(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2012년12월17일
(11) 등록번호 10-1213248
(24) 등록일자 2012년12월11일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C07D 251/18 (2006.01) *C07D 401/12* (2006.01)
(21) 출원번호 10-2005-7014463
(22) 출원일자(국제) 2004년01월23일
심사청구일자 2008년12월23일
(85) 번역문제출일자 2005년08월05일
(65) 공개번호 10-2005-0098894
(43) 공개일자 2005년10월12일
(86) 국제출원번호 PCT/EP2004/000538
(87) 국제공개번호 WO 2004/069814
국제공개일자 2004년08월19일
(30) 우선권주장
03002438.4 2003년02월05일
유럽특허청(EPO)(EP)
03016680.5 2003년08월01일
유럽특허청(EPO)(EP)
(56) 선행기술조사문헌
KR1019990087338 A*
WO199847877 A1*
WO199621640 A1*
*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

(73) 특허권자
바이엘 크롭사이언스 아게
독일 40789 몬하임 알프레드-노벨-스트라세 50
(72) 발명자
아렌스 하르트무트
독일 60598 프랑크푸르트 뫼르펠더 란트스트라쎄 19
디트리히 한스요르그
독일 65719 호프하임 암 쉬테그크로인츠 3베
(뒷면에 계속)
(74) 대리인
제일특허법인, 장성구

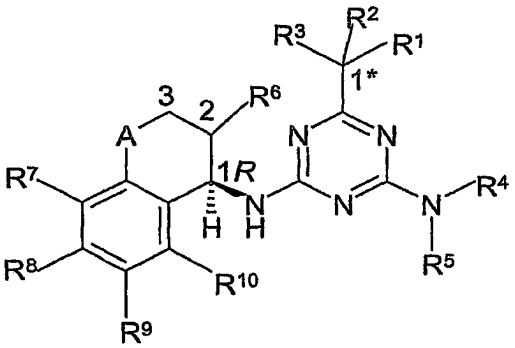
전체 청구항 수 : 총 19 항 심사관 : 송건형

(54) 발명의 명칭 **키랄 바이사이클릭 라디칼로 N-치환된 아미노1,3,5-트라이아진, 이것의 제조방법, 이것의 조성물 및제초제 및 식물 성장 조절제로서의 이것의 용도**

(57) 요 약

본 발명은 화학식 I의 광학적 활성 화합물 또는 이것의 염, 이것의 제조방법, 이것의 조성물 및 제초제 또는 식물 성장 조절제로서의 이것의 용도에 관한 것으로서, 이때 화학식 I에서 여러 다양한 기호들은 본원에 정의된 바와 같다. 또한, 본 발명은 본원에서 정의된 화학식 III, V 및 XIII의 신규한 중간체에 관한 것이다:

화학식 I



(72) 발명자

민 클레멘스

독일 65795 하테르샤임 로쎄르트스트라쎄 61

아울러 토마스

독일 65812 바드 소덴 보너 스트라쎄 15

비링어 헤르만

독일 65817 엡스테인 아이켄베그 26

힐스 마르틴

독일 65510 이드스타인 암 이츠텔그룬트 5베

케네 하인즈

독일 65719 호프하임 일티스베그 7아

메네 후베르트

독일 65719 호프하임 암 알텐 바흐 8아

특허청구의 범위

청구항 1

삭제

청구항 2

삭제

청구항 3

삭제

청구항 4

삭제

청구항 5

삭제

청구항 6

삭제

청구항 7

삭제

청구항 8

삭제

청구항 9

삭제

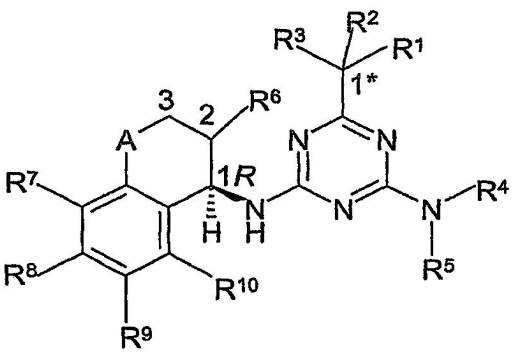
청구항 10

삭제

청구항 11

화학식 I의 광학적 활성 화합물 또는 그의 농학적으로 허용가능한 염:

화학식 I



상기 식에서,

R^1은 H 또는 할로겐이거나; 할로겐, (C_1-C_4)알킬 및 (C_1-C_4)할로알킬로 구성된 그룹에서 선택된 하나 이상의 라디

칼에 의해 치환되거나 비치환된 (C_1-C_6)알킬, (C_1-C_6)할로알킬, [(C_1-C_4)알콕시](C_1-C_6)알킬, (C_3-C_6)사이클로알킬이거나; 또는 (C_2-C_6)알켄일, (C_2-C_6)알카이닐, (C_2-C_6)할로알켄일, (C_4-C_6)사이클로알켄일, (C_4-C_6)할로사이클로알켄일, (C_1-C_6)알콕시 또는 (C_1-C_6)할로알콕시이고;

R^2는 H, 할로겐, (C_1-C_6)알킬 또는 (C_1-C_4)알콕시이거나; 또는

R^1 및 R^2는 부착된 탄소 원자와 함께 (C_3-C_6)사이클로알킬 또는 (C_4-C_6)사이클로알켄일 고리를 형성할 수 있고;

R^3은 H, (C_1-C_6)알킬, (C_1-C_4)알콕시 또는 할로겐이고;

R^4 및 R^5는 각각 독립적으로 H, (C_1-C_4)알킬, (C_1-C_4)할로알킬, (C_3-C_4)알켄일, (C_3-C_4)할로알켄일, (C_3-C_4)알카이닐, (C_3-C_4)할로알카이닐 또는 아실 라디칼이고;

R^6은 (C_1-C_6)알킬이고;

R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 H, (C_1-C_4)알킬, (C_1-C_3)할로알킬, 할로겐, (C_1-C_3)알콕시, (C_1-C_3)할로알콕시 또는 CN이고;

A는 CH_2, O 또는 직접 결합이고;

1로 표시된 위치에서의 입체화학적 배열은 60 내지 100% (R)의 입체화학적 순도를 갖는 (R)이고;

2로 표시된 위치에서의 입체화학적 배열은 60 내지 100% (S)의 입체화학적 순도를 갖는 (S)이다.

청구항 12

제 11 항에 있어서,

R^1이 H, 할로겐, (C_1-C_4)알킬이거나; 하나 또는 두개의 (C_1-C_4)알킬기에 의해 치환되거나 비치환된 (C_1-C_4)할로알킬, [(C_1-C_4)알콕시](C_1-C_4)알킬, (C_3-C_6)사이클로알킬이거나, 또는 (C_3-C_4)할로사이클로알킬, (C_2-C_4)알켄일, (C_2-C_4)할로알켄일, (C_2-C_4)알카이닐, (C_1-C_4)알콕시 또는 (C_1-C_4)할로알콕시이고;

R^2가 H 또는 (C_1-C_4)알킬이거나; 또는

R^1 및 R^2는 부착된 탄소 원자와 함께 (C_3-C_6)사이클로알킬 고리를 형성하고;

R^3이 H, (C_1-C_4)알킬, (C_1-C_2)알콕시 또는 할로겐이고;

R^4가 H, (C_1-C_4)알킬, (C_1-C_4)할로알킬, (C_3-C_4)알켄일, (C_3-C_4)알카이닐 또는 1 내지 12개의 탄소 원자를 갖는 아실 라디칼이고;

R^5가 (C_1-C_4)알킬이고;

R^6이 (C_1-C_3)알킬이고;

R^7, R^8, R^9 및 R^{10}이 각각 독립적으로 H, (C_1-C_3)알킬, 할로겐 또는 (C_1-C_3)알콕시인 점을 특징으로 하는, 화학식 I의 광학적 활성 화합물 또는 그의 염.

청구항 13

제 11 항에 있어서,

R^1이 H 또는 (C_1-C_3)알킬이고;

R^2가 H 또는 (C_1-C_3)알킬이거나; 또는

R^1 및 R^2는 부착된 탄소 원자와 함께 (C_3-C_4)사이클로알킬 고리를 형성하고;

R^3이 H, (C_1-C_2)알킬, 메톡시, Cl 또는 F이고;

R^4가 H, (C_1-C_3)알킬, (C_1-C_3)할로알킬, 알릴, 프로파길, CHO, -CO(C_1-C_3)알킬 또는 -CO(C_1-C_3)할로알킬이고;

R^5가 (C_1-C_2)알킬이고;

R^6이 (C_1-C_3)알킬이고;

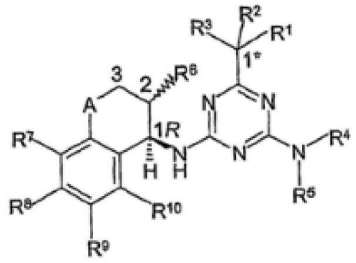
R^7, R^8, R^9 및 R^{10}이 각각 독립적으로 H, 메틸, F 또는 Cl인 점을 특징으로 하는, 화학식 I의 광학적 활성 화합물 또는 그의 염.

청구항 14

제 11 항에 있어서,

상기 화합물이 화학식 Ib의 화합물 또는 그의 염에서 선택된 것인 점을 특징으로 하는, 화학식 I의 광학적 활성 화합물 또는 그의 염:

화학식 Ib



[상기 식에서,

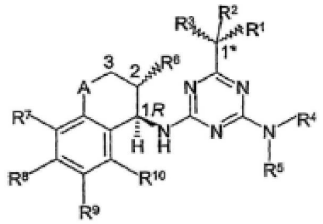
R^1 내지 R^{10}, A기 및, 1 및 2로 표시된 위치에서의 입체화학적 배열은 화학식 I에 정의된 바와 같되, 단, R^1, R^2 및 R^3 중 둘 이상은 구조적으로 동일하다]

청구항 15

제 11 항에 있어서,

상기 화합물이 화학식 Ic의 화합물 또는 그의 염에서 선택된 것인 점을 특징으로 하는, 화학식 I의 광학적 활성 화합물 또는 그의 염:

화학식 Ic



[상기 식에서,

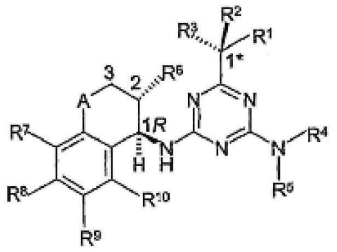
R^1 내지 R^{10}, A기 및, 1 및 2로 표시된 위치에서의 입체화학적 배열은 화학식 I에 정의된 바와 같되, 단, R^1, R^2 및 R^3은 구조적으로 서로 상이하다]

청구항 16

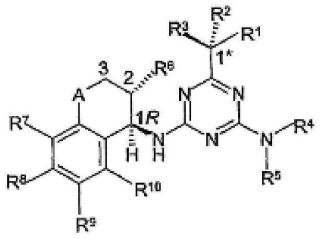
제 11 항에 있어서,

상기 화합물은 화학식 If 또는 Ig의 화합물 또는 그의 혼합물에서 선택된 것인 점을 특징으로 하는, 화학식 I의 광학적 활성 화합물 또는 그의 염:

화학식 If



화학식 Ig



[상기 식에서,

R^1이 (C_1-C_6)알킬, (C_1-C_6)할로알킬 또는 (C_3-C_6)사이클로알킬이고;

R^2가 H이고;

R^3이 (C_1-C_4)알킬 또는 할로겐이고;

R^6이 (C_1-C_6)알킬이고;

다른 다양한 기호들은 화학식 I에 정의된 바와 같되, 단, R^1, R^2 및 R^3은 구조적으로 서로 상이하고,

1로 표시된 위치에서의 입체화학적 배열은 60 내지 100% (R)의 입체화학적 순도를 갖는 (R)이고;

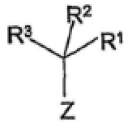
2로 표시된 위치에서의 입체화학적 배열은 60 내지 100% (S)의 입체화학적 순도를 갖는 (S)이다]

청구항 17

제 11 항에서 정의된 화학식 I의 화합물 또는 그의 염의 제조방법으로서,

a) 화학식 II의 화합물을 화학식 III의 바이구아니딘 또는 그의 산 부가 염과 반응시킴을 포함하는 제조방법:

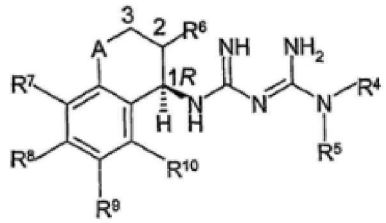
화학식 II



[상기 식에서,

R^1, R^2 및 R^3은 화학식 I에서 정의된 바와 같고, Z는 카복실 에스터, 카복실 오르토에스터, 카복실산 클로라이드, 카복사마이드, 사이아노, 카복실산 무수물 또는 트라이클로로메틸로 구성된 그룹에서 선택되는 작용기이다]

화학식 III



[상기 식에서,

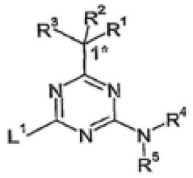
R^4, R^5, R^6, R^7, R^8, R^9, R^{10} 및 A와 1 및 2로 표시된 위치에서의 입체화학적 배열은 화학식 I에서 정의된 바와 같다]

청구항 18

제 11 항에서 정의된 화학식 I의 화합물 또는 그의 염의 제조방법으로서,

b) 화학식 IV의 화합물을 화학식 V의 아민 또는 그의 산 부가 염과 반응시킴을 포함하는 제조방법:

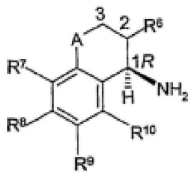
화학식 IV



[상기 식에서,

R^1, R^2, R^3, R^4 및 R^5와 1^*로 표시된 위치에서의 입체화학적 배열은 화학식 I에서 정의된 바와 같고, L^1은 이탈기이다]

화학식 V



[상기 식에서,

R^6, R^7, R^8, R^9, R^{10} 및 A와 1 및 2로 표시된 위치에서의 입체화학적 배열은 화학식 I에서 정의된 바와 같다]

청구항 19

제 11 항에서 정의된 화학식 I의 화합물 또는 그의 염의 제조방법으로서,

c) 화학식 I의 R^4 또는 R^5 중 하나가 (C_1-C_4)알킬, (C_1-C_4)할로알킬, (C_3-C_4)알켄일, (C_3-C_4)할로알켄일, (C_3-C_4)알카이닐 또는 (C_3-C_4)할로알카이닐인 경우,

상기 R^4 또는 R^5가 각각 H이고, 기타 라디칼과 입체화학적 배열은 화학식 I에서 정의된 바와 같은 상응하는 화학식 I의 화합물을 화학식 VI 또는 VII의 알킬화제와 각각 반응시킴을 포함하는 제조방법:

화학식 VI

R^4-L^2

화학식 VII

R^5-L^2

[상기 화학식 VI 및 VII에서, L^2는 이탈기이다]

청구항 20

제 11 항에서 정의된 화학식 I의 화합물 또는 그의 염의 제조방법으로서,

d) 화학식 I의 R^4 또는 R^5 중 하나가 아실 라디칼인 경우,

상기 R^4 또는 R^5가 각각 H이고, 기타 라디칼과 입체화학적 배열은 화학식 I에서 정의된 바와 같은 상응하는 화학식 I의 화합물을 화학식 VIII 또는 IX의 아실화제와 각각 반응시킴을 포함하는 제조방법:

화학식 VIII

R^4-L^3

화학식 IX

R^5-L^3

[상기 화학식 VIII 및 IX에서,

R^4 및 R^5는 각각 화학식 I에서 정의된 아실 라디칼이고, L^3는 이탈기이다]

청구항 21

제 11 항에서 정의된 화학식 I의 화합물 또는 그의 염의 제조방법으로서,

e) 제조되는 화학식 I의 화합물에서 정의된 배열과 상이한 배열을 갖는 화학식 I의 화합물을 분해시킴을 포함하는 제조방법.

청구항 22

제 11 항 내지 제 16 항 중 어느 한 항에 따른 화학식 I의 화합물 또는 그의 염 하나 이상 및 농작물 보호용 보조제제를 포함하는 제초성 또는 식물 성장 조절성 조성물.

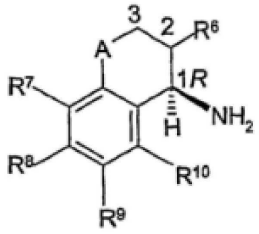
청구항 23

제 11 항 내지 제 16 항 중 어느 한 항에 따른 화학식 I의 화합물 또는 그의 염 하나 이상을 효과량으로 식물, 식물 씨앗 또는 경작 지역에 적용하는 것을 포함하는 해로운 식물의 방제 또는 식물 성장의 조절 방법.

청구항 24

화학식 V의 화합물 또는 그의 염:

화학식 V



[상기 식에서,

R^6은 (C_1-C_6)알킬이고;

R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 H, (C_1-C_4)알킬, (C_1-C_3)할로알킬, 할로겐, (C_1-C_3)알콕시, (C_1-C_3)할로알콕시 또는 CN이고;

A는 CH_2, O 또는 직접 결합이고;

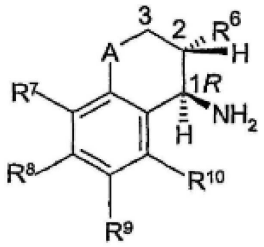
1로 표시된 위치에서의 입체화학적 배열은 60 내지 100% (R)의 입체화학적 순도를 갖는 (R)이고,

2로 표시된 위치에서의 입체화학적 배열은 60 내지 100% (S)의 입체화학적 순도를 갖는 (S)이다]

청구항 25

화학식 Va의 화합물 또는 그의 염:

화학식 Va



[상기 식에서,

R^6은 메틸이고;

R^7 및 R^{10}은 각각 독립적으로 H 또는 메틸이고;

R^8은 H, 메틸, Cl 또는 F이고;

R^9는 H, 메틸, Cl, F 또는 Br이고;

A는 직접 결합, CH_2 또는 O이고;

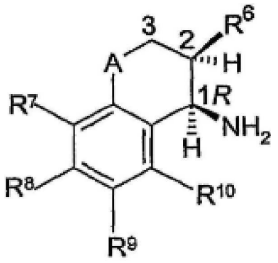
1로 표시된 위치에서의 입체화학적 배열은 60 내지 100% (R)의 입체화학적 순도를 갖는 (R)이고,

2로 표시된 위치에서의 입체화학적 배열은 60 내지 100% (S)의 입체화학적 순도를 갖는 (S)이다]

청구항 26

화학식 Vb의 화합물 또는 그의 염:

화학식 Vb



[상기 식에서,

R^6은 메틸이고;

R^7 및 R^{10}은 각각 독립적으로 H 또는 메틸이고;

R^8은 H, 메틸, Cl 또는 F이고;

R^9는 H, 메틸, Cl, F 또는 Br이고;

A는 직접 결합, CH_2 또는 O이고;

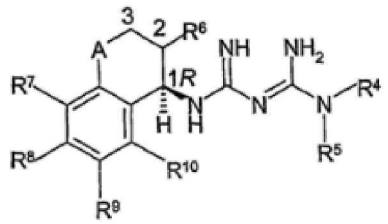
1로 표시된 위치에서의 입체화학적 배열은 60 내지 100% (R)의 입체화학적 순도를 갖는 (R)이고,

2로 표시된 위치에서의 입체화학적 배열은 60 내지 100% (R)의 입체화학적 순도를 갖는 (R)이다]

청구항 27

화학식 III의 화합물 또는 그의 염:

화학식 III



[상기 식에서,

R^4 및 R^5는 각각 독립적으로 H, (C_1-C_4)알킬, (C_1-C_4)할로알킬, (C_3-C_4)알켄일, (C_3-C_4)할로알켄일, (C_3-C_4)알카이닐, (C_3-C_4)할로알카이닐 또는 아실 라디칼이고;

R^6은 (C_1-C_6)알킬이고;

R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 H, (C_1-C_4)알킬, (C_1-C_3)할로알킬, 할로겐, (C_1-C_3)알콕시, (C_1-C_3)할로알콕시 또는 CN이고;

A는 CH_2, O 또는 직접 결합이고;

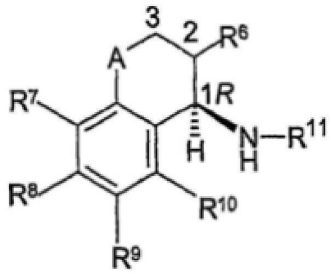
1로 표시된 위치에서의 입체화학적 배열은 60 내지 100% (R)의 입체화학적 순도를 갖는 (R)이고,

2로 표시된 위치에서의 입체화학적 배열은 60 내지 100% (S)의 입체화학적 순도를 갖는 (S)이다]

청구항 28

화학식 XIII의 화합물 또는 그의 염:

화학식 XIII



[상기 식에서,

R^6은 (C_1-C_6)알킬이고;

R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 H, (C_1-C_4)알킬, (C_1-C_3)할로알킬, 할로겐, (C_1-C_3)알콕시, (C_1-C_3)할로알콕시 또는 CN이고;

R^{11}은 할로겐, (C_1-C_4)알콕시 및 (C_1-C_4)알킬티오로 구성된 그룹에서 선택되는 하나 이상의 라디칼에 의해 치환되거나 비치환된 아실이고;

A는 CH_2, O 또는 직접 결합이고;

1로 표시된 위치에서의 입체화학적 배열은 60 내지 100% (R)의 입체화학적 순도를 갖는 (R)이고,

2로 표시된 위치에서의 입체화학적 배열은 60 내지 100% (S)의 입체화학적 순도를 갖는 (S)이되,

단, 화학식 XIII의 화합물 또는 그의 염 중

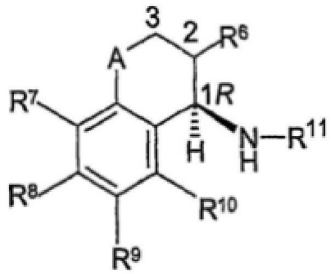
(i) A는 직접 결합이고, R^6은 메틸이고; R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 수소이고, R^{11}은 아세틸이거나, 또는

(ii) A는 CH_2이고, R^6은 메틸이고, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 수소이고, R^{11}은 아세틸인 경우는 제외한다]

청구항 29

화학식 XIII의 화합물 또는 그의 염:

화학식 XIII



[상기 식에서,

R^6은 메틸이고;

R^7 및 R^{10}은 각각 독립적으로 H 또는 메틸이고;

R^8은 H, 메틸, Cl 또는 F이고;

R^9는 H, 메틸, Cl, F 또는 Br이고;

R^{11}은 할로겐, (C_1-C_4)알콕시 및 (C_1-C_4)알킬티오로 구성된 그룹에서 선택된 하나 이상의 라디칼에 의해 치환되거나 비치환된 (C_1-C_6)알칸오일이고;

A는 직접 결합, CH_2 또는 O이고;

1로 표시된 위치에서의 입체화학적 배열은 60 내지 100% (R)의 입체화학적 순도를 갖는 (R)이고,

2로 표시된 위치에서의 입체화학적 배열은 60 내지 100% (S)의 입체화학적 순도를 갖는 (S)이다]

명 세 서

기 술 분 야

[0001] 본 발명은 일부 2-아미노-4-(바이사이클릴)아미노-6-(치환된 알킬)-1,3,5-트라이아진 유도체의 광학적 활성 이성질체, 이것의 제조방법, 이것의 조성물 및 중간체, 및 원치 않는 식물 또는 초목의 방제를 위한 제초제 또는 식물 성장 조절제로서의 이것의 용도에 관한 것이다.

배 경 기 술

[0002] WO 97/31904 및 EP-A-0864567는 2-아미노-4-바이사이클릴-아미노-1,3,5-트라이아진 및 제초제 및 식물 성장 조절제로서의 이것의 용도를 기술한다. 상기 문헌은 원칙적으로 하나 이상의 키랄 센터를 포함하는 일부 라디칼로 치환된 다양한 아미노-1,3,5-트라이아진 유도체를 일반적으로 기술한다. 그러나, 상세하게 개시된 유도체는 오직 입체이성질체의 혼합물, 예컨대 거울상이성질체의 라세미 혼합물 또는 라세미 형태의 부분입체이성질체의 혼합물만이 기술되었다. 일부 경우, 공지의 활성 물질은 사용시에 단점, 예컨대 위해 식물에 대한 불충분한 제초 작용, 날씨, 기후 및/또는 토양 조건에 관계된 너무 엄격한 적용 제한, 잡초에 대한 너무 좁은 스펙트럼 또는 너무 부족한 작물 선택도를 갖는다.

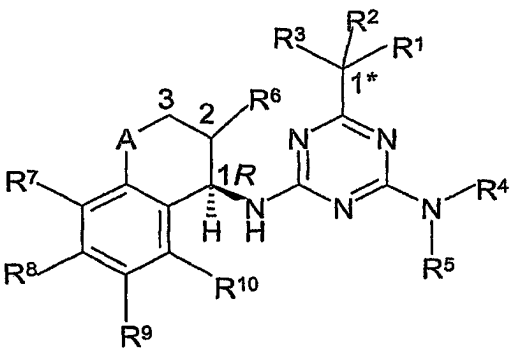
[0003] 특정하게 치환된 2-아미노-1,3,5-트라이아진 유도체의 특정 광학적 활성 이성질체가 종래의 화합물 또는 상응하는 라세미 화합물 또는 이것의 다른 광학적 이성질체와 비교시에 유용한 적용 특성를 가짐을 놀랍게도 발견하였다.

[0004] 예컨대, 이들은 놀랍게도 이것의 입체이성질체 또는 이것의 라세미 혼합물 보다 더 강력한 제초 효과를 갖는, 일련의 위해 잡초의 방제를 위해 사용될 수 있는 매우 유효한 제초제이다.

발명의 상세한 설명

[0005] 본 발명은 화학식 I의 광학적 활성 화합물 또는 이것의 농학적으로 허용가능한 염에 관한 것이다:

화학식 I

[0006] 

[0007] 상기 식에서,

R^1은 H, 할로겐, 또는 비치환되거나 할로겐, (C_1-C_4)알킬 및 (C_1-C_4)할로알킬로 구성된 그룹에서 선택된 하나 이상의 라디칼에 의해 치환된 (C_1-C_6)알킬, (C_1-C_6)할로알킬, $[(C_1-C_4)$알콕시$](C_1-C_6)$알킬, (C_3-C_6)사이클로알킬이거나, 또는 (C_2-C_6)알켄일, (C_2-C_6)알카이닐, (C_2-C_6)할로알켄일, (C_4-C_6)사이클로알켄일, (C_4-C_6)할로사이클로알켄일, (C_1-C_6)알콕시 또는 (C_1-C_6)할로알콕시이고;

[0008] R^2는 H, 할로겐, (C_1-C_6)알킬 또는 (C_1-C_4)알콕시이거나; 또는

[0009] R^1 및 R^2는 부착된 탄소 원자와 함께 (C_3-C_6)사이클로알킬 또는 (C_4-C_6)사이클로알켄일 고리를 형성할 수 있고;

[0010] R^3은 H, (C_1-C_6)알킬, (C_1-C_4)알콕시 또는 할로겐이고;

[0011] R^4 및 R^5는 각각 독립적으로 H, (C_1-C_4)알킬, (C_1-C_4)할로알킬, (C_3-C_4)알켄일, (C_3-C_4)할로알켄일, (C_3-C_4)알카이닐, (C_3-C_4)할로알카이닐 또는 아실 라디칼이고;

[0012] R^6은 H, (C_1-C_6)알킬 또는 (C_1-C_6)알콕시이고;

[0013] R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 H, (C_1-C_4)알킬, (C_1-C_3)할로알킬, 할로겐, (C_1-C_3)알콕시, (C_1-C_3)할로알콕시 또는 CN이고;

[0014] A는 CH_2, O 또는 직접 결합이고;

[0015] 1로 표시된 위치에서의 입체화학적 배열은, 이 지점에서의 (R)- 및 (S)-배열을 갖는 입체이성질체의 함량을 기준으로 60 내지 100% (R), 바람직하게는 70 내지 100% (R), 특히 80 내지 100% (R)의 입체화학적 순도를 갖는 (R)이다.

[0016] 참고로, 화학식 I에서 특정 고리 탄소 원자는 1 내지 3으로 표시된 반면, 트라이아진 고리와 결합되는 탄소 원자는 1^*로 표시된다.

[0017] 본 발명에서 1번으로 표시되는 위치에서의 입체화학적 배열은 칸-인골드-프레로그 시스템에 따라서 주로 (R)로서 정해지지만, 본 발명의 주제 대상(subject matter)은 또한 화학식 I 및 이것의 혼합물에 의해 포함되는 다른 위치에서의 모든 입체이성질체에 관한 것이다. 이런 화학식 I의 화합물은 예컨대 하나 이상의 추가적 비대칭 탄소 원자 또는 화학식 I에서는 구체적으로 언급되지 않은 다른 이중 결합을 함유한다. 본 발명은, 순수 이성질체 및 이것의 다소 풍부한 혼합물 모두를 포함하며, 이때 1로 표시된 위치에서의 비대칭 탄소 원자는 R-배열이거나, 혼합인 경우, 동일한 화학 구성의 화합물(들)은 1로 표시된 위치에서 R-배열을 갖거나, R-배열을 갖는 화합물이 우세하게 존재(60% 이상의 R-배열)하면서 다른 비대칭 탄소 원자(들)은 라세미 형태로 존재할 수 있거나, 또는 다소 분해되는 비율로 존재한다. 1로 표시된 위치에서의 입체화학적 배열에 대한 조건을 충족시키는 경우, 이것의 특정 공간적 형태에 의해 정의되는 가능한 입체이성질체, 예컨대 거울상이성질체, 부분입체이성질체, Z- 및 E-이성질체는 모두 화학식 I에 의해 포괄되고, 입체이성질체의 혼합물로부터 통상적인 방법으로 수득되거나, 입체화학적 순수 출발 물질의 사용과 함께 입체 선택적 반응에 의해 제조될 수 있다.

[0018] 라디칼 R^1, R^2 및 R^3의 정의에 따라서, 상기에 언급된 하나의 가능한 추가적 센터는 화학식 I에서 1^*로 표시된 탄소 원자인데, 이 경우 본 발명에 따른 화학식 I의 화합물은 둘 이상의 순수 입체이성질 형태, 즉 원칙적으로 존재하는 4개의 순수 입체 이성질체로부터 선택된 (1R, 1^*R) 및 (1R, 1^*S)로서 존재할 수 있다. 또한, 추가적 비대칭 센터는 화학식 I에서 2로 표시된 탄소 원자에 존재할 수 있는데, 이 경우 본 발명의 화합물은 4개 이상의 순수 입체이성질체 형태로서 존재하되, 이런 추가적 비대칭 탄소 원자 각각은 칸-인골드-프레로그 시스템에 따른 (R) 또는 (S) 배열을 갖는다(즉, 원칙적으로 존재하는 8개의 순수 입체이성질체에서 선택된 배열 (1R, 1^*R, 2R), (1R, 1^*R, 2S), (1R, 1^*S, 2R) 및 (1R, 1^*S, 2S)을 갖는 순수 이성질체이다). 또한, 기 R^1, R^2, R^3, R^4, R^5, R^6, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}의 성질에 따라서, 추가적 비대칭 탄소 원자가 존재할 수 있다.

[0019] 이후에 도시되는 화학식의 경우, 달리 정의되지 않으면 특정 입체화학적 배열은 임의의 위치, 예컨대 1, 2 또는

1*로 표시된 탄소 원자에서 정의되는데, 이는 표시된 위치에서의 입체화학적 순도가 60 내지 100%, 바람직하게는 70 내지 100%, 특히 80 내지 100%, 가장 바람직하게는 100%임을 의미한다. "입체화학적 순도"는 주어진 키랄 센터를 갖는 입체이성질체의 총 양의 백분율로서 표시되는 언급된 입체이성질체의 양을 의미한다.

[0020] 또한 본 발명은 각 작용기가 존재하는 경우, 임의의 케토 및 에놀 호변이체 형태 및 이것의 혼합물 및 이것의 염을 포함한다.

[0021] 화학식 I의 화합물은 적당한 무기산 또는 유기산, 예컨대 HCl, HBr, H_2SO_4 또는 HNO_3, 또는 단- 또는 이작용성 카복실산 또는 설폰산을 염기성 기, 예컨대 아미노 또는 알킬아미노에 첨가함에 의해 염을 형성할 수 있다.

[0022] 일부 화학식 I의 화합물은 적당한 무기 또는 유기 염기의 첨가에 의해 염을 형성할 수 있다. 이런 화학식 I의 화합물은 "산성 수소 원자", 예컨대 카복실 또는 설포닐기를 함유하는 작용기를 갖되, 이는 아실기의 정의에서의 치환기일 수 있다. 이들 염의 예는 금속 염, 특히 알칼리 금속 염 또는 알칼리 토 금속 염, 바람직하게는 나트륨- 또는 칼륨 염, 또는 비치환되거나 치환된 암모늄 염, 예컨대 암모늄 염 또는 유기 아민의 염, 또는 4급 암모늄 염이 있다.

[0023] 이후의 청구범위를 포함하는 본 특허 명세서에서, 전술된 치환기들은 다음과 같은 의미를 같는다.

[0024] 할로겐은 불소, 염소, 브롬 또는 요오드를 의미한다.

[0025] 라디칼 명칭 앞의 용어 "할로"는 이 라디칼이 부분적으로 또는 완전히 할로겐화된, 즉 F, Cl, Br 또는 I, 또는 이들의 임의의 조합에 의해 치환된 것을 의미한다.

[0026] 표현 "(C_1-C_6)알킬"은 1, 2, 3, 4, 5 또는 6의 탄소 원자(괄호 안의 C-원자의 범위에 의해 나타냄)를 갖는 비분지형 또는 분지형 비-환형 포화 탄화수소 라디칼, 예컨대 메틸, 에틸, 프로필, 아이소프로필, 1-뷰틸, 2-뷰틸, 2-메틸프로필 또는 3급-뷰틸 라디칼을 의미한다. "알콕시알킬"과 같은 복합 라디칼 중의 알킬기에도 동일하게 적용된다.

[0027] 달리 정의되지 않은 한 알킬 라디칼 및 복합 기 중의 알킬 라디칼은 1 내지 4의 탄소 원자를 갖는 것이 바람직하다.

[0028] "(C_1-C_6)할로알킬"은 하나 이상의 수소 원자가 같은 수의 동일 또는 상이한 할로겐 원자와 치환된, 표현 (C_1-C_6)알킬에서 언급된 알킬기, 예컨대 모노할로알킬, CH_2F, CH_2Cl, CH_2Br, CH_2I, CH_2CH_2F, CH_2CH_2Cl, CH_2CH_2Br, CH_2CH_2I, $CHFCH_3$, 또는 퍼할로알킬, 예컨대 CF_3, CCl_3, CF_2CF_3, CCl_2CCl_3, CF_2CCl_3 및 CCl_2CClF_2, 또는 CHF_2, CF_3CH_2, CHF_2CF_2, CH_2FCHCl 또는 $CHCl_2$를 의미한다. "(C_1-C_4)할로알킬"은 특히 모노할로알킬, 퍼할로알킬, CF_3, CHF_2, CH_2F, $CHFCH_3$, CF_2CF_3, CH_2FCHCl, CH_2Cl, CCl_3, $CHCl_2$ 또는 CH_2CH_2Cl이 바람직하다.

[0029] "[(C_1-C_4)알콕시](C_1-C_6)알킬"은 (C_1-C_4)알콕시에 의해 치환된 (C_1-C_6)알킬을 의미한다.

[0030] "(C_1-C_6)알콕시"는 탄소 사슬이 표현 "(C_1-C_6)알킬"에서의 의미를 갖는 알콕시기이다. "할로알콕시"는 예컨대 OCF_3, $OCHF_2$, OCH_2F, CF_3CF_2O, OCH_2CF_3 또는 OCH_2CH_2Cl이다.

[0031] "(C_2-C_6)알켄일"은 여기서 언급된 범위에 해당하는 탄소 원자의 수를 갖고, 임의의 위치의 각각의 불포화 라디칼에 위치될 수 있는 하나 이상의 이중 결합을 함유하는 비분지형 또는 분지형 비환형 탄소 사슬을 의미한다. 이와 같은 "(C_2-C_6)알켄일"은 예컨대 비닐, 알릴, 2-메틸-2-프로펜일, 2-부텐일, 펜텐일, 2-메틸펜텐일 또는 헥센일 기를 가리킨다.

[0032] "(C_2-C_6)알카이닐"은 여기서 언급된 범위에 해당하는 탄소 원자의 수를 갖고, 임의의 위치의 각각의 불포화 라디칼에 위치될 수 있는 하나의 삼중 결합을 함유하는 비분지형 또는 분지형 비환형 탄소 사슬을 의미한다. 이와 같은 "(C_2-C_6)알카이닐일"은 예컨대 프로파길, 1-메틸-2-프로파이닐, 2-뷰타이닐 또는 3-뷰타이닐기를 가리킨다.

[0033] "(C_3-C_6)사이클로알킬"은 단환 알킬 라디칼, 예컨대 사이클로프로필, 사이클로뷰틸, 사이클로펜틸 또는 사이클로헥실 라디칼을 지시한다.

[0034] "(C_4-C_6)사이클로알켄일"은 카보사이클릭 비방향족이며 4 내지 6의 탄소 원자를 갖는 부분적으로 불포화된 고리,

예컨대 1-사이클로뷰텐일, 2-사이클로뷰텐일, 1-사이클로펜텐일, 2-사이클로펜텐일, 3-사이클로펜텐일, 또는 1-사이클로헥센일, 2-사이클로헥센일, 3-사이클로헥센일, 1,3-사이클로헥사디엔일 또는 1,4-사이클로헥사디엔일을 지시한다.

[0035] 아실 라디칼은 넓은 의미로 OH기의 제거에 의해 일반적으로 형성되는 유기산의 라디칼로서, 예컨대 카복실산의 라디칼 및 이것으로부터 유도된 산의 라디칼, 예로 티오카복실산, 비치환된 또는 N-치환된 이미노카복실산, 또는 카보닉 모노에스터의 라디칼, 비치환된 또는 N-치환된 카밤산, 비치환된 또는 N-치환된 티오카밤산, 설폰산, 설핀산, 포스폰산, 및 포스핀산이 있다. 예컨대 아실은 폼일, 알킬카보닐 예컨대 [(C_1-C_4)알킬]카보닐, 페닐카보닐, 알킬옥시카보닐, 페닐옥시카보닐, 벤질옥시카보닐, 알킬설폰일, 알킬설핀일, 페닐설폰일, N-알킬-1-이미노알킬 및 유기산의 다른 라디칼이 있다. 이와 관련하여, 라디칼은 알킬 또는 페닐 잔기 각각에서 추가로 치환될 수 있는데, 예컨대 알킬 잔기에서 할로겐, 알콕시, 페닐 및 페녹시로 구성된 그룹으로부터 선택되는 하나 이상의 라디칼에 의해 치환될 수 있고; 페닐 잔기에서의 치환기의 예는 할로겐, (C_1-C_4)알킬, (C_1-C_4)알콕시, (C_1-C_4)할로알킬, (C_1-C_4)할로알콕시 및 나이트로로 구성된 그룹에서 선택된 단치환된 또는 다치환된(바람직하게는 삼치환된) 동일한 또는 상이한 라디칼이 있으며, 예컨대 o-, m- 및 p-톨릴, 다이메틸페닐, 2-, 3- 및 4-클로로페닐, 2-, 3- 및 4-트라이플루오로- 및 -트라이클로로페닐, 2,4-, 3,5-, 2,5- 및 2,3-다이클로로페닐, o-, m- 및 p-메톡시페닐이다.

[0036] 아실 라디칼은 1 내지 24의 탄소 원자, 바람직하게는 1 내지 18, 보다 바람직하게는 1 내지 12, 가장 바람직하게는 1 내지 7, 특히 1 내지 4의 탄소 원자를 보통 갖는다. 보다 좁은 의미로서의 아실은, 예컨대 알칸산, 알켄산, 알카인산 또는 아릴카복실산(예컨대, 벤조일)의 라디칼이거나, 또는 예컨대 알콕시카보닐, 알켄일옥시카보닐, 알카이닐옥시카보닐, 아릴옥시카보닐, 알킬설폰일, 알킬설핀일 또는 페닐설폰일이고; 보다 더 좁은 의미로는, 아실은 알칸산의 라디칼, 예컨대 (C_1-C_{24})알칸산, 바람직하게는 (C_1-C_{18})알칸산, 특히 (C_1-C_{12})알칸산, 매우 특별하게는 (C_1-C_6)알칸산 예컨대 폼일, 아세틸 또는 프로피오닐이다.

