



(19)中華民國智慧財產局

(12)發明說明書公開本

(11)公開編號：TW 200950699 A1

(43)公開日：中華民國 98 (2009) 年 12 月 16 日

(21)申請案號：098115510

(22)申請日：中華民國 98 (2009) 年 05 月 11 日

(51)Int. Cl.：

A01N43/54 (2006.01)

A01N43/90 (2006.01)

C07D409/04 (2006.01)

C07D403/04 (2006.01)

C07D401/04 (2006.01)

C07D471/04 (2006.01)

A01P13/00 (2006.01)

(30)優先權：2008/05/13

英國

0808664.7

(71)申請人：先正達有限公司 (英國) SYNGENTA LIMITED (GB)

英國

(72)發明人：懷廷翰 威廉 蓋伊 WHITTINGHAM, WILLIAM GUY (GB)；威恩 凱洛琳 路易絲 WINN, CAROLINE LOUISE (GB)；威廉斯 約翰 WILLIAMS, JOHN (GB)；葛利斯洛 哈瑞 GLITHRO, HARRY (GB)

(74)代理人：桂齊恆；閻啟泰

申請實體審查：無 申請專利範圍項數：12 項 圖式數：0 共 183 頁

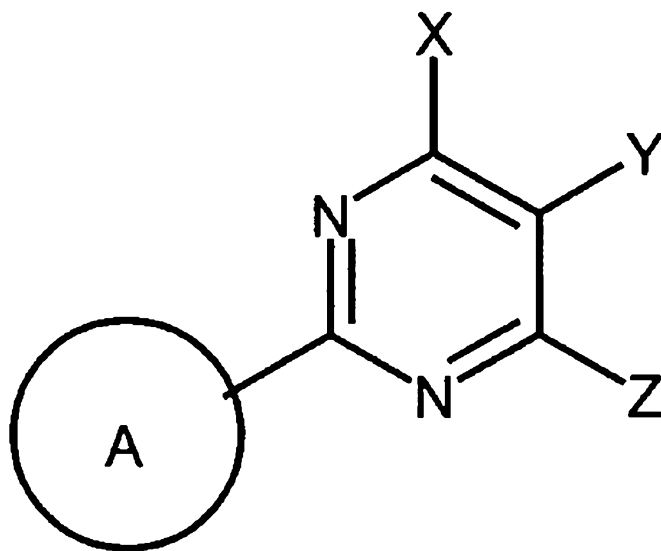
(54)名稱

化合物

CHEMICAL COMPOUNDS

(57)摘要

本發明係關於經取代的嘓啉衍生物，以及其 N-氧化物以及其農化上可接受鹽，以及其在控制不
欲的植物生長的用途，特別是在有用植物作物的用途。本發明涵蓋至包括此化合物的除草組合物，
N-氧化物及 / 或鹽以及該等與另外活性成份(例如除草劑，殺真菌劑，殺蟲劑及 / 或植物生長調節
劑)及 / 或安全劑的混合物。



(I)



(19)中華民國智慧財產局

(12)發明說明書公開本

(11)公開編號：TW 200950699 A1

(43)公開日：中華民國 98 (2009) 年 12 月 16 日

(21)申請案號：098115510

(22)申請日：中華民國 98 (2009) 年 05 月 11 日

(51)Int. Cl.：

A01N43/54 (2006.01)

A01N43/90 (2006.01)

C07D409/04 (2006.01)

C07D403/04 (2006.01)

C07D401/04 (2006.01)

C07D471/04 (2006.01)

A01P13/00 (2006.01)

(30)優先權：2008/05/13

英國

0808664.7

(71)申請人：先正達有限公司 (英國) SYNGENTA LIMITED (GB)

英國

(72)發明人：懷廷翰 威廉 蓋伊 WHITTINGHAM, WILLIAM GUY (GB)；威恩 凱洛琳 路易絲 WINN, CAROLINE LOUISE (GB)；威廉斯 約翰 WILLIAMS, JOHN (GB)；葛利斯洛 哈瑞 GLITHRO, HARRY (GB)

(74)代理人：桂齊恆；閻啟泰

申請實體審查：無 申請專利範圍項數：12 項 圖式數：0 共 183 頁

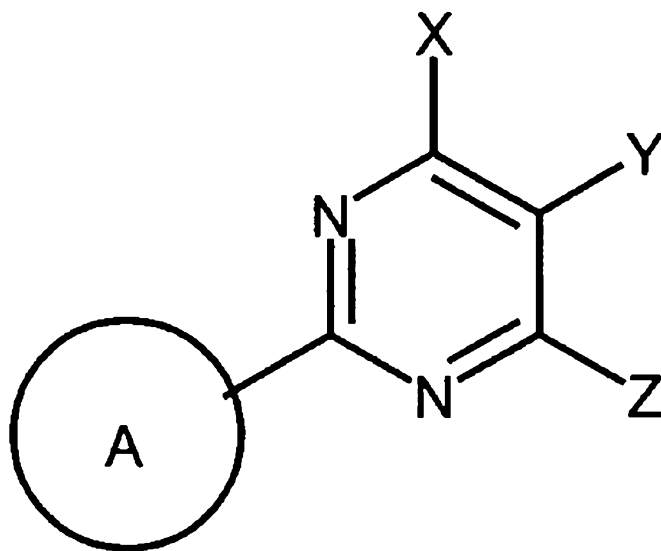
(54)名稱

化合物

CHEMICAL COMPOUNDS

(57)摘要

本發明係關於經取代的嘧啶衍生物，以及其 N-氧化物以及其農化上可接受鹽，以及其在控制不想要的植物生長的用途，特別是在有用植物作物的用途。本發明涵蓋至包括此化合物的除草組合物，N-氧化物及 / 或鹽以及該等與另外活性成份(例如除草劑，殺真菌劑，殺蟲劑及 / 或植物生長調節劑)及 / 或安全劑的混合物。



(I)

六、發明說明：

【發明所屬之技術領域】

本發明係關於新穎的經取代的嘧啶衍生物，以及其 N-氧化物以及其農化上可接受鹽，以及其在控制不欲的植物生長的用途，特別是在有用植物農作物的用途。本發明涵蓋至包括此化合物的除草組合物，N-氧化物及／或鹽以及該等與另外活性成份(例如除草劑，殺真菌劑，殺蟲劑及／或植物生長調節劑)及／或安全劑的混合物。

【先前技術】

為數眾多的經取代的嘧啶衍生物係為此技藝中所習知者。WO 2007/083692 揭示胺基嘧啶衍生物，其中在嘧啶環的第 2 位置經視需要經取代的咪唑環所取代。此類化合物係為殺真菌以及作為植物疾病控制劑。額外地，包括在嘧啶環第 2 位置的視需要經取代的環丙基或視需要經取代的苯基基團經結合在嘧啶環第 6 位置的硝基或視需要經取代的胺基的經取代嘧啶衍生物以及其在作為除草劑的用途被揭示於國際專利公開案 WO 2005/063721。國際專利公開案 WO 2007/082076 揭示多種 2-(多-經取代的芳基)-6-胺基-5-鹵-4-嘧啶羧酸以及其作為除草劑的用途，而國際專利公開案 WO 2007/092184 揭示特定的經取代的嘧啶羧酸衍生物作為能夠改良作物收穫率的化合物。

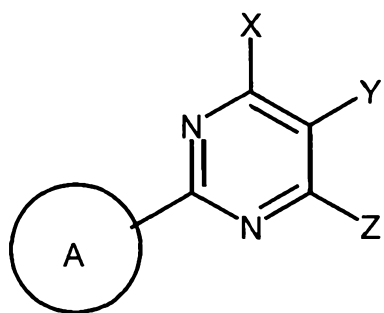
部分是因為耐除草劑的雜草分佈擴大，以及耐除草劑的作物變成自生(volunteer)雜草，對控制此類非所欲的植物

生長，特別是有用植物的作物，有著持續的需求。其他的因素，例如需要更便宜、更有效的除草劑，以及需要具有改良環境分佈(例如更安全、無毒等)，亦驅使對新穎除草化合物的需求。

【發明內容】

本發明係基於發現特定經取代的嘧啶衍生物，特別是那些包含在嘧啶環的第2位置的作為取代基的5至6員雜芳香族環，其為特優的除草化合物。

因此，在第一內容中，本發明提供一種控制植物生長(特別是不欲植物生長)，該方法包括將式(I)化合物施用於該植物(特別是不欲的植物)



(I)

其中：A 係為 5-或 6-員雜芳香環，其包括 1 至 4 個雜原子以及視需要經 1 至 4 個基團 R^1 取代，其中該雜原子係選自 O，N 以及 S，其前提是該雜芳香環僅包括一個 O 或個 S 原子；每一個 R^1 係獨立地為：鹵素，氰基，硝基，疊氮，羥基，視需要經一或多個 R^a 取代的烷基，視需要經一或多個 R^b 取代的烯基，視需要經一或多個 R^c 取代的炔基，視需要經一或多個 R^d ， OR^{aa} ， $S(O)_aR^{bb}$ ， $C(O)R^{cc}$ ， $NR^{dd}R^{ee}$ ，

$\text{SiR}^{\text{ff}}\text{R}^{\text{gg}}\text{R}^{\text{hh}}$, $\text{P}(\text{O})\text{R}^{\text{ii}}\text{R}^{\text{jj}}$, 或 $\text{B}(\text{OR}^{\text{kk}})(\text{OR}^{\text{LL}})$ 取代的環烷基；
 或者二個相鄰 R^1 基團與其所連接的原子形成 5 至 7 員環，
 該環視需要包含 1 或 2 個選自 O, S 以及 N 的雜原子且視需要
 經 1 至 4 個基團 R^3 取代；每一個 R^3 係獨立地為：鹵素；
 氰基；硝基；羥基；視需要經一或多個 R^a 取代的烷基；視
 需要經一或多個 R^b 取代的烯基；視需要經一或多個 R^c 取代
 的炔基；視需要經一或多個 R^d 取代的環烷基； OR^{aa} ；
 $\text{S}(\text{O})_a\text{R}^{\text{bb}}$ ； $\text{C}(\text{O})\text{R}^{\text{cc}}$ ； $\text{NR}^{\text{dd}}\text{R}^{\text{ee}}$ ； $\text{SiR}^{\text{ff}}\text{R}^{\text{gg}}\text{R}^{\text{hh}}$ ； $\text{P}(\text{O})\text{R}^{\text{ii}}\text{R}^{\text{jj}}$ ；或
 者 $\text{B}(\text{OR}^{\text{kk}})(\text{OR}^{\text{LL}})$ ；或者任二個相鄰基團 R^3 一起形成選自
 以下的基團：側氧基； $=\text{CR}^{\text{mm}}\text{R}^{\text{nn}}$ ， $=\text{NOR}^{\text{oo}}$ ，以及 $=\text{NNR}^{\text{pp}}\text{R}^{\text{qq}}$ ；
 每一個 R^a 係獨立地為：鹵素，氰基，硝基，羥基，環烷基，
 OR^{aa} ， $\text{S}(\text{O})_a\text{R}^{\text{bb}}$ ， $\text{C}(\text{O})\text{R}^{\text{cc}}$ ，或者 $\text{NR}^{\text{dd}}\text{R}^{\text{ee}}$ ；每一個 R^b 係獨立
 地為：鹵素，氰基，硝基，羥基，烷氧基， $\text{S}(\text{O})_2\text{R}^{\text{bb}}$ ， $\text{C}(\text{O})\text{R}^{\text{cc}}$ ，
 或者 $\text{P}(\text{O})\text{R}^{\text{ii}}\text{R}^{\text{jj}}$ ；每一個 R^c 係獨立地為：鹵素，氰基，烷氧
 基， $\text{S}(\text{O})_2\text{R}^{\text{bb}}$ ， $\text{C}(\text{O})\text{R}^{\text{cc}}$ ，或者 $\text{SiR}^{\text{ff}}\text{R}^{\text{gg}}\text{R}^{\text{hh}}$ ；每一個 R^d 係
 獨立地為：鹵素，氰基，硝基，羥基，烷基，烯基，炔基，
 環烷基，烷氧基， $\text{S}(\text{O})_a\text{R}^{\text{bb}}$ ，或者 $\text{C}(\text{O})\text{R}^{\text{cc}}$ ；每一個 R^{aa} 係獨
 立地為：烷基，鹵烷基，烷氧基烷基，環烷基烷基，烯基，
 鹵烯基，炔基，鹵炔基，環烷基，烷基羰基，鹵烷基羰基，
 烷氧基羰基，鹵烷氧基羰基，烷基磺醯基，鹵烷基磺醯基，
 胺基羰基，烷基胺基羰基，二烷基胺基羰基，烷基亞胺基，
 或者二烷基亞胺基；a 係為選自 0, 1 以及 2 的整數；每一
 個 R^{bb} 係獨立地為：烷基，鹵烷基，烷氧基烷基，烯基，
 鹵烯基，炔基，鹵炔基，環烷基，或者烷基羰基胺基； R^{cc}

