

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 公表特許公報(A)

(11) 特許出願公表番号

特表2012-532924

(P2012-532924A)

(43) 公表日 平成24年12月20日(2012.12.20)

(51) Int.Cl.

C07C 49/657 (2006.01)
 C07C 251/44 (2006.01)
 C07C 69/24 (2006.01)
 C07C 49/84 (2006.01)
 C07C 49/697 (2006.01)

F 1

C07C 49/657
 C07C 251/44
 C07C 69/24
 C07C 49/84
 C07C 49/697

テーマコード(参考)

4C036
 4H006
 4H011

B

審査請求 未請求 予備審査請求 未請求 (全 126 頁) 最終頁に続く

(21) 出願番号 特願2012-520092(P2012-520092)
 (86) (22) 出願日 平成22年7月15日(2010.7.15)
 (85) 翻訳文提出日 平成24年1月30日(2012.1.30)
 (86) 國際出願番号 PCT/GB2010/001354
 (87) 國際公開番号 WO2011/007146
 (87) 國際公開日 平成23年1月20日(2011.1.20)
 (31) 優先権主張番号 0912385.2
 (32) 優先日 平成21年7月16日(2009.7.16)
 (33) 優先権主張国 英国(GB)

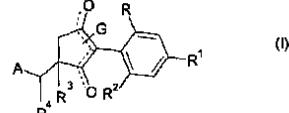
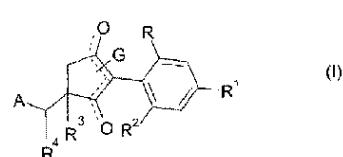
(71) 出願人 500371307
 シンジエンタ リミテッド
 イギリス国 サリー ジュード 7ワイ
 エイチ, ギルドフォード, サリー リサー
 チ パーク, ブリーストリー ロード, ユ
 アロピーアン リージョナル センター
 (74) 代理人 100099759
 弁理士 青木 篤
 (74) 代理人 100077517
 弁理士 石田 敏
 (74) 代理人 100087871
 弁理士 福本 積
 (74) 代理人 100087413
 弁理士 古賀 哲次

最終頁に続く

(54) 【発明の名称】除草活性2-(置換フェニル)-シクロペンタン-1,3-ジオン誘導体

(57) 【要約】

式(I) :



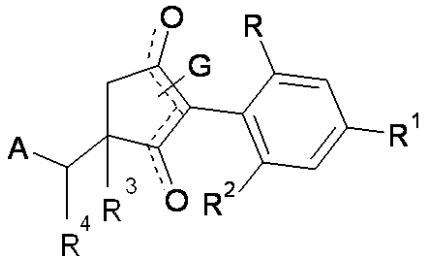
[式中、Rは、メチル、エチル、ビニル、エチニル、ま
 たはシクロプロピルであり、R¹は、水素、C₁-C₆
 アルキル、C₁-C₆ハロアルキル、C₃-C₇シクロ
 アルキル、C₁-C₆アルコキシ、C₁-C₆ハロアル
 コキシ、ビニル、プロペニル、エチニル、プロピニル、
 ハロゲン、または隨意に置換されたフェニルであり、R
²は、メチル、エチル、ビニル、エチニル、またはメト
 キシであり、R³およびR⁴は、水素であるか、または
 共に二重結合を形成し、Aは、非置換、またはC₁-C
₆アルキル、C₁-C₆ハロアルキル、C₁-C₆アル
 コキシ、C₁-C₆アルキルカルボニルオキシ、C₂-
 C₆アルケニル、=O、または=N-R₁Oによって一

【特許請求の範囲】

【請求項 1】

式 I :

【化 1】



(I)

10

[式中、

20

Rは、メチル、エチル、ビニル、エチニル、またはシクロプロピルであり、

R¹は、水素、C₁ - C₆アルキル、C₁ - C₆ハロアルキル、C₃ - C₇シクロアルキル、C₁ - C₆アルコキシ、C₁ - C₆ハロアルコキシ、ビニル、プロペニル、エチニル、プロピニル、ハロゲン、フェニル、またはアルキル、ハロアルキル、アルキルスルホニル、ハロゲン、ニトロ、もしくはシアノによって置換されたフェニルであり、R²は、メチル、エチル、ビニル、エチニル、またはメトキシであり、

20

R³およびR⁴は、水素であるか、または共に二重結合を形成し、Aは、非置換であるか、あるいはC₁ - C₆アルキル、C₁ - C₆ハロアルキル、C₁ - C₆アルコキシ、C₁ - C₆アルキルカルボニルオキシ、C₂ - C₆アルケニル、=O、もしくは=N-R¹によって一度もしくは二度置換されたC₃ - C₇シクロアルキルであり、R¹は、ヒドロキシル、C₁ - C₆アルキル、C₁ - C₆ハロアルキル、C₃ - C₇シクロアルキル、C₁ - C₆アルコキシ、C₁ - C₆アルキル、C₁ - C₆アルコキシ、またはC₁ - C₆ハロアルコキシであるか、あるいはAは、1つの(C₃ - C₆シクロアルキル)メトキシ、C₃ - C₆シクロアルキルオキシ、C₂ - C₅アルケニル-C_H₂-オキシ、ベンジルオキシ、(モノメチルもしくはジメチルフェニル)メトキシ、(モノメトキシもしくはジメトキシフェニル)メトキシ、または(モノフルオロ-もしくはジフルオロ-フェニル)メトキシ置換基によって、4位(シクロヘキシル連結点に関して予測される)で、一度置換されたシクロヘキシルであるか、

30

あるいはAは、デカヒドロ-1-ナフチル、もしくはデカヒドロ-2-ナフチルであるか、

、

あるいはAは、随意に置換されたフェニルであり、

Gは、水素、または農学的に許容される金属、スルホニウム、アンモニウム、もしくは潜在性(latentating)基であって、

Gが潜在性基であるとき、前記潜在性基Gは、C₁ - C₈アルキル、C₂ - C₈ハロアルキル、フェニルC₁ - C₈アルキル(前記フェニルがC₁ - C₃アルキル、C₁ - C₃ハロアルキル、C₁ - C₃アルコキシ、C₁ - C₃ハロアルコキシ、C₁ - C₃アルキルチオ、C₁ - C₃アルキルスルフィニル、C₁ - C₃アルキルスルホニル、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって随意に置換される)、ヘテロアリールC₁ - C₈アルキル(前記ヘテロアリールがC₁ - C₃アルキル、C₁ - C₃ハロアルキル、C₁ - C₃アルコキシ、C₁ - C₃ハロアルコキシ、C₁ - C₃アルキルチオ、C₁ - C₃アルキルスルフィニル、C₁ - C₃アルキルスルホニル、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって随意に置換される)、C₃ - C₈アルケニル、C₃ - C₈ハロアルケニル、C₃ - C₈アルキニル、C(X^a) - R^a、C(X^b) - X^c - R^b、C(X^d) - N(R^c) - R^d、-SO₂ - R^e、-P(X^e)(R^f) - R^g、およびCH₂ - X^f - R^hの基から選択され、

40

50

X^a 、 X^b 、 X^c 、 X^d 、 X^e 、および X^f は、相互に独立して、酸素または硫黄であり、かつ R^a は、H、 $C_1 - C_{1-8}$ アルキル、 $C_2 - C_{1-8}$ アルケニル、 $C_2 - C_{1-8}$ アルキニル、 $C_1 - C_{1-10}$ ハロアルキル、 $C_1 - C_{1-10}$ シアノアルキル、 $C_1 - C_{1-10}$ ニトロアルキル、 $C_1 - C_{1-10}$ アミノアルキル、 $C_1 - C_5$ アルキルアミノ($C_1 - C_5$)アルキル、 $C_2 - C_8$ ジアルキルアミノ($C_1 - C_5$)アルキル、 $C_3 - C_7$ シクロアルキル($C_1 - C_5$)アルキル、 $C_1 - C_5$ アルコキシ($C_1 - C_5$)アルキル、 $C_3 - C_5$ アルケニルオキシ($C_1 - C_5$)アルキル、 $C_1 - C_5$ アルキルチオ($C_1 - C_5$)アルキル、 $C_1 - C_5$ アルキルスルホニル($C_1 - C_5$)アルキル、 $C_2 - C_8$ アルキリデンアミノオキシ($C_1 - C_5$)アルキル、 $C_1 - C_5$ アルキルカルボニル($C_1 - C_5$)アルキル、 $C_1 - C_5$ アルコキシカルボニル($C_1 - C_5$)アルキル、アミノカルボニル($C_1 - C_5$)アルキル、 $C_1 - C_5$ アルキルアミノカルボニル($C_1 - C_5$)アルキル、 $C_2 - C_8$ ジアルキルアミノカルボニル($C_1 - C_5$)アルキル、 $C_1 - C_5$ アルキルカルボニル($C_1 - C_5$)アルキル、 $N - (C_1 - C_5)$ アルキルカルボニル-N - ($C_1 - C_5$)アルキルアミノ($C_1 - C_5$)アルキル、 $C_3 - C_6$ トリアルキルシリル($C_1 - C_5$)アルキル、フェニル($C_1 - C_5$)アルキル(前記フェニルが $C_1 - C_3$ アルキル、 $C_1 - C_3$ ハロアルキル、 $C_1 - C_3$ アルコキシ、 $C_1 - C_3$ ハロアルコキシ、 $C_1 - C_3$ アルキルチオ、 $C_1 - C_3$ アルキルスルフィニル、 $C_1 - C_3$ アルキルスルホニル、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって随意に置換される)、ヘテロアリール($C_1 - C_5$)アルキル(前記ヘテロアリールが $C_1 - C_3$ アルキル、 $C_1 - C_3$ ハロアルキル、 $C_1 - C_3$ アルコキシ、 $C_1 - C_3$ ハロアルコキシ、 $C_1 - C_3$ アルキルチオ、 $C_1 - C_3$ アルキルスルフィニル、 $C_1 - C_3$ アルキルスルホニル、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって随意に置換される)、 $C_2 - C_5$ ハロアルケニル、 $C_3 - C_8$ シクロアルキル；フェニル、または $C_1 - C_3$ アルキル、 $C_1 - C_3$ ハロアルキル、 $C_1 - C_3$ アルコキシ、 $C_1 - C_3$ ハロアルコキシ、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって置換されたフェニル；あるいはヘテロアリール、または $C_1 - C_3$ アルキル、 $C_1 - C_3$ ハロアルキル、 $C_1 - C_3$ アルコキシ、 $C_1 - C_3$ ハロアルコキシ、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって置換されたヘテロアリールであり、

R^b は、 $C_1 - C_{1-8}$ アルキル、 $C_3 - C_{1-8}$ アルケニル、 $C_3 - C_{1-8}$ アルキニル、 $C_2 - C_{1-10}$ ハロアルキル、 $C_1 - C_{1-10}$ シアノアルキル、 $C_1 - C_{1-10}$ ニトロアルキル、 $C_2 - C_{1-10}$ アミノアルキル、 $C_1 - C_5$ アルキルアミノ($C_1 - C_5$)アルキル、 $C_2 - C_8$ ジアルキルアミノ($C_1 - C_5$)アルキル、 $C_3 - C_7$ シクロアルキル($C_1 - C_5$)アルキル、 $C_1 - C_5$ アルコキシ($C_1 - C_5$)アルキル、 $C_3 - C_5$ アルケニルオキシ($C_1 - C_5$)アルキル、 $C_3 - C_5$ アルキニルオキシ($C_1 - C_5$)アルキル、 $C_1 - C_5$ アルキルチオ($C_1 - C_5$)アルキル、 $C_1 - C_5$ アルキルスルフィニル($C_1 - C_5$)アルキル、 $C_1 - C_5$ アルキル、 $C_1 - C_5$ アルキルスルホニル($C_1 - C_5$)アルキル、 $C_1 - C_5$ アルキルカルボニル($C_1 - C_5$)アルキル、 $C_1 - C_5$ アルコキシカルボニル($C_1 - C_5$)アルキル、アミノカルボニル($C_1 - C_5$)アルキル、 $C_1 - C_5$ アルキルアミノカルボニル($C_1 - C_5$)アルキル、 $C_2 - C_8$ ジアルキルアミノカルボニル($C_1 - C_5$)アルキル、 $C_1 - C_5$ アルキルカルボニルアミノ($C_1 - C_5$)アルキル、 $N - (C_1 - C_5)$ アルキルカルボニル-N - ($C_1 - C_5$)アルキルアミノ($C_1 - C_5$)アルキル、 $C_3 - C_6$ トリアルキルシリル($C_1 - C_5$)アルキル、フェニル($C_1 - C_5$)アルキル(前記フェニルが $C_1 - C_3$ アルキル、 $C_1 - C_3$ ハロアルキル、 $C_1 - C_3$ アルコキシ、 $C_1 - C_3$ ハロアルコキシ、 $C_1 - C_3$ アルキルチオ、 $C_1 - C_3$ アルキルスルフィニル、 $C_1 - C_3$ アルキルスルホニル、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって随意に置換されてもよい)、ヘテロアリール $C_1 - C_5$ アルキル(前記ヘテロアリールが $C_1 - C_3$ アルキル、 $C_1 - C_3$ ハロアルキル、 $C_1 - C_3$ アルコキシ、 $C_1 - C_3$ ハロアルコキシ、 $C_1 - C_3$ アルキルチオ、 $C_1 - C_3$ アルキルスルフィニル、 $C_1 - C_3$ アルキルスルホニル、

ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって随意に置換されてもよい)、C₃ - C₅ハロアルケニル、C₃ - C₈シクロアルキル、フェニル、もしくはC₁ - C₃アルキル、C₁ - C₃ハロアルキル、C₁ - C₃アルコキシ、C₁ - C₃ハロアルコキシ、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって置換されるフェニル、ヘテロアリール、もしくはC₁ - C₃アルキル、C₁ - C₃ハロアルキル、C₁ - C₃アルコキシ、C₁ - C₃ハロアルコキシ、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって置換されるヘテロアリールであり、

R^cおよびR^dは、それぞれ相互に独立して、水素、C₁ - C₁₀アルキル、C₃ - C₁₀アルケニル、C₃ - C₁₀アルキニル、C₂ - C₁₀ハロアルキル、C₁ - C₁₀シアノアルキル、C₁ - C₁₀ニトロアルキル、C₁ - C₁₀アミノアルキル、C₁ - C₅アルキルアミノ(C₁ - C₅)アルキル、C₂ - C₈ジアルキルアミノ(C₁ - C₅)アルキル、C₃ - C₇シクロアルキル(C₁ - C₅)アルキル、C₁ - C₅アルコキシ(C₁ - C₅)アルキル、C₃ - C₅アルケニルオキシ(C₁ - C₅)アルキル、C₃ - C₅アルキニルオキシ(C₁ - C₅)アルキル、C₁ - C₅アルキルチオ(C₁ - C₅)アルキル、C₁ - C₅アルキルスルフィニル(C₁ - C₅)アルキル、C₁ - C₅アルキルスルホニル(C₁ - C₅)アルキル、C₂ - C₈アルキリデンアミノオキシ(C₁ - C₅)アルキル、C₁ - C₅アルキルカルボニル(C₁ - C₅)アルキル、C₁ - C₅アルコキシカルボニル(C₁ - C₅)アルキル、アミノカルボニル(C₁ - C₅)アルキル、C₁ - C₅アルキルアミノカルボニル(C₁ - C₅)アルキル、C₂ - C₈ジアルキルアミノカルボニル(C₁ - C₅)アルキル、N - (C₁ - C₅)アルキルカルボニル - N - (C₂ - C₅)アルキルアミノアルキル、C₃ - C₆トリアルキルシリル(C₁ - C₅)アルキル、フェニル(C₁ - C₅)アルキル(前記フェニルがC₁ - C₃アルキル、C₁ - C₃ハロアルキル、C₁ - C₃アルコキシ、C₁ - C₃ハロアルコキシ、C₁ - C₃アルキルチオ、C₁ - C₃アルキルスルフィニル、C₁ - C₃アルキルスルホニル、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって随意に置換される)、ヘテロアリール(C₁ - C₅)アルキル(前記ヘテロアリールがC₁ - C₃アルキル、C₁ - C₃ハロアルキル、C₁ - C₃アルコキシ、C₁ - C₃ハロアルコキシ、C₁ - C₃アルキルチオ、C₁ - C₃アルキルスルフィニル、C₁ - C₃アルキルスルホニル、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって随意に置換される)、C₂ - C₅ハロアルケニル、C₃ - C₈シクロアルキル；フェニル、またはC₁ - C₃アルキル、C₁ - C₃ハロアルキル、C₁ - C₃アルコキシ、C₁ - C₃ハロアルコキシ、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって置換されたフェニル；ヘテロアリール、またはC₁ - C₃アルキル、C₁ - C₃ハロアルキル、C₁ - C₃アルコキシ、C₁ - C₃ハロアルコキシ、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって置換されたヘテロアリールアミノ；ジヘテロアリールアミノ、またはC₁ - C₃アルキル、C₁ - C₃ハロアルキル、C₁ - C₃アルコキシ、C₁ - C₃ハロアルコキシ、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって置換されたヘテロアリールアミノ；ジヘテロアリールアミノ、またはC₁ - C₃アルキル、C₁ - C₃ハロアルキル、C₁ - C₃アルコキシ、C₁ - C₃ハロアルコキシ、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって置換されたジヘテロアリールアミノ；フェニルアミノ、またはC₁ - C₃アルキル、C₁ - C₃ハロアルキル、C₁ - C₃アルコキシ、C₁ - C₃ハロアルコキシ、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって置換されたフェニルアミノ；ジフェニルアミノ、またはC₁ - C₃アルキル、C₁ - C₃ハロアルキル、C₁ - C₃アルコキシ、C₁ - C₃ハロアルコキシ、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって置換されたジフェニルアミノ；あるいはC₃ - C₇シクロアルキルアミノ、ジ - C₃ - C₇シクロアルキルアミノ、またはC₃ - C₇シクロアルコキシであるか、

あるいはR^cおよびR^dは、結合されて、随意にOまたはSから選択される1個のヘテロ原子を含有する、3~7員環を形成してもよく、

R^eは、C₁ - C₁₀アルキル、C₂ - C₁₀アルケニル、C₂ - C₁₀アルキニル、C₁ - C₁₀ハロアルキル、C₁ - C₁₀シアノアルキル、C₁ - C₁₀ニトロアルキル、C₁ - C₁₀アミノアルキル、C₁ - C₅アルキルアミノ(C₁ - C₅)アルキル、C₂ - C₈ジアルキルアミノ(C₁ - C₅)アルキル、C₃ - C₇シクロアルキル(C₁ - C₅)

10

20

30

40

50

₅) アルキル、C₁ - C₅ アルコキシ (C₁ - C₅) アルキル、C₃ - C₅ アルケニルオキシ (C₁ - C₅) アルキル、C₃ - C₅ アルキニルオキシ (C₁ - C₅) アルキル、C₁ - C₅ アルキルチオ (C₁ - C₅) アルキル、C₁ - C₅ アルキルスルフィニル (C₁ - C₅) アルキル、C₁ - C₅ アルキルスルホニル (C₁ - C₅) アルキル、C₂ - C₈ アルキリデンアミノオキシ (C₁ - C₅) アルキル、C₁ - C₅ アルキルカルボニル (C₁ - C₅) アルキル、C₁ - C₅ アルコキシカルボニル (C₁ - C₅) アルキル、アミノカルボニル (C₁ - C₅) アルキル、C₁ - C₅ アルキルアミノカルボニル (C₁ - C₅) アルキル、C₂ - C₈ ジアルキルアミノカルボニル (C₁ - C₅) アルキル、C₁ - C₅ アルキルカルボニルアミノ (C₁ - C₅) アルキル、N - (C₁ - C₅) アルキルカルボニル - N - (C₁ - C₅) アルキルアミノ (C₁ - C₅) アルキル、C₃ - C₆ トリアルキルシリル (C₁ - C₅) アルキル、フェニル (C₁ - C₅) アルキル (前記フェニルがC₁ - C₃ アルキル、C₁ - C₃ ハロアルキル、C₁ - C₃ アルコキシ、C₁ - C₃ ハロアルコキシ、C₁ - C₃ アルキルチオ、C₁ - C₃ アルキルスルフィニル、C₁ - C₃ アルキルスルホニル、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって随意に置換されてもよい)、ヘテロアリール (C₁ - C₅) アルキル (前記ヘテロアリールがC₁ - C₃ アルキル、C₁ - C₃ ハロアルキル、C₁ - C₃ アルコキシ、C₁ - C₃ ハロアルコキシ、C₁ - C₃ アルキルチオ、C₁ - C₃ アルキルスルフィニル、C₁ - C₃ アルキルスルホニル、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって随意に置換されてもよい)、C₂ - C₅ ハロアルケニル、C₃ - C₈ シクロアルキル、フェニル、もしくはC₁ - C₃ アルキル、C₁ - C₃ ハロアルキル、C₁ - C₃ アルコキシ、C₁ - C₃ ハロアルコキシ、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって置換されるフェニル、ヘテロアリール、もしくはC₁ - C₃ アルキル、C₁ - C₃ ハロアルキル、C₁ - C₃ アルコキシ、C₁ - C₃ ハロアルコキシ、C₁ - C₃ アルキルアミノ、もしくはC₁ - C₃ アルキル、C₁ - C₃ ハロアルキル、C₁ - C₃ アルコキシ、C₁ - C₃ ハロアルコキシ、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって置換されるヘテロアリール、ヘテロアリールアミノ、もしくはC₁ - C₃ アルキル、C₁ - C₃ ハロアルキル、C₁ - C₃ アルコキシ、C₁ - C₃ ハロアルコキシ、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって置換されるジヘテロアリールアミノ、フェニルアミノ、もしくはC₁ - C₃ アルキル、C₁ - C₃ ハロアルキル、C₁ - C₃ アルコキシ、C₁ - C₃ ハロアルコキシ、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって置換されるフェニルアミノ、ジフェニルアミノ、もしくはC₁ - C₃ アルキル、C₁ - C₃ ハロアルキル、C₁ - C₃ アルコキシ、C₁ - C₃ ハロアルコキシ、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって置換されるジフェニルアミノ、またはC₃ - C₇ シクロアルキルアミノ、ジC₃ - C₇ シクロアルキルアミノ、もしくはC₃ - C₇ シクロアルコキシ、C₁ - C₁₀ アルコキシ、C₁ - C₁₀ ハロアルコキシ、C₁ - C₅ アルキルアミノ、またはC₂ - C₈ ジアルキルアミノであり、
 R^f およびR^g は、それぞれ相互に独立して、C₁ - C₁₀ アルキル、C₂ - C₁₀ アルケニル、C₂ - C₁₀ アルキニル、C₁ - C₁₀ アルコキシ、C₁ - C₁₀ ハロアルキル、C₁ - C₁₀ シアノアルキル、C₁ - C₁₀ ニトロアルキル、C₁ - C₁₀ アミノアルキル、C₁ - C₅ アルキルアミノ (C₁ - C₅) アルキル、C₂ - C₈ ジアルキルアミノ (C₁ - C₅) アルキル、C₃ - C₇ シクロアルキル (C₁ - C₅) アルキル、C₁ - C₅ アルコキシ (C₁ - C₅) アルキル、C₃ - C₅ アルケニルオキシ (C₁ - C₅) アルキル、C₁ - C₅ アルキルチオ (C₁ - C₅) アルキル、C₁ - C₅ アルキルスルフィニル (C₁ - C₅) アルキル、C₁ - C₅ アルキルスルホニル (C₁ - C₅) アルキル、C₂ - C₈ アルキリデンアミノオキシ (C₁ - C₅) アルキル、C₁ - C₅ アルキルカルボニル (C₁ - C₅) アルキル、C₁ - C₅ アルコキシカルボニル (C₁ - C₅) アルキル、アミノカルボニル (C₁ - C₅) アルキル、C₁ - C₅ アルキルアミノカルボニル (C₁ - C₅) アルキル、C₂ - C₈ ジアルキルアミノカルボニル (C₁ - C₅) アルキル、C₁ - C₅ アルキルカルボニルアミノ (C₁ - C₅) アルキル、N - (C₁ - C₅) アルキルカルボニル - N - (C₂ - C₈) 10
 20
 30
 40
 50

5) アルキルアミノアルキル、C₃ - C₆ トリアルキルシリル(C₁ - C₅)アルキル、フェニル(C₁ - C₅)アルキル(前記フェニルがC₁ - C₃アルキル、C₁ - C₃ハロアルキル、C₁ - C₃アルコキシ、C₁ - C₃ハロアルコキシ、C₁ - C₃アルキルチオ、C₁ - C₃アルキルスルフィニル、C₁ - C₃アルキルスルホニル、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって随意に置換されてもよい)、ヘテロアリール(C₁ - C₅)アルキル(前記ヘテロアリールがC₁ - C₃アルキル、C₁ - C₃ハロアルキル、C₁ - C₃アルコキシ、C₁ - C₃ハロアルコキシ、C₁ - C₃アルキルチオ、C₁ - C₃アルキルスルフィニル、C₁ - C₃アルキルスルホニル、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって随意に置換されてもよい)、C₂ - C₅ハロアルケニル、C₃ - C₈シクロアルキル、フェニル、もしくはC₁ - C₃アルキル、C₁ - C₃ハロアルキル、C₁ - C₃アルコキシ、C₁ - C₃ハロアルコキシ、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって置換されるフェニル、ヘテロアリール、もしくはC₁ - C₃アルキル、C₁ - C₃ハロアルキル、C₁ - C₃アルコキシ、C₁ - C₃ハロアルコキシ、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって置換されるヘテロアリール、ヘテロアリールアミノ、もしくはC₁ - C₃アルキル、C₁ - C₃ハロアルキル、C₁ - C₃アルコキシ、C₁ - C₃ハロアルコキシ、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって置換されるヘテロアリールアミノ、ジヘテロアリールアミノ、もしくはC₁ - C₃アルキル、C₁ - C₃ハロアルキル、C₁ - C₃アルコキシ、C₁ - C₃ハロアルコキシ、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって置換されるジヘテロアリールアミノ、フェニルアミノ、もしくはC₁ - C₃アルキル、C₁ - C₃ハロアルキル、C₁ - C₃アルコキシ、C₁ - C₃ハロアルコキシ、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって置換されるジフェニルアミノ、またはC₃ - C₇シクロアルキルアミノ、ジC₃ - C₇シクロアルキルアミノ、もしくはC₃ - C₇シクロアルコキシ、C₁ - C₁₀ハロアルコキシ、C₁ - C₅アルキルアミノ、もしくはC₂ - C₈ジアルキルアミノ(C₁ - C₅)アルキル、C₁ - C₅アルキルアミノ(C₁ - C₅)アルキル、C₁ - C₅アルコキシ(C₁ - C₅)アルキル、C₃ - C₅アルケニルオキシ(C₁ - C₅)アルキル、C₃ - C₅アルキルオキシ(C₁ - C₅)アルキル、C₁ - C₅アルキルチオ(C₁ - C₅)アルキル、C₁ - C₅アルキルスルフィニル(C₁ - C₅)アルキル、C₁ - C₅アルキル、C₁ - C₅アルキルスルホニル(C₁ - C₅)アルキル、C₂ - C₈アルキリデンアミノオキシ(C₁ - C₅)アルキル、C₁ - C₅アルキルカルボニル(C₁ - C₅)アルキル、C₁ - C₅アルコキシカルボニル(C₁ - C₅)アルキル、アミノカルボニル(C₁ - C₅)アルキル、C₁ - C₅アルキルアミノカルボニル(C₁ - C₅)アルキル、C₂ - C₈ジアルキルアミノカルボニル(C₁ - C₅)アルキル、C₁ - C₅アルキルカルボニルアミノ(C₁ - C₅)アルキル、N - (C₁ - C₅)アルキルカルボニル - N - (C₁ - C₅)アルキルアミノ(C₁ - C₅)アルキル、C₃ - C₆トリアルキルシリル(C₁ - C₅)アルキル、フェニル(C₁ - C₅)アルキル(前記フェニルがC₁ - C₃アルキル、C₁ - C₃ハロアルキル、C₁ - C₃アルコキシ、C₁ - C₃ハロアルコキシ、C₁ - C₃アルキルチオ、C₁ - C₃アルキルスルフィニル、C₁ - C₃アルキルスルホニル、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって随意に置換される)、ヘテロアリール(C₁ - C₅)アルキル(ヘテロアリールがC₁ - C₃アルキル、C₁ - C₃ハロアルキル、C₁ - C₃アルコキシ、C₁ - C₃ハロアルコキシ、C₁ - C₃アルキルチオ、C₁ - C₃アルキルスルフィニル、C₁ - C₃アルキルスルホニル、ハロゲン

10

20

30

40

50

、シアノ、もしくはニトロによって随意に置換される)、フェノキシ($C_1 - C_5$)アルキル(前記フェニルが $C_1 - C_3$ アルキル、 $C_1 - C_3$ ハロアルキル、 $C_1 - C_3$ アルコキシ、 $C_1 - C_3$ ハロアルコキシ、 $C_1 - C_3$ アルキルチオ、 $C_1 - C_3$ アルキルスルフィニル、 $C_1 - C_3$ アルキルスルホニル、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって随意に置換される)、ヘテロアリールオキシ($C_1 - C_5$)アルキル(前記ヘテロアリールが $C_1 - C_3$ アルキル、 $C_1 - C_3$ ハロアルキル、 $C_1 - C_3$ アルコキシ、 $C_1 - C_3$ ハロアルコキシ、 $C_1 - C_3$ アルキルチオ、 $C_1 - C_3$ アルキルスルフィニル、 $C_1 - C_3$ アルキルスルホニル、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって随意に置換される)、 $C_3 - C_5$ ハロアルケニル、 $C_3 - C_8$ シクロアルキル、フェニル、または $C_1 - C_3$ アルキル、 $C_1 - C_3$ ハロアルキル、 $C_1 - C_3$ アルコキシ、 $C_1 - C_3$ ハロアルコキシ、ハロゲン、もしくはニトロによって置換されたフェニル;あるいはヘテロアリール、または $C_1 - C_3$ アルキル、 $C_1 - C_3$ ハロアルキル、 $C_1 - C_3$ アルコキシ、 $C_1 - C_3$ ハロアルコキシ、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって置換されたヘテロアリールである]

の化合物。

【請求項 2】

R は、メチル、エチル、ビニル、エチニル、またはシクロプロピルであり、 R^1 は、水素、 $C_1 - C_6$ アルキル、 $C_1 - C_6$ ハロアルキル、 $C_3 - C_7$ シクロアルキル、 $C_1 - C_6$ アルコキシ、 $C_1 - C_6$ ハロアルコキシ、ビニル、プロペニル、エチニル、プロピニル、ハロゲン、フェニル、またはアルキル、ハロアルキル、アルキルスルホニル、ハロゲン、ニトロ、もしくはシアノによって置換されたフェニルであり、

R^2 は、メチル、エチル、ビニル、エチニル、またはメトキシであり、

R^3 および R^4 は、水素であるか、または共に二重結合を形成し、

A は、非置換であるか、または $C_1 - C_6$ アルキル、 $C_1 - C_6$ ハロアルキル、 $C_1 - C_6$ アルコキシ、 $C_1 - C_6$ アルキルカルボニルオキシ、 $C_2 - C_6$ アルケニル、=O、もしくは=N-R¹によって一度もしくは二度置換された $C_3 - C_7$ シクロアルキルであり、 R^{10} は、ヒドロキシリル、 $C_1 - C_6$ アルキル、 $C_1 - C_6$ ハロアルキル、 $C_3 - C_7$ シクロアルキル、 $C_1 - C_6$ アルコキシ、 $C_1 - C_6$ アルコキシ、 $C_1 - C_6$ アルコキシ、または $C_1 - C_6$ ハロアルコキシであるか、

あるいは A は、随意に置換されたフェニルであり、かつ

G は、水素、または農学的に許容される金属、スルホニウム、アンモニウム、もしくは潜在性基であり、前記潜在性基は、請求項1に記載のとおりである、請求項1に記載の化合物。

【請求項 3】

R^1 は、水素、 $C_1 - C_4$ アルキル、 $C_1 - C_2$ アルコキシ、 $C_1 - C_2$ ハロアルコキシ、ハロゲン、フェニル、またはアルキル、ハロアルキル、アルキルスルホニル、ハロゲン、ニトロ、もしくはシアノによって置換されたフェニルである、請求項1または2に記載の化合物。

【請求項 4】

R^1 は、水素、 $C_1 - C_4$ アルキル、 $C_1 - C_2$ アルコキシ、 $C_1 - C_2$ ハロアルコキシ、ハロゲン、フェニル、または $C_1 - C_4$ アルキル、 CF_3 、 CF_2Cl 、 CF_2H 、 CCl_2H 、 FCH_2 、 $ClCH_2$ 、 $BrCH_2$ 、 CH_3CHF 、 $(CH_3)_2CF$ 、 CF_3CH_2 、 $CH_2CF_2CH_2$ 、 $C_1 - C_4$ アルキルスルホニル、ハロゲン、ニトロ、もしくはシアノによって置換されたフェニルである、請求項3に記載の化合物。

【請求項 5】

R^1 は、水素、 $C_1 - C_4$ アルキル、またはハロゲンである、請求項4に記載の化合物。

【請求項 6】

R^2 は、エチレンである、請求項1、2、3、4、または5に記載の化合物。

【請求項 7】

10

20

30

40

50

R³ および R⁴ は、水素である、請求項 1 ~ 6 のうちのいずれか一項に記載の化合物。

【請求項 8】

A は、非置換、または C₁ - C₄ アルキル、C₁ - C₆ アルキルカルボニルオキシ、C₄ - C₆ アルケニル、=O、または =N - R¹ によって一度もしくは二度置換された C₃ - C₇ シクロアルキルであり、R¹ は、ヒドロキシリルまたは C₁ - C₄ アルコキシである、請求項 1 ~ 7 のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項 9】

G は、水素、または農学的に許容される金属、スルホニウム、またはアンモニウム基、または式 C(X^a) - R^a もしくは C(X^b) - X^c - R^b の潜在性基であり、式中、X^a および X^b は、相互に独立して、酸素または硫黄であり、R^a および R^b は、請求項 1 に記載のとおりである、請求項 1 ~ 8 のうちのいずれか一項に記載の化合物。 10

【請求項 10】

G は、水素、または農学的に許容される金属、スルホニウム、またはアンモニウム基、または式 C(X^a) - R^a もしくは C(X^b) - X^c - R^b の潜在性基であり、式中、X^a および X^b は、相互に独立して、酸素または硫黄であり、R^a は、水素または C₁ - C₁₈ アルキルであり、R^b は、C₁ - C₁₈ アルキルである、請求項 1 ~ 8 のうちのいずれか一項に記載の化合物。

【請求項 11】

R¹ は、水素、C₁ - C₆ アルキル、またはハロゲンであり、R² は、メチルであり、R³ および R⁴ は、水素であるか、または共に二重結合を形成し、A は、非置換、または C₁ - C₆ アルキル、C₁ - C₆ アルキルカルボニルオキシ、C₂ - C₆ アルケニル、=O、または =N - R¹ によって一度もしくは二度置換された C₃ - C₇ シクロアルキルであり、R¹ は、ヒドロキシリルまたは C₁ - C₆ アルコキシであり、G は、水素または潜在性基である、請求項 1 ~ 10 のうちのいずれか一項に記載の化合物。 20

【請求項 12】

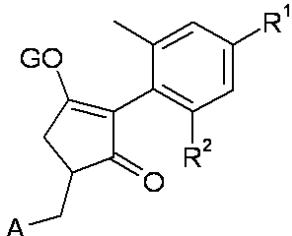
R¹ は、水素、メチル、またはプロモであり、R² は、メチルであり、R³ および R⁴ は、水素であり、A は、非置換、またはメチル、プロペニル、メチルカルボニルオキシ、=O、または =N - R¹ で一度もしくは二度置換された C₅ - もしくは C₆ シクロアルキルであり、R¹ は、ヒドロキシリルまたはメトキシであり、G は、水素またはピバロイルである、請求項 11 に記載の化合物。 30

【請求項 13】

A が随意に置換されたフェニルであるとき、

(a) 式 (I) の化合物は、式 (IB) :

【化 2】



(IB)

[式中、

G は、水素であり、

R² は、CH₃ または CH₃O であり、

R¹ は、H、CH₃、CH₂CH₃、F、Cl、Br、CH₃O、CH₃CH₂O、-CH=CH₂、-CC₂H、フェニル、2-フルオロフェニル、2-クロロフェニル、2-トリフルオロメチルフェニル、2-ニトロフェニル、2-メチルフェニル、2-メタンスルホニルフェニル、2-シアノフェニル、3-フルオロフェニル、3-クロロフェニル、3-トリフルオロメチルフェニル、3-ニトロフェニル、3-メチルフェニル、3-メタン

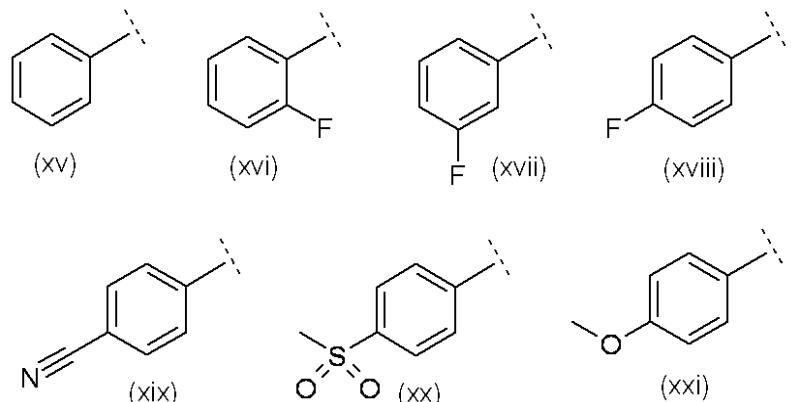
40

50

スルホニルフェニル、3 - シアノフェニル、4 - フルオロフェニル、4 - クロロフェニル、4 - ブロモフェニル、4 - ジフルオロメトキシフェニル、2 - フルオロ - 4 - クロロフェニル、3 - フルオロ - 4 - クロロフェニル、2 - クロロ - 4 - クロロフェニル、3 - クロロ - 4 - クロロフェニル、3 - クロロ - 4 - フルオロフェニル、2 - メチル - 4 - クロロフェニル、4 - トリフルオロメチルフェニル、4 - ニトロフェニル、4 - メチルフェニル、4 - メタンスルホニルフェニル、または4 - シアノフェニルであり、かつ

A は、亜式 (xv)、(xvi)、(xvii)、(xviii)、(xi)、(xx)、または(xxi)

【化3】

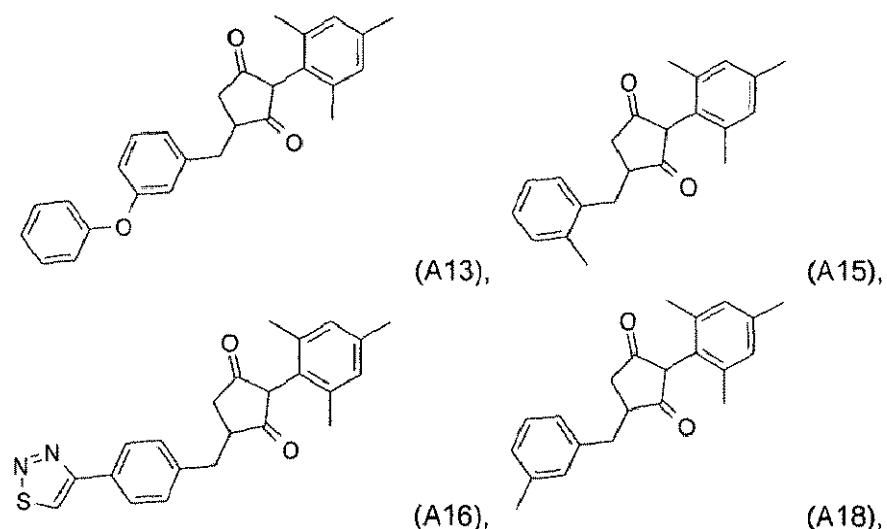


である】

の化合物であるか、あるいは

(b) 式(I)の化合物は、以下の化合物 A 13、A 15、A 16、A 18、A 20、A 21、A 22、B 7、B 8、B 9、B 10、B 11、B 12、B 13、B 14、B 15、B 16、B 17、B 18、またはB 19：

【化4】



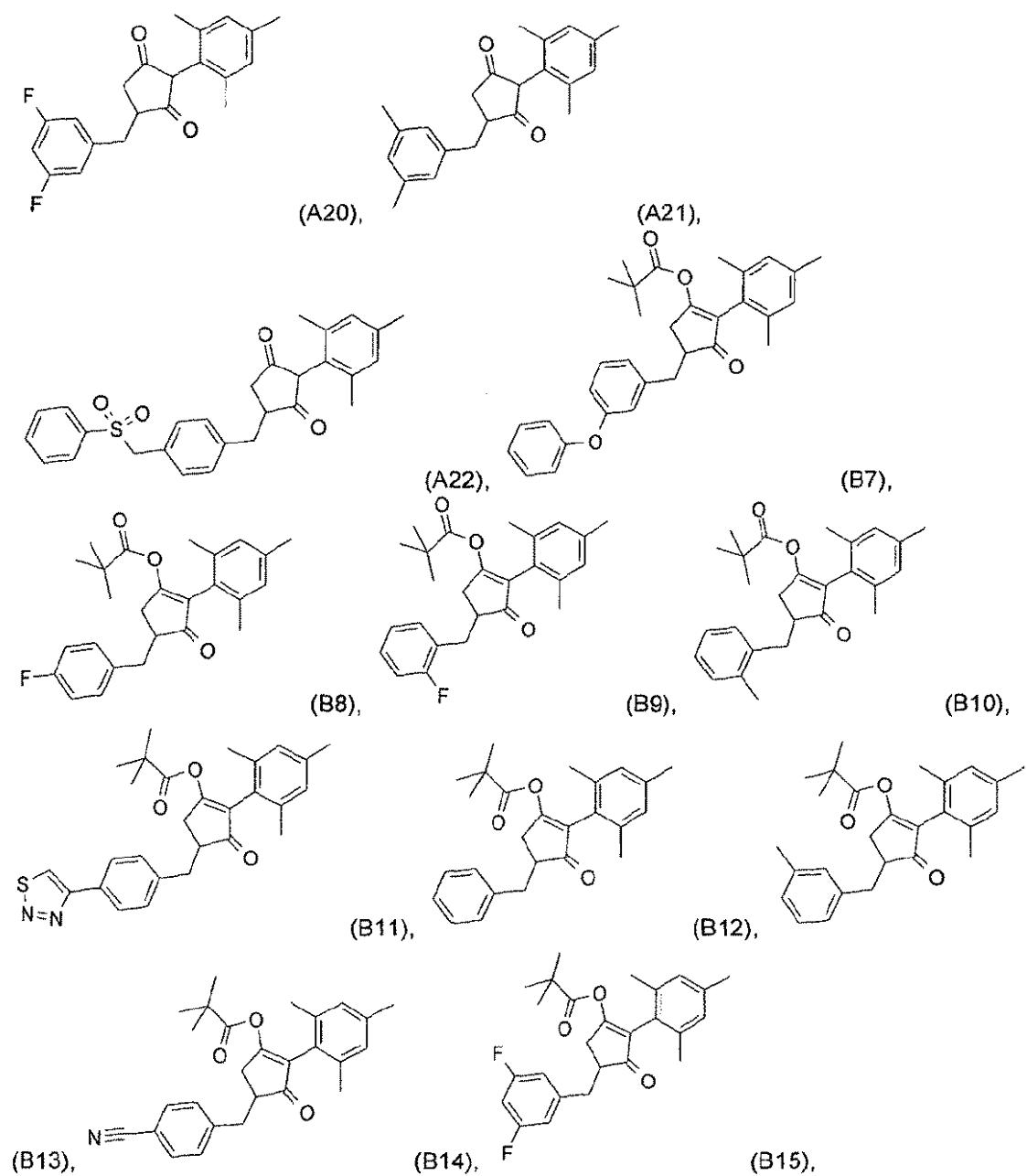
10

20

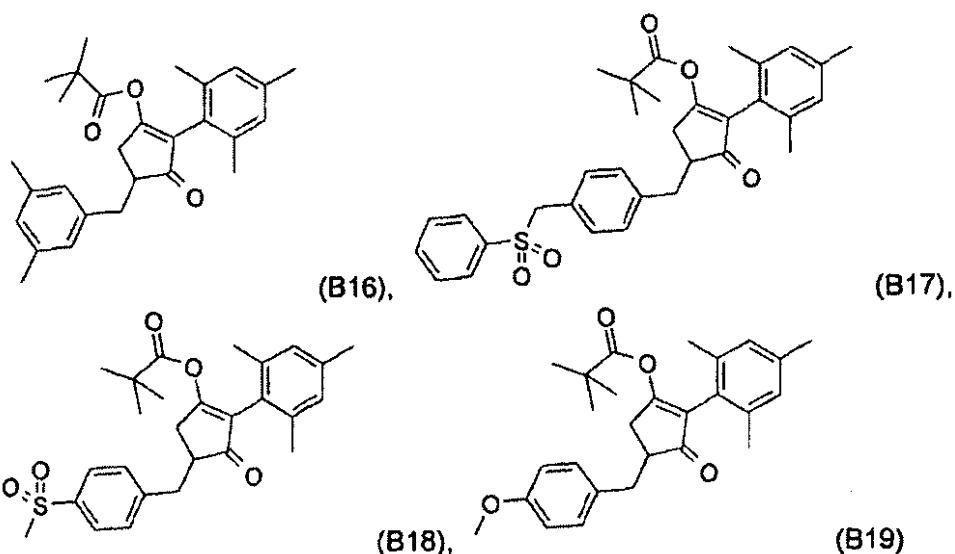
30

40

【化 5】



【化6】



10

20

30

40

50

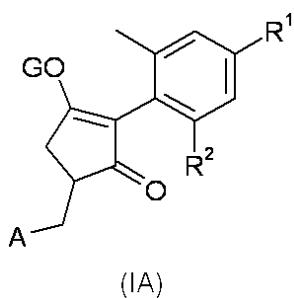
のいずれか1つである、

請求項1～12のうちのうちのいずれか一項に記載の化合物。

【請求項14】

式(I A)：

【化7】



[式中、

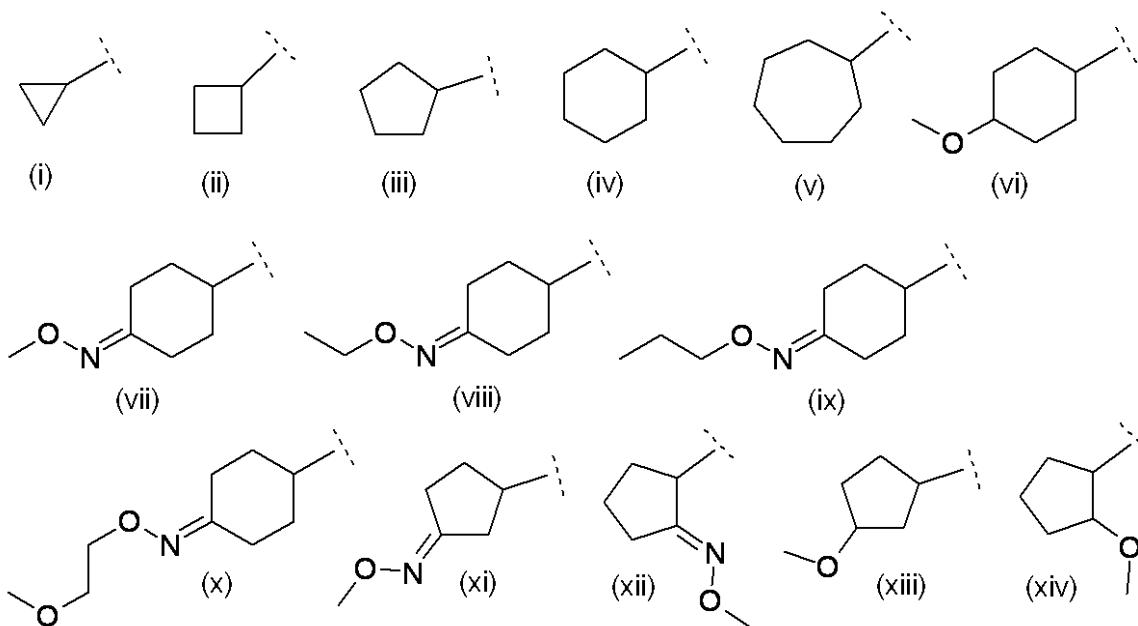
Gは、水素であり、

R²は、CH₃またはCH₃Oであり、

R¹は、H、CH₃、CH₂CH₃、F、Cl、Br、CH₃O、CH₃CH₂O、-CH=CH₂、-CC₃H、フェニル、2-フルオロフェニル、2-クロロフェニル、2-トリフルオロメチルフェニル、2-ニトロフェニル、2-メチルフェニル、2-メタンスルホニルフェニル、2-シアノフェニル、3-フルオロフェニル、3-クロロフェニル、3-トリフルオロメチルフェニル、3-ニトロフェニル、3-メチルフェニル、3-メタンスルホニルフェニル、3-シアノフェニル、4-フルオロフェニル、4-クロロフェニル、4-ブロモフェニル、4-ジフルオロメトキシフェニル、2-フルオロ-4-クロロフェニル、3-フルオロ-4-クロロフェニル、2-クロロ-4-クロロフェニル、3-クロロ-4-クロロフェニル、3-クロロ-4-フルオロフェニル、2-メチル-4-クロロフェニル、4-トリフルオロメチルフェニル、4-ニトロフェニル、4-メチルフェニル、4-メタンスルホニルフェニル、または4-シアノフェニルであり、かつ

