

(19) 日本国特許庁 (JP)

(12) 特 許 公 報 (B2)

(11) 特許番号

特許第5715646号
(P5715646)

(45) 発行日 平成27年5月13日 (2015. 5. 13)

(24) 登録日 平成27年3月20日 (2015. 3. 20)

(51) Int. Cl.	F I
CO7D 413/14 (2006.01)	CO7D 413/14
CO7D 417/14 (2006.01)	CO7D 417/14 C S P
CO7D 491/048 (2006.01)	CO7D 491/048
CO7D 487/04 (2006.01)	CO7D 487/04 1 3 7
AO1N 43/80 (2006.01)	AO1N 43/80 1 O 1
請求項の数 5 (全 177 頁) 最終頁に続く	

(21) 出願番号	特願2012-548142 (P2012-548142)	(73) 特許権者	390023674
(86) (22) 出願日	平成23年1月7日 (2011. 1. 7)		イー・アイ・デュポン・ドウ・ヌムール・
(65) 公表番号	特表2013-516483 (P2013-516483A)		アンド・カンパニー
(43) 公表日	平成25年5月13日 (2013. 5. 13)		E. I. DU PONT DE NEMO
(86) 国際出願番号	PCT/US2011/020473		URS AND COMPANY
(87) 国際公開番号	W02011/085170		アメリカ合衆国、デラウェア州、ウイルミ
(87) 国際公開日	平成23年7月14日 (2011. 7. 14)		ントン、マーケット・ストリート 100
審査請求日	平成25年12月25日 (2013. 12. 25)		7
(31) 優先権主張番号	61/293, 095	(74) 代理人	100127926
(32) 優先日	平成22年1月7日 (2010. 1. 7)		弁理士 結田 純次
(33) 優先権主張国	米国 (US)	(74) 代理人	100140132
			弁理士 竹林 則幸
		(72) 発明者	アンドリス・ジュリス・リーパ
			オーストラリア連邦ビクトリア州ホイラー
			ズビル
		最終頁に続く	

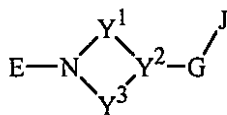
(54) 【発明の名称】 殺菌・殺カビ性ヘテロ環式化合物

(57) 【特許請求の範囲】

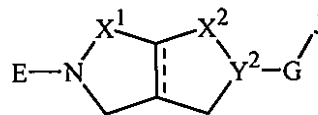
【請求項 1】

式 1 または式 1 A

【化 1】



1

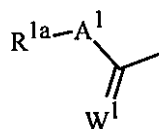


1A

(式中、

E は、

【化 2】

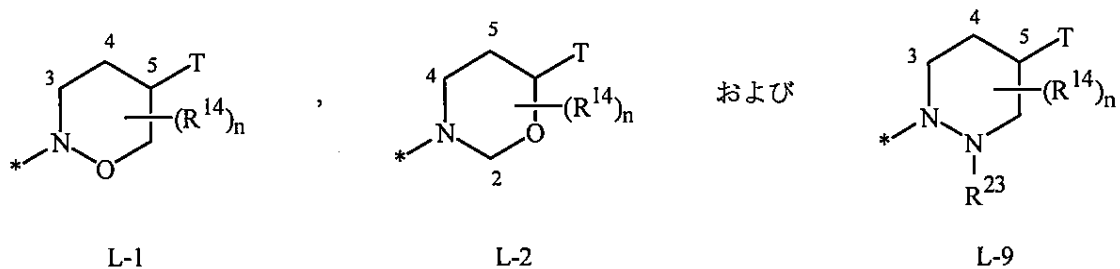


E-1

であり、

式 1 における Y^1 、 Y^2 および Y^3 は、

【化 3】

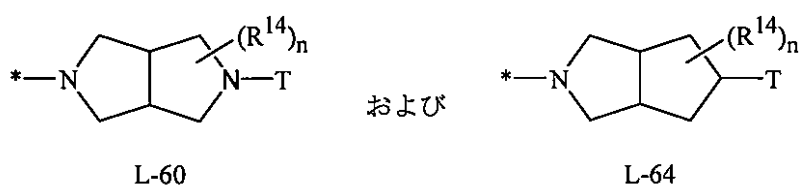


10

から選択される環を形成し、ここで、アスタリスクが付されている左に突出する結合は式 1 における E に結合していると共に、T が付されている右に突出する結合は式 1 における G に結合しており；

式 1 A における Y^2 、 X^1 および X^2 は、

【化 4】



20

から選択される環を形成し、ここでアスタリスクが付されている左に突出する結合は式 1 A における E に結合していると共に、T が付されている右に突出する結合は式 1 A における G に結合しており；

n は 0 から 4 の整数であり；

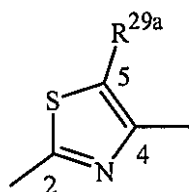
R^{14} は、H、シアノ、ヒドロキシ、 $C_1 \sim C_2$ アルキルまたは $C_1 \sim C_2$ アルコキシであり；

；

R^{23} は独立して、H、 $C_1 \sim C_4$ アルキル、又は、 $C_1 \sim C_3$ アルキルカルボニルであり；

G は、

【化 5】



30

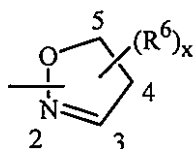
であり、ここで、左に突出する結合は式 1 または式 1 A における Y^2 に結合していると共に、右に突出する結合は式 1 または式 1 A における J に結合しており；

40

R^{29a} は H であり；

J は、

【化 6】



J-29

であり、ここで、左に突出するように示されている結合は式 1 または式 1 A における G に結合していると共に、J 環における利用可能な炭素原子環員に結合しており；

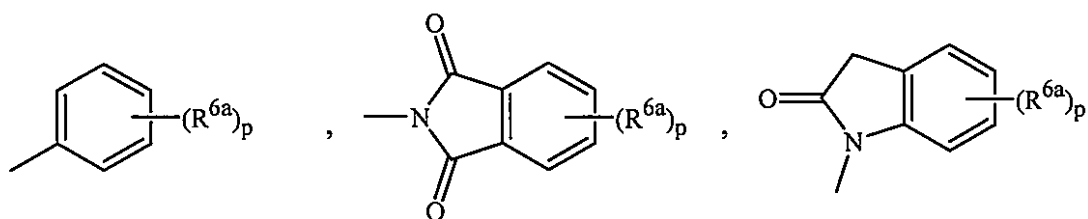
x は 1 であり；

R⁶ は - Z Q であり；

Z は直接結合であり；

Q は、

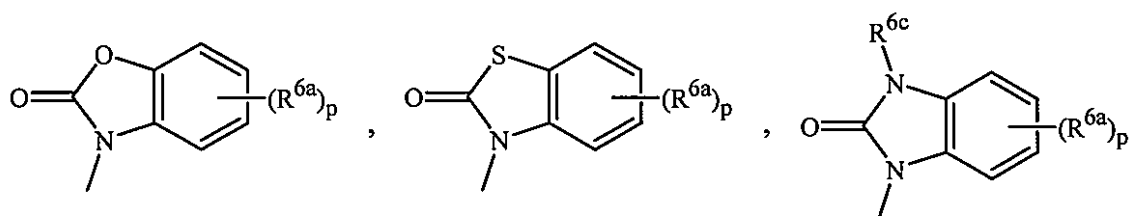
【化 7】



Q-45

Q-63

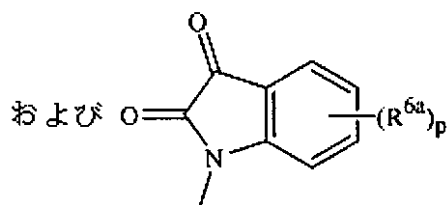
Q-65



Q-70

Q-71

Q-72



Q-84

から選択され；

各 R^{6a} は、独立して、F、Cl、Br、ヒドロキシ、シアノ、メチルまたはメトキシであり；

R^{6c} は、H またはメチルであり；

p は 0、1 または 2 であり；

A¹ は CH R¹⁵ であり；

R¹⁵ は H であり；

W¹ は O であり；

R^{1a} は、

10

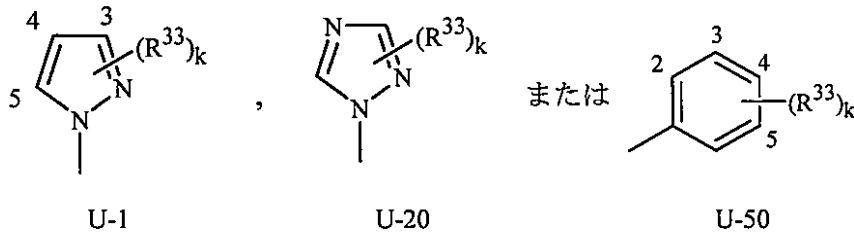
20

30

40

50

【化 8】



であり、ここで R^{33} は炭素環員に付いており、該 R^{33} は R^{33a} から選択され；

k は 1 または 2 であり、そして

各 R^{33a} は、独立して、ハロゲン、 $C_1 \sim C_3$ アルキル、 $C_1 \sim C_3$ ハロアルキルまたは $C_2 \sim C_3$ アルコキシアルキルである）、

その N-オキシドおよび塩、から選択される化合物。

【請求項 2】

1 - [4 - [4 - [5 - (2, 6-ジフルオロフェニル) - 4, 5-ジヒドロ-3-イソオキサゾリル] - 2-チアゾリル] テトラヒドロ-1 (2H) -ピリダジニル] - 2 - [5-メチル-3-(トリフルオロメチル) - 1H-ピラゾール-1-イル] エタノン、
1 - [2-アセチル-4 - [4 - [5 - (2, 6-ジフルオロフェニル) - 4, 5-ジヒドロ-3-イソオキサゾリル] - 2-チアゾリル] テトラヒドロ-1 (2H) -ピリダジニル] - 2 - [5-メチル-3-(トリフルオロメチル) - 1H-ピラゾール-1-イル] エタノン；

1 - [5 - [4 - [5 - (2, 6-ジフルオロフェニル) - 4, 5-ジヒドロ-3-イソオキサゾリル] - 2-チアゾリル] テトラヒドロ-2H-1, 2-オキサジン-2-イル] - 2 - [5-メチル-3-(トリフルオロメチル) - 1H-ピラゾール-1-イル] エタノン；および

1 - [5 - [4 - [5 - (2, 6-ジフルオロフェニル) - 4, 5-ジヒドロ-3-イソオキサゾリル] - 2-チアゾリル] ヘキサヒドロピロロ [3, 4-c] ピロール-2 (1H) -イル] - 2 - [5-メチル-3-(トリフルオロメチル) - 1H-ピラゾール-1-イル] エタノン

から選択される請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 3】

(a) 請求項 1 または 2 に記載の化合物；および (b) 少なくとも 1 つの他の殺菌剤を含む殺菌組成物。

【請求項 4】

(a) 請求項 1 または 2 に記載の化合物；および (b) 界面活性剤、固体希釈剤および液体希釈剤からなる群から選択される少なくとも 1 つの追加の成分；を含む殺菌組成物。

【請求項 5】

真菌性植物病原体によって引き起こされる植物病害を防除する方法であって、植物もしくはその一部分に、または植物種子に、殺菌的に有効な量の請求項 1 または 2 に記載の化合物を施用するステップを含む、上記方法。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、一定のヘテロ環式化合物、これらの N-オキシド、塩および組成物、ならびに、殺菌・殺カビ剤としてのこれらの使用方法に関する。

【背景技術】

【0002】

真菌性植物病原体によって引き起こされる植物病害の防除は、高い作物効率を達成するためにきわめて重要である。観葉植物、野菜、圃場、穀類、および、果実作物に対する植

10

20

30

40

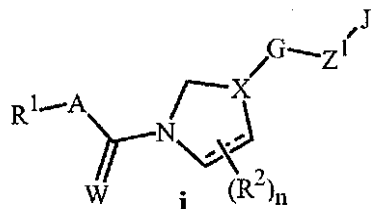
50

物病害による損害は、生産性を著しく低下させ、これにより、消費者に対するコストが増加してしまう可能性がある。これらの目的のために多くの製品が市販されているが、より効果的であり、より安価であり、毒性が低く、環境的に安全であり、または、異なる作用部位を有する新規の化合物に対する要求が継続してある。

【0003】

式 i の一定のピラゾール誘導体、および、殺菌・殺カビ剤としてのこれらの使用が特許文献 1 に開示されている。

【化 1】



10

【先行技術文献】

【特許文献】

【0004】

【特許文献 1】 国際公開第 2008/013925 号パンフレット

【発明の概要】

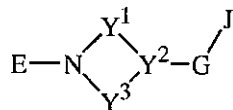
20

【課題を解決するための手段】

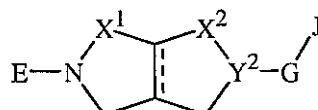
【0005】

本発明は、式 1 および式 1A の化合物（すべての立体異性体を含む）：

【化 2】



1



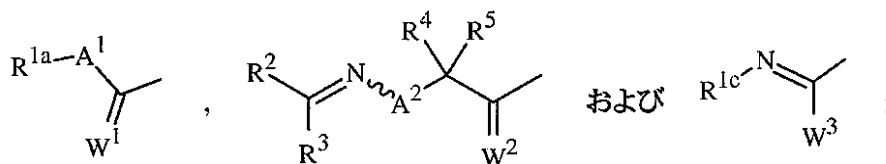
1A

30

（式中、

E は、

【化 3】



E-1

E-2

E-3

40

からなる群から選択されるラジカルであり、

【0006】

Y^1 は、 $-N=C(R^{14})-$ 、 $-C(R^{14})=N-$ 、または、一方の鎖構成員が $-C(R^{14})_2-$ であると共に第 2 の鎖構成員が $-C(R^{14})_2-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-N(R^{23})-$ および $-C(=O)-$ から選択される、2 つの鎖構成員から構成される環形成鎖であり；

Y^2 は、 $-C(R^{14})-$ および $-N-$ から選択される環員であり； e

50

Y^3 は、 $-N=C(R^{14})-$ 、 $-C(R^{14})=N-$ 、または、一方の鎖構成員が $-C(R^{14})_2-$ であると共に第2の鎖構成員が $-C(R^{14})_2-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-N(R^{23})-$ および $-C(=O)-$ から選択される、2つの鎖構成員から構成される環形成鎖であるか；または

Y^3 は、 $-C(R^{14})_2N=C(R^{14})-$ 、 $-C(R^{14})_2C(R^{14})=N-$ 、 $-N=C(R^{14})C(R^{14})_2-$ 、 $-C(R^{14})=NC(R^{14})_2-$ 、または、2つの鎖構成員が $-C(R^{14})_2-$ であるとと共に第3の鎖構成員が $-C(R^{14})_2-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-N(R^{23})-$ および $-C(=O)-$ から選択される、3つの鎖構成員から構成される環形成鎖であり；

X^1 および X^2 は、各々独立して、 $-C(R^{14})-$ および $-O-$ から選択される環員であり；

Gは任意により置換されている5員複素環であり；

Jは、5員～7員環、8員～11員二環系あるいは7員～11員スピロ環系であって、各環もしくは環系は、2個以下のO、2個以下のS、4個以下のNおよび2個以下のSi原子から独立して選択される4個以下のヘテロ原子ならびに炭素原子から選択される環員を含有しており、ここで、3個以下の炭素原子環員は独立して、 $C(=O)$ および $C(=S)$ から選択され、硫黄原子環員は独立して、 $S(=O)_s(NR^{11})_f$ から選択され、ならびに、ケイ素原子環員は独立して、 SiR^9R^{10} から選択され、各環もしくは環系は、任意により、 R^6 から独立して選択される5個以下の置換基で置換されているか；または

Jは $C(=W^4)NT^AT^B$ であり；

W^4 はOまたはSであり；

T^A は、Hまたは $C_1\sim C_3$ アルキルであり；

T^B は $CR^{17}R^{18}R^{19}$ であり；

A^1 は、 CHR^{15} 、 NR^{16} または $C(=O)$ であり；

A^2 は、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-N(R^7)-$ 、 $-C(R^8)_2-$ 、 $-OC(R^8)_2-$ 、 $-SC(R^8)_2-$ または $-N(R^7)C(R^8)_2-$ であり、ここで、左に突出する結合は $-N=C(R^2)(R^3)$ に結合していると共に、右に突出する結合は $-C(R^4)(R^5)-$ に結合しており；

W^1 および W^2 は、各々独立して、OまたはSであり；

W^3 は、 OR^{24} 、 SR^{25} 、 $NR^{26}R^{27}$ または R^{28} であり；

【0007】

R^{1a} および R^{1c} は、独立して、任意により置換されているフェニル、任意により置換されているナフタレニルあるいは任意により置換されている5員～6員芳香族複素環であるか；または、ピロリジニル、ピペリジニルもしくはモルホリニ(morpholinyl)、シアノ、 $C_1\sim C_8$ アルキル、 $C_2\sim C_8$ アルケニル、 $C_2\sim C_8$ アルキニル、 $C_1\sim C_8$ ハロアルキル、 $C_2\sim C_8$ ハロアルケニル、 $C_2\sim C_8$ ハロアルキニル、 $C_3\sim C_8$ シクロアルキル、 $C_3\sim C_8$ ハロシクロアルキル、 $C_4\sim C_{10}$ アルキルシクロアルキル、 $C_4\sim C_{10}$ シクロアルキルアルキル、 $C_4\sim C_{10}$ ハロシクロアルキルアルキル、 $C_5\sim C_{10}$ アルキルシクロアルキルアルキル、 $C_2\sim C_8$ アルコキシアルキル、 $C_2\sim C_8$ ハロアルコキシアルキル、 $C_4\sim C_{10}$ シクロアルコキシアルキル、 $C_3\sim C_{10}$ アルコキシアルコキシアルキル、 $C_2\sim C_8$ アルキルチオアルキル、 $C_2\sim C_8$ ハロアルキルチオアルキル、 $C_2\sim C_8$ アルキルスルフィニルアルキル、 $C_2\sim C_8$ アルキルスルホニルアルキル、 $C_3\sim C_8$ アルコキシカルボニルアルキル、 $C_3\sim C_8$ ハロアルコキシカルボニルアルキル、 $C_2\sim C_8$ アルキルアミノアルキル、 $C_3\sim C_{10}$ ジアルキルアミノアルキル、 $C_2\sim C_8$ ハロアルキルアミノアルキル、 $C_4\sim C_{10}$ シクロアルキルアミノアルキル、 $C_1\sim C_8$ アルコキシ、 $C_1\sim C_8$ ハロアルコキシ、 $C_3\sim C_8$ シクロアルコキシ、 $C_3\sim C_8$ ハロシクロアルコキシ、 $C_4\sim C_{10}$ シクロアルキルアルコキシ、 $C_2\sim C_8$ アルケニルオキシ、 $C_2\sim C_8$ ハロアルケニルオキシ、 $C_2\sim C_8$ アルキニルオキシ、 $C_3\sim C_8$ ハロアルキニルオキシ、 $C_2\sim C_8$ アルコキシアルコキシ、 $C_2\sim C_8$

アルキルカルボニルオキシ、 $C_2 \sim C_8$ ハロアルキルカルボニルオキシ、 $C_1 \sim C_8$ アルキルチオ、 $C_1 \sim C_8$ ハロアルキルチオ、 $C_3 \sim C_8$ シクロアルキルチオ、 $C_3 \sim C_{10}$ トリアルキルシリル、 $C_1 \sim C_8$ アルキルアミノ、 $C_2 \sim C_8$ ジアルキルアミノ、 $C_1 \sim C_8$ ハロアルキルアミノ、 $C_2 \sim C_8$ ハロジアルキルアミノ、 $C_3 \sim C_8$ シクロアルキルアミノ、 $C_2 \sim C_8$ アルキルカルボニルアミノ、 $C_2 \sim C_8$ ハロアルキルカルボニルアミノ、 $C_1 \sim C_8$ アルキルスルホニルアミノあるいは $C_1 \sim C_8$ ハロアルキルスルホニルアミノであり；

R^2 は、H、ハロゲン、シアノ、アミノ、 $-CHO$ 、 $-C(=O)OH$ 、 $-C(=O)NH_2$ 、 $C_1 \sim C_6$ アルキル、 $C_2 \sim C_6$ アルケニル、 $C_2 \sim C_6$ アルキニル、 $C_1 \sim C_6$ ハロアルキル、 $C_2 \sim C_6$ ハロアルケニル、 $C_2 \sim C_6$ ハロアルキニル、 $C_3 \sim C_6$ シクロアルキル、 $C_3 \sim C_6$ ハロシクロアルキル、 $C_4 \sim C_6$ アルキルシクロアルキル、 $C_4 \sim C_6$ シクロアルキルアルキル、 $C_4 \sim C_6$ ハロシクロアルキルアルキル、 $C_3 \sim C_6$ シクロアルケニル、 $C_3 \sim C_6$ ハロシクロアルケニル、 $C_2 \sim C_6$ アルコキシアルキル、 $C_2 \sim C_6$ アルキルチオアルキル、 $C_2 \sim C_6$ アルキルスルフィニルアルキル、 $C_2 \sim C_6$ アルキルスルホニルアルキル、 $C_2 \sim C_6$ アルキルアミノアルキル、 $C_3 \sim C_6$ ジアルキルアミノアルキル、 $C_2 \sim C_6$ ハロアルキルアミノアルキル、 $C_2 \sim C_6$ アルキルカルボニル、 $C_2 \sim C_6$ ハロアルキルカルボニル、 $C_4 \sim C_6$ シクロアルキルカルボニル、 $C_2 \sim C_6$ アルコキシカルボニル、 $C_4 \sim C_6$ シクロアルコキシカルボニル、 $C_5 \sim C_6$ シクロアルキルアルコキシカルボニル、 $C_2 \sim C_6$ アルキルアミノカルボニル、 $C_3 \sim C_6$ ジアルキルアミノカルボニル、 $C_1 \sim C_6$ アルコキシ、 $C_1 \sim C_6$ ハロアルコキシ、 $C_3 \sim C_6$ シクロアルコキシ、 $C_3 \sim C_6$ ハロシクロアルコキシ、 $C_2 \sim C_6$ アルケニルオキシ、 $C_2 \sim C_6$ ハロアルケニルオキシ、 $C_2 \sim C_6$ アルキニルオキシ、 $C_3 \sim C_6$ ハロアルキニルオキシ、 $C_2 \sim C_6$ アルコキシアルコキシ、 $C_2 \sim C_6$ アルキルカルボニルオキシ、 $C_2 \sim C_6$ ハロアルキルカルボニルオキシ、 $C_1 \sim C_6$ アルキルチオ、 $C_1 \sim C_6$ ハロアルキルチオ、 $C_3 \sim C_6$ シクロアルキルチオ、 $C_1 \sim C_6$ アルキルアミノ、 $C_2 \sim C_6$ ジアルキルアミノ、 $C_1 \sim C_6$ ハロアルキルアミノ、 $C_2 \sim C_6$ ハロジアルキルアミノ、 $C_3 \sim C_6$ シクロアルキルアミノ、 $C_2 \sim C_6$ アルキルカルボニルアミノ、 $C_2 \sim C_6$ ハロアルキルカルボニルアミノ、 $C_1 \sim C_6$ アルキルスルホニルアミノまたは $C_1 \sim C_6$ ハロアルキルスルホニルアミノであり；

【0008】

R^3 は、H、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシ、 $C_1 \sim C_3$ アルキル、 $C_1 \sim C_3$ ハロアルキル、 $C_1 \sim C_3$ アルコキシあるいは $C_1 \sim C_3$ ハロアルコキシであるか；または、

R^2 および R^3 は、これらが結合している炭素原子と一緒にあって、2個以下のO、2個以下のS、2個以下のNおよび2個以下のSi原子から独立して選択される4個以下のヘテロ原子ならびに炭素原子から選択される環員を含有する3員～7員環を形成しており、ここで、3個以下の炭素原子環員は独立して、 $C(=O)$ および $C(=S)$ から選択され、硫黄原子環員は独立して、 $S(=O)_s (=NR^{11})_f$ から選択され、および、ケイ素原子環員は独立して、 SiR^9R^{10} から選択され、環は、任意により、炭素原子環員上では、ハロゲン、シアノ、 $C_1 \sim C_2$ アルキル、 $C_1 \sim C_2$ ハロアルキル、 $C_1 \sim C_2$ アルコキシおよび $C_1 \sim C_2$ ハロアルコキシから独立して選択され、ならびに、窒素原子環員上では、シアノ、 $C_1 \sim C_2$ アルキルおよび $C_1 \sim C_2$ アルコキシから独立して選択される4個以下の置換基で置換されており；

R^4 は、任意により置換されているフェニル、任意により置換されているナフタレニルあるいは任意により置換されている5員～6員芳香族複素環であるか；または、H、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシ、 $-CHO$ 、 $C_1 \sim C_4$ アルキル、 $C_2 \sim C_4$ アルケニル、 $C_2 \sim C_4$ アルキニル、 $C_1 \sim C_4$ ハロアルキル、 $C_2 \sim C_4$ ハロアルケニル、 $C_2 \sim C_4$ ハロアルキニル、 $C_2 \sim C_4$ アルコキシアルキル、 $C_2 \sim C_4$ アルキルチオアルキル、 $C_2 \sim C_4$ アルキルスルフィニルアルキル、 $C_2 \sim C_4$ アルキルスルホニルアルキル、 $C_2 \sim C_4$ アルキルカルボニル、 $C_2 \sim C_4$ ハロアルキルカルボニル、 $C_2 \sim C_5$ アルコキシカルボニル、 $C_2 \sim C_5$ アルキルアミノカルボニル、 $C_3 \sim C_5$ ジアルキルアミノカルボ

10

20

30

40

50

ニル、 $C_1 \sim C_4$ アルコキシ、 $C_1 \sim C_4$ ハロアルコキシ、 $C_1 \sim C_4$ アルキルチオ、 $C_1 \sim C_4$ ハロアルキルチオ、 $C_1 \sim C_4$ アルキルスルフィニル、 $C_1 \sim C_4$ ハロアルキルスルフィニル、 $C_1 \sim C_4$ アルキルスルホニル、 $C_1 \sim C_4$ ハロアルキルスルホニル、 $C_2 \sim C_4$ アルキルカルボニルオキシ、 $C_2 \sim C_4$ ハロアルキルカルボニルオキシ、 $C_2 \sim C_5$ アルコキシカルボニルオキシ、 $C_2 \sim C_5$ アルキルアミノカルボニルオキシあるいは $C_3 \sim C_5$ ジアルキルアミノカルボニルオキシであり；

R^5 は、H、 $C_1 \sim C_3$ アルキルまたは $C_1 \sim C_3$ ハロアルキルであり；

各 R^6 は、独立して、H、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシ、アミノ、ニトロ、 $-CHO$ 、 $-C(=O)OH$ 、 $-C(=O)NH_2$ 、 $C_1 \sim C_6$ アルキル、 $C_2 \sim C_6$ アルケニル、 $C_2 \sim C_6$ アルキニル、 $C_1 \sim C_6$ ハロアルキル、 $C_2 \sim C_6$ ハロアルケニル、 $C_2 \sim C_6$ ハロアルキニル、 $C_3 \sim C_8$ シクロアルキル、 $C_3 \sim C_8$ ハロシクロアルキル、 $C_4 \sim C_{10}$ アルキルシクロアルキル、 $C_4 \sim C_{10}$ シクロアルキルアルキル、 $C_6 \sim C_{14}$ シクロアルキルシクロアルキル、 $C_4 \sim C_{10}$ ハロシクロアルキルアルキル、 $C_5 \sim C_{10}$ アルキルシクロアルキルアルキル、 $C_3 \sim C_8$ シクロアルケニル、 $C_3 \sim C_8$ ハロシクロアルケニル、 $C_2 \sim C_6$ アルコキシアルキル、 $C_4 \sim C_{10}$ シクロアルコキシアルキル、 $C_3 \sim C_8$ アルコキシアルコキシアルキル、 $C_2 \sim C_6$ アルキルチオアルキル、 $C_2 \sim C_6$ アルキルスルフィニルアルキル、 $C_2 \sim C_6$ アルキルスルホニルアルキル、 $C_2 \sim C_6$ アルキルアミノアルキル、 $C_3 \sim C_8$ ジアルキルアミノアルキル、 $C_2 \sim C_6$ ハロアルキルアミノアルキル、 $C_4 \sim C_{10}$ シクロアルキルアミノアルキル、 $C_2 \sim C_6$ アルキルカルボニル、 $C_2 \sim C_6$ ハロアルキルカルボニル、 $C_4 \sim C_8$ シクロアルキルカルボニル、 $C_2 \sim C_6$ アルコキシカルボニル、 $C_4 \sim C_8$ シクロアルコキシカルボニル、 $C_5 \sim C_{10}$ シクロアルキルアルコキシカルボニル、 $C_2 \sim C_6$ アルキルアミノカルボニル、 $C_3 \sim C_8$ ジアルキルアミノカルボニル、 $C_4 \sim C_8$ シクロアルキルアミノカルボニル、 $C_2 \sim C_6$ ハロアルコキシアルキル、 $C_1 \sim C_6$ ヒドロキシアルキル、 $C_1 \sim C_6$ アルコキシ、 $C_1 \sim C_6$ ハロアルコキシ、 $C_3 \sim C_8$ シクロアルコキシ、 $C_3 \sim C_8$ ハロシクロアルコキシ、 $C_4 \sim C_{10}$ シクロアルキルアルコキシ、 $C_2 \sim C_6$ アルケニルオキシ、 $C_2 \sim C_6$ ハロアルケニルオキシ、 $C_2 \sim C_6$ アルキニルオキシ、 $C_2 \sim C_6$ ハロアルキニルオキシ、 $C_2 \sim C_6$ アルコキシアルコキシ、 $C_2 \sim C_6$ アルキルカルボニルオキシ、 $C_2 \sim C_6$ ハロアルキルカルボニルオキシ、 $C_4 \sim C_8$ シクロアルキルカルボニルオキシ、 $C_3 \sim C_6$ アルキルカルボニルアルコキシ、 $C_1 \sim C_6$ アルキルチオ、 $C_1 \sim C_6$ ハロアルキルチオ、 $C_3 \sim C_8$ シクロアルキルチオ、 $C_1 \sim C_6$ アルキルスルフィニル、 $C_1 \sim C_6$ ハロアルキルスルフィニル、 $C_1 \sim C_6$ アルキルスルホニル、 $C_1 \sim C_6$ ハロアルキルスルホニル、 $C_3 \sim C_8$ シクロアルキルスルホニル、 $C_3 \sim C_{10}$ トリアルキルシリル、 $C_1 \sim C_6$ アルキルスルホニルアミノ、 $C_1 \sim C_6$ ハロアルキルスルホニルアミノ、 $-NR^{20}$ または $-ZQ$ であり；

【0009】

各 Z は、独立して、直接結合、O、 $C(=O)$ 、 $S(O)_m$ 、 $CH(R^{12})$ または $N(R^{13})$ であり；

各 Q は、独立して、フェニル、ベンジル、ナフタレニル、5員～6員芳香族複素環あるいは8員～11員芳香族複素環式二環系であり、各々は、任意により、炭素原子環員および窒素原子環員上で R^{6b} から独立して選択される2個以下の置換基で置換されており、ならびに、各々は、任意により、炭素原子環員上では、 R^{6a} から独立して選択され、および、窒素原子環員上では、 $C_1 \sim C_3$ アルキル、 $C_2 \sim C_3$ アルキルカルボニル、 $C_2 \sim C_3$ アルコキシカルボニルあるいは $C_1 \sim C_3$ アルコキシから独立して選択される5個以下の置換基で置換されているか；または

3員～7員非芳香族炭素環、5員～7員非芳香族複素環あるいは8員～11員非芳香族二環系であって、各環もしくは環系は、2個以下のO、2個以下のS、4個以下のNおよび2個以下のSi原子から独立して選択される4個以下のヘテロ原子ならびに炭素原子から選択される環員を含有しており、ここで、3個以下の炭素原子環員は $C(=O)$ および $C(=S)$ から独立して選択され、硫黄原子環員は $S(=O)_s (=NR^{11})_f$ から独

10

20

30

40

50

立して選択され、ならびに、ケイ素原子環員は $\text{Si R}^9 \text{R}^{10}$ から独立して選択され、各環もしくは環系は、任意により、炭素原子環員および窒素原子環員上で R^6 から独立して選択される2個以下の置換基で置換されており、ならびに、各環もしくは環系は、任意により、炭素原子環員では R^6 から独立して選択され、ならびに、窒素原子環員上では、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_3$ アルキル、 $\text{C}_2 \sim \text{C}_3$ アルキルカルボニル、 $\text{C}_2 \sim \text{C}_3$ アルコキシカルボニルおよび $\text{C}_1 \sim \text{C}_3$ アルコキシから独立して選択される5個以下の置換基で置換されており；

各 R^6 は、独立して、ハロゲン、ヒドロキシ、アミノ、シアノ、ニトロ、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_6$ アルキル、 $\text{C}_2 \sim \text{C}_6$ アルケニル、 $\text{C}_2 \sim \text{C}_6$ アルキニル、 $\text{C}_3 \sim \text{C}_6$ シクロアルキル、 $\text{C}_4 \sim \text{C}_{10}$ シクロアルキルアルキル、 $\text{C}_4 \sim \text{C}_{10}$ アルキルシクロアルキル、 $\text{C}_5 \sim \text{C}_{10}$ アルキルシクロアルキルアルキル、 $\text{C}_6 \sim \text{C}_{14}$ シクロアルキルシクロアルキル、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_6$ ハロアルキル、 $\text{C}_2 \sim \text{C}_6$ ハロアルケニル、 $\text{C}_2 \sim \text{C}_6$ ハロアルキニル、 $\text{C}_3 \sim \text{C}_6$ ハロシクロアルキル、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_4$ アルコキシ、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_4$ ハロアルコキシ、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_4$ アルキルチオ、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_4$ アルキルスルフィニル、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_4$ アルキルスルホニル、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_4$ ハロアルキルチオ、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_4$ ハロアルキルスルフィニル、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_4$ ハロアルキルスルホニル、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_4$ アルキルアミノ、 $\text{C}_2 \sim \text{C}_8$ ジアルキルアミノ、 $\text{C}_3 \sim \text{C}_6$ シクロアルキルアミノ、 $\text{C}_2 \sim \text{C}_4$ アルコキシアルキル、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_4$ ヒドロキシアルキル、 $\text{C}_2 \sim \text{C}_4$ アルキルカルボニル、 $\text{C}_2 \sim \text{C}_6$ アルコキシカルボニル、 $\text{C}_2 \sim \text{C}_6$ アルキルカルボニルオキシ、 $\text{C}_2 \sim \text{C}_6$ アルキルカルボニルチオ、 $\text{C}_2 \sim \text{C}_6$ アルキルアミノカルボニル、 $\text{C}_3 \sim \text{C}_8$ ジアルキルアミノカルボニルあるいは $\text{C}_3 \sim \text{C}_6$ トリアルキルシリルであるか；または

R^6 および R^6 は、これらが結合している原子と一緒にあって、任意により、1個以下のO、1個以下のSおよび1個以下のN原子から独立して選択される3個以下のヘテロ原子、ならびに、炭素原子から選択される環員を含有する5員～7員環を形成しており、環は、任意により、炭素原子環員上では、ハロゲン、シアノ、ニトロ、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_2$ アルキルおよび $\text{C}_1 \sim \text{C}_2$ アルコキシ、ならびに、窒素原子環員では、シアノ、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_2$ アルキルおよび $\text{C}_1 \sim \text{C}_2$ アルコキシから独立して選択される3個以下の置換基で置換されており；

【0010】

各 R^6 は、独立して、ハロゲン、シアノ、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_2$ アルキル、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_2$ ハロアルキル、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_2$ アルコキシおよび $\text{C}_1 \sim \text{C}_2$ ハロアルコキシから独立して選択される3個以下の置換基で任意により置換されているフェニルであるか；または

2個以下のO、2個以下のSおよび4個以下のN原子から独立して選択される4個以下のヘテロ原子、ならびに、炭素原子から選択される環員を含有していると共に、任意により、炭素原子環員上では、ハロゲン、シアノ、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_2$ アルキル、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_2$ ハロアルキル、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_2$ アルコキシおよび $\text{C}_1 \sim \text{C}_2$ ハロアルコキシから独立して選択され、ならびに、窒素原子環員上では、シアノ、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_2$ アルキルおよび $\text{C}_1 \sim \text{C}_2$ アルコキシから独立して選択される3個以下の置換基で置換されている5員～6員芳香族複素環であるか；または

2個以下のO、2個以下のSおよび4個以下のN原子から独立して選択される4個以下のヘテロ原子ならびに炭素原子から選択される環員を含有する3員～7員非芳香族環であって、ここで、3個以下の炭素原子環員は、独立して、 $\text{C} (= \text{O})$ および $\text{C} (= \text{S})$ から選択され、環は、任意により、炭素原子環員上では、ハロゲン、シアノ、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_2$ アルキル、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_2$ ハロアルキル、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_2$ アルコキシおよび $\text{C}_1 \sim \text{C}_2$ ハロアルコキシから独立して選択され、ならびに、窒素原子環員上では、シアノ、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_2$ アルキルおよび $\text{C}_1 \sim \text{C}_2$ アルコキシから独立して選択される3個以下の置換基で置換されており；

R^7 は、H、シアノ、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_4$ アルキル、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_4$ ハロアルキル、 $\text{C}_2 \sim \text{C}_4$ アルコキシアルキル、 $\text{C}_2 \sim \text{C}_4$ アルキルチオアルキル、 $\text{C}_2 \sim \text{C}_4$ アルキルカルボニル、 $\text{C}_2 \sim \text{C}_4$ ハロアルキルカルボニル、 $\text{C}_2 \sim \text{C}_4$ アルコキシカルボニル、 $\text{C}_2 \sim \text{C}_4$ アルキルアミノカルボニル、 $\text{C}_3 \sim \text{C}_5$ ジアルキルアミノカルボニル、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_4$ アルキルスル

ホニルあるいは $C_1 \sim C_4$ ハロアルキルスルホニルであるか；または

R^3 および R^7 は、これらが結合している結合原子と一緒に、結合原子に追加して、1個以下のO、1個以下のSおよび1個以下のN原子から独立して選択される3個以下のヘテロ原子、ならびに、炭素原子から選択される環員を含有する5員～7員部分飽和環を形成しており、環は、任意により、炭素原子環員上では、ハロゲン、シアノ、ニトロ、 $C_1 \sim C_2$ アルキル、 $C_1 \sim C_2$ ハロアルキル、 $C_1 \sim C_2$ アルコキシおよび $C_1 \sim C_2$ ハロアルコキシから独立して選択され、ならびに、窒素原子環員上では、シアノ、 $C_1 \sim C_2$ アルキルおよび $C_1 \sim C_2$ アルコキシから独立して選択される3個以下の置換基で置換されており；

各 R^8 は、独立して、H、 $C_1 \sim C_3$ アルキルまたは $C_1 \sim C_3$ ハロアルキルであり；

各 R^9 および R^{10} は、独立して、 $C_1 \sim C_5$ アルキル、 $C_2 \sim C_5$ アルケニル、 $C_2 \sim C_5$ アルキニル、 $C_3 \sim C_5$ シクロアルキル、 $C_3 \sim C_6$ ハロシクロアルキル、 $C_4 \sim C_{10}$ シクロアルキルアルキル、 $C_4 \sim C_7$ アルキルシクロアルキル、 $C_5 \sim C_7$ アルキルシクロアルキルアルキル、 $C_1 \sim C_5$ ハロアルキル、 $C_1 \sim C_5$ アルコキシまたは $C_1 \sim C_5$ ハロアルコキシであり；

各 R^{11} は、独立して、H、シアノ、 $C_1 \sim C_6$ アルキル、 $C_1 \sim C_6$ ハロアルキル、 $C_3 \sim C_8$ シクロアルキル、 $C_3 \sim C_8$ ハロシクロアルキル、 $C_1 \sim C_6$ アルコキシ、 $C_1 \sim C_6$ ハロアルコキシ、 $C_1 \sim C_6$ アルキルアミノ、 $C_2 \sim C_8$ ジアルキルアミノ、 $C_1 \sim C_6$ ハロアルキルアミノまたはフェニルであり；

各 R^{12} は、独立して、H、 $C_1 \sim C_4$ アルキルまたは $C_1 \sim C_4$ ハロアルキルであり；

R^{13} は、H、 $C_1 \sim C_4$ アルキル、 $C_1 \sim C_4$ ハロアルキル、 $C_3 \sim C_6$ シクロアルキル、 $C_2 \sim C_4$ アルキルカルボニル、 $C_2 \sim C_4$ ハロアルキルカルボニル、 $C_2 \sim C_4$ アルコキシカルボニルまたは $C_2 \sim C_4$ ハロアルコキシカルボニルであり；

各 R^{14} は、独立して、H、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシ、 $C_1 \sim C_4$ アルキル、 $C_1 \sim C_4$ アルケニル、 $C_1 \sim C_4$ ハロアルキルまたは $C_1 \sim C_4$ アルコキシであり；

【0011】

R^{15} は、H、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシ、 $-CHO$ 、 $C_1 \sim C_4$ アルキル、 $C_2 \sim C_4$ アルケニル、 $C_2 \sim C_4$ アルキニル、 $C_1 \sim C_4$ ハロアルキル、 $C_2 \sim C_4$ ハロアルケニル、 $C_2 \sim C_4$ ハロアルキニル、 $C_2 \sim C_4$ アルコキシアルキル、 $C_2 \sim C_4$ アルキルチオアルキル、 $C_2 \sim C_4$ アルキルスルフィニルアルキル、 $C_2 \sim C_4$ アルキルスルホニルアルキル、 $C_3 \sim C_5$ アルコキシカルボニルアルキル、 $C_2 \sim C_4$ アルキルカルボニル、 $C_2 \sim C_4$ ハロアルキルカルボニル、 $C_2 \sim C_5$ アルコキシカルボニル、 $C_2 \sim C_5$ アルキルアミノカルボニル、 $C_3 \sim C_5$ ジアルキルアミノカルボニル、 $C_1 \sim C_4$ アルコキシ、 $C_1 \sim C_4$ ハロアルコキシ、 $C_1 \sim C_4$ アルキルチオ、 $C_1 \sim C_4$ ハロアルキルチオ、 $C_1 \sim C_4$ アルキルスルフィニル、 $C_1 \sim C_4$ ハロアルキルスルフィニル、 $C_1 \sim C_4$ アルキルスルホニルまたは $C_1 \sim C_4$ ハロアルキルスルホニルであり；

R^{16} は、H、 $C_1 \sim C_4$ アルキル、 $C_2 \sim C_4$ アルケニル、 $C_2 \sim C_4$ アルキニル、 $C_1 \sim C_4$ ハロアルキル、 $C_2 \sim C_4$ ハロアルケニル、 $C_2 \sim C_4$ ハロアルキニル、 $C_2 \sim C_4$ アルコキシアルキル、 $C_2 \sim C_4$ アルキルチオアルキル、 $C_2 \sim C_4$ アルキルスルフィニルアルキル、 $C_2 \sim C_4$ アルキルスルホニルアルキル、 $C_2 \sim C_4$ アルキルカルボニル、 $C_2 \sim C_4$ ハロアルキルカルボニル、 $C_2 \sim C_5$ アルコキシカルボニル、 $C_3 \sim C_5$ アルコキシカルボニルアルキル、 $C_2 \sim C_5$ アルキルアミノカルボニル、 $C_3 \sim C_5$ ジアルキルアミノカルボニル、 $C_1 \sim C_4$ アルキルスルホニルまたは $C_1 \sim C_4$ ハロアルキルスルホニルであり；

R^{17} は、Hまたは $C_1 \sim C_4$ アルキルであり；

R^{18} は、フェニル、ベンジル、ナフタレニルまたは5員～6員芳香族複素環であって、各々は、任意により、 R^{22} から独立して選択される3個以下の置換基で置換されており；

R^{19} は、H、シアノ、ニトロ、 $C_1 \sim C_6$ アルキル、 $C_2 \sim C_6$ アルケニルまたはC

10

20

30

40

50

$_2 \sim C_6$ アルキニルであり；

各 R^{20} は、独立して、H、 $C_1 \sim C_6$ アルキル、 $C_1 \sim C_6$ ハロアルキル、 $C_3 \sim C_8$ シクロアルキル、 $C_2 \sim C_6$ アルキルカルボニル、 $C_2 \sim C_6$ ハロアルキルカルボニル、 $C_2 \sim C_6$ アルコキシカルボニルまたは $C_2 \sim C_6$ ハロアルコキシカルボニルであり；

各 R^{21} は、独立して、 $C_1 \sim C_6$ アルキル、 $C_1 \sim C_6$ ハロアルキル、 $C_3 \sim C_8$ シクロアルキル、 $C_2 \sim C_6$ アルキルカルボニル、 $C_2 \sim C_6$ ハロアルキルカルボニル、 $C_2 \sim C_6$ アルコキシカルボニル、 $C_2 \sim C_6$ ハロアルコキシカルボニルまたは $-Z^1 Q$ であり；

各 R^{22} は、独立して、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシ、 $C_1 \sim C_3$ アルキル、 $C_1 \sim C_3$ ハロアルキルあるいは $C_1 \sim C_3$ アルコキシであるか；または

R^{19} および R^{22} は、これらが結合している原子と一緒に、2個以下のO、2個以下のS、2個以下のNおよび2個以下のSi原子から独立して選択される4個以下のヘテロ原子ならびに炭素原子から選択される環員を含有する5員～7員環を形成しており、ここで、2個以下の炭素原子環員は、独立して、 $C(=O)$ および $C(=S)$ から選択され、硫黄原子環員は、独立して、 $S(=O)_s (=NR^{11})_f$ から選択され、ならびに、ケイ素原子環員は、独立して、 $SiR^9 R^{10}$ から選択され、環は、任意により、炭素原子環員上では、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシ、 $C_1 \sim C_2$ アルキルおよび $C_1 \sim C_2$ アルコキシから独立して選択され、ならびに、窒素原子環員上では、シアノ、 $C_1 \sim C_2$ アルキルおよび $C_1 \sim C_2$ アルコキシから独立して選択される4個以下の置換基で置換されており；

各 Z^1 は、独立して、O、 $C(=O)$ 、 $S(O)_m$ または $CH(R^{12})$ であり；

各 R^{23} は、独立して、H、 $-CHO$ 、 $C_1 \sim C_4$ アルキル、 $C_1 \sim C_4$ アルケニル、 $C_1 \sim C_4$ ハロアルキル、 $C_1 \sim C_3$ アルキルカルボニル、 $C_2 \sim C_4$ アルコキシアルキル、 $C_2 \sim C_4$ アルコキシカルボニル、 $C_2 \sim C_4$ アルキルアミノカルボニル、 $C_4 \sim C_7$ ジアルキルアミノカルボニルまたは $C_2 \sim C_4$ アルキルスルホニルであり；

【0012】

各 R^{24} および R^{25} は、独立して、 $C_1 \sim C_6$ アルキル、 $C_3 \sim C_6$ アルケニル、 $C_3 \sim C_6$ アルキニル、 $C_1 \sim C_6$ ハロアルキル、 $C_3 \sim C_6$ ハロアルケニル、 $C_3 \sim C_6$ ハロアルキニル、 $C_3 \sim C_6$ シクロアルキル、 $C_3 \sim C_6$ ハロシクロアルキル、 $C_4 \sim C_8$ アルキルシクロアルキル、 $C_4 \sim C_8$ シクロアルキルアルキル、 $C_4 \sim C_8$ ハロシクロアルキルアルキル、 $C_5 \sim C_8$ アルキルシクロアルキルアルキル、 $C_2 \sim C_6$ アルコキシアルキル、 $C_4 \sim C_8$ シクロアルコキシアルキル、 $C_3 \sim C_6$ アルコキシアルコキシアルキル、 $C_2 \sim C_6$ アルキルチオアルキル、 $C_2 \sim C_6$ アルキルスルフィニルアルキル、 $C_2 \sim C_6$ アルキルスルホニルアルキル、 $C_2 \sim C_6$ アルキルアミノアルキル、 $C_3 \sim C_6$ ジアルキルアミノアルキル、 $C_2 \sim C_6$ ハロアルキルアミノアルキル、 $C_4 \sim C_8$ シクロアルキルアミノアルキル、 $C_2 \sim C_6$ アルキルカルボニル、 $C_2 \sim C_6$ ハロアルキルカルボニル、 $C_4 \sim C_8$ シクロアルキルカルボニル、 $C_2 \sim C_6$ アルコキシカルボニル、 $C_2 \sim C_6$ アルキルアミノカルボニル、 $C_3 \sim C_8$ ジアルキルアミノカルボニルまたは $C_4 \sim C_8$ シクロアルキルアミノカルボニルであり；

R^{26} は、H、シアノ、ヒドロキシ、アミノ、 $C_1 \sim C_6$ アルキル、 $C_3 \sim C_6$ アルケニル、 $C_3 \sim C_6$ アルキニル、 $C_1 \sim C_6$ ハロアルキル、 $C_3 \sim C_6$ ハロアルケニル、 $C_3 \sim C_6$ ハロアルキニル、 $C_3 \sim C_6$ シクロアルキル、 $C_4 \sim C_8$ シクロアルキルアルキル、 $C_2 \sim C_6$ アルコキシアルキル、 $C_1 \sim C_6$ アルコキシ、 $C_1 \sim C_6$ ハロアルコキシ、 $C_1 \sim C_6$ アルキルスルホニル、 $C_1 \sim C_6$ ハロアルキルスルホニル、 $C_2 \sim C_6$ アルキルカルボニル、 $C_2 \sim C_6$ ハロアルキルカルボニル、 $C_1 \sim C_6$ アルキルアミノ、 $C_2 \sim C_8$ ジアルキルアミノ、 $C_1 \sim C_6$ ハロアルキルアミノまたは $C_2 \sim C_8$ ハロジアルキルアミノであり；

R^{27} は、H、 $C_1 \sim C_6$ アルキル、 $C_3 \sim C_6$ アルケニル、 $C_3 \sim C_6$ アルキニル、 $C_1 \sim C_6$ ハロアルキルあるいは $C_3 \sim C_6$ シクロアルキルであるか；または

R^{26} および R^{27} は、一緒になって、 $-(CH_2)_4-$ 、 $-(CH_2)_5-$ あるいは

10

20

30

40

50

— (CH₂)₂O(CH₂)₂—とされ；

R^{2 8}は、H、ハロゲン、シアノ、C₁～C₄アルキル、C₁～C₄ハロアルキル、C₂～C₄アルコキシアルキル、C₂～C₄アルキルカルボニル、C₂～C₄アルコキシカルボニル、C₂～C₃アルキルアミノカルボニルまたはC₃～C₆ジアルキルアミノカルボニルであり；

各mは、独立して、0、1または2であり；ならびに

sおよびfは、S(=O)_s(=NR^{1 1})_fの各々の場合において、独立して、0、1または2であるが、ただし、sとfとの和は1または2であるが；

ただし；

(a) Y¹が2つの鎖構成員から構成される環形成鎖であると共にY³が2つもしくは3つの鎖構成員から構成される環形成鎖である場合、Y¹またはY³の鎖構成員の少なくとも1つはC(R^{1 4})₂以外であり；

(b) Y¹が2つの鎖構成員から構成される環形成鎖であるか、または、Y³が2つもしくは3つの鎖構成員から構成される環形成鎖である場合であって、かつ、鎖構成員が—C(=O)—である場合、前記鎖構成員は、式1においてN—E以外に結合しており；

(c) X¹が—O—である場合、X²は—C(R^{1 4})—であると共に環は完全飽和であり；および、X²が—O—である場合、X¹は—C(R^{1 4})—であると共に環は完全飽和であり；

(d) Y²がNである場合、複素環Gは炭素原子を介してY²に結合しており；ならびに

(f) R^{1 5}がヒドロキシである場合、R^{1 a}は炭素原子を介して、式1もしくは式1A中のAに結合している)

そのN—オキシドおよび塩、これらを含む農学的組成物、ならびに、殺菌・殺カビ剤としてのこれらの使用に関する。

【0013】

より具体的には、本発明は、式1もしくは式1Aの化合物（すべての立体異性体を含む）、そのN—オキシドまたは塩に関する。

【0014】

本発明はまた、(a)本発明の化合物（すなわち、殺菌・殺カビ的に有効な量で）；ならびに、(b)界面活性剤、固体希釈剤および液体希釈剤からなる群から選択される少なくとも1種の追加の成分を含む殺菌・殺カビ組成物に関する。

【0015】

本発明はまた、(a)本発明の化合物；および、(b)少なくとも1種の他の殺菌・殺カビ剤（例えば、異なる作用部位を有する少なくとも1種の他の殺菌・殺カビ剤）を含む殺菌・殺カビ組成物に関する。

【0016】

本発明は、植物もしくはその一部分または植物種子に、殺菌・殺カビ的に有効な量の本発明の化合物（例えば、本明細書に記載の組成物として）を適用するステップを含む、真菌性植物病原体によって引き起こされる植物病害を防除する方法にさらに関する。

【発明を実施するための形態】

【0017】

本明細書において用いられるところ、用語「含む (comprises)」、「含んでいる (comprising)」、「含む (includes)」、「含んでいる (including)」、「有する (has)」、「有している (having)」、「含有する (contains)」、「含有している (containing)」、「により特徴付けられる」、または、これらのいずれかの他の変形は、明示的に示されているいずれかの限定を条件として、非排他的な包含をカバーすることが意図されている。例えば、要素の一覧を含む組成物、混合物、プロセスあるいは方法は、必ずしもこれらの要素にのみ限定されることはなく、明示的に列挙されていないか、または、このような組成物、混合物、プロセスあるいは方法に固有である他の要素が包含されていてもよい。

【0018】

「からなる (consisting of)」という移行句は、特定されていない要素、ステップまたは成分のすべてを除外する。特許請求の範囲中にある場合、このような句は、特許請求の範囲を、通常これに関連する不純物類を除いて、言及されていない物質の包含を限定するであろう。「からなる (consisting of)」という句が、プリアンブルの直後ではなく特許請求の範囲の本文の一文節中にある場合、これは、その文節中に規定されている要素のみを限定し；他の要素は、特許請求の範囲からは、全体としては除外されない。

【0019】

「基本的に～からなる (consisting essentially of)」という移行句は、文字通り開示されているものに追加して、材料、ステップ、機構、成分あるいは要素を包含する、組成物もしくは方法を定義するために用いられているが、ただし、これらの追加の材料、ステップ、機構、成分あるいは要素は、特許請求された発明の基本的、かつ、新規な特徴に著しく影響しない。「基本的にからなる (consisting essentially of)」という用語は、「を含んでいる (comprising)」と、「からなる (consisting of)」との間の中間点を構成する。

10

【0020】

出願人らが、「を含んでいる (comprising)」などのオープンエンド形式の用語で発明またはその一部分を定義している場合、その記載は（他に明記されていない限りにおいて）、「基本的にからなる (consisting essentially of)」または「からなる (consisting of)」という用語を用いてこのような発明を記載しているとも解釈されるべきであると、直ちに理解されるべきである。

20

【0021】

さらに、相反する記載が明白にされない限り、「あるいは、または、もしくは」は包含的論理和を指し、そして排他的論理和を指さない。例えば、条件Aまたは条件Bは、以下のいずれか1つによって満たされる：Aが真であり（または存在する）、そしてBが偽である（または存在しない）；Aが偽であり（または存在しない）、そしてBが真である（または存在する）；ならびに、AおよびBの両方が真である（または存在する）。

【0022】

また、本発明の要素または成分に先行する不定冠詞「a」および「an」は、要素または成分の事例（すなわち、存在）の数に関して非制限的であることが意図される。従って、「a」または「an」は、1つまたは少なくとも1つ、を含むと読解されるべきであり、要素または成分の単数形の語形は、その数が明らかに単数を意味しない限りにおいては複数をも包含する。

30

【0023】

本開示および特許請求の範囲において言及されるとおり、「植物」とは、幼植物（例えば、苗木に成長する発芽種子）および成熟した生殖成長期（例えば、花および種子をもたらす植物）を含むすべてのライフステージにおける、植物界の構成員、特に種子植物（種子植物目 (Spermatopsida)）を含む。植物の一部分は、典型的には成長培地（例えば、土壌）の表面下で成長する、根、塊茎、鱗茎および球茎などの屈地性の構成員、ならびに、成長培地上で成長する、群葉（茎および葉を含む）、花、果実および種子などの構成員をも含む。

40

【0024】

本明細書において言及されるところ、単独でまたは複合語で用いられる「苗木」という用語は、種子の胚芽から成長する幼植物、または、塊茎、球茎もしくは根茎などの栄養体繁殖器官の芽体を意味する。

【0025】

上記の記載において、単独で、または、「アルキルチオ」もしくは「ハロアルキル」などの複合語で用いられる「アルキル」という用語は、メチル、エチル、n-プロピル、i

50

ープロピル、ならびに、異なるブチル、ペンチルおよびヘキシル異性体などの直鎖および分岐鎖アルキルを含む。「アルケニル」は、エテニル、1-プロペニル、2-プロペニル、ならびに、異なるブテニル、ペンテニルおよびヘキセニル異性体などの直鎖および分岐鎖アルケンを含む。「アルケニル」はまた、1, 2-プロパジエニルおよび2, 4-ヘキサジエニルなどのポリエンを含む。「アルキニル」は、エチニル、1-プロピニル、2-プロピニル、ならびに、異なるブチニル、ペンチニルおよびヘキシニル異性体などの直鎖および分岐鎖アルキンを含む。また、「アルキニル」は、2, 5-ヘキサジイニルなどの、複数の三重結合から構成される部分を含んでいることが可能である。「アルキレン」は、直鎖もしくは分岐鎖アルカンジイルを示す。「アルキレン」の例としては、 CH_2 、 CH_2CH_2 、 $\text{CH}(\text{CH}_3)$ 、 $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2$ 、 $\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)$ 、および異なるブチレン異性体が挙げられる。「アルケニレン」は、1つのオレフィン結合を含有する直鎖もしくは分岐鎖アルケンジイルを示す。「アルケニレン」の例としては、 $\text{CH}=\text{CH}$ 、 $\text{CH}_2\text{CH}=\text{CH}$ および $\text{CH}=\text{C}(\text{CH}_3)$ が挙げられる。

【0026】

「アルコキシ」としては、例えば、メトキシ、エトキシ、n-プロピルオキシ、i-プロピルオキシ、ならびに、異なるブトキシ、ペントキシおよびヘキシルオキシ異性体が挙げられる。「アルケニルオキシ」は、酸素原子を介して結合およびリンクされている直鎖および分岐鎖アルケニルを含む。「アルケニルオキシ」の例としては、 $\text{H}_2\text{C}=\text{CHCH}_2\text{O}$ 、 $\text{CH}_3\text{CH}=\text{CHCH}_2\text{O}$ および $(\text{CH}_3)_2\text{C}=\text{CHCH}_2\text{O}$ が挙げられる。「アルキニルオキシ」は、直鎖および分岐鎖アルキニルオキシ部分を含む。「アルキニルオキシ」の例としては、 $\text{HC}\equiv\text{CCH}_2\text{O}$ 、 $\text{CH}_3\text{C}\equiv\text{CCH}_2\text{O}$ および $\text{CH}_3\text{C}\equiv\text{CCH}_2\text{CH}_2\text{O}$ が挙げられる。「アルキルチオ」という用語は、メチルチオ、エチルチオ、ならびに、異なるプロピルチオ、ブチルチオ、ペンチルチオおよびヘキシルチオ異性体などの直鎖および分岐鎖アルキルチオ部分を含む。「アルキルスルフィニル」は、アルキルスルフィニル基の両方のエナンチオマーを含む。「アルキルスルフィニル」の例としては、 $\text{CH}_3\text{S}(=\text{O})$ 、 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{S}(=\text{O})$ 、 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{S}(=\text{O})$ 、 $(\text{CH}_3)_2\text{CHS}(=\text{O})$ 、ならびに、異なるブチルスルフィニル、ペンチルスルフィニルおよびヘキシルスルフィニル異性体が挙げられる。「アルキルスルホニル」の例としては、 $\text{CH}_3\text{S}(=\text{O})_2$ 、 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{S}(=\text{O})_2$ 、 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{S}(=\text{O})_2$ 、 $(\text{CH}_3)_2\text{CHS}(=\text{O})_2$ 、ならびに、異なるブチルスルホニル、ペンチルスルホニルおよびヘキシルスルホニル異性体が挙げられる。「アルキルアミノ」は、直鎖もしくは分岐鎖アルキル基で置換されたNHラジカルを含む。「アルキルアミノ」の例としては、 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{NH}$ 、 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{NH}$ 、および $(\text{CH}_3)_2\text{CHCH}_2\text{NH}$ が挙げられる。「ジアルキルアミノ」の例としては、 $(\text{CH}_3)_2\text{N}$ 、 $(\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2)_2\text{N}$ および $\text{CH}_3\text{CH}_2(\text{CH}_3)\text{N}$ が挙げられる。

【0027】

「アルキルカルボニル」は、 $\text{C}(=\text{O})$ 部分に結合した直鎖もしくは分岐鎖アルキル基を示す。「アルキルカルボニル」の例としては、 $\text{CH}_3\text{C}(=\text{O})$ 、 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{C}(=\text{O})$ および $(\text{CH}_3)_2\text{CHC}(=\text{O})$ が挙げられる。「アルコキシカルボニル」の例としては、 $\text{CH}_3\text{OC}(=\text{O})$ 、 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OC}(=\text{O})$ 、 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OC}(=\text{O})$ 、 $(\text{CH}_3)_2\text{CHOC}(=\text{O})$ 、ならびに、異なるブトキシ-およびペンタオキシカルボニル異性体が挙げられる。「アルキルアミノカルボニル」の例としては、 $\text{CH}_3\text{NHC}(=\text{O})$ 、 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{NHC}(=\text{O})$ 、 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{NHC}(=\text{O})$ 、 $(\text{CH}_3)_2\text{CHNHC}(=\text{O})$ 、ならびに、異なるブチルアミノ-およびペンチルアミノカルボニル異性体が挙げられる。「ジアルキルアミノカルボニル」の例としては、 $(\text{CH}_3)_2\text{NC}(=\text{O})$ 、 $(\text{CH}_3\text{CH}_2)_2\text{NC}(=\text{O})$ 、 $\text{CH}_3\text{CH}_2(\text{CH}_3)\text{NC}(=\text{O})$ 、 $(\text{CH}_3)_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{NC}(=\text{O})$ および $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2(\text{CH}_3)\text{NC}(=\text{O})$ が挙げられる。

【0028】

「アルコキシアルキル」は、アルキルでのアルコキシ置換を示す。「アルコキシアルキ

10

20

30

40

50

ル」の例としては、 CH_3OCH_2 、 $\text{CH}_3\text{OCH}_2\text{CH}_2$ 、 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OCH}_2$ 、 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OCH}_2$ および $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{CH}_2$ が挙げられる。「アルコキシアルコキシ」は、他のアルコキシ部分でのアルコキシ置換を示す。「アルコキシアルコキシアルキル」は、アルキルでのアルコキシアルコキシ置換を示す。「アルコキシアルコキシアルキル」の例としては、 $\text{CH}_3\text{OCH}_2\text{OCH}_2\text{CH}_3\text{OCH}_2\text{OCH}_2\text{CH}_2$ および $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{OCH}_2$ が挙げられる。

【0029】

「アルキルチオアルキル」は、アルキルでのアルキルチオ置換を示す。「アルキルチオアルキル」の例としては、 CH_3SCH_2 、 $\text{CH}_3\text{SCH}_2\text{CH}_2$ 、 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{SCH}_2$ 、 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{SCH}_2$ および $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{SCH}_2\text{CH}_2$ が挙げられ；「アルキルスルフィニルアルキル」および「アルキルスルホニルアルキル」は、それぞれ、対応するスルホキシドおよびスルホンを含む。「アルキルカルボニルチオ」は、硫黄原子を介して結合およびリンクされている直鎖もしくは分岐鎖アルキルカルボニルを示す。「アルキルカルボニルチオ」の例としては、 $\text{CH}_3\text{C}(=\text{O})\text{S}$ 、 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{C}(=\text{O})\text{S}$ および $(\text{CH}_3)_2\text{CHC}(=\text{O})\text{S}$ が挙げられる。

10

【0030】

「アルキルアミノアルキル」は、アルキルでのアルキルアミノ置換を示す。「アルキルアミノアルキル」の例としては、 CH_3NHCH_2 、 $\text{CH}_3\text{NHCH}_2\text{CH}_2$ 、 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{NHCH}_2$ 、 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{NHCH}_2$ および $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{NHCH}_2\text{CH}_2$ が挙げられる。「ジアルキルアミノアルキル」の例としては、 $(\text{CH}_3)_2\text{CH}_2\text{NCH}_2$ 、 $(\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2)_2\text{NCH}_2$ および $\text{CH}_3\text{CH}_2(\text{CH}_3)\text{NCH}_2\text{CH}_2$ が挙げられる。

20

【0031】

「アルキルカルボニルアミノ」という用語は、 $\text{C}(=\text{O})\text{NH}$ 部分に結合したアルキルを示す。「アルキルカルボニルアミノ」の例としては、 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{C}(=\text{O})\text{NH}$ および $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{C}(=\text{O})\text{NH}$ が挙げられる。「アルキルスルホニルアミノ」は、アルキルスルホニルで置換された NH ラジカルを示す。「アルキルスルホニルアミノ」の例としては、 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{S}(=\text{O})_2\text{NH}$ および $(\text{CH}_3)_2\text{CHS}(=\text{O})_2\text{NH}$ が挙げられる。

【0032】

30

「アルキルカルボニルオキシ」という用語は、 $\text{C}(=\text{O})\text{O}$ 部分に結合した直鎖もしくは分岐鎖アルキルを示す。「アルキルカルボニルオキシ」の例としては、 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{C}(=\text{O})\text{O}$ および $(\text{CH}_3)_2\text{CHC}(=\text{O})\text{O}$ が挙げられる。「アルキルカルボニルアルコキシ」という用語は、アルコキシ部分に結合したアルキルカルボニルを示す。「アルキルカルボニルアルコキシ」の例としては、 $\text{CH}_3\text{C}(=\text{O})\text{CH}_2\text{CH}_2\text{O}$ および $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{C}(=\text{O})\text{CH}_2\text{O}$ が挙げられる。「アルコキシカルボニルオキシ」の例としては、 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OC}(=\text{O})\text{O}$ および $(\text{CH}_3)_2\text{CHOC}(=\text{O})\text{O}$ が挙げられる。「アルコキシカルボニルアルキル」は直鎖もしくは分岐鎖アルキルでのアルコキシカルボニル置換を示す。「アルコキシカルボニルアルキル」の例としては、 $\text{CH}_3\text{OC}(=\text{O})\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)$ 、 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OC}(=\text{O})\text{CH}_2\text{CH}_2$ および $(\text{CH}_3)_2\text{CHOC}(=\text{O})\text{CH}_2$ が挙げられる。

40

【0033】

「アルキルアミノカルボニルオキシ」という用語は、酸素原子を介して結合およびリンクされている直鎖もしくは分岐鎖アルキルアミノカルボニルを示す。「アルキルアミノカルボニルオキシ」の例としては、 $(\text{CH}_3)_2\text{CHCH}_2\text{NHC}(=\text{O})\text{O}$ および $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{NHC}(=\text{O})\text{O}$ が挙げられる。「ジアルキルアミノカルボニルオキシ」の例としては、 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2(\text{CH}_3)\text{NC}(=\text{O})\text{O}$ および $(\text{CH}_3)_2\text{NC}(=\text{O})\text{O}$ が挙げられる。

【0034】

「シクロアルキル」としては、例えば、シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチ

50

ルおよびシクロヘキシルが挙げられる。「シクロアルキルアルキル」という用語は、アルキル部分でのシクロアルキル置換を示す。「シクロアルキルアルキル」の例としては、直鎖もしくは分岐鎖アルキル基に結合したシクロプロピルメチル、シクロペンチルエチルおよび他のシクロアルキル部分が挙げられる。「アルキルシクロアルキル」という用語は、シクロアルキル部分でのアルキル置換を示し、例えば、エチルシクロプロピル、*i*-プロピルシクロブチル、メチルシクロペンチルおよびメチルシクロヘキシルが挙げられる。「シクロアルケニル」は、シクロペンテニルおよびシクロヘキセニルなどの基、ならびに、1, 3-または1, 4-シクロヘキサジエニルなどの2つ以上の二重結合を有する基を含む。

【0035】

「シクロアルコキシ」という用語は、シクロペンチルオキシおよびシクロヘキシルオキシなどの酸素原子を介して結合およびリンクされているシクロアルキルを示す。「シクロアルキルチオ」という用語は、シクロプロピルチオおよびシクロペンチルチオなどの硫黄原子を介して結合およびリンクされているシクロアルキルを示し；「シクロアルキルスルホニル」は、対応するスルホンを含む。「シクロアルコキシアルキル」という用語は、アルキル部分でのシクロアルコキシ置換を示す。「シクロアルコキシアルキル」の例としては、直鎖もしくは分岐鎖アルキル部分に結合したシクロプロピルオキシメチル、シクロペンチルオキシエチルおよび他のシクロアルコキシ基が挙げられる。「シクロアルキルアルコキシ」の例としては、直鎖もしくは分岐鎖アルコキシ部分に結合したシクロプロピルメトキシ、シクロペンチルエトキシおよび他のシクロアルキル基が挙げられる。

【0036】

「アルキルシクロアルキルアルキル」は、アルキルシクロアルキルで置換されたアルキル基を示す。「アルキルシクロアルキルアルキル」の例としては、メチルシクロヘキシルメチルおよびエチルシクロプロピルメチルが挙げられる。「シクロアルキルシクロアルキル」という用語は、他のシクロアルキル環でのシクロアルキル置換を示し、ここで、シクロアルキル環の各々は、独立して、3~7個の炭素原子環員を有する。シクロアルキルシクロアルキルの例としては、シクロプロピルシクロプロピル（1, 1'-ビスシクロプロピル-1-イル、1, 1'-ビスシクロプロピル-2-イルなど）、シクロヘキシルシクロペンチル（4-シクロペンチルシクロヘキシルなど）およびシクロヘキシルシクロヘキシル（1, 1'-ビスシクロヘキシル-1-イルなど）、ならびに、異なるシス-およびトランス-シクロアルキルシクロアルキル異性体（（1R, 2S）-1, 1'-ビスシクロプロピル-2-イルおよび（1R, 2R）-1, 1'-ビスシクロプロピル-2-イルなど）が挙げられる。

【0037】

「シクロアルキルアミノ」は、シクロアルキルで置換されたNHラジカルを示す。「シクロアルキルアミノ」の例としては、シクロプロピルアミノおよびシクロヘキシルアミノが挙げられる。「シクロアルキルアミノアルキル」という用語は、アルキル基でのシクロアルキルアミノ置換を示す。「シクロアルキルアミノアルキル」の例としては、直鎖もしくは分岐鎖アルキル基に結合したシクロプロピルアミノメチル、シクロペンチルアミノエチル、および他のシクロアルキルアミノ部分が挙げられる。

【0038】

「シクロアルキルカルボニル」は、例えば、シクロプロピルカルボニルおよびシクロペンチルカルボニルを含むC(=O)基に結合したシクロアルキルを示す。「シクロアルコキシカルボニル」という用語は、例えば、シクロプロピルオキシカルボニルおよびシクロペンチルオキシカルボニルといった、C(=O)基に結合したシクロアルコキシを意味する。「シクロアルキルアミノカルボニル」は、例えば、シクロペンチルアミノカルボニルおよびシクロヘキシルアミノカルボニルといった、C(=O)基に結合したシクロアルキルアミノを示す。「シクロアルキルアルコキシカルボニル」は、C(=O)基に結合したシクロアルキルアルコキシを示す。「シクロアルキルアルコキシカルボニル」の例として

は、シクロプロピルエトキシカルボニルおよびシクロペンチルメトキシカルボニルが挙げられる。「シクロアルキルカルボニルオキシ」は、酸素原子を介して結合およびリンクされているシクロアルキルカルボニルを示す。「シクロアルキルカルボニルオキシ」の例としては、シクロヘキシルカルボニルオキシおよびシクロペンチルカルボニルオキシが挙げられる。

【0039】

「ハロゲン」という用語は、単独で、もしくは、「ハロアルキル」などの複合語で、または、「ハロゲンで置換されたアルキル」などの記載において用いられる場合、フッ素、塩素、臭素またはヨウ素を含む。さらに、「ハロアルキル」などの複合語で用いられる場合、または、「ハロゲンで置換されたアルキル」などの記載において用いられる場合、前記アルキルは、同一であっても異なってもよいハロゲン原子で部分的にもしくは完全に置換されていてもよい。「ハロアルキル」または「ハロゲンで置換されたアルキル」の例としては、 F_3C 、 $ClCH_2$ 、 CF_3CH_2 および CF_3CCl_2 が挙げられる。「ハロアルケニル」、「ハロアルキニル」「ハロアルコキシ」、「ハロアルキルチオ」、「ハロアルキルアミノ」、「ハロアルキルスルフィニル」、「ハロアルキルスルホニル」、「ハロシクロアルキル」等という用語は、用語「ハロアルキル」と同様に定義される。「ハロアルケニル」の例としては、 $Cl_2C=CHCH_2$ および $CF_3CH_2CH=CHCH_2$ が挙げられる。「ハロアルキニル」の例としては、 $HC\equiv CCHCl$ 、 $CF_3C\equiv C$ 、 $CCl_3C\equiv C$ および $FCH_2C\equiv CCH_2$ が挙げられる。「ハロアルコキシ」の例としては、 CF_3O 、 CCl_3CH_2O 、 $F_2CHCH_2CH_2O$ および CF_3CH_2O が挙げられる。「ハロアルキルチオ」の例としては、 CCl_3S 、 CF_3S 、 CCl_3CH_2S および $ClCH_2CH_2CH_2S$ が挙げられる。「ハロアルキルアミノ」の例としては、 $CF_3(CH_3)CHNH$ 、 $(CF_3)_2CHNH$ および CH_2ClCH_2NH が挙げられる。「ハロアルキルスルフィニル」の例としては、 $CF_3S(=O)$ 、 $CCl_3S(=O)$ 、 $CF_3CH_2S(=O)$ および $CF_3CF_2S(=O)$ が挙げられる。「ハロアルキルスルホニル」の例としては、 $CF_3S(=O)_2$ 、 $CCl_3S(=O)_2$ 、 $CF_3CH_2S(=O)_2$ および $CF_3CF_2S(=O)_2$ が挙げられる。「ハロシクロアルキル」の例としては、2-クロロシクロプロピル、2-フルオロシクロブチル、3-ブロモシクロペンチルおよび4-クロロシクロヘキシルが挙げられる。「ハロジアルキル」という用語は、単独で、もしくは、「ハロジアルキルアミノ」などの複合語で、2個のアルキル基の少なくとも1個が少なくとも1個のハロゲン原子で置換されていることを意味し、独立して、ハロゲン化アルキル基の各々は、同一であっても異なってもよいハロゲン原子で部分的にまたは完全に置換されていてもよい。「ハロジアルキルアミノ」の例としては、 $(BrCH_2CH_2)_2N$ および $BrCH_2CH_2(ClCH_2CH_2)N$ が挙げられる。

【0040】

「ヒドロキシアルキル」は、1個のヒドロキシ基で置換されたアルキル基を示す。「ヒドロキシアルキル」の例としては、 $HOCH_2CH_2$ 、 $CH_3CH_2(OH)CH$ および $HOCH_2CH_2CH_2CH_2$ が挙げられる。

【0041】

「トリアルキルシリル」は、トリメチルシリル、トリエチルシリルおよびt-ブチルジメチルシリルなどのケイ素原子を介して結合およびリンクされている3分岐および／または直鎖アルキルラジカルを含む。

【0042】

置換基中の炭素原子の総数は接頭辞「 $C_i \sim C_j$ 」によって示され、ここで、 i および j は1～14の数字である。例えば、 $C_1 \sim C_4$ アルキルスルホニルはメチルスルホニル～ブチルスルホニルを示し； C_2 アルコキシアルキルは CH_3OCH_2- を示し； C_3 アルコキシアルキルは、例えば、 $CH_3CH(OCH_3)-$ 、 $CH_3OCH_2CH_2-$ または $CH_3CH_2OCH_2-$ を示し；ならびに、 C_4 アルコキシアルキルは、合計で4個の炭素原子を含有するアルコキシ基で置換されたアルキル基の種々の異性体を示し、その例

としては、 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OCH}_2-$ 、および、 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{CH}_2-$ が挙げられる。

【0043】

「非置換である」という用語は、環もしくは環系などの基との関連において、その基が、式1もしくは式1Aの残りに対する1つ以上の結合以外の如何なる置換基も有していないことを意味する。「任意により置換されている」という用語は、置換基の数がゼロであることが可能であることを意味する。他に示されていない限りにおいて、任意により置換されている基は、利用可能な炭素原子もしくは窒素原子のいずれかにおいて水素原子を非水素置換基で置き換えることにより受け入れ可能である限り多くの任意の置換基で置換されていてもよい。通例、任意の置換基の数（存在する場合）は、1～4の範囲である。本明細書において用いられるところ、「任意により置換されている」という用語は、句「置換または非置換である」、または、用語「（非）置換である」と同義的に用いられる。基（例えば、J）が水素であることが可能である置換基（例えば R^6 ）を含有している場合であって、この置換基が水素である場合、これは前記基が非置換であることと等しいと認識される。

10

【0044】

任意の置換基の数は、表記上の限定により制限されていてもよい。例えば、「 R^6 から独立して選択される3個以下の置換基で任意により置換されている」という句は、0、1、2または3個の置換基が存在していることが可能であることを意味する（潜在的な結合点の数により許容されれば）。同様に、「 R^6 から独立して選択される5個以下の置換基で任意により置換されている」という句は、利用可能な結合点の数により許容されれば、0、1、2、3、4または5個の置換基が存在していることが可能であることを意味する。置換基の数について特定されている範囲（例えば、 x は明細表3において0～5の整数である）が環上の置換基で利用可能な位置の数（例えば、明細表3におけるJ-1の $(\text{R}^6)_x$ では2つの位置が利用可能）を超えている場合、範囲の実際の上限は利用可能な位置の数であると認識される。

