

(19) 日本国特許庁 (JP)

(12) 特 許 公 報 (B2)

(11) 特許番号

特許第6568928号
(P6568928)

(45) 発行日 令和1年8月28日 (2019.8.28)

(24) 登録日 令和1年8月9日 (2019.8.9)

(51) Int. Cl.

F 1

C O 7 D 249/08 (2006.01)

C O 7 D 249/08 5 3 5

C O 7 D 401/12 (2006.01)

C O 7 D 401/12 C S P

請求項の数 3 (全 157 頁)

(21) 出願番号 特願2017-501686 (P2017-501686)
 (86) (22) 出願日 平成27年7月28日 (2015.7.28)
 (65) 公表番号 特表2017-524691 (P2017-524691A)
 (43) 公表日 平成29年8月31日 (2017.8.31)
 (86) 国際出願番号 PCT/US2015/042389
 (87) 国際公開番号 W02016/018872
 (87) 国際公開日 平成28年2月4日 (2016.2.4)
 審査請求日 平成30年7月4日 (2018.7.4)
 (31) 優先権主張番号 62/029,763
 (32) 優先日 平成26年7月28日 (2014.7.28)
 (33) 優先権主張国・地域又は機関
 米国 (US)

(73) 特許権者 501035309
 ダウ アグロサイエンシズ エルエルシ
 ー
 アメリカ合衆国 インディアナ州 462
 68, インディアナポリス, ジオンス
 ヴィレ ロード, 9330
 (74) 代理人 110000741
 特許業務法人小田島特許事務所
 (72) 発明者 クルーズ, デイリー・デイ
 アメリカ合衆国インディアナ州46268
 インディアナポリス・ザイオンズビルロー
 ド9330

最終頁に続く

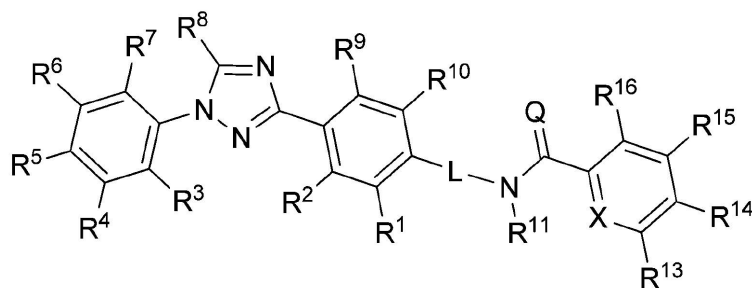
(54) 【発明の名称】 所定の種の殺虫農薬的利用性を有する分子、ならびにそれに関する中間体、組成物および方法

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項 1】

以下の式 1 で表される分子。

【化 1】



式 1

式中：

(A) R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^9 、 R^{10} 、 R^{14} 、 R^{15} および R^{16} は、H、F、Cl、Br、I、 C_1-C_4 ハロアルキル、 C_1-C_4 アルコキシおよび C_1-C_4 ハロアルコキシよりなる群からそれぞれ独立に選択され、

(B) R^8 はHであり、

- (C) Lは、単結合またはC₁－C₄アルキルであり、
 (D) R¹¹は、H、C₁－C₄アルキル、C₁－C₄アルキルC₃－C₆シクロアルキルおよび
C(O)C₁－C₄アルキルから選択され、
 (E) XはCR¹²であり、かつ、R¹²は、HおよびC₁－C₄アルキルよりなる群から選択
され、
 (F) R¹³はフェニルまたは置換フェニルであり、
 ここで前記置換フェニルは、H、F、Cl、Br、I、C₁－C₄アルキル、C₁－C₄アル
コキシ、C(O)C₁－C₄アルキルおよびN(C₁－C₄アルキル)(C₁－C₄アルキル)
よりなる群から独立に選択される1個若しくはそれ以上の置換基で置換されており、かつ
、

10

(G) QはOおよびSから選択される。

【請求項2】

請求項1に記載の分子であって、

- (A) R¹、R²、R³、R⁴、R⁵、R⁶、R⁷、R⁹、R¹⁰、R¹⁴、R¹⁵およびR¹⁶が、H
 、F、Cl、Br、I、C₁－C₄ハロアルキル、C₁－C₄アルコキシおよびC₁－C₄ハロ
アルコキシよりなる群からそれぞれ独立に選択され、
 (B) R⁸がHであり、
 (C) Lが単結合またはC₁－C₄アルキルであり、
 (D) R¹¹が、H、C₁－C₄アルキルおよびC(O)C₁－C₄アルキルよりなる群から独
立に選択され、
 (E) XがCR¹²であり、かつ、R¹²はHであり、
 (F) R¹³がフェニルまたは置換フェニルであり、
 ここで前記置換フェニルは、H、F、Cl、Br、I、C₁－C₄アルキル、C₁－C₄アル
コキシ、C(O)C₁－C₄アルキルおよびN(C₁－C₄アルキル)(C₁－C₄アルキル)
よりなる群から独立に選択される1個若しくはそれ以上の置換基で置換されており、かつ
、
 (G) QがOおよびSから選択される、
分子。

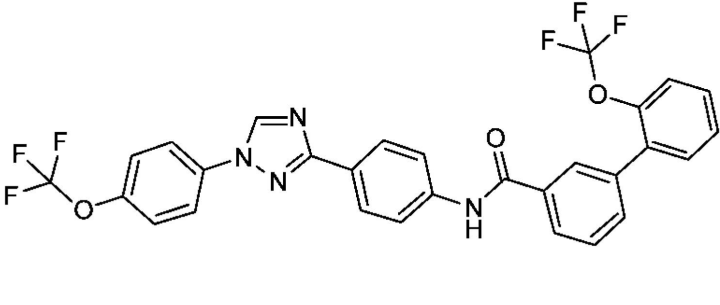
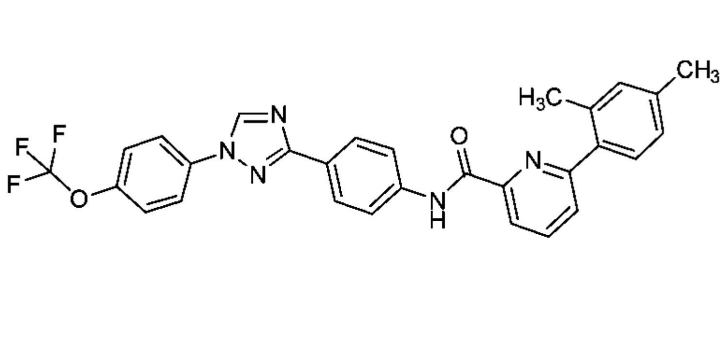
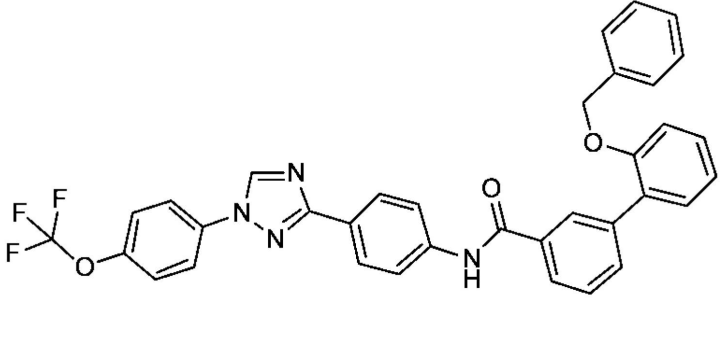
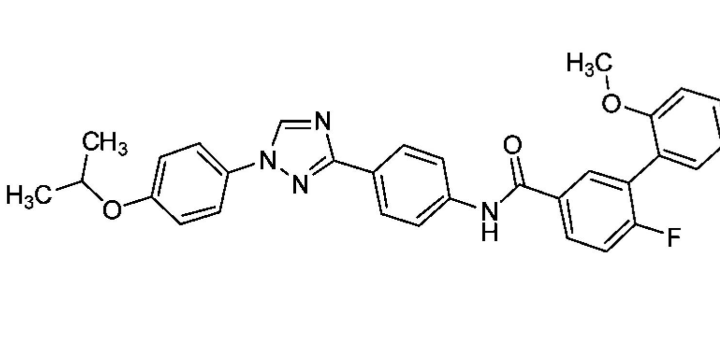
20

【請求項3】

以下の化学構造式で表される分子から選択される請求項1に記載の分子。

30

【表 1】

番号	構造
F1	
F2	
F3	
F4	

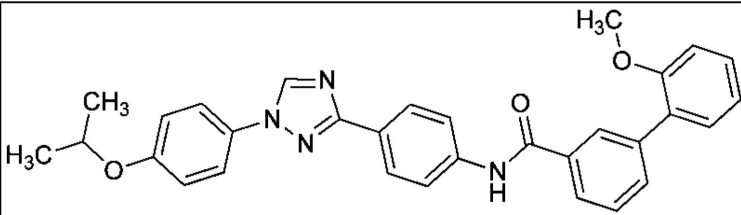
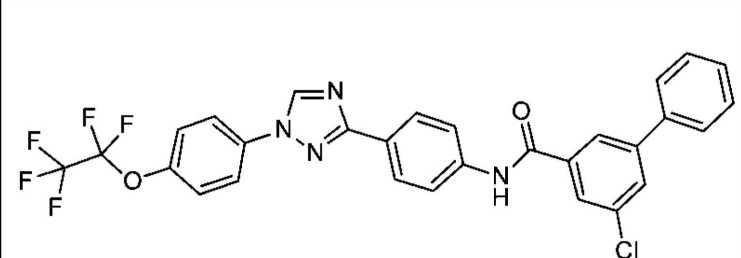
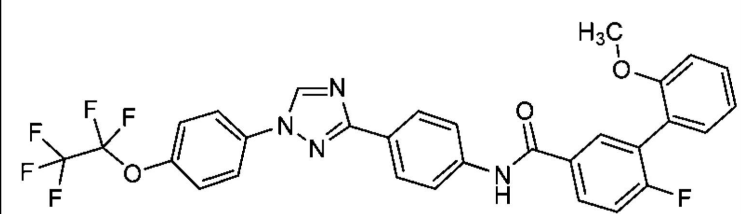
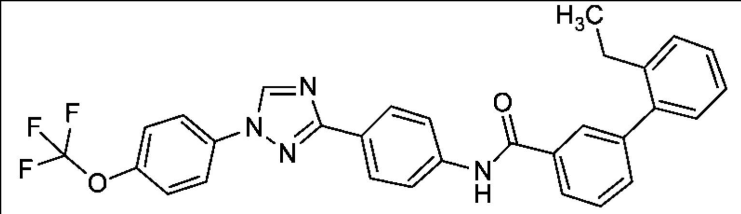
10

20

30

40

【表 2】

F5	
F6	
F7	
F8	

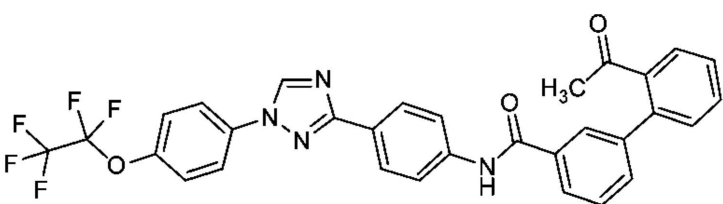
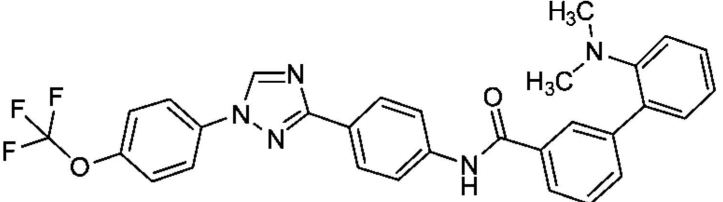
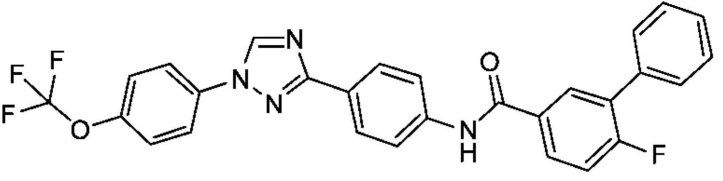
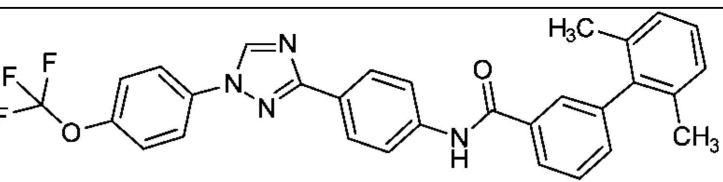
10

20

30

40

【表 3】

F9	 <chem>COc1ccccc1C(=O)Nc2ccc(cc2)c3nn(Cc4ccc(cc4)Oc5c(F)(F)F)nc3</chem>
F10	 <chem>CCN(C)c1ccccc1C(=O)Nc2ccc(cc2)c3nn(Cc4ccc(cc4)Oc5c(F)(F)F)nc3</chem>
F11	 <chem>Fc1ccc(cc1C(=O)Nc2ccc(cc2)c3nn(Cc4ccc(cc4)Oc5c(F)(F)F)nc3)c2</chem>
F12	 <chem>CC1=CC=C(C=C1C(=O)Nc2ccc(cc2)c3nn(Cc4ccc(cc4)Oc5c(F)(F)F)nc3)C=C1</chem>

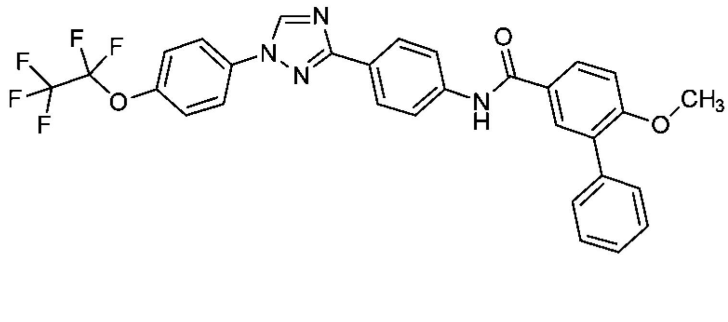
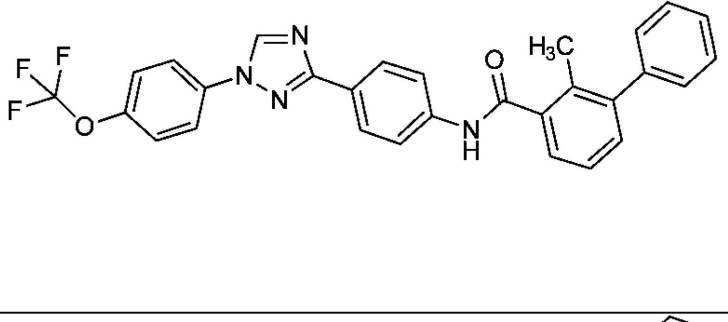
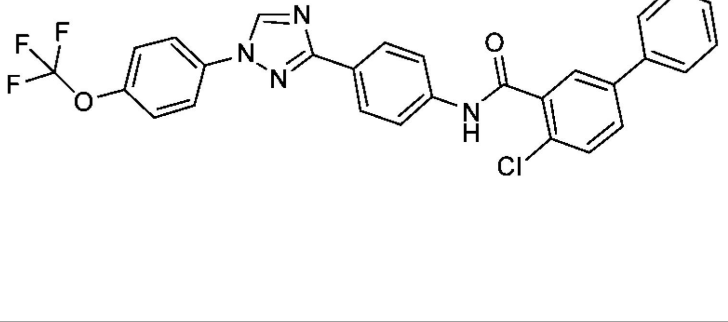
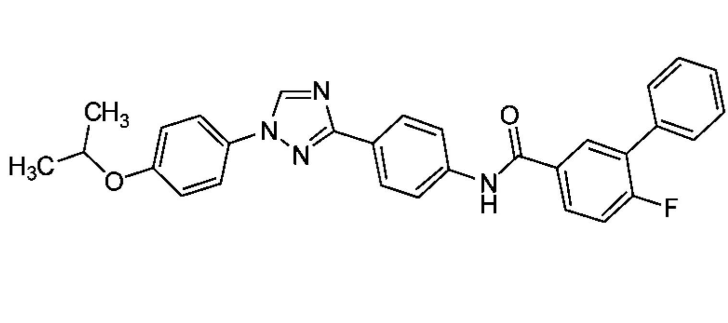
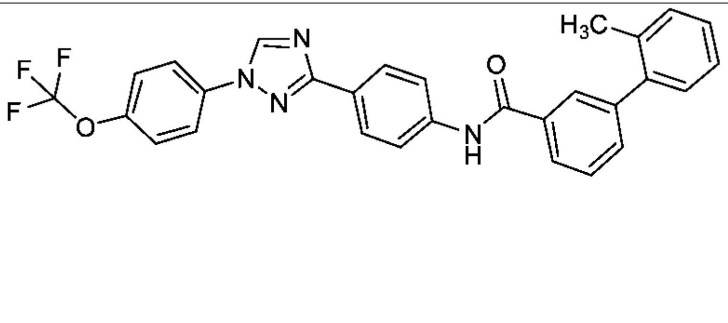
10

20

30

40

【表 4】

F13	
F14	
F15	
F16	
F17	

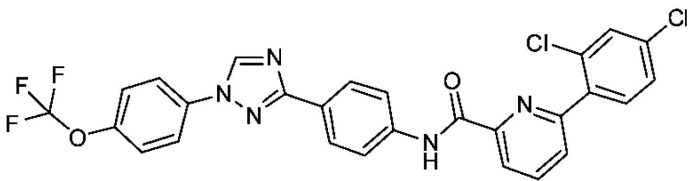
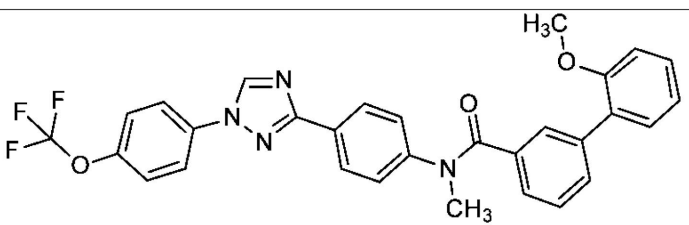
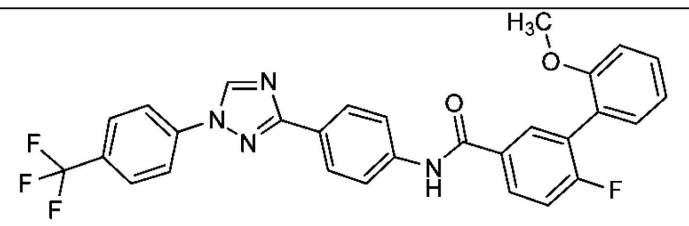
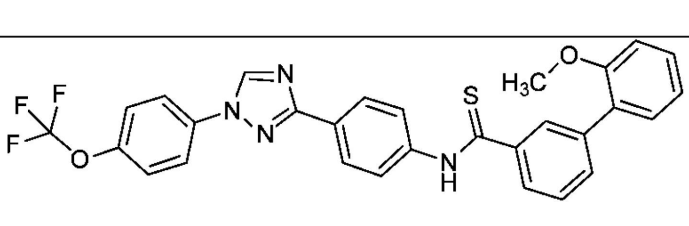
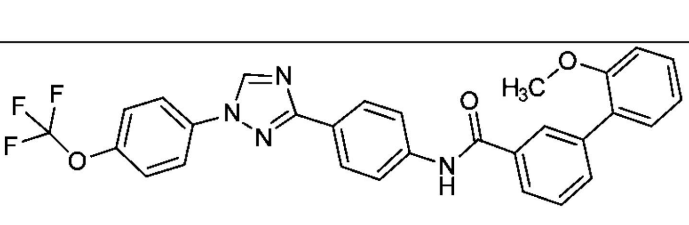
10

20

30

40

【表 5】

F18	
F19	
F20	
F21	
F22	

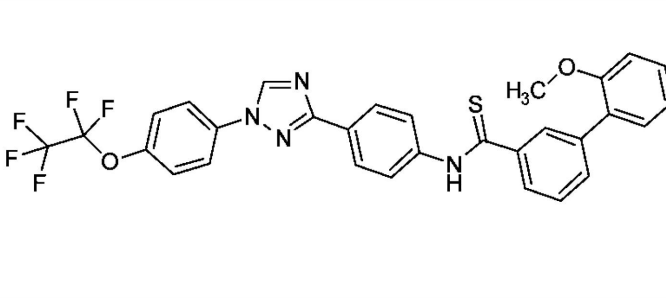
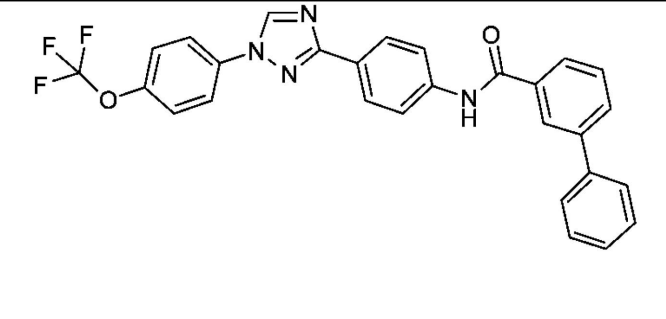
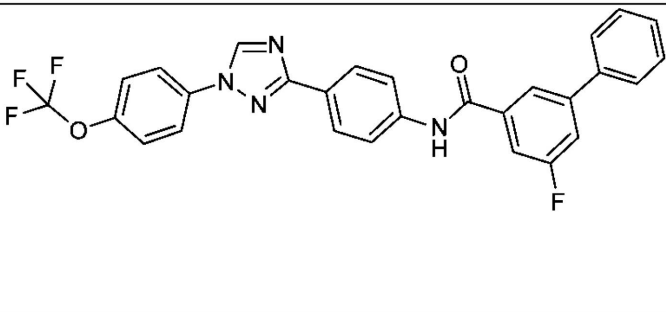
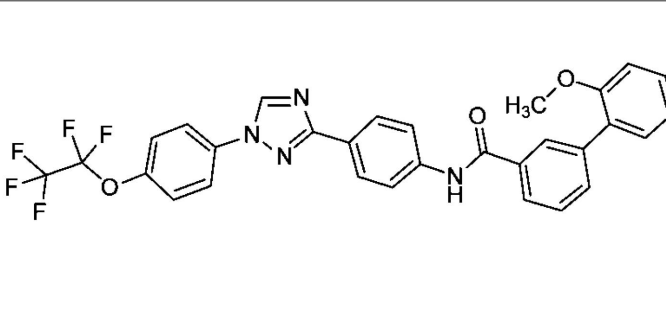
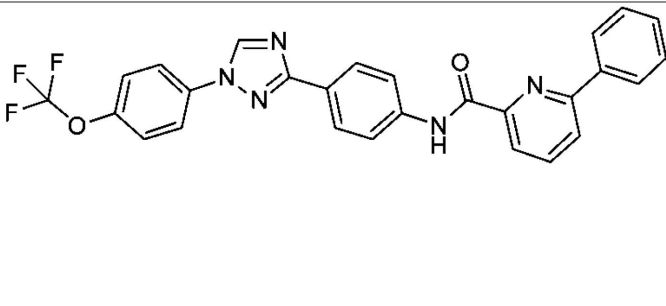
10

20

30

40

【表 6】

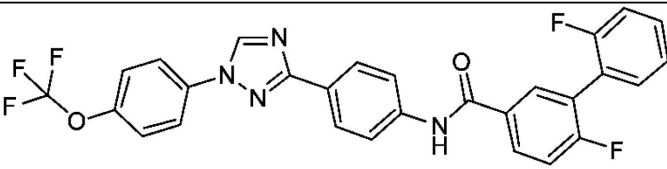
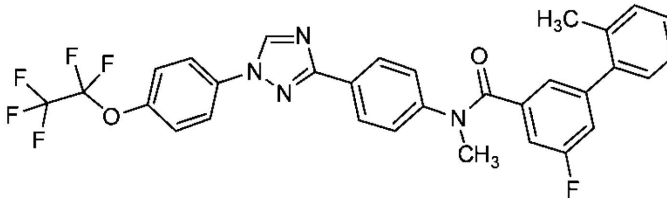
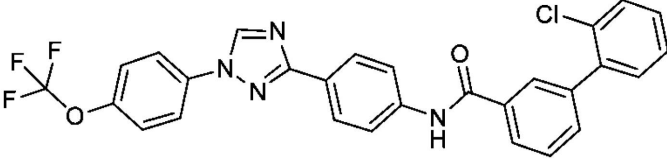
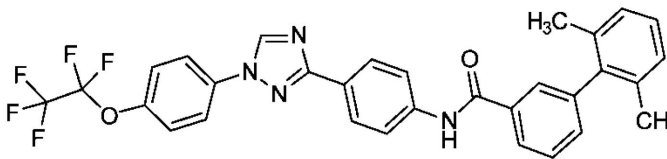
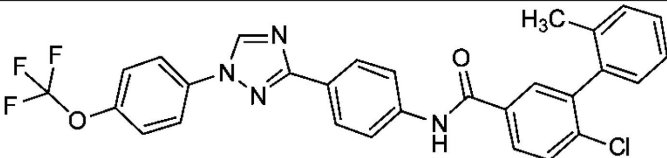
F23	
F24	
F25	
F26	
F27	

20

30

40

【表 7】

F28	
F29	
F30	
F31	
F32	

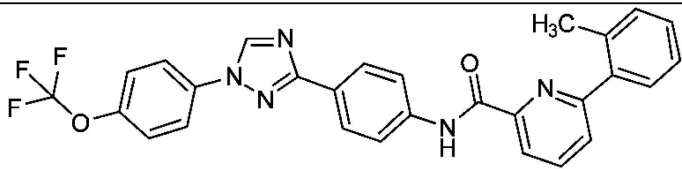
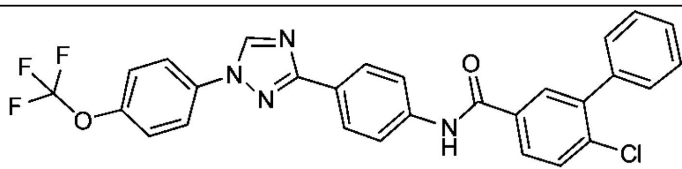
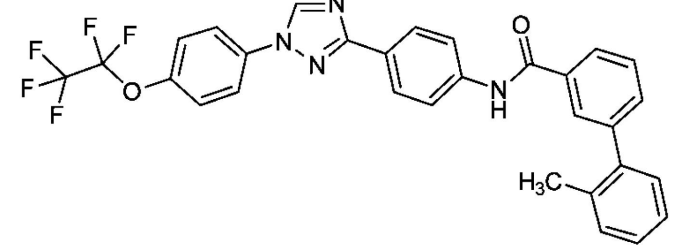
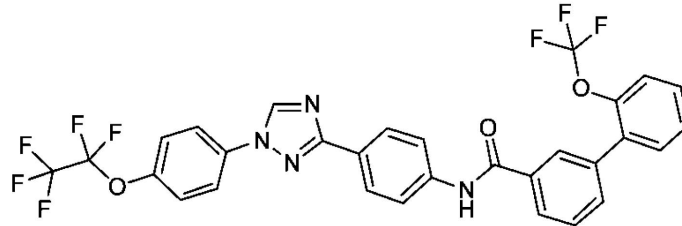
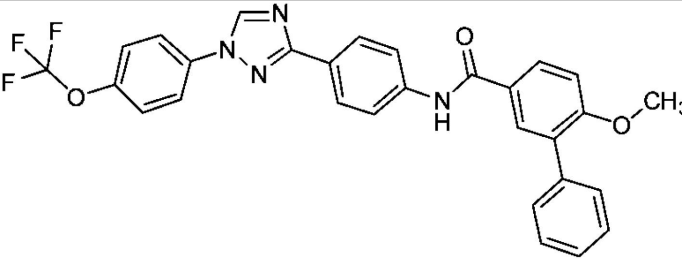
10

20

30

40

【表 8】

F33	
F34	
F35	
F36	
F37	

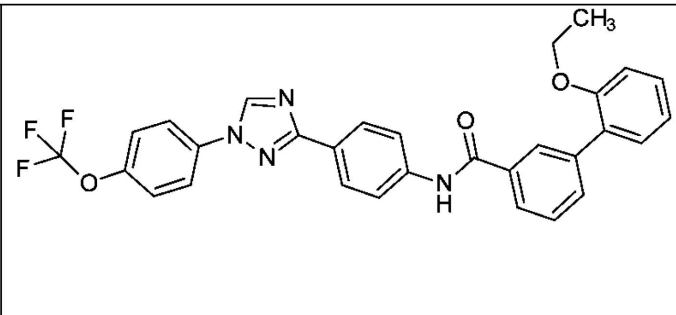
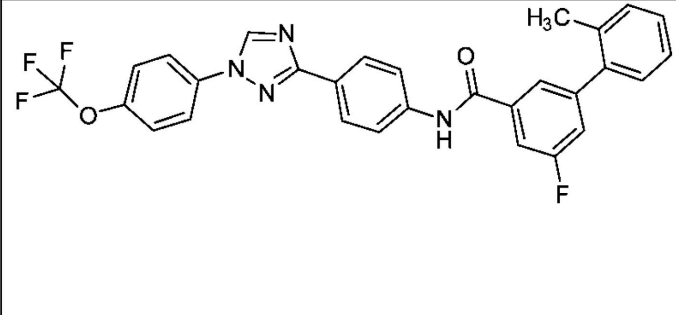
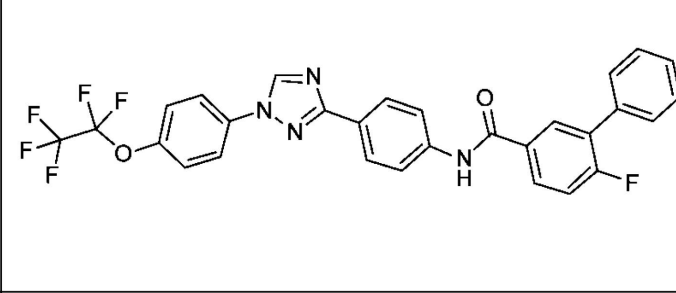
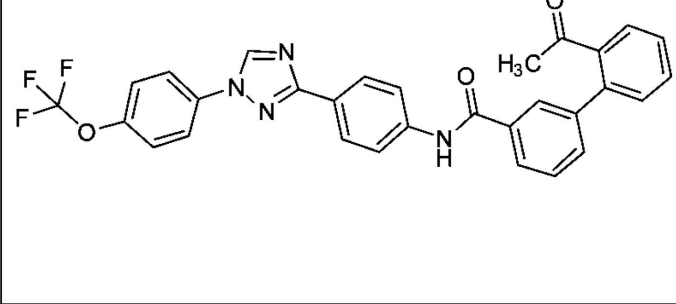
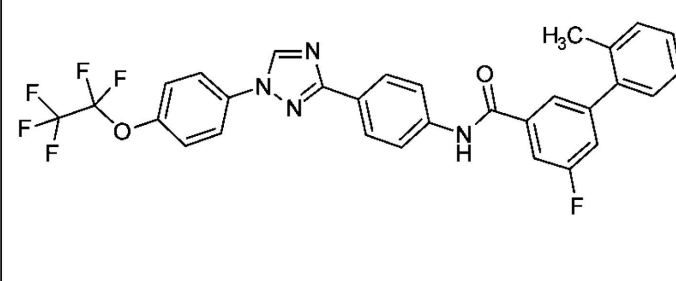
10

20

30

40

【表 9】

F38	
F39	
F40	
F41	
F42	

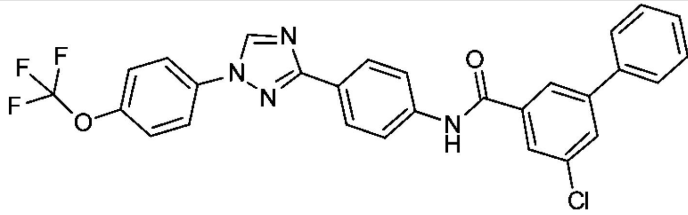
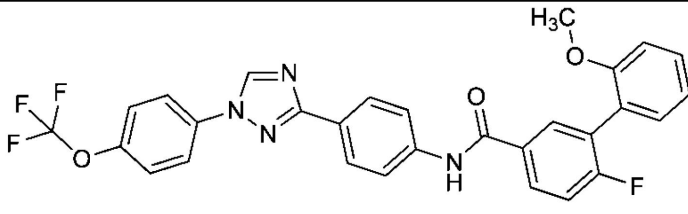
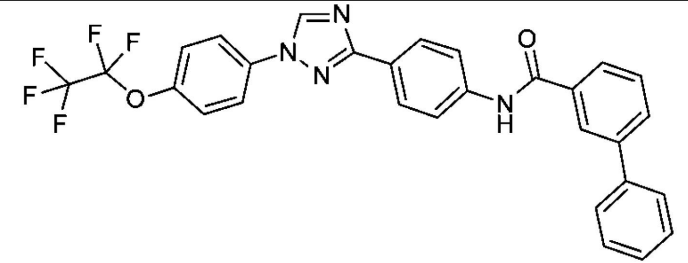
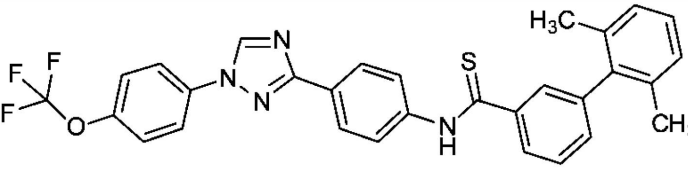
10

20

30

40

【表 10】

F43	
F44	
F45	
F46	

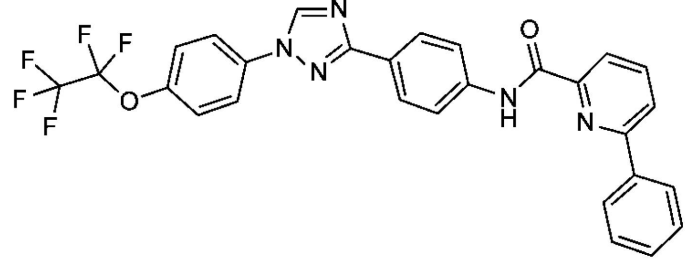
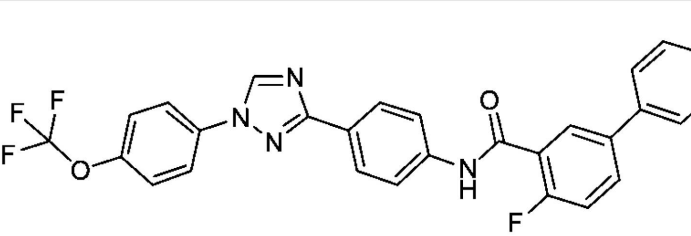
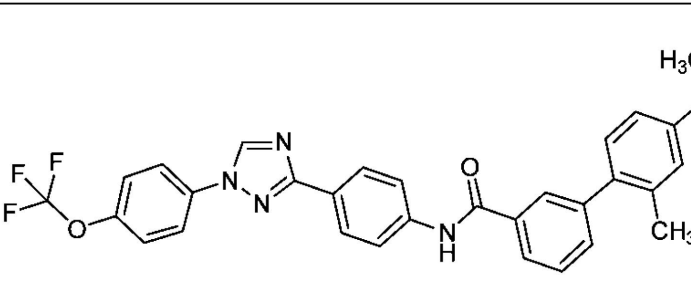
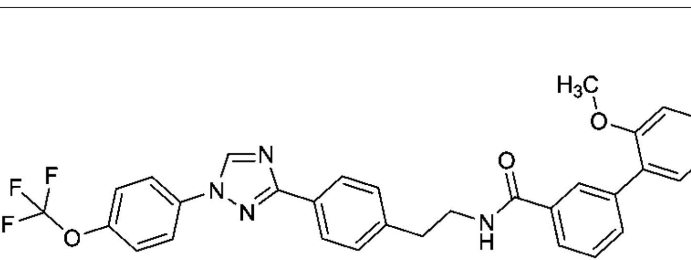
10

20

30

40

【表 1 1】

F47	
F48	
F49	
F50	

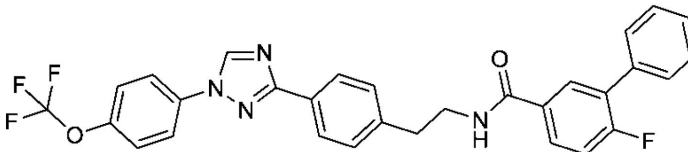
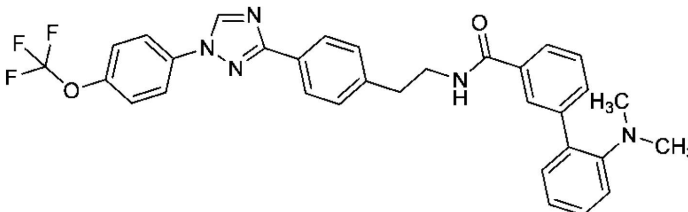
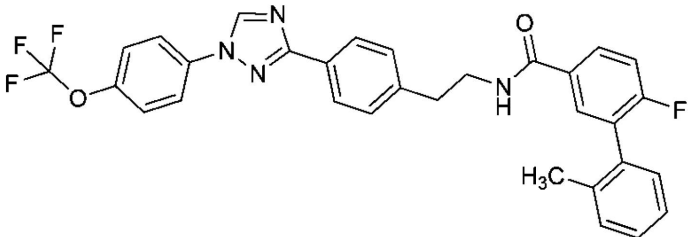
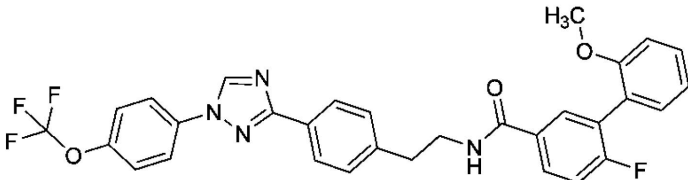
10

20

30

40

【表 1 2】

F51	
F52	
F53	
F54	

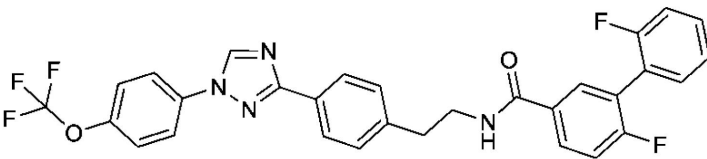
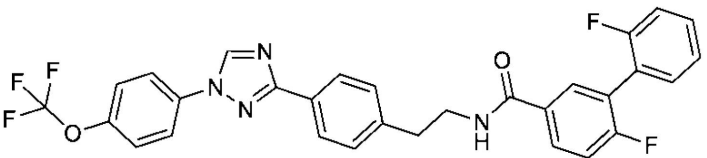
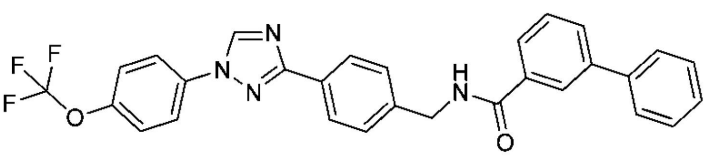
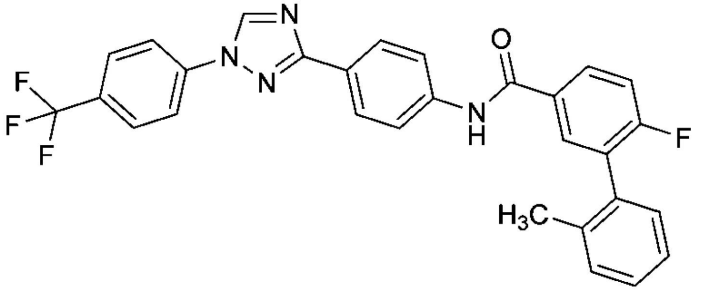
10

20

30

40

【表 1 3】

F55	
F56	
F57	
F58	

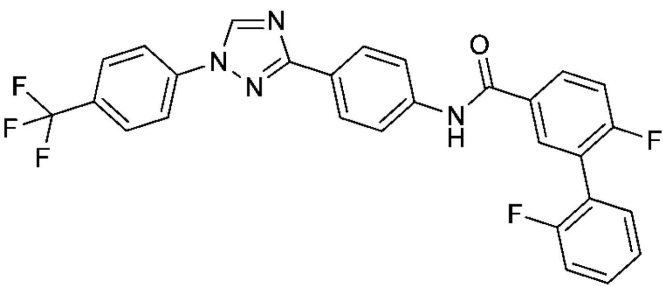
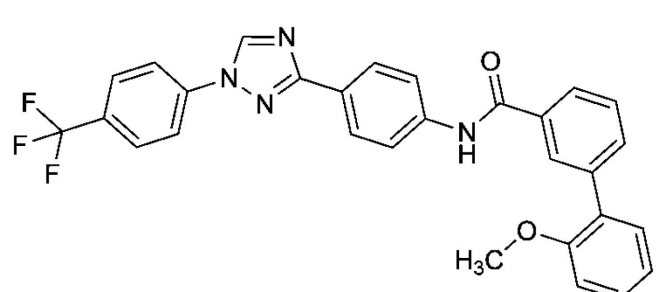
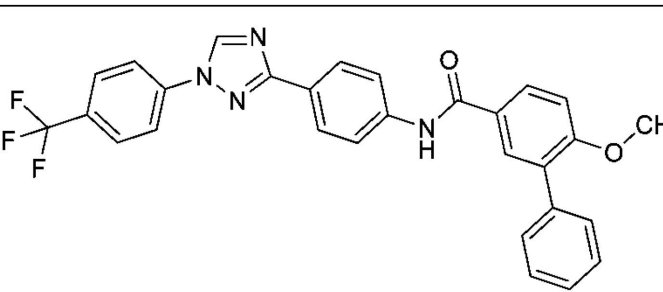
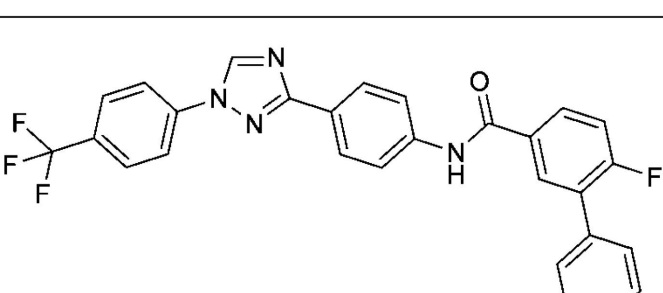
10

20

30

40

【表 1 4】

F59	
F60	
F61	
F62	

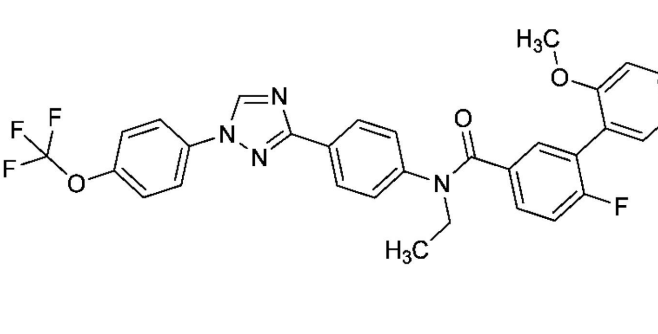
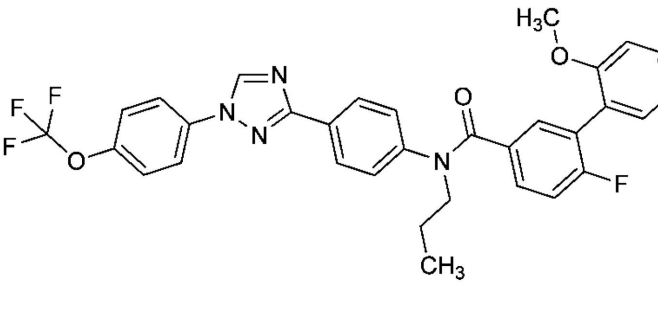
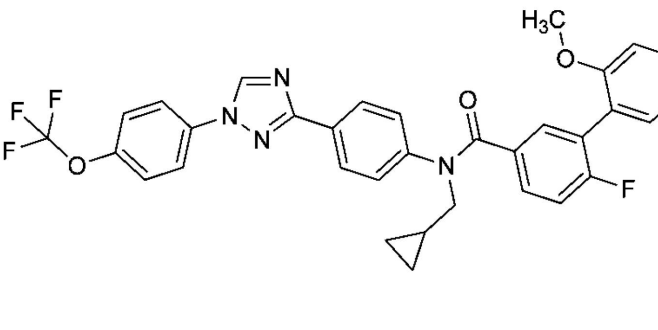
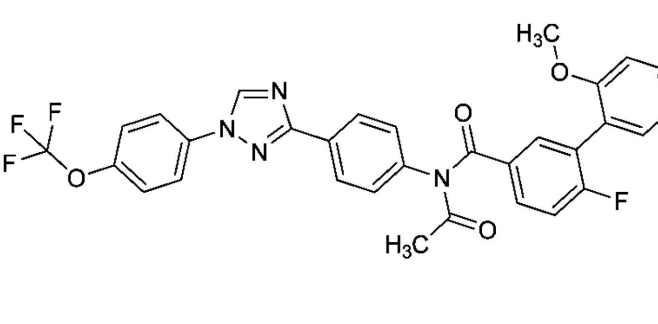
10

20

30

40

【表 1 5】

F64	
F65	
F66	
F67	

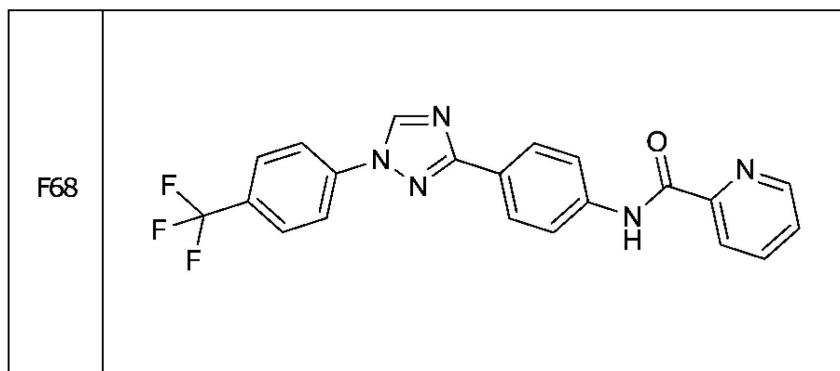
10

20

30

40

【表 1 6】



10

20

30

40

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

[関連出願の交差引用]

本出願は、2014年7月28日に出願された米国仮出願第62/029,756号（その完全な開示は引用することによりここに明白に組み込まれる）の利益およびそれからの優先権を主張する。

【0002】

50

[技術分野]

本開示は、線形動物門、節足動物門および軟体動物門の病害虫に対する殺虫農薬的（pesticidal）利用性を有する分子、こうした分子の製造方法およびこうした方法で使用される中間体、こうした分子を含有する組成物、ならびにこうした病害虫に対するこうした分子の使用方法の分野に関する。これら分子は、例えば殺線虫剤、ダニ駆除剤、殺虫剤、殺ダニ剤および軟体類駆除剤として使用しうる。

【背景技術】

【0003】

「大部分の危険なヒト疾患の多くは昆虫媒介動物により伝播される」（非特許文献1）。歴史的に、とりわけ、マラリア、デング熱、黄熱病、ペストおよびシラミ発疹チフスのような昆虫媒介性疾患は、1600年代から1900年代初期までずっと、合わせられた全部の他の原因より多くのヒト疾患および死亡の原因であった（非特許文献2）。現在、昆虫媒介性疾患は、世界の寄生虫症および感染症の約17%の原因である。世界中の約2億5千万の人々がマラリアを有しかつ約80万の死亡が毎年発生し、それらの死亡の85%は5歳未満の小児であることが推定されている。さらなる25万ないし50万症例のデング出血熱が毎年発生している（非特許文献3）。媒介昆虫防除は感染症の予防および対策において決定的に重要な役割を演じている。しかしながら、複数の殺虫剤に対する耐性を包含する殺虫剤耐性が、ヒト疾患の主要な媒介昆虫である全部の昆虫種で生じている（非特許文献1）。

10

【0004】

20

毎年、昆虫、植物病原体および雑草は、全部の潜在的食糧生産の40%以上を破壊する。この損失は、農薬の適用ならびに輪作および生物学的防除のような多様な非化学的防除の使用にもかかわらず発生する。この食糧の若干だけ保護し得るのであれば、それは栄養不良である世界の30億以上の人々を養うのに使用し得よう（非特許文献4）。

【0005】

植物寄生性線虫は最も広まった病害虫の1つであり、そしてしばしば最も油断のならないかつ多大な費用を要するものの1つである。線虫に起因する損失は先進国における約9%から途上国における約15%までであることが推定されている。しかしながら、米国において、35州における多様な作物に関する調査は25%までの線虫に派生される損失を示した（非特許文献5）。

30

【0006】

腹足類（ナメクジおよびカタツムリ）は昆虫若しくは線虫に比べて経済的重要性の低い病害虫であることが示されているが、しかし、ある地域において、腹足類は収穫量を実質的に低下させることができ、収穫される産出物の質にひどく影響を及ぼし、ならびにヒト、動物および植物の疾患を伝播する。腹足類のわずか数十種が重大な地域的病害虫である一方、わずかの種が世界規模で重要な病害虫である。とりわけ、腹足類は、耕作可能な、牧畜の、および繊維作物；野菜；灌木および木になる果実；薬草；ならびに観賞植物のような多様な農業および園芸作物に影響を及ぼす（非特許文献6）。

【0007】

シロアリは全部の種類の私有および公共建造物ならびに農業および林業資源に対する被害を引き起こす。2003年において、シロアリは毎年世界中で200億米ドル超の被害を引き起こすことが推定された（非特許文献7）。

40

【0008】

従って、上の理由を包含する多くの理由上、新たな農薬に対する必要性が存在する。

【先行技術文献】

【非特許文献】

【0009】

【非特許文献1】Rivero, A. ら、Insect Control of Vector-Borne Diseases: When is Insect Resistance a Problem? Public Library of Scienc

50

e Pathogens、6 (8) (2010)

【非特許文献2】Gubler D.、Resurgent Vector-Borne Diseases as a Global Health Problem、Emerging Infectious Diseases、Vol. 4、No. 3、July-September (1998)

【非特許文献3】Matthews, G.、Integrated Vector Management: controlling vectors of malaria and other insect vector borne diseases (2011)

【非特許文献4】Pimental, D.、Pest Control in World Agriculture、Agricultural Sciences-Vol. II (2009)) 10

【非特許文献5】Nicol, J. ら、Current Nematode Threats to World Agriculture、Genomic and Molecular Genetics of Plant-Nematode Interactions (編 Jones, J. ら)、Chapter 2、(2011)

【非特許文献6】Speiser, B.、Molluscicides、Encyclopedia of Pest Management (2002)

【非特許文献7】Su, N. Y.、Overview of the global distribution and control of the Formosan subterranean termite、Sociobiology 2003、41、177-192 20

【発明の概要】

【0010】

[発明の要約]

定義

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

【0011】 30

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

【0012】

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

【0013】

「アルコキシ」は、炭素-酸素単結合よりさらになるアルキル、例えばメトキシ、エトキシ、プロポキシ、イソプロポキシ、ブトキシ、イソブトキシおよびtert-ブトキシを意味している。 40

【0014】

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

【0015】

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

【0016】

「アルキニルオキシ」は、炭素-酸素単結合よりさらになるアルキニル、例えば、ペン 50

チニルオキシ、ヘキシニルオキシ、ヘプチニルオキシおよびオクチニルオキシを意味している。

【0017】

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

【0018】

「シクロアルケニル」は、炭素および水素よりなる単環若しくは多環不飽和（最低1個の炭素－炭素二重結合）置換基、例えばシクロブテニル、シクロペンテニル、シクロヘキセニル、ノルボルネニル、ビシクロ〔2. 2. 2〕オクテニル、テトラヒドロナフチル、ヘキサヒドロナフチルおよびオクタヒドロナフチルを意味している。

10

【0019】

「シクロアルケニルオキシ」は、炭素－酸素単結合よりさらになるシクロアルケニル、例えばシクロブテニルオキシ、シクロペンテニルオキシ、ノルボルネニルオキシおよびビシクロ〔2. 2. 2〕オクテニルオキシを意味している。

【0020】

「シクロアルキル」は、炭素および水素よりなる単環若しくは多環飽和置換基、例えばシクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、ノルボルニル、ビシクロ〔2. 2. 2〕オクチルおよびデカヒドロナフチルを意味している。

【0021】

「シクロアルコキシ」は、炭素－酸素単結合よりさらになるシクロアルキル、例えばシクロプロピルオキシ、シクロブチルオキシ、シクロペンチルオキシ、ノルボルニルオキシおよびビシクロ〔2. 2. 2〕オクチルオキシを意味している。