[0037] 정의 중의 표현 "...로 구성된 그룹에서 선택된 하나 이상의 라디칼"은 구체적인 제한이 명시적으로 정의되지 않는 한, 각 경우에서 언급된 라디칼 기들로부터 선택된 하나 이상의 동일 또는 상이한 라디칼을 의미하는 것으로서 이해된다.

[0038] 다양한 조합에 의해 일반 화학 구조식은 중성 또는 산성 수성 매질에서 불안정하므로 바람직하지 않거나 오직 이것의 안정한 염 또는 분해 생성물 만으로 사용되는 불안정한 작용기(예컨대, 카밤일 라디칼 또는 하이드록시카보닐옥시 라디칼)를 형식적으로 정의할 수 있다.

[0039] 개별적 라디칼이 이미 언급되어진 또는 이후에 언급되는(특히 실시예 표에 도시된 것들) 바람직한 의미 중 하나를 갖거나, 또는 이미 언급되거나 또는 이후에 언급되는 바람직한 의미 중 둘 이상이 조합된, 본 발명에 따른 언급된 화학식 I의 화합물 또는 이것의 염은 특히 보다 강력한 제조 작용, 보다 우수한 선택성 및/또는 보다 용이한 제조성 때문에 특히 중요하다.

[0040] 라디칼 R^1, R^2, R^3, R^4, R^5, R^6, R^7, R^8, R^9, R^{10} 및 A로 구성된 그룹에서 선택된 라디칼이 아래와 같이 정의되는 것이 바람직한 화학식 I의 화합물이 특히 관심대상이며, 이때 라디칼의 정의는 상기 기의 다른 라디칼의 정의와 무관하다. 바람직한 화학식 I의 화합물은 아래에 개시된 둘 이상의 바람직한 의미를 포함하는 상기 기의 라디칼의 조합을 함유한다.

[0041] 다음의 바람직한 정의에서, 기호들이 구체적으로 정의되지 않은 경우 이들은 본원에서 전술된 바와 같은 의미임을 일반적으로 이해할 것이다.

[0042] 바람직하게는 R^1은 비치환되거나 하나 이상의, 바람직하게는 하나 또는 둘의 (C_1-C_4)알킬기에 의해 치환된 H, 할로겐, (C_1-C_4)알킬, (C_1-C_4)할로알킬, [(C_1-C_4)알콕시](C_1-C_4)알킬, (C_3-C_6)사이클로알킬이거나, 또는 (C_3-C_4)할로사이클로알킬, (C_2-C_4)알켄일, (C_2-C_4)알카이닐, (C_2-C_4)할로알켄일, (C_1-C_4)알콕시 또는 (C_1-C_4)할로알콕시이고; 보다 바람직하게는 R^1은 H, 할로겐, (C_1-C_4)알킬, (C_3-C_6)사이클로알킬 또는 (C_1-C_4)알콕시이고; 보다 더 바람직하게는 R^1은 H 또는 (C_1-C_4)알킬이고; 가장 바람직하게는 R^1은 H 또는 (C_1-C_3)알킬, 특히 H, 메틸 또는 에틸이다.

[0043] 바람직하게는 R^2는 H 또는 (C_1-C_4)알킬이고; 보다 바람직하게는 R^2는 H이다.

[0044] 바람직하게는 R^1 및 R^2는 부착된 탄소 원자와 함께 (C_3-C_6)사이클로알킬 고리, 특히(C_3-C_4)사이클로알킬을 형성한다.

[0045] 바람직하게는 R^3은 H, (C_1-C_4)알킬, (C_1-C_4)알콕시 또는 할로겐이고; 보다 바람직하게는 R^3은 H, (C_1-C_3)알킬, (C_1-C_4)알콕시, Cl 또는 F이고; 보다 더 바람직하게는 R^3은 H, (C_1-C_2)알킬, 메톡시, 클로로 또는 플루오로이다.

[0046] 바람직하게는 R^4는 H, (C_1-C_4)알킬, (C_1-C_4)할로알킬, (C_3-C_4)알켄일, (C_3-C_4)알카이닐 또는 1 내지 12의 탄소 원자를 갖는 아실 라디칼이고, 상기 아실 라디칼는 CHO, $-CO(C_1-C_6)$알킬, $-CO(C_1-C_6)$할로알킬, $-CO_2(C_1-C_6)$알킬, $-SO_2(C_1-C_6)$알킬, $-CO_2$-페닐 또는 -CO-페닐로 구성된 그룹에서 선택되고, 여기서 각 페닐은 비치환되거나 또는 할로겐, (C_1-C_2)알킬, (C_1-C_2)할로알킬, (C_1-C_2)알콕시, (C_1-C_2)할로알콕시 및 NO_2로 구성된 그룹에서 선택된 하나 이상의 라디칼에 의해 치환되고; 보다 바람직하게는 R^4는 H, (C_1-C_3)알킬, (C_1-C_3)할로알킬, 알릴, 프로파길, CHO, $-CO(C_1-C_3)$알킬 또는 $-CO(C_1-C_3)$할로알킬이고; 보다 더 바람직하게는 R^4는 H, CHO, $COCH_3$, $COCH_2Cl$, $COCH(CH_3)Cl$ 또는 $COCF_3$이고; 가장 바람직하게는 R^4는 H이다.

[0047] 바람직하게는 R^5는 H, (C_1-C_4)알킬 또는 (C_1-C_4)할로알킬이고; 보다 바람직하게는 R^5는 H 또는 (C_1-C_2)알킬이고; 가장 바람직하게는 R^5는 H이다.

[0048] 바람직하게는 R^6은 H, (C_1-C_3)알킬 또는 (C_1-C_3)알콕시이고; 보다 바람직하게는 R^6은 H, 메틸 또는 에틸이다.

[0049] 바람직하게는 R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 H, (C_1-C_3)알킬, 할로겐 또는 (C_1-C_3)알콕시이고; 보다 바람직하게는 R^7, R^8, R^9 및 R^{10}은 각각 독립적으로 H, 메틸, F 또는 Cl이다.

[0050] 바람직하게는 A는 CH_2 또는 직접 결합이다.

[0051] 바람직한 화학식 I의 화합물은

[0052] R^1이 H, 할로겐, (C_1-C_4)알킬, 예컨대 메틸, 에틸, n-프로필 또는 아이소-프로필이거나, 비치환되거나 또는 하나 또는 둘의 (C_1-C_4)알킬기에 의해 치환된 (C_1-C_4)할로알킬, $[(C_1-C_4)$알콕시$](C_1-C_4)$알킬, (C_3-C_6)사이클로알킬이거나, 또는 (C_3-C_4)할로사이클로알킬, (C_2-C_4)알켄일, (C_2-C_4)할로알켄일, (C_2-C_4)알카이닐, (C_1-C_4)알콕시 또는 (C_1-C_4)할로알콕시이고;

[0053] R^2가 H 또는 (C_1-C_4)알킬이거나; 또는

[0054] R^1 및 R^2는 부착된 탄소 원자와 함께 (C_3-C_6)사이클로알킬 고리를 형성하고;

[0055] R^3이 H, (C_1-C_4)알킬, (C_1-C_2)알콕시 또는 할로겐이고(보다 바람직하게는 H, (C_1-C_3)알킬, 메톡시, Cl 또는 F이다);

[0056] R^4가 H, (C_1-C_4)알킬, (C_1-C_4)할로알킬, (C_3-C_4)알켄일, (C_3-C_4)알카이닐 또는 1 내지 12의 탄소 원자를 갖는 아실 라디칼이고(바람직하게는, CHO, $-CO(C_1-C_6)$알킬, $-CO(C_1-C_6)$할로알킬, $-CO_2(C_1-C_6)$알킬, $-SO_2(C_1-C_6)$알킬, $-CO_2$-페닐 또는 -CO-페닐이고, 상기에서, 각 페닐은 비치환되거나 또는 할로겐, (C_1-C_2)알킬, (C_1-C_2)할로알킬, (C_1-C_2)알콕시, (C_1-C_2)할로알콕시 및 NO_2로 구성된 그룹에서 선택된 하나 이상의 라디칼에 의해 치환된다);

[0057] R^5가 H, (C_1-C_4)알킬 또는 (C_1-C_4)할로알킬이고;

[0058] R^6이 H, (C_1-C_3)알킬 또는 (C_1-C_3)알콕시이고;

[0059] R^7, R^8, R^9 및 R^{10}이 각각 독립적으로 H, (C_1-C_3)알킬, 할로겐 또는 (C_1-C_3)알콕시이고;

[0060] A가 CH_2, O 또는 직접 결합(바람직하게는 A는 CH_2 또는 직접 결합이고, 특히 직접 결합이다)인 화합물이다.

[0061] 보다 바람직한 화학식 I의 화합물은

[0062] R^1이 H 또는 (C_1-C_3)알킬이고;

[0063] R^2가 H 또는 (C_1-C_3)알킬이거나; 또는

[0064] R^1 및 R^2는 부착된 탄소 원자와 함께 (C_3-C_4)사이클로알킬 고리를 형성하고;

[0065] R^3이 H, (C_1-C_2)알킬, 메톡시, Cl 또는 F이고;

[0066] R^4가 H, (C_1-C_3)알킬, (C_1-C_3)할로알킬, 알릴, 프로파길, CHO, -CO(C_1-C_3)알킬 또는 -CO(C_1-C_3)할로알킬이고;

[0067] R^5가 H 또는 (C_1-C_2)알킬이고;

[0068] R^6이 H, (C_1-C_3)알킬 또는 (C_1-C_3)알콕시이고;

[0069] R^7, R^8, R^9 및 R^{10}이 각각 독립적으로 H, 메틸, F 또는 Cl이고;

[0070] A가 CH_2, O 또는 직접 결합(바람직하게는 A는 CH_2 또는 직접 결합이고, 특히 직접 결합이다)인 화합물이다.

[0071] 특히 바람직한 화학식 I의 화합물은

[0072] R^1이 H 또는 (C_1-C_2)알킬이고;

[0073] R^2가 H 또는 (C_1-C_2)알킬이고; 또는

[0074] R^1 및 R^2는 부착된 탄소 원자와 함께 사이클로프로필 고리를 형성하고;

[0075] R^3이 H, (C_1-C_2)알킬, Cl 또는 F이고;

[0076] R^4가 H이고;

[0077] R^5가 H이고;

[0078] R^6이 H 또는 (C_1-C_3)알킬이고;

[0079] R^7, R^8, R^9 및 R^{10}이 각각 독립적으로 H, 메틸, F 및 Cl로 구성된 군에서 선택되고;

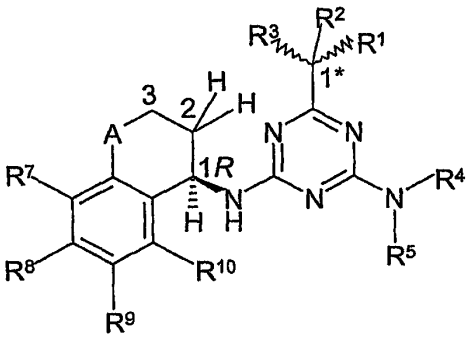
[0080] A가 CH_2, O 또는 직접 결합인 화합물이다.

[0081] 바람직하게는 화학식 I의 화학식 $CR^1R^2R^3$의 라디칼은 (C_1-C_4)알킬, (C_1-C_4)할로알킬, (C_3-C_4)사이클로알킬, 1-(C_1-C_3)알킬-(C_3-C_4)-사이클로알킬 및 (C_3-C_4)할로사이클로알킬로 구성된 그룹에서 선택된 라디칼이고, 보다 바람직하게는 (C_1-C_3)알킬, (C_1-C_4)플루오로알킬, (C_1-C_4)클로로알킬, (C_3-C_4)사이클로알킬, 1-(C_1-C_3)알킬-(C_3-C_4)-사이클로알킬, (C_3-C_4)-플루오로사이클로알킬 또는 (C_3-C_4)클로로사이클로알킬이고, 예로 메틸, 에틸, n-프로필, i-프

로필, n-뷰틸, 2-뷰틸, i-뷰틸, 3급-뷰틸, 1-플루오로-에틸, 1-플루오로-프로필, 1-플루오로-아이소프로필, 1-플루오로-n-뷰틸, 1-클로로-에틸, 1-클로로-프로필, 1-클로로-아이소프로필, 1-클로로-n-뷰틸, 1-메틸-사이클로프로필, 1-클로로-사이클로프로필 또는 1-플루오로-사이클로프로필과 같은 라디칼이다.

[0082] 본 발명의 바람직한 실시양태는 1 및 1*로 표시된 탄소 원자가 모두 키랄이고, 2로 표시된 탄소 원자가 비키랄인 화학식 Ia의 광학적 활성 화합물 또는 이것의 염에 관한 것이다:

화학식 Ia

[0083] 

[0084] 상기 식에서,

[0085] R^1, R^2 및 R^3은 화학식 I에서 정의된 바와 같되, 단, R^1, R^2 및 R^3이 구조적으로 상이하고;

[0086] 다른 다양한 기호들은 화학식 I에 정의된 바와 같고,

[0087] 1로 표시된 탄소 원자에서의 입체화학적 배열은 화학식 I에 정의된 바와 같고,

[0088] 1*로 표시된 탄소 원자에서의 입체화학적 배열은 (R) 또는 (S) 배열 또는 이들의 혼합이고, 이 혼합에는 또한 라세미 혼합물(R,S)이 포함되고, 바람직하게는 라세미 배열 또는 (R) 또는 (S) 배열의 초과가 (R) 및 (S) 배열의 총 합을 기준으로 60 내지 100%, 특히 70 내지 100%, 가장 바람직하게는 80 내지 100%이다.

[0089] R^1이 H, (C_1-C_6)알킬 또는 (C_1-C_6)알콕시이고;

[0090] R^2가 H 또는 (C_1-C_4)알킬이고;

[0091] R^3이 H, (C_1-C_4)알킬 또는 할로겐이고;

[0092] R^4 및 R^5가 각각 H이고;

[0093] R^6이 H이고;

[0094] R^7, R^8, R^9 및 R^{10}이 각각 독립적으로 H, (C_1-C_6)알킬 또는 할로겐이고;

[0095] A가 CH_2, O 또는 직접 결합(보다 바람직하게는 A가 CH_2 또는 직접 결합이고, 특히 직접 결합이다)이되,

[0096] 단, R^1, R^2 및 R^3이 구조적으로 상이한 화학식 Ia의 화합물이 보다 바람직하다.

[0097] R^1이 H, 메틸 또는 에틸이고;

[0098] R^2가 H이고;

[0099] R^3이 H, F, Cl, 메틸 또는 에틸이고;

[0100] R^4 및 R^5가 각각 H이고;

[0101] R^6이 H이고;

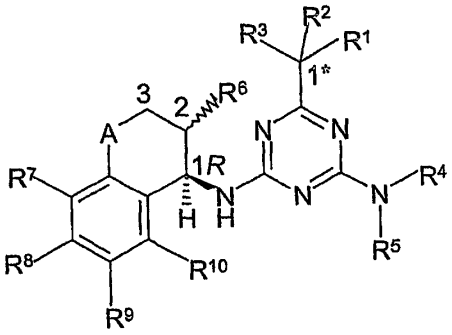
[0102] R^7, R^8, R^9 및 R^{10}이 각각 독립적으로 H, 메틸, Br, Cl 또는 F로 구성된 그룹에서 선택되고;

[0103] A가 CH_2, O 또는 직접 결합(보다 바람직하게는 A가 CH_2 또는 직접 결합이고, 특히 직접 결합이다)이되,

[0104] 단, R^1, R^2 및 R^3이 구조적으로 상이한 화학식 Ia의 화합물이 보다 더 바람직하다.

[0105] 본 발명의 제 2의 바람직한 실시양태는 1 및 2로 표시된 탄소 원자가 모두 키랄이고, 1^*로 표시된 탄소 원자가 비키랄인 화학식 Ib의 광학적 활성 화합물 또는 이것의 염에 관한 것이다:

화학식 Ib

[0106] 

[0107] 상기 식에서,

[0108] R^1, R^2 및 R^3은 화학식 I에서 정의된 바와 같되, 단, R^1, R^2 및 R^3중 둘 이상이 구조적으로 동일하고;

[0109] R^6은 (C_1-C_6)알킬이고;

[0110] 다른 다양한 기호들은 화학식 I에 정의된 바와 같고;

[0111] 1로 표시된 탄소 원자에서의 입체화학적 배열은 화학식 I에 정의된 바와 같고;

[0112] 2로 표시된 탄소 원자에서의 입체화학적 배열은 (R) 또는 (S) 배열 또는 이들의 혼합이고, 이 혼합에는 또한 라세미 혼합물 (R,S)이 포함되고, 바람직하게는 라세미 배열 또는 (R) 또는 (S) 배열의 초과가 (R) 및 (S) 배열의 총 합을 기준으로 60 내지 100%, 특히 70 내지 100%, 가장 바람직하게는 80 내지 100%이다.

[0113] 또한,

[0114] R^1이 H, (C_1-C_6)알킬 또는 (C_1-C_6)알콕시이고;

[0115] R^2가 H 또는 (C_1-C_4)알킬이거나; 또는

[0116] R^1 및 R^2은 부착된 탄소 원자와 함께 (C_3-C_6)사이클로알킬 고리를 형성할 수 있고;

[0117] R^3이 H, (C_1-C_4)알킬 또는 할로겐이고;

[0118] R^4 및 R^5는 각각 H이고;

[0119] R^6이 (C_1-C_6)알킬이고;

[0120] R^7, R^8, R^9 및 R^{10}이 각각 독립적으로 H, (C_1-C_6)알킬 또는 할로겐이고;

[0121] A가 CH_2, O 또는 직접 결합(보다 바람직하게는 A가 CH_2 또는 직접 결합이고, 특히 직접 결합이다)이되,

[0122] 단, R^1, R^2 및 R^3 중 둘 이상이 구조적으로 동일한 화학식 Ib의 화합물이 바람직하다.

[0123] R^1이 H, 메틸 또는 에틸이고;

[0124] R^2가 H이고;

[0125] R^3이 H, F, Cl, 메틸 또는 에틸이고;

[0126] R^4 및 R^5이 각각 H이고;

[0127] R^6이 (C_1-C_4)알킬이고;

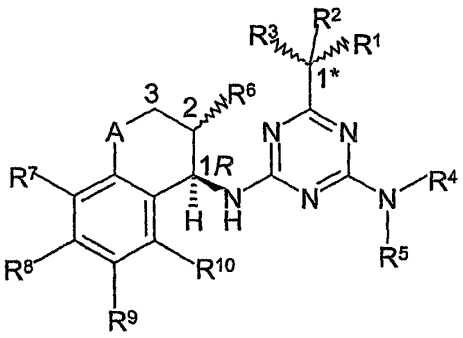
[0128] R^7, R^8, R^9 및 R^{10}이 각각 독립적으로 H, 메틸, Br, Cl 또는 F로 구성된 그룹에서 선택되고;

[0129] A가 CH_2, O 또는 직접 결합(보다 바람직하게는 A가 CH_2 또는 직접 결합이고, 특히 직접 결합이다)이되,

[0130] 단, R^1, R^2 및 R^3 중 둘 이상이 구조적으로 동일한 화학식 Ib의 화합물이 보다 바람직하다.

[0131] 본 발명의 제 3의 바람직한 실시양태는 1, 2 및 1^*로 표시된 탄소 원자가 모두 키랄인 화학식 Ic의 광학적 활성 화합물 또는 이것의 염에 관한 것이다:

화학식 Ic

[0132] 

[0133] 상기 식에서,

[0134] R^1, R^2 및 R^3은 화학식 I에서 정의된 바와 같되, 단, R^1, R^2 및 R^3이 구조적으로 상이하고;

[0135] R^6이 (C_1-C_6)알킬, 바람직하게는 (C_1-C_4)알킬이고;

[0136] 다른 다양한 기호들은 화학식 I에 정의된 바와 같고;

[0137] 1로 표시된 탄소 원자에서의 입체화학적 배열은 화학식 I에 정의된 바와 같고;

[0138] 2 및 1^*로 표시된 탄소 원자 각각에서의 입체화학적 배열은 (R) 또는 (S) 배열 또는 이들의 혼합이고, 이 혼합에는 또한 라세미 혼합물 (R,S)이 포함되고, 바람직하게는 라세미 배열 또는 (R) 또는 (S) 배열의 초과가 (R) 및 (S) 배열의 총 합을 기준으로 60 내지 100%, 특히 70 내지 100%, 가장 바람직하게는 80 내지 100%이다.

[0139] 본 발명의 제 4의 바람직한 실시양태는 1로 표시된 탄소 원자가 키랄이고, 2 및 1^*로 표시된 탄소 원자가 모두 비키랄인 화학식 I의 광학적 활성 화합물 또는 이것의 염에 관한 것으로서,

[0140] 이때 화학식 I에서,

[0141] R^1, R^2 및 R^3은 상기 화학식 I에서 정의된 바와 같되, 단, R^1, R^2 및 R^3중 둘 이상이 구조적으로 동일하고;

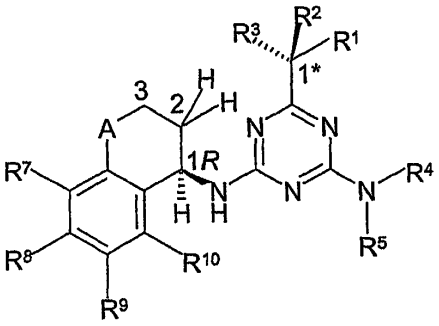
[0142] R^6이 H이고;

[0143] 다른 다양한 기호들은 화학식 I에 정의된 바와 같고;

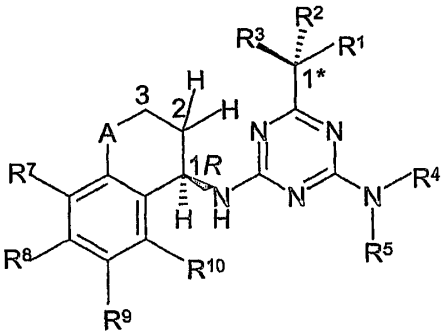
[0144] 1로 표시된 탄소 원자에서의 입체화학적 배열은 화학식 I에 정의된 바와 같다.

[0145] 또한, 1*로 표시된 탄소 원자에서의 배열이 구체적으로 다음과 같이 제한된 (R) 또는 (S)인 화학식 Ia의 화합물의 입체이성질체인 화학식 Id 및 Ie의 화합물이 바람직하다:

화학식 Id

[0146] 

화학식 Ie

[0147] 

[0148] 상기 식에서,

[0149] R^1이 (C_1-C_6)알킬, (C_1-C_6)할로알킬 또는 (C_3-C_6)사이클로알킬이고, 바람직하게는 (C_1-C_4)알킬, (C_1-C_4)할로알킬 또는 (C_3-C_6)사이클로알킬이고;

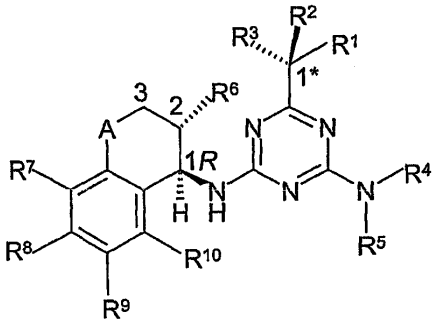
[0150] R^2가 H이고;

[0151] R^3이 할로겐이고;

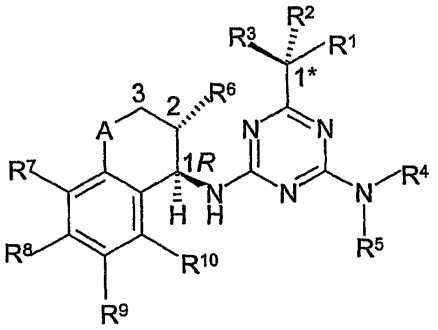
[0152] 다른 다양한 기호들은 화학식 I에 정의된 바와 같다.

[0153] 1, 2 및 1*로 표시된 탄소 원자에서의 배열이 구체적으로 다음과 같이 제한된 화학식 Ic의 화합물의 입체이성질체인 화학식 If, Ig, Ih 및 Ii의 화합물이 또한 바람직하다:

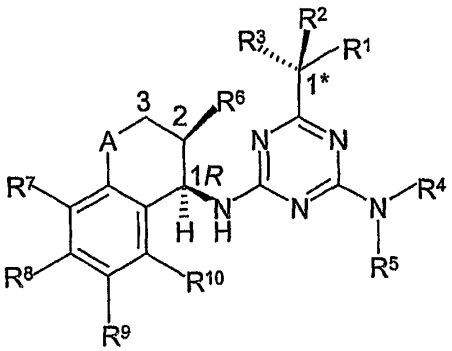
화학식 If

[0154] 

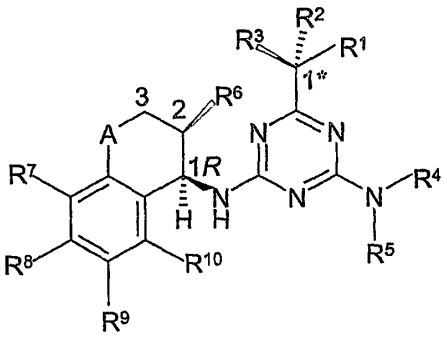
화학식 Ig

[0155] 

화학식 Ih

[0156] 

화학식 Ii

[0157] 

[0158] 상기 식에서,

[0159] R^1이 (C_1-C_6)알킬, (C_1-C_6)할로알킬 또는 (C_3-C_6)사이클로알킬이고;

[0160] R^2가 H이고;

[0161] R^3이 (C_1-C_4)알킬 또는 할로겐이고;

[0162] R^6이 (C_1-C_6)알킬이고;

[0163] 다른 다양한 기호들은 화학식 I에 정의된 바와 같되,

[0164] 단, R^1, R^2 및 R^3은 구조적으로 상이하다.

[0165] R^1이 메틸 또는 에틸이고;

[0166] R^2가 H이고;

[0167] R^3이 메틸, 에틸, F 또는 Cl이고;

[0168] R^4 및 R^5가 각각 H이고;

[0169] R^6이 메틸 또는 에틸이고;

[0170] R^7, R^8, R^9 및 R^{10}이 각각 독립적으로 H, 메틸, Br, Cl 또는 F이되,

[0171] 단, R^1, R^2 및 R^3은 구조적으로 상이한 화학식 If, Ig, Ih 및 Ii의 화합물이 보다 바람직하다.

[0172] 또한,

[0173] R^1이 메틸 또는 에틸이고;

[0174] R^2가 H이고;

[0175] R^3이 메틸, 에틸, F 또는 Cl이고;

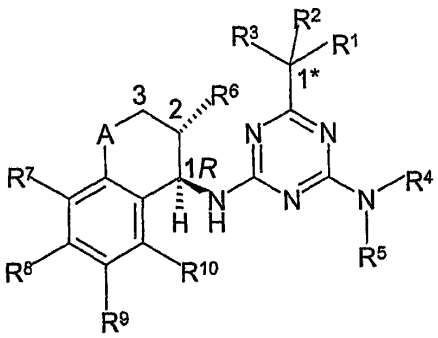
[0176] R^4 및 R^5가 각각 H이고;

[0177] R^7, R^8, R^9 및 R^{10}이 각각 독립적으로 H, 메틸, Br, Cl 또는 F이되,

[0178] 단, R^1, R^2 및 R^3은 구조적으로 상이한 화학식 Id 및 Ie의 화합물이 보다 바람직하다.

[0179] 또한, 1 및 2로 표시된 탄소 원자가 구체적으로 다음과 같이 제한된 화학식 Ib의 화합물의 입체이성질체인 화학식 Ij의 화합물이 바람직하다:

화학식 Ij

[0180] 

[0181] 상기 식에서,

[0182] R^1이 H, (C_1-C_3)알킬 또는 (C_1-C_3)알콕시이거나; 또는

[0183] R^1 및 R^2은 부착된 탄소 원자와 함께 (C_3-C_6)사이클로알킬 고리를 형성할 수 있고;

[0184] R^2가 H 또는 (C_1-C_3)알킬이고;

[0185] R^3이 H, 할로겐 또는 (C_1-C_3)알킬이고;

[0186] R^6이 (C_1-C_6)알킬이고,

[0187] 다른 다양한 기호들은 화학식 I에 정의된 바와 같되,

[0188] 단, R^1, R^2 및 R^3중 둘 이상은 구조적으로 동일하다.

[0189] 또한,

[0190] R^1이 H, 메틸, 에틸, 메톡시 또는 Cl이고;

[0191] R^2가 H 또는 메틸이거나; 또는

[0192] R^1 및 R^2은 부착된 탄소 원자와 함께 사이클로프로필 고리를 형성할 수 있고;

[0193] R^3이 H, 메틸, F 또는 Cl이고;

[0194] R^4 및 R^5가 각각 H이고;

[0195] R^6이 메틸이고;

[0196] R^7, R^8, R^9 및 R^{10}이 각각 독립적으로 H, 메틸, Br, Cl 및 F로 구성된 그룹에서 각각 독립적으로 선택되는 화학식 Ij의 화합물이 바람직하다.

[0197] 화학식 If 및 Ih의 화합물이 특히 바람직하다.

[0198] 화학식 If의 화합물이 가장 바람직하다.

[0199] 바람직한 화합물의 다른 부류는 R^1, R^2, R^3, R^4, R^5, R^6, R^7, R^8, R^9, R^{10} 및 A가 각각 화학식 I에서의 바람직한 의미로 정의된 화학식 Ia, Ib, Ic, Id, Ie, If, Ig, Ih, Ii 또는 Ij의 화합물이다.

[0200] 특히 바람직한 화합물 부류는

[0201] R^1이 (C_1-C_2)알킬이고;

[0202] R^2가 H이고;

[0203] R^3이 (C_1-C_2)알킬, Cl 또는 F이고;

[0204] R^4 및 R^5가 각각 H이고;

[0205] R^6이 (C_1-C_2)알킬이고;

[0206] R^7, R^8, R^9 및 R^{10}이 각각 독립적으로 H, 메틸, F 또는 Cl이고;

[0207] A가 CH_2, O 또는 직접 결합(보다 바람직하게는, A는 직접 결합이다)이되,

[0208] 단, R^1, R^2 및 R^3은 구조적으로 상이한 화학식 If의 화합물이다.

[0209] 또한, R^4 및 R^5가 각각 H이고, 라디칼 R^1, R^2, R^3, R^6, R^7, R^8, R^9, R^{10} 및 A가 각 기본 화학식 Ia, Ic, Id, Ie, If, Ig, Ih, Ii 및 Ij에 대해서 상기 정의된 바와 같은, 이후의 표의 표두 화학식(headformulae)로서 나타낸 바

와 같은 화학식 Ia-1, Ic-1, Id-1, Ie-1, If-1, Ig-1, Ih-1, Ii-1 및 Ij-1의 화합물이 바람직하다.

[0210] R^1이 (C_1-C_6)알킬이고;

[0211] R^2가 H이고;

[0212] R^3이 (C_1-C_6)알킬 또는 할로겐이고;

[0213] R^4 및 R^5가 각각 H이고;

[0214] R^6이 H이고;

[0215] R^7, R^8, R^9 및 R^{10}이 각각 독립적으로 H, (C_1-C_6)알킬 또는 할로겐이되,

[0216] 단, R^1, R^2 및 R^3이 구조적으로 상이한, 이후의 표의 표두 화합물로서 나타낸 바와 같은 화학식 Ia-1, Id-1, Ie-1의 화합물이 보다 바람직하다.

[0217] 또한,

[0218] R^1이 (C_1-C_6)알킬이고;

[0219] R^2가 H이고;

[0220] R^3이 (C_1-C_6)알킬 또는 할로겐이고;

[0221] R^4 및 R^5가 각각 H이고;

[0222] R^6이 (C_1-C_6)알킬이고;

[0223] R^7, R^8, R^9 및 R^{10}이 각각 독립적으로 H, (C_1-C_6)알킬 또는 할로겐이되,

[0224] 단, R^1, R^2 및 R^3이 구조적으로 상이한, 이후의 표의 표두 화합물로서 나타낸 바와 같은 화학식 Ic-1, If-1, Ig-1, Ih-1 및 Ii-1의 화합물이 보다 바람직하다.

[0225] 또한,

[0226] R^1이 H, 메틸, 에틸, 메톡시 또는 Cl이고;

[0227] R^2가 H 또는 메틸이거나; 또는

[0228] CR^1R^2가 사이클로프로필이고;

[0229] R^3이 H, 메틸, Cl 또는 F이고;

[0230] R^4 및 R^5가 각각 H이고;

[0231] R^6이 메틸이고;

[0232] R^7, R^8, R^9 및 R^{10}이 각각 독립적으로 H, (C_1-C_6)알킬 또는 할로겐이되,

[0233] 단, R^1, R^2 및 R^3중 둘 이상이 구조적으로 동일한, 이후의 표의 표두 화합물로서 나타낸 바와 같은 화학식 Ij-1의 화합물이 보다 바람직하다.

[0234] 또한, 라디칼 R^1 내지 R^{10} 및 A가 상응하는 일반 화학식의 바람직한 의미에서 상기 정의된 바와 같은, 이후의 표

의 표두 화합물로서 나타낸 바와 같은 화학식 Ik, IL, Im, In 및 Ip의 화합물이 바람직하다.

[0235] R^1이 H, (C_1-C_6)알킬, 할로겐 또는 (C_1-C_6)알콕시이고;

[0236] R^2가 H 또는 (C_1-C_6)알킬이거나; 또는

[0237] CR^1R^2가 사이클로프로필이고;

[0238] R^3이 H, (C_1-C_6)알킬 또는 할로겐이고;

[0239] R^4 및 R^5가 각각 H이고;

[0240] R^6이 H이고;

[0241] R^7, R^8, R^9 및 R^{10}이 각각 독립적으로 H, (C_1-C_6)알킬 또는 할로겐이되,

[0242] 단, R^1, R^2 및 R^3중 둘 이상이 구조적으로 동일한, 이후의 표의 표두 화합물로서 나타낸 바와 같은 화학식 Ik의 화합물이 보다 바람직하다.

[0243] 또한,

[0244] R^1이 (C_1-C_6)알킬이고;

[0245] R^2가 H이고;

[0246] R^3이 할로겐이고;

[0247] R^4 및 R^5가 각각 H이고;

[0248] R^6이 (C_1-C_6)알킬이고;

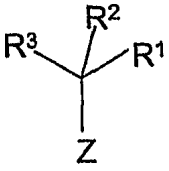
[0249] R^7, R^8, R^9 및 R^{10}이 각각 독립적으로 H, (C_1-C_6)알킬 또는 할로겐인, 이후의 표의 표두 화합물로서 나타낸 바와 같은 화학식 IL, Im, In 및 Ip의 화합물이 보다 바람직하다.

[0250] 바람직한 화학식 I의 화합물은 화학식 I의 광학적 활성 인단일아미노-1,3,5-트라이아진 유도체(A= 직접 결합)이다. 또한, 화학식 I의 광학적 활성 크로만-4-일아미노-1,3,5-트라이아진 유도체(A= 산소 원자) 및 화학식 I의 광학적 활성 테트라하이드로나프탈린일아미노-1,3,5-트라이아진 유도체(A= 메틸렌)가 바람직하다.

[0251] 상기 화학식 I의 화합물은 공지의 방법(즉, 지금까지 사용되거나 문헌에 기술된 방법), 예컨대 WO 97/31904 또는 WO 97/29095 및 본원에 인용된 문헌에 일반적으로 기술된 바와 같은 방법 및 이후에 기술되는 방법을 사용 또는 응용함으로써 제조될 수 있다. 화학식에 표시된 기호들이 구체적으로 정의되지 않은 다음의 기술에서, "이전에 정의된 바와 같은"은 본원에서 각 기호의 제 1 정의 또는 바람직하게는 전술된 바람직한 정의에 따르는 것으로 이해할 것이다. 다음 제조 방법의 기술에서 순서는 상이한 순서로 실시될 수 있고, 적당한 보호기가 화합물을 얻기 위해 필요할 수 있음을 이해할 것이다.

[0252] 본 발명의 특징에 따라서, 화학식 I의 화합물은 화학식 II의 화합물을 화학식 III의 바이구아니딘 또는 이것의 산 부가 염과 반응시켜 제조될 수 있다:

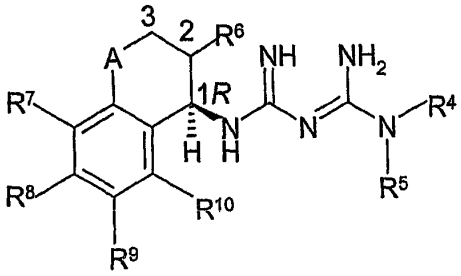
화학식 II

[0253] 

[0254] [상기 식에서,

[0255] R^1, R^2 및 R^3은 화학식 I에서 정의된 바와 같고, Z는 카복실 에스터, 카복실 오르토에스터, 카복실산 클로라이드, 카복사마이드, 사이아노, 카복실산 무수물 또는 트라이클로로메틸로 구성된 그룹에서 선택되는 작용기이다],

화학식 III

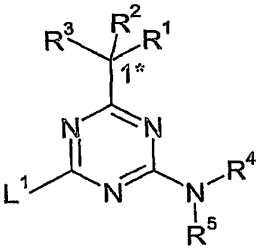
[0256] 

[0257] [상기 식에서,

[0258] R^4, R^5, R^6, R^7, R^8, R^9, R^{10} 및 A와 1로 표시된 위치에서의 배열은 화학식 I에서 정의된 바와 같다]. 그 반응은 염기 존재 하에 불활성 용매, 예컨대 테트라하이드로퓨란, 다이옥산, 아세토나이트릴, N,N-다이메틸폼아마이드, 메탄올 또는 에탄올 중에서, 0℃ 내지 용매의 환류 온도의 온도에서, 바람직하게는 20℃ 내지 60℃에서 일반적으로 실시된다. 염기는 일반적으로 알칼리 금속 하이드록사이드, 알칼리 금속 하이드라이드, 알칼리 금속 카보네이트, 알칼리 금속 알콕사이드, 알칼리 토 금속 카보네이트, 또는 유기 염기, 예컨대 3급 아민, 예로 트라이에틸아민, 또는 1,8-다이아자바이사이클로[5.4.0]운데크-7-엔(DBU)이다.

[0259] 본 발명의 다른 특징에 따라서, 화학식 I의 화합물은 화학식 IV의 화합물을 화학식 V의 아민 또는 이것의 산 부가 염과 반응시켜 또한 제조될 수 있다:

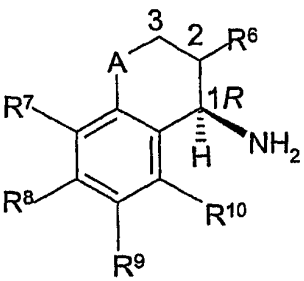
화학식 IV

[0260] 

[0261] [상기 식에서,

[0262] R^1, R^2, R^3, R^4 및 R^5와 1^*로 표시된 위치에서의 배열은 화학식 I에 정의된 바와 같고, L^1은 이탈기, 예컨대 염소, 트라이클로로메틸, (C_1-C_4)알킬-알킬설포닐, 페닐설포닐 또는 (C_1-C_4)알킬-페닐설포닐이다]

화학식 V

[0263] 

[0264] [상기 식에서,

[0265] R^6, R^7, R^8, R^9, R^{10} 및 A와 1로 표시된 위치에서의 배열은 화학식 I에 정의된 바와 같다]. 그 반응은 염기 존재하에 불활성 용매, 예컨대 극성 유기 용매, 예로 테트라하이드로퓨란, 다이옥산, 아세토나이트릴, N,N-다이메틸폼아마이드, 메탄올 또는 에탄올 중에서, 0℃ 내지 용매의 환류 온도의 온도에서, 바람직하게는 20℃ 내지 100℃에서 일반적으로 실시된다. 염기는 일반적으로 알칼리 금속 하이드록사이드, 알칼리 금속 하이드라이드, 알칼리 금속 카보네이트, 알칼리 금속 알콕사이드, 알칼리 토 금속 카보네이트, 또는 유기 염기, 예컨대 3급 아민, 예로 트라이에틸아민, 또는 1,8-다이아자바이사이클로[5.4.0]운데크-7-엔(DBU)이다. 본 제조방법은 예컨대 문헌[Comprehensive Heterocyclic Chemistry, A. R. Katritzky and C. W. Rees, Pergamon Press, Oxford, New York, 1984, Vol.3; Part 2B; ISBN 0-08-030703-5, S. 482]으로부터 일반적 관점에서 공지되어 있다.