Aは、亜式(i)、(ii)、(iii)、(iv)、(v)、(vi)、(vii)、(viii)、(ix)、(x)、(xi)、(xii)、または(xiii)：

【化 8】



10

20

30

40

50

である】

の化合物である、請求項 1 に記載の化合物。

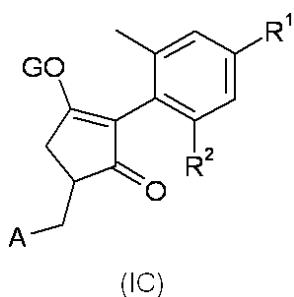
【請求項 1 5】

A は、亜式 (i i i) 、 (i v) 、 (v i) 、 または (v i i) である、請求項 1 4 に記載の化合物。

【請求項 1 6】

式 (I C) :

【化 9】



(IC)

[式中、

G は、水素であり、

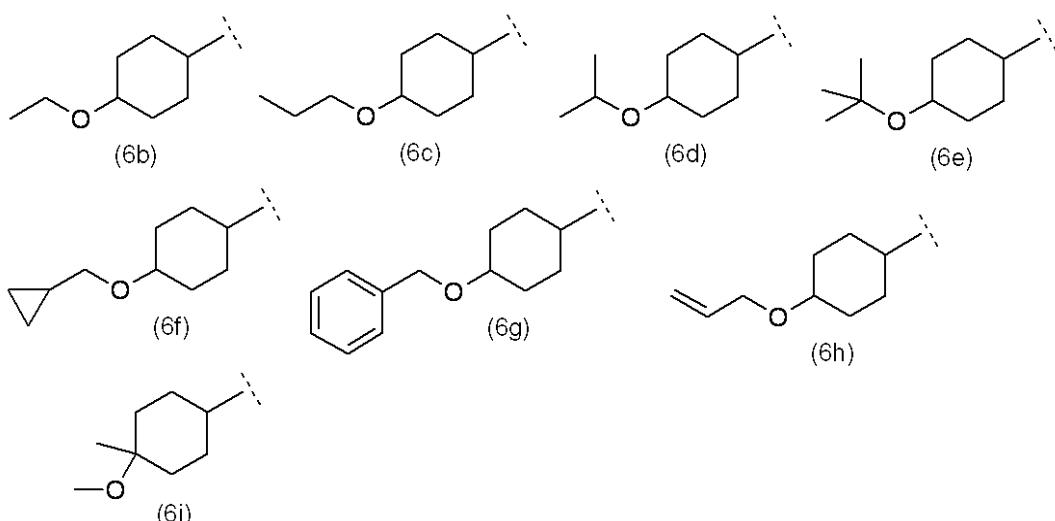
R² は、C H₃ または C H₃ O であり、

R¹ は、H、C H₃、C H₂ C H₃、F、Cl、Br、C H₃ O、C H₃ C H₂ O、-C H=C H₂、-C C H、フェニル、2 - フルオロフェニル、2 - クロロフェニル、2 - トリフルオロメチルフェニル、2 - ニトロフェニル、2 - メチルフェニル、2 - メタンスルホニルフェニル、2 - シアノフェニル、3 - フルオロフェニル、3 - クロロフェニル、3 - トリフルオロメチルフェニル、3 - ニトロフェニル、3 - メチルフェニル、3 - メタンスルホニルフェニル、3 - シアノフェニル、4 - フルオロフェニル、4 - クロロフェニル、4 - ブロモフェニル、4 - ジフルオロメトキシフェニル、2 - フルオロ - 4 - クロロフェニル、3 - フルオロ - 4 - クロロフェニル、2 - クロロ - 4 - クロロフェニル、2 - クロロ - 4 - フルオロフェニル、3 - クロロ - 4 - クロロフェニル、3 - クロロ - 4 - フルオロフェニル、2 - メチル - 4 - クロロフェニル、4 - トリフルオロメチルフェニル、4 - ニトロフェニル、4 - メチルフェニル、4 - メタンスルホニルフェニル、または 4 - シアノフェニルであり、かつ

A は、亜式 (6 b) 、 (6 c) 、 (6 d) 、 (6 e) 、 (6 f) 、 (6 g) 、 (6 h) 、

または(6i)：

【化10】



である】

の化合物である、請求項1に記載の化合物。

【請求項17】

R¹は、H、CH₃、CH₂CH₃、F、Cl、またはBrである、請求項14、15、または16に記載の化合物。 20

【請求項18】

R²は、CH₃である、請求項14、15、16または17に記載の化合物。

【請求項19】

本明細書において表A1～表B1に示す構造によって画定される、化合物A1～A24、A38、またはB1～B19のうちの1つである、請求項1に記載の化合物。

【請求項20】

本明細書において表A1、表B1、および表C1に示す構造によって画定される、化合物A25～A37、A39～A47、B20～B28、またはC1～C10のうちの1つである、請求項1に記載の化合物。 30

【請求項21】

除草有効量の請求項1～20のうちのいずれか一項に記載の式Iの化合物を含む、除草組成物。

【請求項22】

除草有効量の請求項1～20のうちのいずれか一項に記載の式Iの化合物、および隨意に前記式Iの化合物の混合パートナーとしてさらなる除草剤、または隨意に薬害軽減剤、またはその両方を含む、請求項21に記載の除草組成物。

【請求項23】

除草有効量の請求項1～20のうちのいずれか一項に記載の式Iの化合物、薬害軽減剤、および隨意に前記式Iの化合物の混合パートナーとしてさらなる除草剤を含み、ここで前記薬害軽減剤は、ベノキサコール、クロキントセットメキシル、シプロスルファミド、メフェンピル-ジエチル、またはN-(2-メトキシベンゾイル)-4-[（メチルアミノカルボニル）アミノ]ベンゼンスルホンアミドである、請求項22に記載の除草組成物。 40

【請求項24】

有用な植物の作物において草および雑草を制御する方法であって、除草有効量の請求項1～20のうちのいずれか一項に記載の式Iの化合物、または請求項21、22、または23に記載のかかる化合物を含む組成物を、前記植物またはその部位に施用することを含む、前記方法。

【請求項25】

10

30

40

50

前記有用な植物の作物は、小麦、大麦、トウモロコシ、または大豆である、請求項 24 に記載の方法。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、新規の除草活性シクロペンタンジオン化合物およびそれらの誘導体、具体的には、除草活性 2 - (置換ペンチル) - シクロペンタン - 1 , 3 - ジオン誘導体、それらの調製のためのプロセス、それらの化合物を含む組成物、ならびに特に有用な植物の作物における雑草の制御、または望ましくない植物成長の阻害におけるそれらの使用に関する。

10

【背景技術】

【0002】

米国特許 4 , 338 , 122 (Union Carbide Corp.) は、脱ダニおよび除草活性を呈する 2 - アリール - 1 , 3 - シクロペンタンジオン化合物を開示する。国際公開第 WO 96 / 01798 号 (Bayer AG) およびその派生する米国特許第 5 , 840 , 661 号は、2 - アリール - シクロペンタン - 1 , 3 - ジオン誘導体、ならびに農薬および除草剤としてのそれらの使用を開示する。国際公開第 WO 96 / 03366 号 (Bayer AG) およびその派生する米国特許第 5 , 808 , 135 号は、縮合 2 - (2 , 4 , 6 - トリメチルフェニル) シクロペンタン - 1 , 3 - ジオン誘導体、ならびに農薬および除草剤としてのそれらの使用を開示する。国際公開第 WO 01 / 74770 号 (Bayer AG)、その対応する米国特許第 2003 / 0216260 A1 号、およびその派生するオーストラリア特許第 782557 号 (AU 200144215 C) は、C₂ - フェニル - 置換環状ケトエノール、ならびに農薬および除草剤としてのそれらの使用を開示する。

20

【0003】

2009年7月1日に出願され、国際公開第 WO 2010 / 000773 A1 号 (Syngenta Limited) として公開された、同時係属特許出願 PCT / EP 2009 / 058250 号は、5 - (ヘテロシクリルアルキル) - 3 - ヒドロキシ - 2 - フェニル - シクロペント - 2 - エノン、および除草剤としてのそれらの 2 - フェニル - 4 - (ヘテロシクリルアルキル) - シクロペンタン - 1 , 3 - ジオン互変体を開示する。2009年12月9日に出願され、国際公開第 WO 2010 / 069834 A1 号 (Syngenta Participations AG および Syngenta Limited) として公開された、同時係属特許出願 PCT / EP 2009 / 066712 号は、除草剤としての 2 - フェニル - 4 - (ヘテロアリールメチル) - シクロペンタン - 1 , 3 - ジオンを開示する。

30

【0004】

米国特許第 5 , 684 , 205 号 (Bayer AG) は、塩素チャネル遮断薬として、気道疾患、分泌性下痢、および炎症性疾患を制御するために好適である薬剤の調製のための置換シクロペンタンジオンおよびシクロペンタントリオンを開示する。

40

【発明の概要】

【0005】

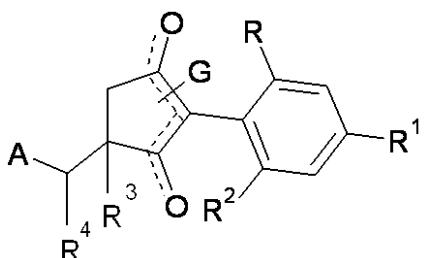
今回、除草特性および/または植物成長阻害特性、具体的には、2 - (置換フェニル) - シクロペンタン - 1 , 3 - ジオン誘導体を有する、新規シクロペンタンジオンおよびその誘導体が見出された。

【0006】

したがって、本発明は、式 I :

【0007】

【化 1】



(1)

10

【 0 0 0 8 】

「式中、

Rは、メチル、エチル、ビニル、エチニル、またはシクロプロピルであり、

R^1 は、水素、 $C_1 - C_6$ アルキル、 $C_1 - C_6$ ハロアルキル、 $C_3 - C_7$ シクロアルキル、 $C_1 - C_6$ アルコキシ、 $C_1 - C_6$ ハロアルコキシ、ビニル、プロペニル、エチニル、プロピニル、ハロゲン、フェニル、またはアルキル（例えば、 $C_1 - C_4$ アルキル）、ハロアルキル（例えば、 CF_3 、 CF_2Cl 、 CF_2H 、 CCl_2H 、 FCH_2 、 $ClCH_2$ 、 $BrCH_2$ 、 CH_3CHF 、 $(CH_3)_2CF$ 、 CF_3CH_2 、または CHF_2CH_2 ）、アルキルスルホニル（例えば、 $C_1 - C_4$ アルキルスルホニル）、ハロゲン、二トド、またはシアノによって置換されたフェニルであり、

20

R^2 は、メチル、エチル、ビニル、エチニル、またはメトキシであり、

R^3 および R^4 は、水素であるか、または共に二重結合を形成し、

Aは、非置換、またはC₁-C₆アルキル、C₁-C₆ハロアルキル、C₁-C₆アルコキシ、C₁-C₆アルキルカルボニルオキシ、C₂-C₆アルケニル、=O、または=N-R¹によって一度もしくは二度置換されたC₃-C₇-シクロアルキルであり、R¹は、ヒドロキシル、C₁-C₆アルキル、C₁-C₆ハロアルキル、C₃-C₇シクロアルキル、C₁-C₆アルコキシ、C₁-C₆アルコキシC₁-C₆アルコキシ、またはC₁-C₆ハロアルコキシであるか。

あるいは、Aは、1つの($C_3 - C_6$ シクロアルキル)メトキシ、 $C_3 - C_6$ シクロアルキルオキシ、 $C_2 - C_5$ アルケニル- CH_2 -オキシ、ベンジルオキシ、(モノメチルもしくはジメチルフェニル)メトキシ、(モノメトキシもしくはジメトキシフェニル)メトキシ、または(モノフルオロ-もしくはジフルオロ-フェニル)メトキシ置換基によって、4位(シクロヘキシリ連結点に関して予測される)で、一度置換されたシクロヘキシリであるか。

あるいは、Aは、デカヒドロ-1-ナフチルもしくはデカヒドロ-2-ナフチルであるか

あるいは、Aは、隨意に置換されたフェニルであり、

G は、水素、または農学的に許容される金属、スルホニウム、アンモニウム、もしくは潜在性 (latent cation) 基であって

Gが潜在性基であるとき、潜在性基Gは、C₁-C₈アルキル、C₂-C₈ハロアルキル、フェニルC₁-C₈アルキル（フェニルがC₁-C₃アルキル、C₁-C₃ハロアルキル、C₁-C₃アルコキシ、C₁-C₃ハロアルコキシ、C₁-C₃アルキルチオ、C₁-C₃アルキルスルフィニル、C₁-C₃アルキルスルホニル、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって随意に置換される）、ヘテロアリールC₁-C₈アルキル（ヘテロアリールがC₁-C₃アルキル、C₁-C₃ハロアルキル、C₁-C₃アルコキシ、C₁-C₃ハロアルコキシ、C₁-C₃アルキルチオ、C₁-C₃アルキルスルフィニル、C₁-C₃アルキルスルホニル、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって随意に置換される）（例えば、ヘテロアリールがピリジンであるか、またはヘテロアリールがN、O、S原子および随意に1個、2個、または3個のN原子を含有する5員单環式ヘテロアリールである）、C₃-C₈アルケニル、C₃-C₈ハロアルケニル、C₃-C₈アルキニル、

48

50

$C(X^a) - R^a$ 、 $C(X^b) - X^c - R^b$ 、 $C(X^d) - N(R^c) - R^d$ 、 $-SO_2 - R^e$ 、 $-P(X^e)(R^f) - R^g$ 、および $CH_2 - X^f - R^h$ の基から選択され、 X^a 、 X^b 、 X^c 、 X^d 、 X^e 、および X^f は、相互に独立して、酸素または硫黄であり、

かつ R^a は、 H 、 $C_1 - C_{18}$ アルキル（例えば、tert-ブチルまたはイソプロピル等の $C_1 - C_6$ アルキルもしくは $C_1 - C_4$ アルキル）、 $C_2 - C_{18}$ アルケニル、 $C_2 - C_{18}$ アルキニル、 $C_1 - C_{10}$ ハロアルキル（例えば、 $C_1 - C_{10}$ フルオロアルキル）、 $C_1 - C_{10}$ シアノアルキル、 $C_1 - C_{10}$ ニトロアルキル、 $C_1 - C_{10}$ アミノアルキル、 $C_1 - C_5$ アルキルアミノ（ $C_1 - C_5$ ）アルキル、 $C_2 - C_8$ ジアルキルアミノ（ $C_1 - C_5$ ）アルキル、 $C_3 - C_7$ シクロアルキル（ $C_1 - C_5$ ）アルキル、 $C_1 - C_5$ アルコキシ（ $C_1 - C_5$ ）アルキル、 $C_3 - C_5$ アルケニルオキシ（ $C_1 - C_5$ ）アルキル、 $C_1 - C_5$ アルキルチオ（ $C_1 - C_5$ ）アルキル、 $C_1 - C_5$ アルキルスルフィニル（ $C_1 - C_5$ ）アルキル、 $C_1 - C_5$ アルキルスルホニル（ $C_1 - C_5$ ）アルキル、 $C_2 - C_8$ アルキリデンアミノキシ（ $C_1 - C_5$ ）アルキル、 $C_1 - C_5$ アルキルカルボニル（ $C_1 - C_5$ ）アルキル、 $C_1 - C_5$ アルコキシカルボニル（ $C_1 - C_5$ ）アルキル、アミノカルボニル（ $C_1 - C_5$ ）アルキル、 $C_1 - C_5$ アルキルアミノカルボニル（ $C_1 - C_5$ ）アルキル、 $C_2 - C_8$ ジアルキルアミノカルボニル（ $C_1 - C_5$ ）アルキル、 $C_1 - C_5$ アルキルカルボニルアミノ（ $C_1 - C_5$ ）アルキル、 $N - (C_1 - C_5)$ アルキルカルボニル - $N - (C_1 - C_5)$ アルキルアミノ（ $C_1 - C_5$ ）アルキル、 $C_3 - C_6$ トリアルキルシリル（ $C_1 - C_5$ ）アルキル、フェニル（ $C_1 - C_5$ ）アルキル（フェニルが $C_1 - C_3$ アルキル、 $C_1 - C_3$ ハロアルキル、 $C_1 - C_3$ アルコキシ、 $C_1 - C_3$ ハロアルコキシ、 $C_1 - C_3$ アルキルチオ、 $C_1 - C_3$ アルキルスルフィニル、 $C_1 - C_3$ アルキルスルホニル、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって随意に置換される）、ヘテロアリール（ $C_1 - C_5$ ）アルキル（ヘテロアリールが $C_1 - C_3$ アルキル、 $C_1 - C_3$ ハロアルキル、 $C_1 - C_3$ アルコキシ、 $C_1 - C_3$ ハロアルコキシ、 $C_1 - C_3$ アルキルチオ、 $C_1 - C_3$ アルキルスルフィニル、 $C_1 - C_3$ アルキルスルホニル、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって随意に置換される）（例えば、ヘテロアリールがピリジニルであるか、あるいは、ヘテロアリールが、N、O、またはS原子、および随意に付加的に1個、2個、または3個のN原子を含有する5員单環式ヘテロアリールである）、 $C_2 - C_5$ ハロアルケニル、 $C_3 - C_8$ シクロアルキル、フェニル、もしくは $C_1 - C_3$ アルキル、 $C_1 - C_3$ ハロアルキル、 $C_1 - C_3$ アルコキシ、 $C_1 - C_3$ ハロアルコキシ、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって置換されたフェニル、またはヘテロアリールもしくは $C_1 - C_3$ アルキル、 $C_1 - C_3$ ハロアルキル、 $C_1 - C_3$ アルコキシ、 $C_1 - C_3$ ハロアルコキシ、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって置換されたヘテロアリール（例えば、ヘテロアリールがピリジニルであるか、あるいはヘテロアリールが、N、O、またはS原子、および随意に付加的に1個、2個、または3個のN原子を含有する5員单環式ヘテロアリールである）であり、

R^b は、 $C_1 - C_{18}$ アルキル（例えば、 $C_1 - C_2$ アルキル等の $C_1 - C_6$ アルキルまたは $C_1 - C_4$ アルキル）、 $C_3 - C_{18}$ アルケニル、 $C_3 - C_{18}$ アルキニル、 $C_2 - C_{10}$ ハロアルキル（例えば、 $C_2 - C_{10}$ フルオロアルキル）、 $C_1 - C_{10}$ シアノアルキル、 $C_1 - C_{10}$ ニトロアルキル、 $C_2 - C_{10}$ アミノアルキル、 $C_1 - C_5$ アルキルアミノ（ $C_1 - C_5$ ）アルキル、 $C_2 - C_8$ ジアルキルアミノ（ $C_1 - C_5$ ）アルキル、 $C_3 - C_7$ シクロアルキル（ $C_1 - C_5$ ）アルキル、 $C_1 - C_5$ アルコキシ（ $C_1 - C_5$ ）アルキル、 $C_3 - C_5$ アルケニルオキシ（ $C_1 - C_5$ ）アルキル、 $C_3 - C_5$ アルキルオキシ（ $C_1 - C_5$ ）アルキル、 $C_1 - C_5$ アルキルチオ（ $C_1 - C_5$ ）アルキル、 $C_1 - C_5$ アルキルスルフィニル（ $C_1 - C_5$ ）アルキル、 $C_1 - C_5$ アルキルスルホニル（ $C_1 - C_5$ ）アルキル、 $C_2 - C_8$ アルキリデンアミノオキシ（ $C_1 - C_5$ ）アルキル、 $C_1 - C_5$ アルコキシカルボニル（ $C_1 - C_5$ ）アルキル、アミノカルボニル（ $C_1 - C_5$ ）アルキル、 $C_1 - C_5$ アルキルアミノカルボニル（ $C_1 - C_5$ ）アルキル、 $C_2 - C_8$ ジアルキルアミノカルボ

ニル (C₁ - C₅) アルキル、C₁ - C₅ アルキルカルボニルアミノ (C₁ - C₅) アルキル、N - (C₁ - C₅) アルキルカルボニル - N - (C₁ - C₅) アルキルアミノ (C₁ - C₅) アルキル、C₃ - C₆ トリアルキルシリル (C₁ - C₅) アルキル、フェニル (C₁ - C₅) アルキル (フェニルが C₁ - C₃ アルキル、C₁ - C₃ ハロアルキル、C₁ - C₃ アルコキシ、C₁ - C₃ ハロアルコキシ、C₁ - C₃ アルキルチオ、C₁ - C₃ アルキルスルフィニル、C₁ - C₃ アルキルスルホニル、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって随意に置換される)、ヘテロアリール C₁ - C₅ アルキル (ヘテロアリールが C₁ - C₃ アルキル、C₁ - C₃ ハロアルキル、C₁ - C₃ アルコキシ、C₁ - C₃ ハロアルコキシ、C₁ - C₃ アルキル - チオ、C₁ - C₃ アルキルスルフィニル、C₁ - C₃ アルキルスルホニル、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって随意に置換される) (例えば、ヘテロアリールがピリジンであるか、またはヘテロアリールが、N、O、S 原子および随意に付加的に 1 個、2 個、3 個の N 原子を含有する 5 員单環式ヘテロアリールである)、C₃ - C₅ ハロアルケニル、C₃ - C₈ シクロアルキル、フェニル、または C₁ - C₃ アルキル、C₁ - C₃ ハロアルキル、C₁ - C₃ アルコキシ、C₁ - C₃ ハロアルコキシ、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって置換されたフェニル、あるいはヘテロアリール、または C₁ - C₃ アルキル、C₁ - C₃ ハロアルキル、C₁ - C₃ アルコキシ、C₁ - C₃ ハロアルコキシ、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロ (例えば、ヘテロアリールがピリジニルであるか、またはヘテロアリールが、N、O、S 原子および随意に付加的に 1 個、2 個、3 個の N 原子を含有する 5 員单環式ヘテロアリールである) によって置換されたヘテロアリールであり、

R^c および R^d は、それぞれ相互に独立して、水素、C₁ - C₁₀ アルキル (例えば、C₁ - C₂ アルキル等の C₁ - C₆ アルキルもしくは C₁ - C₄ アルキル)、C₃ - C₁₀ アルケニル、C₃ - C₁₀ アルキニル、C₂ - C₁₀ ハロアルキル (例えば、C₂ - C₁ フルオロアルキル)、C₁ - C₁₀ シアノアルキル、C₁ - C₁₀ ニトロアルキル、C₁ - C₁₀ アミノアルキル、C₁ - C₅ アルキルアミノ (C₁ - C₅) アルキル、C₂ - C₈ ジアルキルアミノ (C₁ - C₅) アルキル、C₃ - C₇ シクロアルキル (C₁ - C₅) アルキル、C₁ - C₅ アルコキシ (C₁ - C₅) アルキル、C₃ - C₅ アルケニルオキシ (C₁ - C₅) アルキル、C₃ - C₅ アルキニルオキシ (C₁ - C₅) アルキル、C₁ - C₅ アルキルチオ (C₁ - C₅) アルキル、C₁ - C₅ アルキルスルフィニル (C₁ - C₅) アルキル、C₁ - C₅ アルキルスルホニル (C₁ - C₅) アルキルカルボニル (C₁ - C₅) アルキル、C₁ - C₅ アルコキシカルボニル (C₁ - C₅) アルキル、アミノカルボニル (C₁ - C₅) アルキル、C₁ - C₅ アルキルアミノカルボニル (C₁ - C₅) アルキル、C₂ - C₈ ジアルキルアミノカルボニル (C₁ - C₅) アルキル、C₁ - C₅ アルキルカルボニルアミノ (C₁ - C₅) アルキル、N - (C₁ - C₅) アルキルカルボニル - N - (C₂ - C₅) アルキルアミノアルキル、C₃ - C₆ トリアルキルシリル (C₁ - C₅) アルキル、フェニル (C₁ - C₅) アルキル (フェニルが、C₁ - C₃ アルキル、C₁ - C₃ ハロアルキル、C₁ - C₃ アルコキシ、C₁ - C₃ ハロアルコキシ、C₁ - C₃ アルキルチオ、C₁ - C₃ アルキルスルフィニル、C₁ - C₃ アルキルスルホニル、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって随意に置換される) (例えば、ヘテロアリールが、ピリジニルであるか、またはヘテロアリールが、N、O、または S 原子、および随意に付加的に 1 個、2 個、または 3 個の N 原子を含有する 5 員单環式ヘテロアリールである)、C₂ - C₅ ハロアルケニル、C₃ - C₈ シクロアルキル、フェニル、または C₁ - C₃ アルキル、C₁ - C₃ ハロアルキル、C₁ - C₃ アルコキシ、C₁ - C₃ ハロアルコキシ、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって置換されたフェニル、もしくはヘテロアリール、または C₁ - C₃ アルキル、C₁ - C₃ ハロアルキル、C₁ - C₃ アルコキシ、C₁ - C₃ ハロアルコキシ

10

20

30

40

50

、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって置換されたヘテロアリール（例えば、ヘテロアリールがピリジニルであるか、または、ヘテロアリールが、N、O、またはS原子、および随意に付加的に1個、2個、または3個のN原子を含有する5員单環式ヘテロアリールである）、ヘテロアリールアミノ、またはC₁ - C₃アルキル、C₁ - C₃ハロアルキル、C₁ - C₃アルコキシ、C₁ - C₃ハロアルコキシ、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって置換されたヘテロアリールアミノアミノ（例えば、ヘテロアリールがピリジニルであるか、または、ヘテロアリールが、N、O、またはS原子、および随意に付加的に1個、2個、または3個のN原子を含有する5員单環式ヘテロアリールである）、ジヘテロアリールアミノ、またはC₁ - C₃アルキル、C₁ - C₃ハロアルキル、C₁ - C₃アルコキシ、C₁ - C₃ハロアルコキシ、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって置換されたジヘテロアリールアミノ（例えば、ヘテロアリールがピリジニルであるか、または、ヘテロアリールが、N、O、またはS原子、および随意に付加的に1個、2個、または3個のN原子を含有する5員单環式ヘテロアリールである）、フェニルアミノ、またはC₁ - C₃アルキル、C₁ - C₃ハロアルキル、C₁ - C₃アルコキシ、C₁ - C₃ハロアルコキシ、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって置換されたフェニルアミノ、ジフェニルアミノ、またはC₁ - C₃アルキル、C₁ - C₃ハロアルキル、C₁ - C₃アルコキシ、C₁ - C₃ハロアルコキシ、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって置換されたジフェニルアミノ、またはC₃ - C₇シクロアルキルアミノ、ジ-C₃ - C₇シクロアルキルアミノ、またはC₃ - C₇シクロアルコキシであるか、あるいはR^cおよびR^dは、結合されて、随意にOまたはSから選択される1個のヘテロ原子を含有する、3~7員環を形成してもよく、

R^eは、C₁ - C₁₀アルキル（例えば、C₁ - C₂アルキル等のC₁ - C₆アルキルもしくはC₁ - C₄アルキル）、C₂ - C₁₀アルケニル、C₂ - C₁₀アルキニル、C₁ - C₁₀ハロアルキル（例えば、C₁ - C₁₀フルオロアルキル）、C₁ - C₁₀シアノアルキル、C₁ - C₁₀ニトロアルキル、C₁ - C₁₀アミノアルキル、C₁ - C₅アルキルアミノ（C₁ - C₅）アルキル、C₂ - C₈ジアルキルアミノ（C₁ - C₅）アルキル、C₃ - C₇シクロアルキル（C₁ - C₅）アルキル、C₁ - C₅アルコキシ（C₁ - C₅）アルキル、C₃ - C₅アルケニルオキシ（C₁ - C₅）アルキル、C₃ - C₅アルキニルオキシ（C₁ - C₅）アルキル、C₁ - C₅アルキルチオ（C₁ - C₅）アルキル、C₁ - C₅アルキルスルフィニル（C₁ - C₅）アルキル、C₁ - C₅アルキルスルホニル（C₁ - C₅）アルキル、C₂ - C₈アルキリデンアミノキシ（C₁ - C₅）アルキル、C₁ - C₅アルキルカルボニル（C₁ - C₅）アルキル、C₁ - C₅アルコキシカルボニル（C₁ - C₅）アルキル、アミノカルボニル（C₁ - C₅）アルキル、C₁ - C₅アルキルアミノカルボニル（C₁ - C₅）アルキル、C₂ - C₈ジアルキルアミノカルボニル（C₁ - C₅）アルキル、C₁ - C₅アルキルカルボニルアミノ（C₁ - C₅）アルキル、N - (C₁ - C₅)アルキルカルボニル - N - (C₁ - C₅)アルキルアミノ（C₁ - C₅）アルキル、C₃ - C₆トリアルキルシリル（C₁ - C₅）アルキル、フェニル（C₁ - C₅）アルキル（フェニルが、C₁ - C₃アルキル、C₁ - C₃ハロアルキル、C₁ - C₃アルコキシ、C₁ - C₃ハロアルコキシ、C₁ - C₃アルキルチオ、C₁ - C₃アルキルスルフィニル、C₁ - C₃アルキルスルホニル、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって置換される）（例えば、ヘテロアリールがピリジニルであるか、または、ヘテロアリールが、N、O、またはS原子、および随意に付加的に1個、2個、または3個のN原子を含有する5員单環式ヘテロアリールである）、C₂ - C₅ハロアルケニル、C₃ - C₈シクロアルキル、フェニル、またはC₁ - C₃アルキル、C₁ - C₃ハロアルキル、C₁ - C₃アルコキシ、C₁ - C₃ハロアルコキシ、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって置換されたフェニル、ヘテロアリール、またはC₁ - C₃アルキル、C₁ - C₃ハロアルキル、

10

20

30

40

50

C₁ - C₃ アルコキシ、C₁ - C₃ ハロアルコキシ、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって置換されたヘテロアリール、(例えば、ヘテロアリールがピリジニルであるか、または、ヘテロアリールが、N、O、またはS原子、および随意に付加的に1個、2個、または3個のN原子を含有する5員单環式ヘテロアリールである)、ヘテロアリールアミノ、またはC₁ - C₃ アルキル、C₁ - C₃ ハロアルキル、C₁ - C₃ アルコキシ、C₁ - C₃ ハロアルコキシ、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって置換されたヘテロアリールアミノ(例えば、ヘテロアリールがピリジニルであるか、または、ヘテロアリールが、N、O、またはS原子、および随意に付加的に1個、2個、または3個のN原子を含有する5員单環式ヘテロアリールである)、ジヘテロアリールアミノ、またはC₁ - C₃ アルキル、C₁ - C₃ ハロアルキル、C₁ - C₃ アルコキシ、C₁ - C₃ ハロアルコキシ、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって置換されたジヘテロアリールアミノ(例えば、ヘテロアリールがピリジニルであるか、または、ヘテロアリールが、N、O、またはS原子、および随意に付加的に1個、2個、または3個のN原子を含有する5員单環式ヘテロアリールである)、フェニルアミノ、またはC₁ - C₃ アルキル、C₁ - C₃ ハロアルキル、C₁ - C₃ アルコキシ、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって置換されたフェニルアミノ、ジフェニルアミノ、またはC₁ - C₃ アルキル、C₁ - C₃ ハロアルキル、C₁ - C₃ アルコキシ、C₁ - C₃ ハロアルコキシ、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって置換されたジフェニルアミノ、またはC₃ - C₇ シクロアルキルアミノ、ジC₃ - C₇ シクロアルキルアミノ、またはC₃ - C₇ シクロアルコキシ、C₁ - C₁₀ アルコキシ、C₁ - C₁₀ ハロアルコキシ、C₁ - C₅ アルキルアミノ、またはC₂ - C₈ ジアルキルアミノであり、

R^f および R^g は、それぞれ相互に独立して、C₁ - C₁₀ アルキル(例えば、C₁ - C₂ アルキル等のC₁ - C₆ アルキルもしくはC₁ - C₄ アルキル)、C₂ - C₁₀ アルケニル、C₂ - C₁₀ アルキニル、C₁ - C₁₀ アルコキシ、C₁ - C₁₀ ハロアルキル(例えば、C₁ - C₁₀ フルオロアルキル)、C₁ - C₁₀ シアノアルキル、C₁ - C₁₀ ニトロアルキル、C₁ - C₁₀ アミノアルキル、C₁ - C₅ アルキルアミノ(C₁ - C₅)アルキル、C₂ - C₈ ジアルキルアミノ(C₁ - C₅)アルキル、C₃ - C₇ シクロアルキル(C₁ - C₅)アルキル、C₁ - C₅ アルコキシ(C₁ - C₅)アルキル、C₃ - C₅ アルケニルオキシ(C₁ - C₅)アルキル、C₃ - C₅ アルキニルオキシ(C₁ - C₅)アルキル、C₁ - C₅ アルキルチオ(C₁ - C₅)アルキル、C₁ - C₅ アルキルスルフィニル(C₁ - C₅)アルキル、C₁ - C₅ アルキルスルホニル(C₁ - C₅)アルキル、C₂ - C₈ アルキリデンアミノキシ(C₁ - C₅)アルキル、C₁ - C₅ アルキルカルボニル(C₁ - C₅)アルキル、C₁ - C₅ アルコキシカルボニル(C₁ - C₅)アルキル、アミノカルボニル(C₁ - C₅)アルキル、C₁ - C₅ アルキルアミノカルボニル(C₁ - C₅)アルキル、C₂ - C₈ ジアルキルアミノカルボニル(C₁ - C₅)アルキル、C₁ - C₅ アルキルカルボニルアミノ(C₁ - C₅)アルキル、N - (C₁ - C₅)アルキルカルボニル - N - (C₂ - C₅)アルキルアミノアルキル、C₃ - C₆ トリアルキルシリル(C₁ - C₅)アルキル、フェニル(C₁ - C₅)アルキル(フェニルが、C₁ - C₃ アルキル、C₁ - C₃ ハロアルキル、C₁ - C₃ アルコキシ、C₁ - C₃ ハロアルコキシ、C₁ - C₃ アルキルチオ、C₁ - C₃ アルキルスルフィニル、C₁ - C₃ アルキルスルホニル、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって随意に置換される)、ヘテロアリール(C₁ - C₅)アルキル(ヘテロアリールが、C₁ - C₃ アルキル、C₁ - C₃ ハロアルキル、C₁ - C₃ アルコキシ、C₁ - C₃ ハロアルコキシ、C₁ - C₃ アルキルチオ、C₁ - C₃ アルキルスルフィニル、C₁ - C₃ アルキルスルホニル、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって随意に置換される)(例えば、ヘテロアリールがピリジニルであるか、または、ヘテロアリールが、N、O、またはS原子、および随意に付加的に1個、2個、または3個のN原子を含有する5員单環式ヘテロアリールである)、C₂ - C₅ ハロアルケニル、C₃ - C₈ シクロアルキル、フェニル、または、C₁ - C₃ アルキル、C₁ - C₃ ハロアルキル、C₁ - C₃ アルコキシ、C₁ - C₃ ハロアルコキシ、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって置換されたフェニル、ヘテロアリール、また

は $C_1 - C_3$ アルキル、 $C_1 - C_3$ ハロアルキル、 $C_1 - C_3$ アルコキシ、 $C_1 - C_3$ ハロアルコキシ、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって置換されたヘテロアリール（例えば、ヘテロアリールがピリジニルであるか、または、ヘテロアリールが、N、O、またはS原子、および随意に付加的に1個、2個、または3個のN原子を含有する5員单環式ヘテロアリールである）、ヘテロアリールアミノ、または $C_1 - C_3$ アルキル、 $C_1 - C_3$ ハロアルキル、 $C_1 - C_3$ アルコキシ、 $C_1 - C_3$ ハロアルコキシ、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって置換されたヘテロアリールアミノ（例えば、ヘテロアリールがピリジニルであるか、または、ヘテロアリールが、N、O、またはS原子、および随意に付加的に1個、2個、または3個のN原子を含有する5員单環式ヘテロアリールである）、ジヘテロアリールアミノ、または $C_1 - C_3$ アルキル、 $C_1 - C_3$ ハロアルキル、 $C_1 - C_3$ アルコキシ、 $C_1 - C_3$ ハロアルコキシ、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって置換されたジヘテロアリールアミノ（例えば、ヘテロアリールがピリジニルであるか、または、ヘテロアリールが、N、O、またはS原子、および随意に付加的に1個、2個、または3個のN原子を含有する5員单環式ヘテロアリールである）、フェニルアミノ、または $C_1 - C_3$ アルキル、 $C_1 - C_3$ ハロアルキル、 $C_1 - C_3$ アルコキシ、 $C_1 - C_3$ ハロアルコキシ、ハロゲン、シアノ、またはニトロアルキル、 $C_1 - C_3$ ハロアルキル、 $C_1 - C_3$ アルコキシ、 $C_1 - C_3$ ハロアルコキシ、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって置換されたフェニルアミノ、ジフェニルアミノ、または $C_1 - C_3$ アルキル、 $C_1 - C_3$ ハロアルキル、 $C_1 - C_3$ アルコキシ、 $C_1 - C_3$ ハロアルコキシ、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって置換されたジフェニルアミノ、または $C_3 - C_7$ シクロアルキルアミノ、ジ $C_3 - C_7$ シクロアルキルアミノ、または $C_3 - C_7$ シクロアルコキシ、 $C_1 - C_{10}$ ハロアルコキシ、 $C_1 - C_5$ アルキルアミノ、または $C_2 - C_8$ ジアルキルアミノ、ベンジルオキシ、またはフェノキシであり、ベンジル基およびフェニル基は、次に、 $C_1 - C_3$ アルキル、 $C_1 - C_3$ ハロアルキル、 $C_1 - C_3$ アルコキシ、 $C_1 - C_3$ ハロアルコキシ、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって置換されてもよく、

R^h は、 $C_1 - C_{10}$ アルキル（例えば、 $C_1 - C_2$ アルキル等の $C_1 - C_6$ アルキルもしくは $C_1 - C_4$ アルキル）、 $C_3 - C_{10}$ アルケニル、 $C_3 - C_{10}$ アルキニル、 $C_1 - C_{10}$ ハロアルキル（例えば、 $C_1 - C_{10}$ フルオロアルキル）、 $C_1 - C_{10}$ シアノアルキル、 $C_1 - C_{10}$ ニトロアルキル、 $C_2 - C_{10}$ アミノアルキル、 $C_1 - C_5$ アルキルアミノ（ $C_1 - C_5$ アルキル、 $C_2 - C_8$ ジアルキルアミノ（ $C_1 - C_5$ アルキル、 $C_3 - C_7$ シクロアルキル（ $C_1 - C_5$ アルキル、 $C_1 - C_5$ アルコキシ（ $C_1 - C_5$ アルキル、 $C_3 - C_5$ アルケニルオキシ（ $C_1 - C_5$ アルキル、 $C_3 - C_5$ アルキニルオキシ（ $C_1 - C_5$ アルキル、 $C_1 - C_5$ アルキルチオ（ $C_1 - C_5$ アルキル、 $C_1 - C_5$ アルキルスルフィニル（ $C_1 - C_5$ アルキル、 $C_1 - C_5$ アルキルスルホニル（ $C_1 - C_5$ アルキル、 $C_2 - C_8$ アルキリデンアミノオキシ（ $C_1 - C_5$ アルキル、 $C_1 - C_5$ アルキルカルボニル（ $C_1 - C_5$ アルキル、アミノカルボニル（ $C_1 - C_5$ アルキル、 $C_1 - C_5$ アルキルアミノカルボニル（ $C_1 - C_5$ アルキル、 $C_2 - C_8$ ジアルキルアミノカルボニル（ $C_1 - C_5$ アルキル、 $C_1 - C_5$ アルキルカルボニルアミノ（ $C_1 - C_5$ アルキル、 $N - (C_1 - C_5)$ アルキルカルボニル - $N - (C_1 - C_5)$ アルキルアミノ（ $C_1 - C_5$ アルキル、 $C_3 - C_6$ トリアルキルシリル（ $C_1 - C_5$ アルキル、フェニル（ $C_1 - C_5$ アルキル（フェニルが $C_1 - C_3$ アルキル、 $C_1 - C_3$ ハロアルキル、 $C_1 - C_3$ アルコキシ、 $C_1 - C_3$ ハロアルコキシ、 $C_1 - C_3$ アルキルチオ、 $C_1 - C_3$ アルキルスルフィニル、 $C_1 - C_3$ アルキルスルホニル、ハロゲン、シアノ、またはニトロによって随意に置換される）、ヘテロアリール（ $C_1 - C_5$ アルキル（ヘテロアリールが $C_1 - C_3$ アルキル、 $C_1 - C_3$ ハロアルキル、 $C_1 - C_3$ アルコキシ、 $C_1 - C_3$ ハロアルコキシ、 $C_1 - C_3$ アルキルチオ、 $C_1 - C_3$ アルキルスルフィニル、 $C_1 - C_3$ アルキルスルホニル、ハロゲン、シアノ、またはニトロによって随意に置換される）（例えば、ヘテロアリールがピリジニルであるか、または、ヘテロアリールが、N、O、

10

20

30

40

50

または S 原子、および随意に付加的に 1 個、2 個、または 3 個の N 原子を含有する 5 員单環式ヘテロアリールである)、フェノキシ (C₁ - C₅) アルキル (フェニルが C₁ - C₃ アルキル、C₁ - C₃ ハロアルキル、C₁ - C₃ アルコキシ、C₁ - C₃ ハロアルコキシ、C₁ - C₃ アルキルチオ、C₁ - C₃ アルキルスルフィニル、C₁ - C₃ アルキルスルホニル、ハロゲン、シアノ、またはニトロによって随意に置換されてもよい)、ヘテロアリールオキシ (C₁ - C₅) アルキル (ヘテロアリールが C₁ - C₃ アルキル、C₁ - C₃ ハロアルキル、C₁ - C₃ アルコキシ、C₁ - C₃ ハロアルコキシ、C₁ - C₃ アルキルチオ、C₁ - C₃ アルキルスルフィニル、C₁ - C₃ アルキルスルホニル、ハロゲン、シアノ、またはニトロによって随意に置換されてもよい) (例えば、ヘテロアリールがピリジニルであるか、または、ヘテロアリールが、N、O、または S 原子、および随意に付加的に 1 個、2 個、または 3 個の N 原子を含有する 5 員单環式ヘテロアリールである)、C₃ - C₅ ハロアルケニル、C₃ - C₈ シクロアルキル、フェニル、または C₁ - C₃ アルキル、C₁ - C₃ ハロアルキル、C₁ - C₃ アルコキシ、C₁ - C₃ ハロアルコキシ、ハロゲン、もしくはニトロによって置換されるフェニル、もしくはヘテロアリール、または C₁ - C₃ アルキル、C₁ - C₃ ハロアルキル、C₁ - C₃ アルコキシ、C₁ - C₃ ハロアルコキシ、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって置換されるヘテロアリール (例えば、ヘテロアリールがピリジニルであるか、またいは、ヘテロアリールが、N、O、または S 原子、および随意に付加的に 1 個、2 個、または 3 個の N 原子を含有する 5 員单環式ヘテロアリールである)]

の化合物に関する。

10

20

30

40

50

【発明を実施するための形態】

【0009】

好ましくは、式(I)の化合物中、

R は、メチル、エチル、ビニル、エチニル、またはシクロプロピルであり、

R¹ は、水素、C₁ - C₆ アルキル、C₁ - C₆ ハロアルキル、C₃ - C₇ シクロアルキル、C₁ - C₆ アルコキシ、C₁ - C₆ ハロアルコキシ、ビニル、プロペニル、エチニル、プロピニル、ハロゲン、フェニル、またはアルキル (例えば、C₁ - C₄ アルキル)、ハロアルキル (例えば、CF₃、CF₂C₁、CF₂H、CC₁₂H、FC₁₂、C₁C₁₂、BrCH₂、CH₃CHF、(CH₃)₂CF、CF₃CH₂、またはCHF₂CH₂)、アルキルスルホニル (例えば、C₁ - C₄ アルキルスルホニル)、ハロゲン、ニトロ、もしくはシアノによって置換されたフェニルであり、

R² は、メチル、エチル、ビニル、エチニル、またはメトキシであり、

R³ および R⁴ は、水素であるか、または、共に二重結合を形成し、

A は、非置換、または C₁ - C₆ アルキル、C₁ - C₆ ハロアルキル、C₁ - C₆ アルコキシ、C₁ - C₆ アルキルカルボニルオキシ、C₂ - C₆ アルケニル、=O、または=N-R¹ によって一度もしくは二度置換された C₃ - C₇ - シクロアルキルであり、R¹ は、ヒドロキシル、C₁ - C₆ アルキル、C₁ - C₆ ハロアルキル、C₃ - C₇ シクロアルキル、C₁ - C₆ アルコキシ、C₁ - C₆ アルコキシ C₁ - C₆ アルコキシ、または C₁ - C₆ ハロアルコキシであるか、

あるいは、A は、随意に置換されたフェニルであり、かつ

G は、水素、または農学的に許容される金属、スルホニウム、アンモニウム、もしくは潜在性基であり、潜在性基は、本明細書において記載 (例えば、上述) されるとおりである。

【0010】

式Iの化合物の置換基の定義において、各アルキル部分は、単独で、あるいはより大きい基 (アルコキシ、アルキルチオ、アルコキシカルボニル、アルキルカルボニル、アルキルアミノカルボニル、ジアルキルアミノカルボニル等) の一部として、直鎖または分枝鎖であり、例えば、独立して、メチル、エチル、n-プロピル、n-ブチル、n-ペンチル、n-ヘキシル、イソプロピル、n-ブチル、sec-ブチル、イソブチル、tert-ブチル、またはネオペンチルである。アルキル基は、好適には、C₁ - C₆ アルキル基で

あるが、好ましくは、C₁ - C₄ アルキルまたはC₁ - C₃ アルキル基であり、より好ましくは、C₁ - C₂ アルキル基である。

【0011】

アルケニル部分は、直鎖または分枝鎖の形態であることができ、アルケニル部分は、適切な場合は、(E)あるいは(Z)構成のいずれかであることができる。ビニルおよびアリールが例である。アルケニル部分は、任意の組み合わせで、1つ以上の二重結合を含有することができる。

【0012】

ハロゲンは、フッ素、塩素、臭素、またはヨウ素であり、好ましくは、フッ素、塩素、または臭素である。

10

【0013】

ハロアルキル基は、同一または異なるハロゲン原子（例えば、フッ素原子）のうちの1つ以上で置換されるアルキル基であり、独立して、例えば、CF₃、CF₂C₁、CF₂H、CC₁₂H、FC₂H、C₁CH₂、BrCH₂、CH₃CHF、(CH₃)₂CF、CF₃CH₂、またはCHF₂CH₂であることができる。より具体的な実施形態において、ハロアルキル基は、CF₃、CF₂H、FC₂H、CH₃CHF、(CH₃)₂CF、CF₃CH₂、またはCHF₂CH₂である。

【0014】

シクロアルキルは、好ましくは、かつ独立して、シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシリ、およびシクロヘプチルを含む。

20

【0015】

本発明はまた、式Iの化合物が遷移金属、アルカリ金属、またはアルカリ土類金属塩基と共に、アミン、第4級アンモニウム塩基、または第3級スルホニウム塩基を形成することが可能である、農学的に許容される塩に関する。

【0016】

遷移金属、アルカリ金属、またはアルカリ土類金属塩（すなわち、Gが金属である）を形成することが可能な遷移金属、アルカリ金属、またはアルカリ土類金属塩基の間で、特に、銅、鉄、リチウム、ナトリウム、カリウム、マグネシウム、またはカルシウム、ならびに好ましくは、水酸化物、重炭酸塩、またはナトリウムもしくはカリウムの炭酸塩に言及するべきである。

30

【0017】

アンモニウム塩形成に好適なアミンの例としては、アンモニア、または第1級、第2級、もしくは第3級C₁ - C₁₈アルキルアミン、C₁ - C₄ヒドロキシアルキルアミン、またはC₂ - C₄アルコキシアルキル-アミン、例えば、メチルアミン、エチルアミン、n-プロピルアミン、イソプロピルアミン、4つのブチルアミン異性体、n-アミルアミン、イソアミルアミン、ヘキシリルアミン、ヘプチルアミン、オクチルアミン、ノニルアミン、デシルアミン、ペントデシルアミン、ヘキサデシルアミン、ヘプタデシルアミン、オクタデシルアミン、メチルエチルアミン、メチルイソプロピルアミン、メチルヘキシリルアミン、メチルノニルアミン、メチルペントデシルアミン、メチルオクタデシルアミン、エチルブチルアミン、エチルヘプチルアミン、エチルオクチルアミン、ヘキシリルヘプチルアミン、ヘキシリルオクチルアミン、ジメチルアミン、ジエチルアミン、ジ-n-プロピルアミン、ジ-イソプロピルアミン、ジ-n-ブチルアミン、ジ-n-アミルアミン、ジ-イソアミルアミン、ジヘキシリルアミン、ジヘブチルアミン、ジオクチルアミン、エタノールアミン、n-プロパノールアミン、イソプロパノールアミン、N,N-ジエタノールアミン、N-エチルプロパノールアミン、N-ブチルエタノールアミン、アリルアミン、n-ブト-2-エニルアミン、n-ペント-2-エニルアミン、2,3-ジメチルブト-2-エニルアミン、ジブト-2-エニルアミン、n-ヘキソ-2-エニルアミン、プロピレンジアミン、トリメチルアミン、トリエチルアミン、トリ-n-ブチルアミン、トリ-イソプロピルアミン、トリ-n-ブチルアミン、トリ-イソブチルアミン、トリ-sec-ブチルアミン、トリ-n-アミルアミン、メトキシエチルアミン、またはエトキシエチル