20

【0022】

「ハロ」はフルオロ、クロロ、ブロモおよびヨードを意味している。

【0023】

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

【0024】

30

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

【0025】

「ヘテロシクリル」は、完全に飽和、部分的に不飽和若しくは完全に不飽和でありうる環状置換基を意味しており、該環状構造は最低1個の炭素および最低1個のヘテロ原子を含有し、前記ヘテロ原子は窒素、イオウ若しくは酸素である。芳香族ヘテロシクリルの例は、限定されるものでないが、ベンゾフラニル、ベンゾイソチアゾリル、ベンゾイソオキサゾリル、ベンゾオキサゾリル、ベンゾチエニル、ベンゾチアゾリル、シンノリニル、フラニル、インダゾリル、インドリル、イミダゾリル、イソインドリル、イソキノリニル、イソチアゾリル、イソオキサゾリル、オキサジアゾリル、オキサゾリニル、オキサゾリル、フタラジニル、ピラジニル、ピラゾリニル、ピラゾリル、ピリダジニル、ピリジル、ピリミジニル、ピロリル、キナゾリニル、キノリニル、キノキサリニル、テトラゾリル、チアゾリニル、チアゾリル、チエニル、トリアジニルおよびトリアゾリルを挙げることができる。完全に飽和のヘテロシクリルの例は、限定されるものでないが、ピペラジニル、ピペリジニル、モルホリニル、ピロリジニル、テトラヒドロフラニルおよびテトラヒドロピラニルを挙げることができる。部分的に不飽和のヘテロシクリルの例は、限定されるものでないが、1, 2, 3, 4-テトラヒドロキノリニル、4, 5-ジヒドロオキサゾリル、4, 5-ジヒドロ-1H-ピラゾリル、4, 5-ジヒドロイソオキサゾリルおよび

40

50

2, 3-ジヒドロ [1, 3, 4] -オキサジアゾリルを挙げることができる。

【発明を実施するための形態】

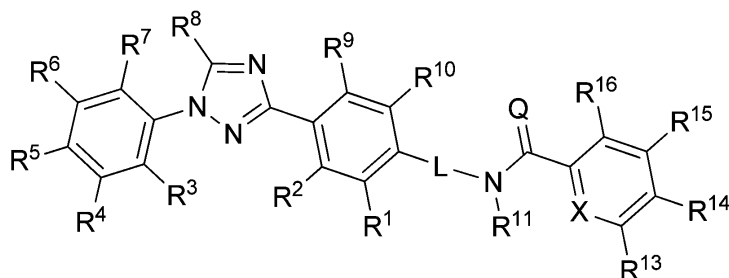
【0026】

[発明の詳細な記述]

本文書は、以下の式（「式1」）

【0027】

【化1】



式1

【0028】

を有する分子を開示し、

式中：

(A) R¹, R², R³, R⁴, R⁵, R⁶, R⁷, R⁹, R¹⁰, R¹⁴, R¹⁵およびR¹⁶は、H、F、Cl、Br、I、CN、NO₂、OH、C₁–C₄アルキル、C₂–C₄アルケニル、C₂–C₄アルケニルオキシ、C₂–C₄アルキニル、C₂–C₄アルキニルオキシ、C₁–C₄ハロアルキル、C₁–C₄アルコキシ、C₁–C₄ハロアルコキシ、C₃–C₆シクロアルキル、C₃–C₆シクロアルコキシ、C₃–C₆シクロアルケニル若しくはC₃–C₆シクロアルケニルオキシよりなる群からそれぞれ独立に選択され、

ここで各アルキル、アルケニル、アルケニルオキシ、アルキニル、アルキニルオキシ、ハロアルキル、アルコキシ、ハロアルコキシ、シクロアルキル、シクロアルコキシ、シクロアルケニル若しくはシクロアルケニルオキシは、H、F、Cl、Br、I、CN、NO₂、OH、C₁–C₄アルキル、C₂–C₄アルケニル、C₂–C₄アルケニルオキシ、C₂–C₄アルキニル、C₂–C₄アルキニルオキシ、C₁–C₄ハロアルキル、C₁–C₄アルコキシ、C₁–C₄ハロアルコキシ、C₃–C₆シクロアルキル、C₃–C₆シクロアルコキシ、C₃–C₆シクロアルケニル若しくはC₃–C₆シクロアルケニルオキシよりなる群から独立に選択される1個若しくはそれ以上の置換基で場合によっては置換されており；

(B) R⁸はHであり；

(C) Lは、環中の炭素に窒素を結合する結合であるリンカーであるか、または、Lは、F、Cl、CN、OH若しくはオキシよりなる群から独立に選択される1個若しくはそれ以上の置換基で場合によっては置換されているC₁–C₄アルキルであり；

(D) R¹¹は、H、(C₁–C₄)アルキル、(C₂–C₄)アルケニル、(C₂–C₄)アルケニルオキシ、(C₂–C₄)アルキニル、(C₂–C₄)アルキニルオキシ、(C₁–C₄)ハロアルキル、(C₁–C₄)アルコキシ、(C₁–C₄)ハロアルコキシ、(C₁–C₄)アルキル(C₁–C₄)アルコキシ、(C₃–C₆)シクロアルキル、(C₃–C₆)シクロアルコキシ、(C₃–C₆)シクロアルケニル、(C₃–C₆)シクロアルケニルオキシ、((C₁–C₄)アルキル)(C₃–C₆)シクロアルキル、C(O)(C₁–C₄)アルキル、C(O)フェニル、((C₁–C₄)アルキル)C(O)(C₁–C₄)アルキルおよび((C₁–C₄)アルキル)C(O)O((C₁–C₄)アルキル)から選択され、

ここで各アルキル、アルケニル、アルケニルオキシ、アルキニル、アルキニルオキシ、ハロアルキル、アルコキシ、ハロアルコキシ、シクロアルキル、シクロアルコキシ、シクロアルケニル、シクロアルケニルオキシおよびフェニルは、H、F、Cl、Br、I、CN、NO₂、OH、オキシおよびOC(O)(C₁–C₄)アルキルから独立に選択される1

10

20

30

40

50

個若しくはそれ以上の置換基で場合によっては置換されており；

(E) XはN若しくは CR^{12} から選択され、式中 R^{12} は、H、F、Cl、Br、I、CN、 NO_2 、OH、 C_1-C_4 アルキル、 C_2-C_4 アルケニル、 C_2-C_4 アルケニルオキシ、 C_2-C_4 アルキニル、 C_2-C_4 アルキニルオキシ、 C_1-C_4 ハロアルキル、 C_1-C_4 アルコキシ、 C_1-C_4 ハロアルコキシ、 C_3-C_6 シクロアルキル、 C_3-C_6 シクロアルコキシ、 C_3-C_6 シクロアルケニル若しくは C_3-C_6 シクロアルケニルオキシよりなる群から選択され；

(F) R^{13} はH、フェニル若しくは置換フェニルよりなる群から選択され、ここで前記置換フェニルは、H、F、Cl、Br、I、CN、 NO_2 、OH、 C_1-C_4 アルキル、 C_2-C_4 アルケニル、 C_2-C_4 アルケニルオキシ、 C_2-C_4 アルキニル、 C_2-C_4 アルキニルオキシ、 C_1-C_4 ハロアルキル、 C_1-C_4 アルコキシ、 C_1-C_4 ハロアルコキシ、 C_3-C_6 シクロアルキル、 C_3-C_6 シクロアルコキシ、 C_3-C_6 シクロアルケニル、 C_3-C_6 シクロアルケニルオキシ、 OC_1-C_4 アルキルフェニル、 $C(O)C_1-C_4$ アルキル若しくはN(C_1-C_4 アルキル)(C_1-C_4 アルキル)よりなる群から独立に選択される1個若しくはそれ以上の置換基で置換されており；

(G) QはO若しくはSから選択される。

【0029】

別の態様において、 R^5 は、 C_1-C_4 ハロアルキル、 C_1-C_4 アルコキシ若しくは C_1-C_4 ハロアルコキシである。本態様は、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^9 、 R^{10} 、 R^{11} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} 、 R^{16} 、X、QおよびLの他の態様と組合せて使用しうる。

【0030】

別の態様において、 R^5 は、 CF_3 、 $OCH(CH_3)_2$ 、 OCF_3 若しくは OCF_2CF_3 である。本態様は、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^9 、 R^{10} 、 R^{11} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} 、 R^{16} 、X、QおよびLの他の態様と組合せて使用しうる。

【0031】

別の態様において、Lは C_1-C_4 アルキルである。本態様は、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^9 、 R^{10} 、 R^{11} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} 、 R^{16} 、XおよびQの他の態様と組合せて使用しうる。

【0032】

別の態様において、Lは単結合、 $-CH_2-$ 若しくは $-CH_2CH_2-$ である。本態様は、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^9 、 R^{10} 、 R^{11} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} 、 R^{16} 、XおよびQの他の態様と組合せて使用しうる。

【0033】

別の態様において、 R^{11} は、H、 C_1-C_4 アルキル、 C_1-C_4 アルキル C_3-C_6 シクロアルキル若しくは $C(O)C_1-C_4$ アルキルである。本態様は、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^9 、 R^{10} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} 、 R^{16} 、X、QおよびLの他の態様と組合せて使用しうる。

【0034】

別の態様において、 R^{11} は CH_3 、 CH_2CH_3 、 $CH_2CH_2CH_3$ 、 CH_2 (シクロプロピル)若しくは $C(O)CH_3$ である。本態様は、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^9 、 R^{10} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} 、 R^{16} 、X、QおよびLの他の態様と組合せて使用しうる。

【0035】

別の態様において、QはOである。本態様は、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^9 、 R^{10} 、 R^{11} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} 、 R^{16} 、XおよびLの他の態様と組合せて使用しうる。

【0036】

別の態様において、QはSである。本態様は、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^9 、 R^{10} 、 R^{11} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} 、 R^{16} 、XおよびLの他の態様と組合せて使用しうる。

10

20

30

40

50

【0037】

別の態様において、XはNである。本態様は、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^9 、 R^{10} 、 R^{11} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} 、 R^{16} 、QおよびLの他の態様と組合せて使用しうる。

【0038】

別の態様において、Xは、 R^{12} がH若しくは C_1-C_4 アルキルである CR^{12} である。本態様は、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^9 、 R^{10} 、 R^{11} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} 、 R^{16} 、QおよびLの他の態様と組合せて使用しうる。

【0039】

別の態様において、Xは、 R^{12} が CH_3 である CR^{12} である。本態様は、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^9 、 R^{10} 、 R^{11} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} 、 R^{16} 、QおよびLの他の態様と組合せて使用しうる。

10

【0040】

別の態様において、 R^{13} はH若しくはフェニルである。本態様は、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^9 、 R^{10} 、 R^{11} 、 R^{14} 、 R^{15} 、 R^{16} 、X、QおよびLの他の態様と組合せて使用しうる。

【0041】

別の態様において、 R^{13} は、H、F、Cl、 C_1-C_4 アルキル、 C_1-C_4 アルコキシ、 C_1-C_4 ハロアルコキシ、 OC_1-C_4 アルキルフェニル、 $C(O)C_1-C_4$ アルキル若しくは $N(C_1-C_4$ アルキル) $(C_1-C_4$ アルキル)よりなる群から選択される1個若しくはそれ以上の置換基で置換されている置換フェニルである。本態様は、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^9 、 R^{10} 、 R^{11} 、 R^{14} 、 R^{15} 、 R^{16} 、X、QおよびLの他の態様と組合せて使用しうる。

20

【0042】

別の態様において、 R^{13} は、 CH_3 、 CH_2CH_3 、 OCH_3 、 OCH_2CH_3 、 OCF_3 、 $OCH_2C_6H_5$ 、 $C(O)CH_3$ 若しくは $N(CH_3)_2$ よりなる群から選択される1個若しくはそれ以上の置換基で置換されている置換フェニルである。本態様は、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^9 、 R^{10} 、 R^{11} 、 R^{14} 、 R^{15} 、 R^{16} 、X、QおよびLの他の態様と組合せて使用しうる。

【0043】

30

別の態様において、 R^{14} は、H、F、Cl若しくは C_1-C_4 アルコキシである。本態様は、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^9 、 R^{10} 、 R^{11} 、 R^{13} 、 R^{15} 、 R^{16} 、X、QおよびLの他の態様と組合せて使用しうる。

【0044】

別の態様において、 R^{14} は OCH_3 である。本態様は、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^9 、 R^{10} 、 R^{11} 、 R^{13} 、 R^{15} 、 R^{16} 、X、QおよびLの他の態様と組合せて使用しうる。

【0045】

別の態様において、 R^{15} はH、F若しくはClである。本態様は、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^9 、 R^{10} 、 R^{11} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{16} 、X、QおよびLの他の態様と組合せて使用しうる。

40

【0046】

別の態様において、 R^{16} はH、F若しくはClである。本態様は、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^9 、 R^{10} 、 R^{11} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} 、X、QおよびLの他の態様と組合せて使用しうる。

【0047】

別の態様において、
(A) R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^9 、 R^{10} 、 R^{14} 、 R^{15} および R^{16} は、H、F、Cl、Br、I、 C_1-C_4 ハロアルキル、 C_1-C_4 アルコキシ若しくは C_1-C_4 ハロアルコキシよりなる群からそれぞれ独立に選択され；

50

- (B) R^8 はHであり；
 (C) Lは単結合若しくは C_1-C_4 アルキルであり；
 (D) R^{11} は、H、 C_1-C_4 アルキル、 C_1-C_4 アルキル C_3-C_6 シクロアルキル若しくは $C(O)C_1-C_4$ アルキルよりなる群から独立に選択され；
 (E) XはN若しくは CR^{12} から選択され、式中 R^{12} はH若しくは C_1-C_4 アルキルよりなる群から選択され；
 (F) R^{13} は、H、フェニル若しくは置換フェニルよりなる群から選択され、
 ここで前記置換フェニルは、H、F、Cl、Br、I、 C_1-C_4 アルキル、 C_1-C_4 アルコキシ、 C_1-C_4 ハロアルコキシ、 OC_1-C_4 アルキルフェニル、 $C(O)C_1-C_4$ アルキル若しくはN(C_1-C_4 アルキル)(C_1-C_4 アルキル)よりなる群から独立に選択される1個若しくはそれ以上の置換基で置換されており；
 (G) QはO若しくはSから選択される。

10

【0048】

別の態様において、

- (A) R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^9 、 R^{10} 、 R^{14} 、 R^{15} および R^{16} は、H、F、Cl、Br、I、 C_1-C_4 ハロアルキル、 C_1-C_4 アルコキシ若しくは C_1-C_4 ハロアルコキシよりなる群からそれぞれ独立に選択され；
 (B) R^8 はHであり；
 (C) Lは単結合若しくは C_1-C_4 アルキルであり；
 (D) R^{11} は、H、 C_1-C_4 アルキル、 C_1-C_4 アルキル C_3-C_6 シクロアルキル若しくは $C(O)C_1-C_4$ アルキルよりなる群から独立に選択され；
 (E) Xは CR^{12} であり、式中 R^{12} はH若しくは C_1-C_4 アルキルよりなる群から選択され；
 (F) R^{13} はフェニル若しくは置換フェニルであり、
 ここで前記置換フェニルは、H、F、Cl、Br、I、 C_1-C_4 アルキル、 C_1-C_4 アルコキシ、 $C(O)C_1-C_4$ アルキル若しくはN(C_1-C_4 アルキル)(C_1-C_4 アルキル)よりなる群から独立に選択される1個若しくはそれ以上の置換基で置換されており；
 (G) QはO若しくはSから選択される。

20

【0049】

別の態様において、

- (A) R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^9 、 R^{10} 、 R^{14} 、 R^{15} および R^{16} は、H、F、Cl、Br、I、 C_1-C_4 ハロアルキル、 C_1-C_4 アルコキシ若しくは C_1-C_4 ハロアルコキシよりなる群からそれぞれ独立に選択され；
 (B) R^8 はHであり；
 (C) Lは単結合若しくは C_1-C_4 アルキルであり；
 (D) R^{11} は、H、 C_1-C_4 アルキル若しくは $C(O)C_1-C_4$ アルキルよりなる群から独立に選択され；
 (E) Xは CR^{12} であり、式中 R^{12} はHであり；
 (F) R^{13} はフェニル若しくは置換フェニルであり、
 ここで前記置換フェニルは、H、F、Cl、Br、I、 C_1-C_4 アルキル、 C_1-C_4 アルコキシ、 $C(O)C_1-C_4$ アルキル若しくはN(C_1-C_4 アルキル)(C_1-C_4 アルキル)よりなる群から独立に選択される1個若しくはそれ以上の置換基で置換されており；
 (G) QはO若しくはSから選択される。

30

40

【0050】

アミドの製造

式1のアミド生成物は、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^9 および R^{10} が以前に定義されたとおりである対応するアミン(1-3)、ならびにX、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} および R^{16} が以前に定義されたとおりである酸塩化物(1-2)から製造し得る。通常、これら酸塩化物は適する前駆体から生成かつ単離され得およびアミドの製造において精製なしに直接使用し得る。1つのこうした適する前駆体はカルボン酸(1-1)であり、

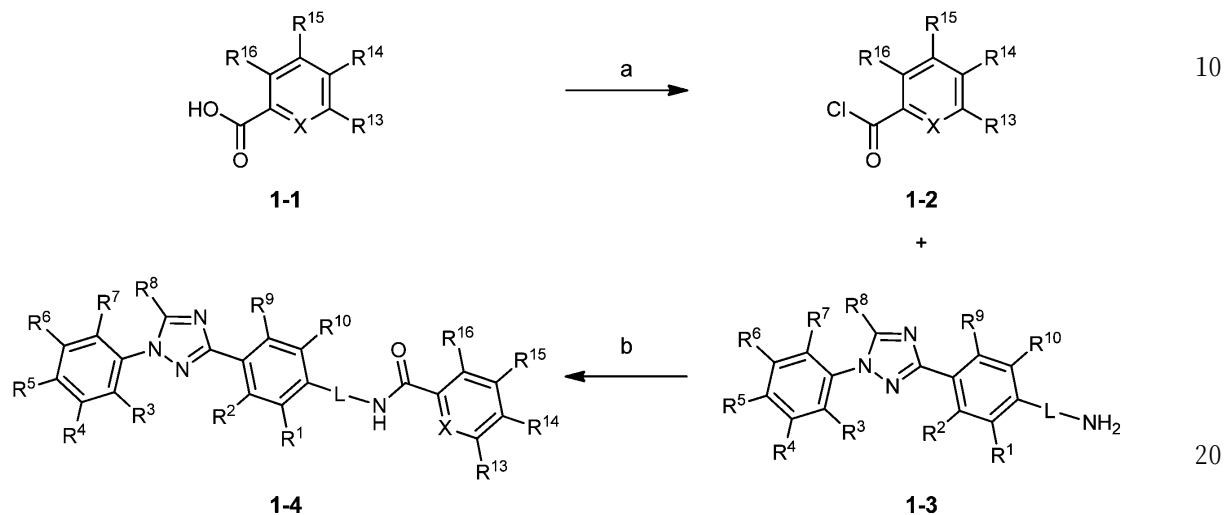
50

これは、ジクロロメタン若しくはテトラヒドロフランのような極性非プロトン性溶媒中触媒量のジメチルホルムアミドの存在下約 -78°C から約 30°C までの温度で塩化オキサリルのような試薬を使用すること（スキーム1、段階a）、次いで濃縮による溶媒の除去により酸塩化物に転化し得る。

【0051】

【化2】

スキーム1



【0052】

あるいは、カルボン酸は、トルエンのような非極性非プロトン性溶媒中約 -10°C から約 110°C までの温度での塩化チオニルでの処理、次いで濃縮若しくは蒸留のような方法による溶媒の除去によってもまた酸塩化物に転化し得る。従って、酸塩化物は常に完全に特徴付けられなくてもよいが、しかしアミドを生成するために特徴付けを伴わず単に直接使用しうることが認識される。

【0053】

酸塩化物（1-2）は、ジイソプロピルエチルアミンのようなアミン塩基の存在下にアニリン若しくはアミン（1-4）で直接処理することができ、アミドの形成をもたらす（1-4、スキーム1、段階b）。該反応は、テトラヒドロフラン、ジクロロメタン、トルエンから選ばれる非プロトン性溶媒中、約 -10°C から約 30°C まで、好ましくは約 15°C から約 25°C までの温度で実施し得るが、しかしテトラヒドロフランの使用が好ましい。

【0054】

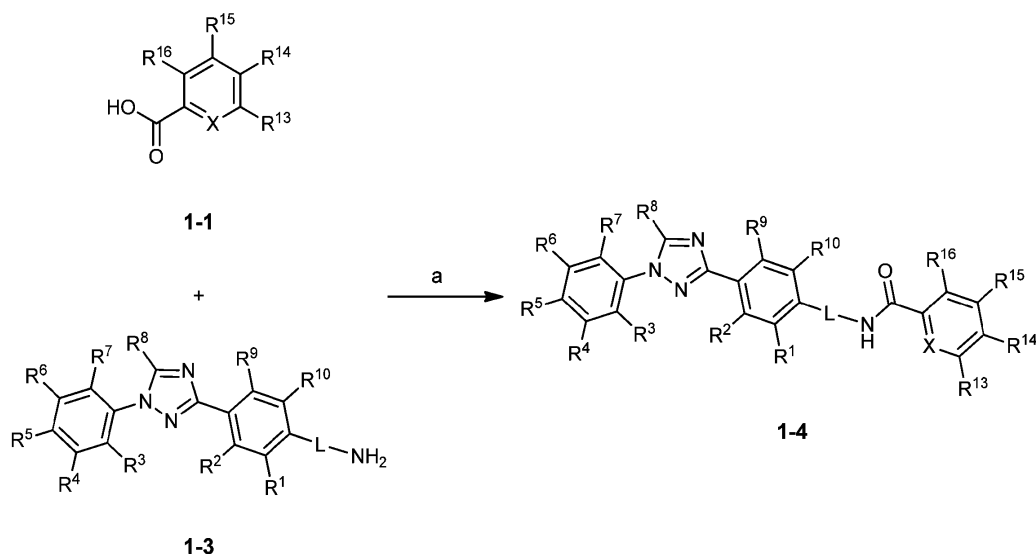
あるいは、アミン（1-3）は、ジメチルホルムアミド、テトラヒドロフラン若しくはジクロロメタンのような極性非プロトン性溶媒中ジイソプロピルエチルアミン若しくはトリエチルアミンのようなアミン塩基の存在下、約 -10°C から約 30°C までの温度で、ジシクロヘキシルカルボジイミド、ジイソプロピルカルボジイミド若しくは1-エチル-3-（3-ジメチルアミノプロピル）カルボジイミドのような活性化基（activating group）、および1-ヒドロキシベンゾトリアゾール若しくは1-ヒドロキシ-7-アザベンゾトリアゾールのようなトリアゾールを用いて、カルボン酸（1-1）に直接カップリングし得る（スキーム2）。該反応は、ジメチルホルムアミド、テトラヒドロフラン若しくはジクロロメタンのような極性非プロトン性溶媒中ジイソプロピルエチルアミン若しくはトリエチルアミンのようなアミン塩基の存在下、約 -10°C から約 30°C までの温度で、O-（7-アザベンゾトリアゾール-1-イル）-N, N, N', N'-тетраметилуoniumгексафторофосфат若しくはベンゾトリアゾール-1-イル-オキシトリピロリジノホスホニウムヘキサフルオロホスフェートのようなウロニウム若しくはホスホニウム活性化基を用いて促進することもまたでき、アミド（1-4）を

形成する。

【0055】

【化3】

スキーム2



10

20

【0056】

N-アルキル若しくはN-アシルアミドの製造

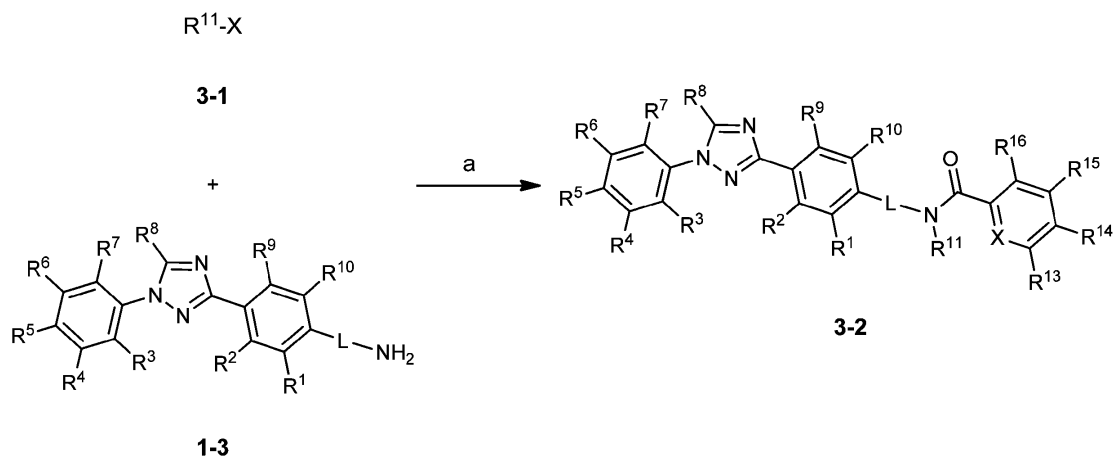
R¹¹が以前に定義されたとおりである式1のN-アルキル若しくはN-アシルアミド生成物(3-2、スキーム3)は、対応するアミド(1-4)から製造しうる。該アミドは、ジメチルホルムアミド若しくはテトラヒドロフランのような極性非プロトン性溶媒中約-10℃から約30℃までの温度で、水素化ナトリウムのような無機塩基で直接処理することができ、次いでアルキルハロゲン化物、アルキルトリフラート若しくはアルキルスルホネートのようなアルキル源で処理してアルキル化アミド(3-2)を形成するか；または、次いで塩化アセチル若しくは無水酢酸のようなアシル源で処理してアシル化アミド(3-2)を形成する。

30

【0057】

【化4】

スキーム3



40

【0058】

チオアミドの製造

式1のチオアミド生成物(4-1、スキーム4)は、対応するアミド(1-4)から製造し得る。該アミドを、テトラヒドロフラン、ジクロロメタン、クロロホルム、トルエン

50

若しくはピリジンから選ばれる非プロトン性溶媒中約60℃から約120℃までの温度で、五硫化二リン若しくは2, 4-ビス(4-メトキシフェニル)-1, 3, 2, 4-ジチアジホスフェタン2, 4-ジスルフィド(ローソン試薬)のようなイオウ源で直接処理し得、チオアミド(4-1)を形成する。

【0059】

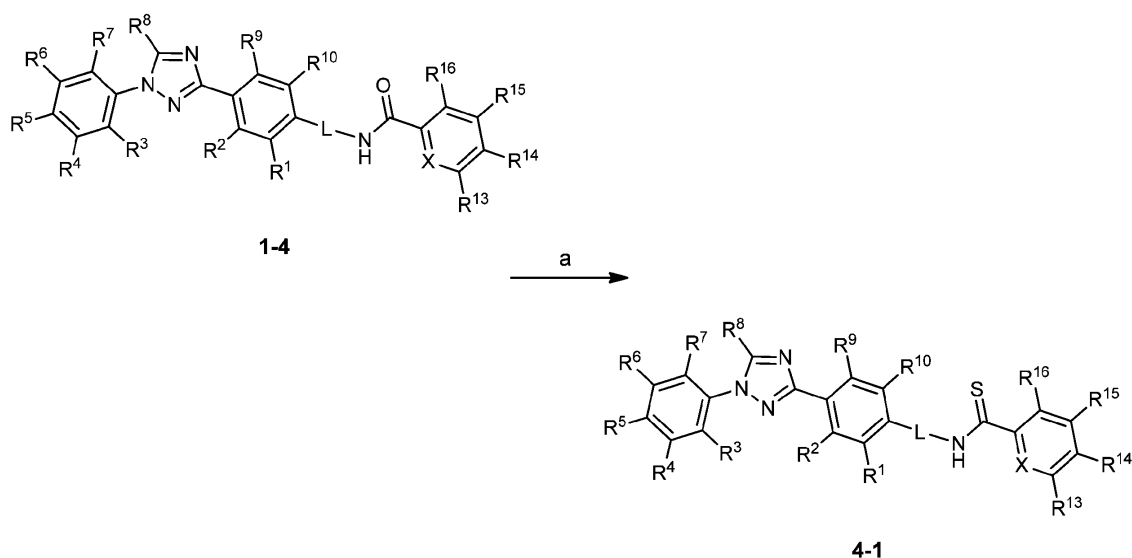
トリアリール中間体の製造

トリアリールアニリン中間体を使用して式1の分子を製造し得る。これらトリアリール中間体は、Crouseら、第WO2009102736号明細書(その開示全体は引用することによりここに組み込まれる)を包含する化学文献に以前に記述された方法により製造し得る。

【0060】

【化5】

スキーム4



【0061】

上述された手順のいくつかは、新規中間体であるトリアリールアニリン中間体の使用を必要とする。これらはスキーム5に記述されるとおり製造しうる。4-トリフルオロメチルフェニルヨードベンゼン若しくは1-ヨード-4-イソプロポキシベンゼンのようなアリールハロゲン化物(5-1)を、ジメチルホルムアミドのような極性非プロトン性溶媒中炭酸セシウム若しくはリン酸カリウムの存在下にプロモトリアゾールにカップリングし得る(5-2、段階a)。この反応は、約80℃と約140℃の間の範囲にわたる温度で、双方とも約0.05ないし約0.25等量で存在するヨウ化銅(I)のような銅塩および8-ヒドロキシキノリンのようなキレート剤により触媒されて、対応するトリアゾール(5-3)を形成する。

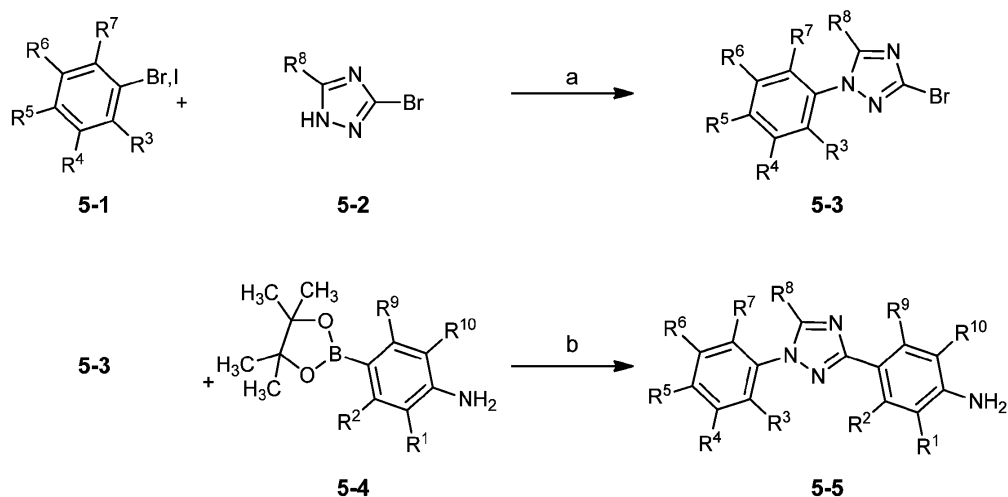
【0062】

プロモ複素環(5-3)のボロン酸エステル(5-4、段階b)とのカップリングは、ジオキサン/水のような適する溶媒系中重炭酸ナトリウムのような塩基の存在下、約50℃から約120℃までの温度で、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0)のようなパラジウム触媒を使用して達成し得、所望のアニリン(5-5)を形成する。

【0063】

【化 6】

スキーム 5



10

【0064】

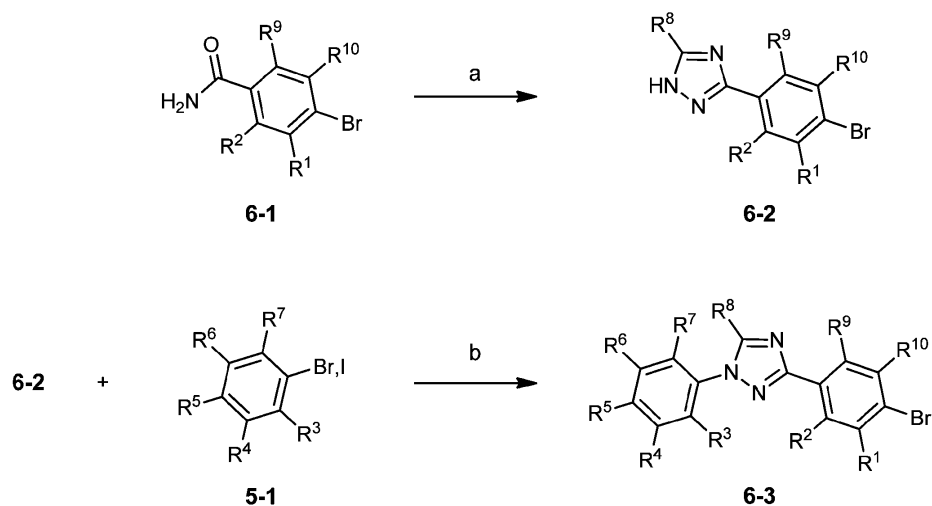
下述される手順のいくつかは、新規中間体であるトリアリールプロミド中間体の使用を必要とする。これらはスキーム 6 に記述されるとおり製造しうる。プロモトリアゾール (6-2、段階 a) は、以前に記述された条件 (Crouse ら、第 WO2009102736 号明細書) 下で 4-ブロモベンズアミド (6-1) から 2 段階で製造しうる。このトリアゾールをその後、ジメチルホルムアミドのような極性非プロトン性溶媒中炭酸セシウム若しくはリン酸カリウムの存在下に 4-トリフルオロメトキシフェニルプロモベンゼンのようなアリールハロゲン化物 (5-1) にカップリングし得る。この反応は、約 80℃ と約 140℃ の間の範囲にわたる温度で、双方とも約 0.05 ないし約 0.25 等量で存在するヨウ化銅 (I) のような銅塩および 8-ヒドロキシキノリンのようなキレート剤により触媒され、トリアリールプロミド中間体を形成する (6-3、段階 b)。

20

【0065】

【化 7】

スキーム 6



30

40

【0066】

1 原子結合された中間体の製造

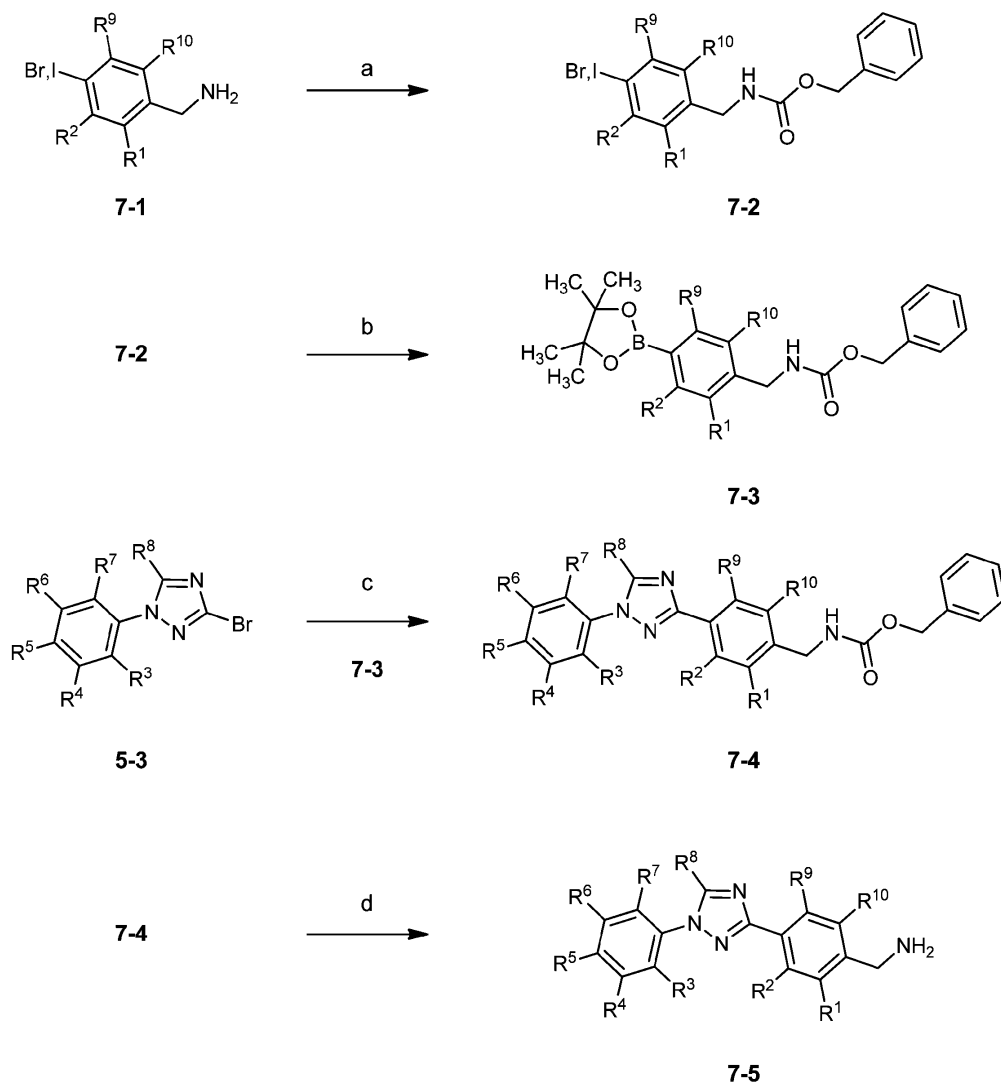
L が C₁ アルキルである式 1 の分子はスキーム 7 に記述されるとおり製造し得る。

【0067】

50

【化 8】

スキーム 7



【0068】

ハロベンジルアミン（7-1）を、ジクロロメタンのような非プロトン性溶媒中トリエチルアミンのような塩基の存在下約 -10°C ないし約 10°C でクロロギ酸ベンジルを使用して保護することができ、N-カルボキシベンジル保護されたベンジルアミン（7-2、段階a）を提供する。tert-ブトキシカルボニル若しくは9-フルオレニルメチルカルボニルのような他のN-保護基を、カルボキシベンジルについて上述された類似の条件を使用して段階aで使用しうることが認識される。N-カルボキシベンジル保護されたボロン酸エステル7-3はミヤウラ条件を使用して製造し得る（段階b）。ボロン酸エステルのブロモ複素環（5-3）とのカップリングは、ジオキサン／水のような適する溶媒系中重炭酸ナトリウム、リン酸カリウム若しくはフッ化セシウムのような塩基の存在下約 50°C から約 120°C までの温度で、テトラキス（トリフェニルホスフィン）パラジウム（0）のようなパラジウム触媒を使用して達成し得、N-保護されたアミノアルキルフェニル中間体を形成する（7-4、段階c）。カルボキシベンジル基の脱保護は、臭化水素のような強酸を用いる酸性条件下で達成し得、次いで重炭酸ナトリウム若しくは水酸化ナトリウムのような塩基で遊離塩基化し（free basing）、遊離アミンを提供する（7-5、段階d）。あるいは、カルボキシベンジル基の脱保護は、パラジウム炭素のような遷移金属触媒の存在下の水素での処理により達成しうる。類似の方法を、Lが $\text{C}_1\text{--}\text{C}_4$ アルキルである化合物に適用し得ることが認識される。

【0069】

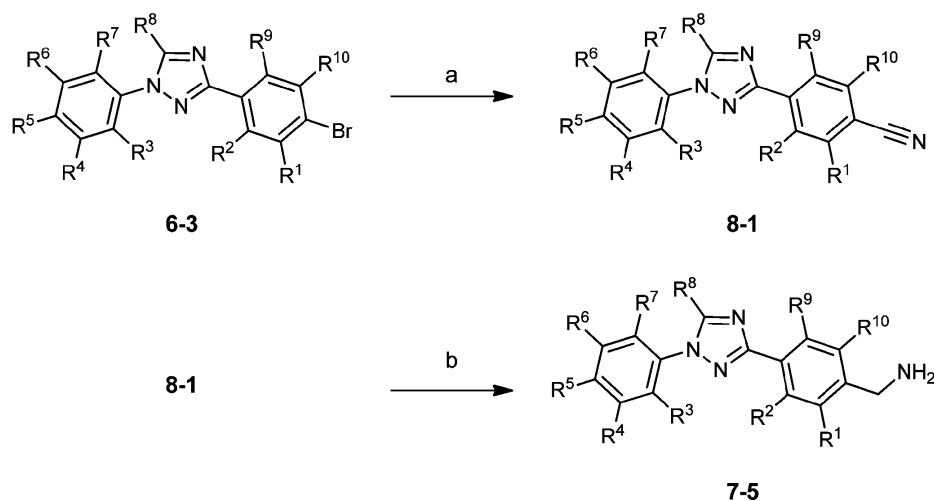
あるいは、LがC₁アルキルである式1の分子はスキーム8に記述されるとおり製造し得る。シアニ化亜鉛のようなシアニド源からのシアニドのブromo複素環(5-3)への取り込みは、ジメチルホルムアミドのような適する溶媒系中約50℃から約120℃までの温度で、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0)のようなパラジウム触媒を使用して達成し得、トリアリールシアノ中間体を形成する(8-1、段階a)。シアノ基の還元は、塩化水素のような強酸の存在下のパラジウム炭素のような金属還元剤での処理、次いで重炭酸ナトリウム若しくは水酸化ナトリウムのような塩基での遊離塩基化により達成し得、遊離ベンジルアミンを提供する(7-5、段階b)。

【0070】

10

【化9】

スキーム8



20

【0071】

エチル結合された中間体の製造

LがC₂アルキルである化合物の製造をスキーム9に記述する。Molanderら Org. Lett.、2007、9(2)、pp 203-206により最初に記述された条件を使用して、酢酸パラジウム(II)のようなパラジウム触媒および炭酸セシウムのような塩基の存在下、約80℃から約120℃までの温度での2-(tert-ブトキシカルボニル)アミノ)エチル)トリフルオロホウ酸カリウムを用いるトリアリールブロミドのカップリング(6-3、段階a)は、対応する2-(tert-ブトキシカルボニル)アミノ)エチル誘導体9-1の形成をもたらす。ジクロロメタン若しくはジオキサンのような非プロトン性溶媒中約0℃から約50℃までの温度での約1ないし約5等量のトリフルオロ酢酸のような酸でのこの物質のさらなる処理が、tert-ブトキシカルボニル基の切断およびアミンの対応する酸塩の形成をもたらす(9-3、段階b)。得られたアミン塩を重炭酸ナトリウム若しくはトリエチルアミンのような塩基で処理

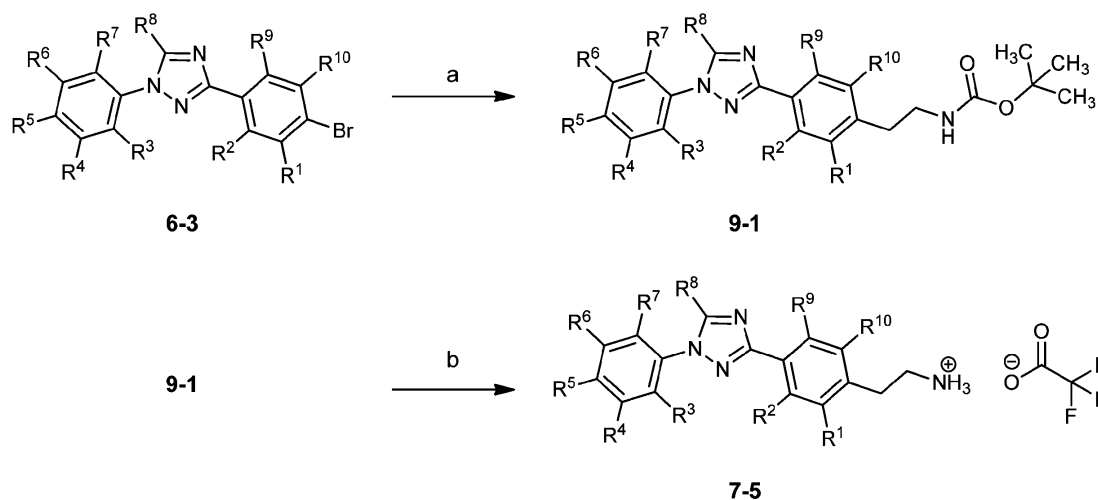
30

40

【0072】

【化10】

スキーム9



10

【実施例】

【0073】

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

20

【0074】

商業的供給源から得た出発原料、試薬および溶媒はさらなる精製なしに使用した。無水溶媒はAldrichからSure/Seal™として購入し、そして受領されたとおりに使用した。融点は、Thomas Hoover Unimeltキャピラリー融点装置、若しくはStanford Research SystemsからのOptiMelt自動融点装置で得、そして未補正である。「室温」を使用する実施例は、約20℃から約24℃までの範囲にわたる温度を伴う温度と湿度が制御された実験室で実施した。分子はISIS Draw、ChemDraw若しくはACD Name Pro内の命名プログラムに従って命名されたそれらの既知の名称を与えられる。こうしたプログラムが分子に命名することが不可能である場合、分子は慣習的命名規則を使用して命名する。¹H

30

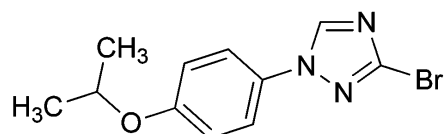
NMRスペクトルデータはppm(δ)であり、そして、別の方法で述べられない限り、300、400若しくは600MHzで記録し、および¹³C NMRスペクトルデータはppm(δ)であり、そして75、100若しくは150MHzで記録した。

【0075】

実施例1：3-ブromo-1-(4-イソプロポキシフェニル)-1H-1,2,4-トリアゾール(C1)の製造

【0076】

【化11】



40

【0077】

3-ブromo-1H-1,2,4-トリアゾール(1.75g、11.8mmol)、ヨウ化銅(I)(0.370g、1.94mmol)、炭酸セシウム(4.98g、15.3mmol)および1-ヨード-4-イソプロポキシベンゼン(2.04g、7.78mmol)(Katsumatu, T.ら Macromolecular Chemistry and Physics, 2009, 210(22), 1891-1902)を

50

ジメチルスルホキシド（50 mL）中に置きかつ窒素で10分間脱気した。該溶液を100℃で20時間加熱した。室温に冷却した後に、該反応混合物を酢酸エチルで希釈しかつ Celite（登録商標）で濾過した。生じるフィルターケーキを追加の酢酸エチル（100 mL）ですすいだ。濾液を水（2×50 mL）で洗浄した。合わせられた水性洗液を、pH紙により測定されたとおり塩酸（2 N）で中和した。該水性溶液を酢酸エチル（2×30 mL）で抽出しかつ有機抽出液を合わせ、そしてその後無水硫酸マグネシウムで乾燥した。有機溶液を Celite（登録商標）上で濃縮し、そして溶出液として0-100%酢酸エチル／ヘキサンを使用するシリカゲルクロマトグラフィーにより精製した。適切な画分を濃縮して、表題化合物を黄色油状物（0.540 g、23%）：¹H NMR（400 MHz、CDCl₃）δ 8.31（s、1H）、7.51（d、J=9.1 Hz、2H）、6.98（d、J=9.0 Hz、2H）、4.59（p、J=6.1 Hz、1H）、1.36（d、J=6.1 Hz、6H）；ESIMS m/z 283（[M+H]⁺）として得た。

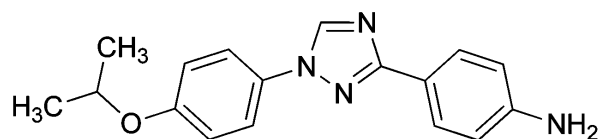
10

【0078】

実施例2：4-（1-（4-イソプロポキシフェニル）-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル）アニリン（C2）の製造

【0079】

【化12】



20

【0080】

3-ブromo-1-（4-イソプロポキシフェニル）-1H-1,2,4-トリアゾール（C1）（0.540 g、1.91 mmol）、4-（4,4,5,5-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロラン-2-イル）アニリン（0.510 g、2.32 mmol）、テトラキス（トリフェニルホスフィン）パラジウム（0）（0.240 g、0.210 mmol）および炭酸カリウム（2.65 g、19.2 mmol）を1,2-ジメトキシエタン（8 mL）および水（2 mL）中に置き、そして該混合物を窒素で10分間脱気した。該溶液を120℃で15時間加熱した。該溶液を室温に冷却し、そして該混合物を酢酸エチル（5 mL）で希釈した。結果として得られる塩を濾過しかつ層を分離した。水層を酢酸エチル（2×5 mL）で抽出した。合わせられた有機層を無水硫酸マグネシウムで乾燥しかつ Celite（登録商標）上で濃縮した。溶出液として0-100%酢酸エチル／ヘキサンを使用するシリカゲルクロマトグラフィーによる精製が、表題化合物を黄褐色固形物（0.430 g、73%）：¹H NMR（400 MHz、CDCl₃）δ 8.40（s、1H）、7.99（d、J=8.7 Hz、2H）、7.60（d、J=9.1 Hz、2H）、6.99（d、J=9.0 Hz、2H）、6.76（d、J=8.7 Hz、2H）、4.59（p、J=6.1 Hz、1H）、3.83（s、2H）、1.37（d、J=6.1 Hz、6H）；ESIMS m/z 295（[M+H]⁺）として提

30

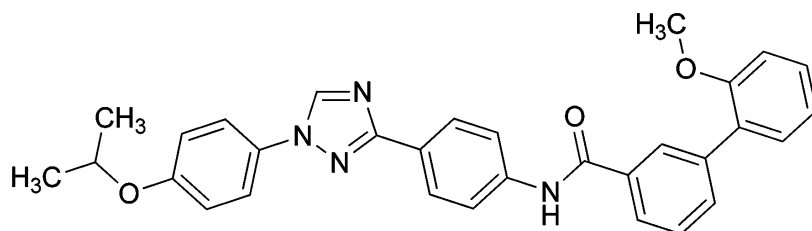
40

【0081】

実施例3：N-（4-（1-（4-イソプロポキシフェニル）-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル）フェニル）-2'-メトキシ-[1,1'-ビフェニル]-3-カルボキサミド（F5）の製造

【0082】

【化 1 3】



【0083】

10

ジクロロメタン（5 mL）中の 2'-メトキシ-[1,1'-ビフェニル]-3-カルボン酸（0.140 g、0.610 mmol）の混合物に塩化オキサリル（0.150 mL、1.75 mmol）およびジメチルホルムアミド（2 滴）を添加した。室温で 3 時間攪拌した後に該反応を乾固まで濃縮した。生じる黄色油状物を無水テトラヒドロフラン（2 mL）に溶解し、そしてテトラヒドロフラン（3 mL）およびジイソプロピルエチルアミン（0.190 mL、1.09 mmol）に溶解された 4-（1-（4-イソプロポキシフェニル）-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル）アニリン（C2）（0.134 g、0.460 mmol）の溶液に添加し、そして室温で 18 時間攪拌した。該溶液を酢酸エチル（10 mL）で希釈しかつ飽和水性重炭酸ナトリウムで洗浄した。該水性洗液を酢酸エチル（2×5 mL）で抽出し、そして合わせられた有機層を無水硫酸マグネシウムで乾燥した。該溶液を Celite（登録商標）上で濃縮し、そして溶出液として 0-100% 酢酸エチル／（1：1 ヘキサン／ジクロロメタン）を使用するシリカゲルクロマトグラフィーにより精製した。適切な画分を濃縮して、表題化合物を灰白色固形物（0.151 g、62%）として生じた。

20

【0084】

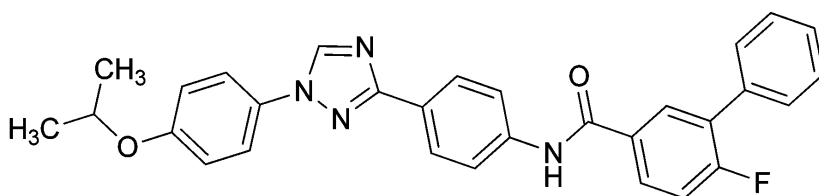
以下の化合物は実施例 3 に開示される手順に従って製造した：

6-フルオロ-N-（4-（1-（4-イソプロポキシフェニル）-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル）フェニル）-[1,1'-ビフェニル]-3-カルボキサミド（F16）

【0085】

30

【化 1 4】



【0086】

白色固形物（0.118 g、52%）として単離された。

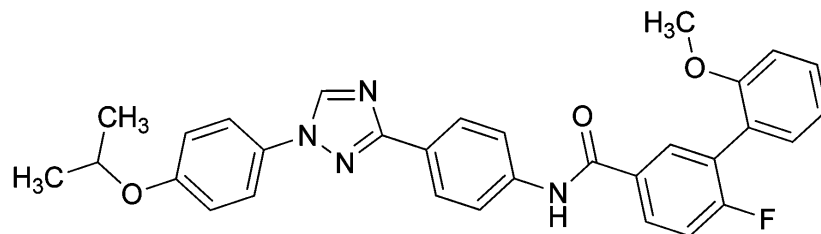
40

【0087】

6-フルオロ-N-（4-（1-（4-イソプロポキシフェニル）-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル）フェニル）-2'-メトキシ-[1,1'-ビフェニル]-3-カルボキサミド（F4）

【0088】

【化 1 5】



【 0 0 8 9 】

10

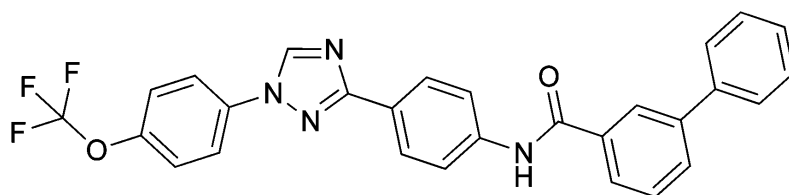
白色固形物（0.106 g、42%）として単離された。

【 0 0 9 0 】

実施例 4：N-（4-（1-（4-（トリフルオロメトキシ）フェニル）-1H-1，2，4-トリアゾル-3-イル）フェニル）-[1，1'-ビフェニル]-3-カルボキサミド（F24）の製造

