



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2022년06월29일
(11) 등록번호 10-2414529
(24) 등록일자 2022년06월24일

- (51) 국제특허분류(Int. Cl.)
A01N 43/54 (2006.01) A01N 43/40 (2006.01)
C07D 213/73 (2006.01) C07D 213/79 (2006.01)
C07D 239/42 (2006.01) C07D 239/47 (2006.01)
- (52) CPC특허분류
A01N 43/54 (2013.01)
A01N 43/40 (2013.01)
- (21) 출원번호 10-2021-7020172(분할)
(22) 출원일자(국제) 2014년03월12일
심사청구일자 2021년06월29일
(85) 번역문제출일자 2021년06월28일
(65) 공개번호 10-2021-0083396
(43) 공개일자 2021년07월06일
(62) 원출원 특허 10-2015-7028565
원출원일자(국제) 2014년03월12일
심사청구일자 2019년03월04일
(86) 국제출원번호 PCT/US2014/024388
(87) 국제공개번호 WO 2014/150850
국제공개일자 2014년09월25일
(30) 우선권주장
13/840,233 2013년03월15일 미국(US)
(56) 선행기술조사문헌
W02009029735 A1*
(뒷면에 계속)
- 전체 청구항 수 : 총 17 항
- (73) 특허권자
코르테바 애그리사이언스 엘엘씨
미국 인디애나주 46268-1054 인디애나폴리스 자이언스빌 로드 9330
- (72) 발명자
에켈바르거 조셉 디
미국 46074 인디애나주 카르멜 윈디 크놀 레인 3038
에프 제프리 비
미국 46062 인디애나주 노블스빌 킨더 오크 드라이브 17947
(뒷면에 계속)
- (74) 대리인
양영준, 임진희
- 심사관 : 윤미란

(54) 발명의 명칭 4-아미노-6-(4-치환된-페닐)-피콜리네이트 및 6-아미노-2-(4-치환된-페닐)-피리미딘-4-카르복실레이트 및 제조제로서의 그의 용도

(57) 요약

4-아미노-6-(4-치환된-페닐)-피콜린산 및 그의 유도체, 및 6-아미노-2-(4-치환된-페닐)-피리미딘-4-카르복실산 및 그의 유도체, 산 및 그의 유도체를 포함하는 조성물, 및 제조제로서의 그의 사용 방법이 본원에 제공된다.

(52) CPC특허분류

C07D 213/73 (2013.01)

C07D 213/79 (2013.01)

C07D 239/42 (2013.01)

C07D 239/47 (2013.01)

(72) 발명자

피셔 린제이 지

미국 46217 인디애나주 인디애나폴리스 스퍼 포인
트 드라이브 2239 아파트먼트 에이치

기암피에트로 나탈리 시

미국 46074 인디애나주 카르멜 더넬렌 서클 3738

어빈 니콜라스 엠

미국 46074 인디애나주 웨스트필드 웨스트 컬럼바
인 레인 327

키스터 제러미

미국 46074 인디애나주 카르멜 어텀 우즈 드라이브
14125

로 윌리엄 시

미국 46037 인디애나주 피셔즈 웨더드 에지 드라이
브 12027

로워 크리스천 티

미국 46074 인디애나주 웨스트필드 엘노라 레인
466

페트쿠스 제프리

미국 46236 인디애나주 인디애나폴리스 가이스트
코브 드라이브 12552

로트 조슈아

미국 46074 인디애나주 카르멜 헤더 크놀 파크웨이
14390

사치비 노버트 엠

미국 46074 인디애나주 카르멜 체립 코트 3100

슈미처 폴 알

미국 46250 인디애나주 인디애나폴리스 노쓰 휘티
어 플레이스 7960

시달 토마스 엘

미국 46077 인디애나주 자이언즈빌 사우쓰 900 이
스트 1925

여키즈 카를라 엔

미국 47933 인디애나주 크로퍼즈빌 사우쓰 스테이
트 로드 47 4571

(56) 선행기술조사문헌

W02009046090 A1*

W02013003740 A1*

W02010092339 A1

W02007082098 A2

*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

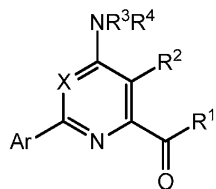
명세서

청구범위

청구항 1

화학식 I의 화합물 또는 그의 N-옥시드 또는 농업상 허용되는 염.

<화학식 I>



상기 식에서,

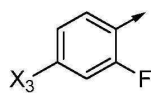
X는 N, CH, 또는 CF이고;

R¹은 OR¹'이고, 여기서 R¹'는 H, C₁-C₈ 알킬, 또는 C₇-C₁₀ 아릴알킬이고;

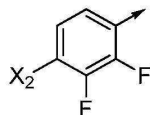
R²는 할로젠 또는 C₁-C₄ 알콕시이고;

R³ 및 R⁴는 각각 독립적으로 수소 또는 포르밀이고;

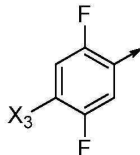
Ar은 Ar3, Ar4, Ar5, 또는 Ar6이고:



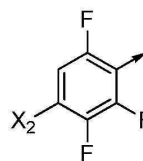
Ar3



Ar4



Ar5



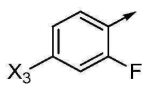
Ar6

여기서,

X₂는 H, F, Cl, Br, I, 에틸닐, CH₃, CFH₂, CF₂H, CF₃, OCF₂H, OCF₃, CN, CONH₂, CO₂H, 또는 NO₂이고;

X₃은 H, F, Br, I, 에틸닐, CH₃, CFH₂, CF₂H, CF₃, OCF₂H, OCF₃, CN, CONH₂, CO₂H, 또는 NO₂이고;

여기서

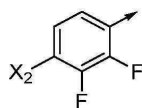
a) Ar이  인 경우에,

i) X가 N인 경우에 R²는 Cl이 아니고;

ii) R²가 OCH₃이고 X가 N인 경우에 X₃은 CH₃, Cl, 또는 에틸닐이 아니고;

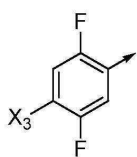
iii) R²가 Cl이고 X가 CH인 경우에 X₃은 H, F, 또는 CH₃이 아니고;

iv) R²가 OCH₃이고 X가 CF인 경우에 X₃은 Br 또는 I가 아니고;



b) Ar이 인 경우에,

- i) X가 N인 경우에 R^2 는 Cl이 아니고;
- ii) R^2 가 OCH_3 이고 X가 N인 경우에 X_2 는 Cl 또는 에틸닐이 아니고;
- iii) R^2 가 Cl이고 X가 CH인 경우에 X_2 는 F가 아니고;
- iv) X가 CF인 경우에 X_2 는 OCF_2H 가 아니고;
- v) R^2 가 OCH_3 이고 X가 CF인 경우에 X_2 는 Cl, Br, I, 또는 CF_3 이 아니고;



c) Ar이 인 경우에,

- i) R^2 가 Cl이고 X가 N인 경우에 X_3 은 CH_3 이 아니고;
- ii) X가 CF이고 R^2 가 OCH_3 인 경우에 X_3 은 Br 또는 I가 아니다.

청구항 2

제1항에 있어서, $R^{1'}$ 이 H 또는 C_1-C_8 알킬인 화합물.

청구항 3

제2항에 있어서, $R^{1'}$ 이 H 또는 메틸인 화합물.

청구항 4

제1항에 있어서, X가 N인 화합물.

청구항 5

제1항에 있어서, X가 CH 또는 CF인 화합물.

청구항 6

제1항에 있어서, R^2 가 Cl 또는 OCH_3 인 화합물.

청구항 7

제1항에 있어서, R^3 및 R^4 가 수소인 화합물.

청구항 8

제1항에 있어서, X_2 가 H, Cl, Br, I, 에틸닐, CH_3 , CF_2H , CF_3 , OCF_2H , 또는 CN인 화합물.

청구항 9

제1항에 있어서, X_3 가 H, Br, I, 에틸닐, OCF_2H , CN, 또는 NO_2 인 화합물.

청구항 10

제1항에 있어서, X_2 가 H, F, Br, I, CH_3 , CF_3 , 또는 CN인 화합물.

청구항 11

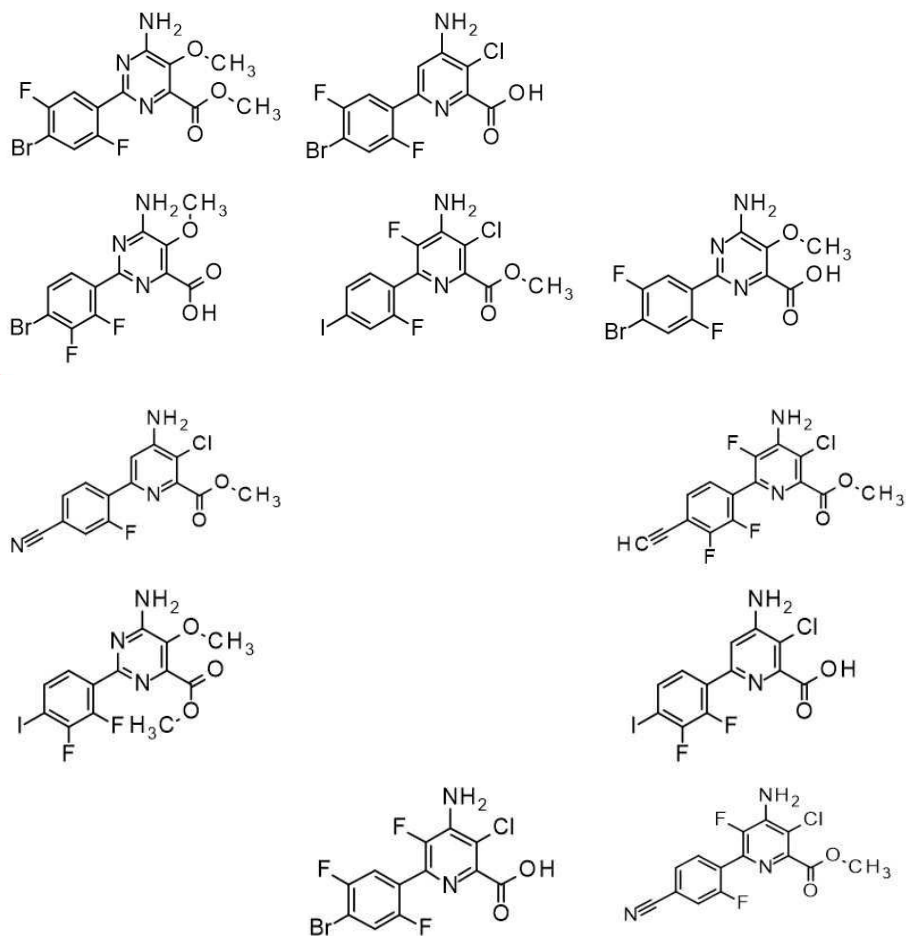
제1항에 있어서, X_3 가 H, F, Br, I, CH_3 , CF_2H , CF_3 , 또는 CN인 화합물.

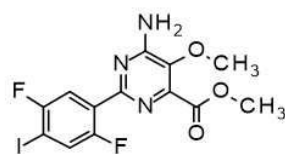
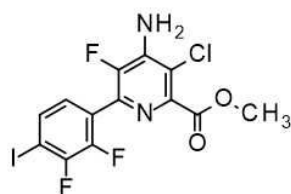
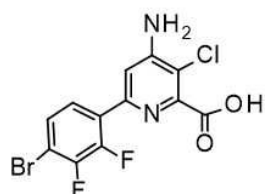
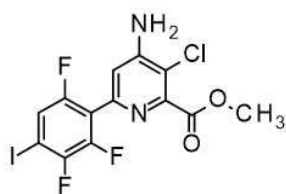
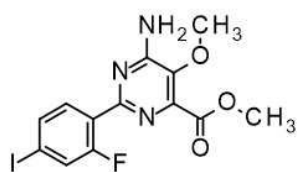
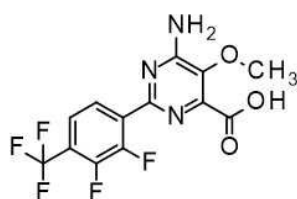
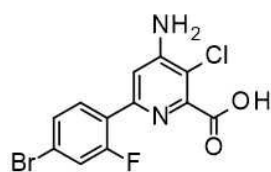
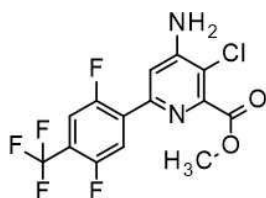
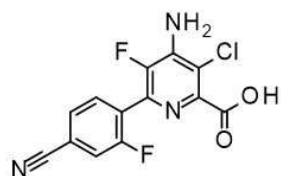
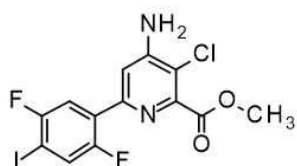
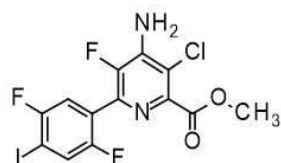
청구항 12

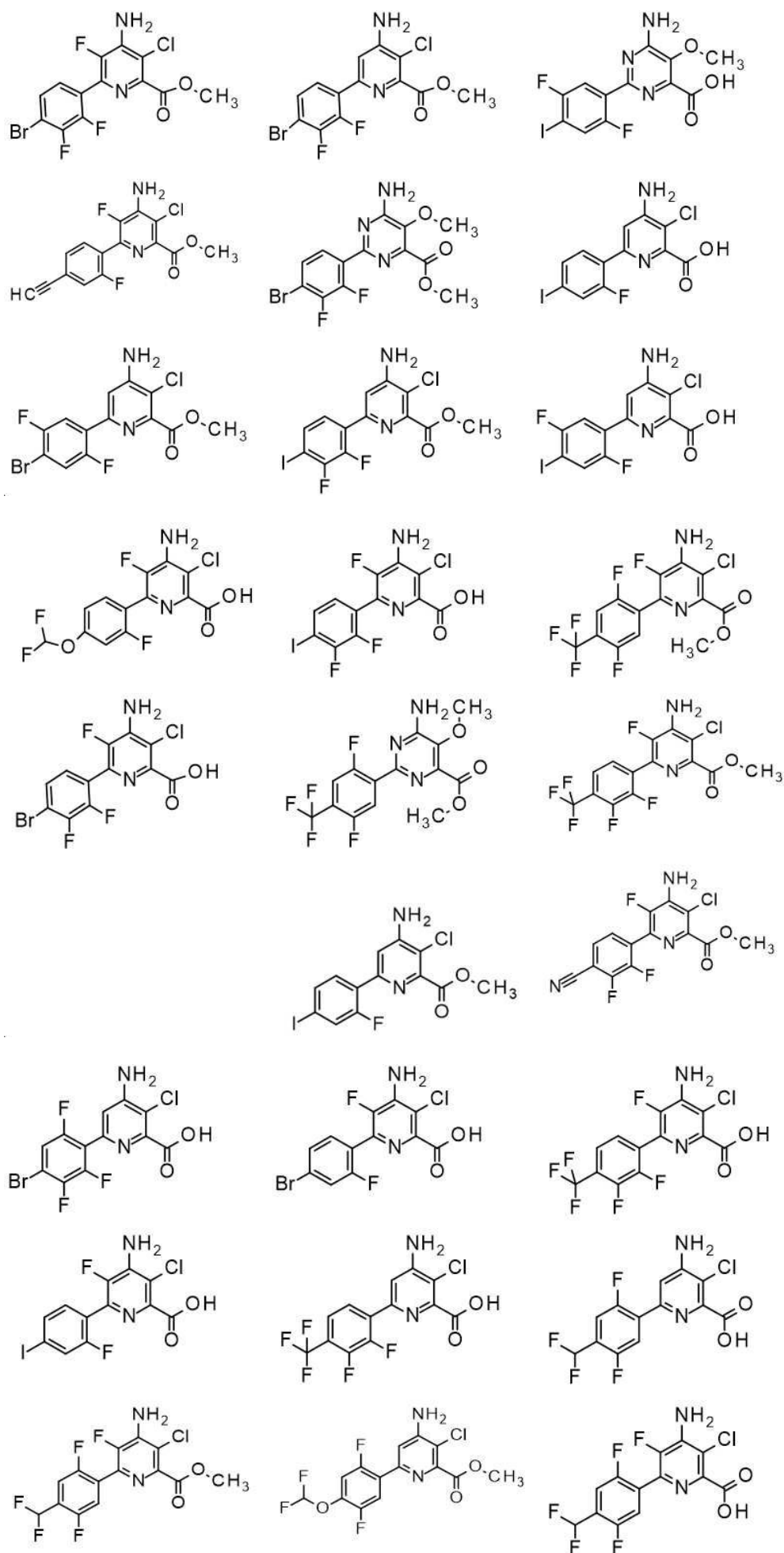
제1항에 있어서, X_2 가 Br 또는 I인 화합물.

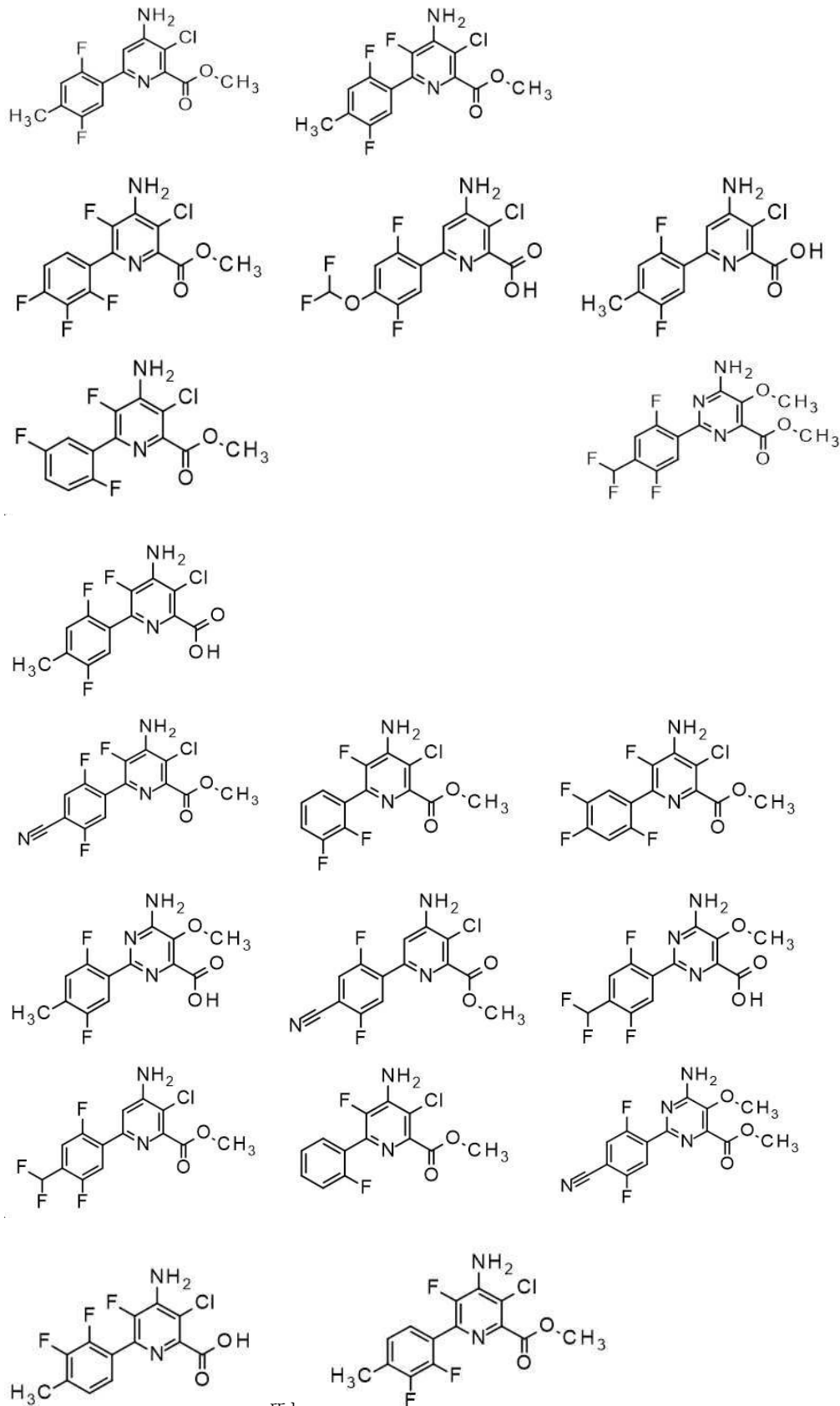
청구항 13

제1항에 있어서,









인 화합물 또는 그의 N-옥시드 또는 농업상 허용되는 염.

청구항 14

제1항의 화합물 또는 그의 N-옥시드 또는 농업상 허용되는 염, 및 농업상 허용되는 보조제 또는 담체를 포함하

는 제초 조성물.

청구항 15

제14항에 있어서, 하나의 추가의 제초 화합물을 추가로 포함하는 조성물.

청구항 16

제14항 또는 제15항에 있어서, 완화제를 추가로 포함하는 조성물.

청구항 17

제1항의 화합물 또는 제14항의 조성물을 적용하는 것을 포함하는, 바람직하지 않은 식생을 방제하는 방법.

청구항 18

삭제

청구항 19

삭제

발명의 설명

기술 분야

[0001] 관련 출원에 대한 상호 참조

[0002] 본원은 2013년 3월 15일 출원된 미국 특허 출원 번호 13/840,233의 우선권을 주장하며, 그의 전문이 본원에 참조로 포함된다.

배경 기술

[0003] 배경기술

[0004] 바람직하지 않은 식생, 예를 들어 잡초의 발생은 작물, 목초지 및 다른 환경에서 농부가 직면하는 지속적인 문제이다. 잡초는 작물과 경쟁하고, 작물 수확량에 부정적으로 영향을 끼친다. 화학적 제초제의 사용은 바람직하지 않은 식생을 방제하는데 중요한 도구이다.

발명의 내용

해결하려는 과제

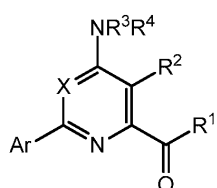
[0005] 보다 넓은 스펙트럼의 잡초 방제, 선택성, 최소 작물 손상, 저장 안정성, 취급의 용이성, 잡초에 대한 보다 높은 활성 및/또는 현재 사용되는 제초제에 대해 발달하는 제초제-내성을 해결하기 위한 수단에 대한 필요성이 남아있다.

과제의 해결 수단

[0006] 개요

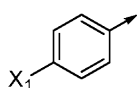
[0007] 하기 화학식 I의 화합물 또는 그의 N-옥시드 또는 농업상 허용되는 염이 본원에 제공된다.

[0008] <화학식 I>

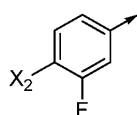


[0009]

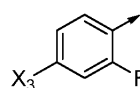
- [0010] 상기 식에서,
- [0011] X는 N 또는 CY이고, 여기서 Y는 수소, 할로젠, C₁-C₃ 알킬, C₁-C₃ 할로알킬, C₁-C₃ 알콕시, C₁-C₃ 할로알콕시, C₁-C₃ 알킬티오, 또는 C₁-C₃ 할로알킬티오이고;
- [0012] R¹은 OR^{1'}이고, 여기서 R^{1'}는 H, C₁-C₈ 알킬, 또는 C₇-C₁₀ 아릴알킬이고;
- [0013] R²는 할로젠, C₁-C₄ 알킬, C₁-C₄ 할로알킬, C₂-C₄ 알케닐, C₂-C₄ 할로알케닐, C₂-C₄ 알키닐, C₂-C₄ 할로알키닐, C₁-C₄ 알콕시, C₁-C₄ 할로알콕시, C₁-C₄ 알킬티오, C₁-C₄ 할로알킬티오, 아미노, C₁-C₄ 알킬아미노, C₂-C₄ 할로알킬아미노, 포르밀, (C₁-C₃ 알킬)카르보닐, (C₁-C₃ 할로알킬)카르보닐, 시아노, 또는 화학식 -CR¹⁷=CR¹⁸-SiR¹⁹R²⁰R²¹의 기이고, 여기서 R¹⁷은 수소, F, 또는 Cl이고; R¹⁸은 수소, F, Cl, C₁-C₄ 알킬, 또는 C₁-C₄ 할로알킬이고; R¹⁹, R²⁰, 및 R²¹은 각각 독립적으로 C₁-C₁₀ 알킬, C₃-C₆ 시클로알킬, C₁-C₁₀ 할로알킬, C₃-C₆ 할로시클로알킬, 페닐, 치환된 페닐, C₁-C₁₀ 알콕시, 또는 OH이고;
- [0014] R³ 및 R⁴는 각각 독립적으로 수소, C₁-C₆ 알킬, C₁-C₆ 할로알킬, C₃-C₆ 알케닐, C₃-C₆ 할로알케닐, C₃-C₆ 알키닐, 히드록시, C₁-C₆ 알콕시, C₁-C₆ 할로알콕시, 포르밀, (C₁-C₃ 알킬)카르보닐, (C₁-C₃ 할로알킬)카르보닐, (C₁-C₆ 알콕시)카르보닐, (C₁-C₆ 알킬)카르바밀, C₁-C₆ 알킬술포닐, 트리(C₁-C₆ 알킬)실릴, 디(C₁-C₆ 알킬)포스포닐이거나, 또는 R³ 및 R⁴는 이들이 부착되어 있는 질소 원자와 함께 5- 또는 6-원 포화 고리를 형성하거나, 또는 R³ 및 R⁴는 함께 =CR^{3'}R^{4'}을 나타내고, 여기서 R^{3'} 및 R^{4'}는 각각 독립적으로 수소, C₁-C₆ 알킬, C₃-C₆ 알케닐, C₃-C₆ 알키닐, C₁-C₆ 알콕시, 또는 C₁-C₆ 알킬아미노이거나, 또는 R^{3'} 및 R^{4'}는 이들이 부착되어 있는 탄소 원자와 함께 5- 또는 6-원 포화 고리를 형성하고;
- [0015] Ar은 Ar1, Ar2, Ar3, Ar4, Ar5, 또는 Ar6이고:



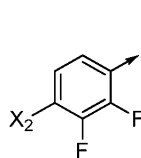
Ar1



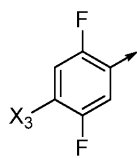
Ar2



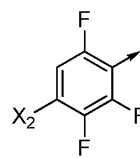
Ar3



Ar4



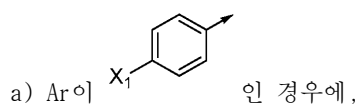
Ar5



Ar6

- [0016]
- [0017] 여기서
- [0018] X₁은 H, F, Br, I, 에틸닐, 할로에틸닐, CF₂H, OCF₂H, OCF₃, CN, CONH₂, CO₂H, CO₂CH₃, 또는 NO₂이고;
- [0019] X₂는 H, F, Cl, Br, I, 에틸닐, 할로에틸닐, CH₃, CFH₂, CF₂H, CF₃, OCF₂H, OCF₃, CN, CONH₂, CO₂H, 또는 NO₂이고;
- [0020] X₃은 H, F, Br, I, 에틸닐, 할로에틸닐, CH₃, CFH₂, CF₂H, CF₃, OCF₂H, OCF₃, CN, CONH₂, CO₂H, 또는 NO₂이고;
- [0021] 여기서

[0022]



[0023]

X는 N, CH, CF, CCl, 또는 CCH₃이고;

[0024]

단,

[0025]

i) X가 N인 경우에 R²는 Cl 또는 비닐이 아니고;

[0026]

ii) R²가 Cl이고 X가 CH인 경우에 X₁은 H, F, OCF₃, 또는 CN이 아니고;

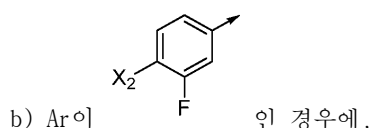
[0027]

iii) R²가 OCH₃이고 X가 CF인 경우에 X₁은 F, I, CN, 또는 에틸닐이 아니고;

[0028]

iv) X가 CCl인 경우에 X₁은 H가 아니고;

[0029]



[0030]

X는 N, CH, CF, CCl, 또는 CCH₃이고;

[0031]

단,

[0032]

i) X가 N인 경우에 R²는 Cl이 아니고;

[0033]

ii) R²가 OCH₃ 또는 비닐이고 X가 N인 경우에 X₂는 Cl이 아니고;

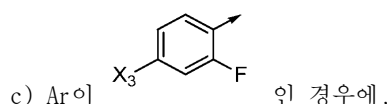
[0034]

iii) R²가 Cl이고 X가 CH인 경우에 X₂는 Cl이 아니고;

[0035]

iv) R²가 OCH₃이고 X가 CF인 경우에 X₂는 Cl, Br, I, 또는 CF₃이 아니고;

[0036]



[0037]

X는 N, CH, 또는 CF이고;

[0038]

단,

[0039]

i) X가 N인 경우에 R²는 Cl이 아니고;

[0040]

ii) R²가 OCH₃이고 X가 N인 경우에 X₃은 CH₃이 아니고;

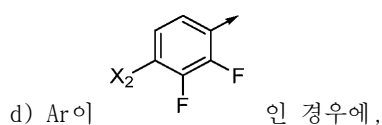
[0041]

iii) R²가 Cl이고 X가 CH인 경우에 X₃은 H, F, 또는 CH₃이 아니고;

[0042]

iv) R²가 OCH₃이고 X가 CF인 경우에 X₃은 Br 또는 I가 아니고;

[0043]



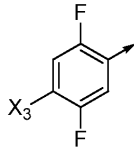
[0044]

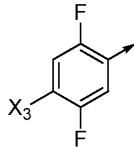
X는 N, CH, 또는 CF이고;

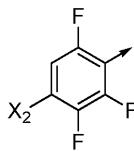
[0045]

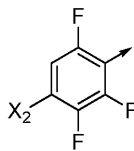
단,

- [0046] i) X가 N인 경우에 R^2 는 Cl이 아니고;
- [0047] ii) R^2 가 OCH_3 또는 비닐이고 X가 N인 경우에 X_2 는 Cl이 아니고;
- [0048] iii) R^2 가 Cl이고 X가 CH인 경우에 X_2 는 F가 아니고;
- [0049] iv) R^2 가 OCH_3 이고 X가 CF인 경우에 X_2 는 Cl, Br, I, 또는 CF_3 이 아니고;



- [0050] e) Ar이  인 경우에,
- [0051] X는 N, CH, 또는 CF이고;
- [0052] 단,
- [0053] i) R^2 가 Cl이고 X가 N인 경우에 X_3 은 CH_3 이 아니고;
- [0054] ii) X가 CF이고 R^2 가 OCH_3 인 경우에 X_3 은 Br 또는 I가 아니고;



- [0055] f) Ar이  인 경우에,
- [0056] X는 N, CH, 또는 CF이다.
- [0057] 또한, 제초 유효량의 적어도 하나의 화학식 I의 화합물 또는 그의 농업상 허용되는 유도체 (예를 들어, 농업상 허용되는 염, 용매화물, 수화물, 에스테르, 아마이드, N-옥시드, 또는 다른 유도체)를 (a) 바람직하지 않은 식생 또는 바람직하지 않은 식생과 인접한 지역에 접촉시키거나, 또는 (b) 출아전에 토양 또는 물에 접촉시키는 것을 포함하는, 바람직하지 않은 식생을 방제하는 방법이 제공된다.

발명의 효과

- [0058] 바람직하지 않은 식생을 방제하기 위한 것이다.

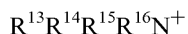
발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

- [0059] 본원에 사용된 제초제 및 제초 활성 성분은 적절한 양으로 적용시에 바람직하지 않은 식생을 방제하는 화합물을 의미한다.
- [0060] 본원에 사용된, 바람직하지 않은 식생의 방제 또는 바람직하지 않은 식생을 방제하는 것은 식생을 사멸시키거나 또는 방지하거나, 또는 식생에 일부 다른 불리한 변형 효과, 예를 들어 자연적 성장 또는 발생으로부터의 이탈, 조절, 탈수, 지체를 발생시키는 것을 의미한다.
- [0061] 본원에 사용된 제초 유효량 또는 식생 방제량은 적용시에 관련된 바람직하지 않은 식생을 방제하는 제초 활성 성분의 양이다.
- [0062] 본원에 사용된 제초제 또는 제초 조성물을 적용하는 것은 이를 표적 식생에 또는 그의 생육지에, 또는 바람직하지 않은 식생의 방제가 바람직한 지역에 직접적으로 전달하는 것을 의미한다. 적용의 방법은 출아전에 토양 또는 물에 접촉시키거나, 또는 출아후에 바람직하지 않은 식생 또는 바람직하지 않은 식생과 인접한 지역에 접촉시키는 것을 포함하지만, 이에 제한되는 것은 아니다.
- [0063] 본원에 사용된 식물 및 식생은 휴면 종자, 발아 종자, 출아 묘목, 영양 번식체로부터 발생한 식물, 미성숙

식생, 및 확립된 식생을 포함하지만, 이에 제한되는 것은 아니다.

[0064] 본원에 사용된 농업상 허용되는 염 및 에스테르는, 제조 활성을 나타내거나 또는 식물, 물 또는 토양에서 언급된 제조제로 전환되거나 또는 전환될 수 있는 염 및 에스테르를 지칭한다. 예시적인 농업상 허용되는 에스테르는, 예를 들어 식물, 물, 또는 토양에서, pH에 따라 해리 또는 비해리 형태일 수 있는 상응하는 카르복실산으로 가수분해, 산화, 대사, 또는 다르게는 전환되거나 또는 전환될 수 있는 것들이다.

[0065] 적합한 염은 알칼리 금속 또는 알칼리 토금속으로부터 유도된 것들 및 암모니아 및 아민으로부터 유도된 것들을 포함한다. 바람직한 양이온은 나트륨, 칼륨, 마그네슘, 및 하기 화학식의 아미늄 양이온을 포함한다:



[0066]

[0067] 상기 식에서, R^{13} , R^{14} , R^{15} 및 R^{16} 은 각각 독립적으로 수소 또는 C_1 - C_{12} 알킬, C_3 - C_{12} 알케닐 또는 C_3 - C_{12} 알키닐을 나타내며, 이들 각각은 1개 이상의 치환기, 예컨대 히드록시, C_1 - C_4 알콕시, C_1 - C_4 알킬티오 또는 페닐 기에 의해 임의로 치환되며, 단 R^{13} , R^{14} , R^{15} 및 R^{16} 은 입체적으로 상용성이다. 추가로, R^{13} , R^{14} , R^{15} 및 R^{16} 중 임의의 2개는 함께 1 내지 12개의 탄소 원자 및 2개 이하의 산소 또는 황 원자를 함유하는 지방족 이관능성 모이어티를 나타낼 수 있다. 화학식 I의 화합물의 염은 화학식 I의 화합물을 금속 수산화물, 예컨대 수산화나트륨으로, 아민, 예컨대 암모니아, 트리메틸아민, 디에탄올아민, 2-메틸티오프로필아민, 비스알틸아민, 2-부톡시에틸아민, 모르폴린, 시클로도데실아민, 또는 벤질아민으로, 또는 테트라알킬암모늄 히드록시드, 예컨대 테트라메틸암모늄 히드록시드 또는 콜린 히드록시드로 처리하여 제조될 수 있다. 화학식 I의 화합물의 아민 염은 그들이 수용성이고, 바람직한 수성계 제조 조성물의 제조에 적합하기 때문에 화학식 I의 화합물의 유용한 형태 또는 유도체이다.

[0068] 화학식 I의 화합물의 다른 형태 또는 유도체는 화학식 I의 화합물의 N-옥시드를 포함한다. 피리딘 N-옥시드는 상응하는 피리딘의 산화에 의해 수득될 수 있다. 적합한 산화 방법은, 예를 들어 문헌 [Houben-Weyl, Methoden der organischen Chemie [Methods in organic chemistry], expanded and subsequent volumes to the 4th edition, volume E 7b, p. 565 f]에 기재되어 있다.

[0069] 본원에 사용된 "아실"은 포르밀, (C_1 - C_3 알킬)카르보닐 및 (C_1 - C_3 할로알킬)카르보닐을 포함한다.

[0070] 본원에 사용된 "알킬"은 포화 직쇄형 또는 분지형 탄화수소 모이어티를 지칭한다. 달리 명시되지 않는 한, C_1 - C_{10} 알킬 기가 의도된다. 예는 메틸, 에틸, 프로필, 1-메틸-에틸, 부틸, 1-메틸-프로필, 2-메틸-프로필, 1,1-디메틸-에틸, 펜틸, 1-메틸-부틸, 2-메틸-부틸, 3-메틸-부틸, 2,2-디메틸-프로필, 1-에틸-프로필, 헥실, 1,1-디메틸-프로필, 1,2-디메틸-프로필, 1-메틸-펜틸, 2-메틸-펜틸, 3-메틸-펜틸, 4-메틸-펜틸, 1,1-디메틸-부틸, 1,2-디메틸-부틸, 1,3-디메틸-부틸, 2,2-디메틸-부틸, 2,3-디메틸-부틸, 3,3-디메틸-부틸, 1-에틸-부틸, 2-에틸-부틸, 1,1,2-트리메틸-프로필, 1,2,2-트리메틸-프로필, 1-에틸-1-메틸-프로필 및 1-에틸-2-메틸-프로필을 포함하지만, 이에 제한되는 것은 아니다.

[0071] 본원에 사용된 "할로알킬"은 직쇄형 또는 분지형 알킬 기를 지칭하며, 이들 기에서 수소 원자는 부분적으로 또는 전부 1개 이상의 할로젠 원자(들)로 치환될 수 있다. 달리 명시되지 않는 한, C_1 - C_8 기가 의도된다. 예는 클로로메틸, 브로모메틸, 디클로로메틸, 트리클로로메틸, 플루오로메틸, 디플루오로메틸, 트리플루오로메틸, 클로로플루오로메틸, 디클로로플루오로메틸, 클로로디플루오로메틸, 1-클로로에틸, 1-브로모에틸, 1-플루오로에틸, 2-플루오로에틸, 2,2-디플루오로에틸, 2,2,2-트리플루오로에틸, 2-클로로-2-플루오로에틸, 2-클로로-2-디플루오로에틸, 2,2-디클로로-2-플루오로에틸, 2,2,2-트리클로로에틸, 펜타플루오로에틸, 및 1,1,1-트리플루오로프로프-2-일을 포함하지만, 이에 제한되는 것은 아니다.

[0072] 본원에 사용된 "알케닐"은 1개 이상의 이중 결합(들)을 함유하는 불포화 직쇄형 또는 분지형 탄화수소 모이어티를 지칭한다. 달리 명시되지 않는 한, C_2 - C_8 알케닐이 의도된다. 알케닐 기는 1개 초과와 불포화 결합을 함유할 수 있다. 예는 에테닐, 1-프로페닐, 2-프로페닐, 1-메틸에테닐, 1-부테닐, 2-부테닐, 3-부테닐, 1-메틸-1-프로페닐, 2-메틸-1-프로페닐, 1-메틸-2-프로페닐, 2-메틸-2-프로페닐, 1-펜테닐, 2-펜테닐, 3-펜테닐, 4-펜테닐, 1-메틸-1-부테닐, 2-메틸-1-부테닐, 3-메틸-1-부테닐, 1-메틸-2-부테닐, 2-메틸-2-부테닐, 3-메틸-2-부테닐, 1-메틸-3-부테닐, 2-메틸-3-부테닐, 3-메틸-3-부테닐, 1,1-디메틸-2-프로페닐, 1,2-디메틸-1-프로페닐, 1,2-디메틸-2-프로페닐, 1-에틸-1-프로페닐, 1-에틸-2-프로페닐, 1-헥세닐, 2-헥세닐, 3-헥세닐, 4-헥세닐, 5-

헥세닐, 1-메틸-1-펜테닐, 2-메틸-1-펜테닐, 3-메틸-1-펜테닐, 4-메틸-1-펜테닐, 1-메틸-2-펜테닐, 2-메틸-2-펜테닐, 3-메틸-2-펜테닐, 4-메틸-2-펜테닐, 1-메틸-3-펜테닐, 2-메틸-3-펜테닐, 3-메틸-3-펜테닐, 4-메틸-3-펜테닐, 1-메틸-4-펜테닐, 2-메틸-4-펜테닐, 3-메틸-4-펜테닐, 4-메틸-4-펜테닐, 1,1-디메틸-2-부테닐, 1,1-디메틸-3-부테닐, 1,2-디메틸-1-부테닐, 1,2-디메틸-2-부테닐, 1,2-디메틸-3-부테닐, 1,3-디메틸-1-부테닐, 1,3-디메틸-2-부테닐, 1,3-디메틸-3-부테닐, 2,2-디메틸-3-부테닐, 2,3-디메틸-1-부테닐, 2,3-디메틸-2-부테닐, 2,3-디메틸-3-부테닐, 3,3-디메틸-1-부테닐, 3,3-디메틸-2-부테닐, 1-에틸-1-부테닐, 1-에틸-2-부테닐, 1-에틸-3-부테닐, 2-에틸-1-부테닐, 2-에틸-2-부테닐, 2-에틸-3-부테닐, 1,1,2-트리메틸-2-프로페닐, 1-에틸-1-메틸-2-프로페닐, 1-에틸-2-메틸-1-프로페닐, 및 1-에틸-2-메틸-2-프로페닐을 포함하지만, 이에 제한되는 것은 아니다.

[0073] 본원에 사용된 "알킬닐"은 1개 이상의 삼중 결합(들)을 함유하는 직쇄형 또는 분지형 탄화수소 모이어티를 지칭한다. 달리 명시되지 않는 한, C_2-C_8 알킬닐 기가 의도된다. 알킬닐 기는 1개 초과와 불포화 결합을 함유할 수 있다. 예는, C_2-C_6 -알킬닐, 예컨대 에티닐, 1-프로피닐, 2-프로피닐 (또는 프로파르길), 1-부티닐, 2-부티닐, 3-부티닐, 1-메틸-2-프로피닐, 1-펜티닐, 2-펜티닐, 3-펜티닐, 4-펜티닐, 3-메틸-1-부티닐, 1-메틸-2-부티닐, 1-메틸-3-부티닐, 2-메틸-3-부티닐, 1,1-디메틸-2-프로피닐, 1-에틸-2-프로피닐, 1-헥시닐, 2-헥시닐, 3-헥시닐, 4-헥시닐, 5-헥시닐, 3-메틸-1-펜티닐, 4-메틸-1-펜티닐, 1-메틸-2-펜티닐, 4-메틸-2-펜티닐, 1-메틸-3-펜티닐, 2-메틸-3-펜티닐, 1-메틸-4-펜티닐, 2-메틸-4-펜티닐, 3-메틸-4-펜티닐, 1,1-디메틸-2-부티닐, 1,1-디메틸-3-부티닐, 1,2-디메틸-3-부티닐, 2,2-디메틸-3-부티닐, 3,3-디메틸-1-부티닐, 1-에틸-2-부티닐, 1-에틸-3-부티닐, 2-에틸-3-부티닐, 및 1-에틸-1-메틸-2-프로피닐을 포함하지만, 이에 제한되는 것은 아니다.

[0074] 본원에 사용된 "알콕시"는 화학식 $R-O$ 의 기를 지칭하며, 여기서 R은 상기 정의된 바와 같은 알킬이다. 달리 명시되지 않는 한, R이 C_1-C_8 알킬 기인 알콕시 기가 의도된다. 예는 메톡시, 에톡시, 프로폭시, 1-메틸-에톡시, 부톡시, 1-메틸-프로폭시, 2-메틸-프로폭시, 1,1-디메틸-에톡시, 펜톡시, 1-메틸-부틸옥시, 2-메틸-부톡시, 3-메틸-부톡시, 2,2-디-메틸-프로폭시, 1-에틸-프로폭시, 헥속시, 1,1-디메틸-프로폭시, 1,2-디메틸-프로폭시, 1-메틸-펜톡시, 2-메틸-펜톡시, 3-메틸-펜톡시, 4-메틸-페톡시, 1,1-디메틸-부톡시, 1,2-디메틸-부톡시, 1,3-디메틸-부톡시, 2,2-디메틸-부톡시, 2,3-디메틸-부톡시, 3,3-디메틸-부톡시, 1-에틸-부톡시, 2-에틸부톡시, 1,1,2-트리메틸-프로폭시, 1,2,2-트리메틸-프로폭시, 1-에틸-1-메틸-프로폭시, 및 1-에틸-2-메틸-프로폭시를 포함하지만, 이에 제한되는 것은 아니다.


[0075] 본원에 사용된 "할로알콕시"는 R이 상기 정의된 바와 같은 할로알킬인 화학식 $R-O$ 의 기를 지칭한다. 달리 명시되지 않는 한, R이 C_1-C_8 알킬 기인 할로알콕시 기가 의도된다. 예는 클로로메톡시, 브로모메톡시, 디클로로메톡시, 트리클로로메톡시, 플루오로메톡시, 디플루오로메톡시, 트리플루오로메톡시, 클로로플루오로메톡시, 디클로로플루오로메톡시, 클로로디플루오로메톡시, 1-클로로에톡시, 1-브로모에톡시, 1-플루오로에톡시, 2-플루오로에톡시, 2,2-디플루오로에톡시, 2,2,2-트리플루오로에톡시, 2-클로로-2-플루오로에톡시, 2-클로로-2-디플루오로에톡시, 2,2-디클로로-2-플루오로에톡시, 2,2,2-트리클로로에톡시, 펜타플루오로에톡시, 및 1,1,1-트리플루오로프로프-2-옥시를 포함하지만, 이에 제한되는 것은 아니다.

[0076] 본원에 사용된 바와 같이, "알킬티오"는 R이 상기 정의된 바와 같은 화학식 $R-S$ 의 기를 지칭한다. 달리 명시되지 않는 한, R이 C_1-C_8 알킬 기인 알킬티오 기가 의도된다. 예는 메틸티오, 에틸티오, 프로필티오, 1-메틸에틸티오, 부틸티오, 1-메틸-프로필티오, 2-메틸프로필티오, 1,1-디메틸에틸티오, 펜틸티오, 1-메틸부틸티오, 2-메틸부틸티오, 3-메틸부틸티오, 2,2-디메틸프로필티오, 1-에틸프로필티오, 헥실티오, 1,1-디메틸프로필티오, 1,2-디메틸프로필티오, 1-메틸펜틸티오, 2-메틸펜틸티오, 3-메틸-펜틸티오, 4-메틸-펜틸티오, 1,1-디메틸 부틸티오, 1,2-디메틸-부틸티오, 1,3-디메틸-부틸티오, 2,2-디메틸 부틸티오, 2,3-디메틸 부틸티오, 3,3-디메틸부틸티오, 1-에틸부틸티오, 2-에틸부틸티오, 1,1,2-트리메틸 프로필티오, 1,2,2-트리메틸 프로필티오, 1-에틸-1-메틸 프로필티오, 및 1-에틸-2-메틸프로필티오를 포함하지만, 이에 제한되는 것은 아니다.

[0077] 본원에 사용된 "할로알킬티오"는 탄소 원자가 부분적으로 또는 전부 1개 이상의 할로젠 원자로 치환된 것인 상기 정의된 바와 같은 알킬티오 기를 지칭한다. 달리 명시되지 않는 한, R이 C_1-C_8 알킬 기인 할로알킬티오 기가 의도된다. 예는 클로로메틸티오, 브로모메틸티오, 디클로로메틸티오, 트리클로로메틸티오, 플루오로메틸티오, 디플루오로메틸티오, 트리플루오로메틸티오, 클로로플루오로메틸티오, 디클로로플루오로메틸티오, 클로로디플루오로메틸티오, 1-클로로에틸티오, 1-브로모에틸티오, 1-플루오로에틸티오, 2-플루오로에틸티오, 2,2-디플루오로에틸티오, 2,2,2-트리플루오로에틸티오, 2-클로로-2-플루오로에틸티오, 2-클로로-2-디플루오로에틸티오, 2,2-디

클로로-2-플루오로에틸티오, 2,2,2-트리클로로에틸티오, 펜타플루오로에틸티오, 및 1,1,1-트리플루오로프로프-2-일티오를 포함하지만, 이에 제한되는 것은 아니다.


[0078] 본원에 사용된 "아릴" 뿐만 아니라 "아릴옥시"와 같은 파생 용어는 페닐, 인다닐 또는 나프틸 기를 지칭한다. 일부 실시양태에서, 페닐이 바람직하다. 용어 "헤테로아릴" 뿐만 아니라 "헤테로아릴옥시"와 같은 파생 용어는 1개 이상의 헤테로원자, 예를 들어 N, O 또는 S를 함유하는 5- 또는 6-원 방향족 고리를 지칭하며; 이들 헤테로 방향족 고리는 다른 방향족계에 융합될 수 있다. 아릴 또는 헤테로아릴 치환기는 비치환되거나, 또는 예를 들어 할로젠, 히드록시, 니트로, 시아노, 포르밀, C₁-C₆ 알킬, C₂-C₆ 알케닐, C₂-C₆ 알키닐, C₁-C₆ 알콕시, C₁-C₆ 할로알킬, C₁-C₆ 할로알콕시, C₁-C₆ 아실, C₁-C₆ 알킬티오, C₁-C₆ 알킬술피닐, C₁-C₆ 알킬술포닐, (C₁-C₆ 알콕시)카르보닐, C₁-C₆ 카르바모일, 히드록시카르보닐, (C₁-C₆ 알킬)카르보닐, 아미노카르보닐, (C₁-C₆ 알킬아미노)카르보닐, (디(C₁-C₆ 알킬)아미노)카르보닐로부터 선택된 1개 이상의 치환기로 치환될 수 있으며, 단 치환기는 입체적으로 상용성이고, 화학적 결합 및 변형의 규칙이 충족된다. 일부 실시양태에서, 바람직한 치환기는, 예를 들어 할로젠, C₁-C₂ 알킬 및 C₁-C₂ 할로알킬을 포함한다.

[0079] 본원에 사용된 "알콕시카르보닐"은 R이 알킬인 화학식 의 기를 지칭한다.

[0080] 본원에 사용된 "알킬아미노" 또는 "디알킬아미노"는 1개 또는 동일하거나 또는 상이할 수 있는 2개의 알킬 기로 치환된 아미노 기를 지칭한다.

[0081] 본원에 사용된 알킬카르바밀"은 질소 상에 알킬 기로 치환된 카르바밀 기를 지칭한다.

[0082] 본원에 사용된 "알킬술포닐"은 R이 알킬 (예를 들어, C₁-C₁₀ 알킬)인 -SO₂R을 지칭한다.

[0083] 본원에 사용된 "카르바밀" (또한 카르바모일 또는 아미노카르보닐로 지칭됨)은 화학식 의 기를 지칭한다.

[0084] 본원에 사용된 "할로알킬아미노"는 알킬 탄소 원자가 부분적으로 또는 전부 1개 이상의 할로젠 원자로 치환된 것인 알킬아미노 기를 지칭한다.

[0085] 본원에 사용된 "Me"는 메틸 기를 지칭한다.

[0086] 본원에 사용된 "할로"와 같은 파생 용어를 비롯한 용어 "할로젠"은 플루오린, 염소, 브로민 또는 아이오딘 (또는 플루오라이드, 클로라이드, 브로마이드 또는 아이오다이드)을 지칭한다.

[0087] 본원에 사용된 식물 및 식생은 발아 종자, 출아 묘목, 영양 번식체로부터 발생한 식물, 미성숙 식생, 및 확립된 식생을 포함하지만, 이에 제한되는 것은 아니다.

[0088] 화합물

[0089] 본원에 정의된 바와 같은 (예를 들어, 상기 개요에서) 화학식 I의 화합물 및 그의 N-옥시드 및 농업상 허용되는 염의 화합물이 본원에 제공된다.

[0090] 일부 실시양태에서, 화합물은 카르복실산 또는 그의 농업상 허용되는 에스테르 또는 염이다. 일부 실시양태에서, 화합물은 카르복실산 또는 그의 메틸 에스테르이다.

[0091] 일부 실시양태에서:

[0092] Ar은 Ar₁, Ar₂, Ar₃, Ar₄, Ar₅, 및 Ar₆으로 이루어진 군으로부터 선택되고;

[0093] R¹은 OR^{1'}이고, 여기서 R^{1'}는 H 또는 C₁-C₈ 알킬이고;

[0094] R²는 할로젠, C₂-C₄ 알케닐, C₂-C₄ 할로알케닐, C₁-C₄ 알콕시, C₁-C₄ 할로알콕시, C₁-C₄ 알킬티오, 또는 C₁-C₄ 할로알킬티오이고;

- [0095] R^3 및 R^4 는 각각 독립적으로 수소, C_1-C_6 알킬, C_1-C_6 할로알킬, C_3-C_6 알케닐, C_3-C_6 할로알케닐, C_3-C_6 알키닐, 포르밀, $(C_1-C_3$ 알킬)카르보닐, $(C_1-C_3$ 할로알킬)카르보닐, $(C_1-C_6$ 알콕시)카르보닐, $(C_1-C_6$ 알킬)카르바밀, 트리 $(C_1-C_6$ 알킬)실릴이거나, 또는 R^3 및 R^4 는 함께 $=CR^{3'}R^{4'}$ 을 나타내고, 여기서 $R^{3'}$ 및 $R^{4'}$ 는 각각 독립적으로 수소, C_1-C_6 알킬, C_3-C_6 알케닐, C_3-C_6 알키닐, C_1-C_6 알콕시, 또는 C_1-C_6 알킬아미노이고;
- [0096] X는 N 또는 CY이고, 여기서 Y는 수소, 할로젠, C_1-C_3 알킬, C_1-C_3 할로알킬, C_1-C_3 알콕시, C_1-C_3 할로알콕시, C_1-C_3 알콕시, C_1-C_3 알킬티오, 또는 C_1-C_3 할로알킬티오이다.
- [0097] 한 실시양태에서, X는 N이다. 한 실시양태에서, X는 CY이다.
- [0098] 한 실시양태에서, Y는 수소이다. 한 실시양태에서, Y는 할로젠 (예를 들어, F, Cl, Br, I)이다. 한 실시양태에서, Y는 C_1-C_3 알킬 (예를 들어, 메틸, 에틸, n-프로필, i-프로필)이다. 한 실시양태에서, Y는 C_1-C_3 할로알킬 (예를 들어, CFH_2 , CF_2H , CF_3 , CF_2CF_3)이다. 한 실시양태에서, Y는 C_1-C_3 알콕시 (예를 들어, OCH_3 , OCH_2CH_3)이다. 한 실시양태에서, Y는 C_1-C_3 할로알콕시 (예를 들어, $OCFH_2$, OCF_2H , OCF_3 , OCF_2CF_3)이다. 한 실시양태에서, Y는 C_1-C_3 알킬티오 (예를 들어, SCH_3 , SCH_2CH_3)이다. 한 실시양태에서, Y는 C_1-C_3 할로알킬티오 (예를 들어, $SCFH_2$, SCF_2H , SCF_3 , SCF_2CF_3)이다.
- [0099] 일부 실시양태에서, X는 N 또는 CY이고, 여기서 Y는 수소, 할로젠, C_1-C_3 알킬, C_1-C_3 할로알킬, C_1-C_3 알콕시, C_1-C_3 할로알콕시, C_1-C_3 알콕시, C_1-C_3 알킬티오, 또는 C_1-C_3 할로알킬티오이다.
- [0100] 일부 실시양태에서, X는 N 또는 CY이고, 여기서 Y는 H, 할로, 또는 C_1-C_3 알킬이다. 일부 실시양태에서, X는 N 또는 CY이고, 여기서 Y는 H 또는 할로이다. 일부 실시양태에서, X는 N 또는 CY이고, 여기서 Y는 H, F, Cl, 또는 Br이다. 일부 실시양태에서, X는 N 또는 CY이고, 여기서 Y는 H, F, 또는 Cl이다. 일부 실시양태에서, X는 N 또는 CY이고, 여기서 Y는 H 또는 C_1-C_3 알킬이다. 일부 실시양태에서, X는 N 또는 CY이고, 여기서 Y는 H 또는 CH_3 이다. 일부 실시양태에서, X는 N 또는 CY이고, 여기서 Y는 H이다. 일부 실시양태에서, X는 N 또는 CY이고, 여기서 Y는 H, F, Cl, Br, 또는 CH_3 이다. 일부 실시양태에서, X는 N 또는 CY이고, 여기서 Y는 H, F, Cl, 또는 CH_3 이다. 일부 실시양태에서, X는 N 또는 CY이고, 여기서 Y는 H 또는 F이다. 일부 실시양태에서, X는 N 또는 CY이고, 여기서 Y는 Br이다. 일부 실시양태에서, X는 N 또는 CY이고, 여기서 Y는 H이다. 일부 실시양태에서, Y는 H이다. 일부 실시양태에서, Y는 F이다. 일부 실시양태에서, Y는 Cl이다. 일부 실시양태에서, Y는 Br이다. 일부 실시양태에서, Y는 CH_3 이다. 일부 실시양태에서, Y는 H, 할로, 또는 C_1-C_3 알킬이다. 일부 실시양태에서, Y는 H 또는 할로이다. 일부 실시양태에서, Y는 H, F, Cl, 또는 Br이다. 일부 실시양태에서, Y는 H, F, 또는 Cl이다. 일부 실시양태에서, Y는 H 또는 C_1-C_3 알킬이다. 일부 실시양태에서, Y는 H 또는 CH_3 이다. 일부 실시양태에서, Y는 H, F, Cl, Br, 또는 CH_3 이다. 일부 실시양태에서, Y는 H, F, Cl, 또는 CH_3 이다. 일부 실시양태에서, Y는 H 또는 F이다. 일부 실시양태에서, Y는 할로이다.
- [0101] 한 실시양태에서, $R^{1'}$ 은 $OR^{1'}$ 이다.
- [0102] 한 실시양태에서, $R^{1'}$ 는 H이다. 한 실시양태에서, $R^{1'}$ 는 C_1-C_8 알킬 (예를 들어, 메틸, 에틸, n-프로필, i-프로필)이다. 한 실시양태에서, $R^{1'}$ 는 C_7-C_{10} 아릴알킬 (예를 들어, 벤질)이다.
- [0103] 일부 실시양태에서, R^1 은 $OR^{1'}$ 이고, 여기서 $R^{1'}$ 는 H 또는 C_1-C_8 알킬이다. 일부 실시양태에서, R^1 은 $OR^{1'}$ 이고, 여기서 $R^{1'}$ 는 H 또는 C_7-C_{10} 아릴알킬이다.
- [0104] 일부 실시양태에서, R^1 은 $OR^{1'}$ 이고, 여기서 $R^{1'}$ 는 H, 메틸, 에틸, 또는 벤질이다. 일부 실시양태에서, R^1 은 $OR^{1'}$ 이고, 여기서 $R^{1'}$ 는 H, 메틸, 또는 에틸이다. 일부 실시양태에서, R^1 은 $OR^{1'}$ 이고, 여기서 $R^{1'}$ 는 H 또는

메틸이다. 일부 실시양태에서, R^1 은 $OR^{1'}$ 이고, 여기서 $R^{1'}$ 는 H 또는 벤질이다.

[0105] 한 실시양태에서, R^2 는 할로젠 (예를 들어, F, Cl, Br, I)이다. 한 실시양태에서, R^2 는 C_1-C_4 알킬 (예를 들어, 메틸, 에틸, 프로필, 부틸)이다. 한 실시양태에서, R^2 는 C_1-C_4 할로알킬 (예를 들어, CFH_2 , CF_2H , CF_3 , CF_2CF_3)이다. 한 실시양태에서, R^2 는 C_2-C_4 알케닐 (예를 들어, 비닐 또는 에테닐, 프로페닐, 부테닐)이다. 한 실시양태에서, R^2 는 C_2-C_4 할로알케닐이다. 한 실시양태에서, R^2 는 C_2-C_4 알키닐이다. 한 실시양태에서, R^2 는 C_2-C_4 할로알키닐이다. 한 실시양태에서, R^2 는 C_1-C_4 알콕시 (예를 들어, OCH_3 , OCH_2CH_3)이다. 한 실시양태에서, R^2 는 C_1-C_4 할로알콕시 (예를 들어, $OCFH_2$, OCF_2H , OCF_3 , OCF_2CF_3)이다. 한 실시양태에서, R^2 는 C_1-C_4 알킬티오 (예를 들어, SCH_3 , SCH_2CH_3)이다. 한 실시양태에서, R^2 는 C_1-C_4 할로알킬티오 (예를 들어, $SCFH_2$, SCF_2H , SCF_3 , SCF_2CF_3)이다. 한 실시양태에서, R^2 는 아미노이다. 한 실시양태에서, R^2 는 C_1-C_4 알킬아미노이다. 한 실시양태에서, R^2 는 C_2-C_4 할로알킬아미노이다. 한 실시양태에서, R^2 는 포르밀이다. 한 실시양태에서, R^2 는 (C_1-C_3 알킬)카르보닐이다. 한 실시양태에서, R^2 는 (C_1-C_3 할로알킬)카르보닐이다. 한 실시양태에서, R^2 는 시아노이다.

[0106] 한 실시양태에서, R^2 는 $-CR^{17}=CR^{18}-SiR^{19}R^{20}R^{21}$ 이다.

[0107] 한 실시양태에서, R^{17} 은 수소이다. 한 실시양태에서, R^{17} 은 F이다. 한 실시양태에서, R^{17} 은 Cl이다.

[0108] 한 실시양태에서, R^{18} 은 수소이다. 한 실시양태에서, R^{18} 은 F이다. 한 실시양태에서, R^{18} 은 Cl이다. 한 실시양태에서, R^{18} 은 C_1-C_4 알킬이다. 한 실시양태에서, R^{18} 은 C_1-C_4 할로알킬이다.

[0109] 한 실시양태에서, R^{19} 는 C_1-C_{10} 알킬이다. 한 실시양태에서, R^{19} 는 C_3-C_6 시클로알킬이다. 한 실시양태에서, R^{19} 는 C_1-C_{10} 할로알킬이다. 한 실시양태에서, R^{19} 는 C_3-C_6 할로시클로알킬이다. 한 실시양태에서, R^{19} 는 페닐이다. 한 실시양태에서, R^{19} 는 치환된 페닐이다. 한 실시양태에서, R^{19} 는 C_1-C_{10} 알콕시이다. 한 실시양태에서, R^{19} 는 OH이다.

[0110] 한 실시양태에서, R^{20} 은 C_1-C_{10} 알킬이다. 한 실시양태에서, R^{20} 은 C_3-C_6 시클로알킬이다. 한 실시양태에서, R^{20} 은 C_1-C_{10} 할로알킬이다. 한 실시양태에서, R^{20} 은 C_3-C_6 할로시클로알킬이다. 한 실시양태에서, R^{20} 은 페닐이다. 한 실시양태에서, R^{20} 은 치환된 페닐이다. 한 실시양태에서, R^{20} 은 C_1-C_{10} 알콕시이다. 한 실시양태에서, R^{20} 은 OH이다.

[0111] 한 실시양태에서, R^{21} 은 C_1-C_{10} 알킬이다. 한 실시양태에서, R^{21} 은 C_3-C_6 시클로알킬이다. 한 실시양태에서, R^{21} 은 C_1-C_{10} 할로알킬이다. 한 실시양태에서, R^{21} 은 C_3-C_6 할로시클로알킬이다. 한 실시양태에서, R^{21} 은 페닐이다. 한 실시양태에서, R^{21} 은 치환된 페닐이다. 한 실시양태에서, R^{21} 은 C_1-C_{10} 알콕시이다. 한 실시양태에서, R^{21} 은 OH이다.

[0112] 일부 실시양태에서, R^2 는 할로젠, C_2-C_4 알케닐, C_2-C_4 할로알케닐, C_1-C_4 알콕시, C_1-C_4 할로알콕시, C_1-C_4 알킬티오, 또는 C_1-C_4 할로알킬티오이다. 일부 실시양태에서, R^2 는 할로젠, C_2-C_4 알케닐, C_2-C_4 할로알케닐, 또는 C_1-C_4 알콕시이다.

- [0113] 일부 실시양태에서, R^2 는 할로젠, C_2-C_4 알케닐, 또는 C_1-C_4 알콕시이다. 일부 실시양태에서, R^2 는 Cl, 비닐, 또는 OCH_3 이다. 일부 실시양태에서, R^2 는 Cl이다. 일부 실시양태에서, R^2 는 비닐이다. 일부 실시양태에서, R^2 는 OCH_3 이다.
- [0114] 한 실시양태에서, R^3 은 수소이다. 한 실시양태에서, R^3 은 C_1-C_6 알킬이다. 한 실시양태에서, R^3 은 C_1-C_6 할로알킬이다. 한 실시양태에서, R^3 은 C_3-C_6 알케닐이다. 한 실시양태에서, R^3 은 C_3-C_6 할로알케닐이다. 한 실시양태에서, R^3 은 C_3-C_6 알키닐이다. 한 실시양태에서, R^3 은 히드록시이다. 한 실시양태에서, R^3 은 C_1-C_6 알콕시이다. 한 실시양태에서, R^3 은 C_1-C_6 할로알콕시이다. 한 실시양태에서, R^3 은 포르밀이다. 한 실시양태에서, R^3 은 $(C_1-C_3$ 알킬)카르보닐이다. 한 실시양태에서, R^3 은 $(C_1-C_3$ 할로알킬)카르보닐이다. 한 실시양태에서, R^3 은 $(C_1-C_6$ 알콕시)카르보닐이다. 한 실시양태에서, R^3 은 $(C_1-C_6$ 알킬)카르바밀이다. 한 실시양태에서, R^3 은 C_1-C_6 알킬술포닐이다. 한 실시양태에서, R^3 은 트리(C_1-C_6 알킬)실릴이다. 한 실시양태에서, R^3 은 디(C_1-C_6 알킬)포스포닐이다.
- [0115] 한 실시양태에서, R^4 는 수소이다. 한 실시양태에서, R^4 는 C_1-C_6 알킬이다. 한 실시양태에서, R^4 는 C_1-C_6 할로알킬이다. 한 실시양태에서, R^4 는 C_3-C_6 알케닐이다. 한 실시양태에서, R^4 는 C_3-C_6 할로알케닐이다. 한 실시양태에서, R^4 는 C_3-C_6 알키닐이다. 한 실시양태에서, R^4 는 히드록시이다. 한 실시양태에서, R^4 는 C_1-C_6 알콕시이다. 한 실시양태에서, R^4 는 C_1-C_6 할로알콕시이다. 한 실시양태에서, R^4 는 포르밀이다. 한 실시양태에서, R^4 는 $(C_1-C_3$ 알킬)카르보닐이다. 한 실시양태에서, R^4 는 $(C_1-C_3$ 할로알킬)카르보닐이다. 한 실시양태에서, R^4 는 $(C_1-C_6$ 알콕시)카르보닐이다. 한 실시양태에서, R^4 는 $(C_1-C_6$ 알킬)카르바밀이다. 한 실시양태에서, R^4 는 C_1-C_6 알킬술포닐이다. 한 실시양태에서, R^4 는 트리(C_1-C_6 알킬)실릴이다. 한 실시양태에서, R^4 는 디(C_1-C_6 알킬)포스포닐이다.
- [0116] 한 실시양태에서, R^3 및 R^4 는 이들이 부착되어 있는 질소 원자와 함께 5-원 포화 고리를 형성한다. 한 실시양태에서, R^3 및 R^4 는 이들이 부착되어 있는 질소 원자와 함께 6-원 포화 고리를 형성한다.
- [0117] 한 실시양태에서, R^3 및 R^4 는 함께 $=CR^{3'}R^{4'}$ 을 나타낸다.
- [0118] 한 실시양태에서, $R^{3'}$ 는 수소이다. 한 실시양태에서, $R^{3'}$ 는 C_1-C_6 알킬이다. 한 실시양태에서, $R^{3'}$ 는 C_3-C_6 알케닐이다. 한 실시양태에서, $R^{3'}$ 는 C_3-C_6 알키닐이다. 한 실시양태에서, $R^{3'}$ 는 C_1-C_6 알콕시이다. 한 실시양태에서, $R^{3'}$ 는 C_1-C_6 알킬아미노이다.
- [0119] 한 실시양태에서, $R^{4'}$ 는 수소이다. 한 실시양태에서, $R^{4'}$ 는 C_1-C_6 알킬이다. 한 실시양태에서, $R^{4'}$ 는 C_3-C_6 알케닐이다. 한 실시양태에서, $R^{4'}$ 는 C_3-C_6 알키닐이다. 한 실시양태에서, $R^{4'}$ 는 C_1-C_6 알콕시이다. 한 실시양태에서, $R^{4'}$ 는 C_1-C_6 알킬아미노이다.
- [0120] 한 실시양태에서, $R^{3'}$ 및 $R^{4'}$ 는 이들이 부착되어 있는 탄소 원자와 함께 5-원 포화 고리를 형성한다. 한 실시양태에서, $R^{3'}$ 및 $R^{4'}$ 는 이들이 부착되어 있는 탄소 원자와 함께 6-원 포화 고리를 형성한다.
- [0121] 일부 실시양태에서, R^3 및 R^4 는 각각 독립적으로 수소, C_1-C_6 알킬, C_1-C_6 할로알킬, C_3-C_6 알케닐, C_3-C_6 할로알

케닐, C₃-C₆ 알키닐, 포르밀, (C₁-C₃ 알킬)카르보닐, (C₁-C₃ 할로알킬)카르보닐, (C₁-C₆ 알콕시)카르보닐, (C₁-C₆ 알킬)카르바밀, 트리(C₁-C₆ 알킬)실릴이다. 일부 실시양태에서, R³ 및 R⁴는 함께 =CR^{3'}R^{4'}을 나타내고, 여기서 R^{3'} 및 R^{4'}는 각각 독립적으로 수소, C₁-C₆ 알킬, C₃-C₆ 알케닐, C₃-C₆ 알키닐, C₁-C₆ 알콕시, 또는 C₁-C₆ 알킬아미노이다.

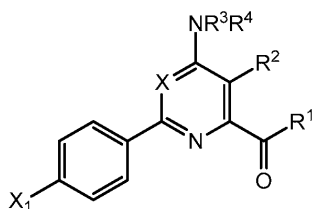
[0122] 일부 실시양태에서, R³은 H이다.

[0123] 일부 실시양태에서, R⁴는 H이다.

[0124] 한 실시양태에서, Ar은 Ar1이다.

[0125] 한 실시양태에서, 하기 화학식 I-1의 화합물, 또는 그의 N-옥시드 또는 농업상 허용되는 염이 본원에 제공된다.

[0126] <화학식 I-1>



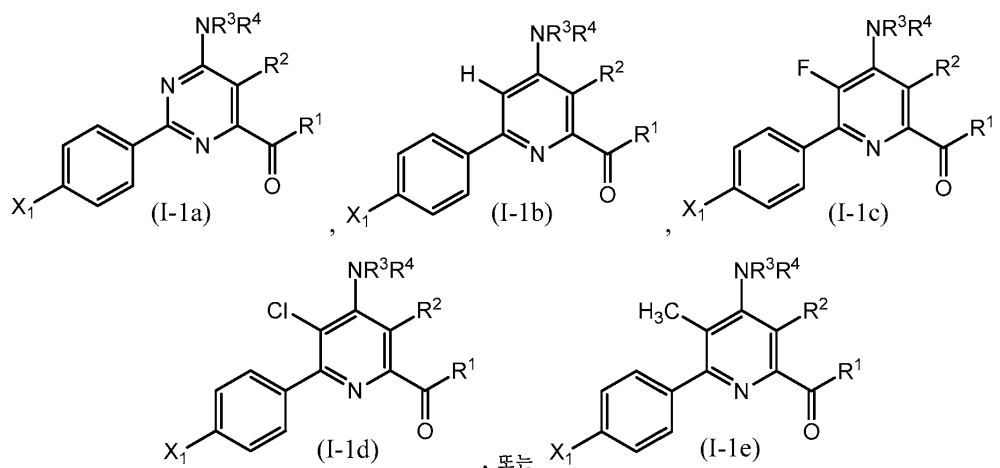
[0127]

[0128] 상기 식에서, X, R¹, R², R³, R⁴, 및 X₁은 본원의 다른 곳에서 정의된다.

[0129] 한 실시양태에서, 화학식 I-1의 화합물에서, R¹은 OH이고 R²는 할로젠이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-1의 화합물에서, R¹은 OH이고 R²는 C₂-C₄ 알케닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-1의 화합물에서, R¹은 OH이고 R²는 C₁-C₄ 알콕시이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-1의 화합물에서, R¹은 OH이고 R²는 Cl이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-1의 화합물에서, R¹은 OH이고 R²는 OCH₃이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-1의 화합물에서, R¹은 OH이고 R²는 비닐 (또는 에테닐)이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-1의 화합물에서, R¹은 OH이고 R²는 1-프로페닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-1의 화합물에서, R¹은 -O-(C₁-C₄ 알킬)이고 R²는 할로젠이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-1의 화합물에서, R¹은 -O-(C₁-C₄ 알킬)이고 R²는 C₂-C₄ 알케닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-1의 화합물에서, R¹은 -O-(C₁-C₄ 알킬)이고 R²는 C₁-C₄ 알콕시이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-1의 화합물에서, R¹은 -O-(C₁-C₄ 알킬)이고 R²는 Cl이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-1의 화합물에서, R¹은 -O-(C₁-C₄ 알킬)이고 R²는 OCH₃이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-1의 화합물에서, R¹은 -O-(C₁-C₄ 알킬)이고 R²는 비닐 (또는 에테닐)이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-1의 화합물에서, R¹은 -O-(C₁-C₄ 알킬)이고 R²는 1-프로페닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-1의 화합물에서, R¹은 OCH₃이고 R²는 할로젠이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-1의 화합물에서, R¹은 OCH₃이고 R²는 C₂-C₄ 알케닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-1의 화합물에서, R¹은 OCH₃이고 R²는 C₁-C₄ 알콕시이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-1의 화합물에서, R¹은 OCH₃이고 R²는 Cl이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-1의 화합물에서, R¹은 OCH₃이고 R²는 OCH₃이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-1의 화합물에서, R¹은 OCH₃이고 R²는 비닐 (또는 에테닐)이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-1의 화합물에서, R¹은 OCH₃이고 R²는 1-프로페닐이다.

[0130] 한 실시양태에서, 하기 화학식 I-1a, I-1b, I-1c, I-1d, 또는 I-1e의 화합물, 또는 그의 N-옥시드 또는 농업상

허용되는 염이 본원에 제공된다.



[0131]

[0132] 상기 식에서, R¹, R², R³, R⁴, 및 X₁은 본원의 다른 곳에서 정의된다.

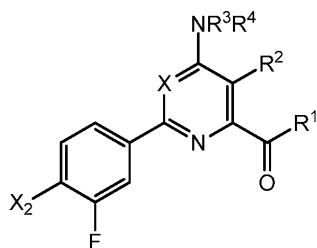
[0133] 한 실시양태에서, 화학식 I-1a의 화합물에서, R¹은 OH이고 R²는 할로젠이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-1a의 화합물에서, R¹은 OH이고 R²는 C₂-C₄ 알케닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-1a의 화합물에서, R¹은 OH이고 R²는 C₁-C₄ 알콕시이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-1a의 화합물에서, R¹은 OH이고 R²는 Cl이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-1a의 화합물에서, R¹은 OH이고 R²는 OCH₃이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-1a의 화합물에서, R¹은 OH이고 R²는 비닐 (또는 에테닐)이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-1a의 화합물에서, R¹은 OH이고 R²는 1-프로페닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-1a의 화합물에서, R¹은 -O-(C₁-C₄ 알킬)이고 R²는 할로젠이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-1a의 화합물에서, R¹은 -O-(C₁-C₄ 알킬)이고 R²는 C₂-C₄ 알케닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-1a의 화합물에서, R¹은 -O-(C₁-C₄ 알킬)이고 R²는 C₁-C₄ 알콕시이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-1a의 화합물에서, R¹은 -O-(C₁-C₄ 알킬)이고 R²는 Cl이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-1a의 화합물에서, R¹은 -O-(C₁-C₄ 알킬)이고 R²는 OCH₃이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-1a의 화합물에서, R¹은 -O-(C₁-C₄ 알킬)이고 R²는 비닐 (또는 에테닐)이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-1a의 화합물에서, R¹은 -O-(C₁-C₄ 알킬)이고 R²는 1-프로페닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-1a의 화합물에서, R¹은 OCH₃이고 R²는 할로젠이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-1a의 화합물에서, R¹은 OCH₃이고 R²는 C₂-C₄ 알케닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-1a의 화합물에서, R¹은 OCH₃이고 R²는 C₁-C₄ 알콕시이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-1a의 화합물에서, R¹은 OCH₃이고 R²는 Cl이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-1a의 화합물에서, R¹은 OCH₃이고 R²는 OCH₃이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-1a의 화합물에서, R¹은 OCH₃이고 R²는 비닐 (또는 에테닐)이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-1a의 화합물에서, R¹은 OCH₃이고 R²는 1-프로페닐이다.

[0134] 한 실시양태에서, 화학식 I-1b의 화합물에서, R¹은 OH이고 R²는 할로젠이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-1b의 화합물에서, R¹은 OH이고 R²는 C₂-C₄ 알케닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-1b의 화합물에서, R¹은 OH이고 R²는 C₁-C₄ 알콕시이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-1b의 화합물에서, R¹은 OH이고 R²는 Cl이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-1b의 화합물에서, R¹은 OH이고 R²는 OCH₃이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-1b의 화합물에서, R¹은

[0138] 한 실시양태에서, Ar은 Ar²이다.

[0139] 한 실시양태에서, 하기 화학식 I-2의 화합물, 또는 그의 N-옥시드 또는 농업상 허용되는 염이 본원에 제공된다.

[0140] <화학식 I-2>

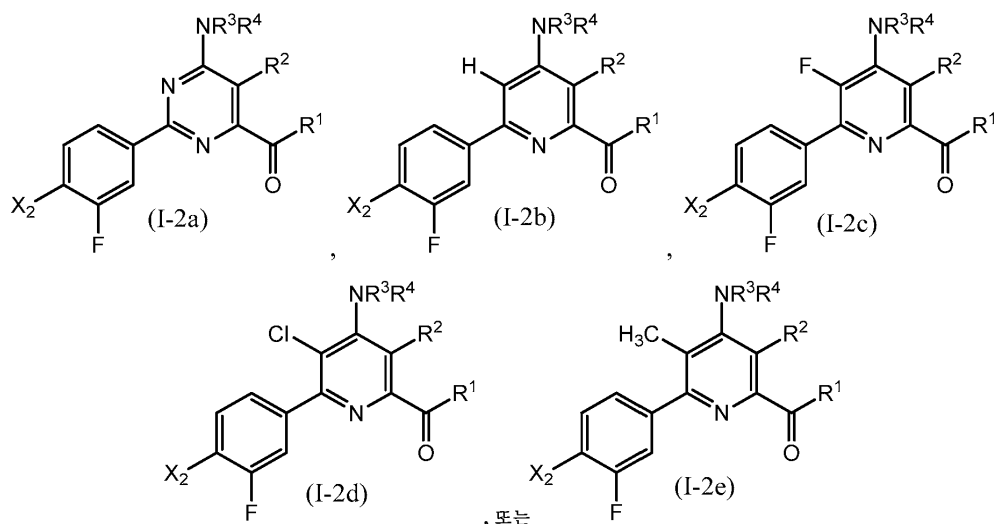


[0141]

[0142] 상기 식에서, X, R¹, R², R³, R⁴, 및 X₂는 본원의 다른 곳에서 정의된다.

