

(19)日本国特許庁(JP)

## (12)特許公報(B2)

(11)特許番号  
特許第7607593号  
(P7607593)

(45)発行日 令和6年12月27日(2024.12.27)

(24)登録日 令和6年12月19日(2024.12.19)

(51)国際特許分類

F I

C 0 7 D 413/10 (2006.01)

C 0 7 D 413/10

C S P

A 0 1 P 13/00 (2006.01)

A 0 1 P 13/00

A 0 1 N 43/80 (2006.01)

A 0 1 N 43/80

1 0 1

A 0 1 N 47/02 (2006.01)

A 0 1 N 47/02

請求項の数 16 (全51頁)

(21)出願番号 特願2021-570316(P2021-570316)

(86)(22)出願日 令和2年5月21日(2020.5.21)

(65)公表番号 特表2022-534105(P2022-534105  
A)

(43)公表日 令和4年7月27日(2022.7.27)

(86)国際出願番号 PCT/EP2020/064212

(87)国際公開番号 WO2020/239607

(87)国際公開日 令和2年12月3日(2020.12.3)

審査請求日 令和5年5月16日(2023.5.16)

(31)優先権主張番号 1907602.5

(32)優先日 令和1年5月29日(2019.5.29)

(33)優先権主張国・地域又は機関  
英国(GB)

(31)優先権主張番号 1914260.3

(32)優先日 令和1年10月3日(2019.10.3)

最終頁に続く

(73)特許権者 520222106

シンジェンタ クロップ プロテクション

アクチエンゲゼルシャフト

スイス 4 0 5 8 パーゼル ローゼンタ

ールシュトラッセ 6 7

(74)代理人 100094569

弁理士 田中 伸一郎

(74)代理人 100103610

弁理士 吉 田 和彦

(74)代理人 100109070

弁理士 須田 洋之

(74)代理人 100119013

弁理士 山崎 一夫

(74)代理人 100123777

弁理士 市川 さつき

最終頁に続く

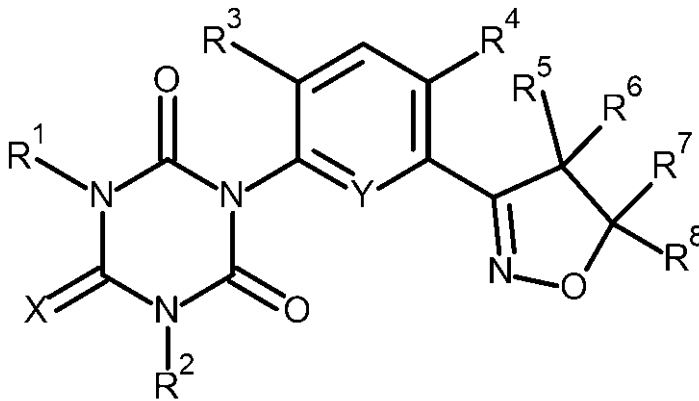
(54)【発明の名称】 除草化合物

(57)【特許請求の範囲】

【請求項1】

式(I)：

【化1】



(I)

(式中、

Xは、酸素及び硫黄からなる群から選択され；

Yは、C-H及び窒素からなる群から選択され；

R<sup>1</sup>は、水素及びC<sub>1</sub>~C<sub>6</sub>アルキルからなる群から選択され；

10

20

$R^2$ は、水素、アミノ、 $C_1 \sim C_6$ アルキル、 $C_3 \sim C_6$ アルケニル及び $C_3 \sim C_6$ アルキニルからなる群から選択され；

$R^3$ は、水素及びハロゲンからなる群から選択され；

$R^4$ は、ハロゲンであり；

各 $R^5$ 及び $R^6$ は、水素及び $C_1 \sim C_6$ アルキルからなる群から独立して選択され；

$R^7$ は、 $C(=Z)R^{15}$ 、 $CO_2R^9$ 、 $CONR^{10}R^{11}$ 及び $CH_2OR^{12}$ からなる群から選択され；

Zは、酸素及び $NOR^{16}$ からなる群から選択され；

$R^8$ は、水素、 $C_1 \sim C_6$ アルキル及び $C_1 \sim C_6$ ハロアルキルからなる群から選択され；

$R^9$ は、水素及び $C_1 \sim C_{10}$ アルキルからなる群から選択され；

10

$R^{10}$ は、水素、 $C_1 \sim C_6$ アルキル及び $SO_2R^{14}$ からなる群から選択され；

$R^{11}$ は、水素及び $C_1 \sim C_6$ アルキルからなる群から選択されるか；

$R^{12}$ は、水素、 $C_1 \sim C_4$ アルキル、及び $C_1 \sim C_4$ アルキルスルホニルからなる群から選択され；

$R^{14}$ は、 $C_1 \sim C_4$ アルキル及び $C_1 \sim C_4$ ハロアルキルからなる群から選択され；

$R^{15}$ は、水素及び $C_1 \sim C_4$ アルキルからなる群から選択され；

$R^{16}$ は、水素、 $C_1 \sim C_4$ アルキル、及び $C_1 \sim C_4$ アルコキシカルボニル $C_1 \sim C_4$ アルキルからなる群から選択される)

の化合物又はその農学的に許容可能な塩。

【請求項 2】

20

Xは、硫黄である、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 3】

Yは、C - Hである、請求項 1 又は 2 に記載の化合物。

【請求項 4】

$R^1$ は、水素及び $C_1 \sim C_4$ アルキルからなる群から選択される、請求項 1 ~ 3 のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項 5】

$R^2$ は、水素、 $C_1 \sim C_4$ アルキル及び $C_3 \sim C_4$ アルキニルからなる群から選択される、請求項 1 ~ 4 のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項 6】

30

$R^3$ は、水素、塩素及びフッ素からなる群から選択される、請求項 1 ~ 5 のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項 7】

$R^4$ は、塩素である、請求項 1 ~ 6 のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項 8】

各 $R^5$ 及び $R^6$ は、水素及び $C_1 \sim C_4$ アルキルからなる群から独立して選択される、請求項 1 ~ 7 のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項 9】

$R^7$ は、 $CO_2R^9$ 、 $CONR^{10}R^{11}$ 及び $CH_2OR^{12}$ からなる群から選択される、請求項 1 ~ 8 のいずれか一項に記載の化合物。

40

【請求項 10】

$R^9$ は、水素及び $C_1 \sim C_4$ アルキルからなる群から選択される、請求項 1 ~ 9 のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項 11】

$R^{10}$ は、水素及び $SO_2R^{14}$ からなる群から選択される、請求項 1 ~ 10 のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項 12】

$R^{11}$ は、水素である、請求項 1 ~ 11 のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項 13】

$R^{12}$ は、水素、 $C_1 \sim C_2$ アルキル、及び $C_1 \sim C_2$ アルキルスルホニルからなる群から選

50

択される、請求項 1 ~ 12 のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項 14】

R<sup>14</sup>は、C<sub>1</sub> ~ C<sub>4</sub>アルキルである、請求項 1 ~ 13 のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項 15】

除草的に有効な量の、請求項 1 ~ 14 のいずれか一項に記載の式 (I) の化合物と、農芸化学的に許容可能な希釈剤又はキャリアとを含む農芸化学的組成物。

【請求項 16】

望ましくない植物の成長を防除又は防止する方法であって、除草的に有効な量の、請求項 1 ~ 14 のいずれか一項に記載の式 (I) の化合物又は請求項 15 に記載の組成物を、植物、その一部又はその生息地に適用する、方法。

10

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、除草的に活性なイソキサゾリン誘導体並びにこのような誘導体の調製に用いられるプロセス及び中間体に関する。本発明は、このような誘導体を含む除草組成物並びに望ましくない植物の成長の防除のためのこのような化合物及び組成物の使用、特に有用な植物の作物における雑草の防除のための使用にさらに及ぶ。

【発明の概要】

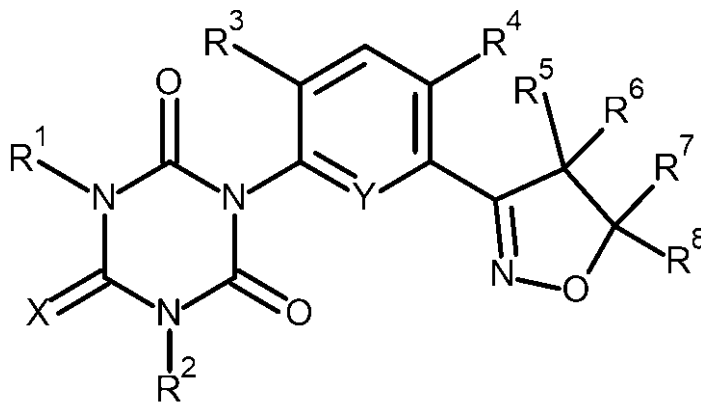
【課題を解決するための手段】

【0002】

本発明は、本明細書において定義されるような式 (I) のイソキサゾリン誘導体が意外なほど良好な除草活性を示すという知見に基づいている。従って、本発明によれば、式 (I) :

20

【化 1】



30

(式中、

Xは、酸素及び硫黄からなる群から選択され；

Yは、C - H及び窒素からなる群から選択され；

R<sup>1</sup>は、水素及びC<sub>1</sub> ~ C<sub>6</sub>アルキルからなる群から選択され；

40

R<sup>2</sup>は、水素、アミノ、C<sub>1</sub> ~ C<sub>6</sub>アルキル、C<sub>3</sub> ~ C<sub>6</sub>アルケニル及びC<sub>3</sub> ~ C<sub>6</sub>アルキニルからなる群から選択され；

R<sup>3</sup>は、水素、ハロゲン、C<sub>1</sub> ~ C<sub>4</sub>アルキル、C<sub>1</sub> ~ C<sub>4</sub>ハロアルキル、C<sub>1</sub> ~ C<sub>4</sub>アルコキシ、C<sub>1</sub> ~ C<sub>4</sub>ハロアルコキシ及びC<sub>1</sub> ~ C<sub>4</sub>アルキルスルホニルからなる群から選択され；

R<sup>4</sup>は、水素、ハロゲン、シアノ、アミノカルボニル、アミノチオカルボニル、C<sub>1</sub> ~ C<sub>4</sub>アルキル、C<sub>1</sub> ~ C<sub>4</sub>ハロアルキル、C<sub>1</sub> ~ C<sub>4</sub>アルコキシ、C<sub>1</sub> ~ C<sub>4</sub>ハロアルコキシ及びC<sub>1</sub> ~ C<sub>4</sub>アルキルスルホニルからなる群から選択され；

各R<sup>5</sup>及びR<sup>6</sup>は、水素、シアノ、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>4</sub>アルキルスルホニル、CO<sub>2</sub>R<sup>9</sup>、CONR<sup>10</sup>R<sup>11</sup>及びCH<sub>2</sub>OR<sup>12</sup>からなる群から独立し

50

て選択され；

各  $R^7$  及び  $R^8$  は、水素、シアノ、 $C_1 \sim C_6$  アルキル、 $C_1 \sim C_6$  ハロアルキル、 $C_1 \sim C_4$  アルコキシ、 $C_1 \sim C_4$  アルキルスルホニル、 $C(=Z)R^{15}$ 、 $CO_2R^9$ 、 $CONR^{10}R^{11}$  及び  $CH_2OR^{12}$  からなる群から独立して選択され；

$Z$  は、酸素、 $NOR^{16}$  及び  $NN(R^{16})_2$  からなる群から選択され；

$R^9$  は、水素、 $C_1 \sim C_{10}$  アルキル、 $C_1 \sim C_{10}$  ハロアルキル、 $C_3 \sim C_6$  アルケニル、 $C_3 \sim C_6$  ハロアルケニル、 $C_3 \sim C_6$  アルキニル、 $C_1 \sim C_4$  アルコキシ  $C_1 \sim C_6$  アルキル、 $C_1 \sim C_4$  ハロアルコキシ  $C_1 \sim C_6$  アルキル、 $C_6 \sim C_{10}$  アリール  $C_1 \sim C_3$  アルキル、1～4個の基  $R^{13}$  によって置換されている  $C_6 \sim C_{10}$  アリール  $C_1 \sim C_3$  アルキル、ヘテロアリール  $C_1 \sim C_3$  アルキル及び1～3個の基  $R^{13}$  によって置換されているヘテロアリール  $C_1 \sim C_3$  アルキルからなる群から選択され；

10

$R^{10}$  は、水素、 $C_1 \sim C_6$  アルキル及び  $SO_2R^{14}$  からなる群から選択され；

$R^{11}$  は、水素及び  $C_1 \sim C_6$  アルキルからなる群から選択されるか；又は

$R^{10}$  及び  $R^{11}$  は、それらが結合されている窒素と一緒に、酸素原子を任意に含有する3～6員ヘテロシクリル環を形成し；

$R^{12}$  は、水素、 $C_1 \sim C_4$  アルキル、 $C_1 \sim C_4$  ハロアルキル、 $C_1 \sim C_4$  アルキルスルホニル、 $C_1 \sim C_4$  ハロアルキルスルホニル、フェニルスルホニル、1～2個の基  $R^{13}$  によって置換されているフェニルスルホニル、 $C_1 \sim C_4$  アルキルカルボニル、 $C_1 \sim C_4$  ハロアルキルカルボニル、 $C_6 \sim C_{10}$  アリールカルボニル、1～4個の基  $R^{13}$  によって置換されている  $C_6 \sim C_{10}$  アリールカルボニル、ヘテロアリールカルボニル、1～3個の基  $R^{13}$  によって置換されているヘテロアリールカルボニル、 $C_6 \sim C_{10}$  アリール  $C_1 \sim C_3$  アルキルカルボニル、1～4個の基  $R^{13}$  によって置換されている  $C_6 \sim C_{10}$  アリール  $C_1 \sim C_3$  アルキルカルボニル、ヘテロアリール  $C_1 \sim C_3$  アルキルカルボニル及び1～3個の基  $R^{13}$  によって置換されているヘテロアリール  $C_1 \sim C_3$  アルキルカルボニルからなる群から選択され；

20

各  $R^{13}$  は、ハロゲン、 $C_1 \sim C_4$  アルキル、 $C_1 \sim C_4$  ハロアルキル、 $C_1 \sim C_4$  アルコキシ、 $C_1 \sim C_4$  ハロアルコキシ、シアノ及び  $C_1 \sim C_4$  アルキルスルホニルからなる群から独立して選択され；

$R^{14}$  は、 $C_1 \sim C_4$  アルキル、 $C_1 \sim C_4$  ハロアルキル及び  $C_1 \sim C_4$  アルキル ( $C_1 \sim C_4$  アルキル) アミノからなる群から選択され；

$R^{15}$  は、水素、 $C_1 \sim C_4$  アルキル及び  $C_1 \sim C_4$  ハロアルキルからなる群から選択され；

30

各  $R^{16}$  は、水素、 $C_1 \sim C_4$  アルキル、 $C_1 \sim C_4$  ハロアルキル及び  $C_1 \sim C_4$  アルコキシカルボニル  $C_1 \sim C_4$  アルキルからなる群から独立して選択される) の化合物又はその農学的に許容可能な塩が提供される。

#### 【0003】

本発明の第2の態様によれば、除草的に有効な量の式(I)の化合物と、農芸化学的に許容可能な希釈剤又はキャリアとを含む農芸化学的組成物が提供される。このような農業用組成物は、少なくとも1種の追加の有効成分をさらに含み得る。

#### 【0004】

本発明の第3の態様によれば、望ましくない植物の成長を防除又は予防する方法であって、除草的に有効な量の式(I)の化合物又はこの化合物を有効成分として含む組成物は、植物、その一部又はその生息地に適用される、方法が提供される。

40

#### 【0005】

本発明の第4の態様によれば、除草剤としての式(I)の化合物の使用が提供される。

#### 【0006】

本発明の第5の態様によれば、式(I)の化合物を調製するためのプロセスが提供される。

#### 【発明を実施するための形態】

#### 【0007】

本明細書において用いられる場合、「ハロゲン」又は「ハロ」という用語は、フッ素(フルオロ)、塩素(クロロ)、臭素(ブロモ)又はヨウ素(ヨード)、好ましくはフッ素

50

、塩素又は臭素を指す。

【0008】

本明細書において用いられる場合、シアノは、 $-CN$ 基を意味する。

【0009】

本明細書において用いられる場合、ヒドロキシは、 $-OH$ 基を意味する。

【0010】

本明細書において用いられる場合、ニトロは、 $-NO_2$ 基を意味する。

【0011】

本明細書において用いられる場合、「 $C_1 \sim C_6$ アルキル」という用語は、炭素及び水素原子のみから構成され、不飽和を含まず、1～6個の炭素原子を有し、且つ単結合によつて分子の残部に結合している直鎖又は分岐鎖炭化水素鎖ラジカルを指す。 $C_1 \sim C_4$ アルキル及び $C_1 \sim C_2$ アルキルは、相応に解釈されるべきである。 $C_1 \sim C_6$ アルキルの例としては、これらに限定されないが、メチル(Me)、エチル(Et)、*n*-プロピル、1-メチルエチル(イソプロピル)、*n*-ブチル及び1-ジメチルエチル(*t*-ブチル)が挙げられる。

10

【0012】

本明細書において用いられる場合、「 $C_1 \sim C_6$ アルコキシ」という用語は、一般に上記に定義されているとおり、 $R_a$ が $C_1 \sim C_6$ アルキル基である式 $-OR_a$ の基を指す。 $C_1 \sim C_4$ アルコキシは、相応に解釈されるべきである。 $C_{1-4}$ アルコキシの例としては、これらに限定されないが、メトキシ、エトキシ、プロポキシ、イソプロポキシ及び*t*-ブトキシが挙げられる。

20

【0013】

本明細書において用いられる場合、「 $C_1 \sim C_6$ ハロアルキル」という用語は、1個以上の同じであるか又は異なるハロゲン原子によって置換されている、一般に上記に定義されている $C_1 \sim C_6$ アルキル基を指す。 $C_1 \sim C_4$ ハロアルキルは、相応に解釈されるべきである。 $C_1 \sim C_6$ ハロアルキルの例としては、これらに限定されないが、クロロメチル、フルオロメチル、フルオロエチル、ジフルオロメチル、トリフルオロメチル及び2,2,2-トリフルオロエチルが挙げられる。

【0014】

本明細書において用いられる場合、「 $C_2 \sim C_6$ アルケニル」という用語は、炭素及び水素原子のみから構成され、(E)又は(Z)立体構成のいずれかであり得る少なくとも1つの二重結合を含み、2～6個の炭素原子を有し、単結合によつて分子の残部に結合している直鎖又は分岐鎖炭化水素鎖ラジカル基を指す。 $C_2 \sim C_4$ アルケニルは、相応に解釈されるべきである。 $C_2 \sim C_6$ アルケニルの例としては、これらに限定されないが、プロブ-1-エニル、アリル(プロブ-2-エニル)及びブタ-1-エニルが挙げられる。

30

【0015】

本明細書において用いられる場合、「 $C_2 \sim C_6$ ハロアルケニル」という用語は、1個以上の同じであるか又は異なるハロゲン原子によって置換されている、一般に上記に定義されている $C_2 \sim C_6$ アルケニル基を指す。 $C_2 \sim C_6$ ハロアルケニルの例としては、これらに限定されないが、クロロエチレン、フルオロエチレン、1,1-ジフルオロエチレン、1,1-ジクロロエチレン及び1,1,2-トリクロロエチレンが挙げられる。

40

【0016】

本明細書において用いられる場合、「 $C_2 \sim C_6$ アルキニル」という用語は、炭素及び水素原子のみから構成され、少なくとも1つの三重結合を含み、2～6個の炭素原子を有し、且つ単結合によつて分子の残部に結合している直鎖又は分岐鎖炭化水素鎖ラジカル基を指す。 $C_2 \sim C_4$ アルキニルは、相応に解釈されるべきである。 $C_2 \sim C_6$ アルキニルの例としては、これらに限定されないが、プロブ-1-イニル、プロパルギル(プロブ-2-イニル)及びブタ-1-イニルが挙げられる。

【0017】

本明細書において用いられる場合、「 $C_1 \sim C_6$ ハロアルコキシ」という用語は、1個以

50

上の同じであるか又は異なるハロゲン原子によって置換されている、上記に定義されている  $C_1 \sim C_6$  アルコキシ基を指す。 $C_1 \sim C_4$  ハロアルコキシは、相応に解釈されるべきである。 $C_1 \sim C_6$  ハロアルコキシの例としては、これらに限定されないが、フルオロメトキシ、ジフルオロメトキシ、フルオロエトキシ、トリフルオロメトキシ及びトリフルオロエトキシが挙げられる。

**【 0 0 1 8 】**

本明細書において用いられる場合、「 $C_1 \sim C_3$  ハロアルコキシ  $C_1 \sim C_3$  アルキル」という用語は、一般に上記に定義されているとおり  $R_b$  が  $C_1 \sim C_3$  ハロアルキル基であり、及び一般に上記に定義されているとおり  $R_a$  が  $C_1 \sim C_3$  アルキレン基である式  $R_b - O - R_a$  - の基を指す。

10

**【 0 0 1 9 】**

本明細書において用いられる場合、「 $C_1 \sim C_3$  アルコキシ  $C_1 \sim C_3$  アルキル」という用語は、一般に上記に定義されているとおり  $R_b$  が  $C_1 \sim C_3$  アルキル基であり、及び一般に上記に定義されているとおり  $R_a$  が  $C_1 \sim C_3$  アルキレン基である式  $R_b - O - R_a$  - の基を指す。

**【 0 0 2 0 】**

本明細書において用いられる場合、「 $C_1 \sim C_3$  アルコキシ  $C_1 \sim C_3$  アルコキシ - 」という用語は、一般に上記に定義されているとおり  $R_b$  が  $C_1 \sim C_3$  アルキル基であり、及び一般に上記に定義されているとおり  $R_a$  が  $C_1 \sim C_3$  アルキレン基である式  $R_b - O - R_a - O$  - の基を指す。

20

**【 0 0 2 1 】**

本明細書において用いられる場合、「 $C_3 \sim C_6$  アルケニルオキシ」という用語は、一般に上記に定義されているとおり  $R_a$  が  $C_3 \sim C_6$  アルケニル基である式  $- O R_a$  の基を指す。

**【 0 0 2 2 】**

本明細書において用いられる場合、「 $C_3 \sim C_6$  アルキニルオキシ」という用語は、一般に上記に定義されているとおり  $R_a$  が  $C_3 \sim C_6$  アルキニル基である式  $- O R_a$  の基を指す。

**【 0 0 2 3 】**

本明細書において用いられる場合、「ヒドロキシ  $C_1 \sim C_6$  アルキル」という用語は、1個以上のヒドロキシ基によって置換されている、一般に上記に定義されている  $C_1 \sim C_6$  アルキル基を指す。

30

**【 0 0 2 4 】**

本明細書において用いられる場合、「 $C_1 \sim C_6$  アルキルカルボニル」という用語は、一般に上記に定義されているとおり  $R_a$  が  $C_1 \sim C_6$  アルキル基である式  $- C ( O ) R_a$  の基を指す。

**【 0 0 2 5 】**

本明細書において用いられる場合、「 $C_1 \sim C_6$  アルコキシカルボニル」という用語は、一般に上記に定義されているとおり  $R_a$  が  $C_1 \sim C_6$  アルキル基である式  $- C ( O ) O R_a$  の基を指す。

**【 0 0 2 6 】**

本明細書において用いられる場合、「アミノカルボニル」という用語は、式  $- C ( O ) N H_2$  の基を指す。

40

**【 0 0 2 7 】**

本明細書において用いられる場合、「アミノチオカルボニル」という用語は、式  $- C ( S ) N H_2$  の基を指す。

**【 0 0 2 8 】**

本明細書において用いられる場合、「 $C_3 \sim C_6$  シクロアルキル」という用語は、飽和又は部分飽和であり、且つ3～6個の炭素原子を含有する安定な単環式環基を指す。 $C_3 \sim C_4$  シクロアルキルは、相応に解釈されるべきである。 $C_3 \sim C_6$  シクロアルキルの例としては、これらに限定されないが、シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル及びシクロヘキシルが挙げられる。

50

## 【0029】

本明細書において用いられる場合、「 $C_3 \sim C_6$ ハロシクロアルキル」という用語は、1個以上の同じであるか又は異なるハロゲン原子によって置換されている、一般に上記に定義されている $C_3 \sim C_6$ シクロアルキル基を指す。 $C_3 \sim C_4$ ハロシクロアルキルは、相応に解釈されるべきである。

## 【0030】

本明細書において用いられる場合、「 $C_3 \sim C_6$ シクロアルコキシ」という用語は、一般に上記に定義されているとおり $R_a$ が $C_3 \sim C_6$ シクロアルキル基である式 $-OR_a$ の基を指す。

