 7.66 (d, 2H), 7.83 (d, 2H), 7.91–7.94 (m, 4H).
114		$^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3)$ 1.28–1.36 (m, 8H), 1.48–1.54 (m, 27H), 1.76–2.16 (m, 4H), 2.65 (t, 2H), 3.38 (dd, 2H), 3.86 (s, 2H), 7.43 (d, 2H), 7.57 (d, 2H), 7.65 (d, 2H), 7.93 (d, 2H).
115		$^1\text{H NMR}(\text{CD}_3\text{OD})$ 1.37–1.56 (m, 6H), 1.54–1.65 (m, 2H), 1.66–1.76 (m, 2H), 1.78–1.94 (m, 4H), 2.96–3.07 (m, 4H), 3.16 (dd, 4H), 7.49 (d, 2H), 7.72 (d, 2H).
116		$^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3)$ 1.26–1.36 (m, 6H), 1.48–1.52 (m, 27H), 1.64–1.84 (m, 4H), 2.60–2.72 (m, 6H), 2.94–3.03 (m, 2H), 3.37 (dd, 2H), 7.29 (d, 2H), 7.77 (d, 2H).
117		$^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3)$ 1.15–1.29 (m, 6H), 1.47–1.52 (m, 27H), 1.54–1.62 (m, 4H), 1.65–1.75 (m, 4H), 2.99 (dd, 2H), 3.22 (dd, 2H), 3.28–3.38 (m, 4H), 7.28–7.34 (m, 2H), 7.58–7.62 (m, 1H), 7.65–7.71 (m, 2H), 7.80–7.86 (m, 1H), 7.96–8.04 (m, 1H), 8.26–8.32 (m, 1H).
118		$^1\text{H NMR}(\text{CD}_3\text{OD})$ 1.40–1.45 (m, 6H), 1.61 (m, 2H), 1.72 (m, 2H), 2.05 (m, 2H), 3.02 (br, 2H), 3.15–3.20 (m, 4H), 3.67 (m, 2H), 4.67 (s, 2H), 7.61 (d, 2H), 7.81 (d, 2H).
119		$^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3)$ 1.25–1.30 (m, 6H), 1.44–1.58 (m, 31H), 1.82 (m, 2H), 2.58 (t, 2H), 2.73 (t, 2H), 3.33 (m, 2H), 3.55 (t, 2H), 4.52 (s, 2H), 7.37 (d, 2H), 7.85 (d, 2H).
120		$^1\text{H NMR}(\text{CD}_3\text{OD})$ 1.39–1.45 (m, 8H), 1.59 (m, 2H), 1.70 (m, 2H), 2.04 (m, 2H), 3.01 (t, 2H), 3.12–3.22 (m, 4H), 3.65 (m, 2H), 4.66 (s, 2H), 7.61 (d, 2H), 7.81 (d, 2H).
121		$^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3)$ 1.24–1.32 (m, 8H), 1.47–1.59 (m, 31H), 1.81 (m, 2H), 2.57 (t, 2H), 2.71 (t, 2H), 3.35 (m, 2H), 3.54 (t, 2H), 4.53 (s, 2H), 7.37 (d, 2H), 7.84 (d, 2H).

[0398] 表中B o cは、t-ブトキシカルボニル基を意味する。

[0399] 実施例1 2 2

(工程1) *t*-ブチル *N*-[*N*, *N'*-ビス(*t*-ブトキシカルボニル)カルバイミドイル]-*N*-[6-[*t*-ブチル(ジメチル)シリル]オキシヘキサー3-インニル]カルバメートの合成

[0400] [化98]

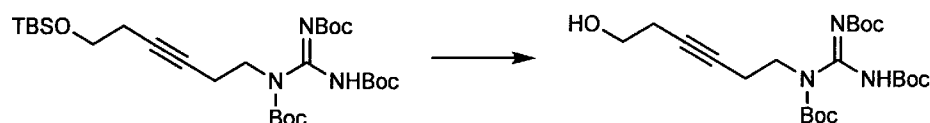


[0401] 6-[*t*-ブチル(ジメチル)シリル]オキシヘキサー3-インニル-1-オール(1.5 g)をテトラヒドロフラン(30 mL)に溶解させ、0℃でトリフェニルホスフィン(1.73 g)、*t*-ブチル *N*-[ビス(*t*-ブトキシカルボニルアミノ)メチレン]カルバメート(3.54 g)、ジエチルアゾジカルボキシレート(2.2 Mトルエン溶液)(2.99 mL)を加えた。反応混合物を室温まで昇温し、同温で6時間攪拌した。反応混合物を減圧濃縮し、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製し、表題化合物を1.48 g(収率39.6%)得た。

$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3): 0.07 (s, 6H)、0.89 (s, 9H)、1.47–1.55 (m, 27H)、2.31–2.38 (m, 2H)、2.49–2.55 (m, 2H)、3.67 (t, 2H)、3.91 (t, 2H)。

[0402] (工程2) *t*-ブチル *N*-[*N*, *N'*-ビス(*t*-ブトキシカルボニル)カルバイミドイル]-*N*-(6-ヒドロキシヘキサー3-インニル)カルバメートの合成

[0403] [化99]



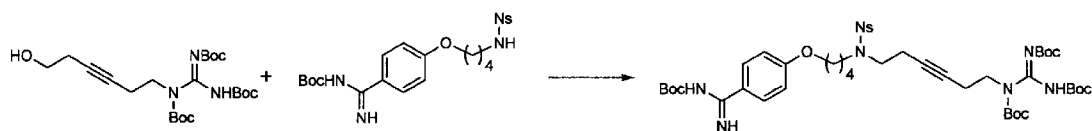
[0404] 工程1で得られた *t*-ブチル *N*-[*N*, *N'*-ビス(*t*-ブトキシカルボニル)カルバイミドイル]-*N*-[6-[*t*-ブチル(ジメチル)シリル]オキシヘキサー3-インニル]カルバメートの合成

〕オキシヘキサー３－インニル〕カルバメート（１．４８ｇ）をテトラヒドロフラン（１５ｍＬ）に溶解させ、０℃でテトラブチルアンモニウムフルオリド（１Ｍテトラヒドロフラン溶液）（２．７ｍＬ）を加えた。反応混合物を室温まで昇温し、同温で５時間攪拌した。反応混合物に水を加え、酢酸エチルで抽出した。有機層を無水硫酸ナトリウムで乾燥し、ろ過後、減圧濃縮し、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製し、表題化合物を１．０２ｇ（収率８７．２％）得た。

$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) : １．４８－１．５４ (m, ２７H)、２．３６－２．４２ (m, ２H)、２．５０－２．５６ (m, ２H)、３．６６ (dd, ２H)、３．９６ (t, ２H) .

[0405] (工程３) t －ブチル N －(N , N' －ビス(t －ブトキシカルボニル)カルバイミドイル)－ N －[６－[４－[４－(N － t －ブトキシカルボニルカルバイミドイル)フェノキシ]ブチルー(２－ニトロフェニル)スルホニル－アミノ]ヘキサー３－インニル〕カルバメートの合成

[0406] [化100]

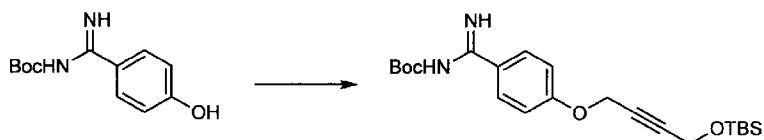


[0407] 工程２で得られた t －ブチル N －[N , N' －ビス(t －ブトキシカルボニル)カルバイミドイル]－ N －(６－ヒドロキシヘキサー３－インニル)カルバメート（２２１ｍｇ）をテトラヒドロフラン（４ｍＬ）に溶解させ、０℃でトリフェニルホスフィン（１５９ｍｇ）、 t －ブチル N －[４－[４－[(２－ニトロフェニル)スルホニルアミノ]ブトキシ]ベンゼンカルボキシイミドイル]カルバメート（２００ｍｇ）、ジエチルアゾジカルボキシレート（２．２Ｍトルエン溶液）（２７７ μ Ｌ）を加えた。反応混合物を室温まで昇温し、同温で６時間攪拌した。反応混合物を減圧濃縮し、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製し、表題化合物（化合物番号：１２４）を１１５ｍｇ（収率３０．５％）得た。

[0408] 合成例 2 1

(工程 1) *t*-ブチル N-[4-[4-[*t*-ブチル(ジメチル)シリル]オキシブター-2-インオキシ]ベンゼンカルボキシイミドイル]カルバメートの合成

[0409] [化101]



[0410] 4-ブロモブター-2-インオキシ-*t*-ブチルジメチルシラン (274 mg) をアセトニトリル (4 mL) に溶解させ、室温で炭酸カリウム (158 mg)、*t*-ブチル N-(4-ヒドロキシベンゼンカルボキシイミドイル)カルバメート (246 mg) を加えた。反応混合物を 60℃まで昇温し、同温で7時間攪拌した。反応混合物に水を加え、酢酸エチルで抽出した。有機層を無水硫酸ナトリウムで乾燥し、ろ過後、減圧濃縮し、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製し、表題化合物を 225 mg (収率 51.7%) 得た。

$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) : 0.09 (s, 6H)、0.89 (s, 9H)、1.55 (s, 9H)、4.34 (s, 2H)、4.77 (s, 2H)、6.99 (d, 2H)、7.83 (d, 2H)。

[0411] (工程 2) *t*-ブチル N-[4-(4-ヒドロキシブター-2-インオキシ)ベンゼンカルボキシイミドイル]カルバメートの合成

[0412] [化102]



[0413] 工程 1 で得られた *t*-ブチル N-[4-[4-[*t*-ブチル(ジメチル)シリル]オキシブター-2-インオキシ]ベンゼンカルボキシイミドイル]カルバメート (225 mg) をテトラヒドロフラン (3 mL) に溶解させ、