[0143] 한 실시양태에서, 화학식 I-2의 화합물에서, R¹은 OH이고 R²는 할로젠이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-2의 화합물에서, R¹은 OH이고 R²는 C₂-C₄ 알케닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-2의 화합물에서, R¹은 OH이고 R²는 C₁-C₄ 알콕시이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-2의 화합물에서, R¹은 OH이고 R²는 C1이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-2의 화합물에서, R¹은 OH이고 R²는 OCH₃이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-2의 화합물에서, R¹은 OH이고 R²는 비닐 (또는 에테닐)이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-2의 화합물에서, R¹은 OH이고 R²는 1-프로페닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-2의 화합물에서, R¹은 -O-(C₁-C₄ 알킬)이고 R²는 할로젠이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-2의 화합물에서, R¹은 -O-(C₁-C₄ 알킬)이고 R²는 C₂-C₄ 알케닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-2의 화합물에서, R¹은 -O-(C₁-C₄ 알킬)이고 R²는 C₁-C₄ 알콕시이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-2의 화합물에서, R¹은 -O-(C₁-C₄ 알킬)이고 R²는 C1이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-2의 화합물에서, R¹은 -O-(C₁-C₄ 알킬)이고 R²는 OCH₃이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-2의 화합물에서, R¹은 -O-(C₁-C₄ 알킬)이고 R²는 비닐 (또는 에테닐)이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-2의 화합물에서, R¹은 -O-(C₁-C₄ 알킬)이고 R²는 1-프로페닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-2의 화합물에서, R¹은 OCH₃이고 R²는 할로젠이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-2의 화합물에서, R¹은 OCH₃이고 R²는 C₂-C₄ 알케닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-2의 화합물에서, R¹은 OCH₃이고 R²는 C₁-C₄ 알콕시이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-2의 화합물에서, R¹은 OCH₃이고 R²는 C1이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-2의 화합물에서, R¹은 OCH₃이고 R²는 OCH₃이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-2의 화합물에서, R¹은 OCH₃이고 R²는 비닐 (또는 에테닐)이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-2의 화합물에서, R¹은 OCH₃이고 R²는 1-프로페닐이다.

[0144] 한 실시양태에서, 하기 화학식 I-2a, I-2b, I-2c, I-2d, 또는 I-2e의 화합물, 또는 그의 N-옥시드 또는 농업상 허용되는 염이 본원에 제공된다.



상기 식에서, R^1 , R^2 , R^3 , R^4 , 및 X_2 는 본원의 다른 곳에서 정의된다.

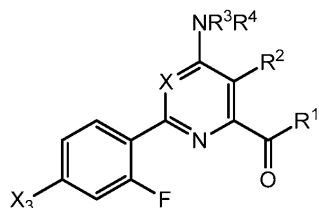
한 실시양태에서, 화학식 I-2a의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 할로젠이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-2a의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 C_2 - C_4 알케닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-2a의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 C_1 - C_4 알콕시이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-2a의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 Cl이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-2a의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 OCH_3 이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-2a의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 비닐 (또는 에테닐)이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-2a의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 1-프로페닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-2a의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4)$ 알킬)이고 R^2 는 할로젠이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-2a의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4)$ 알킬)이고 R^2 는 C_2 - C_4 알케닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-2a의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4)$ 알킬)이고 R^2 는 C_1 - C_4 알콕시이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-2a의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4)$ 알킬)이고 R^2 는 Cl이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-2a의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4)$ 알킬)이고 R^2 는 OCH_3 이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-2a의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4)$ 알킬)이고 R^2 는 비닐 (또는 에테닐)이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-2a의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4)$ 알킬)이고 R^2 는 1-프로페닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-2a의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 할로젠이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-2a의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 C_2 - C_4 알케닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-2a의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 C_1 - C_4 알콕시이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-2a의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 Cl이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-2a의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 OCH_3 이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-2a의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 비닐 (또는 에테닐)이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-2a의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 1-프로페닐이다.

한 실시양태에서, 화학식 I-2b의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 할로젠이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-2b의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 C_2 - C_4 알케닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-2b의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 C_1 - C_4 알콕시이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-2b의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 Cl이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-2b의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 OCH_3 이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-2b의 화합물에서, R^1 은

[0152] 한 실시양태에서, Ar은 Ar³이다.

[0153] 한 실시양태에서, 하기 화학식 I-3의 화합물, 또는 그의 N-옥시드 또는 농업상 허용되는 염이 본원에 제공된다.

[0154] <화학식 I-3>



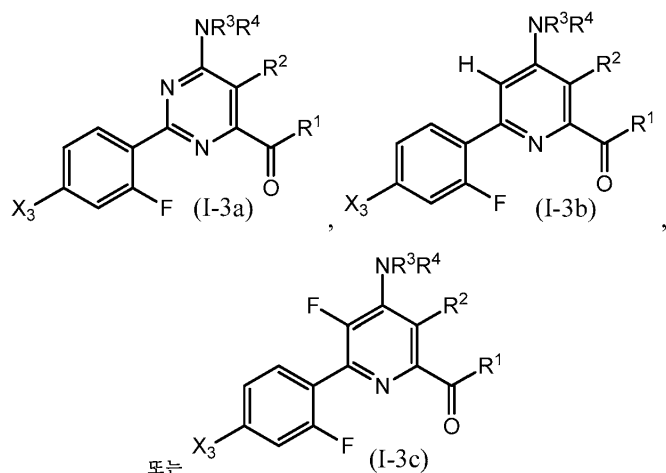
[0155]

[0156] 상기 식에서, X, R¹, R², R³, R⁴, 및 X₃은 본원의 다른 곳에서 정의된다.

[0157]

한 실시양태에서, 화학식 I-3의 화합물에서, R¹은 OH이고 R²는 할로젠이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3의 화합물에서, R¹은 OH이고 R²는 C₂-C₄ 알케닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3의 화합물에서, R¹은 OH이고 R²는 C₁-C₄ 알콕시이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3의 화합물에서, R¹은 OH이고 R²는 Cl이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3의 화합물에서, R¹은 OH이고 R²는 OCH₃이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3의 화합물에서, R¹은 OH이고 R²는 비닐 (또는 에테닐)이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3의 화합물에서, R¹은 OH이고 R²는 1-프로페닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3의 화합물에서, R¹은 -O-(C₁-C₄ 알킬)이고 R²는 할로젠이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3의 화합물에서, R¹은 -O-(C₁-C₄ 알킬)이고 R²는 C₂-C₄ 알케닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3의 화합물에서, R¹은 -O-(C₁-C₄ 알킬)이고 R²는 C₁-C₄ 알콕시이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3의 화합물에서, R¹은 -O-(C₁-C₄ 알킬)이고 R²는 Cl이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3의 화합물에서, R¹은 -O-(C₁-C₄ 알킬)이고 R²는 OCH₃이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3의 화합물에서, R¹은 -O-(C₁-C₄ 알킬)이고 R²는 비닐 (또는 에테닐)이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3의 화합물에서, R¹은 -O-(C₁-C₄ 알킬)이고 R²는 1-프로페닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3의 화합물에서, R¹은 OCH₃이고 R²는 할로젠이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3의 화합물에서, R¹은 OCH₃이고 R²는 C₂-C₄ 알케닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3의 화합물에서, R¹은 OCH₃이고 R²는 C₁-C₄ 알콕시이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3의 화합물에서, R¹은 OCH₃이고 R²는 Cl이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3의 화합물에서, R¹은 OCH₃이고 R²는 OCH₃이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3의 화합물에서, R¹은 OCH₃이고 R²는 비닐 (또는 에테닐)이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3의 화합물에서, R¹은 OCH₃이고 R²는 1-프로페닐이다.

[0158] 한 실시양태에서, 하기 화학식 I-3a, I-3b, I-3c의 화합물, 또는 그의 N-옥시드 또는 농업상 허용되는 염이 본원에 제공된다.



[0159]

[0160] 상기 식에서, R^1 , R^2 , R^3 , R^4 , 및 X_3 은 본원의 다른 곳에서 정의된다.

[0161]

한 실시양태에서, 화학식 I-3a의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 할로젠이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3a의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 C_2 - C_4 알케닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3a의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 C_1 - C_4 알콕시이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3a의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 Cl이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3a의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 OCH_3 이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3a의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 비닐 (또는 에테닐)이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3a의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 1-프로페닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3a의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4)$ 알킬)이고 R^2 는 할로젠이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3a의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4)$ 알킬)이고 R^2 는 C_2 - C_4 알케닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3a의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4)$ 알킬)이고 R^2 는 C_1 - C_4 알콕시이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3a의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4)$ 알킬)이고 R^2 는 Cl이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3a의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4)$ 알킬)이고 R^2 는 OCH_3 이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3a의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4)$ 알킬)이고 R^2 는 비닐 (또는 에테닐)이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3a의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4)$ 알킬)이고 R^2 는 1-프로페닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3a의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 할로젠이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3a의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 C_2 - C_4 알케닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3a의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 C_1 - C_4 알콕시이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3a의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 Cl이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3a의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 OCH_3 이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3a의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 비닐 (또는 에테닐)이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3a의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 1-프로페닐이다.

[0162]

한 실시양태에서, 화학식 I-3b의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 할로젠이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3b의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 C_2 - C_4 알케닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3b의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 C_1 - C_4 알콕시이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3b의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 Cl이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3b의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 OCH_3 이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3b의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 비닐 (또는 에테닐)이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3b의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 1-프로페

닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3b의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4 \text{ 알킬})$ 이고 R^2 는 할로젠이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3b의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4 \text{ 알킬})$ 이고 R^2 는 C_2-C_4 알케닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3b의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4 \text{ 알킬})$ 이고 R^2 는 C_1-C_4 알콕시이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3b의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4 \text{ 알킬})$ 이고 R^2 는 Cl이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3b의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4 \text{ 알킬})$ 이고 R^2 는 OCH_3 이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3b의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4 \text{ 알킬})$ 이고 R^2 는 비닐 (또는 에테닐)이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3b의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4 \text{ 알킬})$ 이고 R^2 는 1-프로페닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3b의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 할로젠이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3b의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 C_2-C_4 알케닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3b의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 C_1-C_4 알콕시이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3b의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 Cl이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3b의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 OCH_3 이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3b의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 비닐 (또는 에테닐)이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3b의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 1-프로페닐이다.

[0163]

한 실시양태에서, 화학식 I-3c의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 할로젠이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3c의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 C_2-C_4 알케닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3c의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 C_1-C_4 알콕시이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3c의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 Cl이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3c의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 OCH_3 이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3c의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 비닐 (또는 에테닐)이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3c의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 1-프로페닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3c의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4 \text{ 알킬})$ 이고 R^2 는 할로젠이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3c의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4 \text{ 알킬})$ 이고 R^2 는 C_2-C_4 알케닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3c의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4 \text{ 알킬})$ 이고 R^2 는 C_1-C_4 알콕시이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3c의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4 \text{ 알킬})$ 이고 R^2 는 Cl이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3c의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4 \text{ 알킬})$ 이고 R^2 는 OCH_3 이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3c의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4 \text{ 알킬})$ 이고 R^2 는 비닐 (또는 에테닐)이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3c의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4 \text{ 알킬})$ 이고 R^2 는 1-프로페닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3c의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 할로젠이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3c의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 C_2-C_4 알케닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3c의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 C_1-C_4 알콕시이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3c의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 Cl이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3c의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 OCH_3 이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3c의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 비닐 (또는 에테닐)이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-3c의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 1-프로페닐이다.

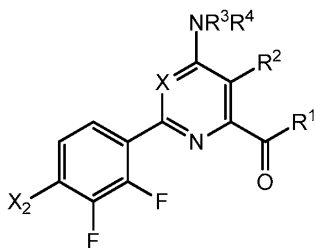
[0164]

한 실시양태에서, Ar은 Ar4이다.

[0165]

한 실시양태에서, 하기 화학식 I-4의 화합물, 또는 그의 N-옥시드 또는 농업상 허용되는 염이 본원에 제공된다.

[0166] <화학식 I-4>



[0167]

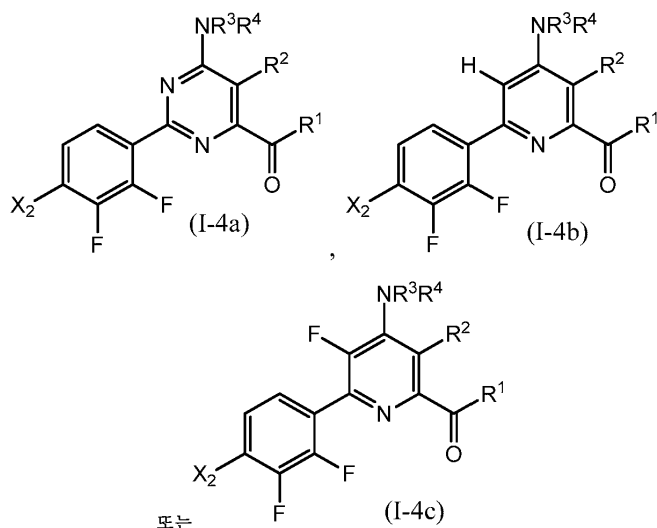
[0168] 상기 식에서, X, R¹, R², R³, R⁴, 및 X₂는 본원의 다른 곳에서 정의된다.

[0169]

한 실시양태에서, 화학식 I-4의 화합물에서, R¹은 OH이고 R²는 할로젠이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4의 화합물에서, R¹은 OH이고 R²는 C₂-C₄ 알케닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4의 화합물에서, R¹은 OH이고 R²는 C₁-C₄ 알콕시이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4의 화합물에서, R¹은 OH이고 R²는 Cl이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4의 화합물에서, R¹은 OH이고 R²는 OCH₃이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4의 화합물에서, R¹은 OH이고 R²는 비닐 (또는 에테닐)이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4의 화합물에서, R¹은 OH이고 R²는 1-프로페닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4의 화합물에서, R¹은 -O-(C₁-C₄ 알킬)이고 R²는 할로젠이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4의 화합물에서, R¹은 -O-(C₁-C₄ 알킬)이고 R²는 C₂-C₄ 알케닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4의 화합물에서, R¹은 -O-(C₁-C₄ 알킬)이고 R²는 C₁-C₄ 알콕시이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4의 화합물에서, R¹은 -O-(C₁-C₄ 알킬)이고 R²는 Cl이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4의 화합물에서, R¹은 -O-(C₁-C₄ 알킬)이고 R²는 OCH₃이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4의 화합물에서, R¹은 -O-(C₁-C₄ 알킬)이고 R²는 비닐 (또는 에테닐)이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4의 화합물에서, R¹은 -O-(C₁-C₄ 알킬)이고 R²는 1-프로페닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4의 화합물에서, R¹은 OCH₃이고 R²는 할로젠이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4의 화합물에서, R¹은 OCH₃이고 R²는 C₂-C₄ 알케닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4의 화합물에서, R¹은 OCH₃이고 R²는 C₁-C₄ 알콕시이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4의 화합물에서, R¹은 OCH₃이고 R²는 Cl이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4의 화합물에서, R¹은 OCH₃이고 R²는 OCH₃이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4의 화합물에서, R¹은 OCH₃이고 R²는 비닐 (또는 에테닐)이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4의 화합물에서, R¹은 OCH₃이고 R²는 1-프로페닐이다.

[0170]

한 실시양태에서, 화학식 I-4a, I-4b, I-4c의 화합물, 또는 그의 N-옥시드 또는 농업상 허용되는 염이 본원에 제공된다.



[0171]

[0172] 상기 식에서, R^1 , R^2 , R^3 , R^4 , 및 X_2 는 본원의 다른 곳에서 정의된다.

[0173]

한 실시양태에서, 화학식 I-4a의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 할로젠이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4a의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 C_2 - C_4 알케닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4a의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 C_1 - C_4 알콕시이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4a의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 Cl이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4a의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 OCH_3 이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4a의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 비닐 (또는 에테닐)이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4a의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 1-프로페닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4a의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4)$ 알킬)이고 R^2 는 할로젠이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4a의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4)$ 알킬)이고 R^2 는 C_2 - C_4 알케닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4a의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4)$ 알킬)이고 R^2 는 C_1 - C_4 알콕시이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4a의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4)$ 알킬)이고 R^2 는 Cl이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4a의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4)$ 알킬)이고 R^2 는 OCH_3 이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4a의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4)$ 알킬)이고 R^2 는 비닐 (또는 에테닐)이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4a의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4)$ 알킬)이고 R^2 는 1-프로페닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4a의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 할로젠이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4a의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 C_2 - C_4 알케닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4a의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 C_1 - C_4 알콕시이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4a의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 Cl이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4a의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 OCH_3 이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4a의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 비닐 (또는 에테닐)이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4a의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 1-프로페닐이다.

[0174]

한 실시양태에서, 화학식 I-4b의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 할로젠이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4b의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 C_2 - C_4 알케닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4b의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 C_1 - C_4 알콕시이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4b의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 Cl이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4b의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 OCH_3 이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4b의 화합물에서, R^1 은

OH이고 R^2 는 비닐 (또는 에테닐)이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4b의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 1-프로페닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4b의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4 \text{ 알킬})$ 이고 R^2 는 할로젠이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4b의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4 \text{ 알킬})$ 이고 R^2 는 C_2-C_4 알케닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4b의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4 \text{ 알킬})$ 이고 R^2 는 C_1-C_4 알콕시이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4b의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4 \text{ 알킬})$ 이고 R^2 는 Cl이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4b의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4 \text{ 알킬})$ 이고 R^2 는 OCH_3 이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4b의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4 \text{ 알킬})$ 이고 R^2 는 비닐 (또는 에테닐)이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4b의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4 \text{ 알킬})$ 이고 R^2 는 1-프로페닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4b의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 할로젠이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4b의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 C_2-C_4 알케닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4b의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 C_1-C_4 알콕시이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4b의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 Cl이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4b의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 OCH_3 이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4b의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 비닐 (또는 에테닐)이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4b의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 1-프로페닐이다.

[0175]

한 실시양태에서, 화학식 I-4c의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 할로젠이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4c의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 C_2-C_4 알케닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4c의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 C_1-C_4 알콕시이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4c의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 Cl이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4c의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 OCH_3 이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4c의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 비닐 (또는 에테닐)이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4c의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 1-프로페닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4c의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4 \text{ 알킬})$ 이고 R^2 는 할로젠이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4c의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4 \text{ 알킬})$ 이고 R^2 는 C_2-C_4 알케닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4c의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4 \text{ 알킬})$ 이고 R^2 는 C_1-C_4 알콕시이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4c의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4 \text{ 알킬})$ 이고 R^2 는 Cl이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4c의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4 \text{ 알킬})$ 이고 R^2 는 OCH_3 이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4c의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4 \text{ 알킬})$ 이고 R^2 는 비닐 (또는 에테닐)이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4c의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4 \text{ 알킬})$ 이고 R^2 는 1-프로페닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4c의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 할로젠이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4c의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 C_2-C_4 알케닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4c의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 C_1-C_4 알콕시이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4c의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 Cl이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4c의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 OCH_3 이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4c의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 비닐 (또는 에테닐)이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-4c의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 1-프로페닐이다.

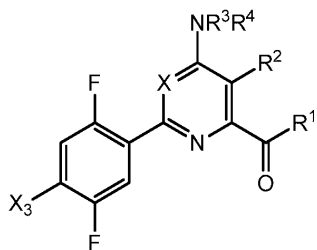
[0176]

한 실시양태에서, Ar은 Ar5이다.

[0177]

한 실시양태에서, 하기 화학식 I-5의 화합물, 또는 그의 N-옥시드 또는 농업상 허용되는 염이 본원에 제공된다.

[0178] <화학식 I-5>



[0179]

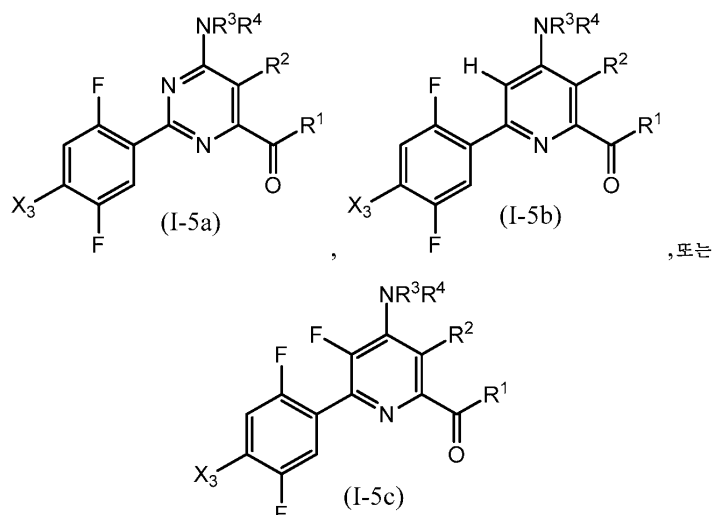
[0180] 상기 식에서, X, R¹, R², R³, R⁴, 및 X₃은 본원의 다른 곳에서 정의된다.

[0181]

한 실시양태에서, 화학식 I-5의 화합물에서, R¹은 OH이고 R²는 할로젠이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5의 화합물에서, R¹은 OH이고 R²는 C₂-C₄ 알케닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5의 화합물에서, R¹은 OH이고 R²는 C₁-C₄ 알콕시이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5의 화합물에서, R¹은 OH이고 R²는 Cl이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5의 화합물에서, R¹은 OH이고 R²는 OCH₃이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5의 화합물에서, R¹은 OH이고 R²는 비닐 (또는 에테닐)이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5의 화합물에서, R¹은 OH이고 R²는 1-프로페닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5의 화합물에서, R¹은 -O-(C₁-C₄ 알킬)이고 R²는 할로젠이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5의 화합물에서, R¹은 -O-(C₁-C₄ 알킬)이고 R²는 C₂-C₄ 알케닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5의 화합물에서, R¹은 -O-(C₁-C₄ 알킬)이고 R²는 C₁-C₄ 알콕시이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5의 화합물에서, R¹은 -O-(C₁-C₄ 알킬)이고 R²는 Cl이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5의 화합물에서, R¹은 -O-(C₁-C₄ 알킬)이고 R²는 OCH₃이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5의 화합물에서, R¹은 -O-(C₁-C₄ 알킬)이고 R²는 비닐 (또는 에테닐)이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5의 화합물에서, R¹은 -O-(C₁-C₄ 알킬)이고 R²는 1-프로페닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5의 화합물에서, R¹은 OCH₃이고 R²는 할로젠이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5의 화합물에서, R¹은 OCH₃이고 R²는 C₂-C₄ 알케닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5의 화합물에서, R¹은 OCH₃이고 R²는 C₁-C₄ 알콕시이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5의 화합물에서, R¹은 OCH₃이고 R²는 Cl이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5의 화합물에서, R¹은 OCH₃이고 R²는 OCH₃이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5의 화합물에서, R¹은 OCH₃이고 R²는 비닐 (또는 에테닐)이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5의 화합물에서, R¹은 OCH₃이고 R²는 1-프로페닐이다.

[0182]

한 실시양태에서, 하기 화학식 I-5a, I-5b, 또는 I-5c의 화합물, 또는 그의 N-옥시드 또는 농업상 허용되는 염이 본원에 제공된다.



[0183]

[0184] 상기 식에서, R^1 , R^2 , R^3 , R^4 , 및 X_3 은 본원의 다른 곳에서 정의된다.

[0185] 한 실시양태에서, 화학식 I-5a의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 할로젠이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5a의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 C_2-C_4 알케닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5a의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 C_1-C_4 알콕시이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5a의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 Cl이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5a의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 OCH_3 이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5a의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 비닐 (또는 에테닐)이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5a의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 1-프로페닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5a의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4)$ 알킬)이고 R^2 는 할로젠이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5a의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4)$ 알킬)이고 R^2 는 C_2-C_4 알케닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5a의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4)$ 알킬)이고 R^2 는 C_1-C_4 알콕시이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5a의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4)$ 알킬)이고 R^2 는 Cl이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5a의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4)$ 알킬)이고 R^2 는 OCH_3 이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5a의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4)$ 알킬)이고 R^2 는 비닐 (또는 에테닐)이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5a의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4)$ 알킬)이고 R^2 는 1-프로페닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5a의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 할로젠이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5a의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 C_2-C_4 알케닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5a의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 C_1-C_4 알콕시이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5a의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 Cl이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5a의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 OCH_3 이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5a의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 비닐 (또는 에테닐)이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5a의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 1-프로페닐이다.

[0186] 한 실시양태에서, 화학식 I-5b의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 할로젠이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5b의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 C_2-C_4 알케닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5b의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 C_1-C_4 알콕시이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5b의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 Cl이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5b의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 OCH_3 이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5b의 화합물에서, R^1 은

OH이고 R^2 는 비닐 (또는 에테닐)이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5b의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 1-프로페닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5b의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4)$ 알킬)이고 R^2 는 할로젠이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5b의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4)$ 알킬)이고 R^2 는 C_2-C_4 알케닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5b의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4)$ 알킬)이고 R^2 는 C_1-C_4 알콕시이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5b의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4)$ 알킬)이고 R^2 는 Cl이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5b의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4)$ 알킬)이고 R^2 는 OCH_3 이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5b의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4)$ 알킬)이고 R^2 는 비닐 (또는 에테닐)이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5b의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4)$ 알킬)이고 R^2 는 1-프로페닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5b의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 할로젠이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5b의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 C_2-C_4 알케닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5b의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 C_1-C_4 알콕시이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5b의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 Cl이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5b의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 OCH_3 이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5b의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 비닐 (또는 에테닐)이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5b의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 1-프로페닐이다.

[0187]

한 실시양태에서, 화학식 I-5c의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 할로젠이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5c의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 C_2-C_4 알케닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5c의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 C_1-C_4 알콕시이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5c의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 Cl이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5c의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 OCH_3 이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5c의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 비닐 (또는 에테닐)이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5c의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 1-프로페닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5c의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4)$ 알킬)이고 R^2 는 할로젠이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5c의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4)$ 알킬)이고 R^2 는 C_2-C_4 알케닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5c의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4)$ 알킬)이고 R^2 는 C_1-C_4 알콕시이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5c의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4)$ 알킬)이고 R^2 는 Cl이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5c의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4)$ 알킬)이고 R^2 는 OCH_3 이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5c의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4)$ 알킬)이고 R^2 는 비닐 (또는 에테닐)이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5c의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4)$ 알킬)이고 R^2 는 1-프로페닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5c의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 할로젠이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5c의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 C_2-C_4 알케닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5c의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 C_1-C_4 알콕시이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5c의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 Cl이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5c의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 OCH_3 이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5c의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 비닐 (또는 에테닐)이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-5c의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 1-프로페닐이다.

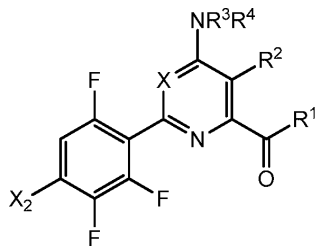
[0188]

한 실시양태에서, Ar은 Ar6이다.

[0189]

한 실시양태에서, 하기 화학식 I-6의 화합물, 또는 그의 N-옥시드 또는 농업상 허용되는 염이 본원에 제공된다.

[0190] <화학식 I-6>

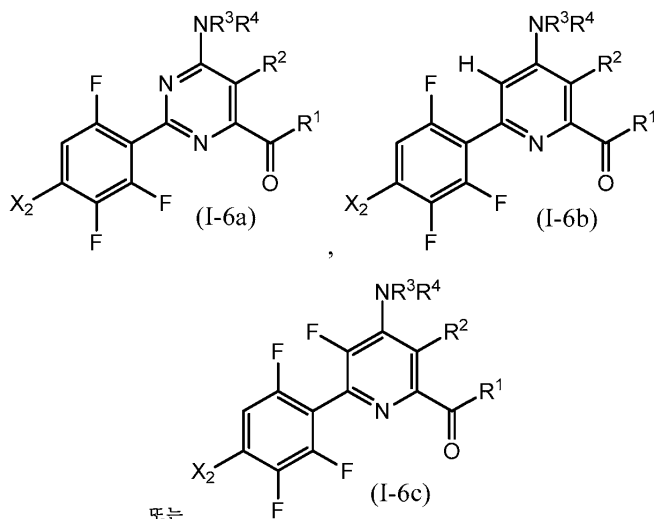


[0191]

[0192] 상기 식에서, X, R¹, R², R³, R⁴, 및 X₂는 본원의 다른 곳에서 정의된다.

[0193] 한 실시양태에서, 화학식 I-6의 화합물에서, R¹은 OH이고 R²는 할로겐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6의 화합물에서, R¹은 OH이고 R²는 C₂-C₄ 알케닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6의 화합물에서, R¹은 OH이고 R²는 C₁-C₄ 알콕시이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6의 화합물에서, R¹은 OH이고 R²는 Cl이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6의 화합물에서, R¹은 OH이고 R²는 OCH₃이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6의 화합물에서, R¹은 OH이고 R²는 비닐 (또는 에테닐)이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6의 화합물에서, R¹은 OH이고 R²는 1-프로페닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6의 화합물에서, R¹은 -O-(C₁-C₄ 알킬)이고 R²는 할로겐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6의 화합물에서, R¹은 -O-(C₁-C₄ 알킬)이고 R²는 C₂-C₄ 알케닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6의 화합물에서, R¹은 -O-(C₁-C₄ 알킬)이고 R²는 C₁-C₄ 알콕시이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6의 화합물에서, R¹은 -O-(C₁-C₄ 알킬)이고 R²는 Cl이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6의 화합물에서, R¹은 -O-(C₁-C₄ 알킬)이고 R²는 OCH₃이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6의 화합물에서, R¹은 -O-(C₁-C₄ 알킬)이고 R²는 비닐 (또는 에테닐)이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6의 화합물에서, R¹은 -O-(C₁-C₄ 알킬)이고 R²는 1-프로페닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6의 화합물에서, R¹은 OCH₃이고 R²는 할로겐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6의 화합물에서, R¹은 OCH₃이고 R²는 C₂-C₄ 알케닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6의 화합물에서, R¹은 OCH₃이고 R²는 C₁-C₄ 알콕시이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6의 화합물에서, R¹은 OCH₃이고 R²는 Cl이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6의 화합물에서, R¹은 OCH₃이고 R²는 OCH₃이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6의 화합물에서, R¹은 OCH₃이고 R²는 비닐 (또는 에테닐)이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6의 화합물에서, R¹은 OCH₃이고 R²는 1-프로페닐이다.

[0194] 한 실시양태에서, 하기 화학식 I-6a, I-6b, 또는 I-6c의 화합물, 또는 그의 N-옥시드 또는 농업상 허용되는 염이 본원에 제공된다.



[0195]

[0196] 상기 식에서, R^1 , R^2 , R^3 , R^4 , 및 X_2 는 본원의 다른 곳에서 정의된다.

[0197]

한 실시양태에서, 화학식 I-6a의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 할로젠이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6a의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 C_2 - C_4 알케닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6a의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 C_1 - C_4 알콕시이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6a의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 Cl이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6a의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 OCH_3 이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6a의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 비닐 (또는 에테닐)이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6a의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 1-프로페닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6a의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4)$ 알킬)이고 R^2 는 할로젠이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6a의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4)$ 알킬)이고 R^2 는 C_2 - C_4 알케닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6a의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4)$ 알킬)이고 R^2 는 C_1 - C_4 알콕시이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6a의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4)$ 알킬)이고 R^2 는 Cl이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6a의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4)$ 알킬)이고 R^2 는 OCH_3 이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6a의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4)$ 알킬)이고 R^2 는 비닐 (또는 에테닐)이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6a의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4)$ 알킬)이고 R^2 는 1-프로페닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6a의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 할로젠이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6a의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 C_2 - C_4 알케닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6a의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 C_1 - C_4 알콕시이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6a의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 Cl이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6a의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 OCH_3 이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6a의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 비닐 (또는 에테닐)이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6a의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 1-프로페닐이다.

[0198]

한 실시양태에서, 화학식 I-6b의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 할로젠이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6b의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 C_2 - C_4 알케닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6b의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 C_1 - C_4 알콕시이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6b의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 Cl이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6b의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 OCH_3 이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6b의 화합물에서, R^1 은

OH이고 R^2 는 비닐 (또는 에테닐)이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6b의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 1-프로페닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6b의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4 \text{ 알킬})$ 이고 R^2 는 할로젠이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6b의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4 \text{ 알킬})$ 이고 R^2 는 C_2-C_4 알케닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6b의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4 \text{ 알킬})$ 이고 R^2 는 C_1-C_4 알콕시이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6b의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4 \text{ 알킬})$ 이고 R^2 는 Cl이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6b의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4 \text{ 알킬})$ 이고 R^2 는 OCH_3 이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6b의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4 \text{ 알킬})$ 이고 R^2 는 비닐 (또는 에테닐)이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6b의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4 \text{ 알킬})$ 이고 R^2 는 1-프로페닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6b의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 할로젠이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6b의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 C_2-C_4 알케닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6b의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 C_1-C_4 알콕시이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6b의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 Cl이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6b의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 OCH_3 이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6b의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 비닐 (또는 에테닐)이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6b의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 1-프로페닐이다.

[0199]

한 실시양태에서, 화학식 I-6c의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 할로젠이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6c의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 C_2-C_4 알케닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6c의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 C_1-C_4 알콕시이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6c의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 Cl이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6c의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 OCH_3 이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6c의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 비닐 (또는 에테닐)이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6c의 화합물에서, R^1 은 OH이고 R^2 는 1-프로페닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6c의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4 \text{ 알킬})$ 이고 R^2 는 할로젠이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6c의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4 \text{ 알킬})$ 이고 R^2 는 C_2-C_4 알케닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6c의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4 \text{ 알킬})$ 이고 R^2 는 C_1-C_4 알콕시이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6c의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4 \text{ 알킬})$ 이고 R^2 는 Cl이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6c의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4 \text{ 알킬})$ 이고 R^2 는 OCH_3 이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6c의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4 \text{ 알킬})$ 이고 R^2 는 비닐 (또는 에테닐)이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6c의 화합물에서, R^1 은 $-O-(C_1-C_4 \text{ 알킬})$ 이고 R^2 는 1-프로페닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6c의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 할로젠이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6c의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 C_2-C_4 알케닐이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6c의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 C_1-C_4 알콕시이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6c의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 Cl이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6c의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 OCH_3 이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6c의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 비닐 (또는 에테닐)이다. 한 실시양태에서, 화학식 I-6c의 화합물에서, R^1 은 OCH_3 이고 R^2 는 1-프로페닐이다.

[0200]

한 실시양태에서, X_1 은 H이다. 한 실시양태에서, X_1 은 F이다. 한 실시양태에서, X_1 은 Br이다. 한 실시양태에서, X_1 은 I이다. 한 실시양태에서, X_1 은 에티닐이다. 한 실시양태에서, X_1 은 CF_2H 이다. 한 실시양태에서, X_1 은

OCF₂H이다. 한 실시양태에서, X₁은 OCF₃이다. 한 실시양태에서, X₁은 CN이다. 한 실시양태에서, X₁은 CONH₂이다. 한 실시양태에서, X₁은 CO₂H이다. 한 실시양태에서, X₁은 CO₂CH₃이다. 한 실시양태에서, X₁은 NO₂이다.

[0201] 일부 실시양태에서, X₁은 H, F, Br, I, 에틸닐, CF₂H, OCF₂H, OCF₃, CN, CONH₂, CO₂CH₃, 또는 NO₂이다.

[0202] 일부 실시양태에서, X₁은 F이다. 일부 실시양태에서, X₁은 Br 또는 I이다.

[0203] 한 실시양태에서, X₂는 H이다. 한 실시양태에서, X₂는 F이다. 한 실시양태에서, X₂는 Cl이다. 한 실시양태에서, X₂는 Br이다. 한 실시양태에서, X₂는 I이다. 한 실시양태에서, X₂는 에틸닐이다. 한 실시양태에서, X₂는 CH₃이다. 한 실시양태에서, X₂는 CFH₂이다. 한 실시양태에서, X₂는 CF₂H이다. 한 실시양태에서, X₂는 CF₃이다. 한 실시양태에서, X₂는 OCF₂H이다. 한 실시양태에서, X₂는 OCF₃이다. 한 실시양태에서, X₂는 CN이다. 한 실시양태에서, X₂는 CONH₂이다. 한 실시양태에서, X₂는 CO₂H이다. 한 실시양태에서, X₂는 NO₂이다.

[0204] 일부 실시양태에서, X₂는 H, Cl, Br, I, 에틸닐, CH₃, CF₂H, CF₃, OCF₂H, 또는 CN이다.

[0205] 일부 실시양태에서, X₂는 H, F, Br, I, 에틸닐, CH₃, CF₃, OCF₂H, 또는 CN이다.

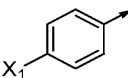
[0206] 일부 실시양태에서, X₂는 F 또는 Cl이다. 일부 실시양태에서, X₂는 Br 또는 I이다.

[0207] 한 실시양태에서, X₃는 H이다. 한 실시양태에서, X₃는 F이다. 한 실시양태에서, X₃는 Br이다. 한 실시양태에서, X₃는 I이다. 한 실시양태에서, X₃는 에틸닐이다. 한 실시양태에서, X₃는 CH₃이다. 한 실시양태에서, X₃는 CFH₂이다. 한 실시양태에서, X₃는 CF₂H이다. 한 실시양태에서, X₃는 CF₃이다. 한 실시양태에서, X₃는 OCF₂H이다. 한 실시양태에서, X₃는 OCF₃이다. 한 실시양태에서, X₃는 CN이다. 한 실시양태에서, X₃는 CONH₂이다. 한 실시양태에서, X₃는 CO₂H이다. 한 실시양태에서, X₃는 NO₂이다.

[0208] 일부 실시양태에서, X₃는 H, Br, I, 에틸닐, OCF₂H, CN, 또는 NO₂이다.

[0209] 일부 실시양태에서, X₃는 H, F, Br, I, CH₃, CF₂H, CF₃, OCF₂H, 또는 CN이다.

[0210] 일부 실시양태에서, X₃는 F 또는 Cl이다. 일부 실시양태에서, X₃는 Br 또는 I이다.

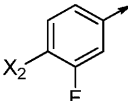
[0211] 한 실시양태에서, Ar이  인 경우에, X는 N, CH, CF, CCl, 또는 CCH₃이고, 단

[0212] i) X가 N인 경우에 R²는 Cl 또는 비닐이 아니고;

[0213] ii) R²가 Cl이고 X가 CH인 경우에 X₁은 H, F, OCF₃, 또는 CN이 아니고;

[0214] iii) R²가 OCH₃이고 X가 CF인 경우에 X₁은 F, I, CN, 또는 에틸닐이 아니고;

[0215] iv) X가 CCl인 경우에 X₁은 H가 아니다.

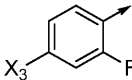
[0216] 한 실시양태에서, Ar이  인 경우에, X는 N, CH, CF, CCl, 또는 CCH₃이고, 단

[0217] i) X가 N인 경우에 R²는 Cl이 아니고;

[0218] ii) R²가 OCH₃ 또는 비닐이고 X가 N인 경우에 X₂는 Cl이 아니고;

[0219] iii) R²가 Cl이고 X가 CH인 경우에 X₂는 Cl이 아니고;

[0220] iv) R^2 가 OCH_3 이고 X가 CF인 경우에 X_2 는 Cl, Br, I, 또는 CF_3 이 아니다.

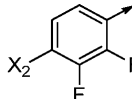
[0221] 한 실시양태에서, Ar이  인 경우에, X는 N, CH, 또는 CF이고, 단

[0222] i) X가 N인 경우에 R^2 는 Cl이 아니고;

[0223] ii) R^2 가 OCH_3 이고 X가 N인 경우에 X_3 은 CH_3 이 아니고;

[0224] iii) R^2 가 Cl이고 X가 CH인 경우에 X_3 은 H, F, 또는 CH_3 이 아니고;

[0225] iv) R^2 가 OCH_3 이고 X가 CF인 경우에 X_3 은 Br 또는 I가 아니다.

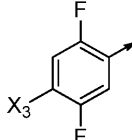
[0226] 한 실시양태에서, Ar이  인 경우에, X는 N, CH, 또는 CF이고, 단

[0227] i) X가 N인 경우에 R^2 는 Cl이 아니고;

[0228] ii) R^2 가 OCH_3 또는 비닐이고 X가 N인 경우에 X_2 는 Cl이 아니고;

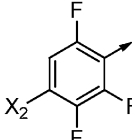
[0229] iii) R^2 가 Cl이고 X가 CH인 경우에 X_2 는 F가 아니고;

[0230] iv) R^2 가 OCH_3 이고 X가 CF인 경우에 X_2 는 Cl, Br, I, 또는 CF_3 이 아니다.

[0231] 한 실시양태에서, Ar이  인 경우에, X는 N, CH, 또는 CF이고, 단

[0232] i) R^2 가 Cl이고 X가 N인 경우에 X_3 은 CH_3 이 아니고;

[0233] ii) X가 CF이고 R^2 가 OCH_3 인 경우에 X_3 은 Br 또는 I가 아니다.

[0234] 한 실시양태에서, Ar이  인 경우에, X는 N, CH, 또는 CF이다.

[0235] Ar, X, Y, R^1 , R^2 , R^3 , R^4 , $R^{1'}$, $R^{1''}$, $R^{2''}$, R^{17} , R^{18} , R^{19} , R^{20} , R^{21} , $R^{3'}$, $R^{4'}$, Ar1, Ar2, Ar3, Ar4, Ar5, Ar6, X_1 , X_2 , 및/또는 X_3 , 및/또는 본원에 기재된 다른 치환기의 조합 중 임의의 것은 본 개시내용에 포괄되고, 본원에 구체적으로 제공된다.

[0236] 화합물의 제조 방법

[0237] 화학식 I의 화합물을 합성하기 위한 예시적인 절차가 하기 제공된다.

[0238] 화학식 I의 3,5-이치환된-4-아미노-6-(임의로 치환된 페닐)피콜린산을 다수의 방식으로 제조할 수 있다. 반응식 I에 도시된 바와 같이, 염기, 예컨대 플루오린화칼륨 및 촉매, 예컨대 비스(트리페닐포스핀)-팔라듐(II) 디클로라이드의 존재 하에 극성 양성자성 용매 혼합물, 예컨대 아세토니트릴-물 중에서 온도, 예컨대 110°C에서,

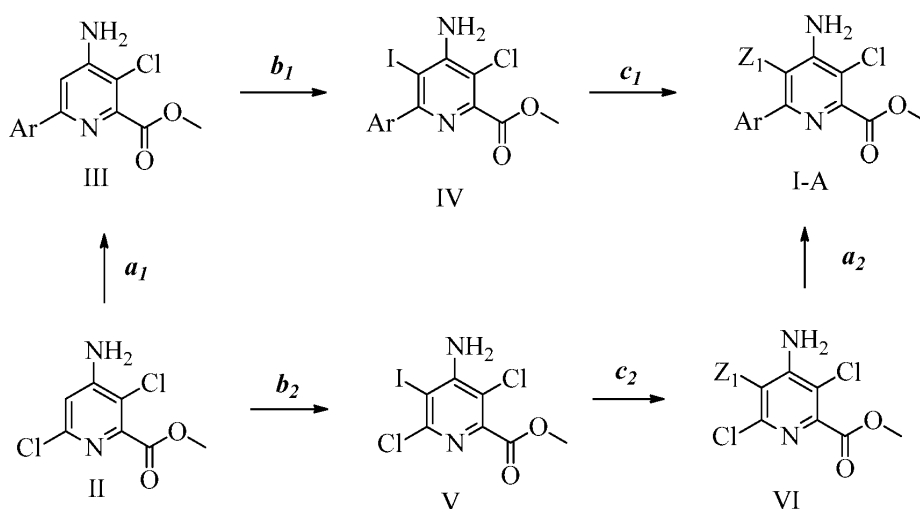
예를 들어 마이크로웨이브 반응기에서 보론산 또는 에스테르와의 스즈키 커플링에 의해 화학식 II의 4-아미노-6-클로로피콜리네이트를 화학식 III의 4-아미노-6-치환된-피콜리네이트 (여기서 Ar은 본원에 정의된 바와 같음)로 전환할 수 있다 (반응 a_1). 화학식 III의 4-아미노-6-치환된-피콜리네이트를 극성 양성자성 용매, 예컨대 메틸 알콜 중에서 아이오딘화 시약, 예컨대 과아이오딘산 및 아이오딘과의 반응에 의해 화학식 IV의 5-아이오도-4-아미노-6-치환된-피콜리네이트로 변환할 수 있다 (반응 b_1). 촉매, 예컨대 비스(트리페닐포스핀)-팔라듐(II) 디클로라이드의 존재 하에 비-반응성 용매, 예컨대 1,2-디클로로에탄 중에서 온도, 예컨대 120-130℃에서, 예를 들어 마이크로웨이브 반응기에서 화학식 IV의 5-아이오도-4-아미노-6-치환된-피콜리네이트의 스타난, 예컨대 테트라메틸주석과의 스틸 커플링으로 화학식 I-A의 5-(치환된)-4-아미노-6-치환된-피콜리네이트 (여기서 Z_1 은 알킬, 알케닐, 알키닐, 할로알케닐 및 알킬티오임)를 제공한다 (반응 c_1).

[0239]

대안적으로, 화학식 II의 4-아미노-6-클로로피콜리네이트를 극성 양성자성 용매, 예컨대 메틸 알콜 중에서 아이오딘화 시약, 예컨대 과아이오딘산 및 아이오딘과의 반응에 의해 화학식 V의 5-아이오도-4-아미노-6-클로로피콜리네이트로 변환할 수 있다 (반응 b_2). 촉매, 예컨대 비스(트리페닐포스핀)-팔라듐(II) 디클로라이드의 존재 하에 비-반응성 용매, 예컨대 1,2-디클로로에탄 중에서 온도, 예컨대 120-130℃에서, 예를 들어 마이크로웨이브 반응기에서 화학식 V의 5-아이오도-4-아미노-6-클로로피콜리네이트의 스타난, 예컨대 테트라메틸주석과의 스틸 커플링으로 화학식 VI의 5-(치환된)-4-아미노-6-클로로피콜리네이트 (여기서 Z_1 은 알킬, 알케닐, 알키닐, 할로알케닐 및 알킬티오임)를 제공한다 (반응 c_2). 염기, 예컨대 플루오린화칼륨 및 촉매, 예컨대 비스(트리페닐포스핀)-팔라듐(II) 디클로라이드의 존재 하에 극성 양성자성 용매 혼합물, 예컨대 아세토니트릴-물 중에서 온도, 예컨대 110℃에서, 예를 들어 마이크로웨이브 반응기에서 보론산 또는 에스테르와의 스즈키 커플링에 의해 화학식 VI의 5-치환된-4-아미노-6-클로로피콜리네이트를 화학식 I-A의 5-치환된-4-아미노-6-치환된-피콜리네이트 (여기서 Ar은 본원에 정의된 바와 같음)로 전환할 수 있다 (반응 a_2).

[0240]

<반응식 I>



[0241]

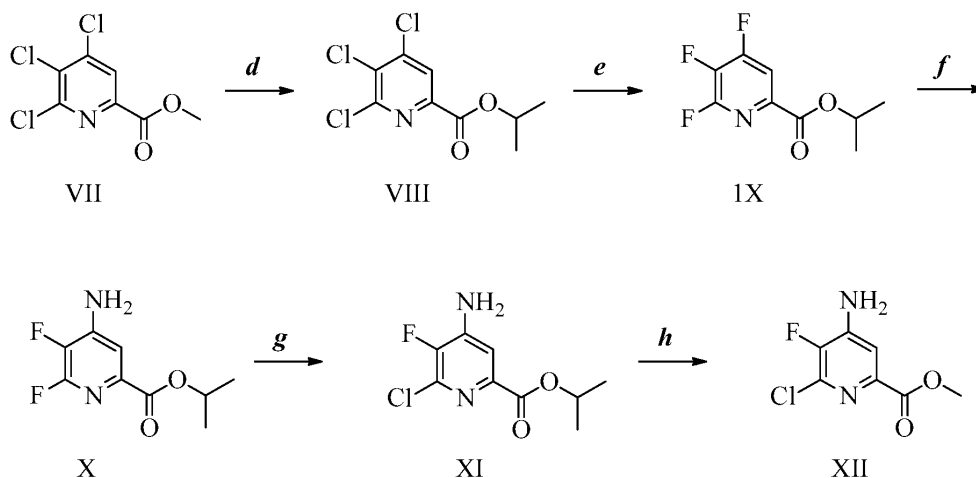
[0242]

반응식 II에 도시된 바와 같이, 화학식 VII의 4,5,6-트리클로로피콜린산을, 예를 들어 환류 온도에서 딤-스타크 (Dean-Stark) 조건 하에 이소프로필 알콜 및 진한 황산과의 반응에 의해 화학식 VIII의 상응하는 이소프로필 에스테르로 전환할 수 있다 (반응 d). 화학식 VIII의 이소프로필 에스테르를 극성 비양성자성 용매, 예컨대 디메틸 술폭시드 (DMSO) 중에서 온도, 예컨대 80℃에서 딤-스타크 조건 하에 플루오라이드 이온 공급원, 예컨대 플루오린화세슘과 반응시켜 화학식 IX의 이소프로필 4,5,6-트리플루오로피콜리네이트를 수득할 수 있다 (반응 e). 화학식 IX의 이소프로필 4,5,6-트리플루오로피콜리네이트를 극성 비양성자성 용매, 예컨대 DMSO 중에서 질소 공급원, 예컨대 암모니아로 아민화하여 화학식 X의 4-아미노-5,6-디플루오로피콜리네이트를 제조할 수 있다 (반응 f). 화학식 X의 4-아미노-5,6-디플루오로피콜리네이트의 6-위치에서의 플루오로 치환기는, 예를 들어 디옥산 중에서 파르 반응기에서 온도, 예컨대 100℃에서 클로라이드 공급원, 예컨대 염화수소에 의한 처리로 클로로 치환기와 교환하여 화학식 XI 4-아미노-5-플루오로-6-클로로-피콜리네이트를 제조할 수 있다 (반응 g). 화학식 XI의 4-아미노-5-플루오로-6-클로로피콜리네이트를 메틸 알콜 중에서 환류 온도에서 티타늄(IV) 이소프로폭시드

와의 반응에 의해 화학식 XII의 상응하는 메틸 에스테르로 에스테르교환할 수 있다 (반응 h).

[0243]

<반응식 II>



[0244]

[0245]

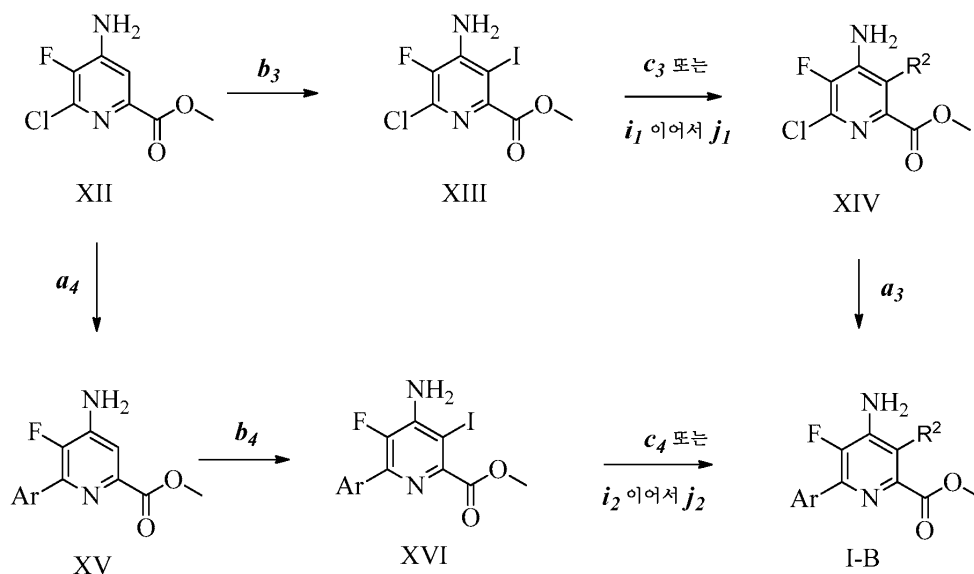
반응식 III에 도시된 바와 같이, 화학식 XII의 4-아미노-5-플루오로-6-클로로피콜리네이트를 극성 양성자성 용매, 예컨대 메틸 알콜 중에서 아이오딘화 시약, 예컨대 과아이오딘산 및 아이오딘과의 반응에 의해 화학식 XIII의 3-아이오도-4-아미노-5-플루오로-6-클로로피콜리네이트로 변환할 수 있다 (반응 b₃). 화학식 XIII의 3-아이오도-4-아미노-5-플루오로-6-클로로피콜리네이트를 비-반응성 용매, 예컨대 1,2-디클로로에탄 중에서 온도, 예컨대 120-130℃에서, 예를 들어 마이크로웨이브 반응기에서 촉매, 예컨대 비스(트리페닐포스핀)-팔라듐(II) 디클로라이드의 존재 하에 스타난, 예컨대 트리부틸(비닐)스탄난과의 스틸 커플링으로 화학식 XIV의 3-(치환된)-4-아미노-5-플루오로-6-클로로피콜리네이트 (여기서 R²는 알킬, 알케닐, 알킬닐, 할로알케닐 및 알킬티오임)를 제공할 수 있다 (반응 c₃). 대안적으로, 화학식 XIII의 3-아이오도-4-아미노-5-플루오로-6-클로로피콜리네이트를 극성 양성자성 용매, 예컨대 메틸 알콜의 존재 하에 온도, 예컨대 65℃에서 탄산세슘 및 구리(I) 아이오다이드 및 1,10-페난트롤린 둘 다의 촉매량으로 처리하여 화학식 XIV의 3-(치환된)-4-아미노-5-플루오로-6-클로로피콜린산 (여기서 R²는 알콕시 또는 할로알콕시임)을 제공할 수 있으며 (반응 i₁), 이를 50℃에서, 예를 들어 염화수소 (기체) 및 메틸 알콜로 처리하여 메틸 에스테르로 에스테르화할 수 있다 (반응 j₁). 염기, 예컨대 플루오린화칼륨 및 촉매, 예컨대 비스(트리페닐포스핀)-팔라듐(II) 디클로라이드의 존재 하에 극성 양성자성 용매 혼합물, 예컨대 아세트니트릴-물 중에서 온도, 예컨대 110℃에서, 예를 들어 마이크로웨이브 반응기에서 보론산 또는 에스테르와의 스즈키 커플링에 의해 화학식 XIV의 3-(치환된)-4-아미노-5-플루오로-6-클로로피콜리네이트를 화학식 I-B의 4-아미노-6-치환된-피콜리네이트 (여기서 Ar은 본원에 정의된 바와 같음)로 전환할 수 있다 (반응 a₃).

[0246]

대안적으로, 화학식 XII의 4-아미노-5-플루오로-6-클로로피콜리네이트를 극성 양성자성 용매 혼합물, 예컨대 아세트니트릴-물 중에서 염기, 예컨대 플루오린화칼륨 및 촉매, 예컨대 비스(트리페닐포스핀)-팔라듐(II) 디클로라이드의 존재 하에 온도, 예컨대 110℃에서, 예를 들어 마이크로웨이브 반응기에서 보론산 또는 에스테르와의 스즈키 커플링을 통해 화학식 XV의 4-아미노-5-플루오로-6-치환된-피콜리네이트 (여기서 Ar은 본원에 정의된 바와 같음)로 전환할 수 있다 (반응 a₄). 화학식 XV의 4-아미노-5-플루오로-6-치환된-피콜리네이트를 극성, 양성자성 용매, 예컨대 메틸 알콜 중에서 아이오딘화 시약, 예컨대 과아이오딘산 및 아이오딘과의 반응에 의해 화학식 XVI의 3-아이오도-4-아미노-5-플루오로-6-치환된-피콜리네이트로 변환할 수 있다 (반응 b₄). 촉매, 예컨대 비스(트리페닐포스핀)-팔라듐(II) 디클로라이드의 존재 하에 비-반응성 용매, 예컨대 1,2-디클로로에탄 중에서 온도, 예컨대 120-130℃에서, 예를 들어 마이크로웨이브 반응기에서 화학식 XVI의 3-아이오도-4-아미노-5-플루오로-6-치환된-피콜리네이트의 스타난, 예컨대 트리부틸(비닐)스탄난과의 스틸 커플링으로 화학식 I-B의 3-(치환된)-4-아미노-5-플루오로-6-치환된-피콜리네이트 (여기서 R²는 알킬, 알케닐, 알킬닐, 할로알케닐 및 알킬티오임)를 제공한다 (반응 c₄). 대안적으로, 화학식 XVI의 3-아이오도-4-아미노-5-플루오로-6-치환된-피콜리네이트를 극성 양성자성 용매, 예컨대 메틸 알콜의 존재 하에 온도, 예컨대 65℃에서 탄산세슘 및 구리(I) 아이오다

이드 및 1,10-페난트롤린 둘 다의 촉매량으로 처리하여 화학식 I-B의 3-(치환된)-4-아미노-5-플루오로-6-치환된-피콜린산 (여기서 R^2 는 알콕시 또는 할로알콕시임)을 제공할 수 있으며 (반응 i_2), 이를 온도, 예컨대 50°C에서, 예를 들어 염화수소 (기체) 및 메틸 알콜로 처리하여 메틸 에스테르로 에스테르화할 수 있다 (반응 j_2).

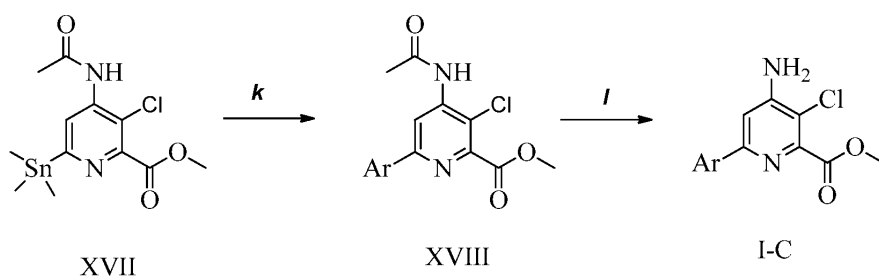
[0247] <반응식 III>



[0248]

[0249] 반응식 IV에 도시된 바와 같이, 화학식 XVII의 4-아세트아미도-6-(트리메틸스탄닐)피콜리네이트를 아릴 브로마이드 또는 아릴 아이오다이드와의 스틸 커플링에 의해 촉매, 예컨대 비스(트리페닐포스핀)-팔라듐(II) 디클로라이드의 존재 하에 용매, 예컨대 1,2-디클로로에탄 중에서, 예를 들어 환류 온도에서 화학식 XVIII의 4-아세트아미도-6-치환된-피콜리네이트 (여기서 Ar은 본원에 정의된 바와 같음)로 전환할 수 있다 (반응 k). 화학식 I-C의 4-아미노-6-치환된-피콜리네이트 (여기서 Ar은 본원에 정의된 바와 같음)를 표준 탈보호 방법, 예컨대 메탄올 중 염산 기체에 의해 화학식 XVIII의 4-아세트아미도-6-치환된-피콜리네이트로부터 합성할 수 있다 (반응 l).

[0250] <반응식 IV>

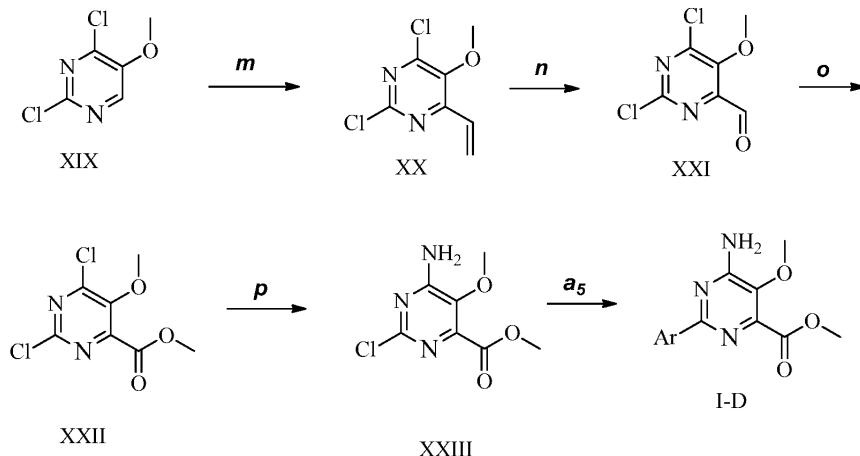


[0251]

[0252] 반응식 V에 도시된 바와 같이, 2,4-디클로로-5-메톡시피리미딘 (XIX)을 극성 비양성자성 용매, 예컨대 테트라히드로푸란 중에서 비닐 브로민화마그네슘과의 반응에 의해 2,4-디클로로-5-메톡시-6-비닐피리미딘 (XX)으로 변환할 수 있다 (반응 m). 2,4-디클로로-5-메톡시-6-비닐피리미딘 (XX)을, 예를 들어 디클로로메탄:메탄올 용매 혼합물 중에서 오존으로 처리하여 2,6-디클로로-5-메톡시피리미딘-4-카르복스알데히드 (XXI)로 변환할 수 있다 (반응 n). 2,6-디클로로-5-메톡시피리미딘-4-카르복스알데히드 (XXI)를, 예를 들어 메탄올:물 용매 혼합물 중에서 브로민으로 처리하여 메틸 2,6-디클로로-5-메톡시피리미딘-4-카르복실레이트 (XXII)로 변환할 수 있다 (반응 o). 메틸 2,6-디클로로-5-메톡시피리미딘-4-카르복실레이트 (XXII)를 용매, 예컨대 DMSO 중에서 암모니아 (예를 들어, 2 당량)로 처리하여 메틸 6-아미노-2-클로로-5-메톡시피리미딘-4-카르복실레이트 (XXIII)로 변환할 수 있다 (반응 p). 최종적으로, 화학식 I-D의 6-아미노-2-치환된-5-메톡시피리미딘-4-카르복실레이트 (여기서

Ar은 본원에 정의된 바와 같음)를 염기, 예컨대 플루오린화칼륨 및 촉매, 예컨대 비스(트리페닐포스핀)-팔라듐 (II) 디클로라이드의 존재 하에 극성, 양성자성 용매 혼합물, 예컨대 아세토니트릴-물 중에서 온도, 예컨대 110 °C에서, 예를 들어 마이크로웨이브 반응기에서 보론산 또는 에스테르와의 스즈키 커플링에 의해 6-아미노-2-클로로-5-메톡시피리미딘-4-카르복실레이트 (XXIII)를 이용하여 제조할 수 있다 (반응 a₅).

[0253] <반응식 V>



[0254]

[0255] 이들 방법 중 임의의 것에 의해 수득된 화학식 I-A, I-B, I-C 및 I-D의 화합물은 통상의 수단에 의해 회수할 수 있고, 표준 절차, 예컨대 재결정화 또는 크로마토그래피에 의해 정제할 수 있다. 화학식 I의 화합물은 관련 기술분야에 널리 공지된 표준 방법을 사용하여 화학식 I-A, I-B, I-C 및 I-D의 화합물로부터 제조할 수 있다.

[0256] 조성물 및 방법

[0257] 일부 실시양태에서, 본원에 제공된 화합물은 적어도 하나의 농업상 허용되는 보조제 또는 담체와 함께 제조 유효량의 화합물을 함유하는 혼합물에서 사용된다. 예시적인 보조제 또는 담체는 작물의 존재 하에 선택적 잡초 방제를 위해 조성물을 적용하는데 사용되는 농도에서 가치있는 작물에 식물독성이거나 또는 유의하게 식물독성이지 않고/거나 본원에 제공된 화합물 또는 다른 조성물 성분과 화학적으로 반응하거나 또는 유의하게 반응하지 않는 것들을 포함한다. 이러한 혼합물은 잡초 또는 그의 생육지에 직접 적용을 위해 설계될 수 있거나, 또는 적용 전에 추가의 담체 및 보조제로 희석되는 농축물 또는 제제일 수 있다. 이들은 고체, 예컨대 예를 들어 분진, 과립, 수분산성 과립 또는 습윤성 분말이거나, 또는 액체, 예컨대 유화성 농축물, 용액, 에멀전 또는 현탁액일 수 있다. 이들은 또한 프리-믹스 또는 탱크-믹스로서 제공될 수 있다.

[0258] 개시내용의 제조 혼합물의 제조에 유용한 적합한 농업용 보조제 및 담체는 통상의 기술자에게 널리 공지되어 있다. 이들 보조제의 일부는 작물 오일 농축물 (미네랄 오일 (85%) + 유화제 (15%)); 노닐페놀 에톡실레이트; 벤질코코알킬디메틸 4급 암모늄 염; 석유 탄화수소, 알킬 에스테르, 유기 산 및 음이온성 계면활성제의 블렌드; C₉-C₁₁ 알킬폴리글리코시드; 포스페이트화 알콜 에톡실레이트; 천연 1급 알콜 (C₁₂-C₁₆) 에톡실레이트; 디-sec-부틸페놀 EO-PO 블록 공중합체; 폴리실록산-메틸 캡; 노닐페놀 에톡실레이트 + 우레아 질산암모늄; 유화된 메틸화 중자 오일; 트리데실 알콜 (합성) 에톡실레이트 (8EO); 탈로우 아민 에톡실레이트 (15 EO); PEG (400) 디올레아이트-99를 포함하지만, 이에 제한되는 것은 아니다.

[0259] 사용될 수 있는 액체 담체는 물 및 유기 용매를 포함한다. 전형적으로 사용되는 유기 용매 석유 분획 또는 탄화수소, 예컨대 미네랄 오일, 방향족 용매, 파라핀계 오일 등; 식물성 오일, 예컨대 대두 오일, 평지씨 오일, 올리브 오일, 피마자 오일, 해바라기씨 오일, 코코넛 오일, 옥수수 오일, 목화씨 오일, 아마인 오일, 팜 오일, 땅콩 오일, 홍화 오일, 참깨 오일, 유동 오일 등; 상기 식물성 오일의 에스테르; 모노알콜 또는 2가, 3가, 또는 다른 저가 폴리알콜 (4-6개의 히드록시 함유)의 에스테르, 예컨대 2-에틸헥실 스테아레이트, n-부틸 올레레이트, 이소프로필 미리스테이트, 프로필렌 글리콜 디올레레이트, 디-옥틸 숙시네이트, 디-부틸 아디페이트, 디-옥틸 프탈레이트 등; 모노-, 디- 및 폴리-카르복실산의 에스테르 등을 포함하지만, 이에 제한되는 것은 아니다. 구체적인 유기 용매는 톨루엔, 크실렌, 석유 나프타, 작물 오일, 아세톤, 메틸 에틸 케톤, 시클로헥사논, 트리클로로에틸렌, 퍼클로로에틸렌, 에틸 아세테이트, 아밀 아세테이트, 부틸 아세테이트, 프로필렌 글리콜 모노메틸 에테르 및 디에틸렌 글리콜 모노메틸 에테르, 메틸 알콜, 에틸 알콜, 이소프로필 알콜, 아밀 알콜, 에틸렌 글리콜, 프로필렌 글리콜, 글리세린, N-메틸-2-피롤리디논, N,N-디메틸 알킬아미드, 디메틸 술폰, 액

체 비료 등을 포함한다. 일부 실시양태에서, 물은 농축물의 희석을 위한 담체이다.

- [0260] 적합한 고체 담체는 활석, 피로필라이트 점토, 실리카, 아타폴구스 점토, 카올린 점토, 규조토(kieselguhr), 백악, 규조토(diatomaceous earth), 석회, 탄산칼슘, 벤토나이트 점토, 폴러토, 면설피, 밀가루, 대두분, 부식, 목분, 호두 껍질 가루, 리그닌 등을 포함한다.
- [0261] 일부 실시양태에서, 하나 이상의 표면-활성제가 본 개시내용의 조성물에서 이용된다. 일부 실시양태에서, 이러한 표면-활성제는 고체 및 액체 조성물 둘 다에, 예를 들어 적용 전에 담체로 희석되도록 설계된 것에 사용된다. 표면-활성제는 특정상 음이온성, 양이온성 또는 비이온성일 수 있고, 유화제, 습윤제, 현탁화제로, 또는 다른 목적으로 사용될 수 있다. 제제의 관련 기술분야에서 통상적으로 사용되고, 본 발명의 제제에서 또한 사용될 수 있는 계면활성제는, 특히 문헌 [McCutcheon's Detergents and Emulsifiers Annual, MC Publishing Corp., Ridgewood, New Jersey, 1998, 및 Encyclopedia of Surfactants, Vol. I-III, Chemical Publishing Co., New York, 1980-81]에 기재되어 있다. 전형적인 표면-활성제는 알킬 술페이트의 염, 예컨대 디에탄올암모늄 라우릴 술페이트; 알킬아릴술포네이트 염, 예컨대 칼슘 도데실벤젠술포네이트; 알킬페놀-알킬렌 옥시드 부가 생성물, 예컨대 노닐페놀-C₁₈ 에톡실레이트; 알콜-알킬렌 옥시드 부가 생성물, 예컨대 트리데실 알콜-C₁₆ 에톡실레이트; 비누, 예컨대 스테아르산나트륨; 알킬나프탈렌-술포네이트 염, 예컨대 소듐 디부틸나프탈렌술포네이트; 술포숙시네이트 염의 디알킬 에스테르, 예컨대 소듐 디(2-에틸헥실) 술포숙시네이트; 소르비톨 에스테르, 예컨대 소르비톨 올레에이트; 4급 아민, 예컨대 라우릴 트리메틸암모늄 클로라이드; 지방산의 폴리에틸렌 글리콜 에스테르, 예컨대 폴리에틸렌 글리콜 스테아레이트; 에틸렌 옥시드 및 프로필렌 옥시드의 블록 공중합체; 모노 및 디알킬 포스페이트 에스테르의 염; 식물성 또는 종자 오일, 예컨대 대두 오일, 팽지씨/카놀라 오일, 올리브 오일, 피마자 오일, 해바라기씨 오일, 코코넛 오일, 옥수수 오일, 목화씨 오일, 아마인 오일, 팜 오일, 땅콩 오일, 홍화 오일, 참깨 오일, 유동 오일 등; 및 상기 식물성 오일의 에스테르, 예를 들어 메틸 에스테르를 포함한다.
- [0262] 종종, 이들 물질 중 일부, 예컨대 식물성 오일 또는 종자 오일 및 그의 에스테르는 농업용 보조제로서, 액체 담체로서, 또는 표면 활성제로서 상호교환적으로 사용될 수 있다.
- [0263] 농업용 조성물에 일반적으로 사용되는 다른 보조제는 상용화제, 소포제, 봉쇄제, 중화제 및 완충제, 부식 억제제, 염료, 부취제, 확산제, 침투 보조제, 점착제, 분산제, 증점제, 동결점 강하제, 향미생물제 등을 포함한다. 조성물은 또한 다른 상용성 성분, 예를 들어 다른 제초제, 식물 성장 조절제, 살진균제, 살곤충제 등을 함유할 수 있고, 액체 비료 또는 고체 입상 비료 담체, 예컨대 질산암모늄, 우레아 등과 함께 제제화될 수 있다.
- [0264] 본 개시내용의 제초 조성물 중의 활성 성분의 농도는 일반적으로 약 0.001 내지 약 98 중량%이다. 약 0.01 내지 약 90 중량%의 농도가 종종 사용된다. 농축물로 사용되기 위해 설계된 조성물에서, 활성 성분은 일반적으로 약 5 내지 약 98 중량%, 바람직하게는 약 10 내지 약 90 중량%의 농도로 존재한다. 이러한 조성물은 전형적으로 적용 전에 불활성 담체, 예컨대 물로 희석된다. 잡초 또는 잡초의 생육지에 통상적으로 적용되는 희석된 조성물은 약 0.0001 내지 약 1 중량% 활성 성분을 함유하고, 바람직하게는 약 0.001 내지 약 0.05 중량%를 함유한다.
- [0265] 본 발명의 조성물은 통상의 지면 또는 항공 살분기, 분무기 및 과립 어플리케이터를 사용함으로써, 관개수 또는 논용수에 첨가함으로써 및 통상의 기술자에게 공지된 다른 통상적인 수단에 의해 잡초 또는 그의 생육지에 적용될 수 있다.
- [0266] 일부 실시양태에서, 본원에 기재된 화합물 및 조성물은 출아후 적용, 출아전 적용, 담수된 논벼 또는 수역에 대한 수중 적용 또는 고사(burn-down) 적용으로서 적용될 수 있다.
- [0267] 일부 실시양태에서, 본원에 제공된 화합물 및 조성물은 시트러스, 사과, 고무, 오일, 팜, 임업, 직파, 담수직파 및 이식 벼, 밀, 보리, 귀리, 호밀, 소르굼, 옥수수/메이즈, 목장, 목초지, 방목장, 휴경지, 잔디, 나무 및 덩굴 과수원, 수생 또는 줄뿌림 작물을 포함하지만 이에 제한되는 것은 아닌 작물에서, 뿐만 아니라 비-작물 환경, 예를 들어 산업적 식생 관리 (IVM) 또는 공공 통행로에서 잡초를 방제하는데 이용된다. 일부 실시양태에서, 화합물 및 조성물은 목본 식물, 광엽 및 화본과 잡초 또는 사초를 방제하는데 사용된다.
- [0268] 일부 실시양태에서, 본원에 제공된 화합물 및 조성물은 벼에서 바람직하지 않은 식생을 방제하는데 이용된다. 특정 실시양태에서, 바람직하지 않은 식생은 브라키아리아 플라티필라 (그로셉.) 나쉬(*Brachiaria platyphylla* (Groseb.) Nash) (광엽 시그널그래스, BRAPP), 디기타리아 산구이날리스 (L.) 스코프.(*Digitaria sanguinalis*

(L.) Scop.) (대형 크랩그래스, DIGSA), 에키노클로아 크루스-갈리 (L.) P. 보브.(*Echinochloa crus-galli* (L.) P. Beauv.) (반야드그래스, ECHCG), 에키노클로아 콜로눔 (L.) 링크(*Echinochloa colonum* (L.) LINK) (정글라이스, ECHCO), 에키노클로아 오리조이데스 (아르드.) 프리치(*Echinochloa oryzoides* (Ard.) Fritsch) (열리 워터그래스, ECHOR), 에키노클로아 오리지콜라 (바싱어) 바싱어(*Echinochloa oryzicola* (Vasinger) Vasinger) (레이트 워터그래스, ECHPH), 이스카에뮴 루고숨 살리슘.(*Ischaemum rugosum* Salisb.) (사라몰라그래스, ISCRU), 랩토클로아 키넨시스 (L.) 니스(*Leptochloa chinensis* (L.) Nees) (중국 스프랭글톱, LEFCH), 랩토클로아 파시쿨라리스 (람.) 그레이(*Leptochloa fascicularis* (Lam.) Gray) (비어디드 스프랭글톱, LEFFA), 랩토클로아 파니코이데스 (프레슬.) 히치크.(*Leptochloa panicoides* (Presl.) Hitchc.) (아마존 스프랭글톱, LEFPA), 파니쿰 디코토미플로룸 (L.) 미척스.(*Panicum dichotomiflorum* (L.) Michx.) (폴 파니쿰, PANDI), 파스팔룸 딜라타툼 포이르.(*Paspalum dilatatum* Poir.) (달리스그래스, PASDI), 시페루스 디포르미스 L.(*Cyperus difformis* L.) (알방동사니, CYPDI), 시페루스 에스쿨렌투스 L.(*Cyperus esculentus* L.) (기름골, CYPES), 시페루스 이리아 L.(*Cyperus iria* L.) (참방동사니, CYPID), 시페루스 로툰두스 L.(*Cyperus rotundus* L.) (향부자, CYPRO), 엘레오카리스(*Eleocharis*) 종 (ELOSS), 펄브리스틸리스 밀리아세아 (L.) 바홀(*Fimbristylis miliacea* (L.) Vahl) (바람하늘지기, FIMMI), 스코에노플렉투스 준코이데스 록스브.(*Schoenoplectus juncoideus* Roxb.) (올챙이고랭이, SCPJU), 스코에노플렉투스 마리티무스 L.(*Schoenoplectus maritimus* L.) (새섬매자기, SCPMA), 스코에노플렉투스 무크로나투스 L.(*Schoenoplectus mucronatus* L.) (좀송이고랭이, SCPMU), 아에쉬노메네(*Aeschynomene*) 종, (조인트베치, AESSS), 알테르난테라 펄록세로이데스 (마트.) 그리셉.(*Alternanthera philoxeroides* (Mart.) Griseb.) (엘리게이터위드, ALRPH), 알리스마 플란타고-아쿠아티카 L.(*Alisma plantago-aquatica* L.) (질경이택사, ALSPA), 아마란투스(*Amaranthus*) 종, (비름 및 아마란스, AMASS), 암만니아 코시네아 로트브.(*Ammannia coccinea* Rottb.) (미국좀부처꽃, AMMCO), 에클립타 알바 (L.) 하스크.(*Eclipta alba* (L.) Hassk.) (한련초, ECLAL), 헤테란테라 리모사 (SW.) 월드./바홀(*Heteranthera limosa* (SW.) Willd./Vahl) (덕샬러드, HETLI), 헤테란테라 레니포르미스 R. & P.(*Heteranthera reniformis* R. & P.) (환엽 머드플랜테인, HETRE), 이포모에아 헤테라세아 (L.) 자크.(*Ipomoea hederacea* (L.) Jacq.) (담쟁이덩굴엽 모닝글로리, IPOHE), 린데르니아 두비아 (L.) 펜넬(*Lindernia dubia* (L.) Pennell) (낮은 폴스 핼퍼벌, LIDDU), 모노코리아 코르사코위이 레겔 & 막크(*Monochoria korsakowii* Regel & Maack) (모노코리아, MOOKA), 모노코리아 바기날리스 (부름. F.) C. 프레슬 엑스 쿠트(*Monochoria vaginalis* (Burm. F.) C. Presl ex Kuhth) (모노코리아, MOOVA), 무르단니아 누디플로라 (L.) 브레난(*Murdannia nudiflora* (L.) Brennan) (도브위드, MUDNU), 폴리고눔 펜실바니쿰 L.(*Polygonum pensylvanicum* L.) (펜실베이니아 스마트위드, POLPY), 폴리고눔 페르시카리아 L.(*Polygonum persicaria* L.) (레이디스튬, POLPE), 폴리고눔 히드로피페로이데스 미척스.(*Polygonum hydropiperoides* Michx.) (마일드 스마트위드, POLHP), 로탈라 인디카 (월드.) 코에네(*Rotala indica* (Willd.) Koehne) (인디안 투스킵, ROTIN), 사기타리아(*Sagittaria*) 종, (화살촉, SAGSS), 세스바니아 엑살타타 (라프.) 코리/리드브. 엑스 힐(*Sesbania exaltata* (Raf.) Cory/Rydb. Ex Hill) (헴프 세스바니아, 세백스), 또는 스펜노클레아 제일라니카 가에르튼.(*Sphenoclea zeylanica* Gaertn.) (구스위드, SPDZE)이다.

[0269] 일부 실시양태에서, 본원에 제공된 화합물 및 조성물은 곡류에서 바람직하지 않은 식생을 방제하는데 이용된다. 특정 실시양태에서, 바람직하지 않은 식생은 알로페쿠루스 미오수로이데스 허드스.(*Alopecurus myosuroides* Huds.) (블랙그래스, ALOMY), 아페라 스피카-벤티 (L.) 보브.(*Apera spica-venti* (L.) Beauv.) (윈드그래스, APESV), 아베나 파투아 L.(*Avena fatua* L.) (야생 귀리, AVEFA), 브로무스 텍토룸 L.(*Bromus tectorum* L.) (다우니 브룸, BROTE), 롤리움 멀티플로룸 람.(*Lolium multiflorum* Lam.) (이탈리안 라이그래스, LOLMU), 팔라리스 미노르 랫츠.(*Phalaris minor* Retz.) (리틀시드 캐나리그래스, PHAMI), 포아 안누아 L.(*Poa annua* L.) (애뉴얼 블루그래스, POAAN), 세타리아 푸밀리아 (포이르.) 로에머 & J.A. 스클테스(*Setaria pumila* (Poir.) Roemer & J.A. Schultes) (황색 폭스테일, SETLU), 세타리아 비리디스 (L.) 보브.(*Setaria viridis* (L.) Beauv.) (녹색 폭스테일, SETVI), 시르시움 아르벤세 (L.) 스코프.(*Cirsium arvense* (L.) Scop.) (캐나다 티슬, CIRAR), 갈리움 아파리네 L.(*Galium aparine* L.) (캐치위드 베드스트로우, GALAP), 코키아 스크파리아 (L.) 스크라드.(*Kochia scoparia* (L.) Schrad.) (코키아, KCHSC), 라미움 푸르푸레움 L.(*Lamium purpureum* L.) (자주색 광대수염, LAMPU), 매트리카리아 레쿠티타 L.(*Matricaria recutita* L.) (야생 카모마일, MATCH), 매트리카리아 매트리카리오이데스 (레스.) 포터(*Matricaria matricarioides* (Less.) Porter) (파인애플위드, MATMT), 파파베르 로에아스 L.(*Papaver rhoeas* L.) (일반 포피, PAPRH), 폴리고눔 콘볼볼루스 L.(*Polygonum convolvulus* L.) (야생 메밀, POLCO), 살솔라 트라구스 L.(*Salsola tragus* L.) (러시안 티슬, SASKR), 스텔라리아 메디아 (L.) 빌.(*Stellaria media* (L.) Vill.) (일반 치크위드, STEME), 베로니카 페르시카 포이르.(*Veronica persica* Poir.) (페르시안 스피드웰, VERPE), 비올라 아르벤시스 무르.(*Viola arvensis* Murr.)

