

(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)

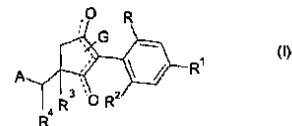
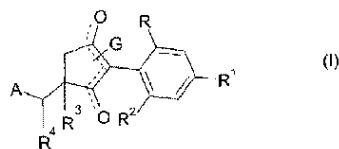
|                                      |                      |             |
|--------------------------------------|----------------------|-------------|
| (51) Int.Cl.                         | F I                  | テーマコード (参考) |
| <b>C O 7 C 49/657 (2006.01)</b>      | C O 7 C 49/657       | 4 C O 3 6   |
| <b>C O 7 C 251/44 (2006.01)</b>      | C O 7 C 251/44 C S P | 4 H O O 6   |
| <b>C O 7 C 69/24 (2006.01)</b>       | C O 7 C 69/24        | 4 H O 1 1   |
| <b>C O 7 C 49/84 (2006.01)</b>       | C O 7 C 49/84 B      |             |
| <b>C O 7 C 49/697 (2006.01)</b>      | C O 7 C 49/697       |             |
| 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) | (71) 出願人 | 500371307             |
| (86) (22) 出願日 | 平成22年7月15日 (2010.7.15)       |          | シンジェンタ リミテッド          |
| (85) 翻訳文提出日   | 平成24年1月30日 (2012.1.30)       |          | イギリス国 サリー ジーユー2 7ワイ   |
| (86) 国際出願番号   | PCT/GB2010/001354            |          | エイチ, ギルドフォード, サリー リサー |
| (87) 国際公開番号   | W02011/007146                |          | チ パーク, プリーストリー ロード, ユ |
| (87) 国際公開日    | 平成23年1月20日 (2011.1.20)       |          | アロピーアン リージョナル センター    |
| (31) 優先権主張番号  | 0912385.2                    | (74) 代理人 | 100099759             |
| (32) 優先日      | 平成21年7月16日 (2009.7.16)       |          | 弁理士 青木 篤              |
| (33) 優先権主張国   | 英国 (GB)                      | (74) 代理人 | 100077517             |
|               |                              |          | 弁理士 石田 敬              |
|               |                              | (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) :



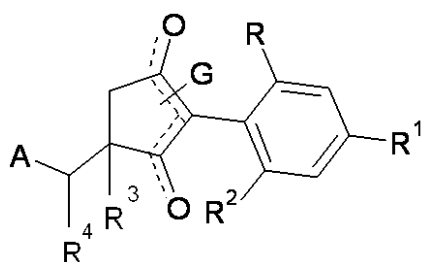
[式中、Rは、メチル、エチル、ビニル、エチニル、またはシクロプロピルであり、R<sup>1</sup>は、水素、C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>アルキル、C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>ハロアルキル、C<sub>3</sub>-C<sub>7</sub>シクロアルキル、C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>アルコキシ、C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>ハロアルコキシ、ビニル、プロペニル、エチニル、プロビニル、ハロゲン、または随意に置換されたフェニルであり、R<sup>2</sup>は、メチル、エチル、ビニル、エチニル、またはメトキシであり、R<sup>3</sup>およびR<sup>4</sup>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C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>アルキル、C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>ハロアルキル、C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>アルコキシ、C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>アルキルカルボニルオキシ、C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>アルケニル、=O、または=N-R<sub>10</sub>によって-

## 【特許請求の範囲】

## 【請求項 1】

式 I :

## 【化 1】



(I)

10

[ 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<sup>1</sup> は、水素、C<sub>1</sub> - C<sub>6</sub> アルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>6</sub> ハロアルキル、C<sub>3</sub> - C<sub>7</sub> シクロアルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>6</sub> アルコキシ、C<sub>1</sub> - C<sub>6</sub> 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<sup>2</sup> 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<sup>3</sup> および R<sup>4</sup> 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 C<sub>1</sub> - C<sub>6</sub> アルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>6</sub> ハロアルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>6</sub> アルコキシ、C<sub>1</sub> - C<sub>6</sub> アルキルカルボニルオキシ、C<sub>2</sub> - C<sub>6</sub> アルケニル、= O、もしくは = N - R<sup>10</sup> によって一度もしくは二度置換された C<sub>3</sub> - C<sub>7</sub> シクロアルキルであり、R<sup>10</sup> は、ヒドロキシル、C<sub>1</sub> - C<sub>6</sub> アルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>6</sub> ハロアルキル、C<sub>3</sub> - C<sub>7</sub> シクロアルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>6</sub> アルコキシ、C<sub>1</sub> - C<sub>6</sub> ハロアルコキシ、C<sub>1</sub> - C<sub>6</sub> アルコキシ、または C<sub>1</sub> - C<sub>6</sub> ハロアルコキシであるか、

あるいは A は、1 つの (C<sub>3</sub> - C<sub>6</sub> シクロアルキル) メトキシ、C<sub>3</sub> - C<sub>6</sub> シクロアルキルオキシ、C<sub>2</sub> - C<sub>5</sub> アルケニル - CH<sub>2</sub> - 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、

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 (latent) 基であって、

G が潜在性基であるとき、前記潜在性基 G は、C<sub>1</sub> - C<sub>8</sub> アルキル、C<sub>2</sub> - C<sub>8</sub> ハロアルキル、フェニル C<sub>1</sub> - C<sub>8</sub> アルキル (前記フェニルが C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> アルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> ハロアルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> アルコキシ、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> ハロアルコキシ、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> アルキルチオ、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> アルキルスルフィニル、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> 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<sub>1</sub> - C<sub>8</sub> アルキル (前記ヘテロアリールが C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> アルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> ハロアルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> アルコキシ、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> ハロアルコキシ、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> アルキルチオ、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> アルキルスルフィニル、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> 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<sub>3</sub> - C<sub>8</sub> アルケニル、C<sub>3</sub> - C<sub>8</sub> ハロアルケニル、C<sub>3</sub> - C<sub>8</sub> アルキニル、C(X<sup>a</sup>) - R<sup>a</sup>、C(X<sup>b</sup>) - X<sup>c</sup> - R<sup>b</sup>、C(X<sup>d</sup>) - N(R<sup>c</sup>) - R<sup>d</sup>、- SO<sub>2</sub> - R<sup>e</sup>、- P(X<sup>e</sup>)(R<sup>f</sup>) - R<sup>g</sup>、および CH<sub>2</sub> - X<sup>f</sup> - R<sup>h</sup> の基から選択され、

20

30

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、 $C_1 - C_{18}$  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、 $C_1 - C_{10}$  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、 $C_1 - C_{18}$  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、 $C_1 - C_{10}$  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、 $C_1 - C_5$  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、

10

20

30

40

50

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)、 $C_3 - C_5$  ハロアルケニル、 $C_3 - C_8$  シクロアルキル、フェニル、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るフェニル、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、 $C_1 - C_{10}$  アルキル、 $C_3 - C_{10}$  アルケニル、 $C_3 - C_{10}$  アルキニル、 $C_2 - C_{10}$  ハロアルキル、 $C_1 - C_{10}$  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、 $C_3 - C_5$  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、 $C_1 - C_5$  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 -  $N - (C_2 - C_5)$  アルキルアミノアルキル、 $C_3 - C_6$  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; 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; 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; 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; 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; あるいは  $C_3 - C_7$  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、 $C_1 - C_{10}$  アルキル、 $C_2 - C_{10}$  アルケニル、 $C_2 - C_{10}$  アルキニル、 $C_1 - C_{10}$  ハロアルキル、 $C_1 - C_{10}$  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 ( $C_1 - C$

10

20

30

40

50

<sub>5</sub>) アルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub> アルコキシ (C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub>) アルキル、C<sub>3</sub> - C<sub>5</sub> アルケニルオキシ (C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub>) アルキル、C<sub>3</sub> - C<sub>5</sub> アルキニルオキシ (C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub>) アルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub> アルキルチオ (C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub>) アルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub> アルキルスルフィニル (C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub>) アルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub> アルキルスルホニル (C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub>) アルキル、C<sub>2</sub> - C<sub>8</sub> アルキリデンアミノオキシ (C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub>) アルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub> アルキルカルボニル (C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub>) アルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub> アルコキシカルボニル (C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub>) アルキル、アミノカルボニル (C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub>) アルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub> アルキルアミノカルボニル (C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub>) アルキル、C<sub>2</sub> - C<sub>8</sub> ジアルキルアミノカルボニル (C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub>) アルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub> アルキルカルボニルアミノ (C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub>) アルキル、N - (C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub>) アルキルカルボニル - N - (C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub>) アルキルアミノ (C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub>) アルキル、C<sub>3</sub> - C<sub>6</sub> トリアルキルシリル (C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub>) アルキル、フェニル (C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub>) アルキル (前記フェニルが C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> アルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> ハロアルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> アルコキシ、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> ハロアルコキシ、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> アルキルチオ、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> アルキルスルフィニル、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> 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<sub>1</sub> - C<sub>5</sub>) アルキル (前記ヘテロアリールが C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> アルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> ハロアルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> アルコキシ、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> ハロアルコキシ、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> アルキルチオ、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> アルキルスルフィニル、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> 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)、C<sub>2</sub> - C<sub>5</sub> ハロアルケニル、C<sub>3</sub> - C<sub>8</sub> シクロアルキル、フェニル、もしくは C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> アルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> ハロアルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> アルコキシ、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> 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 C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> アルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> ハロアルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> アルコキシ、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> 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 C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> アルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> ハロアルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> アルコキシ、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> 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 C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> アルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> ハロアルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> アルコキシ、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> 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 C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> アルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> ハロアルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> アルコキシ、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> 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 C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> アルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> ハロアルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> アルコキシ、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> 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 C<sub>3</sub> - C<sub>7</sub> シクロアルキルアミノ、ジ C<sub>3</sub> - C<sub>7</sub> シクロアルキルアミノ、もしくは C<sub>3</sub> - C<sub>7</sub> シクロアルコキシ、C<sub>1</sub> - C<sub>10</sub> アルコキシ、C<sub>1</sub> - C<sub>10</sub> ハロアルコキシ、C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub> アルキルアミノ、または C<sub>2</sub> - C<sub>8</sub> ジアルキルアミノであり、

R<sup>f</sup> および R<sup>g</sup> は、それぞれ相互に独立して、C<sub>1</sub> - C<sub>10</sub> アルキル、C<sub>2</sub> - C<sub>10</sub> アルケニル、C<sub>2</sub> - C<sub>10</sub> アルキニル、C<sub>1</sub> - C<sub>10</sub> アルコキシ、C<sub>1</sub> - C<sub>10</sub> ハロアルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>10</sub> シアノアルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>10</sub> ニトロアルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>10</sub> アミノアルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub> アルキルアミノ (C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub>) アルキル、C<sub>2</sub> - C<sub>8</sub> ジアルキルアミノ (C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub>) アルキル、C<sub>3</sub> - C<sub>7</sub> シクロアルキル (C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub>) アルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub> アルコキシ (C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub>) アルキル、C<sub>3</sub> - C<sub>5</sub> アルケニルオキシ (C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub>) アルキル、C<sub>3</sub> - C<sub>5</sub> アルキニルオキシ (C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub>) アルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub> アルキルチオ (C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub>) アルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub> アルキルスルフィニル (C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub>) アルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub> アルキルスルホニル (C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub>) アルキル、C<sub>2</sub> - C<sub>8</sub> アルキリデンアミノオキシ (C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub>) アルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub> アルキルカルボニル (C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub>) アルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub> アルコキシカルボニル (C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub>) アルキル、アミノカルボニル (C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub>) アルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub> アルキルアミノカルボニル (C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub>) アルキル、C<sub>2</sub> - C<sub>8</sub> ジアルキルアミノカルボニル (C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub>) アルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub> アルキルカルボニルアミノ (C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub>) アルキル、N - (C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub>) アルキルカルボニル - N - (C<sub>2</sub> - C

10

20

30

40

50

5) アルキルアミノアルキル、 $C_3 - C_6$  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)、 $C_2 - C_5$  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るフェニル、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るヘテロアリール、ヘテロアリールアミノ、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  $C_1 - C_3$  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るジヘテロアリールアミノ、フェニルアミノ、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るフェニルアミノ、ジフェニルアミノ、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るジフェニルアミノ、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、もしくは  $C_3 - C_7$  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、もしくは  $C_2 - C_8$  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、ここで、前記ベンジル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、 $C_3 - C_{10}$  アルケニル、 $C_3 - C_{10}$  アルキニル、 $C_1 - C_{10}$  ハロアルキル、 $C_1 - C_{10}$  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、 $C_1 - C_5$  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

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)、ヘテロアリーロキシ( $C_1 - C_5$ )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 $=N - R^{10}$ 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、 $CF_3$ 、 $CF_2CH_3$ 、 $CF_2H$ 、 $CCl_2H$ 、 $FCH_2$ 、 $ClCH_2$ 、 $BrCH_2$ 、 $CH_3CHF$ 、 $(CH_3)_2CF$ 、 $CF_3CH_2$ 、 $CHF_2CH_2$ 、 $C_1 - C_4$ 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

$R^3$  および  $R^4$  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  $C_1 - C_4$  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  $=N - R^{10}$  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、ヒドロキシルまたは  $C_1 - C_4$  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

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  $C_1 - C_{18}$  アルキルであり、 $R^b$  は、 $C_1 - C_{18}$  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】

$R^1$  は、水素、 $C_1 - C_6$  アルキル、またはハロゲンであり、 $R^2$  は、メチルであり、 $R^3$  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  $C_1 - C_6$  アルキル、 $C_1 - C_6$  アルキルカルボニルオキシ、 $C_2 - C_6$  アルケニル、 $=O$ 、または  $=N - R^{10}$  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、ヒドロキシルまたは  $C_1 - C_6$  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】

$R^1$  は、水素、メチル、またはプロモであり、 $R^2$  は、メチルであり、 $R^3$  および  $R^4$  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  $=N - R^{10}$  で一度もしくは二度置換された  $C_5$  - もしくは  $C_6$  - シクロアルキルであり、 $R^{10}$  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。

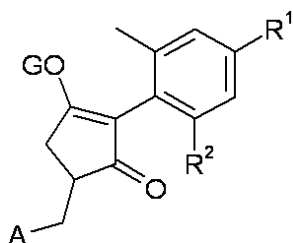
30

【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)

40

[ 式中、

G は、水素であり、

$R^2$  は、 $CH_3$  または  $CH_3O$  であり、

$R^1$  は、 $H$ 、 $CH_3$ 、 $CH_2CH_3$ 、 $F$ 、 $Cl$ 、 $Br$ 、 $CH_3O$ 、 $CH_3CH_2O$ 、 $-CH=CH_2$ 、 $-CCH_3$ 、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

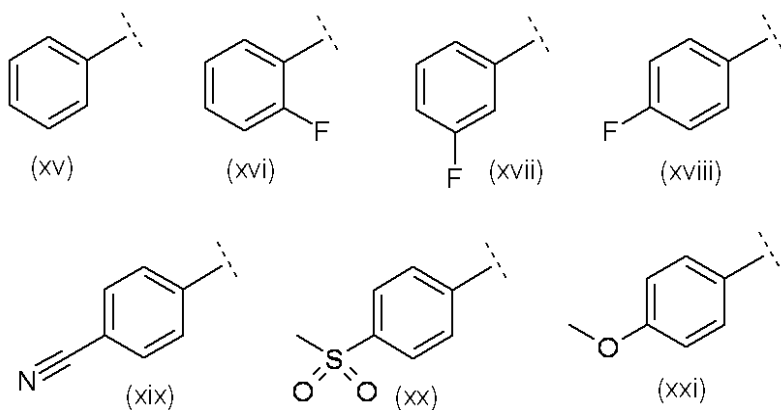
50

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、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、垂式 (xv)、(xvi)、(xvii)、(xviii)、(xix)、(xx)、または (xxi)

【化 3】

10



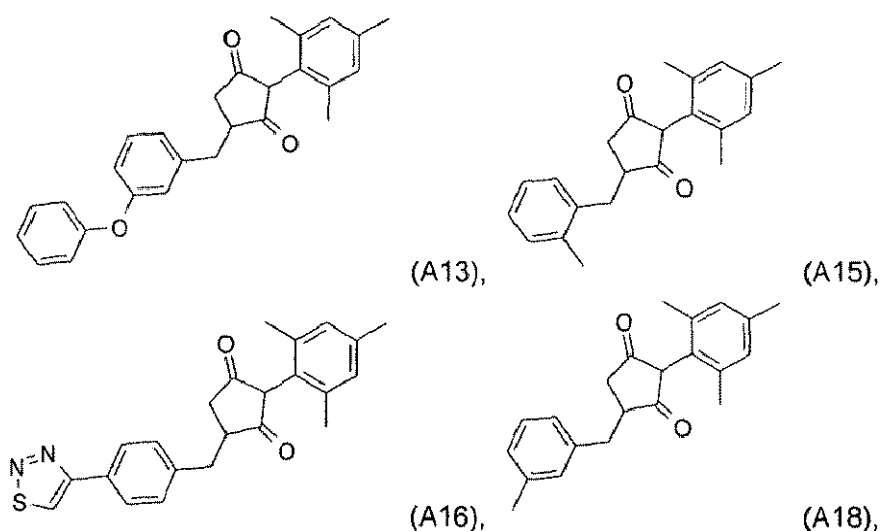
20

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 :

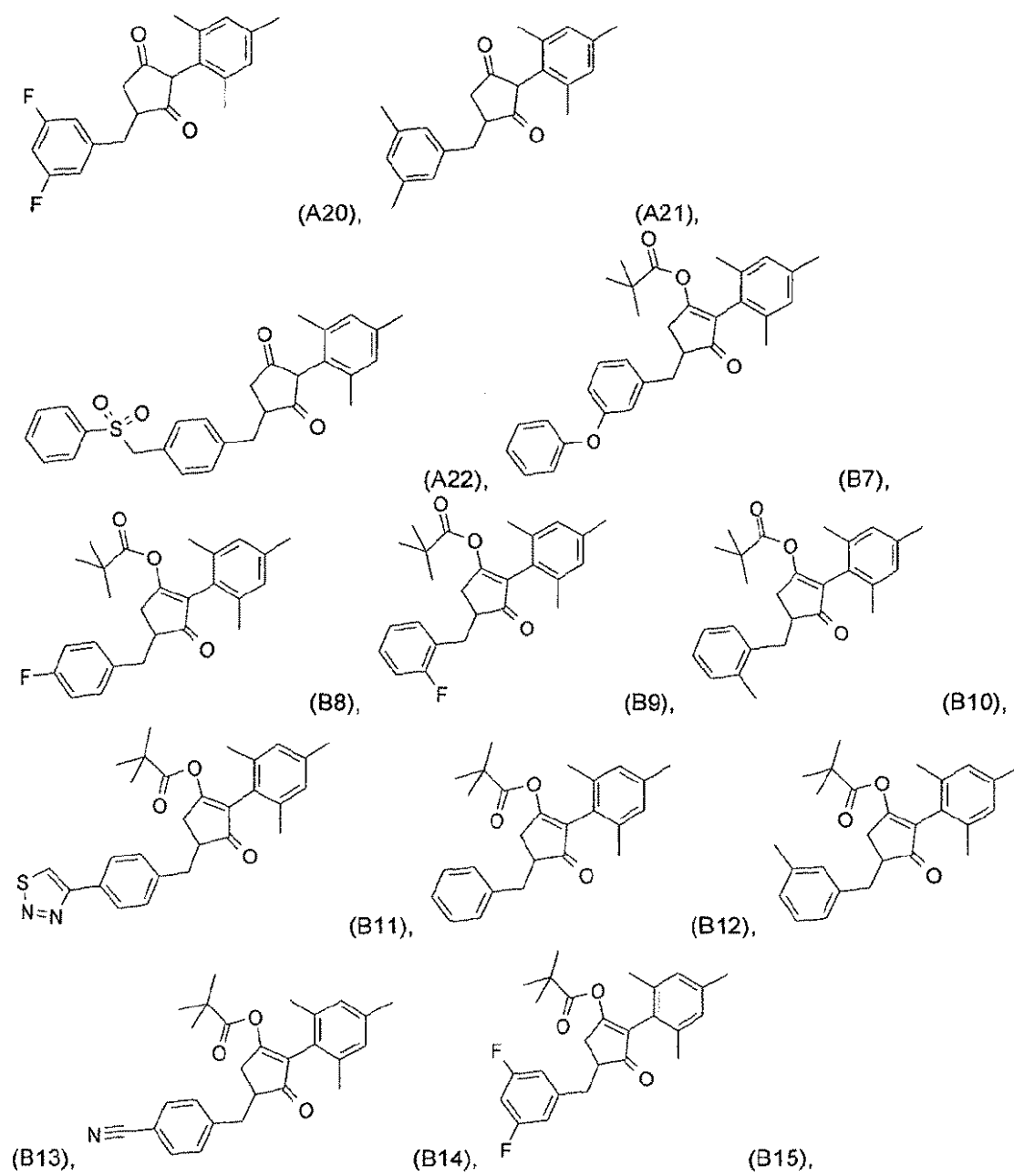
【化 4】



30

40

## 【化 5】

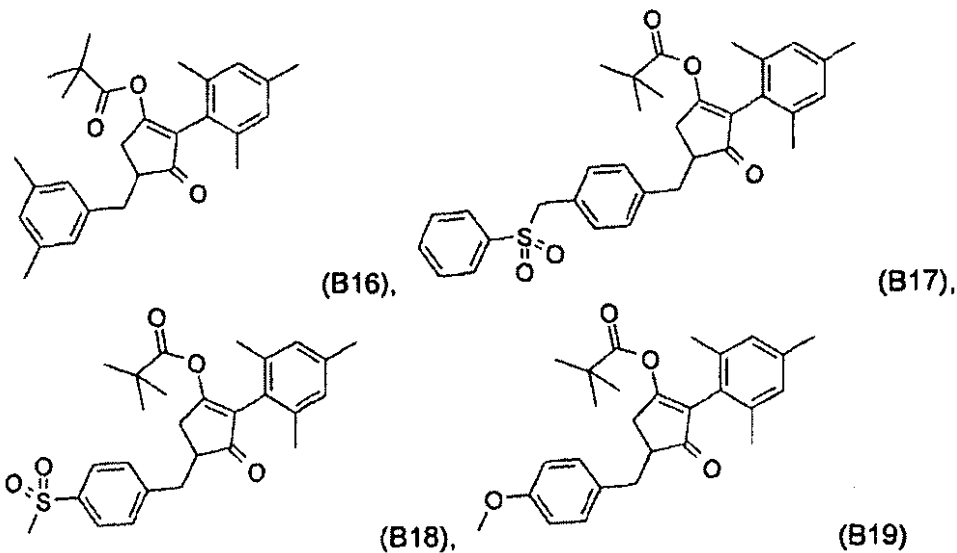


10

20

30

## 【化 6】



10

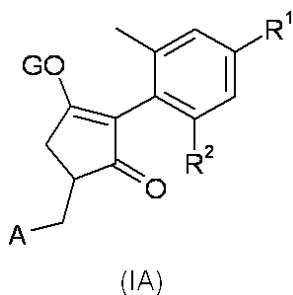
のいずれか 1 つである、  
請求項 1 ~ 12 のうちのうちのいずれか一項に記載の化合物。

20

## 【請求項 14】

式 (IA) :

## 【化 7】



30

[ 式中、

G は、水素であり、

 $R^2$  は、 $CH_3$  または  $CH_3O$  であり、

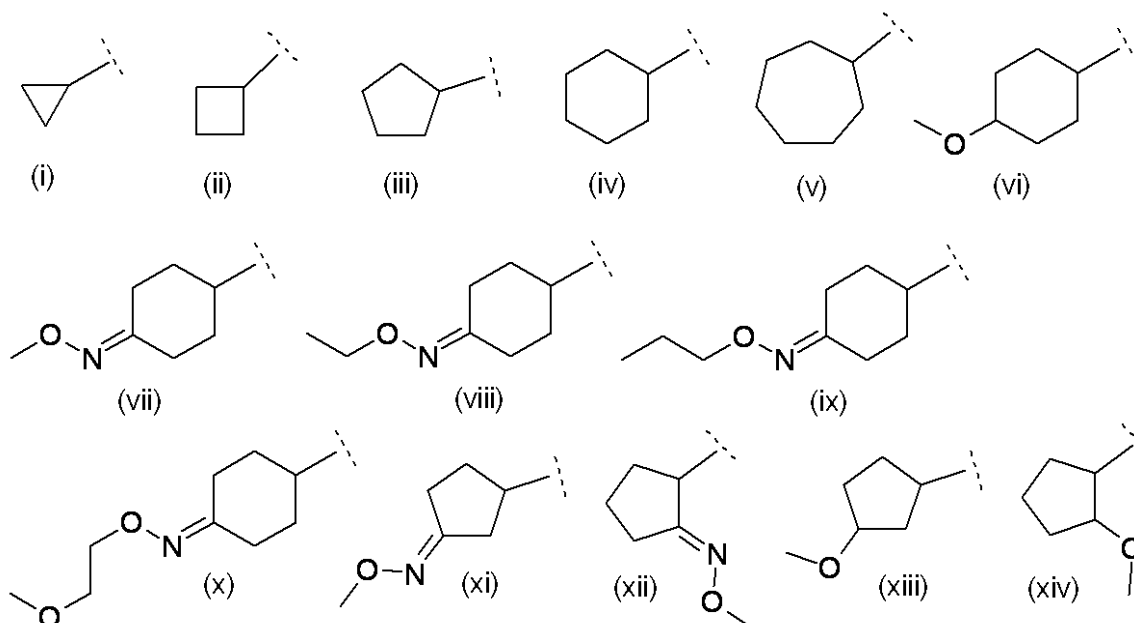
$R^1$  は、H、 $CH_3$ 、 $CH_2CH_3$ 、F、Cl、Br、 $CH_3O$ 、 $CH_3CH_2O$ 、 $-CH=CH_2$ 、 $-CCH_3$ 、フェニル、2-フルオロフェニル、2-クロロフェニル、2-トリフルオロメチルフェニル、2-ニトロフェニル、2-メチルフェニル、2-メタンスルホニルフェニル、2-シアノフェニル、3-フルオロフェニル、3-クロロフェニル、3-トリフルオロメチルフェニル、3-ニトロフェニル、3-メチルフェニル、3-メタンスルホニルフェニル、3-シアノフェニル、4-フルオロフェニル、4-クロロフェニル、4-プロモフェニル、4-ジフルオロメトキシフェニル、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、垂式 (i)、(ii)、(iii)、(iv)、(v)、(vi)、(vii)、(viii)、(ix)、(x)、(xi)、(xii)、(xiii)、または (xiv) :

50

## 【化 8】



10

である]

の化合物である、請求項 1 に記載の化合物。

20

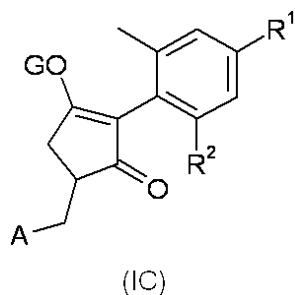
## 【請求項 1 5】

A は、垂式 ( 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】



30

[ 式中、

G は、水素であり、

 $R^2$  は、 $CH_3$  または  $CH_3O$  であり、

$R^1$  は、H、 $CH_3$ 、 $CH_2CH_3$ 、F、Cl、Br、 $CH_3O$ 、 $CH_3CH_2O$ 、 $-CH=CH_2$ 、 $-CCH_3$ 、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romo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