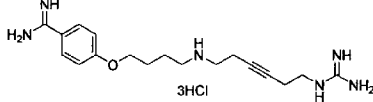
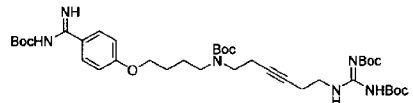
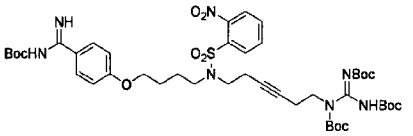
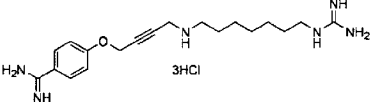
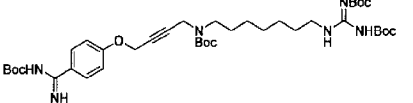
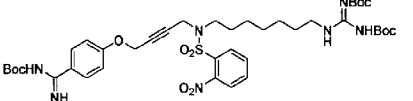
0℃でテトラブチルアンモニウムフルオリド（1 Mテトラヒドロフラン溶液）（564 μ L）を加えた。反応混合物を室温まで昇温し、同温で4時間攪拌した。反応混合物に水を加え、酢酸エチルで抽出した。有機層を無水硫酸ナトリウムで乾燥し、ろ過後、減圧濃縮し、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製し、表題化合物を131 mg（収率80.4%）得た。

$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) : 1.55 (s, 9H)、4.31 (s, 2H)、4.78 (s, 2H)、6.99 (d, 2H)、7.83 (d, 2H)。

[0414] 実施例123～127

実施例122と同様の手法にて、本発明に係る化合物を合成した。また、合成例21で得られた化合物を用い、実施例40または40-2と同様の手法にて、本発明に係る化合物を合成した。合成した化合物の一部について、その構造を表に示す。

[0415] [表46]

化合物番号	構造	NMRデータ
122		$^1\text{H NMR}$ (CD_3OD) 1.87–1.95 (m, 4H), 2.45–2.50 (m, 2H), 2.62–2.68 (m, 2H), 3.10–3.20 (m, 4H), 3.35–3.44 (m, 2H), 4.12–4.15 (m, 2H), 7.11 (d, 2H), 7.77 (d, 2H).
123		$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) 1.46–1.58 (m, 45H), 1.68–1.82 (m, 4H), 2.30–2.42 (m, 2H), 2.45–2.55 (m, 2H), 3.26–3.36 (m, 4H), 3.85–3.92 (m, 2H), 4.01 (dd, 2H), 6.90 (d, 2H), 7.84 (d, 2H).
124		$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) 1.46–1.52 (m, 36H), 1.76–1.84 (m, 4H), 2.38–2.50 (m, 4H), 3.40–3.50 (m, 4H), 3.80–3.86 (m, 2H), 3.96–4.04 (m, 2H), 6.90 (d, 2H), 7.62–7.72 (m, 3H), 7.85 (d, 2H), 8.01–8.06 (m, 1H).
125		$^1\text{H NMR}$ (CD_3OD) 1.38–1.46 (m, 6H), 1.56–1.66 (m, 2H), 1.66–1.76 (m, 2H), 3.04–3.10 (m, 2H), 3.14–3.22 (m, 2H), 4.01 (s, 2H), 4.99 (s, 2H), 7.20 (d, 2H), 7.82 (d, 2H).
126		$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) 1.14–1.30 (m, 6H), 1.46–1.56 (m, 40H), 3.20 (dd, 2H), 3.45 (dd, 2H), 3.98–4.16 (m, 2H), 4.74 (s, 2H), 6.99 (d, 2H), 7.90 (d, 2H).
127		$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) 1.18–1.22 (m, 6H), 1.48–1.52 (m, 18H), 1.56–1.62 (m, 15H), 3.25–3.40 (m, 4H), 4.63 (s, 2H), 6.91 (d, 2H), 7.46–7.70 (m, 3H), 7.88 (d, 2H), 8.00 (dd, 1H).

[0416] 表中B o c は、t-ブトキシカルボニル基を意味する。

[0417] 合成例 2 2

(工程 1) 4-(5-ヒドロキシペンター-1-インイル) ベンゾニトリルの合成

[0418] [化103]

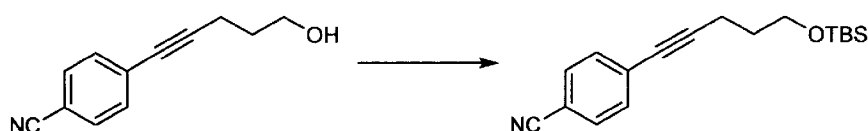


[0419] 4-ブロモベンゾニトリル (2 g) をジイソプロピルアミン (20 mL) に溶解させ、室温で4-ペンチン-1-オール (1.2 g)、ジクロロビス(トリフェニルホスフィン)パラジウム (383 mg)、よう化銅 (62 mg) を加えた。反応混合物を70℃まで昇温し、同温で一晩攪拌した。反応混合物を室温まで冷却し、水を加え、酢酸エチルで抽出した。有機層を無水硫酸ナトリウムで乾燥し、ろ過後、減圧濃縮し、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製し、表題化合物を1.85 g (92.0%) 得た。

$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) : 1.88 (td, 2H), 2.57 (t, 2H), 3.82 (dd, 2H), 7.46 (d, 2H), 7.57 (d, 2H).

[0420] (工程 2) 4-[5-[t-ブチル(ジメチル)シリル]オキシペンター-1-インイル] ベンゾニトリルの合成

[0421] [化104]



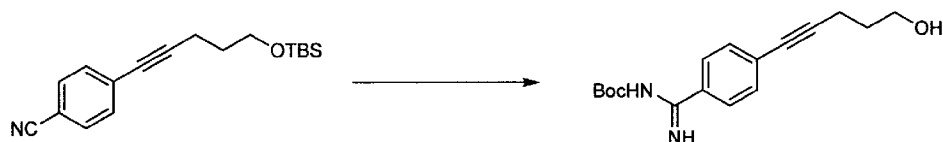
[0422] 工程 1 で得られた 4-(5-ヒドロキシペンター-1-インイル) ベンゾニトリル (1.85 g) をジクロロメタン (20 mL) に溶解させ、0℃でトリエチルアミン (2.0 g)、塩化 t-ブチルジメチルシリル (1.66 g)

）、４－ジメチルアミノピリジン（１２２ｍｇ）を加えた。反応混合物を室温まで昇温し、同温で３時間撹拌した。反応混合物に水を加え、クロロホルムで抽出した。有機層を無水硫酸ナトリウムで乾燥し、ろ過後、減圧濃縮し、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製し、表題化合物を２．８４ｇ（収率９４．６％）得た。

$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) : 0.07 (s, 6H), 0.91 (s, 9H), 1.82 (td, 2H), 2.51 (t, 2H), 3.75 (t, 2H), 7.45 (d, 2H), 7.56 (d, 2H).

[0423] (工程３) t －ブチル N －[４－(５－ヒドロキシペンター１－インイル)ベンゼンカルボキシイミドイル]カルバメートの合成

[0424] [化105]



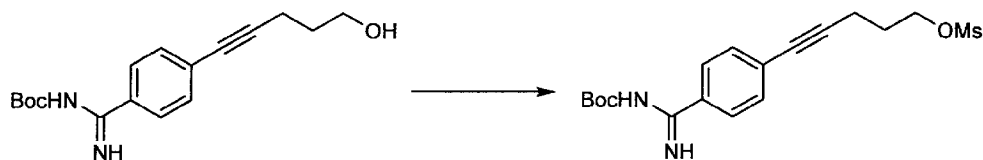
[0425] 工程２で得られた４－[５－[t －ブチル（ジメチル）シリル]オキシペンター１－インイル]ベンゾニトリル（２ｇ）をテトラヒドロフラン（２０ｍＬ）に溶解させ、室温でリチウムビス(トリメチルシリル)アミド（１．３Ｍテトラヒドロフラン溶液）（７．２ｍＬ）を加えた。同温で１時間撹拌後、塩化水素（４Ｍジオキサン溶液）（２０ｍＬ）、メタノール（２０ｍＬ）を加え、室温で２時間撹拌後、反応混合物を減圧濃縮した。得られた残渣をジメチルホルムアミド（２０ｍＬ）に溶解させ、０℃でトリエチルアミン（２．７ｇ）、ジ－ t －ブチルジカーボネート（２．９２ｇ）を加えた。反応混合物を室温まで昇温し、同温で４時間撹拌した。反応混合物に水を加え、酢酸エチルで抽出した。有機層を無水硫酸ナトリウムで乾燥し、ろ過後、減圧濃縮し、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製し、表題化合物を１．２４ｇ（収率６１．３％）得た。

$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) : 1.55 (s, 9H), 1.88 (td, 2H), 2.57 (t, 2H), 3.82 (dd, 2H), 7.44 (d, 2H)

、 7. 79 (d, 2H) .

[0426] (工程4) 5-[4-(N-t-ブトキシカルボニルカルバイミドイル)フェニル]ペンター4-インイルメタンスルホネートの合成

[0427] [化106]



[0428] 工程3で得られたt-ブチル N-[4-(5-ヒドロキシペンター1-インイル)ベンゼンカルボキシイミドイル]カルバメート(500mg)をジクロロメタン(5mL)に溶解させ、0℃でトリエチルアミン(400mg)、塩化メタンスルホニル(227mg)、4-ジメチルアミノピリジン(20mg)を加えた。反応混合物を室温まで昇温し、同温で4時間撹拌した。反応混合物に水を加え、クロロホルムで抽出した。有機層を無水硫酸ナトリウムで乾燥し、ろ過後、減圧濃縮し、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製し、表題化合物を640mg(定量的)得た。

$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) : 1. 55 (s, 9H)、2. 06 (td, 2H)、2. 61 (t, 2H)、3. 04 (s, 3H)、4. 41 (t, 2H)、7. 44 (d, 2H)、7. 79 (d, 2H) .