係：氫，羥基，烷基，鹵烷基，烷氧基烷基，烯基，鹵烯基，炔基，鹵炔基，環烷基，烷氧基，鹵烷氧基，烷氧基烷氧基，芳基烷氧基，環烷氧基，胺基，烷基胺基，二烷基胺基，或者烷基磺醯基胺基； R^{dd} 係為：氫，烷基；鹵烷基，烷氧基烷基，烯基，鹵烯基，炔基，鹵炔基，環烷基，烷基羰基，鹵烷基羰基，烷氧基羰基，鹵烷氧基羰基，烷基磺醯基，鹵烷基磺醯基，胺基羰基，烷基胺基羰基，或者二烷基胺基羰基； R^{ee} 係為氫，烷基，鹵烷基，烷氧基烷基，烯基，鹵烯基，炔基，鹵炔基，或者環烷基；或者 R^{dd} 以及 R^{ee} ，一起與其所連接的 N 原子形成 4 至 6 員環，視需要包含一個另外的選自 O，N 以及 S 的雜原子，該環係視需要經 1 至 4 個選自以下基團所取代：鹵素，烷基，烷氧基，烷基羰基，烷氧基羰基，以及側氧基； R^{ff} ， R^{gg} ，以及 R^{hh} 係每一個獨立地為烷基或鹵烷基； R^{ii} 係為烷基，鹵烷基，烷氧基，或鹵烷氧基； R^{jj} 係為烷氧基或鹵烷氧基； R^{kk} 以及 R^{LL} 係每一個獨立地為氫或烷基；或者 R^{kk} 以及 R^{LL} 一起與其所連接的 O 原子以及 B 原子形成 5 員或 6 員雜環狀環，其視需要經 1 至 4 個烷基基團所取代； R^{mm} 係為：氫，鹵素，氰基，硝基，烷基，鹵烷基，烷氧基烷基，環烷基，烷基羰基，鹵烷基羰基，烷氧基羰基，鹵烷氧基羰基，烷基磺醯基，鹵烷基磺醯基，胺基羰基，烷基胺基羰基，或二烷基胺基羰基； R^{nn} 係為：氫，鹵素，氰基，硝基，烷基，鹵烷基，烷基羰基，鹵烷基羰基，烷氧基羰基，鹵烷氧基羰基，烷基磺醯基，鹵烷基磺醯基，胺基羰基，烷基胺基

羰或者二烷基胺基羰基； R^{oo} 係為：氫，烷基，鹵烷基，烷
 氧基烷基，環烷基，烷基羰基，鹵烷基羰基，烷氧基羰基，
 鹵烷氧基羰基，胺基羰基，烷基胺基羰基，或者二烷基胺
 基羰基； R^{pp} 係為：氫，烷基，鹵烷基，烷氧基烷基，或者
 環烷基； R^{qq} 係為氫，烷基，鹵烷基，烷基羰基，鹵烷基羰
 基，烷氧基羰基，胺基羰基，烷基胺基羰基，或者二烷基
 胺基羰基；或者 R^{pp} 以及 R^{qq} 一起與其連接的氮形成 5 員
 或 6 員視需要經取代的環，該環視需要包含另外選自 O，S
 以及 N 的雜原子，該取代係選自鹵素以及烷基；X 係為硝
 基，疊氮，鹵素，視需要經取代的烷氧基，視需要經取代
 的胺基氧基，或者 NR^5R^6 ，其中： R^5 係為：氫，視需要經
 取代的烷基，其前提是該取代不包含環系統，甲醯基，視
 需要經取代的烷基羰基，其前提是該取代不包含芳基部
 分，視需要經取代的環烷基羰基，視需要經取代的烯基羰
 基，視需要經取代的炔基羰基，視需要經取代的苯基羰基，
 視需要經取代的雜芳基羰基，視需要經取代的胺基羰基，
 視需要經取代的烷氧基羰基，視需要經取代的烷基磺醯
 基，視需要經取代的環烷基磺醯基，視需要經取代的烯基
 磺醯基，視需要經取代的炔基磺醯基，視需要經取代的苯
 基磺醯基，視需要經取代的胺基，羥基，視需要經取代的
 烷氧基，視需要經取代的環烷氧基，視需要經取代的烷基
 羰基氧基，視需要經取代的烷氧基羰基氧基，視需要經取
 代的胺基羰基氧基，視需要經取代的苯氧基，視需要經取
 代的烯基，其前提係該取代不包含環系統，視需要經取代

的炔基，其前提係該取代不包含環系統， $N=CR^gR^h$ ，氰基，視需要經取代的甲矽烷基，或者視需要經取代的膦鹽基；以及 R^6 係為：氫，視需要經取代的烷基，其前提係該取代不包含環系統，視需要經取代的烯基，其前提係該取代不包含環系統，或者視需要經取代的炔基，其前提係該取代不包含環系統；或者 R^5 以及 R^6 一起形成基團 $=C(R^i)OR^j$ ， $=C(R^k)SR^L$ ， $=C(R^m)NR^nR^o$ ；或者 R^5 以及 R^6 一起與其所連接的 N 原子形成 3 至 8 員視需要經取代的環系統，該環系統視需要包含 1 至 3 個另外的獨立地選自 O, S 以及 N 的雜原子為； R^g 係為：氫，視需要經取代的烷基，視需要經取代的環烷基，視需要經取代的苯基，視需要經取代的雜芳基，視需要經取代的胺基，視需要經取代的烷氧基，視需要經取代的苯氧基，視需要經取代的烷基硫基，或者視需要經取代的苯基硫基； R^h 係為：視需要經取代的烷基，視需要經取代的環烷基，視需要經取代的苯基，視需要經取代的雜芳基，視需要經取代的胺基，視需要經取代的烷氧基，或者視需要經取代的烷基硫基；或者 R^g 以及 R^h 一起與其所連接的 C 原子形成 5 至 7 員環系統； R^i 係為氫，視需要經取代的烷基，其前提係該取代不包含環系統，視需要經取代的胺基，視需要經取代的烷氧基，或者視需要經取代的烷基硫基； R^j 係為視需要經取代的烷基或者視需要經取代的環烷基； R^k 係為氫，視需要經取代的烷基，其前提係該取代不包含環系統，視需要經取代的胺基，或者視需要經取代的烷基硫基； R^L 係為視需要經取代的烷基，或者視

需要經取代的環烷基； R^m 係為氫，視需要經取代的烷基，視需要經取代的環烷基，視需要經取代的苯基，視需要經取代的雜芳基，或者視需要經取代的胺基； R^n 以及 R^o 係每一個獨立地為氫，視需要經取代的烷基或者視需要經取代的環烷基； Y 係為：鹵素，氰基，視需要經取代的烷基，視需要經取代的環烷基，視需要經取代的烯基，視需要經取代的炔基，視需要經取代的苯基，視需要經取代的雜芳基，視需要經取代的烷氧基，視需要經取代的烷基硫基，視需要經取代的烷基亞磺基，視需要經取代的烷基磺基，視需要經取代的二烷基磷基，或者視需要經取代的三烷基甲矽烷基； Z 係為： $(T)_m-(U)_n-V$ ；其中， m 係為 0 或 1 的整數； n 係為選自 0, 1, 2 以及 3 的整數，以及 $n \geq m$ ； T 係為氧或硫原子； U 係為 CR^wR^x ；每一個 R^w 係獨立地為氫，鹵素，羥基，視需要經取代的烷基，視需要經取代的烷氧基羰基，或者或者 ^{y} 其中每一個 R^y 係獨立地為視需要經取代的烷基或視需要經取代的烷基羰基；每一個 R^x 係獨立地為氫，鹵素，視需要經取代的烷基，或者 OR^z 其中每一個 R^z 係獨立地為視需要經取代的烷基；或者任何孳位 R^w 以及 R^x 一起形成選自側氧基， $OR=NOR^{ca}$ ，其中 R^{ca} 係為氫或者視需要經取代的烷基；或者任何孳位，相鄰或非相鄰 R^w 及/或 R^x 一起與其所連接的 C 原子以及任何插入原子形成視需要經取代的 3 至 6 員環；或者其中當至少一個 R^w 係為或者 ^{y} 且至少一個 R^x 係為 OR^z ，該 OR^y 以及 OR^z 基團一起與其所連接的 C 原子及任何插入原子形成視需要經取代的 5

至 6 員雜環狀環；V 係為 $C(O)R^{cb}$ ， $C(S)R^{cd}$ ， $C(=NR^{ce})R^{cf}$ ， $CHR^{cg}R^{ch}$ ， $CH(S[O]_pR^{ci})(S[O]_qR^{cj})$ ， $CR^{ck}R^{cl}R^{cm}$ ，或者 CH_2OOR^{cn} ； R^{cb} 係為氫，羥基，視需要經取代的烷氧基，視需要經取代的環烷氧基，視需要經取代的烷基硫基，或者視需要經取代的胺基； R^{cd} 係為視需要經取代的烷氧基，視需要經取代的環烷氧基，視需要經取代的烷基硫基，或者視需要經取代的胺基； R^{ce} 係為氫，視需要經取代的烷基，視需要經取代的烷氧基，視需要經取代的環烷氧基，或者視需要經取代的胺基； R^{cf} 係為氫，視需要經取代的烷氧基，視需要經取代的環烷氧基，視需要經取代的烷基硫基，或者視需要經取代的胺基； R^{cg} 以及 R^{ch} 係每一個獨立地為視需要經取代的烷氧基基團；或者 R^{cg} 以及 R^{ch} ，一起與其所連接的碳形成二氧雜環戊烷(dioxolane)或者二噁烷環，該環係視需要經取代的； R^{ci} 以及 R^{cj} 係每一個獨立地為視需要經取代的烷基基團；或者 R^{ci} 以及 R^{cj} 一起與其所連接的碳原子和硫原子形成視需要經取代的 5 至 6 員環；p 以及 q 係每一個獨立地為 0，1，或 2 的整數； R^{ck} ， R^{cl} ，以及 R^{cm} 係每一個獨立地為視需要經取代的烷氧基基團；或者 R^{ck} 以及 R^{cl} 以及 R^{cm} 一起與其連接的碳形成視需要經取代的三氧噁二環[2.2.2]辛烷環系統；以及 R^{cn} 係為氫或者視需要經取代的烷基羰基基團。