## 【0031】

本明細書において用いられる場合、「 $N-C_3 \sim C_6$ シクロアルキルアミノ」という用語は、一般に上記に定義されているとおり $R_a$ が $C_3 \sim C_6$ シクロアルキル基である式 $-NHR_a$ の基を指す。

## 【0032】

本明細書において用いられる場合、別段の定めがある場合を除き、「ヘテロアリアル」という用語は、窒素、酸素及び硫黄から独立して選択される1、2、3又は4個のヘテロ原子を含む5又は6員単環式芳香族環を指す。ヘテロアリアル基は、炭素原子又はヘテロ原子を介して分子の残部に結合し得る。ヘテロアリアルの例としては、フリル、ピロリル、イミダゾリル、チエニル、ピラゾリル、チアゾリル、イソチアゾリル、オキサゾリル、イソオキサゾリル、トリアゾリル、テトラゾリル、ピラジニル、ピリダジニル、ピリミジル又はピリジルが挙げられる。

## 【0033】

本明細書において用いられる場合、別段の定めがある場合を除き、「ヘテロシクリル」又は「複素環式」という用語は、窒素、酸素及び硫黄から独立して選択される1、2又は3個のヘテロ原子を含む安定な4～6員非芳香族単環式環基を指す。ヘテロシクリル基は、炭素原子又はヘテロ原子を介して分子の残部に結合し得る。ヘテロシクリルの例としては、これらに限定されないが、ピロリニル、ピロリジル、テトラヒドロフリル、テトラヒドロチエニル、テトラヒドロチオピラニル、ペペリジル、ペペラジニル、テトラヒドロピラニル、ジヒドロイソキサゾリル、ジオキサラニル、モルホリニル又は $-$ ラクタミルが挙げられる。

## 【0034】

式(I)の化合物中における1個以上の場合により不斉の炭素原子の存在は、その化合物が、キラル異性形態、すなわち鏡像異性形態又はジアステレオ異性形態で生じ得ることを意味する。また、アストロブ異性体は、単結合に係る回転の制限の結果として生じ得る。式(I)は、すべてのこれらの可能性のある異性形態及びその混合物を含むことが意図されている。本発明は、式(I)の化合物に係るすべてのこれらの可能性のある異性形態及びその混合物を含む。同様に、式(I)は、存在する場合、すべての可能性のある互変異性体(ラクタム-ラクチム互変異性及びケト-エノール互変異性を含む)を含むことが意図されている。本発明は、式(I)の化合物に係るすべての可能性のある互変異性形態を含む。同様に、二置換されたアルケンが存在する場合、これらは、E若しくはZ形態で又はいずれかの割合における両方の混合物として存在し得る。本発明は、式(I)の化合物について、すべてのこれらの可能な異性形態及びその混合物を含む。

## 【0035】

式(I)の化合物は、典型的には、農学的に許容可能な塩、双性イオン又は双性イオンの農学的に許容可能な塩の形態で提供される。本発明は、このような農学的に許容可能な塩、双性イオン及びすべての割合でのその混合物のすべてを包含する。

## 【0036】

本発明の好適な農学的に許容可能な塩は、これらに限定されないが、金属、アミンの共役酸及び有機カチオンを含むカチオンを有し得る。好適な金属の例としては、アルミニウム、カルシウム、セシウム、銅、リチウム、マグネシウム、マンガン、カリウム、ナトリ

10

20

30

40

50

ウム、鉄及び亜鉛が挙げられる。好適なアミンの例としては、アリルアミン、アンモニア、アミルアミン、アルギニン、ベネタミン、ベンザチン、ブテニル - 2 - アミン、ブチルアミン、ブチルエタノールアミン、シクロヘキシルアミン、デシルアミン、ジアミルアミン、ジブチルアミン、ジエタノールアミン、ジエチルアミン、ジエチレントリアミン、ジヘブチルアミン、ジヘキシルアミン、ジイソアミルアミン、ジイソプロピルアミン、ジメチルアミン、ジオクチルアミン、ジプロパノールアミン、ジプロパルギルアミン、ジプロピルアミン、ドデシルアミン、エタノールアミン、エチルアミン、エチルブチルアミン、エチレンジアミン、エチルヘブチルアミン、エチルオクチルアミン、エチルプロパノールアミン、ヘプタデシルアミン、ヘブチルアミン、ヘキサデシルアミン、ヘキセニル - 2 - アミン、ヘキシルアミン、ヘキシルヘブチルアミン、ヘキシルオクチルアミン、ヒスチジン、インドリン、イソアミルアミン、イソブタノールアミン、イソブチルアミン、イソプロパノールアミン、イソプロピルアミン、リシン、メグルミン、メトキシエチルアミン、メチルアミン、メチルブチルアミン、メチルエチルアミン、メチルヘキシルアミン、メチルイソプロピルアミン、メチルノニルアミン、メチルオクタデシルアミン、メチルペンタデシルアミン、モルホリン、N, N - ジエチルエタノールアミン、N - メチルピペラジン、ノニルアミン、オクタデシルアミン、オクチルアミン、オレイルアミン、ペンタデシルアミン、ペンテニル - 2 - アミン、フェノキシエチルアミン、ピコリン、ピペラジン、ピペリジン、プロパノールアミン、プロピルアミン、プロピレンジアミン、ピリジン、ピロリジン、s e c - ブチルアミン、ステアリルアミン、タローアミン、テトラデシルアミン、トリブチルアミン、トリデシルアミン、トリメチルアミン、トリヘブチルアミン、トリヘキシルアミン、トリイソブチルアミン、トリイソデシルアミン、トリイソプロピルアミン、トリメチルアミン、トリペンチルアミン、トリプロピルアミン、トリス(ヒドロキシメチル)アミノメタン及びウンデシルアミンが挙げられる。好適な有機カチオンの例としては、ベンジルトリブチルアンモニウム、ベンジルトリメチルアンモニウム、ベンジルトリフェニルホスホニウム、コリン、テトラブチルアンモニウム、テトラブチルホスホニウム、テトラエチルアンモニウム、テトラエチルホスホニウム、テトラメチルアンモニウム、テトラメチルホスホニウム、テトラプロピルアンモニウム、テトラプロピルホスホニウム、トリブチルスルホニウム、トリブチルスルホキソニウム、トリエチルスルホニウム、トリエチルスルホキソニウム、トリメチルスルホニウム、トリメチルスルホキソニウム、トリプロピルスルホニウム及びトリプロピルスルホキソニウムが挙げられる。

【0037】

以下のリストは、本発明に従う式(I)の化合物に関連した置換基X、Y、Z、R<sup>1</sup>、R<sup>2</sup>、R<sup>3</sup>、R<sup>4</sup>、R<sup>5</sup>、R<sup>6</sup>、R<sup>7</sup>、R<sup>8</sup>、R<sup>9</sup>、R<sup>10</sup>、R<sup>11</sup>、R<sup>12</sup>、R<sup>13</sup>、R<sup>14</sup>、R<sup>15</sup>及びR<sup>16</sup>についての、好ましい定義を含む定義を提供する。これらの置換基の任意の1つについて、下記に与えられる定義のいずれも、本明細書の下記又は他の箇所与えられる任意の他の置換基の任意の定義と組み合わせられ得る。

【0038】

好ましくは、Xは、硫黄である。

【0039】

好ましくは、Yは、C - Hである。

【0040】

好ましくは、R<sup>1</sup>は、水素及びC<sub>1</sub> ~ C<sub>4</sub>アルキルからなる群から選択され、より好ましくはC<sub>1</sub> ~ C<sub>2</sub>アルキルであり、最も好ましくはメチルである。

【0041】

好ましくは、R<sup>2</sup>は、水素、C<sub>1</sub> ~ C<sub>4</sub>アルキル及びC<sub>3</sub> ~ C<sub>4</sub>アルキニルからなる群から選択され、より好ましくはC<sub>1</sub> ~ C<sub>2</sub>アルキルであり、最も好ましくはメチルである。

【0042】

好ましくは、R<sup>3</sup>は、水素、塩素及びフッ素、より好ましくは塩素及びフッ素からなる群から選択される。

【0043】

10

20

30

40

50

好ましくは、 $R^4$ は、水素、塩素、シアノ及びアミノチオカルボニル、より好ましくは塩素、シアノ及びアミノチオカルボニルからなる群から選択され、最も好ましくは塩素である。

## 【0044】

好ましくは、各 $R^5$ 及び $R^6$ は、水素、 $C_1 \sim C_4$ アルキル、 $CO_2R^9$ 及び $CH_2OR^{12}$ 、より好ましくは水素及び $C_1 \sim C_2$ アルキルからなる群から独立して選択され、最も好ましくは水素である。

## 【0045】

好ましくは、各 $R^7$ 及び $R^8$ は、水素、 $C_1 \sim C_4$ アルキル、 $C_1 \sim C_6$ ハロアルキル、 $CO_2R^9$ 、 $CONR^{10}R^{11}$ 及び $CH_2OR^{12}$ からなる群から独立して選択される。より好ましくは、 $R^7$ は、 $CO_2R^9$ 、 $CONR^{10}R^{11}$ 及び $CH_2OR^{12}$ からなる群から選択され、最も好ましくは $CO_2R^9$ である。より好ましくは、 $R^8$ は、水素及び $C_1 \sim C_4$ アルキルからなる群から選択され、最も好ましくはメチルである。

10

## 【0046】

好ましくは、 $R^9$ は、水素、 $C_1 \sim C_4$ アルキル、 $C_1 \sim C_4$ ハロアルキル、 $C_1 \sim C_2$ アルコキシ $C_1 \sim C_2$ アルキル、フェニル $C_1 \sim C_2$ アルキル及び1～2個の基 $R^{13}$ によって置換されているフェニル $C_1 \sim C_2$ アルキル、より好ましくは水素、 $C_1 \sim C_4$ アルキル、 $C_1 \sim C_2$ アルコキシ $C_1 \sim C_2$ アルキル及びフェニル $C_1 \sim C_2$ アルキル、最も好ましくは水素、 $C_1 \sim C_4$ アルキル及びフェニル $C_1 \sim C_2$ アルキルからなる群から選択される。

## 【0047】

好ましくは、 $R^{10}$ は、水素及び $SO_2R^{14}$ からなる群から選択され、より好ましくは $SO_2R^{14}$ である。

20

## 【0048】

好ましくは、 $R^{11}$ は、水素である。

## 【0049】

好ましくは、 $R^{12}$ は、水素、 $C_1 \sim C_2$ アルキル、 $C_1 \sim C_2$ アルキルスルホニル、 $C_1 \sim C_2$ ハロアルキルスルホニル、 $C_1 \sim C_4$ アルキルカルボニル、フェニルカルボニル、1～2個の基 $R^{13}$ によって置換されているフェニルカルボニル、フェニル $C_1 \sim C_2$ アルキルカルボニル及び1～2個の基 $R^{13}$ によって置換されているフェニル $C_1 \sim C_2$ アルキルカルボニル、より好ましくは $C_1 \sim C_2$ アルキルスルホニル、 $C_1 \sim C_2$ ハロアルキルスルホニル及び $C_1 \sim C_4$ アルキルカルボニルからなる群から選択される。

30

## 【0050】

好ましくは、 $R^{13}$ は、ハロゲン、 $C_1 \sim C_4$ アルキル、 $C_1 \sim C_4$ ハロアルキル、 $C_1 \sim C_4$ アルコキシ、 $C_1 \sim C_4$ ハロアルコキシ、シアノ及び $C_1 \sim C_4$ アルキルスルホニルからなる群から選択される。

## 【0051】

好ましくは、 $R^{14}$ は、 $C_1 \sim C_4$ アルキル及び $C_1 \sim C_4$ アルキル( $C_1 \sim C_4$ アルキル)アミノ、より好ましくはメチル及びイソプロピル(メチル)アミノからなる群から選択される。

## 【0052】

化合物の好ましいサブセットは、

Xが硫黄であり；

YがC-Hであり；

$R^1$ が $C_1 \sim C_2$ アルキルであり；

$R^2$ が $C_1 \sim C_2$ アルキルであり；

$R^3$ が、水素、塩素及びフッ素からなる群から選択され；

$R^4$ が、塩素、シアノ及びアミノチオカルボニルからなる群から選択され；

各 $R^5$ 及び $R^6$ が、水素及び $C_1 \sim C_2$ アルキルからなる群から独立して選択され；

$R^7$ が、 $CO_2R^9$ 、 $CONR^{10}R^{11}$ 及び $CH_2OR^{12}$ からなる群から選択され；

$R^8$ が、水素及び $C_1 \sim C_4$ アルキルからなる群から選択され；

40

50

$R^9$ が、水素、 $C_1 \sim C_4$ アルキル、 $C_1 \sim C_2$ アルコキシ $C_1 \sim C_2$ アルキル及びフェニル  
 $C_1 \sim C_2$ アルキルからなる群から選択され；  
 $R^{10}$ が $SO_2R^{14}$ であり；  
 $R^{11}$ が水素であり；  
 $R^{12}$ が、 $C_1 \sim C_2$ アルキルスルホニル、 $C_1 \sim C_2$ ハロアルキルスルホニル及び $C_1 \sim C_4$   
アルキルカルボニルからなる群から選択され；  
 $R^{14}$ が、メチル及びイソプロピル（メチル）アミノからなる群から選択されるものであ  
る。

## 【0053】

化合物のより好ましいサブセットは、

Xが硫黄であり；

YがC - Hであり；

$R^1$ がメチルであり；

$R^2$ がメチルであり；

$R^3$ が、塩素及びフッ素からなる群から選択され；

$R^4$ が塩素であり；

各 $R^5$ 及び $R^6$ が水素であり；

$R^7$ が $CO_2R^9$ であり；

$R^8$ がメチルであり；

$R^9$ が、水素、 $C_1 \sim C_4$ アルキル及びフェニル $C_1 \sim C_2$ アルキルからなる群から選択さ  
れるものである。

## 【0054】

実施例の表

この表は、 $R^1$ 及び $R^2$ がメチルである、式(I)の具体的な化合物を開示する。

## 【0055】

10

20

30

40

50

【表 1 - 1】

化合物 番号	X	R <sup>3</sup>	R <sup>4</sup>	R <sup>5</sup>	R <sup>6</sup>	R <sup>7</sup>	R <sup>8</sup>
1	O	H	Cl	H	H	CO <sub>2</sub> H	Me
2	O	H	Cl	H	H	CO <sub>2</sub> Me	Me
3	O	H	Cl	H	H	CO <sub>2</sub> Et	Me
4	O	H	Cl	H	H	CO <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> Ph	Me
5	O	H	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OH	Me
6	O	H	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OMe	Me
7	O	H	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OCOMe	Me
8	O	H	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OCOPh	Me
9	O	H	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> Me	Me
10	O	H	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> CF <sub>3</sub>	Me
11	O	H	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> (4MePh)	Me
12	O	F	Cl	H	H	CO <sub>2</sub> H	Me
13	O	F	Cl	H	H	CO <sub>2</sub> Me	Me
14	O	F	Cl	H	H	CO <sub>2</sub> Et	Me
15	O	F	Cl	H	H	CO <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> Ph	Me
16	O	F	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OH	Me
17	O	F	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OMe	Me
18	O	F	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OCOMe	Me
19	O	F	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OCOPh	Me
20	O	F	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> Me	Me
21	O	F	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> CF <sub>3</sub>	Me
22	O	F	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> (4MePh)	Me
23	O	Cl	Cl	H	H	CO <sub>2</sub> H	Me
24	O	Cl	Cl	H	H	CO <sub>2</sub> Me	Me
25	O	Cl	Cl	H	H	CO <sub>2</sub> Et	Me
26	O	Cl	Cl	H	H	CO <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> Ph	Me
27	O	Cl	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OH	Me
28	O	Cl	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OMe	Me
29	O	Cl	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OCOMe	Me
30	O	Cl	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OCOPh	Me
31	O	Cl	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> Me	Me
32	O	Cl	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> CF <sub>3</sub>	Me
33	O	Cl	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> (4MePh)	Me

10

20

30

40

50

【表 1 - 2】

化合物 番号	X	R <sup>3</sup>	R <sup>4</sup>	R <sup>5</sup>	R <sup>6</sup>	R <sup>7</sup>	R <sup>8</sup>
34	S	H	Cl	H	H	CO <sub>2</sub> H	Me
35	S	H	Cl	H	H	CO <sub>2</sub> Me	Me
36	S	H	Cl	H	H	CO <sub>2</sub> Et	Me
37	S	H	Cl	H	H	CO <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> Ph	Me
38	S	H	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OH	Me
39	S	H	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OMe	Me
40	S	H	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OCOMe	Me
41	S	H	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OCOPh	Me
42	S	H	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> Me	Me
43	S	H	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> CF <sub>3</sub>	Me
44	S	H	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> (4MePh)	Me
45	S	F	Cl	H	H	CO <sub>2</sub> H	Me
46	S	F	Cl	H	H	CO <sub>2</sub> Me	Me
47	S	F	Cl	H	H	CO <sub>2</sub> Et	Me
48	S	F	Cl	H	H	CO <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> Ph	Me
49	S	F	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OH	Me
50	S	F	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OMe	Me
51	S	F	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OCOMe	Me
52	S	F	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OCOPh	Me
53	S	F	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> Me	Me
54	S	F	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> CF <sub>3</sub>	Me
55	S	F	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> (4MePh)	Me
56	S	Cl	Cl	H	H	CO <sub>2</sub> H	Me
57	S	Cl	Cl	H	H	CO <sub>2</sub> Me	Me
58	S	Cl	Cl	H	H	CO <sub>2</sub> Et	Me
59	S	Cl	Cl	H	H	CO <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> Ph	Me
60	S	Cl	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OH	Me
61	S	Cl	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OMe	Me
62	S	Cl	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OCOMe	Me
63	S	Cl	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OCOPh	Me
64	S	Cl	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> Me	Me
65	S	Cl	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> CF <sub>3</sub>	Me
66	S	Cl	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> (4MePh)	Me
67	S	H	CN	H	H	CO <sub>2</sub> H	Me

10

20

30

40

50

【表 1 - 3】

化合物 番号	X	R <sup>3</sup>	R <sup>4</sup>	R <sup>5</sup>	R <sup>6</sup>	R <sup>7</sup>	R <sup>8</sup>
68	S	H	CN	H	H	CO <sub>2</sub> Me	Me
69	S	H	CN	H	H	CO <sub>2</sub> Et	Me
70	S	H	CN	H	H	CO <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> Ph	Me
71	S	H	CN	H	H	CH <sub>2</sub> OH	Me
72	S	H	CN	H	H	CH <sub>2</sub> OMe	Me
73	S	H	CN	H	H	CH <sub>2</sub> OCOMe	Me
74	S	H	CN	H	H	CH <sub>2</sub> OCOPh	Me
75	S	H	CN	H	H	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> Me	Me
76	S	H	CN	H	H	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> CF <sub>3</sub>	Me
77	S	H	CN	H	H	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> (4MePh)	Me
78	S	F	CN	H	H	CO <sub>2</sub> H	Me
79	S	F	CN	H	H	CO <sub>2</sub> Me	Me
80	S	F	CN	H	H	CO <sub>2</sub> Et	Me
81	S	F	CN	H	H	CO <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> Ph	Me
82	S	F	CN	H	H	CH <sub>2</sub> OH	Me
83	S	F	CN	H	H	CH <sub>2</sub> OMe	Me
84	S	F	CN	H	H	CH <sub>2</sub> OCOMe	Me
85	S	F	CN	H	H	CH <sub>2</sub> OCOPh	Me
86	S	F	CN	H	H	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> Me	Me
87	S	F	CN	H	H	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> CF <sub>3</sub>	Me
88	S	F	CN	H	H	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> (4MePh)	Me
89	S	Cl	CN	H	H	CO <sub>2</sub> H	Me
90	S	Cl	CN	H	H	CO <sub>2</sub> Me	Me
91	S	Cl	CN	H	H	CO <sub>2</sub> Et	Me
92	S	Cl	CN	H	H	CO <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> Ph	Me
93	S	Cl	CN	H	H	CH <sub>2</sub> OH	Me
94	S	Cl	CN	H	H	CH <sub>2</sub> OMe	Me
95	S	Cl	CN	H	H	CH <sub>2</sub> OCOMe	Me
96	S	Cl	CN	H	H	CH <sub>2</sub> OCOPh	Me
97	S	Cl	CN	H	H	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> Me	Me
98	S	Cl	CN	H	H	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> CF <sub>3</sub>	Me
99	S	Cl	CN	H	H	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> (4MePh)	Me
100	S	H	CSNH <sub>2</sub>	H	H	CO <sub>2</sub> H	Me
101	S	H	CSNH <sub>2</sub>	H	H	CO <sub>2</sub> Me	Me

10

20

30

40

50

【表 1 - 4】

化合物 番号	X	R <sup>3</sup>	R <sup>4</sup>	R <sup>5</sup>	R <sup>6</sup>	R <sup>7</sup>	R <sup>8</sup>
102	S	H	CSNH <sub>2</sub>	H	H	CO <sub>2</sub> Et	Me
103	S	H	CSNH <sub>2</sub>	H	H	CO <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> Ph	Me
104	S	H	CSNH <sub>2</sub>	H	H	CH <sub>2</sub> OH	Me
105	S	H	CSNH <sub>2</sub>	H	H	CH <sub>2</sub> OMe	Me
106	S	H	CSNH <sub>2</sub>	H	H	CH <sub>2</sub> OCOMe	Me
107	S	H	CSNH <sub>2</sub>	H	H	CH <sub>2</sub> OCOPh	Me
108	S	H	CSNH <sub>2</sub>	H	H	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> Me	Me
109	S	H	CSNH <sub>2</sub>	H	H	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> CF <sub>3</sub>	Me
110	S	H	CSNH <sub>2</sub>	H	H	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> (4MePh)	Me
111	S	F	CSNH <sub>2</sub>	H	H	CO <sub>2</sub> H	Me
112	S	F	CSNH <sub>2</sub>	H	H	CO <sub>2</sub> Me	Me
113	S	F	CSNH <sub>2</sub>	H	H	CO <sub>2</sub> Et	Me
114	S	F	CSNH <sub>2</sub>	H	H	CO <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> Ph	Me
115	S	F	CSNH <sub>2</sub>	H	H	CH <sub>2</sub> OH	Me
116	S	F	CSNH <sub>2</sub>	H	H	CH <sub>2</sub> OMe	Me
117	S	F	CSNH <sub>2</sub>	H	H	CH <sub>2</sub> OCOMe	Me
118	S	F	CSNH <sub>2</sub>	H	H	CH <sub>2</sub> OCOPh	Me
119	S	F	CSNH <sub>2</sub>	H	H	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> Me	Me
120	S	F	CSNH <sub>2</sub>	H	H	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> CF <sub>3</sub>	Me
121	S	F	CSNH <sub>2</sub>	H	H	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> (4MePh)	Me
122	S	Cl	CSNH <sub>2</sub>	H	H	CO <sub>2</sub> H	Me
123	S	Cl	CSNH <sub>2</sub>	H	H	CO <sub>2</sub> Me	Me
124	S	Cl	CSNH <sub>2</sub>	H	H	CO <sub>2</sub> Et	Me
125	S	Cl	CSNH <sub>2</sub>	H	H	CO <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> Ph	Me
126	S	Cl	CSNH <sub>2</sub>	H	H	CH <sub>2</sub> OH	Me
127	S	Cl	CSNH <sub>2</sub>	H	H	CH <sub>2</sub> OMe	Me
128	S	Cl	CSNH <sub>2</sub>	H	H	CH <sub>2</sub> OCOMe	Me
129	S	Cl	CSNH <sub>2</sub>	H	H	CH <sub>2</sub> OCOPh	Me
130	S	Cl	CSNH <sub>2</sub>	H	H	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> Me	Me
131	S	Cl	CSNH <sub>2</sub>	H	H	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> CF <sub>3</sub>	Me
132	S	Cl	CSNH <sub>2</sub>	H	H	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> (4MePh)	Me
133	S	H	Cl	Me	H	CO <sub>2</sub> H	Me
134	S	H	Cl	Me	H	CO <sub>2</sub> Me	Me
135	S	H	Cl	Me	H	CO <sub>2</sub> Et	Me