[0429] (工程5) t-ブチル N-[4-(5-ブromoペンター1-インイル)ベンゼンカルボキシイミドイル]カルバメートの合成

[0430] [化107]



[0431] 工程4で得られた5-[4-(N-t-ブトキシカルボニルカルバイミドイル)フェニル]ペンター4-インイルメタンスルホネート(646mg)をアセトニトリル(7mL)に溶解させ、室温で臭化リチウム(295

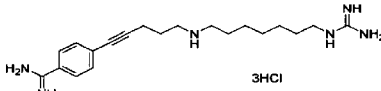
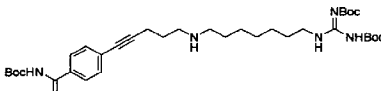
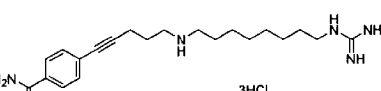
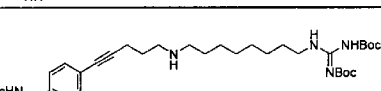
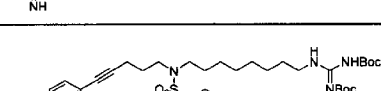
m g) を加えた。反応混合物を 50℃まで昇温し、同温で 5 時間攪拌した。反応混合物を室温まで冷却し、水を加え、酢酸エチルで抽出した。有機層を無水硫酸ナトリウムで乾燥し、ろ過後、減圧濃縮し、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製し、表題化合物を 485 mg (収率 78.1%) 得た。

$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) : 1.55 (s, 9H), 2.20–2.12 (m, 2H), 2.63 (t, 2H), 3.62–3.54 (m, 3H), 7.44 (d, 2H), 7.78 (d, 2H).

[0432] 実施例 128～132

合成例 22 で得られた化合物を用い、実施例 40–2 と同様の手法にて、本発明に係る化合物を合成した。合成した化合物の一部について、その構造を表に示す。

[0433] [表47]

化合物番号	構造	NMRデータ
128		$^1\text{H NMR}$ (CD_3OD) 1.36–1.50 (m, 6H), 1.56–1.66 (m, 2H), 1.70–1.80 (m, 2H), 2.03 (dt, 2H), 2.65 (t, 2H), 3.04 (dd, 2H), 3.14–3.21 (m, 4H), 7.62 (d, 2H), 7.76 (d, 2H).
129		$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) 1.26–1.34 (m, 6H), 1.48–1.52 (m, 27H), 1.56–1.61 (m, 4H), 1.76–1.84 (m, 2H), 2.49 (t, 2H), 2.62 (t, 2H), 2.77 (t, 2H), 3.35 (dd, 2H), 7.43 (d, 2H), 7.82 (d, 2H).
130		$^1\text{H NMR}$ (CD_3OD) 1.34–1.52 (m, 8H), 1.56–1.65 (m, 2H), 1.71–1.79 (m, 2H), 2.05 (dt, 2H), 2.65 (t, 2H), 3.08 (dd, 2H), 3.15–3.22 (m, 4H), 7.62 (d, 2H), 7.76 (d, 2H).
131		$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) 1.24–1.34 (m, 6H), 1.48–1.54 (m, 27H), 1.56–1.68 (m, 4H), 1.80–1.90 (m, 2H), 2.52 (t, 2H), 2.66 (t, 2H), 2.81 (t, 2H), 3.30–3.44 (m, 4H), 7.43 (d, 2H), 7.82 (d, 2H).
132		$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) 1.16–1.24 (m, 8H), 1.46–1.60 (m, 31H), 1.82–1.92 (m, 2H), 2.54 (t, 2H), 3.26–3.36 (m, 4H), 3.45 (t, 2H), 7.42 (d, 2H), 7.60–7.71 (m, 3H), 7.90 (d, 2H), 8.02 (d, 1H).

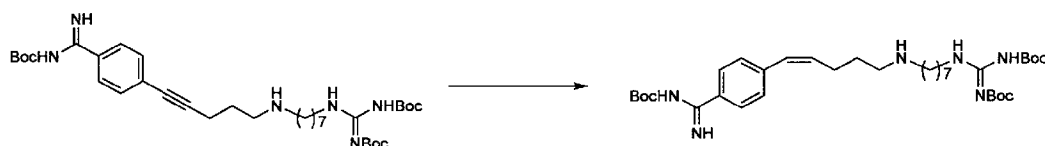
[0434] 表中 Boc は、t-ブトキシカルボニル基を意味する。

[0435] 実施例 133

t-ブチル N- [4- [5- [7- [[(Z) -N, N'-ビス (t-ブトキシカルボニル) カルバイミドイル] アミノ] ヘプチルアミノ] ペンター

1-エンイル] ベンゼンカルボキシイミドイル] カルバメートの合成

[0436] [化108]

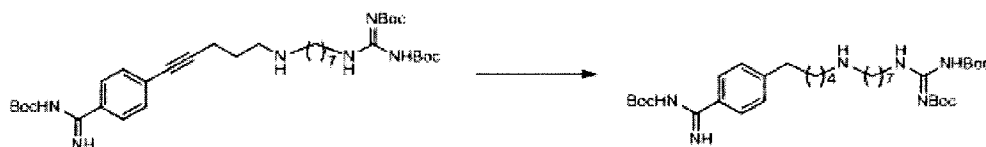


[0437] t-ブチル N-[4-[5-[7-[[N, N'-ビス (t-ブトキシカルボニル) カルバイミドイル] アミノ] ヘプチルアミノ] ペンター1-インイル] ベンゼンカルボキシイミドイル] カルバメート (化合物番号: 129、100 mg) をメタノール (2 mL) に溶解させ、室温でリンドラー触媒 (10 mg) を加えた。同温で系内を水素置換し、3時間攪拌した。反応混合物をろ過し、ろ液を減圧濃縮した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製し、表題化合物 (化合物番号: 134) (アルケン/アルカン=4/1) を55 mg (収率55.6%) 得た。

[0438] 実施例134

t-ブチル N-[4-[5-[7-[[N, N'-ビス (t-ブトキシカルボニル) カルバイミドイル] アミノ] ヘプチルアミノ] ペンチル] ベンゼンカルボキシイミドイル] カルバメートの合成

[0439] [化109]

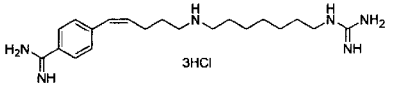
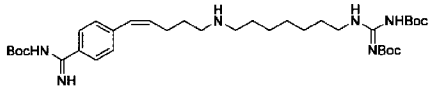
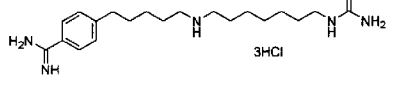
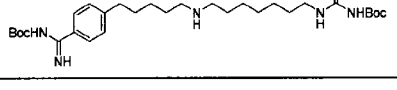


[0440] t-ブチル N-[4-[5-[7-[[N, N'-ビス (t-ブトキシカルボニル) カルバイミドイル] アミノ] ヘプチルアミノ] ペンター1-インイル] ベンゼンカルボキシイミドイル] カルバメート (化合物番号: 129、200 mg) をメタノール (5 mL) に溶解させ、室温で10%パラジウム炭素 (20 mg) を加えた。同温で系内を水素置換し、一晩攪拌した。反応混合物をろ過し、ろ液を減圧濃縮する事で表題化合物 (化合物番号: 136) を175 mg (収率87.1%) 得た。

[0441] 実施例 135、136

実施例 133、134 と同様の手法にて、本発明に係る化合物を合成した。
合成した化合物の一部について、その構造を表に示す。

[0442] [表48]

化合物番号	構造	NMRデータ
133		alkene:alkane=4:1 ¹ HNMR(CD ₃ OD) 1.38–1.48 (m, 6H), 1.55–1.64 (m, 2H), 1.68–1.78 (m, 2H), 1.84–1.92 (m, 2H), 2.46–2.52 (m, 1.6H), 2.96–3.06 (m, 4H), 3.17 (t, 2H), 5.84–5.92 (m, 0.8H), 6.60 (d, 0.8H), 7.53 (d, 1.6H), 7.80 (d, 1.6H)
134		alkene:alkane=4:1 ¹ HNMR(CDCl ₃) 1.22–1.34 (m, 6H), 1.44–1.56 (m, 27H), 1.60–1.90 (m, 6H), 2.34–2.42 (m, 1.6H), 2.62–2.78 (m, 4H), 3.40–3.44 (m, 2H), 5.70–5.78 (m, 0.8H), 6.45 (d, 0.8H), 7.31 (d, 1.6H), 7.82 (d, 2H)
135		¹ HNMR(CD ₃ OD) 1.38–1.51 (m, 8H), 1.55–1.64 (m, 2H), 1.66–1.80 (m, 6H), 2.77 (t, 2H), 2.99 (dd, 4H), 3.11–3.22 (m, 2H), 7.47 (d, 2H), 7.73 (d, 2H).
136		¹ HNMR(CDCl ₃) 1.21–1.34 (m, 8H), 1.46–1.50 (m, 27H), 1.60–1.84 (m, 8H), 2.60 (t, 2H), 2.72–2.81 (m, 4H), 3.30 (dd, 2H), 7.17 (d, 2H), 7.78 (d, 2H).

[0443] 表中Bocは、t-ブトキシカルボニル基を意味する。

[0444] 合成例 23

t-ブチル-N-[[3-(3-アミノプロポキシ)プロピルアミノ]-(t-ブトキシカルボニルアミノ)メチレン]カルバメートの合成

[0445] [化110]



[0446] 3-(3-アミノプロポキシ)プロパン-1-アミン (1.5 g) をジクロロメタン (30 mL) に溶解させ、室温にてジイソプロピルエチルアミン (977 mg)、Goodman試薬 (2.98 g) を加え、同温で4時間攪拌した。反応混合物に水を加え、酢酸エチルで抽出した。有機層を無水硫酸ナトリウムで乾燥し、ろ過後、減圧濃縮した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製し、表題化合物を2.02 g (収率71.4%) 得た。

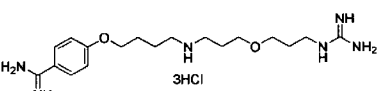
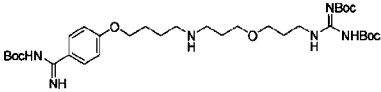
¹HNMR(CDCl₃) : 1.49 (s, 9H)、1.50 (s, 9H)、

1. 74 (t t, 2H)、1. 83 (t t, 2H)、2. 79 (t, 2H)、3. 49–3. 58 (m, 6H)。

[0447] 実施例 137、138

合成例 23 で得られた化合物を用い、実施例 23、24 と同様の手法にて、本発明に係る化合物を合成した。合成した化合物の一部について、その構造を表に示す。

[0448] [表49]

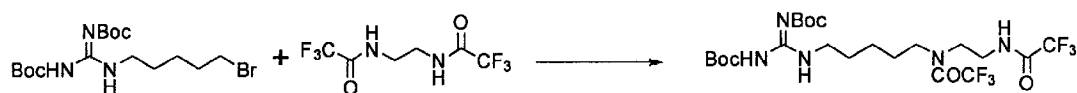
化合物番号	構造	NMRデータ
137		¹ HNMR(CD ₃ OD) 1.29–1.34 (m, 4H), 1.80–1.86 (m, 2H), 1.89–1.96 (m, 4H), 1.98–2.06 (m, 2H), 3.08–3.16 (m, 2H), 3.50–3.61 (m, 4H), 4.10–4.20 (m, 2H), 7.14 (d, 2H), 7.79 (d, 2H).
138		¹ HNMR(CDCl ₃) 1.44–1.54 (m, 31H), 1.79–1.89 (m, 6H), 2.64–2.74 (m, 2H), 3.46–3.56 (m, 6H), 4.02 (dd, 2H), 6.90 (d, 2H), 7.83 (d, 2H).