【實施方式】

本文所述的式(I)化合物可能以不同幾何或光學異構物

或不同互變異構物形式存在。可能存在一或多個對掌中心，其中在此情況下，式(I)化合物可能以純對映異構物，對映異構物混合物，純非對映異構物或非對映異構物混合物。分子內可能存在雙鍵，例如 C=C 或 C=N 鍵，其中在此情況下，式(I)化合物係以單一異構物或異構物混合物存在。可能存在互變異構作用中心。本發明涵蓋所有此類異構物以及互變異構物以及其所有比例的混合物，以及同位素形式，例如氘化化合物。

● 為了避免疑問，本文所採的"化合物"包括該化合物所有的鹽和 N-氧化物。

適宜的鹽包括那些與酸或鹼接觸所形成者。適宜的酸加成鹽包括那些與無機酸（例如氫氯酸、氫溴酸、硫酸、硝酸與磷酸）或有機羧酸（例如草酸、酒石酸、乳酸、丁酸、甲基苯甲酸、己酸與鄰苯二甲酸）或是磺酸（例如甲磺酸、苯磺酸與甲苯磺酸）之鹽。有機羧酸的其他例子包括有鹵代酸，例如三氟乙酸。

● 適宜的鹽亦包括那些與強鹼（例如金屬氫氧化物，特別是氫氧化鈉、氫氧化鉀或氫氧化鋰或四級氫氧化銨）以及那些與胺所形成者。

N-氧化物是三級胺的氧化形式或是含氮雜芳香化合物的氧化形式。N-氧化物在許多書籍當中有說明，舉例來說，說明於 Angelo Albini 與 Silvio Pietra 所著之 "Heterocyclic N-oxides," CRC Press, Boca Raton, Florida, 1991。

各烷基部分一單獨抑或是作為較大型基團（例如烷氧

基、烷氧基羰基、烷基羰基、烷基胺基羰基、二烷基胺基羰基等)的一部分一係為直鏈或支鏈且為，舉例來說，甲基、乙基、正丙基、正丁基、正戊基、正己基、異丙基、二級丁基、異丁基、三級丁基或新戊基。烷基基團係適宜為 C_1 至 C_{10} 烷基基團，但較佳為 C_1 - C_8 烷基基團，更佳為 C_1 - C_6 烷基基團，且最佳為 C_1 - C_4 烷基基團。

形成環或鏈的伸烷基、伸烯基及伸炔基基團可視需要的地進一步被一或多個鹵素、 C_1 - C_3 烷基及/或 C_1 - C_3 烷氧基基團取代。

若出現時，位在烷基部分（單獨抑或是作為較大型基團的一部分）上的視需要的取代基係包括下列當中的一或多者：鹵素、硝基、氰基、 C_{3-7} 環烷基（其本身係視需要的地被 C_{1-6} 烷基或鹵素取代）、 C_{5-7} 環烯基（其本身係視需要的地被 C_{1-6} 烷基或鹵素取代）、羥基、 C_1 - C_{10} 烷氧基、 C_1 - C_{10} 烷氧基(C_{1-10})烷氧基、三(C_{1-4})烷基甲矽烷基(C_{1-6})烷氧基、 C_{1-6} 烷氧基羰基(C_{1-10})烷氧基、 C_{1-10} 鹵烷氧基、芳基(C_{1-4})-烷氧基（其中芳基基團係經視需要的地取代）、 C_{3-7} 環烷基氧基（其中環烷基基團係視需要的地被 C_{1-6} 烷基或鹵素取代）、 C_{2-10} 烯基氧基、 C_{2-10} 炔基氧基、SH、 C_{1-10} 烷基硫基、 C_{1-10} 鹵烷基硫基、芳基(C_{1-4})烷基硫基（其中芳基基團係經視需要的地取代）、 C_{3-7} 環烷基硫基（其中環烷基基團係視需要的地被 C_{1-6} 烷基或鹵素取代）、三(C_{1-4})烷基甲矽烷基(C_{1-6})烷基硫基、芳基硫基（其中芳基基團係經視需要的地取代）、 C_{1-6} 烷基磺醯基、 C_{1-6} 鹵烷基磺醯基、 C_{1-6} 烷基亞

磺醯基、 C_{1-6} 鹵烷基亞磺醯基、芳基磺醯基（其中芳基基團可被視需要的地取代）、三(C_{1-4})烷基甲矽烷基、芳基二(C_{1-4})烷基甲矽烷基、(C_{1-4})烷基二芳基甲矽烷基、三芳基甲矽烷基、芳基(C_{1-4})烷基硫基(C_{1-4})烷基、芳氧基(C_{1-4})烷基、甲醯基、 C_{1-10} 烷基羰基、羥基羰基、 C_{1-10} 烷氧基羰基、胺基羰基、 C_{1-6} 烷基胺基羰基、二(C_{1-6} 烷基)胺基羰基、 $N-(C_{1-3}$ 烷基)- $N-(C_{1-3}$ 烷氧基)胺基羰基、 C_{1-6} 烷基羰基氧基、芳基羰基氧基（其中芳基基團係經視需要的地取代）、二(C_{1-6})烷基胺基羰基氧基、肟與肟醚，例如=NO 烷基、=NO 鹵烷基與=NO 芳基（其本身係經視需要的地取代）、芳基（其本身係經視需要的地取代）、雜芳基（其本身係經視需要的地取代）、雜環基（其本身係視需要的地被 C_{1-6} 烷基或鹵素取代）、芳基氧基（其中芳基基團係經視需要的地取代）、雜芳基氧基、（其中雜芳基基團係經視需要的地取代）、雜環基氧基（其中雜環基基團係視需要的地被 C_{1-6} 烷基或鹵素取代）、胺基、 C_{1-6} 烷基胺基、二(C_{1-6})烷基胺基、 C_{1-6} 烷基羰基胺基、 $N-(C_{1-6})$ 烷基羰基- $N-(C_{1-6})$ 烷基胺基、 C_{2-6} 烯基羰基、 C_{2-6} 炔基羰基、 C_{3-6} 烯基氧基羰基、 C_{3-6} 炔基氧基羰基、芳基氧基羰基（其中芳基基團係經視需要的地取代）及芳基羰基（其中芳基基團係經視需要的地取代）。

烯基與炔基部分可為直鏈或支鏈形式，而烯基部分一適當的話—可呈（E）-或（Z）-構形。例子有乙烯基、烯丙基與炔丙基。烯基與炔基部分可含有呈任何組合之一或多個雙鍵及/或參鍵。可理解到的是丙二烯基與炔基烯基係包

括在該等用詞內。

若出現時，位在烯基或炔基上的視需要的取代基係包括該等上文提及烷基部分時所給定的視需要的取代基。

在本說明書上下文中，鹼基為經視需要的地取代之 C_{1-6} 烷基羰基（舉例來說：乙鹼基）、經視需要的地取代之 C_{2-6} 烯基羰基、經視需要的地取代之 C_{3-6} 環烷基羰基（舉例來說：環丙烷基羰基、經視需要的地取代之 C_{2-6} 炔基羰基、經視需要的地取代之芳基羰基（舉例來說：苯甲鹼基）或是經視需要的地取代之雜芳基羰基。

鹵素為氟、氯、溴或碘。

鹵烷基是被一或多個相同或不同的鹵素原子取代的烷基且為，舉例來說， CF_3 、 CF_2Cl 、 CF_2H 、 CCl_2H 、 FCH_2 、 $ClCH_2$ 、 $BrCH_2$ 、 CH_3CHF 、 $(CH_3)_2CF$ 、 CF_3CH_2 或 CHF_2CH_2 。

在本說明書中，環系統可為飽和，不飽和或芳香族，且亦可為稠合、螺或橋接系統。在本說明書上下文中，“芳基”、“芳環”及“芳環系統”等用詞指的是可為單-、二-或是三環的環系統。該類環的例子包括了苯基、萘基、蒽基、茚基或菲基。較佳的芳基基團是苯基。此外，“雜芳基”、“雜芳環”或是“雜芳環系統”等用詞指的是含有至少一個雜原子並由單一環構成抑或由二或多個稠合環構成的芳環系統。較佳地，單一環係含有至多三個而雙環系統係含有至多四個較佳選自於氮、氧與硫的雜原子。該類基團的例子包括有呋喃基、噻吩基、吡咯基、吡唑基、咪唑基、1,2,3-三唑基、1,2,4-三唑基、噁唑基、異噁唑基、噻唑基、異噻

唑基、1,2,3-噁二唑基、1,2,4-噁二唑基、1,3,4-噁二唑基、1,2,5-噁二唑基、1,2,3-噻二唑基、1,2,4-噻二唑基、1,3,4-噻二唑基、1,2,5-噻二唑基、吡啶基、嘧啶基、噻吩基、吡吩基、1,2,3-三吩基、1,2,4-三吩基、1,3,5-三吩基、苯并呋喃基、苯并異呋喃基、苯并噻吩基、苯并異噻吩基、吡啶基、異吡啶基、吡唑基、苯并噻唑基、苯并異噻唑基、苯并噁唑基、苯并異噁唑基、苯并咪唑基、2,1,3-苯并噁二唑、喹啉基、異喹啉基、噌啉基、吡吩基、喹啉基、喹喔啉基、蔡啶基、苯并三吩基、嘌呤基、喋啶基以及吡吩基。雜芳基的較佳例子係包括吡啶基、嘧啶基、三吩基、噻吩基、呋喃基、噁唑基、異噁唑基、2,1,3-苯并噁二唑及噻唑基。

雜環與雜環基等用詞指的是含有至多 10 個原子的非芳族單環或雙環系統，其包括一或多個（較佳為一或二個）選自於 O、S 與 N 的雜原子。該類環的例子包括 1,3-二氧噻雜環戊烷、氧雜環丁烷、四氫呋喃、嗎啉、硫代嗎啉及哌啶。

若為雜芳香或雜環狀環中包含硫為雜原子者，硫原子亦可為單氧化物或二氧化物形式。

若出現時，位在雜環基上的視需要的取代基係包括 C₁₋₆ 烷基與 C₁₋₆ 鹵烷基，側氧基(容許環中的一個碳原子為酮基團形式)以及該等上文提及烷基部分時所給定的視需要的取代基。