10

20

30

40

50

【表 1 - 5】

化合物 番号	X	R <sup>3</sup>	R <sup>4</sup>	R <sup>5</sup>	R <sup>6</sup>	R <sup>7</sup>	R <sup>8</sup>
136	S	H	Cl	Me	H	CO <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> Ph	Me
137	S	H	Cl	Me	H	CH <sub>2</sub> OH	Me
138	S	H	Cl	Me	H	CH <sub>2</sub> OMe	Me
139	S	H	Cl	Me	H	CH <sub>2</sub> OCOMe	Me
140	S	H	Cl	Me	H	CH <sub>2</sub> OCOPh	Me
141	S	H	Cl	Me	H	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> Me	Me
142	S	H	Cl	Me	H	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> CF <sub>3</sub>	Me
143	S	H	Cl	Me	H	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> (4MePh)	Me
144	S	F	Cl	Me	H	CO <sub>2</sub> H	Me
145	S	F	Cl	Me	H	CO <sub>2</sub> Me	Me
146	S	F	Cl	Me	H	CO <sub>2</sub> Et	Me
147	S	F	Cl	Me	H	CO <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> Ph	Me
148	S	F	Cl	Me	H	CH <sub>2</sub> OH	Me
149	S	F	Cl	Me	H	CH <sub>2</sub> OMe	Me
150	S	F	Cl	Me	H	CH <sub>2</sub> OCOMe	Me
151	S	F	Cl	Me	H	CH <sub>2</sub> OCOPh	Me
152	S	F	Cl	Me	H	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> Me	Me
153	S	F	Cl	Me	H	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> CF <sub>3</sub>	Me
154	S	F	Cl	Me	H	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> (4MePh)	Me
155	S	Cl	Cl	Me	H	CO <sub>2</sub> H	Me
156	S	Cl	Cl	Me	H	CO <sub>2</sub> Me	Me
157	S	Cl	Cl	Me	H	CO <sub>2</sub> Et	Me
158	S	Cl	Cl	Me	H	CO <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> Ph	Me
159	S	Cl	Cl	Me	H	CH <sub>2</sub> OH	Me
160	S	Cl	Cl	Me	H	CH <sub>2</sub> OMe	Me
161	S	Cl	Cl	Me	H	CH <sub>2</sub> OCOMe	Me
162	S	Cl	Cl	Me	H	CH <sub>2</sub> OCOPh	Me
163	S	Cl	Cl	Me	H	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> Me	Me
164	S	Cl	Cl	Me	H	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> CF <sub>3</sub>	Me
165	S	Cl	Cl	Me	H	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> (4MePh)	Me
166	S	H	Cl	Me	Me	CO <sub>2</sub> H	Me
167	S	H	Cl	Me	Me	CO <sub>2</sub> Me	Me
168	S	H	Cl	Me	Me	CO <sub>2</sub> Et	Me
169	S	H	Cl	Me	Me	CO <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> Ph	Me

10

20

30

40

50

【表 1 - 6】

化合物 番号	X	R <sup>3</sup>	R <sup>4</sup>	R <sup>5</sup>	R <sup>6</sup>	R <sup>7</sup>	R <sup>8</sup>
170	S	H	Cl	Me	Me	CH <sub>2</sub> OH	Me
171	S	H	Cl	Me	Me	CH <sub>2</sub> OMe	Me
172	S	H	Cl	Me	Me	CH <sub>2</sub> OCOMe	Me
173	S	H	Cl	Me	Me	CH <sub>2</sub> OCOPh	Me
174	S	H	Cl	Me	Me	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> Me	Me
175	S	H	Cl	Me	Me	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> CF <sub>3</sub>	Me
176	S	H	Cl	Me	Me	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> (4MePh)	Me
177	S	F	Cl	Me	Me	CO <sub>2</sub> H	Me
178	S	F	Cl	Me	Me	CO <sub>2</sub> Me	Me
179	S	F	Cl	Me	Me	CO <sub>2</sub> Et	Me
180	S	F	Cl	Me	Me	CO <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> Ph	Me
181	S	F	Cl	Me	Me	CH <sub>2</sub> OH	Me
182	S	F	Cl	Me	Me	CH <sub>2</sub> OMe	Me
183	S	F	Cl	Me	Me	CH <sub>2</sub> OCOMe	Me
184	S	F	Cl	Me	Me	CH <sub>2</sub> OCOPh	Me
185	S	F	Cl	Me	Me	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> Me	Me
186	S	F	Cl	Me	Me	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> CF <sub>3</sub>	Me
187	S	F	Cl	Me	Me	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> (4MePh)	Me
188	S	Cl	Cl	Me	Me	CO <sub>2</sub> H	Me
189	S	Cl	Cl	Me	Me	CO <sub>2</sub> Me	Me
190	S	Cl	Cl	Me	Me	CO <sub>2</sub> Et	Me
191	S	Cl	Cl	Me	Me	CO <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> Ph	Me
192	S	Cl	Cl	Me	Me	CH <sub>2</sub> OH	Me
193	S	Cl	Cl	Me	Me	CH <sub>2</sub> OMe	Me
194	S	Cl	Cl	Me	Me	CH <sub>2</sub> OCOMe	Me
195	S	Cl	Cl	Me	Me	CH <sub>2</sub> OCOPh	Me
196	S	Cl	Cl	Me	Me	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> Me	Me
197	S	Cl	Cl	Me	Me	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> CF <sub>3</sub>	Me
198	S	Cl	Cl	Me	Me	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> (4MePh)	Me
199	S	H	Cl	H	H	CO <sub>2</sub> H	H
200	S	H	Cl	H	H	CO <sub>2</sub> Me	H
201	S	H	Cl	H	H	CO <sub>2</sub> Et	H
202	S	H	Cl	H	H	CO <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> Ph	H
203	S	H	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OH	H

10

20

30

40

50

【表 1 - 7】

化合物 番号	X	R <sup>3</sup>	R <sup>4</sup>	R <sup>5</sup>	R <sup>6</sup>	R <sup>7</sup>	R <sup>8</sup>
204	S	H	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OMe	H
205	S	H	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OCOMe	H
206	S	H	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OCOPh	H
207	S	H	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> Me	H
208	S	H	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> CF <sub>3</sub>	H
209	S	H	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> (4MePh)	H
210	S	F	Cl	H	H	CO <sub>2</sub> H	H
211	S	F	Cl	H	H	CO <sub>2</sub> Me	H
212	S	F	Cl	H	H	CO <sub>2</sub> Et	H
213	S	F	Cl	H	H	CO <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> Ph	H
214	S	F	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OH	H
215	S	F	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OMe	H
216	S	F	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OCOMe	H
217	S	F	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OCOPh	H
218	S	F	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> Me	H
219	S	F	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> CF <sub>3</sub>	H
220	S	F	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> (4MePh)	H
221	S	Cl	Cl	H	H	CO <sub>2</sub> H	H
222	S	Cl	Cl	H	H	CO <sub>2</sub> Me	H
223	S	Cl	Cl	H	H	CO <sub>2</sub> Et	H
224	S	Cl	Cl	H	H	CO <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> Ph	H
225	S	Cl	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OH	H
226	S	Cl	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OMe	H
227	S	Cl	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OCOMe	H
228	S	Cl	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OCOPh	H
229	S	Cl	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> Me	H
230	S	Cl	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> CF <sub>3</sub>	H
231	S	Cl	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> (4MePh)	H
232	S	H	Cl	CO <sub>2</sub> H	Me	H	H
233	S	F	Cl	CO <sub>2</sub> H	Me	H	H
234	S	Cl	Cl	CO <sub>2</sub> H	Me	H	H
235	S	H	Cl	CO <sub>2</sub> Et	Me	H	H
236	S	F	Cl	CO <sub>2</sub> Et	Me	H	H
237	S	Cl	Cl	CO <sub>2</sub> Et	Me	H	H

10

20

30

40

50

【表 1 - 8】

化合物 番号	X	R <sup>3</sup>	R <sup>4</sup>	R <sup>5</sup>	R <sup>6</sup>	R <sup>7</sup>	R <sup>8</sup>
238	S	H	Cl	CH <sub>2</sub> OH	Me	H	H
239	S	F	Cl	CH <sub>2</sub> OH	Me	H	H
240	S	Cl	Cl	CH <sub>2</sub> OH	Me	H	H
241	S	H	Cl	CO <sub>2</sub> H	Me	H	Me
242	S	F	Cl	CO <sub>2</sub> H	Me	H	Me
243	S	Cl	Cl	CO <sub>2</sub> H	Me	H	Me
244	S	H	Cl	CO <sub>2</sub> Et	Me	H	Me
245	S	F	Cl	CO <sub>2</sub> Et	Me	H	Me
246	S	Cl	Cl	CO <sub>2</sub> Et	Me	H	Me
247	S	H	Cl	CH <sub>2</sub> OH	Me	H	Me
248	S	F	Cl	CH <sub>2</sub> OH	Me	H	Me
249	S	Cl	Cl	CH <sub>2</sub> OH	Me	H	Me
250	S	H	Cl	H	H	CO <sub>2</sub> H	CF <sub>3</sub>
251	S	H	Cl	H	H	CO <sub>2</sub> Me	CF <sub>3</sub>
252	S	H	Cl	H	H	CO <sub>2</sub> Et	CF <sub>3</sub>
253	S	H	Cl	H	H	CO <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> Ph	CF <sub>3</sub>
254	S	H	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OH	CF <sub>3</sub>
255	S	H	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OMe	CF <sub>3</sub>
256	S	H	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OCOMe	CF <sub>3</sub>
257	S	H	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OCOPh	CF <sub>3</sub>
258	S	H	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> Me	CF <sub>3</sub>
259	S	H	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> CF <sub>3</sub>	CF <sub>3</sub>
260	S	H	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> (4MePh)	CF <sub>3</sub>
261	S	F	Cl	H	H	CO <sub>2</sub> H	CF <sub>3</sub>
262	S	F	Cl	H	H	CO <sub>2</sub> Me	CF <sub>3</sub>
263	S	F	Cl	H	H	CO <sub>2</sub> Et	CF <sub>3</sub>
264	S	F	Cl	H	H	CO <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> Ph	CF <sub>3</sub>
265	S	F	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OH	CF <sub>3</sub>
266	S	F	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OMe	CF <sub>3</sub>
267	S	F	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OCOMe	CF <sub>3</sub>
268	S	F	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OCOPh	CF <sub>3</sub>
269	S	F	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> Me	CF <sub>3</sub>
270	S	F	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> CF <sub>3</sub>	CF <sub>3</sub>
271	S	F	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> (4MePh)	CF <sub>3</sub>

10

20

30

40

50

【表 1 - 9】

化合物 番号	X	R <sup>3</sup>	R <sup>4</sup>	R <sup>5</sup>	R <sup>6</sup>	R <sup>7</sup>	R <sup>8</sup>
272	S	Cl	Cl	H	H	CO <sub>2</sub> H	CF <sub>3</sub>
273	S	Cl	Cl	H	H	CO <sub>2</sub> Me	CF <sub>3</sub>
274	S	Cl	Cl	H	H	CO <sub>2</sub> Et	CF <sub>3</sub>
275	S	Cl	Cl	H	H	CO <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> Ph	CF <sub>3</sub>
276	S	Cl	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OH	CF <sub>3</sub>
277	S	Cl	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OMe	CF <sub>3</sub>
278	S	Cl	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OCOMe	CF <sub>3</sub>
279	S	Cl	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OCOPh	CF <sub>3</sub>
280	S	Cl	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> Me	CF <sub>3</sub>
281	S	Cl	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> CF <sub>3</sub>	CF <sub>3</sub>
282	S	Cl	Cl	H	H	CH <sub>2</sub> OSO <sub>2</sub> (4MePh)	CF <sub>3</sub>
283	S	H	Cl	H	H	CONHSO <sub>2</sub> Me	Me
284	S	F	Cl	H	H	CONHSO <sub>2</sub> Me	Me
285	S	Cl	Cl	H	H	CONHSO <sub>2</sub> Me	Me
286	S	H	Cl	H	H	CONHSO <sub>2</sub> N(Me)(CHMe <sub>2</sub> )	Me
287	S	F	Cl	H	H	CONHSO <sub>2</sub> N(Me)(CHMe <sub>2</sub> )	Me
288	S	Cl	Cl	H	H	CONHSO <sub>2</sub> N(Me)(CHMe <sub>2</sub> )	Me
289	S	H	Cl	H	H	COMe	Me
290	S	F	Cl	H	H	COMe	Me
291	S	Cl	Cl	H	H	COMe	Me
292	S	H	Cl	H	H	C(NOMe)Me	Me
293	S	F	Cl	H	H	C(NOMe)Me	Me
294	S	Cl	Cl	H	H	C(NOMe)Me	Me
295	S	H	Cl	H	H	C(NOH)Me	Me
296	S	F	Cl	H	H	C(NOH)Me	Me
297	S	Cl	Cl	H	H	C(NOH)Me	Me
298	S	H	Cl	H	H	C(NOCH <sub>2</sub> CO <sub>2</sub> Me)Me	Me
299	S	F	Cl	H	H	C(NOCH <sub>2</sub> CO <sub>2</sub> Me)Me	Me
300	S	Cl	Cl	H	H	C(NOCH <sub>2</sub> CO <sub>2</sub> Me)Me	Me
301	S	H	Cl	H	H	C(NNH <sub>2</sub> )Me	Me
302	S	F	Cl	H	H	C(NNH <sub>2</sub> )Me	Me
303	S	Cl	Cl	H	H	C(NNH <sub>2</sub> )Me	Me
304	S	H	Cl	H	H	CONHSO <sub>2</sub> NMe <sub>2</sub>	Me
305	S	F	Cl	H	H	CONHSO <sub>2</sub> NMe <sub>2</sub>	Me

10

20

30

40

50

【表 1 - 10】

化合物 番号	X	R <sup>3</sup>	R <sup>4</sup>	R <sup>5</sup>	R <sup>6</sup>	R <sup>7</sup>	R <sup>8</sup>
306	S	Cl	Cl	H	H	CONHSO <sub>2</sub> NMe <sub>2</sub>	Me
307	S	H	Cl	H	H	CONH <sub>2</sub>	Me
308	S	F	Cl	H	H	CONH <sub>2</sub>	Me
309	S	Cl	Cl	H	H	CONH <sub>2</sub>	Me
310	S	H	Cl	H	H	CO <sub>2</sub> Me	OMe
311	S	F	Cl	H	H	CO <sub>2</sub> Me	OMe
312	S	Cl	Cl	H	H	CO <sub>2</sub> Me	OMe

10

## 【0056】

本発明の化合物は、有機化学の当業者に公知の技法によって調製され得る。式(I)の化合物の一般的な製造方法が以下に記載される。本文に特に明記しない限り、置換基X、Y、Z、R<sup>1</sup>、R<sup>2</sup>、R<sup>3</sup>、R<sup>4</sup>、R<sup>5</sup>、R<sup>6</sup>、R<sup>7</sup>、R<sup>8</sup>、R<sup>9</sup>、R<sup>10</sup>、R<sup>11</sup>、R<sup>12</sup>、R<sup>13</sup>、R<sup>14</sup>、R<sup>15</sup>及びR<sup>16</sup>は、上記において本明細書に定義されているとおりである。本発明の化合物の調製のために使用される出発原料は、通常の商業的供給業者から購入され得るか、又は公知の方法によって調製され得る。出発原料及び中間体は、クロマトグラフィー、結晶化、蒸留及びろ過などの従来技術の方法により、次のステップでの使用前に精製され得る。

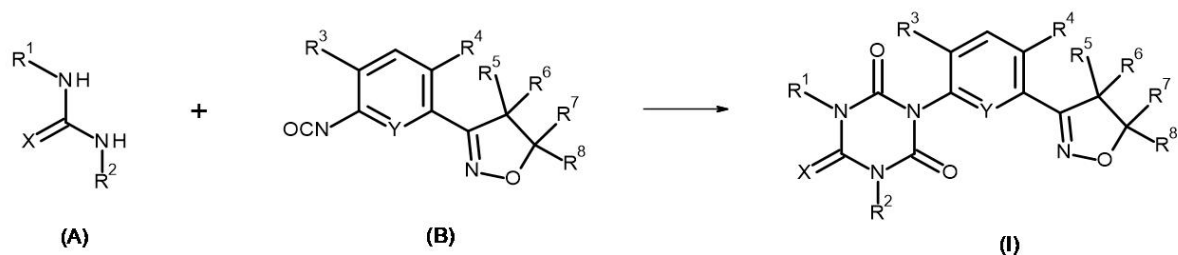
20

## 【0057】

式(I)の化合物は、反応スキーム1に示されるように、式(A)の化合物と式(B)の化合物とから調製され得る。

反応スキーム1

## 【化2】



30

## 【0058】

例えば、式(A)の化合物と式(B)の化合物との混合物は、トルエンなどの好適な溶媒中において、トリエチルアミンなどの塩基及びホスゲン又はカルボニルジイミダゾールなどのカルボニル移動試薬で処理され得る。

40

## 【0059】

式(A)の尿素又はチオ尿素は、入手可能であるか又は文献で周知の方法によって調製され得る。

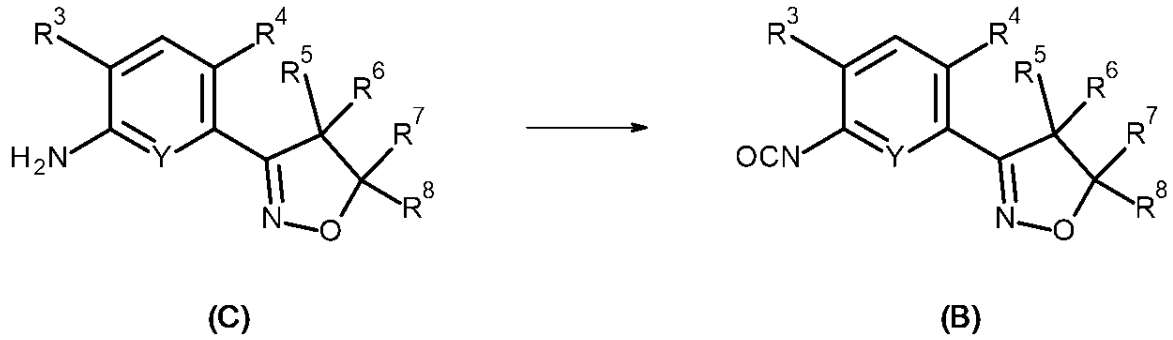
## 【0060】

式(B)の化合物は、反応スキーム2に示されるように、式(C)のアニリン類から調製され得る。

反応スキーム2

50

## 【化3】



10

## 【0061】

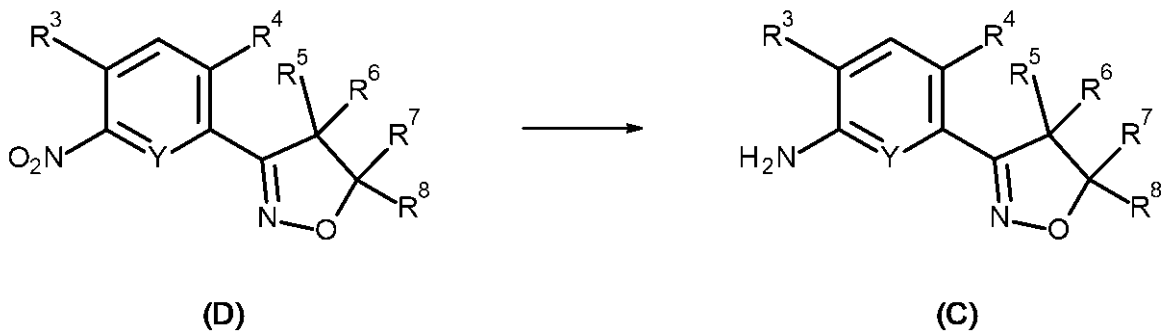
例えば、式(C)の化合物は、トルエンなどの好適な溶媒中において、ジホスゲン又はトリホスゲンなどのカルボニル移動試薬で処理され得る。

## 【0062】

式(C)のアニリン類は、反応スキーム3に示されるように、式(D)のニトロ化合物から調製され得る。

反応スキーム3

## 【化4】



20

## 【0063】

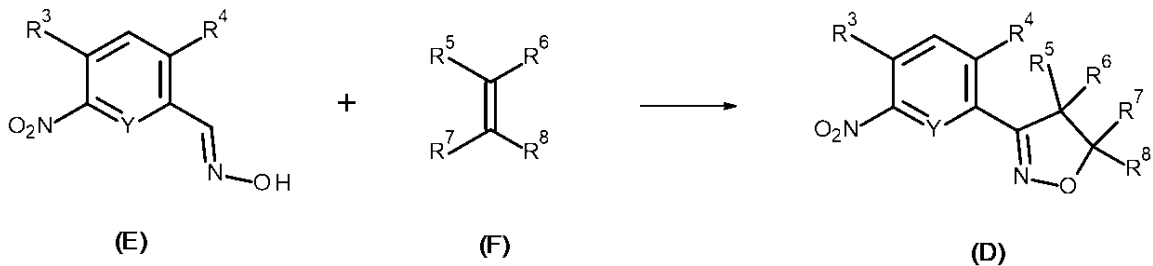
例えば、式(D)の化合物は、水とエタノールとの混合物などの好適な溶媒中において、鉄及び塩化アンモニウムなどの還元剤で処理することができる。

## 【0064】

式(D)のニトロ化合物は、反応スキーム4に示されるように、式(E)のオキシムと式(F)のアルケンとから調製され得る。

反応スキーム4

## 【化5】



40

## 【0065】

例えば、式(E)のオキシムは、ジメチルホルムアミドなどの好適な溶媒中においてN-クロロスクシンイミドで処理され得、次いで、得られた中間体は、ジクロロメタンなどの好適な溶媒中、トリエチルアミンなどの塩基の存在下において式(F)のアルケンで処理される。

50

【0066】

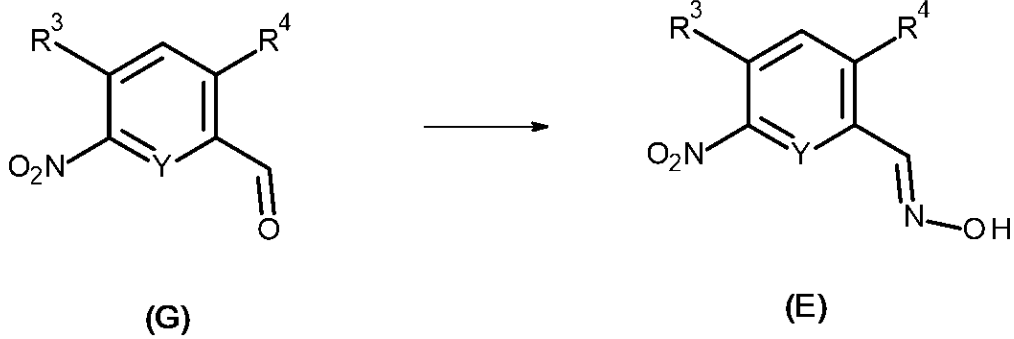
式(F)のアルケンは、入手可能であるか又は文献で公知の方法によって調製され得る。

【0067】

式(E)のオキシムは、反応スキーム5に示されるように、式(G)のアルデヒドから調製され得る。

反応スキーム5

【化6】



10

【0068】

例えば、式(G)のアルデヒドは、水とエタノールとの混合物などの好適な溶媒中においてヒドロキシルアミン塩酸塩で処理され得る。

20

【0069】

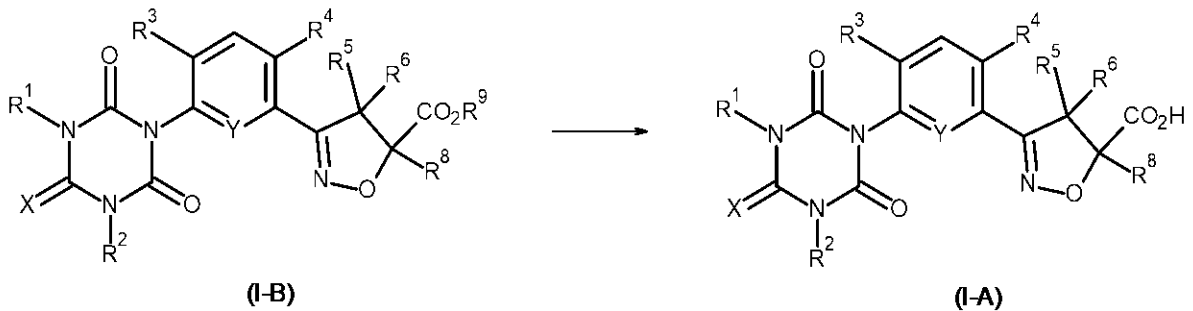
式(G)のアルデヒドは、入手可能であるか又は文献で公知の方法によって調製することができる。

【0070】

$R^7$ がカルボン酸基である式(I)の化合物である、式(I-A)の化合物は、反応スキーム6に示されるように、 $R^7$ が $CO_2R^9$ である式(I)の化合物である、式(I-B)の化合物から調製され得る。