[0449] 表中B o c は、t –ブトキシカルボニル基を意味する。

[0450] 実施例 139

(工程 1) t –ブチル N – [(t –ブトキシカルボニルアミノ) – [5 – [(2, 2, 2 –トリフルオロアセチル) – [2 – [(2, 2, 2 –トリフルオロアセチル) アミノ] エチル] アミノ] ペンチルアミノ] メチレン] カルバメートの合成

[0451] [化111]



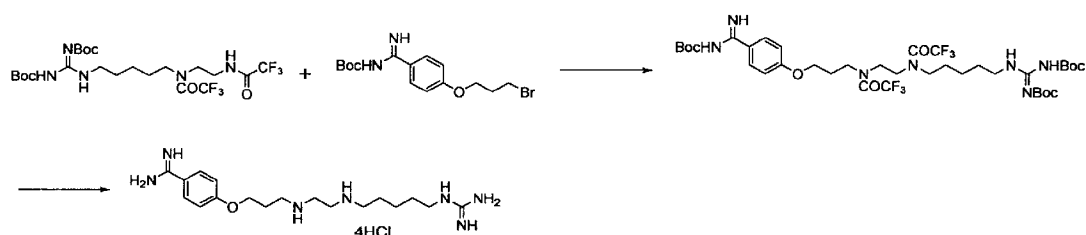
[0452] 2, 2, 2 –トリフルオロ – N – [2 – [(2, 2, 2 –トリフルオロアセチル) アミノ] エチル] アセトアミド (5. 56 g) 及び t –ブチル (N – [(5 –ブロモペンチルアミノ) – (t –ブトキシカルボニルアミノ) メチレン] カルバメート (3. 00 g) のジメチルホルムアミド (30 mL) 溶液に炭酸カリウム (3. 05 g) を加え室温で8日間反応させた。その後、反応混合物を水に注ぎ入れ、酢酸エチルで抽出した。有機層を合わせ無水硫酸マグネシウムで乾燥した後、ろ過した。ろ液を減圧濃縮し、残渣をシ

リカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製し、表題化合物を2.14 g (収率50%) 得た。

$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) : 1.32 (dt, 2H), 1.48 (t, 9H), 1.52 (t, 9H), 1.57–1.76 (m, 4H), 3.42 (t, 2H), 3.53–3.69 (m, 4H), 3.90 (t, 2H), 7.48 (br. s, 1H), 9.25 (br. s, 2H).

[0453] (工程2) 4-[3-[2-(5-グアニジノペンチルアミノ)エチルアミノ]プロポキシ]ベンズアミジン 4塩酸塩の合成

[0454] [化112]



[0455] 工程1で得られたt-ブチル N-[(t-ブトキシカルボニルアミノ)-[5-[[(2,2,2-トリフルオロアセチル)-[2-[(2,2,2-トリフルオロアセチル)アミノ]エチル]アミノ]ペンチルアミノ]メチレン]カルバメート (1.21 g) 及びt-ブチル N-[4-(4-ブロモブトキシ)ベンゼンカルボキシイミドイル]カルバメート (1.20 g) のジメチルホルムアミド (24 mL) 溶液に炭酸カリウム (0.38 g) を加え50℃で一晩反応させた。その後、反応混合物を室温に冷却し水に注ぎ入れ、酢酸エチルで抽出した。有機層を合わせ無水硫酸マグネシウムで乾燥した後、ろ過した。ろ液を減圧濃縮し、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製し、化合物Aを0.57 g (収率32%) 得た。

[0456] 次いで、得られた化合物A (0.57 g) をメタノール (57 mL) に溶解させ、室温で炭酸カリウム (0.90 g) を加え、同温で3日間攪拌した。その後、反応混合物を減圧濃縮し、得られた残渣を水に注ぎ入れクロロホルムで抽出した。有機層を合わせ無水硫酸マグネシウムで乾燥した後、ろ過した。ろ液を減圧濃縮し、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーによ

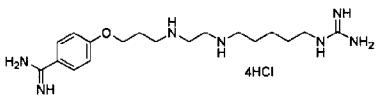
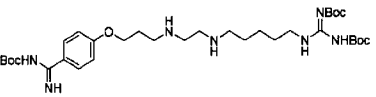
り精製し化合物Bを0.28g（収率63%）得た。

[0457] 次に、化合物B（0.37g）をジクロロメタン（18mL）に溶解させ、室温でトリフルオロ酢酸（9mL）を加えた。同温で一晩攪拌した後、減圧濃縮した。得られた残渣をメタノール（5mL）に溶解させ、室温で塩化水素ジオキサン溶液（4M, 15mL）を加え、同温で1時間攪拌し、減圧濃縮し、表題化合物（化合物番号：139）を0.49g（定量的）得た。

[0458] 実施例140

実施例139と同様の手法にて、本発明に係る化合物を合成した。合成した化合物の一部について、その構造を表に示す。

[0459] [表50]

化合物番号	構造	NMRデータ
139		¹ HNMR(CD ₃ OD) 1.47–1.59 (m, 2H), 1.60–1.73 (m, 2H), 1.74–1.88 (m, 2H), 2.24–2.38 (m, 2H), 3.14 (t, 2H), 3.22 (t, 2H), 3.43–3.56 (m, 4H), 4.28 (t, 2H), 7.19 (d, 2H), 7.81 (d, 2H).
140		¹ HNMR(CDCl ₃) 1.20–1.59 (m, 33H), 1.91–2.05 (m, 2H), 2.55 (t, 2H), 2.64–2.77 (m, 4H), 2.81 (t, 2H), 3.08 (t, 2H), 4.09 (t, 2H), 6.91 (d, 2H), 7.82 (d, 2H).

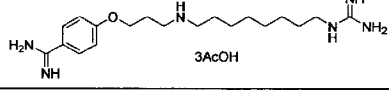
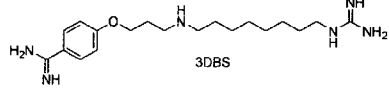
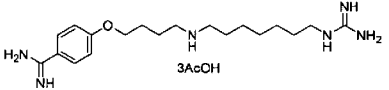
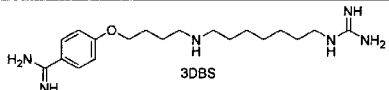
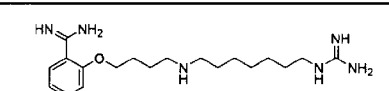
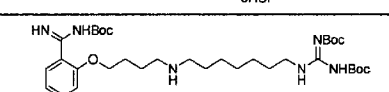
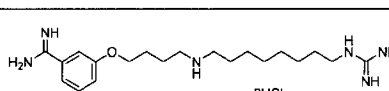
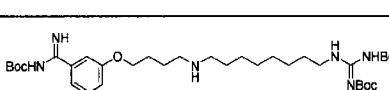
[0460] 表中Bocは、t-ブトキシカルボニル基を意味する。

[0461] 実施例141～148

実施例2または3と同様の手法にて、本発明に係る化合物を合成した。合成した化合物の一部について、その構造を表に示す。

[0462]

[表51]

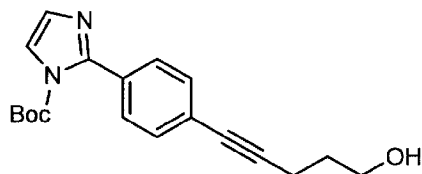
化合物番号	構造	NMRデータ
141		¹ HNMR(CD ₃ OD) 1.35–1.43 (m, 8H), 1.55–1.62 (m, 2H), 1.67–1.74 (m, 2H), 1.93 (s, 9H), 2.18–2.23 (m, 2H), 2.95–3.02 (m, 2H), 3.15–3.23 (m, 4H), 4.19–4.23 (m, 2H), 7.12–7.15 (m, 2H), 7.77–7.79 (m, 2H).
142		¹ HNMR(CD ₃ OD) 0.68–0.92 (m, 17H), 1.02–1.54 (m, 48H), 1.53–1.73 (m, 24H), 2.87–3.07 (m, 2H), 3.02–3.36 (m, 4H), 4.08–4.17 (m, 2H), 7.20 (d, 2H), 7.20–7.26 (m, 6H), 7.72–7.82 (m, 8H).
143		¹ HNMR(CD ₃ OD) 1.36–1.46 (m, 6H), 1.54–1.64 (m, 2H), 1.66–1.76 (m, 2H), 1.84–1.94 (m, 4H), 1.98 (s, 9H), 2.99 (dd, 2H), 3.08 (t, 2H), 3.17 (t, 2H), 4.13 (dd, 2H), 7.12 (d, 2H), 7.79 (d, 2H).
144		¹ HNMR(CD ₃ OD) 0.78–0.94 (m, 15H), 1.04–1.34 (m, 46H), 1.54–1.76 (m, 24H), 1.88–1.94 (m, 4H), 2.99–3.04 (m, 2H), 3.06–3.14 (m, 2H), 3.14–3.20 (m, 2H), 4.11–4.16 (m, 2H), 7.13 (d, 2H), 7.20–7.26 (m, 6H), 7.72–7.82 (m, 8H).
145		¹ HNMR(CD ₃ OD) 1.28–1.34 (m, 4H), 1.56–1.64 (m, 2H), 1.69–1.80 (m, 2H), 1.88–1.98 (m, 4H), 3.00–3.04 (m, 2H), 3.06–3.11 (m, 2H), 3.16–3.24 (m, 4H), 4.14–4.21 (m, 2H), 7.13 (t, 1H), 7.23 (d, 1H), 7.55 (d, 1H), 7.63 (t, 1H).
146		¹ HNMR(CDCl ₃) 1.30–1.40 (m, 6H), 1.46–1.52 (m, 31H), 1.60–1.72 (m, 2H), 1.88–1.96 (m, 2H), 2.60 (t, 2H), 2.67 (t, 2H), 3.40 (dd, 2H), 4.14 (t, 2H), 6.95 (d, 1H), 7.02 (t, 1H), 7.44 (t, 1H), 8.24–8.32 (m, 1H).
147		¹ HNMR(CD ₃ OD) 1.36–1.44 (m, 4H), 1.55–1.64 (m, 2H), 1.68–1.76 (m, 2H), 1.90–1.96 (m, 4H), 2.98–3.04 (m, 2H), 3.06–3.14 (m, 2H), 3.14–3.20 (m, 4H), 4.12–4.17 (m, 2H), 7.31 (d, 1H), 7.34–7.40 (m, 2H), 7.52 (t, 1H).
148		¹ HNMR(CDCl ₃) 1.28–1.36 (m, 8H), 1.46–1.52 (m, 31H), 1.62–1.70 (m, 2H), 1.79–1.88 (m, 2H), 2.60 (t, 2H), 2.67 (t, 2H), 3.36–3.42 (m, 2H), 4.03 (t, 2H), 7.00–7.06 (m, 1H), 7.30–7.42 (m, 3H).