[0266] 본 발명의 다른 특징에 따라서, R^4 또는 R^5 중 하나가 (C_1-C_4)알킬, (C_1-C_4)할로알킬, (C_3-C_4)알켄일, (C_3-C_4)할로알켄일, (C_3-C_4)알카이닐 또는 (C_3-C_4)할로알카이닐인 화학식 I의 화합물은, 상기 R^4 또는 R^5가 각각 H이고, 기타 라디칼과 배열은 화학식 I에 정의된 바와 같은 상응하는 화학식 I의 화합물을 화학식 VI 또는 VII의 알킬화제와 각각 반응시켜 또한 제조될 수 있다:

화학식 VI

[0267] R^4-L^2

화학식 VII

[0268] R^5-L^2

[0269] 상기 화학식 VI 및 VII에서,

[0270] L^2는 이탈기, 일반적으로는 할로겐, 바람직하게는 염소, 브롬 또는 요오드이거나, 또는 알킬- 또는 페닐-설폰일옥시 잔기, 예컨대 메틸 설폰일옥시 또는 4-톨루엔설폰일옥시이다. 그 반응은 불활성 용매, 예컨대 테트라하이드로퓨란, 다이옥산, 아세토나이트릴 또는 N,N-다이메틸폼아마이드 중에서, 0℃ 내지 용매의 환류 온도의 온도에서, 바람직하게는 20℃ 내지 100℃에서 일반적으로 실시된다.

[0271] 본 발명의 다른 특징에 따라서, R^4 또는 R^5 중 하나가 아실 라디칼인 화학식 I의 화합물은, 상기 R^4 또는 R^5가 각각 H이고, 기타 라디칼과 배열은 화학식 I에 정의된 바와 같은 상응하는 화학식 I의 화합물을 화학식 VIII 또는 IX의 아실화제와 각각 반응시켜 제조될 수 있다:

화학식 VIII

[0272] R^4-L^3

화학식 IX

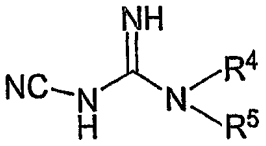
[0273] R^5-L^3

[0274] 상기 화학식 VIII 및 IX식에서,

[0275] R^4 및 R^5는 각각 화학식 I에서 정의된 아실 라디칼이고, L^3는 이탈기, 일반적으로는 할로겐, 바람직하게는 염소이거나, 또는 포밀화제, 예컨대 폼산-아세트산 무수물이다. 염기는 임의적으로 아실화 반응에 사용되고, 일반적으로 알칼리 금속 하이드록사이드, 알칼리 금속 하이드라이드, 알칼리 금속 카보네이트, 알칼리 금속 알콕사이드, 알칼리 토 금속 카보네이트, 또는 유기 염기, 예컨대 3급 아민, 예로 트라이에틸아민에서 선택된다. 그 반응은 불활성 용매, 예컨대 테트라하이드로퓨란, 다이옥산, 아세토나이트릴, 또는 N,N-다이메틸폼아마이드 중에서, 0℃ 내지 용매의 환류 온도의 온도에서, 바람직하게는 20℃ 내지 100℃에서 일반적으로 실시된다.

[0276] 화학식 III의 중간체는 화학식 X의 화합물을 상기 화학식 V의 화합물과 반응시켜 제조될 수 있다:

화학식 X

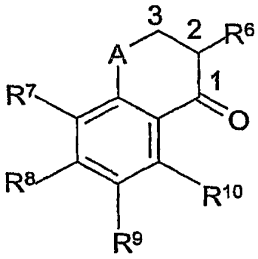


[0277]

[0278] 그 반응은 산 부가 염, 예컨대 화학식 X의 화합물의 하이드로클로라이드 염을 사용하여 용매, 예컨대 1,2-다이클로로벤젠, 데칼린 또는 백색 미네랄 오일 중에서 20℃ 내지 용매의 환류 온도의 온도에서, 바람직하게는 50℃ 내지 200℃에서 실시된다.

[0279] 화학식 V의 중간체는 공지의 방법, 예컨대 화학식 XI의 케톤 또는 상응하는 옥심의 환원적 아민화, 임의적으로 비대칭 환원적 아민화, 또는 공지의 절차, 예컨대 국제 공개 공보 WO 97/031904에 기술된 절차에 따른 화학식 XII의 화합물의 암모니아 또는 이것의 염과의 반응에 의해 제조될 수 있다:

화학식 XI

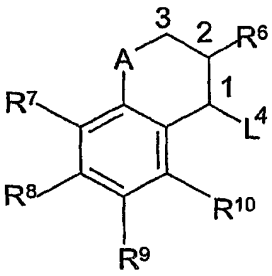


[0280]

[0281] [상기 식에서,

[0282] R^6, R^7, R^8, R^9, R^{10} 및 A가 화학식 I에서 정의된 바와 같다]

화학식 XII



[0283]

[0284] [상기 식에서,

[0285] R^6, R^7, R^8, R^9, R^{10} 및 A가 화학식 I에 정의된 바와 같고, L^4가 이탈기, 예컨대 할로겐, 하이드록시, 메틸 설폰일옥시 또는 4-톨루엔설폰일옥시이다].

[0286] 하나 이상의 비대칭 탄소 원자가 단일 거울상이성질체 형태로서 존재하는 화학식 I의 화합물의 제조방법에 있어서, 상기 제조방법은 화학식 II, III, IV, V, VI, VII 또는 XII의 화합물의 적당한 거울상이성질체 또는 부분입체이성질체 형태를 이용하여 적합하게 할 수 있다.

[0287] 거울상이성질적으로 순수 형태의 화학식 II의 화합물은 공지되어 있거나, 또는 예컨대 문헌[Tetrahedron Asymmetry 1994, 5, 981, J. Chem. Soc. Perkin Trans I, 1979, 2248] 및 거기에 인용된 문헌에 기술된 공지의 절차에 따라서 제조될 수 있다.

[0288] 분해된(resolved) 형태 또는 부분적으로 분해된 형태의 화학식 I의 화합물의 제조는, 예컨대 제조되는 화학식 I의 화합물에서 정의된 배열과 배열이 상이한 하나 이상의 중간체 II, III, IV 또는 V를 사용하여 화학식 I의 화합물을 분해시키고, 공지의 분해 방법에 따라서 수득된 혼합물을 분해시키는 전술된 공정에 따라서 실시될 수 있다.

[0289] 일반적으로, 광학 분해(문헌[Textbooks of Sterochemistry] 참조)를 위한 통상적 방법, 예컨대 혼합물의 부분입체이성질체로의 하기와 같은 분리 공정, 예를 들면 결정화, 크로마토그래픽 공정, 특히 컬럼 크로마토그래피 및 고압 액체 크로마토그래피, 증류(적절한 경우 감압 하에서), 추출 및 기타 공정과 같은 물리적 공정을 사용할 수 있고, 일반적으로 키랄 고체 상에서의 크로마토그래픽 분리에 의해 거울상이성질체의 나머지 혼합물을 분리시킬 수 있다.

[0290] 광학적 활성 산을 사용하여, 적절하게는 산성 기가 존재하는 경우에는 광학적 활성 염기를 사용하여, 화합물 I로부터 수득될 수 있는 부분입체이성질체 염의 결정화와 같은 공정이 제조량 또는 산업적 규모에서의 사용에 적당하다.

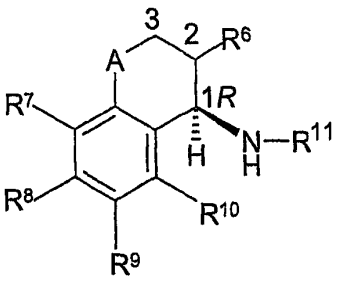
[0291] 부분입체이성질체 염의 결정화에 의한 광학적 분해에 적당한 광학적 활성 산은 예컨대 캄포설폰산, 캄포산, 브로모캄포설폰산, 퀸산(quinic acid), 타르타르산, 다이벤조일타르타르산 및 기타 유사 산이고; 적당한 광학적 활성 염기는 예컨대 퀴닌, 신초닌, 퀴니딘, 브루신, 1-페닐에틸아민 및 다른 유사 염기이다.

[0292] 그 후, 적당하게는 시딩(seeding) 후에 보다 덜 용해성인 부분입체이성질체가 먼저 침전되는 결정화가 대부분의 경우 수성 용매 또는 수성 유기 용매에서 실시된다. 이후 화학식 I의 화합물의 한 거울상이성질체는 산성화에 의해 또는 염기를 사용하여 침전된 염으로부터 유리되거나, 다른 하나가 결정으로부터 유리된다.

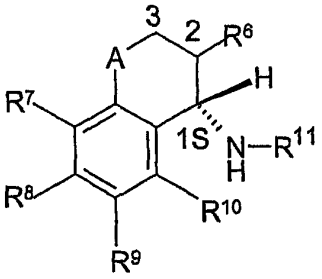
[0293] 공지의 방법, 예컨대 문헌[Houben-Weyl, Methoden der Organischen Chemie, 4. Auflage, Band E 21 b, 1833 ff. or Band E 21e, 5133]에 기술된 방법을 이용하여 거울상이성질적으로 순수한 화학식 V의 아민 중간체가 제조될 수 있다. 바람직한 절차 중 하나는 효소적 트랜스아민화를 포함하는 비대칭 촉매화에 의한 화학식 XI의 케톤의 환원적 아민화이다. 거울상이성질적으로 순수한 화학식 V의 아민의 제조를 위한 다른 절차는 문헌[J. Prakt. Chem. 339, (1997), pages 381-384] 또는 문헌[Org.Lett., Vol. 3, Nr. 25, page 4101]에 기술된 라세미체 분할 방법이다. 이 절차에서, 생촉매의 존재 하에 임의적으로 치환된 지방산 에스터(바람직하게는 메틸 클로로아세테이트, 에틸 클로로아세테이트, 메틸 메톡시아세테이트 또는 에틸 메톡시아세테이트이다)와 같은 아실화제를 사용하여 화학식 V의 라세미 아민이 거울상선택적으로(enantioselectively) 아실화된다. 아실화되지 않은 거울상 이성질체는 단순히 미네랄 산에 의한 처리에 의해 분리된다. 그 후, 알칼리 금속 하이드록사이드(예, 수산화 나트륨)와 같은 염기, 또는 미네랄 산(예로 염화 수소)과 같은 산을 사용하여 아실화된 아민 거울상이성질체가 상응하는 아민으로 도로 분할된다. 생촉매로서는, 리파아제, 예컨대 슈도모나스 세파시아(*Pseudomonas cepacia*), 칸디다 사일린드라세(*Candida cylindracea*) 또는 칸디다 안타크티카(*Candida antarctica*)가 본 목적에 특히 적절하다. 이들 리파아제 중 어떤 것은 또한 부동 형태(immobilized form)(상표명: "Novozym 435")로 상업적으로 입수가능하다.

[0294] 상기 효소적 아실화 방법과 유사하게, 화학식 XIII 또는 XIV의 화합물은 원칙적으로 화학식 V의 화합물에 상응하는 라세미 아민의 아실화에 의해 중간체로서 제조될 수 있고, 그 후 목적하는 광학적 이성질체 V는 미네랄 산을 사용하여 화학식 XIII을 분할시킴에 의해 수득되거나, 아실화된 화합물 XIV가 효소적으로 형성되는 경우에는 비아실화된 아민 V을 직접 사용하여 수득된다:

화학식 XIII

[0295] 

화학식 XIV



[0296]

[0297] 상기 화학식 XIII 및 XIV에서,

[0298] R^6, R^7, R^8, R^9, R^{10} 및 A가 화학식 I에서 정의된 바와 같고,

[0299] R^{11}이 아실이고, 바람직하게는 비치환되거나 또는 할로겐, (C_1-C_4)알콕시 및 (C_1-C_4)알킬티오로 구성된 그룹에서 선택된 하나 이상의 라디칼에 의해 치환된 (C_1-C_6)알칸오일이고; 보다 바람직하게는 폼일, 아세틸, 프로피오닐, 할로아세틸, 할로프로피오닐, (C_1-C_4)알콕시아세틸 또는 (C_1-C_4)알콕시프로피오닐, 가장 바람직하게는 클로로아세틸 또는 메톡시아세틸이다.

[0300] 예컨대 다음의 산이 화학식 I의 화합물의 산 부가 염의 제조에 적당하다: 하이드로할산(hydrohalic acid), 예컨대 염산 또는 하이드로브롬산, 또한 인산, 질산, 황산, 단- 또는 이작용성 카복실산 및 하이드로카복실산, 예컨대 아세트산, 옥살산, 말레산, 석신산, 푸마르산, 타르타르산, 시트르산, 살리실산, 소브산 또는 락트산 및 설폰산, 예컨대 p-톨루엔설폰산 및 1,5-나프탈렌다이설폰산. 화학식 I의 산 부가 화합물은 염을 형성하는 통상적인 방법, 예컨대 화학식 I의 화합물을 적당한 유기 용매, 예컨대 메탄올, 아세톤, 메틸렌 클로라이드 또는 벤젠에 용해시키고, 0 내지 100℃의 온도에서 산을 첨가함에 의한 단순한 방법에 의해 수득가능하고, 이들은 공지의 방식, 예컨대 여과에 의해 단리될 수 있고, 적절한 경우, 불활성 유기 용매로 세척하여 정제될 수 있다.

[0301] 화학식 I의 염기 부가 염은 불활성 극성 용매, 예컨대 물, 메탄올 또는 아세톤 중에서 0 내지 100℃의 온도에서 제조되는 것이 바람직하다. 본 발명에 따른 염을 제조하기에 적당한 염기의 예는 탄산 칼륨과 같은 알칼리 금속 카보네이트, 알칼리 금속 및 알칼리 토금속 하이드록사이드, 예컨대 NaOH 또는 KOH, 알칼리 금속 및 알칼리 토금속 하이드라이드, 예컨대 NaH, 알칼리 금속 및 알칼리 토금속 알콕사이드, 예컨대 나트륨 메톡사이드, 칼륨 3급-뷰톡사이드, 또는 암모니아 또는 에탄올아민이 있다. 4급 암모늄 염은 화학식 $[NRR'R''R''']^+X^-$(여기서, R, R', R", R'''은 서로 독립적으로 (C_1-C_4)알킬, 페닐 또는 벤질이고, X^-는 음이온, 예컨대 Cl^- 또는 OH^-이다)의 4급 암모늄 염과의 예컨대 염 교환 또는 축합에 의해 수득될 수 있다.

[0302] 하나 이상의 비대칭 탄소 원자가 단일 형태 또는 광학적으로 풍부한 거울상이성질체 형태로서 존재하는 일부 화학식 III 및 V의 화합물은 신규하고, 이런 화합물은 본 발명의 추가의 특징을 형성하고, 전술된 바와 같이 제조될 수 있다. 다음 화학식 V의 아민은 공지되어 있다:

[0303] a) 인단:

[0304] (1R)-1-아미노-인단(문헌[Chem. Abstracts Registry No. 10277-74-4]);

[0305] (1R)-1-아미노-7-메톡시-인단(문헌[Arch. Pharm. 331 (1998) 59-71]);

[0306] (1R)-1-아미노-7-n-프로폭시-인단(문헌[Arch. Pharm. 331 (1998) 59-71]);

[0307] (1R)-1-아미노-7-사이아노-인단(문헌[Arch. Pharm. 331 (1998)59-71])

[0308] b) 테트라하이드로나프탈렌:

[0309] (1R)-1-아미노-1,2,3,4-테트라하이드로나프탈렌(문헌[Chem. Abstracts Registry No. 23357-46-2]);

[0310] (1R)-1-아미노-7-메틸-1,2,3,4-테트라하이드로나프탈렌(WO-98/47877);

[0311] (1R)-1-아미노-7-메톡시-1,2,3,4-테트라하이드로나프탈렌(WO-98/47877);

[0312] (1R)-1-아미노-7-아이소프로필-1,2,3,4-테트라하이드로나프탈렌(WO-98/47877);

[0313] (1R)-1-아미노-7-t-뷰틸-1,2,3,4-테트라하이드로나프탈렌(WO-98/47877);

[0314] 마지막 두 화합물들의 염산 염(WO-98/47877);

[0315] (1R)-1-아미노-6,8-다이메틸-1,2,3,4-테트라하이드로나프탈렌(문헌[J. of

[0316] Chromatography 959 (2002) 75-83]),

[0317] c) 크로만(chromane):

[0318] (4R)-4-아미노-크로만(문헌[Beilstein Registry No.7687402 및/또는 7687403]).

[0319] 그러므로, 본 발명의 또 다른 특징은

[0320] R^6이 H, (C_1-C_6)알킬 또는 (C_1-C_6)알콕시이고;

[0321] R^7, R^8, R^9 및 R^{10}이 각각 독립적으로 H, (C_1-C_4)알킬, (C_1-C_3)할로알킬, 할로겐, (C_1-C_3)알콕시, (C_1-C_3)할로알콕시 또는 CN이고;

[0322] A가 CH_2, O 또는 직접 결합이고;

[0323] 1번 위치에서의 입체화학적 배열이 화학식 I에서 정의된 바와 같되,

[0324] 단,

[0325] (i) A가 직접 결합이고, R^6, R^7, R^8 및 R^9가 각각 수소이고, R^{10}이 수소, 메톡시, n-프로폭시 또는 사이아노이거나;

[0326] (ii) A가 CH_2이고, R^6, R^7, R^8 및 R^{10}이 각각 수소이고, R^9가 수소, 메틸, 메톡시, 아이소프로폭시 또는 t-뷰틸이거나; 또는

[0327] A가 CH_2이고, R^6, R^7 및 R^9가 각각 수소이고, R^8이 메틸이고, R^{10}이 메틸이거나; 또는

[0328] (iii) A가 산소 원자이고, R^6, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}이 각각 H인 경우는 제외된 화학식 III 또는 V의 화합물 또는 이들의 염에 관한 것이다.

[0329] 신규의 화학식 III 및 V의 중간체 화합물 또는 이들의 염의 바람직한 부류는

[0330] R^6, R^7 및 R^{10}이 각각 독립적으로 H 또는 메틸이고;

[0331] R^8이 H, 메틸, Cl 또는 F이고;

[0332] R^9가 H, 메틸, Cl, F 또는 Br이고;

[0333] A가 직접 결합, CH_2 또는 O이고;

[0334] 1로 표시된 위치에서의 입체화학적 배열이 화학식 I에 정의된 바와 같되,

[0335] (i) A가 직접 결합이고, R^6, R^7, R^8 및 R^9가 각각 수소이고, R^{10}이 수소이거나;

[0336] (ii) A가 CH_2이고, R^6, R^7, R^8 및 R^{10}이 각각 수소이고, R^9가 수소 또는 메틸이거나; 또는

[0337] (iii) A가 산소 원자이고, R^6, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}이 각각 H인 경우는 제외된 화학식 III 또는 V의 화합물 또는 이들의 염이다.

[0338] 신규의 화학식 III 및 V의 중간체 화합물 또는 이들의 염의 보다 바람직한 부류는

[0339] A가 직접 결합이고;

[0340] R^6이 H 또는 메틸이고;

[0341] R^7 및 R^{10}이 수소이고;

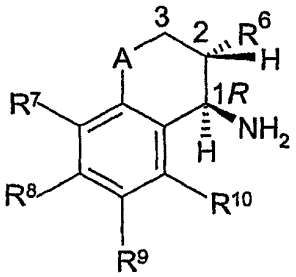
[0342] R^8이 H, 메틸, Cl 또는 F이고;

[0343] R^9가 H, 메틸, Cl, F 또는 Br이고;

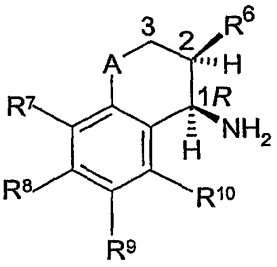
[0344] 1로 표시된 위치에서의 입체화학적 배열이 화학식 I에 정의된 바와 같은 화합물이다.

[0345] 신규의 화학식 Va 및 Vb의 중간체 화합물 또는 이들의 염의 보다 바람직한 부류는 다음과 같고, 이런 형태의 화합물은 본 발명의 또 다른 특징을 형성한다:

화학식 Va

[0346] 

화학식 Vb

[0347] 

[0348] 상기 화학식 Va 및 Vb에서,

[0349] R^6이 메틸이고;

[0350] R^7 및 R^{10}이 각각 독립적으로 H 또는 메틸이고;

[0351] R^8이 H, 메틸, Cl 또는 F이고;

[0352] R^9가 H, 메틸, Cl, F 또는 Br이고;

[0353] A가 직접 결합, CH_2 또는 O이다.

[0355] 하나 이상의 비대칭 탄소 원자가 단일 형태 또는 광학적으로 풍부한 거울상이성질체 형태로서 존재하는 화학식 V의 광학적 활성 아민 또는 화학식 III의 바이구아나이드의 제조에서의 중간체로서 사용될 수 있는 일부 화학식 XIII의 화합물(아마이드)은 신규하고, 이런 화합물은 본 발명의 추가의 특징을 형성하고, 전술된 바와 같이 제조될 수 있다. 다음 아실화된 화학식 XIII의 아민은 이미 공지되어 있다:

[0356] a) 인단:

[0357] (1R)-1-아세틸아미노-인단(문헌[Chem. Europe 6(2000,1840-1846)]);

[0358] (1R)-1-폼일아미노-인단(문헌[J. Am. Chem. Soc. 88 (1966) 2233-2240])

[0359] (1R)-1-(트라이플루오로아세틸아미노)-인단(문헌[J. Med. Chem. 45 (2002) 5260-5279 또는 US-A-4948395])

[0360] (1R)-1-(브로모아세틸아미노)-인단(문헌[Biochemistry 1980, 2140-2144]);

[0361] (1R)-1-아세틸아미노-2-메틸-인단(문헌[J. Org. Chem. 1999, 1774-1775]);

[0362] (1R)-1-아세틸아미노-5-플루오로-인단(문헌[J. Org. Chem. 1999, 1774-1775]);

[0363] b)테트라하이드로나프탈렌:

[0364] (1R)-1-아세틸아미노-1,2,3,4-테트라하이드로나프탈렌(문헌[J. Org. Chem. 1999, 1774-1775] 또는 [Tetrahedron Lett. 43 (2002) 5260]);

[0365] (1R)-1-아세틸아미노-6-메톡시-1,2,3,4-테트라하이드로나프탈렌(문헌[J. Org. Chem. 1999]);

[0366] (1R)-1-아세틸아미노-5,7-다이메틸-1,2,3,4-테트라하이드로나프탈렌(문헌[J. Org. Chem. 1999, 1774-1775]);

[0367] (1R)-1-(클로르아세틸아미노)-1,2,3,4-테트라하이드로나프탈렌(문헌[Farmaco. ED. Sci. Sol. 26(1971) 474-486]);

[0368] (1R)-1-(트라이플루오로아세틸아미노)-1,2,3,4-테트라하이드로나프탈렌(US-A-4948395);

[0369] c) 크로만:

[0370] (4R)-4-아세틸아미노-크로만(문헌[Org. Lett. 4 (2002) 1695-1668]).

[0371] 따라서, 본 발명의 다른 특징은, 신규의 화학식 XIII의 화합물 또는 이것의 염에 관한 것이되,

[0372] 상기 화학식 XIII에서,

[0373] R^6이 H, (C_1-C_6)알킬 또는 (C_1-C_6)알콕시이고;

[0374] R^7, R^8, R^9 및 R^{10}이 각각 독립적으로 H, (C_1-C_4)알킬, (C_1-C_3)할로알킬, 할로겐, (C_1-C_3)알콕시, (C_1-C_3)할로알콕시 또는 CN이고;

[0375] R^{11}이 아실, 바람직하게는 비치환되거나 또는 할로겐, (C_1-C_4)알콕시 및 (C_1-C_4)알킬티오로 구성된 그룹에서 선택된 하나 이상의 라디칼에 의해 치환되는 (C_1-C_6)알칸오닐; 보다 바람직하게는 폼일, 아세틸, 프로피오닐, 할로아세틸, 할로프로피오닐, (C_1-C_4)알콕시아세틸 또는 (C_1-C_4)알콕시프로피오닐, 가장 바람직하게는 클로로아세틸 또는 메톡시아세틸이고;

[0376] A가 CH_2,O 또는 직접 결합이고;

[0377] 1로 표시된 위치에서의 입체화학적 배열이 화학식 I에 정의된 바와 같되,

[0378] (i) A가 직접 결합이고, R^6, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}이 각각 수소이고, R^{11}이 폼일, 아세틸, 트라이플루오로아세틸 또는 브로모아세틸이거나,

[0379] A가 직접 결합이고, R^6이 메틸이고; R^7, R^8, R^9 및 R^{10}이 각각 수소이고, R^{11}이 아세틸이거나, 또는

[0380] A가 직접 결합이고, R^6, R^7, R^9 및 R^{10}이 각각 수소이고, R^8이 플루오로이고, R^{11}이 아세틸이거나, 또는

[0381] (ii) A가 CH_2이고, R^6, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}이 각각 수소이고, R^{11}이 아세틸, 트라이플루오로아세틸 또는 클로로아세틸이거나;

[0382] A가 CH_2이고, R^6, R^7 및 R^9가 각각 수소이고, R^8이 메틸이고, R^{10}이 메틸이고, R^{11}이 아세틸이거나, 또는

[0383] A가 CH_2이고, R^6, R^7, R^9 및 R^{10}이 각각 수소이고, R^8이 메톡시이고, R^{11}이 아세틸이거나, 또는

[0384] A가 CH_2이고, R^6이 메틸이고, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}이 각각 수소이고, R^{11}이 아세틸이거나, 또는

[0385] (iii) A가 산소 원자이고, R^6, R^7, R^8, R^9 및 R^{10}이 각각 수소이고, R^{11}이 아세틸인 화합물 또는 이것의 염은 제외한다.

[0386] 화학식 II, IV, VI, VII, VIII, IX, X, XI 및 XII의 화합물, 뿐만 아니라 III 및 V의 라세미 화합물은 공지되어 있거나, 또는 공지 방법과 유사하게 제조될 수 있다.

[0387] 전술된 방법에 의해 합성될 수 있는 화학식 I의 화합물 콜렉션은 수동, 부분적 자동 또는 완전 자동화되어 실시될 수 있는 병렬 방식으로 부가적으로 제조될 수 있다. 이와 관련하여, 반응의 절차, 후처리 또는 생성물 또는 중간체의 정제를 자동화시킬 수 있다. 총괄적으로, 이는 예컨대 드위트(S. H. DeWitt)의 문헌["Annual Reports in Combinatorial Chemistry 및 Molecular Diversity: Automated Synthesis", Volume 1, published by Escom, 1997, pages 69 to 77]에 기술된 절차를 의미하는 것으로 이해할 것이다.

[0388] 병렬 방식으로 반응 및 후처리를 실시하기 위해, 예컨대 영국 CM9 8SE 에섹스 톨레스버리 우드롤페 로드의 스템 코포레이션 또는 독일 85764 오베르샤이스샤임 브룩만링 28의 H+P 라보르테크닉 게엠베하로부터 상업적으로 입수가능한 일련의 기구가 사용된다. 화학식 I 또는 제조 도중 수득된 중간체의 병렬식 정제를 실시하기 위해, 그중에서도 크로마토그래픽 장비는 미국 네브레스카주 68504 링컨 슈페리어 스트리트 4700의 ISCO 인코포레이티드로부터 입수가능하다. 언급된 장비는 개별적 단계가 자동화되지만, 단계들 사이에서 수동 조작이 수행되어야 하는 모듈 절차를 가능케 한다. 이는, 해당 자동화 모듈이 예컨대 로봇에 의해 조작되는 부분적 또는 완전하게 통합된 자동화 시스템을 사용함에 의해 우회적으로 실시될 수 있다. 이런 자동화 시스템은 예컨대 미국 메사추세스주 01748 홉킨톤 자이마크 센터의 자이마크 코포레이션으로부터 입수될 수 있다.

[0389] 전술된 방법 외에, 화학식 I의 화합물은 고체 상 지지된 방법에 의해 전체적으로 또는 부분적으로 제조될 수 있다. 이 목적에서, 합성 중의 또는 해당 절차에 적합화된 합성 중의 개별적 중간체 또는 모든 중간체는 합성 수지에 결합된다. 고체 상 지지된 합성 방법은 예컨대 특허 문헌[Barry A. Bunin in "The Combinatorial Index", published by Academic Press, 1998]에 상세하게 기술되어 있다. 고체 상 지지된 합성 방법의 사용은 다음에 수동으로 또는 자동화된 방식으로 실시될 수 있는, 문헌으로부터 공지된 일련의 프로토콜을 가능케 한다. 예컨대 "티백(teabag) 방법"(문헌[Houghten, US 4,631,211; Houghten et al., Proc. Nati. Acad. Sci., 1985, 82, 5131-5135])은 미국 캘리포니아주 92037 라 졸라 노스 토레이 파인스 로드 11149의 아이로리(IRORI)의 제품을 사용하여 부분적으로 자동화될 수 있다. 고체 상 지지된 병렬 합성은 예컨대 미국 캘리포니아주 94070 산 카를로스 인더스트리알 로드 887의 아르고나우트 테크놀로지스 인코포레이티드 또는 독일 58454 위텐 불레너 펠트의 멀티신테크 게엠베하의 장비를 사용하여 성공적으로 자동화될 수 있다.

[0390] 본원에 기술된 제조방법에 따른 제조는 물질 콜렉션 또는 물질 라이브러리의 형태로 화학식 I의 화합물을 수득한다. 그러므로 본 발명은 또한 둘 이상의 화학식 I의 화합물을 함유하는 화학식 I의 화합물 및 이들의 전구체의 라이브러리에 관한 것이다.

실 시 예

[0391] 다음의 비제한적 실시예는 화학식 I의 화합물의 제조를 설명한다.

[0392] A. 화학적 실시예

[0393] 하기 실시예에서, 양(및 백분율)은 달리 언급되지 않는 한 중량 기준이다. 용매의 비는 부피 기준이다.

[0394] 광회전(optical rotation)은 표준 조건(c=1g/ml, t=25℃)하에서 파장 589nm의 편광(Na-D 편광)의 비회전(specific rotation)[α]으로서 측정한다. 용매는 달리 표시되지 않는 한 클로로폼이다.

[0395] 실시예 A1

[0396] 2-아미노-4-[(1R)-1-인단일아미노]-6-메틸-1,3,5-트라이아진(표 8, 화합물 번호 8.1)

[0397] N,N-다이메틸폼아마이드중 2-아미노-4-클로로-6-메틸-1,3,5-트라이아진(2.2g, 0.015몰), R(-)-1-아미노인단(2.0g, 0.015몰) 및 탄산칼륨(4.6g, 2.2몰)의 혼합물을 90 내지 100℃에서 5시간동안 교반하였다. 반응이 종결되면, 용매를 진공하에 100℃ 미만에서 증발시키고, 수득된 혼합물을 냉각시킨 다음 물을 첨가하였다. 에틸 아세테이트를 첨가하고, 유기 층을 분리, 건조(황산나트륨) 및 증발시켰다. 에틸 아세테이트로 용리시키는 칼럼 크로마토그래피에 의해 잔류물을 정제시킴으로써, 2-아미노-4-[(1R)-1-인단일아미노]-6-메틸-1,3,5-트라이아진

(3.5g, 95% 수율, 화합물 8.1)(융점 94 내지 96℃, 화학적 순도 > 95%, HPLC에 의한 ee 91%, 광회전($CHCl_3$, c=1): +87.4°)를 수득하였다.

[0398] 실시예 A2

[0399] 2-아미노-4-[(4R)-4-크로만일아미노]-6-[(1R)-1-플루오로에틸]-1,3,5-트라이아진(표 1, 화합물 번호 1.20)

[0400] a. 크로만-4-온 옥심

[0401] 60℃의 물중 아세트산나트륨(41.53g, 0.506몰)의 혼합물을 60℃의 에탄올중 크로만-4-온(25g, 0.169몰) 및 하이드록실아민 하이드로클로라이드(20.0g, 0.287몰)의 교반되는 혼합물과 혼합하였다. 생성된 혼합물을 환류 온도에서 90분간 가열하고 냉각 및 여과하였다. 조질 고체를 물로 세척하여, 크로만-4-온 옥심(27.9g, 수율 96%)(융점 114 내지 117℃, 순도 95%)을 수득하였다.

[0402] b. 4-아미노크로만 하이드로클로라이드

[0403] 에탄올중 크로만-4-온 옥심(27.9g, 0.157몰)을 질소하에 에탄올중 라니-니켈 촉매(3.0g)에 첨가하였다. 혼합물을 교반하고, 이론적인 양(약 3.6리터)이 흡착될 때까지 수소를 도입하였다. 촉매를 여과하고, 용매를 증발시킨 다음, 6N 에탄올 염산 용액(25ml)을 첨가하였다. 용매를 증발시키고 잔류물을 다이에틸에터/아세톤(10:1)으로 세척한 다음 재여과하여, 4-아미노크로만 하이드로클로라이드(18.3g, 수율 58%)(융점 220 내지 226℃, 순도 95%)를 수득하였다.

[0404] c. N-[(4R)-4-크로만일]-2-메톡시아세트아마이드

[0405] 4-아미노크로만 하이드로클로라이드(27.8g, 0.15몰)와 수산화나트륨 수용액(2N)의 혼합물을 에틸 아세테이트로 추출하고, 유기 층을 건조(황산나트륨) 및 증발시켜, 라세미 4-아미노크로만(14.2g, 0.095몰)을 수득하였다. 여기에, t-뷰틸 메틸 에터중 메틸 2-메톡시아세테이트(10.94g, 0.105몰) 및 노보자임(Novozym) 435(알드리치 코포레이션(Aldrich Corp.)) 2.5g을 첨가하고, 혼합물을 환류 온도에서 2시간동안 가열하였다. 노보자임 435(0.5g)를 추가로 첨가하고, HPLC에 의해 반응이 종결된 것으로 판정될 때까지 계속 가열하였다. 다이클로로메테인을 첨가하고 생체 촉매를 여과해낸 다음, 유기 층을 건조(황산나트륨) 및 증발시켰다. 잔류물을 최소량의 다이클로로메테인에 용해시키고, 에탄올 염산 용액(8N)을 첨가하여 (4S)-4-아미노크로만 하이드로클로라이드를 수득하고, 이를 여과해낸 다음 여액을 증발시켜, N-[(4R)-4-크로만일]-2-메톡시아세트아마이드(8.2g)(융점 109 내지 112℃)를 수득하였다.

[0406] d. (4R)-4-아미노크로만 하이드로클로라이드

[0407] 에탄올(100ml) 및 진한 염산(30ml)중 상기 N-[(4R)-4-크로만일]-2-메톡시아세트아마이드(2.2g, 0.0325몰)의 용액을 환류온도에서 12시간동안 가열한 다음 증발시켰다. 소량의 에틸 아세테이트를 잔류물에 첨가하고 고체를 여과해내어, (4R)-4-아미노크로만 하이드로클로라이드(2.3g)(융점 261 내지 263℃, 화학적 순도 > 95%)를 수득하였다.

[0408] e. (4S)-4-(비스구아니디노)크로만 하이드로클로라이드

[0409] 1,3-다이클로로벤젠중 (4R)-3,4-다이하이드로-2H-4-크로만일암모늄 클로라이드(2.3g, 0.0124몰)와 1-사이아노구아니딘(1.04g, 0.0124몰)의 균질 혼합물을 140 내지 150℃에서 150분간 가열하였다. 냉각된 혼합물을 톨루엔으로 희석시키고 여과하여, (4S)-4-(비스구아니디노)크로만 하이드로클로라이드(3.3g, 수율 89.4%)를 고체(순도 90%)로서 수득하였다.

[0410] f. 2-아미노-4-[(4R)-4-크로만일아미노]-6-[(1R)-1-플루오로에틸]-1,3,5-트라이아진

[0411] 메탄올중 메톡시화나트륨의 30% 용액(0.7g, 0.75ml, 0.004몰)을 메탄올중 (4S)-4-(비스구아니디노)크로만 하이드로클로라이드(1.1g, 0.004몰)의 교반되는 현탁액에 첨가하였다. 이어, 메틸 (2R)-2-플루오로프로파노에이트(1.08g, 0.01몰)를 실온에서 첨가한 다음, 추가량의 메톡시화나트륨의 30% 용액(1.0g, 1.0ml, 0.006몰)을 첨가하였다. 실온에서 4시간 후, 혼합물을 여과하고 여액을 증발시킨 다음, 잔류물을 에틸 아세테이트에 용해시켰다. 유기 상을 세척(물), 건조(황산나트륨) 및 증발시켰다. 에틸 아세테이트:헵테인의 7:3 혼합물로 용리시키는 칼럼 크로마토그래피에 의해 잔류물을 정제시켜, 2-아미노-4-[(4R)-4-크로만일아미노]-6-[(1R)-1-플루오로에틸]-1,3,5-트라이아진(0.3g, 수율 25%, 화합물 1.20)(융점 110 내지 112℃, 광회전(다이클로로메테인, c=1): +75.4° , 순도 98.35%(HPLC, Chiralcel OD, 250×4.6mm, 용리제 n-헥세인:2-프로판올 90:10, 0.6ml/분, 실온,

21.4분))을 수득하였다.

[0412] 실시예 A3

[0413] 2-아미노-4-[(1R,2S)-2-메틸-1-인단일아미노]-6-[(1R)-1-플루오로에틸]-1,3,5-트라이아진(표 2, 화합물 번호 2.1)

[0414] a. 2-메틸-인단-1-온 옥심

[0415] 에탄올중 2-메틸-1-인단온(10g, 0.0684몰) 및 하이드록실아민 하이드로클로라이드(9.5g, 0.1368몰)의 혼합물을 60℃에서 교반하고, 물중 아세트산나트륨(16.8g, 0.2052몰)의 용액을 첨가하였다. 생성된 혼합물을 환류 온도에서 90분간 가열한 다음 냉각시키고 고체를 여과하였다. 조질 생성물을 물로 세척하고 여과하여, 2-메틸-인단-1-온 옥심(9.9g, 수율 81%)(융점 82 내지 91℃, 90% 순도)을 수득하였다.

[0416] b. 1-(RS)(+-)-1-아미노-2-메틸인단 하이드로클로라이드

[0417] 메탄올 및 아세트산중 상기 2-메틸인단-1-온 옥심(9.5g, 0.0589몰) 및 Pd/C 촉매(10%, 1.0g)의 혼합물을 질소하에 교반하였다. 이어, 이론적인 양이 흡착될 때까지 수소를 도입하였다. 촉매를 여과해내고 용매를 진공에서 증발시켰다. 에탄올 염산 용액(6N)을 첨가하고, 용매를 증발시킨 다음, 잔류물을 다이에틸에터/아세톤(10:1)의 혼합물로 세척하고 여과하여, 1-(RS)(+-)-1-아미노-2-메틸인단 하이드로클로라이드(9.7g, 수율 85%)(융점 241 내지 242℃, 순도 95%)를 수득하였다.

[0418] c. 트랜스-1-아미노-2-메틸인단

[0419] 1-(RS)(+-)-1-아미노-2-메틸인단 하이드로클로라이드(19.7g, 0.1073몰)를 수산화나트륨 수용액(2N)과 혼합하고, 에틸 아세테이트로 추출하였다. 유기 층을 건조(황산나트륨) 및 증발시키고, 잔류물을 에틸 아세테이트/트라이에틸아민(100:1)으로 용리시키는 칼럼 크로마토그래피에 의해 정제하여, 하기 화합물을 수득하였다:

[0420] i) 트랜스-1-아미노-2-메틸인단(6.6g), ^{1}H-NMR ($CDCl_3$): 1.25 (3H, d), 1.90-2.05 (1H, m), 2.5 (1H, dd), 3.05 (1H, dd), 3.78 (1H, d, 8.1Hz), 7.1-7.3 (4H, m);

[0421] ii) 트랜스-1-아미노-2-메틸인단과 시스-1-아미노-2-메틸인단의 혼합물(2.7g); 및

[0422] iii) 시스-1-아미노-2-메틸인단(4.0g), ^{1}H-NMR ($CDCl_3$): 0.95 (3H, d), 2.40-2.60 (2H, m), 2.80-2.95 (1H, m), 4.20 (1H, d, 6.2Hz), 7.1-7.3 (4H, m).