反応スキーム6

【化7】



30

【0071】

例えば、式(I-B)の化合物は、水とエタノールとの混合物などの好適な溶媒中において水酸化ナトリウムで処理され得る。

40

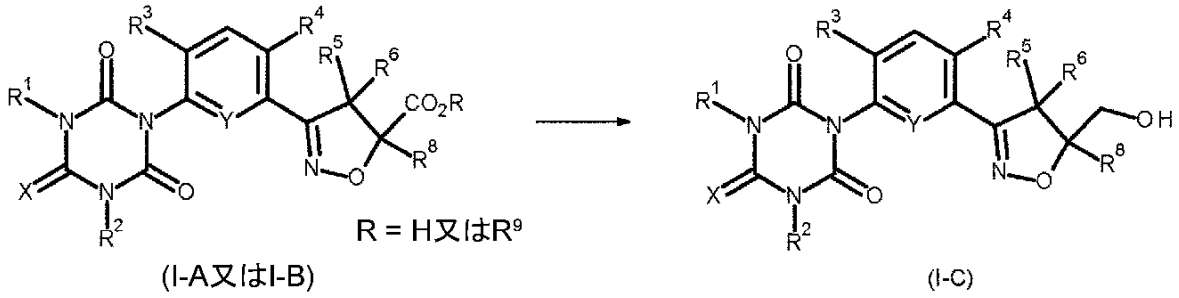
【0072】

$R^7$ がヒドロキシメチル基である式(I)の化合物である、式(I-C)の化合物は、反応スキーム7に示されるように、式(I-A又はI-B)の化合物から調製され得る。

反応スキーム7

50

## 【化 8】



10

## 【0073】

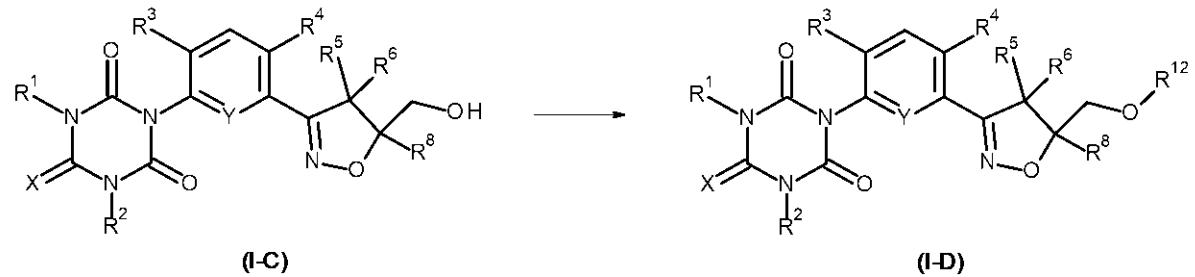
例えば、式 ( I - A ) 又は ( I - B ) の化合物は、テトラヒドロフランなどの好適な溶媒中において、好適な還元剤、例えば水素化ホウ素ナトリウム又はボランなどの金属水素化物試薬で処理され得る。

## 【0074】

R<sup>7</sup>がCH<sub>2</sub>OR<sup>12</sup>である式 ( I ) の化合物である、式 ( I - D ) の化合物は、反応スキーム 8 に示されるように、式 ( I - C ) の化合物から調製され得る。

反応スキーム 8

## 【化 9】



20

## 【0075】

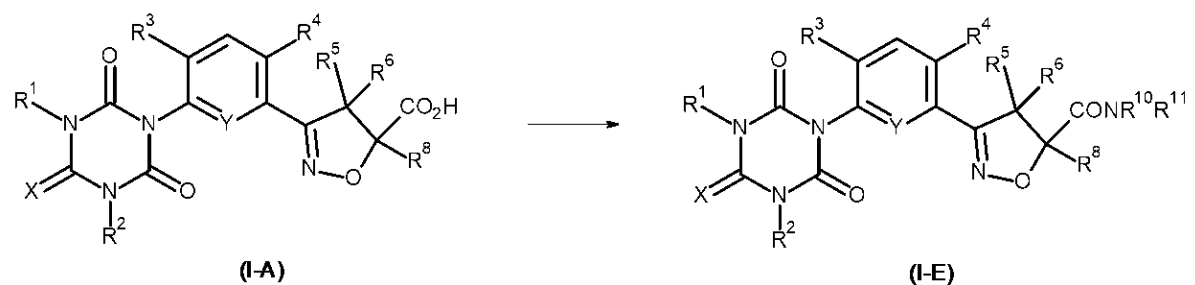
例えば、式 ( I - C ) の化合物は、テトラヒドロフランなどの好適な溶媒中、水素化ナトリウム又はトリエチルアミンなどの塩基の存在下においてアルキル化剤、アシル化剤又はスルホニル化剤などの試薬 R<sup>12</sup> - LG (式中、LGは、ハロゲンなどの脱離基である) で処理され得る。

## 【0076】

R<sup>7</sup>がCONR<sup>10</sup>R<sup>11</sup>である式 ( I ) の化合物である、式 ( I - E ) の化合物は、反応スキーム 9 に示されるように、式 ( I - A ) の化合物から調製され得る。

反応スキーム 9

## 【化 10】



40

## 【0077】

例えば、式 ( I - A ) の化合物は、ジクロロメタンなどの好適な溶媒中において、塩化オキサリルなどのハロゲン化試薬で処理されて、アシルハロゲン化物を形成し、これは、

50

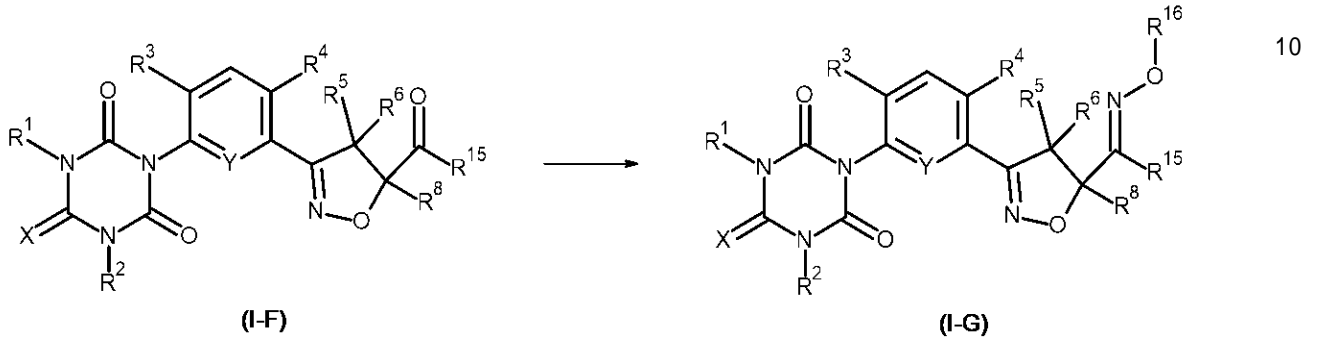
ジクロロメタンなどの好適な溶媒中、トリエチルアミンなどの塩基の存在下において試薬  $\text{HNOR}^{10}\text{R}^{11}$  で処理され得る。

【0078】

$\text{R}^7$  がオキシム基である式 (I) の化合物である、式 (I-G) の化合物は、反応スキーム 10 に示されるように、 $\text{R}^7$  がケトン基である式 (I) の化合物である、式 (I-F) の化合物から調製され得る。

反応スキーム 10

【化 11】



【0079】

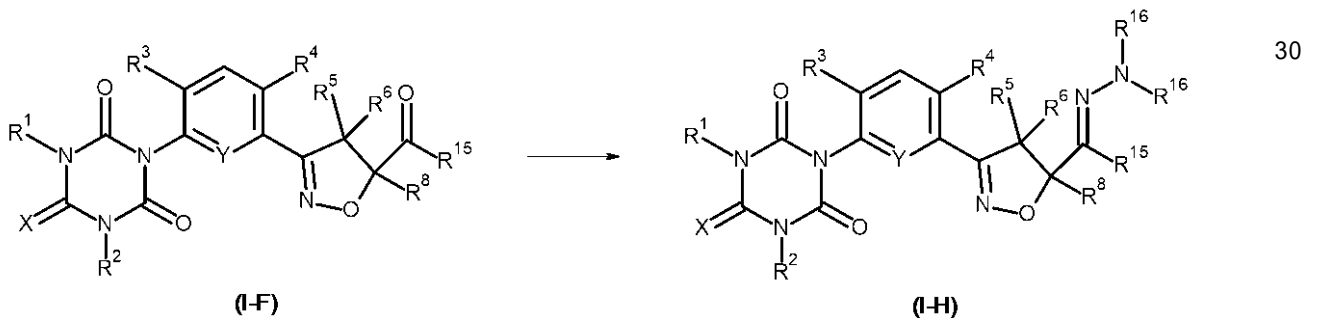
例えば、式 (I-F) の化合物は、エタノールなどの好適な溶媒中、トリエチルアミンなどの任意に塩基の存在下においてヒドロキシルアミン  $\text{H}_2\text{NOR}^{16}$  又はその塩で処理され得る。

【0080】

$\text{R}^7$  がヒドラゾン基である式 (I) の化合物である、式 (I-H) の化合物は、反応スキーム 11 に示されるように、 $\text{R}^7$  がケトン基である式 (I) の化合物である、式 (I-F) の化合物から調製され得る。

反応スキーム 11

【化 12】



【0081】

例えば、式 (I-F) の化合物は、エタノールなどの好適な溶媒中、トリエチルアミンなどの任意に塩基の存在下においてヒドラジン  $\text{H}_2\text{NN}(\text{R}^{16})_2$  又はその塩で処理され得る。

【0082】

当業者は、上記で記載された変換が行われる順番を変更するか、又は式 (I) の広範囲の化合物を調製するために代わりの方法でそれらを組み合わせることが多くの場合に可能であることを理解するであろう。複数のステップも単一の反応に組み合わせられ得る。すべてのこのような変形形態は、本発明の範囲内と考えられる。

【0083】

当業者は、いくつかの試薬が、ある種の値又は本明細書で定義されるような置換基 X、Y、Z、 $\text{R}^1$ 、 $\text{R}^2$ 、 $\text{R}^3$ 、 $\text{R}^4$ 、 $\text{R}^5$ 、 $\text{R}^6$ 、 $\text{R}^7$ 、 $\text{R}^8$ 、 $\text{R}^9$ 、 $\text{R}^{10}$ 、 $\text{R}^{11}$ 、 $\text{R}^{12}$ 、 $\text{R}^{13}$ 、

R<sup>14</sup>、R<sup>15</sup>及びR<sup>16</sup>の組み合わせと適合しないであろうことも認識し、所望の変換を達成するために必要である保護及び/又は脱保護ステップなどの任意の追加のステップは、当業者に明らかであろう。

【0084】

本発明に従う化合物は、修飾されない形態で除草剤として使用することができるが、一般に、担体、溶媒及び界面活性物質などの製剤補助剤を用いて様々な方法で組成物に配合される。製剤は、種々の物理的形態、例えば散布剤、ゲル、水和剤、水分散性顆粒、水分散性錠剤、発泡性ペレット、乳化性濃縮物、マイクロ乳化性濃縮物、水中油型エマルション、オイルフロアブル剤、水性分散体、油性分散体、サスポエマルション、カプセル懸濁液、乳化性顆粒、可溶性液体、水溶性濃縮物（担体として水又は水混和性有機溶媒を含む）、含浸ポリマーフィルム

の形態又は例えばManual on Development and Use of FAO and WHO Specifications for Pesticides, United Nations, First Edition, Second Revision (2010)から知られている他の形態とすることができる。水溶性化合物、可溶性液体、水溶性濃縮物又は水溶性顆粒が好ましい。このような製剤は、直接使用することができるか、又は使用前に希釈することができる。希釈は、例えば、水、液体肥料、微量栄養素、生物有機体、油又は溶媒を用いて行うことができる。

10

【0085】

製剤は、例えば、微粉化固体、顆粒、溶液、分散体又はエマルションの形態の組成物を得るために、有効成分を製剤補助剤と混合することによって調製することができる。また、有効成分は、微粉化固体、鉱油、植物又は動物由来の油、植物又は動物由来の変性油、有機溶媒、水、界面活性物質又はこれらの組み合わせなどの他の補助剤と共に配合することができる。

20

【0086】

また、有効成分は、微細なマイクロカプセル中に含有させることもできる。マイクロカプセルは、多孔質担体中に有効成分を含有する。これは、有効成分が制御された量で環境に放出される（例えば、持続放出）ことを可能にする。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。マイクロカプセルは、カプセル重量の約25~95重量%の量の有効成分を含有する。有効成分は、モノリシック固体の形態、固体又は液体分散体中の微粒子の形態又は適切な溶液の形態であり得る。カプセル化膜は、例えば、天然又は合成ゴム、セルロース、スチレン/ブタジエンコポリマー、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、ポリウレタン又は化学修飾ポリマー及びデンブンキサンテート又は当業者に知られている他のポリマーを含むことができる。代わりに、有効成分が基体の固体マトリックス中に微粉化粒子の形態で含有された微細なマイクロカプセルを形成することができるが、マイクロカプセル自体は、カプセル化されない。

30

【0087】

本発明に従う組成物の調製に適した製剤補助剤は、それ自体知られている。液体担体としては、水、トルエン、キシレン、石油エーテル、植物油、アセトン、メチルエチルケトン、シクロヘキサノン、酸無水物、アセトニトリル、アセトフェノン、酢酸アミル、2-ブタノン、炭酸ブチレン、クロロベンゼン、シクロヘキサノール、酢酸のアルキルエステル、ジアセトンアルコール、1,2-ジクロロプロパン、ジエタノールアミン、p-ジエチルベンゼン、ジエチレングリコール、ジエチレングリコールアピエタート、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、N,N-ジメチルホルムアミド、ジメチルスルホキシド、1,4-ジオキサン、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、ジプロピレングリコールジベンゾアート、ジプロキシトール、アルキルピロリドン、酢酸エチル、2-エチルヘキサノール、炭酸エチレン、1,1,1-トリクロロエタン、2-ヘプタノン、アルファ-ピネン、d-リモネン、乳酸エチル、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、ガンマ-

40

50

ブチロラクトン、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、ヘキサデカン、ヘキシレングリコール、酢酸イソアミル、酢酸イソボルニル、イソオクタン、イソホロン、イソプロピルベンゼン、ミリスチン酸イソプロピル、乳酸、ラウリルアミン、酸化メシチル、メトキシプロパノール、メチルイソアミルケトン、メチルイソブチルケトン、ラウリン酸メチル、オクタン酸メチル、オレイン酸メチル、塩化メチレン、m - キシレン、n - ヘキサン、n - オクチルアミン、オクタデカン酸、オクチルアミン酢酸塩、オレイン酸、オレイルアミン、o - キシレン、フェノール、ポリエチレングリコール、プロピオン酸、乳酸プロピル、炭酸プロピレン、プロピレングリコール、プロピレングリコールメチルエーテル、p - キシレン、トルエン、トリエチルホスファート、トリエチレングリコール、キシレンスルホン酸、パラフィン、鉱油、トリクロロエチレン、ペルククロロエチレン、酢酸エチル、酢酸アミル、酢酸ブチル、プロピレングリコールメチルエーテル、ジエチレングリコールメチルエーテル、メタノール、エタノール、イソプロパノール及びより高分子量のアルコール、例えばアミルアルコール、テトラヒドロフルフリルアルコール、ヘキサノール、オクタノール、エチレングリコール、プロピレングリコール、グリセロール、N - メチル - 2 - ピロリドンなどが使用され得る。

【 0 0 8 8 】

適切な固体担体は、例えば、タルク、二酸化チタン、パイロフィライトクレイ、シリカ、アタパルジャイトクレイ、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、綿実殻、小麦粉、大豆粉、軽石、木粉、粉末クルミ殻、リグニン及び同様の物質である。

【 0 0 8 9 】

多数の界面活性物質は、固体及び液体製剤の両方において、特に使用する前に担体により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、非イオン性又は高分子であり得、乳化剤、湿潤剤若しくは懸濁化剤として又は他の目的のために使用することができる。典型的な界面活性物質には、例えば、アルキル硫酸の塩、例えばラウリル硫酸ジエタノールアンモニウムなど；アルキルアリアルスルホン酸の塩、例えばドデシルベンゼンスルホン酸カルシウムなど；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など；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など；石鹼、例えばステアリン酸ナトリウムなど；アルキルナフタレンスルホン酸の塩、例えばジブチルナフタレンスルホン酸ナトリウムなど；スルホコハク酸塩のジアルキルエステル、例えばジ(2 - エチルヘキシル)スルホコハク酸ナトリウムなど；ソルビトールエステル、例えばソルビトールオレアートなど；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など、例えばステアリン酸ポリエチレングリコールなど；エチレンオキシド及びプロピレンオキシドのブロックコポリマー；並びにモノ - 及びジ - アルキルリン酸エステルの塩が含まれ、例えば McCutcheon's Detergents and Emulsifiers Annual, M C Publishing Corp., Ridgewood New Jersey (1981) に記載されるさらなる物質も含まれる。

【 0 0 9 0 】

農薬製剤において使用することができるさらなる補助剤には、結晶化抑制剤、粘度調整剤、懸濁化剤、染料、酸化防止剤、起泡剤、光吸収剤、混合助剤、消泡剤、錯化剤、中和又はpH調整物質及び緩衝剤、防蝕剤、香料、湿潤剤、吸収増強剤、微量栄養素、可塑剤、流動化剤、潤滑剤、分散剤、増粘剤、凍結防止剤、殺菌剤並びに液体及び固体肥料が含まれる。

【 0 0 9 1 】

本発明に従う組成物は、植物又は動物由来の油、鉱油、このような油のアルキルエステル又はこのような油及び油誘導体の混合物を含む添加剤を含むことができる。本発明に従う組成物中の油添加剤の量は、適用される混合物を基準として一般に0.01~10%である。例えば、油添加剤は、スプレー混合物を調製した後、所望の濃度でスプレータンク

10

20

30

40

50

に添加することができる。好ましい油添加剤は、鉱油又は植物由来の油（例えば、菜種油、オリーブ油又はヒマワリ油）、乳化植物油、植物由来の油のアルキルエステル（例えば、メチル誘導体）又は動物由来の油（例えば、魚油又は牛脂など）を含む。好ましい油添加剤は、 $C_8 \sim C_{22}$ 脂肪酸のアルキルエステル、特に $C_{12} \sim C_{18}$ 脂肪酸のメチル誘導体、例えばラウリン酸、パルミチン酸及びオレイン酸のメチルエステル（それぞれラウリン酸メチル、パルミチン酸メチル及びオレイン酸メチル）を含む。Compendium of Herbicide Adjuvants, 10<sup>th</sup> Edition, Southern Illinois University, 2010から多数の油誘導体が知られている。

【0092】

除草組成物は、一般に、0.1～99重量%、特に0.1～95重量%の式(I)の化合物と、好ましくは0～25重量%の界面活性物質を含む1～99.9重量%の製剤補助剤とを含む。本発明の組成物は、一般に、0.1～99重量%、特に0.1～95重量%の本発明の化合物と、好ましくは0～25重量%の界面活性物質を含む1～99.9重量%の製剤補助剤とを含む。市販の製品は、好ましくは、濃縮物として配合され得るが、エンドユーザーは、通常、希釈製剤を使用するであろう。

10

【0093】

適用率は、広い範囲内で異なり、土壌の性質、適用方法、作物植物、防除される有害生物、優勢な気候条件並びに適用方法、適用の時期及び標的作物に支配される他の要因によって決まる。一般的な指針として、化合物は、1～2000 l / ha、特に10～1000 l / haの割合で適用され得る。

20

【0094】

好ましい製剤は、以下の組成（重量%）を有することができる。

【0095】

乳化性濃縮物：

有効成分：1～95%、好ましくは60～90%

界面活性剤：1～30%、好ましくは5～20%

液体担体：1～80%、好ましくは1～35%

【0096】

散布剤：

有効成分：0.1～10%、好ましくは0.1～5%

固体担体：99.9～90%、好ましくは99.9～99%

30

【0097】

懸濁液濃縮液：

有効成分：5～75%、好ましくは10～50%

水：94～24%、好ましくは88～30%

界面活性剤：1～40%、好ましくは2～30%

【0098】

水和剤：

有効成分：0.5～90%、好ましくは1～80%

界面活性剤：0.5～20%、好ましくは1～15%

固体担体：5～95%、好ましくは15～90%

40

【0099】

顆粒：

有効成分：0.1～30%、好ましくは0.1～15%

固体担体：99.5～70%、好ましくは97～85%

【0100】

本発明の組成物は、少なくとも1つの付加的な農薬をさらに含み得る。例えば、本発明に従う化合物は、他の除草剤又は植物成長調節剤と組み合わせて使用することもできる。好ましい実施形態では、付加的な農薬は、除草剤及び/又は除草剤薬害軽減剤である。

【0101】

50

従って、式( I )の化合物を1つ又は複数の他の除草剤と組み合わせて使用して、種々の除草剤混合物を提供することができる。このような混合物の特定の例としては、以下が挙げられる(ここで、「 I 」は、式( I )の化合物を表す)： - I + アセトクロール； I + アシフルオルフェン(アシフルオルフェン - ナトリウムを含む)； I + アクロニフェン； I + アラクロール； I + アロキシジム； I + アメトリン； I + アミノカルバゾン； I + アミドスルフロソ； I + アミノシクロピラクロル； I + アミノピラリド； I + アミトロール； I + アシュラム； I + アトラジン； I + ベンスルフロソ(ベンスルフロソ - メチルを含む)； I + ベンタゾン； I + ビシクロピロン； I + ビラナホス； I + ビフェノックス； I + ビスピリバック - ナトリウム； I + ビクスロゾソ； I + プロマシル； I + プロモキシニル； I + ブタクロール； I + ブタフェナシル； I + カフェンストロール； I + カルフェントラゾン(カルフェントラゾン - エチルを含む)； クロランスラム(クロランスラム - メチルを含む)； I + クロリムロン(クロリムロン - エチルを含む)； I + クロロトルロン； I + シノスルフロソ； I + クロルスルフロソ； I + シンメチリン； I + クラシホス； I + クレトジム； I + クロジナホップ(クロジナホップ - プロパルギルを含む)； I + クロマゾン； I + クロピラリド； I + シクロピラニル； I + シクロピリモレート； I + シクロスルファミロン； I + シハロホップ(シハロホップ - ブチルを含む)； I + 2, 4 - D(コリン塩及びその2 - エチルヘキシルエステルを含む)； I + 2, 4 - DB； I + ダイムロン； I + デスメディファミン； I + ジカンパ(そのアルミニウム、アミノプロピル、ビス - アミノプロプルメチル、コリン、ジクロロプロップ、ジグリコールアミン、ジメチルアミン、ジメチルアンモニウム、カリウム及びナトリウム塩を含む)； I + ジクロホップ - メチル； I + ジクロスラム； I + ジフルヘニカン； I + ジフェンゾコート； I + ジフルヘニカン； I + ジフルフェンゾピル； I + ジメタクロール； I + ジメテナミド - P； I + ダイコートジプロミド； I + ジウロン； I + エスプロカルブ； I + エタルフルラリン； I + エトフメセート； I + フェノキサプロップ(フェノキサプロップ - P - エチルを含む)； I + フェノキサスルフォン； I + フェンキノトリオン； I + フェントラザミド； I + フラザスルフロソ； I + フロラスラム； I + フロルピラウキシフェン； I + フルアジホップ(フルアジホップ - P - ブチルを含む)； I + フルカルバゾン(フルカルバゾン - ナトリウムを含む)； I + フルフェナセット； I + フルメトラリン； I + フルメツラム； I + フルミオキサジン； I + フルピルスルフロソ(フルピルスルフロソ - メチル - ナトリウムを含む)； I + フルロキシピル(フルロキシピル - メチルを含む)； I + フルチアセット - メチル； I + フォメサフェン； I + ホラムスルフロソ； I + グルホシネート(そのアンモニウム塩を含む)； I + グリホサート(そのジアンモニウム、イソプロピルアンモニウム及びカリウム塩を含む)； I + ハラウキシフェン(ハラウキシフェン - メチルを含む)； I + ハロスルフロソ - メチル； I + ハロキシホップ(ハロキシホップ - メチルを含む)； I + ヘキサジノン； I + ヒダントシジン； I + イマザモックス； I + イマザピック； I + イマザピル； I + イマザキン； I + イマゼタピル； I + インダジフラム； I + イオドスルフロソ(イオドスルフロソ - メチル - ナトリウムを含む)； I + イオフェンスルフロソ； I + イオフェンスルフロソ - ナトリウム； I + アイオキシニル； I + イブフェンカルバゾン； I + イソプロツロン； I + イソキサベン； I + イソキサフルトール； I + ラクトフェン； I + ランコトリオン； I + リニユロン； I + MCPA； I + MCPB； I + メコプロップ - P； I + メフェナセット； I + メソスルフロソ； I + メソスルフロソ - メチル； I + メソトリオン； I + メタミトロン； I + メタザクロール； I + メチオゾリン； I + メトプロムロン； I + メトラクロール； I + メトスラム； I + メトキシウロン； I + メトリブジン； I + メトスルフロソ； I + モリネート； I + ナプロパミド； I + ニコスルフロソ； I + ノルフラゾン； I + オルソスルファミロン； I + オキサジアルギル； I + オキサジアゾン； I + オキサスルフロソ； I + オキシフルオルフェン； I + パラコートジクロリド； I + ペンディメタリン； I + ペノキススラム； I + フェンメディファミン； I + ピクロラム； I + ピコリナフェン； I + ピノキサデン； I + プレチラクロール； I + プリミスルフロソ - メチル； I + プロジアミン； I + プロメトリン； I + プロパクロル； I + プロパニル； I + プロパキサホップ； I + プロファミン； I + プロピリスルフロソ、 I + プロ