[0463] 表中Bocは、t-ブトキシカルボニル基を意味する。表中DBSは、ドデシルベンゼンスルホン酸を意味する。

[0464] 合成例 24

(工程1) t-ブチル 2-[4-(5-ヒドロキシペント-1-インイル)フェニル]イミダゾール-1-カルボキシレート

[0465] [化113]

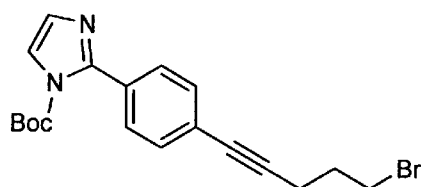


[0466] t-ブチル 2-(4-ブロモフェニル)-1H-イミダゾール-1-カルボキシレートを用いて合成例22工程1と同様の手法で表題化合物を合成した。

$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) : 1.43 (s, 9H), 1.87 (tt, 2H), 2.56 (t, 2H), 3.84 (dd, 2H), 7.06 (d, 1H), 7.42 (d, 2H), 7.46–7.52 (m, 3H).

[0467] (工程2) t-ブチル 2-[4-(5-ブロモペント-1-インイル)フェニル]イミダゾール-1-カルボキシレート

[0468] [化114]



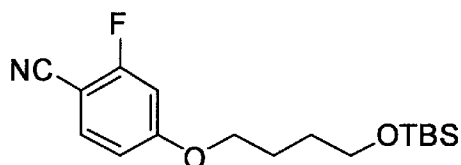
[0469] 工程1で得られたt-ブチル 2-[4-(5-ヒドロキシペント-1-インイル)フェニル]イミダゾール-1-カルボキシレートを用いて、合成例22工程4および5と同様の手法で表題化合物を合成した。

$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) : 1.44 (s, 9H), 2.15 (tt, 2H), 2.63 (t, 2H), 3.59 (t, 2H), 7.07 (d, 1H), 7.43 (d, 2H), 7.47–7.52 (m, 3H).

[0470] 合成例25

(工程1) 4-(4-((t-ブチルジメチルシリル)オキシ)ブトキシ)-2-フルオロベンズニトリルの合成

[0471] [化115]



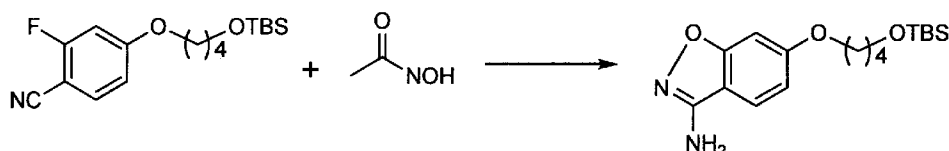
[0472] 2-フルオロ-4-ヒドロキシベンズニトリルを用いて合成例12工程1と同様の手法で表題化合物を合成した。

$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) : 0.06 (s, 6H), 0.90 (s, 9H), 1.61–1.72 (m, 2H), 1.81–1.92 (m, 2H), 3.68 (t, 2H), 4.03 (t, 2H), 6.69 (dd, 1H), 6.

7.5 (dd, 1H), 7.50 (dd, 1H).

[0473] (工程2) 6-[4-[t-ブチル(ジメチル)シリル]オキシブトキシ]-1,2-ベンズオキサゾール-3-アミンの合成

[0474] [化116]

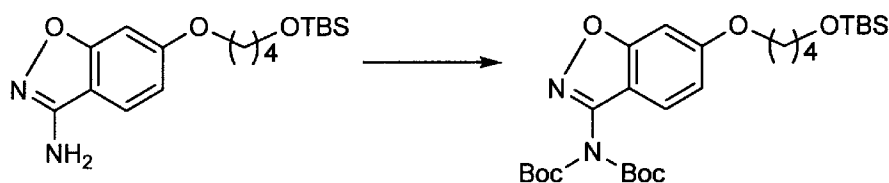


[0475] 工程1で得られた4-(4-(tert-ブチルジメチルシリル)オキシ)ブトキシ)-2-フルオロベンゾニトリル(4g)をジメチルホルムアミド(85mL)に溶解させ、室温で水(14mL)、炭酸カリウム(10.28g)、アセトヒドロキサム酸(2.78g)を加えた。反応混合物を80℃まで昇温し、同温で一晩攪拌した。反応混合物を室温まで冷却し、水を加え、酢酸エチルで抽出した。有機層を無水硫酸ナトリウムで乾燥し、ろ過後、減圧濃縮し、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製し、表題化合物を2.31g(収率55.5%)得た。

$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3): 0.06 (s, 6H), 0.90 (s, 9H), 1.66–1.75 (m, 2H), 1.84–1.94 (m, 2H), 3.68 (t, 2H), 4.04 (t, 2H), 6.82–6.86 (m, 2H), 7.35 (d, 1H).

[0476] (工程3) t-ブチル N-t-ブトキシカルボニル-N-[6-[4-[t-ブチル(ジメチル)シリル]オキシブトキシ]-1,2-ベンズオキサゾール-3-イル]カルバメートの合成

[0477] [化117]



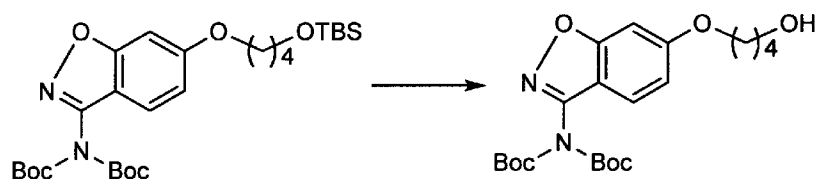
[0478] 工程2で得られた6-[4-[t-ブチル(ジメチル)シリル]オキシブ

トキシ] - 1, 2-ベンズオキサゾール-3-アミン (2.31 g) をジクロロメタンに溶解させ、0℃でトリエチルアミン (1.39 g)、ジ-*t*-ブチルジカーボネート (1.94 g)、4-ジメチルアミノピリジン (83 mg) を加えた。反応混合物を室温まで昇温し、同温で一晩攪拌した。反応混合物に水を加え、クロロホルムで抽出した。有機層を無水硫酸ナトリウムで乾燥し、ろ過後、減圧濃縮し、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製し、表題化合物を 1.64 g (収率 44.6%) 得た。

$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) : 0.07 (s, 6H), 0.91 (s, 9H), 1.40 (s, 18H), 1.68–1.76 (m, 2H), 1.88–1.94 (m, 2H), 3.71 (t, 2H), 4.07 (t, 2H), 6.95–6.99 (m, 2H), 7.36 (d, 1H).

[0479] (工程4) *t*-ブチル N-*t*-ブトキシカルボニル-N-[6-(4-ヒドロキシブトキシ)-1, 2-ベンズオキサゾール-3-イル] カルバメートの合成

[0480] [化118]



[0481] 工程3で得られた *t*-ブチル N-*t*-ブトキシカルボニル-N-[6-[4-[*t*-ブチル(ジメチル)シリル]オキシブトキシ]-1, 2-ベンズオキサゾール-3-イル] カルバメート (1.64 g) をテトラヒドロフラン (20 mL) に溶解させ、0℃でテトラブチルアンモニウムフルオリド (1 M テトラヒドロフラン溶液) (3.4 mL) を加えた。反応混合物を室温まで昇温し、同温で5時間攪拌した。反応混合物に水を加え、酢酸エチルで抽出した。有機層を無水硫酸ナトリウムで乾燥し、ろ過後、減圧濃縮し、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製し、表題化

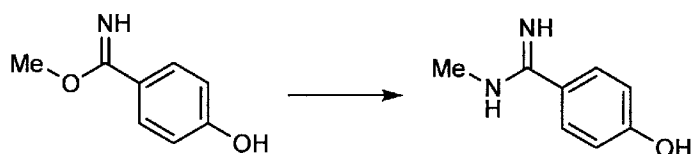
合物を1.02 g (収率79.2%) 得た。

$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) : 1.41 (s, 18H), 1.75–1.84 (m, 2H), 1.91–2.02 (m, 2H), 3.76 (dd, 2H), 4.09 (t, 2H), 6.93–7.00 (m, 2H), 7.37 (d, 1H).

[0482] 合成例26

(工程1) 4-ヒドロキシ-N-メチルベンズアミジンの合成

[0483] [化119]

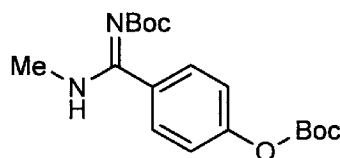


[0484] メチル 4-ヒドロキシベンゼンカルボキシイミデート (2.5 g) をメタノール (40 mL) に溶解させ、0℃でトリエチルアミン (13 mL)、メチルアミン (40%メタノール溶液) (2.07 g) を加えた。反応混合物を室温まで昇温し、同温で4時間攪拌した。反応混合物を減圧濃縮し、表題化合物を得た。

$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) : 3.05 (s, 3H), 6.84 (d, 2H), 7.55 (d, 2H).