[0423] d. N-[(1R,2S)-2-메틸-1-인단일]-2-메톡시아세트아마이드 및 (1S,2R)-1-아미노-2-메틸인단 하이드로클로라이드

[0424] t-뷰틸 메틸 에터중 트랜스-1-아미노-2-메틸인단(6.6g, 0.0448몰) 및 메틸 2-메톡시아세테이트(5.04g, 0.0484몰)의 혼합물에 노보자임 435(알드리치 코포레이션, 1.0g)를 첨가하였다. 혼합물을 환류 온도에서 2시간 동안 가열하고, 추가량의 노보자임 435(0.5g)를 첨가한 다음, 추가로 2시간동안 계속 가열하였다. 다이클로로메테인을 냉각된 혼합물에 첨가하고, 생체 촉매를 여과해내었다. 유기 층을 건조(황산나트륨) 및 증발시키고, 잔류물을 최소량의 다이클로로메테인에 용해시켰다. 에탄올 염산 용액(8N)을 첨가하고 고체를 여과하여, (1S,2R)-1-아미노-2-메틸인단 하이드로클로라이드를 수득하고, 여액을 증발시켜 N-[(1R,2S)-2-메틸-1-인단일]-2-메톡시아세트아마이드(5.9g)(융점 78 내지 79℃)를 수득하였다.

[0425] e. (1R,2S)-1-아미노-2-메틸인단 하이드로클로라이드

[0426] 에탄올 및 물중 N-[(1R,2S)-2-메틸-1-인단일]-2-메톡시아세트아마이드(5.9g, 0.0269몰)의 용액에 진한 염산(8ml)을 첨가하고, 혼합물을 환류 온도에서 12시간동안 가열하였다. 용매를 증발시키고 소량의 에틸 아세테이트를 첨가하였다. 용해되지 않은 고체를 여과해내어, (1R,2S)-1-아미노-2-메틸인단 하이드로클로라이드(1.0g)를 고체(화학적 순도 > 95%)로서 수득하였다.

[0427] f. (1R,2S)-1-(비스구아니디노)-2-메틸인단 모노하이드로클로라이드

[0428] 1,3-다이클로로벤젠중 (1R,2S)-1-아미노-2-메틸인단 하이드로클로라이드(1.0g, 0.0054몰) 및 1-사이아노구아니딘(0.46g, 0.0054몰)의 균질 혼합물을 140 내지 150℃에서 150분간 가열하였다. 냉각된 혼합물을 톨루엔으로 희석시키고 고체를 여과해내어, (1R,2S)-1-(비스구아니디노)-2-메틸인단 모노하이드로클로라이드(1.1g, 수율 67.7%)를 고체(융점 172 내지 178℃, 순도 90%)로서 수득하였다.

[0429] g. 2-아미노-4-[(1R,2S)-2-메틸-1-인단일아미노]-6-[(1R)-1-플루오로에틸]-1,3,5-트라이아진

[0430] 메탄올중 (1R,2S)-1-(비스구아니디노)-2-메틸인단 모노하이드로클로라이드(0.550g, 0.0021몰)의 교반되는 현탁액에 메탄올중 메톡시화나트륨(0.39g, 0.4ml, 0.0022몰)의 30% 용액을 첨가하였다. 이어, 메틸 (2R)-2-플루오로프로파노에이트(0.55g, 0.0051몰)를 실온에서 첨가한 다음, 추가량의 메톡시화나트륨 30% 용액(0.59g, 0.6ml, 0.0033몰)을 첨가하였다. 실온에서 4시간 후, 혼합물을 여과하고 여액을 증발시켰다. 잔류물을 에틸 아세테이트에 용해시키고, 세척(물), 건조(황산나트륨) 및 증발시켰다. 용리제로서 에틸 아세테이트:헵테인(7:3)의 혼합물로 용리시키는 칼럼 크로마토그래피에 의해 잔류물을 정제시켜, 2-아미노-4-[(1R,2S)-2-메틸-1-인단일아미노]-6-[(1R)-1-플루오로에틸]-1,3,5-트라이아진(0.09g, 수율 15%, 화합물 2.1)(융점 146 내지 150℃, 광회전(클로로폼, c=1): +104.4°, 순도 95.25%(HPLC, Chiralcel OD, 250×4.6mm, 용리제 n-헥세인:2-프로판올 90:10, 0.6ml/분, 실온, 17.93분))을 수득하였다.

[0431] 표 1 내지 표 14에 도시된 하기 화학식 I의 바람직한 화합물은 또한 본 발명의 일부를 구성하며, 상기 실시예 A1, A2 및 A3 또는 전술한 일반적인 방법에 의해, 또는 이들 방법과 유사한 방식으로 수득된다.

[0432] 표에서, 화합물의 구조는 달리 구체적으로(예컨대, 키랄 화합물의 라세미 혼합물) 정의되지 않는 한 우세한 입체 화학적 이성질체의 화학식으로 표시된다.

[0433] 표 1 내지 표 14에는 하기 약어가 이용된다:

[0434] "Me"는 메틸을 의미하고, "Et"는 에틸을 의미하며, "Pr"은 n-프로필을 의미한다.

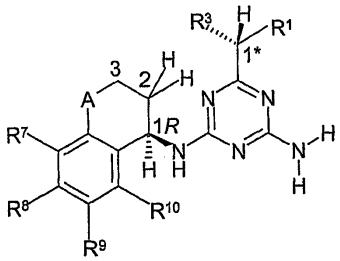
[0435] "Cpd"는 화합물 번호를 의미한다. 화합물 번호는 참조 목적으로만 제공된다.

[0436] 몇몇 표의 끝에는 개별 표의 화합물중 일부에 대한 추가적인 물리적 데이터가 제공되어 있다.

[0437] 광회전은 상기 실시예 A1 내지 A3에서와 같이 측정 및 정의된다. 달리 언급되지 않는 한 중수소 포함 클로로폼(deuterochloroform)에서 ^{1}H-NMR 스펙트럼을 기록하였으며, 화학적 시프트는 ppm 단위로 기재되었다. 하기 기호가 사용된다: s=단일선, d=이중선, t=삼중선, m=다중선.

표 1

화학식 Id-1의 화합물:



화합물 번호	R^1	R^3	R^7	R^8	R^9	R^{10}	A	물리적 데이터
1.1	Me	F	H	H	H	H	직접 결합	백색 고체
1.2	Me	F	H	H	Me	H	직접 결합	밝은 갈색 고체
1.3	Me	F	H	H	F	H	직접 결합	백색 고체
1.4	Me	F	H	H	Cl	H	직접 결합	
1.5	Me	F	H	H	Br	H	직접 결합	
1.6	Me	F	Me	H	Me	H	직접 결합	
1.7	Me	F	H	Me	Me	H	직접 결합	왁스성 고체
1.8	Me	F	H	H	Me	Me	직접 결합	
1.9	Me	F	H	F	Me	H	직접 결합	
1.10	Me	F	H	Cl	Cl	H	직접 결합	
1.11	Me	F	H	H	H	H	CH_2	백색 고체
1.12	Me	F	H	H	Me	H	CH_2	고체
1.13	Me	F	H	H	F	H	CH_2	
1.14	Me	F	H	H	Cl	H	CH_2	
1.15	Me	F	Me	H	Me	H	CH_2	백색 고체
1.16	Me	F	H	Me	Me	H	CH_2	
1.17	Me	F	H	H	Me	Me	CH_2	
1.18	Me	F	H	F	Me	H	CH_2	
1.19	Me	F	H	Cl	Cl	H	CH_2	
1.20	Me	F	H	H	H	H	O	백색 고체
1.21	Me	F	H	H	Me	H	O	고체
1.22	Me	F	H	H	F	H	O	
1.23	Me	F	H	H	Cl	H	O	
1.24	Me	Cl	H	H	H	H	직접 결합	백색 고체
1.25	Me	Cl	H	H	Me	H	직접 결합	
1.26	Me	Cl	H	H	F	H	직접 결합	
1.27	Me	Cl	H	H	Cl	H	직접 결합	
1.28	Me	Cl	H	H	H	H	CH_2	고체
1.29	Me	Cl	H	H	Me	H	CH_2	
1.30	Me	Cl	H	H	F	H	CH_2	

[0438]

[0439]

화합물 번호	R^1	R^3	R^7	R^8	R^9	R^{10}	A	물리적 데이터
1.31	Me	Cl	H	H	H	H	O	백색 고체
1.32	Me	Cl	H	H	Me	H	O	
1.33	Me	Cl	H	H	F	H	O	
1.34	Me	Cl	H	H	Cl	H	O	
1.35	Et	F	H	H	H	H	직접 결합	
1.36	Et	F	H	H	Me	H	직접 결합	
1.37	Et	F	H	H	F	H	직접 결합	
1.38	Et	F	H	H	Cl	H	직접 결합	
1.39	Et	F	H	H	Br	H	직접 결합	
1.40	Et	Cl	H	H	H	H	직접 결합	
1.41	Et	Cl	H	H	Me	H	직접 결합	
1.42	Et	Cl	H	H	F	H	직접 결합	
1.43	Et	Cl	H	H	Cl	H	직접 결합	
1.44	Et	Cl	H	H	Br	H	직접 결합	
1.45	Et	F	H	H	H	H	CH_2	
1.46	Et	F	H	H	Me	H	CH_2	
1.47	Et	F	H	H	F	H	CH_2	
1.48	Et	F	H	H	Cl	H	CH_2	
1.49	Et	F	H	H	Br	H	CH_2	
1.50	Et	Cl	H	H	H	H	CH_2	
1.51	Et	Cl	H	H	Me	H	CH_2	
1.52	Et	Cl	H	H	F	H	CH_2	
1.53	Et	Cl	H	H	Cl	H	CH_2	
1.54	Et	Cl	H	H	Br	H	CH_2	
1.55	Et	F	H	H	H	H	O	
1.56	Et	F	H	H	Me	H	O	
1.57	Et	F	H	H	F	H	O	
1.58	Et	F	H	H	Cl	H	O	
1.59	Et	F	H	H	Br	H	O	
1.60	Et	Cl	H	H	H	H	O	
1.61	Et	Cl	H	H	Me	H	O	
1.62	Et	Cl	H	H	F	H	O	
1.63	Et	Cl	H	H	Cl	H	O	
1.64	Et	Cl	H	H	Br	H	O	
1.65	Me	Cl	Me	H	Me	H	CH_2	
1.66	Me	F	Me	Me	H	H	O	백색 고체
1.67	Me	F	F	H	H	H	O	고체
1.68	Me	F	H	H	Et	H	직접 결합	고체
1.69	Me	F	H	H	OMe	H	직접 결합	고체

[0440] 주) 표 1의 물리적 데이터(표 1의 화합물 번호를 지칭함):

[0441] 화합물 번호 1.1 : mp 176-178℃, 광회전 +116.7° ;

[0442] 화합물 번호 1.2 : 광회전 +113.5° ;

[0443] 화합물 번호 1.3 : 광회전 +112.7° ;

[0444] 화합물 번호 1.11 : mp 151-154℃, 광회전 +111.1° ;

[0445] 화합물 번호 1.12 : mp 68-72℃, 광회전 +76.8° ;

[0446] 화합물 번호 1.15 : mp 163-165℃, 광회전 +70.1° ;

[0447] 화합물 번호 1.20 : mp 110-112℃, 광회전 +75.4° ;

[0448] 화합물 번호 1.21 : 127-130℃, 광회전 +52.3° ;

[0449] 화합물 번호 1.24 : mp 153-155℃, 광회전 +82.5° ;

[0450] 화합물 번호 1.28 : mp 140-144℃, 광회전 +79.9° ;

[0451] 화합물 번호 1.31 : mp 99-100℃, 광회전 +69.2° ;

[0452] 화합물 번호 1.66 : 광회전 +112.7° ;

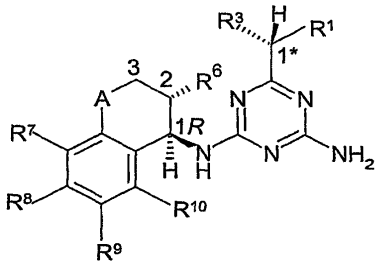
[0453] 화합물 번호 1.67 : mp 88-95℃, 광회전 +66.5° ;

[0454] 화합물 번호 1.68 : mp 145-146℃, 광회전 +79.3° ;

[0455] 화합물 번호 1.69 : mp 149-150℃, 광회전 +84.0°

표 2

화학식 If-1의 화합물:



[0456]

화합물 번호	R^1	R^3	R^6	R^7	R^8	R^9	R^{10}	A	물리적 데이터
2.1	Me	F	Me	H	H	H	H	직접 결합	백색 고체
2.2	Me	F	Me	H	H	Me	H	직접 결합	백색 포움
2.3	Me	F	Me	H	H	F	H	직접 결합	
2.4	Me	F	Me	H	H	Cl	H	직접 결합	백색 고체
2.5	Me	F	Me	H	H	Br	H	직접 결합	
2.6	Me	F	Me	Me	H	Me	H	직접 결합	
2.7	Me	F	Me	H	Me	Me	H	직접 결합	
2.8	Me	F	Me	H	H	Me	Me	직접 결합	
2.9	Me	F	Me	H	F	Me	H	직접 결합	
2.10	Me	F	Me	H	Cl	Cl	H	직접 결합	
2.11	Me	F	Me	H	H	H	H	CH_2	백색 고체
2.12	Me	F	Me	H	H	Me	H	CH_2	
2.13	Me	F	Me	H	H	F	H	CH_2	
2.14	Me	F	Me	H	H	Cl	H	CH_2	
2.15	Me	F	Me	Me	H	Me	H	CH_2	
2.16	Me	F	Me	H	Me	Me	H	CH_2	
2.17	Me	F	Me	H	H	Me	Me	CH_2	
2.18	Me	F	Me	H	F	Me	H	CH_2	
2.19	Me	F	Me	H	Cl	Cl	H	CH_2	
2.20	Me	F	Me	H	H	H	H	O	
2.21	Me	F	Me	H	H	Me	H	O	
2.22	Me	F	Me	H	H	F	H	O	
2.23	Me	F	Me	H	H	Cl	H	O	
2.24	Me	Cl	Me	H	H	H	H	직접 결합	
2.25	Me	Cl	Me	H	H	Me	H	직접 결합	고체
2.26	Me	Cl	Me	H	H	F	H	직접 결합	
2.27	Me	Cl	Me	H	H	Cl	H	직접 결합	
2.28	Me	Cl	Me	H	H	Me	H	CH_2	백색 고체
2.29	Me	Cl	Me	H	H	H	H	CH_2	
2.30	Me	Cl	Me	H	H	Me	H	CH_2	

화합물 번호	R^1	R^3	R^6	R^7	R^8	R^9	R^{10}	A	물리적 데이터
2.31	Me	Cl	Me	H	H	F	H	CH_2	
2.32	Me	Cl	Me	H	H	Cl	H	CH_2	
2.33	Me	Cl	Me	H	H	H	H	O	
2.34	Me	Cl	Me	H	H	Me	H	O	
2.35	Me	Cl	Me	H	H	F	H	O	
2.36	Me	Cl	Me	H	H	Cl	H	O	
2.37	Et	F	Me	H	H	H	H	직접 결합	
2.38	Et	F	Me	H	H	Me	H	직접 결합	
2.39	Et	F	Me	H	H	F	H	직접 결합	
2.40	Et	F	Me	H	H	Cl	H	직접 결합	
2.41	Et	F	Me	H	H	Br	H	직접 결합	
2.42	Et	Cl	Me	H	H	H	H	직접 결합	
2.43	Et	Cl	Me	H	H	Me	H	직접 결합	
2.44	Et	Cl	Me	H	H	F	H	직접 결합	
2.45	Et	Cl	Me	H	H	Cl	H	직접 결합	
2.46	Et	Cl	Me	H	H	Br	H	직접 결합	
2.47	Et	F	Me	H	H	H	H	CH_2	
2.48	Et	F	Me	H	H	Me	H	CH_2	
2.49	Et	F	Me	H	H	F	H	CH_2	
2.50	Et	F	Me	H	H	Cl	H	CH_2	
2.51	Et	F	Me	H	H	Br	H	CH_2	
2.52	Et	Cl	Me	H	H	H	H	CH_2	
2.53	Et	Cl	Me	H	H	Me	H	CH_2	
2.54	Et	Cl	Me	H	H	F	H	CH_2	
2.55	Et	Cl	Me	H	H	Cl	H	CH_2	
2.56	Et	Cl	Me	H	H	Br	H	CH_2	
2.57	Et	F	Me	H	H	H	H	O	
2.58	Et	F	Me	H	H	Me	H	O	
2.59	Et	F	Me	H	H	F	H	O	
2.60	Et	F	Me	H	H	Cl	H	O	
2.61	Et	F	Me	H	H	Br	H	O	
2.62	Et	Cl	Me	H	H	H	H	O	
2.63	Et	Cl	Me	H	H	Me	H	O	
2.64	Et	Cl	Me	H	H	F	H	O	
2.65	Et	Cl	Me	H	H	Cl	H	O	
2.66	Et	Cl	Me	H	H	Br	H	O	
2.67	Me	F	Me	Me	Me	H	H	O	
2.68	Me	F	Me	F	H	H	H	O	
2.69	Me	F	Me	H	H	Et	H	직접 결합	
2.70	Me	F	Me	H	H	OMe	H	직접 결합	

[0457]

[0458] 주) 표 2의 물리적 데이터(표 2의 화합물 번호를 지칭함):

[0459] 화합물 번호 2.1 : mp 146-150℃, 광회전 +104° ;

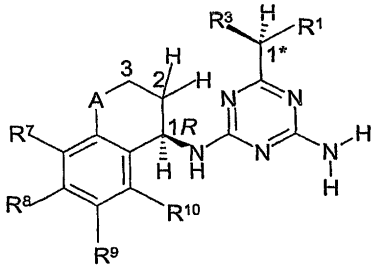
[0460] 화합물 번호 2.11 : 광회전 +168. 9° ;

[0461] 화합물 번호 2.25 : mp 68-70℃, 광회전 +140.9° .

[0462] 화합물 번호 2.28 : mp 127-128℃, 광회전 +49.6° .

표 3

화학식 Ie-1의 화합물:



화합물 번호	R^1	R^3	R^7	R^8	R^9	R^{10}	A	물리적 데이터
3.1	Me	F	H	H	H	H	직접 결합	백색 고체
3.2	Me	F	H	H	Me	H	직접 결합	백색 고체
3.3	Me	F	H	H	F	H	직접 결합	
3.4	Me	F	H	H	Cl	H	직접 결합	
3.5	Me	F	H	H	Br	H	직접 결합	
3.6	Me	F	Me	H	Me	H	직접 결합	
3.7	Me	F	H	Me	Me	H	직접 결합	왁스성 고체
3.8	Me	F	H	H	Me	Me	직접 결합	
3.9	Me	F	H	F	Me	H	직접 결합	
3.10	Me	F	H	Cl	Cl	H	직접 결합	
3.11	Me	F	H	H	H	H	CH_2	백색 고체
3.12	Me	F	H	H	Me	H	CH_2	
3.13	Me	F	H	H	F	H	CH_2	
3.14	Me	F	H	H	Cl	H	CH_2	
3.15	Me	F	Me	H	Me	H	CH_2	백색 고체
3.16	Me	F	H	Me	Me	H	CH_2	
3.17	Me	F	H	H	Me	Me	CH_2	
3.18	Me	F	H	F	Me	H	CH_2	
3.19	Me	F	H	Cl	Cl	H	CH_2	

[0463]

화합물 번호	R^1	R^3	R^7	R^8	R^9	R^{10}	A	물리적 데이터
3.20	Me	F	H	H	H	H	O	백색 고체
3.21	Me	F	H	H	Me	H	O	
3.22	Me	F	H	H	F	H	O	
3.23	Me	F	H	H	Cl	H	O	
3.24	Me	Cl	H	H	H	H	직접 결합	백색 고체
3.25	Me	Cl	H	H	Me	H	직접 결합	
3.26	Me	Cl	H	H	F	H	직접 결합	
3.27	Me	Cl	H	H	Cl	H	직접 결합	
3.28	Me	Cl	H	H	H	H	CH_2	
3.29	Me	Cl	H	H	Me	H	CH_2	
3.30	Me	Cl	H	H	F	H	CH_2	
3.31	Me	Cl	Me	H	Me	H	CH_2	
3.32	Me	Cl	H	H	H	H	O	
3.33	Me	Cl	H	H	Me	H	O	
3.34	Me	Cl	H	H	F	H	O	
3.35	Me	Cl	H	H	Cl	H	O	
3.36	Et	F	H	H	H	H	직접 결합	
3.37	Et	F	H	H	Me	H	직접 결합	
3.38	Et	F	H	H	F	H	직접 결합	
3.39	Et	F	H	H	Cl	H	직접 결합	
3.40	Et	F	H	H	Br	H	직접 결합	
3.41	Et	Cl	H	H	H	H	직접 결합	
3.42	Et	Cl	H	H	Me	H	직접 결합	
3.43	Et	Cl	H	H	F	H	직접 결합	
3.44	Et	Cl	H	H	Cl	H	직접 결합	
3.45	Et	Cl	H	H	Br	H	직접 결합	
3.46	Et	F	H	H	H	H	CH_2	
3.47	Et	F	H	H	Me	H	CH_2	
3.48	Et	F	H	H	F	H	CH_2	
3.49	Et	F	H	H	Cl	H	CH_2	
3.50	Et	F	H	H	Br	H	CH_2	
3.51	Et	Cl	H	H	H	H	CH_2	
3.52	Et	Cl	H	H	Me	H	CH_2	
3.53	Et	Cl	H	H	F	H	CH_2	
3.54	Et	Cl	H	H	Cl	H	CH_2	
3.55	Et	Cl	H	H	Br	H	CH_2	
3.56	Et	F	H	H	H	H	O	
3.57	Et	F	H	H	Me	H	O	
3.58	Et	F	H	H	F	H	O	
3.59	Et	F	H	H	Cl	H	O	
3.60	Et	F	H	H	Br	H	O	
3.61	Et	Cl	H	H	H	H	O	

[0464]

화합물 번호	R^1	R^3	R^7	R^8	R^9	R^{10}	A	물리적 데이터
3.62	Et	Cl	H	H	Me	H	O	
3.63	Et	Cl	H	H	F	H	O	
3.64	Et	Cl	H	H	Cl	H	O	
3.65	Et	Cl	H	H	Br	H	O	

[0465]

[0466] 주) 표 3의 물리적 데이터(표 3의 화합물 번호를 지칭함):

[0467] 화합물 번호 3.1 : mp 149-150℃, 광회전 +74.4° ;

[0468] 화합물 번호 3.2 : 광회전 +113.5° ;

[0469] 화합물 번호 3.11 : mp 147-149℃, 광회전 +84.4° ;

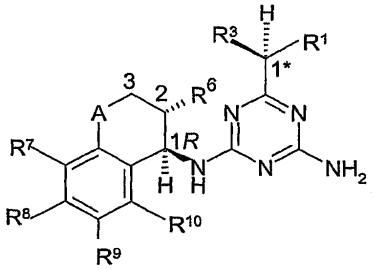
[0470] 화합물 번호 3.15 : mp 167-171℃, 광회전 +36.5° ;

[0471] 화합물 번호 3.20 : mp 183-185℃, 광회전 +54.5° ;

[0472] 화합물 번호 3.24 : mp 151-152℃, 광회전 +71.8° .

표 4

화학식 Ig-1의 화합물:



화합물 번호	R^1	R^3	R^6	R^7	R^8	R^9	R^{10}	A	물리적 데이터
4.1	Me	F	Me	H	H	H	H	직접 결합	백색 고체
4.2	Me	F	Me	H	H	Me	H	직접 결합	백색 포움
4.3	Me	F	Me	H	H	F	H	직접 결합	
4.4	Me	F	Me	H	H	Cl	H	직접 결합	
4.5	Me	F	Me	H	H	Br	H	직접 결합	
4.6	Me	F	Me	Me	H	Me	H	직접 결합	
4.7	Me	F	Me	H	Me	Me	H	직접 결합	
4.8	Me	F	Me	H	H	Me	Me	직접 결합	
4.9	Me	F	Me	H	F	Me	H	직접 결합	
4.10	Me	F	Me	H	Cl	Cl	H	직접 결합	
4.11	Me	F	Me	H	H	H	H	CH_2	
4.12	Me	F	Me	H	H	Me	H	CH_2	
4.13	Me	F	Me	H	H	F	H	CH_2	
4.14	Me	F	Me	H	H	Cl	H	CH_2	
4.15	Me	F	Me	Me	H	Me	H	CH_2	
4.16	Me	F	Me	H	Me	Me	H	CH_2	
4.17	Me	F	Me	H	H	Me	Me	CH_2	
4.18	Me	F	Me	H	F	Me	H	CH_2	
4.19	Me	F	Me	H	Cl	Cl	H	CH_2	
4.20	Me	F	Me	H	H	H	H	O	
4.21	Me	F	Me	H	H	Me	H	O	
4.22	Me	F	Me	H	H	F	H	O	
4.23	Me	F	Me	H	H	Cl	H	O	
4.24	Me	Cl	Me	H	H	H	H	직접 결합	
4.25	Me	Cl	Me	H	H	Me	H	직접 결합	
4.26	Me	Cl	Me	H	H	F	H	직접 결합	
4.27	Me	Cl	Me	H	H	Cl	H	직접 결합	
4.28	Me	Cl	Me	H	H	H	H	CH_2	
4.29	Me	Cl	Me	H	H	Me	H	CH_2	
4.30	Me	Cl	Me	H	H	F	H	CH_2	

[0473]

화합물 번호	R^1	R^3	R^6	R^7	R^8	R^9	R^{10}	A	물리적 데이터
4.31	Me	Cl	Me	H	H	Cl	H	CH_2	
4.32	Me	Cl	Me	H	H	H	H	O	
4.33	Me	Cl	Me	H	H	Me	H	O	
4.34	Me	Cl	Me	H	H	F	H	O	
4.35	Me	Cl	Me	H	H	Cl	H	O	
4.36	Et	F	Me	H	H	H	H	직접 결합	
4.37	Et	F	Me	H	H	Me	H	직접 결합	
4.38	Et	F	Me	H	H	F	H	직접 결합	
4.39	Et	F	Me	H	H	Cl	H	직접 결합	
4.40	Et	F	Me	H	H	Br	H	직접 결합	
4.41	Et	Cl	Me	H	H	H	H	직접 결합	
4.42	Et	Cl	Me	H	H	Me	H	직접 결합	
4.43	Et	Cl	Me	H	H	F	H	직접 결합	
4.44	Et	Cl	Me	H	H	Cl	H	직접 결합	
4.45	Et	Cl	Me	H	H	Br	H	직접 결합	
4.46	Et	F	Me	H	H	H	H	CH_2	
4.47	Et	F	Me	H	H	Me	H	CH_2	
4.48	Et	F	Me	H	H	F	H	CH_2	
4.49	Et	F	Me	H	H	Cl	H	CH_2	
4.50	Et	F	Me	H	H	Br	H	CH_2	
4.51	Et	Cl	Me	H	H	H	H	CH_2	
4.52	Et	Cl	Me	H	H	Me	H	CH_2	
4.53	Et	Cl	Me	H	H	F	H	CH_2	
4.54	Et	Cl	Me	H	H	Cl	H	CH_2	
4.55	Et	Cl	Me	H	H	Br	H	CH_2	
4.56	Et	F	Me	H	H	H	H	O	
4.57	Et	F	Me	H	H	Me	H	O	
4.58	Et	F	Me	H	H	F	H	O	
4.59	Et	F	Me	H	H	Cl	H	O	
4.60	Et	F	Me	H	H	Br	H	O	
4.61	Et	Cl	Me	H	H	H	H	O	
4.62	Et	Cl	Me	H	H	Me	H	O	
4.63	Et	Cl	Me	H	H	F	H	O	
4.64	Et	Cl	Me	H	H	Cl	H	O	
4.65	Et	Cl	Me	H	H	Br	H	O	

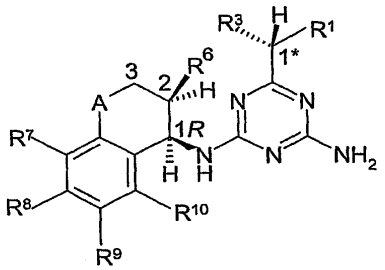
[0474]

[0475] 주) 표 4의 물리적 데이터(표 4의 화합물 번호를 지칭함):

[0476] 화합물 번호 4.1 : mp 146-150℃, 광회전 +77.9° .

표 5

화학식 Ih-1의 화합물:



화합물 번호	R^1	R^3	R^6	R^7	R^8	R^9	R^{10}	A	물리적 데이터
5.1	Me	F	Me	H	H	H	H	직접 결합	왁스성
5.2	Me	F	Me	H	H	Me	H	직접 결합	황색 시럽
5.3	Me	F	Me	H	H	F	H	직접 결합	
5.4	Me	F	Me	H	H	Cl	H	직접 결합	
5.5	Me	F	Me	H	H	Br	H	직접 결합	
5.6	Me	F	Me	Me	H	Me	H	직접 결합	
5.7	Me	F	Me	H	Me	Me	H	직접 결합	
5.8	Me	F	Me	H	H	Me	Me	직접 결합	
5.9	Me	F	Me	H	F	Me	H	직접 결합	
5.10	Me	F	Me	H	Cl	Cl	H	직접 결합	
5.11	Me	F	Me	H	H	H	H	CH_2	
5.12	Me	F	Me	H	H	Me	H	CH_2	
5.13	Me	F	Me	H	H	F	H	CH_2	
5.14	Me	F	Me	H	H	Cl	H	CH_2	
5.15	Me	F	Me	Me	H	Me	H	CH_2	
5.16	Me	F	Me	H	Me	Me	H	CH_2	
5.17	Me	F	Me	H	H	Me	Me	CH_2	
5.18	Me	F	Me	H	F	Me	H	CH_2	
5.19	Me	F	Me	H	Cl	Cl	H	CH_2	
5.20	Me	F	Me	H	H	H	H	O	
5.21	Me	F	Me	H	H	Me	H	O	
5.22	Me	F	Me	H	H	F	H	O	
5.23	Me	F	Me	H	H	Cl	H	O	
5.24	Me	Cl	Me	H	H	H	H	직접 결합	
5.25	Me	Cl	Me	H	H	Me	H	직접 결합	
5.26	Me	Cl	Me	H	H	F	H	직접 결합	
5.27	Me	Cl	Me	H	H	Cl	H	직접 결합	
5.28	Me	Cl	Me	H	H	H	H	CH_2	
5.29	Me	Cl	Me	H	H	Me	H	CH_2	

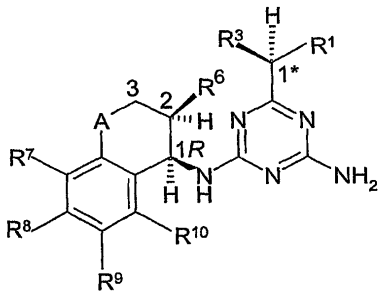
[0477]

[0478]

화합물 번호	R^1	R^3	R^6	R^7	R^8	R^9	R^{10}	A	물리적 데이터
5.30	Me	Cl	Me	H	H	F	H	CH_2	
5.31	Me	Cl	Me	H	H	Cl	H	CH_2	
5.32	Me	Cl	Me	H	H	H	H	O	
5.33	Me	Cl	Me	H	H	Me	H	O	
5.34	Me	Cl	Me	H	H	F	H	O	
5.35	Me	Cl	Me	H	H	Cl	H	O	
5.36	Et	F	Me	H	H	H	H	직접 결합	
5.37	Et	F	Me	H	H	Me	H	직접 결합	
5.38	Et	F	Me	H	H	F	H	직접 결합	
5.39	Et	F	Me	H	H	Cl	H	직접 결합	
5.40	Et	F	Me	H	H	Br	H	직접 결합	
5.41	Et	Cl	Me	H	H	H	H	직접 결합	
5.42	Et	Cl	Me	H	H	Me	H	직접 결합	
5.43	Et	Cl	Me	H	H	F	H	직접 결합	
5.44	Et	Cl	Me	H	H	Cl	H	직접 결합	
5.45	Et	Cl	Me	H	H	Br	H	직접 결합	
5.46	Et	F	Me	H	H	H	H	CH_2	
5.47	Et	F	Me	H	H	Me	H	CH_2	
5.48	Et	F	Me	H	H	F	H	CH_2	
5.49	Et	F	Me	H	H	Cl	H	CH_2	
5.50	Et	F	Me	H	H	Br	H	CH_2	
5.51	Et	Cl	Me	H	H	H	H	CH_2	
5.52	Et	Cl	Me	H	H	Me	H	CH_2	
5.53	Et	Cl	Me	H	H	F	H	CH_2	
5.54	Et	Cl	Me	H	H	Cl	H	CH_2	
5.55	Et	Cl	Me	H	H	Br	H	CH_2	
5.56	Et	F	Me	H	H	H	H	O	
5.57	Et	F	Me	H	H	Me	H	O	
5.58	Et	F	Me	H	H	F	H	O	
5.59	Et	F	Me	H	H	Cl	H	O	
5.60	Et	F	Me	H	H	Br	H	O	
5.61	Et	Cl	Me	H	H	H	H	O	
5.62	Et	Cl	Me	H	H	Me	H	O	
5.63	Et	Cl	Me	H	H	F	H	O	
5.64	Et	Cl	Me	H	H	Cl	H	O	
5.65	Et	Cl	Me	H	H	Br	H	O	

표 6

화학식 Ii-1의 화합물:



화합물 번호	R^1	R^3	R^6	R^7	R^8	R^9	R^{10}	A	물리적 데이터
6.1	Me	F	Me	H	H	H	H	직접 결합	왁스
6.2	Me	F	Me	H	H	Me	H	직접 결합	무색 시럽
6.3	Me	F	Me	H	H	F	H	직접 결합	
6.4	Me	F	Me	H	H	Cl	H	직접 결합	
6.5	Me	F	Me	H	H	Br	H	직접 결합	
6.6	Me	F	Me	Me	H	Me	H	직접 결합	
6.7	Me	F	Me	H	Me	Me	H	직접 결합	
6.8	Me	F	Me	H	H	Me	Me	직접 결합	
6.9	Me	F	Me	H	F	Me	H	직접 결합	
6.10	Me	F	Me	H	Cl	Cl	H	직접 결합	
6.11	Me	F	Me	H	H	H	H	CH_2	
6.12	Me	F	Me	H	H	Me	H	CH_2	
6.13	Me	F	Me	H	H	F	H	CH_2	
6.14	Me	F	Me	H	H	Cl	H	CH_2	
6.15	Me	F	Me	Me	H	Me	H	CH_2	
6.16	Me	F	Me	H	Me	Me	H	CH_2	
6.17	Me	F	Me	H	H	Me	Me	CH_2	
6.18	Me	F	Me	H	F	Me	H	CH_2	
6.19	Me	F	Me	H	Cl	Cl	H	CH_2	
6.20	Me	F	Me	H	H	H	H	O	
6.21	Me	F	Me	H	H	Me	H	O	
6.22	Me	F	Me	H	H	F	H	O	
6.23	Me	F	Me	H	H	Cl	H	O	
6.24	Me	Cl	Me	H	H	H	H	직접 결합	
6.25	Me	Cl	Me	H	H	Me	H	직접 결합	
6.26	Me	Cl	Me	H	H	F	H	직접 결합	
6.27	Me	Cl	Me	H	H	Cl	H	직접 결합	
6.28	Me	Cl	Me	H	H	H	H	CH_2	
6.29	Me	Cl	Me	H	H	Me	H	CH_2	

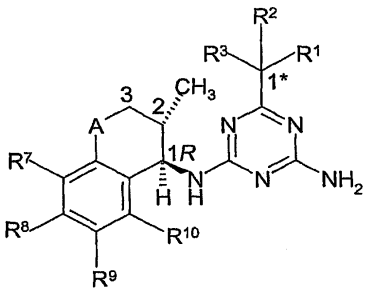
[0479]

[0480]

화합물 번호	R^1	R^3	R^6	R^7	R^8	R^9	R^{10}	A	물리적 데이터
6.30	Me	Cl	Me	H	H	F	H	CH_2	
6.31	Me	Cl	Me	H	H	Cl	H	CH_2	
6.32	Me	Cl	Me	H	H	H	H	O	
6.33	Me	Cl	Me	H	H	Me	H	O	
6.34	Me	Cl	Me	H	H	F	H	O	
6.35	Me	Cl	Me	H	H	Cl	H	O	
6.36	Et	F	Me	H	H	H	H	직접 결합	
6.37	Et	F	Me	H	H	Me	H	직접 결합	
6.38	Et	F	Me	H	H	F	H	직접 결합	
6.39	Et	F	Me	H	H	Cl	H	직접 결합	
6.40	Et	F	Me	H	H	Br	H	직접 결합	
6.41	Et	Cl	Me	H	H	H	H	직접 결합	
6.42	Et	Cl	Me	H	H	Me	H	직접 결합	
6.43	Et	Cl	Me	H	H	F	H	직접 결합	
6.44	Et	Cl	Me	H	H	Cl	H	직접 결합	
6.45	Et	Cl	Me	H	H	Br	H	직접 결합	
6.46	Et	F	Me	H	H	H	H	CH_2	
6.47	Et	F	Me	H	H	Me	H	CH_2	
6.48	Et	F	Me	H	H	F	H	CH_2	
6.49	Et	F	Me	H	H	Cl	H	CH_2	
6.50	Et	F	Me	H	H	Br	H	CH_2	
6.51	Et	Cl	Me	H	H	H	H	CH_2	
6.52	Et	Cl	Me	H	H	Me	H	CH_2	
6.53	Et	Cl	Me	H	H	F	H	CH_2	
6.54	Et	Cl	Me	H	H	Cl	H	CH_2	
6.55	Et	Cl	Me	H	H	Br	H	CH_2	
6.56	Et	F	Me	H	H	H	H	O	
6.57	Et	F	Me	H	H	Me	H	O	
6.58	Et	F	Me	H	H	F	H	O	
6.59	Et	F	Me	H	H	Cl	H	O	
6.60	Et	F	Me	H	H	Br	H	O	
6.61	Et	Cl	Me	H	H	H	H	O	
6.62	Et	Cl	Me	H	H	Me	H	O	
6.63	Et	Cl	Me	H	H	F	H	O	
6.64	Et	Cl	Me	H	H	Cl	H	O	
6.65	Et	Cl	Me	H	H	Br	H	O	

표 7

화학식 Ij-1의 화합물:



[화학식 Ij-1의 화합물에서 1*로 표시된 탄소 원자는 비키랄이다]

[0481]

화합물 번호	R^1	R^2	R^3	R^7	R^8	R^9	R^{10}	A	물리적 데이터
7.1	H	H	H	H	H	H	H	직접 결합	백색 고체
7.2	H	H	H	H	H	Me	H	직접 결합	고체
7.3	H	H	H	H	H	F	H	직접 결합	왁스성
7.4	H	H	H	H	H	Cl	H	직접 결합	왁스성
7.5	H	H	H	H	H	Br	H	직접 결합	
7.6	H	H	H	Me	H	Me	H	직접 결합	
7.7	H	H	H	H	Me	Me	H	직접 결합	
7.8	H	H	H	H	H	Me	Me	직접 결합	
7.9	H	H	H	H	F	Me	H	직접 결합	
7.10	H	H	H	H	Cl	Cl	H	직접 결합	
7.11	H	H	H	H	H	H	H	CH_2	백색 고체
7.12	H	H	H	H	H	Me	H	CH_2	
7.13	H	H	H	H	H	F	H	CH_2	
7.14	H	H	H	H	H	Cl	H	CH_2	
7.15	H	H	H	Me	H	Me	H	CH_2	
7.16	H	H	H	H	Me	Me	H	CH_2	
7.17	H	H	H	H	H	Me	Me	CH_2	
7.18	H	H	H	H	F	Me	H	CH_2	
7.19	H	H	H	H	Cl	Cl	H	CH_2	
7.20	H	H	H	H	H	H	H	O	
7.21	H	H	H	H	H	Me	H	O	
7.22	H	H	H	H	H	F	H	O	
7.23	H	H	H	H	H	Cl	H	O	
7.24	Me	Me	H	H	H	H	H	직접 결합	백색 고체
7.25	Me	Me	H	H	H	Me	H	직접 결합	
7.26	Me	Me	H	H	H	F	H	직접 결합	
7.27	Me	Me	H	H	H	Cl	H	직접 결합	

[0482]