(필드 바이올렛, VIOAR), 또는 비올라 트리콜로르 L. (*Viola tricolor* L.) (야생 바이올렛, VIOTR)이다.

[0270] 일부 실시양태에서, 본원에 제공된 화합물 및 조성물은 방목지 및 목장에서 바람직하지 않은 식생을 방제하는데 이용된다. 특정 실시양태에서, 바람직하지 않은 식생은 암브로시아 아르테미시이폴리아 L. (*Ambrosia artemisiifolia* L.) (일반 래그위드, AMBEL), 카시아 옵투스폴리아 (*Cassia obtusifolia*) (시클 포트, CASOB), 센타우레아 마쿨로사 아우트. 논 램. (*Centaurea maculosa* auct. non Lam.) (스팟 넵위드, CENMA), 시르시움 아르벤세 (L.) 스코프. (*Cirsium arvense* (L.) Scop.) (캐나다 티슬, CIRAR), 콘볼볼루스 아르벤시스 L. (*Convolvulus arvensis* L.) (필드 바인드위드, CONAR), 유포르비아 에술라 L. (*Euphorbia esula* L.) (다엽 스퍼지, EPHES), 락투카 세리올라 L./토른. (*Lactuca serriola* L./Torn.) (가시 상추, LACSE), 플란타고 란세올라타 L. (*Plantago lanceolata* L.) (벽흔 플랜테인, PLALA), 루벡스 오브투스폴리우스 L. (*Rumex obtusifolius* L.) (광엽 도크, RUMOB), 시다 스피노사 L. (*Sida spinosa* L.) (가시 시다, SIDSP), 시나피스 아르벤시스 L. (*Sinapis arvensis* L.) (야생 머스타드, SINAR), 손쿠스 아르벤시스 L. (*Sonchus arvensis* L.) (다년생 소우티슬, SONAR), 솔리다고 (*Solidago*) 종 (골든로드, SOOSS), 타락사쿰 오피시날레 G.H. 웨버 엑스 위저스 (*Taraxacum officinale* G.H. Weber ex Wiggers) (단델리온, TAROF), 트리폴리움 레펜스 L. (*Trifolium repens* L.) (백색 클로버, TRFRE), 또는 우르티카 디오이카 L. (*Urtica dioica* L.) (일반 네틸, URTDI)이다.

[0271] 일부 실시양태에서, 본원에 제공된 화합물 및 조성물은 줄뿌림 작물에서 발견되는 바람직하지 않은 식생을 방제하는데 이용된다. 특정 실시양태에서, 바람직하지 않은 식생은 알로페쿠루스 미오수로이데스 허드스. (*Alopecurus myosuroides* Huds.) (블랙그래스, ALOMY), 아베나 파투아 L. (*Avena fatua* L.) (야생 귀리, AVEFA), 브라키아리아 플라티필라 (그로세.) 나쉬 (*Brachiaria platyphylla* (Groseb.) Nash) (광엽 시그널그래스, BRAPP), 디기타리아 산구이날리스 (L.) 스코프. (*Digitaria sanguinalis* (L.) Scop.) (대형 크랩그래스, DIGSA), 에키노클로아 크루스-갈리 (L.) P. 보브. (*Echinochloa crus-galli* (L.) P. Beauv.) (반야드그래스, ECHCG), 에키노클로아 콜로눔 (L.) 링크 (*Echinochloa colonum* (L.) LINK) (정글라이스, ECHCO), 롤리움 멀티플로룸 램. (*Lolium multiflorum* Lam.) (이탈리안 라이그래스, LOLMU), 파니쿰 디코토미폴로룸 미척스. (*Panicum dichotomiflorum* Michx.) (폴 파니쿰, PANDI), 파니쿰 밀리아세움 L. (*Panicum miliaceum* L.) (야생-프로소 밀렛, PANMI), 세타리아 파베리 헤름. (*Setaria faberi* Herrm.) (자이언트 폭스테일, SETFA), 세타리아 비리디스 (L.) 보브. (*Setaria viridis* (L.) Beauv.) (녹색 폭스테일, SETVI), 소르굼 할레펜세 (L.) 페르스. (*Sorghum halepense* (L.) Pers.) (존슨그래스, SORHA), 소르굼 비콜로르 (L.) 뮌히 ssp. 아룬디나세움 (*Sorghum bicolor* (L.) Moench ssp. Arundinaceum) (췌터케인, SORVU), 시페루스 에스쿨렌투스 L. (*Cyperus esculentus* L.) (기름골, CYPES), 시페루스 로툰두스 L. (*Cyperus rotundus* L.) (향부자, CYPRO), 아부틸론 테오프라스티 메디크. (*Abutilon theophrasti* Medik.) (벨벳립, ABUTH), 아마란투스 (*Amaranthus*) 종 (비름 및 아마란스, AMASS), 암브로시아 아르테미시이폴리아 L. (*Ambrosia artemisiifolia* L.) (일반 래그위드, AMBEL), 암브로시아 프실로스탁키아 DC. (*Ambrosia psilostachya* DC.) (서부 래그위드, AMBPS), 암브로시아 트리피다 L. (*Ambrosia trifida* L.) (자이언트 래그위드, AMBTR), 아스클레피아스 시리아카 L. (*Asclepias syriaca* L.) (일반 밀크위드, ASCSY), 케노포디움 알BUM L. (*Chenopodium album* L.) (일반 램스쿼터스, CHEAL), 시르시움 아르벤세 (L.) 스코프. (*Cirsium arvense* (L.) Scop.) (캐나다 티슬, CIRAR), 콤멜리나 벵갈렌시스 L. (*Commelina benghalensis* L.) (열대 스파이더위드, COMBE), 다투라 스트라모니움 L. (*Datura stramonium* L.) (짐슨위드, DATST), 다우쿠스 카로타 L. (*Daucus carota* L.) (야생 당근, DAUCA), 유포르비아 헤테로필라 L. (*Euphorbia heterophylla* L.) (야생 포인세티아, EPHHL), 에리게론 보나리엔시스 L. (*Erigeron bonariensis* L.) (헤어리 플리베인, ERIBO), 에리게론 캐나다넨시스 L. (*Erigeron canadensis* L.) (캐나다 플리베인, ERICA), 헬리안투스 안누스 L. (*Helianthus annuus* L.) (일반 해바라기, HELAN), 자크쿠에몬티아 탐니폴리아 (L.) 그리셉. (*Jacquemontia tamnifolia* (L.) Griseb.) (소형화 모닝글로리, IAQTA), 이포모에아 헤테라세아 (L.) 자크. (*Ipomoea hederacea* (L.) Jacq.) (담쟁이덩굴엽 모닝글로리, IPOHE), 이포모에아 라쿠노사 L. (*Ipomoea lacunosa* L.) (백색 모닝글로리, IPOLA), 락투카 세리올라 L./토른. (*Lactuca serriola* L./Torn.) (가시 상추, LACSE), 포르툴라카 올레라세아 L. (*Portulaca oleracea* L.) (일반 퍼슬린, POROL), 시다 스피노사 L. (*Sida spinosa* L.) (가시 시다, SIDSP), 시나피스 아르벤시스 L. (*Sinapis arvensis* L.) (야생 머스타드, SINAR), 솔라눔 프티칸툼 두날 (*Solanum ptychanthum* Dunal) (동부 흑색 나이트쉐이드, SOLPT), 또는 크산티움 스트루마리움 L. (*Xanthium strumarium* L.) (일반 코클버, XANST)이다.

[0272] 일부 실시양태에서, 약 1 내지 약 4,000 그램/헥타르 (g/ha)의 적용률이 출아후 작업에 사용된다. 일부 실시양태에서, 약 1 내지 약 4,000 g/ha의 비율이 출아전 작업에 사용된다.

[0273] 일부 실시양태에서, 본원에 제공된 화합물, 조성물 및 방법은 보다 폭넓게 다양한 바람직하지 않은 식생을 방제

하기 위해 하나 이상의 다른 제초제와 함께 사용된다. 다른 제초제와 함께 사용되는 경우, 본원에 청구된 화합물을 다른 제초제 또는 제초제들과 함께 제제화하거나, 또는 다른 제초제 또는 제초제들과 함께 탱크-혼합하거나, 또는 다른 제초제 또는 제초제들과 함께 순차적으로 적용할 수 있다. 본 개시내용의 화합물과 함께 사용될 수 있는 제초제의 일부는 4-CPA, 4-CPB, 4-CPP, 2,4-D, 2,4-D 콜린 염, 2,4-D 에스테르 및 아민, 2,4-DB, 3,4-DA, 3,4-DB, 2,4-DEB, 2,4-DEP, 3,4-DP, 2,3,6-TBA, 2,4,5-T, 2,4,5-TB, 아세트클로르, 아시플루오르펜, 아클로니펜, 아크롤레인, 알라클로르, 알리도클로르, 알록시딤, 알릴 알콜, 알로락, 아메트리디온, 아메트린, 아미부진, 아미카르바존, 아미도솔푸론, 아미노시클로피라클로르, 아미노피랄리드, 아미프로포스-메틸, 아미트룰, 술폰산암모늄, 아닐로포스, 아니수론, 아솔람, 아트라톤, 아트라진, 아자페니딘, 아짐솔푸론, 아지프로트린, 바르반, BCPC, 베플루부타미드, 베나졸린, 벤카르바존, 베플루달린, 베플레세이트, 베플푸론-메틸, 베플리드, 벤티오카르브, 벤티존-소듐, 벤자독스, 벤즈펜디존, 벤지프람, 벤조비시클론, 벤조페남, 벤조플루오르, 벤조일프로프, 벤즈티아주론, 비시클로피론, 비페녹스, 빌라나포스, 비스피리박-소듐, 보락스, 브로마실, 브로모보닐, 브로모부티드, 브로모페녹심, 브로목시닐, 브롬피라존, 부타클로르, 부타페나실, 부타미포스, 부테나클로르, 부티다졸, 부티우론, 부트랄린, 부트록시딤, 부투론, 부틸레이트, 카코딜산, 카펜스트롤, 염소산칼슘, 칼슘 시안아미드, 캄벤디클로르, 카르바솔람, 카르베타미드, 카르복사졸, 클로르프로카르브, 카르펜트라존-에틸, CDEA, CEPC, 클로메톡시펜, 클로람벤, 클로라노크릴, 클로라지포프, 클로라진, 클로르브로무론, 클로르부팜, 클로레투론, 클로르페낙, 클로르펜프로프, 클로르플루라졸, 클로르플루레놀, 클로리다존, 클로리무론, 클로르니트로펜, 클로로폰, 클로로톨루론, 클로록수론, 클로록시닐, 클로르프로팜, 클로르솔푸론, 클로르탈, 클로르티아미드, 시니돈-에틸, 신메틸린, 시노솔푸론, 시스아닐리드, 클레토딤, 클리오디네이트, 클로디나포프-프로파르길, 클로포프, 클로마존, 클로메프로프, 클로프로프, 클로프로시딤, 클로피랄리드, 클로란술람-메틸, CMA, 황산구리, CPMF, CPPC, 크레다진, 크레졸, 쿠밀루론, 시아나트린, 시아나진, 시클로에이트, 시클로솔파무론, 시클록시딤, 시클루론, 시할로포프-부틸, 시페르퀴트, 시프라진, 시프라졸, 시프로미드, 다이무론, 달라폰, 다조메트, 델라클로르, 데스메디팜, 데스메트린, 디-알레이트, 디캄바, 디클로베닐, 디클로랄우레아, 디클로르메이트, 디클로르프로프, 디클로르프로프-P, 디클로포프, 디클로솔람, 디에탐퀴트, 디에타틸, 디페노펜텐, 디페녹수론, 디펜조퀴트, 디플루페니칸, 디플루펜조피르, 디메푸론, 디메피페레이트, 디메타클로르, 디메타메트린, 디메테나미드, 디메테나미드-P, 디멕사노, 디미다존, 디니트라민, 디노페네이트, 디노프로프, 디노삼, 디노세브, 디노테르브, 디페나미드, 디프로페트린, 디퀴트, 디솔, 디티오피르, 디우론, DMPA, DNOC, DSMA, EBEP, 에글리나진, 엔도탈, 에프로나즈, EPTC, 에르본, 에스프로카르브, 에탈플루랄린, 에트벤자미드, 에타메트솔푸론, 에티디무론, 에티올레이트, 에토벤자미드, 에토벤자미드, 에토푸메세이트, 에톡시펜, 에톡시솔푸론, 에티노펜, 에티니프로미드, 에토벤자니드, EXD, 페나솔람, 페노프로프, 페녹사프로프, 페녹사프로프-P-에틸, 페녹사프로프-P-에틸 + 이속사디펜-에틸, 페녹사솔폰, 펜테라콜, 펜티아프로프, 펜트라자미드, 페누론, 황산제1철, 플람프로프, 플람프로프-M, 플라자솔푸론, 플로라솔람, 플루아지포프, 플루아지포프-P-부틸, 플루아졸레이트, 플루카르바존, 플루세토솔푸론, 플루클로랄린, 플루페나세트, 플루페니칸, 플루펜피르-에틸, 플루메트솔람, 플루메진, 플루미클로락-펜틸, 플루미옥사진, 플루미프로핀, 플루오메투론, 플루오로디펜, 플루오로글리코펜, 플루오로미딘, 플루오로니트로펜, 플루오티우론, 플루폭삼, 플루프로파실, 플루프로파네이트, 플루피리솔푸론, 플루리돈, 플루로클로리돈, 플루록시피르, 플루르타몬, 플루티아세트, 포메사펜, 포람솔푸론, 포사민, 푸릴옥시펜, 글루포시네이트, 글루포시네이트-암모늄, 글리포세이트, 할로사펜, 할로솔푸론-메틸, 할록시딘, 할록시포프-메틸, 할록시포프-P-메틸, 할라옥시펜-메틸, 헥사클로로아세톤, 헥사플루레이트, 헥사지논, 이마자메타벤즈, 이마자목스, 이마자픽, 이마자피르, 이마자퀸, 이마제타피르, 이마조솔푸론, 인다나판, 인다지플람, 아이오도보닐, 아이오도메탄, 아이오도솔푸론, 이오펜솔푸론, 이옥시닐, 이파진, 이프펜카르바존, 이프리미담, 이소카르바미드, 이소실, 이소메티오진, 이소노루론, 이소폴리네이트, 이소프로팔린, 이소프로투론, 이소우론, 이속사벤, 이속사클로르톨, 이속사플루톨, 이속사피리포프, 카르부틸레이트, 케토스피라독스, 락토펜, 레나실, 리누론, MAA, MAMA, MCPA 에스테르 및 아민, MCPA-티오에틸, MCPB, 메코프로프, 메코프로프-P, 메디노테르브, 메페나세트, 메플루이디드, 메소프라진, 메소솔푸론, 메소트리온, 메탐, 메타미포프, 메타미트론, 메타자클로르, 메타조솔푸론, 메트플루라존, 메타벤즈티아주론, 메탈프로팔린, 메타졸, 메티오벤카르브, 메티오졸린, 메티우론, 메토메톤, 메토프로트린, 메틸 브로마이드, 메틸 이소티오시아네이트, 메틸딤론, 메토벤주론, 메토브로무론, 메톨라클로르, 메토솔람, 메톡수론, 메트리부진, 메트솔푸론, 몰리네이트, 모날리드, 모니소우론, 모노클로로아세트산, 모노리누론, 모누론, 모르팜퀴트, MSMA, 나프로아닐리드, 나프로파미드, 나프로파미드-M, 나프탈람, 네부론, 니코솔푸론, 니피라클로펜, 니트랄린, 니트로펜, 니트로플루오르펜, 노르플루라존, 노루론, OCH, 오르벤카르브, 오르토-디클로로벤젠, 오르토솔파무론, 오리잘린, 옥사디아르길, 옥사디아존, 옥사피라존, 옥사솔푸론, 옥사지클로메폰, 옥시플루오르펜, 파라플루펜-에틸, 파라플루론, 파라퀴트, 페블레이트, 펠라르곤산, 펜디메탈린, 페녹스솔람, 펜타클로로페놀, 펜타노클로르, 펜톡사존, 피플루이돈, 페톡사미드, 펜이소팜, 펜

메디팜, 펜메디팜-에틸, 페노벤주론, 페닐수은 아세테이트, 피클로람, 피콜리나펜, 피녹사텐, 피페로포스, 아비산칼륨, 칼륨 아지드, 칼륨 시아네이트, 프레틸라클로르, 프리미술푸론-메틸, 프로시아진, 프로디아민, 프로플루아졸, 프로플루랄린, 프로폭시딤, 프로글리나진, 프로헥사디온-칼슘, 프로메톤, 프로메트린, 프로파클로르, 프로파닐, 프로파퀴자포프, 프로파진, 프로팜, 프로피소클로르, 프로폭시카르바존, 프로피리술푸론, 프로피자미드, 프로솔팔린, 프로솔포카르브, 프로솔푸론, 프록산, 프리나클로르, 피다논, 피라클로닐, 피라플루펜, 피라솔포톨, 피라조길, 피라줄리네이트, 피라조술푸론-에틸, 피라족시펜, 피리벤족심, 피리부티카르브, 피리클로르, 피리다폴, 피리데이트, 피리프탈리드, 피리미노박, 피리미술판, 피리티오박-메틸, 피록사술폰, 피록스술람, 퀴클로락, 퀴메락, 퀴노클라민, 퀴논아미드, 퀴잘로포프, 퀴잘로포프-P-에틸, 로데타닐, 림술푸론, 사플루페나실, S-메톨라클로르, 세부틸라진, 세크부메톤, 세톡시딤, 시두론, 시마진, 시메톤, 시메트린, SMA, 아비산나트륨, 아지드화나트륨, 염소산나트륨, 술포트리온, 술포라이트, 술포트라존, 술포메투론, 술포세이트, 술포술푸론, 황산, 술포글리카핀, 스웨프, TCA, 테부탐, 테부티우론, 테푸틸트리온, 템보트리온, 테프탈록시딤, 테르바실, 테르부카르브, 테르부클로르, 테르부메톤, 테르부틸라진, 테르부트린, 테트라플루론, 테닐클로르, 티아자플루론, 티아조피르, 티디아지민, 티디아주론, 티엔카르바존-메틸, 티펜술푸론, 티오벤카르브, 티오카르바질, 티오클로람, 토프라메존, 트랄록시딤, 트리아파몬, 트리-알레이트, 트리아술푸론, 트리아지플람, 트리베누론, 트리캄바, 트리클로피르 에스테르 및 아민, 트리디판, 트리에타진, 트리플록시술푸론, 트리플루랄린, 트리플루술푸론, 트리포프, 트리포프심, 트리히드록시트리아진, 트리메투론, 트리프로핀단, 트리탁, 트리토술푸론, 베르놀레이트 및 크실라클로르를 포함한다.

[0274] 본 개시내용의 화합물 및 조성물은 일반적으로 그의 선택성을 증진시키기 위해, 공지된 제초제 완화제, 예컨대 페녹사코르, 벤티오카르브, 브라시놀리드, 클로퀸토세트 (예를 들어, 맥실), 시오메트리닐, 다이무론, 디클로르미드, 디시클로논, 디메피페레이트, 디술포톤, 펜클로라졸-에틸, 펜클로람, 플루라졸, 플록소페닐, 푸릴라졸, 하르핀 단백질, 이속사디펜-에틸, 메펜피르-디에틸, MG 191, MON 4660, 나프탈산 무수물 (NA), 옥사메트리닐, R29148 및 N-페닐술포닐벤조산 아미드와 조합하여 사용될 수 있다.

[0275] 본원에 기재된 화합물, 조성물 및 방법은, 예를 들어, 글리포세이트, 글루포시네이트, 디캄바, 페녹시 옥신, 피리딜옥시 옥신, 아릴옥시페녹시프로피오네이트, ACCase 억제제, 이미다졸리논, ALS 억제제, HPPD 억제제, PPO 억제제, 트리아진, 및 브로복시닐과 함께 글리포세이트-내성-, 글루포시네이트-내성-, 디캄바-내성-, 페녹시 옥신-내성-, 피리딜옥시 옥신-내성-, 아릴옥시페녹시프로피오네이트-내성-, 아세틸 CoA 카르복실라제 (ACCase) 억제제-내성-, 이미다졸리논-내성-, 아세토라테이트 신타제 (ALS) 억제제-내성-, 4-히드록시페닐-피루베이트 디옥시게나제 (HPPD) 억제제-내성-, 프로토포르피리노겐 옥시다제 (PPO) 억제제-내성-, 트리아진-내성-, 및 브로복시닐-내성-작물 (예컨대 비제현적으로 대두, 목화, 카놀라/유지종자 평지, 벼, 곡류, 옥수수, 잔디 등)에서 바람직하지 않은 식생을 방제하는데 사용될 수 있다. 조성물 및 방법은 다중 화학물질 및/또는 다중 작용 방식의 억제제에 대한 내성을 부여하는 다중 또는 축적된 형질을 보유하는 작물에서 바람직하지 않은 식생을 방제하는데 사용될 수 있다.

[0276] 본원에 제공된 화합물 및 조성물은 제초제 저항성 또는 내성 잡초를 방제하는데 사용될 수 있다. 예시적인 저항성 또는 내성 잡초는 아세토라테이트 신타제 (ALS) 억제제, 광화학계 II 억제제, 아세틸 CoA 카르복실라제 (ACCase) 억제제, 합성 옥신, 광화학계 I 억제제, 5-엔올피루빌쉬키메이트-3-포스페이트 (EPSP) 신타제 억제제, 미세관 어셈블리 억제제, 지질 합성 억제제, 프로토포르피리노겐 옥시다제 (PPO) 억제제, 카로티노이드 생합성 억제제, 매우 장쇄 지방산 (VLCFA) 억제제, 피토엔 대생투라제 (PDS) 억제제, 글루타민 신테타제 억제제, 4-히드록시페닐-피루베이트-디옥시게나제 (HPPD) 억제제, 유사분열 억제제, 셀룰로스 생합성 억제제, 다중 작용 방식을 갖는 제초제, 예컨대 퀴클로락, 및 미분류 제초제, 예컨대 아릴아미노프로피온산, 디펜조퀴트, 엔도탈, 및 유기비소물질에 대해 저항성 또는 내성인 생물형을 포함하지만, 이에 제한되는 것은 아니다. 예시적인 저항성 또는 내성 잡초는 다중 제초제, 다중 화학물질 부류 및 다중 제초제 작용 방식에 대한 저항성 또는 내성을 갖는 생물형을 포함하지만, 이에 제한되는 것은 아니다.

[0277] 기재된 실시양태 및 하기 실시예는 예시적 목적을 위한 것이며, 청구범위의 범위를 제한하는 것으로 의도되는 것은 아니다. 본원에 기재된 조성물과 관련된 기타 변형, 용도 또는 조합은 청구된 대상의 취지 및 범위로부터 벗어나지 않으면서 통상의 기술자에게 명백할 것이다.

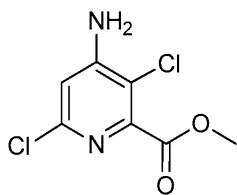
[0278] 실시예

[0279] 전구체의 합성

[0280] 일반적 고려사항: 플루오린 스펙트럼을 브루커(Bruker) DRX400 분광계 상에서 376 MHz에서 획득하였다. 스펙트

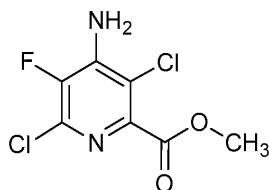
럼은 외부 표준으로서 트리클로로플루오로메탄 (CFC_13)을 참조하였고, 전형적으로 양성자 탈커플링을 이용하여 수행하였다.

[0281] 실시예 1: 메틸 4-아미노-3,6-디클로로피콜리네이트의 제조 (헤드 A)



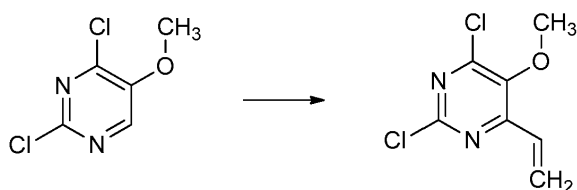
[0282]
[0283] WO 2001051468 A1 (Fields et al.)에 기재된 바와 같이 제조하였다.

[0284] 실시예 2: 메틸 4-아미노-3,6-디클로로-5-플루오로피콜리네이트의 제조 (헤드 B)



[0285]
[0286] 문헌 [Fields et al., Tetrahedron Letters 2010, 51, 79-81]에 기재된 바와 같이 제조하였다.

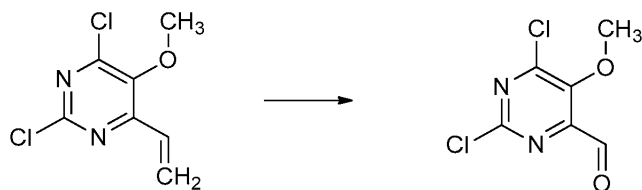
[0287] 실시예 3: 2,6-디클로로-5-메톡시-4-비닐 피리미딘의 제조



[0288]
[0289] 건조 테트라히드로푸란 중 상업적으로 입수가 가능한 2,6-디클로로-5-메톡시 피리미딘 (100 그램 (g), 0.55 몰 (mol)의 용액에 테트라히드로푸란 용매 (124 g, 0.94 mol) 중 1 몰 (M) 비닐 브로민화마그네슘을 1시간 (h)에 걸쳐 실온에서 적가하였다. 이어서, 혼합물을 실온에서 4시간 동안 교반하였다. 혼합물의 온도를 20℃ 미만의 온도에서 유지하면서 과량의 그리냐르 시약을 아세트 (200 밀리리터 (mL))의 첨가로 키텔하였다. 그 후, 2,3-디클로로-5,6-디시아노-p-벤조퀴논 (DDQ; 151 g, 0.67 mol)을 한 번에 첨가하고, 밤새 교반하였다. 황색 고체가 침전되었다. 고체를 여과하고, 에틸 아세테이트 (500 mL)로 세척하였다. 여과물을 감압 하에 농축시키고, 생성된 조 화합물을 에틸 아세테이트 (2 리터 (L))로 희석하였다. 생성된 미용해 암색의 반고체를 에틸 아세테이트를 사용한 여과에 의해 분리하였다. 이를 추가로 감압 하에 농축시켜 조 화합물을 수득하였으며, 이를 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제하였다. 화합물을 헥산 혼합물 중 5%에서 10% 에틸 아세테이트로 용리시켜 표제 화합물 (70 g, 60%)을 수득하였다.

[0290] mp 60 – 61 °C; ^1H NMR (CDCl_3) δ 3.99 (s, 3H), 5.85 (d, 1H), 6.75 (d, 1H), 6.95 (dd, 1H).

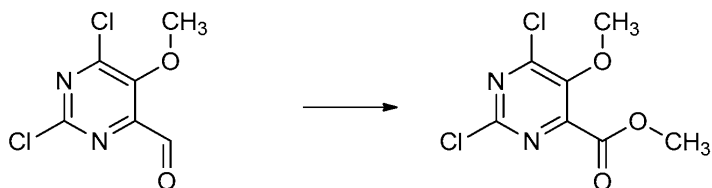
[0291] 실시예 4: 2,6-디클로로-5-메톡시-피리미딘-4-카르보알데히드의 제조



[0292]
[0293] 디클로로메탄:메탄올 (4:1, 2L) 중 2,6-디클로로-5-메톡시-4-비닐 피리미딘 (50 g, 0.24 mol)의 용액을 -78℃로 냉각시켰다. 오존 기체를 5시간 동안 버블링하였다. 반응을 디메틸 술폰 (50 mL)로 키텔하였다. 혼합물

을 실온으로 천천히 가온하고, 감압 하에 40℃에서 농축시켜 표제 화합물 (50.5 g, 100%)을 수득하였다.

[0294] 실시예 5: 메틸 2,6-디클로로-5-메톡시-피리미딘-4-카르복실레이트의 제조

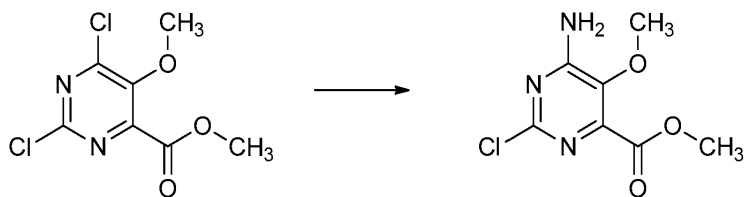


[0295]

[0296] 메탄올 (1 L) 및 물 (60 mL) 중 2,6-디클로로-5-메톡시-피리미딘-4-카르브알데히드 (50 g, 0.24 mol)의 용액을 제조하였다. 용액에, 중탄산나트륨 (400 g)을 첨가하였다. 혼합물을 교반하면서, 메탄올/물 (600 mL, 9:1 v/v) 중 브로민 (192 g, 1.2 mol)의 2 M 용액을 피리미딘 용액에 0℃에서 45분 (min)에 걸쳐 적가하였다. 교반을 동일한 온도에서 1시간 동안 계속하였다. 이후에, 혼합물을 실온에서 4시간 동안 교반하였다. 그 후에, 교반하면서, 반응 혼합물을 분쇄 얼음 (2 L), 중아황산나트륨 (50 g), 및 염화나트륨 (NaCl; 200 g)의 혼합물에 부었다. 생성물을 에틸 아세테이트 (1 L x 2)로 추출하고, 합한 유기 층을 황산나트륨 (Na₂SO₄) 상에서 건조시키고, 여과하였다. 용매를 감압 하에 증발시켜 농후한 물질을 생성하였으며, 이를 오래 정치하여 고체화하여 표제 화합물 (50.8 g, 87%)을 수득하였다.

[0297] ESIMS m/z 238 ([M+H]⁺).

[0298] 실시예 6: 메틸 6-아미노-2-클로로-5-메톡시-피리미딘-4-카르복실레이트의 제조 (헤드 C)

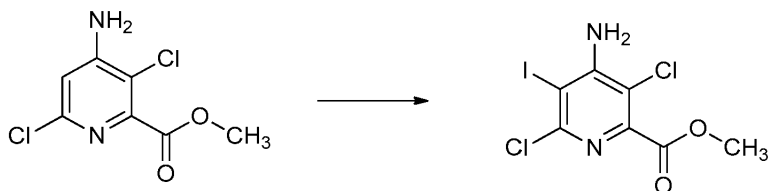


[0299]

[0300] 메틸 2,6-디클로로-5-메톡시-피리미딘-4-카르복실레이트 (25 g, 0.1 mol) 및 디메틸 술폭시드의 용액 (DMSO)을 제조하였다. 이 용액에, 0-5℃에서, DMSO 중 암모니아 (2 당량 (equiv))의 용액을 첨가하였다. 이 혼합물을 동일한 0-5℃ 온도에서 10 내지 15분 동안 교반하였다. 이후에, 혼합물을 에틸 아세테이트로 희석하고, 생성된 고체를 여과하였다. 에틸 아세테이트 여과물을 염수 용액으로 세척하고, Na₂SO₄ 상에서 건조시켰다. 농축시켜 조 생성물을 수득하였다. 조 생성물을 최소량의 에틸 아세테이트 중에서 교반하고, 여과하여 순수한 화합물을 수득하였다. 추가의 순수한 화합물을 여과물로부터 수득하였으며, 이를 농축 후에 플래쉬 크로마토그래피에 의해 정제하였다. 상기로서 표제 화합물 (11 g, 50%)이 수득되었다:

[0301] mp 158 °C; ¹H NMR (DMSO-*d*₆) δ 3.71 (s, 3H), 3.86 (s, 3H), 7.65 (br s, 1H), 8.01 (br s, 1H).

[0302] 실시예 7: 메틸 4-아미노-3,6-디클로로-5-아이오도피콜리네이트의 제조



[0303]

[0304] 메틸 4-아미노-3,6-디클로로피콜리네이트(10.0 g, 45.2 mmol), 과아이오딘산 (3.93 g, 17.2 밀리몰 (mmol)), 및 아이오딘 (11.44 g, 45.1 mmol)을 메탄올 (30 mL) 중에 용해시키고, 환류 하에 60℃에서 27시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 농축시키고, 디에틸 에테르로 희석하고, 포화 수성 중아황산나트륨으로 2회 세척하였다. 수성 층을 디에틸 에테르로 1회 추출하고, 합한 유기 층을 무수 Na₂SO₄ 상에서 건조시켰다. 생성물을 농축시키고, 플래쉬 크로마토그래피 (실리카 겔; 0-50% 에틸 아세테이트/헥산)에 의해 정제하여 표제 화합물을 연황색

고체 (12.44 g, 79%)로서 수득하였다.

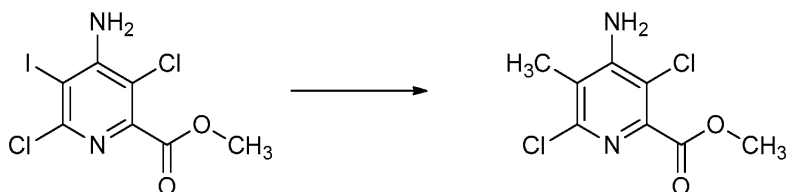
mp 130.0–131.5 °C; ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 5.56

(s, 2H), 3.97 (s, 3H); ^{13}C NMR (101 MHz, CDCl_3) δ 163.80, 153.00, 152.75, 145.63, 112.12, 83.91, 53.21; EIMS m/z 346.

[0305]

[0306]

실시예 8: 메틸 4-아미노-3,6-디클로로-5-메틸피콜리네이트의 제조 (헤드 D)



[0307]

[0308]

1,2-디클로로에탄 (40 mL) 중 메틸 4-아미노-3,6-디클로로-5-아이오도피콜리네이트 (8.1 g, 23.4 mmol), 테트라메틸스탄난 (8.35 g, 46.7 mmol), 및 비스(트리페닐포스핀)염화팔라듐 (II) (2.5 g, 3.5 mmol)의 혼합물을 측면으로부터 외부 적외선 (IR)-센서 온도 모니터링을 갖는 바이오타지 이니시에이터(Biotage Initiator)TM 마이크로웨이브에서 120°C에서 30분 동안 조사하였다. 반응 혼합물을 실리카 겔 카트리지 상에 직접 로딩하고, 플래쉬 크로마토그래피 (실리카 겔; 0-50% 에틸 아세테이트/헥산)에 의해 정제하여 표제 화합물을 오렌지색 고체 (4.53 g, 83%)로서 수득하였다.

mp 133–136 °C; ^1H NMR (400 MHz,

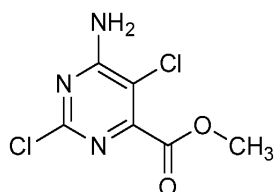
CDCl_3) δ 4.92 (s, 2H), 3.96 (s, 3H), 2.29 (s, 3H); ^{13}C NMR (101 MHz, CDCl_3) δ 164.34,

150.24, 148.69, 143.94, 117.01, 114.60, 53.02, 14.40; ESIMS m/z 236 ($[\text{M}+\text{H}]^+$), 234 ($[\text{M}-\text{H}]^-$).

[0309]

[0310]

실시예 9: 메틸 6-아미노-2,5-디클로로피리미딘-4-카복실레이트의 제조 (헤드 E)



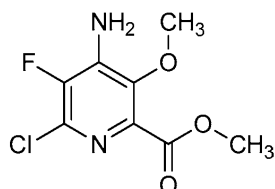
[0311]

[0312]

WO 2007082076 A1 (Epp et al.)에 기재된 바와 같이 제조하였다.

[0313]

실시예 10: 메틸 4-아미노-6-클로로-5-플루오로-3-메톡시피콜리네이트의 제조 (헤드 F)

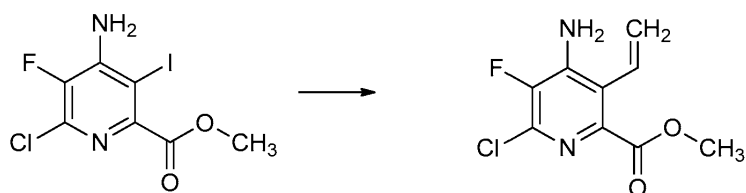


[0314]

[0315]

WO 2013003740 A1 (Epp et al.)에 기재된 바와 같이 제조하였다.

[0316] 실시예 11: 메틸 4-아미노-6-클로로-5-플루오로-3-비닐피콜리네이트의 제조 (헤드 G)



[0317]

[0318] 메틸 4-아미노-6-클로로-5-플루오로-3-아이오도피콜리네이트 (7.05 g, 21.33 mmol, WO 2013003740 A1 (Epp et al.)에 기재된 바와 같이 제조함) 및 비닐 트리-n-부틸주석 (7.52 mL, 25.6 mmol)을 디클로로에탄 (71.1 mL) 중에 현탁시키고, 혼합물을 아르곤으로 10분 동안 탈기하였다. 이어서, 비스(트리페닐포스핀)팔라듐 (II) 클로라이드 (1.497 g, 2.133 mmol)를 첨가하고, 반응 혼합물을 70℃에서 밤새 교반하였다 (투명한 오렌지색 용액). 반응물을 기체 크로마토그래피-질량 분광측정법 (GC-MS)에 의해 모니터링하였다. 20시간 후, 반응 혼합물을 농축시키고, 셀라이트(Celite)® 상에 흡착시키고, 칼럼 크로마토그래피 (실리카 겔 (SiO₂); 헥산/에틸 아세테이트 구배)에 의해 정제하여 표제 화합물을 담갈색 고체 (3.23 g, 65.7%)로서 수득하였다.

mp 99–100 °C; ¹H NMR (400 MHz,

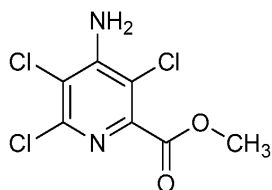
CDCl₃) δ 6.87 (dd, *J* = 18.1, 11.6 Hz, 1H), 5.72 (dd, *J* = 11.5, 1.3 Hz, 1H), 5.52 (dd, *J* =

18.2, 1.3 Hz, 1H), 4.79 (s, 2H), 3.91 (s, 3H); ¹⁹F NMR (376 MHz, CDCl₃) δ -138.79 (s);

EIMS *m/z* 230.

[0319]

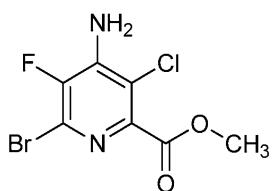
[0320] 실시예 12: 메틸 4-아미노-3,5,6-트리클로로피콜리네이트의 제조 (헤드 H)



[0321]

[0322] WO 2006062979 A1 (Finkelstein et al.)에 기재된 바와 같이 제조하였다.

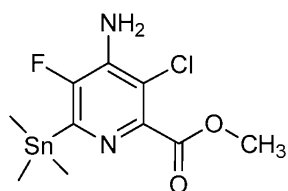
[0323] 실시예 13: 메틸 4-아미노-6-브로모-3-클로로-5-플루오로피콜리네이트의 제조 (헤드 I)



[0324]

[0325] US 20120190857 A1 (Arndt et al.)에 기재된 바와 같이 제조하였다.

[0326] 실시예 14: 메틸 4-아미노-3-클로로-5-플루오로-6-(트리메틸스틸)피콜리네이트의 제조 (헤드 J)



[0327]

[0328] 메틸 4-아미노-6-브로모-3-클로로-5-플루오로피콜리네이트 (500 밀리그램 (mg), 1.8 mmol), 1,1,1,2,2,2-헥사메틸디스틸란 (580 mg, 1.8 mmol) 및 비스(트리페닐포스핀)-염화팔라듐 (II) (120 mg, 0.18 mmol)을 건조 디옥산 (6 mL) 중에서 합하고, 질소의 스트림으로 10분 동안 폭기한 다음, 80℃로 2시간 동안 가열하였다. 냉각된 혼합물을 에틸 아세테이트 (25 mL) 및 포화 NaCl (25 mL)과 함께 15분 동안 교반하였다. 유기 상을 분리하고,

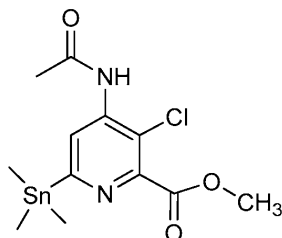
규조토를 통해 여과하고, 건조시키고 (Na_2SO_4), 증발시켰다. 잔류물을 에틸 아세테이트 (4 mL)에 녹이고, 교반하고, 헥산 (15 mL)으로 조금씩 처리하였다. 유백색 용액을 임의의 생성된 고체로부터 따라내고, 글래스 울을 통해 여과하고, 증발시켜 표제 화합물을 회백색 고체 (660 mg, 100%)로서 수득하였다.

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 4.63 (d, $J = 29.1$ Hz, 2H), 3.97 (s, 3H), 0.39 (s, 9H);

^{19}F NMR (376 MHz, CDCl_3) δ -130.28; EIMS m/z 366.

[0329]

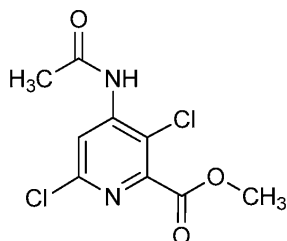
[0330] 실시예 15: 메틸 4-아세트아미도-3-클로로-6-(트리메틸스탄닐)-피콜리네이트의 제조 (헤드 K)



[0331]

[0332] WO 2003011853 A1 (Balko et al.)에 기재된 바와 같이 제조하였다.

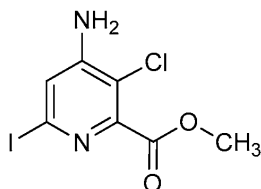
[0333] 실시예 16: 메틸 4-아세트아미도-3,6-디클로로피콜리네이트의 제조 (헤드 L)



[0334]

[0335] WO 2001051468 A1 (Fields et al.)에 기재된 바와 같이 제조하였다.

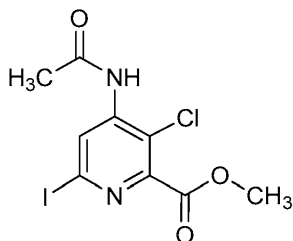
[0336] 실시예 17: 메틸 4-아미노-3-클로로-6-아이오도피콜리네이트의 제조 (헤드 M)



[0337]

[0338] WO 2007082098 A2 (Balko et al.)에 기재된 바와 같이 제조하였다.

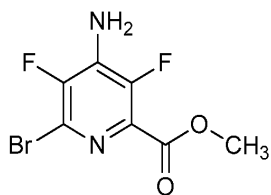
[0339] 실시예 18: 메틸 4-아세트아미도-3-클로로-6-아이오도피콜리네이트의 제조 (헤드 N)



[0340]

[0341] WO 2007082098 A2 (Balko et al.)에 기재된 바와 같이 제조하였다.

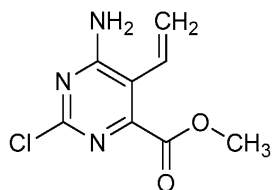
[0342] 실시예 19: 메틸 4-아미노-6-브로모-3,5-디플루오로피콜리네이트의 제조 (헤드 O)



[0343]

[0344] WO 2001051468 A1 (Fields et al.)에 기재된 바와 같이 제조하였다.

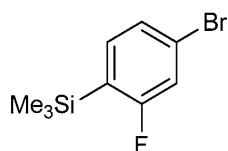
[0345] 실시예 20: 메틸 6-아미노-2-클로로-5-비닐피리미딘-4-카르복실레이트의 제조 (헤드 P)



[0346]

[0347] US 20090088322 (Epp et al.)에 기재된 바와 같이 제조하였다.

[0348] 실시예 22: 4-브로모-2-플루오로페닐)트리메틸실란의 제조



[0349]

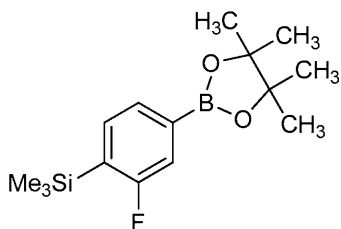
[0350] 헥산 중 n-부틸리튬 (n-BuLi; 900 마이크로리터 (μ L), 2.2 mmol, 1.1 당량)의 2.5 M 용액을 -78°C 에서 디에틸 에테르 (10 mL) 중 1,4-디브로모-2-플루오로벤젠 (500 mg, 2.0 mmol, 1.0 당량)의 교반 용액에 첨가하였다. 생성된 연황색 용액을 -78°C 에서 2시간 동안 교반하였다. 클로로트리메틸실란 (300 μ L, 2.4 mmol, 1.2 당량)을 첨가하고, 생성된 연황색 용액을 드라이 아이스 / 아세톤 조로 용융되도록 함으로써 23°C 로 천천히 가온되도록 하고, 72시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 물 (50 mL)로 희석하고, 디클로로메탄 (3 x 50 mL)으로 추출하였다. 합한 유기 층을 건조시키고 (황산마그네슘 (MgSO_4)), 중력 여과하고, 회전 증발에 의해 농축시켜 표제 화합물을 연황색 오일 (350 mg, 71%)로서 수득하였다.

IR (박막) 3068 (w), 2955 (m), 2927 (m), 2855 (w), 1598 (w), 1567 (w) cm^{-1} ;

^1H NMR (400 MHz, DMSO- d_6) δ 7.38 – 7.49 (m, 3H), 0.30 (s, 9H).

[0351]

[0352] 실시예 23: (2-플루오로-4-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란-2-일)페닐)트리메틸실란의 제조



[0353]

[0354] n-BuLi (8.5 mL, 21 mmol, 1.1 당량)의 2.5 M 용액을 -78°C 에서 테트라히드로푸란 (80 mL) 중 (4-브로모-2-플루오로페닐)트리메틸실란 (4.8 g, 19 mmol, 1.0 당량)의 교반 용액에 첨가하였다. 생성된 오렌지색 용액을 -78°C 에서 15분 동안 교반하였다. 2-이소프로폭시-4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란 (4.4 mL, 21 mmol, 1.1 당량)을 첨가하고, 탁한 오렌지색 용액을 드라이 아이스 / 아세톤 조로 용융되도록 함으로써 23°C 로 천천히 가온되도록 하고, 20시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 물 (200 mL)로 희석하고, 1 M 염산 (HCl)을 사용하여 대략 pH 4로 조정하고, 디클로로메탄 (3 x 100 mL)으로 추출하였다. 합한 유기 층을 건조시키고 (MgSO_4),

중력 여과하고, 회전 증발에 의해 농축시켜 표제 화합물을 연황색 반고체 (6.0 g, 99%)로서 수득하였다.

$^1\text{H NMR}$ (400 MHz, CDCl_3) δ

7.55 (dt, $J = 7.5$, 1 Hz, 1H), 7.38 – 7.42 (m, 2H), 1.34 (s, 12H), 0.29 (d, $J = 1$ Hz, 9H).

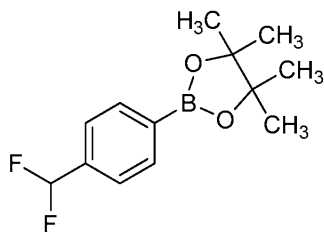
[0355]

하기 화합물을 실시예 23에 개시된 절차에 따라 제조하였다:

[0356]

2-(4-(디플루오로메틸)페닐)-4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란

[0357]



[0358]

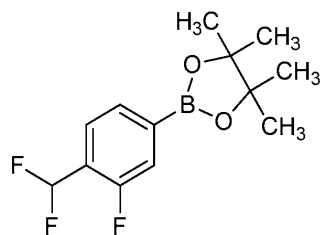
$^1\text{H NMR}$ (400 MHz, CDCl_3) δ 7.89 (br d, $J = 8$ Hz, 2H), 7.50 (br d, $J = 8$ Hz,

2H), 6.65 (t, $J = 56$ Hz, 1H), 1.35 (s, 12H).

[0359]

2-(4-(디플루오로메틸)-3-플루오로페닐)-4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란

[0360]



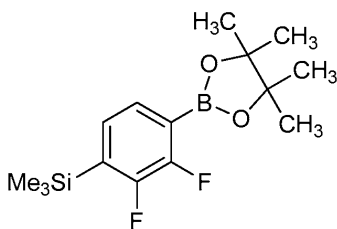
[0361]

$^1\text{H NMR}$ (400 MHz, CDCl_3) δ 7.51 – 7.68 (m, 3H), 6.90 (t, $J = 55$ Hz, 1H), 1.35 (s, 12H).

[0362]

실시예 24: (2,3-디플루오로-4-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란-2-일)페닐)트리메틸실란의 제조

[0363]



[0364]

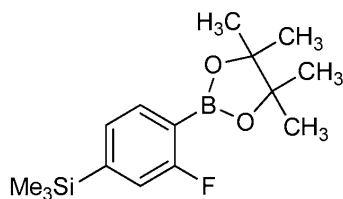
n-BuLi (9.5 mL, 24 mmol, 1.1 당량)의 2.5 M 용액을 -78°C 에서 테트라히드로푸란 (86 mL) 중 (2,3-디플루오로페닐)트리메틸실란 (4.0 g, 21 mmol, 1.0 당량)의 교반 용액에 첨가하였다. 생성된 매우 연황색의 용액을 -78°C 에서 1시간 동안 교반하였다. 2-이소프로폭시-4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란 (4.8 mL, 24 mmol, 1.1 당량)을 첨가하고, 연황색 용액을 드라이 아이스 / 아세톤 조로 용융되도록 함으로써 23°C 로 천천히 가온되도록 하고, 20시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 물 (200 mL)로 희석하고, 1M HCl을 사용하여 대략 pH 4로 조정하고, 디클로로메탄 (3 x 100 mL)으로 추출하였다. 합한 유기 층을 건조시키고 (MgSO_4), 중력 여과하고, 회전 증발에 의해 농축시켜 표제 화합물을 백색 분말 (6.4 g, 96%)로서 수득하였다.

$^1\text{H NMR}$ (400 MHz, CDCl_3) δ 7.42 (ddd, $J = 7.5$, 4.5, 0.5 Hz,

1H), 7.09 (ddd, $J = 7.5$, 4, 1 Hz, 1H), 1.34 (s, 12H), 0.29 (d, $J = 1$ Hz, 9H).

[0366]

[0367] 실시예 25: (3-플루오로-4-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란-2-일)페닐)트리메틸실란의 제조



[0368]

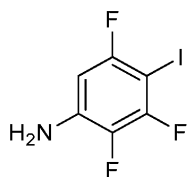
[0369] n-BuLi (3.5 mL, 8.5 mmol, 1.1 당량)의 2.5 M 용액을 -78℃에서 테트라히드로푸란 (THF; 26 mL) 중 1,4-디브로모-2-플루오로벤젠 (2.0 g, 7.9 mmol, 1.0 당량)의 교반 용액에 첨가하였다. 생성된 담황색 용액을 -78℃에서 15분 동안 교반하였다. 2-이소프로폭시-4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란 (1.8 mL, 8.7 mmol, 1.1 당량)을 첨가하고, 생성된 연황색 용액을 -78℃에서 30분 동안 교반하였다. n-BuLi (3.5 mL, 8.5 mmol, 1.1 당량)의 2.5 M 용액을 첨가하고, 생성된 황색/갈색 용액을 -78℃에서 15분 동안 교반하였다. 클로로트리메틸실란 (2.2 mL, 17 mmol, 2.2 당량)을 첨가하고, 생성된 연황색 용액을 드라이 아이스 / 아세톤 조로 용융되도록 함으로써 23℃로 천천히 가온되도록 하고, 18시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 물 (150 mL)로 희석하고, 디클로로메탄 (2 x 100 mL)으로 추출하였다. 합한 유기 층을 건조시키고 (MgSO₄), 중력 여과하고, 회전 증발에 의해 농축시켜 표제 화합물을 연황색 분말 (2.3 g, 99%)로서 수득하였다.

IR (박막)

3058 (w), 2981 (s), 2932 (m), 1615 (m) cm⁻¹; ¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 7.72 (dd, *J* = 7.5, 6 Hz, 1H), 7.26 (m, 1H), 7.16 (d, *J* = 7.5 Hz, 1H), 1.34 (s, 12H), 0.23 (s, 9H).

[0370]

[0371] 실시예 26: 2,3,5-트리플루오로-4-아이오도아닐린의 제조



[0372]

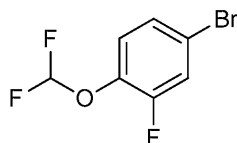
[0373] -78℃에서 건조 THF (40 mL) 중 2,3,5-트리플루오로아닐린 (2.0 g, 13.605 mmol, 1.0 당량)의 교반 용액에 sec-부틸리튬 (10.88 mL, 13.6 mmol, 1.0 당량)을 30분에 걸쳐 첨가하였다. 교반을 -78℃에서 2시간 동안 계속하였다. 아이오딘 (4.14 g, 16.32 mmol, 1.2 당량)의 용액을 적가하고, 반응 혼합물을 20℃로 1시간에 걸쳐 천천히 가온하였다. 반응을 10% 수성 (aq) 티오황산나트륨 (Na₂S₂O₃) 용액으로 키텅하고, 메틸 tert-부틸 에테르 (MTBE; 3 x 50 mL)로 추출하였다. 합한 유기 추출물을 포화 염수 용액으로 세척하고, 무수 Na₂SO₄ 상에서 건조시키고, 여과하고, 감압 하에 증발 건조시켰다. 조 생성물을 실리카 상에서 헥산을 함유하는 0-10% 에틸 아세테이트 (EtOAc)를 용리액으로서 사용하여 칼럼 정제하여 2,3,5-트리플루오로-4-아이오도아닐린 (1.3 g, 35%)을 분홍색 고체로서 수득하였다.

¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 6.43

- 6.39 (m, 1H), 3.99 (br s, 2H); ESIMS *m/z* 274 ([M+H]⁺).

[0374]

[0375] 실시예 27: 4-브로모-1-(디플루오로메톡시)-2-플루오로벤젠의 제조



[0376]

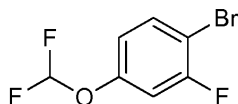
[0377] N,N-디메틸포름아미드 (DMF; 23 mL)가 채워진 100 mL 플라스크에 소듐 2-클로로-2,2-디플루오로아세테이트 (4.79 g, 31.4 mmol), 탄산칼륨 (2.60 g, 18.85 mmol), 4-브로모-2-플루오로페놀 (3 g, 15.71 mmol)을 첨가하였다. 물 (5.75 mL)을 첨가하고, 반응 혼합물을 100℃로 3시간 동안 가열하였다. 실온으로 냉각시킨 후, 반응

혼합물을 디에틸 에테르 (Et₂O; 100 mL) 및 2 노르말 (N) 수산화나트륨 (NaOH) 용액 (100 mL)으로 희석하였다. 유기 층을 제거하고, 무수 Na₂SO₄ 상에서 건조시켰다. 여과 후 유기 용액을 4℃에서 수조를 이용하여 회전 증발기 상에서 농축시켜 표제 화합물을 투명한 오일 (1 g, 13%)로서 수득하였다.

¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 7.35 (dd, *J* = 9.7, 2.3 Hz, 1H), 7.27 (ddd, *J* = 8.7, 2.3, 1.5 Hz, 1H), 7.19 – 7.04 (m, 1H), 6.53 (t, *J* = 73.0 Hz, 1H); ESIMS *m/z* 242([M+H]⁺).

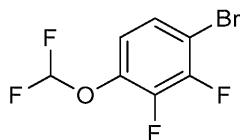
하기 화합물을 실시예 27에 개시된 절차에 따라 제조하였다:

1-브로모-4-(디플루오로메톡시)-2-플루오로벤젠



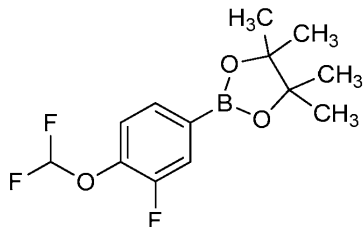
¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 7.53 (dd, *J* = 8.8, 7.7 Hz, 1H), 6.95 (dd, *J* = 9.1, 2.7 Hz, 1H), 6.90 – 6.79 (m, 1H), 6.50 (t, *J* = 72.8 Hz, 1H); IR (박막) 781.76, 811.23, 856.78, 945.20, 1043.80, 977.35, 1141.65, 1113.50, 1174.18, 1260.90, 1285.55, 1382.78, 1423.39, 1487.03, 1593.17, 2847.53, 2927.91, 2992.21, 3112.78 cm⁻¹; ESIMS *m/z* 242([M+H]⁺).

1-브로모-4-(디플루오로메톡시)-2,3-디플루오로벤젠



¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 7.31 (ddd, *J* = 9.2, 6.9, 2.5 Hz, 1H), 7.02 – 6.93 (m, 1H), 6.56 (t, *J* = 72.4 Hz, 1H); IR (박막) 776.30, 811.66, 884.39, 986.70, 1100.95, 1144.65, 1211.05, 1241.96, 1266.36, 1297.59, 1383.98, 1494.35, 1474.47, 1600.40, 1679.63, 3038.31, 3103.90 cm⁻¹; ESIMS *m/z* 260 ([M+H]⁺).

실시예 28: 2-(4-(디플루오로메톡시)-3-플루오로페닐)-4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란의 제조



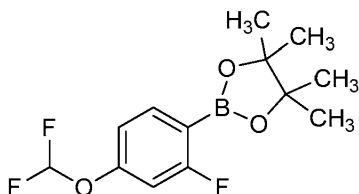
DMSO (10 mL)에 4,4,4',4',5,5,5',5'-옥타메틸-2,2'-비(1,3,2-디옥사보롤란) (1.264 g, 4.98 mmol), PdCl₂(dppf) (0.304 g, 0.415 mmol), 아세트산칼륨 (1.222 g, 12.45 mmol), 및 4-브로모-1-(디플루오로메톡시)-2-플루오로벤젠 (1 g, 4.15 mmol)을 첨가하였다. 반응물을 80℃의 외부 온도로 18시간 동안 가열하였다. 냉각시킨 후, 반응 혼합물을 빙수 (50 mL)에 부었다. 빙수 혼합물을 분리 깔때기로 옮기고, EtOAc (50 mL)로 2회 추출을 완료하였다. 유기 층을 합하고, Na₂SO₄ 상에서 건조시키고, 여과하였다. 용액을 EtOAc를 용매로서 사용하여 셀라이트® (5 g) 상에 농축시켰다. 함침성 셀라이트®를 실리카 겔 크로마토그래피에 의해 0-30% EtOAc:헥산을 사용하여 정제하여 표제 화합물을 황색 오일 (773 mg, 64%)로서 수득하였다.

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.61 – 7.53 (m, 2H), 7.25 – 7.16 (m, 1H), 6.58 (t, $J = 73.5$ Hz, 1H), 1.34 (s, 12H); ESIMS m/z 289 ($[\text{M}+\text{H}]^+$).

[0389]

[0390] 하기 화합물을 실시예 28에 개시된 절차에 따라 제조하였다:

[0391] 2-(4-(디플루오로메톡시)-2-플루오로페닐)-4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란

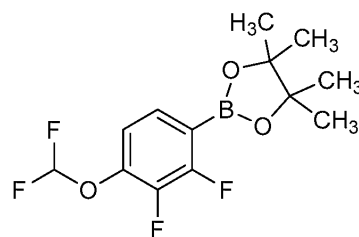


[0392]

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.74 (dd, $J = 8.3, 6.8$ Hz, 1H), 6.89 (dd, $J = 8.3, 2.2$ Hz, 1H), 6.81 (dd, $J = 9.9, 2.2$ Hz, 1H), 6.54 (t, $J = 73.2$ Hz, 1H), 1.26 (s, 12H); IR (박막) 848.53, 961.04, 1066.43, 1125.19, 1172.02, 1238.3, 1212.77, 1330.51, 1281.58, 1357.05, 1372.85, 1380.73, 1425.32, 1469.05, 1579.31, 1621.00, 2933.42, 2982.31 cm^{-1} ; ESIMS m/z 289 ($[\text{M}+\text{H}]^+$).

[0393]

[0394] 2-(4-(디플루오로메톡시)-2,3-디플루오로페닐)-4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란

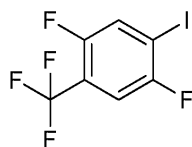


[0395]

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.46 (ddd, $J = 8.3, 5.8, 2.3$ Hz, 1H), 7.05 – 6.95 (m, 1H), 6.59 (t, $J = 72.8$ Hz, 1H), 1.35 (s, 12H); IR (박막) 673.35, 851.08, 916.78, 965.07, 1123.87, 1142.58, 1210.42, 1331.14, 1280.13, 1362.56, 1392.44, 1467.32, 1507.77, 1589.62, 1629.61, 2935.00, 2982.70 cm^{-1} ; ESIMS m/z 307 ($[\text{M}+\text{H}]^+$).

[0396]

[0397] 실시예 29: 1,4-디플루오로-2-아이오도-5-(트리플루오로메틸)벤젠의 제조



[0398]

[0399] N-(2,5-디플루오로-4-(트리플루오로메틸)페닐)아세트아미드 (950 mg, 4.0 mmol; 문헌 [Y. Tanabe et al, J. Org. Chem. 1988, 53, 4585-4587]에 따라 제조함)를 메탄올 (25 mL) 중에서 교반하고, 아세틸 클로라이드 (3 mL)로 처리하고, 환류 하에 2시간 동안 가열하였다. 휘발성 물질을 증발에 의해 제거하고, 고체 잔류물을 6 N HCl (50 mL) 중에 용해시키고, 5°C로 냉각시키고, 물 (5 mL) 중 아질산나트륨 (410 mg, 6.0 mmol)의 용액으로 조금씩 처리하였다. 30분 후, 상기 혼합물을 물 (50 mL) 중 아이오딘화나트륨 (2.4 g, 16 mmol)의 용액에 붓고, 디클로로메탄 (50 mL)과 함께 급속 교반하였다. 30분 후, 고체 중아황산나트륨을 첨가하여 아이오딘 색상을 없애고, 분리된 유기 상을 포화 NaCl로 세척하고, 건조시키고 (Na_2SO_4), 증발시켰다. 물질을 플래쉬 크로마토그래피 (SiO_2 ; 헥산으로 용리)에 의해 정제하여 표제 화합물을 휘발성 투명한 액체 (250 mg, 20%)로서 수득

하였다.

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.64

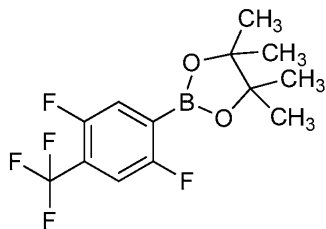
(ddd, $J = 8.8, 4.8, 0.4$ Hz, 1H), 7.28 (dd, $J = 11.1, 4.7$ Hz, 1H); ^{19}F NMR (376 MHz, CDCl_3)

δ -61.92, -97.64, -97.68, -118.59, -118.63, -118.64, -118.67; EIMS m/z 308.

[0400]

[0401]

실시예 30: 2-(2,5-디플루오로-4-(트리플루오로메틸)페닐)-4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란의 제조



[0402]

[0403]

1,4-디플루오로-2-아이오도-5-(트리플루오로메틸)벤젠 (500 mg, 1.6 mmol)을 건조 THF (7 mL) 중에 용해시키고, 0°C로 냉각시키고, 이소프로필 염화마그네슘-염화리튬 착물 (1.3 M; 1.4 mL, 1.8 mmol)로 조금씩 처리하고, 40분 동안 5°C에서 교반하였다. 2-이소프로폭시-4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란 (360 μL , 330 mg, 1.8 mmol)을 첨가하고, 교반을 1시간 동안 계속하였다. 포화 염화암모늄 (NH_4Cl)으로 처리한 후, 혼합물을 에틸 아세테이트와 함께 진탕시켰다. 유기 상을 포화 NaCl로 세척하고, 건조시키고 (Na_2SO_4), 증발시켜 표제 화합물을 담갈색 오일 (500 mg, 100%)로서 수득하였다. 물질을 추가로 정제 없이 사용하였다.

^1H

NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.54 (dd, $J = 9.9, 4.3$ Hz, 1H), 7.27 (dd, $J = 8.0, 5.2$ Hz, 2H),

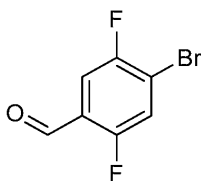
1.37 (s, 12H); ^{19}F NMR (376 MHz, CDCl_3) δ -62.10, -62.13, -106.85, -106.90, -121.81, -

121.87, -121.90.

[0404]

[0405]

실시예 31: 4-브로모-2,5-디플루오로벤즈알데히드의 제조



[0406]

[0407]

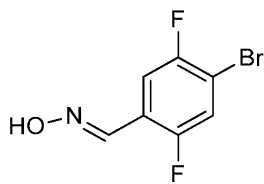
-78°C에서 디에틸 에테르 (150 mL) 중 2,5-디브로모-1,4-디플루오로벤젠 (10.0 g, 36.77 mmol)의 용액에 질소 하에 n-부틸 리튬 (헥산 중 2.5 M, 14.86 mL, 37.15 mmol)을 적가하였다. 반응 혼합물을 -78°C에서 30분 동안 교반하였다. 디에틸 에테르 (10 mL) 중 건조 DMF (3.13 mL, 40.46 mmol)를 적가하고, 반응을 실온으로 2시간에 걸쳐 천천히 가온하였다. 반응을 수성 포화 NH_4Cl 용액 (25 mL)으로 킨칭하고, 디에틸 에테르로 추출하였다. 유기 상을 포화 염수 용액으로 세척하고, 건조시키고 (Na_2SO_4), 여과하고, 감압 하에 농축시켰다 (주: 생성물은 고도로 휘발성임). 조 생성물을 플래쉬 크로마토그래피 (SiO_2 , 헥산 중 2-20% 에틸 아세테이트로 용리)에 의해 정제하여 표제 화합물을 연황색 고체 (7.0 g, 86%)로서 수득하였다.

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.50 (dd,

$J = 5.08, 8.92$ Hz, 1H), 7.62 (dd, $J = 5.80, 7.68$ Hz, 1H), 10.30 (d, $J = 2.76$ Hz, 1H).

[0408]

[0409] 실시예 32: (E)-4-브로모-2,5-디플루오로벤즈알데히드 옥심의 제조

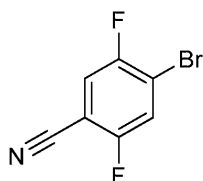


[0410]

[0411] 피리딘 (35 mL) 및 에탄올 (35 mL) 중 4-브로모-2,5-디플루오로벤즈알데히드 (7.0 g, 31.67 mmol), 히드록실아민 히드로클로라이드 (2.42 g, 34.84 mmol)의 용액을 실온에서 30분 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 포화 NH_4Cl 용액으로 희석하고, 에틸 아세테이트로 추출하였다. 유기 상을 포화 염수 용액으로 세척하고, 건조시키고 (Na_2SO_4), 여과하고, 감압 하에 농축시켰다. 조 생성물을 플래쉬 크로마토그래피 (SiO_2 ; 헥산 중 5-100% 에틸 아세테이트로 용리)에 의해 정제하여 표제 화합물을 황색 고체 (4.0 g, 53%)로서 수득하였다.

[0412] ESIMS m/z 238 ($[\text{M}+2\text{H}]^+$).

[0413] 실시예 33: 4-브로모-2,5-디플루오로벤조니트릴의 제조



[0414]

[0415] 시아누르산 클로라이드 (3.12 g, 16.94 mmol) 및 건조 DMF의 용액 (8.5 mL)을 30분 동안 또는 백색 고체의 형성까지 교반하였다. 시아누르산 클로라이드의 소멸을 박층 크로마토그래피 (TLC)에 의해 확인하였다. DMF (26 mL) 중 (E)-4-브로모-2,5-디플루오로벤즈알데히드 옥심 (4.0 g, 16.94 mmol)을 현탁액에 적가하고, 1시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 물로 희석하고, 헥산으로 추출하였다. 유기 추출물을 물로 세척하고, 포화 염수 용액으로 세척하고, 건조시키고 (Na_2SO_4), 여과하고, 감압 하에 증발 건조시켰다. 조 생성물을 플래쉬 크로마토그래피 (SiO_2 ; 헥산 중 2-20% 에틸 아세테이트로 용리)에 의해 정제하여 표제 화합물을 백색 고체 (2.5 g, 68%)로서 수득하였다.

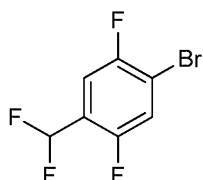
^1H NMR

(400 MHz, CDCl_3) δ 7.40 (dd, $J = 5.36, 7.10$ Hz, 1H), 7.52 (dd, $J = 5.40, 7.66$ Hz, 1H);

EIMS m/z 218.

[0416]

[0417] 실시예 34: 1-브로모-4-(디플루오로메틸)-2,5-디플루오로벤젠의 제조



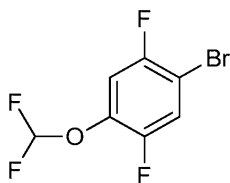
[0418]

[0419] 디클로로메탄 (55 mL) 중 4-브로모-2,5-디플루오로벤즈알데히드 (11.0 g, 49.77 mmol)의 용액에 0°C에서 (디아미노)황 트리플루오라이드 (DAST; 24.06 g, 0.15 mol)를 적가 방식으로 첨가하였다. 첨가가 완결된 후, 냉각조를 제거하고, 교반을 실온 (rt)에서 2시간 동안 계속하였다. 반응 혼합물을 디클로로메탄으로 희석하고, 물로 세척하고, 포화 염수 용액으로 세척하고, 건조시키고 (Na_2SO_4), 감압 하에 증발시켰다. 조 생성물을 플래쉬 크로마토그래피 (SiO_2 ; 0-10% 헥산 중 에틸 아세테이트로 용리)에 의해 정제하여 표제 화합물을 연갈색 액체 (8.39 g, 69%)로서 수득하였다.

$^1\text{H NMR}$ (400 MHz, CDCl_3) δ 6.58 (t, $J = 72.32$ Hz, 1H), 7.12 (t, $J = 7.92$ Hz, 1H), 7.44 (dd, $J = 6.32, 9.18$ Hz, 1H); EIMS m/z

244.

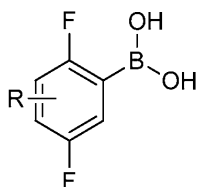
실시예 35: 1-브로모-4-(디플루오로메톡시)-2,5-디플루오로벤젠의 제조



밀봉된 튜브에서, -78°C 에서 아세토니트릴 및 물 (110 mL)의 1:1 혼합물 중 4-브로모-2,5-디플루오로페놀 (5.0 g, 23.9 mmol) 및 수산화칼륨 (26.8 g, 479 mmol)의 용액을 브로모-디플루오로메틸 디에틸포스포네이트 (12.8 g, 47.9 mmol)로 한 번에 처리하였다. 밀봉된 튜브를 실온에서 밤새 교반하였다. 반응 혼합물을 디에틸 에테르로 희석하고, 유기 상을 분리하였다. 수성 상을 디에틸 에테르로 2회 추출하였다. 합한 유기 추출물을 포화 염수 용액으로 세척하고, 건조시키고 (Na_2SO_4), 여과하고, 감압 하에 증발 건조시켰다. 조 생성물을 플래쉬 크로마토그래피 (SiO_2 ; 헥산 중 0-10% 에틸 아세테이트로 용리)에 의해 정제하여 표제 화합물을 투명한 액체 (4.2 g, 67.8%)로서 수득하였다

$^1\text{H NMR}$ (300 MHz, CDCl_3) δ 6.56 (t, $J = 72.36$ Hz, 1H), 7.11 (t, $J = 7.32$ Hz, 1H), 7.40 – 7.45 (m, 1H); EIMS m/z 259.

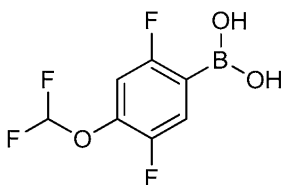
실시예 36: 보론산의 합성에 대한 일반적 절차



아르곤을 DMSO (기질 중 0.1-0.2 M을 제공하기에 충분한 부피) 중 브로모페닐 기질 (1.0 당량), 아세트산칼륨 (3.0 당량), 및 비스-(피나콜레이트)디보론 (1.1 당량)의 용액을 통해 15분 동안 밀봉된 튜브 중에서 버블링하였다. $\text{Pd}(\text{dppf})\text{Cl}_2$ (0.1 당량)를 첨가하고, 밀봉된 튜브를 다시 마개를 막았다. 반응 혼합물을 80°C 에서 18시간 동안 가열하였다. 냉각된 반응 혼합물을 물로 희석하고, 메틸 t-부틸 에테르로 추출하였다. 유기 추출물을 물로 세척하고, 포화 염수 용액으로 세척하고, 건조시키고 (Na_2SO_4), 여과하고, 감압 하에 증발 건조시켰다. 조 보로네이트 (1.0 당량)를 디에틸 에테르 (10 vol) 중에 용해시키고, 디에탄올아민 (1.1 당량)을 첨가하였다. 반응 혼합물을 실온에서 30-45분 동안 교반하였다. 백색 고체가 45분 후에 침전하였다. 교반을 멈추고, 용매를 가만히 따라내었다. 새로운 에테르를 고체에 첨가하고, 이어서 과량의 1.5 N HCl을 첨가하였다. 생성된 2상 용액을 30분 동안 교반하였다. 유기 상을 포화 염수 용액으로 세척하고, 건조시키고 (Na_2SO_4), 여과하고, 감압 하에 증발 건조시켰다. 이와 같이 하여 수득한 보론산을 후속 단계에 정제 없이 사용하였다.

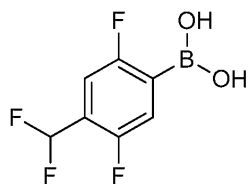
하기 화합물을 실시예 36에 개시된 절차에 따라 제조하였다:

(4-(디플루오로메톡시)-2,5-디플루오로페닐)보론산



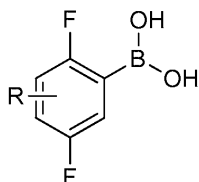
^1H NMR(300 MHz, CDCl_3) δ 6.59 (t, $J=72.78$ Hz, 1H), 6.97 (dd, $J=2.70, 9.14$ Hz, 1H), 7.52 (dd, $J=5.19, 10.29$ Hz, 1H).

(4-(디플루오로메틸)-2,5-디플루오로페닐)보론산



^1H NMR(400 MHz, CDCl_3) δ 6.87 (dt, $J=8.48, 54.64$ Hz, 1H), 7.25 – 7.32 (m, 1H), 7.49 (dd, $J=4.08, 9.48$ Hz, 1H), 7.59 – 7.60 (m, 1H).

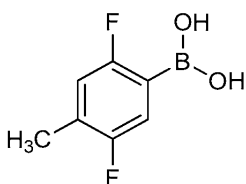
실시예 37: 보론산의 합성에 대한 일반적 절차 (방법 A)



-78℃에서 건조 THF (10 vol) 중 적절한 브로모페닐 기질 (1.0 당량)의 용액에 n-BuLi (헥산 중 2.5 M; 1.2 당량)를 적가하였다. 첨가가 완결된 후, 교반을 30분 동안 계속하였다. 트리메틸 보레이트 (1.5 당량)를 한 번에 첨가하고, 교반을 -78℃에서 1시간 동안 계속하였다. 반응 혼합물을 천천히 실온으로 가온하고, 1.5 N HCl로 켄칭하고, 에틸 아세테이트로 추출하였다. 유기 추출물을 물로 세척하고, 포화 염수 용액으로 세척하고, 건조시키고 (Na_2SO_4), 여과하고, 감압 하에 증발 건조시켰다. 이와 같이 하여 수득한 보론산을 후속 단계에 정제 없이 사용하였다.

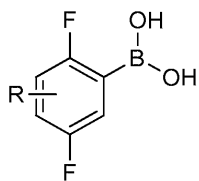
하기 화합물을 실시예 37에 개시된 절차에 따라 제조하였다:

(2,5-디플루오로-4-메틸페닐)보론산



^1H NMR(300 MHz, CDCl_3) δ 2.30 (s, 3H), 5.03 (br s, 2H), 6.89 (dd, $J=5.67, 10.25$ Hz, 1H), 7.42 (dd, $J=5.40, 9.19$ Hz, 1H).

실시예 38: 보론산의 합성에 대한 일반적 절차 (방법 B)

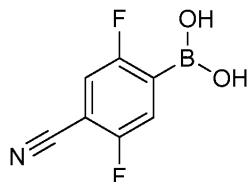


-40℃에서 건조 THF (10 vol) 중 적절한 브로모페닐 기질 (1.0 당량)의 용액에 이소프로필 염화마그네슘 염화리튬 착물 용액 (THF 중 1.3 M 용액; 1.05 당량)을 적가하였다. 첨가가 완결된 후, 반응 혼합물을 -40℃에서 45

분 동안 교반한 다음, 0℃로 천천히 가온하였다. 이소프로폭시보론산 피나콜 에스테르 (1.07 당량)를 적가하고, 교반을 0℃에서 2시간 동안 계속하였다. 반응 혼합물을 실온으로 가온하고, 수성 포화 NH₄Cl 용액으로 킨칭하고, 에틸 아세테이트로 추출하였다. 유기 추출물을 포화 염수 용액으로 세척하고, 건조시키고 (Na₂SO₄), 여과하고, 감압 하에 증발시켰다. 이와 같이 하여 수득한 보론산을 후속 단계에 정제 없이 사용하였다.

[0445] 하기 화합물을 실시예 38에 개시된 절차에 따라 제조하였다:

[0446] (4-시아노-2,5-디플루오로페닐)보론산

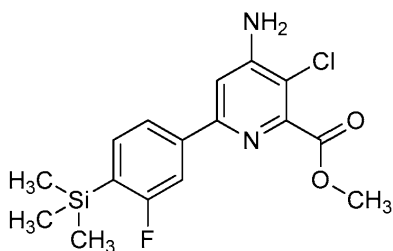


[0447]

¹H NMR(300 MHz, CDCl₃) δ 5.15 (br s, 2H), 7.29 – 7.36 (m, 1H), 7.69 (dd, *J* = 4.80, 8.28 Hz, 1H).

[0448]

[0449] 실시예 39: 메틸 4-아미노-3-클로로-6-(3-플루오로-4-(트리메틸실릴)페닐)피콜리네이트의 제조



[0450]

[0451] 교반용 막대가 구비된 20-mL 마이크로웨이브 용기에, 헤드 A (500 mg, 2.262 mmol), (2-플루오로-4-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란-2-일)페닐)트리메틸실란 (997 mg, 3.39 mmol), 비스(트리페닐포스핀)팔라듐(II) 디클로라이드 (203 mg, 3.39 mmol), 및 플루오린화세슘 (741 mg, 4.88 mmol)을 채웠다. 용기를 질소 (N₂) 분위기 하에 두고, 아세트니트릴 (4.0 mL) 및 H₂O (1.0 mL)를 첨가하였다. 용기를 용기의 측면으로부터 외부 IR-센서 온도 모니터링을 갖는 바이오타지 이니시에이터™ 마이크로웨이브 반응기에 120℃에서 30분 동안 두었다. 반응물을 염수 용액에 붓고, 에틸 아세테이트 (3 x 75 mL)로 추출하였다. 합한 유기 층을 무수 MgSO₄ 상에서 건조시키고, 여과하고, 농축시켰다. 생성된 잔류물을 플래쉬 크로마토그래피 (실리카 겔; 헥산 중 0-30% EtOAc)에 의해 정제하여 표제 화합물을 황색 고체 (0.328 g, 41%)로서 수득하였다.

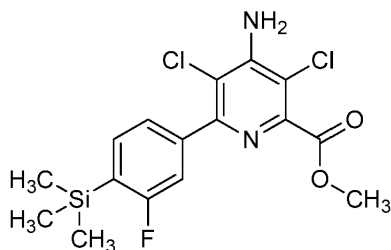
¹H NMR (400 MHz, DMSO-*d*₆)

δ 7.68 (dd, *J* = 7.5, 1.4 Hz, 1H), 7.61 – 7.47 (m, 2H), 7.30 (s, 1H), 6.78 (s, 2H), 3.88 (s, 3H), 0.30 (d, *J* = 0.8 Hz, 9H); ¹⁹F NMR (376 MHz, DMSO-*d*₆) δ -101.12; ESIMS *m/z* 353 ([M+H]⁺).