[0485] (工程2) [4-(N'-t-ブトキシカルボニル-N-メチルカルバミドイル)フェニル] t-ブチルカルバメートの合成

[0486] [化120]



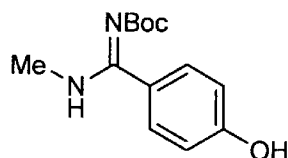
[0487] 工程1で得られた4-ヒドロキシ-N-メチルベンズアミジンを用いて合成例6工程2と同様の手法で表題化合物を得た。

$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) : 1.14 (s, 9H), 1.57 (s, 9H),

3. 37 (b r s, 3 H), 7. 19 (d, 2 H), 7. 36–7. 48 (m, 2 H).

[0488] (工程3) t-ブチル-N-[(4-ヒドロキシフェニル)-(メチルアミノ)メチレン]カルバメートの合成

[0489] [化121]

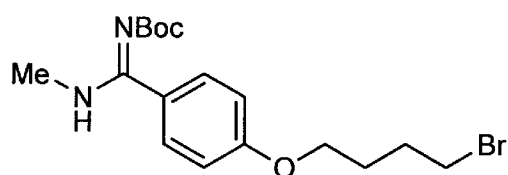


[0490] 工程2で得られた[4-(N'-t-ブトキシカルボニル-N-メチルカルバイミドイル)フェニル] t-ブチルカルバメートを用いて、合成例6工程3と同様の手法で表題化合物を得た。

$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3): 1. 21 (s, 9 H), 3. 32 (s, 3 H), 6. 80 (d, 2 H), 7. 31 (d, 2 H).

[0491] (工程4) t-ブチル-N-[[4-(4-ブロモブトキシ)フェニル]-(メチルアミノ)メチレン]カルバメートの合成

[0492] [化122]



[0493] 工程3で得られたt-ブチル-N-[(4-ヒドロキシフェニル)-(メチルアミノ)メチレン]カルバメートを用いて、合成例6工程4と同様の手法で表題化合物を得た。

$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3): 1. 18 (s, 9 H), 1. 92–2. 01 (m, 2 H), 2. 02–2. 13 (m, 2 H), 3. 34 (s, 3 H), 3. 50 (t, 2 H), 4. 00–4. 06 (m, 2 H), 6. 86–6. 92 (m, 2 H), 7. 36 (d, 1 H), 7. 67 (d, 1 H).

[0494] 実施例149～154

合成例 24～26 で得られた化合物を用い、実施例 40 または 40-2 と同様の手法にて、本発明に係る化合物を合成した。合成した化合物の一部について、その構造を表に示す。

[0495] [表52]

化合物 番号	構造	NMRデータ
149		$^1\text{H NMR}$ (CD_3OD) 1.38–1.45 (m, 8H), 1.55–1.65 (m, 2H), 1.70–1.76 (m, 2H), 2.02 (tt, 2H), 2.65 (t, 2H), 3.03 (dd, 2H), 3.12–3.22 (m, 4H), 7.36–7.45 (m, 1H), 7.64–7.69 (m, 3H), 7.88 (d, 2H).
150		$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) 1.28–1.36 (m, 8H), 1.46–1.54 (m, 27H), 1.53–1.62 (m, 4H), 1.88–1.98 (m, 2H), 2.53 (t, 2H), 2.70–2.78 (m, 2H), 2.86–2.94 (m, 2H), 3.36–3.42 (m, 2H), 7.06 (d, 1H), 7.42 (d, 2H), 7.46–7.50 (m, 3H).
151		$^1\text{H NMR}$ (CD_3OD) 1.36–1.48 (m, 6H), 1.55–1.66 (m, 2H), 1.68–1.76 (m, 2H), 1.88–1.98 (m, 4H), 2.98–3.06 (m, 2H), 3.08–3.16 (m, 2H), 3.16–3.22 (m, 2H), 4.10–4.16 (m, 2H), 6.90 (dd, 1H), 6.98 (d, 1H), 7.66 (d, 1H).
152		$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) 1.30–1.36 (m, 6H), 1.40 (s, 9H), 1.46–1.54 (m, 27H), 1.54–1.62 (m, 4H), 1.76–1.94 (m, 4H), 2.66–2.74 (m, 2H), 2.75–2.84 (m, 2H), 3.35–3.44 (m, 2H), 4.05 (t, 2H), 6.92–7.00 (m, 2H), 7.36 (d, 1H).
153		$^1\text{H NMR}$ (CD_3OD) 1.38–1.46 (m, 6H), 1.55–1.65 (m, 2H), 1.68–1.78 (m, 2H), 1.88–1.96 (m, 4H), 2.98–3.06 (m, 2H), 3.06–3.14 (m, 5H), 3.14–3.21 (m, 2H), 4.10–4.18 (m, 2H), 7.12 (d, 2H), 7.70 (d, 2H).
154		$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3) 1.30–1.39 (m, 6H), 1.46–1.58 (m, 29H), 1.60–1.71 (m, 2H), 1.82–1.92 (m, 4H), 2.72–2.80 (m, 2H), 2.80–2.90 (m, 2H), 3.34 (s, 3H), 3.38 (dd, 2H), 3.97–4.04 (m, 2H), 6.86–6.90 (m, 2H), 7.35 (d, 1H), 7.68 (d, 1H).

[0496] 表中 B o c は、t-ブトキシカルボニル基を意味する。

[0497] 製剤実施例（乳剤）

本発明化合物 5.62 質量部

界面活性剤 4.49 質量部

ジメチルホルムアミド 89.89 質量部

以上を混合溶解して、有効成分 5.62 質量%の乳剤を得た。

[0498] （リンゴ黒星病防除試験）

前記製剤実施例の配合処方て調製された乳剤を有効成分 125 ppm になるように水で希釈した。素焼きポットで栽培したリンゴ幼苗（品種「王林」、3～4葉期）に、前記希釈液を散布した。室温で自然乾燥させた。その後

、リンゴ黒星病菌 (*Venturia inaequalis*) の分生孢子を接種し、明暗を12時間毎に繰り返す20℃、高湿度の室内に2週間保持した。葉上の病斑出現状態を無処理と比較し防除効果を調べた。

[0499] 化合物7、9、19、22、28、30、32、34、36、41、43、46、58、61、64、66、68、71、74、77、80、82、84、87、89、91、93、95、98、101、103、105、108、115、118、120、125、128、130、133、135、137、139、141、143、および147について前記リンゴ黒星病防除試験を行った。いずれの化合物も75%以上の防除価を示した。

[0500] (キュウリ灰色かび病防除試験)

前記製剤実施例の配合処方で調製された乳剤を有効成分125ppmになるように水で希釈した。素焼きポットで栽培したキュウリ幼苗(品種「ときわ地這」、子葉期)に、前記希釈液を散布した。室温で自然乾燥した後、キュウリ灰色かび病菌 (*Botrytis cinerea*) の分生孢子懸濁液を滴下接種し、暗所、20℃、高湿度の室内に4日間保持した。葉上の病斑出現状態を無処理と比較調査し、防除効果を求めた。

[0501] 化合物7、9、13、19、22、28、30、32、34、36、38、41、43、46、48、52、54、56、58、61、64、66、68、71、74、77、80、82、84、87、89、91、93、95、98、101、103、105、108、111、115、118、120、122、125、128、130、133、135、137、139、141、142、143、144、および147について前記キュウリ灰色かび病防除試験を行った。いずれの化合物も75%以上の防除価を示した。

[0502] (コムギうどんこ病防除試験)

前記製剤実施例の配合処方で調製された乳剤を有効成分125ppmになるように水で希釈した。素焼きポットで栽培したコムギ幼苗(品種「チホク」、1.0~1.2葉期)に前記希釈液を散布した。葉を風乾させた後、コ

ムギうどんこ病菌 (*Erysiphe graminis* f.sp.*tritici*) の分生胞子を振り払い接種し、22～25℃の温室で7日間保持した。葉上の病斑出現状態を無処理と比較調査し、防除効果を求めた。

[0503] 化合物7、9、19、28、30、32、34、36、38、41、43、46、48、54、56、58、61、64、66、68、71、74、77、80、82、84、87、91、93、95、98、101、103、105、111、113、115、118、120、122、125、128、130、133、135、139、141、142、143、144、および147について前記コムギうどんこ病防除試験を行った。いずれの化合物も75%以上の防除価を示した。

[0504] (トマト疫病防除試験)

前記製剤実施例の配合処方で調製された乳剤を有効成分125ppmになるように水で希釈した。素焼きポットで栽培したトマト幼苗(品種「レジナ」、4～5葉期)に、前記希釈液を散布した。葉を風乾させた後、トマト疫病菌 (*Phytophthora infestans*) の遊走子懸濁液を噴霧接種し、明暗を12時間毎に繰り返す高湿度の恒温室(20℃)に4日間保持した。葉上の病斑出現状態を無処理と比較調査し、防除価を求めた。

[0505] 化合物7、9、34、41、43、58、61、64、68、71、77、82、84、87、93、98、105、108、115、120、128、130、139、および143について前記トマト疫病防除試験を行った。いずれの化合物も75%以上の防除価を示した。

[0506] (コムギ赤さび病防除試験)

前記製剤実施例の配合処方で調製された乳剤を有効成分125ppmになるように水で希釈した。素焼きポットで栽培したコムギ幼苗(品種「農林61号」、1.0～1.2葉期)に前記希釈液を散布した。葉を風乾させた後、コムギ赤さび病菌 (*Puccinia recondita*) の夏胞子を振り払い接種し、22～25℃の温室で10日間保持した。葉上の病斑出現状態を無処理と比較調査し、防除効果を求めた。

化合物 7、9、19、22、34、41、43、54、56、61、64、66、68、71、74、77、82、84、87、91、93、98、101、103、105、111、113、115、120、128、130、133、135、142、143、144、および147について前記コムギ赤さび病防除試験を行った。いずれの化合物も75%以上の防除価を示した。