10

20

30

40

50

ピザミド； I + プロスルホカルブ； I + プロスルフロン； I + ピラクロニル； I + ピラフルフェン（ピラフルフェン - エチルを含む）； I + ピラスルホトール； I + ピラゾリネート、 I + ピラゾスルフロン - エチル； I + ピリベンゾキシム； I + ピリデート； I + ピリフタリド； I + ピリミスルファン、 I + ピリチオバック - ナトリウム； I + ピロキサスルホン； I + ピロキシスラム； I + キンクロラック； I + キンメラック； I + キザロホップ（キザロホップ - P - エチル及びキザロホップ - P - テフリルを含む）； I + リムスルフロン； I + サフルフェナシル； I + セトキシジム； I + シマジン； I + S - メトラクロール； I + スルコトリオン； I + スルフェントラゾン； I + スルホスルフロン； I + テブチウロン； I + テフリルトリオン； I + テンボトリオン； I + テルブチラジン； I + テルブトリン； I + チエンカルバゾン； I + チフェンスルフロン； I + チアフェナシル； I + トルピラレート； I + トプラメゾン； I + トラルコキシジム； I + トリアファモネ； I + トリアレート； I + トリアスルフロン； I + トリベヌロン（トリベヌロン - メチルを含む）； I + トリクロピル； I + トリフロキシスルフロン（トリフロキシスルフロン - ナトリウムを含む）； I + トリフルジモキサジン； I + トリフルラリン； I + トリフルスルフロン； I + トリトスルフロン； I + 4 - ヒドロキシ - 1 - メトキシ - 5 - メチル - 3 - [ 4 - （トリフルオロメチル） - 2 - ピリジル ] イミダゾリジン - 2 - オン； I + 4 - ヒドロキシ - 1, 5 - ジメチル - 3 - [ 4 - （トリフルオロメチル） - 2 - ピリジル ] イミダゾリジン - 2 - オン； I + 5 - エトキシ - 4 - ヒドロキシ - 1 - メチル - 3 - [ 4 - （トリフルオロメチル） - 2 - ピリジル ] イミダゾリジン - 2 - オン； I + 4 - ヒドロキシ - 1 - メチル - 3 - [ 4 - （トリフルオロメチル） - 2 - ピリジル ] イミダゾリジン - 2 - オン； I + 4 - ヒドロキシ - 1, 5 - ジメチル - 3 - [ 1 - メチル - 5 - （トリフルオロメチル）ピラゾール - 3 - イル ] イミダゾリジン - 2 - オン； I + ( 4 R ) 1 - ( 5 - t - ブチルイソキサゾール - 3 - イル ) - 4 - エトキシ - 5 - ヒドロキシ - 3 - メチル - イミダゾリジン - 2 - オン； I + 3 - [ 2 - ( 3, 4 - ジメトキシフェニル ) - 6 - メチル - 3 - オキソ - ピリダジン - 4 - カルボニル ] ビシクロ [ 3 . 2 . 1 ] オクタン - 2, 4 - ジオン； I + 2 - [ 2 - ( 3, 4 - ジメトキシフェニル ) - 6 - メチル - 3 - オキソ - ピリダジン - 4 - カルボニル ] - 5 - メチル - シクロヘキサン - 1, 3 - ジオン； I + 2 - [ 2 - ( 3, 4 - ジメトキシフェニル ) - 6 - メチル - 3 - オキソ - ピリダジン - 4 - カルボニル ] シクロヘキサン - 1, 3 - ジオン； I + 2 - [ 2 - ( 3, 4 - ジメトキシフェニル ) - 6 - メチル - 3 - オキソ - ピリダジン - 4 - カルボニル ] - 5, 5 - ジメチル - シクロヘキサン - 1, 3 - ジオン； I + 6 - [ 2 - ( 3, 4 - ジメトキシフェニル ) - 6 - メチル - 3 - オキソ - ピリダジン - 4 - カルボニル ] - 2, 2, 4, 4 - テトラメチル - シクロヘキサン - 1, 3, 5 - トリオン； I + 2 - [ 2 - ( 3, 4 - ジメトキシフェニル ) - 6 - メチル - 3 - オキソ - ピリダジン - 4 - カルボニル ] - 5 - エチル - シクロヘキサン - 1, 3 - ジオン； I + 2 - [ 2 - ( 3, 4 - ジメトキシフェニル ) - 6 - メチル - 3 - オキソ - ピリダジン - 4 - カルボニル ] - 4, 4, 6, 6 - テトラメチル - シクロヘキサン - 1, 3 - ジオン； I + 2 - [ 6 - シクロプロピル - 2 - ( 3, 4 - ジメトキシフェニル ) - 3 - オキソ - ピリダジン - 4 - カルボニル ] - 5 - メチル - シクロヘキサン - 1, 3 - ジオン； I + 3 - [ 6 - シクロプロピル - 2 - ( 3, 4 - ジメトキシフェニル ) - 3 - オキソ - ピリダジン - 4 - カルボニル ] ビシクロ [ 3 . 2 . 1 ] オクタン - 2, 4 - ジオン； I + 2 - [ 6 - シクロプロピル - 2 - ( 3, 4 - ジメトキシフェニル ) - 3 - オキソ - ピリダジン - 4 - カルボニル ] - 5, 5 - ジメチル - シクロヘキサン - 1, 3 - ジオン； I + 6 - [ 6 - シクロプロピル - 2 - ( 3, 4 - ジメトキシフェニル ) - 3 - オキソ - ピリダジン - 4 - カルボニル ] - 2, 2, 4, 4 - テトラメチル - シクロヘキサン - 1, 3, 5 - トリオン； I + 2 - [ 6 - シクロプロピル - 2 - ( 3, 4 - ジメトキシフェニル ) - 3 - オキソ - ピリダジン - 4 - カルボニル ] シクロヘキサン - 1, 3 - ジオン； I + 4 - [ 2 - ( 3, 4 - ジメトキシフェニル ) - 6 - メチル - 3 - オキソ - ピリダジン - 4 - カルボニル ] - 2, 2, 6, 6 - テトラメチル - テトラヒドロピラン - 3, 5 - ジオン及び I + 4 - [ 6 - シクロプロピル - 2 - ( 3, 4 - ジメトキシフェニル ) - 3 - オキソ - ピリダジン - 4 - カルボニル ] - 2, 2, 6, 6 - テトラメチル - テトラヒドロ

10

20

30

40

50

ピラン - 3 , 5 - ジオン。

【 0 1 0 2 】

また、式 ( I ) の化合物の混合パートナーは、例えば、The Pesticide Manual , Fourteenth Edition , British Crop Protection Council , 2 0 0 6 において言及されるように、エステル又は塩の形態であり得る。

【 0 1 0 3 】

また、式 ( I ) の化合物は、殺真菌剤、殺線虫剤又は殺虫剤などの他の農業化学品 ( その例は、The Pesticide Manual に示される ) との混合物で使用することもできる。

【 0 1 0 4 】

式 ( I ) の化合物の混合パートナーに対する混合比は、好ましくは、1 : 1 0 0 ~ 1 0 0 0 : 1 である。

【 0 1 0 5 】

混合物は、上記の製剤 ( この場合、「有効成分」は、式 ( I ) の化合物と混合パートナーとのそれぞれの混合物に関する ) において有利に使用することができる。

【 0 1 0 6 】

本発明の式 ( I ) の化合物は、除草剤毒性緩和剤とも組み合わせられ得る。好ましい組み合わせ ( ここで、「I」は、式 ( I ) の化合物を表す ) としては、- I + ベノキサコール、I + クロキントセット ( クロキントセットメキシルを含む ) ; I + シプロスルファミド ; I + ジクロルミド ; I + フェンクロラゾール ( フェンクロラゾール - エチルを含む ) ; I + フェンクロリム ; I + フルキソフェニム ; I + フリラゾール I + イソキサジフェン ( イソキサジフェン - エチルを含む ) ; I + メフェンピル ( メフェンピル - ジエチルを含む ) ; I + メトカミフェン ; I + 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及び I + オキサベトリニルが挙げられる。

【 0 1 0 7 】

式 ( I ) の化合物と、シプロスルファミド、イソキサジフェン ( イソキサジフェン - エチルを含む )、クロキントセット ( クロキントセットメキシルを含む ) 及び / 又は 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との混合物が特に好ましい。

【 0 1 0 8 】

また、式 ( I ) の化合物の薬害軽減剤は、例えば、The Pesticide Manual , 1 4 <sup>th</sup> Edition ( B C P C ) , 2 0 0 6 において言及されるように、エステル又は塩の形態であり得る。クロキントセット - メキシルへの言及は、国際公開第 0 2 / 3 4 0 4 8 号に開示されるように、そのリチウム、ナトリウム、カリウム、カルシウム、マグネシウム、アルミニウム、鉄、アンモニウム、第 4 級アンモニウム、スルホニウム又はホスホニウム塩にも適用され、及びフェンクロラゾール - エチルへの言及は、フェンクロラゾールにも適用されるなどである。

【 0 1 0 9 】

好ましくは、式 ( I ) の化合物の薬害軽減剤に対する混合比は、1 0 0 : 1 ~ 1 : 1 0 0、特に 2 0 : 1 ~ 1 : 1 である。

【 0 1 1 0 】

混合物は、上記の製剤 ( この場合、「有効成分」は、式 ( I ) の化合物と薬害軽減剤とのそれぞれの混合物に関する ) において有利に使用することができる。

【 0 1 1 1 】

本発明の式 ( I ) の化合物は、除草剤として有用である。従って、本発明は、不要な植物を防除する方法をさらに含み、本方法は、有効量の本発明の化合物又は前記化合物を含む除草組成物を前記植物又はそれを含む生息地に適用することを含む。「防除」は、死滅、成長の低減若しくは遅延又は発芽の防止若しくは低減を意味する。一般に、防除される植物は、不要な植物 ( 雑草 ) である。「生息地」は、植物が成長している領域又は成長す

10

20

30

40

50

る予定の領域を意味する。

【0112】

式(I)の化合物の適用率は、広い範囲内で異なり、土壌の性質、適用方法(出芽前; 出芽後; まき溝への適用; 非耕作適用など)、作物植物、防除される雑草、優勢な気候条件並びに適用方法、適用の時期及び標的作物に支配される他の要因によって決まり得る。本発明に従う式(I)の化合物は、一般に、10~2000g/ha、特に50~1000g/haの割合で適用される。好ましい範囲は、10~200g/haである。

【0113】

適用は、一般に、通常広い領域のためにトラクターに取り付けられた噴霧器によって組成物を噴霧することによって行われるが、散布(粉末用)、滴下又は灌注などの他の方法を使用することもできる。

10

【0114】

本発明に従う組成物を使用することができる有用な植物には、穀物、例えば大麦及び小麦、綿、アブラナ、ヒマワリ、トウモロコシ、米、大豆、テンサイ、サトウキビ及び芝生などの作物が含まれる。

【0115】

また、作物植物は、果樹、ヤシの木、ココヤシの木又は他のナッツなどの木も含むことができる。また、ブドウなどのつる植物、果実の低木、果実植物及び野菜も含まれる。

【0116】

作物は、従来の育種方法又は遺伝子操作によって除草剤又は除草剤の種類(例えば、ALS-、GS-、EPSPS-、PPO-、ACCase-及びHPPD-抑制剤)に対して耐性にされた作物も含むと理解されるべきである。従来の育種方法によってイミダゾリノン、例えばイマザモックスに対して耐性にされた作物の一例は、Clearfield(登録商標)夏ナタネ(キャノーラ)である。遺伝子操作方法によって除草剤に対して耐性にされた作物の例としては、例えば、商品名Roundup Ready(登録商標)及びLiberty Link(登録商標)で市販されているグリホサート耐性及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。

20

【0117】

また、作物は、遺伝子操作方法によって害虫に対して耐性にされたもの、例えばBtトウモロコシ(ヨーロッパアワノメイガに耐性)、Bt綿(綿花ゾウムシに耐性)及びさらにBtジャガイモ(コロラドハムシに耐性)でも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Bt176トウモロコシハイブリッドである。Bt毒素は、バチルス・チューリングエンシス(Bacillus thuringiensis)土壌細菌によって天然に形成されるタンパク質である。毒素又はこのような毒素を合成することができるトランスジェニック植物の例は、欧州特許出願公開第451878号明細書、欧州特許出願公開第374753号明細書、国際公開第93/07278号、国際公開第95/34656号、国際公開第03/052073号及び欧州特許出願公開第427529号明細書に記載されている。殺虫剤耐性をコードし、1つ又は複数の毒素を発現する1つ又は複数の遺伝子を含む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 Guard(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)、Nature Guard(登録商標)及びProtecta(登録商標)である。植物作物又はその種子材料は、いずれも除草剤に対して耐性であり、同時に昆虫の摂取に対しても耐性であり得る(「積層」トランスジェニック事象)。例えば、種子は、殺虫性Cry3タンパク質を発現する能力を有し、同時にグリホサートに対して耐性である。

30

40

【0118】

また、作物は、従来の育種方法又は遺伝子操作方法によって得られ、いわゆる出力形質(output trait)(例えば、改善された貯蔵安定性、より高い栄養価及び改善された風味)を含有するものも含むことが理解されるべきである。

50

## 【0119】

他の有用な植物には、例えば、ゴルフ場、芝地、公園及び沿道における芝草又は芝生のために商業的に栽培された芝草並びに花又は低木などの観賞植物が含まれる。

## 【0120】

本発明の式(I)の化合物及び組成物は、通常、様々な種類の単子葉及び双子葉雑草種を防除するために使用することができる。通常防除することができる単子葉種の例としては、アロペクルス・ミオスロイデス(*Alopecurus myosuroides*)、アベナ・ファツア(*Avena fatua*)、ブラキアリア・プランタギネア(*Brachiaria plantaginea*)、ブロムス・テクトルム(*Bromus tectorum*)、キペルス・エスクレンツス(*Cyperus esculentus*)、ディギタリア・サングイナリス(*Digitaria sanguinalis*)、エキノクロア・クルスガリ(*Echinochloa crus-galli*)、ロリウム・ペレンネ(*Lolium perenne*)、ロリウム・マルチフロラム(*Lolium multiflorum*)、パニクム・ミリアケウム(*Panicum miliaecum*)、ポア・アヌア(*Poa annua*)、セタリア・ビリディス(*Setaria viridis*)、セタリア・ファベリ(*Setaria faberi*)及びソルガム・ビコロ(*Sorghum bicolor*)が挙げられる。防除することができる双子葉種の例としては、アブティロン・テオフラスティ(*Abutilon theophrasti*)、アマランサス・レトロフレクス(*Amaranthus retroflexus*)、ビデンス・ピローサ(*Bidens pilosa*)、ケノポディウム・アルブム(*Chenopodium album*)、ユーフォルビア・ヘテロフィラ(*Euphorbia heterophylla*)、ガリウム・アパリネ(*Galium aparine*)、イポモエア・ヘデラケア(*Ipomoea hederacea*)、コキア・スコパリア(*Kochia scoparia*)、ポリゴナム・コンボルブルス(*Polygonum convolvulus*)、シダ・スピノサ(*Sida spinosa*)、シナピス・アルペンシス(*Sinapis arvensis*)、ソラナム・ニグルム(*Solanum nigrum*)、ステラリア・メディア(*Stellaria media*)、ベロニカ・ペルシカ(*Veronica persica*)及びキサランチウム・ストルマリウム(*Xanthium strumarium*)が挙げられる。

## 【0121】

式(I)の化合物は、作物、これらに限定されないが、例えばジャガイモ、大豆、ヒマワリ及びコットンの収穫前の乾燥にも有用である。収穫前の乾燥は、収穫を促進するために、作物自体への有意な損傷なしに作物の葉を乾燥するために用いられる。

## 【0122】

本発明の化合物/組成物は、非選択的なバーンダウン(burn down)適用において特に有用であり、従って自生植物を防除するか又は作物植物を退避させるためにも使用され得る。

## 【0123】

本発明の種々の態様及び実施形態は、ここで、例としてさらに詳細に説明されるであろう。本発明の範囲から逸脱することなく詳細の変更がなされ得ることが認識されるであろう。

## 【実施例】

## 【0124】

以下の実施例は、本発明を例示するためのものであり、限定するものではない。

本発明のまた別の態様は、以下のとおりであってもよい。

〔1〕式(I)：

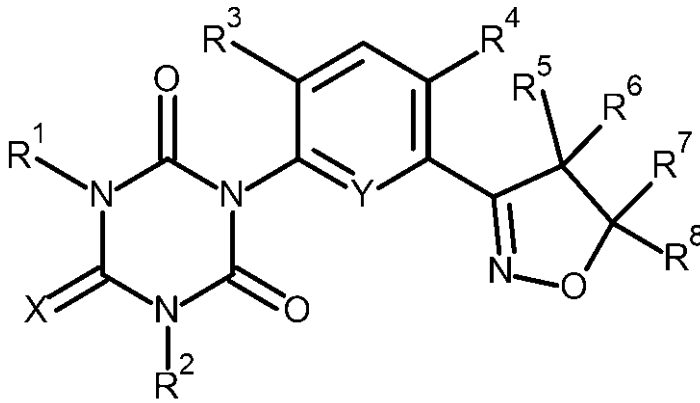
10

20

30

40

## 【化1】



(I)

(式中、

Xは、酸素及び硫黄からなる群から選択され；

Yは、C-H及び窒素からなる群から選択され；

R<sup>1</sup>は、水素及びC<sub>1</sub>~C<sub>6</sub>アルキルからなる群から選択され；

R<sup>2</sup>は、水素、アミノ、C<sub>1</sub>~C<sub>6</sub>アルキル、C<sub>3</sub>~C<sub>6</sub>アルケニル及びC<sub>3</sub>~C<sub>6</sub>アルキニルからなる群から選択され；

R<sup>3</sup>は、水素、ハロゲン、C<sub>1</sub>~C<sub>4</sub>アルキル、C<sub>1</sub>~C<sub>4</sub>ハロアルキル、C<sub>1</sub>~C<sub>4</sub>アルコキシ、C<sub>1</sub>~C<sub>4</sub>ハロアルコキシ及びC<sub>1</sub>~C<sub>4</sub>アルキルスルホニルからなる群から選択され；

R<sup>4</sup>は、水素、ハロゲン、シアノ、アミノカルボニル、アミノチオカルボニル、C<sub>1</sub>~C<sub>4</sub>アルキル、C<sub>1</sub>~C<sub>4</sub>ハロアルキル、C<sub>1</sub>~C<sub>4</sub>アルコキシ、C<sub>1</sub>~C<sub>4</sub>ハロアルコキシ及びC<sub>1</sub>~C<sub>4</sub>アルキルスルホニルからなる群から選択され；

各R<sup>5</sup>及びR<sup>6</sup>は、水素、シアノ、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>4</sub>アルキルスルホニル、CO<sub>2</sub>R<sup>9</sup>、CONR<sup>10</sup>R<sup>11</sup>及びCH<sub>2</sub>OR<sup>12</sup>からなる群から独立して選択され；

各R<sup>7</sup>及びR<sup>8</sup>は、水素、シアノ、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>4</sub>アルコキシ、C<sub>1</sub>~C<sub>4</sub>アルキルスルホニル、C(=Z)R<sup>15</sup>、CO<sub>2</sub>R<sup>9</sup>、CONR<sup>10</sup>R<sup>11</sup>及びCH<sub>2</sub>OR<sup>12</sup>からなる群から独立して選択され；

Zは、酸素、NOR<sup>16</sup>及びNN(R<sup>16</sup>)<sub>2</sub>からなる群から選択され；

R<sup>9</sup>は、水素、C<sub>1</sub>~C<sub>10</sub>アルキル、C<sub>1</sub>~C<sub>10</sub>ハロアルキル、C<sub>3</sub>~C<sub>6</sub>アルケニル、C<sub>3</sub>~C<sub>6</sub>ハロアルケニル、C<sub>3</sub>~C<sub>6</sub>アルキニル、C<sub>1</sub>~C<sub>4</sub>アルコキシC<sub>1</sub>~C<sub>6</sub>アルキル、C<sub>1</sub>~C<sub>4</sub>ハロアルコキシC<sub>1</sub>~C<sub>6</sub>アルキル、C<sub>6</sub>~C<sub>10</sub>アリールC<sub>1</sub>~C<sub>3</sub>アルキル、1~4個の基R<sup>13</sup>によって置換されているC<sub>6</sub>~C<sub>10</sub>アリールC<sub>1</sub>~C<sub>3</sub>アルキル、ヘテロアリールC<sub>1</sub>~C<sub>3</sub>アルキル及び1~3個の基R<sup>13</sup>によって置換されているヘテロアリールC<sub>1</sub>~C<sub>3</sub>アルキルからなる群から選択され；

R<sup>10</sup>は、水素、C<sub>1</sub>~C<sub>6</sub>アルキル及びSO<sub>2</sub>R<sup>14</sup>からなる群から選択され；

R<sup>11</sup>は、水素及びC<sub>1</sub>~C<sub>6</sub>アルキルからなる群から選択されるか；又は

R<sup>10</sup>及びR<sup>11</sup>は、それらが結合されている窒素と一緒に、酸素原子を任意に含有する3~6員ヘテロシクリル環を形成し；

R<sup>12</sup>は、水素、C<sub>1</sub>~C<sub>4</sub>アルキル、C<sub>1</sub>~C<sub>4</sub>ハロアルキル、C<sub>1</sub>~C<sub>4</sub>アルキルスルホニル、C<sub>1</sub>~C<sub>4</sub>ハロアルキルスルホニル、フェニルスルホニル、1~2個の基R<sup>13</sup>によって置換されているフェニルスルホニル、C<sub>1</sub>~C<sub>4</sub>アルキルカルボニル、C<sub>1</sub>~C<sub>4</sub>ハロアルキルカルボニル、C<sub>6</sub>~C<sub>10</sub>アリールカルボニル、1~4個の基R<sup>13</sup>によって置換されているC<sub>6</sub>~C<sub>10</sub>アリールカルボニル、ヘテロアリールカルボニル、1~3個の基R<sup>13</sup>によって置換されているヘテロアリールカルボニル、C<sub>6</sub>~C<sub>10</sub>アリールC<sub>1</sub>~C<sub>3</sub>アルキルカルボニル、1~4個の基R<sup>13</sup>によって置換されているC<sub>6</sub>~C<sub>10</sub>アリールC<sub>1</sub>~C<sub>3</sub>アルキルカルボニル、ヘテロアリールC<sub>1</sub>~C<sub>3</sub>アルキルカルボニル及び1~3個の基R<sup>13</sup>によって