20

【0045】

化合物が、前記置換基の数が様々であることが可能であることを示す下付文字を有する置換基（例えば、 x が0～5である、明細表3における $(\text{R}^6)_x$ ）で置換されている場合、前記置換基は、他に示されていない限りにおいて、定義された置換基の群から独立して選択される。任意により、ある位置に様々な基が結合されると示されている場合（例えば、 p が0であってもよい、明細表6における $(\text{R}^{6a})_p$ ）、これら様々な基の定義において言及されていない場合であっても、水素がその位置にあってもよい。

30

【0046】

「任意により置換されている」という用語は、可能な置換基の数またはアイデンティティを特定することなく（例えば、Gにおける環ならびに R^2 および R^3 の定義において）、非置換であるか、または、非置換類似体が有する生物学的活性を消失させない少なくとも1個の非水素置換基を有する基を指す。

【0047】

本開示における置換基の命名では、当業者への化学構造の正確な伝達を簡潔とする認知されている用語法が利用されている。簡潔さのために、部位識別文字は省略されている場合がある。

40

【0048】

発明の概要において記載されているとおり、 Y^1 は、 $-\text{N}=\text{C}(\text{R}^{14})-$ 、 $-\text{C}(\text{R}^{14})=\text{N}-$ 、または、一方の鎖構成員が $-\text{C}(\text{R}^{14})_2-$ であると共に第2の鎖構成員が $-\text{C}(\text{R}^{14})_2-$ 、 $-\text{O}-$ 、 $-\text{S}-$ 、 $-\text{N}(\text{R}^{23})-$ および $-\text{C}(=\text{O})-$ から選択される、2つの鎖構成員から構成される環形成鎖である。 Y^1 が、 $-\text{N}=\text{C}(\text{R}^{14})-$ または $-\text{C}(\text{R}^{14})=\text{N}-$ である場合、左に突出する結合は式1の窒素原子（すなわちN-E）に結合していると共に、右に突出する結合は式1中の Y^2 に結合している。 Y^1 が環形成鎖である場合、一方の鎖構成員は $-\text{C}(\text{R}^{14})_2-$ であると共に、他の構

50

成要素は、 $-C(R^{14})_2-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-N(R^{23})-$ および $-C(=O)-$ から選択される。 Y^1 の両方の構成要素は $-C(R^{14})_2-$ であり得る。第2の鎖構成員が $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-N(R^{23})-$ および $-C(=O)-$ から選択される場合、得られる環形成鎖は、任意の順番で式1の窒素原子（すなわち $N-E$ ）および式1中の Y^2 に結合していてもよい。環を形成している鎖 Y^1 は、例えば、 $-C(R^{14})_2C(R^{14})_2-$ 、 $-C(R^{14})_2O-$ 、 $-NR^{23}(CR^{14})_2-$ または $-S(CR^{14})_2-$ であり得、ここで、 R^{14} および R^{23} は、発明の概要において定義されているとおりであり、式中、左に突出する結合は、式1の窒素（すなわち $N-E$ ）または式1の Y^2 の一方に結合している。

【0049】

発明の概要において記載されているとおり、 Y^3 は、 $-N=C(R^{14})-$ 、 $-C(R^{14})=N-$ 、または、一方の鎖構成員が $-C(R^{14})_2-$ であると共に第2の鎖構成員が $-C(R^{14})_2-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-N(R^{23})-$ および $-C(=O)-$ から選択される、2つの鎖構成員から構成される環形成鎖である。 Y^3 が、 $-N=C(R^{14})-$ または $-C(R^{14})=N-$ である場合、左に突出する結合は式1の窒素原子（すなわち $N-E$ ）に結合していると共に、右に突出する結合は式1中の Y^2 に結合している。 Y^3 の構成要素の両方が $-C(R^{14})_2-$ であり得る。第2の鎖構成員が、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-N(R^{23})-$ および $-C(=O)-$ から選択される場合、得られる環形成鎖は、任意の順番で式1の窒素原子（すなわち $N-E$ ）および式1における Y^2 に結合していてもよい。環を形成している鎖 Y^3 は、例えば、 $-C(R^{14})_2C(R^{14})_2-$ 、 $-C(R^{14})_2O-$ 、 $-NR^{23}(CR^{14})_2-$ または $-S(CR^{14})_2-$ であり得、ここで、 R^{14} および R^{23} は、発明の概要に定義されているとおりであり、式中、左に突出する結合は、式1の窒素（すなわち $N-E$ ）または式1の Y^2 の一方に結合している。

【0050】

発明の概要において記載されているとおり、 Y^3 は、 $-C(R^{14})_2N=C(R^{14})-$ 、 $-C(R^{14})_2C(R^{14})=N-$ 、 $-N=C(R^{14})C(R^{14})_2-$ 、 $-C(R^{14})=NC(R^{14})_2-$ 、または、2つの鎖構成員が $-C(R^{14})_2-$ であると共に第3の鎖構成員が $-C(R^{14})_2-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-N(R^{23})-$ および $-C(=O)-$ から選択される、3つの鎖構成員から構成される環形成鎖である。 Y^3 が、 $-C(R^{14})_2N=C(R^{14})-$ 、 $-C(R^{14})_2C(R^{14})=N-$ 、 $-N=C(R^{14})C(R^{14})_2-$ または $-C(R^{14})=NC(R^{14})_2-$ である場合、左に突出する結合は式1の窒素原子（すなわち $N-E$ ）に結合していると共に、右に突出する結合は式1中の Y^2 に結合している。 Y^3 が、2つの鎖構成員が $-C(R^{14})_2-$ であると共に第3の鎖構成員が $-C(R^{14})_2-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-N(R^{23})-$ および $-C(=O)-$ から選択される、3つの鎖構成員から構成される環形成鎖である場合、得られる環形成鎖は、いずれかの順番で式1の窒素（すなわち $N-E$ ）および Y^2 に結合していてもよい。例えば、 Y^3 は、 $-C(R^{14})_2OC(R^{14})_2-$ 、 $-SC(R^{14})_2C(R^{14})_2-$ 、または $-N(R^{23})C(R^{14})_2C(R^{14})_2-$ であり得、式中、左に突出する結合は、式1の窒素（すなわち $N-E$ ）または式1の Y^2 の一方に結合している。 Y^3 の3つの鎖構成員のすべてが $-C(R^{14})_2-$ であり得ることに注目すべきである。

【0051】

発明の概要において記載されているとおり、 X^1 および X^2 は、各々、独立して、 $-C(R^{14})-$ および $-O-$ から選択される環員である。 X^1 または X^2 は同時に酸素であることは可能ではないことに注目すべきである。また、 X^1 もしくは X^2 の一方が酸素である場合、 X^1 もしくは X^2 の他方は、 $-C(R^{14})-$ でなければならない、 X^1 および X^2 を含む二環系は完全飽和であることに注目されたい。さらに、 X^1 および X^2 の両方が同時に $-C(R^{14})-$ であってもよいことに注目すべきである。

【0052】

10

20

30

40

50

環形成鎖 Y^1 または Y^3 の構成要素として $-C(=O)-$ が選択される場合、その位置は、式 1 の窒素（すなわち $N-E$ ）に隣接してはいけないうことに注目すべきである。環を形成している構成要素 Y^1 および Y^3 は、式 1 の環員 Y^2 と組み合わせられて、以下の明細表 1 A および明細表 1 B に示されているものなどの 6 員もしくは 7 員環を形成していることが可能である。 Y^1 が 2 つの鎖構成員から構成される環形成鎖であり、および、 Y^3 が 2 つもしくは 3 つの鎖構成員から構成される環形成鎖である場合、 Y^1 または Y^3 の鎖構成員の少なくとも一方は $C(R^{14})_2$ 以外であることに注目すべきである。例えば、 Y^1 が $-C(R^{14})_2-C(R^{14})_2-$ である場合、 Y^3 の少なくとも 1 つの構成要素は、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-N(R^{23})-$ および $-C(=O)-$ から選択されなければならない。同様に、 Y^3 が $-C(R^{14})_2-C(R^{14})_2-C(R^{14})_2-$ である場合、 Y^1 の少なくとも 1 つの環員は、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-N(R^{23})-$ および $-C(=O)-$ から選択されなければならない。

10

【0053】

他に示されていない限りにおいて、式 1 もしくは式 1 A の構成成分としての「環」もしくは「環系」（例えば、置換基 J および Q ）は、炭素環式または複素環式である。「環系」という用語は、2 つ以上の結合している環を示す。「スピロ環系」という用語は、単一の原子で結合している 2 つの環（従って、環は単一の原子を共有している）からなる環系を示す。スピロ環系である J 部分の図例は、以下の明細表 3 A に示されている $J-29-27$ である。「二環系」という用語は、2 個以上の共通の原子を共有する 2 つの環からなる環系を示す。「縮合二環系」において、共通の原子は隣接しており、従って、これらの環は 2 個の隣接した原子とこれらを結合している結合とを共有している。「架橋二環系」において、共通の原子は隣接していない（すなわち、橋頭原子間に結合はない）。「架橋二環系」は、1 つ以上の原子の断片が環の隣接していない環員に結合されることにより形成されることが可能である。

20

【0054】

環、二環系またはスピロ環系は 2 つ以上の環を含有する拡大された環系の一部であることが可能であり、ここで、環、二環系またはスピロ環系上の置換基は一緒になって、拡大された環系における他の環と二環式および／またはスピロ環式の関係にあってもよい追加の環を形成している。例えば、以下の明細表 3 A に示されている J 部分 $J-29-30$ は、 $-ZQ$ （式中、 Z は $-CH_2-$ 基であり、および、 Q は、ジヒドロイソキサゾリン環上の他の R^6 置換基（ $-CH_2-$ ）と一緒に環系中の追加の 6 員環を形成する R^{6a} 置換基（ $-CH_2-$ ）で置換されているフェニル環である）である 1 個の R^6 置換基で置換されているジヒドロイソキサゾリン環から構成されている。

30

【0055】

「環員」という用語は、環もしくは環系の主鎖を形成する、原子（例えば、 C 、 O 、 N または S ）または他の部分（例えば、 $C(=O)$ 、 $C(=S)$ 、 SiR^9R^{10} または $S(=O)_s(=NR^{11})_f$ ）を指す。「芳香族」という用語は、環原子の各々は基本的に同一の面内にあり、環面に垂直な p -軌道を有しており、および、ヒュッケルの法則に従うよう $(4n+2)\pi$ 個の電子（ n は正の整数である）が環に付随していることを示している。

40

【0056】

「炭素環」という用語は、環主鎖を形成している原子が炭素のみから選択されている環を示す。他に示されていない限りにおいて、炭素環は、飽和、部分飽和または完全不飽和環であることが可能である。完全不飽和炭素環がヒュッケルの法則を満たす場合、前記環は「芳香族環」とも呼ばれる。「飽和炭素環式」は、単結合によって互いに結合された炭素原子から構成される主鎖を有する環を指し；他に規定されていない限りにおいて、残りの炭素原子価は水素原子によって占有されている。

【0057】

本明細書において用いられるところ、「部分飽和環」または「部分飽和複素環」という用語は、例えば 4, 5-ジヒドロ-1H-ピラゾール-1-イル環といった、不飽和の環

50

原子および1つ以上の二重結合を含有しているが芳香族ではない環を指す。

【0058】

「複素環 (heterocyclic ring)」もしくは「複素環 (heterocycle)」といった用語は、環主鎖を形成している原子の少なくとも1つが炭素以外である環を示す。他に示されていない限りにおいて、複素環は、飽和、部分飽和もしくは完全不飽和環であることが可能である。完全不飽和複素環がヒュッケルの法則を満たす場合、前記環は「芳香族複素環 (heteroaromatic ring)」もしくは芳香族複素環 (aromatic heterocyclic ring) と呼ばれる。「飽和複素環」は、環員間に単結合のみを含有する複素環を指す。

【0059】

他に示されていない限りにおいて、複素環および環系は、いずれかの利用可能な炭素原子もしくは窒素原子を介して、前記炭素原子もしくは窒素原子上の水素を置き換えることにより式1もしくは式1Aの残りに結合している。

【0060】

式1A、および、本記載に示されている他の環（例えば、明細表3におけるJ-44およびJ-45）における点線は、結合が単結合または二重結合であることが可能であることを示している。

【0061】

窒素原子と、式1、式1Aおよび本記載に示されている他の環においてA¹により表されている原子との間の波状の結合は、単結合であること、および、隣接する二重結合（すなわち、窒素原子を置換基R²およびR³に結合する結合）に関する幾何学的配置がシス（E）、トランス（Z）、または、これらの混合物のいずれかであることを示す。

【0062】

上記のとおり、Jは、（とりわけ）5員～7員環、8員～11員二環系または7員～11員スピロ環系であり、各環もしくは環系は、2個以下のO、2個以下のS、4個以下のNおよび2個以下のSi原子から独立して選択される4個以下のヘテロ原子ならびに炭素原子から選択される環員を含有しており、ここで、3個以下の炭素原子環員は、独立して、C(=O)およびC(=S)から選択され、硫黄原子環員は、独立して、S(=O)_s (=NR¹)_f から選択され、ならびに、ケイ素原子環員は、独立して、SiR⁹R¹⁰ から選択され、各環もしくは環系は、任意により、R⁶ から独立して選択される5個以下の置換基で置換されている。この定義において、2個以下のO、2個以下のS、4個以下のNおよび2個以下のSi原子から選択される環員は、ヘテロ原子環員の数にゼロであってもよい。ヘテロ原子環員が存在していない場合、環もしくは環系は炭素環式である。少なくとも1個のヘテロ原子環員が存在している場合、環もしくは環系は複素環式である。S(=O)_s (=NR¹)_f の定義により、酸化された硫黄部分（例えば、S(=O) または S(=O)₂）または未酸化の硫黄原子（すなわち、sおよびfが共にゼロである場合）であることが可能である2個以下の硫黄環員が許容される。式1および式1Aに関連する化合物もまたN-オキシド誘導体を含んでいるため、窒素原子環員は、N-オキシドとして酸化されていてもよい。C(=O)およびC(=S)から選択される3個以下の炭素原子環員は、2個以下のO、2個以下のS、4個以下のNおよび2個以下のSi原子から選択される4個以下のヘテロ原子に対する追加である。R⁶置換基は任意であるため、Jにおける利用可能な結合点の数にのみ限定されて、0～5個の置換基が存在していてもよい。置換基R⁶がHである場合、これは、5個の任意の置換基の1つとして数えられない。ケイ素原子環員上の置換基は、個別に、R⁹およびR¹⁰と定義される。

【0063】

上記のとおり、R²およびR³は、これらが結合している炭素原子と一緒にあって3員～7員環を形成していてもよい。この3員～7員環は、置換基R²およびR³が結合している炭素原子を環員として含む。他の2～6個の環員は、2個以下のO、2個以下のS、2個以下のNおよび2個以下のSi原子から独立して選択される4個以下のヘテロ原子、

10

20

30

40

50

ならびに、炭素原子から選択される。この定義において、ヘテロ原子は、ヘテロ原子環員
 の数はゼロであってもよい任意である。ヘテロ原子環員が存在していない場合、環は
 炭素環式である。少なくとも1個のヘテロ原子環員が存在している場合、環は複素環式で
 ある。環は、任意により、炭素原子環員上では、ハロゲン、シアノ、 $C_1 \sim C_2$ アルキル
 $C_1 \sim C_2$ ハロアルキル、 $C_1 \sim C_2$ アルコキシおよび $C_1 \sim C_2$ ハロアルコキシから
 独立して選択され、ならびに、窒素原子環員上では、シアノ、 $C_1 \sim C_2$ アルキルおよび
 $C_1 \sim C_2$ アルコキシから独立して選択される4個以下の置換基で置換されている。式1
 および式1Aに関連する化合物もまたN-オキシド誘導体を含んでいるため、窒素原子環
 員は、N-オキシドとして酸化されていてもよい。

【0064】

上記のとおり、Qは、(とりわけ) 3員～7員非芳香族炭素環、5員～7員非芳香族複
 素環または8員～11員芳香族複素環式二環系であって、各環もしくは環系は、2個以下
 のO、2個以下のS、4個以下のNおよび2個以下のSi原子から独立して選択される4
 個以下のヘテロ原子ならびに炭素原子から選択される環員を含有しており、ここで、3個
 以下の炭素原子環員は、独立して、 $C(=O)$ および $C(=S)$ から選択され、硫黄原子
 環員は、独立して、 $S(=O)_s$ ($=NR^{11}$)_f から選択され、ならびに、ケイ素原子
 環員は、独立して、 SiR^9R^{10} から選択され、各環もしくは環系は、任意により、炭
 素原子環員および窒素原子環員上では R^6 から独立して選択される2個以下の置換基で
 置換されており、ならびに、炭素原子環員上では R^6 から独立して選択され、および、
 窒素原子環員上では、H、 $C_1 \sim C_3$ アルキル、 $C_2 \sim C_3$ アルキルカルボニル、 $C_2 \sim$ 20
 C_3 アルコキシカルボニルおよび $C_1 \sim C_3$ アルコキシから独立して選択される5個以下
 の置換基から選択されている。この定義において、2個以下のO、2個以下のS、4個以
 下のNおよび2個以下のSi原子から選択される環員は、ヘテロ原子環員の数ゼロであ
 ってもよい任意である。ヘテロ原子環員が存在していない場合、環もしくは環系は炭
 素環式である。少なくとも1個のヘテロ原子環員が存在している場合、環もしくは環系は
 複素環式である。 $S(=O)_s$ ($=NR^{11}$)_f の定義により、酸化された硫黄部分(例
 えば、 $S(=O)$ または $S(=O)_2$) または未酸化の硫黄原子(すなわち、sおよびf
 が共にゼロである場合)であることが可能である2個以下の硫黄環員が許容される。式1
 および式1Aに関連する化合物もまたN-オキシド誘導体を含んでいるため、窒素原子環
 員は、N-オキシドとして酸化されていてもよい。 $C(=O)$ および $C(=S)$ から選択 30
 される3個以下の炭素原子環員は、2個以下のO、2個以下のS、4個以下のNおよび2
 個以下のSi原子から選択される4個以下のヘテロ原子に対する追加である。

【0065】

上記のとおり、 R^6 および R^6 は、これらが結合している原子と一緒にあって、環員
 として以下を含む5員～7員環を形成し得る：(a) 置換基 R^6 および R^6 が直接的に
 結合している2個の原子、(b) R^6 および R^6 が間接的に結合しているとみなされる
 ことが可能であるJ、ZおよびQの介在している(すなわち、他のリンクしている)原子
 、ならびに、(c) R^6 および R^6 置換基。環の環員は、任意により、1個以下のO、
 1個以下のSおよび1個以下のN原子から独立して選択される4個以下のヘテロ原子、な
 らびに、炭素原子から選択される。この定義において、1個以下のO、1個以下のSおよ
 び1個以下のN原子から選択される環員は、ヘテロ原子環員の数ゼロであってもよいた
 め任意である。環は、任意により、炭素原子環員上では、ハロゲン、シアノ、ニトロ、 C
 $C_1 \sim C_2$ アルキルおよび $C_1 \sim C_2$ アルコキシから独立して選択され、ならびに、窒素原
 子環員上では、シアノ、 $C_1 \sim C_2$ アルキルおよび $C_1 \sim C_2$ アルコキシから独立して選
 択される3個以下の置換基で置換されている。これらの任意の置換基(存在する場合)は
 、 R^6 および R^6 による環の部分における利用可能な炭素原子環員および窒素原子環員
 に結合しており、ならびに、J、ZおよびQに結合している置換基への追加である。

【0066】

上記のとおり、 R^3 および R^7 は、これらが結合している結合原子と一緒にあって5員
 ～7員部分飽和環を形成していてもよい。結合原子は、 R^3 が直接的に結合している炭素 50

10

20

30

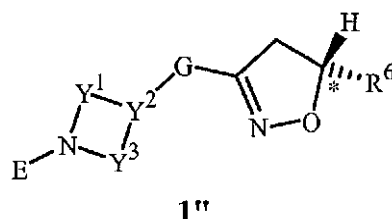
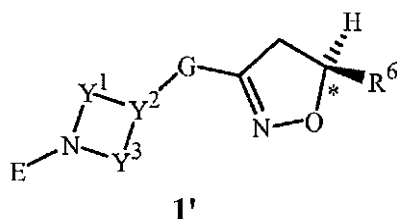
40

50

体、または、光学的に活性な形態として存在していてもよい。例えば、Jが、式1の残りに3位で結合しているJ-29（明細表2を参照のこと）であると共に、H以外の1個のR⁶置換基を5位に有している場合、式1は、R⁶が結合している炭素原子でキラル中心を有している。2個のエナンチオマーが以下の式1'および式1''で示されていると共に、キラル中心がアスタリスク（*）で示されている。

【0069】

【化4】



10

【0070】

式1および式1Aの化合物は、例えば、式1'および1''のエナンチオマーの量が等しいラセミ混合物を含む。加えて、式1および式1Aの化合物はラセミ混合物と比して、式1もしくは式1Aのエナンチオマーが富化されている化合物を含む。また、実質的に純粋な、例えば、式1'および式1''といった式1および式1Aの化合物のエナンチオマーも含まれる。

20

【0071】

鏡像異性体的に富化されている場合、一方のエナンチオマーが他方のものよりも多量に存在しており、富化の程度は、 $(2x - 1) \cdot 100\%$ と定義される鏡像異性体過剰率（「ee」）の表記により定義されることが可能であり、式中、xは混合物中の主たるエナンチオマーのモル分率である（例えば、20%のeeは、エナンチオマーの60：40の比に相当する）。

【0072】

好ましくは、式1および式1Aの本発明の組成物は、より活性な異性体について、少なくとも50%の鏡像異性体過剰率；より好ましくは少なくとも75%の鏡像異性体過剰率；さらにより好ましくは少なくとも90%の鏡像異性体過剰率；ならびに、最も好ましくは、少なくとも94%の鏡像異性体過剰率を有する。より活性な異性体の鏡像異性体的に純粋な実施形態に特に注目すべきである。

30

【0073】

式1および式1Aの化合物は、追加のキラル中心を含んでいることが可能である。例えば、A¹、A²、R^{1a}、R^{1c}、R²、R³、R⁴、R⁶、R^{6a}、T^B、J、QおよびZなどの置換基および他の分子成分は、これら自体がキラル中心を含んでいてもよい。式1および式1Aの化合物は、これらの追加のキラル中心でのラセミ混合物、ならびに、富化され、実質的に純粋な立体構造を含んでいる。

【0074】

式1および式1Aの化合物は、式1もしくは式1Aにおけるアミド結合（例えば、C（=W¹）-N）についての回転の制限による1種以上の配座異性体として存在していることが可能である。式1および式1Aの化合物は、配座異性体の混合物を含んでいる。加えて、式1および式1Aの化合物は、1種の配座異性体が他のものと比して富化されている化合物を含んでいる。

40

【0075】

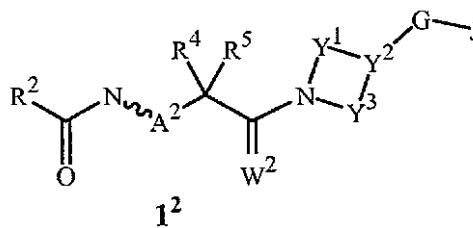
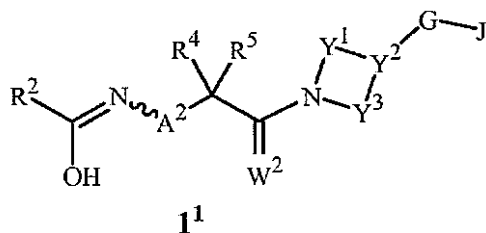
当業者は、式1および式1Aの化合物は、1種以上の対応する互変異性の相手と平衡状態で存在していることが可能であることを認識している。他に示されていない限りにおいて、1種の互変異性体の記載による化合物への言及は、すべての互変異性体を含んでいるとみなされるべきである。例えば、式1において、EがE-2であると共にR³がヒドロキシである場合、式1¹によって示される互変異性形態への言及は、式1²によって示さ

50

れる互変異性形態をも含んでいる。

【0076】

【化5】



10

【0077】

さらに、明細表1A、1B、2、2A、3、4、5、5Aおよび6に示されている不飽和環および環系のいくつかは、示されているものとは異なる単結合および二重結合配列を環員間に有していることが可能である。環原子の特定の配列に関するこのように異なる結合の配列は、異なる互変異性体に対応する。これらの不飽和環および環系について、示されている特定の互変異性体は、示されている環原子の配列について可能であるすべての互変異性体の代表であるとみなされるべきである。

【0078】

本発明の化合物は、式1および式1AのN-オキシド誘導体を含む。当業者は、窒素は酸化物への酸化に利用可能な電子の孤立電子対を必要とするため、すべての窒素含有複素環がN-オキシドを形成することが可能であるわけではないことを認め；当業者は、N-オキシドを形成することが可能である窒素含有複素環を認識するであろう。当業者はまた、第三級アミンがN-オキシドを形成することが可能であることを認識するであろう。複素環および第三級アミンのN-オキシドの調製のための合成方法は当業者によりきわめて周知であり、過酢酸およびm-クロロ過安息香酸(MCPBA)などのペルオキシ酸、過酸化水素、t-ブチルヒドロ過酸化物などのアルキルヒドロ過酸化物、過ホウ酸ナトリウム、ならびに、ジメチルジオキシランなどのジオキシランでの複素環および第三級アミンの酸化が挙げられる。N-オキシドを調製するためのこれらの方法は広範に記載されていると共に文献において概説されており、例えば：T. L. Gilchrist, Comprehensive Organic Synthesis, vol. 7, pp 748-750, S. V. Ley, Ed., Pergamon Press; M. Tisler and B. Stanovnik, Comprehensive Heterocyclic Chemistry, vol. 3, pp 18-20, A. J. Boulton and A. McKillop, Eds., Pergamon Press; M. R. Grimmett and B. R. T. Keene, Advances in Heterocyclic Chemistry, vol. 43, pp 149-161, A. R. Katritzky, Ed., Academic Press; M. Tisler and B. Stanovnik, Advances in Heterocyclic Chemistry, vol. 9, pp 285-291, A. R. Katritzky and A. J. Boulton, Eds., Academic Press; および、G. W. H. Cheeseman and E. S. G. Werstiuk, Advances in Heterocyclic Chemistry, vol. 22, pp 390-392, A. R. Katritzky and A. J. Boulton, Eds., Academic Pressを参照のこと。

【0079】

当業者は、環境中および生理学的条件下において、化学化合物の塩はそれらの対応する非塩形態と平衡にあるため、塩は、非塩形態の生物学的実用性を共有することを認識する。本混合物および組成物を形成する化合物が酸性または塩基性部分を含有している場合、広く多様な塩が形成されることが可能であり、これらの塩は、真菌性植物病原体によって

20

30

40

50

引き起こされる植物病害の防除のための本混合物および組成物において有用である（すなわち、農学的に好適である）。化合物がアミン官能基などの塩基性部分を含有している場合、塩としては、臭化水素酸、塩酸、硝酸、リン酸、硫酸、酢酸、酪酸、フマル酸、乳酸、マレイン酸、マロン酸、シュウ酸、プロピオン酸、サリチル酸、酒石酸、4-トルエンスルホン酸または吉草酸などの無機酸もしくは有機酸との酸付加塩が挙げられる。化合物がカルボン酸またはフェノールなどの酸性部分を含有している場合、塩としては、ピリジン、トリエチルアミンもしくはアンモニア、または、アミド、水素化物、水酸化物、または、ナトリウム、カリウム、リチウム、カルシウム、マグネシウムあるいはバリウムの炭酸塩などの有機塩基または無機塩基と形成されるものが挙げられる。

【0080】

式1、式1A、これらの立体異性体、互変異性体、N-オキシドおよび塩から選択される化合物は、典型的には2つ以上の形態で存在し、それ故、式1および式1Aは、式1および式1Aが表す化合物のすべての結晶性および非結晶形態を含む。非結晶形態は、ワックスおよびガムなどの固形分である実施形態、ならびに、溶液および熔融物などの液体である実施形態を含む。結晶形態は、実質的に単結晶タイプを表す実施形態、および、異形体（すなわち、異なる結晶性タイプ）の混合物を表す実施形態を含む。「異形体」という用語は、異なる結晶形態で結晶化することが可能である化学化合物の特定の結晶形態を指し、これらの形態では、結晶格子における分子の配置および／または配座が異なっている。異形体は同一の化学的組成を有していることが可能であるが、これらはまた、格子中に弱くまたは強固に結合していることが可能である共結晶化水または他の分子の存在または不在により組成が異なっていることが可能である。異形体は、結晶形状、密度、硬度、色、化学的安定性、融点、吸湿性、懸垂性、溶解速度および生物学的利用可能性などの、化学的特性、物理的特性および生物学的特性において異なっていることが可能である。当業者は、式1もしくは式1Aによって表される化合物の異形体は、式1もしくは式1Aによって表される同一の化合物の他の異形体または異形体の混合物と比して、有益な効果（例えば、有用な配合物の調製に対する適合性、向上した生物学的性能）を示す可能性があることを認めるであろう。式1もしくは式1Aによって表される化合物の特定の異形体の調製および単離は、例えば、選択された溶剤および温度を用いる結晶化を含む当業者に公知の方法により達成されることが可能である。

【0081】

発明の概要に記載されている本発明の実施形態は以下に記載のものを含む。以下の実施形態において、式1および式1Aは、幾何異性体および立体異性体、これらの互変異性体、N-オキシド、および塩を含み、「式1などの化合物」もしくは「式1Aの化合物」への言及は、実施形態においてさらに定義されていない限りにおいて、発明の概要において特定されている置換基の定義を含む。以下の実施形態において、「式1もしくは式1A」という句が簡便性のために用いられているが、しかしながら、すべての可変要素が式1および式1Aの化合物の両方に適用可能であるというわけではない。当業者は、発明の概要において規定された置換基の定義を用いて、以下の実施形態のいずれが式1および式1Aの化合物に適用可能であるか、ならびに、そのいずれが式1もしくは式1Aのみに適用可能であるかを知っているであろう。

【0082】

実施形態1．式1もしくは式1Aの化合物であって、式中、EはE-3である。

【0083】

実施形態2．式1もしくは式1Aの化合物であって、式中、EはE-1またはE-2である。

【0084】

実施形態3．式1もしくは式1Aまたは実施形態2の化合物であって、式中、EはE-1である。

【0085】

実施形態4．式1もしくは式1Aまたは実施形態2の化合物であって、式中、EはE-

2である。

【0086】

実施形態5．式1もしくは式1Aまたは実施形態1～4のいずれか一つの化合物であって、式中、 Y^1 は、 $-N=C(R^{14})-$ 、 $-C(R^{14})=N-$ 、または、一方の鎖構成員が $-C(R^{14})_2-$ であると共に第2の鎖構成員が $-C(R^{14})_2-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ および $-N(R^{23})-$ から選択される、2つの鎖構成員から構成される環形成鎖である。

【0087】

実施形態6．式1もしくは式1Aまたは実施形態1～5のいずれか一つの化合物であって、式中、 Y^2 は窒素環員である。

10

【0088】

実施形態7．式1もしくは式1Aまたは実施形態1～5のいずれか一つの化合物であって、式中、 Y^2 は $C(R^{14})$ 環員である。

【0089】

実施形態8．式1もしくは式1Aまたは実施形態1～7のいずれか一つの化合物であって、式中、 Y^3 は、 $-N=C(R^{14})-$ 、 $-C(R^{14})=N-$ 、あるいは、一方の鎖構成員が $-C(R^{14})_2-$ であると共に第2の鎖構成員が $-C(R^{14})_2-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ および $-N(R^{23})-$ から選択される、2つの鎖構成員から構成される環形成鎖であるか；または

Y^3 は、 $-C(R^{14})_2N=C(R^{14})-$ 、 $-C(R^{14})_2C(R^{14})=N-$ 、 $-N=C(R^{14})C(R^{14})_2-$ 、 $-C(R^{14})=NC(R^{14})_2-$ 、または、2つの鎖構成員が $-C(R^{14})_2-$ であるとと共に第3の鎖構成員が $-C(R^{14})_2-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ および $-N(R^{23})-$ から選択される、3つの鎖構成員から構成される環形成鎖である。

20

【0090】

実施形態9．実施形態8の化合物であって、式中、 Y^3 は、 $-C(R^{14})_2N=C(R^{14})-$ 、 $-C(R^{14})_2C(R^{14})=N-$ 、 $-N=C(R^{14})C(R^{14})_2-$ 、 $-C(R^{14})=NC(R^{14})_2-$ 、または、2つの鎖構成員が $-C(R^{14})_2-$ であるとと共に第3の鎖構成員が $-C(R^{14})_2-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ および $-N(R^{23})-$ から選択される、3つの鎖構成員から構成される環形成鎖である。

30

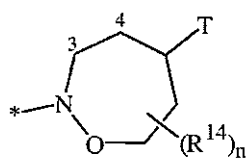
【0091】

実施形態10．実施形態1～9のいずれか一つの化合物であって、式中、 Y^1 、 Y^2 および Y^3 は、明細表1Aにおいて以下に示されているL-25～L-59から選択される環（本明細書において以降「L」と称する）を形成しており、

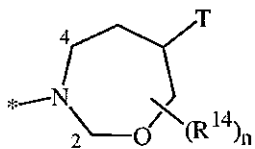
【0092】

【化 6】

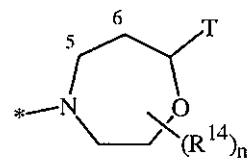
提示 1A



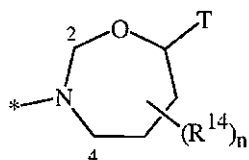
L-25



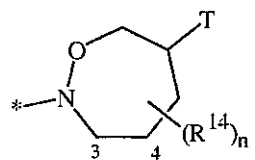
L-26



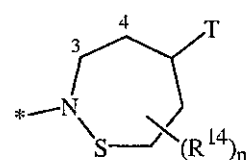
L-27



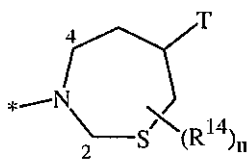
L-28



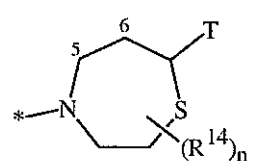
L-29



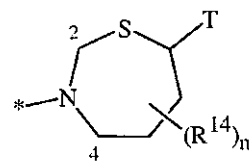
L-30



L-31



L-32



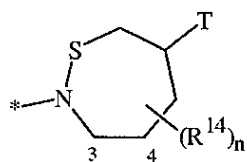
L-33

【 0 0 9 3 】

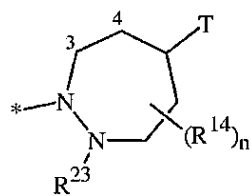
10

20

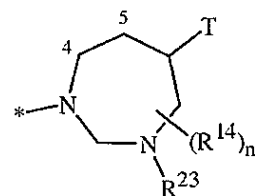
【化 7】



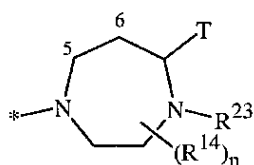
L-34



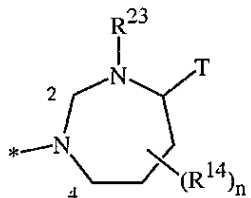
L-35



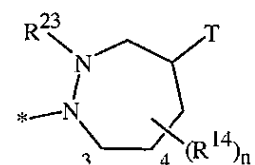
L-36



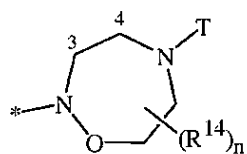
L-37



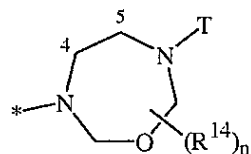
L-38



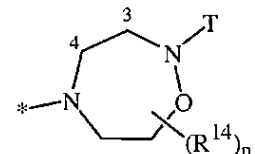
L-39



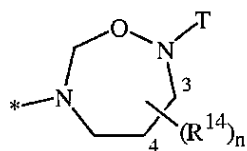
L-40



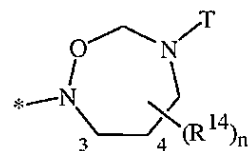
L-41



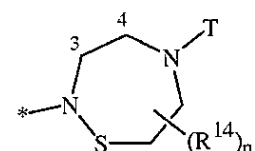
L-42



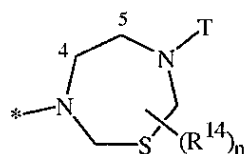
L-43



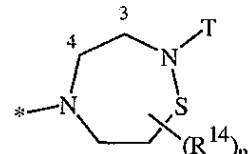
L-44



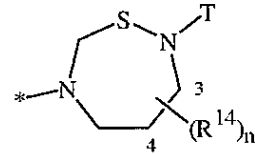
L-45



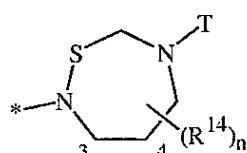
L-46



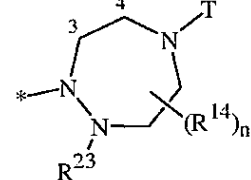
L-47



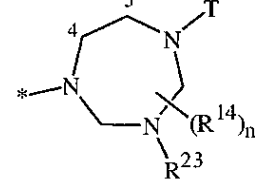
L-48



L-49

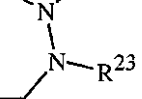


L-50

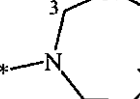


L-51

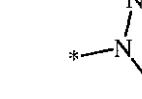
【 0 0 9 4 】



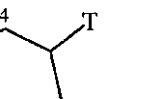
L-52



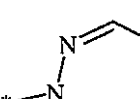
L-53



L-54



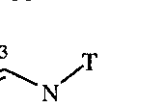
L-55



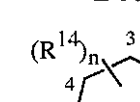
L-56



L-57



L-58

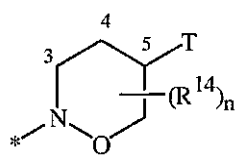


L-59

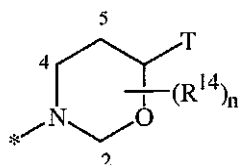
および

【 0 0 9 9 】

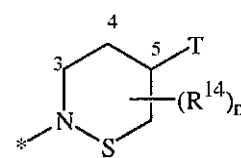
【化 9】

提示 1B

L-1



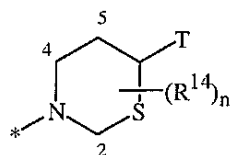
L-2



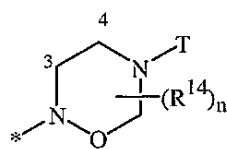
L-3

【 0 1 0 0 】

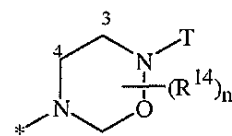
【化 1 0】



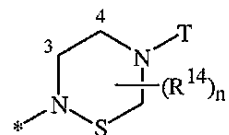
L-4



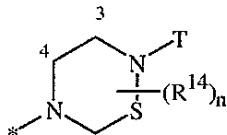
L-5



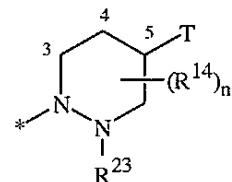
L-6



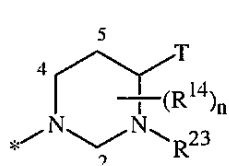
L-7



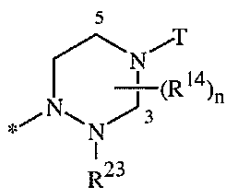
L-8



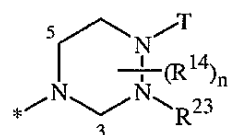
L-9



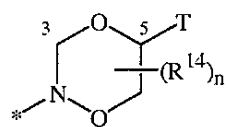
L-10



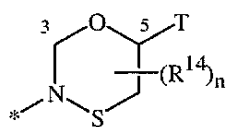
L-11



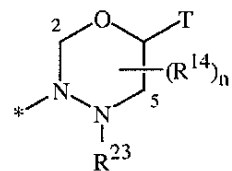
L-12



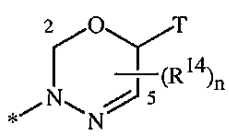
L-13



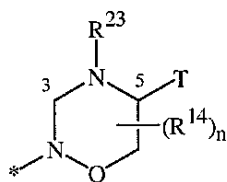
L-14



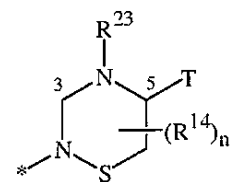
L-15



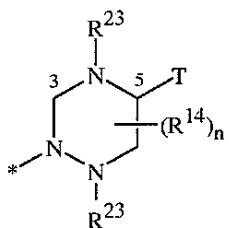
L-16



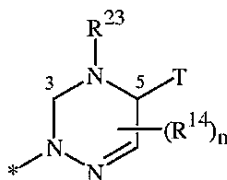
L-17



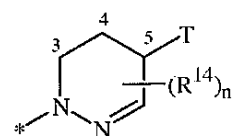
L-18



L-19



L-20



L-21

【 0 1 0 1】

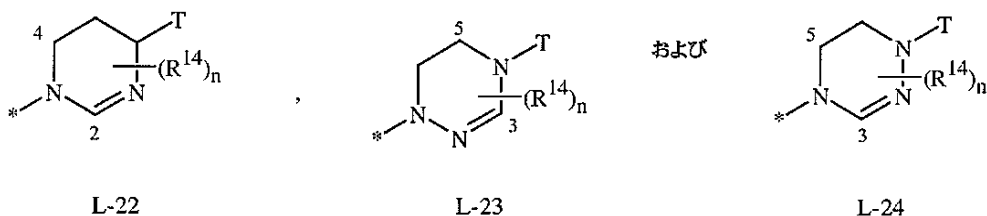
10

20

30

40

【化 1 1】



式中、左に突出する（すなわち、アスタリスク（「*」）が付されている）結合は式 1 もしくは式 1 A における E に結合していると共に、右に突出する（すなわち、「T」が付されている）結合は式 1 もしくは式 1 A における G に結合しており；ならびに、n は 0 ～ 4 の整数である。

10

【0 1 0 2】

実施形態 1 5．実施形態 1 4 の化合物であって、式中、L は、L-1、L-2 または L-9 である。

【0 1 0 3】

実施形態 1 6．実施形態 1 5 の化合物であって、式中、L は、L-1 または L-9 である。

【0 1 0 4】

実施形態 1 6 a．式 1 もしくは式 1 A または実施形態 1 ～ 1 6 のいずれか一つの化合物であって、式中、X¹ および X² は、各々独立して、1 つの構成員が -C(R¹⁴)₂- であると共に第 2 の鎖構成員が -O- である環員であり、ならびに、X¹ および X² を含有する二環式環は完全飽和であるか；または

20

X¹ および X² は共に環員が -C(R¹⁴)₂- である。

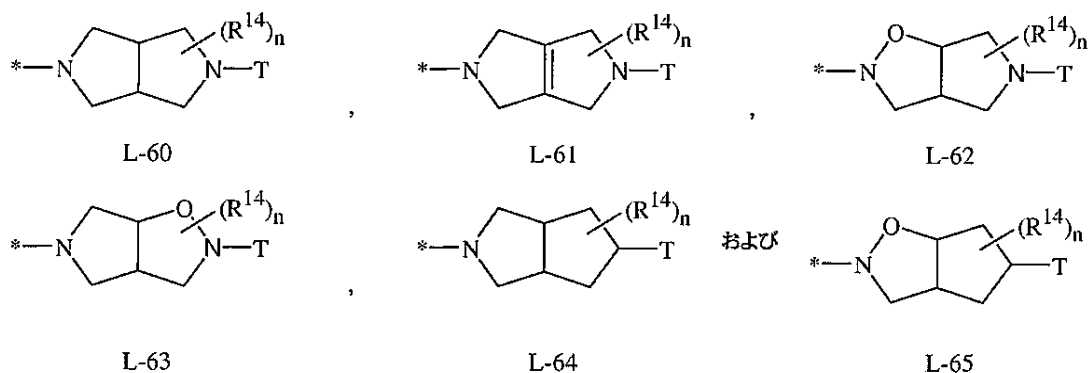
【0 1 0 5】

実施形態 1 6 b．実施形態 1 ～ 9 のいずれか一つの化合物であって、式中、Y²、X¹ および X² は、明細表 1 C において以下に示されている L-60 ～ L-65 から選択される環（本明細書において以降「L」と称する）を形成しており、

【化 1 2】

30

提示 1C



40

式中、左に突出する（すなわち、アスタリスク（「*」）が付されている）結合は式 1 もしくは式 1 A における E に結合していると共に、右に突出する（すなわち、「T」が付されている）結合は式 1 もしくは式 1 A における G に結合しており；ならびに、n は 0 ～ 4 の整数である。

【0 1 0 6】

実施形態 1 6 c．実施形態 1 6 b の化合物であって、式中、L は、L-60、L-61、L-64 または L-65 である。

【0 1 0 7】

50

実施形態 16 d. 実施形態 16 c の化合物であって、式中、L は、L-60 または L-64 である。

【0108】

実施形態 17. 式 1 もしくは式 1A または実施形態 1～16 のいずれか一つの化合物であって、式中、G は、炭素原子環員上では R^{29} から独立して選択される 2 個以下の置換基であり、および、窒素原子環員上では R^{30} で任意により置換されている 5 員複素環であり；

各 R^{29} は、独立して、ハロゲン、 $C_1 \sim C_3$ アルキルまたは $C_1 \sim C_3$ ハロアルキルであり；ならびに

各 R^{30} は、独立して、 $C_1 \sim C_3$ アルキルである。

10

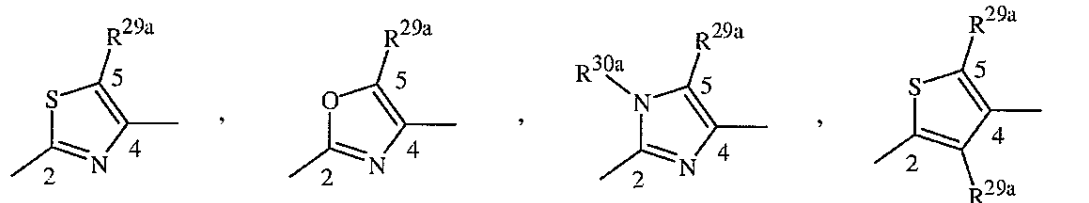
【0109】

実施形態 17 a. 式 1 もしくは式 1A または実施形態 1～17 のいずれか一つの化合物であって、式中、G は、明細表 2 において以下に示されている G-1～G-48 であり、

【0110】

【化 1 3】

提示 2



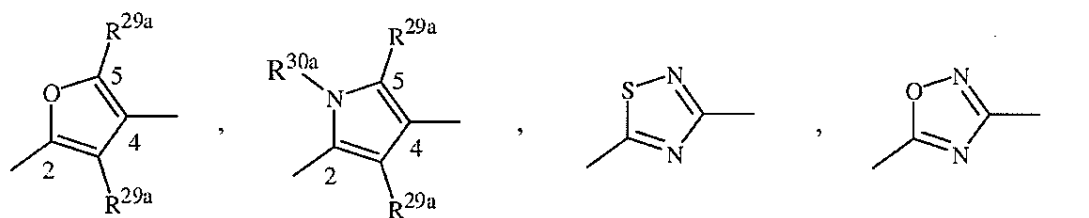
G-1

G-2

G-3

G-4

10

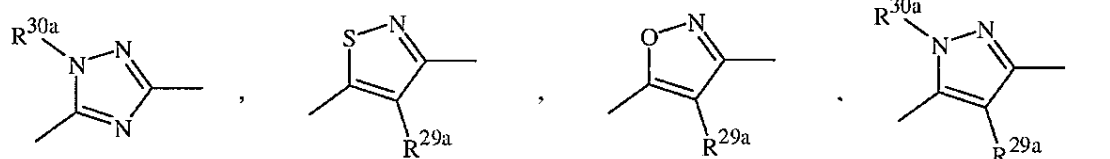


G-5

G-6

G-7

G-8



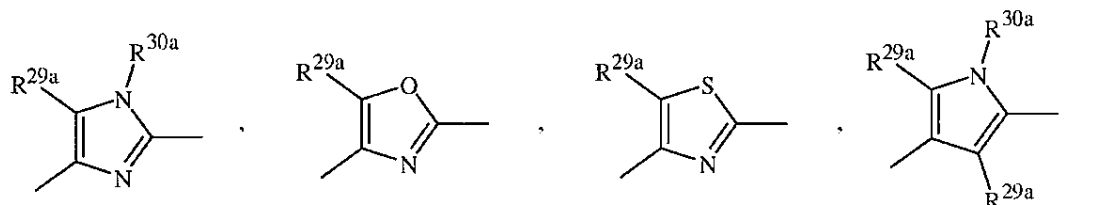
G-9

G-10

G-11

G-12

20



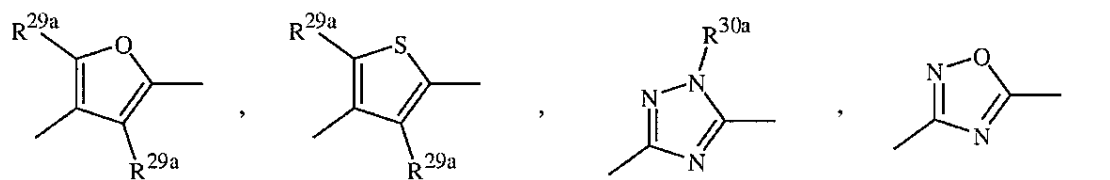
G-13

G-14

G-15

G-16

30



G-17

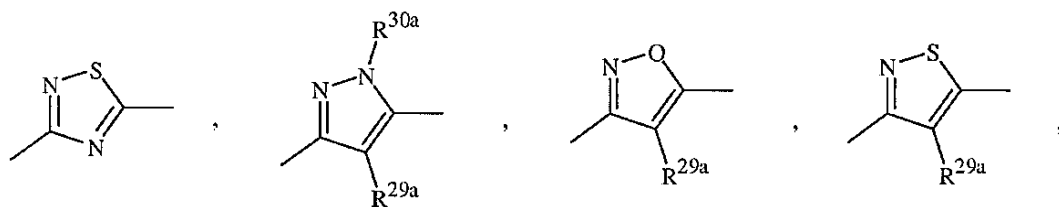
G-18

G-19

G-20

【 0 1 1 1 】

【化 1 4】

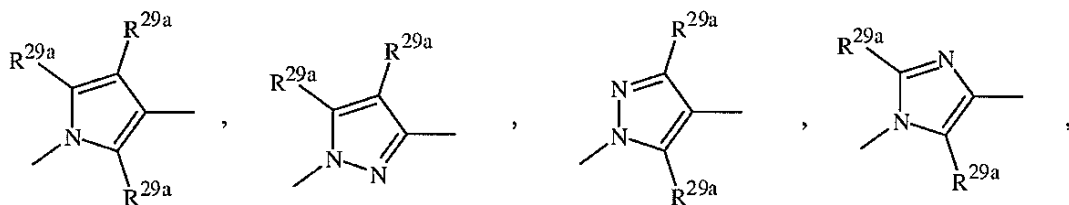


G-21

G-22

G-23

G-24

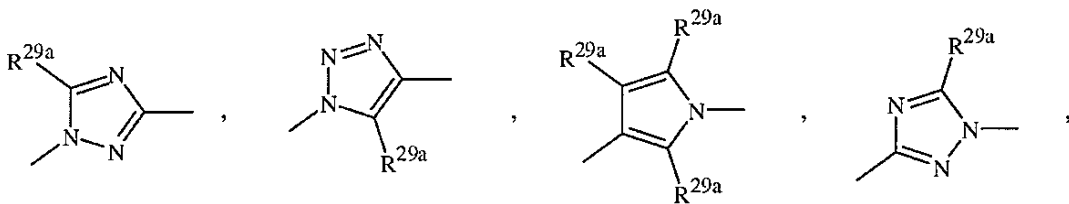


G-25

G-26

G-27

G-28

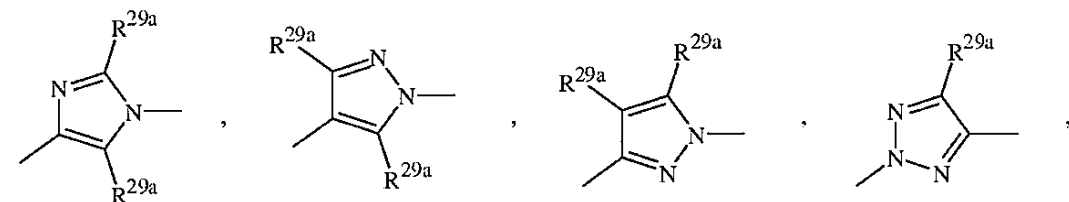


G-29

G-30

G-31

G-32

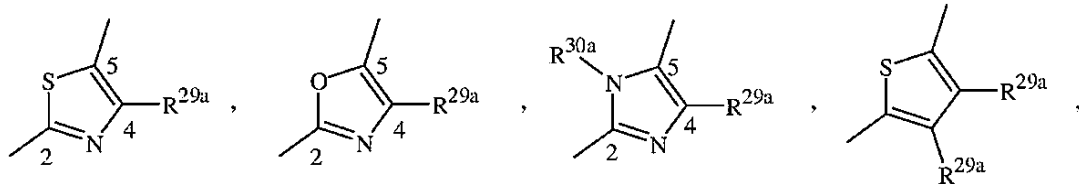


G-33

G-34

G-35

G-36

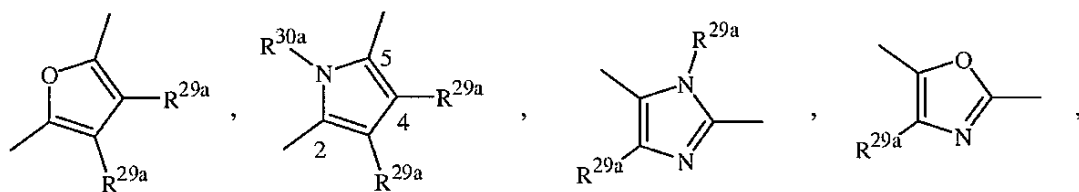


G-37

G-38

G-39

G-40



G-41

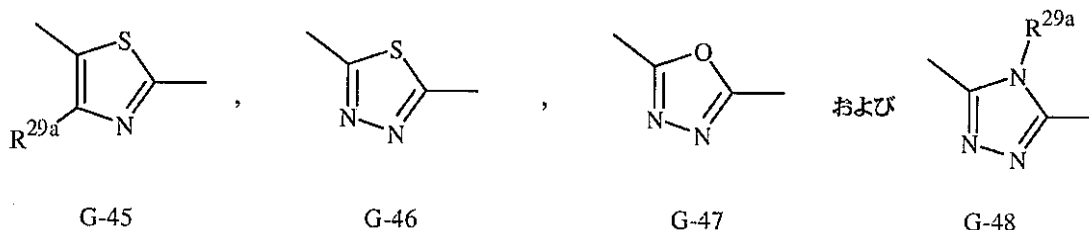
G-42

G-43

G-44

【 0 1 1 2 】

【化 1 5】



式中、左に突出する結合は式 1 または式 1 A における Y^2 に結合しており、および、右に突出する結合は式 1 もしくは式 1 A における J に結合しており；各 R^{29a} は、独立して、H および R^{30} から選択され；ならびに、 R^{30a} は、H および R^{30} から選択される。

10

【0 1 1 3】

実施形態 18. 実施形態 17 a の化合物であって、式中、G は、G-1 ~ G-3、G-7、G-8、G-10、G-11、G-14、G-15、G-23、G-24、G-26 ~ G-28、G-30 および G-36 ~ G-38 から選択される。

【0 1 1 4】

実施形態 19. 実施形態 18 の化合物であって、式中、G は、G-1、G-2、G-7、G-8、G-14、G-15、G-23、G-24、G-26、G-27、G-36、G-37 および G-38 から選択される。

20

【0 1 1 5】

実施形態 20. 実施形態 19 の化合物であって、式中、G は、G-1、G-2、G-15、G-26、G-27、G-36、G-37 および G-38 から選択される。

【0 1 1 6】

実施形態 21. 実施形態 20 の化合物であって、式中、G は、G-1、G-2、G-15、G-26、G-36 および G-37 から選択される。

【0 1 1 7】

実施形態 21 a. 実施形態 1 ~ 9 のいずれか一つの化合物であって、式中、各 R^{29a} は、独立して、H、ハロゲンまたは $C_1 \sim C_3$ アルキルである。

30

【0 1 1 8】

実施形態 21 b. 実施形態 21 a の化合物であって、式中、各 R^{29a} は、独立して、H またはメチルである。

【0 1 1 9】

実施形態 21 c. 実施形態 21 b の化合物であって、式中、各 R^{29a} は H である。

【0 1 2 0】

実施形態 21 d. 実施形態 1 ~ 9 のいずれか一つの化合物であって、式中、各 R^{30a} は、独立して、H またはメチルである。

【0 1 2 1】

実施形態 21 e. 実施形態 21 d の化合物であって、式中、各 R^{30a} は H である。

40

【0 1 2 2】

実施形態 22. 実施形態 1 ~ 9 のいずれか一つの化合物であって、式中、G は、 Y^2 および J への結合を除き非置換である複素環である。

【0 1 2 3】

実施形態 23. 実施形態 22 の化合物であって、式中、G は G-15 である。

【0 1 2 4】

実施形態 24. 実施形態 22 の化合物であって、式中、G は G-2 である。

【0 1 2 5】

実施形態 25. 実施形態 22 の化合物であって、式中、G は G-36 である。

【0 1 2 6】

50

実施形態 26. 実施形態 22 の化合物であって、式中、G は G-26 である。

【0127】

実施形態 27. 実施形態 22 の化合物であって、式中、G は G-1 である。

【0128】

実施形態 28. 式 1 もしくは式 1A または実施形態 1~27 のいずれか一つの化合物であって、式中、J は、5 員~7 員環、8 員~11 員二環系または 7 員~11 員スピロ環系であり、各環もしくは環系は、2 個以下の O、2 個以下の S および 4 個以下の N から独立して選択される 4 個以下のヘテロ原子ならびに炭素原子から選択される環員を含有しており、ここで、3 個以下の炭素原子環員は、独立して、C(=O) および C(=S) から選択されると共に硫黄原子環員は、独立して、S(=O)_s (=NR^{1 1})_f から選択され、各環もしくは環系は、任意により、R⁶ から独立して選択される 5 個以下の置換基で置換されているか；または J は、C(=W⁴)NT^AT^B である。

10

【0129】

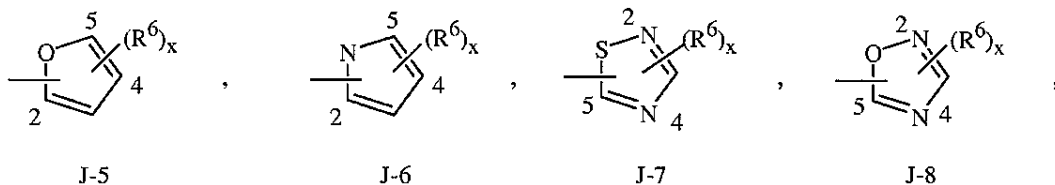
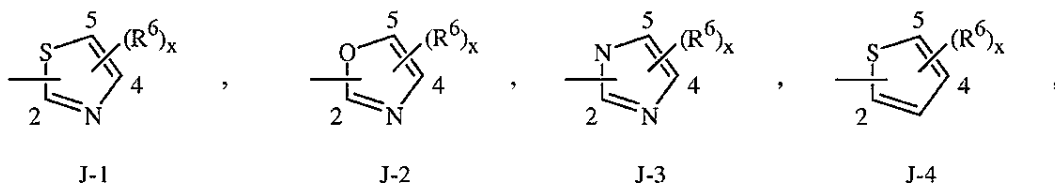
実施形態 29. 実施形態 28 の化合物であって、式中、J が C(=W⁴)NT^AT^B 以外である場合、J は、明細表 3 において以下に示されている J-1~J-82 からなる群から選択される環であり、

【0130】

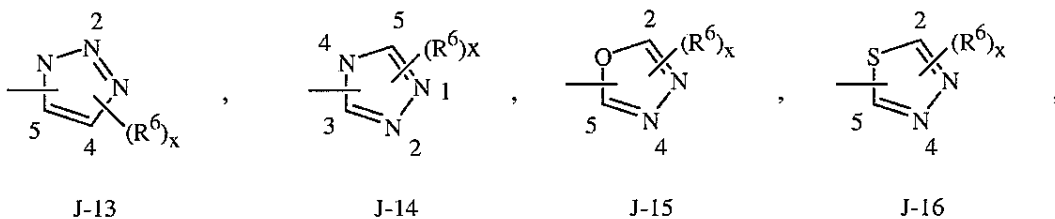
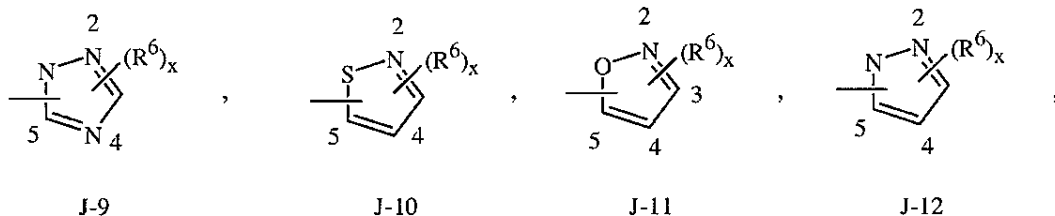
【化 16】

提示 3

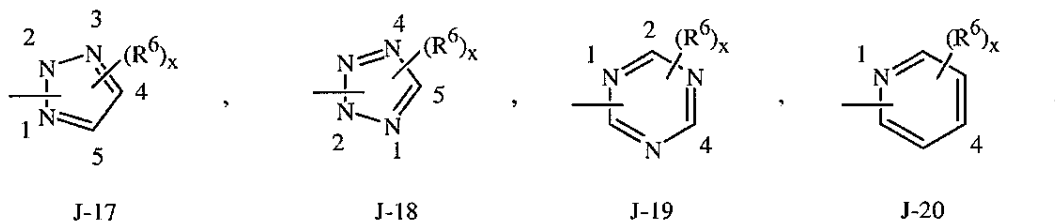
20



30



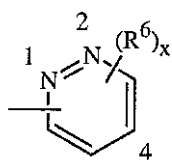
40



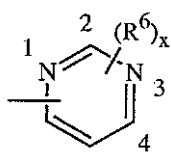
50

【 0 1 3 1 】

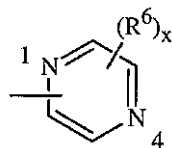
【 化 1 7 】



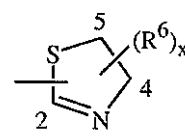
J-21



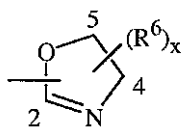
J-22



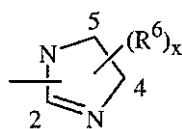
J-23



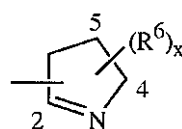
J-24



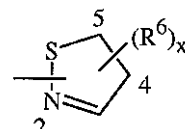
J-25



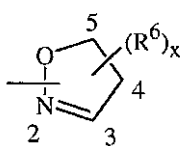
J-26



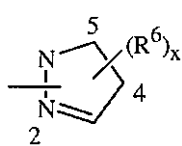
J-27



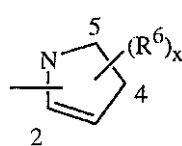
J-28



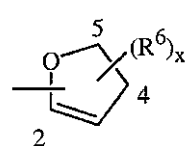
J-29



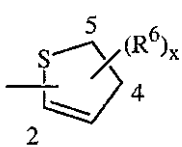
J-30



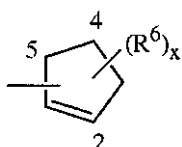
J-31



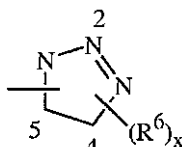
J-32



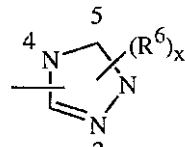
J-33



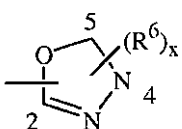
J-34



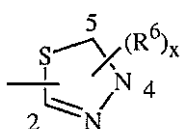
J-35



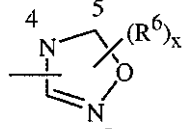
J-36



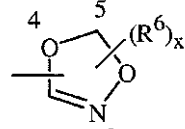
J-37



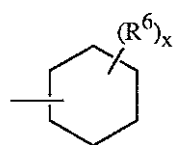
J-38



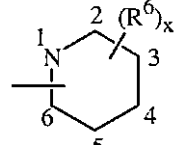
J-39



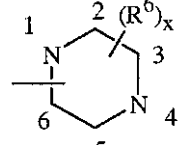
J-40



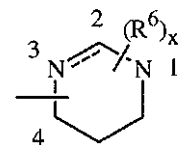
J-41



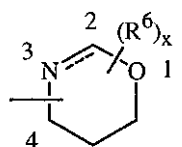
J-42



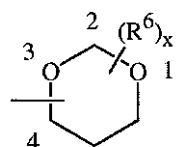
J-43



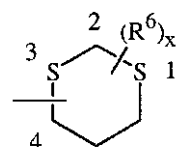
J-44



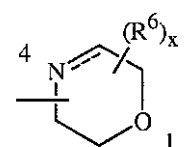
J-45



J-46



J-47



J-48

【 0 1 3 2 】

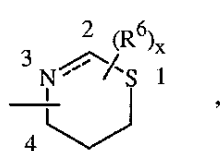
10

20

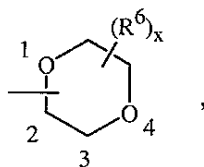
30

40

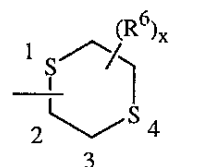
【化 1 8】



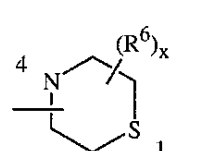
J-49



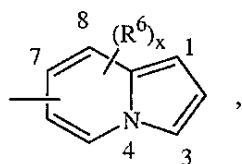
J-50



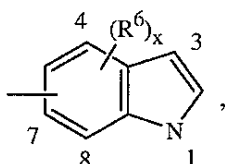
J-51



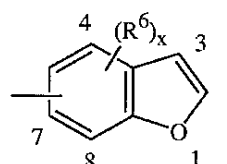
J-52



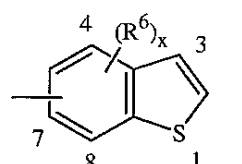
J-53



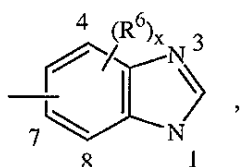
J-54



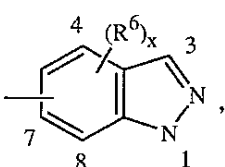
J-55



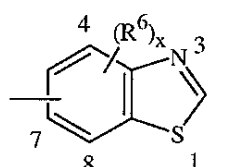
J-56



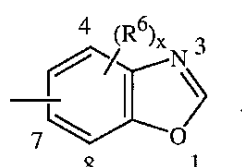
J-57



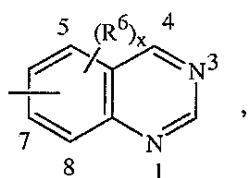
J-58



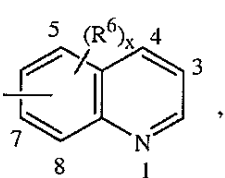
J-59



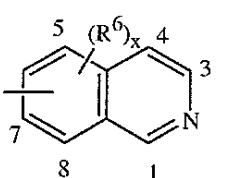
J-60



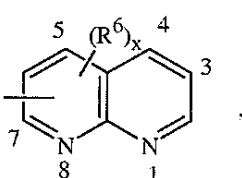
J-61



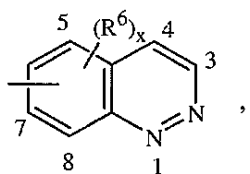
J-62



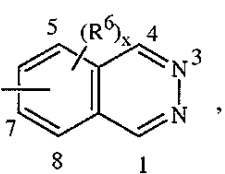
J-63



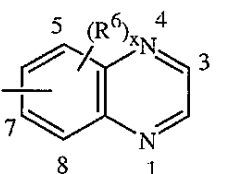
J-64



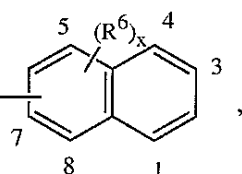
J-65



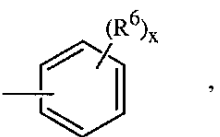
J-66



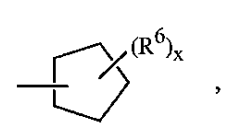
J-67



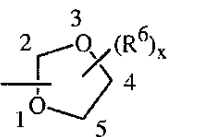
J-68



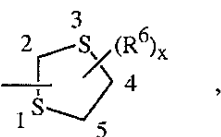
J-69



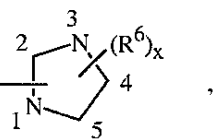
J-70



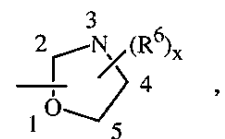
J-71



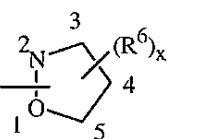
J-72



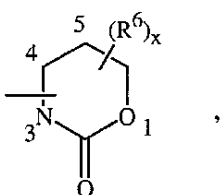
J-73



J-74



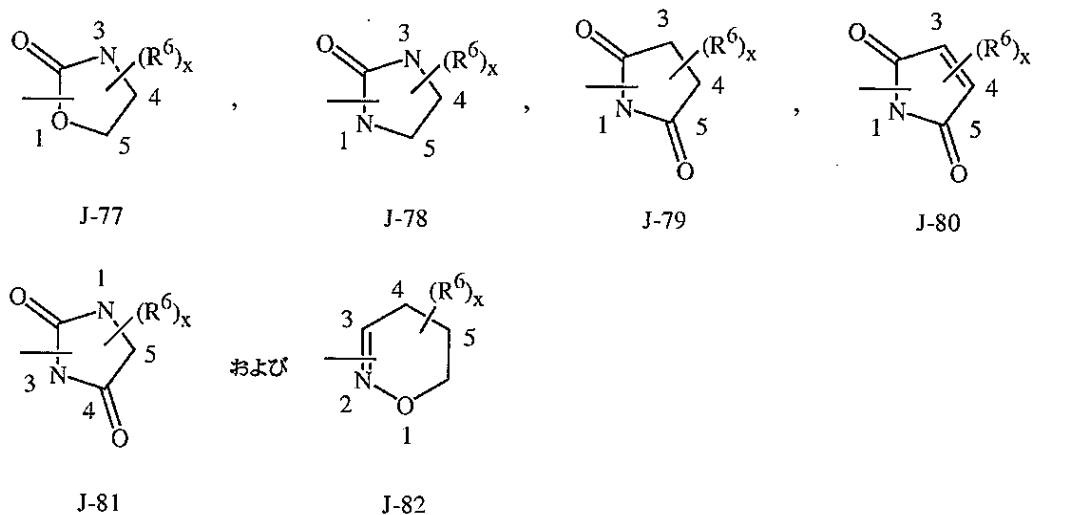
J-75



J-76

【 0 1 3 3】

【化 19】



10

式中、左に突出して示されている結合は、式 1 もしくは式 1 A における G および J 環における利用可能な炭素原子もしくは窒素原子環員に結合しており；ならびに、 x は 0 ～ 5 の整数である。

【0134】

20

実施形態 30. 実施形態 29 の化合物であって、式中、J は、J-1 ～ J-82 からなる群から選択される環であり、 x は 1 ～ 5 の整数であり、および、 x が 2、3、4 または 5 である場合、 R^6 は最大で 1 の事例で $-ZQ$ である。

【0135】

実施形態 31. 実施形態 29 または 30 の化合物であって、式中、J は、J-1、J-2、J-3、J-4、J-5、J-7、J-8、J-9、J-10、J-11、J-12、J-14、J-15、J-16、J-20、J-24、J-25、J-26、J-29、J-30、J-37、J-38、J-45 および J-69 からなる群から選択される環である。

【0136】

30

実施形態 32. 実施形態 29 または 30 の化合物であって、式中、J は、J-1 ～ J-82 からなる群から選択される環である。

【0137】

実施形態 33. 実施形態 31 または 32 の化合物であって、式中、J は、J-4、J-5、J-8、J-11、J-15、J-16、J-20、J-29、J-30、J-37、J-38 および J-69 から選択される。

【0138】

実施形態 34. 実施形態 33 の化合物であって、式中、J は、J-4、J-5、J-11、J-20、J-29、J-37、J-38 および J-69 から選択される。