【 0 0 9 1 】

【化 1 6】



20

【 0 0 9 2 】

ジクロロメタン（4 mL）中の〔1，1'-ビフェニル〕-3-カルボン酸（0.172 g、0.870 mmol）の混合物に塩化オキサリル（0.150 mL、1.75 mmol）およびジメチルホルムアミド（2 滴）を添加した。室温で3 時間攪拌した後に該反応を乾固まで濃縮した。生じる黄色油状物を無水テトラヒドロフラン（1 mL）に溶解し、そしてテトラヒドロフラン（3 mL）およびジイソプロピルエチルアミン（0.150 mL、0.860 mmol）に溶解された4-（1-（4-（トリフルオロメトキシ）フェニル）-1H-1, 2, 4-トリアゾル-3-イル）アニリン（0.102 g、0.320 mmol）（第WO 2009102736号明細書）の溶液に添加しかつ室温で18 時間攪拌した。該溶液を酢酸エチル（10 mL）で希釈しかつ飽和水性重炭酸ナトリウムで洗浄した。該水性洗液を酢酸エチル（2×5 mL）で抽出し、そして合わせられた有機層を無水硫酸マグネシウムで乾燥した。該溶液をCelite（登録商標）上で濃縮し、そして溶出液として0-100%酢酸エチル／（1：1 ヘキサン／ジクロロメタン）を使用するフラッシュカラムクロマトグラフィーにより精製した。適切な画分を濃縮して、表題化合物を白色固形物（0.0440 g、28%）として生じた。

30

【 0 0 9 3 】

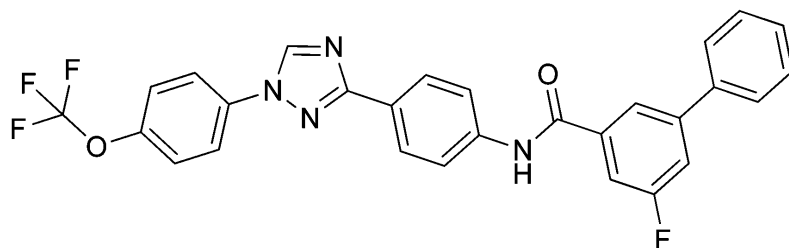
以下の化合物は実施例 4 に開示される手順に従って製造した：

40

5-フルオロ-N-(4-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)フェニル)-[1,1'-ビフェニル]-3-カルボキサミド (F25)

【 0 0 9 4 】

【化 17】



【0095】

10

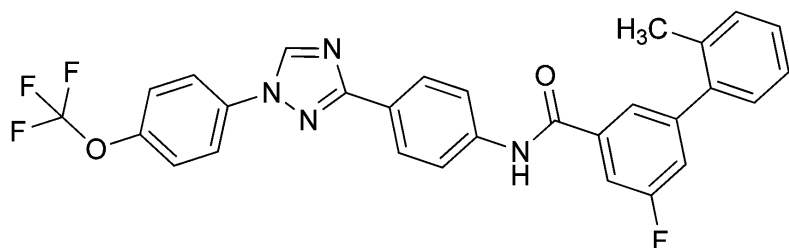
灰白色固形物（0.062 g、27%）として単離された。

【0096】

5-フルオロ-2'-メチル-N-(4-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)フェニル)-[1,1'-ビフェニル]-3-カルボキサミド (F39)

【0097】

【化 18】



20

【0098】

橙色油性固形物（0.136 g、57%）として単離された。

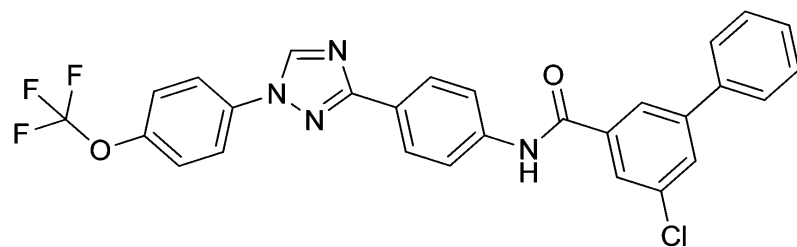
【0099】

5-クロロ-N-(4-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)フェニル)-[1,1'-ビフェニル]-3-カルボキサミド (F43)

30

【0100】

【化 19】



40

【0101】

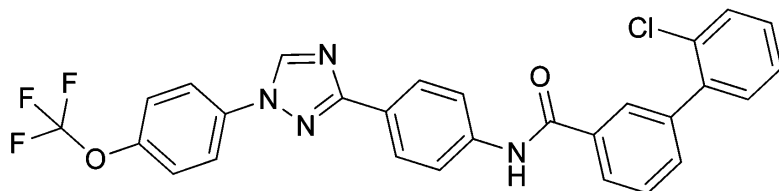
灰白色固形物（0.148 g、65%）として単離された。

【0102】

2'-クロロ-N-(4-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)フェニル)-[1,1'-ビフェニル]-3-カルボキサミド (F30)

【0103】

【化 2 0】



【0 1 0 4】

灰白色固形物（0.061 g、25%）として単離された。

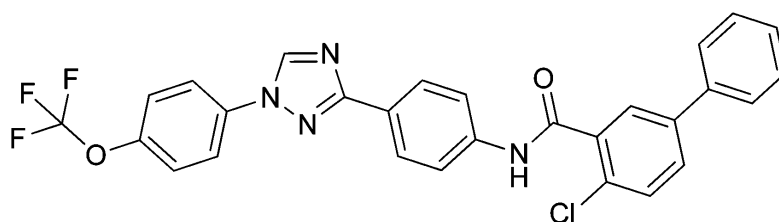
10

【0 1 0 5】

4-クロロ-N-(4-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)フェニル)-[1,1'-ビフェニル]-3-カルボキサミド (F15)

【0 1 0 6】

【化 2 1】



20

【0 1 0 7】

灰白色固形物（0.066 g、29%）として単離された。

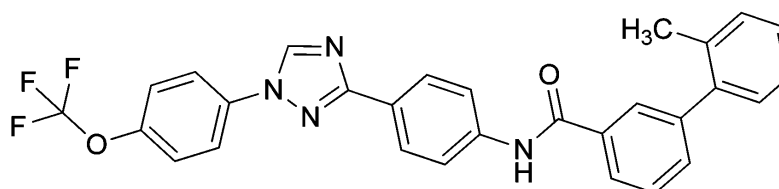
【0 1 0 8】

2'-メチル-N-(4-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)フェニル)-[1,1'-ビフェニル]-3-カルボキサミド (F17)

【0 1 0 9】

【化 2 2】

30



【0 1 1 0】

灰白色固形物（0.130 g、53%）として単離された。

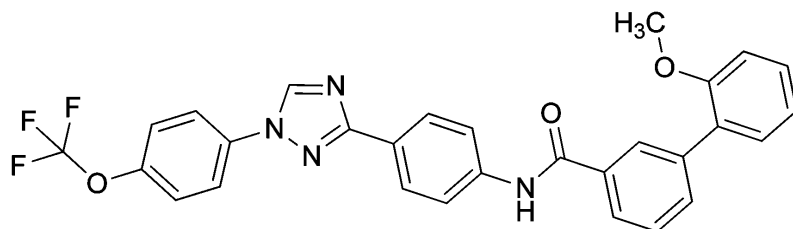
【0 1 1 1】

2'-メトキシ-N-(4-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)フェニル)-[1,1'-ビフェニル]-3-カルボキサミド (F22)

【0 1 1 2】

40

【化 2 3】



【0 1 1 3】

灰白色固形物（0.142 g、73%）として単離された。

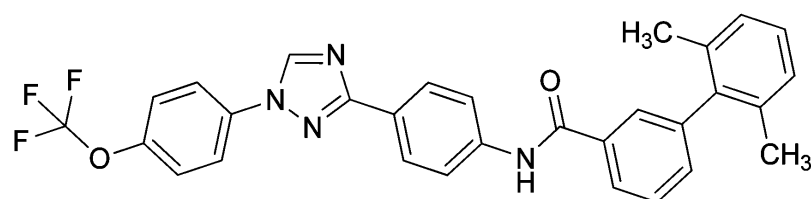
10

【0 1 1 4】

2', 6'-ジメチル-N-(4-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1, 2, 4-トリアゾル-3-イル)フェニル)-[1, 1'-ビフェニル]-3-カルボキサミド (F 1 2)

【0 1 1 5】

【化 2 4】



20

【0 1 1 6】

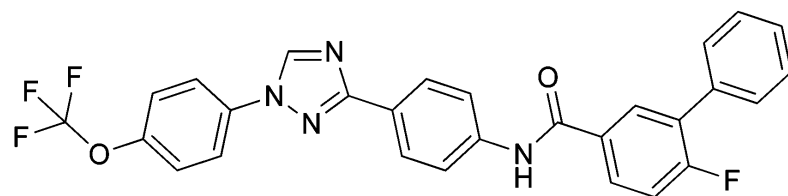
灰白色固形物（0.206 g、54%）として単離された。

【0 1 1 7】

6-フルオロ-N-(4-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1, 2, 4-トリアゾル-3-イル)フェニル)-[1, 1'-ビフェニル]-3-カルボキサミド (F 1 1)

【0 1 1 8】

【化 2 5】



30

【0 1 1 9】

灰白色固形物（0.052 g、25%）として単離された。

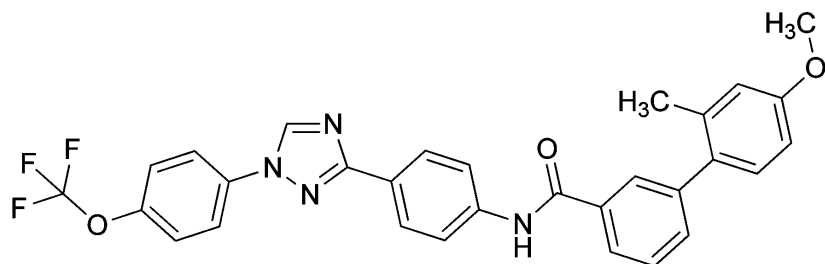
40

【0 1 2 0】

4'-メトキシ-2'-メチル-N-(4-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1, 2, 4-トリアゾル-3-イル)フェニル)-[1, 1'-ビフェニル]-3-カルボキサミド (F 4 9)

【0 1 2 1】

【化 2 6】



【0 1 2 2】

10

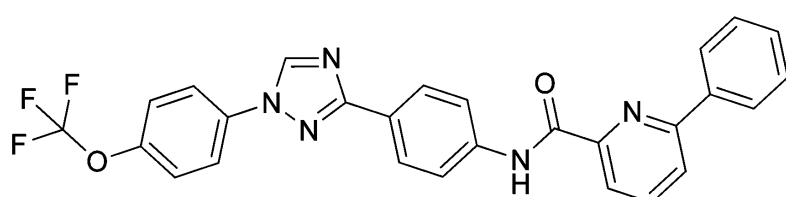
灰白色固形物（0.120 g、52%）として単離された。

【0 1 2 3】

6-フェニル-N-(4-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)フェニル)ピコリンアミド (F 2 7)

【0 1 2 4】

【化 2 7】



20

【0 1 2 5】

灰白色固形物（0.078 g、35%）として単離された。

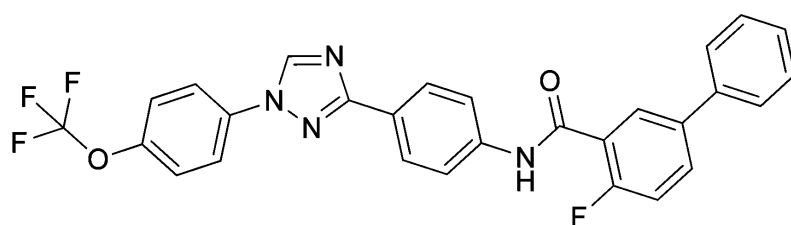
【0 1 2 6】

4-フルオロ-N-(4-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)フェニル)-[1,1'-ビフェニル]-3-カルボキサミド (F 4 8)

【0 1 2 7】

30

【化 2 8】



【0 1 2 8】

白色固形物（0.107 g、49%）として単離された。

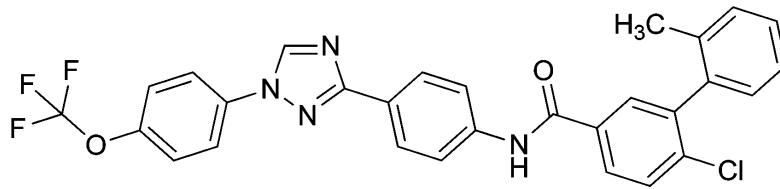
40

【0 1 2 9】

6-クロロ-2'-メチル-N-(4-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)フェニル)-[1,1'-ビフェニル]-3-カルボキサミド (F 3 2)

【0 1 3 0】

【化 2 9】



【0 1 3 1】

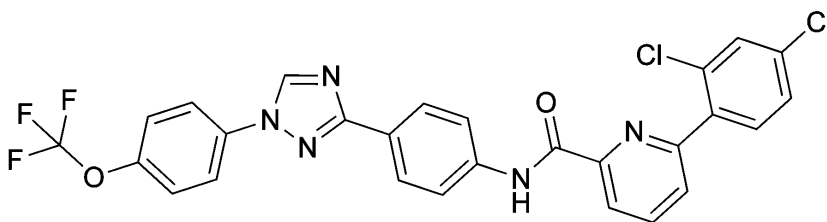
白色固形物 (0.149 g、66%) として単離された。

【0 1 3 2】

6-(2,4-ジクロロフェニル)-N-(4-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)フェニル)ピコリンアミド (F18)

【0 1 3 3】

【化 3 0】



【0 1 3 4】

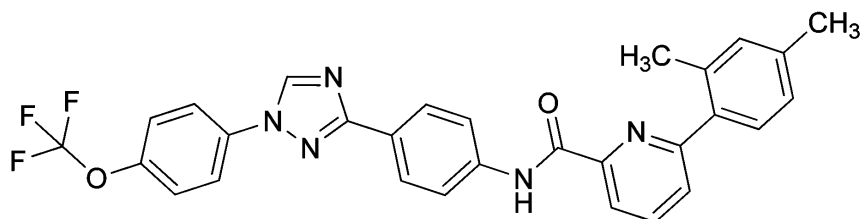
灰白色固形物 (0.041 g、16%) として単離された。

【0 1 3 5】

6-(2,4-ジメチルフェニル)-N-(4-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)フェニル)ピコリンアミド (F2)

【0 1 3 6】

【化 3 1】



【0 1 3 7】

黄褐色固形物 (0.107 g、45%) として単離された。

【0 1 3 8】

6-(オトリル)-N-(4-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)フェニル)ピコリンアミド (F33)

【0 1 3 9】

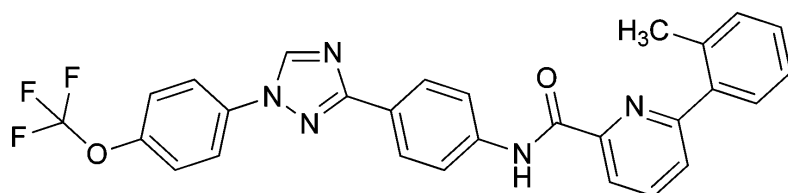
10

20

30

40

【化 3 2】



【0 1 4 0】

白色固形物（0.161 g、68%）として単離された。

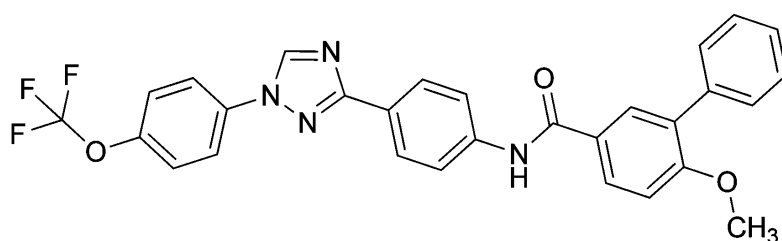
10

【0 1 4 1】

6-メトキシ-N-(4-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)フェニル)-[1,1'-ビフェニル]-3-カルボキサミド (F 37)

【0 1 4 2】

【化 3 3】



20

【0 1 4 3】

白色固形物（0.206 g、70%）として単離された。

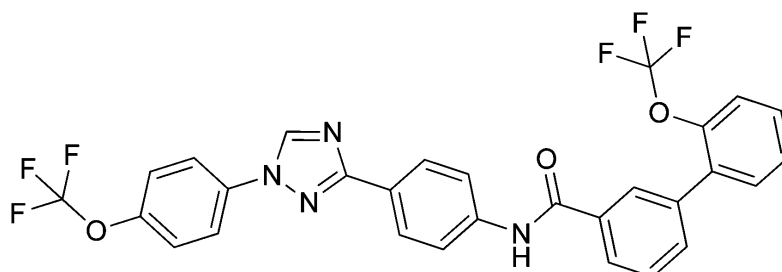
【0 1 4 4】

2'-(トリフルオロメトキシ)-N-(4-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)フェニル)-[1,1'-ビフェニル]-3-カルボキサミド (F 1)

30

【0 1 4 5】

【化 3 4】



40

【0 1 4 6】

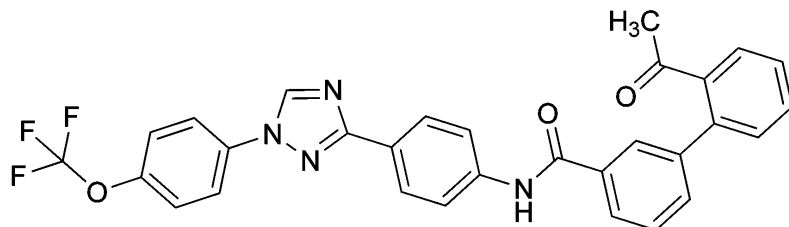
灰白色固形物（0.087 g、34%）として単離された。

【0 1 4 7】

2'-アセチル-N-(4-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)フェニル)-[1,1'-ビフェニル]-3-カルボキサミド (F 41)

【0 1 4 8】

【化 3 5】



【0149】

灰白色固形物（0.074 g、30%）として単離された。

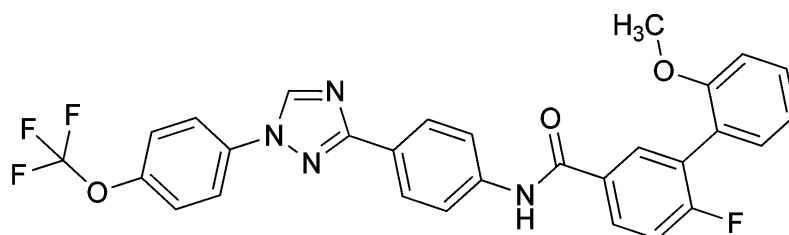
10

【0150】

6-フルオロ-2'-メトキシ-N-(4-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)フェニル)-[1,1'-ビフェニル]-3-カルボキサミド (F44)

【0151】

【化 3 6】



20

【0152】

白色固形物（0.160 g、46%）として単離された。

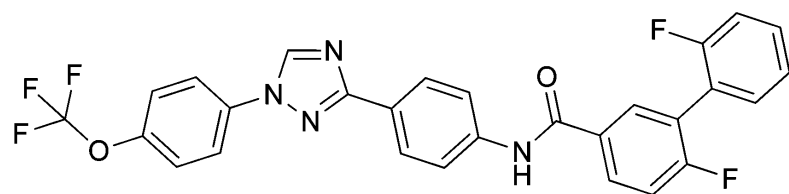
【0153】

2',6-ジフルオロ-N-(4-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)フェニル)-[1,1'-ビフェニル]-3-カルボキサミド (F28)

30

【0154】

【化 3 7】



【0155】

灰白色固形物（0.121 g、49%）として単離された。

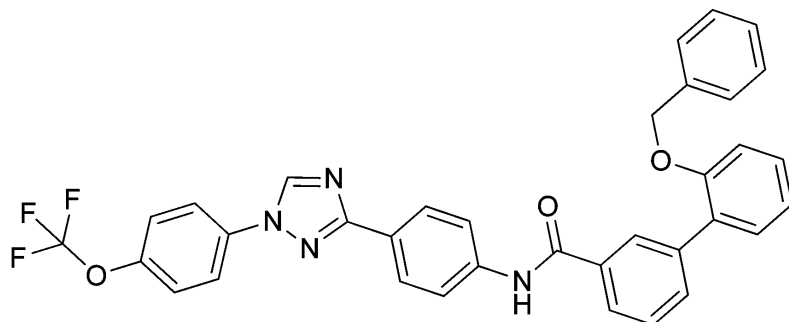
40

【0156】

2'-(ベンジルオキシ)-N-(4-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)フェニル)-[1,1'-ビフェニル]-3-カルボキサミド (F3)

【0157】

【化 3 8】



10

【0 1 5 8】

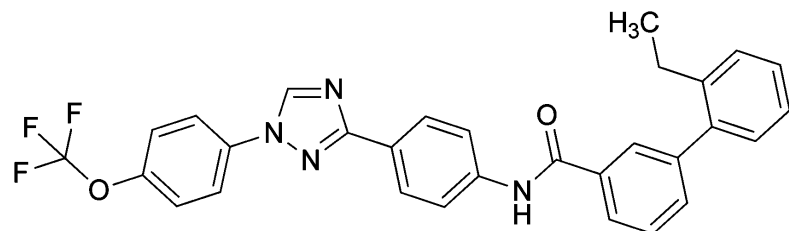
白色固形物 (0.101 g、35%) として単離された。

【0 1 5 9】

2'-エチルーN-(4-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)フェニル)-[1,1'-ビフェニル]-3-カルボキサミド (F 8)

【0 1 6 0】

【化 3 9】



20

【0 1 6 1】

白色固形物 (0.089 g、30%) として単離された。

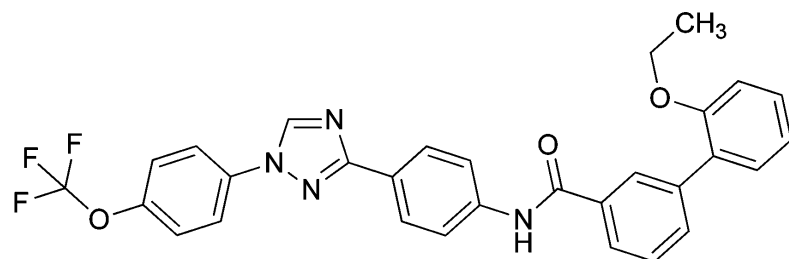
【0 1 6 2】

2'-エトキシ-N-(4-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)フェニル)-[1,1'-ビフェニル]-3-カルボキサミド (F 3 8)

30

【0 1 6 3】

【化 4 0】



40

【0 1 6 4】

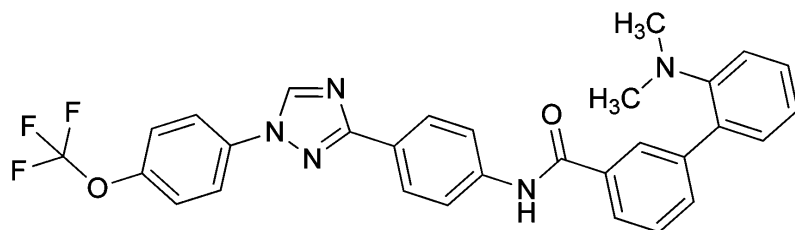
白色固形物 (0.209 g、73%) として単離された。

【0 1 6 5】

2'-(ジメチルアミノ)-N-(4-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)フェニル)-[1,1'-ビフェニル]-3-カルボキサミド (F 1 0)

【0 1 6 6】

【化 4 1】



【0167】

黄色油状物 (0.084 g、29%) として単離された。

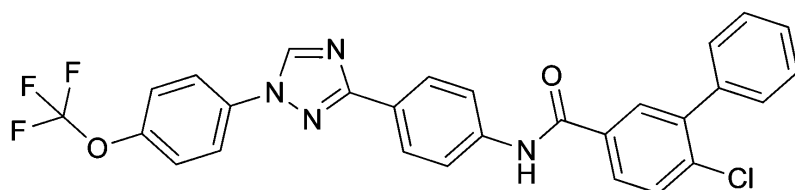
10

【0168】

6-クロロ-N-(4-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)フェニル)-[1,1'-ビフェニル]-3-カルボキサミド (F34)

【0169】

【化 4 2】



20

【0170】

黄褐色固形物 (0.141 g、59%) として単離された。

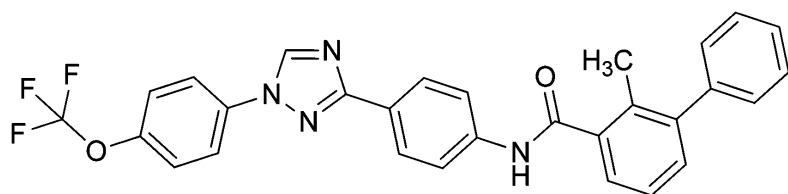
【0171】

2-メチル-N-(4-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)フェニル)-[1,1'-ビフェニル]-3-カルボキサミド (F14)

【0172】

【化 4 3】

30



【0173】

灰白色固形物 (0.090 g、40%) として単離された。

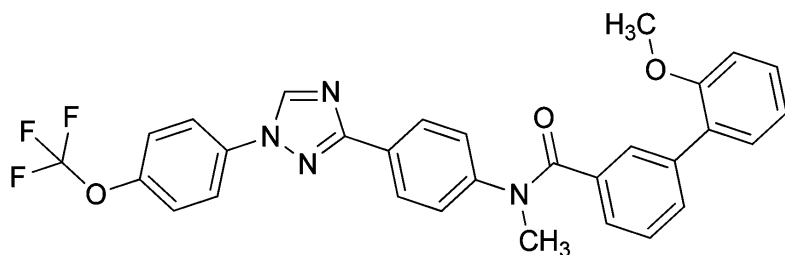
【0174】

実施例 5：2'-メトキシ-N-メチル-N-(4-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)フェニル)-[1,1'-ビフェニル]-3-カルボキサミド (F19) の製造

40

【0175】

【化 4 4】



【0176】

10

テトラヒドロフラン（2 mL）に溶解された 2'-メトキシ-N-（4-（1-（4-（トリフルオロメトキシ）フェニル）-1H-1, 2, 4-トリアゾル-3-イル）フェニル）-〔1, 1'-ビフェニル〕-3-カルボキサミド（F22）（0.080 g、0.15 mmol）の溶液に水素化ナトリウム（60 重量%、0.0096 g、0.24 mmol）を添加した。室温で 20 分間攪拌した後にヨウ化メチル（0.025 mL、0.40 mmol）を添加し、そして該混合物を 18 時間攪拌した。飽和水性重炭酸ナトリウムを該溶液に添加し、次いで酢酸エチル（3×5 mL）で抽出した。合わせられた有機抽出液を無水硫酸マグネシウムで乾燥しかつ濃縮した。溶出液として 0-40% 酢酸エチル／1:1 ヘキサン／ジクロロメタンを使用するフラッシュカラムクロマトグラフィーによる精製が、表題化合物を無色油状物（0.039 g、45%）として提供した。

20

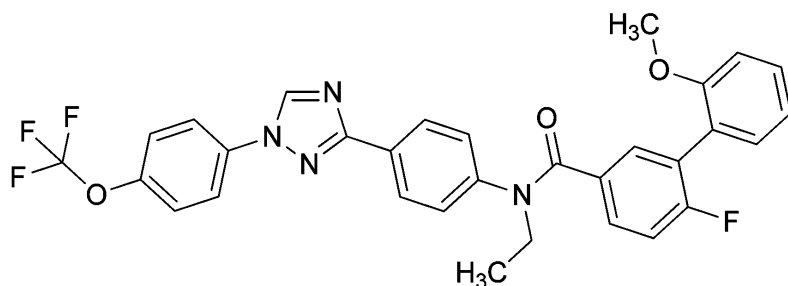
【0177】

以下の実施例は実施例 5 に開示される手順に従って製造した：

N-エチル-6-フルオロ-2'-メトキシ-N-（4-（1-（4-（トリフルオロメトキシ）フェニル）-1H-1, 2, 4-トリアゾル-3-イル）フェニル）-〔1, 1'-ビフェニル〕-3-カルボキサミド（F64）

【0178】

【化 4 5】



30

【0179】

無色油状物（0.163 g、86%）として単離された。

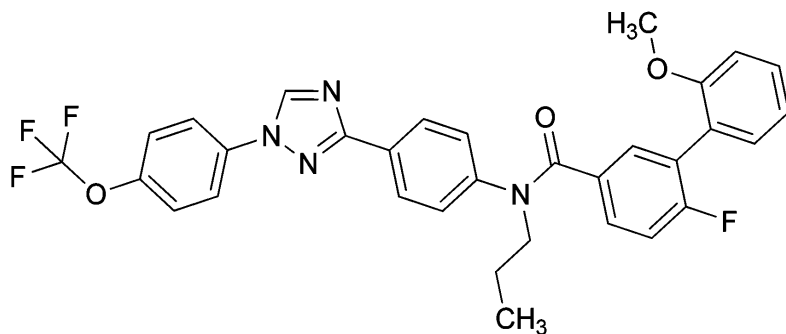
【0180】

6-フルオロ-2'-メトキシ-N-プロピル-N-（4-（1-（4-（トリフルオロメトキシ）フェニル）-1H-1, 2, 4-トリアゾル-3-イル）フェニル）-〔1, 1'-ビフェニル〕-3-カルボキサミド（F65）

40

【0181】

【化 4 6】



10

【0182】

無色油状物（0.160 g、89%）として単離された。

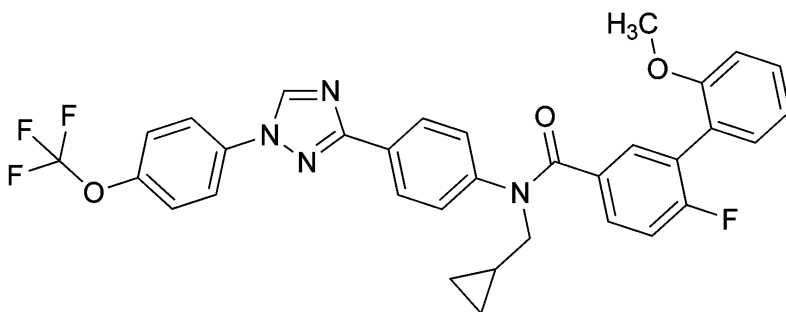
【0183】

N-(シクロプロピルメチル)-6-フルオロ-2'-メトキシ-N-(4-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)フェニル)-[1,1'-ビフェニル]-3-カルボキサミド (F66)

【0184】

【化 4 7】

20



【0185】

無色油状物（0.040 g、22%）として単離された。

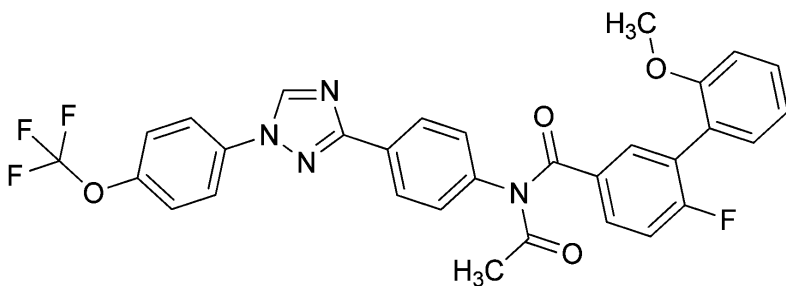
30

【0186】

N-アセチル-6-フルオロ-2'-メトキシ-N-(4-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)フェニル)-[1,1'-ビフェニル]-3-カルボキサミド (F67)

【0187】

【化 4 8】



40

【0188】

無水酢酸を求電子試薬として使用した。無色油状物（0.214 g、83%）として単離された。

【0189】

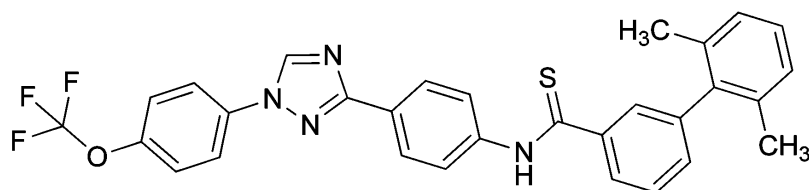
実施例 6：2', 6'-ジメチル-N-(4-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フ

50

エニル) - 1H-1, 2, 4-トリアゾル-3-イル) フェニル) - [1, 1'-ビフェニル] - 3-カルボチオアミド (F46) の製造

【0190】

【化49】



10

【0191】

テトラヒドロフラン (3 mL) に溶解された 2', 6'-ジメチル-N-(4-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1, 2, 4-トリアゾル-3-イル)フェニル)-[1, 1'-ビフェニル]-3-カルボキサミド (F12) (0.132 g、0.250 mmol) の溶液に、2, 4-ビス(4-メトキシフェニル)-1, 3, 2, 4-ジチアジホスフェタン 2, 4-ジスルフィド (ローソン試薬) (0.129 g、0.320 mmol) を添加し、そして該混合物を 60℃ で 18 時間加熱した。追加の 2, 4-ビス(4-メトキシフェニル)-1, 3, 2, 4-ジチアジホスフェタン 2, 4-ジスルフィド (0.262 g、0.65 mmol) を添加し、そして該反応を、反応が完了であることが確認されるまで 60℃ で加熱させた。該反応混合物を Celite (登録商標) 上で濃縮し、そして 0-100% 酢酸エチル / (1:1 ヘキサン / ジクロロメタン) を使用するフラッシュカラムクロマトグラフィーにより精製した。表題化合物を黄色油状物 (0.043 g、30%) として得た。

20

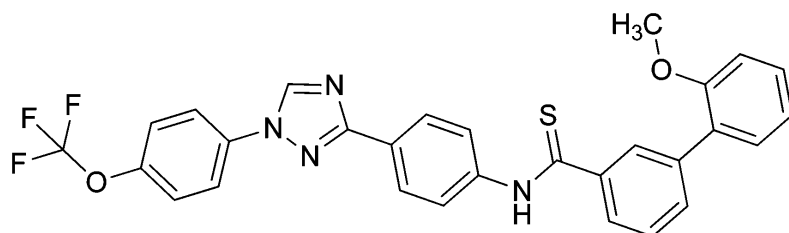
【0192】

以下の実施例は実施例 6 に開示される手順に従って製造した：

2'-メトキシ-N-(4-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1, 2, 4-トリアゾル-3-イル)フェニル)-[1, 1'-ビフェニル]-3-カルボチオアミド (F21)

【0193】

【化50】



30

【0194】

黄色固形物 (0.087 g、48%) として単離された。

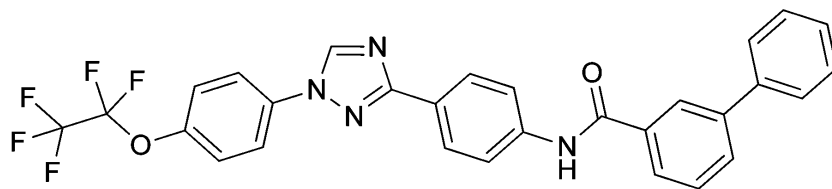
40

【0195】

実施例 7：N-(4-(1-(4-(パーフルオロエトキシ)フェニル)-1H-1, 2, 4-トリアゾル-3-イル)フェニル)-[1, 1'-ビフェニル]-3-カルボキサミド (F45) の製造

【0196】

【化 5 1】



【0197】

ジクロロメタン（4 mL）中の〔1，1′-ビフェニル〕-3-カルボン酸（0.172 g、0.870 mmol）の混合物に塩化オキサリル（0.150 mL、1.75 mmol）およびジメチルホルムアミド（2 滴）を添加した。室温で3時間攪拌した後に該反応を乾固まで濃縮した。生じる黄色油状物を無水テトラヒドロフラン（1 mL）に溶解し、そしてテトラヒドロフラン（3 mL）およびジイソプロピルエチルアミン（0.150 mL、0.860 mmol）に溶解された4-（1-（4-（パーフルオロエトキシ）フェニル）-1H-1，2，4-トリアゾル-3-イル）アニリン（0.102 g、0.280 mmol）（第WO 2009102736号明細書）の溶液に添加し、そして室温で18時間攪拌した。該反応を酢酸エチル（10 mL）で希釈しかつ飽和水性重炭酸ナトリウムで洗浄した。該水性洗液を酢酸エチル（2×5 mL）で抽出し、そして合わせられた有機層を無水硫酸マグネシウムで乾燥した。該溶液をCelite（登録商標）上で濃縮し、そして溶出液として0-100%酢酸エチル／（1：1 ヘキサン／ジクロロメタン）を使用するフラッシュカラムクロマトグラフィーにより精製した。適切な画分を濃縮して表題化合物を白色固形物（0.109 g、68%）として生じた。

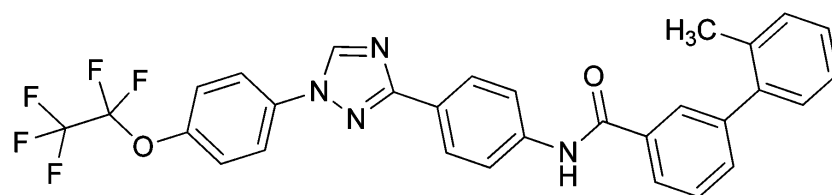
【0198】

以下の実施例は実施例7に開示される手順に従って製造した：

2′-メチル-N-（4-（1-（4-（パーフルオロエトキシ）フェニル）-1H-1，2，4-トリアゾル-3-イル）フェニル）-〔1，1′-ビフェニル〕-3-カルボキサミド（F35）

【0199】

【化 5 2】



【0200】

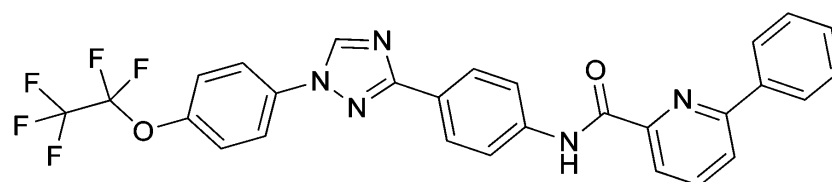
白色固形物（0.095 g、56%）として単離された。

【0201】

N-（4-（1-（4-（パーフルオロエトキシ）フェニル）-1H-1，2，4-トリアゾル-3-イル）フェニル）-6-フェニルピコリンアミド（F47）

【0202】

【化 5 3】



【0203】

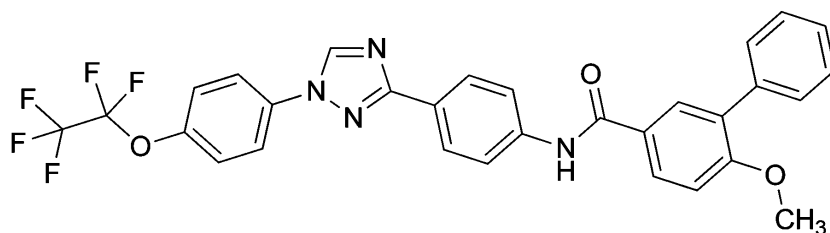
白色固形物 (0.102 g、67%) として単離された。

【0204】

6-メトキシ-N-(4-(1-(4-(パーフルオロエトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)フェニル)-[1,1'-ビフェニル]-3-カルボキサミド (F13)

【0205】

【化54】



10

【0206】

白色固形物 (0.094 g、42%) として単離された。

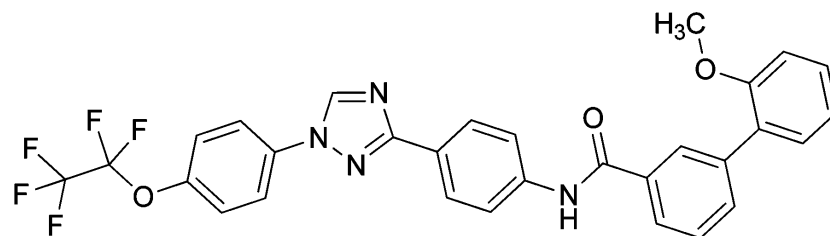
【0207】

2'-メトキシ-N-(4-(1-(4-(パーフルオロエトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)フェニル)-[1,1'-ビフェニル]-3-カルボキサミド (F26)

20

【0208】

【化55】



30

【0209】

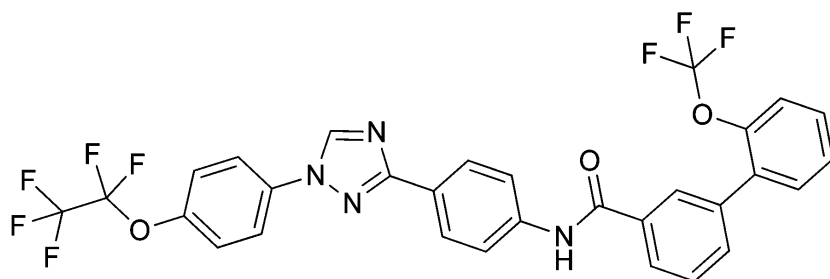
白色固形物 (0.284 g、67%) として単離された。

【0210】

N-(4-(1-(4-(パーフルオロエトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)フェニル)-2'-(トリフルオロメトキシ)-[1,1'-ビフェニル]-3-カルボキサミド (F36)

【0211】

【化56】



40

【0212】

灰白色固形物 (0.057 g、22%) として単離された。

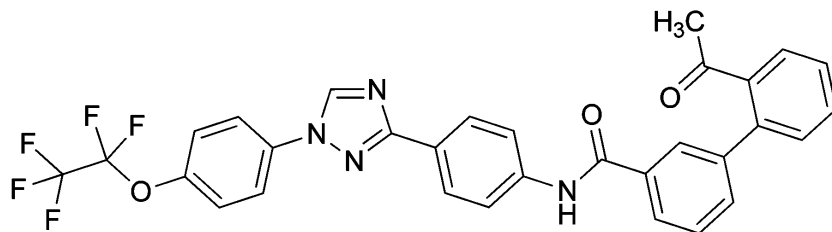
【0213】

50

2'-アセチル-N-(4-(1-(4-(パーフルオロエトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)フェニル)-[1,1'-ビフェニル]-3-カルボキサミド (F9)

【0214】

【化57】



10

【0215】

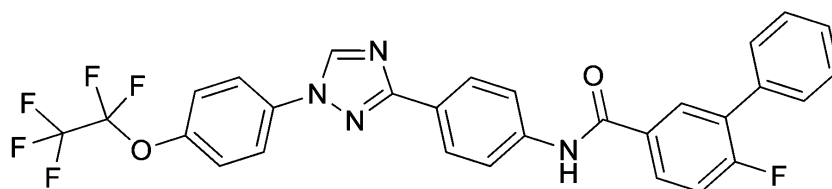
灰白色固形物 (0.110 g、52%) として単離された。

【0216】

6-フルオロ-N-(4-(1-(4-(パーフルオロエトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)フェニル)-[1,1'-ビフェニル]-3-カルボキサミド (F40)

【0217】

【化58】



20

【0218】

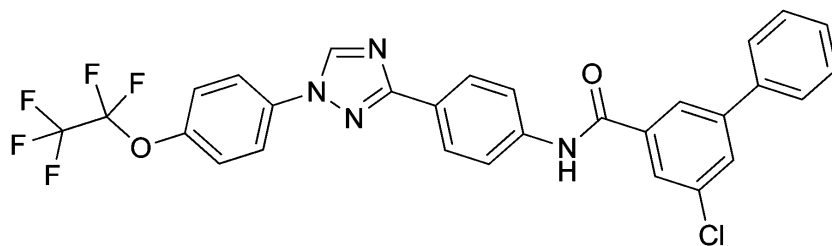
灰白色固形物 (0.138 g、63%) として単離された。

【0219】

5-クロロ-N-(4-(1-(4-(パーフルオロエトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)フェニル)-[1,1'-ビフェニル]-3-カルボキサミド (F6)

【0220】

【化59】



40

【0221】

灰白色固形物 (0.141 g、63%) として単離された。

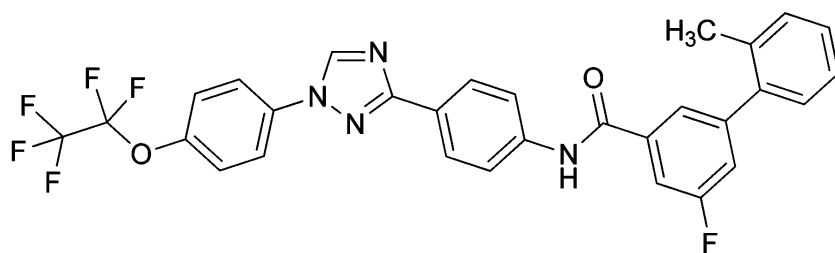
【0222】

5-フルオロ-2'-メチル-N-(4-(1-(4-(パーフルオロエトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)フェニル)-[1,1'-ビフェニル]-3-カルボキサミド (F42)

50

【0223】

【化60】



10

【0224】

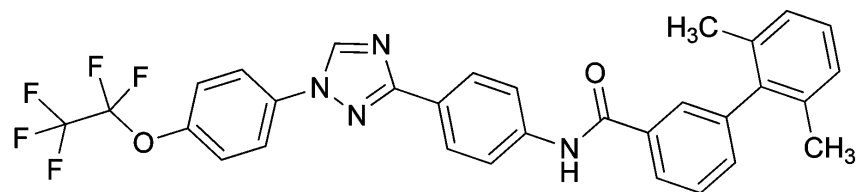
灰白色固形物（0.160 g、70％）として単離された。

【0225】

2',6'-ジメチル-N-(4-(1-(4-(パーフルオロエトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)フェニル)-[1,1'-ビフェニル]-3-カルボキサミド (F31)

【0226】

【化61】



20

【0227】

灰白色固形物（0.140 g、63％）として単離された。

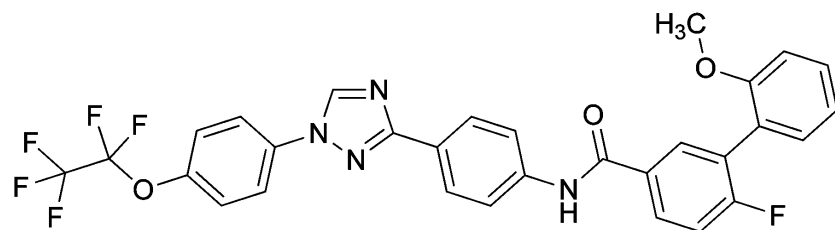
【0228】

6-フルオロ-2'-メトキシ-N-(4-(1-(4-(パーフルオロエトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)フェニル)-[1,1'-ビフェニル]-3-カルボキサミド (F7)

30

【0229】

【化62】



40

【0230】

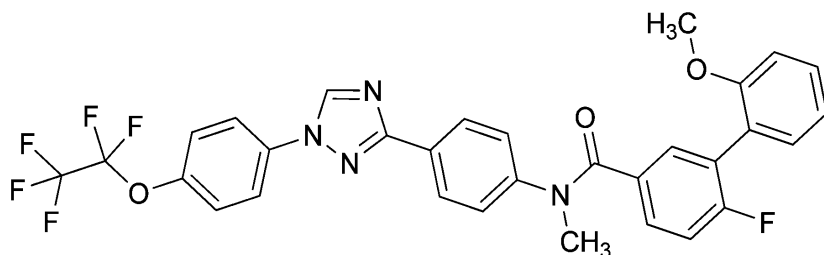
灰白色固形物（0.128 g、62％）として単離された。

【0231】

実施例8：5-フルオロ-N,2'-ジメチル-N-(4-(1-(4-(パーフルオロエトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)フェニル)-[1,1'-ビフェニル]-3-カルボキサミド (F29) の製造

【0232】

【化 6 3】



【0 2 3 3】

10

テトラヒドロフラン（2 mL）に溶解された5-フルオロ-2'-メチル-N-（4-（1-（4-（パーフルオロエトキシ）フェニル）-1H-1, 2, 4-トリアゾル-3-イル）フェニル）-〔1, 1'-ビフェニル〕-3-カルボキサミド（F 4 2）（0.070 g、0.12 mmol）の溶液に水素化ナトリウム（60重量%、0.0096 g、0.24 mmol）を添加した。室温で20分間攪拌した後にヨウ化メチル（0.025 mL、0.40 mmol）を添加し、そして該混合物を2.5時間攪拌した。飽和水性重炭酸ナトリウムを該溶液に添加し、次いで酢酸エチル（3×5 mL）で抽出した。合わせられた有機抽出液を無水硫酸マグネシウムで乾燥しかつ濃縮した。溶出液として0-40%酢酸エチル／（1：1 ヘキサン／ジクロロメタン）を使用するフラッシュカラムクロマトグラフィーによる精製が、表題化合物を無色油状物（0.044 g、58%）として提供した。

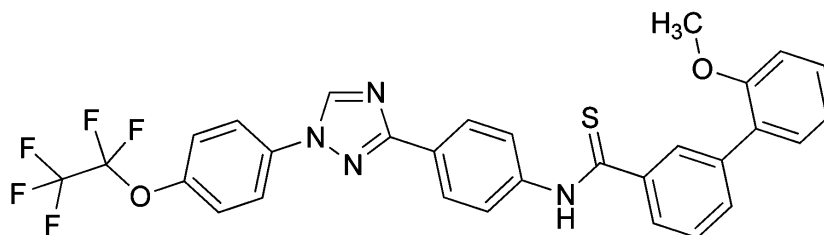
20

【0 2 3 4】

実施例 9：2'-メトキシ-N-（4-（1-（4-（パーフルオロエトキシ）フェニル）-1H-1, 2, 4-トリアゾル-3-イル）フェニル）-〔1, 1'-ビフェニル〕-3-カルボチオアミド（F 2 3）の製造

【0 2 3 5】

【化 6 4】



30

【0 2 3 6】

テトラヒドロフラン（2 mL）に溶解された2'-メトキシ-N-（4-（1-（4-（パーフルオロエトキシ）フェニル）-1H-1, 2, 4-トリアゾル-3-イル）フェニル）-〔1, 1'-ビフェニル〕-3-カルボキサミド（F 2 6）（0.132 g、0.230 mmol）の溶液に、2, 4-ビス（4-メトキシフェニル）-1, 3, 2, 4-ジチアジホスフェタン2, 4-ジスルフィド（0.129 g、0.320 mmol）を添加し、そして該混合物を60℃で18時間加熱した。追加の2, 4-ビス（4-メトキシフェニル）-1, 3, 2, 4-ジチアジホスフェタン2, 4-ジスルフィド（0.074 g、0.18 mmol）および該反応を、反応が完了であることが確認されるまで還流で加熱させた。該反応混合物をCelite（登録商標）上で濃縮し、そして0-100%酢酸エチル／（1：1 ヘキサン／ジクロロメタン）を使用するフラッシュカラムクロマトグラフィーにより精製した。表題化合物を黄色固形物（0.071 g、49%）として得た。

40

【0 2 3 7】

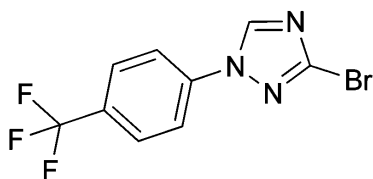
実施例 10：3-ブロモ-1-（4-（トリフルオロメチル）フェニル）-1H-1, 2

50

， 4-トリアゾール（C3）の製造

【0238】

【化65】



【0239】

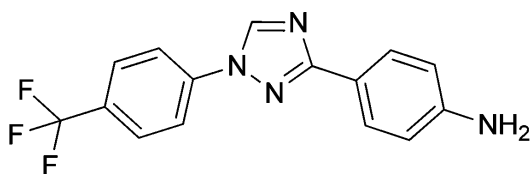
3-ブロモ-1-(4-イソプロポキシフェニル)-1H-1,2,4-トリアゾール (7.15 g、48.3 mmol)、ヨウ化銅(I) (1.25 g、6.56 mmol)、炭酸セシウム (18.9 g、58.0 mmol) および1-ヨード-4-(トリフルオロメチル)ベンゼン (8.29 g、28.8 mmol) をジメチルスルホキシド (50 mL) 中に置き、そして窒素で10分間脱気した。該溶液を100℃で20時間加熱した。室温に冷却した後、該反応混合物を酢酸エチルで希釈しかつCelite (登録商標) で濾過した。生じるフィルターケーキを追加の酢酸エチル (100 mL) ですすいだ。飽和水性塩化アンモニウムを濾液に添加し、それをその後30分間攪拌した。層を分離しそして水層を酢酸エチル (2×50 mL) で抽出した。合わせられた有機抽出液を無水硫酸マグネシウムで乾燥しかつCelite (登録商標) 上で濃縮した。溶出液として0-100%酢酸エチル/ヘキサンを使用するフラッシュカラムクロマトグラフィーによる精製が、表題化合物を白色固形物 (5.64 g、64%) : mp 87-89℃; ¹H NMR (400 MHz、CDCl₃) δ 8.53 (s、1H)、7.85-7.77 (m、4H); ESI-MS m/z 292 ([M+H]⁺) として提供した。

【0240】

実施例11: 4-(1-(4-(トリフルオロメチル)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾール-3-イル)アニリン (C4) の製造