화합물 번호	R^1	R^2	R^3	R^7	R^8	R^9	R^{10}	A	물리적 데이터
7.28	Me	H	H	H	H	Br	H	직접 결합	
7.29	Me	H	H	Me	H	Me	H	직접 결합	
7.30	Me	H	H	H	Me	Me	H	직접 결합	
7.31	Me	H	H	H	H	Me	Me	직접 결합	
7.32	Me	H	H	H	F	Me	H	직접 결합	
7.33	Me	H	H	H	Cl	Cl	H	직접 결합	
7.34	Me	Me	H	H	H	H	H	CH_2	
7.35	Me	Me	H	H	H	Me	H	CH_2	
7.36	Me	Me	H	H	H	F	H	CH_2	
7.37	Me	Me	H	H	H	Cl	H	CH_2	
7.38	Me	H	H	Me	H	Me	H	CH_2	
7.39	Me	H	H	H	Me	Me	H	CH_2	
7.40	Me	H	H	H	H	Me	Me	CH_2	
7.41	Me	H	H	H	F	Me	H	CH_2	
7.42	Me	H	H	H	Cl	Cl	H	CH_2	
7.43	Me	Me	H	H	H	H	H	O	
7.44	Me	Me	H	H	H	Me	H	O	
7.45	Me	Me	H	H	H	F	H	O	
7.46	Me	Me	H	H	H	Cl	H	O	
7.47	Et	H	H	H	H	H	H	직접 결합	백색 고체
7.48	Et	H	H	H	H	Me	H	직접 결합	백색 고체
7.49	Et	H	H	H	H	F	H	직접 결합	
7.50	Et	H	H	H	H	Cl	H	직접 결합	
7.51	Et	H	H	H	H	Br	H	직접 결합	
7.52	Et	H	H	Me	H	Me	H	직접 결합	
7.53	Et	H	H	H	Me	Me	H	직접 결합	
7.54	Et	H	H	H	H	Me	Me	직접 결합	
7.55	Et	H	H	H	F	Me	H	직접 결합	
7.56	Et	H	H	H	Cl	Cl	H	직접 결합	
7.57	Et	H	H	H	H	H	H	CH_2	백색 고체
7.58	Et	H	H	H	H	Me	H	CH_2	
7.59	Et	H	H	H	H	F	H	CH_2	
7.60	Et	H	H	H	H	Cl	H	CH_2	
7.61	Et	H	H	Me	H	Me	H	CH_2	
7.62	Et	H	H	H	Me	Me	H	CH_2	
7.63	Et	H	H	H	H	Me	Me	CH_2	
7.64	Et	H	H	H	F	Me	H	CH_2	
7.65	Et	H	H	H	Cl	Cl	H	CH_2	
7.66	Et	H	H	H	H	H	H	O	
7.67	Et	H	H	H	H	Me	H	O	
7.68	Et	H	H	H	H	F	H	O	
7.69	Et	H	H	H	H	Cl	H	O	
7.70	OMe	H	H	H	H	H	H	직접 결합	백색 고체
7.71	OMe	H	H	H	H	H	H	CH_2	

[0483]

화합물 번호	R^1	R^2	R^3	R^7	R^8	R^9	R^{10}	A	물리적 데이터
7.72	OMe	H	H	H	H	Me	H	직접 결합	고체
7.73	OMe	H	H	H	H	Me	H	CH_2	
7.74	Me	H	H	H	H	H	H	직접 결합	백색 고체
7.75	Me	H	H	H	H	Me	H	직접 결합	백색 고체
7.76	Me	H	H	H	H	F	H	직접 결합	
7.77	Me	H	H	H	H	Cl	H	직접 결합	
7.78	Me	H	H	H	H	H	H	CH_2	백색 고체
7.79	Me	H	H	H	H	Me	H	CH_2	
7.80	Me	H	H	H	H	F	H	CH_2	
7.81	Me	H	H	H	H	Cl	H	CH_2	
7.82	Me	H	H	H	H	H	H	O	
7.83	Me	H	H	H	H	Me	H	O	
7.84	Me	H	H	H	H	F	H	O	
7.85	Me	H	H	H	H	Cl	H	O	
7.86	Cl	Me	Cl	H	H	H	H	직접 결합	
7.87	Cl	Me	Cl	H	H	Me	H	직접 결합	
7.88	Cl	Me	Cl	H	H	F	H	직접 결합	
7.89	Cl	Me	Cl	H	H	Cl	H	직접 결합	
7.90	Cl	Me	Cl	H	H	H	H	CH_2	
7.91	Cl	Me	Cl	H	H	Me	H	CH_2	
7.92	Cl	Me	Cl	H	H	F	H	CH_2	
7.93	Cl	Me	Cl	H	H	Cl	H	CH_2	
7.94	Cl	Me	Cl	H	H	H	H	O	
7.95	Cl	Me	Cl	H	H	Me	H	O	
7.96	Cl	Me	Cl	H	H	F	H	O	
7.97	Cl	Me	Cl	H	H	Cl	H	O	
7.98	H	H	F	H	H	H	H	직접 결합	
7.99	H	H	F	H	H	Me	H	직접 결합	
7.100	H	H	F	H	H	F	H	직접 결합	
7.101	H	H	F	H	H	Cl	H	직접 결합	
7.102	H	H	F	H	H	Br	H	직접 결합	
7.103	H	H	F	Me	H	Me	H	직접 결합	
7.104	H	H	F	H	Me	Me	H	직접 결합	
7.105	H	H	F	H	H	Me	Me	직접 결합	
7.106	H	H	F	H	F	Me	H	직접 결합	
7.107	H	H	F	H	Cl	Cl	H	직접 결합	
7.108	H	H	F	H	H	H	H	CH_2	
7.109	H	H	F	H	H	Me	H	CH_2	
7.110	H	H	F	H	H	F	H	CH_2	
7.111	H	H	F	H	H	Cl	H	CH_2	
7.112	H	H	F	Me	H	Me	H	CH_2	
7.113	H	H	F	H	Me	Me	H	CH_2	
7.114	H	H	F	H	H	Me	Me	CH_2	
7.115	H	H	F	H	F	Me	H	CH_2	

[0484]

화합물 번호	R^1	R^2	R^3	R^7	R^8	R^9	R^{10}	A	물리적 데이터
7.116	H	H	F	H	Cl	Cl	H	CH_2	
7.117	H	H	F	H	H	H	H	O	
7.118	H	H	F	H	H	Me	H	O	
7.119	H	H	F	H	H	F	H	O	
7.120	H	H	F	H	H	Cl	H	O	
7.121	H	H	Cl	H	H	H	H	직접 결합	
7.122	H	H	Cl	H	H	Me	H	직접 결합	
7.123	H	H	Cl	H	H	F	H	직접 결합	
7.124	H	H	Cl	H	H	Cl	H	직접 결합	
7.125	H	H	Cl	H	H	H	H	CH_2	
7.126	H	H	Cl	H	H	Me	H	CH_2	
7.127	H	H	Cl	H	H	F	H	CH_2	
7.128	H	H	Cl	H	H	Cl	H	CH_2	
7.129	H	H	Cl	H	H	H	H	O	
7.130	H	H	Cl	H	H	Me	H	O	
7.131	H	H	Cl	H	H	F	H	O	
7.132	H	H	Cl	H	H	Cl	H	O	
7.133	사이클로프로필	H	H	H	H	H	H	직접 결합	
7.134	사이클로프로필	H	H	H	H	Me	H	직접 결합	
7.135	사이클로프로필	H	H	H	H	F	H	직접 결합	
7.136	사이클로프로필	H	H	H	H	Cl	H	직접 결합	
7.137	사이클로프로필	H	H	H	H	Br	H	직접 결합	
7.138	사이클로프로필	H	Me	H	H	Me	H	직접 결합	
7.139	사이클로프로필	H	H	Me	Me	Me	H	직접 결합	
7.140	사이클로프로필	H	H	H	H	Me	Me	직접 결합	
7.141	사이클로프로필	H	H	F	Me	H	직접 결합		
7.142	사이클로프로필	H	H	Cl	Cl	H	직접 결합		
7.143	사이클로프로필	H	H	H	H	H	H	CH_2	
7.144	사이클로프로필	H	H	H	H	Me	H	CH_2	
7.145	사이클로프로필	H	H	H	H	F	H	CH_2	
7.146	사이클로프로필	H	H	H	H	Cl	H	CH_2	
7.147	사이클로프로필	H	Me	H	Me	H	CH_2		
7.148	사이클로프로필	H	H	Me	Me	H	CH_2		
7.149	사이클로프로필	H	H	H	Me	Me	CH_2		
7.150	사이클로프로필	H	H	F	Me	H	CH_2		
7.151	사이클로프로필	H	H	Cl	Cl	H	CH_2		
7.152	사이클로프로필	H	H	H	H	H	O		
7.153	사이클로프로필	H	H	H	Me	H	O		
7.154	사이클로프로필	H	H	H	F	H	O		
7.155	사이클로프로필	H	H	H	Cl	H	O		
7.156	사이클로프로필	Me	H	H	H	H	직접 결합		
7.157	사이클로프로필	Me	H	H	Me	H	직접 결합		
7.158	사이클로프로필	Me	H	H	F	H	직접 결합		
7.159	사이클로프로필	Me	H	H	Cl	H	직접 결합		

[0485]

화합물 번호	R^1	R^2	R^3	R^7	R^8	R^9	R^{10}	A	물리적 데이터
7.160	사이클로프로필		Me	H	H	H	H	CH_2	
7.161	사이클로프로필		Me	H	H	Me	H	CH_2	
7.162	사이클로프로필		Me	H	H	F	H	CH_2	
7.163	사이클로프로필		Me	H	H	Cl	H	CH_2	
7.164	사이클로프로필		Me	H	H	H	H	O	
7.165	사이클로프로필		Me	H	H	Me	H	O	
7.166	사이클로프로필		Me	H	H	F	H	O	
7.167	사이클로프로필		Me	H	H	Cl	H	O	
7.168	사이클로프로필		F	H	H	H	H	직접 결합	
7.169	사이클로프로필		F	H	H	Me	H	직접 결합	
7.170	사이클로프로필		F	H	H	F	H	직접 결합	
7.171	사이클로프로필		F	H	H	Cl	H	직접 결합	
7.172	사이클로프로필		F	H	H	Br	H	직접 결합	
7.173	사이클로프로필		F	Me	H	Me	H	직접 결합	
7.174	사이클로프로필		F	H	Me	Me	H	직접 결합	
7.175	사이클로프로필		F	H	H	Me	Me	직접 결합	
7.176	사이클로프로필		F	H	F	Me	H	직접 결합	
7.177	사이클로프로필		F	H	Cl	Cl	H	직접 결합	
7.178	사이클로프로필		F	H	H	H	H	CH_2	
7.179	사이클로프로필		F	H	H	Me	H	CH_2	
7.180	사이클로프로필		F	H	H	F	H	CH_2	
7.181	사이클로프로필		F	H	H	Cl	H	CH_2	
7.182	사이클로프로필		F	Me	H	Me	H	CH_2	
7.183	사이클로프로필		F	H	Me	Me	H	CH_2	
7.184	사이클로프로필		F	H	H	Me	Me	CH_2	
7.185	사이클로프로필		F	H	F	Me	H	CH_2	
7.186	사이클로프로필		F	H	Cl	Cl	H	CH_2	
7.187	사이클로프로필		F	H	H	H	H	O	
7.188	사이클로프로필		F	H	H	Me	H	O	
7.189	사이클로프로필		F	H	H	F	H	O	
7.190	사이클로프로필		F	H	H	Cl	H	O	
7.191	사이클로프로필		Cl	H	H	H	H	직접 결합	
7.192	사이클로프로필		Cl	H	H	Me	H	직접 결합	
7.193	사이클로프로필		Cl	H	H	F	H	직접 결합	
7.194	사이클로프로필		Cl	H	H	Cl	H	직접 결합	
7.195	사이클로프로필		Cl	H	H	H	H	CH_2	
7.196	사이클로프로필		Cl	H	H	Me	H	CH_2	
7.197	사이클로프로필		Cl	H	H	F	H	CH_2	
7.198	사이클로프로필		Cl	H	H	Cl	H	CH_2	
7.199	사이클로프로필		Cl	H	H	H	H	O	
7.200	사이클로프로필		Cl	H	H	Me	H	O	
7.201	사이클로프로필		Cl	H	H	F	H	O	
7.202	사이클로프로필		Cl	H	H	Cl	H	O	
7.203	Me	Me	F	H	H	H	H	CH_2	백색 고체

화합물 번호	R^1	R^2	R^3	R^7	R^8	R^9	R^{10}	A	물리적 데이터
7.204	Me	Me	F	H	H	Me	H	CH_2	
7.205	Me	Me	F	H	H	F	H	CH_2	
7.206	Me	Me	F	H	H	Cl	H	CH_2	
7.207	Me	Me	F	Me	H	Me	H	CH_2	
7.208	Me	Me	F	H	Me	Me	H	CH_2	
7.209	Me	Me	F	H	H	Me	Me	CH_2	
7.210	Me	Me	F	H	F	Me	H	CH_2	
7.211	Me	Me	F	H	Cl	Cl	H	CH_2	
7.212	Me	Me	F	H	H	H	H	O	
7.213	Me	Me	F	H	H	Me	H	O	
7.214	Me	Me	F	H	H	F	H	O	
7.215	Me	Me	F	H	H	Cl	H	O	
7.216	Me	Me	Cl	H	H	H	H	직접 결합	
7.217	Me	Me	Cl	H	H	Me	H	직접 결합	
7.218	Me	Me	Cl	H	H	F	H	직접 결합	
7.219	Me	Me	Cl	H	H	Cl	H	직접 결합	
7.220	Me	Me	Cl	H	H	H	H	CH_2	
7.221	Me	Me	Cl	H	H	Me	H	CH_2	
7.222	Me	Me	Cl	H	H	F	H	CH_2	
7.223	Me	Me	Cl	H	H	Cl	H	CH_2	
7.224	Me	Me	Cl	H	H	H	H	O	
7.225	Me	Me	Cl	H	H	Me	H	O	
7.226	Me	Me	Cl	H	H	F	H	O	
7.227	Me	Me	Cl	H	H	Cl	H	O	
7.228	Me	Me	F	H	H	H	H	직접 결합	백색 고체
7.229	Me	Me	F	H	H	Me	H	직접 결합	백색 고체
7.230	Me	Me	F	H	H	F	H	직접 결합	
7.231	Me	Me	F	H	H	Cl	H	직접 결합	
7.232	Me	Me	F	H	H	Br	H	직접 결합	
7.233	Me	Me	F	Me	H	Me	H	직접 결합	
7.234	Me	Me	F	H	Me	Me	H	직접 결합	
7.235	Me	Me	F	H	H	Me	Me	직접 결합	
7.236	Me	Me	F	H	F	Me	H	직접 결합	
7.237	Me	Me	F	H	Cl	Cl	H	직접 결합	
7.238	CH_2-SCF_3	H	H		H	Me	H	직접 결합	왁스성
7.239	F	F	F	H	H	H	H	직접 결합	고체
7.240	F	F	F	H	H	Me	H	직접 결합	고체
7.241	CH_2-SCF_3	H	H	H	H	H	H	직접 결합	고체
7.242	CN	H	H	H	H	H	H	직접 결합	백색 고체
7.243	CN	F	H	H	H	Me	H	직접 결합	고체
7.244	F	F	H	H	H	H	H	직접 결합	고체
7.245	Pr	H	H	H	H	Me	H	직접 결합	백색 고체

[0486]

[0487] 주) 표 7의 물리적 데이터(표 7의 화합물 번호를 지칭함):

[0488] 화합물 번호 7.1 : mp 163.5℃;

[0489] 화합물 번호 7.2 : mp 90-92℃, 광회전 +179.4° ;

[0490] 화합물 번호 7.72 : mp 58-60℃;

[0491] 화합물 번호 7.203 : 광회전 +83.4°

[0492] 화합물 번호 7.239 : mp 180-183℃, 광회전 +153.4° ;

[0493] 화합물 번호 7.240 : mp 80-83℃;

[0494] 화합물 번호 7.241 : mp 50-52℃, 광회전 +109.6° ;

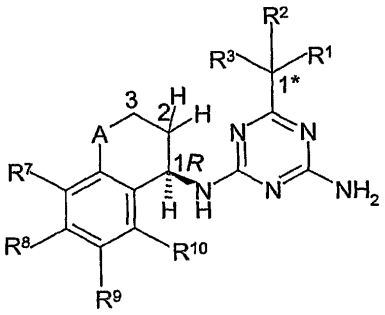
[0495] 화합물 번호 7.242 : 광회전 +116.2° ;

[0496] 화합물 번호 7.243 : mp 64-66℃, 광회전 +135.0° ;

[0497] 화합물 번호 7.244 : mp 72-76℃

표 8

화학식 Ik의 화합물:



[화학식 Ik의 화합물에서 1*로 표시된 탄소 원자는 비키랄이다]

[0498]

화합물 번호	R^1	R^2	R^3	R^7	R^8	R^9	R^{10}	A	물리적 데이터
8.1	H	H	H	H	H	H	H	직접 결합	백색 고체
8.2	H	H	H	H	H	Me	H	직접 결합	백색 고체
8.3	H	H	H	H	H	F	H	직접 결합	고체
8.4	H	H	H	H	H	Cl	H	직접 결합	

[0499]

화합물 번호	R^1	R^2	R^3	R^7	R^8	R^9	R^{10}	A	물리적 데이터
8.5	H	H	H	H	H	Br	H	직접 결합	
8.6	H	H	H	Me	H	Me	H	직접 결합	
8.7	H	H	H	H	Me	Me	H	직접 결합	왁스
8.8	H	H	H	H	H	Me	Me	직접 결합	
8.9	H	H	H	H	F	Me	H	직접 결합	
8.10	H	H	H	H	Cl	Cl	H	직접 결합	
8.11	H	H	H	H	H	H	H	CH_2	백색 포움
8.12	H	H	H	H	H	Me	H	CH_2	고체
8.13	H	H	H	H	H	F	H	CH_2	
8.14	H	H	H	H	H	Cl	H	CH_2	
8.15	H	H	H	Me	H	Me	H	CH_2	고체
8.16	H	H	H	H	Me	Me	H	CH_2	
8.17	H	H	H	H	H	Me	Me	CH_2	
8.18	H	H	H	H	F	Me	H	CH_2	
8.19	H	H	H	H	Cl	Cl	H	CH_2	
8.20	H	H	H	H	H	H	H	O	
8.21	H	H	H	H	H	Me	H	O	고체
8.22	H	H	H	H	H	F	H	O	
8.23	H	H	H	H	H	Cl	H	O	
8.24	Me	H	H	H	H	H	H	직접 결합	고체
8.25	Me	H	H	H	H	Me	H	직접 결합	황색 시럽
8.26	Me	H	H	H	H	F	H	직접 결합	고체
8.27	Me	H	H	H	H	Cl	H	직접 결합	
8.28	Me	H	H	H	H	Br	H	직접 결합	
8.29	Me	H	H	Me	H	Me	H	직접 결합	
8.30	Me	H	H	H	Me	Me	H	직접 결합	
8.31	Me	H	H	H	H	Me	Me	직접 결합	
8.32	Me	H	H	H	F	Me	H	직접 결합	
8.33	Me	H	H	H	Cl	Cl	H	직접 결합	
8.34	Me	H	H	H	H	H	H	CH_2	고체 포움
8.35	Me	H	H	H	H	Me	H	CH_2	고체
8.36	Me	H	H	H	H	F	H	CH_2	
8.37	Me	H	H	H	H	Cl	H	CH_2	
8.38	Me	H	H	Me	H	Me	H	CH_2	고체
8.39	Me	H	H	H	Me	Me	H	CH_2	
8.40	Me	H	H	H	H	Me	Me	CH_2	
8.41	Me	H	H	H	F	Me	H	CH_2	
8.42	Me	H	H	H	Cl	Cl	H	CH_2	
8.43	Me	H	H	H	H	H	H	O	
8.44	Me	H	H	H	H	Me	H	O	고체
8.45	Me	H	H	H	H	F	H	O	
8.46	Me	H	H	H	H	Cl	H	O	
8.47	Et	H	H	H	H	H	H	직접 결합	
8.48	Et	H	H	H	H	Me	H	직접 결합	무색 포움

화합물 번호	R^1	R^2	R^3	R^7	R^8	R^9	R^{10}	A	물리적 데이터
8.49	Et	H	H	H	H	F	H	직접 결합	고체
8.50	Et	H	H	H	H	Cl	H	직접 결합	
8.51	Et	H	H	H	H	Br	H	직접 결합	
8.52	Et	H	H	Me	H	Me	H	직접 결합	
8.53	Et	H	H	H	Me	Me	H	직접 결합	
8.54	Et	H	H	H	H	Me	Me	직접 결합	
8.55	Et	H	H	H	F	Me	H	직접 결합	
8.56	Et	H	H	H	Cl	Cl	H	직접 결합	
8.57	Et	H	H	H	H	H	H	CH_2	
8.58	Et	H	H	H	H	Me	H	CH_2	고체
8.59	Et	H	H	H	H	F	H	CH_2	
8.60	Et	H	H	H	H	Cl	H	CH_2	
8.61	Et	H	H	Me	H	Me	H	CH_2	고체
8.62	Et	H	H	H	Me	Me	H	CH_2	
8.63	Et	H	H	H	H	Me	Me	CH_2	
8.64	Et	H	H	H	F	Me	H	CH_2	
8.65	Me	Me	Cl	H	H	Cl	H	O	
8.66	Me	Me	H	H	H	H	H	직접 결합	
8.67	Me	Me	H	H	H	Me	H	직접 결합	백색 고체
8.68	Me	Me	H	H	H	F	H	직접 결합	고체
8.69	Me	Me	H	H	H	Cl	H	직접 결합	
8.70	Me	Me	H	H	H	H	H	CH_2	
8.71	Me	Me	H	H	H	Me	H	CH_2	고체
8.72	Me	Me	H	H	H	F	H	CH_2	
8.73	Me	Me	H	H	H	Cl	H	CH_2	
8.74	Me	Me	H	H	H	H	H	O	
8.75	Me	Me	H	H	H	Me	H	O	고체
8.76	Me	Me	H	H	H	F	H	O	
8.77	Me	Me	H	H	H	Cl	H	O	
8.78	Cl	Me	Cl	H	H	H	H	직접 결합	
8.79	Cl	Me	Cl	H	H	Me	H	직접 결합	무색 고체
8.80	Cl	Me	Cl	H	H	F	H	직접 결합	
8.81	Cl	Me	Cl	H	H	Cl	H	직접 결합	
8.82	Cl	Me	Cl	H	H	H	H	CH_2	
8.83	Cl	Me	Cl	H	H	Me	H	CH_2	
8.84	Cl	Me	Cl	H	H	F	H	CH_2	
8.85	Cl	Me	Cl	H	H	Cl	H	CH_2	
8.86	Cl	Me	Cl	H	H	H	H	O	
8.87	Cl	Me	Cl	H	H	Me	H	O	
8.88	Cl	Me	Cl	H	H	F	H	O	
8.89	Cl	Me	Cl	H	H	Cl	H	O	
8.90	H	H	F	H	H	H	H	직접 결합	고체
8.91	H	H	F	H	H	Me	H	직접 결합	
8.92	H	H	F	H	H	F	H	직접 결합	

[0500]

[0501]

화합물 번호	R^1	R^2	R^3	R^7	R^8	R^9	R^{10}	A	물리적 데이터
8.93	H	H	F	H	H	Cl	H	직접 결합	
8.94	H	H	F	H	H	Br	H	직접 결합	
8.95	H	H	F	Me	H	Me	H	직접 결합	
8.96	H	H	F	H	Me	Me	H	직접 결합	
8.97	H	H	F	H	H	Me	Me	직접 결합	
8.98	H	H	F	H	F	Me	H	직접 결합	
8.99	H	H	F	H	Cl	Cl	H	직접 결합	
8.100	H	H	F	H	H	H	H	CH_2	고체
8.101	H	H	F	H	H	Me	H	CH_2	
8.102	H	H	F	H	H	F	H	CH_2	
8.103	H	H	F	H	H	Cl	H	CH_2	
8.104	H	H	F	Me	H	Me	H	CH_2	
8.105	H	H	F	H	Me	Me	H	CH_2	
8.106	H	H	F	H	H	Me	Me	CH_2	
8.107	H	H	F	H	F	Me	H	CH_2	
8.108	H	H	F	H	Cl	Cl	H	CH_2	
8.109	H	H	F	H	H	H	H	O	
8.110	H	H	F	H	H	Me	H	O	
8.111	H	H	F	H	H	F	H	O	
8.112	H	H	F	H	H	Cl	H	O	
8.113	H	H	Cl	H	H	H	H	직접 결합	고체
8.114	H	H	Cl	H	H	Me	H	직접 결합	
8.115	H	H	Cl	H	H	F	H	직접 결합	
8.116	H	H	Cl	H	H	Cl	H	직접 결합	
8.117	H	H	Cl	H	H	H	H	CH_2	왁스성
8.118	H	H	Cl	H	H	Me	H	CH_2	
8.119	H	H	Cl	H	H	F	H	CH_2	
8.120	H	H	Cl	H	H	Cl	H	CH_2	
8.121	H	H	Cl	H	H	H	H	O	
8.122	H	H	Cl	H	H	Me	H	O	
8.123	H	H	Cl	H	H	F	H	O	
8.124	H	H	Cl	H	H	Cl	H	O	
8.125	사이클로프로필		H	H	H	H	H	직접 결합	
8.126	사이클로프로필		H	H	H	Me	H	직접 결합	
8.127	사이클로프로필		H	H	H	F	H	직접 결합	
8.128	사이클로프로필		H	H	H	Cl	H	직접 결합	
8.129	사이클로프로필		H	H	H	Br	H	직접 결합	
8.130	사이클로프로필		H	Me	H	Me	H	직접 결합	
8.131	사이클로프로필		H	H	Me	Me	H	직접 결합	
8.132	사이클로프로필		H	H	H	Me	Me	직접 결합	
8.133	사이클로프로필		H	H	F	Me	H	직접 결합	
8.134	사이클로프로필		H	H	Cl	Cl	H	직접 결합	
8.135	사이클로프로필		H	H	H	H	H	CH_2	
8.136	사이클로프로필		H	H	H	Me	H	CH_2	

[0502]

화합물 번호	R^1	R^2	R^3	R^7	R^8	R^9	R^{10}	A	물리적 데이터
8.137	사이클로프로필		H	H	H	F	H	CH_2	
8.138	사이클로프로필		H	H	H	Cl	H	CH_2	
8.139	사이클로프로필		H	Me	H	Me	H	CH_2	
8.140	사이클로프로필		H	H	Me	Me	H	CH_2	
8.141	사이클로프로필		H	H	H	Me	Me	CH_2	
8.142	사이클로프로필		H	H	F	Me	H	CH_2	
8.143	사이클로프로필		H	H	Cl	Cl	H	CH_2	
8.144	사이클로프로필		H	H	H	H	H	O	
8.145	사이클로프로필		H	H	H	Me	H	O	
8.146	사이클로프로필		H	H	H	F	H	O	
8.147	사이클로프로필		H	H	H	Cl	H	O	
8.148	사이클로프로필		Me	H	H	H	H	직접 결합	왁스성
8.149	사이클로프로필		Me	H	H	Me	H	직접 결합	
8.150	사이클로프로필		Me	H	H	F	H	직접 결합	
8.151	사이클로프로필		Me	H	H	Cl	H	직접 결합	
8.152	사이클로프로필		Me	H	H	H	H	CH_2	왁스
8.153	사이클로프로필		Me	H	H	Me	H	CH_2	
8.154	사이클로프로필		Me	H	H	F	H	CH_2	
8.155	사이클로프로필		Me	H	H	Cl	H	CH_2	
8.156	사이클로프로필		Me	H	H	H	H	O	
8.157	사이클로프로필		Me	H	H	Me	H	O	
8.158	사이클로프로필		Me	H	H	F	H	O	
8.159	사이클로프로필		Me	H	H	Cl	H	O	
8.160	사이클로프로필		F	H	H	H	H	직접 결합	고체
8.161	사이클로프로필		F	H	H	Me	H	직접 결합	
8.162	사이클로프로필		F	H	H	F	H	직접 결합	
8.163	사이클로프로필		F	H	H	Cl	H	직접 결합	
8.164	사이클로프로필		F	H	H	Br	H	직접 결합	
8.165	사이클로프로필		F	Me	H	Me	H	직접 결합	
8.166	사이클로프로필		F	H	Me	Me	H	직접 결합	
8.167	사이클로프로필		F	H	H	Me	Me	직접 결합	
8.168	사이클로프로필		F	H	F	Me	H	직접 결합	
8.169	사이클로프로필		F	H	Cl	Cl	H	직접 결합	
8.170	사이클로프로필		F	H	H	H	H	CH_2	고체
8.171	사이클로프로필		F	H	H	Me	H	CH_2	
8.172	사이클로프로필		F	H	H	F	H	CH_2	
8.173	사이클로프로필		F	H	H	Cl	H	CH_2	
8.174	사이클로프로필		F	Me	H	Me	H	CH_2	
8.175	사이클로프로필		F	H	Me	Me	H	CH_2	
8.176	사이클로프로필		F	H	H	Me	Me	CH_2	
8.177	사이클로프로필		F	H	F	Me	H	CH_2	
8.178	사이클로프로필		F	H	Cl	Cl	H	CH_2	
8.179	사이클로프로필		F	H	H	H	H	O	
8.180	사이클로프로필		F	H	H	Me	H	O	

[0503]

화합물 번호	R^1	R^2	R^3	R^7	R^8	R^9	R^{10}	A	물리적 데이터
8.181	사이클로프로필		F	H	H	F	H	O	
8.182	사이클로프로필		F	H	H	Cl	H	O	
8.183	사이클로프로필		Cl	H	H	H	H	직접 결합	고체
8.184	사이클로프로필		Cl	H	H	Me	H	직접 결합	
8.185	사이클로프로필		Cl	H	H	F	H	직접 결합	
8.186	사이클로프로필		Cl	H	H	Cl	H	직접 결합	
8.187	사이클로프로필		Cl	H	H	H	H	CH_2	고체
8.188	사이클로프로필		Cl	H	H	Me	H	CH_2	
8.189	사이클로프로필		Cl	H	H	F	H	CH_2	
8.190	사이클로프로필		Cl	H	H	Cl	H	CH_2	
8.191	사이클로프로필		Cl	H	H	H	H	O	
8.192	사이클로프로필		Cl	H	H	Me	H	O	
8.193	사이클로프로필		Cl	H	H	F	H	O	
8.194	사이클로프로필		Cl	H	H	Cl	H	O	
8.195	Me	Me	F	H	H	H	H	직접 결합	고체
8.196	Me	Me	F	H	H	Me	H	직접 결합	밝은 갈색 고체
8.197	Me	Me	F	H	H	F	H	직접 결합	고체
8.198	Me	Me	F	H	H	Cl	H	직접 결합	
8.199	Me	Me	F	H	H	Br	H	직접 결합	
8.200	Me	Me	F	Me	H	Me	H	직접 결합	
8.201	Me	Me	F	H	Me	Me	H	직접 결합	고체 포움
8.202	Me	Me	F	H	H	Me	Me	직접 결합	
8.203	Me	Me	F	H	F	Me	H	직접 결합	
8.204	Me	Me	F	H	Cl	Cl	H	직접 결합	
8.205	Me	Me	F	H	H	H	H	CH_2	베이지색 고체
8.206	Me	Me	F	H	H	Me	H	CH_2	고체
8.207	Me	Me	F	H	H	F	H	CH_2	
8.208	Me	Me	F	H	H	Cl	H	CH_2	
8.209	Me	Me	F	Me	H	Me	H	CH_2	고체
8.210	Me	Me	F	H	Me	Me	H	CH_2	
8.211	Me	Me	F	H	H	Me	Me	CH_2	
8.212	Me	Me	F	H	F	Me	H	CH_2	
8.213	Me	Me	F	H	Cl	Cl	H	CH_2	
8.214	Me	Me	F	H	H	H	H	O	
8.215	Me	Me	F	H	H	Me	H	O	고체
8.216	Me	Me	F	H	H	F	H	O	
8.217	Me	Me	F	H	H	Cl	H	O	
8.218	Me	Me	Cl	H	H	H	H	직접 결합	
8.219	Me	Me	Cl	H	H	Me	H	직접 결합	무색 고체
8.220	Me	Me	Cl	H	H	F	H	직접 결합	
8.221	Me	Me	Cl	H	H	Cl	H	직접 결합	
8.222	Me	Me	Cl	H	H	H	H	CH_2	
8.223	Me	Me	Cl	H	H	Me	H	CH_2	
8.224	Me	Me	Cl	H	H	F	H	CH_2	

화합물 번호	R^1	R^2	R^3	R^7	R^8	R^9	R^{10}	A	물리적 데이터
8.225	Me	Me	Cl	H	H	Cl	H	CH_2	
8.226	Me	Me	Cl	H	H	H	H	O	
8.227	Me	Me	Cl	H	H	Me	H	O	
8.228	Me	Me	Cl	H	H	F	H	O	
8.229	Et	H	H	H	Cl	Cl	H	CH_2	
8.230	Et	H	H	H	H	H	H	O	
8.231	Et	H	H	H	H	Me	H	O	고체
8.232	Et	H	H	H	H	F	H	O	
8.233	OMe	H	H	H	H	H	H	직접 결합	고체
8.234	OMe	H	H	H	H	H	H	CH_2	고체
8.235	OMe	H	H	H	H	Me	H	직접 결합	
8.236	OMe	H	H	H	H	Me	H	CH_2	
8.237	Me	Me	F	F	H	H	H	O	고체
8.238	H	H	H	F	H	H	H	O	백색 고체
8.239	Me	H	H	F	H	H	H	O	백색 고체
8.240	Et	H	H	F	H	H	H	O	고체
8.241	Me	Me	F	Me	Me	H	H	O	왁스성
8.242	Me	H	H	Me	Me	H	H	O	왁스성
8.243	Me	Me	F	H	H	OMe	H	직접 결합	왁스성
8.244	Me	H	H	H	H	OMe	H	직접 결합	왁스성
8.245	Me	Me	F	H	H	Et	H	직접 결합	고체
8.246	H	H	H	H	H	Et	H	직접 결합	고체
8.247	Me	Me	H	H	H	Et	H	직접 결합	고체
8.248	Me	H	H	H	H	Et	H	직접 결합	고체
8.249	Et	H	H	H	H	Et	H	직접 결합	고체
8.250	CH_2-SCF_3	H	H	H	H	Et	H	직접 결합	왁스성
8.251	CH_2-SCF_3	H	H	H	H	Me	H	CH_2	왁스성
8.252	Me	Me	H	Me	H	Me	H	CH_2	고체
8.253	OMe	H	H	Me	H	Me	H	CH_2	백색 고체
8.254	F	F	F	H	H	H	H	CH_2	고체
8.255	CN	H	H	H	H	H	H	CH_2	백색 고체
8.256	F	F	H	H	H	H	H	CH_2	고체
8.257	Pr	H	H	H	H	Et	H	CH_2	고체

[0504]

[0505] 주) 표 8의 물리적 데이터(표 8의 화합물 번호를 지칭함):

[0506] 화합물 번호 8.1 : mp 94-96℃, 광회전 +87.4° ;

[0507] 화합물 번호 8.2 : mp 100-102℃;

[0508] 화합물 번호 8.3 : mp 87-89℃, 광회전 +97.2° ;

[0509] 화합물 번호 8.11 : 광회전 +78.7° ;

[0510] 화합물 번호 8.12 : mp 95-98℃, 광회전 +73.5° ;

[0511] 화합물 번호 8.15 : mp100-103℃, 광회전 +92.1° ;

[0512] 화합물 번호 8.21 : mp 95-97℃, 광회전 +44.3° ;

[0513] 화합물 번호 8.24 : mp 65-70℃, 광회전 +95.7° ;

[0514] 화합물 번호 8.26 : mp 77-78℃, 광회전 +80.0° ;

[0515] 화합물 번호 8.34 : 광회전 +98.5° ;

[0516] 화합물 번호 8.35 : mp 77-80℃, 광회전 +79.3° ;

[0517] 화합물 번호 8.38 : mp 172-174℃;

[0518] 화합물 번호 8.44 : mp 75-79℃, 광회전 +56.3° ;

[0519] 화합물 번호 8.49 : mp 138-139℃, 광회전 +122.1° ;

[0520] 화합물 번호 8.58 : mp 135-138℃, 광회전 +69.0° ;

[0521] 화합물 번호 8.61 : mp 178-180℃;

[0522] 화합물 번호 8.67 : mp 83-84℃;

[0523] 화합물 번호 8.68 : mp 67-68℃, 광회전 +74.2° ;

[0524] 화합물 번호 8.71 : mp 73-75℃, 광회전 +77.7° ;

[0525] 화합물 번호 8.75 : mp 75-78℃, 광회전 +59.4° ;

[0526] 화합물 번호 8.79 : mp 149-151℃;

[0527] 화합물 번호 8.90 : mp 163-165℃, 광회전 +91.6° ;

[0528] 화합물 번호 8.100 : mp 114-117℃, 광회전 +94.1° ;

[0529] 화합물 번호 8.113 : mp 63-68℃, 광회전 +77.6° ;

[0530] 화합물 번호 8.117: 광회전 +64.0° ;

[0531] 화합물 번호 8.152 : 광회전 +75.3° ;

[0532] 화합물 번호 8.160 : mp 70-75℃, 광회전 +75.0° ;

[0533] 화합물 번호 8.195 : mp 125-126℃, 광회전 +87.7° ;

[0534] 화합물 번호 8.196 : mp 87-89℃;

[0535] 화합물 번호 8.197 : mp 87-89℃, 광회전 +68.8° ;

[0536] 화합물 번호 8.205 : mp 165-167℃;

[0537] 화합물 번호 8.206 : mp 87-90℃, 광회전 +60.5° ;

[0538] 화합물 번호 8.209 : mp 90-93℃;

[0539] 화합물 번호 8.215 : mp 100-108℃, 광회전 +42.0℃;

[0540] 화합물 번호 8.219 : mp 136-138℃;

[0541] 화합물 번호 8.231 : mp 70-75℃, 광회전 +49.3° ;

[0542] 화합물 번호 8.233 : mp 148-155℃, 광회전 +86.9° ;

[0543] 화합물 번호 8.234 : mp 135-140℃, 광회전 +81.8° ;

[0544] 화합물 번호 8.237 : mp 87-95℃, 광회전 +68.0° ;

[0545] 화합물 번호 8.239 : 광회전 +52.7° ;

[0546] 화합물 번호 8.240 : mp 87-88℃, 광회전 +55.5° ;

[0547] 화합물 번호 8.243 : 광회전 +63.0° ;

[0548] 화합물 번호 8.245 : mp 136-139℃, 광회전 +66.7° ;

[0549] 화합물 번호 8.246 : mp 73-75℃, 광회전 +75.0° ;

[0550] 화합물 번호 8.247 : mp 63-70℃, 광회전 +75.0° ;

[0551] 화합물 번호 8.248 : mp 63-70℃, 광회전 +71.2° ;

[0552] 화합물 번호 8.252 : mp 70-75℃;

[0553] 화합물 번호 8.254 : mp 170-173℃, 광회전 +109.6° ;

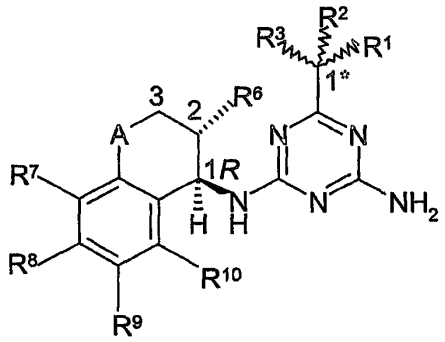
[0554] 화합물 번호 8.256 : mp 72-76℃;

[0555] 화합물 번호 8.257 : mp 63-65℃

[0556] 하나 이상의 키랄 센터의 입체화학이 구체화된 다음의 표 9 내지 14에서, 1R 위치에서의 광학적 순도는 표 실시예에서 90% 이상이다.