40

50

アミン、または複素環式アミン、例えば、ピリジン、キノリン、イソキノリン、モルホリン、ピペリジン、ピロリジン、インドリン、キヌクリジン、もしくはアゼピン、または第1級アリールアミン、例えば、アニリン、メトキシアニリン、エトキシアニリン、o-、m-、もしくはp-トルイジン、フェニレンジアミン、ベンジジン、ナフチルアミン、またはo-、m-、およびp-クロロアニリンが挙げられるが、特にトリエチルアミン、イソプロピルアミン、またはジ-イソプロピルアミンが挙げられる。

【0018】

塩形成に好適な好ましい第4級アンモニウム塩基（すなわち、Gがアンモニウムである）は、例えば、式 $[N(R_a R_b R_c R_d)]OH$ に対応し、式中、R_a、R_b、R_c、およびR_dは、それぞれ他から独立して、水素、またはC₁-C₄アルキルである。他のアニオンを有するさらなる好適なテトラアルキルアンモニウム塩基は、例えば、アニオン交換反応によって得ることができる。
10

【0019】

塩形成に好適な好ましい第3級スルホニウム塩基（すなわち、Gがスルホニウムである）は、例えば、式 $[SR_e R_f R_g]OH$ に対応し、式中、R_e、R_f、およびR_gは、それぞれ他から独立して、C₁-C₄アルキルである。トリメチルスルホニウムヒドロキシドが特に好ましい。好適なスルホニウム塩基は、チオエーテル、特に、ジアルキルスルフィドのハロゲン化アルキルとの反応、続いて、アニオン交換反応による好適な塩基、例えば、水酸化物への変換から得ることができる。

【0020】

Gが上記の金属、アンモニウム、またはスルホニウムであり、したがって、カチオンを表す、式Iのそれらの化合物において、対応する負電荷は、O-C=C-C=Oユニットにわたって大きく非局在化されることを理解されたい。
20

【0021】

本発明に従った式Iの化合物はまた、水和物、例えば、塩形成中に形成される場合がある、水和物を含む。

【0022】

潜在性基Gは、Gが処理される領域または植物への施用前、施用中、または施用後（好ましくは施用中または施用後）にHである式Iの化合物を提供するための生化学的、化学的、または物理的プロセスのうちの1つまたはその組み合わせによるその除去を可能にするように選択される。これらのプロセスの実施例としては、酵素的開裂（例えば、エステルの酵素的開裂）、化学的加水分解、および光分解が挙げられる。そのような潜在性基Gを有する化合物は、ある場合において、処理される植物のクチクラの改善された浸透性、作物の増加した耐性、他の除草剤、除草剤薬害軽減剤、植物成長調整剤、殺菌剤、および/または殺虫剤を含有する製剤混合物における改善された適合性もしくは安定性、または減少した土壤浸出、特に、処理される植物のクチクラの改善された浸透性等のある特定の利点を提供してもよい。
30

【0023】

潜在性基G中、好ましくは、X^a、X^b、X^c、X^d、X^e、および/またはX^fは、酸素である。より好ましくは、X^a、X^b、X^c、X^d、X^e、およびX^fの全ては、酸素である。
40

【0024】

好ましくは、潜在性基Gは、-C(X^a)-R^aまたは-C(X^b)-X^c-R^bの基である。

【0025】

より好ましくは、潜在性基Gは、-C(X^a)-R^aまたは-C(X^b)-X^c-R^bの基であり、式中、R^aは、水素、またはC₁-C₁₈アルキル（より具体的には、水素またはC₁-C₆アルキル、さらにより好ましくは、C₁-C₆アルキル、最も好ましくは、tert-ブチルまたはイソプロピル等のC₁-C₄アルキル）であり、R^bは、C₁-C₁₈アルキル（より好ましくは、C₁-C₆アルキル、さらにより好ましくは、C
50

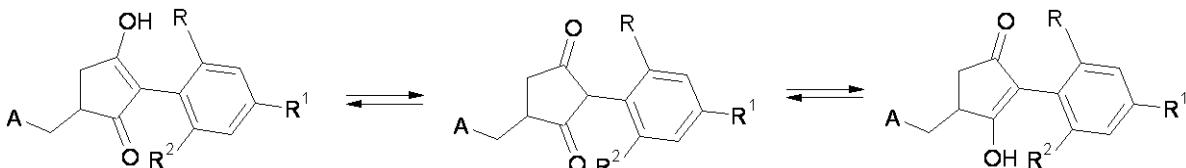
$C_1 - C_2$ アルキル等の $C_1 - C_4$ アルキル) であり、 X^a 、 X^b 、 X^c の意味は、上述のとおりである(より好ましくは、 X^a 、 X^b 、および X^c は、酸素である)。

【0026】

置換基の性質に応じて、式Iの化合物は、異なる異性体形態で存在してもよい。Gが水素であるとき、例えば、式Iの化合物は、以下のスキームに示すとおり、異なる互変異性体形態(1つのジオン互変異性体および2つの異なるケト-エノール互変異性体)で存在してもよい。

【0027】

【化2】



10

【0028】

本発明は、あらゆる割合で、全てのそのような異性体および互変異性体ならびにそれらの混合物を含む。また、置換基が二重結合である場合、シス-およびトランス-異性体が存在することができる。これらの異性体もまた、請求項に記載された式Iの化合物の範囲内である。

【0029】

明確にするために、GがHである式Iの化合物を、異なる異性体形態または異性体形態の組み合わせとして存在する場合であっても、単一の互変異性体として表す。

【0030】

好ましくは、式Iの化合物中、置換基 R^1 は、水素、 $C_1 - C_4$ アルキル、ハロゲン、 $C_1 - C_2$ アルコキシ、 $C_1 - C_2$ ハロアルコキシ(例えば、ジフルオロメトキシ)、フェニル、またはアルキル(例えば、 $C_1 - C_2$ アルキル等の $C_1 - C_4$ アルキル)、ハロアルキル(例えば、 CF_3 、 CF_2Cl 、 CF_2H 、 CCl_2H 、 FCH_2 、 $ClCH_2$ 、 $BrCH_2$ 、 CH_3CHF 、 $(CH_3)_2CF$ 、 CF_3CH_2 、または CHF_2CH_2 、 $(CF_3$ 、 CF_2H 、 FCH_2 、 CH_3CHF 、 $(CH_3)_2CF$ 、 CF_3CH_2 、または CHF_2CH_2 等、特に、トリフルオロメチル)、アルキルスルホニル(例えば、 $C_1 - C_2$ アルキルスルホニル等の $C_1 - C_4$ アルキルスルホニル、例えば、メタンスルホニル)、ハロゲン(例えば、フッ素、塩素、または臭素)、ニトロ、もしくはシアノによって置換されたフェニルである。

30

【0031】

より好ましくは、 R^1 は、水素、 $C_1 - C_4$ アルキル(例えば、 $C_1 - C_2$ アルキル)、またはハロゲン(例えば、フッ素、塩素、または臭素)である。最も好ましくは、 R^1 は、メチルである。

【0032】

好ましくは、 R^2 は、メチル、エチル、またはメトキシである。より好ましくは、 R^2 は、メチルまたはエチル、最も好ましくは、メチルである。

40

【0033】

好ましくは、R は、メチルまたはエチルである。最も好ましくは、R は、メチルである。

【0034】

好ましくは、 R^3 および R^4 は、水素である。

【0035】

好ましくは、A は、非置換、または $C_1 - C_4$ アルキル、 $C_1 - C_6$ アルキルカルボニルオキシ、 $C_4 - C_6$ アルケニル、=O、または=N-R¹ によって一度もしくは二度置換された $C_3 - C_7$ シクロアルキルであり、R¹ は、ヒドロキシルまたは $C_1 - C_4$ アルコキシである。

50

【0036】

好ましくは、R^aは、水素またはC₁ - C₁₈アルキルである。より好ましくは、R^aは、水素またはC₁ - C₆アルキル、さらにより好ましくは、C₁ - C₆アルキル、最も好ましくは、tert-ブチルまたはイソプロピル等のC₁ - C₄アルキルである。

【0037】

好ましくは、R^bは、C₁ - C₁₈アルキルである。より好ましくは、R^bは、C₁ - C₆アルキル、さらにより好ましくは、C₁ - C₂アルキル等のC₁ - C₄アルキルである。

【0038】

好ましくは、Gは、水素、または農学的に許容される金属（特に、アルカリ金属またはアルカリ土類金属）、スルホニウム、またはアンモニウム基、もしくは式C(X^a) - R^aまたはC(X^b) - X^c - R^bの潜在性基であり、式中、X^aおよびX^bは、相互に独立して、酸素または硫黄（より好ましくは、酸素）であり、R^aおよびR^bは、本明細書（例えば、上述）に定義するとおりである。10

【0039】

より具体的には、Gは、水素、または農学的に許容される金属（特に、アルカリ金属またはアルカリ土類金属）、スルホニウム、またはアンモニウム基、もしくは、式C(X^a) - R^aまたはC(X^b) - X^c - R^bの潜在性基であり、式中、X^aおよびX^bは、相互に独立して、酸素または硫黄（より好ましくは、酸素）であり、R^aは、水素またはC₁ - C₁₈アルキルであり、R^bは、C₁ - C₁₈アルキルである。より好ましくは、R^aは、水素またはC₁ - C₆アルキル（さらにより具体的には、tert-ブチルまたはイソプロピル等のC₁ - C₄アルキル）、および/またはR^bは、C₁ - C₆アルキル（さらにより好ましくは、C₁ - C₂アルキル等のC₁ - C₄アルキル）である。20

【0040】

Gが水素またはピバロイル(C(=O)tert-ブチル)であることが特に好ましい。

【0041】

式(I)の化合物の好ましい基において、R¹は、水素、C₁ - C₆アルキル、またはハロゲンであり、R²は、メチルであり、R³およびR⁴は、水素であるか、または共に二重結合を形成し、Aは、非置換、またはC₁ - C₆アルキル、C₁ - C₆アルキルカルボニルオキシ、C₂ - C₆アルケニル、=O、または=N - R¹⁰によって一度もしくは二度置換されたC₃ - C₇ - シクロアルキルであり、R¹⁰は、ヒドロキシルまたはC₁ - C₆アルコキシであり、Gは、水素または潜在性基である。30

【0042】

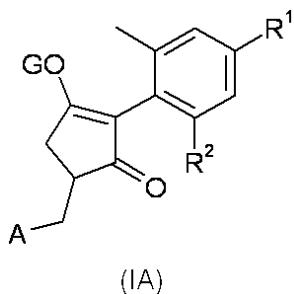
より好ましくは、式Iの化合物において、R¹は、水素、メチル、またはプロモであり、R²は、メチルであり、R³およびR⁴は、水素であり、Aは、非置換、またはメチル、プロペニル、メチルカルボニルオキシ、=O、または=N - R¹⁰によって一度もしくは二度置換されたC₅ - またはC₆ - シクロアルキルであり、R¹⁰は、ヒドロキシルまたはメトキシであり、Gは、水素またはピバロイル(C(=O) - tert-ブチル)である。

【0043】

本発明の1つの好ましい実施形態（以下、表1、2、3、4、5、6a、7、8、9、10、11、12、13、および14に開示するとおり）において、式(I)の化合物は、式(I A)：40

【0044】

【化3】



[式中、

10

Gは、水素であり、

R²は、CH₃またはCH₃Oであり、

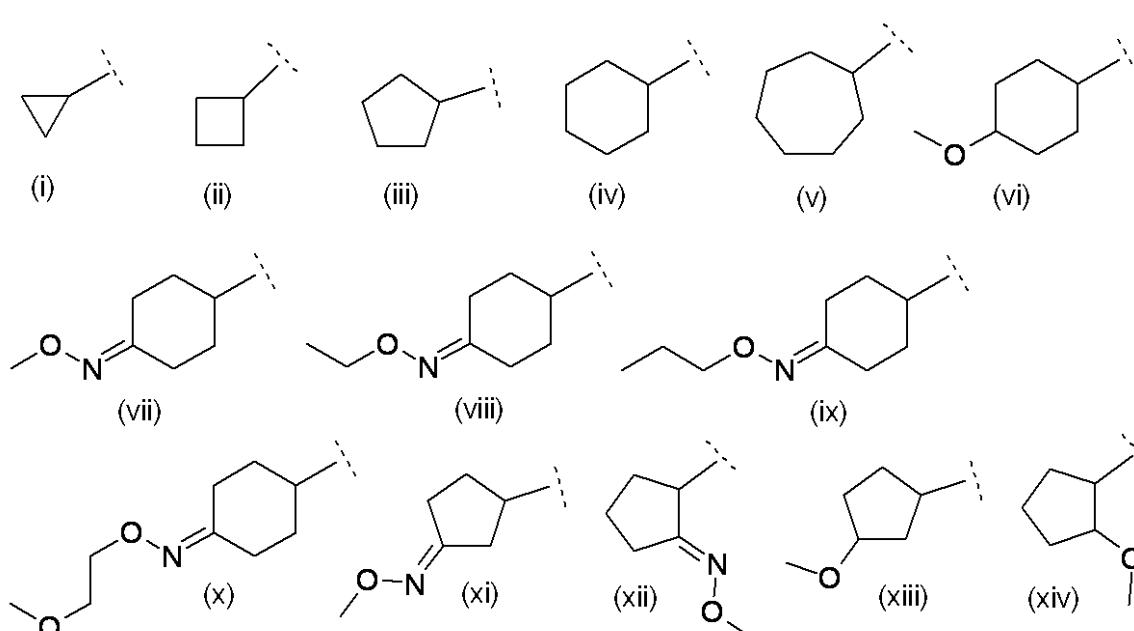
R¹は、H、CH₃、CH₂CH₃、F、Cl、Br、CH₃O、CH₃CH₂O、-CH=CH₂、-CC₂H、フェニル、2-フルオロフェニル、2-クロロフェニル、2-トリフルオロメチルフェニル、2-ニトロフェニル、2-メチルフェニル、2-メタンスルホニルフェニル、2-シアノフェニル、3-フルオロフェニル、3-クロロフェニル、3-トリフルオロメチルフェニル、3-ニトロフェニル、3-メチルフェニル、3-メタンスルホニルフェニル、3-シアノフェニル、4-フルオロフェニル、4-クロロフェニル、4-ブロモフェニル、4-ジフルオロメトキシフェニル、2-フルオロ-4-クロロフェニル、3-フルオロ-4-クロロフェニル、2-クロロ-4-クロロフェニル、3-クロロ-4-クロロフェニル、2-メチル-4-クロロフェニル、4-トリフルオロメチルフェニル、4-ニトロフェニル、4-メチルフェニル、4-メタンスルホニルフェニル、または4-シアノフェニルであり、かつ

20

Aは、亜式(i)、(ii)、(iii)、(iv)、(v)、(vi)、(vii)、(viii)、(ix)、(x)、(xi)、(xii)、または(xv)：

【0045】

【化4】



【0046】

である】

の化合物である。

【0047】

50

式(IA)の化合物において、好ましくは、Aは、亜式(i i i)、(i v)、(v i)、または(v i i)であり、より好ましくは、Aは、亜式(v i)、または(v i i)である。

【0048】

式(IA)の化合物は、好ましくは、以下、表A1に示すとおり、化合物A2、A3、A9、A10、A11、またはA38のうちの1つである。

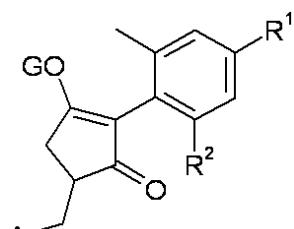
【0049】

本発明の代替的に好ましい実施形態において(以下、表15、16、17、18、19、20、および21、および/または表A1(化合物A13~A24)および/または表B1(化合物B7~B19)開示するとおり)、Aが、随意に置換されたフェニルであるとき、次いで、
10

(a)式(IA)の化合物は、式(IB)：

【0050】

【化5】



(IB)

【0051】

[式中、

Gは、水素であり、

R²は、CH₃またはCH₃Oであり、

R¹は、H、CH₃、CH₂CH₃、F、Cl、Br、CH₃O、CH₃CH₂O、-CH=CH₂、-CC₂H、フェニル、2-フルオロフェニル、2-クロロフェニル、2-トリフルオロメチルフェニル、2-ニトロフェニル、2-メチルフェニル、2-メタンスルホニルフェニル、2-シアノフェニル、3-フルオロフェニル、3-クロロフェニル、3-トリフルオロメチルフェニル、3-ニトロフェニル、3-メチルフェニル、3-メタンスルホニルフェニル、3-シアノフェニル、4-フルオロフェニル、4-クロロフェニル、4-ブロモフェニル、4-ジフルオロメトキシフェニル、2-フルオロ-4-クロロフェニル、3-フルオロ-4-クロロフェニル、2-クロロ-4-クロロフェニル、2-クロロ-4-フルオロフェニル、3-クロロ-4-クロロフェニル、3-クロロ-4-フルオロフェニル、2-メチル-4-クロロフェニル、4-トリフルオロメチルフェニル、4-ニトロフェニル、4-メチルフェニル、4-メタンスルホニルフェニル、または4-シアノフェニルであり、かつ
30

Aは、亜式(x v)、(x v i)、(x v i i)、(x v i i i)、(x i x)、(x x)、または(x x i)：

【0052】

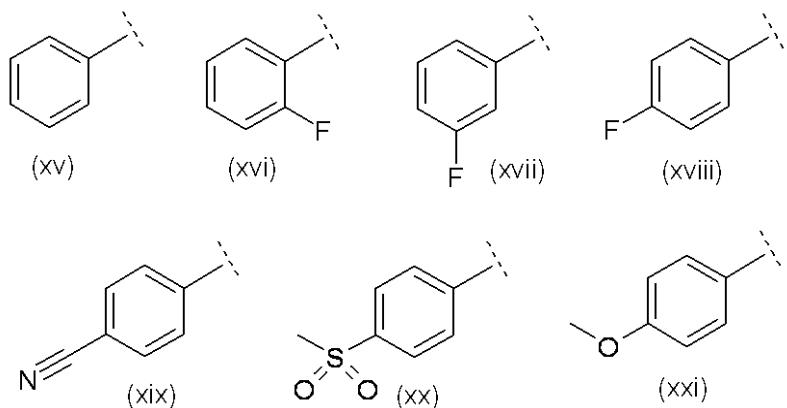
10

20

30

40

【化6】



10

【0053】

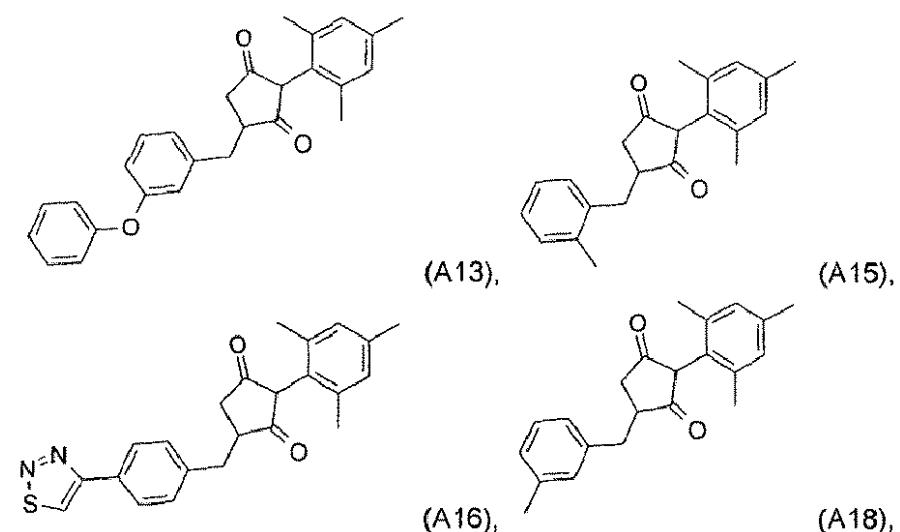
である】

の化合物であるか、あるいは、

(b) 化合物は、以下の化合物 A 13、A 15、A 16、A 18、A 20、A 21、A 22、B 7、B 8、B 9、B 10、B 11、B 12、B 13、B 14、B 15、B 16、B 17、B 18、または B 19 のうちの 1 つである：

【0054】

【化7】

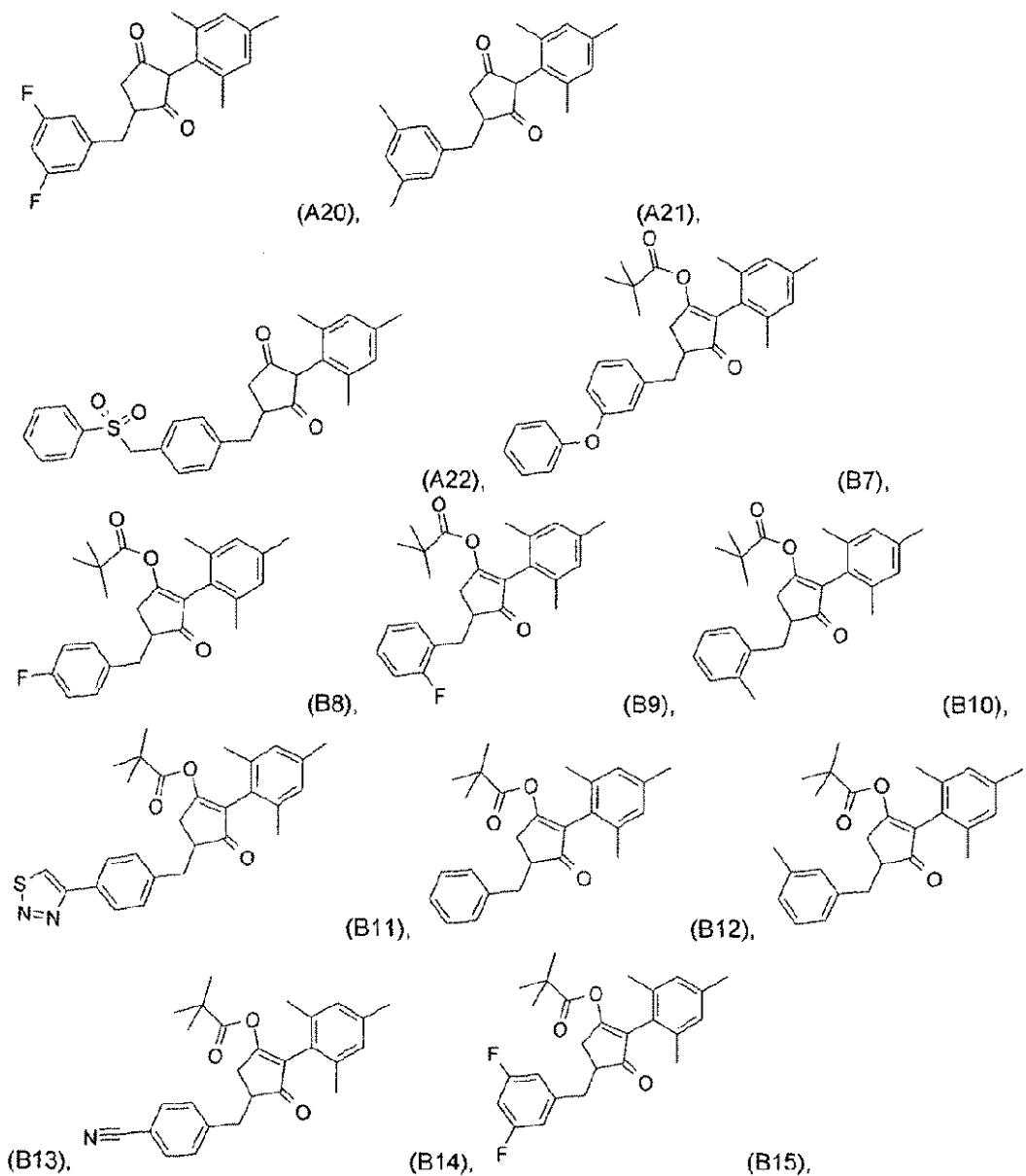


20

30

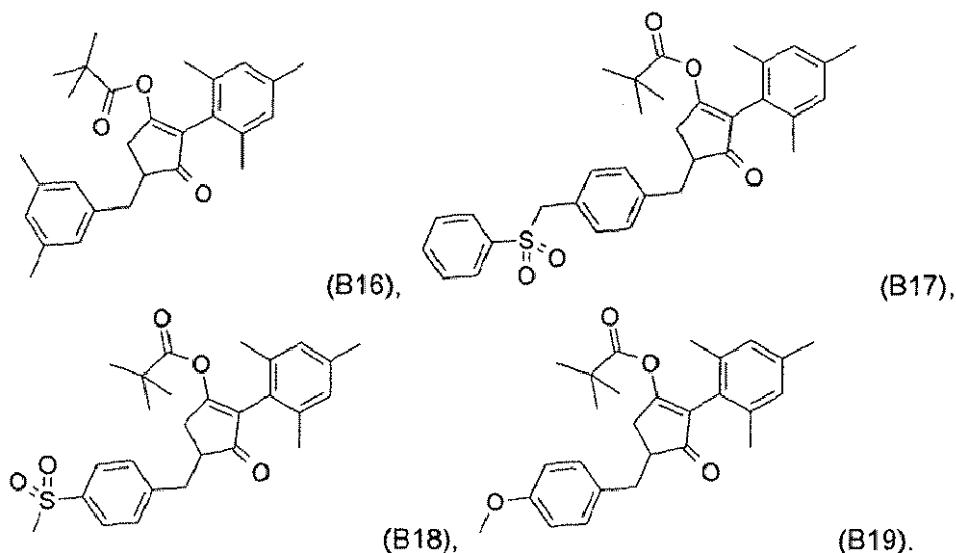
【0055】

【化 8】



【0 0 5 6】

【化9】



10

【0057】

同様に、式(I)の化合物において、Aが随意に置換されたフェニルであるとき、次いで、好ましい実施形態において、(a)：

Gは、水素であり、

Rは、メチルであり、

R²は、CH₃またはCH₃Oであり、

R¹は、H、CH₃、CH₂CH₃、F、Cl、Br、CH₃O、CH₃CH₂O、-CH=CH₂、-CC₃H、フェニル、2-フルオロフェニル、2-クロロフェニル、2-トリフルオロメチルフェニル、2-ニトロフェニル、2-メチルフェニル、2-メタンスルホニルフェニル、2-シアノフェニル、3-フルオロフェニル、3-クロロフェニル、3-トリフルオロメチルフェニル、3-ニトロフェニル、3-メチルフェニル、3-メタンスルホニルフェニル、3-シアノフェニル、4-フルオロフェニル、4-クロロフェニル、4-ブロモフェニル、4-ジフルオロメトキシフェニル、2-フルオロ-4-クロロフェニル、3-フルオロ-4-クロロフェニル、2-クロロ-4-クロロフェニル、2-クロロ-4-フルオロフェニル、2-メチル-4-クロロフェニル、4-トリフルオロメチルフェニル、4-ニトロフェニル、4-メチルフェニル、4-メタンスルホニルフェニル、または4-シアノフェニルであり、

R³およびR⁴の両方は、水素であり、かつ

Aは、亜式(xv)、(xvi)、(xvii)、(xviii)、(xi)、(xx)、または(xxi)：

【0058】

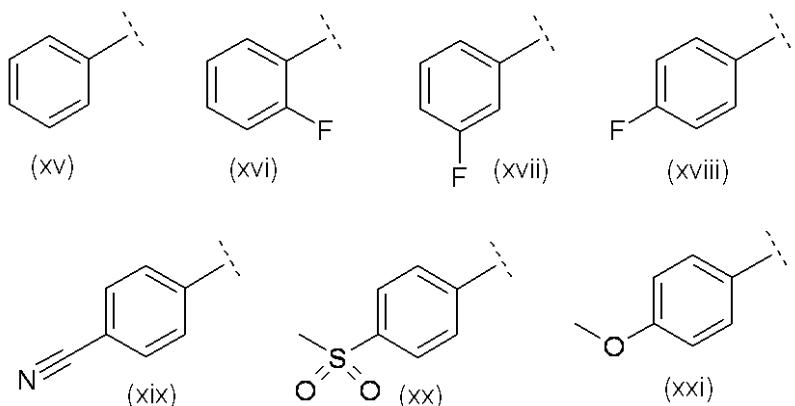
20

30

30

40

【化10】



10

【0059】

であるか、あるいは

(b) 化合物は、本明細書に説明するとおり（例えば、上述）、化合物A13、A15、A16、A18、A20、A21、A22、B7、B8、B9、B10、B11、B12、B13、B14、B15、B16、B17、B18、またはB19のうちの1つである。

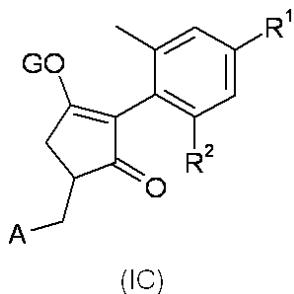
【0060】

本発明の別の代替的に好ましい実施形態（以下、表6b、6c、6d、6e、6f、6g、6h、および6iに開示するとおり）において、式(I)の化合物は、式(ICI)：

20

【0061】

【化11】



30

【0062】

[式中、

Gは、水素であり、

R²は、CH₃またはCH₃Oであり、

R¹は、H、CH₃、CH₂CH₃、F、Cl、Br、CH₃O、CH₃CH₂O、-CH=CH₂、-CC₂H、フェニル、2-フルオロフェニル、2-クロロフェニル、2-トリフルオロメチルフェニル、2-ニトロフェニル、2-メチルフェニル、2-メタンスルホニルフェニル、2-シアノフェニル、3-フルオロフェニル、3-クロロフェニル、3-トリフルオロメチルフェニル、3-ニトロフェニル、3-メチルフェニル、3-メタンスルホニルフェニル、3-シアノフェニル、4-フルオロフェニル、4-クロロフェニル、4-ブロモフェニル、4-ジフルオロメトキシフェニル、2-フルオロ-4-クロロフェニル、3-フルオロ-4-クロロフェニル、2-クロロ-4-クロロフェニル、2-クロロ-4-フルオロフェニル、3-クロロ-4-クロロフェニル、3-クロロ-4-フルオロフェニル、2-メチル-4-クロロフェニル、4-トリフルオロメチルフェニル、4-ニトロフェニル、4-メチルフェニル、4-メタンスルホニルフェニル、または4-シアノフェニルであり、かつ

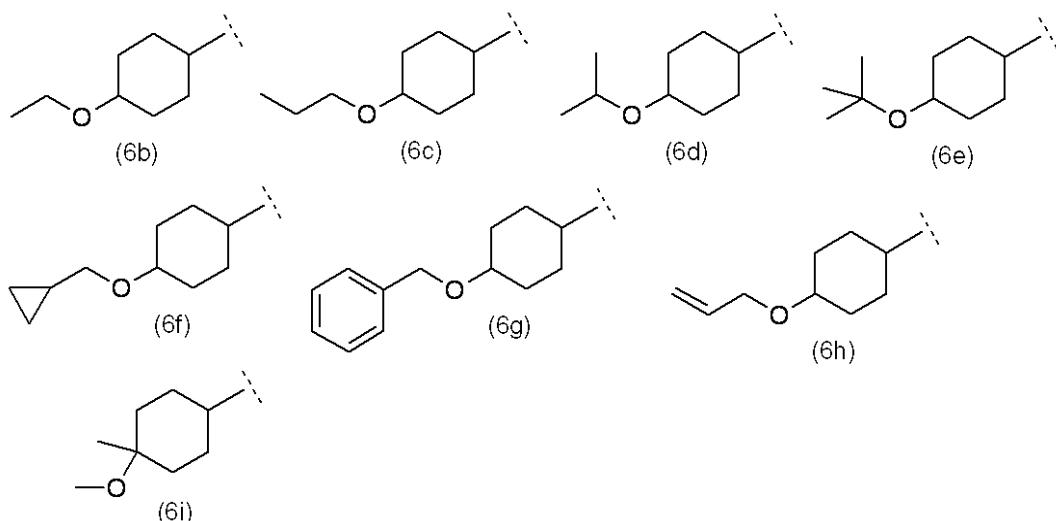
40

Aは、亜式(6b)、(6c)、(6d)、(6e)、(6f)、(6g)、(6h)、または(6i)：

【0063】

50

【化12】



10

20

30

40

50

である】

の化合物である。

【0064】

式(I C)の化合物は、好ましくは、以下、表A1に示すとおり、化合物A40～A47のうちの1つである。

【0065】

式(I A)、(I B)、および/または(I C)の化合物において、R¹は、H、CH₃、CH₂CH₃、F、Cl、またはBrである。

【0066】

式(I A)、(I B)、および/または(I C)の化合物において、より好ましくは、R¹は、CH₃である。

【0067】

式(I A)、(I B)、および/または(I C)の化合物において、好ましくは、R²は、CH₃(メチル)である。

【0068】

本発明の特に好ましい実施形態において、化合物は、本明細書において表A1、表B1、および表C1(以下)に示す構造によって画定されるとおり、化合物A1～A47、またはB1～B28、またはC1～C10のうちの1つである。

【0069】

例えば、化合物は、好ましくは、本明細書において表A1、表B1(以下)に示す構造によって画定されるとおり、化合物A1～A24、A38、またはB1～B19のうちの1つである。

【0070】

あるいは、化合物は、好ましくは、本明細書において表A1、表B1、および表C1(以下)に示す構造によって画定されるとおり、化合物A25～A37、A39～A47、B20～B28、またはC1～C10のうちの1つである。

【0071】

式(I)のある特定の化合物は、アルケンであり、したがって、既知の方法に従って、水素化を受け、式(I)のさらなる化合物を得てもよい。

【0072】

当業者は、式(I)の化合物が、既知の条件下で代替的置換基に変換される能力を有する1つ以上の置換基を有する芳香族部分を含有してもよく、かつこれらの化合物が、それ自体で、さらなる式(I)の化合物の調製において中間体として機能してもよいことを理解するであろう。

【0073】

例えば、式(I)の化合物(式中、R¹がアルケニルまたはアルキニルである)は、既知の条件下で、式(I)の化合物(式中、R¹がアルキルである)に還元されてもよく、かつ式(I)の化合物(式中、R¹がハロゲン、好ましくは、臭素またはヨウ素である)は、Suzuki-Miyaura、Sonogashiraの文献に説明される条件下で、好適なカップリングパートナーとのクロスカップリング反応、および関連するクロスカップリング反応を受けて、さらなる式(I)の化合物を得てもよい(例えば、O'Brien, C. J. および Organ, M. G. Angew. Chem. Int. Ed. (2007), 46, 2768-2813、Suzuki, A. Journal of Organometallic Chemistry (2002), 653, 83、Miyaura, N. および Suzuki, A. Chem. Rev. (1995), 95, 2457-2483を参照)。

10

【0074】

一実施形態では、式中、GがC₁-C₈アルキル、C₂-C₈ハロアルキル、フェニルC₁-C₈アルキル(フェニルがC₁-C₃アルキル、C₁-C₃ハロアルキル、C₁-C₃アルコキシ、C₁-C₃ハロアルコキシ、C₁-C₃アルキルチオ、C₁-C₃アルキルスルフィニル、C₁-C₃アルキルスルホニル、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって随意に置換されてもよい)、ヘテロアリールC₁-C₈アルキル(ヘテロアリールがC₁-C₃アルキル、C₁-C₃ハロアルキル、C₁-C₃アルコキシ、C₁-C₃ハロアルコキシ、C₁-C₃アルキルチオ、C₁-C₃アルキルスルフィニル、C₁-C₃アルキルスルホニル、ハロゲン、シアノ、もしくはニトロによって随意に置換されてもよい)、C₃-C₈アルケニル、C₃-C₈ハロアルケニル、C₃-C₈アルキニル、C(X^a)-R^a、C(X^b)-X^c-R^b、C(X^d)-N(R^c)-R^d、-SO₂-R^e、-P(X^e)(R^f)-R^g、またはCH₂-X^f-R^h(式中、X^a、X^b、X^c、X^d、X^e、X^f、R^a、R^b、R^c、R^d、R^e、R^f、R^g、およびR^hは、上記に定義されるとおりである)である、式(I)の化合物は、式(A)の化合物(これは、GがHである式(I)の化合物である)を、試薬G-Z(G-Zは、アルキル化剤、例えば、ハロゲン化アルキル(ハロゲン化アルキルの定義は、単純ハロゲン化C₁-C₈アルキル、例えばヨウ化メチルおよびヨウ化エチル、置換ハロゲン化アルキル、例えばクロロメチルアルキルエーテル、C₁-CH₂-X^f-R^h(式中、X^fは酸素である)、およびクロロメチルアルキルスルフィドC₁-CH₂-X^f-R^h(式中、X^fは硫黄である)を含む)、スルホン酸C₁-C₈アルキル、もしくは硫酸ジ(C₁-C₈アルキル)である)で、またはハロゲン化C₃-C₈アルケニルで、またはハロゲン化C₃-C₈アルキニルで、またはアシリル化剤(例えば、カルボン酸、HO-C(X^a)R^a(式中、X^aは酸素である)、酸塩化物、C₁-C(X^a)R^a(式中、X^aは酸素である)、もしくは酸無水物、[R^aC(X^a)]₂O(式中、X^aは酸素である)、もしくはイソシアネート、R^cN=C=O、もしくは塩化カルバモイル、C₁-C(X^d)-N(R^c)-R^d(式中、X^dは酸素であるが、ただし、R^cおよびR^dのいずれも水素ではない)、もしくは塩化チオカルバモイルC₁-C(X^d)-N(R^c)-R^d(式中、X^dは硫黄であるが、ただし、R^cおよびR^dのいずれも水素ではない)、もしくはクロロギ酸、C₁-C(X^b)-X^c-R^b(式中、X^bおよびX^cは酸素である)、もしくはクロロチオギ酸、C₁-C(X^b)-X^c-R^b(式中、X^bは酸素であり、X^cは硫黄である)、もしくはクロロジチオギ酸、C₁-C(X^b)-X^c-R^b(式中、X^bおよびX^cは硫黄である)、もしくはイソチオシアネート、R^cN=C=Sで処理することによって、または二硫化炭素およびアルキル化剤での連続処理によって、またはリン酸化剤、例えば、塩化ホスホリル、C₁-P(X^e)(R^f)-R^gで、またはスルホニル化剤、例えば、塩化スルホニル、C₁-SO₂-R^eで、好ましくは少なくとも1当量の塩基の存在下で処理することによって調製されてもよい。

20

30

40

40

【0075】

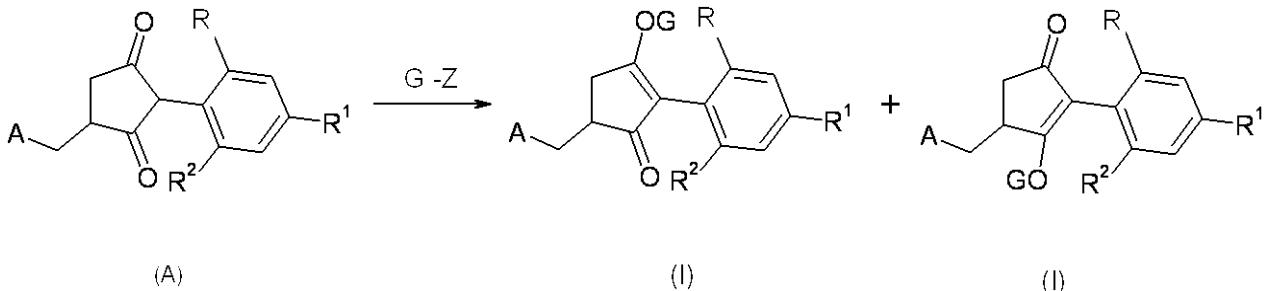
式(I)の異性体化合物は、形成されてもよい。例えば、式(A)の化合物は、式(I)の2つの異性体化合物、または式(I)の化合物の異性体混合物を引き起こしてもよい

50

。本発明は、式(Ⅰ)の異性体化合物の両方を、任意の割合のこれらの化合物の混合物と一緒に包含する。

〔 0 0 7 6 〕

【化 1 3】



〔 0 0 7 7 〕

環状1,3-ジオンのO-アルキル化は、既知であり、好適な方法は、例えば米国特許第4436666号に記載されている。代替方法は、Pizzorno, M.T.およびAlbonico, S.M. Chem. Ind. (London), (1972), 425、Born, H. et al., J. Chem. Soc., (1953), 1779、Constantino, M.G. et al., Synth. Commun. (1992), 22(19), 2859、Tian, Y. et al., Synth. Commun., (1997), 27(9), 1577、Chandra Roy, S. et al., Chem. Lett. (2006), 35(1), 16、Zubaaidha, P.K. et al., Tetrahedron Lett. (2004), 45, 7187、およびZwanenburg, B. et al. Tetrahedron (2005), 45(22), 7109によって報告されている。

【 0 0 7 8 】

環状1, 3-ジオンのO-アシル化は、例えば、米国特許第4551547号、同第4175135号、同第4422870号、同第4659372号、および同第443666号に記載される方法と同様の方法によって達成されてもよい。典型的には、式(A)のジオンは、アシル化剤で、少なくとも1当量の好適な塩基の存在下で、および随意に、好適な溶媒の存在下で処理されてもよい。塩基は、無機、例えば、アルカリ金属炭酸塩もしくは水酸化物、または金属水素化物、または有機塩基、例えば、第3級アミンもしくは金属アルコキシドであってもよい。好適な無機塩基の例としては、炭酸ナトリウム、水酸化ナトリウムまたは水酸化カリウム、水素化ナトリウムが挙げられ、好適な有機塩基としては、トリアルキルアミン類、例えば、トリメチルアミンおよびトリエチルアミン、ピリジン、または他のアミン塩基、例えば、1, 4-ジアゾビシクロ[2.2.2]-オクタンおよび1, 8-ジアザビシクロ[5.4.0]ウンデカ-7-エンが挙げられる。好ましい塩基としては、トリエチルアミンおよびピリジンが挙げられる。この反応のための好適な溶媒は、試薬と適合性があるように選択され、テトラヒドロフランおよび1, 2-ジメトキシエタン等のエーテル、ならびにジクロロメタンおよびクロロホルム等のハロゲン化溶媒が挙げられる。ピリジンおよびトリエチルアミン等のある特定の塩基は、塩基および溶媒の両方としてうまく採用され得る。アシル化剤がカルボン酸である場合、アシル化は、好ましくは、ヨウ化2-クロロ-1-メチルピリジニウム、N,N-ジシクロヘキシリカルボジイミド、1-(3-ジメチルアミノプロピル)-3-エチルカルボジイミド、およびN,N-カルボジイミザゾール等のカップリング剤の存在下で、かつ随意にテトラヒドロフラン、ジクロロメタン、またはアセトニトリル等の好適な溶媒中のトリエチルアミンまたはピリジン等の塩基の存在下で達成される。好適な方法は、例えば、Zhang, W. および Pugh, G. Tetrahedron Lett. (1999), 40(43), 7595、および Isobe, T. および Ishikawa, T. J. Org. Chem. (1999), 64(19) 6984によって記載されている。

【 0 0 7 9 】

環状1,3-ジオンのリン酸化は、米国特許第4409153号に記載されるものと同様の方法によって、ハロゲン化ホスホリルまたはハロゲン化チオホスホリル、ならびに塩基を使用して達成されてもよい。

【 0 0 8 0 】

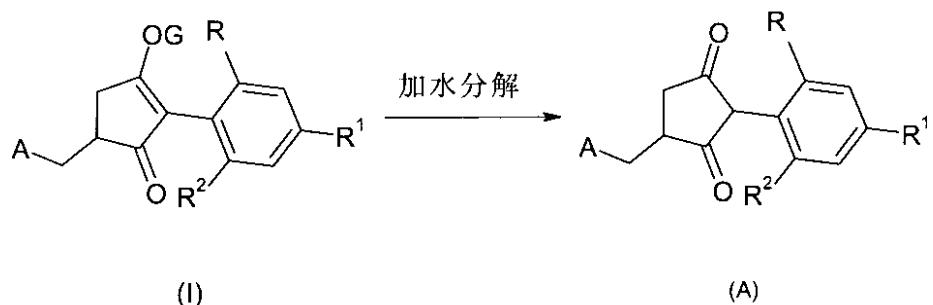
式(A)の化合物のスルホニル化は、例えば、C. Kowalski および K. F.ield, J. Org. Chem., (1981), 46, 197の方法によって、ハロゲン化アルキルまたはハロゲン化アリールスルホニルを使用して、好ましくは少なくとも1当量の塩基の存在下で達成されてもよい。

【 0 0 8 1 】

式(A)の化合物は、加水分解によって、好ましくは塩酸等の酸触媒の存在下で、かつ随意に、テトラヒドロフランまたはアセトン等の好適な溶媒の存在下で、好ましくは、25～150の間で、従来の加熱下、またはマイクロ波照射下で、式(I)の化合物から調製されてもよい。あるいは、式(A)の化合物は、国際公開第WO0435588号において、また、*Stevens, K. L. et al., Bioorg. Med. Chem. Lett.* (2008), 18, 5758によって説明されるとおり、好ましくは、25～200の間で、従来の加熱下、またはマイクロ波照射下で、モルホリン中で加熱下で脱アルキル化によって式(I)の化合物から調製されてもよい。

〔 0 0 8 2 〕

【化 1 4】

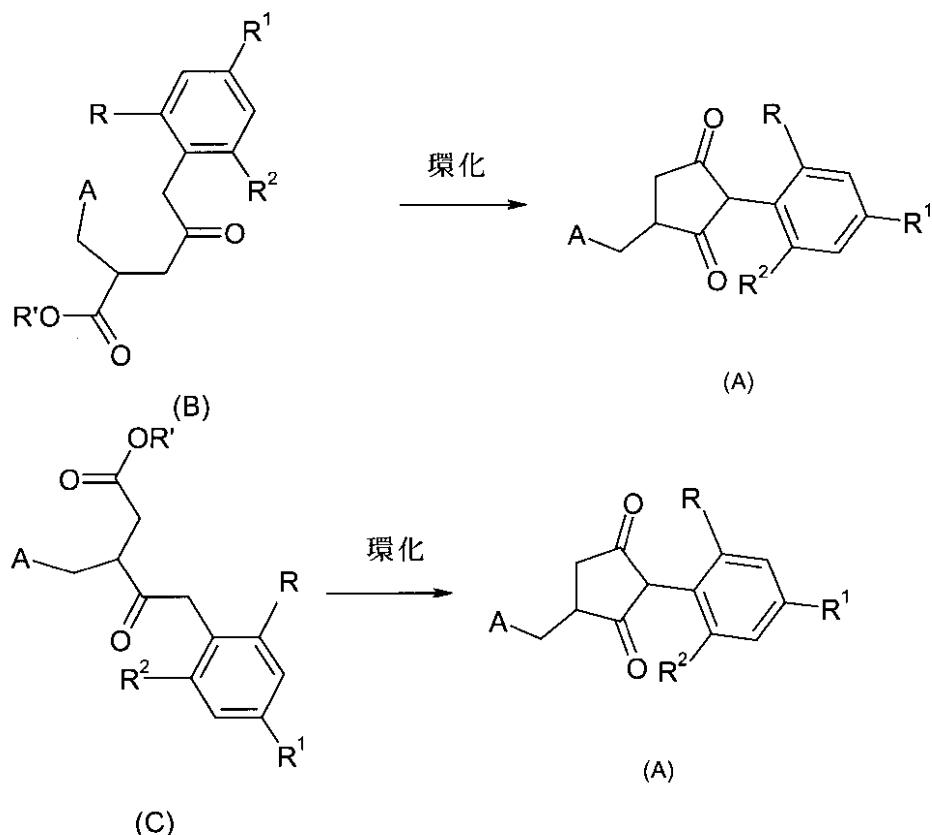


【 0 0 8 3 】

さらなる方法において、式(A)の化合物は、T.N.Wheeler、米国特許第4209532号によって記載されるようなものと同様の方法によって、好ましくは、酸または塩基の存在下で、随意に好適な溶媒の存在下で、式(B)の化合物、または式(C)の化合物(式中、R'は、水素またはアルキル基である)の環化によって調製されてもよい。式(B)の化合物、または式(C)の化合物(式中、R'は、水素である)は、酸性条件下で、好ましくは、硫酸、ポリリン酸、またはイートン試薬等の強酸の存在下で、随意に酢酸、トルエン、またはジクロロメタン等の好適な溶媒の存在下で環化されてもよい。

[0 0 8 4]

【化15】



【0085】

式(B)の化合物、または式(C)の化合物(式中、R'は、アルキル(好ましくは、メチルまたはエチル)である)は、酸性または塩基性条件下で、好ましくは、カリウムtert-ブトキシド、リチウムジイソプロピルアミド、または水素化ナトリウム等の少なくとも1当量の強塩基の存在下で、およびテトラヒドロフラン、ジメチルスルホキシド、またはN,N-ジメチルホルムアミド等の溶媒中で環化されてもよい。

30

【0086】

式(B)の化合物および式(C)の化合物(式中、R'は、Hである)は、それぞれ、基準条件下で、例えば、酸触媒の存在下で、アルキルアルコール、ROHで加熱することによって、式(B)の化合物および式(C)の化合物(R'は、アルキルである)にエステル化されてもよい。