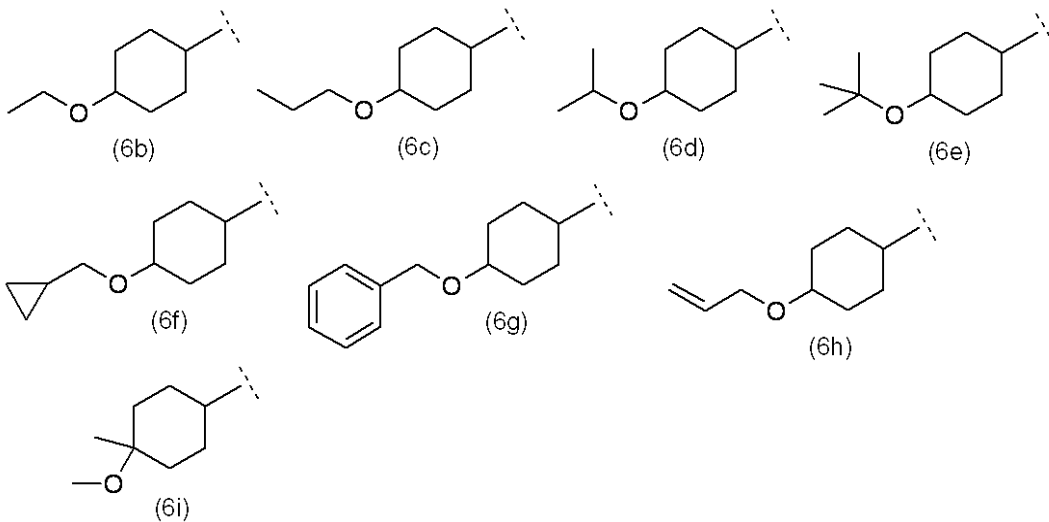
40

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

50

または (6i) :

【化 10】



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】

$R^1$  は、H、 $CH_3$ 、 $CH_2CH_3$ 、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】

$R^2$  は、 $CH_3$  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、および随意に前記式 I の化合物の混合パートナーとしてさらなる除草剤、または随意に薬害軽減剤、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、および随意に前記式 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、ペノキサコール、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】

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 2 4 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 (AU200144215 C) は、C<sub>2</sub> - 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 - シクロペンタ - 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 日に申請され、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トリオンを開示する。

【発明の概要】

40

【0005】

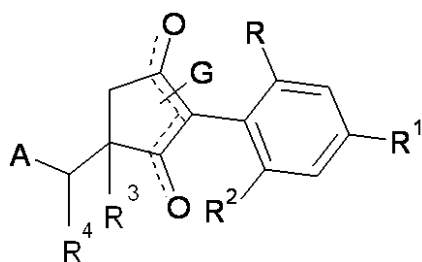
今回、除草特性および / または植物成長阻害特性、具体的には、2 - (置換フェニル) - シクロペンタン - 1, 3 - ジオン誘導体を有する、新規シクロペンタンジオンおよびその誘導体が見出された。

【0006】

したがって、本発明は、式 I :

【0007】

## 【化 1】



(I)

10

## 【0008】

[ 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<sup>1</sup> は、水素、C<sub>1</sub> - C<sub>6</sub> アルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>6</sub> ハロアルキル、C<sub>3</sub> - C<sub>7</sub> シクロアルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>6</sub> アルコキシ、C<sub>1</sub> - C<sub>6</sub> 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<sub>1</sub> - C<sub>4</sub> アルキル）、ハロアルキル（例えば、CF<sub>3</sub>、CF<sub>2</sub>Cl、CF<sub>2</sub>H、CCl<sub>2</sub>H、FCH<sub>2</sub>、ClCH<sub>2</sub>、BrCH<sub>2</sub>、CH<sub>3</sub>CHF、(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>CF、CF<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>、またはCHF<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>）、アルキルスルホニル（例えば、C<sub>1</sub> - C<sub>4</sub> アルキルスルホニル）、ハロゲン、ニトロ、またはシアノによって置換されたフェニルであり、

20

R<sup>2</sup> 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<sup>3</sup> および R<sup>4</sup> 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 C<sub>1</sub> - C<sub>6</sub> アルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>6</sub> ハロアルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>6</sub> アルコキシ、C<sub>1</sub> - C<sub>6</sub> アルキルカルボニルオキシ、C<sub>2</sub> - C<sub>6</sub> アルケニル、=O、または =N - R<sup>10</sup> によって一度もしくは二度置換された C<sub>3</sub> - C<sub>7</sub> - シクロアルキルであり、R<sup>10</sup> は、ヒドロキシル、C<sub>1</sub> - C<sub>6</sub> アルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>6</sub> ハロアルキル、C<sub>3</sub> - C<sub>7</sub> シクロアルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>6</sub> アルコキシ、C<sub>1</sub> - C<sub>6</sub> アルコキシ C<sub>1</sub> - C<sub>6</sub> アルコキシ、または C<sub>1</sub> - C<sub>6</sub> ハロアルコキシであるか、

あるいは、A は、1つの (C<sub>3</sub> - C<sub>6</sub> シクロアルキル) メトキシ、C<sub>3</sub> - C<sub>6</sub> シクロアルキルオキシ、C<sub>2</sub> - C<sub>5</sub> アルケニル - CH<sub>2</sub> - 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 (latent i a t i n g) 基であって、

G が潜在性基であるとき、潜在性基 G は、C<sub>1</sub> - C<sub>8</sub> アルキル、C<sub>2</sub> - C<sub>8</sub> ハロアルキル、フェニル C<sub>1</sub> - C<sub>8</sub> アルキル (フェニルが C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> アルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> ハロアルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> アルコキシ、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> ハロアルコキシ、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> アルキルチオ、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> アルキルスルフィニル、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> 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<sub>1</sub> - C<sub>8</sub> アルキル (ヘテロアリールが C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> アルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> ハロアルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> アルコキシ、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> ハロアルコキシ、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> アルキルチオ、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> アルキルスルフィニル、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> 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 員単環式ヘテロアリールである)、C<sub>3</sub> - C<sub>8</sub> アルケニル、C<sub>3</sub> - C<sub>8</sub> ハロアルケニル、C<sub>3</sub> - C<sub>8</sub> アルキニル、

40

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  
 イニル（ $C_1 - C_5$ ）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  
 $-C_8$  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  
 $-C_5$  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  
 エニルが  $C_1 - C_3$  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員単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  
 $-C_3$  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員単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  
 $-C_7$  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、 $C_1 - C_5$  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

10

20

30

40

50

ニル (C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub>) アルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub> アルキルカルボニルアミノ (C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub>) アルキル、N - (C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub>) アルキルカルボニル - N - (C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub>) アルキルアミノ (C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub>) アルキル、C<sub>3</sub> - C<sub>6</sub> トリアルキルシリル (C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub>) アルキル、フェニル (C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub>) アルキル (フェニルが C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> アルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> ハロアルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> アルコキシ、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> ハロアルコキシ、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> アルキルチオ、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> アルキルスルフィニル、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> 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<sub>1</sub> - C<sub>5</sub> アルキル (ヘテロアリールが C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> アルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> ハロアルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> アルコキシ、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> ハロアルコキシ、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> アルキル - チオ、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> アルキルスルフィニル、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> 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 員単環式ヘテロアリールである)、C<sub>3</sub> - C<sub>5</sub> ハロアルケニル、C<sub>3</sub> - C<sub>8</sub> シクロアルキル、フェニル、または C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> アルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> ハロアルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> アルコキシ、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> 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<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> アルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> ハロアルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> アルコキシ、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> 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 員単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<sup>c</sup> および R<sup>d</sup> は、それぞれ相互に独立して、水素、C<sub>1</sub> - C<sub>10</sub> アルキル (例えば、C<sub>1</sub> - C<sub>2</sub> アルキル等の C<sub>1</sub> - C<sub>6</sub> アルキルもしくは C<sub>1</sub> - C<sub>4</sub> アルキル)、C<sub>3</sub> - C<sub>10</sub> アルケニル、C<sub>3</sub> - C<sub>10</sub> アルキニル、C<sub>2</sub> - C<sub>10</sub> ハロアルキル (例えば、C<sub>2</sub> - C<sub>10</sub> フルオロアルキル)、C<sub>1</sub> - C<sub>10</sub> シアノアルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>10</sub> ニトロアルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>10</sub> アミノアルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub> アルキルアミノ (C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub>) アルキル、C<sub>2</sub> - C<sub>8</sub> ジアルキルアミノ (C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub>) アルキル、C<sub>3</sub> - C<sub>7</sub> シクロアルキル (C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub>) アルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub> アルコキシ (C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub>) アルキル、C<sub>3</sub> - C<sub>5</sub> アルケニルオキシ (C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub>) アルキル、C<sub>3</sub> - C<sub>5</sub> アルキニルオキシ (C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub>) アルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub> アルキルチオ (C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub>) アルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub> アルキルスルフィニル (C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub>) アルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub> アルキルスルホニル (C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub>) アルキル、C<sub>2</sub> - C<sub>8</sub> アルキリデンアミノキシ (C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub>) アルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub> アルキルカルボニル (C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub>) アルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub> アルコキシカルボニル (C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub>) アルキル、アミノカルボニル (C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub>) アルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub> アルキルアミノカルボニル (C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub>) アルキル、C<sub>2</sub> - C<sub>8</sub> ジアルキルアミノカルボニル (C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub>) アルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub> アルキルカルボニルアミノ (C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub>) アルキル、N - (C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub>) アルキルカルボニル - N - (C<sub>2</sub> - C<sub>5</sub>) アルキルアミノアルキル、C<sub>3</sub> - C<sub>6</sub> トリアルキルシリル (C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub>) アルキル、フェニル (C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub>) アルキル (フェニルが、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> アルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> ハロアルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> アルコキシ、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> ハロアルコキシ、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> アルキルチオ、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> アルキルスルフィニル、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> 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<sub>1</sub> - C<sub>5</sub>) アルキル (ヘテロアリールが、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> アルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> ハロアルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> アルコキシ、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> ハロアルコキシ、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> アルキルチオ、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> アルキルスルフィニル、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> 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 員単環式ヘテロアリールである)、C<sub>2</sub> - C<sub>5</sub> ハロアルケニル、C<sub>3</sub> - C<sub>8</sub> シクロアルキル、フェニル、または C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> アルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> ハロアルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> アルコキシ、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> 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 C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> アルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> ハロアルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> アルコキシ、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub> 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員単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<sub>1</sub>-C<sub>3</sub>アルキル、C<sub>1</sub>-C<sub>3</sub>ハロアルキル、C<sub>1</sub>-C<sub>3</sub>アルコキシ、C<sub>1</sub>-C<sub>3</sub>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員単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<sub>1</sub>-C<sub>3</sub>アルキル、C<sub>1</sub>-C<sub>3</sub>ハロアルキル、C<sub>1</sub>-C<sub>3</sub>アルコキシ、C<sub>1</sub>-C<sub>3</sub>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員単環式ヘテロアリールである）、フェニルアミノ、またはC<sub>1</sub>-C<sub>3</sub>アルキル、C<sub>1</sub>-C<sub>3</sub>ハロアルキル、C<sub>1</sub>-C<sub>3</sub>アルコキシ、C<sub>1</sub>-C<sub>3</sub>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<sub>1</sub>-C<sub>3</sub>アルキル、C<sub>1</sub>-C<sub>3</sub>ハロアルキル、C<sub>1</sub>-C<sub>3</sub>アルコキシ、C<sub>1</sub>-C<sub>3</sub>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<sub>3</sub>-C<sub>7</sub>シクロアルキルアミノ、ジ-C<sub>3</sub>-C<sub>7</sub>シクロアルキルアミノ、またはC<sub>3</sub>-C<sub>7</sub>シクロアルコキシであるか、

あるいはR<sup>c</sup>およびR<sup>d</sup>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<sup>e</sup>は、C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>アルキル（例えば、C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>アルキル等のC<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>アルキルもしくはC<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>アルキル）、C<sub>2</sub>-C<sub>10</sub>アルケニル、C<sub>2</sub>-C<sub>10</sub>アルキニル、C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>ハロアルキル（例えば、C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>フルオロアルキル）、C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>シアノアルキル、C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>ニトロアルキル、C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>アミノアルキル、C<sub>1</sub>-C<sub>5</sub>アルキルアミノ（C<sub>1</sub>-C<sub>5</sub>）アルキル、C<sub>2</sub>-C<sub>8</sub>ジアルキルアミノ（C<sub>1</sub>-C<sub>5</sub>）アルキル、C<sub>3</sub>-C<sub>7</sub>シクロアルキル（C<sub>1</sub>-C<sub>5</sub>）アルキル、C<sub>1</sub>-C<sub>5</sub>アルコキシ（C<sub>1</sub>-C<sub>5</sub>）アルキル、C<sub>3</sub>-C<sub>5</sub>アルケニルオキシ（C<sub>1</sub>-C<sub>5</sub>）アルキル、C<sub>3</sub>-C<sub>5</sub>アルキニルオキシ（C<sub>1</sub>-C<sub>5</sub>）アルキル、C<sub>1</sub>-C<sub>5</sub>アルキルチオ（C<sub>1</sub>-C<sub>5</sub>）アルキル、C<sub>1</sub>-C<sub>5</sub>アルキルスルフィニル（C<sub>1</sub>-C<sub>5</sub>）アルキル、C<sub>1</sub>-C<sub>5</sub>アルキルスルホニル（C<sub>1</sub>-C<sub>5</sub>）アルキル、C<sub>2</sub>-C<sub>8</sub>アルキリデンアミノキシ（C<sub>1</sub>-C<sub>5</sub>）アルキル、C<sub>1</sub>-C<sub>5</sub>アルキルカルボニル（C<sub>1</sub>-C<sub>5</sub>）アルキル、C<sub>1</sub>-C<sub>5</sub>アルコキシカルボニル（C<sub>1</sub>-C<sub>5</sub>）アルキル、アミノカルボニル（C<sub>1</sub>-C<sub>5</sub>）アルキル、C<sub>1</sub>-C<sub>5</sub>アルキルアミノカルボニル（C<sub>1</sub>-C<sub>5</sub>）アルキル、C<sub>2</sub>-C<sub>8</sub>ジアルキルアミノカルボニル（C<sub>1</sub>-C<sub>5</sub>）アルキル、C<sub>1</sub>-C<sub>5</sub>アルキルカルボニルアミノ（C<sub>1</sub>-C<sub>5</sub>）アルキル、N-（C<sub>1</sub>-C<sub>5</sub>）アルキルカルボニル-N-（C<sub>1</sub>-C<sub>5</sub>）アルキルアミノ（C<sub>1</sub>-C<sub>5</sub>）アルキル、C<sub>3</sub>-C<sub>6</sub>トリアルキルシリル（C<sub>1</sub>-C<sub>5</sub>）アルキル、フェニル（C<sub>1</sub>-C<sub>5</sub>）アルキル（フェニルが、C<sub>1</sub>-C<sub>3</sub>アルキル、C<sub>1</sub>-C<sub>3</sub>ハロアルキル、C<sub>1</sub>-C<sub>3</sub>アルコキシ、C<sub>1</sub>-C<sub>3</sub>ハロアルコキシ、C<sub>1</sub>-C<sub>3</sub>アルキルチオ、C<sub>1</sub>-C<sub>3</sub>アルキルスルフィニル、C<sub>1</sub>-C<sub>3</sub>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<sub>1</sub>-C<sub>5</sub>）アルキル（ヘテロアリールが、C<sub>1</sub>-C<sub>3</sub>アルキル、C<sub>1</sub>-C<sub>3</sub>ハロアルキル、C<sub>1</sub>-C<sub>3</sub>アルコキシ、C<sub>1</sub>-C<sub>3</sub>ハロアルコキシ、C<sub>1</sub>-C<sub>3</sub>アルキルチオ、C<sub>1</sub>-C<sub>3</sub>アルキルスルフィニル、C<sub>1</sub>-C<sub>3</sub>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員単環式ヘテロアリールである）、C<sub>2</sub>-C<sub>5</sub>ハロアルケニル、C<sub>3</sub>-C<sub>8</sub>シクロアルキル、フェニル、またはC<sub>1</sub>-C<sub>3</sub>アルキル、C<sub>1</sub>-C<sub>3</sub>ハロアルキル、C<sub>1</sub>-C<sub>3</sub>アルコキシ、C<sub>1</sub>-C<sub>3</sub>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<sub>1</sub>-C<sub>3</sub>アルキル、C<sub>1</sub>-C<sub>3</sub>ハロアルキル、

10

20

30

40

50

$C_1 - C_3$  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アル、(例えば、ヘテロアリアルがピリジニルであるか、  
 または、ヘテロアリアルが、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員単環式ヘテロアリアルである)、ヘテロアリアルアミ  
 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、ヘテロアリアルがピリジニルであるか、または、ヘテロアリアル  
 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員単環式ヘテロアリアルである)、ジヘテロアリアルアミノ、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アルアミノ(例え  
 ば、ヘテロアリアルがピリジニルであるか、または、ヘテロアリアルが、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員単環式ヘ  
 テロアリアルである)、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、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、 $C_1 - C_{10}$  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 $C_2 - C_8$  ジアルキルアミノであり、  
 $R^f$  および  $R^g$  は、それぞれ相互に独立して、 $C_1 - C_{10}$  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)、 $C_2 - C_{10}$  アルケ  
 ニル、 $C_2 - C_{10}$  アルキニル、 $C_1 - C_{10}$  アルコキシ、 $C_1 - C_{10}$  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、 $C_3 - C_5$  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-( $C_2 - C_5$ )アルキルアミノアルキル、 $C_3 - C_6$  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  
 テロアリアル( $C_1 - C_5$ )アルキル(ヘテロアリアルが、 $C_1 - C_3$  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、ヘテロアリアルがピリ  
 ジニルであるか、または、ヘテロアリアルが、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員単環式ヘテロアリアルである)、 $C$   
 $_2 - C_5$  ハロアルケニル、 $C_3 - C_8$  シクロアルキル、フェニル、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、ヘテロアリアル、また

10

20

30

40

50

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員単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員単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員単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、 $C_1 - C_5$  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、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員単環式ヘテロアリールである)、フェノキシ(C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub>)アルキル(フェニルがC<sub>1</sub> - C<sub>3</sub>アルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub>ハロアルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub>アルコキシ、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub>ハロアルコキシ、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub>アルキルチオ、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub>アルキルスルフィニル、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub>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(C<sub>1</sub> - C<sub>5</sub>)アルキル(ヘテロアリールがC<sub>1</sub> - C<sub>3</sub>アルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub>ハロアルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub>アルコキシ、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub>ハロアルコキシ、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub>アルキルチオ、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub>アルキルスルフィニル、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub>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員単環式ヘテロアリールである)、C<sub>3</sub> - C<sub>5</sub>ハロアルケニル、C<sub>3</sub> - C<sub>8</sub>シクロアルキル、フェニル、またはC<sub>1</sub> - C<sub>3</sub>アルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub>ハロアルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub>アルコキシ、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub>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C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub>アルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub>ハロアルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub>アルコキシ、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub>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員単環式ヘテロアリールである) ]

の化合物に関する。

【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、

R<sup>1</sup>は、水素、C<sub>1</sub> - C<sub>6</sub>アルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>6</sub>ハロアルキル、C<sub>3</sub> - C<sub>7</sub>シクロアルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>6</sub>アルコキシ、C<sub>1</sub> - C<sub>6</sub>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<sub>1</sub> - C<sub>4</sub>アルキル)、ハロアルキル(例えば、CF<sub>3</sub>、CF<sub>2</sub>Cl、CF<sub>2</sub>H、CCl<sub>2</sub>H、FCH<sub>2</sub>、ClCH<sub>2</sub>、BrCH<sub>2</sub>、CH<sub>3</sub>CHF、(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>CF、CF<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>、またはCHF<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>)、アルキルスルホニル(例えば、C<sub>1</sub> - C<sub>4</sub>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<sup>2</sup>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<sup>3</sup>およびR<sup>4</sup>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C<sub>1</sub> - C<sub>6</sub>アルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>6</sub>ハロアルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>6</sub>アルコキシ、C<sub>1</sub> - C<sub>6</sub>アルキルカルボニルオキシ、C<sub>2</sub> - C<sub>6</sub>アルケニル、=O、または=N - R<sup>10</sup>によって一度もしくは二度置換されたC<sub>3</sub> - C<sub>7</sub>シクロアルキルであり、R<sup>10</sup>は、ヒドロキシル、C<sub>1</sub> - C<sub>6</sub>アルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>6</sub>ハロアルキル、C<sub>3</sub> - C<sub>7</sub>シクロアルキル、C<sub>1</sub> - C<sub>6</sub>アルコキシ、C<sub>1</sub> - C<sub>6</sub>アルコキシC<sub>1</sub> - C<sub>6</sub>アルコキシ、またはC<sub>1</sub> - C<sub>6</sub>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、C<sub>1</sub> - C<sub>6</sub>アルキル基で

あるが、好ましくは、 $C_1 - C_4$  アルキルまたは  $C_1 - C_3$  アルキル基であり、より好ましくは、 $C_1 - C_2$  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、 $CF_3$ 、 $CF_2Cl$ 、 $CF_2H$ 、 $CCl_2H$ 、 $FCH_2$ 、 $ClCH_2$ 、 $BrCH_2$ 、 $CH_3CHF$ 、 $(CH_3)_2CF$ 、 $CF_3CH_2$ 、または $CHF_2CH_2$ 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、 $CF_3$ 、 $CF_2H$ 、 $FCH_2$ 、 $CH_3CHF$ 、 $(CH_3)_2CF$ 、 $CF_3CH_2$ 、または $CHF_2CH_2$ 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、シクロヘキシル、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  $C_1 - C_{18}$  アルキルアミン、 $C_1 - C_4$  ヒドロキシアルキルアミン、または  $C_2 - C_4$  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、ペンタデシルアミン、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、メチルヘキシルアミン、メチルノニルアミン、メチルペンタデシルアミン、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、ヘキシルヘプチルアミン、ヘキシルオクチルアミン、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、ジヘキシルアミン、ジヘプチルアミン、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-プロピルアミン、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 級アリアルアミン、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  $C_1 - C_4$  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、 $C_1 - C_4$  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。

20

#### 【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。

#### 【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、または減少した土壌浸出、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  $C_1 - C_{18}$  アルキル（より具体的には、水素または  $C_1 - C_6$  アルキル、さらにより好ましくは、 $C_1 - C_6$  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  $C_1 - C_4$  アルキル）であり、 $R^b$  は、 $C_1 - C_{18}$  アルキル（より好ましくは、 $C_1 - C_6$  アルキル、さらにより好ましくは、C

50

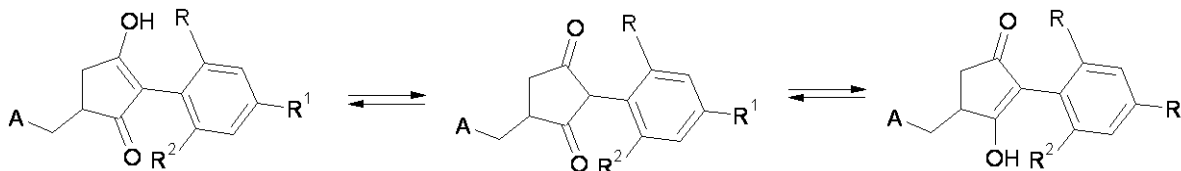
$C_1 - C_2$  アルキル等の  $C_1 - C_4$  アルキル) であり、 $X^a$ 、 $X^b$ 、 $X^c$  の意味は、上述のとおりである (より好ましくは、 $X^a$ 、 $X^b$ 、および  $X^c$  は、酸素である)。

【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。

20

【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  $=N - R^{10}$  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  $C_1 - C_{18}$  アルキルである。より好ましくは、 $R^a$  は、水素または  $C_1 - C_6$  アルキル、さらにより好ましくは、 $C_1 - C_6$  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  $C_1 - C_4$  アルキルである。

## 【0037】

好ましくは、 $R^b$  は、 $C_1 - C_{18}$  アルキルである。より好ましくは、 $R^b$  は、 $C_1 - C_6$  アルキル、さらにより好ましくは、 $C_1 - C_2$  アルキル等の  $C_1 - C_4$  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  $C_1 - C_{18}$  アルキルであり、 $R^b$  は、 $C_1 - C_{18}$  アルキルである。より好ましくは、 $R^a$  は、水素または  $C_1 - C_6$  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  $C_1 - C_4$  アルキル）、および/または  $R^b$  は、 $C_1 - C_6$  アルキル（さらにより好ましくは、 $C_1 - C_2$  アルキル等の  $C_1 - C_4$  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、 $R^1$  は、水素、 $C_1 - C_6$  アルキル、またはハロゲンであり、 $R^2$  は、メチルであり、 $R^3$  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  $C_1 - C_6$  アルキル、 $C_1 - C_6$  アルキルカルボニルオキシ、 $C_2 - C_6$  アルケニル、 $=O$ 、または  $=N - R^{10}$  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、ヒドロキシルまたは  $C_1 - C_6$  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、 $R^1$  は、水素、メチル、またはプロモであり、 $R^2$  は、メチルであり、 $R^3$  および  $R^4$  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  $=N - R^{10}$  によって一度もしくは二度置換された  $C_5$  - または  $C_6$  - シクロアルキルであり、 $R^{10}$  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。

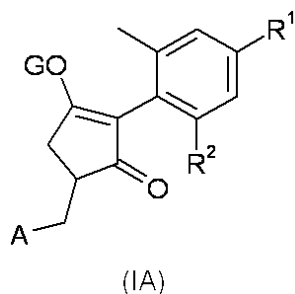
## 【0043】

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 (IA) :

40

## 【0044】

## 【化 3】



[ 式中、

10

G は、水素であり、

 $R^2$  は、 $CH_3$  または  $CH_3O$  であり、

$R^1$  は、H、 $CH_3$ 、 $CH_2CH_3$ 、F、Cl、Br、 $CH_3O$ 、 $CH_3CH_2O$ 、 $-CH=CH_2$ 、 $-CCH$ 、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romo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

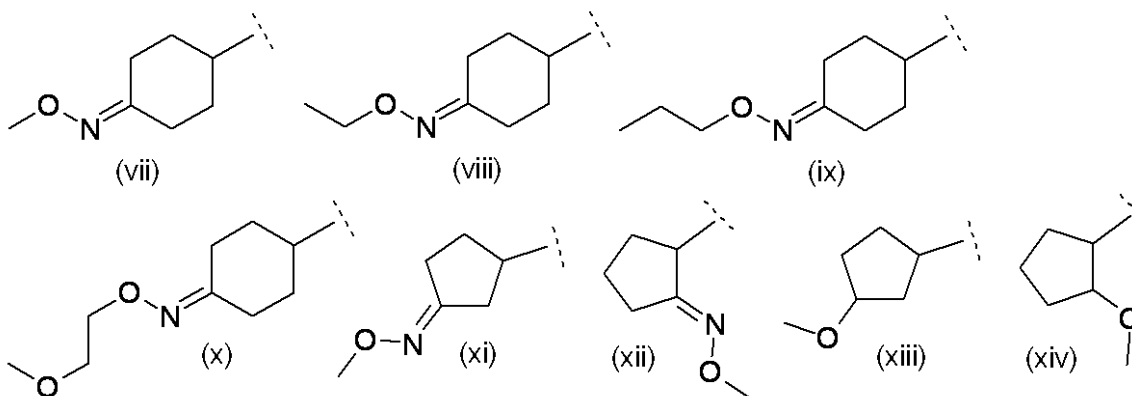
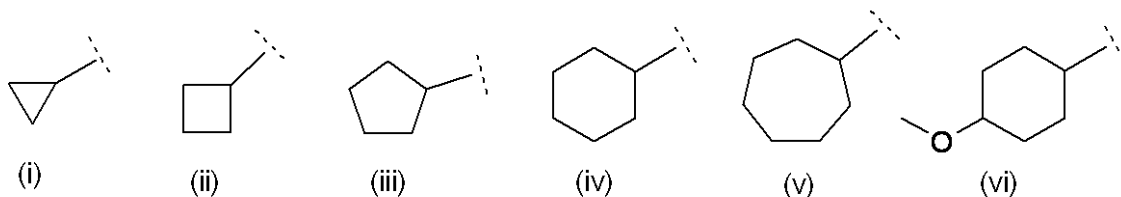
20