【0241】

【化66】



【0242】

3-ブロモ-1-(4-(トリフルオロメチル)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾール (C3) (8.64 g、29.6 mmol)、4-(4,4,5,5-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロラン-2-イル)アニリン (7.42 g、33.9 mmol)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0) (3.30 g、2.86 mmol) および炭酸カリウム (7.82 g、56.6 mmol) を1,2-ジメトキシエタン (75 mL) および水 (18 mL) 中に置き、そして該混合物を窒素で10分間脱気した。該反応混合物を120℃で16時間加熱した。該反応を室温に冷却しかつ酢酸エチルで希釈した。結果として生じる塩を濾過しかつ濾過された層を分離した。水層を酢酸エチルで分離した (2回)。合わせられた有機層を無水硫酸マグネシウムで乾燥しかつCelite (登録商標) 上で濃縮した。溶出液として0-100%酢酸エチル/ヘキサンを使用するフラッシュカラムクロマトグラフィーによる精製が、表題化合物を黄色固形物 (5.34 g、58%) : ¹H NMR (400 MHz、CDCl₃) δ 8.60 (s、1H)、8.03-7.97 (m、2H)、7.88 (d、J=8.4 Hz、2H)、7.77 (d、J=8.5 Hz、2H)、6.79-6.74 (m、2H)、3.88 (

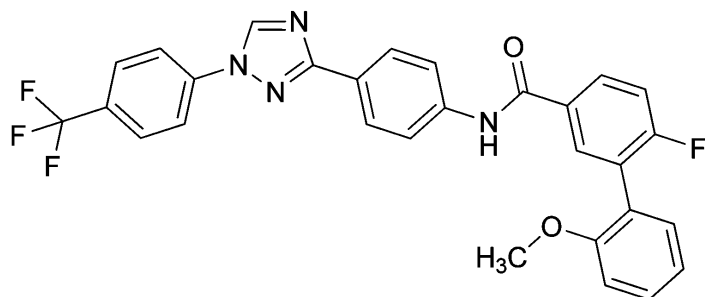
s、2H)； ^{13}C NMR (101 MHz、 CDCl_3) δ 163.94、148.07、139.68、129.67、129.34、128.04、127.07、127.04、127.00、126.96、125.05、120.50、119.35、114.87； ^{19}F NMR (376 MHz、 CDCl_3) δ -62.43；ESI MS m/z 305 ($[\text{M}+\text{H}]^+$)として提供した。

【0243】

実施例12：6-フルオロ-2'-メトキシ-N-(4-(1-(4-(トリフルオロメチル)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)フェニル)-[1,1'-ビフェニル]-3-カルボキサミド(F20)の製造

【0244】

【化67】



【0245】

ジクロロメタン(3 mL)中の6-フルオロ-2'-メトキシ-[1,1'-ビフェニル]-3-カルボン酸(0.086 g、0.35 mmol)の混合物に塩化オキサリル(0.070 mL、0.82 mmol)およびジメチルホルムアミド(2滴)を添加した。室温で3時間攪拌した後に該反応を乾固まで濃縮した。生じる黄色油状物を無水テトラヒドロフラン(2 mL)に溶解し、そしてテトラヒドロフラン(3 mL)およびジイソプロピルエチルアミン(0.20 mL、1.15 mmol)に溶解された4-(1-(4-(トリフルオロメチル)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)アニリン(C4)(0.16 mg、0.54 mmol)の溶液に添加しかつ室温で18時間攪拌した。該反応を酢酸エチル(10 mL)で希釈しかつ飽和水性重炭酸ナトリウムで洗浄した。該水性洗液を酢酸エチル(2×5 mL)で抽出し、そして合わせられた有機層を無水硫酸マグネシウムで乾燥した。該溶液をCelite(登録商標)上で濃縮し、そして溶出液として0-100%酢酸エチル/(1:1ヘキサン/ジクロロメタン)を使用するフラッシュカラムクロマトグラフィーにより精製した。適切な画分を濃縮して、表題化合物を白色固形物(0.071 g、23%)として生じた。

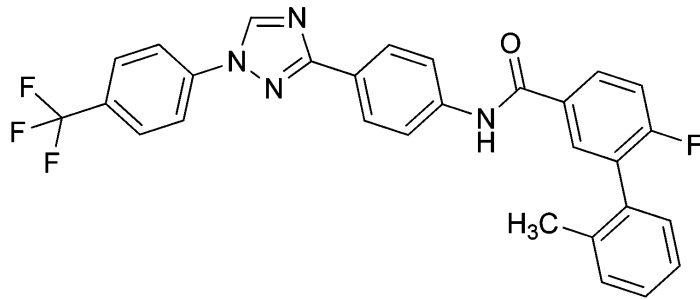
【0246】

以下の実施例は実施例12に開示される手順に従って製造した：

6-フルオロ-2'-メチル-N-(4-(1-(4-(トリフルオロメチル)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)フェニル)-[1,1'-ビフェニル]-3-カルボキサミド(F58)

【0247】

【化 6 8】



10

【0 2 4 8】

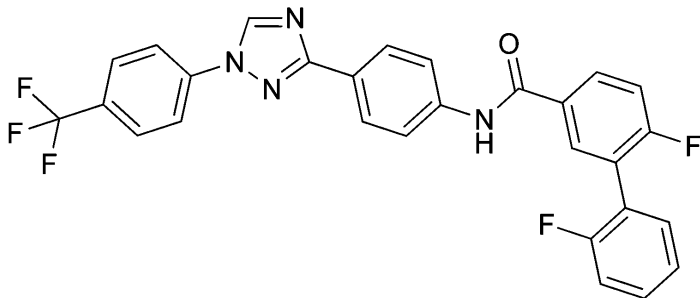
白色固形物 (0.300 g、58%) として単離された。

【0 2 4 9】

2', 6-ジフルオロ-N-(4-(1-(4-(トリフルオロメチル)フェニル)-1H-1, 2, 4-トリアゾル-3-イル)フェニル)-[1, 1'-ビフェニル]-3-カルボキサミド (F 59)

【0 2 5 0】

【化 6 9】



20

【0 2 5 1】

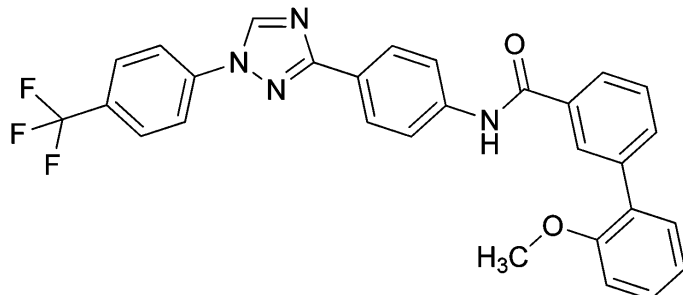
白色固形物 (0.149 g、47%) として単離された。

【0 2 5 2】

2'-メトキシ-N-(4-(1-(4-(トリフルオロメチル)フェニル)-1H-1, 2, 4-トリアゾル-3-イル)フェニル)-[1, 1'-ビフェニル]-3-カルボキサミド (F 60)

【0 2 5 3】

【化 7 0】



40

【0 2 5 4】

灰白色固形物 (0.192 g、58%) として単離された。

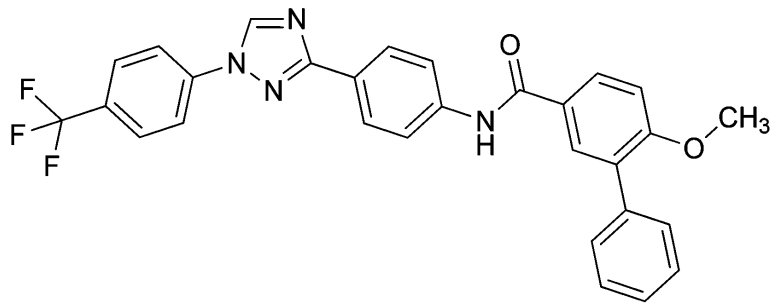
【0 2 5 5】

6-メトキシ-N-(4-(1-(4-(トリフルオロメチル)フェニル)-1H-1, 2, 4-トリアゾル-3-イル)フェニル)-[1, 1'-ビフェニル]-3-カルボキサミド (F 61)

50

【0256】

【化71】



10

【0257】

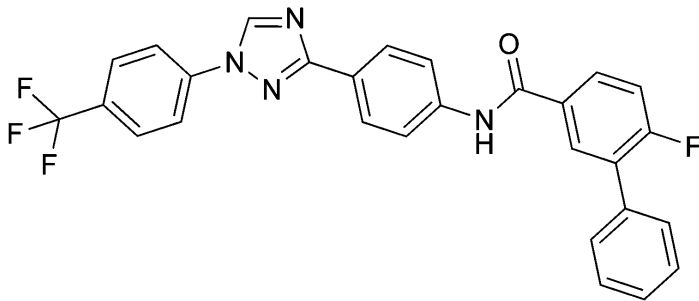
白色固形物（0.162 g、42%）として単離された。

【0258】

6-フルオロ-N-(4-(1-(4-(トリフルオロメチル)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)フェニル)-[1,1'-ビフェニル]-3-カルボキサミド (F62)

【0259】

【化72】



20

【0260】

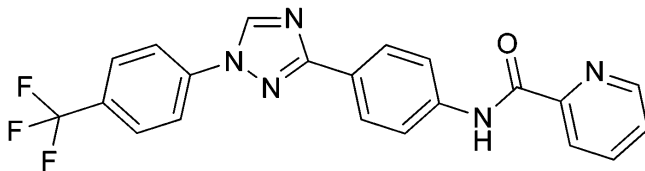
白色固形物（0.068 g、25%）として単離された。

【0261】

N-(4-(1-(4-(トリフルオロメチル)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)フェニル)ピコリンアミド (F68)

【0262】

【化73】



40

【0263】

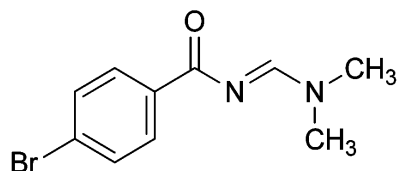
白色固形物（0.097 g、40%）として単離された。

【0264】

実施例13：(E)-4-ブロモ-N-((ジメチルアミノ)メチレン)ベンズアミド (C5)の製造

【0265】

【化 7 4】



【0 2 6 6】

ジメチルホルムアミドジメチルアセタール（40 mL）中の4-ブロモベンズアミド（21.9 g、109 mmol）を5時間還流した。該溶液を室温に冷却しかつ濃縮した。ヘキサンを残渣に添加しかつ30分間攪拌した。固形物を濾過し、ヘキサンですすぎかつ一夜乾燥して、表題化合物を黄褐色固形物（17.2 g、59%）：mp 103–106 °C；¹H NMR（400 MHz、CDCl₃）δ 8.63（s、1H）、8.17–8.11（m、2H）、7.57–7.52（m、2H）、3.21（dd、J=7.2、0.5 Hz、6H）；ESI MS m/z 257（[M+2H]⁺）として提供した。

10

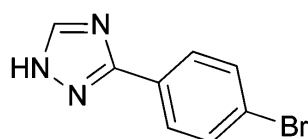
【0 2 6 7】

実施例 14：3-（4-ブロモフェニル）-1H-1,2,4-トリアゾール（C6）の製造

【0 2 6 8】

【化 7 5】

20



【0 2 6 9】

酢酸（35 mL）中の（E）-4-ブロモ-N-（（ジメチルアミノ）メチレン）ベンズアミド（C5）（17.2 g、67.3 mmol）を氷浴中で冷却した。ヒドラジーン水和物（6.50 mL、104 mmol）を、活発に攪拌しながらゆっくりと添加した。白色固形物が生じ始めた。該反応を90 °Cで3時間加熱した。該溶液を冷却しかつ冷水（150 mL）中に注いだ。沈殿物を濾過し、冷水で洗浄しかつ真空下に一夜乾燥して、表題化合物を白色固形物（14.5 g、91%）：mp > 200 °C（分解）；¹H NMR（400 MHz、DMSO-d₆）δ 14.24（s、1H）、8.52（s、1H）、8.04–7.91（m、2H）、7.75–7.63（m、2H）；ESI MS m/z 224（[M]⁺）として提供した。

30

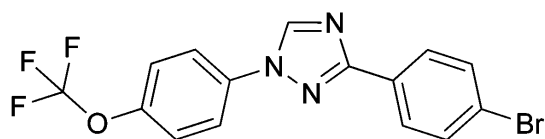
【0 2 7 0】

実施例 15：3-（4-ブロモフェニル）-1-（4-（トリフルオロメトキシ）フェニル）-1H-1,2,4-トリアゾール（C7）の製造

【0 2 7 1】

【化 7 6】

40



【0 2 7 2】

丸底フラスコ中の3-（4-ブロモフェニル）-1H-1,2,4-トリアゾール（C6）（10.9 g、48.5 mmol）、ヨウ化銅（I）（2.38 g、12.5 mmol）および炭酸セシウム（30.3 g、93.0 mmol）を窒素で洗い流した。ジメチ

50

ルスルホキシド（85 mL）、次いで1-ヨード-4-（トリフルオロメトキシ）ベンゼン（13.2 g、45.8 mmol）を添加した。該反応を5分間脱気し、その後100℃で3日間加熱した。該反応を室温に冷却し、酢酸エチルで希釈し、そしてCelite（登録商標）の栓で濾過し酢酸エチルですすいだ。濾液に飽和塩化アンモニウムを添加しかつ1.5時間攪拌した。層を分離しそして水層を酢酸エチルで抽出した（3回）。合わせられた有機層を硫酸マグネシウムで乾燥し、濾過しかつCelite（登録商標）上で濃縮した。溶出液として0-40% EtOAc／ヘキサンを使用するフラッシュカラムクロマトグラフィーによる精製が、表題化合物を灰白色固形物（9.65 g、52%）：mp 109-112℃；¹H NMR（400 MHz、CDCl₃）δ 8.56（s、1H）、8.10-8.03（m、2H）、7.83-7.75（m、2H）、7.64-7.57（m、2H）、7.42-7.35（m、2H）；ESI MS m/z 386（[M+2H]⁺）として提供した。

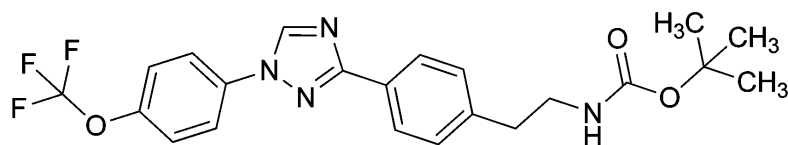
10

【0273】

実施例16：tert-ブチル4-（1-（4-（トリフルオロメトキシ）フェニル）-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル）フェネチルカルバメート（C8）の製造

【0274】

【化77】



20

【0275】

トルエン（4 mL）および水（1 mL）中の3-（4-ブロモフェニル）-1-（4-（トリフルオロメトキシ）フェニル）-1H-1,2,4-トリアゾール（C7）（0.13 g、0.32 mmol）の溶液に、（2-（tert-ブトキシカルボニル）アミノ）エチルトリフルオロホウ酸カリウム（0.082 g、0.33 mmol）、酢酸パラジウム（II）（0.027 g、0.027 mmol）、炭酸セシウム（0.33 g、1.0 mmol）およびジシクロヘキシル（2',6'-ジイソプロポキシ-[1,1'-ビフェニル]-2-イル）ホスフィン（0.016 g、0.034 mmol）を添加し、そして該溶液を窒素下に攪拌しかつ95℃に8時間加熱した。該溶液をその後冷却しかつジエチルエーテル（5 mL）で希釈し、そしてシリカゲルプレカラムに吸着させた。溶出液として0-50%酢酸エチル／ヘキサンを使用するフラッシュカラムクロマトグラフィーが、表題化合物を薄黄褐色固形物（0.095 g、63%）：mp 149-153℃；¹H NMR（400 MHz、CDCl₃）δ 8.56（s、1H）、8.18-8.10（m、2H）、7.84-7.77（m、2H）、7.43-7.35（m、2H）、7.31（d、J=8.2 Hz、2H）、4.58（d、J=8.1 Hz、1H）、3.49-3.34（m、1H）、2.87（t、J=7.0 Hz、1H）、1.44（s、9H）；ESI MS m/z 449（[M+H]⁺）として提供した。

30

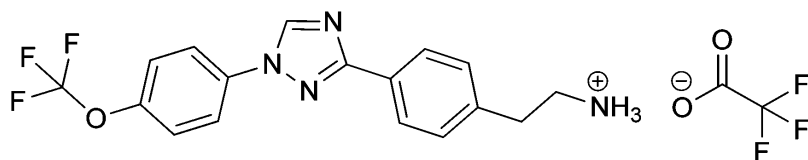
【0276】

実施例17：2-（4-（1-（4-（トリフルオロメトキシ）フェニル）-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル）フェニル）エチルアンモニウムトリフルオロアセテート（C9）の製造

【0277】

40

【化 7 8】



【0 2 7 8】

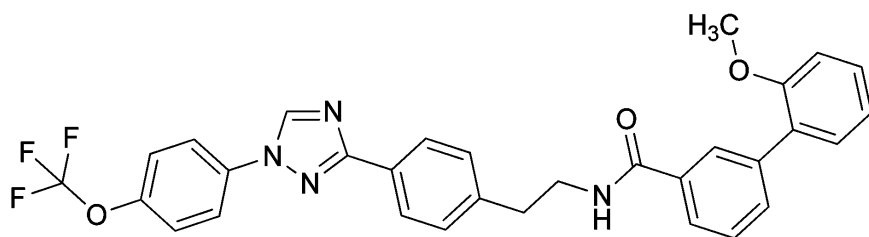
ジクロロメタン（60 mL）中の *tert*-ブチル 4-（1-（4-（トリフルオロメトキシ）フェニル）-1*H*-1, 2, 4-トリアゾル-3-イル）フェネチルカルバメート（C8）（5.76 g、12.8 mmol）にトリフルオロ酢酸（8 mL、104 mmol）を添加し、そして室温で一夜攪拌した。該溶液を濃縮して黄色油状物を生じた。該黄色油状物をジクロロメタンに部分的に溶解しかつ水を添加し、それに際して沈殿物が生じ始めた。飽和重炭酸ナトリウムを添加し、そして沈殿物を濾過しかつジクロロメタンですすいで、表題化合物を白色固形物（5.43 g、87%）：¹H NMR（400 MHz、DMSO-*d*₆）δ 9.41（s、1H）、8.11–8.05（m、4H）、7.98（s、2H）、7.66–7.59（m、2H）、7.43（d、J = 8.3 Hz、2H）、3.12（s、2H）、2.99–2.91（m、2H）；¹⁹F NMR（376 MHz、DMSO-*d*₆）δ –57.00、–73.64；ESI MS *m/z* 349（[M+H]⁺）として提供した。

【0 2 7 9】

実施例 18：2'-メトキシ-N-（4-（1-（4-（トリフルオロメトキシ）フェニル）-1*H*-1, 2, 4-トリアゾル-3-イル）フェネチル）-[1, 1'-ビフェニル]-3-カルボキサミド（F50）の製造

【0 2 8 0】

【化 7 9】



【0 2 8 1】

2'-メトキシ-[1, 1'-ビフェニル]-3-カルボン酸（0.488 g、2.10 mmol）をジクロロメタン（10 mL）に溶解し、そして塩化オキサリル（0.250 mL、2.90 mmol）およびジメチルホルムアミド（2 滴）を添加した。活発な発泡が発生し、そして該混合物を室温で3時間攪拌した。該溶液を濃縮して黄色油状物を生じた。この溶液の半分を、無水テトラヒドロフラン（5.2 mL）およびジイソプロピルエチルアミン（0.970 mL、5.60 mmol）中の2-（4-（1-（4-（トリフルオロメトキシ）フェニル）-1*H*-1, 2, 4-トリアゾル-3-イル）フェニル）エチルアンモニウムトリフルオロアセテート（C9）（0.288 g、0.620 mmol）の溶液に添加した。該反応混合物を室温で一夜攪拌し、飽和重炭酸ナトリウムでクエンチしかつ酢酸エチルで抽出した（3回）。合わせられた有機層を硫酸マグネシウムで乾燥しかつ Celite（登録商標）に吸着させた。溶出液として0–100%酢酸エチル／1：1 ジクロロメタン／ヘキサンを使用するフラッシュカラムクロマトグラフィーによる精製が、表題化合物を白色固形物（0.181 g、49%）として提供した。

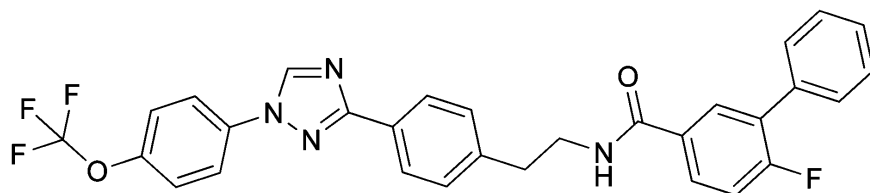
【0 2 8 2】

以下の実施例は実施例 18 に開示される手順に従って製造した：

6-フルオロ-N-(4-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)フェネチル)-[1,1'-ビフェニル]-3-カルボキサミド (F51)

【0283】

【化80】



10

【0284】

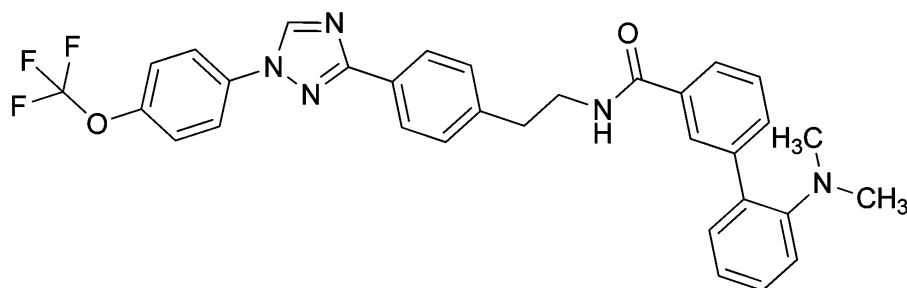
白色固形物 (0.146 g、46%) として単離された。

【0285】

2'-(ジメチルアミノ)-N-(4-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)フェネチル)-[1,1'-ビフェニル]-3-カルボキサミド (F52)

【0286】

【化81】



20

【0287】

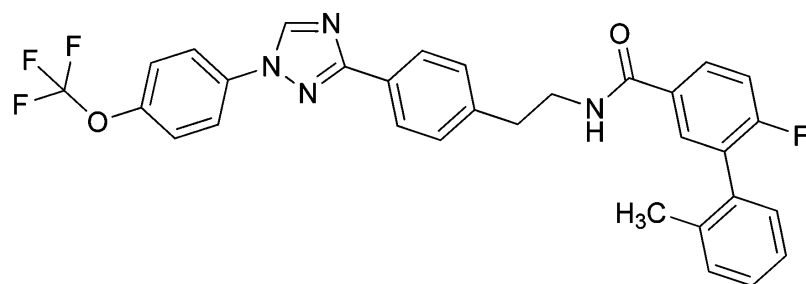
白色固形物 (0.237 g、41%) として単離された。

【0288】

6-フルオロ-2'-メチル-N-(4-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)フェネチル)-[1,1'-ビフェニル]-3-カルボキサミド (F53)

【0289】

【化82】



40

【0290】

白色固形物 (0.049 g、5%) として単離された。

【0291】

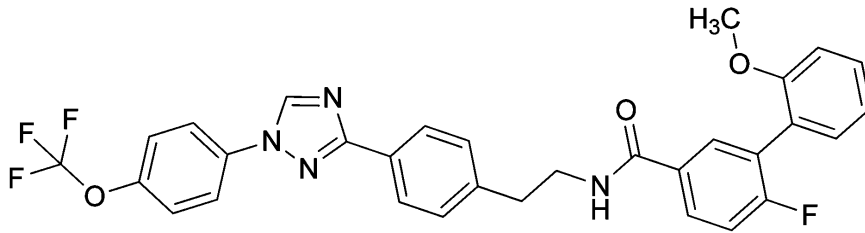
6-フルオロ-2'-メトキシ-N-(4-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)フェネチル)-[1,1'-ビフェ

50

ニル] - 3 - カルボキサミド (F 5 4)

【0 2 9 2】

【化 8 3】



10

【0 2 9 3】

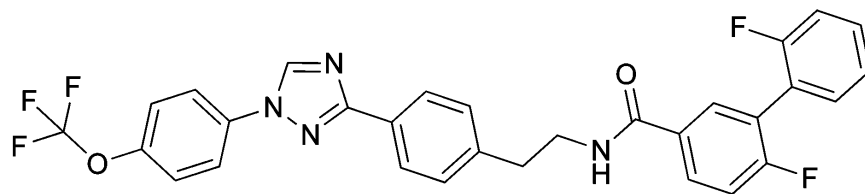
無色油状物 (0.012 g、1%) として単離された。

【0 2 9 4】

2', 6-ジフルオロ-N-(4-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1, 2, 4-トリアゾル-3-イル)フェネチル)-[1, 1'-ビフェニル]-3-カルボキサミド (F 5 5)

【0 2 9 5】

【化 8 4】



20

【0 2 9 6】

白色固形物 (0.094 g、26%) として単離された。

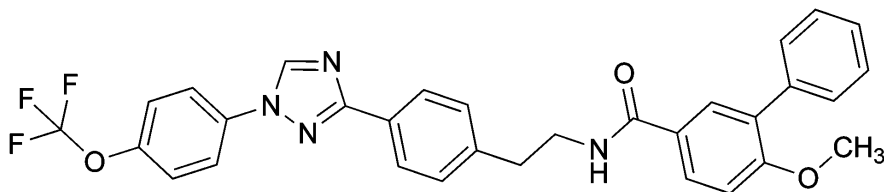
【0 2 9 7】

6-メトキシ-N-(4-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1, 2, 4-トリアゾル-3-イル)フェネチル)-[1, 1'-ビフェニル]-3-カルボキサミド (F 5 6)

30

【0 2 9 8】

【化 8 5】



40

【0 2 9 9】

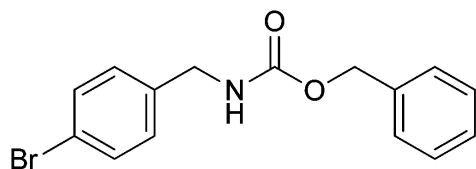
白色固形物 (0.172 g、52%) として単離された。

【0 3 0 0】

実施例 19: ベンジル 4-ブロモベンジルカルバメート (C 1 0) の製造

【0 3 0 1】

【化 8 6】



【0302】

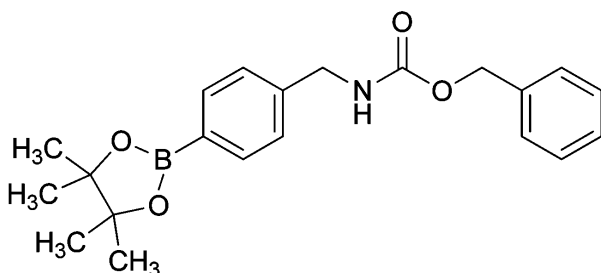
丸底フラスコ（500 mL）中で、（4-ブロモフェニル）メタンアミニウムクロリド（10.0 g、44.9 mmol）および水酸化ナトリウム（4.00 g、100 mmol）をテトラヒドロフラン（80 mL）および水（80 mL）に溶解した。該溶液を氷水浴中で冷却しかつクロロギ酸ベンジル（7.06 mL、49.4 mmol）を一滴ずつ添加した。該反応を1時間攪拌させた。該反応を塩水溶液中に注ぎかつ酢酸エチルで抽出した（2回）。合わせられた有機物を硫酸マグネシウムで乾燥し、濾過しかつ濃縮して、表題化合物を白色固形物（14.8 g、10%）：¹H NMR（400 MHz、DMSO-d₆）δ 7.92（t、J=6.0 Hz、1H）、7.64–7.53（m、2H）、7.47–7.33（m、5H）、7.32–7.20（m、2H）、5.10（s、2H）、4.23（d、J=6.2 Hz、2H）；¹³C NMR（101 MHz、DMSO-d₆）δ 156.33、139.20、137.05、131.10、129.22、128.33、127.72、119.77、65.42、43.19；ESI MS m/z 320、322（[M+H]⁺）として提供した。

【0303】

実施例 19：ベンジル 4-（4,4,5,5-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロラン-2-イル）ベンジルカルバメート（C11）の製造

【0304】

【化 8 7】



【0305】

丸底フラスコ（500 mL）中で、ベンジル 4-ブロモベンジルカルバメート（C10）（14.1 g、44.0 mmol）、4,4,4',4',5,5,5',5'-オクタメチル-2,2'-ビ（1,3,2-ジオキサボロラン）（12.3 g、48.4 mmol）および酢酸カリウム（8.64 g、88.0 mmol）をジオキサン（200 mL）に懸濁した。該懸濁液を窒素で5分間分散させ、その時間の後に[1,1'-ビスジフェニルホスフィノフェロセン]パラジウム（II）ジクロリド（1.61 g、2.20 mmol）を添加した。該反応をポンプで送るかつ窒素でページした（2回）。該反応をその後70℃の内部温度に加熱し、一夜攪拌した。該反応を室温に冷却し、塩水溶液中に注ぎそして酢酸エチル（3×250 mL）で抽出した。合わせられた有機物を硫酸マグネシウムで乾燥し、濾過しかつCelite（登録商標）上で濃縮した。溶出液として0-22%酢酸エチル/ヘキサンを使用するフラッシュカラムクロマトグラフィー（2回）を介する精製が、表題化合物を白色固形物（13.8 g、81%）：¹H NMR（400 MHz、DMSO-d₆）δ 7.87（t、J=6.2 Hz、1H）、7.70–7.60（m、2H）、7.46–7.22（m、7H）、5.06（s、2H）、4.24（d、J=6.2 Hz、2H）、1.29（s、12H）；¹³C NMR（101 MHz、

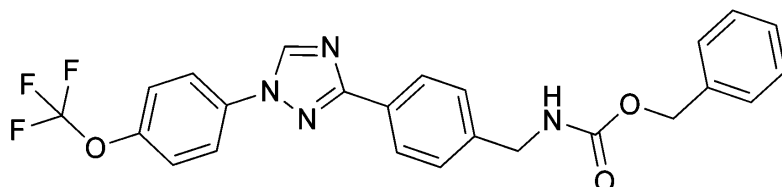
DMSO- d_6) δ 156.35、143.18、137.12、134.45、128.31、127.69、126.38、83.51、66.32、65.37、64.89、43.83、24.62; ESIMS m/z 368 ($[M+H]^+$)として提供した。

【0306】

実施例20：ベンジル4-（1-（4-（トリフルオロメトキシ）フェニル）-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル）ベンジルカルバメート（C12）の製造

【0307】

【化88】



【0308】

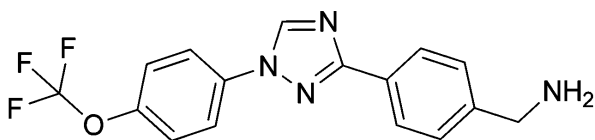
丸底フラスコ（100mL）に、3-ブロモ-1-（4-（トリフルオロメトキシ）フェニル）-1H-1,2,4-トリアゾール（5.19g、16.8mmol）、ベンジル4-（4,4,5,5-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロラン-2-イル）ベンジルカルバメート（C11）（6.80g、18.5mmol）およびリン酸カリウム（7.15g、33.7mmol）をジオキサン（140mL）および水（35.0mL）に溶解した。該反応混合物を窒素で5分間分散させ、その時間の後に[1,1'-ビス（ジ-tert-ブチルホスフィノ）フェロセン]ジクロロパラジウム（II）（0.329g、0.505mmol）を添加した。フラスコを封止しかつ窒素雰囲気下に置いた。該反応をその後75℃の内部温度に9時間加熱した。該反応を塩水溶液中に注ぎかつ酢酸エチル（4×100mL）で抽出した。合わせられた有機物を硫酸マグネシウムで乾燥し、濾過しかつ濃縮した。生じる残渣を、10-80%酢酸エチル/ヘキサンを使用するフラッシュカラムクロマトグラフィーにより精製して、表題化合物を灰白色固形物（9.31g、94%）： ^1H NMR（400MHz、DMSO- d_6 ） δ 9.40（s、1H）、8.16-8.01（m、4H）、7.91（t、 $J=6.2$ Hz、1H）、7.67-7.58（m、2H）、7.48-7.15（m、7H）、5.07（s、2H）、4.28（d、 $J=6.2$ Hz、2H）； ^{19}F NMR（376MHz、DMSO- d_6 ） δ -56.96; ESIMS m/z 469 ($[M+H]^+$)として提供した。

【0309】

実施例21：（4-（1-（4-（トリフルオロメトキシ）フェニル）-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル）フェニル）メタンアミンの製造方法A（C13）

【0310】

【化89】



【0311】

丸底フラスコ（200mL）中で、ベンジル4-（1-（4-（トリフルオロメトキシ）フェニル）-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル）ベンジルカルバメート（C12）（0.599g、1.28mmol）を臭化水素（8.00mL、45.7mmol）で希釈した。該懸濁液を室温で1時間攪拌した。この懸濁液にジエチルエーテル（100mL）を添加しそして該懸濁液を30分間攪拌した。沈殿物を、ガラスフリットロート（glass fritted funnel）での濾過を介して収集した。収集された

固形物をその後水性水酸化ナトリウムで処理しそして酢酸エチル（3×75 mL）で抽出した。合わせられた有機物を硫酸マグネシウムで乾燥し、濾過しかつ濃縮して、表題化合物（0.395 g、92%）：¹H NMR（400 MHz、DMSO-d₆）δ 9.45（s、1H）、8.25–8.03（m、4H）、7.74–7.62（m、2H）、7.60–7.48（m、2H）、3.85（s、2H）；¹⁹F NMR（376 MHz、DMSO-d₆）δ –56.97；ESIMS m/z 318（[M–NH₂+H]⁺）を提供した。

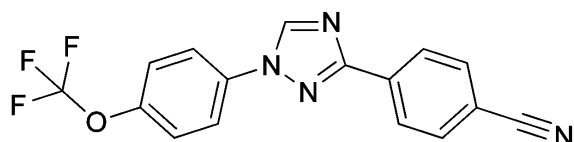
【0312】

実施例22：4-（1-（4-（トリフルオロメトキシ）フェニル）-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル）ベンゾニトリル（C14）の製造

10

【0313】

【化90】



【0314】

窒素下ジメチルホルムアミド（30 mL）中の3-（4-ブロモフェニル）-1-（4-（トリフルオロメトキシ）フェニル）-1H-1,2,4-トリアゾール（C7）（4.00 g、10.4 mmol）の溶液に、シアン化亜鉛（1.46 g、12.4 mmol）、テトラキス（トリフェニルホスフィン）パラジウム（0）（0.601 g、0.0500 mmol）を添加し、そして該反応を、アルゴンで脱気した後110℃に16時間加熱した。該反応混合物を室温に冷却しそして酢酸エチルで希釈しかつ水で洗浄した。水層を酢酸エチルで抽出し、そして合わせられた有機層を水および塩水で洗浄した。有機層を硫酸ナトリウムで乾燥しかつ減圧下に濃縮した。フラッシュカラムクロマトグラフィーによる精製が灰白色固形物を提供し、これをヘキサンとともにさらに摩砕して、表題化合物を白色固形物（3.40 g、94%）：¹H NMR（400 MHz、CDCl₃）δ 8.60（s、1H）、8.31（d、J=6.6 Hz、2H）7.81–7.76（m、4H）、7.41（d、J=8.8 Hz、2H）；ESIMS m/z 331（[M+H]⁺）として提供した。

20

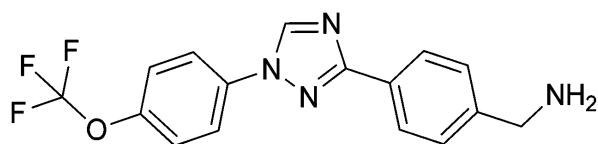
30

【0315】

実施例23：4-（1-（4-（トリフルオロメトキシ）フェニル）-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル）フェニル）メタンアミンの製造—方法B（C13）

【0316】

【化91】



40

【0317】

エタノール（30 mL）中の4-（1-（4-（トリフルオロメトキシ）フェニル）-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル）ベンゾニトリル（C14）（3.00 g、9.09 mmol）の溶液に、濃塩酸（3 mL）、パラジウム炭素（10重量%、0.500 g）を添加し、そして該反応混合物を真空にしかつ水素でパージした。該反応混合物を水素（50 psi）下で24時間攪拌した。該反応混合物をCelite（登録商標）で濾過し、エタノールで洗浄しかつ減圧下に濃縮して粗固形物を得、これをジエチルエーテルで洗浄して、表題化合物を灰白色固形物（2.80 g、93%）：¹H NMR（300 MHz、DMSO-d₆）δ 9.43（s、1H）、8.37（bs、3H）、8.

50

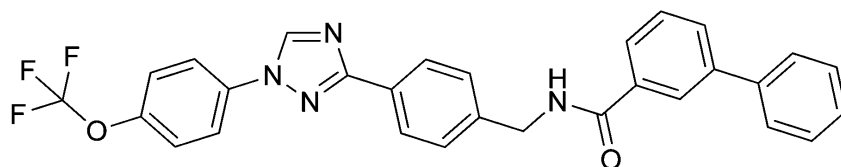
1.8 (d, $J = 8.1$ Hz, 2H), 8.08 (d, $J = 9.3$ Hz, 2H), 7.63 (d, $J = 8.1$ Hz, 2H), 4.11–4.07 (m, 2H); ESI-MS m/z 335 ($[M+H]^+$) として提供した。

【0318】

実施例 24: N-(4-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)ベンジル)-[1,1'-ビフェニル]-3-カルボキサミド (F57) の製造

【0319】

【化92】



10

【0320】

ジメチルホルムアミド (3.5 mL) 中の [1,1'-ビフェニル]-3-カルボン酸 (0.213 g, 1.08 mmol) の溶液に、ジイソプロピルエチルアミン (0.406 g, 3.14 mmol)、1-[ビス(ジメチルアミノ)メチレン]-1H-1,2,3-トリアゾロ[4,5-b]ピリジニウム 3-オキシド (oxid) ヘキサフルオロホスフェート (0.409 g, 1.08 mmol) および (4-(1-(4-(トリフルオロメトキシ)フェニル)-1H-1,2,4-トリアゾル-3-イル)フェニル)メタンアミン (C13) (0.300 g, 0.890 mmol) を室温で添加した。生じる反応混合物を 16 時間攪拌し、塩酸 (2N) でクエンチし、酢酸エチル (2 × 50 mL) で抽出した。合わせられた有機層を塩水で洗浄し、硫酸ナトリウムで乾燥し、減圧下に濃縮した。得られた粗物質 (the crude) をフラッシュカラムクロマトグラフィーにより精製して、表題化合物を灰白色固形物 (0.0600 g, 13%) として提供した。

20

【0321】

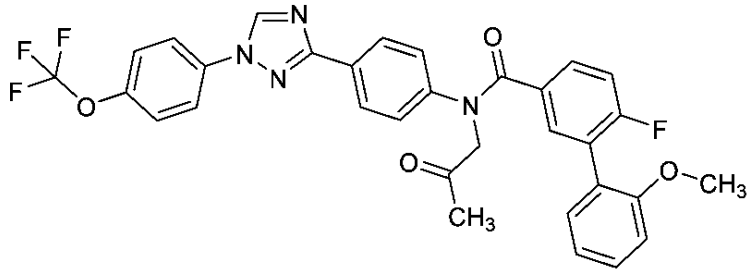
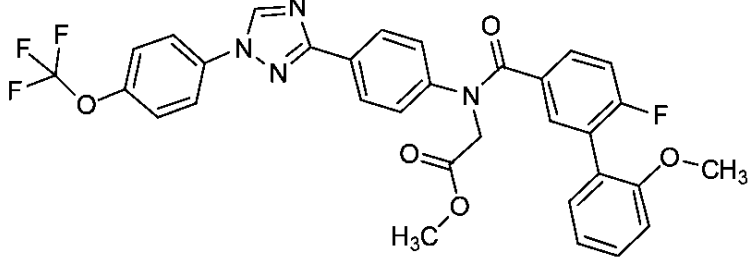
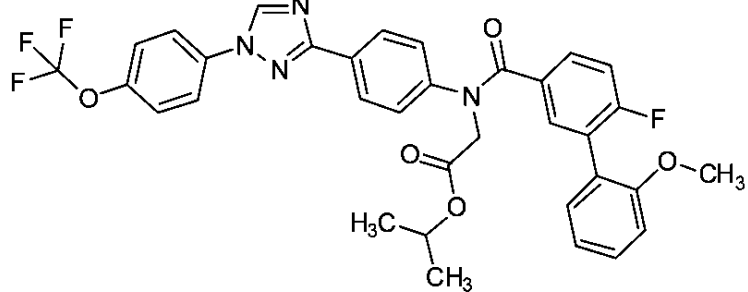
本明細書に開示される手順を使用して、式 1 に従った構造を有する予言的分子の以下の一覧を作成する (表 1)。

30

【0322】

【表 1】

表 1. 予言的化合物の構造および製造方法

番号	構造	製造に対応する実施例:
P1		5
P2		5
P3		5

【0323】

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

BAWは、その集団を減少させるための有効な寄生物、疾患若しくは捕食生物をほとんど有しない。BAWは多くの雑草、樹木、草、マメおよび農作物にはびこる。多様な場所で、それは、他の植物のなかでもアスパラガス、ワタ、トウモロコシ、ダイズ、タバコ、アルファルファ、サトウダイコン、コショウ、トマト、ジャガイモ、タマネギ、エンドウ (peas)、ヒマワリおよび柑橘類に対する経済的関心事である。イラクサギンウワバはヤガ科のガの 1 メンバーである。それは世界中で見出される。それは、攻撃キャベツ、カリフラワー、ブロッコリー、メキャベツ、トマト、キュウリ、ジャガイモ、ケール、カブ、カラシナ、コショウ、ナス、スイカ、メロン、カボチャ (squash)、カンタロープ、エンドウ (peas)、豆類、コラード、レタス、ハウレンソウ、セロリ、パセリ、ビート、エンドウ (peas)、アルファルファ、ダイズおよびワタである。この種は葉のその食欲な消費により植物に対し非常に破壊的である。キャベツの場合、しかしながら、それらは結球葉を常食とするのみならず、しかしまた発達している頭部にも穴を開けることができる。該幼虫は 1 日に植物材料においてそれらの重量の 3 倍を消費する。摂食部位は粘性の湿った糞便物質の大量の蓄積により印を付けられる。

【0324】

結果、上の要因のため、これら病害虫の防除は重要である。さらに、咀嚼病害虫として知られるこれら病害虫（BAWおよびCL）を防除する分子は、植物を咀嚼する他の病害虫の防除において有用である。

【0325】

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

【0326】

BAWでのバイオアッセイ

10

BAWでのバイオアッセイは128ウェルダイエットトレイアッセイを使用して実施した。1ないし5匹の第二齢BAW幼虫を、（50 μ Lの90：10 アセトン-水混合物に溶解された）50 μ g / cm^2 の試験化合物が（8ウェルのそれぞれに）適用されかつその後乾燥させられていた、1mLの人工餌で事前に満たされていたダイエットトレイの各ウェル（3mL）中に置いた。トレイを透明な自己接着性カバーで覆いかつ25℃、14：10の明-暗で5ないし7日間保持した。死亡パーセントを各ウェル中の幼虫について記録し；8ウェル中の活性をその後平均した。結果は「表ABC：生物学的結果」と題された表に示す（表の節を参照されたい）。

【0327】

CLにおけるイラクサギンウワバでのバイオアッセイ

20

CLでのバイオアッセイは128ウェルダイエットトレイアッセイを使用して実施した。1ないし5匹の第二齢CL幼虫を、（50 μ Lの90：10 アセトン-水混合物に溶解された）50 μ g / cm^2 の試験化合物が（8ウェルのそれぞれに）適用されかつその後乾燥させられていた、1mLの人工餌で事前に満たされていたダイエットトレイの各ウェル（3mL）中に置いた。トレイを透明な自己接着性カバーで覆いかつ25℃、14：10の明-暗で5ないし7日間保持した。死亡パーセントを各ウェル中の幼虫について記録し；8ウェル中の活性をその後平均した。結果は「表ABC：生物学的結果」と題された表に示す（表の節を参照されたい）。

【0328】

実施例B：モモアカアブラムシ（モモアカアブラムシ（Myzus persicae）、MIZUPE）（「GPA」）でのバイオアッセイ

30

GPAはモモの木のもっとも重大なアブラムシ病害虫であり、低下された成長、葉のしぼみおよび多様な組織の死を引き起こす。それがナス科のナス属植物／ジャガイモのメンバーへのジャガイモウイルスYおよびジャガイモ葉巻き病ウイルスのような植物ウイルス、ならびに多くの他の食用作物への多様なモザイクウイルスの輸送の媒介昆虫として作用するため、それはまた危険でもある。GPAは、他の植物のなかでもブロッコリー、ゴボウ、キャベツ、ニンジン、カリフラワー、ダイコン、ナス、サヤインゲン（green beans）、レタス、マカダミア、パパイヤ、コショウ、サツマイモ、トマト、ミズガラシおよびズッキーニのような植物を攻撃する。GPAはまた、カーネーション、キク、ハボタン（flowering white cabbage）、ポインセチアおよびバラの

40

ような多くの観賞用作物も攻撃する。GPAは多くの農薬に対する耐性を発生している。結果、上の要因のため、この病害虫の防除は重要である。さらに、吸汁性病害虫として知られるこの病害虫（GPA）を防除する分子は、植物を吸う他の病害虫の防除において有用である。

【0329】

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

【0330】

2～3枚の小（3～5cm）本葉をもつ3インチ鉢中で生育されたキャベツ種苗を試験

50

支持体として使用した。種苗に、化学物質適用1日前に20～50匹のGPA（無翅成虫および若虫段階）をはびこらせた。個別の種苗を含む4個の鉢を各処理に使用した。試験化合物（2mg）を2mLのアセトン／メタノール（1：1）溶媒に溶解して1000ppmの試験化合物のストック溶液を形成した。ストック溶液を水中0.025%Tween 20で5倍希釈して200ppmの試験化合物の溶液を得た。携帯式吸引器型噴霧器を、液体流出までキャベツ葉の両側に溶液を噴霧するために使用した。参照植物（溶媒確認）は、20容量%のアセトン／メタノール（1：1）溶媒を含有するのみの希釈液を噴霧した。処理された植物は、等級分類する前におよそ25℃および周囲相対湿度（RH）で保持室に3日間保持した。評価は植物あたりの生存アブラムシの数を顕微鏡下で計数することにより実施した。防除パーセントを、後に続くところのAbbottの補正式（W. S. Abbott, “A Method of Computing the Effectiveness of an Insecticide” J. Econ. Entomol. 18 (1925), pp. 265–267）を使用することにより測定した。

補正防除% = $100 \times (X - Y) / X$

式中

X = 溶媒確認植物上の生存アブラムシの数、および

Y = 処理された植物上の生存アブラムシの数

【0331】

結果は「表ABC：生物学的結果」と題された表に示す（表の節を参照されたい）。

【0332】

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

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

【0333】

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

【0334】

100μLのジメチルスルホキシド（DMSO）に溶解された400μgの分子を含有する（4000ppmの溶液に同等）マスタープレートを使用する。集成された分子のマスタープレートはウェルあたり15μLを含有する。このプレートに、135μLの90：10 水：アセトン混合物を各ウェルに添加する。ロボット（Biomek（登録商標）NXPLaboratory Automation Workstation）を、マスタープレートから空の96ウェル浅型プレート（「嬢」プレート）に15μLの吸引を分注するようプログラムする。マスターあたり創成される6個の複製物（「嬢」プレート）が存在する。創成される嬢プレートにその後直ちにYFM幼虫をはびこらせる。

【0335】

プレートを処理するはずである前の日に、蚊の卵を肝粉末を含有するMillipore水中に置いて孵化を開始させる（4gを400mL中に）。嬢プレートをロボットを使用して創成した後に、それらに220μLの肝粉末／幼虫の蚊の混合物（約1日齢幼虫）

をはびこらせる。プレートに蚊の幼虫をはびこらせた後に、非蒸発性蓋を使用してプレートを覆い乾燥を低減する。プレートは等級分類する前に3日間室温で保持する。3日後に各ウェルを観察し、そして死亡率に基づき点数を付ける。

【0336】

結果は「表ABC：生物学的結果」と題される表に示す（表の節を参照されたい）。

【0337】

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

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

10

【0338】

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

20

【0339】

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

【0340】

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

30

【0341】

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

【0342】

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

【0343】

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

40

【0344】

立体異性体

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

50

の立体異性体および光学活性の混合物を包含する。1種の異性体が他者より活性でありうるものが当業者により認識されるであろう。本開示に開示される構造は明快さのためたゞ1つの幾何学的形態で描かれるが、しかし該分子の全部の幾何学的形態を表すことを意図している。

【0345】

組合せ

別の態様において、式1の分子は、式1の分子の作用様式（「M o A」）と同一、類似若しくは異なる作用様式をそれぞれ有する1種若しくはそれ以上の化合物と組合せで（1種の組成混合物中で、または同時若しくは逐次適用でのような）使用しうる。作用様式は、例えば以下：アセチルコリンエステラーゼ（A C h E）阻害剤；G A B A作動性クロラ
10
イドチャンネルアンタゴニスト；ナトリウムチャンネル調節物質；ニコチン性アセチルコリン（n A C h R）アゴニスト；ニコチン性アセチルコリン受容体（n A C h R）アロステリック活性化物質；クロライドチャンネル活性化物質；幼若ホルモン模倣物；雑多な非特異的（多部位）阻害剤；選択的同翅類摂食阻害剤；ダニ成長阻害剤；昆虫中腸膜の微生物性攪乱物質；ミトコンドリアA T P合成酵素の阻害剤；プロトン勾配の破壊を介する酸化的リン酸化の脱共役剤；ニコチン性アセチルコリン受容体（n A C h R）チャンネル阻害剤；キチン生合成の阻害剤、タイプ0；キチン生合成の阻害剤、タイプ1；脱皮攪乱物質（m o
20
u l t i n g d i s u r u p t o r）、双翅類；エクジソン受容体アゴニスト；オクトパミン受容体アゴニスト；ミトコンドリア複合体I I I電子伝達阻害剤；ミトコンドリア複合体I電子伝達阻害剤；電位依存性ナトリウムチャンネル阻害剤；アセチルC o Aカルボ
キシラーゼの阻害剤；ミトコンドリア複合体I V電子伝達阻害剤；ミトコンドリア複合体I I電子伝達阻害剤；およびリアノジン受容体調節物質を包含する。

【0346】

別の態様において、式1の分子は、ダニ駆除、殺藻、殺鳥、殺菌、防カビ、除草、殺虫、軟体類駆除、殺線虫、殺鼠および／若しくは殺ウイルス特性を有する1種若しくはそれ以上の化合物と組合せで（1種の組成混合物中で、または同時若しくは逐次適用でのような）使用しうる。

【0347】

別の態様において、式1の分子は、摂食阻害剤、鳥類忌避剤、化学殺菌剤、除草剤毒性緩和剤、昆虫誘引物質、昆虫忌避剤、哺乳動物忌避剤、交信攪乱剤、植物活性化物質、植物成長調節剤および／若しくは共力剤である1種若しくはそれ以上の化合物と組合せで（1種の組成混合物中で、または同時若しくは逐次適用でのような）使用しうる。

【0348】

別の態様において、式1の分子は、臭化（3-エトキシプロピル）水銀、1，2-ジクロロプロパン、1，3-ジクロロプロペン、1-メチルシクロプロペン、1-ナフトール、2-（オクチルチオ）エタノール、2，3，5-トリヨード安息香酸、2，3，6-T
30
B A、2，3，6-T B Aジメチルアンモニウム塩、2，3，6-T B Aリチウム塩、2，3，6-T B Aカリウム塩、2，3，6-T B Aナトリウム塩、2，4，5-T、2，4，5-T 2-ブトキシプロピル、2，4，5-T 2-エチルヘキシル、2，4，5-T 3-ブトキシプロピル、2，4，5-T B、2，4，5-Tブトメチル、2，4，5-T
40
ブトチル、2，4，5-Tブチル、2，4，5-Tイソブチル、2，4，5-Tイソクチル（i s o c t y l）、2，4，5-Tイソプロピル、2，4，5-Tメチル、2，4，5-Tペンチル、2，4，5-Tナトリウム塩、2，4，5-Tトリエチルアンモニウム塩、2，4，5-Tトロラミン、2，4-D、2，4-D 2-ブトキシプロピル、2，4-D 2-エチルヘキシル、2，4-D 3-ブトキシプロピル、2，4-Dアンモニウム塩、2，4-D B、2，4-D Bブチル、2，4-D Bジメチルアンモニウム塩、2，4-D Bイソクチル、2，4-D Bカリウム塩、2，4-D Bナトリウム塩、2，4-Dブトチル、2，4-Dブチル、2，4-Dジエチルアンモニウム塩、2，4-Dジメチルアンモニウム塩、2，4-Dジオラミン、2，4-Dドデシルアンモニウム塩、2，4-D E
50
B、2，4-D E P、2，4-Dエチル、2，4-Dヘプチルアンモニウム塩、2，4-