【0139】

40

実施形態 35. 実施形態 34 の化合物であって、式中、J は J-11 である。

【0140】

実施形態 36. 実施形態 34 の化合物であって、式中、J は J-29 である。

【0141】

実施形態 37. 実施形態 34 の化合物であって、式中、J は J-69 である。

【0142】

実施形態 38. 実施形態 1 ～ 9 のいずれか一つの化合物であって、式中、 x は 1 または 2 である。

【0143】

実施形態 39. 実施形態 38 の化合物であって、式中、 x は 1 である。

50

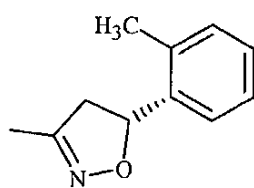
【0144】

実施形態40. 実施形態36の化合物であって、式中、Jは、明細表3Aにおいて以下に示されているJ-29-1～J-29-58からなる群から選択される環であり、

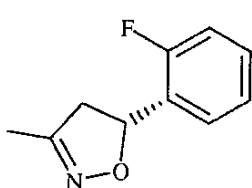
【0145】

【化 2 0】

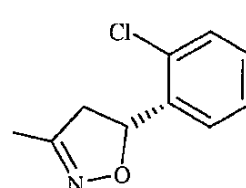
提示 3A



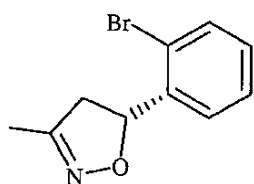
J-29-1



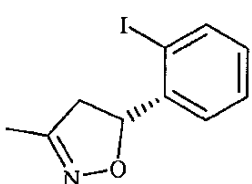
J-29-2



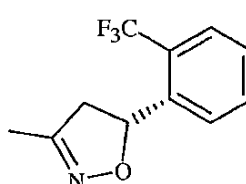
J-29-3



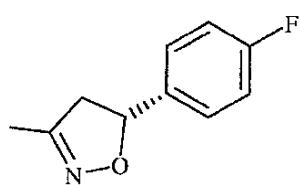
J-29-4



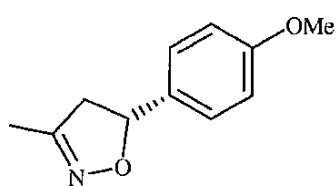
J-29-5



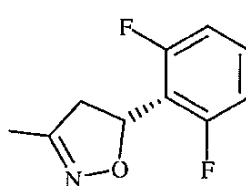
J-29-6



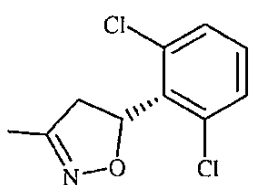
J-29-7



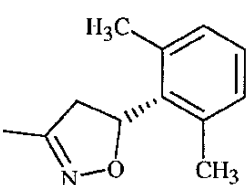
J-29-8



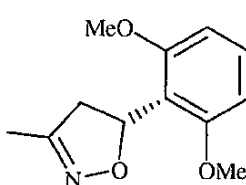
J-29-9



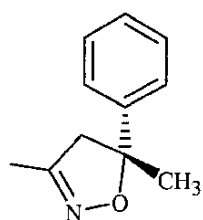
J-29-10



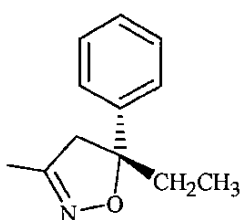
J-29-11



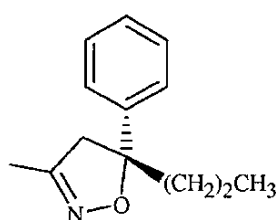
J-29-12



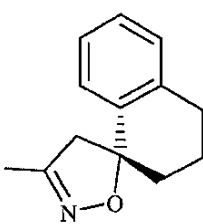
J-29-13



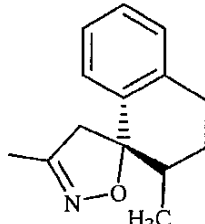
J-29-14



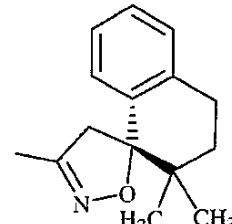
J-29-15



J-29-16



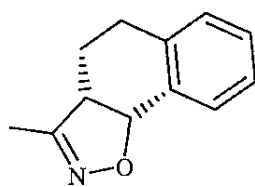
J-29-17



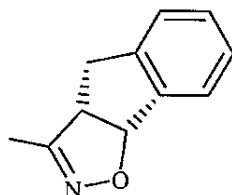
J-29-18

【 0 1 4 6】

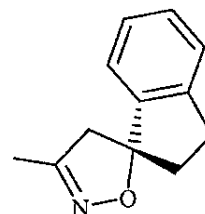
【化 2 1】



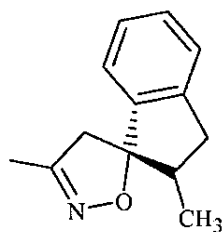
J-29-19



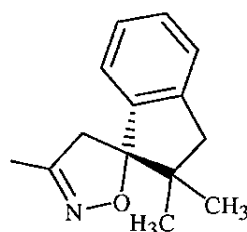
J-29-20



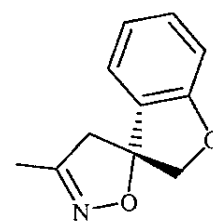
J-29-21



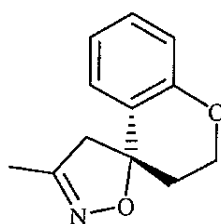
J-29-22



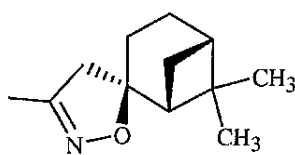
J-29-23



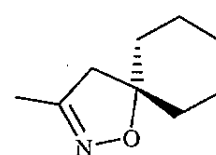
J-29-24



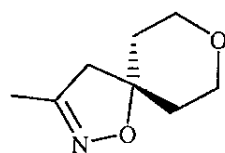
J-29-25



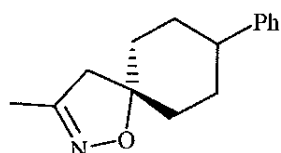
J-29-26



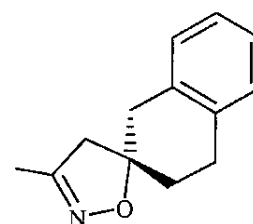
J-29-27



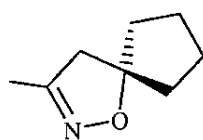
J-29-28



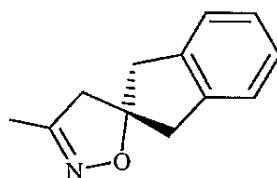
J-29-29



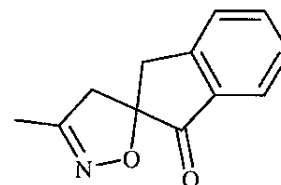
J-29-30



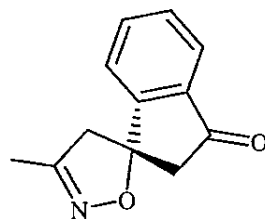
J-29-31



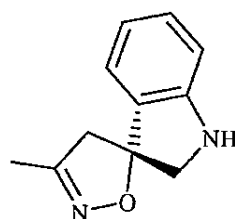
J-29-32



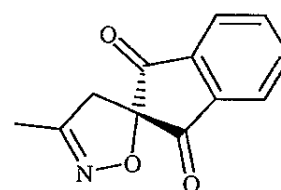
J-29-33



J-29-34



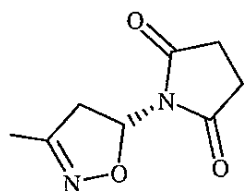
J-29-35



J-29-36

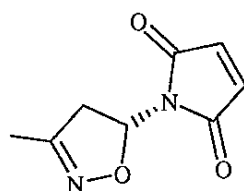
【 0 1 4 7 】

【化 2 2】



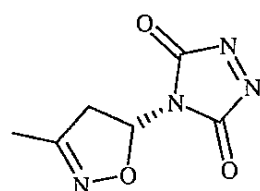
J-29-37

,



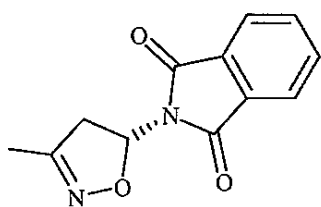
J-29-38

,



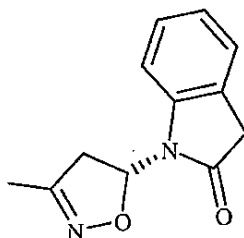
J-29-39

,



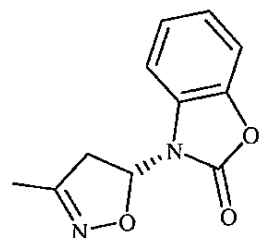
J-29-40

,



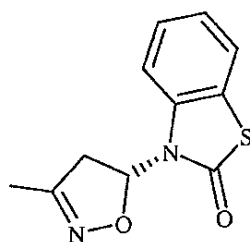
J-29-41

,



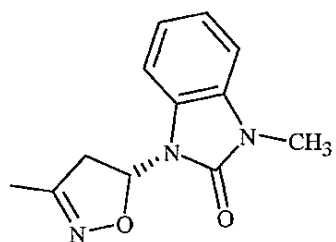
J-29-42

10



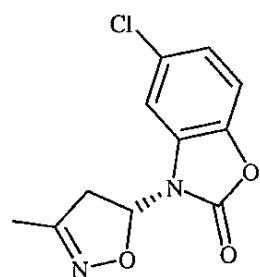
J-29-43

,



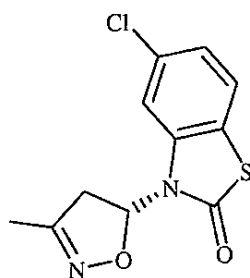
J-29-44

,



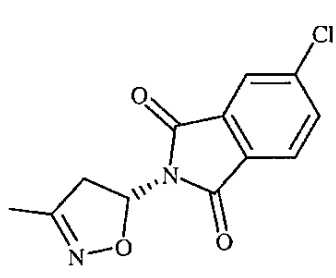
J-29-45

20



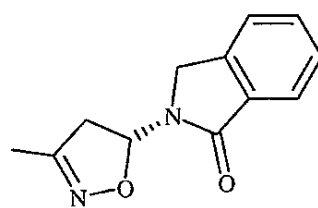
J-29-46

,



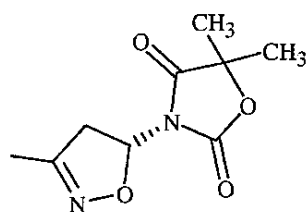
J-29-47

,



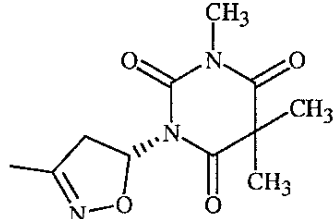
J-29-48

30



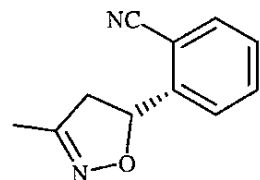
J-29-49

,



J-29-50

,

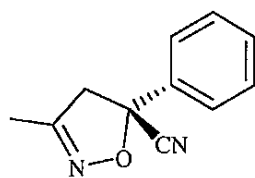


J-29-51

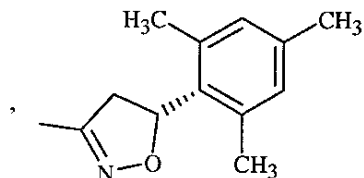
40

【 0 1 4 8 】

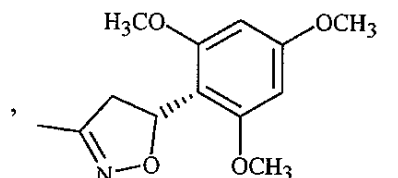
【化 2 3】



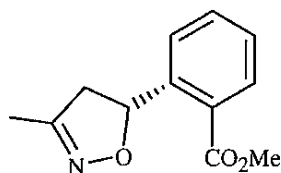
J-29-52



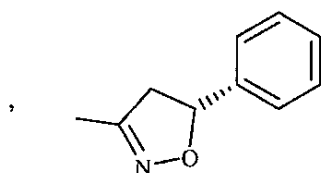
J-29-53



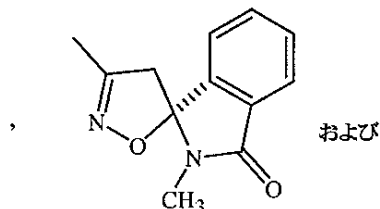
J-29-54



J-29-55

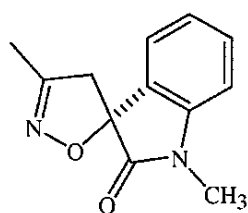


J-29-56



J-29-57

および



J-29-58

式中、左に突出して示されている結合は式 1 もしくは式 1 A における G に結合している。

【0149】

実施形態 4 1. 式 1 もしくは式 1 A または実施形態 1 ~ 4 0 のいずれか一つの化合物であって、式中、各 R^6 は、単独で（すなわち、 R^{6a} とは一緒にせずに）、独立して、H、ハロゲン、シアノ、 $C_1 \sim C_6$ アルキル、 $C_2 \sim C_6$ アルケニル、 $C_2 \sim C_6$ アルキニル、 $C_1 \sim C_6$ ハロアルキル、 $C_2 \sim C_6$ ハロアルケニル、 $C_2 \sim C_6$ ハロアルキニル、 $C_3 \sim C_8$ シクロアルキル、 $C_3 \sim C_8$ ハロシクロアルキル、 $C_4 \sim C_{10}$ アルキルシクロアルキル、 $C_4 \sim C_{10}$ シクロアルキルアルキル、 $C_2 \sim C_6$ アルコキシアルキル、 $C_4 \sim C_{10}$ シクロアルコキシアルキル、 $C_3 \sim C_8$ アルコキシアルコキシアルキル、 $C_2 \sim C_6$ アルキルチオアルキル、 $C_2 \sim C_6$ アルコキシカルボニル、 $C_1 \sim C_6$ アルコキシ、 $C_1 \sim C_6$ ハロアルコキシ、 $C_3 \sim C_8$ シクロアルコキシ、 $C_3 \sim C_8$ ハロシクロアルコキシ、 $C_4 \sim C_{10}$ シクロアルキルアルコキシ、 $C_2 \sim C_6$ アルケニルオキシ、 $C_2 \sim C_6$ ハロアルケニルオキシ、 $C_2 \sim C_6$ アルキニルオキシ、 $C_2 \sim C_6$ ハロアルキニルオキシ、 $C_2 \sim C_6$ アルコキシアルコキシ、 $C_2 \sim C_6$ アルキルカルボニルオキシ、 $C_2 \sim C_6$ ハロアルキルカルボニルオキシ、 $C_4 \sim C_8$ シクロアルキルカルボニルオキシ、 $C_3 \sim C_6$ アルキルカルボニルアルコキシ、 $C_1 \sim C_6$ アルキルチオ、 $C_1 \sim C_6$ ハロアルキルチオ、 $C_3 \sim C_8$ シクロアルキルチオ、 $C_3 \sim C_{10}$ トリアルキルシリル、 $-NR^{20}$ R^{21} または $-ZQ$ である。

【0150】

実施形態 4 2. 実施形態 4 1 の化合物であって、式中、各 R^6 は、単独で、独立して、H、シアノ、 $C_1 \sim C_6$ アルキル、 $C_1 \sim C_6$ ハロアルキル、 $C_3 \sim C_8$ シクロアルキル、 $C_3 \sim C_8$ ハロシクロアルキル、 $C_2 \sim C_6$ アルコキシアルキル、 $C_1 \sim C_6$ アルコキシ、 $C_1 \sim C_6$ ハロアルコキシ、 $C_3 \sim C_8$ シクロアルコキシ、 $C_2 \sim C_6$ アルケニルオキシ、 $C_2 \sim C_6$ ハロアルケニルオキシ、 $C_2 \sim C_6$ アルキニルオキシ、 $C_2 \sim C_6$ アルコキシアルコキシ、 $C_2 \sim C_6$ アルキルカルボニルオキシ、 $C_2 \sim C_6$ ハロアルキルカルボニルオキシ、 $C_1 \sim C_6$ アルキルチオ、 $C_1 \sim C_6$ ハロアルキルチオ、 $C_3 \sim C_{10}$ ト

リアルキシル、 $-NR^{20}R^{21}$ または $-ZQ$ である。

【0151】

実施形態43. 実施形態42の化合物であって、式中、各 R^6 は、単独で、独立して、H、シアノ、 $C_1 \sim C_6$ アルキル、 $C_1 \sim C_6$ ハロアルキル、 $C_1 \sim C_6$ アルコキシ、 $C_1 \sim C_6$ ハロアルコキシ、 $-NR^{20}R^{21}$ または $-ZQ$ である。

【0152】

実施形態44. 実施形態43の化合物であって、式中、各 R^6 は、単独で、独立して、H、シアノ、 $C_1 \sim C_3$ アルキル、 $C_1 \sim C_3$ ハロアルキルまたは $-ZQ$ である。

【0153】

実施形態45. 実施形態44の化合物であって、式中、各 R^6 は、単独で、 $-ZQ$ である。 10

【0154】

実施形態46. 式1もしくは式1Aまたは実施形態1～45のいずれか一つの化合物であって、式中、各 R^6 は単独である。

【0155】

実施形態47. 式1または実施形態1～46のいずれか一つの化合物であって、式中、各Zは、独立して、直接結合、O、 $C(=O)$ 、 $S(=O)_2$ または $CH(R^{12})$ である。

【0156】

実施形態48. 実施形態47の化合物であって、式中、各Zは直接結合である。 20

【0157】

実施形態49. 式1もしくは式1Aまたは実施形態1～28のいずれか一つの化合物であって、式中、Jは、 $C(=W^4)NT^AT^B$ である。

【0158】

実施形態50. 実施形態49の化合物であって、式中、Jが $C(W^4)NT^AT^B$ である場合、Jは、明細表4において以下に示されているJ-83～J-93からなる群から選択され、

提示 4



【 0 1 5 9 】

40

【 0 1 6 0 】

【 0 1 6 1 】

【 0 1 6 2 】

【 0 1 6 3 】

実施形態 55. 実施形態 53 または実施形態 54 の化合物であって、式中、 A^1 は NR^{16} である。

【0164】

実施形態 56. 実施形態 53 の化合物であって、式中、 A^1 は CHR^{15} である。

【0165】

実施形態 57. 式 1 もしくは式 1A または実施形態 1～52 のいずれか一つの化合物であって、式中、 A^2 は、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-N(R^7)-$ 、 $-C(R^8)_2-$ または $-OC(R^8)_2-$ であり、式中、左に突出する結合は $-N=C(R^2)(R^3)$ に結合していると共に、右に突出する結合は $-C(R^4)(R^5)-$ に結合しており；

実施形態 58. 実施形態 57 の化合物であって、式中、 A^2 は $-O-$ 、 $-S-$ または $-N(R^7)-$ である。

10

【0166】

実施形態 59. 実施形態 58 の化合物であって、式中、 A^2 は $-O-$ または $-N(R^7)-$ である。

【0167】

実施形態 60. 式 1 もしくは式 1A または実施形態 1～59 のいずれかの化合物であって、式中、 W^1 は O である。

【0168】

実施形態 60a. 式 1 もしくは式 1A または実施形態 1～59 のいずれかの化合物であって、式中、 W^2 は O である。

20

【0169】

実施形態 61. 式 1 もしくは式 1A または実施形態 1～52 のいずれか一つの化合物であって、式中、 W^3 は、 OR^{24} 、 SR^{25} または $NR^{26}R^{27}$ である。

【0170】

実施形態 62. 実施形態 61 の化合物であって、式中、 W^3 は OR^{24} である。

【0171】

実施形態 63. 実施形態 61 の化合物であって、式中、 W^3 は SR^{25} である。

【0172】

実施形態 64. 実施形態 61 の化合物であって、式中、 W^3 は $NR^{26}R^{27}$ である。

【0173】

30

実施形態 65. 式 1 もしくは式 1A または実施形態 1～64 のいずれか一つの化合物であって、式中、 R^{1a} および R^{1c} は、独立して、任意により置換されているフェニル、任意により置換されているナフタレニルあるいは任意により置換されている 5 員～6 員芳香族複素環であるか；または、シアノ、 $C_1 \sim C_8$ アルキル、 $C_2 \sim C_8$ アルケニル、 $C_2 \sim C_8$ アルキニル、 $C_1 \sim C_8$ ハロアルキル、 $C_2 \sim C_8$ ハロアルケニル、 $C_2 \sim C_8$ ハロアルキニル、 $C_3 \sim C_8$ シクロアルキル、 $C_2 \sim C_8$ アルコキシアルキル、 $C_2 \sim C_8$ ハロアルコキシアルキル、 $C_2 \sim C_8$ アルキルチオアルキル、 $C_2 \sim C_8$ ハロアルキルチオアルキル、 $C_2 \sim C_8$ アルキルスルフィニルアルキル、 $C_2 \sim C_8$ アルキルスルホニルアルキル、 $C_3 \sim C_8$ アルコキシカルボニルアルキル、 $C_3 \sim C_8$ ハロアルコキシカルボニルアルキル、 $C_2 \sim C_8$ アルキルアミノアルキル、 $C_3 \sim C_{10}$ ジアルキルアミノアルキル、 $C_2 \sim C_8$ ハロアルキルアミノアルキル、 $C_4 \sim C_{10}$ シクロアルキルアミノアルキル、 $C_1 \sim C_8$ アルコキシ、 $C_1 \sim C_8$ ハロアルコキシ、 $C_3 \sim C_8$ シクロアルコキシ、 $C_3 \sim C_8$ ハロシクロアルコキシ、 $C_4 \sim C_{10}$ シクロアルキルアルコキシ、 $C_2 \sim C_8$ アルケニルオキシ、 $C_2 \sim C_8$ ハロアルケニルオキシ、 $C_2 \sim C_8$ アルキニルオキシ、 $C_3 \sim C_8$ ハロアルキニルオキシ、 $C_2 \sim C_8$ アルコキシアルコキシ、 $C_2 \sim C_8$ アルキルカルボニルオキシ、 $C_2 \sim C_8$ ハロアルキルカルボニルオキシ、 $C_1 \sim C_8$ アルキルチオ、 $C_1 \sim C_8$ ハロアルキルチオ、 $C_3 \sim C_8$ シクロアルキルチオ、 $C_3 \sim C_{10}$ トリアルキルシリル、 $C_1 \sim C_8$ アルキルアミノ、 $C_2 \sim C_8$ ジアルキルアミノ、 $C_2 \sim C_8$ アルキルカルボニルアミノ、ピロリジニル、ピペリジニルまたはモルホリニルである。

40

【0174】

50

実施形態 66. 実施形態 65 の化合物であって、式中、独立して、 R^{1a} および R^{1c} が任意により置換されているフェニル、任意により置換されているナフタレニル、または、任意により置換されている 5 員もしくは 6 員芳香族複素環以外である場合、 R^{1a} および R^{1c} は、独立して、シアノ、 $C_1 \sim C_8$ アルキル、 $C_2 \sim C_8$ アルケニル、 $C_2 \sim C_8$ アルキニル、 $C_1 \sim C_8$ ハロアルキル、 $C_2 \sim C_8$ ハロアルケニル、 $C_2 \sim C_8$ ハロアルキニル、 $C_3 \sim C_8$ シクロアルキル、 $C_2 \sim C_8$ アルコキシアルキル、 $C_2 \sim C_8$ アルキルチオアルキル、 $C_2 \sim C_8$ アルキルスルフィニルアルキル、 $C_2 \sim C_8$ アルキルスルホニルアルキル、 $C_2 \sim C_8$ アルキルアミノアルキル、 $C_3 \sim C_{10}$ ジアルキルアミノアルキル、 $C_1 \sim C_8$ アルコキシ、 $C_1 \sim C_8$ ハロアルコキシ、 $C_1 \sim C_8$ アルキルチオ、 $C_3 \sim C_{10}$ トリアルキルシリル、 $C_1 \sim C_8$ アルキルアミノ、 $C_2 \sim C_8$ ジアルキルアミノ、 $C_2 \sim C_8$ アルキルカルボニルアミノ、ピロリジニル、ピペリジニルまたはモルホリニルである。

10

【0175】

実施形態 67. 実施形態 66 の化合物であって、式中、独立して、 R^{1a} および R^{1c} が、任意により置換されているフェニル、任意により置換されているナフタレニル、または、任意により置換されている 5 員もしくは 6 員芳香族複素環以外である場合、 R^{1a} および R^{1c} は、独立して、 $C_1 \sim C_8$ アルキル、 $C_2 \sim C_8$ アルケニル、 $C_1 \sim C_8$ ハロアルキル、 $C_2 \sim C_8$ アルコキシアルキル、 $C_2 \sim C_8$ アルキルチオアルキル、 $C_2 \sim C_8$ アルキルアミノアルキル、 $C_1 \sim C_8$ アルコキシ、 $C_1 \sim C_8$ アルキルチオ、ピロリジニル、ピペリジニルまたはモルホリニルである。

20

【0176】

実施形態 68. 実施形態 66 の化合物であって、式中、独立して、 R^{1a} および R^{1c} が、任意により置換されているフェニル、任意により置換されているナフタレニル、または、任意により置換されている 5 員もしくは 6 員芳香族複素環以外である場合、 R^{1a} および R^{1c} は、独立して、 $C_2 \sim C_5$ アルキル、 $C_2 \sim C_5$ アルケニル、 $C_2 \sim C_5$ ハロアルキル、 $C_2 \sim C_5$ ハロアルケニル、 $C_2 \sim C_5$ ハロアルキルチオアルキル、 $C_2 \sim C_5$ アルコキシアルキル、 $C_2 \sim C_5$ ハロアルコキシアルキル、 $C_2 \sim C_5$ アルキルチオアルキル、 $C_2 \sim C_5$ アルキルアミノアルキル、 $C_2 \sim C_5$ アルキルカルボニルオキシ、 $C_2 \sim C_5$ ハロアルキルカルボニルオキシ、 $C_2 \sim C_5$ アルコキシ、 $C_2 \sim C_5$ ハロアルコキシ、 $C_2 \sim C_5$ アルキルチオ、 $C_2 \sim C_5$ アルキルアミノまたは $C_2 \sim C_5$ アルキルカルボニルアミノである。

30

【0177】

実施形態 69. 実施形態 68 の化合物であって、式中、独立して、 R^{1a} および R^{1c} が、任意により置換されているフェニル、任意により置換されているナフタレニル、または、任意により置換されている 5 員もしくは 6 員芳香族複素環以外である場合、 R^{1a} および R^{1c} は、独立して、 $C_3 \sim C_5$ アルキル、 $C_3 \sim C_5$ アルケニル、 $C_3 \sim C_5$ ハロアルキル、 $C_3 \sim C_5$ ハロアルケニル、 $C_2 \sim C_4$ ハロアルキルチオアルキル、 $C_2 \sim C_4$ アルコキシアルキル、 $C_2 \sim C_4$ ハロアルコキシアルキル、 $C_2 \sim C_4$ アルキルチオアルキル、 $C_2 \sim C_4$ アルキルアミノアルキル、 $C_2 \sim C_3$ アルキルカルボニルオキシ、 $C_2 \sim C_3$ ハロアルキルカルボニルオキシ、 $C_2 \sim C_4$ アルコキシ、 $C_2 \sim C_4$ ハロアルコキシ、 $C_2 \sim C_4$ アルキルチオ、 $C_2 \sim C_4$ アルキルアミノまたは $C_2 \sim C_3$ アルキルカルボニルアミノである。

40

【0178】

実施形態 70. 実施形態 69 の化合物であって、式中、独立して、 R^{1a} および R^{1c} が、任意により置換されているフェニル、任意により置換されているナフタレニル、または、任意により置換されている 5 員もしくは 6 員芳香族複素環以外である場合、 R^{1a} および R^{1c} は、独立して、 $C_3 \sim C_5$ ハロアルキル、 $C_3 \sim C_5$ ハロアルケニル、 $C_3 \sim C_5$ ハロアルキルチオアルキル、 $C_3 \sim C_5$ ハロアルコキシアルキル、 $C_2 \sim C_3$ ハロアルキルカルボニルオキシまたは $C_2 \sim C_4$ ハロアルコキシである。

【0179】

50

実施形態 71. 実施形態 70 の化合物であって、式中、独立して、 R^{1a} および R^{1c} が、任意により置換されているフェニル、任意により置換されているナフタレニル、または、任意により置換されている 5 員もしくは 6 員芳香族複素環以外である場合、 R^{1a} および R^{1c} は、独立して、 C_4 ハロアルキル、 C_4 ハロアルケニル、 C_3 ハロアルコキシアルキルまたは C_3 ハロアルコキシである。

【0180】

実施形態 72. 式 1 もしくは式 1A または実施形態 65 の化合物であって、式中、独立して、 R^{1a} および R^{1c} が、任意により置換されているフェニル、任意により置換されているナフタレニル、または、任意により置換されている 5 員もしくは 6 員芳香族複素環である場合、任意により置換されているフェニル、任意により置換されているナフタレニル、あるいは、任意により置換されている 5 員もしくは 6 員芳香族複素環は、任意により、3 個以下の独立して選択される置換基で置換されている。

10

【0181】

実施形態 73. 式 1 もしくは式 1A または実施形態 72 の化合物であって、式中、独立して、 R^{1a} および R^{1c} が、任意により置換されているフェニル、任意により置換されているナフタレニル、または、任意により置換されている 5 員もしくは 6 員芳香族複素環である場合、任意により置換されているフェニル、任意により置換されているナフタレニル、あるいは、任意により置換されている 5 員もしくは 6 員芳香族複素環は、任意により、2 個以下の独立して選択される置換基で置換されている。

20

【0182】

実施形態 74. 式 1 もしくは式 1A、または、実施形態 72 もしくは 73 の化合物であって、式中、独立して、 R^{1a} および R^{1c} が、任意により置換されているフェニル、任意により置換されているナフタレニル、または、任意により置換されている 5 員もしくは 6 員芳香族複素環である場合、フェニル、ナフタレニルまたは 5 員もしくは 6 員芳香族複素環上の任意の置換基は、独立して、炭素環員上では R^{33a} および窒素環員上では R^{33b} から選択され；

各 R^{33a} は、独立して、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシ、アミノ、ニトロ、 $C_1 \sim C_6$ アルキル、 $C_2 \sim C_6$ アルケニル、 $C_2 \sim C_6$ アルキニル、 $C_3 \sim C_6$ シクロアルキル、 $C_4 \sim C_{10}$ シクロアルキルアルキル、 $C_4 \sim C_{10}$ アルキルシクロアルキル、 $C_5 \sim C_{10}$ アルキルシクロアルキルアルキル、 $C_1 \sim C_6$ ハロアルキル、 $C_2 \sim C_6$ ハロアルケニル、 $C_2 \sim C_6$ ハロアルキニル、 $C_3 \sim C_6$ ハロシクロアルキル、 $C_1 \sim C_4$ アルコキシ、 $C_1 \sim C_4$ ハロアルコキシ、 $C_1 \sim C_4$ アルキルチオ、 $C_1 \sim C_4$ アルキルスルフィニル、 $C_1 \sim C_4$ アルキルスルホニル、 $C_1 \sim C_4$ ハロアルキルチオ、 $C_1 \sim C_4$ ハロアルキルスルフィニル、 $C_1 \sim C_4$ ハロアルキルスルホニル、 $C_1 \sim C_4$ アルキルアミノ、 $C_2 \sim C_8$ ジアルキルアミノ、 $C_3 \sim C_6$ シクロアルキルアミノ、 $C_2 \sim C_4$ アルコキシアルキル、 $C_1 \sim C_4$ ヒドロキシアルキル、 $C_2 \sim C_4$ アルキルカルボニル、 $C_2 \sim C_6$ アルコキシカルボニル、 $C_2 \sim C_6$ アルキルカルボニルオキシ、 $C_2 \sim C_6$ アルキルカルボニルチオ、 $C_2 \sim C_6$ アルキルアミノカルボニル、 $C_3 \sim C_8$ ジアルキルアミノカルボニルまたは $C_3 \sim C_6$ トリアルキルシリルであり；および

30

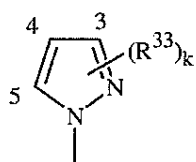
各 R^{33b} は、独立して、 $C_1 \sim C_6$ アルキル、 $C_3 \sim C_6$ アルケニル、 $C_3 \sim C_6$ アルキニル、 $C_3 \sim C_6$ シクロアルキル、 $C_1 \sim C_6$ ハロアルキル、 $C_3 \sim C_6$ ハロアルケニル、 $C_3 \sim C_6$ ハロアルキニル、 $C_3 \sim C_6$ ハロシクロアルキルまたは $C_2 \sim C_4$ アルコキシアルキルである。

40

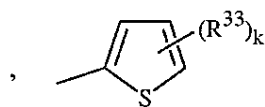
【0183】

実施形態 75. 実施形態 74 の化合物であって、式中、独立して、 R^{1a} および R^{1c} は、明細表 5 において以下に示されている U-1 ~ U-50 の一つから選択され、

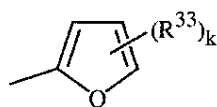
【化 2 5】

提示 5

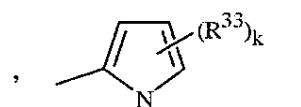
U-1



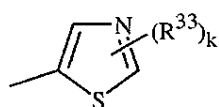
U-2



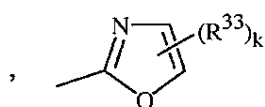
U-3



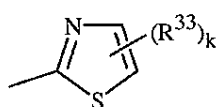
U-4



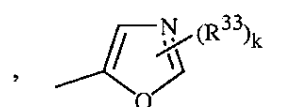
U-5



U-6



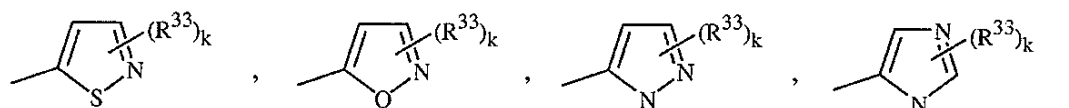
U-7



U-8

【 0 1 8 4 】

【化 2 6】

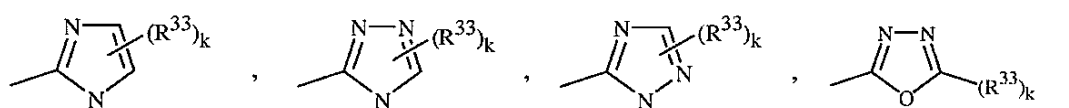


U-9

U-10

U-11

U-12

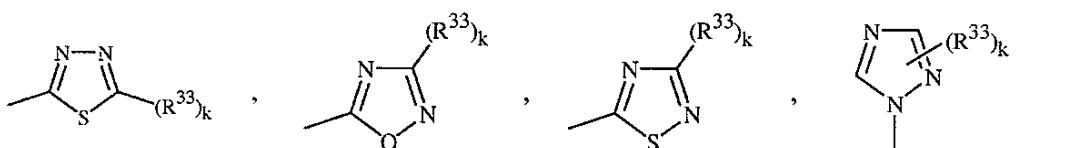


U-13

U-14

U-15

U-16

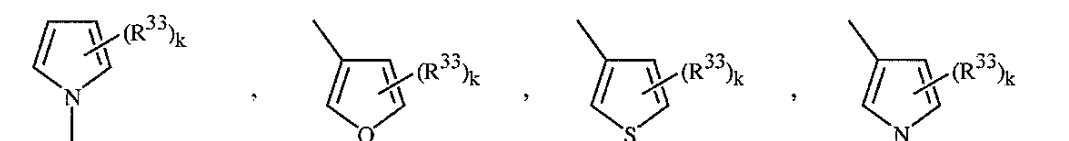


U-17

U-18

U-19

U-20

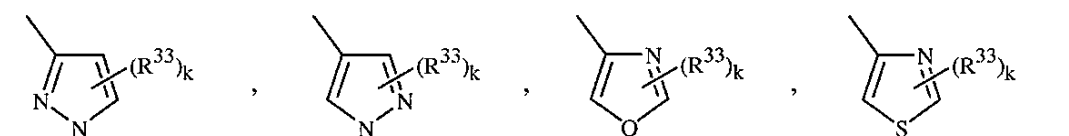


U-21

U-22

U-23

U-24

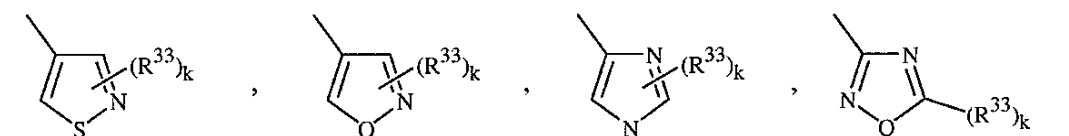


U-25

U-26

U-27

U-28

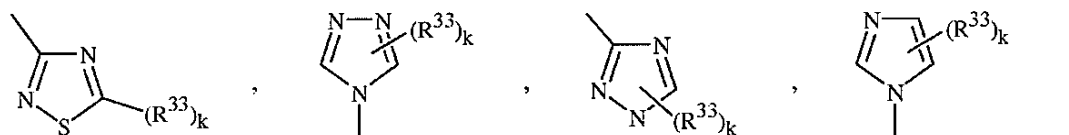


U-29

U-30

U-31

U-32

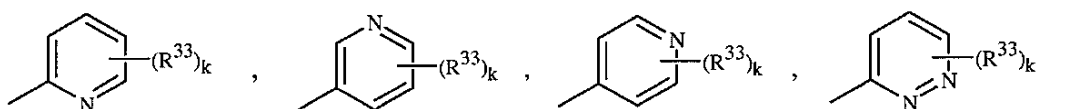


U-33

U-34

U-35

U-36



U-37

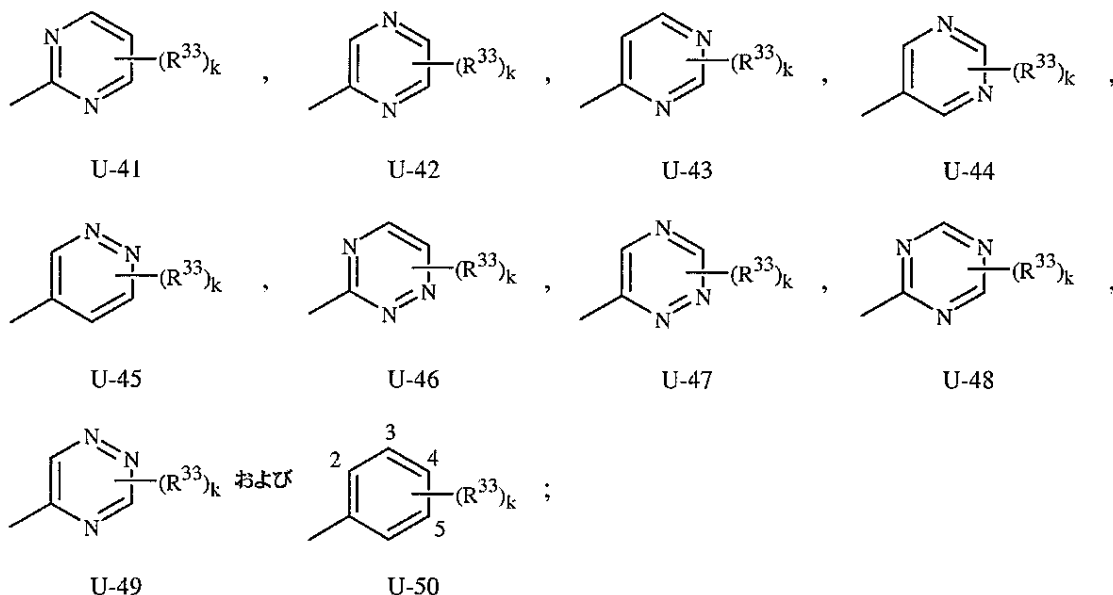
U-38

U-39

U-40

【 0 1 8 5】

【化 27】



10

式中、 R^{33} が炭素環員に結合している場合、前記 R^{33} は R^{33a} から選択されると共に、 R^{33} が窒素環員（例えば、U-4、U-11～U-15、U-24～U-26、U-31またはU-35における）に結合している場合、前記 R^{33} は、 R^{33b} から選択され；および、 k は0、1または2である。

20

【0186】

実施形態76．実施形態75の化合物であって、式中、独立して、 R^{1a} および R^{1c} は、U-1～U-5、U-8、U-11、U-13、U-15、U-20～U-28、U-31、U-36～U-39およびU-50から選択される。

【0187】

実施形態77．実施形態76の化合物であって、式中、独立して、 R^{1a} および R^{1c} は、U-1～U-3、U-5、U-8、U-11、U-13、U-20、U-22、U-23、U-25～U-28、U-36～U-39およびU-50から選択される。

30

【0188】

実施形態77a．実施形態77の化合物であって、式中、独立して、 R^{1a} および R^{1c} は、U-1～U-3、U-11、U-13、U-20、U-22、U-23、U-36～U-39およびU-50から選択される。

【0189】

実施形態77b．実施形態77aの化合物であって、式中、独立して、 R^{1a} および R^{1c} はU-1、U-20またはU-50である。

【0190】

実施形態77c．実施形態77bの化合物であって、式中、独立して、 R^{1a} および R^{1c} はU-1またはU-50である。

40

【0191】

実施形態77d．実施形態77cの化合物であって、式中、独立して、 R^{1a} および R^{1c} はU-1である。

【0192】

実施形態77e．実施形態77bの化合物であって、式中、独立して、 R^{1a} および R^{1c} はU-20である。

【0193】

実施形態77f．実施形態77bまたは77cの化合物であって、式中、独立して、 R^{1a} および R^{1c} はU-50である。

【0194】

50

実施形態 77 g. 式 1 もしくは式 1 A または実施形態 1 ~ 77 f のいずれか一つの化合物であって、式中、各 $R^{3\ 3\ a}$ は、独立して、ハロゲン、 $C_1 \sim C_6$ アルキル、 $C_1 \sim C_6$ ハロアルキルまたは $C_2 \sim C_4$ アルコキシアルキルである。

【0195】

実施形態 77 h. 実施形態 1 ~ 77 g の化合物であって、式中、各 $R^{3\ 3\ a}$ は、独立して、ハロゲン、 $C_1 \sim C_3$ アルキル、 $C_1 \sim C_3$ ハロアルキルまたは $C_2 \sim C_3$ アルコキシアルキルである。

【0196】

実施形態 77 i. 式 1 もしくは式 1 A または実施形態 1 ~ 77 a のいずれか一つの化合物であって、式中、各 $R^{3\ 3\ b}$ は、独立して、 $C_1 \sim C_6$ アルキルである。

10

【0197】

実施形態 78. 式 1 もしくは式 1 A または実施形態 1 ~ 52 のいずれか一つの化合物であって、式中、 R^2 は、単独で（すなわち、 R^3 とは一緒にせずに）、H、シアノ、 $C_1 \sim C_4$ アルキル、 $C_2 \sim C_4$ アルケニル、 $C_2 \sim C_4$ アルキニル、 $C_1 \sim C_4$ ハロアルキル、 $C_2 \sim C_4$ ハロアルケニル、 $C_2 \sim C_4$ ハロアルキニル、 $C_2 \sim C_4$ アルコキシアルキル、 $C_2 \sim C_4$ アルキルチオアルキル、 $C_2 \sim C_4$ アルキルカルボニル、 $C_2 \sim C_4$ ハロアルキルカルボニル、 $C_2 \sim C_4$ アルコキシカルボニル、 $C_1 \sim C_4$ アルコキシ、 $C_1 \sim C_4$ ハロアルコキシ、 $C_2 \sim C_4$ アルケニルオキシ、 $C_2 \sim C_4$ ハロアルケニルオキシ、 $C_2 \sim C_4$ アルキニルオキシ、 $C_3 \sim C_4$ ハロアルキニルオキシ、 $C_2 \sim C_4$ アルコキシアルコキシ、 $C_1 \sim C_4$ アルキルチオ、 $C_1 \sim C_4$ ハロアルキルチオ、 $C_1 \sim C_4$ アルキルアミノ、 $C_2 \sim C_4$ ジアルキルアミノ、 $C_1 \sim C_4$ ハロアルキルアミノまたは $C_2 \sim C_4$ ハロジアルキルアミノである。

20

【0198】

実施形態 79. 実施形態 78 の化合物であって、式中、 R^2 は、単独で、H、シアノ、 $C_1 \sim C_3$ アルキル、 $C_2 \sim C_3$ アルケニル、 $C_2 \sim C_3$ アルキニル、 $C_1 \sim C_3$ ハロアルキル、 $C_2 \sim C_3$ ハロアルケニル、 $C_2 \sim C_3$ ハロアルキニル、 $C_1 \sim C_3$ アルコキシまたは $C_1 \sim C_3$ ハロアルコキシである。

【0199】

実施形態 80. 実施形態 79 の化合物であって、式中、 R^2 は、単独で、H、 $C_1 \sim C_3$ アルキルまたは $C_1 \sim C_3$ ハロアルキルである。

30

【0200】

実施形態 81. 実施形態 80 の化合物であって、式中、 R^2 は、単独で、H、 $C_1 \sim C_3$ アルキルまたは $C_1 \sim C_3$ フルオロアルキルである。

【0201】

実施形態 82. 実施形態 81 の化合物であって、式中、 R^2 は、メチル、トリフルオロメチルまたは CF_3CH_2 である。

【0202】

実施形態 83. 式 1 もしくは式 1 A、または、実施形態 1 ~ 52 あるいは 78 ~ 82 のいずれか一つの化合物であって、式中、 R^2 は単独である。

40

【0203】

実施形態 84. 式 1 もしくは式 1 A、または、実施形態 1 ~ 52 あるいは 78 ~ 83 のいずれか一つの化合物であって、式中、 R^3 は、単独で（すなわち、 R^2 または R^7 とは一緒にせずに）、H、 $C_1 \sim C_3$ アルキル、 $C_1 \sim C_3$ アルコキシまたは $C_1 \sim C_3$ ハロアルキルである。

【0204】

実施形態 85. 実施形態 84 の化合物であって、式中、 R^3 は、単独で、H、 $C_1 \sim C_3$ アルキルまたは $C_1 \sim C_3$ ハロアルキルである。

【0205】

実施形態 86. 実施形態 85 の化合物であって、式中、 R^3 は、単独で、H、 $C_1 \sim C_2$ アルキルまたは $C_1 \sim C_3$ フルオロアルキルである。

50

【0206】

実施形態87. 実施形態86の化合物であって、式中、 R^3 はH、メチルまたはトリフルオロメチルである。

【0207】

実施形態88. 式1もしくは式1A、または、実施形態1～52あるいは78～87のいずれか一つの化合物であって、式中、 R^3 は単独である。

【0208】

実施形態89. 式1もしくは式1Aまたは実施形態1～52のいずれか一つの化合物であって、式中、 R^2 および R^3 がこれらが結合している炭素原子と一緒に環を形成している場合、環は3員～6員であり、2個以下のO、2個以下のSおよび2個以下のNから独立して選択される2個以下のヘテロ原子ならびに炭素原子から選択される環員を含有しており、ここで、1個以下の炭素原子環員はC(=O)またはC(=S)であり、ならびに、環は、任意により、炭素原子環員上では、ハロゲン、シアノ、 $C_1 \sim C_2$ アルキル、 $C_1 \sim C_2$ ハロアルキル、 $C_1 \sim C_2$ アルコキシおよび $C_1 \sim C_2$ ハロアルコキシから独立して選択され、ならびに、窒素原子環員上では、シアノ、 $C_1 \sim C_2$ アルキルおよび $C_1 \sim C_2$ アルコキシから独立して選択される3個以下の置換基で置換されている。

10

【0209】

実施形態90. 式1もしくは式1Aまたは実施形態1～52のいずれか一つの化合物であって、式中、 R^3 および R^7 がこれらが結合している結合原子と一緒に環を形成している場合、環は、任意により、炭素原子環員上では、ハロゲン、シアノ、ニトロ、 $C_1 \sim C_2$ アルキル、 $C_1 \sim C_2$ ハロアルキル、 $C_1 \sim C_2$ アルコキシおよび $C_1 \sim C_2$ ハロアルコキシから独立して選択され、ならびに、窒素原子環員上では、シアノ、 $C_1 \sim C_2$ アルキルおよび $C_1 \sim C_2$ アルコキシから独立して選択される2個以下の置換基で置換されている。

20

【0210】

実施形態91. 実施形態90の化合物であって、式中、 R^3 および R^7 がこれらが結合している結合原子と一緒に環を形成している場合、環は、任意により、炭素原子環員上では、ハロゲンおよび $C_1 \sim C_2$ アルキルから独立して選択される2個以下の置換基で置換されている。

30

【0211】

実施形態92. 実施形態91の化合物であって、式中、 R^3 および R^7 は、これらが結合している結合原子と一緒に環を形成している。

【0212】

実施形態93. 式1もしくは式1A、または、実施形態1～52あるいは78～92のいずれか一つの化合物であって、式中、 R^4 は、任意により置換されているフェニル、任意により置換されているナフタレニルまたは任意により置換されている5員もしくは6員芳香族複素環であるか；または、H、シアノ、ヒドロキシ、 $C_1 \sim C_3$ アルキル、 $C_2 \sim C_3$ アルケニル、 $C_2 \sim C_3$ アルキニル、 $C_1 \sim C_3$ ハロアルキル、 $C_2 \sim C_3$ ハロアルケニル、 $C_2 \sim C_3$ ハロアルキニル、 $C_2 \sim C_3$ アルキルカルボニル、 $C_2 \sim C_3$ ハロアルキルカルボニル、 $C_1 \sim C_3$ アルコキシ、 $C_1 \sim C_3$ ハロアルコキシ、 $C_1 \sim C_3$ アルキルチオ、 $C_1 \sim C_3$ ハロアルキルチオ、 $C_2 \sim C_3$ アルキルカルボニルオキシあるいは $C_2 \sim C_3$ ハロアルキルカルボニルオキシである。

40

【0213】

実施形態94. 実施形態93の化合物であって、式中、 R^4 が、任意により置換されているフェニル、任意により置換されているナフタレニルまたは任意により置換されている5員もしくは6員芳香族複素環以外である場合、 R^4 は、H、シアノ、ヒドロキシ、 C_1

50

～C₃ アルキル、C₂～C₃ アルケニル、C₂～C₃ アルキニル、C₁～C₃ ハロアルキル、C₂～C₃ ハロアルケニル、C₂～C₃ ハロアルキニル、C₂～C₃ アルキルカルボニル、C₂～C₃ ハロアルキルカルボニル、C₁～C₃ アルコキシ、C₁～C₃ ハロアルコキシ、C₁～C₃ アルキルチオ、C₁～C₃ ハロアルキルチオ、C₂～C₃ アルキルカルボニルオキシまたはC₂～C₃ ハロアルキルカルボニルオキシである。

【0214】

実施形態95. 実施形態94の化合物であって、式中、R⁴が、任意により置換されているフェニル、任意により置換されているナフタレニルまたは任意により置換されている5員もしくは6員芳香族複素環以外である場合、R⁴は、H、シアノ、ヒドロキシ、C₁～C₃ アルキル、C₁～C₃ ハロアルキル、C₁～C₃ アルコキシ、C₁～C₃ ハロアルコキシ、C₁～C₃ アルキルチオ、C₁～C₃ ハロアルキルチオ、C₂～C₃ アルキルカルボニルオキシまたはC₂～C₃ ハロアルキルカルボニルオキシである。

10

【0215】

実施形態96. 式1もしくは式1A、または、実施形態1～52あるいは78～95のいずれか一つの化合物であって、式中、R⁴は、H、シアノ、メチル、メトキシまたはCH₃C(=O)O-である。

【0216】

実施形態97. 実施形態96の化合物であって、式中、R⁴はHまたはメチルである。

【0217】

実施形態98. 実施形態97の化合物であって、式中、R⁴はHである。

20

【0218】

実施形態99. 式1もしくは式1Aまたは実施形態1～95のいずれか一つの化合物であって、式中、R⁴が、任意により置換されているフェニル、任意により置換されているナフタレニルまたは任意により置換されている5員もしくは6員芳香族複素環である場合、任意により置換されているフェニル、任意により置換されているナフタレニルまたは任意により置換されている5員もしくは6員芳香族複素環は、3個以下の任意の置換基で置換されている。

【0219】

実施形態100. 実施形態99の化合物であって、式中、R⁴が、任意により置換されているフェニル、任意により置換されているナフタレニルまたは任意により置換されている5員もしくは6員芳香族複素環である場合、任意により置換されているフェニル、任意により置換されているナフタレニルまたは任意により置換されている5員もしくは6員芳香族複素環は、2個以下の任意の置換基で置換されている。

30

【0220】

実施形態101. 式1もしくは式1A、または、実施形態1～52あるいは78～100のいずれか一つの化合物であって、R⁴が、任意により置換されているフェニル、任意により置換されているナフタレニルまたは任意により置換されている5員もしくは6員芳香族複素環である場合、フェニル、ナフタレニルまたは5員もしくは6員芳香族複素環上の任意の置換基は、独立して、炭素環員上ではR^{3 2 a}から、および、窒素環員上ではR^{3 2 b}から選択され；

40

各R^{3 2 a}は、独立して、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシ、アミノ、ニトロ、C₁～C₆ アルキル、C₂～C₆ アルケニル、C₂～C₆ アルキニル、C₃～C₆ シクロアルキル、C₄～C₁₀ シクロアルキルアルキル、C₄～C₁₀ アルキルシクロアルキル、C₅～C₁₀ アルキルシクロアルキルアルキル、C₁～C₆ ハロアルキル、C₂～C₆ ハロアルケニル、C₂～C₆ ハロアルキニル、C₃～C₆ ハロシクロアルキル、C₁～C₄ アルコキシ、C₁～C₄ ハロアルコキシ、C₁～C₄ アルキルチオ、C₁～C₄ アルキルスルフィニル、C₁～C₄ アルキルスルホニル、C₁～C₄ ハロアルキルチオ、C₁～C₄ ハロアルキルスルフィニル、C₁～C₄ ハロアルキルスルホニル、C₁～C₄ アルキルアミノ、C₂～C₈ ジアルキルアミノ、C₃～C₆ シクロアルキルアミノ、C₂～C₄ アルコキシアルキル、C₁～C₄ ヒドロキシアルキル、C₂～C₄ アルキルカルボニル、C₂～C

50

₆ アルコキシカルボニル、C₂～C₆ アルキルカルボニルオキシ、C₂～C₆ アルキルカルボニルチオ、C₂～C₆ アルキルアミノカルボニル、C₃～C₈ ジアルキルアミノカルボニルまたはC₃～C₆ トリアルキルシリルであり；および

各R^{3 2 b}は、独立して、C₁～C₆ アルキル、C₃～C₆ アルケニル、C₃～C₆ アルキニル、C₃～C₆ シクロアルキル、C₁～C₆ ハロアルキル、C₃～C₆ ハロアルケニル、C₃～C₆ ハロアルキニル、C₃～C₆ ハロシクロアルキルまたはC₂～C₄ アルコキシアルキルである。

【0221】

実施形態102．実施形態101の化合物であって、式中、各R^{3 2 a}は、独立して、ハロゲン、C₁～C₂ アルキル、C₁～C₂ ハロアルキルまたはC₁～C₂ アルコキシである。

10

【0222】

実施形態103．実施形態102の化合物であって、式中、各R^{3 2 a}は、独立して、Cl、Br、I、C₁～C₂ アルキル、トリフルオロメチルまたはメトキシである。

【0223】

実施形態104．実施形態103の化合物であって、式中、各R^{3 2 a}は、独立して、Cl、Br、C₁～C₂ アルキルまたはトリフルオロメチルである。

【0224】

実施形態105．式1もしくは式1A、または、実施形態2～52あるいは78～104のいずれか一つの化合物であって、式中、R⁴は、任意により置換されているナフタレニル以外である。

20

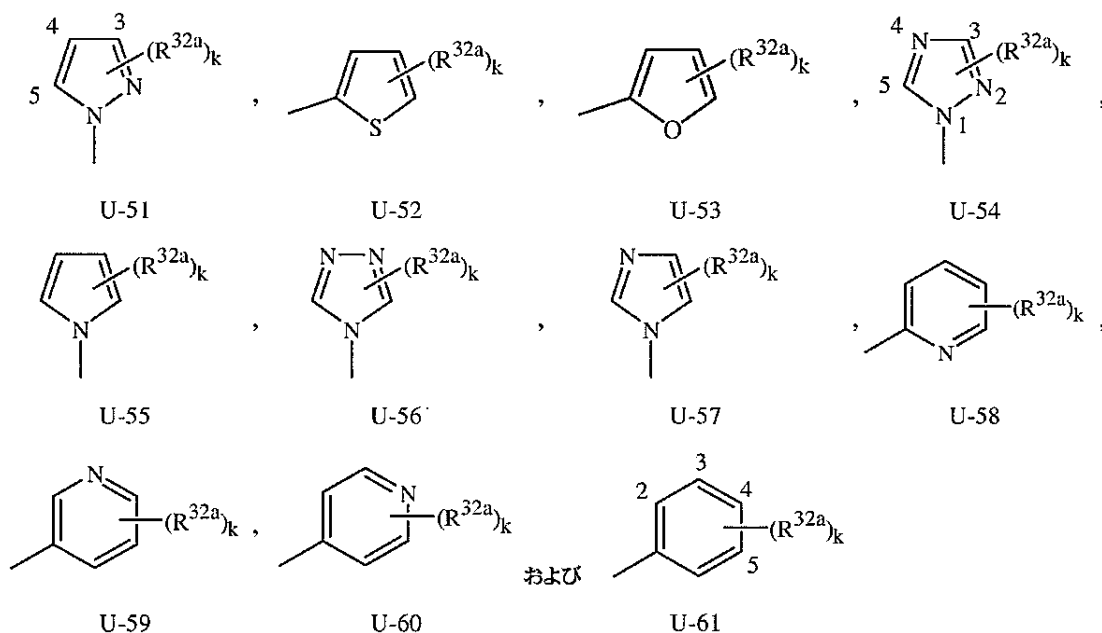
【0225】

実施形態106．式1もしくは式1A、または、実施形態1～52あるいは78～104のいずれか一つの化合物であって、式中、R⁴が、任意により置換されている5員～6員芳香族複素環である場合、R⁴は、U-51～U-60からなる群から選択され、および、R⁴が任意により置換されているフェニルである場合、R⁴は、明細表5Aにおいて以下に示されているU-61から選択され、

【化28】

提示 5A

30



40

式中、kは0、1または2である。

【0226】

実施形態107．実施形態106の化合物であって、式中、R⁴は、U-51～U-6

50

1 からなる群から選択される。

【0227】

実施形態108. 実施形態107の化合物であって、式中、 R^4 は、U-51、U-54およびU-61から選択される。

【0228】

実施形態109. 実施形態108の化合物であって、式中、 R^4 はU-51である。

【0229】

実施形態110. 式1もしくは式1Aまたは実施形態1～109のいずれか一つの化合物であって、式中、 R^5 は、Hまたは $C_1 \sim C_2$ アルキルである。

【0230】

実施形態111. 実施形態110の化合物であって、式中、 R^5 はHである。

【0231】

実施形態112. 式1もしくは式1Aまたは実施形態1～111のいずれか一つの化合物であって、式中、各Zは、独立して、直接結合、O、 $C(=O)$ 、 $S(O)_m$ または $CH(R^{12})$ である。

【0232】

実施形態113. 式1もしくは式1Aまたは実施形態1～112のいずれか一つの化合物であって、式中、各Zは、独立して、直接結合、O、 $C(=O)$ 、 $S(=O)_2$ または $CH(R^{12})$ である。

【0233】

実施形態114. 実施形態113の化合物であって、式中、各Zは、直接結合である。

【0234】

実施形態115. 式1もしくは式1Aまたは実施形態1～114のいずれか一つの化合物であって、式中、各Qは、独立して、フェニル、ベンジル、ナフタレニル、5員～6員芳香族複素環あるいは8員～11員芳香族複素環式二環系であり、各々は、任意により、炭素原子環員および窒素原子環員上では R^{6b} から独立して選択される1個以下の置換基で置換されており、ならびに、各々は任意により、炭素原子環員上では R^{6a} から独立して選択され、ならびに、窒素原子環員上では $C_1 \sim C_3$ アルキル、 $C_2 \sim C_3$ アルキルカルボニル、 $C_2 \sim C_3$ アルコキシカルボニルまたは $C_1 \sim C_3$ アルコキシから独立して選択される5個以下の置換基で置換されており；または

3員～7員非芳香族炭素環、5員～7員非芳香族複素環または8員～11員非芳香族二環系であって、各環もしくは環系は、2個以下のO、2個以下のSおよび4個以下のN原子から独立して選択される4個以下のヘテロ原子ならびに炭素原子から選択される環員を含有しており、ここで、3個以下の炭素原子環員は、独立して、 $C(=O)$ および $C(=S)$ から選択され、硫黄原子環員は、独立して、 $S(=O)_s$ ($=NR^{11}$)_fから選択され、各環もしくは環系は、任意により、炭素原子環員および窒素原子環員上で R^{6b} から独立して選択される1個以下の置換基で置換されており、ならびに、各環もしくは環系は、任意により、炭素原子環員上では R^{6a} から独立して選択され、および、窒素原子環員上では、 $C_1 \sim C_3$ アルキル、 $C_2 \sim C_3$ アルキルカルボニル、 $C_2 \sim C_3$ アルコキシカルボニルおよび $C_1 \sim C_3$ アルコキシから独立して選択される5個以下の置換基で置換されている。

【0235】

実施形態116. 実施形態115の化合物であって、式中、Qは、明細表6において以下に示されているQ-1～Q-102から選択される環であり、

【0236】

10

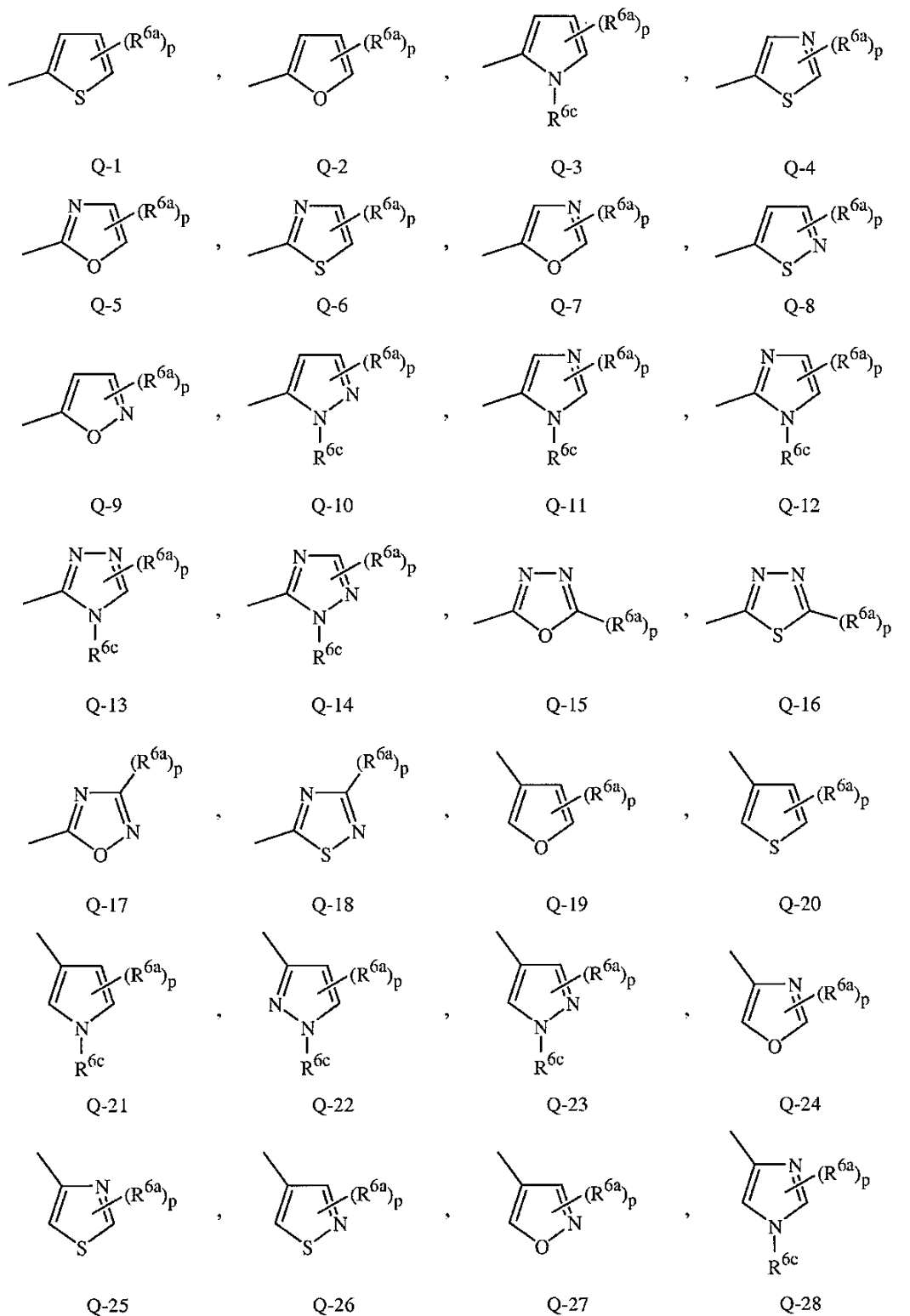
20

30

40

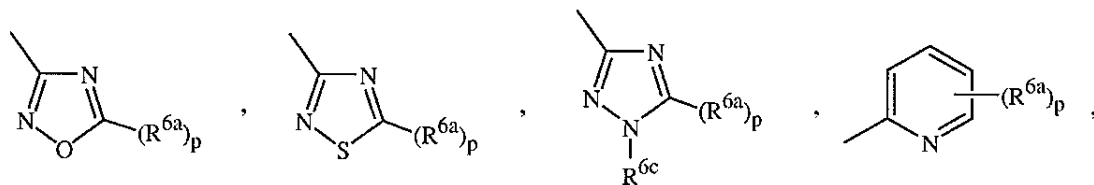
【化 2 9】

提示 6



【 0 2 3 7 】

【化 3 0】

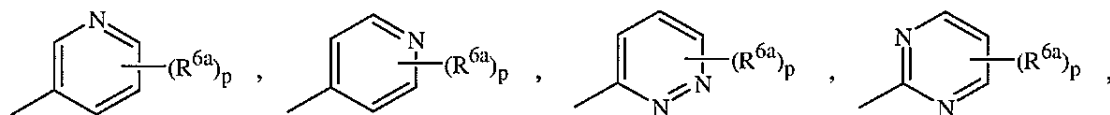


Q-29

Q-30

Q-31

Q-32

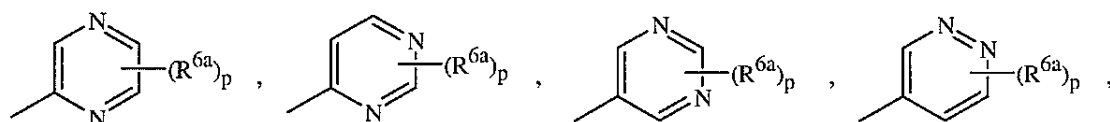


Q-33

Q-34

Q-35

Q-36

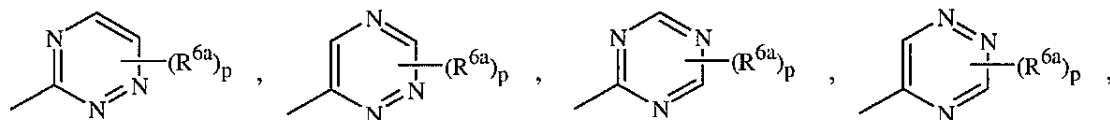


Q-37

Q-38

Q-39

Q-40

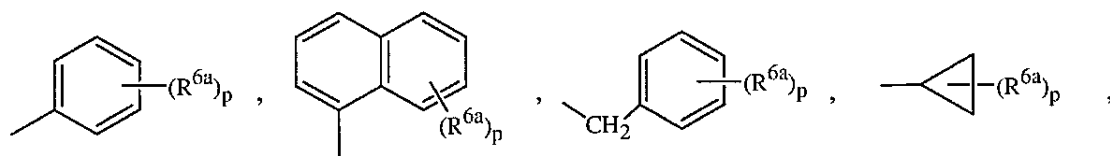


Q-41

Q-42

Q-43

Q-44

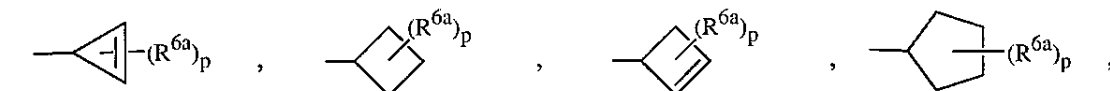


Q-45

Q-46

Q-47

Q-48

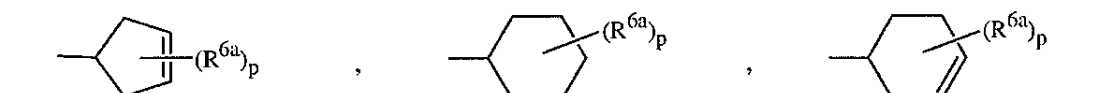


Q-49

Q-50

Q-51

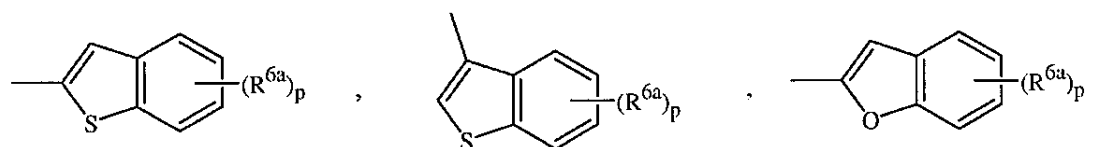
Q-52



Q-53

Q-54

Q-55



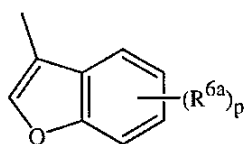
Q-56

Q-57

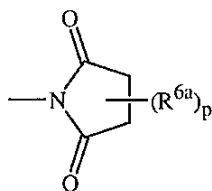
Q-58

【 0 2 3 8 】

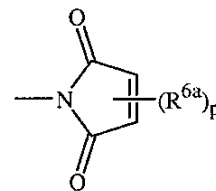
【化 3 1】



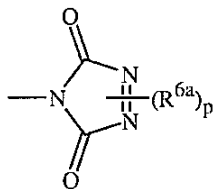
Q-59



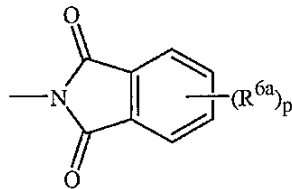
Q-60



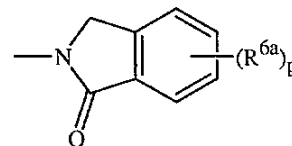
Q-61



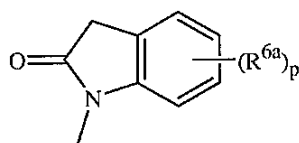
Q-62



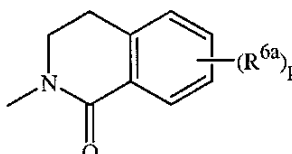
Q-63



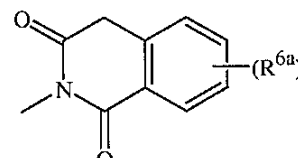
Q-64



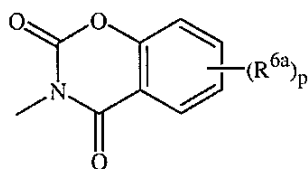
Q-65



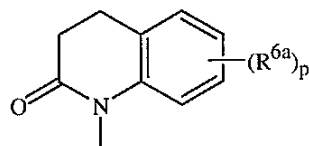
Q-66



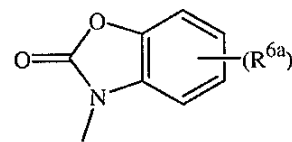
Q-67



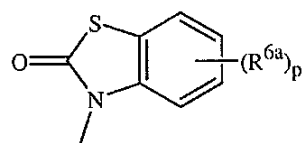
Q-68



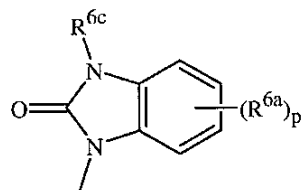
Q-69



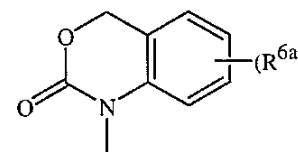
Q-70



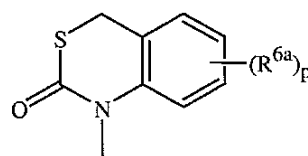
Q-71



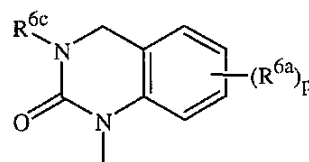
Q-72



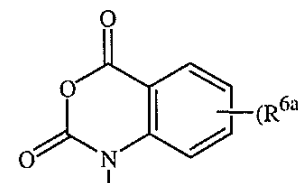
Q-73



Q-74



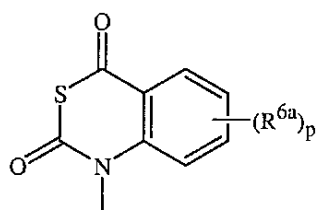
Q-75



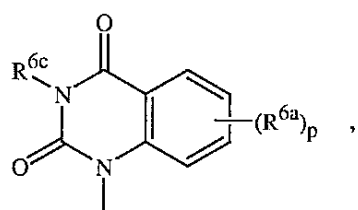
Q-76

【 0 2 3 9】

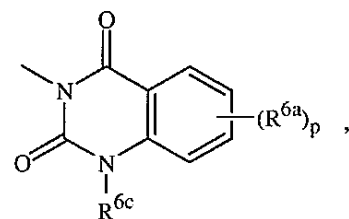
【化 3 2】



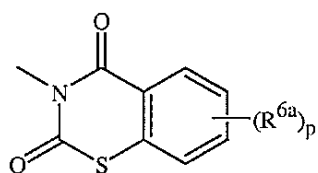
Q-77



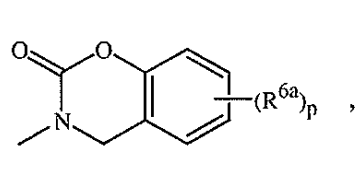
Q-78



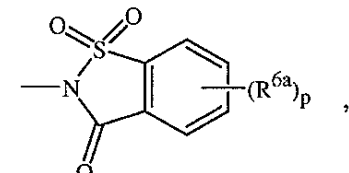
Q-79



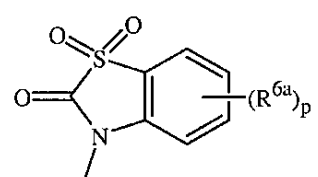
Q-80



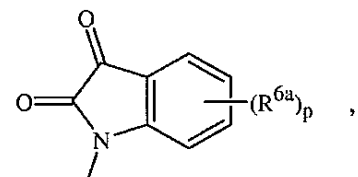
Q-81



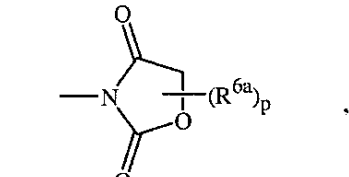
Q-82



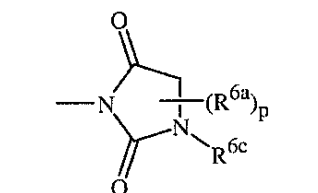
Q-83



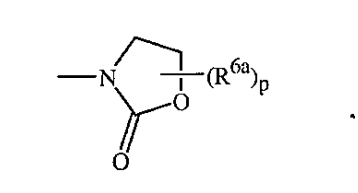
Q-84



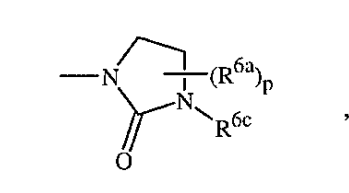
Q-85



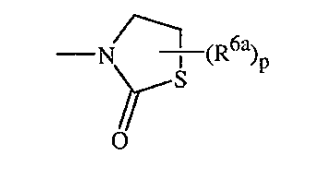
Q-86



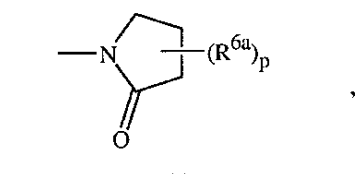
Q-87



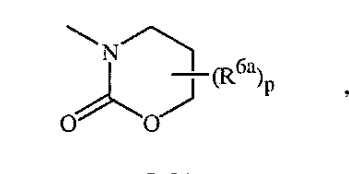
Q-88



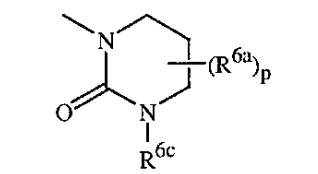
Q-89



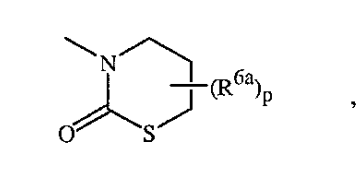
Q-90



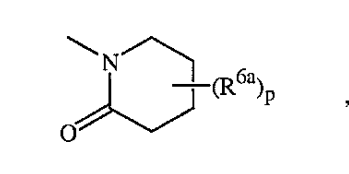
Q-91



Q-92



Q-93



Q-94

【 0 2 4 0 】

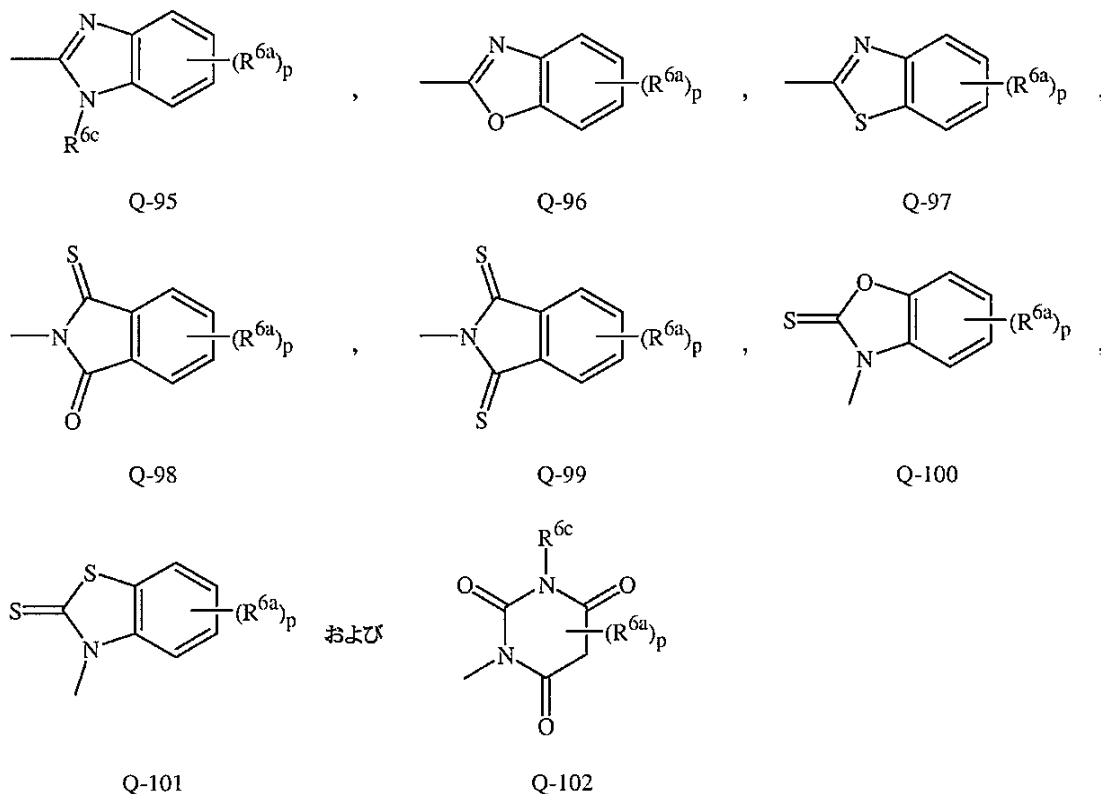
10

20

30

40

【化 3 3】



【0241】

式中、 p は0～5の整数であり；および、各 R^{6c} は、独立して、 H 、 $C_1 \sim C_3$ アルキル、 $C_2 \sim C_3$ アルキルカルボニル、 $C_2 \sim C_3$ アルコキシカルボニルおよび $C_1 \sim C_3$ アルコキシから選択される。

【0242】

実施形態117．実施形態116の化合物であって、式中、 p は、0、1、2または3である。

【0243】

実施形態118．実施形態116の化合物であって、式中、 Q は、 $Q-1$ 、 $Q-20$ 、 $Q-32 \sim Q-34$ 、 $Q-45 \sim Q-47$ 、 $Q-60 \sim Q-73$ 、 $Q-76 \sim Q-79$ 、 $Q-84 \sim Q-94$ および $Q-98 \sim Q-102$ から選択される。

【0244】

実施形態119．実施形態118の化合物であって、式中、 Q は、 $Q-1$ 、 $Q-45$ 、 $Q-63$ 、 $Q-64$ 、 $Q-65$ 、 $Q-68$ 、 $Q-69$ 、 $Q-70$ 、 $Q-71$ 、 $Q-72$ 、 $Q-73$ 、 $Q-76$ 、 $Q-78$ 、 $Q-79$ 、 $Q-84$ 、 $Q-85$ 、 $Q-98$ 、 $Q-99$ 、 $Q-100$ 、 $Q-101$ および $Q-102$ から選択される。

【0245】

実施形態120．実施形態119の化合物であって、式中、 Q は、 $Q-45$ 、 $Q-63$ 、 $Q-64$ 、 $Q-65$ 、 $Q-68$ 、 $Q-69$ 、 $Q-70$ 、 $Q-71$ 、 $Q-72$ 、 $Q-84$ および $Q-85$ から選択される。

【0246】

実施形態121．実施形態120の化合物であって、式中、 Q は、 $Q-45$ 、 $Q-63$ 、 $Q-65$ 、 $Q-70$ 、 $Q-71$ 、 $Q-72$ 、 $Q-84$ および $Q-85$ から選択される。

【0247】

実施形態122．実施形態121の化合物であって、式中、 Q は、 $Q-45$ 、 $Q-63$ 、 $Q-65$ 、 $Q-70$ 、 $Q-71$ 、 $Q-72$ および $Q-84$ から選択される。