環烷基係包括環丙基、環丁基、環戊基和環己基。環

烷基烷基較佳為環丙基甲基。環烯基包括環戊烯基和環己烯基。

若出現時，位在環烷基或環烯基上的視需要的取代基係包括 C_{1-3} 烷基以及該等上文提及烷基部分時所給定的視需要的取代基。

碳環包括了芳基、環烷基及環烯基基團。

若出現時，位在芳基或雜芳基上的視需要的取代基係分別選自於鹵素、硝基、氰基、 C_{1-6} 烷基、 C_{1-6} 鹵烷基、 C_{1-6} 烷氧基-(C_{1-6})烷基、 C_{2-6} 烯基、 C_{2-6} 鹵烯基、 C_{2-6} 炔基、 C_{3-7} 環烷基（其本身係視需要的地被 C_{1-6} 烷基或鹵素取代）、 C_{5-7} 環烯基（其本身係視需要的地被 C_{1-6} 烷基或鹵素取代）、羥基、 C_{1-10} 烷氧基、 C_{1-10} 烷氧基(C_{1-10})烷氧基、三(C_{1-4})烷基-甲矽烷基(C_{1-6})烷氧基、 C_{1-6} 烷氧基羰基(C_{1-10})烷氧基、 C_{1-10} 鹵烷氧基、芳基(C_{1-4})烷氧基（其中芳基基團係視需要的地被鹵素或 C_{1-6} 烷基取代）、 C_{3-7} 環烷基氧基（其中環烷基基團係視需要的地被 C_{1-6} 烷基或鹵素取代）、 C_{2-10} 烯基氧基、 C_{2-10} 炔基氧基、SH、 C_{1-10} 烷基硫基、 C_{1-10} 鹵烷基硫基、芳基(C_{1-4})烷基硫基 C_{3-7} 環烷基硫基（其中環烷基基團係視需要的地被 C_{1-6} 烷基或鹵素取代）、三(C_{1-4})-烷基甲矽烷基(C_{1-6})烷基硫基、芳基硫基、 C_{1-6} 烷基磺醯基、 C_{1-6} 鹵烷基磺醯基、 C_{1-6} 烷基亞磺醯基、 C_{1-6} 鹵烷基亞磺醯基、芳基磺醯基、 C_{1-10} 烷基羰基、羥基羰基、 C_{1-10} 烷氧基羰基、胺基羰基、 C_{1-6} 烷基胺基羰基、二(C_{1-6} 烷基)-胺基羰基、N-(C_{1-3} 烷基)-N-(C_{1-3} 烷氧基)胺基羰基、 C_{1-6} 烷基羰基氧

基、芳基羰基氧基、(C₁₋₆)烷基胺基-羰基氧基、二(C₁₋₆)烷基胺基-羰基氧基、芳基（其本身係視需要的地被 C₁₋₆ 烷基或鹵素取代）、雜芳基（其本身係視需要的地被 C₁₋₆ 烷基或鹵素取代）、雜環基（其本身係視需要的地被 C₁₋₆ 烷基或鹵素取代）、芳基氧基（其中其中芳基基團係視需要的地被 C₁₋₆ 烷基或鹵素取代）、雜芳基氧基（其中雜芳基基團係視需要的地被 C₁₋₆ 烷基或鹵素取代）、雜環基氧基（其中雜環基基團係視需要的地被 C₁₋₆ 烷基或鹵素取代）、胺基、C₁₋₆ 烷基胺基、二(C₁₋₆)烷基胺基、C₁₋₆ 烷基羰基胺基、N-(C₁₋₆)烷基羰基-N-(C₁₋₆)烷基胺基、芳基羰基、（其中芳基基團本身係視需要的地被鹵素或 C₁₋₆ 烷基取代）或者位在芳基或雜芳基系統上的兩毗鄰位置可環化以形成一個 5、6 或是 7 員碳環或雜環，該環本身係視需要的地被鹵素或 C₁₋₆ 烷基取代。就芳基或雜芳基而言的其他取代基係包括芳基羰基胺基（其中芳基基團係被 C₁₋₆ 烷基或是鹵素取代）、(C₁₋₆)烷基氧基羰基胺基(C₁₋₆)烷基氧基羰基-N-(C₁₋₆)

烷基胺基、芳基氧基羰基胺基（其中芳基基團係被 C₁₋₆ 烷基或是鹵素取代）、芳基氧基羰基-N-(C₁₋₆)烷基胺基（其中芳基基團係被 C₁₋₆ 烷基或是鹵素取代）、芳基磺醯基胺基（其中芳基基團係被 C₁₋₆ 烷基或是鹵素取代）、芳基磺醯基-N-(C₁₋₆)烷基胺基（其中芳基基團被 C₁₋₆ 烷基或鹵素取代）、芳基-N-(C₁₋₆)烷基胺基（其中芳基基團係被 C₁₋₆ 烷基或是鹵素取代）、芳基胺基（其中芳基基團係被 C₁₋₆ 烷基或是鹵素取代）、雜芳基胺基（其中雜芳基基團係被 C₁₋₆

烷基或是鹵素取代)、雜環基胺基(其中雜環基基團係被 C_{1-6} 烷基或是鹵素取代)、胺基羰基胺基、 C_{1-6} 烷基胺基羰基胺基、二(C_{1-6})烷基胺基羰基胺基、芳基胺基羰基胺基(其中芳基基團係被 C_{1-6} 烷基或是鹵素取代)、芳基-N-(C_{1-6})烷基胺基羰基胺基(其中芳基基團係被 C_{1-6} 烷基或是鹵素取代)、 C_{1-6} 烷基胺基羰基-N-(C_{1-6})烷基胺基、二(C_{1-6})烷基胺基羰基-N-(C_{1-6})烷基胺基、芳基胺基羰基-N-(C_{1-6})烷基胺基(其中芳基基團係被 C_{1-6} 烷基或是鹵素取代)以及芳基-N-(C_{1-6})烷基胺基羰基-N-(C_{1-6})烷基胺基(其中芳基基團係被 C_{1-6} 烷基或是鹵素取代)。

對經取代的苯基部分，雜環基以及雜芳基基團而言，較佳者，一或多個取代基係獨立地選自鹵素， C_{1-6} 烷基， C_{1-6} 鹵烷基， C_{1-6} 烷氧基(C_{1-6})烷基， C_{1-6} 烷氧基， C_{1-6} 鹵烷氧基， C_{1-6} 烷基硫基， C_{1-6} 鹵烷基硫基， C_{1-6} 烷基亞磺基， C_{1-6} 鹵烷基亞磺基， C_{1-6} 烷基磺基， C_{1-6} 鹵烷基磺基， C_{2-6} 烯基， C_{2-6} 鹵烯基， C_{2-6} 炔基， C_{3-7} 環烷基，硝基，氰基， CO_2H ， C_{1-6} 烷基羰基， C_{1-6} 氧基羰基，芳基，雜芳基， C_{1-6} 烷基胺基，二(C_{1-6} 烷基)胺基， C_{1-6} 烷基胺基羰基，或二(C_{1-6} 烷基)胺基羰基。

鹵烯基基團是取代有一或多個相同或不同鹵素原子的烯基基團。

欲被理解的是二烷基胺基取代基係包括該等其中二烷基基團和其所連接的 N 原子共同形成一個五、六或七員雜環，該雜環可含有一或二個選自於 O、N 或 S 的其他雜原子

並可視需要的地被一或二個分別選定的(C₁₋₆)烷基基團所取代。當雜環係藉由使 N 原子上的兩基團聯接而形成時，則所生成的環係適宜為吡咯啉、哌啉、N-甲基哌啉、硫代嗎啉及嗎啉，其各別可被一或二個分別選定的(C₁₋₆)烷基基團取代。

本發明較佳具體實例中，A，X，Y，以及 Z 的較佳基團，以任何組合而言，係如以下所述。

如同以上所述，A 係為 5-或 6-員雜芳香族環，其包含 1 至 4 個雜原子且視需要經 1 至 4 個基團 R¹ 取代，其中該雜原子係選自 O，N 以及 S，其前提是該雜芳香族環僅包含一個 O 或者一個 S 原子。

較佳者，A 係為環系統，其係選自：噻吩，呋喃，吡咯，異噁唑，異噻唑，噁唑，噻唑，咪唑，吡唑，1，2，3-噁二唑，1，2，4-噁二唑，1，2，5-噁二唑，1，3，4-噁二唑，1，2，3-噻二唑，1，2，4-噻二唑，1，2，5-噻二唑，1，3，4-噻二唑，1，2，3-三唑，1，2，4-三唑，1，2，3，4-噁三唑，1，2，3，4-噻三唑，四唑，吡啶，嗒吡，嘧啶，吡嗪，1，2，3-三吡，1，2，4-三吡，1，3，5-三吡，以及 1，2，4，5-四吡，其中該環系統係視需要經 1 至 3 個基團 R¹ 取代。

更佳者，A 係為環系統，其係選自噻吩，呋喃，吡咯，異噁唑，異噻唑，噁唑，噻唑，咪唑，吡唑，1，2，4-噁二唑，1，3，4-噁二唑，1，2，4-噻二唑，1，3，4-噻二唑，1，2，3-三唑，1，2，4-三唑，吡啶，嗒吡，嘧啶，吡嗪，1，2，4-三吡，以及 1，3，5-三吡，其中該環系統係視需

要經 1 至 3 個基團 R^1 取代。

最佳者，A 係為環，其係選自：噻吩，噻唑，1, 2, 3-三唑，以及吡啶，其中該環係視需要經 1 至 3 個基團 R^1 取代。

每一個 R^1 係獨立地為：鹵素，氰基，硝基，疊氮，羥基，視需要經一或多個 R^a 取代的烷基，視需要經一或多個 R^b 取代的烯基，視需要經一或多個 R^c 取代的炔基，視需要經一或多個 R^d 取代的環烷基， OR^{aa} ， $S(O)_aR^{bb}$ ， $C(O)R^{cc}$ ， $NR^{dd}R^{ee}$ ， $SiR^{ff}R^{gg}R^{hh}$ ， $P(O)R^{ii}R^{jj}$ ，或者 $B(OR^{kk})(OR^{ll})$ ；或者 2 個相鄰 R^1 基團與其所連接的原子形成 5 至 7 員環，該環視需要地包含 1 或 2 個選自 O, S 以及 N 的雜原子且視需要經 1 至 4 個 R^3 基團取代。

較佳者，每一個 R^1 係獨立地為：鹵素；氰基；硝基；羥基；視需要經 1 至 4 個 R^a 基團取代的 C_{1-6} 烷基；視需要經 1 至 4 個 R^a 基團取代的 C_{1-6} 鹵烷基； OR^{aa} ； $S(O)_aR^{bb}$ ； $C(O)R^{cc}$ ；或者 $NR^{dd}R^{ee}$ ；或者 2 個相鄰基團 R^1 一起與其所連接的原子形成 5 至 6 員環，其視需要地包含 1 或 2 個選自 O, N 以及 S 的雜原子，該 5 至 6 員環係視需要經 1 至 4 個 R^3 基團取代。

更佳者，每一個 R^1 係獨立地為：鹵素，氰基， C_{1-4} 烷基， C_{1-4} 鹵烷基， C_{1-4} 烷氧基， C_{1-4} 鹵烷氧基，胺基， C_{1-4} 烷基胺基，二(C_{1-2} 烷基)胺基， C_{1-4} 烷基硫基，或者 C_{1-4} 鹵烷基硫基；或者 2 個相鄰 R^1 基團一起與其所連接的原子形成 6 員芳香族環，其視需要經 1 至 2 個獨立地選自鹵素，

氟基， C_{1-4} 烷基， C_{1-4} 鹵烷基， C_{1-4} 烷氧基， C_{1-4} 鹵烷氧基， C_{1-4} 烷基硫基，以及 C_{1-4} 鹵烷基硫基的基團所取代。

最佳者，每一個 R^1 係獨立地選自：鹵素，氟基， C_{1-2} 烷基， C_{1-2} 鹵烷基， C_{1-2} 烷氧基， C_{1-2} 鹵烷氧基，以及二(C_{1-2} 烷基)胺基；或者 2 個相鄰 R^1 基團與其所連接的原子形成 6 員芳香族環，其視需要經 1 至 2 個獨立地選自鹵素，氟基， C_{1-2} 烷基， C_{1-2} 鹵烷基， C_{1-2} 烷氧基，以及 C_{1-2} 鹵烷氧基取代。