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

## 【 0 0 4 5 】

## 【 化 4 】

30



40

## 【 0 0 4 6 】

である]

の化合物である。

## 【 0 0 4 7 】

50

式 ( I A ) 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。

【 0 0 4 8 】

式 ( I A ) の化合物は、好ましくは、以下、表 A 1 に示すとおり、化合物 A 2、A 3、A 9、A 1 0、A 1 1、または A 3 8 のうちの 1 つである。

【 0 0 4 9 】

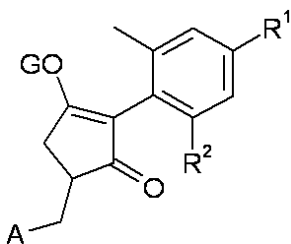
本発明の代替的に好ましい実施形態において ( 以下、表 1 5、1 6、1 7、1 8、1 9、2 0、および 2 1、および / または表 A 1 ( 化合物 A 1 3 ~ A 2 4 ) および / または表 B 1 ( 化合物 B 7 ~ B 1 9 ) 開示するとおり )、A が、随意に置換されたフェニルであるとき、次いで、

10

( a ) 式 ( I ) の化合物は、式 ( I B ) :

【 0 0 5 0 】

【 化 5 】



(IB)

20

【 0 0 5 1 】

[ 式中、

G は、水素であり、

R<sup>2</sup> は、CH<sub>3</sub> または CH<sub>3</sub>O であり、

R<sup>1</sup> は、H、CH<sub>3</sub>、CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>、F、Cl、Br、CH<sub>3</sub>O、CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>O、-CH=CH<sub>2</sub>、-CCH、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-プロモフェニル、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

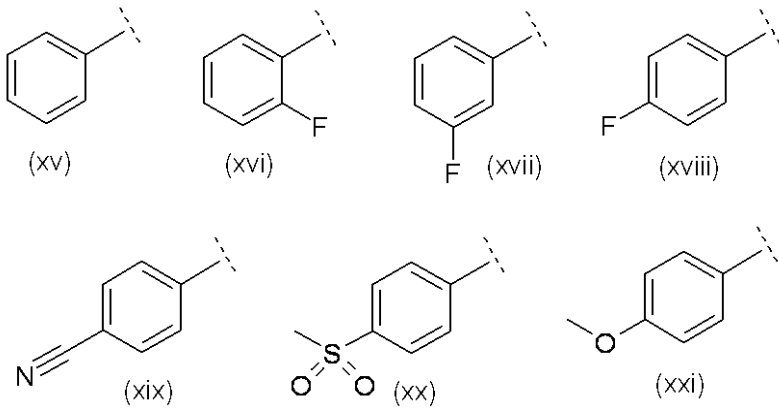
30

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 ) :

40

【 0 0 5 2 】

## 【化 6】



10

## 【 0 0 5 3 】

である]

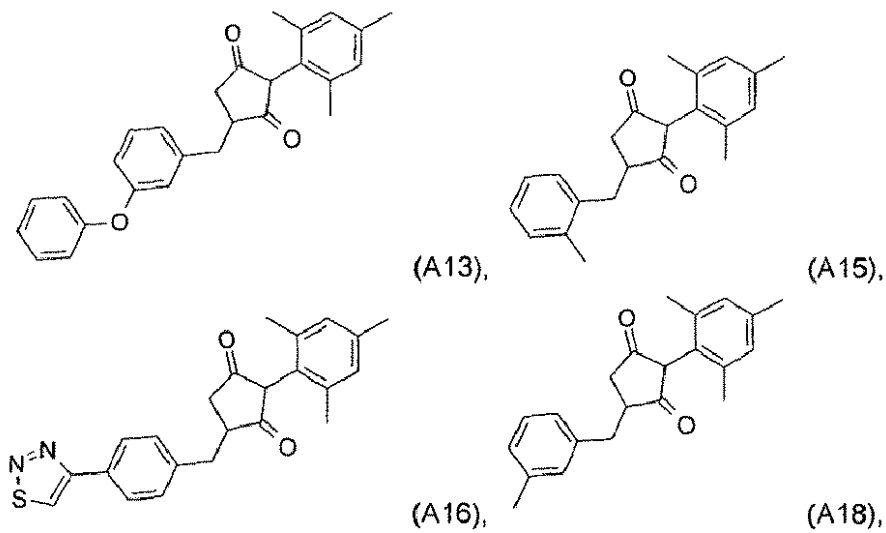
の化合物であるか、あるいは、

(b) 化合物は、以下の化合物 A 1 3、A 1 5、A 1 6、A 1 8、A 2 0、A 2 1、A 2 2、B 7、B 8、B 9、B 1 0、B 1 1、B 1 2、B 1 3、B 1 4、B 1 5、B 1 6、B 1 7、B 1 8、または B 1 9 のうちの 1 つである：

## 【 0 0 5 4 】

## 【化 7】

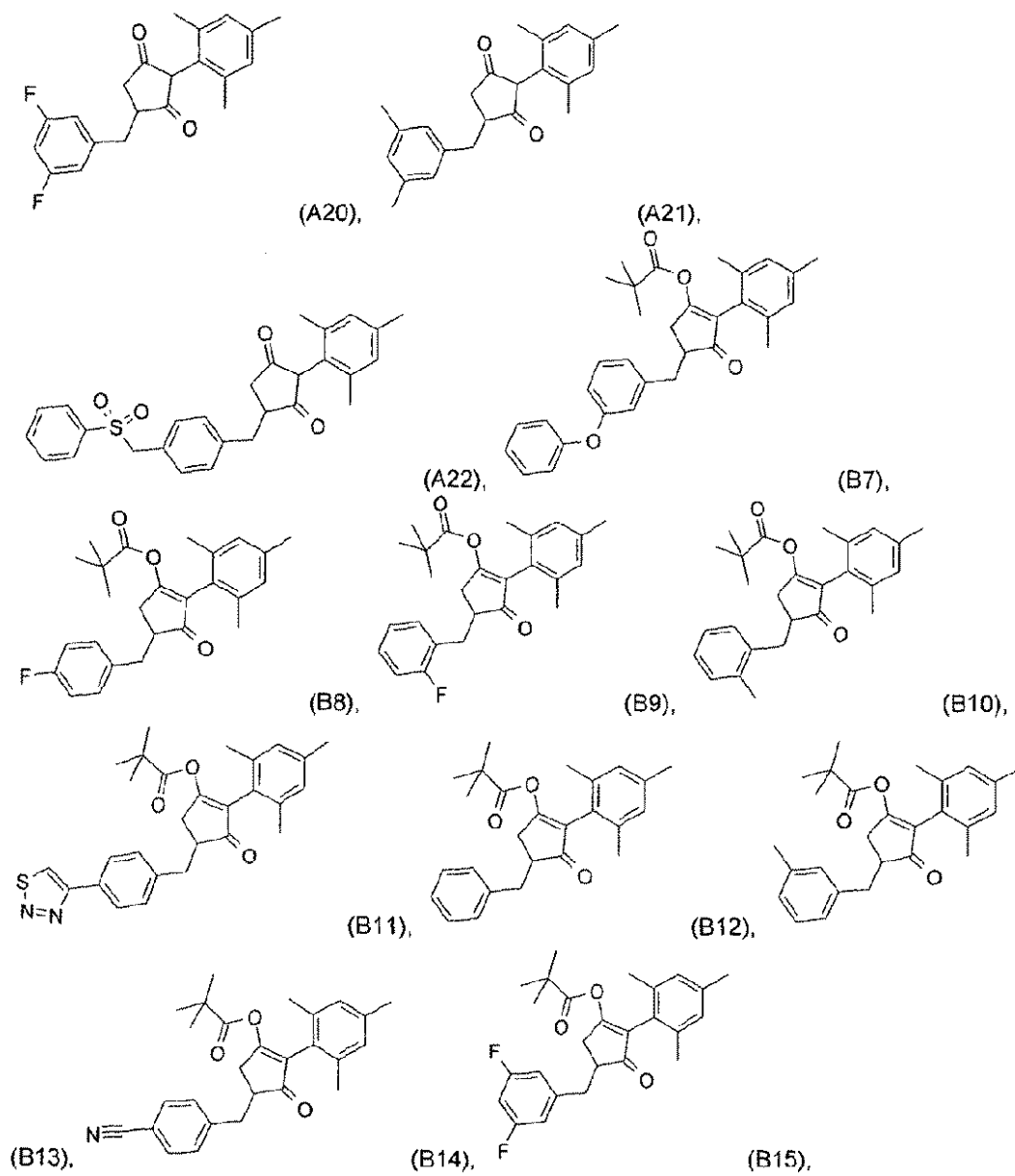
20



30

## 【 0 0 5 5 】

## 【化 8】



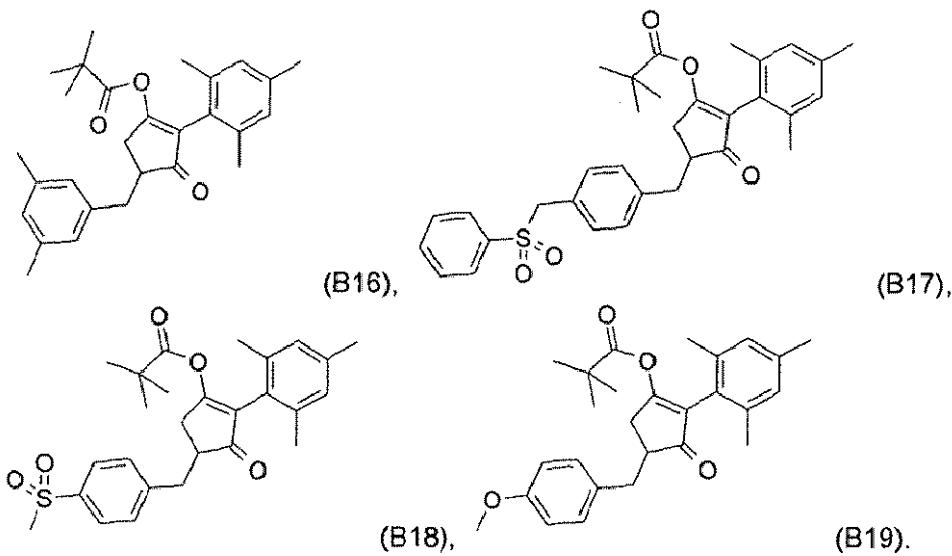
10

20

30

【 0 0 5 6 】

## 【化 9】



10

## 【 0 0 5 7 】

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 ) :

20

G は、水素であり、

R は、メチルであり、

R<sup>2</sup> は、CH<sub>3</sub> または CH<sub>3</sub>O であり、

R<sup>1</sup> は、H、CH<sub>3</sub>、CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>、F、Cl、Br、CH<sub>3</sub>O、CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>O、-CH=CH<sub>2</sub>、-CCH<sub>3</sub>、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romo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、

30

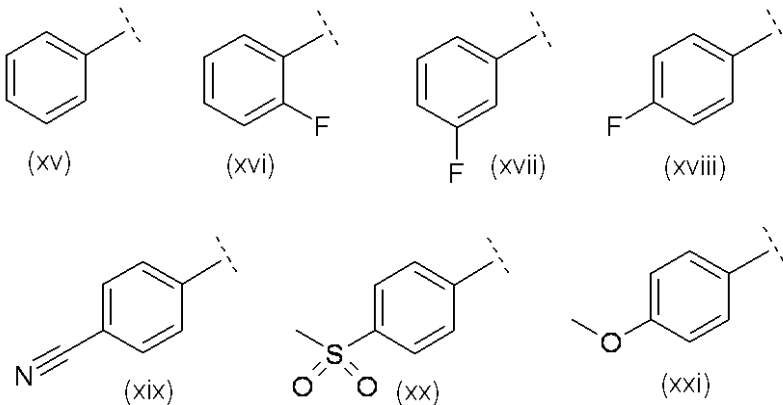
R<sup>3</sup> および R<sup>4</sup> の両方は、水素であり、かつ

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 ) :

## 【 0 0 5 8 】

40

## 【化 10】



10

## 【0059】

であるか、あるいは

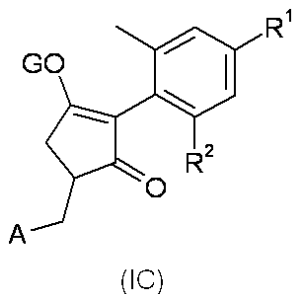
(b) 化合物は、本明細書に説明するとおり（例えば、上述）、化合物 A 13、A 15、A 16、A 18、A 20、A 21、A 22、B 7、B 8、B 9、B 10、B 11、B 12、B 13、B 14、B 15、B 16、B 17、B 18、または B 19 のうちの 1 つである。

## 【0060】

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

## 【0061】

## 【化 11】



30

## 【0062】

[ 式中、

G は、水素であり、

R<sup>2</sup> は、CH<sub>3</sub> または CH<sub>3</sub>O であり、

R<sup>1</sup> は、H、CH<sub>3</sub>、CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>、F、Cl、Br、CH<sub>3</sub>O、CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>O、-CH=CH<sub>2</sub>、-CCH、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-プロモフェニル、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

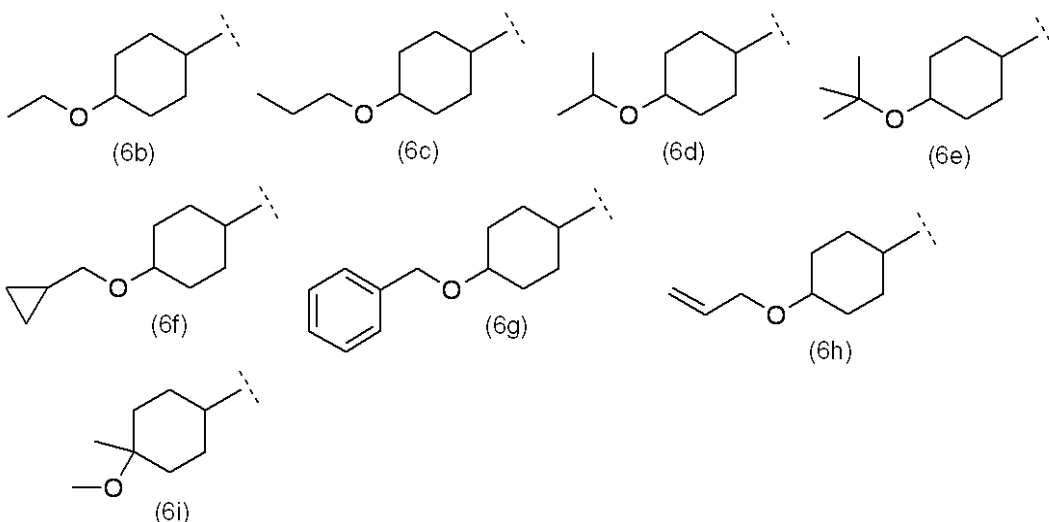
40

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

## 【0063】

50

## 【化 1 2】



10

である ]  
の化合物である。

## 【 0 0 6 4 】

式 ( I C ) の化合物は、好ましくは、以下、表 A 1 に示すとおり、化合物 A 4 0 ~ A 4 7 のうちの 1 つである。

20

## 【 0 0 6 5 】

式 ( I A )、( I B )、および / または ( I C ) の化合物において、 $R^1$  は、H、 $CH_3$ 、 $CH_2CH_3$ 、F、Cl、または Br である。

## 【 0 0 6 6 】

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、 $R^1$  は、 $CH_3$  である。

## 【 0 0 6 7 】

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、 $R^2$  は、 $CH_3$  (メチル) である。

## 【 0 0 6 8 】

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 A 1、表 B 1、および表 C 1 (以下) に示す構造によって画定されるとおり、化合物 A 1 ~ A 4 7、または B 1 ~ B 2 8、または C 1 ~ C 1 0 のうちの 1 つである。

30

## 【 0 0 6 9 】

例えば、化合物は、好ましくは、本明細書において表 A 1、表 B 1 (以下) に示す構造によって画定されるとおり、化合物 A 1 ~ A 2 4、A 3 8、または B 1 ~ B 1 9 のうちの 1 つである。

## 【 0 0 7 0 】

あるいは、化合物は、好ましくは、本明細書において表 A 1、表 B 1、および表 C 1 (以下) に示す構造によって画定されるとおり、化合物 A 2 5 ~ A 3 7、A 3 9 ~ A 4 7、B 2 0 ~ B 2 8、または C 1 ~ C 1 0 のうちの 1 つである。

40

## 【 0 0 7 1 】

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。

## 【 0 0 7 2 】

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むしてもよく、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。

## 【 0 0 7 3 】

50

例えば、式 (I) の化合物 (式中、 $R^1$  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、 $R^1$  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、 $R^1$  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  $C_1 - C_8$  アルキル、 $C_2 - C_8$  ハロアルキル、フェニル  $C_1 - C_8$  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てもよい)、ヘテロアリール  $C_1 - C_8$  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てもよい)、 $C_3 - C_8$  アルケニル、 $C_3 - C_8$  ハロアルケニル、 $C_3 - C_8$  アルキニル、 $C(X^a) - R^a$ 、 $C(X^b) - X^c - R^b$ 、 $C(X^d) - N(R^c) - R^d$ 、 $-SO_2 - R^e$ 、 $-P(X^e)(R^f) - R^g$ 、または  $CH_2 - X^f - R^h$  (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  $C_1 - C_8$  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、 $Cl - CH_2 - X^f - R^h$  (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  $Cl - CH_2 - X^f - R^h$  (式中、 $X^f$  は硫黄である) を含む)、スルホン酸  $C_1 - C_8$  アルキル、もしくは硫酸ジ ( $C_1 - C_8$  アルキル) である) で、またはハロゲン化  $C_3 - C_8$  アルケニルで、またはハロゲン化  $C_3 - C_8$  アルキニルで、またはアシル化剤 (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、 $Cl - C(X^a)R^a$  (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、 $Cl - C(X^d) - N(R^c) - R^d$  (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  $Cl - C(X^d) - N(R^c) - R^d$  (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、 $Cl - C(X^b) - X^c - R^b$  (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、 $Cl - C(X^b) - X^c - R^b$  (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、 $Cl - C(X^b) - X^c - R^b$  (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、 $Cl - P(X^e)(R^f) - R^g$  で、またはスルホニル化剤、例えば、塩化スルホニル、 $Cl - SO_2 - R^e$  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

## 【0075】

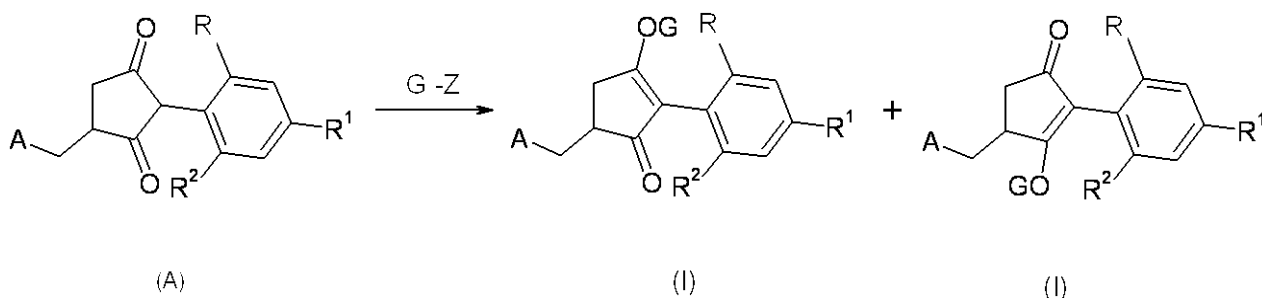
式 (I) の異性体化合物は、形成されてもよい。例えば、式 (A) の化合物は、式 (I) の 2 つの異性体化合物、または式 (I) の化合物の異性体混合物を引き起こしてもよい

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。

【0076】

【化13】



10

【0077】

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 Albónico, 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、Zubaidha, 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。

20

【0078】

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4436666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-ジアゾビスクロ[2.2.2]-オクタンおよび1,8-ジアザビスクロ[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-ジシクロヘキシルカルボジイミド、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。

30

40

【0079】

50

環状 1, 3 - ジオンのリン酸化は、米国特許第 4 4 0 9 1 5 3 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 . K o w a l s k i および K . F i e l d s , J . O r g . C h e m . , ( 1 9 8 1 ) , 4 6 , 1 9 7 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。

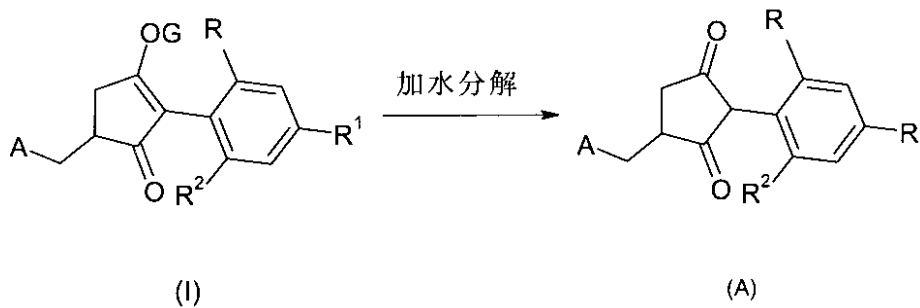
【 0 0 8 1 】

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 W O 0 4 3 5 5 8 8 号において、また、S t e v e n s , K . L . e t a l , B i o o r g . M e d . C h e m . L e t t . ( 2 0 0 8 ) , 1 8 , 5 7 5 8 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。

10

【 0 0 8 2 】

【 化 1 4 】



20

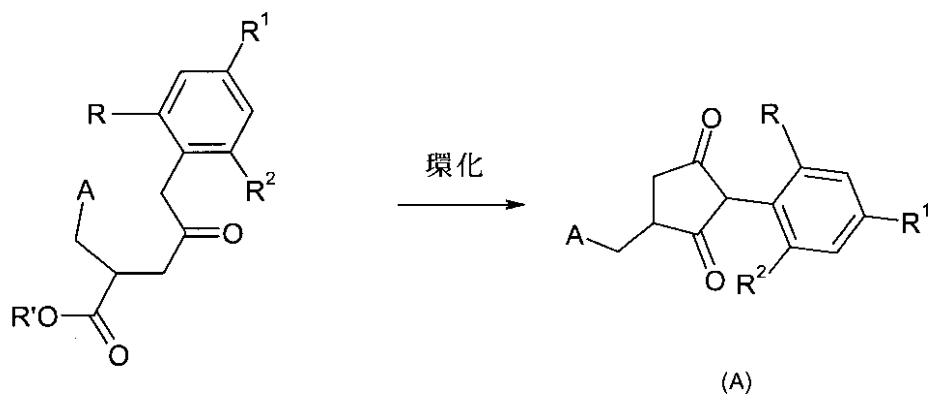
【 0 0 8 3 】

さらなる方法において、式 (A) の化合物は、T . N . W h e e l e r、米国特許第 4 2 0 9 5 3 2 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。

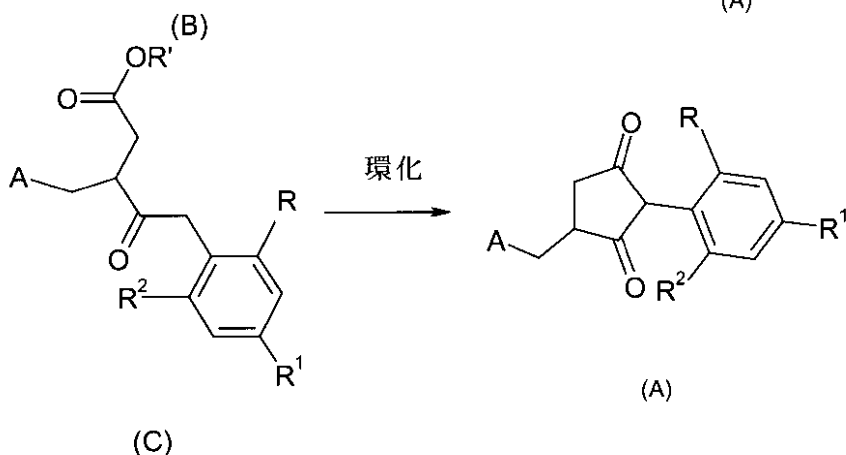
30

【 0 0 8 4 】

## 【化 1 5】



10



20

## 【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。

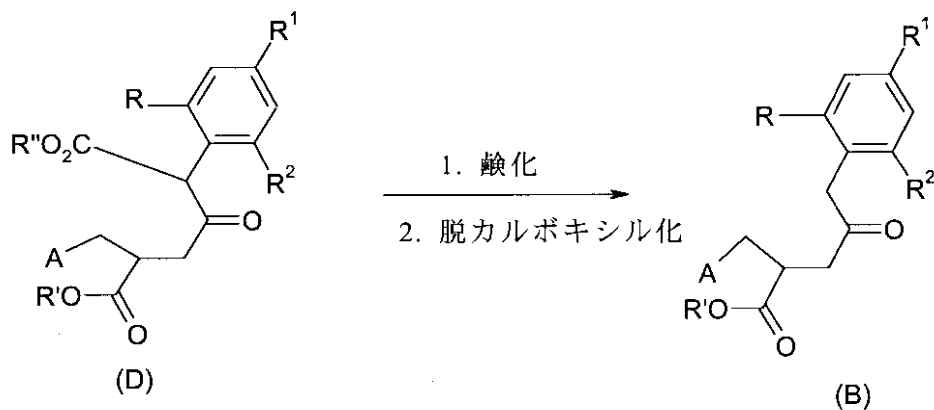
## 【0087】

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。

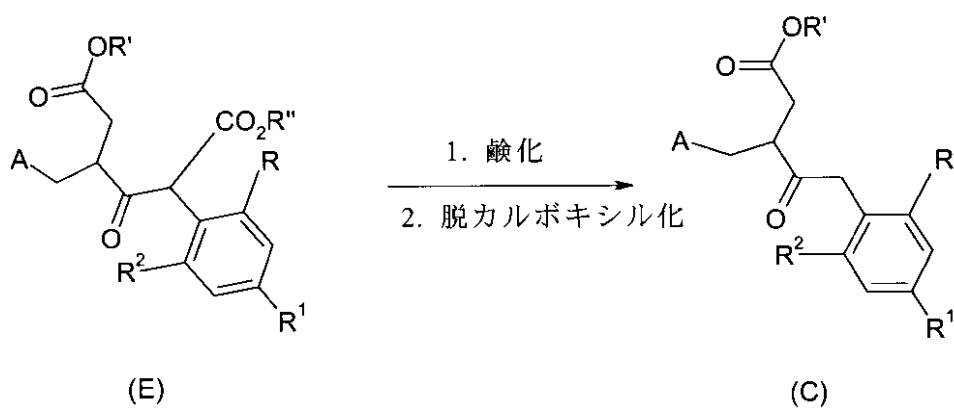
40

## 【0088】

## 【化 1 6】



10



20

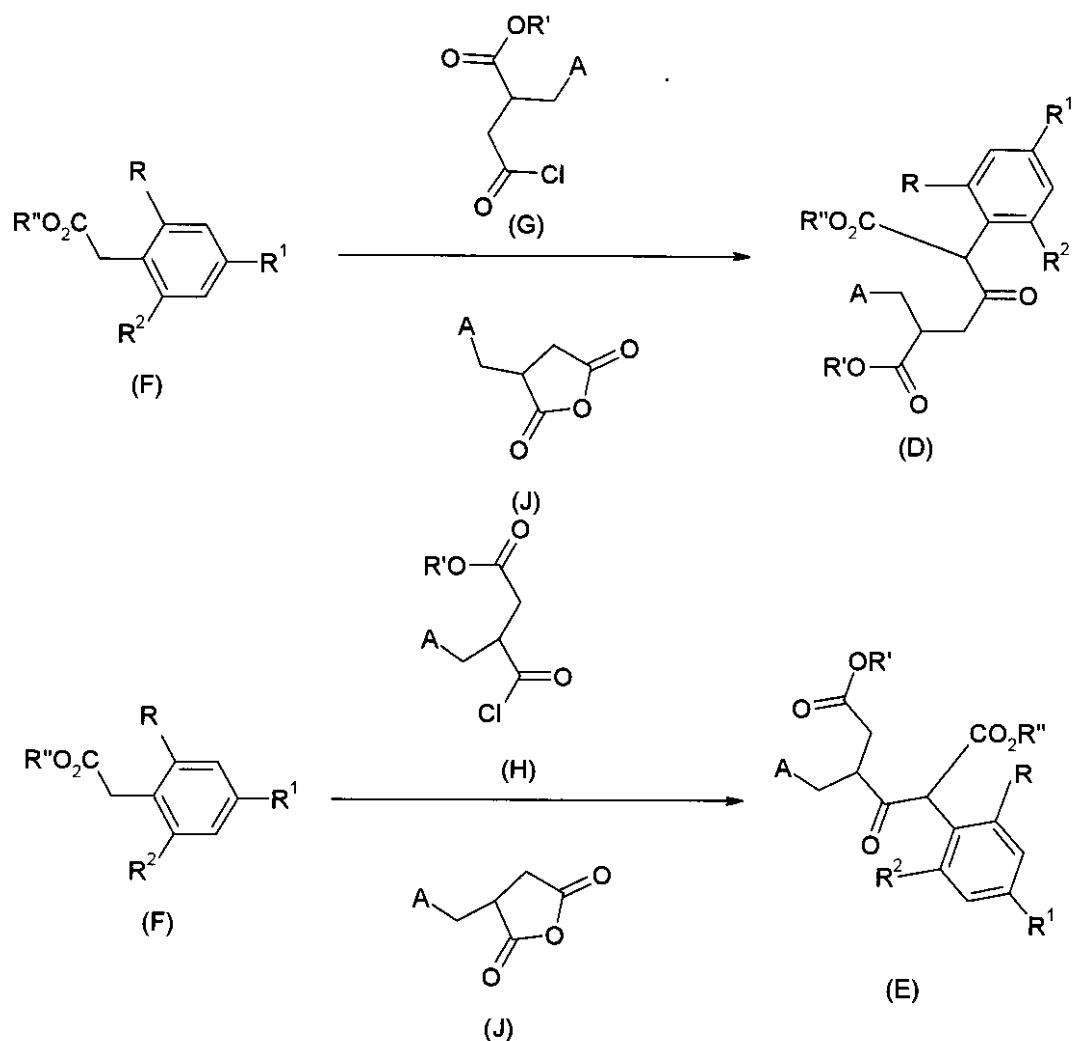
## 【 0 0 8 9 】

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、 $-80 \sim 30$  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 ( $-80 \sim 30$  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。