[0452]

[0453] 하기 화합물을 실시예 39에 개시된 절차에 따라 제조하였다:

[0454] 메틸 4-아미노-3,5-디클로로-6-(3-플루오로-4-(트리메틸실릴)페닐)피콜리네이트



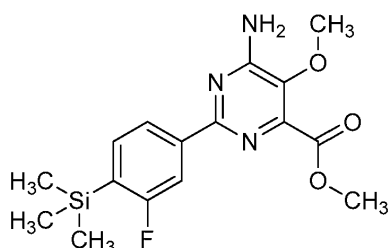
[0455]

[0456] 표제 화합물을 실시예 39에 기재된 바와 같이 헤드 H (500 mg, 1.96 mmol)를 이용하여 제조하고, 백색 고체 (0.381 g, 50%)로서 단리하였다.

^1H NMR (400 MHz, DMSO- d_6) δ 7.52 (dd, J = 7.6, 5.9 Hz, 1H), 7.41 (dd, J = 7.5, 1.3 Hz, 1H), 7.30 (dd, J = 9.6, 1.4 Hz, 1H), 7.11 (s, 2H), 3.87 (s, 3H), 0.33 (d, J = 0.9 Hz, 9H); ^{19}F NMR (376 MHz, DMSO- d_6) δ -101.38; ESIMS m/z 387 ($[\text{M}+\text{H}]^+$).

[0457]

[0458] 메틸 6-아미노-2-(3-플루오로-4-(트리메틸실릴)페닐)-5-메톡시피리미딘-4-카르복실레이트



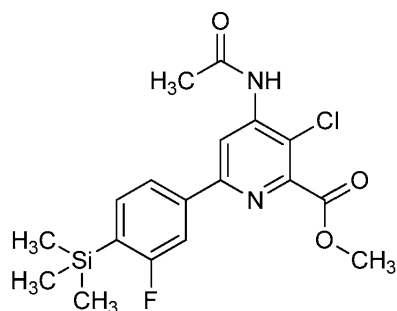
[0459]

[0460] 표제 화합물을 실시예 39에 기재된 바와 같이 헤드 C (0.510 g, 2.34 mmol)를 이용하여 제조하고, 황색 고체 (0.307 g, 38%)로서 단리하였다.

^1H NMR (400 MHz, DMSO- d_6) δ 8.08 – 7.99 (m, 1H), 7.82 (dd, J = 10.3, 1.4 Hz, 1H), 7.60 – 7.27 (m, 3H), 3.91 (s, 3H), 3.74 (s, 3H), 0.32 (d, J = 0.9 Hz, 9H); ^{19}F NMR (376 MHz, DMSO- d_6) δ -101.73; ESIMS m/z 350 ($[\text{M}+\text{H}]^+$).

[0461]

[0462] 메틸 4-아세트아미도-3-클로로-6-(3-플루오로-4-(트리메틸실릴)페닐)피콜리네이트



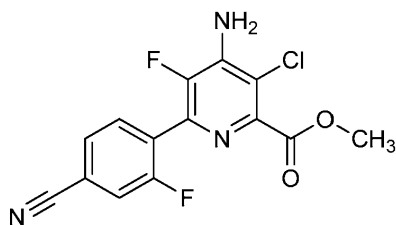
[0463]

[0464] 표제 화합물을 실시예 39에 기재된 바와 같이 디옥산 (7.0 mL) 및 H₂O (2.0 mL) 중 헤드 L (0.500 g, 1.90 mmol)을 이용하여 제조하고, 황색 고체 (0.433 g, 58%)로서 단리하였다.

^1H NMR (400 MHz, DMSO- d_6) δ 9.99 (s, 1H), 8.71 (s, 1H), 7.75 (dd, J = 7.6, 1.5 Hz, 1H), 7.63 (dd, J = 10.1, 1.5 Hz, 1H), 7.56 (dd, J = 7.7, 5.9 Hz, 1H), 3.94 (s, 3H), 2.24 (s, 3H), 0.30 (d, J = 0.8 Hz, 9H); ^{19}F NMR (376 MHz, DMSO- d_6) δ -100.78; ESIMS m/z 396 ([M+H] $^+$).

[0465]

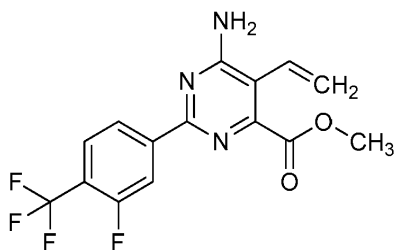
[0466] 메틸 4-아미노-3-클로로-6-(4-시아노-2-플루오로페닐)-5-플루오로피콜리네이트 (화합물 44)



[0467]

[0468] 표제 화합물을 실시예 39에 기재된 바와 같이 디옥산 (4.5 mL) 및 H₂O (1.2 mL) 중 헤드 B (400 mg, 1.673 mmol) 및 (4-시아노-2-플루오로페닐)보론산 (400 mg, 2.425 mmol)을 이용하여 제조하고, 회백색 고체 (0.451 g, 83%)로서 분리하였다.

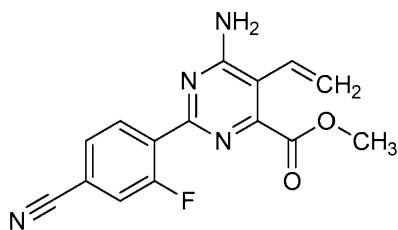
[0469] 메틸 6-아미노-2-(3-플루오로-4-(트리플루오로메틸)페닐)-5-비닐피리미딘-4-카르복실레이트 (화합물 137)



[0470]

[0471] 표제 화합물을 실시예 39에 기재된 바와 같이 디옥산 (5.0 mL) 및 H₂O (1.0 mL) 중 헤드 P (350 mg, 1.64 mmol) 및 (3-플루오로-4-(트리플루오로메틸)페닐)보론산 (445 mg, 2.14 mmol)을 이용하여 제조하고, 담갈색 고체 (0.291 g, 52%)로서 분리하였다.

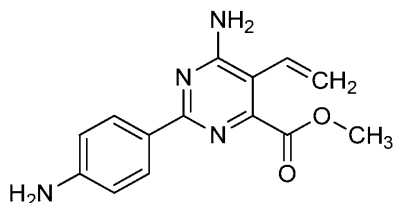
[0472] 메틸 6-아미노-2-(4-시아노-2-플루오로페닐)-5-비닐피리미딘-4-카르복실레이트 (화합물 98)



[0473]

[0474] 표제 화합물을 실시예 39에 기재된 바와 같이 디옥산 (4.5 mL) 및 H₂O (1.2 mL) 중 헤드 P (350 mg, 1.638 mmol) 및 (4-시아노-2-플루오로페닐)보론산 (375 mg, 2.27 mmol)을 이용하여 제조하고, 황색 고체 (0.291 g, 60%)로서 분리하였다.

[0475] 메틸 6-아미노-2-(4-아미노페닐)-5-비닐피리미딘-4-카르복실레이트



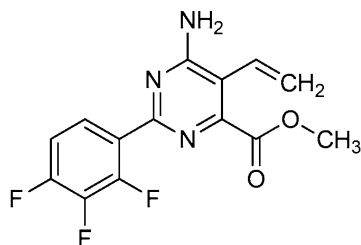
[0476]

[0477] 표제 화합물을 실시예 39에 기재된 바와 같이 디옥산 (15.6 mL) 및 H₂O (3.12 mL) 중 헤드 P (0.800 g, 3.74 mmol) 및 4-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란-2-일)아닐린 (0.985 g, 4.49 mmol)을 이용하여 제조하고, 황색 고체 (0.400 g, 40%)로서 단리하였다.

¹H NMR (400 MHz, DMSO-*d*₆) δ 8.08 – 7.86 (m, 2H), 6.99 (s, 2H), 6.76 – 6.51 (m, 3H), 5.61 (s, 2H), 5.49 – 5.30 (m, 2H), 3.81 (s, 3H); ESIMS *m/z* 271 ([M+H]⁺).

[0478]

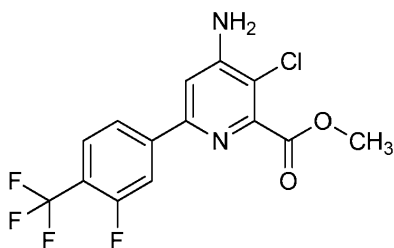
[0479] 메틸 6-아미노-2-(2,3,4-트리플루오로페닐)-5-비닐피리미딘-4-카르복실레이트 (화합물 197)



[0480]

[0481] 표제 화합물을 실시예 39에 기재된 바와 같이 디옥산 (5.0 mL) 및 H₂O (1.0 mL) 중 헤드 P (0.350 g, 1.64 mmol) 및 (2,3,4-트리플루오로페닐)보론산 (0.346 g, 1.97 mmol)을 이용하여 제조하고, 황색 고체 (0.414 g, 82%)로서 단리하였다.

[0482] 실시예 40. 메틸 4-아미노-3-클로로-6-(3-플루오로-4-(트리플루오로메틸)페닐)피콜리네이트의 제조 (화합물 29)

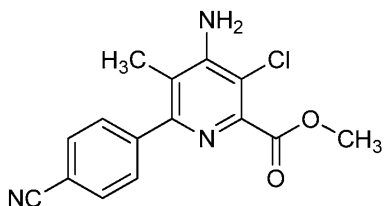


[0483]

[0484] 아세트니트릴/물 (8 mL, 3:1) 중 메틸 4-아미노-3,6-디클로로피콜리네이트 (630 mg, 2.85 mmol), 2-(3-플루오로-4-(트리플루오로메틸)페닐)-4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란 (1.06 g, 3.65 mmol, 1.3 당량), 비스(트리페닐포스핀)염화팔라듐 (II) (209 mg, 0.30 mmol, 0.1 당량), 및 플루오린화칼륨 (510 mg, 8.8 mmol, 3 당량)을 용기의 측면로부터 외부 IR-센서 온도 모니터링을 갖는 바이오타지 이니시에이터™ 마이크로웨이브 반응기 상에 115℃에서 20분 동안 25-mL 바이알 용기 중에서 마개를 막았다. 반응 혼합물을 에틸 아세테이트로 회석하고, 물로 세척하였다. 수성 층을 에틸 아세테이트로 추출하고, 합한 유기 층을 무수 Na₂SO₄ 상에서 건조시키고, 여과하고, 농축시켰다. 조 화합물을 셀라이트® 카트리지 상에 로딩하고, 진공 오븐 중에서 건조시켰다. 역상 플래쉬 크로마토그래피 (0-60, 60, 60-100% 아세트니트릴/물)에 의해 정제하여 표제 화합물을 백색 고체 (0.57 g, 57%)로서 수득하였다.

[0485] 하기 화합물을 실시예 40에 개시된 절차에 따라 제조하였다:

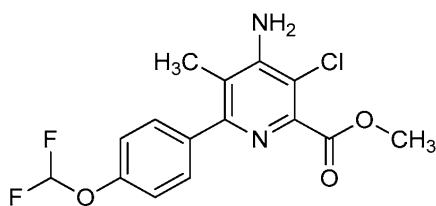
[0486] 메틸 4-아미노-3-클로로-6-(4-시아노페닐)-5-메틸피콜리네이트 (화합물 83)



[0487]

[0488] 표제 화합물을 실시예 40에서와 같이 헤드 D를 이용하여 제조하고, 오렌지색 고체 (180 mg, 55%)로서 분리하였다.

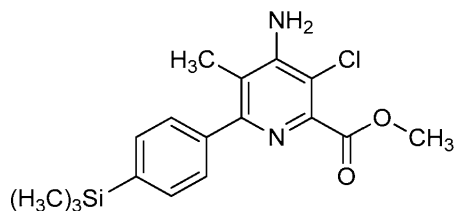
[0489] 메틸 4-아미노-3-클로로-6-(4-(디플루오로메톡시)페닐)-5-메틸피콜리네이트 (화합물 111)



[0490]

[0491] 표제 화합물을 실시예 40에서와 같이 제조하고, 왁스상 황색 고체 (120 mg, 32%)로서 제조하였다.

[0492] 메틸 4-아미노-3-클로로-5-메틸-6-(4-(트리메틸실릴)페닐)피콜리네이트



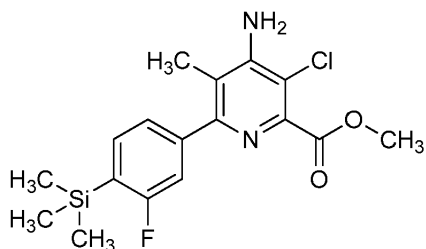
[0493]

[0494] 표제 화합물을 실시예 40에서와 같이 헤드 D를 이용하여 제조하고, 황색 고체 (1.11 g, 45%)로서 분리하였다.

mp 160–163 °C; ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.57 (d, $J = 8.2$ Hz, 2H), 7.42 (d, $J = 8.2$ Hz, 2H), 4.80 (s, 2H), 3.94 (s, 3H), 2.18 (s, 3H), 0.28 (s, 9H); ^{13}C NMR (101 MHz, CDCl_3) δ 167.01, 157.65, 150.16, 146.19, 141.69, 141.24, 134.39, 129.61, 117.96, 114.49, 53.95, 15.86, 1.16; ESIMS m/z 348 ($[\text{M}]^+$).

[0495]

[0496] 메틸 4-아미노-3-클로로-6-(3-플루오로-4-(트리메틸실릴)페닐)-5-메틸피콜리네이트



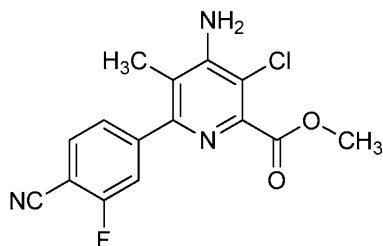
[0497]

[0498] 표제 화합물을 실시예 40에서와 같이 헤드 D를 이용하여 제조하고, 황색 고체 (346 mg, 27%)로서 단리하였다.

mp 167 °C (dec); ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.43 (dd, J = 7.4, 5.8 Hz, 1H), 7.20 (dd, J = 7.4, 0.9 Hz, 1H), 7.10 (dd, J = 9.2, 1.3 Hz, 1H), 4.83 (s, 2H), 3.95 (s, 3H), 2.18 (s, 3H), 0.33 (d, J = 0.8 Hz, 9H); ^{19}F NMR (376 MHz, CDCl_3) δ -100.73; ESIMS m/z 367 ($[\text{M}+\text{H}]^+$).

[0499]

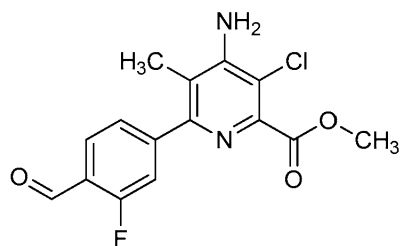
[0500] 메틸 4-아미노-3-클로로-6-(4-시아노-3-플루오로페닐)-5-메틸피콜리네이트 (화합물 155)



[0501]

[0502] 표제 화합물을 실시예 40에서와 같이 헤드 D를 이용하여 제조하고, 백색 박편상 고체 (200 mg, 49%)로서 단리하였다.

[0503] 메틸 4-아미노-3-클로로-6-(3-플루오로-4-포르밀페닐)-5-메틸피콜리네이트



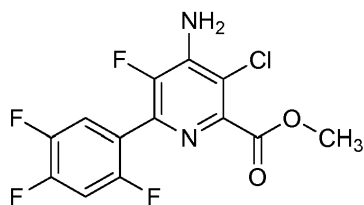
[0504]

[0505] 표제 화합물을 실시예 40에서와 같이 헤드 D를 이용하여 제조하고, 오렌지색 고체 (747 mg, 65%)로서 단리하였다.

mp 114–120 °C; ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 10.40 (s, 1H), 7.92 (t, J = 7.5 Hz, 1H), 7.38 – 7.29 (m, 2H), 4.97 (s, 2H), 3.97 (s, 3H), 2.18 (s, 3H); ^{19}F NMR (376 MHz, CDCl_3) δ -121.53; ESIMS m/z 323 ($[\text{M}+\text{H}]^+$).

[0506]

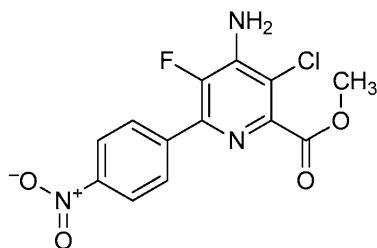
[0507] 메틸 4-아미노-3-클로로-5-플루오로-6-(2,4,5-트리플루오로페닐)피콜리네이트 (화합물 200)



[0508]

[0509] 표제 화합물을 실시예 40에서와 같이 헤드 B를 이용하여 제조하고, 백색 분말 (370 mg, 73%)로서 단리하였다.

[0510] 실시예 41: 메틸 4-아미노-3-클로로-5-플루오로-6-(4-니트로페닐)피콜리네이트의 제조 (화합물 95)

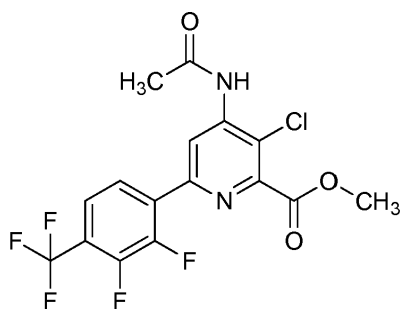


[0511]

[0512] 물/아세트니트릴 혼합물 (2.8/0.7 mL) 중 헤드 B (250 mg, 1.05 mmol), (4-니트로페닐)보론산 (192 mg, 1.15 mmol), 플루오린화세슘 (CsF; 315 mg, 2.09 mmol) 및 트리스(3-술포네이트페닐)포스핀 수화물 나트륨 염 (TPPTS, 60 mg, 0.11 mmol)의 현탁액에 아세트산팔라듐 (12 mg, 0.05 mmol)을 첨가하였다. 바이오타지™ 벤치탑 마이크로웨이브에서, 혼합물을 150℃에서 5분 동안 가열하였다. 이어서, 반응 혼합물을 셀라이트®를 통해 여과하고, EtOAc로 희석시키고, 물 및 염수로 세척하였다. 이어서, 유기부를 건조시키고 (Na₂SO₄), 여과하고, 진공 하에 농축시킨 다음, 실리카 겔 크로마토그래피에 의해 헥산 중 0-100% EtOAc로 용리시키면서 정제하여 황색 고체 (150 mg, 44%)를 수득하였다.

[0513] 하기 화합물을 실시예 41에 개시된 절차에 따라 제조하였다:

[0514] 메틸 4-아세트아미도-3-클로로-6-(2,3-디플루오로-4-(트리플루오로메틸)페닐)피콜리네이트

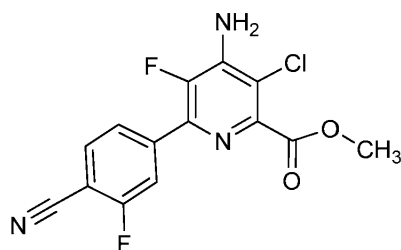


[0515]

¹H NMR (400 MHz, DMSO-*d*₆) δ 10.03 (s, 1H), 8.79 (d, *J* = 1.0 Hz, 1H), 7.93 – 7.84 (m, 1H), 7.75 (dd, *J* = 8.3, 6.3 Hz, 1H), 3.96 (s, 3H), 2.26 (s, 3H); ESIMS *m/z* 409 ([M+H]⁺).

[0516]

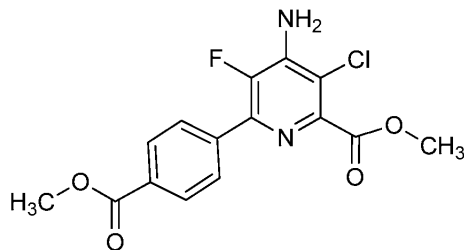
[0517] 실시예 42: 메틸 4-아미노-3-클로로-6-(4-시아노-3-플루오로페닐)-5-플루오로피콜리네이트의 제조 (화합물 135)



[0518]

[0519] 헤드 B (0.300 g, 1.255 mmol), 4-시아노-3-플루오로페닐보론산 (0.248 g, 1.506 mmol), 비스(트리페닐포스핀)염화팔라듐 (II) (0.088 g, 0.126 mmol), 및 플루오린화세슘 (0.381 g, 2.51 mmol)을 1,2-디메톡시에탄 (2 mL) 및 물 (2 mL) 중에서 합하고, 마이크로웨이브 반응기에서 110℃에서 20분 동안 가열하였다. 냉각된 반응 혼합물을 에틸 아세테이트와 물 사이에 분배하였다. 유기 상을 건조시키고, 농축시켰다. 생성물을 플래쉬 크로마토그래피 (SiO₂; 헥산 중 5-60% 에틸 아세테이트로 용리)에 의해 정제하여 표제 화합물을 백색 고체 (0.189 g, 46.5%)로서 수득하였다.

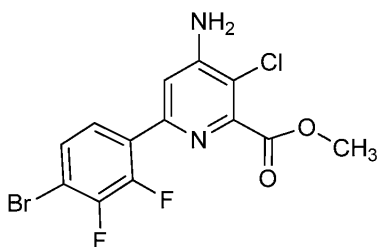
[0520] 실시예 43: 메틸 4-아미노-3-클로로-5-플루오로-6-(4-(메톡시카르보닐)페닐)피콜리네이트의 제조 (화합물 190)



[0521]

[0522] 헤드 B (0.4 g, 1.673 mmol), 4-(메톡시카르보닐)페닐보론산 (0.392 g, 2.175 mmol), 플루오린화칼륨 (0.253 g, 4.35 mmol), 및 비스(트리페닐포스핀)염화팔라듐 (II) (0.059 g, 0.084 mmol)을 아세토니트릴 (3 mL) 및 물 (1 mL) 중에서 합하였다. 이어서, 반응 혼합물을 마이크로웨이브에서 110℃에서 밀봉된 바이알에서 20분 동안 조사하였다. 냉각된 반응 혼합물을 에틸 아세테이트와 물 사이에 분배하였다. 유기 상을 건조시키고, 실리카 겔 상에 농축시켰다. 상기 혼합물을 실리카 겔 칼럼의 상단에 적용하고, 생성물을 헥산 중 5-60% 에틸 아세테이트 구배 용매계로 용리시켰다. 이 과정으로 표제 화합물을 백색 고체 (0.230 g, 40.6%)로서 수득하였다.

[0523] 실시예 44: 메틸 4-아미노-6-(4-브로모-2,3-디플루오로페닐)-3-클로로피콜리네이트의 제조 (화합물 114)

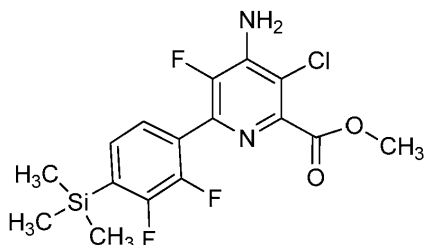


[0524]

[0525] 단계 1: 헤드 N (0.600 g, 1.692 mmol), 4-브로모-2,3-디플루오로페닐보론산 (0.481 g, 2.031 mmol), 플루오린화세슘 (0.617 g, 4.06 mmol), 및 비스(트리페닐포스핀)염화팔라듐 (II) (0.119 g, 0.169 mmol)을 1,2-디메톡시에탄 (4 mL) 및 물 (4 mL) 중에서 합하고, 마이크로웨이브 반응기에서 110℃에서 20분 동안 가열하였다. 냉각된 반응 혼합물을 에틸 아세테이트와 물 사이에 분배하였다. 유기 상을 분리하고, 실리카 겔 상에 농축시켰다. 생성물을 에틸 아세테이트/헥산 구배로 용리시켜 메틸 4-아세트아미도-6-(4-브로모-2,3-디플루오로페닐)-3-클로로피콜리네이트 (0.515 g, 72.5%)를 백색 고체로서 수득하였다.

[0526] 단계 2: 메틸 4-아세트아미도-6-(4-브로모-2,3-디플루오로페닐)-3-클로로피콜리네이트 (0.515 g, 1.227 mmol)를 메탄올 (20 mL) 중에 현탁시키고, 아세트릴 클로라이드 (1.559 mL, 21.93 mmol)를 적가하였다. 반응 혼합물을 실온에서 밤새 교반하고, 진공 하에 농축시켰다. 잔류물을 에틸 아세테이트와 5% 중탄산나트륨 용액 사이에 분배하였다. 유기 상을 실리카 겔 상에 농축시키고, 플래쉬 크로마토그래피 (SiO₂; 헥산 중 5-60% 에틸 아세테이트로 용리)에 의해 정제하여 표제 화합물을 백색 고체 (0.231 g, 55.8%)로서 수득하였다.

[0527] 실시예 45: 메틸 4-아미노-3-클로로-6-(2,3-디플루오로-4-(트리메틸실릴)페닐)-5-플루오로피콜리네이트의 제조



[0528]

[0529] 헤드 B (2.0 g, 8.37 mmol), (2,3-디플루오로-4-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란-2-일)페닐)트리메틸실란 (3.40 g, 10.88 mmol), 탄산나트륨 (0.887 g, 8.37 mmol) 및 비스(트리페닐포스핀)염화팔라듐 (II) (0.587 g, 0.837 mmol)을 아세토니트릴 (25 mL) 및 물 (8 mL) 중에서 합하였다. 이어서, 반응 혼합물을 환류 하에 4시간 동안 가열하였다. 냉각된 반응 혼합물을 에틸 아세테이트와 물 사이에 분배하였다. 유기 상을 2회 더 물로 세척한 다음, 실리카 겔 상에 농축시켰다. 상기 혼합물을 실리카 겔 크로마토그래피에 의해 정제하고,

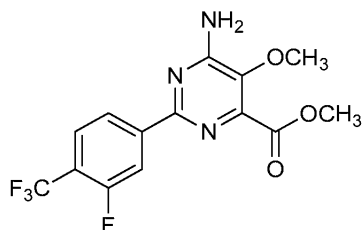
생성물을 헥산 용매계 중 7-60% 에틸 아세테이트로 용리시켰다. 이 과정으로 표제 화합물을 백색 고체 (2.7 g, 83%)로서 수득하였다.

mp 160-162 °C; ^1H NMR (300 MHz, CDCl_3) δ 7.37 - 7.28 (m, 1H), 7.21 (ddd, J = 7.7, 4.4, 1.3 Hz, 1H), 4.96 (br s, 2H), 3.97 (s, 3H), 0.35 (s, 9H).

[0530]

[0531]

실시예 46: 메틸 6-아미노-2-(3-플루오로-4-(트리플루오로메틸)페닐)-5-메톡시피리미딘-4-카르복실레이트의 제조 (화합물 26)



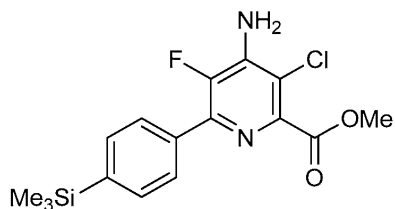
[0532]

[0533]

마이크로웨이브 바이알에 헤드 C (184 mg, 0.846 mmol), 2-(3-플루오로-4-(트리플루오로메틸)페닐)-4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란 (270 mg, 0.930 mmol), 플루오린화칼륨 (128 mg, 2.198 mmol), 및 비스(트리페닐포스핀)염화팔라듐 (II) (59.3 mg, 0.085 mmol)을 첨가하였다. 후속적으로, 아세트니트릴 (2.789 mL) 및 물 (2.79 mL)을 첨가하였다. 이어서, 반응 바이알을 마개를 막고, 용기의 측면로부터 외부 IR-센서 온도 모니터링을 갖는 바이오타지™ 이니시에이터 마이크로웨이브 반응기에서 20분 동안 115°C에서 두었다. 반응 혼합물을 실온으로 냉각시키고, EtOAc로 희석하고, H_2O 로 세척하였다. 유기부를 Na_2SO_4 상에서 건조시키고, 여과하고, 진공 하에 농축시켰다. 조 생성물을 플래쉬 크로마토그래피 (실리카; 헥산/EtOAc)에 의해 정제하였다. 이렇게 하여 표제 화합물 (172 mg, 58.9%)을 백색 고체로서 수득하였다.

[0534]

실시예 47: 메틸 4-아미노-3-클로로-5-플루오로-6-(4-(트리메틸실릴)페닐)피콜리네이트의 제조



[0535]

[0536]

헤드 B (600 mg, 2.5 mmol, 1.0 당량) 및 (4-(트리메틸실릴)페닐)보론산 (540 mg, 2.8 mmol, 1.1 당량)을 20 mL 바이알 중에서 합하고, 이어서 플루오린화세슘 (420 mg, 2.8 mmol, 1.1 당량), 아세트산팔라듐 (28 mg, 0.13 mmol, 0.05 당량), 및 소듐 3,3',3"-포스핀트리일트리벤젠술포네이트 (140 mg, 0.25 mmol, 0.10 당량)를 첨가하였다. 물:아세트니트릴의 3:1 혼합물 (7.2 mL)을 첨가하고, 생성된 갈색 혼합물을 마개를 막고, 용기의 측면으로부터 외부 IR-센서 온도 모니터링을 갖는 바이오타지 이니시에이터™ 마이크로웨이브 반응기에 150°C에서 5분 동안 두었다. 냉각된 반응 혼합물을 물 (150 mL)로 희석하고, 디클로로메탄 (5 x 60 mL)으로 추출하였다. 합한 유기 층을 건조시키고 (MgSO_4), 중력 여과하고, 회전 증발에 의해 농축시켰다. 잔류물을 실리카 겔 칼럼 크로마토그래피 (헥산 중 33% 에틸 아세테이트)에 의해 정제하여 표제 화합물을 연황색 분말 (700 mg, 79%)로서 수득하였다.

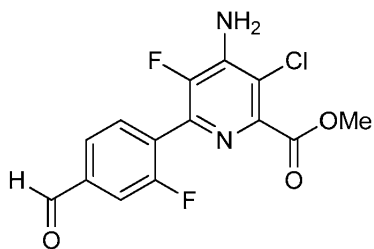
mp 148-150 °C; ^1H NMR (300 MHz, CDCl_3) δ 7.86 (m, 2H), 7.62 (m, 2H), 4.88 (br s, 2H), 3.98 (s, 3H), 0.29 (s, 9H); ESIMS m/z 353 ($[\text{M}+\text{H}]^+$).

[0537]

[0538]

하기 화합물을 실시예 47에 개시된 절차에 따라 제조하였다:

[0539] 메틸 4-아미노-3-클로로-5-플루오로-6-(2-플루오로-4-포르밀페닐)피콜리네이트

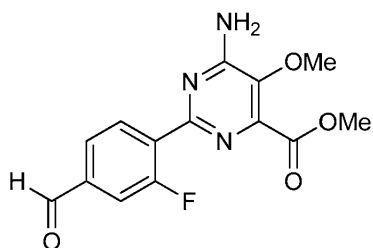


[0540]

mp 151–154 °C; ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 10.06 (d, $J = 2$ Hz, 1H), 7.79 – 7.84 (m, 2H), 7.67 (dd, $J = 10, 1$ Hz, 1H), 5.00 (br s, 2H), 3.99 (s, 3H); ESIMS m/z 327 ($[\text{M}+\text{H}]^+$).

[0541]

[0542] 메틸 6-아미노-2-(2-플루오로-4-포르밀페닐)-5-메톡시피리미딘-4-카르복실레이트

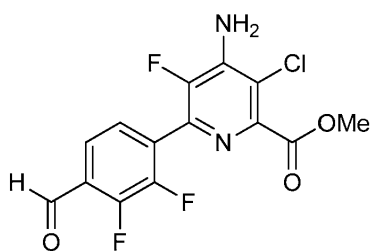


[0543]

mp 176–178 °C; ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 10.03 (d, $J = 2$ Hz, 1H), 8.10 (t, $J = 8$ Hz, 1H), 7.73 (dd, $J = 8, 1.5$ Hz, 1H), 7.65 (dd, $J = 8, 1.5$ Hz, 1H), 5.45 (br s, 2H), 4.00 (s, 3H), 3.96 (s, 3H); ESIMS m/z 306 ($[\text{M}+\text{H}]^+$).

[0544]

[0545] 메틸 4-아미노-3-클로로-6-(2,3-디플루오로-4-포르밀페닐)-5-플루오로피콜리네이트

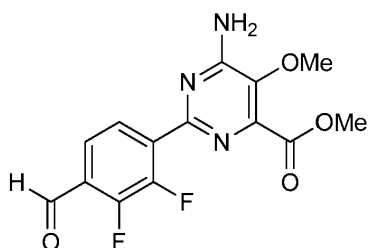


[0546]

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 10.40 (d, $J = 1$ Hz, 1H), 7.74 (m, 1H), 7.52 (m, 1H), 5.01 (br s, 2H), 3.97 (s, 3H).

[0547]

[0548] 메틸 6-아미노-2-(2,3-디플루오로-4-포르밀페닐)-5-메톡시피리미딘-4-카르복실레이트

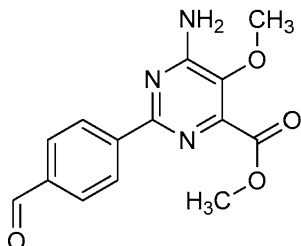


[0549]

mp 184–186 °C; ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 10.38 (d, $J = 0.5$ Hz, 1H), 7.84 (m, 1H), 7.67 (ddd, $J = 8, 6, 2$ Hz, 1H), 5.47 (br s, 2H), 4.01 (s, 3H), 3.96 (s, 3H); ESIMS m/z 324 ($[\text{M}+\text{H}]^+$).

[0550]

[0551] 메틸 6-아미노-2-(4-포르밀페닐)-5-메톡시피리미딘-4-카르복실레이트

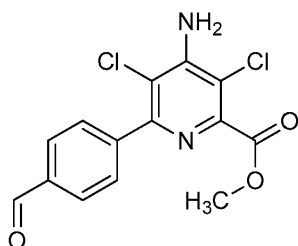


[0552]

mp 155–156 °C; ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 10.1 (s, 1H), 8.54 (d, 2H), 7.99 (d, 2H), 5.56 (s, 2H), 4.08 (s, 3H), 3.99 (s, 3H); ESIMS m/z 288 ($[\text{M}+\text{H}]^+$).

[0553]

[0554] 메틸 4-아미노-3,5-디클로로-6-(4-포르밀페닐)피콜리네이트

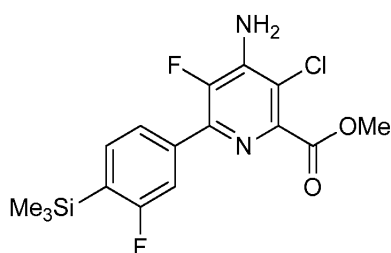


[0555]

mp 131–133 °C; ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 10.08 (s, 1H), 7.96 (d, 2H), 7.83 (d, 2H), 5.36 (s, 2H), 3.98 (s, 3H); ESIMS m/z 325 ($[\text{M}+\text{H}]^+$).

[0556]

[0557] 실시예 48: 메틸 4-아미노-3-클로로-5-플루오로-6-(3-플루오로-4-(트리메틸실릴)페닐)피콜리네이트의 제조



[0558]

[0559] 디클로로[비스(트리페닐포스피노)]-팔라듐(II) (150 mg, 0.21 mmol, 0.10 당량) 및 탄산나트륨 (270 mg, 2.5 mmol, 1.2 당량)을 물:아세트니트릴의 1:1 혼합물 (7.0 mL) 중 조 (2-플루오로-4-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란-2-일)페닐)트리메틸실란 (990 mg, 2.5 mmol, 1.2 당량) 및 헤드 B (500 mg, 2.1 mmol, 1.0 당량)의 교반 혼합물에 23°C에서 순차적으로 첨가하였다. 생성된 암오렌지색 혼합물을 85°C로 가열하고, 4시간 동안 교반하였다. 냉각된 반응 혼합물을 물 (150 mL)로 희석하고, 디클로로메탄 (3 x 80 mL)으로 추출하였다. 합한 유기 층을 건조시키고 (MgSO_4), 중력 여과하고, 회전 증발에 의해 농축시켰다. 잔류물을 실리카 겔 칼럼 크로마토그래피 (헥산 중 25% 에틸 아세테이트)에 의해 정제하여 표제 화합물을 연황색 분말 (500 mg, 65%)로서 수득하였다.

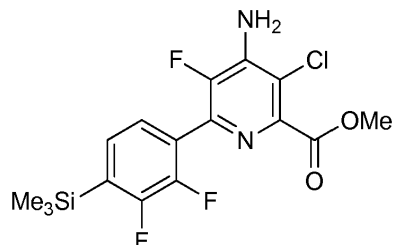
mp

125–127 °C; IR (박막) 3481 (m), 3350 (s), 2952 (w), 1728 (m), 1610 (m) cm^{-1} ; ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.71 (dt, $J = 6.5$, 1 Hz, 1H), 7.59 (dt, $J = 10$, 1 Hz, 1H), 7.50 (dd, $J = 8$, 6.5 Hz, 1H), 4.91 (br s, 2H), 3.99 (s, 3H), 0.33 (d, 9H); ESIMS m/z 371 ($[\text{M}+\text{H}]^+$).

[0560]

[0561] 하기 화합물을 실시예 48에 개시된 절차에 따라 제조하였다:

[0562] 메틸 4-아미노-3-클로로-6-(2,3-디플루오로-4-(트리메틸실릴)페닐)-5-플루오로피콜리네이트

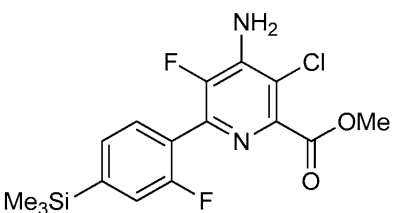


[0563]

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.33 (ddd, $J = 8$, 4.5, 1 Hz, 1H), 7.21 (ddd, $J = 8$, 5, 1.5 Hz, 1H), 4.94 (br s, 2H), 3.96 (s, 3H), 0.33 (d, $J = 1$ Hz, 9H); ESIMS m/z 389 ($[\text{M}+\text{H}]^+$).

[0564]

[0565] 메틸 4-아미노-3-클로로-5-플루오로-6-(2-플루오로-4-(트리메틸실릴)페닐)피콜리네이트

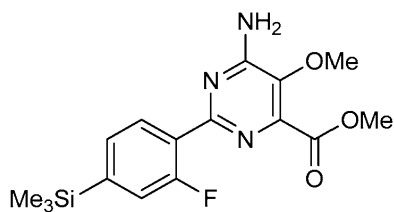


[0566]

mp 175–177 °C; ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.58 (t, $J = 8$ Hz, 1H), 7.39 (dd, $J = 8$, 1 Hz, 1H), 7.27 (m, 1H), 4.91 (br s, 2H), 3.96 (s, 3H), 0.26 (s, 9H); ESIMS m/z 371 ($[\text{M}+\text{H}]^+$).

[0567]

[0568] 메틸 6-아미노-2-(2-플루오로-4-(트리메틸실릴)페닐)-5-메톡시피리미딘-4-카르복실레이트

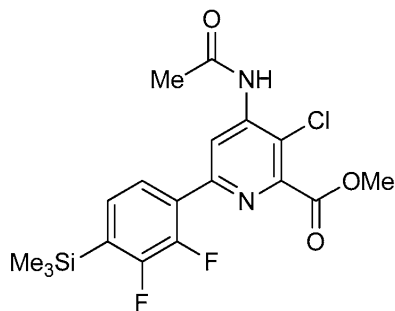


[0569]

mp 140–142 °C; ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.85 (t, $J = 8$ Hz, 1H), 7.32 (dd, $J = 8$, 1 Hz, 1H), 7.26 (m, 1H), 5.38 (br s, 2H), 3.99 (s, 3H), 3.94 (s, 3H), 0.26 (s, 9H); ESIMS m/z 348 ($[\text{M}-\text{H}]^-$).

[0570]

[0571] 메틸 4-아세트아미도-3-클로로-6-(2,3-디플루오로-4-(트리메틸실릴)페닐)피콜리네이트

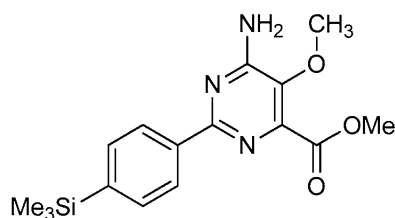


[0572]

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 9.04 (d, $J = 1$ Hz, 1H), 7.99 (br s, 1H), 7.65 (m, 1H), 7.18 (m, 1H), 4.00 (s, 3H), 2.31 (s, 3H), 0.33 (d, $J = 1$ Hz, 9H); ESIMS m/z 413 ($[\text{M}-\text{H}]^-$).

[0573]

[0574] 메틸 6-아미노-5-메톡시-2-(4-(트리메틸실릴)페닐)피리미딘-4-카르복실레이트

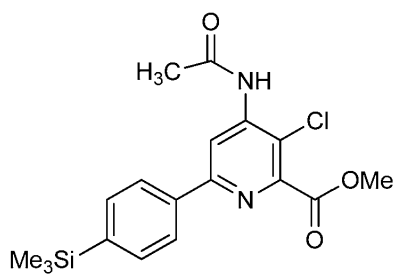


[0575]

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 8.25 (m, 2H), 7.58 m, 2H), 5.35 (br s, 2H), 4.01 (s, 3H), 3.91 (s, 3H), 0.30 (s, 9H); ESIMS m/z 330 ($[\text{M}-\text{H}]^-$).

[0576]

[0577] 메틸 4-아세트아미도-3-클로로-6-(4-(트리메틸실릴)페닐)피콜리네이트

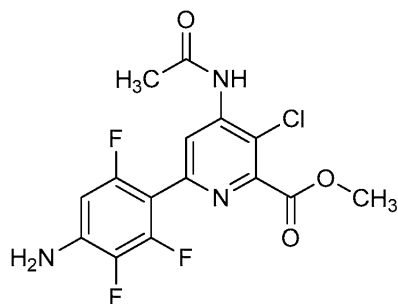


[0578]

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 9.00 (s, 1H), 7.98 (m, 2H), 7.61 (m, 2H), 7.25 (s, 1H), 4.01 (s, 3H), 2.32 (s, 3H), 0.29 (s, 9H); ESIMS m/z 375 ($[\text{M}-\text{H}]^-$).

[0579]

[0580] 실시예 49: 메틸 4-아세트아미도-6-(4-아미노-2,3,6-트리플루오로페닐)-3-클로로피콜리네이트의 제조



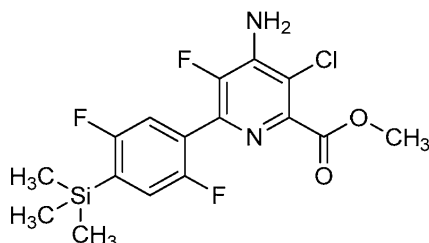
[0581]

[0582] 건조 DMF (3 mL) 중 메틸 4-아세트아미도-3-클로로-6-(트리메틸스틸)피콜리네이트 (헤드 K; 0.502 g, 1.409 mmol, 1.0 당량), 2,3,5-트리플루오로-4-아이오도아닐린 (0.5 g, 1.831 mmol, 1.3 당량), 비스(트리페닐포스핀)염화팔라듐 (II) (0.098 g, 0.1401 mmol, 0.1 당량) 및 CuI (26 mg, 0.1401 mmol, 0.1 당량)의 현탁액을 마이크로웨이브로 120℃에서 1시간 동안 조사하였다. 반응 혼합물을 20℃로 냉각시키고, 15분 동안 수성 플루오린화칼륨 (KF) 용액 (20 mL)과 함께 교반한 다음, 에틸 아세테이트 (3x100 mL)로 추출하였다. 합한 유기 층을 무수 Na₂SO₄ 상에서 건조시키고, 여과하고, 감압 하에 증발 건조시켰다. 조 생성물을 실리카 겔 (60-120 메쉬) 상에서 헥산 중 0-30% EtOAc 구배를 사용하여 정제하여 표제 화합물을 갈색 고체 (280 mg, 44.8%)로서 수득하였다.

¹H NMR (400 MHz, DMSO-*d*₆) δ 9.96 (s, 1H), 8.32 (s, 1H), 6.51 – 6.46 (m, 1H), 6.22 (br s, 2H), 3.92 (s, 3H), 2.23 (s, 3H); ESIMS *m/z* 376 ([M+3H]⁺).

[0583]

[0584] 실시예 50: 메틸 4-아미노-3-클로로-6-(2,5-디플루오로-4-(트리메틸실릴)페닐)-5-플루오로피콜리네이트의 제조



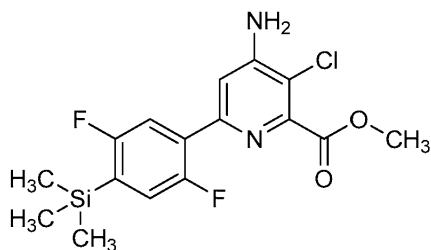
[0585]

[0586] 마이크로웨이브 용기에서, 아세토니트릴 (4.00 mL) 및 물 (1.334 mL)의 3:1 혼합물 중 (2,5-디플루오로-4-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란-2-일)페닐)트리메틸실란 (예를 들어, WO 2013003740 A1 참조; 0.6 g, 1.922 mmol), 메틸 4-아미노-3,6-디클로로-5-플루오로피콜리네이트 (헤드 B; 0.383 g, 1.601 mmol), 비스(트리페닐 포스핀)염화팔라듐 (II) (0.112 g, 0.160 mmol) 및 탄산나트륨 (0.204 g, 1.922 mmol)의 현탁액을 마이크로웨이브 조사 (120℃, 20분) 하에 교반하였다. 반응 혼합물을 반포화 염수 용액에 붓고, EtOAc (3x)로 추출하였다. 합한 유기 층을 Na₂SO₄ 상에서 건조시키고, 여과하고, 농축시켰다. 잔류물을 정제용 역상 HPLC (물/아세토니트릴 구배)에 의해 정제하여 표제 화합물을 백색 고체 (0.271 g, 43.5%)로서 수득하였다.

¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 7.23 (dd, *J* = 7.8, 5.1 Hz, 1H), 7.13 (dd, *J* = 9.3, 4.0 Hz, 1H), 4.95 (s, 2H), 3.98 (s, 3H), 0.33 (d, *J* = 0.8 Hz, 9H); ¹⁹F NMR (376 MHz, CDCl₃) δ -106.81, -106.87, -121.20, -121.25, -121.29, -121.35, -137.32, -137.41; ESIMS *m/z* 389 ([M+H]⁺).

[0587]

[0588] 실시예 51: 메틸 4-아미노-3-클로로-6-(2,5-디플루오로-4-(트리메틸실릴)페닐)피콜리네이트의 제조



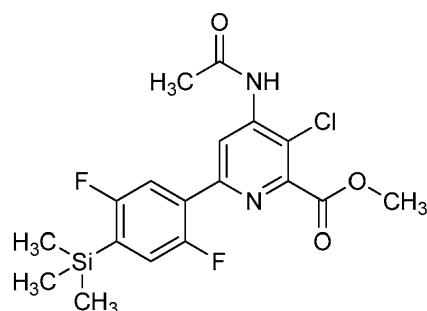
[0589]

[0590] 마이크로웨이브 용기에서, 아세트니트릴 (4.00 mL) 및 물 (1.334 mL)의 3:1 혼합물 중 (2,5-디플루오로-4-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란-2-일)페닐)트리메틸실란 (예를 들어, WO 2013003740 A1 참조) (0.6 g, 1.922 mmol), 메틸 4-아미노-3,6-디클로로피콜리네이트(헤드 A) (0.354 g, 1.601 mmol), 비스(트리페닐 포스핀)염화팔라듐 (II) (0.112 g, 0.160 mmol) 및 탄산나트륨 (0.204 g, 1.922 mmol)의 현탁액을 마이크로웨이브 조사 (120℃, 20분) 하에 교반하였다. 반응 혼합물을 반포화 염수 용액에 붓고, EtOAc (3x)로 추출하였다. 합한 유기 층을 Na₂SO₄ 상에서 건조시키고, 여과하고, 농축시켰다. 잔류물을 정제용 역상 HPLC (물/아세트니트릴 구배)에 의해 정제하여 표제 화합물을 백색 고체 (0.234 g, 0.631 mmol, 39.4%)로서 수득하였다.

¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 7.66 (dd, *J* = 8.7, 5.8 Hz, 1H), 7.25 (d, *J* = 1.2 Hz, 1H), 7.09 (dd, *J* = 10.8, 4.1 Hz, 1H), 4.84 (s, 2H), 4.00 (s, 3H), 0.32 (d, *J* = 0.7 Hz, 9H); ¹⁹F NMR (376 MHz, CDCl₃) δ -106.56, -106.61, -124.00, -124.06; ESIMS *m/z* 371 ([M+H]⁺).

[0591]

[0592] 실시예 52: 메틸 4-아세트아미도-3-클로로-6-(2,5-디플루오로-4-(트리메틸실릴)페닐)피콜리네이트의 제조



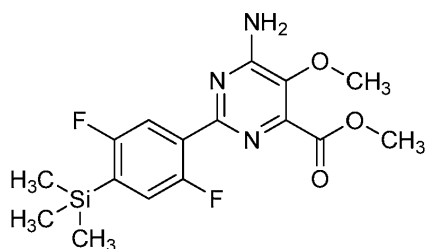
[0593]

[0594] 마이크로웨이브 용기에서, 아세트니트릴 (5.34 mL) 및 물 (1.779 mL)의 3:1 혼합물 중 (2,5-디플루오로-4-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란-2-일)페닐)트리메틸실란 (예를 들어, WO 2013003740 A1 참조; 1 g, 2.56 mmol), 메틸 4-아세트아미도-3,6-디클로로피콜리네이트(헤드 L; 0.562 g, 2.135 mmol), 비스(트리페닐 포스핀)염화팔라듐 (II) (0.150 g, 0.214 mmol) 및 탄산나트륨 (0.272 g, 2.56 mmol)의 현탁액을 마이크로웨이브 조사 (120℃, 20분) 하에 교반하였다. 반응 혼합물을 반포화 염수 용액에 붓고, EtOAc (3x)로 추출하였다. 합한 유기 층을 Na₂SO₄ 상에서 건조시키고, 여과하고, 농축시켰다. 잔류물을 정제용 역상 HPLC (물/아세트니트릴 구배)에 의해 정제하여 표제 화합물을 백색 고체 (0.481 g, 54.6%)로서 수득하였다.

mp 135–137 °C; ¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 9.07 (d, *J* = 0.8 Hz, 1H), 7.96 (s, 1H), 7.62 (dd, *J* = 8.5, 5.7 Hz, 1H), 7.13 (dd, *J* = 10.5, 4.1 Hz, 1H), 4.02 (s, 3H), 2.33 (s, 3H), 0.33 (d, *J* = 0.8 Hz, 9H); ¹⁹F NMR (376 MHz, CDCl₃) δ -106.66, -106.72, -123.42, -123.48; ESIMS *m/z* 411 ([M-H]⁻).

[0595]

[0596] 실시예 53: 메틸 6-아미노-2-(2,5-디플루오로-4-(트리메틸실릴)페닐)-5-메톡시피리미딘-4-카복실레이트의 제조



[0597]

[0598]

마이크로웨이브 용기에서, 아세트니트릴 (8.62 mL) 및 물 (2.87 mL)의 3:1 혼합물 중 (2,5-디플루오로-4-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란-2-일)페닐)트리메틸실란 (예를 들어, WO 2013003740 A1; 1.925 g, 5.05 mmol), 메틸 6-아미노-2-클로로-5-메톡시피리미딘-4-카르복실레이트 (헤드 C; 1 g, 4.60 mmol), 비스(트리페닐 포스핀)염화팔라듐 (II) (0.323 g, 0.460 mmol) 및 탄산나트륨 (0.584 g, 5.51 mmol)의 현탁액을 마이크로웨이브 조사 (120°C, 20분) 하에 교반하였다. 반응 혼합물을 반포화 염수 용액에 붓고, EtOAc (3x)로 추출하였다. 합한 유기 층을 Na₂SO₄ 상에서 건조시키고, 여과하고, 농축시켰다. 잔류물을 정제용 역상 HPLC (물/아세트니트릴 구배)에 의해 정제하여 표제 화합물을 백색 고체 (0.994 g, 58.9%)로서 수득하였다.

mp 130–131 °C; ¹H NMR (400 MHz,

CDCl₃) δ 7.53 (dd, *J* = 8.4, 5.6 Hz, 1H), 7.10 (dd, *J* = 10.2, 4.1 Hz, 1H), 5.44 (s, 2H), 4.00

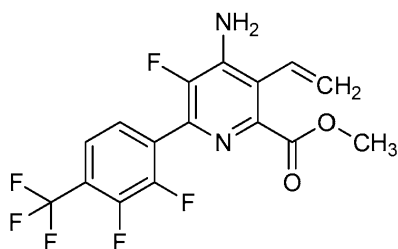
(s, 3H), 3.94 (s, 3H), 0.32 (d, *J* = 0.9 Hz, 9H); ¹⁹F NMR (376 MHz, CDCl₃) δ -107.45, -

107.51, -122.32, -122.37; ESIMS *m/z* 367 ([M]⁺).

[0599]

[0600]

실시예 54: 메틸 4-아미노-6-(2,3-디플루오로-4-(트리플루오로메틸)페닐)-5-플루오로-3-비닐피콜리네이트의 제조 (화합물 53)



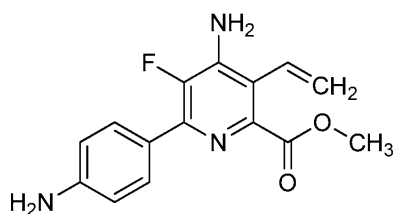
[0601]

[0602]

마이크로웨이브 용기에서, 아세트니트릴 (3.25 mL) 및 물 (1.084 mL)의 3:1 혼합물 중 2-(2,3-디플루오로-4-(트리플루오로메틸)페닐)-4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란 (상업적으로 입수가능함; 0.641 g, 2.081 mmol), 메틸 4-아미노-6-클로로-5-플루오로-3-비닐피콜리네이트 (헤드 G; 0.4 g, 1.734 mmol), 비스(트리페닐 포스핀)염화팔라듐 (II) (0.122 g, 0.173 mmol) 및 탄산나트륨 (0.368 g, 3.47 mmol)의 현탁액을 마이크로웨이브 조사 (120°C, 20분) 하에 교반하였다. 반응 혼합물을 반포화 염수 용액에 붓고, EtOAc (3x)로 추출하였다. 합한 유기 층을 Na₂SO₄ 상에서 건조시키고, 여과하고, 농축시켰다. 잔류물을 정제용 역상 HPLC (물/아세트니트릴 구배)에 의해 정제하여 표제 화합물을 갈색 고체 (0.163 g, 24.98%)로서 수득하였다.

[0603]

실시예 55: 메틸 4-아미노-6-(4-아미노페닐)-5-플루오로-3-비닐피콜리네이트의 제조



[0604]

[0605]

마이크로웨이브 용기에서, 아세트니트릴 (3.61 mL) 및 물 (3.61 mL)의 1:1 혼합물 중 4-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란-2-일)아닐린 (상업적으로 입수가능함; 0.617 g, 2.82 mmol), 메틸 4-아미노-6-클로로-5-플

루오로-3-비닐피콜리네이트 (헤드 G; 0.5 g, 2.168 mmol), 비스(트리페닐 포스핀)염화팔라듐 (II) (0.152 g, 0.217 mmol) 및 플루오린화칼륨 (0.327 g, 5.64 mmol)의 현탁액을 마이크로웨이브 조사 (120℃, 20분) 하에 교반하였다. 반응 혼합물을 반포화 염수 용액에 붓고, EtOAc (3x)로 추출하였다. 합한 유기 층을 Na₂SO₄ 상에서 건조시키고, 여과하고, 농축시켰다. 잔류물을 플래쉬 칼럼 크로마토그래피 (SiO₂, 24 g; 헥산/EtOAc 구배)에 의해 정제하여 표제 화합물을 황색 고체 (0.552 g, 89%)로서 수득하였다.

¹H NMR (400 MHz, DMSO-*d*₆) δ 7.60 – 7.58 (m, 2H),

6.72 (dd, *J* = 17.7, 11.5 Hz, 1H), 6.65 – 6.58 (m, 2H), 6.24 (s, 2H), 5.47 (s, 2H), 5.45 (dd, *J*

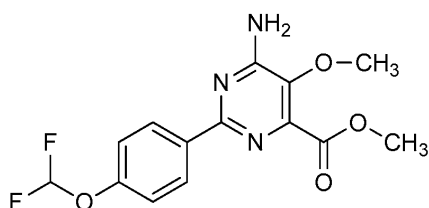
= 11.5, 1.2 Hz, 1H), 5.38 (dd, *J* = 17.7, 1.2 Hz, 1H), 3.77 (s, 3H); ¹⁹F NMR (376 MHz,

DMSO-*d*₆) δ -146.62; ESIMS *m/z* 286 ([M-H]).

[0606]

[0607]

실시예 56: 메틸 6-아미노-2-(4-(디플루오로메톡시)페닐)-5-메톡시피리미딘-4-카르복실레이트의 제조 (화합물 106)



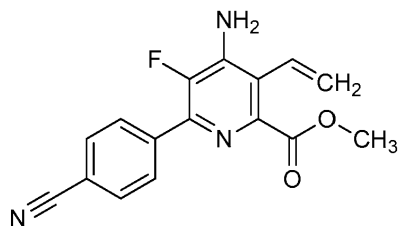
[0608]

[0609]

5-mL 마이크로웨이브 안전 바이알에 플루오린화칼륨 (0.151 g, 2.59 mmol), 아세트산팔라듐 (II) (0.012 g, 0.052 mmol), 2-(4-(디플루오로메톡시)페닐)-4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란 (0.28 g, 1.037 mmol), 메틸 6-아미노-2-클로로-5-메톡시피리미딘-4-카르복실레이트 (0.226 g, 1.037 mmol), 및 3,3',3"-포스핀트리일 트리벤젠술포네이트 (0.052 g, 0.104 mmol)를 첨가하였다. 물 (1 mL) 및 아세트니트릴 (2 mL)의 혼합물을 첨가하고, 반응물을 마개를 막고, 용기의 측면로부터 외부 IR-센서 온도 모니터링을 갖는 바이오타지 이니시에이터™ 마이크로웨이브 반응기에 160℃에서 6분 동안 두었다. 실온으로 냉각시킨 후, 반응 혼합물을 EtOAc (50 mL) 및 물 (50 mL)로 희석하였다. CH₂Cl₂ 층을 목화 플러그를 통해 여과한 후, CH₂Cl₂ (50 mL)를 사용하여 추가로 추출하고, EtOAc와 합하고, Na₂SO₄ (50 g) 상에서 건조시켰다. 합한 유기부를 회전 증발기로 농축시키고, 잔류물을 텔레다인 이스코(TELEDYNE ISCO) 정제 시스템을 사용하여 CH₂Cl₂ 및 EtOAc의 구배 용리액 시스템으로 정제하여 표제 화합물을 백색 고체 (134.4 mg, 39.8%)로서 수득하였다.

[0610]

실시예 57: 메틸 4-아미노-6-(4-시아노페닐)-5-플루오로-3-비닐피콜리네이트의 제조 (화합물 107)



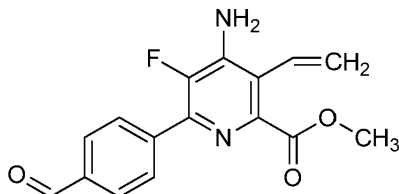
[0611]

[0612]

5-mL 마이크로웨이브 안전 바이알에 플루오린화칼륨 (0.227 g, 3.90 mmol), 메틸 4-아미노-6-클로로-5-플루오로-3-비닐피콜리네이트 (0.3 g, 1.301 mmol), 비스(트리페닐포스핀)팔라듐 (II) 클로라이드 (0.091 g, 0.130 mmol) 및 4-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란-2-일)벤조니트릴 (0.313 g, 1.366 mmol)을 첨가하였다. 물 (1 mL) 및 아세트니트릴 (2 mL)의 혼합물을 첨가하고, 반응물을 마개를 막고, 용기의 측면로부터 외부 IR-센서 온도 모니터링을 갖는 바이오타지 이니시에이터™ 마이크로웨이브 반응기에 115℃에서 20분 동안 두었다. 실온으로 냉각시킨 후, 반응 혼합물을 CH₂Cl₂ (25 mL) 및 물 (25 mL)로 희석하고, 유기 층을 목화 플러그를 통해 여과하였다. EtOAc (25 mL)를 사용하여 추가로 추출하고, CH₂Cl₂와 합하고, Na₂SO₄ (50 g) 상에서 건조시켰다. 합한 유기부를 목화 플러그를 통해 여과하고 회전 증발기 상에서 농축시킨 후, 잔류물을 텔레다인 이스코 정제 시스템을 사용하여 CH₂Cl₂ 및 EtOAc의 구배 용리액 시스템으로 정제하여 표제 화합물을 황갈색 고체 (297

mg, 76%)로서 수득하였다.

[0613] 실시예 58: 메틸 4-아미노-5-플루오로-6-(4-포르밀페닐)-3-비닐피콜리네이트의 제조



[0614]

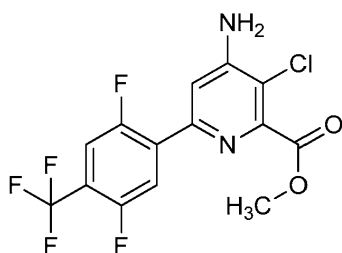
[0615] 5-mL 마이크로웨이브 안전 바이알에 플루오린화칼륨 (0.378 g, 6.50 mmol), 메틸 4-아미노-6-클로로-5-플루오로-3-비닐피콜리네이트 (0.5 g, 2.168 mmol), 비스(트리페닐포스핀)염화팔라듐 (II) (0.152 g, 0.217 mmol) 및 4-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란-2-일)벤즈알데히드 (0.528 g, 2.276 mmol)를 첨가하였다. 물 (1 mL) 및 아세토니트릴 (2 mL)의 혼합물을 첨가하고, 반응물을 마개를 막고, 용기의 측면로부터 외부 IR-센서 온도 모니터링을 갖는 바이오타지 이니시에이터™ 마이크로웨이브 반응기에서 115℃에서 20분 동안 두었다. 실온으로 냉각시킨 후, 반응 혼합물을 CH₂Cl₂ (25 mL) 및 물 (25 mL)로 희석하고, 유기 층을 목화 플러그를 통해 여과하였다. EtOAc (25 mL)를 사용하여 추가로 추출하고, CH₂Cl₂와 합하고, Na₂SO₄ (50 g) 상에서 건조시켰다. 합한 유기부를 목화 플러그를 통해 여과하고 회전 증발기 상에서 농축시킨 후, 잔류물을 텔레다인 이스코 정제 시스템을 사용하여 CH₂Cl₂ 및 EtOAc의 구배 용리액 시스템으로 정제하여 표제 화합물을 백색 고체 (635 mg, 98%)로서 수득하였다.

¹H

NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 10.08 (s, 1H), 8.13 (dd, *J* = 8.3, 1.6 Hz, 2H), 8.03 – 7.93 (m, 2H), 6.91 (ddd, *J* = 18.1, 11.6, 0.5 Hz, 1H), 5.73 (dd, *J* = 11.5, 1.4 Hz, 1H), 5.60 (dd, *J* = 18.1, 1.4 Hz, 1H), 4.77 (s, 2H), 3.94 (s, 3H); ¹⁹F NMR (376 MHz, CDCl₃) δ -143.49; ESIMS *m/z* 301 ([M+H]⁺).

[0616]

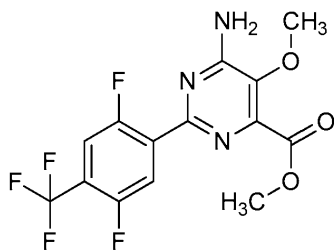
[0617] 실시예 59: 메틸 4-아미노-3-클로로-6-(2,5-디플루오로-4-(트리플루오로메틸)페닐)피콜리네이트의 제조 (화합물 70)



[0618]

[0619] 1,4-디플루오로-2-아이오도-5-(트리플루오로메틸)벤젠 (250 mg, 0.81 mmol), 헤드 K (318 mg, 0.81 mmol), 구리(I)아이오다이드 (0.08 mmol) 및 비스(트리페닐포스핀)팔라듐 (II) 클로라이드 (57 mg, 0.08 mmol)를 건조 DMF (5 mL) 중에서 합하고, 질소의 스트림으로 10분 동안 기체를 제거하고, 75℃로 가열하였다. 2시간 후, 혼합물을 냉각시키고, 에틸 아세테이트와 물 사이에 분배하였다. 유기 상을 포화 NaCl로 세척하고, 건조시키고 (Na₂SO₄), 증발시켰다. 조 생성물을 플래쉬 크로마토그래피 (SiO₂; 헥산 중 0-30% 에틸 아세테이트로 용리)에 의해 정제하여 아세트아미드 중간체 100 mg을 수득하였다. 이 물질을 메탄올 (20 mL)에 녹이고, 아세틸 클로라이드 (3 mL)로 처리하고, 20℃에서 3일 동안 교반하였다. 진공 하에 휘발성 물질을 제거한 후, 혼합물을 포화 NaHCO₃ 및 에틸 아세테이트와 함께 교반하였다. 유기 상을 포화 NaCl로 세척하고, 건조시키고 (Na₂SO₄), 증발시켜 표제 화합물을 백색 고체 (77 mg, 24%)로서 수득하였다.

[0620] 실시예 60: 메틸 6-아미노-2-(2,5-디플루오로-4-(트리플루오로메틸)페닐)-5-메톡시피리미딘-4-카르복실레이트의 제조 (화합물 148)



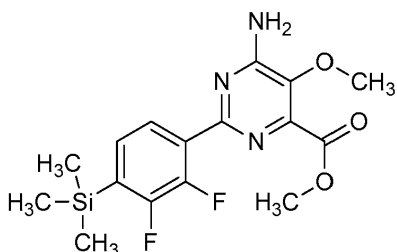
[0621]

[0622]

2-(2,5-디플루오로-4-(트리플루오로메틸)페닐)-4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란 (400 mg, 1.2 mmol), 헤드 C (250 mg 1.2 mmol), 플루오린화세슘 (360 mg, 2.3 mmol) 및 비스(트리페닐포스핀)팔라듐 (II) 클로라이드 (82 mg, 0.12 mmol)를 1:1 부피당 부피 (v/v) 아세트니트릴-물 (4 mL) 중에서 합하고, 마이크로웨이브 반응기에서 115°C에서 30분 동안 가열하였다. 혼합물을 물과 에틸 아세테이트 사이에 분배하였다. 유기 상을 포화 NaCl로 세척하고, 건조시키고 (Na₂SO₄), 증발시켰다. 물질을 플래쉬 크로마토그래피 (SiO₂; 헥산 중 0-30% 에틸 아세테이트로 용리)에 의해 정제하여 갈색 오일을 수득하였으며, 이를 헥산-디클로로메탄으로 연화처리하여 표제 화합물을 백색 고체 (40 mg, 8.8%)로서 수득하였다.

[0623]

실시예 61: 메틸 6-아미노-2-(2,3-디플루오로-4-(트리메틸실릴)페닐)-5-메톡시피리미딘-4-카르복실레이트의 제조



[0624]

[0625]

(2,3-디플루오로-4-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란-2-일)페닐)트리메틸실란(1.3 g, 4.2 mmol) (예를 들어, WO 2013003740 A1), 헤드 C (750 mg, 3.5 mmol) 및 비스(트리페닐포스핀)팔라듐 (II) 클로라이드 (240 mg, 0.34 mmol)를 1:1 v/v 아세트니트릴-물 (10 mL) 중에서 합하고, 마이크로웨이브에 의해 115°C로 30분 동안 가열하였다. 냉각된 혼합물을 포화 NaCl와 에틸 아세테이트 사이에 분배하였다. 유기 상을 포화 NaCl로 세척하고, 건조시키고 (Na₂SO₄), 증발시켰다. 물질을 플래쉬 크로마토그래피 (SiO₂; 헥산 중 0-20% 에틸 아세테이트로 용리)에 의해 정제하여 표제 화합물을 백색 고체 (330 mg, 26%)로서 수득하였다.

mp 157-159° C; ¹H

NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 7.60 (ddd, *J* = 7.5, 6.0, 1.2 Hz, 1H), 7.14 (ddd, *J* = 7.7, 4.5, 1.5

Hz, 1H), 5.48 (s, 2H), 4.00 (s, 3H), 3.95 (s, 3H), 0.34 (d, *J* = 0.7 Hz, 9H); ¹⁹F NMR (376

MHz, CDCl₃) δ -127.10 to -127.25 (m), -142.40 (dd, *J* = 22.6, 3.6 Hz); ESIMS *m/z* 368

([M+H]⁺).

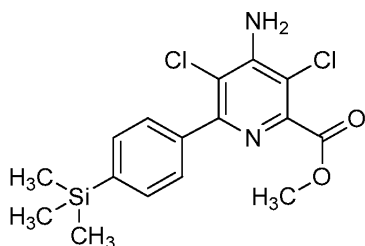
[0626]

[0627]

하기 화합물을 실시예 61에 개시된 절차에 따라 상업적으로 입수가능한 (4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란-2-일)페닐)트리메틸실란으로부터 제조하였다:

[0628]

메틸 4-아미노-3,5-디클로로-6-(4-(트리메틸실릴)페닐)피콜리네이트 (헤드 H를 이용하여 제조함)



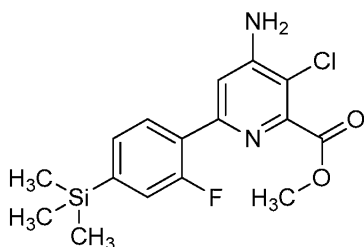
[0629]

mp 171–174 °C; ¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 6.36(m, 4H), 5.33(2, 2H), 3.99(s, 3H), 0.307 (s, 9H); ESIMS *m/z* 369 ([M+H]⁺).

[0630]

[0631] 하기 화합물을 실시예 61에 개시된 절차에 따라 상업적으로 입수가능한 2-플루오로-4-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란-2-일)페닐)트리메틸실란으로부터 제조하였다 (WO 2013003740 A1에 따라 제조함):

[0632] 메틸 4-아미노-3-클로로-6-(2-플루오로-4-(트리메틸실릴)페닐)피콜리네이트 (헤드 A를 이용하여 제조함)

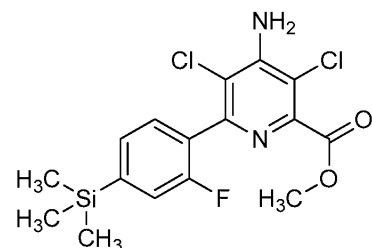


[0633]

mp 154–156° C; ¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 7.97 (m, 1H), 7.30 (m, 3H), 4.84 (s, 2H), 4.01 (s, 3H), 0.293 (s, 9H); ESIMS *m/z* 353 ([M+H]⁺).

[0634]

[0635] 메틸 4-아미노-3,5-디클로로-6-(2-플루오로-4-(트리메틸실릴)페닐)피콜리네이트 (헤드 H를 이용하여 제조함)



[0636]

mp 184–185° C; ¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 7.35 (m, 3H), 5.33 (s, 2H), 3.96 (s, 3H), 0.290 (s, 9H); ESIMS *m/z* 387 ([M+H]⁺).

[0637]

[0638] 실시예 62: 스즈키 커플링에 대한 일반적 절차 (방법 A)

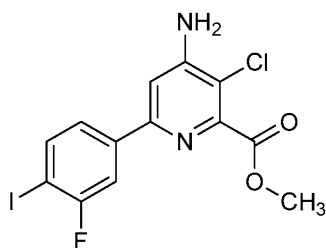
[0639] 아르곤을 1:1 톨루엔: 에탄올 (20 vol) 중 헤드 A, 헤드 B, 또는 헤드 C (1.0 당량), 보론산 (1.0 당량), Na₂CO₃ (2.0 당량) 및 Pd(PPh₃)₄ (0.1 당량)의 용액을 통해 밀봉된 튜브 중 15분 동안 버블링하였다. 이어서, 반응 혼합물을 밀봉된 튜브에서 110°C에서 18시간 동안 가열하였다. 냉각된 반응 혼합물을 물로 희석하고, 에틸 아세테이트로 추출하였다. (주: 수성 층은 카르복실산 생성물을 함유하였으며, 이를 하기 기재된 바와 같이 분리하였음). 유기 추출물을 물로 세척하고, 포화 염수 용액으로 세척하고, 건조시키고 (Na₂SO₄), 여과하고, 감압 하에 증발 건조시켰다. 조 생성물을 정제용 TLC에 의해 정제하여 순수한 에스테르를 수득하였다. 수성 층을 1.5 N HCl을 사용하여 pH 2로 산성화시키고, 에틸 아세테이트로 추출하였다. 유기 추출물을 포화 염수 용액으로 세척하고, 건조시키고 (Na₂SO₄), 여과하고, 감압 하에 증발 건조시켰다. 조 생성물을 정제용 TLC에 의해 정제하여 순수한 카르복실산 유도체를 수득하였다.

[0640] 실시예 63: 스즈키 커플링에 대한 일반적 절차 (방법 B)

[0641] 아르곤을 건조 디옥산 (20 vol) 중 헤드 A, 헤드 B 또는 헤드 C (0.8 당량), 보론산 (1.0 당량), NaHCO₃ (2 M 용액, 1.0 당량) 및 Pd(PPh₃)₄ (0.1 당량)의 용액을 통해 밀봉된 튜브 중 15분 동안 버블링하였다. 밀봉된 튜브를 80°C에서 18시간 동안 가열하였다. 냉각된 반응 혼합물을 물로 희석하고, 에틸 아세테이트로 추출하였다. 유기 추출물을 물로 세척하고, 포화 염수용액으로 세척하고, 건조시키고 (Na₂SO₄), 여과하고, 감압 하에 증발 건조시켰다. 조 생성물을 플래쉬 크로마토그래피 (SiO₂; 헥산 중 5-40% 에틸 아세테이트로 용리)에 의해 정제하

여 순수한 화합물을 수득하였다.

[0642] 실시예 64: 메틸 4-아미노-3-클로로-6-(3-플루오로-4-아이오도페닐)피콜리네이트의 제조 (화합물 66)

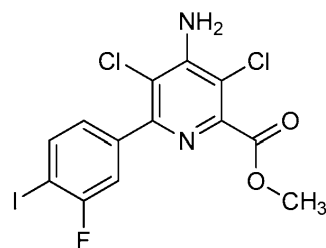


[0643]

[0644] 교반용 막대가 구비된 250-mL 둥근 바닥 플라스크에 메틸 4-아미노-3-클로로-6-(3-플루오로-4-(트리메틸실릴)페닐)피콜리네이트 (0.328 g, 0.930 mmol), 및 디클로로메탄 (5.0 mL)을 첨가하였다. 상기 용액에 일염화아이오딘 (0.141 mL, 2.79 mmol)을 첨가하였다. 반응 혼합물을 실온에서 18시간 동안 교반되도록 하였다. 일염화아이오딘 (0.141 mL, 2.79 mmol)의 또 다른 분량을 첨가하고, 반응물을 실온에서 추가 4.5시간 동안 교반되도록 하였다. 반응 혼합물을 1 M Na₂SO₃에 붓고, 층을 분배하였다. 수성 상을 추가의 에틸 아세테이트 (2x 100 mL)로 추출하였다. 합한 유기 층을 무수 MgSO₄ 상에서 건조시키고, 여과하고, 농축시켜 표제 화합물을 갈색 고체 (0.375 g, 99%)로서 수득하였다.

[0645] 하기 화합물을 실시예 64에 개시된 절차에 따라 제조하였다:

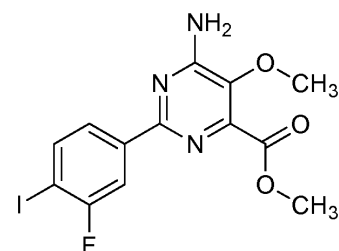
[0646] 메틸 4-아미노-3,5-디클로로-6-(3-플루오로-4-아이오도페닐)피콜리네이트 (화합물 13)



[0647]

[0648] 표제 화합물을 실시예 64에 기재된 바와 같이 메틸 4-아미노-3,5-디클로로-6-(3-플루오로-4-(트리메틸실릴)페닐)피콜리네이트 (0.381 g, 0.984 mmol)를 이용하여 제조하고, 황색 고체 (0.360 g, 83%)로서 분리하였다.

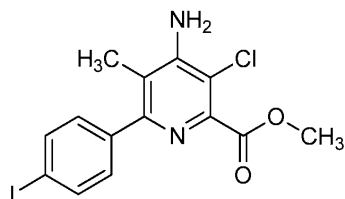
[0649] 메틸 6-아미노-2-(3-플루오로-4-아이오도페닐)-5-메톡시피리미딘-4-카르복실레이트 (화합물 27)



[0650]

[0651] 표제 화합물을 실시예 64에 기재된 바와 같이 메틸 6-아미노-2-(3-플루오로-4-(트리메틸실릴)페닐)-5-메톡시피리미딘-4-카르복실레이트 (0.307 g, 0.879 mmol)를 이용하여 제조하고, 황색 고체 (0.368 g)로서 분리하였다.

[0652] 실시예 65: 메틸 4-아미노-3-클로로-6-(4-아이오도페닐)-5-메틸피콜리네이트의 제조 (화합물 136)

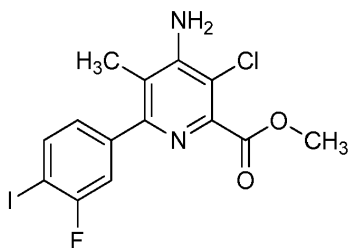


[0653]

[0654] 디클로로메탄 (9 mL) 중 메틸 4-아미노-3-클로로-5-메틸-6-(4-(트리메틸실릴)페닐)피콜리네이트 (0.95 g, 2.72 mmol)에 디클로로메탄 (4.5 mL) 중 일염화아이오딘 (920 mg, 5.67 mmol)을 적가하였다. 반응물을 실온에서 4시간 동안 교반한 다음, 포화 수성 티오황산나트륨으로 켄칭하고, 물로 희석하고, 디클로로메탄 (3x)으로 추출하였다. 유기 층을 무수 Na₂SO₄ 상에서 건조시키고, 여과하고, 농축시켰다. 플래쉬 크로마토그래피 (0-30% 에틸 아세테이트/헥산)에 의해 정제하여 표제 화합물을 적색-오렌지색 고체 (618 mg, 56%)로서 수득하였다.

[0655] 하기 화합물을 실시예 65에 개시된 절차에 따라 제조하였다:

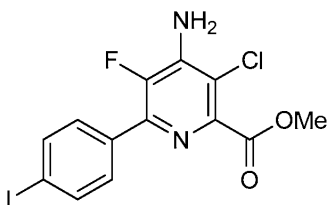
[0656] 메틸 4-아미노-3-클로로-6-(3-플루오로-4-아이오도페닐)-5-메틸피콜리네이트 (화합물 79)



[0657]

[0658] 표제 화합물을 실시예 65에서와 같이 제조하고, 회백색 고체 (54 mg, 59%)로서의 단리하였다.

[0659] 실시예 66: 메틸 4-아미노-6-(4-아이오도페닐)-3-클로로-5-플루오로피콜리네이트의 제조 (화합물 118)

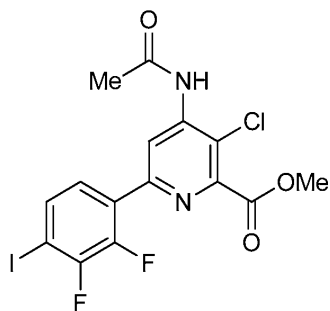


[0660]

[0661] 일염화아이오딘 (280 mg, 1.7 mmol, 2.0 당량)을 23℃에서 1,2-디클로로에탄 (5.7 mL) 중 메틸 4-아미노-3-클로로-5-플루오로-6-(4-(트리메틸실릴)페닐)피콜리네이트 (300 mg, 0.85 mmol, 1.0 당량)의 교반 용액에 첨가하였다. 생성된 갈색 용액을 23℃에서 17시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 티오황산나트륨의 포화 용액 (100 mL)으로 희석하고, 디클로로메탄 (4 x 40 mL)으로 추출하였다. 합한 유기 층을 건조시키고 (MgSO₄), 중력 여과하고, 회전 증발에 의해 농축시켰다. 잔류물을 실리카 겔 칼럼 크로마토그래피 (헥산 중 33% 에틸 아세테이트)에 의해 정제하여 표제 화합물을 연자주색 분말 (250 mg, 71%)로서 수득하였다.