每一個 R^3 係獨立地為：鹵素；氟基；硝基；羥基；視需要經一或多個 R^a 取代的烷基；視需要經一或多個 R^b 取代的烯基；視需要經一或多個 R^c 取代的炔基；視需要經一或多個 R^d 取代的環烷基； OR^{aa} ； $S(O)_aR^{bb}$ ； $C(O)R^{cc}$ ； $NR^{dd}R^{ee}$ ； $SiR^{ff}R^{gg}R^{hh}$ ； $P(O)R^{ii}R^{jj}$ ； $B(OR^{kk})(OR^{LL})$ ；或者任二個孿位基團 R^3 一起形成選自以下的基團：側氧基； $=CR^{mm}R^{nn}$ ， $=NOR^{oo}$ ，以及 $=NNR^{pp}R^{qq}$ 。

較佳者，每一個 R^3 係獨立地為：鹵素；氟基；硝基；羥基；視需要經 1 至 4 個 R^a 基團取代的 C_{1-6} 烷基；視需要經 1 至 4 個 R^a 基團取代的 C_{1-6} 鹵烷基； OR^{aa} ； $S(O)_aR^{bb}$ ； $C(O)R^{cc}$ ； $NR^{dd}R^{ee}$ ；或者任二個孿位基團 R^3 一起形成選自以下的基團：側氧基， $=CR^{mm}R^{nn}$ ， $=NOR^{oo}$ ，以及 $=NNR^{pp}R^{qq}$ ；

每一個 R^a 係獨立地為：鹵素；氟基；硝基；羥基；環烷基； OR^{aa} ； $S(O)_aR^{bb}$ ； $C(O)R^{cc}$ ；或者 $NR^{dd}R^{ee}$ 。

較佳者，每一個 R^a 係獨立地為：氟基，羥基， C_{3-6} 環烷基， OR^{aa} ， $S(O)_aR^{bb}$ ， $C(O)R^{cc}$ ，或者 $NR^{dd}R^{ee}$ 。

每一 R^b 係獨立地為：鹵素；氰基；硝基；羥基；烷氧基； $S(O)_2R^{bb}$ ； $C(O)R^{cc}$ ；或者 $P(O)R^{ii}R^{jj}$ 。

每一個 R^c 係獨立地為：鹵素；氰基；烷氧基； $S(O)_2R^{bb}$ ； $C(O)R^{cc}$ ；或者 $SiR^{ff}R^{gg}R^{hh}$ 。

每一個 R^d 係獨立地為：鹵素；氰基；硝基；羥基；烷基；烯基；炔基；環烷基；烷氧基； $S(O)_aR^{bb}$ ；或者 $C(O)R^{cc}$ 。

每一個 R^{aa} 係獨立地為：烷基，鹵烷基，烷氧基烷基，環烷基烷基，烯基，鹵烯基，炔基，鹵炔基，環烷基，烷基羰基，鹵烷基羰基，烷氧基羰基，鹵烷氧基羰基，烷基磺醯基，鹵烷基磺醯基，胺基羰基，烷基胺基羰基，二烷基胺基羰基，烷基亞胺基，或者二烷基亞胺基。

較佳者，每一個 R^{aa} 係獨立地為： C_{1-6} 烷基， C_{1-6} 鹵烷基， C_{2-8} 烷氧基烷基，或者 C_{1-6} 烷基羰基；

a 係為選自 0、1 以及 2 的整數。

每一個 R^{bb} 係獨立地為烷基，鹵烷基，烷氧基烷基，烯基，鹵烯基，炔基，鹵炔基，環烷基，或者烷基羰基胺基。

較佳者，每一個 R^{bb} 係獨立地為： C_{1-6} 烷基， C_{1-6} 鹵烷基， C_{2-6} 烯基， C_{2-6} 炔基， C_{3-6} 環烷基，或者 C_{1-6} 烷基羰基胺基。

每一個 R^{cc} 係獨立地為氫，羥基，烷基，鹵烷基，烷氧基烷基，烯基，鹵烯基，炔基，鹵炔基，環烷基，烷氧基，鹵烷氧基，烷氧基烷氧基，芳基烷氧基，環烷氧基，胺基，烷基胺基，二烷基胺基，或者烷基磺醯基胺基。

較佳者，每一個 R^{cc} 係獨立地為：氫，羥基， C_{1-6} 烷基， C_{1-6} 鹵烷基， C_{3-6} 環烷基， C_{1-6} 烷氧基，苯基(C_{1-6})烷氧基，

C_{3-6} 環烷氧基，胺基， C_{1-6} 烷基胺基，二(C_{1-4})烷基胺基(在本文中亦稱為 C_{2-8} 二烷基胺基)，或者 C_{1-6} 烷基磺醯基胺基。

R^{dd} 係為氫，烷基，鹵烷基，烷氧基烷基，烯基，鹵烯基，炔基，鹵炔基，環烷基，烷基羰基，鹵烷基羰基，烷氧基羰基，鹵烷氧基羰基，烷基磺醯基，鹵烷基磺醯基，胺基羰基，烷基胺基羰基，或者二烷基胺基羰基。

R^{ee} 係為氫，烷基，鹵烷基，烷氧基烷基，烯基，鹵烯基，炔基，鹵炔基，或者環烷基。

或者 R^{dd} 以及 R^{ee} ，一起與其所連接的 N 原子形成 4 至 6 員環，其視需要地包含選自 O, N 以及 S 的雜原子，該環係視需要地 1 至 4 個選自以下的基團所取代：鹵素，烷基，烷氧基，烷基羰基，烷氧基羰基，以及側氧基。

較佳者， R^{dd} 係為氫， C_{1-6} 烷基， C_{1-6} 烷基羰基， C_{2-6} 烷氧基羰基， C_{1-6} 烷基磺醯基， C_{1-6} 鹵烷基磺醯基，胺基羰基， C_{1-6} 烷基胺基羰基，或者 C_{2-8} 二烷基胺基羰基(本文中亦稱為二(C_{1-4})烷基胺基羰基)。

較佳者，每一個 R^{ee} 係獨立地為：氫， C_{1-6} 烷基，或者 C_{3-6} 環烷基；或者 R^{dd} 以及 R^{ee} ，一起與其所連接的 N 原子形成 5-或 6-員飽和環，其視需要地包含另一個選自 O, N 以及 S 的雜原子，該環係視需要經 1 或 2 個 C_{1-6} 烷基或者側氧基基團所取代。

R^{ff} ， R^{gg} 以及 R^{hh} 係每一個獨立地為烷基或者鹵烷基。 R^{ii} 係為烷基，鹵烷基，烷氧基，或者鹵烷氧基。 R^{jj} 係為烷氧基或者鹵烷氧基。 R^{kk} 以及 R^{ll} 係每一個獨立地為氫或者

烷基；或者 R^{kk} 以及 R^{LL} 一起與其所連接的 O 原子以及 B 原子形成 5-或 6-員雜環狀環，其視需要經 1 至 4 個烷基基團所取代。

R^{mm} 係為氫，鹵素，氰基，硝基，烷基，鹵烷基，烷氧基烷基，環烷基，烷基羰基，鹵烷基羰基，烷氧基羰基，鹵烷氧基羰基，烷基磺醯基，鹵烷基磺醯基，胺基羰基，烷基胺基羰基，或者二烷基胺基羰基。

較佳者，每一個 R^{mm} 係獨立地為：氫，鹵素，氰基，硝基， C_{1-6} 烷基， C_{3-6} 環烷基， C_{1-6} 烷基羰基， C_{1-6} 烷氧基羰基， C_{1-6} 烷基磺醯基，或者胺基羰基。

R^{nn} 係為氫，鹵素，氰基，硝基，烷基，鹵烷基，烷基羰基，鹵烷基羰基，烷氧基羰基，鹵烷氧基羰基，烷基磺醯基，鹵烷基磺醯基，胺基羰基，烷基胺基羰基，或者二烷基胺基羰基。

較佳者，每一個 R^{nn} 係獨立地為：氫，鹵素，氰基，硝基， C_{1-6} 烷基， C_{1-6} 烷基羰基， C_{1-6} 烷氧基羰基， C_{1-6} 烷基磺醯基，或者胺基羰基。

R^{oo} 係為氫，烷基，鹵烷基，烷氧基烷基，環烷基，烷基羰基，鹵烷基羰基，烷氧基羰基，鹵烷氧基羰基，胺基羰基，烷基胺基羰基，或者二烷基胺基羰基。較佳者，每一個 R^{oo} 係獨立地為氫， C_{1-6} 烷基，或者 C_{3-6} 環烷基。

R^{pp} 係為氫，烷基，鹵烷基，烷氧基烷基，或者環烷基。

R^{qq} 係為氫，烷基，鹵烷基，烷基羰基，鹵烷基羰基，烷氧基羰基，胺基羰基，烷基胺基羰基，或者二烷基胺基

羰基，或者 R^{pp} 以及 R^{qq} 一起與其所連接者形成 5-或 6-員且視需要經取代的環，該環視需要地包含另外選自氧、硫以及氮的雜原子，該取代係獨立地選自鹵素以及烷基。

較佳者，每一個 R^{pp} 係獨立地為氫， C_{1-6} 烷基，或者 C_{3-6} 環烷基。

較佳者，每一個 R^{qq} 係獨立地為氫或者 C_{1-6} 烷基。

如同本文中所定義者，X 係為硝基，疊氮，鹵素，視需要經取代的烷氧基，視需要經取代的胺基氧基，或者 NR^5R^6 。較佳者，X 係為 NR^5R^6 或者鹵素。更佳者，X 係為 NR^5R^6 。最佳者，X 係為胺基。

R^5 係為氫，視需要經取代的烷基，其前提是該取代不包含環系統，甲醯基，視需要經取代的烷基羰基，其前提是該取代不包含芳基部分，視需要經取代的環烷基羰基，視需要經取代的烯基羰基，視需要經取代的炔基羰基，視需要經取代的苯基羰基，視需要經取代的雜芳基羰基，視需要經取代的胺基羰基，視需要經取代的烷氧基羰基，視需要經取代的烷基磺醯基，視需要經取代的環烷基磺醯基，視需要經取代的烯基磺醯基，視需要經取代的炔基磺醯基，視需要經取代的苯基磺醯基，視需要經取代的胺基，羥基，視需要經取代的烷氧基，視需要經取代的環烷氧基，視需要經取代的烷基羰基氧基，視需要經取代的烷氧基羰基氧基，視需要經取代的胺基羰基氧基，視需要經取代的烯基，其前提是該取代不包含環系統，視需要經取代的炔基，其前提是該取代不包含環系統， $N=CR^gR^h$ ，氰基，視需

要經取代的甲矽烷基，或者視需要經取代的膦鹽基。

R^6 係為氫，視需要經取代的烷基，其前提是該取代不包含環系統，視需要經取代的烯基，其前提是該取代不包含環系統，或者視需要經取代的炔基，其前提是該取代不包含環系統；或者 R^5 以及 R^6 一起形成基團 $=C(R^i)OR^j$ ， $=C(R^k)SR^L$ ，或者 $=C(R^m)NR^nR^o$ ；或者 R^5 以及 R^6 一起與其所連接的 N 原子形成 3 至 8 員視需要經取代的環系統，該環系統視需要地包含 1 至 3 個另外獨立地選自 O，S 以及 N 的雜原子。