30

## 【 0 0 9 0 】

## 【化 17】



10

20

30

40

50

## 【0091】

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】

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. Helv. Chim. 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。

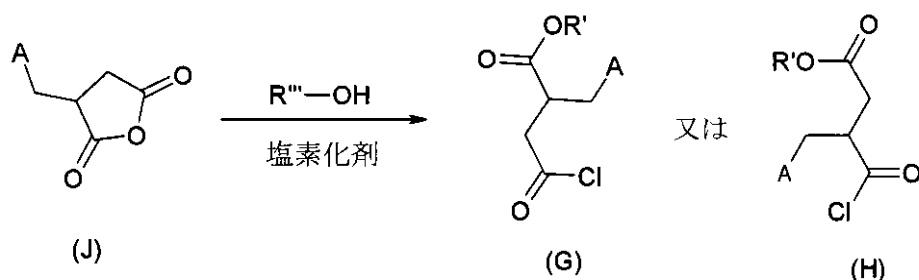
## 【0093】

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 Vasella, A. Helv. Chim. Acta, (2005), 88, 3151、およびM. 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】



10

【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。

20

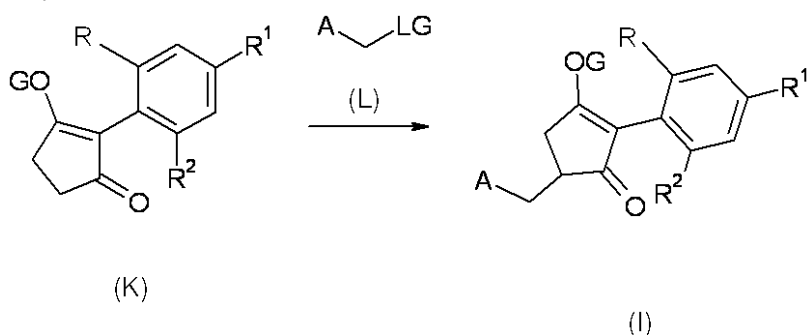
【0096】

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。

30

【0097】

【化19】



40

【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. 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。

50

## 【0100】

あるいは、式(K)の化合物(式中、Gは、 $C_1 - C_6$ 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。

10

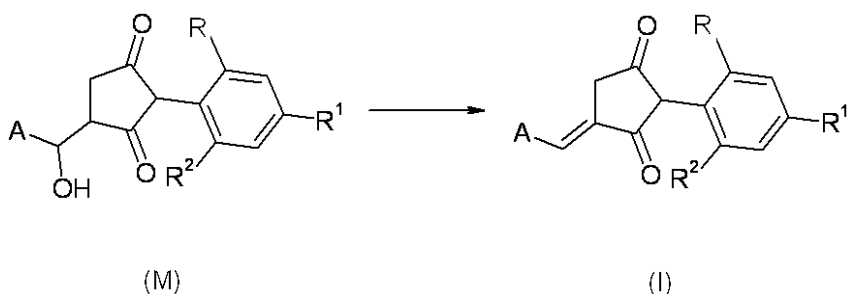
## 【0102】

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。

20

## 【0103】

## 【化20】



30

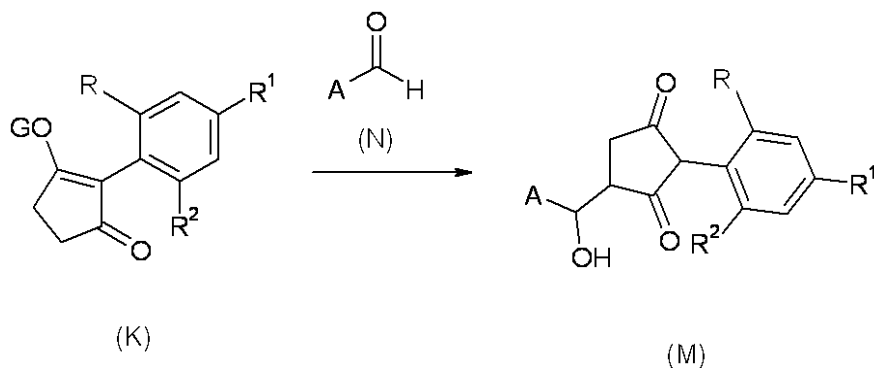
## 【0104】

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、 $-80 \sim 30$ 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。

40

## 【0105】

## 【化 2 1】



10

## 【0106】

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もよい。

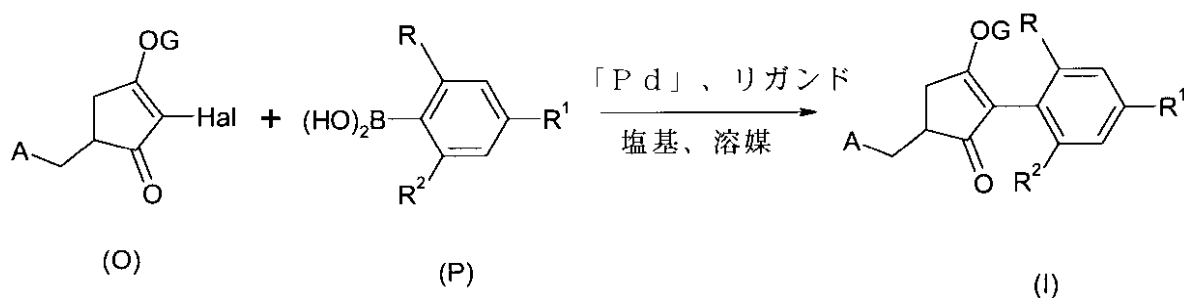
## 【0107】

式 (I) の化合物 (式中、G は、 $C_1 - C_4$  アルキルである) は、式 (O) の化合物 (式中、G は、 $C_1 - C_4$  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 (O) 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 (O) 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 (O) に対して 0.001 - 50 % の (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、Kueth, J. T. et al. J. Org. Chem. (2002), 67 (17), 5993 - 6000) を参照)。

20

## 【0108】

## 【化 2 2】



30

## 【0109】

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 の方法によって、式 (R) の得られたハロゲン化物を、 $C_1 - C_4$  ハロゲン化アルキルまたはトリ  $C_1 - C_4$  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、 $C_1 - C_4$  ハロゲン化アルキルまたはトリ  $C_1 - C_4$  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、Kueth, J. T. et al. J. Org. Chem. (2002), 67 (17), 5993 - 6000、Belmont, D. T. et al. J. Or

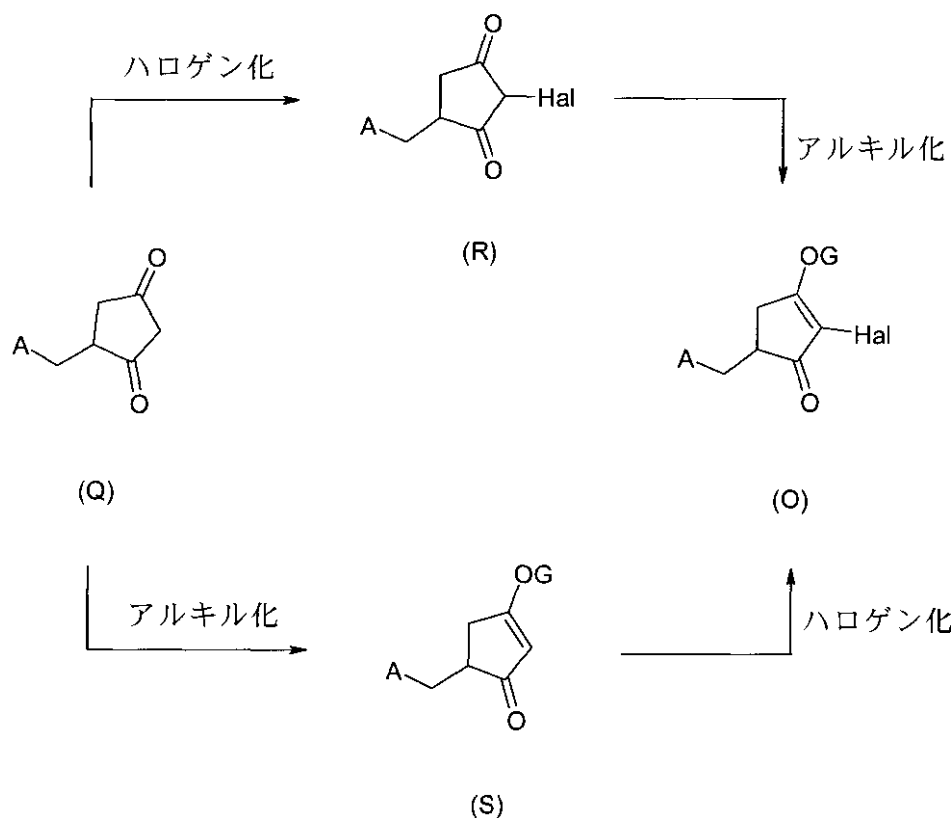
40

50

g. Chem. 1985, 50(21), 4102-4107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】



10

20

【0111】

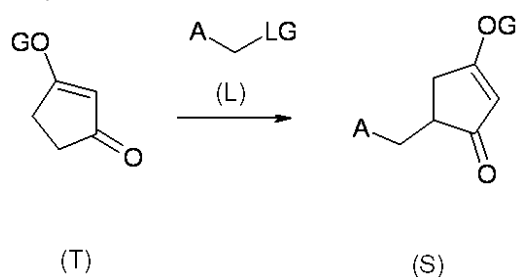
式(S)の化合物は、式(T)の化合物を、塩基性条件下で、式(L)の化合物(式中、LGは、ハロゲン(好ましくは、臭素またはヨウ素)等の脱離基または活性アルコール(好ましくは、メシレートまたはトシレート)である)で、処理することによって調製されてもよい。好適な塩基としては、リチウムジイソプロピルアミド、ナトリウムヘキサメチルジシルアジド、カリウムtert-ブトキシドが挙げられ、反応は、好ましくは、-80 ~ 30 の間の温度で、好適な溶媒(テトラヒドロフラン等)中で実施される(例えば、Gulias, M. et al. Org. Lett. (2003), 5(11), 1975-1977、Altenbach, R. J. et al. J. Med. Chem. (2006), 49(23), 6869-6887、Snowden, R. L. Tetrahedron (1986), 42(12), 3277-90、Oppolzer, W. et al. Helv. Chim. Acta (1980), 63(4), 788-92、Mellor, M. et al. Synth. Commun. 1979, 9(1), 1-4を参照)。

30

40

【0112】

【化24】



50

## 【 0 1 1 3 】

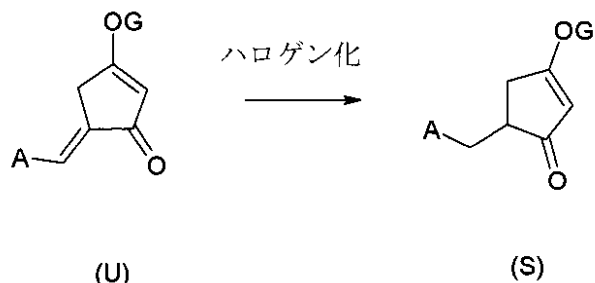
式 ( T ) の化合物は、既知であるか、または既知の方法によって既知の化合物から作製されてもよい。

## 【 0 1 1 4 】

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。

## 【 0 1 1 5 】

## 【 化 2 5 】



10

## 【 0 1 1 6 】

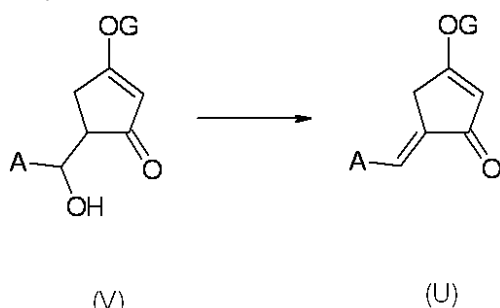
式 ( U ) の化合物は、既知の方法で、既知の方法によって式 ( V ) の化合物からの式 ( U ) の化合物のハロゲン化で調製することができる (例えば、Nagaoka, H. et al. Tetrahedron Letters (1985), 26(41), 5053-5056、Nagaoka, H. et al. J. Am. Chem. Soc. (1986), 108(16), 5019-5021、Zuki, M. et al. Bull. Chem. Soc. Japan (1988), 61(4), 1299-1312、Enhölm, E. J. et al. J. Org. 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

30

## 【 0 1 1 7 】

## 【 化 2 6 】



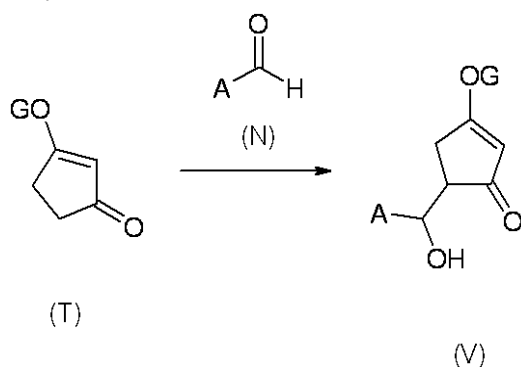
40

## 【 0 1 1 8 】

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、Aleman, J. et al. Chem. Comm. (2007), (38), 3921-3923を参照)。

## 【 0 1 1 9 】

## 【化 2 7】



10

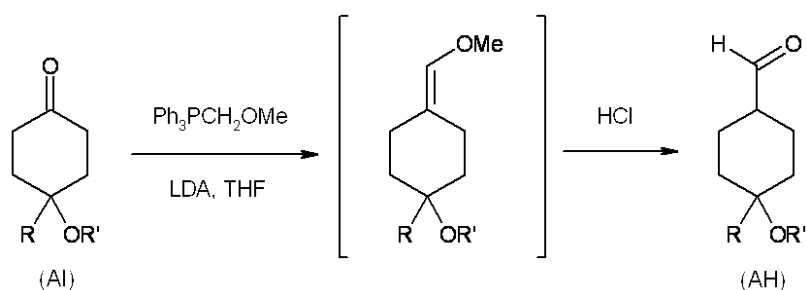
## 【 0 1 2 0】

(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】



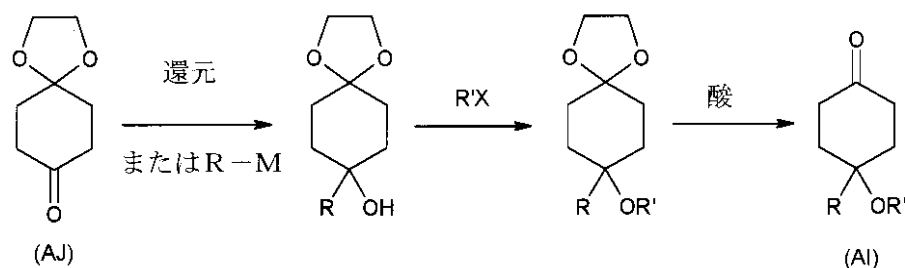
30

## 【 0 1 2 2】

(AI) 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、(AJ) 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 W. 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、 $-80 \sim 30$  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。

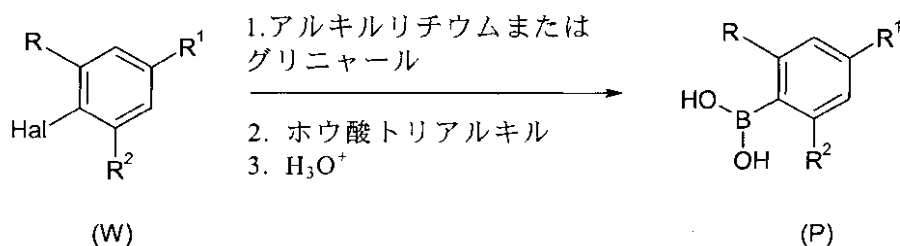
【0125】

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、 $-80 \sim 30$  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、酸性条件下で、加水分解されて、式 (P) のボロン酸を提供し得る。

10

【0126】

【化30】



20

【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、酸性条件下で、加水分解され、式 (P) のボロン酸を得てもよい。

30

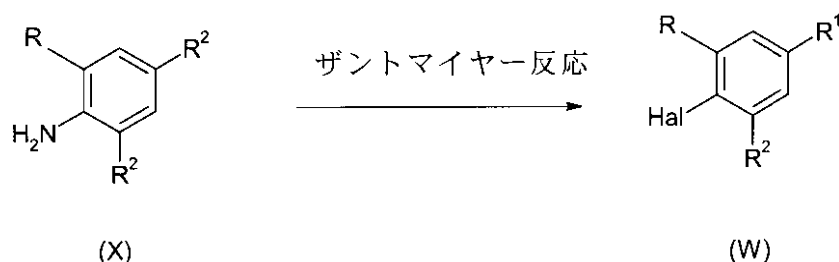
【0128】

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

40

【0129】

【化31】



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。

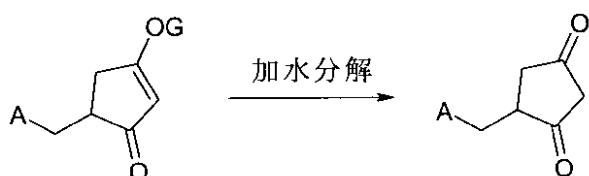
## 【 0 1 3 2 】

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 で、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 】



(S)

(Q)

20

## 【 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 % の (2 - ジシクロヘキシルホスフィノ) - 2, 4, 6 - トリイソプロピルピフェニル) 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、Belmont, 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 WO 2005 / 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、式 ( 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

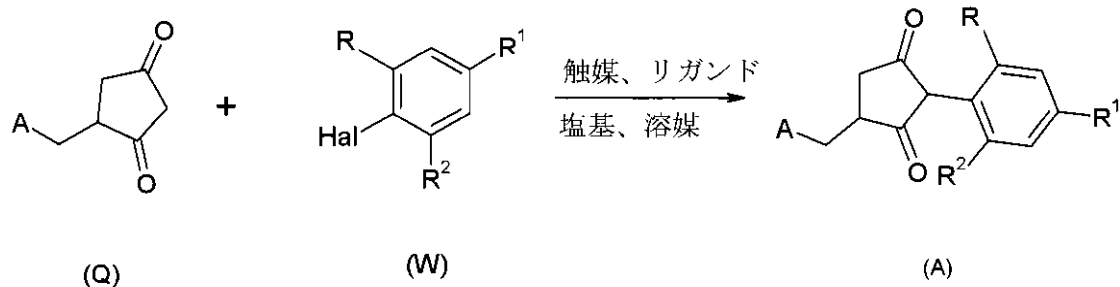
40

50

既知である。

【 0 1 3 6 】

【 化 3 3 】



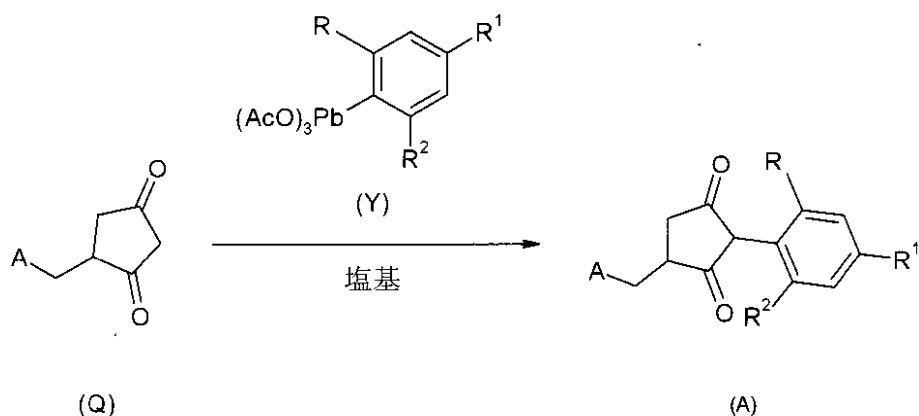
10

【 0 1 3 7 】

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。

【 0 1 3 8 】

【 化 3 4 】



20

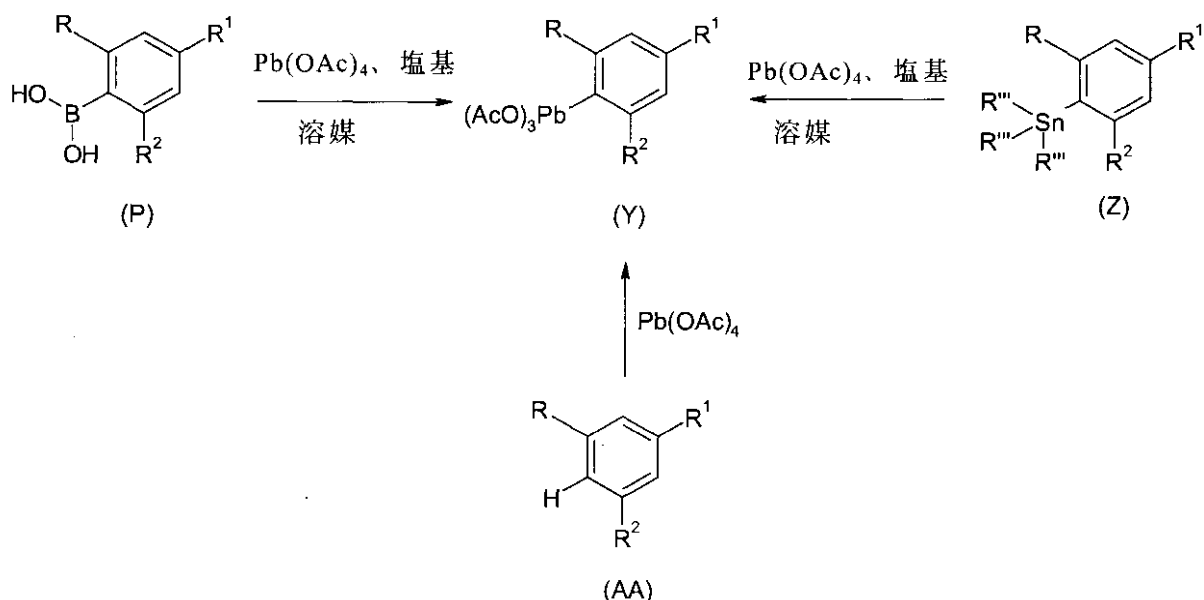
30

【 0 1 3 9 】

式 (X) の有機鉛試薬は、式 (P) のボロン酸、式 (Z) のスタナン (式中、R は、C<sub>1</sub> - C<sub>4</sub> 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 (A A) の化合物の直接的鉛酢酸化によって調製されてもよい。

【 0 1 4 0 】

## 【化 3 5】



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照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

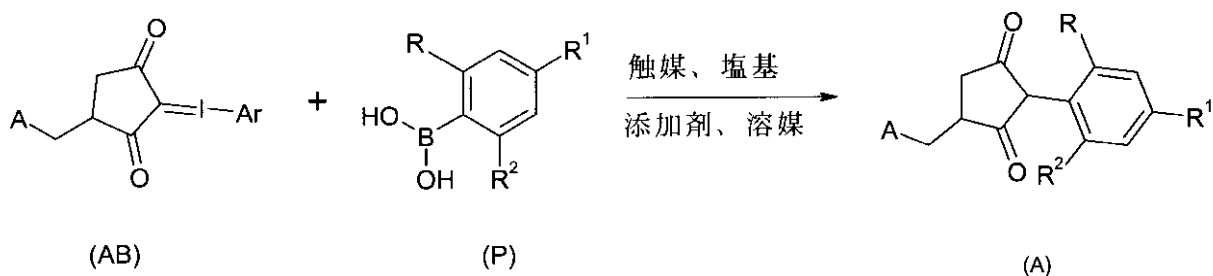
## 【0142】

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 3 6】



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)、二塩化ビス (トリシクロヘキシルホスフィン) 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) ( $\text{PdCl}_2$ ) または酢酸パラジウム (II) ( $\text{Pd(OAc)}_2$ ) を、所望のリガンド、例えば、トリフェニルホスフィン ( $\text{PPh}_3$ )、トリシクロペンチルホスフィン、トリシクロヘキシルホスフィン、2 - ジシクロヘキ