[0662] 하기 화합물을 실시예 66에 개시된 절차에 따라 제조하였다:

[0663] 메틸 4-아세트아미도-3-클로로-6-(2,3-디플루오로-4-아이오도페닐)피콜리네이트

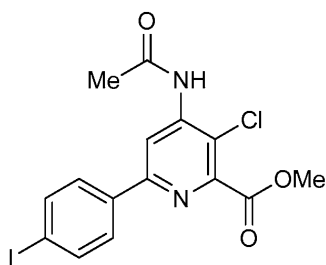


[0664]

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 9.06 (d, $J = 1.5$ Hz, 1H), 7.98 (br s, 1H), 7.60 (ddd, $J = 9, 5, 2$ Hz, 1H), 7.53 (ddd, $J = 9, 7, 2$ Hz, 1H), 4.03 (s, 3H), 2.34 (s, 3H); ESIMS m/z 467 ($[\text{M}+\text{H}]^+$).

[0665]

[0666] 메틸 4-아세트아미도-3-클로로-6-(4-아이오도페닐)피콜리네이트

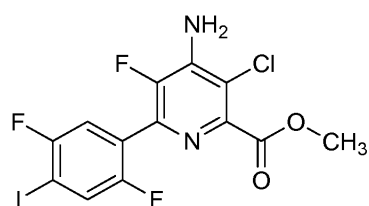


[0667]

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 9.00 (s, 1H), 7.77 (m, 4H), 7.25 (s, 1H), 4.03 (s, 3H), 2.33 (s, 3H); ESIMS m/z 431 ($[\text{M}+\text{H}]^+$).

[0668]

[0669] 실시예 67: 메틸 4-아미노-3-클로로-6-(2,5-디플루오로-4-아이오도페닐)-5-플루오로피콜리네이트의 제조 (화합물 55)

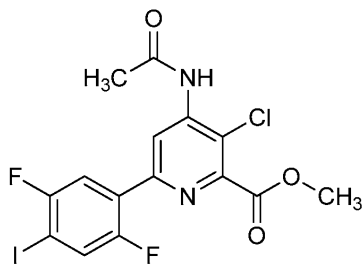


[0670]

[0671] 20°C에서 CH_2Cl_2 (2.88 mL) 중 메틸 4-아미노-3-클로로-6-(2,5-디플루오로-4-(트리메틸실릴)페닐)-5-플루오로피콜리네이트 (0.280 g, 0.720 mmol)의 용액에 일염화아이오딘 (0.144 mL, 2.880 mmol)을 첨가하였다. 반응 혼합물을 20°C에서 밤새 교반하였다. 이어서, 혼합물을 Na_2SO_3 의 10% 수용액에 붓고, EtOAc (3x)로 추출하고, Na_2SO_4 상에서 건조시키고, 여과하고, 농축시켰다. 잔류물을 플래쉬 칼럼 크로마토그래피 (SiO_2 ; 헥산/EtOAc 구배)에 의해 정제하여 표제 화합물을 백색 고체 (0.237 g, 74.4%)로서 수득하였다.

[0672] 하기 화합물을 실시예 67에 개시된 절차에 따라 제조하였다:

[0673] 메틸 4-아세트아미도-3-클로로-6-(2,5-디플루오로-4-아이오도페닐)피콜리네이트

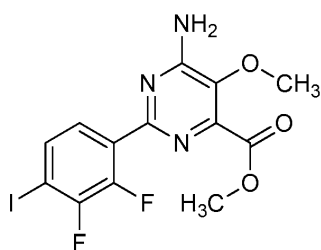


[0674]

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 9.10 (d, $J = 0.7$ Hz, 1H), 7.96 (s, 1H), 7.76 (dd, $J = 8.4, 6.4$ Hz, 1H), 7.57 (dd, $J = 9.8, 5.0$ Hz, 1H), 4.03 (s, 3H), 2.33 (s, 3H); ^{19}F NMR (376 MHz, CDCl_3) δ -99.95, -100.00, -119.90, -119.95; ESIMS m/z 465 ($[\text{M}-\text{H}]^-$).

[0675]

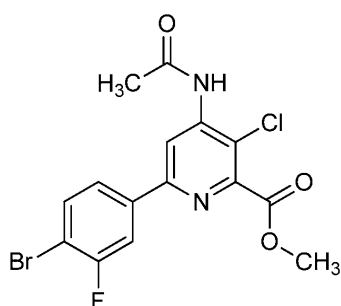
[0676] 실시예 68: 메틸 6-아미노-2-(2,3-디플루오로-4-아이오도페닐)-5-메톡시피리미딘-4-카르복실레이트의 제조 (화합물 24)



[0677]

[0678] 메틸 6-아미노-2-(2,3-디플루오로-4-(트리메틸실릴)페닐)-5-메톡시피리미딘-4-카르복실레이트 (330 mg, 0.90 mmol)를 1,2-디클로로에탄 (5 mL) 중에서 교반하고, 일염화아이오딘 (1.0 g, 6.9 mmol)으로 처리하고, 70°C로 21시간 동안 가열하였다. 냉각시킨 후, 혼합물을 에틸 아세테이트로 희석하고, 15% 중아황산나트륨으로 세척하고, 포화 NaCl로 세척하고, 건조시키고 (Na_2SO_4), 증발시켰다. 물질을 RP-HPLC에 의해 70% 아세토니트릴을 사용하여 정제하여 표제 화합물을 백색 고체 (250 mg, 66%)로서 수득하였다.

[0679] 실시예 69: 메틸 4-아세트아미도-6-(4-브로모-3-플루오로페닐)-3-클로로피콜리네이트의 제조



[0680]

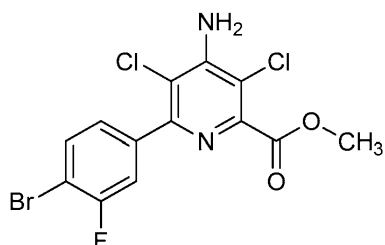
[0681] 교반용 막대가 구비된 100-mL 둥근 바닥 플라스크에 메틸 4-아세트아미도-3-클로로-6-(3-플루오로-4-(트리메틸실릴)페닐)피콜리네이트 (433 mg, 1.11 mmol), 디클로로메탄 (10 mL) 및 브로민 (0.225 mL, 4.39 mmol)을 첨가하였다. 반응 혼합물을 실온에서 18시간 동안 교반되도록 하였다. 이어서, 반응 혼합물을 1 N Na_2SO_3 에 붓고, 에틸 아세테이트 (3 x 50 mL)로 추출하였다. 합한 유기 층을 무수 MgSO_4 상에서 건조시키고, 여과하고, 농축시켰다. 생성된 잔류물을 플래쉬 크로마토그래피 (헥산 중 0-50% EtOAc)에 의해 정제하여 표제 화합물을 담갈색 고체 (0.440 g, 100%)로서 수득하였다.

^1H NMR (400 MHz, DMSO- d_6) δ 10.02 (s, 1H), 8.71 (s, 1H), 7.98 – 7.81 (m, 2H), 7.74 (dd, J = 8.4, 2.1 Hz, 1H), 3.94 (s, 3H), 2.23 (s, 3H); ^{19}F NMR (376 MHz, DMSO- d_6) δ -107.44; ESIMS m/z 402 ($[\text{M}+\text{H}]^+$).

[0682]

[0683] 하기 화합물을 실시예 69에 개시된 절차에 따라 제조하였다:

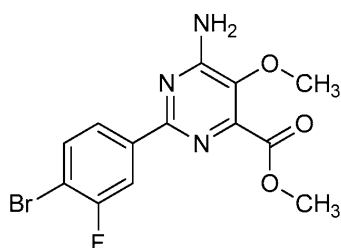
[0684] 메틸 4-아미노-6-(4-브로모-3-플루오로페닐)-3,5-디클로로피콜리네이트 (화합물 73)



[0685]

[0686] 표제 화합물을 실시예 69에 기재된 바와 같이 메틸 4-아미노-3,5-디클로로-6-(3-플루오로-4-(트리메틸실릴)페닐)피콜리네이트 (0.290 g, 0.749 mmol)를 이용하여 제조하고, 백색 고체 (0.250 g, 85%)로서 분리하였다.

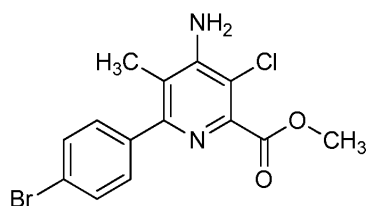
[0687] 메틸 6-아미노-2-(4-브로모-3-플루오로페닐)-5-메톡시피리미딘-4-카르복실레이트 (화합물 171)



[0688]

[0689] 표제 화합물을 실시예 69에 기재된 바와 같이 메틸 6-아미노-2-(3-플루오로-4-(트리메틸실릴)페닐)-5-메톡시피리미딘-4-카르복실레이트 (0.250 g, 0.715 mmol)를 이용하여 제조하고, 백색 고체 (0.200 g, 78%)로서 분리하였다.

[0690] 실시예 70: 메틸 4-아미노-6-(4-브로모페닐)-3-클로로-5-메틸피콜리네이트의 제조 (화합물 81)

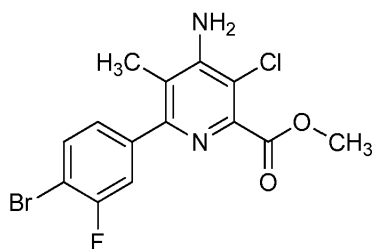


[0691]

[0692] 1,2-디클로로에탄 (DCE, 2.9 mL) 중 메틸 4-아미노-3-클로로-5-메틸-6-(4-(트리메틸실릴)페닐)피콜리네이트 (150 mg, 0.43 mmol) 및 탄산칼륨 (215 mg, 1.56 mmol)에 브로민 (0.03 mL, 0.58 mmol)을 첨가하고, 실온에서 18시간 동안 교반하였다. DCE를 진공 하에 농축시키고, 조 물질을 에틸 아세테이트와 수성 탄산칼륨 사이에 분배하였다. 수성 층을 에틸 아세테이트 (3x)로 추출하고, 물로 세척하고, 무수 MgSO_4 상에서 건조시키고, 여과하고, 실리카 겔 상에 흡착시켰다. 플래쉬 크로마토그래피 (0-40% 에틸 아세테이트/헥산)에 의해 정제하여 표제 화합물을 연오렌지색 분말 (68 mg, 45%)로서 수득하였다.

[0693] 하기 화합물을 실시예 70에 개시된 절차에 따라 제조하였다:

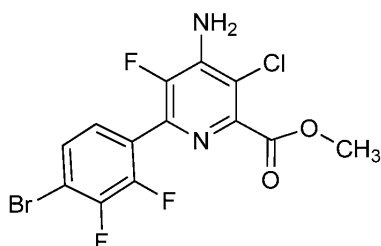
[0694] 메틸 4-아미노-6-(4-브로모-3-플루오로페닐)-3-클로로-5-메틸피콜리네이트 (화합물 112)



[0695]

[0696] 표제 화합물을 실시예 70에서와 같이 제조하고, 회백색 고체 (96 mg, 52%)로서 분리하였다.

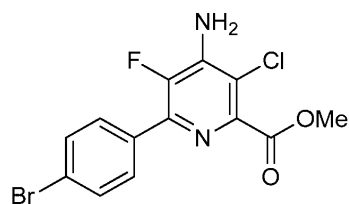
[0697] 실시예 71: 메틸 4-아미노-6-(4-브로모-2,3-디플루오로페닐)-3-클로로-5-플루오로피콜리네이트의 제조 (화합물 109)



[0698]

[0699] 메틸 4-아미노-3-클로로-6-(2,3-디플루오로-4-(트리메틸실릴)페닐)-5-플루오로피콜리네이트 (2.5 g, 6.43 mmol)를 아세토니트릴 (32 mL) 중에 용해시키고, 브로민 (3.31 mL, 64.3 mmol)을 첨가하였다. 반응 혼합물을 실온에서 4시간 동안 교반하였으며, 이 때 액체 크로마토그래피-질량 분광측정법 (LC-MS)은 반응이 대부분 완결되었음을 나타내었다. 반응 혼합물을 디클로로메탄과 물 사이에 분배하고, 티오황산나트륨 (10.17 g, 64.3 mmol)을 첨가하였다. 수성 상을 디클로로메탄으로 추출하고, 유기 추출물을 합하고, 진공 하에 농축시켰다. 생성물을 플래쉬 크로마토그래피 (SiO₂; 헥산 중 5-40% 에틸 아세테이트로 용리)에 의해 정제하여 표제 화합물을 담황색 고체 (1.62 g, 63.7%)로서 수득하였다.

[0700] 실시예 72: 메틸 4-아미노-6-(4-브로모페닐)-3-클로로-5-플루오로피콜리네이트의 제조 (화합물 138)

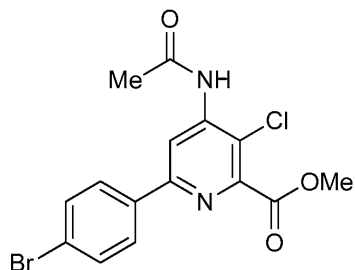


[0701]

[0702] 브로민 (47 μ L, 0.92 mmol, 1.2 당량)을 23°C에서 1,2-디클로로에탄 (5.1 mL) 중 메틸 4-아미노-3-클로로-5-플루오로-6-(4-(트리메틸실릴)페닐)피콜리네이트 (270 mg, 0.77 mmol, 1.0 당량)의 교반 용액에 첨가하였다. 생성된 암오렌지색 용액을 23°C에서 24시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 티오황산나트륨 (5 mL)의 포화 용액으로 킨칭한 다음, 2 M 수산화나트륨을 사용하여 pH 10로 조정하였다. 반응 혼합물을 물 (50 mL)로 희석하고, 디클로로메탄 (3 x 30 mL)으로 추출하였다. 합한 유기 층을 건조시키고 (MgSO₄), 중력 여과하고, 회전 증발에 의해 농축시켰다. 잔류물을 역상 칼럼 크로마토그래피 (5% 아세토니트릴에서 100% 아세토니트릴 구배)에 의해 정제하여 표제 화합물을 황갈색 분말 (160 mg, 57%)로서 수득하였다.

[0703] 하기 화합물을 실시예 72에 개시된 절차에 따라 제조하였다:

[0704] 메틸 4-아세트아미도-6-(4-브로모페닐)-3-클로로피콜리네이트

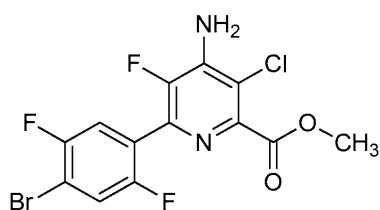


[0705]

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 9.01(s, 1H), 7.90 (m, 2H), 7.49 (m, 2H), 7.25 (s, 1H), 4.03 (s, 3H), 2.34 (s, 3H); ESIMS m/z 385 ($[\text{M}+\text{H}]^+$).

[0706]

[0707] 실시예 73: 메틸 4-아미노-6-(4-브로모-2,5-디플루오로페닐)-3-클로로-5-플루오로피콜리네이트의 제조 (화합물 51)

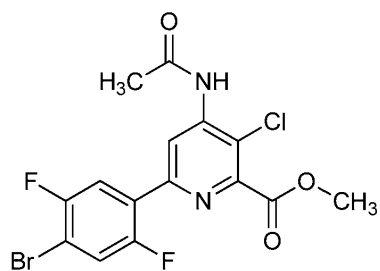


[0708]

[0709] 20℃에서 CH_2Cl_2 (2.469 mL) 중 메틸 4-아미노-3-클로로-6-(2,5-디플루오로-4-(트리메틸실릴)페닐)-5-플루오로피콜리네이트 (0.240 g, 0.617 mmol)의 용액에 브로민 (0.127 mL, 2.469 mmol)을 첨가하였다. 24시간 후, 반응 혼합물을 $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$ 의 포화 수용액에 붓고, EtOAc (3x)로 추출하였다. 합한 유기 층을 Na_2SO_4 상에서 건조시키고, 여과하고, 농축시켰다. 잔류물을 플래쉬 칼럼 크로마토그래피 (SiO_2 ; 헥산/EtOAc 구배)에 의해 정제하여 표제 화합물을 백색 고체 (0.187 g, 77%)로서 수득하였다.

[0710] 하기 화합물을 실시예 73에 개시된 절차에 따라 제조하였다:

[0711] 메틸 4-아세트아미도-6-(4-브로모-2,5-디플루오로페닐)-3-클로로피콜리네이트

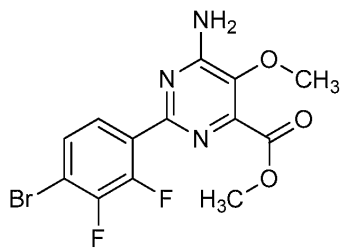


[0712]

mp 177–179 °C; ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 9.10 (d, $J = 0.7$ Hz, 1H), 7.97 (s, 1H), 7.85 (dd, $J = 9.1, 6.6$ Hz, 1H), 7.40 (dd, $J = 9.9, 5.5$ Hz, 1H), 4.03 (s, 3H), 2.33 (s, 3H); ^{19}F NMR (376 MHz, CDCl_3) δ -112.76, -112.80, -119.21, -119.26; ESIMS m/z 418 ($[\text{M}-\text{H}]^-$).

[0713]

[0714] 실시예 74: 메틸 6-아미노-2-(4-브로모-2,3-디플루오로페닐)-5-메톡시피리미딘-4-카르복실레이트의 제조 (화합물 122)



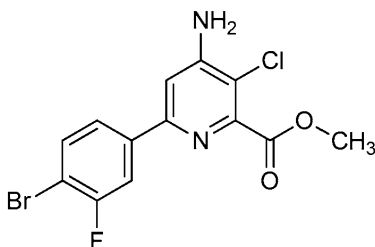
[0715]

[0716]

메틸 6-아미노-2-(2,3-디플루오로-4-(트리메틸실릴)페닐)-5-메톡시피리미딘-4-카르복실레이트 (350 mg, 0.95 mmol)를 1,2-디클로로에탄 (4 mL) 중에서 교반하고, 브로민 (1.0 g, 6.3 mmol)으로 처리하고, 60℃로 6시간 동안 가열하였다. 냉각시킨 후, 혼합물을 전분-아이오딘 종이로 음성일 때까지 15% 중아황산나트륨 용액과 함께 교반하였다. 혼합물을 에틸 아세테이트로 희석하고, 포화 NaCl로 세척하고, 건조시키고 (Na₂SO₄), 증발시켰다. 플래쉬 크로마토그래피 (SiO₂; 헥산 중 0-30% 에틸 아세테이트로 용리)에 의해 정제하여 표제 화합물을 백색 고체 (75 mg, 23%)로서 수득하였다.

[0717]

실시예 75: 메틸 4-아미노-6-(4-브로모-3-플루오로페닐)-3-클로로피콜리네이트의 제조 (화합물 115)



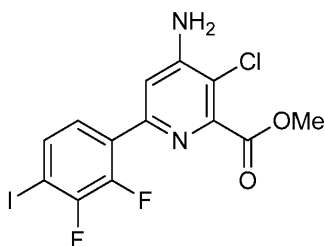
[0718]

[0719]

교반용 막대가 구비된 100-mL 둥근 바닥 플라스크에 메틸 4-아세트아미도-6-(4-브로모-3-플루오로페닐)-3-클로로피콜리네이트 (0.411 g, 1.023 mmol), 메탄올 (5.12 mL) 및 아세틸 클로라이드 (1.45 mL, 20.5 mmol)를 첨가하였다. 반응 혼합물을 실온에서 18시간 동안 교반되도록 하였다. 용매를 회전 증발기로 제거하였다. 생성된 고체를 1 N NaHCO₃ 중에 용해시키고, 에틸 아세테이트 (3 x 75 mL)로 추출하였다. 합한 유기 층을 무수 MgSO₄ 상에서 건조시키고, 여과하고, 농축시켜 표제 화합물을 백색 고체 (0.324 g, 88%)로서 수득하였다.

[0720]

실시예 76: 메틸 4-아미노-3-클로로-6-(2,3-디플루오로-4-아이오도페닐)피콜리네이트의 제조 (화합물 129)

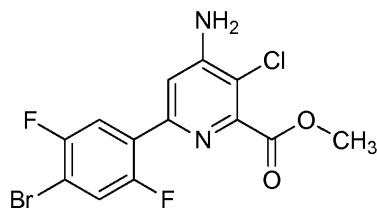


[0721]

[0722]

아세틸 클로라이드 (1.3 mL, 18 mmol, 10 당량)를 메탄올 (12 mL)에 천천히 첨가하고, 23℃에서 30분 동안 교반하였다. 메틸 4-아세트아미도-3-클로로-6-(2,3-디플루오로-4-아이오도페닐)피콜리네이트 (830 mg, 1.8 mmol, 1.0 당량)를 첨가하고, 불균질 백색 혼합물을 23℃에서 18시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 회전 증발에 의해 농축시켰다. 잔류물을 포화 중탄산나트륨 (200 mL)으로 희석하고, 디클로로메탄 (3 x 75 mL)으로 추출하였다. 유기 층을 건조시키고 (MgSO₄), 중력 여과하고, 회전 증발에 의해 농축시켜 표제 화합물을 백색 분말 (720 mg, 95%)로서 수득하였다.

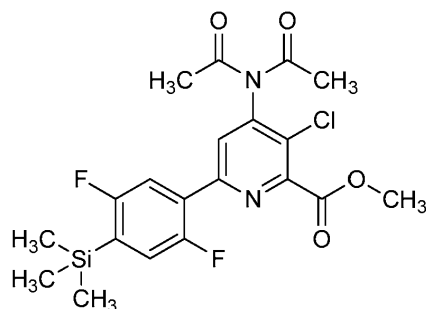
[0723] 실시예 77: 메틸 4-아미노-6-(4-브로모-2,5-디플루오로페닐)-3-클로로피콜리네이트의 제조 (화합물 127)



[0724]

[0725] 메탄올 (3.57 mL) 및 THF (3.57 mL)의 혼합물 중 메틸 4-아세트아미도-6-(4-브로모-2,5-디플루오로페닐)-3-클로로피콜리네이트 (0.300 g, 0.715 mmol)의 용액에 아세틸 클로라이드 (1.017 mL, 14.30 mmol)를 천천히 첨가하였다. 반응 혼합물을 20℃에서 2시간 동안 교반하였다. 이어서, 혼합물을 NaHCO₃의 포화 수용액에 붓고, EtOAc (3x)로 추출하였다. 합한 유기 층을 Na₂SO₄ 상에서 건조시키고, 여과하고, 농축시키고, 진공 하에 건조시켜 메틸 4-아미노-6-(4-브로모-2,5-디플루오로페닐)-3-클로로피콜리네이트 (0.257 g, 95%)를 백색 고체로서 수득하였다.

[0726] 실시예 78: 메틸 4-(N-아세틸아세트아미도)-3-클로로-6-(2,5-디플루오로-4-(트리메틸실릴)페닐)피콜리네이트의 제조



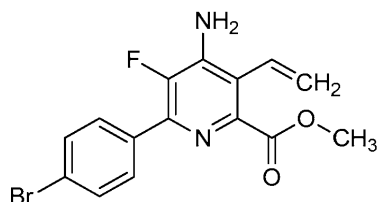
[0727]

[0728] 디클로로에탄 (3.02 mL) 중 메틸 4-아미노-3-클로로-6-(2,5-디플루오로-4-(트리메틸실릴)페닐)피콜리네이트 (0.280 g, 0.755 mmol)의 용액에 N,N-디이소프로필에틸아민 (0.396 mL, 2.265 mmol) 및 아세틸 클로라이드 (0.107 mL, 1.510 mmol)를 첨가하였다. 반응 혼합물을 20℃에서 4시간 동안 교반한 다음, 60℃에서 2시간 동안 교반하였다. 혼합물을 NH₄Cl의 포화 수용액에 붓고, EtOAc (3x)로 추출하였다. 합한 유기 층을 염수로 세척하고, Na₂SO₄ 상에서 건조시키고, 여과하고, 농축시켰다. 잔류물을 플래쉬 칼럼 크로마토그래피 (SiO₂; 헥산/EtOAc 구배)에 의해 정제하여 표제 화합물을 담황색 고체 (104 mg, 30.3%)로서 수득하였다.

mp 121–123 °C; ¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 7.88 (d, *J* = 0.7 Hz, 1H), 7.79 (dd, *J* = 8.5, 5.8 Hz, 1H), 7.15 (dd, *J* = 10.9, 4.1 Hz, 1H), 4.05 (s, 3H), 2.35 (s, 6H), 0.35 (d, *J* = 0.8 Hz, 9H); ESIMS *m/z* 455 ([M+H]⁺).

[0729]

[0730] 실시예 79: 메틸 4-아미노-6-(4-브로모페닐)-5-플루오로-3-비닐피콜리네이트의 제조 (화합물 57)



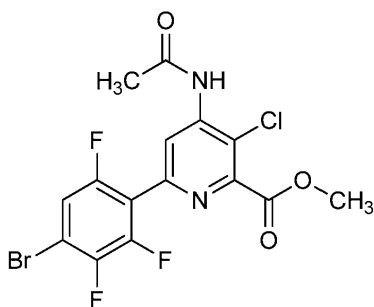
[0731]

[0732] CH₂Cl₂ (2 mL) 중 니트로실 테트라플루오로보레이트 (0.122 g, 1.044 mmol)의 0℃ 현탁액에 CH₂Cl₂ 및 CH₃CN (10 mL)의 1:1 혼합물 중 메틸 4-아미노-6-(4-아미노페닐)-5-플루오로-3-비닐피콜리네이트 (0.3 g, 1.044 mmol)의 용액을 첨가하였다. 반응 혼합물을 0℃에서 30분 동안 교반한 다음, 브로민화칼륨 (0.497 g, 4.18 mmol), 18-

크라운-6 (0.028 g, 0.104 mmol), 브로민화구리 (II) (0.023 g, 0.104 mmol), 브로민화구리 (I) (0.015 g, 0.104 mmol), 및 1,10-페난트롤린 (0.019 g, 0.104 mmol)의 현탁액에 적가하였다. 혼합물을 20℃에서 1시간 동안 교반하였다. 추가의 브로민화구리 (I) (0.749 g, 5 당량)를 첨가하고, 반응 혼합물을 20℃에서 추가 1시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 Et₂O로 희석하고, 셀라이트®의 짧은 패드 상에서 여과하였다. 상청액을 농축시키고, 플래쉬 칼럼 크로마토그래피 (SiO₂; 헥산/EtOAc 구배)에 이어서 정제용 역상 HPLC (물/아세트니트릴 구배)에 의해 정제하여 표제 화합물을 담갈색 고체 (130 mg, 35.5%)로서 수득하였다.

[0733] 하기 화합물을 실시예 79에 개시된 절차에 따라 제조하였다:

[0734] 메틸 4-아세트아미도-6-(4-브로모-2,3,6-트리플루오로페닐)-3-클로로피콜리네이트

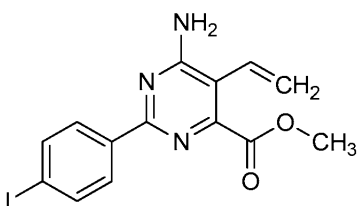


[0735]

¹H NMR (400 MHz, DMSO-*d*₆) δ 10.08 (s, 1H), 8.48 (s, 1H), 7.87 – 7.84 (m, 1H), 3.93 (s, 3H), 2.25 (s, 3H); ESIMS *m/z* 437 ([M+2H]⁺).

[0736]

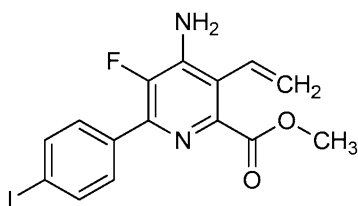
[0737] 실시예 80: 메틸 6-아미노-2-(4-아이오도페닐)-5-비닐피리미딘-4-카르복실레이트의 제조 (화합물 164)



[0738]

[0739] 교반용 막대가 구비된 50-mL 둥근 바닥 플라스크에 니트로실 테트라플루오로보레이트 (78 mg, 0.67 mmol) 및 디클로로메탄 (2.0 mL)을 첨가하였다. 플라스크를 빙수조에서 냉각시키고, N₂ 분위기 하에 두었다. 이어서, 디클로로메탄 (2.5 mL) 중 메틸 6-아미노-2-(4-아미노페닐)-5-비닐피리미딘-4-카르복실레이트 (180 mg, 0.666 mmol)를 적가하였다. 반응 혼합물을 60분 동안 교반되도록 하였다. 이어서, 최소량의 H₂O 중 아이오딘화나트륨 (499 mg, 3.33 mmol)에 이어서 디옥산 (1.0 mL)을 첨가하였다. 반응물을 실온에서 18시간 동안 교반되도록 하였다. 반응 혼합물을 포화 Na₂SO₃ 용액에 붓고, 에틸 아세테이트 (3 x 50 mL)로 추출하였다. 합한 유기 층을 무수 MgSO₄ 상에서 건조시키고, 여과하고, 농축시켰다. 생성된 잔류물을 플래쉬 크로마토그래피 (실리카 겔; 헥산 중 0-30% EtOAc) 및 역상 크로마토그래피에 의해 정제하여 표제 화합물을 담황색 고체 (0.068 g, 27%)로서 수득하였다.

[0740] 실시예 81: 메틸 4-아미노-5-플루오로-6-(4-아이오도페닐)-3-비닐피콜리네이트의 제조 (화합물 139)



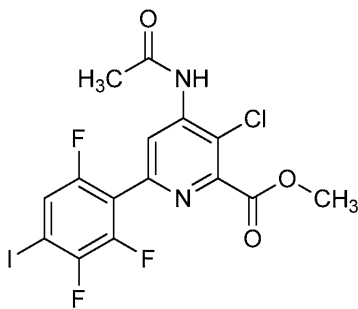
[0741]

[0742] CH₂Cl₂ (1 mL) 중 니트로실 테트라플루오로보레이트 (0.041 g, 0.348 mmol)의 0℃ 현탁액에 CH₂Cl₂ 및 CH₃CN (4

mL)의 1:1 혼합물 중 메틸 4-아미노-6-(4-아미노페닐)-5-플루오로-3-비닐피콜리네이트 (0.1 g, 0.348 mmol)의 용액을 첨가하였다. 반응 혼합물을 0℃에서 30분 동안 교반한 다음, 최소량의 물 중에 용해된 아이오딘화나트륨 (0.261 g, 1.740 mmol)의 용액을 첨가하고, 반응 혼합물을 20℃에서 30분 동안 교반하였다. 이어서, 혼합물을 아황산나트륨의 10% 수용액에 붓고, EtOAc (3x)로 추출하였다. 합한 유기 층을 Na₂SO₄ 상에서 건조시키고, 여과하고, 농축시켰다. 잔류물을 플래쉬 칼럼 크로마토그래피 (SiO₂; 헥산/EtOAc 구배)에 이어서 정제용 역상 HPLC (물/아세토니트릴 구배)에 의해 정제하여 표제 화합물을 백색 고체 (32 mg, 23.09%)로서 수득하였다.

[0743] 하기 화합물을 실시예 81에 개시된 절차에 따라 제조하였다:

[0744] 메틸 4-아세트아미도-3-클로로-6-(2,3,6-트리플루오로-4-아이오도페닐)피콜리네이트

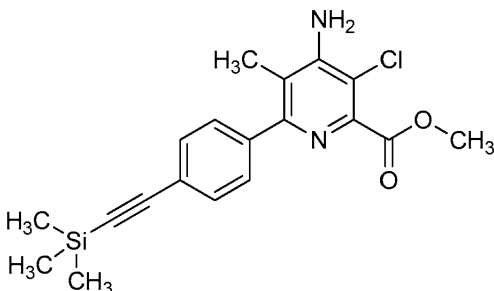


[0745]

¹H NMR (400 MHz, DMSO-*d*₆) δ 10.07 (s, 1H), 8.46 (s, 1H), 7.89 – 7.85 (m, 1H), 3.93 (s, 3H), 2.25 (s, 3H); ESIMS *m/z* 487 ([M+3H]⁺).

[0746]

[0747] 실시예 82. 메틸 4-아미노-3-클로로-5-메틸-6-(4-((트리메틸실릴)에틸)페닐)피콜리네이트의 제조



[0748]

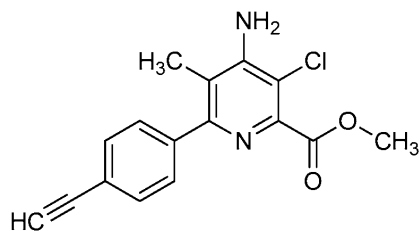
[0749] 무수 DMF (1.3 mL) 중 메틸 4-아미노-3-클로로-6-(4-아이오도페닐)-5-메틸피콜리네이트 (264 mg, 0.66 mmol), 트리메틸((트리부틸스판닐)에틸)실란 (280 mg, 0.72 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) (75 mg, 0.065 mmol)의 혼합물을 90℃에서 16시간 동안 가열하였다. 반응 혼합물을 냉각시키고, 물로 희석하고, 에틸 아세테이트 (2x)로 추출하였다. 유기 층을 무수 MgSO₄ 상에서 건조시키고, 여과하고, 실리카 겔 상에 흡착시켰다. 플래쉬 크로마토그래피 (0-100% 에틸 아세테이트/헥산)에 의해 정제하여 표제 화합물을 갈색 고체 (52 mg, 21%)로서 수득하였다.

mp 158–164

°C; ¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 7.52 (d, *J* = 8.5 Hz, 2H), 7.40 (d, *J* = 8.5 Hz, 2H), 4.83 (s, 2H), 3.96 (s, 3H), 2.14 (s, 3H), 0.26 (s, 9H); IR (순수한 필름) 3325, 3227, 2955, 2157, 1729, 1629, 1246 cm⁻¹; ESIMS *m/z* 372 ([M]⁺).

[0750]

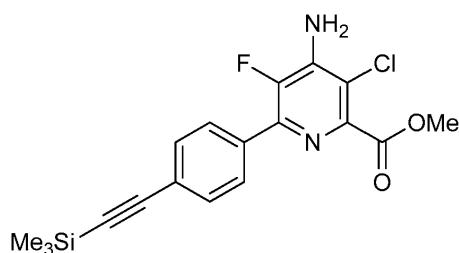
[0751] 실시예 83: 메틸 4-아미노-3-클로로-6-(4-에티닐페닐)-5-메틸피콜리네이트의 제조 (화합물 40)



[0752]

[0753] 메탄올 (0.7 mL) 중 메틸 4-아미노-3-클로로-5-메틸-6-(4-((트리메틸실릴)에티닐)페닐)-피콜리네이트 (50 mg, 0.13 mmol)에 탄산칼륨 (24 mg, 0.17 mmol)을 첨가하였다. 반응 혼합물을 실온에서 40분 동안 교반한 다음, 물로 희석하고, 디클로로메탄 (4x)으로 추출하였다. 유기 층을 무수 MgSO_4 상에서 건조시키고, 여과하고, 농축시켜 표제 화합물을 갈색 오일 (34 mg, 84%)로서 수득하였다.

[0754] 실시예 84: 메틸 4-아미노-3-클로로-5-플루오로-6-(4-((트리메틸실릴)에티닐)페닐)피콜리네이트의 제조



[0755]

[0756] 트리메틸((트리부틸스테인)에티닐)실란 (510 mg, 1.3 mmol, 1.1 당량)을 23°C에서 DMF (2.4 mL) 중 메틸 4-아미노-3-클로로-5-플루오로-6-(4-아이오도페닐)피콜리네이트 (490 mg, 1.2 mmol, 1.0 당량) 및 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) (140 mg, 0.12 mmol, 0.10 당량)의 교반 혼합물에 첨가하였다. 반응 혼합물을 90°C로 가열하고, 균질 황색 용액이 생성되었고, 20시간 동안 교반하였다. 냉각된 반응 혼합물을 물 (200 mL)로 희석하고, 디에틸 에테르 (4 x 100 mL)로 추출하였다. Hexan (100 mL)을 합한 유기 층에 첨가하고, 흔탁한 용액을 물 (200 mL)로 세척하였다. 유기 층을 건조시키고 (MgSO_4), 중력 여과하고, 회전 증발에 의해 농축시켰다. 잔류물을 실리카 겔 칼럼 크로마토그래피 (Hexan 중 25% 에틸 아세테이트)에 의해 정제하여 표제 화합물을 황갈색 분말 (330 mg, 73%)로서 수득하였다.

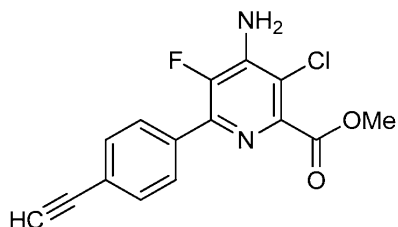
mp 83–86 °C; IR (박막) 3487 (m), 3375 (s), 2958 (s), 2159 (m), 1739

(s), 1618 (s) cm^{-1} ; ^1H NMR (300 MHz, CDCl_3) δ 7.89 (m, 2H), 7.55 (m, 2H), 4.89 (br s,

2H), 3.99 (s, 3H), 0.26 (s, 9H); ESIMS m/z 377 ($[\text{M}+\text{H}]^+$).

[0757]

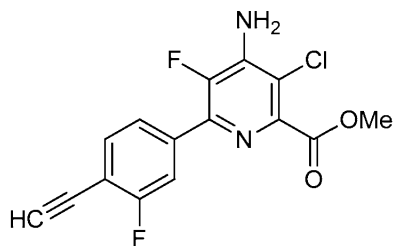
[0758] 실시예 85: 메틸 4-아미노-3-클로로-6-(4-에티닐페닐)-5-플루오로피콜리네이트의 제조 (화합물 7)



[0759]

[0760] 탄산칼륨 (100 mg, 0.74 mmol, 1.0 당량)을 23°C에서 메탄올 (3.7 mL) 중 메틸 4-아미노-3-클로로-5-플루오로-6-(4-((트리메틸실릴)에티닐)페닐)피콜리네이트 (280 mg, 0.74 mmol, 0.10 당량)의 교반 혼합물에 첨가하였다. 불균질 연황색 혼합물을 23°C에서 30분 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 물 (200 mL)로 희석하고, 디클로로메탄 (5 x 50 mL)으로 추출하였다. 유기 층을 건조시키고 (MgSO_4), 중력 여과하고, 회전 증발에 의해 농축시켜 표제 화합물을 황갈색 분말 (220 mg, 96%)로서 수득하였다.

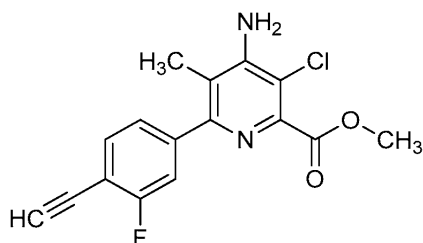
[0761] 실시예 86: 메틸 4-아미노-3-클로로-6-(4-에티닐-3-플루오로페닐)-5-플루오로피콜리네이트의 제조 (화합물 133)



[0762]

[0763] 디메틸 1-디아조-2-옥소프로필포스포네이트 (290 mg, 1.5 mmol, 1.2 당량)를 23℃에서 메탄올 (12 mL) 중 메틸 4-아미노-3-클로로-5-플루오로-6-(3-플루오로-4-포르밀페닐)피콜리네이트 (410 mg, 1.3 mmol, 1.0 당량) 및 고체 탄산칼륨 (350 mg, 2.5 mmol, 2.0 당량)의 교반 혼합물에 첨가하였다. 생성된 탁한 연황색 혼합물을 23℃에서 2시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 물 (150 mL)로 희석하고, 디클로로메탄 (4 x 60 mL)으로 추출하였다. 유기 층을 건조시키고 (MgSO₄), 중력 여과하고, 회전 증발에 의해 농축시켰다. 잔류물을 실리카 겔 칼럼 크로마토그래피 (헥산 중 33% 에틸 아세테이트)에 의해 정제하여 표제 화합물을 백색 분말 (150 mg, 38%)로서 수득하였다.

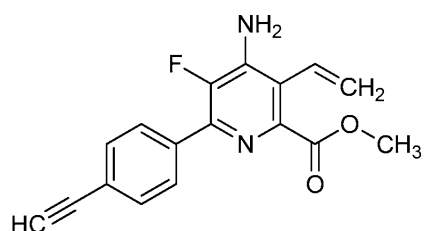
[0764] 실시예 87. 메틸 4-아미노-3-클로로-6-(4-에티닐-3-플루오로페닐)-5-메틸피콜리네이트의 제조 (화합물 151)



[0765]

[0766] 실온에서 메탄올 (11 mL) 중 메틸 4-아미노-3-클로로-6-(3-플루오로-4-포르밀페닐)-5-메틸피콜리네이트 (358 mg, 1.1 mmol) 및 탄산칼륨 (537 mg, 3.9 mmol)의 용액에 디메틸 (1-디아조-2-옥소프로필)포스포네이트 (베스트만-오히라 시약, 조 시약; 1mL)를 첨가하고, 혼합물을 3시간 동안 교반하였다. 반응물을 포화 수성 중탄산나트륨으로 키텅하고, 에틸 아세테이트 (3x)로 추출하였다. 합한 유기 층을 무수 Na₂SO₄ 상에서 건조시키고, 여과하고, 실리카 겔 상에 흡착시켰다. 플래쉬 크로마토그래피 (0-50% 에틸 아세테이트/헥산)에 의해 정제하여 표제 화합물을 황색 고체 (245 mg, 69%)로서 수득하였다.

[0767] 실시예 88: 메틸 4-아미노-6-(4-에티닐페닐)-5-플루오로-3-비닐피콜리네이트의 제조 (화합물 60)

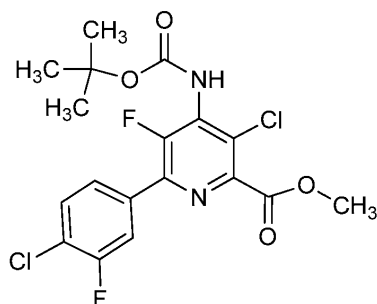


[0768]

[0769] 20 mL 반응 바이알에 메틸 4-아미노-5-플루오로-6-(4-포르밀페닐)-3-비닐피콜리네이트 (0.41 g, 1.365 mmol), 탄산칼륨 (0.377 g, 2.73 mmol) 및 메탄올 (10 mL)을 첨가하였다. 디메틸 (1-디아조-2-옥소프로필)포스포네이트 (0.315 g, 1.638 mmol)를 한 번에 첨가하였다. 4시간 동안 교반한 후, 반응 혼합물을 Et₂O (50 mL)로 희석하고, NaHCO₃의 5% 용액 (25 mL)으로 세척하였다. 유기 층을 MgSO₄ (5 g) 상에서 건조시키고, 여과하고, 회전 증발기로 농축시켰다. 생성된 잔류물을 텔레다인 이스코 정제 시스템을 사용하여 CH₂Cl₂ 및 EtOAc의 구배 용리액 시스템으로 정제하여 표제 화합물을 백색 고체 (250 mg, 61%)로서 수득하였다.

[0770] 실시예 89: 메틸 4-((tert-부톡시카르보닐)아미노)-3-클로로-6-(4-클로로-3-플루오로페닐)-5-플루오로피콜리네

이트의 제조



[0771]

[0772]

단계 1: 메틸 4-아미노-3-클로로-6-(4-클로로-3-플루오로페닐)-5-플루오로피콜리네이트 (1.43 g, 4.29 mmol)를 디클로로메탄 (30 mL) 중 디-tert-부틸 디카르보네이트 (2.99 mL, 12.88 mmol) 및 N,N-디메틸피리딘-4-아민 (0.079 g, 0.644 mmol)과 혼합하였다. 반응 혼합물을 실온에서 밤새 교반하였다. 반응 혼합물을 질소의 스트림 하에 농축시키고, 실리카 겔의 칼럼에 직접 적용하였다. 화합물을 2-20% 에틸 아세테이트/헥산 구배 용매계로 용리시켜 메틸 4-(비스(tert-부톡시카르보닐)아미노)-3-클로로-6-(4-클로로-3-플루오로페닐)-5-플루오로피콜리네이트 (2.1 g, 92%)를 백색 고체로서 수득하였다.

[0773]

단계 2: 메틸 4-(비스(tert-부톡시카르보닐)아미노)-3-클로로-6-(4-클로로-3-플루오로페닐)-5-플루오로피콜리네이트 (2.1 g, 3.94 mmol)를 디클로로에탄 (20 mL) 중에 용해시키고, 트리플루오로아세트산 (0.598 mL, 7.76 mmol)을 실온에서 첨가하였다. 반응 혼합물을 실온에서 밤새 교반한 다음, 진공 하에 농축시켰다. 생성물을 플래쉬 크로마토그래피 (SiO₂; 디클로로메탄 중 2-20% 에틸 아세테이트로 용리)에 의해 정제하여 표제 화합물을 백색 고체 (1.64 g, 98%)로서 수득하였다.

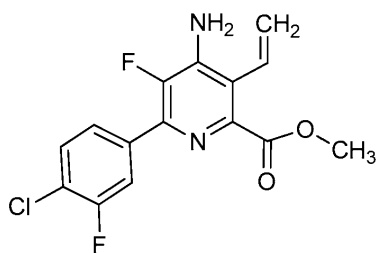
¹H NMR (300 MHz, CDCl₃) δ

7.80 (dd, *J* = 22.0, 8.5 Hz, 2H), 7.50 (dd, *J* = 8.3, 7.6 Hz, 1H), 6.51 (s, 1H), 4.02 (s, 3H), 1.56 (s, 9H); ESIMS *m/z* 431 ([M-H]).

[0774]

[0775]

실시예 90: 메틸 4-아미노-6-(4-클로로-3-플루오로페닐)-5-플루오로-3-비닐피콜리네이트의 제조 (화합물 215)



[0776]

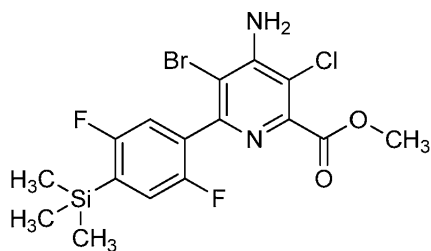
[0777]

단계 1: 메틸 4-(tert-부톡시카르보닐아미노)-3-클로로-6-(4-클로로-3-플루오로페닐)-5-플루오로피콜리네이트 (1.5 g, 3.46 mmol), 트리부틸(비닐)스탄난 (2.196 g, 6.92 mmol), 및 비스(트리페닐포스핀)팔라듐 (II) 클로라이드 (0.365 g, 0.519 mmol)를 1,2-디클로로에탄 (4.62 mL) 중에서 합하고, 30분 동안 밀봉된 바이알 중에서 130°C에서 마이크로웨이브 중에서 조사하였다. 냉각된 반응 혼합물을 실리카 겔 칼럼에 직접 적용하고, 5-40% 에틸 아세테이트/헥산 구배로 용리시켜 메틸 4-(tert-부톡시카르보닐아미노)-6-(4-클로로-3-플루오로페닐)-5-플루오로-3-비닐피콜리네이트 (0.966 g, 65.7%)를 백색 고체로서 수득하였다.

[0778]

단계 2: 메틸 4-(tert-부톡시카르보닐아미노)-6-(4-클로로-3-플루오로페닐)-5-플루오로-3-비닐피콜리네이트 (0.966 g, 2.274 mmol)를 디클로로에탄 (11 mL) 중에 용해시키고, 트리플루오로아세트산 (3.50 mL, 45.5 mmol)을 첨가하였다. 실온에서 4시간 후, 반응 혼합물을 진공 하에 농축시킨 다음, 추가의 디클로로에탄으로 2회 더 공증발시켰다. 잔류물을 플래쉬 크로마토그래피 (SiO₂; 헥산 중 7-60% 에틸 아세테이트로 용리)에 의해 정제하여 표제 화합물을 백색 고체 (0.705 g, 95%)로서 수득하였다.

[0779] 실시예 91: 메틸 4-아미노-5-브로모-3-클로로-6-(2,5-디플루오로-4-(트리메틸실릴)페닐)피콜리네이트의 제조



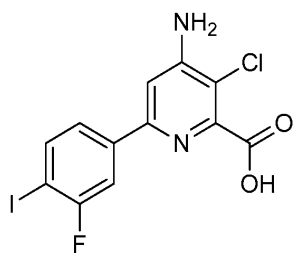
[0780]

[0781] 20℃에서 CH₂Cl₂ (2.265 mL) 중 메틸 4-아미노-3-클로로-6-(2,5-디플루오로-4-(트리메틸실릴)페닐)피콜리네이트 (0.210 g, 0.566 mmol)의 용액에 브로민 (0.117 mL, 2.265 mmol)을 첨가하였다. 반응 혼합물을 20℃에서 밤새 교반하였다. 이어서, 혼합물을 Na₂S₂O₃의 포화 수용액에 붓고, EtOAc (3x)로 추출하였다. 합한 유기 층을 Na₂SO₄ 상에서 건조시키고, 여과하고, 농축시켰다. 잔류물을 플래쉬 칼럼 크로마토그래피 (SiO₂; 헥산/EtOAc 구배)에 의해 정제하여 표제 화합물을 백색 고체 (0.125 g, 49.1%)로서 수득하였다.

mp 165–166 °C; ¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 7.10 (dd, *J* = 8.9, 4.0 Hz, 1H), 7.03 (dd, *J* = 7.6, 5.1 Hz, 1H), 5.43 (s, 2H), 3.96 (s, 3H), 0.33 (d, *J* = 0.7 Hz, 9H); ESIMS *m/z* 450 ([M+H]⁺).

[0782]

[0783] 실시예 92: 4-아미노-3-클로로-6-(3-플루오로-4-아이오도페닐)피콜린산의 제조 (화합물 77)

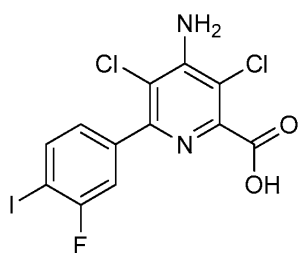


[0784]

[0785] 교반용 막대가 구비된 100-mL 둥근 바닥 플라스크에 메틸 4-아미노-3-클로로-6-(3-플루오로-4-아이오도페닐)피콜리네이트 (0.284 g, 0.699 mmol), 1.0 N 수산화나트륨 (2.79 mL, 2.79 mmol) 및 메탄올 (5.0 mL)을 첨가하였다. 반응 혼합물을 실온에서 18시간 동안 교반되도록 하였다. 이어서, 용매를 회전 증발기로 제거하였다. 생성된 고체를 H₂O로 희석하고, 이를 1 N HCl을 사용하여 pH~3.0으로 조정하고, 에틸 아세테이트 (3 x 50 mL)로 추출하였다. 합한 유기 층을 무수 MgSO₄ 상에서 건조시키고, 여과하고, 농축시켜 표제 화합물을 백색 고체 (0.056 g, 21%)로서 수득하였다.

[0786] 하기 화합물을 실시예 92에 개시된 절차에 따라 제조하였다:

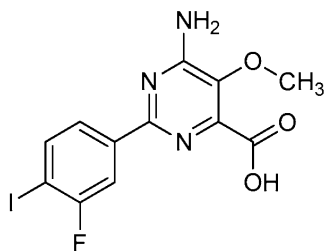
[0787] 4-아미노-3,5-디클로로-6-(3-플루오로-4-아이오도페닐)피콜린산 (화합물 145)



[0788]

[0789] 표제 화합물을 실시예 92에 기재된 바와 같이 메틸 4-아미노-3,5-디클로로-6-(3-플루오로-4-아이오도페닐)피콜리네이트 (0.197 g, 0.447 mmol)를 이용하여 제조하고, 백색 고체 (0.133 g, 70%)로서 단리하였다.

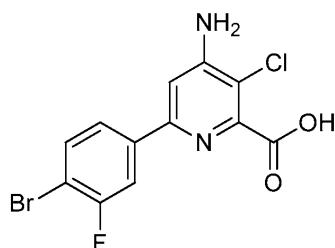
[0790] 6-아미노-2-(3-플루오로-4-아이오도페닐)-5-메톡시피리미딘-4-카르복실산 (화합물 37)



[0791]

[0792] 표제 화합물을 실시예 92에 기재된 바와 같이 메틸 6-아미노-2-(3-플루오로-4-아이오도페닐)-5-메톡시피리미딘-4-카르복실레이트 (0.309 g, 0.766 mmol)를 이용하여 제조하고, 백색 고체 (0.065 g, 22%)로서 분리하였다.

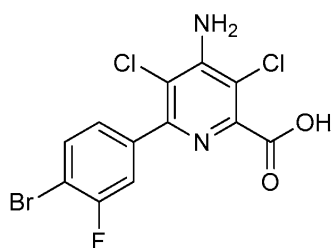
[0793] 4-아미노-6-(4-브로모-3-플루오로페닐)-3-클로로피콜린산 (화합물 110)



[0794]

[0795] 표제 화합물을 실시예 92에 기재된 바와 같이 메틸 4-아미노-6-(4-브로모-3-플루오로페닐)-3-클로로피콜리네이트 (291 mg, 0.809 mmol)를 이용하여 제조하고, 회백색 고체 (0.247 g, 88%)로서 분리하였다.

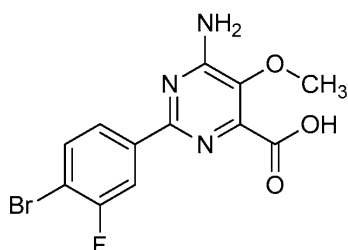
[0796] 4-아미노-6-(4-브로모-3-플루오로페닐)-3,5-디클로로피콜린산 (화합물 43)



[0797]

[0798] 표제 화합물을 실시예 92에 기재된 바와 같이 메틸 4-아미노-6-(4-브로모-3-플루오로페닐)-3,5-디클로로피콜리네이트 (225 mg, 0.571 mmol)를 이용하여 제조하고, 백색 고체 (0.219 g, 100%)로서 분리하였다.

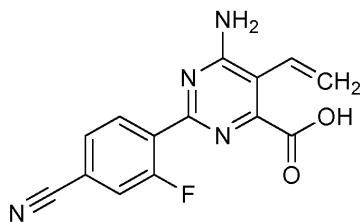
[0799] 6-아미노-2-(4-브로모-3-플루오로페닐)-5-메톡시피리미딘-4-카르복실산 (화합물 113)



[0800]

[0801] 표제 화합물을 실시예 92에 기재된 바와 같이 메틸 6-아미노-2-(4-브로모-3-플루오로페닐)-5-메톡시피리미딘-4-카르복실레이트 (166 mg, 0.466 mmol)를 이용하여 제조하고, 백색 고체 (0.056 g, 35%)로서 분리하였다.

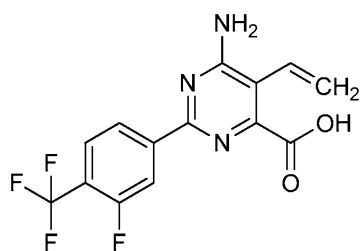
[0802] 6-아미노-2-(4-시아노-2-플루오로페닐)-5-비닐피리미딘-4-카르복실산 (화합물 5)



[0803]

[0804] 표제 화합물을 실시예 92에 기재된 바와 같이 메틸 6-아미노-2-(4-시아노-2-플루오로페닐)-5-비닐피리미딘-4-카르복실레이트 (294 mg, 0.986 mmol)를 이용하여 제조하고, 오렌지색 고체 (0.202 g, 72%)로서 단리하였다.

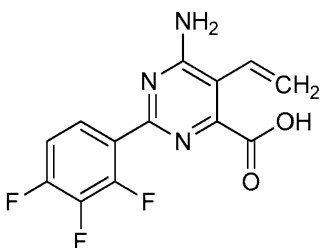
[0805] 6-아미노-2-(3-플루오로-4-(트리플루오로메틸)페닐)-5-비닐피리미딘-4-카르복실산 (화합물 32)



[0806]

[0807] 표제 화합물을 실시예 92에 기재된 바와 같이 메틸 6-아미노-2-(3-플루오로-4-(트리플루오로메틸)페닐)-5-비닐피리미딘-4-카르복실레이트 (265 mg, 0.777 mmol)를 이용하여 제조하고, 담황색 고체 (0.234 g, 92%)로서 단리하였다.

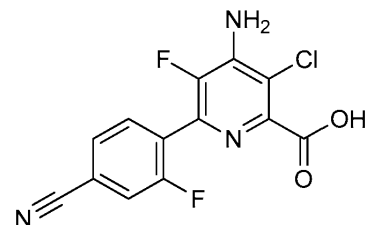
[0808] 6-아미노-2-(2,3,4-트리플루오로페닐)-5-비닐피리미딘-4-카르복실산 (화합물 191)



[0809]

[0810] 표제 화합물을 실시예 92에 기재된 바와 같이 메틸 6-아미노-2-(2,3,4-트리플루오로페닐)-5-비닐피리미딘-4-카르복실레이트 (335 mg, 1.08 mmol)를 이용하여 제조하고, 황색 고체 (0.275 g, 86%)로서 단리하였다.

[0811] 실시예 93: 4-아미노-3-클로로-6-(4-시아노-2-플루오로페닐)-5-플루오로피콜린산의 제조 (화합물 65)



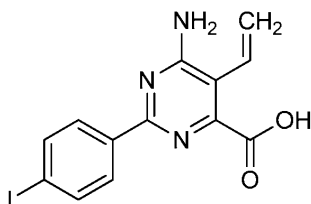
[0812]

[0813] 교반용 막대가 구비된 50-mL 둥근 바닥 플라스크에서, 메틸 4-아미노-3-클로로-6-(4-시아노-2-플루오로페닐)-5-플루오로피콜리네이트 (351 mg, 1.084 mmol) 및 수산화리튬 수화물 (100 mg, 2.383 mmol)을 테트라히드로푸란 (2.0 mL), 메탄올 (2.0 mL) 및 H₂O (1.0 mL) 중에 용해시켰다. 반응물을 실온에서 2시간 동안 교반하였다. 이어서, 용매를 회전 증발기에 의해 제거하였다. 생성된 고체를 H₂O로 처리하고, 이어서 이를 1 N HCl을 사용하여 pH-3.0으로 조정하고, 에틸 아세테이트 (3 x 50 mL)로 추출하였다. 합한 유기 층을 무수 MgSO₄ 상에서 건조시키고, 여과하고, 농축시켰다. 생성된 잔류물을 역상 크로마토그래피 (150 g C₁₈, H₂O 중 0-100%

아세트니트릴)에 의해 필요에 따라 정제하여 표제 화합물을 갈색 고체 (0.058 g, 20%)로서 수득하였다.

[0814] 하기 화합물을 실시예 93에 개시된 절차에 따라 제조하였다:

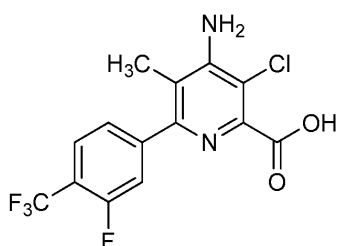
[0815] 6-아미노-2-(4-아이오도페닐)-5-비닐피리미딘-4-카르복실산 (화합물 123)



[0816]

[0817] 표제 화합물을 실시예 93에 기재된 바와 같이 메틸 6-아미노-2-(4-아이오도페닐)-5-비닐피리미딘-4-카르복실레이트 (65 mg, 0.177 mmol)를 이용하여 제조하고, 회백색 고체 (60 mg, 92%)로서 단리하였다.

[0818] 실시예 94. 4-아미노-3-클로로-6-(3-플루오로-4-(트리플루오로메틸)페닐)-5-메틸피콜린산의 제조 (화합물 161)

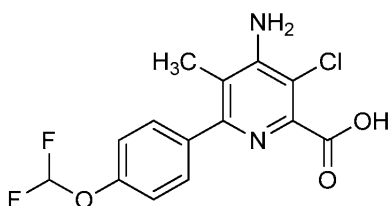


[0819]

[0820] 메탄올 (6.4 mL) 중 메틸 4-아미노-3-클로로-6-(3-플루오로-4-(트리플루오로메틸)페닐)-5-메틸피콜리네이트 (0.35 g, 0.96 mmol)에 2 N NaOH (1.93 mL, 3.9 mmol)를 첨가하고, 반응 혼합물을 실온에서 18시간 동안 교반하였다. 용액을 2 N HCl을 사용하여 산성화시키고, 침전물을 진공 여과하여 표제 화합물을 백색 분말 (199 mg, 59%)로서 수득하였다.

[0821] 하기 화합물을 실시예 94에 개시된 절차에 따라 제조하였다:

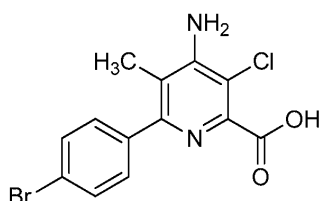
[0822] 4-아미노-3-클로로-6-(4-(디플루오로메톡시)페닐)-5-메틸피콜린산 (화합물 94)



[0823]

[0824] 표제 화합물을 실시예 94에서와 같이 제조하고, 황색 고체 (36 mg, 68%)로서 단리하였다.

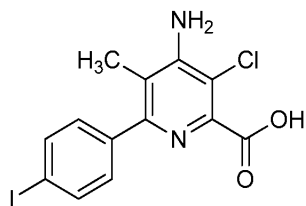
[0825] 4-아미노-6-(4-브로모페닐)-3-클로로-5-메틸피콜린산 (화합물 78)



[0826]

[0827] 표제 화합물을 실시예 94에서와 같이 제조하고, 백색 고체 (24 mg, 71%)로서 단리하였다.

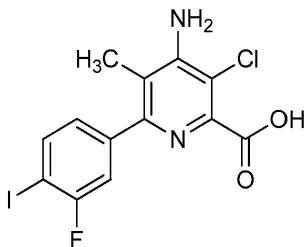
[0828] 4-아미노-3-클로로-6-(4-아이오도페닐)-5-메틸피콜린산 (화합물 116)



[0829]

[0830] 표제 화합물을 실시예 94에서와 같이 제조하고, 오렌지색 분말 (86 mg, 83%)로서 분리하였다.

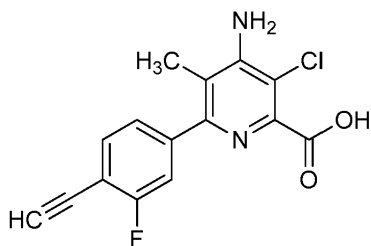
[0831] 4-아미노-3-클로로-6-(3-플루오로-4-아이오도페닐)-5-메틸피콜린산 (화합물 87)



[0832]

[0833] 표제 화합물을 실시예 94에서와 같이 제조하고, 백색 분말 (120.5 mg, 88%)로서 분리하였다.

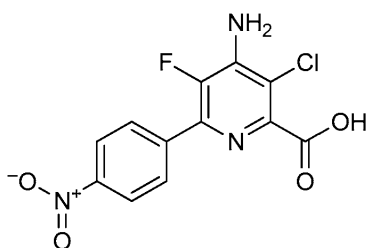
[0834] 4-아미노-3-클로로-6-(4-에티닐-3-플루오로페닐)-5-메틸피콜린산 (화합물 6)



[0835]

[0836] 표제 화합물을 실시예 94에서와 같이 제조하고, 황색 분말 (147 mg, 82%)로서 분리하였다.

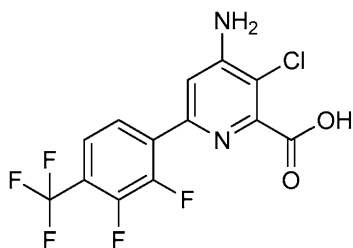
[0837] 실시예 95: 4-아미노-3-클로로-5-플루오로-6-(4-니트로페닐)피콜린산의 제조 (화합물 31)



[0838]

[0839] 메탄올 (MeOH; 3 mL) 중 메틸 4-아미노-3-클로로-5-플루오로-6-(4-니트로페닐)피콜리네이트 (88 mg, 0.27 mmol)의 용액에 1 노르말 (N) 수성 수산화나트륨 용액 (NaOH; 3 mL, 3 mmol)을 첨가하였다. 반응 혼합물을 주위 온도에서 24시간 동안 교반하였다. 이어서, 용액을 농축시키고, 2 N 수성 HCl 용액으로 산성화시켰다. 목 적 생성물을 용액으로부터 침전시키고, 부호너 깔대기에 수집하고, 밤새 건조되도록 하여 황갈색 고체 (84 mg, 100%)를 수득하였다.

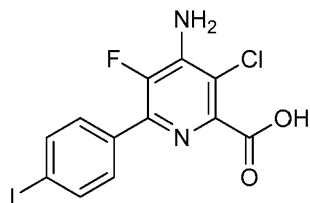
[0840] 실시예 96: 4-아미노-3-클로로-6-(2,3-디플루오로-4-(트리플루오로메틸)페닐)피콜린산의 제조 (화합물 172)



[0841]

[0842] 메탄올 (1 mL) 중 메틸 4-아세트아미도-3-클로로-6-(2,3-디플루오로-4-(트리플루오로메틸)페닐)피콜리네이트 (115 mg, 0.28 mmol)의 혼합물에 2 노르말 (N) 수성 수산화나트륨 용액 (NaOH; 1.4 mL, 2.81 mmol)을 첨가하였다. 반응 용액을 주위 온도에서 15시간 동안 교반하였다. 이어서, 용액을 농축시키고, 2 N 수성 HCl 용액으로 산성화시켰다. 목적 생성물을 용액으로부터 침전시켰다. 이 혼합물을 디클로로메탄으로 추출하고 (3x), 유기 부를 합하고, 건조시키고 (Na₂SO₄), 여과하고, 진공 하에 농축시켜 백색 고체 (94 mg, 90%)를 수득하였다.

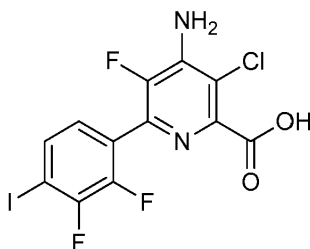
[0843] 실시예 97: 4-아미노-3-클로로-5-플루오로-6-(4-아이오도페닐)피콜린산의 제조 (화합물 45)



[0844]

[0845] 수산화나트륨 (740 μL, 1.5 mmol, 4.0 당량)의 2 M 용액을 23°C에서 메탄올 (3.7 mL) 중 메틸 4-아미노-6-(4-아이오도페닐)-3-클로로-5-플루오로피콜리네이트 (150 mg, 0.37 mmol, 1.0 당량)의 교반 용액에 첨가하였다. 생성된 분홍색 용액을 23°C에서 3시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 진한 HCl을 사용하여 pH 3으로 조정하고, 회전 증발에 의해 농축시켰다. 잔류물을 물 중에 슬러리화하고, 진공 여과하여 표제 화합물을 연분홍색 분말 (110 mg, 79%)로서 수득하였다.

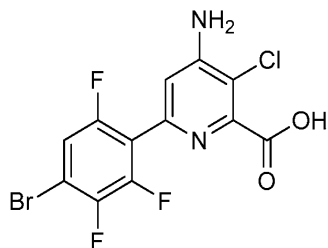
[0846] 실시예 98: 4-아미노-3-클로로-6-(2,3-디플루오로-4-아이오도페닐)-5-플루오로피콜린산의 제조 (화합물 141)



[0847]

[0848] 수성 수산화나트륨 (270 μL, 0.54 mmol, 2.0 당량)의 2 M 용액을 23°C에서 메탄올 (2.7 mL) 중 메틸 4-아미노-3-클로로-6-(2,3-디플루오로-4-아이오도페닐)-5-플루오로피콜리네이트 (120 mg, 0.27 mmol, 1.0 당량)의 교반 현탁액에 첨가하였다. 불균질 백색 혼합물을 23°C에서 18시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 진한 HCl의 적가에 의해 대략 pH 4로 조정하고, 회전 증발에 의해 농축시켰다. 잔류물을 디클로로메탄 (250 mL) 중에 용해시키고, 소수성 막 상 분리를 통과시키고, 건조시키고 (MgSO₄), 중력 여과하고, 회전 증발에 의해 농축시켜 표제 화합물을 백색 분말 (110 mg, 92%)로서 수득하였다.

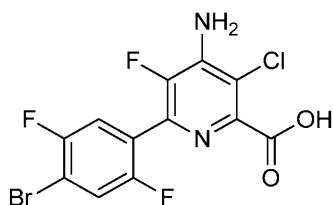
[0849] 실시예 99: 4-아미노-6-(4-브로모-2,3,6-트리플루오로페닐)-3-클로로피콜린산의 제조 (화합물 162)



[0850]

[0851] THF:MeOH:H₂O (1:1:0.5; 2.5 mL) 중 메틸 4-아세트아미도-6-(4-브로모-2,3,6-트리플루오로페닐)-3-클로로피콜리네이트 (50 mg, 0.122 mmol, 1.0 당량) 및 수산화나트륨 (14 mg, 0.366 mmol, 3.0 당량)의 용액을 20℃에서 2 시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 1.5 N HCl을 사용하여 pH 4-5로 산성화시키고, EtOAc (2x)로 추출하였다. 합한 유기 추출물을 무수 Na₂SO₄ 상에서 건조시키고, 감압 하에 증발 건조시켜 표제 화합물을 갈색 고체 (30 mg, 65%)로서 수득하였다.

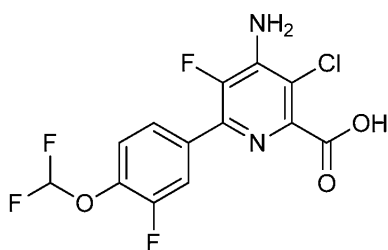
[0852] 실시예 100: 4-아미노-6-(4-브로모-2,5-디플루오로페닐)-3-클로로-5-플루오로피콜린산의 제조 (화합물 42)



[0853]

[0854] MeOH (0.674 mL) 및 아세톤 (0.674 mL)의 1:1 혼합물 중 메틸 4-아미노-6-(4-브로모-2,5-디플루오로페닐)-3-클로로-5-플루오로피콜리네이트 (0.160 g, 0.404 mmol)의 용액에 수산화나트륨의 2 N 수용액 (0.607 mL, 1.213 mmol)을 첨가하였다. 반응 혼합물을 20℃에서 밤새 교반하였다. 반응 혼합물을 농축시키고, HCl의 2 N 수용액에 붓고, EtOAc (3x)로 추출하였다. 합한 유기 층을 Na₂SO₄ 상에서 건조시키고, 여과하고, 농축시키고, 진공 하에 건조시켜 표제 화합물을 담갈색 고체 (126 mg, 82%)로서 수득하였다.

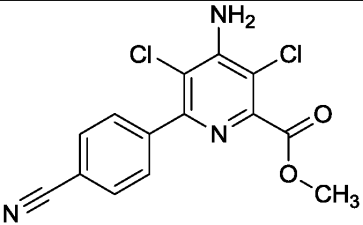
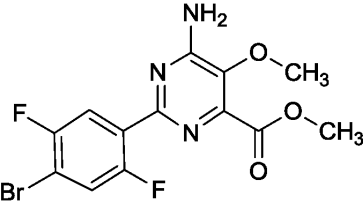
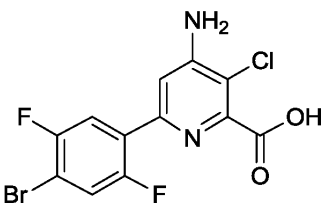
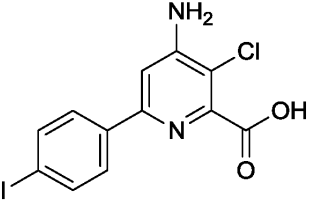
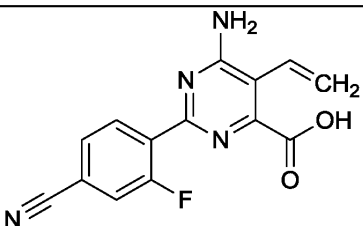
[0855] 실시예 101: 4-아미노-3-클로로-6-(4-(디플루오로메톡시)-3-플루오로페닐)-5-플루오로피콜린산의 제조 (화합물 92)



[0856]

[0857] MeOH (2 mL)가 채워진 플라스크에 메틸 4-아미노-3-클로로-6-(4-(디플루오로메톡시)-3-플루오로페닐)-5-플루오로피콜리네이트 (190 mg, 0.52 mmol) 및 2 M 수산화나트륨 용액 (1 mL, 1 mmol)을 첨가하였다. 12시간의 기계적 교반에 이어서, 반응 혼합물을 40℃ 수조 온도를 이용하여 회전 증발기를 사용하여 농축시켰다. 물을 생성된 오일에 첨가하고, 용액을 진한 HCl의 첨가에 의해 황갈색 침전물이 형성될 때까지 천천히 산성화하였다. 여과지 및 부흐너 깔때기를 사용하여 여과하여 표제 화합물을 황갈색 고체 (108 mg, 59%)로서 수득하였다.