較佳者， R^5 係為：氫；視需要經一或多個 R^p 取代的烷基；視需要經一或多個 R^t 取代的烯基；視需要經一或多個 R^u 基團取代的炔基； OR^{rr} ； SO_2R^{ss} ； $C(O)R^{uu}$ ； $NR^{vv}R^{ww}$ ； $N=CR^gR^h$ ；氰基；三烷基甲矽烷基；或者二烷基膦鹽基。

更佳者， R^5 係為：氫；視需要經 1 至 4 個基團 R^p 取代的 C_{1-6} 烷基；視需要經 1 至 4 個基團 R^p 取代的 C_{1-6} 鹵烷基； SO_2R^{ss} ；或者 $C(O)R^{uu}$ 。

最佳者， R^5 係為：氫；視需要經 1 至 2 個基團 R^p 取代的 C_{1-4} 烷基；視需要經 1 至 2 個基團 R^p 取代的 C_{1-4} 鹵烷基； SO_2R^{ss} ；者 $C(O)R^{uu}$ 。

在較佳具體實例中， R^6 係為氫，視需要經一或多個 R^p 取代的烷基，視需要經一或多個 R^t 取代的烯基，或者視需要經一或多個基團 R^u 取代的炔基；或者 R^5 以及 R^6 一起形成基團 $=C(R^i)OR^j$ ， $=C(R^k)SR^L$ ， $=C(R^m)NR^nR^o$ ；或者 R^5 以及 R^6 一起與其所連接的 N 原子形成 3 至 8 員環系統，該環

系統視需要地包含 1 至 3 個另外獨立地選自 O, N 以及 S 的雜原子且該環系統係視需要經 1 至 4 個基團 R^v 取代。

在更佳具體實例中， R^6 係為氫；視需要經 1 至 4 個基團 R^p 取代的 C_{1-6} 烷基；或者視需要經 1 至 4 個基團 R^p 取代的 C_{1-6} 鹵烷基；或者 R^5 以及 R^6 一起與其所連接的 N 原子形成 3 至 8 員環系統，該環系統視需要地包含 1 或 2 個另外獨立地的選自 O, N 以及 S 的雜原子且視需要經 1 至 2 個基團 R^v 取代；或者 R^5 以及 R^6 一起形成基團 $=C(R^i)OR^j$ ， $=C(R^k)SR^L$ ，或者 $=C(R^m)NR^nR^o$ 。

在最佳具體實例中， R^6 係為：氫；視需要經 1 至 2 個基團 R^p 取代的 C_{1-4} 烷基；或者視需要經 1 至 2 個基團 R^p 取代的 C_{1-4} 鹵烷基；或者 R^5 以及 R^6 一起與其所連接的 N 原子形成 4 至 6 員環系統，該環系統係視需要地包含 1 個另外選自 O, S 以及 N 的雜原子且視需要經 1 至 2 個基團 R^v 取代；或者 R^5 以及 R^6 一起形成選自以下的基團： $=C(R^i)OR^j$ ， $=C(R^k)SR^L$ ，以及 $=C(R^m)NR^nR^o$ 。

R^g 係為：氫，視需要經取代的烷基，視需要經取代的環烷基，視需要經取代的苯基，視需要經取代的雜芳基，視需要經取代的胺基，視需要經取代的烷氧基，視需要經取代的苯氧基，視需要經取代的烷基硫基，或者視需要經取代的苯基硫基。

R^h 係為：視需要經取代的烷基，視需要經取代的環烷基，視需要經取代的苯基，視需要經取代的雜芳基，視需要經取代的胺基，視需要經取代的烷氧基，或者視需要經

取代的烷基硫基。可替代的， R^g 以及 R^h 一起與其所連接的 C 原子形成視需要經取代的 5 至 7 員環系統。

較佳者， R^g 以及 R^h 係每一個獨立地為：氫；視需要經一或多個 R^{xx} 取代的烷基；經一或多個 R^{yy} 取代的環烷基；經一或多個 R^{zz} 取代的苯基；經一或多個 R^{ab} 取代的雜芳基； $NR^{ac}R^{ad}$ ； OR^{ae} ；或者 SR^{af} ；或者 R^g 以及 R^h 一起與其所連接的 C 原子形成 5 至 7 員環系統，其視需要經 1 至 4 個基團 R^{ag} 取代。

R^i 係為氫，視需要經取代的烷基，其前提是該取代不包含環系統，視需要經取代的胺基，視需要經取代的烷氧基，或者視需要經取代的烷基硫基；

較佳者， R^i 係為：氫；視需要經一或多個 R^{xx} 取代的烷基； $NR^{ac}R^{ad}$ ； OR^{ae} ；或者 SR^{af} 。更佳者， R^i 係為：氫；視需要經 1 至 4 個基團 R^{xx} 取代的 C_{1-4} 烷基；視需要經 1 至 4 個基團 R^{xx} 取代的 C_{1-4} 鹵烷基； C_{1-4} 烷氧基， C_{1-4} 烷基硫基；或者 $NR^{ac}R^{ad}$ 。最佳者， R^i 係為氫， C_{1-4} 烷基， C_{1-4} 烷氧基， C_{1-4} 烷基硫基，或者 $NR^{ac}R^{ad}$ 。

R^j 係為視需要經取代的烷基或者視需要經取代的環烷基。較佳者， R^j 係為視需要經一或多個 R^{ah} 取代的烷基或者經一或多個 R^{ai} 取代的環烷基。更佳者， R^j 係為 C_{1-4} 烷基，或者 C_{1-4} 鹵烷基，且最佳者， R^j 係為 C_{1-4} 烷基。

R^k 係為氫，視需要經取代的烷基，其前提是該取代不包含環系統，視需要經取代的胺基，或者視需要經取代的烷基硫基。較佳者， R^k 係為：氫；視需要經一或多個 R^{xx}

取代的烷基； $\text{NR}^{\text{ac}}\text{R}^{\text{ad}}$ ；或者 SR^{af} 。更佳者， R^{k} 係為：氫；視需要經 1 至 4 個基團 R^{xx} 取代的 C_{1-4} 烷基；視需要經 1 至 4 個基團 R^{xx} 取代的 C_{1-4} 鹵烷基； C_{1-4} 烷基硫基；或者 $\text{NR}^{\text{ac}}\text{R}^{\text{ad}}$ 。最佳者， R^{k} 係為氫， C_{1-4} 烷基， C_{1-4} 烷基硫基，或者 $\text{NR}^{\text{ac}}\text{R}^{\text{ad}}$ 。

R^{L} 係為視需要經取代的烷基，或者視需要經取代的環烷基。較佳者， R^{L} 係為視需要經一或多個 R^{ah} 取代的烷基或者視需要經一或多個 R^{ai} 取代的環烷基。更佳者， R^{L} 係為 C_{1-4} 烷基，或者 C_{1-4} 鹵烷基。最佳者， R^{L} 係為 C_{1-4} 烷基。

R^{m} 係為氫，視需要經取代的烷基，視需要經取代的環烷基，視需要經取代的苯基，視需要經取代的雜芳基，或者視需要經取代的胺基。較佳者， R^{m} 係為：氫；視需要經一或多個 R^{xx} 取代的烷基；視需要經一或多個 R^{yy} 取代的環烷基；視需要經一或多個 R^{zz} 取代的苯基；經一或多個 R^{ab} 取代的雜芳基；或者 $\text{NR}^{\text{ac}}\text{R}^{\text{ad}}$ 。更佳者， R^{m} 係為：氫；視需要經 1 至 4 個基團 R^{xx} 取代的 C_{1-4} 烷基；視需要經 1 至 4 個基團 R^{xx} 取代的 C_{1-4} 鹵烷基；視需要經 1 至 4 個基團 R^{yy} 取代的 C_{3-6} 環烷基；視需要經 1 至 3 個基團 R^{zz} 取代的苯基；或者 $\text{NR}^{\text{ac}}\text{R}^{\text{ad}}$ 。最佳者， R^{m} 係為氫， C_{1-4} 烷基， C_{3-6} 環烷基，苯基，或者 $\text{NR}^{\text{ac}}\text{R}^{\text{ad}}$ 。

R^{n} 以及 R^{o} 係每一個獨立地為氫，視需要經取代的烷基或者視需要經取代的環烷基。較佳者， R^{n} 以及 R^{o} 係每一個獨立地為氫，視需要經一或多個 R^{ah} 取代的烷基，或者視需要經一或多個 R^{ai} 取代的環烷基。更佳者， R^{n} 以及 R^{o} 係每

一個獨立地為氫， C_{1-4} 烷基，或者 C_{1-4} 鹵烷基。最佳者， R^n 以及 R^o 係每一個獨立地為氫，或者 C_{1-4} 烷基。

R^p 係為鹵素，氰基，硝基，羥基，烷氧基，烷氧基烷氧基， $S(O)_bR^{am}$ ， $C(O)R^{an}$ ，或者 $NR^{ao}R^{ap}$ 。較佳者， R^p 係為鹵素，氰基，羥基， C_{1-4} 烷氧基，或者 C_{2-8} 烷氧基烷氧基。更佳者， R^p 係為鹵素，羥基，或者 C_{1-4} 烷氧基。

R^t 係為鹵素，氰基，或者烷氧基羰基。

R^u 係為鹵素，氰基，烷氧基，或者烷氧基羰基；

每一個 R^v 係獨立地為：鹵素；氰基；硝基；羥基；烷基視需要經一或多個取代 R^{aq} ；視需要經一或多個 R^{ar} 取代的烯基；視需要經一或多個 R^{as} 取代的炔基；經一或多個 R^{at} 取代的環烷基； OR^{al} ； $S(O)_bR^{am}$ ； $C(O)R^{an}$ ；或者 $NR^{au}R^{av}$ ；或者任二個孿位基團 R^v 一起形成側氧基基團。較佳者，每一個 R^v 係獨立地為：鹵素；氰基；羥基； C_{1-4} 烷基； C_{1-4} 鹵烷基； C_{2-8} 烷氧基烷基；視需要經一或多個 R^{ar} 取代的 C_{2-4} 烯基； C_{1-4} 烷氧基； C_{1-4} 鹵烷氧基； C_{1-4} 烷基磺醯基； C_{1-4} 鹵烷基磺醯基；或者 $C(O)R^{an}$ ；或者任二個孿位基團 R^v 一起形成側氧基基團。最佳者，每一個 R^v 係獨立地為鹵素，或者 C_{1-4} 烷基；

每一個 R^{rr} 係為氫，烷基，鹵烷基，環烷基，烷基羰基，鹵烷基羰基，烷氧基羰基，胺基羰基，烷基胺基羰基，二烷基胺基羰基，或者視需要經一或多個 R^{zz} 基團取代的苯基。

每一個 R^{ss} 係為烷基，鹵烷基，烯基，鹵烯基，炔基，

鹵炔基，環烷基，或者視需要經一或多個 R^{zz} 基團取代的苯基。較佳者， R^{ss} 係為 C_{1-4} 烷基，視需要經 1 至 3 個基團 R^{zz} 取代的苯基，或者 C_{1-4} 鹵烷基。更佳者， R^{ss} 係為 C_{1-4} 烷基，或者視需要經 1 至 3 個基團 R^{zz} 取代的苯基。