産業上の利用可能性

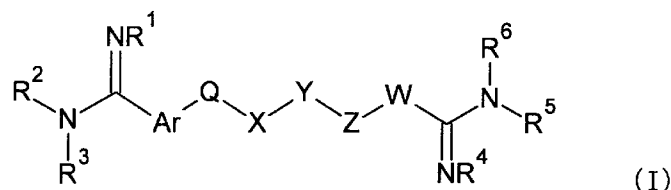
[0507] 本発明に係る第一の実施形態のアリールアミジン化合物（式（I）または式（II）で表される化合物またはその塩）は、殺菌活性に優れ、安全性に優れ、且つ工業的に有利に合成することができる。当該アリールアミジン化合物を有効成分として含有する第三の実施形態の殺菌剤若しくは植物病害防除剤は、リンゴ黒星病、キュウリ灰色かび病、コムギうどんこ病、トマト疫病、コムギ赤さび病などの植物病害の防除価に特に優れている。

本発明に係る第二の実施形態のアリールアミジン化合物（式（III-1）または式（III-2）で表される化合物）及びグアニジン化合物（式（IV-1）または式（IV-2）で表される化合物）は、本発明の第一の実施形態のアリールアミジン化合物（式（I）または式（II）で表される化合物またはその塩）を安価に製造するための中間体として有用である。

請求の範囲

[請求項1] 式 (I) で表される化合物またはその塩。

[化1]



(式 (I) 中、

Arは、無置換の若しくは置換基を有する二価の芳香族炭化水素残基、または無置換の若しくは置換基を有する二価の複素環式化合物残基を示し、

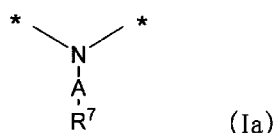
Qは、単結合、無置換の若しくは置換基を有するフェニレン、 $-CH=CH-$ 、 $-C\equiv C-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-SO-$ 、 $-SO_2-$ 、または $-N(R^9)-$ を示す。R⁹は、水素原子、無置換の若しくは置換基を有する炭化水素基、無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリル基、ヒドロキシ基、無置換の若しくは置換基を有するアルコキシ基、無置換の若しくは置換基を有するアルコキシカルボニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールオキシ基、無置換の若しくは置換基を有するアミノ基、無置換の若しくは置換基を有するアルキルスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリルスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するアルキルカルボニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールカルボニル基、または無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリルカルボニル基を示す。

XおよびZは、それぞれ独立に、無置換の若しくは置換基を有するアルキレン基、無置換の若しくは置換基を有するアルケニレン基、無置換の若しくは置換基を有するアルキニレン基、 $-T^a-O-T^b-$ 、または $-T^a-N(R^{20})-T^b-$ を示す。T^aおよびT^bは、それぞ

れ独立に、無置換の若しくは置換基を有するアルキレン基を示し、 R^{20} は、水素原子、無置換の若しくは置換基を有する炭化水素基、無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリル基、ヒドロキシ基、無置換の若しくは置換基を有するアルコキシ基、無置換の若しくは置換基を有するアルコキシカルボニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールオキシ基、無置換の若しくは置換基を有するアミノ基、無置換の若しくは置換基を有するアルキルスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリルスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するアルキルカルボニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールカルボニル基、または無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリルカルボニル基を示す。

Yは、 $-C(=O)-NH-$ 、 $-NH-C(=O)-$ 、または式(Ia)

[化2]



(式(Ia)中、Aは、単結合、 $-C(=O)-$ 、または $-SO_2-$ を示し、 R^7 は、水素原子、無置換の若しくは置換基を有する炭化水素基、無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリル基、ヒドロキシ基、無置換の若しくは置換基を有するアルコキシ基、無置換の若しくは置換基を有するアリールオキシ基、または無置換の若しくは置換基を有するアミノ基を示す。)を示し、

Wは、単結合、または $-N(R^8)-$ を示す。 R^8 は、水素原子、無置換の若しくは置換基を有する炭化水素基、無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリル基、ヒドロキシ基、無置換の若しくは置換基を有するアルコキシ基、無置換の若しくは置換基を有するアルコキ

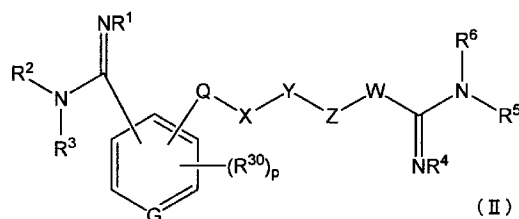
シカルボニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールオキシ基、無置換の若しくは置換基を有するアミノ基、無置換の若しくは置換基を有するアルキルスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリルスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するアルキルカルボニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールカルボニル基、または無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリルカルボニル基を示す。

$R^1 \sim R^6$ は、それぞれ独立に、水素原子、無置換の若しくは置換基を有する炭化水素基、無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリル基、ヒドロキシ基、無置換の若しくは置換基を有するアルコキシ基、無置換の若しくは置換基を有するアルコキシカルボニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールオキシ基、無置換の若しくは置換基を有するアミノ基、無置換の若しくは置換基を有するアルキルスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリルスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するアルキルカルボニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールカルボニル基、または無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリルカルボニル基を示す。 R^1 と R^2 、 R^2 と R^3 、 R^4 と R^5 、または R^5 と R^6 とが一緒になって結合して、4～8員環を形成していてもよい。 $R^1 \sim R^3$ いずれかひとつとArが一緒になって結合して、4～8員環を形成していてもよい。)

[請求項2]

前記式 (I) が式 (II) で表される請求項 1 に記載の化合物またはその塩。

[化3]



(式 (II) 中、

Gは、炭素原子または窒素原子を示し、

Q、X、Y、Z、およびWは、請求項1に記載の通りである。

R¹～R⁶は、それぞれ独立に、水素原子、無置換の若しくは置換基を有する炭化水素基、無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリル基、ヒドロキシル基、無置換の若しくは置換基を有するアルコキシ基、無置換の若しくは置換基を有するアルコキシカルボニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールオキシ基、または無置換の若しくは置換基を有するアミノ基、無置換の若しくは置換基を有するアルキルスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリルスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するアルキルカルボニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールカルボニル基、または無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリルカルボニル基を示す。R¹とR²、R²とR³、R⁴とR⁵、またはR⁵とR⁶とが一緒になって結合して、4～8員環を形成していてもよい。

R³⁰は、C1～6アルキル基、C3～8シクロアルキル基、C6～10アリール基、3～6員ヘテロシクリル基、ヒドロキシル基、C1～6アルコキシ基、C6～10アリールオキシ基、カルボキシル基、ハロゲノ基、C1～6ハロアルキル基、C6～10ハロアリール基、C1～6ハロアルコキシ基、アミノ基(NH₂で表される基)、C1～6アルキル置換アミノ基、C6～10アリールアミノ基、C1～7アシルアミノ基、C1～6アルコキシカルボニルアミノ基、C1～

6 アルキルチオ基、C 6 ～ 1 0 アリールチオ基、ヘテロアリールチオ基、C 7 ～ 1 1 アラルキルチオ基、C 1 ～ 6 アルキルスルフィニル基、C 6 ～ 1 0 アリールスルフィニル基、ヘテロアリールスルフィニル基、C 7 ～ 1 1 アラルキルスルフィニル基、C 1 ～ 6 アルキルスルホニル基、C 6 ～ 1 0 アリールスルホニル基、ヘテロシクリルスルホニル基、シアノ基、ニトロ基を示す。R¹～R³いずれかひとつとR³⁰が一緒になって結合して、4～8員環を形成していてもよい。

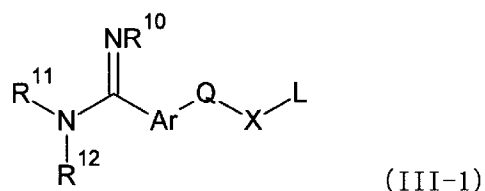
p は、R³⁰の個数を示し、0～4のいずれかの整数である。)

[請求項3] 請求項1または請求項2に記載の化合物またはその塩から選ばれる少なくとも一つを有効成分として含有する殺菌剤。

[請求項4] 請求項1または請求項2に記載の化合物またはその塩から選ばれる少なくとも一つを含有する植物病害防除剤。

[請求項5] 式 (III-1) で表される化合物。

[化4]



(式 (III-1) 中、

L は、脱離基を示し、

Q は、単結合、無置換の若しくは置換基を有するフェニレン、 ---CH=CH--- 、 $\text{---C}\equiv\text{C---}$ 、 ---O--- 、 ---S--- 、 ---SO--- 、 $\text{---SO}_2\text{---}$ 、または $\text{---N(R}^9\text{)---}$ を示す。

R⁹は、水素原子、無置換の若しくは置換基を有する炭化水素基、無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリル基、ヒドロキシ基、無置換の若しくは置換基を有するアルコキシ基、無置換の若しくは置換基を有するアルコキシカルボニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールオキシ基、無置換の若しくは置換基を有するアミノ基

、無置換の若しくは置換基を有するアルキルスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリルスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するアルキルカルボニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールカルボニル基、または無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリルカルボニル基を示す。

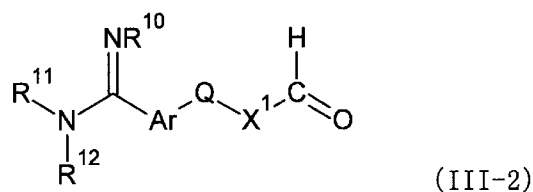
A^rは、無置換の若しくは置換基を有する二価の芳香族炭化水素残基、または無置換の若しくは置換基を有する二価の複素環式化合物残基を示し、

Xは、無置換の若しくは置換基を有するアルキレン基、無置換の若しくは置換基を有するアルケニレン基、無置換の若しくは置換基を有するアルキニレン基、 $-T^a-O-T^b-$ 、または $-T^a-N(R^{20})-T^b-$ を示し、 T^a および T^b は、それぞれ独立に、無置換の若しくは置換基を有するアルキレン基を示し、 R^{20} は、水素原子、無置換の若しくは置換基を有する炭化水素基、無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリル基、ヒドロキシ基、無置換の若しくは置換基を有するアルコキシ基、無置換の若しくは置換基を有するアルコキシカルボニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールオキシ基、無置換の若しくは置換基を有するアミノ基、無置換の若しくは置換基を有するアルキルスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリルスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するアルキルカルボニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールカルボニル基、または無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリルカルボニル基を示す。