【0248】

10

20

30

40

50

実施形態 1 2 3. 式 1 もしくは式 1 A または実施形態 1 ~ 1 2 2 のいずれか一つの化合物であって、式中、各 R^{6a} は、単独で（すなわち、 R^6 とは一緒にせずに）、独立して、ハロゲン、ヒドロキシ、アミノ、シアノ、ニトロ、 $C_1 \sim C_3$ アルキル、 $C_1 \sim C_3$ ハロアルキル、 $C_1 \sim C_3$ アルコキシまたは $C_1 \sim C_3$ ハロアルコキシである。

【0 2 4 9】

実施形態 1 2 4. 実施形態 1 2 3 の化合物であって、式中、各 R^{6a} は、単独で、独立して、ハロゲン、ヒドロキシ、アミノ、シアノ、ニトロ、 $C_1 \sim C_2$ アルキル、 $C_1 \sim C_2$ ハロアルキル、 $C_1 \sim C_2$ アルコキシまたは $C_1 \sim C_2$ ハロアルコキシである。

【0 2 5 0】

実施形態 1 2 5. 実施形態 1 2 4 の化合物であって、式中、各 R^{6a} は、単独で、独立して、ハロゲン、ヒドロキシ、シアノ、 $C_1 \sim C_2$ アルキル、 $C_1 \sim C_2$ ハロアルキルまたは $C_1 \sim C_2$ アルコキシである。

10

【0 2 5 1】

実施形態 1 2 6. 式 1 もしくは式 1 A または実施形態 1 ~ 1 2 5 のいずれか一つの化合物であって、式中、各 R^{6a} は単独である。

【0 2 5 2】

実施形態 1 2 7. 実施形態 1 2 6 の化合物であって、式中、各 R^{6a} は、独立して、ハロゲン、ヒドロキシ、シアノ、 $C_1 \sim C_2$ アルキルまたは $C_1 \sim C_2$ アルコキシである。

【0 2 5 3】

実施形態 1 2 8. 実施形態 1 2 6 の化合物であって、式中、各 R^{6a} は、独立して、F、Cl、Br、ヒドロキシ、シアノ、メチルまたはメトキシである。

20

【0 2 5 4】

実施形態 1 2 9. 式 1 もしくは式 1 A のいずれか一方、または、実施形態 1 ~ 1 2 2 のいずれかの化合物であって、式中、 R^6 および R^{6a} が、これらが結合している原子と一緒に環を形成している場合、環は 5 員環 ~ 6 員環であると共に 1 個以下の O、1 個以下の S および 1 個以下の N 原子から選択される 3 個以下のヘテロ原子ならびに炭素原子から選択される環員を含有しており、ならびに、環は、任意により、炭素原子環員上では、ハロゲン、 $C_1 \sim C_2$ アルキルおよび $C_1 \sim C_2$ アルコキシから独立して選択され、ならびに、窒素原子環員上では、 $C_1 \sim C_2$ アルキルから独立して選択される 2 個以下の置換基で置換されている。

30

【0 2 5 5】

実施形態 1 3 0. 実施形態 1 2 9 の化合物であって、式中、 R^6 および R^{6a} が、これらが結合している原子と一緒に環を形成している場合、環は、1 個以下の O、1 個以下の S および 1 個以下の N 原子から選択される 1 個以下のヘテロ原子、ならびに、炭素原子から選択される環員を含有しており、ならびに、環は、任意により、炭素原子環員上では、ハロゲン、 $C_1 \sim C_2$ アルキルおよび $C_1 \sim C_2$ アルコキシから独立して選択される 1 個以下の置換基で置換されている。

【0 2 5 6】

実施形態 1 3 1. 式 1 もしくは式 1 A または実施形態 1 ~ 1 3 0 のいずれか一つの化合物であって、式中、 R^7 は、単独で（すなわち、 R^3 とは一緒にせずに）、H、 $C_1 \sim C_2$ アルキル、 $C_1 \sim C_2$ ハロアルキル、 $CH_3C(=O)$ 、 $CF_3C(=O)$ または $CH_3OC(=O)$ である。

40

【0 2 5 7】

実施形態 1 3 2. 実施形態 1 3 1 の化合物であって、式中、 R^7 は、単独で、H または $C_1 \sim C_2$ アルキルである。

【0 2 5 8】

実施形態 1 3 3. 実施形態 1 3 2 の化合物であって、式中、 R^7 は、単独で、H またはメチルである。

【0 2 5 9】

実施形態 1 3 4. 式 1 もしくは式 1 A または実施形態 1 ~ 1 3 3 のいずれか一つの化合

50

物であって、式中、 R^7 は単独である。

【0260】

実施形態135. 式1もしくは式1Aまたは実施形態1～134のいずれか一つの化合物であって、式中、 R^{14} は、H、シアノ、ヒドロキシ、 $C_1 \sim C_3$ アルキル、 $C_1 \sim C_3$ ハロアルキルまたは $C_1 \sim C_3$ アルコキシである。

【0261】

実施形態136. 実施形態135の化合物であって、式中、 R^{14} は、H、シアノ、ヒドロキシ、 $C_1 \sim C_2$ アルキルまたは $C_1 \sim C_2$ アルコキシである。

【0262】

実施形態137. 実施形態136の化合物であって、式中、 R^{14} は、Hまたはメチルである。 10

【0263】

実施形態138. 式1もしくは式1A、または、実施形態1～53あるいは60～137のいずれか一つの化合物であって、式中、 A^1 は CHR^{15} である。

【0264】

実施形態139. 実施形態138の化合物であって、式中、 R^{15} は、H、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシ、 $-CHO$ 、 $C_1 \sim C_4$ アルキル、 $C_1 \sim C_4$ ハロアルキル、 $C_2 \sim C_5$ アルコシカルボニルまたは $C_1 \sim C_4$ アルコキシである。

【0265】

実施形態140. 実施形態139の化合物であって、式中、 R^{15} は、H、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシ、メチルまたはメトキシである。 20

【0266】

実施形態141. 実施形態140の化合物であって、式中、 R^{15} はHである。

【0267】

実施形態142. 式1もしくは式1A、または、実施形態1～55あるいは60～137のいずれか一つの化合物であって、式中、 A^1 は NR^{16} である。

【0268】

実施形態143. 実施形態142の化合物であって、式中、 R^{16} は、H、 $C_1 \sim C_4$ アルキル、 $C_1 \sim C_4$ ハロアルキル、 $C_2 \sim C_4$ アルキルカルボニル、 $C_2 \sim C_4$ ハロアルキルカルボニルまたは $C_2 \sim C_4$ アルコシカルボニルである。 30

【0269】

実施形態144. 実施形態143の化合物であって、式中、 R^{16} は、H、メチル、メチルカルボニルまたはメトキシカルボニルである。

【0270】

実施形態145. 実施形態144の化合物であって、式中、 R^{16} はHである。

【0271】

実施形態146. 式1もしくは式1Aまたは実施形態1～145のいずれか一つの化合物であって、式中、 R^{17} はHまたはメチルである。

【0272】

実施形態147. 式1もしくは式1Aまたは実施形態1～146のいずれか一つの化合物であって、式中、 R^{18} は、フェニル、ベンジルまたはピリジニルであって、各々は任意により、 R^{22} から独立して選択される3個以下の置換基で置換されている。 40

【0273】

実施形態148. 式1もしくは式1Aまたは実施形態1～147のいずれか一つの化合物であって、式中、各 R^{22} は、独立して、ハロゲンまたは $C_1 \sim C_3$ アルキルである。

【0274】

実施形態149. 式1もしくは式1Aまたは実施形態1～148のいずれか一つの化合物であって、式中、 R^{19} は、Hまたは $C_1 \sim C_3$ アルキルである。

【0275】

実施形態150. 実施形態149の化合物であって、式中、 R^{19} は、Hまたはメチル 50

である。

【0276】

実施形態151. 式1もしくは式1Aまたは実施形態1～147のいずれか一つの化合物であって、式中、 R^{19} および R^{22} が、これらが結合している原子と一緒に5員～7員環を形成している場合、環は、2個以下のO、2個以下のS、2個以下のNから独立して選択される2個以下のヘテロ原子ならびに炭素原子から選択される環員を含有しており、ここで、2個以下の炭素原子環員は、独立して、 $C(=O)$ および $C(=S)$ から選択されると共に硫黄原子環員は、独立して、 $S(=O)_s(=NR^{11})_f$ から選択され、および、環は、任意により、炭素原子環員上では、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシ、 $C_1\sim C_2$ アルキルおよび $C_1\sim C_2$ アルコキシから独立して選択され、ならびに、窒素原子環員上では、シアノ、 $C_1\sim C_2$ アルキルおよび $C_1\sim C_2$ アルコキシから独立して選択される3個以下の置換基で置換されている。

10

【0277】

実施形態151a. 実施形態151の化合物であって、式中、 R^{19} および R^{22} が、これらが結合している原子と一緒に5員～7員環を形成している場合、環は、O、SおよびNから独立して選択される1個のヘテロ原子、ならびに、炭素原子から選択される環員を含有している。

【0278】

実施形態152. 式1もしくは式1Aまたは実施形態1～151aのいずれか一つの化合物であって、式中、各 R^{21} は、独立して、 $C_1\sim C_3$ アルキルまたは $-Z^1Q$ である。

20

【0279】

実施形態153. 実施形態152の化合物であって、式中、各 R^{21} は、独立して、 $C_1\sim C_3$ アルキルである。

【0280】

実施形態154. 式1もしくは式1Aまたは実施形態1～152のいずれか一つの化合物であって、式中、各 Z^1 は、独立して、 $C(=O)$ または $S(=O)_2$ である。

【0281】

実施形態155. 実施形態154の化合物であって、式中、各 Z^1 は $C(=O)$ である。

30

【0282】

実施形態156. 式1もしくは式1Aまたは実施形態1～155のいずれか一つの化合物であって、式中、各 R^{23} は、独立して、H、 $-CHO$ 、 $C_1\sim C_4$ アルキル、 $C_1\sim C_4$ アルケニルまたは $C_1\sim C_4$ ハロアルキルである。

【0283】

実施形態157. 実施形態156の化合物であって、式中、各 R^{23} は、独立して、Hまたは CH_3 である。

【0284】

実施形態158. 実施形態157の化合物であって、式中、各 R^{23} はHである。

【0285】

40

実施形態159. 式1もしくは式1A、または、実施形態1～52、61～63あるいは65～158のいずれか一つの化合物であって、式中、各 R^{24} および R^{25} は、独立して、 $C_1\sim C_6$ アルキル、 $C_3\sim C_4$ アルケニル、 $C_3\sim C_4$ アルキニル、 $C_1\sim C_4$ ハロアルキル、 $C_3\sim C_6$ ハロアルケニル、 $C_3\sim C_6$ ハロアルキニル、 $C_2\sim C_6$ アルコシアルキルおよび $C_3\sim C_6$ シクロアルキルから選択される。

【0286】

実施形態160. 実施形態159の化合物であって、式中、各 R^{24} および R^{25} は、 $C_1\sim C_6$ アルキル、 $C_3\sim C_4$ アルケニル、 $C_3\sim C_4$ アルキニルおよび $C_1\sim C_4$ ハロアルキルから選択される。

【0287】

50

実施形態 161. 実施形態 160 の化合物であって、式中、各 R^{24} および R^{25} は、独立して、 $C_1 \sim C_4$ アルキルである。

【0288】

実施形態 162. 式 1 もしくは式 1A、または、実施形態 1～52、61、あるいは 64～158 のいずれか一つの化合物であって、式中、 R^{26} は、H、シアノ、ヒドロキシ、アミノおよび $C_1 \sim C_6$ アルキルから選択される。

【0289】

実施形態 163. 式 1 もしくは式 1A、または、実施形態 1～52、61あるいは 64～158 のいずれか一つの化合物であって、式中、 R^{27} は、H および $C_1 \sim C_6$ アルキルから選択される。

【0290】

実施形態 164. 式 1 もしくは式 1A、または、実施形態 1～52、61あるいは 64～158 のいずれか一つの化合物であって、式中、 R^{26} および R^{27} は一緒になって、 $-(CH_2)_4-$ 、 $-(CH_2)_5-$ または $-(CH_2)_2O(CH_2)_2-$ とされる。

【0291】

実施形態 165. 実施形態 164 の化合物であって、式中、 R^{26} および R^{27} は一緒になって、 $-(CH_2)_4-$ または $-(CH_2)_2O(CH_2)_2-$ とされる。

【0292】

実施形態 166. 実施形態 165 の化合物であって、式中、 R^{26} および R^{27} は一緒になって $-(CH_2)_4-$ とされる。

【0293】

実施形態 167. 式 1 もしくは式 1A、または、実施形態 1～52、63あるいは 67～158 のいずれか一つの化合物であって、式中、 R^{28} は、H、ハロゲン、シアノまたは $C_1 \sim C_4$ アルキルである。

【0294】

実施形態 168. 実施形態 167 の化合物であって、式中、 R^{28} は、H、ハロゲンまたはシアノである。

【0295】

実施形態 169. 実施形態 168 の化合物であって、式中、 R^{28} は、Cl またはシアノである。

【0296】

実施形態 170. 式 1 もしくは式 1A、または、実施形態 1～52、57、60あるいは 78～169 のいずれか一つの化合物であって、式中、各 R^8 は、独立して、H、 CH_3 または CH_2CF_3 である。

【0297】

実施形態 171. 式 1 もしくは式 1A または実施形態 1～170 のいずれか一つの化合物であって、式中、各 R^{11} は、独立して、H、 $C_1 \sim C_6$ アルキルまたは $C_3 \sim C_8$ シクロアルキルである。

【0298】

実施形態 172. 式 1 もしくは式 1A または実施形態 1～171 のいずれか一つの化合物であって、式中、各 R^{12} は、独立して、H、 CH_3 、 CF_3 または CH_2CF_3 である。

【0299】

実施形態 173. 式 1 もしくは式 1A または実施形態 1～172 のいずれか一つの化合物であって、式中、各 R^{20} は、独立して、H、 CH_3 、 CH_2CF_3 、 CF_3 またはシクロプロピルである。

【0300】

実施形態 174. 式 1 または実施形態 1～172 のいずれか一つの化合物である。

【0301】

実施形態 175. 式 1A または実施形態 1～172 のいずれか一つの化合物である。

10

20

30

40

50

【0302】

上記の実施形態1～173、ならびに、本明細書に記載の他の実施形態のいずれかを含む本発明の実施形態はいずれかの様式で組み合わせられることが可能であり、実施形態における可変要素の記載は、実施形態においてさらに定義されていない限りにおいて、式1および式1Aの化合物を含む組成物のみならず、式1、式1Aの化合物、式1および式1Aの化合物の調製に有用な出発化合物および中間体化合物にも関連している。加えて、上記の実施形態1～173、ならびに、本明細書に記載の他の実施形態のいずれかを含む本発明の実施形態、および、いずれかのこれらの組み合わせは、本発明の組成物および方法に関する。実施形態1～173の組み合わせが以下に例示されている。

【0303】

実施形態A1. 式1もしくは式1Aの化合物であって、式中、

EはE-3であり；

Y^1 は、 $-N=C(R^{14})-$ 、 $-C(R^{14})=N-$ 、または、一方の鎖構成員が $-C(R^{14})_2-$ であると共に第2の鎖構成員が $-C(R^{14})_2-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ および $-N(R^{23})-$ から選択される、2つの鎖構成員から構成される環形成鎖であり；

Y^3 は、 $-N=C(R^{14})-$ 、 $-C(R^{14})=N-$ 、あるいは、一方の鎖構成員が $-C(R^{14})_2-$ であると共に第2の鎖構成員が $-C(R^{14})_2-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ および $-N(R^{23})-$ から選択される、2つの鎖構成員から構成される環形成鎖であるか；または

Y^3 は、 $-C(R^{14})_2N=C(R^{14})-$ 、 $-C(R^{14})_2C(R^{14})=N-$ 、 $-N=C(R^{14})C(R^{14})_2-$ 、 $-C(R^{14})=NC(R^{14})_2-$ 、あるいは、2つの鎖構成員が $-C(R^{14})_2-$ であると共に第3の鎖構成員が $-C(R^{14})_2-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ および $-N(R^{23})-$ から選択される、3つの鎖構成員から構成される環形成鎖であり；

Gは、任意により、炭素環員上では R^{29} で置換されており、および、任意により、窒素環員上では R^{30} で置換されているG-1～G-48であり；

Jは、5員～7員環、8員～11員二環系または7員～11員スピロ環系であり、各環もしくは環系は、2個以下のO、2個以下のSおよび4個以下のNから独立して選択される4個以下のヘテロ原子ならびに炭素原子から選択される環員を含有しており、ここで、3個以下の炭素原子環員は、独立して、 $C(=O)$ および $C(=S)$ から選択されると共に硫黄原子環員は、独立して、 $S(=O)_s(=NR^{11})_f$ から選択され、各環もしくは環系は、任意により、 R^6 から独立して選択される5個以下の置換基で置換されているか；またはJは $C(=W^4)NT^AT^B$ であり；

W^3 は、 OR^{24} 、 SR^{25} または $NR^{26}R^{27}$ であり；

W^4 はOであり；

T^A はHまたはメチルであり；

R^{1c} は、任意により置換されているフェニル、任意により置換されているナフタレニルあるいは任意により置換されている5員～6員芳香族複素環であるか；または、シアノ、 $C_1\sim C_8$ アルキル、 $C_2\sim C_8$ アルケニル、 $C_2\sim C_8$ アルキニル、 $C_1\sim C_8$ ハロアルキル、 $C_2\sim C_8$ ハロアルケニル、 $C_2\sim C_8$ ハロアルキニル、 $C_3\sim C_8$ シクロアルキル、 $C_2\sim C_8$ アルコキシアルキル、 $C_2\sim C_8$ ハロアルコキシアルキル、 $C_2\sim C_8$ アルキルチオアルキル、 $C_2\sim C_8$ ハロアルキルチオアルキル、 $C_2\sim C_8$ アルキルスルフィニルアルキル、 $C_2\sim C_8$ アルキルスルホニルアルキル、 $C_3\sim C_8$ アルコキシカルボニルアルキル、 $C_3\sim C_8$ ハロアルコキシカルボニルアルキル、 $C_2\sim C_8$ アルキルアミノアルキル、 $C_3\sim C_{10}$ ジアルキルアミノアルキル、 $C_2\sim C_8$ ハロアルキルアミノアルキル、 $C_4\sim C_{10}$ シクロアルキルアミノアルキル、 $C_1\sim C_8$ アルコキシ、 $C_1\sim C_8$ ハロアルコキシ、 $C_3\sim C_8$ シクロアルコキシ、 $C_3\sim C_8$ ハロシクロアルコキシ、 $C_4\sim C_{10}$ シクロアルキルアルコキシ、 $C_2\sim C_8$ アルケニルオキシ、 $C_2\sim C_8$ ハロアルケニルオキシ、 $C_2\sim C_8$ アルキニルオキシ、 $C_3\sim C_8$ ハロアルキニルオキシ、 $C_2\sim C_8$ アルコキシアルコキシ、 $C_2\sim C_8$ アルキルカルボニルオキシ、 $C_2\sim C_8$ ハ

10

20

30

40

50

ロアルキルカルボニルオキシ、 $C_1 \sim C_8$ アルキルチオ、 $C_1 \sim C_8$ ハロアルキルチオ、 $C_3 \sim C_8$ シクロアルキルチオ、 $C_3 \sim C_{10}$ トリアルキルシリル、 $C_1 \sim C_8$ アルキルアミノ、 $C_2 \sim C_8$ ジアルキルアミノ、 $C_2 \sim C_8$ アルキルカルボニルアミノ、ピロリジニル、ピペリジニルまたはモルホリニルであり；

R^6 は、独立して、H、ハロゲン、シアノ、 $C_1 \sim C_6$ アルキル、 $C_2 \sim C_6$ アルケニル、 $C_2 \sim C_6$ アルキニル、 $C_1 \sim C_6$ ハロアルキル、 $C_2 \sim C_6$ ハロアルケニル、 $C_2 \sim C_6$ ハロアルキニル、 $C_3 \sim C_8$ シクロアルキル、 $C_3 \sim C_8$ ハロシクロアルキル、 $C_4 \sim C_{10}$ アルキルシクロアルキル、 $C_4 \sim C_{10}$ シクロアルキルアルキル、 $C_2 \sim C_6$ アルコキシアルキル、 $C_4 \sim C_{10}$ シクロアルコキシアルキル、 $C_3 \sim C_8$ アルコキシアルコキシアルキル、 $C_2 \sim C_6$ アルキルチオアルキル、 $C_2 \sim C_6$ アルコキシカルボニル、 $C_1 \sim C_6$ アルコキシ、 $C_1 \sim C_6$ ハロアルコキシ、 $C_3 \sim C_8$ シクロアルコキシ、 $C_3 \sim C_8$ ハロシクロアルコキシ、 $C_4 \sim C_{10}$ シクロアルキルアルコキシ、 $C_2 \sim C_6$ アルケニルオキシ、 $C_2 \sim C_6$ ハロアルケニルオキシ、 $C_2 \sim C_6$ アルキニルオキシ、 $C_2 \sim C_6$ ハロアルキニルオキシ、 $C_2 \sim C_6$ アルコキシアルコキシ、 $C_2 \sim C_6$ アルキルカルボニルオキシ、 $C_2 \sim C_6$ ハロアルキルカルボニルオキシ、 $C_4 \sim C_8$ シクロアルキルカルボニルオキシ、 $C_3 \sim C_6$ アルキルカルボニルアルコキシ、 $C_1 \sim C_6$ アルキルチオ、 $C_1 \sim C_6$ ハロアルキルチオ、 $C_3 \sim C_8$ シクロアルキルチオ、 $C_3 \sim C_{10}$ トリアルキルシリル、 $-NR^{20}R^{21}$ または $-ZQ$ であり；

R^{6a} は、独立して、ハロゲン、ヒドロキシ、シアノ、 $C_1 \sim C_2$ アルキルあるいは $C_1 \sim C_2$ アルコキシであるか；または、

R^6 および R^{6a} は、これらが結合している原子と一緒に環を形成しており、環は5員～6員環であると共に1個以下のO、1個以下のSおよび1個以下のN原子から選択される3個以下のヘテロ原子ならびに炭素原子から選択される環員を含有しており、ならびに、環は、任意により、炭素原子環員上では、ハロゲン、 $C_1 \sim C_2$ アルキルおよび $C_1 \sim C_2$ アルコキシから独立して選択され、ならびに、窒素原子環員上では、 $C_1 \sim C_2$ アルキルから独立して選択される2個以下の置換基で置換されており；

Zは、独立して、直接結合、O、 $C(=O)$ 、 $S(=O)_2$ または $CH(R^{12})$ であり；

Qは、任意により、炭素構成員上で0～5個の R^{6a} で置換されており、および、任意により、窒素環員上で R^{6c} で置換されている、 $Q-1 \sim Q-102$ から選択される環であり；

R^{6c} は、独立して、H、 $C_1 \sim C_3$ アルキル、 $C_2 \sim C_3$ アルキルカルボニル、 $C_2 \sim C_3$ アルコキシカルボニルおよび $C_1 \sim C_3$ アルコキシから選択され；

R^{11} は、独立して、H、 $C_1 \sim C_6$ アルキルまたは $C_3 \sim C_8$ シクロアルキルであり；

R^{12} は、独立して、H、 CH_3 、 CF_3 または CH_2CF_3 であり；

R^{14} は、H、シアノ、ヒドロキシ、 $C_1 \sim C_3$ アルキル、 $C_1 \sim C_3$ ハロアルキルまたは $C_1 \sim C_3$ アルコキシであり；

R^{17} は、Hまたはメチルであり

R^{18} は、フェニル、ベンジルまたはピリジニルであり、各々は、任意により、 R^{22} から独立して選択される3個以下の置換基で置換されており；

R^{19} は、Hまたは $C_1 \sim C_3$ アルキルであり；

R^{20} は、独立して、H、 CH_3 、 CH_2CF_3 、 CF_3 またはシクロプロピルであり；

R^{21} は、独立して、 $C_1 \sim C_3$ アルキルまたは $-Z^1Q$ であり；

Z^1 は、独立して、 $C(=O)$ または $S(=O)_2$ であり；

R^{22} は、独立して、ハロゲンもしくは $C_1 \sim C_3$ アルキルであるか；または

R^{19} および R^{22} は、これらが結合している原子と一緒に環を形成しており、環は、2個以下のO、2個以下のS、2個以下のNから独立して選択される2個以下のヘテロ原子および炭素原子から選択される環員を含有しており、ここで、2個以

10

20

30

40

50

下の炭素原子環員は、独立して、 $C(=O)$ および $C(=S)$ から選択されると共に硫黄原子環員は、独立して、 $S(=O)_s(NR^{11})_f$ から選択され、ならびに、環は、任意により、炭素原子環員上では、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシ、 $C_1 \sim C_2$ アルキルおよび $C_1 \sim C_2$ アルコキシから独立して選択され、ならびに、窒素原子環員上では、シアノ、 $C_1 \sim C_2$ アルキルおよび $C_1 \sim C_2$ アルコキシから独立して選択される 3 個以下の置換基で置換されており；

R^{23} は、独立して、 H 、 $-CHO$ 、 $C_1 \sim C_4$ アルキル、 $C_1 \sim C_4$ アルケニルまたは $C_1 \sim C_4$ ハロアルキルであり、

各 R^{24} および R^{25} は、独立して、 $C_1 \sim C_6$ アルキル、 $C_3 \sim C_4$ アルケニル、 $C_3 \sim C_4$ アルキニル、 $C_1 \sim C_4$ ハロアルキル、 $C_3 \sim C_6$ ハロアルケニル、 $C_3 \sim C_6$ ハロアルキニル、 $C_2 \sim C_6$ アルコキシアルキルおよび $C_3 \sim C_6$ シクロアルキルから選択され；

R^{26} は、 H 、シアノ、ヒドロキシ、アミノおよび $C_1 \sim C_6$ アルキルから選択され；

R^{27} は、 H 、 $C_1 \sim C_6$ アルキ (alkyl) から選択されるか；または

R^{26} および R^{27} は、一緒になって、 $-(CH_2)_4-$ 、 $-(CH_2)_5-$ あるいは $-(CH_2)_2O(CH_2)_2-$ とされ；

R^{28} は、 H 、ハロゲン、シアノまたは $C_1 \sim C_4$ アルキルであり；

各 R^{29} は、独立して、ハロゲン、 $C_1 \sim C_3$ アルキルまたは $C_1 \sim C_3$ ハロアルキルであり；

各 R^{30} は、独立して、 $C_1 \sim C_3$ アルキルであり；

x は 1 ～ 5 の整数であり、 x が 2、3、4 または 5 である場合、 R^6 は最大で 1 の事例で $-ZQ$ であり；

m は 0 または 1 であり；ならびに

s および f は 0 または 1 であるが、ただし、 s と f との和は 1 である。

【0304】

実施形態 A2. 実施形態 A1 の化合物であって、式中、

式 1 中の Y^1 、 Y^2 および Y^3 は、 $L-1 \sim L-24$ から選択される環を形成しており；

式 1A 中の Y^2 、 X^1 および X^2 は $L-60 \sim L-65$ から選択される環を形成しており；

G は、 $G-1$ 、 $G-2$ 、 $G-7$ 、 $G-8$ 、 $G-14$ 、 $G-15$ 、 $G-23$ 、 $G-24$ 、 $G-26$ 、 $G-27$ 、 $G-36$ 、 $G-37$ および $G-38$ から選択され；

J は、 $J-1$ 、 $J-2$ 、 $J-3$ 、 $J-4$ 、 $J-5$ 、 $J-7$ 、 $J-8$ 、 $J-9$ 、 $J-10$ 、 $J-11$ 、 $J-12$ 、 $J-14$ 、 $J-15$ 、 $J-16$ 、 $J-20$ 、 $J-24$ 、 $J-25$ 、 $J-26$ 、 $J-29$ 、 $J-30$ 、 $J-37$ 、 $J-38$ 、 $J-45$ および $J-69$ からなる群から選択される環であり；

W^3 は $NR^{26}R^{27}$ であり；

R^{1c} は、任意により置換されているフェニル、任意により置換されているナフタレニルまたは任意により置換されている 5 員もしくは 6 員芳香族複素環であって、フェニル、ナフタレニルまたは 5 員もしくは 6 員芳香族複素環上の任意の置換基は、独立して、炭素環員では R^{33a} から、および、窒素環員上では R^{33b} から選択され；

各 R^{33a} は、独立して、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシ、アミノ、ニトロ、 $C_1 \sim C_6$ アルキル、 $C_2 \sim C_6$ アルケニル、 $C_2 \sim C_6$ アルキニル、 $C_3 \sim C_6$ シクロアルキル、 $C_4 \sim C_{10}$ シクロアルキルアルキル、 $C_4 \sim C_{10}$ アルキルシクロアルキル、 $C_5 \sim C_{10}$ アルキルシクロアルキルアルキル、 $C_1 \sim C_6$ ハロアルキル、 $C_2 \sim C_6$ ハロアルケニル、 $C_2 \sim C_6$ ハロアルキニル、 $C_3 \sim C_6$ ハロシクロアルキル、 $C_1 \sim C_4$ アルコキシ、 $C_1 \sim C_4$ ハロアルコキシ、 $C_1 \sim C_4$ アルキルチオ、 $C_1 \sim C_4$ アルキルスルフィニル、 $C_1 \sim C_4$ アルキルスルホニル、 $C_1 \sim C_4$ ハロアルキルチオ、 $C_1 \sim C_4$ ハロアルキルスルフィニル、 $C_1 \sim C_4$ ハロアルキルスルホニル、 $C_1 \sim C_4$ アルキルアミノ、 $C_2 \sim C_8$ ジアルキルアミノ、 $C_3 \sim C_6$ シクロアルキルアミノ、 $C_2 \sim C_4$ アルコキ

シアルキル、 $C_1 \sim C_4$ ヒドロキシアルキル、 $C_2 \sim C_4$ アルキルカルボニル、 $C_2 \sim C_6$ アルコキシカルボニル、 $C_2 \sim C_6$ アルキルカルボニルオキシ、 $C_2 \sim C_6$ アルキルカルボニルチオ、 $C_2 \sim C_6$ アルキルアミノカルボニル、 $C_3 \sim C_8$ ジアルキルアミノカルボニルまたは $C_3 \sim C_6$ トリアルキルシリルであり；

各 $R^{3\ 3\ b}$ は、独立して、 $C_1 \sim C_6$ アルキル、 $C_3 \sim C_6$ アルケニル、 $C_3 \sim C_6$ アルキニル、 $C_3 \sim C_6$ シクロアルキル、 $C_1 \sim C_6$ ハロアルキル、 $C_3 \sim C_6$ ハロアルケニル、 $C_3 \sim C_6$ ハロアルキニル、 $C_3 \sim C_6$ ハロシクロアルキルまたは $C_2 \sim C_4$ アルコキシアルキルであり；

Zは直接結合であり；

Qは、Q-45、Q-63、Q-65、Q-70、Q-71、Q-72、Q-84およびQ-85から選択され；

pは、0、1、2または3であり；ならびに

$R^{6\ a}$ は、F、Cl、Br、ヒドロキシ、シアノ、メチルまたはメトキシである。

【0305】

実施形態A3．式1もしくは式1Aの化合物であって、式中、

Eは、E-1またはE-2であり；

Y^1 は、 $-N=C(R^{1\ 4})-$ 、 $-C(R^{1\ 4})=N-$ 、または、一方の鎖構成員が $-C(R^{1\ 4})_2-$ であると共に第2の鎖構成員が $-C(R^{1\ 4})_2-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ および $-N(R^{2\ 3})-$ から選択される、2つの鎖構成員から構成される環形成鎖であり；

Y^3 は、 $-N=C(R^{1\ 4})-$ 、 $-C(R^{1\ 4})=N-$ 、あるいは、一方の鎖構成員が $-C(R^{1\ 4})_2-$ であると共に第2の鎖構成員が $-C(R^{1\ 4})_2-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ および $-N(R^{2\ 3})-$ から選択される、2つの鎖構成員から構成される環形成鎖であるか；または

Y^3 は、 $-C(R^{1\ 4})_2N=C(R^{1\ 4})-$ 、 $-C(R^{1\ 4})_2C(R^{1\ 4})=N-$ 、 $-N=C(R^{1\ 4})C(R^{1\ 4})_2-$ 、 $-C(R^{1\ 4})=NC(R^{1\ 4})_2-$ 、あるいは、2つの鎖構成員が $-C(R^{1\ 4})_2-$ であるとと共に第3の鎖構成員が $-C(R^{1\ 4})_2-$ 、 $-O-$ 、 $-S-$ および $-N(R^{2\ 3})-$ から選択される、3つの鎖構成員から構成される環形成鎖であり；

Gは、G-1、G-2、G-15、G-26、G-27、G-36、G-37およびG-38から選択され；

各 $R^{2\ 9}$ は、独立して、ハロゲン、 $C_1 \sim C_3$ アルキルまたは $C_1 \sim C_3$ ハロアルキルであり；

Jは、J-4、J-5、J-11、J-20、J-29、J-37、J-38およびJ-69からなる群から選択される環であり；

xは1～5の整数であり、xが2、3、4または5である場合、 R^6 は最大で1の事例で $-ZQ$ であり；

R^6 は、H、シアノ、 $C_1 \sim C_6$ アルキル、 $C_1 \sim C_6$ ハロアルキル、 $C_3 \sim C_8$ シクロアルキル、 $C_3 \sim C_8$ ハロシクロアルキル、 $C_2 \sim C_6$ アルコキシアルキル、 $C_1 \sim C_6$ アルコキシ、 $C_1 \sim C_6$ ハロアルコキシ、 $C_3 \sim C_8$ シクロアルコキシ、 $C_2 \sim C_6$ アルケニルオキシ、 $C_2 \sim C_6$ ハロアルケニルオキシ、 $C_2 \sim C_6$ アルキニルオキシ、 $C_2 \sim C_6$ アルコキシアルコキシ、 $C_2 \sim C_6$ アルキルカルボニルオキシ、 $C_2 \sim C_6$ ハロアルキルカルボニルオキシ、 $C_1 \sim C_6$ アルキルチオ、 $C_1 \sim C_6$ ハロアルキルチオ、 $C_3 \sim C_{10}$ トリアルキルシリル、 $-NR^{2\ 0}R^{2\ 1}$ または $-ZQ$ であり；

A^1 は、 $CHR^{1\ 5}$ または $NR^{1\ 6}$ であり；

A^2 は、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-N(R^7)-$ 、 $-C(R^8)_2-$ または $-OC(R^8)_2-$ であり；

W^1 はOであり；

W^2 はOであり；

$R^{1\ a}$ は、任意により置換されているフェニル、任意により置換されているナフタレニルまたは任意により置換されている5員もしくは6員芳香族複素環であって、フェニル、

10

20

30

40

50

ナフタレニルまたは5員もしくは6員芳香族複素環上の任意の置換基は、独立して、炭素環員上では $R^{3\ 3\ a}$ から、および、窒素環員上では $R^{3\ 3\ b}$ から選択され；

R^2 は、H、シアノ、 $C_1 \sim C_4$ アルキル、 $C_2 \sim C_4$ アルケニル、 $C_2 \sim C_4$ アルキニル、 $C_1 \sim C_4$ ハロアルキル、 $C_2 \sim C_4$ ハロアルケニル、 $C_2 \sim C_4$ ハロアルキニル、 $C_2 \sim C_4$ アルコキシアルキル、 $C_2 \sim C_4$ アルキルチオアルキル、 $C_2 \sim C_4$ アルキルカルボニル、 $C_2 \sim C_4$ ハロアルキルカルボニル、 $C_2 \sim C_4$ アルコキシカルボニル、 $C_1 \sim C_4$ アルコキシ、 $C_1 \sim C_4$ ハロアルコキシ、 $C_2 \sim C_4$ アルケニルオキシ、 $C_2 \sim C_4$ ハロアルケニルオキシ、 $C_2 \sim C_4$ アルキニルオキシ、 $C_3 \sim C_4$ ハロアルキニルオキシ、 $C_2 \sim C_4$ アルコキシアルコキシ、 $C_1 \sim C_4$ アルキルチオ、 $C_1 \sim C_4$ ハロアルキルチオ、 $C_1 \sim C_4$ アルキルアミノ、 $C_2 \sim C_4$ ジアルキルアミノ、 $C_1 \sim C_4$ ハロアルキルアミノまたは $C_2 \sim C_4$ ハロジアルキルアミノであり；

10

R^3 は、H、 $C_1 \sim C_3$ アルキル、 $C_1 \sim C_3$ アルコキシまたは $C_1 \sim C_3$ ハロアルキルであり；

R^4 は、Hまたはメチルであり；

$R^{3\ 2\ a}$ は、独立して、ハロゲン、 $C_1 \sim C_2$ アルキル、 $C_1 \sim C_2$ ハロアルキルまたは $C_1 \sim C_2$ アルコキシであり；

kは、0、1または2であり；

R^5 は、Hまたは $C_1 \sim C_2$ アルキルであり；

R^7 は、H、 $C_1 \sim C_2$ アルキル、 $C_1 \sim C_2$ ハロアルキル、 $CH_3C(=O)$ 、 $CF_3C(=O)$ または $CH_3OC(=O)$ であり；

20

各 R^8 は、独立して、H、 CH_3 または CH_2CF_3 であり；

Zは直接結合であり；

Qは、Q-45、Q-63、Q-65、Q-70、Q-71、Q-72、Q-84およびQ-85から選択され；

pは、0、1、2または3であり；ならびに

各 $R^{6\ a}$ は、F、Cl、Br、ヒドロキシ、シアノ、メチルまたはメトキシであり；

$R^{1\ 4}$ は、H、シアノ、ヒドロキシ、 $C_1 \sim C_3$ アルキル、 $C_1 \sim C_3$ ハロアルキルまたは $C_1 \sim C_3$ アルコキシであり；

$R^{1\ 5}$ は、H、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシ、 $-CHO$ 、 $C_1 \sim C_4$ アルキル、 $C_1 \sim C_4$ ハロアルキル、 $C_2 \sim C_5$ アルコキシカルボニルまたは $C_1 \sim C_4$ アルコキシであり；

30

$R^{1\ 6}$ は、H、メチル、メチルカルボニルまたはメトキシカルボニルであり；

$R^{2\ 0}$ は、独立して、H、 CH_3 、 CH_2CF_3 、 CF_3 またはシクロプロピルであり；

$R^{2\ 1}$ は、独立して、 $C_1 \sim C_3$ アルキルであり；

各 $R^{2\ 3}$ は、独立して、Hまたは CH_3 であり；

各 $R^{3\ 3\ a}$ は、独立して、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシ、アミノ、ニトロ、 $C_1 \sim C_6$ アルキル、 $C_2 \sim C_6$ アルケニル、 $C_2 \sim C_6$ アルキニル、 $C_3 \sim C_6$ シクロアルキル、 $C_4 \sim C_{10}$ シクロアルキルアルキル、 $C_4 \sim C_{10}$ アルキルシクロアルキル、 $C_5 \sim C_{10}$ アルキルシクロアルキルアルキル、 $C_1 \sim C_6$ ハロアルキル、 $C_2 \sim C_6$ ハロアルケニル、 $C_2 \sim C_6$ ハロアルキニル、 $C_3 \sim C_6$ ハロシクロアルキル、 $C_1 \sim C_4$ アルコキシ、 $C_1 \sim C_4$ ハロアルコキシ、 $C_1 \sim C_4$ アルキルチオ、 $C_1 \sim C_4$ アルキルスルフィニル、 $C_1 \sim C_4$ アルキルスルホニル、 $C_1 \sim C_4$ ハロアルキルチオ、 $C_1 \sim C_4$ ハロアルキルスルフィニル、 $C_1 \sim C_4$ ハロアルキルスルホニル、 $C_1 \sim C_4$ アルキルアミノ、 $C_2 \sim C_8$ ジアルキルアミノ、 $C_3 \sim C_6$ シクロアルキルアミノ、 $C_2 \sim C_4$ アルコキシアルキル、 $C_1 \sim C_4$ ヒドロキシアルキル、 $C_2 \sim C_4$ アルキルカルボニル、 $C_2 \sim C_6$ アルコキシカルボニル、 $C_2 \sim C_6$ アルキルカルボニルオキシ、 $C_2 \sim C_6$ アルキルカルボニルチオ、 $C_2 \sim C_6$ アルキルアミノカルボニル、 $C_3 \sim C_8$ ジアルキルアミノカルボニルまたは $C_3 \sim C_6$ トリアルキルシリルであり；ならびに

40

各 $R^{3\ 3\ b}$ は、独立して、 $C_1 \sim C_6$ アルキル、 $C_3 \sim C_6$ アルケニル、 $C_3 \sim C_6$ ア

50

ルキニル、 $C_3 \sim C_6$ シクロアルキル、 $C_1 \sim C_6$ ハロアルキル、 $C_3 \sim C_6$ ハロアルケニル、 $C_3 \sim C_6$ ハロアルキニル、 $C_3 \sim C_6$ ハロシクロアルキルまたは $C_2 \sim C_4$ アルコキシアルキルである。

【0306】

実施形態 A 4. 実施形態 A 3 の化合物であって、式中、

E は E-1 であり；

式 1 中の Y^1 、 Y^2 および Y^3 は、L-1 ～ L-24 から選択される環を形成しており；

式 1 A 中の Y^2 、 X^1 および X^2 は、L-60、L-61、L-64 および L-65 から選択される環を形成しており；

G は、G-1、G-2、G-15、G-26、G-36 および G-37 から選択され；

J は、J-29-1 ～ J-29-58 であり；

R^{1a} は、U-1 ～ U-50 の 1 つから選択され；

各 R^{33a} は、独立して、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシ、アミノ、ニトロ、 $C_1 \sim C_6$ アルキル、 $C_2 \sim C_6$ アルケニル、 $C_2 \sim C_6$ アルキニル、 $C_3 \sim C_6$ シクロアルキル、 $C_4 \sim C_{10}$ シクロアルキルアルキル、 $C_4 \sim C_{10}$ アルキルシクロアルキル、 $C_5 \sim C_{10}$ アルキルシクロアルキルアルキル、 $C_1 \sim C_6$ ハロアルキル、 $C_2 \sim C_6$ ハロアルケニル、 $C_2 \sim C_6$ ハロアルキニル、 $C_3 \sim C_6$ ハロシクロアルキル、 $C_1 \sim C_4$ アルコキシ、 $C_1 \sim C_4$ ハロアルコキシ、 $C_1 \sim C_4$ アルキルチオ、 $C_1 \sim C_4$ アルキルスルフィニル、 $C_1 \sim C_4$ アルキルスルホニル、 $C_1 \sim C_4$ ハロアルキルチオ、 $C_1 \sim C_4$ ハロアルキルスルフィニル、 $C_1 \sim C_4$ ハロアルキルスルホニル、 $C_1 \sim C_4$ アルキルアミノ、 $C_2 \sim C_8$ ジアルキルアミノ、 $C_3 \sim C_6$ シクロアルキルアミノ、 $C_2 \sim C_4$ アルコキシアルキル、 $C_1 \sim C_4$ ヒドロキシアルキル、 $C_2 \sim C_4$ アルキルカルボニル、 $C_2 \sim C_6$ アルコキシカルボニル、 $C_2 \sim C_6$ アルキルカルボニルオキシ、 $C_2 \sim C_6$ アルキルカルボニルチオ、 $C_2 \sim C_6$ アルキルアミノカルボニル、 $C_3 \sim C_8$ ジアルキルアミノカルボニルまたは $C_3 \sim C_6$ トリアルキルシリルであり；

各 R^{33b} は、独立して、 $C_1 \sim C_6$ アルキル、 $C_3 \sim C_6$ アルケニル、 $C_3 \sim C_6$ アルキニル、 $C_3 \sim C_6$ シクロアルキル、 $C_1 \sim C_6$ ハロアルキル、 $C_3 \sim C_6$ ハロアルケニル、 $C_3 \sim C_6$ ハロアルキニル、 $C_3 \sim C_6$ ハロシクロアルキルまたは $C_2 \sim C_4$ アルコキシアルキルであり；

R^{14} は、H、シアノ、ヒドロキシ、 $C_1 \sim C_2$ アルキルまたは $C_1 \sim C_2$ アルコキシであり；

A^1 は CHR^{15} であり；

R^{15} は、H、ハロゲン、シアノ、ヒドロキシ、メチルまたはメトキシであり；ならびに

R^{23} は H である。

【0307】

実施形態 A 5. 実施形態 A 4 の化合物であって、式中、；

式 1 中の Y^1 、 Y^2 および Y^3 は、L-1、L-2 および L-9 から選択される環を形成しており；

式 1 A 中の Y^2 、 X^1 および X^2 は、L-6 および L-64 から選択される環を形成しており；

R^{1a} は、U-1、U-20 または U-50 であり；

R^{15} は H であり；

k は 1 または 2 であり；

各 R^{33a} は、独立して、ハロゲン、 $C_1 \sim C_3$ アルキル、 $C_1 \sim C_3$ ハロアルキルまたは $C_2 \sim C_3$ アルコキシアルキルであり；

G は G-1 であり；

R^{29a} は H であり；

J は J-29 であり；ならびに

10

20

30

40

50

R^6 は $-ZQ$ であり；

Q は、 $Q-45$ 、 $Q-63$ 、 $Q-65$ 、 $Q-70$ 、 $Q-71$ 、 $Q-72$ および $Q-84$ から選択され；

各 R^6a は、独立して、 F 、 Cl 、 Br 、ヒドロキシ、シアノ、メチルまたはメトキシであり；

R^6c は H またはメチルであり；ならびに

p は、 0 、 1 または 2 である。

【0308】

特定の実施形態は：

1- [4- [4- [5- (2, 6-ジフルオロフェニル)-4, 5-ジヒドロ-3-イソオキサゾリル]-2-チアゾリル] テトラヒドロ-1 (2H)-ピリダジニル]-2- [5-メチル-3- (トリフルオロメチル)-1H-ピラゾール-1-イル] エタノン、

1- [2-アセチル-4- [4- [5- (2, 6-ジフルオロフェニル)-4, 5-ジヒドロ-3-イソオキサゾリル]-2-チアゾリル] テトラヒドロ-1 (2H)-ピリダジニル]-2- [5-メチル-3- (トリフルオロメチル)-1H-ピラゾール-1-イル] エタノン；

1- [5- [4- [5- (2, 6-ジフルオロフェニル)-4, 5-ジヒドロ-3-イソオキサゾリル]-2-チアゾリル] テトラヒドロ-2H-1, 2-オキサジン-2-イル]-2- [5-メチル-3- (トリフルオロメチル)-1H-ピラゾール-1-イル] エタノン；ならびに

1- [5- [4- [5- (2, 6-ジフルオロフェニル)-4, 5-ジヒドロ-3-イソオキサゾリル]-2-チアゾリル] ヘキサヒドロピロールオール [3, 4-c] ピロール-2 (1H)-イル]-2- [5-メチル-3- (トリフルオロメチル)-1H-ピラゾール-1-イル] エタノン

からなる群から選択される式1および式1Aの化合物を含む。

【0309】

本発明は、式1もしくは式1Aの化合物（そのすべての立体異性体、N-オキシドおよび塩を含む）と、少なくとも1種の他の殺菌・殺カビ剤とを含む殺菌・殺カビ組成物を提供する。このような組成物の実施形態として注目すべきは、上記の化合物実施形態のいずれかに対応する化合物を含む組成物である。

【0310】

本発明は、式1もしくは式1Aの化合物（そのすべての立体異性体、N-オキシドおよび塩を含む）（すなわち、殺菌・殺カビ的に有効な量で）と、界面活性剤、固体希釈剤および液体希釈剤からなる群から選択される少なくとも1種の追加の成分とを含む殺菌・殺カビ組成物を提供する。このような組成物の実施形態として注目すべきは、上記の化合物実施形態のいずれかに対応する化合物を含む組成物である。

【0311】

本発明は、植物もしくはその一部分または植物種子に、殺菌・殺カビ的に有効な量の式1もしくは式1Aの化合物（そのすべての立体異性体、N-オキシドおよび塩を含む）を適用するステップを含む、真菌性植物病原体によって引き起こされる植物病害を防除する方法を提供する。このような方法の実施形態として注目すべきは、上記の化合物実施形態のいずれかに対応する化合物を殺菌・殺カビ的に有効な量で適用するステップを含むものである。特に注目すべきは、化合物が本発明の組成物として適用される実施形態である。

【0312】

スキーム1～30に記載されている以下の方法および変形の1つ以上を用いて、式1もしくは式1Aの化合物を調製することが可能である。以下の式1～57の化合物における、 Y^1 、 Y^2 、 Y^3 、 X^1 、 X^2 、 G 、 J 、 W^1 、 W^2 、 W^3 、 W^4 、 T^A 、 T^B 、 A^1 、 A^2 、 R^1a 、 R^1c 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^7 、 R^8 、 R^{16} 、 R^{24} 、 R^{25} 、 R^{26} および R^{28} の定義は、特に記載のない限り、発明の概要において上記に定義されているとおりである。式1a～1iの化合物は式1の化合物の種々のサブセットであ

10

20

30

40

50

り、式 1 a ~ 1 i に関するすべての置換基は、式 1 に関して上記に定義されているとおりである。

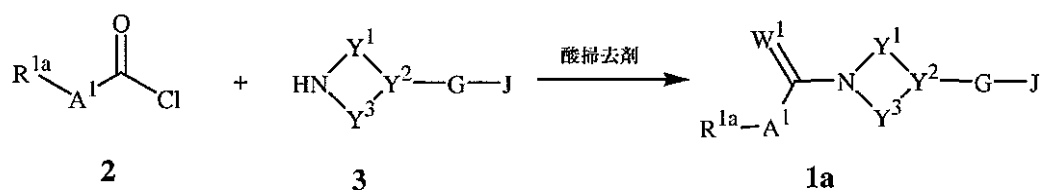
【0313】

スキーム 1 に示されているとおり、 W^1 が O である式 1 a の化合物（E が E-1 であり、 A^1 が CHR^{15} または $C=O$ である式 1）は、式 2 の酸塩化物と式 3 のアミンとを酸掃去剤の存在下にカップリングさせることにより調製されることが可能である。典型的な酸掃去剤としては、トリエチルアミン、N, N-ジイソプロピルエチルアミンおよびピリジンなどのアミン塩基が挙げられる。他の掃去剤としては、水酸化ナトリウムおよび水酸化カリウムなどの水酸化物、ならびに、炭酸ナトリウムおよび炭酸カリウムなどの炭酸塩が挙げられる。一定の事例においては、ポリマー固定化 N, N-ジイソプロピルエチルアミンおよびポリマー固定化 4-（ジメチルアミノ）ピリジンなどのポリマーにより担持された酸掃去剤を用いることが有用である。当業者は、式 3 のアミンが第 2 の NH 官能基を含有している場合に混合物がもたらされ得、所望の異性体の単離に標準的な分離法を採用することが可能であることを認識するであろう。

【0314】

【化 3 4】

スキーム 1



式中、 A^1 は CHR^{15} であるか、または、 $C(=O)$ および W^1 は O である

【0315】

少なくとも 2 当量の酸掃去剤が存在している場合には、式 3 のアミンの酸塩をこの反応において用いることも可能である。アミンとの塩の形成に用いられる典型的な酸としては、塩酸、シュウ酸およびトリフルオロ酢酸が挙げられる。その後のステップにおいて、 W^1 が O である式 1 a のアミドは、五硫化リンまたは 2, 4-ビス（4-メトキシフェニル）-1, 3-ジチア-2, 4-ジホスフェタン-2, 4-ジスルフィド（ローソン試薬）などの多様な標準的な硫化試薬を用いて W^1 が S である式 1 a のチオアミドに転換されることが可能である。

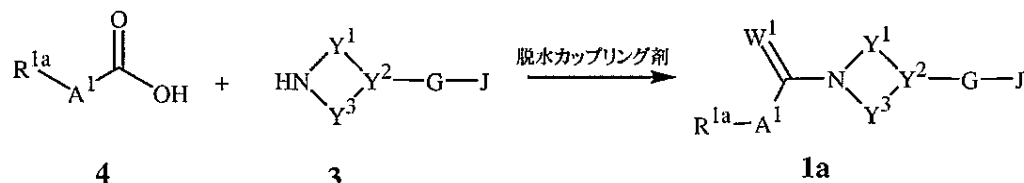
【0316】

W^1 が O である式 1 a の化合物の調製のための代替的な手法がスキーム 2 に示されており、ジシクロヘキシルカルボジイミド（DCC）、塩酸 1-（3-ジメチルアミノプロピル）-3-エチルカルボジイミド（EDC）または O-ベンゾトリアゾール-1-イル-N, N, N', N'-テトラメチルウロニウムヘキサフルオロリン酸（HBTU）などの脱水カップリング試薬の存在下での式 4 の酸と式 3 のアミン（またはその酸塩）とのカップリングが含まれている。ここでも、再度、ポリマー固定化シクロヘキシルカルボジイミドなどのポリマーにより担持された試薬が有用である。これらの反応は、典型的には、0 ~ 40 °C で、ジクロロメタンまたはアセトニトリルなどの溶剤中に、トリエチルアミンまたは N, N-ジイソプロピルエチルアミンなどの塩基の存在下で行われる。当業者は、式 3 のアミンが第 2 の NH 官能基を含有している場合に混合物がもたらされ得、所望の異性体の単離に標準的な分離法を採用することが可能であることを認識するであろう。

【0317】

【化 3 5】

スキーム 2



式中、 A^1 は CHR^{15} または $\text{C}(=\text{O})$ であり、および、 W^1 は O である

【0318】

10

式4の酸は、公知であるか、または、当業者に公知の方法により調製されることが可能である。例えば、 R^{1a} がヘテロ原子を介して酢酸残渣に結合している $\text{R}^{1a}\text{CH}_2\text{COOH}$ は、対応する R^{1a}H とハロ酢酸またはエステルとを塩基の存在下に反応させることにより調製されることが可能である；例えば、米国特許第4,084,955号明細書を参照のこと。 R^{1a} が炭素原子を介して酢酸残渣に結合している $\text{R}^{1a}\text{CH}_2\text{COOH}$ は、対応する R^{1a}CH_2 -ハロゲン化合物から、シアン化物でのハロゲンの置換、これに続く加水分解によって（例えば、K. Adachi, Yuki Gosei Kagaku Kyokai shi 1969, 27, 875-876を参照のこと）、または、 $\text{R}^{1a}\text{C}(=\text{O})\text{CH}_3$ からヴィルゲロット-キンドラール反応によって（例えば、H. R. Darabi et al., Tetrahedron Letters 1999, 40, 7549-7552およびM. M. Alam and S. R. Adapa, Synthetic Communications 2003, 33, 59-63、ならびに、その中で引用されている文献を参照のこと）、または、 R^{1a}Br もしくは R^{1a}I から、 t -酢酸ブチルもしくはマロン酸ジエチルが伴うパラジウム触媒クロスカップリング、これに続くエステル加水分解によって（例えば、W. A. Moradi and S. L. Buchwald, J. Am. Chem. Soc. 2001, 123, 7996-8002およびJ. F. Hartwig et al., J. Am. Chem. Soc. 2002, 124, 12557-12565を参照のこと）調製されることが可能である。

20

【0319】

アミドが形成される方法が多く合成文献に含まれているため、スキーム1および2の合成手法は単に、式1の化合物の調製に有用である広く多様な方法の代表例である。当業者はまた、式2の酸塩化物は、式4の酸から数多くの周知の方法により調製されることが可能であること理解する。

30

【0320】

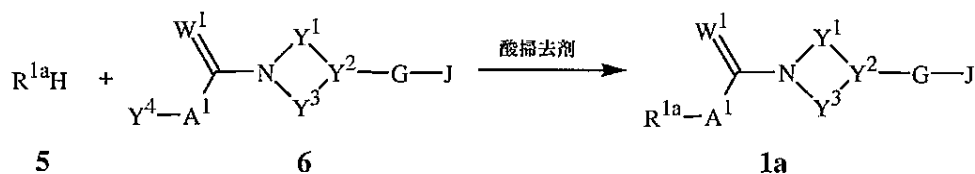
R^{1a} がヘテロ原子を介して A^1 に結合している式1aの一定の化合物（EがE-1であり、 A^1 が CHR^{15} または $\text{C}=\text{O}$ であり、および、 W^1 が O である式1）は、スキーム3に示されているとおり、式5の化合物と、式6のハロアセトアミドまたは塩化オキサリルとの反応により調製されることが可能である。この反応は、水素化ナトリウム、炭酸カリウムまたはトリエチルアミンなどの塩基の存在下に、テトラヒドロフラン、N,N-ジメチルホルムアミドまたはアセトニトリルなどの溶剤中で、0~80℃で実施される。式6のハロアセトアミドは、スキーム1および2のそれぞれに記載のアミド生成反応と同様の、式3のアミンと、 α -ハロカルボン酸ハロゲン化物または α -ハロカルボン酸もしくはその無水物との反応により調製されることが可能である。式6の塩化オキサリル（すなわち、式中、Aは $\text{C}(=\text{O})$ ）は、当業者に公知である式3のアミンと塩化オキサリルとの反応により調製されることが可能である。

40

【0321】

【化 3 6】

スキーム 3

式中、 A^1 は CHR^{15} または $\text{C}(=\text{O})$ であり、および、 W^1 は O である

式中、 R^{1a} はヘテロ原子を介して A^1 に結合しており；および、 Y^4 は Cl 、 Br または I である。

10

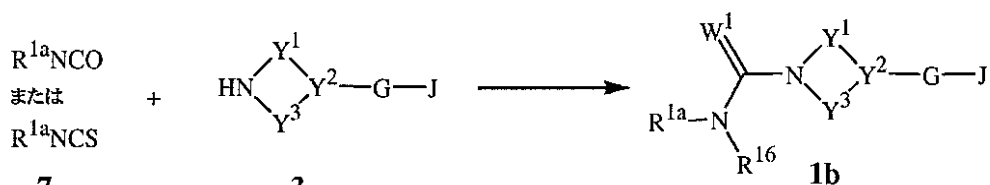
【0 3 2 2】

R^{16} が H であると共に W^1 が O または S である式1bの化合物（ E が $\text{E}-1$ であると共に A^1 が NR^{16} である式1）は、スキーム4に示されているとおり、式3のアミンと、それぞれ、式7のイソシアネートまたはイソチオシアネートとの反応により調製されることが可能である。この反応は、典型的には、周囲温度で、ジクロロメタンまたはアセトニトリルなどの非プロトン性溶剤中に実施される。

【0 3 2 3】

【化 3 7】

スキーム 4



式中、 R^{16} は H であり、
 および、 W^1 は O または S である

20

【0 3 2 4】

式1bの化合物はまた、スキーム5に示されているとおり、式8のアミンと、式9のカルバモイルまたは塩化チオカルバモイルまたはイミダゾールとの反応により調製されることが可能である。 Y^5 が塩素である場合、この反応は、典型的には、酸掃去剤の存在下に実施される。典型的な酸掃去剤としては、トリエチルアミン、 N 、 N -ジイソプロピルエチルアミンおよびピリジンなどのアミン塩基が挙げられる。他の掃去剤としては、水酸化ナトリウムおよび水酸化カリウムなどの水酸化物、ならびに、炭酸ナトリウムおよび炭酸カリウムなどの炭酸塩が挙げられる。当業者に公知である一般的な方法に準拠して、式9のカルバモイルまたは塩化チオカルバモイル（式中、 Y^5 は Cl である）は、式3のアミンから、それぞれホスゲンもしくはチオホスゲン、または、これらの均等物での処理により調製されることが可能であり、一方で、式9のカルバモイルもしくはチオカルバモイルイミダゾール（式中、 Y^5 はイミダゾール-1-イルである）は、式3のアミンから、それぞれ、1, 1'-カルボニルジイミダゾールもしくは1, 1'-チオカルボニルジイミダゾールでの処理により調製されることが可能である。

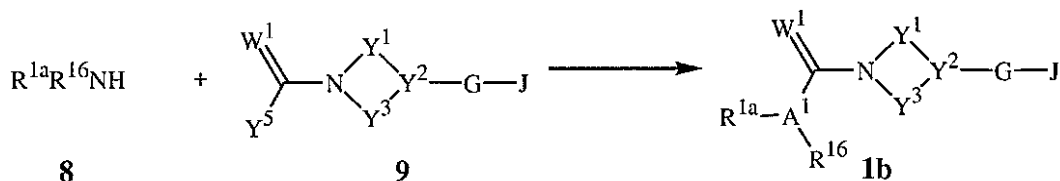
30

40

【0 3 2 5】

【化 3 8】

スキーム 5



式中、 W^1 は O または S であり、および、 Y^5 は Cl またはイミダゾール-1-イルである

10

【0 3 2 6】

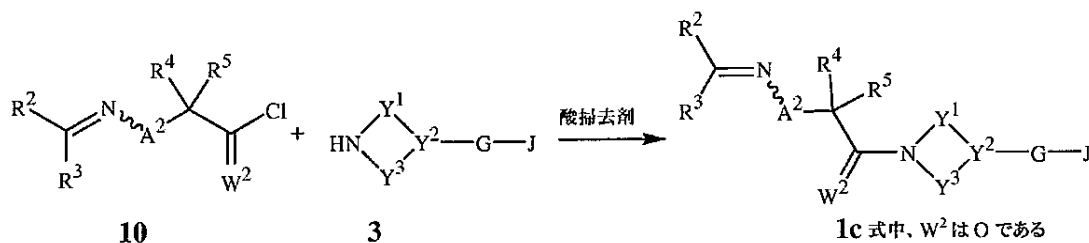
スキーム 6 に示されているとおり、 W^2 が O である式 1 c の化合物（E が E-2 である式 1）は、スキーム 1 に記載の方法と同様に、酸掃去剤の存在下に式 10 の酸塩化物を式 3 のアミンとカップリングさせることにより調製されることが可能である。その後のステップにおいて、 W^2 が O である式 1 c の化合物は、五硫化リンまたは 2, 4-ビス（4-メトキシフェニル）-1, 3-ジチア-2, 4-ジホスフェタン-2, 4-ジスルフィド（ローソン試薬）などの多様な標準的な硫化試薬を用いて、 W^2 が S である対応するチオアミドに転換される。

【0 3 2 7】

【化 3 9】

20

スキーム 6



【0 3 2 8】

30

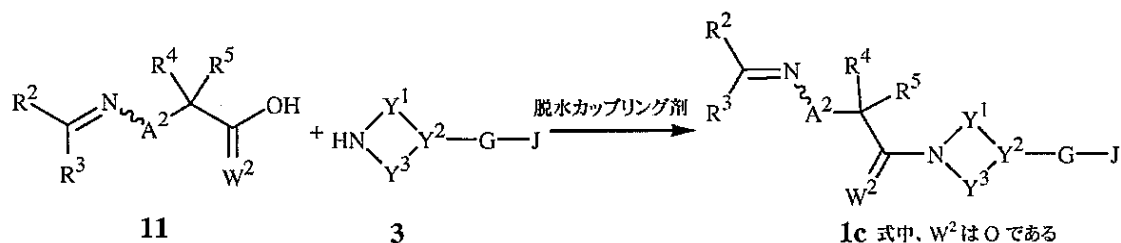
式 1 c の化合物（E が E-2 であると共に W^2 が O である式 1）を調製するための代替的な手法がスキーム 7 に示されており、スキーム 2 に記載の方法と同様の、脱水カップリング試薬の存在下での式 11 の酸と式 3 のアミン（または、その酸塩）とのカップリングが関与している。式 11 の酸は公知であるか、または、当業者に公知の方法により調製されることが可能である。最先端の文献については、例えば、Schumann, Paquette et al., J. Med. & Pharm. Chem. 1962, 5, 464-77; Van Dijk, Jan et al., J. Med. Chem. 1977, 20 (9), 1199-206; A. Balsamo et al., J. Med. Chem. 1989, 32, 1398-1401、および、その中で引用されている文献、ならびに、米国特許第 4, 584, 014 号明細書を参照のこと。

40

【0 3 2 9】

【化 4 0】

スキーム 7



10

【0 3 3 0】

スキーム 6 と同様に、W² が O である式 1 c の化合物は、五硫化リンまたは 2, 4-ビス(4-メトキシフェニル)-1, 3-ジチア-2, 4-ジホスフェタン-2, 4-ジスルフィド(ローソン試薬)などの多様な標準的な硫化試薬を用いて、W² が S である対応するチオアミドに転換される。

【0 3 3 1】

式 1 0 の酸塩化物は、式 1 1 の酸から数多くの周知の方法により調製されることが可能である。

【0 3 3 2】

アミドが形成される方法が多く合成文献に含まれているため、スキーム 6 および 7 の方法は単に、式 1 の化合物の調製に有用である広く多様な方法の代表例である。

20

【0 3 3 3】

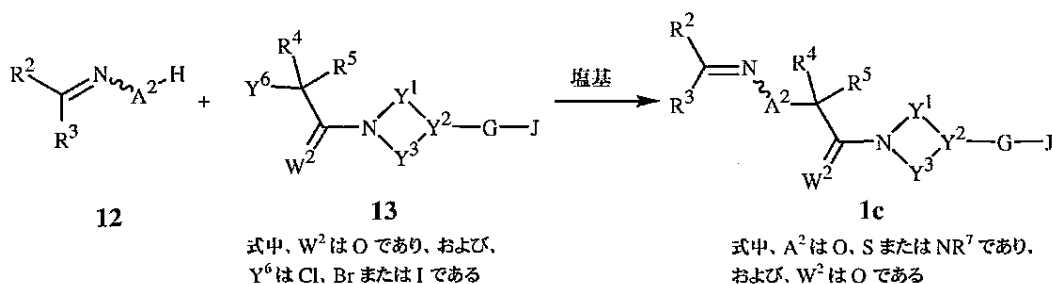
A² が、-O-、-S- および -N(R⁷)- であると共に、W² が O である式 1 c の化合物(E が E-2 である式 1)は、スキーム 8 に示されているとおり、式 1 2 の化合物と、Y が Cl、Br または I である式 1 3 のハロアセトアミドとの反応により調製されることが可能である。この反応は、水素化ナトリウムまたは炭酸カリウムなどの塩基の存在下に、テトラヒドロフラン、N, N-ジメチルホルムアミドまたはアセトニトリルなどの溶剤中で、典型的には、0~80℃で実施される。式 1 2 のイミン、オキシムおよびヒドラゾン は公知であるか、または、技術分野において公知である方法によって調製されることが可能である；例えば、S. Dayagi et al., The Chemistry of the Carbon-Nitrogen Double Bond, ed. S. Patei, Interscience, New York 1970; S. R. Sandler et al., Organic Functional Group Preparations, Academic Press, New York 1972, 3, 372、および、G. Hilgetag et al., Preparative Organic Chemistry, John Wiley & Sons, New York 1972, 504-515 を参照のこと。

30

【0 3 3 4】

【化 4 1】

スキーム 8



40

【0 3 3 5】

50

式13のハロアセトアミド化合物は、式3のアミンと、 α -ハロカルボン酸ハロゲン化合物もしくは α -ハロカルボン酸またはその無水物との反応により、それぞれ、スキーム1および2に記載のアミド生成反応と同様に調製されることが可能である。

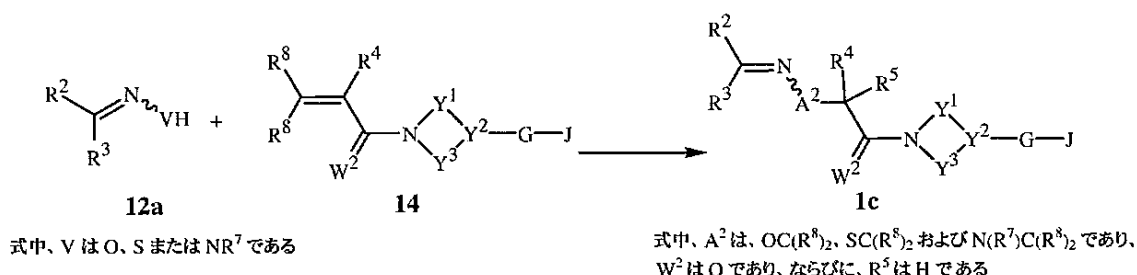
【0336】

A^2 が $-\text{OC}(\text{R}^8)_2-$ 、 $-\text{SC}(\text{R}^8)_2-$ または $-\text{N}(\text{R}^7)\text{C}(\text{R}^8)_2-$ であると共に、 R^5 がHである式1cの化合物(EがE-2である式1)は、式12aの化合物の式14の α 、 β -不飽和アミドとの塩基触媒縮合反応により、式12aにおけるVと式14における $\text{C}(\text{R}^8)_2$ とが式1cにおける A^2 を形成するスキーム9に示されているとおり、調製されることが可能である。この反応は、水酸化ナトリウムもしくは水酸化カリウム、水素化ナトリウムまたは炭酸カリウムなどの塩基の存在下に、テトラヒドロフラン、N,N-ジメチルホルムアミド、エタノールまたはアセトニトリルなどの溶剤中で、典型的には0~80℃で実施される。式14の α 、 β -不飽和アミドは、スキーム1および2に記載の方法と同様の方法による、対応する α 、 β -不飽和酸または酸塩化物と式3のアミンとのカップリングにより調製されることが可能である。

【0337】

【化42】

スキーム9



【0338】

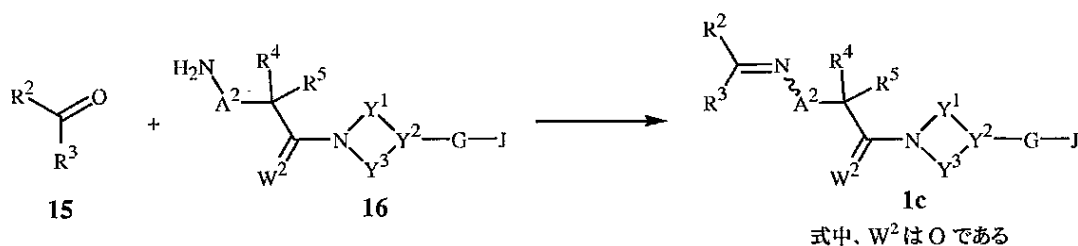
式1cの化合物(EがE-2である式1)はまた、スキーム10に例示されているとおり、式15の化合物と式16の化合物とを反応させることにより調製されることが可能である。この反応は、エタノール、テトラヒドロフランまたは水などの溶剤中に、および、任意により、酢酸、塩酸または硫酸などの酸触媒の存在下に実施されることが可能である。式16の酸塩もまた、好ましくは、ピリジンまたはトリエチルアミンなどの少なくとも1モル当量の酸掃去剤の存在下で、スキーム10の方法において用いられることが可能である。アミンとの塩の形成に用いられる典型的な酸としては、塩酸、シュウ酸およびトリフルオロ酢酸が挙げられる。アミンとカルボニル化合物との反応は周知であり、例えば、S. Dayagi et al., The Chemistry of the Carbon-Nitrogen Double Bond, ed. S. Patei, Interscience, New York 1970; S. R. Sandler et al., Organic Functional Group Preparations, Academic Press, New York 1972, 3, 372、および、G. Hilgetag et al., Preparative Organic Chemistry, John Wiley & Sons, New York 1972, 504-515を参照のこと。式15の化合物は、公知であるか、または、当業者に公知の方法により調製されることが可能である。式16の化合物は、直接的に、または、式16の対応するNが保護された化合物の脱保護により調製されることが可能である。式16の対応するNが保護された化合物は、スキーム1、2、3および4について既に記載のものと同様の方法によって調製されることが可能である。好適なNが保護された窒素の選択および使用は当業者には明らかであろう；代表例については、T. W. Greene and P. G. M. Wuts, Protective Groups in Organic Synthesis, 2nd ed.; Wiley: New York, 1991を

参照のこと。

【0339】

【化43】

スキーム 10



10

【0340】

スキーム 11 に示されているとおり、式 1 d ~ 1 g の一定の化合物（E が E - 3 であると共に W³ が、OR^{2 4}、SR^{2 5}、NR^{2 6} R^{2 7} または CN である式 1）は、式 17 のイミドイルクロリドと式 18 の化合物とを酸掃去剤の存在下に反応させることにより調製されることが可能である。好適な酸掃去剤としては、これらに限定されないが、トリエチルアミン、N, N - ジイソプロピルエチルアミンおよびピリジンなどのアミン塩基、水酸化ナトリウムおよび水酸化カリウムなどの水酸化物、ならびに、炭酸ナトリウムおよび炭酸カリウムなどの炭酸塩が挙げられる。代わりに、式 17 の化合物と式 18 の化合物とを酸掃去剤の不存在下に接触させて式 1 d ~ 1 f の化合物を対応する HCl 塩（これらもまた本発明の化合物である）としてもたらしることが可能である。所望の場合には、HCl 塩が標準的な方法によって塩基から遊離されて式 1 d ~ 1 f の化合物がもたらされることが可能である。反応が酸掃去剤と共に、もしくは、酸掃去剤を伴わずに実施されたかにかかわらず、この反応は、典型的には、好適な有機溶剤中に約 - 20 ~ 100 °C の温度で実施される。多様な溶剤を用いてこの方法に好適な溶剤を形成することが可能であり、例えば、アセトニトリルなどのニトリル、テトラヒドロフランなどのエーテル、および、ジクロロメタンなどのハロゲン化炭化水素、および、N, N - ジメチルホルムアミドなどのアミド、ならびに、これらの混合物が挙げられる。式 1 d ~ 1 g の化合物は、一般に、それぞれ、イソ尿素、イソチオ尿素、グアニジンおよびシアノアミジンと分類されることが可能である。化合物のこれらの分類に関する最先端の文献については、J. L o n M a t h i a s, O r g a n i c P r e p a r a t i o n s a n d P r o c e d u r e s I n t e r n a t i o n a l 1980, 12 (5), 309 - 326; C o m p r e h e n s i v e O r g a n i c C h e m i s t r y, v o l. 2, I. O. S u t h e r l a n d, E d., P e r g a m o n P r e s s, O x f o r d; R o d d ' s C h e m i s t r y o f C a r b o n C o m p o u n d s, v o l. 1 C, E l s e v i e r, N e w Y o r k; A. R. K a t r i t z k y e t a l., J. O r g a n i c C h e m. 2004, 69, 309 - 313 を参照のこと。当業者は、式 1 d、1 f および 1 g の一定の化合物は、式 1 e の対応する化合物から、式 18 の適切な化合物での処理により調製されることが可能であることを認識するであろう。例えば、チウロニウム塩の調製、および、そのグアニジンへの転換は文献中に記載されており、C. R. R a s m u s s e n e t a l., S y n t h e s i s 1988, 6, 460 - 466 を参照のこと。式 17 のイミドイルクロリドは、式 1 b の化合物（E が E - 1 であり、A¹ が NH である式 1）から、ジクロロメタンなどの溶剤中に、塩化チオニル、オキシ塩化リンまたは五塩化リンで処理することにより調製されることが可能である。典型的な反応条件については、例えば、W. Z i e l i n s k i e t a l., H e t e r o c y c l e s 1998, 48, 319 - 327 または国際公開第 2009 / 094445 号パンフレットを参照のこと。式 18 の化合物の多くが市販されていると共に、化学技術分野において十分に記述されている方法によって調製されることが可能である。

20

30

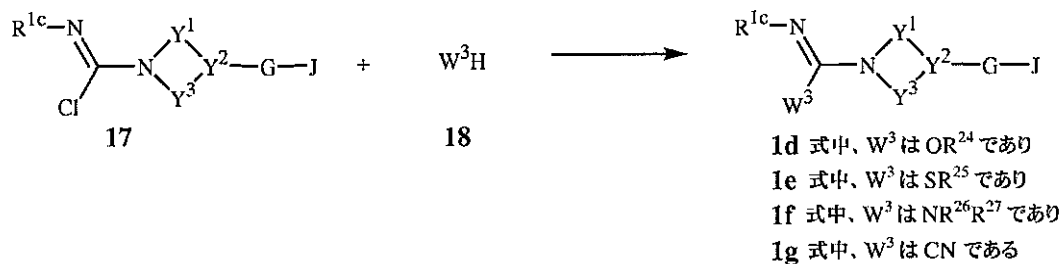
40

【0341】

50

【化 4 4】

スキーム 11



10

【0342】

スキーム 12 に示されている代替的な手法においては、式 1 d ~ 1 f および式 1 h の一定の化合物（E が E-3 であると共に、 W^3 が R^{28} である式 1）は、スキーム 11 に記載のものと同様の条件を用いて、式 3 のアミンと式 19 のイミドイルクロリドとを反応させることにより調製されることが可能である。式 19 のイミドイルクロリドの多くは、技術分野において開示されている方法によって調製されることが可能であり、例えば、R. Bonnett, The Chemistry of the Carbon-Nitrogen Double Bond, S. Patai, Ed., Interscience Publishers、およびその中で引用されている文献を参照のこと。

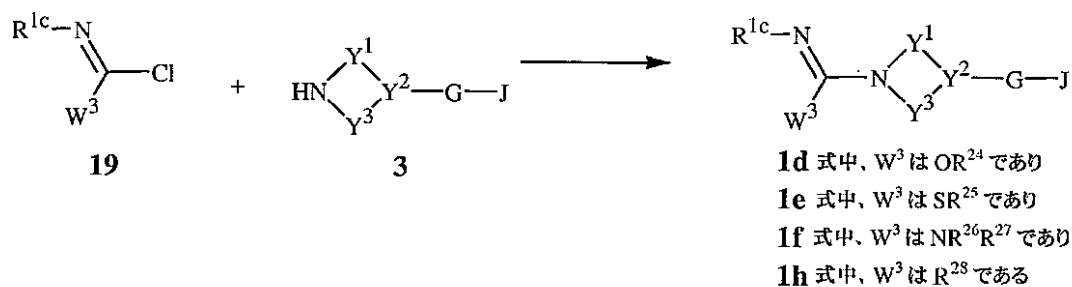
式 19 のイミドイルクロリドのいくつかは市販されている（例えば、 R^{1c} がフェニル、置換フェニルまたは低級アルキルであると共に、 W^3 が OMe、SMe または N(Me)₂ である式 19 は商業的に入手可能である）と共に、化学技術分野において十分に記述されている方法によって調製されることが可能である。