每一個 R^{uu} 係為：氫；視需要經一或多個 R^{xx} 取代的烷基；視需要經一或多個 R^{yy} 取代的環烷基；視需要經一或多個 R^{zz} 取代的苯基；視需要經一或多個 R^{ab} 取代雜芳基； $NR^{ac}R^{ad}$ 雜芳基；或者 OR^{ae} 。較佳者， R^{uu} 係為：氫；視需要經 1 至 4 個基團 R^{xx} 取代的 C_{1-4} 烷基；視需要經 1 至 4 個基團 R^{xx} 取代的 C_{1-4} 鹵烷基；視需要經 1 至 4 個基團 R^{yy} 取代的 C_{3-6} 環烷基，視需要經 1 至 3 個基團 R^{zz} 取代的苯基；視需要經 1 至 3 個基團 R^{ab} 取代的雜芳基； $NR^{ac}R^{ad}$ ；或者 OR^{ae} 。更佳者， R^{uu} 係為： C_{1-4} 烷基；視需要經 1 至 3 個基團 R^{zz} 取代的苯基； C_{1-4} 烷氧基；或者 $NR^{ac}R^{ad}$ 。

每一個 R^{vv} 係獨立地為：氫；視需要經一或多個 R^{xx} 取代的烷基；視需要經一或多個 R^{yy} 取代的環烷基；視需要經一或多個 R^{zz} 取代的苯基；視需要經一或多個 R^{ab} 取代的雜芳基； SO_2R^{ss} ；或者 $C(O)R^{uu}$ 。

每一個 R^{ww} 係獨立地為：氫，視需要經一或多個 R^{xx} 取代的烷基；視需要經一或多個 R^{yy} 取代的環烷基；視需要經一或多個 R^{zz} 取代的苯基；或者視需要經一或多個 R^{ab} 取代雜的芳基；或者 R^{vv} 以及 R^{ww} 一起與其所連接的 N 原子形成 5 至 6 員環，該環視需要地包含另一個選自 O，S 以及 N 的雜原子且視需要經 1 至 2 個選自烷基以及烷基羰基基團

取代。

每一個 R^{xx} 係獨立地為鹵素，氰基，烷氧基，或者烷氧基羰基。較佳者，每一個 R^{xx} 係獨立地為氰基， C_{1-4} 烷氧基，或者 C_{1-4} 烷氧基羰基。

每一個 R^{yy} 係獨立地為：鹵素；氰基；烷基；環烷基；視需要經一或多個 R^{zz} 取代的苯基；視需要經一或多個 R^{ab} 取代的雜芳基；或者烷氧基羰基。較佳者，每一個 R^{yy} 係獨立地為鹵素，氰基或者 C_{1-4} 烷基。

每一個 R^{zz} 係獨立地為：鹵素；氰基；硝基；羥基；視需要經一或多個 R^{aq} 取代的烷基；視需要經一或多個 R^{ar} 取代的烯基，視需要經一或多個 R^{as} 取代的炔基； OR^{al} ， $S(O)_bR^{am}$ ；或者 $C(O)R^{an}$ 。較佳者，每一個 R^{zz} 係獨立地為鹵素，氰基，硝基， C_{1-4} 烷基， C_{1-4} 鹵烷基， C_{2-8} 烷氧基烷基， C_{1-4} 烷氧基， C_{1-4} 鹵烷氧基， C_{1-4} 烷基磺醯基， C_{1-4} 鹵烷基磺醯基或者 $C(O)R^{an}$ 。更佳者， R^{zz} 係為鹵素， C_{1-4} 烷基， C_{1-4} 烷氧基，或者 C_{1-4} 烷基磺醯基。

每一個 R^{ab} 係獨立地為：鹵素；氰基；羥基；視需要經一或多個 R^{aq} 取代的烷基；視需要經一或多個 R^{ar} 取代的烯基，視需要經一或多個 R^{as} 取代的炔基； OR^{al} ， $S(O)_bR^{am}$ ；或者 $C(O)R^{an}$ 。較佳者，每一個 R^{ab} 係獨立地為鹵素，氰基，硝基， C_{1-4} 烷基， C_{1-4} 鹵烷基， C_{2-8} 烷氧基烷基， C_{1-4} 烷氧基， C_{1-4} 鹵烷氧基， C_{1-4} 烷基磺醯基， C_{1-4} 鹵烷基磺醯基，或者 $C(O)R^{an}$ 。

R^{ac} 係為氫，烷基，鹵烷基，烷氧基烷基，烷基羰基，

烷氧基羰基，或者視需要經一或多個 R^{zz} 取代的苯基。較佳者， R^{ac} 係為氫， C_{1-4} 烷基， C_{1-4} 鹵烷基，或者 C_{2-8} 烷氧基烷基。更佳者， R^{ac} 係為氫或者 C_{1-4} 烷基。

R^{ad} 係為氫，烷基，鹵烷基，烷氧基烷基，或者視需要經一或多個 R^{zz} 取代的苯基。較佳者， R^{ad} 係為氫， C_{1-4} 烷基， C_{1-4} 鹵烷基，或者 C_{2-8} 烷氧基烷基。更佳者， R^{ad} 係為氫或者 C_{1-4} 烷基；

R^{ae} 係為烷基，視需要經一或多個 R^{zz} 取代的苯基烷基，或者視需要經一或多個 R^{zz} 取代的苯基。較佳者， R^{ae} 係為： C_{1-4} 烷基；視需要經 1 至 3 個基團 R^{zz} 取代的苯基 C_{1-4} 烷基；或者視需要經 1 至 3 個基團 R^{zz} 取代的苯基。

R^{af} 係為烷基或者苯基。

每一個 R^{ag} 係獨立地為烷基或者鹵烷基。

每一個 R^{ah} 係獨立地為鹵素或者苯基。

每一個 R^{ai} 係獨立地為鹵素或者烷基。

R^{al} 係為烷基，鹵烷基，烷氧基烷基，或者烷基磺醯基。

R^{am} 係為烷基，鹵烷基，烯基，炔基，苯基，或者烷基羰基氨基。

b 係為選自 0、1 或 2 的整數。

R^{an} 係為氫，烷基，鹵烷基，烷氧基，鹵烷氧基，胺基，烷基胺基，二烷基胺基，或者烷基磺醯基胺基。較佳者， R^{an} 係為 C_{1-4} 烷基， C_{1-4} 鹵烷基， C_{1-4} 烷氧基， C_{1-4} 鹵烷氧基，胺基， C_{1-4} 烷基胺基，或者 C_{2-8} 二烷基胺基。

R^{ao} 係為氫，烷基，烷氧基烷基，苯基烷基，甲醯基，

烷基羰基，烷氧基羰基，胺基羰基，烷基胺基羰基，二烷基胺基羰基。

R^{ap} 係為氫，烷基，烷氧基烷基，或者苯基烷基。

每一個 R^{aq} 係獨立地為鹵素，烷氧基，氰基，烷氧基羰基，或者烷基磺醯基。

每一個 R^{ar} 係獨立地為鹵素，氰基，硝基，烷氧基，烷基羰基，烷氧基羰基，胺基羰基，烷基磺醯基，或者二烷基膦醯基。較佳者，每一個 R^{ar} 係獨立地為鹵素，氰基，硝基，或者 C_{1-4} 烷氧基羰基。

每一個 R^{as} 係獨立地為鹵素，氰基，三烷基甲矽烷基，烷基羰基，烷氧基羰基，胺基羰基，或者烷基磺醯基。

每一個 R^{at} 係獨立地為鹵素，烷基，或者烷氧基羰基。

R^{au} 係為氫，烷基，鹵烷基，烷氧基烷基，烷基羰基，烷氧基羰基，胺基羰基，或者視需要經一或多個 R^{zz} 取代的苯基。

R^{av} 係為氫，烷基，鹵烷基，或者烷氧基烷基。可替代的， R^{au} 以及 R^{av} 一起與其所連接的 N 原子形成 5 至 6 員環，該環視需要地包含另一個選自 O，S 以及 N 的雜原子且視需要經 1 至 2 個選自烷基以及烷基羰基的基團取代；

根據本發明，Y 係定義為鹵素，氰基，視需要經取代的烷基，視需要經取代的環烷基，視需要經取代的烯基，視需要經取代的炔基，視需要經取代的苯基，視需要經取代的雜芳基，視需要經取代的烷氧基，視需要經取代的胺基，視需要經取代的烷基硫基，視需要經取代的烷基亞磺醯

基，視需要經取代的烷基磺醯基，視需要經取代的二烷基磺醯基，或者視需要經取代的三烷基甲矽烷基。

較佳者，Y 係為鹵素；氰基；視需要經 1 至 3 個基團 R^{ba} 取代的 C_{1-6} 烷基；視需要經 1 至 3 個基團 R^{ba} 取代的 C_{1-6} 鹵烷基；視需要經 1 至 3 個基團 R^{bc} 取代的 C_{3-6} 環烷基；視需要經 1 至 3 個基團 R^{bd} 取代的 C_{2-6} 烯基；視需要經 1 至 3 個基團 R^{be} 取代的 C_{2-6} 炔基；視需要經 1 至 4 個基團 R^{bf} 取代的苯基；視需要經 1 至 3 個基團 R^{bg} 取代的雜芳基；
 OR^{bh}；NR^{bi}R^{bj}；S(O)_cR^{bk}；C₂₋₈ 二烷基磺醯基；或者 C₃₋₁₂ 三烷基甲矽烷基。

更佳者，Y 係為鹵素，C₁₋₃ 烷基，C₁₋₃ 鹵烷基，C₂₋₅ 烷氧基烷基，視需要經 1 至 2 個基團 R^{bc} 取代的環丙基，C₂₋₄ 烯基，C₂₋₄ 鹵烯基，或者視需要經 1 至 2 個基團 R^{be} 取代的 C₂₋₄ 炔基；

最佳者，Y 係為鹵素，C₁₋₂ 烷基，C₁₋₂ 鹵烷基，C₂₋₃ 烷氧基烷基，或者 C₂₋₃ 烯基。

每一個 R^{ba} 係獨立地為：氰基；硝基；羥基；C₁₋₄ 烷氧基；C₁₋₄ 烷基硫基；C₁₋₄ 烷基羰基；或者 C₁₋₄ 烷氧基羰基。

每一個 R^{bc} 係獨立地為：鹵素；氰基；C₁₋₄ 烷基；C₁₋₄ 烷氧基；或者 C₁₋₄ 氧基羰基。較佳者，每一個 R^{bc} 係獨立地為鹵素或者 C₁₋₂ 烷基。

每一個 R^{bd} 係獨立地為：鹵素；氰基；C₁₋₄ 烷基羰基；或者 C₁₋₄ 烷氧基羰基。

每一個 R^{be} 係獨立地為：鹵素；氰基；羥基；C₁₋₄ 烷氧

基羰基；或者三(C₁₋₄)烷基甲矽烷基(本文中亦稱為 C₃₋₁₂ 三烷基甲矽烷基)。較佳者，每一個 R^{be} 係獨立地為鹵素或者三(C₁₋₃)烷基甲矽烷基(C₃₋₉ 三烷基甲矽烷基)。

每一個 R^{bf} 係獨立地為：鹵素；氰基；C₁₋₄ 烷基；C₁₋₄ 鹵烷基；C₁₋₄ 烷氧基(C₁₋₄)烷基(亦稱為 C₂₋₈ 烷氧基烷基)；C₁₋₄ 烷氧基；C₁₋₄ 鹵烷氧基；C₁₋₄ 烷基磺醯基；或者 C₁₋₄ 烷氧基羰基。