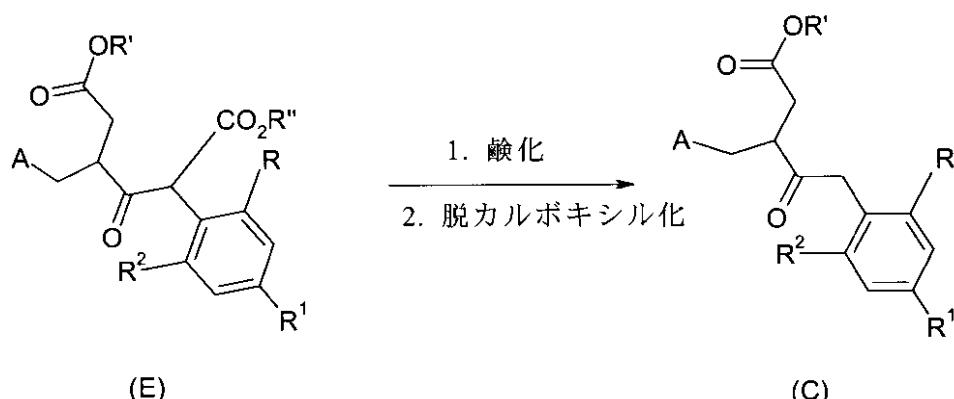
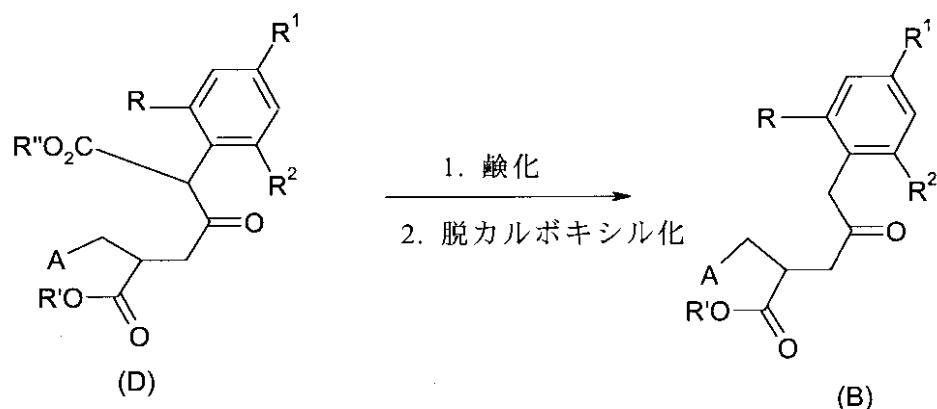
【0087】

式(B)の化合物および式(C)の化合物(式中、R'は、Hである)は、それぞれ、基準条件下で、式(D)の化合物および式(E)の化合物(式中、R'は、アルキルである(好ましくは、メチルまたはエチル))の鹼化後、例えば、T.N.Wheeler,米国特許第4209532号に説明されるプロセスと同様のプロセスによって脱カルボキシル化をもたらすように反応混合物の酸化によって、調製されてもよい。

40

【0088】

【化16】

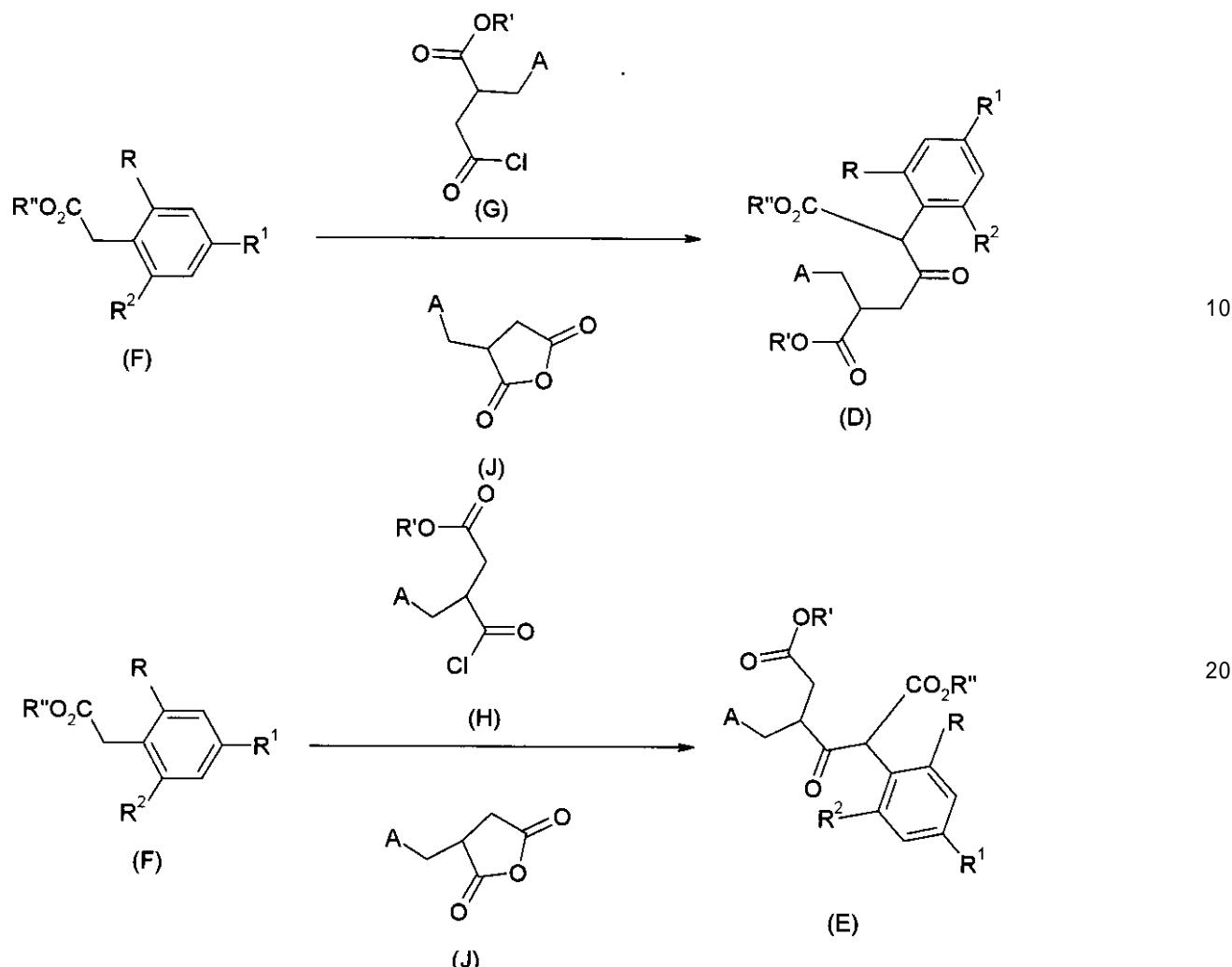


【0089】

式(D)の化合物および式(E)の化合物(式中、Rは、アルキルである)は、それぞれ、塩基性条件下で、式(F)の化合物を、式(G)の好適なカルボン酸塩化物、または式(H)の好適なカルボン酸塩化物で処理することによって調製されてもよい。好適な塩基としては、カリウムtert-ブトキシド、ナトリウムビス(トリメチルシリル)アミド、およびリチウムジイソプロピルアミドが挙げられ、反応は、-80～30の間の温度で、好適な溶媒(テトラヒドロフランまたはトルエン等)中で実施される。あるいは、式(D)の化合物および式(E)の化合物(式中、Rは、Hである)は、好適な温度(-80～30の間)で、好適な溶媒(テトラヒドロフランまたはトルエン等)中で、式(F)の化合物を好適な塩基(カリウムtert-ブトキシド、ナトリウムビス(トリメチルシリル)アミド、およびリチウムジイソプロピルアミド等)で処理し、得られたアニオンを好適な式(J)の無水物と反応させることによって調製されてもよい。

【0090】

【化17】



【0091】

30

式(F)の化合物は、既知の化合物であるか、または既知の方法によって既知の化合物から調製されてもよい。

【0092】

40

式(J)の化合物は、既知であるか（例えば、Arnold, R. T. および Showell, J. S. J. Am. Chem. Soc. (1957), 79 (2), 419-422、Ballini, R. et al. Synthesis (2002), (5), 681-685を参照）、または、例えば、Bergmeier, S. C. および Ismail, K. A. Synthesis (2000), (10), 1369-1371、Groutas, W. C. et al. J. Med. Chem. (1989), 32 (7), 1607-11、および Bernhard, K. および Lincke, H. Helvetica Chimica Acta (1946), 29, 1457-1466によって説明される方法と類似の方法によって、調製されてもよい。

【0093】

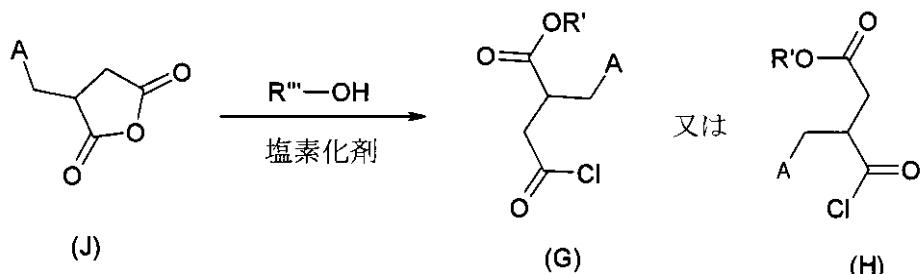
50

式(G)の化合物または式(H)の化合物は、ジメチルアミノピリジンまたはアルカリ金属アルコキシド等の塩基の存在下で、アルキルアルコール、R-OHでの処理（例えば、Buser, S. および Vassella, A. Helvetica Chimica Acta, (2005), 88, 3151、および Hart, et al. Bioorg. Med. Chem. Letters, (2004), 14, 1969を参照）後、既知の条件下で、得られた酸を、塩化オキサリルまたは塩化チオニル等の塩素化試薬で処理（例えば、Santelli-Rouvier, C. Tetrahedron Lett. (198

4), 25(39), 4371、Walba D. および Wand, M. Tetrahedron Lett. (1982), 23(48), 4995、Cason, J. Org. Synth. Coll. Vol. III, (169), 1955を参照)することによって、式(J)の化合物から調製されてもよい。

【0094】

【化18】



【0095】

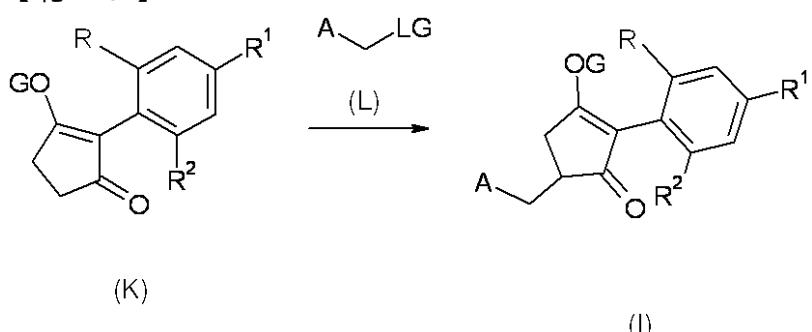
式(G)の化合物および式(H)の化合物は、既知の方法によって既知の化合物から作製されてもよい。例えば、式(G)の化合物および式(H)の化合物を得るための類似方法は、Bergmeier, S. C. および Ismail, K. A. Synthesis (2000), (10), 1369-1371によって説明されている。

【0096】

さらなる方法では、式(I)の化合物は、塩基性条件下で、式(K)の化合物を、式(L)の化合物(式中、LGは、ハロゲン(好ましくはヨウ素または臭素)等の脱離基である)、または活性アルコール(好ましくは、メシラートまたはトシラート)で処理することによって調製されてもよい。好適な塩基としては、リチウムジイソプロピルアミド、ヘキサメチルジシルアジドナトリウム、カリウムtert-ブトキシドが挙げられ、反応は、好ましくは、-80 ~ 30 の間の温度で、好適な溶媒(テトラヒドロフラン等)中で実施される。

【0097】

【化19】



【0098】

式(L)の化合物は、既知であるか、または既知の方法によって既知の化合物から作製されてもよい。

【0099】

式(K)の化合物は、既知の化合物であるか、または既知の方法(例えば、Son, Y. S. et al. Tetrahedron Lett. (2005), 46(46), 5987-5990、Kuethe, J. T. et al. J. Org. Chem. (2002), 67(17), 5993-6000を参照)によって既知の化合物から作製されてもよい。

10

20

30

40

50

【0100】

あるいは、式(K)の化合物(式中、Gは、C₁-C₆アルキルである)は、既知の条件下で、式(K)の化合物(式中、Gは、水素である)のアルキル化によって、または既知の方法(例えば、Eberhardt, U. et al. Chem. Ber. (1983), 116(1), 119-135を参照)によって、調製されてもよい。

【0101】

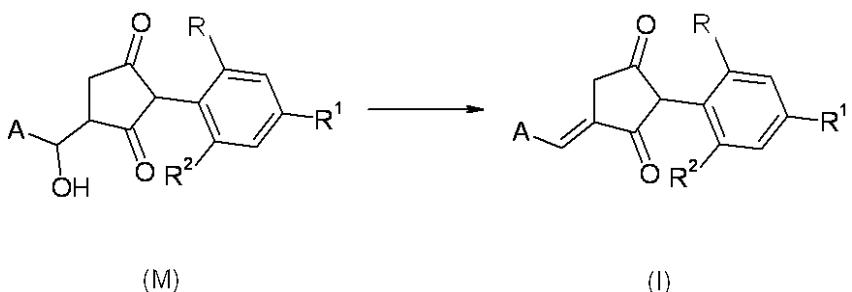
式(K)の化合物(式中、Gは、水素である)は、既知であるか、または既知の方法(例えば、Nguyen, H. N. et al. J. Am. Chem. Soc. (2003), 125(39), 11818-11819、Bonjoch, J. et al. Tetrahedron (2001), 57(28), 6011-6017、Fox, J. M. et al. J. Am. Chem. Soc. (2000), 122(7), 1360-1370、米国特許第4338122号、米国特許第4283348号を参照)によって既知の化合物から調製されてもよい。

【0102】

あるいは、二重結合を有する式(I)の化合物は、既知の方法(例えば、Habib-Zahmani, H. et al. Synlett (2007), (7), 1037-1042、Nagaoka, H. et al. Tetrahedron Letters (1985), 26(41), 5053-5056、Nagaoka, H. et al. J. Am. Chem. Soc. (1986), 108(16), 5019-5021、Enholm, E. J. et al. J. Org. Chem. (1996), 61(16), 5384-5390、Clive, D. L. J. et al. Tetrahedron (2001), 57(18), 3845-3858、Bartoli, G. et al. J. Org. Chem. (2002), 67(25), 9111-9114、Jung, M. E. et al. Chem. Comm. (2003), (2), 196-197、欧州特許第1433772号、日本特許第2004203844号、インド特許第194295号を参照)によって、式(M)の化合物から調製されてもよい。

【0103】

【化20】



【0104】

式(M)の化合物は、塩基性条件下で、式(K)の化合物(Gは、水素である)を、式(N)の化合物で処理することによって、調製されてもよい。好適な塩基としては、リチウムジイソプロピルアミド、ヘキサメチルジシルアジドナトリウム、カリウムtert-ブトキシドが挙げられ、反応は、好ましくは、-80 ~ 30 の間の温度で、好適な溶媒(テトラヒドロフラン等)中で実施される。

【0105】

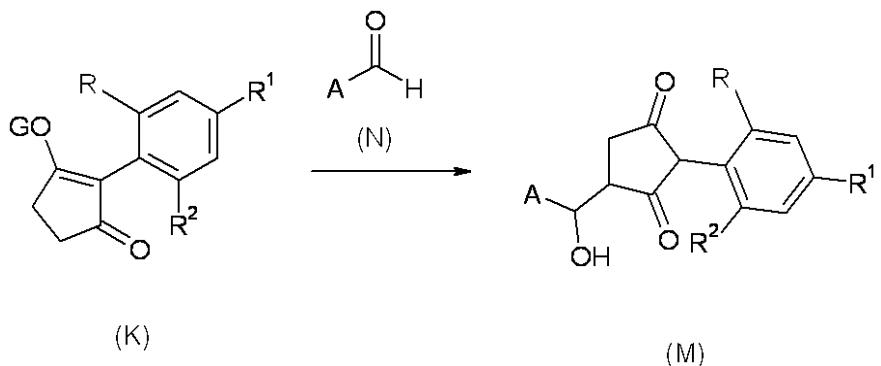
10

20

30

40

【化 2 1】



10

[0 1 0 6]

式 (N) の化合物は、既知であるか、または既知の方法によって既知の化合物から作製されてよい。

[0 1 0 7]

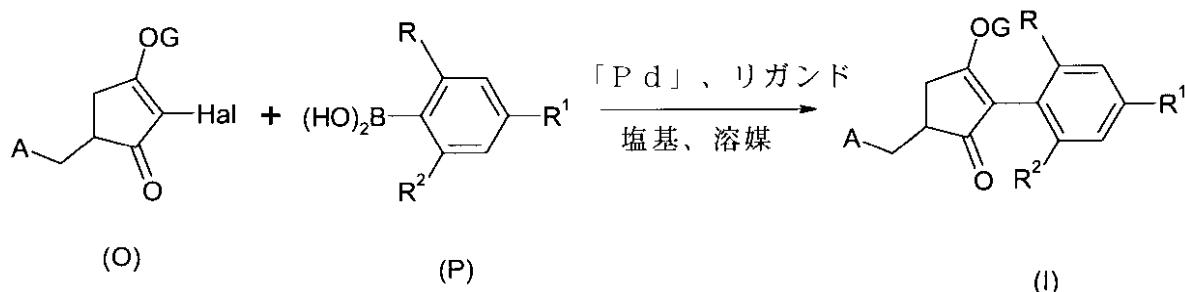
式(Ⅰ)の化合物(式中、Gは、C₁-C₄アルキルである)は、式(〇)の化合物(式中、Gは、C₁-C₄アルキルであり、Halは、ハロゲン、好ましくは、臭素またはヨウ素である)を、好適なパラジウム触媒(例えば、化合物(〇)に対して、0.001-50%のパラジウム(II))、および塩基(例えば、化合物(〇)に対して1~10等量のリン酸カリウム)の存在下で、好ましくは、好適なリガンド(例えば、化合物(〇)に対して0.001-50%(2-ジシクロヘキシルホスフィノ)-2,6-ジメトキシビフェニル)の存在下で、好適な溶媒(例えば、トルエンまたは1,2-ジメトキシエタン)中で、好ましくは、25~200の間で、従来の加熱下、またはマイクロ波照射下で、式(P)のアリールボロン酸、Ar-B(OH)₂と反応させることによって調製されてもよい(例えば、Song, Y.S.S. et al. *Tetrahedron Lett.* (2005), 46(46), 5987-5990, Kuethel, J.T. et al. *J. Org. Chem.* (2002), 67(17), 5993-6000)を参照)。

20

[0 1 0 8]

【化 2 2】

30



【 0 1 0 9 】

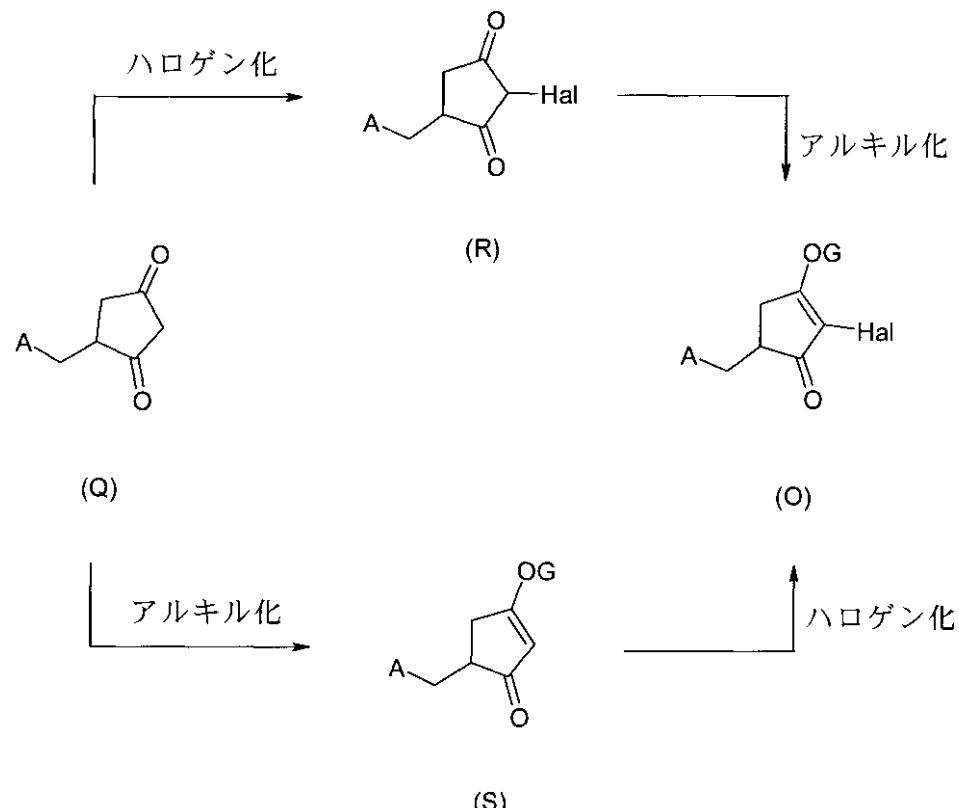
式(O)の化合物は、式(Q)の化合物をハロゲン化した後に、既知の条件下で、例えば、Shepherd R.G. et al. J. Chem. Soc. Perkin Trans. 1 (1987), 2153-2155およびLin Y.-L. et al. Bioorg. Med. Chem. (2002), 10, 685-690の方法によつて、式(R)の得られたハロゲン化物を、C₁-C₄ハロゲン化アルキルまたはトリC₁-C₄オルトギ酸アルキルでアルキル化することによって調製されてもよい。あるいは、式(O)の化合物は、式(Q)の化合物を、C₁-C₄ハロゲン化アルキルまたはトリC₁-C₄オルトギ酸アルキルでアルキル化し、既知の条件下(例えば、Song, Y.S. et al. Tetrahedron Lett. (2005), 46 (36), 5987-5990、Kuethe, J.T. et al. J. Org. Chem. (2002), 67 (17), 5993-6000、Belmont, D.T. et al. J. Org.

40

g . C h e m . 1 9 8 5 , 5 0 (2 1) , 4 1 0 2 - 4 1 0 7 を参照)で、式(S)の得られたエノンをハロゲン化することによって調製されてもよい。

【0110】

【化23】

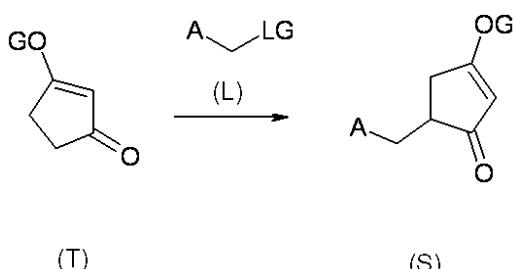


【0111】

式(S)の化合物は、式(T)の化合物を、塩基性条件下で、式(L)の化合物(式中、LGは、ハロゲン(好ましくは、臭素またはヨウ素)等の脱離基または活性アルコール(好ましくは、メシレートまたはトシレート)である)で、処理することによって調製されてもよい。好適な塩基としては、リチウムジイソプロピルアミド、ナトリウムヘキサメチルジシリルアジド、カリウムtert-ブトキシドが挙げられ、反応は、好ましくは、-80 ~ 30 の間の温度で、好適な溶媒(テトラヒドロフラン等)中で実施される(例えば、G u l i a s , M . e t a l . O r g . L e t t . (2 0 0 3) , 5 (1 1) , 1 9 7 5 - 1 9 7 7 、A l t e n b a c h , R . J . e t a l . J . M e d . C h e m . (2 0 0 6) , 4 9 (2 3) , 6 8 6 9 - 6 8 8 7 、S n o w d e n , R . L . T e t r a h e d r o n (1 9 8 6) , 4 2 (1 2) , 3 2 7 7 - 9 0 、O p p o l z e r , W . e t a l . H e l v . C h i m . A c t a (1 9 8 0) , 6 3 (4) , 7 8 8 - 9 2 、M e l l o r , M . e t a l . S y n t h . C o m m u n . 1 9 7 9 , 9 (1) , 1 - 4 を参照)。

【0112】

【化24】



10

20

30

40

50

【0113】

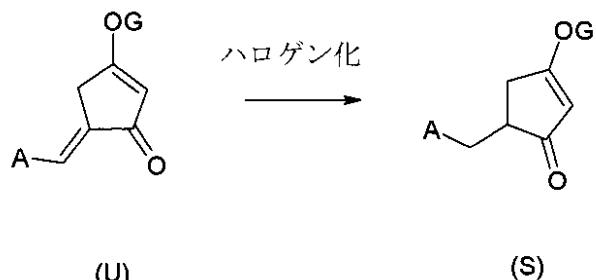
式(T)の化合物は、既知であるか、または既知の方法によって既知の化合物から作製されてもよい。

【0114】

あるいは、式(S)の化合物は、既知の方法で、式(U)の化合物の水素化によって調製することができる。

【0115】

【化25】



10

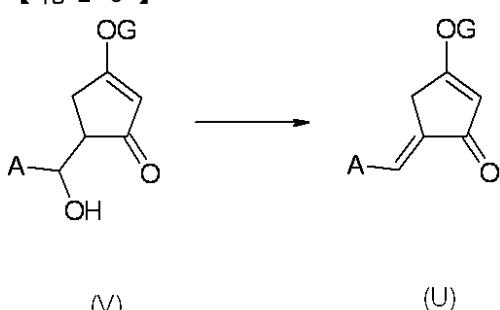
【0116】

式(U)の化合物は、既知の方法で、既知の方法によって式(V)の化合物からの式(U)の化合物のハロゲン化で調製することができる(例えば、Nagaoka, H. et al. *Tetrahedron Letters* (1985), 26 (41), 5053-5056、Nagaoka, H. et al. *J. Am. Chem. Soc.* (1986), 108 (16), 5019-5021、Zuki, M. et al. *Bull. Chem. Soc. Japan* (1988), 61 (4), 1299-1312、Enhōlm, E. J. et al. *J. Org. Chem.* (1996), 61 (16), 5384-5390、Clive, D. L. J. et al. *Tetrahedron* (2001), 57 (18), 3845-3858、Bartoli, G. et al. *J. Org. Chem.* (2002), 67 (25), 9111-9114、Jung, M. E. et al. *Chem. Comm.* (2003), (2), 196-197、欧州特許第1433772号、日本特許第2004203844号、インド特許第194295号を参照)。

20

【0117】

【化26】



30

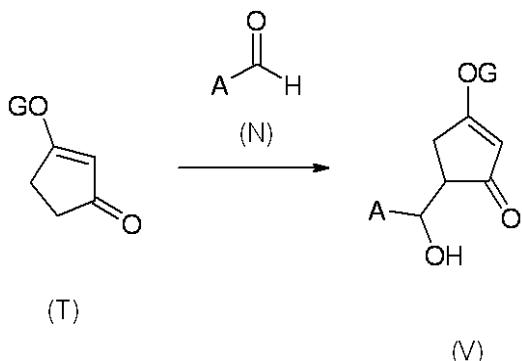
【0118】

式(V)の化合物は、塩基性条件下で、式(T)の化合物を、式(N)の化合物で処理することによって調製されてもよい。好適な塩基としては、リチウムジイソプロピルアミド、ナトリウムヘキサメチルジシルアジド、カリウムtert-ブトキシドが挙げられ、反応は、好ましくは、-80 ~ 30 の間の温度で、好適な溶媒(テトラヒドロフラン等)中で実施される(例えば、Alleman, J. et al. *Chem. Comm.* (2007), (38), 3921-3923を参照)。

40

【0119】

【化 2 7】



10

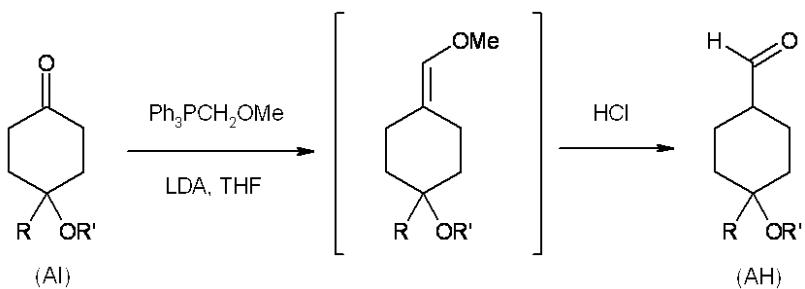
[0 1 2 0]

(N)等の化合物は、既知であり、既知の方法によって調製することができる。特に、Aが4-アルコキシシクロヘキシリル基(AH)である実施例は、S.G.Pyne et al. J.Am.Chem.Soc.(1982), 104, 5719によって説明される方法等の方法で、(AI)等のケトンから調製することができる。例えば、-80 ~ -30 の間で、好適な溶媒、好ましくはTHF中での(メトキシメチル)トリフェニル塩化ホスホニウムのリチウムジイソプロピルアミド等の強塩基での処理は、式(AI)のケトンの追加に続く。次いで、得られた溶液は、強塩基、好ましくは、水性塩化水素で処理され、0 ~ 120 の間で加熱されてもよい。

20

【 0 1 2 1 】

【化 2 8】



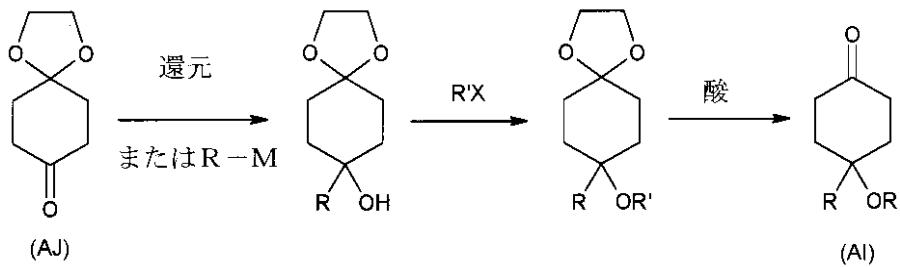
30

【 0 1 2 2 】

(A I) 等のケトンは、D. Cooper et al. によって、国際公開第WO 2007107566号および第WO 2008119716号に説明される方法を介して、アルキル金属種の還元または追加後、O-アルキル化および脱保護によって、(A J)から調製することができる。

【 0 1 2 3 】

【化 2 9】



40

【 0 1 2 4 】

式 (P) の化合物は、既知の方法（例えば、Thompson et al. J. Org. Chem. (1984), 49, 5237 および R. Hawkins et al. J. Am. Chem. (1960), 82, 3053 を参照）によって、式 (W) のハロゲン化アリール（式中、Hal は、臭素またはヨウ素である）から調製されてもよい。

50

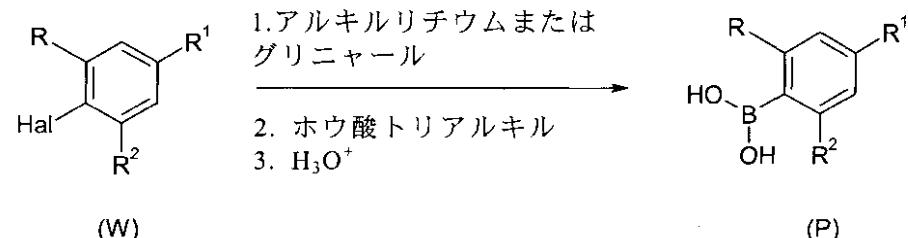
。例えば、式 (W) のハロゲン化アリールは、好適な溶媒、好ましくは、ジエチルエーテルまたはテトラヒドロフラン中で、-80 ~ 30 の間の温度で、アルキルリチウムまたはハロゲン化アルキルマグネシウムで処理されてもよく、次いで、得られたアリールマグネシウムまたはアリールリチウム試薬は、ホウ酸トリアルキル（好ましくは、ホウ酸トリメチル）で反応させて、アリールジアルキルホウ酸を得てもよく、それは、酸性条件下で、加水分解されて式 (P) のボロン酸を提供してもよい。

【0125】

式 (P) の化合物は、既知の方法（例えば、Thompson W. et al. J. Org. Chem. (1984), 49, 5237 および R. Hawkins et al. J. Am. Chem. Soc. (1960), 82, 3053 を参照）によって、式 (W) のハロゲン化アリール（式中、Hal は、臭素またはヨウ素である）から調製されてもよい。例えば、式 (W) のハロゲン化アリールは、好適な溶媒、好ましくはジエチルエーテルまたはテトラヒドロフラン中で、-80 ~ 30 の範囲の温度で、アルキルリチウムまたはハロゲン化アルキルマグネシウムで処理されてもよく、次いで、得られたアリールマグネシウムまたはアリールリチウム試薬は、ホウ酸トリアルキル（好ましくは、ホウ酸トリメチル）で処理して、ボロン酸アリールジアルキルを得てもよく、それは、酸性化条件下で、加水分解されて、式 (P) のボロン酸を提供し得る。

【0126】

【化30】



【0127】

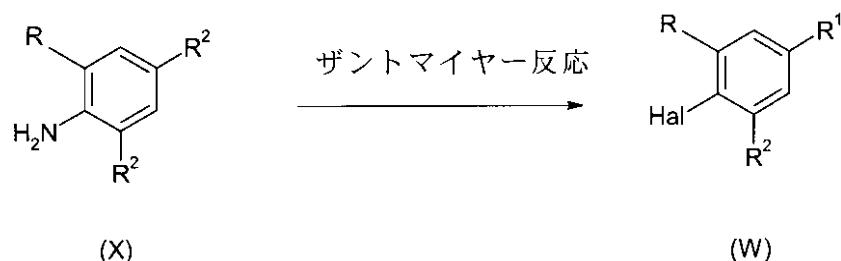
あるいは、式 (W) の化合物は、既知の方法（例えば、Miyaura N. et al. J. Org. Chem. (1995), 60, 7508 および Zhu W. et al. Org. Lett. (2006), 8, (2), 261 を参照）で、2,2-ジメチル-1,3-プロパンジオール、および2-メチル-2,4-ペンタンジオール等の1,2もしくは1,3-アルカンジオールから得られる環状ボロン酸エステルで反応させられ、得られたボロン酸エステルは、酸性化条件下で、加水分解され、式 (P) のボロン酸を得てもよい。

【0128】

式 (W) のハロゲン化アリールは、既知であるか、または既知の方法によって既知の化合物から調製されてもよい。例えば、式 (W) のハロゲン化アリールは、既知の方法、例えば、対応するジアゾニウム塩によるザントマイヤー反応によって、式 (X) のアニリンから調製されてもよい。

【0129】

【化31】



10

20

30

40

50

[0 1 3 0]

式(X)のアニリンは、既知であるか、または既知の方法によって既知の化合物から作製されてもよい。

[0 1 3 1]

あるいは、式(W)の化合物は、既知の方法によって、対応する既知の化合物のハロゲン化によって作製することができる。

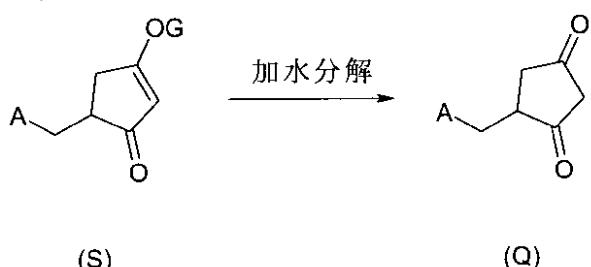
(0 1 3 2)

式 (Q) の化合物は、加水分解、好ましくは、塩酸等の酸性触媒の存在下で、随意にテトラヒドロフランまたはアセトン等の好適な溶媒の存在下で、好ましくは、25～150度、従来の加熱下で、またはマイクロ波照射下で、式 (S) の化合物から調製されてもよい。

10

[0 1 3 3]

【化 3 2】



30

[0 1 3 4]

あるいは、式(Q)の化合物は、既知の方法(例えば、Manukina, T. A. et al. Zhurnal Organicheskoi Khimii (1986), 22 (4), 873-4, Mellor, M. et al. Synth. Commun. 1979, 9 (1), 1-4 を参照) によって、既知の化合物から作製することができる。

[0 1 3 5]

さらなる方法において、式(A)の化合物は、式(Q)の化合物を、好適なハロゲン化アリール(ヨウ化アリール、臭化アリール、または塩化アリール等)、好適なハロゲン化アリール(ヨウ化アリール、臭化アリール、または塩化アリール等)、好適なパラジウム触媒(例えば、式(Q)の化合物に対して、0.001~50%のパラジウム(II)アセテート)の存在下で、式(V)のAr-Hal、および塩基(例えば、式(Q)の化合物に対して、1~10等量のリン酸カリウム)と、好ましくは、好適なリガンド(例えば、式(Q)の化合物に対して、0.001~50%(2-ジシクロヘキシルホスフィノ)-2,4,6-トリイソプロピルビフェニル)存在下で、好適な溶媒(例えば、ジオキサンまたは1,2-ジメトキシエタン)中で、好ましくは、25~200の間で、反応させることによって調製されてもよい。同様の結合は、文献(例えば、Bellmont, D.T. et al. J. Org. Chem. 1985, 50(21), 4102~4107, Fox J.M. et al. J. Am. Chem. Soc. (2000), 122(7), 1360~1370, B. Hong et al. 国際公開第WO2005/000233を参照)において既知である。あるいは、式(A)の化合物は、式(Q)の化合物を、好適なハロゲン化アリール(ヨウ化アリール等)、好適な銅触媒(例えば、式(Q)の化合物に対して、0.001~50%のヨウ化銅(I))の存在下で、式(V)のAr-Hal、および塩基(例えば、敷居(Q)の化合物に対して、1~10等量の炭酸カリウム)と、好ましくは、好適なリガンド(例えば、式(Q)の化合物に対して、0.001~50%のL-プロリン)の存在下で、好適な溶媒(例えば、ジメチルスルホキシド)中で、好ましくは、25~200の間で、反応させることによって調製されてもよい。同様の結合は、ハロゲン化アリールの文献(例えば、Jiang, Y. et al. Synlett (2005), 18, 2731~2734を参照)において

30

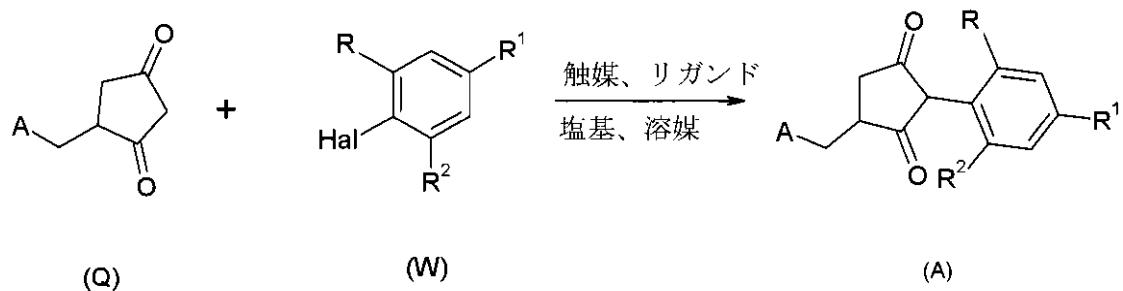
40

50

既知である。

【0136】

【化33】



10

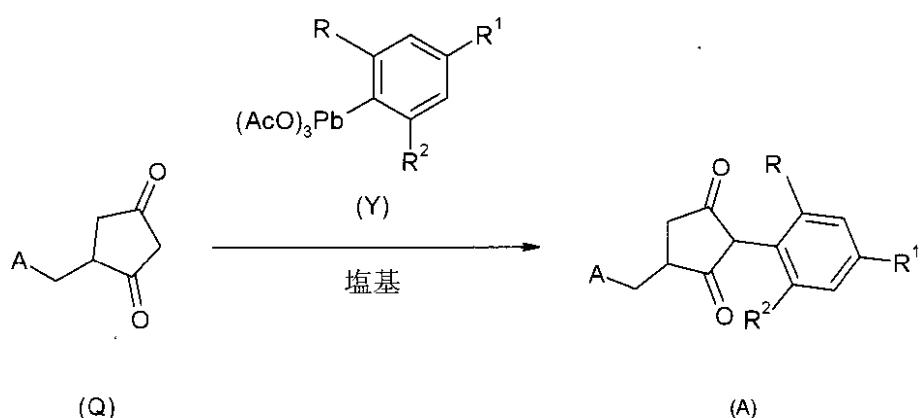
【0137】

式(A)のさらなる化合物は、例えば、Pinhey, J. Pure and Appl. Chem. (1996), 68(4), 819およびMoloney Ml. et al. Tetrahedron Lett. (2002), 43, 3407によって説明されている条件下で、式(Q)の化合物を、式(Y)の有機鉛試薬と反応させることによって調製されてもよい。

【0138】

【化34】

20



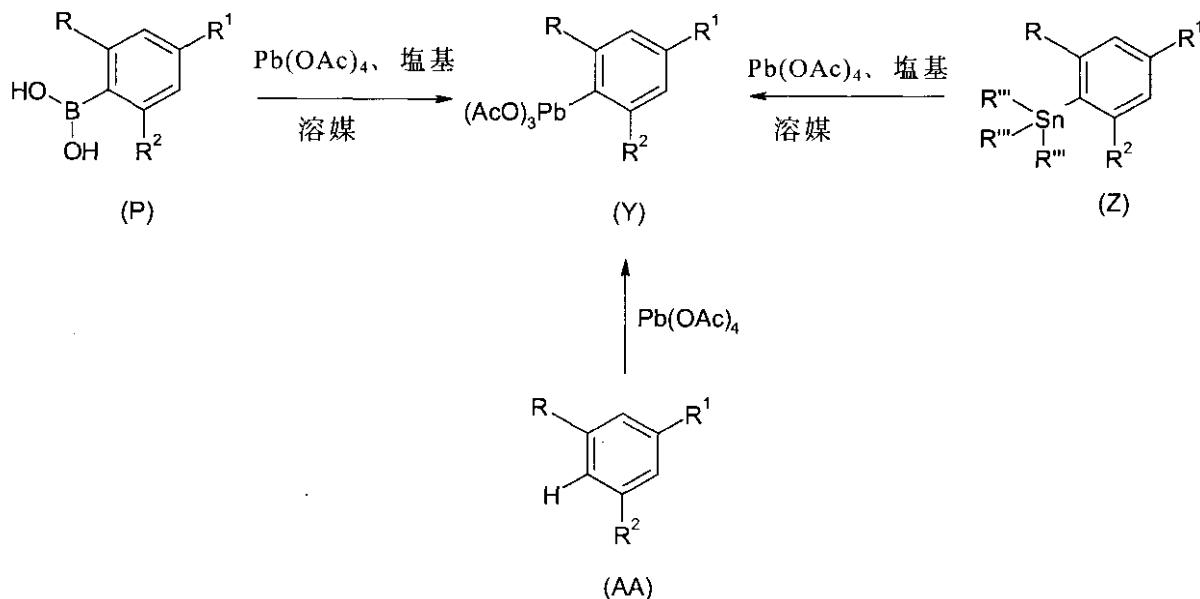
30

【0139】

式(X)の有機鉛試薬は、式(P)のボロン酸、式(Z)のスタンナン(式中、Rは、C₁-C₄アルキルである)から、または既知の方法に従い、四酢酸鉛での式(AA)の化合物の直接的鉛酢酸化によって調製されてもよい。

【0140】

【化35】



10

【0141】

さらなる式(A)の化合物は、例えば、Fedorov, A. U. et al. Russ. Chem. Bull. Int. Ed. (2005), 54(11), 2602およびKoech P. et al. J. Am. Chem. Soc. (2004), 126(17), 5350、および本明細書における参考文献によって説明されている条件下で、式(Q)の化合物を、好適なトリアリールビスマス化合物で反応させることによって調製されてもよい。

20

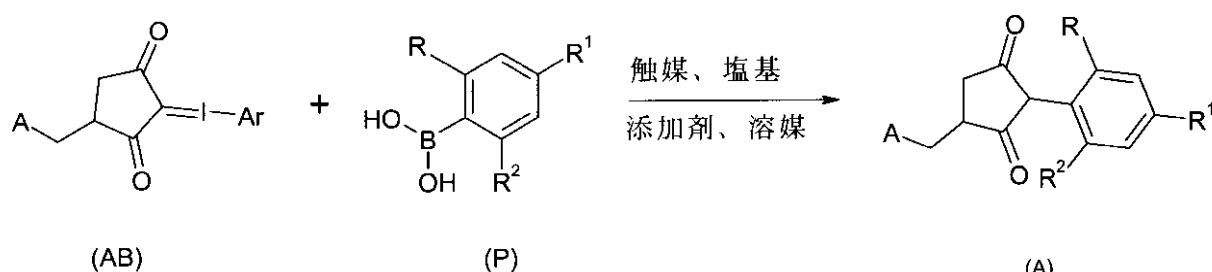
【0142】

さらなる式(A)の化合物は、好適なパラジウム触媒および塩基の存在下、ならびに好適な溶媒中で、式(AB)のヨードニウムイリド(式中、Arは、随意に置換されたフェニル基である)を、式(P)のアリールボロン酸と反応させることによって調製されてもよい。

30

【0143】

【化36】



40

【0144】

好適なパラジウム触媒は、概して、パラジウム(II)またはパラジウム(0)錯体、例えば、二ハロゲン化パラジウム(II)、酢酸パラジウム(II)、硫酸パラジウム(II)、二塩化ビス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(II)、二塩化ビス(トリシクロペンチルホスフィン)パラジウム(II)、ビス(ジベンジリデンアセトン)パラジウム(0)、またはテトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0)である。パラジウム触媒はまた、所望のリガンドと錯体化することによって、例えば、錯体化させるパラジウム(II)塩、例えば、二塩化パラジウム(II)(PdCl₂)または酢酸パラジウム(II)(Pd(OAc)₂)を、所望のリガンド、例えば、トリフェニルホスフィン(PPh₃)、トリシクロペンチルホスフィン、トリシクロヘキシリホスフィン、2-ジシクロヘキ

50

シリル - ホスフィノ - 2' , 6' - ジメトキシビフェニル、または 2 - ジシクロヘキシルホスフィノ - 2' , 4' , 6' - トライソプロピルビフェニル、および選択された溶媒と共に、式 (A B) の化合物、式 (P) のアリールボロン酸、および塩基と混合することによって、パラジウム (II) 又はパラジウム (0) 化合物から原位置で調製することもできる。また、二座のリガンド、例えば、1 , 1' - ビス (ジフェニルホスフィノ) フェロセンまたは 1 , 2 - ビス (ジフェニルホスフィノ) - エタンも好適である。したがって、反応媒体を加熱することによって、C - C カップリング反応のために望ましいパラジウム (II) 錯体またはパラジウム (0) 錯体が、「原位置で」形成され、次いで、C - C カップリング反応を開始する。

【 0 1 4 5 】

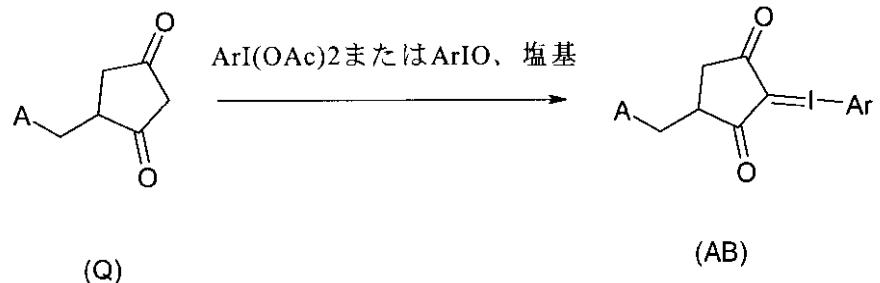
パラジウム触媒は、式(AA)の化合物に基づき、0.001~50モル%の量で、好みしくは0.1~15モル%の量で使用される。反応はまた、テトラアルキルアンモニウム塩、例えば、臭化テトラブチルアンモニウム等の他の添加剤の存在下で実施されてもよい。好みしくは、パラジウム触媒は、酢酸パラジウムであり、塩基は、水酸化リチウムであり、溶媒は、水性1,2-ジメトキシエタンである。

【 0 1 4 6 】

式 (A B) の化合物は、Schank K. et al. Synthesis (1983), 392、Moriarty R. M. et al. J. Am. Chem. Soc. (1985), 107, 1375、または Yang Z. et al. Org. Lett. (2002), 4(19), 3333 の方法に従った水、または水性エタノール等の水性アルコール中で、(ジアセトキシヨードベンゼン) またはヨードシリルベンゼン等の超原子価ヨウ素試薬、および水性炭酸ナトリウム、水酸化リチウム、または水酸化ナトリウム等の塩基での処理によって、式 (Q) の化合物から調製されてもよい。

【 0 1 4 7 】

【化 3 7】

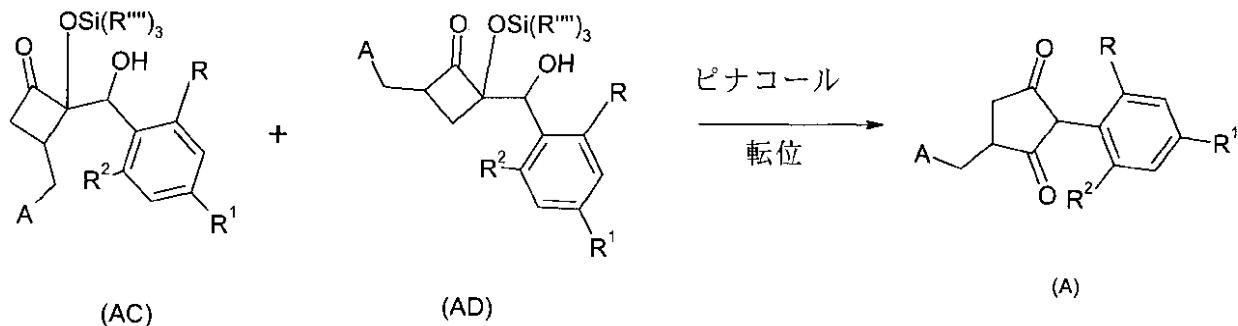


【 0 1 4 8 】

さらなる式(A)の化合物は、酸性化条件下(例えば、Eberhardt, U. et al. Chem. Ber. (1983), 116(1), 119-35およびWheeler, T. N. 米国特許第4283348号を参照)で、式(AC)の化合物、または式(AD)の化合物(式中、R'、'、'は、C₁-C₄アルキル(好ましくはメチル)のピナコール転位によって調製されてもよい。