10

20

30

40

50

置換されているヘテロアリール  $C_1 \sim C_3$  アルキルカルボニルからなる群から選択され；  
 各  $R^{13}$  は、ハロゲン、 $C_1 \sim C_4$  アルキル、 $C_1 \sim C_4$  ハロアルキル、 $C_1 \sim C_4$  アルコキシ、 $C_1 \sim C_4$  ハロアルコキシ、シアノ及び  $C_1 \sim C_4$  アルキルスルホニルからなる群から独立して選択され；  
 $R^{14}$  は、 $C_1 \sim C_4$  アルキル、 $C_1 \sim C_4$  ハロアルキル及び  $C_1 \sim C_4$  アルキル ( $C_1 \sim C_4$  アルキル) アミノからなる群から選択され；  
 $R^{15}$  は、水素、 $C_1 \sim C_4$  アルキル及び  $C_1 \sim C_4$  ハロアルキルからなる群から選択され；  
 $R^{16}$  は、水素、 $C_1 \sim C_4$  アルキル、 $C_1 \sim C_4$  ハロアルキル及び  $C_1 \sim C_4$  アルコキシカルボニル  $C_1 \sim C_4$  アルキルからなる群から選択される)  
 の化合物又はその農学的に許容可能な塩。  
 [ 2 ] X は、硫黄である、前記 [ 1 ] に記載の化合物。  
 [ 3 ] Y は、C - H である、前記 [ 1 ] 又は [ 2 ] に記載の化合物。  
 [ 4 ]  $R^1$  は、水素及び  $C_1 \sim C_4$  アルキルからなる群から選択される、前記 [ 1 ] ~ [ 3 ] のいずれか一項に記載の化合物。  
 [ 5 ]  $R^2$  は、水素、 $C_1 \sim C_4$  アルキル及び  $C_3 \sim C_4$  アルキニルからなる群から選択される、前記 [ 1 ] ~ [ 4 ] のいずれか一項に記載の化合物。  
 [ 6 ]  $R^3$  は、水素、塩素及びフッ素からなる群から選択される、前記 [ 1 ] ~ [ 5 ] のいずれか一項に記載の化合物。  
 [ 7 ]  $R^4$  は、水素、塩素、シアノ及びアミノチオカルボニルからなる群から選択される、前記 [ 1 ] ~ [ 6 ] のいずれか一項に記載の化合物。  
 [ 8 ] 各  $R^5$  及び  $R^6$  は、水素、 $C_1 \sim C_4$  アルキル、 $CO_2R^9$  及び  $CH_2OR^{12}$  からなる群から独立して選択される、前記 [ 1 ] ~ [ 7 ] のいずれか一項に記載の化合物。  
 [ 9 ] 各  $R^7$  及び  $R^8$  は、水素、 $C_1 \sim C_4$  アルキル、 $C_1 \sim C_6$  ハロアルキル、 $CO_2R^9$ 、 $CONR^{10}$ 、 $R^{11}$  及び  $CH_2OR^{12}$  からなる群から独立して選択される、前記 [ 1 ] ~ [ 8 ] のいずれか一項に記載の化合物。  
 [ 10 ]  $R^9$  は、水素、 $C_1 \sim C_4$  アルキル、 $C_1 \sim C_4$  ハロアルキル、 $C_1 \sim C_2$  アルコキシ、 $C_1 \sim C_2$  アルキル、フェニル  $C_1 \sim C_2$  アルキル及び 1 ~ 2 個の基  $R^{13}$  によって置換されているフェニル  $C_1 \sim C_2$  アルキルからなる群から選択される、前記 [ 1 ] ~ [ 9 ] のいずれか一項に記載の化合物。  
 [ 11 ]  $R^{10}$  は、水素及び  $SO_2R^{14}$  からなる群から選択される、前記 [ 1 ] ~ [ 10 ] のいずれか一項に記載の化合物。  
 [ 12 ]  $R^{11}$  は、水素である、前記 [ 1 ] ~ [ 11 ] のいずれか一項に記載の化合物。  
 [ 13 ]  $R^{12}$  は、水素、 $C_1 \sim C_2$  アルキル、 $C_1 \sim C_2$  アルキルスルホニル、 $C_1 \sim C_2$  ハロアルキルスルホニル、 $C_1 \sim C_4$  アルキルカルボニル、フェニルカルボニル、1 ~ 2 個の基  $R^{13}$  によって置換されているフェニルカルボニル、フェニル  $C_1 \sim C_2$  アルキルカルボニル及び 1 ~ 2 個の基  $R^{13}$  によって置換されているフェニル  $C_1 \sim C_2$  アルキルカルボニルからなる群から選択される、前記 [ 1 ] ~ [ 12 ] のいずれか一項に記載の化合物。  
 [ 14 ]  $R^{13}$  は、ハロゲン、 $C_1 \sim C_4$  アルキル、 $C_1 \sim C_4$  ハロアルキル、 $C_1 \sim C_4$  アルコキシ、 $C_1 \sim C_4$  ハロアルコキシ、シアノ及び  $C_1 \sim C_4$  アルキルスルホニルからなる群から選択される、前記 [ 1 ] ~ [ 13 ] のいずれか一項に記載の化合物。  
 [ 15 ]  $R^{14}$  は、 $C_1 \sim C_4$  アルキル及び  $C_1 \sim C_4$  アルキル ( $C_1 \sim C_4$  アルキル) アミノからなる群から選択される、前記 [ 1 ] ~ [ 14 ] のいずれか一項に記載の化合物。  
 [ 16 ] 除草的に有効な量の、前記 [ 1 ] ~ [ 15 ] のいずれか一項に記載の式 ( I ) の化合物と、農芸化学的に許容可能な希釈剤又はキャリアとを含む農芸化学的組成物。  
 [ 17 ] 望ましくない植物の成長を防除又は防止する方法であって、除草的に有効な量の、前記 [ 1 ] ~ [ 15 ] のいずれか一項に記載の式 ( I ) の化合物又は前記 [ 16 ] に記載の組成物を、植物、その一部又はその生息地に適用する、方法。

【 0 1 2 5 】

合成例

実施例 1 エチル 3 - [ 2 - クロロ - 5 - ( 3 , 5 - ジメチル - 2 , 6 - ジオキソ - 4 -

10

20

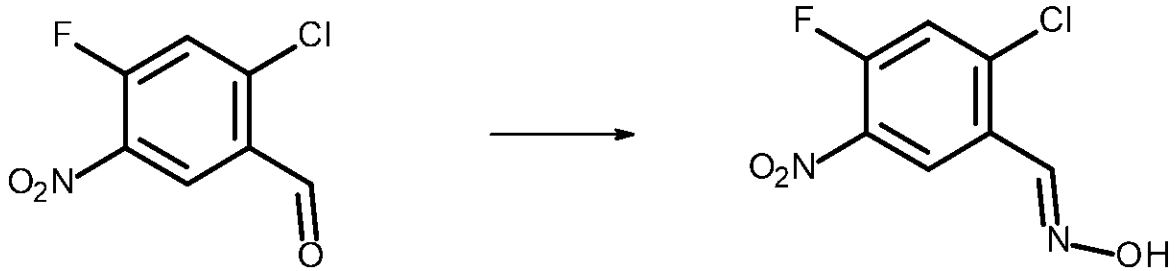
30

40

50

チオキソ - 1, 3, 5 - トリアジナン - 1 - イル) - 4 - フルオロ - フェニル] - 5 - メチル - 4 H - イソオキサゾール - 5 - カルボキシレート (化合物 47) の合成

ステップ 1 2 - クロロ - 4 - フルオロ - 5 - ニトロ - ベンズアルデヒドオキシムの合成  
【化 13】



10

室温でエタノール (65 ml) 中の 2 - クロロ - 4 - フルオロ - 5 - ニトロ - ベンズアルデヒド (13 g、61.3 mmol) の攪拌溶液にヒドロキシルアミン塩酸塩 (6.39 g、92 mmol) を添加した。得られた溶液を室温でさらに 60 分間攪拌した。水 (125 ml) を添加し、得られた混合物をろ過して 2 - クロロ - 4 - フルオロ - 5 - ニトロ - ベンズアルデヒドオキシムを黄色の固体 (13.0 g) として得た。

$^1\text{H}$  NMR (400 MHz,  $\text{CHCl}_3$ ) 8.65 (d, 1H), 8.5 (s, 1H), 8.1 (br s, 1H), 7.4 (d, 1H) ppm.

20

この一般的な方法によって以下のものも調製した。

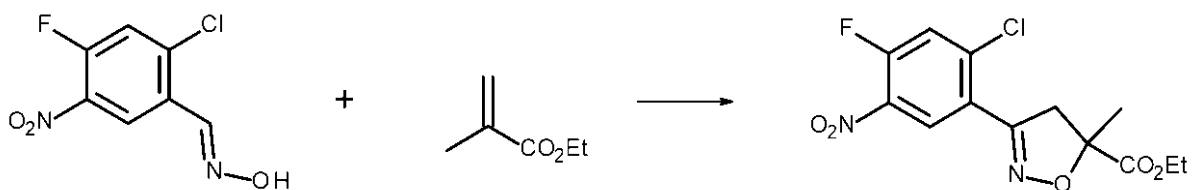
2 - クロロ - 5 - ニトロ - ベンズアルデヒドオキシム

$^1\text{H}$  NMR (400 MHz,  $\text{CHCl}_3$ ) 8.75 (s, 1H), 8.55 (s, 1H), 8.15 (m, 1H), 7.9 (s, 1H), 7.6 (m, 1H) ppm.

2, 4 - ジクロロ - 5 - ニトロ - ベンズアルデヒドオキシム

【0126】

ステップ 2 エチル 3 - (2 - クロロ - 4 - フルオロ - 5 - ニトロ - フェニル) - 5 - メチル - 4 H - イソオキサゾール - 5 - カルボキシレートの合成  
【化 14】



30

30 で N, N - ジメチルホルムアミド (4.8 ml) 中の 2 - クロロ - 4 - フルオロ - 5 - ニトロ - ベンズアルデヒドオキシム (1.2 g、5.5 mmol) の攪拌溶液に 1 - クロロピロリジン - 2, 5 - ジオン (0.6 ml、6.6 mmol) を 10 分にわたって少しずつ添加した。得られた混合物を 35 で 1 時間攪拌し、次いで室温に冷却し、ジクロロメタン (50 ml) を添加した。混合物を希塩酸 (15 ml) で洗浄し、乾燥させ、5 に冷却した。この攪拌溶液にトリエチルアミン (1.33 ml 9.5 mmol) とエチル 2 - メチルプロパ - 2 - エノアート (1.14 g、9.5 mmol) との混合物を少しずつ添加した。室温で 17 時間放置した後、希塩酸 (5 ml) を添加し、相を分離し、有機相を乾燥させ、クロマトグラフィーによって精製してエチル 3 - (2 - クロロ - 4 - フルオロ - 5 - ニトロ - フェニル) - 5 - メチル - 4 H - イソオキサゾール - 5 - カルボキシレート (1.0 g) を得た。

40

$^1\text{H}$  NMR (400 MHz,  $\text{CHCl}_3$ ) 8.45 (d, 1H), 7.45 (d, 1H), 4.3 (q, 2H), 4.0 (d, 1H), 3.4 (d, 1H), 1.75 (s, 3H), 1.35 (t, 3H) ppm.

50

この一般的な方法によって以下のものも調製した。

エチル 3 - ( 2 - クロロ - 5 - ニトロ - フェニル ) - 5 - メチル - 4 H - イソオキサゾール - 5 - カルボキシレート

$^1\text{H}$  NMR ( 400 MHz ,  $\text{CHCl}_3$  ) 8 . 55 ( d , 1 H ) , 8 . 2 ( d , 1 H ) , 7 . 65 ( d , 1 H ) , 4 . 3 ( q , 2 H ) , 4 . 05 ( d , 1 H ) , 3 . 4 ( d , 1 H ) , 1 . 75 ( s , 3 H ) , 1 . 35 ( t , 3 H ) ppm .

メチル 3 - ( 2 - クロロ - 4 - フルオロ - 5 - ニトロ - フェニル ) - 5 - ( トリフルオロメチル ) - 4 H - イソオキサゾール - 5 - カルボキシレート

$^1\text{H}$  NMR ( 400 MHz ,  $\text{CHCl}_3$  ) 8 . 45 ( d , 1 H ) , 7 . 45 ( d , 1 H ) , 4 . 2 ( d , 1 H ) , 3 . 95 ( d , 1 H ) , 3 . 95 ( s , 3 H ) ppm .

メチル 3 - ( 2 - クロロ - 4 - フルオロ - 5 - ニトロ - フェニル ) - 4 , 5 - ジメチル - 4 H - イソオキサゾール - 5 - カルボキシレート

$^1\text{H}$  NMR ( 400 MHz ,  $\text{CHCl}_3$  ) 8 . 3 ( d , 1 H ) , 7 . 45 ( d , 1 H ) , 3 . 9 ( q , 1 H ) , 3 . 8 ( s , 3 H ) , 1 . 75 ( s , 3 H ) , 1 . 1 ( d , 3 H ) ppm .

[ 3 - ( 2 - クロロ - 4 - フルオロ - 5 - ニトロ - フェニル ) - 5 - メチル - 4 H - イソオキサゾール - 5 - イル ] メタノール

$^1\text{H}$  NMR ( 400 MHz ,  $\text{CHCl}_3$  ) 8 . 45 ( d , 1 H ) , 7 . 45 ( d , 1 H ) , 3 . 8 ( br d , 1 H ) , 3 . 65 ( d , 1 H ) , 3 . 6 ( br d , 1 H ) , 3 . 2 ( d , 1 H ) , 2 . 1 ( m , 1 H ) , 1 . 5 ( s , 3 H ) ppm .

1 - [ 3 - ( 2 - クロロ - 4 - フルオロ - 5 - ニトロ - フェニル ) - 5 - メチル - 4 H - イソオキサゾール - 5 - イル ] エタノン

$^1\text{H}$  NMR ( 400 MHz ,  $\text{CHCl}_3$  ) 8 . 4 ( d , 1 H ) , 7 . 45 ( d , 1 H ) , 3 . 95 ( d , 1 H ) , 3 . 2 ( d , 1 H ) , 2 . 35 ( s , 3 H ) , 1 . 65 ( s , 3 H ) ppm .

エチル 3 - ( 2 , 4 - ジクロロ - 5 - ニトロ - フェニル ) - 5 - メチル - 4 H - イソオキサゾール - 5 - カルボキシレート

$^1\text{H}$  NMR ( 400 MHz ,  $\text{CHCl}_3$  ) 8 . 35 ( s , 1 H ) , 7 . 7 ( s , 1 H ) , 4 . 3 ( q , 2 H ) , 4 . 05 ( d , 1 H ) , 3 . 4 ( d , 1 H ) , 1 . 75 ( s , 3 H ) , 1 . 35 ( t , 3 H ) ppm .

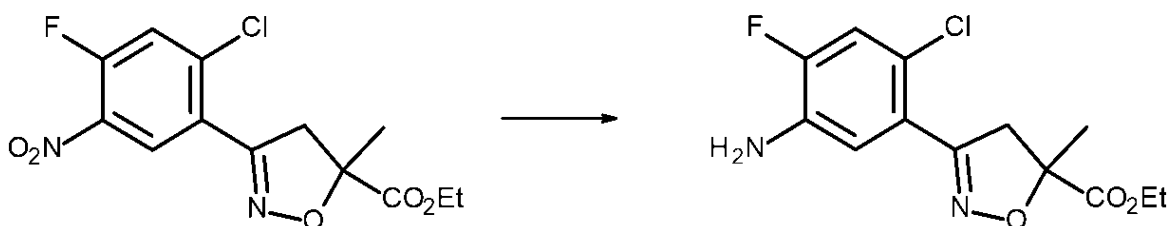
メチル 3 - ( 2 - クロロ - 4 - フルオロ - 5 - ニトロ - フェニル ) - 5 - メトキシ - 4 H - イソオキサゾール - 5 - カルボキシレート

$^1\text{H}$  NMR ( 400 MHz ,  $\text{CHCl}_3$  ) 8 . 55 ( d , 1 H ) , 7 . 45 ( d , 1 H ) , 4 . 0 ( d , 1 H ) , 3 . 9 ( s , 3 H ) , 3 . 6 ( d , 1 H ) , 3 . 5 ( s , 3 H ) ppm .

【 0 1 2 7 】

ステップ 3 エチル 3 - ( 5 - アミノ - 2 - クロロ - 4 - フルオロ - フェニル ) - 5 - メチル - 4 H - イソオキサゾール - 5 - カルボキシレートの合成

【 化 1 5 】



室温で酢酸エチル ( 60 ml ) 中のエチル 3 - ( 2 - クロロ - 4 - フルオロ - 5 - ニトロ - フェニル ) - 5 - メチル - 4 H - イソオキサゾール - 5 - カルボキシレート ( 1 . 0 g 、 3 . 0 mmol ) の攪拌溶液に二塩化スズ水和物 ( 2 . 3 g 、 12 . 1 mmol ) を

添加した。5分後から混合物を還流で3時間加熱し、冷却し、減圧下で蒸発させて茶色の油を得、これをクロマトグラフィーによって精製してエチル3-(5-アミノ-2-クロロ-4-フルオロ-フェニル)-5-メチル-4H-イソキサゾール-5-カルボキシレート(800mg)を得た。

$^1\text{H NMR}$  (400MHz,  $\text{CHCl}_3$ ) 7.15 (d, 1H), 7.05 (d, 1H), 4.3 (q, 2H), 3.95 (d, 1H), 3.4 (d, 1H), 1.7 (s, 3H), 1.3 (t, 3H) ppm ( $\text{NH}_2$ は観察されず)。

この一般的な方法によって以下のものも調製した。

エチル3-(5-アミノ-2-クロロ-フェニル)-5-メチル-4H-イソキサゾール-5-カルボキシレート

10

メチル3-(5-アミノ-2-クロロ-4-フルオロ-フェニル)-5-(トリフルオロメチル)-4H-イソキサゾール-5-カルボキシレート

$^1\text{H NMR}$  (400MHz,  $\text{CHCl}_3$ ) 7.15 (d, 1H), 7.1 (d, 1H), 4.2 (d, 1H), 3.95 (d, 1H), 3.9 (s, 3H), 3.85 (br s, 2H) ppm.

メチル3-(5-アミノ-2-クロロ-4-フルオロ-フェニル)-4,5-ジメチル-4H-イソキサゾール-5-カルボキシレート

$^1\text{H NMR}$  (400MHz,  $\text{CHCl}_3$ ) 7.15 (d, 1H), 6.9 (d, 1H), 3.9 (q, 1H), 3.85 (br s, 2H), 3.8 (s, 3H), 1.75 (s, 3H), 1.0 (d, 3H) ppm.

20

[3-(5-アミノ-2-クロロ-4-フルオロ-フェニル)-5-メチル-4H-イソキサゾール-5-イル]メチルアセテート

1-[3-(5-アミノ-2-クロロ-4-フルオロ-フェニル)-5-メチル-4H-イソキサゾール-5-イル]エタノン

エチル3-(5-アミノ-2,4-ジクロロ-フェニル)-5-メチル-4H-イソキサゾール-5-カルボキシレート

$^1\text{H NMR}$  (400MHz,  $\text{CHCl}_3$ ) 7.35 (s, 1H), 7.3 (s, 1H), 4.3 (q, 2H), 4.1 (br s, 2H), 3.95 (d, 1H), 3.4 (d, 1H), 1.75 (s, 3H), 1.35 (t, 3H) ppm.

メチル3-(5-アミノ-2-クロロ-4-フルオロ-フェニル)-5-メトキシ-4H-イソキサゾール-5-カルボキシレート

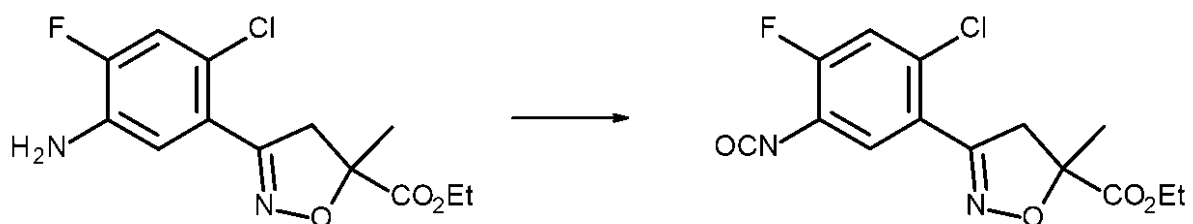
30

$^1\text{H NMR}$  (400MHz,  $\text{CHCl}_3$ ) 7.15 (d, 1H), 7.1 (d, 1H), 3.95 (d, 1H), 3.9 (s, 3H), 3.85 (br s, 2H), 3.6 (d, 1H), 3.45 (s, 3H) ppm.

【0128】

ステップ4 エチル3-(2-クロロ-4-フルオロ-5-イソシアナト-フェニル)-5-メチル-4H-イソキサゾール-5-カルボキシレートの合成

【化16】



40

室温で攪拌ジホスゲン(0.4ml, 3.2mmol)に乾燥トルエン(16ml)中のエチル3-(5-アミノ-2-クロロ-4-フルオロ-フェニル)-5-メチル-4H-イソキサゾール-5-カルボキシレート(800mg, 2.66mmol)の溶液を添加し、次いで混合物を還流で3時間加熱し、冷却し、減圧下で蒸発させた。トルエン(

50

10 ml) を添加し、混合物を減圧下で蒸発させてエチル 3 - ( 2 - クロロ - 4 - フルオロ - 5 - イソシアナト - フェニル ) - 5 - メチル - 4 H - イソオキサゾール - 5 - カルボキシレート を淡茶色の液体 ( 750 mg ) として得た。

$^1\text{H NMR}$  ( 400 MHz,  $\text{CHCl}_3$  ) 7.45 ( d, 1 H ), 7.25 ( d, 1 H ), 4.3 ( q, 2 H ), 3.9 ( d, 1 H ), 3.35 ( d, 1 H ), 1.75 ( s, 3 H ), 1.35 ( t, 3 H ) ppm .

この一般的な方法によって以下のものも調製した。

エチル 3 - ( 2 - クロロ - 5 - イソシアナト - フェニル ) - 5 - メチル - 4 H - イソオキサゾール - 5 - カルボキシレート

メチル 3 - ( 2 - クロロ - 4 - フルオロ - 5 - イソシアナト - フェニル ) - 5 - ( トリフルオロメチル ) - 4 H - イソオキサゾール - 5 - カルボキシレート 10

$^1\text{H NMR}$  ( 400 MHz,  $\text{CHCl}_3$  ) 7.45 ( d, 1 H ), 7.3 ( d, 1 H ), 4.15 ( d, 1 H ), 3.95 ( d, 1 H ), 3.95 ( s, 3 H ) ppm .

メチル 3 - ( 2 - クロロ - 4 - フルオロ - 5 - イソシアナト - フェニル ) - 4, 5 - ジメチル - 4 H - イソオキサゾール - 5 - カルボキシレート

1 - [ 3 - ( 2 - クロロ - 4 - フルオロ - 5 - イソシアナト - フェニル ) - 5 - メチル - 4 H - イソオキサゾール - 5 - イル ] メチルアセテート

1 - [ 3 - ( 2 - クロロ - 4 - フルオロ - 5 - イソシアナト - フェニル ) - 5 - メチル - 4 H - イソオキサゾール - 5 - イル ] エタノン

エチル 3 - ( 2, 4 - ジクロロ - 5 - イソシアナト - フェニル ) - 5 - メチル - 4 H - イソオキサゾール - 5 - カルボキシレート 20

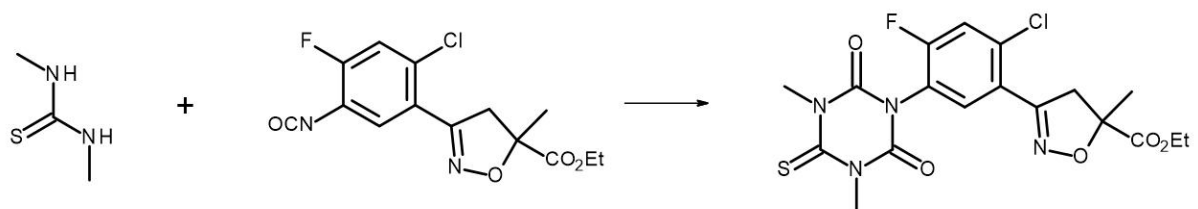
メチル 3 - ( 2 - クロロ - 4 - フルオロ - 5 - イソシアナト - フェニル ) - 5 - メトキシ - 4 H - イソオキサゾール - 5 - カルボキシレート

$^1\text{H NMR}$  ( 400 MHz,  $\text{CHCl}_3$  ) 7.5 ( d, 1 H ), 7.25 ( d, 1 H ), 3.95 ( d, 1 H ), 3.9 ( s, 3 H ), 3.6 ( d, 1 H ), 3.5 ( s, 3 H ) ppm .