표 9

1*로 표시된 탄소 원자에서의 입체화학적 배열이 키랄성이지만 라세미성 (즉, (1*R,S))인 화학식 IL의 화합물



[0557]

화합물 번호	R^1	R^2	R^3	R^6	R^7	R^8	R^9	R^{10}	A	물리적 데이터
9.1	Me	H	F	Me	H	H	H	H	직접 결합	
9.2	Me	H	F	Me	H	H	Me	H	직접 결합	
9.3	Me	H	F	Me	H	H	F	H	직접 결합	
9.4	Me	H	F	Me	H	H	Cl	H	직접 결합	
9.5	Me	H	F	Me	H	H	Br	H	직접 결합	
9.6	Me	H	F	Me	Me	H	Me	H	직접 결합	
9.7	Me	H	F	Me	H	Me	Me	H	직접 결합	
9.8	Me	H	F	Me	H	H	Me	Me	직접 결합	
9.9	Me	H	F	Me	H	F	Me	H	직접 결합	
9.10	Me	H	F	Me	H	Cl	Cl	H	직접 결합	
9.11	Me	H	F	Me	H	H	H	H	CH_2	
9.12	Me	H	F	Me	H	H	Me	H	CH_2	
9.13	Me	H	F	Me	H	H	F	H	CH_2	
9.14	Me	H	F	Me	H	H	Cl	H	CH_2	
9.15	Me	H	F	Me	Me	H	Me	H	CH_2	
9.16	Me	H	F	Me	H	Me	Me	H	CH_2	
9.17	Me	H	F	Me	H	H	Me	Me	CH_2	
9.18	Me	H	F	Me	H	F	Me	H	CH_2	
9.19	Me	H	F	Me	H	Cl	Cl	H	CH_2	
9.20	Me	H	F	Me	H	H	H	H	O	
9.21	Me	H	F	Me	H	H	Me	H	O	
9.22	Me	H	F	Me	H	H	F	H	O	
9.23	Me	H	F	Me	H	H	Cl	H	O	
9.24	Me	H	Cl	Me	H	H	H	H	직접 결합	
9.25	Me	H	Cl	Me	H	H	Me	H	직접 결합	
9.26	Me	H	Cl	Me	H	H	F	H	직접 결합	
9.27	Me	H	Cl	Me	H	H	Cl	H	직접 결합	
9.28	Me	H	Cl	Me	H	H	H	H	CH_2	
9.29	Me	H	Cl	Me	H	H	Me	H	CH_2	
9.30	Me	H	Cl	Me	H	H	F	H	CH_2	
9.31	Me	H	Cl	Me	H	H	Cl	H	CH_2	
9.32	Me	H	Cl	Me	H	H	H	H	O	
9.33	Me	H	Cl	Me	H	H	Me	H	O	
9.34	Me	H	Cl	Me	H	H	F	H	O	
9.35	Me	H	Cl	Me	H	H	Cl	H	O	
9.36	Et	H	F	Me	H	H	H	H	직접 결합	백색 고체
9.37	Et	H	F	Me	H	H	Me	H	직접 결합	백색 고체
9.38	Et	H	F	Me	H	H	F	H	직접 결합	
9.39	Et	H	F	Me	H	H	Cl	H	직접 결합	
9.40	Et	H	F	Me	H	H	Br	H	직접 결합	
9.41	Et	H	Cl	Me	H	H	H	H	직접 결합	
9.42	Et	H	Cl	Me	H	H	Me	H	직접 결합	

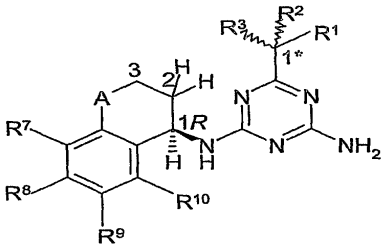
[0558]

[0559]

화합물 번호	R^1	R^2	R^3	R^6	R^7	R^8	R^9	R^{10}	A	물리적 데이터
9.43	Et	H	Cl	Me	H	H	F	H	직접 결합	
9.44	Et	H	Cl	Me	H	H	Cl	H	직접 결합	
9.45	Et	H	Cl	Me	H	H	Br	H	직접 결합	
9.46	Et	H	F	Me	H	H	H	H	CH_2	
9.47	Et	H	F	Me	H	H	Me	H	CH_2	
9.48	Et	H	F	Me	H	H	F	H	CH_2	
9.49	Et	H	F	Me	H	H	Cl	H	CH_2	
9.50	Et	H	F	Me	H	H	Br	H	CH_2	
9.51	Et	H	Cl	Me	H	H	H	H	CH_2	
9.52	Et	H	Cl	Me	H	H	Me	H	CH_2	
9.53	Et	H	Cl	Me	H	H	F	H	CH_2	
9.54	Et	H	Cl	Me	H	H	Cl	H	CH_2	
9.55	Et	H	Cl	Me	H	H	Br	H	CH_2	
9.56	Et	H	F	Me	H	H	H	H	O	
9.57	Et	H	F	Me	H	H	Me	H	O	
9.58	Et	H	F	Me	H	H	F	H	O	
9.59	Et	H	F	Me	H	H	Cl	H	O	
9.60	Et	H	F	Me	H	H	Br	H	O	
9.61	Et	H	Cl	Me	H	H	H	H	O	
9.62	Et	H	Cl	Me	H	H	Me	H	O	
9.63	Et	H	Cl	Me	H	H	F	H	O	
9.64	Et	H	Cl	Me	H	H	Cl	H	O	
9.65	Et	H	Cl	Me	H	H	Br	H	O	
9.66	Pr	H	H	Me	H	H	Me	H	직접 결합	백색 고체

표 10

1*로 표시된 탄소 원자에서의 입체 화학적 배열이 라세미성(즉, (1*RS))인,
1*로 표시된 탄소 원자에서 키랄 센터를 갖는 화학식 Ia-1의 화합물:



화합물 번호	R^1	R^2	R^3	R^7	R^8	R^9	R^{10}	A	물리적 데이터
10.1	Me	H	F	H	H	H	H	직접 결합	백색 고체
10.2	Me	H	F	H	H	Me	H	직접 결합	백색 고체
10.3	Me	H	F	H	H	F	H	직접 결합	
10.4	Me	H	F	H	H	Cl	H	직접 결합	
10.5	Me	H	F	H	H	Br	H	직접 결합	
10.6	Me	H	F	Me	H	Me	H	직접 결합	
10.7	Me	H	F	H	Me	Me	H	직접 결합	
10.8	Me	H	F	H	H	Me	Me	직접 결합	
10.9	Me	H	F	H	F	Me	H	직접 결합	
10.10	Me	H	F	H	Cl	Cl	H	직접 결합	
10.11	Me	H	F	H	H	H	H	CH_2	
10.12	Me	H	F	H	H	Me	H	CH_2	
10.13	Me	H	F	H	H	F	H	CH_2	
10.14	Me	H	F	H	H	Cl	H	CH_2	
10.15	Me	H	F	Me	H	Me	H	CH_2	
10.16	Me	H	F	H	Me	Me	H	CH_2	
10.17	Me	H	F	H	H	Me	Me	CH_2	
10.18	Me	H	F	H	F	Me	H	CH_2	
10.19	Me	H	F	H	Cl	Cl	H	CH_2	
10.20	Me	H	F	H	H	H	H	O	
10.21	Me	H	F	H	H	Me	H	O	
10.22	Me	H	F	H	H	F	H	O	
10.23	Me	H	F	H	H	Cl	H	O	
10.24	Me	H	Cl	H	H	H	H	직접 결합	
10.25	Me	H	Cl	H	H	Me	H	직접 결합	
10.26	Me	H	Cl	H	H	F	H	직접 결합	
10.27	Me	H	Cl	H	H	Cl	H	직접 결합	
10.28	Me	H	Cl	H	H	H	H	CH_2	
10.29	Me	H	Cl	H	H	Me	H	CH_2	
10.30	Me	H	Cl	H	H	F	H	CH_2	
10.31	Me	H	Cl	Me	H	Me	H	CH_2	
10.32	Me	H	Cl	H	H	H	H	O	
10.33	Me	H	Cl	H	H	Me	H	O	
10.34	Me	H	Cl	H	H	F	H	O	
10.35	Me	H	Cl	H	H	Cl	H	O	
10.36	Et	H	F	H	H	H	H	직접 결합	
10.37	Et	H	F	H	H	Me	H	직접 결합	백색 고체 (c)
10.38	Et	H	F	H	H	F	H	직접 결합	고체
10.39	Et	H	F	H	H	Cl	H	직접 결합	
10.40	Et	H	F	H	H	Br	H	직접 결합	

[0560]

화합물 번호	R^1	R^2	R^3	R^7	R^8	R^9	R^{10}	A	물리적 데이터
10.41	Et	H	Cl	H	H	H	H	직접 결합	
10.42	Et	H	Cl	H	H	Me	H	직접 결합	
10.43	Et	H	Cl	H	H	F	H	직접 결합	
10.44	Et	H	Cl	H	H	Cl	H	직접 결합	
10.45	Et	H	Cl	H	H	Br	H	직접 결합	
10.46	Et	H	F	H	H	H	H	CH_2	
10.47	Et	H	F	H	H	Me	H	CH_2	고체
10.48	Et	H	F	H	H	F	H	CH_2	
10.49	Et	H	F	H	H	Cl	H	CH_2	
10.50	Et	H	F	H	H	Br	H	CH_2	
10.51	Et	H	Cl	H	H	H	H	CH_2	
10.52	Et	H	Cl	H	H	Me	H	CH_2	
10.53	Et	H	Cl	H	H	F	H	CH_2	
10.54	Et	H	Cl	H	H	Cl	H	CH_2	
10.55	Et	H	Cl	H	H	Br	H	CH_2	
10.56	Et	H	F	H	H	H	H	O	
10.57	Et	H	F	H	H	Me	H	O	고체
10.58	Et	H	F	H	H	F	H	O	
10.59	Et	H	F	H	H	Cl	H	O	
10.60	Et	H	F	H	H	Br	H	O	
10.61	Et	H	Cl	H	H	H	H	O	
10.62	Et	H	Cl	H	H	Me	H	O	
10.63	Et	H	Cl	H	H	F	H	O	
10.64	Et	H	Cl	H	H	Cl	H	O	
10.65	Et	H	Cl	H	H	Br	H	O	
10.66	Pr	H	F	H	H	Me	H	CH_2	백색 고체
10.67	Pr	H	F	Me	H	Me	H	O	고체
10.68	Et	H	F	Me	H	Me	H	CH_2	고체

[0561]

[0562] 주) 표 10의 물리적 데이터(표 10의 화합물 번호를 지칭함):

[0563] 화합물 번호 10.1 : mp 147-151℃, 광회전 +91.5° ;

[0564] 화합물 번호 10.2 : mp 92-94℃;

[0565] 화합물 번호 10.37 : mp 82-84℃;

[0566] 화합물 번호 10.38 : mp 76-77℃;

[0567] 화합물 번호 10.47 : mp 85-88℃;

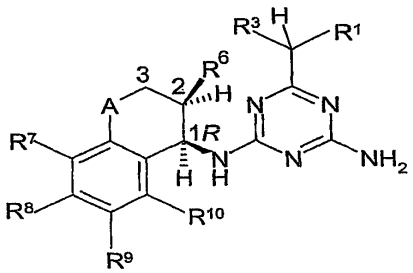
[0568] 화합물 번호 10.57 : mp90-93℃;

[0569] 화합물 번호 10.67 : mp80-85℃;

[0570] 화합물 번호 10.68 : mp 90-93℃, 광회전 +77.0° .

표 11

1*로 표시된 탄소 원자에서의 입체화학적 배열이 라세미성(즉, (1*RS))인 화학식 Im의 화합물:



[0571]

화합물 번호	R^1	R^3	R^6	R^7	R^8	R^9	R^{10}	A	물리적 데이터 mp/ 광회전/외형
11.1	Me	F	Me	H	H	H	H	직접 결합	
11.2	Me	F	Me	H	H	Me	H	직접 결합	
11.3	Me	F	Me	H	H	F	H	직접 결합	
11.4	Me	F	Me	H	H	Cl	H	직접 결합	
11.5	Me	F	Me	H	H	Br	H	직접 결합	
11.6	Me	F	Me	Me	H	Me	H	직접 결합	
11.7	Me	F	Me	H	Me	Me	H	직접 결합	
11.8	Me	F	Me	H	H	Me	Me	직접 결합	
11.9	Me	F	Me	H	F	Me	H	직접 결합	
11.10	Me	F	Me	H	Cl	Cl	H	직접 결합	
11.11	Me	F	Me	H	H	H	H	CH_2	
11.12	Me	F	Me	H	H	Me	H	CH_2	
11.13	Me	F	Me	H	H	F	H	CH_2	
11.14	Me	F	Me	H	H	Cl	H	CH_2	
11.15	Me	F	Me	Me	H	Me	H	CH_2	
11.16	Me	F	Me	H	Me	Me	H	CH_2	
11.17	Me	F	Me	H	H	Me	Me	CH_2	
11.18	Me	F	Me	H	F	Me	H	CH_2	
11.19	Me	F	Me	H	Cl	Cl	H	CH_2	
11.20	Me	F	Me	H	H	H	H	O	
11.21	Me	F	Me	H	H	Me	H	O	
11.22	Me	F	Me	H	H	F	H	O	

화합물 번호	R^1	R^3	R^6	R^7	R^8	R^9	R^{10}	A	물리적 데이터 mp/ 광회전/외형
11.23	Me	F	Me	H	H	Cl	H	O	
11.24	Me	Cl	Me	H	H	H	H	직접 결합	
11.25	Me	Cl	Me	H	H	Me	H	직접 결합	
11.26	Me	Cl	Me	H	H	F	H	직접 결합	
11.27	Me	Cl	Me	H	H	Cl	H	직접 결합	
11.28	Me	Cl	Me	H	H	H	H	CH_2	
11.29	Me	Cl	Me	H	H	Me	H	CH_2	
11.30	Me	Cl	Me	H	H	F	H	CH_2	
11.31	Me	Cl	Me	H	H	Cl	H	CH_2	
11.32	Me	Cl	Me	H	H	H	H	O	
11.33	Me	Cl	Me	H	H	Me	H	O	
11.34	Me	Cl	Me	H	H	F	H	O	
11.35	Me	Cl	Me	H	H	Cl	H	O	
11.36	Et	F	Me	H	H	H	H	직접 결합	
11.37	Et	F	Me	H	H	Me	H	직접 결합	
11.38	Et	F	Me	H	H	F	H	직접 결합	
11.39	Et	F	Me	H	H	Cl	H	직접 결합	
11.40	Et	F	Me	H	H	Br	H	직접 결합	
11.41	Et	Cl	Me	H	H	H	H	직접 결합	
11.42	Et	Cl	Me	H	H	Me	H	직접 결합	
11.43	Et	Cl	Me	H	H	F	H	직접 결합	
11.44	Et	Cl	Me	H	H	Cl	H	직접 결합	
11.45	Et	Cl	Me	H	H	Br	H	직접 결합	
11.46	Et	F	Me	H	H	H	H	CH_2	
11.47	Et	F	Me	H	H	Me	H	CH_2	
11.48	Et	F	Me	H	H	F	H	CH_2	
11.49	Et	F	Me	H	H	Cl	H	CH_2	
11.50	Et	F	Me	H	H	Br	H	CH_2	
11.51	Et	Cl	Me	H	H	H	H	CH_2	
11.52	Et	Cl	Me	H	H	Me	H	CH_2	
11.53	Et	Cl	Me	H	H	F	H	CH_2	
11.54	Et	Cl	Me	H	H	Cl	H	CH_2	
11.55	Et	Cl	Me	H	H	Br	H	CH_2	
11.56	Et	F	Me	H	H	H	H	O	
11.57	Et	F	Me	H	H	Me	H	O	
11.58	Et	F	Me	H	H	F	H	O	
11.59	Et	F	Me	H	H	Cl	H	O	
11.60	Et	F	Me	H	H	Br	H	O	
11.61	Et	Cl	Me	H	H	H	H	O	
11.62	Et	Cl	Me	H	H	Me	H	O	
11.63	Et	Cl	Me	H	H	F	H	O	

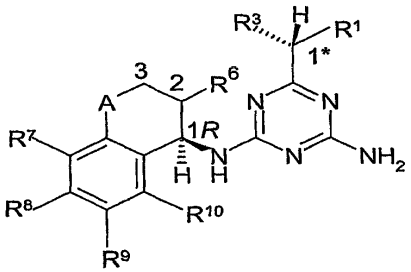
[0572]

화합물 번호	R^1	R^3	R^6	R^7	R^8	R^9	R^{10}	A	물리적 데이터 mp/ 광회전/외형
11.64	Et	Cl	Me	H	H	Cl	H	O	
11.65	Et	Cl	Me	H	H	Br	H	O	

[0573]

표 12

2로 표시된 탄소 원자에서의 입체화학적 배열이 라세미성(즉, (2RS))인 화학식 In의 화합물:



화합물 번호	R^1	R^3	R^6	R^7	R^8	R^9	R^{10}	A	물리적 데이터 mp/ 광회전/외형
12.1	Me	F	Me	H	H	H	H	직접 결합	
12.2	Me	F	Me	H	H	Me	H	직접 결합	
12.3	Me	F	Me	H	H	F	H	직접 결합	
12.4	Me	F	Me	H	H	Cl	H	직접 결합	
12.5	Me	F	Me	H	H	Br	H	직접 결합	
12.6	Me	F	Me	Me	H	Me	H	직접 결합	
12.7	Me	F	Me	H	Me	Me	H	직접 결합	
12.8	Me	F	Me	H	H	Me	Me	직접 결합	
12.9	Me	F	Me	H	F	Me	H	직접 결합	
12.10	Me	F	Me	H	Cl	Cl	H	직접 결합	
12.11	Me	F	Me	H	H	H	H	CH_2	
12.12	Me	F	Me	H	H	Me	H	CH_2	
12.13	Me	F	Me	H	H	F	H	CH_2	
12.14	Me	F	Me	H	H	Cl	H	CH_2	
12.15	Me	F	Me	Me	H	Me	H	CH_2	
12.16	Me	F	Me	H	Me	Me	H	CH_2	
12.17	Me	F	Me	H	H	Me	Me	CH_2	
12.18	Me	F	Me	H	F	Me	H	CH_2	
12.19	Me	F	Me	H	Cl	Cl	H	CH_2	
12.20	Me	F	Me	H	H	H	H	O	

[0574]

화합물 번호	R^1	R^3	R^6	R^7	R^8	R^9	R^{10}	A	물리적 데이터 mp/ 광회전/외형
12.21	Me	F	Me	H	H	Me	H	O	
12.22	Me	F	Me	H	H	F	H	O	
12.23	Me	F	Me	H	H	Cl	H	O	
12.24	Me	Cl	Me	H	H	H	H	직접 결합	
12.25	Me	Cl	Me	H	H	Me	H	직접 결합	
12.26	Me	Cl	Me	H	H	F	H	직접 결합	
12.27	Me	Cl	Me	H	H	Cl	H	직접 결합	
12.28	Me	Cl	Me	H	H	H	H	CH_2	
12.29	Me	Cl	Me	H	H	Me	H	CH_2	
12.30	Me	Cl	Me	H	H	F	H	CH_2	
12.31	Me	Cl	Me	H	H	Cl	H	CH_2	
12.32	Me	Cl	Me	H	H	H	H	O	
12.33	Me	Cl	Me	H	H	Me	H	O	
12.34	Me	Cl	Me	H	H	F	H	O	
12.35	Me	Cl	Me	H	H	Cl	H	O	
12.36	Et	F	Me	H	H	H	H	직접 결합	
12.37	Et	F	Me	H	H	Me	H	직접 결합	
12.38	Et	F	Me	H	H	F	H	직접 결합	
12.39	Et	F	Me	H	H	Cl	H	직접 결합	
12.40	Et	F	Me	H	H	Br	H	직접 결합	
12.41	Et	Cl	Me	H	H	H	H	직접 결합	
12.42	Et	Cl	Me	H	H	Me	H	직접 결합	
12.43	Et	Cl	Me	H	H	F	H	직접 결합	
12.44	Et	Cl	Me	H	H	Cl	H	직접 결합	
12.45	Et	Cl	Me	H	H	Br	H	직접 결합	
12.46	Et	F	Me	H	H	H	H	CH_2	
12.47	Et	F	Me	H	H	Me	H	CH_2	
12.48	Et	F	Me	H	H	F	H	CH_2	
12.49	Et	F	Me	H	H	Cl	H	CH_2	
12.50	Et	F	Me	H	H	Br	H	CH_2	
12.51	Et	Cl	Me	H	H	H	H	CH_2	
12.52	Et	Cl	Me	H	H	Me	H	CH_2	
12.53	Et	Cl	Me	H	H	F	H	CH_2	
12.54	Et	Cl	Me	H	H	Cl	H	CH_2	
12.55	Et	Cl	Me	H	H	Br	H	CH_2	
12.56	Et	F	Me	H	H	H	H	O	
12.57	Et	F	Me	H	H	Me	H	O	
12.58	Et	F	Me	H	H	F	H	O	
12.59	Et	F	Me	H	H	Cl	H	O	
12.60	Et	F	Me	H	H	Br	H	O	
12.61	Et	Cl	Me	H	H	H	H	O	

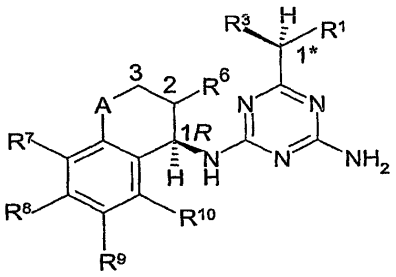
[0575]

화합물 번호	R^1	R^3	R^6	R^7	R^8	R^9	R^{10}	A	물리적 데이터 mp/ 광회전/외형
12.62	Et	Cl	Me	H	H	Me	H	O	
12.63	Et	Cl	Me	H	H	F	H	O	
12.64	Et	Cl	Me	H	H	Cl	H	O	
12.65	Et	Cl	Me	H	H	Br	H	O	

[0576]

표 13

2로 표시된 탄소 원자에서의 입체화학적 배열이 라세미성(즉, (2RS))인 화학식 Ip의 화합물:



[0577]

화합물 번호	R^1	R^3	R^6	R^7	R^8	R^9	R^{10}	A	물리적 데이터 mp/ 광회전/외형
13.1	Me	F	Me	H	H	H	H	직접 결합	
13.2	Me	F	Me	H	H	Me	H	직접 결합	
13.3	Me	F	Me	H	H	F	H	직접 결합	
13.4	Me	F	Me	H	H	Cl	H	직접 결합	
13.5	Me	F	Me	H	H	Br	H	직접 결합	
13.6	Me	F	Me	Me	H	Me	H	직접 결합	
13.7	Me	F	Me	H	Me	Me	H	직접 결합	
13.8	Me	F	Me	H	H	Me	Me	직접 결합	
13.9	Me	F	Me	H	F	Me	H	직접 결합	
13.10	Me	F	Me	H	Cl	Cl	H	직접 결합	
13.11	Me	F	Me	H	H	H	H	CH_2	
13.12	Me	F	Me	H	H	Me	H	CH_2	
12.13	Me	F	Me	H	H	F	H	CH_2	
13.14	Me	F	Me	H	H	Cl	H	CH_2	
13.15	Me	F	Me	Me	H	Me	H	CH_2	
13.16	Me	F	Me	H	Me	Me	H	CH_2	
13.17	Me	F	Me	H	H	Me	Me	CH_2	
13.18	Me	F	Me	H	F	Me	H	CH_2	

화합물 번호	R^1	R^3	R^6	R^7	R^8	R^9	R^{10}	A	물리적 데이터 mp/ 광회전/외형
13.19	Me	F	Me	H	Cl	Cl	H	CH_2	
13.20	Me	F	Me	H	H	H	H	O	
13.21	Me	F	Me	H	H	Me	H	O	
13.22	Me	F	Me	H	H	F	H	O	
13.23	Me	F	Me	H	H	Cl	H	O	
13.24	Me	Cl	Me	H	H	H	H	직접 결합	
13.25	Me	Cl	Me	H	H	Me	H	직접 결합	
13.26	Me	Cl	Me	H	H	F	H	직접 결합	
13.27	Me	Cl	Me	H	H	Cl	H	직접 결합	
13.28	Me	Cl	Me	H	H	H	H	CH_2	
13.29	Me	Cl	Me	H	H	Me	H	CH_2	
13.30	Me	Cl	Me	H	H	F	H	CH_2	
13.31	Me	Cl	Me	H	H	Cl	H	CH_2	
13.32	Me	Cl	Me	H	H	H	H	O	
13.33	Me	Cl	Me	H	H	Me	H	O	
13.34	Me	Cl	Me	H	H	F	H	O	
13.35	Me	Cl	Me	H	H	Cl	H	O	
13.36	Et	F	Me	H	H	H	H	직접 결합	
13.37	Et	F	Me	H	H	Me	H	직접 결합	
13.38	Et	F	Me	H	H	F	H	직접 결합	
13.39	Et	F	Me	H	H	Cl	H	직접 결합	
13.40	Et	F	Me	H	H	Br	H	직접 결합	
13.41	Et	Cl	Me	H	H	H	H	직접 결합	
13.42	Et	Cl	Me	H	H	Me	H	직접 결합	
13.43	Et	Cl	Me	H	H	F	H	직접 결합	
13.44	Et	Cl	Me	H	H	Cl	H	직접 결합	
13.45	Et	Cl	Me	H	H	Br	H	직접 결합	
13.46	Et	F	Me	H	H	H	H	CH_2	
13.47	Et	F	Me	H	H	Me	H	CH_2	
13.48	Et	F	Me	H	H	F	H	CH_2	
13.49	Et	F	Me	H	H	Cl	H	CH_2	
13.50	Et	F	Me	H	H	Br	H	CH_2	
13.51	Et	Cl	Me	H	H	H	H	CH_2	
13.52	Et	Cl	Me	H	H	Me	H	CH_2	
13.53	Et	Cl	Me	H	H	F	H	CH_2	
13.54	Et	Cl	Me	H	H	Cl	H	CH_2	
13.55	Et	Cl	Me	H	H	Br	H	CH_2	
13.56	Et	F	Me	H	H	H	H	O	
13.57	Et	F	Me	H	H	Me	H	O	
13.58	Et	F	Me	H	H	F	H	O	
13.59	Et	F	Me	H	H	Cl	H	O	

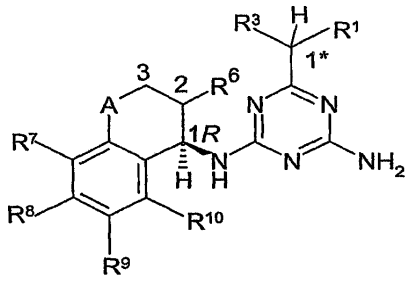
[0578]

화합물 번호	R^1	R^3	R^6	R^7	R^8	R^9	R^{10}	A	물리적 데이터 mp/ 광회전/외형
13.60	Et	F	Me	H	H	Br	H	O	
13.61	Et	Cl	Me	H	H	H	H	O	
13.62	Et	Cl	Me	H	H	Me	H	O	
13.63	Et	Cl	Me	H	H	F	H	O	
13.64	Et	Cl	Me	H	H	Cl	H	O	
13.65	Et	Cl	Me	H	H	Br	H	O	

[0579]

표 14

2 및 1*로 표시된 탄소 원자에서의 입체화학적 배열이 라세미성(즉, (1*RS, 2RS))인 화학식 Ic-1의 화합물:



[0580]

화합물 번호	R^1	R^3	R^6	R^7	R^8	R^9	R^{10}	A	물리적 데이터 mp/ 광회전/외형
14.1	Me	F	Me	H	H	H	H	직접 결합	
14.2	Me	F	Me	H	H	Me	H	직접 결합	
14.3	Me	F	Me	H	H	F	H	직접 결합	
14.4	Me	F	Me	H	H	Cl	H	직접 결합	
14.5	Me	F	Me	H	H	Br	H	직접 결합	
14.6	Me	F	Me	Me	H	Me	H	직접 결합	
14.7	Me	F	Me	H	Me	Me	H	직접 결합	
14.8	Me	F	Me	H	H	Me	Me	직접 결합	
14.9	Me	F	Me	H	F	Me	H	직접 결합	
14.10	Me	F	Me	H	Cl	Cl	H	직접 결합	
14.11	Me	F	Me	H	H	H	H	CH_2	
14.12	Me	F	Me	H	H	Me	H	CH_2	
14.13	Me	F	Me	H	H	F	H	CH_2	
14.14	Me	F	Me	H	H	Cl	H	CH_2	
14.15	Me	F	Me	Me	H	Me	H	CH_2	
14.16	Me	F	Me	H	Me	Me	H	CH_2	

화합물 번호	R^1	R^3	R^6	R^7	R^8	R^9	R^{10}	A	물리적 데이터 mp/ 광회전/외형
14.17	Me	F	Me	H	H	Me	Me	CH_2	
14.18	Me	F	Me	H	F	Me	H	CH_2	
14.19	Me	F	Me	H	Cl	Cl	H	CH_2	
14.20	Me	F	Me	H	H	H	H	O	
14.21	Me	F	Me	H	H	Me	H	O	
14.22	Me	F	Me	H	H	F	H	O	
14.23	Me	F	Me	H	H	Cl	H	O	
14.24	Me	Cl	Me	H	H	H	H	직접 결합	
14.25	Me	Cl	Me	H	H	Me	H	직접 결합	
14.26	Me	Cl	Me	H	H	F	H	직접 결합	
14.27	Me	Cl	Me	H	H	Cl	H	직접 결합	
14.28	Me	Cl	Me	H	H	H	H	CH_2	
14.29	Me	Cl	Me	H	H	Me	H	CH_2	
14.30	Me	Cl	Me	H	H	F	H	CH_2	
14.31	Me	Cl	Me	H	H	Cl	H	CH_2	
14.32	Me	Cl	Me	H	H	H	H	O	
14.33	Me	Cl	Me	H	H	Me	H	O	
14.34	Me	Cl	Me	H	H	F	H	O	
14.35	Me	Cl	Me	H	H	Cl	H	O	
14.36	Et	F	Me	H	H	H	H	직접 결합	
14.37	Et	F	Me	H	H	Me	H	직접 결합	
14.38	Et	F	Me	H	H	F	H	직접 결합	
14.39	Et	F	Me	H	H	Cl	H	직접 결합	
14.40	Et	F	Me	H	H	Br	H	직접 결합	
14.41	Et	Cl	Me	H	H	H	H	직접 결합	
14.42	Et	Cl	Me	H	H	Me	H	직접 결합	
14.43	Et	Cl	Me	H	H	F	H	직접 결합	
14.44	Et	Cl	Me	H	H	Cl	H	직접 결합	
14.45	Et	Cl	Me	H	H	Br	H	직접 결합	
14.46	Et	F	Me	H	H	H	H	CH_2	
14.47	Et	F	Me	H	H	Me	H	CH_2	
14.48	Et	F	Me	H	H	F	H	CH_2	
14.49	Et	F	Me	H	H	Cl	H	CH_2	
14.50	Et	F	Me	H	H	Br	H	CH_2	
14.51	Et	Cl	Me	H	H	H	H	CH_2	
14.52	Et	Cl	Me	H	H	Me	H	CH_2	
14.53	Et	Cl	Me	H	H	F	H	CH_2	
14.54	Et	Cl	Me	H	H	Cl	H	CH_2	
14.55	Et	Cl	Me	H	H	Br	H	CH_2	
14.56	Et	F	Me	H	H	H	H	O	
14.57	Et	F	Me	H	H	Me	H	O	

[0581]

화합물 번호	R^1	R^3	R^6	R^7	R^8	R^9	R^{10}	A	물리적 데이터 mp/ 광회전/외형
14.58	Et	F	Me	H	H	F	H	O	
14.59	Et	F	Me	H	H	Cl	H	O	
14.60	Et	F	Me	H	H	Br	H	O	
14.61	Et	Cl	Me	H	H	H	H	O	
14.62	Et	Cl	Me	H	H	Me	H	O	
14.63	Et	Cl	Me	H	H	F	H	O	
14.64	Et	Cl	Me	H	H	Cl	H	O	
14.65	Et	Cl	Me	H	H	Br	H	O	

[0582]

[0583] 다음의 표 15는 화학식 Ia, Ia-1, Ib, Ic, Ic-1, Id, Id-1, Ie, Ie-1, Ik, In 및 Ip의 화합물을 제조하기 위해 사용되는 화학식 V의 중간체 아민을 예시적으로 설명한 것이다. R^6이 메틸인 화합물에서 2로 표시된 탄소 원자에서의 배열은 라세미성(즉, (2RS))이다.

표 15

[0584]

화합물 번호	R^6	R^7	R^8	R^9	R^{10}	A	물리적 데이터 mp/ 광회전/외형
15.1	H	H	H	H	H	직접 결합	
15.2	H	H	H	Me	H	직접 결합	HCl 염 고체
15.3	H	H	H	F	H	직접 결합	HCl 염 고체 (a)
15.4	H	H	H	Cl	H	직접 결합	
15.5	H	H	H	Br	H	직접 결합	
15.6	H	Me	H	Me	H	직접 결합	
15.7	H	H	Me	Me	H	직접 결합	(b)
15.8	H	H	H	Me	Me	직접 결합	(c)
15.9	H	H	F	Me	H	직접 결합	(d)
15.10	H	H	Cl	Cl	H	직접 결합	
15.11	H	H	H	H	H	CH_2	
15.12	H	H	H	Me	H	CH_2	HCl 염 고체 mp>260℃ (e)
15.13	H	H	H	F	H	CH_2	
15.14	H	H	H	Cl	H	CH_2	
15.15	H	H	H	Br	H	CH_2	
15.16	H	Me	H	Me	H	CH_2	HCl 염 고체 mp 254-268℃ (f)
15.17	H	H	Me	Me	H	CH_2	
15.18	H	H	H	Me	Me	CH_2	
15.19	H	H	F	Me	H	CH_2	
15.20	H	H	Cl	Cl	H	CH_2	

[0585]

화합물 번호	R^6	R^7	R^8	R^9	R^{10}	A	물리적 데이터 mp/ 광회전/외형
15.21	H	H	H	H	H	O	
15.22	H	H	H	Me	H	O	HCl 염 고체 mp>260℃ (g)
15.23	H	H	H	F	H	O	
15.24	H	H	H	Cl	H	O	
15.25	H	H	H	Br	H	O	
15.26	H	Me	H	Me	H	O	
15.27	H	H	Me	Me	H	O	
15.28	H	H	H	Me	Me	O	
15.29	H	H	F	Me	H	O	
15.30	H	H	Cl	Cl	H	O	
15.31	Me	H	H	H	H	직접 결합	
15.32	Me	H	H	Me	H	직접 결합	
15.33	Me	H	H	F	H	직접 결합	
15.34	Me	H	H	Cl	H	직접 결합	
15.35	Me	H	H	Br	H	직접 결합	
15.36	Me	Me	H	Me	H	직접 결합	
15.37	Me	H	Me	Me	H	직접 결합	
15.38	Me	H	H	Me	Me	직접 결합	
15.39	Me	H	F	Me	H	직접 결합	
15.40	Me	H	Cl	Cl	H	직접 결합	
15.41	Me	H	H	H	H	CH_2	
15.42	Me	H	H	Me	H	CH_2	
15.43	Me	H	H	F	H	CH_2	
15.44	Me	H	H	Cl	H	CH_2	
15.45	Me	H	H	Br	H	CH_2	
15.46	Me	Me	H	Me	H	CH_2	
15.47	Me	H	Me	Me	H	CH_2	
15.48	Me	H	H	Me	Me	CH_2	
15.49	Me	H	F	Me	H	CH_2	
15.50	Me	H	Cl	Cl	H	CH_2	
15.51	Me	H	H	H	H	O	
15.52	Me	H	H	Me	H	O	
15.53	Me	H	H	F	H	O	
15.54	Me	H	H	Cl	H	O	
15.55	Me	H	H	Br	H	O	
15.56	Me	Me	H	Me	H	O	
15.57	Me	H	Me	Me	H	O	
15.58	Me	H	H	Me	Me	O	
15.59	Me	H	F	Me	H	O	
15.60	Me	H	Cl	Cl	H	O	
15.61	H	H	H	Et	H	직접 결합	HCl 염 고체 mp>260℃ (h)
15.62	H	F	H	H	H	O	HCl 염 고체 (i)

[0586]

화합물 번호	R^6	R^7	R^8	R^9	R^{10}	A	물리적 데이터 mp/ 광회전/외형
15.63	H	Me	Me	H	H	O	HCl 염 고체 mp> 241-245℃(j)
15.64	H	H	H	OMe	H	직접 결합	HCl 염 고체

[0587] 주) 표 15의 참고번호 (a) 내지 (k):

(a) 1H-NMR (DMSO) 8.8 (br, 3H), 7.5 (m, 1H), 7.3 (m, 1H), 7.1 (m, 1H), 4.7 (m, 1H), 3.0 (m, 1H), 2.8 (m, 1H), 2.5 (m, 1H), 2.0 (m, 1H);
(b) 7.14 (s, 1H), 6.98 (s, 1H), 4.30 (t, 1H), 2.87 (ddd, 1H), 2.72 (m, 1H), 2.45 (m, 1H), 2.25 (s, 3H), 2.24 (s, 3H), 1.62 (m, 1H);
(c) 7.03 (d, 1H), 6.99 (d, 1H), 4.50 (dd, 1H), 3.12 (m, 1H), 2.79 (ddd, 1H), 2.38 (m, 1H), 2.30 (s, 3H), 2.25 (s, 3H), 1.88 (m, 1H);
(d) 7.12 (d, 1H), 6.83 (d, 1H), 4.30 (t, 1H), 2.90 (ddd, 1H), 2.75 (m, 1H), 2.50 (m, 1H), 2.24 (s, 3H), 1.64 (m, 1H);
(e) (DMSO) 8.5 (br, 3H), 7.4 (s, 1H), 7.1 (m, 2H), 4.3 (t, 1H), 2.7 (m, 2H), 2.25 (s, 3H), 2.1-1.6 (m, 4H);
(f) (DMSO) 8.4 (br, 3H), 7.15 (s, 1H), 6.95 (s, 1H), 4.3 (br, 1H), 2.5 (m, 2H), 2.25 (s, 3H), 2.15 (s, 3H), 2.0-1.6 (m, 4H);
(g) (DMSO) 8.8 (br, 3H), 7.4 (d, 1H), 7.05 (dd, 1H), 6.75 (d, 1H), 4.4 (br, 1H), 4.2 (m, 2H), 2.25 (s, 3H), 2.3-2.0 (m, 2H);
(h) (DMSO) 8.6 (br, 3H), 7.5 (s, 1H), 7.2 (dd, 2H), 4.7 (t, 1H), 3.0 (m, 1H), 2.8 (m, 1H), 2.6 (q, 2H), 2.5 (m, 1H), 2.0 (m, 1H), 1.2 (t, 3H);
(i) (DMSO) 8.9 (br, 3H), 7.4 (d, 1H), 7.2 (m, 1H), 6.95 (m, 1H), 4.5 (t, 1H), 4.3 (m, 2H), 2.4-2.1 (m, 2H;
(j) (DMSO) 8.7 (br, 3H), 7.3 (d, 1H), 6.75 (d, 1H), 4.4 (t, 1H), 4.3 (m, 2H), 2.2 (s, 3H), 2.3-2.1 (m, 2H), 2.0 (s, 3H).

[0588]

[0589] 다음의 표 16은 화학식 If, If-1, Ig, Ig-1, Ij, Ij-1 및 IL의 화합물을 제조하기 위해 사용되는 화학식 Va의 중간체 아민을 예시적으로 설명한 것이다.