【 0 1 4 9 】

【化38】



10

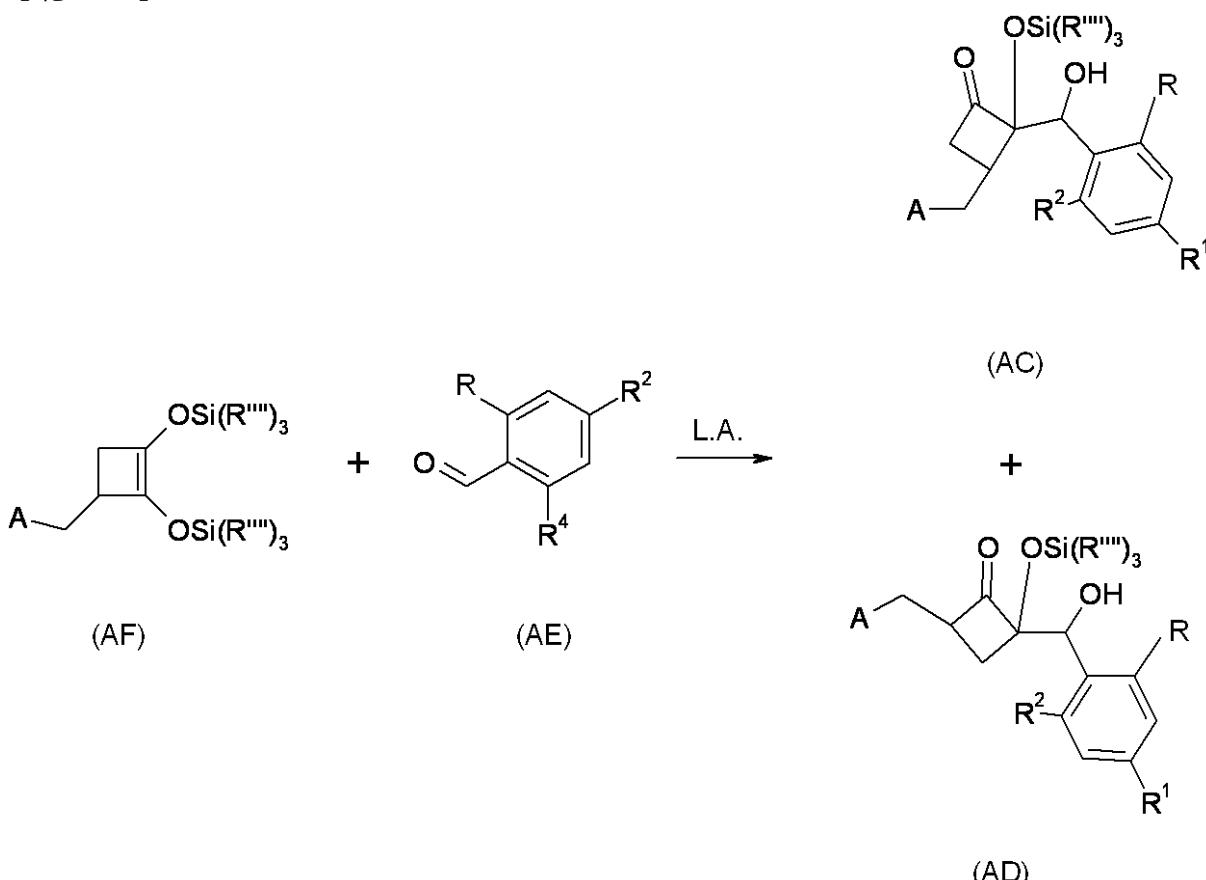
【0150】

式(AC)の化合物および式(AD)の化合物は、酸(四塩化チタンまたはヨウ化マグネシウム等)の存在下で、随意に好適な溶媒(ジクロロメタン)中で、-80 ~ 30の範囲の温度(例えば、Li, W.-D.Z.およびZhang, X.-X. Org. Lett. (2002), 4 (20), 3485 - 3488, Shimada, J. et al. J. Am. Chem. Soc. (1984), 106 (6), 1759 - 73, Eberhardt, U. et al. Chem. Ber. (1983), 116 (1), 119 - 35、およびWheeler, T.N. 米国特許第4283348号を参照)で、式(AE)の化合物を、式(AF)の化合物で処理することによって調製されてもよい。

20

【0151】

【化39】



30

【0152】

式(AD)の化合物は、既知であるか、または既知の方法によって、式(W)の化合物または式(AA)の化合物から作製されてもよい。

【0153】

式(AF)の化合物は、クロロトリ-C₁-C₄アルキルシリルおよび金属(好ましく

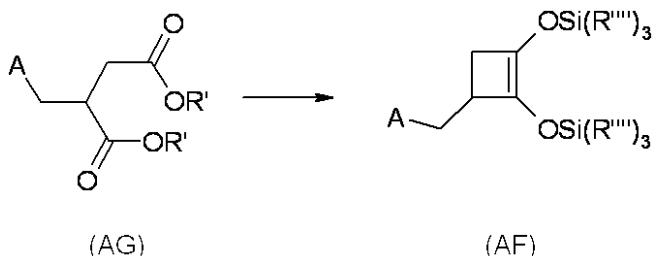
40

50

は、ナトリウム)の存在下で、好適な溶媒(トルエンまたはジエチルエーテル等)中で、
20 ~ 150 の範囲の温度(例えば、Blanchard, A. N. および Burrell, D. J. *Tetrahedron Lett.* (2001), 42 (29), 4779 - 4781 および Salaun, J. et al. *Tetrahedron* (1989), 45 (10), 3151 - 62 を参照)で、式(AG)の化合物(式中、R は、アルキル基(好ましくは、メチル)である)から調製されてもよい。

(0 1 5 4)

【化 4 0】



【 0 1 5 5 】

式 (A G) の化合物は、式 (H) の化合物および式 (G) の化合物と類似し、式 (H) の化合物および式 (G) の化合物を説明する方法と類似する既知の方法によって調製されてもよい。式 (A G) の化合物はまた、文献において既知である（例えば、Arnold, R. T. および Showell, J. S. J. Am. Chem. Soc. 1957, 79 (2), 419-422 を参照）。

[0 1 5 6]

本発明に従った式Iの化合物は、合成で得られるような、未修飾形態の作物保護剤として使用することができるが、それらは、概して、担体、溶媒、および界面活性物質等の製剤アジュバントを使用して、種々の方法で作物保護組成物に製剤化される。

【 0 1 5 7 】

したがって、本発明はまた、本明細書に説明する除草有効量の式Iの化合物を含有する、除草組成物を提供する。

(0 1 5 8)

製剤（組成物）は、様々な物理的形態、例えば、散布剤、ゲル、水和剤、標的部位への手動または機械的分配のための被覆もしくは含浸顆粒、水分散性顆粒、水溶性顆粒、乳化性顆粒、水分散性錠剤、発泡性圧縮錠剤、水溶性テープ、乳化性濃縮物、マイクロ乳化性濃縮物、水中油型（EW）もしくは油中水（WO）乳剤、他の多相系、例えば、油／水／油および水／油／水生成物、油流動化剤、水性分散液、油性分散液、サスペンション、カプセル懸濁剤、可溶性液体、水溶性濃縮物（担体として水もしくは水混和性有機溶媒を有する）、含浸高分子膜の形態、または例えば、Manual on Development and Use of FAO Specifications for Plant Protection Products, 5th Edition, 1999から既知の他の形態であってもよい。活性成分は、ポリマーまたは重合性単量体から形成され、約0.1～約50ミクロンの直径、および約10～約1000の間のアスペクト比を有する、マイクロファイバまたはマイクロロッドに組み込まれてもよい。

【 0 1 5 9 】

かかる製剤は、直接使用するか、あるいは使用前に希釀することができる。次いで、それらは、好適な地上または空中散布用噴霧装置、または中心枢軸灌漑システムもしくはドリップ／トリクル灌漑手段等の他の地上散布用装置によって、施用することができる。次いで、それらは、好適な地上または空中散布用噴霧装置、または中心枢軸灌漑システムもしくはドリップ／トリクル灌漑手段等の他の地上散布用装置によって、施用することができる。

〔 0 1 6 0 〕

希釈された製剤は、例えば、水、液肥、微量栄養素、生物有機体、油、または溶媒で調

製することができる。

【0161】

製剤は、例えば、微粉固体、顆粒、溶液、分散液、または乳剤の形態で、組成物を得るために、活性成分を製剤アジュバントと混合することによって調製することができる。活性成分はまた、コアおよびポリマーシェルから成る微細マイクロカプセルに含有することができる。マイクロカプセルは通常、0.1～500ミクロンの直径を有する。それらは、カプセル重量の約25～95重量%の量の活性成分を含有する。活性成分は、液体技術材料の形態で、好適な溶液の形態で、固体もしくは液体の分散体中の微粒子の形態で、またはモノリシック固体として存在することができる。封入膜は、例えば、天然および合成ゴム、セルロース、スチレンブタジエン共重合体、もしくは他の同様の好適な膜形成材料、ポリアクリロニトリル、ポリアクリレート、ポリエステル、ポリアミド、ポリ尿素、ポリウレタン、アミノプラスチ樹脂、もしくは化学修飾デンプン、またはこれに関連して当業者に既知である他のポリマーを含む。

10

【0162】

あるいは、微細な「マイクロカプセル」と呼ばれるものが形成されることが可能であり、ここで、活性成分は、基体物質の固体マトリクス中の微粉粒子の形態で存在し、その場合、マイクロカプセルは、前段落で概説したように、拡散制限膜で封入されない。

【0163】

活性成分は、多孔質担体上で吸着されてもよい。これは、活性成分が制御された量でそれらの周囲に放出されることを可能にし得る（例えば、徐放）。制御放出製剤の他の形態は、活性成分がより低分子量のポリマー、ワックス、または好適な固形物質から成る固体マトリクス中に分散または溶解される、顆粒または粉末である。好適なポリマーは、ポリ酢酸ビニル、ポリスチレン、ポリオレフィン、ポリビニルアルコール、ポリビニルピロリドン、アルキル化ポリビニルピロリドン、ポリビニルピロリドンおよび無水マレイン酸の共重合体およびそれらのエステルおよび半エステル、カルボキシメチルセルロース、メチルセルロース、ヒドロキシエチルセルロース等の化学修飾セルロースエステルである。好適なワックスの例は、ポリエチレンワックス、酸化ポリエチレンワックス、エステルワックス、例えば、モンタンワックス、天然由来のワックス、例えば、カルナバワックス、キャンデリラワックス、蜜ろう等である。徐放製剤のための他の好適なマトリクス材料は、デンプン、ステアリン、リグニンである。

20

【0164】

本発明に従った組成物の調製に好適な製剤アジュバントは、それ自体が既知である。

【0165】

液体担体として、水、芳香族溶媒、例えば、トルエン、m-キシレン、o-キシレン、p-キシレン、およびその混合物、クメン、Solvesso（登録商標）、Shell sol A（登録商標）、Caromax（登録商標）、Hydrosol（登録商標）等の様々な商標下で既知の、140～320の間の沸点範囲を有する芳香族炭化水素ブレンド、パラフィンおよびイソパラフィン担体、例えば、パラフィン油、鉱油、例えば、Exxsol（登録商標）の商標下で既知の、50～320の間の沸点範囲を有する脱芳香族化炭化水素溶媒、Varso1（登録商標）の商標下で既知の、100～320の間の沸点範囲を有する非脱芳香族化炭化水素溶媒、Isopar（登録商標）またはShell sol T（登録商標）等の商標下で既知の、100～320の間の沸点範囲を有するイソパラフィン溶媒、炭化水素、例えば、シクロヘキサン、テトラヒドロナフタレン（テトラリン）、デカヒドロナフタレン、-ピネン、d-リモネン、ヘキサデカン、イソオクタン、エステル溶媒、例えば、酢酸エチル、酢酸n/i-ブチル、酢酸アミル、i-酢酸ボルニル、酢酸2-エチルヘキシル、Exxate（登録商標）の商標下で既知の酢酸のC₆-C₁₈アルキルエステル、乳酸エチルエステル、乳酸プロピルエステル、乳酸ブチルエステル、安息香酸ベンジル、乳酸ベンジル、二安息香酸ジプロピレングリコール、コハク酸、マレイン酸、およびフマル酸のジアルキルエステル、および極性溶媒、例えば、N-メチルピロリドン、N-エチルピロリドン、C₃-C₁₈-アルキルピロ

30

40

50

リドン、 γ -ブチロラクトン、ジメチルスルホキシド、N,N-ジメチルホルムアミド、N,N-ジメチルアセトアミド、N,N-ジメチルラクトアミド、C₄-C₁₈脂肪酸ジメチルアミド、安息香酸ジメチルアミド、アセトニトリル、アセトン、メチルエチルケトン、メチル-イソブチルケトン、イソアミルケトン、2-ヘプタノン、シクロヘキサン、イソホロン、メチルイソブテニルケトン(メシチルオキシド)、アセトフェノン、エチレンカーボネート、プロピレンカーボネート、ブチレンカーボネート、アルコール溶媒および希釈剤、例えば、メタノール、エタノール、プロパノール、n/イソ-ブタノール、n/イソ-ペントノール、2-エチルヘキサンノール、n-オクタノール、テトラヒドロフルフリルアルコール、2-メチル-2,4-ペントンジオール、4-ヒドロキシ-4-メチル-2-ペントノン、シクロヘキサンノール、ベンジルアルコール、エチレングリコール、エチレングリコールブチルエーテル、エチレングリコールメチルエーテル、ジエチレングリコール、ジエチレングリコールブチルエーテル、ジエチレングリコールエチルエーテル、ジエチレングリコールメチルエーテル、プロピレングリコール、ジプロピレングリコール、ジプロピレングリコールメチルエーテル、およびエチレングリコール、プロピレングリコール、およびブチレングリコール原料に基づく他の同様のグリコールエーテル溶媒、トリエチレングリコール、ポリエチレングリコール(PEG 400)、400~400の分子量を有するポリブロピレングリコール、グリセロール、酢酸グリセロール、二酢酸グリセロール、三酢酸グリセロール、1,4-ジオキサン、アビエチン酸ジエチレングリコール、クロロベンゼン、クロロトルエン、脂肪酸エステル、例えば、オクタン酸メチル、ミリスチン酸イソプロピル、ラウリン酸メチル、オレイン酸メチル、C₈-C₁₀脂肪酸メチルエステル、菜種油メチルおよびエチルエステル、大豆油メチルおよびエチルエステルの混合物、植物油、脂肪酸、例えば、オレイン酸、リノール酸、リノレン酸、リノ酸およびホスホン酸のエステル、例えば、リン酸トリエチル、C₃-C₁₈-トリス-リン酸アルキル、リン酸アルキルアリール、ビス-オクチル-ホスホン酸オクチルが使用されてもよい。

10

20

20

30

40

50

【0166】

水は、概して、濃縮物の希釈のために選択される担体である。

【0167】

好適な固体担体は、例えば、タルク、二酸化チタン、パイロフィライトクレー、シリカ(ヒュームドまたは沈降シリカ、随意に、官能化または処理される、例えば、シラン化される)、アタパルジャイトクレー、珪藻土、石灰石、炭酸カルシウム、ベントナイト、カルシウムモンモリロナイト、綿実外皮、小麦粉、大豆粉、軽石、木粉、粉碎クルミ殻、リグニン、および例えば、EPA CFR 180.1001.(c) & (d)に記載されるような同様の材料である。粉状または粒状肥料もまた、固体担体として使用することができる。

【0168】

多くの界面活性物質は、固体および液体製剤の両方において、特に、使用前に担体で希釈され得る製剤において有利に使用することができる。界面活性物質は、アニオン性、カチオン性、両性、非イオン性、または高分子であってもよく、それらは、乳化剤、潤滑剤、分散剤、もしくは懸濁化剤として、または他の目的で使用されてもよい。典型的な界面活性物質としては、例えば、アルキル硫酸塩の塩、例えば、ラウリル硫酸ジエタノールアンモニウム；ラウリル硫酸ナトリウム、アルキルアリールスルホン酸塩の塩、例えば、ドデシルベンゼンスルホン酸カルシウムまたはナトリウム；アルキル-フェノールアルキレンオキシド付加生成物、例えば、ノニルフェノールエトキシレート；アルコール-アルキレンオキシド付加生成物、例えば、トリデシルアルコールエトキシレート；石鹼、例えば、ステアリン酸ナトリウム；アルキルナフタレンスルホン酸塩の塩、例えば、ジブチルナフタレンスルホン酸ナトリウム；スルホコハク酸塩、例えば、スルホコハク酸ジ(2-エチルヘキシル)ナトリウムのジアルキルエステル；ソルビトールエステル、例えば、オレイン酸ソルビトール；第4級アミン、例えば、塩化ラウリルトリメチルアンモニウム、脂肪酸のポリエチレングリコールエステル、例えば、ステアリン酸ポリエチレングリコール

; エチレンオキシドおよびプロピレンオキシドのブロック共重合体；およびリン酸モノ-およびジ-アルキルエステルの塩；ならびに例えば、" McCutcheon's Detergents and Emulsifiers Annual" , MC Publishing Corp. , Ridgewood , New Jersey , 1981 に記載されるさらなる物質が挙げられる。

【0169】

殺虫製剤で通常使用され得るさらなるアジュバントとしては、結晶化阻害剤、粘度修飾物質、懸濁化剤、染料、酸化防止剤、発泡剤、光吸收体、混合補助剤、消泡剤、錯化剤、中和またはpH変性物質および緩衝剤、腐食防止剤、香料、湿潤剤、吸収改善剤、微量栄養素、可塑剤、流動促進剤、潤滑剤、分散剤、増粘剤、不凍剤、殺菌剤、相溶化剤および可溶化剤、ならびに液体および固体肥料が挙げられる。
10

【0170】

製剤はまた、追加の活性物質、例えば、さらなる除草剤、除草剤薬害軽減剤、植物成長調整剤、殺菌剤、または殺虫剤を含んでもよい。

【0171】

したがって、本発明はまた、本明細書に説明するとおり、除草有効量の式Iの化合物、および随意に（または好ましくは）式Iの化合物のための混合パートナーとしてのさらなる除草剤、または随意に（または好ましくは）薬害軽減剤、またはその両方を含む、除草組成物を提供する。

【0172】

本発明はまた、本明細書に説明するとおり、除草有効量の式Iの化合物、薬害軽減剤、および随意に（または好ましくは）、式Iの化合物のための混合パートナーとしてのさらなる除草剤を含む、除草組成物を提供し、ここで薬害軽減剤は、ベノキサコール、クロキントセットメキシル、シプロスルファミド、メフェンピル-ジエチル、またはN-(2-メトキシベンゾイル)-4-[（メチルアミノカルボニル）アミノ]ベンゼンスルホニアミドである。
20

【0173】

本発明に従った組成物は、さらに、鉱油、植物または動物由来の油、そのような油のアルキルエステルまたはそのような油の混合物、ならびに油誘導体を含む、添加剤（一般的にアジュバントと称される）を含むことができる。本発明に従った組成物で使用される油添加剤の量は、概して、噴霧混合物に基づき、0.01~10%である。例えば、油添加剤は、噴霧混合物が調製された後に、所望の濃度で噴霧タンクに添加することができる。好ましい油添加剤としては、鉱油または植物由来の油、例えば、菜種油、オリーブ油、またはヒマワリ油、乳化性植物油、例えば、AMIGO（登録商標）（Love Land Products Inc.）、植物由来の油のアルキルエステル、例えば、メチル誘導体、または動物由来の油、例えば、魚油または牛脂が挙げられる。好ましい添加剤は、例えば、活性成分として、本質的に80重量%の魚油のアルキルエステル、および15重量%のメチル化菜種油、ならびに5重量%の従来の乳化剤およびpH変性剤を含有する。特に好ましい油添加剤は、C₈-C₂₂脂肪酸のアルキルエステル、特に、C₁₂-C₁₈脂肪酸のメチル誘導体を含み、例えば、ラウリン酸、パルミチン酸、およびオレイン酸のメチルエステルが重要である。それらのエステルは、ラウリン酸メチル（CAS-1111-82-0）、パルミチン酸メチル（CAS-112-39-0）、およびオレイン酸メチル（CAS-112-62-9）として既知である。好ましい脂肪酸メチルエステル誘導体は、AGNIQUE ME 18 RD-F（登録商標）（Cognis）である。それらおよび他の油誘導体はまた、Compendium of Herbicide Adjuvants, 5th Edition, Southern Illinois University, 2000からも既知である。
30

【0174】

油添加剤の適用および作用は、それらを界面活性物質、例えば、非イオン性、アニオン性、カチオン性、または両性界面活性剤と混合することによってさらに改善することがで
40

きる。好適なアニオン性、非イオン性、カチオン性、または両性界面活性剤の例は、国際公開第 WO 97 / 34485 号の 7 および 8 ページに列挙される。好ましい界面活性物質は、ドデシルベンジルスルホネート型のアニオン性界面活性剤、特にそのカルシウム塩、および脂肪アルコールエトキシレート型の非イオン性界面活性剤である。5 ~ 40 のエトキシ化度を有するエトキシ化 C₁₂ - C₂₂ 脂肪アルコールが特に好ましい。市販の界面活性剤の例は、Genapol タイプ (Clarariant) である。また、シリコーン界面活性剤、特に、例えば、SILWET L-77 (登録商標) として市販されているポリアルキル - オキシド - 修飾ヘプタメチルトリロキサン、およびパーカルオロ化界面活性剤が好ましい。添加剤全体に関連した界面活性物質の濃度は、概して、1 ~ 50 重量 % である。油もしくは鉱油またはそれらの誘導体と界面活性剤との混合物から成る油添加剤の例は、TURBOCHARGE (登録商標)、ADIGOR (登録商標) (両方とも Syngenta Crop Protection AG)、ACTIPRON (登録商標) (BP Oil UK Limited)、AGRI-DEX (登録商標) (Helena Chemical Company) である。

10

【0175】

上記の界面活性物質はまた、単独で、すなわち、油添加剤なしで製剤に使用されてもよい。

【0176】

さらに、油添加剤 / 界面活性剤混合物への有機溶媒の添加は、作用のさらなる強化に寄与することができる。好適な溶媒は、例えば、SOLVESSO (登録商標) および AROMATIC (登録商標) 溶媒 (Exxon Corporation) である。そのような溶媒の濃度は、総重量の 10 ~ 80 重量 % であることができる。溶媒との混和剤中に存在してもよいそのような油添加剤は、例えば、米国特許第 4 834 908 号に記載されている。その中に開示される市販の油添加剤は、MERGE (登録商標) (BASF) の名前で既知である。本発明に従って好ましいさらなる油添加剤は、SCORE (登録商標) および ADIGOR (登録商標) (両方とも Syngenta Crop Protection AG) である。

20

【0177】

上記に列挙される油添加剤に加えて、本発明に従った組成物の作用を強化するために、アルキルピロリドンの製剤 (例えば、ISP からの AGRIMAX (登録商標)) を噴霧混合物に添加することも可能である。合成ラテックスの製剤、例えば、ポリアクリルアミド、ポリビニル化合物、またはポリ - 1 - p - メンテン (例えば、BOND (登録商標)、COURIER (登録商標)、または EMERALD (登録商標)) 等も使用することができる。

30

【0178】

前段落に記載するそのようなアジュバント油は、活性化合物の物理的形態に応じて適切に、活性化合物が溶解、乳化、または分散される担体液体として採用されてもよい。

【0179】

殺虫製剤 (例えば、除草剤) は、概して、0.1 ~ 99 重量 %、特に、0.1 ~ 95 重量 % の式 I の化合物、および好ましくは、1 ~ 99.9 重量 % の製剤アジュバント (それは、好ましくは、0 ~ 25 重量 % の界面活性物質を含む) を含有する。市販の製品は、好ましくは濃縮物として製剤化されるが、エンドユーザは、通常、希釈製剤を採用する。

40

【0180】

式 I の化合物の施用の割合は、広い範囲内で変化することができ、土壤の性質、施用の方法 (出芽前または出芽後 ; 種子粉衣 ; まき溝への施用 ; 不耕起栽培への施用等)、作物、制御されるべき雑草または草、一般的な気候条件、および施用の方法によって支配される他の要因、施用の期間、および標的作物によって異なることができる。本発明に従った式 I の化合物は、概して、1 ~ 2000 g / ha、好ましくは、1 ~ 1000 g / ha、より好ましくは、1 ~ 500 g / ha、最も好ましくは、10 ~ 250 g / ha (特に、10、15、16、20、30、50、60、62.5、100、125、または 250

50

g / h a) の割合で施用される。

【 0 1 8 1 】

好ましい製剤は、特に、以下の代表的な組成物を有する。

(% = 重量 %) :

【 0 1 8 2 】

乳化性濃縮物 :

活性成分 : 1 ~ 9 5 %、好ましくは、6 0 ~ 9 0 %

界面活性剤 : 1 ~ 3 0 %、好ましくは、5 ~ 2 0 %

液体担体としての溶媒 : 1 ~ 8 0 %、好ましくは、1 ~ 3 5 %

細粉 :

活性成分 : 0 . 1 ~ 1 0 %、好ましくは、0 . 1 ~ 5 %

固体担体 : 9 9 . 9 ~ 9 0 %、好ましくは、9 9 . 9 ~ 9 9 %

懸濁液濃縮物 :

活性成分 : 5 ~ 7 5 %、好ましくは、1 0 ~ 5 0 %

水 : 9 4 ~ 2 4 %、好ましくは、8 8 ~ 3 0 %

界面活性剤 : 1 ~ 4 0 %、好ましくは、2 ~ 3 0 %

水和剤 :

活性成分 : 0 . 5 ~ 9 0 %、好ましくは、1 ~ 8 0 %

界面活性剤 : 0 . 5 ~ 2 0 %、好ましくは、1 ~ 1 5 %

固体担体 : 5 ~ 9 5 %、好ましくは、1 5 ~ 9 0 %

顆粒 :

活性成分 : 0 . 1 ~ 3 0 %、好ましくは、0 . 1 ~ 1 5 %

固体担体 : 9 9 . 5 ~ 7 0 %、好ましくは、9 7 ~ 8 5 %

水分散性顆粒 :

活性成分 : 1 ~ 9 0 %、好ましくは、1 0 ~ 8 0 %

界面活性剤 : 0 . 5 ~ 8 0 %、好ましくは、5 ~ 3 0 %

固体担体 : 9 0 ~ 1 0 %、好ましくは、7 0 ~ 3 0 %

【 0 1 8 3 】

以下の実施例は、本発明をさらに例示するが、本発明を制限しない。

【 0 1 8 4 】

F1. 乳化性濃縮物

	a)	b)	c)	d)
活性成分	5 %	10 %	25 %	50 %

ドデシルベンゼンスルホン酸

カルシウム	6 %	8 %	6 %	8 %
-------	-----	-----	-----	-----

ヒマシ油ポリグリコールエーテル

(36モルのエチレンオキシド)	4 %	-	4 %	4 %
-----------------	-----	---	-----	-----

オクチルフェノールポリグリコールエーテル

(7-8モルのエチレンオキシド)	-	4 %	-	2 %
------------------	---	-----	---	-----

NMP

	-	10 %		20 %
--	---	------	--	------

芳香族炭化水素

	85 %	68 %	65 %	16 %
--	------	------	------	------

混合物C₉-C₁₂

【 0 1 8 5 】

任意の所望の濃度の乳剤は、水による希釈によってそのような濃縮物から調製することができる。

【 0 1 8 6 】

F2. 溶液

	a)	b)	c)	d)
--	----	----	----	----

活性成分

	5 %	10 %	50 %	90 %
--	-----	------	------	------

1-メトキシ-3-(3-メトキシ-

プロポキシ)-プロパン	40 %	50 %	-	
-------------	------	------	---	--

ポリエチレングリコールMW 400

	20 %	10 %	-	
--	------	------	---	--

10

20

30

40

50

NMP	-		50 %	10 %
芳香族炭化水素	35 %	30 %	-	-

混合物C₉-C₁₂
【0187】

溶液は、希釈されない状態で、または水による希釈後、施用に好適である。

【0188】

F3. 水和剤	a)	b)	c)	d)	
活性成分	5 %	25 %	50 %	80 %	
リグノスルホン酸ナトリウム	4 %	-	3 %	-	
ラウリル硫酸ナトリウム	2 %	3 %	-	4 %	10
ジイソブチルナフタレンスルホン酸					
ナトリウム	-	6 %	5 %	6 %	
オクチルフェノールポリグリコールエーテル	-	1 %	2 %	-	
7-8モルのエチレンオキシド)					
高度分散ケイ酸	1 %	3 %	5 %	10 %	
カオリン	88 %	62 %	35 %	-	

【0189】

活性成分をアジュバントと十分に混合し、混合物を好適なミルで十分に粉碎し、水和剤を得、それを水で希釈し、任意の所望の濃度の懸濁液を得る。

【0190】

F4. 被覆顆粒	a)	b)	c)	
活性成分	0.1 %	5 %	15 %	
高度分散シリカ	0.9 %	2 %	2 %	
無機担体	99.0 %	93 %	83 %	
(直径0.1~1mm)				
例えば、CaCO ₃ またはSiO ₂				

【0191】

活性成分を塩化メチレンに溶解し、溶液を担体に噴霧し、続いて、溶媒を真空中で蒸発させる。

【0192】

F5. 被覆顆粒	a)	b)	c)	
活性成分	0.1 %	5 %	15 %	
ポリエチレングリコールMW 200	1.0 %	2 %	3 %	
高度分散シリカ	0.9 %	1 %	2 %	
無機担体	98.0 %	92 %	80 %	
(直径0.1~1 mm)				
例えば、CaCO ₃ またはSiO ₂				

【0193】

細かく粉碎された活性成分を、ミキサー内で、ポリエチレングリコールで湿潤させた担体に均一に塗布した。非粉末状被覆顆粒は、この方法で得られる。

【0194】

F6. 押出顆粒	a)	b)	c)	d)
活性成分	0.1 %	3 %	5 %	15 %
リグノスルホン酸ナトリウム	1.5 %	2 %	3 %	4 %
カルボキシメチルセルロース	1.4 %	2 %	2 %	2 %
カオリン	97.0 %	93 %	90 %	79 %

【0195】

活性成分をアジュバントと混合し、粉碎し、混合物を水で湿潤させる。得られた混合物を押し出し、次いで、空気流で乾燥させる。

【0196】

20

30

40

50

F7. 水分散性顆粒	a)	b)	c)	d)
活性成分	5 %	10 %	40 %	90 %
リグノスルホン酸ナトリウム	20 %	20 %	15 %	7 %
ジブチルナフタレンスルホン酸	5 %	5 %	4 %	2 %
アラビアゴム	2 %	1 %	1 %	1 %
珪藻土	20 %	30 %	5 %	
硫酸ナトリウム	4 %	5 %		
カオリン	48 %	30 %	30 %	

【0197】

活性成分をアジュバントと混合し、粉碎し、混合物を水で湿潤させる。得られた混合物を押し出し、次いで、空気流で乾燥させる。 10

【0198】

F7 細粉	a)	b)	c)
活性成分	0.1 %	1 %	5 %
タルカム	39.9 %	49 %	35 %
カオリン	60.0 %	50 %	60 %

【0199】

すぐに使用できる細粉は、有効成分を担体と混合し、混合物を好適なミル内で粉碎することによって得られる。 20

【0200】

F8. 懸濁液濃縮物	a)	b)	c)	d)
活性成分 _{<0}	3 %	10 %	25 %	50 %
プロピレングリコール	5 %	5 %	5 %	5 %
ノニルフェノールポリグリコールエーテル (15モルのエチレンオキシド)	-	1 %	2 %	-
リグノスルホン酸ナトリウム	3 %	3 %	7 %	6 %
ヘテロ多糖(キサンタン)	0.2 %	0.2 %	0.2 %	0.2 %
1,2-ベンズイソチアゾリン-3-オン	0.1 %	0.1 %	0.1 %	0.1 %
シリコーン油乳剤	0.7 %	0.7 %	0.7 %	0.7 %
水	87 %	79 %	62 %	38 %

【0201】

細かく粉碎された活性成分をアジュバントと密接に混合し、懸濁液濃縮物を得、そこから、任意の所望の濃度の懸濁液を、水による希釈によって調製することができる。 30

【0202】

好ましくは、上述の実施例に使用するとき、「活性成分」という用語は、下記に示す表1～21から選択される化合物のうちの1つを指す。また、他の除草剤または薬害軽減剤との式Iの化合物の混合物、特に、かかる表1～21から選択される化合物を指すことができ、その混合物は、下記に具体的に開示されている。

【0203】

本発明はまた、本明細書に説明する除草有効量の式Iの化合物、またはかかる化合物を含む組成物を、植物またはその部位に施用することを含む、有用な植物の作物において草および雑草を制御する方法も提供する。 40

【0204】

本発明に従った草および雑草を制御するための組成物および/または方法を使用することができる、有用な植物の作物は、典型的には、穀物（具体的には、小麦、大麦、ライ麦、またはライ小麦、好ましくは、小麦または大麦）、米、トウモロコシ（すなわち、トウモロコシ）、菜種、甜菜、サトウキビ、大豆、綿、ヒマワリ、ピーナッツ、またはプランテーション作物である。あるいは、有用な植物の作物は、オート麦（例えば、アヴィーナ・サディヴァ、一般的なオート麦）であることができる。有用な植物の作物は、好ましくは、穀物（例えば、小麦、大麦、ライ麦、またはライ小麦）、トウモロコシ、または大豆

、より好ましくは、小麦、大麦、トウモロコシ、または大豆、最も好ましくは、小麦または大麦である。

【0205】

「作物」という用語は、従来の育種または遺伝子工学的方法の結果として、除草剤または除草剤クラス（例えば、ALS、GS、EPSPS、PPO、およびHPPD阻害剤）に対する耐性が与えられた作物も含むものであると理解されるべきである。従来の育種法によって、例えばイミダゾリノン、例えば、イマザモックスに対する耐性が与えられた作物の例は、Clearfield（登録商標）夏菜種（Canola）である。遺伝子工学的方法によって除草剤に対する耐性が与えられた作物の例としては、例えば、Roundup Ready（登録商標）およびLiberty Link（登録商標）という商品名で市販されている、グリホセート耐性およびグルホシネット耐性のトウモロコシ品種が挙げられる。10

【0206】

制限される雑草は、单子葉植物および／または双子葉植物の雑草、例えば、ハコベ属、オランダガラシ属、コヌカグサ属、メヒシバ属（例えば、オニヒメシバ（DIGSA））、カラスムギ属（例えば、一般的野生オート麦としても公知の、エンバク（一般的オート麦）、好ましくは、カラスムギ（AVEFA）以外のカラスムギ族）、エノコログサ属（例えば、アキノエノコログサ（SETFA））、シロガラシ属、ドクムギ属（例えば、ペレニアルライグラス（LOLPE））、ナス属、ヒ工属（例えば、イヌビエ（ECHCG））、ホタルイ属、ミズアオイ属、オモダカ属、スズメノチャヒキ属、スズメノテッポウ属（例えば、ノスズメノテッポウ（ALOMY））、モロコシ属、ツノアイアシ属、カヤツリグサ属、イチビ属、キンゴジカ属、オナモミ属、ヒユ属、アカザ属、サツマイモ属、キク属、ヤエムグラ属、スミレ属、および／またはクワガタソウ属であってもよい。あるいは、制御される雑草は、クサヨシ属、カラスムギ属、アゼガヤ属、フウロソウ属、ベタ属、アブラナ属、コキア属、イチゴツナギ属、シナピス属、タデ属、ビロードキビ属、ナルコビ工属、センダングサ属、トウダイグサ属、および／またはキビ属であってもよい。20

【0207】

单子葉の雑草（例えば、雑草草）、具体的には、コヌカグサ属、の制御が好ましい。カラスムギ属（例えば、一般的野生オート麦としても公知の、エンバク（一般的オート麦）、好ましくは、カラスムギ（AVEFA）以外のカラスムギ族）、エノコログサ属（例えば、アキノエノコログサ（SETFA））、ドクムギ属（例えば、ペレニアルライグラス（LOLPE））、ヒ工属（例えば、イヌビエ（ECHCG））、スズメノチャヒキ属、スズメノテッポウ属（例えば、ノスズメノテッポウ（ALOMY））、および／またはモロコシ属である。あるいは、制御される单子葉の雑草は、具体的には、クサヨシ属、カラスムギ属、キビ属、メヒシバ属、ビロードキビ属、イチゴツナギ属、ナルコビ工属、ツノアイアシ属、および／またはアゼガヤ属であり、および／または自生（非作物）穀物および／または自生（非作物）トウモロコシができる。式Iの化合物によって制御される单子葉雑草は、式Iの化合物ではない、1つ以上の除草剤に感受性であるか、または部分的あるいは完全に耐性であることができ、それらは、除草使用のためにすでに認可されており、市販されている（および／または、それらは、除草剤として農業においてすでに使用されている）。30

【0208】

作物はまた、遺伝子工学的方法によって、害虫に対して耐性が与えられたもの、例えば、Btトウモロコシ（欧洲アワノメイガに対して耐性がある）、Bt綿（綿花ゾウムシに対して耐性がある）、そしてまたBtジャガイモ（コロラドハムシに対して耐性がある）であると理解されるべきである。Btトウモロコシの例は、NK（登録商標）（Syngenta Seeds）のBt-176トウモロコシハイブリッドである。Bt毒素は、バチルス・チューリングンシス土壤細菌によって天然に形成されるタンパク質である。毒素およびそのような毒素を合成できるトランスジェニック植物の例は、欧洲特許第EP-A-451878号、欧洲特許第EP-A-374753号、国際公開第WO93/40

07278号、国際公開第WO95/34656号、国際公開第WO03/052073号、および欧州特許第EP-A-427529号に記載される。殺虫剤耐性をコードする1つ以上の遺伝子を含有し、1つ以上の毒素を発現するトランスジェニック植物の例は、KnockOut(登録商標)(トウモロコシ)、ieldGuard(登録商標)(トウモロコシ)、NUCOTIN33B(登録商標)(綿)、Bollgard(登録商標)(綿)、NewLeaf(登録商標)(ジャガイモ)、NatureGuard(登録商標)、およびProtecta(登録商標)である。植物作物およびそれらの種子材料は、除草剤と同時に昆虫の摂食に対しても耐性を有し得る(「積み重ね」トランスジェニック事象)。例えば、種子は、殺虫活性Cry3タンパク質を発現する能力を有し、同時に、グリホセートに対する耐性を有することができる。「作物」という用語は、従来の育種または遺伝子工学的方法の結果として得られ、いわゆる出力形質(例えば、改善された風味、貯蔵安定性、栄養素含有量)を含むものであると理解されるべきである。

【0209】

耕作地は、作物が既に成長している土地、ならびにそれらの作物の栽培を目的とする土地を含むものと理解されるべきである。

【0210】

本発明に従った式Iの化合物はまた、さらなる除草剤と組み合わせて使用することができる。好ましくは、これらの混合物において、式Iの化合物は、以下の表1～21、および/または表A1、B1、および/またはC1に列挙される化合物のうちの1つである。式Iの化合物の以下の混合物は、特に、重要であってもよい。

【0211】

式Iの化合物+アセトクロール、式Iの化合物+アシフルオルフェン、式Iの化合物+アシフルオルフェンナトリウム、式Iの化合物+アクロニフェン、式Iの化合物+アクロレイン、式Iの化合物+アラクロール、式Iの化合物+アロキシジム、式Iの化合物+アリルアルコール、式Iの化合物+アメトリン、式Iの化合物+アミカルバゾン、式Iの化合物+アミドスルフロン、式Iの化合物+アミノピラリド、式Iの化合物+アミトロール、式Iの化合物+スルファミン酸アンモニウム、式Iの化合物+アニロホス、式Iの化合物+アスマム、式Iの化合物+アトラトン、式Iの化合物+アトラジン、式Iの化合物+アジムスルフロン、式Iの化合物+B C P C、式Iの化合物+ベフルブタミド、式Iの化合物+ベナゾリン、式Iの化合物+ベンフルラリン、式Iの化合物+ベンフレセート、式Iの化合物+ベンスルフロン、式Iの化合物+ベンスルフロンメチル、式Iの化合物+ベンスリド、式Iの化合物+ベンタゾン、式Iの化合物+ベンズフェンジゾン、式Iの化合物+ベンゾビシクロン、式Iの化合物+ベンゾフェナップ、式Iの化合物+ビフェノックス、式Iの化合物+ビアラホス、式Iの化合物+ビスピリバック、式Iの化合物+ビスピリバックナトリウム、式Iの化合物+ホウ砂、式Iの化合物+プロマシル、式Iの化合物+プロモブチド、式Iの化合物+プロモキシニル、式Iの化合物+ブタクロール、式Iの化合物+ブタフェナシル、式Iの化合物+ブタミホス、式Iの化合物+ブトラリン、式Iの化合物+ブロキジジム、式Iの化合物+酪酸塩、式Iの化合物+カコジル酸、式Iの化合物+塩素酸カルシウム、式Iの化合物+カフェンストロール、式Iの化合物+カルベタミド、式Iの化合物+カルフェントラゾン、式Iの化合物+カルフェントラゾンエチル、式Iの化合物+C D E A、式Iの化合物+C E P C、式Iの化合物+クロルフルレノール、式Iの化合物+クロルフルレノールメチル、式Iの化合物+クロリダゾン、式Iの化合物+クロリムロン、式Iの化合物+クロリムロンエチル、式Iの化合物+クロロ酢酸、式Iの化合物+クロロトルロン、式Iの化合物+クロルプロファム、式Iの化合物+クロルスルフロン、式Iの化合物+クロルタール、式Iの化合物+クロルタールジメチル、式Iの化合物+シニドンエチル、式Iの化合物+シンメチリン、式Iの化合物+シノスルフロン、式Iの化合物+シサニリド、式Iの化合物+クレトジム、式Iの化合物+クロジナホップ、式Iの化合物+クロジナホッププロバルギル、式Iの化合物+クロマゾン、式Iの化合物+クロメプロップ、式Iの化合物+クロピラリド、式Iの化合物+クロランスラム、式Iの化合物+クロランスラムメチル、式Iの化合物+C M A、式Iの化合物+4-

10

20

30

40

50

C P B、式 I の化合物 + C P M F、式 I の化合物 + 4 - C P P、式 I の化合物 + C P P C、式 I の化合物 + クレゾール、式 I の化合物 + クミルロン、式 I の化合物 + シアナミド、式 I の化合物 + シアナジン、

【0212】

式 I の化合物 + シクロエート、式 I の化合物 + シクロスルファムロン、式 I の化合物 + シクロキシジム、式 I の化合物 + シハロホップ、式 I の化合物 + シハロホップブチル、式 I の化合物 + 2 , 4 - D、式 I の化合物 + 3 , 4 - D A、式 I の化合物 + ダイムロン、式 I の化合物 + ダラポン、式 I の化合物 + ダゾメット、式 I の化合物 + 2 , 4 - D B、式 I の化合物 + 3 , 4 - D B、式 I の化合物 + 2 , 4 - D E B、式 I の化合物 + デスマディファム、式 I の化合物 + ジカンバ、式 I の化合物 + ジクロベニル、式 I の化合物 + オルト - ジクロロベンゼン、式 I の化合物 + パラ - ジクロロベンゼン、式 I の化合物 + ジクロルプロップ、式 I の化合物 + ジクロルプロップ - P、式 I の化合物 + ジクロホップ、式 I の化合物 + ジクロホップメチル、式 I の化合物 + ジクロスラム、式 I の化合物 + ジフェンゾコート、式 I の化合物 + ジフェンゾコートメチルサルフェート、式 I の化合物 + ジフルフェニカン、式 I の化合物 + ジフルフェンゾピル、式 I の化合物 + ジメフロン、式 I の化合物 + ジメピペレート、式 I の化合物 + ジメタクロル、式 I の化合物 + ジメタメトリン、式 I の化合物 + ジメテナミド、式 I の化合物 + ジメテナミド - P、式 I の化合物 + ジメチピン、式 I の化合物 + ジメチルアルシン酸、式 I の化合物 + ジニトラミン、式 I の化合物 + ジノテルブ、式 I の化合物 + ジフェナミド、式 I の化合物 + ジクワット、式 I の化合物 + ニ臭化ジクワット、式 I の化合物 + ジチオピル、式 I の化合物 + ジウロン、式 I の化合物 + D N O C、式 I の化合物 + 3 , 4 - D P、式 I の化合物 + D S M A、式 I の化合物 + E B E P、式 I の化合物 + エンドタール、式 I の化合物 + E P T C、式 I の化合物 + エスプロカルブ、式 I の化合物 + エタルフルラリン、式 I の化合物 + エタメツルフロン、式 I の化合物 + エタメツルフロンメチル、式 I の化合物 + エトフメサート、式 I の化合物 + エトキシフェン、式 I の化合物 + エトキシスルフロン、式 I の化合物 + エトベンザニド、式 I の化合物 + フェノキサプロップ - P、式 I の化合物 + フェノキサプロップ - P - エチル、式 I の化合物 + フェントラザミド、式 I の化合物 + 硫酸第一鉄、式 I の化合物 + フラムプロップ - M、式 I の化合物 + フラザスルフロン、式 I の化合物 + フロラスラム、式 I の化合物 + フルアジホップ、式 I の化合物 + フルアジホップブチル、式 I の化合物 + フルアジホップ - P、式 I の化合物 + フルアジホップ - P - ブチル、式 I の化合物 + フルカルバゾン、式 I の化合物 + フルカルバゾンナトリウム、式 I の化合物 + フルセトスルフロン、式 I の化合物 + フルクロラリン、式 I の化合物 + フルフェナセット、式 I の化合物 + フルフェンピル、式 I の化合物 + フルフェンピルエチル、式 I の化合物 + フルメトラム、式 I の化合物 + フルミクロラック、式 I の化合物 + フルミクロラックペンチル、式 I の化合物 + フルミオキサジン、式 I の化合物 + フルオメツロン、式 I の化合物 + フルオログリコフェン、式 I の化合物 + フルオログリコフェンエチル、式 I の化合物 + フルプロバネート、式 I の化合物 + フルビルスルフロン、式 I の化合物 + フルビルスルフロンメチルナトリウム、式 I の化合物 + フルレノール、

【0213】

式 I の化合物 + フルリドン、式 I の化合物 + フルロクロリドン、式 I の化合物 + フルロキシピル、式 I の化合物 + フルルタモン、式 I の化合物 + フルチアセット、式 I の化合物 + フルチアセットメチル、式 I の化合物 + フォメサフェン、式 I の化合物 + ホラムスルフロン、式 I の化合物 + フォサミン、式 I の化合物 + グルホシネート、式 I の化合物 + グルホシネートアンモニウム、式 I の化合物 + グリホサート、式 I の化合物 + ハロスルフロン、式 I の化合物 + ハロスルフロンメチル、式 I の化合物 + ハロキシホップ、式 I の化合物 + ハロキシホップ - P、式 I の化合物 + H C - 2 5 2、式 I の化合物 + ヘキサジノン、式 I の化合物 + イマザメタベンズ、式 I の化合物 + イマザメタベンズメチル、式 I の化合物 + イマザモックス、式 I の化合物 + イマザピック、式 I の化合物 + イマザピル、式 I の化合物 + イマザキン、式 I の化合物 + イマゼタピル、式 I の化合物 + イマゾスルフロン、式 I の化合物 + インダノファン、式 I の化合物 + ヨードメタン、式 I の化合物 + ヨードスル

10

20

30

40

50

フロン、式 I の化合物 + ヨードスルフロンメチルナトリウム、式 I の化合物 + イオキシニル、式 I の化合物 + イソプロツロン、式 I の化合物 + イソウロン、式 I の化合物 + イソキサベン、式 I の化合物 + イソキサクロルトール、式 I の化合物 + イソキサフルトール、式 I の化合物 + カルブチレート、式 I の化合物 + ラクトフェン、式 I の化合物 + レナシル、式 I の化合物 + リニュロン、式 I の化合物 + MAA、式 I の化合物 + MAMA、式 I の化合物 + MCPA、式 I の化合物 + MCPAチオエチル、式 I の化合物 + MCPB、式 I の化合物 + メコプロップ、式 I の化合物 + メコプロップ - P、式 I の化合物 + メフェナセット、式 I の化合物 + メフルイジド、式 I の化合物 + メソスルフロン、式 I の化合物 + メソスルフロンメチル、式 I の化合物 + メソトリオン、式 I の化合物 + メタム、式 I の化合物 + メタミホップ、式 I の化合物 + メタミトロン、式 I の化合物 + メタザクロル、式 I の化合物 + メタベンズチアズロン、式 I の化合物 + メチルアルソン酸、式 I の化合物 + メチルダイムロン、式 I の化合物 + メチルイソチオシアネート、式 I の化合物 + メトベンズロン、式 I の化合物 + メトラクロル、式 I の化合物 + S - メトラクロル、式 I の化合物 + メトラム、式 I の化合物 + メトキスロン、式 I の化合物 + メトリブジン、式 I の化合物 + メトスルフロン、式 I の化合物 + メトスルフロンメチル、式 I の化合物 + MK - 616、式 I の化合物 + モリネート、式 I の化合物 + モノリニュロン、式 I の化合物 + MSMA、式 I の化合物 + ナプロアニリド、式 I の化合物 + ナプロパミド、式 I の化合物 + ナプタラム、式 I の化合物 + ネブロン、式 I の化合物 + ニコスルフロン、式 I の化合物 + ノナン酸、式 I の化合物 + ノルフルラゾン、式 I の化合物 + オレイン酸(脂肪酸)、式 I の化合物 + オルベンカーブ、式 I の化合物 + オルトスルファムロン、式 I の化合物 + オリザリン、式 I の化合物 + オキサジアルギル、式 I の化合物 + オキサジアゾン、