20

【0343】

【化 4 5】

スキーム 12



30

【0344】

スキーム 11 および 12 は、式 1 e の化合物を調製する単に 2 つの方法の代表である。スキーム 13 に示されている他の方法において、式 1 e の化合物は、式 1 b のチオ尿素（E が E-1 であり、 A^1 が NH であり、および、 W^1 が S である式 1）と、 Y^6 がハライド（例えば、Cl、Br、I）またはスルホネート（例えば、メシレート、トリフレート、p-トルエンスルホネート）等などの求核反応脱離基である式 20 の化合物のアルキル化剤またはアシル化剤とを反応させることにより調製されることが可能である。この方法は、酸掃去剤および好適な有機溶剤の存在下に、約 0 ~ 100 °C の温度で実施されることが可能である。好適な溶剤としては、例えば、ジクロロメタン、テトラヒドロフラン、アセトニトリル、N, N-ジメチルホルムアミド、および、これらの混合物が挙げられる。好適な酸掃去剤は、例えば、トリエチルアミン、N, N-ジイソプロピルエチルアミンおよびピリジンなどのアミン塩基、水酸化ナトリウムおよび水酸化カリウムなどの水酸化物、ならびに、炭酸ナトリウムおよび炭酸カリウムなどの炭酸塩を含む。代わりに、式 1 b の化合物と式 20 の化合物とを酸掃去剤の不在下に接触させて、式 1 e の対応するイソチ

40

50

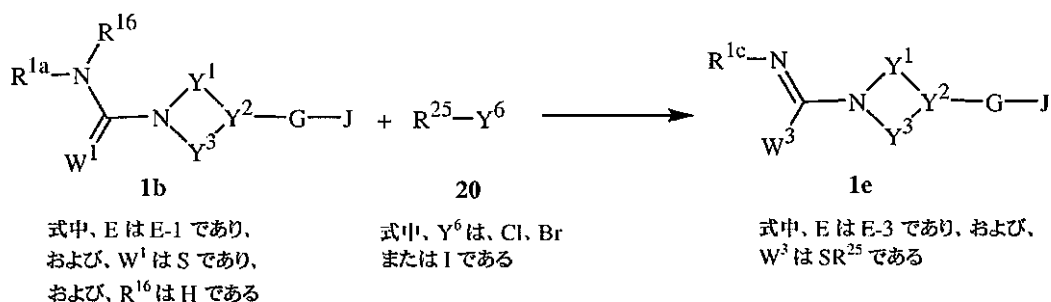
ウロニウム塩（これらもまた本発明の化合物である）をもたらすことが可能である。その後の反応において、これらの塩が技術分野において記載されている標準的な方法を用いて塩基から遊離されて式1eの化合物をもたらすことが可能である。チウロニウム塩の調製、および、そのグアニジンへの転換を例示する一例については、C. R. Rasmussen et al., Synthesis 1988, 6, 460-466、または、国際公開第2009/094445号パンフレットを参照のこと。式20の化合物の多くが公知であると共に、技術分野において開示されている一般的な方法によって調製されることが可能である。

【0345】

【化46】

10

スキーム13



20

【0346】

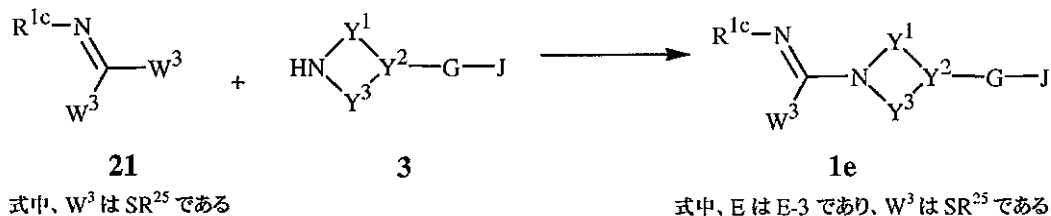
式1eの化合物はまた、スキーム14に例示されているとおり、式3のアミンと式21のジチオカルバミン酸とを反応させることにより調製されることが可能である。スキーム14の反応は、典型的には、好適な溶剤中に、約0～100℃の温度で実施される。好適な溶剤の例としては、アセトニトリル、テトラヒドロフラン、ジクロロメタン、N、N-ジメチルホルムアミド、および、これらの混合物が挙げられる。式21のジチオカルバミン酸は、Alvarez-Ibarra et al., Organic Preparations and Procedures 1991, 23(5), 611-616の一般的な方法に準拠して、対応するアミン、二硫化炭素、および、2当量の塩基から、その後続く、アルキル化剤での処理により調製されることが可能である。

30

【0347】

【化47】

スキーム14



40

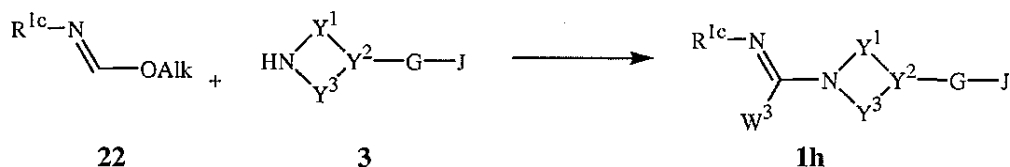
【0348】

R²⁸がHである式1hの一定の化合物は、スキーム15に示されているとおり、式3のアミンを式22のメトキシまたはエトキシイミンで処理することにより調製されることが可能である。式22のイミンは、対応するアミンから入手可能である。この手法においては、トルエンまたはキシレン中において、触媒量のp-トルエンスルホネートの存在下にアミンをトリメチルオルトホルメートまたはトリエチルオルトホルメートと加熱するステップが関与している。

【0349】

【化 4 8】

スキーム 15

式中、Alk は、C₁~C₂アルキルである式中、E は E-3 であり、W³は SR²⁸であり、および、R²⁸は H である

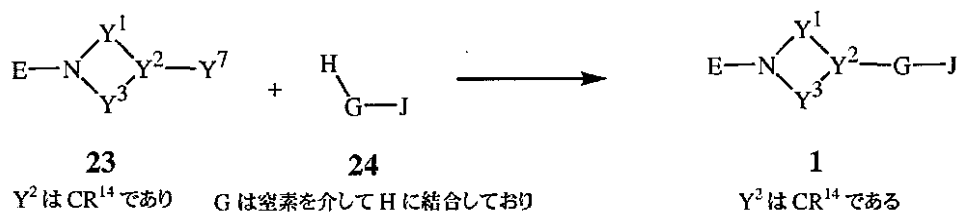
【0350】

Y² が C (R¹⁴) であると共に、G が窒素原子を介して Y² に結合している式 1 の化合物は、スキーム 16 に示されているとおり、式 23 の化合物における適切な脱離基（すなわち Y⁷）の式 24 の窒素含有複素環での塩基の存在下での置換により調製されることが可能である。好適な塩基としては、水素化ナトリウムまたは炭酸カリウムが挙げられ、および、反応は、N，N-ジメチルホルムアミドまたはアセトニトリルなどの溶剤中に 0 ~ 80 °C で実施されることが可能である。式 23 の化合物における好適な脱離基としては、臭化物イオン、ヨウ化物イオン、メシレート (OS(O)₂CH₃)、トリフレート (OS(O)₂CF₃) 等が挙げられる。式 23 の化合物は、Y⁷ が OH である対応する化合物から、技術分野において公知である一般的な方法を用いて調製されることが可能である。

【0351】

【化 4 9】

スキーム 16



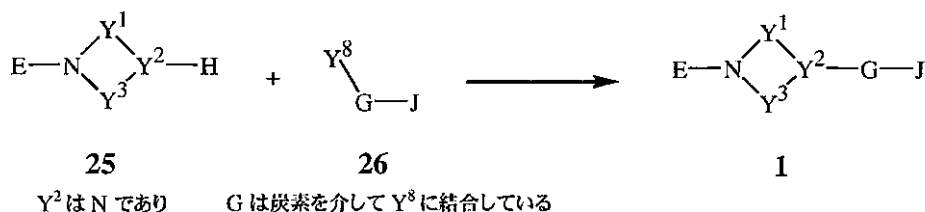
【0352】

Y² が窒素原子であると共に、G が C (R¹⁴) を介して Y² に結合している式 1 の化合物は、スキーム 17 に示されているとおり、式 25 の化合物と、Y⁸ が脱離基（例えば、ブロミド、ヨージド、メシレート (OS(O)₂CH₃)、トリフレート (OS(O)₂CF₃) 等）である式 26 のヘテロ環式化合物との反応により調製されることが可能である。この反応は、炭酸カリウムなどの塩基の存在下に、ジメチルスルホキシド、N，N-ジメチルホルムアミドまたはアセトニトリルなどの溶剤中で、約 0 ~ 80 °C の温度で実施されることが可能である。式 26 の化合物は、Y⁸ が OH である対応する化合物から当業者に公知である方法により調製されることが可能である。

【0353】

【化 5 0】

スキーム 17



【0354】

10

20

30

40

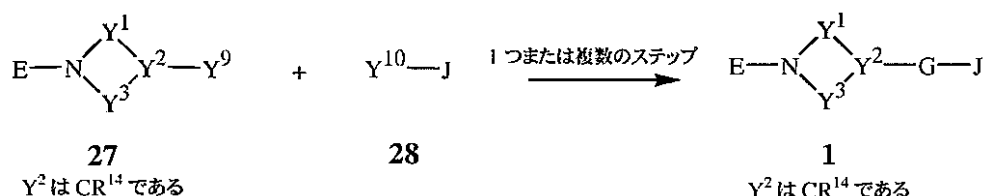
50

式 1 の化合物はまた、スキーム 18 に示されているとおり、式 27 の好適に官能基化された化合物と、式 28 の好適に官能基化された化合物との反応により調製されることが可能である。官能基 Y^9 および Y^{10} は、特にこれらに限定されないが、アルデヒド、ケトン、エステル、酸、アミド、チオアミド、ニトリル、アミン、アルコール、チオール、ヒドラジン、オキシム、アミジン、アミドオキシム、オレフィン、アセチレン、ハライド、ハロゲン化アルキル、メタンスルホネート、トリフルオロメタンスルホネート、ボロン酸、ボロネート等などの部分から選択され、これらは、適切な反応条件下で、種々の複素環 G の構築を許容することとなる。一例として、 Y^9 がチオアミド基である式 27 の化合物と、 Y^{10} がブromoアセチル基である式 28 の化合物との反応は、G がチアゾール環である式 1 の化合物をもたらすこととなる。合成文献に、5 員芳香族複素環（例えば、G-1 ~ G-48）を形成するための多くの一般的な方法が記載されている；例えば、Comprehensive Heterocyclic Chemistry, Vol. 4-6, A. R. Katritzky and C. W. Rees editors, Pergamon Press, New York, 1984; Comprehensive Heterocyclic Chemistry II, Vol. 2-4, A. R. Katritzky, C. W. Rees, and E. F. Scriven editors, Pergamon Press, New York, 1996; および、the series, The Chemistry of Heterocyclic Compounds, E. C. Taylor, editor, Wiley, New York を参照のこと。芳香族環とのクロスカップリング反応において用いられる有機亜鉛試薬を調製するための Y^2 が $C(R^{14})$ であると共に、 Y^9 が Br、I、メタンスルホネートまたはトリフルオロメタンスルホネートである式 27 の中間体の使用が記載されている；例えば、S. Bellotte, Synlett 1998, 379-380 および M. Nakamura et al., Synlett 2005, 1794-1798 を参照のこと。当業者は、所望の複素環 G の構築に適切な官能基をどのように選択するかを知っている。式 28 の化合物は、は公知であるか、または、技術分野において公知である方法によって調製されることが可能である。

【0355】

【化51】

スキーム 18



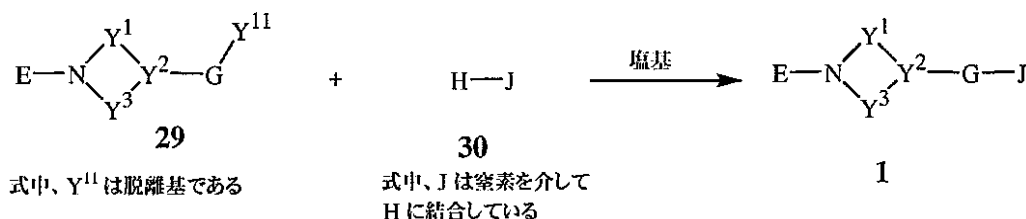
【0356】

J が $C(=W^4)NT^A T^B$ 以外であり、および、J 環の窒素原子が G の炭素原子に結合している式 1 の化合物は、スキーム 19 に示されているとおり、塩基の存在下での式 29 の G 上の適切な脱離基（すなわち Y^{11} ）の式 30 の化合物での置換により調製されることが可能である。好適な塩基としては水素化ナトリウムまたは炭酸カリウムが挙げられ、反応は、N, N-ジメチルホルムアミドまたはアセトニトリルなどの溶剤中に、約 0 ~ 80 °C の温度で実施されることが可能である。式 29 の化合物における好適な脱離基としては、例えば、臭化物イオン、ヨウ化物イオン、メシレート ($OS(O)_2CH_3$)、トリフレート ($OS(O)_2CF_3$) 等が挙げられる。式 29 の化合物は、 Y^{11} が OH である対応する化合物から、技術分野において公知である一般的な方法によって調製されることが可能である。式 30 の化合物は公知であるか、または、技術分野において公知である一般的な方法によって調製されることが可能である。

【0357】

【化52】

スキーム19



10

【0358】

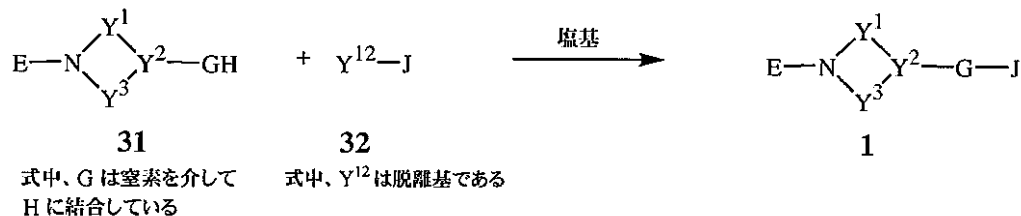
GがG環窒素を介してJに結合している式1の化合物はまた、スキーム20に示されているとおり、塩基の存在下での式32のJ上の適切な脱離基Y¹²の式31の化合物の置換によっても調製されることが可能である。好適な塩基としては、水素化ナトリウムまたは炭酸カリウムが挙げられ、反応は、N，N-ジメチルホルムアミドまたはアセトニトリルなどの溶剤中に、約0～80℃の温度で実施される。式32の化合物における好適な脱離基としては、例えば、臭化物イオン、ヨウ化物イオン、メシレート（OS(O)₂CH₃）、トリフレート（OS(O)₂CF₃）等が挙げられる。式32の化合物は、Y¹²がOHである対応する化合物から、技術分野において公知である一般的な方法によって調製されることが可能である。式32の化合物の多くは公知であるか、または、技術分野において公知である一般的な方法によって調製されることが可能である。

20

【0359】

【化53】

スキーム20



30

【0360】

JがC(=W⁴)NT^AT^B以外である式1の化合物はまた、スキーム21に示されているとおり、式33の好適に官能基化された化合物と式34の好適に官能基化された化合物との反応により調製されることが可能である。官能基Y¹³およびY¹⁴は、特にこれらに限定されないが、アルデヒド、ケトン、エステル、酸、アミド、チオアミド、ニトリル、アミン、アルコール、チオール、ヒドラジン、オキシム、アミジン、アミドオキシム、オレフィン、アセチレン、ハライド、ハロゲン化アルキル、メタンスルホネート、トリフルオロメタンスルホネート、ボロン酸、ボロネート等などの部分から選択され、これらは、適切な反応条件下で、種々の複素環Jの構築を許容することとなる。一例として、Y¹³がクロロオキシム部分である式33の化合物と、Y¹⁴がビニルまたはアセチレン基である式34の化合物との塩基の存在下での反応は、Jが、それぞれ、イソキサゾリンまたはイソオキサゾールである式1の化合物をもたらすこととなる。合成文献は、炭素環および複素環ならびに環系を形成するための多くの一般的な方法を含んでいる；例えば、Comprehensive Heterocyclic Chemistry, Vol. 4-6, A. R. Katritzky and C. W. Rees editors, Pergamon Press, New York, 1984; Comprehensive Heterocyclic Chemistry II, Vol. 2-4, A. R. Katritzky, C. W. Rees, and E. F. Scriven editors, Pergamon Press, New York, 1996; the seri

40

50

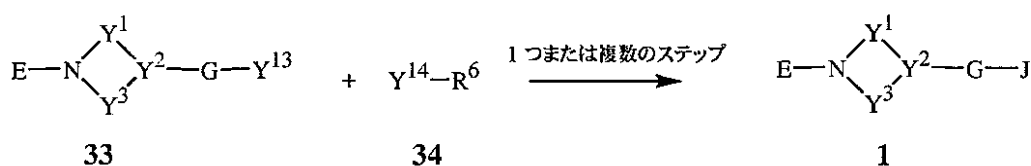
es, The Chemistry of Heterocyclic Compounds, E. C. Taylor, editor, Wiley, New York、および、Rod d's Chemistry of Carbon Compounds, Vol. 2-4, Elsevier, New Yorkを参照のこと。ニトリルオキシドのオレフィンでの環付加のための基本手順は化学文献において十分に記述されている。関連する文献については、Lee, Synthesis 1982, 6, 508-509および Kanemasa et al., Tetrahedron 2000, 56, 1057-1064、ならびに、これらにおいて引用されている文献を参照のこと。当業者は、所望の複素環 J を構築するために適切な官能基をどのように選択するかを知っている。式 34 の化合物は公知であるか、または、技術分野において公知である一般的な方法によって調製されることが可能である。

10

【0361】

【化54】

スキーム21



式中、J は R⁶ により置換されていると共に C(=W⁴)NT^AT^B 以外である

20

【0362】

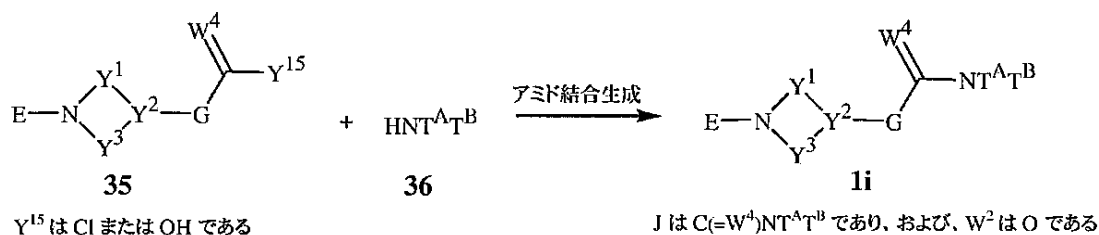
スキーム 22 に示されているとおり、W⁴ が O である式 1 i の化合物 (J が C(=W⁴)NT^AT^B) は、上記スキーム 1 および 2 に記載のものと同様の標準的なアミド結合形成反応を用いて、式 35 の酸または酸塩化物と、式 36 のアミンとを反応させることにより調製されることが可能である。その後のステップにおいて、W⁴ が O である式 1 i のアミドは、五硫化リンまたは 2, 4-ビス (4-メトキシフェニル) - 1, 3-ジチア-2, 4-ジホスフェタン-2, 4-ジスルフィド (ローソン試薬) などの多様な標準的な硫化試薬を用いて W⁴ が S である式 1 i のチオアミドに転換されることが可能である。式 1 i のもののような化合物を調製する代替的なアプローチは、国際公開第 2007/014290 号パンフレットに見いだされることが可能である。式 36 のアミンは、公知であるか、または、当業者に公知の方法により調製されることが可能である。

30

【0363】

【化55】

スキーム22



40

【0364】

J が 5 員 ~ 7 員環、および、8 員 ~ 11 員二環式環もしくは環系である式 1 の化合物の代替的な調製は、スキーム 23 に示されているとおり、式 37 または式 40 のヨウ化物または臭化物の、それぞれ、式 38 または式 39 のボロン酸でのパラジウム触媒クロスカップリングを含むスズキ反応の使用を含む。この種の変換には多くの触媒が有用であり；典型的な触媒はテトラキス (トリフェニルホスフィン) パラジウムである。テトラヒドロフ

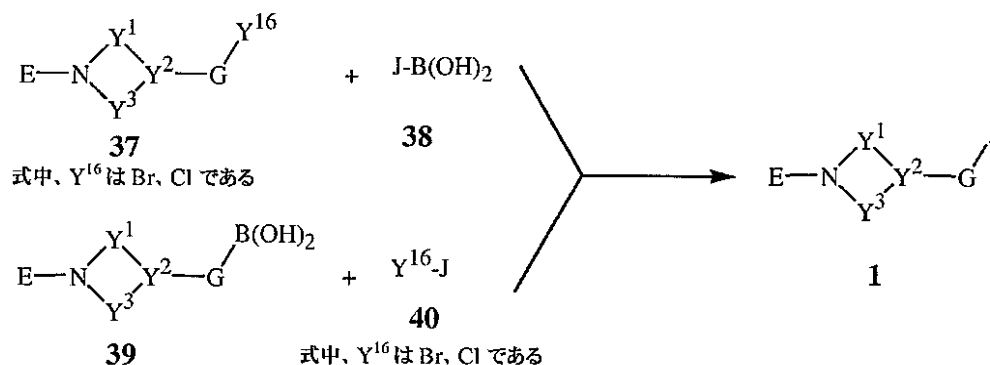
50

ラン、アセトニトリル、ジエチルエーテルおよびジオキサンなどの溶剤が好適である。スズキ反応および関連するカップリング手法では、G-J結合を形成するための代替法が多く提供されている。最先端の文献については、例えばC. A. Zifcick and D. J. Hlasta, *Tetrahedron* 2004, 60, 8991-9016を参照のこと。G-J結合の合成に適用可能なパラジウム化学の詳細な概説については、J. J. Li and G. W. Gribble, editors, *Palladium in Heterocyclic Chemistry: A Guide for the Synthetic Chemist*, Elsevier: Oxford, UK, 2000を参照のこと。技術分野において公知であるスズキ反応の多くの変形が、式1の化合物の調製に有用である。

【0365】

【化56】

スキーム23



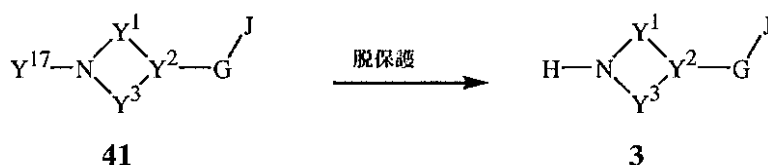
【0366】

式3のアミンは、スキーム24に示されているとおり、Y¹⁷がアミン保護基である式41の化合物から、脱保護反応を介して調製されることが可能である。多様なアミン保護基がスキーム24の方法について好適であり（例えば、T. W. Greene and P. G. M. Wuts, *Protective Groups in Organic Synthesis*, 2nd ed.; Wiley: New York, 1991を参照のこと）、および、適切な保護基の選択は化学合成における当業者には明らかであろう。脱保護の後、式3のアミンは、技術分野において公知である一般的な方法によって、その酸塩または遊離アミンとして単離されることが可能である。

【0367】

【化57】

スキーム24

式41
式中、Y¹⁷はアミン保護基である

【0368】

当業者は、多くの式41の化合物は、基EがY¹⁷により置き換えられている、上記スキーム16～23に記載されているものと同様の方法により調製されることが可能であることを認識するであろう。それ故、EがY¹⁷により置き換えられている、式23、25、27、29、31、33、35、37および39に対応する化合物が、式1の化合物の調製のために有用な中間体である。

【0369】

10

20

30

40

50

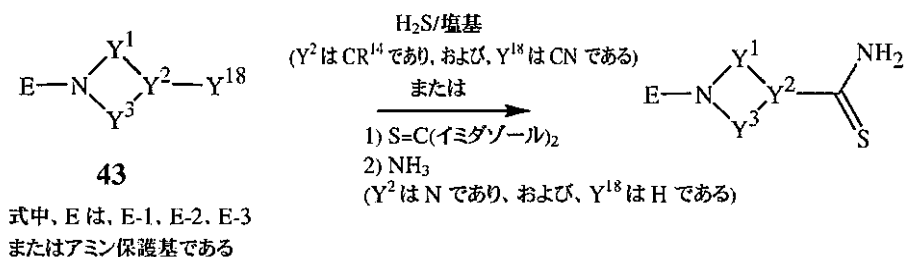
式 4 2 のチオアミドは、式 1 および式 4 1 の化合物の調製に特に有用な中間体である。式 4 2 のチオアミドは、スキーム 2 5 に示されているとおり、 Y^2 が $C(R^{14})$ であると共に、 Y^{18} がニトリル部分である式 4 3 の対応するニトリルへの硫化水素の付加により調製されることが可能である。スキーム 2 5 の方法は、式 4 3 の化合物を硫化水素と、ピリジン、ジエチルアミンまたはジエタノールアミンなどのアミンの存在下で接触させることにより調製されることが可能である。代わりに、硫化水素は、そのアルカリ金属との二硫化塩またはアンモニアの形態で用いられることが可能である。この種の反応は、文献に十分に記述されている；例えば、欧州特許第 6 9 6 5 8 1 号明細書を参照のこと。

【0370】

【化 5 8】

10

スキーム 25



20

【0371】

スキーム 2 5 にも示されているとおり、式 4 2 のチオアミドは、J. L. Collins, et. al., J. Med. Chem. 1998, 41 (25), 5037-5054 に記載されているとおり、式 4 3 の化合物（式中、 Y^2 は窒素原子であると共に、 Y^{18} は H である）のチオカルボニルジイミダゾールとの反応が実施され、続いて、アンモニアの処理が行われることにより調製されることが可能である。

【0372】

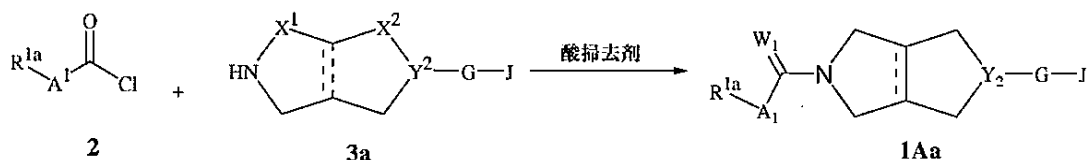
当業者は、スキーム 1 ～スキーム 2 5 の方法はまた、式 1 の化合物について示されている核となる複素環を、式 1 A の化合物について示されている核となる複素環と置き換えることにより、式 1 A の化合物の調製に用いられることが可能であることを認識するであろう。例えば、スキーム 1 の方法は、式 1 A a の化合物の調製を例示するためのスキーム 1 A として、再度、表記されることが可能である。

30

【0373】

【化 5 9】

スキーム 1A



式中、 A^1 は、 CHR^{15} または $C(=O)$ であり、
および、 W^1 は O である

40

【0374】

式 4 8 のハロメチルイソキサゾリンケトンもまた、J が例えば、J-29 である式 1 および式 1 A の一定のキラル化合物の調製に特に有用な中間体である。式 4 8 のハロメチルイソキサゾリンケトンは、スキーム 2 6 に示されている多段反応シーケンスにより調製されることが可能である。

【0375】

当業者は、スキーム 2 6 はまた、式 4 5 の化合物が式 4 4 a のラセミ類似体に直接的に

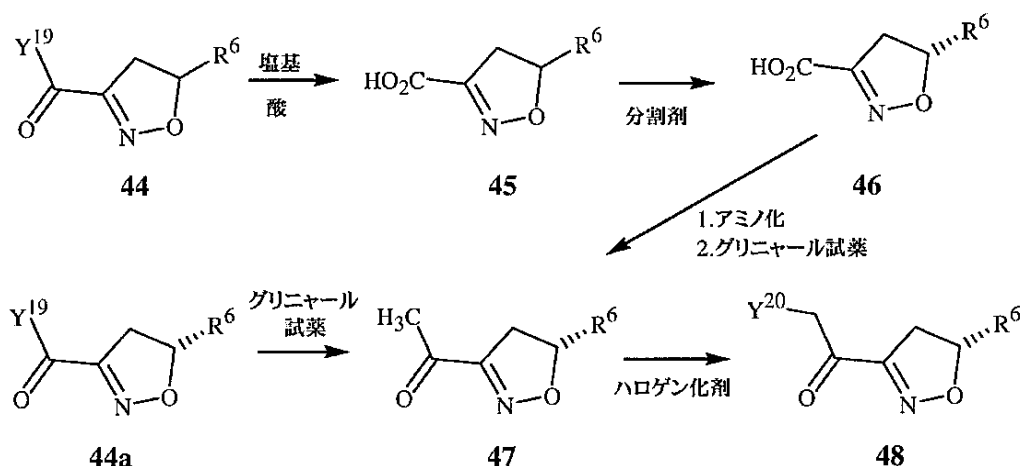
50

転換されるよう分割剤を用いずに実施されることが可能であり、次いで、これが用いられて、式 47、式 48 のラセミ類似体ならびに式 1 および式 1 A の一定のラセミ化合物を調製することが可能であることを認識するであろう。

【0376】

【化60】

スキーム 26



式中、Y¹⁹ は、C₂～C₈ ジアルキルアミノ、C₂～C₆ ハロアルキルアミノ、1-ピペリジニル、1-ピロリジニルまたは 4-モルホリニルであり；および、R⁶ は、発明の概要において上記に定義されているとおりである。

【0377】

式 45 のラセミカルボン酸の調製は、好ましくはわずかな過剰量の水酸化ナトリウムが用いられる、メタノールまたはテトラヒドロフランなどの水和性の共溶剤中における、約 25～45℃での対応する式 44 の化合物の、周知の方法である塩基性または酸性加水分解に準拠して達成されることが可能である。生成物は、反応混合物の pH を約 1～3 に調節し、その後、ろ過または抽出することによって、任意により、蒸発により有機溶剤を除去することによって単離することが可能である。式 45 のラセミカルボン酸は、シンコニン、ジヒドロシンコニンまたはこれらの混合物などの好適なキラルアミン塩基のジアステレオ異性塩の一般的な分別結晶化により分割されることが可能である。約 85：15 比でのシンコニン-ジヒドロシンコニン混合物が、より難溶性の塩として、例えば、R⁶ が置換フェニル基である式 46 の (R)-立体配置のカルボン酸をもたらすために特に有用である。しかも、これらのキラルアミン塩基は、商業規模で容易に入手可能である。式 48 のハロメチルケトン、先ず、純粋なエナンチオマー（すなわち式 44a）であるか、または、鏡像異性体的に富化されているか、または、ラセミ混合物の対応する式 44 のアミドを、1 モル当量のメチルハロゲン化マグネシウム（グリニャール試薬）と、テトラヒドロフランおよびトルエンなどの好適な溶剤または溶媒混合物中に、約 0～20℃で反応させることにより調製されることが可能であり、ならびに、式 47 の粗ケトン生成物は、水性酸での失活、抽出、および、濃縮により単離されることが可能である。次いで、式 47 の粗ケトンが塩化スルフルルなどの試薬でハロゲン化されて、Y²⁰ が Cl または分子臭素である式 48 のクロロメチルケトンが得られて、Y²⁰ が Br である式 48 の対応するブロモメチルケトンが得られる。式 48 のハロメチルケトンは、ヘキサンもしくはメタノールなどの溶剤からの結晶化により精製されることが可能であり、または、さらなる精製を伴わずに、チオアミドとの縮合反応に用いられることが可能である。

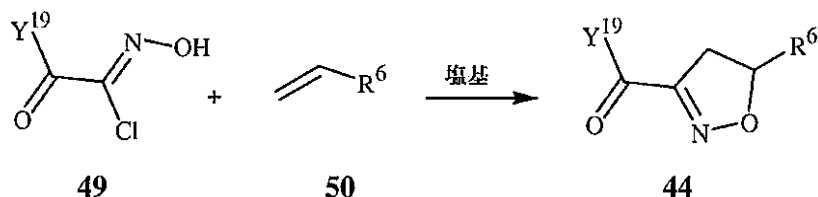
【0378】

式 44 のイソキサゾリンカルボキサミドは、スキーム 27 に示されているとおり、式 49 の対応する塩化ヒドロキサモイルの式 50 のオレフィン誘導体での環付加により調製されることが可能である。

【0379】

【化61】

スキーム27



式中、 Y^{19} は、 $\text{C}_2 \sim \text{C}_8$ ジアルキルアミノ、 $\text{C}_2 \sim \text{C}_6$ ハロアルキルアミノ、1-ピペリジニル、1-ピロリジニルまたは4-モルホリニルであり；および、 R^6 は、発明の概要において上記に定義されているとおりである。

【0380】

この方法において、すべての3種の反応成分（式49および式50の化合物、ならびに、塩基）は、式49の塩化ヒドロキサモイルの加水分解または二量体化加水分解または二量体化が最低限となるよう接触させられる。典型的な一手法においては、トリエチルアミンなどの第三級アミン塩基、または、アルカリ金属もしくはアルカリ土類カーボネートなどの無機塩基、炭酸水素塩、または、リン酸のいずれかであることが可能である塩基が、式50のオレフィン誘導体と混合され、および、式49の塩化ヒドロキサモイルが、典型的には5～25℃といった比較的速い速度で環付加が進行する温度で徐々に添加される。代わりに、塩基は、他の2つの成分（式49および式50の化合物）に徐々に添加されることが可能である。この代替的な手法は、式49の塩化ヒドロキサモイルが反応媒体中に実質的に不溶性である場合に好ましい。反応媒体中の溶剤は、水、または、トルエン、ヘキサンなどの不活性有機溶剤、または、過剰量である用いられるオレフィン誘導体であることも可能である。生成物は、ろ過、または、水での洗浄、これに続く溶剤の蒸発により塩共生成物から分離されることが可能である。粗生成物は結晶化により精製されることが可能であるか、または、粗生成物は、スキーム26の方法において直接的に用いられることが可能である。式44の化合物は、式47の対応するメチルケトンおよび式48のハロメチルケトンに対する有用な前駆体であり、ならびに、スキーム26に示されているとおり、加水分解、分割、メチルケトン合成およびハロゲン化によって式47および48の化合物の分割されたエナンチオマーを調製するために有用でもある。

【0381】

上記スキーム（いくつかの特定の例については上記明細表1Aおよび1Bも参照のこと）に示されている核となる6員および7員複素環系は、公知であるか、または、当業者に公知の方法により調製されることが可能である。合成文献には、飽和および部分飽和6員および7員複素環系を形成するための一般的な方法の多くが記載されている。例えば、Comprehensive Heterocyclic Chemistry, Vol. 3 and 7, A. R. Katritzky and C. W. Rees editors, Pergamon Press, New York, 1984; Comprehensive Heterocyclic Chemistry II, Vol. 6 and 9, A. R. Katritzky, C. W. Rees, and E. F. Scriven editors, Pergamon Press, New York, 1996; および、the series, The Chemistry of Heterocyclic Compounds, E. C. Taylor, editor, Wiley, New Yorkを参照のこと。加えて、これらの環系の多くの数多くの特定の例を、当業者に公知であるScifinderおよびBielsteinなどの電子データベースを用いる構造サーチを通じて合成文献の原本中に見いだすことが可能である。当業者は、所望の複素環を構築するために適切な保護基および官能基をどのように選択するかを知っているであろう。

【0382】

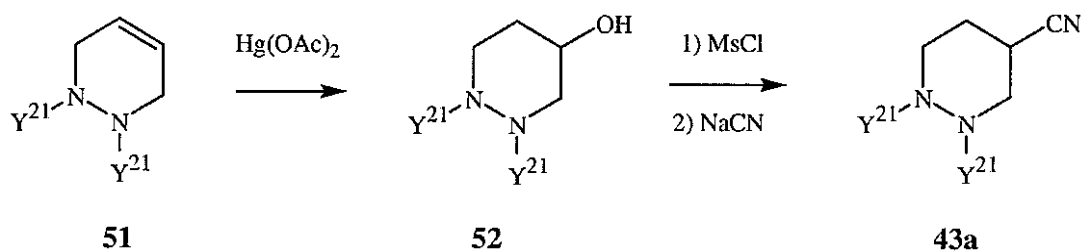
例えば、核となる複素環がヘキサヒドロピリダジン（例えば、上記明細表1B中のL-9）である中間体シアノ化合物43aは、スキーム28に概説されている3つのステップシーケンスにより調製されることが可能である。テトラヒドロピリダジン51は酢酸第二水銀の存在下でヒドロキシル化されて化合物52がもたらされる（Vartanyan, R. S. et al. *Armyanskii Khimicheskii Zhurnal* 1991, 44(4), 259を参照のこと）。化合物52中のヒドロキシル基はその対応するメシレートに転換され、および、標準的な方法を用いてシアノ化物アニオンで置換されて、化合物43aがもたらされることが可能である。これらの形質転換の詳細な説明は、以下の合成実施例1において見いだすことが可能である。

10

【0383】

【化62】

スキーム28



20

Y²¹ は、エトキシカルボニルなどの
アミン保護基である

【0384】

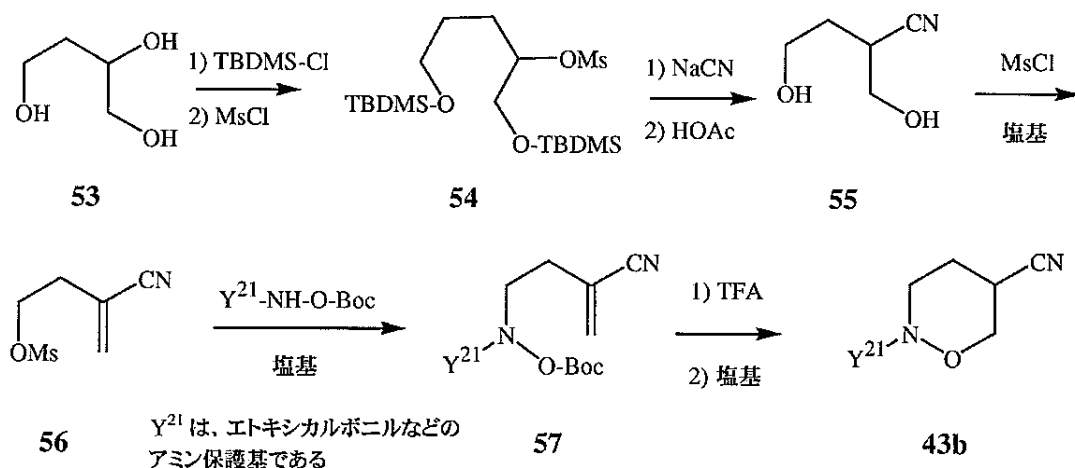
第2の実施例において、核となる複素環がテトラヒドロ-1,2-オキサジン（例えば、上記明細表1B中のL-1）である中間体シアノ化合物43bは、スキーム29に概説されている8つのステップにおいて調製されることが可能である。トリオール53の第1位にあるヒドロキシル基は保護され、第2位にあるヒドロキシル基はメシル化されると共にシアノ化物により置換され、続いて、脱保護されてシアノジオール55がもたらされる。メシル化に続く塩基処理でオレフィン56がもたらされ、メシル基がO, N二保護ヒドロキシルアミンにより置換される。O保護基は塩基触媒環化により除去可能であり、これにより式43bの化合物がもたらされる。これらの形質転換の詳細な説明は以下の合成実施例3に見いだされる。

30

【0385】

【化63】

スキーム29



40

Y²¹ は、エトキシカルボニルなどの
アミン保護基である

50

【0386】

代わりに、テトラヒドロ-1, 2-オキサジン（例えば、上記明細表1BにおけるL-1）は、Ensley, H. E. and Mahadevan, S., *Tetrahedron Lett.* 1989, 30 (25), 3255に記載されているとおりニトロシルヒドリドもしくはニトロソホルムアルデヒドの置換ジェンでの環付加により、または、Riddell, F. G. and Williams, D. A. R., *Tetrahedron* 1974, 30 (9), 1083に記載されているとおり置換1, 4-ジプロモブタンとN-ヒドロキシウレタンとの反応により調製されることが可能である。

【0387】

テトラヒドロ-1, 3-オキサジン（例えば、明細表1B中のL-2）などの核となる複素環は、Meisel, S. L., Dickert, J. J., Jr., and Hartough, H. D., *J. Am. Chem. Soc.* 1956, 78, 4782およびこれらにおいて提供されている追加の情報に記載されているとおりビニル化合物のアミノメチル化により、または、Pandey, G. et al., *Org. Lett.* 2009, 11 (12), 2547およびこれらにおいて提供されている追加の情報に記載されているとおり、置換1, 4-アミノアルコールをアルデヒドまたはアルデヒド均等物で環化することにより調製されることが可能である。1, 4, 2-テトラヒドロジオキサジン（例えば、上記明細表1B中のL-13）などの核となる複素環は、Fruchier, A. et al., *Bull. Soc. Chim. Fr.* 1984, 5-6, Pt. 2, 173に記載されているとおり、メチルヒドロキシカルバメートでの置換オキシランの開環、これに続く、アルデヒドでの環化により調製されることが可能である。1, 3, 4-テトラヒドロオキサジアジン（例えば、上記明細表1B中のL-15）などの核となる複素環は、米国特許第3, 251, 838号明細書においてKalm, M. J. によって記載されているとおり、置換1, 4-アミノアルコールから、ジアゾ化、対応するヒドラジンへの還元、および、アルデヒドでの環化により調製されることが可能である。

【0388】

上記スキーム（特定の例については上記明細表1Cを参照のこと）に示されている核となる二環式複素環系は公知であり、および、化学文献において記載されている数多くの方法を用いて調製されることが可能である。3, 7-ジアザビシクロ[3. 3. 0]オクタン（例えば、明細表1C中のL-60）などの核となる複素環は、J. Med. Chem. 2009, 52, 4126-4141、国際公開第2010/108628号パンフレット、米国特許第7, 164, 019号明細書、および、その中で引用されている文献において開示されている方法によって形成されることが可能である。さらに、いくつかの誘導体は市販されている。3, 7-ジアザビシクロ[3. 3. 0]オクター-5-エン（例えば、明細表1C中のL-61）などの環核となる複素環は、国際公開第2010/108628号パンフレットおよび米国特許出願公開第2010/144594号明細書、ならびに、その中で引用されている文献に記載されている化学を用いて構築され得る。2-オキサ-3, 7-ジアザビシクロ[3. 3. 0]オクタン（例えば、明細表1C中のL-63およびL-63）などの核となる複素環は、国際公開第2007/082262号パンフレットおよび国際公開第2006/002047号パンフレット、ならびに、その中で引用されている文献に概説されている方法によって調製されることが可能である。

【0389】

2-オキサ-3-アザビシクロ[3. 3. 0]オクタン（例えば、明細表1C中のL-65）などの核となる複素環は、国際公開第2006/081264号パンフレットに概説されている方法により形成されることが可能である。

【0390】

3-アザビシクロ[3. 3. 0]オクタン（例えば、明細表1C中のL-64）などの核となる複素環は、以下のスキーム30に示されているとおり形成されることが可能である。この方法においては、式60の化合物は、Cho et al., *Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters* 2010, 20

10

20

30

40

50

、および、「b r s」は幅広の一重項を意味する。

【0395】

実施例1

1-[4-[4-[5-(2,6-ジフルオロフェニル)-4,5-ジヒドロ-3-イソオキサゾリル]-2-チアゾリル]テトラヒドロ-1(2H)-ピリダジニル]-2-[5-メチル-3-(トリフルオロメチル)-1H-ピラゾール-1-イル]エタノンの調製

ステップA: 5-(2,6-ジフルオロフェニル)-4,5-ジヒドロ-N,N-ジメチル-3-イソオキサゾールカルボキサミドの調製

機械式攪拌機、温度計および滴下ロートを備えた1 L丸底フラスコに、クロロベンゼン (275 g) 中の2-(ジメチルアミノ)-N-ヒドロキシ-2-オキソエタンイミドイルクロリド (94.0 g、0.62 mol) および2,6-ジフルオロスチレン (84.0 g、0.60 mol) を添加した。この反応混合物を10℃に冷却し、次いで、水 (350 mL) 中の重炭酸カリウム (70 g、0.70 mol) を、10~15℃の温度を維持しながら1時間かけて滴下した。反応混合物のガスクロマトグラフィ分析が、2-(ジメチルアミノ)-N-ヒドロキシ-2-オキソエタンイミドイルクロリドの約3%が残留していることを示したら、水 (200 mL) を反応混合物に添加し、層を分離した。有機層を水 (300 mL) で洗浄し、減圧下で濃縮した。トルエンを得られた残渣に添加し、混合物を減圧下で濃縮して表題の化合物を油として得た (144 g)。

¹H NMR (CDCl₃): δ 3.1 (s, 3H), 3.3 (s, 3H), 3.4 (m, 1H), 3.57 (m, 1H), 6.0 (m, 1H), 6.95 (m, 2H), 7.35 (m, 1H)。

【0396】

ステップB: 1-(4,5-ジヒドロ-5-(2,6-ジフルオロフェニル)-3-イソオキサゾリル)エタノンの調製

温度計および滴下ロートを備えた1 L丸底フラスコに、5-(2,6-ジフルオロフェニル)-4,5-ジヒドロ-N,N-ジメチル-3-イソオキサゾールカルボキサミド (すなわち、ステップAの生成物) (80.0 g、0.31 mol) およびトルエン (320 mL) を添加した。この反応混合物を-5℃に冷却し、臭化メチルマグネシウム (テトラヒドロフラン中に3.0 M、120 mL、0.36 mol) を-10~-5℃の温度を維持しながら滴下した。反応混合物のガスクロマトグラフィ分析が、5-(2,6-ジフルオロフェニル)-4,5-ジヒドロ-N,N-ジメチル-3-イソオキサゾールカルボキサミドの約2%が残留していることを示したら、反応混合物を、濃塩酸 (80 mL) と水 (320 mL) との攪拌溶液に、10~30℃の温度を維持しながら注ぎ入れた。有機層を分離し、飽和塩化ナトリウム水溶液 (80 mL) で洗浄し、次いで、減圧下で濃縮した。得られた油をヘキサン (100 mL) から結晶化し、ろ過により回収し、ヘキサンで洗浄し、真空オーブン中で、一晚、23℃で乾燥させて、47~50℃で溶融する、ワックス状のオフホワイトの固体として表題の化合物を得た (65 g)。

¹H NMR (CDCl₃): δ 2.6 (s, 3H), 3.3 (m, 1H), 3.5 (m, 1H), 6.1 (m, 1H), 6.9 (m, 2H), 7.3 (m, 1H)。

【0397】

ステップC: 2-ブromo-1-(4,5-ジヒドロ-5-(2,6-ジフルオロフェニル)-3-イソオキサゾリル)エタノンの調製

機械式攪拌機、温度計、滴下ロートおよびスクラバーを備える500 mLフラスコに、1-(4,5-ジヒドロ-5-(2,6-ジフルオロフェニル)-3-イソオキサゾリル)エタノン (すなわち、ステップBの生成物) (60.0 g、0.27 mol) およびジクロロメタン (130 mL) を添加した。この反応混合物を33℃で加熱し、次いで、ジクロロメタン (100 mL) 中の臭素 (39.2 mL、0.24 mol) を滴下ロートを介して滴下した。約5 mLの臭素/ジクロロメタン溶液を添加した後、添加を止め、反応混合物を33℃で約10分間攪拌したところ、その間、反応混合物は赤色から黄色に変

色した。この反応混合物を5℃に冷却し、次いで、残った臭素／ジクロロメタン溶液を90分間かけて滴下した。添加が完了した後、反応混合物を、亜硫酸水素ナトリウム水溶液（100mLの水中に3.5g）で洗浄した。有機層を減圧下で濃縮し、ヘキサンを添加し、得られた固体沈殿物をろ過により回収し、ヘキサンで洗浄して、茶色の固体として表題の化合物を得（73g）、これをさらに精製せずに用いた。

【0398】

ステップD：1, 2-ジエチルテトラヒドロ4-ヒドロキシ-1, 2-ピリダジンジカルボキシレートの調製

1, 2-ジエチル-3, 6-ジヒドロ-1, 2-ピリダジンジカルボキシレート、（25.0g、0.11mol）と酢酸第二水銀（52.4g、0.165mol）とのテトラヒドロフラン（100mL）および水（100mL）中の混合物を室温で攪拌した。48時間後、水浴で冷却しながら、反応混合物を水酸化ナトリウム溶液（水中に3M、155mL）にゆっくりと添加し、続いて、水酸化ナトリウム（水中に3M）中のナトリウムボロハイドライド（水中に0.5M）をゆっくりと添加した。この反応混合物を24時間攪拌し、塩化ナトリウムを添加し、液体相を傾瀉した。層を分離し、水性相をテトラヒドロフラン（2×）で抽出した。組み合わせた有機層を硫酸マグネシウムで乾燥させ、ろ過し、減圧下で濃縮して、薄い黄色の油として表題の化合物を得（19.25g）、これをさらに精製せずに用いた

【0399】

ステップE：1, 2-ジエチル4-シアノテトラヒドロ-1, 2-ピリダジンジカルボキシレートの調製

1, 2-ジエチルテトラヒドロ4-ヒドロキシ-1, 2-ピリダジンジカルボキシレート（19.0g、0.077mol）（すなわち、ステップDの生成物）の水浴により冷却したジクロロメタン（150mL）中の溶液にトリエチルアミン（15mL、0.108mol）を添加し、続いて、反応混合物の温度を8℃未満に維持しながら、ジクロロメタン（50mL）中のメタン塩化スルホニル（7.15mL、0.0924mol）を1.5時間の時間をかけて添加した。30分間攪拌した後、反応混合物を塩酸（水中に2M）（2×）、水（2×）で洗浄し、硫酸マグネシウムで乾燥させ、ろ過し、減圧下で黄色の油に濃縮した。黄色の油（約0.077mol）と、ジメチルスルホキシド（DMSO）（350mL）中のシアン化ナトリウム（15.0g、0.308mol）とを70℃で20時間攪拌した。シアン化ナトリウム（5g、0.103mol）をさらに反応混合物に添加し、攪拌をさらに48時間続けた。この反応混合物を冷却し、水に注ぎ入れ、ジエチルエーテル（3×300mL）で抽出した。組み合わせた有機抽出物を水で洗浄し、硫酸マグネシウムで乾燥させ、ろ過し、減圧下で薄い黄色の油に濃縮した。黄色の油をCelite（登録商標）（珪藻土ろ過助剤）に吸着させ、次いで、シリカゲルカラムクロマトグラフィー（流出液として、石油エーテル中に10%～60%勾配の酢酸エチル）により精製して表題の化合物を得た（5.5g）。

【0400】

ステップF：1, 2-ジエチル4-（アミノチオキソメチル）テトラヒドロ-1, 2-ピリダジンジカルボキシレートの調製

1, 2-ジエチル4-シアノテトラヒドロ-1, 2-ピリダジンジカルボキシレート（すなわち、ステップEの生成物）（5.5g、0.024mol）とチオアセタミド（5.5g、0.073mol）とのトリフルオロ酢酸（約10mL）中の混合物を、50℃で20時間加熱した。この反応混合物を冷却し、次いで、水とジエチルエーテル（約30mL）との間に分割した。層を分離し、水性層をジエチルエーテル（2×）で抽出した。組み合わせた有機抽出物を水（約30mL）で洗浄し、硫酸マグネシウムで乾燥させ、ろ過し、減圧下でオレンジ色の油に濃縮した。油をCelite（登録商標）（珪藻土ろ過助剤）に吸着させ、次いで、シリカゲルカラムクロマトグラフィー（流出液として、石油エーテル中に25%～60%勾配の酢酸エチル）により精製して、黄色の固体として表題の化合物を得た（3.97g）。

【0401】

ステップG：1，2-ジエチル4-[4-[5-(2，6-ジフルオロフェニル)-4，5-ジヒドロ-3-イソオキサゾリル]-2-チアゾリル]テトラヒドロ-1，2-ピリダジンジカルボキシレートの調製

1，2-ジエチル4-(アミノチオキソメチル)テトラヒドロ-1，2-ピリダジンジカルボキシレート(すなわち、ステップFの生成物)(2.58g、0.0089mol)と2-ブromo-1-(4，5-ジヒドロ-5-(2，6-ジフルオロフェニル)-3-イソオキサゾリル)エタノン(すなわち、ステップCの生成物)(2.63g、0.0086mol)とのメタノール(20mL)中の混合物を35℃に注意深く加熱した。発熱は観察されず、温度は45～50℃に昇温し、この温度で1時間保持した。この反応混合物を水性酢酸ナトリウム(約20mL水中に0.73g)で中和した。この反応混合物をジエチルエーテル(3×)で抽出し、硫酸マグネシウムで乾燥させ、ろ過し、減圧下で濃縮して表題の化合物を得(4.18g)、これを精製せずに用いた。

¹H NMR(CDC1₃): δ 1.2～1.4(m, 6H), 1.95～2.1(m, 1H), 2.1～2.2(m, 1H), 3.0～3.3(m, 2H), 3.3～3.45(m, 1H), 3.6～3.7(m, 1H), 3.7～3.85(m, 1H), 4.1～4.3(m, 4H), 4.3～4.7(m, 2H), 6.0～6.15(m, 1H), 6.92(m, 2H), 7.3(m, 1H), 7.69(s, 1H)。

【0402】

ステップH：4-[4-[5-(2，6-ジフルオロフェニル)-4，5-ジヒドロ-3-イソオキサゾリル]-2-チアゾリル]ヘキサヒドロピリダジンの調製

1，2-ジエチル4-[4-[5-(2，6-ジフルオロフェニル)-4，5-ジヒドロ-3-イソオキサゾリル]-2-チアゾリル]テトラヒドロ-1，2-ピリダジンジカルボキシレート(すなわち、ステップGの生成物)(4.09g、0.0083mol)と水酸化カリウム(2.32g、0.0414mol)とのエタノール(50mL)および水(5mL)中の混合物を還流で20時間加熱した。この反応混合物を冷却し、濃塩酸の添加により酸性化し、次いで、約70℃に10分間温めた。この反応混合物を冷却し、重炭酸ナトリウムの添加により中和した。この反応混合物を減圧下で濃縮し、得られた物質をジエチルエーテル(3×)で抽出し、硫酸マグネシウムで乾燥させ、ろ過し、減圧下で黄褐色の油に濃縮した(2.99g)。油をCelite(登録商標)(珪藻土ろ過助剤)に吸着させ、次いで、シリカゲルカラムクロマトグラフィー(流出液として、クロロホルム中の5%～100%勾配のメタノール)により精製して、表題の化合物を得た(1.275g)。

¹H NMR(CDC1₃): δ 1.75～1.90(m, 1H), 2.05～2.20(m, 1H), 2.75～2.90(m, 1H), 2.90～3.05(m, 1H), 3.05～3.30(m, 4H), 3.30～3.45(m, 1H), 3.45～3.65(m, 1H), 3.65～3.70(m, 1H), 5.90～6.05(m, 1H), 6.75～6.90(m, 2H), 7.15～7.30(m, 1H), 7.58(s, 1H)。

【0403】

ステップI：1-[4-[4-[5-(2，6-ジフルオロフェニル)-4，5-ジヒドロ-3-イソオキサゾリル]-2-チアゾリル]テトラヒドロ-1(2H)-ピリダジン]-2-[5-メチル-3-(トリフルオロメチル)-1H-ピラゾール-1-イル]エタノンの調製

4-[4-[5-(2，6-ジフルオロフェニル)-4，5-ジヒドロ-3-イソオキサゾリル]-2-チアゾリル]ヘキサヒドロピリダジン(すなわち、ステップHの生成物)(0.29g、0.83mmol)と、5-メチル-3-(トリフルオロメチル)-1H-ピラゾール-1-酢酸(0.19g、0.91mmol)と、N，N-ジシクロヘキシルカルボジイミド(0.19g、0.91mmol)とのジクロロメタン(5mL)中の混合物を室温で48時間攪拌した。ジクロロメタンを反応混合物にさらに添加し、混合

10

20

30

40

50

物をろ過し、ジクロロメタンで完全に洗浄した。濾液を減圧下で濃縮し、c h r o m a t o t r o n プレート (4mm) に仕込んだ。プレートをジクロロメタンで溶出し、続いて、ジクロロメタン中の 0.5%~2% 勾配のメタノールにより溶出した。生成物質を含有する画分を、A l l t i m a C 18 カラム (250×22mm) を用い、波長 225nm で監視し、60%メタノールおよび水中の 0.1% 2, 2, 2-トリフルオロ酢酸で溶出する H P L C によりさらに精製し、本発明の化合物である表題の化合物を得た (69mg)。

¹H NMR (600 MHz; -40°C, CD₃CN): δ 1.95~2.10 (m, 1H), 2.20~2.35 (m, 4H), 2.95~3.15 (m, 2H), 3.40~3.55 (m, 2H), 3.55~3.67 (m, 1H), 3.80~3.95 (m, 1H), 4.50~4.60 (m, 1H), 5.25~5.45 (m, 2H), 6.10~6.20 (m, 1H), 6.50 (s, 1H), 7.05~7.20 (m, 2H), 7.43~7.55 (m, 1H), 7.92 (s, 1H)。

【0404】

実施例 2

1-[2-アセチル-4-[4-[5-(2,6-ジフルオロフェニル)-4,5-ジヒドロ-3-イソオキサゾリル]-2-チアゾリル]テトラヒドロ-1(2H)-ピリダジニル]-2-[5-メチル-3-(トリフルオロメチル)-1H-ピラゾール-1-イル]エタノンの調製

1-[4-[4-[5-(2,6-ジフルオロフェニル)-4,5-ジヒドロ-3-イソオキサゾリル]-2-チアゾリル]テトラヒドロ-1(2H)-ピリダジニル]-2-[5-メチル-3-(トリフルオロメチル)-1H-ピラゾール-1-イル]エタノン (すなわち、実施例 1 の生成物) (0.24g、0.44mmol) の無水酢酸 (2mL) 中の混合物を 100°C で一晩加熱した。この反応混合物を冷却し、水 (30mL) を添加し、混合物を 30 分攪拌し、次いで、酢酸エチルで抽出した。酢酸エチル抽出物を飽和重炭酸ナトリウム水溶液および飽和塩化ナトリウム溶液で洗浄し、硫酸マグネシウムで乾燥させ、ろ過し、減圧下で濃縮した。得られた材料をシリカゲルクロマトグラフィ (流出液として、ヘキサン中に 0~100% 勾配の酢酸エチル) により精製して、濃色の泡として本発明の化合物である表題の化合物を得た (150mg)。

¹H NMR (CDCl₃): δ 2.00~2.38 (m, 8H), 2.85~3.90 (m, 5H), 4.30~4.80 (m, 2H), 4.90~5.10 (m, 2H), 6.02~6.15 (m, 1H), 6.30~6.40 (m, 1H), 6.85~6.98 (m, 2H), 7.25~7.38 (m, 1H), 7.75 (s, 1H)。

【0405】

実施例 3

1-[5-[4-[5-(2,6-ジフルオロフェニル)-4,5-ジヒドロ-3-イソオキサゾリル]-2-チアゾリル]テトラヒドロ-2H-1,2-オキサジン-2-イル]-2-[5-メチル-3-トリフルオロメチル)-1H-ピラゾール-1-イル]エタノンの調製

ステップ A: 2, 2, 3, 3, 10, 10, 11, 11-オクタメチル-4,9-ジオキサ-3,10-ジシラドデカン-6-オール の調製

1, 2, 4-ブタントリオール (12.0g、0.113mol) およびイミダゾール (38.42g、0.565mol) の N, N-ジメチルホルムアミド (120mL) 中の氷浴で冷却した溶液に、t-ブチルジメチルクロロシラン (35.83g、0.238mol) を 5~10 分間かけて、数回に分けて添加した。混合物を室温に温めさせ、一晩攪拌した。この反応混合物を水 (約 200mL) とジエチルエーテル (約 200mL) との間に分割した。層を分離し、水性画分をジエチルエーテルで 2 回抽出した。組み合わせた有機層を水 (200mL) で洗浄し、硫酸マグネシウムで乾燥させ、ろ過し、濃縮して、薄い黄色の油として表題の化合物を得 (38.09g)、これをさらに精製せずに用いた。

10

20

30

40

50

【0406】

ステップB：6-メチルスルホニルオキシ-2, 2, 3, 3, 10, 10, 11, 11-オクタメチル-4, 9-ジオキサー3, 10-ジシラドデカンの調製

2, 2, 3, 3, 10, 10, 11, 11-オクタメチル-4, 9-ジオキサー3, 10-ジシラドデカン-6-オール（すなわち、ステップAの生成物）（36.31g、0.109mol）の窒素下で約0℃に冷却したジクロロメタン（300mL）中の溶液に、トリエチルアミン（22.8mL、0.163mol）を添加し、続いて、反応混合物を10℃未満に維持しながら、メタンスルホニルクロリド（10.14mL、0.13mol）のジクロロメタン（100mL）中の溶液を滴下した。この反応混合物をさらに30分間攪拌し、次いで、クエン酸（約200mL、10%）、水（約200mL）および重炭酸ナトリウム（約200mL）で洗浄し、硫酸マグネシウムで乾燥させ、ろ過し、減圧下で濃縮して、黄色の油として表題の化合物を得（42.16g）、これをさらに精製せずに用いた。

^1H NMR (CDCl_3) : δ 0.00~0.15 (m, 12H), 0.90 (s, 18H), 1.90 (m, 2H), 3.07 (s, 3H), 3.65~3.85 (m, 4H), 4.80 (m, 1H)。

【0407】

ステップC：4-[[(1, 1-ジメチルエチル) ジメチルシリル] オキシ] -2-[[(1, 1-ジメチルエチル) ジメチルシリル] オキシ] メチル] -ブタンニトリルの調製

6-メチルスルホニルオキシ-2, 2, 3, 3, 10, 10, 11, 11-オクタメチル-4, 9-ジオキサー3, 10-ジシラドデカン（すなわち、ステップBの生成物）（59.29g、0.144mol）とシアン化ナトリウム（15.55g、0.317mol）とのDMSO中の混合物を90℃（油浴を用いて）で2時間加熱した。この反応混合物を室温に冷却し、水（500mL）を添加し、混合物をジエチルエーテル（4×250mL）で抽出した。組み合わせた有機層を飽和塩化ナトリウム水溶液（300mL）で洗浄し、硫酸マグネシウムで乾燥させ、ろ過し、減圧下で濃い黄色の油（48.86g）に濃縮した。油を、シリカゲルクロマトグラフィ（石油エーテル、続いて、石油エーテル中に1~4%勾配の酢酸エチルでの溶出）により精製して、濃色の泡として本発明の化合物である表題の化合物を得た（150mg）。混合した画分を前の実験からの混合物（総重量19g）と組み合わせ、シリカゲルクロマトグラフィにより精製して表題の化合物を得た（約11g）。

【0408】

ステップD：2-シアノー1, 4-ブタンジオールの調製

4-[[(1, 1-ジメチルエチル) ジメチルシリル] オキシ] -2-[[(1, 1-ジメチルエチル) ジメチルシリル] オキシ] メチル] ブタンニトリル（14.29g、0.041mol）のテトラヒドロフラン（15mL）、水（15mL）および酢酸（45mL）中の溶液を室温で5日間攪拌した。混合物を乾燥するまで濃縮して、表題の化合物を定量的収率で得、これを精製せずに用いた。

【0409】

ステップE：4-メチルスルホニルオキシ-2-（ヒドロキシメチル）ブタンニトリルの調製

2-シアノー1, 4-ブタンジオール（6.36g、0.055mol）（すなわち、ステップDの生成物）の0℃に冷却したジクロロメタン（70mL）中の溶液に、窒素下で、メタンスルホニルクロリド（10.27mL、0.133mol）をゆっくりと添加し、続いて、反応混合物の温度を5℃未満に維持しながら、ジクロロメタン（30mL）中のトリエチルアミンを約1時間かけて滴下した。NMRにより判定して一旦添加が完了したら、反応混合物を冷たい塩酸（1M、約50mL）、水（50mL）および飽和塩化ナトリウム水溶液（50mL）で洗浄し、硫酸マグネシウムで乾燥させ、ろ過し、減圧下で濃縮して黄色の油を得た（11.96g）。

【0410】

黄色の油（11.96g、0.044mol）のジクロロメタン（50mL）中の混合物を氷浴中で冷却し、次いで、トリエチルアミン（7.4mL、0.053mol）をゆっくりと添加した。添加が完了した後、反応混合物を室温に温めさせ、20時間攪拌した。この反応混合物を塩酸（2M、20mL）、水（20mL）および飽和塩化ナトリウム水溶液（20mL）で2回洗浄し、硫酸マグネシウムで乾燥させ、ろ過し、減圧下で濃縮して表題の化合物を得（6.87g）、これを精製せずに用いた。

【0411】

ステップF：1, 1-ジメチルエチル（エトキシカルボニル）アザニルカーボネートの調製

塩酸ヒドロキシルアミン（111.2g、1.6mol）、クロロギ酸エチル（153mL、1.6mol）と炭酸ナトリウム（250g、2.4mol）との水（750mL）中の混合物を室温で20時間攪拌した。この反応混合物を塩酸（6M）の添加により酸性化し、次いで、ジエチルエーテル（5×500mL）で抽出した。組み合わせた有機抽出物を硫酸マグネシウムで乾燥させ、ろ過し、減圧下で濃縮して赤-黄褐色の油を得た（94.22g）。得られた油（24.79g、0.236mol）を、トルエン中のジ-tert-ブチルジカルボネート（51.53g、90.24mol）およびトリエチルアミン（1mL）と組み合わせ、70℃で約3時間加熱した。この反応混合物を減圧下で濃縮して、薄い黄色の油として表題の化合物を得（45.9g）、これを精製せずに用いた。

【0412】

ステップG：（3-シアノ-3-ブテン-1-イル）（エトキシカルボニル）アザニル1, 1-ジメチルエチルカーボネートの調製

4-メチルスルホニルオキシ-2-（ヒドロキシメチル）ブタンニトリル（すなわち、ステップEの生成物）（6.87g、0.039mol）と、1, 1-ジメチルエチル（エトキシカルボニル）アザニルカーボネート（7.65g、0.037mol）（すなわち、ステップFの生成物）と、炭酸カリウム（10.21g、0.074mol）とのN, N-ジメチルホルムアミド（50mL）中の混合物を、室温で20時間攪拌した。この反応混合物を氷冷水（100mL）に注ぎ入れ、ジエチルエーテル（3×50mL）で抽出した。組み合わせた有機層を水（50mL）で洗浄し、薄い黄褐色の油に濃縮した（10.05g）。油をCelite（登録商標）（珪藻土ろ過助剤）に吸着させ、次いで、シリカゲルクロマトグラフィ（流出液として、石油エーテル中に0~100%勾配の酢酸エチル）により精製した。適切な画分を組み合わせ、黄色の油として表題の化合物を得た（3.78g）。

【0413】

ステップH：エチル5-シアノテトラヒドロ-2H-1, 2-オキサジン-2-カルボキシレート

（3-シアノ-3-ブテン-1-イル）（エトキシカルボニル）アザニル1, 1-ジメチルエチルカーボネート（すなわち、ステップGの生成物）およびトリフルオロ酢酸（3mL）のジクロロメタン（40mL）中の溶液を室温で3日間攪拌した。この反応混合物を減圧下で黄褐色の油に濃縮した。油をN, N-ジメチルホルムアミド（30mL）中の炭酸カリウム（3.6g、0.026mol）と組み合わせ、80℃で24時間攪拌した。この反応混合物を減圧下で濃縮してほぼ乾燥させた。メタノールおよびジクロロメタンを添加し、析出した固形分をろ過により除去した。得られた固体をCelite（登録商標）（珪藻土ろ過助剤）に吸着させ、次いで、シリカゲルクロマトグラフィにより精製して薄い黄褐色の油として表題の化合物を得た（0.645g）。

^1H NMR (CDCl₃) : δ 1.30 (m, 3H), 1.90~2.15 (m, 2H), 2.95 (m, 1H), 3.62 (m, 1H), 3.87 (m, 1H), 4.00~4.18 (m, 2H), 4.18~4.28 (m, 2H)。

【0414】

ステップI：エチル5-（アミノチオソメチル）テトラヒドロ-2H-1, 2-オキサ

10

20

30

40

50

ジン-2-カルボキシレートの調製

エチル5-シアノテトラヒドロ-2H-1, 2-オキサジン-2-カルボキシレート（すなわち、ステップHの生成物）（0.63g、0.0034mol）とチオアセタミド（0.72g、0.0096mol）とのトリフルオロ酢酸（約2mL）中の混合物を50℃で20時間攪拌した。この反応混合物を水（10mL）に注ぎ入れ、ジエチルエーテル（3×10mL）で抽出した。組み合わせた有機抽出物を水（10mL）で洗浄し、硫酸マグネシウムで乾燥させ、ろ過し、濃縮して、オレンジ色の油を得た（約0.76g）。得られた油をCelite（登録商標）（珪藻土ろ過助剤）に吸着させ、次いで、シリカゲルカラムクロマトグラフィー（流出液として、石油エーテル中に25%～50%勾配の酢酸エチル）により精製して表題の化合物を得た（0.19g）。 10

¹H NMR (CDCl₃) : δ 1.30 (m, 3H), 1.85~2.00 (m, 1H), 2.00~2.15 (m, 1H), 3.05~3.15 (m, 1H), 3.3~3.43 (m, 1H), 3.95~4.15 (m, 3H), 4.15~4.22 (m, 2H), 7.95 (br s, 1H), 8.08 (br s, 1H)。

【0415】

ステップJ：エチル5-[4-[5-(2, 6-ジフルオロフェニル)-4, 5-ジヒドロ-3-イソオキサゾリル]-2-チアゾリル]テトラヒドロ-2H-1, 2-オキサジン-2-カルボキシレートの調製

エチル5-(アミノチオキソメチル)テトラヒドロ-2H-1, 2-オキサジン-2-カルボキシレート（すなわち、ステップIの生成物）（0.19g、0.87mmol）と2-ブromo-1-(4, 5-ジヒドロ-5-(2, 6-ジフルオロフェニル)-3-イソオキサゾリル)エタノン（実施例1、ステップCの生成物）（0.264g、0.87mmol）とのメタノール（2mL）中の溶液を50℃で1時間加熱した。メタノールを減圧下で除去し、得られた材料を酢酸ナトリウム（10%、5mL）とジエチルエーテル（5mL）との間に分割した。層を分離し、水性相をジエチルエーテル（2×）で抽出した。有機画分を減圧下で濃縮して、薄い黄褐色の油として表題の化合物を得た（0.383g）。 20

¹H NMR (CDCl₃) : δ 1.30 (m, 3H), 2.07~2.17 (m, 1H), 2.17~2.30 (m, 1H), 3.50~3.75 (m, 3H), 3.75~3.88 (m, 1H), 4.05~4.12 (m, 1H), 4.12~4.22 (m, 1H), 4.22~4.32 (m, 2H), 4.35~4.45 (m, 1H), 6.03~6.12 (m, 1H), 6.88~6.98 (m, 2H), 7.25~7.38 (m, 1H), 7.70 (s, 1H)。 30

【0416】

ステップK：5-[4-[5-(2, 6-ジフルオロフェニル)-4, 5-ジヒドロ-3-イソオキサゾリル]-2-チアゾリル]テトラヒドロ-2H-1, 2-オキサジンの調製

エチル5-[4-[5-(2, 6-ジフルオロフェニル)-4, 5-ジヒドロ-3-イソオキサゾリル]-2-チアゾリル]テトラヒドロ-2H-1, 2-オキサジン-2-カルボキシレート（すなわち、ステップJの生成物）（0.30g、0.71mmol）と水酸化カリウム（0.20g、3.50mmol）とのエタノール（10mL）および水（1mL）中の溶液を還流で20時間加熱し、次いで、室温に冷却した。この反応混合物を濃塩酸の添加により酸性化し、70℃で約20分間加熱し、室温に冷却し、次いで、水酸化ナトリウム（1%）の添加により塩基化した。この反応混合物を酢酸エチル（20mL）で抽出し、組み合わせた有機抽出物を減圧下で濃縮して、黄色の油として表題の化合物を得（0.235g）、これを精製せずに用いた。 40

¹H NMR (CDCl₃) : δ 2.00~2.15 (m, 1H), 2.15~2.30 (m, 1H), 3.20~4.35 (m, 7H), 4.8~5.8 (br m, 1H), 6.02~6.12 (m, 1H), 6.85~6.95 (m, 2H), 7.25~7.32 (m, 1H), 7.68 (s, 1H)。 50

【0417】

ステップL：1-[5-[4-[5-(2,6-ジフルオロフェニル)-4,5-ジヒドロ-3-イソオキサゾリル]-2-チアゾリル]テトラヒドロ-2H-1,2-オキサジン-2-イル]-2-[5-メチル-3-トリフルオロメチル)-1H-ピラゾール-1-イル]エタノンの調製

5-[4-[5-(2,6-ジフルオロフェニル)-4,5-ジヒドロ-3-イソオキサゾリル]-2-チアゾリル]テトラヒドロ-2H-1,2-オキサジン(すなわち、ステップKの生成物)(0.235g、0.67mmol)と、5-メチル-3-(トリフルオロメチル)-1H-ピラゾール-1-酢酸(0.154g、0.74mmol)と、N,N-ジシクロヘキシルカルボジイミド(0.152g、0.74mmol)とのジクロロメタン中の混合物を室温で20時間攪拌した。この反応混合物をさらなるジクロロメタンで希釈し、尿素副産物をろ過により除去した。濾液を減圧下で薄い黄色のフォームに濃縮した(0.42g)。得られたフォームを最低量のジクロロメタンに溶解させ、ジクロロメタン中の酢酸エチルの勾配で溶出するchromatotronプレート(2mm)に仕込んで、本発明の化合物である表題の化合物を無色の泡状の固体として得た(0.101g)。

¹H NMR (CDCl₃): δ 2.05~2.20 (m, 1H), 2.20~2.35 (m, 4H), 3.403.55 (m, 1H), 3.55~3.70 (m, 2H), 3.75~3.88 (m, 1H), 4.08~4.20 (m, 1H), 4.35~4.45 (m, 1H), 4.45~4.55 (m, 1H), 5.08 (s, 2H), 6.02~6.12 (m, 1H), 6.30 (s, 1H), 6.85~6.98 (m, 2H), 7.25~7.38 (m, 1H), 7.72 (s, 1H)。

【0418】

実施例4

1-[5-[4-[5-(2,6-ジフルオロフェニル)-4,5-ジヒドロ-3-イソオキサゾリル]-2-チアゾリル]ヘキサヒドロピロールオール[3,4-c]ピロール-2(1H)-イル]-2-[5-メチル-3-(トリフルオロメチル)-1H-ピラゾール-1-イル]エタノンの調製

ステップA：1,1-ジメチルエチル5-(アミノチオキソメチル)ヘキサヒドロピロロ[3,4-c]ピロール-2(1H)-カルボキシレート調製の調製

1,1-ジメチルエチルヘキサヒドロピロロ[3,4-c]ピロール-2(1H)-カルボン酸エステル(4.8g、22.55mmol)の0℃に冷却したテトラヒドロフラン(THF)(60mL)中の攪拌溶液に、THF(40mL)中の1,1'-チオカルボニルジイミダゾール(4.8g、26.97mmol)を滴下した。この反応混合物を室温で2時間攪拌し、0℃に冷却し、次いで、アンモニアのメタノール中の溶液(飽和)を滴下した。この反応混合物を圧力チューブに移し、室温で16時間攪拌し、次いで、減圧下で濃縮した。得られた材料を酢酸エチル(150mL)と水(150mL)との間に分割した。有機層を分離し、飽和塩化ナトリウム水溶液で洗浄し、減圧下で濃縮した。得られた材料を石油エーテルで倍散し、ろ過して、188.1~190.2℃で溶融する白色の固体として表題の生成物を得た(3.4g)。

¹H NMR (CDCl₃): δ 5.59 (s, 2H), 3.7~4.0 (m, 3H), 3.58~3.64 (m, 2H), 3.01~3.36 (m, 5H), 1.46 (s, 9H)。

【0419】

ステップB：2-クロロ-1-[5-(2,6-ジフルオロフェニル)-4,5-ジヒドロイソキサゾール-3-イル]エタノンの調製

1,3-ジクロロ-2-プロパノン(10.0g、78.74mmol)の0℃に冷却したジエチルエーテルおよび塩酸(ジエチルエーテル中に2M、100mL)中の攪拌溶液に、亜硝酸1,1-ジメチルエチルエステル(8.11g、78.74mmol)を滴下した。この反応混合物を室温で16時間攪拌し、次いで、減圧下で白色の半固体に濃縮

した。固体を石油エーテルおよび1-クロロブタン(2:1)で倍散し、ろ過して、3-クロロ-N-ヒドロキシ-2-オキソプロパンイミドイルクロリドを、98.0~99.3℃で溶融する白色の固体として得た(7.0g)。

【0420】

3-クロロ-N-ヒドロキシ-2-オキソプロパンイミドイルクロリド(0.89g、5.71mmol)のアセトニトリル(20mL)中の攪拌溶液に、2-エテニル-1,3-ジフルオロベンゼン(1.0g、7.14mmol)および重炭酸ナトリウム(1.8g、2.14mmol)を室温で添加した。この反応混合物を室温で12時間攪拌し、減圧下で濃縮し、得られた材料を酢酸エチル(50mL)と水(50mL)との間に分割した。有機層を分離し、飽和塩化ナトリウム水溶液で洗浄し、減圧下で濃縮した。得られた材料を石油エーテルで倍散し、ろ過して表題の生成物を82.1~83.4℃で溶融する白色の固体として得た(1.1g)。

¹H NMR(CDCl₃): δ 7.3~7.4(m, 1H), 6.9~6.98(m, 2H), 6.1~6.18(m, 1H), 4.76(s, 2H), 3.52~3.62(m, 1H), 3.31~3.4(m, 1H), 1.46(s, 9H)。