[0858] 표 1. 화합물 번호, 구조, 제조 및 외관

화합물 번호	구조	외관	하기 실시예에서와 같이 제조함:
1		백색 고체	42
2		백색 고체	73
3		백색 고체	100
4		갈색 고체	97
5		오렌지색 고체	92

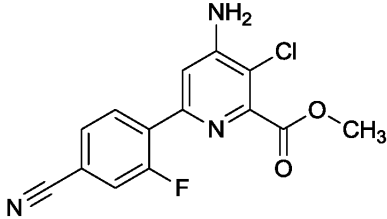
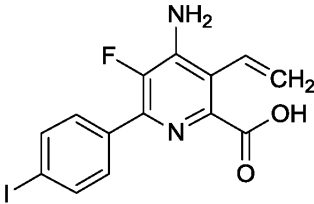
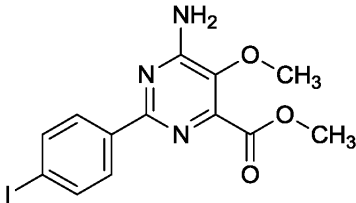
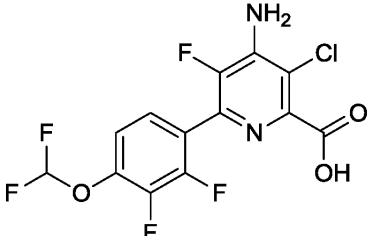
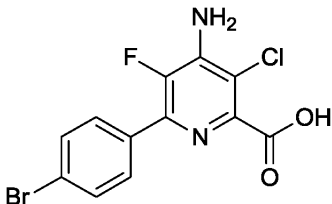
[0859]

화합물 번호	구조	외관	하기 실시예에서와 같이 제조합:
6		황색 분말	94
7		황갈색 분말	85
8		백색 고체	98
9		회백색 분말	66
10		백색 고체	98

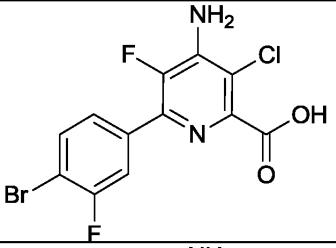
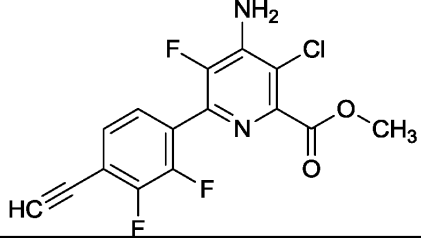
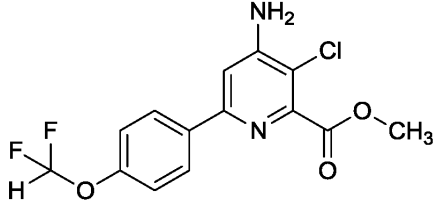
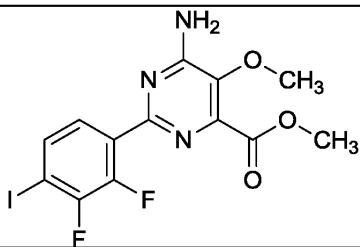
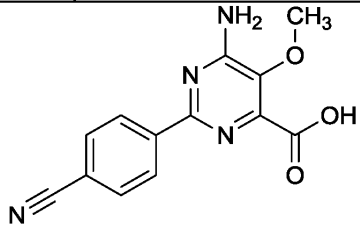
[0860]

화합물 번호	구조	외관	하기 실시예에서와 같이 제조함:
11		백색 고체	100
12		황갈색 고체	42
13		황색 고체	64
14		백색 고체	98
15		황색 고체	42

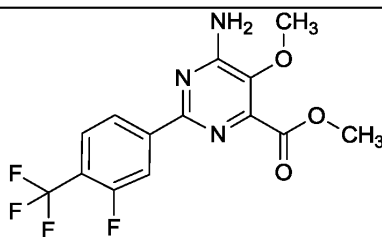
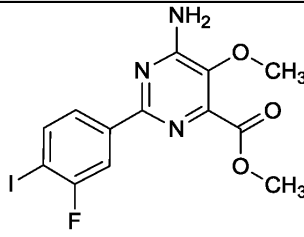
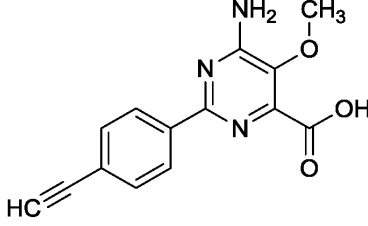
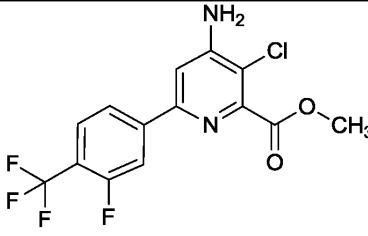
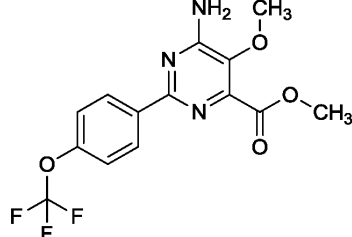
[0861]

화합물 번호	구조	외관	하기 실시예에서와 같이 제조함:
16		회백색 고체	42
17		황색 고체	100
18		담황색 오일	66
19		백색 고체	101
20		오렌지색- 빛깔의 백색 고체	97

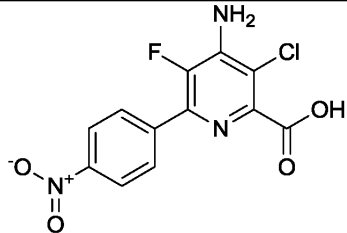
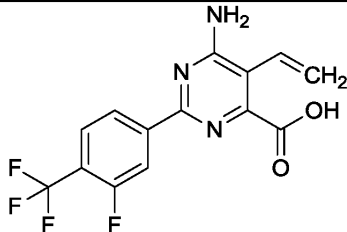
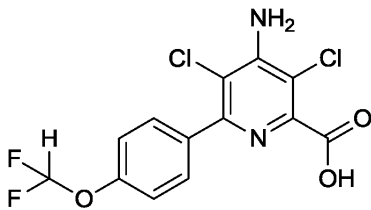
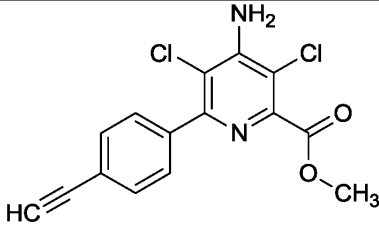
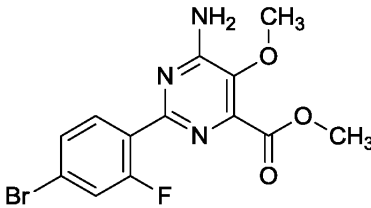
[0862]

화합물 번호	구조	외관	하기 실시예에서와 같이 제조함:
21		회백색 분말	97
22		백색 분말	86
23		황색 고체	42
24		백색 고체	68
25		황색 고체	98

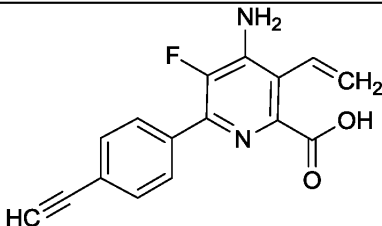
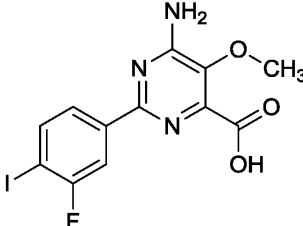
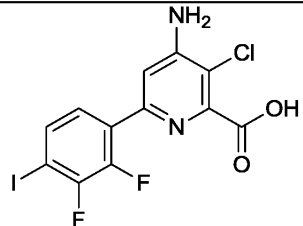
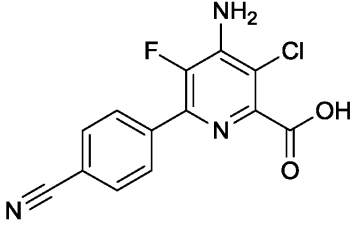
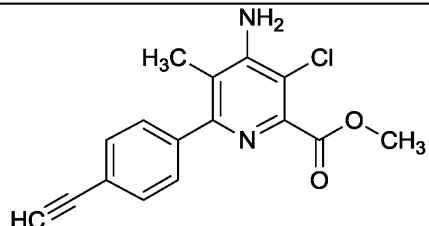
[0863]

화합물 번호	구조	외관	하기 실시예에서와 같이 제조함:
26		백색 고체	46
27		황색 고체	64
28		백색 고체	98
29		백색 고체	46
30		황색 고체	42

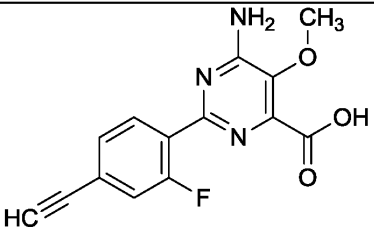
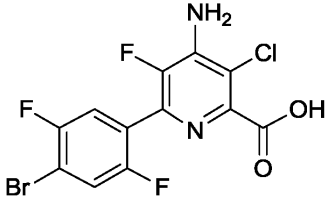
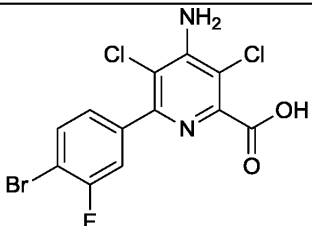
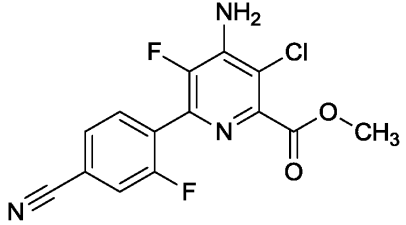
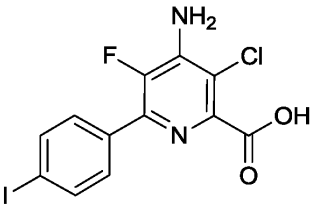
[0864]

화합물 번호	구조	외관	하기 실시예에서와 같이 제조함:
31		황갈색 고체	95
32		담황색 고체	92
33		백색 고체	98
34		황색 고체	86
35		회백색 분말	72

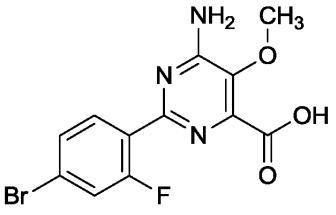
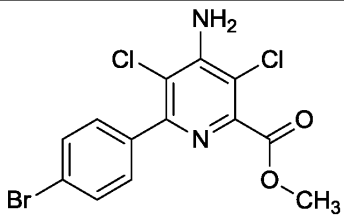
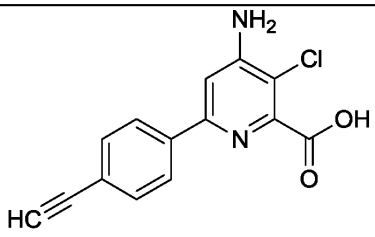
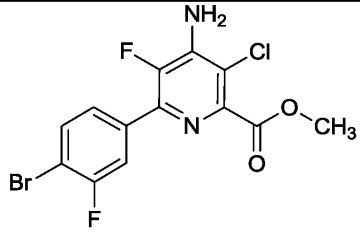
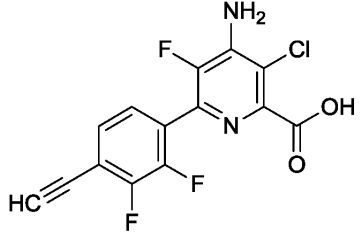
[0865]

화합물 번호	구조	외관	하기 실시예에서와 같이 제조함:
36		회백색 고체	101
37		백색 고체	92
38		백색 분말	97
39		백색 고체	98
40		갈색 오일	83

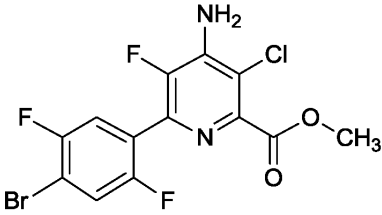
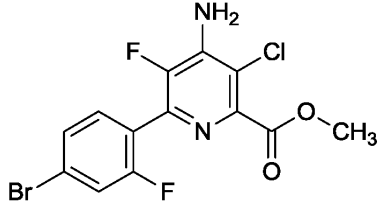
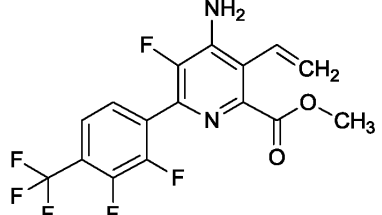
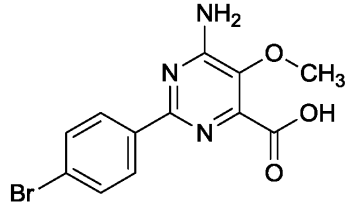
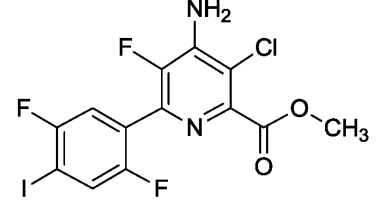
[0866]

화합물 번호	구조	외관	하기 실시예에서와 같이 제조합:
41		황갈색 분말	98
42		담갈색 고체	100
43		백색 고체	92
44		회백색 고체	39
45		연분홍색 분말	97

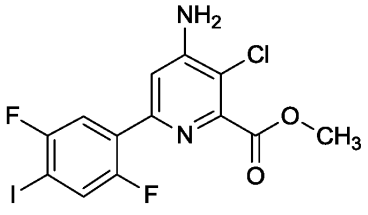
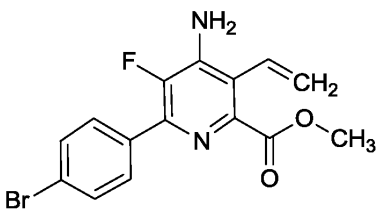
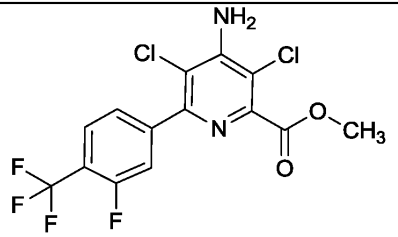
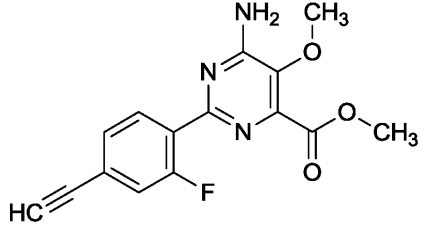
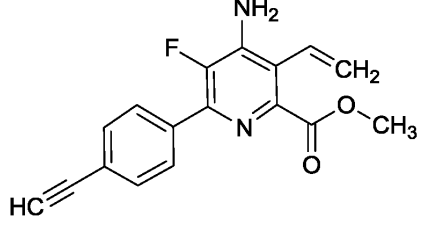
[0867]

화합물 번호	구조	외관	하기 실시예에서와 같이 제조함:
46		회백색 분말	98
47		백색 고체	74
48		백색 고체	98
49		회백색 분말	72
50		회백색 분말	98

[0868]

화합물 번호	구조	외관	하기 실시예에서와 같이 제조함:
51		백색 고체	73
52		백색 분말	72
53		갈색 고체	54
54		백색 고체	97
55		백색 고체	67

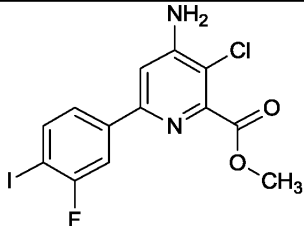
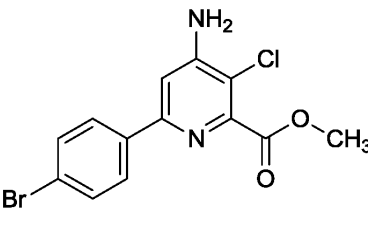
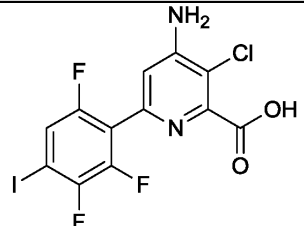
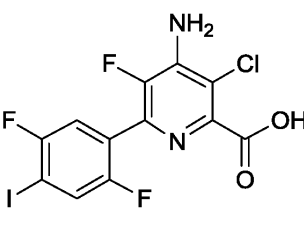
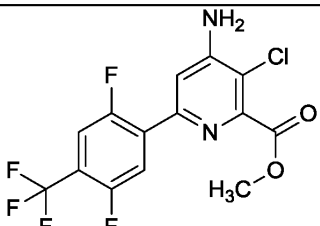
[0869]

화합물 번호	구조	외관	하기 실시예에서와 같이 제조함:
56		오렌지색 고체	77
57		담갈색 고체	79
58		회백색 고체	46
59		백색 분말	86
60		백색 고체	88

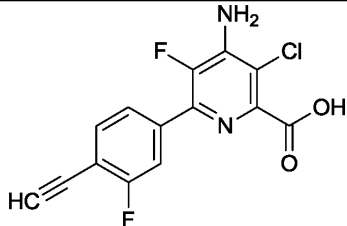
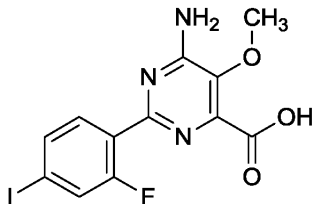
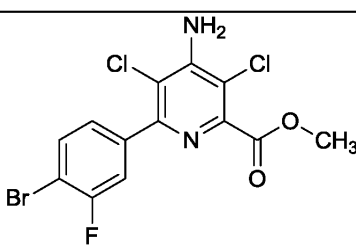
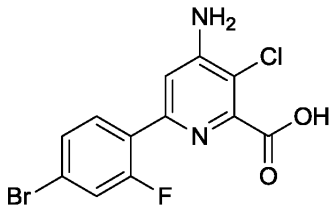
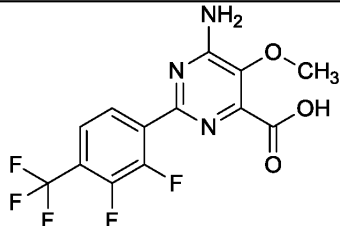
[0870]

화합물 번호	구조	외관	하기 실시예에서와 같이 제조합:
61		갈색 점착성 오일	100
62		황갈색 분말	97
63		백색 고체	96
64		백색 고체	41
65		갈색 고체	93

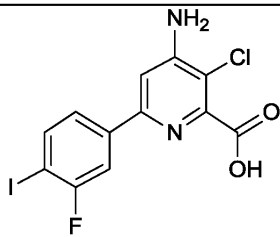
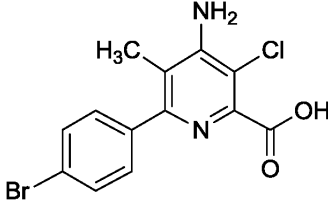
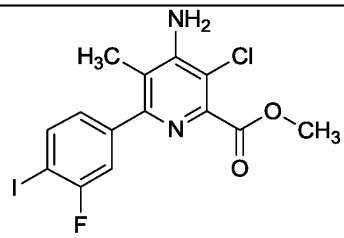
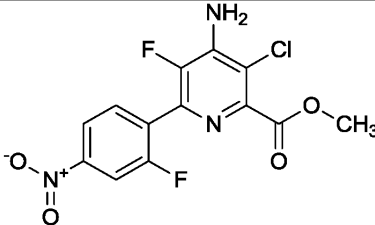
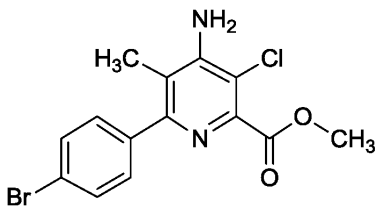
[0871]

화합물 번호	구조	외관	하기 실시예에서와 같이 제조함:
66		갈색 고체	64
67		암갈색 점성 오일	76
68		회백색 고체	100
69		백색 고체	100
70		백색 고체	59

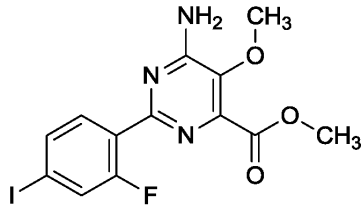
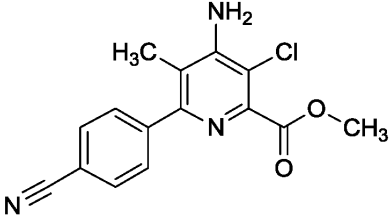
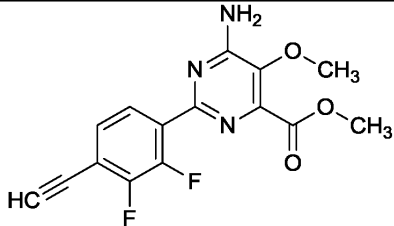
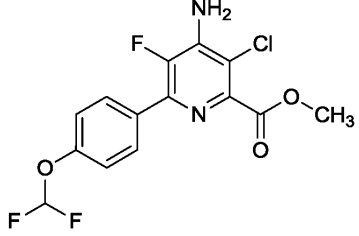
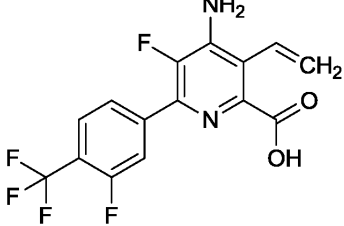
[0872]

화합물 번호	구조	외관	하기 실시예에서와 같이 제조함:
71		회백색 분말	98
72		황색 분말	98
73		백색 고체	69
74		백색 고체	98
76		백색 고체	95

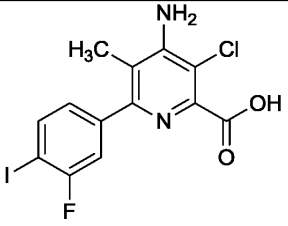
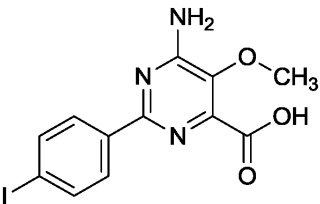
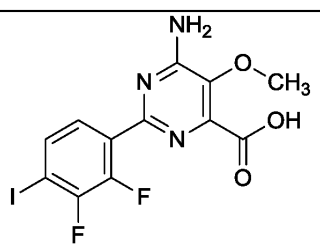
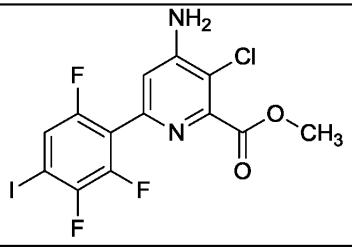
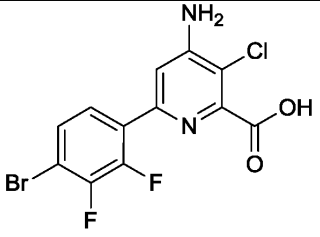
[0873]

화합물 번호	구조	외관	하기 실시예에서와 같이 제조함:
77		백색 고체	92
78		백색 고체	94
79		회백색 고체	65
80		황색 고체	41
81		연오렌지색 분말	70

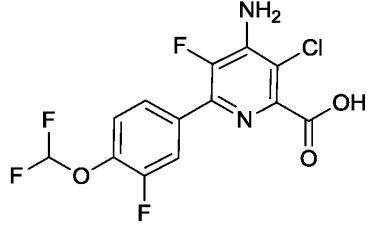
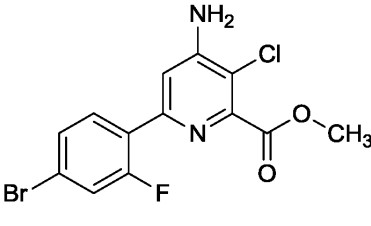
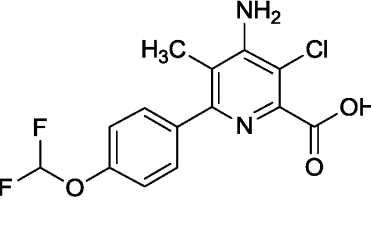
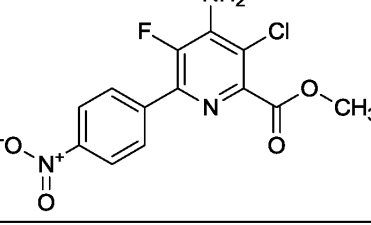
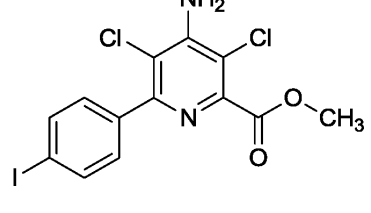
[0874]

화합물 번호	구조	외관	하기 실시예에서와 같이 제조함:
82		황색 분말	66
83		오렌지색 고체	40
84		백색 분말	86
85		백색 고체	42
86		백색 고체	98

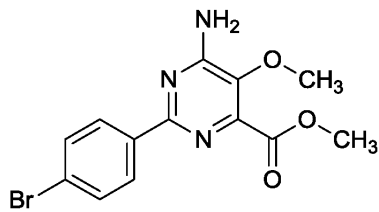
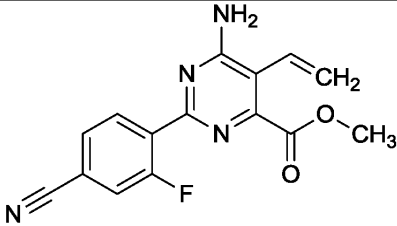
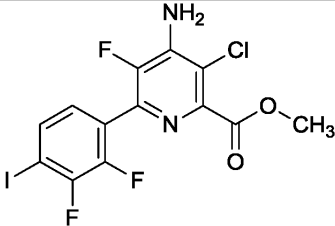
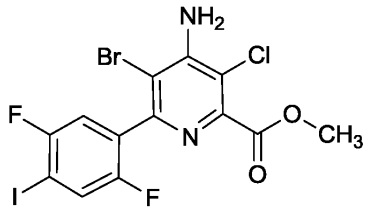
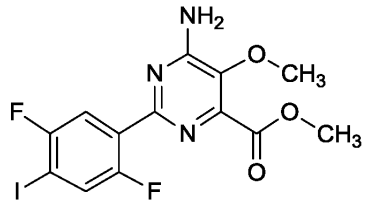
[0875]

화합물 번호	구조	외관	하기 실시예에서와 같이 제조함:
87		백색 분말	94
88		백색 고체	97
89		백색 고체	98
90		백색 고체	77
91		백색 고체	97

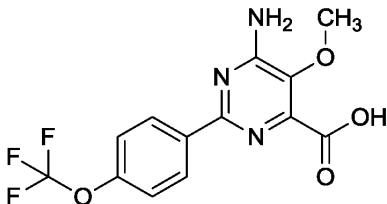
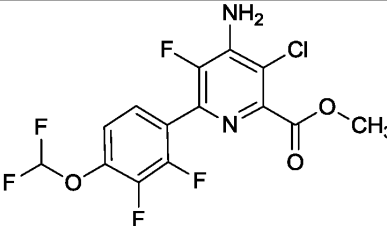
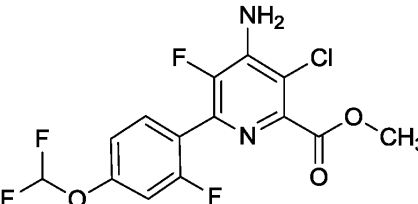
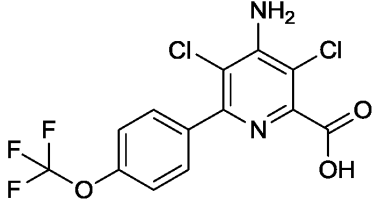
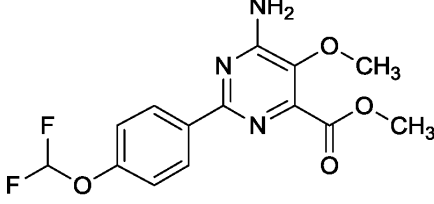
[0876]

화합물 번호	구조	외관	하기 실시예에서와 같이 제조함:
92		황갈색 고체	101
93		백색 고체	74
94		황색 고체	94
95		황색 고체	41
96		회색 고체	68

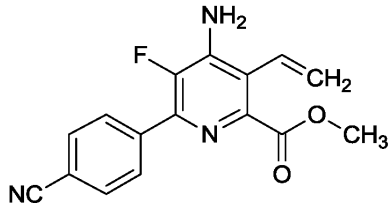
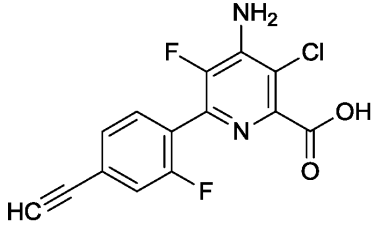
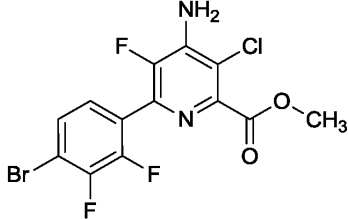
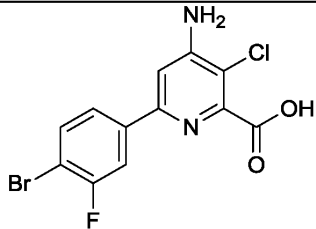
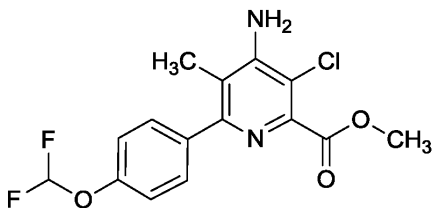
[0877]

화합물 번호	구조	외관	하기 실시예에서와 같이 제조함:
97		회백색 고체	72
98		황색 고체	39
99		백색 분말	66
100		담갈색 고체	67
101		백색 고체	67

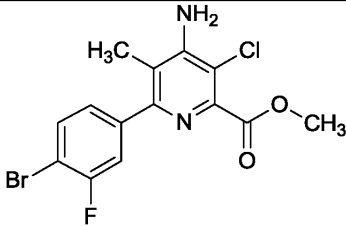
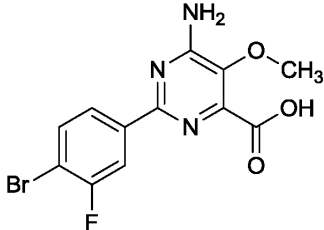
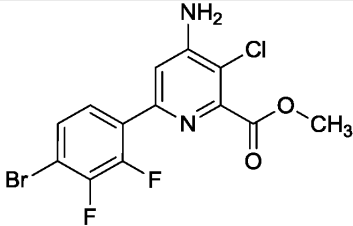
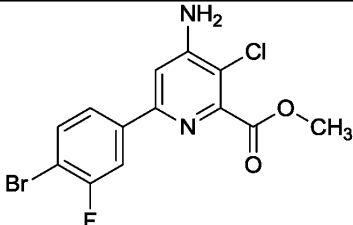
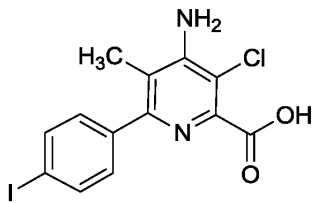
[0878]

화합물 번호	구조	외관	하기 실시예에서와 같이 제조함:
102		황색 고체	98
103		황갈색 고체	56
104		황색 고체	56
105		백색 고체	98
106		백색 고체	56

[0879]

화합물 번호	구조	외관	하기 실시예에서와 같이 제조함:
107		황갈색 고체	57
108		연오렌지색 분말	98
109		담황색 고체	71
110		회백색 고체	92
111		왁스상 황색 고체	40

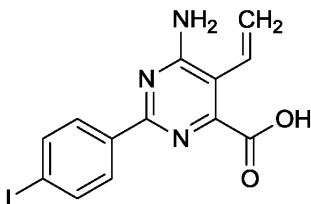
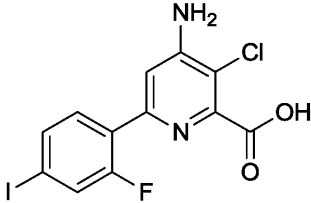
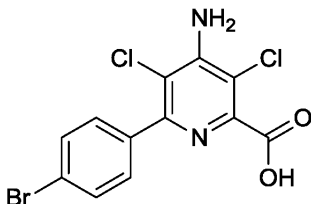
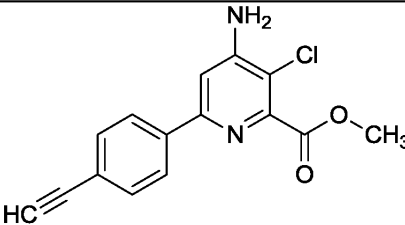
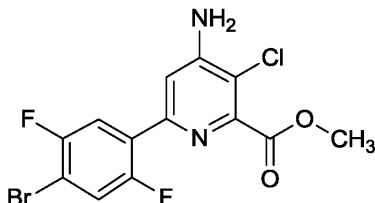
[0880]

화합물 번호	구조	외관	하기 실시예에서와 같이 제조함:
112		회백색 고체	70
113		백색 고체	92
114		백색 고체	44
115		백색 고체	75
116		오렌지색 분말	94

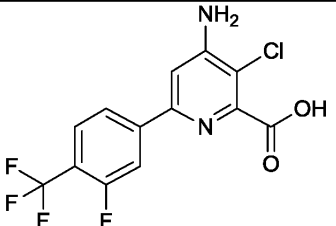
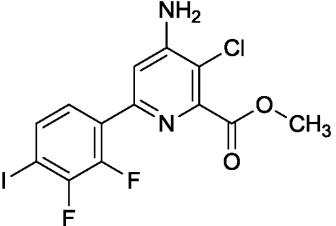
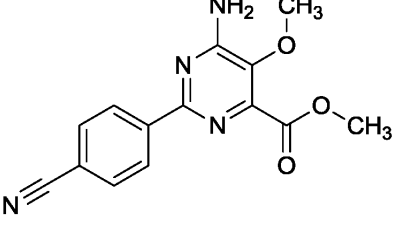
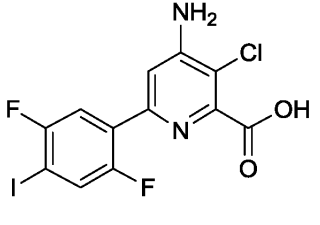
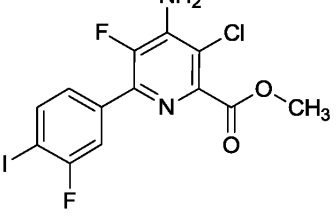
[0881]

화합물 번호	구조	외관	하기 실시예에서와 같이 제조함:
117		담갈색 고체	100
118		자주색 분말	66
119		황색 고체	100
121		백색 분말	86
122		백색 고체	74

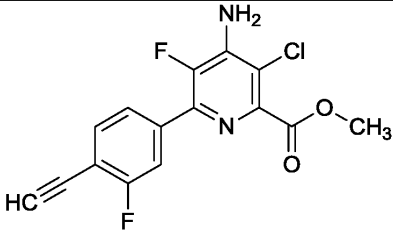
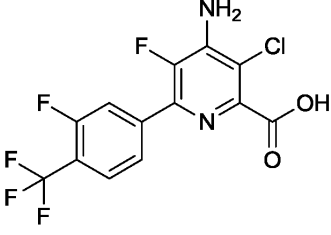
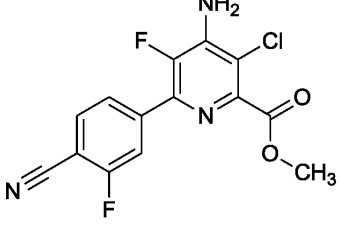
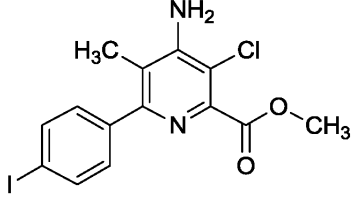
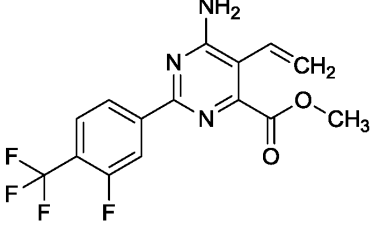
[0882]

화합물 번호	구조	외관	하기 실시예에서와 같이 제조함:
123		회백색 고체	93
124		황색 고체	98
125		백색 고체	98
126		황색 고체	86
127		백색 고체	77

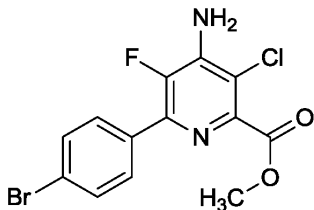
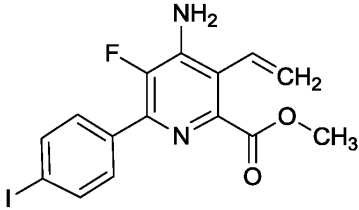
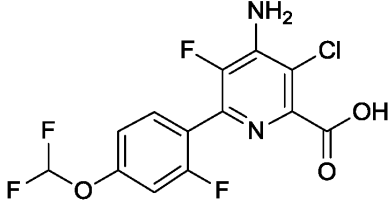
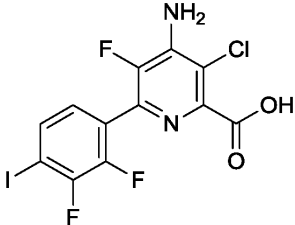
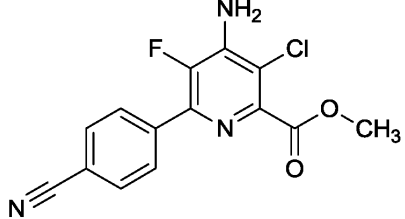
[0883]

화합물 번호	구조	외관	하기 실시예에서와 같이 제조함:
128		백색 고체	96
129		백색 분말	76
130		백색 고체	42
131		담갈색 고체	100
132		황갈색 분말	66

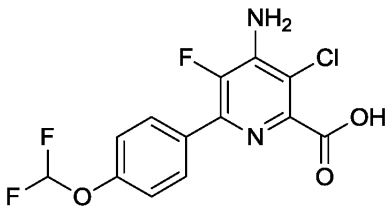
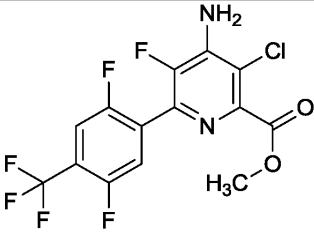
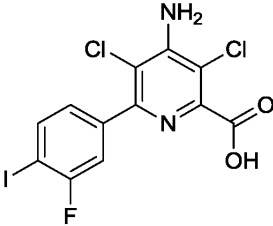
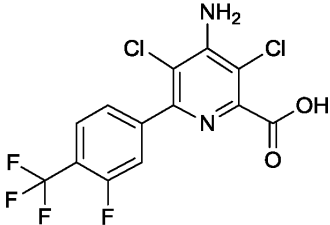
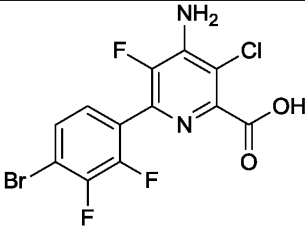
[0884]

화합물 번호	구조	외관	하기 실시예에서와 같이 제조함:
133		백색 분말	86
134		백색 고체	95
135		백색 고체	42
136		적색- 오렌지색 고체	65
137		담갈색 고체	39

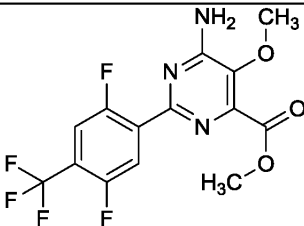
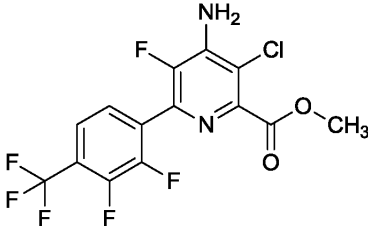
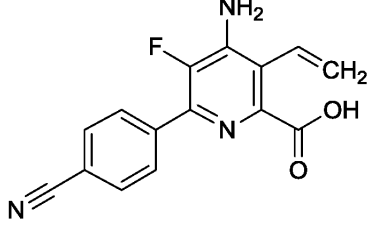
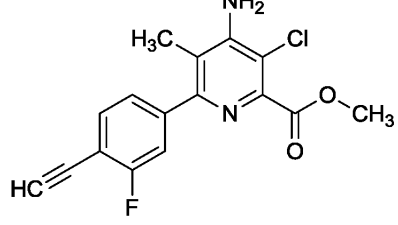
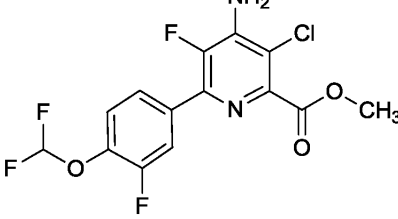
[0885]

화합물 번호	구조	외관	하기 실시예에서와 같이 제조함:
138		황갈색 분말	72
139		백색 고체	81
140		회백색 고체	101
141		백색 분말	98
142		고체	42

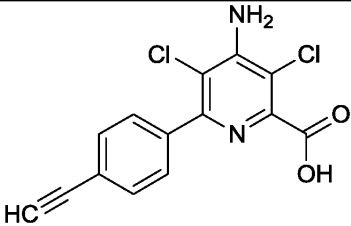
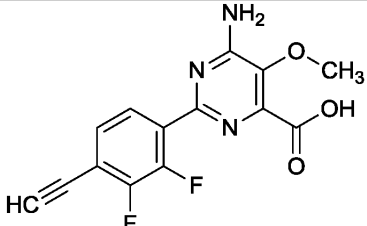
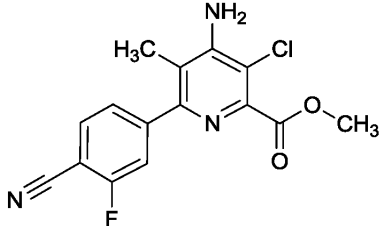
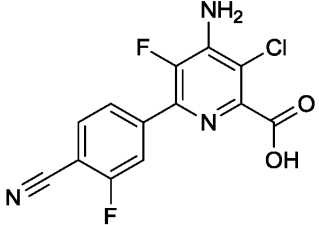
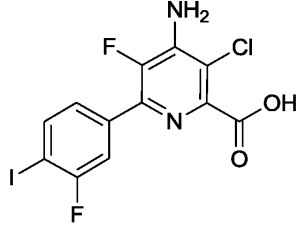
[0886]

화합물 번호	구조	외관	하기 실시예에서와 같이 제조함:
143		백색 고체	98
144		백색 고체	60
145		백색 고체	92
146		백색 고체	96
147		황갈색 고체	98

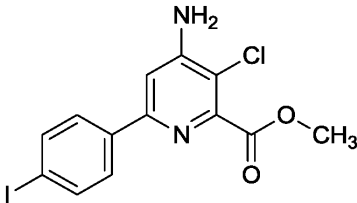
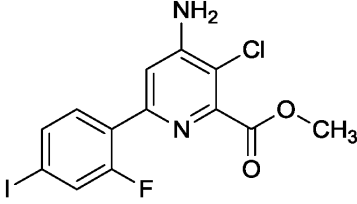
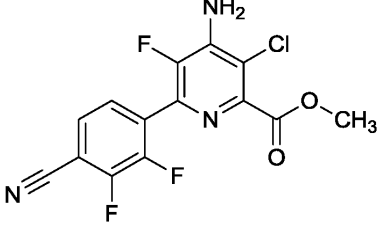
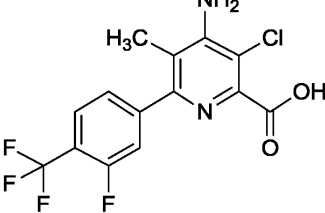
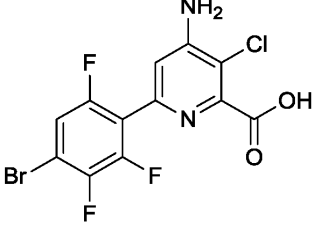
[0887]

화합물 번호	구조	외관	하기 실시예에서와 같이 제조함:
148		백색 고체	60
149		백색 고체	41
150		황갈색 고체	101
151		황색 고체	87
152		백색 고체	56

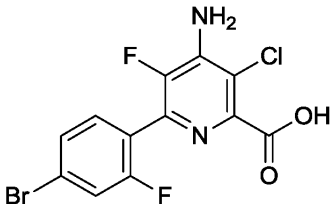
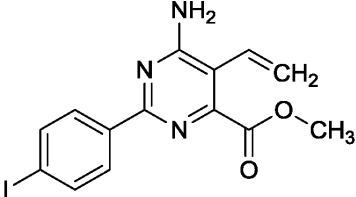
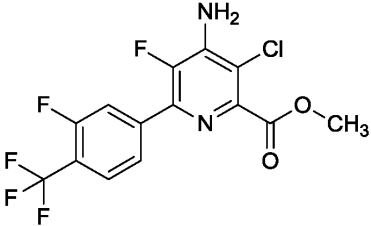
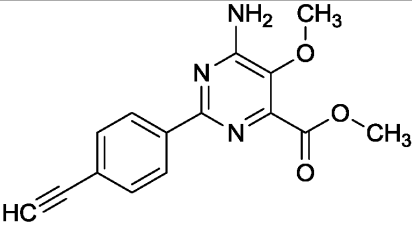
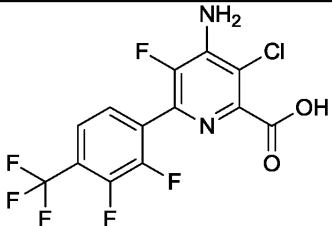
[0888]

화합물 번호	구조	외관	하기 실시예에서와 같이 제조함:
153		황색 고체	98
154		황갈색 분말	98
155		백색 박편상 고체	40
156		백색 고체	98
157		황갈색 분말	97

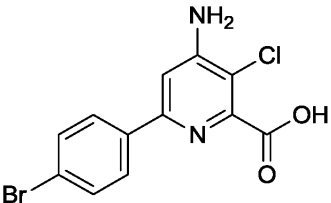
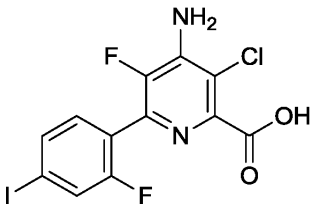
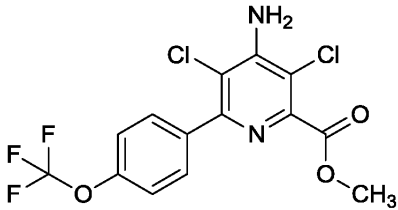
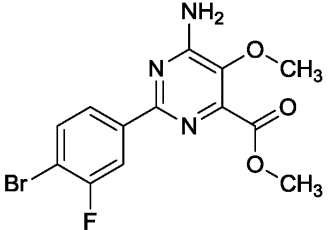
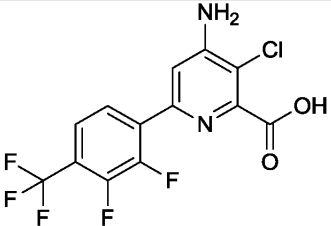
[0889]

화합물 번호	구조	외관	하기 실시예에서와 같이 제조함:
158		암갈색 반고체	76
159		백색 고체	68
160		백색 고체	41
161		백색 분말	94
162		갈색 고체	99

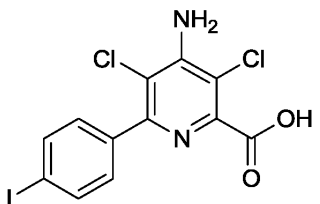
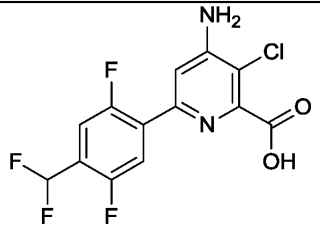
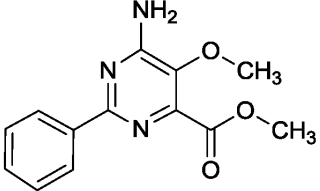
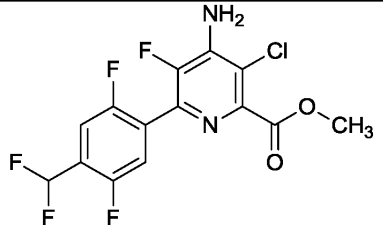
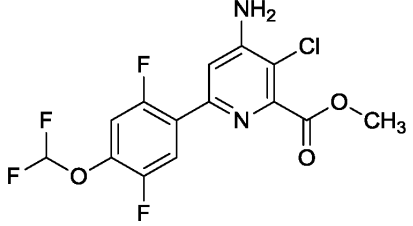
[0890]

화합물 번호	구조	외관	하기 실시예에서와 같이 제조함:
163		회백색 분말	98
164		담황색 고체	80
165		백색 고체	41
166		황색 고체	86
167		백색 고체	95

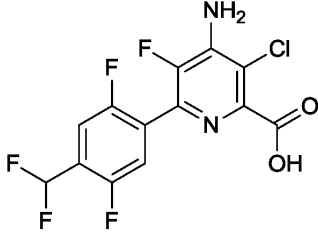
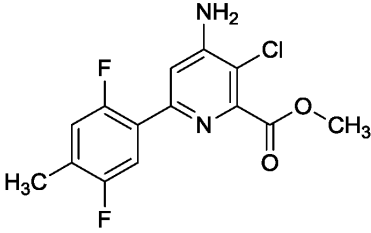
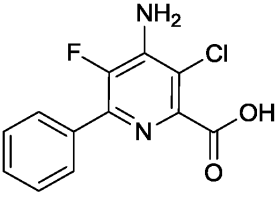
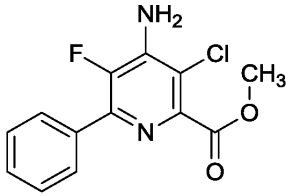
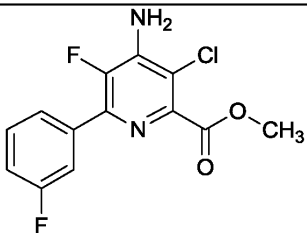
[0891]

화합물 번호	구조	외관	하기 실시예에서와 같이 제조함:
168		갈색 고체	97
169		회백색 분말	98
170		백색 고체	42
171		백색 고체	69
172		백색 고체	96

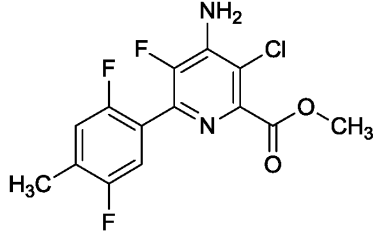
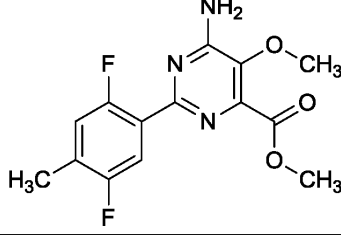
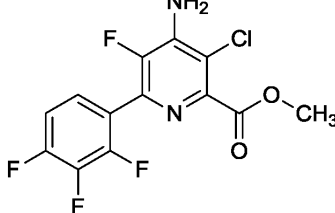
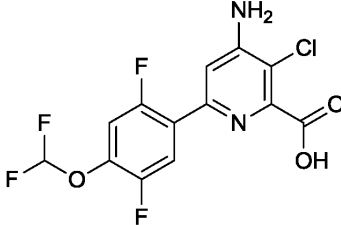
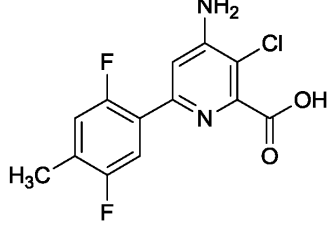
[0892]

화합물 번호	구조	외관	하기 실시예에서와 같이 제조함:
173		황색 고체	98
174		회백색 고체	62
175		황갈색 고체	57
176		백색 고체	63
177		백색 고체	63

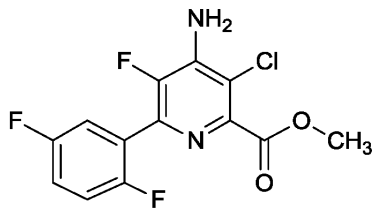
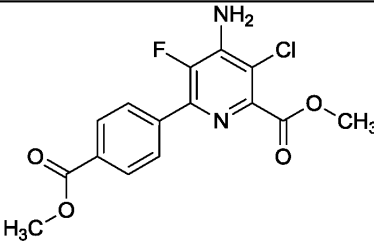
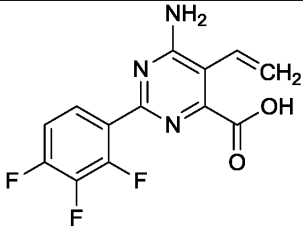
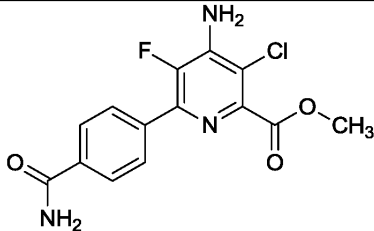
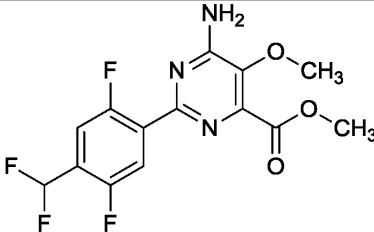
[0893]

화합물 번호	구조	외관	하기 실시예에서와 같이 제조함:
178		회백색 고체	62
179		백색 고체	63
180		백색 고체	101
181		회백색 고체	57
183		연황색 오일	46

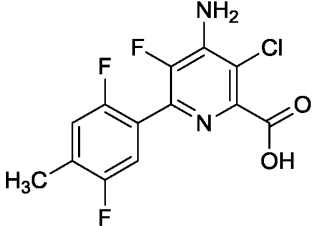
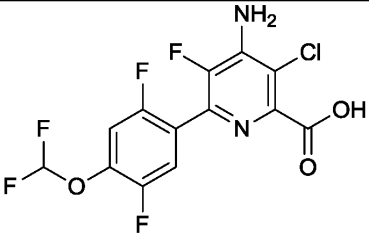
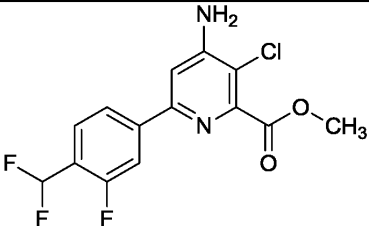
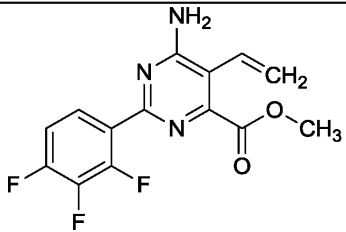
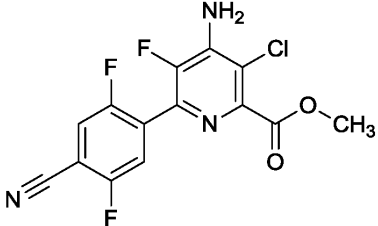
[0894]

화합물 번호	구조	외관	하기 실시예에서와 같이 제조함:
184		백색 고체	63
185		백색 고체	63
186		백색 고체	41
187		백색 고체	98
188		백색 고체	62

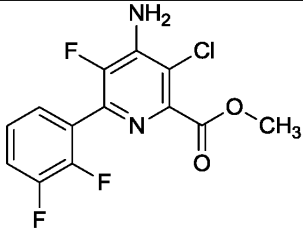
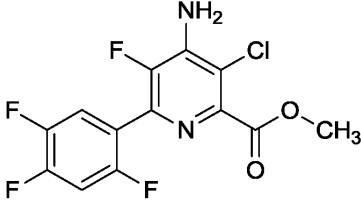
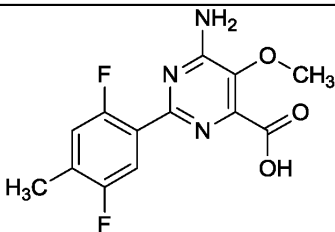
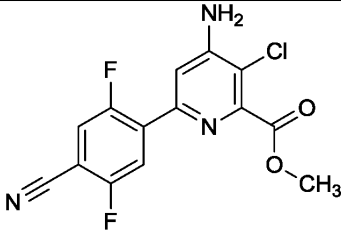
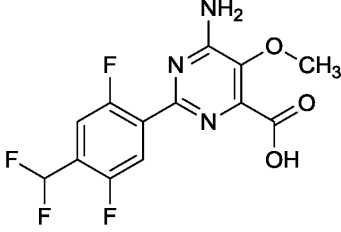
[0895]

화합물 번호	구조	외관	하기 실시예에서와 같이 제조함:
189		백색 고체	46
190		백색 고체	43
191		황색 고체	92
192		백색 고체	43
193		백색 고체	63

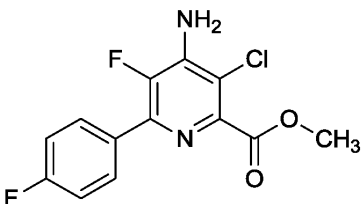
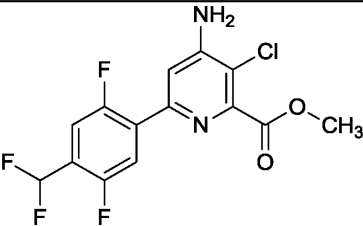
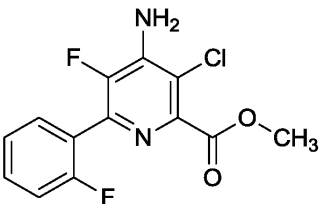
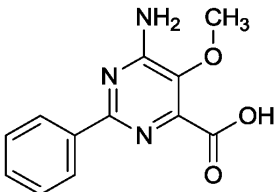
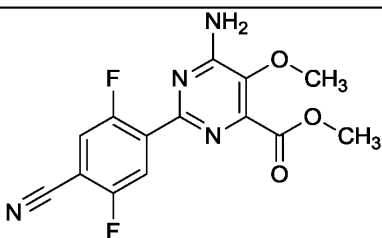
[0896]

화합물 번호	구조	외관	하기 실시예에서와 같이 제조함:
194		백색 고체	62
195		백색 고체	98
196		백색 분말	47
197		황색 고체	39
198		백색 고체	63

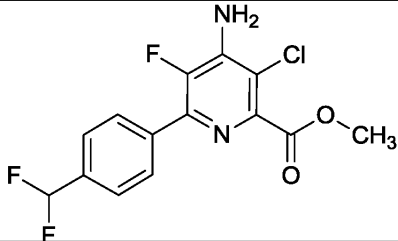
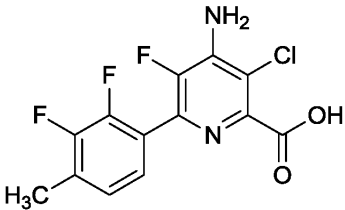
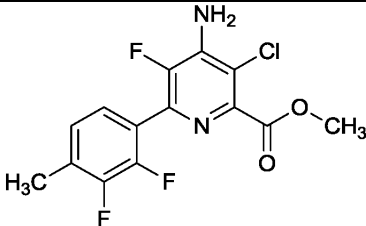
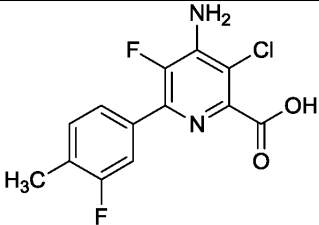
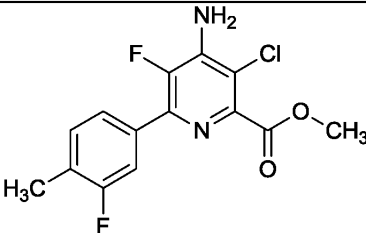
[0897]

화합물 번호	구조	외관	하기 실시예에서와 같이 제조함:
199		황갈색 고체	57
200		백색 분말	40
201		백색 고체	62
202		백색 고체	63
203		백색 고체	62

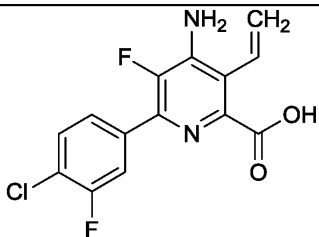
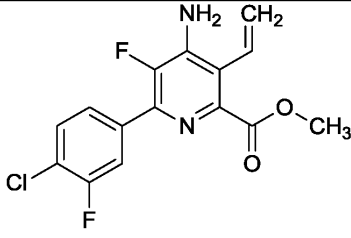
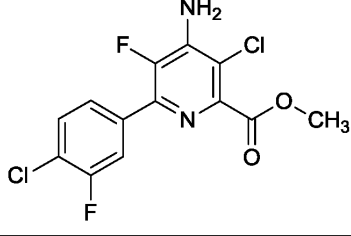
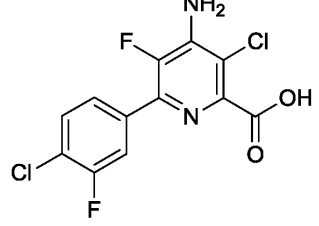
[0898]

화합물 번호	구조	외관	하기 실시예에서와 같이 제조함:
204		백색 고체	41
205		백색 고체	62
206		황갈색 고체	57
207		황갈색 고체	101
208		백색 고체	63

[0899]

화합물 번호	구조	외관	하기 실시예에서와 같이 제조함:
209		백색 분말	47
210			95
211		백색 고체	41
212			95
213		백색 고체	41

[0900]

화합물 번호	구조	외관	하기 실시예에서와 같이 제조합:
214		백색 고체	98
215		백색 고체	90
216		백색 고체	42
217		회백색 고체	97

[0901]

[0902]

표 2. 표 1에서의 화합물에 대한 분석 데이터

화합물 번호	mp (°C)	IR (cm ⁻¹)	질량 ^a	¹ H NMR ^b	¹³ C 또는 ¹⁹ F NMR
1	133.4- 134.8		ESIMS <i>m/z</i> 322 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.81 (m, 4H), 5.42 (s, 2H), 4.02 (s, 3H)	
2	186- 187		ESIMS <i>m/z</i> 373 ([M-H] ⁻)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.78 (dd, <i>J</i> = 9.0, 6.5 Hz, 1H), 7.37 (dd, <i>J</i> = 9.6, 5.6 Hz, 1H), 5.43 (s, 2H), 4.01 (s, 3H), 3.95 (s, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -113.66, - 113.70, -117.53, -117.58
3	172- 174		ESIMS <i>m/z</i> 364 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 7.89- 7.84 (m, 2H), 7.26 (d, <i>J</i> = 1.2 Hz, 1H), 6.85 (s, 2H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -108.94, -108.99, -114.18, -114.22
4			ESIMS <i>m/z</i> 375 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 7.85 (m, 2H), 7.69 (m, 2H), 7.24 (s, 1H), 6.73 (br s, 2H)	
5	164- 168			¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 13.65 (s, 1H), 8.12 - 7.89 (m, 2H), 7.80 (dd, <i>J</i> = 8.0, 1.6 Hz, 1H), 7.32 (d, <i>J</i> = 4.8 Hz, 2H), 6.66 (dd, <i>J</i> = 17.7, 11.4 Hz, 1H), 5.75 - 5.41 (m, 2H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -111.46
6	175.0- 176.5		ESIMS <i>m/z</i> 303 ([M-H] ⁻)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 13.38 (s, 1H), 7.62 (t, <i>J</i> = 7.7 Hz, 1H), 7.40 (dd, <i>J</i> = 10.4, 1.5 Hz, 1H), 7.31 (dd, <i>J</i> = 7.9, 1.6 Hz, 1H), 6.51 (s, 2H), 4.59 (s, 1H), 2.09 (s, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -111.32
7	127- 130	IR (박막) 3478 (s), 3374 (s), 3239 (s), 2955 (w), 1731 (m), 1624 (m) cm ⁻¹	ESIMS <i>m/z</i> 305 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃) δ 7.91 (m, 2H), 7.58 (m, 2H), 4.90 (br s, 2H), 3.99 (s, 3H), 3.16 (s, 1H)	
8	126- 128 (dec)		ESIMS <i>m/z</i> 360 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 13.64 (s, 1H), 7.74 - 7.56 (m, 2H), 7.45 (s, 2H), 3.76 (s, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -131.53, -131.58, -136.08, -136.14

[0903]

화합물 번호	mp (°C)	IR (cm ⁻¹)	질량 ^a	¹ H NMR ^b	¹³ C 또는 ¹⁹ F NMR
9	136-138	IR (박막) 3489 (s), 3381 (s), 3233 (m), 3199 (m), 3083 (w), 3000 (w), 2954 (m), 2853 (w), 1737 (s), 1622 (s) cm ⁻¹	ESIMS <i>m/z</i> 425 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.88 (dd, <i>J</i> = 8, 1.5 Hz, 1H), 7.55 (dd, <i>J</i> = 10, 1.5 Hz, 1H), 7.33 (dd, <i>J</i> = 8.5, 8 Hz, 1H), 4.94 (br s, 2H), 3.96 (s, 3H)	
10	170.4-172.1		ESIMS <i>m/z</i> 315 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 7.97(d, 2H), 7.30(m, 5H), 6.72(s, 2H)	
11	132-133		ESIMS <i>m/z</i> 359 ([M-H] ⁻)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 7.86 - 7.73 (m, 2H), 7.43 (s, 2H), 3.75 (s, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -114.36, -114.40, -116.52, -116.57
12	77-78		ESIMS <i>m/z</i> 359 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.86 (dd, <i>J</i> = 9.0, 6.9 Hz, 2H), 7.69 (t, <i>J</i> = 7.8 Hz, 1H), 6.90 (dd, <i>J</i> = 18.1, 11.6 Hz, 1H), 5.74 (dd, <i>J</i> = 11.6, 1.3 Hz, 1H), 5.60 (dd, <i>J</i> = 18.1, 1.3 Hz, 1H), 4.78 (s, 2H), 3.94 (s, 3H)	
13			ESIMS <i>m/z</i> 442 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 7.95 (dd, <i>J</i> = 8.1, 6.7 Hz, 1H), 7.47 (dd, <i>J</i> = 9.1, 1.9 Hz, 1H), 7.22 (dd, <i>J</i> = 8.1, 1.9 Hz, 1H), 7.14 (s, 2H), 3.87 (s, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -95.18
14	178.0-179.7		ESIMS <i>m/z</i> 308 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 7.95 (d, 2H), 7.80 (d, 2H), 7.09 (s, 2H)	
15	102.4-103.6		ESIMS <i>m/z</i> 363 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.72 (d, 2H), 7.24 (d, 2H), 5.42 (s, 2H), 4.02 (s, 3H)	
16			ESIMS <i>m/z</i> 306 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.01 (m, 2H), 7.79 (dd, <i>J</i> = 8.1, 1.5 Hz, 1H), 7.30 (d, <i>J</i> = 1.5 Hz, 1H), 6.96 (s, 2H), 3.89 (s, 3H)	

[0904]

화합물 번호	mp (°C)	IR (cm ⁻¹)	질량 ^a	¹ H NMR ^b	¹³ C 또는 ¹⁹ F NMR
17			ESIMS <i>m/z</i> 385 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 13.12 (s, 1H), 7.87 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 2H), 7.66 (d, <i>J</i> = 7.6 Hz, 2H), 6.75 (dd, <i>J</i> = 17.8, 11.5 Hz, 1H), 6.41 (s, 2H), 5.55 (dd, <i>J</i> = 14.2, 1.1 Hz, 1H), 5.52 (dd, <i>J</i> = 7.8, 1.1 Hz, 1H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -145.75
18			ESIMS <i>m/z</i> 387 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.04 (m, 2H), 7.77 (m, 2H), 5.36 (br s, 2H), 4.01 (s, 3H), 3.91 (s, 3H)	
19	113- 115	IR (박막) 1025.80, 1047.25, 1126.02, 1225.15, 1266.03, 1299.98, 1386.12, 1481.90, 1515.13, 1585.75, 1633.93, 1721.56, 2536.01, 3199.39, 3331.39, 3471.03 cm ⁻¹	ESIMS <i>m/z</i> 369 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 13.70 (s, 1H), 7.47 (ddd, <i>J</i> = 9.2, 7.2, 2.0 Hz, 1H), 7.40 (d, <i>J</i> = 3.0 Hz, 1H), 7.37 (t, <i>J</i> = 72.3 Hz, 1H), 7.07 (s, 2H)	
20	149- 152		ESIMS <i>m/z</i> 347 ([M+H] ⁺)	NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 7.85 - 7.77 (m, 2H), 7.75 - 7.68 (m, 2H), 6.94 (s, 2H)	
21	117- 120	IR (박막) 3468 (s), 3334 (s), 3198 (s), 1717 (w), 1629 (m), 1573 (w) cm ⁻¹	ESIMS <i>m/z</i> 365 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 7.88 (dd, <i>J</i> = 9, 8 Hz, 1H), 7.82 (dd, <i>J</i> = 9, 1.5 Hz, 1H), 7.70 (d, <i>J</i> = 9 Hz, 1H), 6.73 (br s, 2H)	
22	190- 192	IR (박막) 3512 (m), 3411 (s), 3248 (s), 2954 (w), 1730 (m), 1616 (m) cm ⁻¹	ESIMS <i>m/z</i> 341 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.33 - 7.35 (m, 2H), 4.98 (br s, 2H), 3.98 (s, 3H), 3.43 (s, 1H)	
23	166.4- 169.0		ESIMS <i>m/z</i> 329 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.95 (d, 2H), 7.31 (m, 3H), 6.85 (s, 2H), 3.92 (s, 3H)	
24	169- 170		ESIMS <i>m/z</i> 422 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.58 - 7.43 (m, 2H), 5.53 (s, 2H), 4.00 (s, 3H), 3.95 (s, 3H)	

[0905]

화합물 번호	mp (°C)	IR (cm ⁻¹)	질량 ^a	¹ H NMR ^b	¹³ C 또는 ¹⁹ F NMR
25	185.2- 186.1		ESIMS <i>m/z</i> 271 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 13.6 (s, 1H), 8.40 (d, 2H), 7.96 (d, 2H), 7.46 (s, 2H), 3.79 (s, 3H)	
26		IR (박막) 3401, 1739, 1638 cm ⁻¹	ESIMS <i>m/z</i> 346 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.19 (t, <i>J</i> = 16.1 Hz, 1H), 8.11 (d, <i>J</i> = 12.3 Hz, 1H), 7.92 (t, <i>J</i> = 7.9 Hz, 1H), 7.74 - 7.46 (m, 2H), 3.92 (s, 3H), 3.76 (s, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -59.9, -115.7, -116.0
27			ESIMS <i>m/z</i> 403 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.00 - 7.87 (m, 2H), 7.82 (dd, <i>J</i> = 8.3, 1.8 Hz, 1H), 7.49 (s, 2H), 3.90 (s, 3H), 3.74 (s, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -95.51
28	170.7- 171.3		ESIMS <i>m/z</i> 270 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 13.6 (s, 1H), 8.25 (d, 2H), 7.59 (d, 2H), 7.36 (s, 2H), 4.35 (s, 1H), 3.77 (s, 3H)	
29	145- 146		ESIMS <i>m/z</i> 349 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.79 (dd, <i>J</i> = 15.8, 9.9 Hz, 2H), 7.66 (t, <i>J</i> = 7.7 Hz, 1H), 7.12 (s, 1H), 4.90 (s, 2H), 4.02 (s, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -61.3, -113.9
30	122.0- 123.6		ESIMS <i>m/z</i> 343 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.33 (d, 2H), 7.27 (d, 2H), 5.84 (s, 2H), 4.03 (s, 3H), 3.95 (s, 3H)	
31	180- 181			¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 13.71 (s, 1H), 8.40 - 8.33 (m, 2H), 8.13 (d, <i>J</i> = 8.3, 2H), 7.07 (s, 2H)	
32	168- 171		ESIMS <i>m/z</i> 328 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 13.68 (s, 1H), 8.28 (d, <i>J</i> = 8.2 Hz, 1H), 8.20 (d, <i>J</i> = 12.2 Hz, 1H), 7.94 (t, <i>J</i> = 7.9 Hz, 1H), 7.35 (d, <i>J</i> = 27.9 Hz, 2H), 6.68 (dd, <i>J</i> = 17.7, 11.5 Hz, 1H), 5.75 - 5.46 (m, 2H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -59.97 (d, <i>J</i> = 12.2 Hz), - 115.77 (q, <i>J</i> = 12.2 Hz)

[0906]

화합물 번호	mp (°C)	IR (cm ⁻¹)	질량 ^a	¹ H NMR ^b	¹³ C 또는 ¹⁹ F NMR
33	146.3- 147.6		ESIMS <i>m/z</i> 349 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 13.7 (s, 1H), 7.68 (d, 2H), 7.32 (d, 2H), 6.96 (s, 2H)	
34	164.2- 166.8		ESIMS <i>m/z</i> 321 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃) δ 6.30 (m, 5H), 5.35 (s, 2H), 3.98 (s, 3H)	
35	163- 165	IR (박막) 3416 (s), 3355 (w), 3300 (m), 3162(s), 2957 (w), 1730 (s), 1637 (s) cm ⁻¹	ESIMS <i>m/z</i> 358 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.84 (t, <i>J</i> = 9 Hz, 1H), 7.31 - 7.37 (m, 2H), 5.41 (br s, 2H), 3.99 (s, 3H), 3.93 (s, 3H)	
36			ESIMS <i>m/z</i> 282 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.93 - 7.84 (m, 2H), 7.64 - 7.54 (m, 2H), 6.75 (dd, <i>J</i> = 17.8, 11.5 Hz, 1H), 6.36 (s, 2H), 5.57 (dd, <i>J</i> = 17.8, 1.4 Hz, 1H), 5.50 (dd, <i>J</i> = 11.5, 1.4 Hz, 1H), 4.31 (s, 1H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -141.43
37			ESIMS <i>m/z</i> 390 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 13.57 (s, 1H), 8.02 - 7.92 (m, 2H), 7.85 (dd, <i>J</i> = 8.2, 1.8 Hz, 1H), 7.41 (s, 2H), 3.75 (s, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -95.59.
38	288- 293 (dec)	IR (박막) 3473 (s), 1588 (m) cm ⁻¹	ESIMS <i>m/z</i> 411 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 7.74 (m, 1H), 7.55 (m, 1H), 7.02 (d, <i>J</i> = 1.5 Hz, 1H), 6.30 (br s, 2H)	
39			ESIMS <i>m/z</i> 292 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.08 - 7.92 (m, 4H), 7.03 (s, 2H)	
40			ESIMS <i>m/z</i> 301 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.55 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 2H), 7.42 (d, <i>J</i> = 8.5 Hz, 2H), 4.83 (s, 2H), 3.96 (s, 3H), 3.12 (s, 1H), 2.16 (s, 3H)	¹³ C NMR (101 MHz, CDCl ₃) δ 165.71, 155.51, 149.15, 145.10, 140.11, 132.02, 129.34, 122.02, 116.77, 113.59, 83.42, 77.90, 52.87, 14.65

[0907]

화합물 번호	mp (°C)	IR (cm ⁻¹)	질량 ^a	¹ H NMR ^b	¹³ C 또는 ¹⁹ F NMR
41	155- 165 (dec)	IR (박막) 3297 (s), 3218 (s), 2938 (w), 1618 (s), 1576 (m) cm ⁻¹	ESIMS <i>m/z</i> 288 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 7.80 (t, <i>J</i> = 8 Hz, 1H), 7.35 - 7.40 (m, 2H), 6.66 (br s, 2H), 4.41 (s, 1H), 3.76 (s, 3H)	
42	156- 157		ESIMS <i>m/z</i> 382 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 13.63 (s, 1H), 7.92 (dd, <i>J</i> = 9.0, 5.7 Hz, 1H), 7.61 (dd, <i>J</i> = 8.4, 6.3 Hz, 1H), 7.06 (s, 2H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -113.46, -113.50, -117.37, -117.41, -117.45, -117.49, -138.28, -138.36
43			ESIMS <i>m/z</i> 381 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 13.72 (s, 1H), 7.82 (dd, <i>J</i> = 8.3, 7.3 Hz, 1H), 7.60 (dd, <i>J</i> = 9.8, 2.0 Hz, 1H), 7.40 (dd, <i>J</i> = 8.3, 2.0 Hz, 1H), 7.06 (s, 2H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -108.25
44			ESIMS <i>m/z</i> 324 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.05 (dd, <i>J</i> = 10.0, 1.5 Hz, 1H), 7.85 (dd, <i>J</i> = 8.0, 1.5 Hz, 1H), 7.73 - 7.81 (m, 1H), 7.18 (s, 2H), 3.87 (s, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -112.13 (d, <i>J</i> = 28.4 Hz), -137.43 (d, <i>J</i> = 28.4 Hz)
45	148- 150		ESIMS <i>m/z</i> 393 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 7.87 (m, 2H), 7.62 (m, 2H), 6.91 (br s, 2H)	
46	133- 135	IR (박막) 3490 (s), 3350 (s), 1753 (w), 1634 (m), 1607 (m) cm ⁻¹	ESIMS <i>m/z</i> 344 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 13.60 (br s, 1H), 7.81 (t, <i>J</i> = 9 Hz, 1H), 7.63 (dd, <i>J</i> = 11, 2 Hz, 1H), 7.52 (dd, <i>J</i> = 9, 2 Hz, 1H), 7.38 (br s, 2H), 3.76 (s, 3H)	
47	159.6- 161.1		ESIMS <i>m/z</i> 377 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.58 (m, 4H), 5.36 (s, 2H), 3.99 (s, 3H)	
48	204.2- 205.9		ESIMS <i>m/z</i> 273 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 13.5 (s, 1H), 7.94 (d, 2H), 7.60 (d, 2H), 7.30 (s, 1H), 6.69 (s, 2H)	

[0908]

화합물 번호	mp (°C)	IR (cm ⁻¹)	질량 ^a	¹ H NMR ^b	¹³ C 또는 ¹⁹ F NMR
49	114-116	IR (박막) 3492 (s), 3378 (s), 3235 (w), 2955 (w), 2927 (w), 1736 (s), 1621 (s) cm ⁻¹	ESIMS <i>m/z</i> 379 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃) δ 7.76 (m, 1H), 7.60 - 7.68 (m, 2H), 4.94 (br s, 2H), 3.99 (s, 3H)	
50	174-176	IR (박막) 3305 (s), 1720 (w), 1634 (m), 1586 (w) cm ⁻¹	ESIMS <i>m/z</i> 327 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 7.53 (dd, <i>J</i> = 8, 7 Hz, 1H), 7.41 (m, 1H), 6.93 (br s, 2H), 4.81 (s, 1H)	
51	153-154		ESIMS <i>m/z</i> 394 ([M-H] ⁻)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.42 - 7.38 (m, 2H), 4.98 (s, 2H), 3.99 (s, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -112.74, -112.78, -116.99, -117.03, -117.09, -117.13, -137.28, -137.38
52	146-148	IR (순수한 필름) 3519 (m), 3473 (m), 3420 (s), 3379 (s), 3196 (w), 3075 (w), 2955 (w), 2852 (w), 1736 (s), 1616 (s) cm ⁻¹	ESIMS <i>m/z</i> 379 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.50 (dd, <i>J</i> = 8, 7 Hz, 1H), 7.42 (dd, <i>J</i> = 8, 2 Hz, 1H), 7.36 (dd, <i>J</i> = 10, 2 Hz, 1H), 4.93 (br s, 2H), 3.96 (s, 3H)	
53	118-120		ESIMS <i>m/z</i> 377 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.53 - 7.45 (m, 2H), 6.91 (dd, <i>J</i> = 18.1, 11.6 Hz, 1H), 5.76 (dd, <i>J</i> = 11.6, 1.3 Hz, 1H), 5.61 (dd, <i>J</i> = 18.1, 1.3 Hz, 1H), 4.81 (s, 2H), 3.92 (s, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -61.16, -61.20, -135.77, -135.83, -135.86, -135.92, -138.61, -138.65, -138.67, -138.68, -138.70, -138.72, -138.74, -138.77, -140.73, -140.82
54			ESIMS <i>m/z</i> 326.07 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.15 (m, 2H), 7.67 (m, 2H), 7.45 (br s, 2H), 3.75 (s, 3H)	
55	142-144		ESIMS <i>m/z</i> 443 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.56 (dd, <i>J</i> = 8.5, 4.9 Hz, 1H), 7.32 (dd, <i>J</i> = 7.6, 5.8 Hz, 1H), 4.97 (s, 2H), 3.98 (s, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -99.87, -99.91, -117.70, -117.74, -117.80, -117.84, -137.25, -137.35

[0909]

화합물 번호	mp (°C)	IR (cm ⁻¹)	질량 ^a	¹ H NMR ^b	¹³ C 또는 ¹⁹ F NMR
56	142- 144		ESIMS <i>m/z</i> 425 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.80 (dd, <i>J</i> = 8.5, 6.5 Hz, 1H), 7.53 (dd, <i>J</i> = 10.0, 5.0 Hz, 1H), 7.25 (d, <i>J</i> = 1.2 Hz, 1H), 4.86 (s, 2H), 4.01 (s, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -100.00, -100.05, -120.62, -120.66.
57	93-94		ESIMS <i>m/z</i> 352 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.86 - 7.79 (m, 2H), 7.62 - 7.56 (m, 2H), 6.89 (dd, <i>J</i> = 18.1, 11.5 Hz, 1H), 5.71 (dd, <i>J</i> = 11.6, 1.4 Hz, 1H), 5.58 (dd, <i>J</i> = 18.1, 1.4 Hz, 1H), 4.71 (s, 2H), 3.93 (s, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -144.04
58		IR (박막) 3367, 1735, 1608 cm ⁻¹ .	ESIMS <i>m/z</i> 381 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 7.91 (t, <i>J</i> = 7.8 Hz, 1H), 7.74 (d, <i>J</i> = 11.6 Hz, 1H), 7.62 (d, <i>J</i> = 8.1 Hz, 1H), 7.20 (d, <i>J</i> = 21.4 Hz, 2H), 3.87 (s, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -59.9, -115.6, -116.3
59	203- 205	IR (박막) 3425 (m), 3297 (m), 3245 (s), 3158 (m), 3008 (w), 2956 (w), 1729 (m), 1637 (m) cm ⁻¹	ESIMS <i>m/z</i> 302 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.91 (t, <i>J</i> = 8 Hz, 1H), 7.32 (dd, <i>J</i> = 8, 1.5 Hz, 1H), 7.26 (dd, <i>J</i> = 12, 1.5 Hz, 1H), 5.40 (br s, 2H), 3.99 (s, 3H), 3.93 (s, 3H), 3.15 (s, 1H)	
60			ESIMS <i>m/z</i> 297 ([M+H] ⁺ +1)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.93 (ddd, <i>J</i> = 8.2, 1.6, 0.7 Hz, 2H), 7.65 - 7.54 (m, 2H), 6.90 (ddd, <i>J</i> = 18.1, 11.6, 0.5 Hz, 1H), 5.71 (dd, <i>J</i> = 11.5, 1.4 Hz, 1H), 5.58 (dd, <i>J</i> = 18.1, 1.4 Hz, 1H), 4.71 (s, 2H), 3.93 (s, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -143.86
61			ESIMS <i>m/z</i> 361 ([M-H] ⁻)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.55 - 7.45 (m, 2H), 7.25 (dd, <i>J</i> = 18.3, 11.6 Hz, 1H), 5.85 (dd, <i>J</i> = 11.7, 1.2 Hz, 1H), 5.64 (dd, <i>J</i> = 18.4, 1.2 Hz, 1H), 5.11 (s, 2H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -61.22, -61.25, -135.48, -135.54, -135.57, -135.62, -137.62, -137.66, -137.68, -137.69, -137.71, -137.73, -137.75, -137.78, -137.87, -137.95

[0910]

화합물 번호	mp (°C)	IR (cm ⁻¹)	질량 ^a	¹ H NMR ^b	¹³ C 또는 ¹⁹ F NMR
62	142- 147 (dec)	IR (박막) 3317 (s), 3199 (s), 2955 (w), 2924 (w), 2870 (w), 2256 (w), 1721 (m), 1634 (m) cm ⁻¹	ESIMS <i>m/z</i> 291 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 7.86 (m, 2H), 7.61 (m, 2H), 6.93 (br s, 2H), 4.33 (s, 1H)	
63		IR (박막) 2979, 1715 cm ⁻¹	ESIMS <i>m/z</i> 332 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.22 (t, <i>J</i> = 10.7 Hz, 1H), 8.17 (d, <i>J</i> = 12.3 Hz, 1H), 7.90 (dd, <i>J</i> = 21.3, 13.4 Hz, 1H), 7.56 (d, <i>J</i> = 44.0 Hz, 3H), 3.77 (s, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -59.9, -115.3, -116.7
64	140- 141		ESIMS <i>m/z</i> 364 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 7.87 (t, <i>J</i> = 7.5 Hz, 1H), 7.72 - 7.66 (m, 1H), 7.58 (s, 2H), 3.90 (s, 3H), 3.78 (s, 3H)	
65			ESIMS <i>m/z</i> 310 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 13.71 (s, 1H), 8.05 (dd, <i>J</i> = 9.9, 1.4 Hz, 1H), 7.86 (dd, <i>J</i> = 8.0, 1.5 Hz, 1H), 7.75 - 7.81 (m, 1H), 7.09 (s, 2H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -112.04 (d, <i>J</i> = 29.9 Hz), -138.35 (d, <i>J</i> = 29.6 Hz)
66	141- 143		ESIMS <i>m/z</i> 407 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 7.95 (dd, 1H), 7.77 (dd, 1H), 7.52 (dd, 1H), 7.32 (s, 1H), 6.81 (s, 2H), 3.89 (s, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -95.03
67			ESIMS <i>m/z</i> 341 ([M-H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.77 (m, 2H), 7.55 (m, 2H), 7.1 (s, 1H), 4.84 (br s, 2H), 4.00 (s, 3H)	
68	170.1- 172.6		ESIMS <i>m/z</i> 431 ([M+3H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 6.85 - 6.77 (m, 3H), 7.79 (m, 1H)	
69	159- 161		ESIMS <i>m/z</i> 429 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 11.14 (s, 1H), 7.63 (dd, <i>J</i> = 8.6, 4.9 Hz, 1H), 7.27 (dd, <i>J</i> = 7.5, 5.7 Hz, 1H), 5.21 (s, 2H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -99.15, -99.20, -117.70, -117.74, -117.79, -117.83, -134.64, -134.71

[0911]