D イソブチル、2, 4-D イソクチル、2, 4-D イソプロピル、2, 4-D イソプロピル
 アンモニウム塩、2, 4-D リチウム塩、2, 4-D メプチル、2, 4-D メチル、2,
 4-D オクチル、2, 4-D ペンチル、2, 4-D カリウム塩、2, 4-D プロピル、
 2, 4-D ナトリウム塩、2, 4-D テフリル、2, 4-D テトラデシルアンモニウム塩
 、2, 4-D トリエチルアンモニウム塩、2, 4-D トリス (2-ヒドロキシプロピル)
 アンモニウム塩、2, 4-D トロラミン、2 i P、塩化2-メトキシエチル水銀、2-フ
 ェニルフェノール、3, 4-DA、3, 4-DB、3, 4-DP、4-アミノピリジン、
 4-CPA、4-CPA ジオラミン (4-CPA-di ol a m i n e)、4-CPA カ
 リウム塩、4-CPA ナトリウム塩、4-CPB、4-CP P、4-ヒドロキシフェネチ
 ルアルコール、8-ヒドロキシキノリン硫酸塩、8-フェニルマーキュリオキシキノリン
 (p h e n y l m e r c u r i o x y q u i n o l i n e)、アバメクチン、アブシジン
 酸、ACC、アセフェート、アセキノシル、アセタミプリド、アセチオン、アセトクロー
 ル、アセトホス、アセトプロール、アシベンゾラル、アシベンゾラルS-メチル、アシフ
 ルオルフェン、アシフルオルフェンメチル、アシフルオルフェンナトリウム塩、アクロニ
 フェン、アクレップ (a c r e p)、アクリナトリン、アクロレイン、アクリロニトリル
 、アシペタックス、アシペタックス銅、アシペタックス亜鉛、アフィドピロペン、アフォ
 キソラネル (a f o x o l a n e r)、アラクロール、アラニカルブ、アルベンダゾール
 、アルジカルブ、アルジモルフ、アルドキシカルブ、アルドリル、アレスリン、アリシン
 、アリドクロール、アロサミジン、アロキシジウム、アロキシジウムナトリウム、アリルアル
 コール、アリキシカルブ、アロラック、アルファシペルメトリン、アルファエンドスルフ
 ザン、アメトクトラジン、アメトリジオン、アメトリン、アミブジン、アミカルバゾン、
 アミカルチアゾール (a m i c a r t h i a z o l)、アミジチオン、アミドフルメット
 、アミドスルフロニ、アミノカルブ、アミノシクロピラクロル、アミノシクロピラクロル
 メチル、アミノシクロピラクロルカリウム塩、アミノピラリド、アミノピラリドカリウム
 塩、アミノピラリドトリス (2-ヒドロキシプロピル) アンモニウム塩、アミプロホス
 メチル、アミプロホス、アミスルブロン、アミトン、アミトンシュウ酸塩、アミトラズ、ア
 ミトロール、スルファミン酸アンモニウム、 α -ナフタレン酢酸アンモニウム、アンバム
 、アンプロピルホス、アナバシン、硫酸アナバシン、アンシミドール、アニラジン、アニ
 ロホス、アニスロン、アントラキノ、アンツ、アホラート、アラマイト、三酸化ヒ素
 、アソメート、アスピリン、アシュラム、アシュラムカリウム塩、アシュラムナトリウム
 塩、アチダチオン、アトラトン、アトラジン、オーレオファンギン (a u r e o f u n g
 i n)、アビグリシン、アビグリシン塩酸塩、アザコナゾール、アザジラクチン、アザフ
 ェニジン、アザメチホス、アジウムスルフロニ、アジンホスエチル、アジンホスメチル、ア
 ジプロトリン、アジチラム、アゾベンゼン、アゾシクロチン、アゾトエート、アゾキシス
 トロピン、バクメデシュ (b a c h m e d e s h)、バルバン、ヘキサフルオロケイ酸バ
 リウム、多硫化バリウム、バルトリン、BCPC、ベフルブタミド、ベナラキシル、ベナ
 ラキシルM、ベナゾリン、ベナゾリンジメチルアンモニウム塩、ベナゾリンエチル、ベナ
 ゴリンカリウム塩、ベンカルバゾン、ベンクロチアズ、ベンダイオカルブ、ベンフルラリ
 ン、ベンフラカルブ、ベンフレセート、ベノダニル、ベノミル、ベノキサコル、ベノキサ
 ホス、ベンキノックス、ベンスルフロニ、ベンスルフロニメチル、ベンスリド、ベンスル
 タップ、ベントラルロン、ベントラジン、ベントラジンナトリウム塩、ベンチアバリカルブ、ベ
 ンチアバリカルブイソプロピル、ベンチアゾール、ベントラニル、ベンザドックス、ベン
 ザドックスアンモニウム塩、塩化ベンザルコニウム、ベンザマクリル、ベンザマクリルイ
 ソブチル、ベンザモルフ、ベンズフェンジゾン、ベンジブラム、ベンゾビシクロニ、ベン
 ゴフェナップ、ベンゾフルオル、ベンゾヒドロキサム酸、ベンゾベンジフルピル、ベンゾ
 キシメート、ベンゾイルプロップ、ベンゾイルプロップエチル、ベンズチアズロン、安息
 香酸ベンジル、ベンジルアデニン、ベルベリン、ベルベリン塩化物、ベータ・シフルトリ
 ン、ベータ・シペルメトリン、ベトキサジン、ビシクロピロン、ビフェナゼート、ビフェ
 ノックス、ビフェントリン、ビフチュンツィ (b i f u j u n z h i)、ビラナホス、ビ
 ラナホスナトリウム塩、ビナパクリル、ビンチンシアオ (b i n g q i n g x i a o)、

10

20

30

40

50

ビオアレスリン、ビオエタノメトリン (bioethanomethrin)、ビオペル
 メトリン、ビオレスメトリン、ビフェニル、ビスアジル、ビスメルチアゾール、ビスピリ
 バック、ビスピリバックナトリウム塩、ビストリフルロン、ビテルタノール、ビチオノー
 ル、ピキサフェン、ブラストサイジンS、ハウ砂、ボルドー液、ハウ酸、ボスカリド、ブ
 ラシノリド、ブラシノリドエチル、ブレビコミン、ブロジファクム、ブロフェンバレレー
 ト (brofenvalerate)、ブロフルトリネート (brofluthrinat
 e)、ブロマシル、ブロマシルリチウム塩、ブロマシルナトリウム塩、ブロマジオロン
 、ブロメタリン、ブロメトリン (bromethrin)、ブロムフェンビンホス、ブロ
 モアセトアミド、ブロモボニル、ブロモブチド、ブロモシクレン、ブロモDDT、ブロモ
 フェノキシム、ブロモホス、ブロモホスエチル、ブロモプロピレート、ブロモタロニル (
 bromothalonil)、ブロモキシニル、ブロモキシニルブチラート、ヘプタン
 酸ブロモキシニル、オクタン酸ブロモキシニル、ブロモキシニルカリウム塩、ブロムピラ
 ゾン、ブロムコナゾール、ブロノポール、ブカルポラート、ブフェンカルブ、ブミナホス
 、ブピリメート、ブプロフェジン、バーガンディー混合物 (Burgundy mixt
 ure)、ブスルファン、ブタカルブ、ブタクロール、ブタフェナシル、ブタミホス、ブ
 タチオホス、ブテナクロール、ブテトリン (butethrin)、ブチダゾール、ブチ
 オベート、ブチウロン、ブトカルボキシム、ブトネート、ブトピロノキシル、ブトキシカ
 ルボキシム、ブトルアリン、ブトロキシジム、ブツロン、ブチルアミン、ブチレート、カ
 コジル酸、カズサホス、カフェンストロール、ヒ酸カルシウム、塩素酸カルシウム、カル
 シウムシアナミド、多硫化カルシウム、カルビンホス、カンベンジクロル、カンフェクロ
 ル、カンファー、カプタホール、キャプタン、カルバモルフ、カーボノレート、カルバリ
 ル、カルバスラム、カルベンダジム、カルベンダジムベンゼンスルホン酸塩、カルベンダ
 ジム亜硫酸塩、カルベタミド、カルボフラン、二硫化炭素、四塩化炭素、カルボフェノチ
 オン、カルボスルファン、カルボキサゾール、カルボキシド (carboxide)、カル
 ボキシニル、カルフェントラゾン、カルフェントラゾンエチル、カルプロパミド、カルタ
 ップ、カルタップ塩酸塩、カルバクロール、カルボン、CDEA、セロシジン、CEPC
 、セラルレ、チェシュハント混合物 (Cheshunt mixture)、キノメチオ
 ナート、キトサン、クロベンチアゾン、クロメトキシフェン、クロラロース、クロランベ
 ン、クロランベンアンモニウム塩、クロランベンジオラミン、クロランベンメチル、クロ
 ランベンメチルアンモニウム塩、クロランベンナトリウム塩、クロラミンリン (chlo
 ramine phosphorus)、クロラムフェニコール、クロラニホルメタン、
 クロラニル、クロラノクリル、クロラントラニリプロール、クロラジホップ、クロラジホ
 ッププロパルギル、クロラジン、クロルベンシド、クロルベンズロン、クロルビシクレン
 、クロルブロムロン、クロルブファム、クロルデン、クロルデコン、クロルジメホルム、
 塩酸クロルジメホルム、クロルエンペントリン (chlorempenthrin)、ク
 ロレトキシホス、クロレツロン、クロルフェナック、クロルフェナックアンモニウム塩、
 クロルフェナックナトリウム塩、クロルフェナピル、クロルフェナゾール、クロルフェネ
 トール、クロルフェンプロップ、クロルフェンソン、クロルフェンスルフィド、クロルフ
 ェンビンホス、クロルフルアズロン、クロルフルラゾール、クロルフルレン、クロルフル
 レンメチル、クロルフルレノール、クロルフルレノールメチル、クロリダゾン、クロリム
 ロン、クロリムロンエチル、クロルメホス、クロルメコート、塩化クロルメコート、クロ
 ルニジン、クロルニトロフェン、クロロベンジレート、クロロジニトロナフタレン、クロ
 ロホルム、クロロメブホルム、クロロメチウロン、クロロネブ、クロロファシノン、クロ
 ロファシノンナトリウム塩、クロロピクリン、クロロポン、クロロプロピレート、クロロ
 タロニル、クロロトルロン、クロロクスロン、クロロキシニル、クロルホニウム、塩化ク
 ロルホニウム、クロルホキシム、クロルプラゾホス、クロルプロカルブ、クロルプロファ
 ム、クロルピリホス、クロルピリホスメチル、クロルキノックス、クロルスルフロ
 ン、クロルタール、クロルタールジメチル、クロルタールモノメチル、クロルチアミド、クロ
 ルチオホス、クロゾリネート、コリン塩化物、コレカルシフェロール、クロマフェノジド、
 シネリンI、シネリンII、シネリン類、シニドンエチル、シンメチリン、シノスルフロ

10

20

30

40

50

ン、シオブチド、シサニリド (cisanilide)、シスメトリン、クラシホス、クレトジム、クリンバゾール、クリオジネート、クロジナホップ、クロジナホッププロパルギル、クロエトカルブ、クロフェンセット、クロフェンセットカリウム塩、クロフェンテジン、クロフィブリン酸、クロホップ、クロホップイソブチル、クロマゾン、クロメプロップ、クロプロップ、クロプロキシジム、クロピラリド、クロピラリドメチル、クロピラリドオラミン (clopyralid-olamine)、クロピラリドカリウム塩、クロピラリドトリス (2-ヒドロキシプロピル) アンモニウム塩、クロキントセット、クロキントセットメキシル、クロランスラム、クロランスラムメチル、クロサンテル、クロチアニジン、クロトリマゾール、クロキシホナック、クロキシホナックナトリウム塩、CMA、コドレルア、コロホネート、酢酸銅、アセト亜ヒ酸銅、ヒ酸銅、塩基性炭酸銅、水酸化銅、ナフテン酸銅、オレイン酸銅、オキシ塩化銅、ケイ酸銅、硫酸銅、クロム酸亜鉛銅 (copper zinc chromate)、クマクロール、クマフリル、クマホス、クマテトラリル、クミトエート、クモキシストロビン、クモキシストロビン、CPMC、CPMF、CPPC、クレダジン、クレゾール、クリミジン、クロタミトン、クロトキシホス、クルホメート、氷晶石、キュウルア、クフラネブ、クミルロン、クプロバム (cuprobam)、酸化第一銅、クルクメノール、シアナミド、シアナトリン、シアナジン、シアノフェンホス、シアノホス、シアントエート、シアントラニリプロール、シアゾファミド、シブトリン、シクラファミド、シクラニリド、シクラニリプロール、シクレトリン、シクロエート、シクロヘキシミド、シクロプラート、シクロプロトリン、シクロピリモレート、シクロスルファムロン、シクロキサプリド、シクロキシジム、シクルロン、シエノピラフェン、シフルフェナミド、シフルメトフェン、シフルトリン、シハロホップ、シハロホップブチル、シハロトリン、シヘキサチン、シミアゾール、シミアゾール塩酸塩、シモキサニル、シオメトリニル、シペンダゾール、シベルメトリン、シベルコート、シベルコートクロリド、シフェノトリン、シブラジン、シブラゾール、シプロコナゾール、シプロジニル、シプロフラム、シプロミッド、シプロスルファミド、シロマジン、シチオアート、ダイムロン、ダラボン、ダラボンカルシウム塩、ダラボンマグネシウム塩、ダラボンナトリウム塩、ダミノジッド、タヨウトン (dayoutong)、ダゾメット、ダゾメットナトリウム塩、DBCP、d-カンファー、DCIP、DCPTA、DDT、デバカルブ、デカフェンチン、デカルボフラン、デヒドロ酢酸、デラクロール、デルタメトリン、デメフィオン、デメフィオン-O、デメフィオン-S、ジメトン、ジメトンメチル、ジメトン-O、ジメトン-O-メチル、ジメトン-S、ジメトン-S-メチル、ジメトン-S-メチルスルホン、デスメディファム、デスメトリン、d-ファンシルチュエビンチュツィ (d-fanshiluquebingjuzhi)、ジアフェンチウロン、ジアリホス、ジアレート、ジアミダホス、ケイ藻土、ダイアジノン、フタル酸ジブチル、コハク酸ジブチル、ジカンバ、ジカンバジグリコールアミン、ジカンバジメチルアンモニウム塩、ジカンバジオラミン、ジカンバイソプロピルアンモニウム塩、ジカンバメチル、ジカンバオラミン (dicamba-olamine)、ジカンバカリウム塩、ジカンバナトリウム塩、ジカンバトロラミン、ジカプトン、ジクロベニル、ジクロフェンチオン、ジクロフルアニド、ジクロロン、ジクロラル尿素 (dichloralurea)、ジクロルベンズロン (dichlorbenzuron)、ジクロフルレノール、ジクロフルレノールメチル、ジクロルメート、ジクロルミド、ジクロロフェン、ジクロルプロップ、ジクロルプロップ2-エチルヘキシル、ジクロルプロップブトチル、ジクロルプロップジメチルアンモニウム塩、ジクロルプロップエチルアンモニウム塩、ジクロルプロップイソクチル、ジクロルプロップメチル、ジクロルプロップP、ジクロルプロップP2-エチルヘキシル、ジクロルプロップPジメチルアンモニウム塩、ジクロルプロップカリウム塩、ジクロルプロップPカリウム塩、ジクロルプロップPナトリウム塩、ジクロルプロップナトリウム塩、ジクロルボス、ジクロゾリン、ジクロブトラゾール、ジクロシメット、ジクロホップ、ジクロホップメチル、ジクロメジン、ジクロメジンナトリウム塩、ジクロラン、ジクロスラム、ジコホル、ジクマロール、ジクレシル、ジクロトホス、ジシクラニル、ジシクロノン、ディルドリン、ジエノクロル、ジエタムコート、ジエタムコートジクロリド

10

20

30

40

50

、ジエタチル、ジエタチルエチル、ジエトフェンカルブ、ジエトラート、ジエチルピロカーボネート、ジエチルトルアミド、ジフェナクム、ジフェノコナゾール、ジフェノペンテン、ジフェノペンテンエチル、ジフェノキスロン、ジフェンゾコート、ジフェンゾコートメチル硫酸塩、ジフェチアロン、ジフロピダジン、ジフルベンズロン、ジフルフェニカン、ジフルフェンゾピル、ジフルフェンゾピルナトリウム塩、ジフルメトリム、ジケグラック、ジケグラックナトリウム塩、ジロール、ジマチフ (dimatif)、ジメフルトリン、ジメホックス、ジメフロン、ジメピペレート、ジメタクロン (dimetachlone)、ジメタン (dimetan)、ジメタカルブ (dimethacarb)、ジメタクロール、ジメタメトリン、ジメテナミド、ジメテナミドP、ジメチピン、ジメチリモール、ジメトエート、ジメトモルフ、ジメトリン、ジメチルカルバート、フタル酸ジメチル、ジメチルビンホス、ジメチラン、ジメキサノ、ジミダゾン、ジモキシストロビン、ジネックス、ジネックスジクレキシシ、ティンチュンエツォ (dingjunezuo)、ジニコナゾール、ジニコナゾールM、ジニトラミン、ジノブトン、ジノカップ、ジノカップー4、ジノカップー6、ジノクトン、ジノフェナート、ジノペントン、ジノプロップ、ジノサム、ジノセブ、酢酸ジノセブ、ジノセブアンモニウム塩、ジノセブジオラミン (dinoseb-dioline)、ジノセブナトリウム塩、ジノセブトロラミン、ジノスルホン、ジノテフラン、ジノテルブ、酢酸ジノテルブ、ジノテルボン、ジオフェノラン、ジオキサベンゾホス、ジオキサカルブ、ジオキサチオン、ダイファシノン、ダイファシノンナトリウム塩、ジフェナミド、ジフェニルスルホン、ジフェニルアミン、ジプロパリン、ジプロペトリン、ジピリチオン、ジクワット、ジクワットジプロミド、ディスパー
 ルア、ジスル、ジスルフィラム、ジスルホトン、ジスルナトリウム、ジタリムホス、ジチアノン、ジチクロホス、ジチオエーテル、ジチオピル、ジウロン、d-リモネン、DMPA、DNOC、DNOCアンモニウム塩、DNOCカリウム塩、DNOCナトリウム塩、ドデモルフ、酢酸ドデモルフ、安息香酸ドデモルフ、ドジシン、ドジシン塩酸塩、ドジシンナトリウム塩、ドジン、ドフェナピン、ドミニカルア、ドラメクチン、ドラゾキシロン、DSMA、ズフリン、EBEP、EBP、エクジステロン、エジフェンホス、エグリナジン、エグリナジンエチル、エマメクチン、エマメクチン安息香酸塩、EMPC、エンペントリン、エンドスルファン、エンドタール、エンドタールニアンモニウム塩、エンドタールニカリウム塩、エンドタールニナトリウム塩、エンドチオン、エンドリン、エネストロブリン、エノキサストロビン、EPN、エポコレオン、エポフェノナン、エポキシコナ
 ザール、エプリノメクチン、エプロナズ、EPTC、エルボン、エルゴカルシフェロール、アルルチシアンカオアン (erlujixiancaoan)、エスデパレトリン (esdepallethrine)、エスフェンバレート、エスロプロカルブ、エタセラシル、エタコナゾール、エタホス、エテム (etem)、エタボキサム、エタクロル (ethachlor)、エタルフルラリン、エタメトスルフルロン、エタメトスルフルロンメチル、エタプロクロル (ethaprochlor)、エテホン、エチジムロン、エチオフェンカルブ、エチオレート、エチオン、エチオジン、エチプロール、エチリモール、エトエートメチル、エトフメセート、エトヘキサジオール、エトプロホス、エトキシフェン、エトキシフェンエチル、エトキシキン、エトキシスルフロロン、エチクロゼート、ギ酸エチル、 α -ナフタレン酢酸エチル、エチルDDD、エチレン、二臭化エチレン、二塩化エチレン、エチレンオキシド、エチリシン、エチル水銀2, 3-ジヒドロキシプロピルメルカプチド、酢酸エチル水銀、臭化エチル水銀、塩化エチル水銀、リン酸エチル水銀、エチノフェン、エトニプロミド、エトベンザニド、エトフェンブロックス、エトキサゾール、エトリジアゾール、エトリムホス、オイゲノール、EXD、ファモキサドン、ファムフル、フェンアミドン、フェナミノスルフ、フェナミンストロビン、フェナミホス、フェナパニル、フェナリモル、フェナシュラム、フェナザフロル、フェナザキン、フェンブコナゾール、酸化フェンブタスズ、フェンクロラゾール、フェンクロラゾールエチル、フェンクロルホス、フェンクロリム、フェネタカルブ、フェンフルトリン、フェンフラム、フェンヘキサミド、フェニトロパン、フェニトロチオン、フェンチュントン (fenjuntong)、フェノブカルブ、フェノプロップ、フェノプロップ3-ブトキシプロピル、

10

20

30

40

50

フェノプロップブトメチル、フェノプロップブトチル、フェノプロップブチル、フェノプロ
 ロップイソクチル、フェノプロップメチル、フェノプロップカリウム塩、フェノチオカル
 ブ、フェノキサクリム、フェノキサニル、フェノキサプロップ、フェノキサプロップエチ
 ル、フェノキサプロップP、フェノキサプロップPエチル、フェノキサスルホン、フェノ
 キシカルブ、フェンピクロニル、フェンピリトリン、フェンプロバトリン、フェンプロピ
 ジン、フェンプロピモルフ、フェンピラザミン、フェンピロキシメート、フェンキノトリ
 オン、フェンリダゾン、フェンリダゾンカリウム塩、フェンリダゾンプロピル、フェンソ
 ン、フェンスルホチオン、フェンテラコール、フェンチアプロップ、フェンチアプロップ
 エチル、フェンチオン、フェンチオン・エチル、フェンチン、酢酸フェンチン、フェンチ
 ンクロリド、水酸化フェンチン、フェントラザミド、フェントリファニル、フェニユロン
 、フェニユロンTCA、フェンバレレート、ファーバム、フェリムゾン、硫酸第一鉄、フィ
 プロニル、フランプロップ、フランプロップイソプロピル、フランプロップM、フラン
 プロップメチル、フランプロップMイソプロピル、フランプロップMメチル、フラザスル
 フロン、フロクマフェン、フロメトキン、フロニカミド、フロラスラム、フルアクリピリ
 ム、フルアジホップ、フルアジホップブチル、フルアジホップメチル、フルアジホップP
 、フルアジホップPブチル、フルアジナム、フルアゾレート、フルアズロン、フルベンジ
 アミド、フルベンジミン、フルカルバゾン、フルカルバゾンナトリウム塩、フルセトスル
 フロン、フルクロラルイン、フルコフロン、フルシクロクスロン、フルシトリネート、フル
 ジオキシニル、フルエネチル、フルエンズルホン、フルフェナセット、フルフェネリム、
 フルフェニカン、フルフェノクスロン、フルフェノキシストロビン、フルフェンプロック
 ス、フルフェンピル、フルフェンピルエチル、フルフィプロール、フルヘキサホン (f l
 u h e x a f o n)、フルメトリン、フルメトベル、フルメトラリン、フルメツラム、フル
 メジン、フルミクロラック、フルミクロラックペンチル、フルミオキサジン、フルミプ
 ロピン、フルモルフ、フルオメツロン、フルオピコリド、フルオピラム、フルオルベンシ
 ド、フルオリダミド、フルオロアセトアミド、フロロジフェン、フルオログリコフェン、
 フルオログリコフェンエチル、フルオルイミド、フルオロミジン、フルオロニトロフェン
 、フルオチウロン、フルオトリマゾール、フルオキサストロビン、フルポキサム、フルプ
 ロパシル、フルプロバジン、フルプロパネート、フルプロパネートナトリウム塩、フルピ
 ラジフロン、フルピルスルフロン、フルピルスルフロンメチル、フルピルスルフロンメチ
 ルナトリウム塩、フルキンコナゾール、フルララネル、フルラゾール、フルレノール、フル
 レノールブチル、フルレノールメチル、フルリドン、フルロクロリドン、フルロキシピ
 ル、フルロキシピルブトメチル、フルロキシピルメブチル、フルルプリミドール、フルル
 スルアミド (f l u r s u l a m i d)、フルルタモン、フルシラゾール、フルスルファ
 ミド、フルチアセット、フルチアセットメチル、フルチアニル、フルトラニル、フルトリ
 アホール、フルバリネート、フルキサピロキサド、フルキソフェニム、ホルベット、ホメ
 サフェン、ホメサフェンナトリウム塩、ホノホス、ホラムスルフロン、ホルクロルフェニ
 ユロン、ホルムアルデヒド、ホルメタネート、塩酸ホルメタネート、ホルモチオン、ホル
 ムパラネート、塩酸ホルムパラネート、ホサミン、ホサミンアンモニウム、ホセチル (f
 o s e t y l)、ホセチル (f o s e t y l - a l m i n i u m)、ホスメチラン、ホス
 ピレート、ホスチアゼート、ホスチエタン、フロンタリン、フベリダゾール、フカオチン
 (f u c a o j i n g)、フカオミ (f u c a o m i)、フナイヒカオリン (f u n a i
 h e c a o l i n g)、フフェンチオ尿素 (f u p h e n t h i o u r e a)、フララン
 (f u r a l a n e)、フララキシル、フラメトリン、フラメトピル、フラチオカルブ、
 フルカルバニル、フルコナゾール、フルコナゾール・シス、フレトリン (f u r e t h r
 i n)、フルフラール、フリラゾール、フルメシクロックス、フロファネート、フリロキ
 シフェン、ガンマシハロトリン、ガンマHCH、ジェニット (g e n i t)、ジベレリン
 酸、ジベレリン類、グリフトル (g l i f t o r)、グルホシネート、グルホシネートア
 ンモニウム塩、グルホシネートP、グルホシネートPアンモニウム塩、グルホシネートP
 ナトリウム塩、グリオジン、グリオキシム、グリホサート、グリホサートジアンモニウム
 塩、グリホサートジメチルアンモニウム塩、グリホサートイソプロピルアンモニウム塩、

10

20

30

40

50

グリホサートモノアンモニウム塩、グリホサートカリウム塩、グリホサートセスキナトリウム塩、グリホサートトリメシウム塩、グリホシン、ゴシップルア、グランドルア、グリセオフルビン、グアザチン、酢酸グアザチン、ハラクリネート、ハラウキシフェン、ハラウキシフェンメチル、ハルフェンプロックス、ハロフェノジド、ハロサフェン、ハロスルフロン、ハロスルフロンメチル、ハロキシジン、ハロキシホップ、ハロキシホップエトチル、ハロキシホップメチル、ハロキシホップP、ハロキシホップPエトチル、ハロキシホップPメチル、ハロキシホップナトリウム塩、HCH、ヘメル (heme l)、ヘンバ、HEOD、ヘプタクロル、ヘプタフルトリン、ヘプテノホス、ヘプトパルギル、ハービマイシン、ヘテロホス、ヘキサクロロアセトン、ヘキサクロロベンゼン、ヘキサクロロブタジエン、ヘキサクロロフェン、ヘキサコナゾール、ヘキサフルムロン、ヘキサフルラート (hexaflurate)、ヘキサルア、ヘキサミド、ヘキサジノン、ヘキシルチオホス、ヘキシチアゾクス、HHDN、ホロスルフ、ファンカイウォ (huancaiwu)、ファンカオリン (huangcaoling)、ファンチュンツォ (huanjunzuo)、ヒドラメチルノン、ヒドラガフェン、消石灰、シアン化水素、ヒドロブレン、ヒメキサゾール、ヒキンカルブ、IAA、IBA、イカリジン、イマザリル、イマザリルニトラート、硫酸イマザリル、イマザメタベンズ、イマザメタベンズメチル、イマザモックス、イマザモックスアンモニウム塩、イマザピック、イマザピックアンモニウム塩、イマザピル、イマザピルイソプロピルアンモニウム塩、イマザキン、イマザキンアンモニウム塩、イマザキンメチル、イマザキンナトリウム塩、イマゼタピル、イマゼタピルアンモニウム塩、イマゾスルフロン、イミベンコナゾール、イミシアホス、イミダクロプリド、イミダクロチズ、イミノクタジン、イミノクタジン酢酸塩、イミノクタジンアルベシル酸塩、イミプロトリン、イナベンフィド、インダノファン、インダジフラム、インドキサカルブ、イネジン、ヨードボニル、ヨードカルブ、ヨードメタン、ヨードスルフロン、ヨードスルフロンメチル、ヨードスルフロンメチルナトリウム塩、ヨーフェンスルフロン、ヨーフェンスルフロンナトリウム塩、アイオキシニル (ioxynil)、アイオキシニル (ioxynil octanoate)、アイオキシニルリチウム塩、アイオキシニルナトリウム塩、イパジン、イブコナゾール、イブフェンカルバゾン、イプロベンホス、イプロジオン、イプロバリカルブ、イプリミダム、イプスジエノール、イプセノール、IPSP、イサミドホス、イサゾホス、イソベンザン、イソカルバミド、イソカルボホス、イソシル、イソドリン、イソフェンホス、イソフェンホスメチル、イソフェタミド、イソラン、イソメチオジン、イソノルロン、イソポリネート、イソプロカルブ、イソプロパリン、イソプロチオラン、イソプロツロン、イソピラザム、イソピリモール、イソチオエート、イソチアニル、イソウロン、イソバレジオン、イソキサベン、イソキサクロルトール、イソキサジフェン、イソキサジフェンエチル、イソキサフルトール、イソキサピリホップ、イソキサチオン、イベルメクチン、イゾパンホス (izopamfos)、ジャポニルア、ジャポトリン (japothrin) 類、ジャスモリンI、ジャスモリンII、ジャスモン酸、チアフアンチョンツォン (jiahuangchongzong)、チアチツェンシアオリン (jiajizengxiaolin)、チアシャンチュンツィ (jiaxiangjunzhi)、チエカオワン (jiecaowan)、チエカオシ (jiecaoxi)、ヨードフェンホス、幼若ホルモンI、幼若ホルモンII、幼若ホルモンIII、カデスリン、カルブチレート、カレタザン、カレタザンカリウム塩、カスガマイシン、カスガマイシン塩酸塩、ケチュンリン (kejunlin)、ケレバン、ケトスピラドックス、ケトスピラドックスカリウム、カイネチン、キノブレン、クレソキシムメチル、クイカオシ (kuicaoxi)、ラクトフェン、ラムダシハロトリン、ラチルア、ヒ酸鉛、レナシル、レピメクチン、レプトホス、リンデン、リネアチン、リニュロン、リリムホス、リトルア、ルーブルア、ルフェヌロン、ルヴティンチュンツィ (lvdingjunzhi)、ルヴシアンカオリン (lvxiancaolin)、リチダチオン、MAA、マラチオン、マレイン酸ヒドラジド、マロノベン、マルトデキストリン、MAMA、マンカップ、マンゼブ、マンジプロパミド、マンドストロビン、マンネブ、マトリン、マジドックス、MCPA、MCPA 2-エチルヘキシル、MCPAブトチル、MCPAブチ

10

20

30

40

50

ル、MCPAジメチルアンモニウム塩、MCPAジオラミン、MCPAエチル、MCPA
 イソブチル、MCPAイソクチル、MCPAイソプロピル、MCPAメチル、MCPAオ
 ラミン、MCPAカリウム塩、MCPAナトリウム塩、MCPAチオエチル、MCPAト
 ロラミン、MCPB、MCPBエチル、MCPBメチル、MCPBナトリウム塩、メベニ
 ル、メカルバム、メカルピンジド、メカルホン、メコプロップ、メコプロップ2-エチル
 ヘキシル、メコプロップジメチルアンモニウム塩、メコプロップジオラミン、メコプロッ
 プエタジル、メコプロップイソクチル、メコプロップメチル、メコプロップP、メコプロ
 ップP2-エチルヘキシル、メコプロップPジメチルアンモニウム塩、メコプロップPイ
 ソブチル、メコプロップカリウム塩、メコプロップPカリウム塩、メコプロップナトリウ
 ム塩、メコプロップトロラミン、メジメホルム (medimeform)、メジノテルブ
 、メジノテルブアセタート、メドルア、メフェナセット、メフェンピル、メフェンピルジ
 エチル、メフルイジド、メフルイジドジオラミン、メフルイジドカリウム塩、メガトモ酸
 、メナゾン、メパニピリム、メペルフルトリン、メフェナート、メホスホラン、メピコー
 ト、メピコートクロリド、メピコート五ホウ酸塩、メプロニル、メブチルジノカップ、塩
 化第二水銀、酸化水銀、塩化第一水銀、メルホス、メソプラジン、メソスルフロン、メソ
 スルフロンメチル、メソトリオン、メスルフェン、メスルフェンホス、メタフルミゾン、
 メタラキシル、メタラキシルM、メタアルデヒド、カーバム、カーバムアンモニウム塩、
 メタミホップ、メタミトロン、カーバムカリウム塩、カーバムナトリウム塩、メタザクロ
 ール、メタゾスルフロン、メタゾキソロン、メトコナゾール、メテパ (metepa)、
 メトフルラゾン、メタベンズチアズロン、メタクリホス、メタルプロパリン、メタミドホ
 ス、メタスルホカルブ、メサゾール、メトフロキサム、メチダチオン、メチオベンカルブ
 、メチオカルブ、メチオピリスルフロン (methiopyrisulfuron)、メ
 チオテパ、メチオゾリン、メチウロン、メトクロトホス、メトメトン、メソミル、メトブ
 レン、メトプロトリン、メトキンブチル、メトトリン、メトキシクロル、メトキシフェノ
 ジド、メトキシフェノン、メチルアホラート、臭化メチル、メチルオイゲノール、ヨウ化
 メチル、イソチオシアン酸メチル、メチルアセトホス (methylacetophos
)、メチルクロロホルム、メチルダイムロン、塩化メチレン、安息香酸メチル水銀、メチ
 ル水銀ジシアンジアミド、メチル水銀ペンタクロロフェノキシド、メチルネオデカナミド
 、メチラム、メトベンズロン、メトブロムロン、メトフルトリン、メトラクロール、メト
 ルカルブ、メトミノストロビン、メトスラム、メトキサジアゾン、メトキスロン、メトラ
 フェノン、メトリブジン、メトスルホバックス、メトスルフロン、メトスルフロンメチル
 、メピンホス、メキサカルベート、ミエシュアン (mieshuan)、ミルベメクチン
 、ミルベマイシンオキシム、ミルネブ、ミパホックス、マイレックス、MNAF、モクチ
 ユン (moguchun)、モリネート、モロスルタップ (molosultap)、モ
 ンフルオロトリン、モナリッド、モニソウロン、モノクロロ酢酸、モノクロトホス、モノ
 リニューロン、モノスルフロン、モノスルフロンエステル、モニューロン、モニューロンTCA
 、モルファムコート、モルファムコートジクロリド、モロキシジン、モロキシジン塩酸塩
 、モルホチオン、モルジド (morzid)、モキシデクチン、MSMA、ムスカルア、
 ミクロブタニル、ミクロゾリン、N- (エチル水銀) -p-トルエンスルホンアニリド、
 ナーバム、ナフタロホス、ナレッド、ナフタレン、ナフタレンアセトアミド、無水ナフタ
 ル酸、ナフトキシ酢酸、ナプロアニリド、ナプロパミド、ナプロパミドM、ナプタラム、
 ナプタラムナトリウム塩、ナタマイシン、ネブロン、ニクロサミド、ニクロサミドオラミ
 ン、ニコスルフロン、ニコチン、ニフルリジッド、ニピラクロフェン、ニテンピラム、ニ
 チアジン、ニトラリン、ニトラピリン、ニトリラカルブ、ニトロフェン、ニトロフルオル
 フェン、ニトロスチレン、ニトロタル・イソプロピル、ノルボルミド、ノルフルラゾン、
 ノルニコチン、ノルロン、ノバルロン、ノピフルムロン、ヌアリモール、OCH、オクタ
 クロロジプロピルエーテル、オクチリノン、オフラセ、オメトエート、オルベンカルブ、
 オルフルアルア、オルトジクロロベンゼン、オルトスルファムロン、オリクタールア、オリサ
 ストロビン、オリザリン、オストール、オストラモン (ostramone)、オキサベ
 トリニル、オキサジアルギル、オキサジアゾン、オキサジキシル、オキサマート (oxa

10

20

30

40

50

mate)、オキサミル、オキサピラゾン、オキサピラゾンジモラミン (oxapyrazone-dimolamine)、オキサピラゾンナトリウム、オキサスルフロ、オキサチアピプロリン、オキサジクロメホン、オキシ銅、オキシリニック酸、オキスポコナゾール、オキスポコナゾールフマル酸塩、オキシカルボキシン、オキシジメトンメチル、オキシデプロホス、オキシジスルホトン、オキシフローフェン、オキシマトリン、オキシテトラサイクリン、オキシテトラサイクリン塩酸塩、パクロブトラゾール、パイチョンティン (paichongding)、パラジクロロベンゼン、パラフルロン、パラコート、パラコートジクロリド、パラコートジメチル硫酸塩、パラチオン、パラチオンメチル、パリノール、ペプレート、ペフラゾエート、ペラルゴン酸、ペンコナゾール、ペンシクロロン、ペンディメタリン、ペンフルフェン、ペンフルロン、ペノキススラム、ペンタクロロフェノール、ラウリン酸ペンタクロロフェニル、ペンタノクロール、ペンチオピラド、ペントメトリン (pentmethrin)、ペントキサゾン、ペルフルイドン、ペルメトリン、ペトキサミド、フェナマクリル、フェナジンオキシド、フェニソファミ、フェンカプトン、フェンメディファミ、フェンメディファミエチル、フェノベンズロン、フェノトリン、フェンプロキシド (phenproxide)、フェントエート、フェニルマーキュリ尿素 (phenylmercuriurea)、酢酸フェニル水銀、塩化フェニル水銀、ピロカテコールのフェニル水銀誘導体、硝酸フェニル水銀、サリチル酸フェニル水銀、ホレート、ホサセチム、ホサロン、ホスダイフェン、ホスホラン、ホスホランメチル、ホスグリシン (phosglycin)、ホスメット、ホスニクロル、ホスファミドン、ホスフィン、ホスホカルブ、リン、ホスチン (phostin)、ホキシム、ホキシムメチル、フタリド、ピカルブトラゾクス、ピクロラム、ピクロラム 2-エチルヘキシル、ピクロラムイソクチル、ピクロラムメチル、ピクロラムオラミン、ピクロラムカリウム、ピクロラムトリエチルアンモニウム塩、ピクロラムトリス (2-ヒドロキシプロピル) アンモニウム塩、ピコリナフェン、ピコキシストロビン、ピンドン、ピンドンナトリウム塩、ピノキサデン、ピペラリン、ピペロニルブトキシド、ピペロニルシクロネン、ピペロホス、ピプロクタニル (piproctanyl)、ピプロクタニル (piproctanyl bromide)、ピプロタール (piprotal)、ピリメタホス、ピリミカーブ、ピリミオキシホス、ピリミホスエチル、ピリミホスメチル、プリフェナート、ポリカルバメート、ポリオキシシン類、ポリオキシソリム、ポリオキシソリム亜鉛、ポリチアラン (polythialan)、亜ヒ酸カリウム、アジ化カリウム、シアン酸カリウム、ジベレリン酸カリウム、ナフテン酸カリウム、多硫化カリウム、チオシアン酸カリウム、 α -ナフタレン酢酸カリウム、pp'-DDT、プラレトリン、プレコセン I、プレコセン II、プレコセン III、プレチラクロール、プリミドホス、プリミスルフロ、プリミスルフロメチル、プロベナゾール、プロクロラズ、プロクロラズマンガン塩、プロクロノール、プロシアジン、プロシミドン、プロジアミン、プロフェノホス、プロフルアゾール、プロフルラリン、プロフルトリン、プロホキシジム、プログリナジン、プログリナジンエチル、プロヘキサジオン、プロヘキサジオンカルシウム塩、プロヒドロジャスモン、プロマシル、プロメカルブ、プロメトン、プロメトリン、プロムリット、プロパクロール、プロパミジン、プロパミジン二塩酸塩、プロパモカルブ、プロパモカルブ塩酸塩、プロパニル、プロパホス、プロパキサホップ、プロバルギット、プロバルトリン、プロバジン、プロベタムホス、プロファミ、プロピコナゾール、プロピネブ、プロピソクロール、プロポキスル、プロポキシカルバゾン、プロポキシカルバゾンナトリウム塩、プロピルイソム (propyl isome)、プロピリスルフロ・刀Aプロピザミド、プロキナジド、プロスレル (prosuler)、プロスルファリン、プロスルホカルブ、プロスルフロ、プロチダチオン、プロチオカルブ、プロチオカルブ塩酸塩、プロチオコナゾール、プロチオホス、プロトエート、プロトリフェンブト、プロキサン、プロキサンナトリウム塩、プリナクロール、ピダノン、ピフルブミド、ピメトロジン、ピラカルボリド、ピラクロホス、ピラクロニル、ピラクロストロビン、ピラフルフェン、ピラフルフェンエチル、ピラフルプロール、ピラマト (pyramat)、ピラメストロビン、ピラオキシストロビン、ピラスルホトール、ピラゾリネート、ピラゾホス、ピラゾスルフロ、ピラゾスル

10

20

30

40

50

フロンエチル、ピラゾチオン、ピラゾキシフェン、ピレスメトリン、ピレトリン I、ピレ
 トリン II、ピレトリン類、ピリバムベンズイソプロピル (pyri bambenz-i
 sopropyl)、ピリバムベンズプロピル (pyri bambenz-propyl)
)、ピリベンカルブ、ピリベンゾキシム、ピリブチカルブ、ピリクロル、ピリダベン、ピ
 リダフォル、ピリダリル、ピリダフェンチオン、ピリデート、ピリジニトリル、ピリフェ
 ノックス、ピリフルキナゾン、ピリフタリド、ピリメタニル、ピリミジフェン、ピリミノ
 バック、ピリミノバックメチル、ピリミノストロピン、ピリミスルファン、ピリミテート
 、ピリニュロン、ピリオフェノン、ピリプロール、ピリプロパノール (pyriprop
 anol)、ピリプロキシフェン、ピリソキサゾール、ピリチオバック、ピリチオバック
 ナトリウム塩、ピロラン (pyrrolan)、ピロキロン、ピロキサスルホン、ピロキス
 スラム、ピロキシクロル、ピロキシフル、ニガキ、キナセトール、キナセトールスルフェ
 ート、キナルホス、キナルホスメチル、キナザミド、キンクロラック、キンコナゾール、
 キンメラック、キノクラミン、キノナミド、キノチオン、キノキシフェン、キンチオホス
 、キントゼン、キザロホップ、キザロホップエチル、キザロホップ P、キザロホップ Pエ
 チル、キザロホップ Pテフリル、チュウエンツィ (quwenzhi)、チュインティン
 (quyingding)、ラベンザゾール、ラフォキサニド、レベミド、レスカルア、
 レスメトリン、ロデタニル、ロドジャポニン III、リバビリン、リムスルフロン、ロテ
 ノン、リアニア、サフルフェナシル、サイチュンマオ (saijunmao)、サイセン
 トン (saisentong)、サリチルアニリド、サンギナリン、サントニン、シュラ
 ーダン、シリロシド、セブチラジン、セクブメトン、セダキサン、セラメクチン、セミア
 ミトラズ、セミアミトラズ塩化物、セサメックス、セサモリン、セトキシジム、シュアン
 チアアンカオリン (shuangjiaancaolin)、シデュロン、シグルール、
 シラフルオフエン、シラトラン、シリカゲル、シルチオフアム、シマジン、シメコナゾー
 ル、シメトン、シメトリン、シントフェン、SMA、エスメトラクロール、亜ヒ酸ナトリ
 ウム、アジ化ナトリウム、塩素酸ナトリウム、フッ化ナトリウム、フルオロ酢酸ナトリウ
 ム、ヘキサフルオロケイ酸ナトリウム、ナフテン酸ナトリウム、ナトリウムオルトフェニ
 ルフェノキシド、ナトリウムペンタクロロフェノキシド、多硫化ナトリウム、チオシアン
 酸ナトリウム、α-ナフタレン酢酸ナトリウム、ソファミド、スピネトラム、スピノサド
 、スピロジクロフェン、スピロメシフェン、スピロテトラマト、スピロキサミン、ストレ
 プトマイシン、ストレプトマイシンセスキ硫酸塩、ストリキニーネ、スルカトール、スル
 コフロン、スルコフロンナトリウム、スルコトリオン、スルファレート、スルフェントラ
 ゾン、スルフィラム、スルフルラミド、スルホメツロン、スルホメツロンメチル、スルホ
 スルフロン、スルホテップ、スルホキサフロル、スルホキシド、スルホキシム、イオウ、
 硫酸、フッ化スルフルル、スルグリカピン、スルプロホス、スルトロペン、スウェップ、
 タウフルバリネート、タブロン (tavron)、タジムカルブ、TCA、TCAアンモ
 ニウム塩、TCAカルシウム塩、TCAエタジル、TCAマグネシウム塩、TCAナトリ
 ウム塩、TDE、テブコナゾール、テブフェノジド、テブフェンピラド、テブフロキン、
 テブピリムホス、テブタム、テブチウロン、テクロフタラム、テクナゼン、テコラム (t
 ecoram)、テフルベンズロン、テフルトリン、テフリルトリオン、テムボトリオン
 、テムホス、テパ、TEPP、テブラロキシジム、テラレトリン、ターバシル、テルブカル
 ルブ、テルブクロル、テルブホス、テルブメトン、テルブチラジン、テルブトリン、テト
 シクラシス、テトラクロロエタン、テトラクロロピンホス、テトラコナゾール、テトラジ
 ホン、テトラフルロン、テトラメスリン、テトラメチルフルトリン、テトラミン、テトラ
 ナクチン (tetranactin)、テトラニリプロール (tetranilipro
 le)、テトラスル、硫酸タリウム、テニルクロール、シータシベルメトリン、チアベン
 ダゾール、チアクロプリド、チアジフルオール、チアメトキサム、チアプロニル (thi
 apronil)、チアザフルロン、チアゾピル、チクロホス、チシオフエン、チジアジ
 ミン、チジアズロン、チエンカルバゾン、チエンカルバゾンメチル、チフェンスルフロン
 、チフェンスルフロンメチル、チフルザミド、チオベンカルブ、チオカルボキシム、チオ
 クロルフェンヒム、チオシクラム、チオシクラム塩酸塩、チオシクラムシュウ酸塩、チオ

10

20

30

40

50

ジアゾール銅、チオジカルブ、チオファノックス、チオフルオキシメート (thiofluoximate)、チオヘンパ (thiohempa)、チメロサル、チオメトン、チオナジン、チオファネート、チオファネートメチル、チオキノックス、チオセミカルバジド、チオスルタップ (thiosultap)、チオスルタップニアンモニウム塩、チオスルタップ (thiosultap-disodium)、チオスルタップモノナトリウム塩、チオテパ、チウラム、ツリンギエンシン、チアジニル、チアフエナシル、ティアオチエアン (tiaojiean)、チオカルバジル、チオクロリム、チオキサザフェン、チオキシミド、チルパート、トルクロホスメチル、トルフェンピラド、トルプロカルブ、トルピラレート、トリルフルアニド、酢酸トリル水銀、トブラメゾン、トラルコキシジム、トラロシトリン、トラロメトリン、トラロピリル、トランスフルトリン、トランスペルメトリン、トレタミン、トリアコンタノール、トリアジメホン、トリアジメノール、トリアファモン、トリアレート、トリアミホス、トリアペンテノール、トリアラテン、トリアリモール、トリアスルフロソ、トリアザメート、トリアズブチル、トリアジフラム、トリアゾホス、トリアゾキシド、トリベニユロン、トリベニユロンメチル、トリブホス、酸化トリブチルスズ、トリカンバ、トリクラミド、トリクロルホン、トリクロロメタホス-3、トリクロロナート、トリクロピル、トリクロピルブトチル、トリクロピルエチル、トリクロピリカルブ、トリクロピルトリエチルアンモニウム塩、トリシクラゾール、トリデモルフ、トリジファン、トリエタジン、トリフェンモルフ、トリフェノホス、トリフロキシストロビン、トリフロキシスルフロソ、トリフロキシスルフロソナトリウム塩、トリフルジモキサジン (trifludimoxazin)、トリフルメゾピリム、トリフルミゾール、トリフルムロン、トリフルラリン、トリフルスルフロソ、トリフルスルフロソメチル、トリホップ、トリホップメチル、トリホブシム、トリホリン、トリヒドロキシトリアジン、トリメドルア、トリメタカルブ、トリメツロン (trimeturon)、トリネキサバック、トリネキサバックエチル、トリブレン、トリプロピンダン、トリプトリド、トリタック (tritac)、トリチコナゾール、トリトスルフロソ、トランクコール (trunc-call)、ウニコナゾール、ウニコナゾールP、アーバサイド (urbacide)、ウレデパ、吉草酸エステル、バリダマイシン、バリフェナレート、バロン (valone)、バミドチオン、バンガード (vanguard)、バニリプロール、バーナレート、ピンクロゾリン、ワルファリン、ワルファリンカリウム、ワルファリンナトリウム、シャオチョンリウリン (xiaochongliulin)、シンチュンアン (xinjunan)、シウォチュンアン (xiwojunan)、XMC、キシラクロール、キシレノール類、キシリルカルブ、イシチン (yishijing)、ザリラミド、ゼアチン、ツェンシャオアン (zengxiaoan)、ゼータシベルメトリン、ナフテン酸亜鉛、リン化亜鉛、チアゾール亜鉛、ジネブ、ジラム、ゾラプロホス、ゾキサミド、ツォミファンロン (zuomihunaglong)、 α -クロロヒドリン、 α -エクジソン、 α -ムルチストリアチンおよび α -ナフタレン酢酸の1種若しくはそれ以上のような「別の化合物」と組合せて(1種の組成混合物中で、または同時若しくは逐次適用でのような)使用しうる。さらなる情報については、alanwood.netに配置されている“COMPENDIUM OF PESTICIDE COMMON NAMES”を参照されたい。また、“THE PESTICIDE MANUAL”第15版、C D S Tomlinにより編、British Crop Production Councilによる著作権 2009年、またはその以前若しくはより最近の版も参照されたい。

【0349】

別の態様において、式1の分子は、以下の化合物と組合せて(1種の組成混合物中で、または同時若しくは逐次適用でのような)もまた使用しうる。

【0350】

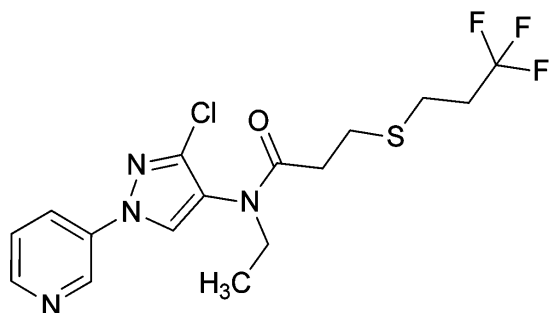
10

20

30

40

【化 9 3】



10

【0351】

別の態様において、式1の化合物は1種若しくはそれ以上の生物農薬と組合せて（1種の組成混合物中で、または同時若しくは逐次適用でのような）もまた使用しうる。「生物農薬」という用語は、化学的農薬と類似の様式で適用される微生物の生物学的病害虫防除剤に使用される。普遍的にこれらは細菌性であるが、しかし、トリコデルマ属（*Trichoderma*）スピーシーズおよびアンペロミセス キスカリス（*Ampelomyces quisqualis*）（ブドウうどんこ病の防除剤）を包含する真菌性防除剤の例もまた存在する。放線菌（*Bacillus subtilis*）は植物病原体を防除するのに使用される。雑草およびげっ歯類もまた微生物の剤で防除されている。1つの公知の殺虫剤の例は、チョウ目、コウチュウ目およびハエ目の細菌性疾患、パチルス チューリンゲンシス（*Bacillus thuringiensis*）である。それは他の生物体に対する影響をほとんど有しないため、それは合成農薬より環境に優しいと考えられている。生物学的殺虫剤は：昆虫病原性糸状菌（例えば黒きょう病菌（*Metarhizium anisopliae*））；昆虫病原性線虫（例えばステイネルネマ フェルチアエ（*Steinernema feltiae*））；および昆虫病原性ウイルス（例えばコドリंगा（*Cydia pomonella*）顆粒ウイルス）に基づく製品を包含する。

20

【0352】

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

30

40

【0353】

別の態様において、上の可能な組合せは多様な重量比で使用しうる。例えば、ある2成分混合物、別の化合物に対する式1の分子の重量比は約100：1から約1：100までであり得；別の例において、該重量比は約50：1ないし約1：50であり得；別の例において、該重量比は約20：1ないし約20につき1であり得；別の例において、該重量比は約10：1ないし約1：10であり得；別の例において、該重量比は約5：1ないし1：5であり得；別の例において、該重量比は約3：1ないし約1：3であり得；別の例において、該重量比は約2：1ないし約1：2であり得；そして最後の例において該重量

50

比は約 1 : 1 であり得る。しかしながら、好ましくは、約 10 : 1 ないし約 1 : 10 未満の重量比が好ましい。式 1 の 1 種若しくはそれ以上の分子および上の可能な組合せからの 1 種若しくはそれ以上の他の化合物を含んでなる 3 若しくは 4 成分の混合物を使用することともまたときに好ましい。

【0354】

【表 2】

表A

番号	別の化合物に対する式 1 の分子の 重量比の範囲
1	100:1 ないし 1:100
2	50:1 ないし 1:50
3	20:1 ないし 1:20
4	10:1 ないし 1:10
5	5:1 ないし 1:5
6	3:1 ないし 1:3
7	2:1 ないし 1:2
8	1:1