50

10

10

10

10

20

## 20

## 20

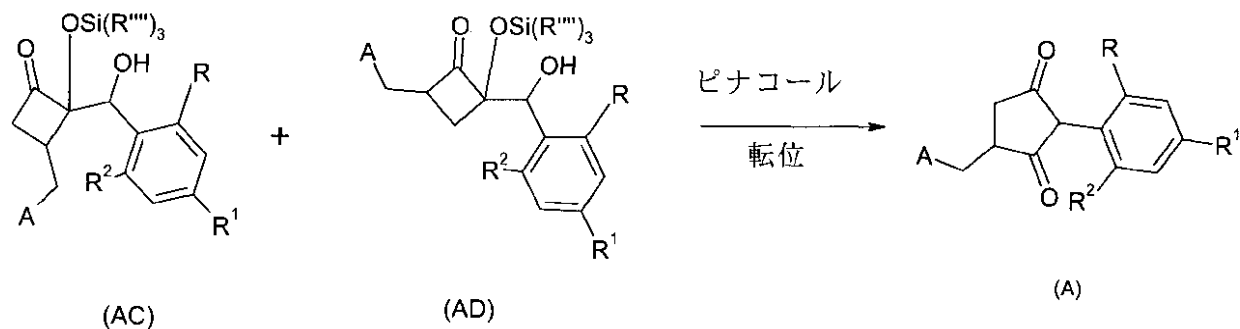


## 40

40

## 40

## 【化 3 8】



10

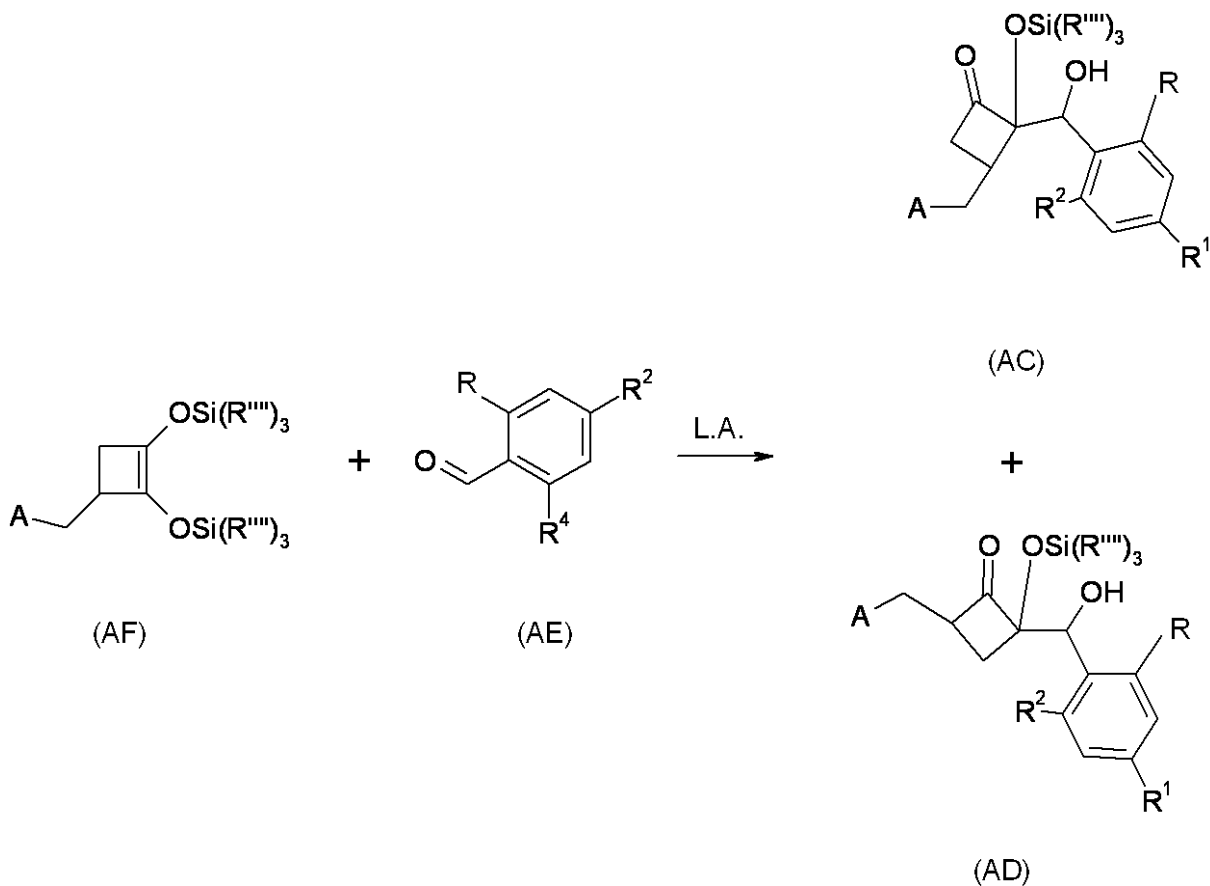
## 【0150】

式 (A C) の化合物および式 (A D) 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、 $-80 \sim 30$  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 (A E) の化合物を、式 (A F) 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 3 9】



30

40

## 【0152】

式 (A E) 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 (A A) の化合物から作製されてもよい。

## 【0153】

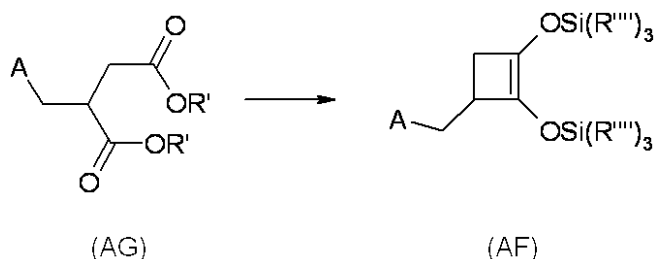
式 (A F) の化合物は、クロロトリ - C<sub>1</sub> - C<sub>4</sub> アルキルシリルおよび金属 (好ましく

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 Burnell, 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。

【0154】

【化40】



10

【0155】

式(AG)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(AG)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)。

20

【0156】

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。

【0157】

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。

【0158】

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、サスポエマルション、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。

30

40

【0159】

かかる製剤は、直接使用するか、あるいは使用前に希釈することができる。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。

【0160】

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

50

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、アミノプラスト樹脂、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

30

#### 【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、Solveso（登録商標）、Shell sol A（登録商標）、Caromax（登録商標）、Hydro sol（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、Exxol（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炭化水素溶媒、Varsol（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C<sub>6</sub>-C<sub>18</sub>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、C<sub>3</sub>-C<sub>18</sub>-アルキルピロ

40

50

リドン、 $\gamma$ -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 - ジメチルラクタアミド、C<sub>4</sub> - C<sub>18</sub> 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、シクロヘキサノン、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 - ペンタノール、2 - エチルヘキサノール、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 - ペンタジオール、4 - ヒドロキシ - 4 - メチル - 2 - ペンタノン、シクロヘキサノール、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 ~ 4000 の分子量を有するポリプ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、C<sub>8</sub> - C<sub>10</sub> 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、リン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、C<sub>3</sub> - C<sub>18</sub> - 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。

#### 【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、湿潤剤、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、光吸収体、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、シブロスルファミド、メフェンビル-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。

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）（Loveland 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、C<sub>8</sub>-C<sub>22</sub>脂肪酸のアルキルエステル、特に、C<sub>12</sub>-C<sub>18</sub>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-111-82-0）、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

40

【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

50

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W O 9 7 / 3 4 4 8 5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 ~ 4 0のエトキシ化度を有するエトキシ化C<sub>12</sub> - C<sub>22</sub>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(Clarisant)である。また、シリコン界面活性剤、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、およびパーフ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 ~ 5 0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。

【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。

【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。

【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。

【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、土壌の性質、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

10

20

30

40

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                    | 4 %  | -    | 4 %  | 4 %  |
| (36モルのエチレンオキシド)                    |      |      |      |      |
| オクチルフェノールポリグリコールエーテル               | -    | 4 %  | -    | 2 %  |
| (7-8モルのエチレンオキシド)                   |      |      |      |      |
| NMP                                | -    | 10 % |      | 20 % |
| 芳香族炭化水素                            | 85 % | 68 % | 65 % | 16 % |
| 混合物C <sub>9</sub> -C <sub>12</sub> |      |      |      |      |

【 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 % | -    | -    |

|                                    |      |      |      |      |
|------------------------------------|------|------|------|------|
| NMP                                | -    |      | 50 % | 10 % |
| 芳香族炭化水素                            | 35 % | 30 % | -    | -    |
| 混合物C <sub>9</sub> -C <sub>12</sub> |      |      |      |      |

## 【 0 1 8 7 】

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。

## 【 0 1 8 8 】

|   |      |      |      |      |    |
|---|------|------|------|------|----|
| 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 |
| ジソプロピルナフタレンスルホン酸<br>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<br>7-8モルのエチレンオキシド) | -    | 1 %  | 2 %  | -    |    |
| 高度分散ケイ酸                                 | 1 %  | 3 %  | 5 %  | 10 % |    |
| カオリン                                    | 88 % | 62 % | 35 % | -    |    |

## 【 0 1 8 9 】

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砕し、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。

## 【 0 1 9 0 】

|               |        |      |      |  |
|---------------|--------|------|------|--|
| 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<sub>3</sub>またはSiO<sub>2</sub>

## 【 0 1 9 1 】

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、溶媒を真空内で蒸発させる。

## 【 0 1 9 2 】

|                   |        |      |      |  |
|-------------------|--------|------|------|--|
| 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<sub>3</sub>またはSiO<sub>2</sub>

## 【 0 1 9 3 】

細かく粉砕された活性成分を、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。

## 【 0 1 9 4 】

|               |        |      |      |      |  |
|---------------|--------|------|------|------|--|
| 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 % |  |

## 【 0 1 9 5 】

活性成分をアジュバントと混合し、粉砕し、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。

## 【 0 1 9 6 】

10

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。

## 【0200】

20

| F8. 懸濁液濃縮物                | a)    | b)    | c)    | d)    |
|---------------------------|-------|-------|-------|-------|
| 活性成分 <sub>&lt;0&gt;</sub> | 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       | -     | 1 %   | 2 %   | -     |
| (15モルのエチレンオキシド)           |       |       |       |       |
| 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 %  |

30

## 【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。

## 【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もでき、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

50

、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な方法の結果として、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。遺伝子工学的な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ー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、単子葉植物および／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、ヒエ属（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、シナビス属、タデ属、ビロードキビ属、ナルコビエ属、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】

単子葉の雑草（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））、ヒエ属（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、制御される単子葉の雑草は、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、ナルコビエ属、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）トウモロコシであることができる。式Iの化合物によって制御される単子葉雑草は、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

40

#### 【0208】

作物はまた、遺伝子工学的な方法によって、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（欧州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・チューリンゲンシス土壌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、欧州特許第EP-A-451 878号、欧州特許第EP-A-374 753号、国際公開第WO93/

50

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-427 529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むし、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）、Yield Gard（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）、NatureGard（登録商標）、およびProteXcta（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。

10

#### 【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。

20

#### 【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+アスラム、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+アジメスルフロン、式Iの化合物+BCPC、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+ベントゾン、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+ピフェノックス、式Iの化合物+ピアラホス、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+ハウ砂、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+ブトロキシジム、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+CDEA、式Iの化合物+CEPC、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パルギル、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+CMA、式Iの化合物+4-

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、

【 0 2 1 2 】

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 + ダラボン、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 + デスメディファム、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 + ジフルフェンソピル、式 I の化合物 + ジメフロノ、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 + 二臭化ジクワット、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 + フルメトスラム、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 + フルプロパネート、式 I の化合物 + フルピルスルフロン、式 I の化合物 + フルピ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、

【 0 2 1 3 】

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 + リニユロン、式 I の化合物 + M A A、式 I の化合物 + M A M A、式 I の化合物 + M C P A、式 I の化合物 + M C P A チオエチル、式 I の化合物 + M C P B、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 + メフェナセツト、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 + メトスラム、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 + M K - 6 1 6、式 I の化合物 + モリネート、式 I の化合物 + モノリニユロン、式 I の化合物 + M S M A、式 I の化合物 + ナプロアニリド、式 I の化合物 + ナプロバミド、式 I の化合物 + ナブタラム、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、

10

20

# 【 0 2 1 4 】

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 + ペプレート、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 + フェンメディファム、式 I の化合物 + フェ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 + ビノキサデン、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 + プロメトリン、式 I の化合物 + プロバクロル、式 I の化合物 + プロバニル、式 I の化合物 + プロパキザホップ、式 I の化合物 + プロバジン、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 + プロボキシカルバゾン、式 I の化合物 + プロボキシカルバゾンナトリウム、式 I の化合物 + プロピザミド、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 + ビラクロニル、式 I の化合物 + ビラフルフェン、式 I の化合物 + ビラフルフェンエチル、式 I の化合物 + ビラゾリネート、式 I の化合物 + ビラゾスルフロン、式 I の化合物 + ビラゾスルフロンエチル、式 I の化合物 + ビラゾキシフェン、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 + S M A、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

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、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 + テブラロキシジム、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 + テニルクロール、式 I の化合物 + チアゾビル、式 I の化合物 + チフ  
ェンスルフロ、式 I の化合物 + チフェンスルフロメチル、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、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 + トリクロビル、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、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、  
式 I の化合物 + トリフルスルフロメチル、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、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 - メチルチオフエン - 3 - カルボン酸 ( BAY 63  
6 )、式 I の化合物 + BAY 747 ( 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 ) :

式 I の化合物 + 国際公開第 WO 2010 / 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 WO 2010 / 059680 号に開示する除草化合物 ( Dow  
w、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 WO 2010 / 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 )。

【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 + メフェンビルジエチル、式 I の化合物 + メフェンビル二酸、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 + A D - 6 7、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 + フラゾール、式 I の化合物 + C L 3 0 4 , 4 1 5、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 + D K A - 2 4、式 I の化合物 + R - 2 9 1 4 8、および式 I の化合物 + P P G - 1 2 9 2。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 + M C P A、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

20

30

40

50

#### 【 0 2 2 0 】

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 - 2 9 1 4 8は、例えば、P. B. Goldsbrough 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、P P G - 1 2 9 2は、国際公開第W O 0 9 2 1 1 7 6 1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。

#### 【 0 2 2 1 】

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、メフェンビルジエチルおよび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。

#### 【 0 2 2 2 】

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。

#### 【 0 2 2 3 】

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。

#### 【 0 2 2 4 】

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、メフェンビル - 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。

#### 【 0 2 2 5 】

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

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。 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壌に導入され、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、 $\alpha$ -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

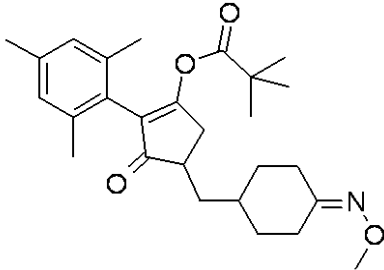
50

## 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

【 0 2 3 3 】

【 化 4 1 】



10

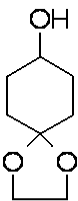
【 0 2 3 4 】

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

【 0 2 3 5 】

【 化 4 2 】



20

【 0 2 3 6 】

250 ml の丸底フラスコ中で、20 g の 1, 4 - ジオキサ - スピロ [ 4 . 5 ] デカン - 8 - オン ( 128 mmol ) を計量し、200 ml 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 ( 4 g、106 mmol ) 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 時間撹拌した。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 0.5 M の水性塩酸で酸性にし、ジエチルエーテル ( 2 × 100 ml ) 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 ( 12.2 g ) を得る。

30

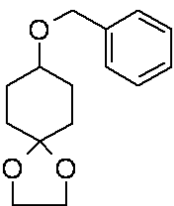
【 0 2 3 7 】

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

【 0 2 3 8 】

【 化 4 3 】



40

【 0 2 3 9 】

乾燥したテトラヒドロフラン ( 50 ml ) 中の 1, 4 - ジオキサ - スピロ [ 4 . 5 ] デカン - 8 - オル ( 11.0 g、70 mmol ) を、乾燥したテトラヒドロフラン ( 50 ml ) 中の鉱油 ( 2.80 g、70 mmol ) 中に分散した 60 % の水酸化ナトリウムの撹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 時間室温で撹拌す

50

る。乾燥したテトラヒドロフラン (50 ml) 中の臭化ベンジルの溶液 (13.2 g、77 mmol) 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 (200 ml) 中に注入し、0.5 N の水性塩酸で中和し、塩化メチレン (2 × 100 ml) 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 (16 g) を得る。

【0240】

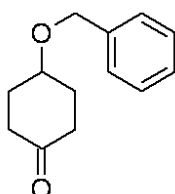
ステップ3:

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 (15 g、60 mmol) を、THF (150 ml) 中で溶解し、1 M の水性塩酸 (40 ml) 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 × 200 ml) で抽出する前に、冷却し、水 (200 ml) 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 (10 g) を得る。

20

【0243】

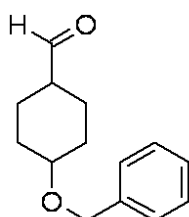
ステップ4:

4 - ベンジルオキシ - シクロヘキサカルバルデヒドの調製

【0244】

30

【化45】



【0245】

乾燥した THF (80 ml) 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 (13.8 g、40 mmol) に、リチウムジイソプロピルアミヂオの溶液 (24.4 ml、44 mmol、ヘキサン / THF / エチルベンゼン中の 1.8 M) を、0 ~ 5 °C で、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 °C まで冷却する。この温度で、テトラヒドロフラン (30 ml) 中の 4 - ベンジルオキシ - シクロヘキサノン (6.1 g、30 mmol) 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 °C 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、2 N 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 × 100 mm) 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 - シクロヘキサカルバルデヒド (5.7 g) を得る。

40

50

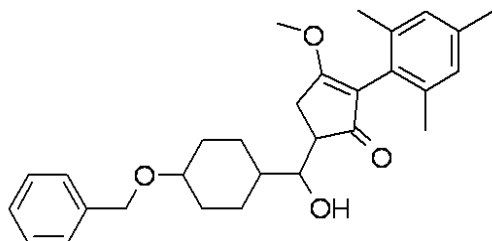
【 0 2 4 6 】

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

【 0 2 4 7 】

【 化 4 6 】



10

【 0 2 4 8 】

250 ml 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 、 26 mmol ) を計量し、乾燥したテトラヒドロフラン ( 30 ml ) 中で溶解した。

【 0 2 4 9 】

リチウムジイソプロピルアミチオの溶液 ( 13.5 ml 、 24.3 mmol 、 ヘキサン / THF / エチルベンゼン中の 1.8 M ) を、20 分間の期間にわたり、液滴に添加した後、溶液を - 78 °C まで冷却した。テトラヒドロフラン ( 30 ml ) 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 ( 4.74 g 、 21.7 mmol ) を添加する前に、得られた溶液を、30 分間、- 78 °C 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 × 200 ml ) 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 ( 6.7 g ) を得る。

20

【 0 2 5 0 】

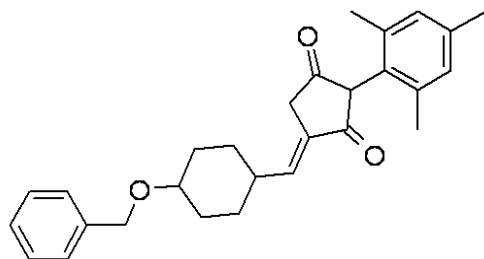
30

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

【 0 2 5 1 】

【 化 4 7 】



40

【 0 2 5 2 】

6 個の 20 ml のマイクロ波バイアル中に、アセトン ( 7.5 ml ) および 2 N の水性塩酸 ( 7.5 ml ) 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 、 2.2 mmol ) 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 °C まで加熱する。次いで、反応混合物を混合し、水 ( 100 ml ) で希釈し、ジクロロメタン ( 2 × 50 ml ) 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、フラッシュ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 ( 4 . 3 g ) を得る。

【 0 2 5 3 】

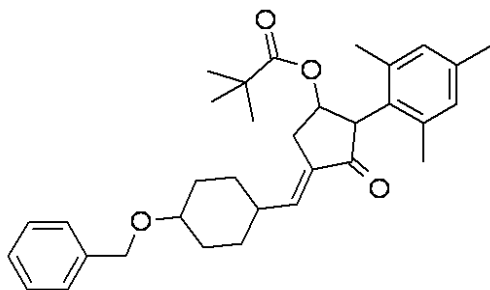
ステップ7 :

2 , 2 - ジメチルプロピオン酸 4 - [ 1 - ( 4 - ベンジルオキシ - シクロヘキシル ) - メト - ( 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

【 0 2 5 4 】

10

【 化 4 8 】



【 0 2 5 5 】

20

ジクロロメタン ( 6 0 m l ) およびトリエチルアミン ( 2 m l ) 中の 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 ( 4 . 0 g , 9 . 6 m m o l ) の溶液に、0 で、塩化ピパロイル ( 1 . 7 3 g , 1 4 . 3 m m o l ) を添加する。反応物を、室温まで温め、次いで、3 時間撹拌する。反応混合物を水 ( 5 0 m l ) に注入し、ジクロロメタン ( 2 x 5 0 m l ) 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 - シクロヘキシル ) - 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 . 5 g ) を得る。

【 0 2 5 6 】

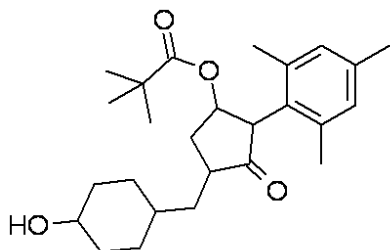
30

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

【 0 2 5 7 】

【 化 4 9 】



40

【 0 2 5 8 】

2 , 2 - ジメチルプロピオン酸 4 - [ 1 - ( 4 - ベンジルオキシ - シクロヘキシル ) - 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 . 5 g , 9 . 0 m m o l ) を、酢酸エチル ( 4 0 m l ) 中に溶解し、炭素上の 1 g の 5 % のパラジウムを追加し、反応混合物を、水素圧 ( 3 パール ) 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、フラッシュ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

50

ロヘキシルメチル) - 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 . 3 7 g ) を得た。

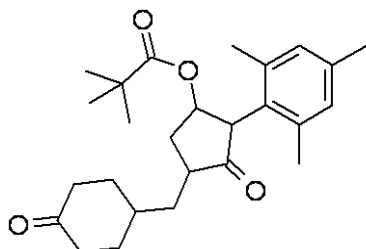
【 0 2 5 9 】

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

【 0 2 6 0 】

【 化 5 0 】



10

【 0 2 6 1 】

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 0 0 m g ) 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 m l 、 1 6 7 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 × 5 0 m l ) 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 ( 7 2 m g ) を得る。

20

【 0 2 6 2 】

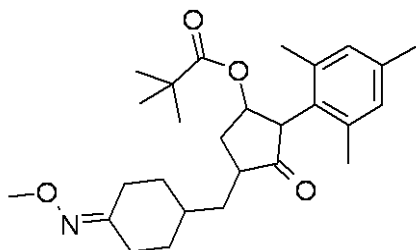
ステップ10:

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

【 0 2 6 3 】

【 化 5 1 】



40

【 0 2 6 4 】

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 ( 1 5 0 m g 、 0 . 3 6 m m o l ) を、エタノール ( 8 m l ) 中に溶解し、ヒドロキシルアミン塩酸塩 ( 3 6 m g 、 0 . 4 3 m m o l ) を添加する。溶液を、ピリジン ( 3 2 m g 、 0 . 4 0 m m o l ) 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 × 4 0 m l ) 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

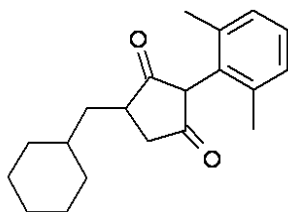
【 0 2 6 5 】

実施例2:

4 - シクロヘキシルメチル - 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

【 0 2 6 6 】

【 化 5 2 】



10

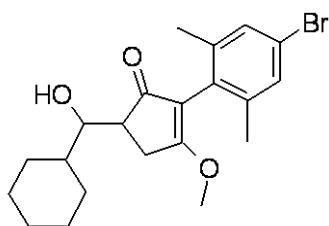
【 0 2 6 7 】

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

【 0 2 6 8 】

【 化 5 3 】



20

【 0 2 6 9 】

10 ml 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 . 4 mmol ) の溶液に、窒素環境下で、 $-78^{\circ}\text{C}$  で、LiHMDS ( 4 . 42 ml 、 4 . 42 mmol ) をゆっくりと添加し、 $-78^{\circ}\text{C}$  で 40 分間攪拌する。乾燥したテトラヒドロフラン ( 10 ml ) 中のシクロヘキシルカルボキシアリデヒド ( 761 mg 、 6 . 8 mmol ) の溶液を、 $-78^{\circ}\text{C}$  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 ( 50 ml ) で急冷し、水性層を酢酸エチル ( 3 \* 100 ml ) 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

【 0 2 7 0 】

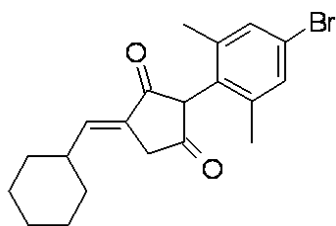
ステップ2:

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

40

【 0 2 7 1 】

【 化 5 4 】



【 0 2 7 2 】

50

エタノール ( 27.6 ml ) および 2 N の水性塩酸 ( 13.8 ml ) 中の 2 - ( 4 - ブロモ - 2 , 6 - ジメチルフェニル ) - 5 - ( シクロヘキシル - ヒドロキシ - メチル ) - 3 - メトキシ - シクロペント - 2 - エノン ( 1.38 g、3.4 mmol ) 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 × 100 ml ) 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 - シクロヘキシル - メス - ( E ) - イリデン ] - シクロペンタン - 1 , 3 - ジオン ( 250 mg ) を得た。

【 0 2 7 3 】

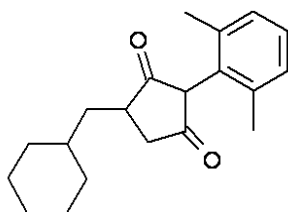
ステップ 3 :

10

4 - シクロヘキシルメチル - 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

【 0 2 7 4 】

【 化 5 5 】



20

【 0 2 7 5 】

メタノール ( 25 ml ) 中の 2 - ( 4 - ブロモ - 2 , 6 - ジメチルフェニル ) - 4 - [ 1 - シクロヘキシル - メス - ( E ) - イリデン ] - シクロペンタン - 1 , 3 - ジオンの溶液 ( 250 mg、0.844 mmol ) に、炭素上の 10 % のパラジウム ( 50 mg、20 % ) を添加し、室温で、水素バルーン圧下で、7 ~ 8 時間、撹拌した。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 - ジオンを得た。

【 0 2 7 6 】

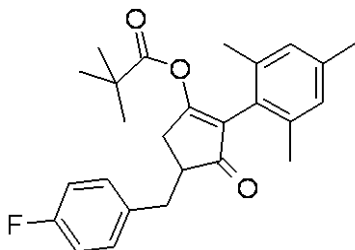
30

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

【 0 2 7 7 】

【 化 5 6 】



40

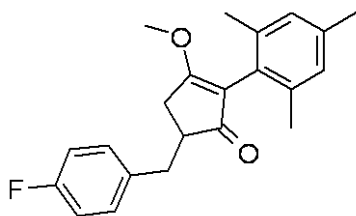
【 0 2 7 8 】

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

【 0 2 7 9 】

## 【化 5 7】



## 【 0 2 8 0】

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、N<sub>2</sub> 下で、- 78  
 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、- 78 で、40 分間、撹拌させる。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、- 78 で、30 分間、撹拌する。反応物を  
 、飽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。

10

20

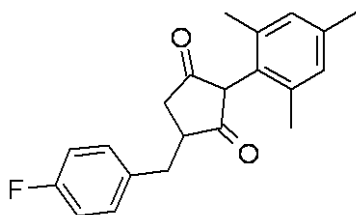
## 【 0 2 8 1】

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

## 【 0 2 8 2】

## 【化 5 8】



30

## 【 0 2 8 3】

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 . 4  
 0 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、40 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。

40

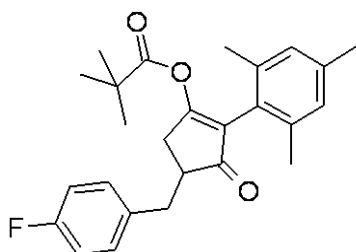
## 【 0 2 8 4】

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

## 【 0 2 8 5】

## 【化 5 9】



## 【0 2 8 6】

ジクロロメタン ( 1 m l ) およびトリエチルアミン ( 5 2  $\mu$  l 、 0 . 3 7 m m o l ) 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 ( 3 0 m g 、 0 . 0 9 m m o l ) に、室温で、塩化ピバロイル ( 3 4  $\mu$  l 、 0 . 3 7 m m o l ) を添加する。反応混合物を、一晚、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 ( 3 1 m g ) を得る。