화합물 번호	mp (°C)	IR (cm ⁻¹)	질량 ^a	¹ H NMR ^b	¹³ C 또는 ¹⁹ F NMR
70	114- 116		ESIMS <i>m/z</i> 367 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.97 (dd, <i>J</i> = 10.6, 6.3 Hz, 1H), 7.39 (dd, <i>J</i> = 10.5, 5.6 Hz, 1H), 7.30 (d, <i>J</i> = 1.2 Hz, 1H), 4.91 (s, 2H), 4.02 (s, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -61.69, -61.73, -119.19, -119.22, -119.24, -119.27, -120.01, -120.06
71	157- 160 (dec)	IR (박막) 3400 (s), 3300 (s), 3200 (m), 1711 (w), 1630 (m) cm ⁻¹	ESIMS <i>m/z</i> 309 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 7.68 - 7.78 (m, 3H), 6.76 (br s, 2H), 4.66 (s, 1H)	
72	95-98	IR (박막) 3327 (s), 2941 (w), 1718 (w), 1629 (m), 1603 (m) cm ⁻¹	ESIMS <i>m/z</i> 390 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 13.67 (br s, 1H), 7.73 (dd, <i>J</i> = 11, 1.5 Hz, 1H), 7.68 (dd, <i>J</i> = 8.5, 1.5 Hz, 1H), 7.63 (t, <i>J</i> = 8.5 Hz, 1H), 7.33 (br s, 2H), 3.76 (s, 3H)	
73			ESIMS <i>m/z</i> 395 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 7.82 (dd, <i>J</i> = 8.3, 7.3 Hz, 1H), 7.60 (dd, <i>J</i> = 9.8, 2.0 Hz, 1H), 7.40 (dd, <i>J</i> = 8.3, 2.0 Hz, 1H), 7.16 (s, 2H), 3.87 (s, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 108.20
74	186.0- 187.3		ESIMS <i>m/z</i> 345 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 13.6 (s, 1H), 7.87 (m, 1H), 7.72 (m, 1H), 7.57 (m, 1H), 7.23 (s, 1H), 6.18 (s, 2H)	
76	169- 170		ESIMS <i>m/z</i> 350 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 13.63 (s, 1H), 7.89 (t, <i>J</i> = 7.5 Hz, 1H), 7.69 (t, <i>J</i> = 7.0 Hz, 1H), 7.48 (s, 2H), 3.79 (s, 3H)	
77			ESIMS <i>m/z</i> 393 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 13.57 (s, 1H), 7.95 (dd, <i>J</i> = 8.2, 6.8 Hz, 1H), 7.74 (dd, <i>J</i> = 9.8, 2.0 Hz, 1H), 7.53 (dd, <i>J</i> = 8.3, 2.0 Hz, 1H), 7.28 (s, 1H), 6.71 (s, 2H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -95.12

[0912]

화합물 번호	mp (°C)	IR (cm ⁻¹)	질량 ^a	¹ H NMR ^b	¹³ C 또는 ¹⁹ F NMR
78	185.5- 187.0		ESIMS <i>m/z</i> 342 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 7.64 (d, <i>J</i> = 8.5 Hz, 2H), 7.40 (d, <i>J</i> = 8.5 Hz, 2H), 6.47 (s, 2H), 2.07 (s, 3H)	¹³ C NMR (101 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 166.57, 153.45, 150.28, 138.92, 131.35, 130.86, 121.35, 115.84, 109.91, 99.49, 14.91
79	121- 124		ESIMS <i>m/z</i> 421 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.80 (dd, <i>J</i> = 8.1, 6.5 Hz, 1H), 7.19 (dd, <i>J</i> = 8.6, 1.9 Hz, 1H), 7.00 (dd, <i>J</i> = 8.1, 1.9 Hz, 1H), 4.86 (s, 2H), 3.96 (s, 3H), 2.17 (s, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -93.62
80	170- 171		ESIMS <i>m/z</i> 344 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.30 (dd, <i>J</i> = 9.8, 2.1 Hz, 1H), 8.22 (dd, <i>J</i> = 8.5, 2.2 Hz, 1H), 7.87 (m, 1H), 7.22 (s, 2H), 3.88 (s, 3H)	
81	128- 130		ESIMS <i>m/z</i> 354 ([M-H] ⁻)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.56 (d, <i>J</i> = 8.5 Hz, 2H), 7.33 (d, <i>J</i> = 8.5 Hz, 2H), 4.84 (s, 2H), 3.96 (s, 3H), 2.15 (s, 3H)	¹³ C NMR (101 MHz, CDCl ₃) δ 165.68, 155.19, 149.18, 145.09, 138.57, 131.42, 131.00, 122.60, 116.69, 113.59, 52.88, 14.65
82	159- 162	IR (박막) 3493 (s), 3352 (s), 2943 (w), 2853 (w), 1725 (m), 1602 (m) cm ⁻¹	ESIMS <i>m/z</i> 404 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.68 (t, <i>J</i> = 8 Hz, 1H), 7.50 - 7.58 (m, 2H), 5.40 (br s, 2H), 4.00 (s, 3H), 3.94 (s, 3H)	
83	145- 148, 220		ESIMS <i>m/z</i> 302 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.73 (d, <i>J</i> = 8.5 Hz, 2H), 7.58 (d, <i>J</i> = 8.5 Hz, 2H), 4.90 (s, 2H), 3.96 (s, 3H), 2.16 (s, 3H)	¹³ C NMR (101 MHz, CDCl ₃) δ 165.50, 154.25, 149.37, 145.36, 144.19, 132.09, 130.18, 118.67, 116.71, 114.01, 112.06, 52.95, 14.58

[0913]

화합물 번호	mp (°C)	IR (cm ⁻¹)	질량 ^a	¹ H NMR ^b	¹³ C 또는 ¹⁹ F NMR
84	214- 217	IR (박막) 3453 (m), 3302 (m), 3242 (s), 3170 (m), 2963 (w), 2852 (w), 2112 (w), 1732 (m), 1631 (m) cm ⁻¹	ESIMS <i>m/z</i> 320 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.69 (ddd, <i>J</i> = 9, 7, 2 Hz, 1H), 7.27 (m, 1H), 5.42 (br s, 2H), 4.00 (s, 3H), 3.95 (s, 3H), 3.42 (s, 1H)	
85	126- 125		ESIMS <i>m/z</i> 347 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 7.88 (dd, <i>J</i> = 8.8, 1.3, 2H), 7.34 (t, <i>J</i> = 7.8, 1H), 7.31 (d, <i>J</i> = 8.9, 2H), 7.01 (br s, 2H), 3.88 (s, 1H)	
86	120- 122		ESIMS <i>m/z</i> 345 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 13.22 (s, 1H), 8.02 - 7.94 (m, 3H), 6.78 (dd, <i>J</i> = 17.7, 11.6 Hz, 1H), 6.56 (s, 2H), 5.65 - 5.52 (m, 2H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -61.37, -61.41, -114.17, -114.20, -114.24, -114.27, -143.61
87	171- 172		ESIMS <i>m/z</i> 407 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 13.36 (s, 1H), 7.91 (dd, <i>J</i> = 8.0, 6.8 Hz, 1H), 7.35 (dd, <i>J</i> = 9.1, 1.9 Hz, 1H), 7.10 (dd, <i>J</i> = 8.1, 1.9 Hz, 1H), 6.49 (s, 2H), 2.09 (s, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -95.45
88			ESIMS <i>m/z</i> 372 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.00 (m, 2H), 7.84 (m, 2H), 7.35 (br s, 2H), 3.11 (s, 3H)	
89	119- 121			¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 13.63 (s, 1H), 7.72 (ddd, <i>J</i> = 8.3, 5.7, 1.8 Hz, 1H), 7.51 (ddd, <i>J</i> = 8.6, 7.0, 1.8 Hz, 1H), 7.43 (s, 2H), 3.76 (s, 3H)	
90	176.2- 178.7		ESIMS <i>m/z</i> 445 ([M+2H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 3.86 (s, 3H), 6.98 - 6.94 (m, 3H), 7.89 - 7.85 (m, 1H)	
91	173- 175		ESIMS <i>m/z</i> 363 ([M-H] ⁻)	¹ H NMR (300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 7.76 - 7.56 (m, 2H), 7.22 (d, <i>J</i> = 1.7, 1H), 6.84 (s, 2H)	

[0914]

화합물 번호	mp (°C)	IR (cm ⁻¹)	질량 ^a	¹ H NMR ^b	¹³ C 또는 ¹⁹ F NMR
92	147- 149	IR (박막) 778.80, 822.34, 879.66, 973.14, 1006.40, 1026.12, 1056.64, 1120.85, 1214.80, 1276.30, 1389.19, 1409.98, 1459.47, 1496.89, 1519.03, 1592.79, 1627.42, 1720.12, 1769.38, 2535.30, 3199.10, 3386.23, 3501.86 cm ⁻¹	ESIMS <i>m/z</i> 351 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 13.63 (s, 1H), 7.83 (dd, <i>J</i> = 11.8, 2.1 Hz, 1H), 7.75 (t, <i>J</i> = 72.0 Hz, 1H), 7.52 (d, <i>J</i> = 8.0 Hz, 1H), 7.50 - 7.14 (m, 1H), 6.99 (s, 2H)	
93	98.9- 101.6		ESIMS <i>m/z</i> 359 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.93 (m, 1H), 7.34 (m, 2H), 7.22 (s, 1H), 4.85 (s, 2H), 4.00 (s, 3H)	
94	158.5- 159.5		ESIMS <i>m/z</i> 329 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 7.51 (d, <i>J</i> = 8.6 Hz, 2H), 7.33 - 7.14 (m, 3H), 6.61 (s, 2H), 2.09 (s, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -82.20
95			ESIMS <i>m/z</i> 326 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃) δ 8.32 (d, <i>J</i> = 9.0, 2H), 8.13 (dd, <i>J</i> = 9.0, 1.4, 2H), 5.02 (s, 2H), 4.01 (s, 3H)	
96	187.2- 189.9		ESIMS <i>m/z</i> 423 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.80 (d, 2H), 7.42 (d, 2H), 5.35 (s, 2H), 3.98 (s, 3H)	
97			ESIMS <i>m/z</i> 340 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.19 (m, 2H), 7.55 (m, 2H), 5.35 (br s, 2H), 4.01 (s, 3H), 3.92 (s, 3H)	
98			ESIMS <i>m/z</i> 299 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.13 - 7.90 (m, 2H), 7.80 (dd, <i>J</i> = 8.0, 1.6 Hz, 1H), 7.46 (s, 2H), 6.66 (dd, <i>J</i> = 17.6, 11.5 Hz, 1H), 5.63 - 5.43 (m, 2H), 3.82 (s, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -111.51

[0915]

화합물 번호	mp (°C)	IR (cm ⁻¹)	질량 ^a	¹ H NMR ^b	¹³ C 또는 ¹⁹ F NMR
99	168- 170	IR (박막) 3502 (m), 3378 (s), 2953 (w), 1739 (m), 1726 (m), 1617 (m) cm ⁻¹	ESIMS <i>m/z</i> 443 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.62 (ddd, <i>J</i> = 9, 6, 2 Hz, 1H), 7.16 (ddd, <i>J</i> = 9, 6.5, 2 Hz, 1H), 4.97 (br s, 2H), 3.96 (s, 3H)	
100	145- 147		ESIMS <i>m/z</i> 502 ([M-H] ⁻)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.54 (dd, <i>J</i> = 8.2, 4.9 Hz, 1H), 7.12 (dd, <i>J</i> = 7.4, 5.8 Hz, 1H), 5.44 (s, 2H), 3.97 (s, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -99.80, -99.84, -116.84, -116.89
101	193- 194		ESIMS <i>m/z</i> 422 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.69 (dd, <i>J</i> = 8.3, 6.3 Hz, 1H), 7.54 (dd, <i>J</i> = 9.5, 5.0 Hz, 1H), 5.43 (s, 2H), 4.00 (s, 3H), 3.94 (s, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -100.82, -100.86, -118.25, -118.29
102	171.0- 172.1		ESIMS <i>m/z</i> 330 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 7.35 (d, 2H), 7.47 (d, 2H), 7.39 (s, 2H), 3.78 (s, 3H)	
103		IR (박막) 708.67, 786.89, 824.69, 939.95, 1032.81, 1120.09, 1153.46, 1204.33, 1225.97, 1263.98, 1424.87, 1375.02, 1445.12, 1481.84, 1518.14, 1615.72, 1739.13, 2959.84, 3195.90, 3378.30, 3486.20 cm ⁻¹	ESIMS <i>m/z</i> 383 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.37 (ddd, <i>J</i> = 8.7, 7.0, 2.3 Hz, 1H), 7.19 - 7.11 (m, 1H), 6.61 (t, <i>J</i> = 72.5 Hz, 1H), 4.99 (s, 2H), 3.98 (s, 3H)	
104	127- 129	IR (박막) 758.08, 793.58, 824.98, 856.60, 919.36, 972.37, 1014.89, 1053.05, 1122.86, 1162.89, 1203.20, 1241.89, 1276.59, 1369.66, 1439.27, 1480.39, 1512.36, 1611.65, 1732.10, 2957.77, 3021.70, 3389.26, 3506.76 cm ⁻¹	ESIMS <i>m/z</i> 366 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.61 (t, <i>J</i> = 8.3 Hz, 1H), 7.04 (ddd, <i>J</i> = 8.6, 2.3, 0.8 Hz, 1H), 6.96 (dd, <i>J</i> = 10.5, 2.3 Hz, 1H), 6.55 (t, <i>J</i> = 73.0 Hz, 1H), 4.96 (s, 2H), 3.97 (s, 3H)	¹³ C NMR (101 MHz, CDCl ₃) δ 164.70, 161.50, 158.98, 152.94, 152.84, 147.17, 144.60, 143.59, 143.54, 140.22, 140.08, 137.91, 137.78, 132.54, 132.53, 132.49, 119.75, 119.71, 119.60, 119.56, 118.02, 115.77, 115.75, 115.42, 115.40, 115.37, 112.81, 107.69, 107.43, 53.07

[0916]

화합물 번호	mp (°C)	IR (cm ⁻¹)	질량 ^a	¹ H NMR ^b	¹³ C 또는 ¹⁹ F NMR
105	141.9- 143.1		ESIMS <i>m/z</i> 367 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 13.7 (s, 1H), 7.75 (d, 2H), 7.49 (d, 2H), 7.01 (s, 2H)	
106	183- 184	IR (박막) 861.93, 886.37, 962.21, 984.56, 1035.97, 1010.25, 1113.86, 1143.26, 1173.58, 1222.01, 1251.67, 1294.93, 1438.95, 1397.88, 1514.76, 1486.42, 1595.67, 1568.01, 1608.88, 1645.71, 1735.15, 2693.18, 2860.72, 2960.57, 3179.92, 3320.20, 3406.42 cm ⁻¹	ESIMS <i>m/z</i> 326 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.35 - 8.29 (m, 2H), 7.19 - 7.10 (m, 2H), 6.56 (t, <i>J</i> = 72 Hz, 1H), 5.33 (s, 3H), 4.02 (s, 3H), 3.92 (s, 3H)	
107			ESIMS <i>m/z</i> 298 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.08 (dd, <i>J</i> = 8.6, 1.5 Hz, 2H), 7.78 - 7.71 (m, 2H), 6.89 (dd, <i>J</i> = 18.1, 11.6 Hz, 1H), 5.73 (dd, <i>J</i> = 11.6, 1.4 Hz, 1H), 5.59 (dd, <i>J</i> = 18.1, 1.4 Hz, 1H), 4.78 (s, 2H), 3.93 (s, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -143.64
108	165- 175 (dec)	IR (박막) 3468 (s), 1621 (m) cm ⁻¹	ESIMS <i>m/z</i> 309 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 7.55 (t, <i>J</i> = 8 Hz, 1H), 7.50 (dd, <i>J</i> = 11, 1.5 Hz, 1H), 7.46 (dd, <i>J</i> = 8, 1.5 Hz, 1H), 6.47 (br s, 2H), 4.45 (s, 1H)	
109	184- 186		ESIMS <i>m/z</i> 393 ([M-H] ⁻)	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃) δ 7.48 - 7.40 (m, 1H), 7.33 - 7.26 (m, 1H), 4.99 (br s, 2H), 3.98 (s, 3H)	
110			ESIMS <i>m/z</i> 345 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 13.33 (s, 1H), 7.70 - 7.52 (m, 2H), 7.45 (dd, <i>J</i> = 8.4, 2.0 Hz, 1H), 7.06 (s, 1H), 6.52 (s, 2H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -107.95.

[0917]

화합물 번호	mp (°C)	IR (cm ⁻¹)	질량 ^a	¹ H NMR ^b	¹³ C 또는 ¹⁹ F NMR
111			ESIMS <i>m/z</i> 341 ([M-H] ⁻)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.46 (d, <i>J</i> = 8.7 Hz, 2H), 7.18 (d, <i>J</i> = 8.7 Hz, 2H), 6.53 (t, <i>J</i> = 73.8 Hz, 1H), 4.84 (s, 2H), 3.95 (s, 3H), 2.16 (s, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -80.81
112	134- 137		ESIMS <i>m/z</i> 375 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.61 (dd, <i>J</i> = 8.2, 7.1 Hz, 1H), 7.27 - 7.25 (m, 1H), 7.13 (ddd, <i>J</i> = 8.2, 1.9, 0.6 Hz, 1H), 4.86 (s, 2H), 3.96 (s, 3H), 2.17 (s, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -107.04
113			ESIMS <i>m/z</i> 344 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 13.63 (s, 1H), 8.07 (dd, <i>J</i> = 10.3, 1.9 Hz, 1H), 8.01 (dd, <i>J</i> = 8.5, 2.0 Hz, 1H), 7.81 (dd, <i>J</i> = 8.4, 7.2 Hz, 1H), 7.40 (s, 2H), 3.76 (s, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -108.44
114	178- 180		ESIMS <i>m/z</i> 379 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 7.78 - 7.58 (m, 2H), 7.26 (d, <i>J</i> = 1.6, 1H), 6.95 (s, 2H), 3.89 (s, 3H)	
115			ESIMS <i>m/z</i> 359 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 7.91 - 7.80 (m, 2H), 7.75 - 7.67 (m, 1H), 7.35 (s, 1H), 6.86 (s, 2H), 3.93 (s, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -107.88
116	179.5- 181.0		ESIMS <i>m/z</i> 389 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 7.81 (d, <i>J</i> = 8.3 Hz, 2H), 7.25 (d, <i>J</i> = 8.3 Hz, 2H), 6.46 (s, 2H), 2.07 (s, 3H)	¹³ C NMR (101 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 166.56, 153.62, 150.28, 139.23, 136.72, 131.38, 115.78, 109.86, 94.48, 48.57, 14.90
117	149- 151		ESIMS <i>m/z</i> 336 ([M-H] ⁻)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 13.13 (s, 1H), 7.82 (dd, <i>J</i> = 8.5, 0.9 Hz, 2H), 7.74 - 7.66 (m, 2H), 6.75 (dd, <i>J</i> = 17.8, 11.5 Hz, 1H), 6.42 (s, 2H), 5.56 (dd, <i>J</i> = 12.8, 1.3 Hz, 1H), 5.52 (dd, <i>J</i> = 6.5, 1.3 Hz, 1H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -145.77

[0918]

화합물 번호	mp (°C)	IR (cm ⁻¹)	질량 ^a	¹ H NMR ^b	¹³ C 또는 ¹⁹ F NMR
118	133-135		ESIMS <i>m/z</i> 407 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃) δ 7.81 (m, 2H), 7.67 (m, 2H), 4.91 (br s, 2H), 3.99 (s, 3H)	
119	131-132		ESIMS <i>m/z</i> 408 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 7.83 (dd, <i>J</i> = 9.6, 5.1 Hz, 1H), 7.66 (dd, <i>J</i> = 8.5, 6.3 Hz, 1H), 7.42 (s, 2H), 3.75 (s, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -101.95, -102.00, -117.68, -117.72
121	186-188	IR (박막) 3500 (w), 3472 (m), 3370 (s), 3229 (m), 2955 (w), 2921 (w), 2850 (w), 1728 (m), 1622 (m) cm ⁻¹	ESIMS <i>m/z</i> 323 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.58 (t, <i>J</i> = 8 Hz, 1H), 7.39 (dd, <i>J</i> = 8, 1.5 Hz, 1H), 7.28 (m, 1H), 4.94 (br s, 2H), 3.97 (s, 3H), 3.17 (s, 1H)	
122	171-172		ESIMS <i>m/z</i> 374 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.65 (ddd, <i>J</i> = 9.0, 7.1, 2.1 Hz, 1H), 7.40 - 7.31 (m, 1H), 5.45 (s, 2H), 4.01 (s, 3H), 3.95 (s, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -129.82 (s), -129.88 (s), -135.73 (s), -135.79 (s)
123	187-190		ESIMS <i>m/z</i> 368 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.01 - 8.09 (m, 2H), 7.82 - 7.90 (m, 2H), 7.16 (s, 1H), 6.65 (dd, <i>J</i> = 17.7, 11.5 Hz, 1H), 5.61 (dd, <i>J</i> = 17.7, 1.3 Hz, 1H), 5.49 (dd, <i>J</i> = 11.4, 1.3 Hz, 1H)	
124	208.4-210.2		ESIMS <i>m/z</i> 393 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 13.7 (s, 1H), 7.78 (m, 3H), 7.23 (s, 1H), 6.83 (s, 2H)	
125	164.9-166.1		ESIMS <i>m/z</i> 363 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 13.69 (s, 1H), 7.67 (d, 2H), 7.55 (d, 2H), 6.99 (s, 2H)	
126	158.9-161.2		ESIMS <i>m/z</i> 287 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.93 (d, 2H), 7.60 (d, 2H), 7.16 (s, 1H), 4.89 (s, 2H), 4.05 (s, 3H)	

[0919]

화합물 번호	mp (°C)	IR (cm ⁻¹)	질량 ^a	¹ H NMR ^b	¹³ C 또는 ¹⁹ F NMR
127	174- 176		ESIMS <i>m/z</i> 376 ([M-H] ⁻)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.89 (dd, <i>J</i> = 9.2, 6.7 Hz, 1H), 7.36 (dd, <i>J</i> = 10.2, 5.5 Hz, 1H), 7.25 (d, <i>J</i> = 1.2 Hz, 1H), 4.86 (s, 2H), 4.01 (s, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -112.80, -112.84, -119.98, -120.02
128		IR (박막) 3334, 1722 cm ⁻¹	ESIMS <i>m/z</i> 336 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.25 (d, <i>J</i> = 8.1 Hz, 2H), 8.17 (d, <i>J</i> = 11.9 Hz, 2H), 7.95 (t, <i>J</i> = 7.9 Hz, 2H), 7.66 (s, 1H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO) δ -60.0, -114.7, -116.5
129	172- 174	IR (박막) 3481 (m), 3338 (s), 3185 (w), 3096 (w), 2963 (w), 1727 (m), 1608 (m) cm ⁻¹	ESIMS <i>m/z</i> 425 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.55 -7.62 (m, 2H), 7.21 (d, <i>J</i> = 2 Hz, 1H), 4.86 (br s, 2H), 3.99 (s, 3H)	
130	185.1- 186.9		ESIMS <i>m/z</i> 285 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.45 (d, 2H), 7.75 (s, 2H), 5.84 (s, 2H), 4.03 (s, 3H), 3.96 (s, 3H)	
131	173- 175		ESIMS <i>m/z</i> 411 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 7.90 (dd, <i>J</i> = 10.2, 5.1 Hz, 1H), 7.73 (dd, <i>J</i> = 8.6, 6.6 Hz, 1H), 7.26 (s, 1H), 6.83 (s, 2H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -96.56, -96.61, -115.34, -115.38
132	138- 140	IR (박막) 3437 (w), 3352 (s), 3197 (w), 2949 (w), 1737 (m), 1614 (m) cm ⁻¹	ESIMS <i>m/z</i> 425 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.88 (dd, <i>J</i> = 9, 7 Hz, 1H), 7.73 (ddd, <i>J</i> = 9, 2, 1 Hz, 1H), 7.55 (dt, <i>J</i> = 8.5, 2 Hz, 1H), 4.94 (br s, 2H), 4.00 (s, 3H)	
133	141- 143	IR (박막) 3385 (s), 3242 (m), 2955 (w), 2918 (w), 2856 (w), 1734 (m), 1622 (m) cm ⁻¹	ESIMS <i>m/z</i> 323 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.75 (d, <i>J</i> = 9.5 Hz, 2H), 7.57 (t, <i>J</i> = 7 Hz, 1H), 4.93 (br s, 2H), 3.98 (s, 3H), 3.37 (s, 1H)	
134	124- 126		ESIMS <i>m/z</i> 353 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 7.92 (d, <i>J</i> = 12.8 Hz, 3H), 7.01 (s, 2H)	
135			ESIMS <i>m/z</i> 324 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.98 - 7.83 (m, 1H), 7.72 (dd, <i>J</i> = 8.4, 6.6, 1H), 5.01 (s, 1H), 4.01 (s, 2H)	

[0920]

화합물 번호	mp (°C)	IR (cm ⁻¹)	질량 ^a	¹ H NMR ^b	¹³ C 또는 ¹⁹ F NMR
136	115- 118		ESIMS <i>m/z</i> 403 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.77 (d, <i>J</i> = 8.5 Hz, 2H), 7.20 (d, <i>J</i> = 8.5 Hz, 2H), 4.83 (s, 2H), 3.95 (s, 3H), 2.15 (s, 3H)	¹³ C NMR (101 MHz, CDCl ₃) δ 165.69, 155.29, 149.17, 145.12, 139.19, 137.39, 131.16, 116.65, 113.57, 94.30, 52.86, 14.64
137			ESIMS <i>m/z</i> 342 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.26 (d, <i>J</i> = 8.2 Hz, 1H), 8.17 (d, <i>J</i> = 12.2 Hz, 1H), 7.94 (t, <i>J</i> = 7.9 Hz, 1H), 7.35 (s, 2H), 6.67 (dd, <i>J</i> = 17.7, 11.5 Hz, 1H), 5.52 (m, 2H), 3.85 (s, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -59.99 (d, <i>J</i> = 12.2 Hz), -115.72 (d, <i>J</i> = 12.2 Hz)
138			ESIMS <i>m/z</i> 361 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.81 (m, 2H), 7.60 (m, 2H), 7.40 (d, <i>J</i> = 2 Hz, 2H), 4.91 (br s, 2H), 3.99 (s, 3H)	
139	95-96		ESIMS <i>m/z</i> 399 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.84 - 7.75 (m, 2H), 7.73 - 7.66 (m, 2H), 6.89 (dd, <i>J</i> = 18.1, 11.6 Hz, 1H), 5.71 (dd, <i>J</i> = 11.6, 1.4 Hz, 1H), 5.58 (dd, <i>J</i> = 18.1, 1.4 Hz, 1H), 4.71 (s, 2H), 3.92 (s, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -143.98
140	149- 151	IR (박막) 698.09, 825.26, 869.29, 998.15, 1025.59, 1050.34, 1098.57, 1129.54, 1167.58, 1246.97, 1386.17, 1435.44, 1481.70, 1515.78, 1590.42, 1628.74, 1720.93, 2535.45, 3198.03, 3327.36, 3469.29 cm ⁻¹	ESIMS <i>m/z</i> 351 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 18.40 (s, 1H), 12.39 (t, <i>J</i> = 8.4 Hz, 1H), 12.16 (t, <i>J</i> = 72.0 Hz, 1H), 12.05 (dd, <i>J</i> = 11.1, 2.4 Hz, 1H), 11.94 (dd, <i>J</i> = 8.5, 2.4 Hz, 1H), 11.75 (s, 2H)	
141	155- 157	IR (박막) 3325 (s), 3193 (s), 1625 (m) cm ⁻¹	ESIMS <i>m/z</i> 429 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 7.81 (br t, <i>J</i> = 7 Hz, 1H), 7.20 (br t, <i>J</i> = 7 Hz, 1H), 6.64 (br s, 2H)	

[0921]

화합물 번호	mp (°C)	IR (cm ⁻¹)	질량 ^a	¹ H NMR ^b	¹³ C 또는 ¹⁹ F NMR
142	164- 167		ESIMS <i>m/z</i> 306 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.06 - 7.94 (m, 4H), 7.12 (br s, 2H), 3.89 (s, 3H)	
143	137- 139		ESIMS <i>m/z</i> 333 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 7.90 (dd, <i>J</i> = 8.8, 1.3, 2H), 7.34 (t, <i>J</i> = 73.8, 1H), 7.30 (d, <i>J</i> = 8.8, 2H), 6.90 (s, 2H)	
144	124- 126		ESIMS <i>m/z</i> 385 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.50 (dd, <i>J</i> = 9.8, 5.3 Hz, 1H), 7.42 (dd, <i>J</i> = 8.9, 5.6 Hz, 1H), 5.03 (s, 2H), 3.99 (s, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -61.82, -61.85, -116.72, -116.76, -116.81, -116.86, -119.30, -119.33, -119.35, -119.38, -137.15, -137.24
145			ESIMS <i>m/z</i> 427 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 13.75 (s, 1H), 7.95 (dd, <i>J</i> = 8.1, 6.7 Hz, 1H), 7.48 (dd, <i>J</i> = 9.1, 1.9 Hz, 1H), 7.25 (dd, <i>J</i> = 8.1, 1.9 Hz, 1H), 7.04 (s, 2H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -95.25
146		IR (박막) 3359, 1719, 1619 cm ⁻¹	ESIMS <i>m/z</i> 369 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 7.90 (t, <i>J</i> = 7.9 Hz, 2H), 7.75 (d, <i>J</i> = 11.8 Hz, 2H), 7.64 (d, <i>J</i> = 8.1 Hz, 2H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -59.9, - 115.3, -116.6
147	168- 170		ESIMS <i>m/z</i> 381 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 7.74 - 7.65 (m, 1H), 7.43 - 7.32 (m, 1H), 7.00 (br s, 2H)	
148	96-98		ESIMS <i>m/z</i> 364 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.84 (dd, <i>J</i> = 10.6, 5.9 Hz, 1H), 7.39 (dd, <i>J</i> = 9.8, 5.6 Hz, 1H), 5.46 (s, 2H), 4.01 (s, 3H), 3.96 (s, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -61.73, -61.76, -117.59, -117.64, -120.18, -120.21, -120.23, -120.26
149	131- 132		ESIMS <i>m/z</i> 385 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 7.77 (t, <i>J</i> = 7.2, 1H), 7.63 (t, <i>J</i> = 7.0, 1H), 7.25 (s, 2H), 3.88 (s, 3H)	

[0922]

화합물 번호	mp (°C)	IR (cm ⁻¹)	질량 ^a	¹ H NMR ^b	¹³ C 또는 ¹⁹ F NMR
150			ESIMS <i>m/z</i> 284 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 11.46 (s, 1H), 8.05 - 7.98 (m, 2H), 7.84 - 7.75 (m, 2H), 7.26 (ddd, <i>J</i> = 18.4, 11.7, 1.4 Hz, 1H), 5.85 (dd, <i>J</i> = 11.7, 1.4 Hz, 1H), 5.63 (dd, <i>J</i> = 18.4, 1.4 Hz, 1H), 5.06 (s, 2H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -140.74
151	130- 132		ESIMS <i>m/z</i> 319 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.53 (dd, <i>J</i> = 7.9, 7.3 Hz, 1H), 7.22 (ddd, <i>J</i> = 7.3, 6.7, 1.5 Hz, 2H), 4.87 (s, 2H), 3.96 (s, 3H), 3.35 (s, 1H), 2.17 (s, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -110.01
152	112- 114	IR (박막) 751.85, 792.16, 879.37, 933.73, 1013.05, 1094.15, 1058.41, 1117.03, 1200.23, 1247.75, 1267.53, 1375.51, 1432.34, 1476.69, 1516.02, 1611.65, 1725.02, 2961.33, 3378.00, 3505.09 cm ⁻¹	ESIMS <i>m/z</i> 366 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.86 - 7.68 (m, 2H), 7.36 - 7.29 (m, 1H), 6.60 (t, <i>J</i> = 73.3 Hz, 1H), 4.95 (s, 2H), 4.00 (s, 3H)	
153	160.9- 162.6		ESIMS <i>m/z</i> 307 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 13.72 (s, 1H), 7.61 (m, 5H), 7.04 (s, 2H)	
154	142- 144	IR (박막) 3486 (m), 3378 (s), 3225 (s), 2940 (w), 1768 (w), 1719 (w), 1625 (m) cm ⁻¹	ESIMS <i>m/z</i> 306 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 7.72 (m, 1H), 7.46 (m, 1H), 7.11 (br s, 2H), 4.80 (s, 1H), 3.79 (m, 3H)	
155	177- 180		ESIMS <i>m/z</i> 318 ([M-H] ⁻)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.78 - 7.61 (m, 1H), 7.42 - 7.29 (m, 2H), 4.92 (s, 2H), 3.97 (s, 3H), 2.17 (s, 3H)	¹³ C NMR (101 MHz, CDCl ₃) δ 165.33, 164.23, 161.59, 152.85, 149.49, 145.46, 133.27, 125.88, 117.79, 117.58, 116.64, 114.32, 113.80, 53.01, 14.55; ¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -105.97

[0923]

화합물 번호	mp (°C)	IR (cm ⁻¹)	질량 ^a	¹ H NMR ^b	¹³ C 또는 ¹⁹ F NMR
156			ESIMS <i>m/z</i> 310 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.07 (dd, <i>J</i> = 8.1, 7.0, 1H), 7.96 - 7.85 (m, 2H), 7.08 (s, 2H)	
157	140- 150 (dec)	IR (박막) 3462 (s), 3194 (s), 1610 (m) cm ⁻¹	ESIMS <i>m/z</i> 411 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 7.99 (dd, <i>J</i> = 8, 7 Hz, 1H), 7.68 (dd, <i>J</i> = 10, 1 Hz, 1H), 7.53 (dt, <i>J</i> = 9, 1.5 Hz, 1H), 6.39 (br s, 2H)	
158			ESIMS <i>m/z</i> 387 ([M-H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.75 (m, 2H), 7.63 (m, 2H), 7.08 (s, 1H), 4.87 (br s, 2H), 4.00 (s, 3H)	
159	139.8- 141.2		ESIMS <i>m/z</i> 407 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.60 (m, 3H), 7.39 (s, 1H), 5.53 (s, 2H), 4.04 (s, 3H)	
160	163- 164		ESIMS <i>m/z</i> 342 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 7.90 (m, 1H), 7.59 (t, <i>J</i> = 6.8 Hz, 1H), 7.25 (s, 2H), 3.87 (s, 3H)	
161	170.0- 171.5		ESIMS <i>m/z</i> 349 ([M] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.73 (t, <i>J</i> = 7.7 Hz, 1H), 7.32 (t, <i>J</i> = 8.9 Hz, 2H), 5.15 (s, 2H), 2.23 (s, 3H)	¹⁹ F NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ -61.4, -113.3
162			ESIMS <i>m/z</i> 383 ([M+2H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 6.90 - 6.70 (br s, 3H), 7.88 (d, <i>J</i> = 8.96 Hz, 1H)	
163	162- 164	IR (박막) 3467 (s), 1609 (m) cm ⁻¹	ESIMS <i>m/z</i> 365 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 7.75 (dd, <i>J</i> = 10, 2 Hz, 1H), 7.60 (dd, <i>J</i> = 8, 2Hz, 1H), 7.52 (t, <i>J</i> = 8 Hz, 1H), 6.55 (br s, 2H)	
164	142- 144		ESIMS <i>m/z</i> 382 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 3.83 (s, 3H), 5.38 - 5.58 (m, 2H), 6.65 (dd, <i>J</i> = 17.6, 11.5 Hz, 1H), 6.98 - 7.65 (m, 2H), 7.86 (d, <i>J</i> = 8.5 Hz, 2H), 8.03 (d, <i>J</i> = 8.5 Hz, 2H)	

[0924]

화합물 번호	mp (°C)	IR (cm ⁻¹)	질량 ^a	¹ H NMR ^b	¹³ C 또는 ¹⁹ F NMR
165	133-135		ESIMS <i>m/z</i> 368 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 7.92 (m, 3H), 7.17 (s, 2H), 3.90 (s, 3H)	
166	148.2-150.9		ESIMS <i>m/z</i> 284 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.29(d, 2H), 7.56 (d, 2H), 5.37 (s, 2H), 4.02 (s, 3H), 3.93 (s, 3H) 3.18 (s, 1H)	
167	69-70		ESIMS <i>m/z</i> 369 ([M-H] ⁻)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 13.75 (s, 1H), 7.77 (m, 1H), 7.64 (m, 1H), 7.16 (s, 2H)	
168			ESIMS <i>m/z</i> 329 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 7.84 (m, 2H), 7.68 (m, 2H), 7.25 (s, 1H), 6.72 (br s, 2H)	
169	152-155	IR (박막) 3470 (s), 1716 (w), 1629 (m), 1606 (m) cm ⁻¹	ESIMS <i>m/z</i> 411 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 7.84 (dd, <i>J</i> = 10, 1.5 Hz, 1H), 7.76 (dd, <i>J</i> = 8, 1.5 Hz, 1H), 7.33 (t, <i>J</i> = 8 Hz, 1H), 6.61 (br s, 2H)	
170	178.9-180.2		ESIMS <i>m/z</i> 381 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.75 (d, 2H), 7.32 (d, 2H), 5.40 (s, 2H), 4.02 (s, 3H)	
171			ESIMS <i>m/z</i> 356 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.11 - 7.90 (m, 2H), 7.82 (dd, <i>J</i> = 8.3, 7.2 Hz, 1H), 7.67 - 7.39 (m, 2H), 3.91 (s, 3H), 3.75 (s, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -108.34
172	161		ESIMS <i>m/z</i> 353 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 13.69 (s, 1H), 7.91 (t, <i>J</i> = 7.5 Hz, 1H), 7.71 (t, <i>J</i> = 7.2 Hz, 1H), 7.30 (d, <i>J</i> = 1.7 Hz, 1H), 6.93 (s, 2H)	
173	188.7-190.3		ESIMS <i>m/z</i> 409 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 13.79 (s, 1H), 7.87 (d, 2H), 7.42 (d, 2H), 7.01 (s, 2H)	

[0925]

화합물 번호	mp (°C)	IR (cm ⁻¹)	질량 ^a	¹ H NMR ^b	¹³ C 또는 ¹⁹ F NMR
174	171.8- 173.9		ESIMS <i>m/z</i> 337 [(M+3H) ⁺]	¹ H-NMR(400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 6.91 (br s, 2H), 7.26 (t, <i>J</i> = 53.88 Hz, 1H), 7.45 - 7.47 (m, 1H), 7.68 (dd, <i>J</i> = 5.60, 10.64 Hz, 1H), 7.87 (dd, <i>J</i> = 5.88, 10.74 Hz, 1H), 13.68 (br s, 1H)	
175	123- 124		ESIMS <i>m/z</i> 260 [(M+H) ⁺]	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.34 - 8.24 (m, 2H), 7.49 - 7.38 (m, 3H), 5.33 (s, 2H), 4.02 (s, 3H), 3.92 (s, 3H)	
176	135.2- 136.9		ESIMS <i>m/z</i> 367 [(M+H) ⁺]	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.41 (m, 2H), 6.91 (t, 1H), 5.02 (s, 2H), 4.00 (s, 3H)	
177	107.5- 110.3		ESIMS <i>m/z</i> 365 [(M+H) ⁺]	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.95 (m, 1H), 7.26 (s, 1H), 7.08 (m, 1H), 6.61 (t, 1H), 4.91 (s, 2H), 4.02 (s, 3H)	
178	86.1- 88.4		ESIMS <i>m/z</i> 354 [(M+2H) ⁺]	¹ H NMR(400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 6.99 (br s, 2H), 7.28 (t, <i>J</i> = 54.00 Hz, 1H), 7.60- 7.70 (m, 2H)	
179	137.2- 138.8		ESIMS <i>m/z</i> 313 [(M+H) ⁺]	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.73 (m, 1H), 7.76 (s, 1H), 6.95 (m, 1H), 4.85 (s, 2H), 4.01 (s, 3H), 2.30 (s, 3H)	
180			ESIMS <i>m/z</i> 267 [(M+H) ⁺]	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 7.82 (m, 2H), 7.55 - 7.44 (m, 3H), 6.88 (s, 2H)	
181	105- 108		ESIMS <i>m/z</i> 281 [(M+H) ⁺]	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 7.82 (m, 2H), 7.55 - 7.44 (m, 3H), 6.88 (s, 2H), 3.98 (s, 3H)	
183			ESIMS <i>m/z</i> 299 [(M+H) ⁺]	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 7.68 (dq, <i>J</i> = 7.9, 1.3 Hz, 1H), 7.58 (m, 2H), 7.33 (m, 1H), 7.06 (s, 2H), 3.89 (s, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -112.86, -140.06

[0926]

화합물 번호	mp (°C)	IR (cm ⁻¹)	질량 ^a	¹ H NMR ^b	¹³ C 또는 ¹⁹ F NMR
184	116.5- 118.8		ESIMS <i>m/z</i> 331 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.26 (m, 1H), 6.99 (m, 1H), 4.95 (s, 2H), 3.99 (s, 3H), 2.32 (s, 3H)	
185	163.4- 164.8		ESIMS <i>m/z</i> 310 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.62 (m, 1H), 6.97 (m, 1H), 5.45 (s, 2H), 4.01 (s, 3H), 3.95 (s, 3H), 2.30 (s, 3H)	
186	147- 148			¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 7.46 (m, 2H), 7.17 (s, 2H), 3.87 (s, 3H)	
187	167.4- 170.2		ESIMS <i>m/z</i> 351 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR(400 MHz, CD ₃ OD) δ 4.89 (s, 2H), 7.02 (t, <i>J</i> = 72.80 Hz, 1H), 7.33 (dd, <i>J</i> = 6.40, 10.80 Hz, 1H), 7.80 (dd, <i>J</i> = 7.20, 11.00 Hz, 1H)	
188	172.9- 175.0		ESIMS <i>m/z</i> 301 ([M+2H] ⁺)	¹ H NMR(400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 2.28 (s, 3H), 6.80 (br s, 2H), 7.25 (s, 1H), 7.31 (dd, <i>J</i> = 6.32, 11.58 Hz, 1H), 7.65 (dd, <i>J</i> = 6.60, 10.36 Hz, 1H), 13.54 (br s, 1H)	
189		IR (박막) 3376, 1737, 1615 cm ⁻¹	ESIMS <i>m/z</i> 317 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 7.50 - 7.32 (m, 3H), 7.13 (s, 2H), 3.87 (d, <i>J</i> = 2.3 Hz, 3H)	
190	163- 165		ESIMS <i>m/z</i> 339 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.13 - 8.04 (m, 2H), 8.02 - 7.92 (m, 2H), 7.08 (s, 2H), 3.89 (s, 6H)	
191	154- 157		ESIMS <i>m/z</i> 296 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 7.86 - 7.70 (m, 1H), 7.41 (tdd, <i>J</i> = 9.5, 7.3, 2.1 Hz, 3H), 6.66 (dd, <i>J</i> = 17.6, 11.5 Hz, 1H), 5.63 - 5.38 (m, 2H), 3.82 (s, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -132.72 (dd, <i>J</i> = 21.4, 8.8 Hz), -135.29 (dd, <i>J</i> = 21.0, 8.7 Hz), -161.04 (t, <i>J</i> = 21.3 Hz)

[0927]

화합물 번호	mp (°C)	IR (cm ⁻¹)	질량 ^a	¹ H NMR ^b	¹³ C 또는 ¹⁹ F NMR
192	192- 195		ESIMS <i>m/z</i> 324 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 8.08 (br s, 1H), 7.99 (m, 2H), 7.87 (m, 2H), 7.47 (br s, 1H), 7.03 (br s, 2H), 3.89 (s, 3H)	
193	127.9- 129.2		ESIMS <i>m/z</i> 346 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.77 (m, 1H), 7.39 (m, 1H), 6.89 (t, 1H), 5.49 (s, 2H), 4.02 (s, 3H), 3.97 (s, 3H)	
194	167.4- 170.2		ESIMS <i>m/z</i> 317 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR(400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 2.30 (s, 3H), 6.41 (br s, 2H), 7.28-7.45 (m, 2H)	
195	162.0- 165.0		ESIMS <i>m/z</i> 369 ([M+H] ⁺)	¹ H-NMR(400 MHz, CD ₃ OD) δ 4.90 (s, 2H), 7.01 (t, <i>J</i> = 72.72 Hz, 1H), 7.29 (dd, <i>J</i> = 6.52, 9.76 Hz, 1H), 7.55 (dd, <i>J</i> = 6.36, 10.52 Hz, 1H)	
196	127- 129	IR (박막) 3480 (s), 3345 (s), 3186 (w), 2961 (w), 1717 (s), 1614 (s) cm ⁻¹	ESIMS <i>m/z</i> 331 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃) δ 7.75 - 7.81 (m, 2H), 7.67 (t, <i>J</i> = 8 Hz, 1H), 7.14 (s, 1H), 6.94 (t, <i>J</i> = 55 Hz, 1H), 4.90 (br s, 2H), 4.04 (s, 3H)	
197	156- 158		ESIMS <i>m/z</i> 309 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 7.86 - 7.70 (m, 1H), 7.41 (tdd, <i>J</i> = 9.5, 7.3, 2.1 Hz, 3H), 6.66 (dd, <i>J</i> = 17.6, 11.5 Hz, 1H), 5.63 - 5.38 (m, 2H), 3.82 (s, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ -132.72 (dd, <i>J</i> = 21.4, 8.8 Hz), -135.29 (dd, <i>J</i> = 21.0, 8.7 Hz), -161.04 (t, <i>J</i> = 21.3 Hz)
198			ESIMS <i>m/z</i> 342 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.54(m, 1H), 7.44(m, 1H), 5.06(s, 2H), 4.00(s, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -111.33, -111.38, -115.73, -115.77, -115.83, -115.89, -136.82, -136.92
199	145- 147		ESIMS <i>m/z</i> 317 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.36 (tt, <i>J</i> = 5.8, 1.7 Hz, 1H), 7.29 - 7.15 (m, 2H), 4.97 (s, 2H), 3.98 (s, 3H)	

[0928]

화합물 번호	mp (°C)	IR (cm ⁻¹)	질량 ^a	¹ H NMR ^b	¹³ C 또는 ¹⁹ F NMR
200	143.5- 144.5	IR (박막) 3498, 3374, 1731, 1621, 1520, 1232 cm ⁻¹	ESIMS <i>m/z</i> 335 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.57 - 7.39 (m, 1H), 7.09 - 6.96 (m, 1H), 4.96 (s, 2H), 4.00 (s, 3H)	¹⁹ F NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ -114.6, -131.0, -137.5, -142.0
201	135.9- 137.7		ESIMS <i>m/z</i> 297 ([M+H] ⁺)	¹ H-NMR(400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 2.28 (s, 3H), 3.75 (s, 3H), 7.24 (dd, <i>J</i> = 6.24, 10.98 Hz, 1H), 7.36 (br s, 2H), 7.58 (dd, <i>J</i> = 6.32, 10.20 Hz, 1H), 13.5(s,1H)	
202	209.7- 211.9		ESIMS <i>m/z</i> 324 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.03 (m, 1H), 7.42 (m, 1H), 7.32 (s, 1H), 4.96 (s, 2H), 4.03 (s, 3H)	¹⁹ F NMR (376 MHz, CDCl ₃) δ -111.15, -119.08
203	143.7- 145.5		ESIMS <i>m/z</i> 332 ([M+H] ⁺)	¹ H-NMR(400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 3.76 (s, 3H), 7.24 (t, <i>J</i> = 54.00 Hz, 1H), 7.43 (br s, 2H), 7.59 (dd, <i>J</i> = 5.60, 10.00 Hz, 1H), 7.78 (dd, <i>J</i> = 5.60, 10.40 Hz, 1H)	
204	131			¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 7.87 (m, 2H), 7.35 (m, 2H), 7.01 (s, 2H), 3.89 (s, 3H)	
205	141.8- 145		ESIMS <i>m/z</i> 349 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.91(m, 1H), 7.38 (m, 1H), 7.35 (s, 1H), 6.90 (t, 1H), 4.90(s, 2H), 4.03(s, 3H)	
206	159- 161		ESIMS <i>m/z</i> 299 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 7.55 (m, 2H), 7.39 - 7.30 (m, 2H), 7.05 (s, 2H), 3.86 (s, 3H)	
207	130- 132		ESIMS <i>m/z</i> 246 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 8.29 - 8.21 (m, 2H), 7.48 (m, 3H), 5.66 (s, 2H), 4.06 (s, 3H)	
208	165.0- 166.5		ESIMS <i>m/z</i> 321 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.88 (m, 1H), 7.42 (m, 1H), 5.51 (s, 2H), 4.03 (s, 3H), 3.98 (s, 3H)	

[0929]

화합물 번호	mp (°C)	IR (cm ⁻¹)	질량 ^a	¹ H NMR ^b	¹³ C 또는 ¹⁹ F NMR
209	113- 115	IR (박막) 3496 (s), 3377 (s), 2954 (w), 1726 (s), 1611 (s) cm ⁻¹	ESIMS <i>m/z</i> 331 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃) δ 8.01 (br d, <i>J</i> = 8 Hz, 2H), 7.61 (br d, <i>J</i> = 8 Hz, 2H), 6.70 (t, <i>J</i> = 56 Hz, 1H), 4.93 (br s, 2H), 3.99 (s, 3H)	
210	159 분해		ESIMS <i>m/z</i> 317 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 7.26 (m, 2H), 7.02 (s, 2H), 2.35 (d, <i>J</i> = 1.7 Hz, 3H)	
211	167- 168		ESIMS <i>m/z</i> 329 ([M-H] ⁻)	¹ H NMR (300 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 7.23 (m, 2H), 7.08 (s, 2H), 3.85 (s, 3H), 2.33 (d, <i>J</i> = 2.1 Hz, 3H)	
212	145- 146		ESIMS <i>m/z</i> 299 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 13.59 (s, 1H), 7.60 (m, 2H), 7.42 (m, 1H), 6.94 (s, 2H), 2.30 (s, 3H)	
213	127		ESIMS <i>m/z</i> 313 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 7.57 (dd, <i>J</i> = 14.6, 9.7 Hz, 2H), 7.42 (t, <i>J</i> = 8.1 Hz, 1H), 7.02 (s, 2H), 3.89 (s, 3H), 2.30 (s, 3H)	
214	151- 154		ESIMS <i>m/z</i> 311 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (400 MHz, DMSO- <i>d</i> ₆) δ 7.87 (dd, <i>J</i> = 11.2, 1.6 Hz, 1H), 7.80 - 7.68 (m, 2H), 6.76 (dd, <i>J</i> = 17.6, 11.7 Hz, 1H), 6.50 (br s, 2H), 5.57 (dd, <i>J</i> = 7.3, 0.9 Hz, 1H), 5.53 (s, 1H)	
215	97- 101		ESIMS <i>m/z</i> 325 ([M+H] ⁺)	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃) δ 7.83 - 7.77 (m, 1H), 7.76 - 7.69 (m, 1H), 7.48 (dd, <i>J</i> = 8.4, 7.6 Hz, 1H), 6.89 (dd, <i>J</i> = 18.0, 11.7 Hz, 1H), 5.73 (dd, <i>J</i> = 11.5, 1.4 Hz, 1H), 5.59 (dd, <i>J</i> = 18.1, 1.4 Hz, 1H), 4.78 (br s, 2H), 3.93 (s, 3H)	
216	111- 114				

[0930]

화합물 번호	mp (°C)	IR (cm ⁻¹)	질량 ^a	¹ H NMR ^b	¹³ C 또는 ¹⁹ F NMR
217	159- 161			¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.80 (d, <i>J</i> = 10.4 Hz, 1H), 7.72 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 1H), 7.48 (m, 1H), 4.93 (s, 2H), 4.00 (s, 3H)	

[0931]

[0932] ^a 질량 분광측정법 데이터는 달리 나타내지 않는 한 전기분무 이온화 질량 분광측정법 (ESIMS)이다.

[0933] ^b 모든 ¹H NMR 데이터는 달리 나타내지 않는 한 400 MHz에서 CDCl₃ 중에서 측정하였다.

[0934] 제초 활성의 실시예

[0935] 제초 평가를 0은 어떠한 활성도 나타내지 않고, 100은 완전한 식물 사멸을 나타내는 것인 0 내지 100의 척도 상에서 시각적으로 수행하였다. 데이터를 표 A에서 나타낸 바와 같이 표시하였다.

[0936] 표 A: 퍼센트 방제율 평가 전환 표

등급	% 방제율
A	95-100
B	85-94
C	75-84
D	60-74
E	45-59
F	30-44
G	0-29

[0937]

[0938] 실시예 A. 출아후 제초 활성의 평가

[0939] 출아후 시험 I: 시험 종의 종자를 상업적 공급업체로부터 입수하고, 토양-무함유 배지 믹스 (메트로-믹스 (Metro-Mix)360®, 선 그로 홀티컬처(Sun Gro Horticulture))가 담긴 13 센티미터 (cm) 직경-둥근 포트에 식재하였다. 출아후 처리를 적용 8-12일(d) 전에 식재하고, 보충 광원이 구비된 온실에서 배양하여 24-29℃에서 16 시간(h) 광주기를 제공하였다. 모든 포트를 표면 관개하였다.

[0940] 시험할 가장 높은 비율에 의해 결정한 칭량된 양의 각각의 화합물을 1.3 mL 아세톤-디메틸 술폭시드 (DMSO; 97:3, 부피당 부피 (v/v)) 중에 용해시키고, 0.02% 트리톤(Triton) X-155를 함유하는 4.1 mL 물-이소프로판올-작물 오일 농축물 (78:20:2, v/v/v)로 희석하여 진한 원액을 수득하였다. 높은 비율의 용액을 아세톤 및 DMSO의 97:3 v/v 혼합물의 적절한 부피, 및 물, 이소프로필 알콜, 0.02% 트리톤 X-155를 함유하는 작물 오일 농축물 (78:20:2, v/v/v)의 혼합물의 적절한 부피를 함유하는 용액에 연속적으로 희석하여 추가의 적용물을 획득하였다.

[0941] 제제화된 화합물을 데빌비스(DeVilbiss)® 압축 공기 분무기를 사용하여 제곱인치당 (psi) 2-4 파운드로 적용하였다. 처리 후, 포트를 시험 기간 동안 온실로 되돌렸다. 모든 포트를 필요한 경우에 지하관개하여 최적 성장 조건을 제공하였다. 모든 포트를 피터스 피트-라이트 스페셜(Peters Peat-Lite Special)® 비료(20-10-20)로 지하-관개하여 1주에 1회 비료를 주었다.

[0942] 식물독성 평가를 출아후 처리 적용 10일 후에 입수하였다. 모든 평가를 0은 어떠한 활성도 나타내지 않고, 100은 완전한 식물 사멸을 나타내는 것인 0 내지 100의 척도 상에서 시각적으로 수행하고, 표 A에서 나타낸 바와 같이 표시하였다.

[0943] 시험된 화합물, 사용된 적용물, 시험된 식물 종 및 결과의 일부를 표 3에 제공하였다.

[0944] 표 3. 주요 광엽 및 화본과 잡초 뿐만 아니라 작물 중에 대한 출아후 시험 I 제초 활성

화합물 번호	적용률 (kg ai/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 14 일 후					
		AMARE	AVEFA	ECHCG	HELAN	IPOHE	SETFA
138	4	A	C	A	A	A	A
20	4	n/t	C	A	A	B	A
135	4.04	A	D	A	A	B	C
156	4.04	A	C	A	A	A	B
16	3.84	A	G	E	A	A	D
114	3.92	A	G	A	A	B	C
85	3.76	A	F	A	A	F	B
142	3.84	A	E	A	A	A	D
118	2.32	A	A	A	A	A	A
45	3.96	A	A	A	A	B	A
143	4	A	n/t	A	A	E	A
39	2	A	C	B	A	D	n/t
209	4	A	B	A	A	B	A
199	4	A	n/t	D	A	C	B
206	4.04	A	n/t	G	A	C	G
196	3.84	A	D	A	A	B	A
181	1.76	A	G	G	A	C	G
109	4	n/t	C	A	A	B	A
147	3.96	A	C	A	A	A	A
215	3.96	n/t	F	B	A	A	G
214	4.04	n/t	D	A	A	A	B

[0945]

[0946] AMARE : 털비름 (아마란투스 레트로플렉수스(*Amaranthus retroflexus*))

[0947] AVEFA : 야생 귀리 (아베나 파투아(*Avena fatua*))

[0948] ECHCG : 돌피 (에키노클로아 크루스-갈리(*Echinochloa crus-galli*))

[0949] HELAN : 해바라기 (헬리안투스 안누스(*Helianthus annuus*))

[0950] IPOHE : 담쟁이덩굴엽 모닝글로리 (이포모에아 헤데라세아(*Ipomoea hederecea*))

[0951] SETFA : 가을 강아지풀 (세타리아 파베리(*Setaria faberi*))

[0952] kg ai/ha: 헥타르당 킬로그램 활성 성분

[0953] n/t: 시험하지 않음

[0954] 실시예 B. 출아전 제초 활성의 평가

[0955] 출아전 시험 I: 시험 종의 종자를 사양토를 함유하는 둥근 플라스틱 포트 (5-인치 직경)에 식재하였다. 식재 후에, 모든 포트를 화합물 적용 16시간 전에 지하-관개하였다.

[0956] 화합물을 아세톤 및 DMSO의 97:3 v/v 혼합물 중에 용해시키고, 물, 아세톤, 이소프로판올, DMSO 및 아그리-텍스 (작물 오일 농축물)를 59:23:15:1.0:1.5 v/v 비로 함유하고, 0.02% w/v (중량/부피)의 트리톤 X-155를 함유하는 최종 적용 용액 중에 적절한 농도로 희석시켜 최고 적용률을 함유하는 분무 용액을 수득하였다. 최고 비율

용액을 상기 적용 용액으로 연속 희석하여 추가의 적용률을 획득하였다.

[0957] 제제화된 화합물 (2.7 mL)을 토양 표면 위에 균일하게 피펫팅한 다음, 물 (15 mL)과 혼합하였다. 처리 후에, 포트를 시험 기간 동안 온실로 되돌렸다. 온실은 낮 동안 약 23-29℃ 및 밤 동안 22-28℃에서 유지되는 대략 15시간의 광주기로 프로그램되었다. 영양소 및 물을 표면 관개를 통해 정기적으로 첨가하고, 필요한 경우에 오버헤드 금속 할라이트 1000-와트 램프로 보충 조명을 제공하였다.

[0958] 제초 효과 평가를 처리 14일 후에 입수하였다. 모든 평가를 적절한 방제에 대해 0은 어떠한 제초 효과도 없음을 나타내고, 100은 완전한 식물 사멸 또는 토양으로부터의 출아 결핍을 나타내는 것인 0 내지 100의 척도 상에서 수행하고, A에서 나타낸 바와 같이 표시하였다. 시험된 화합물, 사용된 적용률, 시험된 식물 종 및 결과의 일부를 표 4에 제공하였다.

[0959] 표 4. 주요 광엽 및 화분과 잡초 뿐만 아니라 작물 종에 대한 출아전 시험 I 제초 활성

화합물 번호	적용률 (kg ai/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 14 일 후					
		AMARE	AVEFA	ECHCG	HELAN	IPOHE	SETFA
138	4	A	A	A	A	A	A
20	4	n/t	A	A	A	A	A
135	4.04	A	F	F	A	A	F
156	4.04	A	C	A	A	A	A
16	3.84	A	F	F	A	A	G
114	3.92	A	A	C	A	A	B
85	3.76	A	C	A	A	F	n/t
142	3.84	A	A	F	A	A	n/t
118	2.32	A	A	A	A	A	n/t
45	3.96	A	A	A	A	A	A
143	4	B	D	B	A	B	A
39	2	A	B	A	A	A	n/t
209	4	A	A	A	A	A	A
199	4	n/t	n/t	G	D	C	E
206	4.04	n/t	n/t	G	A	A	C
196	3.84	A	n/t	B	A	A	A
181	1.76	A	G	n/t	B	B	C
109	4	n/t	B	A	C	A	A
147	3.96	n/t	A	A	A	A	A
215	3.96	A	B	A	A	A	B
214	4.04	n/t	B	A	A	A	A

[0960] AMARE : 털비름 (아마란투스 레트로플렉수스(*Amaranthus retroflexus*))

[0962] AVEFA : 야생 귀리 (아베나 파투아(*Avena fatua*))

[0963] ECHCG : 돌피 (에키노클로아 크루스-갈리(*Echinochloa crus-galli*))

[0964] HELAN : 해바라기 (헬리안투스 안누스(*Helianthus annuus*))

[0965] IPOHE : 담쟁이덩굴엽 모닝글로리 (이포모에아 헤데라세아(*Ipomoea hederecea*))

[0966] SETFA : 가을 강아지풀 (세타리아 파베리(*Setaria faberi*))

- [0967] kg ai/ha: 헥타르당 킬로그램 활성 성분
- [0968] n/t: 시험하지 않음
- [0969] 실시예 C. 출아후 제초 활성의 평가
- [0970] 출아후 시험 II: 목적하는 시험 식물 종의 종자 또는 소견과를 64 제곱 센티미터의 표면적을 갖는 플라스틱 포트 내에, 전형적으로 6.0 내지 6.8의 pH 및 약 30 퍼센트의 유기 물질 함량을 갖는 메트로-믹스® 360 식재 혼합물에 식재하였다. 우수한 발아 및 건강한 식물을 보장해야 하는 경우에, 살진균제 처리 및/또는 다른 화학 물질 또는 물리적 처리를 적용하였다. 식물을 낮 동안 약 23-29℃ 및 밤 동안 22-28℃에서 유지되는 대략 15시간의 광주기를 갖는 온실에서 7-21일 동안 성장시켰다. 영양소 및 물을 정기적으로 첨가하고, 필요한 경우에 오버헤드 금속 할라이드 1000-와트 램프로 보충 조명을 제공하였다. 식물이 제1 또는 제2 본엽기에 도달하였을 때 시험에 사용하였다.
- [0971] 시험할 가장 높은 비율에 의해 결정된 칭량된 양의 각각의 시험 화합물을 25 mL 유리 바이알에 넣고, 4 mL의 아세톤 및 DMSO 97:3 v/v 혼합물 중에 용해시켜 진한 원액을 수득하였다. 시험 화합물이 용이하게 용해되지 않는 경우, 혼합물을 가온하고/거나 초음파처리하였다. 획득된 진한 원액을 아세톤, 물, 이소프로필 알콜, DMSO, 아트플러스(Atpplus) 411F 작물 오일 농축물 및 트리톤® X-155 계면활성제를 48.5:39:10:1.5:1.0:0.02 v/v 비로 함유하는 수성 혼합물 20 mL로 희석하여 가장 높은 적용률을 함유하는 분무 용액을 수득하였다. 높은 비율 용액 12 mL를 아세톤 및 DMSO의 97:3 v/v 혼합물 2 mL, 및 아세톤, 물, 이소프로필 알콜, DMSO, 아트플러스 411F 작물 오일 농축물 및 트리톤 X-155 계면활성제를 48.5:39:10:1.5:1.0:0.02 v/v 비로 함유하는 수성 혼합물 10 mL를 함유하는 용액에 연속적으로 희석하여 상기 높은 비율 용액의 1/2X, 1/4X, 1/8X 및 1/16X 비율을 수득함으로써 추가의 적용률을 수득하였다. 화합물 요건은 187 헥타르당 리터 (L/ha) 비율에서 12 mL 적용 부피를 기준으로 한다. 제제화된 화합물은 평균 식물 캐노피 높이보다 18인치 (43 cm) 높은 분무 높이에서 0.503 제곱 미터의 적용 영역 상에 187 L/ha를 전달하도록 보정된 8002E 노즐이 구비된 오버헤드 만텔 트랙 분무기로 식물 재료에 적용하였다. 대조군 식물은 용매 블랭크를 동일한 방식으로 분무하였다.
- [0972] 처리된 식물 및 대조군 식물을 상기 기재된 온실에 두고, 지하관개로 물을 대어 시험 화합물이 씻겨 나가는 것을 방지하였다. 14일 후, 시험 식물의 상태를 비처리 식물의 것과 비교하여 시각적으로 결정하고, 0은 어떠한 손상도 없음에 상응하고, 100은 완전한 사멸에 상응하는 것인 0 내지 100 퍼센트의 척도 상에서 점수를 매기고, 표 A에서 나타낸 바와 같이 표시하였다. 시험된 화합물, 사용된 적용률, 시험된 식물 종 및 결과의 일부를 표 5에 제공하였다.

표 5. 주요 광엽 잡초 및 작물 종에 대한 출아후 시험 II 제초 활성

화합물 번호	적용률 (g ai/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 14 일 후						
		ABUTH	AMARE	BRSNN	CHEAL	EPHHL	HELAN	VIOTR
20	70	A	A	A	A	A	A	A
	140	A	A	A	A	A	A	A
216	70	A	A	C	A	A	A	B
	140	A	A	B	A	A	A	A
217	70	A	A	B	A	A	A	A
	140	A	A	A	A	A	A	A
135	70	A	A	D	A	A	A	D
	140	A	A	D	A	A	A	D
156	70	D	A	C	A	B	A	D
	140	C	A	B	A	B	A	D
16	70	B	n/t	G	A	A	A	F
	140	A	A	G	A	A	A	F
95	70	D	A	G	A	A	A	G
	140	C	A	F	A	A	A	G
31	70	G	A	F	D	G	A	G
	140	G	A	E	B	G	A	G

화합물 번호	적용물 (g ai/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 14 일 후						
		ABUTH	AMARE	BRNN	CHEAL	EPHL	HELAN	VIOTR
149	70	A	A	B	A	A	A	B
	140	A	A	A	A	A	A	B
114	70	A	A	B	A	A	A	A
	140	A	A	A	A	A	A	A
85	70	A	A	E	B	A	B	G
	140	A	A	D	A	A	A	G
142	70	A	A	G	A	A	A	C
	140	A	A	G	A	A	A	B
118	70	A	A	A	A	A	A	B
	140	A	A	A	A	A	A	A
45	70	A	A	A	A	A	A	B
	140	A	A	A	A	A	A	A
91	70	B	A	C	B	A	B	A
	140	A	A	B	B	A	B	A
143	70	B	D	D	B	A	D	F
	140	B	B	B	B	A	B	F
190	70	G	G	G	D	G	G	G
	140	G	F	G	F	G	G	G
39	70	F	G	G	B	B	A	F

화합물 번호	적용률 (g ai/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 14 일 후						
		ABUTH	AMARE	BRNN	CHEAL	EPHHL	HELAN	VIOTR
	140	D	G	F	A	A	A	F
165	70	B	B	C	A	A	A	E
	140	A	B	B	A	A	A	A
160	70	F	B	G	D	E	B	G
	140	E	A	G	C	D	A	G
204	70	A	A	B	A	A	A	C
	140	A	A	A	A	A	A	A
186	70	A	A	B	A	A	B	B
	140	A	A	A	A	A	A	A
209	70	A	A	B	A	A	A	G
	140	A	A	B	A	A	A	G
134	70	B	B	A	A	A	A	A
	140	B	A	A	A	A	A	A
80	70	G	D	G	A	C	D	G
	140	G	B	G	A	C	C	G
199	70	A	A	B	B	D	C	G
	140	A	A	A	A	B	A	F
206	70	A	A	C	B	A	D	E
	140	A	A	B	B	A	B	D

화합물 번호	적용률 (g ai/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 14 일 후						
		ABUTH	AMARE	BRNN	CHEAL	EPHIL	HELAN	VIOTR
180	70	B	E	B	A	D	B	G
	140	A	C	A	A	C	B	G
213	66	A	A	B	A	A	A	G
	132	A	A	B	A	A	A	G
196	70	A	A	F	A	A	A	G
	140	A	A	F	A	A	A	G
181	70	A	B	B	A	B	A	G
	140	A	A	A	A	A	A	G
212	70	A	A	A	A	A	A	G
	140	A	A	A	A	A	A	G
211	70	A	A	D	A	A	A	G
	140	A	A	B	A	A	A	G
109	70	A	A	A	A	A	G	A
	140	A	A	A	A	A	A	A
147	70	A	A	A	A	A	A	A
	140	G	A	A	A	A	A	A
210	70	B	A	C	A	A	A	G
	140	A	A	C	A	A	A	G
167	70	B	A	A	A	A	A	A

화합물 번호	적용률 (g ai/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 14 일 후						
		ABUTH	AMARE	BRNN	CHEAL	EPHHL	HELAN	VIOTR
	140	A	A	A	A	A	A	B
215	70	A	A	A	A	A	A	G
	140	A	A	A	A	A	A	n/t
214	70	A	A	A	A	A	A	C
	140	A	A	A	A	A	A	C
175	70	E	E	G	G	B	E	G
	140	E	A	G	F	B	D	G
7	70	A	A	B	A	B	B	G
	140	A	A	B	A	A	A	G
62	70	C	A	A	B	A	B	G
	140	C	n/t	A	B	A	A	G
64	70	A	E	C	A	A	A	D
	140	A	C	B	A	A	A	D
76	70	A	A	B	B	A	B	E
	140	A	A	A	A	n/t	A	D
172	70	A	A	C	B	A	A	E
	140	A	A	C	B	A	A	D
106	70	G	G	G	G	G	G	G
	140	G	G	G	G	G	G	G

화합물 번호	적용률 (g ai/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 14 일 후						
		ABUTH	AMARE	BRNN	CHEAL	EPHHL	HELAN	VIOTR
49	70	A	A	A	A	n/t	A	A
	140	A	A	A	A	n/t	A	A
21	70	A	A	A	A	A	A	A
	140	A	A	A	A	A	A	A
132	70	A	A	A	A	A	A	A
	140	A	A	A	A	A	A	A
157	70	B	A	A	A	A	A	A
	140	B	A	A	A	A	A	A
152	70	B	B	B	B	A	C	G
	140	B	B	B	B	A	B	G
103	70	E	G	G	G	G	C	G
	140	E	G	F	B	G	C	G
99	70	A	A	A	A	A	A	A
	140	A	A	A	A	A	A	A
67	70	A	A	G	A	A	B	G
	140	A	A	D	A	A	A	G
158	70	A	A	D	A	A	C	G
	140	A	A	C	A	A	C	G
141	70	B	A	A	B	A	A	A

화합물 번호	적용률 (g ai/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 14 일 후							
		ABUTH	AMARE	BRSNN	CHEAL	EPHHL	HELAN	VIOTR	
	140	B	A	A	B	A	A	A	
104	70	E	G	G	G	C	C	G	
	140	E	G	G	G	B	C	G	
133	70	B	C	C	A	B	A	G	
	140	A	C	A	A	A	A	F	
71	70	G	D	E	B	A	D	G	
	140	E	C	E	B	A	C	G	
121	70	B	G	B	C	E	B	G	
	140	B	G	A	A	A	A	G	
168	70	A	A	A	A	A	A	G	
	140	A	A	A	A	A	A	F	
4	70	A	B	A	A	A	C	G	
	140	A	B	A	A	A	B	G	
97	70	B	A	B	B	A	C	D	
	140	A	A	A	A	A	A	A	
18	70	C	G	C	B	A	A	G	
	140	C	G	A	A	A	A	E	
54	70	B	A	A	A	A	B	F	
	140	B	A	A	A	A	A	E	

화합물 번호	적용률 (g ai/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 14 일 후						
		ABUTH	AMARE	BRNN	CHEAL	EPHL	HELAN	VOTR
88	70	C	B	A	n/t	A	B	E
	140	A	B	A	A	A	B	D
59	70	G	G	F	G	G	D	G
	140	G	G	E	D	G	D	G
41	70	G	G	G	G	G	D	G
	140	G	G	E	D	G	C	G
108	70	E	C	B	D	B	B	G
	140	C	A	B	C	A	A	E
122	70	A	A	A	A	A	B	A
	140	A	A	A	A	A	A	B
24	70	A	C	A	A	A	B	E
	140	A	B	A	A	A	A	A
52	70	A	A	A	A	A	A	A
	140	A	A	A	A	A	A	A
9	70	G	G	G	G	G	G	G
	140	G	G	G	G	G	G	G
163	70	B	A	A	A	A	A	A
	140	B	A	A	A	A	A	A
169	70	B	A	A	A	A	A	A

화합물 번호	적용률 (g ai/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 14 일 후						
		ABUTH	AMARE	BRNN	CHEAL	EPHHL	HELAN	VIOTR
	140	B	A	A	A	A	A	A
22	70	G	G	G	E	G	E	G
	140	G	G	D	C	A	C	G
50	70	D	G	G	G	E	E	G
	140	D	G	G	G	A	D	G
82	70	A	A	B	B	A	A	D
	140	A	A	B	A	A	A	C
72	70	B	A	B	A	A	A	D
	140	B	A	B	A	A	A	D
	140	B	A	B	A	A	A	D
35	70	A	C	A	A	A	A	B
	140	A	A	A	A	A	A	A
46	70	A	B	A	A	A	B	E
	140	A	A	A	A	A	A	A
89	70	B	B	A	A	A	A	A
	140	A	A	A	A	A	A	A
84	70	G	G	G	G	G	n/t	G
	140	G	G	G	G	G	D	G
154	70	G	G	G	G	A	C	G
	140	E	G	D	E	A	C	G

화합물 번호	적용률 (g ai/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 14 일 후						
		ABUTH	AMARE	BRSNN	CHEAL	EPHHL	HELAN	VIOTR
129	70	A	A	B	A	A	C	A
	140	A	A	A	A	A	B	A
38	70	A	B	A	B	A	C	A
	140	A	A	A	A	A	B	A
183	70	C	A	D	A	A	B	G
	140	A	A	B	A	A	B	G
92	70	G	E	F	B	A	D	G
	140	G	D	E	B	A	C	G
140	70	G	G	G	G	B	D	G
	140	G	G	G	G	B	C	G
19	70	G	G	G	G	G	C	G
	140	G	G	D	G	F	C	G
8	70	A	A	A	A	A	A	A
	140	A	A	A	A	A	A	A
26	70	B	D	F	G	A	B	G
	140	B	C	F	G	A	B	G
29	70	B	D	E	A	A	B	G
	140	B	D	D	A	A	B	G
63	70	D	D	C	B	A	B	C

화합물 번호	적용률 (g ai/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 14 일 후						
		ABUTH	AMARE	BRSSN	CHEAL	EPHHL	HELAN	VIOTR
	140	B	C	B	A	A	B	A
128	70	G	E	F	E	E	E	G
	140	F	E	E	E	E	E	G
58	70	B	B	D	A	G	A	G
	140	A	A	C	A	G	A	G
146	70	C	C	B	B	G	A	G
	140	B	B	B	B	G	A	G
47	70	A	A	A	A	B	A	G
	140	A	A	A	A	A	A	G
125	70	A	A	A	A	F	A	G
	140	A	A	A	A	E	A	G
189	70	C	A	E	B	G	B	n/t
	140	C	A	D	B	G	B	G
200	70	A	A	A	A	A	B	C
	140	A	A	A	A	A	A	A
12	70	C	G	G	G	E	G	G
	140	B	E	G	G	A	G	G
126	70	A	A	C	A	A	B	G
	140	A	A	B	A	A	A	F

화합물 번호	적용률 (g ai/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 14 일 후						
		ABUTH	AMARE	BRNN	CHEAL	EPHHL	HELAN	VIOTR
48	140	A	A	B	B	A	A	G
23	70	A	A	G	B	A	G	G
	140	A	A	G	A	A	B	G
10	140	A	A	D	C	A	B	G
34	70	A	A	B	A	C	A	G
	140	A	A	A	A	B	A	G
153	140	A	A	A	A	G	A	G
15	140	B	G	G	F	G	A	G
33	140	D	G	F	G	G	A	G
170	140	G	G	G	D	G	B	G
105	140	G	G	G	G	G	A	G
1	140	D	D	G	B	G	A	G
14	140	G	G	G	A	G	A	G
51	70	A	A	A	A	A	A	A
	140	A	A	A	A	A	A	A
42	70	B	A	A	A	A	A	A
	140	A	A	A	A	A	A	A
55	70	A	A	A	A	A	A	A
	140	A	A	A	A	A	A	A

화합물 번호	적용률 (g ai/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 14 일 후						
		ABUTH	AMARE	BRSNN	CHEAL	EPHHL	HELAN	VIOTR
69	70	B	A	A	A	A	A	A
	140	B	A	A	A	A	A	A
86	70	A	n/t	C	A	A	A	A
	140	A	n/t	A	A	A	A	A
100	70	B	B	D	A	E	B	G
	140	B	A	D	A	E	B	G
166	140	G	A	G	D	A	B	G
	140	E	G	G	G	A	G	G
102	140	G	G	G	G	A	D	G
	140	G	G	G	G	G	G	G
127	70	A	A	B	A	A	B	A
	140	A	A	A	A	A	A	A
56	70	A	A	B	A	A	C	A
	140	A	A	B	A	A	B	A
3	70	A	A	B	A	A	B	A
	140	A	A	A	A	A	B	A
131	70	A	A	A	A	A	B	A
	140	A	A	A	A	A	A	A
159	70	A	A	B	A	A	C	G

화합물 번호	적용률 (g ai/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 14 일 후						
		ABUTH	AMARE	BRNN	CHEAL	EPHHL	HELAN	VIOTR
	140	A	A	B	A	A	A	E
124	70	B	A	A	A	A	B	A
	140	B	A	A	A	A	B	A
96	70	A	B	C	A	C	A	G
	140	A	A	B	A	E	A	G
173	70	D	B	B	B	G	A	G
	140	B	A	B	B	E	A	G
28	140	G	A	G	A	A	B	G
130	140	G	G	G	G	A	B	G
161	70	C	E	A	A	G	A	G
	140	B	A	A	A	G	A	G
53	70	G	G	G	G	A	G	G
	140	G	G	G	G	A	G	G
93	70	A	A	G	B	A	B	F
	140	A	A	D	A	A	B	n/t
74	70	A	A	B	A	A	A	A
	140	A	A	B	A	A	A	A
61	70	B	A	G	C	A	A	G
	140	A	A	G	B	A	A	G

화합물 번호	적용률 (g ai/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 14 일 후						
		ABUTH	AMARE	BRNN	CHEAL	EPHHL	HELAN	VIOTR
81	140	A	A	D	A	C	A	G
136	70	A	B	B	A	G	A	G
	140	A	B	B	A	G	A	G
78	70	A	B	B	B	G	A	G
	140	A	A	A	B	G	A	G
116	70	A	C	B	B	G	A	G
	140	A	B	A	B	G	A	G
2	70	A	B	A	A	A	A	F
	140	A	B	A	A	A	A	A
101	70	B	B	A	B	A	B	G
	140	B	B	A	B	A	B	G
11	70	A	A	A	A	A	A	G
	140	A	A	A	A	A	A	E
119	70	C	B	A	A	A	B	G
	140	B	A	A	A	A	B	G
107	70	C	G	G	A	A	C	G
	140	C	G	G	A	A	B	G
40	66	C	G	E	E	G	B	G
	132	A	E	E	D	G	A	G

화합물 번호	적용률 (g ai/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 14 일 후						
		ABUTH	AMARE	BRSNN	CHEAL	EPHHL	HELAN	VIOTR
150	70	E	A	E	B	A	A	G
	140	D	A	D	B	A	A	G
60	70	G	G	G	G	G	E	G
	140	G	G	G	G	G	C	G
36	70	G	A	G	B	A	B	G
	140	G	A	G	B	A	B	G
57	70	B	B	D	B	B	B	G
	140	B	A	C	B	B	B	G
17	70	A	A	A	B	A	B	G
	140	A	A	A	A	A	A	G
117	70	A	A	C	A	A	B	G
	140	A	A	C	A	A	B	G
83	70	G	G	G	G	G	B	G
	140	F	G	G	G	G	B	G
111	70	F	G	G	F	G	C	G
	140	D	G	G	D	G	B	G
94	70	G	G	G	B	G	B	G
	140	G	E	G	B	G	B	G
192	70	G	G	G	G	G	G	G

화합물 번호	적용률 (g ai/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 14 일 후						
		ABUTH	AMARE	BRSNN	CHEAL	EPHHL	HELAN	VIOTR
	140	G	G	G	G	G	G	G
112	70	A	A	B	B	G	A	G
	140	A	A	B	B	G	A	G
79	66	B	D	B	A	G	A	G
	132	A	C	B	A	G	A	G
155	70	G	G	E	B	G	B	G
	140	G	G	D	A	G	B	G
66	70	B	A	E	B	A	B	G
	140	B	A	E	B	A	B	G
13	70	B	B	B	A	G	A	G
	140	A	A	B	A	F	A	G
27	70	D	D	D	B	A	B	A
	140	C	C	D	B	A	B	A
77	70	B	A	C	A	A	B	G
	140	A	A	B	A	A	B	G
145	70	E	C	A	A	D	A	G
	140	D	A	A	A	D	A	G
37	70	E	B	A	A	A	B	A
	140	D	B	A	A	A	B	A