【0214】

式 I の化合物 + オキサスルフロン、式 I の化合物 + オキサジクロメホン、式 I の化合物 + オキシフルオルフェン、式 I の化合物 + パラコート、式 I の化合物 + パラコートジクロリド、式 I の化合物 + ペブレート、式 I の化合物 + ペンディメタリン、式 I の化合物 + ペノキスラム、式 I の化合物 + ペンタクロロフェノール、式 I の化合物 + ペンタノクロル、式 I の化合物 + ペントキサゾン、式 I の化合物 + ペントキサミド、式 I の化合物 + 石油、式 I の化合物 + フエンメディファム、式 I の化合物 + フエンメディファムエチル、式 I の化合物 + ピクロラム、式 I の化合物 + ピコリナフェン、式 I の化合物 + ピノキサデン、式 I の化合物 + ピペロホス、式 I の化合物 + 亜ヒ酸カリウム、式 I の化合物 + アジ化カリウム、式 I の化合物 + プレチラクロル、式 I の化合物 + プリミスルフロン、式 I の化合物 + プリミスルフロンメチル、式 I の化合物 + プロジアミン、式 I の化合物 + プロフルアゾール、式 I の化合物 + プロホキシジム、式 I の化合物 + プロメトン、式 I の化合物 + プロメトリノ、式 I の化合物 + プロパクロル、式 I の化合物 + プロパニル、式 I の化合物 + プロパキザホップ、式 I の化合物 + プロパジン、式 I の化合物 + プロファム、式 I の化合物 + プロピソクロル、式 I の化合物 + プロポキシカルバゾン、式 I の化合物 + プロポキシカルバゾンナトリウム、式 I の化合物 + プロビザミド、式 I の化合物 + プロスルホカルブ、式 I の化合物 + プロスルフロン、式 I の化合物 + ピラクロニル、式 I の化合物 + ピラフルフェン、式 I の化合物 + ピラフルフェンエチル、式 I の化合物 + ピラゾリネット、式 I の化合物 + ピラゾスルフロン、式 I の化合物 + ピラゾスルフロンエチル、式 I の化合物 + ピラゾキシフェン、式 I の化合物 + ピリベンゾキシム、式 I の化合物 + ピリブチカルブ、式 I の化合物 + ピリダホル、式 I の化合物 + ピリデート、式 I の化合物 + ピリフタリド、式 I の化合物 + ピリミノバク、式 I の化合物 + ピリミノバクメチル、式 I の化合物 + ピリミスルファン、式 I の化合物 + ピリチオバク、式 I の化合物 + ピリチオバクナトリウム、式 I の化合物 + キンクロラク、式 I の化合物 + キンメラク、式 I の化合物 + キノクラミン、式 I の化合物 + キザロホップ、式 I の化合物 + キザロホップ - P、式 I の化合物 + リムスルフロン、式 I の化合物 + セトキシジム、式 I の化合物 + シデュロン、式 I の化合物 + シマジン、式 I の化合物 + シメトリン、式 I の化合物 + SMA、式 I の化合物 + 亜ヒ酸ナトリウム、式 I の化合物 + アジ化ナトリウム、式 I の化合物 + 塩素酸ナトリウム、式 I の化合物 + スルコトリオン、式 I の化合物 + スルフェントラゾン、式 I の化合物 + スルホメツ

10

20

30

40

50

ロン、式Iの化合物+スルホメツロンメチル、式Iの化合物+スルホサート、式Iの化合物+スルホスルフロン、式Iの化合物+硫酸、式Iの化合物+タール油、式Iの化合物+2,3,6-TBA、式Iの化合物+TCA、式Iの化合物+TCAナトリウム、式Iの化合物+テブチウロン、式Iの化合物+テプラロキシジム、式Iの化合物+ターバシル、
【0215】

式Iの化合物+テルブメトン、式Iの化合物+テルブチラジン、式Iの化合物+テルブトリン、式Iの化合物+テニルクロル、式Iの化合物+チアゾピル、式Iの化合物+チフェンスルフロン、式Iの化合物+チフェンスルフロンメチル、式Iの化合物+チオベンカルブ、式Iの化合物+チオカルバジル、式Iの化合物+トプラメゾン、式Iの化合物+トラルコキシジム、式Iの化合物+トリアレート、式Iの化合物+トリアスルフロン、式Iの化合物+トリアジフラム、式Iの化合物+トリベヌロン、式Iの化合物+トリベヌロンメチル、式Iの化合物+トリカンバ、式Iの化合物+トリクロピル、式Iの化合物+トリエタジン、式Iの化合物+トリフロキシスルフロン、式Iの化合物+トリフロキシスルフロンナトリウム、式Iの化合物+トリフルラリン、式Iの化合物+トリフルスルフロン、式Iの化合物+トリフルスルフロンメチル、式Iの化合物+トリヒドロキシトリアジン、式Iの化合物+トリトスルフロン、式Iの化合物+[3-[2-クロロ-4-フルオロ-5-(1-メチル-6-トリフルオロメチル-2,4-ジオキソ-1,2,3,4-テトラヒドロピリミジン-3-イル)フェノキシ]-2-ピリジルオキシ]酢酸エチルエステル(CAS RN 353292-31-6)、式Iの化合物+4-[(4,5-ジヒドロ-3-メトキシ-4-メチル-5-オキソ)-1H-1,2,4-トリアゾール-1-イルカルボニルスルファモイル]-5-メチルチオフェン-3-カルボン酸(BAY636)、式Iの化合物+BAY747(CAS RN 335104-84-2)、式Iの化合物+トプラメゾン(CAS RN 210631-68-8)、式Iの化合物+4-ヒドロキシ-3-[[2-[(2-メトキシエトキシ)メチル]-6-(トリフルオロメチル)-3-ピリジニル]カルボニル]-ビシクロ[3.2.1]オクト-3-エン-2-オン(CAS RN 352010-68-5)、および式Iの化合物+4-ヒドロキシ-3-[[2-(3-メトキシプロピル)-6-(ジフルオロメチル)-3-ピリジニル]カルボニル]-ビシクロ[3.2.1]オクト-3-エン-2-オン。
【0216】

式Iの化合物の以下の代替的混合物は、重要であってもよい(好ましくは、これらの混合物において、式Iの化合物は、以下の表1~21、および/または表A1、B1、および/またはC1に列挙するこれらの化合物のうちの1つである):
30

式Iの化合物+国際公開第WO2010/059676号に開示する除草化合物のうちの1つ(Dow、例えば、穀物作物と使用するための、例えば、クロキントセットメキシルを足すことができる)、

式Iの化合物++国際公開第WO2010/059680号に開示する除草化合物(Dow、例えば、穀物作物と使用するための、例えば、クロキントセットメキシル以外の薬害軽減剤をプラスすることができる)、および

式Iの化合物+国際公開第WO2010/059671号に開示する除草化合物のうちの1つ(Dow、例えば、米作物と使用するための、例えば、薬害軽減剤を足すことができる)。
40

【0217】

式Iの化合物のための混合パートナーはまた、例えば、The Pesticide Manual, 12th Edition (BCPC) 2000で言及されるようなエステルまたは塩の形態で存在してもよい。

【0218】

本発明に従った式Iの化合物はまた、薬害軽減剤と組み合わせて使用することができる。好ましくは、これらの混合物において、式Iの化合物は、以下の表1~21に列挙される化合物のうちの1つである。薬害軽減剤を有する以下の混合物が特に考慮される。

【0219】

10

20

30

40

50

式Iの化合物 + クロキントセットメキシル、式Iの化合物 + クロキントセット酸およびその塩、式Iの化合物 + フェンクロラゾールエチル、式Iの化合物 + フェンクロラゾール酸およびその塩、式Iの化合物 + メフェンピルジエチル、式Iの化合物 + メフェンピルニ酸、式Iの化合物 + イソキサジフェンエチル、式Iの化合物 + イソキサジフェン酸、式Iの化合物 + フリラゾール、式Iの化合物 + フリラゾールR異性体、式(I)の化合物 + N - (2 - メトキシベンゾイル) - 4 - [(メチルアミノカルボニル) アミノ] ベンゼンスルホンアミド、式Iの化合物 + ベノキサコール、式Iの化合物 + ジクロルミド、式Iの化合物 + AD - 67、式Iの化合物 + オキサベトリニル、式Iの化合物 + シオメトリニル、式Iの化合物 + シオメトリニルZ異性体、式Iの化合物 + フェンクロリム、式Iの化合物 + シプロスルファミドアミド、式Iの化合物 + ナフタル酸無水物、式Iの化合物 + フルラゾール、式Iの化合物 + CL 304, 415、式Iの化合物 + ジシクロノン、式Iの化合物 + フルキソフェニム、式Iの化合物 + DKA - 24、式Iの化合物 + R - 29148、および式Iの化合物 + PPG - 1292。安全化効果はまた、式Iの化合物 + ダイムロン、式Iの化合物 + MCPA、式Iの化合物 + メコプロップ、および式Iの化合物 + メコプロップ - Pの混合物に対して認めることができる。

10

【0220】

上記の薬害軽減剤および除草剤は、例えば、Pesticide Manual, Twelfth Edition, British Crop Protection Council, 2000に記載される。R - 29148は、例えば、P. B. Goldsborough et al., Plant Physiology, (2002), Vol. 130 pp. 1497 - 1505およびその中の参考文献によって記載され、PPG - 1292は、国際公開第WO 09211761号から既知であり、N - (2 - メトキシベンゾイル) - 4 - [(メチルアミノカルボニル) アミノ] ベンゼンスルホンアミドは、欧州特許第365484号から既知である。

20

【0221】

ベノキサコール、クロキントセットメキシル、シプロスルファミドアミド、メフェンピルジエチルおよびN - (2 - メトキシベンゾイル) - 4 - [(メチルアミノカルボニル) アミノ] ベンゼンスルホンアミドは、特に好ましい薬害軽減剤である。

【0222】

クロキントセットメキシルは、最も好ましい薬害軽減剤である。クロキントセットメキシルは、本発明に従った式Iの化合物と組み合わせた(それとの混合物)使用において特に価値がある。

30

【0223】

したがって、本発明はまた、本明細書に説明する除草有効量の式Iの化合物、随意に(または好ましくは)、式Iの化合物のための混合パートナーとしてのさらなる除草剤、または随意に(または好ましくは)、薬害軽減剤、またはその両方を含む、除草組成物を提供する。

【0224】

本発明はまた、本明細書に説明する除草有効量の式Iの化合物、薬害軽減剤、および随意に(または好ましくは)、式Iの化合物のための混合パートナーとしてのさらなる除草剤を含む、除草組成物を提供し、ここで薬害軽減剤は、ベノキサコール、クロキントセットメキシル、シプロスルファミド、メフェンピル - ジエチル、またはN - (2 - メトキシベンゾイル) - 4 - [(メチルアミノカルボニル) アミノ] ベンゼンスルホンアミドである。

40

【0225】

除草剤(例えば、式Iの化合物)に対する薬害軽減剤の施用の割合は、施用の様式によって大きく左右される。地上処理の場合、

a) 概して、0.001 ~ 5.0 kg の薬害軽減剤 / ha、好ましくは、0.001 ~ 0.5 kg の薬害軽減剤 / ha、より好ましくは、2 ~ 100 g の薬害軽減剤 / ha(具体的には、2.5、5、7.5、10、20、または50 g の薬害軽減剤 / ha)、および

50

b) 概して、0.001~2 kg の除草剤 / ha、しかし好ましくは、0.005~1 kg の除草剤 / ha、より好ましくは、5~500 g の除草剤 / ha、最も好ましくは 10~250 g の除草剤 / ha (具体的には、10、15、16、20、30、50、60、62.5、100、125、または 250 g の除草剤 / ha)

が施用される。

【0226】

薬害軽減剤および除草剤 (例えば、式 I の化合物) は、例えば、(混合製剤で組み合わせるとき) g / ha の除草剤および薬害軽減剤の施用、具体的には、薬害軽減剤がクロキントセットメキシルである除草剤および薬害軽減剤の施用の割合に基づき測定された、16:1~1:1 (8:1、4:1、または 2:1 等) の除草剤 : 薬害軽減剤の割合で使用することができる。10

【0227】

本発明に従った除草組成物は、例えば、出芽前施用、出芽後施用、および種子粉衣等、農業において慣習的な施用方法の全てに好適である。使用目的に応じて、薬害軽減剤は、作物の種子材料を前処理する (種子または苗を粉衣する) ために使用することができるか、または播種の前または後に土壤に導入され、続いて、随意に共除草剤と組み合わせて (安全化されていない) 式 (I) の化合物を施用することができる。しかしながら、それはまた、植物の出芽前または後に、単独で、または除草剤と一緒に施用することもできる。したがって、薬害軽減剤による植物または種子材料の処理は、原則として、除草剤の施用時間とは無関係に行うことができる。除草剤および薬害軽減剤 (例えば、タンク混合物の形態で) の同時施用による植物の処理が概して好ましい。除草剤に対する薬害軽減剤の施用の割合は、施用の様式によって大きく左右される。地上処理の場合、概して、0.001~5.0 kg の薬害軽減剤 / ha、好ましくは、0.001~0.5 kg の薬害軽減剤 / ha が施用される。種子粉衣の場合、概して、0.001~10 g の薬害軽減剤 / 種子 1 kg、好ましくは、0.05~2 g の薬害軽減剤 / 種子 1 kg が施用される。薬害軽減剤が、播種の直前に浸種によって液体の形態で施用される場合、1~10000 ppm、好ましくは、100~1000 ppm の濃度の活性成分を含有する、薬害軽減剤溶液を使用するのが有利である。20

【0228】

上記の薬害軽減剤のうちの 1 つと一緒に、式 I の化合物の混合パートナーを施用することが好ましい。30

【0229】

以下の実施例は、本発明をさらに例示するが、本発明を制限しない。

【実施例】

【0230】

調製実施例 :

当業者は、以下に記載するある特定の化合物が、-ケトエノールであり、したがって、例えば、J. March, Advanced Organic Chemistry, third edition, John Wiley および Sons によって記載されるように、単一の互変異性体として、またはケト-エノールおよびジケトン互変異性体の混合物として存在してよいことを理解するであろう。表 T 1 に示す化合物は、任意の単一のエノール互変異性体として描かれるが、この記述は、ジケトン形態、および互変異性によって生じ得る任意の考えられるエノールの両方を含むと推測されるべきである。さらに、表 A 1 および表 B 1 に示す化合物のうちのいくつかは、簡単にするために、単一の鏡像異性体として描かれているが、単一の鏡像異性体と特に指定しない限り、これらの構造は、鏡像異性体の混合物を表すものとして解釈されるべきである。40

【0231】

詳細な実験の項の中では、たとえ主要な互変異性体がエノール形態であっても、名称付けの目的で、ジケトン互変異性体が選択される。

【0232】

10

20

30

40

50

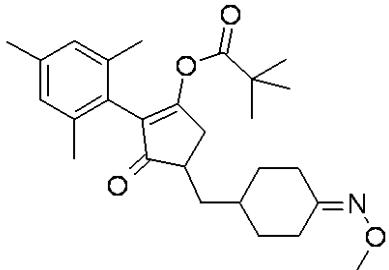
実施例1：

2,2-ジメチルプロピオン酸4-(4-メトキシイミノ-シクロヘキシルメチル)-3-オキシオ-2-(2,4,6-トリメチルフェニル)-シクロペント-1-エニルエス

テルの調製

【0233】

【化41】



10

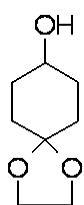
【0234】

ステップ1：

1,4-ジオキサ-スピロ[4.5]デカン-8-オルの調製

【0235】

【化42】



20

【0236】

250mlの丸底フラスコ中で、20gの1,4-ジオキサ-スピロ[4.5]デカン-8-オル(128mmol)を計量し、200mlのメタノール中で溶解して、淡黄色溶液を得る。溶液を、5まで冷却し、温度を20以下に維持しながら、水素化ホウ素ナトリウム(4g、106mmol)を、小分けして添加する。添加が終了すると、溶液を室温で3時間攪拌した。反応を、3分の1の容量まで蒸発させ、次いで、水で希釈し、慎重に0.5Mの水性塩酸で酸性にし、ジエチルエーテル(2×100ml)で抽出した。混合した有機抽出物を、硫酸マグネシウムで乾燥させ、濾過し、蒸発させ、1,4-ジオキサ-スピロ[4.5]デカン-8-オル(12.2g)を得る。

30

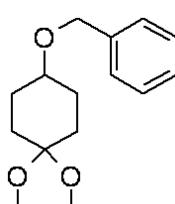
【0237】

ステップ2：

8-ベンジルオキシ-1,4-ジオキサ-スピロ[4.5]デカンの調製

【0238】

【化43】



40

【0239】

乾燥したテトラヒドロフラン(50ml)中の1,4-ジオキサ-スピロ[4.5]デカン-8-オル(11.0g、70mmol)を、乾燥したテトラヒドロフラン(50ml)中の鉱油(2.80g、70mmol)中に分散した60%の水酸化ナトリウムの攪拌した懸濁液に液滴に添加する。追加が完了すると、反応混合物を、2時間室温で攪拌す

50

る。乾燥したテトラヒドロフラン(50ml)中の臭化ベンジルの溶液(13.2g、77mmol)を、20分の期間にわたり液滴に添加し、室温で一晩攪拌する。反応混合物を、水(200ml)中に注入し、0.5Nの水性塩酸で中和し、塩化メチレン(2×100ml)で抽出する。混合した有機層を、硫酸マグネシウムで乾燥させ、濾過し、減圧下で蒸発させる。残渣をシリカゲル上に吸収させ、フラッシュクロマトグラフィー上で精製し、8-ベンジルオキシ-1,4-ジオキサ-スピロ[4.5]デカン(16g)を得る。

【0240】

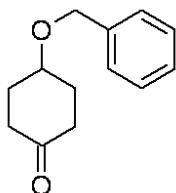
ステップ3:

4-ベンジルオキシ-シクロヘキササノンの調製

10

【0241】

【化44】



【0242】

8-ベンジルオキシ-1,4-ジオキサ-スピロ[4.5]デカン(15g、60mmol)を、THF(150ml)中で溶解し、1Mの水性塩酸(40ml)を添加し、反応混合物を加熱して一晩還流する。反応混合物を、酢酸エチル(1×200ml)で抽出する前に、冷却し、水(200ml)で希釈する。有機抽出物を、重炭酸ナトリウムの飽和溶液で洗浄し、次いで、硫酸マグネシウムで乾燥させ、濾過し、減圧下で蒸発させ、油を得る。油を、クーゲルロール中で真空下で蒸留し、4-ベンジルオキシ-シクロヘキサノン(10g)を得る。

20

【0243】

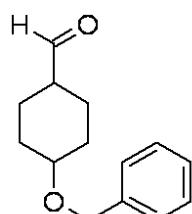
ステップ4:

4-ベンジルオキシ-シクロヘキサンカルバルデヒドの調製

30

【0244】

【化45】



【0245】

乾燥したTHF(80ml)中のメトキシメチルトリフェニル塩化ホスホニウムの攪拌した懸濁液(13.8g、40mmol)に、リチウムジイソプロピルアミヂオの溶液(24.4ml、44mmol、ヘキサン/THF/エチルベンゼン中の1.8M)を、0~5度、液滴に添加する。得られた反応混合物を、30分間攪拌し、次いで、-78度まで冷却する。この温度で、テトラヒドロフラン(30ml)中の4-ベンジルオキシ-シクロヘキサノン(6.1g、30mmol)の溶液を、30分間の期間にわたり添加する。添加が完了すると、反応混合物を、-78度で1時間攪拌し、次いで、室温まで温め、一晩攪拌する。次いで、反応混合物を、2Nの塩酸の水性溶液でpH=2まで希釈し、3時間、室温で攪拌する。反応物を、水で希釈し、酢酸エチル(2×100ml)で抽出する。混合した有機抽出物を、硫酸マグネシウムで乾燥させ、濾過し、減圧下で蒸発させる。残渣を、フラッシュクロマトグラフィーによって精製し、4-ベンジルオキシ-シクロヘキサンカルバルデヒド(5.7g)を得る。

40

50

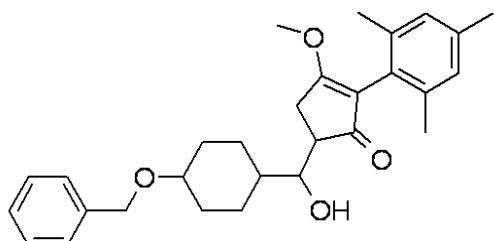
【0246】

ステップ5：

5 - [(4 - ベンジルオキシ - シクロヘキシル) - ヒドロキシ - メチル] - 3 - メトキシ - 2 - (2 , 4 , 6 - トリメチルフェニル) - シクロペント - 2 - エノンの調製

【0247】

【化46】



10

【0248】

250mlの丸底フラスコ中で、3 - メトキシ - 2 - (2 , 4 , 6 - トリメチルフェニル) - シクロペント - 2 - エノン (6 g 、 26mmol) を計量し、乾燥したテトラヒドロフラン (30ml) 中で溶解した。

【0249】

リチウムジイソプロピルアミヂオの溶液 (13.5ml 、 24.3mmol 、 ヘキサン / THF / エチルベンゼン中の 1.8M) を、 20 分間の期間にわたり、液滴に添加した後、溶液を -78 ℃まで冷却した。テトラヒドロフラン (30ml) 中に溶解した 4 - ベンジルオキシ - シクロヘキサンカルバルデヒド (4.74g 、 21.7mmol) を添加する前に、得られた溶液を、 30 分間、 -78 ℃で攪拌する。反応混合物を、 30 分間、攪拌し、室温まで温める。次いで、反応混合物を、塩化アンモニウムの飽和水性溶液中に注入し、酢酸エチル (2 × 200ml) で抽出する。混合された有機抽出物を、硫酸マグネシウムで乾燥させ、濾過し、減圧下で蒸発させ、橙色油を得る。残渣を、フラッシュクロマトグラフィーによって精製し、5 - [(4 - ベンジルオキシ - シクロヘキシル) - ヒドロキシ - メチル] - 3 - メトキシ - 2 - (2 , 4 , 6 - トリメチルフェニル) - シクロペント - 2 - エノン (6.7g) を得る。

20

【0250】

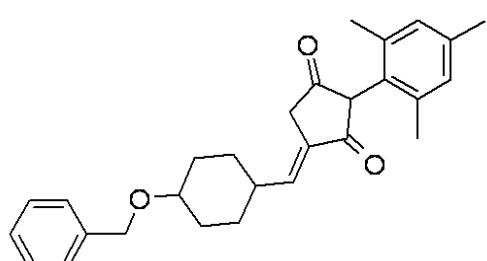
30

ステップ6：

4 - [1 - (4 - ベンジルオキシ - シクロヘキシル) - メス - (E) - イリデン] - 2 - (2 , 4 , 6 - トリメチルフェニル) - シクロペンタン - 1 , 3 - ジオンの調製

【0251】

【化47】



40

【0252】

6個の20mlのマイクロ波バイアル中に、アセトン (7.5ml) および 2N の水性塩酸 (7.5ml) の混合物中の 5 - [(4 - ベンジルオキシ - シクロヘキシル) - ヒドロキシ - メチル] - 3 - メトキシ - 2 - (2 , 4 , 6 - トリメチルフェニル) - シクロペント - 2 - エノン (1 g 、 2.2mmol) を添加する。したがって、それぞれのバイアルを、マイクロ波照射によって、 1 時間、 120 ℃まで加熱する。次いで、反応混合物を混合し、水 (100ml) で希釈し、ジクロロメタン (2 × 50ml) で抽出する。混合さ

50

れた有機抽出物を、硫酸マグネシウムで乾燥させ、濾過し、減圧下で蒸発させ、黄色ゴムを得る。ゴムを、フラッショクロマトグラフィーによって精製し、4-[1-(4-ベンジルオキシ-シクロヘキシリ)-メス-(E)-イリデン]-2-(2,4,6-トリメチルフェニル)-シクロペンタン-1,3-ジオン(4.3g)を得る。

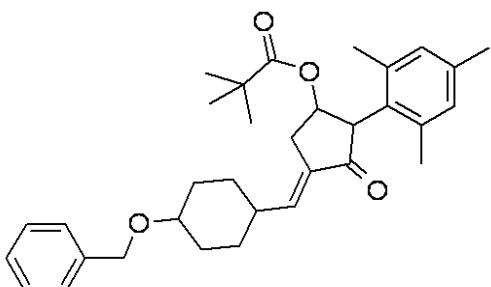
【0253】

ステップ7:

2,2-ジメチルプロピオン酸4-[1-(4-ベンジルオキシ-シクロヘキシリ)-メス-(E)-イリデン]-3-オキソ-2-(2,4,6-トリメチルフェニル)-シクロペンチルエステルの調製

【0254】

【化48】



【0255】

ジクロロメタン(60ml)およびトリエチルアミン(2ml)中の4-[1-(4-ベンジルオキシ-シクロヘキシリ)-メス-(E)-イリデン]-2-(2,4,6-トリメチルフェニル)-シクロペンタン-1,3-ジオン(4.0g、9.6mmol)の溶液に、0で、塩化ピバロイル(1.73g、14.3mmol)を添加する。反応物を、室温まで温め、次いで、3時間攪拌する。反応混合物を水(50ml)に注入し、ジクロロメタン(2×50ml)で抽出する。混合された有機抽出物を、硫酸マグネシウムで乾燥させ、濾過し、蒸発させ、2,2-ジメチルプロピオン酸4-[1-(4-ベンジルオキシ-シクロヘキシリ)-メス-(E)-イリデン]-3-オキソ-2-(2,4,6-トリメチルフェニル)-シクロペンチルエステル(4.5g)を得る。

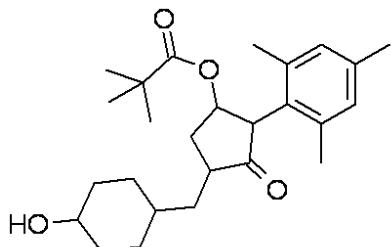
【0256】

ステップ8:

2,2-ジメチルプロピオン酸4-(4-ヒドロキシ-シクロヘキシリメチル)-3-オキソ-2-(2,4,6-トリメチルフェニル)-シクロペンチルエステルの調製

【0257】

【化49】



【0258】

2,2-ジメチルプロピオン酸4-[1-(4-ベンジルオキシ-シクロヘキシリ)-メス-(E)-イリデン]-3-オキソ-2-(2,4,6-トリメチルフェニル)-シクロペンチルエステル(4.5g、9.0mmol)を、酢酸エチル(40ml)中に溶解し、炭素上の1gの5%のパラジウムを追加し、反応混合物を、水素圧(3バル)下で、3時間、定置した。反応混合物を濾過し、酢酸エチルで洗浄した。濾過物をシリカゲル上に吸収させ、フラッショクロマトグラフィーによって精製し、粘着性固体を得る。固体をヘキサンから結晶化し、2,2-ジメチルプロピオン酸4-(4-ヒドロキシ-シク

10

20

30

40

50

シクロヘキシリルメチル) - 3 - オキソ - 2 - (2 , 4 , 6 - トリメチルフェニル) - シクロペンチルエステル (1 . 37 g) を得た。

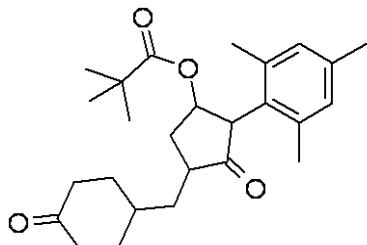
【 0259 】

ステップ9:

2 , 2 - ジメチルプロピオン酸 3 - オキソ - 4 - (4 - オキソ - シクロヘキシリルメチル) - 2 - (2 , 4 , 6 - トリメチルフェニル) - シクロペンチルエステルの調製

【 0260 】

【 化 50 】



10

【 0261 】

2 , 2 - ジメチルプロピオン酸 4 - (4 - ヒドロキシ - シクロヘキシリルメチル) - 3 - オキソ - 2 - (2 , 4 , 6 - トリメチルフェニル) - シクロペンチルエステル (100 mg) を、アセトン中に溶解し、0 ℃まで冷却する。ジョーンズ試薬 (1 . 3 ml 、 167 M) を、30分間の期間にわたり、液滴に添加する。反応物を、1時間、室温まで温める。反応物を、水に注入し、酢酸エチル (3 × 50 ml) で抽出する。混合された有機抽出物を、重炭酸ナトリウムの飽和水性溶液で洗浄し、硫酸マグネシウムで乾燥させ、濾過し、溶媒を減圧下で除去し、結晶性固体を得る。固体を、フラッシュクロマトグラフィーによって精製し、2 , 2 - ジメチルプロピオン酸 3 - オキソ - 4 - (4 - オキソ - シクロヘキシリルメチル) - 2 - (2 , 4 , 6 - トリメチルフェニル) - シクロペンチルエステル (72 mg) を得る。

20

【 0262 】

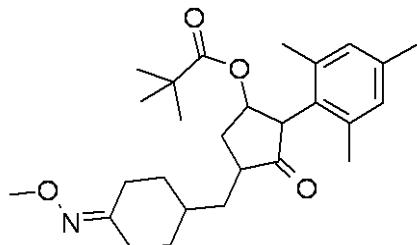
ステップ10:

2 , 2 - ジメチルプロピオン酸 4 - (4 - メトキシイミノ - シクロヘキシリルメチル) - 3 - オキソ - 2 - (2 , 4 , 6 - トリメチルフェニル) - シクロペンチルエステルの調製

30

【 0263 】

【 化 51 】



40

【 0264 】

2 , 2 - ジメチルプロピオン酸 3 - オキソ - 4 - (4 - オキソ - シクロヘキシリルメチル) - 2 - (2 , 4 , 6 - トリメチルフェニル) - シクロペンチルエステル (150 mg 、 0 . 36 mmol) を、エタノール (8 ml) 中に溶解し、ヒドロキシリルアミン塩酸塩 (36 mg 、 0 . 43 mmol) を添加する。溶液を、ピリジン (32 mg 、 0 . 40 mmol) を添加しながら、攪拌する。反応混合物を加熱して、2時間還流する。反応混合物を、水で希釈し、ジクロロメタン (1 × 40 ml) で抽出する。有機抽出物を、硫酸マグネシウムで乾燥させ、濾過し、茶色ガムまで蒸発させる。生成物を、HPLC によって精製し、2 , 2 - ジメチルプロピオン酸 4 - (4 - メトキシイミノ - シクロヘキシリルメチル) - 3 - オキソ - 2 - (2 , 4 , 6 - トリメチルフェニル) - シクロペンチルエステルを得る。

50

【0265】

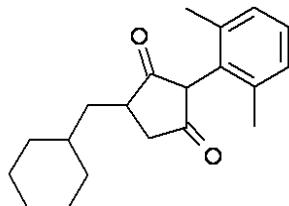
実施例2：

4 - シクロヘキシリルメチル - 2 - (2 , 6 - ジメチルフェニル) - シクロペンタン - 1 ,

3 - ジオンの調製

【0266】

【化52】



10

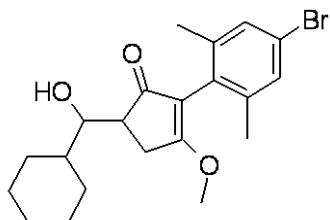
【0267】

ステップ1：

2 - (4 - ブロモ - 2 , 6 - ジメチルフェニル) - 5 - (シクロヘキシリル - ヒドロキシ - メチル) - 3 - メトキシ - シクロペント - 2 - エノンの調製

【0268】

【化53】



20

【0269】

10mlの乾燥したテトラヒドロフラン中の2 - (4 - ブロモ - 2 , 6 - ジメチルフェニル) - 3 - メトキシ - シクロペント - 2 - エノン (1 g、3.4mmol) の溶液に、窒素環境下で、-78度で、LiHMDS (4.42ml、4.42mmol) をゆっくりと添加し、-78度で40分間攪拌する。乾燥したテトラヒドロフラン (10ml) 中のシクロヘキシリカルボキシアルデヒド (761mg、6.8mmol) の溶液を、-78度で、反応混合物に添加する。反応混合物をこの温度で2時間、次いで、室温で3時間攪拌する。反応混合物を、水 (50ml) で急冷し、水性層を酢酸エチル (3 * 100ml) で抽出する。混合した有機層を、硫酸ナトリウムで乾燥させ、真空化で濃縮し、粗生成物を得、それは、さらなる精製なく次のステップに直接運ばれる。

30

【0270】

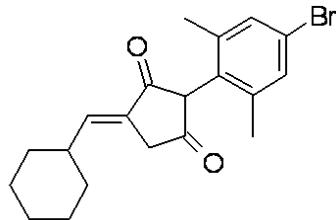
ステップ2：

2 - (4 - ブロモ - 2 , 6 - ジメチルフェニル) - 4 - [1 - シクロヘキシリル - メス - (E) - イリデン] - シクロペンタン - 1 , 3 - ジオンの調製

40

【0271】

【化54】



【0272】

50

エタノール(27.6ml)および2Nの水性塩酸(13.8ml)中の2-(4-ブロモ-2,6-ジメチルフェニル)-5-(シクロヘキシリ-ヒドロキシ-メチル)-3-メトキシ-シクロペント-2-エノン(1.38g、3.4mmol)の溶液を、130で、40分間、マイクロ波照射を受けさせる。反応混合物を、真空下で濃縮し、エタノールを除去する。水性層を、酢酸エチル(3×100ml)で抽出し、真空下で濃縮し、粗質量を得る。化合物を、カラムクロマトグラフィーによって精製し、2-(4-ブロモ-2,6-ジメチルフェニル)-4-[1-シクロヘキシリ-メス-(E)-イリデン]-シクロペンタン-1,3-ジオン(250mg)を得た。

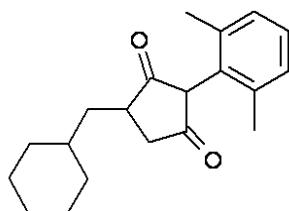
【0273】

ステップ3:

4-シクロヘキシリメチル-2-(2,6-ジメチルフェニル)-シクロペンタン-1,3-ジオンの調製

【0274】

【化55】



10

20

【0275】

メタノール(25ml)中の2-(4-ブロモ-2,6-ジメチルフェニル)-4-[1-シクロヘキシリ-メス-(E)-イリデン]-シクロペンタン-1,3-ジオンの溶液(250mg、0.844mmol)に、炭素上の10%のパラジウム(50mg、20%)を添加し、室温で、水素バルーン圧下で、7~8時間、攪拌した。反応混合物を、セライトベッドを介して濾過して、高真空下で濃縮した。化合物を、自動調製精製システムによって分離し、4-シクロヘキシリメチル-2-(2,6-ジメチルフェニル)-シクロペンタン-1,3-ジオンを得た。

【0276】

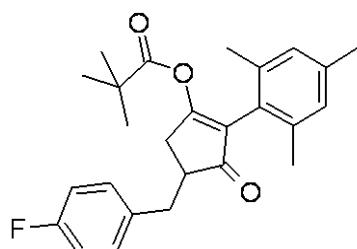
30

実施例3:

2,2-ジメチルプロピオン酸4-(4-フルオロ-ベンジル)-3-オキソ-2-(2,4,6-トリメチルフェニル)-シクロペント-1-エニルエステルの調製

【0277】

【化56】



40

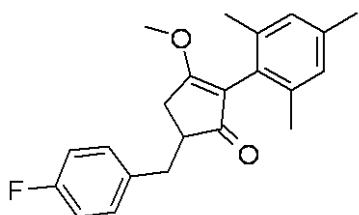
【0278】

ステップ1:

5-(4-フルオロ-ベンジル)-3-メトキシ-2-(2,4,6-トリメチルフェニル)-シクロペント-2-エノンの調製

【0279】

【化57】



【0280】

THF (3 ml) 中の 3 - メトキシ - 2 - (2 , 4 , 6 - トリメチルフェニル) - シクロペント - 2 - エノンの溶液 (200 mg, 0 . 86 mmol) に、 N₂ 下で、 -78¹⁰ で、 テトラヒドロフラン / ヘプタン / エチルベンゼン (0 . 53 ml, 0 . 95 mmol) 中の 1 . 8 M のリチウムジイソプロピルアミンの溶液を液滴で添加する。得られる溶液を、 -78¹⁰ で、 40 分間、 搅拌させる。次いで、 THF (1 ml) 中の 4 - フルオロ臭化ベンジル (0 . 16 ml, 1 . 3 mmol) の溶液を、 一部分添加し、 60 分の期間にわたり室温まで温める前に、 反応混合物を、 -78¹⁰ で、 30 分間、 搅拌する。反応物を、 饱和水性塩化アンモニウム (5 ml) の添加によって急冷し、 酢酸エチル (2 × 10 ml) で抽出する。混合した有機物を、 フラッシュクロマトグラフィー によって精製し、 5 - (4 - フルオロ - ベンジル) - 3 - メトキシ - 2 - (2 , 4 , 6 - トリメチルフェニル) - シクロペント - 2 - エノン (236 mg) を得る。

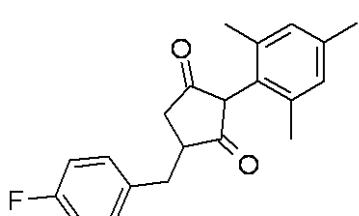
【0281】

ステップ 2 :

4 - (4 - フルオロ - ベンジル) - 2 - (2 , 4 , 6 - トリメチルフェニル) - シクロペンタン - 1 , 3 - ジオンの精製

【0282】

【化58】



【0283】

アセトン (2 ml) 中の 5 - (4 - フルオロ - ベンジル) - 3 - メトキシ - 2 - (2 , 4 , 6 - トリメチルフェニル) - シクロペント - 2 - エノンの溶液 (136 mg, 0 . 40 mmol) に、 塩酸の 2 N の溶液 (2 ml) を添加し、 得られる溶液を、 マイクロ波照射によって、 30 分間、 40⁴⁰ まで加熱する。反応混合物は、 2 N の塩酸 (25 ml) で希釈し、 酢酸エチル (2 × 25 ml) で抽出する。混合した有機物は、 塩水 (25 ml) で洗浄し、 硫酸マグネシウムで乾燥させ、 濾過し、 真空内で濃縮し、 4 - (4 - フルオロ - ベンジル) - 2 - (2 , 4 , 6 - トリメチルフェニル) - シクロペンタン - 1 , 3 - ジオン (124 mg) を得る。

【0284】

ステップ 3 :

2 , 2 - ジメチルプロピオン酸 4 - (4 - フルオロ - ベンジル) - 3 - オキソ - 2 - (2 , 4 , 6 - トリメチルフェニル) - シクロペント - 1 - エニルエステルの調製

【0285】

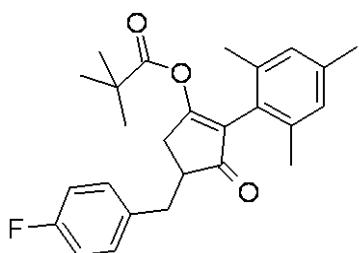
10

20

30

40

【化59】



【0286】

ジクロロメタン(1ml)およびトリエチルアミン(52μl、0.37mmol)中の4-(4-フルオロ-ベンジル)-2-(2,4,6-トリメチルフェニル)-シクロペンタン-1,3-ジオンの溶液(30mg、0.09mmol)に、室温で、塩化ビバロイル(34μl、0.37mmol)を添加する。反応混合物を、一晩、室温で、攪拌する。シリカゲルを、粗反応混合物に添加し、溶媒を、減圧下で蒸発させ、残渣を、シリカゲル上のフラッシュクロマトグラフィーによって精製し、2,2-ジメチルプロピオン酸4-(4-フルオロ-ベンジル)-3-オキソ-2-(2,4,6-トリメチルフェニル)-シクロペント-1-エニルエステル(31mg)を得る。

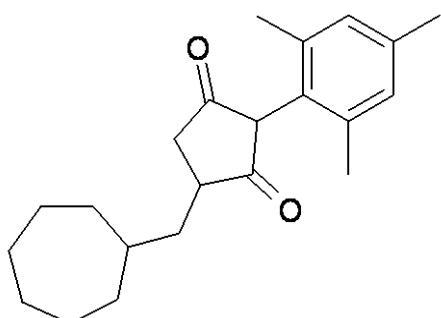
【0287】

実施例4:

4-シクロヘプチルメチル-2-(2,4,6-トリメチルフェニル)-シクロペンタン-1,3-ジオンの調製

【0288】

【化60】



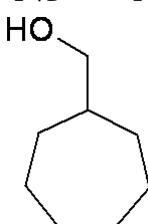
【0289】

ステップ1:

シクロヘプチル-メタノールの調製

【0290】

【化61】



【0291】

N_2 環境下で、炉乾燥した三つ口フラスコに、LiAlH₄(4.0g、0.11mol)の後、無水Et₂O(100ml)を添加した。攪拌した懸濁液に、無水Et₂O(50ml)中のシクロヘプタンカルボン酸(5.0g、0.035mol)を、1時間にわたり、液滴で添加した。反応物を、室温で、2時間、攪拌し、次いで、氷槽で冷却した。H₂O(4ml)を、慎重に20分間にわたり、液滴で添加した後、慎重にNaOH(

10

20

30

40

50

4 ml の 15 % の水性溶液) を液滴で追加し、次いで、さらなる H₂O (12 ml) を液滴で追加した。反応物を、5分間、激しく攪拌し、得られる白色沈殿物を濾過によって除去し、多量の Et₂O で洗浄した。混合した濾過物および洗浄物を、減圧下で、乾燥するまで蒸発させ、さらなる精製の必要がない無色油として所望の化合物 (3.74 g) を得る。

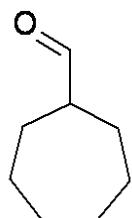
【0292】

ステップ2:

シクロヘプタンカルバルデヒドの調製

【0293】

【化62】



10

【0294】

C₂H₂Cl₂ (50 ml) 中のシクロヘプタン - メタノールの攪拌した溶液 (1.28 g、0.01 mol) に、室温で、PCC (3.23 g、0.015 mol) を小分けにして添加した。ほぼ瞬時に暗褐色に変化した反応物を、室温で、4時間、攪拌した。次いで、反応物を、Et₂O (50 ml) で希釈し、溶液を、固体残渣から移した。残渣を、さらなる Et₂O (2 × 25 ml) で洗浄した。次いで、反応混合物および混合した洗浄物を、10 g の SiO₂ クロマトグラフィーカートリッジを介して濾過し、さらなる Et₂O (25 ml) で洗浄した。次いで、溶媒を、減圧下で除去し、さらなる精製なく使用された無色の芥子油として所望の化合物 (1.08 g) を得た。

20

【0295】

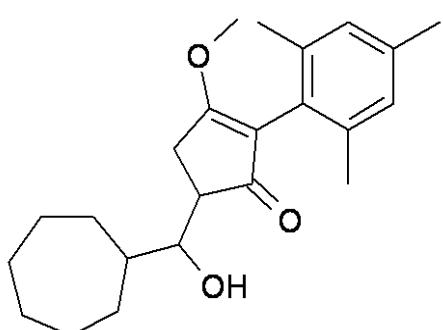
ステップ3:

5 - (シクロヘプチル - ヒドロキシ - メチル) - 3 - メトキシ - 2 - (2,4,6 - トリメチルフェニル) - シクロpent - 2 - エノンの精製

30

【0296】

【化63】



40

【0297】

無水 THF (20 ml) 中の 3 - メトキシ - 2 - (2,4,6 - トリメチルフェニル) - シクロpent - 2 - エノン (0.46 g、2.0 mmol) の攪拌した溶液に、-78 °C で、N₂ 環境下で、リチウムジイソプロピルアミヂオ (THF / ヘプタン / エチルベンゼン中の 1.22 ml の 1.8 M の溶液、2.2 mmol) の溶液を、液滴に添加した。反応物を、-78 °C で、90 分間、攪拌し、次いで、無水 THF (3 ml) 中のシクロヘプタンカルバルデヒドの溶液 (316 mg、2.5 mmol) を、液滴に添加した。反応物を、-78 °C で、さらに 30 分間、攪拌し、次いで、30 分にわたり、室温まで温めた。反応物を、H₂O (25 ml) の添加により急冷し、EtOAc (3 × 20 ml) で抽

50

出した。混合された有機抽出物を、塩水(15ml)で洗浄し、MgSO₄で乾燥させ、濾過し、減圧下で、乾燥するまで蒸発させ、褐色油(628mg)を得た。粗原料を、100%のイソヘキサン対100%のEtOAc勾配を使用して、SiO₂上でフラッシュクロマトグラフィーによって精製し、無色油(101mg)として所望の生成物を得た。

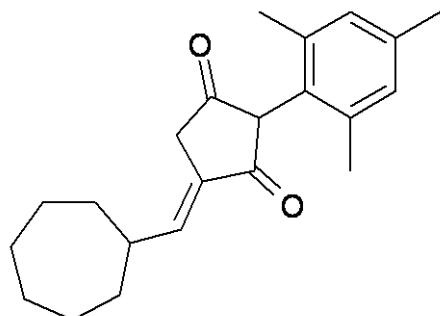
【0298】

ステップ4：

4-[1-シクロヘプチル-メチリデン]-2-(2,4,6-トリメチルフェニル)-シクロ pentan-1,3-ジオンの調製

【0299】

【化64】



10

【0300】

20

10mlのバイアル内のアセトン(4ml)中の5-(シクロヘプチル-ヒドロキシ-メチル)-3-メトキシ-2-(2,4,6-トリメチルフェニル)-シクロ pentan-2-エノンの溶液(100mg、0.28mmol)に、2MのHCl(4ml)を添加した。反応物をキャッピングし、マイクロ波照射下で、30分間、120まで加熱した。反応物を、H₂O(20ml)で希釈し、EtOAc(3×15ml)で抽出した。混合された有機抽出物を塩水(10ml)で洗浄し、MgSO₄で乾燥させ、濾過し、減圧下で、乾燥するまで蒸発させ、褐色油(88mg)を得た。粗原料を、100%のイソヘキサン対100%のEtOAc勾配を使用して、SiO₂上でフラッシュクロマトグラフィーによって精製し、無色油(62mg)として所望の生成物を得た。

【0301】

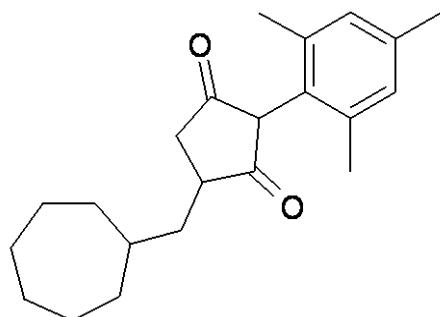
30

ステップ5：

4-チクロヘプチルメチル-2-(2,4,6-トリメチルフェニル)-シクロ pentan-1,3-ジオンの調製

【0302】

【化65】



40

【0303】

5%のw/wのPd/C(5mg)に、MeOH(10ml)中の4-[1-シクロヘプチル-メチリデン]-2-(2,4,6-トリメチルフェニル)-シクロ pentan-1,3-ジオン(39mg、0.12mmol)を添加した。反応物を、H₂(1.5バル)の環境下で、2時間、攪拌し、セライトパッドを介して濾過し、MeOH(20ml)で洗浄した。溶媒を、減圧下で除去し、さらなる精製が必要のない無色油(29mg)

50

として所望の生成物を得た。

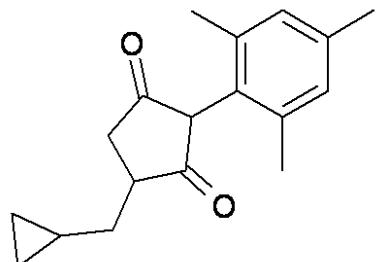
【0304】

実施例5：

4 - シクロプロピルメチル - 2 - (2 , 4 , 6 - トリメチルフェニル) - シクロペンタン
- 1 , 3 - ジオンの精製

【0305】

【化66】



10

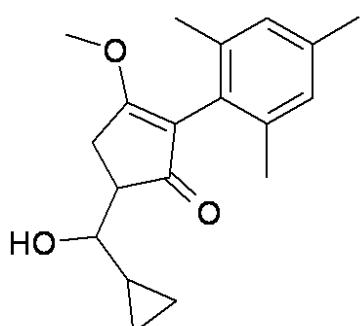
【0306】

ステップ1：

5 - (シクロプロピル - ヒドロキシ - メチル) - 3 - メトキシ - 2 - (2 , 4 , 6 - トリ
メチルフェニル) - シクロペント - 2 - エノンの調製

【0307】

【化67】



20

30

【0308】

無水 THF (10 ml) 中の 3 - メトキシ - 2 - (2 , 4 , 6 - トリメチルフェニル)
- シクロペント - 2 - エノン攪拌した溶液 (0 . 69 、 3 . 0 mmol) に、 - 78 で
、 N₂ 環境下で、リチウムジイソプロピルアミデオ (THF / ヘプタン / エチルベンゼン
中の 1 . 75 ml の 1 . 8 M の溶液、 3 . 15 mmol) の溶液を液滴に追加した。反応
物を、 - 78 で、 60 分間、攪拌し、次いで、シクロプロパンカルバルデヒド (0 . 2
7 ml 、 3 . 6 mmol) を液滴で添加した。反応物を、 - 78 で、さらに 30 分間、
攪拌し、次いで、 210 分間にわたり、室温まで温めた。反応物を、 H₂O (50 ml)
の添加によって急冷し、 EtOAc (50 ml) で抽出した。有機相を、 H₂O (50 ml)
および塩水 (50 ml) で洗浄し、 MgSO₄ で乾燥させ、濾過し、減圧下で乾燥す
るまで蒸発させ、褐色油 (1 . 37 g) を得た。粗原料を、 100 % のイソヘキサン対
100 % の EtOAc 勾配を使用して、 SiO₂ 上でフラッシュクロマトグラフィーによ
つて精製し、無色油 (622 mg) として所望の生成物 (ジアステレオマーの混合) を得た
。