$R^{10} \sim R^{12}$ は、それぞれ独立に、水素原子または t -ブトキシカルボニル基を示す。ただし、 $R^{10} \sim R^{12}$ のうち1つ以上が、 t -ブトキシカルボニル基である。)

[請求項6] 式 (III-2) で表される化合物。

[化5]



(式 (III-2) 中、

Arは、無置換の若しくは置換基を有する二価の芳香族炭化水素残基、または無置換の若しくは置換基を有する二価の複素環式化合物残基を示し、

Qは、単結合、無置換の若しくは置換基を有するフェニレン、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ 、 $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 、 $-\text{O}-$ 、 $-\text{S}-$ 、 $-\text{SO}-$ 、 $-\text{SO}_2-$ 、または $-\text{N}(\text{R}^9)-$ を示す。R⁹は、水素原子、無置換の若しくは置換基を有する炭化水素基、無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリル基、ヒドロキシ基、無置換の若しくは置換基を有するアルコキシ基、無置換の若しくは置換基を有するアルコキシカルボニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールオキシ基、無置換の若しくは置換基を有するアミノ基、無置換の若しくは置換基を有するアルキルスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリルスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するアルキルカルボニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールカルボニル基、または無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリルカルボニル基を示す。

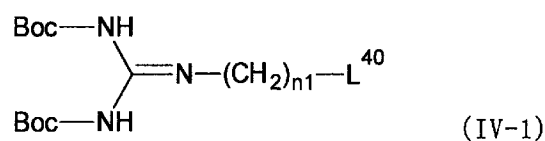
X¹は、無置換の若しくは置換基を有するアルキレン基、無置換の若しくは置換基を有するアルケニレン基、無置換の若しくは置換基を有するアルキニレン基、 $-\text{T}^a-\text{O}-\text{T}^b-$ 、または $-\text{T}^a-\text{N}(\text{R}^{20})-\text{T}^b-$ を示し、T^aおよびT^bは、それぞれ独立に、無置換の若しくは置換基を有するアルキレン基を示し、R²⁰は、水素原子、無置

換の若しくは置換基を有する炭化水素基、無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリル基、ヒドロキシル基、無置換の若しくは置換基を有するアルコキシ基、無置換の若しくは置換基を有するアルコシカルボニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールオキシ基、無置換の若しくは置換基を有するアミノ基、無置換の若しくは置換基を有するアルキルスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリルスルホニル基、無置換の若しくは置換基を有するアルキルカルボニル基、無置換の若しくは置換基を有するアリールカルボニル基、または無置換の若しくは置換基を有するヘテロシクリルカルボニル基を示す。

R¹⁰～R¹²は、それぞれ独立に、水素原子または t-ブトキシカルボニル基を示す。ただし、R¹⁰～R¹²のうち 1 つ以上が、t-ブトキシカルボニル基である。）

〔請求項7〕 式（IV-1）または式（IV-2）で表される化合物。

[化6]



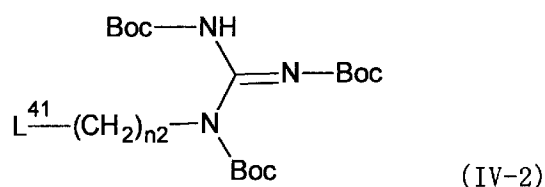
(式 (IV-1) 中、

L⁴⁰は、脱離基またはアルデヒドを示し、

Bocは、t-ブトキシカルボニル基を示し、

n_1 は、2、3、または6～10の整数を示す。)

[化7]



(式 (IV-2) 中、

L^{41} は、脱離基またはアルデヒドを示し、

Boc は、*t*-ブトキシカルボニル基を示し、

n_2 は、2、3、または5～10の整数を示す。)

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2014/082511

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

See extra sheet.

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

C07C257/00, A01N37/00, A01N47/00, A01P3/00, C07C279/00, C07C311/00, C07C323/00, C07D213/00, C07D233/00, C07D239/00, C07D261/00, C07D307/00

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Jitsuyo Shinan Koho 1922-1996 Jitsuyo Shinan Toroku Koho 1996-2015
Kokai Jitsuyo Shinan Koho 1971-2015 Toroku Jitsuyo Shinan Koho 1994-2015

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)
CAplus/REGISTRY (STN)

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	WO 2003/074476 A1 (Toyama Chemical Co., Ltd.), 12 September 2003 (12.09.2003), page 34, the compound represented by formula [2] & US 2005/0113424 A1 & EP 1481966 A1	5
X	WO 96/16947 A1 (Toyama Chemical Co., Ltd.), 06 June 1996 (06.06.1996), page 18, the compound represented by formula [3a] & JP 8-231515 A & US 5877174 A & EP 805149 A1	5
X	JP 8-291144 A (Toyama Chemical Co., Ltd.), 05 November 1996 (05.11.1996), page 6, the compound represented by formula [3] (Family: none)	5

☒ Further documents are listed in the continuation of Box C.

☐ See patent family annex.

* Special categories of cited documents:

"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance

"E" earlier application or patent but published on or after the international filing date

"L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)

"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means

"P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed

"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention

"X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone

"Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art

"&" document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search
04 March 2015 (04.03.15)

Date of mailing of the international search report
17 March 2015 (17.03.15)

Name and mailing address of the ISA/
Japan Patent Office
3-4-3, Kasumigaseki, Chiyoda-ku,
Tokyo 100-8915, Japan

Authorized officer

Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2014/082511

C (Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	WO 2013/062024 A1 (Ishihara Sangyo Kaisha, Ltd.), 02 May 2013 (02.05.2013), claims 1 to 3 (Family: none)	1-4, 6-7
A	WO 2007/074868 A1 (Toyama Chemical Co., Ltd.), 05 July 2007 (05.07.2007), claims 1 to 6 & US 2010/0016602 A1 & EP 1967190 A1	1-4, 6-7
A	WO 2006/011499 A1 (Toyama Chemical Co., Ltd.), 02 February 2006 (02.02.2006), claims 1 to 6 & JP 5021308 B	1-4, 6-7

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2014/082511

Continuation of A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

(International Patent Classification (IPC))

*C07C257/18(2006.01)i, A01N37/52(2006.01)i, A01N47/44(2006.01)i,
A01P3/00(2006.01)i, C07C279/12(2006.01)i, C07C279/24(2006.01)i,
C07C311/18(2006.01)i, C07C311/19(2006.01)i, C07C311/51(2006.01)i,
C07C323/60(2006.01)i, C07D213/64(2006.01)i, C07D233/22(2006.01)i,
C07D239/06(2006.01)i, C07D261/20(2006.01)i, C07D307/81(2006.01)i*

(According to International Patent Classification (IPC) or to both national
classification and IPC)

A. 発明の属する分野の分類（国際特許分類（I P C））

Int.Cl. 特別ページ参照

B. 調査を行った分野

調査を行った最小限資料（国際特許分類（I P C））

Int.Cl. C07C257/00, A01N37/00, A01N47/00, A01P3/00, C07C279/00, C07C311/00, C07C323/00, C07D213/00, C07D233/00, C07D239/00, C07D261/00, C07D307/00

最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの

日本国実用新案公報	1 9 2 2 - 1 9 9 6 年
日本国公開実用新案公報	1 9 7 1 - 2 0 1 5 年
日本国実用新案登録公報	1 9 9 6 - 2 0 1 5 年
日本国登録実用新案公報	1 9 9 4 - 2 0 1 5 年

国際調査で使用した電子データベース（データベースの名称、調査に使用した用語）

CAplus/REGISTRY (STN)

C. 関連すると認められる文献

引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号
X	WO 2003/074476 A1（富山化学工業株式会社）2003. 09. 12, 第 3 4 頁の式 [2] の化合物 & US 2005/0113424 A1 & EP 1481966 A1	5
X	WO 96/16947 A1（富山化学工業株式会社）1996. 06. 06, 第 1 8 頁の式 [3 a] の化合物 & JP 8-231515 A & US 5877174 A & EP 805149 A1	5
X	JP 8-291144 A（富山化学工業株式会社）1996. 11. 05, 第 6 頁の式 [3] の化合物（ファミリーなし）	5

☒ C 欄の続きにも文献が列挙されている。☐ パテントファミリーに関する別紙を参照。

* 引用文献のカテゴリー

「A」特に関連のある文献ではなく、一般的技術水準を示すもの
「E」国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの
「L」優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献（理由を付す）
「O」口頭による開示、使用、展示等に言及する文献
「P」国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願

の日の後に公表された文献

「T」国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と矛盾するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの
「X」特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの
「Y」特に関連のある文献であって、当該文献と他の 1 以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの
「&」同一パテントファミリー文献

国際調査を完了した日

0 4 . 0 3 . 2 0 1 5

国際調査報告の発送日

1 7 . 0 3 . 2 0 1 5

国際調査機関の名称及びあて先

日本国特許庁（I S A / J P）
郵便番号 1 0 0 - 8 9 1 5
東京都千代田区霞が関三丁目 4 番 3 号

特許庁審査官（権限のある職員）

前田 憲彦

4 H

8 3 1 8

電話番号 0 3 - 3 5 8 1 - 1 1 0 1 内線 3 4 4 3

C (続き) . 関連すると認められる文献		
引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号
A	WO 2013/062024 A1 (石原産業株式会社) 2013. 05. 02, 請求項 1 - 3 (ファミリーなし)	1-4, 6-7
A	WO 2007/074868 A1 (富山化学工業株式会社) 2007. 07. 05, 請求項 1 - 6 & US 2010/0016602 A1 & EP 1967190 A1	1-4, 6-7
A	WO 2006/011499 A1 (富山化学工業株式会社) 2006. 02. 02, 請求項 1 - 6 & JP 5021308 B	1-4, 6-7

発明の属する分野の分類

C07C257/18(2006.01)i, A01N37/52(2006.01)i, A01N47/44(2006.01)i, A01P3/00(2006.01)i,
C07C279/12(2006.01)i, C07C279/24(2006.01)i, C07C311/18(2006.01)i,
C07C311/19(2006.01)i, C07C311/51(2006.01)i, C07C323/60(2006.01)i,
C07D213/64(2006.01)i, C07D233/22(2006.01)i, C07D239/06(2006.01)i,
C07D261/20(2006.01)i, C07D307/81(2006.01)i