10

20

【0355】

共力的殺虫農薬組成物であることが予見される別の化合物に対する式 1 のある分子若しくはそのいずれかの農薬で許容できる塩の重量比は、 $X : Y$ として描くことができ；式中 X は式 1 のある分子若しくはそのいずれかの農薬で許容できる塩の重量部分であり、および Y は別の化合物の重量部分である。 X の重量部分の数値範囲は、表 B に図で示されたとおり、 $0 < X \leq 100$ であり、そして Y の重量部分は $0 < Y \leq 100$ である。制限しない例として、別の化合物に対する該農薬の重量比は約 20 : 1 でありうる。

【0356】

【表 3】

表B

別の化合物 (Y) 重量部分	100	X ₁ Y		X ₁ Y					
	50	X ₁ Y	X ₁ Y		X ₁ Y				
	20	X ₁ Y		X ₁ Y					
	15	X ₁ Y	X ₁ Y	X ₁ Y	X ₁ Y				
	10	X ₁ Y		X ₁ Y		X ₁ Y		X ₁ Y	
	3	X ₁ Y	X ₁ Y		X ₁ Y	X ₁ Y	X ₁ Y		X ₁ Y
	2	X ₁ Y		X ₁ Y		X ₁ Y		X ₁ Y	
	1	X ₁ Y	X ₁ Y	X ₁ Y	X ₁ Y	X ₁ Y	X ₁ Y	X ₁ Y	X ₁ Y
		1	2	3	10	15	20	50	100

式 1 の分子
(X) 重量部分

30

40

【0357】

共力的殺虫農薬組成物であることが予見される別の化合物に対する式 1 のある分子若しくはそのいずれかの農薬で許容できる塩の重量比の範囲は、 $X_1 : Y_1$ ないし $X_2 : Y_2$ として描くことができ、式中 X および Y は上のとおり定義される。特定の一態様において、重量比の範囲は、 $X_1 > Y_1$ かつ $X_2 < Y_2$ である $X_1 : Y_1$ ないし $X_2 : Y_2$ でありうる。制限しない例として、別の化合物に対する式 1 のある分子若しくはそのいずれかの農薬で許容できる塩の重量比の範囲は、約 3 : 1 と約 1 : 3 の間でありうる。いくつかの態様において、重量比の範囲は、 $X_1 > Y_1$ かつ $X_2 > Y_2$ である $X_1 : Y_1$ ないし $X_2 : Y_2$ でありうる。制

50

限しない例として、別の化合物に対する式1のある分子若しくはそのいずれかの農業で許容できる塩の範囲は、約15:1と約3:1の間でありうる。さらなる態様において、重量比の範囲は、 $X_1 < Y_1$ かつ $X_2 < Y_2$ である $X_1:Y_1$ ないし $X_2:Y_2$ でありうる。制限しない例として、別の化合物に対する式1のある分子若しくはそのいずれかの農業で許容できる塩の重量比の範囲は、約1:3と約1:20の間でありうる。

【0358】

製剤

農薬はその純粋な形態で適用にまれに適する。農薬を必要とされる濃度でかつ適切な形態で使用して適用、取り扱い、輸送、貯蔵の容易さおよび最大殺虫農薬活性を可能にすることができるように、他の物質を添加することが通常必要である。かように、農薬は、例えばベイト (baits)、CE剤 (concentrated emulsions)、粉剤 (dusts)、乳剤 (emulsifiable concentrates)、燻蒸剤、ゲル剤、粒剤、微小被包化、種子処理、SC剤 (suspension concentrates)、SE剤 (suspoemulsions)、錠剤、水溶性液体、水和性顆粒剤若しくはドライフロアブル剤、水和剤 (wettable powders)、および超低容量溶液に調合される。製剤の種類についてのさらなる情報については、CropLife Internationalによる“Catalogue of Pesticide Formulation Types and International Coding System”技術モノグラフ第2号、第5版(2002)を参照されたい。

【0359】

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

【0360】

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

【0361】

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

【0362】

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

【0363】

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

10

【0364】

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

【0365】

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

【0366】

20

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

【0367】

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

30

【0368】

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

【0369】

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

40

【0370】

別の態様はEW剤(oil-in-water emulsion)であり、ここで、該エマルションは、それぞれ層状の液晶コーティングを提供されかつ水層に分散されている油性小球を含んでなり、各油性小球は農業で活性である最低1種の化合物を含んでなり、かつ：(1)最低1種の非イオン性親油性界面活性剤、(2)最低1種の非イオン性親水性界面活性剤、および(3)最低1種のイオン性界面活性剤、を含んでなるモノラメラ若しくはオリゴラメラの層で個別に被覆されており、該小球は800ナノメートル未満の

50

平均粒子径を有する。該態様に関するさらなる情報は、特許出願番号第11／495, 228号を有する2007年2月1日公開の米国特許公開第20070027034号明細書に開示されている。使用の容易さのため、本態様を「OIWE」と称することができる。

【0371】

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

10

【0372】

他の製剤成分

一般に、式1に開示される分子が製剤中で使用される場合、こうした製剤は他の成分もまた含有し得る。これらの成分は、限定されるものでないが（これは網羅的でなくかつ相互に排除しない一覧である）湿潤剤、展着剤、粘着剤、浸透剤、緩衝剤、封鎖剤、ドリフト低減剤、適合性剤、消泡剤、清浄剤および乳化剤を挙げることができる。数種の成分を直ちに記述する。

【0373】

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

20

【0374】

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

30

40

【0375】

50

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

【0376】

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

【0377】

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

【0378】

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

【0379】

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

【0380】

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

【0381】

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

【0382】

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

【0383】

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

【0384】

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

【0385】

病害虫

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

【0386】

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

【0387】

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

【0388】

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

【0389】

別の態様において、式1の分子はシラミ目の病害虫を防除するのに使用しうる。特定の属の網羅的でない一覧は、限定されるものでないが、ハエマトピヌス（Haematopinus）スピーシーズ、ホプロプレウラ属（Hoplopleura）スピーシーズ、ケモノホソジラミ属（Linognathus）スピーシーズ、シラミ属（Pediculus）スピーシーズおよびイエネズミジラミ属（Polyplox）スピーシーズを挙げ

10

20

30

40

50

ることができる。特定の種の網羅的でない一覧は、限定されるものでないがウマジラミ (Haematopinus asini)、ブタジラミ (Haematopinus suis)、イヌジラミ (Linognathus setosus)、ヒツジジラミ (Linognathus ovis)、アタマジラミ (Pediculus humanus capitis)、コロモジラミ (Pediculus humanus humanus) およびケジラミ (Pthirus pubis) を挙げるることができる。

【0390】

別の態様において、式1の分子はコウチュウ目の害虫を防除するのに使用しうる。特定の属の網羅的でない一覧は、限定されるものでないが、ミツバマメゾウムシ属 (Acanthoscelides) スピーシーズ、アグリオテス属 (Agriotes) スピーシーズ、アントノムス属 (Anthonomus) スピーシーズ、ホソクチゾウムシ属 (Apion) スピーシーズ、カンショコガネ属 (Apogonia) スピーシーズ、ウリハムシ属 (Aulacophora) スピーシーズ、ブルクス属 (Bruchus) スピーシーズ、セロステルナ属 (Cerosterna) スピーシーズ、セロトマ属 (Cerotoma) スピーシーズ、サルゾウムシ属 (Ceutorhynchus) スピーシーズ、カエトクネマ属 (Chaetocnema) スピーシーズ、コラスピス属 (Colaspis) スピーシーズ、クテニセラ属 (Ctenicera) スピーシーズ、シギゾウムシ属 (Curculio) スピーシーズ、コガネカブト属 (Cyclocephala) スピーシーズ、ディアブロティカ属 (Diabrotica) スピーシーズ、タコゾウムシ属 (Hypera) スピーシーズ、イプス属 (Ips) スピーシーズ、リクツス属 (Lyctus) スピーシーズ、メガスケリス属 (Megascelis) スピーシーズ、チビケシキスイ属 (Meligethes) スピーシーズ、オチオリンクス属 (Otiorynchus) スピーシーズ、パントモルス属 (Pantomorus) スピーシーズ、フィロファガ属 (Phyllophaga) スピーシーズ、キスジノミハムシ属 (Phyllotreta) スピーシーズ、リゾトログス属 (Rhizotrogus) スピーシーズ、リンキテス属 (Rhynchites) スピーシーズ、リンコフォルス属 (Rhynchophorus) スピーシーズ、スコリツス属 (Scolytus) スピーシーズ、スフェノフォルス属 (Sphenophorus) スピーシーズ、コクゾウムシ属 (Sitophilus) スピーシーズおよびトリボリウム属 (Tribolium) スピーシーズを挙げるることができる。特定の種の網羅的でない一覧は、限定されるものでないが、インゲンマメゾウムシ (Acanthoscelides obtectus)、アオナガタマムシ (Agrius planipennis)、ツヤハダゴマダラカミキリ (Anoplophora glabripennis)、ワタミハナゾウムシ (Anthonomus grandis)、アタエニウス スプレツルス (Ataenius spretulus)、アトマリア リネアリス (Atomaria linearis)、ボチノデレス プンクチベントリス (Bothynoderes punctiventris)、エンドウゾウムシ (Bruchus pisorum)、ヨツモンマメゾウムシ (Callosobruchus maculatus)、クリヤケシキスイ (Carpophilus hemipterus)、カッシダ ビッタタ (Cassida vittata)、セロトマ トリフルカタ (Cerotoma trifurcata)、キャベツサヤゾウムシ (Ceutorhynchus assimilis)、セウトリンクス ナピ (Ceutorhynchus napi)、コノデルス スカラリス (Conoderus scalaris)、コノデルス スチグモス (Conoderus stigmatus)、スモモゾウムシ (Conotrachelus nenuphar)、コチニス ニチダ (Cotinis nitida)、クリオセリス アスパラギ (Crioceris asparagi)、サビカクムネチビヒラタムシ (Cryptolestes ferrugineus)、カクムネチビヒラタムシ (Cryptolestes pusillus)、トルコカクムネチビヒラタムシ (Cryptolestes turcicus)、シリンドロコプツルス アドスペルス (Cylindrocopturus adspersus)、デボラウス マルギナツス

10

20

30

40

50

(Deporaus marginatus)、オビカツオブシムシ (Derme stes lardarius)、ハラジロカツオブシムシ (Derme stes maculatus)、インゲンテントウ (Epilachna varivestis)、ファウスチヌス クバエ (Faustinus cubae)、ヒロビウス パレス (Hyl obius pales)、アルファルファタコゾウムシ (Hypera postica)、コーヒーミノキクイムシ (Hypothenemus hampei)、タバコシバ ンムシ (Lasioderma serricorne)、コロラドハムシ (Lepti notarsa decemlineata)、リオゲニス フスクス (Liogeny s fuscus)、リオゲニス スツラリス (Liogenys suturalis)、イネミズゾウムシ (Lissorhopterus oryzophilus)、マエ 10 コラスピス ジョリベチ (Maecolaspis joliveti)、メラノツス コムニス (Melanotus communis)、メリゲテス アエネウス (Mel igithe s aeneus)、ヨーロッパコフキコガネ (Melolontha m elolontha)、オベレア ブレビス (Oberea brevis)、オベレア リネアリス (Oberea linearis)、サイカブト (Oryctes rh inoceros)、オオメノコギリヒラタムシ (Oryzaephilus merc ator)、ノコギリヒラタムシ (Oryzaephilus surinamensi s)、クビアカクビホソハムシ (Oulema melanopus)、イネクビホソハ 20 ムシ (Oulema oryzae)、フィロファガ クヤバナ (Phyllophag a cuyabana)、マメコガネ (Popillia japonica)、オオコ ナナガシנקイ (Prostephanus truncatus)、コナナガシנקイ ムシ (Rhyzopertha dominica)、アカアシチビコフキゾウムシ (Sitona lineatus)、グラナリアコクゾウムシ (Sitophilus granarius)、コクゾウムシ (Sitophilus oryzae)、コク ゾウムシ (Sitophilus zeamais)、ジンサンシバンムシ (Stego bium paniceum)、コクヌストモドキ (Tribolium castan eum)、ヒラタコクヌストモドキ (Tribolium confusum)、キマダ ラカツオブシムシ (Trogoderma variabile) およびザブルス テネ ブリオイデス (Zabrus tenebrioides) を挙げることができる。

【0391】

別の態様において、式1の分子はハサミムシ目の害虫を防除するのに使用しうる。

【0392】

別の態様において、式1の分子はゴキブリ目の害虫を防除するのに使用しうる。特定 30 の種の網羅的でない一覧は、限定されるものでないがチャバネゴキブリ (Blattella germanica)、トウヨウゴキブリ (Blatta orientalis)、パルコブラッタ ペンシルバニカ (Parcoblatta pennsylvan ica)、ワモンゴキブリ (Periplaneta americana)、コワモン ゴキブリ (Periplaneta australasiae)、トビイロゴキブリ (Periplaneta brunnea)、クロゴキブリ (Periplaneta fuliginosa)、オガサワラゴキブリ (Pycnoscelus surina mensis) およびチャオビゴキブリ (Supella longipalpa) を挙げ 40 ることができる。

【0393】

別の態様において、式1の分子はハエ目の害虫を防除するのに使用しうる。特定の属 50 の網羅的でない一覧は、限定されるものでないがヤブカ属 (Aedes) スピーシーズ、 アグロミザ属 (Agromyza) スピーシーズ、アナストレファ属 (Anastrepha) スピーシーズ、ハマダラカ属 (Anopheles) スピーシーズ、バクトロセラ 属 (Bactrocera) スピーシーズ、セラチチス属 (Ceratitis) スピー シーズ、メクラアブ属 (Chrysops) スピーシーズ、コクリオミイヤ属 (Coch liomyia) スピーシーズ、コンタリニア属 (Contarinia) スピーシーズ

、イエカ属 (Culex) スピーシーズ、ダシネウラ属 (Dasineura) スピーシーズ、デリア属 (Delia) スピーシーズ、ショウジョウバエ属 (Drosophila) スピーシーズ、ヒメイエバエ属 (Fannia) スピーシーズ、ヒレミイヤ属 (Hylemyia) スピーシーズ、リリオミザ属 (Liriomyza) スピーシーズ、イエバエ属 (Musca) スピーシーズ、フォルビア属 (Phorbia) スピーシーズ、アブ属 (Tabanus) スピーシーズおよびガガンボ属 (Tipula) スピーシーズを挙げることができる。特定の種の網羅的でない一覧は、限定されるものでないが、ムラサキウマゴヤシハモグリムシ (Agromyza frontella)、カリブミバエ (Anastrepha suspensa)、メキシコミバエ (Anastrepha ludens)、アナストレファ オブリカ (Anastrepha obliqua)、ウリミバエ (Bactrocera cucurbitae)、ミカンコミバエ (Bactrocera dorsalis)、バクトロセラ インバデンス (Bactrocera invadens)、モモミバエ (Bactrocera zonata)、チチュウカイミバエ (Ceratitis capitata)、ダイコンタマバエ (Dasineura brassicae)、タネバエ (Delia platura)、ヒメイエバエ (Fannia canicularis)、コブアシヒメイエバエ (Fannia scalaris)、ウマバエ (Gasterophilus intestinalis)、グラシリア ペルセアエ (Gracillia perseae)、ノサンバエ (Haematobia irritans)、キスジウシバエ (Hypoderma lineatum)、アブラナハモグリバエ (Liriomyza brassicae)、ヒツジシラミバエ (Melophagus ovinus)、ムスカ アウツムナリス (Musca autumnalis)、イエバエ (Musca domestica)、ヒツジバエ (Oestrus ovis)、オスシネラ フリット (Oscinella frit)、テンサイハモグリバエ (Pegomya betae)、ニンジンサビバエ (Psila rosae)、ヨーロッパオウトウミバエ (Rhagoletis cerasi)、リンゴミバエ (Rhagoletis pomonella)、ラゴレチス メンダックス (Rhagoletis mendax)、ムギアカタマバエ (Sitodiplosis mosellana) およびサシバエ (Stomoxys calcitrans) を挙げることができる。

【0394】

別の態様において、式1の分子はカメムシ目の害虫を防除するのに使用しうる。特定の属の網羅的でない一覧は、限定されるものでないが、アデルゲス属 (Adelges) スピーシーズ、アウラカスピス属 (Aulacaspis) スピーシーズ、アフロフォラ属 (Aphrophora) スピーシーズ、ワタアブラムシ属 (Aphis) スピーシーズ、ベミシア属 (Bemisia) スピーシーズ、ロウムシ属 (Ceroplastes) スピーシーズ、キオナスピス属 (Chionaspis) スピーシーズ、トビイロマルカイガラムシ属 (Chrysomphalus) スピーシーズ、カタカイガラムシ属 (Coccus) スピーシーズ、ミドリヒメヨコバイ属 (Empoasca) スピーシーズ、レピドサフェス属 (Lepidosaphes) スピーシーズ、ラギノトムス属 (Lagynotomus) スピーシーズ、マキバカスミカメ属 (Lygus) スピーシーズ、マクロシフム属 (Macrosiphum) スピーシーズ、ツマグロヨコバイ属 (Nephotettix) スピーシーズ、ネザラ属 (Nezara) スピーシーズ、フィラエヌス属 (Philaenus) スピーシーズ、オオマダラカスミカメ属 (Phytocoris) スピーシーズ、ピエゾドルス属 (Piezodorus) スピーシーズ、ミカンコナカイガラムシ属 (Planococcus) スピーシーズ、クワコナカイガラムシ属 (Pseudococcus) スピーシーズ、ロパロシフム属 (Rhopalosiphum) スピーシーズ、ハンエンカタカイガラムシ属 (Saissetia) スピーシーズ、テリオアフィス属 (Therioaphis) スピーシーズ、トウメイエラ属 (Toumeyella) スピーシーズ、トキソプテラ属 (Toxoptera) スピーシーズ、トリアレウロデス属 (Trialeurodes) スピーシーズ、サシガメ属 (Triato

ma) スピーシーズおよびヤノネカイガラムシ属 (*Unaspis*) スピーシーズを挙げることができる。特定の種の網羅的でない一覧は、限定されるものでないが、アクロステルヌム ヒラレ (*Acrosternum hilare*)、エンドウヒゲナガアブラムシ (*Acyrtosiphon pisum*)、タマナコナジラミ (*Aleyrodes proletella*)、スパイラルリングコナジラミ (*Aleurodicus dispersus*)、ミカンワタコナジラミ (*Aleurothrixus floccosus*)、フタテンミドリヒメヨコバイ (*Amrasca biguttula biguttula*)、アカマルカイガラムシ (*Aonidiella aurantii*)、ワタアブラムシ (*Aphis gossypii*)、ダイズアブラムシ (*Aphis glycines*)、ヨーロップリンゴアブラムシ (*Aphis pomi*)、ジャガイモヒゲナガアブラムシ (*Aulacorthum solani*)、シルバーリーフコナジラミ (*Bemisia argentifolii*)、タバココナジラミ (*Bemisia tabaci*)、アメリカコバネナガカメムシ (*Blissus leucopterus*)、ブラキコリネラ アスパラギ (*Brachycorynella asparagi*)、ブレベンニア レヒ (*Brevennia rehi*)、ダイコンアブラムシ (*Brevicoryne brassicae*)、カロコリス ノルベギクス (*Calocoris norvegicus*)、ルビーロウカイガラムシ (*Ceroplastes rubens*)、タイワントコジラミ (*Cimex hemipterus*)、トコジラミ (*Cimex lectularius*)、ダグベルツス ファスシアツス (*Dagbertus fasciatus*)、ディケロプス フルカツス (*Dichelops furcatus*)、ロシアコムギアブラムシ (*Diuraphis noxia*)、ミカンキジラミ (*Diaphorina citri*)、オオバコアブラムシ (*Dysaphis plantaginea*)、ジスデルクス スツレルス (*Dysdercus suturellus*)、エデッサ メディタブンダ (*Edessa meditabunda*)、リンゴワタムシ (*Eriosoma lanigerum*)、エウリガスター マウラ (*Eurygaster maura*)、エウスキスツス ヘロス (*Euschistus heros*)、エウスキスツス セルプス (*Euschistus servus*)、ヘロベルチス アントニイ (*Helopeltis antonii*)、ヘロベルチス テイボラ (*Helopeltis theivora*)、ワタフキカイガラムシ (*Icerya purchasi*)、イディオスコプス ニチズルス (*Idioscopus nitidulus*)、ヒメトビウンカ (*Laodelphax striatellus*)、タイワンクモヘリカメムシ (*Leptocorisa oratorius*)、クモヘリカメムシ (*Leptocorisa varicornis*)、リグス ヘスペルス (*Lygus hesperus*)、マコネリコッカス ヒルスツス (*Maconelllicoccus hirsutus*)、チューリップヒゲナガアブラムシ (*Macrosiphum euphorbiae*)、ムギヒゲナガアブラムシ (*Macrosiphum granarium*)、バラアブラムシ (*Macrosiphum rosae*)、ヨツテンヨコバイ (*Macrosteles quadrilineatus*)、マハナルバ フリムビオラタ (*Mahanarva frimbiolata*)、ムギウスイロアブラムシ (*Metopolophium dirhodum*)、ミクチス ロンギコルニス (*Mictis longicornis*)、モモアカアブラムシ (*Myzus persicae*)、ツマグロヨコバイ (*Nephotettix cinctipes*)、ネウロコルプス ロンギロストリス (*Neurocolpus longirostris*)、ミナミアオカメムシ (*Nezara viridula*)、トビイロウンカ (*Nilaparvata lugens*)、マルクロホシカイガラムシ (*Parlatoria pergandii*)、ヒメクロカイガラムシ (*Parlatoria ziziphi*)、トウモロコシウンカ (*Peregrinus maidis*)、ブドウネアブラムシ (*Phylloxera vitifoliae*)、フィソケルメス ピセアエ (*Physokermes piceae*)、フィトコリス カリフォルニクス (*Phytocoris californicus*)、フィトコリス レ

10

20

30

40

50

ラチブス (Phytocoris relativus)、ピエゾドルス グイルジニイ (Piezodorus guildinii)、ポエシロカプスス リネアツス (Poecillocapsus lineatus)、プサルス バクシニコラ (Psallus vaccinicola)、プセウダシスタ ペルセアエ (Pseudacysta perseae)、パインアップルコナカイガラムシ (Pseudococcus brevipes)、ナシマルカイガラムシ (Quadraspidiotus perniciosus)、トウモロコシアブラムシ (Rhopalosiphum maidis)、ムギクビレアブラムシ (Rhopalosiphum padi)、オリーブカタカイガラムシ (Saissetia oleae)、スカプトコリス カスタネア (Scaptocoris castanea)、ムギミドリアブラムシ (Schizaphis graminum)、ムギヒゲナガアブラムシ (Sitobion avenae)、セジロウンカ (Sogatella furcifera)、オンシツコナジラミ (Trialeurodes vaporariorum)、トリアレウロデス アブチロネウス (Trialeurodes abutiloneus)、ヤノネカイガラムシ (Unaspis yanonensis) およびズリア エントレリアナ (Zulia entrerriana) を挙げることができる。

【0395】

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

【0396】

別の態様において、式1の分子はシロアリ目の病害虫を防除するのに使用しうる。特定の属の網羅的でない一覧は、限定されるものでないが、イエシロアリ属 (Coptotermes) スピーシーズ、コルニテルメス属 (Cornitermes) スピーシーズ、ダイコクシロアリ属 (Cryptotermes) スピーシーズ、ヘテロテルメス属 (Heterotermes) スピーシーズ、カロテルメス属 (Kaloterme) スピーシーズ、インシシテルメス属 (Incisitermes) スピーシーズ、マクロテルメス属 (Macrotermes) スピーシーズ、マルギニテルメス属 (Marginitermes) スピーシーズ、マイクロセロテルメス属 (Microcerotermes) スピーシーズ、プロコルニテルメス属 (Procornitermes) スピーシーズ、ヤマトシロアリ属 (Reticulitermes) スピーシーズ、ツチミゾガラシシロアリ属 (Schedorhinotermes) スピーシーズおよびアメリカオオシロアリ属 (Zootermopsis) スピーシーズを挙げることができる。特定の種の網羅的でない一覧は、限定されるものでないがコプトテルメス クルビグナツス (Coptotermes curvignathus)、コプトテルメス フレンキ (Copto

10

20

30

40

50

termes frenchi)、イエシロアリ (Coptotermes formosanus)、ヘテロテルメス アウレウス (Heterotermes aureus)、ミクロテルメス オベシ (Microtermes obesi)、レチクリテルメス バニウレンシス (Reticulitermes banyulensis)、レチクリテルメス グラッセイ (Reticulitermes grassei)、キアシシロアリ (Reticulitermes flavipes)、レチクリテルメス ハゲニ (Reticulitermes hageni)、レチクリテルメス ヘスペルス (Reticulitermes hesperus)、レチクリテルメス サントネシス (Reticulitermes santonensis)、ヤマトシロアリ (Reticulitermes speratus)、レチクリテルメス チビアリス (Reticulitermes tibialis) およびレチクリテルメス ビルギニクス (Reticulitermes virginicus) を挙げることができる。

【0397】

別の態様において、式1の分子はチョウ目の害虫を防除するのに使用しうる。特定の属の網羅的でない一覧は、限定されるものでないが、コカクモンハマキ属 (Adoxophyes) スピーシーズ、ヤガ属 (Agrotis) スピーシーズ、アルギロタエニア属 (Argyrotaenia) スピーシーズ、カコエシア属 (Cacoecia) スピーシーズ、ハマキホソガ属 (Caloptilia) スピーシーズ、キロ属 (Chilo) スピーシーズ、クリソデイクシス属 (Chrysodeixis) スピーシーズ、モンキチョウ属 (Colias) スピーシーズ、クランプス属 (Crambus) スピーシーズ、ジアファニア属 (Diaphania) スピーシーズ、ジアトラエア属 (Diatraea) スピーシーズ、エアリアス属 (Earias) スピーシーズ、エフェスチア属 (Ephestia) スピーシーズ、エピメシス属 (Epimecis) スピーシーズ、フェルチア属 (Feltia) スピーシーズ、ゴルチナ属 (Gortyna) スピーシーズ、ヘリコベルパ属 (Helicoverpa) スピーシーズ、ヘリオティス属 (Heliothis) スピーシーズ、インダルベラ属 (Indarbela) スピーシーズ、リトコレチス属 (Lithocolletis) スピーシーズ、ロクサグロチス属 (Loxagrotis) スピーシーズ、オビカレハ属 (Malacosoma) スピーシーズ、ペリドロマ属 (Peridroma) スピーシーズ、キンモンホソガ属 (Phyllonorycter) スピーシーズ、キョトウ属 (Pseudaletia) スピーシーズ、セサミア属 (Sesamia) スピーシーズ、スポドプテラ属 (Spodoptera) スピーシーズ、シナンテドン属 (Synanthedon) スピーシーズおよびスガ属 (Yponomeuta) スピーシーズを挙げることができる。特定の種の網羅的でない一覧は、限定されるものでないが、シラホシアシブトクチバ (Achaea janata)、リンゴコカクモンハマキ (Adoxophyes orana)、タマナヤガ (Agrotis ipsilon)、アラバマ アルギラセア (Alabama argillacea)、アモルビア クネアナ (Amorbia cuneana)、アミエロイス トランシテラ (Amyelois transitella)、アナカンプトデス デフェクタリア (Anacamptodes defectaria)、モモキバガ (Anarsia lineatella)、ヒメアカキリバ (Anomis sabulifera)、アンチカルシア ゲンマタリス (Anticarsia gemmatalis)、アルキプス アルギロスピラ (Archips argyrospila)、アルキプス ロサナ (Archips rosana)、ミカンコハマキ (Argyrotaenia citrana)、ガンマキンウワバ (Autographa gamma)、ボナゴタ クラナオデス (Bonagota cranaodes)、ユウレイセセリ (Borbo cinnara)、ブックラトリクス ツルベリエラ (Bucculatrix thurberiella)、カプア レチクラナ (Capua reticulana)、モモシンクイガ (Carposina niponensis)、クルメチア トランスベルサ (Chlumetia transversa)、ハスオビハマキ (Choristoneura rosaceana)、コブノメイガ (Cnaphaloc

10

20

30

40

50

rocis medinalis)、ココアツマキホソガ (Conopomorpha
cramerella)、オオボクトウ (Cossus cossus)、シディア カ
 リヤナ (Cydia caryana)、スモモヒメハマキ (Cydia funebr
ana)、シディア モレスタ (Cydia molesta)、エンドウシンクイ (C
ydia nigricana)、コドリナ (Cydia pomonella)、ダル
 ナ ジズクタ (Darna diducta)、ジアトラエア サッカラリス (Dia
traea saccharalis)、ジアトラエア グランジオセラ (Diatra
ea grandiosella)、ミスジアオリナ (Earias insulan
a)、クサオビリンガ (Earias vittella)、エクジトロファ アウラン
 チアヌム (Ecdytolopha aurantianum)、モロコシマダラメイガ
 (Elasmopalpus lignosellus)、スジマダラメイガ (Ephe
stia cautella)、チャマダラメイガ (Ephestia elutell
a)、スジコナマダラメイガ (Ephestia kuehniella)、エピノチア
 アポレマ (Epinotia aporema)、リンゴウスチャイロハマキ (Epi
phyas postvittana)、バナナセセリ (Erionota thrax
)、ブドウホソハマキ (Eupoecilia ambiguella)、エウクソア
 アウキシリアリス (Euxoa auxiliaris)、ナシヒメシンクイ (Grap
holita molesta)、マエウスキノメイガ (Hedylepta indi
cata)、オオタバコガ (Helicoverpa armigera)、アメリカタ
 バコガ (Helicoverpa zea)、ニセアメリカタバコガ (Heliothi
s virescens)、ハイマダラノメイガ (Hellula undalis)、
 ケイフェリア リコペルシセラ (Keiferia lycopersicella)、
 ナスノメイガ (Leucinodes orbonalis)、レウコプテラ コフェ
 エラ (Leucoptera coffeella)、レウコプテラ マリフォルエラ (L
eucoptera malifoliella)、ロベシア ボトラナ (Lobesi
a botrana)、ロクサグロチス アルビコスタ (Loxagrotis alb
icosta)、マイマイガ (Lymantria dispar)、モモハモグリガ (L
yonetia clerkella)、マハセナ コルベッチ (Mahasena
corbetti)、ヨトウガ (Mamestra brassicae)、マメノメイ
 ガ (Maruca testulalis)、メチサ プラナ (Metisa plan
a)、アメリカキヨトウ (Mythimna unipuncta)、ネオレウシノデス
 エレガンタリス (Neoleucinodes elegantalis)、ニンフラ
 デプンクタリス (Nymphula depunctalis)、ナミスジフユナミシ
 ャク (Operophtera brumata)、ヨーロッパアワノメイガ (Ostr
inia nubilalis)、オキシジア ベスリア (Oxydia vesuli
a)、パンデミス セラサナ (Pandemis cerasana)、トビハマキ (P
andemis heparana)、アフリカオナシアゲハ (Papilio dem
odocus)、ワタアカミムシガ (Pectinophora gossypiella)、
 ニセタマナヤガ (Peridroma saucia)、ペリレウコプテラ コフ
 エエラ (Perileucoptera coffeella)、ジャガイモキバガ (P
hthorimaea operculella)、ミカンコハモグリ (Phylloc
nistis citrella)、モンシロチョウ (Pieris rapae)、プ
 ラチペナ スカブラ (Plathypena scabra)、ノシメマダラメイガ (P
lodia interpunctella)、コナガ (Plutella xylos
tella)、ブドウヒメハマキ (Polychrosis viteana)、プライ
 ス エンドカルパ (Prays endocarpa)、プライス オレアエ (Pray
s oleae)、アワヨトウ (Pseudaletia unipuncta)、ダイ
 ズシャクトリムシ (Pseudoplusia includens)、ラキプルシア
 ヌ (Rachiplusia nu)、イッテンオオメイガ (Scirpophaga
incertulas)、イネヨトウ (Sesamia inferens)、セサミア

10

20

30

40

50

ノナグリオイデス (Sesamia nonagrioides)、セトラ ニテンス (Setora nitens)、バクガ (Sitotroga cerealella)、テングハマキ (Sparganothis pilleriana)、シロイチモジヨトウ (Spodoptera exigua)、ツマジロクサヨトウ (Spodoptera frugiperda)、スポドプテラ エリダニア (Spodoptera eridania)、テクラ バシリデス (Thecla basilides)、コイガ (Tineola bisselliella)、イラクサギンウワバ (Trichoplusia ni)、トマトキバガ (Tuta absoluta)、コーヒーゴマフボクトウ (Zeuzera coffeae) およびゴマフボクトウ (Zeuzera pyrina) を挙げることができる。

10

【0398】

別の態様において、式1の分子はハジラミ目の害虫を防除するのに使用しうる。特定の属の網羅的でない一覧は、限定されるものでないが、アナチコーラ属 (Anaticola) スピーシーズ、ボビコーラ属 (Bovicola) スピーシーズ、ケロピステス属 (Chelopistes) スピーシーズ、ゴニオデス属 (Goniodes) スピーシーズ、メナカンツス属 (Menacanthus) スピーシーズおよびケモノハジラミ属 (Trichodectes) スピーシーズを挙げることができる。特定の種の網羅的でない一覧は、限定されるものでないがウシハジラミ (Bovicola bovis)、ヤギハジラミ (Bovicola caprae)、ヒツジハジラミ (Bovicola ovis)、ツノハジラミ (Chelopistes meleagridis)、カクアゴハジラミ (Goniodes dissimilis)、マルハジラミ (Goniodes gigas)、フクロマルハジラミ (Menacanthus stramineus)、ニワトリハジラミ (Menopon gallinae) およびイヌハジラミ (Trichodectes canis) を挙げることができる。

20

【0399】

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

30

【0400】

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

40

【0401】

別の態様において、式1の分子はアザミウマ目の害虫を防除するのに使用しうる。特定の属の網羅的でない一覧は、限定されるものでないが、カリオトリプス属 (Caliothrips) スピーシーズ、フランクリニエラ属 (Frankliniella) スピーシーズ、スシルトリプス属 (Scirtothrips) スピーシーズおよびトリプス属 (Thrips) スピーシーズを挙げることができる。特定の種の網羅的でない一覧

50

は、限定されるものでないが、ウスグロアザミウマ (Frankliniella fusca)、ミカンキイロアザミウマ (Frankliniella occidentalis)、フランクリニエラ スクルトゼイ (Frankliniella schultzei)、フランクリニエラ ウィリアムシ (Frankliniella williamsi)、クロトンアザミウマ (Heliothrips haemorrhoidalis)、リピフォロトリプス クルエンタツス (Rhipiphorothrips cruentatus)、スシルトリプス シトリ (Scirtothrips citri)、チャノキイロアザミウマ (Scirtothrips dorsalis) およびタエニオトリプス ロパランテナリス (Taeniothrips rhopalantennalis)、ハナアザミウマ (Thrips hawaiiensis)、クロゲハナアザミウマ (Thrips nigropilosus)、トリプス オリエンタリス (Thrips orientalis)、ネギアザミウマ (Thrips tabaci) を挙げることができる。

10

【0402】

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

【0403】

別の態様において、式1の分子はダニ目の病害虫を防除するのに使用しうる。特定の属の網羅的でない一覧は、限定されるものでないが、コナダニ属 (Acarus) スピーシーズ、アクロプス属 (Aculops) スピーシーズ、ウシマダニ属 (Boophilus) スピーシーズ、ニキビダニ属 (Demodex) スピーシーズ、カクマダニ属 (Dermacentor) スピーシーズ、エピトリメルス属 (Epitrimerus) スピーシーズ、エリオフィエス属 (Eriophyes) スピーシーズ、マダニ属 (Ixodes) スピーシーズ、ツメハダニ属 (Oligonychus) スピーシーズ、マルハダニ属 (Panonychus) スピーシーズ、ネダニ属 (Rhizoglyphus) スピーシーズおよびナミハダニ属 (Tetranychus) スピーシーズを挙げることができる。特定の種の網羅的でない一覧は、限定されるものでないが、アカリンダニ (Acarapis woodi)、アシブトコナダニ (Acarus siro)、アセリア

20

30

マンギフェラエ (Aceria mangiferae)、トマトサビダニ (Aculops lycopersici)、ミカンサビダニ (Aculus pelekassii)、リンゴサビダニ (Aculus schlechtendali)、マダニ (Amblyomma americanum)、チャノヒメハダニ (Brevipalpus obovatus)、ミナミヒメハダニ (Brevipalpus phoenicis)、アメリカイヌカクマダニ (Dermacentor variabilis)、ヤケヒョウヒダニ (Dermatophagoides pteronyssinus)、エオテトラニクス カルピニ (Eotetranychus carpini)、ネコシヨウヒゼンダニ (Notoedres cati)、マンゴーツメハダニ (Oligonychus coffeae)、チビコブツメハダニ (Oligonychus ilicis)、ミカンハダニ (Panonychus citri)、リンゴハダニ (Panonychus ulmi)、フィロコプトルタ オレイボラ (Phyllocoptura oleivora)、チャノホコリダニ (Polyphagotarsonemus latus)、クリイロコイタマダニ (Rhipicephalus sanguineus)、ヒゼンダニ (Sarcoptes scabiei)、テゴロフス ペルセアフロラエ (Tegolophus perseafloreae)、ナミハダニ (Tetranychus urticae) およびミツバチヘギイタダニ (Varroa destructor) を挙げることができる。

40

【0404】

別の態様において、式1の分子はコムカデ目の病害虫を防除するのに使用しうる。特定

50

の種の網羅的でない一覧は、限定されるものでないがミゾコムカデ (Scutigera immaculata) を挙げることができる。

【0405】

別の態様において、式1の分子は線形動物門の病害虫を防除するのに使用しうる。特定の属の網羅的でない一覧は、限定されるものでないが、アフェレンコイデス属 (Aphelenchoides) スピーシーズ、ベロノライムス属 (Belonolaimus) スピーシーズ、クリコネメラ属 (Criconemella) スピーシーズ、ジチレンクス属 (Ditylenchus) スピーシーズ、ヘテロデラ属 (Heterodera) スピーシーズ、ヒルスクマニエラ属 (Hirschmanniella) スピーシーズ、ホプロライムス属 (Hoplolaimus) スピーシーズ、ネコブセンチュウ属 (Meloidogyne) スピーシーズ、ネグサレセンチュウ属 (Pratylenchus) スピーシーズおよびバナナネモグリセンチュウ属 (Radopholus) スピーシーズを挙げることができる。特定の種の網羅的でない一覧は、限定されるものでないが、犬糸状虫 (Dirofilaria immitis)、トウモロコシシストセンチュウ (Heterodera zeae)、サツマイモネコブセンチュウ (Meloidogyne incognita)、ジャワネコブセンチュウ (Meloidogyne javanica)、回旋糸状虫 (Onchocerca volvulus)、バナナネモグリセンチュウ (Radopholus similis) およびニセフクロセンチュウ (Rotylenchulus reniformis) を挙げることができる。

10

【0406】

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

20

【0407】

適用

線形動物門、節足動物門および／若しくは軟体動物門の病害虫を防除することは、一般に、病害虫の集団、病害虫の活動性若しくはその双方がある場所で低下されることを意味している。これは：

- (a) 病害虫集団がある場所から駆逐される；
- (b) 病害虫がある場所中若しくはその周囲で行動能力を奪われる；または
- (c) 病害虫がある場所中若しくはその周囲で根絶される

30

場合に発生し得る。もちろんこれらの結果の組合せが発生し得る。一般に、病害虫の集団、活動性若しくは双方は、望ましくは50パーセント以上、好ましくは90パーセント以上、および最も好ましくは98パーセント以上低下される。一般に、該場所はヒトの中若しくは上でなく；結果、該場所は一般にヒト以外の場所である。

【0408】

別の態様において、式1の分子が適用される場所は、線形動物門、節足動物門および／若しくは軟体動物門の病害虫により生息されている、若しくは生息されるようになりうる、またはそれにより横断されるいかなる場所でもあり得る。例えば、該場所は：

40

- (a) 作物、樹木、果実、穀類、かいば、匍匐植物、芝および／若しくは観賞用植物が成長している場所；
- (b) 家畜が住んでいる場所；
- (c) (穀類が貯蔵される場所のような) 建物の内部若しくは外側表面；
- (d) (含浸された木材のような) 建物で使用する建設材料；ならびに
- (e) 建物の周囲の土壌

であり得る。式1の分子を使用するための特定の作付け区域は、リンゴ、トウモロコシ、ヒマワリ、ワタ、ダイズ、キャノーラ、小麦、米、モロコシ、大麦、オート麦、ジャガイモ、オレンジ、アルファルファ、レタス、イチゴ、トマト、コショウ、アブラナ科植物、セイヨウナシ、タバコ、アーモンド、サトウダイコン、豆類およびその他の高価な作物が

50

【 0 4 0 9 】

【 0 4 1 0 】

10

【 0 4 1 1 】

20

【 0 4 1 2 】

30

【 0 4 1 3 】

【 0 4 1 4 】

40

【 0 4 1 5 】

【 0 4 1 6 】

50

」外来遺伝子をもつものを包含する。さらに、式1の分子でのこうした種子処理は、ストレスの多い生育条件をより良好に耐える植物の能力をさらに高めうる。これはより健康でより活発な植物をもたらし、それは収穫時のより高収量につながり得る。一般に、100,000種子あたり約1グラムないし約500グラムの式1の分子が良好な利益を提供すると期待され、100,000種子あたり約10グラムから約100グラムまでの量がより良好な利益を提供すると期待され、そして、100,000種子あたり約25グラムから約75グラムまでの量がなおより良好な利益を提供すると期待される。

【0417】

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

10

【0418】

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

20

【0419】

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

【0420】

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

【0421】

30

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

【0422】

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

【0423】

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

40

【0424】

農薬が使用若しくは商業的に販売され得る前に、こうした農薬は多様な政府当局 (地方、地域、州、国および国際的) による非常に長い評価過程を受ける。大量のデータ要件が

50

規制当局により指定され、そして、しばしば、ワールドワイドウェブへの接続を伴うコンピュータを使用して、製品登録者による若しくは製品登録者の代理の第三者によるデータ生成および提出により対処されなければならない。これらの政府当局がその後こうしたデータを審査し、そして安全性の確認が結論づけられる場合は、潜在的使用者若しくは販売者に製品登録承認を提供する。その後、製品登録が賦与されかつ裏付けられている場所で、こうした使用者若しくは販売者はこうした農薬を使用若しくは販売してよい。

【0425】

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

10

【0426】

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

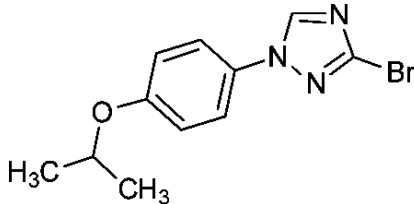
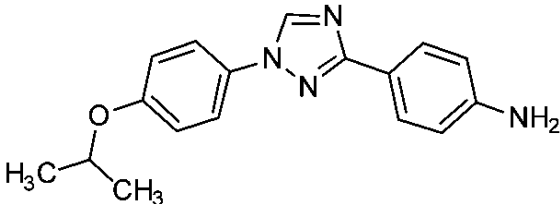
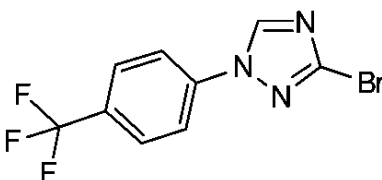
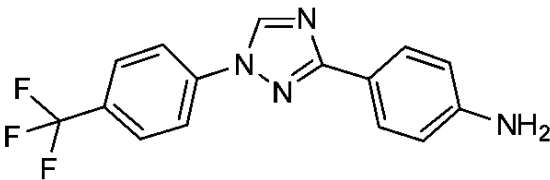
【0427】

表の節

【0428】

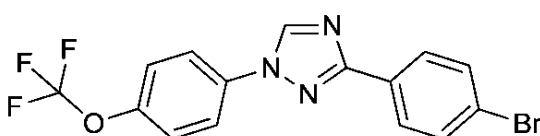
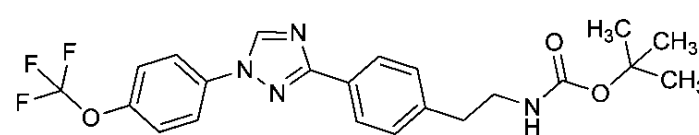
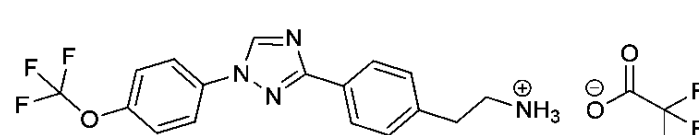
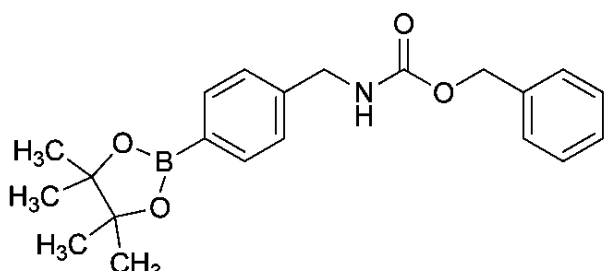
【表 4 - 1】

表 2：中間体の構造

番号	構造	外観	製造に対応する実施例：
C1		黄色油状物	1
C2		黄褐色固形物	2
C3		白色固形物	10
C4		黄色固形物	11

【 0 4 2 9】

【表 4 - 2】

C7		灰白色固 形物	15
C8		薄黄褐色 固形物	16
C9		白色固形 物	17
C11		白色固形 物	19

【 0 4 3 0 】

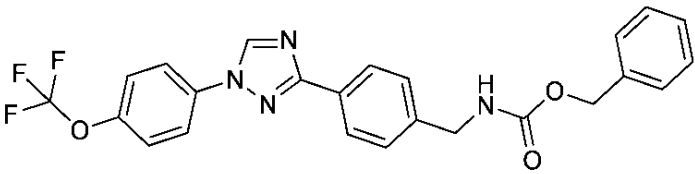
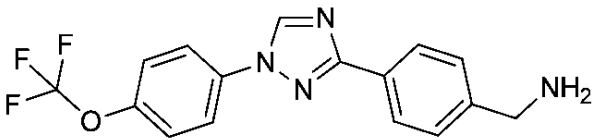
10

20

30

40

【表 4－3】

C12		灰白色固 形物	20
C13		灰白色固 形物	21, 23

【 0 4 3 1 】

【表 5 - 1】

表 3 : 式 1 の分子の構造

番号	構造	外観	製造に対応する実施例：
F1		灰白色固形物	4
F2		黄褐色固形物	4
F3		白色固形物	4
F4		白色固形物	3

10

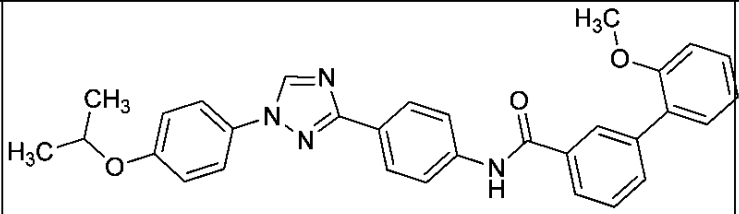
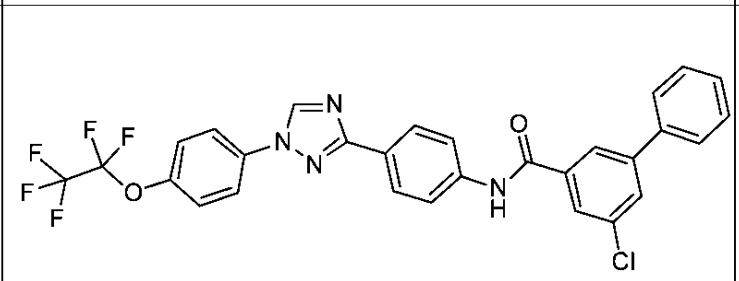
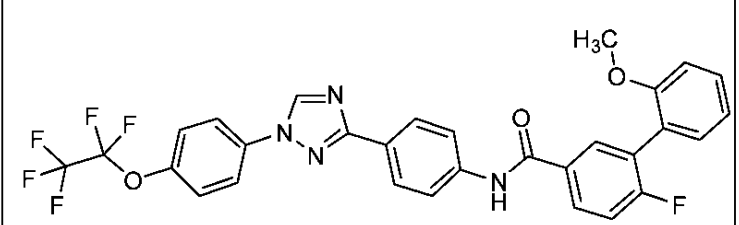
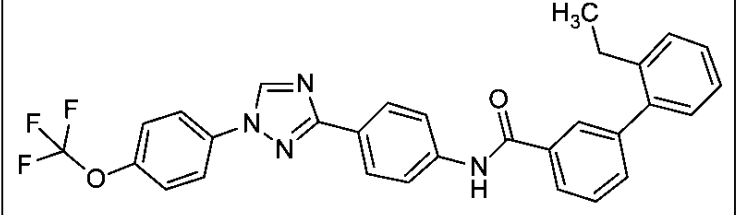
20

30

40

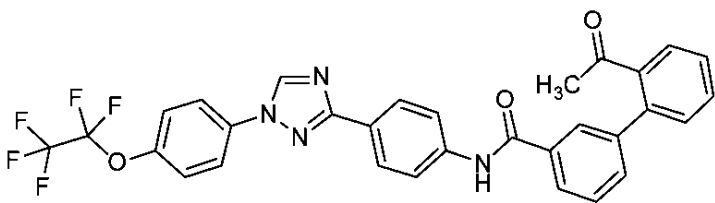
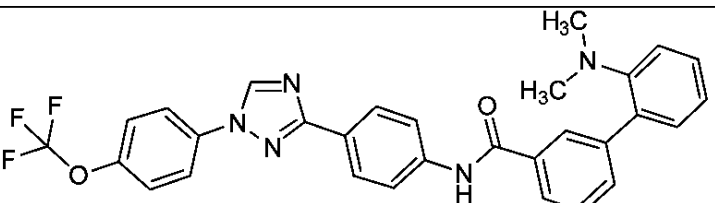
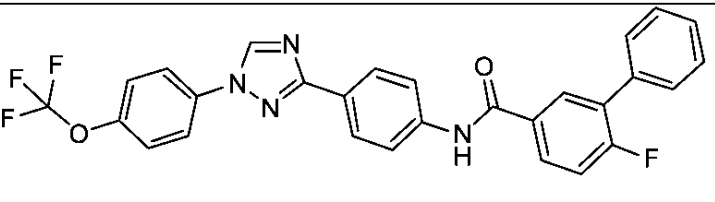
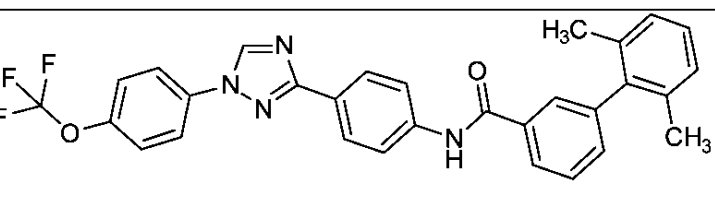
【 0 4 3 2 】

【表 5 - 2】

F5		灰白色 固形物	3
F6		灰白色 固形物	7
F7		灰白色 固形物	7
F8		白色固 形物	4

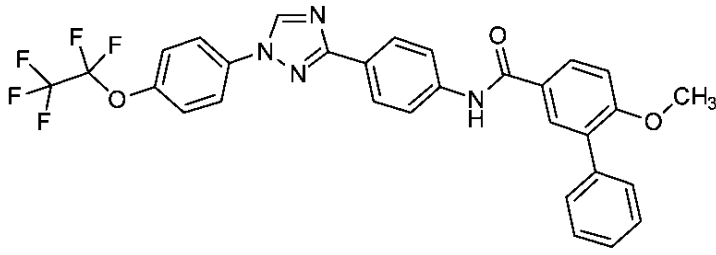
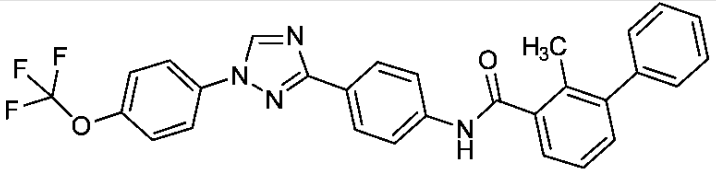
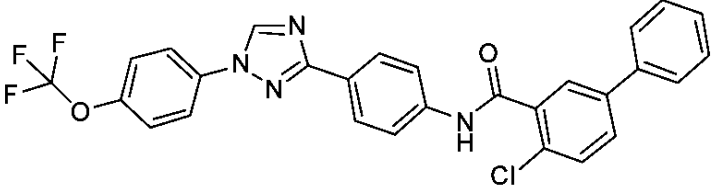
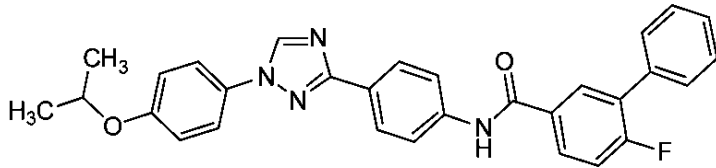
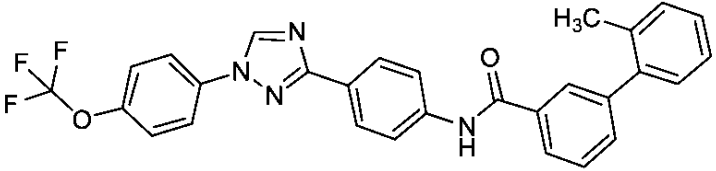
【 0 4 3 3 】