표 16

화합물 번호	R^6	R^7	R^8	R^9	R^{10}	A	물리적 데이터
16.1	Me	H	H	H	H	직접 결합	HCl 염 고체 (a)
16.2	Me	H	H	Me	H	직접 결합	HCl 염 고체 (b)
16.3	Me	H	H	F	H	직접 결합	
16.4	Me	H	H	Cl	H	직접 결합	
16.5	Me	H	H	Br	H	직접 결합	
16.6	Me	Me	H	Me	H	직접 결합	
16.7	Me	H	Me	Me	H	직접 결합	
16.8	Me	H	H	Me	Me	직접 결합	
16.9	Me	H	F	Me	H	직접 결합	
16.10	Me	H	Cl	Cl	H	직접 결합	
16.11	Me	H	H	H	H	CH_2	HCl 염 고체 mp 246-247℃ (c)
16.12	Me	H	H	Me	H	CH_2	
16.13	Me	H	H	F	H	CH_2	
16.14	Me	H	H	Cl	H	CH_2	
16.15	Me	H	H	Br	H	CH_2	
16.16	Me	Me	H	Me	H	CH_2	
16.17	Me	H	Me	Me	H	CH_2	
16.18	Me	H	H	Me	Me	CH_2	
16.19	Me	H	F	Me	H	CH_2	
16.20	Me	H	Cl	Cl	H	CH_2	
16.21	Me	H	H	H	H	O	HCl 염 고체
16.22	Me	H	H	Me	H	O	
16.23	Me	H	H	F	H	O	
16.24	Me	H	H	Cl	H	O	
16.25	Me	H	H	Br	H	O	
16.26	Me	Me	H	Me	H	O	
16.27	Me	H	Me	Me	H	O	
16.28	Me	H	H	Me	Me	O	
16.29	Me	H	F	Me	H	O	
16.30	Me	H	Cl	Cl	H	O	

[0590]

[0591] 주) 표 16의 참고번호 (a) 내지 (c):

(a) (DMSO) 8.8 (br, 3H), 7.7 (d, 1H), 7.3 (m, 3H), 4.3 (br, 1H), 3.2 (m, 1H), 2.5 (m, 2H), 1.2 (d, 3H);

(b) (DMSO) 8.8 (br, 3H), 7.4 (s, 1H), 7.15 (m, 2H), 4.2 (br, 1H), 3.2 (m, 1H), 2.5 (m, 2H), 2.3 (s, 3H), 1.2 (d, 3H);

(c) (DMSO) 8.5 (br, 3H), 7.6 (dd, 1H), 7.2 (m, 3H), 4.1 (br, 1H), 2.8 (m, 1H), 2.2 (m, 1H), 2.0 (m, 1H), 1.5 (m, 1H), 1.1 (d, 3H).

[0592]

[0593] 다음의 표 17은 화학식 Ih, Ih-1, Ii, Ii-1 및 Im의 화합물을 제조하기 위해 사용되는 화학식 Vb의 중간체 아민을 예시적으로 설명한 것이다.

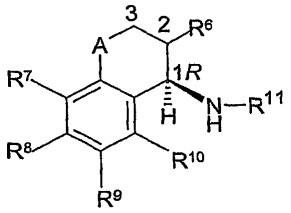
표 17

[0594]

화합물 번호	R^6	R^7	R^8	R^9	R^{10}	A	물리적 데이터
17.1	Me	H	H	H	H	직접 결합	HCl 염 고체 mp 245-260℃
17.2	Me	H	H	Me	H	직접 결합	
17.3	Me	H	H	F	H	직접 결합	
17.4	Me	H	H	Cl	H	직접 결합	
17.5	Me	H	H	Br	H	직접 결합	
17.6	Me	Me	H	Me	H	직접 결합	
17.7	Me	H	Me	Me	H	직접 결합	
17.8	Me	H	H	Me	Me	직접 결합	
17.9	Me	H	F	Me	H	직접 결합	
17.10	Me	H	Cl	Cl	H	직접 결합	
17.11	Me	H	H	H	H	CH_2	
17.12	Me	H	H	Me	H	CH_2	
17.13	Me	H	H	F	H	CH_2	
17.14	Me	H	H	Cl	H	CH_2	
17.15	Me	H	H	Br	H	CH_2	
17.16	Me	Me	H	Me	H	CH_2	
17.17	Me	H	Me	Me	H	CH_2	
17.18	Me	H	H	Me	Me	CH_2	
17.19	Me	H	F	Me	H	CH_2	
17.20	Me	H	Cl	Cl	H	CH_2	
17.21	Me	H	H	H	H	O	
17.22	Me	H	H	Me	H	O	
17.23	Me	H	H	F	H	O	
17.24	Me	H	H	Cl	H	O	
17.25	Me	H	H	Br	H	O	
17.26	Me	Me	H	Me	H	O	
17.27	Me	H	Me	Me	H	O	
17.28	Me	H	H	Me	Me	O	
17.29	Me	H	F	Me	H	O	
17.30	Me	H	Cl	Cl	H	O	

표 18및19

화학식 XIII의 화합물:



상기 식에서,
R^{11}이 클로로아세틸[화합물 번호 18.1 내지 18.63] 또는 메톡시아세틸[화합물 번호 19.1 내지 19.63]이고, R^{6}이 메틸인 화합물의 경우에서 2로 표시된 탄소 원자에서의) 배열은 라세미성(즉, (2RS)이다.

화합물 번호	화합물 번호	R^6	R^7	R^8	R^9	R^{10}	A	물리적 데이터 mp/ 광회전/외형
18.1	19.1	H	H	H	H	H	직접 결합	
18.2	19.2	H	H	H	Me	H	직접 결합	
18.3	19.3	H	H	H	F	H	직접 결합	
18.4	19.4	H	H	H	Cl	H	직접 결합	
18.5	19.5	H	H	H	Br	H	직접 결합	
18.6	19.6	H	Me	H	Me	H	직접 결합	
18.7	19.7	H	H	Me	Me	H	직접 결합	
18.8	19.8	H	H	H	Me	Me	직접 결합	
18.9	19.9	H	H	F	Me	H	직접 결합	
18.10	19.10	H	H	Cl	Cl	H	직접 결합	
18.11	19.11	H	H	H	H	H	CH_2	
18.12	19.12	H	H	H	Me	H	CH_2	
18.13	19.13	H	H	H	F	H	CH_2	
18.14	19.14	H	H	H	Cl	H	CH_2	
18.15	19.15	H	H	H	Br	H	CH_2	
18.16	19.16	H	Me	H	Me	H	CH_2	
18.17	19.17	H	H	Me	Me	H	CH_2	
18.18	18.18	H	H	H	Me	Me	CH_2	
18.19	19.19	H	H	F	Me	H	CH_2	
18.20	19.20	H	H	Cl	Cl	H	CH_2	
18.21	19.21	H	H	H	H	H	O	
18.22	19.22	H	H	H	Me	H	O	
18.23	19.23	H	H	H	F	H	O	

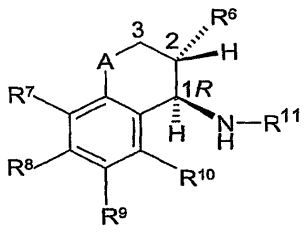
[0595]

[0596]

화합물 번호	화합물 번호	R^6	R^7	R^8	R^9	R^{10}	A	물리적 데이터 mp/ 광회전/외형
18.24	19.24	H	H	H	Cl	H	O	
18.25	19.25	H	H	H	Br	H	O	
18.26	19.26	H	Me	H	Me	H	O	
18.27	19.27	H	H	Me	Me	H	O	
18.28	19.28	H	H	H	Me	Me	O	
18.29	19.29	H	H	F	Me	H	O	
18.30	19.30	H	H	Cl	Cl	H	O	
18.31	19.31	Me	H	H	H	H	직접 결합	
18.32	19.32	Me	H	H	Me	H	직접 결합	
18.33	19.33	Me	H	H	F	H	직접 결합	
18.34	19.34	Me	H	H	Cl	H	직접 결합	
18.35	19.35	Me	H	H	Br	H	직접 결합	
18.36	19.36	Me	Me	H	Me	H	직접 결합	
18.37	19.37	Me	H	Me	Me	H	직접 결합	
18.38	19.38	Me	H	H	Me	Me	직접 결합	
18.39	19.39	Me	H	F	Me	H	직접 결합	
18.40	19.40	Me	H	Cl	Cl	H	직접 결합	
18.41	19.41	Me	H	H	H	H	CH_2	
18.42	19.42	Me	H	H	Me	H	CH_2	
18.43	19.43	Me	H	H	F	H	CH_2	
18.44	19.44	Me	H	H	Cl	H	CH_2	
18.45	19.45	Me	H	H	Br	H	CH_2	
18.46	19.46	Me	Me	H	Me	H	CH_2	
18.47	19.47	Me	H	Me	Me	H	CH_2	
18.48	19.48	Me	H	H	Me	Me	CH_2	
18.49	19.49	Me	H	F	Me	H	CH_2	
18.50	19.50	Me	H	Cl	Cl	H	CH_2	
18.51	19.51	Me	H	H	H	H	O	
18.52	19.52	Me	H	H	Me	H	O	
18.53	19.53	Me	H	H	F	H	O	
18.54	19.54	Me	H	H	Cl	H	O	
18.55	19.55	Me	H	H	Br	H	O	
18.56	19.56	Me	Me	H	Me	H	O	
18.57	19.57	Me	H	Me	Me	H	O	
18.58	19.58	Me	H	H	Me	Me	O	
18.59	19.59	Me	H	F	Me	H	O	
18.60	19.60	Me	H	Cl	Cl	H	O	
18.61	19.61	H	H	H	Et	H	직접 결합	
18.62	19.62	H	F	H	H	H	O	
18.63	19.63	H	Me	Me	H	H	O	

표 20및21

화학식 XIIIa의 화합물:



상기 식에서,
R^{11}이 클로로아세틸[화합물 번호 20.1 내지 20.30] 또는 메톡시아세틸
[화합물 번호 21.1 내지 21.30]이다.

[0597]

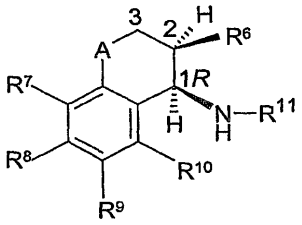
화합물 번호	화합물 번호	R^6	R^7	R^8	R^9	R^{10}	A	물리적 데이터
20.1	21.1	Me	H	H	H	H	직접 결합	
20.2	21.2	Me	H	H	Me	H	직접 결합	
20.3	21.3	Me	H	H	F	H	직접 결합	
20.4	21.4	Me	H	H	Cl	H	직접 결합	
20.5	21.5	Me	H	H	Br	H	직접 결합	
20.6	21.6	Me	Me	H	Me	H	직접 결합	
20.7	21.7	Me	H	Me	Me	H	직접 결합	
20.8	21.8	Me	H	H	Me	Me	직접 결합	
20.9	21.9	Me	H	F	Me	H	직접 결합	
20.10	21.10	Me	H	Cl	Cl	H	직접 결합	
20.11	21.11	Me	H	H	H	H	CH_2	
20.12	21.12	Me	H	H	Me	H	CH_2	
20.13	21.13	Me	H	H	F	H	CH_2	
20.14	21.14	Me	H	H	Cl	H	CH_2	
20.15	21.15	Me	H	H	Br	H	CH_2	
20.16	21.16	Me	Me	H	Me	H	CH_2	
20.17	21.17	Me	H	Me	Me	H	CH_2	
20.18	21.18	Me	H	H	Me	Me	CH_2	
20.19	21.19	Me	H	F	Me	H	CH_2	
20.20	21.20	Me	H	Cl	Cl	H	CH_2	
20.21	21.21	Me	H	H	H	H	O	
20.22	21.22	Me	H	H	Me	H	O	
20.23	21.23	Me	H	H	F	H	O	
20.24	21.24	Me	H	H	Cl	H	O	

[0598]

화합물 번호	화합물 번호	R^6	R^7	R^8	R^9	R^{10}	A	물리적 데이터
20.25	21.25	Me	H	H	Br	H	O	
20.26	21.26	Me	Me	H	Me	H	O	
20.27	21.27	Me	H	Me	Me	H	O	
20.28	21.28	Me	H	H	Me	Me	O	
20.29	21.29	Me	H	F	Me	H	O	
20.30	21.30	Me	H	Cl	Cl	H	O	

표 22및23

화학식 XIIIb의 화합물:



상기 식에서,
R^{11}이 클로로아세틸[화합물 번호 22.1 내지 22.30] 또는 메톡시아세틸
[화합물 번호 23.1 내지 23.30]이다.

화합물 번호	화합물 번호	R^6	R^7	R^8	R^9	R^{10}	A	물리적 데이터
22.1	23.1	Me	H	H	H	H	직접 결합	
22.2	23.2	Me	H	H	Me	H	직접 결합	
22.3	23.3	Me	H	H	F	H	직접 결합	
22.4	23.4	Me	H	H	Cl	H	직접 결합	
22.5	23.5	Me	H	H	Br	H	직접 결합	
22.6	23.6	Me	Me	H	Me	H	직접 결합	
22.7	23.7	Me	H	Me	Me	H	직접 결합	
22.8	23.8	Me	H	H	Me	Me	직접 결합	
22.9	23.9	Me	H	F	Me	H	직접 결합	
22.10	23.10	Me	H	Cl	Cl	H	직접 결합	
22.11	23.11	Me	H	H	H	H	CH_2	
22.12	23.12	Me	H	H	Me	H	CH_2	
22.13	23.13	Me	H	H	F	H	CH_2	
22.14	23.14	Me	H	H	Cl	H	CH_2	
22.15	23.15	Me	H	H	Br	H	CH_2	
22.16	23.16	Me	Me	H	Me	H	CH_2	
22.17	23.17	Me	H	Me	Me	H	CH_2	
22.18	23.18	Me	H	H	Me	Me	CH_2	
22.19	23.19	Me	H	F	Me	H	CH_2	

[0599]

화합물 번호	화합물 번호	R^6	R^7	R^8	R^9	R^{10}	A	물리적 데이터
22.20	23.20	Me	H	Cl	Cl	H	CH_2	
22.21	23.21	Me	H	H	H	H	O	
22.22	23.22	Me	H	H	Me	H	O	
22.23	23.23	Me	H	H	F	H	O	
22.24	23.24	Me	H	H	Cl	H	O	
22.25	23.25	Me	H	H	Br	H	O	
22.26	23.26	Me	Me	H	Me	H	O	
22.27	23.27	Me	H	Me	Me	H	O	
22.28	23.28	Me	H	H	Me	Me	O	
22.29	23.29	Me	H	F	Me	H	O	
20.30	23.30	Me	H	Cl	Cl	H	O	

[0600]

[0601] 본 발명의 다른 특징에 따라, 잡초를 방제하거나 또는 식물 소재지에서 식물의 성장을 조절하기 위하여 화학식 I의 화합물 또는 그의 염을 효과량으로 투여함을 특징으로 하는, 제초제 또는 식물 성장 조절제로서의 용도가 제공된다. 이를 위하여, 상기 화합물을 통상 제초 조성물 형태로(즉, 제초 조성물에 사용하기 적합한 상용성 희석제 또는 담체 및/또는 표면 활성제와 함께), 예컨대 이후 기재되는 바와 같이 사용한다. '식물 소재지'에 투여한다는 것은, 예컨대 토양 같은 식물 성장 배지, 및 종자, 발아한 묘종, 뿌리, 줄기, 잎 또는 다른 식물 부분에 투여함을 의미한다.

[0602] 화학식 I의 화합물 및 이들의 염(아래에서는 이들 모두를 화학식 I의 화합물이라고 함)은 경제적으로 중요한 광범위한 단자엽성 및 쌍자엽성 유해 식물에 대해 탁월한 제초 활성을 갖는다. 화학식 I의 화합물은 또한, 근경, 뿌리 줄기 또는 다른 숙근성 기관으로부터 새싹을 내는, 방제하기 어려운 다년생 잡초에 대해서도 효과적으로 작용한다. 이와 관련하여, 파종 전, 발안 전 또는 발아 후에 성분을 투여할 수 있다.

[0603] 구체적으로는, 화학식 I의 화합물에 의해 방제될 수 있는 단자엽성 및 쌍자엽성 잡초군의 몇몇 대표적인 예를 언급할 수 있다(열거된 것이 특정 종으로의 한정을 의미하지는 않음).

[0604] 단자엽성 잡초 종 중에서, 활성 성분이 효과적으로 작용하는 종은 예컨대 일년생 군에서는 아그로스티스(Agrostis), 알로페쿠루스(Alopecurus), 아페라(Apera), 아베나(Avena), 브라키카리아(Brachicaria), 브로무스(Bromus), 닥틸록테늄(Dactyloctenium), 디기타리아(Digitaria), 에키노클로아(Echinochloa), 엘레오카리스(Eleocharis), 엘류신(Eleusine), 페스투카(Festuca), 핌브리스틸리스(Fimbristylis), 이스카에뭄(Ischaemum), 롤륨(Lolium), 모노코리아(Monochoria), 파니쿰(Panicum), 파스팔룸(Paspalum), 팔라리스(Phalaris), 플레움(Phleum), 포아(Poa), 사기타리아(Sagittaria), 씨르푸스(Scirpus), 세타리아(Setaria), 스페노클레아(Sphenoclea) 및 사이퍼루스(Cyperus) 종, 및 다년생 종에서는 아그로피론(Agropyron), 사이노돈(Cynodon), 임페라타(Imperata), 소굼(Sorghum) 및 다년생 사이퍼루스 종이다. 쌍자엽성 잡초 종의 경우, 작용 범위는 예컨대 일년생 종에서는 갈륨(Galium), 비올라(Viola), 베로니카(Veronica), 라뮴(Lamium), 스텔라리아(Stellaria), 아마란투스(Amaranthus), 시나피스(Sinapis), 이포모에아(Ipomoea), 마트리카리아(Matricaria), 아부틸론(Abutilon) 및 시다(Sida), 및 다년생 잡초의 경우 콘볼불루스(Convolvulus), 시르슘(Cirsium), 루멕스(Rumex) 및 아르테미시아(Artemisia) 같은 종까지 확장된다. 암브로시아(Ambrosia), 안테미스(Anthemis), 카두스(Carduus), 센타우레아(Centaurea), 체노포듐(Chenopodium), 다투라(Datura), 에멕스(Emex), 갈레오프시스(Galeopsis), 갈린소가(Galinsoga), 코키아(Kochia), 레피듐(Lepidium), 린데르니아(Lindernia), 파파베르(Papaver), 포르틀라카(Portlaca), 폴리고눔(Polygonum), 라눈쿨루스(Ranunculus), 로리파(Rorippa), 로탈라(Rotala), 세네세이오(Seneceio), 세스바니아(Sesbania), 솔라눔(Solanum), 손쿠스(Sonchus), 타락사쿰(Taraxacum), 트리폴륨(Trifolium), 우르티카(Urtica) 및 잔튬(Xanthium) 같은 쌍자엽성 유해 식물의 경우에도 제초 작용이 달성된다.

[0605] 벼의 특수한 재배 조건하에서 발생되는 유해 식물, 예컨대 사기타리아(Sagittaria), 알리스마(Alisma), 엘레오카리스(Eleocharis), 씨르푸스(Scirpus) 및 사이퍼루스(Cyperus)도 본 발명에 따른 활성 성분에 의해 잘 방제된다.

[0606] 발아 전에(잡초의 발아 전) 토양 표면에 본 발명에 따른 화합물을 투여하면, 잡초 묘종이 완전히 발아되지 않거나, 또는 잡초가 자엽 단계에 도달할 때까지 성장한 다음 성장이 중지되고 3 내지 4주가 경과한 후 마침내 완전히 죽게 된다.

[0607] 활성 성분을 식물의 녹색 부분에 발아 후 투여하는 경우에는, 처리한 후 매우 단시간내에 급격하게 성장이 중지되고 잡초 식물이 투여시의 성장 단계에 머무르거나, 또는 소정 시간 후에 완전히 죽는 바, 이러한 방식으로 작물에 유해한 잡초에 의한 경쟁이 매우 초기 단계에서 지속적인 방식으로 제거되도록 한다.

[0608] 본 발명에 따른 화합물이 단자엽성 및 쌍자엽성 잡초에 대해 탁월한 제초 활성을 가짐에도 불구하고, 예컨대 밀, 보리, 호밀, 라이밀(triticale), 벼, 옥수수, 사탕무, 목화 또는 대두(특히, 밀, 보리, 벼 또는 옥수수) 같은 경제적으로 중요한 몇몇 작물은 적절한 투여량이 투여되는 경우 미미한 한도로만 손상을 받거나 또는 전혀 손상되지 않는다. 이러한 이유로, 본 발명의 화합물은 일부 경우 유용한 농작물 경작지 또는 관상수 경작지에서 원치 않는 초목을 선택적으로 방제하는데 적합하다.

[0609] 활성 덕분에, 몇몇 작물에서 선택적인 제초제로서 비교적 낮은 투여량에서, 활엽 잡초 및 초본 잡초를 발아 전 및 발아 후 방제하기 위한(바람직하게는 다수의 경우 잡초의 발아전) 효과적인 제초 활성 성분으로서 본 발명의 화합물을 사용할 수 있다. 다르게는, 농장 작물 및 비경작지에서 광범위한 쌍자엽성 잡초 및 단자엽성 잡초를 방제하기 위하여, 또한 특수 투여 기법에 의해 줄로 늘어서서 키우는 작물(예: 옥수수, 목화 등)에서 줄 사이를 처리하기 위하여, 본 발명의 화합물을 다소 더 높은 투여량에서 효과적으로 사용할 수 있다.

[0610] 본 발명에 따른 조성물을 사용하여, 기름 야자나무, 야자수, 탄성 고무 나무, 감귤류, 파인애플, 이과(pome), 목화, 커피, 코코아 등과 같은 농장 작물, 및 과일 생산 및 포도 재배에서, 일년생 및 다년생 유해 식물을 선택적으로 방제할 수 있다. 마찬가지로, 비-경작 또는 제로-경작 방법을 이용하는 경작용 작물 생산에 본 발명에 따른 화합물의 조합을 사용할 수 있다.

[0611] 따라서, 본 발명의 다른 목적은 본 발명에 따른 화합물을 제초제로서 투여함으로써, 농장 작물에서 잡초를 선택적으로 방제하는 것이다.

[0612] 다르게는, 길, 공지 및 공업용지 등에서 비-선택적인 방식의 매우 효과적인 제초제로서 본 발명의 화합물을 사용하여, 이들 구역에서 원치 않는 초목이 자라지 않도록 할 수 있다.

[0613] 본 발명에 따른 제초 조성물은 신속한 개시와 함께 장기적인 제초 작용을 그 특징으로 한다.

[0614] 예컨대 살충제, 살진드기제, 제초제, 살진균제, 완화제(safener), 비료 및/또는 성장 조절제 같은 다른 농약 활성 성분 또는 영양제와 함께 화학식 I의 화합물을 사용할 수도 있다.

[0615] 따라서, 본 발명은 또한 하나 이상의 유형 B 제초제 및 유형 C 계면활성제와 함께 하나 이상의 유형 A 제초제를 유해 식물, 이들 식물의 일부 또는 경작지에 투여함을 포함하는, 원치 않는 초목을 방제하는 방법에 관한 것이다. 유형 A 제초제는 화학식 I의 화합물 또는 이들의 염이고; 유형 B 제초제는 방제되는 잡초 범위를 넓히기 위해, 또는 제초 효과를 증가시키기 위해 화학식 I의 화합물과 조합하기에 유용한 다른 제초제이다(몇몇 가능한 유형 B 제초제가 아래에 추가로 언급되어 있음).

[0616] 또한, 본 발명에 따른 성분은 작물에서 탁월한 성장-조절 특성을 갖는다. 이들은 조절 방식으로 식물의 대사에 관여하고, 따라서 표적화된 방식으로 식물 구성요소에 영향을 끼치기 위하여, 또한 예컨대 탈수 및 성장 방해를 유발시킴으로써 수확을 촉진시키기 위하여 사용될 수 있다. 뿐만 아니라, 이들 화합물은 또한 동시에 식물을 죽이지 않으면서 통상적으로 원치 않는 식물의 성장을 방제 및 방해하는데 적합하다. 식물 성장 방해는 이로써 식물의 쓰러짐이 감소되거나 완전히 방지될 수 있기 때문에 많은 단자엽성 및 쌍자엽성 작물에서 중요한 역할을 한다.

[0617] 이들의 제초 특성 및 식물-성장 조절 특성 때문에, 공지의 유전자 개질된 식물 또는 아직 개발중인 유전자 개질 식물의 작물에서 유해 식물을 방제하는 데에도 화학식 I의 화합물을 사용할 수 있다. 통상적으로, 유전자 도입 식물은 특수한 유리한 특성, 예컨대 특정 농약(주로 특정 제초제)에 대한 내성, 식물 질병 또는 특정 곤충 또는 미생물(예: 진균, 세균 또는 바이러스) 같은 식물 질병의 병원체에 대한 내성을 특징으로 한다. 다른 특수한 특성은 예컨대 수확물의 양, 품질, 저장 특성, 조성 및 특수한 구성성분과 관련된다. 따라서, 전분 함량이 증가되거나 또는 전분 품질이 변경된 유전자 도입 식물, 또는 수확물이 상이한 지방산 스펙트럼을 갖는 유전자 도입 식물이 공지되어 있다.

[0618] 유용한 식물 및 관상수, 예를 들어 곡류(예: 밀, 보리, 호밀, 귀리, 소굼 및 기장, 벼, 카사바 및 옥수수) 또는 다른 작물(예: 사탕무, 목화, 대두, 평지씨, 감자, 토마토, 완두콩 및 다른 채소)의 경제적으로 중요한 유전자 도입 작물에 화학식 I의 화합물을 바람직하게 사용한다.

[0619] 제초제의 식물 독성 효과에 내성이거나 유전공학에 의해 그렇게 된 유용한 작물에서 화학식 I의 화합물을 제초제로서 바람직하게 사용할 수 있다.

[0620] 기존 식물과 비교하여 변화된 특징을 갖는 신규 식물을 발생시키는 전통적인 방법은 예컨대 육종 방법 및 돌연변이체의 발생으로 이루어진다. 그러나, 유전공학 방법(예컨대, EP-A-0221044 호, EP-A-0131624 호 참조)에 의해서도 변화된 특징을 갖는 신규 식물을 발생시킬 수 있다. 예를 들어, 몇몇 경우에서는 식물에서 합성된 전분을 개질시키기 위한 작물의 유전자 개질(예컨대, WO 92/11376 호, WO 92/14827 호, WO91/19806 호), 글루포시네이트 유형(예컨대, EP-A-0242236 호, EP-A-242246 호 참조) 또는 글라이포세이트 유형(WO 92/00377 호) 또는 설폰일유레아 유형(EP-A-0257993 호, US-A-5013659 호)의 특정 제초제에 대해 내성인 유전자 도입 작물, 식물을 특정 해충에 대해 내성으로 만드는 바실루스 투린기엔시스(Bacillus thuringiensis) 독소(Bt 독소)를 생성시킬 수 있는 유전자 도입 작물(예: 목화)(EP-A-0142924 호, EP-A-0193259 호), 및 지방산 스펙트럼이 변화된 유전자 도입 작물(WO 91/13972 호)을 기재하였다.

[0621] 변화된 특징을 갖는 신규의 유전자 도입 식물을 발생시킬 수 있는 분자 생물학에서의 다수의 기법은 원칙적으로 공지되어 있다. 예를 들어 샘브룩(Sambrook) 등의 문헌[1989, Molecular Cloning, A Laboratory Manual, 제2판, Cold Spring Harbor Laboratory Press, 뉴욕주 콜드 스프링 하버]; 또는 위내커(Winnacker)의 문헌["Gene und Klone"[Genes and Clones], VCH Weinheim 2nd Edition 1996]; 또는 크리스토(Christou)의 문헌["Trends in Plant Science" 1 (1996) 423-431] 참조.

[0622] 이러한 유전 공학 조작을 수행하기 위하여, DNA 서열의 재조합에 의해 돌연변이 또는 서열 변화를 허용하는 플라스미드내로 핵산 분자를 도입할 수 있다. 예를 들어, 염기 교환을 수행하는 전술한 표준 방법에 의해, 부속 서열을 제거하거나 천연 또는 합성 서열을 추가할 수 있다. DNA 분절을 서로 연결하기 위하여, 아답터 또는 링커를 분절에 부착시킬 수 있다.

[0623] 예를 들어, 하나 이상의 상응하는 안티센스 RNA, 즉 동시 억제 효과를 달성하기 위한 센스 RNA를 발현시킴으로써, 또는 전술한 유전자 생성물의 전사물을 특이적으로 절단하는 적합한 구조의 하나 이상의 라이보자임을 발현

시킴으로써, 감소된 유전자 생성물 활성을 갖는 식물 세포를 발생시킬 수 있다.

[0624] 이를 위하여, 한편으로는 존재할 수 있는 임의의 인접 서열을 포함하는 유전자 생성물의 전체 코딩 서열을 포함하는 DNA 분자를, 다른 한편으로는 코딩 서열의 일부(그러나, 이들 일부는 세포에서 안티센스 효과를 실행하기에 충분히 길어야 함)만을 포함하는 DNA 분자를 사용할 수 있다. 또한, 유전자 생성물의 코딩 서열에 대해 고도의 상동성을 나타내지만 완전히 동일하지는 않은 DNA 서열도 사용할 수 있다.

[0625] 핵산 분자가 식물에서 발현되면, 합성된 단백질은 식물 세포의 임의의 목적하는 구획에 위치할 수 있다. 그러나, 특정 구획에 편재시키기 위해서는, 예를 들어 특정 구획으로의 편재를 보장하는 DNA 서열을 코딩 영역에 연결시킬 수 있다. 이러한 서열은 당해 분야의 숙련자에게 공지되어 있다. 예를 들어, 브라운(Braun) 등의 문헌[EMBO J. 11 (1992), 3219-3227]; 월터(Wolter) 등의 문헌[Proc. Natl. Acad. Sci. USA 85 (1988), 846-850]; 손느왈드(Sonnewald) 등의 문헌[Plant J. 1 (1991), 95-106] 참조.

[0626] 완전한 식물을 제공하기 위하여 공지 기법에 의해 유전자 도입 식물 세포를 재생시킬 수 있다. 원칙적으로, 유전자 도입 식물은 임의의 목적하는 식물 종의 식물, 즉 소위 단자엽성 식물 및 쌍자엽성 식물일 수 있다.

[0627] 이로써, 동종(=천연) 유전자 또는 유전자 서열의 과발현, 억제 또는 금지에 의해 또는 이종(=외래) 유전자 또는 유전자 서열의 발현에 의해 변화된 특징을 나타내는 유전자 도입 식물을 수득할 수 있다.

[0628] 설폰일유레아, 글루포시네이트-암모늄 또는 글라이포세이트-아이소프로필암모늄 및 유사한 활성 성분으로 이루어진 군으로부터의 제초제에 대해 내성인 유전자 도입 작물에 화학식 I의 화합물을 바람직하게 사용할 수 있다.

[0629] 화학식 I의 화합물을 유전자 도입 작물에 사용하는 경우, 특정 유전자 도입 작물에서의 투여에 특이적인, 다른 작물에서 관찰되는 제초 효과 외의 효과, 예를 들어 변화되거나 구체적으로는 넓어진 방제될 수 있는 잡초 범위, 투여에 이용될 수 있는 변화된 투여량, 바람직하게는 유전자 도입 작물이 내성인 제초제와의 우수한 조합능, 및 유전자 도입 작물의 성장 및 수율에 대한 효과가 흔히 발견된다.

[0630] 따라서, 본 발명은 또한 유전자 도입 작물에서 유해한 식물을 방제하기 위한 제초제로서의 화학식 I의 화합물의 용도에 관한 것이다.

[0631] 유해 식물을 방제하거나 식물 성장을 조절하기 위한 본 발명에 따른 용도는 또한 전구체("전구약물")를 식물에 투여한 후 이 전구체로부터 식물 또는 토양에서 화학식 I의 화합물이 형성되는 경우를 포함한다.

[0632] 화학식 I의 화합물은 습윤성 분말, 유화가능한 농축액, 분무가능한 용액, 살포제 또는 과립제로서 통상적인 제제에 사용될 수 있다. 따라서, 본 발명은 화학식 I의 화합물을 포함하는 제초 조성물 및 식물-성장-조절 조성물에 관한 것이다.

[0633] 본 발명의 다른 특징에 따라, 하나 이상의 상용성의 농업 면에서 허용가능한 희석제 또는 담체 및/또는 표면 활성제[즉, 당해 분야에서 제초 조성물에 사용하기 적합한 것으로 통상적으로 허용되는 유형이고, 본 발명의 화합물과 상용성인 희석제 또는 담체 및/또는 표면 활성제]와 함께(바람직하게는 이들에 균질하게 분산된) 효과량의 상기 정의된 화학식 I의 화합물 또는 그의 농업 면에서 허용가능한 염을 포함하는 제초 조성물 또는 식물 성장 조절 조성물이 제공된다. 용어 "균질하게 분산된"이란 화학식 I의 화합물이 다른 성분에 용해된 조성물을 포함하도록 사용된다. 용어 "제초 조성물"이란 넓은 의미에서 제초제로서 즉시 사용가능한 조성물 뿐만 아니라 사용 전에 희석되어야 하는 농축물(탱크 혼합물 포함)을 포함하도록 사용된다.

[0634] 우세한 생물학적 변수 및/또는 화학-물리적 변수에 따라 다양한 방식으로 화학식 I의 화합물을 제형화시킬 수 있다. 적합한 가능한 제형의 예는 다음과 같다: 습윤성 분말(WP), 수용성 분말(SP), 수용성 농축액, 유화가능한 농축액(EC), 수중유적형 유화액 및 유중수적형 유화액 같은 유화액(EW), 분무가능한 용액, 현탁 농축액(SC), 오일성 또는 수성 분산액, 오일과 혼합가능한 용액, 캡슐 현탁액(CS), 살포제(DP), 종자-드레싱 제품, 살포 또는 토양 투여용 과립제, 미소과립 형태의 과립제(GR), 분무 과립제, 코팅된 과립제 및 흡착 과립제, 수분산성 과립제(WG), 수용성 과립제(SG), ULV 제제, 미소캡슐 및 왁스.

[0635] 이들 개별적인 제형 유형은 원칙적으로 공지되어 있고, 예를 들어 위내커-퀴홀러(Kuchler)의 문헌["Chemische Technologie"[Chemical Technology], Volume 7, C. Hauser Verlag, 뮌헨, 제4판 1986]; 발켄부르그(Wade van Valkenburg)의 문헌["Pesticide Formulations", Marcel Dekker, 뉴욕, 1973]; 마르텐스(K. Martens)의 문헌["Spray Drying Handbook", 제3판, 1979, G. Goodwin Ltd. 런던]에 기재되어 있다.

[0636] 불활성 물질, 계면활성제, 용매 및 다른 첨가제 같은 필요한 제형 보조제도 공지되어 있으며, 예컨대 와트킨스

(Watkins)의 문헌["Handbook of Insecticide Dust Diluents and Carriers", 제2판, Darland Books, 뉴욕주 칼드웰]; 올펜(H.v. Olphen)의 문헌["Introduction to Clay Colloid Chemistry", 제2판, J. Wiley & Sons, 뉴욕]; 마르스덴(C. Marsden)의 문헌["Solvents Guide", 제2판, Interscience, 뉴욕, 1963]; 맥커천(McCutcheon)의 문헌["Detergents and Emulsifiers Annual", MC Publ. Corp., 뉴욕주 리지우드]; 시슬리(Sisley) 및 우드(Wood)의 문헌["Encyclopedia of Surface Active Agents", Chem. Publ. Co. Inc., 뉴욕 1964]; 쉰펠트(Schonfeldt)의 문헌["Grenzflachenaktive Athylenoxidaddukte"[Surface-active ethylene oxide adducts], Wiss. Verlagsgesell., 슈투트가르트 1976]; 위내커-퀴흘러의 문헌["Chemische Technologie"[Chemical Technology], Volume 7, C. Hauser Verlag, 뮌헨, 제4판, 1986]에 기재되어 있다.

[0637] 이들 제형에 기초하여, 예컨대 살충제, 살진드기제, 제초제, 살진균제, 및 완화제, 비료 및/또는 성장 조절제 같은 다른 농약 활성 성분과의 조합을 예컨대 즉시 사용가능한 혼합물 또는 탱크 혼합물의 형태로 제조할 수도 있다.

[0638] 습윤성 분말은 물에 균일하게 분산될 수 있고, 화학식 I의 화합물 외에 희석제 또는 불활성 성분에 덧붙여 이온성 및/또는 비이온성 계면활성제(습윤제, 분산제), 예컨대 폴리옥시에틸화 알킬페놀, 폴리옥시에틸화 지방 알콜, 폴리옥시에틸화 지방 아민, 지방 알콜 폴리글라이콜 에터 설페이트, 알케인설폰에이트 또는 알킬벤젠설폰에이트, 나트륨 리그노설폰에이트, 나트륨 2,2'-다이나프틸메테인-6,6'-다이설폰에이트, 나트륨 다이뷰틸나프탈렌설폰에이트 또는 나트륨 올레오일메틸타우린에이트도 포함하는 제제이다. 습윤성 분말을 제조하기 위하여, 화학식 I의 화합물을 해머 밀(hammer mill), 블로우어(blower) 밀 및 공기-분사 밀 같은 통상적인 장치에서 미분시키는 동시에 또는 그 후에 제형 보조제와 혼합한다.

[0639] 예를 들어, 하나 이상의 이온성 및/또는 비이온성 계면활성제(유화제)를 첨가하여, 화학식 I의 화합물을 유기 용매, 예를 들어 뷰탄올, 사이클로헥산온, 다이메틸폼아마이드, 자일렌 또는 비점이 더욱 높은 방향족 화합물 또는 탄화수소 또는 이들의 혼합물에 용해시킴으로써 유화가능한 농축액을 제조한다. 사용될 수 있는 유화제는 예를 들어 칼슘 도데실벤젠설폰에이트 같은 알킬아릴설폰산의 칼슘 염, 지방산 폴리글라이콜 에스터, 알킬아릴 폴리글라이콜 에터, 지방 알콜 폴리글라이콜 에터, 프로필렌 옥사이드/에틸렌 옥사이드 축합물, 알킬 폴리에터 같은 비이온성 유화제, 솔비탄 지방산 에스터 같은 솔비탄 에스터, 또는 폴리옥시에틸렌 솔비탄 지방산 에스터 같은 폴리옥시에틸렌 솔비탄 에스터이다.

[0640] 활성 성분을 미분된 고체 성분, 예컨대 활석 또는 천연 점토(예: 카올린, 벤토나이트 또는 납석), 또는 규조토와 함께 분쇄함으로써 살포제를 수득한다.

[0641] 현탁 농축액은 수성 또는 오일성일 수 있다. 예를 들어 적절한 경우 다른 제형 유형의 경우에 상기 이미 언급된 것과 같은 계면활성제를 첨가하여, 시판중인 비드 밀에 의해 습식 분쇄함으로써 이들을 제조할 수 있다.

[0642] 수성 유기 용매, 및 적절한 경우 다른 제형 유형의 경우에 상기 이미 언급된 것과 같은 계면활성제를 사용하여, 교반기, 콜로이드 밀 및/또는 정적 혼합기에 의해, 유화액, 예를 들어 수중유적형 유화액(EW)을 제조할 수 있다.

[0643] 결합제, 예를 들어 폴리비닐 알콜, 나트륨 폴리아크릴레이트 또는 광유에 의해, 화학식 I의 화합물을 흡착성의 과립화된 불활성 물질상에 분무하거나, 또는 활성 성분 농축액을 모래, 카올리나이트 또는 과립화된 불활성 물질 같은 담체의 표면상에 분무함으로써, 과립제를 제조할 수 있다. 필요한 경우 비료와 혼합하여 비료 과립의 제조에 통상적인 방식으로 적합한 활성 성분을 과립화시킬 수도 있다.

[0644] 통상적으로는 분무-건조, 유동상 과립화, 디스크 과립화, 고속 혼합기에서의 혼합 및 고체 불활성 물질 부재하에서의 압출 같은 통상적인 방법에 의해 수분산성 과립을 제조한다. 디스크, 유동상, 압출기 및 분무 과립을 제조하기 위해서는, 예컨대 문헌["Spray-Drying Handbook" 제3판, 1979, G. Goodwin Ltd., 런던; 브라우닝(J. E. Browning), "Agglomeration", Chemical and Engineering 1967, 페이지 147 이하; "Perry's Chemical Engineer's Handbook", 제5판, McGraw-Hill, 뉴욕 1973, p. 8-57]의 방법을 참조한다.

[0645] 작물 보호 제품의 제형에 대한 추가적인 세부사항에 대해서는 예를 들어 클링맨(G. C. Klingman)의 문헌["Weed Control as a Science", John Wiley and Sons, Inc., 뉴욕, 1961, 페이지 81-96] 및 프레이어(J. D. Freyer), 에반스(S. A. Evans)의 문헌["Weed Control Handbook", 제5판, Blackwell Scientific Publications, 옥스포드, 1968, 페이지 101-103]을 참조한다.

[0646] 통상적으로, 농약 제제는 0.1 내지 99중량%, 특히 0.1 내지 95중량%의 화학식 I의 화합물을 포함한다.