40

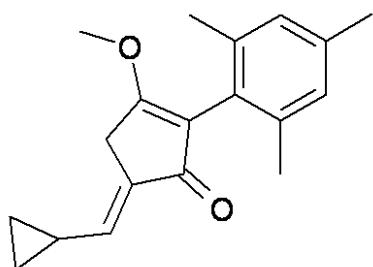
【0309】

ステップ2：

5 - [1 - シクロプロピル - メチリデン] - 3 - メトキシ - 2 - (2 , 4 , 6 - トリメチ
ルフェニル) - シクロペント - 2 - エノンの精製

【0310】

【化68】



【0311】

CH_2Cl_2 (10ml) 中の 5 - (シクロプロピル - ヒドロキシ - メチル) - 3 - メトキシ - 2 - (2 , 4 , 6 - トリメチルフェニル) - シクロペント - 2 - エノンの溶液 (622mg、2.1mmol) に、0 度で、 Et_3N (0.59ml、4.2mmol) の後に、塩化メタンスルホニル (0.33ml、4.2mmol) を液滴で添加した。反応物を、10分間にわたり、室温まで温め、次いで、1Mの HCl (10ml) の添加によって急冷した。層を分離し、有機相を、減圧下で、乾燥するまで蒸発させた。粗メシラートを、 MeOH (10ml) 中に溶解し、 K_2CO_3 (580mg、4.2mmol) を单一量で添加した。反応物を、室温で、2時間、攪拌し、次いで、溶媒を、減圧下で除去した。粗原料を、 EtOAc (20ml) と H_2O (20ml) の間で分割し、有機相を、塩水 (20ml) で洗浄し、 MgSO_4 で乾燥させ、濾過し、減圧下で乾燥するまで蒸発させた。粗原料を、100%のイソヘキサン対100%の EtOAc 勾配を使用して、 SiO_2 上でフラッショクロマトグラフィーによって精製し、無色油 (83mg) として所望の生成物を得た。

10

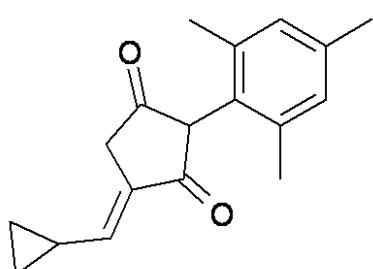
【0312】

ステップ3:

4 - [1 - シクロプロピル - メチリデン] - 2 - (2 , 4 , 6 - トリメチルフェニル) - シクロ pentan - 1 , 3 - ジオンの精製

【0313】

【化69】



30

【0314】

モルホリン (3ml) 中の 5 - [1 - シクロプロピル - メチリデン] - 3 - メトキシ - 2 - (2 , 4 , 6 - トリメチルフェニル) - シクロペント - 2 - エノンの溶液 (83mg、0.28mmol) を、100 度で、17時間、加熱した。反応物を、室温まで冷却し、次いで、減圧下で乾燥するまで蒸発させた。粗原料を、 EtOAc (15ml) 中に溶解し、次いで、2Mの HCl ($3 \times 15\text{ml}$) および塩水 (15ml) で洗浄した。有機相を、 Na_2SO_4 で乾燥させ、濾過し、減圧下で乾燥するまで蒸発させ、無色油 (200mg) を得た。粗原料を、100%のヘキサン対100%の EtOAc 勾配を使用して、 SiO_2 上でフラッショクロマトグラフィーによって精製し、白色固体 (45mg) として所望の化合物を得た。

40

【0315】

ステップ4:

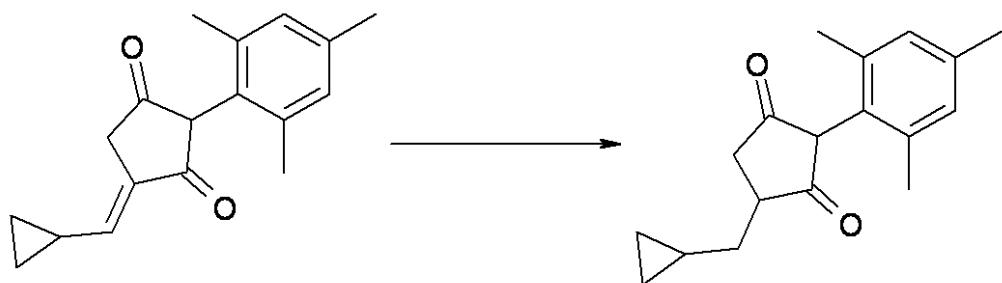
4 - シクロプロピルメチル - 2 - (2 , 4 , 6 - トリメチルフェニル) - シクロ pentan

50

- 1 , 3 - ジオンの精製

【 0 3 1 6 】

【 化 7 0 】



10

【 0 3 1 7 】

5 % の w / w の Pd / C (5 m g) に、MeOH (1 0 m l) 中の 4 - [1 - シクロプロピル - メチリデン] - 2 - (2 , 4 , 6 - トリメチルフェニル) - シクロ pentan - 1 , 3 - ジオン (2 8 m g 、 0 . 0 9 m m o l) の溶液を添加した。反応物を、H₂ (1 . 5 バール) の環境下で、1 . 5 時間、攪拌し、セライトパッドを介して濾過し、MeOH (2 0 m l) で洗浄した。溶媒を、質量指向 HPLC によって生成された粗生成物 (2 0 m g) を得るように減圧下で除去し、所望の生成物 (5 m g) を得た。

【 0 3 1 8 】

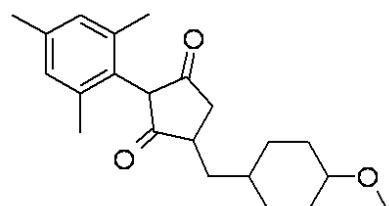
実施例 6 :

20

4 - (4 - メトキシ - シクロヘキシルメチル) - 2 - (2 , 4 , 6 - トリメチルフェニル) - シクロ pentan - 1 , 3 - ジオンの調製

【 0 3 1 9 】

【 化 7 1 】



30

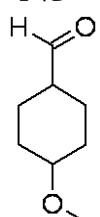
【 0 3 2 0 】

ステップ 1 :

4 - メトキシ - シクロヘキサンカルバルデヒドの調製

【 0 3 2 1 】

【 化 7 2 】



40

【 0 3 2 2 】

乾燥した THF (6 0 m l) 中のメトキシメチルトリフェニル塩化ホスホニウム (2 0 . 8 g 、 6 0 m m o l) の攪拌した懸濁液に、0 ~ 5 度、(3 8 m l 、 6 9 m m o l 、ヘキサン / THF / エチルベンゼン中 1 . 8 M) の溶液を、液滴に添加する。得られる反応混合物を、3 0 分間、攪拌し、次いで、- 7 8 度まで冷却する。この温度で、テトラヒドロフラン (6 0 0 m l) 中のメトキシシクロヘキサン (6 g 、 4 7 m m o l) の溶液を、3 0 分間の期間にわたり添加する。添加が完了すると、反応混合物を、- 7 8 度、1 時間、攪拌し、次いで、室温まで温め、一晩、攪拌した。次いで、反応混合物を、塩酸の 2 N の水性溶液で pH = 2 まで希釈し、3 時間、室温で、攪拌した。反応物を、水で希

50

釀し、酢酸エチルで抽出した。混合された有機抽出物を、硫酸マグネシウムで乾燥させ、濾過し、減圧下で蒸発させた。残渣を、フラッシュクロマトグラフィーによって精製し、4-ベンジルオキシ-シクロヘキサンカルバルデヒド(5.1g)を得る。

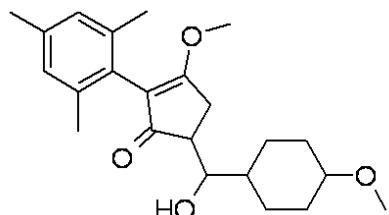
【0323】

ステップ2

5-[ヒドロキシ-(4-メトキシ-シクロヘキシル)-メチル]-3-メトキシ-2-(2,4,6-トリメチルフェニル)-シクロペント-2-エノンの精製

【0324】

【化73】



10

【0325】

乾燥したテトラヒドロフラン(25ml)中の3-メトキシ-2-(2,4,6-トリメチルフェニル)-シクロペント-2-エノンの溶液(2g、8.7mmol)に、-78で、リチウムジイソプロピルアミヂオの溶液(5.8ml、10.4mmol、ヘキサン/THF/エチルベンゼン中の1.8M)を、20分間にわたり、液滴で添加する。テトラヒドロフラン(15ml)中に溶解した4-メトキシ-シクロヘキサンカルバルデヒド(1.4g、9.8mmol)を添加する前に、得られた溶液を、-78で、30分間、攪拌する。反応混合物を、一晩、室温まで温め、次いで、水で希釀し、2NのHClで酸性化し、酢酸エチル(3×15ml)で抽出する。混合された有機抽出物を、硫酸マグネシウムで乾燥させ、濾過し、減圧下で蒸発させ、褐色油を得る。残渣を、フラッシュクロマトグラフィーによって、5-[ヒドロキシ-(4-メトキシ-シクロヘキシル)-メチル]-3-メトキシ-2-(2,4,6-トリメチルフェニル)-シクロペント-2-エノン(1.7g)に精製する。

20

【0326】

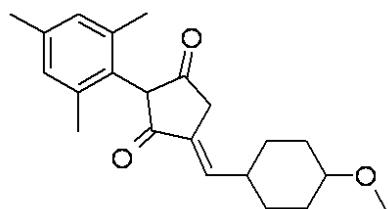
ステップ3:

4-[1-(4-メトキシ-シクロヘキシル)-メス-(E)-イリデン]-2-(2,4,6-トリメチルフェニル)-シクロペンタン-1,3-ジオンの精製

30

【0327】

【化74】



40

【0328】

アセトン(3ml)中の5-[4-ベンジルオキシ-シクロヘキシル]-ヒドロキシ-メチル]-3-メトキシ-2-(2,4,6-トリメチルフェニル)-シクロペント-2-エノンの溶液(1.5g、4.0mmol)に、2Nの水性塩酸(3ml)を添加し、混合物を、マイクロ波照射によって、1時間、120で加熱した。次いで、反応混合物を、水(20ml)で希釀し、酢酸エチル(3×15ml)で抽出する。混合された有機抽出物を、硫酸マグネシウムで乾燥させ、濾過し、減圧下で蒸発させ、褐色ガムを得る。ガムを、ヘキサン/酢酸エチルで希釀して、フラッシュクロマトグラフィーによって精製し、無色固体(0.32g)として4-[1-(4-メトキシ-シクロヘキシル)-メス-(E)-イリデン]-2-(2,4,6-トリメチルフェニル)-シクロペンタン-1,3-ジオンを得る。

50

ス - (E) - イリデン] - 2 - (2 , 4 , 6 - トリメチルフェニル) - シクロペンタン - 1 , 3 - ジオンを得る。

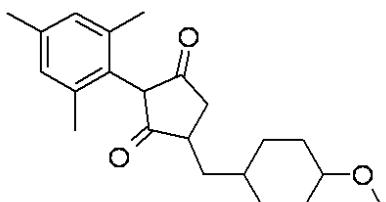
【 0 3 2 9 】

ステップ4:

4 - (4 - メトキシ - シクロヘキシリルメチル) - 2 - (2 , 4 , 6 - トリメチルフェニル) - シクロペンタン - 1 , 3 - ジオンの精製

【 0 3 3 0 】

【 化 7 5 】



10

【 0 3 3 1 】

4 - [1 - (4 - メトキシ - シクロヘキシリル) - メス - (E) - イリデン] - 2 - (2 , 4 , 6 - トリメチルフェニル) - シクロペンタン - 1 , 3 - ジオン (150 mg , 0 . 44 mmol) およびエタノール (3 . 5 ml) の混合物に、炭素 (30 mg) 上の 5 % のパラジウムを添加し、得られる混合物を、3バール圧力で、3時間、水素化する。次いで、反応混合物を、セライトを介して濾過し、濾過物を、減圧下で濃縮し、淡黄色固体 (142 g) として、4 - (4 - メトキシ - シクロヘキシリルメチル) - 2 - (2 , 4 , 6 - トリメチルフェニル) - シクロペンタン - 1 , 3 - ジオンを得る。

20

【 0 3 3 2 】

他に規定のない限り、プロトン NMR スペクトルを周囲温度で記録した。

【 0 3 3 3 】

HPLC - MS によって特徴付けられる化合物を、以下に記載する 3 つの方法のうちの 1 つを使用して分析した。

【 0 3 3 4 】

方法 A

Waters Atlantis dC18 カラム (カラムの長さ 20 mm 、カラムの内径 3 mm 、粒径 3 ミクロン) 、 Waters フォトダイオードアレイ、および Micromass ZQ2000 を装備した Waters 2795 HPLC を使用して、HPLC - MS によって特徴付けられる化合物を分析した。以下の勾配表に従って、3 分の実行時間を用いて、分析を行った。

30

【 0 3 3 5 】

【表1】

時間(分)	溶媒A(%)	溶媒B(%)	流量(mL/min)
0.00	90.0	10.0	2.00
0.25	90.0	10.0	2.00
2.00	10.0	90.0	2.00
2.50	10.0	90.0	2.00
2.60	90.0	10.0	2.00
3.0	90.0	10.0	2.00

10

20

溶媒A：0.1% HCOOHを含有するH₂O溶媒B：0.1% HCOOHを含有するCH₃CN

【0336】

方法B

Waters Atlantis dC18 ISカラム（カラムの長さ20mm、カラムの内径3mm、粒径3ミクロン）、Waters 2996フォトダイオードアレイ、Waters 2420 ELS D、およびMicromass ZQ 2000を装備した1525マイクロポンプHPLCを有するWater 2777を使用して、HPLC-MSによって特徴付けられる化合物を分析した。以下の勾配表に従って、3分の実行時間を用いて、分析を行った。

30

【0337】

【表2】

時間(分)	溶媒A(%)	溶媒B(%)	流量(mL/min)
0.00	95.0	5	1.300
2.50	0.00	100	1.300
2.80	0.00	100	1.300
2.90	95.0	5	1.300

40

溶媒A：0.05% TFAを有するH₂O溶媒B：0.05% TFAを有するCH₃CN

【0338】

方法C：

Waters Xterra カラム（カラムの長さ50mm、カラムの内径4.6mm、粒径3.5ミクロン、温度40）、Waters フォトダイオードアレイ、およびMicromass ZQ 2000を装備したFinnigan Surveyor MSQ Plusを使用して、HPLC-MSによって特徴付けられる化合物を分析した。以下の勾配表に従って、6分の実行時間を用いて、分析を行った。

50

【0339】

【表3】

時間(分)	溶媒A(%)	溶媒B(%)	流量(mL/min)
0.00	90.0	10.0	1.30
3.80	0.00	100	1.30
4.80	0.00	100	1.30
5.00	90.0	10.0	1.30
6.00	90.0	10.0	1.30

10

20

30

40

溶媒A: 0.0.05% HCOOHを含有するH₂O溶媒B: 0.0.05% HCOOHを含有するCH₃CN

【0340】

方法D

Waters Atlantis dC18カラム(カラムの長さ20mm、カラムの内径3mm、粒径3ミクロン、温度40)、Waters フォトダイオードアレイ、およびMicromass ZQ2000を装備したWaters Acuity UPLCを使用して、UPLC-MSによって特徴付けられる化合物を分析した。以下の勾配表に従って、2分の実行時間を用いて、分析を行った。

【0341】

【表4】

時間(分)	溶媒A(%)	溶媒B(%)	流量(mL/min)
0.00	90.0	10.0	2.00
1.50	10.0	90.0	2.00
1.75	10.0	90.0	2.00
1.9	90.0	10.0	2.00
2.00	90.0	10.0	2.00

溶媒A: 0.1% HCOOHを含有するH₂O溶媒B: 0.1% HCOOHを含有するCH₃CN

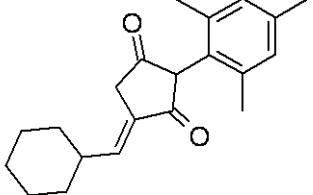
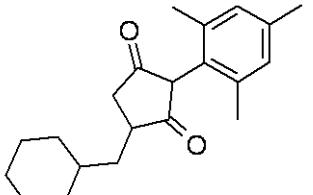
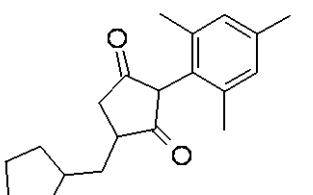
【0342】

50

表 A 1 : 化合物 A 1 ~ A 4 7

【 0 3 4 3 】

【 表 5 】

化合物番号	構造	LC/MS、NMRまたは他の物理的データ
A1		LC/MS (方法A) ES ⁺ : MH ⁺ = 3 11 反応時間= 1.76分
A2		LC/MS (方法A) ES ⁺ : MH ⁺ = 3 13 反応時間= 1.73分
A3		LC/MS (方法A) ES ⁺ : MH ⁺ = 2 99 反応時間= 1.64分

10

20

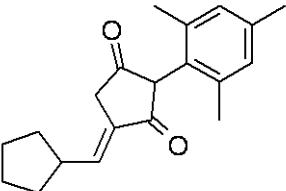
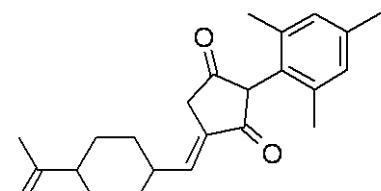
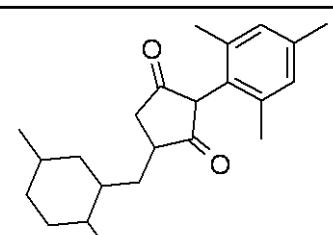
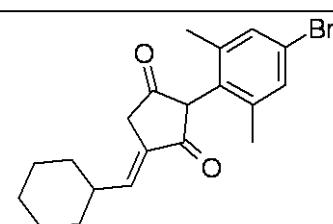
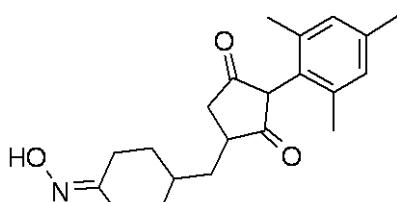
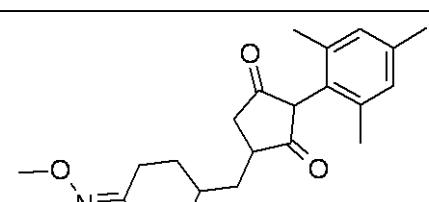
30

40

50

【0344】

【表6】

A4		LC/MS (方法A) ES ⁺ : MH ⁺ = 2 97 反応時間= 1.68分
A5		LC/MS (方法A) ES ⁺ : MH ⁺ = 3 51 反応時間= 1.79分
A6		LC/MS (方法A) ES ⁺ : MH ⁺ = 3 41 反応時間= 1.91分
A7		LC/MS (室温C) ES ⁺ : M-H ⁺ = 377, 375 反応時間= 4.8分
A8		LC/MS (室温B) ES ⁺ : MH ⁺ = 3 42 反応時間= 1.28分
A9		LC/MS (方法B) ES ⁺ : MH ⁺ = 3 56 反応時間= 1.45分

10

20

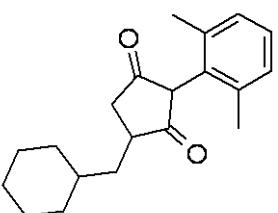
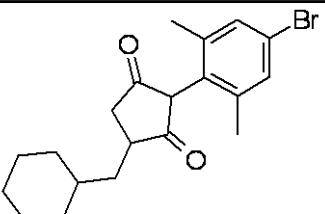
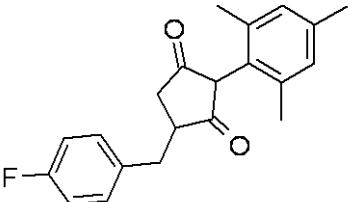
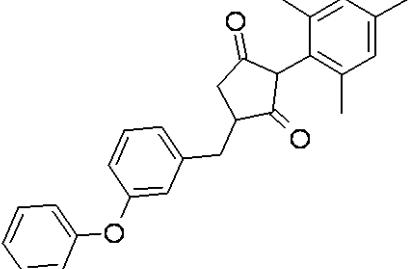
30

40

50

【 0 3 4 5 】

【表 7】

A10		LC/MS (方法C) ES ⁺ : M+H ⁺ = 297 反応時間=4.42分 δ ppm 7.14 (m, 1H); 7.07 (m, 2H); 6.5 (br s, 1H), 2.8–3.0 (m, 2H); 2.2–2.4 (m, 1H); 2.1 (s, 6H); 1.7–1.9 (m, 6H); 1.4 (m, 1H); 1.1–1.4 (m, 6H)
A11		LC/MS (方法C) ES ⁻ : M-H ⁺ = 377, 375 反応時間=4.8分 δ ppm 7.25 (s, 2H); 2.8 (m, 2H); 2.36 (m, 1H); 2.09 (s, 6H); 1.6–1.8 (m, 6H); 1.4 (m, 1H); 1.2–1.3 (m, 6H)
A12		δ 7.27–7.18 (m, 2H), 7.11–7.02 (m, 2H), 6.90 (s, 2H), 6.71 (bs, 1H), 3.39–2.39 (m, 5H), 2.27 (s, 3H), 2.07 (s, 3H), 1.97 (s, 3H) ppm. Mpt 183.1–183.2 °C
A13		δ 7.34 (t, 2H), 7.28–7.23 (m, 1H), 7.11 (t, 1H), 7.04–6.95 (m, 3H), 6.94–6.84 (m, 4H), 6.29 (bs, 1H), 3.36–2.86 (m, 5H), 2.28 (s, 3H), 2.08 (s, 3H), 1.98–1.96 (m, 3H) ppm. Mpt: 192.0–194.8 °C

10

20

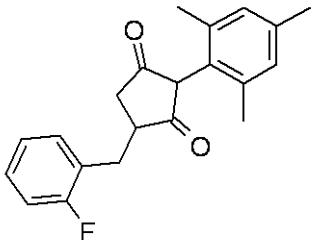
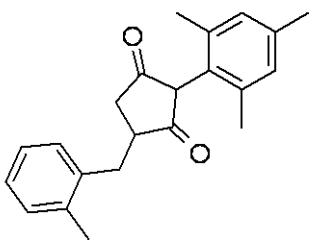
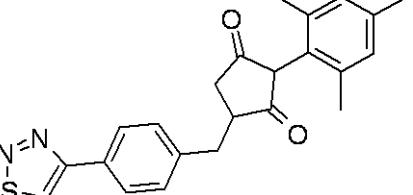
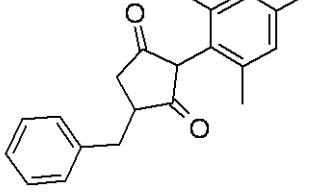
30

40

50

【 0 3 4 6 】

【 表 8 】

A14		δ 7.22–7.17 (m, 2H), 7.03–6.93 (m, 2H), 6.92–6.86 (m, 2H), 6.50 (bs, 1H), 3.85–2.82 (m, 5H), 2.28 (s, 3H), 2.08 (s, 3H), 1.92 (s, 3H) ppm. Mpt 197.8–210.2 ° C
A15		δ 7.23–7.10 (m, 4H), 6.92 (s, 2H), 6.58–6.34 (bm, 1H), 3.45–2.42 (m, 5H), 2.38 (s, 3H), 2.28 (s, 3H), 2.13–2.03 (m, 6H) ppm. Mpt 210–215.5 ° C
A16		δ 8.65–8.59 (m, 1H), 8.03–7.95 (m, 2H), 7.43–7.36 (m, 2H), 6.95–9.87 (m, 2H), 6.36–6.20 (m, 1H), 3.46–2.32 (m, 5H), 2.28 (s, 3H), 2.11–2.07 (m, 3H), 1.97–1.94 (m, 3H) ppm. Mpt 225–232 ° C
A17		δ 7.34–7.19 (m, 5H), 6.93–6.86 (m, 2H), 6.49 (bs, 1H), 3.37–2.37 (m, 5H), 2.27 (s, 3H), 2.08 (s, 3H), 1.93 (s, 3H) ppm. Mpt 160–165 ° C

10

20

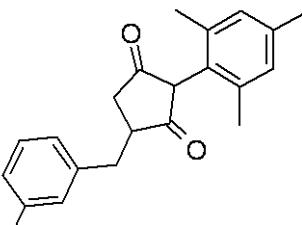
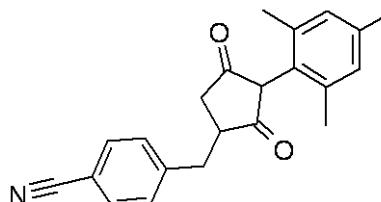
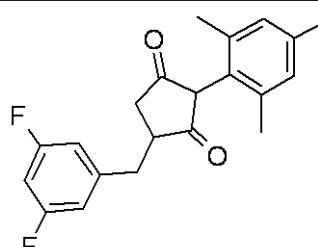
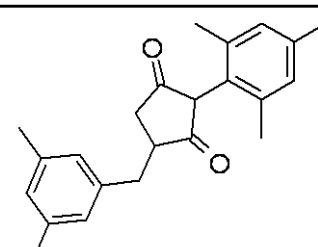
30

40

50

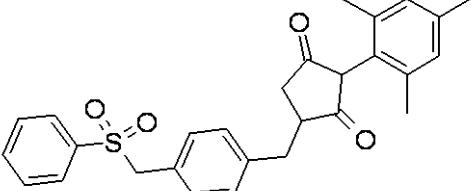
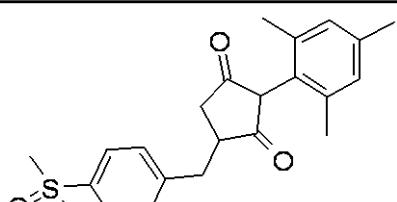
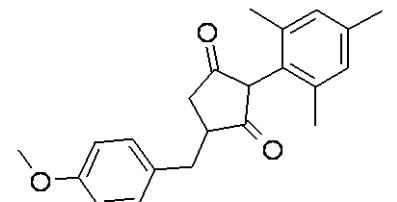
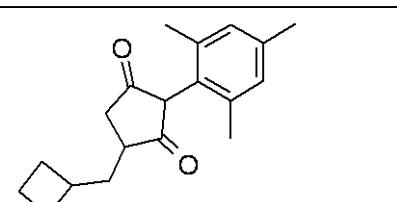
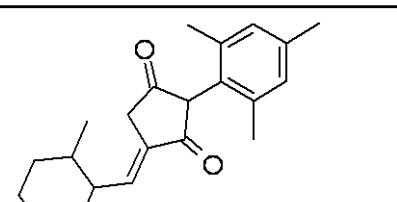
【 0 3 4 7 】

【表 9】

A18		δ 7.18 (t, 1H), 7.10–6.99 (m, 3H), 6.94–6.86 (m, 2H), 6.86–6.6 (bs, 1H), 3.25–2.38 (m, 5H), 2.32 (s, 3H), 2.26 (s, 3H), 2.06 (s, 3H), 1.94 (s, 3H) ppm. Mpt 173–179 °C	10
A19		δ 7.59 (d, 2H), 7.36 (d, 2H), 6.92–6.89 (m, 2H), 6.79–6.66 (bs, 1H), 3.40–2.31 (m, 5H), 2.27 (s, 3H), 2.07 (s, 3H), 1.91 (s, 3H) ppm. Mpt 249–251 °C	20
A20		δ 6.93–6.83 (m, 2H), 6.81–6.72 (m, 2H), 6.71–6.61 (m, 2H), 3.41–2.31 (m, 5H), 2.27 (s, 3H), 2.07 (s, 3H), 1.95 (s, 3H) ppm. MPt 193.0–193.2 °C	30
A21		δ 6.94–6.82 (m, 5H), 6.27 (bs, 1H), 3.35–2.89 (m, 5H), 2.31–2.25 (m, 9H), 2.10–2.07 (m, 3H), 2.00–1.98 (m, 3H) ppm. MPt 181–184 °C	40

【 0 3 4 8 】

【表 1 0 】

A22		δ 7.80–7.58 (m, 3H), 7.56–7.42 (m, 2H), 7.37–7.13 (m, 4H), 7.08–6.75 (m, 3H), 4.48 (s, 2H), 3.35–2.34 (m, 5H), 2.27 (s, 3H), 2.07 (s, 3H), 2.02–1.93 (m, 3H) ppm. MPt 189.0–191.7 °C
A23		δ 7.93–7.86 (m, 2H), 7.46 (d, 2H), 6.91 (d, 2H), 6.61–6.49 (m, 1H), 3.41–2.31 (m, 8H), 2.28 (s, 3H), 2.08 (s, 3H), 1.94–1.89 (m, 3H) ppm MPt 235.3–238.6 °C
A24		δ 7.14 (d, 2H), 6.91–6.87 (m, 2H), 6.83 (d, 2H), 6.79–6.67 (bs, 1H), 3.79 (s, 3H), 3.21–2.38 (m, 5H), 2.27 (s, 3H), 2.07 (s, 3H), 1.93 (s, 3H) ppm. MPt 197.3–197.6 °C
A25		LC/MS (方法A) ES ⁺ : MH ⁺ = 285 反応時間= 1.60分
A26		LC/MS (方法A) ES ⁺ : MH ⁺ = 325 反応時間= 1.80分

10

20

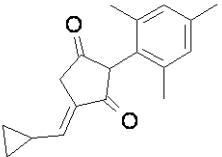
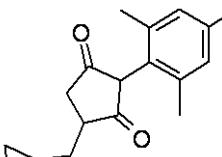
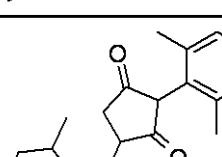
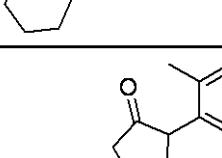
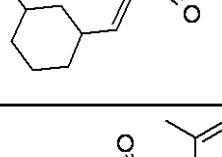
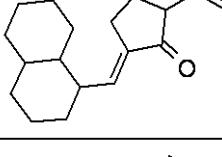
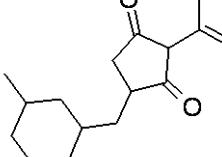
30

40

50

【0 3 4 9】

【表 11】

A27		LC/MS (方法A) ES ⁺ : MH ⁺ = 2 69 反応時間= 1.44分
A28		LC/MS (方法A) ES ⁺ : MH ⁺ = 2 71 反応時間= 1.53分
A29		LC/MS (方法D) ES ⁺ : MH ⁺ = 3 27 反応時間= 1.12分
A30		LC/MS (方法A) ES ⁺ : MH ⁺ = 3 25 反応時間= 1.81分
A31		LC/MS (方法A) ES ⁺ : MH ⁺ = 3 65 反応時間= 2.03分
A32		LC/MS (方法A) ES ⁺ : MH ⁺ = 3 27 反応時間= 1.80分
A33		LC/MS (方法A) ES ⁺ : MH ⁺ = 3 27 反応時間= 1.85分

10

20

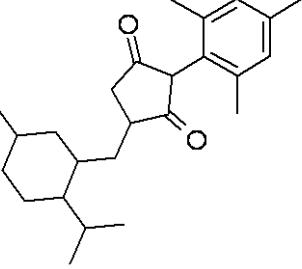
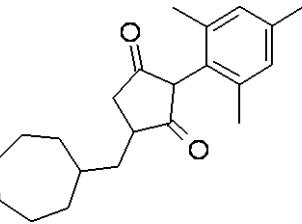
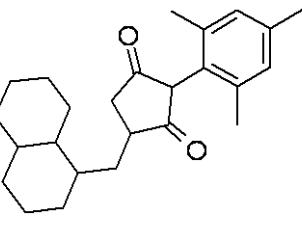
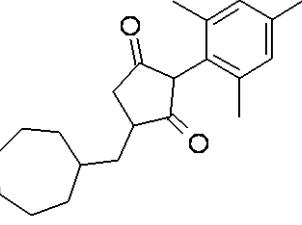
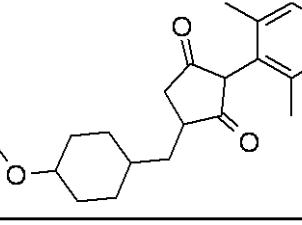
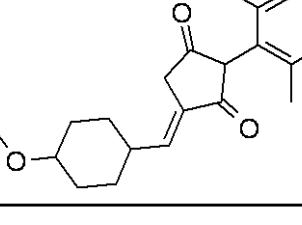
30

40

50

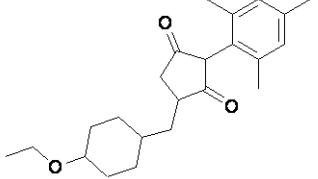
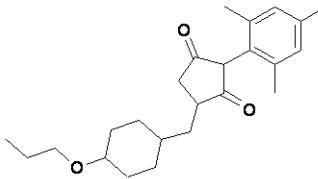
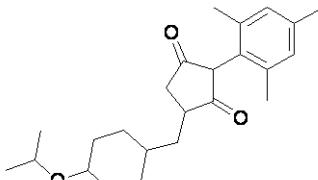
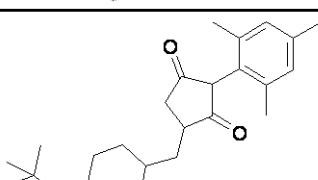
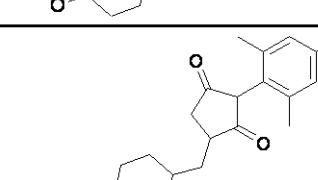
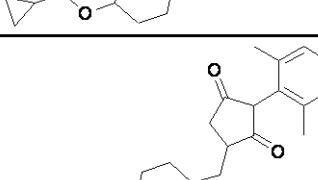
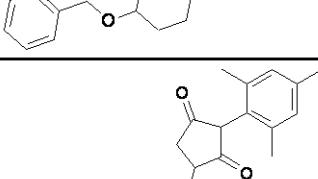
【 0 3 5 0 】

【表 12】

A34		LC/MS (方法A) ES ⁺ : MH ⁺ = 3 69 反応時間= 2.06分
A35		LC/MS (方法A) ES ⁺ : MH ⁺ = 3 27 反応時間= 1.83分
A36		LC/MS (方法A) ES ⁺ : MH ⁺ = 3 67 反応時間= 2.02分
A37		LC/MS (方法A) ES ⁺ : MH ⁺ = 3 25 反応時間= 1.84分
A38		LC/MS (方法A) ES ⁺ : MH ⁺ = 3 43 反応時間= 1.41分
A39		LC/MS (方法A) ES ⁺ : MH ⁺ = 3 41 反応時間= 1.54分

【 0 3 5 1 】

【表13】

A40		
A41		10
A42		
A43		20
A44		
A45		30
A46		

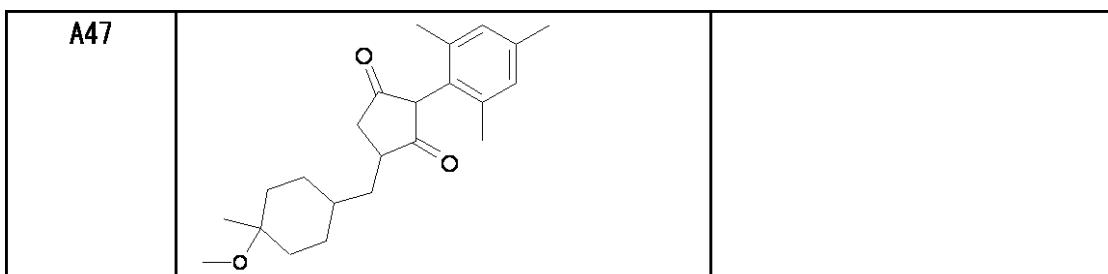
40

20

30

40

【表14】



10

20

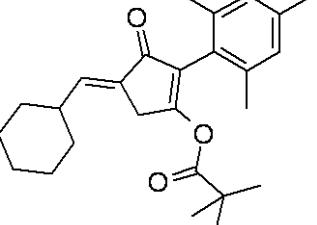
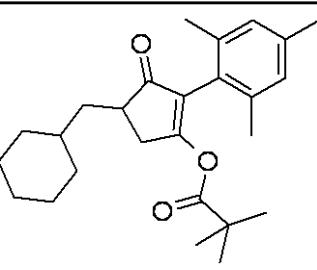
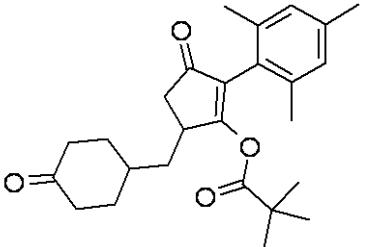
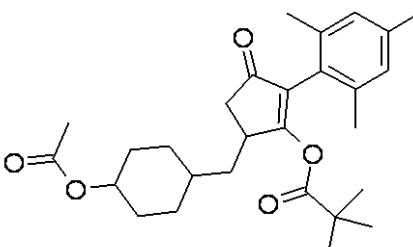
30

40

【0353】

【表15】

表B1：化合物B1～B28

化合物番号	構造	LC/MS, NMRまたは他の物理的データ
B1		LC/MS (方法A) ES ⁺ : MH ⁺ = 395 反応時間= 2.23分
B2		LC/MS (方法A) ES ⁺ : MH ⁺ = 397 反応時間= 2.29分
B3		LC/MS (方法A) ES ⁺ : MH ⁺ = 411 反応時間= 1.81
B4		LC/MS (方法A) ES ⁺ : M-H ⁺ = 453 反応時間= 1.46

10

20

30

40

【表16】

B5		LC/MS (方法A) ES ⁺ : MH ⁺ 426 反応時間= 1.59
B6		LC/MS (方法A) ES ⁺ : MH ⁺ 440 反応時間= 1.98
B7		δ 7.37–7.30 (m, 2H), 7.28–7.23 (m, 1H), 7.11 (t, 1H), 7.03–6.96 (m, 3H), 6.92 (s, 1H), 6.89–6.81 (m, 3H), 3.35–3.26 (m, 1H), 3.24–3.09 (m, 2H), 2.79–2.68 (m, 2H), 2.25 (s, 3H), 2.06 (s, 3H), 1.98 (s, 3H), 1.06 (s, 9H) ppm. LC-MS (方法B) ES ⁺ : MH ⁺ = 483, 反応時間rt = 2.22分
B8		δ 7.29–7.17 (m, 2H), 7.11–7.01 (m, 2H), 6.83 (s, 2H), 3.38 (dd, 1H), 3.16–3.08 (m, 1H), 3.01 (dd, 1H), 2.87–2.72 (m, 2H), 2.25 (s, 3H), 2.06 (s, 3H), 1.98 (s, 3H), 1.06 (s, 9H) ppm. LC-MS (方法B) ES ⁺ : MH ⁺ = 409, 反応時間= 2.03分

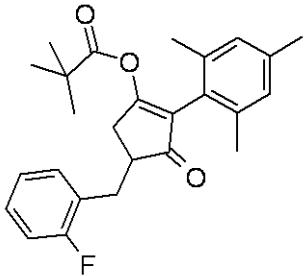
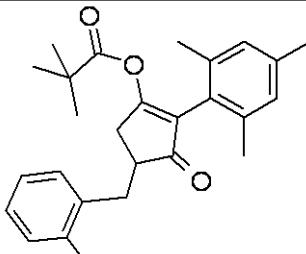
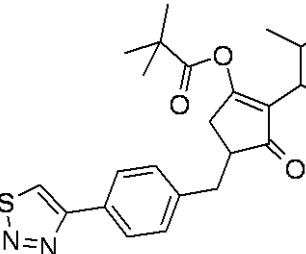
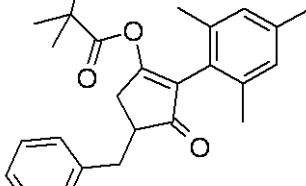
10

20

30

40

【表17】

B9		<p>δ 7.23–7.17 (m, 2H), 7.02–6.95 (m, 2H), 6.86–6.81 (m, 2H), 3.26 (dd, 1H), 3.09–2.92 (m, 2H), 2.87–2.67 (m, 2H), 2.25 (s, 3H), 2.07 (s, 3H), 1.93 (s, 3H), 1.05 (s, 9H) ppm.</p> <p>LC-MS (方法B) ES⁺: MH⁺ = 409, 反応時間= 2.01分</p>
B10		<p>δ 7.22–7.13 (m, 4H), 6.85 (s, 2H), 3.42 (dd, 1H), 3.12–3.05 (m, 1H), 3.03–2.94 (m, 1H), 2.77–2.60 (m, 2H), 2.38 (s, 3H), 2.26 (s, 3H), 2.09–2.06 (m, 6H), 1.06 (s, 9H) ppm.</p> <p>LC-MS (方法B) ES⁺: MH⁺ = 405, 反応時間= 2.09分</p>
B11		<p>LC-MS (方法B) ES⁺: MH⁺ = 475, 反応時間= 1.99分</p>
B12		<p>LC-MS (方法B) ES⁺: MH⁺ = 391, 反応時間= 2.02分</p>

10

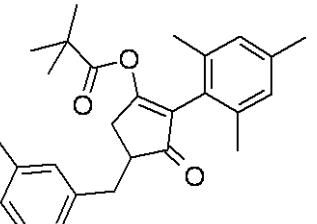
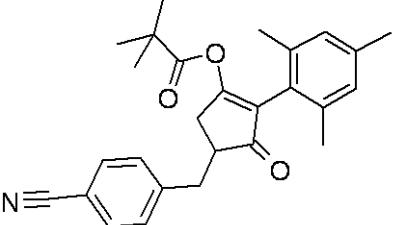
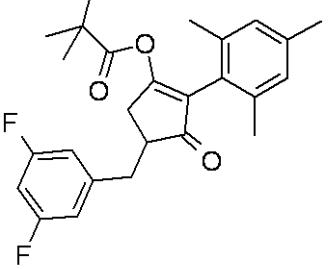
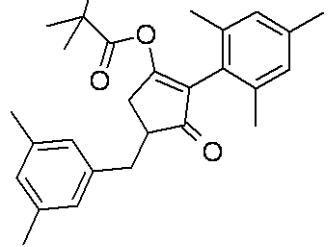
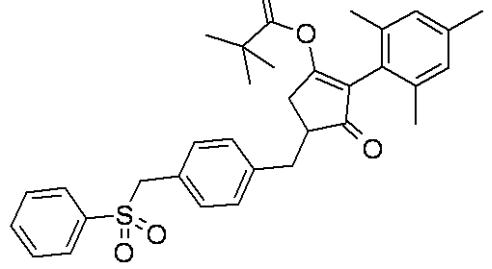
20

30

40

【0356】

【表18】

B13		LC-MS (Method B) ES ⁺ : MH ⁺ = 405, 反応時間= 2.10分
B14		LC-MS (方法B) ES ⁺ : MH ⁺ = 416, 反応時間= 1.91分
B15		LC-MS (方法B) ES ⁺ : MH ⁺ = 427, 反応時間= 2.04分
B16		LC-MS (方法B) ES ⁺ : MH ⁺ = 419, 反応時間= 2.19分
B17		LC-MS (方法B) ES ⁺ : MH ⁺ = 445, 反応時間= 1.98分

10

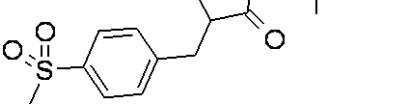
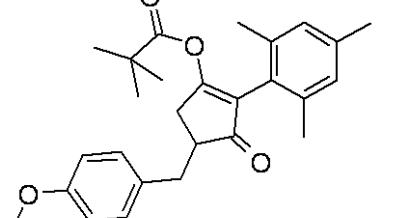
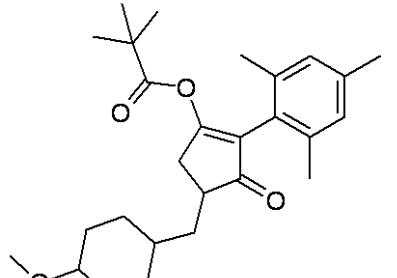
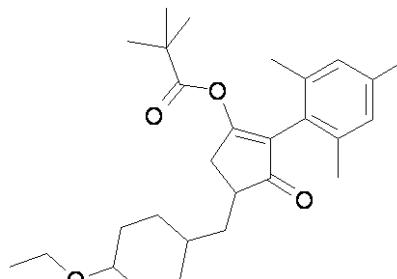
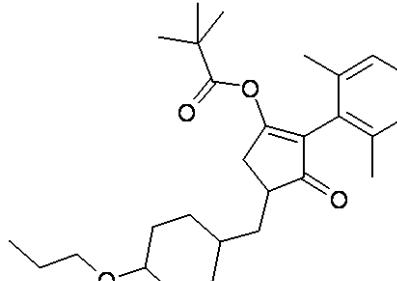
20

30

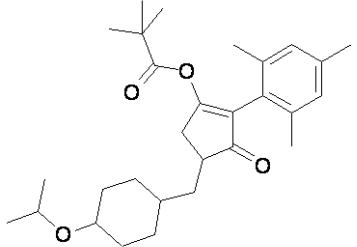
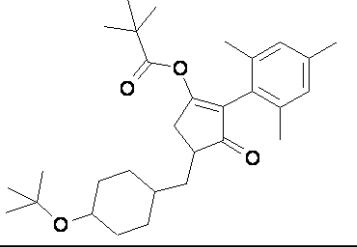
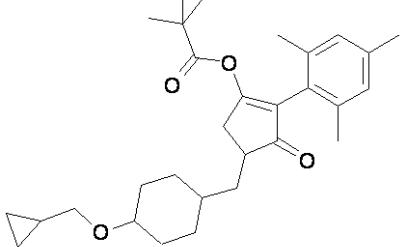
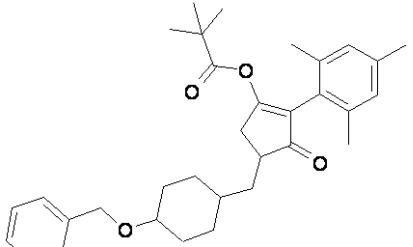
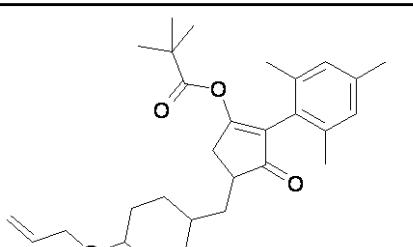
40

【0357】

【表19】

B18		LC-MS (方法B) ES ⁺ : MH ⁺ = 469, 反応時間= 1.75分
B19		LC-MS (方法B) ES ⁺ : MH ⁺ = 421, 反応時間= 1.99分
B20		
B21		
B22		

【表 20】

B23			
B24			10
B25			20
B26			
B27			30
			40

【表 21】

B28		
-----	--	--

10

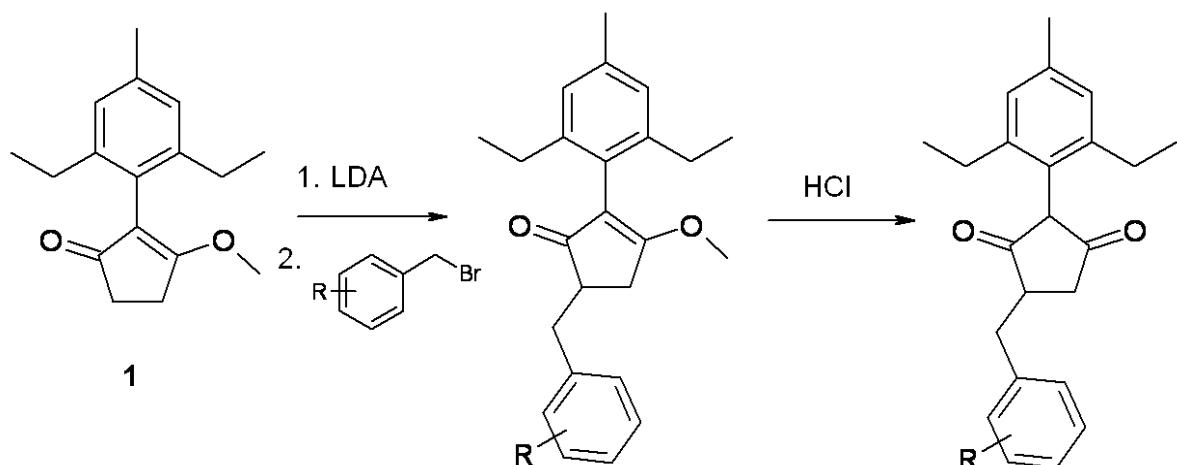
【0360】

表 C1：化合物 C1 ~ C10

以下のシクロヘキサンジオン上にベンジルまたは置換ベンジル側鎖を含有する、2 - (2,6 - ディエチル4 - メチルフェニル) - シクロヘキサン - 1,3 - ジオン（すなわち、A = 式 (I) に従った随意に置換されたフェニル）を、実質的に以下の合成経路および条件によって一般に合成した。