【0421】

ステップC: 1,1-ジメチルエチル5-[4-[5-(2,6-ジフルオロフェニル)-4,5-ジヒドロ-3-イソオキサゾリル]-2-チアゾリル]ヘキサヒドロピロロ[3,4-c]ピロール-2(1H)-カルボキシレート の調製

1,1-ジメチルエチル5-(アミノチオキソメチル)ヘキサヒドロピロロ[3,4-c]ピロール-2(1H)-カルボキシレート(すなわち、ステップAの生成物)(0.5g、18.42mmol)のクロロホルム(20mL)中の攪拌溶液に、2-クロロ-1-[5-(2,6-ジフルオロフェニル)-4,5-ジヒドロイソキサゾール-3-イル]エタノン(すなわち、ステップBの生成物)(0.478g、18.42mmol)およびピリジン(0.29g、37.12mmol)を室温で添加した。この反応混合物を90℃で5時間加熱し、室温に冷却し、減圧下で濃縮した。得られた材料を酢酸エチル(100mL)に溶解させ、水(100mL)および飽和塩化ナトリウム水溶液(100mL)で洗浄し、減圧下で濃縮した。得られた材料をカラムクロマトグラフィー(流出液として1%メタノール/クロロホルム)により精製して、表題の生成物を、78.9~80.2℃で溶融する白色の固体として得た(0.7g)。

¹H NMR(CDCl₃): δ 7.28(m, 1H), 6.85~6.93(m, 3H), 5.99~6.03(m, 1H), 3.39~3.78(m, 10H), 3.04(m, 2H), 1.46(s, 9H)。

【0422】

ステップD: 5-[4-[5-(2,6-ジフルオロフェニル)-4,5-ジヒドロ-3-イソオキサゾリル]-2-チアゾリル]ヘキサヒドロピロロ[3,4-c]ピロールの調製

1,1-ジメチルエチル5-[4-[5-(2,6-ジフルオロフェニル)-4,5-ジヒドロ-3-イソオキサゾリル]-2-チアゾリル]ヘキサヒドロピロロ[3,4-c]ピロール-2(1H)-カルボキシレート(すなわち、ステップCの生成物)(0.6g、1.26mmol)の0℃に冷却したジクロロメタン(15mL)中の攪拌溶液に、トリフルオロ酢酸(2mL、26.93mmol)を添加した。この反応混合物を室温に温めさせ、3時間攪拌し、次いで、減圧下で濃縮した。得られた材料を水(50mL)に溶解させ、水酸化ナトリウム(10%)の添加によりpH12に塩基化し、次いで、クロロホルム(3×50mL)で抽出した。組み合わせた有機抽出物を減圧下で濃縮して、表題の生成物を白色のガム状の固体として得た(0.42g)。

¹H NMR(CDCl₃): δ 7.23~7.31(m, 1H), 6.85~6.93(m, 3H), 5.98~6.05(m, 1H), 3.49~3.71(m, 4H), 3.37~3.40(m, 2H), 3.13~3.19(m, 2H), 2.82~2.97(m, 4H)。

【0423】

ステップE：（5－メチル－3－トリフルオロメチル－ピラゾール－1－イル）アセチルの調製

（5－メチル－3－トリフルオロメチル－ピラゾール－1－イル）酢酸（0.0885 g、0.4255 mmol）のジクロロメタン（10 mL）中の攪拌溶液に、塩化オキサリル（0.108 g、0.851 mmol）および1滴のDMFを添加した。この反応混合物を45℃で2時間攪拌し、次いで、減圧下で濃縮して白色の固体として表題の化合物を得た（0.096 g）。

^1H NMR (CDCl₃) : δ 6.38 (s, 1H), 5.27 (s, 2H), 2.31 (s, 3H)。

10

【0424】

ステップF：1－[5－[4－[5－（2，6－ジフルオロフェニル）－4，5－ジヒドロ－3－イソオキサゾリル]－2－チアゾリル]ヘキサヒドロピロールオール[3，4－c]ピロール－2（1H）－イル]－2－[5－メチル－3－（トリフルオロメチル）－1H－ピラゾール－1－イル]エタノンの調製

5－[4－[5－（2，6－ジフルオロフェニル）－4，5－ジヒドロ－3－イソオキサゾリル]－2－チアゾリル]ヘキサヒドロピロロ[3，4－c]ピロール（すなわち、ステップDの生成物）（0.16 g、0.4255 mmol）のクロロホルム（20 mL）中の攪拌溶液に、トリフルオロ酢酸（0.086 g、0.851 mmol）および（5－メチル－3－トリフルオロメチル－ピラゾール－1－イル）塩化アセチル（すなわち、ステップEの生成物）（0.096 g、0.4255 mmol）を0℃で添加した。この反応混合物を室温で2時間攪拌し、次いで、減圧下で濃縮した。得られた材料を酢酸エチル（100 mL）に溶解させ、水（100 mL）、飽和塩化ナトリウム水溶液（100 mL）で洗浄し、減圧下で濃縮した。得られた材料をカラムクロマトグラフィー（流出液として、5%メタノール／クロロホルム）により精製して、本発明の化合物である表題の生成物を白色の固体として得た（0.18 g）。

20

^1H NMR (CDCl₃) : δ 7.27～7.29 (m, 1H), 6.86～6.92 (m, 3H), 6.32 (s, 1H), 6.0～6.03 (m, 1H), 4.81～4.93 (q, 2H), 3.5～3.88 (m, 10H), 3.1～3.25 (m, 2H), 2.32 (s, 3H)。

30

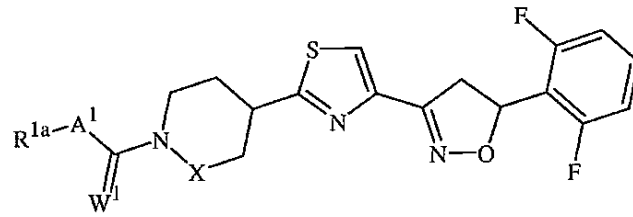
【0425】

技術分野において公知である方法を伴う本明細書に記載の手法により、表1～9 rの以下の化合物を調製することが可能である。以下の略語が以下の表中に用いられている：tは第3級を意味し、sは第2級を意味し、nはノルマルを意味し、iはイソを意味し、cはシクロを意味し、Acはアセチル（すなわち－C(=O)CH₃）を意味し、Meはメチルを意味し、Etはエチルを意味し、およびPhはフェニルを意味する。

【0426】

【表 1】

表 1



A ¹ はCH ₂ であり、W ¹ はOであり、および、 XはOである R ^{1a}	A ¹ はCH ₂ であり、W ¹ はOであり、および、 XはOである R ^{1a}
Ph 2-メチルフェニル 2-メトキシフェニル 2-クロロフェニル 2-ブromoフェニル 2-エトキシフェニル 2-(メチルチオ)フェニル 3-クロロフェニル 3-ブromoフェニル 3-ヨードフェニル 3-メチルフェニル 2-クロロ-5-(CF ₃)フェニル 2,5-ジブromoフェニル 2-ブromo-5-メチルフェニル 2-ブromo-5-(CF ₃)フェニル 5-クロロ-2-メチルフェニル 5-ブromo-2-メチルフェニル 2,5-ジメチルフェニル 2-メチル-5-(CF ₃)フェニル 5-シアノ-2-メチルフェニル 2-メチル-5-ニトロフェニル 5-クロロ-2-メトキシフェニル 5-ブromo-2-メトキシフェニル 2-メトキシ-5-メチルフェニル	3-エチルフェニル 3-(CF ₃)フェニル 3-シアノフェニル 3-ニトロフェニル 2,5-ジクロロフェニル 5-ブromo-2-クロロフェニル 2-クロロ-5-メチルフェニル 2-メトキシ-5-(CF ₃)フェニル 2,5-ジエチルフェニル 3-メチルピラゾール-1-イル 3-クロロピラゾール-1-イル 3-ブromoピラゾール-1-イル 3-(CF ₃)ピラゾール-1-イル 3,5-ジメチルピラゾール-1-イル 3-クロロ-5-メチルピラゾール-1-イル 3-ブromo-5-メチルピラゾール-1-イル 5-メトキシ-3-メチルピラゾール-1-イル 3,5-ジエチルピラゾール-1-イル 5-エチル-3-(CF ₃)ピラゾール-1-イル 2,5-ジメチル-3-フリル 2,5-ジメチル-3-チエニル 2,5-ジクロロ-3-チエニル 1,4-ジメチル-3-ピローリル 1,4-ジメチル-3-ピラゾリル

【表 2】

A ¹ はCH ₂ であり、W ¹ はOであり、および、 XはOである R ^{1a}	A ¹ はCH ₂ であり、W ¹ はOであり、および、 XはOである R ^{1a}	
3-エチル-5-メチルピラゾール-1-イル	1,3-ジメチル-4-ピラゾリル	10
5-メチル-3-(CF ₃)ピラゾール-1-イル	2,5-ジメチル-4-オキサゾリル	
5-メチル-3-(C ₂ F ₅)ピラゾール-1-イル	2,5-ジメチル-4-チアゾリル	
5-クロロ-3-メチルピラゾール-1-イル	3,6-ジメチル-2-ピリジリル	
3,5-ジクロロピラゾール-1-イル	2,5-ジメチル-3-ピリジリル	
5-クロロ-3-(CF ₃)ピラゾール-1-イル	2,5-ジメチル-4-ピリジリル	
5-ブロモ-3-メチルピラゾール-1-イル	3,6-ジクロロ-2-ピリジリル	
3,5-ジブロモピラゾール-1-イル	2,5-ジクロロ-3-ピリジリル	
5-ブロモ-3-(CF ₃)ピラゾール-1-イル	2,5-ジクロロ-4-ピリジリル	
3,5-ジメチル-2-チエニル	4-ブロモ-3-ピリダジニル	
3,5-ジクロロ-2-チエニル	4-(CF ₃)-2-ピリミジニル	20
3,5-ジメチル-2-フリル	3,6-ジメチル-2-ピラジニル	
4-メチル-2-(CF ₃)-5-チアゾリル	2,5-ジメチル-4-ピリミジニル	
4-メチル-2-(CF ₃)-5-オキサゾリル	4-メトキシ-5-ピリミジニル	
1-メチル-4-(CF ₃)-2-イミダゾリル	3,6-ジメチル-4-ピリダジニル	
2,4-ジメチル-1-ピローリル	1-メチル-4-(CF ₃)イミダゾール-2-イル	
1-メチル-3-(CF ₃)ピラゾール-5-イル	3,5-ビス-(CF ₃)ピラゾール-1-イル	
3-ブロモ-5-(CF ₃)ピラゾール-1-イル	3-クロロ-5-(CF ₃)ピラゾール-1-イル	
3-メチル-5-(CF ₃)ピラゾール-1-イル	3,5-ビス-(ジフルオロメトキシ)ピラゾール-1-イル	
3-メトキシ-5-(CF ₃)ピラゾール-1-イル	3,5-ジメトキシピラゾール-1-イル	
3,5-ジブロモピラゾール-1-イル	5-エトキシ-3-メチルピラゾール-1-イル	30
5-メトキシ-3-メチルピラゾール-1-イル	5-エトキシ-3-(CF ₃)ピラゾール-1-イル	
5-メトキシ-3-(CF ₃)ピラゾール-1-イル	3,5-ジプロモトリアゾール-1-イル	
3,5-ジクロロトリアゾール-1-イル	3-クロロ-5-メチルトリアゾール-1-イル	
3-メチル-5-クロロトリアゾール-1-イル	3-ブロモ-5-メチルトリアゾール-1-イル	
3-メチル-5-プロモトリアゾール-1-イル	3-(CF ₃)-5-クロロトリアゾール-1-イル	
3-クロロ-5-(CF ₃)トリアゾール-1-イル	3-(CF ₃)-5-プロモトリアゾール-1-イル	
3-ブロモ-5-(CF ₃)トリアゾール-1-イル	3,5-ビス(CF ₃)トリアゾール-1-イル	
n-ブチル	トリフルオロメトキシエチル	
i-アミル	2-メトキシエトキシ	40
3-メチル-2-ブテン-1-イル	3,3,3-トリフルオロプロポキシ	
プロパルギル	2,2,2-トリフルオロエチルカルボニルオキシ	
4,4,4-トリフルオロブタン-1-イル	アリルオキシ	
3,3-ジクロロ-2-プロペン-1-イル	プロピルチオ	
2-(CF ₃)シクロプロピル-1-イル	3,3,3-トリフルオロプロピルチオ	
i-ブトキシ	3,3,3-トリフルオロプロピルアミノ	
2,2,2-トリフルオロエトキシメチル		

【0428】

本開示は表 1 b ~ 1 i をも含み、その各々は、表 1 における行の表題（すなわち、「A

¹はCH₂であり、W¹はOであり、および、XはOである」)が以下に示されているそれぞれの行の表題で置き換えられていると共に、R^{1a}が上記表1において定義されているとおりであることを除き、上記の表1と同じく構成されている。例えば、表1bにおいて、行の表題は「A¹はNHであり、W¹はOであり、および、XはOである」であり、R^{1a}は、上記の表1において定義されているとおりである。それ故、表1bにおける最初の項目は、A¹がNHであり、W¹がOであり、XがOであり、および、R^{1a}がフェニルである、式1の化合物を特定的に開示している。表1c～1iが同様に構成されている。

【0429】

【表3】

10

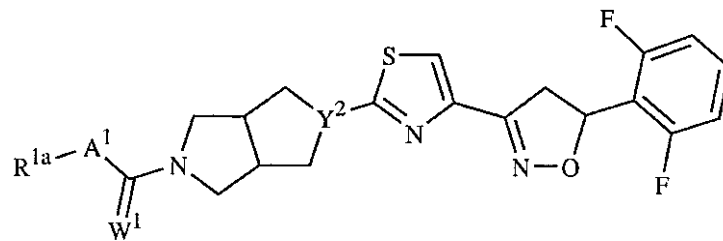
表の行の表題	A ¹	W ¹	X	表の行の表題	A ¹	W ¹	X
1b	NH	O	O	1f	C=O	O	NH
1c	C=O	O	O	1g	CH ₂	O	NMe
1d	CH ₂	O	NH	1h	NH	O	NMe
1e	NH	O	NH	1i	C=O	O	NMe

【0430】

【表4】

20

表1A



A ¹ はCH ₂ であり、W ¹ はOであり、および、 Y ² はNである R ^{1a}	A ¹ はCH ₂ であり、W ¹ はOであり、および、 Y ² はNである R ^{1a}
Ph	3-エチルフェニル
2-メチルフェニル	3-(CF ₃)フェニル
2-メトキシフェニル	3-シアノフェニル
2-クロロフェニル	3-ニトロフェニル
2-ブロモフェニル	2,5-ジクロロフェニル
2-エトキシフェニル	5-ブロモ-2-クロロフェニル
2-(メチルチオ)フェニル	2-クロロ-5-メチルフェニル
3-クロロフェニル	2-メトキシ-5-(CF ₃)フェニル
3-ブロモフェニル	2,5-ジエチルフェニル
3-ヨードフェニル	3-メチルピラゾール-1-イル
3-メチルフェニル	3-クロロピラゾール-1-イル
2-クロロ-5-(CF ₃)フェニル	3-ブロモピラゾール-1-イル
2,5-ジブロモフェニル	3-(CF ₃)ピラゾール-1-イル

30

40

【0431】

50

【表 5】

A^1 は CH_2 であり, W^1 は O であり, および, Y^2 は N である R^{1a}	A^1 は CH_2 であり, W^1 は O であり, および, Y^2 は N である R^{1a}	
2-ブromo-5-メチルフェニル	3,5-ジメチルピラゾール-1-イル	10
2-ブromo-5-(CF_3)フェニル	3-クロロ-5-メチルピラゾール-1-イル	
5-クロロ-2-メチルフェニル	3-ブromo-5-メチルピラゾール-1-イル	
5-ブromo-2-メチルフェニル	5-メトキシ-3-メチルピラゾール-1-イル	
2,5-ジメチルフェニル	3,5-ジエチルピラゾール-1-イル	
2-メチル-5-(CF_3)フェニル	5-エチル-3-(CF_3)ピラゾール-1-イル	
5-シアノ-2-メチルフェニル	2,5-ジメチル-3-フリル	
2-メチル-5-ニトロフェニル	2,5-ジメチル-3-チエニル	
5-クロロ-2-メトキシフェニル	2,5-ジクロロ-3-チエニル	
5-ブromo-2-メトキシフェニル	1,4-ジメチル-3-ピローリル	
2-メトキシ-5-メチルフェニル	1,4-ジメチル-3-ピラゾリル	20
3-エチル-5-メチルピラゾール-1-イル	1,3-ジメチル-4-ピラゾリル	
5-メチル-3-(CF_3)ピラゾール-1-イル	2,5-ジメチル-4-オキサゾリル	
5-メチル-3-(C_2F_5)ピラゾール-1-イル	2,5-ジメチル-4-チアゾリル	
5-クロロ-3-メチルピラゾール-1-イル	3,6-ジメチル-2-ピリジル	
3,5-ジクロロピラゾール-1-イル	2,5-ジメチル-3-ピリジル	
5-クロロ-3-(CF_3)ピラゾール-1-イル	2,5-ジメチル-4-ピリジル	
5-ブromo-3-メチルピラゾール-1-イル	3,6-ジクロロ-2-ピリジル	
3,5-ジブromoピラゾール-1-イル	2,5-ジクロロ-3-ピリジル	
5-ブromo-3-(CF_3)ピラゾール-1-イル	2,5-ジクロロ-4-ピリジル	
3,5-ジメチル-2-チエニル	4-ブromo-3-ピリダジニル	30
3,5-ジクロロ-2-チエニル	4-(CF_3)-2-ピリミジニル	
3,5-ジメチル-2-フリル	3,6-ジメチル-2-ピラジニル	
4-メチル-2-(CF_3)-5-チアゾリル	2,5-ジメチル-4-ピリミジニル	
4-メチル-2-(CF_3)-5-オキサゾリル	4-メトキシ-5-ピリミジニル	
1-メチル-4-(CF_3)-2-イミダゾリル	3,6-ジメチル-4-ピリダジニル	
2,4-ジメチル-1-ピローリル	1-メチル-4-(CF_3)イミダゾール-2-イル	
1-メチル-3-(CF_3)ピラゾール-5-イル	3,5-ビス-(CF_3)ピラゾール-1-イル	
3-ブromo-5-(CF_3)ピラゾール-1-イル	3-クロロ-5-(CF_3)-ピラゾール-1-イル	
3-メチル-5-(CF_3)-ピラゾール-1-イル	3,5-ビス-(ジフルオロメトキシ)ピラゾール-1-イル	40
3-メトキシ-5-(CF_3)-ピラゾール-1-イル	3,5-ジメトキシピラゾール-1-イル	
3,5-ジブromoピラゾール-1-イル	5-エトキシ-3-メチルピラゾール-1-イル	
5-メトキシ-3-メチルピラゾール-1-イル	5-エトキシ-3-(CF_3)ピラゾール-1-イル	
5-メトキシ-3-(CF_3)ピラゾール-1-イル	3,5-ジブromotリアゾール-1-イル	
3,5-ジクロロトリアゾール-1-イル	3-クロロ-5-メチルトリアゾール-1-イル	
3-メチル-5-クロロトリアゾール-1-イル	3-ブromo-5-メチルトリアゾール-1-イル	

【表 6】

A^1 は CH_2 であり、 W^1 は O であり、および、 Y^2 は N である R^{1a}	A^1 は CH_2 であり、 W^1 は O であり、および、 Y^2 は N である R^{1a}
3-メチル-5-プロモトリアゾール-1-イル	3-(CF_3)-5-クロロトリアゾール-1-イル
3-クロロ-5-(CF_3)トリアゾール-1-イル	3-(CF_3)-5-プロモトリアゾール-1-イル
3-プロモ-5-(CF_3)トリアゾール-1-イル	3,5-ビス(CF_3)トリアゾール-1-イル
<i>n</i> -ブチル	トリフルオロメチル
<i>i</i> -アミル	2-メトキシエチル
3-メチル-2-ブテン-1-イル	3,3,3-トリフルオロプロポキシ
プロパルギル	2,2,2-トリフルオロエチルカルボニルオキシ
4,4,4-トリフルオロブタン-1-イル	アリルオキシ
3,3-ジクロロ-2-プロペン-1-イル	プロピルチオ
2-(CF_3)シクロプロピル-1-イル	3,3,3-トリフルオロプロピルチオ
<i>i</i> -ブトキシ	3,3,3-トリフルオロプロピルアミノ
2,2,2-トリフルオロエトキシメチル	

【0433】

本開示は表 1 A b ~ 1 A f をも含み、その各々は、表 1 A における行の表題（すなわち、「 A^1 は CH_2 であり、 W^1 は O であり、および、 Y^2 は N である」）が以下に示されているそれぞれの行の表題で置き換えられていると共に、 R^{1a} が上記表 1 A において定義されているとおりであることを除き、上記の表 1 A と同じく構成されている。例えば、表 1 A b において、行の表題は「 A^1 は NH であり、 W^1 は O であり、および、 Y^2 は N である」であり、 R^{1a} は、上記の表 1 A において定義されているとおりである。それ故、表 1 A b における最初の項目は、 A^1 が NH であり、 W^1 が O であり、 Y^2 が N であり、および、 R^{1a} がフェニルである、式 1 A の化合物を特定の開示している。表 1 A c ~ 1 A f が同様に構成されている。

【0434】

【表 7】

表の行の表題	A^1	W^1	Y^2	表の行の表題	A^1	W^1	Y^2
1Ab	NH	O	N	1Af	C=O	O	CH
1Ac	C=O	O	N				
1Ad	CH_2	O	CH				
1Ae	NH	O	CH				

【0435】

10

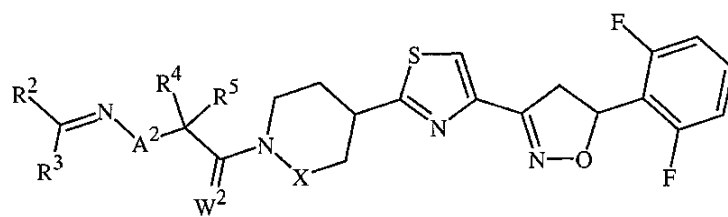
20

30

40

【表 8】

表 2



XはOである

R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	A ²	W ²
CH ₃	CH ₃	H	H	O	O
CH ₃	CH ₃	H	H	S	O

【 0 4 3 6 】

【表 9】

XはOである					
R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	A ²	W ²
CH ₃	CH ₃	H	H	NH	O
CH ₃	CH ₃	H	H	N(Me)	O
CH ₃	CH ₃	H	H	CH ₂	O
CH ₃	CH ₃	H	H	OCH ₂	O
CH ₃	CH ₃	H	H	SCH ₂	O
CH ₃	CH ₃	H	H	NHCH ₂	O
CH ₃	CH ₃	H	H	-N(Me)CH ₂ -	O
CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	O	O
CH ₃	CH ₃	CH ₃	CH ₃	O	O
CH ₃	CH ₃	H	H	O	S
CF ₃	H	H	H	O	O
CF ₃	H	H	H	S	O
CF ₃	H	H	H	NH	O
CF ₃	H	H	H	N(Me)	O
CF ₃	H	H	H	CH ₂	O
CF ₃	H	H	H	OCH ₂	O
CF ₃	H	H	H	SCH ₂	O
CF ₃	H	H	H	NHCH ₂	O
CF ₃	H	H	H	-N(Me)CH ₂ -	O
CF ₃	CH ₃	H	H	O	O
CF ₃	CH ₃	H	H	S	O
CF ₃	CH ₃	H	H	NH	O
CF ₃	CH ₃	H	H	N(Me)	O
CF ₃	CH ₃	H	H	CH ₂	O
CF ₃	CH ₃	H	H	OCH ₂	O
CF ₃	CH ₃	H	H	SCH ₂	O
CF ₃	CH ₃	H	H	NHCH ₂	O
CF ₃	CH ₃	H	H	-N(Me)CH ₂ -	O
CF ₃	H	Me	H	O	O
CF ₃	CH ₃	H	Me	O	O
CF ₃ CH ₂	H	H	H	O	O
CF ₃ CH ₂	CH ₃	H	H	O	O
Et	H	H	H	O	O
Et	CH ₃	H	H	O	O
CH ₃	H	H	H	O	O
CH ₃	*	H	H	N*	O
CF ₃	*	H	H	N*	O

*R³およびR⁷は、一緒になって-CH₂CH(CH₃)-架橋を形成する

【0437】

本開示は表2b～2cをも含み、その各々は、表2における行の表題（すなわち、「XはOである」）が以下に示されているそれぞれの行の表題で置き換えられていることを除き、上記の表2と同じく構成されている。例えば、表2bにおいて、行の表題は「XはNHである」であり、R²、R³、R⁴、R⁵、A²およびW²は、上記表2において定義

されているとおりである。それ故、表 2 b における最初の項目は、X が NH であり、R² が CH₃ であり、R³ が CH₃ であり、R⁴ が H であり、R⁵ が H であり、A² が O であり、および、W² が O である、式 1 の化合物を特定の開示している。表 2 c が同様に構成されている。

【0438】

【表 10】

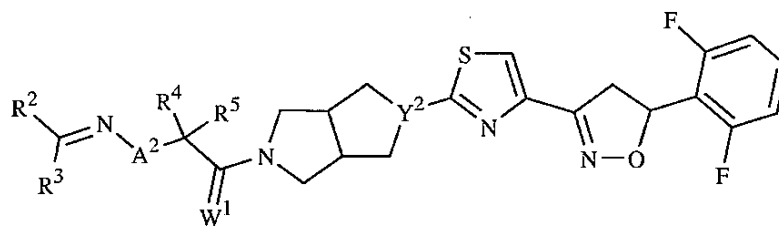
表の行の表題	X
2b	NH
2c	NMe

10

【0439】

【表 11】

表 2A



20

Y²はNである

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

30

40

【0440】

【表 1 2】

Y ² はNである						
R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	A ²	W ²	
CF ₃	H	H	H	N(Me)	O	
CF ₃	H	H	H	CH ₂	O	
CF ₃	H	H	H	OCH ₂	O	
CF ₃	H	H	H	SCH ₂	O	
CF ₃	H	H	H	NHCH ₂	O	
CF ₃	H	H	H	-N(Me)CH ₂ -	O	10
CF ₃	CH ₃	H	H	O	O	
CF ₃	CH ₃	H	H	S	O	
CF ₃	CH ₃	H	H	NH	O	
CF ₃	CH ₃	H	H	N(Me)	O	
CF ₃	CH ₃	H	H	CH ₂	O	
CF ₃	CH ₃	H	H	OCH ₂	O	
CF ₃	CH ₃	H	H	SCH ₂	O	
CF ₃	CH ₃	H	H	NHCH ₂	O	
CF ₃	CH ₃	H	H	-N(Me)CH ₂ -	O	20
CF ₃	H	Me	H	O	O	
CF ₃	CH ₃	H	Me	O	O	
CF ₃ CH ₂	H	H	H	O	O	
CF ₃ CH ₂	CH ₃	H	H	O	O	
Et	H	H	H	O	O	
Et	CH ₃	H	H	O	O	
CH ₃	H	H	H	O	O	
CH ₃	*	H	H	N*	O	
CF ₃	*	H	H	N*	O	30

*R³およびR⁷ は、一緒になって-CH₂CH(CH₃)-架橋を形成する

【0 4 4 1】

本開示は表 2 A b をも含み、これは、表 2 A における行の表題（すなわち、「Y²はNである」）が行の表題「Y²はCHである」と置き換えられていると共に、R²、R³、R⁴、R⁵、A²およびW²が上記表 2 A において定義されているとおりであることを除き、表 2 2 A と同じく構成されている。それ故、表 2 A b における最初の項目は、Y²がCHであり、R²がCH₃であり、R³がCH₃であり、R⁴がHであり、R⁵がHであり、A²がOであり、および、W²がOである、式 1 A の化合物を特定の開示している。

40

【0 4 4 2】

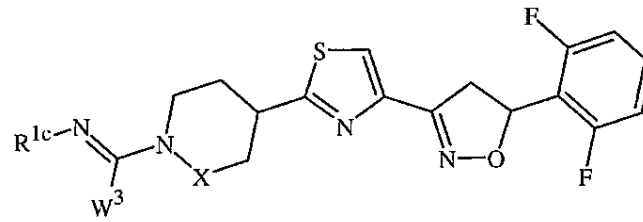
【表 1 3】

表の行の表題	Y ²
2Ab	CH

【0 4 4 3】

【表 1 4】

表 3



X は O である

R ^{1c}	W ³	R ^{1c}	W ³
2-メチルフェニル	OMe	2-メチルフェニル	OMe
2-メトキシフェニル	OMe	2-メトキシフェニル	OMe
2-クロロフェニル	OMe	2-クロロフェニル	OMe
2-ブロモフェニル	OMe	2-ブロモフェニル	OMe
2-エチルフェニル	OMe	2-エチルフェニル	OMe
2-エトキシフェニル	OMe	2-エトキシフェニル	OMe
2-(メチルチオ)-フェニル	OMe	2-(メチルチオ)-フェニル	OMe
2-(トリフルオロメトキシ)-フェニル	OMe	2-(トリフルオロメトキシ)-フェニル	OMe
3-クロロフェニル	OMe	3-クロロフェニル	OMe
3-ブロモフェニル	OMe	3-ブロモフェニル	OMe
3-メチルフェニル	OMe	3-メチルフェニル	OMe
2,5-ジメチルフェニル	OMe	2,5-ジメチルフェニル	OMe
2,5-ジクロロフェニル	OMe	2,5-ジクロロフェニル	OMe
2-クロロ-5-(CF ₃)-フェニル	OMe	2-クロロ-5-(CF ₃)-フェニル	OMe
2,5-ジブロモフェニル	OMe	2,5-ジブロモフェニル	OMe
2-ブロモ-5-(CF ₃)-フェニル	OMe	2-ブロモ-5-(CF ₃)-フェニル	OMe
5-クロロ-2-メチルフェニル	OMe	5-クロロ-2-メチルフェニル	OMe
5-ブロモ-2-メチルフェニル	OMe	5-ブロモ-2-メチルフェニル	OMe
2-メチル-5-(CF ₃)-フェニル	OMe	2-メチル-5-(CF ₃)-フェニル	OMe
5-クロロ-2-メトキシフェニル	OMe	5-クロロ-2-メトキシフェニル	OMe
5-ブロモ-2-メトキシフェニル	OMe	5-ブロモ-2-メトキシフェニル	OMe
2-メトキシ-5-メチルフェニル	OMe	2-メトキシ-5-メチルフェニル	OMe
2-メトキシ-5-(CF ₃)-フェニル	OMe	2-メトキシ-5-(CF ₃)-フェニル	OMe
2,5-ジエチルフェニル	OMe	2,5-ジエチルフェニル	OMe
3,5-ジメチルピラゾール-1-イル	OMe	3,5-ジメチルピラゾール-1-イル	OMe
3,5-ジクロロピラゾール-1-イル	OMe	3,5-ジクロロピラゾール-1-イル	OMe
3,5-ジブロモピラゾール-1-イル	OMe	3,5-ジブロモピラゾール-1-イル	OMe
3,5-ビス-(CF ₃)-ピラゾール-1-イル	OMe	3,5-ビス-(CF ₃)-ピラゾール-1-イル	OMe
5-メチル-3-(CF ₃)-ピラゾール-1-イル	OMe	5-メチル-3-(CF ₃)-ピラゾール-1-イル	OMe

【 0 4 4 4 】

【表 1 5】

X は O である

R ^{1c}	W ³	R ^{1c}	W ³	
3,5-ジメチル-1,2,4-トリアゾール-1-イル	OMe	3,5-ジメチル-1,2,4-トリアゾール-1-イル	OMe	
3,5-ジクロル-1,2,4-トリアゾール-1-イル	OMe	3,5-ジクロル-1,2,4-トリアゾール-1-イル	OMe	
3,5-ジブromo-1,2,4-トリアゾール-1-イル	OMe	3,5-ジブromo-1,2,4-トリアゾール-1-イル	OMe	
<i>n</i> -ブチル	OMe	<i>n</i> -ブチル	OMe	
<i>i</i> -アミル	OMe	<i>i</i> -アミル	OMe	
3-メチル-2-ブテン-1-イル	OMe	3-メチル-2-ブテン-1-イル	OMe	10
プロパルギル	OMe	プロパルギル	OMe	
4,4,4-トリフルオロブタン-1-イル	OMe	4,4,4-トリフルオロブタン-1-イル	OMe	
3,3-ジクロロ-2-プロペン-1-イル	OMe	3,3-ジクロロ-2-プロペン-1-イル	OMe	
2-(CF ₃)-シクロプロピル-1-イル	OMe	2-(CF ₃)-シクロプロピル-1-イル	OMe	
<i>i</i> -ブトキシ	OMe	<i>i</i> -ブトキシ	OMe	
トリフルオロメチルエチル	OMe	トリフルオロメチルエチル	OMe	
3,3,3-トリフルオロプロポキシ	OMe	3,3,3-トリフルオロプロポキシ	OMe	
2-メチルフェニル	SMe	2-メチルフェニル	SMe	
2-メトキシフェニル	SMe	2-メトキシフェニル	SMe	20
2-クロロフェニル	SMe	2-クロロフェニル	SMe	
2-ブromoフェニル	SMe	2-ブromoフェニル	SMe	
2-エチルフェニル	SMe	2-エチルフェニル	SMe	
2-エトキシフェニル	SMe	2-エトキシフェニル	SMe	
2-(メチルチオ)-フェニル	SMe	2-(メチルチオ)-フェニル	SMe	
2-(トリフルオロメチル)-フェニル	SMe	2-(トリフルオロメチル)-フェニル	SMe	
3-クロロフェニル	SMe	3-クロロフェニル	SMe	
3-ブromoフェニル	SMe	3-ブromoフェニル	SMe	
3-メチルフェニル	SMe	3-メチルフェニル	SMe	30
2,5-ジメチルフェニル	SMe	2,5-ジメチルフェニル	SMe	
2,5-ジクロロフェニル	SMe	2,5-ジクロロフェニル	SMe	
2-クロロ-5-(CF ₃)-フェニル	SMe	2-クロロ-5-(CF ₃)-フェニル	SMe	
2,5-ジブromoフェニル	SMe	2,5-ジブromoフェニル	SMe	
2-ブromo-5-(CF ₃)-フェニル	SMe	2-ブromo-5-(CF ₃)-フェニル	SMe	
5-クロロ-2-メチルフェニル	SMe	5-クロロ-2-メチルフェニル	SMe	
5-ブromo-2-メチルフェニル	SMe	5-ブromo-2-メチルフェニル	SMe	
2-メチル-5-(CF ₃)-フェニル	SMe	2-メチル-5-(CF ₃)-フェニル	SMe	
5-クロロ-2-メトキシフェニル	SMe	5-クロロ-2-メトキシフェニル	SMe	40
5-ブromo-2-メトキシフェニル	SMe	5-ブromo-2-メトキシフェニル	SMe	
2-メトキシ-5-メチルフェニル	SMe	2-メトキシ-5-メチルフェニル	SMe	
2-メトキシ-5-(CF ₃)-フェニル	SMe	2-メトキシ-5-(CF ₃)-フェニル	SMe	

【 0 4 4 5 】

【表 1 6】

X は O である

R ^{1c}	W ³	R ^{1c}	W ³	
2,5-ジエチルフェニル	SMe	2,5-ジエチルフェニル	SMe	
3,5-ジメチルピラゾール-1-イル	SMe	3,5-ジメチルピラゾール-1-イル	SMe	
3,5-ジクロロピラゾール-1-イル	SMe	3,5-ジクロロピラゾール-1-イル	SMe	
3,5-ジブロモピラゾール-1-イル	SMe	3,5-ジブロモピラゾール-1-イル	SMe	
3,5-ビス-(CF ₃)-ピラゾール-1-イル	SMe	3,5-ビス-(CF ₃)-ピラゾール-1-イル	SMe	
5-メチル-3-(CF ₃)-ピラゾール-1-イル	SMe	5-メチル-3-(CF ₃)-ピラゾール-1-イル	SMe	10
3,5-ジメチル-1,2,4-トリアゾール-1-イル	SMe	3,5-ジメチル-1,2,4-トリアゾール-1-イル	SMe	
3,5-ジクロロ-1,2,4-トリアゾール-1-イル	SMe	3,5-ジクロロ-1,2,4-トリアゾール-1-イル	SMe	
3,5-ジブロモ-1,2,4-トリアゾール-1-イル	SMe	3,5-ジブロモ-1,2,4-トリアゾール-1-イル	SMe	
<i>n</i> -ブチル	SMe	<i>n</i> -ブチル	SMe	
<i>i</i> -アミル	SMe	<i>i</i> -アミル	SMe	
3-メチル-2-ブテン-1-イル	SMe	3-メチル-2-ブテン-1-イル	SMe	
プロパルギル	SMe	プロパルギル	SMe	
4,4,4-トリフルオロブタン-1-イル	SMe	4,4,4-トリフルオロブタン-1-イル	SMe	
3,3-ジクロロ-2-プロペン-1-イル	SMe	3,3-ジクロロ-2-プロペン-1-イル	SMe	20
2-(CF ₃)-シクロプロピル-1-イル	SMe	2-(CF ₃)-シクロプロピル-1-イル	SMe	
<i>i</i> -ブトキシ	SMe	<i>i</i> -ブトキシ	SMe	
トリフルオロメトキシエチル	SMe	トリフルオロメトキシエチル	SMe	
3,3,3-トリフルオロプロポキシ	SMe	3,3,3-トリフルオロプロポキシ	SMe	
2-メチルフェニル	NH ₂	2-メチルフェニル	NH ₂	
2-メトキシフェニル	NH ₂	2-メトキシフェニル	NH ₂	
2-クロロフェニル	NH ₂	2-クロロフェニル	NH ₂	
2-ブロモフェニル	NH ₂	2-ブロモフェニル	NH ₂	
2-エチルフェニル	NH ₂	2-エチルフェニル	NH ₂	30
2-エトキシフェニル	NH ₂	2-エトキシフェニル	NH ₂	
2-(メチルチオ)-フェニル	NH ₂	2-(メチルチオ)-フェニル	NH ₂	
2-(トリフルオロメトキシ)-フェニル	NH ₂	2-(トリフルオロメトキシ)-フェニル	NH ₂	
3-クロロフェニル	NH ₂	3-クロロフェニル	NH ₂	
3-ブロモフェニル	NH ₂	3-ブロモフェニル	NH ₂	
3-メチルフェニル	NH ₂	3-メチルフェニル	NH ₂	
2,5-ジメチルフェニル	NH ₂	2,5-ジメチルフェニル	NH ₂	
2,5-ジクロロフェニル	NH ₂	2,5-ジクロロフェニル	NH ₂	
2-クロロ-5-(CF ₃)-フェニル	NH ₂	2-クロロ-5-(CF ₃)-フェニル	NH ₂	40
2,5-ジブロモフェニル	NH ₂	2,5-ジブロモフェニル	NH ₂	
2-ブロモ-5-(CF ₃)-フェニル	NH ₂	2-ブロモ-5-(CF ₃)-フェニル	NH ₂	
5-クロロ-2-メチルフェニル	NH ₂	5-クロロ-2-メチルフェニル	NH ₂	

【 0 4 4 6 】

【表 17】

X は O である

R ^{1c}	W ³	R ^{1c}	W ³	
5-プロモ-2-メチルフェニル	NH ₂	5-プロモ-2-メチルフェニル	NH ₂	
2-メチル-5-(CF ₃)-フェニル	NH ₂	2-メチル-5-(CF ₃)-フェニル	NH ₂	
5-クロロ-2-メトキシフェニル	NH ₂	5-クロロ-2-メトキシフェニル	NH ₂	
5-プロモ-2-メトキシフェニル	NH ₂	5-プロモ-2-メトキシフェニル	NH ₂	
2-メトキシ-5-メチルフェニル	NH ₂	2-メトキシ-5-メチルフェニル	NH ₂	
2-メトキシ-5-(CF ₃)-フェニル	NH ₂	2-メトキシ-5-(CF ₃)-フェニル	NH ₂	10
2,5-ジエチルフェニル	NH ₂	2,5-ジエチルフェニル	NH ₂	
3,5-ジメチルピラゾール-1-イル	NH ₂	3,5-ジメチルピラゾール-1-イル	NH ₂	
3,5-ジクロロピラゾール-1-イル	NH ₂	3,5-ジクロロピラゾール-1-イル	NH ₂	
3,5-ジプロモピラゾール-1-イル	NH ₂	3,5-ジプロモピラゾール-1-イル	NH ₂	
3,5-ビス-(CF ₃)-ピラゾール-1-イル	NH ₂	3,5-ビス-(CF ₃)-ピラゾール-1-イル	NH ₂	
5-メチル-3-(CF ₃)-ピラゾール-1-イル	NH ₂	5-メチル-3-(CF ₃)-ピラゾール-1-イル	NH ₂	
3,5-ジメチル-1,2,4-トリアゾール-1-イル	NH ₂	3,5-ジメチル-1,2,4-トリアゾール-1-イル	NH ₂	
3,5-ジクロロ-1,2,4-トリアゾール-1-イル	NH ₂	3,5-ジクロロ-1,2,4-トリアゾール-1-イル	NH ₂	20
3,5-ジプロモ-1,2,4-トリアゾール-1-イル	NH ₂	3,5-ジプロモ-1,2,4-トリアゾール-1-イル	NH ₂	
<i>n</i> -ブチル	NH ₂	<i>n</i> -ブチル	NH ₂	
<i>i</i> -アミル	NH ₂	<i>i</i> -アミル	NH ₂	
3-メチル-2-ブテン-1-イル	NH ₂	3-メチル-2-ブテン-1-イル	NH ₂	
プロパルギル	NH ₂	プロパルギル	NH ₂	
4,4,4-トリフルオロブタン-1-イル	NH ₂	4,4,4-トリフルオロブタン-1-イル	NH ₂	
3,3-ジクロロ-2-プロペン-1-イル	NH ₂	3,3-ジクロロ-2-プロペン-1-イル	NH ₂	
2-(CF ₃)-クロプロピル-1-イル	NH ₂	2-(CF ₃)-クロプロピル-1-イル	NH ₂	
<i>i</i> -ブトキシ	NH ₂	<i>i</i> -ブトキシ	NH ₂	30
トリフルオロメトキシエチル	NH ₂	トリフルオロメトキシエチル	NH ₂	
3,3,3-トリフルオロプロポキシ	NH ₂	3,3,3-トリフルオロプロポキシ	NH ₂	
2-メチルフェニル	NHOH	2-メチルフェニル	NHOH	
2-メトキシフェニル	NHOH	2-メトキシフェニル	NHOH	
2-クロロフェニル	NHOH	2-クロロフェニル	NHOH	
2-プロモフェニル	NHOH	2-プロモフェニル	NHOH	
2-エチルフェニル	NHOH	2-エチルフェニル	NHOH	
2-エトキシフェニル	NHOH	2-エトキシフェニル	NHOH	
2-(メチルチオ)-フェニル	NHOH	2-(メチルチオ)-フェニル	NHOH	40
2-(トリフルオロメトキシ)-フェニル	NHOH	2-(トリフルオロメトキシ)-フェニル	NHOH	
3-クロロフェニル	NHOH	3-クロロフェニル	NHOH	
3-プロモフェニル	NHOH	3-プロモフェニル	NHOH	
3-メチルフェニル	NHOH	3-メチルフェニル	NHOH	

【0447】

【表 18】

X は O である

R ^{1c}	W ³	R ^{1c}	W ³	
2,5-ジメチルフェニル	NHOH	2,5-ジメチルフェニル	NHOH	
2,5-ジクロロフェニル	NHOH	2,5-ジクロロフェニル	NHOH	
2-クロロ-5-(CF ₃)-フェニル	NHOH	2-クロロ-5-(CF ₃)-フェニル	NHOH	
2,5-ジプロモフェニル	NHOH	2,5-ジプロモフェニル	NHOH	
2-プロモ-5-(CF ₃)-フェニル	NHOH	2-プロモ-5-(CF ₃)-フェニル	NHOH	10
5-クロロ-2-メチルフェニル	NHOH	5-クロロ-2-メチルフェニル	NHOH	
5-プロモ-2-メチルフェニル	NHOH	5-プロモ-2-メチルフェニル	NHOH	
2-メチル-5-(CF ₃)-フェニル	NHOH	2-メチル-5-(CF ₃)-フェニル	NHOH	
5-クロロ-2-メトキシフェニル	NHOH	5-クロロ-2-メトキシフェニル	NHOH	
5-プロモ-2-メトキシフェニル	NHOH	5-プロモ-2-メトキシフェニル	NHOH	
2-メトキシ-5-メチルフェニル	NHOH	2-メトキシ-5-メチルフェニル	NHOH	
2-メトキシ-5-(CF ₃)-フェニル	NHOH	2-メトキシ-5-(CF ₃)-フェニル	NHOH	
2,5-ジエチルフェニル	NHOH	2,5-ジエチルフェニル	NHOH	
3,5-ジメチルピラゾール-1-イル	NHOH	3,5-ジメチルピラゾール-1-イル	NHOH	20
3,5-ジクロロピラゾール-1-イル	NHOH	3,5-ジクロロピラゾール-1-イル	NHOH	
3,5-ジプロモピラゾール-1-イル	NHOH	3,5-ジプロモピラゾール-1-イル	NHOH	
3,5-ビス-(CF ₃)-ピラゾール-1-イル	NHOH	3,5-ビス-(CF ₃)-ピラゾール-1-イル	NHOH	
5-メチル-3-(CF ₃)-ピラゾール-1-イル	NHOH	5-メチル-3-(CF ₃)-ピラゾール-1-イル	NHOH	
3,5-ジメチル-1,2,4-トリアゾール-1-イル	NHOH	3,5-ジメチル-1,2,4-トリアゾール-1-イル	NHOH	
3,5-ジクロロ-1,2,4-トリアゾール-1-イル	NHOH	3,5-ジクロロ-1,2,4-トリアゾール-1-イル	NHOH	
3,5-ジプロモ-1,2,4-トリアゾール-1-イル	NHOH	3,5-ジプロモ-1,2,4-トリアゾール-1-イル	NHOH	
<i>n</i> -ブチル	NHOH	<i>n</i> -ブチル	NHOH	
<i>i</i> -アミル	NHOH	<i>i</i> -アミル	NHOH	30
3-メチル-2-ブテン-1-イル	NHOH	3-メチル-2-ブテン-1-イル	NHOH	
プロパルギル	NHOH	プロパルギル	NHOH	
4,4,4-トリフルオロブタン-1-イル	NHOH	4,4,4-トリフルオロブタン-1-イル	NHOH	
3,3-ジクロロ-2-プロペン-1-イル	NHOH	3,3-ジクロロ-2-プロペン-1-イル	NHOH	
2-(CF ₃)-シクロプロピル-1-イル	NHOH	2-(CF ₃)-シクロプロピル-1-イル	NHOH	
<i>i</i> -ブトキシ	NHOH	<i>i</i> -ブトキシ	NHOH	
トリフルオロメトキシエチル	NHOH	トリフルオロメトキシエチル	NHOH	
3,3,3-トリフルオロプロポキシ	NHOH	3,3,3-トリフルオロプロポキシ	NHOH	
2-メチルフェニル	NHOMe	2-メチルフェニル	NHOMe	40
2-メトキシフェニル	NHOMe	2-メトキシフェニル	NHOMe	
2-クロロフェニル	NHOMe	2-クロロフェニル	NHOMe	
2-プロモフェニル	NHOMe	2-プロモフェニル	NHOMe	
2-エチルフェニル	NHOMe	2-エチルフェニル	NHOMe	

【表 19】

X は O である

R ^{1c}	W ³	R ^{1c}	W ³
2-エトキシフェニル	NHOMe	2-エトキシフェニル	NHOMe
2-(メチルチオ)-フェニル	NHOMe	2-(メチルチオ)-フェニル	NHOMe
2-(トリフルオロメトキシ)-フェニル	NHOMe	2-(トリフルオロメトキシ)-フェニル	NHOMe
3-クロロフェニル	NHOMe	3-クロロフェニル	NHOMe
3-ブロモフェニル	NHOMe	3-ブロモフェニル	NHOMe
3-メチルフェニル	NHOMe	3-メチルフェニル	NHOMe
2,5-ジメチルフェニル	NHOMe	2,5-ジメチルフェニル	NHOMe
2,5-ジクロロフェニル	NHOMe	2,5-ジクロロフェニル	NHOMe
2-クロロ-5-(CF ₃)-フェニル	NHOMe	2-クロロ-5-(CF ₃)-フェニル	NHOMe
2,5-ジブロモフェニル	NHOMe	2,5-ジブロモフェニル	NHOMe
2-ブロモ-5-(CF ₃)-フェニル	NHOMe	2-ブロモ-5-(CF ₃)-フェニル	NHOMe
5-クロロ-2-メチルフェニル	NHOMe	5-クロロ-2-メチルフェニル	NHOMe
5-ブロモ-2-メチルフェニル	NHOMe	5-ブロモ-2-メチルフェニル	NHOMe
2-メチル-5-(CF ₃)-フェニル	NHOMe	2-メチル-5-(CF ₃)-フェニル	NHOMe
5-クロロ-2-メトキシフェニル	NHOMe	5-クロロ-2-メトキシフェニル	NHOMe
5-ブロモ-2-メトキシフェニル	NHOMe	5-ブロモ-2-メトキシフェニル	NHOMe
2-メトキシ-5-メチルフェニル	NHOMe	2-メトキシ-5-メチルフェニル	NHOMe
2-メトキシ-5-(CF ₃)-フェニル	NHOMe	2-メトキシ-5-(CF ₃)-フェニル	NHOMe
2,5-ジエチルフェニル	NHOMe	2,5-ジエチルフェニル	NHOMe
3,5-ジメチルピラゾール-1-イル	NHOMe	3,5-ジメチルピラゾール-1-イル	NHOMe
3,5-ジクロロピラゾール-1-イル	NHOMe	3,5-ジクロロピラゾール-1-イル	NHOMe
3,5-ジブロモピラゾール-1-イル	NHOMe	3,5-ジブロモピラゾール-1-イル	NHOMe
3,5-ビス-(CF ₃)-ピラゾール-1-イル	NHOMe	3,5-ビス-(CF ₃)-ピラゾール-1-イル	NHOMe
5-メチル-3-(CF ₃)-ピラゾール-1-イル	NHOMe	5-メチル-3-(CF ₃)-ピラゾール-1-イル	NHOMe
3,5-ジメチル-1,2,4-トリアゾール-1-イル	NHOMe	3,5-ジメチル-1,2,4-トリアゾール-1-イル	NHOMe
3,5-ジクロロ-1,2,4-トリアゾール-1-イル	NHOMe	3,5-ジクロロ-1,2,4-トリアゾール-1-イル	NHOMe
3,5-ジブロモ-1,2,4-トリアゾール-1-イル	NHOMe	3,5-ジブロモ-1,2,4-トリアゾール-1-イル	NHOMe
<i>n</i> -ブチル	NHOMe	<i>n</i> -ブチル	NHOMe
<i>i</i> -アミル	NHOMe	<i>i</i> -アミル	NHOMe
3-メチル-2-ブテン-1-イル	NHOMe	3-メチル-2-ブテン-1-イル	NHOMe
プロパルギル	NHOMe	プロパルギル	NHOMe
4,4,4-トリフルオロブタン-1-イル	NHOMe	4,4,4-トリフルオロブタン-1-イル	NHOMe
3,3-ジクロロ-2-プロペン-1-イル	NHOMe	3,3-ジクロロ-2-プロペン-1-イル	NHOMe
2-(CF ₃)-シクロプロピル-1-イル	NHOMe	2-(CF ₃)-シクロプロピル-1-イル	NHOMe
<i>i</i> -ブトキシ	NHOMe	<i>i</i> -ブトキシ	NHOMe
トリフルオロメトキシエチル	NHOMe	トリフルオロメトキシエチル	NHOMe

【 0 4 4 9 】

【表 20】

X は O である

R ^{1c}	W ³	R ^{1c}	W ³	
3,3,3-トリフルオロプロポキシ	NHOMe	3,3,3-トリフルオロプロポキシ	NHOMe	
2-メチルフェニル	NHNH ₂	2-メチルフェニル	NHNH ₂	
2-メトキシフェニル	NHNH ₂	2-メトキシフェニル	NHNH ₂	
2-クロロフェニル	NHNH ₂	2-クロロフェニル	NHNH ₂	
2-プロモフェニル	NHNH ₂	2-プロモフェニル	NHNH ₂	
2-エチルフェニル	NHNH ₂	2-エチルフェニル	NHNH ₂	10
2-エトキシフェニル	NHNH ₂	2-エトキシフェニル	NHNH ₂	
2-(メチルチオ)-フェニル	NHNH ₂	2-(メチルチオ)-フェニル	NHNH ₂	
2-(トリフルオロメトキシ)-フェニル	NHNH ₂	2-(トリフルオロメトキシ)-フェニル	NHNH ₂	
3-クロロフェニル	NHNH ₂	3-クロロフェニル	NHNH ₂	
3-プロモフェニル	NHNH ₂	3-プロモフェニル	NHNH ₂	
3-メチルフェニル	NHNH ₂	3-メチルフェニル	NHNH ₂	
2,5-ジメチルフェニル	NHNH ₂	2,5-ジメチルフェニル	NHNH ₂	
2,5-ジクロロフェニル	NHNH ₂	2,5-ジクロロフェニル	NHNH ₂	
2-クロロ-5-(CF ₃)-フェニル	NHNH ₂	2-クロロ-5-(CF ₃)-フェニル	NHNH ₂	20
2,5-ジプロモフェニル	NHNH ₂	2,5-ジプロモフェニル	NHNH ₂	
2-プロモ-5-(CF ₃)-フェニル	NHNH ₂	2-プロモ-5-(CF ₃)-フェニル	NHNH ₂	
5-クロロ-2-メチルフェニル	NHNH ₂	5-クロロ-2-メチルフェニル	NHNH ₂	
5-プロモ-2-メチルフェニル	NHNH ₂	5-プロモ-2-メチルフェニル	NHNH ₂	
2-メチル-5-(CF ₃)-フェニル	NHNH ₂	2-メチル-5-(CF ₃)-フェニル	NHNH ₂	
5-クロロ-2-メトキシフェニル	NHNH ₂	5-クロロ-2-メトキシフェニル	NHNH ₂	
5-プロモ-2-メトキシフェニル	NHNH ₂	5-プロモ-2-メトキシフェニル	NHNH ₂	
2-メトキシ-5-メチルフェニル	NHNH ₂	2-メトキシ-5-メチルフェニル	NHNH ₂	
2-メトキシ-5-(CF ₃)-フェニル	NHNH ₂	2-メトキシ-5-(CF ₃)-フェニル	NHNH ₂	30
2,5-ジエチルフェニル	NHNH ₂	2,5-ジエチルフェニル	NHNH ₂	
3,5-ジメチルピラゾール-1-イル	NHNH ₂	3,5-ジメチルピラゾール-1-イル	NHNH ₂	
3,5-ジクロロピラゾール-1-イル	NHNH ₂	3,5-ジクロロピラゾール-1-イル	NHNH ₂	
3,5-ジプロモピラゾール-1-イル	NHNH ₂	3,5-ジプロモピラゾール-1-イル	NHNH ₂	
3,5-ビス-(CF ₃)-ピラゾール-1-イル	NHNH ₂	3,5-ビス-(CF ₃)-ピラゾール-1-イル	NHNH ₂	
5-メチル-3-(CF ₃)-ピラゾール-1-イル	NHNH ₂	5-メチル-3-(CF ₃)-ピラゾール-1-イル	NHNH ₂	
3,5-ジメチル-1,2,4-トリアゾール-1-イル	NHNH ₂	3,5-ジメチル-1,2,4-トリアゾール-1-イル	NHNH ₂	
3,5-ジクロロ-1,2,4-トリアゾール-1-イル	NHNH ₂	3,5-ジクロロ-1,2,4-トリアゾール-1-イル	NHNH ₂	
3,5-ジプロモ-1,2,4-トリアゾール-1-イル	NHNH ₂	3,5-ジプロモ-1,2,4-トリアゾール-1-イル	NHNH ₂	40
<i>n</i> -ブチル	NHNH ₂	<i>n</i> -ブチル	NHNH ₂	
<i>i</i> -アミル	NHNH ₂	<i>i</i> -アミル	NHNH ₂	
3-メチル-2-ブテン-1-イル	NHNH ₂	3-メチル-2-ブテン-1-イル	NHNH ₂	

【0450】

【表 2 1】

X は O である

R ^{1c}	W ³	R ^{1c}	W ³
プロパルギル	NHNH ₂	プロパルギル	NHNH ₂
4,4,4-トリフルオロブタン-1-イル	NHNH ₂	4,4,4-トリフルオロブタン-1-イル	NHNH ₂
3,3-ジクロロ-2-プロペン-1-イル	NHNH ₂	3,3-ジクロロ-2-プロペン-1-イル	NHNH ₂
2-(CF ₃)-シクロプロピル-1-イル	NHNH ₂	2-(CF ₃)-シクロプロピル-1-イル	NHNH ₂
i-ブトキシ	NHNH ₂	i-ブトキシ	NHNH ₂
トリフルオロメトキシエチル	NHNH ₂	トリフルオロメトキシエチル	NHNH ₂
3,3,3-トリフルオロプロポキシ	NHNH ₂	3,3,3-トリフルオロプロポキシ	NHNH ₂

10

【0 4 5 1】

本開示は表 3 b ~ 3 c をも含み、その各々は、表 3 における行の表題（すなわち、「X は O である」）が以下に示されているそれぞれの行の表題で置き換えられていることを除き、上記の表 3 と同じく構成されている。例えば、表 3 b において、行の表題は「X は N H である」であり、R^{1c} および W³ は上記表 3 において定義されているとおりである。それ故、表 3 b における最初の項目は、X が N H であり、R^{1c} が 2-メチルフェニルであり、および、W³ がメトキシである、式 1 の化合物を特定の開示している。表 3 c が同様に構成されている。

20

【0 4 5 2】

【表 2 2】

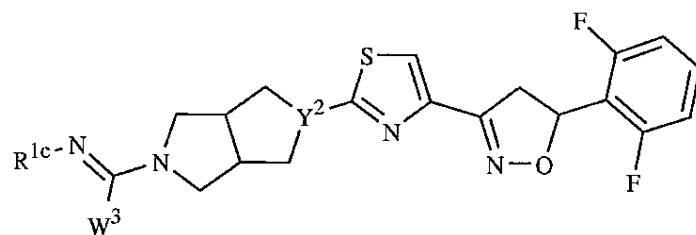
表の行の表題	X
3b	NH
3c	N-Me

【0 4 5 3】

30

【表 2 3】

表 3A

Y²はNである

R ^{1c}	W ³	R ^{1c}	W ³
2-メチルフェニル	OMe	2-メチルフェニル	OMe
2-メトキシフェニル	OMe	2-メトキシフェニル	OMe
2-クロロフェニル	OMe	2-クロロフェニル	OMe
2-ブロモフェニル	OMe	2-ブロモフェニル	OMe
2-エチルフェニル	OMe	2-エチルフェニル	OMe
2-エトキシフェニル	OMe	2-エトキシフェニル	OMe
2-(メチルチオ)-フェニル	OMe	2-(メチルチオ)-フェニル	OMe
2-(トリフルオロメトキシ)-フェニル	OMe	2-(トリフルオロメトキシ)-フェニル	OMe
3-クロロフェニル	OMe	3-クロロフェニル	OMe
3-ブロモフェニル	OMe	3-ブロモフェニル	OMe

【0 4 5 4】

10

20

【表 2 4】

Y²はNである

R ^{1c}	W ³	R ^{1c}	W ³	
3-メチルフェニル	OMe	3-メチルフェニル	OMe	
2,5-ジメチルフェニル	OMe	2,5-ジメチルフェニル	OMe	
2,5-ジクロロフェニル	OMe	2,5-ジクロロフェニル	OMe	
2-クロロ-5-(CF ₃)-フェニル	OMe	2-クロロ-5-(CF ₃)-フェニル	OMe	
2,5-ジプロモフェニル	OMe	2,5-ジプロモフェニル	OMe	
2-プロモ-5-(CF ₃)-フェニル	OMe	2-プロモ-5-(CF ₃)-フェニル	OMe	10
5-クロロ-2-メチルフェニル	OMe	5-クロロ-2-メチルフェニル	OMe	
5-プロモ-2-メチルフェニル	OMe	5-プロモ-2-メチルフェニル	OMe	
2-メチル-5-(CF ₃)-フェニル	OMe	2-メチル-5-(CF ₃)-フェニル	OMe	
5-クロロ-2-メトキシフェニル	OMe	5-クロロ-2-メトキシフェニル	OMe	
5-プロモ-2-メトキシフェニル	OMe	5-プロモ-2-メトキシフェニル	OMe	
2-メトキシ-5-メチルフェニル	OMe	2-メトキシ-5-メチルフェニル	OMe	
2-メトキシ-5-(CF ₃)-フェニル	OMe	2-メトキシ-5-(CF ₃)-フェニル	OMe	
2,5-ジエチルフェニル	OMe	2,5-ジエチルフェニル	OMe	
3,5-ジメチルピラゾール-1-イル	OMe	3,5-ジメチルピラゾール-1-イル	OMe	20
3,5-ジクロロピラゾール-1-イル	OMe	3,5-ジクロロピラゾール-1-イル	OMe	
3,5-ジプロモピラゾール-1-イル	OMe	3,5-ジプロモピラゾール-1-イル	OMe	
3,5-ビス-(CF ₃)-ピラゾール-1-イル	OMe	3,5-ビス-(CF ₃)-ピラゾール-1-イル	OMe	
5-メチル-3-(CF ₃)-ピラゾール-1-イル	OMe	5-メチル-3-(CF ₃)-ピラゾール-1-イル	OMe	
3,5-ジメチル-1,2,4-トリアゾール-1-イル	OMe	3,5-ジメチル-1,2,4-トリアゾール-1-イル	OMe	
3,5-ジクロロ-1,2,4-トリアゾール-1-イル	OMe	3,5-ジクロロ-1,2,4-トリアゾール-1-イル	OMe	
3,5-ジプロモ-1,2,4-トリアゾール-1-イル	OMe	3,5-ジプロモ-1,2,4-トリアゾール-1-イル	OMe	
<i>n</i> -ブチル	OMe	<i>n</i> -ブチル	OMe	
<i>i</i> -アミル	OMe	<i>i</i> -アミル	OMe	30
3-メチル-2-ブテン-1-イル	OMe	3-メチル-2-ブテン-1-イル	OMe	
プロパルギル	OMe	プロパルギル	OMe	
4,4,4-トリフルオロブタン-1-イル	OMe	4,4,4-トリフルオロブタン-1-イル	OMe	
3,3-ジクロロ-2-プロペン-1-イル	OMe	3,3-ジクロロ-2-プロペン-1-イル	OMe	
2-(CF ₃)-シクロプロピル-1-イル	OMe	2-(CF ₃)-シクロプロピル-1-イル	OMe	
<i>i</i> -ブトキシ	OMe	<i>i</i> -ブトキシ	OMe	
トリフルオロメトキシエチル	OMe	トリフルオロメトキシエチル	OMe	
3,3,3-トリフルオロプロポキシ	OMe	3,3,3-トリフルオロプロポキシ	OMe	
2-メチルフェニル	SMe	2-メチルフェニル	SMe	40
2-メトキシフェニル	SMe	2-メトキシフェニル	SMe	
2-クロロフェニル	SMe	2-クロロフェニル	SMe	
2-プロモフェニル	SMe	2-プロモフェニル	SMe	

【0 4 5 5】

【表 2 5】

Y²はNである

R ^{1c}	W ³	R ^{1c}	W ³
2-エチルフェニル	SMe	2-エチルフェニル	SMe
2-エトキシフェニル	SMe	2-エトキシフェニル	SMe
2-(メチルチオ)-フェニル	SMe	2-(メチルチオ)-フェニル	SMe
2-(トリフルオロメトキシ)-フェニル	SMe	2-(トリフルオロメトキシ)-フェニル	SMe
3-クロロフェニル	SMe	3-クロロフェニル	SMe
3-ブロモフェニル	SMe	3-ブロモフェニル	SMe
3-メチルフェニル	SMe	3-メチルフェニル	SMe
2,5-ジメチルフェニル	SMe	2,5-ジメチルフェニル	SMe
2,5-ジクロロフェニル	SMe	2,5-ジクロロフェニル	SMe
2-クロロ-5-(CF ₃)-フェニル	SMe	2-クロロ-5-(CF ₃)-フェニル	SMe
2,5-ジブロモフェニル	SMe	2,5-ジブロモフェニル	SMe
2-ブロモ-5-(CF ₃)-フェニル	SMe	2-ブロモ-5-(CF ₃)-フェニル	SMe
5-クロロ-2-メチルフェニル	SMe	5-クロロ-2-メチルフェニル	SMe
5-ブロモ-2-メチルフェニル	SMe	5-ブロモ-2-メチルフェニル	SMe
2-メチル-5-(CF ₃)-フェニル	SMe	2-メチル-5-(CF ₃)-フェニル	SMe
5-クロロ-2-メトキシフェニル	SMe	5-クロロ-2-メトキシフェニル	SMe
5-ブロモ-2-メトキシフェニル	SMe	5-ブロモ-2-メトキシフェニル	SMe
2-メトキシ-5-メチルフェニル	SMe	2-メトキシ-5-メチルフェニル	SMe
2-メトキシ-5-(CF ₃)-フェニル	SMe	2-メトキシ-5-(CF ₃)-フェニル	SMe
2,5-ジエチルフェニル	SMe	2,5-ジエチルフェニル	SMe
3,5-ジメチルピラゾール-1-イル	SMe	3,5-ジメチルピラゾール-1-イル	SMe
3,5-ジクロロピラゾール-1-イル	SMe	3,5-ジクロロピラゾール-1-イル	SMe
3,5-ジブロモピラゾール-1-イル	SMe	3,5-ジブロモピラゾール-1-イル	SMe
3,5-ビス-(CF ₃)-ピラゾール-1-イル	SMe	3,5-ビス-(CF ₃)-ピラゾール-1-イル	SMe
5-メチル-3-(CF ₃)-ピラゾール-1-イル	SMe	5-メチル-3-(CF ₃)-ピラゾール-1-イル	SMe
3,5-ジメチル-1,2,4-トリアゾール-1-イル	SMe	3,5-ジメチル-1,2,4-トリアゾール-1-イル	SMe
3,5-ジクロロ-1,2,4-トリアゾール-1-イル	SMe	3,5-ジクロロ-1,2,4-トリアゾール-1-イル	SMe
3,5-ジブロモ-1,2,4-トリアゾール-1-イル	SMe	3,5-ジブロモ-1,2,4-トリアゾール-1-イル	SMe
<i>n</i> -ブチル	SMe	<i>n</i> -ブチル	SMe
<i>i</i> -アミル	SMe	<i>i</i> -アミル	SMe
3-メチル-2-ブテン-1-イル	SMe	3-メチル-2-ブテン-1-イル	SMe
プロパルギル	SMe	プロパルギル	SMe
4,4,4-トリフルオロブタン-1-イル	SMe	4,4,4-トリフルオロブタン-1-イル	SMe
3,3-ジクロロ-2-プロペン-1-イル	SMe	3,3-ジクロロ-2-プロペン-1-イル	SMe
2-(CF ₃)-シクロプロピル-1-イル	SMe	2-(CF ₃)-シクロプロピル-1-イル	SMe
<i>i</i> -ブトキシ	SMe	<i>i</i> -ブトキシ	SMe

【 0 4 5 6 】

【表 2 6】

Y² は N である

R ^{1c}	W ³	R ^{1c}	W ³
トリフルオロメトキシエチル	SMe	トリフルオロメトキシエチル	SMe
3,3,3-トリフルオロプロポキシ	SMe	3,3,3-トリフルオロプロポキシ	SMe
2-メチルフェニル	NH ₂	2-メチルフェニル	NH ₂
2-メトキシフェニル	NH ₂	2-メトキシフェニル	NH ₂
2-クロロフェニル	NH ₂	2-クロロフェニル	NH ₂
2-ブロモフェニル	NH ₂	2-ブロモフェニル	NH ₂
2-エチルフェニル	NH ₂	2-エチルフェニル	NH ₂
2-エトキシフェニル	NH ₂	2-エトキシフェニル	NH ₂
2-(メチルチオ)-フェニル	NH ₂	2-(メチルチオ)-フェニル	NH ₂
2-(トリフルオロメトキシ)-フェニル	NH ₂	2-(トリフルオロメトキシ)-フェニル	NH ₂
3-クロロフェニル	NH ₂	3-クロロフェニル	NH ₂
3-ブロモフェニル	NH ₂	3-ブロモフェニル	NH ₂
3-メチルフェニル	NH ₂	3-メチルフェニル	NH ₂
2,5-ジメチルフェニル	NH ₂	2,5-ジメチルフェニル	NH ₂
2,5-ジクロロフェニル	NH ₂	2,5-ジクロロフェニル	NH ₂
2-クロロ-5-(CF ₃)-フェニル	NH ₂	2-クロロ-5-(CF ₃)-フェニル	NH ₂
2,5-ジブロモフェニル	NH ₂	2,5-ジブロモフェニル	NH ₂
2-ブロモ-5-(CF ₃)-フェニル	NH ₂	2-ブロモ-5-(CF ₃)-フェニル	NH ₂
5-クロロ-2-メチルフェニル	NH ₂	5-クロロ-2-メチルフェニル	NH ₂
5-ブロモ-2-メチルフェニル	NH ₂	5-ブロモ-2-メチルフェニル	NH ₂
2-メチル-5-(CF ₃)-フェニル	NH ₂	2-メチル-5-(CF ₃)-フェニル	NH ₂
5-クロロ-2-メトキシフェニル	NH ₂	5-クロロ-2-メトキシフェニル	NH ₂
5-ブロモ-2-メトキシフェニル	NH ₂	5-ブロモ-2-メトキシフェニル	NH ₂
2-メトキシ-5-メチルフェニル	NH ₂	2-メトキシ-5-メチルフェニル	NH ₂
2-メトキシ-5-(CF ₃)-フェニル	NH ₂	2-メトキシ-5-(CF ₃)-フェニル	NH ₂
2,5-ジエチルフェニル	NH ₂	2,5-ジエチルフェニル	NH ₂
3,5-ジメチルピラゾール-1-イル	NH ₂	3,5-ジメチルピラゾール-1-イル	NH ₂
3,5-ジクロロピラゾール-1-イル	NH ₂	3,5-ジクロロピラゾール-1-イル	NH ₂
3,5-ジブロモピラゾール-1-イル	NH ₂	3,5-ジブロモピラゾール-1-イル	NH ₂
3,5-ビス-(CF ₃)-ピラゾール-1-イル	NH ₂	3,5-ビス-(CF ₃)-ピラゾール-1-イル	NH ₂
5-メチル-3-(CF ₃)-ピラゾール-1-イル	NH ₂	5-メチル-3-(CF ₃)-ピラゾール-1-イル	NH ₂
3,5-ジメチル-1,2,4-トリアゾール-1-イル	NH ₂	3,5-ジメチル-1,2,4-トリアゾール-1-イル	NH ₂
3,5-ジクロロ-1,2,4-トリアゾール-1-イル	NH ₂	3,5-ジクロロ-1,2,4-トリアゾール-1-イル	NH ₂
3,5-ジブロモ-1,2,4-トリアゾール-1-イル	NH ₂	3,5-ジブロモ-1,2,4-トリアゾール-1-イル	NH ₂
<i>n</i> -ブチル	NH ₂	<i>n</i> -ブチル	NH ₂
<i>i</i> -アミル	NH ₂	<i>i</i> -アミル	NH ₂

【 0 4 5 7 】

【表 2 7】

Y²はNである

R ^{1c}	W ³	R ^{1c}	W ³	
3-メチル-2-ブテン-1-イル	NH ₂	3-メチル-2-ブテン-1-イル	NH ₂	
プロパルギル	NH ₂	プロパルギル	NH ₂	
4,4,4-トリフルオロブタン-1-イル	NH ₂	4,4,4-トリフルオロブタン-1-イル	NH ₂	
3,3-ジクロロ-2-プロペン-1-イル	NH ₂	3,3-ジクロロ-2-プロペン-1-イル	NH ₂	
2-(CF ₃)-クロプロピル-1-イル	NH ₂	2-(CF ₃)-クロプロピル-1-イル	NH ₂	
<i>i</i> -ブトキシ	NH ₂	<i>i</i> -ブトキシ	NH ₂	10
トリフルオロメトキシエチル	NH ₂	トリフルオロメトキシエチル	NH ₂	
3,3,3-トリフルオロプロポキシ	NH ₂	3,3,3-トリフルオロプロポキシ	NH ₂	
2-メチルフェニル	NHOH	2-メチルフェニル	NHOH	
2-メトキシフェニル	NHOH	2-メトキシフェニル	NHOH	
2-クロロフェニル	NHOH	2-クロロフェニル	NHOH	
2-ブロモフェニル	NHOH	2-ブロモフェニル	NHOH	
2-エチルフェニル	NHOH	2-エチルフェニル	NHOH	
2-エトキシフェニル	NHOH	2-エトキシフェニル	NHOH	
2-(メチルチオ)-フェニル	NHOH	2-(メチルチオ)-フェニル	NHOH	20
2-(トリフルオロメトキシ)-フェニル	NHOH	2-(トリフルオロメトキシ)-フェニル	NHOH	
3-クロロフェニル	NHOH	3-クロロフェニル	NHOH	
3-ブロモフェニル	NHOH	3-ブロモフェニル	NHOH	
3-メチルフェニル	NHOH	3-メチルフェニル	NHOH	
2,5-ジメチルフェニル	NHOH	2,5-ジメチルフェニル	NHOH	
2,5-ジクロロフェニル	NHOH	2,5-ジクロロフェニル	NHOH	
2-クロロ-5-(CF ₃)-フェニル	NHOH	2-クロロ-5-(CF ₃)-フェニル	NHOH	
2,5-ジブロモフェニル	NHOH	2,5-ジブロモフェニル	NHOH	
2-ブロモ-5-(CF ₃)-フェニル	NHOH	2-ブロモ-5-(CF ₃)-フェニル	NHOH	30
5-クロロ-2-メチルフェニル	NHOH	5-クロロ-2-メチルフェニル	NHOH	
5-ブロモ-2-メチルフェニル	NHOH	5-ブロモ-2-メチルフェニル	NHOH	
2-メチル-5-(CF ₃)-フェニル	NHOH	2-メチル-5-(CF ₃)-フェニル	NHOH	
5-クロロ-2-メトキシフェニル	NHOH	5-クロロ-2-メトキシフェニル	NHOH	
5-ブロモ-2-メトキシフェニル	NHOH	5-ブロモ-2-メトキシフェニル	NHOH	
2-メトキシ-5-メチルフェニル	NHOH	2-メトキシ-5-メチルフェニル	NHOH	
2-メトキシ-5-(CF ₃)-フェニル	NHOH	2-メトキシ-5-(CF ₃)-フェニル	NHOH	
2,5-ジエチルフェニル	NHOH	2,5-ジエチルフェニル	NHOH	
3,5-ジメチルピラゾール-1-イル	NHOH	3,5-ジメチルピラゾール-1-イル	NHOH	40
3,5-ジクロロピラゾール-1-イル	NHOH	3,5-ジクロロピラゾール-1-イル	NHOH	
3,5-ジブロモピラゾール-1-イル	NHOH	3,5-ジブロモピラゾール-1-イル	NHOH	
3,5-ビス-(CF ₃)-ピラゾール-1-イル	NHOH	3,5-ビス-(CF ₃)-ピラゾール-1-イル	NHOH	

【表 2 8】

Y²はNである

R ^{1c}	W ³	R ^{1c}	W ³
5-メチル-3-(CF ₃)-ピラゾール-1-イル	NHOH	5-メチル-3-(CF ₃)-ピラゾール-1-イル	NHOH
3,5-ジメチル-1,2,4-トリアゾール-1-イル	NHOH	3,5-ジメチル-1,2,4-トリアゾール-1-イル	NHOH
3,5-ジクロロ-1,2,4-トリアゾール-1-イル	NHOH	3,5-ジクロロ-1,2,4-トリアゾール-1-イル	NHOH
3,5-ジブromo-1,2,4-トリアゾール-1-イル	NHOH	3,5-ジブromo-1,2,4-トリアゾール-1-イル	NHOH
<i>n</i> -ブチル	NHOH	<i>n</i> -ブチル	NHOH
<i>i</i> -アミル	NHOH	<i>i</i> -アミル	NHOH
3-メチル-2-ブテン-1-イル	NHOH	3-メチル-2-ブテン-1-イル	NHOH
プロパルギル	NHOH	プロパルギル	NHOH
4,4,4-トリフルオロブタン-1-イル	NHOH	4,4,4-トリフルオロブタン-1-イル	NHOH
3,3-ジクロロ-2-プロペン-1-イル	NHOH	3,3-ジクロロ-2-プロペン-1-イル	NHOH
2-(CF ₃)-シクロプロピル-1-イル	NHOH	2-(CF ₃)-シクロプロピル-1-イル	NHOH
<i>i</i> -ブトキシ	NHOH	<i>i</i> -ブトキシ	NHOH
トリフルオロメトキシエチル	NHOH	トリフルオロメトキシエチル	NHOH
3,3,3-トリフルオロプロポキシ	NHOH	3,3,3-トリフルオロプロポキシ	NHOH
2-メチルフェニル	NHOMe	2-メチルフェニル	NHOMe
2-メトキシフェニル	NHOMe	2-メトキシフェニル	NHOMe
2-クロロフェニル	NHOMe	2-クロロフェニル	NHOMe
2-ブromoフェニル	NHOMe	2-ブromoフェニル	NHOMe
2-エチルフェニル	NHOMe	2-エチルフェニル	NHOMe
2-エトキシフェニル	NHOMe	2-エトキシフェニル	NHOMe
2-(メチルチオ)-フェニル	NHOMe	2-(メチルチオ)-フェニル	NHOMe
2-(トリフルオロメトキシ)-フェニル	NHOMe	2-(トリフルオロメトキシ)-フェニル	NHOMe
3-クロロフェニル	NHOMe	3-クロロフェニル	NHOMe
3-ブromoフェニル	NHOMe	3-ブromoフェニル	NHOMe
3-メチルフェニル	NHOMe	3-メチルフェニル	NHOMe
2,5-ジメチルフェニル	NHOMe	2,5-ジメチルフェニル	NHOMe
2,5-ジクロロフェニル	NHOMe	2,5-ジクロロフェニル	NHOMe
2-クロロ-5-(CF ₃)-フェニル	NHOMe	2-クロロ-5-(CF ₃)-フェニル	NHOMe
2,5-ジブromoフェニル	NHOMe	2,5-ジブromoフェニル	NHOMe
2-ブromo-5-(CF ₃)-フェニル	NHOMe	2-ブromo-5-(CF ₃)-フェニル	NHOMe
5-クロロ-2-メチルフェニル	NHOMe	5-クロロ-2-メチルフェニル	NHOMe
5-ブromo-2-メチルフェニル	NHOMe	5-ブromo-2-メチルフェニル	NHOMe
2-メチル-5-(CF ₃)-フェニル	NHOMe	2-メチル-5-(CF ₃)-フェニル	NHOMe
5-クロロ-2-メトキシフェニル	NHOMe	5-クロロ-2-メトキシフェニル	NHOMe
5-ブromo-2-メトキシフェニル	NHOMe	5-ブromo-2-メトキシフェニル	NHOMe
2-メトキシ-5-メチルフェニル	NHOMe	2-メトキシ-5-メチルフェニル	NHOMe