10

## 【0 2 8 7】

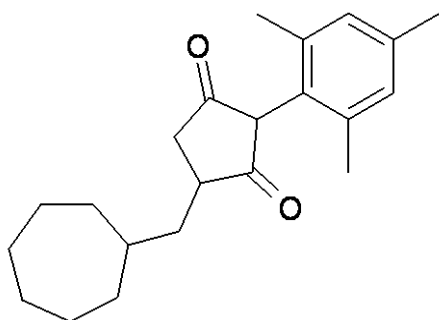
実施例 4 :

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

20

## 【0 2 8 8】

## 【化 6 0】



30

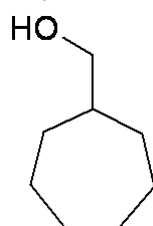
## 【0 2 8 9】

ステップ 1 :

シクロヘプチル - メタノールの調製

## 【0 2 9 0】

## 【化 6 1】



40

## 【0 2 9 1】

$N_2$  環境下で、炉乾燥した三口フラスコに、 $LiAlH_4$  ( 4 . 0 g 、 0 . 1 1 m o l ) の後、無水  $Et_2O$  ( 1 0 0 m l ) を添加した。攪拌した懸濁液に、無水  $Et_2O$  ( 5 0 m l ) 中のシクロヘプタンカルボン酸 ( 5 . 0 g 、 0 . 0 3 5 m o l ) 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。 $H_2O$  ( 4 m l ) を、慎重に 2 0 分間にわたり、液滴で添加した後、慎重に  $NaOH$  (

50

4 ml の 15 % の水性溶液) を液滴で追加し、次いで、さらなる  $H_2O$  (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  $Et_2O$  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】

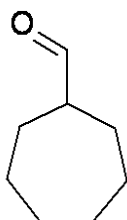
ステップ2:

シクロヘプタンカルバルデヒドの調製

【0293】

【化62】

10



【0294】

$CH_2Cl_2$  (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、 $Et_2O$  (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  $Et_2O$  (2 x 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  $SiO_2$  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  $Et_2O$  (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】

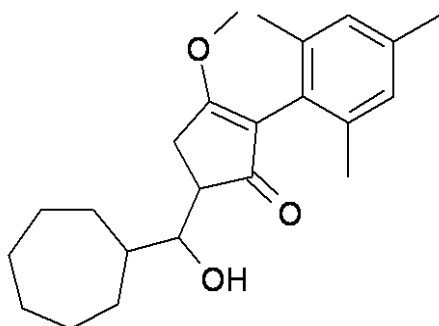
ステップ3:

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) - シクロペント - 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) - シクロペント - 2 - エノン (0.46 g, 2.0 mmol) の攪拌した溶液に、-78 で、 $N_2$  環境下で、リチウムジイソプロピルアミチオ ( $THF$  / 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 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 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、 $H_2O$  (25 ml) の添加により急冷し、 $EtOAc$  (3 x 20 ml) で抽

50

出した。混合された有機抽出物を、塩水 ( 1 5 m l ) で洗浄し、M g S O <sub>4</sub> 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 ( 6 2 8 m g ) を得た。粗原料を、1 0 0 % のイソヘキサン対 1 0 0 % の E t O A c 勾配を使用して、S i O <sub>2</sub> 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 ( 1 0 1 m g ) として所望の生成物を得た。

【 0 2 9 8 】

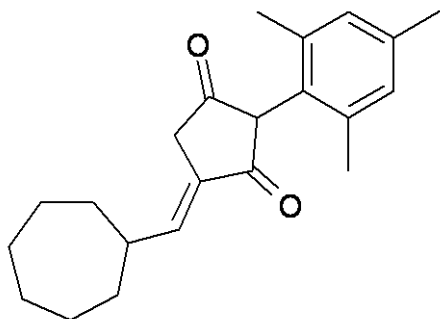
ステップ 4 :

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 ) - シクロペンタン - 1 , 3 - ジオンの調製

【 0 2 9 9 】

【 化 6 4 】

10



【 0 3 0 0 】

20

1 0 m l のバイアル内のアセトン ( 4 m l ) 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 ) - シクロペント - 2 - エノンの溶液 ( 1 0 0 m g 、 0 . 2 8 m m o l ) に、2 M の H C l ( 4 m l ) 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、3 0 分間、1 2 0 °C まで加熱した。反応物を、H <sub>2</sub> O ( 2 0 m l ) で希釈し、E t O A c ( 3 × 1 5 m l ) で抽出した。混合された有機抽出物を塩水 ( 1 0 m l ) で洗浄し、M g S O <sub>4</sub> 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 ( 8 8 m g ) を得た。粗原料を、1 0 0 % のイソヘキサン対 1 0 0 % の E t O A c 勾配を使用して、S i O <sub>2</sub> 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 ( 6 2 m g ) として所望の生成物を得た。

【 0 3 0 1 】

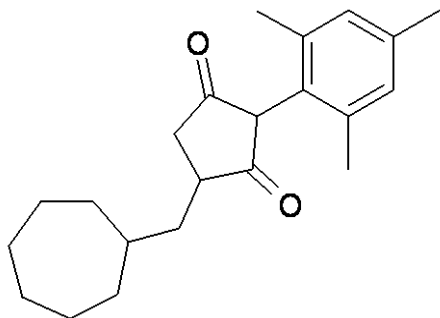
30

ステップ 5 :

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

【 0 3 0 2 】

【 化 6 5 】



40

【 0 3 0 3 】

5 % の w / w の P d / C ( 5 m g ) に、M e O H ( 1 0 m l ) 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 ) - シクロペンタン - 1 , 3 - ジオン ( 3 9 m g 、 0 . 1 2 m m o l ) を添加した。反応物を、H <sub>2</sub> ( 1 . 5 バール ) の環境下で、2 時間、撹拌し、セライトパッドを介して濾過し、M e O H ( 2 0 m l ) 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 ( 2 9 m g )

50

として所望の生成物を得た。

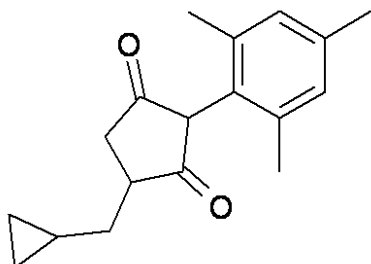
【0304】

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

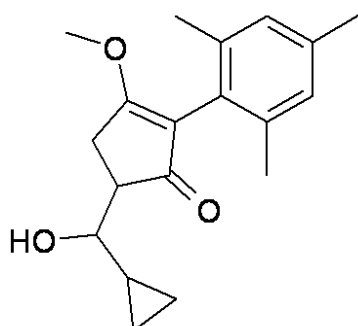
【0306】

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】



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 撹拌した溶液 ( 0 . 69、3 . 0 mmol ) に、 - 78 で  
、 $N_2$  環境下で、リチウムジイソプロピルアミド ( 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、撹拌し、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、  
撹拌し、次いで、210 分間にわたり、室温まで温めた。反応物を、 $H_2O$  ( 50 ml )  
の添加によって急冷し、EtOAc ( 50 ml ) で抽出した。有機相を、 $H_2O$  ( 50 ml )  
および塩水 ( 50 ml ) 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、褐色油 ( 1 . 37 g ) を得た。粗原料を、100% のイソヘキサン対 1  
00% の EtOAc 勾配を使用して、 $SiO_2$  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 ( 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

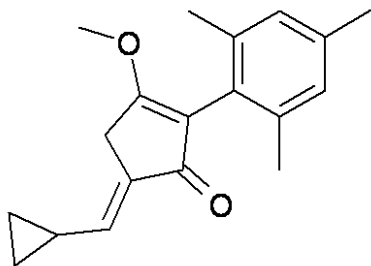
【0309】

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 6 8】



## 【0311】

10

CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> (10 ml) 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 (622 mg, 2.1 mmol) に、0 で、Et<sub>3</sub>N (0.59 ml, 4.2 mmol) の後に、塩化メタンスルホニル (0.33 ml, 4.2 mmol) 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、1 M の HCl (10 ml) 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 (10 ml) 中に溶解し、K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (580 mg, 4.2 mmol) を単一量で添加した。反応物を、室温で、2 時間、撹拌し、次いで、溶媒を、減圧下で除去した。粗原料を、EtOAc (20 ml) と H<sub>2</sub>O (20 ml) の間で分割し、有機相を、塩水 (20 ml) で洗浄し、MgSO<sub>4</sub> 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<sub>2</sub> 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 (83 mg) として所望の生成物を得た。

20

## 【0312】

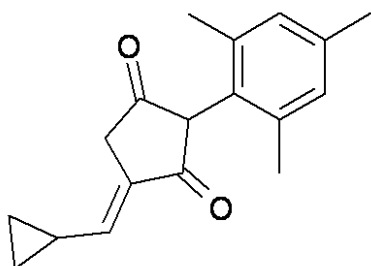
ステップ 3:

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) - シクロペンタン - 1, 3 - ジオンの精製

## 【0313】

## 【化 6 9】

30



## 【0314】

40

ホルホルン (3 ml) 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 (83 mg, 0.28 mmol) を、100 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 (15 ml) 中に溶解し、次いで、2 M の HCl (3 × 15 ml) および塩水 (15 ml) で洗浄した。有機相を、Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> 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 (200 mg) 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<sub>2</sub> 上でフラッシュクロマトグラフィーによって精製し、白色固体 (45 mg) として所望の化合物を得た。

## 【0315】

ステップ 4:

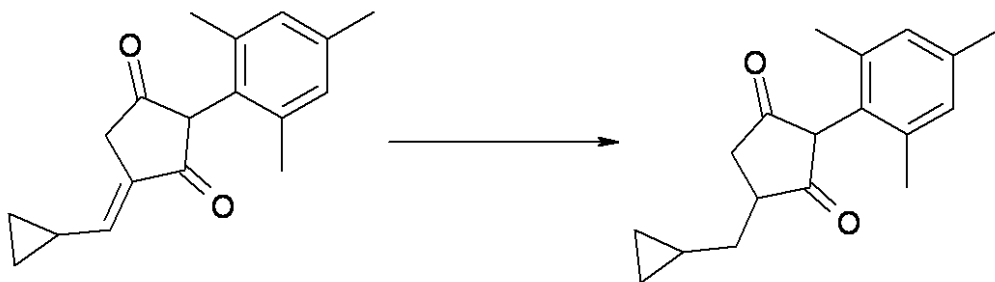
4 - シクロプロピルメチル - 2 - (2, 4, 6 - トリメチルフェニル) - シクロペンタン

50

- 1, 3 - ジオンの精製

【0316】

【化70】



10

【0317】

5%のw/wのPd/C(5mg)に、MeOH(10ml)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)-シクロペンタン-1,3-ジオン(28mg、0.09mmol)の溶液を添加した。反応物を、H<sub>2</sub>(1.5バル)の環境下で、1.5時間、撹拌し、セライトパッドを介して濾過し、MeOH(20ml)で洗浄した。溶媒を、質量指向HPLCによって生成された粗生成物(20mg)を得るように減圧下で除去し、所望の生成物(5mg)を得た。

【0318】

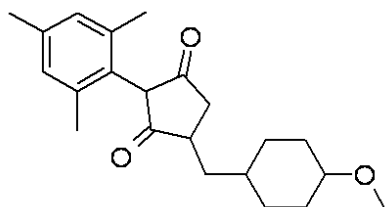
実施例6:

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)-シクロペンタン-1,3-ジオンの調製

20

【0319】

【化71】



30

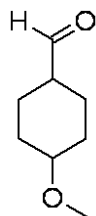
【0320】

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

【0321】

【化72】



40

【0322】

乾燥したTHF(60ml)中のメトキシメチルトリフェニル塩化ホスホニウム(20.8g、60mmol)の撹拌した懸濁液に、0~5℃で、(38ml、69mmol、ヘキサン/THF/エチルベンゼン中1.8M)の溶液を、液滴に添加する。得られる反応混合物を、30分間、撹拌し、次いで、-78℃まで冷却する。この温度で、テトラヒドロフラン(600ml)中のメトキシシクロヘキサノン(6g、47mmol)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℃で、1時間、撹拌し、次いで、室温まで温め、一晚、撹拌した。次いで、反応混合物を、塩酸の2Nの水性溶液でpH=2まで希釈し、3時間、室温で、撹拌した。反応物を、水で希

50

釈し、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 . 1 g ) を得る。

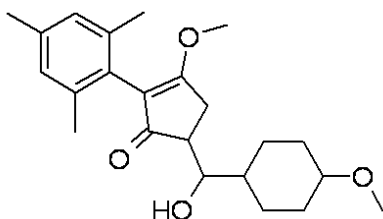
【 0 3 2 3 】

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

【 0 3 2 4 】

【 化 7 3 】



10

【 0 3 2 5 】

乾燥したテトラヒドロフラン ( 2 5 m l ) 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 ( 2 g 、 8 . 7 m m o l ) に、 - 7 8 で、リチウムジイソプロピルアミヂオの溶液 ( 5 . 8 m l 、 1 0 . 4 m m o l 、 ヘキサン / T H F / エチルベンゼン中の 1 . 8 M ) を、 2 0 分間にわたり、液滴で添加する。テトラヒドロフラン ( 1 5 m l ) 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 . 4 g 、 9 . 8 m m o l ) を添加する前に、得られた溶液を、 - 7 8 で、 3 0 分間、撹拌する。反応混合物を、一晚、室温まで温め、次いで、水で希釈し、 2 N の H C l で酸性化し、酢酸エチル ( 3 × 1 5 m l ) 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 . 7 g ) に精製する。

20

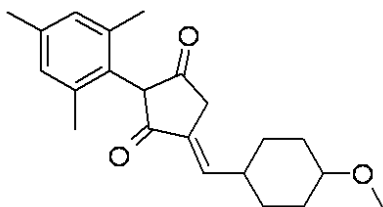
【 0 3 2 6 】

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

【 0 3 2 7 】

【 化 7 4 】



40

【 0 3 2 8 】

アセトン ( 3 m l ) 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 . 5 g 、 4 . 0 m m o l ) に、 2 N の水性塩酸 ( 3 m l ) を添加し、混合物を、マイクロ波照射によって、 1 時間、 1 2 0 で加熱した。次いで、反応混合物を、水 ( 2 0 m l ) で希釈し、酢酸エチル ( 3 × 1 5 m l ) 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 / 酢酸エチルで希釈して、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 . 3 2 g ) として 4 - [ 1 - ( 4 - メトキシ - シクロヘキシル ) - メ

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。

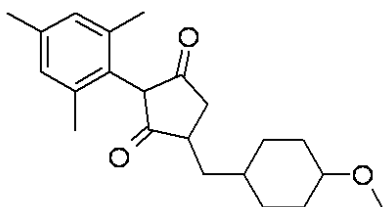
【 0 3 2 9 】

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 ( 1 5 0 m g 、 0 . 4 4 m m o l ) およびエタノール ( 3 . 5 m l ) の混合物に、炭素 ( 3 0 m g ) 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 ( 1 4 2 g ) として、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 2 0 m m 、カラムの内径 3 m m 、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/mn) |
|--------|---------|---------|------------|
| 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 % H C O O H を含有する H <sub>2</sub> O

溶媒 B : 0 . 1 % H C O O H を含有する C H <sub>3</sub> C N

## 【 0 3 3 6 】

## 方法 B

Waters Atlantis dC18IS 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 2996 フォトダイオードアレイ、Waters 2420 ELSD、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

## 【 0 3 3 7 】

【表 2】

| 時間 (分) | 溶媒A (%) | 溶媒B (%) | 流量 (mL/mn) |
|--------|---------|---------|------------|
| 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 . 0 5 % T F A を有する H <sub>2</sub> O

溶媒 B : 0 . 0 5 % T F A を有する C H <sub>3</sub> C N

## 【 0 3 3 8 】

## 方法 C :

Waters Xterra カラム ( カラムの長さ 50 mm、カラムの内径 4 . 6 mm、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 ZQ2000 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

【 0 3 3 9 】

【 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

溶媒 A : 0 . 0 . 0 5 % H C O O H を含有する H<sub>2</sub> O

20

溶媒 B : 0 . 0 . 0 5 % H C O O H を含有する C H<sub>3</sub> C N

【 0 3 4 0 】

方法 D

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、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 Acquity 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。

【 0 3 4 1 】

【 表 4 】

30

| 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        |

40

溶媒 A : 0 . 1 % H C O O H を含有する H<sub>2</sub> O溶媒 B : 0 . 1 % H C O O H を含有する C H<sub>3</sub> C N

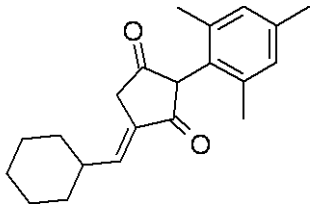
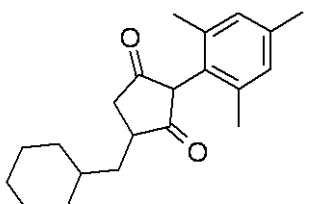
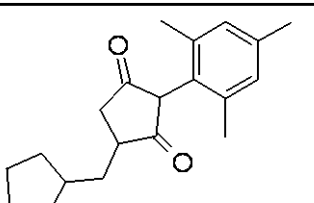
【 0 3 4 2 】

50

表 A 1 : 化合物 A 1 ~ A 4 7

【 0 3 4 3 】

【 表 5 】

| 化合物<br>番号 | 構造   | LC/MS、NMRまたは他の物理的<br>データ                         |
|-----------|--|--|
| A1        |   | LC/MS (方法A) $ES^+$ : $MH^+ = 311$<br>反応時間= 1.76分 |
| A2        |   | LC/MS (方法A) $ES^+$ : $MH^+ = 313$<br>反応時間= 1.73分 |
| A3        |  | LC/MS (方法A) $ES^+$ : $MH^+ = 299$<br>反応時間= 1.64分 |

10

20

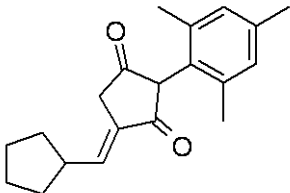
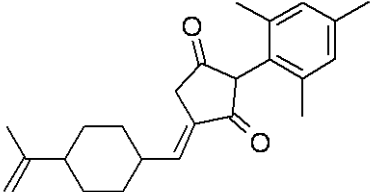
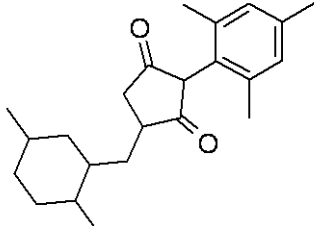
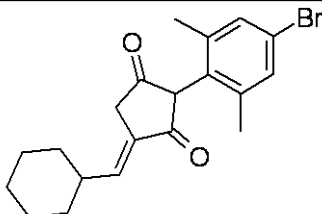
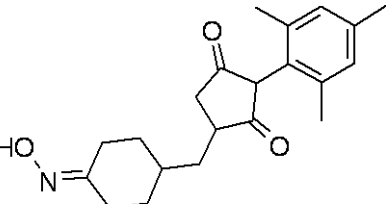
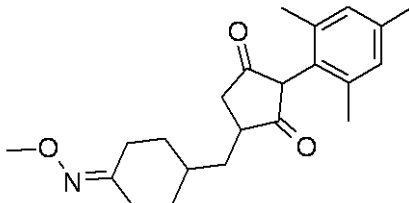
30

40

50

【 0 3 4 4 】

【 表 6 】

|    |   |   |
|----|---|---|
| A4 |    | LC/MS (方法A) $ES^+$ : $MH^+ = 297$<br>反応時間= 1.68分      |
| A5 |    | LC/MS (方法A) $ES^+$ : $MH^+ = 351$<br>反応時間= 1.79分      |
| A6 |    | LC/MS (方法A) $ES^+$ : $MH^+ = 341$<br>反応時間= 1.91分      |
| A7 |  | LC/MS (室温C) $ES^+$ : $M-H^+ = 377, 375$<br>反応時間= 4.8分 |
| A8 |  | LC/MS (室温B) $ES^+$ : $MH^+ = 342$<br>反応時間=1.28分       |
| A9 |  | LC/MS (方法B) $ES^+$ : $MH^+ = 356$<br>反応時間= 1.45分      |

10

20

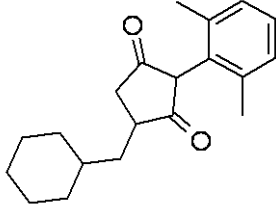
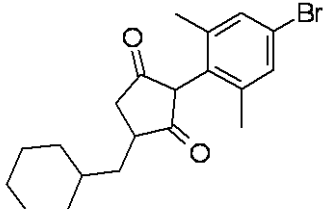
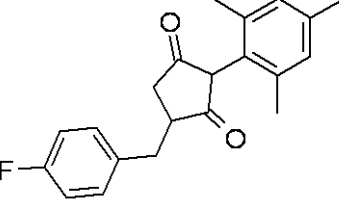
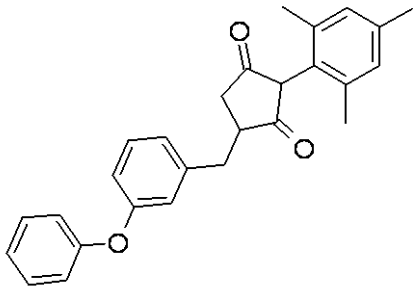
30

40

50

【 0 3 4 5 】

【 表 7 】

|     |   |   |
|-----|---|---|
| A10 |    | LC/MS (方法C) ES <sup>+</sup> : MH <sup>+</sup> = 297<br>反応時間=4.42分<br>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 <sup>+</sup> : M-H <sup>+</sup> = 377, 375<br>反応時間= 4.8分<br>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.<br>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.<br>Mpt: 192.0 -194.8 ° C                |

10

20

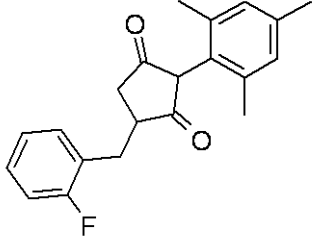
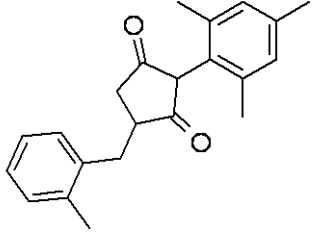
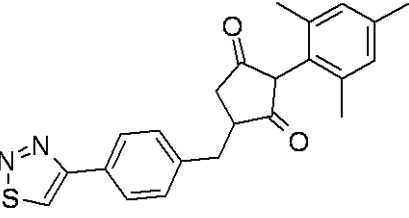
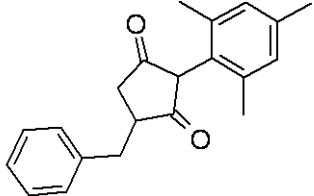
30

40

50

【 0 3 4 6 】

【 表 8 】

|     |   |   |
|-----|---|---|
| A14 |    | $\delta$ 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.<br><br>Mpt 197.8–210.2 ° C                              |
| A15 |    | $\delta$ 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.<br><br>Mpt 210–215.5 ° C  |
| A16 |   | $\delta$ 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.<br><br>Mpt 225–232 ° C |
| A17 |  | $\delta$ 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.<br><br>Mpt 160–165° C  |

10

20

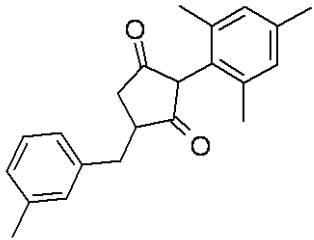
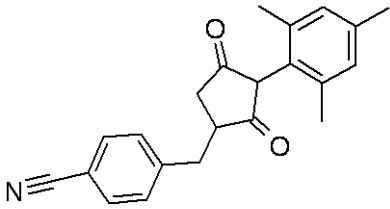
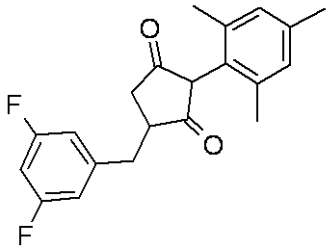
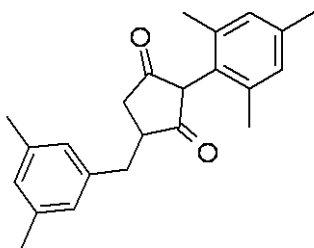
30

40

50

【 0 3 4 7 】

【 表 9 】

|     |   |   |
|-----|---|---|
| A18 |    | $\delta$ 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.<br><br>Mpt 173–179 ° C |
| A19 |    | $\delta$ 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.<br><br>Mpt 249–251 ° C                   |
| A20 |   | $\delta$ 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.<br><br>MPt 193.0–193.2 ° C                         |
| A21 |  | $\delta$ 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.<br><br>MPt 181–184 ° C                                     |

10

20

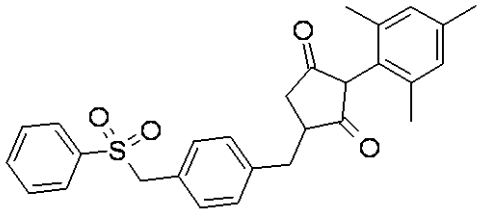
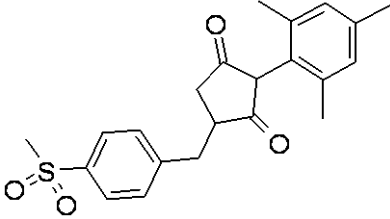
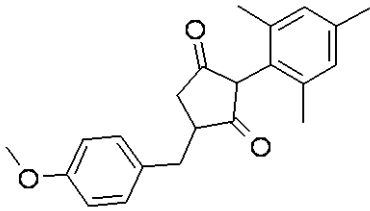
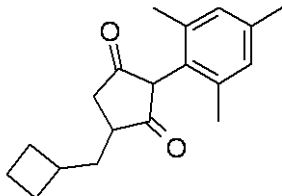
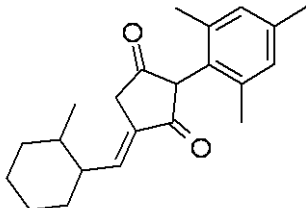
30

40

50

【 0 3 4 8 】

【 表 1 0 】

|     |   |   |
|-----|---|---|
| A22 |    | $\delta$ 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.<br>MPt 189.0–191.7 ° C |
| A23 |    | $\delta$ 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<br>MPt 235.3–238.6 ° C                          |
| A24 |   | $\delta$ 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.<br>MPt 197.3–197.6 ° C               |
| A25 |  | LC/MS (方法A) ES <sup>+</sup> : MH <sup>+</sup> = 285<br>反応時間= 1.60分  |
| A26 |  | LC/MS (方法A) ES <sup>+</sup> : MH <sup>+</sup> = 325<br>反応時間= 1.80分  |

10

20

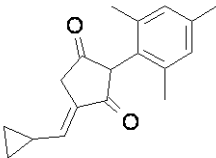
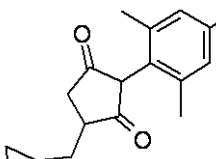
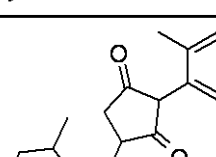
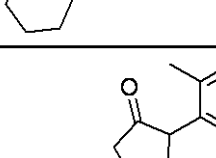
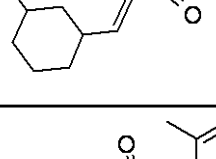
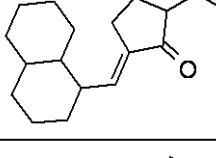
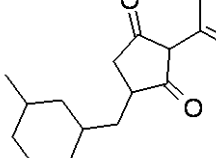
30

40

50

【 0 3 4 9 】

【 表 1 1 】

|     |   |  |
|-----|---|--|
| A27 |    | LC/MS (方法A) ES <sup>+</sup> : MH <sup>+</sup> = 269<br>反応時間= 1.44分 |
| A28 |    | LC/MS (方法A) ES <sup>+</sup> : MH <sup>+</sup> = 271<br>反応時間= 1.53分 |
| A29 |    | LC/MS (方法D) ES <sup>+</sup> : MH <sup>+</sup> = 327<br>反応時間= 1.12分 |
| A30 |    | LC/MS (方法A) ES <sup>+</sup> : MH <sup>+</sup> = 325<br>反応時間= 1.81分 |
| A31 |   | LC/MS (方法A) ES <sup>+</sup> : MH <sup>+</sup> = 365<br>反応時間= 2.03分 |
| A32 |  | LC/MS (方法A) ES <sup>+</sup> : MH <sup>+</sup> = 327<br>反応時間= 1.80分 |
| A33 |  | LC/MS (方法A) ES <sup>+</sup> : MH <sup>+</sup> = 327<br>反応時間= 1.85分 |