【0361】

【化76】



20

30

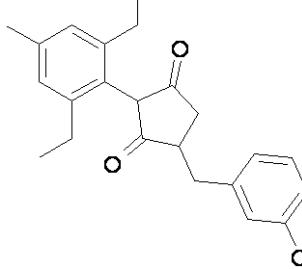
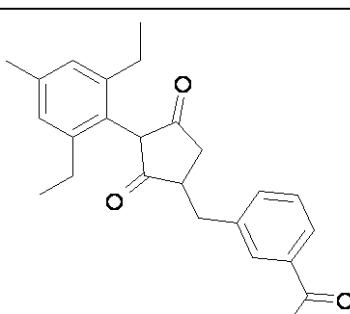
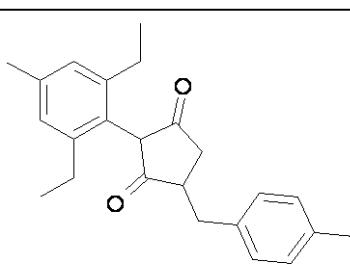
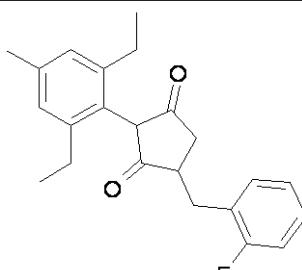
【0362】

上述のスキームの化合物 1 は、国際公開第 WO 2009 / 19005 号から既知である（本明細書において、実施例 2、ステップ 2、項 55 ~ 56 を参照）。LDA = リチウムジイソプロピルアミド。

40

【0363】

【表22】

化合物番号	構造	データ
C1		LC/MS (方法A) ES+: MH+ = 365 反応時間= 1.68
C2		LC/MS (方法A) ES+: MH+ = 379 反応時間= 1.49 分
C3		LC/MS (方法A) ES+: MH+ = 379 反応時間= 1.50分
C4		LC/MS (方法A) ES+: MH+ = 353 反応時間= 1.72分

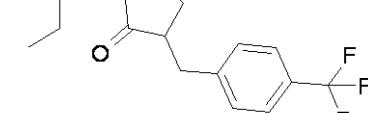
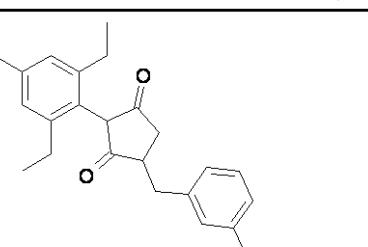
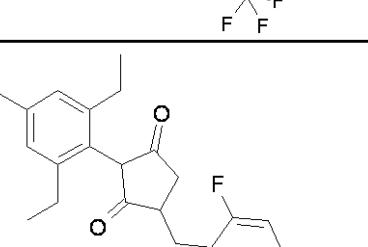
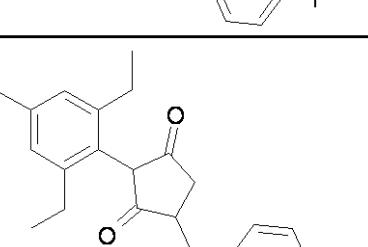
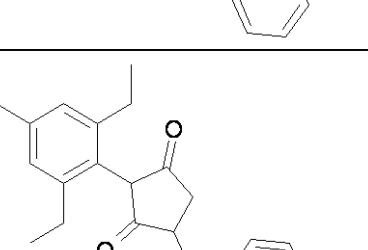
10

20

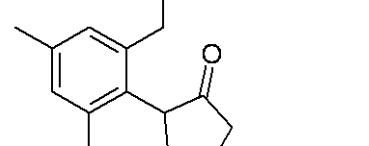
30

40

【表 2 3】

C5		LC/MS (方法A) ES+: MH+ = 403 反応時間= 1.82分
C6		LC/MS (方法A) ES+: MH+ = 403 反応時間= 1.80分
C7		LC/MS (方法A) ES+: MH+ = 371 反応時間= 1.73分
C8		LC/MS (方法A) ES+: MH+ = 335 反応時間= 1.70分
C9		LC/MS (方法A) ES+: MH+ = 353 反応時間= 1.70分

【表2-4】

C10		LC/MS (方法A) ES+: MH+ = 419 反応時間= 1.85分
-----	---	---

【 0 3 6 6 】

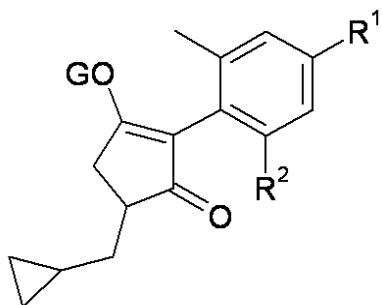
以下の表 1 ~ 2 1 の化合物は、同様の方法で得ることができる。

【 0 3 6 7 】

表 1 は、以下のタイプの 82 個の化合物を網羅する：

【 0 3 6 8 】

【化 7 7】



【 0 3 6 9 】

式中、Gは、水素であり、R¹およびR²は、下記の表1に説明するとおりである：

10

20

30

40

【 0 3 7 0 】

【表25】

化合物番号	R1	R2
1.001	H	CH ₃
1.002	CH ₃	CH ₃
1.003	CH ₂ CH ₃	CH ₃
1.004	F	CH ₃
1.005	Cl	CH ₃
1.006	Br	CH ₃
1.007	CH ₃ O	CH ₃
1.008	CH ₃ CH ₂ O	CH ₃
1.009	-CH=CH ₂	CH ₃

10

20

30

40

【表26】

1.010	-CCH	CH ₃
1.011	フェニル	CH ₃
1.012	2-フルオロフェニル	CH ₃
1.013	2-クロロフェニル	CH ₃
1.014	2-トリフルオロメチルフェニル	CH ₃
1.015	2-ニトロフェニル	CH ₃
1.016	2-メチルフェニル	CH ₃
1.017	2-メタンスルホニルフェニル	CH ₃
1.018	2-シアノフェニル	CH ₃
1.019	3-フルオロフェニル	CH ₃
1.020	3-クロロフェニル	CH ₃
1.021	3-トリフルオロメチルフェニル	CH ₃
1.022	3-ニトロフェニル	CH ₃
1.023	3-メチルフェニル	CH ₃
1.024	3-メタンスルホニルフェニル	CH ₃
1.025	3-シアノフェニル	CH ₃
1.026	4-フルオロフェニル	CH ₃
1.027	4-クロロフェニル	CH ₃
1.028	4-ブロモフェニル	CH ₃
1.029	4-ジフルオロメトキシフェニル	CH ₃
1.030	2-フルオロ-4-トリフルオロメチルフェニル	CH ₃
1.031	3-フルオロ-4-クロロフェニル	CH ₃
1.032	2-クロロ-4-フルオロフェニル	CH ₃
1.033	2-クロロ-4-フルオロフェニル	CH ₃
1.034	3-クロロ-4-フルオロフェニル	CH ₃
1.035	3-クロロ-4-フルオロフェニル	CH ₃
1.036	2-メチル-4-クロロフェニル	CH ₃
1.037	4-トリフルオロメチルフェニル	CH ₃
1.038	4-ニトロフェニル	CH ₃
1.039	4-メチルフェニル	CH ₃
1.040	4-メタンスルホニルフェニル	CH ₃
1.041	4-シアノフェニル	CH ₃
1.042	H	CH ₃ O
1.043	CH ₃	CH ₃ O

10

20

30

40

【表27】

1.044	CH ₂ CH ₃	CH ₃ O
1.045	F	CH ₃ O
1.046	Cl	CH ₃ O
1.047	Br	CH ₃ O
1.048	CH ₃ O	CH ₃ O
1.049	CH ₃ CH ₂ O	CH ₃ O
1.050	-CH=CH ₂	CH ₃ O
1.051	-CCH	CH ₃ O
1.052	フェニル	CH ₃ O
1.053	2-フルオロフェニル	CH ₃ O
1.054	2-クロロフェニル	CH ₃ O
1.055	2-トリフルオロメチルフェニル	CH ₃ O
1.056	2-ニトロフェニル	CH ₃ O
1.057	2-メチルフェニル	CH ₃ O
1.058	2-メタンスルホニルフェニル	CH ₃ O
1.059	2-シアノフェニル	CH ₃ O
1.060	3-フルオロフェニル	CH ₃ O
1.061	3-クロロフェニル	CH ₃ O
1.062	3-トリフルオロメチルフェニル	CH ₃ O
1.063	3-ニトロフェニル	CH ₃ O
1.064	3-メチルフェニル	CH ₃ O
1.065	3-メタンスルホニルフェニル	CH ₃ O
1.066	3-シアノフェニル	CH ₃ O
1.067	4-フルオロフェニル	CH ₃ O
1.068	4-クロロフェニル	CH ₃ O
1.069	4-ブロモフェニル	CH ₃ O
1.070	4-ジフルオロメトキシフェニル	CH ₃ O
1.071	2-フルオロ-4-トリフルオロメチルフェニル	CH ₃ O
1.072	3-フルオロ-4-クロロフェニル	CH ₃ O
1.073	2-クロロ-4-フルオロフェニル	CH ₃ O
1.074	2-クロロ-4-フルオロフェニル	CH ₃ O
1.075	3-クロロ-4-フルオロフェニル	CH ₃ O
1.076	3-クロロ-4-フルオロフェニル	CH ₃ O
1.077	2-メチル-4-クロロフェニル	CH ₃ O

10

20

30

40

【表 2 8】

1.078	4-トリフルオロメチルフェニル	CH ₃ O
1.079	4-ニトロフェニル	CH ₃ O
1.080	4-メチルフェニル	CH ₃ O
1.081	4-メタンスルホニルフェニル	CH ₃ O
1.082	4-シアノフェニル	CH ₃ O

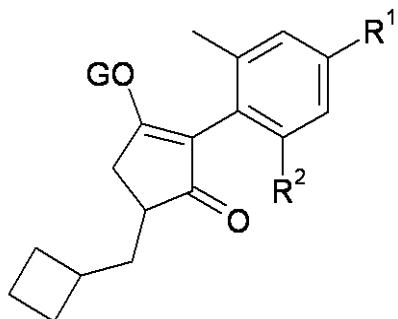
【0 3 7 4】

10

表 2 は、以下のタイプの 8 2 個の化合物を網羅する：

【0 3 7 5】

【化 7 8】



20

【0 3 7 6】

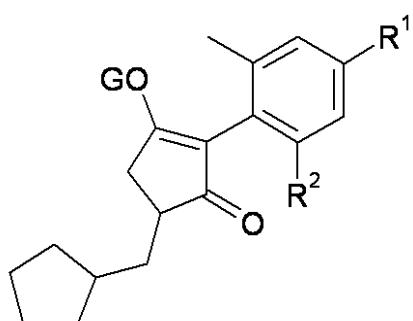
[式中、G は、水素であり、R¹ および R² は、表 1 に説明するとおりである。]

【0 3 7 7】

表 3 は、以下のタイプの 8 2 個の化合物を網羅する：

【0 3 7 8】

【化 7 9】



30

【0 3 7 9】

[式中、G は、水素であり、R¹ および R² は、表 1 に説明するとおりである。]

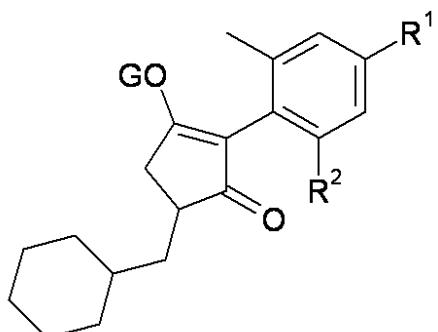
【0 3 8 0】

40

表 4 は、以下のタイプの 8 2 個の化合物を網羅する：

【0 3 8 1】

【化80】



10

【0382】

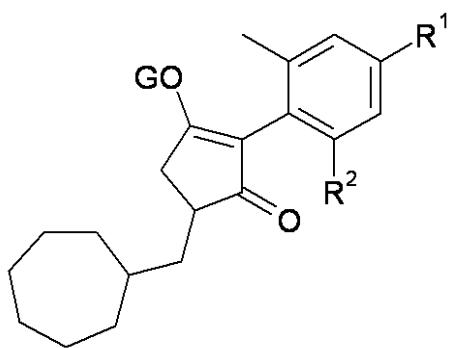
[式中、Gは、水素であり、R¹およびR²は、表1に説明するとおりである。]

【0383】

表5は、以下のタイプの82個の化合物を網羅する

【0384】

【化81】



20

【0385】

[式中、Gは、水素であり、R¹およびR²は、表1に説明するとおりである。]

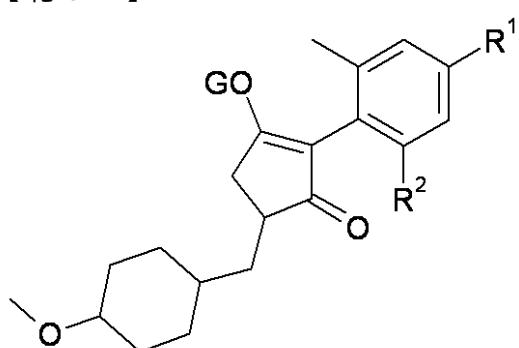
【0386】

表6aは、以下のタイプの82個の化合物を網羅する

30

【0387】

【化82】



40

【0388】

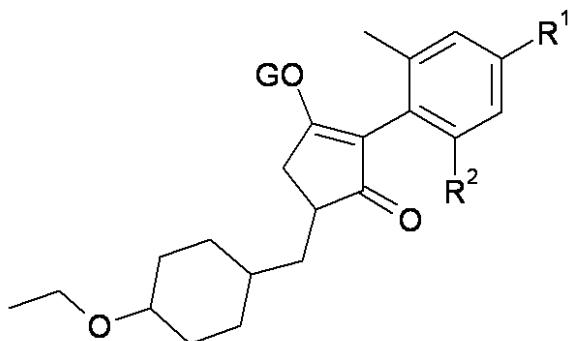
[式中、Gは、水素であり、R¹およびR²は、表1に説明するとおりである。]

【0389】

表6bは、以下のタイプの82個の化合物を網羅する：

【0390】

【化83】



【0391】

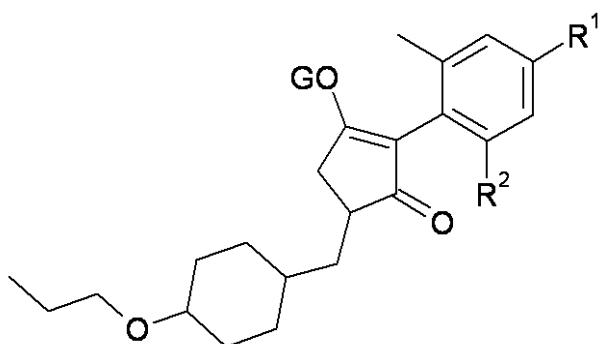
[式中、Gは、水素であり、R¹およびR²は、表1に説明するとおりである。]

【0392】

表6cは、以下のタイプの82個の化合物を網羅する

【0393】

【化84】



【0394】

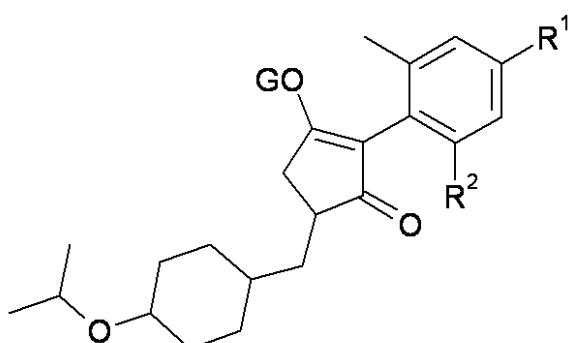
[式中、Gは、水素であり、R¹およびR²は、表1に説明するとおりである。]

【0395】

表6dは、以下のタイプの82個の化合物を網羅する：

【0396】

【化85】



【0397】

[式中、Gは、水素であり、R¹およびR²は、表1に説明するとおりである。]

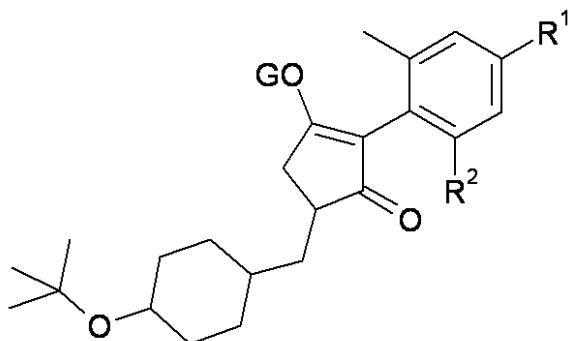
【0398】

表6eは、以下のタイプの82個の化合物を網羅する：

【0399】

40

【化86】



10

【0400】

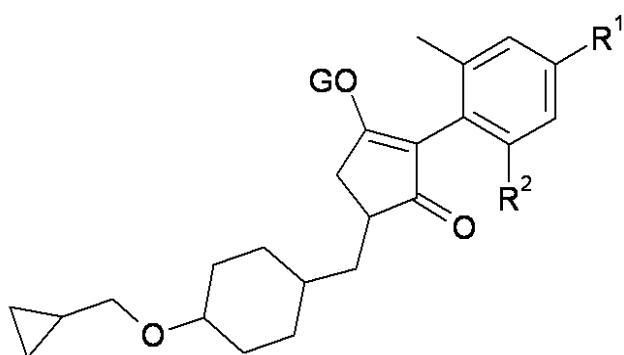
[式中、Gは、水素であり、R¹およびR²は、表1に説明するとおりである。]

【0401】

表6fは、以下のタイプの82個の化合物を網羅する：

【0402】

【化87】



20

【0403】

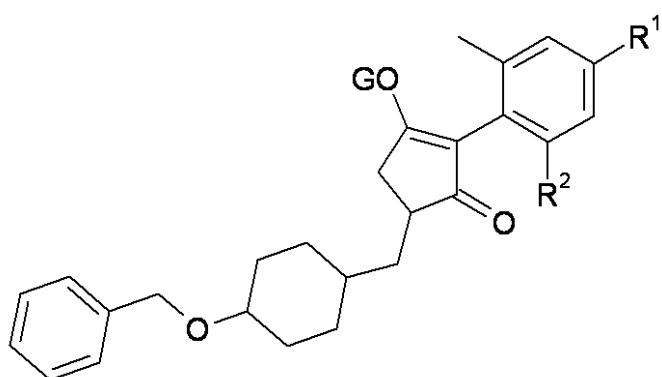
[式中、Gは、水素であり、R¹およびR²は、表1に説明するとおりである。]

【0404】

表6gは、以下のタイプの82個の化合物を網羅する：

【0405】

【化88】



30

【0406】

[式中、Gは、水素であり、R¹およびR²は、表1に説明するとおりである。]

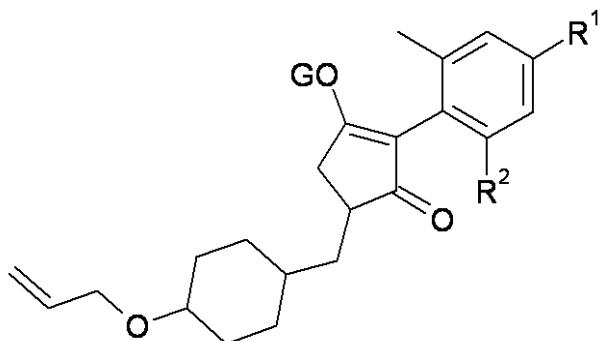
【0407】

表6hは、以下のタイプの82個の化合物を網羅する：

【0408】

40

【化89】



10

【0409】

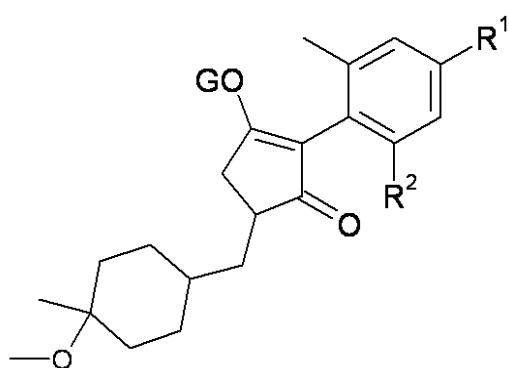
[式中、Gは、水素であり、R¹およびR²は、表1に説明するとおりである。]

【0410】

表6iは、以下のタイプの82個の化合物を網羅する：

【0411】

【化90】



20

【0412】

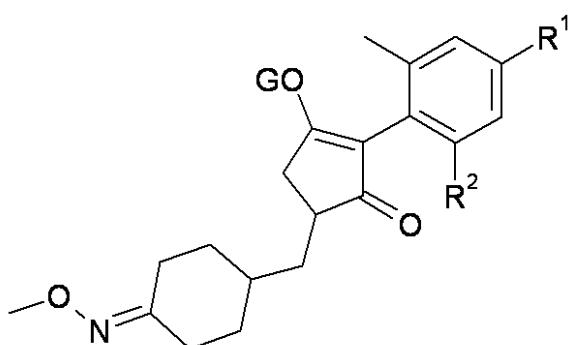
[式中、Gは、水素であり、R¹およびR²は、表1に説明するとおりである。]

【0413】

表7は、以下のタイプの82個の化合物を網羅する：

【0414】

【化91】



30

【0415】

[式中、Gは、水素であり、R¹およびR²は、表1に説明するとおりである。]

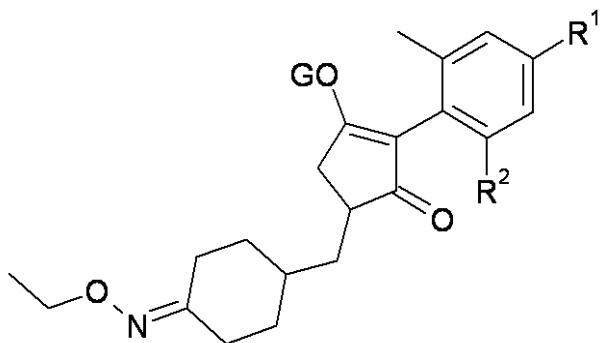
【0416】

表8は、以下のタイプの82個の化合物を網羅する：

【0417】

40

【化92】



10

【0418】

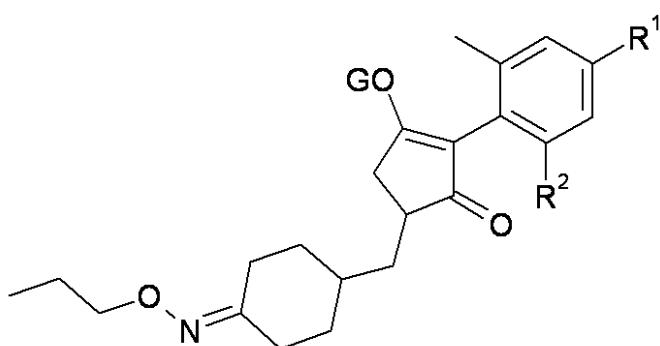
[式中、Gは、水素であり、R¹およびR²は、表1に説明するとおりである。]

【0419】

表9は、以下のタイプの82個の化合物を網羅する：

【0420】

【化93】



20

【0421】

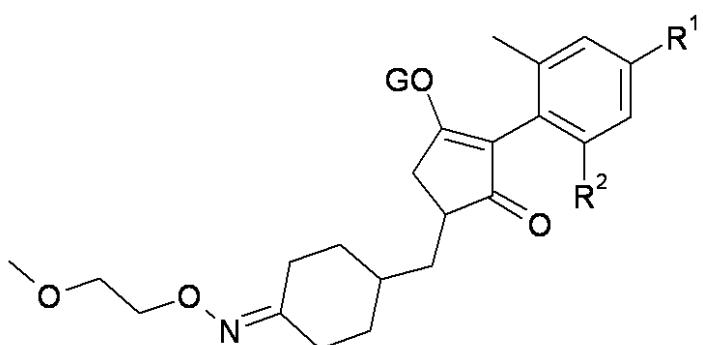
[式中、Gは、水素であり、R¹およびR²は、表1に説明するとおりである。]

【0422】

表10は、以下のタイプの82個の化合物を網羅する

【0423】

【化94】



30

【0424】

[式中、Gは、水素であり、R¹およびR²は、表1に説明するとおりである。]

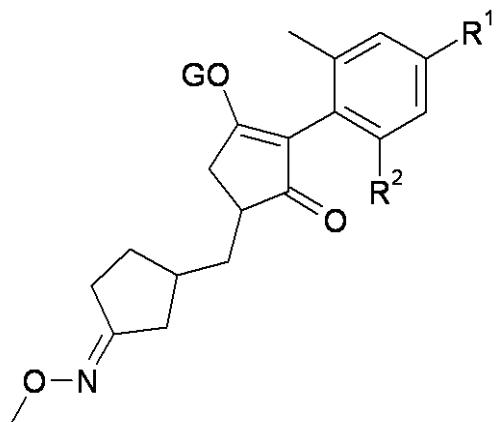
【0425】

表11は、以下のタイプの82個の化合物を網羅する

【0426】

40

【化95】



【0427】

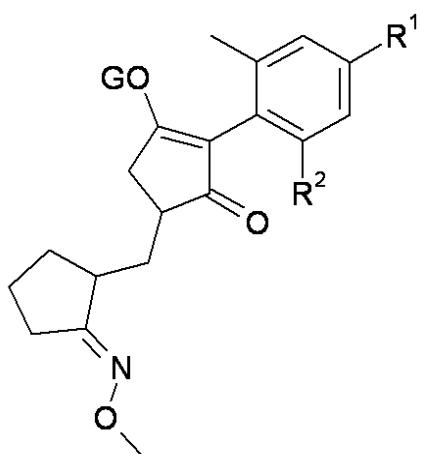
[式中、Gは、水素であり、R¹およびR²は、表1に説明するとおりである。]

【0428】

表12は、以下のタイプの82個の化合物を網羅する：

【0429】

【化96】



【0430】

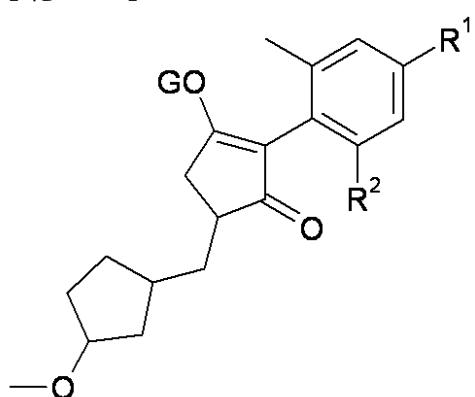
[式中、Gは、水素であり、R¹およびR²は、表1に説明するとおりである。]

【0431】

表13は、以下のタイプの82個の化合物を網羅する：

【0432】

【化97】



【0433】

[式中、Gは、水素であり、R¹およびR²は、表1に説明するとおりである。]

10

20

30

40

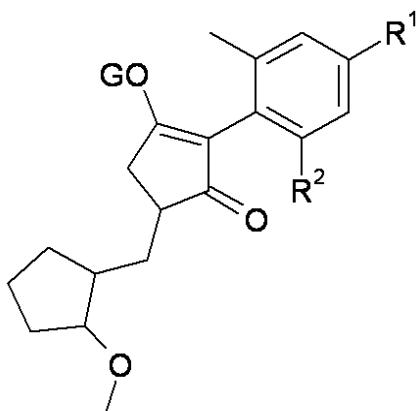
50

【0434】

表14は、以下のタイプの82個の化合物を網羅する：

【0435】

【化98】



【0436】

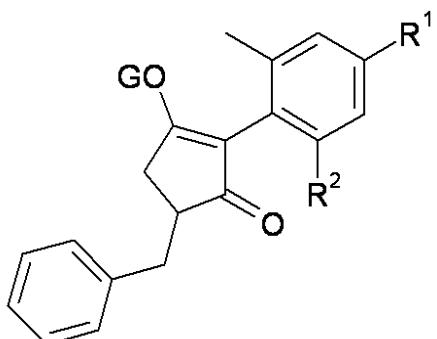
[式中、Gは、水素であり、R¹およびR²は、表1に説明するとおりである。]

【0437】

表15は、以下のタイプの82個の化合物を網羅する：

【0438】

【化99】



20

30

【0439】

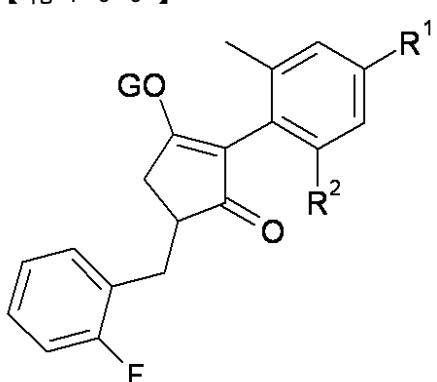
[式中、Gは、水素であり、R¹およびR²は、表1に説明するとおりである。]

【0440】

表16は、以下のタイプの82個の化合物を網羅する：

【0441】

【化100】



40

【0442】

[式中、Gは、水素であり、R¹およびR²は、表1に説明するとおりである。]

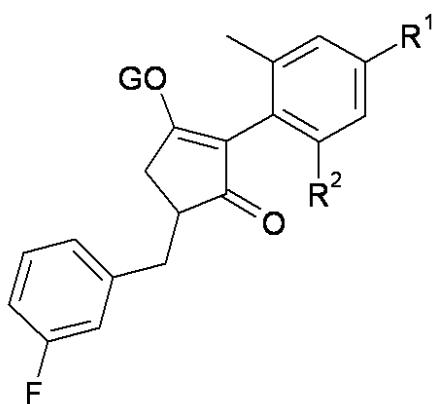
【0443】

50

表17は、以下のタイプの82個の化合物を網羅する：

【0444】

【化101】



10

【0445】

[式中、Gは、水素であり、R¹およびR²は、表1に説明するとおりである。]

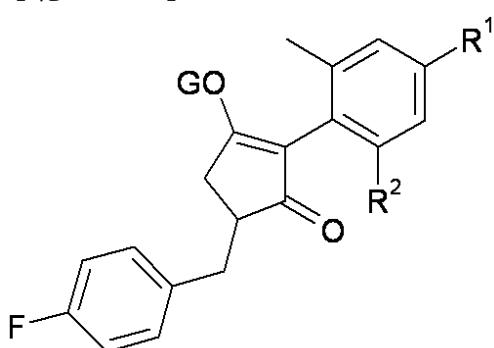
【0446】

表18は、以下のタイプの82個の化合物を網羅する：

【0447】

【化102】

20



30

【0448】

[式中、Gは、水素であり、R¹およびR²は、表1に説明するとおりである。]

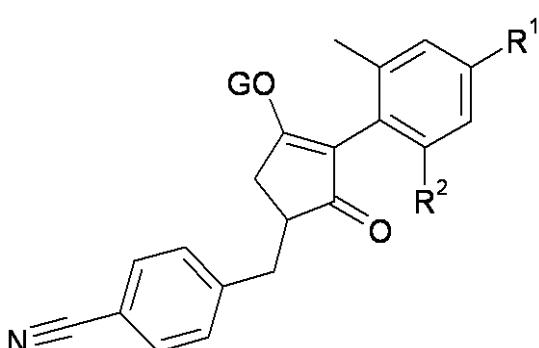
【0449】

表19は、以下のタイプの82個の化合物を網羅する：

【0450】

【化103】

40



【0451】

[式中、Gは、水素であり、R¹およびR²は、表1に説明するとおりである。]

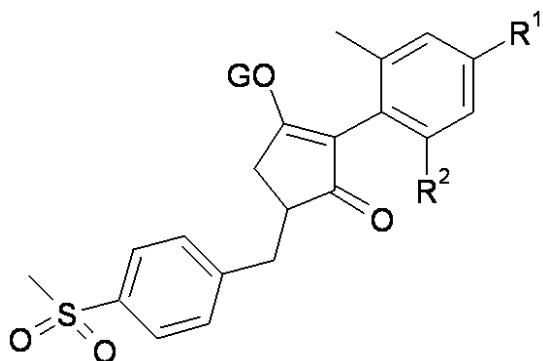
【0452】

表20は、以下のタイプの82個の化合物を網羅する：

50

【0453】

【化104】



10

【0454】

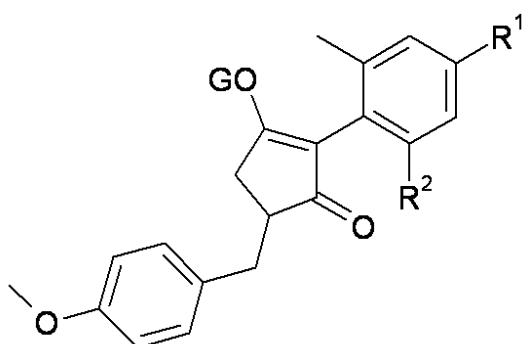
[式中、Gは、水素であり、R¹およびR²は、表1に説明するとおりである。]

【0455】

表21は、以下のタイプの82個の化合物を網羅する：

【0456】

【化105】



20

【0457】

[式中、Gは、水素であり、R¹およびR²は、表1に説明するとおりである。]

30

【0458】

生物学的実施例

実施例A:

種々の試験種の種を鉢中の基準土壌に蒔いた。温室中の制御された条件下(24/16、日中/夜間；14時間の光；65%の湿度)で、栽培後1日目(出芽前)または栽培後8日目(出芽後)、0.5%Tween 20(ポリオキシエチレンソルビタンモノラウレート、CAS RN 9005-64-5)を含有するアセトン/水(50:50)溶液中の技術的活性成分の製剤から得られる水性噴霧溶液を、植物に噴霧した。

【0459】

次いで、試験植物を、温室中の制御された条件下(24/16、日中/夜間；14時間の光；65%の湿度)で成長させ、1日2回水をやった。出芽前および出芽後13日目、試験を評価した(100=植物への全損傷；0=植物への損傷なし)。

40

【0460】

試験植物:

ペレニアルライグラス(LOLPE)、ノスズメノテッポウ(ALOMY)、ヒエ(ECHCG)、およびカラスムギ(AVEFA)。

【0461】

【表29】

出芽後活性

化合物番号	割合g/h a	LOLPE	ALOMY	ECHCG	AVEFA
A1	250	80	80	90	80
A2	250	100	70	90	80
A3	250	90	90	90	80
A4	250	60	70	90	70
A5	250	30	30	30	20
A6	250	80	80	80	60
A7	250	30	50	80	40
A8	250	100	70	50	90
A9	250	100	100	80	90
A10	250	40	20	70	20
A11	250	50	10	20	0
A13	250	20	30	20	30

10

20

30

40

50

【 0 4 6 2 】

【 表 3 0 】

A14	250	90	80	80	30
A15	250	90	80	40	50
A16	250	30	20	50	50
A17	250	80	80	60	40
A18	250	90	80	50	50
A19	250	90	90	90	60
A20	250	50	20	50	30
A21	250	30	40	60	20
A22	250	20	0	20	10
A23	250	50	90	90	90
A24	250	80	80	30	90
A25	250	100	60	90	80
A26	250	90	60	70	50
A27	250	100	60	100	70
A28	250	100	70	90	50
A29	250	90	0	50	0
A30	250	60	60	80	70
A31	250	70	20	80	20
A32	250	100	70	100	90
A33	250	100	30	60	70
A34	250	30	20	10	10
A35	250	80	50	80	20
A36	250	70	40	70	90
A37	250	50	20	60	10
A38	250	100	100	100	100
A39	250	50	90	100	90
B1	250	70	50	30	10
B2	250	90	80	60	80
B3	250	90	70	90	90
B4	250	90	60	70	80
B6	250	90	80	90	90
B7	250	20	20	20	0
B8	250	70	40	40	20
B9	250	80	70	80	20

10

20

30

40

50

【 0 4 6 3 】

【表 3 1】

B10	250	90	50	40	30
B12	250	90	60	50	30
B13	250	80	60	60	30
B14	250	60	70	70	50
B15	250	70	10	50	10
B16	250	40	30	50	10
B18	250	50	70	80	80
B19	250	80	80	30	60

10

【 0 4 6 4 】

【表 3 2】

発芽前活性

化合物番号	割合g/h a	LOLPE	ALOMY	ECHCG	AVEFA
A1	250	100	70	100	50
A2	250	100	70	90	70
A3	250	100	100	100	70
A4	250	100	100	100	70
A5	250	40	30	80	0
A6	250	100	50	90	50
A7	250	60	40	50	20
A8	250	90	60	90	40
A9	250	100	70	100	70
A10	250	80	0	20	0
A11	250	20	0	0	0
A13	250	40	10	20	0
A14	250	100	70	90	40
A15	250	100	70	60	70
A16	250	70	10	80	30
A17	250	90	50	70	30
A18	250	100	80	100	50
A19	250	90	80	100	40
A20	250	100	30	80	20
A21	250	100	60	90	20

20

30

40

50

【 0 4 6 5 】

【 表 3 3 】

A22	250	20	0	30	0
A23	250	100	90	90	80
A24	250	100	90	80	80
A25	250	100	100	100	60
A26	250	100	90	100	90
A27	250	100	90	100	70
A28	250	100	90	100	70
A29	250	90	50	90	50
A30	250	100	80	100	70
A31	250	90	40	90	20
A32	250	90	70	100	50
A33	250	0	30	100	50
A34	250	0	10	60	0
A35	250	30	50	100	50
A36	250	10	70	70	50
A37	250	0	40	60	20
A38	250	100	90	100	60
A39	250	50	60	100	80
B1	250	80	70	100	20
B2	250	100	30	100	0
B3	250	90	70	50	50
B5	250	90	70	70	40
B6	250	100	70	90	50
B7	250	20	30	0	0
B8	250	100	70	50	30
B9	250	100	90	70	40
B10	250	100	30	30	20
B12	250	90	30	40	20
B13	250	70	40	60	20
B14	250	80	60	50	10
B15	250	70	20	40	20
B16	250	80	40	50	10
B18	250	70	60	80	60
B19	250	80	40	10	30

10

20

30

40

【 0 4 6 6 】

実施例 B :

種々の冬小麦「Hereward」の種を鉢中の基準土壌に蒔いた。温室中の制御された条件下(24/16、日中/夜間; 14時間の光; 65%の湿度)で、栽培後1日目(出芽前)または栽培後8日目(出芽後)、0.5% Tween 20(ポリオキシエチレンソルビタンモノラウレート、CAS RN 9005-64-5)を含有するアセトン/水(50:50)溶液中の技術的活性成分の製剤から得られる水性噴霧溶液を、植物に噴霧した。温室試験の開始前に1キログラムの乾燥種当たり0.5グラムの比率で、種々の冬小麦の種「Hereward」を、穀物除草剤薬害軽減剤の可溶性粉末製剤、クロキ

50

ントセットメキシルで処理された種であった。1つの種を、試験化合物の施用前8日目に、1cmの深さで、砂壌土中に1.5インチのプラスチックポット毎に蒔き、温室中の制御された条件下(24/16、日中/夜間；14時間の光；65%の湿度)で水をやり、成長させた。植物を、0.5%Tween 20(ポリオキシエチレンソルビタンモノラウレート、CAS RN 9005-64-5)アセトン/水(50:50)溶液中の技術的活性成分の製剤から得られる水性噴霧溶液で発芽後に噴霧した。

【0467】

次いで、試験植物を、温室中の制御された条件下(24/16、日中/夜間；14時間の光；65%の湿度)で成長させ、1日2回水をやった。出芽前および出芽後13日目、試験を評価した(100=植物への全損傷；0=植物への損傷なし)。

10

【0468】

【表34】

化合物番号	割合g/ha	冬小麦 (Hereward)	冬小麦 (Hereward) +クロキントセットメキシル
A1	250	60	50
A2	250	70	10
A3	250	60	20
A4	250	60	0
A5	250	10	0
A6	250	10	0
A7	250	20	0
A8	250	30	10

20

30

40

50

【 0 4 6 9 】

【 表 3 5 】

A9	250	30	40
A10	250	10	0
A11	250	0	0
A14	250	30	20
A15	250	30	20
A17	250	10	10
A18	250	20	10
A19	250	60	10
A20	250	10	0
A21	250	20	20
A23	250	50	50
A24	250	40	10
A25	250	30	0
A26	250	40	20
A27	250	40	0
A28	250	30	10
A30	250	50	0
A31	250	20	0
A32	250	30	0
A33	250	40	0
A34	250	20	10
A35	250	20	0
A36	250	20	0
A38	250	70	50
B1	250	10	0
B2	250	70	0
B3	250	40	30
B5	250	40	10

10

20

30

【国際調査報告】

INTERNATIONAL SEARCH REPORT					International application No PCT/GB2010/001354															
A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER INV. C07C49/657 C07C49/683 C07C65/36 C07C69/24 C07C69/28 C07C205/45 C07C251/44 C07C255/56 C07C317/24 A01N31/06 A01N31/08 A01N33/20 A01N33/24 A01N37/02 A01N37/10																				
According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC																				
B. FIELDS SEARCHED <small>Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)</small> A01N C07C C07D																				
Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched																				
Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practical, search terms used) EPO-Internal, CHEM ABS Data, WPI Data, BEILSTEIN Data																				
C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT <table border="1" style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <thead> <tr> <th style="text-align: left; padding: 2px;">Category*</th> <th style="text-align: left; padding: 2px;">Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages</th> <th style="text-align: left; padding: 2px;">Relevant to claim No.</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td style="padding: 2px;">Y</td> <td style="padding: 2px;">US 4 283 348 A (WHEELER THOMAS N) 11 August 1981 (1981-08-11) cited in the application column 1, line 7 - line 57 column 9, line 55 - line 56 column 9, line 59 - line 60</td> <td style="padding: 2px;">1-15, 17-25</td> </tr> <tr> <td style="padding: 2px;">A</td> <td style="padding: 2px;"></td> <td style="padding: 2px;">16</td> </tr> <tr> <td style="padding: 2px;">Y</td> <td style="padding: 2px;">US 5 840 661 A (FISCHER REINER [DE] ET AL) 24 November 1998 (1998-11-24) cited in the application column 1, line 6 - column 3, line 7; table 1</td> <td style="padding: 2px;">1-7, 9, 10, 13, 19-25</td> </tr> <tr> <td style="padding: 2px;">Y</td> <td style="padding: 2px;">US 4 489 012 A (HODAKOWSKI LEONARD E [US]) 18 December 1984 (1984-12-18) column 3, line 22 - line 44</td> <td style="padding: 2px;">1-15, 17-25</td> </tr> </tbody> </table>						Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.	Y	US 4 283 348 A (WHEELER THOMAS N) 11 August 1981 (1981-08-11) cited in the application column 1, line 7 - line 57 column 9, line 55 - line 56 column 9, line 59 - line 60	1-15, 17-25	A		16	Y	US 5 840 661 A (FISCHER REINER [DE] ET AL) 24 November 1998 (1998-11-24) cited in the application column 1, line 6 - column 3, line 7; table 1	1-7, 9, 10, 13, 19-25	Y	US 4 489 012 A (HODAKOWSKI LEONARD E [US]) 18 December 1984 (1984-12-18) column 3, line 22 - line 44	1-15, 17-25
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.																		
Y	US 4 283 348 A (WHEELER THOMAS N) 11 August 1981 (1981-08-11) cited in the application column 1, line 7 - line 57 column 9, line 55 - line 56 column 9, line 59 - line 60	1-15, 17-25																		
A		16																		
Y	US 5 840 661 A (FISCHER REINER [DE] ET AL) 24 November 1998 (1998-11-24) cited in the application column 1, line 6 - column 3, line 7; table 1	1-7, 9, 10, 13, 19-25																		
Y	US 4 489 012 A (HODAKOWSKI LEONARD E [US]) 18 December 1984 (1984-12-18) column 3, line 22 - line 44	1-15, 17-25																		
<input type="checkbox"/> Further documents are listed in the continuation of Box C.			<input checked="" type="checkbox"/> See patent family annex.																	
<small>* Special categories of cited documents :</small> <ul style="list-style-type: none"> *A* document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance *E* earlier document but published on or after the international filing date *L* document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified) *O* document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means *P* document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed 																				
<small>*T* later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention</small>																				
<small>*X* document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone</small>																				
<small>*Y* document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art.</small>																				
<small>*&* document member of the same patent family</small>																				
Date of the actual completion of the International search			Date of mailing of the International search report																	
22 October 2010			29/10/2010																	
Name and mailing address of the ISA/ European Patent Office, P.B. 5818 Patentlaan 2 NL - 2280 HV Rijswijk Tel. (+31-70) 340-2040, Fax (+31-70) 340-3016			Authorized officer Mooren, Nicolai																	

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

Information on patent family members

International application No
PCT/GB2010/001354

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member(s)		Publication date
US 4283348	A 11-08-1981	NONE		
US 5840661	A 24-11-1998	AU 2925195 A	09-02-1996	
		BR 9508247 A	23-12-1997	
		WO 9601798 A1	25-01-1996	
		EP 0769001 A1	23-04-1997	
		ES 2150575 T3	01-12-2000	
		ES 2229614 T3	16-04-2005	
		JP 3847335 B2	22-11-2006	
		JP 10504537 T	06-05-1998	
US 4489012	A 18-12-1984	NONE		

フロントページの続き

(51) Int.Cl.	F I	テーマコード(参考)
C 0 7 C 255/56	(2006.01)	C 0 7 C 255/56
C 0 7 C 317/24	(2006.01)	C 0 7 C 317/24
C 0 7 C 69/28	(2006.01)	C 0 7 C 69/28
C 0 7 C 65/36	(2006.01)	C 0 7 C 65/36
A 0 1 N 35/06	(2006.01)	A 0 1 N 35/06
A 0 1 P 13/00	(2006.01)	A 0 1 P 13/00
A 0 1 N 35/10	(2006.01)	A 0 1 N 35/10
A 0 1 N 37/34	(2006.01)	A 0 1 N 37/34 1 0 3
A 0 1 N 43/828	(2006.01)	A 0 1 N 43/82 1 0 2
A 0 1 N 41/10	(2006.01)	A 0 1 N 41/10 A
C 0 7 D 285/06	(2006.01)	C 0 7 D 285/06

(81) 指定国 AP(BW,GH,GM,KE,LR,LS,MW,MZ,NA,SD,SL,SZ,TZ,UG,ZM,ZW),EA(AM,AZ,BY,KG,KZ,MD,RU,TJ,TM),EP(AL,AT,BE,BG,CH,CY,CZ,DE,DK,EE,ES,FI,FR,GB,GR,HR,HU,IE,IS,IT,LT,LU,LV,MC,MK,MT,NL,NO,PL,PT,RO,S,E,SI,SK,SM,TR),OA(BF,BJ,CF,CG,CI,CM,GA,GN,GQ,GW,ML,MR,NE,SN,TD,TG),AE,AG,AL,AM,AO,AT,AU,AZ,BA,BB,BG,BH,BR,BW,BY,BZ,CA,CH,CL,CN,CO,CR,CU,CZ,DE,DK,DM,DO,DZ,EC,EE,EG,ES,FI,GB,GD,GE,GH,GM,GT,HN,HR,HU,ID,IL,IN,IS,JP,KE,KG,KM,KN,KP,KR,KZ,LA,LC,LK,LR,LS,LT,LU,LY,MA,MD,ME,MG,MK,MN,MW,MX,MY,MZ,NA,NG,NI,NO,NZ,OM,PE,PG,PH,PL,PT,RO,RS,RU,SC,SD,SE,SG,SK,SL,SM,ST,SV,SY,TH,TJ,TM,TN,TR,TT,TZ,UA,UG,US,UZ,VC,VN,ZA,ZM,ZW

(74) 代理人 100117019

弁理士 渡辺 陽一

(74) 代理人 100150810

弁理士 武居 良太郎

(74) 代理人 100164563

弁理士 佐々木 貴英

(72) 発明者 ダニエル ジェイソン フォーリー

イギリス国, バークシャー アールジー 4 2 6イーウィ , ブラックネル , ジェロッツ ヒル インターナショナル リサーチ センター , シンジェンタ リミテッド

(72) 発明者 ステファーヌ アンドレ マリー ジャンマール

スイス国, ツェーハー - 4 3 3 2 シュタイン , シャフハウゼンシュトライセ , ベルク シュタイン , シンジェンタ クロップ プロテクション アクチングゼルシャフト

(72) 発明者 エイドリアン ロングスタッフ

イギリス国, バークシャー アールジー 4 2 6イーウィ , ブラックネル , ジェロッツ ヒル インターナショナル リサーチ センター , シンジェンタ リミテッド

(72) 発明者 ロバート ウィリアム パーソンズ

イギリス国, バークシャー アールジー 4 2 6イーウィ , ブラックネル , ジェロッツ ヒル インターナショナル リサーチ センター , シンジェンタ リミテッド

(72) 発明者 クレア ジャネット ラッセル

イギリス国, バークシャー アールジー 4 2 6イーウィ , ブラックネル , ジェロッツ ヒル インターナショナル リサーチ センター , シンジェンタ リミテッド

(72) 発明者 ジョン ベンジャミン テイラ

イギリス国, バークシャー アールジー 4 2 6イーウィ , ブラックネル , ジェロッツ ヒル インターナショナル リサーチ センター , シンジェンタ リミテッド

(72) 発明者 ジェフリー スティーブン ウエールズ

イギリス国, バークシャー アールジー 4 2 6イーウィ , ブラックネル , ジェロッツ ヒル インターナショナル リサーチ センター , シンジェンタ リミテッド

F ターム(参考) 4C036 AD04 AD19 AD27

4H006 AA01 AA03 AB04 BM73 BP30 BR70 BS30 BW18 BW31 BW44
4H011 AB01 BA01 BB05 BB06 BB07 BB10 BC03 BC06 BC18 DA16
DC05 DD03

【要約の続き】

度もしくは二度置換された C₃ - C₇ シクロアルキルであるか、あるいは、A は、1 つの (C₃ - C₆ シクロアルキル) メトキシ、C₃ - C₆ シクロアルキルオキシ、C₂ - C₅ アルケニル - CH₂ - オキシ、またはベンジルオキシ置換基によって、4 位で、一度置換されたシクロヘキシルであるか、あるいは、A は、デカヒドロ - 1 - ナフチルまたはデカヒドロ - 2 - ナフチルであるか、あるいは、A は、随意に置換されたフェニルであり、かつ G は、水素、または農学的に許容される金属、スルホニウム、アンモニウム、もしくは潜在性基である] で表わされる化合物は、除草剤としての使用に好適である。