10

20

30

40

【表 2 9】

Y²はNである

R ^{1c}	W ³	R ^{1c}	W ³
2-メトキシ-5-(CF ₃)-フェニル	NHOMe	2-メトキシ-5-(CF ₃)-フェニル	NHOMe
2,5-ジエチルフェニル	NHOMe	2,5-ジエチルフェニル	NHOMe
3,5-ジメチルピラゾール-1-イル	NHOMe	3,5-ジメチルピラゾール-1-イル	NHOMe
3,5-ジクロロピラゾール-1-イル	NHOMe	3,5-ジクロロピラゾール-1-イル	NHOMe
3,5-ジブロモピラゾール-1-イル	NHOMe	3,5-ジブロモピラゾール-1-イル	NHOMe
3,5-ビス-(CF ₃)-ピラゾール-1-イル	NHOMe	3,5-ビス-(CF ₃)-ピラゾール-1-イル	NHOMe
5-メチル-3-(CF ₃)-ピラゾール-1-イル	NHOMe	5-メチル-3-(CF ₃)-ピラゾール-1-イル	NHOMe
3,5-ジメチル-1,2,4-トリアゾール-1-イル	NHOMe	3,5-ジメチル-1,2,4-トリアゾール-1-イル	NHOMe
3,5-ジクロロ-1,2,4-トリアゾール-1-イル	NHOMe	3,5-ジクロロ-1,2,4-トリアゾール-1-イル	NHOMe
3,5-ジブロモ-1,2,4-トリアゾール-1-イル	NHOMe	3,5-ジブロモ-1,2,4-トリアゾール-1-イル	NHOMe
<i>n</i> -ブチル	NHOMe	<i>n</i> -ブチル	NHOMe
<i>i</i> -アミル	NHOMe	<i>i</i> -アミル	NHOMe
3-メチル-2-ブテン-1-イル	NHOMe	3-メチル-2-ブテン-1-イル	NHOMe
プロパルギル	NHOMe	プロパルギル	NHOMe
4,4,4-トリフルオロブタン-1-イル	NHOMe	4,4,4-トリフルオロブタン-1-イル	NHOMe
3,3-ジクロロ-2-プロペン-1-イル	NHOMe	3,3-ジクロロ-2-プロペン-1-イル	NHOMe
2-(CF ₃)-シクロプロピル-1-イル	NHOMe	2-(CF ₃)-シクロプロピル-1-イル	NHOMe
<i>i</i> -ブトキシ	NHOMe	<i>i</i> -ブトキシ	NHOMe
トリフルオロメトキシエチル	NHOMe	トリフルオロメトキシエチル	NHOMe
3,3,3-トリフルオロプロポキシ	NHOMe	3,3,3-トリフルオロプロポキシ	NHOMe
2-メチルフェニル	NHNH ₂	2-メチルフェニル	NHNH ₂
2-メトキシフェニル	NHNH ₂	2-メトキシフェニル	NHNH ₂
2-クロロフェニル	NHNH ₂	2-クロロフェニル	NHNH ₂
2-ブロモフェニル	NHNH ₂	2-ブロモフェニル	NHNH ₂
2-エチルフェニル	NHNH ₂	2-エチルフェニル	NHNH ₂
2-エトキシフェニル	NHNH ₂	2-エトキシフェニル	NHNH ₂
2-(メチルチオ)-フェニル	NHNH ₂	2-(メチルチオ)-フェニル	NHNH ₂
2-(トリフルオロメトキシ)-フェニル	NHNH ₂	2-(トリフルオロメトキシ)-フェニル	NHNH ₂
3-クロロフェニル	NHNH ₂	3-クロロフェニル	NHNH ₂
3-ブロモフェニル	NHNH ₂	3-ブロモフェニル	NHNH ₂
3-メチルフェニル	NHNH ₂	3-メチルフェニル	NHNH ₂
2,5-ジメチルフェニル	NHNH ₂	2,5-ジメチルフェニル	NHNH ₂
2,5-ジクロロフェニル	NHNH ₂	2,5-ジクロロフェニル	NHNH ₂
2-クロロ-5-(CF ₃)-フェニル	NHNH ₂	2-クロロ-5-(CF ₃)-フェニル	NHNH ₂
2,5-ジブロモフェニル	NHNH ₂	2,5-ジブロモフェニル	NHNH ₂
2-ブロモ-5-(CF ₃)-フェニル	NHNH ₂	2-ブロモ-5-(CF ₃)-フェニル	NHNH ₂

10

20

30

40

【表 3 0】

Y²はNである

R ^{1c}	W ³	R ^{1c}	W ³
5-クロロ-2-メチルフェニル	NHNH ₂	5-クロロ-2-メチルフェニル	NHNH ₂
5-プロモ-2-メチルフェニル	NHNH ₂	5-プロモ-2-メチルフェニル	NHNH ₂
2-メチル-5-(CF ₃)-フェニル	NHNH ₂	2-メチル-5-(CF ₃)-フェニル	NHNH ₂
5-クロロ-2-メトキシフェニル	NHNH ₂	5-クロロ-2-メトキシフェニル	NHNH ₂
5-プロモ-2-メトキシフェニル	NHNH ₂	5-プロモ-2-メトキシフェニル	NHNH ₂
2-メトキシ-5-メチルフェニル	NHNH ₂	2-メトキシ-5-メチルフェニル	NHNH ₂
2-メトキシ-5-(CF ₃)-フェニル	NHNH ₂	2-メトキシ-5-(CF ₃)-フェニル	NHNH ₂
2,5-ジエチルフェニル	NHNH ₂	2,5-ジエチルフェニル	NHNH ₂
3,5-ジメチルピラゾール-1-イル	NHNH ₂	3,5-ジメチルピラゾール-1-イル	NHNH ₂
3,5-ジクロロピラゾール-1-イル	NHNH ₂	3,5-ジクロロピラゾール-1-イル	NHNH ₂
3,5-ジプロモピラゾール-1-イル	NHNH ₂	3,5-ジプロモピラゾール-1-イル	NHNH ₂
3,5-ビス-(CF ₃)-ピラゾール-1-イル	NHNH ₂	3,5-ビス-(CF ₃)-ピラゾール-1-イル	NHNH ₂
5-メチル-3-(CF ₃)-ピラゾール-1-イル	NHNH ₂	5-メチル-3-(CF ₃)-ピラゾール-1-イル	NHNH ₂
3,5-ジメチル-1,2,4-トリアゾール-1-イル	NHNH ₂	3,5-ジメチル-1,2,4-トリアゾール-1-イル	NHNH ₂
3,5-ジクロロ-1,2,4-トリアゾール-1-イル	NHNH ₂	3,5-ジクロロ-1,2,4-トリアゾール-1-イル	NHNH ₂
3,5-ジプロモ-1,2,4-トリアゾール-1-イル	NHNH ₂	3,5-ジプロモ-1,2,4-トリアゾール-1-イル	NHNH ₂
<i>n</i> -ブチル	NHNH ₂	<i>n</i> -ブチル	NHNH ₂
<i>i</i> -アミル	NHNH ₂	<i>i</i> -アミル	NHNH ₂
3-メチル-2-ブテン-1-イル	NHNH ₂	3-メチル-2-ブテン-1-イル	NHNH ₂
プロパルギル	NHNH ₂	プロパルギル	NHNH ₂
4,4,4-トリフルオロブタン-1-イル	NHNH ₂	4,4,4-トリフルオロブタン-1-イル	NHNH ₂
3,3-ジクロロ-2-プロペン-1-イル	NHNH ₂	3,3-ジクロロ-2-プロペン-1-イル	NHNH ₂
2-(CF ₃)-シクロプロピル-1-イル	NHNH ₂	2-(CF ₃)-シクロプロピル-1-イル	NHNH ₂
<i>i</i> -ブトキシ	NHNH ₂	<i>i</i> -ブトキシ	NHNH ₂
トリフルオロメトキシエチル	NHNH ₂	トリフルオロメトキシエチル	NHNH ₂
3,3,3-トリフルオロプロポキシ	NHNH ₂	3,3,3-トリフルオロプロポキシ	NHNH ₂

10

20

30

【0 4 6 1】

本開示は表 3 A b をも含み、これは、表 3 A における行の表題（すなわち、「Y²はNである」）が行の表題「Y²はNHである」と置き換えられていると共に、R^{1c}およびW³が上記表 3 A において定義されているとおりであることを除き、表 2 3 A と同じく構成されている。それ故、表 3 b における最初の項目は、Y²がCHであり、R^{1c}が2-メチルフェニルであり、および、W³がメトキシである、式 1 A の化合物を特定的に開示している。

40

【0 4 6 2】

【表 3 1】

表の行の表題	Y ²
3Ab	CH

【0 4 6 3】

表 4

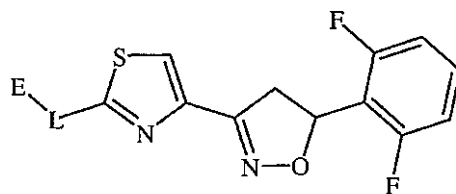
表 4 において、上記の明細表 1 A、明細表 1 B および明細表 1 C からの適切な L 構造が総括的な表 4 のチアゾールに結合しており、ここで、アスタリスク（*）が付された結合

50

は適切な E 値（以下の表 4 v に見いだされる）に結合しており、「T」はチアゾール環の 2 位に結合している。例えば、表 4 に最初に列挙されている化合物は、E が E-1 a であり、L が L-1 であり、R¹⁻⁴ が H であり、および、R²⁻³ に対する値がない式 1 の化合物である。

【0464】

【表 3 2】



10

E は E-1a である

L	R ¹⁴	R ²³
L-1	H	-
L-2	H	-
L-3	H	-
L-4	H	-
L-5	H	-
L-6	H	-
L-7	H	-
L-8	H	-
L-9	H	H
L-10	H	H
L-11	H	H
L-12	H	H
L-13	H	-
L-14	H	-
L-15	H	H
L-16	H	-
L-17	H	H
L-18	H	H
L-19	H	H
L-20	H	H
L-21	H	-
L-22	H	-
L-23	H	-
L-24	H	-
L-25	H	-

20

30

40

【0465】

【表 3 3】

E は E-1a である

L	R ¹⁴	R ²³	
L-26	H	-	
L-27	H	-	
L-28	H	-	
L-29	H	-	
L-30	H	-	
L-31	H	-	10
L-32	H	-	
L-33	H	-	
L-34	H	-	
L-35	H	H	
L-36	H	H	
L-37	H	H	
L-38	H	H	
L-39	H	H	
L-40	H	-	20
L-41	H	-	
L-42	H	-	
L-43	H	-	
L-44	H	-	
L-45	H	-	
L-46	H	-	
L-47	H	-	
L-48	H	-	30
L-49	H	-	
L-50	H	H	
L-51	H	H	
L-52	H	H	
L-53	H	H	
L-54	H	H	
L-55	H	-	
L-56	H	-	
L-57	H	-	40
L-58	H	-	
L-59	H	-	
L-2	2-Me	-	
L-4	2-Me	-	

【 0 4 6 6 】

【表 3 4】

E は E-1a である

L	R ¹⁴	R ²³	
L-5	6-Me	-	
L-6	6-Me	-	
L-13	3-Me	-	
L-22	2-Me	-	
L-26	2-Me	-	
L-9	H	Me	10
L-10	2-Me	Me	
L-11	H	Me	
L-12	H	Me	
L-15	H	Me	
L-35	H	Me	
L-50	H	Me	
L-9	H	Ac	
L-60	H	-	
L-61	H	-	20
L-62	H	-	
L-63	H	-	
L-64	H	-	
L-65	H	-	

【0 4 6 7】

本開示は表 4 b ~ 4 v をも含み、その各々は、表 4 における行の表題（すなわち、「E は E-1 a である」）が以下に示されているそれぞれの行の表題で置き換えられていることを除き、上記の表 4 と同じく構成されている。例えば、表 4 b において、行の表題は「E は E-1 b である」であり、R^{1 4} および R^{2 3} は、上記表 4 において定義されているとおりである。それ故、表 4 b における最初の項目は、E が E-1 b であり、L が L-1 であり、R^{1 4} が H であり、および、R^{2 3} に対する値がない、式 1 の化合物を特定的に開示している。表 4 c ~ 4 v が同様に構成されている。

【0 4 6 8】

30

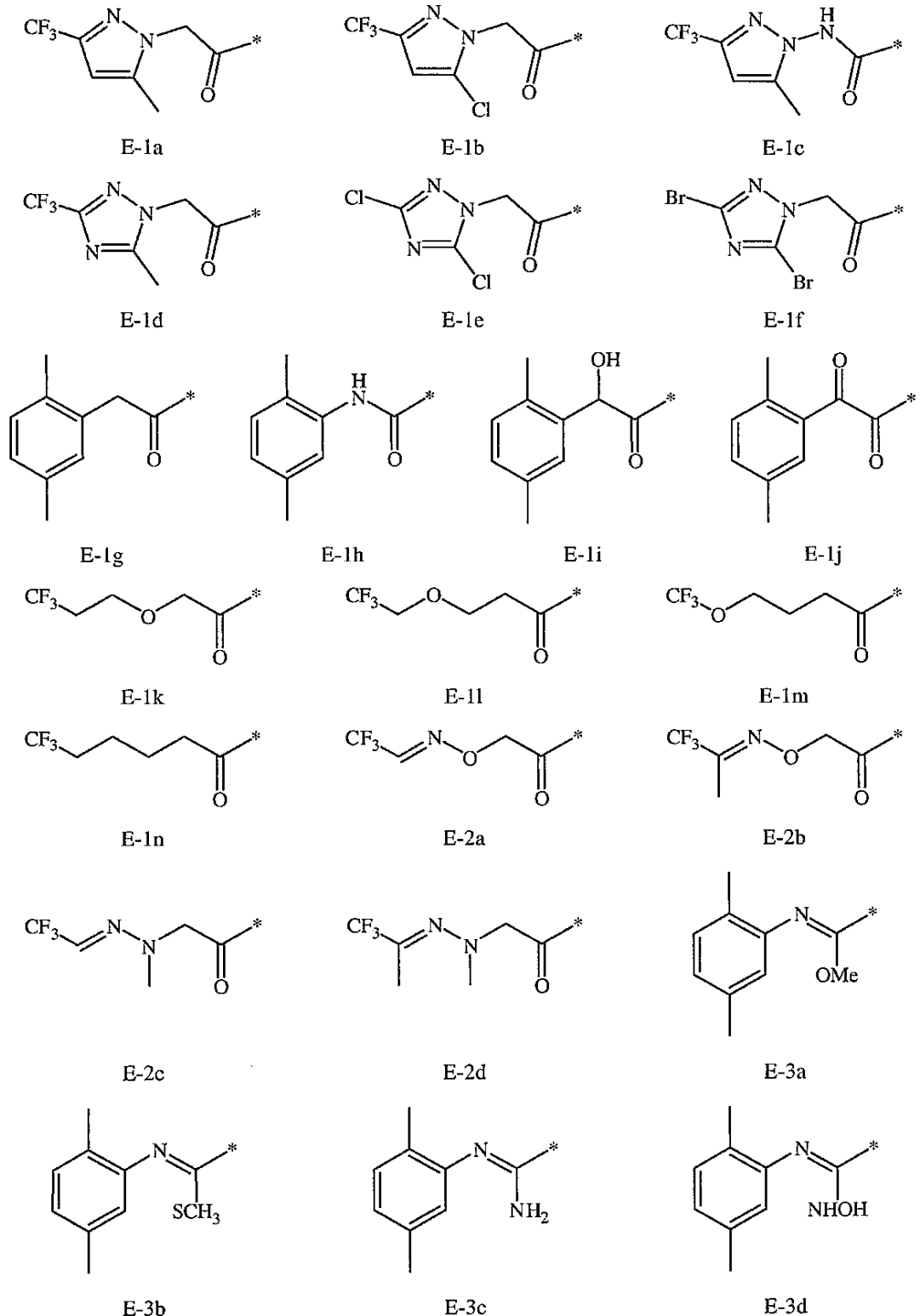
【表 3 5】

表の行の表題	E	
4b	E-1b	
4c	E-1c	
4d	E-1d	
4e	E-1e	
4f	E-1f	
4g	E-1g	
4h	E-1h	10
4i	E-1i	
4j	E-1j	
4k	E-1k	
4l	E-1l	
4m	E-1m	
4n	E-1n	
4o	E-2a	
4p	E-2b	
4q	E-2c	20
4r	E-2d	
4s	E-3a	
4t	E-3b	
4u	E-3c	
4v	E-3d	

【0 4 6 9】

表 4 における可変項「E」に対する値は E-1 a ~ E-3 d を含む。

【化 6 5】



【0470】

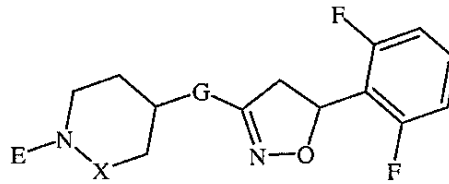
表 5

表 5 において、個別の G 構造は上記明細表 2 からのものであり（例えば、G-1～G-48）、ここで、左に突出する結合は式 1 の Y² に結合していると共に、右に突出する結合は 5 員イソキサゾリン環に結合している。例えば、表 5 に最初に列挙されている化合物は、E が E-1 a であり（表 4 からの E の値）、X が O であり、Y² が C(R^{1 4}) であり、G が G-1（チアゾール環の 2 位で Y² に結合していると共に、チアゾールの 4 位を介して 5 員イソキサゾリン環の炭素に結合している）であり、R^{2 9 a} が H であり、およ

び、 R^{30a} に対する値がない式 1 の化合物である。

【0471】

【表36】



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

【0472】

本開示は表 5 b ~ 5 r をも含み、その各々は、表 5 における行の表題（すなわち、「E は E-1 a であり、および、X は O である」）が以下に示されているそれぞれの行の表題で置き換えられていることを除き、上記の表 5 と同じく構成されている。例えば、表 5 b において、行の表題は「E は E-1 g であり、および、X は O である」であり、G、 R^{29a} および R^{30a} は上記表 5 において定義されているとおりである。それ故、表 5 b における最初の項目は、E が E-1 g であり、X が O であり、G が G-1 であり、 R^{29a} が H であり、および、 R^{30a} に対する値がない、式 1 の化合物を特定的に開示している。表 5 c ~ 5 r が同様に構成されている。

【0473】

10

20

30

【表 3 7】

表の行の表題	E	X	表の行の表題	E	X
5b	E-1g	O	5k	E-2b	NH
5c	E-1h	O	5l	E-3a	NH
5d	E-2a	O	5m	E-1a	N-Me
5e	E-2b	O	5n	E-1g	N-Me
5f	E-3a	O	5o	E-1h	N-Me
5g	E-1a	NH	5p	E-2a	N-Me
5h	E-1g	NH	5q	E-2b	N-Me
5i	E-1h	NH	5r	E-3a	N-Me
5j	E-2a	NH			

10

【0 4 7 4】

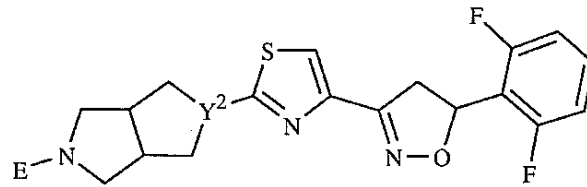
表 5 A

表 5 A において、個別の G 構造は上記明細表 2 からのものであり（例えば、G-1～G-48）、ここで、左に突出する結合は式 1 A の Y^2 に結合していると共に、右に突出する結合は 5 員イソキサゾリン環に結合している。例えば、表 5 A に最初に列挙されている化合物は、E が E-1 a であり（表 4 からの E の値）、 Y^2 が CH であり、G が G-1 であり（チアゾール環の 2 位で Y^2 に結合していると共に、チアゾールの 4 位を介して 5 員イソキサゾリン環の炭素に結合している）、 R^{29a} が H であり、および、 R^{30a} に対する値がない式 1 の化合物 A である。

20

【0 4 7 5】

【表 3 8】



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

【0 4 7 6】

本開示は表 5 A b ~ 5 A l をも含み、その各々は、表 5 A における行の表題（すなわち、「E は E-1 a であり、および、Y² は CH である」）が以下に示されているそれぞれの行の表題で置き換えられていることを除き、上記の表 5 A と同じく構成されている。例えば、表 5 A b において、行の表題は「E は E-1 g であり、および、Y² は CH である」であり、G、R^{29a} および R^{30a} は上記表 5 において定義されているとおりである。それ故、表 5 A b における最初の項目は、E が E-1 g であり、Y² が CH であり、G が G-1 であり、R^{29a} が H であり、および、R^{30a} に対する値がない、式 1 A の化合物を特定の開示している。表 5 A c ~ 5 A l は同様に構成されているが、ただし、Y² が N である場合、G は G-25 ~ G-30 または G-36 ではない。

【0 4 7 7】

【表 3 9】

表の行の表題	E	Y ²	表の行の表題	E	Y ²
5Ab	E-1g	CH	5Ah	E-1g	N
5Ac	E-1h	CH	5Ai	E-1h	N
5Ad	E-2a	CH	5Aj	E-2a	N
5Ae	E-2b	CH	5Ak	E-2b	N
5Af	E-3a	CH	5Al	E-3a	N
5Ag	E-1a	N			

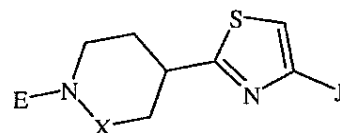
【0 4 7 8】

表 6

表 6 において、各 J の個別の構造は、上記明細表 3 A および 4 に示されているとおり J-29-1 ~ J-29-58 を含む。また、表 6 において、各 J の個別の構造は以下に示されている J-83-1 ~ J-93-1 を含む。J の各構造における左に突出する結合は 6 員チアゾール環に結合している。J が J-83-1 ~ J-93-1 の 1 つにより表される場合、アスタリスク (*) が付された炭素原子を有する構造が立体中心を含んでいる。

【0479】

【表 40】



E は E-1a であり、X は O である

J	J	J	J	J	J	J
J-29-1	J-29-11	J-29-21	J-29-31	J-29-41	J-29-51	J-85-1
J-29-2	J-29-12	J-29-22	J-29-32	J-29-42	J-29-52	J-86-1
J-29-3	J-29-13	J-29-23	J-29-33	J-29-43	J-29-53	J-87-1
J-29-4	J-29-14	J-29-24	J-29-34	J-29-44	J-29-54	J-88-1
J-29-5	J-29-15	J-29-25	J-29-35	J-29-45	J-29-55	J-89-1
J-29-6	J-29-16	J-29-26	J-29-36	J-29-46	J-29-56	J-90-1
J-29-7	J-29-17	J-29-27	J-29-37	J-29-47	J-29-57	J-92-1
J-29-8	J-29-18	J-29-28	J-29-38	J-29-48	J-29-58	J-93-1
J-29-9	J-29-19	J-29-29	J-29-39	J-29-49	J-83-1	
J-29-10	J-29-20	J-29-30	J-29-40	J-29-50	J-84-1	

【0480】

本開示は表 6 b ~ 6 r をも含み、その各々は、表 6 における行の表題（すなわち、「E は E-1 a であり、および、X は O である」）が以下に示されているそれぞれの行の表題で置き換えられていることを除き、上記の表 6 と同じく構成されている。例えば、表 6 b において、行の表題は「E は E-1 g でありおよび X は O である」であり、J は、上記の表 6 において定義されているとおりである。それ故、表 6 b における最初の項目は、E が E-1 g であり、X が O であり、J が J-29-1 である式 1 の化合物を特定的に開示している。表 6 c ~ 6 r が同様に構成されている。

【0481】

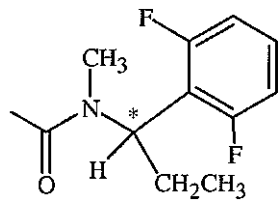
【表 41】

表の行の表題	E	X	表の行の表題	E	X
6b	E-1g	O	6k	E-2b	NH
6c	E-1h	O	6l	E-3a	NH
6d	E-2a	O	6m	E-1a	N-Me
6e	E-2b	O	6n	E-1g	N-Me
6f	E-3a	O	6o	E-1h	N-Me
6g	E-1a	NH	6p	E-2a	N-Me
6h	E-1g	NH	6q	E-2b	N-Me
6i	E-1h	NH	6r	E-3a	N-Me
6j	E-2a	NH			

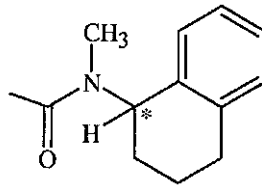
【0482】

上記表6における可変項「J」に対する値はJ-83-1～J-93-1を含んでいる。

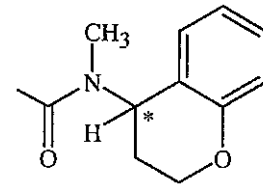
【化66】



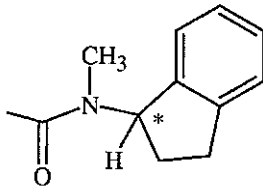
J-83-1



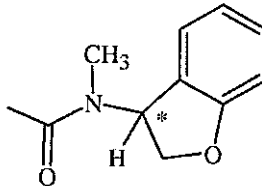
J-84-1



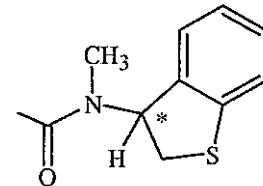
J-85-1



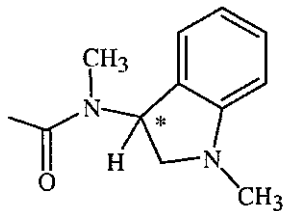
J-86-1



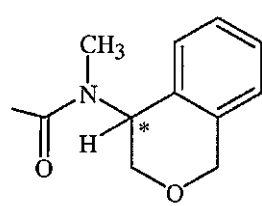
J-87-1



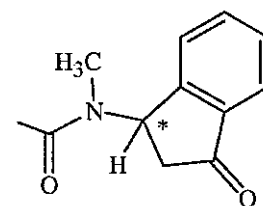
J-88-1



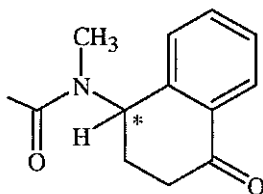
J-89-1



J-90-1



J-92-1



J-93-1

【0483】

表6A

表6Aにおいて、各Jの個別の構造は、上記明細表3Aおよび4に示されているとおりJ-29-1～J-29-58を含む。また、表6Aにおいて、各Jの個別の構造は以下に示されているJ-83-1～J-93-1を含む。Jの各構造における左に突出する結合は6員チアゾール環に結合している。JがJ-83-1～J-93-1の1つにより表される場合、アスタリスク（*）が付された炭素原子を有する構造が立体中心を含んでいる。

【0484】

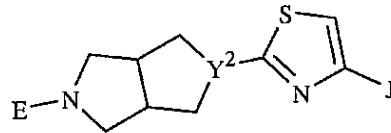
10

20

30

40

【表 4 2】

E は E-1a であり、Y² は N である

J	J	J	J	J	J	J
J-29-1	J-29-11	J-29-21	J-29-31	J-29-41	J-29-51	J-85-1
J-29-2	J-29-12	J-29-22	J-29-32	J-29-42	J-29-52	J-86-1
J-29-3	J-29-13	J-29-23	J-29-33	J-29-43	J-29-53	J-87-1
J-29-4	J-29-14	J-29-24	J-29-34	J-29-44	J-29-54	J-88-1
J-29-5	J-29-15	J-29-25	J-29-35	J-29-45	J-29-55	J-89-1
J-29-6	J-29-16	J-29-26	J-29-36	J-29-46	J-29-56	J-90-1
J-29-7	J-29-17	J-29-27	J-29-37	J-29-47	J-29-57	J-92-1
J-29-8	J-29-18	J-29-28	J-29-38	J-29-48	J-29-58	J-93-1
J-29-9	J-29-19	J-29-29	J-29-39	J-29-49	J-83-1	
J-29-10	J-29-20	J-29-30	J-29-40	J-29-50	J-84-1	

10

20

【0 4 8 5】

本開示は表 6 A b ～ 6 A l をも含み、その各々は、表 6 A における行の表題（すなわち、「E は E-1 a であり、および、Y² は N である」）が以下に示されているそれぞれの行の表題で置き換えられていることを除き、上記の表 6 A と同じく構成されている。例えば、表 6 A b において、行の表題は「E は E-1 g であり、および、Y² は N である」であり、J は、上記の表 6 A において定義されているとおりである。それ故、表 6 A b における最初の項目は、E が E-1 g であり、Y² が N であり、J が J-2 9-1 である、式 1 A の化合物を特定の開示している。表 6 A c ～ 6 A l が同様に構成されている。

【0 4 8 6】

【表 4 3】

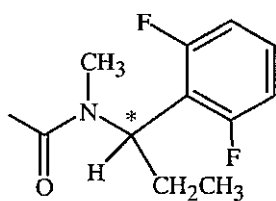
表の行の表題	E	Y ²	表の行の表題	E	Y ²
6Ab	E-1g	N	6Ah	E-1g	CH
6Ac	E-1h	N	6Ai	E-1h	CH
6Ad	E-2a	N	6Aj	E-2a	CH
6Ae	E-2b	N	6Ak	E-2b	CH
6Af	E-3a	N	6Al	E-3a	CH
6Ag	E-1a	CH			

40

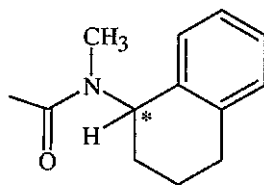
【0 4 8 7】

上記表 6 A における可変項「J」に対する値は J-8 3-1 ～ J-9 3-1 を含んでいる。

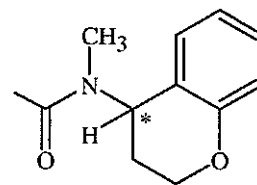
【化 6 7】



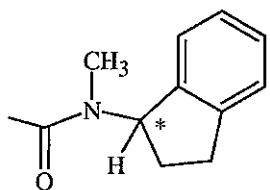
J-83-1



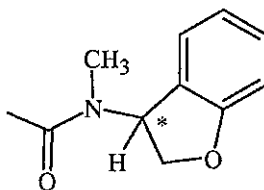
J-84-1



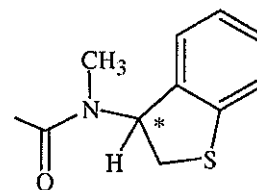
J-85-1



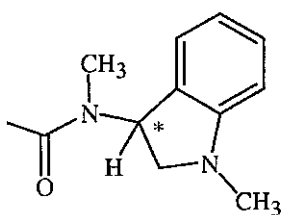
J-86-1



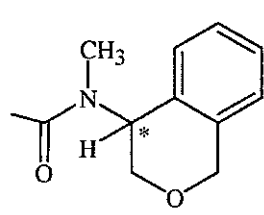
J-87-1



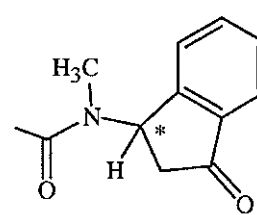
J-88-1



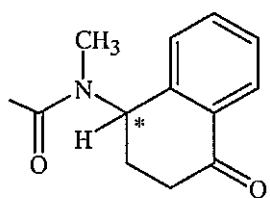
J-89-1



J-90-1



J-92-1



J-93-1

10

20

30

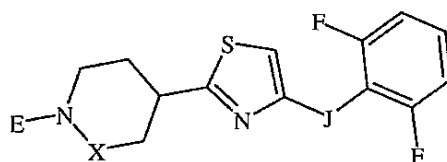
【0488】

表 7

表 7 において、各 J の個別の構造は、明細表 3 からの個別の J 値（例えば、J-1～J-82）を指している。J に続く括弧中の数字は、チアゾールおよび 2, 6-ジフルオロフェニル環に対する J 環の結合点を指す。最初の数字は、チアゾールが結合している J 上の環位置であり、2 番目の数字は、2, 6-ジフルオロフェニル環が結合している J 上の環位置である。

【0489】

【表 4 4】



E は E-1a であり、および、X は O である:

J	J	J	J	J	J	J
J-1 (2/4)	J-6 (3/1)	J-21 (3/6)	J-27 (5/3)	J-33 (4/2)	J-45 (2/4)	J-73 (4/2)
J-1 (2/5)	J-7 (5/3)	J-21 (5/3)	J-28 (3/5)	J-34 (1/3)	J-45 (2/5)	J-73 (1/3)
J-1 (4/2)	J-7 (3/5)	J-22 (2/4)	J-28 (5/3)	J-34 (1/4)	J-45 (2/6)	J-73 (1/4)
J-1 (5/2)	J-8 (5/3)	J-22 (2/5)	J-29 (3/5)	J-34 (3/5)	J-46 (2/4)	J-73 (4/1)
J-2 (2/4)	J-8 (3/5)	J-22 (4/6)	J-29 (5/3)	J-34 (3/1)	J-46 (2/5)	J-74 (3/5)
J-2 (2/5)	J-9 (4/1)	J-22 (4/2)	J-30 (3/5)	J-34 (4/1)	J-46 (4/2)	J-74 (5/3)
J-2 (4/2)	J-10 (3/5)	J-22 (5/2)	J-30 (5/3)	J-35 (4/1)	J-46 (5/2)	J-75 (3/5)
J-2 (5/2)	J-10 (5/3)	J-23 (2/5)	J-30 (3/1)	J-36 (1/3)	J-47 (2/4)	J-75 (5/3)
J-3 (4/1)	J-11 (3/5)	J-23 (2/6)	J-30 (4/1)	J-36 (3/1)	J-47 (2/5)	J-75 (2/4)
J-4 (2/4)	J-11 (5/3)	J-24 (2/4)	J-31 (2/4)	J-36 (3/5)	J-47 (4/2)	J-75 (2/5)
J-4 (2/5)	J-12 (3/1)	J-24 (2/5)	J-31 (2/5)	J-36 (5/3)	J-47 (5/2)	J-76 (3/6)
J-4 (4/2)	J-13 (1/4)	J-24 (4/2)	J-31 (3/5)	J-37 (2/5)	J-48 (3/5)	J-76 (6/3)
J-4 (5/2)	J-13 (4/1)	J-24 (5/2)	J-31 (3/1)	J-37 (5/2)	J-49 (2/4)	J-77 (3/5)
J-4 (3/5)	J-14 (5/3)	J-25 (2/4)	J-31 (4/1)	J-37 (2/4)	J-49 (2/5)	J-77 (5/3)
J-4 (5/3)	J-15 (2/5)	J-25 (2/5)	J-31 (4/2)	J-37 (4/2)	J-49 (4/2)	J-78 (1/3)
J-5 (2/5)	J-16 (2/5)	J-25 (4/2)	J-31 (5/2)	J-38 (2/5)	J-49 (5/2)	J-79 (1/3)
J-5 (4/2)	J-17 (4/2)	J-25 (5/2)	J-32 (2/4)	J-38 (5/2)	J-50 (2/6)	J-79 (3/1)
J-5 (5/2)	J-18 (5/2)	J-26 (2/4)	J-32 (2/5)	J-38 (2/4)	J-51 (2/6)	J-80 (1/3)
J-5 (3/5)	J-19 (2/4)	J-26 (2/5)	J-32 (3/5)	J-38 (4/2)	J-52 (2/6)	J-80 (3/1)
J-5 (5/3)	J-19 (4/2)	J-26 (4/2)	J-32 (5/3)	J-40 (3/5)	J-69 (1/3)	J-81 (3/5)
J-6 (2/4)	J-20 (2/4)	J-26 (5/2)	J-32 (5/2)	J-40 (5/3)	J-69 (1/4)	J-81 (5/3)
J-6 (3/5)	J-20 (2/5)	J-26 (4/1)	J-32 (4/2)	J-41 (1/3)	J-70 (1/3)	J-82 (3/5)
J-6 (2/5)	J-20 (2/6)	J-27 (2/4)	J-33 (2/4)	J-41 (1/4)	J-71 (2/4)	J-82 (3/6)
J-6 (4/2)	J-20 (3/5)	J-27 (2/5)	J-33 (2/5)	J-44 (1/3)	J-71 (4/2)	J-82 (5/3)
J-6 (5/2)	J-20 (4/2)	J-27 (3/5)	J-33 (3/5)	J-44 (2/4)	J-72 (2/4)	J-82 (6/3)
J-6 (4/2)	J-20 (5/2)	J-27 (4/2)	J-33 (5/3)	J-44 (2/5)	J-72 (4/2)	
J-6 (5/3)	J-21 (3/5)	J-27 (5/2)	J-33 (5/2)	J-44 (2/6)	J-73 (2/4)	

【0 4 9 0】

本開示は表 7 b ~ 7 r をも含み、その各々は、表 7 における行の表題（すなわち、「E は E-1 a であり、および、X は O である」）が以下に示されているそれぞれの行の表題で置き換えられていることを除き、上記の表 7 と同じく構成されている。例えば、表 7 b において、行の表題は「E は E-1 g でありおよび X は O である」であり、G は、上記の表 7 において定義されているとおりである。それ故、表 7 b における最初の項目は、E が E-1 g であり、X が O であり、J が、J-1 の 2 位でチアゾールに結合している J-1 であると共に 2, 6-ジフルオロフェニル環に 4 位で結合している J-1 である、式 1 の化合物を特定の開示している。表 7 c ~ 7 r が同様に構成されている。

【0 4 9 1】

10

20

30

40

50

【表 4 5】

表の行の表題	E	X	表の行の表題	E	X
7b	E-1g	O	7k	E-2b	NH
7c	E-1h	O	7l	E-3a	NH
7d	E-2a	O	7m	E-1a	N-Me
7e	E-2b	O	7n	E-1g	N-Me
7f	E-3a	O	7o	E-1h	N-Me
7g	E-1a	NH	7p	E-2a	N-Me
7h	E-1g	NH	7q	E-2b	N-Me
7i	E-1h	NH	7r	E-3a	N-Me
7j	E-2a	NH			

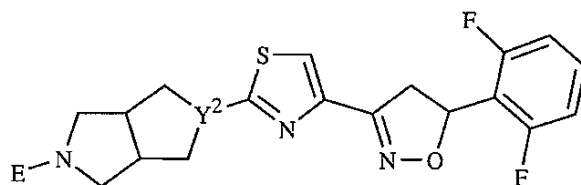
【0 4 9 2】

表 7 A

表 7 Aにおいて、各 J の個別の構造は、明細表 3 からの個別の J 値（例えば、J-1 ～ J-8 2）を指している。J に続く括弧中の数字は、チアゾールおよび 2, 6-ジフルオロフェニル環に対する J 環の結合点を指す。最初の数字は、チアゾールが結合している J 上の環位置であり、2 番目の数字は、2, 6-ジフルオロフェニル環が結合している J 上の環位置である。

【0 4 9 3】

【表 4 6】

E は E-1a であり、および、Y² は N である

J	J	J	J	J	J	J
J-1 (2/4)	J-6 (3/1)	J-21 (3/6)	J-27 (5/3)	J-33 (4/2)	J-45 (2/4)	J-73 (4/2)
J-1 (2/5)	J-7 (5/3)	J-21 (5/3)	J-28 (3/5)	J-34 (1/3)	J-45 (2/5)	J-73 (1/3)
J-1 (4/2)	J-7 (3/5)	J-22 (2/4)	J-28 (5/3)	J-34 (1/4)	J-45 (2/6)	J-73 (1/4)
J-1 (5/2)	J-8 (5/3)	J-22 (2/5)	J-29 (3/5)	J-34 (3/5)	J-46 (2/4)	J-73 (4/1)
J-2 (2/4)	J-8 (3/5)	J-22 (4/6)	J-29 (5/3)	J-34 (3/1)	J-46 (2/5)	J-74 (3/5)
J-2 (2/5)	J-9 (4/1)	J-22 (4/2)	J-30 (3/5)	J-34 (4/1)	J-46 (4/2)	J-74 (5/3)
J-2 (4/2)	J-10 (3/5)	J-22 (5/2)	J-30 (5/3)	J-35 (4/1)	J-46 (5/2)	J-75 (3/5)
J-2 (5/2)	J-10 (5/3)	J-23 (2/5)	J-30 (3/1)	J-36 (1/3)	J-47 (2/4)	J-75 (5/3)
J-3 (4/1)	J-11 (3/5)	J-23 (2/6)	J-30 (4/1)	J-36 (3/1)	J-47 (2/5)	J-75 (2/4)
J-4 (2/4)	J-11 (5/3)	J-24 (2/4)	J-31 (2/4)	J-36 (3/5)	J-47 (4/2)	J-75 (2/5)
J-4 (2/5)	J-12 (3/1)	J-24 (2/5)	J-31 (2/5)	J-36 (5/3)	J-47 (5/2)	J-76 (3/6)
J-4 (4/2)	J-13 (1/4)	J-24 (4/2)	J-31 (3/5)	J-37 (2/5)	J-48 (3/5)	J-76 (6/3)
J-4 (5/2)	J-13 (4/1)	J-24 (5/2)	J-31 (3/1)	J-37 (5/2)	J-49 (2/4)	J-77 (3/5)
J-4 (3/5)	J-14 (5/3)	J-25 (2/4)	J-31 (4/1)	J-37 (2/4)	J-49 (2/5)	J-77 (5/3)
J-4 (5/3)	J-15 (2/5)	J-25 (2/5)	J-31 (4/2)	J-37 (4/2)	J-49 (4/2)	J-78 (1/3)
J-5 (2/5)	J-16 (2/5)	J-25 (4/2)	J-31 (5/2)	J-38 (2/5)	J-49 (5/2)	J-79 (1/3)
J-5 (4/2)	J-17 (4/2)	J-25 (5/2)	J-32 (2/4)	J-38 (5/2)	J-50 (2/6)	J-79 (3/1)
J-5 (5/2)	J-18 (5/2)	J-26 (2/4)	J-32 (2/5)	J-38 (2/4)	J-51 (2/6)	J-80 (1/3)
J-5 (3/5)	J-19 (2/4)	J-26 (2/5)	J-32 (3/5)	J-38 (4/2)	J-52 (2/6)	J-80 (3/1)
J-5 (5/3)	J-19 (4/2)	J-26 (4/2)	J-32 (5/3)	J-40 (3/5)	J-69 (1/3)	J-81 (3/5)
J-6 (2/4)	J-20 (2/4)	J-26 (5/2)	J-32 (5/2)	J-40 (5/3)	J-69 (1/4)	J-81 (5/3)
J-6 (3/5)	J-20 (2/5)	J-26 (4/1)	J-32 (4/2)	J-41 (1/3)	J-70 (1/3)	J-82 (3/5)
J-6 (2/5)	J-20 (2/6)	J-27 (2/4)	J-33 (2/4)	J-41 (1/4)	J-71 (2/4)	J-82 (3/6)
J-6 (4/2)	J-20 (3/5)	J-27 (2/5)	J-33 (2/5)	J-44 (1/3)	J-71 (4/2)	J-82 (5/3)
J-6 (5/2)	J-20 (4/2)	J-27 (3/5)	J-33 (3/5)	J-44 (2/4)	J-72 (2/4)	J-82 (6/3)
J-6 (4/2)	J-20 (5/2)	J-27 (4/2)	J-33 (5/3)	J-44 (2/5)	J-72 (4/2)	
J-6 (5/3)	J-21 (3/5)	J-27 (5/2)	J-33 (5/2)	J-44 (2/6)	J-73 (2/4)	

【0 4 9 4】

本開示は表 7 A b ~ 7 A l をも含み、その各々は、表 7 A における行の表題（すなわち、「E は E-1 a であり、および、Y² は N である」）が以下に示されているそれぞれの行の表題で置き換えられていることを除き、上記の表 7 A と同じく構成されている。例えば、表 7 A b において、行の表題は「E は E-1 g であり、および、Y² は N である」であり、G は、上記の表 7 A において定義されているとおりである。それ故、表 7 A b における最初の項目は、E が E-1 g であり、Y² が N であり、J が、J-1 の 2 位でチアゾールに結合している J-1 であると共に 2, 6-ジフルオロフェニル環に 4 位で結合している J-1 である、式 1 A の化合物を特定の開示している。表 7 A c ~ 7 A l が同様に構成されている。

10

20

30

40

50

【0495】

【表47】

表の行の表題	E	Y ²	
7Ab	E-1g	N	
7Ac	E-1g	N	
7Ad	E-1h	N	
7Ae	E-2a	N	
7Af	E-2b	N	10
7Ag	E-1a	CH	
7Ah	E-1g	CH	
7Ai	E-1h	CH	
7Aj	E-2a	CH	
7Ak	E-2b	CH	
7Al	E-3a	CH	

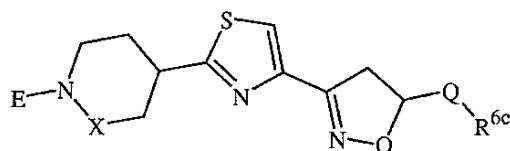
【0496】

表8

表8において、各Q環の個別の構造は、明細表6からの個別のQ環値（例えば、Q-1 20
 ～Q-102）を指し、左に突出する結合を介してイソキサゾリン環の5位に結合してい
 る。表8において、Q環は非置換である（すなわち、R⁶およびR^{6a}は共にHである）
 。存在している場合、R^{6c}値は表8中に列挙されている。

【0497】

【表 4 8】



E は E-1a であり、および、X は O である

Q	R ^{6c}	Q	R ^{6c}	Q	R ^{6c}	Q	R ^{6c}	Q	R ^{6c}	Q	R ^{6c}
Q-1	-	Q-22	Me	Q-17	-	Q-36	-	Q-71	-	Q-87	-
Q-2	-	Q-23	Me	Q-18	-	Q-37	-	Q-72	Me	Q-88	Me
Q-3	Me	Q-24	-	Q-19	-	Q-38	-	Q-73	-	Q-89	-
Q-4	-	Q-25	-	Q-20	-	Q-39	-	Q-74	-	Q-90	-
Q-5	-	Q-26	-	Q-21	Me	Q-40	-	Q-75	Me	Q-91	-
Q-6	-	Q-27	-	Q-42	-	Q-41	-	Q-76	-	Q-92	Me
Q-7	-	Q-28	Me	Q-43	-	Q-61	-	Q-77	-	Q-93	-
Q-8	-	Q-29	-	Q-44	-	Q-62	-	Q-78	Me	Q-94	-
Q-9	-	Q-30	-	Q-46	-	Q-63	-	Q-79	Me	Q-95	Me
Q-10	Me	Q-31	Me	Q-48	-	Q-64	-	Q-80	-	Q-96	-
Q-11	Me	Q-32	-	Q-49	-	Q-65	-	Q-81	-	Q-97	-
Q-12	Me	Q-33	-	Q-50	-	Q-66	-	Q-82	-	Q-98	-
Q-13	Me	Q-34	-	Q-51	-	Q-67	-	Q-83	-	Q-99	-
Q-14	Me	Q-35	-	Q-52	-	Q-68	-	Q-84	-	Q-100	-
Q-15	-	-	-	Q-53	-	Q-69	-	Q-85	-	Q-101	-
Q-16	-	-	-	Q-36	-	Q-70	-	Q-86	Me	Q-102	Me

【0 4 9 8】

本開示は表 8 b ~ 8 r をも含み、その各々は、表 8 における行の表題（すなわち、「E は E-1 a であり、および、X は O である」）が以下に示されているそれぞれの行の表題で置き換えられていることを除き、上記の表 8 と同じく構成されている。例えば、表 8 b において、行の表題は「E は E-1 g でありおよび X は O である」であり、Q および R^{6c} は、上記表 8 において定義されているとおりである。それ故、表 8 b における最初の項目は、E が E-1 g であり、X が O であり、Q が Q-1 であり、および、R^{6c} が H である、式 1 の化合物を特定の開示している。表 8 c ~ 8 r が同様に構成されている。

【0 4 9 9】

10

20

30

【表 4 9】

表の行の表題	E	X	
8b	E-1g	O	
8c	E-1h	O	
8d	E-2a	O	
8e	E-2b	O	
8f	E-3a	O	
8g	E-1a	NH	
8h	E-1g	NH	10
8i	E-1h	NH	
8j	E-2a	NH	
8k	E-2b	NH	
8l	E-3a	NH	
8m	E-1a	N-Me	
8n	E-1g	N-Me	
8o	E-1h	N-Me	
8p	E-2a	N-Me	
8q	E-2b	N-Me	20
8r	E-3a	N-Me	

【0 5 0 0】

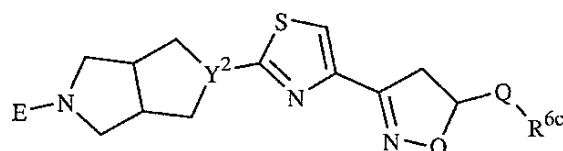
表 8 A

表 8 Aにおいて、各 Q 環の個別の構造は、明細表 6 からの個別の Q 環値（例えば、Q-1～Q-102）を指し、左に突出する結合を介してイソキサゾリン環の 5 位に結合している。表 8 Aにおいて、Q 環は非置換である（すなわち、R⁶ および R^{6a} は共に H である）。存在している場合、R^{6c} 値は表 8 A 中に列挙されている。

【0 5 0 1】

30

【表 5 0】



EはE-1aであり、および、Y²はOである

Q	R ^{6c}	Q	R ^{6c}	Q	R ^{6c}	Q	R ^{6c}	Q	R ^{6c}	Q	R ^{6c}
Q-1	-	Q-20	-	Q-38	-	Q-58	-	Q-76	-	Q-92	Me
Q-2	-	Q-21	Me	Q-39	-	Q-59	-	Q-77	-	Q-93	-
Q-3	Me	Q-22	Me	Q-40	-	Q-60	-	Q-78	Me	Q-94	-
Q-4	-	Q-23	Me	Q-41	-	Q-61	-	Q-79	Me	Q-95	Me
Q-5	-	Q-24	-	Q-42	-	Q-62	-	Q-80	-	Q-96	-
Q-6	-	Q-25	-	Q-43	-	Q-63	-	Q-81	-	Q-97	-
Q-7	-	Q-26	-	Q-44	-	Q-64	-	Q-82	-		
Q-8	-	Q-27	-	Q-46	-	Q-65	-	Q-83	-	Q-98	-
Q-9	-	Q-28	Me	Q-48	-	Q-66	-	Q-84	-	Q-99	-
Q-10	Me	Q-29	-	Q-49	-	Q-67	-	Q-85	-	Q-100	-
Q-11	Me	Q-30	-	Q-50	-	Q-68	-	Q-86	Me	Q-101	-
Q-12	Me	Q-31	Me	Q-51	-	Q-69	-	Q-87	-	Q-102	Me
Q-13	Me	Q-32	-	Q-52	-	Q-70	-	Q-88	Me		
Q-14	Me	Q-33	-	Q-53	-	Q-71	-	Q-89	-		
Q-15	-	Q-34	-	Q-54	-	Q-72	Me	Q-90	-		
Q-16	-	Q-35	-	Q-55	-	Q-73	-	Q-91	-		
Q-17	-	Q-36	-	Q-56	-	Q-74	-				
Q-18	-	Q-36	-	Q-57	-	Q-75	Me				
Q-19	-	Q-37	-								

10

20

30

【0 5 0 2】

本開示は表 8 A b ~ 8 A l をも含み、その各々は、表 8 A における行の表題（すなわち、「EはE-1 aであり、および、Y²はNである」）が以下に示されているそれぞれの行の表題で置き換えられていることを除き、上記の表 8 A と同じく構成されている。例えば、表 8 A b において、行の表題は「EはE-1 gであり、および、Y²はNである」であり、QおよびR^{6c}は、上記表 8 A において定義されているとおりである。それ故、表 8 A b における最初の項目は、EがE-1 gであり、Y²がNであり、QがQ-1であり、および、R^{6c}がHである、式 1 A の化合物を特定の開示している。表 8 A c ~ 8 A l が同様に構成されている。

【0 5 0 3】

40

【表 5 1】

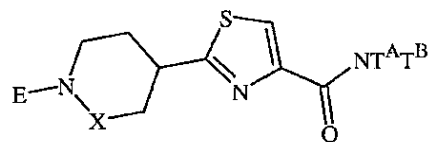
表の行の表題	E	Y ²
8Ab	E-1g	N
8Ac	E-1h	N
8Ad	E-2a	N
8Ae	E-2b	N
8Af	E-3a	N
8Ag	E-1a	CH
8Ah	E-1g	CH
8Ai	E-1h	CH
8Aj	E-2a	CH
8Ak	E-2b	CH
8Al	E-3a	CH

10

【 0 5 0 4 】

【表 5 2】

表 9



20

E は E-1a であり、および、X は O である NT ^A T ^B	E は E-1a であり、および、X は O である NT ^A T ^B
(1R)-N-メチル-1-フェニルエチルアミノ	(1R)-NH-1-フェニルエチルアミノ
(1R)-N-メチル-1-フェニルプロピルアミノ	(1R)-N-メチル-1-(2-メチルフェニル)エチルアミノ
(1R)-N-メチル-1,2,3,4-テトラヒドロ-1-ナフタレニルアミノ	(1R)-N-メチル-1-(2-フルオロフェニル)エチルアミノ
N-メチル-4-ヒドロキシ-1,2,3,4-テトラヒドロ-1-ナフタレニルアミノ	(1R)-N-メチル-1-(2-クロロフェニル)エチルアミノ
N,2-ジメチル-1,2,3,4-テトラヒドロ-1-ナフタレニルアミノ	(1R)-N-メチル-1-(2-プロモフェニル)エチルアミノ
N,2,2-トリメチル-1,2,3,4-テトラヒドロ-1-ナフタレニルアミノ	(1R)-N-メチル-1-(2-シアノフェニル)エチルアミノ
N-メチル-4-オキソ-1,2,3,4-テトラヒドロ-1-ナフタレニルアミノ	(1R)-N-メチル-1-(2-トリフルオロメチルフェニル)エチルアミノ
(1R)-N-メチル-1-インダニルアミノ	(1R)-N-メチル-1-(2-メトキシフェニル)エチルアミノ
N,2-ジメチル-1-インダニルアミノ	(1R)-N-メチル-1-(2,6-ジメチルフェニル)エチルアミノ
N,2,2-トリメチル-1-インダニルアミノ	(1R)-N-メチル-1-(2,6-ジメトキシフェニル)エチルアミノ
N-メチル-3-ヒドロキシ-1-インダニルアミノ	(1R)-N-メチル-1-(2,6-ジフルオロフェニル)エチルアミノ
N-メチル-3-オキソ-1-インダニルアミノ	(1R)-N-メチル-1-(2,6-ジクロロフェニル)エチルアミノ
(1R)-N-エチル-1-フェニルエチルアミノ	(1R)-N-メチル-1-(2,6-ジフルオロフェニル)プロピルアミノ
(1R)-N-プロピル-1-フェニルエチルアミノ	(1R)-N-メチル-1-(2,6-ジフルオロフェニル)ブチルアミノ

30

40

【 0 5 0 5 】

本開示は表 9 b ~ 9 r をも含み、その各々は、表 9 における行の表題（すなわち、「E は E-1 a であり、および、X は O である」）が以下に示されているそれぞれの表の行の表題で置き換えられていることを除き、上記の表 9 と同じく構成されている。例えば、表 9 b において、行の表題は「E は E-1 g でありおよび X は O である」であり、NT^AT^B は、上記の表 9 において定義されているとおりである。それ故、表 9 b における最初の項目は、E が E-1 g であり、X が O であり、および、NT^AT^B が (1R)-N-メチル-1-フェニルエチルアミノである、式 1 の化合物を特定的に開示している。表 9 c ~

50

9 r が同様に構成されている。

【0506】

【表53】

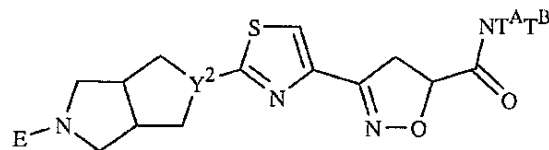
表の行の表題	E	X	表の行の表題	E	X	表の行の表題	E	X
9b	E-1g	O	9g	E-1a	NH	9m	E-1a	N-Me
9c	E-1h	O	9h	E-1g	NH	9n	E-1g	N-Me
9d	E-2a	O	9i	E-1h	NH	9o	E-1h	N-Me
9e	E-2b	O	9j	E-2a	NH	9p	E-2a	N-Me
9f	E-3a	O	9k	E-2b	NH	9q	E-2b	N-Me
			9l	E-3a	NH	9r	E-3a	N-Me

10

【0507】

【表54】

表9A



20

E は E-1a であり、および、Y² は N である。

E は E-1a であり、および、Y² は N である。

NT^AT^B

NT^AT^B

(1R)-N-メチル-1-フェニルエチルアミノ	(1R)-NH-1-フェニルエチルアミノ
(1R)-N-メチル-1-フェニルプロピルアミノ	(1R)-N-メチル-1-(2-メチルフェニル)エチルアミノ
(1R)-N-メチル-1,2,3,4-テトラヒドロ-1-ナフタレニルアミノ	(1R)-N-メチル-1-(2-フルオロフェニル)エチルアミノ
N-メチル-4-ヒドロキシ-1,2,3,4-テトラヒドロ-1-ナフタレニルアミノ	(1R)-N-メチル-1-(2-クロロフェニル)エチルアミノ
N,2-ジメチル-1,2,3,4-テトラヒドロ-1-ナフタレニルアミノ	(1R)-N-メチル-1-(2-プロモフェニル)エチルアミノ
N,2,2-トリメチル-1,2,3,4-テトラヒドロ-1-ナフタレニルアミノ	(1R)-N-メチル-1-(2-シアノフェニル)エチルアミノ
N-メチル-4-オキシ-1,2,3,4-テトラヒドロ-1-ナフタレニルアミノ	(1R)-N-メチル-1-(2-トリフルオロメチルフェニル)エチルアミノ
(1R)-N-メチル-1-インダニルアミノ	(1R)-N-メチル-1-(2-メトキシフェニル)エチルアミノ
N,2-ジメチル-1-インダニルアミノ	(1R)-N-メチル-1-(2,6-ジメチルフェニル)エチルアミノ
N,2,2-トリメチル-1-インダニルアミノ	(1R)-N-メチル-1-(2,6-ジメトキシフェニル)エチルアミノ
N-メチル-3-ヒドロキシ-1-インダニルアミノ	(1R)-N-メチル-1-(2,6-ジフルオロフェニル)エチルアミノ
N-メチル-3-オキシ-1-インダニルアミノ	(1R)-N-メチル-1-(2,6-ジクロロフェニル)エチルアミノ
(1R)-N-エチル-1-フェニルエチルアミノ	(1R)-N-メチル-1-(2,6-ジフルオロフェニル)プロピルアミノ
(1R)-N-プロピル-1-フェニルエチルアミノ	(1R)-N-メチル-1-(2,6-ジフルオロフェニル)ブチルアミノ

30

【0508】

本開示は表9Ab～9Alをも含み、その各々は、表9Aにおける行の表題（すなわち、「EはE-1aであり、および、Y²はNである」）が以下に示されているそれぞれの表の行の表題で置き換えられていることを除き、上記の表9Aと同じく構成されている。例えば、表9Abにおいて、行の表題は「EはE-1gであり、および、Y²はNである」であり、NT^AT^Bは、上記の表9Aにおいて定義されているとおりである。それ故、表9Abにおける最初の項目は、EがE-1gであり、Y²がNであり、および、NT^AT^Bが(1R)-N-メチル-1-フェニルエチルアミノである、式1Aの化合物を特定的に開示している。表9Ac～9Alが同様に構成されている。

【0509】

40

【表 5 5】

表の行の表題	E	X	表の行の表題	E	Y ²
9Ab	E-1g	N	9g	E-1a	CH
9Ac	E-1h	N	9h	E-1g	CH
9Ad	E-2a	N	9Ai	E-1h	CH
9Ae	E-2b	N	9Aj	E-2a	CH
9Af	E-3a	N	9Ak	E-2b	CH
			9Al	E-3a	CH

10

【0 5 1 0】

配合物／実用性

そのN-オキシドおよび塩を含む本発明の式1もしくは式1Aの化合物は、一般に、組成物、すなわち配合物において、殺菌・殺カビ性有効成分として、キャリアとなる界面活性剤、固体希釈剤および液体希釈剤からなる群から選択される少なくとも1種の追加の成分と共に用いられることとなる。配合物または組成物処方成分は、有効成分の物理特性、適用形態、ならびに、土壌タイプ、水分および温度などの環境要因と合致するように選択される。

【0 5 1 1】

20

有用な配合物は、液体組成物および固体組成物の両方を含む。液体組成物としては、溶液（乳化性濃縮物を含む）、懸濁液、エマルジョン（マイクロエマルジョンおよび／またはサスポエマルジョンを含む）等が挙げられ、これらは、任意により、ゲルに増粘されることが可能である。水性液体組成物の一般的なタイプは、可溶性濃縮物、懸濁濃縮物、カプセル懸濁液、濃縮エマルジョン、マイクロエマルジョンおよびサスポエマルジョンである。非水性液体組成物の一般的なタイプは、乳化性濃縮物、ミクロ乳化性濃縮物、分散性濃縮物および油分散体である。

【0 5 1 2】

固体組成物の一般的なタイプは、粉剤、粉末、顆粒、ペレット、プリル、香錠、錠剤、充填フィルム（種子粉衣を含む）等であり、これらは、水分散性（「湿潤性」）または水溶性であることが可能である。フィルム形成性溶液または流動性懸濁液から形成されたフィルムおよびコーティングが、種子処理に特に有用である。有効成分は（マイクロ）カプセル化されていることが可能であり、さらに、懸濁液または固体配合物に形成されることが可能である；あるいは、有効成分の配合物全体をカプセル化（または「オーバーコート」）することが可能である。カプセル化は、有効成分の放出を制御すること、または、遅らせることが可能である。乳化性顆粒は、乳化性濃縮物配合物の利点と乾燥粒状配合物の利点とを兼ね備えている。高強度組成物は、さらなる配合物への中間体として主に用いられる。

30

【0 5 1 3】

噴霧可能な配合物は、典型的には、吹付けの前に好適な媒体中で希釈される。このような液体および固体配合物は、通常は水である噴霧媒体中で容易に希釈されるよう配合される。噴霧量は、およそ約1〜数千リットル／ヘクタールの範囲であることが可能であるが、より典型的には、約10〜数百リットル／ヘクタールの範囲である。噴霧可能な配合物は、空中もしくは地上散布による葉の処理のために、または、植物の成長培地への適用のために好適な他の媒体または水と、タンク中で混合されることが可能である。液体および乾燥配合物は、注入灌漑システムに直接的に計量可能であり、または、植え付けの最中に畝間に計量可能である。液体および固体配合物は、植え付けの前に、全身摂取を介して成長する根および他の地下植物部位および／または群葉を保護するために、作物および他の望ましい植生の種子に種子処理として適用されることが可能である。

40

【0 5 1 4】

50

配合物は、典型的には、有効量の有効成分、希釈剤および界面活性剤を、合計が100重量パーセントとなる以下のおよその範囲内で含有するであろう。

【0515】

【表56】

	重量 %		
	活性成分	希釈剤	界面活性剤
水分散性および水溶性の顆粒、 タブレットおよび粉末	0.001-90	0-99.999	0-15
油分散液、懸濁液、乳液、溶液 (乳化可能濃縮物を含む)	1-50	40-99	0-50
ダスト	1-25	70-99	0-5
顆粒およびペレット	0.001-99	5-99.999	0-15
高強度組成物	90-99	0-10	0-2

10

【0516】

20

固体希釈剤としては、例えば、ベントナイト、モンモリロナイト、アタパルジャイトおよびカオリンなどのクレイ、石膏、セルロース、二酸化チタン、酸化亜鉛、デンプン、デキストリン、糖質（例えば、ラクトース、スクロース）、シリカ、タルク、雲母、珪藻土、尿素、炭酸カルシウム、炭酸ナトリウムおよび重炭酸ナトリウム、ならびに、硫酸ナトリウムが挙げられる。典型的な固体希釈剤が、Watkins et al., Handbook of Insecticide Dust Diluents and Carriers, 2nd Ed., Dorland Books, Caldwell, New Jersey に記載されている。

【0517】

液体希釈剤としては、例えば、水、N,N-ジメチルアルカンアミド（例えば、N,N-ジメチルホルムアミド）、リモネン、ジメチルスルホキシド、N-アルキルピロリドン（例えば、N-メチルピロリジノン）、エチレングリコール、トリエチレングリコール、プロピレングリコール、ジプロピレングリコール、ポリプロピレングリコール、プロピレンカーボネート、ブチレンカーボネート、パラフィン（例えば、白色鉱油、正パラフィン、イソパラフィン）、アルキルベンゼン、アルキルナフタレン、グリセリン、グリセロールトリアセテート、ソルビトール、芳香族炭化水素、脱芳香族化脂肪族、アルキルベンゼン、アルキルナフタレン、シクロヘキサノン、2-ヘプタノン、イソホロンおよび4-ヒドロキシ-4-メチル-2-ペンタノンなどのケトン、酢酸イソアミル、酢酸ヘキシル、酢酸ヘプチル、酢酸オクチル、酢酸ノニル、酢酸トリデシルおよび酢酸イソボルニルなどの酢酸塩、アルキル化乳酸塩エステル、二塩基性エステルおよびγ-ブチロラクトンなどの他のエステル、ならびに、メタノール、エタノール、n-プロパノール、イソプロピルアルコール、n-ブタノール、イソブチルアルコール、n-ヘキサノール、2-エチルヘキサノール、n-オクタノール、デカノール、イソデシルアルコール、イソオクタデカノール、セチルアルコール、ラウリルアルコール、トリデシルアルコール、オレイルアルコール、シクロヘキサノール、テトラヒドロフルフリルアルコール、ジアセトンアルコールおよびベンジルアルコールなどの直鎖、分岐、飽和または不飽和であることが可能であるアルコールが挙げられる。液体希釈剤としてはまた、植物種子油および果実油（例えば、オリーブ、ヒマ、亜麻仁、ゴマ、コーン（トウモロコシ）、ピーナッツ、ヒマワリ、ブドウ種子、ベニバナ、綿実、ダイズ、ナタネ、ココナツおよびパーム核の油）、動物性脂肪（例えば、牛脂、豚脂、ラード、タラ肝油、魚油）、ならびに、これらの混合物などの飽

30

40

50

和および不飽和脂肪酸のグリセロールエステル（典型的には $C_6 \sim C_{22}$ ）が挙げられる。液体希釈剤としてはまたアルキル化脂肪酸（例えば、メチル化、エチル化、ブチル化）が挙げられ、ここで、脂肪酸は、植物性および動物性グリセロールエステルの加水分解により入手され得、蒸留によって精製されることが可能である。典型的な液体希釈剤が、Marsden, Solvents Guide, 2nd Ed., Interscience, New York, 1950に記載されている。

【0518】

本発明の固体および液体組成物は、度々、1種以上の界面活性剤を含む。液体に添加される場合、界面活性剤（「表面活性薬剤」としても知られている）は、一般に、液体の表面張力を変性（最も頻繁には低減）させる。界面活性剤分子中の親水性基および親油性基の性質に応じて、界面活性剤は、湿潤剤、分散剤、乳化剤または消泡剤として有用であることが可能である。

【0519】

界面活性剤は、ノニオン性、アニオン性またはカチオン性に分類されることが可能である。本組成物に有用なノニオン性界面活性剤としては、これらに限定されないが：天然および合成アルコール（分岐または直鎖であり得る）系であり、ならびに、アルコールおよびエチレンオキシド、プロピレンオキシド、ブチレンオキシドまたはこれらの混合物から調製されるアルコールアルコキシレートなどのアルコールアルコキシレート；アミンエトキシレート、アルカノールアミドおよびエトキシ化アルカノールアミド；エトキシ化ダイズ油、ヒマシ油およびナタネ油などのアルコキシ化トリグリセリド；オクチルフェノールエトキシレート、ノニルフェノールエトキシレート、ジノニルフェノールエトキシレートおよびドデシルフェノールエトキシレートなどのアルキルフェノールアルコキシレート（フェノールおよびエチレンオキシド、プロピレンオキシド、ブチレンオキシドまたはこれらの混合物から調製されたもの）；エチレンオキシドまたはプロピレンオキシドから調製されたブロックポリマー、および、末端ブロックがプロピレンオキシドから調製された逆ブロックポリマー；エトキシ化脂肪酸；エトキシ化脂肪エステルおよび油；エトキシ化メチルエステル；エトキシ化トリステアシルフェノール（エチレンオキシド、プロピレンオキシド、ブチレンオキシドまたはこれらの混合物から調製されたものを含む）；ポリエトキシ化ソルビタン脂肪酸エステル、ポリエトキシ化ソルビトール脂肪酸エステルおよびポリエトキシ化グリセロール脂肪酸エステルなどの脂肪酸エステル、グリセロールエステル、ラノリン系誘導体、ポリエトキシレートエステル；ソルビタンエステルなどの他のソルビタン誘導体；ランダムコポリマー、ブロックコポリマー、アルキドPEG（ポリエチレングリコール）樹脂、グラフトまたはくし形ポリマーおよび星形ポリマーなどの高分子界面活性剤；ポリエチレングリコール（PEG）；ポリエチレングリコール脂肪酸エステル；シリコン系界面活性剤；ならびに、スクロースエステル、アルキルポリグリコシドおよびアルキル多糖類などの糖質誘導体が挙げられる。

【0520】

有用なアニオン性界面活性剤としては、これらに限定されないが：アルキルアリアルスルホン酸およびこれらの塩；カルボキシ化アルコールまたはアルキルフェノールエトキシレート；ジフェニルスルホネート誘導体；リグノスルホネートなどのリグニンおよびリグニン誘導体；マレイン酸またはコハク酸またはこれらの無水物；オレフィンスルホン酸塩；アルコールアルコキシレートのリン酸エステル、アルキルフェノールアルコキシレートのリン酸エステルおよびステアシルフェノールエトキシレートのリン酸エステルなどのリン酸エステル；タンパク質系界面活性剤；サルコシン誘導体；硫酸ステアシルフェノールエーテル；油および脂肪酸の硫酸塩およびスルホン酸塩；エトキシ化アルキルフェノールの硫酸塩およびスルホン酸塩；アルコールの硫酸塩；エトキシ化アルコールの硫酸塩；N, N-アルキルタウレートなどのアミンおよびアミドのスルホン酸塩；ベンゼン、クメン、トルエン、キシレン、ならびに、ドデシルおよびトリデシルベンゼンのスルホン酸塩；縮合ナフタレンのスルホン酸塩；ナフタレンおよびアルキルナフタレンのスルホン酸塩；精留された石油のスルホン酸塩；スクシナメート；ならびに、ジアルキルスルホコハク

酸塩などのスルホコハク酸塩およびそれらの誘導体が挙げられる。

【0521】

有用なカチオン性界面活性剤としては、これらに限定されないが：アミドおよびエトキシ化アミド；N-アルキルプロパンジアミン、トリプロピレントリアミンおよびジプロピレントトラアミン、ならびに、エトキシ化アミン、エトキシ化ジアミンおよびプロポキシ化アミンなどのアミン（アミンおよびエチレンオキシド、プロピレンオキシド、ブチレンオキシドまたはこれらの混合物から調製されたもの）；アミン酢酸塩およびジアミン塩などのアミン塩；第4級塩、エトキシ化第4級塩およびジ第4級塩などの第4級アンモニウム塩；ならびに、アルキルジメチルアミノオキシドおよびビスー（2-ヒドロキシエチル）-アルキルアミノオキシドなどのアミノオキシドが挙げられる。

10

【0522】

ノニオン性界面活性剤とアニオン性界面活性剤との混合物、または、ノニオン性界面活性剤とカチオン性界面活性剤との混合物もまた本組成物について有用である。ノニオン性界面活性剤、アニオン性界面活性剤およびカチオン性界面活性剤、ならびに、これらの推奨される使用が、McCutcheon's Emulsifiers and Detergents, McCutcheon's Division, The Manufacturing Confectioner Publishing Co. 発行の年刊国際および北米版；Sisely and Wood, Encyclopedia of Surface Active Agents, Chemical Publ. Co., Inc., New York, 1964；および、A. S. Davidson and B. Milwidsky, Synthetic Detergents, Seventh Edition, John Wiley and Sons, New York, 1987を含む多様な発行済みの文献中に開示されている。

20

【0523】

本発明の組成物はまた、配合助剤、および、当業者に配合助剤として公知である添加剤を含有していてもよい（これらのいく種かは、固体希釈剤、液体希釈剤または界面活性剤としても機能するとみなされ得る）。このような配合助剤および添加剤は：pH（緩衝剤）、処理中の発泡（ポリオルガノシロキサンなどの消泡剤）、有効成分の析出（懸濁剤）、粘度（チクソトロピー性増粘剤）、容器中の微生物の増殖（抗菌剤）、生成物の凍結（不凍液）、色（染料／顔料分散体）、洗濯堅牢性（塗膜形成剤または展着剤）、蒸発（蒸発抑制剤）および他の配合属性を制御し得る。塗膜形成剤としては、例えば、ポリ酢酸ビニル、ポリ酢酸ビニルコポリマー、ポリビニルピロリドン-ビニルアセテートコポリマー、ポリビニルアルコール、ポリビニルアルコールコポリマーおよびワックスが挙げられる。配合助剤および添加剤の例としては、McCutcheon's Volume 2: Functional Materials, McCutcheon's Division, The Manufacturing Confectioner Publishing Co. 発行の年刊国際および北米版；ならびに、国際公開第03/024222号パンフレットに列挙されているものが挙げられる。

30

【0524】

式1もしくは式1Aの化合物およびいずれかの他の有効成分は、典型的には、有効成分を溶剤中に溶解させることにより、または、液体もしくは乾燥希釈剤中に粉碎することにより、本組成物中に組み込まれる。乳化性濃縮物を含む溶液は、単に処方成分を混合することにより調製することが可能である。乳化性濃縮物として用いることが意図されている液体組成物の溶剤が不水和性である場合、乳化剤は、典型的には、水での希釈時に有効成分含有溶剤が乳化するよう添加される。2,000 μm 以下の粒径を有する有効成分スラリーは、媒体ミルを用いて湿潤粉碎されて、3 μm 未満の平均直径を有する粒子とされることが可能である。水性スラリーは、最終懸濁濃縮物（例えば、米国特許第3,060,084号明細書を参照のこと）とされるか、または、噴霧乾燥によりさらに処理されて水分分散性顆粒が形成されることが可能である。乾燥配合物は、通常は、2~10 μm の範囲内の平均粒径をもたらす乾式粉碎プロセスを必要とする。粉剤および粉末は、ブレンダー

40

50

工程および通常は粉碎工程により調製されることが可能である（ハンマーミルまたは流体－エネルギーミルなどで）。顆粒およびペレットは、予め形成した粒状キャリアに有効成分材を吹付けることにより、または、凝塊技術により調製されることが可能である。Brown ing, 「Agglomeration」, Chemical Engineer ing, December 4, 1967, pp147－48、Perry's Chemical Engineer's Handbook, 4th Ed., McGraw－Hill, New York, 1963, pages 8－57およびそれ以降、ならびに、国際公開第91／13546号パンフレットを参照のこと。ペレットは、米国特許第4, 172, 714号明細書に記載のとおり調製することが可能である。水分散性および水溶性顆粒は、米国特許第4, 144, 050号明細書、米国特許第3, 920, 442号明細書および独国特許第3, 246, 493号明細書に教示されているとおり調製することが可能である。錠剤は、米国特許第5, 180, 587号明細書、米国特許第5, 232, 701号明細書および米国特許第5, 208, 030号明細書に教示されているとおり調製することが可能である。フィルムは、英国特許2, 095, 558号明細書および米国特許第3, 299, 566号明細書に教示されているとおり調製することが可能である。

10

【0525】

配合技術分野に関するさらなる情報に関しては、T. S. Woods, 「The Formulator's Toolbox－Product Forms for Modern Agriculture」, Pesticide Chemistry and Bioscience, The Food－Environment Challenge, T. Brooks and T. R. Roberts, Eds., 9th International Congress on Pesticide Chemistryの予稿集, The Royal Society of Chemistry, Cambridge, 1999, pp. 120－133を参照のこと。また、米国特許第3, 235, 361号明細書、第6欄、第16行～第7欄、第19行および実施例10～41；米国特許第3, 309, 192号明細書、第5欄、第43行～第7欄、第62行、ならびに、実施例8、12、15、39、41、52、53、58、132、138～140、162～164、166、167および169～182；米国特許第2, 891, 855号明細書、第3欄、第66行～第5欄、第17行および実施例1～4；Klingman, Weed Control as a Science, John Wiley and Sons, Inc., New York, 1961, pp81－96；Hance et al., Weed Control Handbook, 8th Ed., Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1989；ならびに、Developments in formulation technology, PJB Publications, Richmond, UK, 2000を参照のこと。