【 0 1 2 9 】

ステップ 5 エチル 3 - [ 2 - クロロ - 5 - ( 3, 5 - ジメチル - 2, 6 - ジオキソ - 4 - チオキソ - 1, 3, 5 - トリアジナン - 1 - イル ) - 4 - フルオロ - フェニル ] - 5 - メチル - 4 H - イソオキサゾール - 5 - カルボキシレート ( 化合物 47 ) の調製 30

【 化 1 7 】



室温でトルエン ( 16 ml ) 中のエチル 3 - ( 2 - クロロ - 4 - フルオロ - 5 - イソシアナト - フェニル ) - 5 - メチル - 4 H - イソオキサゾール - 5 - カルボキシレート ( 800 mg, 2.45 mmol ) の攪拌溶液にトルエン中の 1, 3 - ジメチルチオ尿素 ( 0.31 g, 2.94 mmol ) 及びトリエチルアミン ( 0.45 ml, 3.82 mmol ) の溶液を添加した。得られた混合物を還流まで加熱し、カルボニルジイミダゾール ( 0.62 g, 3.67 mmol ) を 15 分にわたって少しずつ添加した。混合物を還流で 3.5 時間加熱し、冷却し、減圧下で蒸発させて茶色の油を得、これをクロマトグラフィーによって精製してエチル 3 - [ 2 - クロロ - 5 - ( 3, 5 - ジメチル - 2, 6 - ジオキソ - 4 - チオキソ - 1, 3, 5 - トリアジナン - 1 - イル ) - 4 - フルオロ - フェニル ] - 5 - メチル - 4 H - イソオキサゾール - 5 - カルボキシレート ( 化合物 47 ) ( 775 mg ) を得た。

$^1\text{H NMR}$  ( 400 MHz,  $\text{CHCl}_3$  ) 7.75 ( d, 1 H ), 7.35 ( d, 1 50

H), 4.25 (q, 2H), 4.0 (d, 1H), 3.75 (s, 6H), 3.4 (d, 1H), 1.7 (s, 3H), 1.3 (t, 3H) ppm.

化合物47の個々の鏡像異性体をキラルクロマトグラフィーによって調製した(上記のと  
おりの<sup>1</sup>H NMR)。

この一般的な方法によって以下のものも調製した。

エチル3-[2-クロロ-5-(3,5-ジメチル-2,6-ジオキソ-4-チオキソ-1,3,5-トリアジナン-1-イル)フェニル]-5-メチル-4H-イソオキサゾール-5-カルボキシレート(化合物36)

<sup>1</sup>H NMR(400MHz, CHCl<sub>3</sub>) 7.7 (d, 1H), 7.55 (d, 1H), 7.25 (m, 1H), 4.25 (q, 2H), 4.0 (d, 1H), 3.75 (s, 6H), 3.4 (d, 1H), 1.7 (s, 3H), 1.3 (t, 3H) ppm.

10

メチル3-[2-クロロ-5-(3,5-ジメチル-2,6-ジオキソ-4-チオキソ-1,3,5-トリアジナン-1-イル)-4-フルオロ-フェニル]-5-トリフルオロメチル-4H-イソオキサゾール-5-カルボキシレート(化合物262)

<sup>1</sup>H NMR(400MHz, CHCl<sub>3</sub>) 7.8 (d, 1H), 7.45 (d, 1H), 4.2 (d, 1H), 4.0 (d, 1H), 3.95 (s, 3H), 3.8 (s, 6H) ppm.

メチル3-[2-クロロ-5-(3,5-ジメチル-2,6-ジオキソ-4-チオキソ-1,3,5-トリアジナン-1-イル)-4-フルオロ-フェニル]-4,5-ジメチル-4H-イソオキサゾール-5-カルボキシレート(化合物145)

20

<sup>1</sup>H NMR(400MHz, CHCl<sub>3</sub>) 7.5 (d, 1H), 7.4 (d, 1H), 3.95 (q, 1H), 3.8 (s, 3H), 3.75 (s, 6H), 1.75 (s, 3H), 1.1 (d, 3H) ppm.

[3-[2-クロロ-5-(3,5-ジメチル-2,6-ジオキソ-4-チオキソ-1,3,5-トリアジナン-1-イル)-4-フルオロ-フェニル]-5-メチル-4H-イソオキサゾール-5-イル]メチルアセテート(化合物51)

<sup>1</sup>H NMR(400MHz, CHCl<sub>3</sub>) 7.75 (d, 1H), 7.35 (d, 1H), 4.2 (q, 2H), 3.75 (s, 6H), 3.5 (d, 1H), 3.25 (d, 1H), 2.1 (s, 3H), 1.5 (s, 3H) ppm.

3-[5-(5-アセチル-5-メチル-4H-イソオキサゾール-3-イル)-4-クロロ-2-フルオロ-フェニル]-1,5-ジメチル-6-チオキソ-1,3,5-トリアジナン-2,4-ジオン(化合物290)

30

<sup>1</sup>H NMR(400MHz, CHCl<sub>3</sub>) 7.7 (d, 1H), 7.4 (d, 1H), 3.95 (d, 1H), 3.75 (s, 6H), 3.2 (d, 1H), 2.35 (s, 3H), 1.55 (s, 3H) ppm.

エチル3-[2,4-ジクロロ-5-(3,5-ジメチル-2,6-ジオキソ-4-チオキソ-1,3,5-トリアジナン-1-イル)フェニル]-5-メチル-4H-イソオキサゾール-5-カルボキシレート(化合物58)

<sup>1</sup>H NMR(400MHz, CHCl<sub>3</sub>) 7.8 (s, 1H), 7.65 (s, 1H), 4.4 (q, 2H), 4.0 (d, 1H), 3.75 (s, 6H), 3.4 (d, 1H), 1.7 (s, 3H), 1.3 (t, 3H) ppm.

40

メチル3-[2-クロロ-5-(3,5-ジメチル-2,6-ジオキソ-4-チオキソ-1,3,5-トリアジナン-1-イル)-4-フルオロ-フェニル]-5-メトキシ-4H-イソオキサゾール-5-カルボキシレート(化合物311)

<sup>1</sup>H NMR(400MHz, CHCl<sub>3</sub>) 7.8 (d, 1H), 7.4 (d, 1H), 3.95 (d, 1H), 3.9 (s, 3H), 3.8 (s, 6H), 3.6 (d, 1H), 3.45 (s, 3H) ppm.

【0130】

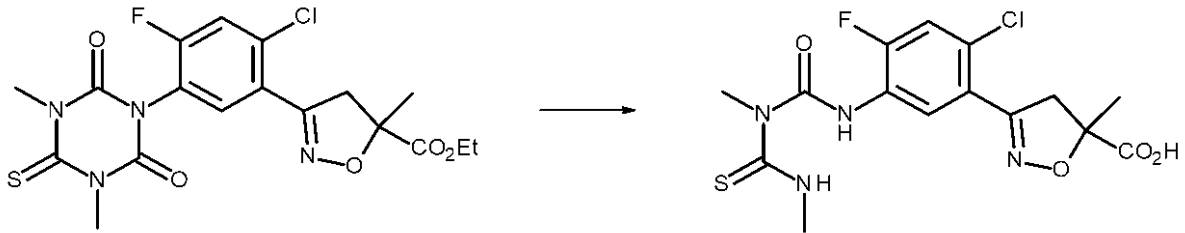
実施例2 3-[2-クロロ-5-(3,5-ジメチル-2,6-ジオキソ-4-チオキソ-1,3,5-トリアジナン-1-イル)-4-フルオロ-フェニル]-5-メチル-

50

## 4 H - イソキサゾール - 5 - カルボン酸 (化合物 45) の調製

ステップ 1 3 - [ 2 - クロロ - 4 - フルオロ - 5 - [ [メチル (メチルカルバモチオイル) カルバモイル] アミノ ] フェニル ] - 5 - メチル - 4 H - イソキサゾール - 5 - カルボン酸の調製

## 【化 18】



10

室温でエタノール (5 ml) 中のエチル 3 - [ 2 - クロロ - 5 - ( 3 , 5 - ジメチル - 2 , 6 - ジオキソ - 4 - チオキソ - 1 , 3 , 5 - トリアジナン - 1 - イル ) - 4 - フルオロ - フェニル ] - 5 - メチル - 4 H - イソキサゾール - 5 - カルボキシレート ( 400 mg、0.87 mmol ) の攪拌懸濁液に水性水酸化ナトリウム ( 2 N ; 0.87 ml、1.75 mmol ) を添加した。得られた混合物を 30 分間攪拌し、水 ( 5 ml )、続いて水性希塩酸 ( 2 ml ) を添加した。混合物をろ過し、固体を乾燥させて 3 - [ 2 - クロロ - 4 - フルオロ - 5 - [ [メチル (メチルカルバモチオイル) カルバモイル] アミノ ] フェニル ] - 5 - メチル - 4 H - イソキサゾール - 5 - カルボン酸を白色の固体 ( 260 mg ) として得た。

20

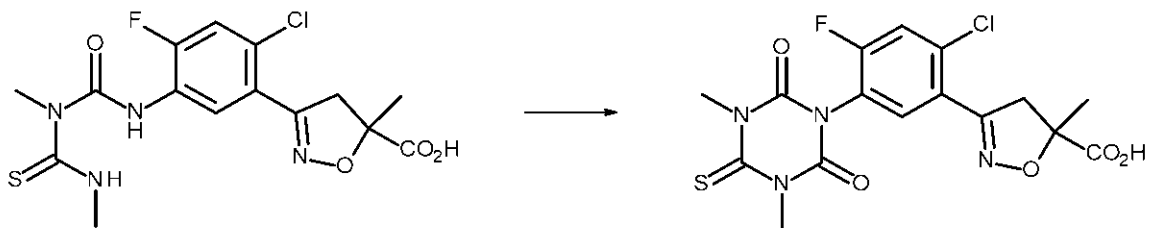
$^1\text{H}$  NMR ( 400 MHz , DMSO ) 13.3 ( br s , 1 H ) , 10.15 ( s , 2 H ) , 7.95 ( d , 1 H ) , 7.7 ( d , 1 H ) , 3.85 ( d , 1 H ) , 3.55 ( s , 3 H ) , 3.4 ( d , 1 H ) , 3.0 ( s , 3 H ) , 1.6 ( s , 3 H ) ppm .

## 【 0131】

ステップ 2 3 - [ 2 - クロロ - 5 - ( 3 , 5 - ジメチル - 2 , 6 - ジオキソ - 4 - チオキソ - 1 , 3 , 5 - トリアジナン - 1 - イル ) - 4 - フルオロ - フェニル ] - 5 - メチル - 4 H - イソキサゾール - 5 - カルボン酸 (化合物 45) の調製

30

## 【化 19】



室温でトルエン ( 3 ml ) 中の 3 - [ 2 - クロロ - 4 - フルオロ - 5 - [ [メチル (メチルカルバモチオイル) カルバモイル] アミノ ] フェニル ] - 5 - メチル - 4 H - イソキサゾール - 5 - カルボン酸 ( 150 mg、0.37 mmol ) の攪拌溶液にトリエチルアミン ( 0.068 ml、0.48 mmol )、続いてカルボニルジ - イミダゾール ( 93 mg、0.56 mmol ) を添加した。次いで、混合物を還流で 3 時間加熱し、冷却し、減圧下で蒸発させて残渣を得、これをクロマトグラフィーによって精製して 3 - [ 2 - クロロ - 5 - ( 3 , 5 - ジメチル - 2 , 6 - ジオキソ - 4 - チオキソ - 1 , 3 , 5 - トリアジナン - 1 - イル ) - 4 - フルオロ - フェニル ] - 5 - メチル - 4 H - イソキサゾール - 5 - カルボン酸 (化合物 45) を白色の固体 ( 35 mg ) として得た。

40

$^1\text{H}$  NMR ( 400 MHz ,  $\text{CHCl}_3$  ) 7.7 ( d , 1 H ) , 7.3 ( d , 1 H ) , 5.2 ( br s , 1 H ) , 3.75 ( d , 1 H ) , 3.7 ( s , 6 H ) , 3.2 ( d

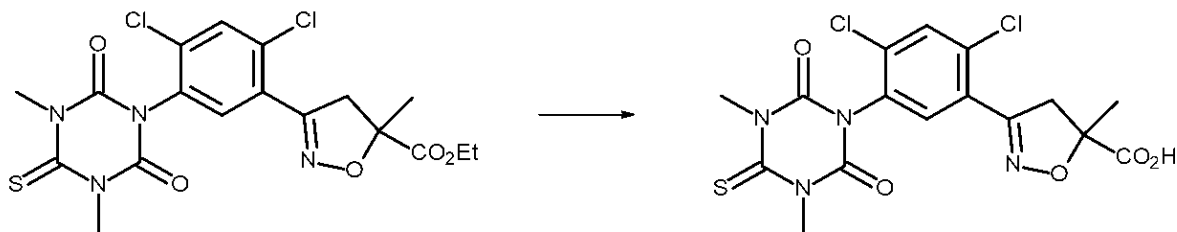
50

, 1 H), 1.5 (s, 3 H) ppm.

【0132】

実施例3 3-[2,4-ジクロロ-5-(3,5-ジメチル-2,6-ジオキソ-4-チオキソ-1,3,5-トリアジナン-1-イル)-フェニル]-5-メチル-4H-イソオキサゾール-5-カルボン酸(化合物56)の調製

【化20】



10

氷酢酸(3ml)中のエチル3-[2,4-ジクロロ-5-(3,5-ジメチル-2,6-ジオキソ-4-チオキソ-1,3,5-トリアジナン-1-イル)フェニル]-5-メチル-4H-イソオキサゾール-5-カルボキシレート(実施例1、ステップ5に記載されているとおり調製された; 300mg、0.63mmol)の攪拌溶液に濃硫酸(0.75ml、13mmol)を添加し、得られた混合物を100℃で1時間加熱した。混合物を周囲温度に冷却し、水中に注ぎ、得られた混合物をジクロロメタンで抽出した。有機抽出物を硫酸マグネシウムで乾燥させ、ろ過し、減圧下で蒸発させて残渣を残し、これをクロマトグラフィーによって精製して3-[2,4-ジクロロ-5-(3,5-ジメチル-2,6-ジオキソ-4-チオキソ-1,3,5-トリアジナン-1-イル)-フェニル]-5-メチル-4H-イソオキサゾール-5-カルボン酸(化合物56)を油(200mg)として得た。

20

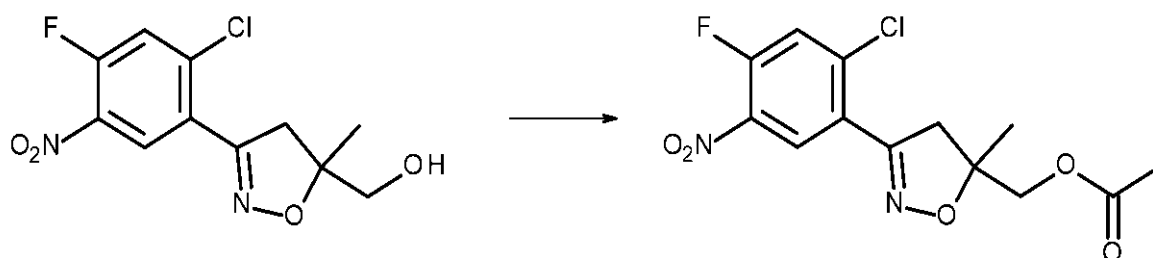
$^1\text{H NMR}$  (400MHz,  $\text{CHCl}_3$ ) 7.75 (s, 1H), 7.65 (s, 1H), 5.75 (br s, 1H), 4.0 (d, 1H), 3.75 (s, 6H), 3.4 (d, 1H), 1.7 (s, 3H) ppm.

【0133】

実施例4 [3-(2-クロロ-4-フルオロ-5-ニトロ-フェニル)-5-メチル-4H-イソオキサゾール-5-イル]メチルアセテートの調製

30

【化21】



40

[3-(2-クロロ-4-フルオロ-5-ニトロ-フェニル)-5-メチル-4H-イソオキサゾール-5-イル]メタノール(実施例1、ステップ2に記載されているとおり調製された; 150mg、0.52mmol)と無水酢酸(60mg、0.57mmol)との混合物を90℃で2時間加熱し、次いで放冷し、減圧下で蒸発させて[3-(2-クロロ-4-フルオロ-5-ニトロ-フェニル)-5-メチル-4H-イソオキサゾール-5-イル]メチルアセテートを油(160mg)として得た。

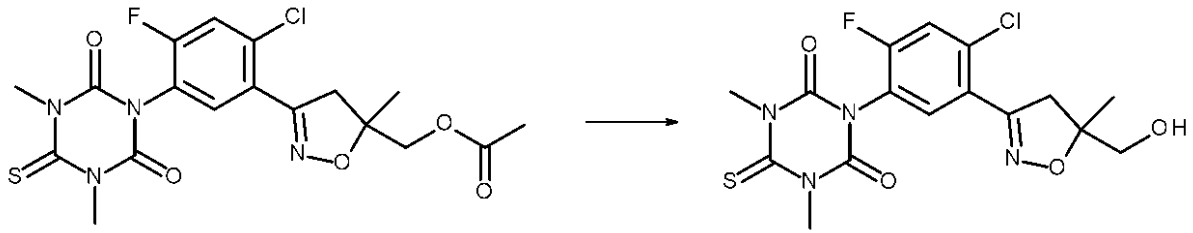
$^1\text{H NMR}$  (400MHz,  $\text{CHCl}_3$ ) 8.45 (d, 1H), 7.45 (d, 1H), 4.3 (d, 1H), 4.15 (d, 1H), 3.5 (d, 1H), 3.25 (d, 1H), 2.1 (s, 3H), 1.5 (s, 3H) ppm.

50

## 【 0 1 3 4 】

実施例 5 3 - [ 4 - クロロ - 2 - フルオロ - 5 - [ 5 - ( ヒドロキシメチル ) - 5 - メチル - 4 H - イソオキサゾール - 3 - イル ] フェニル ] - 1 , 5 - ジメチル - 6 - チオキソ - 1 , 3 , 5 - トリアジナン - 2 , 4 - ジオン ( 化合物 4 9 ) の調製

## 【 化 2 2 】



10

メタノール ( 2 5 m l ) 中の [ 3 - [ 2 - クロロ - 5 - ( 3 , 5 - ジメチル - 2 , 6 - ジオキソ - 4 - チオキソ - 1 , 3 , 5 - トリアジナン - 1 - イル ) - 4 - フルオロ - フェニル ] - 5 - メチル - 4 H - イソオキサゾール - 5 - イル ] メチルアセテート ( 実施例 1 、 ステップ 5 に記載されているとおり調製された ; 2 5 0 m g 、 0 . 5 5 m m o l ) の攪拌溶液に飽和水性炭酸水素ナトリウム ( 7 6 m g 、 0 . 8 9 m m o l ) を添加した。混合物を室温で 1 7 時間攪拌し、減圧下で濃縮し、ジクロロメタンで抽出した。有機抽出物を乾燥させ、減圧下で蒸発させて残渣を残し、これをクロマトグラフィーによって精製して

20

3 - [ 4 - クロロ - 2 - フルオロ - 5 - [ 5 - ( ヒドロキシメチル ) - 5 - メチル - 4 H - イソオキサゾール - 3 - イル ] フェニル ] - 1 , 5 - ジメチル - 6 - チオキソ - 1 , 3 , 5 - トリアジナン - 2 , 4 - ジオン ( 化合物 4 9 ) をガラス質の固体 ( 1 3 8 m g ) として得た。

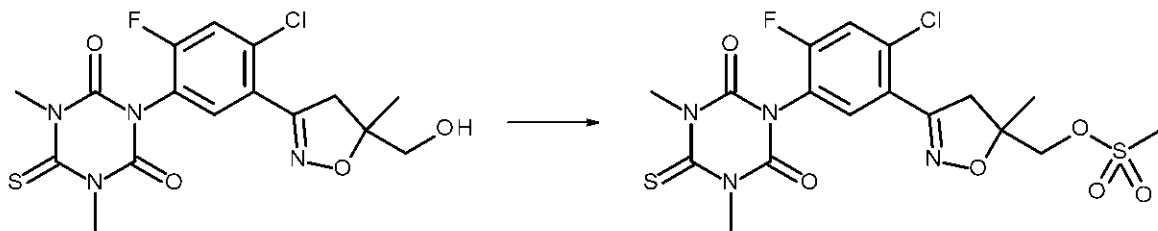
$^1\text{H NMR}$  ( 4 0 0 M H z ,  $\text{CHCl}_3$  ) 7 . 7 5 ( d , 1 H ) , 7 . 5 5 ( d , 1 H ) , 3 . 7 5 ( s , 6 H ) , 3 . 6 5 ( d , 1 H ) , 3 . 5 5 ( d , 1 H ) , 3 . 3 ( d , 1 H ) , 3 . 2 ( d , 1 H ) , 1 . 4 5 ( s , 3 H ) p p m ( O H 観 察 さ れ ず ) .

## 【 0 1 3 5 】

実施例 6 [ 3 - [ 2 - クロロ - 5 - ( 3 , 5 - ジメチル - 2 , 6 - ジオキソ - 4 - チオキソ - 1 , 3 , 5 - トリアジナン - 1 - イル ) - 4 - フルオロ - フェニル ] - 5 - メチル - 4 H - イソオキサゾール - 5 - イル ] メチルメタンサルホネート ( 化合物 5 3 ) の調製

30

## 【 化 2 3 】



40

トルエン ( 3 m l ) 中の 3 - [ 4 - クロロ - 2 - フルオロ - 5 - [ 5 - ( ヒドロキシメチル ) - 5 - メチル - 4 H - イソオキサゾール - 3 - イル ] フェニル ] - 1 , 5 - ジメチル - 6 - チオキソ - 1 , 3 , 5 - トリアジナン - 2 , 4 - ジオン ( 実施例 5 に記載されているとおり調製された ; 3 8 m g 、 0 . 0 7 7 m m o l ) の攪拌溶液にメタンサルホニルクロリド ( 0 . 1 m l 、 1 . 0 m m o l ) を添加した。得られた溶液を室温で 2 時間攪拌し、減圧下で蒸発させ、残渣をジクロロメタンで抽出した。抽出物を乾燥させ、減圧下で蒸発させて残渣を残し、これをクロマトグラフィーによって精製して [ 3 - [ 2 - クロロ - 5 - ( 3 , 5 - ジメチル - 2 , 6 - ジオキソ - 4 - チオキソ - 1 , 3 , 5 - トリアジナン - 1 - イル ) - 4 - フルオロ - フェニル ] - 5 - メチル - 4 H - イソオキサゾール - 5 - イル ] メチルメタンサルホネート ( 化合物 5 3 ) をガム ( 4 0 m g ) として得た。

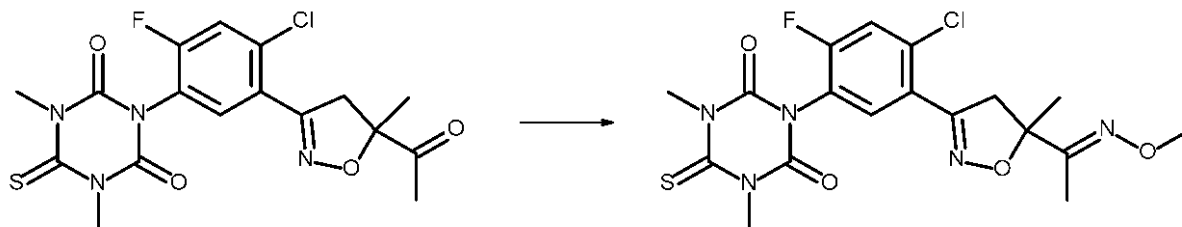
50

$^1\text{H}$  NMR (400 MHz,  $\text{CHCl}_3$ ) 7.7 (d, 1H), 7.35 (d, 1H), 4.3 (q, 2H), 3.75 (s, 6H), 3.65 (d, 1H), 3.25 (d, 1H), 3.1 (s, 3H), 1.4 (s, 3H) ppm.

【0136】

実施例7 3-[4-クロロ-2-フルオロ-5-[5-[N-メトキシ-C-メチル-カルボンイミドイル]-5-メチル-イソキサゾリジン-3-イル]フェニル]-1,5-ジメチル-6-チオキソ-1,3,5-トリアジナン-2,4-ジオン(化合物293)の調製

【化24】



10

エタノール(2.5 ml)及びジクロロメタン(2 ml)中の3-[5-(5-アセチル-5-メチル-4H-イソキサゾール-3-イル)-4-クロロ-2-フルオロ-フェニル]-1,5-ジメチル-6-チオキソ-1,3,5-トリアジナン-2,4-ジオン(実施例1、ステップ5に記載されているとおり調製された; 51 mg、0.12 mmol)の攪拌溶液にO-メチルヒドロキシルアミン塩酸塩(12 mg、0.14 mmol)を添加した。得られた溶液を室温で17時間攪拌し、減圧下で蒸発させ、残渣をジクロロメタンと水との間で分配させた。相を分離し、有機相を乾燥させ、減圧下で蒸発させて残渣を残し、これをクロマトグラフィーによって精製して3-[4-クロロ-2-フルオロ-5-[5-[N-メトキシ-C-メチル-カルボンイミドイル]-5-メチル-イソキサゾリジン-3-イル]フェニル]-1,5-ジメチル-6-チオキソ-1,3,5-トリアジナン-2,4-ジオン(化合物293)をふわふわした固体(52 mg)として得た。

20

$^1\text{H}$  NMR (400 MHz,  $\text{CHCl}_3$ ) 7.7 (d, 1H), 7.35 (d, 1H), 4.1 (d, 1H), 3.85 (s, 3H), 3.8 (s, 6H), 3.2 (d, 1H), 1.95 (s, 3H), 1.6 (s, 3H) ppm.