【表 5 - 3】

F9		灰白色 固形物	7
F10		黄色油 状物	4
F11		白色固 形物	4
F12		灰白色 固形物	4

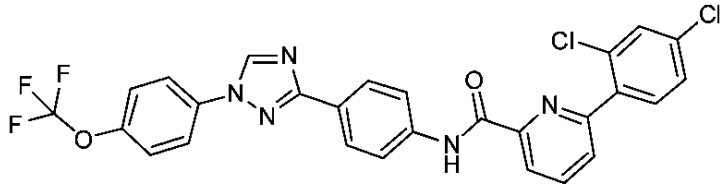
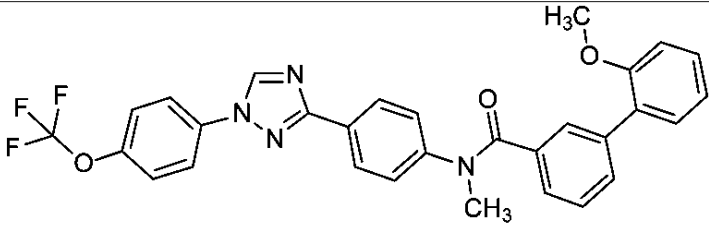
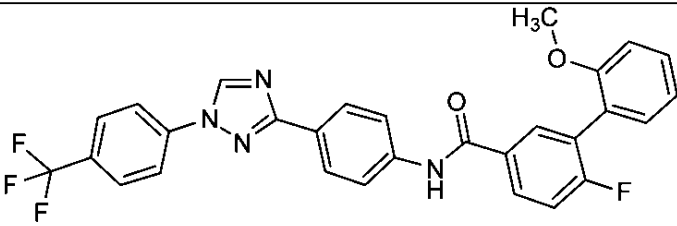
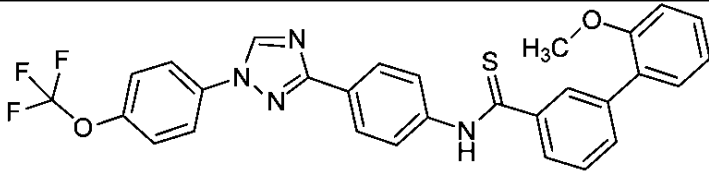
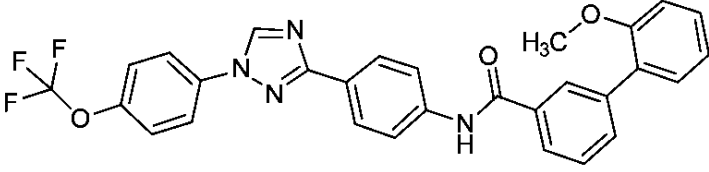
【 0 4 3 4 】

【表 5 - 4】

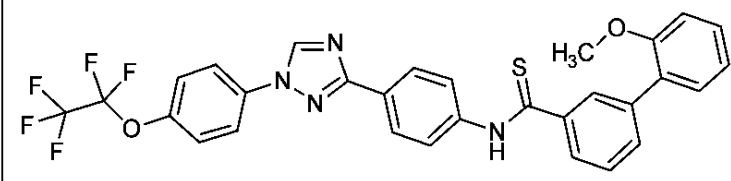
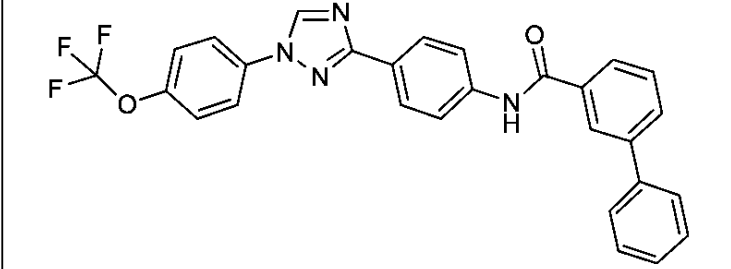
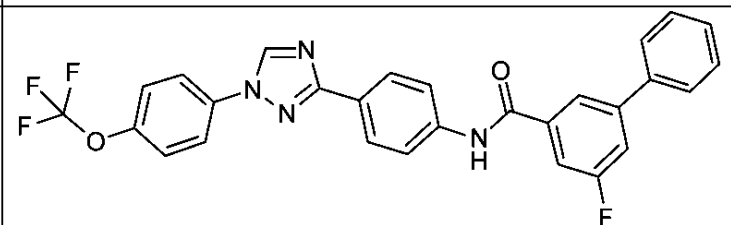
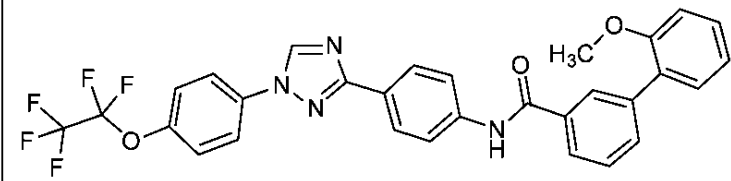
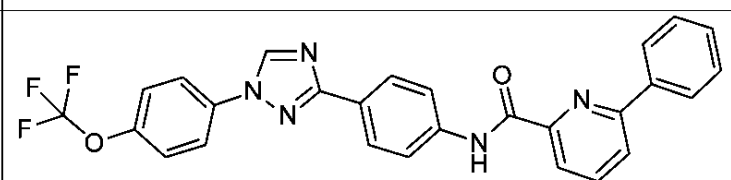
F13		白色固 形物	7
F14		白色固 形物	4
F15		白色固 形物	4
F16		白色固 形物	3
F17		灰白色 固形物	4

【 0 4 3 5 】

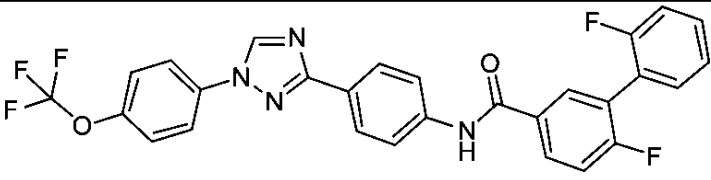
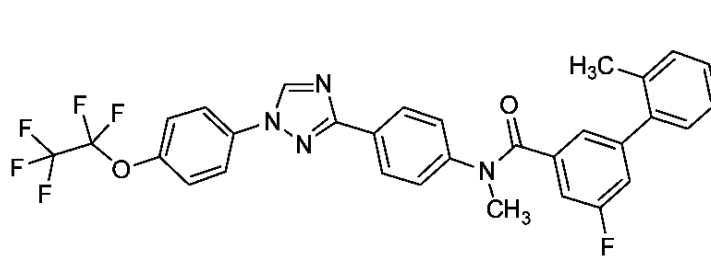
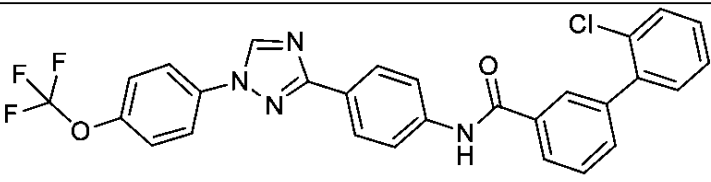
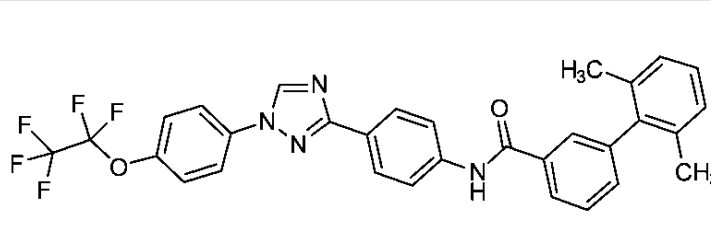
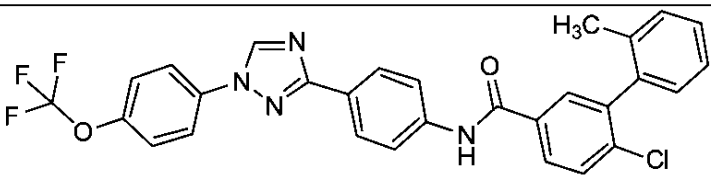
【表 5 - 5】

F18		灰白色	4
F19		無色油状物	5
F20		白色固形物	12
F21		黄色固形物	6
F22		白色固形物	4

【表 5 - 6】

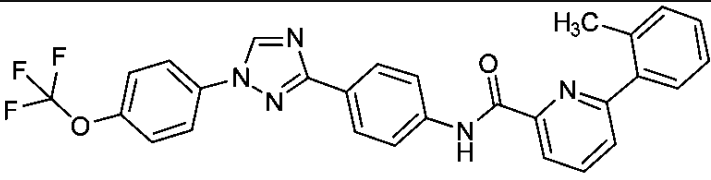
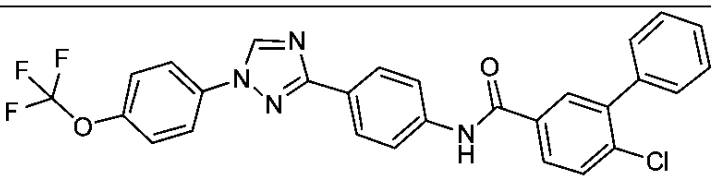
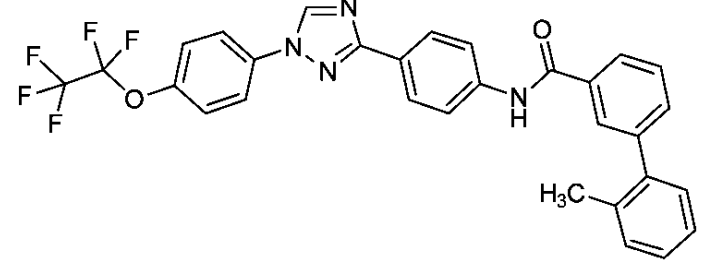
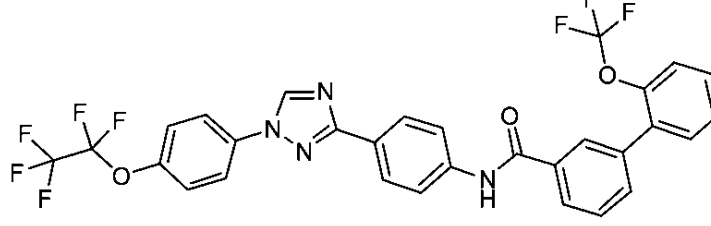
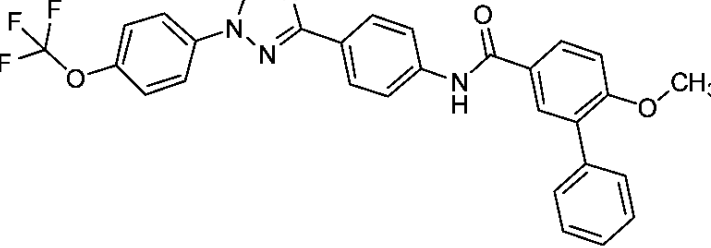
F23		黄色固 形物	9
F24		白色固 形物	4
F25		灰白色 固形物	4
F26		白色固 形物	7
F27		白色固 形物	4

【表 5 - 7】

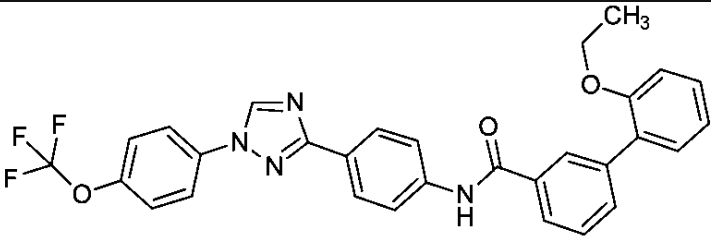
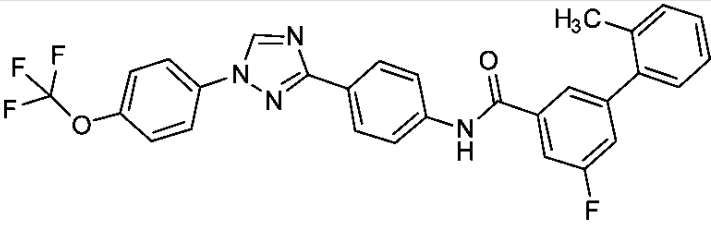
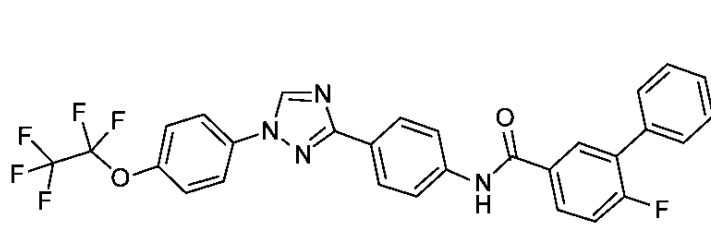
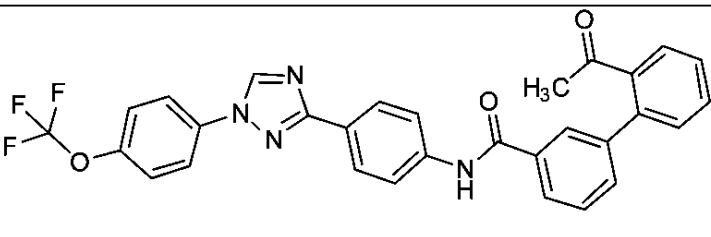
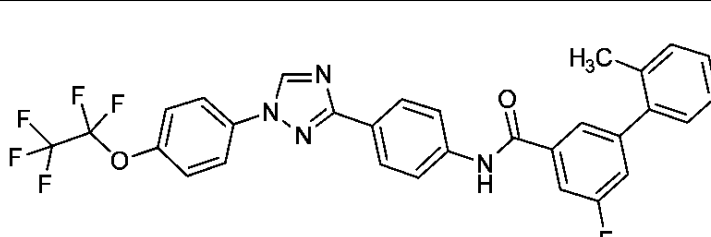
F28		灰白色 固形物	4
F29		無色油 状物	8
F30		白色固 形物	4
F31		灰白色 固形物	7
F32		白色固 形物	4

【 0 4 3 8 】

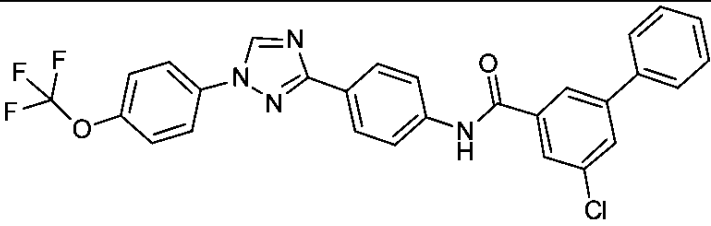
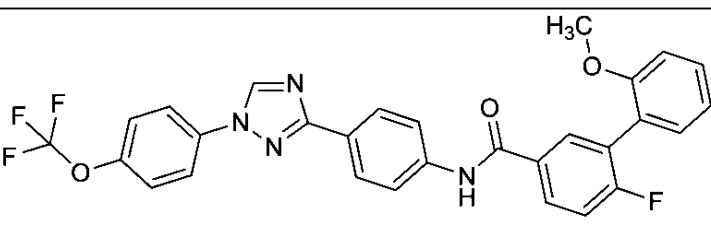
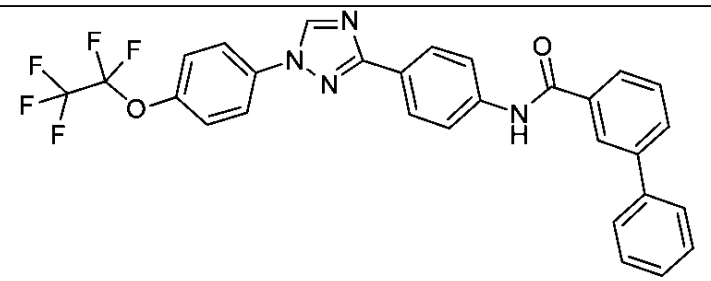
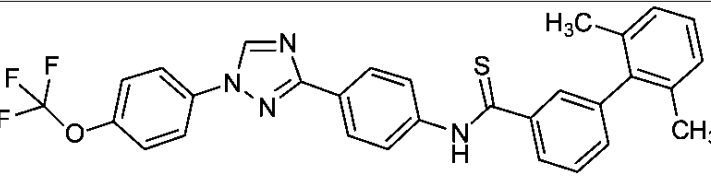
【表 5 - 8】

F33		白色固 形物	4
F34		黄褐色 固形物	4
F35		白色固 形物	7
F36		灰白色 固形物	7
F37		白色固 形物	4

【表 5 - 9】

F38		白色固 形物	4
F39		橙色油 性固形 物	4
F40		灰白色 固形物	7
F41		灰白色 固形物	4
F42		灰白色 固形物	7

【表 5 - 1 0】

F43		灰白色 固形物	4
F44		白色固 形物	4
F45		白色固 形物	7
F46		黄色油 状物	6

【 0 4 4 1】

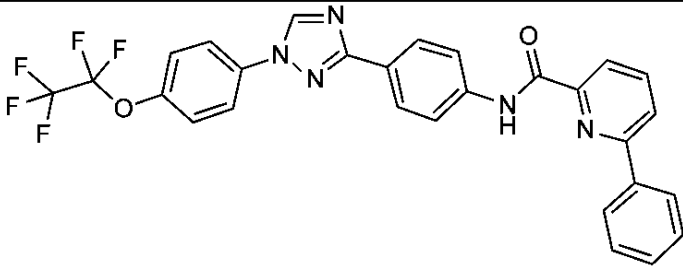
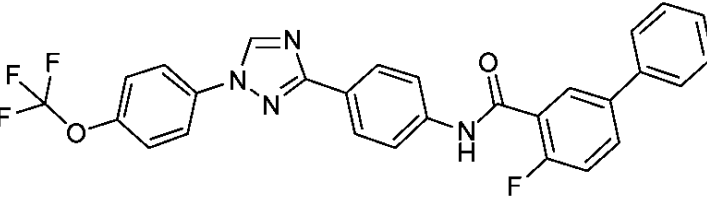
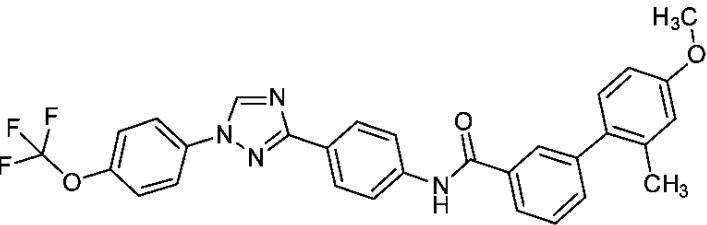
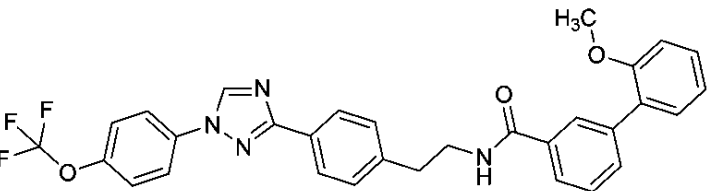
10

20

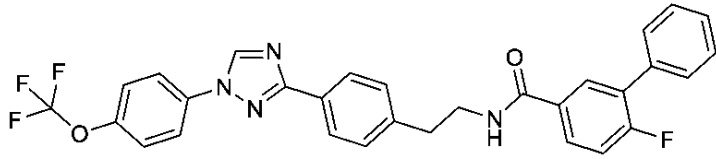
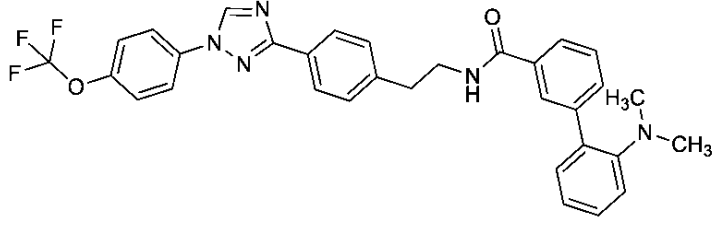
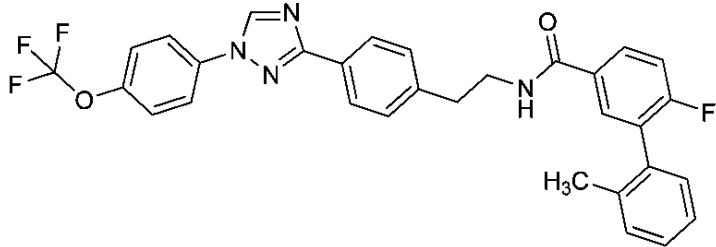
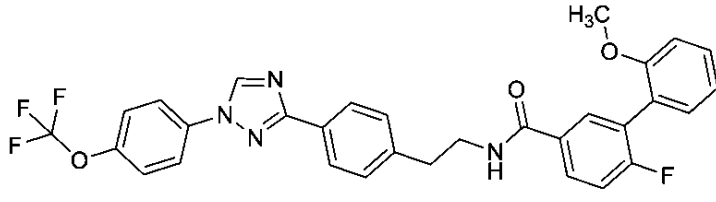
30

40

【表 5 - 1 1】

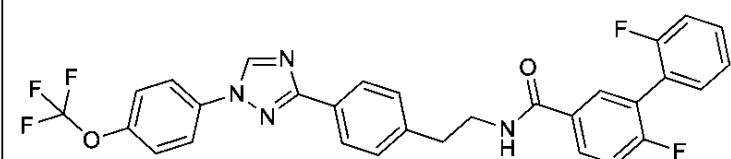
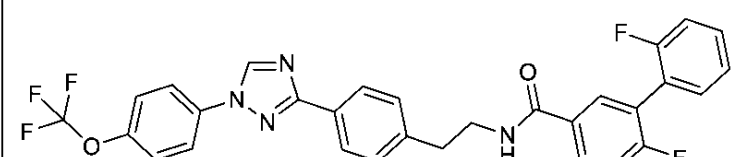
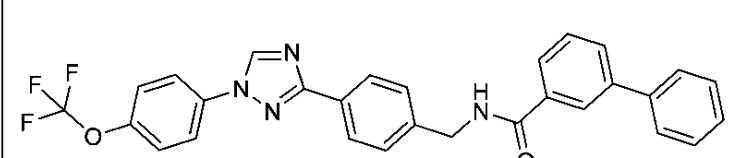
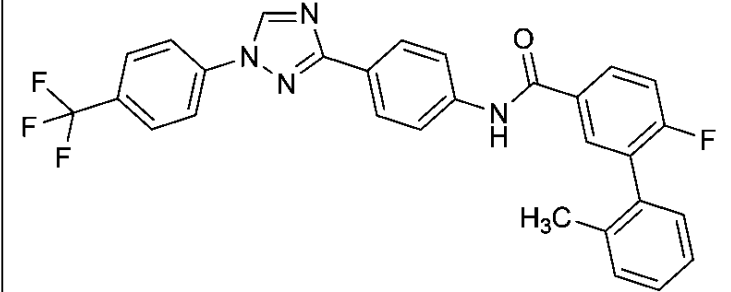
F47		白色固 形物	7
F48		白色固 形物	4
F49		白色固 形物	4
F50		白色固 形物	18

【表 5 - 1 2】

F51		白色固 形物	18
F52		白色固 形物	18
F53		白色固 形物	18
F54		無色油 状物	18

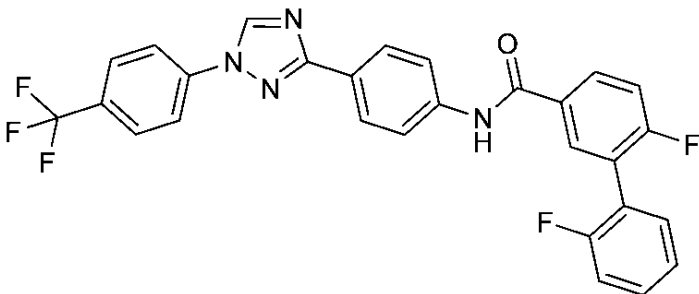
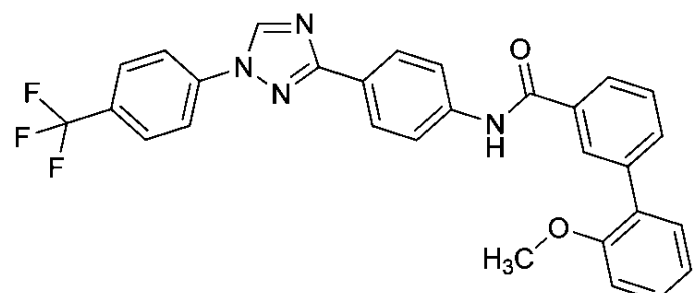
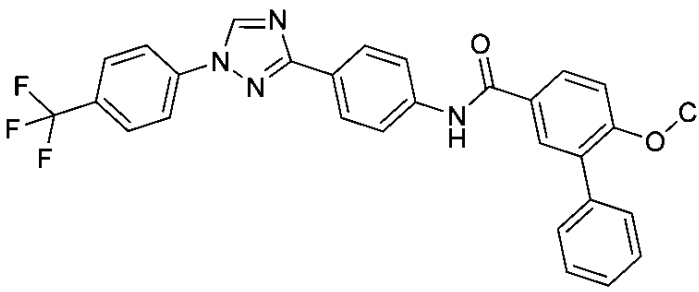
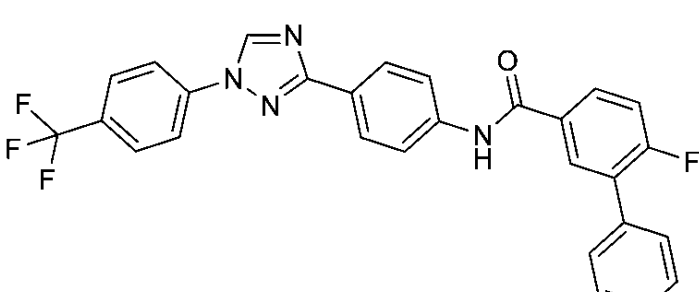
【 0 4 4 3】

【表 5 - 1 3】

F55		白色固 形物	18
F56		白色固 形物	18
F57		灰白色 固形物	24
F58		白色固 形物	12

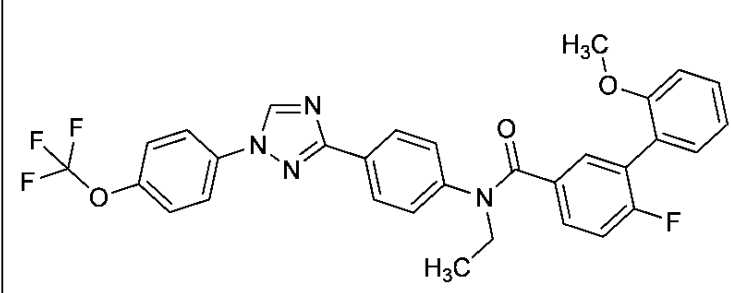
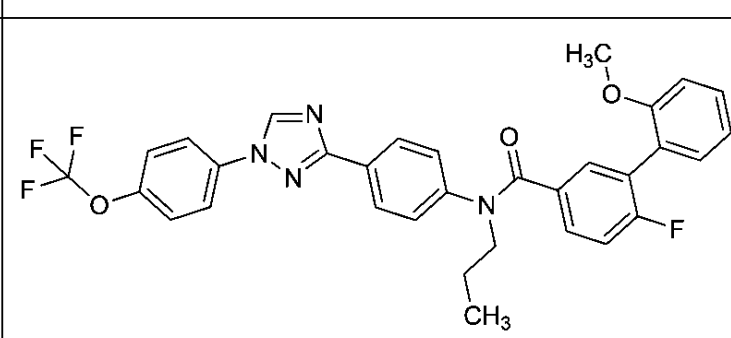
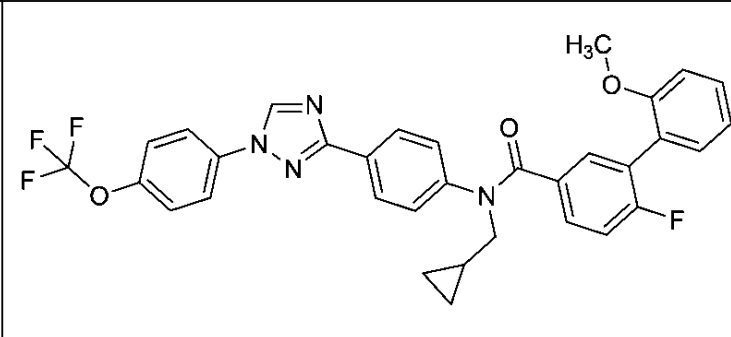
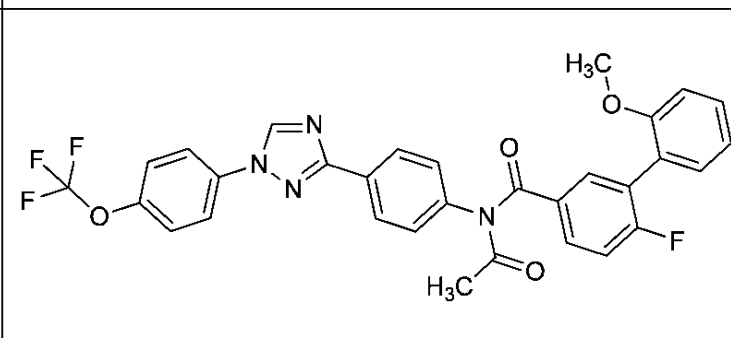
【 0 4 4 4】

【表 5 - 1 4】

F59		白色固 形物	12
F60		灰白色 固形物	12
F61		白色固 形物	12
F62		白色固 形物	12

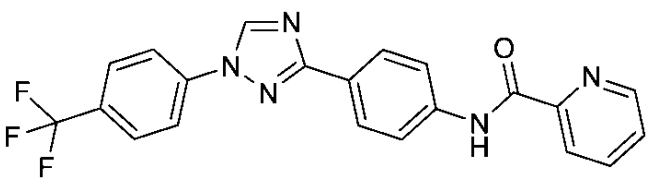
【 0 4 4 5】

【表 5 - 1 5】

F64		無色油状物	5
F65		無色油状物	5
F66		無色油状物	5
F67		無色油状物	5

【 0 4 4 6 】

【表 5 - 1 6】

F68		白色固 形物	12
-----	--	-----------	----

【 0 4 4 7 】

【表 6 - 1】

表 4 : 表 3 の化合物の分析データ。

番号	Mp (°C)	IR (cm ⁻¹)	質量 (<i>m/z</i>)	¹ H NMR	¹³ CNMR; ¹⁹ F NMR
F1	162-169	IR (薄膜) 3251, 3060, 1667, 1595, 1515 cm ⁻¹	HRMS-FAB (<i>m/z</i>) C ₂₉ H ₁₈ F ₆ N ₄ O ₃ の 計算値,584.1283; 実測値,584.1287.	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 10.53 (s, 1H), 9.40 (s, 1H), 8.14 - 8.03 (m, 6H), 8.00 - 7.95 (m, 2H), 7.73 (dt, <i>J</i> = 7.7, 1.5 Hz, 1H), 7.70 - 7.53 (m, 7H).	¹³ C NMR (101 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 165.13, 161.82, 146.98, 145.20, 143.64, 140.35, 136.21, 135.65, 134.92, 133.85, 132.12, 131.69, 129.77, 128.53, 128.13, 128.03, 127.24, 126.53, 125.42, 122.50, 121.56, 120.99, 120.31; ¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -56.15, -56.98.
F2	152-156	IR (薄膜) 3530, 3131, 2917, 1690, 1614, 1588, 1517 cm ⁻¹	HRMS-FAB (<i>m/z</i>) C ₂₉ H ₂₂ F ₃ N ₅ O ₂ の計 算値,529.1726; 実測値,529.1728.	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 10.22 (s, 1H), 8.56 (s, 1H), 8.27 (dd, <i>J</i> = 7.7, 1.0 Hz, 1H), 8.24 - 8.18 (m, 2H), 7.98 (t, <i>J</i> = 7.8 Hz, 1H), 7.93 - 7.85 (m, 2H), 7.84 - 7.77 (m, 2H), 7.61 (dd, <i>J</i> = 7.8, 1.0 Hz, 3H), 7.42 - 7.34 (m, 2H), 7.22 - 7.14 (m, 1H), 2.43 (s, 6H).	¹³ C NMR (101 MHz, CDCl ₃) δ 163.16, 162.23, 158.59, 148.92, 148.35, 141.47, 139.09, 138.88, 138.01, 136.50, 135.78, 135.60, 131.86, 129.73, 127.46, 126.98, 126.90, 126.22, 122.39, 121.18, 120.20, 119.66, 21.20, 20.56.

【 0 4 4 8 】

【表 6 - 2】

F3	183-186	IR (薄膜) 3306, 3064, 1658, 1595, 1513 cm ⁻¹	HRMS-FAB (<i>m/z</i>) C ₃₅ H ₂₅ F ₃ N ₄ O ₃ の計 算値, 606.1879; 実測値, 606.1875.	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.55 (s, 1H), 8.19 - 8.14 (m, 2H), 8.09 (t, <i>J</i> = 1.6 Hz, 1H), 7.90 - 7.86 (m, 1H), 7.82 - 7.73 (m, 4H), 7.63 - 7.59 (m, 2H), 7.54 (t, <i>J</i> = 7.7 Hz, 1H), 7.43 - 7.23 (m, 9H), 7.10 (ddt, <i>J</i> = 6.5, 3.3, 1.7 Hz, 2H), 5.11 (s, 2H).	¹³ C NMR (101 MHz, CDCl ₃) δ 165.81, 163.09, 155.49, 148.34, 141.47, 139.32, 138.93, 136.94, 135.57, 134.48, 133.04, 130.83, 129.86, 129.31, 128.70, 128.64, 128.00, 127.94, 127.35, 126.97, 126.32, 126.07, 122.39, 121.57, 121.18, 119.94, 113.17, 70.46; ¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -58.01.
F4	139-143	IR (薄膜) 3298, 3118, 2977, 2935, 2836, 2247, 1654, 1598, 1514 cm ⁻¹	HRMS-FAB (<i>m/z</i>) C ₃₁ H ₂₇ FN ₄ O ₃ の計 算値, 522.2067; 実測値, 522.2070.	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.44 (s, 1H), 8.23 - 8.14 (m, 2H), 7.94 (s, 1H), 7.92 - 7.86 (m, 2H), 7.77 - 7.72 (m, 2H), 7.63 - 7.58 (m, 2H), 7.41 (ddd, <i>J</i> = 8.3, 7.5, 1.8 Hz, 1H), 7.29 (dd, <i>J</i> = 7.5, 1.3 Hz, 1H), 7.25 - 7.19 (m, 1H), 7.08 - 6.97 (m, 4H), 4.60 (p, <i>J</i> = 6.1 Hz, 1H), 3.82 (s, 3H), 1.37 (d, <i>J</i> = 6.0 Hz, 6H).	¹³ C NMR (101 MHz, CDCl ₃) δ 164.72, 163.51, 162.45, 160.98, 157.69, 156.82, 141.40, 138.93, 131.17, 131.16, 131.00, 130.95, 130.75, 130.71, 130.29, 129.99, 128.45, 128.36, 127.33, 126.99, 126.97, 126.80, 123.79, 121.75, 120.66, 119.95, 116.65, 116.26, 116.02, 111.11, 70.44, 55.69, 21.93; ¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -108.15.

【表 6 - 3】

F5	128-132	IR (薄膜) 3296, 3062, 2976, 2935, 2835, 2246, 1654, 1595, 1513 cm^{-1}	HRMS-FAB (m/z) $\text{C}_{31}\text{H}_{28}\text{N}_4\text{O}_3$ の計算 値, 504.2161; 実測値, 504.2156.	^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 8.44 (s, 1H), 8.23 - 8.17 (m, 2H), 8.03 (t, $J = 1.6$ Hz, 1H), 7.99 (s, 1H), 7.85 (ddd, $J =$ 7.7, 1.8, 1.2 Hz, 1H), 7.80 - 7.75 (m, 2H), 7.75 - 7.69 (m, 1H), 7.64 - 7.58 (m, 2H), 7.53 (t, $J =$ 7.7 Hz, 1H), 7.40 - 7.32 (m, 2H), 7.09 - 6.97 (m, 4H), 4.60 (p, $J =$ 6.1 Hz, 1H), 3.83 (s, 3H), 1.37 (d, $J = 6.1$ Hz, 6H).	^{13}C NMR (101 MHz, CDCl_3) δ 165.79, 162.49, 157.67, 156.37, 141.40, 139.25, 139.08, 134.73, 133.10, 130.79, 130.30, 129.42, 129.27, 128.53, 128.06, 127.32, 126.88, 125.61, 121.75, 120.97, 119.89, 116.65, 111.25, 70.43, 55.60, 21.93.
F6	201-205	IR (薄膜) 3273, 3094, 2251, 2125, 1660, 1599, 1570, 1532, 1514 cm^{-1}	HRMS-FAB (m/z) $\text{C}_{29}\text{H}_{18}\text{ClF}_5\text{N}_4\text{O}_2$ の 計算値, 584.1038; 実測値, 584.1045.	^1H NMR (400 MHz, $\text{DMSO}-d_6$) δ 10.62 (s, 1H), 9.42 (s, 1H), 8.23 (t, $J =$ 1.6 Hz, 1H), 8.16 - 8.06 (m, 4H), 8.04 - 7.93 (m, 4H), 7.83 (dd, J $= 8.3, 1.2$ Hz, 2H), 7.63 (d, $J =$ 9.1 Hz, 2H), 7.57 - 7.51 (m, 2H), 7.50 - 7.44 (m, 1H).	^{13}C NMR (101 MHz, $\text{DMSO}-d_6$) δ 164.00, 161.79, 146.00, 143.66, 142.34, 140.13, 137.93, 137.12, 135.79, 133.90, 129.28, 129.03, 128.43, 127.02, 126.56, 126.33, 125.60, 124.64, 123.08, 120.98, 120.39; ^{19}F NMR (376 MHz, $\text{DMSO}-d_6$) δ -85.21, -86.93.

【表 6 - 4】

F7	179-186	IR (薄膜) 3255, 3069, 2838, 2251, 2124, 1667, 1599, 1534, 1513 cm ⁻¹	HRMS-FAB (<i>m/z</i>) C ₃₀ H ₂₀ F ₆ N ₄ O ₃ の計 算値, 598.1440; 実測値, 598.1428.	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 10.45 (s, 1H), 9.41 (s, 1H), 8.14 - 8.01 (m, 6H), 7.98 - 7.93 (m, 2H), 7.62 (d, <i>J</i> = 9.1 Hz, 2H), 7.50 - 7.40 (m, 2H), 7.35 (dd, <i>J</i> = 7.5, 1.7 Hz, 1H), 7.20 - 7.15 (m, 1H), 7.10 (td, <i>J</i> = 7.4, 1.0 Hz, 1H), 3.78 (s, 3H).	¹³ C NMR (101 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 164.38, 162.65, 161.87, 160.14, 156.51, 146.04, 143.69, 140.43, 135.84, 131.48, 131.44, 130.91, 130.78, 130.75, 130.04, 129.49, 129.40, 126.56, 125.94, 125.77, 125.39, 123.51, 123.14, 121.03, 120.51, 120.31, 115.67, 115.44, 111.37, 55.51; ¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -85.21, -86.92, -109.18.
F8	173-176	IR (薄膜) 3294, 3060, 2968, 2932, 2873, 2246, 1654, 1593, 1514 cm ⁻¹	HRMS-FAB (<i>m/z</i>) C ₃₀ H ₂₃ F ₃ N ₄ O ₂ の計 算値, 528.1773; 実測値, 528.1782.	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.55 (s, 1H), 8.23 - 8.17 (m, 2H), 8.00 (s, 1H), 7.89 (dt, <i>J</i> = 7.1, 1.8 Hz, 1H), 7.84 - 7.76 (m, 5H), 7.59 - 7.49 (m, 2H), 7.42 - 7.32 (m, 4H), 7.29 - 7.19 (m, 2H), 2.60 (q, <i>J</i> = 7.5 Hz, 2H), 1.11 (t, <i>J</i> = 7.5 Hz, 3H).	¹³ C NMR (101 MHz, CDCl ₃) δ 165.57, 163.04, 148.33, 142.70, 141.56, 141.48, 140.35, 139.28, 135.56, 134.69, 132.80, 129.86, 128.75, 128.67, 128.07, 127.70, 127.48, 126.51, 125.76, 125.61, 122.39, 121.17, 119.98, 26.15, 15.62; ¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -58.01.

【表 6 - 5】

F9	170-180	IR (薄膜) 3251, 3060, 2252, 2125, 1684, 1595, 1531, 1513 cm ⁻¹	HRMS-FAB (<i>m/z</i>) C ₃₁ H ₂₁ F ₅ N ₄ O ₃ の計 算値, 592.1534; 実測値, 592.1545.	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 10.51 (s, 1H), 9.41 (s, 1H), 8.14 - 8.08 (m, 4H), 8.02 (dt, <i>J</i> = 7.7, 1.3 Hz, 1H), 8.00 - 7.95 (m, 3H), 7.74 - 7.71 (m, 1H), 7.69 - 7.49 (m, 7H), 2.27 (s, 3H).	¹³ C NMR (101 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 202.71, 165.15, 161.84, 146.01, 143.65, 140.62, 140.38, 139.94, 139.22, 135.80, 134.84, 131.85, 130.98, 130.58, 128.56, 128.01, 127.77, 127.60, 126.87, 126.52, 125.39, 123.08, 120.99, 120.32, 30.17; ¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -85.21, -86.93.
F10		IR (薄膜) 3298, 3062, 2941, 2831, 2782, 2245, 1655, 1593, 1514 cm ⁻¹	HRMS-FAB (<i>m/z</i>) C ₃₀ H ₂₄ F ₃ N ₅ O ₂ の計 算値, 543.1882; 実測値, 543.1893.	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.55 (s, 1H), 8.23 - 8.18 (m, 2H), 8.10 (t, <i>J</i> = 1.6 Hz, 1H), 8.02 (s, 1H), 7.86 - 7.77 (m, 6H), 7.53 (t, <i>J</i> = 7.7 Hz, 1H), 7.38 (d, <i>J</i> = 8.3 Hz, 2H), 7.31 (ddd, <i>J</i> = 8.1, 7.4, 1.7 Hz, 1H), 7.25 (d, <i>J</i> = 7.5 Hz, 1H), 7.10 - 7.01 (m, 2H), 2.55 (s, 6H).	¹³ C NMR (101 MHz, CDCl ₃) δ 165.83, 163.06, 151.29, 148.32, 142.65, 141.48, 139.41, 135.57, 134.95, 132.89, 132.32, 131.57, 128.97, 128.71, 127.46, 127.02, 126.40, 125.42, 122.38, 121.77, 121.17, 119.93, 117.86, 43.49; ¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -58.01.

【表 6 - 6】

F11	166-170	IR (薄膜) 3316, 3106, 1651, 1593, 1514 cm ⁻¹	HRMS-FAB (<i>m/z</i>) C ₂₈ H ₂₅ F ₃ N ₄ O ₄ の計 算値,538.1828; 実測値,538.1833.	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 10.52 (s, 1H), 9.40 (s, 1H), 8.19 (dd, <i>J</i> = 7.5, 2.4 Hz, 1H), 8.16 - 8.01 (m, 5H), 8.00 - 7.92 (m, 2H), 7.72 - 7.59 (m, 4H), 7.59 - 7.44 (m, 4H).	¹³ C NMR (101 MHz, CDCl ₃) δ 164.41, 162.20, 161.91, 159.70, 147.09, 143.73, 140.41, 135.74, 134.43, 131.50, 130.49, 129.53, 128.98, 128.74, 128.28, 128.08, 126.62, 125.51, 122.59, 121.33, 121.08, 120.41, 118.78, 116.57, 116.34; ¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -56.97, -113.91.
F12	180-192	IR (薄膜) 3290, 3061, 2246, 1652, 1593, 1513 cm ⁻¹	HRMS-FAB (<i>m/z</i>) C ₃₀ H ₂₃ F ₃ N ₄ O ₂ の計 算値, 528.1773; 実測値,528.1796.	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.56 (s, 1H), 8.23 - 8.17 (m, 2H), 7.98 (s, 1H), 7.91 (ddd, <i>J</i> = 7.8, 1.8, 1.2 Hz, 1H), 7.83 - 7.76 (m, 4H), 7.68 (t, <i>J</i> = 1.6 Hz, 1H), 7.58 (t, <i>J</i> = 7.7 Hz, 1H), 7.41 - 7.35 (m, 3H), 7.21 (dd, <i>J</i> = 8.5, 6.4 Hz, 1H), 7.16 - 7.11 (m, 2H), 2.05 (s, 6H).	¹³ C NMR (101 MHz, CDCl ₃) δ 165.47, 163.05, 148.37, 141.88, 141.49, 140.52, 139.28, 135.93, 135.57, 135.00, 132.87, 129.19, 127.58, 126.50, 125.68, 122.40, 121.18, 119.99, 115.80, 20.91.

【表 6 - 7】

F13	188-197	IR (薄膜) 3394, 3262, 3104, 1657, 1598, 1514 cm ⁻¹	HRMS-FAB (<i>m/z</i>) C ₃₀ H ₂₁ F ₅ N ₄ O ₃ の計 算値, 580.1534; 実測値, 580.1545.	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 10.35 (s, 1H), 9.41 (s, 1H), 8.13 - 8.03 (m, 4H), 8.01 (d, <i>J</i> = 2.4 Hz, 1H), 7.99 - 7.94 (m, 2H), 7.65 - 7.55 (m, 4H), 7.51 - 7.31 (m, 4H), 7.28 (d, <i>J</i> = 8.8 Hz, 1H), 3.87 (s, 3H).	¹³ C NMR (101 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 164.85, 161.94, 158.79, 146.04, 143.65, 140.69, 137.48, 135.85, 129.94, 129.53, 129.38, 129.35, 129.22, 129.16, 128.21, 128.05, 127.17, 126.80, 126.52, 125.15, 123.11, 121.01, 120.27, 111.21, 55.85; ¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -85.22, -86.93.
F14	178-187	IR (薄膜) 3268, 3112, 1670, 1652, 1613, 1589, 1511 cm ⁻¹	HRMS-FAB (<i>m/z</i>) C ₂₉ H ₂₁ F ₃ N ₄ O ₂ の計 算値, 514.1617; 実測値, 514.1637.	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 10.64 (s, 1H), 9.39 (s, 1H), 8.09 (dd, <i>J</i> = 9.0, 6.9 Hz, 4H), 7.92 (d, <i>J</i> = 8.7 Hz, 2H), 7.62 (d, <i>J</i> = 8.3 Hz, 2H), 7.49 (dd, <i>J</i> = 7.9, 6.6 Hz, 3H), 7.45 - 7.30 (m, 5H), 2.26 (s, 3H).	¹³ C NMR (101 MHz, CDCl ₃) δ 168.35, 161.91, 147.05, 143.72, 142.41, 140.88, 140.55, 138.56, 135.73, 131.92, 130.78, 129.06, 128.36, 127.21, 126.71, 126.18, 125.74, 125.37, 122.58, 121.11, 119.62, 17.27.

【 0 4 5 4 】

【表 6 - 8】

F15	>200 (dec.)	IR (薄膜) 3234, 3031, 1675, 1599, 1543, 1516 cm ⁻¹	HRMS-FAB (<i>m/z</i>) C ₂₈ H ₁₈ ClF ₃ N ₄ O ₂ の 計算値, 534.1070; 実測値, 534.1084.	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.59 (s, 1H), 8.23 (d, <i>J</i> = 8.6 Hz, 2H), 8.17 (s, 1H), 7.93 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.84 - 7.78 (m, 4H), 7.70 (d, <i>J</i> = 1.6 Hz, 1H), 7.62 (td, <i>J</i> = 6.9, 6.3, 3.2 Hz, 3H), 7.52 - 7.37 (m, 5H).	¹³ C NMR (101 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 164.87, 161.83, 147.03, 143.72, 143.06, 140.20, 137.92, 135.70, 135.44, 130.69, 129.52, 129.12, 128.48, 127.54, 126.95, 126.75, 125.58, 125.43, 122.56, 121.10, 119.62.
F16	183-186	IR (薄膜) 3252, 3058, 2976, 2932, 2252, 1666, 1599, 1535, 1514 cm ⁻¹	HRMS-FAB (<i>m/z</i>) C ₃₀ H ₂₅ FN ₄ O ₂ の計 算値, 492.1962; 実測値 492.1964.	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 10.50 (s, 1H), 9.21 (s, 1H), 8.19 (dd, <i>J</i> = 7.5, 2.4 Hz, 1H), 8.13 - 8.02 (m, 3H), 7.97 - 7.92 (m, 2H), 7.84 - 7.78 (m, 2H), 7.70 - 7.65 (m, 2H), 7.58 - 7.44 (m, 4H), 7.14 - 7.08 (m, 2H), 4.70 (p, <i>J</i> = 6.0 Hz, 1H), 1.30 (d, <i>J</i> = 6.0 Hz, 6H).	¹³ C NMR (101 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 164.33, 162.15, 161.34, 159.64, 156.78, 142.89, 140.10, 134.40, 131.48, 131.45, 130.48, 130.44, 129.95, 129.58, 129.48, 128.94, 128.91, 128.70, 128.24, 128.16, 128.02, 126.40, 125.89, 121.00, 120.35, 116.53, 116.32, 69.61, 21.71; ¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -113.94

【表 6 - 9】

F17	164-168	IR (薄膜) 3296, 3061, 2246, 1654, 1593, 1515 cm^{-1}	HRMS-FAB (m/z) $\text{C}_{29}\text{H}_{21}\text{F}_3\text{N}_4\text{O}_2$ の計 算値, 514. 1617; 実測値, 514.1630.	^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 8.55 (s, 1H), 8.23 - 8.17 (m, 2H), 8.06 - 8.00 (m, 2H), 7.84 (ddd, J = 7.7, 1.8, 1.2 Hz, 1H), 7.82 - 7.76 (m, 4H), 7.72 (dt, J = 7.7, 1.2 Hz, 1H), 7.52 (t, J = 7.7 Hz, 1H), 7.41 - 7.32 (m, 4H), 7.09 - 6.98 (m, 2H), 3.83 (s, 3H).	^{13}C NMR (101 MHz, CDCl_3) δ 165.60, 163.05, 148.36, 142.71, 141.49, 140.68, 139.29, 135.57, 135.31, 134.80, 132.78, 130.50, 129.69, 128.70, 127.85, 127.69, 127.49, 126.52, 125.97, 125.58, 122.39, 121.67, 121.18, 119.99, 119.11, 20.43.
F18	182-201	IR (薄膜) 3318, 3103, 2918, 2849, 1690, 1615, 1590, 1570, 1532, 1517 cm^{-1}	HRMS-FAB (m/z) $\text{C}_{27}\text{H}_{16}\text{Cl}_2\text{F}_3\text{N}_5\text{O}_2$ の計算値, 569.0633; 実測値, 569.0634.	^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 10.15 (s, 1H), 8.57 (s, 1H), 8.34 (dd, J = 7.8, 1.0 Hz, 1H), 8.25 - 8.18 (m, 2H), 8.02 (t, J = 7.8 Hz, 1H), 7.94 - 7.87 (m, 2H), 7.84 - 7.77 (m, 3H), 7.62 - 7.56 (m, 2H), 7.48 - 7.36 (m, 3H).	^{13}C NMR (101 MHz, CDCl_3) δ 163.13, 161.77, 154.45, 149.48, 148.35, 141.49, 138.96, 138.05, 136.56, 135.56, 133.19, 132.30, 130.26, 127.58, 127.48, 126.36, 122.39, 121.41, 121.20, 119.71.

【表 6 - 1 0】

F19			ESIMS m/z 545 ($[M+H]^+$)	^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 8.55 (s, 1H), 8.11 - 8.06 (m, 2H), 7.80 - 7.74 (m, 2H), 7.54 (t, $J = 1.5$ Hz, 1H), 7.44 (dt, $J = 7.6, 1.5$ Hz, 1H), 7.41 - 7.36 (m, 2H), 7.31 - 7.17 (m, 5H), 7.03 (dd, $J = 7.8, 1.8$ Hz, 1H), 6.92 (ddd, $J = 8.5, 5.9, 1.2$ Hz, 2H), 3.71 (s, 3H), 3.56 (s, 3H).	^{13}C NMR (151 MHz, CDCl_3) δ 162.64, 156.35, 148.37, 146.24, 141.58, 138.24, 135.43, 131.03, 130.78, 129.93, 129.74, 128.79, 128.26, 127.43, 127.38, 127.16, 126.99, 122.92, 122.37, 121.21, 121.10, 120.74, 119.49, 117.78, 111.24, 55.51, 38.32; ^{19}F NMR (376 MHz, CDCl_3) δ -58.03.
F20	>220 (dec.)	IR (薄膜) 3252, 3067, 2838, 2250, 2125, 1667, 1615, 1599, 1524 cm^{-1}	HRMS-FAB (m/z) $\text{C}_{29}\text{H}_{20}\text{F}_4\text{N}_4\text{O}_2$ の計算値, 532.1522; 実測値, 532.1537.	^1H NMR (400 MHz, $\text{DMSO}-d_6$) δ 10.46 (s, 1H), 9.52 (s, 1H), 8.20 (d, $J = 8.4$ Hz, 2H), 8.15 - 8.10 (m, 2H), 8.05 (ddt, $J = 9.1, 7.1, 2.3$ Hz, 2H), 8.01 - 7.94 (m, 4H), 7.50 - 7.40 (m, 2H), 7.35 (dd, $J = 7.5, 1.7$ Hz, 1H), 7.20 - 7.15 (m, 1H), 7.10 (td, $J = 7.4, 1.0$ Hz, 1H), 3.78 (s, 3H).	^{13}C NMR (101 MHz, $\text{DMSO}-d_6$) δ 164.40, 162.65, 162.05, 160.15, 156.51, 144.02, 140.55, 139.59, 131.49, 131.44, 130.91, 130.77, 130.74, 130.05, 129.50, 129.41, 127.71, 127.39, 127.10, 127.06, 126.66, 125.94, 125.78, 125.27, 125.22, 123.51, 122.57, 120.51, 120.32, 119.44, 115.68, 115.45, 111.38, 55.52; ^{19}F NMR (376 MHz, $\text{DMSO}-d_6$) δ -60.80, -109.15.