20

30

【0526】

以下の実施例においては、すべてのパーセンテージは重量基準でありおよびすべての配合物は従来の方法によって調製されている。化合物番号は、索引表A～B中の化合物を指している。さらなる詳細なしで、当業者は、上記の記載を用いて、本発明を最大限利用可能であると考えられている。以下の実施例は、従って、単なる例示であって、本開示を如何様にも全く限定しないと構築されるべきである。パーセンテージは、他に示されていない限りにおいて重量基準である。

40

【0527】

【表 5 7】

実施例 A高強度濃縮物

化合物 2	98.5%
シリカエーロゲル	0.5%
合成非晶質ファインシリカ	1.0%

【0 5 2 8】

【表 5 8】

10

実施例 B水和粉末

化合物 1	65.0%
ドデシルフェノールポリエチレングリコールエーテル	2.0%
リグニンスルホン酸ナトリウム	4.0%
アルミノケイ酸ナトリウム	6.0%
モンモリロナイト(焼成)	23.0%

20

【0 5 2 9】

【表 5 9】

実施例 C顆粒

化合物 3	10.0%
アタパルジャイト顆粒(低揮発性素材、0.71/0.30mm; U.S.S.No.25-50 シーズ)	90.0%

【0 5 3 0】

【表 6 0】

30

実施例 D押出ペレット

化合物 1	25.0%
無水硫酸ナトリウム	10.0%
粗製リグニンスルホン酸カルシウム	5.0%
アルキルナフタレンスルホン酸ナトリウム	1.0%
カルシウム/マグネシウムベントナイト	59.0%

40

【0 5 3 1】

【表 6 1】

実施例 E乳化性濃縮物

化合物 2	10.0%
ポリオキシエチレンソルビトールヘキソレート	20.0%
C ₆ -C ₁₀ 脂肪酸メチルエステル	70.0%

【0 5 3 2】

10

【表 6 2】

実施例 Fマイクロエマルジョン

化合物 3	5.0%
ポリビニルピロリドン-酢酸ビニルコポリマー	30.0%
アルキルポリグリコシド	30.0%
モノオレイン酸グリセリル	15.0%
水	20.0%

20

【0 5 3 3】

【表 6 3】

実施例 Gシード処理

化合物 1	20.00%
ポリビニルピロリドン-酢酸ビニルコポリマー	5.00%
モンタン酸ワックス	5.00%
リグニンスルホン酸カルシウム	1.00%
ポリオキシエチレン/ポリオキシプロピレンブロックコポリマー	1.00%
ステアリルアルコール (POE 20)	2.00%
ポリオルガノシラン	0.20%
着色剤 赤色染料	0.05%
水	65.75%

30

【0 5 3 4】

水溶性および水分散性配合物は、典型的には、適用の前に水で希釈されて水性組成物が形成される。植物またはその一部分への直接適用のための水性組成物（例えば、噴霧タンク組成物）は、典型的には、本発明の化合物が少なくとも約 1 p p m 以上（例えば、1 p p m ~ 1 0 0 p p m）である。

40

【0 5 3 5】

本発明の化合物は、植物病害防除剤として有用である。本発明は、従って、保護されるべき植物もしくはその一部分、または、保護されるべき植物種子に、有効量の本発明の化合物または前記化合物を含有する殺菌・殺カビ組成物を適用する工程を含む、真菌性植物病原体により引き起こされた植物病害を防除する方法をさらに含む。本発明の化合物および／または組成物は、担子菌、子囊菌、卵菌および不完全菌類のクラスにおける幅広い範囲の真菌性植物病原体によって引き起こされる病害の防除をもたらす。これらは、幅広い範囲の植物病害、特に、観賞植物、芝生、野菜、圃場、穀類および果実作物の葉病原体の

50

防除に有効である。これらの病原体としては：フィトフトラ インフェスタンス (*Phytophthora infestans*)、フィトフトラ メガスペルマ (*Phytophthora megasperma*)、フィトフトラ パラシティカ (*Phytophthora parasitica*)、フィトフトラ シンナモミ (*Phytophthora cinnamomi*) およびフィトフトラ カプシシ (*Phytophthora capsici*) などの疫病菌 (*Phytophthora*) 病害、ピシウム ア
 ファニデルマツム (*Pythium aphanidermatum*) などの腐敗病菌 (*Pythium*) 病害、ならびに、プラズモパラ ビチコーラ (*Plasmopara viticola*)、ツユカビ種 (*Peronospora* spp.) (タバコベと病
 菌 (*Peronospora tabacina*) およびアブラナ科ベと病菌 (*Peronospora parasitica*) を含む)、プソイドペロノスポラ種 (*Pseudoperonospora* spp.) (プソイドペロノスポラ クベンシス (*Pseudoperonospora cubensis*) を含む) およびブレミナ ラクツカ
 エ (*Bremia lactucae*) などのツユカビ (*Peronosporaceae*) 科における病害を含む卵菌；アルテルナリア ソラニ (*Alternaria solani*) およびアルテルナリア ブラッシカエ (*Alternaria brassicae*) などのアルテルナリア属 (*Alternaria*) 病害、ガイグナルディア ビ
 ドウェル (*Guignardia bidwellii*) などのガイグナルディア属 (*Guignardia*) 病害、ベンツリア イナエクアリス (*Venturia inaequalis*) などのベンツリア属 (*Venturia*) 病害、セプトリア ノドルム (*Septoria nodorum*) およびセプトリア トリティシ (*Septoria tritici*) などのセプトリア属 (*Septoria*) 病害、エリシフェ種 (*Erysiphe* spp.) (エリシフェ グラミニス (*Erysiphe graminis*)
) およびエリシフェ ポリゴニ (*Erysiphe polygoni*) を含む)、ウン
 シヌラ ネカツル (*Uncinula necator*)、スファエロテカ フリゲナ (*Sphaerotheca fuliginea*) およびポドスファエラ ルコトリチャ (*Podosphaera leucotricha*)、プソイドセルコスポレラ ヘルポ
 トリコイド (*Pseudocercospora herpotrichoides*) などのウドンコ病病害、ボトリチス シネレア (*Botrytis cinerea*)、モニリニア フルクティコーラ (*Monilinia fructicola*) など
 のボトリチス (*Botrytis*) 病害、スクレロティニア スクレロティロルム (*Sclerotinia sclerotiorum*)、マグナポルテ グリセア (*Magnaporthe grisea*)、ホモプシス ビティコーラ (*Phomopsis viticola*) などのスクレロティニア属 (*Sclerotinia*) 病害、ヘルミン
 トスポリウム トリティシ レペンティス (*Helminthosporium tritici repentis*)、ピレノホラ テレス (*Pyrenophora teres*) などのヘルミントスポリウム属 (*Helminthosporium*) 病害、グロ
 メレラ属 (*Glomerella*) またはコレトリカム種 (*Colletotrichum* spp.) (コレトリカム オルビクラレ (*Colletotrichum orbiculare*) およびコレトリカム オルビクラレ (*Colletotrichum orbiculare*) など) およびゲーウマノミセス グラミニス (*Gaeumannomyces graminis*) などの炭疽病病害を含む子嚢菌；プッシニア種 (*Puccinia* spp.) (プッシニア レコンディタ (*Puccinia recondita*)、プッシニア ストリイフォルミス (*Puccinia striiformis*)、プッシニア ホルデイ (*Puccinia hordei*)、プッシニア
 グラミニス (*Puccinia graminis*) およびプッシニア アラキディス (*Puccinia arachidis*) など) によって引き起こされる銹病、ヘミレ
 イア バスタトリクス (*Hemileia vastatrix*) およびファコプソラ
 パチリジ (*Phakopsora pachyrhizi*) を含む担子菌；ラストロエミ
 ア フロッコサム (*Rutstroemia floccosum*) (スクレロンティナ

10

20

30

40

50

ホモエオカルパ (*Sclerontina homoeocarpa*) としても知られる) ; リゾクトニア (*Rhizoctonia* spp.) (リゾクトニア ソラニ (*Rhizoctonia solani*) など) ; フザリウム ロゼウム (*Fusarium roseum*)、フザリウム グラミネアルム (*Fusarium graminearum*) およびフザリウム オキシスポラム (*Fusarium oxysporum*) などのフザリウム属 (*Fusarium*) 病害 ; ベルティシリウム ダーリエア (*Verticillium dahliae*) ; スクレロティウム ロルフィシ (*Sclerotium rolfsii*) ; リンコスפורリウム セカリス (*Rynchosporium secalis*) ; セルコスפורジウム ペルソナツム (*Cercosporidium personatum*)、セルコスפור アラクキディコーラ (*Cercospora arachidicola*) およびセルコスפור ベティコーラ (*Cercospora beticola*) を含む他の病原体 ; ならびに、これらの病原体に密接に関連している他の属および種が挙げられる。これらの殺菌・殺カビ活性に追加して、組成物または組み合わせは、エルウィニア アミロボラ (*Erwinia amylovora*)、キサントモナス カムペストリス (*Xanthomonas campestris*)、プソイドモナス シリンガエ (*Pseudomonas syringae*) および他の関連種などの細菌に対する活性をも有している。

【0536】

植物病害防除は、通常、感染前もしくは感染後に、根、茎、群葉、果実、種子、塊茎あるいは鱗茎などの保護されるべき植物の一部、または、保護されるべき植物が生育している媒体 (土壌もしくは砂土) に、有効量の本発明の化合物を適用することにより達成される。化合物はまた、種子および種子から発育している実生を保護するために種子に適用することが可能である。化合物はまた、植物を処理するための灌漑水を介して適用されることが可能である。

【0537】

これらの化合物の適用量 (すなわち、殺菌・殺カビ的に有効な量) は、防除されるべき植物病害、保護されるべき植物種、周囲の湿気および温度などの要因によって影響されることが可能であり、実際の使用条件下で判定されるべきである。当業者は、単純な実験を通じて、所望されるレベルの植物病害防除に必要な殺菌・殺カビ的に有効な量を容易に判定することが可能である。群葉は、通常、約 1 g / ha 未満 ~ 約 5, 000 g / ha の有効成分の量で処理された場合に保護されることが可能である。種子および実生は、通常、種子が、1 キログラムの種子当たり約 0. 1 ~ 約 10 g の量で処理される場合に保護されることが可能である。

【0538】

本発明の化合物はまた、殺菌・殺カビ剤、殺虫剤、抗線虫薬、殺菌剤、殺ダニ剤、除草剤、除草剤毒性緩和剤、昆虫脱皮阻害剤および発根促進剤などの成長調整剤、不妊化剤、信号化学物質、忌避剤、誘引剤、フェロモン、摂食刺激物質、植物栄養分、他の生体活性化合物または昆虫病原性細菌、ウイルスまたは真菌を含む 1 種以上の他の生体活性化合物または薬剤と混合されて、多成分有害生物防除剤を形成し、さらに幅広い範囲の農学的保護をもたらすことが可能である。それ故、本発明はまた、式 1 もしくは式 1 A の化合物 (殺菌・殺カビ的に有効な量で) および少なくとも 1 種の追加の生物学的に有効な化合物または薬剤 (生物学的に有効な量で) を含む組成物に関し、界面活性剤、固体希釈剤または液体希釈剤の少なくとも 1 種をさらに含んでいることが可能である。他の生体活性化合物または薬剤は、界面活性剤、固体または液体希釈剤の少なくとも 1 種を含む組成物中に配合されていることが可能である。本発明の混合物について、1 種以上の他の生体活性化合物または薬剤を式 1 もしくは式 1 A の化合物と一緒に配合して予混合物を形成することが可能であり、または、1 種以上の他の生体活性化合物または薬剤を式 1 もしくは式 1 A の化合物とは別に配合し、配合物を適用の前に (例えば、噴霧タンク中で) 組み合わせること、もしくは、代わりに、連続して適用することが可能である。

【0539】

注目すべきは、式 1 もしくは式 1 A の化合物に追加して、分類 (1) メチルベンズイミダゾールカルバメート (MBC) 殺菌・殺カビ剤；(2) ジカルボキシイミド殺菌・殺カビ剤；(3) 脱メチル化抑制 (DMI) 殺菌・殺カビ剤；(4) フェニルアミド殺菌・殺カビ剤；(5) アミン／モルホリン殺菌・殺カビ剤；(6) リン脂質生合成抑制殺菌・殺カビ剤；(7) カルボキサミド殺菌・殺カビ剤；(8) ヒドロキシ (2-アミノ-) ピリミジン殺菌・殺カビ剤；(9) アニリノピリミジン殺菌・殺カビ剤；(10) N-フェニルカルバメート殺菌・殺カビ剤；(11) キノン外部抑制 (QoI) 殺菌・殺カビ剤；(12) フェニルピロール殺菌・殺カビ剤；(13) キノリン殺菌・殺カビ剤；(14) 脂質過酸化抑制殺菌・殺カビ剤；(15)メラニン生合成抑制ーレダクターゼ (MBI-R) 殺菌・殺カビ剤；(16)メラニン生合成抑制ーデヒドラターゼ (MBI-D) 殺菌・殺カビ剤；(17) ヒドロキシアニリド殺菌・殺カビ剤；(18) スクアレンーエポキシダーゼ抑制殺菌・殺カビ剤；(19) ポリオキシン殺菌・殺カビ剤；(20) フェニル尿素殺菌・殺カビ剤；(21) キノン内部抑制 (QiI) 殺菌・殺カビ剤；(22) ベンズアミド殺菌・殺カビ剤；(23) エノピラヌロン酸抗生物質殺菌・殺カビ剤；(24) ヘキソピラノシル抗生物質殺菌・殺カビ剤；(25) グルコピラノシル抗生物質：タンパク質合成殺菌・殺カビ剤；(26) グルコピラノシル抗生物質：トレハラーゼおよびイノシトール生合成殺菌・殺カビ剤；(27) シアノアセタミドオキシム殺菌・殺カビ剤；(28) カルバメート殺菌・殺カビ剤；(29) 酸化性リン酸化脱共役殺菌・殺カビ剤；(30) 有機錫殺菌・殺カビ剤；(31) カルボン酸殺菌・殺カビ剤；(32) 芳香族複素環式殺菌・殺カビ剤；(33) ホスホネート殺菌・殺カビ剤；(34) フタルアミド酸殺菌・殺カビ剤；(35) ベンゾトリアジン殺菌・殺カビ剤；(36) ベンゼンースルホンアミド殺菌・殺カビ剤；(37) ピリダジノン殺菌・殺カビ剤；(38) チオフェンーカルボキサミド殺菌・殺カビ剤；(39) ピリミジンアミド殺菌・殺カビ剤；(40) カルボン酸アミド (CAA) 殺菌・殺カビ剤；(41) テトラサイクリン抗生物質殺菌・殺カビ剤；(42) チオカルバメート殺菌・殺カビ剤；(43) ベンズアミド殺菌・殺カビ剤；(44) 宿主植物防御誘起殺菌・殺カビ剤；(45) 多部位接触作用殺菌・殺カビ剤；(46) 分類 (1) ~ (45) 以外の殺菌・殺カビ剤；および、分類 (1) ~ (46) の化合物の塩からなる群から選択される少なくとも 1 種の殺菌・殺カビ性化合物を含む組成物である。

【0540】

これらの分類の殺菌・殺カビ性化合物のさらなる記載が以下に供されている。

【0541】

(1) 「メチルベンズイミダゾールカルバメート (MBC) 殺菌・殺カビ剤」(殺菌剤耐性菌対策委員会 (FRAC) コード 1) は、微小管会合中に β -チューブリンに結合することにより有糸分裂を阻害する。微小管会合の阻害は、細胞分裂、細胞内輸送および細胞構造を攪乱することが可能である。メチルベンズイミダゾールカルバメート殺菌・殺カビ剤としては、ベンズイミダゾールおよびチオフアネート殺菌・殺カビ剤が挙げられる。ベンズイミダゾールとしては、ベノミル、カルベンダジム、フベリダゾールおよびチアベンダゾールが挙げられる。チオフアネートとしては、チオフアネートおよびチオフアネート-メチルが挙げられる。

【0542】

(2) 「ジカルボキシイミド殺菌・殺カビ剤」(殺菌剤耐性菌対策委員会 (FRAC) コード 2) は、NADHチトクロム c レダクターゼへの干渉を介して真菌における脂質過酸化を阻害すると提案されている。例としては、クロゾリネート、イプロジオン、プロシミドンおよびピンクロゾリンが挙げられる。

【0543】

(3) 「脱メチル化抑制 (DMI) 殺菌・殺カビ剤」(殺菌剤耐性菌対策委員会 (FRAC) コード 3) は、ステロール産生に関与する C14-デメチラーゼを阻害する。エルゴステロールなどのステロールは、膜構造および膜機能のために必要であり、機能性細胞壁の発達のために必須とされている。従って、これらの殺菌・殺カビ剤への露出は、感受

性の真菌の異常な成長および最終的には死滅をもたらす。DMI殺菌・殺カビ剤は数々の化学的分類に分けられる：アゾール（トリアゾールおよびイミダゾールを含む）、ピリミジン、ピペラジンおよびピリジン。トリアゾールとしては、アザコナゾール、ビテルタノール、ブロムコナゾール、シプロコナゾール、ジフェンコナゾール、ジニコナゾール（ジニコナゾール-Mを含む）、エポキシコナゾール、フェンブコナゾール、フルキンコナゾール、フルシラゾール、フルトリアホール、ヘキサコナゾール、イミベンコナゾール、イブコナゾール、メトコナゾール、ミクロブタニル、ペンコナゾール、プロピコナゾール、プロチオコナゾール、シメコナゾール、テブコナゾール、テトラコナゾール、トリアジメホン、トリアジメノール、トリチコナゾールおよびウニコナゾールが挙げられる。イミダゾールとしては、クロトリマゾール、イマザリル、オキシポコナゾール、プロクロラズ、ペフラゾエートおよびトリフルミゾールが挙げられる。ピリミジンとしては、フェナリモルおよびヌアリモルが挙げられる。ピペラジンとしてはトリホリンが挙げられる。ピリジンとしてはピリフェノックスが挙げられる。生化学的研究は、上述の殺菌・殺カビ剤のすべてが、K. H. Kuck et al., *Modern Selective Fungicides - Properties, Applications and Mechanisms of Action*, H. Lyr (Ed.), Gustav Fischer Verlag: New York, 1995, 205-258に記載されているDMI殺菌・殺カビ剤であることを示した。

10

【0544】

(4)「フェニルアミド殺菌・殺カビ剤」（殺菌剤耐性菌対策委員会（FRAC）コード4）は、卵菌類真菌におけるRNAポリメラーゼの特異的抑制剤である。これらの殺菌・殺カビ剤に露出された感受性の真菌は、ウリジンをrRNAに組み込む能力の低下を示す。感受性の真菌における成長および発生は、この分類の殺菌・殺カビ剤への露出により妨げられる。フェニルアミド殺菌・殺カビ剤としては、アシルアラニン、オキサゾリジノンおよびブチロラクトン殺菌・殺カビ剤が挙げられる。アシルアラニンとしては、ベナラキシル、ベナラキシル-M、フララキシル、メタラキシルおよびメタラキシル-M/メフェノキサムが挙げられる。オキサゾリジノンとしてはオキサジキシルが挙げられる。ブチロラクトンとしてはオフレースが挙げられる。

20

【0545】

(5)「アミン/モルホリン殺菌・殺カビ剤」（殺菌剤耐性菌対策委員会（FRAC）コード5）は、ステロール生合成経路、 $\Delta^8 \rightarrow \Delta^7$ イソメラーゼおよび Δ^{14} レダクターゼにおける2つの標的部位を阻害する。エルゴステロールなどのステロールは、膜構造および膜機能のために必要であり、機能性細胞壁の発達のために必須とされている。従って、これらの殺菌・殺カビ剤への露出は、感受性の真菌の異常な成長および最終的には死滅をもたらす。アミン/モルホリン殺菌・殺カビ剤（非DMIステロール生合成抑制剤としても知られている）としては、モルホリン、ペペリジンおよびスピロケタール-アミン殺菌・殺カビ剤が挙げられる。モルホリンとしては、アルジモルフ、ドデモルフ、フェンプロピモルフ、トリデモルフおよびトリモルフアミドが挙げられる。ペペリジンとしては、フェンプロピジンおよびピペラリンが挙げられる。スピロケタール-アミンとしてはスピロキサミンが挙げられる。

30

40

【0546】

(6)「リン脂質生合成抑制殺菌・殺カビ剤」（殺菌剤耐性菌対策委員会（FRAC）コード6）は、リン脂質生合成に作用することにより真菌の成長を阻害する。リン脂質生合成殺菌・殺カビ剤としては、ホホロチオレート（phosphorothiolate）およびジチオラン殺菌・殺カビ剤が挙げられる。ホスホロチオレートとしては、エディフェンホス、イプロベンホスおよびピラゾホスが挙げられる。ジチオランとしてはイソプロチオランが挙げられる。

【0547】

(7)「カルボキサミド殺菌・殺カビ剤」（殺菌剤耐性菌対策委員会（FRAC）コード7）は、クレブス回路（TCA回路）における重要な酵素、すなわち、琥珀酸塩脱水素

50

酵素を攪乱することにより、複合体 I I (琥珀酸塩脱水素酵素) 真菌の呼吸を阻害する。呼吸の阻害は真菌類の A T P 形成を妨げ、それ故、成長および繁殖を阻害する。カルボキサミド殺菌・殺カビ剤としては、ベンズアミド、フランカルボキサミド、オキサチンカルボキサミド、チアゾールカルボキサミド、ピラゾールカルボキサミドおよびピリジンカルボキサミドが挙げられる。ベンズアミドとしては、ベノダニル、フルトラニルおよびメプロニルが挙げられる。フランカルボキサミドとしては、フェンフラムが挙げられる。オキサチンカルボキサミドとしては、カルボキシシンおよびオキシカルボキシシンが挙げられる。チアゾールカルボキサミドとしては、チフルザミドが挙げられる。ピラゾールカルボキサミドとしては、フラメトピル、ペンチオピラド、ビキサフェン、イソピラザム、N-[2-(1S, 2R)-[1, 1'-ビスクロプロピル]-2-イルフェニル]-3-(ジフルオロメチル)-1-メチル-1H-ピラゾール-4-カルボキサミドおよびペンフルフェン(N-[2-(1, 3-ジメチル-ブチル)フェニル]-5-フルオロ-1, 3-ジメチル-1H-ピラゾール-4-カルボキサミド)が挙げられる。ピリジンカルボキサミドとしてはボスカリドが挙げられる。

【0548】

(8) 「ヒドロキシ(2-アミノ)ピリミジン殺菌・殺カビ剤」(殺菌剤耐性菌対策委員会(FRAC)コード8)は、アデノシンデアミナーゼに干渉することにより核酸合成を阻害する。例としては、ブピリメート、ジメチリモールおよびエチリモールが挙げられる。

【0549】

(9) 「アニリノピリミジン殺菌・殺カビ剤」(殺菌剤耐性菌対策委員会(FRAC)コード9)は、アミノ酸メチオニンの生合成を阻害すると共に、感染の最中に植物細胞を溶解する加水分解酵素の分泌を攪乱すると提案されている。例としては、シプロジニル、メパニピリムおよびピリメタニルが挙げられる。

【0550】

(10) 「N-フェニルカルバメート殺菌・殺カビ剤」(殺菌剤耐性菌対策委員会(FRAC)コード10)は、 β -チューブリンに結合し、微小管会合を攪乱することにより有糸分裂を阻害する。微小管会合の阻害は、細胞分裂、細胞内輸送および細胞構造を攪乱することが可能である。例としては、ジエトフェンカルブが挙げられる。

【0551】

(11) 「キノン外部抑制(QoI)殺菌・殺カビ剤」(殺菌剤耐性菌対策委員会(FRAC)コード11)は、ユビキノールオキシダーゼに作用することにより真菌における複合体 I I I ミトコンドリアの呼吸を阻害する。ユビキノールの酸化は、真菌の内部ミトコンドリア膜内に位置されているチトクロム $b c_1$ 複合体の「キノン外部」(Q_o)部位でブロックされる。ミトコンドリアの呼吸の阻害は正常な真菌の成長および発生を妨げる。キノン外部抑制殺菌・殺カビ剤(ストロビルリン殺菌・殺カビ剤としても公知である)としては、メトキシアクリレート、メトキシカルバメート、オキシミノアセテート、オキシミノアセタミド、オキサゾリジンジオン、ジヒドロジオキサジン、イミダゾリノンおよびベンジルカルバメート殺菌・殺カビ剤が挙げられる。メトキシアクリレートとしては、アゾキシストロビン、エネストロビン(SYP-Z071)、ピコキシストロビンおよびピラオキシストロビン(SYP-3343)が挙げられる。メトキシカルバメートとしては、ピラクロストロビンおよびピラメトストロビン(SYP-4155)が挙げられる。オキシミノアセテートとしては、クレソキシム-メチルおよびトリフロキシストロビンが挙げられる。オキシミノアセタミドとしては、ジモキシストロビン、メトミノストロビン、オリザストロビン、 α -[メトキシイミノ]-N-メチル-2-[[[1-[3-(トリフルオロメチル)フェニル]エトキシ]-イミノ]-メチル]-ベンゼンアセタミドおよび2-[[[3-(2, 6-ジクロロフェニル)-1-メチル-2-プロペン-1-イリデン]-アミノ]オキシ]メチル]- α -(メトキシイミノ)-N-メチルベンゼンアセタミドが挙げられる。オキサゾーリジンジオンとしてはファモキサドンが挙げられる。ジヒドロジオキサジンとしてはフルオキサストロビンが挙げられる。イミダゾリノン

としてはフェンアミドンが挙げられる。ベンジルカルバメートとしてはピリベンカルブが挙げられる。

【0552】

(12)「フェニルピロール殺菌・殺カビ剤」(殺菌剤耐性菌対策委員会(FRAC)コード12)は、真菌における浸透圧シグナル伝達系に関連するMAPタンパク質キナーゼを阻害する。フェンピクロニルおよびフルジオキシニルがこの殺菌・殺カビ剤分類の例である。

【0553】

(13)「キノリン殺菌・殺カビ剤」(殺菌剤耐性菌対策委員会(FRAC)コード13)は、初期細胞シグナリングにおけるGタンパク質に作用することによりシグナル伝達を阻害すると提案されている。これらは、ウドンコ病の原因となる真菌における発芽および/または付着器形成に干渉すると見られている。キノキシフェンおよびテブフロキンがこの殺菌・殺カビ剤の分類の例である。

10

【0554】

(14)「脂質過酸化抑制殺菌・殺カビ剤」(殺菌剤耐性菌対策委員会(FRAC)コード14)は、真菌における膜合成に作用する脂質過酸化を阻害すると提案されている。エトリジアゾールなどのこの分類の構成要素もまた、呼吸およびメラニン生合成などの他の生物学的プロセスに作用し得る。脂質過酸化殺菌・殺カビ剤としては、芳香族炭素および1, 2, 4-チアジアゾール殺菌・殺カビ剤が挙げられる。芳香族炭素殺菌・殺カビ剤としては、ビフェニル、クロロネブ、ジクロラン、キントゼン、テクナゼンおよびトルコホスーメチルが挙げられる。1, 2, 4-チアジアゾール殺菌・殺カビ剤としてはエトリジアゾールが挙げられる。

20

【0555】

(15)「メラニン生合成抑制ーレダクターゼ(MBI-R)殺菌・殺カビ剤」(殺菌剤耐性菌対策委員会(FRAC)コード16.1)は、メラニン生合成におけるナフトレン還元ステップを阻害する。メラニンは、ある種の真菌による宿主植物感染に必要とされる。メラニン生合成抑制ーレダクターゼ殺菌・殺カビ剤としては、イソベンゾフラノン、ピロロキノリノンおよびトリアゾロベンゾチアゾール殺菌・殺カビ剤が挙げられる。イソベンゾフラノンとしてはフサライドが挙げられる。ピロロキノリノンとしてはピロキロンが挙げられる。トリアゾロベンゾチアゾールとしてはトリシクラゾールが挙げられる。

30

【0556】

(16)「メラニン生合成抑制ーデヒドラターゼ(MBI-D)殺菌・殺カビ剤」(殺菌剤耐性菌対策委員会(FRAC)コード16.2)は、メラニン生合成におけるシタロンデヒドラターゼを阻害する。メラニンは、ある種の真菌による宿主植物感染に必要とされる。メラニン生合成抑制ーデヒドラターゼ殺菌・殺カビ剤としては、シクロプロパンカルボキサミド、カルボキサミドおよびプロピオンアミド殺菌・殺カビ剤が挙げられる。シクロプロパンカルボキサミドとしてはカプロパミドが挙げられる。カルボキサミドとしてはジクロシメットが挙げられる。プロピオンアミドとしてはフェノキサニルが挙げられる。

【0557】

(17)「ヒドロキシアニリド殺菌・殺カビ剤」(殺菌剤耐性菌対策委員会(FRAC)コード17)は、ステロール産生に参与するC4-デメチラーゼを阻害する。例としてはフェンヘキサミドが挙げられる。

40

【0558】

(18)「スクアレンーエポキシダーゼ抑制殺菌・殺カビ剤」(殺菌剤耐性菌対策委員会(FRAC)コード18)は、エルゴステロール生合成経路におけるスクアレンーエポキシダーゼを阻害する。エルゴステロールなどのステロールは、膜構造および膜機能のために必要であり、機能性細胞壁の発達のために必須とされている。従ってこれらの殺菌・殺カビ剤への露出は、感受性の真菌の異常な成長および最終的には死滅をもたらす。スクアレンーエポキシダーゼ抑制殺菌・殺カビ剤としては、チオカルバメートおよびアリルア

50

ミン殺菌・殺カビ剤が挙げられる。チオカルバメートとしてはピリブチカルブが挙げられる。アリアルミンとしては、ナフチフィンおよびテルビナフィンが挙げられる。

【0559】

(19)「ポリオキシシン殺菌・殺カビ剤」(殺菌剤耐性菌対策委員会(FRAC)コード19)は、キチンシンターゼを阻害する。例としては、ポリオキシシンが挙げられる。

【0560】

(20)「フェニル尿素殺菌・殺カビ剤」(殺菌剤耐性菌対策委員会(FRAC)コード20)は、細胞分裂に作用すると提案されている。例としては、ペンシクロンが挙げられる。

【0561】

(21)「キノン内部抑制(Q_iI)殺菌・殺カビ剤」(殺菌剤耐性菌対策委員会(FRAC)コード21)は、ユビキノールレダクターゼに作用することにより真菌における複合体I₁I₂I₃ミトコンドリアの呼吸を阻害する。ユビキノールの還元は、真菌の内部ミトコンドリア膜内に位置されているチトクロムbc₁複合体の「キノン内部」(Q_i)部位でブロックされる。ミトコンドリアの呼吸の阻害は正常な真菌の成長および発生を妨げる。キノン内部抑制殺菌・殺カビ剤としては、シアノイミダゾールおよびスルファモイルトリアゾール殺菌・殺カビ剤が挙げられる。シアノイミダゾールとしてはシアゾファミドが挙げられる。スルファモイルトリアゾールとしてはアミスルブロムが挙げられる。

【0562】

(22)「ベンズアミド殺菌・殺カビ剤」(殺菌剤耐性菌対策委員会(FRAC)コード22)は、β-チューブリンに結合すると共に微小管会合を攪乱することにより有糸分裂を阻害する。微小管会合の阻害は、細胞分裂、細胞内輸送および細胞構造を攪乱することが可能である。例としては、ゾキサミドが挙げられる。

【0563】

(23)「エノピラヌロン酸抗生物質殺菌・殺カビ剤」(殺菌剤耐性菌対策委員会(FRAC)コード23)は、タンパク質生合成に作用することにより真菌の成長を阻害する。例としては、ブラストサイジン-Sが挙げられる。

【0564】

(24)「ヘキソピラノシル抗生物質殺菌・殺カビ剤」(殺菌剤耐性菌対策委員会(FRAC)コード24)は、タンパク質生合成に作用することにより真菌の成長を阻害する。例としては、カスガマイシンが挙げられる。

【0565】

(25)「グルコピラノシル抗生物質：タンパク質合成殺菌・殺カビ剤」(殺菌剤耐性菌対策委員会(FRAC)コード25)は、タンパク質生合成に作用することにより真菌の成長を阻害する。例としては、ストレプトマイシンが挙げられる。

【0566】

(26)「グルコピラノシル抗生物質：トレハラーゼおよびイノシトール生合成殺菌・殺カビ剤」(殺菌剤耐性菌対策委員会(FRAC)コード26)は、イノシトール生合成経路におけるトレハラーゼを阻害する。例としては、バリダマイシンが挙げられる。

【0567】

(27)「シアノアセタミドオキシム殺菌・殺カビ剤」(殺菌剤耐性菌対策委員会(FRAC)コード27)としてはシモキサニルが挙げられる。

【0568】

(28)「カルバメート殺菌・殺カビ剤」(殺菌剤耐性菌対策委員会(FRAC)コード28)は、真菌の成長の多部位抑制剤であるとみなされる。これらは、細胞膜における脂肪酸の合成に干渉し、次いで、細胞膜浸透性を攪乱すると提案されている。プロパマカルブ、塩酸プロパマカルブ、ヨードカルブおよびプロチオカルブがこの殺菌・殺カビ剤分類の例である。

【0569】

(29)「酸化性リン酸化脱共役殺菌・殺カビ剤」(殺菌剤耐性菌対策委員会(FRAC

10

20

30

40

50

C) コード 29) は、脱共役酸化性リン酸化により真菌の呼吸を阻害する。呼吸の阻害は正常な真菌の成長および発生を妨げる。この分類は、フルアジナムなどの 2, 6-ジニトロアニリン、フェリムゾンなどのピリミドンヒドラダゾン、ならびに、ジノカップ、メプチルジノカップおよびピナパクリルなどのクロトン酸ジニトロフェニルを含む。

【0570】

(30) 「有機錫殺菌・殺カビ剤」(殺菌剤耐性菌対策委員会(FRAC)コード30)は、酸化性リン酸化経路におけるアデノシン三リン酸(ATP)シンターゼを阻害する。例としては、酢酸トリフェニルスズ、塩化トリフェニルスズおよびトリフェニルスズビドロキシドが挙げられる。

【0571】

10

(31) 「カルボン酸殺菌・殺カビ剤」(殺菌剤耐性菌対策委員会(FRAC)コード31)は、デオキシリボ核酸(DNA)トポイソメラーゼタイプII(ギラーゼ)に作用することにより真菌の成長を阻害する。例としては、オキソリン酸が挙げられる。

【0572】

(32) 「芳香族複素環式殺菌・殺カビ剤」(殺菌剤耐性菌対策委員会(FRAC)コード32)は、DNA/リボ核酸(RNA)合成に作用すると提案されている。芳香族複素環式殺菌・殺カビ剤としては、イソオキサゾールおよびイソチアゾロン殺菌・殺カビ剤が挙げられる。イソキサゾールとしてはヒメキサゾールが挙げられおよびイソチアゾロンとしてはオクチリノンが挙げられる。

【0573】

20

(33) 「ホスホネート殺菌・殺カビ剤」(殺菌剤耐性菌対策委員会(FRAC)コード33)としては、垂リン酸およびホセチルーアルミニウムを含むその種々の塩が挙げられる。

【0574】

(34) 「フタルアミド酸殺菌・殺カビ剤」(殺菌剤耐性菌対策委員会(FRAC)コード34)としてはテクロフタラムが挙げられる。

【0575】

(35) 「ベンゾトリアジン殺菌・殺カビ剤」(殺菌剤耐性菌対策委員会(FRAC)コード35)としてはトリアゾキシドが挙げられる。

【0576】

30

(36) 「ベンゼン-スルホンアミド殺菌・殺カビ剤」(殺菌剤耐性菌対策委員会(FRAC)コード36)としてはフルスルファミドが挙げられる。

【0577】

(37) 「ピリダジノン殺菌・殺カビ剤」(殺菌剤耐性菌対策委員会(FRAC)コード37)としてはジクロメジンが挙げられる。

【0578】

(38) 「チオフェン-カルボキサミド殺菌・殺カビ剤」(殺菌剤耐性菌対策委員会(FRAC)コード38)は、ATP産生に作用すると提案されている。例としては、シルチオフアムが挙げられる。

【0579】

40

(39) 「ピリミジンアミド殺菌・殺カビ剤」(殺菌剤耐性菌対策委員会(FRAC)コード39)は、リン脂質生合成に作用することにより真菌の成長を阻害し、ジフルメトリムが挙げられる。

【0580】

(40) 「カルボン酸アミド(CAA)殺菌・殺カビ剤」(殺菌剤耐性菌対策委員会(FRAC)コード40)は、リン脂質生合成および細胞壁沈着を阻害すると提案されている。これらのプロセスの阻害は、成長を妨げて、標的的真菌類に死をもたらす。カルボン酸アミド殺菌・殺カビ剤としては、桂皮酸アミド、バリンアミドカルバメートおよびマンデル酸アミド殺菌・殺カビ剤が挙げられる。桂皮酸アミドとしては、ジメトモルフおよびフルモルフが挙げられる。バリンアミドカルバメートとしては、ベンチアバリカルブ、ベン

50

チアバリカルブーイソプロピル、イプロバリカルブ、バリフェナレートおよびバリフェナルが挙げられる。マンデル酸アミドとしては、マンジプロパミド、N-〔2-〔4-〔〔3-（4-クロロフェニル）-2-プロピン-1-イル〕オキシ〕-3-メトキシフェニル〕エチル〕-3-メチル-2-〔（メチルスルホニル）アミノ〕ブタンアミドおよびN-〔2-〔4-〔〔3-（4-クロロフェニル）-2-プロピン-1-イル〕オキシ〕-3-メトキシフェニル〕エチル〕-3-メチル-2-〔（エチルスルホニル）アミノ〕ブタンアミドが挙げられる。

【0581】

（41）「テトラサイクリン抗生物質殺菌・殺カビ剤」（殺菌剤耐性菌対策委員会（FRAC）コード41）は、複合体1ニコチンアミドアデニンジヌクレオチド（NADH）オキシドレダクターゼに作用することにより真菌の成長を阻害する。例としては、オキシテトラサイクリンが挙げられる。

10

【0582】

（42）「チオカルバメート殺菌・殺カビ剤（b42）」（殺菌剤耐性菌対策委員会（FRAC）コード42）としてはメタスルホカルブが挙げられる。

【0583】

（43）「ベンズアミド殺菌・殺カビ剤」（殺菌剤耐性菌対策委員会（FRAC）コード43）は、スペクトリン様タンパク質の非局在化により真菌の成長を阻害する。例としては、フルオピコリドおよびフルオピラム（flupyram）などのアシルピコリド殺菌・殺カビ剤が挙げられる。

20

【0584】

（44）「宿主植物防御誘起殺菌・殺カビ剤」（殺菌剤耐性菌対策委員会（FRAC）コードP）は、宿主植物防御メカニズムを誘起する。宿主植物防御誘起殺菌・殺カビ剤としては、ベンゾーチアジアゾール、ベンゾイソチアゾールおよびチアジアゾール-カルボキサミド殺菌・殺カビ剤が挙げられる。ベンゾーチアジアゾールとしてはアシベンゾラー-S-メチルが挙げられる。ベンゾイソチアゾールとしてはプロベナゾールが挙げられる。チアジアゾール-カルボキサミドとしては、チアジニルおよびイソチアニルが挙げられる。

【0585】

（45）「多部位接触殺菌・殺カビ剤」は、多数の作用部位を介して真菌の成長を阻害すると共に、接触／予防活性を有する。この分類の殺菌・殺カビ剤としては：（45.1）「銅殺菌・殺カビ剤」（殺菌剤耐性菌対策委員会（FRAC）コードM1）」、（45.2）「硫黄殺菌・殺カビ剤」（殺菌剤耐性菌対策委員会（FRAC）コードM2）」、（45.3）「ジチオカルバメート殺菌・殺カビ剤」（殺菌剤耐性菌対策委員会（FRAC）コードM3）」、（45.4）「フタルイミド殺菌・殺カビ剤」（殺菌剤耐性菌対策委員会（FRAC）コードM4）」、（45.5）「クロロニトリル殺菌・殺カビ剤」（殺菌剤耐性菌対策委員会（FRAC）コードM5）」、（45.6）「スルファミド殺菌・殺カビ剤」（殺菌剤耐性菌対策委員会（FRAC）コードM6）」、（45.7）「グアニジン殺菌・殺カビ剤」（殺菌剤耐性菌対策委員会（FRAC）コードM7）」、（45.8）「トリアジン殺菌・殺カビ剤」（殺菌剤耐性菌対策委員会（FRAC）コードM8）」および（45.9）「キノン殺菌・殺カビ剤」（殺菌剤耐性菌対策委員会（FRAC）コードM9）」が挙げられる。「銅殺菌・殺カビ剤」は、銅を、典型的には銅（II）酸化状態で含有する無機化合物であり；例としては、ボルドー液（三塩基性硫酸銅）などの組成物を含む、オキシ塩化銅、硫酸銅および水酸化銅が挙げられる。「硫黄殺菌・殺カビ剤」は、硫黄原子の環または鎖を含有する無機化学物質であり；例としては、元素硫黄が挙げられる。

30

「ジチオカルバメート殺菌・殺カビ剤」は、ジチオカルバメート分子部分を含有し；例としては、マンコゼブ、メチラム、プロピネブ、フェルバム、マンネブ、チラム、ジネブおよびジラムが挙げられる。「フタルイミド殺菌・殺カビ剤」はフタルイミド分子部分を含有し；例としては、ホルベット、キャプタンおよびカプタホールが挙げられる。「クロロニトリル殺菌・殺カビ剤」は、クロロおよびシアノで置換された芳香族環を含有し；例と

40

50

してはクロロタロニルが挙げられる。「スルファミド殺菌・殺カビ剤」としては、ジクロフルアニドおよびトリフルアニドが挙げられる。「グアニジン殺菌・殺カビ剤」としては、ドジン、グアザチン、イミノクタジンアルベシレートおよびイミノクタジントリアセテートが挙げられる。「トリアジン殺菌・殺カビ剤」としてはアニラジンが挙げられる。「キノン殺菌・殺カビ剤」としてはジチアノンが挙げられる。

【0586】

(46) 「分類(1)～(45)の殺菌・殺カビ剤以外の殺菌・殺カビ剤」は、作用機構が未知であり得る一定の殺菌・殺カビ剤を含む。これらとしては：(46. 1) 「チアゾールカルボキサミド殺菌・殺カビ剤」(殺菌剤耐性菌対策委員会(FRAC)コードU5)、(46. 2) 「フェニルーアセトアミド殺菌・殺カビ剤」(殺菌剤耐性菌対策委員会(FRAC)コードU6)、(46. 3) 「キナゾリノン殺菌・殺カビ剤」(殺菌剤耐性菌対策委員会(FRAC)コードU7)、(46. 4) 「ベンゾフェノン殺菌・殺カビ剤」(殺菌剤耐性菌対策委員会(FRAC)コードU8)、および、(46. 5) 「トリアゾロピリミジン殺菌・殺カビ剤」が挙げられる。チアゾールカルボキサミドとしてはエタボキサムが挙げられる。フェニルーアセトアミドとしては、シフルフェナミドおよびN-[[[(シクロプロピルメトキシ)アミノ][6-(ジフルオロメトキシ)-2, 3-ジフルオロフェニル]-メチレン]ベンゼンアセタミドが挙げられる。キナゾリノンとしては、プロキナジドおよび2-ブトキシ-6-ヨード-3-プロピル-4H-1-ベンゾピラン-4-オンが挙げられる。ベンゾフェノンとしてはメトラフェノンが挙げられる。トリアゾロピリミジンとしてはアメトクトラジンが挙げられる。(b46) 分類としてはまた、

ベトキサジン、ネオアソジン(メタンアルソン酸第二鉄)、ピロールニトリン、キノメチオネート、N-[2-[4-[[(3-(4-クロロフェニル)-2-プロピン-1-イル]オキシ)-3-メトキシフェニル]-エチル]-3-メチル-2-[(メチルスルホニル)アミノ]-ブタンアミド、N-[2-[4-[[(3-(4-クロロフェニル)-2-プロピン-1-イル]オキシ)-3-メトキシフェニル]-エチル]-3-メチル-2-[(エチルスルホニル)-アミノ]-ブタンアミド、2-[[2-フルオロ-5-(トリフルオロメチル)-フェニル]チオ]-2-[3-(2-メトキシフェニル)-2-チアゾーリジニル-イデン]-アセトニトリル、3-[5-(4-クロロフェニル)-2, 3-ジメチル-3-イソキサゾリジニル]ピリジン、4-フルオロフェニルN-[1-[[(1-(4-シアノフェニル)エチル)スルホニル]メチル]-プロピル]カルバメート、5-クロロ-6-(2, 4, 6-トリフルオロフェニル)-7-(4-メチルペリジン-1-イル)[1, 2, 4]-トリアゾロー[1, 5-a]-ピリミジン、N-(4-クロロ-2-ニトロフェニル)-N-エチル-4-メチルベンゼンスルホンアミド、N-[[[(シクロプロピル-メトキシ)-アミノ]-[6-(ジフルオロメトキシ)-2, 3-ジフルオロフェニル]メチレン]-ベンゼンアセタミド、N'-[4-[4-クロロ-3-(トリフルオロメチル)-フェノキシ]-2, 5-ジメチルフェニル]-N-エチル-N-メチル-メタンイミド-アミド、1-[(2-プロペニルチオ)カルボニル]-2-(1-メチルエチル)-4-(2-メチルフェニル)-5-アミノ-1H-ピラゾール-3-オン、N-[9-(ジクロロメチレン)-1, 2, 3, 4-テトラヒドロ-1, 4-メタノナフタレン-5-イル]-3-(ジフルオロメチル)-1-メチル-1H-ピラゾール-4-カルボキサミド、3-(ジフルオロメチル)-N-[9-(ジフルオロメチレン)-1, 2, 3, 4-テトラヒドロ-1, 4-メタノナフタレン-5-イル]-1-メチル-1H-ピラゾール-4-カルボキサミド、N-[9-(ジブロモメチレン)-1, 2, 3, 4-テトラヒドロ-1, 4-メタノナフタレン-5-イル]-3-(ジフルオロメチル)-1-メチル-1H-ピラゾール-4-カルボキサミド、N-[9-(ジブロモメチレン)-1, 2, 3, 4-テトラヒドロ-1, 4-メタノナフタレン-5-イル]-1-メチル-3-(トリフルオロメチル)-1H-ピラゾール-4-カルボキサミド、N-[9-(ジフルオロメチレン)-1, 2, 3, 4-テトラヒドロ-1, 4-メタノナフタレン-5-イル]-1-メチル-3-(トリフルオロメチル)-1H-ピラゾール-4-カルボキサミドおよびN-[9-(ジクロロメチレ

10

20

30

40

50

ン) - 1, 2, 3, 4-テトラヒドロ-1, 4-メタノナフタレン-5-イル] - 1-メチル-3-(トリフルオロメチル)-1H-ピラゾール-4-カルボキサミドが挙げられる。

【0587】

従って、注目すべきは、式1もしくは式1Aの化合物と、上記の分類(1)～(46)からなる群から選択される少なくとも1種の殺菌・殺カビ性化合物とを含む混合物(すなわち、組成物)である。また、注目すべきは、前記混合物(殺菌・殺カビ的に有効な量で)を含み、界面活性剤、固体希釈剤および液体希釈剤からなる群から選択される少なくとも1種の追加の成分をさらに含む組成物である。また、特に注目すべきは、式1もしくは式1Aの化合物と、分類(1)～(46)に関連して上記に列挙されている特定の化合物の群から選択される少なくとも1種の殺菌・殺カビ性化合物とを含む混合物(すなわち、組成物)である。また、特に注目すべきは、前記混合物(殺菌・殺カビ的に有効な量で)を含み、界面活性剤、固体希釈剤および液体希釈剤からなる群から選択される少なくとも1種の追加の界面活性剤をさらに含む組成物である。

【0588】

本発明の化合物と共に配合可能である他の生体活性化合物または薬剤の例は以下のとおりである：アバメクチン、アセフェート、アセタミプリド、アクリナトリン、アミドフルメト(S-1955)、アベルメクチン、アザジラクチン、アジンホス-メチル、ピフェントリン、ピフェナゼート、ブプロフェジン、カルボフラン、カルタップ、クロラントラニリプロール、クロルフェナピル、クロルフルアズロン、クロルピリホス、クロルピリホス-メチル、クロマフェノジド、クロチアニジン、シアントラニリプロール(3-ブromo-1-(3-クロロ-2-ピリジニル)-N-[4-シアノ-2-メチル-6-[(メチルアミノ)カルボニル]フェニル]-1H-ピラゾール-5-カルボキサミド)、シフルメトフェン、シフルトリン、β-シフルトリン、シハロトリン、ラムダーシハロトリン、シベルメトリン、シロマジン、デルタメトリン、ジアフェンチウロン、ダイアジノン、ディルドリン、ジフルベンズロン、ジメフルトリン、ジメトエート、ジノテフラン、ジオフェノラン、エマメクチン、エンドスルファン、エスフェンバレレート、エチプロール、フェノチオカルブ、フェノキシカルブ、フェンプロパトリン、フェンバレレート、フィプロニル、フロニカミド、フルベンジアミド、フルシトリネート、エ-フルバリネート、フルフェネリム(UR-50701)、フルフェノクスロン、ホノホス、ハロフェノジド、ヘキサフルムロン、ヒドラメチルノン、イミダクロプリド、インドキサカルブ、イソフェンホス、ルフエヌロン、マラチオン、メタフルミゾン、メタアルデヒド、メタミドホス、メチダチオン、メソミル、メトブレン、メトキシクロル、メトフルトリン、ミルベマイシンオキシム、モノクロトホス、メトキシフェノジド、ニコチン、ニテンピラム、ニチアジン、ノバルロン、ノビフルムロン(XDE-007)、オキサミル、パラチオン、パラチオン-メチル、ペルメトリン、ホレート、ホサロン、ホスメット、ホスファミドン、ピリミカーブ、プロフェノホス、プロフルトリン、ピメトロジン、ピラフルプロール、プレトリン、ピリダリル、ピリフルキナゾン、ピリプロール、ピリプロキシフェン、ロテノン、リアノジン、スピネトラム、スピノサド、スピロジクロフェン、スピロメシフェン(BSN2060)、スピロテトラマト、スルプロホス、テブフェノジド、テフルベンズロン、テフルトリン、テルブホス、テトラクロルビンホス、チアクロプリド、チアメトキサム、チオジカルブ、チオスルタップ-ナトリウム、トルフェンピラド、トラロメトリン、トリアザメート、トリクロルホンおよびトリフルムロンなどの殺虫剤；ならびに、バチルスチューリングゲンシスアイザワイ(*Bacillus thuringiensis subsp. aizawai*)、バチルスチューリングゲンシスクルスターキ(*Bacillus thuringiensis subsp. kurstaki*)およびバチルスチューリングゲンシス(*Bacillus thuringiensis*)の被包性デルタエンドトキシン(例えば、Cellcap、MPV、MPV II)などの昆虫病原性細菌を含む生物剤；グリーンムスカリン菌などの昆虫病原性菌；バキュロウイルス、HzNPV、AfNPVなどの核多核体ウイルス(NPV)を含む昆虫病原性ウイルス；ならびに、CpG

10

20

30

40

50

Vなどの顆粒病ウイルス（GV）。

【0589】

本発明の化合物およびその組成物は、有害無脊椎生物に対して有害なタンパク質（バチルスチューリンゲンシス（*Bacillus thuringiensis*）デルタエンドトキシンなど）を発現するよう遺伝的に形質転換された植物に適用することが可能である。外因的に適用された本発明殺菌・殺カビ性化合物の効果は、発現された毒素タンパク質と相乗的であり得る。

【0590】

農学的保護剤（すなわち、殺虫剤、殺菌・殺カビ剤、抗線虫薬、殺ダニ剤、除草剤および生物剤）に対する一般的な文献としては、The Pesticide Manual, 13th Edition, C. D. S. Tomlin, Ed., British Crop Protection Council, Farnham, Surrey, U. K., 2003およびThe BioPesticide Manual, 2nd Edition, L. G. Copping, Ed., British Crop Protection Council, Farnham, Surrey, U. K., 2001が挙げられる。

【0591】

これらの種々の混合パートナーの1種以上が用いられる実施形態については、これらの種々の混合パートナー（合計）対式1もしくは式1Aの化合物の重量比は、典型的には、約1：3000～約3000：1である。注目すべきは、約1：300～約300：1の重量比（例えば、約1：30～約30：1の比）である。当業者は、単純な実験を通して、所望の範囲の生物活性に必要な有効成分の生物学的に有効な量を容易に判定することが可能である。これらの追加の成分を包含することで、式1もしくは式1Aの化合物単独で防除される範囲を超えて、防除される病害の範囲を拡大し得ることが明らかであろう。

【0592】

一定の事例においては、本発明の化合物と、他の生体活性（特に殺菌・殺カビ）化合物または薬剤（すなわち、有効成分）との組み合わせは、相加的效果を超える効果（すなわち、相乗的效果）をもたらすことが可能である。効果的な有害生物の防除を確保しつつ、環境中に放出される有効成分の量を低減することが常に望ましい。殺菌・殺カビ性有効成分の相乗作用が農業経済学的に十分なレベルの真菌性防除をもたらす施用量で生じる場合、このような組み合わせは、作物生産費用の削減および環境的負荷の低減に有利であることが可能である。

【0593】

注目すべきは、式1もしくは式1Aの化合物と、少なくとも1種の他の殺菌・殺カビ性有効成分との組み合わせである。特に注目すべきは、他の殺菌・殺カビ性有効成分が、式1もしくは式1Aの化合物とは異なる作用部位を有するような組み合わせである。一定の事例において、同様の防除範囲を有するが異なる作用部位を有する少なくとも1種の他の殺菌・殺カビ性有効成分との組み合わせが、耐性管理のために特に有利であろう。それ故、本発明の組成物は、同様の防除範囲を有するが異なる作用部位を有する少なくとも1種の追加の殺菌・殺カビ性有効成分を生物学的に有効な量でさらに含んでいることが可能である。

【0594】

特に注目すべきは、式1もしくは式1Aの化合物の化合物に追加して、（1）アルキレンビス（ジチオカルバメート）殺菌・殺カビ剤；（2）シモキサニル；（3）フェニルアミド殺菌・殺カビ剤；（4）ピリミジノン殺菌・殺カビ剤；（5）クロロタロニル；（6）真菌性ミトコンドリア呼吸系電子移動部位の複合体IIで作用するカルボキサミド；（7）キノキシフェン；（8）メトラフェノン；（9）シフルフェナミド；（10）シプロジニル；（11）銅化合物；（12）フタルイミド殺菌・殺カビ剤；（13）ホセチルーアルミニウム；（14）ベンズイミダゾール殺菌・殺カビ剤；（15）シアゾファミド；（16）フルアジナム；（17）イプロバリカルブ；（18）プロパモカルブ；（19）

10

20

30

40

50

バリドマイシン (validomycin) ; (20) ジクロロフェニルジカルボキシイミド殺菌・殺カビ剤 ; (21) ゴキサミド ; (22) フルオピコリド ; (23) マンジプロパミド ; (24) リン脂質生合成および細胞壁沈着に作用するカルボン酸アミド ; (25) ジメトモルフ ; (26) 非DMIステロール生合成抑制剤 ; (27) ステロール生合成におけるデメチラーゼの抑制剤 ; (28) bc₁ 複合体殺菌・殺カビ剤 ; ならびに、(1) ~ (28) の化合物の塩からなる群から選択される少なくとも1種の化合物を含む組成物である。

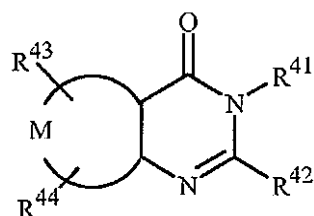
【0595】

殺菌・殺カビ性化合物の分類のさらなる説明が以下に提供されている。

【0596】

ピリミジノン殺菌・殺カビ剤 (群 (4)) は式 A1 の化合物

【化68】



A1

(式中、Mは縮合フェニル、チオフェンまたはピリジン環を形成しており ; R⁴¹はC₁ ~ C₆ アルキルであり ; R⁴²は、C₁ ~ C₆ アルキルまたはC₁ ~ C₆ アルコキシであり ; R⁴³はハロゲンであり ; および、R⁴⁴は水素またはハロゲンである) を含む。

【0597】

ピリミジノン殺菌・殺カビ剤は、国際公開第94/26722号パンフレット、ならびに、米国特許第6,066,638号明細書、米国特許第6,245,770号明細書、米国特許第6,262,058号明細書、および、米国特許第6,277,858号明細書に記載されている。注目すべきは、群 : 6-プロモ-3-プロピル-2-プロピルオキシ-4(3H)-キナゾリノン、6,8-ジヨード-3-プロピル-2-プロピルオキシ-4(3H)-キナゾリノン、6-ヨード-3-プロピル-2-プロピルオキシ-4(3H)-キナゾリノン (プロキナジド)、6-クロロ-2-プロポキシ-3-プロピルチエノー [2,3-d] ピリミジン-4(3H)-オン、6-プロモ-2-プロポキシ-3-プロピルチエノー [2,3-d] ピリミジン-4(3H)-オン、7-プロモ-2-プロポキシ-3-プロピルチエノー [3,2-d] ピリミジン-4(3H)-オン、6-プロモ-2-プロポキシ-3-プロピルピリド [2,3-d] ピリミジン-4(3H)-オン、6,7-ジプロモ-2-プロポキシ-3-プロピルチエノー [3,2-d] ピリミジン-4(3H)-オン、および3-(シクロプロピルメチル)-6-ヨード-2-(プロピルチオ)-ピリド [2,3-d] ピリミジン-4(3H)-オンから選択されるピリミジノン殺菌・殺カビ剤である。

【0598】

ステロール生合成抑制剤 (群 (27)) は、ステロール生合成経路において酵素を阻害することにより真菌を防除する。デメチラーゼ阻害殺菌・殺カビ剤は、真菌におけるステロールへの前駆体であるラノステロールまたは24-メチレンジヒドロラノステロールの14位での脱メチル化の阻害を含む、共通の作用部位を真菌性ステロール生合成経路において有する。この部位で作用する化合物は、度々、デメチラーゼ抑制剤、DMI殺菌・殺カビ剤、または、DMIと称される。デメチラーゼ酵素は、時々、生化学文献においては、チトクロムP-450(14DM)を含む他の名称で称される。デメチラーゼ酵素は、例えば、J. Biol. Chem. 1992, 267, 13175-79およびその中

10

20

30

40

50

で引用されている文献中に記載されている。DMI 殺菌・殺カビ剤は数々の化学的分類に分けられる：アゾール（トリアゾールおよびイミダゾールを含む）、ピリミジン、ピペラジンおよびピリジン。トリアゾールとしては、アザコナゾール、ブロムコナゾール、シプロコナゾール、ジフェンコナゾール、ジニコナゾール（ジニコナゾール-Mを含む）、エポキシコナゾール、エタコナゾール、フェンブコナゾール、フルキンコナゾール、フルシラゾール、フルトリアホル、ヘキサコナゾール、イミベンコナゾール、イブコナゾール、メトコナゾール、ミクロブタニル、ペンコナゾール、プロピコナゾール、プロチオコナゾール、キンコナゾール、シメコナゾール、テブコナゾール、テトラコナゾール、トリアジメホン、トリアジメノール、トリチコナゾールおよびウニコナゾールが挙げられる。イミダゾールとしては、クロトリマゾール、エコナゾール、イマザリル、イソコナゾール、ミコナゾール、オキスポコナゾール、プロクロラズおよびトリフルミゾールが挙げられる。ピリミジンとしては、フェナリモル、ヌアリモルおよびトリアリモルが挙げられる。ピペラジンとしてはトリホリンが挙げられる。ピリジンとしては、ブチオベートおよびピリフェノックスが挙げられる。生化学的研究が、上述の殺菌・殺カビ剤のすべてが、K. H. Kuck et al., *Modern Selective Fungicides - Properties, Applications and Mechanisms of Action*, H. Lyr (Ed.), Gustav Fischer Verlag: New York, 1995, 205-258 に記載の DMI 殺菌・殺カビ剤であることを示した。

10

【0599】

20

bc₁ 複合体殺菌・殺カビ剤（群28）は、ミトコンドリア呼吸鎖中のbc₁ 複合体を阻害する殺菌・殺カビ性作用機構を有する。bc₁ 複合体は、度々、生化学文献においては、電子移動鎖の複合体IIIおよびユビヒドロキノン：チトクロムcオキシドレダクターゼを含む他の名称で称される。この複合体は、酵素番号（Enzyme Commission number）EC1. 10. 2. 2によって固有に識別される。bc₁ 複合体は、例えば、J. Biol. Chem. 1989, 264, 14543-48; Methods Enzymol. 1986, 126, 253-71; および、その中で引用されている文献に記載されている。アゾキシストロビン、ジモキシストロビン、エネストロビン（SY-P-7071）、フルオキサストロビン、クレソキシムーメチル、メトミノストロビン、オリザストロビン、ピコキシストロビン、ピラクロストロビン、ピラメトストロビン、ピラオキシストロビンおよびトリフロキシストロビンなどのストロビルリン殺菌・殺カビ剤が、この作用機構を有していることで知られている（H. Sauter et al., *Angew. Chem. Int. Ed.* 1999, 38, 1328-1349）。ミトコンドリア呼吸鎖におけるbc₁ 複合体を阻害する他の殺菌・殺カビ性化合物としては、ファモキサドンおよびフェンアミドンが挙げられる。

30

【0600】

アルキレンビス（ジチオカルバメート）（群（1））としては、マンコゼブ、マンネブ、プロピネブおよびジネブなどの化合物が挙げられる。フェニルアミド（群（3））としては、メタラキシル、ベナラキシル、フララキシルおよびオキサジキシルなどの化合物が挙げられる。カルボキサミド（群（6））としては、ボスカリド、カルボキシン、フェンフラム、フルトラニル、フラメトピル、メプロニル、オキシカルボキシン、チフルザミド、ペンチオピラドおよびN-[2-(1, 3-ジメチルブチル)フェニル]-5-フルオロ-1, 3-ジメチル-1H-ピラゾール-4-カルボキサミド（国際公開第2003/010149号パンフレット）などの化合物が挙げられ、呼吸系電子移動鎖における複合体II（琥珀酸塩脱水素酵素）を攪乱することによりミトコンドリアの機能を阻害すると知られている。銅化合物（群（11））としては、ボルドー液（三塩基性硫酸銅）などの組成物を含む、オキシ塩化銅、硫酸銅および水酸化銅などの化合物が挙げられる。フタリイミド（群（12））としては、ホルベットおよびキャプタンなどの化合物が挙げられる。ベンズイミダゾール殺菌・殺カビ剤（群（14））としては、ベノミルおよびカルベンダジムが挙げられる。ジクロロフェニルジカルボキシイミド殺菌・殺カビ剤（群（20

40

50

)) としては、クロゾリネート、ジクロゾリン、イプロジオン、イソバレジオン、ミクロゾリン、プロシミドンおよびピンクロゾリンが挙げられる。

【0601】

非DMIステロール生合成抑制剤（群（26））としては、モルホリンおよびピペリジン殺菌・殺カビ剤が挙げられる。モルホリンおよびピペリジンは、ステロール生合成経路における、DMIステロール生合成（群（27））によって達成される阻害よりも後の時点のステップを阻害すると示されているステロール生合成抑制剤である。モルホリンとしては、アルジモルフ、ドデモルフ、フェンプロピモルフ、トリデモルフおよびトリモルファミドが挙げられる。ピペリジンとしてはフェンプロピジンが挙げられる。

【0602】

さらに注目すべきは、式1もしくは式1Aの化合物と、アゾキシストロビン、クレソキシムーメチル、トリフロキシストロビン、ピラクロストロビン、ピコキシストロビン、ジモキシストロビン、メトミノストロビン／フェノミノストロビン、カルベンダジム、クロロタロニル、キノキシフェン、メトラフェノン、シフルフェナミド、フェンプロピジン、フェンプロピモルフ、ブロムコナゾール、シプロコナゾール、ジフェンコナゾール、エポキシコナゾール、フェンブコナゾール、フルシラゾール、ヘキサコナゾール、イプロコナゾール、メトコナゾール、ペンコナゾール、プロピコナゾール、プロキナジド、プロチオコナゾール、テブコナゾール、トリチコナゾール、ファモキサドン、プロクロラズ、ペンチオピラドおよびボスカリド（ニコビフェン）との組み合わせである。

【0603】

真菌性植物病原体によって引き起こされる植物病害のより良好な防除（例えば、低い使用量もしくはより広い範囲の防除される植物病原体）、または、耐性管理のために、本発明の化合物と、群アゾキシストロビン、クレソキシムーメチル、トリフロキシストロビン、ピラクロストロビン、ピコキシストロビン、ジモキシストロビン、メトミノストロビン／フェノミノストロビン、キノキシフェン、メトラフェノン、シフルフェナミド、フェンプロピジン、フェンプロピモルフ、シプロコナゾール、エポキシコナゾール、フルシラゾール、メトコナゾール、プロピコナゾール、プロキナジド、プロチオコナゾール、テブコナゾール、トリチコナゾール、ファモキサドンおよびペンチオピラドから選択される殺菌・殺カビ剤との混合物が好ましい。

【0604】

特に好ましい混合物（化合物番号は、索引表A～B中の化合物を指す）は、以下の群から選択される：化合物1、化合物2または化合物3とアゾキシストロビンとの組み合わせ、化合物1、化合物2または化合物3とクレソキシムーメチルとの組み合わせ、化合物1、化合物2または化合物3とトリフロキシストロビンとの組み合わせ、化合物1、化合物2または化合物3とピラクロストロビンとの組み合わせ、化合物1、化合物2または化合物3とピコキシストロビンとの組み合わせ、化合物1、化合物2または化合物3とジモキシストロビンとの組み合わせ、化合物1、化合物2または化合物3とメトミノストロビン／フェノミノストロビンとの組み合わせ、化合物1、化合物2または化合物3とキノキシフェンとの組み合わせ、化合物1、化合物2または化合物3とメトラフェノンとの組み合わせ、化合物1、化合物2または化合物3とシフルフェナミドとの組み合わせ、化合物1、化合物2または化合物3とフェンプロピジンとの組み合わせ、化合物1、化合物2または化合物3とフェンプロピモルフとの組み合わせ、化合物1、化合物2または化合物3とシプロコナゾールとの組み合わせ、化合物1、化合物2または化合物3とエポキシコナゾールとの組み合わせ、化合物1、化合物2または化合物3とフルシラゾールとの組み合わせ、化合物1、化合物2または化合物3とメトコナゾールとの組み合わせ、化合物1、化合物2または化合物3とプロピコナゾールとの組み合わせ、化合物1、化合物2または化合物3とプロチオコナゾールとの組み合わせ、化合物1、化合物2または化合物3とテブコナゾールとの組み合わせ、化合物1、化合物2または化合物3とトリチコナゾールとの組み合わせ、化合物1、化合物2または化合物3とファモキサドンとの組み合わせ、および、化合物1、化合物2または化合物3とペンチオピラドとの組み合わせ。

【0605】

有効な防除のために必要とされる適用量（すなわち、「生物学的に有効な量」）は、防除される植物病害、場所、時季、ホスト作物、周囲の湿気、温度等などの要因に応じることとなる。当業者は、所望される植物病害の防除レベルに対して必要とされる生物学的に有効な量を単純な実験を通じて容易に判定することが可能である。以下のテストA～Cは、特定の病原体に対する本発明の化合物の防除効力を実証している。しかしながら、化合物によってもたらされる病原体防除保護は、これらのテスト（すなわち、以下のテストA～C）に限定されない。化合物の説明は以下の索引表A～Bに提供されている。以下の略語が索引表において用いられている：Meはメチルであり、Phはフェニルであり、MeOはメトキシであり、CNはシアノであり、NO₂はニトロであり、および、Acはアセチルを意味する。「Cmpd. No.」という略記は化合物番号を意味し、および、「Ex.」は「実施例」を表すと共に、どの実施例において化合物が調製されているかを示す番号が続いている。カラムの表題「AP+ (M+1)」下に報告されている数値は、H⁺（1の分子量）の分子への付加により形成し、大気圧化学イオン化（AP⁺）を用いる質量分光測定により観察した最も高い同位体存在度を示す親イオン（M+1）の分子量である。原子量が1もしくはそれ以上高い存在度が小さい同位体（例えば、³⁷C1、⁸¹Br）を含有する分子イオンの存在は報告されていない。

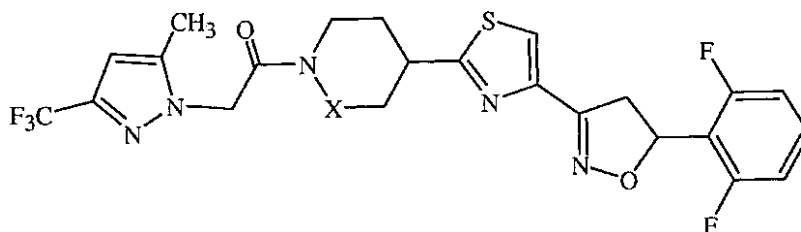
10

【0606】

【表64】

索引表 A

20



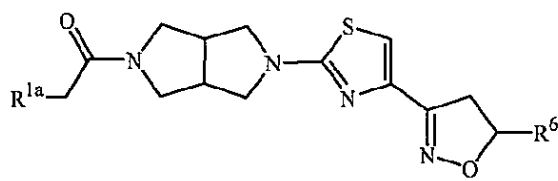
Cmpd. No.	X	AP+ (M+1)	¹ H NMR
1 (Ex. 1)	NH	541	*
2 (Ex. 2)	N-Ac	583	*
3 (Ex. 3)	O	542	*

30

* ¹H NMR データについては索引表 C を参照のこと

【0607】

【表 6 5】



Cmpd. No.	R1a	R6	MS (M+1)	¹ H NMR
4	2, 5-ジ-Me-Ph	2, 6-ジ-F-Ph	523	*
5	2, 5-ジ-Me-Ph	Ph	487	*
6 (Ex. 4)	5-Me-3-CF ₃ -ピラゾール-1-イル	2, 6-ジ-F-Ph	567	*
7	5-Me-3-CF ₃ -1H-ピラゾール-1-イル,	Ph	531	*

* ¹H NMR データについては索引表 C を参照のこと

【 0 6 0 8 】

【表 6 6】

索引表 C

Compd. No.	¹ H NMR データ(他に記載のない限り CDCl ₃ 溶液) ^a
1	δ (-40 °C, CD ₃ CN): 1.95-2.10 (m, 1H), 2.20-2.35 (m, 4H), 2.95-3.15 (m, 2H), 3.40-3.55 (m, 2H), 3.55-3.67 (m, 1H), 3.80-3.95 (m, 1H), 4.50-4.60 (m, 1H), 5.25-5.45 (m, 2H), 6.10-6.20 (m, 1H), 6.50 (s, 1H), 7.05-7.20 (m, 2H), 7.43-7.55 (m, 1H), 7.92 (s, 1H)
2	δ 2.00-2.38 (m, 8H), 2.85-3.90 (m, 5H), 4.30-4.80 (m, 2H), 4.90-5.10 (m, 2H), 6.02-6.15 (m, 1H), 6.30-6.40 (m, 1H), 6.85-6.98 (m, 2H), 7.25-7.38 (m, 1H), 7.75 (s, 1H)
3	δ 2.05-2.20 (m, 1H), 2.20-2.35 (m, 4H), 3.40-3.55 (m, 1H), 3.55-3.70 (m, 2H), 3.75-3.88 (m, 1H), 4.08-4.20 (m, 1H), 4.35-4.45 (m, 1H), 4.45-4.55 (m, 1H), 5.08 (s, 2H), 6.02-6.12 (m, 1H), 6.30 (s, 1H), 6.85-6.98 (m, 2H), 7.25-7.38 (m, 1H), 7.72 (s, 1H)
4	δ 7.26-7.29 (m, 1H), 6.68-6.98 (m, 6H), 6.0-6.06 (m, 1H), 3.53-3.83 (m, 5H), 3.47 (s, 2H), 3.39-3.44 (m, 5H), 3.08-3.11 (m, 2H), 2.27 (s, 3H), 2.23 (s, 3H)
5	δ 7.31-7.40 (m, 5H), 7.05-7.06 (d, 1H), 6.93-6.98 (m, 2H), 6.81 (s, 1H), 5.68-5.72 (m, 1H), 3.71-3.83 (m, 5H), 3.58 (s, 2H), 3.28-3.58 (m, 5H), 3.05-3.15 (m, 2H), 2.27 (s, 3H), 2.23 (s, 3H)
6	δ 7.27-7.29 (m, 1H), 6.86-6.92 (m, 3H), 6.32 (s, 1H), 6.0-6.03 (m, 1H), 4.81-4.93 (q, 2H), 3.5-3.88 (m, 10H), 3.1-3.25 (m, 2H), 2.32 (s, 3H)
7	δ 7.31-7.40 (m, 5H), 6.82 (s, 1H), 6.32 (s, 1H), 5.68-5.73 (m, 1H), 4.85-4.89 (q, 2H), 3.74-3.88 (m, 5H), 3.1-3.53 (m, 7H), 2.32 (s, 3H)

^a ¹H NMR データはテトラメチルシランの低磁場側に ppm である。カップリングは、(s)-一重項、(d)-二重項、(q)-四重項および(m)-多重項により示されている。

【 0 6 0 9 】

本発明の生物学実施例

テスト A ~ C 用のテスト懸濁液を調製するための一般的なプロトコル： 先ず、テスト化合物を最終体積の 3 % に等しい量でアセトン中に溶解させ、次いで、250 ppm の界面活性剤 Trem (登録商標) 014 (多価アルコールエステル) を含有する精製水 (体積基準で 50 / 50 混合物) およびアセトンの中に所望の濃度 (ppm) で懸濁させた。次いで、得られたテスト懸濁液をテスト A ~ C において用いた。テスト植物への 200 ppm テスト懸濁液の流出点までの吹付けは 800 g / ha の割合に等しかった。他に示されていない限りにおいて、格付けの値は、200 ppm テスト懸濁液を用いたことを示す (

10

20

30

40

50

格付けの値の隣のアスタリスク「*」は、40 ppmテスト懸濁液を用いたことを示す。
)。

【0610】

テストA

ブドウ苗木に、プラズモパラ ビチコーラ (*Plasmopara viticola*) (ブドウべと病の病因) の孢子懸濁液を播種し、飽和雰囲気中に20℃で24時間インキュベートした。短時間乾かした後、テスト懸濁液をブドウ苗木に流出点まで噴霧し、次いで、20℃のグロースチャンバに5日間移し、次いで、20℃の飽和雰囲気中に24時間戻した。取り出した後、視覚的な病害の評価を行った。

【0611】

テストB

テスト懸濁液をトマト苗木に流出点まで噴霧した。次の日に、フィトフトラ インフェスタンス (*Phytophthora infestans*) (トマト疫病の病因) の孢子懸濁液を苗木に播種し、飽和雰囲気中に20℃で24時間インキュベートし、次いで、20℃のグロースチャンバに5日間移し、その後、視覚的な病害の評価を行った。

【0612】

テストC

トマト苗木に、フィトフトラ インフェスタンス (*Phytophthora infestans*) (トマト疫病の病因) の孢子懸濁液を播種し、飽和雰囲気中に20℃で17時間インキュベートした。短時間乾かした後、テスト懸濁液をトマト苗木に流出点まで噴霧し、次いで、20℃のグロースチャンバに4日間移し、その後、視覚的な病害の評価を行った。

【0613】

テストA～Cに追加して、処理の24時間後にボトリチス シネレア (*Botrytis cinerea*) またはアルテルナリア ソラニ (*Alternaria solani*) を播種した個別の2組のトマト植物、および、うどん粉病菌 (*Blumeria graminis* f. sp. *tritici*) を播種したコムギ植物にも化合物を噴霧した。テスト化合物は、テストした施用量でのテスト条件下では、これらの追加の病原体に対する活性を示さなかった。

【0614】

テストA～Cに対する結果が表Aに記載されている。この表において、100の格付けは100%の病害防除を示し、0の格付けは病害防除がない(対照と相対的に)ことを示す。格付けの値の隣のアスタリスク「*」は、40 ppmテスト懸濁液を用いたことを示す。

【0615】

【表67】

表A

Cmpd. No	テストA	テストB	テストC
1	99*	100*	99*
2	89*	100*	98*
3	100*	100*	99*
4	99*	100*	99*
5	81*	92*	64*
6	99*	100*	99*
7	57*	100*	99*

フロントページの続き

(51)Int.Cl. F I
A 0 1 N 43/90 (2006.01) A 0 1 N 43/90 1 0 3
A 0 1 P 3/00 (2006.01) A 0 1 P 3/00

(72)発明者 ロバート・ジェイムズ・パステリス
アメリカ合衆国デラウェア州19713. ニューアーク. コロラドドライブ842
(72)発明者 トーマス・マーティン・スティーブンソン
アメリカ合衆国デラウェア州19702. ニューアーク. イロコイコート103

審査官 伊藤 幸司

(56)参考文献 国際公開第2008/091594 (WO, A1)
欧州特許出願公開第02009006 (EP, A1)
米国特許出願公開第2007/0004741 (US, A1)
国際公開第2007/064553 (WO, A1)
欧州特許出願公開第01790640 (EP, A1)
欧州特許出願公開第00469685 (EP, A1)
米国特許第04151279 (US, A)
国際公開第2009/094445 (WO, A1)
国際公開第2009/094407 (WO, A1)
国際公開第2008/013622 (WO, A1)

(58)調査した分野(Int.Cl., DB名)
C 0 7 D
A 0 1 N
CAPLUS/REGISTRY (STN)