10

20

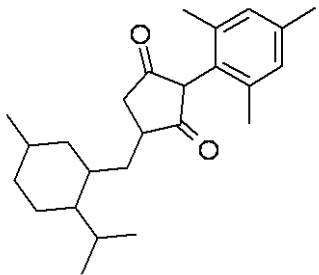
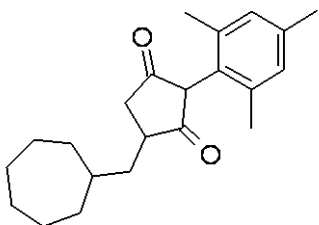
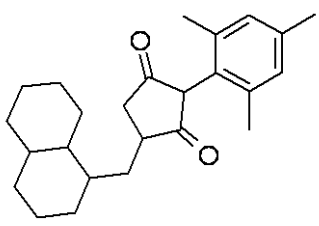
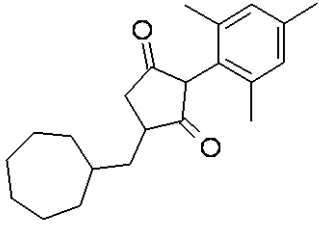
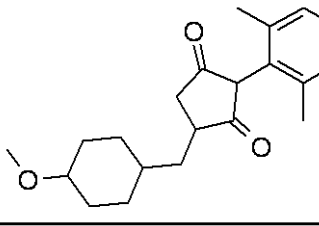
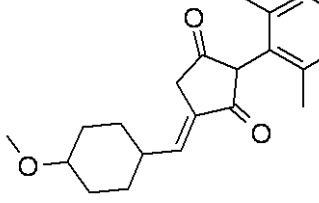
30

40

50

【 0 3 5 0 】

【 表 1 2 】

|     |   |  |
|-----|---|--|
| A34 |    | LC/MS (方法A) ES <sup>+</sup> : MH <sup>+</sup> = 369<br>反応時間= 2.06分 |
| A35 |    | LC/MS (方法A) ES <sup>+</sup> : MH <sup>+</sup> = 327<br>反応時間= 1.83分 |
| A36 |   | LC/MS (方法A) ES <sup>+</sup> : MH <sup>+</sup> = 367<br>反応時間= 2.02分 |
| A37 |  | LC/MS (方法A) ES <sup>+</sup> : MH <sup>+</sup> = 325<br>反応時間= 1.84分 |
| A38 |  | LC/MS (方法A) ES <sup>+</sup> : MH <sup>+</sup> = 343<br>反応時間= 1.41分 |
| A39 |  | LC/MS (方法A) ES <sup>+</sup> : MH <sup>+</sup> = 341<br>反応時間= 1.54分 |

10

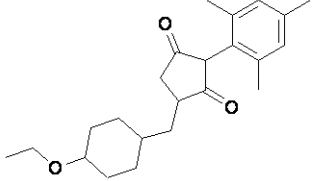
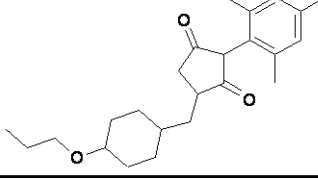
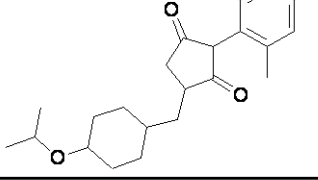
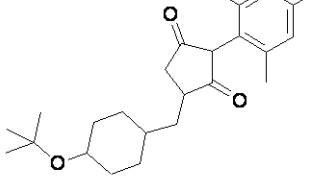
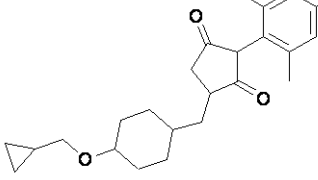
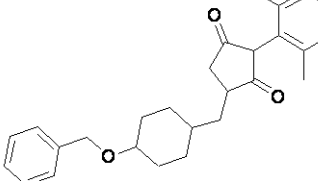
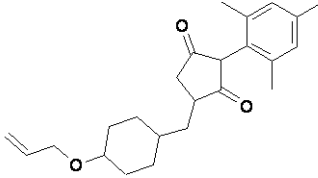
20

30

40

【 0 3 5 1 】

【表 1 3】

|     |   |  |
|-----|---|--|
| A40 |    |  |
| A41 |    |  |
| A42 |    |  |
| A43 |    |  |
| A44 |  |  |
| A45 |  |  |
| A46 |  |  |

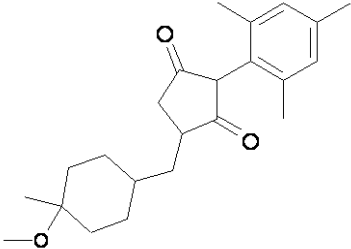
10

20

30

40

【表 1 4】

|     |   |  |
|-----|---|--|
| A47 |  |  |
|-----|---|--|

10

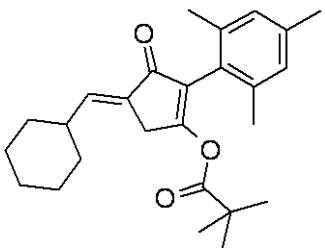
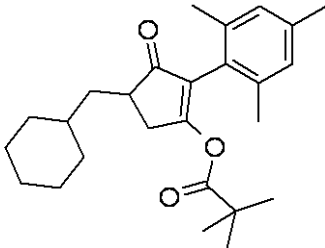
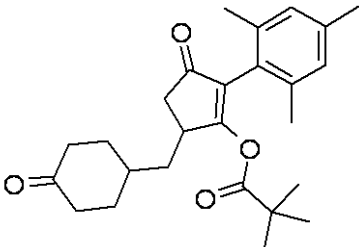
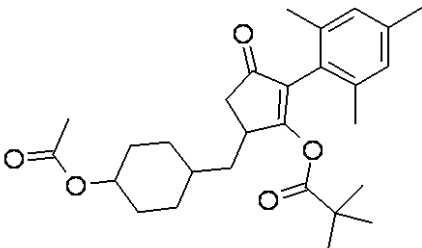
20

30

40

【表 15】

表B1：化合物B1～B28

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

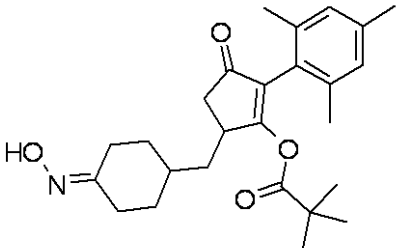
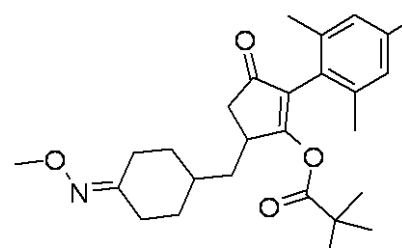
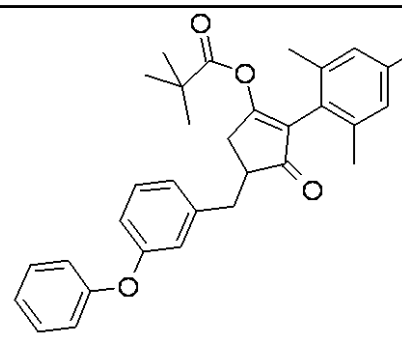
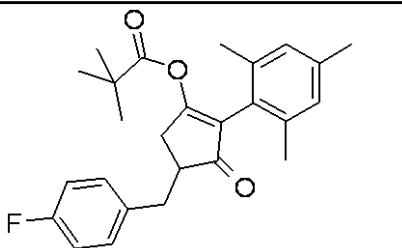
10

20

30

40

【表 1 6】

|    |   |  |
|----|---|--|
| B5 |    | LC/MS (方法A) ES <sup>+</sup> : MH <sup>+</sup> 426<br>反応時間= 1.59  |
| B6 |    | LC/MS (方法A) ES <sup>+</sup> : MH <sup>+</sup> 440<br>反応時間= 1.98  |
| B7 |   | $\delta$ 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.<br>LC-MS (方法B) ES <sup>+</sup> : MH <sup>+</sup> = 483, 反応時間rt = 2.22分 |
| B8 |  | $\delta$ 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.<br>LC-MS (方法B) ES <sup>+</sup> : MH <sup>+</sup> = 409, 反応時間= 2.03分   |

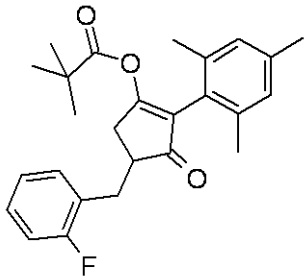
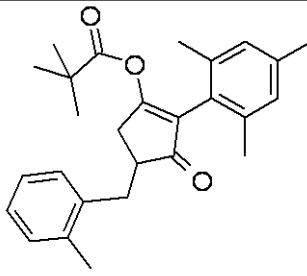
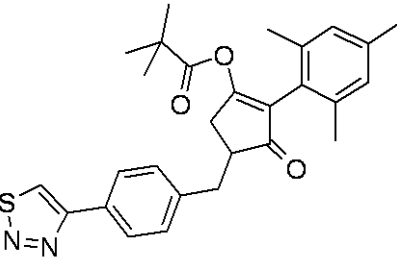
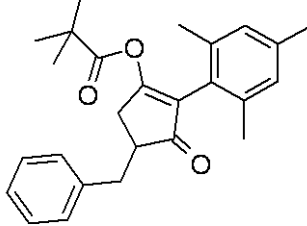
10

20

30

40

【表 1 7】

|     |   |   |
|-----|---|---|
| B9  |    | $\delta$ 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.<br>LC-MS (方法B) $ES^+$ : $MH^+ = 409$ , 反応時間= 2.01分 |
| B10 |    | $\delta$ 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.<br>LC-MS (方法B) $ES^+$ : $MH^+ = 405$ , 反応時間= 2.09分 |
| B11 |  | LC-MS (方法B) $ES^+$ : $MH^+ = 475$ , 反応時間= 1.99分   |
| B12 |  | LC-MS (方法B) $ES^+$ : $MH^+ = 391$ , 反応時間= 2.02分   |

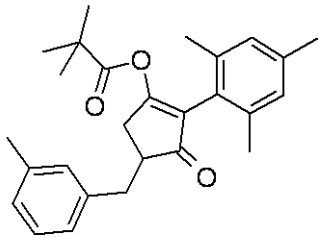
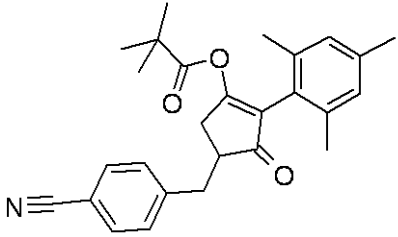
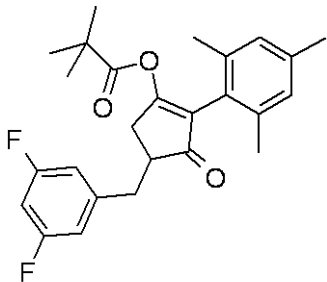
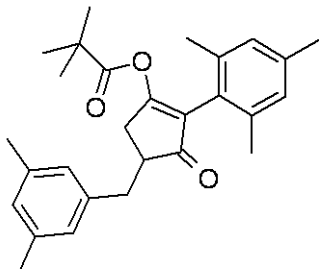
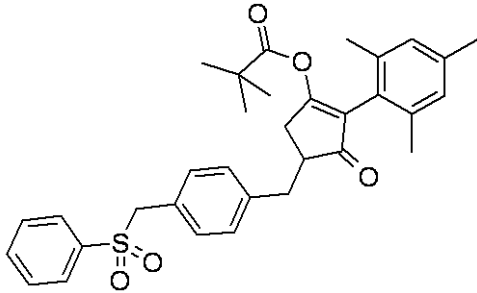
10

20

30

40

【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      |

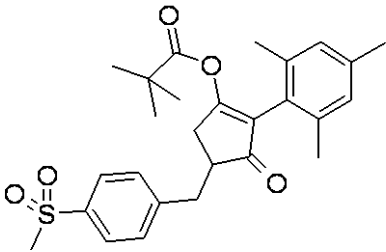
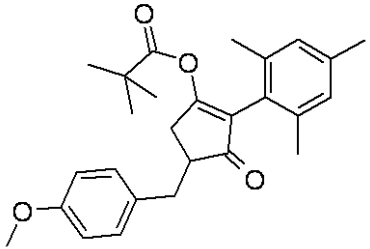
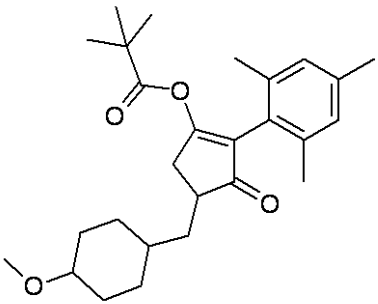
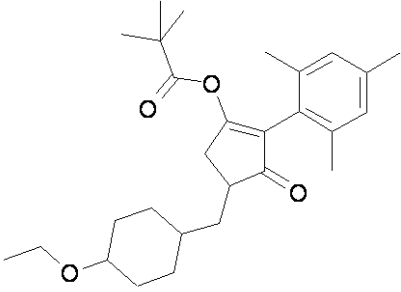
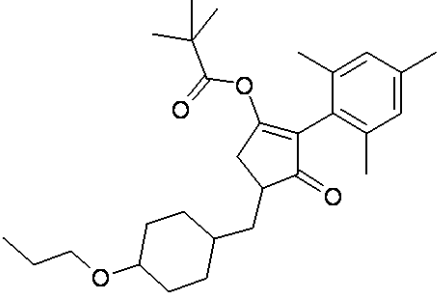
10

20

30

40

【表 1 9】

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

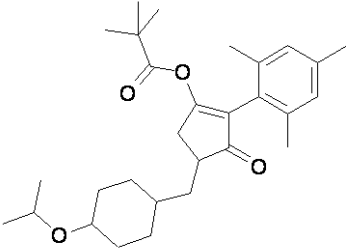
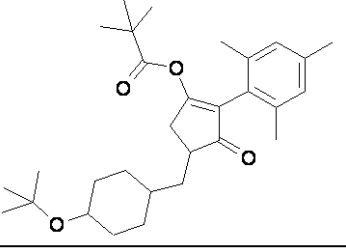
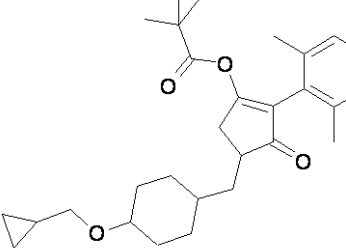
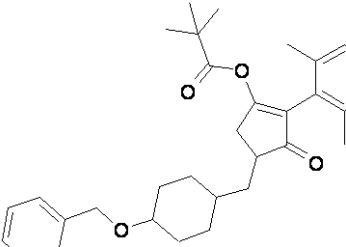
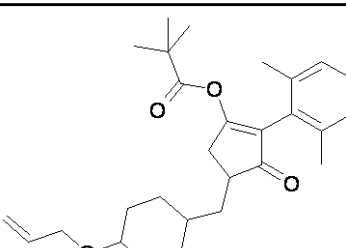
10

20

30

40

【表 2 0】

|     |   |  |
|-----|---|--|
| B23 |    |  |
| B24 |    |  |
| B25 |    |  |
| B26 |  |  |
| B27 |  |  |

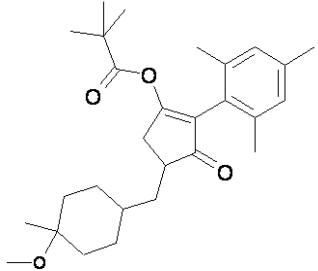
10

20

30

40

【表 2 1】

|     |   |  |
|-----|---|--|
| B28 |  |  |
|-----|---|--|

10

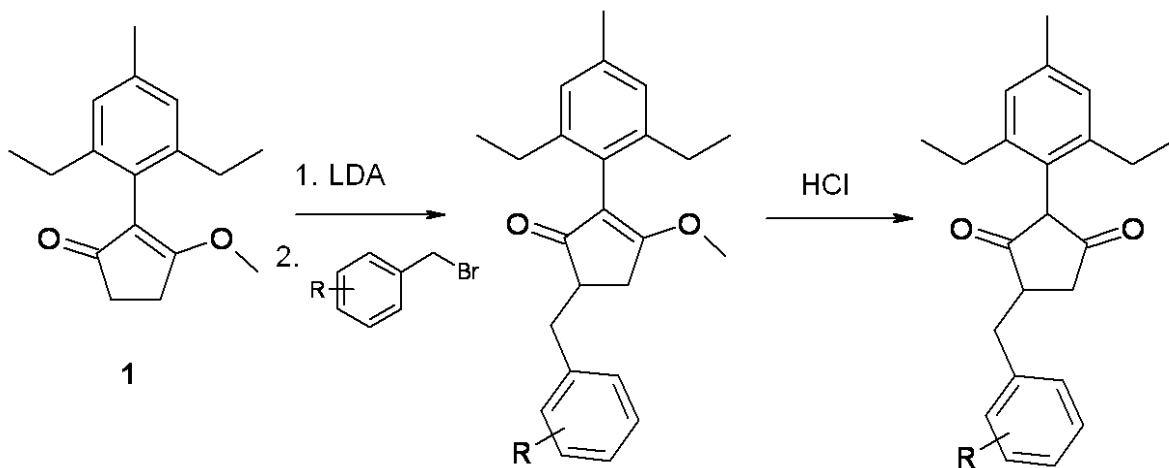
## 【0360】

表 C 1 : 化合物 C 1 ~ C 1 0

以下のシクロペンタ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 - ジエチル 4 - メチルフェニル) - シクロペンタン - 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 7 6】



20

30

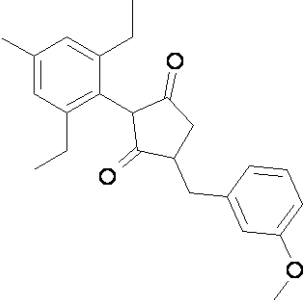
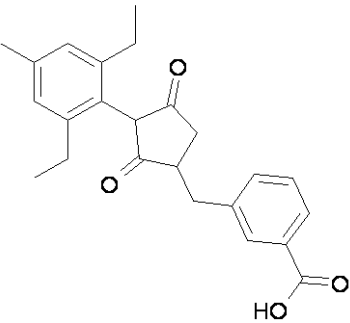
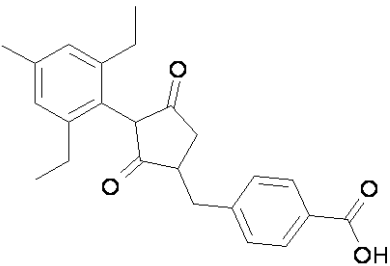
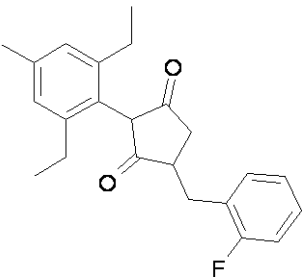
## 【0362】

上述のスキームの化合物 1 は、国際公開第 WO 2 0 0 9 / 1 9 0 0 5 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 5 5 ~ 5 6 を参照)。LDA = リチウムジイソプロピルアミド。

40

## 【0363】

【表 2 2】

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

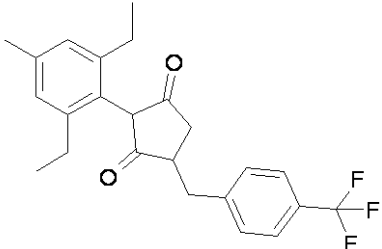
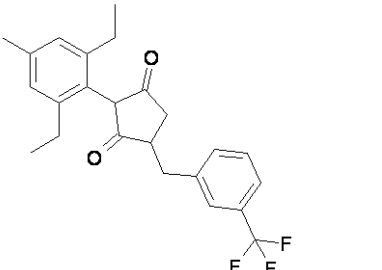
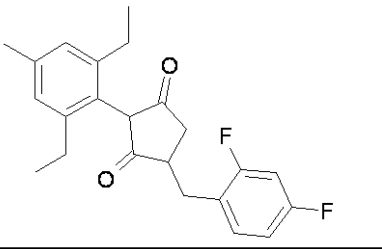
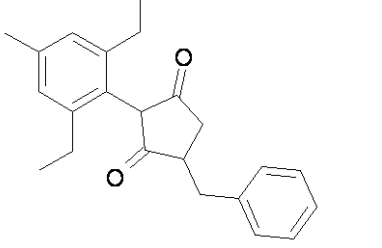
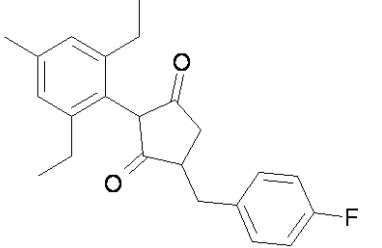
10

20

30

40

【表 2 3】

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

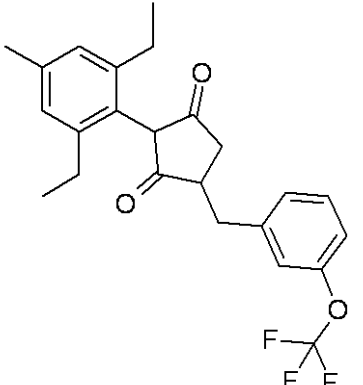
10

20

30

40

【表 2 4】

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

10

【0366】

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。

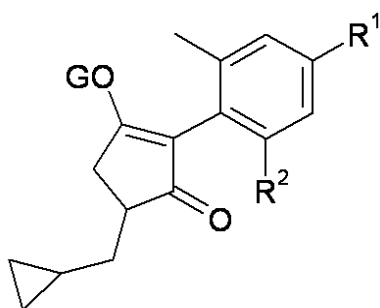
【0367】

表 1 は、以下のタイプの 8 2 個の化合物を網羅する：

【0368】

【化 7 7】

20



【0369】

式中、G は、水素であり、R<sup>1</sup> および R<sup>2</sup> は、下記の表 1 に説明するとおりである：

30

40

【0370】

【表 2 5】

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

10

20

30

40

【表 2 6】

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

10

20

30

40

【表 2 7】

|       |                                  |                       |
|-------|----------------------------------|-----------------------|
| 1.044 | $\text{CH}_2\text{CH}_3$         | $\text{CH}_3\text{O}$ |
| 1.045 | F                                | $\text{CH}_3\text{O}$ |
| 1.046 | Cl                               | $\text{CH}_3\text{O}$ |
| 1.047 | Br                               | $\text{CH}_3\text{O}$ |
| 1.048 | $\text{CH}_3\text{O}$            | $\text{CH}_3\text{O}$ |
| 1.049 | $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{O}$ | $\text{CH}_3\text{O}$ |
| 1.050 | $-\text{CH}=\text{CH}_2$         | $\text{CH}_3\text{O}$ |
| 1.051 | $-\text{CCH}$                    | $\text{CH}_3\text{O}$ |
| 1.052 | フェニル                             | $\text{CH}_3\text{O}$ |
| 1.053 | 2-フルオロフェニル                       | $\text{CH}_3\text{O}$ |
| 1.054 | 2-クロロフェニル                        | $\text{CH}_3\text{O}$ |
| 1.055 | 2-トリフルオロメチルフェニル                  | $\text{CH}_3\text{O}$ |
| 1.056 | 2-ニトロフェニル                        | $\text{CH}_3\text{O}$ |
| 1.057 | 2-メチルフェニル                        | $\text{CH}_3\text{O}$ |
| 1.058 | 2-メタンスルホニルフェニル                   | $\text{CH}_3\text{O}$ |
| 1.059 | 2-シアノフェニル                        | $\text{CH}_3\text{O}$ |
| 1.060 | 3-フルオロフェニル                       | $\text{CH}_3\text{O}$ |
| 1.061 | 3-クロロフェニル                        | $\text{CH}_3\text{O}$ |
| 1.062 | 3-トリフルオロメチルフェニル                  | $\text{CH}_3\text{O}$ |
| 1.063 | 3-ニトロフェニル                        | $\text{CH}_3\text{O}$ |
| 1.064 | 3-メチルフェニル                        | $\text{CH}_3\text{O}$ |
| 1.065 | 3-メタンスルホニルフェニル                   | $\text{CH}_3\text{O}$ |
| 1.066 | 3-シアノフェニル                        | $\text{CH}_3\text{O}$ |
| 1.067 | 4-フルオロフェニル                       | $\text{CH}_3\text{O}$ |
| 1.068 | 4-クロロフェニル                        | $\text{CH}_3\text{O}$ |
| 1.069 | 4-ブロモフェニル                        | $\text{CH}_3\text{O}$ |
| 1.070 | 4-ジフルオロメトキシフェニル                  | $\text{CH}_3\text{O}$ |
| 1.071 | 2-フルオロ-4-トリフルオロメチルフェニル           | $\text{CH}_3\text{O}$ |
| 1.072 | 3-フルオロ-4-クロロフェニル                 | $\text{CH}_3\text{O}$ |
| 1.073 | 2-クロロ-4-フルオロフェニル                 | $\text{CH}_3\text{O}$ |
| 1.074 | 2-クロロ-4-フルオロフェニル                 | $\text{CH}_3\text{O}$ |
| 1.075 | 3-クロロ-4-フルオロフェニル                 | $\text{CH}_3\text{O}$ |
| 1.076 | 3-クロロ-4-フルオロフェニル                 | $\text{CH}_3\text{O}$ |
| 1.077 | 2-メチル-4-クロロフェニル                  | $\text{CH}_3\text{O}$ |

10

20

30

40

【表 2 8】

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

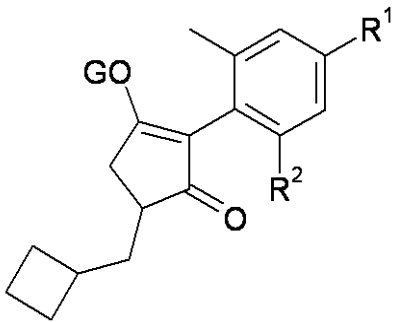
【0374】

10

表 2 は、以下のタイプの 82 個の化合物を網羅する：

【0375】

【化 7 8】



20

【0376】

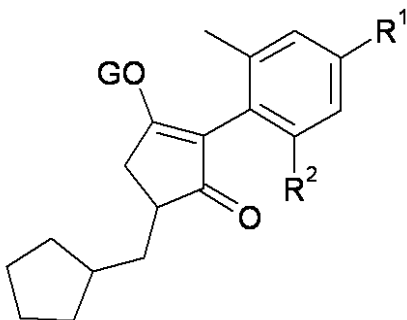
[ 式中、G は、水素であり、R<sup>1</sup> および R<sup>2</sup> は、表 1 に説明するとおりである。 ]

【0377】

表 3 は、以下のタイプの 82 個の化合物を網羅する：

【0378】

【化 7 9】



30

【0379】

[ 式中、G は、水素であり、R<sup>1</sup> および R<sup>2</sup> は、表 1 に説明するとおりである。 ]