화합물 번호	적용률 (g ai/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 14 일 후						
		ABUTH	AMARE	BRSN	CHEAL	EPHHL	HELAN	VIOTR
73	70	B	A	A	B	E	A	E
	140	B	A	A	B	D	A	E
171	70	C	B	B	B	A	B	A
	140	B	A	B	B	A	B	A
43	70	B	A	A	C	D	A	A
	140	B	A	A	C	D	A	A
113	70	B	A	A	A	A	A	A
	140	B	A	A	A	A	A	A
115	70	B	A	D	A	A	B	A
	140	B	A	C	A	A	A	A
110	70	A	A	A	A	A	A	E
	140	A	A	A	A	A	A	E
197	70	A	A	A	A	A	B	D
	140	A	A	B	A	A	B	C
191	70	D	A	A	A	A	A	E
	140	A	A	A	A	A	A	E
137	70	C	G	G	G	G	E	G
	140	B	G	G	E	D	D	G
98	70	G	G	G	G	G	G	G

화합물 번호	적용률 (g ai/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 14 일 후						
		ABUTH	AMARE	BRSNN	CHEAL	EPHHL	HELAN	VIOTR
	140	G	G	G	G	G	G	G
32	70	D	C	G	A	A	B	G
	140	D	A	E	A	A	B	G
5	70	G	G	G	G	G	B	G
	140	G	G	G	G	G	B	G
151	70	A	n/t	C	A	G	B	G
	140	A	n/t	B	A	G	B	G
87	70	B	n/t	A	B	G	B	D
	140	B	n/t	A	B	G	B	B
123	70	G	A	G	G	A	C	G
	140	G	A	D	G	A	C	E
70	70	A	A	C	A	A	B	D
	140	A	A	B	A	A	A	C
44	70	F	C	G	C	B	B	G
	140	D	A	G	B	A	A	G
65	70	G	A	G	D	A	B	G
	140	G	A	F	C	A	A	F
144	70	B	A	B	B	C	B	C
	140	A	A	A	A	B	A	B

회합물 번호	적용률 (g ai/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 14 일 후						
		ABUTH	AMARE	BRNN	CHEAL	EPHHL	HELAN	VIOTR
148	70	C	G	E	B	B	E	E
	140	C	G	D	A	C	D	D
90	70	B	A	A	A	A	F	A
	140	B	A	A	A	A	C	A
162	70	B	A	A	A	A	B	A
	140	B	A	A	A	A	B	A
68	70	B	A	A	A	A	D	A
	140	B	A	A	A	A	G	A
202	70	A	A	C	A	A	A	D
	140	A	A	B	A	A	A	D
198	70	D	D	C	B	E	A	F
	140	C	A	C	A	D	A	D
208	70	G	G	G	G	F	G	G
	140	G	G	G	G	E	E	G
205	70	A	A	D	A	A	B	E
	140	A	A	B	A	A	A	D
176	70	A	A	A	B	A	A	F
	140	A	A	A	B	A	A	E
193	70	D	C	D	B	B	D	G

화합물 번호	적용률 (g ai/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 14 일 후						
		ABUTH	AMARE	BRSNN	CHEAL	EPHHL	HELAN	VIOTR
	140	C	A	D	A	A	C	F
177	70	B	C	F	C	A	F	G
	140	B	B	C	B	A	G	G
179	70	A	A	F	A	A	B	G
	140	A	A	E	A	A	B	G
184	70	A	B	B	B	B	A	G
	140	A	A	A	A	A	A	G
185	70	F	G	F	D	C	C	G
	140	E	G	E	A	B	B	G
174	70	C	A	A	A	A	A	E
	140	C	A	A	A	A	A	D
178	70	C	A	A	A	B	A	F
	140	C	A	A	A	A	A	E
203	70	F	E	F	B	A	D	G
	140	F	A	E	A	A	C	F
187	70	E	A	C	C	A	E	G
	140	D	A	C	A	A	D	G
195	70	G	G	E	E	F	D	G
	140	G	E	D	C	F	B	G

화합물 번호	적용률 (g ai/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 14 일 후						
		ABUTH	AMARE	BRSNN	CHEAL	EPHHL	HELAN	VIOTR
188	70	C	A	D	A	A	C	G
	140	A	A	D	B	A	C	G
194	70	D	A	D	C	B	B	G
	140	C	A	C	B	B	A	G
201	70	F	F	A	B	E	D	G
	140	D	D	A	C	B	C	G

- [0995]
- [0996] ABUTH : 어저귀 (아부틸론 테오프라스티(*Abutilon theophrasti*))
- [0997] AMARE : 털비름 (아마란투스 레트로플렉수스(*Amaranthus retroflexus*))
- [0998] BRSNN : 유지종자 평지, 카놀라 (브라시카 나푸스 (*Brassica napus*))
- [0999] CHEAL : 명아주 (케노포디움 알BUM (*Chenopodium album*))
- [1000] EPHHL : 야생 포인세티아 (유포르비아 헤테로필라(*Euphorbia heterophylla*))
- [1001] HELAN : 해바라기 (헬리안투스 안누스(*Helianthus annuus*))
- [1002] VIOTR : 야생 팬지 (비올라 트리콜로르(*Viola tricolor*))
- [1003] g ai/ha: 헥타르당 그램 활성 성분
- [1004] n/t : 시험하지 않음

[1005] 표 6. 주요 화분과 및 사초과 잡초 뿐만 아니라 그래스 작물에 대한 출아후 시험 II 제조 활성

화합물 번호	적용률 (g ai/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 14 일 후							
		CYPES	DIGSA	ECHCG	SETFA	SORVU	ORYSA	TRZSS	ZEAMX
20	70	A	A	A	A	A	D	C	A
	140	A	A	A	A	A	D	C	A
216	70	B	F	A	F	B	G	G	B
	140	A	C	A	E	B	G	F	B
217	70	B	B	A	A	B	D	C	B
	140	B	B	A	A	B	C	C	A
135	70	B	D	A	D	C	G	F	C
	140	A	C	A	C	B	G	F	C
156	70	D	D	C	B	D	G	E	C
	140	B	C	B	A	D	G	D	C
16	70	A	D	C	E	D	G	F	B
	140	A	C	A	D	D	G	E	B
95	70	E	G	B	G	D	G	G	G
	140	C	G	A	G	D	G	G	G
31	70	G	D	C	G	G	G	G	G
	140	G	D	B	G	G	G	G	G

[1006]

화합물 번호	적용률 (g ai/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 14 일 후							
		CYPES	DIGSA	ECHCG	SETFA	SORVU	ORYSA	TRZSS	ZEAMX
149	70	A	F	A	F	A	G	F	C
	140	A	F	A	F	A	G	E	B
114	70	A	D	A	D	A	G	F	B
	140	A	D	A	C	A	G	E	B
85	70	B	F	A	E	C	G	F	C
	140	B	F	A	C	B	G	F	C
142	70	C	D	C	G	E	G	G	E
	140	B	D	B	G	E	G	F	D
118	70	A	C	A	E	A	F	C	D
	140	A	B	A	D	A	E	C	B
45	70	B	B	A	B	D	E	D	B
	140	A	B	A	B	A	D	C	A
91	70	A	B	A	C	C	G	E	B
	140	A	B	A	B	C	G	E	B
143	70	B	C	A	C	B	G	E	B
	140	B	C	A	C	B	F	D	B
190	70	G	G	G	G	G	G	G	G
	140	G	G	G	G	G	G	G	G
39	70	D	F	B	G	F	G	F	D

회합물 번호	적용률 (g ai/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 14 일 후							
		CYPES	DIGSA	ECHCG	SETFA	SORVU	ORYSA	TRZSS	ZEAMX
	140	C	E	B	F	D	G	E	D
165	70	A	D	B	D	D	G	E	C
	140	A	D	A	B	D	G	E	A
160	70	G	G	G	G	G	G	G	G
	140	G	G	G	G	G	G	G	G
204	70	B	D	A	G	C	G	E	C
	140	B	D	A	E	B	G	D	C
186	70	B	E	B	G	D	G	D	C
	140	B	D	A	D	C	F	D	B
209	70	B	E	A	E	A	G	G	C
	140	B	D	A	C	A	G	G	B
134	70	A	C	A	A	B	E	D	E
	140	A	B	A	A	B	E	C	D
80	70	G	G	G	G	G	G	G	G
	140	G	G	G	G	G	G	G	G
199	70	G	G	G	G	G	G	G	G
	140	G	G	G	G	G	G	G	G
206	70	G	G	G	G	G	G	G	G
	140	G	G	G	G	G	G	G	G

화합물 번호	적용률 (g ai/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 14 일 후							
		CYPES	DIGSA	ECHCG	SETFA	SORVU	ORYSA	TRZSS	ZEAMX
180	70	F	G	G	G	G	G	G	G
	140	E	G	G	G	F	G	G	G
213	66	G	G	B	G	C	G	G	D
	132	E	G	B	G	A	G	G	C
196	70	B	E	A	G	C	G	G	G
	140	B	E	A	G	C	G	G	C
181	70	A	G	G	G	G	G	G	G
	140	A	G	G	G	F	G	G	F
212	70	G	G	C	E	D	D	D	C
	140	F	F	B	C	C	D	D	B
211	70	E	G	E	E	G	G	G	F
	140	D	G	B	D	F	G	G	E
109	70	A	B	A	A	B	E	E	B
	140	A	A	A	A	A	E	D	B
147	70	A	B	A	G	A	D	D	A
	140	A	A	A	A	A	C	D	A
210	70	G	G	D	C	G	G	G	G
	140	G	G	C	B	G	F	G	E
167	70	B	C	A	B	B	G	D	C

화합물 번호	적용률 (g ai/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 14 일 후							
		CYPES	DIGSA	ECHCG	SETFA	SORVU	ORYSA	TRZSS	ZEAMX
	140	A	C	A	A	B	G	D	B
215	70	A	G	G	G	E	G	G	F
	140	A	G	A	G	D	G	G	E
214	70	A	G	A	G	C	G	G	B
	140	A	G	A	F	B	E	G	B
175	70	G	G	G	G	G	G	G	G
	140	G	G	G	G	G	G	G	G
7	70	C	C	C	D	B	G	F	A
	140	B	B	A	A	B	G	E	A
62	70	A	B	A	A	C	G	E	C
	140	A	B	A	A	C	G	E	B
64	70	E	D	E	F	F	G	F	A
	140	D	B	B	D	E	G	E	A
76	70	G	C	B	E	E	G	E	G
	140	F	B	A	D	E	F	E	A
172	70	A	C	A	A	C	G	E	A
	140	A	C	A	A	C	G	D	A
106	70	G	G	G	G	G	G	G	G
	140	G	G	G	G	G	G	G	G

화합물 번호	적용률 (g ai/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 14일 후							
		CYPES	DIGSA	ECHCG	SETFA	SORVU	ORYSA	TRZSS	ZEAMX
49	70	A	D	B	D	A	G	E	A
	140	B	C	A	A	A	G	D	A
21	70	A	C	A	A	A	G	D	A
	140	A	C	A	A	A	G	D	A
132	70	E	B	B	G	B	G	G	A
	140	B	B	C	D	A	G	F	A
157	70	E	C	A	A	B	G	E	A
	140	E	B	A	A	A	G	E	A
152	70	D	E	n/t	G	E	G	G	A
	140	A	C	B	E	E	G	G	A
103	70	G	G	G	G	G	G	G	G
	140	E	G	G	G	G	G	G	G
99	70	n/t	C	A	A	A	G	E	A
	140	A	B	A	A	A	G	D	A
67	70	A	D	B	G	B	G	G	G
	140	A	C	A	G	B	G	G	E
158	70	E	D	D	G	B	G	G	G
	140	E	D	C	G	B	G	E	G
141	70	G	C	B	C	B	G	D	A

화합물 번호	적용률 (g ai/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 14 일 후							
		CYPES	DIGSA	ECHCG	SETFA	SORVU	ORYSA	TRZSS	ZEAMX
	140	A	C	A	A	B	G	D	A
104	70	G	G	G	G	G	G	G	E
	140	E	G	G	G	E	G	G	A
133	70	F	G	G	E	D	G	F	A
	140	E	D	D	C	C	G	F	A
71	70	G	D	B	D	F	G	F	A
	140	G	E	B	D	E	G	E	A
121	70	E	G	G	G	E	G	G	A
	140	E	G	G	G	D	G	G	A
168	70	A	C	A	A	A	G	D	A
	140	A	C	A	A	A	G	D	A
4	70	E	D	C	D	C	G	C	G
	140	A	C	B	D	C	G	C	G
97	70	A	E	G	G	G	G	F	A
	140	A	E	D	F	F	G	D	A
18	70	A	G	G	G	F	G	F	A
	140	A	F	E	G	G	G	F	A
54	70	E	G	A	C	D	G	E	A
	140	A	D	A	C	C	G	E	A

화합물 번호	적용률 (g ai/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 14 일 후							
		CYPES	DIGSA	ECHCG	SETFA	SORVU	ORYSA	TRZSS	ZEAMX
88	70	B	G	C	D	C	G	D	E
	140	A	G	C	B	B	G	D	E
59	70	G	G	G	G	G	G	G	G
	140	G	G	G	G	G	G	G	G
41	70	G	G	G	G	G	G	G	G
	140	G	G	G	G	G	G	G	G
108	70	E	D	E	E	G	G	F	G
	140	F	D	C	F	F	G	F	E
122	70	A	E	B	n/t	A	G	E	A
	140	A	E	A	A	B	G	E	A
24	70	A	E	A	D	B	G	G	A
	140	A	D	A	B	B	G	F	A
52	70	A	B	D	n/t	A	G	F	A
	140	A	B	C	B	A	G	F	A
9	70	G	G	G	G	G	G	G	G
	140	G	G	G	G	G	G	G	G
163	70	A	C	B	B	B	G	D	E
	140	A	B	B	A	B	G	D	D
169	70	A	C	C	A	A	F	F	A

화합물 번호	적용률 (g ai/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 14 일 후							
		CYPES	DIGSA	ECHCG	SETFA	SORVU	ORYSA	TRZSS	ZEAMX
	140	A	B	C	A	A	F	E	A
22	70	G	G	G	G	G	G	G	G
	140	G	G	E	G	G	G	G	E
50	70	G	G	E	F	G	G	G	A
	140	G	E	C	E	G	G	G	A
82	70	A	G	E	G	G	G	F	A
	140	A	G	B	G	E	G	F	A
72	70	G	E	A	E	B	G	D	D
	140	A	D	A	C	A	G	D	D
35	70	A	E	F	G	E	G	F	A
	140	A	B	B	E	D	G	E	A
46	70	A	E	B	C	E	G	E	E
	140	A	D	B	B	D	G	D	E
89	70	E	E	B	B	B	G	G	E
	140	A	D	B	B	A	D	E	A
84	70	G	G	G	G	G	G	G	G
	140	G	G	G	G	G	G	G	G
154	70	G	G	E	G	G	G	G	G
	140	G	G	E	G	G	G	G	G

화합물 번호	적용률 (g ai/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 14 일 후							
		CYPES	DIGSA	ECHCG	SETFA	SORVU	ORYSA	TRZSS	ZEAMX
129	70	A	D	C	n/t	A	G	E	D
	140	n/t	D	C	n/t	A	G	E	C
38	70	A	C	A	A	B	G	D	B
	140	A	C	A	A	B	G	D	A
183	70	G	G	n/t	G	F	G	G	G
	140	G	G	n/t	G	E	G	G	G
92	70	G	D	n/t	n/t	F	G	F	D
	140	G	D	n/t	n/t	E	G	E	D
140	70	G	G	n/t	n/t	G	G	G	G
	140	G	G	n/t	n/t	G	G	G	G
19	70	G	G	G	G	G	G	G	G
	140	G	G	G	G	G	G	G	G
8	70	A	C	B	C	A	F	D	D
	140	A	B	B	A	A	E	C	B
26	70	n/t	G	G	G	G	G	E	G
	140	n/t	G	G	G	G	G	E	E
29	70	F	F	G	G	E	G	G	G
	140	E	D	G	G	E	G	G	G
63	70	n/t	D	C	n/t	G	G	D	D

화합물 번호	적용률 (g ai/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 14 일 후							
		CYPES	DIGSA	ECHCG	SETFA	SORVU	ORYSA	TRZSS	ZEAMX
	140	n/t	D	A	A	F	G	D	D
128	70	G	F	E	C	G	G	G	G
	140	G	F	E	C	G	G	G	G
58	70	A	D	G	n/t	E	G	E	D
	140	A	C	C	n/t	E	G	D	D
146	70	A	D	C	n/t	F	G	D	D
	140	A	D	B	n/t	F	G	C	D
47	70	B	C	B	B	B	G	E	B
	140	A	C	B	A	B	G	E	B
125	70	A	D	n/t	B	D	G	D	D
	140	A	D	n/t	A	B	G	D	D
189	70	G	G	n/t	G	G	G	G	G
	140	G	G	n/t	G	G	G	G	G
200	70	G	C	C	E	G	G	F	E
	140	E	C	C	C	G	G	F	D
12	70	F	G	G	G	G	G	G	G
	140	E	G	G	G	G	G	G	G
126	70	D	C	A	G	C	G	G	G
	140	F	B	A	C	B	G	G	D

화합물 번호	적용률 (g ai/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 14 일 후							
		CYPES	DIGSA	ECHCG	SETFA	SORVU	ORYSA	TRZSS	ZEAMX
48	140	G	D	C	G	G	G	F	G
23	70	E	C	B	G	B	G	G	G
	140	C	C	A	E	A	G	G	G
10	140	G	C	B	A	C	G	D	D
34	70	D	G	G	C	F	G	D	D
	140	D	E	G	B	E	G	D	D
153	140	E	E	G	C	G	G	D	D
15	140	G	G	G	G	G	G	G	G
33	140	G	G	G	G	G	G	G	G
170	140	G	G	G	G	G	G	G	G
105	140	G	G	G	G	G	G	G	G
1	140	F	G	G	G	G	G	G	G
14	140	G	G	G	G	G	G	G	G
51	70	A	A	A	A	A	G	D	B
	140	A	n/t	A	A	A	G	B	B
42	70	A	C	A	A	A	F	D	C
	140	A	B	A	A	A	F	C	D
55	70	A	B	A	A	B	G	n/t	D
	140	A	B	A	A	A	G	A	B

화합물 번호	적용물 (g ai/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 14 일 후							
		CYPES	DIGSA	ECHCG	SETFA	SORVU	ORYSA	TRZSS	ZEAMX
69	70	E	A	A	A	A	G	D	C
	140	A	A	A	A	A	G	B	C
86	70	A	G	C	G	C	F	G	D
	140	A	G	B	G	n/t	E	G	D
100	70	G	E	G	G	G	G	F	G
	140	G	D	G	G	G	G	D	E
166	140	E	G	G	G	G	G	G	E
30	140	G	G	G	G	G	G	G	G
102	140	G	G	G	G	G	G	G	G
25	140	G	G	G	G	G	G	G	G
127	70	A	B	A	A	A	G	D	B
	140	A	A	A	A	A	G	C	B
56	70	A	C	A	A	C	G	D	B
	140	A	B	A	A	B	G	D	B
3	70	A	C	B	A	B	F	D	B
	140	A	B	B	A	B	E	D	B
131	70	B	C	A	A	D	G	D	B
	140	B	C	A	A	C	F	C	B
159	70	A	B	B	C	A	G	D	D

화합물 번호	적용률 (g ai/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 14 일 후							
		CYPES	DIGSA	ECHCG	SETFA	SORVU	ORYSA	TRZSS	ZEAMX
	140	A	B	A	A	A	G	D	C
124	70	A	C	B	D	A	F	E	C
	140	A	B	B	A	A	F	D	C
96	70	A	D	G	D	B	G	D	C
	140	A	C	D	C	B	G	C	C
173	70	A	D	C	C	C	G	D	D
	140	A	C	C	B	B	G	D	C
28	140	G	D	G	E	G	G	G	D
130	140	G	G	G	G	G	G	G	G
161	70	A	F	E	B	G	G	D	D
	140	n/t	E	D	B	G	G	D	D
53	70	G	G	G	G	G	G	G	G
	140	G	G	G	G	G	G	G	G
93	70	A	C	B	C	B	G	E	D
	140	A	A	B	C	A	G	E	C
74	70	A	B	B	C	B	G	E	C
	140	A	B	B	B	B	F	D	C
61	70	E	G	E	G	E	G	F	D
	140	E	G	D	G	D	G	F	D

회합물 번호	적용물 (g ai/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 14 일 후							
		CYPES	DIGSA	ECHCG	SETFA	SORVU	ORYSA	TRZSS	ZEAMX
81	140	G	E	G	D	C	G	E	C
136	70	A	D	G	F	D	G	E	D
	140	A	D	G	E	D	G	E	C
78	70	G	G	G	E	G	G	E	G
	140	A	G	G	D	G	G	E	F
116	70	G	E	E	E	F	G	E	E
	140	G	D	D	D	E	G	E	D
2	70	D	n/t	D	E	F	G	E	C
	140	D	D	D	D	D	G	E	C
101	70	E	E	G	G	F	G	F	D
	140	E	D	B	D	E	G	F	D
11	70	E	D	B	D	D	G	E	D
	140	E	D	B	D	C	G	D	D
119	70	E	E	B	D	D	G	E	D
	140	E	D	B	D	D	G	D	D
107	70	G	G	G	G	G	G	G	G
	140	D	G	G	G	G	G	G	G
40	66	G	G	G	G	G	G	G	G
	132	G	G	G	G	G	G	G	G

회합물 번호	적용률 (g ai/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 14일 후							
		CYPES	DIGSA	ECHCG	SETFA	SORVU	ORYSA	TRZSS	ZEAMX
150	70	G	G	G	G	E	G	F	E
	140	E	G	G	D	E	G	E	D
60	70	G	G	G	G	G	G	G	G
	140	G	G	G	G	G	G	G	G
36	70	G	G	D	G	D	G	E	F
	140	A	G	C	G	D	G	E	E
57	70	A	G	G	G	C	G	G	G
	140	A	G	G	G	A	G	G	G
17	70	A	G	C	G	B	D	F	D
	140	A	G	B	E	A	B	E	C
117	70	A	G	C	G	B	E	G	E
	140	A	G	C	E	B	E	G	D
83	70	G	G	G	G	G	G	G	G
	140	G	G	G	G	G	G	G	G
111	70	G	G	G	G	G	G	G	G
	140	G	G	G	G	G	G	G	G
94	70	G	G	G	G	G	G	G	G
	140	G	G	G	G	G	G	G	G
192	70	G	G	G	G	G	G	G	G

화합물 번호	적용률 (g ai/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 14일 후							
		CYPES	DIGSA	ECHCG	SETFA	SORVU	ORYSA	TRZSS	ZEAMX
	140	G	G	G	G	G	G	G	G
112	70	A	D	D	B	B	G	E	D
	140	A	D	D	A	B	G	D	D
79	66	A	D	D	C	D	G	G	D
	132	A	D	D	C	C	G	F	D
155	70	G	G	G	G	G	G	G	G
	140	G	G	G	G	G	G	G	G
66	70	E	D	G	G	C	G	G	G
	140	A	D	D	G	B	G	G	G
13	70	C	D	D	E	B	G	E	D
	140	C	C	C	C	B	G	D	D
27	70	G	G	G	G	G	G	E	G
	140	A	G	G	G	F	G	E	G
77	70	G	C	D	G	E	G	E	G
	140	E	B	D	G	E	G	E	G
145	70	E	B	C	C	B	G	D	C
	140	E	B	C	C	B	G	D	C
37	70	G	E	C	G	C	G	E	G
	140	G	D	C	D	B	G	D	E

회합물 번호	적용률 (g ai/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 14 일 후							
		CYPES	DIGSA	ECHCG	SETFA	SORVU	ORYSA	TRZSS	ZEAMX
73	70	A	G	G	D	B	G	D	D
	140	A	E	D	D	B	G	D	D
171	70	E	G	F	G	G	G	F	D
	140	E	D	D	G	E	G	F	C
43	70	A	C	C	D	A	G	D	C
	140	A	C	D	D	A	F	D	C
113	70	A	C	B	C	B	F	D	B
	140	A	C	B	C	B	D	C	B
115	70	A	B	B	G	B	G	G	G
	140	A	B	B	G	A	G	G	G
110	70	E	C	D	D	B	G	E	E
	140	E	C	C	D	B	G	E	D
197	70	D	E	G	G	D	G	G	D
	140	D	D	C	G	D	G	G	D
191	70	G	D	B	C	E	G	G	E
	140	D	C	C	C	E	G	F	D
137	70	E	G	G	G	G	G	G	G
	140	E	G	G	G	G	G	G	G
98	70	G	G	G	G	G	G	G	G

화합물 번호	적용률 (g ai/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 14 일 후							
		CYPES	DIGSA	ECHCG	SETFA	SORVU	ORYSA	TRZSS	ZEAMX
	140	G	G	G	G	G	G	G	G
32	70	G	G	C	G	D	G	G	E
	140	E	G	C	G	D	G	G	D
5	70	G	G	G	G	G	G	G	G
	140	G	G	G	G	G	G	G	G
151	70	G	G	G	G	D	G	G	D
	140	C	G	E	D	D	G	G	C
87	70	G	D	C	D	D	G	D	D
	140	E	D	C	C	D	G	D	D
123	70	G	G	C	G	F	G	G	E
	140	E	G	B	G	F	G	G	D
70	70	A	B	B	F	B	G	C	A
	140	A	A	A	D	A	G	B	A
44	70	F	G	G	G	G	G	F	G
	140	E	G	G	G	G	G	F	G
65	70	G	G	G	G	G	G	G	G
	140	G	G	G	G	G	G	G	G
144	70	B	D	E	D	C	G	D	D
	140	A	C	C	C	B	G	C	C

화합물 번호	적용률 (g ai/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 14 일 후							
		CYPES	DIGSA	ECHCG	SETFA	SORVU	ORYSA	TRZSS	ZEAMX
148	70	D	G	G	G	G	G	F	G
	140	C	G	G	G	G	F	D	F
90	70	A	B	B	B	A	F	F	D
	140	A	C	B	B	A	G	E	D
162	70	A	C	B	B	B	E	E	D
	140	E	C	C	C	A	E	E	C
68	70	A	C	B	B	A	E	F	G
	140	A	C	C	C	A	E	E	C
202	70	B	F	D	D	D	G	D	F
	140	B	D	A	D	B	G	C	E
198	70	D	G	G	G	G	G	F	G
	140	D	G	G	G	G	G	E	G
208	70	G	G	G	G	G	G	G	G
	140	G	G	G	G	G	G	G	G
205	70	B	F	B	E	D	G	G	F
	140	A	E	B	C	C	G	F	D
176	70	B	E	B	B	D	G	F	G
	140	A	D	B	B	B	G	E	B
193	70	F	G	G	G	G	G	G	G

화합물 번호	적용률 (g ai/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 14 일 후							
		CYPES	DIGSA	ECHCG	SETFA	SORVU	ORYSA	TRZSS	ZEAMX
	140	E	G	G	E	E	G	F	G
177	70	E	G	G	F	G	G	F	G
	140	E	G	D	E	E	G	F	G
179	70	G	G	G	G	G	G	G	G
	140	G	G	F	G	E	G	G	G
184	70	G	G	E	G	G	G	G	G
	140	G	G	D	G	F	G	G	G
185	70	G	G	G	G	G	G	G	G
	140	G	G	G	G	G	G	G	G
174	70	D	G	D	G	G	G	G	G
	140	B	E	B	E	G	G	G	G
178	70	B	G	D	B	E	G	F	G
	140	B	E	B	D	D	G	E	F
203	70	G	G	G	G	G	G	G	G
	140	C	G	G	C	G	G	G	G
187	70	G	G	D	D	G	G	G	G
	140	F	G	D	C	G	G	E	G
195	70	G	G	G	G	G	G	G	G
	140	G	G	G	G	G	G	G	G

화합물 번호	적용률 (g ai/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 14 일 후							
		CYPES	DIGSA	ECHCG	SETFA	SORVU	ORYSA	TRZSS	ZEAMX
188	70	G	G	C	G	E	G	G	G
	140	G	G	D	F	G	G	G	G
194	70	G	G	G	E	G	G	G	G
	140	G	G	G	D	G	G	G	G
201	70	G	G	D	G	G	G	G	G
	140	G	G	E	F	E	G	G	G

[1027]

[1028] ECHCG : 돌피 (에키노클로아 크루스-갈리(*Echinochloa crus-galli*))

[1029] CYPES : 기름골 (시페루스 에스쿨렌투스 (*Cyperus esculentus*))

[1030] DIGSA : 크랩그래스 (디기타리아 산구이날리스(*Digitaria sanguinalis*))

[1031] ORYSA : 벼 (오리자 사티바(*Oryza sativa*))

[1032] SETFA : 가을 강아지풀 (세타리아 파베리(*Setaria faberi*))

[1033] SORVU : 존슨그래스 (소르굼 불가레(*Sorghum vulgare*))

[1034] TRZAS : 밀, 봄 (트리티쿰 아에스티븀(*Triticum aestivum*))

[1035] ZEAMX : 메이즈, 옥수수 (제아 메이스(*Zea mays*))

[1036] g ai/ha: 헥타르당 그램 활성 성분

[1037] n/t: 시험하지 않음

[1038] 실시예 D. 밀 및 보리의 출아후 제초 활성의 평가

[1039] 발아후 시험 III. 목적하는 시험 식물 종의 종자를 103.2 제곱 센티미터 (cm²)의 표면적을 갖는 플라스틱 포트 내에, 전형적으로 6.0 내지 6.8의 pH 및 약 30 퍼센트의 유기 물질 함량을 갖는 선 그로 메트로믹스® 306 식재

혼합물에 식재하였다. 우수한 발아 및 건강한 식물을 보장해야 하는 경우에, 살진균제 처리 및/또는 다른 화학 물질 또는 물리적 처리를 적용하였다. 식물을 낮 동안 약 18℃ 및 밤 동안 17℃에서 유지되는 대략 14시간의 광주기를 갖는 온실에서 7-36일 동안 성장시켰다. 영양소 및 물을 정기적으로 첨가하고, 필요한 경우에 오버헤드 금속 할라이트 1000-와트 램프로 보충 조명을 제공하였다. 식물이 제2 또는 제3 본엽기에 도달하였을 때 시험에 사용하였다.

[1040] 시험할 가장 높은 비율에 의해 결정된 칭량된 양의 각각의 시험 화합물을 25 mL 유리 바이알에 넣고, 4 mL 아세톤 및 DMSO 97:3 v/v 혼합물에 용해시켜 진한 원액을 수득하였다. 시험 화합물이 용이하게 용해되지 않는 경우, 혼합물을 가온하고/거나 초음파처리하였다. 획득된 진한 원액을 아세톤, 물, 이소프로필 알콜, DMSO, 아그리-텍스 작물 오일 농축물 및 X-77 계면활성제를 48:39:10:1.5:1.5:0.02 v/v 비로 함유하는 수성 혼합물 20 mL로 희석하여 가장 높은 적용률을 함유하는 분무 용액을 수득하였다. 높은 비율 용액 12 mL를 아세톤 및 DMSO의 97:3 v/v 혼합물 2 mL, 및 아세톤, 물, 이소프로필 알콜, DMSO, 아그리-텍스 작물 오일 농축물 및 X-77 계면활성제를 48:39:10:1.5:1.5:0.02 v/v 비로 함유하는 수성 혼합물 10 mL를 함유하는 용액에 연속 희석하여 높은 비율 용액의 1/2X, 1/4X, 1/8X 및 1/16X 비율을 수득함으로써 추가의 적용률을 수득하였다. 화합물 요건은 187의 헥타르당 리터 (L/ha) 비율에서 12 mL 적용 부피를 기준으로 한다. 제제화된 화합물을 평균 식물 캐노피 높이보다 18인치 (43 cm) 높은 분무 높이에서 0.503 제곱 미터의 적용 영역 상에 187 L/ha를 전달하도록 보정된 8002E 노즐이 구비된 오버헤드 만델 트랙 분무기로 식물 재료에 적용하였다. 대조군 식물은 용매 블랭크를 동일한 방식으로 분무하였다.

[1041] 처리된 식물 및 대조군 식물을 상기 기재된 온실에 두고, 지하관개로 물을 대어 시험 화합물이 씻겨 나가는 것을 방지하였다. 21일 후, 시험 식물의 상태를 비처리 식물의 것과 비교하여 시각적으로 결정하고, 0은 어떠한 손상도 없음에 상응하고, 100은 완전한 사멸에 상응하는 것인 0 내지 100 퍼센트의 척도 상에서 점수를 매기고, 표 A에서 나타낸 바와 같이 표시하였다.

[1042] 문헌 [J. Berkson, Journal of the American Statistical Society, 48, 565 (1953) 및 D. Finney, "Probit Analysis" Cambridge University Press (1952)]에 기재된 바와 같은 널리-용인되는 프로빗 분석을 적용함으로써, 다양한 비율에서의 구체적 화합물의 제초 손상을 사용하여, 식물의 각각 20퍼센트, 50퍼센트, 80퍼센트 및 90퍼센트의 성장 감소 (GR)를 제공하는데 요구되는 제초제 유효 용량에 상응하는 성장 감소율로서 정의되는 GR₂₀, GR₅₀, GR₈₀ 및 GR₉₀ 값을 계산할 수 있다. 프로빗 분석을 하기 실시예에서 예시된 절차를 이용하여 개별 화합물의 다수의 용량 비율로부터 수집한 데이터에 적용하였다. 일부 용량 비율에 대한 데이터 및 모든 용량 비율에 대한 분석이 하기 표에 제공된다.

[1043] 시험된 화합물, 사용된 적용률, 시험된 식물 종 및 결과의 일부를 표 7 내지 11에 제공하였다.

표 7: 밀 및 보리에서의 제초 화합물의 활성

화합물 번호	적용률 (g ai/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 21 일 후													
		ALOMY	APESV	BROTE	KCHSC	LAMSS	LOLSS	MATSS	PAPRH	PHAMI	SETVI	STEME	VERPE	HORSS	TRZSS
138	35	C	B	C	A	A	D	D	A	E	B	F	D	B	B
	70	B	B	B	A	A	C	B	A	C	B	F	B	B	B
	140	A	A	B	A	A	B	B	A	B	A	E	B	A	B
	GR ₂₀	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	1	1
	GR ₅₀	11	2	12	1	1	20	16	1	31	8	125	15	--	--
	GR ₈₀	30	12	42	4	1	66	51	1	78	32	>140	49	--	--
20	35	C	B	C	A	A	E	A	A	B	A	C	D	B	B
	70	C	B	B	A	A	D	A	A	B	A	A	D	A	B
	140	C	B	B	A	A	D	A	A	B	A	A	C	A	B
	GR ₂₀	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	1	1
	GR ₅₀	21	2	3	2	1	25	1	1	5	4	8	33	--	--
	GR ₈₀	72	12	87	5	1	>140	1	1	25	10	25	>140	--	--
216	35	E	B	F	A	A	G	C	A	G	D	F	E	B	C
	70	D	B	E	A	A	F	C	A	F	C	F	D	B	B
	140	C	A	E	A	A	E	B	A	C	B	C	C	B	B
	GR ₂₀	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	1	1
	GR ₅₀	54	6	136	1	1	137	10	1	>140	20	52	32	--	--

화합물 번호	작용물 (g ai/ha)	시각적 손상 감소 (%) 적용 21 일 후													
		ALOMY	APEsv	BROTE	KCHSC	LAMSS	LOLSS	MATSS	PAPRH	PHAMt	SETVI	STEME	VERPE	HORSS	TRZSS
	GR ₈₀	>140	20	>140	2	1	>140	62	1	>140	64	>140	>140	--	--
217	35	C	B	C	B	A	E	B	A	B	C	D	D	C	C
	70	B	B	B	A	A	D	B	A	B	C	C	D	C	C
	140	B	A	B	A	A	D	B	A	B	C	C	D	C	B
	GR ₂₀	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	7	2
	GR ₅₀	12	6	15	2	1	32	34	1	11	46	28	19	--	--
	GR ₈₀	31	15	33	6	2	>140	>140	1	30	>140	88	73	--	--
114	35	G	G	G	D	B	G	G	A	G	G	G	F	G	F
	70	G	G	G	D	B	G	G	A	G	G	G	F	F	E
	140	G	G	G	C	A	G	G	A	G	G	G	F	F	E
	GR ₂₀	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	42	16
	GR ₅₀	>140	>140	>140	3	1	>140	>140	1	>140	>140	>140	>140	--	--
	GR ₈₀	>140	>140	>140	>140	4	>140	>140	4	>140	>140	>140	>140	--	--
85	35	G	G	G	G	B	G	G	B	G	G	G	F	G	D
	70	G	G	G	G	B	G	G	A	G	G	G	E	F	D
	140	G	G	G	G	B	G	G	A	G	G	G	D	D	D
	GR ₂₀	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	33	1
	GR ₅₀	>140	>140	>140	>140	0.014	>140	88	1	>140	>140	57	90	--	--
	GR ₈₀	>140	>140	>140	>140	6	>140	>140	3	>140	>140	123	>140	--	--

화질문 번호	작용물 (g ai/ha)	시각적 성장 감소 (%) 작용 21 일 후													
		ALOMY	APESV	BROTE	KCHSC	LAMSS	LOLSS	MATSS	PAPRH	PHAMI	SETVI	STEME	VERPE	HORSS	TRZSS
142	35	G	G	G	E	B	G	G	B	G	G	G	C	G	G
	70	G	G	G	D	B	G	G	A	G	G	G	B	G	G
	140	G	G	G	D	B	G	F	A	G	G	G	B	G	E
	GR ₂₀	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	57	>140
	GR ₅₀	>140	>140	>140	17	0.15	>140	>140	1	>140	>140	>140	5	--	--
	GR ₈₀	>140	>140	>140	>140	5	>140	>140	4	>140	>140	>140	40	--	--
118	35	D	D	D	B	A	F	D	A	G	G	F	B	B	C
	70	C	C	B	B	A	D	C	A	D	F	F	B	B	B
	140	B	B	B	A	A	C	B	A	C	D	F	A	B	B
	GR ₂₀	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	1	0.29
	GR ₅₀	25	22	31	3	1	49	14	1	68	91	1	5	--	--
	GR ₈₀	60	60	64	17	1	121	60	1	126	184	1	17	--	--
45	35	C	B	B	B	B	D	B	A	C	D	F	C	B	B
	70	B	B	B	A	A	C	A	A	B	B	F	B	B	B
	140	A	A	A	A	A	B	A	A	A	A	F	B	A	B
	GR ₂₀	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	1	1
	GR ₅₀	9	8	13	2	1	20	2	1	15	18	75	7	--	--
	GR ₈₀	27	25	36	9	6	69	29	1	32	52	>140	30	--	--

시험물 번호	적용률 (g a/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 21 일 후													
		ALOMY	APESV	BROTE	KCHSC	LAMSS	LOLSS	MATSS	PAPRH	PHAMI	SETVI	STEME	VERPE	HORSS	TRZSS
91	35	E	E	E	C	A	G	D	A	F	D	G	F	C	C
	70	E	E	E	B	A	G	C	A	F	C	F	F	C	B
	140	E	D	F	B	A	G	B	A	F	C	E	E	B	B
	GR ₂₀	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	1	1
	GR ₅₀	98	67	29	2	1	>140	11	1	>140	6	>140	123	--	--
	GR ₈₀	>140	>140	>140	47	3	>140	75	1	>140	105	>140	>140	--	--
143	35	G	D	G	F	B	G	G	B	G	E	G	F	D	D
	70	D	D	E	F	B	F	D	B	F	E	G	E	C	C
	140	D	C	E	E	B	E	D	B	D	D	G	E	B	C
	GR ₂₀	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	2	0.09
	GR ₅₀	71	31	95	>140	1	116	67	1	112	52	>140	97	--	--
	GR ₈₀	>140	129	>140	>140	1	>140	>140	8	>140	>140	>140	>140	--	--
39	35	G	F	G	C	A	F	A	A	G	F	G	B	F	C
	70	E	E	G	B	A	E	A	A	F	E	F	B	E	C
	140	E	D	G	B	A	D	A	A	E	D	E	A	D	B
	GR ₂₀	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	18	1
	GR ₅₀	111	70	>140	3	1	82	1	1	118	68	111	1	--	--
	GR ₈₀	>140	>140	>140	40	1	>140	1	1	>140	>140	>140	12	--	--

화질문 번호	적용물 (g ai/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 21 일 후													
		ALOMY	APESV	BROTE	KCHSC	LAMISS	LOLSS	MATSS	PAPRH	PHAMI	SETVI	STEME	VERPE	HORSS	TRZSS
204	35	G	G	G	B	B	G	G	B	G	G	C	D	F	D
	70	E	F	G	A	A	G	G	B	E	F	C	D	D	C
	140	E	D	F	A	A	G	G	A	D	F	B	D	D	B
	GR ₂₀	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	16	7
	GR ₅₀	105	106	>140	2	1	>140	>140	3	100	>140	7	20	--	--
	GR ₈₀	>140	>140	>140	9	8	>140	>140	19	>140	>140	61	>140	--	--
186	35	G	G	G	D	C	G	G	D	G	G	F	F	G	G
	70	G	G	G	D	B	G	G	D	G	G	F	E	G	G
	140	G	G	G	D	B	G	G	C	G	G	F	D	G	G
	GR ₂₀	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	115	>140
	GR ₅₀	>140	>140	>140	1	1	>140	>140	1	>140	>140	>140	82	--	--
	GR ₈₀	>140	>140	>140	>140	25	>140	>140	>140	>140	>140	>140	>140	--	--
209	35	G	G	G	D	B	G	G	A	G	F	G	D	E	F
	70	G	G	F	B	B	F	G	A	G	E	F	C	D	D
	GR ₂₀	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	16	25
	GR ₅₀	>140	>140	88	12	7	93	>140	2	>140	65	>140	20	--	--
	GR ₈₀	>140	>140	>140	42	29	>140	>140	5	>140	>140	>140	86	--	--

화합물 번호	적용물 (g a/ha)	시각적 손상 감소 (%) 적용 21 일 후													
		ALOMY	APESV	BROTE	KCHSC	LAMSS	LOLSS	MATSS	PAPRH	PHAMI	SETVI	STEME	VERPE	HORSS	TRZSS
109	35	D	B	C	B	A	E	F	A	A	C	D	B	C	D
	70	C	B	B	B	A	E	E	A	A	C	D	A	B	C
	GR ₂₀	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	2	4
	GR ₅₀	22	1	14	3	1	34	72	1	6	15	11	2	--	--
	GR ₈₀	88	6	41	19	1	>140	>140	1	14	42	>140	13	--	--
147	35	D	B	C	B	B	F	A	A	A	D	F	E	B	C
	70	B	B	B	A	B	E	A	A	A	B	D	C	B	B
	140	B	B	B	B	B	D	A	A	A	B	D	D	B	B
	GR ₂₀	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	0.07	0.07
	GR ₅₀	20	5	6	4	1	71	6	1	4	16	61	43	--	--
	GR ₈₀	47	16	28	19	8	>140	14	1	14	49	>140	>140	--	--
167	35	F	C	F	D	A	G	C	A	C	F	F	A	E	E
	70	D	B	C	C	A	G	B	A	B	C	F	A	C	D
	GR ₂₀	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	13	14
	GR ₅₀	57	20	43	23	1	>140	24	1	22	40	>140	1	--	--
	GR ₈₀	119	46	81	52	1	>140	48	1	44	90	>140	2	--	--

화합물 번호	적용률 (g at/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 21 일 후													
		ALOMY	APESV	BROTE	KCHSC	LAMSS	LOLSS	MATSS	PAPRH	PHAMI	SETVI	STEME	VERPE	HORSS	TRZSS
214	35	F	G	G	C	C	F	C	A	G	G	F	G	F	
	70	E	F	G	B	C	E	B	A	G	F	F	D	F	
	140	F	E	G	A	B	B	B	A	G	E	C	C	D	
	GR ₂₀	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	24	
	GR ₅₀	95	110	>140	7	12	59	4	4	>140	>140	71	62	--	
	GR ₈₀	>140	>140	>140	52	33	>140	41	9	>140	>140	>140	>140	--	

표 8: 밀 및 보리에서의 제초 화합물의 활성

화합물 번호	적용률 (g ai/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 21 일 후										
		CIRAR	GALAP	KCHSC	LAMISS	MATSS	PAPRH	SASKR	VERPE	VIOSS	HORSS	TRZSS
135	35	B	D	C	C	F	B	D	D	D	G	F
	70	B	A	C	B	F	B	D	C	D	F	F
	140	B	A	C	B	E	A	C	B	C	D	E
	GR ₂₀	--	--	--	--	--	--	--	--	--	37	16
	GR ₅₀	1	12	3	1	125	1	3	24	23	--	--
	GR ₈₀	13	38	130	19	>140	1	>140	78	>140	>140	>140
3	35	D	A	A	A	A	A	C	E	A	B	B
	70	C	A	A	A	A	A	B	D	A	A	B
	GR ₂₀	--	--	--	--	--	--	--	--	--	1	1
	GR ₅₀	18	5	2	1	4	1	2	34	4	--	--
	GR ₈₀	53	7	8	1	11	1	28	126	7	--	--
124	35	D	B	B	A	C	A	D	C	D	B	B
	70	C	A	B	A	B	A	B	B	A	A	B
	GR ₂₀	--	--	--	--	--	--	--	--	--	1	1
	GR ₅₀	24	6	3	1	9	1	12	20	24	--	--
	GR ₈₀	91	21	29	1	32	1	53	39	49	--	--

화합물 번호	적용률 (g ai/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 21 일 후										
		CIRAR	GALAP	KCHSC	LAMSS	MATSS	PAPRH	SASKR	VERPE	VIOSS	HORSS	TRZSS
79	35	A	A	D	D	C	A	C	C	G	B	C
	70	A	A	C	D	B	A	B	B	G	B	B
	GR ₂₀	--	--	--	--	--	--	--	--	--	1	2
	GR ₅₀	1	4	24	27	13	1	11	2	>140	--	--
	GR ₈₀	5	6	70	72	46	1	43	37	>140	--	--
27	35	C	B	C	B	F	A	D	C	C	F	D
	70	C	B	C	B	F	A	D	B	A	E	C
	GR ₂₀	--	--	--	--	--	--	--	--	--	11	11
	GR ₅₀	18	5	18	1	109	1	22	5	8	--	--
	GR ₈₀	70	25	61	14	>140	1	116	42	27	--	--
145	35	A	E	D	A	A	A	D	B	G	B	B
	70	B	C	D	A	A	A	C	B	G	A	B
	140	A	A	C	A	A	A	B	A	F	A	B
	GR ₂₀	--	--	--	--	--	--	--	--	--	1	1
	GR ₅₀	2	18	37	4	3	1	9	1	>140	--	--
	GR ₈₀	7	54	112	13	10	1	79	10	>140	--	--

화합물 번호	적용률 (g ai/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 21일 후										
		CIRAR	GALAP	KCHSC	LAMSS	MATSS	PAPRH	SASKR	VERPE	VIOSS	HORSS	TRZSS
37	35	E	B	E	B	D	A	E	D	C	D	C
	70	C	A	D	A	D	A	D	C	B	C	B
	GR ₂₀	--	--	--	--	--	--	--	--	--	5	3
	GR ₅₀	23	14	34	1	21	1	33	15	12	--	--
	GR ₈₀	103	31	119	11	77	1	104	66	35	--	--
171	35	D	B	B	B	F	A	D	B	A	E	C
	70	D	A	A	A	F	A	C	B	A	D	B
	GR ₂₀	--	--	--	--	--	--	--	--	--	20	11
	GR ₅₀	17	9	9	2	>140	1	21	4	5	--	--
	GR ₈₀	80	23	23	11	>140	1	67	27	10	--	--
43	35	B	A	D	B	B	A	C	F	E	A	B
	70	B	A	B	B	A	A	C	C	D	A	A
	GR ₂₀	--	--	--	--	--	--	--	--	--	1	1
	GR ₅₀	0.18	2	11	1	3	1	3	33	37	--	--
	GR ₈₀	13	6	41	10	7	1	61	>140	>140	--	--

화합물 번호	적용률 (g ai/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 21 일 후										
		CIRAR	GALAP	KCHSC	LAMSS	MATSS	PAPRH	SASKR	VERPE	VIOSS	HORSS	TRZSS
113	35	C	A	A	A	B	A	C	B	A	B	B
	70	B	A	A	A	A	A	B	B	A	A	B
	GR ₂₀	--	--	--	--	--	--	--	--	--	1	1
	GR ₅₀	7	5	3	1	4	1	5	3	4	--	--
	GR ₈₀	33	12	10	4	15	1	36	18	11	--	--
110	35	C	A	A	A	D	A	C	G	F	B	B
	70	C	A	A	A	B	A	B	G	D	A	B
	GR ₂₀	--	--	--	--	--	--	--	--	--	1	1
	GR ₅₀	19	1	1	1	10	1	1	>140	51	--	--
	GR ₈₀	52	1	1	1	37	1	30	>140	144	--	--

[1057] 표 9: 밀 및 보리에서의 제초 화합물의 활성

화합물 번호	적용률 (g ai/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 21 일 후					
		APESV	KCHSC	LOLSS	SETVI	HORSS	TRZSS
76	35	C	G	F	E	D	C
	70	B	E	E	D	D	B
	GR ₂₀	--	--	--	--	6	4
	GR ₅₀	27	74	53	42	--	--
	GR ₈₀	52	132	133	87	--	--
172	35	F	D	G	D	D	C
	70	D	D	G	C	D	C
	GR ₂₀	--	--	--	--	3	1
	GR ₅₀	53	38	>140	25	--	--
	GR ₈₀	124	73	>140	56	--	--
168	35	C	A	G	E	B	B
	70	B	A	E	D	A	A
	GR ₂₀	--	--	--	--	1	1
	GR ₅₀	21	5	108	28	--	--
	GR ₈₀	57	15	>140	70	--	--
35	35	G	C	G	G	D	C
	70	F	B	F	F	D	C
	GR ₂₀	--	--	--	--	8	2
	GR ₅₀	113	8	126	79	--	--
	GR ₈₀	>140	37	>140	>140	--	--
46	35	G	C	G	G	D	C
	70	G	B	F	F	D	C
	140	E	B	E	F	B	B
	GR ₂₀	--	--	--	--	8	1
	GR ₅₀	>140	10	118	>140	--	--
	GR ₈₀	>140	45	>140	>140	--	--

[1058]

화합물 번호	적용률 (g ai/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 21 일 후					
		APESV	KCHSC	LOLSS	SETVI	HORSS	TRZSS
154	35	G	G	G	F	G	G
	70	G	G	G	D	G	F
	140	G	G	G	C	E	E
	GR ₂₀	--	--	--	--	81	49
	GR ₅₀	>140	57	>140	56	--	--
	GR ₈₀	>140	93	>140	109	--	--
146	35	A	G	G	E	C	C
	70	A	G	G	C	B	B
	140	A	G	G	A	A	B
	GR ₂₀	--	--	--	--	1	1
	GR ₅₀	23	>140	>140	41	--	--
	GR ₈₀	34	>140	>140	76	--	--
47	35	A	B	G	G	A	B
	70	A	C	E	C	A	A
	140	A	A	D	B	A	A
	GR ₂₀	--	--	--	--	1	1
	GR ₅₀	10	20	80	51	--	--
	GR ₈₀	14	45	>140	104	--	--
125	35	C	D	G	B	B	C
	70	B	B	G	B	A	C
	140	A	A	E	B	A	B
	GR ₂₀	--	--	--	--	1	1
	GR ₅₀	10	8	>140	2	--	--
	GR ₈₀	41	34	>140	16	--	--
51	35	B	B	C	C	B	B
	70	A	A	C	B	A	A
	GR ₂₀	--	--	--	--	1	1
	GR ₅₀	3	4	3	24	--	--
	GR ₈₀	11	14	61	49	--	--
42	35	B	B	F	B	B	B

[1059]

화합물 번호	적용률 (g ai/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 21 일 후					
		APESV	KCHSC	LOLSS	SETVI	HORSS	TRZSS
	70	B	D	E	B	B	B
	140	A	A	C	A	A	A
	GR ₂₀	--	--	--	--	1	1
	GR ₅₀	7	1	76	1	--	--
	GR ₈₀	22	1	>140	19	--	--
55	35	C	B	D	C	B	B
	70	A	B	C	B	A	A
	GR ₂₀	--	--	--	--	1	1
	GR ₅₀	4	4	21	29	--	--
	GR ₈₀	18	21	50	46	--	--
159	35	B	B	E	E	B	B
	70	A	A	D	D	A	A
	GR ₂₀	--	--	--	--	1	1
	GR ₅₀	11	4	36	43	--	--
	GR ₈₀	25	19	89	113	--	--
96	35	F	G	E	G	B	B
	70	F	D	D	D	A	B
	140	E	D	D	C	A	A
	GR ₂₀	--	--	--	--	1	1
	GR ₅₀	125	79	48	72	--	--
	GR ₈₀	>140	>140	>140	128	--	--
173	35	D	F	F	F	B	C
	70	C	E	E	E	A	B
	GR ₂₀	--	--	--	--	1	1
	GR ₅₀	27	60	119	54	--	--
	GR ₈₀	59	131	>140	104	--	--
28	35	G	G	G	G	G	F
	70	G	F	G	G	F	D
	GR ₂₀	--	--	--	--	43	17
	GR ₅₀	>140	88	>140	>140	--	--

[1060]

화합물 번호	적용-률 (g ai/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 21 일 후					
		APESV	KCHSC	LOLSS	SETVI	HORSS	TRZSS
	GR ₈₀	>140	>140	>140	>140	--	--
161	35	D	G	G	F	B	C
	70	C	G	G	D	B	C
	GR ₂₀	--	--	--	--	1	1
	GR ₅₀	30	>140	38	53	--	--
	GR ₈₀	57	>140	82	128	--	--
74	35	B	B	F	C	B	C
	70	B	A	E	B	B	C
	GR ₂₀	--	--	--	--	1	1
	GR ₅₀	10	3	>140	3	--	--
	GR ₈₀	25	11	>140	49	--	--
150	35	G	D	G	G	F	D
	70	G	D	G	F	E	D
	GR ₂₀	--	--	--	--	8	1
	GR ₅₀	>140	7	>140	79	--	--
	GR ₈₀	>140	>140	>140	>140	--	--
36	35	G	G	G	G	F	C
	70	G	G	G	F	D	C
	GR ₂₀	--	--	--	--	16	1
	GR ₅₀	>140	>140	>140	126	--	--
	GR ₈₀	>140	>140	>140	>140	--	--
117	35	E	D	E	G	G	G
	70	D	C	D	D	G	F
	GR ₂₀	--	--	--	--	73	32
	GR ₅₀	41	20	41	59	--	--
	GR ₈₀	>140	67	>140	99	--	--

[1061]

[1062]

표 10: 밀 및 보리에서의 제초 화합물의 활성

화합물 번호	적용률 (g ai/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 21 일 후						
		KCHSC	MATSS	SASKR	VERPE	VIOSS	HORSS	TRZSS
49	35	B	D	C	E	A	C	C
	70	B	C	B	D	A	B	B
	GR ₂₀	--	--	--	--	--	1	1
	GR ₅₀	4	15	1	37	5	--	--
	GR ₈₀	18	93	30	>140	8	--	--
21	35	A	B	C	F	A	B	C
	70	A	B	B	G	A	A	B
	GR ₂₀	--	--	--	--	--	1	1
	GR ₅₀	1	5	1	130	4	--	--
	GR ₈₀	1	31	25	>140	6	--	--
132	35	B	G	C	G	A	D	D
	70	B	F	C	C	A	C	D
	140	A	F	C	B	A	A	C
	GR ₂₀	--	--	--	--	--	9	10
	GR ₅₀	4	>140	1	58	9	--	--
	GR ₈₀	20	>140	66	99	17	--	--
157	35	B	D	C	F	A	B	C
	70	B	C	B	D	A	A	C
	GR ₂₀	--	--	--	--	--	1	1
	GR ₅₀	6	21	11	50	1	--	--
	GR ₈₀	18	64	34	>140	4	--	--
99	35	C	F	C	A	A	B	B
	70	B	E	C	A	A	A	B
	GR ₂₀	--	--	--	--	--	1	1
	GR ₅₀	9	63	10	8	9	--	--
	GR ₈₀	27	>140	48	17	19	--	--

[1063]

화합물 번호	적용률 (g ai/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 21 일 후						
		KCHSC	MATSS	SASKR	VERPE	VIOSS	HORSS	TRZSS
141	35	C	C	C	C	A	B	C
	70	B	A	B	B	A	A	B
	GR ₂₀	--	--	--	--	--	1	1
	GR ₅₀	7	15	4	14	7	--	--
	GR ₈₀	28	33	40	43	11	--	--
108	35	G	F	G	D	F	F	C
	70	G	D	F	C	F	E	C
	GR ₂₀	--	--	--	--	--	16	6
	GR ₅₀	>140	58	136	22	85	--	--
	GR ₈₀	>140	>140	>140	67	>140	--	--
122	35	B	G	A	A	A	D	C
	70	A	F	A	A	A	B	B
	GR ₂₀	--	--	--	--	--	3	1
	GR ₅₀	5	>140	<17.5	1	10	--	--
	GR ₈₀	14	>140	<17.5	2	21	--	--
52	35	C	G	D	C	A	B	B
	70	B	D	C	A	A	A	B
	GR ₂₀	--	--	--	--	--	1	1
	GR ₅₀	5	62	4	20	12	--	--
	GR ₈₀	38	91	84	37	19	--	--
163	35	C	C	C	C	C	B	C
	70	B	A	B	A	A	A	C
	GR ₂₀	--	--	--	--	--	1	1
	GR ₅₀	8	5	3	13	14	--	--
	GR ₈₀	36	24	27	30	29	--	--

[1064]

화합물 번호	적용률 (g ai/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 21 일 후						
		KCHSC	MATSS	SASKR	VERPE	VIOSS	HORSS	TRZSS
169	37.1	D	C	D	B	C	A	C
	74.3	B	A	C	A	A	A	B
	149	B	A	B	A	A	A	B
	GR ₂₀	--	--	--	--	--	1	1
	GR ₅₀	8	15	5	19	21	--	--
	GR ₈₀	72	35	83	37	36	--	--
72	35	D	G	F	B	F	E	C
	70	D	F	D	A	E	D	B
	GR ₂₀	--	--	--	--	--	5	1
	GR ₅₀	27	126	48	1	67	--	--
	GR ₈₀	105	>140	106	8	>140	--	--
89	35	B	C	B	A	A	D	C
	70	B	B	B	A	A	D	B
	GR ₂₀	--	--	--	--	--	3	1
	GR ₅₀	12	14	9	3	11	--	--
	GR ₈₀	25	36	21	6	19	--	--
129	35	B	G	C	F	C	B	C
	70	A	F	B	E	A	B	B
	GR ₂₀	--	--	--	--	--	1	1
	GR ₅₀	7	89	6	92	17	--	--
	GR ₈₀	21	131	41	>140	34	--	--
38	35	B	D	D	F	A	B	B
	70	B	B	D	D	A	B	B
	GR ₂₀	--	--	--	--	--	1	1
	GR ₅₀	1	21	17	42	13	--	--
	GR ₈₀	24	56	68	112	26	--	--

[1065]

화합물 번호	적용률 (g ai/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 21 일 후						
		KCHSC	MATSS	SASKR	VERPE	VIOSS	HORSS	TRZSS
8	35	A	D	B	A	B	D	C
	70	A	C	B	A	B	C	B
	GR ₂₀	--	--	--	--	--	1	1
	GR ₅₀	3	26	1	1	13	--	--
	GR ₈₀	6	73	16	1	28	--	--
69	35	B	C	B	B	B	B	B
	70	B	B	B	A	A	A	B
	GR ₂₀	--	--	--	--	--	1	1
	GR ₅₀	5	5	7	1	3	--	--
	GR ₈₀	19	29	29	4	8	--	--
86	35	C	D	D	B	D	F	D
	70	C	D	C	B	D	F	D
	GR ₂₀	--	--	--	--	--	14	1
	GR ₅₀	12	22	18	15	21	--	--
	GR ₈₀	55	85	66	34	77	--	--

[1066]

[1067]

표 11: 밀 및 보리에서의 제초 화합물의 활성

화합물 번호	적용률 (g ai/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 21 일 후					
		KCHSC	MATSS	SASKR	VIOSS	HORSS	TRZSS
149	35	F	E	D	F	D	E
	70	D	D	D	D	C	C
	GR ₂₀	18	9	6	11	21	20
	GR ₅₀	56	38	24	44	--	--
	GR ₈₀	>140	>140	100	>140	--	--
165	35	B	G	C	F	C	D
	70	B	E	B	D	B	C
	GR ₂₀	--	--	--	--	9	8
	GR ₅₀	9	81	4	55	--	--
	GR ₈₀	30	>140	46	>140	--	--

[1068]

[1069]

ALOMY : 블랙그래스 (알로페쿠루스 미오수로이데스(*Alopecurus myosuroides*))

[1070]

APESV : 벤트그래스 (아페라 스피카-벤티(*Apera spica-venti*))

[1071]

BROTE : 다우니 브롬(브로무스 텍토룸(*Bromus tectorum*))

[1072]

HORSS : 보리, 예컨대 봄 및 겨울 (호르데움 불가레(*Hordeum vulgare*))

[1073]

TRZSS : 밀, 예컨대 봄 및 겨울 (트리티쿰 아에스티붐(*Triticum aestivum*))

[1074]

LOLSS : 라이그래스, 예컨대 이탈리아인 라이그래스 (롤리움 멀티플로룸(*Lolium multiflorum*)), 리지드 라이그래스 (롤리움 리지둠(*Lolium rigidum*)), 애뉴얼 라이그래스 (롤리움 멀티플로룸(*Lolium multiflorum*) 아종 가우

디니(*Gaudini*))

- [1075] PHAMI : 레서 카나리 그래스 (팔라리스 미노르(*Phalaris minor*))
- [1076] SETVI : 강아지풀 (세타리아 비리디스(*Setaria viridis*))
- [1077] KCHSC : 코키아 (코키아 스키파리아(*Kochia scoparia*))
- [1078] LAMSS : 예컨대 자주색 광대수염 (라미움 푸르푸레움(*Lamium purpureum*)) 및 광대나물 (라미움 암플렉시카울레(*Lamium amplexicaule*))
- [1079] GALAP : 클리버스 (갈리움 아파리네(*Galium aparine*))
- [1080] VERPE : 새눈 스피드웰 (베로니카 페르시카(*veronica persica*))
- [1081] PAPRH : 일반 포피 (파파베르 로에아스(*Papaver rhoeas*))
- [1082] SASKR : 러시아 엉겅퀴 (살솔라 이베리카(*Salsola iberica*))
- [1083] CIRAR : 캐나다 엉겅퀴 (시르시움 아르벤세(*Cirsium arvense*))
- [1084] VIOSS : 야생 팬지 (비올라 트리콜로르(*Viola tricolor*)), 필드 바이올렛 (비올라 아르벤시스(*Viola arvensis*))
- [1085] MATSS : 향기나는 메이워드 (마트리카리아 카모밀라(*Matricaria chamomilla*)), 파인애플워드 (마트리카리아 마트리카리오이데스(*Matricaria matricarioides*))
- [1086] STEME : 별꽃 (스텔라리아 메디아(*Stellaria media*)).
- [1087] g ai/ha: 헥타르당 그램 활성 성분
- [1088] nt: 시험하지 않음
- [1089] GR₂₀: 식물 성장의 20% 성장 감소
- [1090] GR₅₀: 식물 성장의 50% 성장 감소
- [1091] GR₈₀: 식물 성장의 80% 성장 감소
- [1092] GR₉₀: 식물 성장의 90% 성장 감소
- [1093] 실시예 E. 출아전 제초 활성의 평가
- [1094] 출아전 시험 III. 시험 종의 종자를 사양토를 함유하는 사각 플라스틱 포트 (10 cm 폭)에 식재하였다. 식재 후에, 모든 포트를 화합물 적용 16시간 전에 지하-관개하였다.
- [1095] 시험할 가장 높은 비율에 의해 결정된 청량된 양의 각각의 시험 화합물을 25 mL 유리 바이알에 넣고, 4 mL의 아세톤 및 DMSO 97:3 v/v 혼합물에 용해시켜 진한 원액을 수득하였다. 시험 화합물이 용이하게 용해되지 않는 경우, 혼합물을 가온하고/거나 초음파처리하였다. 획득된 진한 원액을 물 및 0.02% w/v (중량/부피)의 트리톤 X-155를 함유하는 수성 혼합물 20 mL로 희석하여 가장 높은 적용물을 함유하는 분무 용액을 수득하였다. 높은 비율 용액 12 mL를 아세톤 및 DMSO의 97:3 v/v 혼합물 2 mL, 및 물 및 0.02% w/v (중량/부피)의 트리톤 X-155를 함유하는 수성 혼합물 10 mL에 연속 희석하여 높은 비율 용액의 1/2X, 1/4X, 1/8X 및 1/16X 비율을 수득함으로써 추가의 적용물을 수득하였다. 화합물 요건은 187의 헥타르당 리터 (L/ha) 비율에서 12 mL 적용 부피를 기준으로 한다. 제제화된 화합물은 0.503 제곱 미터의 적용 영역 상에 187 L/ha를 전달하도록 보정된 8002E 노즐이 구비된 오버헤드 만델 트랙 분무기로 토양 표면에 적용하였다. 대조군 포트는 용매 블랭크를 동일한 방식으로 분무하였다.
- [1096] 처리된 포트 및 대조군 포트를 상기 기재된 온실에 두고, 표면 관개로 물을 대었다. 21일 후, 시험 포트의 상태를 비처리 포트의 것과 비교하여 시각적으로 결정하고, 0은 어떠한 제초 효과도 없음에 상응하고, 100은 식물 사멸 또는 토양으로부터의 출아 결핍에 상응하는 것인 0 내지 100 퍼센트의 척도 상에서 점수를 매기고, 표 A에서 나타난 바와 같이 표시하였다.
- [1097] 문헌 [J. Berkson, Journal of the American Statistical Society, 48, 565 (1953) 및 D. Finney, "Probit

Analysis" Cambridge University Press (1952),]에 기재된 바와 같이 널리-용인되는 프로빗 분석을 적용함으로써, 다양한 비율에서의 구체적 화합물의 제초 손상을 사용하여, 식물의 각각 20퍼센트, 50퍼센트, 80퍼센트 및 90퍼센트의 성장 감소 (GR)를 제공하는데 요구되는 제초제 유효 용량에 상응하는 성장 감소율로서 정의되는 GR₂₀, GR₅₀, GR₈₀ 및 GR₉₀ 값을 계산할 수 있다. 프로빗 분석을 하기 실시예에서 예시된 절차를 이용하여 개별 화합물의 다수의 용량 비율로부터 수집한 데이터에 적용하였다. 일부 용량 비율에 대한 데이터 및 모든 용량 비율에 대한 분석이 하기 표에 제공된다.

[1098] 시험된 화합물, 사용된 적용률, 시험된 식물 종 및 결과의 일부를 표 12에 제공하였다.

[1099] 표 12: 밀 및 보리에서의 제초 화합물에서의 출아전 활성

화합물 번호	적용률 (g ai/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 21 일 후					
		APESV	LAMSS	LOLSS	SETVI	HORSS	TRZSS
20	35	A	A	G	F	F	E
	70	A	A	E	B	E	E
	GR ₂₀	--	--	--	--	17	10
	GR ₅₀	6	6	>70	32	--	--
	GR ₈₀	16	9	>70	71	--	--
147	35	C	A	G	E	G	F
	70	B	A	G	C	G	F
	GR ₂₀	--	--	--	--	70	23
	GR ₅₀	19	1	52	17	--	--
	GR ₈₀	33	5	>70	>70	--	--
214	35	C	A	G	G	G	G
	70	A	A	E	G	G	F
	GR ₂₀	--	--	--	--	93	28
	GR ₅₀	13	1	>70	>70	--	--
	GR ₈₀	28	2	>70	>70	--	--
49	35	F	A	G	F	G	G
	70	E	A	G	F	G	G
	GR ₂₀	--	--	--	--	>70	>70
	GR ₅₀	>70	1	>70	>70	--	--
	GR ₈₀	>70	3	>70	>70	--	--
42	35	B	A	G	E	F	E
	70	A	A	G	D	E	E
	GR ₂₀	--	--	--	--	11	5
	GR ₅₀	12	1	>70	36	--	--
	GR ₈₀	27	1	>70	>70	--	--

[1100] APESV : 벤트그래스 (아페라 스피카-벤티(*Apera spica-venti*))

[1102] LAMPU : 자주색 광대수염 (라미움 푸르푸레움(*Lamium purpureum*))

[1103] LOLSS : 라이그래스, 예컨대 이탈리아인 라이그래스 (롤리움 멀티플로룸(*Lolium multiflorum*)), 리지드 라이그래스 (롤리움 리지둠(*Lolium rigidum*)), 애뉴얼 라이그래스 (롤리움 멀티플로룸(*Lolium multiflorum*)) 아종 가우

디니(*Gaudini*))

- [1104] SETVI : 강아지풀 (세타리아 비리디스(*Setaria viridis*))
- [1105] HORSS : 보리, 예컨대 봄 및 겨울 (호르테움 불가레(*Hordeum vulgare*))
- [1106] TRZSS : 밀, 예컨대 봄 및 겨울 (트리티쿰 아에스티쿰(*Triticum aestivum*))
- [1107] g ai/ha: 헥타르당 그램 활성 성분
- [1108] nt: 시험하지 않음
- [1109] GR₂₀: 식물 성장의 20% 성장 감소
- [1110] GR₅₀: 식물 성장의 50% 성장 감소
- [1111] GR₈₀: 식물 성장의 80% 성장 감소
- [1112] GR₉₀: 식물 성장의 90% 성장 감소
- [1113] 실시예 F. 직과 벼에서의 출아후 제초 활성의 평가
- [1114] 목적하는 시험 식물 종의 종자 또는 소견과를 양토 (43 퍼센트 실트, 19 퍼센트 점토 및 38 퍼센트 모래, 약 8.1의 pH 및 약 1.5 퍼센트의 유기 물질 함량)와 강모래를 80 내지 20의 비로 혼합하여 제조한 토양 매트릭스에 식재하였다. 토양 매트릭스는 139.7 cm²의 표면적을 갖는 플라스틱 포트에 함유되었다. 우수한 발아 및 건강한 식물을 보장해야 하는 경우에, 살진균제 처리 및/또는 다른 화학 물질 또는 물리적 처리를 적용하였다. 식물을 낮 동안 약 29℃ 및 밤 동안 26℃에서 유지되는 대략 14시간의 광주기를 갖는 온실에서 10-17일 동안 성장시켰다. 영양소 및 물을 정기적으로 첨가하고, 필요한 경우에 오버헤드 금속 할라이드 1000-와트 램프로 보충 조명을 제공하였다. 식물이 제2 또는 제3 본엽기에 도달하였을 때 시험에 사용하였다.
- [1115] 시험할 가장 높은 비율에 의해 결정된 청량한 양의 각각의 시험 화합물을 25 mL 유리 바이알에 넣고, 97:3 v/v 아세톤-DMSO의 부피 중에 용해시켜 12X 원액을 수득하였다. 시험 화합물이 용이하게 용해되지 않는 경우, 혼합물을 가운하고/거나 초음파처리하였다. 진한 원액을 분무 용액에 첨가하여 최종 아세톤 및 DMSO 농도가 각각 16.2% 및 0.5%가 되도록 하였다. 분무 용액은 1.5% (v/v) 아그리-텍스 작물 오일 농축물의 수성 혼합물 10 mL를 첨가하여 적절한 최종 농도로 희석하였다. 최종 분무 용액은 1.25% (v/v) 아그리-텍스 작물 오일 농축물을 함유하였다. 화합물 요건은 187 L/ha 비율에서 12 mL 적용 부피를 기준으로 한다. 제제화된 화합물은 평균 식물 캐노피 높이보다 18 인치 (43 cm) 높은 분무 높이에서 0.503 제곱 미터 (m²)의 적용 영역 상에 187 L/ha를 전달하도록 보정된 8002E 노즐이 구비된 오버헤드 만델 트랙 분무기로 식물 물질에 적용하였다. 대조군 식물에 용매 블랭크를 동일한 방식으로 분무하였다.
- [1116] 처리된 식물 및 대조군 식물을 상기 기재된 온실에 두고, 지하관개로 물을 대어 시험 화합물이 씻겨 나가는 것을 방지하였다. 20-22일 후, 시험 식물의 상태를 비처리 식물의 것과 비교하여 시각적으로 결정하고, 0은 어떠한 손상도 없음에 상응하고, 100은 완전한 사멸에 상응하는 것인 0 내지 100 퍼센트의 척도 상에서 점수를 매기고, 표 A에서 나타낸 바와 같이 표시하였다.
- [1117] 문헌 [J. Berkson, Journal of the American Statistical Society, 48, 565 (1953) 및 D. Finney, "Probit Analysis" Cambridge University Press (1952)]에 기재된 바와 같은 널리-용인되는 프로빗 분석을 적용함으로써, 다양한 비율에서의 구체적 화합물의 제초 손상을 사용하여, 식물의 각각 20퍼센트, 50퍼센트, 80퍼센트 및 90퍼센트의 성장 감소 (GR)를 제공하는데 요구되는 제초제 유효 용량에 상응하는 성장 감소율으로서 정의되는 GR₂₀, GR₅₀, GR₈₀ 및 GR₉₀ 값을 계산할 수 있다. 프로빗 분석을 하기 실시예에서 예시된 절차를 이용하여 개별 화합물의 다수의 용량 비율로부터 수집한 데이터에 적용하였다. 일부 용량 비율에 대한 데이터 및 모든 용량 비율에 대한 분석이 하기 표에 제공된다.
- [1118] 사용된 적용물 및 비율, 시험된 식물 종 및 결과의 일부를 표 13에 제공하였다.

표 13: 직파 벼에서의 제초 화합물의 활성

화합물 번호	적용률 (g ai/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 21 일 후						
		BRAPP	CYPSS	ECHSS	LEFSS	SCPIU	SEBEX	ORYSS
216	35	B	B	B	B	A	A	G
	70	B	B	A	A	A	A	G
	GR ₂₀	--	--	--	--	--	--	>70
	GR ₅₀	8	10	4	8	1	1	--
	GR ₈₀	27	70	15	23	1	1	--
217	35	A	A	A	A	A	A	E
	70	A	A	A	A	A	A	C
	GR ₂₀	--	--	--	--	--	--	10
	GR ₅₀	3	5	1	1	1	1	--
	GR ₈₀	5	11	1	3	1	1	--
135	35	B	C	C	G	B	A	G
	70	B	B	C	D	A	A	G
	GR ₂₀	--	--	--	--	--	--	>70
	GR ₅₀	4	5	17	57	2	1	--
	GR ₈₀	11	49	70	114	5	1	--
165	35	B	C	B	G	nt	A	G
	70	A	C	A	A	nt	A	F

회합물 번호	적용률 (g ai/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 21 일 후						
		BRAP	CYPSS	ECHSS	LEFSS	SCPJU	SEBEX	ORYSS
	GR ₂₀	--	--	--	--	--	--	44
	GR ₅₀	12	19	10	24	--	1	--
	GR ₈₀	27	67	24	56	--	1	--
134	35	A	A	A	A	nt	A	D
	70	A	A	A	A	A	A	B
	GR ₂₀	--	--	--	--	--	--	5
	GR ₅₀	3	6	1	6	1	1	--
	GR ₈₀	12	13	1	15	1	1	--
122	35	C	A	C	G	A	A	G
	70	B	A	B	G	A	A	G
	GR ₂₀	--	--	--	--	--	--	70
	GR ₅₀	5	1	6	>70	1	1	--
	GR ₈₀	42	1	47	>70	1	1	--
8	35	A	A	A	G	A	A	C
	70	A	A	A	F	A	A	B
	GR ₂₀	--	--	--	--	--	--	2
	GR ₅₀	4	1	2	>70	1	3	--
	GR ₈₀	9	1	6	>70	1	5	--
58	35	G	A	G	G	A	A	G

화합물 번호	적용률 (g ai/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 21 일 후						
		BRAPP	CYPSS	ECHSS	LEFSS	SCPJU	SEBEX	ORYSS
	70	G	A	G	E	A	A	G
	GR ₂₀	--	--	--	--	--	--	>70
	GR ₅₀	>70	4	>70	>70	5	2	--
	GR ₈₀	>70	8	>70	>70	8	4	--
146	35	D	A	B	G	A	A	F
	70	A	A	B	C	A	A	D
	GR ₂₀	--	--	--	--	--	--	18
	GR ₅₀	8	1	17	44	1	3	--
	GR ₈₀	29	1	32	87	1	4	--
47	35	F	A	F	C	A	A	G
	70	F	A	G	G	A	A	G
	GR ₂₀	--	--	--	--	--	--	>70
	GR ₅₀	>70	1	>70	>70	1	1	--
	GR ₈₀	>70	3	>70	>70	1	1	--
125	35	E	A	E	E	A	A	G
	70	D	A	D	D	A	A	G
	GR ₂₀	--	--	--	--	--	--	0
	GR ₅₀	46	4	40	43	1	1	--
	GR ₈₀	>70	10	>70	>70	1	1	--

회합물 번호	적용률 (g ai/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 21 일 후						
		BRAP	CYPSS	ECHSS	LEFSS	SCPJU	SEBEX	ORYSS
159	35	A	A	A	A	A	A	E
	70	A	A	A	A	A	A	D
	GR ₂₀	--	--	--	--	--	--	12
	GR ₅₀	3	2	2	12	1	1	--
	GR ₈₀	8	5	4	19	1	1	--
124	35	A	A	A	A	A	A	D
	70	A	A	A	A	A	A	B
	GR ₂₀	--	--	--	--	--	--	1
	GR ₅₀	4	1	2	7	1	1	--
	GR ₈₀	8	1	6	16	1	1	--
96	35	D	A	E	B	A	A	G
	70	B	A	B	C	A	A	G
	GR ₂₀	--	--	--	--	--	--	130
	GR ₅₀	19	3	29	27	1	1	--
	GR ₈₀	58	6	84	58	1	1	--
173	35	C	A	C	E	A	A	E
	70	A	A	A	A	A	A	D
	GR ₂₀	--	--	--	--	--	--	16
	GR ₅₀	8	2	12	24	1	1	--

화합물 번호	적용률 (g ai/ha)	시각적 성장 감소 (%) 적용 21 일 후						
		BRAPP	CYPSS	ECHSS	LEFSS	SCPJU	SEBEX	ORYSS
93	GR ₈₀	26	4	33	47	1	1	--
	35	A	A	A	A	A	A	E
	70	A	A	A	A	A	A	D
	GR ₂₀	--	--	--	--	--	--	I3
	GR ₅₀	1	1	1	6	1	1	--
	GR ₈₀	1	2	1	11	1	1	--
	35	A	A	A	A	A	A	D
	70	A	A	A	A	A	A	D
	GR ₂₀	--	--	--	--	--	--	4
	GR ₅₀	1	5	1	6	1	1	--
	GR ₈₀	5	10	1	13	1	1	--
	35	D	A	B	G	A	A	F
11	70	B	A	A	G	A	A	E
	GR ₂₀	--	--	--	--	--	--	25
	GR ₅₀	13	1	11	175	1	3	--
	GR ₈₀	44	1	25	463	1	7	--

[1124]

[1125]

[1126]

[1127]

[1128]

[1129]

[1130]

[1131]

[1132]

[1133]

BRAPP : 광엽 시그널그래스 (브라키아리아 플라티필라(*Brachiaria platyphylla*))

CYPSS : 사초, 예컨대 알방동사니 (시페루스 디포르미스(*Cyperus difformis*)), 기름골 (시페루스 에스쿨렌투스(*Cyperus esculentus*)), 참방동사니 (시페루스 이리아(*Cyperus iria*))

ECHSS : 예컨대 돌피 (에키노클로아 크루스-갈리(*Echinochloa crus-galli*)), 정글라이스 (에키노클로아 콜로눔(*Echinochloa colonum*))

LEFSS : 드렁새, 예컨대 중국 드렁새 (렙토클로아 키넨시스(*Leptochloa chinensis*)), 녹색 드렁새 (렙토클로아 두비아(*Leptochloa dubia*))

SCPJU : 올챙이고랭이, 스코에노플렉투스 준코이데스(*Schoenoplectus juncooides*)

세백스 : 헴프 세스바니아 (세스바니아 엑살타타(*Sesbania exaltata*))

ORYSS : 오리자 사티바(*Oryza sativa*)

nt: 시험하지 않음

g ai/ha : 헥타르당 그램 활성 성분