[0647] 습윤성 분말중 화학식 I의 화합물의 농도는 예를 들어 약 10 내지 90중량%이고, 100중량%가 되도록 하는 나머지 량은 통상적인 제형화 성분으로 구성된다. 유화가능한 농축액의 경우, 화학식 I의 화합물의 농도는 약 1 내지 90중량%, 바람직하게는 5 내지 80중량%일 수 있다. 살포제 형태의 제형은 통상 1 내지 30중량%, 바람직하게는 5 내지 20중량%의 화학식 I의 화합물을 포함할 수 있는 한편, 분무가능한 용액은 약 0.05 내지 80중량%, 바람직하게는 2 내지 50중량%의 화학식 I의 화합물을 포함한다. 수분산성 과립제의 경우, 화학식 I의 화합물의 함량은 화학식 I의 화합물이 액체 형태인지 또는 고체 형태인지의 여부에 따라, 또한 과립화 보조제, 충전재 등이 사용되는지에 따라 달라진다. 수분산성 과립제는 예컨대 1 내지 95중량%, 바람직하게는 10 내지 80중량%의 활성 성분을 포함한다.

[0648] 또한, 언급된 화학식 I의 화합물의 제형은 적절한 경우 각각 통상적인 접착제, 습윤제, 분산제, 유화제, 침투제, 보존제, 냉동 방지제, 용매, 충전재, 담체, 착색제, 소포제, 증발 억제제, pH 조절제 및 점도 조절제를 포함한다.

[0649] 화학식 I의 화합물 또는 이들의 염은 그 자체로 또는 다른 농약 활성 성분, 예컨대 살충제, 살진드기제, 살선충제, 제초제, 살진균제, 완화제, 비료 및/또는 성장 조절제와의 조합으로서의 제제(배합물) 형태로, 예를 들어 프리믹스 또는 탱크 혼합물로서 사용될 수 있다.

[0650] 혼합된 배합물 또는 탱크 혼합물에서 본 발명에 따른 활성 성분에 대해 사용될 수 있는 성분은 예를 들어 아세토락테이트 신타제, 아세틸-조효소 A 카복실라제, PS I, PS II, HPPDO, 파이토엔 데세추라제, 프로토포르피리노겐 옥시다제, 글루타민 신테타제, 셀룰로즈 생합성, 5-에놀피루빌시키메이트-3-포스페이트 신테타제의 저해에 기초하는 공지의 활성 화합물이다. 이들 화합물 및 사용될 수 있는 다른 화합물(이들의 작용 메카니즘은 어느 정도 알려지지 않거나 상이함)은 예를 들어 문헌[Weed Research 26, 441-445 (1986); 또는 "The Pesticide Manual", 제12판, 2000(이후, "PM"으로 약칭됨), The British Crop Protection Council and the Royal Soc. of Chemistry (편집)(e-Pesticide Manual Version 2.2 (2002) 포함)], 및 여기에 인용된 문헌에 기재되어 있다. 문헌으로부터 공지되고 언급될 수 있으며 화학식 I의 화합물과 조합될 수 있는 제초제는 예를 들어 하기 활성 성분이며(주: 이들 화합물은 국제 표준화 기구(ISO)에 따른 일반명에 의해, 또는 적절한 경우 통상적인 코드 번호와 함께 화학명을 이용하여 기재됨); 일반명을 갖는 화합물은 또한 인터넷 및 그에 인용된 문헌에서 입수될 수 있는 "농약 일반명 일람표"에도 언급되어 있다:

[0651] 아세토클로르; 아시플루오르펜(-나트륨); 아클로니펜; AKH 7088, 즉 [[[1-[5-[2-클로로-4-(트라이플루오로메틸)페녹시]-2-나이트로페닐]-2-메톡시에틸리덴]아미노]옥시]아세트산 및 그의 메틸 에스터; 알라클로르; 알록시딤(-나트륨); 아메트린; 아미카바존, 아미도클로르, 아미도설퓨론; 아미트롤; AMS, 즉 암모늄 설팜에이트; 아닐로포스; 아설람; 아트라진; 아자페니딘; 아짐설퓨론(DPX-A8947); 아지프로트린; 바반; BAS 516 H, 즉 5-플루오로-2-페닐-4H-3,1-벤즈옥사진-4-온; 베플루뷰타미드; 베나졸린(-에틸); 벤플루랄린; 벤퓨레세이트; 벤설퓨론(-메틸); 벤설라이드; 벤타존(-나트륨); 벤조바이사이클론; 벤조페나프; 벤조플루오르; 벤조일프로프(-에틸); 벤즈티아주론; 비알라포스(빌라나포스); 비페녹스; 비스피리바크(-나트륨); 브로마실; 브로모뷰타이드; 브로모페녹심; 브로목시닐; 브로뮤론; 뷰미나포스; 뷰속시논; 뷰타클로르; 뷰타페나실; 뷰타미포스; 뷰테나클로르; 뷰티다졸; 뷰트랄린; 뷰트록시딤; 뷰틸레이트; 카펜스트롤(CH-900); 카베타마이드; 카펜트라존(-에틸); 칼록시딤; CDAA, 즉 2-클로로-N,N-다이-2-프로펜일아세트아마이드; CDEC, 즉 2-클로로알릴 다이에틸다이티오카밤에이트; 클로메톡시펜; 클로람벤; 클로라지포프-뷰틸; 클로르브로뮤론; 클로르뷰팜; 클로르페낙; 클로르플루레놀-메틸; 클로리다존; 클로리뮤론(-에틸); 클로르니트로펜; 클로로톨루론; 클로록수론; 클로르프로팜; 클로르설퓨론; 클로르탈-다이메틸; 클로르티아미드; 클로르톨루론, 시니돈(-메틸 또는 -에틸), 신메틸린; 시노설퓨론; 클레토딤; 클레폭시딤, 클로디나포프 및 그의 에스터 유도체(예컨대, 클로디나포프-프로파길); 클로마존; 클로메프로프; 클로프록시딤; 클로피랄리드; 클로피라설퓨론(-메틸); 클로란설람(-메틸); 큐밀루론(JC 940); 사이아나진; 사이클로에이트; 사이클로설파뮤론(AC 104); 사이클록시딤; 사이클루론; 사이할로포프 및 그의 에스터 유도체(예를 들어, 뷰틸-에스터, DEH-112); 사이퍼쿠아트; 사이프라진; 사이프라졸; 다이뮤론; 2,4-D; 2,4-DB; 달라폰; 다조메트, 데스메디팜; 데스메트린; 다이-알레이트; 다이캄바; 다이클로베닐; 다이클로르프로프(-P); 다이클로포프 및 그의 에스터(예: 다이클로포프-메틸); 다이클로설람, 다이에타틸(-에틸); 다이페녹수론; 다이펜조쿠아트; 다이플루페니칸; 다이플루펜조피르; 다이메퓨론; 다이메피페레이트; 다이메타클로르; 다이메타메트린; 다이메텐아미드(SAN-582H); 다이메텐아미드(-P); 다이메타존, 다이메티퓐; 다이멕시플람, 다이메트라설퓨론, 다이니트라민; 다이노셉; 다이노터브; 다이펜아미드; 다이프로페트린; 다이쿠아트; 다이티오피르; 다이유론; DNOC; 에글리나진-에틸; EL 77, 즉 5-사이아노-1-(1,1-다이메틸-에틸)-N-메틸-1H-피라졸-4-카복사마이드; 엔도탈; 에포프로단, EPTC; 에스프로카브; 에탈플루랄린; 에타메트설퓨론-메틸; 에티다이뮤론; 에티오진; 에토퓨메

세이트; 에톡시펜 및 그의 에스터(예를 들어, 에틸 에스터, HC-252), 에톡시설퓨론, 에토벤자니드(HW 52); F5231, 즉 N-[2-클로로-4-플루오로-5-[4-(3-플루오로프로필)-4,5-다이하이드로-5-옥소-1H-테트라졸-1-일]-페닐]에테인설폰아마이드; 페노프로프; 페녹산, 페녹사프로프 및 페녹사프로프-P 및 이들의 에스터, 예를 들어 페녹사프로프-P-에틸 및 페녹사프로프-에틸; 페녹시딤; 펜트라자마이드; 페누론; 플람프로프(-메틸 또는 -아이소프로필 또는 -아이소프로필-L); 플라자설퓨론; 플로라설람; 플루아지포프 및 플루아지포프-P 및 이들의 에스터, 예컨대 플루아지포프-뷰틸 및 플루아지포프-P-뷰틸; 플루아졸레이트, 플루카바존(-나트륨); 플루클로랄린; 플루페나세트(FOE 5043), 플루펜피르, 플루메트설람; 플루메튜론; 플루미클로락(-펜틸); 플루미옥사진(S-482); 플루미프로핀; 플루오메튜론; 플루오로클로리돈, 플루오로디펜; 플루오로글라이코펜(-에틸); 플루폭삼(KNW-739); 플루프로파실(UBIC-4243); 플루프로아네이트, 플루피르설퓨론(-메틸 또는 -나트륨); 플루레놀(-뷰틸); 플루리돈; 플루로클로리돈; 플루록시피르(-멥틸); 플루르프리미돌, 플루르타몬; 플루티아세트(-메틸); 플루티아마이드(플루페나세트로도 알려짐); 포메사펜; 포람설퓨론; 포사민; 퓨릴라졸(MON 13900), 퓨릴옥시펜; 글루포시네이트(-암모늄); 글라이포세이트(-아이소프로필암모늄); 할로사펜; 할로설퓨론(-메틸) 및 그의 에스터(예컨대, 메틸 에스터, NC-319); 할록시포프 및 그의 에스터; 할록시포프-P(=R-할록시포프) 및 그의 에스터; HC-252(다이페닐에터), 헥사지논; 이마자메타벤즈(-메틸); 이마자메타피르; 이마자목스; 이마자픽, 이마자피르; 이마자퀸 및 염(예: 암모늄 염); 이마제타메타피르; 이마제타피르, 이마조설퓨론; 인다노판; 아이오도설퓨론-(메틸)-(나트륨), 아이옥시닐; 아이소카바미드; 아이소프로팔린; 아이소프로튜론; 아이소유론; 아이속사벤; 아이속사클로르톨; 아이속사플루톨; 아이속사피리포프; 카르뷰틸레이트; 락토펜; 레나실; 리뉴론; MCPA; MCPB; 메코프로프; 메페나세트; 메플루이디드; 메조설퓨론(-메틸); 메조트리온; 메탐, 메타미포프, 메타미트론; 메타자클로르; 메타벤즈티아주론; 메타졸; 메톡시페논; 메틸딤론; 메토벤주론, 메토브로뮤론; (S-)메톨라클로르; 메토설람(XRD 511); 메톡수론; 메트리뷰진; 메트설퓨론-메틸; MK-616; 몰리네이트; 모날라이드; 모노카바마이드 다이하이드로겐설페이트; 모놀리뉴론; 모뉴론; MT 128, 즉 6-클로로-N-(3-클로로-2-프로펜일)-5-메틸-N-페닐-3-피리다진아민; MT 5950, 즉 N-[3-클로로-4-(1-메틸에틸)-페닐]-2-메틸펜탄아마이드; 나프로아닐리드; 나프로파마이드; 나프탈람; NC 310, 즉 4-(2,4-다이클로로벤조일)-1-메틸-5-벤질옥시피라졸; 네뷰론; 니코설퓨론; 니피라클로펜; 니트랄린; 니트로펜; 니트로플루오르펜; 노르플루라존; 오르벤카브; 오리잘린; 옥사다이아르길(RP-020630); 옥사디아존; 옥사설퓨론; 옥사지클로메폰; 옥시플루오르펜; 파라쿠아트; 페뷸레이트; 펠라르곤산; 펜디메탈린; 페녹술람; 펜타노클로르, 펜톡사존; 퍼플루이돈; 페톡사미드, 페니소팜; 펜메디팜; 피클로람; 피콜리나펜; 피페로포스; 피리뷰티카브; 피리페노프-뷰틸; 프레틸라클로르; 프리미설퓨론(-메틸); 프로카바존(-나트륨); 프로사이아진; 프로다이아민; 프로플루아졸, 프로플루랄린; 프로글리나진(-에틸); 프로메톤; 프로메트린; 프로파클로르; 프로파닐; 프로파퀴자포프; 프로파진; 프로팜; 프로피소클로르; 프로폭시카바존(-나트륨), 프로피자마이드; 프로설팔린; 프로설포카브; 프로설퓨론(CGA-152005); 프리나클로르; 피라클로닐, 피라플루펜(-에틸); 피라졸리네이트; 피라존; 피라조설퓨론(-에틸); 피라족시펜; 피리벤족심; 피리뷰티카브; 피리다폴; 피리데이트; 피리프탈리드, 피리미도박(-메틸); 피리티오박(-나트륨)(KIH-2031); 피록소포프 및 그의 에스터(예를 들어, 프로파길 에스터); 퀸클로락; 퀸메락; 퀴노클라민, 퀴노포프 및 그의 에스터 유도체, 퀴잘로포프 및 퀴잘로포프-P 및 이들의 에스터 유도체, 예를 들어 퀴잘로포프-에틸; 퀴잘로포프-P-테퓨릴 및 -에틸; 렌리듀론; 림설퓨론(DPX-E 9636); S 275, 즉 2-[4-클로로-2-플루오로-5-(2-프로핀일옥시)페닐]-4,5,6,7-테트라하이드로-2H-인다졸; 세크뷰메톤; 세톡시딤; 시듀론; 시마진; 시메트린; SN 106279, 즉 2-[[7-[2-클로로-4-(트라이플루오로메틸)페녹시]-2-나프탈렌일]옥시]프로판산 및 그의 메틸 에스터; 설코트리온; 설펜트라존(FMC-97285, F-6285); 설파주론; 설포메튜론(-메틸); 설포세이트(ICI-A0224); 설포설퓨론; TCA; 테뷰탐(GCP-5544); 테뷰티우론; 테프랄록시딤; 터바실; 터뷰카브; 터뷰클로르; 터뷰메톤; 터뷰틸아진; 터뷰트린; TFH 450, 즉 N,N-다이에틸-3-[(2-에틸-6-메틸페닐)설폰일]-1H-1,2,4-트라이아졸-1-카복사마이드; 테닐클로르(NSK-850); 티아플루아마이드; 티아자플루론; 티아조피르(Mon-13200); 티디아지민(SN-24085); 티펜설퓨론(-메틸); 티오벤카브; 티오카바질; 트랄콕시딤; 트라이-알레이트; 트라이아설퓨론; 트라이아지플람; 트라이아조페나마이드; 트라이베뉴론(-메틸); 2,3,6-트라이클로로벤조산(2,3,6-TBA), 트라이클로피르; 트라이다이페인; 트라이에타진; 트라이플록시설퓨론(-나트륨), 트라이플루랄린; 트라이플루설퓨론 및 에스터(예컨대, 메틸 에스터, DPX-66037); 트라이메튜론; 트라이토설퓨론; 시토데프; 베르놀레이트; WL 110547, 즉 5-페녹시-1-[3-(트라이플루오로메틸)페닐]-1H-테트라졸; UBH-509; D-489; LS 82-556; KPP-300; NC-324; NC-330; KH-218; DPX-N8189; SC-0774; DOWCO-535; DK-8910; V-53482; PP-600; MBH-001; KIH-9201; ET-751; KIH-6127; KIH-2023 및 KIH5996.

[0652] 유해 식물을 선택적으로 방제하는 것은 유용한 식물 및 관상수에서 특히 중요하다. 화학식 I의 화합물이 이미 다수의 작물에서 매우 우수하거나 충분한 선택성을 나타냄에도 불구하고, 원칙적으로 몇몇 작물에서, 특히 덜 선택성인 다른 제초제와의 혼합물의 경우에, 경작되는 식물에서 식물 독성 증상이 나타날 수 있다. 이와 관련

하여, 특히 중요한 본 발명에 따른 화학식 I의 화합물의 조합은 화학식 I의 화합물 또는 다른 제초제 또는 농약과 이들의 조합 및 완화제를 함유하는 것이다. 해독제로서 작용하는 양으로 사용되는 완화제는, 예컨대 곡류(밀, 보리, 호밀, 옥수수, 벼, 소굼 및 기장), 사탕무, 사탕수수, 평지씨, 목화 및 대두, 바람직하게는 곡류 같은 경제적으로 중요한 작물에서, 사용되는 제초제/농약의 식물 독성 부작용을 감소시킨다. 하기 화합물 군은, 화학식 I의 화합물 및 이들 화합물과 추가적인 농약의 조합에 적합한 완화제(농업에서 통상적으로 이용되는 입체 이성질체 및 염 포함)의 예이다:

[0653] a) 다이클로로페닐피라졸린-3-카복실산 유형의 화합물, 바람직하게는 에틸 1-(2,4-다이클로로페닐)-5-(에톡시카본일)-5-메틸-2-피라졸린-3-카복실레이트(S1-1)("메펜피르-다이에틸", PM, pp. 594-595) 같은 화합물 및 WO 91/07874 호에 기재되어 있는 관련 화합물;

[0654] b) 다이클로로페닐피라졸카복실산 유도체, 바람직하게는 에틸 1-(2,4-다이클로로페닐)-5-메틸피라졸-3-카복실레이트(S1-2), 에틸 1-(2,4-다이클로로페닐)-5-아이소프로필피라졸-3-카복실레이트(S1-3), 에틸 1-(2,4-다이클로로페닐)-5-(1,1-다이메틸에틸)피라졸-3-카복실레이트(S1-4), 에틸 1-(2,4-다이클로로페닐)-5-페닐피라졸-3-카복실레이트(S1-5) 같은 화합물, 및 EP-A-333 131 호 및 EP-A-269 806 호에 기재되어 있는 관련 화합물;

[0655] c) 트라이아졸카복실산 유형의 화합물, 바람직하게는 펜클로라졸(및 그의 에틸 에스터), 즉 에틸 1-(2,4-다이클로로페닐)-5-트라이클로로메틸-(1H)-1,2,4-트라이아졸-3-카복실레이트(S1-6) 같은 화합물, 및 관련 화합물(EP-A-174 562 호 및 EP-A-346 620 호 참조);

[0656] d) 5-벤질- 또는 5-페닐-2-아이속사졸린-3-카복실산 유형, 또는 5,5-다이페닐-2-아이속사졸린-3-카복실산 유형의 화합물, 바람직하게는 에틸 5-(2,4-다이클로로벤질)-2-아이속사졸린-3-카복실레이트(S1-7) 또는 에틸 5-페닐-2-아이속사졸린-3-카복실레이트(S1-8) 같은 화합물, 및 WO 91/08202에 기재되어 있는 관련 화합물, 또는 독일 특허원(WO-A-95/07897 호)에 기재되어 있는 에틸 5,5-다이페닐-2-아이속사졸린카복실레이트(S1-9)("아이속사다이펜-에틸") 또는 n-프로필 5,5-다이페닐-2-아이속사졸린카복실레이트(S1-10) 또는 에틸 5-(4-플루오로페닐)-5-페닐-2-아이속사졸린-3-카복실레이트(S1-11);

[0657] e) 8-퀴놀린옥시아세트산 유형(S2)의 화합물, 바람직하게는 1-메틸헥스-1-일 (5-클로로-8-퀴놀린옥시)아세테이트(일반명 "클로퀸토세트-멕실")(S2-1)(PM, pp. 195-196 참조), 1,3-다이메틸뷰트-1-일 (5-클로로-8-퀴놀린옥시)아세테이트(S2-2), 4-알릴옥시뷰틸 (5-클로로-8-퀴놀린옥시)아세테이트(S2-3), 1-알릴옥시프로프-2-일 (5-클로로-8-퀴놀린옥시)아세테이트(S2-4), 에틸 (5-클로로-8-퀴놀린옥시)아세테이트(S2-5), 메틸 (5-클로로-8-퀴놀린옥시)아세테이트(S2-6), 알릴 (5-클로로-8-퀴놀린옥시)아세테이트(S2-7), 2-(2-프로필리덴이미노옥시)-1-에틸 (5-클로로-8-퀴놀린옥시)아세테이트(S2-8), 2-옥소프로프-1-일 (5-클로로-8-퀴놀린옥시)아세테이트(S2-9), 및 EP-A-86 750 호, EP-A-94 349 호 및 EP-A-191 736 호 또는 EP-A-0 492 366 호에 기재되어 있는 바와 같은 관련 화합물;

[0658] f) (5-클로로-8-퀴놀린옥시)말론산 유형의 화합물, 바람직하게는 다이에틸 (5-클로로-8-퀴놀린옥시)말론에이트, 다이알릴 (5-클로로-8-퀴놀린옥시)말론에이트, 메틸에틸 (5-클로로-8-퀴놀린옥시)말론에이트 같은 화합물, 및 EP-A-0 582 198 호에 기재되어 있는 관련 화합물;

[0659] g) 예컨대 2,4-다이클로로페녹시아세트산(및 그의 에스터)(2,4-D), 4-클로로-2-메틸페녹시프로피온산 에스터(메코프롭), MCPA 또는 3,6-다이클로로-2-메톡시벤조산(및 그의 에스터)(다이캄바) 같은 페녹시아세트산 또는 페녹시프로피온산 유도체 유형 또는 방향족 카복실산 유형의 활성 성분;

[0660] h) 예를 들어 파종된 벼에서 프레틸라클로르에 대한 완화제로서도 알려져 있는 "펜클로림"(PM, pp. 386-387)(=4,6-다이클로로-2-페닐피리미딘) 같은, 토양-작용 완화제로서 벼에 사용되는 피리미딘 유형의 활성 성분;

[0661] i) 예를 들어, "다이클로르미드"(PM, pp. 270-271)(=N,N-다이알릴-2,2-다이클로로아세트아마이드), "R-29148"(=3-다이클로로아세틸-2,2,5-트라이메틸-1,3-옥사졸리딘, 스타우퍼(Stauffer)), "베녹사코르"(PM, pp. 74-75)(=4-다이클로로아세틸-3,4-다이하이드로-3-메틸-2H-1,4-벤즈옥사진), "PPG-1292"(=N-알릴-N-[(1,3-다이옥솔란-2-일)메틸]다이클로로아세트아마이드, 피피지 인더스트리즈(PPG Industries)), "DK-24"(=N-알릴-N-[(알릴아미노카본일)메틸]다이클로로아세트아마이드, 사그로-켐(Sagro-Chem)), "AD-67" 또는 "MON 4660"(=3-다이클로로아세틸-1-옥사-3-아자스피로[4,5]데케인, 각각 나이트로케미아(Nitrokemia) 및 몬산토(Monsanto)), "다이클로논" 또는 "BAS145138" 또는 "LAB145138"(=3-다이클로로아세틸-2,5,5-트라이메틸-1,3-다이아자바이사이클로[4.3.0]노네인, 바스프(BASF)), 및 "퓨릴라졸" 또는 "MON 13900"(PM, 482-483 참조)(=(RS)-3-다이클로로아세틸-5-(2-퓨릴)-2,2-다이메틸옥사졸리딘 같은, 발아전 완화제(토양-작용 완화제)로서 흔히 사용되는 다이클로로아

세트아마이드 유형의 활성 성분;

[0662] j) 예를 들어 옥수수용 완화제로서 공지되어 있는 "MG 191"(CAS 등록 번호 96420-72-3)(=2-다이클로로메틸-2-메틸-1,3-다이옥솔레인, 나이트로케미아) 같은, 다이클로로아세톤 유도체 유형의 활성 성분;

[0663] k) 예컨대 메톨라클로르 손상에 대해 소굼 및 기장을 보호하기 위한 종자-처리 완화제로서 공지되어 있는 "옥사베트리닐"(PM, pp. 689)(=(Z)-1,3-다이옥솔란-2-일메톡시이미노(페닐)-아세토나이트릴), 메톨라클로르 손상에 대해 소굼 및 기장을 보호하기 위한 종자-드레싱 완화제로서 공지되어 있는 "플룩소페님"(PM, pp. 467-468)(=1-(4-클로로페닐)-2,2,2-트라이플루오로-1-에탄온 O-(1,3-다이옥솔란-2-일메틸)옥심), 및 메톨라클로르 손상에 대해 소굼 및 기장을 보호하기 위한 종자-처리 완화제로서 공지되어 있는 "사이오메트리닐" 또는 "CGA-43089"(PM, p. 1170)(=(Z)-사이아노메톡시-이미노(페닐)아세토나이트릴) 같은, 종자 처리 제품으로서 공지되어 있는 옥시이미노 화합물 유형의 활성 성분;

[0664] l) 예를 들어, 알라클로르 및 메톨라클로르 손상에 대해 소굼 및 기장을 보호하기 위한 종자-처리 완화제로서 공지되어 있는 "플루라졸"(PM, pp. 450-451)(=벤질 2-클로로-4-트라이플루오로메틸-1,3-티아졸-5-카복실레이트) 같은, 종자 처리 제품으로서 공지되어 있는 티아졸카복실산 에스터 유형의 활성 성분;

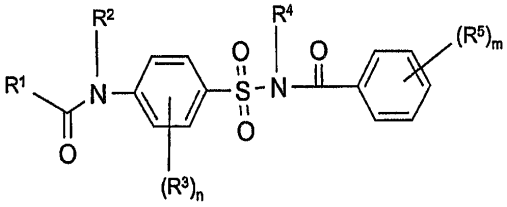
[0665] m) 예컨대, 티오카밤에이트 제초제 손상에 대해 옥수수를 보호하기 위한 종자-처리 완화제로서 공지되어 있는 "나프탈산 무수물"(PM, p. 1009-1010)(=1,8-나프탈렌다이카복실산 무수물) 같은, 종자 처리 제품으로서 공지된 나프탈렌다이카복실산 유도체 유형의 활성 성분;

[0666] n) 이미다졸린온에 의한 손상으로부터 옥수수를 보호하기 위한 완화제로서 공지되어 있는 "CL 304415"(CAS 등록 번호 31541-57-8)(=2-(4-카복시크로만-4-일)아세트산, 어메리칸 사이아나미드(American Cyanamid)) 같은, 크로만아세트산 유도체 유형의 활성 성분;

[0667] o) 예를 들어, 제초제인 몰리네이트에 의한 손상에 대해 벼를 보호하기 위한 완화제로서 공지되어 있는 "다이메피페레이트" 또는 "MY-93"(PM, pp. 302-303)(=S-1-메틸-1-페닐에틸 피페리딘-1-카보티오에이트), 제초제인 이마조설퓨론에 의한 손상에 대해 벼를 보호하기 위한 완화제로서 공지된 "다이뮤론" 또는 "SK 23"(PM, p. 247)(=1-(1-메틸-1-페닐에틸)-3-p-톨릴유레아), 몇몇 제초제에 의한 손상으로부터 벼를 보호하기 위한 완화제로서 공지된 "큐밀루론" 또는 "JC-940"(=3-(2-클로로페닐메틸)-1-(1-메틸-1-페닐-에틸)유레아, JP-A-60087254 호 참조), 몇몇 제초제에 의한 손상으로부터 벼를 보호하기 위한 완화제로서 공지된 "메톡시페논" 또는 "NK 049"(=3,3'-다이메틸-4-메톡시벤조페논), 몇몇 제초제에 의한 손상에 대해 벼를 보호하기 위한 완화제로서 공지된 "CSB"(=1-브로모-4-(클로로메틸설폰일)벤젠)(CAS 등록 번호 54091-06-4, 구미아이(Kumiai)) 같은, 벼 같은 작물과 관련하여 유해 식물에 대한 제초 작용에 덧붙여 완화제 작용도 나타내는 활성 성분;

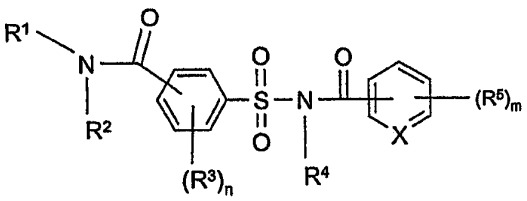
[0668] p) WO-A-97/45016 호에 기재되어 있는 바와 같은 하기 화학식 S3의 N-아실설폰아마이드 및 이들의 유도체:

화학식 S3

[0669] 

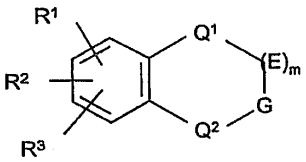
[0670] q) 국제 특허원 PCT/EP98/06097 호에 기재되어 있는 바와 같은, 적절한 경우 염 형태의 하기 화학식 S4의 아실설팜오일벤즈아마이드:

화학식 S4

[0671] 

[0672] r) WO-A 98/13 361 호에 기재되어 있는 바와 같은 화학식 S5의 화합물:

화학식 S5

[0673] 

[0674] 언급된 완화제 중에서, (S1-1), (S1-9) 및 (S2-1), 특히 (S1-1) 및 (S1-9)가 특히 중요하다.

[0675] 완화제중 일부는 제초제로서 이미 공지되어 있고, 따라서 유해 식물과 관련된 제초 작용에 덧붙여 작물과 관련된 보호 작용도 동시에 나타낸다.

[0676] 제초제(혼합물) 대 완화제의 중량비는 통상적으로 해당 제초제의 투여량 및 완화제의 효능에 따라 달라지며; 예컨대 200:1 내지 1:200, 바람직하게는 100:1 내지 1:100, 특히 20:1 내지 1:20의 범위에서 광범위하게 변할 수 있다. 화학식 I의 화합물 또는 이들의 혼합물과 유사한 방식으로 완화제를 추가적인 제초제/농약과 함께 제형화시킬 수 있으며, 제초제와 함께 즉시 사용가능한 혼합물 또는 탱크 혼합물로서 제공하여 사용할 수 있다.

[0677] 사용하기 위해서는, 통상적인 시판 형태로 제공하는 제초제 또는 제초제 완화제 제형을 적절한 경우 통상적인 방식으로, 예를 들어 습윤성 분말, 유화가능한 농축액, 분산액 및 수분산성 과립제의 경우 물을 사용하여 희석시킨다. 살포제, 토양 과립제, 살포용 과립제 및 분무가능한 용액 형태의 제제는 통상적으로 사용하기 전에 다른 불활성 물질로 추가로 희석시키지 않는다.

[0678] 화학식 I의 화합물의 요구되는 투여량은 특히 온도, 습도 및 사용되는 제초제의 유형 같은 외부 조건에 따라 변화된다. 이는 광범위하게, 예컨대 0.001 내지 10.0kg/ha 이상의 활성 성분으로 변할 수 있으나, 바람직하게는 0.002 내지 3kg/ha, 특히 0.005 내지 1kg/ha이다.

[0679] B. 제형 실시예

[0680] a) 10중량부의 화학식 I의 화합물 및 불활성 물질로서의 90중량부의 활석을 혼합하고, 그 혼합물을 햄머 밀에서 그라인딩하여 더스트를 수득한다.

[0681] b) 25중량부의 화학식 I의 화합물, 64중량부의 불활성 물질로서의 카올린-함유 석영, 10중량부의 칼륨 리그노설포네이트 및 습윤제 및 분산제로서의 1중량부의 나트륨 올레오일메틸타우리네이트를 혼합하고, 그 혼합물을 핀-디스크(pinned-disk) 밀에서 그라인딩하여 물에 용이하게 분산가능한 습식 분말을 수득한다.

[0682] c) 20중량부의 화학식 I의 화합물을 6중량부의 알킬페놀 폴리글라이콜 에터(등록상표 Triton X 207), 3중량부의 아이소트라이데칸올 폴리글라이콜 에터(8EO) 및 71중량부의 파라핀 미네랄 오일(예컨대 약 255 내지 277℃ 초과의 비등점)과 혼합하고, 그 혼합물을 볼 밀에서 5μ 미만으로 미세하게 그라인딩하여 물에 용이하게 분산가능한 분산 농축물을 수득한다.

[0683] d) 15중량부의 화학식 I의 화합물, 용매로서의 75중량부의 사이클로헥사논 및 유화제로서의 10중량부의 옥세틸화된 노닐페놀로부터 유화가능한 농축물을 수득한다.

[0684] e) 75중량부의 화학식 I의 화합물,

[0685] 10중량부의 칼슘 리그노-설포네이트,

[0686] 5중량부의 나트륨 라우릴설페이트,

[0687] 3중량부의 폴리비닐 알콜 및

[0688] 7중량부의 카올린을 혼합하고, 그 혼합물을 핀 디스크 밀에서 그라인딩하고, 과립화 액으로서 물 상에 분무함에 의해 유동화 베드에서 그 분말을 과립화하여 수-분산성 과립을 수득한다.

[0689] f) 다르게는,

[0690] 25중량부의 화학식 I의 화합물,

[0691] 5중량부의 나트륨 2,2'-다이나프틸메테인-6,6'-다이설포네이트,

[0692] 2중량부의 나트륨 올레오일메틸타우리네이트,

[0693] 1중량부의 폴리비닐 알콜

[0694] 17중량부의 칼슘 카보네이트 및

[0695] 50중량부의 물을 콜로이드 밀 상에서 균질화 및 예비분쇄한 후, 그 혼합물을 비드 밀 상에서 그라인당하고, 생성된 현탁액을 분무 타월에서 단일-물질 노즐에 의해 분무 및 건조시켜 수-분산성 과립을 수득한다.

[0696] C. 생물학적 실시예

[0697] 생물학적 실시예 1: 잡초에 대한 발아-전 효과

[0698] 단자엽 및 쌍자엽 잡초 식물의 씨앗 또는 근경 종을 플라스틱 포트의 모래 롬(loam)에 넣고, 토양으로 덮었다. 그 후, 습식 분말 또는 유제 농축물의 형태로 제형화된 본 발명에 따른 화합물을, 수성 현탁액 또는 유제로서 1 ha(전환됨) 당 600 내지 800 ℓ의 물의 적용 비율을 갖는 다양한 투여량으로 토양 커버의 표면에 적용하였다.

[0699] 처리 후, 포트를 온실에 넣고, 잡초에 좋은 성장 조건 하에 유지시켰다. 3 내지 4주의 실험 기간 후에 시험 식물이 발아한 후에 비처리된 대조군과 비교하여 식물 또는 발아 손상을 가시적으로 기록하였다.

[0700] 다음과 같은 화합물 번호의 본 발명에 따른 화합물은 헥타 당 1kg 이하의 활성 성분의 적용 비율로 적용할 경우 스텔라리아 메디아(Stellaria media), 로륨 물티포룸(Lolium multiforum), 아마란투스 레트로플렉수스(Amaranthus retroflexus), 시나피스 알바(Sinapis alba), 아베나 사티바(Avena sativa) 및 세타리아 비리디스(Setaria viridis)와 같은 해로운 식물에 대해 매우 우수한 발아-전 방제를 보인다:

[0701] 화합물 번호1.1, 1.2, 1.3, 1.7, 1.11, 1.12, 1.15, 1.20, 1.21, 1.24, 1.28, 1.31, 1.66, 1.67, 1,68, 1.69, 2.1, 2.2, 2.4, 2.11, 2.25, 2.28, 3.1, 3.2, 3.7, 3.11, 3.15, 3.20, 3.24, 4.1, 4.2, 5.1, 5.2, 6.1, 6.2, 7.1, 7.2, 7.3, 7.4, 7.11, 7.24, 7.47, 7.48, 7.57, 7.70, 7.72, 7.74, 7.75, 7.78, 7.203, 7.228, 7,229, 7.238, 7.239, 7.240, 7.241, 7,242, 7.243, 7.244, 7.245, 8.1, 8.2, 8.3, 8.7, 8.11, 8.12, 8.15, 8.21, 8.24, 8.25, 8.26, 8.34, 8.35, 8.38, 8.44, 8.48, 8.49, 8.58, 8.61, 8.67, 8.68, 8.71, 8.75, 8.79, 8.90, 8.100, 8.113, 8.117, 8.148, 8.152, 8.160, 8.170, 8.183, 8.187, 8.195, 8.196, 8.197, 8.201, 8.205, 8.206, 8.209, 8.215, 8.219, 8.231, 8.233, 8.234, 8.237, 8.238, 8.239, 8.240, 8.241, 8.242, 8.243, 8.244, 8.245, 8.246, 8.247, 8.248, 8.249, 8.250, 8.251, 8.252, 8.253, 8.254, 8.255, 8.256, 8.257, 9.36, 9.37, 9.66, 10.1, 10.2, 10.37, 10.38, 10.47, 10.57, 10.66, 10.67 및 10.68 .

[0702] 생물학적 실시예 2: 잡초에 대한 발아-후 효과

[0703] 단자엽 및 쌍자엽 잡초 식물의 씨앗 또는 근경 종을 플라스틱 포트의 모래 롬(loam)에 넣고, 토양으로 덮었고, 양호한 성장 조건하에 온실에서 성장시켰다. 씨 뿌린지 3주 후에, 시험 식물을 3-엽 단계에서 처리하였다. 습식 분말 또는 유제 농축물로서 제형화된 다양한 투여량의 본 발명에 따른 화합물을 녹색 식물 부분에 1 ha(전환됨) 당 600 내지 800 ℓ의 물의 적용 비율로 분무하였다. 시험 화합물을 최적 성장 조건 하에 약 3 내지 4주 동안 온실에서 정치시킨 후, 비처리된 대조군과 비교하여 제제의 효과를 시각적으로 기록하였다.

[0704] 1 헥타 당 2kg 이하의 활성 성분의 적용 비로 적용 시에, 다음과 같은 화합물 번호의 본 발명에 따른 화합물은 시나피스 알바(Sinapis alba), 에치노크로아 크루스-갈리(Echinochloa crus-galli), 로륨 물티포룸(Lolium multiforum), 스텔라리아 메디아(Stellaria media), 사이페루스 이리아(Cyperus iria), 아마란투스 레트로플렉수스(Amaranthus retroflexus), 세타리아 비리디스(Setaria viridis), 아베나 사티바(Avena sativa), 라뮴 푸르푸륨(Lamium purpureum), 마트리카리아 이노도라(Matricaria inodora), 파파베르 로에아스(Papaver rhoeas), 베로니카 페르시카(Veronica persica), 비올라 트로콜로르(Viola trocolor), 코치아 에스피피(Kochia spp) 및 체노포듐 알붐(Chenopodium album)과 같은 해로운 식물에 대해 매우 우수한 발아-후 제초 활성을 보인다:

화합물 번호 1.1, 1.2, 1.3, 1.7, 1.11, 1.12, 1.15, 1.20, 1.21, 1.24, 1.28, 1.31, 1.66, 1.67, 1,68, 1.69, 2.1, 2.2, 2.4, 2.11, 2.25, 2.28, 3.1, 3.2, 3.7, 3.11, 3.15, 3.20, 3.24, 4.1, 4.2, 5.1, 5.2, 6.1, 6.2, 7.1, 7.2, 7.3, 7.4, 7.11, 7.24, 7.47, 7.48, 7.57, 7.70, 7.72, 7.74, 7.75, 7.78, 7.203, 7.228, 7,229, 7.238, 7.239, 7.240, 7.241, 7,242, 7.243, 7.244, 7.245, 8.1, 8.2, 8.3, 8.7, 8.11, 8.12, 8.15, 8.21, 8.24, 8.25, 8.26, 8.34, 8.35, 8.38, 8.44, 8.48, 8.49, 8.58, 8.61, 8.67, 8.68, 8.71, 8.75, 8.79, 8.90, 8.100, 8.113, 8.117, 8.148, 8.152, 8.160, 8.170, 8.183, 8.187, 8.195, 8.196, 8.197, 8.201, 8.205, 8.206, 8.209, 8.215, 8.219, 8.231, 8.233, 8.234, 8.237, 8.238, 8.239, 8.240, 8.241, 8.242, 8.243, 8.244, 8.245, 8.246, 8.247, 8.248, 8.249, 8.250, 8.251, 8.252, 8.253, 8.254, 8.255, 8.256, 8.257, 9.36, 9.37, 9.66, 10.1, 10.2, 10.37, 10.38, 10.47, 10.57, 10.66, 10.67 및 10.68 .

[0705]

[0706] 생물학적 실시예 3: 경작지 작물에서의 잡초 방제

[0707] 다른 필드 시험에서, 천연 잡초가 만연하는 조건 하에 경작지 작물을 성장시키고, 본 발명에 따른 화학식 I의 물질을 다양한 양으로 분무하였다. 적용 후 다양한 시간 간격에서, 본 발명에 따른 화합물에서는 예컨대 오일 팜, 코코넛 팜, 인디아-고무 나무, 감귤류, 파인애플, 면, 커피, 코코아 및 포도와 같은 경작지 작물이 높은 활성 성분 비율에서도 손상되지 않는 상태로 남아 있음을 시각적으로 발견하였다. 화학식 I의 화합물은 종래 기술과 비교 시에 개선된 정도의 선택도를 보이고, 따라서 경작지 작물에서의 원치 않는 식물의 방제에 적당하다. 또한, 특히 잡초의 발아-전에 매우 우수한 잡초 방제 효과가 있다.