30

この一般的な方法によって以下のものも調製した。

3-[4-クロロ-2-フルオロ-5-[5-[N-ヒドロキシ-C-メチル-カルボンイミドイル]-5-メチル-イソキサゾリジン-3-イル]フェニル]-1,5-ジメチル-6-チオキソ-1,3,5-トリアジナン-2,4-ジオン(化合物296)

$^1\text{H}$  NMR (400 MHz,  $\text{CHCl}_3$ ) 7.7 (d, 1H), 7.35 (d, 1H), 5.7 (br s, 1H), 3.9 (d, 1H), 3.75 (s, 6H), 3.3 (d, 1H), 2.0 (s, 3H), 1.65 (s, 3H) ppm.

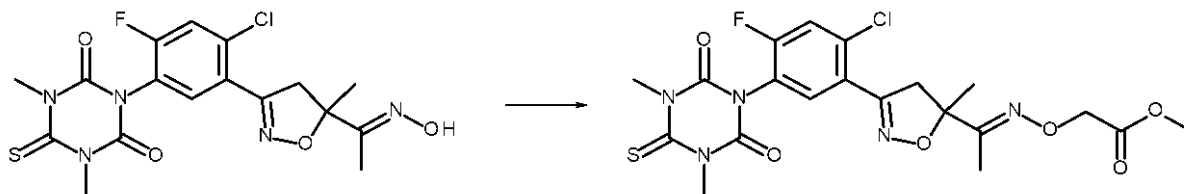
【0137】

実施例8 メチル2-[1-[3-[2-クロロ-5-(3,5-ジメチル-2,6-ジオキソ-4-チオキソ-1,3,5-トリアジナン-1-イル)-4-フルオロ-フェニル]-5-メチル-4H-イソキサゾール-5-イル]エチリデンアミノ]オキシアセテート(化合物299)の調製

40

50

## 【化25】



4 - メチルペンタン - 2 - オン ( 2 m l ) 中の 3 - [ 4 - クロロ - 2 - フルオロ - 5 - [ 5 - [ N - ヒドロキシ - C - メチル - カルボンイミドイル ] - 5 - メチル - イソオキサゾリジン - 3 - イル ] フェニル ] - 1 , 5 - ジメチル - 6 - チオキソ - 1 , 3 , 5 - トリアジナン - 2 , 4 - ジオン ( 実施例 7 に記載されているとおり調製された ; 40 m g , 0 . 09 m m o l ) の溶液にプロモ酢酸メチル ( 0 . 01 m l , 0 . 1 m m o l ) 、続いて炭酸カリウム ( 12 . 5 m g , 0 . 09 m m o l ) 及びヨウ化カリウム ( 触媒的 ) を添加した。得られた混合物を電子レンジ中 100 で 1 時間加熱し、放冷し、溶媒を減圧下で蒸発させて固体を残し、これをクロマトグラフィーによって精製してメチル 2 - [ 1 - [ 3 - [ 2 - クロロ - 5 - ( 3 , 5 - ジメチル - 2 , 6 - ジオキソ - 4 - チオキソ - 1 , 3 , 5 - トリアジナン - 1 - イル ) - 4 - フルオロ - フェニル ] - 5 - メチル - 4 H - イソオキサゾール - 5 - イル ] エチリデンアミノ ] オキシアセテート ( 化合物 299 ) をガム ( 20 m g ) として得た。

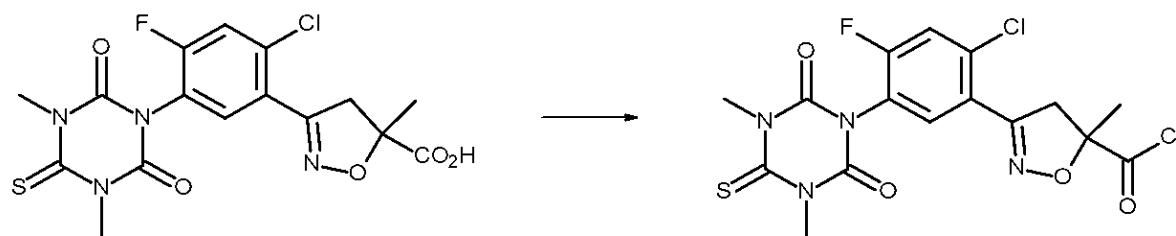
$^1\text{H NMR}$  ( 400 MHz ,  $\text{CHCl}_3$  ) 7 . 7 ( d , 1 H ) , 7 . 35 ( d , 1 H ) , 4 . 6 ( s , 2 H ) , 4 . 0 ( d , 1 H ) , 3 . 8 ( s , 6 H ) , 3 . 7 ( s , 3 H ) , 3 . 2 ( d , 1 H ) , 2 . 0 ( s , 3 H ) , 1 . 6 ( s , 3 H ) p p m .

## 【0138】

実施例 9 3 - [ 2 - クロロ - 5 - ( 3 , 5 - ジメチル - 2 , 6 - ジオキソ - 4 - チオキソ - 1 , 3 , 5 - トリアジナン - 1 - イル ) - 4 - フルオロ - フェニル ] - 5 - メチル - 4 H - イソオキサゾール - 5 - カルボキサミド ( 化合物 308 ) の調製

ステップ 1 3 - [ 2 - クロロ - 5 - ( 3 , 5 - ジメチル - 2 , 6 - ジオキソ - 4 - チオキソ - 1 , 3 , 5 - トリアジナン - 1 - イル ) - 4 - フルオロ - フェニル ] - 5 - メチル - 4 H - イソオキサゾール - 5 - カルボニルクロリドの調製

## 【化26】



0 でジクロロメタン ( 2 m l ) 中の 3 - [ 2 - クロロ - 5 - ( 3 , 5 - ジメチル - 2 , 6 - ジオキソ - 4 - チオキソ - 1 , 3 , 5 - トリアジナン - 1 - イル ) - 4 - フルオロ - フェニル ] - 5 - メチル - 4 H - イソオキサゾール - 5 - カルボン酸 ( 実施例 3 に記載されているとおり調製された ; 42 m g , 0 . 10 m m o l ) の攪拌溶液に塩化オキサリル ( 0 . 01 m l , 0 . 11 m m o l ) 、続いてジメチルホルムアミド ( 滴 ) を添加した。得られた溶液を 5 分間攪拌し、次いで周囲温度まで温まるようにし、直接使用した。

## 【0139】

ステップ 2 3 - [ 2 - クロロ - 5 - ( 3 , 5 - ジメチル - 2 , 6 - ジオキソ - 4 - チオキソ - 1 , 3 , 5 - トリアジナン - 1 - イル ) - 4 - フルオロ - フェニル ] - 5 - メチル - 4 H - イソオキサゾール - 5 - カルボキサミド ( 化合物 308 ) の調製

10

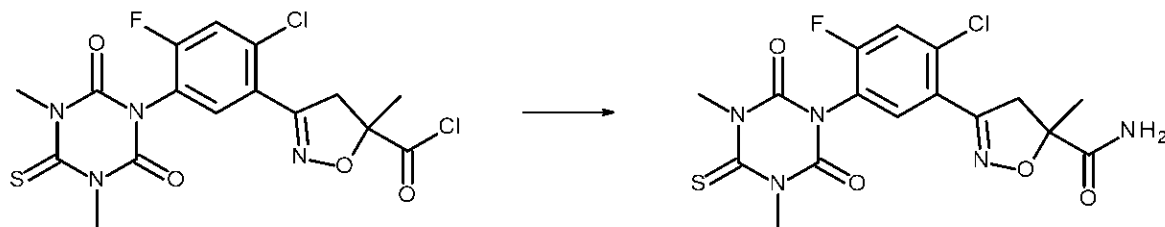
20

30

40

50

## 【化 2 7】



0 でジクロロメタン (2 ml) 中の 3 - [ 2 - クロロ - 5 - ( 3 , 5 - ジメチル - 2 , 6 - ジオキソ - 4 - チオキソ - 1 , 3 , 5 - トリアジナン - 1 - イル ) - 4 - フルオロ - フェニル ] - 5 - メチル - 4 H - イソオキサゾール - 5 - カルボニルクロリドの攪拌溶液に水性濃アンモニア (0.5 ml、30 mmol) を添加した。得られた溶液を 30 分間攪拌し、次いで減圧下で蒸発させて白色の固体を残し、これを水で倍散して 3 - [ 2 - クロロ - 5 - ( 3 , 5 - ジメチル - 2 , 6 - ジオキソ - 4 - チオキソ - 1 , 3 , 5 - トリアジナン - 1 - イル ) - 4 - フルオロ - フェニル ] - 5 - メチル - 4 H - イソオキサゾール - 5 - カルボキサミド (化合物 308) を白色の固体 (35 mg) として得た。

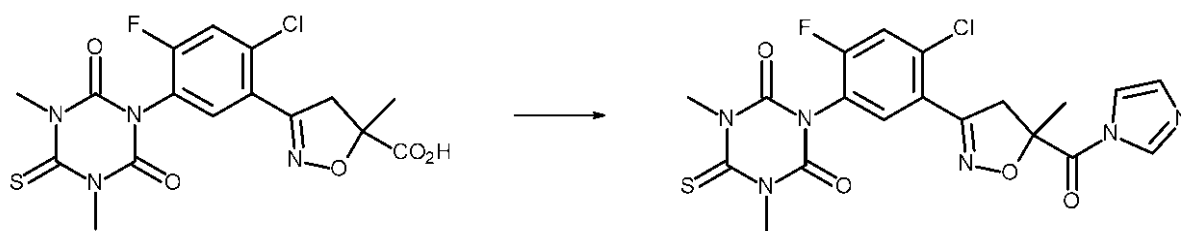
$^1\text{H NMR}$  (400 MHz,  $d_6$ -DMSO) 7.9 (m, 2H), 7.6 (br s, 1H), 7.4 (br s, 1H), 3.8 (d, 1H), 3.65 (s, 6H), 1.6 (s, 3H) ppm (1つのCHは水抑制のために観察されず)。

## 【 0 1 4 0】

実施例 10 3 - [ 2 - クロロ - 5 - ( 3 , 5 - ジメチル - 2 , 6 - ジオキソ - 4 - チオキソ - 1 , 3 , 5 - トリアジナン - 1 - イル ) - 4 - フルオロ - フェニル ] - 5 - メチル - N - メチルスルホニル - 4 H - イソオキサゾール - 5 - カルボキサミド (化合物 284) の調製

ステップ 1 3 - [ 4 - クロロ - 2 - フルオロ - 5 - [ 5 - ( イミダゾール - 1 - カルボニル ) - 5 - メチル - 4 H - イソオキサゾール - 3 - イル ] フェニル ] - 1 , 5 - ジメチル - 6 - チオキソ - 1 , 3 , 5 - トリアジナン - 2 , 4 - ジオンの調製

## 【化 2 8】



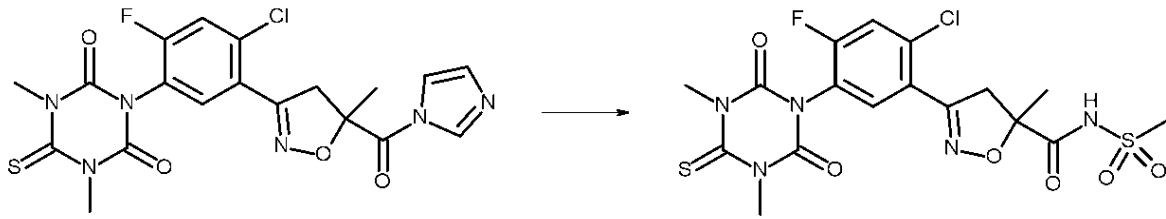
周囲温度でジクロロメタン (5 ml) 中の 3 - [ 2 - クロロ - 5 - ( 3 , 5 - ジメチル - 2 , 6 - ジオキソ - 4 - チオキソ - 1 , 3 , 5 - トリアジナン - 1 - イル ) - 4 - フルオロ - フェニル ] - 5 - メチル - 4 H - イソオキサゾール - 5 - カルボン酸 (実施例 3 に記載されているとおり調製された; 400 mg、0.93 mmol) 及びトリエチルアミン (0.17 ml、0.93 mmol) の攪拌溶液にカルボニルジイミダゾール (234 mg、1.4 mmol) を添加した。得られた溶液を 45 分間攪拌し、次いで溶媒を減圧下で蒸発させて 3 - [ 4 - クロロ - 2 - フルオロ - 5 - [ 5 - ( イミダゾール - 1 - カルボニル ) - 5 - メチル - 4 H - イソオキサゾール - 3 - イル ] フェニル ] - 1 , 5 - ジメチル - 6 - チオキソ - 1 , 3 , 5 - トリアジナン - 2 , 4 - ジオンを得、これを直接使用した。

## 【 0 1 4 1】

ステップ 2 3 - [ 2 - クロロ - 5 - ( 3 , 5 - ジメチル - 2 , 6 - ジオキソ - 4 - チオキソ - 1 , 3 , 5 - トリアジナン - 1 - イル ) - 4 - フルオロ - フェニル ] - 5 - メチル

- N - メチルスルホニル - 4 H - イソオキサゾール - 5 - カルボキサミド (化合物 284) の調製

【化 29】



周囲温度でジクロロメタン (5 ml) 中の 3 - [ 4 - クロロ - 2 - フルオロ - 5 - [ 5 - ( イミダゾール - 1 - カルボニル ) - 5 - メチル - 4 H - イソオキサゾール - 3 - イル ] フェニル ] - 1, 5 - ジメチル - 6 - チオキソ - 1, 3, 5 - トリアジナン - 2, 4 - ジオン (200 mg、0.42 mmol) 及びメタンスルホンアミド (82 mg、0.84 mmol) の攪拌溶液に DBU (0.13 ml、0.84 mmol) を添加した。得られた溶液を 40 時間攪拌し、次いで減圧下で蒸発させて黄色の油を残し、これをクロマトグラフィーによって精製して 3 - [ 2 - クロロ - 5 - ( 3, 5 - ジメチル - 2, 6 - ジオキソ - 4 - チオキソ - 1, 3, 5 - トリアジナン - 1 - イル ) - 4 - フルオロ - フェニル ] - 5 - メチル - N - メチルスルホニル - 4 H - イソオキサゾール - 5 - カルボキサミド (化合物 284) を白色の固体 (52 mg) として得た。

$^1\text{H NMR}$  (400 MHz,  $\text{CHCl}_3$ ) 9.1 (br s, 1H), 7.7 (d, 1H), 7.4 (d, 1H), 4.0 (d, 1H), 3.75 (s, 6H), 3.45 (d, 1H), 3.3 (s, 3H), 1.75 (s, 3H) ppm.

この一般的な方法によって以下のものも調製した。

3 - [ 2 - クロロ - 5 - ( 3, 5 - ジメチル - 2, 6 - ジオキソ - 4 - チオキソ - 1, 3, 5 - トリアジナン - 1 - イル ) - 4 - フルオロ - フェニル ] - N - (ジメチルスルファモイル) - 5 - メチル - 4 H - イソオキサゾール - 5 - カルボキサミド (化合物 305)

$^1\text{H NMR}$  (400 MHz,  $\text{CHCl}_3$ ) 8.95 (br s, 1H), 7.7 (d, 1H), 7.4 (d, 1H), 4.0 (d, 1H), 3.75 (s, 6H), 3.45 (d, 1H), 2.95 (s, 6H), 1.75 (s, 3H) ppm.

【0142】

配合物実施例

【0143】

配合例

【表 2】

水和剤	a)	b)	c)
有効成分	25%	50%	75%
リグノスルホン酸ナトリウム	5%	5%	-
ラウリル硫酸ナトリウム	3%	-	5%
ジイソブチルナフタレンスルホン酸ナトリウム	-	6%	10%
フェノールポリエチレングリコールエーテル (7~8mol のエチレンオキシド)	-	2%	-
高分散ケイ酸	5%	10%	10%
カオリン	62%	27%	-

【0144】

組み合わせを補助剤と十分に混合し、混合物を好適なミル中において十分に粉碎して、水で希釈して所望の濃度の懸濁液とすることが可能である水和剤が得られる。

【0145】

乳化性濃縮物

有効成分 10%

オクチルフェノールポリエチレングリコールエーテル 3%  
(4~5 molのエチレンオキシド)

ドデシルベンゼンスルホン酸カルシウム 3%

ヒマシ油ポリグリコールエーテル(35 molのエチレンオキシド) 4%

シクロヘキサノン 30%

キシレン混合物 50%

【0146】

植物の保護に使用可能であるいずれかの要求される希釈率のエマルジョンをこの濃縮物から水による希釈によって得ることが可能である。

10

【0147】

【表3】

粉剤	a)	b)	c)
有効成分	5%	6%	4%
タルカム	95%	-	-
カオリン	-	94%	-
無機充填材	-	-	96%

20

【0148】

直ちに使用可能な粉剤は、組み合わせとキャリアとを混合し、混合物を好適なミル中において粉碎することにより得られる。

【0149】

押し出し顆粒

有効成分 15%

リグノスルホン酸ナトリウム 2%

カルボキシメチルセルロース 1%

カオリン 82%

【0150】

組み合わせを補助剤と混合及び粉碎し、混合物を水で湿らせる。混合物を押し出し、次いで空気流中で乾燥させる。

30

【0151】

被被覆顆粒

有効成分 8%

ポリエチレングリコール(mol.wt.200) 3%

カオリン 89%

【0152】

ミキサ中において、微細に粉末化した組み合わせを、ポリエチレングリコールで湿らせたカオリンに均一に適用する。これにより、粉剤を含まない被覆顆粒が得られる。

40

【0153】

懸濁液濃縮物

有効成分 40%

プロピレングリコール 10%

ノニルフェノールポリエチレングリコールエーテル(15 molのエチレンオキシド)  
6%

リグノスルホン酸ナトリウム 10%

カルボキシメチルセルロース 1%

シリコーン油(75%水中エマルジョンの形態) 1%

水 32%

50

## 【0154】

微細に粉碎した組み合わせを補助剤と完全に混合し、これにより懸濁液濃縮物を得、これから、いずれかの所望の希釈率の懸濁液を水による希釈によって得ることが可能である。

## 【0155】

## 緩効性カプセル懸濁液

28部の組み合わせを2部の芳香族溶剤及び7部のトルエンジイソシアネート/ポリメチレン-ポリフェニルイソシアネート-混合物(8:1)と混合する。この混合物を、1.2部のポリビニルアルコール、0.05部の脱泡剤及び51.6部の水の混合物中において、所望される粒径が達成されるまで乳化させる。このエマルジョンに5.3部の水中の2.8部の1,6-ジアミノヘキサンの混合物を添加する。混合物を重合反応が完了するまで攪拌する。

10

## 【0156】

得られたカプセル懸濁液を、0.25部の増粘剤及び3部の分散剤を添加することにより安定化させる。カプセル懸濁液配合物は、28%の有効成分を含有する。中度のカプセル直径は、8~15ミクロンである。

## 【0157】

得られる配合物を目的に好適な装置中において水性懸濁液として種子に適用する。

## 【0158】

## 生物学の実施例

## 発芽前の生物学的効力

20

雑草及び/又は作物の種子をポット中の標準的な土壌中に播種した。温室内の制御された条件下(24/16、昼/夜;14時間の光;65%湿度)で1日間栽培した後、0.5%の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)溶液中の技術的な有効成分の配合物に由来するスプレー水溶液を植物に噴霧して、テスト化合物の所望の最終用量を与えた。

## 【0159】

次いで、テスト植物を温室内の制御された条件下(24/16、昼/夜;14時間の光;65%湿度)で育て、1日2回水を与えた。13日後、テストを評価した(100=植物に対する全損傷;0=植物に対する損傷なし)。結果を以下の表2に示す。

30

## 【0160】

40

50

【表 4】

表2

化合物	率 (g/ha)	種					
		AMAPA	LOLPE	EPHHL	SETFA	ECHCG	IPOHE
36	250	70	10	70	90	90	40
45	250	100	100	100	100	100	100
47	250	100	70	100	100	100	100
47 (鏡像異性体A)	250	100	50	100	100	60	90
47 (鏡像異性体B)	250	100	40	100	100	50	80
49	250	100	90	100	100	90	90
51	250	100	90	100	100	90	80
53	250	100	70	-	100	60	0
56	250	90	10	10	10	0	30
58	250	90	0	0	0	0	60
145	250	100	90	100	100	90	100
262	250	-	30	0	50	30	0
284	250	100	40	100	70	30	100
290	250	100	90	100	100	90	100
293	250	100	90	100	100	90	50
296	250	100	80	90	100	80	90
299	250	100	60	90	60	0	80
305	250	100	30	60	90	30	80
308	250	100	60	80	90	10	50
311	250	100	10	50	90	10	70

## 【0161】

発芽後の生物学的効力

雑草及び/又は作物の種子をポット中の標準的な土壤中に播種した。温室内の制御された条件下(24/16、昼/夜; 14時間の光; 65%湿度)で8日間栽培した後、0.5%の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)溶液中の技術的な有効成分の配合物に由来するスプレー水溶液を植物に噴霧して、テスト化合物の所望の最終用量を与えた。

## 【0162】

次いで、テスト植物を温室内の制御された条件下(24/16、昼/夜; 14時間の光; 65%湿度)で育て、1日2回水を与えた。13日後、テストを評価した(100 = 植物に対する全損傷; 0 = 植物に対する損傷なし)。結果を以下の表3に示す。

## 【0163】

【表 5】

表3

化合物	率 (g/ha)	種								
		AMAPA	CHEAL	EPHHL	IPOHE	ELEIN	LOLPE	DIGSA	SETFA	ECHCG
36	250	100	90	90	70	50	50	100	100	100
45	250	100	100	100	100	100	100	100	100	100
47	250	100	100	100	100	100	100	100	100	100
47 (鏡像異性体A)	250	100	100	90	100	90	70	100	100	100
47 (鏡像異性体B)	250	100	100	100	100	100	100	100	100	100
49	250	100	100	100	100	90	60	90	100	70
51	250	100	100	100	90	80	50	100	100	30
53	250	90	90	90	80	80	40	70	40	30
56	250	100	90	80	90	80	30	80	90	90
58	250	90	90	70	100	90	30	80	90	90
145	250	100	100	100	100	100	100	100	100	100
262	250	40	30	60	50	40	0	50	30	20
284	250	100	100	90	100	100	80	100	100	100
290	250	100	100	100	100	100	90	100	90	90
293	250	100	100	100	100	90	60	100	90	30
296	250	100	100	80	90	90	70	70	80	30
299	250	100	100	90	90	90	90	80	100	100
305	250	100	100	100	100	100	100	100	100	100
308	250	100	100	90	100	100	90	100	100	100
311	250	90	90	90	90	90	50	80	100	90

10

20

30

40

50

## フロントページの続き

(33)優先権主張国・地域又は機関

英国(GB)

(31)優先権主張番号 2002209.1

(32)優先日 令和2年2月18日(2020.2.18)

(33)優先権主張国・地域又は機関

英国(GB)

(74)代理人 100111796

弁理士 服部 博信

(74)代理人 100183379

弁理士 藤代 昌彦

(72)発明者 ウィリアムス ジョン

イギリス アールジー 4 2 6 イーワイ パークシャー ブラックネル シンジェンタ ジーロズ ヒル  
インターナショナル リサーチ センター シンジェンタ リミテッド内

(72)発明者 マシューズ クリストファー ジョン

イギリス アールジー 4 2 6 イーワイ パークシャー ブラックネル シンジェンタ ジーロズ ヒル  
インターナショナル リサーチ センター シンジェンタ リミテッド内

(72)発明者 ウィットینگム ウィリアム ガイ

イギリス アールジー 4 2 6 イーワイ パークシャー ブラックネル シンジェンタ ジーロズ ヒル  
インターナショナル リサーチ センター シンジェンタ リミテッド内

審査官 高森 ひとみ

(56)参考文献 特開平 0 9 - 0 2 5 2 7 0 ( J P , A )

特開平 0 9 - 1 3 2 5 6 9 ( J P , A )

米国特許出願公開第 2 0 1 8 / 0 2 3 0 1 3 9 ( U S , A 1 )

WANG, Da-Wei et al. , Discovery of Novel N-Isoxazolinyphenyltriazinones as Promising Pro  
toporphyrinogen IX Oxidase Inhibitors , Journal of Agricultural and Food Chemistry , 201  
9年 , Vol.67, No.45 , pp.12382-12392 , DOI: 10.1021/acs.jafc.9b04844

(58)調査した分野 (Int.Cl. , D B 名)

C 0 7 D

A 0 1 P

A 0 1 N

C A p l u s / R E G I S T R Y ( S T N )