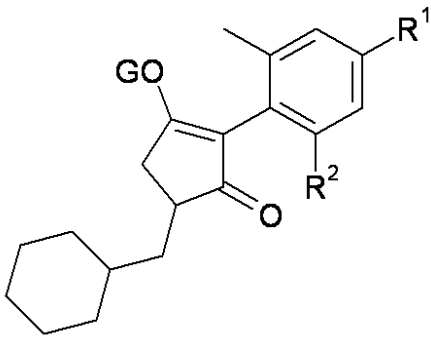
【0380】

40

表 4 は、以下のタイプの 82 個の化合物を網羅する：

【0381】

【化 8 0】



10

【 0 3 8 2】

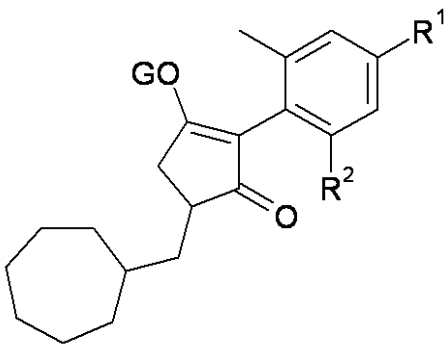
[ 式中、G は、水素であり、 $R^1$  および  $R^2$  は、表 1 に説明するとおりである。 ]

【 0 3 8 3】

表 5 は、以下のタイプの 8 2 個の化合物を網羅する

【 0 3 8 4】

【化 8 1】



20

【 0 3 8 5】

[ 式中、G は、水素であり、 $R^1$  および  $R^2$  は、表 1 に説明するとおりである。 ]

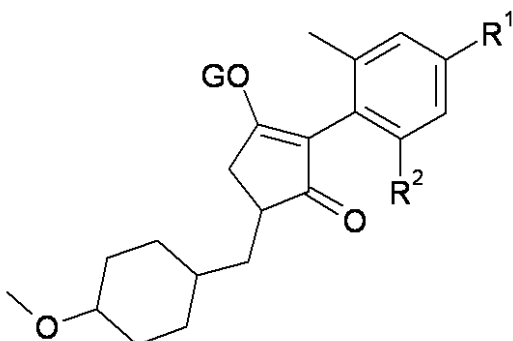
【 0 3 8 6】

表 6 a は、以下のタイプの 8 2 個の化合物を網羅する

30

【 0 3 8 7】

【化 8 2】



40

【 0 3 8 8】

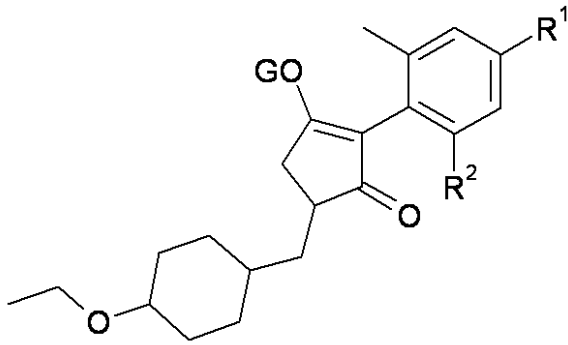
[ 式中、G は、水素であり、 $R^1$  および  $R^2$  は、表 1 に説明するとおりである。 ]

【 0 3 8 9】

表 6 b は、以下のタイプの 8 2 個の化合物を網羅する：

【 0 3 9 0】

【化 8 3】



10

【 0 3 9 1】

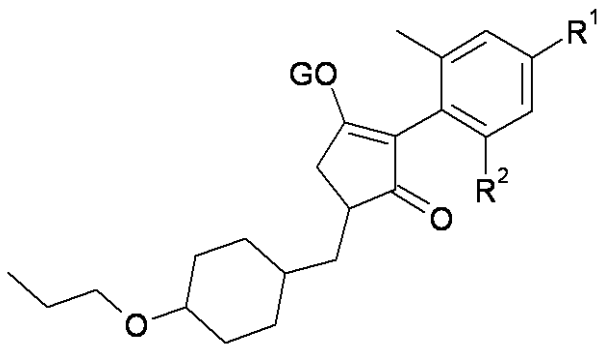
[ 式中、G は、水素であり、 $R^1$  および  $R^2$  は、表 1 に説明するとおりである。 ]

【 0 3 9 2】

表 6 c は、以下のタイプの 8 2 個の化合物を網羅する

【 0 3 9 3】

【化 8 4】



20

【 0 3 9 4】

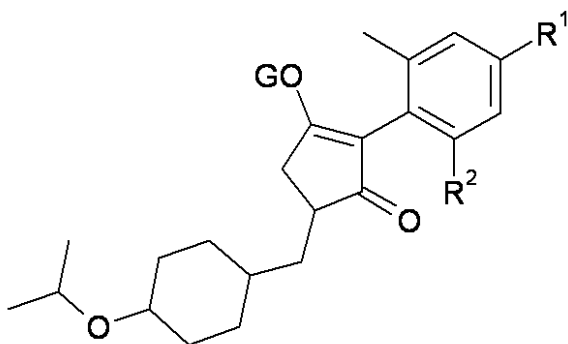
[ 式中、G は、水素であり、 $R^1$  および  $R^2$  は、表 1 に説明するとおりである。 ]

【 0 3 9 5】

表 6 d は、以下のタイプの 8 2 個の化合物を網羅する：

【 0 3 9 6】

【化 8 5】



40

【 0 3 9 7】

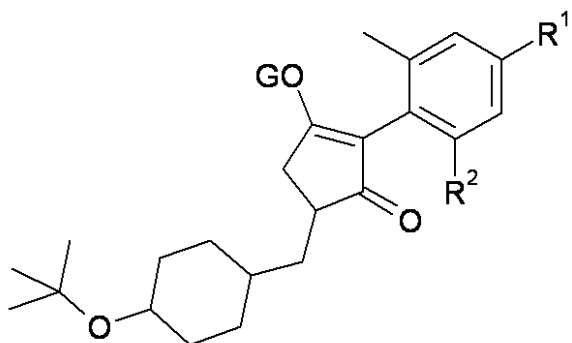
[ 式中、G は、水素であり、 $R^1$  および  $R^2$  は、表 1 に説明するとおりである。 ]

【 0 3 9 8】

表 6 e は、以下のタイプの 8 2 個の化合物を網羅する：

【 0 3 9 9】

【化 8 6】



10

【 0 4 0 0】

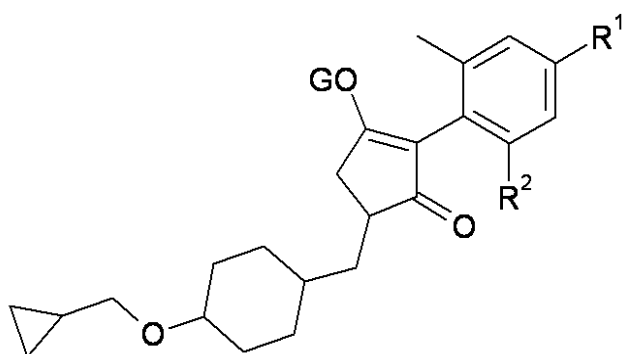
[ 式中、G は、水素であり、R<sup>1</sup> および R<sup>2</sup> は、表 1 に説明するとおりである。 ]

【 0 4 0 1】

表 6 f は、以下のタイプの 8 2 個の化合物を網羅する：

【 0 4 0 2】

【化 8 7】



20

【 0 4 0 3】

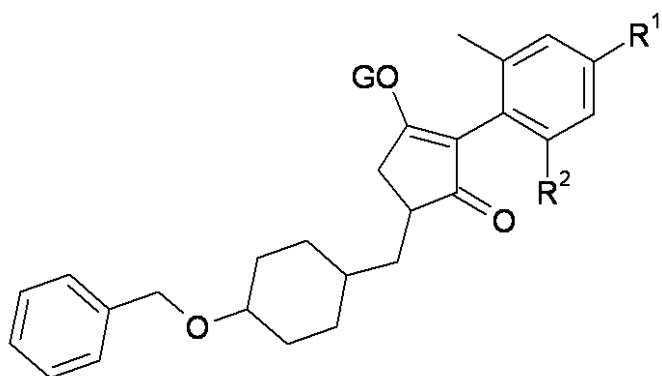
[ 式中、G は、水素であり、R<sup>1</sup> および R<sup>2</sup> は、表 1 に説明するとおりである。 ]

【 0 4 0 4】

表 6 g は、以下のタイプの 8 2 個の化合物を網羅する：

【 0 4 0 5】

【化 8 8】



40

【 0 4 0 6】

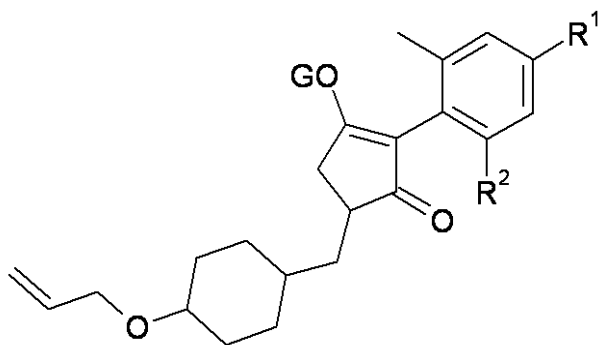
[ 式中、G は、水素であり、R<sup>1</sup> および R<sup>2</sup> は、表 1 に説明するとおりである。 ]

【 0 4 0 7】

表 6 h は、以下のタイプの 8 2 個の化合物を網羅する：

【 0 4 0 8】

【化 8 9】



10

【 0 4 0 9】

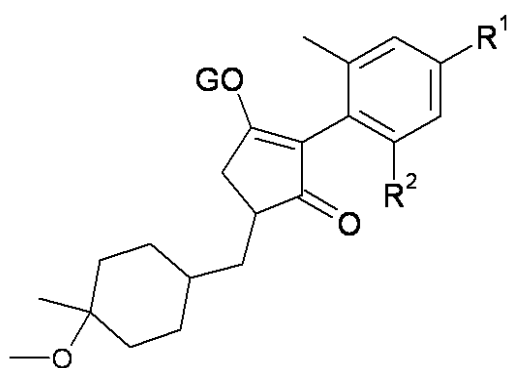
[ 式中、G は、水素であり、 $R^1$  および  $R^2$  は、表 1 に説明するとおりである。 ]

【 0 4 1 0】

表 6 i は、以下のタイプの 8 2 個の化合物を網羅する：

【 0 4 1 1】

【化 9 0】



20

【 0 4 1 2】

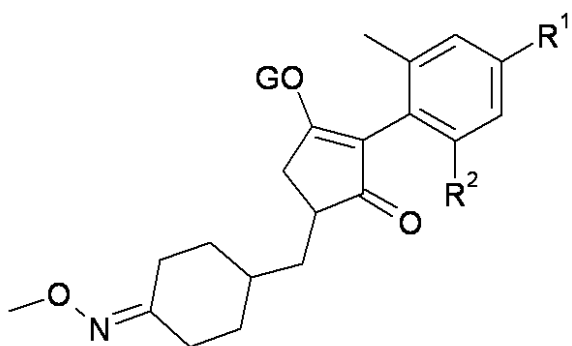
[ 式中、G は、水素であり、 $R^1$  および  $R^2$  は、表 1 に説明するとおりである。 ]

【 0 4 1 3】

表 7 は、以下のタイプの 8 2 個の化合物を網羅する：

【 0 4 1 4】

【化 9 1】



40

【 0 4 1 5】

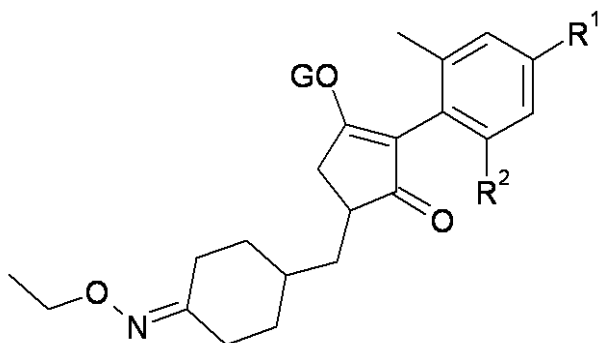
[ 式中、G は、水素であり、 $R^1$  および  $R^2$  は、表 1 に説明するとおりである。 ]

【 0 4 1 6】

表 8 は、以下のタイプの 8 2 個の化合物を網羅する：

【 0 4 1 7】

【化 9 2】



10

【 0 4 1 8 】

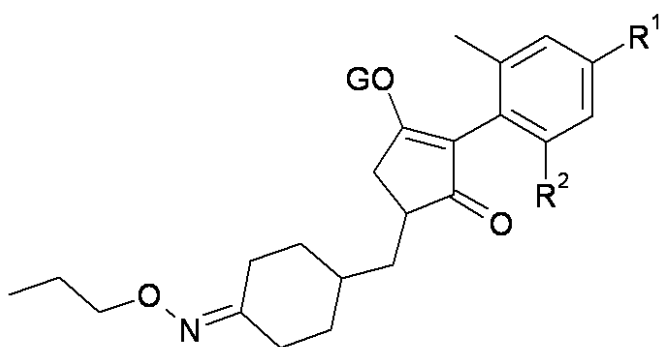
[ 式中、G は、水素であり、R<sup>1</sup> および R<sup>2</sup> は、表 1 に説明するとおりである。 ]

【 0 4 1 9 】

表 9 は、以下のタイプの 8 2 個の化合物を網羅する：

【 0 4 2 0 】

【化 9 3】



20

【 0 4 2 1 】

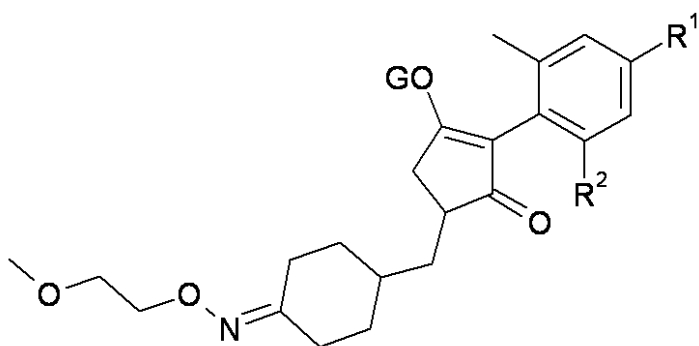
[ 式中、G は、水素であり、R<sup>1</sup> および R<sup>2</sup> は、表 1 に説明するとおりである。 ]

【 0 4 2 2 】

表 1 0 は、以下のタイプの 8 2 個の化合物を網羅する

【 0 4 2 3 】

【化 9 4】



40

【 0 4 2 4 】

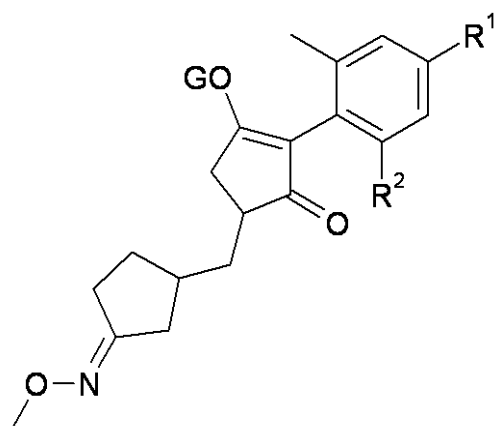
[ 式中、G は、水素であり、R<sup>1</sup> および R<sup>2</sup> は、表 1 に説明するとおりである。 ]

【 0 4 2 5 】

表 1 1 は、以下のタイプの 8 2 個の化合物を網羅する

【 0 4 2 6 】

【化 9 5】



10

【 0 4 2 7】

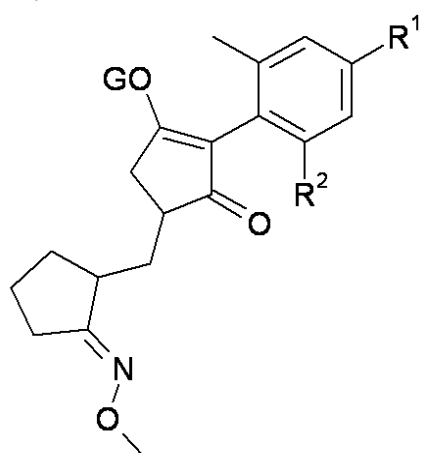
[ 式中、G は、水素であり、 $R^1$  および  $R^2$  は、表 1 に説明するとおりである。 ]

【 0 4 2 8】

表 1 2 は、以下のタイプの 8 2 個の化合物を網羅する：

【 0 4 2 9】

【化 9 6】



20

30

【 0 4 3 0】

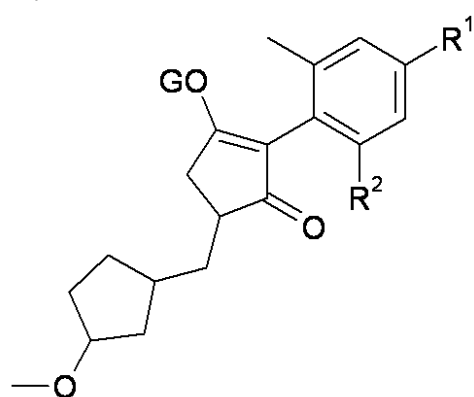
[ 式中、G は、水素であり、 $R^1$  および  $R^2$  は、表 1 に説明するとおりである。 ]

【 0 4 3 1】

表 1 3 は、以下のタイプの 8 2 個の化合物を網羅する：

【 0 4 3 2】

【化 9 7】



40

【 0 4 3 3】

[ 式中、G は、水素であり、 $R^1$  および  $R^2$  は、表 1 に説明するとおりである。 ]

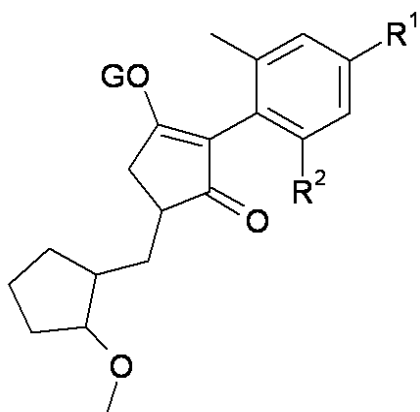
50

【 0 4 3 4 】

表 1 4 は、以下のタイプの 8 2 個の化合物を網羅する：

【 0 4 3 5 】

【 化 9 8 】



10

【 0 4 3 6 】

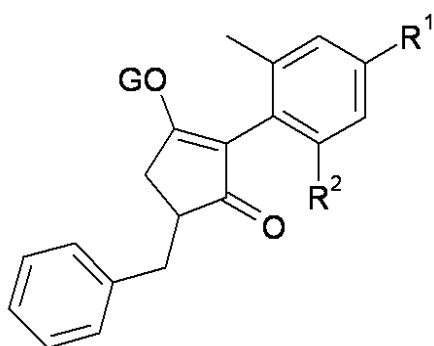
[ 式中、G は、水素であり、R<sup>1</sup> および R<sup>2</sup> は、表 1 に説明するとおりである。 ]

【 0 4 3 7 】

表 1 5 は、以下のタイプの 8 2 個の化合物を網羅する：

【 0 4 3 8 】

【 化 9 9 】



30

【 0 4 3 9 】

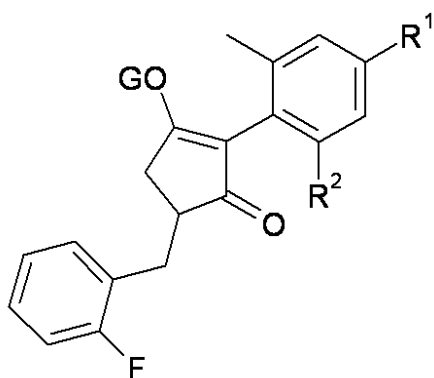
[ 式中、G は、水素であり、R<sup>1</sup> および R<sup>2</sup> は、表 1 に説明するとおりである。 ]

【 0 4 4 0 】

表 1 6 は、以下のタイプの 8 2 個の化合物を網羅する：

【 0 4 4 1 】

【 化 1 0 0 】



40

【 0 4 4 2 】

[ 式中、G は、水素であり、R<sup>1</sup> および R<sup>2</sup> は、表 1 に説明するとおりである。 ]

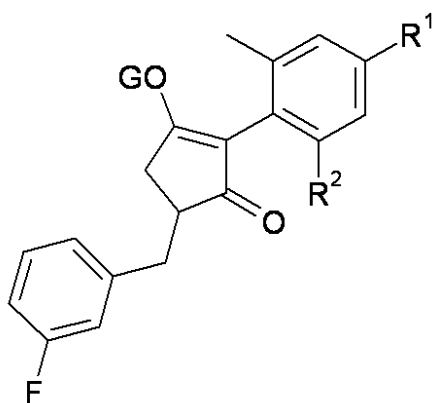
【 0 4 4 3 】

50

表 17 は、以下のタイプの 82 個の化合物を網羅する：

【 0 4 4 4 】

【 化 1 0 1 】



10

【 0 4 4 5 】

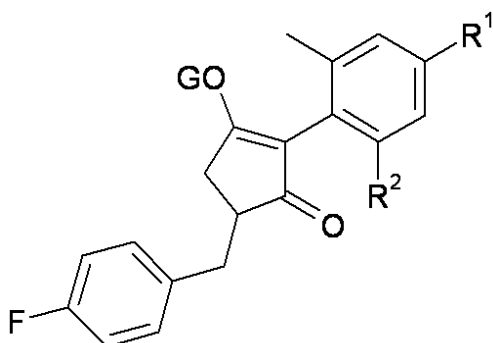
[ 式中、G は、水素であり、R<sup>1</sup> および R<sup>2</sup> は、表 1 に説明するとおりである。 ]

【 0 4 4 6 】

表 18 は、以下のタイプの 82 個の化合物を網羅する：

【 0 4 4 7 】

【 化 1 0 2 】



20

【 0 4 4 8 】

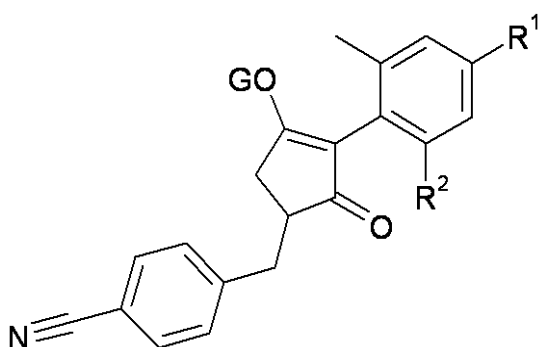
[ 式中、G は、水素であり、R<sup>1</sup> および R<sup>2</sup> は、表 1 に説明するとおりである。 ]

【 0 4 4 9 】

表 19 は、以下のタイプの 82 個の化合物を網羅する：

【 0 4 5 0 】

【 化 1 0 3 】



30

40

【 0 4 5 1 】

[ 式中、G は、水素であり、R<sup>1</sup> および R<sup>2</sup> は、表 1 に説明するとおりである。 ]

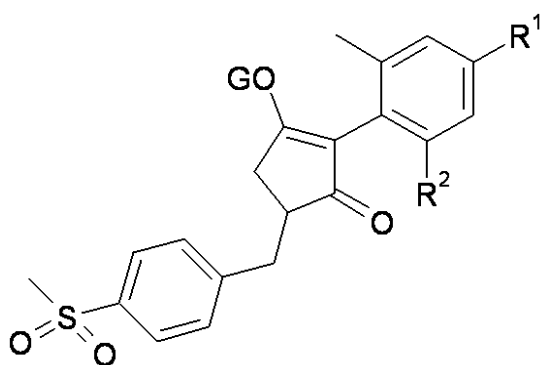
【 0 4 5 2 】

表 20 は、以下のタイプの 82 個の化合物を網羅する：

50

【 0 4 5 3 】

【 化 1 0 4 】



10

【 0 4 5 4 】

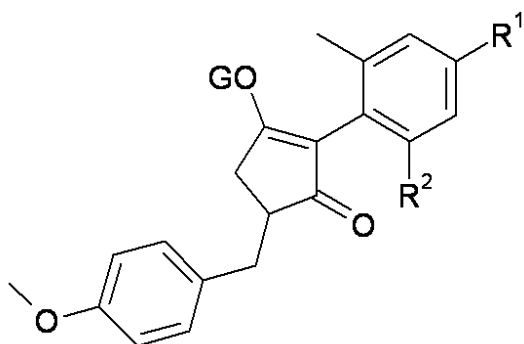
[ 式中、Gは、水素であり、R<sup>1</sup>およびR<sup>2</sup>は、表1に説明するとおりである。 ]

【 0 4 5 5 】

表21は、以下のタイプの82個の化合物を網羅する：

【 0 4 5 6 】

【 化 1 0 5 】



20

【 0 4 5 7 】

[ 式中、Gは、水素であり、R<sup>1</sup>およびR<sup>2</sup>は、表1に説明するとおりである。 ]

30

【 0 4 5 8 】

生物学の実施例

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 RN9005-64-5）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。

【 0 4 5 9 】

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

【 0 4 6 0 】

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）。

【 0 4 6 1 】

【表 2 9】

出芽後活性

| 化合物<br>番号 | 割合g/h<br>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<br>番号 | 割合g/h<br>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、砂壤土中に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）。

【0468】

【表34】

| 化合物番号 | 割合g/<br>ha | 冬小麦<br>(Hereward) | 冬小麦<br>(Hereward)<br>+ 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                                  |

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

|  |  |            |  |            |                             |
|--|--|------------|--|------------|-----------------------------|
| <b>A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER</b>   |  |            |  |            |                             |
| 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>B. FIELDS SEARCHED</b>  |  |            |  |            |                             |
| Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)  |  |            |  |            |                             |
| 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  |  |            |  |            |                             |
| <b>C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT</b>  |  |            |  |            |                             |
| 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)<br>11 August 1981 (1981-08-11)<br>cited in the application               |            |  |            | 1-15,<br>17-25              |
| A  | column 1, line 7 - line 57<br>column 9, line 55 - line 56<br>column 9, line 59 - line 60                   |            |  |            | 16                          |
| Y  | US 5 840 661 A (FISCHER REINER [DE] ET AL)<br>24 November 1998 (1998-11-24)<br>cited in the application    |            |  |            | 1-7, 9,<br>10, 13,<br>19-25 |
|  | column 1, line 6 - column 3, line 7; table 1   |            |  |            |                             |
| Y  | US 4 489 012 A (HODAKOWSKI LEONARD E [US])<br>18 December 1984 (1984-12-18)<br>column 3, line 22 - line 44 |            |  |            | 1-15,<br>17-25              |
| <input type="checkbox"/> Further documents are listed in the continuation of Box C. <input checked="" type="checkbox"/> See patent family annex.   |  |            |  |            |                             |
| * Special categories of cited documents :<br>"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance<br>"E" earlier document but published on or after the international filing date<br>"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)<br>"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means<br>"P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed<br>"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<br>"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<br>"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<br>"&" document member of the same patent family |  |            |  |            |                             |
| 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/<br>European Patent Office, P.B. 6818 Patentlaan 2<br>NL - 2280 HV Rijswijk<br>Tel. (+31-70) 340-2040,<br>Fax (+31-70) 340-3016  |  |            | Authorized officer<br><br>Mooren, Nicolai          |            |                             |

## INTERNATIONAL SEARCH REPORT

Information on patent family members

International application No

PCT/GB2010/001354

| Patent document<br>cited in search report |   | Publication<br>date | Patent family<br>member(s) | Publication<br>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, T M), 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, I L, 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, パークシャー アールジー 4 2 6 イーワイ, 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, シンジエンタ リミテッド

(72)発明者 ステファーン 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, シャフハウザーシュトラッセ, ベルク シュタイ  
ン, シンジエンタ クロップ プロテクション アクチェンゲゼルシャフト

(72)発明者 エイドリアン ロングスタッフ

イギリス国, パークシャー アールジー 4 2 6 イーワイ, 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, シンジエンタ 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, パークシャー アールジー 4 2 6 イーワイ, 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, シンジエンタ 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, パークシャー アールジー 4 2 6 イーワイ, 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, シンジエンタ リミテッド

(72)発明者 ジョン ベンジャミン テイラー

イギリス国, パークシャー アールジー 4 2 6 イーワイ, 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, シンジエンタ リミテッド

(72)発明者 ジェフリー スティーブン ウェールズ

イギリス国, パークシャー アールジー 4 2 6 イーワイ, 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, シンジエンタ 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 $C_3 - C_7$ シクロアルキルであるか、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、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。