【表 6 - 1 1】

F21	138-148	IR (薄膜) 2959, 2836, 1596, 1515 cm ⁻¹	HRMS-FAB (<i>m/z</i>) C ₂₉ H ₂₁ F ₃ N ₄ O ₂ S の 計算値, 546.1337; 実測値, 546.1334.	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 9.21 (s, 1H), 8.74 (s, 1H), 8.22 (d, <i>J</i> = 7.7 Hz, 2H), 7.95 (d, <i>J</i> = 10.0 Hz, 3H), 7.79 (d, <i>J</i> = 9.0 Hz, 3H), 7.67 (d, <i>J</i> = 7.4 Hz, 1H), 7.47 (t, <i>J</i> = 7.6 Hz, 1H), 7.36 (dd, <i>J</i> = 16.8, 8.0 Hz, 3H), 7.08 - 6.91 (m, 3H), 3.83 (d, <i>J</i> = 3.6 Hz, 3H).	¹³ C NMR (101 MHz, CDCl ₃) δ 161.99, 156.37, 148.57, 141.80, 140.48, 139.07, 135.24, 132.73, 132.57, 130.82, 129.42, 129.25, 128.34, 127.84, 127.40, 125.65, 123.30, 122.40, 121.64, 121.30, 120.98, 111.24, 55.61; ¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -57.99.
F22	63-67	IR (薄膜) 3290, 3063, 2938, 2835, 2246, 1655, 1593, 1513 cm ⁻¹	HRMS-FAB (<i>m/z</i>) C ₂₉ H ₂₁ F ₃ N ₄ O ₃ の計 算値, 530.1566; 実測値, 530.1573.	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.55 (s, 1H), 8.23 - 8.17 (m, 2H), 8.06 - 8.00 (m, 2H), 7.84 (ddd, <i>J</i> = 7.7, 1.8, 1.2 Hz, 1H), 7.82 - 7.76 (m, 4H), 7.72 (dt, <i>J</i> = 7.7, 1.2 Hz, 1H), 7.52 (t, <i>J</i> = 7.7 Hz, 1H), 7.41 - 7.32 (m, 4H), 7.09 - 6.98 (m, 2H), 3.83 (s, 3H).	¹³ C NMR (101 MHz, CDCl ₃) δ 165.85, 163.07, 156.39, 148.32, 141.48, 139.41, 135.57, 134.68, 133.15, 130.79, 129.43, 129.30, 128.54, 128.08, 127.46, 126.41, 125.62, 122.38, 121.67, 121.17, 120.99, 119.97, 119.11, 111.29, 55.61.

【表 6 - 1 2】

F23	145-154	IR (薄膜) 2940, 2836, 1596, 1513 cm ⁻¹	HRMS-FAB (<i>m/z</i>) C ₃₀ H ₂₁ F ₅ N ₄ O ₂ S の 計算値, 596.1305; 実測値, 596.1308.	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 9.19 (s, 1H), 8.69 (s, 1H), 8.24 (d, <i>J</i> = 7.7 Hz, 2H), 8.03 - 7.87 (m, 3H), 7.68 (d, <i>J</i> = 7.5 Hz, 3H), 7.48 (t, <i>J</i> = 7.6 Hz, 1H), 7.37 (dd, <i>J</i> = 21.0, 8.3 Hz, 4H), 7.09 - 6.91 (m, 3H), 3.84 (s, 3H).	¹³ C NMR (101 MHz, CDCl ₃) δ 162.32, 156.38, 147.70, 141.80, 140.42, 139.09, 135.51, 132.73, 132.60, 130.82, 129.43, 129.26, 128.36, 127.38, 125.63, 123.28, 123.10, 121.25, 120.98, 113.77, 113.61, 111.25, 55.62; ¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -85.88, -87.84.
F24	180-183	IR (薄膜) 3293, 3061, 1655, 1593, 1515 cm ⁻¹	HRMS-FAB (<i>m/z</i>) C ₂₈ H ₁₉ F ₃ N ₄ O ₂ の計 算値, 500.1460; 実測値, 500.1469.	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.56 (s, 1H), 8.22 (d, <i>J</i> = 8.7 Hz, 2H), 8.10 (t, <i>J</i> = 1.7 Hz, 1H), 8.03 (s, 1H), 7.87 - 7.75 (m, 6H), 7.66 - 7.60 (m, 2H), 7.57 (t, <i>J</i> = 7.7 Hz, 1H), 7.48 (t, <i>J</i> = 7.5 Hz, 2H), 7.40 (t, <i>J</i> = 8.0 Hz, 3H).	¹³ C NMR (101 MHz, CDCl ₃) δ 165.68, 163.05, 148.34, 142.05, 141.49, 140.02, 139.27, 135.56, 135.43, 130.67, 129.31, 128.97, 127.92, 127.49, 127.21, 126.55, 125.92, 125.67, 122.39, 121.18, 120.03, 119.11; ¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -58.01.

【表 6 - 1 3】

F25	180-189	IR (薄膜) 3306, 3114, 1648, 1592, 1544, 1515 cm ⁻¹	HRMS-FAB (<i>m/z</i>) C ₂₈ H ₁₈ F ₄ N ₄ O ₂ の計 算値, 518.1366; 実測値, 518.1383.	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.57 (s, 1H), 8.25 - 8.19 (m, 2H), 8.01 (s, 1H), 7.86 (t, <i>J</i> = 1.5 Hz, 1H), 7.83 - 7.76 (m, 4H), 7.64 - 7.58 (m, 2H), 7.56 (ddd, <i>J</i> = 8.7, 2.3, 1.6 Hz, 1H), 7.52 - 7.36 (m, 6H).	¹³ C NMR (101 MHz, CDCl ₃) δ 164.45, 162.94, 161.91, 148.41, 144.31, 141.53, 138.95, 138.84, 137.45, 137.37, 135.53, 129.11, 129.04, 128.52, 127.52, 127.15, 126.79, 122.40, 121.67, 121.37, 121.19, 120.15, 119.10, 117.62, 117.40, 113.10, 112.87; ¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -58.01, -111.14.
F26	150-154	IR (薄膜) 3251, 3065, 2836, 2250, 2124, 1667, 1596, 1531, 1513 cm ⁻¹	HRMS-FAB (<i>m/z</i>) C ₃₀ H ₂₁ F ₅ N ₄ O ₃ の計 算値, 580.1534; 実測値, 580.1541.	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 10.48 (s, 1H), 9.41 (s, 1H), 8.15 - 8.05 (m, 5H), 8.01 - 7.90 (m, 3H), 7.72 (dt, <i>J</i> = 7.7, 1.2 Hz, 1H), 7.66 - 7.54 (m, 3H), 7.45 - 7.36 (m, 2H), 7.17 (dd, <i>J</i> = 8.8, 0.9 Hz, 1H), 7.09 (td, <i>J</i> = 7.5, 1.0 Hz, 1H), 3.80 (s, 3H).	¹³ C NMR (101 MHz, CDCl ₃) δ 165.66, 161.92, 156.11, 146.07, 143.70, 140.55, 138.30, 135.87, 134.67, 132.56, 130.49, 129.30, 129.02, 128.39, 128.07, 126.57, 126.26, 125.36, 123.14, 121.05, 120.82, 120.30, 111.76, 55.53; ¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -85.21, -86.92.

【 0 4 6 0 】

【表 6 - 1 4】

F27	199-204	IR (薄膜) 3307, 3105, 1678, 1589, 1538, 1516 cm ⁻¹	HRMS-FAB (<i>m/z</i>) C ₂₇ H ₁₈ F ₃ N ₅ O ₂ の計 算値, 501.1413; 実測値, 501.1427.	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 10.29 (s, 1H), 8.57 (s, 1H), 8.26 (ddd, <i>J</i> = 14.8, 7.2, 1.5 Hz, 3H), 8.10 - 7.90 (m, 6H), 7.85 - 7.77 (m, 2H), 7.62 - 7.47 (m, 3H), 7.43 - 7.36 (m, 2H).	¹³ C NMR (101 MHz, CDCl ₃) δ 163.15, 162.15, 156.11, 149.45, 148.32, 141.48, 139.03, 138.63, 138.18, 135.59, 129.68, 129.01, 127.50, 127.02, 126.31, 123.54, 122.40, 121.20, 120.87, 119.72.
F28	175-182	IR (薄膜) 3294, 3117, 1655, 1595, 1515 cm ⁻¹	HRMS-FAB (<i>m/z</i>) C ₂₈ H ₁₇ F ₅ N ₄ O ₂ の計 算値, 536.1272; 実測値, 536.1273.	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.55 (s, 1H), 8.23 - 8.16 (m, 2H), 7.99 (s, 1H), 7.92 (dd, <i>J</i> = 7.3, 5.2 Hz, 2H), 7.83 - 7.73 (m, 4H), 7.46 - 7.35 (m, 4H), 7.31 - 7.15 (m, 3H).	¹³ C NMR (101 MHz, CDCl ₃) δ 164.49, 163.26, 162.98, 161.00, 160.72, 158.52, 148.38, 141.49, 139.09, 135.53, 131.46, 131.09, 131.05, 130.86, 130.85, 130.82, 130.50, 130.42, 129.06, 128.97, 127.48, 126.66, 124.35, 124.32, 124.15, 122.39, 122.28, 121.17, 120.11, 119.10, 116.59, 116.36, 116.03, 115.81; ¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -58.02, -108.64, -114.62.

10

20

30

【表 6 - 1 5】

F29		IR (薄膜) 1514, 1609, 1644, 3065 cm ⁻¹	HRMS-FAB (<i>m/z</i>) C ₃₁ H ₂₂ F ₆ N ₄ O ₂ の計 算値, 596.1647; 実測値, 596.1653.	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.57 (s, 1H), 8.14 - 8.07 (m, 2H), 7.84 - 7.77 (m, 2H), 7.40 (d, <i>J</i> = 9.0 Hz, 2H), 7.24 - 7.08 (m, 6H), 6.99 (t, <i>J</i> = 1.4 Hz, 1H), 6.91 (dd, <i>J</i> = 7.9, 1.2 Hz, 2H), 3.55 (s, 3H), 1.94 (s, 3H).	¹³ C NMR (101 MHz, CDCl ₃) δ 169.29, 163.17, 162.51, 160.71, 147.64, 145.72, 143.75, 143.68, 141.63, 139.71, 137.64, 137.56, 135.58, 135.09, 130.26, 129.46, 128.77, 127.84, 127.60, 127.01, 125.78, 125.36, 123.12, 123.01, 121.16, 120.98, 117.72, 117.51, 114.33, 114.10, 112.14, 38.25, 19.91; ¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -85.89, -87.86, -112.79.
F30	171-179	IR (薄膜) 3306, 3118, 1642, 1592, 1515 cm ⁻¹	HRMS-FAB (<i>m/z</i>) C ₂₈ H ₁₈ ClF ₃ N ₄ O ₂ の 計算値, 534.1070; 実測値, 534.1085.	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.56 (s, 1H), 8.24 - 8.17 (m, 2H), 8.02 (s, 1H), 7.96 - 7.89 (m, 2H), 7.83 - 7.76 (m, 4H), 7.66 (dt, <i>J</i> = 7.7, 1.3 Hz, 1H), 7.57 (t, <i>J</i> = 7.7 Hz, 1H), 7.52 - 7.48 (m, 1H), 7.42 - 7.30 (m, 5H).	¹³ C NMR (101 MHz, CDCl ₃) δ 165.47, 163.04, 148.36, 141.49, 140.08, 139.32, 139.25, 135.57, 134.83, 133.06, 132.43, 131.28, 130.09, 129.15, 128.67, 128.02, 127.49, 127.06, 126.55, 126.35, 122.39, 121.18, 120.05.

【 0 4 6 2】

【表 6 - 1 6】

F31	102-110	IR (薄膜) 3251, 3062, 2250, 2124, 1667, 1596, 1532, 1513 cm ⁻¹	HRMS-FAB (<i>m/z</i>) C ₃₁ H ₂₃ F ₅ N ₄ O ₂ の計 算値, 578.1741; 実測値, 578.1749.	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 10.42 (s, 1H), 9.41 (s, 1H), 8.13 - 8.07 (m, 4H), 8.03 (dt, <i>J</i> = 7.8, 1.2 Hz, 1H), 7.99 (d, <i>J</i> = 1.9 Hz, 1H), 7.97 (d, <i>J</i> = 1.9 Hz, 1H), 7.85 (t, <i>J</i> = 1.5 Hz, 1H), 7.70 - 7.58 (m, 3H), 7.40 (dt, <i>J</i> = 7.5, 1.4 Hz, 1H), 7.26 - 7.13 (m, 3H), 2.02 (s, 6H).	¹³ C NMR (101 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 165.13, 161.85, 146.00, 143.64, 140.56, 140.47, 140.40, 135.80, 135.21, 134.67, 132.19, 128.74, 127.75, 127.27, 126.48, 126.44, 125.34, 123.08, 120.97, 120.37, 20.51; ¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -85.22, -86.94.
F32	202-204	IR (薄膜) 3295, 3116, 3062, 2246, 1653, 1596, 1567, 1513 cm ⁻¹	HRMS-FAB (<i>m/z</i>) C ₂₉ H ₂₀ ClF ₃ N ₄ O ₂ の 計算値, 548.1227; 実測値, 548.1234.	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.55 (s, 1H), 8.22 - 8.17 (m, 2H), 7.95 (s, 1H), 7.87 (dd, <i>J</i> = 8.3, 2.3 Hz, 1H), 7.82 - 7.73 (m, 5H), 7.61 (d, <i>J</i> = 8.3 Hz, 1H), 7.42 - 7.25 (m, 5H), 7.17 (dd, <i>J</i> = 7.4, 1.2 Hz, 1H), 2.15 (s, 3H).	¹³ C NMR (101 MHz, CDCl ₃) δ 164.47, 162.98, 148.37, 141.49, 141.25, 139.01, 138.24, 137.59, 136.17, 135.54, 133.21, 130.06, 129.38, 129.27, 128.45, 127.49, 126.70, 125.75, 122.40, 121.66, 121.17, 120.06, 119.10, 19.79.

【表 6 - 1 7】

F33	170-180	IR (薄膜) 3343, 3124, 1686, 1616, 1589, 1546, 1517 cm^{-1}	HRMS-FAB (m/z) $\text{C}_{28}\text{H}_{20}\text{F}_3\text{N}_5\text{O}_2$ の計 算値, 515.1569; 実測値, 515.1567.	^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 10.20 (s, 1H), 8.56 (s, 1H), 8.30 (dd, J = 7.7, 1.0 Hz, 1H), 8.24 - 8.17 (m, 2H), 8.00 (t, J = 7.8 Hz, 1H), 7.92 - 7.86 (m, 2H), 7.84 - 7.77 (m, 2H), 7.63 (dd, J = 7.8, 1.0 Hz, 1H), 7.50 - 7.44 (m, 1H), 7.39 (tq, J = 6.4, 3.3, 2.2 Hz, 5H), 2.45 (s, 3H).	^{13}C NMR (101 MHz, CDCl_3) δ 162.14, 161.14, 157.53, 147.97, 147.30, 140.45, 138.25, 138.04, 137.07, 134.93, 134.58, 130.05, 128.70, 127.89, 126.44, 126.01, 125.24, 125.16, 121.37, 120.17, 119.41, 118.66, 19.58.
F34	166-169	IR (薄膜) 3290, 3060, 2246, 1652, 1595, 1565, 1513 cm^{-1}	HRMS-FAB (m/z) $\text{C}_{28}\text{H}_{18}\text{ClF}_3\text{N}_4\text{O}_2$ の 計算値, 534.1070; 実測値, 534.1081.	^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 8.55 (s, 1H), 8.23 - 8.17 (m, 2H), 7.98 (s, 1H), 7.87 - 7.74 (m, 6H), 7.60 (d, J = 8.2 Hz, 1H), 7.49 - 7.35 (m, 7H).	^{13}C NMR (101 MHz, CDCl_3) δ 164.53, 162.98, 148.38, 141.50, 141.12, 139.02, 138.33, 136.55, 135.55, 133.45, 130.55, 129.83, 129.34, 128.29, 128.19, 127.50, 127.17, 126.72, 122.40, 121.18, 120.09.

【 0 4 6 4 】

【表 6 - 1 8】

F35	196-199	IR (薄膜) 3135, 1656, 1592, 1541, 1512 cm ⁻¹	HRMS-FAB (<i>m/z</i>) C ₃₀ H ₂₁ F ₅ N ₄ O ₂ の計 算値, 564.1585; 実測値, 5564.1589.	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 10.47 (s, 1H), 9.40 (s, 1H), 8.10 (dd, <i>J</i> = 8.9, 6.7 Hz, 4H), 8.03 - 7.93 (m, 4H), 7.67 - 7.56 (m, 4H), 7.37 - 7.28 (m, 4H), 2.28 (s, 3H).	¹³ C NMR (101 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 165.39, 161.92, 146.08, 143.72, 141.37, 140.53, 135.87, 134.78, 134.70, 132.22, 130.41, 129.62, 128.40, 127.99, 127.69, 126.57, 126.48, 126.06, 125.41, 123.16, 121.07, 120.38, 20.14; ¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -85.21, -86.92.
F36	129-133	IR (薄膜) 3291, 3064, 1667, 1605, 1513 cm ⁻¹	HRMS-FAB (<i>m/z</i>) C ₃₀ H ₁₈ F ₈ N ₄ O ₃ の計 算値, 634.1251; 実測値, 634.1258.	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 10.53 (s, 1H), 9.41 (s, 1H), 8.14 - 8.03 (m, 6H), 8.01 - 7.94 (m, 2H), 7.75 - 7.52 (m, 8H).	¹³ C NMR (101 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 165.13, 161.83, 146.01, 145.21, 143.65, 140.36, 136.21, 135.80, 134.92, 133.85, 132.12, 131.69, 129.77, 128.54, 128.13, 128.03, 127.24, 126.53, 125.40, 123.08, 121.56, 120.99, 120.31; ¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -56.15, -85.21, -86.93.

10

20

30

【 0 4 6 5 】

【表 6 - 1 9】

F37	120-132	IR (薄膜) 3385, 3264, 3096, 3006, 2838, 2251, 2125, 1656, 1600, 1517 cm ⁻¹	HRMS-FAB (<i>m/z</i>) C ₂₉ H ₂₁ F ₃ N ₄ O ₃ の計 算値, 530.1566; 実測値, 530.1569.	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 10.35 (s, 1H), 9.40 (s, 1H), 8.12 - 8.03 (m, 5H), 8.01 (d, <i>J</i> = 2.4 Hz, 1H), 7.98 - 7.94 (m, 2H), 7.65 - 7.60 (m, 2H), 7.57 (dd, <i>J</i> = 8.3, 1.3 Hz, 2H), 7.50 - 7.44 (m, 2H), 7.41 - 7.35 (m, 1H), 7.28 (d, <i>J</i> = 8.8 Hz, 1H), 3.87 (s, 3H).	¹³ C NMR (101 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 164.79, 161.88, 158.74, 146.97, 143.60, 140.62, 137.42, 135.65, 129.88, 129.33, 129.29, 129.10, 128.00, 127.12, 126.74, 126.46, 125.10, 122.48, 121.24, 120.97, 120.22, 118.69, 111.36, 55.80; ¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -56.97.
F38	164-172	IR (薄膜) 330, 3063, 2980, 2931, 2246, 1656, 1594, 1514 cm ⁻¹	HRMS-FAB (<i>m/z</i>) C ₃₀ H ₂₃ F ₃ N ₄ O ₃ の計 算値, 544.1722; 実測値, 544.1730.	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.55 (s, 1H), 8.20 (d, <i>J</i> = 8.7 Hz, 2H), 8.07 (t, <i>J</i> = 1.5 Hz, 1H), 8.01 (s, 1H), 7.87 - 7.73 (m, 6H), 7.52 (t, <i>J</i> = 7.7 Hz, 1H), 7.36 (ddd, <i>J</i> = 15.4, 7.7, 6.2 Hz, 4H), 7.08 - 6.96 (m, 2H), 4.07 (q, <i>J</i> = 7.0 Hz, 2H), 1.37 (t, <i>J</i> = 7.0 Hz, 3H).	¹³ C NMR (101 MHz, CDCl ₃) δ 165.86, 163.07, 155.77, 148.33, 141.47, 139.32, 135.57, 134.56, 133.17, 130.76, 129.48, 129.23, 128.45, 128.01, 127.47, 126.39, 125.57, 122.38, 121.67, 121.16, 120.97, 119.91, 119.10, 112.56, 64.03, 14.86; ¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -58.01.

【表 6 - 2 0】

F39		IR (薄膜) 3295, 3066, 1655, 1591, 1515 cm ⁻¹	HRMS-FAB (<i>m/z</i>) C ₂₉ H ₂₀ F ₄ N ₄ O ₂ の計 算値, 532.1522; 実測値, 532.1519.	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.56 (s, 1H), 8.20 (d, <i>J</i> = 8.8 Hz, 2H), 8.01 (s, 1H), 7.83 - 7.75 (m, 4H), 7.64 - 7.57 (m, 2H), 7.41 - 7.36 (m, 2H), 7.34 - 7.21 (m, 5H), 2.29 (s, 3H).	¹³ C NMR (101 MHz, CDCl ₃) δ 171.22, 164.36, 163.79, 162.96, 161.32, 148.38, 148.36, 144.97, 144.89, 141.51, 139.53, 138.97, 136.83, 136.76, 135.53, 135.19, 130.64, 129.49, 128.28, 127.50, 126.75, 126.08, 123.33, 123.31, 122.40, 121.19, 120.11, 119.87, 119.66, 115.83, 113.12, 112.89, 20.36; ¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -58.02, -111.56.
F40	200-205	IR (薄膜) 3301, 3122, 1666, 1600, 1515 cm ⁻¹	HRMS-FAB (<i>m/z</i>) C ₂₉ H ₁₈ F ₆ N ₄ O ₂ の計 算値, 568.1334; 実測値, 568.1342.	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 10.52 (s, 1H), 9.40 (s, 1H), 8.19 (dd, <i>J</i> = 7.5, 2.4 Hz, 1H), 8.15 - 8.01 (m, 5H), 7.96 (d, <i>J</i> = 8.9 Hz, 2H), 7.70 - 7.59 (m, 4H), 7.59 - 7.44 (m, 4H).	¹³ C NMR (101 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 164.37, 162.16, 161.87, 159.66, 146.05, 143.69, 140.36, 135.83, 134.39, 131.45, 131.41, 130.48, 130.44, 129.58, 129.49, 128.93, 128.90, 128.70, 128.24, 128.17, 128.03, 126.58, 125.46, 123.13, 121.03, 120.37, 116.53, 116.29; ¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -85.22, -86.93, -113.91.

【 0 4 6 7 】

【表 6 - 2 1】

F41	177-184	IR (薄膜) 3251, 3060, 2252, 1670, 1594, 1514 cm ⁻¹	HRMS-FAB (<i>m/z</i>) C ₃₀ H ₂₁ F ₃ N ₄ O ₃ の計 算値, 542.1566; 実測値, 542.1562.	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 10.51 (s, 1H), 9.40 (s, 1H), 8.13 - 8.06 (m, 4H), 8.02 (dt, <i>J</i> = 7.7, 1.3 Hz, 1H), 7.99 - 7.95 (m, 3H), 7.74 - 7.70 (m, 1H), 7.68 - 7.59 (m, 4H), 7.58 - 7.50 (m, 3H), 2.27 (s, 3H).	¹³ C NMR (101 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 202.70, 165.13, 161.81, 146.98, 143.63, 140.60, 140.35, 139.93, 139.20, 135.64, 134.82, 131.84, 130.97, 130.56, 128.55, 128.00, 127.76, 127.58, 126.86, 126.50, 125.38, 122.49, 120.98, 120.30, 30.16; ¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -56.96.
F42	134-138	IR (薄膜) 3255, 3063, 2250, 2125, 1669, 1592, 1533, 1513 cm ⁻¹	HRMS-FAB (<i>m/z</i>) C ₃₀ H ₂₀ F ₆ N ₄ O ₂ の計 算値, 582.1490; 実測値, 582.1452.	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 10.52 (s, 1H), 9.41 (s, 1H), 8.16 - 8.05 (m, 4H), 8.00 - 7.93 (m, 2H), 7.88 - 7.78 (m, 2H), 7.62 (d, <i>J</i> = 9.1 Hz, 2H), 7.50 (ddd, <i>J</i> = 9.5, 2.5, 1.4 Hz, 1H), 7.38 - 7.30 (m, 4H), 2.29 (s, 3H).	¹³ C NMR (101 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 163.92, 162.88, 161.80, 160.44, 146.01, 143.76, 143.68, 140.13, 139.27, 136.73, 135.80, 134.80, 130.44, 129.50, 128.05, 126.53, 126.04, 125.58, 124.29, 123.08, 120.98, 120.40, 119.12, 118.91, 113.29, 113.06, 19.98; ¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -85.23, -86.94, -112.72.

【 0 4 6 8 】

【表 6 - 2 2】

F43	>200 (dec.)	IR (薄膜) 3298, 3119, 2919, 1648, 1595, 1582, 1570, 1549, 1516 cm ⁻¹	HRMS-FAB (<i>m/z</i>) C ₂₈ H ₁₈ ClF ₃ N ₄ O ₂ の 計算値, 534.1070; 実測値, 534.1087.	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.56 (s, 1H), 8.24 - 8.19 (m, 2H), 8.02 (s, 1H), 7.96 (t, <i>J</i> = 1.6 Hz, 1H), 7.83 - 7.77 (m, 5H), 7.74 (t, <i>J</i> = 1.8 Hz, 1H), 7.62 - 7.57 (m, 2H), 7.52 - 7.36 (m, 5H).	¹³ C NMR (101 MHz, CDCl ₃) δ 164.40, 162.97, 148.38, 148.36, 143.75, 141.50, 138.93, 138.69, 137.00, 135.54, 135.35, 130.49, 129.10, 128.51, 127.51, 127.16, 126.83, 125.75, 124.11, 122.40, 121.17, 120.16.
F44	195-202	IR (薄膜) 3251, 3068, 2838, 1667, 1598, 1515 cm ⁻¹	HRMS-FAB (<i>m/z</i>) C ₂₉ H ₂₀ F ₄ N ₄ O ₃ の計 算値, 548.1472; 実測値, 548.1470.	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 10.45 (s, 1H), 9.40 (s, 1H), 8.13 - 8.01 (m, 6H), 7.95 (d, <i>J</i> = 8.8 Hz, 2H), 7.63 (d, <i>J</i> = 8.3 Hz, 2H), 7.50 - 7.40 (m, 2H), 7.35 (dd, <i>J</i> = 7.5, 1.7 Hz, 1H), 7.17 (d, <i>J</i> = 7.8 Hz, 1H), 7.10 (td, <i>J</i> = 7.4, 1.0 Hz, 1H), 3.78 (s, 3H).	¹³ C NMR (101 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 164.39, 162.65, 161.87, 160.14, 156.51, 147.04, 143.68, 140.42, 135.70, 131.44, 130.91, 130.75, 130.04, 129.49, 126.56, 125.94, 125.77, 125.41, 123.52, 122.55, 121.03, 120.51, 120.31, 115.67, 115.44, 111.38, 55.52; ¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -56.97, -109.17.

10

20

30

【表 6 - 2 3】

F45	185-194	IR (薄膜) 3299, 3062, 2247, 1654, 1594, 1513 cm ⁻¹	HRMS-FAB (<i>m/z</i>) C ₂₉ H ₁₉ F ₅ N ₄ O ₂ の計 算値, 550.1428; 実測値, 550.1431.	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.56 (s, 1H), 8.24 - 8.19 (m, 2H), 8.10 (t, <i>J</i> = 1.7 Hz, 1H), 8.03 (s, 1H), 7.87 - 7.76 (m, 6H), 7.66 - 7.61 (m, 2H), 7.57 (t, <i>J</i> = 7.8 Hz, 1H), 7.51 - 7.45 (m, 2H), 7.43 - 7.37 (m, 3H).	¹³ C NMR (101 MHz, CDCl ₃) δ 165.68, 163.07, 147.51, 142.05, 141.50, 140.03, 139.29, 135.73, 135.44, 130.67, 129.31, 128.97, 127.93, 127.50, 127.22, 126.54, 125.93, 125.68, 123.07, 121.15, 120.04; ¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -85.89, -87.83.
F46		IR (薄膜) 2950, 1673, 1596, 1515 cm ⁻¹	HRMS-FAB (<i>m/z</i>) C ₃₀ H ₂₃ F ₃ N ₄ OS の 計算値, 544.1545; 実測値, 544.1557.	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 9.15 (s, 1H), 8.68 (s, 1H), 8.24 (s, 2H), 8.02 - 7.85 (m, 3H), 7.80 (d, <i>J</i> = 9.0 Hz, 2H), 7.69 (s, 1H), 7.52 (s, 1H), 7.44 - 7.30 (m, 2H), 7.22 - 7.08 (m, 3H), 6.95 (dd, <i>J</i> = 8.8, 3.2 Hz, 1H), 2.06 (d, <i>J</i> = 10.4 Hz, 6H).	¹³ C NMR (101 MHz, CDCl ₃) δ 148.54, 141.76, 140.51, 140.31, 135.95, 135.38, 132.74, 132.61, 132.21, 128.93, 127.51, 127.48, 127.39, 125.36, 123.49, 122.42, 121.28, 113.79, 113.63, 55.39; ¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -58.01.

【表 6 - 2 4】

F47	207-212	IR (薄膜) 3345, 3095, 1688, 1613, 1586, 1514 cm ⁻¹	HRMS-FAB (<i>m/z</i>) C ₂₈ H ₁₈ F ₅ N ₅ O ₂ の計 算値, 551.1381; 実測値, 551.1379.	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 10.70 (s, 1H), 9.42 (s, 1H), 8.42 - 8.35 (m, 2H), 8.27 (dd, <i>J</i> = 7.3, 1.7 Hz, 1H), 8.21 - 8.06 (m, 8H), 7.67 - 7.49 (m, 5H).	¹³ C NMR (101 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 162.74, 161.88, 155.29, 149.72, 146.09, 143.75, 139.46, 139.15, 137.44, 135.86, 129.67, 128.82, 127.28, 126.61, 125.82, 123.37, 123.15, 121.10, 120.73; ¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -85.21, -86.92.
F48	186-196	IR (薄膜) 3332, 3118, 1674, 1610, 1554, 1535, 1515 cm ⁻¹	HRMS-FAB (<i>m/z</i>) C ₂₈ H ₁₈ F ₄ N ₄ O ₂ の計 算値, 518.1366; 実測値, 518.1365.	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.67 - 8.56 (m, 2H), 8.42 (dd, <i>J</i> = 7.6, 2.5 Hz, 1H), 8.22 (d, <i>J</i> = 8.7 Hz, 2H), 7.82 (t, <i>J</i> = 8.9 Hz, 4H), 7.74 (ddt, <i>J</i> = 7.5, 4.8, 2.5 Hz, 1H), 7.64 - 7.57 (m, 2H), 7.47 (t, <i>J</i> = 7.5 Hz, 2H), 7.42 - 7.35 (m, 3H), 7.31 - 7.23 (m, 1H).	¹³ C NMR (101 MHz, CDCl ₃) δ 162.98, 161.21, 161.17, 161.09, 158.64, 148.37, 141.53, 139.07, 138.97, 138.51, 135.55, 132.35, 132.26, 130.74, 128.98, 127.89, 127.48, 127.05, 126.70, 122.40, 121.19, 120.40, 116.78, 116.53; ¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -58.01, -116.01.

10

20

30

【表 6 - 2 5】

F49	140-143	IR (薄膜) 3292, 3116, 2956, 2835, 2247, 1655, 1605, 1514 cm^{-1}	HRMS-FAB (m/z) $\text{C}_{30}\text{H}_{23}\text{F}_3\text{N}_4\text{O}_3$ の計 算値, 544.1722; 実測値, 544.1750.	^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 8.55 (s, 1H), 8.20 (d, J = 8.8 Hz, 2H), 8.00 (s, 1H), 7.87 - 7.76 (m, 6H), 7.56 - 7.47 (m, 2H), 7.42 - 7.35 (m, 2H), 7.18 (d, J = 8.3 Hz, 1H), 6.86 - 6.79 (m, 2H), 3.85 (s, 3H), 2.27 (s, 3H).	^{13}C NMR (101 MHz, CDCl_3) δ 165.69, 163.04, 159.14, 148.35, 142.42, 141.48, 139.31, 136.75, 135.56, 134.75, 133.32, 133.02, 130.79, 128.63, 127.93, 127.47, 126.48, 125.25, 122.39, 121.67, 121.17, 119.97, 115.88, 111.30, 55.29, 20.75.
F50	147 -152	IR (薄膜) 3302, 1642, 1538, 1515, 1247, 1206, 1162, 1024 cm^{-1}	HRMS-FAB (m/z) $\text{C}_{31}\text{H}_{25}\text{F}_3\text{N}_4\text{O}_3$ の計 算値, 558.1879; 実測値, 558.1883.	^1H NMR (400 MHz, $\text{DMSO}-d_6$) δ 9.39 (s, 1H), 8.63 (t, J = 5.6 Hz, 1H), 8.10 - 8.01 (m, 4H), 7.91 (t, J = 1.6 Hz, 1H), 7.78 (dt, J = 7.7, 1.4 Hz, 1H), 7.65 - 7.59 (m, 3H), 7.49 (t, J = 7.7 Hz, 1H), 7.44 - 7.30 (m, 4H), 7.16 - 7.11 (m, 1H), 7.05 (td, J = 7.4, 1.0 Hz, 1H), 3.77 (s, 3H), 3.56 (q, J = 6.9 Hz, 2H), 2.94 (t, J = 7.2 Hz, 2H).	^{13}C NMR (101 MHz, $\text{DMSO}-d_6$) δ 166.18, 162.08, 156.05, 147.05, 143.69, 141.34, 138.13, 135.68, 134.47, 131.91, 130.42, 129.21, 129.15, 128.11, 127.89, 126.10, 125.63, 122.55, 121.28, 121.05, 120.74, 118.73, 111.69, 55.48, 40.61, 34.91; ^{19}F NMR (376 MHz, $\text{DMSO}-d_6$) δ -56.98.

【表 6 - 2 6】

F51	184 - 187	IR (薄膜) 3303, 1626, 1607, 1541, 1517, 1279, 1255, 1209, 1165 cm ⁻¹	ESIMS <i>m/z</i> 547 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.55 (s, 1H), 8.17 - 8.12 (m, 2H), 7.85 - 7.76 (m, 3H), 7.64 (ddd, <i>J</i> = 8.5, 4.6, 2.4 Hz, 1H), 7.53 (dt, <i>J</i> = 8.1, 1.4 Hz, 2H), 7.46 - 7.41 (m, 2H), 7.40 - 7.33 (m, 5H), 7.17 (dd, <i>J</i> = 10.1, 8.5 Hz, 1H), 6.21 (t, <i>J</i> = 5.6 Hz, 1H), 3.76 (q, <i>J</i> = 6.8 Hz, 2H), 3.01 (t, <i>J</i> = 6.8 Hz, 2H).	¹³ C NMR (101 MHz, CDCl ₃) δ 166.50, 163.26, 162.84, 160.32, 148.37, 141.51, 140.63, 135.53, 134.77, 131.07, 131.03, 129.98, 129.94, 129.44, 129.30, 129.22, 128.98, 128.95, 128.85, 128.56, 128.12, 127.67, 127.58, 126.95, 122.40, 121.67, 121.17, 119.10, 116.54, 116.31, 41.11, 35.59; ¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -58.02, -113.22.
-----	--------------	--	--	--	--

10

20

【 0 4 7 3 】

【表 6 - 2 7】

F52	142 - 146	IR (薄層) 3313, 1641, 1538, 1516, 1247, 1207, 1162 cm^{-1}	HRMS-FAB (m/z) $\text{C}_{32}\text{H}_{28}\text{F}_3\text{N}_5\text{O}_2$ の計算値, 571.2195; 実測値, 571.2222.	^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 8.55 (s, 1H), 8.14 (d, $J = 8.2$ Hz, 2H), 7.92 (t, $J = 1.6$ Hz, 1H), 7.79 (d, $J = 9.0$ Hz, 2H), 7.72 (d, $J = 7.7$ Hz, 1H), 7.64 (d, $J = 7.8$ Hz, 1H), 7.44 (d, $J = 7.7$ Hz, 1H), 7.42 - 7.33 (m, 4H), 7.30 - 7.23 (m, 1H), 7.20 (dd, $J = 7.5, 1.6$ Hz, 1H), 7.05 - 6.98 (m, 2H), 6.24 (t, $J = 5.7$ Hz, 1H), 3.78 (q, $J = 6.7$ Hz, 2H), 3.01 (t, $J = 6.9$ Hz, 2H), 2.51 (s, 6H).	^{13}C NMR (101 MHz, CDCl_3) δ 167.67, 163.30, 151.22, 148.37, 142.35, 141.49, 140.76, 135.56, 134.70, 133.04, 131.79, 131.59, 129.21, 128.77, 128.63, 128.49, 126.92, 125.07, 122.39, 121.66, 121.16, 117.73, 43.44, 41.04, 35.67; ^{19}F NMR (376 MHz, CDCl_3) δ -58.02.
-----	-----------	---	--	---	---

10

20

30

【 0 4 7 4 】

【表 6 - 2 8】

F53	91 - 111	IR (薄膜) 3317, 1643, 1592, 1540, 1516, 1261, 1208 cm ⁻¹	HRMS-FAB (<i>m/z</i>) C ₃₁ H ₄₂ F ₄ N ₄ O ₂ の計 算値, 560.1835; 実測値, 560.1841.	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.57 (s, 1H), 8.16 - 8.11 (m, 2H), 7.83 - 7.77 (m, 2H), 7.44 - 7.32 (m, 6H), 7.29 - 7.20 (m, 3H), 7.20 - 7.13 (m, 2H), 6.20 (t, <i>J</i> = 5.6 Hz, 1H), 3.76 (q, <i>J</i> = 6.8 Hz, 2H), 3.01 (t, <i>J</i> = 6.9 Hz, 2H), 2.24 (s, 3H).	¹³ C NMR (101 MHz, CDCl ₃) δ 166.28, 163.64, 163.20, 161.18, 148.40, 144.64, 144.56, 141.53, 140.50, 139.68, 139.66, 136.58, 136.51, 135.53, 135.14, 130.55, 129.51, 129.18, 128.83, 128.09, 126.97, 125.99, 123.25, 123.22, 122.40, 121.19, 119.34, 119.13, 112.73, 112.50, 20.33; ¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -58.02, -112.20.
F54			ESIMS <i>m/z</i> 577 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.56 (s, 1H), 8.18 - 8.11 (m, 2H), 7.80 (d, <i>J</i> = 9.1 Hz, 2H), 7.75 - 7.65 (m, 2H), 7.42 - 7.32 (m, 5H), 7.25 (d, <i>J</i> = 6.8 Hz, 1H), 7.18 - 7.10 (m, 1H), 7.06 - 6.95 (m, 2H), 6.16 (t, <i>J</i> = 5.7 Hz, 1H), 3.81 - 3.71 (m, 5H), 3.00 (t, <i>J</i> = 6.9 Hz, 2H).	¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -58.02, -109.14.

【表 6 - 2 9】

F55	157 - 162	IR (薄膜) 3301, 1628, 1517, 1253, 1207, 1165 cm ⁻¹	HRMS-FAB (<i>m/z</i>) C ₃₀ H ₂₁ F ₅ N ₄ O ₂ の計 算値, 564.1585; 実測値, 564.1586.	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 9.39 (s, 1H), 8.71 (t, <i>J</i> = 5.5 Hz, 1H), 8.10 - 8.01 (m, 4H), 8.00 - 7.92 (m, 2H), 7.62 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 2H), 7.53 (tdd, <i>J</i> = 7.6, 3.2, 1.4 Hz, 2H), 7.48 - 7.33 (m, 5H), 3.56 (q, <i>J</i> = 6.6 Hz, 2H), 2.93 (t, <i>J</i> = 7.3 Hz, 2H).	¹³ C NMR (101 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 164.78, 162.06, 161.91, 160.31, 159.41, 157.85, 147.05, 143.69, 141.23, 135.67, 131.63, 131.60, 131.14, 131.11, 130.81, 130.72, 130.67, 129.74, 129.65, 129.18, 128.15, 126.12, 124.81, 124.78, 122.65, 122.54, 122.49, 122.28, 122.13, 121.28, 118.73, 115.88, 115.79, 115.65, 115.57, 40.69, 34.88; ¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -56.99, -111.42, -111.47, -114.90, -114.96.
F56	151 - 156	IR (薄膜) 2942, 2890, 2866, 1463, 1380, 1037, 1027 cm ⁻¹	HRMS-FAB (<i>m/z</i>) C ₃₁ H ₂₅ F ₃ N ₄ O ₃ の計 算値, 558.1879; 実測値, 558.1883.	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.55 (s, 1H), 8.17 - 8.11 (m, 2H), 7.83 - 7.76 (m, 2H), 7.74 - 7.65 (m, 2H), 7.50 (dd, <i>J</i> = 8.3, 1.3 Hz, 2H), 7.44 - 7.29 (m, 7H), 6.97 (d, <i>J</i> = 8.6 Hz, 1H), 6.17 (t, <i>J</i> = 5.7 Hz, 1H), 3.84 (s, 3H), 3.75 (q, <i>J</i> = 6.8 Hz, 2H), 3.00 (t, <i>J</i> = 6.9 Hz, 2H).	¹³ C NMR (101 MHz, CDCl ₃) δ 167.02, 163.32, 158.99, 148.35, 141.49, 140.84, 137.56, 135.56, 129.61, 129.47, 129.24, 128.74, 128.08, 127.76, 127.32, 126.96, 126.91, 122.39, 121.67, 121.17, 119.10, 110.83, 55.74, 41.03, 35.72; ¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -58.02.

【表 6 - 3 0】

F57	180 - 183		ESIMS m/z 515 ($[M+H]^+$)	^1H NMR (300 MHz, DMSO- d_6) δ 9.39 (s, 1H), 9.25 (t, $J = 6.0$ Hz, 1H), 8.22 (t, $J = 1.7$ Hz, 1H), 8.14 - 7.98 (m, 4H), 7.96 - 7.81 (m, 2H), 7.80 - 7.70 (m, 2H), 7.66 - 7.45 (m, 6H), 7.45 - 7.34 (m, 1H), 4.60 (d, $J = 5.9$ Hz, 2H).	
F58	202 - 210		HRMS-FAB (m/z) C ₂₉ H ₂₀ F ₄ N ₄ O の計算値, 516.1573; 実測値, 516.1572.	^1H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.65 (s, 1H), 8.24 - 8.18 (m, 2H), 8.00 (s, 1H), 7.91 (d, $J = 8.4$ Hz, 2H), 7.82 - 7.75 (m, 4H), 7.63 - 7.57 (m, 2H), 7.33 - 7.20 (m, 5H), 2.29 (s, 3H).	^{19}F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -62.48, -111.52.
F59	217 - 222		HRMS-FAB (m/z) C ₂₈ H ₁₇ F ₅ N ₄ O の計算値, 520.1323; 実測値, 520.1327.	^1H NMR (400 MHz, DMSO- d_6) δ 10.51 (s, 1H), 9.53 (s, 1H), 8.20 (d, $J = 8.4$ Hz, 2H), 8.17 - 8.09 (m, 4H), 8.02 - 7.92 (m, 4H), 7.65 - 7.50 (m, 3H), 7.45 - 7.35 (m, 2H).	^{19}F NMR (376 MHz, DMSO- d_6) δ -60.80, -110.30, -114.84.

【表 6 - 3 1】

F60	183 - 187		HRMS-FAB (m/z) $C_{29}H_{21}F_3N_4O_2$ の 計算値, 514.1617; 実測値, 514.1613.	^1H NMR (400 MHz, DMSO- d_6) δ 10.49 (s, 1H), 9.53 (s, 1H), 8.20 (d, J = 8.4 Hz, 2H), 8.17 - 8.10 (m, 2H), 8.08 (t, J = 1.5 Hz, 1H), 8.03 - 7.91 (m, 5H), 7.72 (dt, J = 7.7, 1.3 Hz, 1H), 7.59 (t, J = 7.7 Hz, 1H), 7.45 - 7.36 (m, 2H), 7.19 - 7.14 (m, 1H), 7.09 (td, J = 7.5, 1.0 Hz, 1H), 3.80 (s, 3H).	^{19}F NMR (376 MHz, DMSO- d_6) δ -60.79.
F61	203 - 206		HRMS-FAB (m/z) $C_{29}H_{21}F_3N_4O_2$ の計 算値, 514.1617; 実測値 514.1628.	^1H NMR (400 MHz, DMSO- d_6) δ 10.36 (s, 1H), 9.52 (s, 1H), 8.20 (d, J = 8.4 Hz, 2H), 8.14 - 8.10 (m, 2H), 8.05 (dd, J = 8.6, 2.4 Hz, 1H), 8.02 - 7.95 (m, 5H), 7.57 (dd, J = 8.3, 1.3 Hz, 2H), 7.47 (td, J = 6.8, 6.4, 1.6 Hz, 2H), 7.41 - 7.35 (m, 1H), 7.28 (d, J = 8.8 Hz, 1H), 3.87 (s, 3H).	^{19}F NMR (376 MHz, DMSO- d_6) δ -60.80.

【表 6 - 3 2】

F62	212 - 215		HRMS-FAB (<i>m/z</i>) $C_{28}H_{18}F_4N_4O$ の 計算値, 502.1417; 実測値, 502.1417.	^1H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 10.53 (s, 1H), 9.53 (s, 1H), 8.22 - 8.17 (m, 3H), 8.15 - 8.11 (m, 2H), 8.05 (ddd, <i>J</i> = 8.5, 4.8, 2.4 Hz, 1H), 7.98 (t, <i>J</i> = 8.5 Hz, 4H), 7.70 - 7.65 (m, 2H), 7.58 - 7.45 (m, 4H).	^{19}F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -60.79, -113.89.
F64			HRMS-FAB (<i>m/z</i>) $C_{31}H_{24}F_4N_4O_3$ の計 算値, 576.1785; 実測値, 576.1784.	^1H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.58 (s, 1H), 8.15 - 8.08 (m, 2H), 7.82 - 7.76 (m, 2H), 7.42 - 7.26 (m, 5H), 7.20 - 7.13 (m, 2H), 6.95 - 6.87 (m, 4H), 4.03 (q, <i>J</i> = 7.1 Hz, 2H), 3.69 (s, 3H), 1.26 (t, <i>J</i> = 7.1, 1.5 Hz, 3H).	^{19}F NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ -58.02, -110.78.

10

20

30

【表 6 - 3 3】

F65			HRMS-FAB (<i>m/z</i>) C ₃₂ H ₂₆ F ₄ N ₄ O ₃ の計算値, 590.1941; 実測値, 590.1947.	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.58 (s, 1H), 8.13 - 8.07 (m, 2H), 7.82 - 7.76 (m, 2H), 7.42 - 7.25 (m, 5H), 7.19 - 7.13 (m, 2H), 6.94 - 6.85 (m, 4H), 3.98 - 3.88 (m, 2H), 3.68 (s, 3H), 1.74 - 1.64 (m, 2H), 0.96 (t, <i>J</i> = 7.4 Hz, 3H).	¹⁹ F NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ -58.03, -110.85.
F66			HRMS-FAB (<i>m/z</i>) C ₃₃ H ₂₆ F ₄ N ₄ O ₃ の計算値, 602.1941; 実測値, 602.1941.	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.57 (s, 1H), 8.11 (d, <i>J</i> = 8.6 Hz, 2H), 7.82 - 7.76 (m, 2H), 7.42 - 7.26 (m, 5H), 7.22 (d, <i>J</i> = 8.6 Hz, 2H), 6.94 - 6.85 (m, 4H), 3.90 - 3.79 (m, 2H), 3.69 (s, 3H), 1.19 - 1.08 (m, 1H), 0.50 - 0.41 (m, 2H), 0.20 (d, <i>J</i> = 5.0 Hz, 2H).	¹⁹ F NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ -58.02, -110.87.

【表 6 - 3 4】

F67			HRMS-FAB (<i>m/z</i>) C ₃₁ H ₂₂ F ₄ N ₄ O ₄ の計算値, 590.1577; 実測値, 590.1578.	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) (~9:1 mixture of <i>N</i> -Acetyl and <i>O</i> -acetyl) δ 8.58 (s, 1H), 8.23 - 8.17 (m, 2H), 7.81 - 7.76 (m, 2H), 7.72 - 7.63 (m, 2H), 7.42 - 7.33 (m, 3H), 7.30 - 7.25 (m, 2H), 7.09 - 7.02 (m, 2H), 7.01 - 6.94 (m, 2H), 3.74 (s, 3H), 2.47 (s, 3H).	¹⁹ F NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ -58.02, -106.07.
F68	179 - 182		HRMS-FAB (<i>m/z</i>) C ₂₁ H ₁₄ F ₃ N ₅ O の計算値, 409.1150; 実測値, 409.1154.	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 10.84 (s, 1H), 9.53 (s, 1H), 8.78 (ddd, <i>J</i> = 4.8, 1.6, 0.9 Hz, 1H), 8.20 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 3H), 8.16 - 8.06 (m, 5H), 7.99 (d, <i>J</i> = 8.6 Hz, 2H), 7.71 (ddd, <i>J</i> = 7.6, 4.8, 1.3 Hz, 1H).	¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -60.80.

【 0 4 8 1 】

【表 7】

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

【0482】

【表8】

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

10

【0483】

【表 9 - 1】

表ABC：生物学的結果

番号	昆虫種			
	BAW	CL	GPA	YFM
F1	D	A	C	D
F2	B	D	C	D
F3	D	D	C	D
F4	A	A	C	B
F5	A	A	C	B
F6	D	D	C	D
F7	A	A	C	D
F8	A	A	B	B
F9	A	A	C	A
F10	A	A	C	B
F11	A	A	C	D
F12	A	A	B	A
F13	D	A	C	D
F14	A	A	B	D
F15	D	D	C	D
F16	D	A	C	B
F17	A	A	C	D
F18	D	D	C	D
F19	A	A	C	A
F20	A	A	C	A
F21	A	A	C	A
F22	A	A	C	A
F23	A	A	C	A
F24	A	A	B	D
RF25	A	A	C	D
F26	A	A	C	A
F27	B	D	C	D
F28	A	A	C	A
F29	A	D	C	D
F30	A	A	C	D
F31	A	A	C	D
F32	D	A	C	D
F33	D	A	C	D
F34	A	A	C	D
F35	A	A	C	D
F36	D	A	C	D
F37	A	A	C	A
F38	A	A	B	A
F39	A	A	C	D

【表 9 - 2】

F40	D	A	C	D
F41	A	A	C	A
F42	D	A	C	D
F43	A	A	C	D
F44	A	A	C	B
F45	A	A	C	D
F46	B	D	C	D
F47	D	D	C	D
F48	D	A	C	D
F49	A	A	C	B
F50	A	A	C	D
F51	A	D	C	D
F52	A	A	C	A
F53	A	A	C	A
F54	A	A	C	C
F55	A	A	B	D
F56	A	A	C	A
F57	D	A	C	D
F58	A	A	C	D
F59	A	A	D	A
F60	A	A	B	A
F61	A	A	C	A
F62	A	A	C	B
F64	A	A	C	D
F65	A	A	C	D
F66	A	A	C	D
F67	A	A	C	A
F68	B	D	C	D

10

20

30

フロントページの続き

- (72)発明者 スパークス, トーマス・シー
アメリカ合衆国インディアナ州46268インディアナポリス・ザイオンズビルロード9330
- (72)発明者 フイツシャー, リンジー・ジー
アメリカ合衆国インディアナ州46268インディアナポリス・ザイオンズビルロード9330
- (72)発明者 ゴールドスミス, ミリアム・イー
アメリカ合衆国インディアナ州46268インディアナポリス・ザイオンズビルロード9330

審査官 早乙女 智美

- (56)参考文献 国際公開第2014/004064 (WO, A1)
特表2017-527534 (JP, A)
国際公開第2013/009791 (WO, A1)
特表2009-539791 (JP, A)
特表2013-501720 (JP, A)
国際公開第2009/072621 (WO, A1)
特開平08-092224 (JP, A)

(58)調査した分野(Int.Cl., DB名)

C07D
A01N
A61K
Caplus/REGISTRY/MARPAT (STN)