每一個 R^{bg} 係獨立地為：鹵素；氰基；C₁₋₄ 烷基；C₁₋₄ 鹵烷基；C₁₋₄ 烷氧基(C₁₋₄)烷基(亦稱為 C₂₋₈ 烷氧基烷基)；C₁₋₄ 烷氧基；C₁₋₄ 鹵烷氧基；C₁₋₄ 烷基磺醯基；或者 C₁₋₄ 烷氧基羰基。

每一個 R^{bh} 係獨立地為：C₁₋₄ 烷基；C₁₋₄ 鹵烷基；或者 C₁₋₄ 烷基磺醯基。

每一個 R^{bi} 係獨立地為：氫；C₁₋₄ 烷基；C₁₋₄ 烷基羰基；C₂₋₄ 烷氧基羰基；胺基羰基；C₁₋₄ 烷基胺基羰基；或者二(C₁₋₄)烷基胺基羰基(C₂₋₈ 二烷基胺基羰基)。

每一個 R^{bj} 係獨立地為氫或者 C₁₋₄ 烷基。

每一個 R^{bk} 係獨立地為 C₁₋₄ 烷基或者 C₁₋₄ 鹵烷基；

c 係為選自 0、1 或 2 的整數。

根據本發明，Z 係定義為(T)_m-(U)_n-V。較佳者，Z 係為(O)_m-(U)_n-V，更佳者，Z 係為(O)_m-(CR^wR^x)_n-C(O)R^{cb}，以及最佳者，Z 係為 C(O)R^{cb}。

T 係為氧或者硫原子，較佳為氧原子。

m 係為 0 至 1 的整數；n 係為選自 0、1 或 2 的整數，

且 $n \geq m$ 。較佳者， n 具有 0 或者 1 的數值。

U 係為 CR^wR^x 。每一個 R^w 係獨立地為氫，鹵素，羥基，視需要經取代的烷基，視需要經取代的烷氧基羰基，或者 OR^y 。

每一個 R^x 係獨立地為氫，鹵素，視需要經取代的烷基，或者 OR^z 。

可替代地，任何孳位 R^w 以及 R^x 一起形成選自側氧基，或者 $=NOR^{ca}$ 基團；或者任何孳位，相鄰或者非相鄰 R^w 及 / 或 R^x 一起與其所連接的 C 原子以及任何插入原子形成視需要經取代的 3 至 6 員環。

R^{ca} 係為氫或者視需要經取代的烷基。

再者，當至少一個 R^w 係為 OR^y 且至少一個 R^x 係為 OR^z ，該 OR^y 以及 OR^z 基團一起與其所連接的 C 原子以及任何插入原子形成視需要經取代的 5 至 6 員雜環狀環。

較佳者， R^w 係為氫，鹵素，羥基， C_{1-4} 烷基， C_{1-4} 鹵烷基， C_{1-3} 烷氧基(C_{1-3})烷基， C_{1-6} 烷氧基羰基， C_{1-4} 烷氧基， C_{1-4} 烷基羰基氧基。

更佳者， R^w 係為氫或者 C_{1-4} 烷基。

較佳者， R^x 係為氫，鹵素， C_{1-4} 烷基， C_{1-4} 鹵烷基， C_{1-3} 烷氧基(C_{1-3})烷基， C_{1-4} 烷氧基；或者任何孳位 R^w 以及 R^x 一起形成選自側氧基，或者 $=NOR^{ca}$ 基團。更佳者， R^x 係為氫。

每一個 R^y 係獨立地為視需要經取代的烷基或者視需要經取代的烷基羰基。

每一個 R^Z 係獨立地為視需要經取代的烷基基團。

根據本發明， V 係為 $C(O)R^{cb}$ ， $C(S)R^{cd}$ ， $C(=NR^{ce})R^{cf}$ ， $CHR^{cg}R^{ch}$ ， $CH(S[O]_pR^{ci})(S[O]_qR^{cj})$ ， $CR^{ck}R^{cl}R^{cm}$ ，或者 CH_2OR^{cn} ，其中 R^{cb} ， R^{cd} ， R^{ce} ， R^{cf} ， R^{cg} ， R^{ch} ， R^{ci} ， R^{cj} ， R^{ck} ， R^{cl} ， R^{cm} 以及 R^{cn} 係定義如后。

每一個 R^{cb} 係為氫，羥基，視需要經取代的烷氧基，視需要經取代的環烷氧基，視需要經取代的烷基硫基，或者視需要經取代的胺基。較佳者，每一個 R^{cb} 係為氫，羥基， C_{1-10} 烷基硫基，胺基， C_{1-6} 烷基胺基，二(C_{1-4})烷基胺基，或者 OR^{co} 。更佳者，每一個 R^{cb} 係為羥基， C_{1-10} 烷基硫基，或者 OR^{co} 。最佳者，每一個 R^{cb} 係為羥基， C_{1-10} 烷氧基，或者苯基(C_{1-2})烷氧基。

每一個 R^{cd} 係為視需要經取代的烷氧基，視需要經取代的環烷氧基，視需要經取代的烷基硫基，或者視需要經取代的胺基。較佳者，每一個 R^{cd} 係為 C_{1-20} 烷氧基， C_{1-10} 烷基硫基，胺基， C_{1-6} 烷基胺基，或者二(C_{1-4})烷基胺基。

每一個 R^{ce} 係為氫，視需要經取代的烷基，視需要經取代的烷氧基，視需要經取代的環烷氧基，或者視需要經取代的胺基。較佳者，每一個 R^{ce} 係為氫， C_{1-6} 烷基，胺基， C_{1-6} 烷基胺基，二(C_{1-4})烷基胺基， C_{1-6} 烷氧基，或者 C_{3-6} 環烷氧基。

每一個 R^{cf} 係為氫，視需要經取代的烷氧基，視需要經取代的環烷氧基，視需要經取代的烷基硫基，或者視需要經取代的胺基。較佳者，每一個 R^{cf} 係為氫， C_{1-6} 烷氧基，

C_{1-6} 烷基硫基，胺基， C_{1-6} 烷基胺基，或者二(C_{1-4})烷基胺基。

R^{cg} 以及 R^{ch} 係每一個獨立地為視需要經取代的烷氧基基團。可替代地， R^{cg} 以及 R^{ch} ，一起與其所連接的碳形成二氧雜環戊烷或者二噁烷環，該環係視需要經取代的，較佳者，經 1 至 2 個 C_{1-2} 烷基基團取代。較佳者， R^{cg} 以及 R^{ch} 係每一個獨立地為 C_{1-4} 烷氧基。

R^{ci} 以及 R^{cj} 係每一個獨立地為視需要經取代的烷基基團。可替代地， R^{ci} 以及 R^{cj} ，一起與其所連接的碳原子及硫原子形成視需要經取代的 5 至 6 員環，該環較佳經 1 或 2 個 C_{1-2} 烷基基團取代。較佳者， R^{ci} 以及 R^{cj} 係每一個獨立地為 C_{1-4} 烷基。

p 以及 q 係每一個獨立地為 0，1，或者 2 的整數。較佳者， p 以及 q 係每一個獨立地為 0 或者 1。

R^{ck} ， R^{cl} ，以及 R^{cm} 係每一個獨立地為視需要經取代的烷氧基基團。可替代地， R^{ck} 以及 R^{cl} 以及 R^{cm} 一起與其所連接的碳形成視需要經取代的三氧雜二環[2.2.2]辛烷環系統。較佳者， R^{ck} ， R^{cl} ，以及 R^{cm} 係每一個獨立地為 C_{1-4} 烷氧基。

R^{cn} 係為氫或者視需要經取代的烷基羰基基團。較佳者， R^{cn} 係為氫或者 C_{1-4} 烷基羰基。

R^{co} 係為：視需要經 1 至 3 個基團 R^{cq} 取代的 C_{1-20} 烷基；視需要經 1 至 3 個基團 R^{cq} 取代的 C_{1-20} 鹵烷基；或者 C_{3-6} 環烷基。較佳者， R^{co} 係為視需要經 1 至 2 個基團 R^{cq} 取代的 C_{1-20} 烷基或者視需要經 1 至 2 個基團 R^{cq} 取代的 C_{1-20}

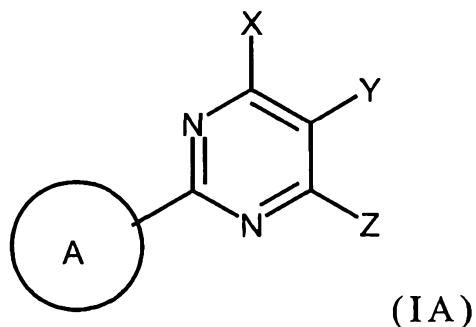
鹵烷基。

每一個 R^{c^q} 係獨立地為： C_{3-6} 環烷基， C_{1-6} 烷氧基，視需要經 1 至 4 個基團 R^{c^r} 取代的苯基，或者視需要經 1 至 3 個基團 R^{c^s} 取代的雜芳基。較佳者，每一個 R^{c^q} 係獨立地為視需要經 1 至 3 個基團 R^{c^r} 取代的苯基，或者視需要經 1 至 2 個基團 R^{c^s} 取代的雜芳基。

每一個 R^{c^r} 係獨立地為：鹵素，氰基， C_{1-4} 烷基， C_{1-4} 鹵烷基， C_{1-3} 烷氧基(C_{1-3})烷基， C_{1-4} 烷氧基， C_{1-4} 鹵烷氧基， C_{1-4} 烷基磺醯基， C_{1-4} 烷氧基羰基，或者胺基。較佳者，每一個 R^{c^r} 係獨立地為鹵素，氰基， C_{1-4} 烷基， C_{1-4} 鹵烷基， C_{1-3} 烷氧基(C_{1-3})烷基， C_{1-4} 烷氧基， C_{1-4} 鹵烷氧基， C_{1-4} 烷基磺醯基，或者 C_{1-4} 烷氧基羰基。

每一個 R^{c^s} 係獨立地為：鹵素，氰基， C_{1-4} 烷基， C_{1-4} 鹵烷基， C_{1-3} 烷氧基(C_{1-3})烷基， C_{1-4} 烷氧基， C_{1-4} 鹵烷氧基， C_{1-4} 烷基磺醯基， C_{1-4} 烷氧基羰基，或者胺基。較佳者，每一個 R^{c^s} 係獨立地為鹵素，氰基， C_{1-4} 烷基， C_{1-4} 鹵烷基， C_{1-3} 烷氧基(C_{1-3})烷基， C_{1-4} 烷氧基， C_{1-4} 鹵烷氧基， C_{1-4} 烷基磺醯基，或者 C_{1-4} 烷氧基羰基。

一些式(I)係為新穎的。因此，本發明另一內容係提供新穎式(I)化合物，其係為式(IA)化合物



其中 A, Y, 以及 Z 係如前述式(I)化合物所定義, X 係為 NR^5R^6 或者鹵素, 且 R^5 以及 R^6 係如前述式(I)化合物所定義。關於 A, Y, Z, R^5 以及 R^6 , 以任何組合的較佳取代基係如前述式(I)化合物所定義。

一些特佳式(IA)化合物為那些 A 係為選自以下表 1 所示取代基的組群, 及/或 X 係為選自 Cl, NH_2 , NHCH_3 , $\text{N}(\text{CH}_3)_2$, $\text{NH}(\text{COCH}_3)$, $\text{NH}(\text{CO}_2\text{CH}_3)$, $\text{NH}(\text{SO}_2\text{CH}_3)$, $\text{NCH}_3(\text{COCH}_3)$, $\text{NCH}_3(\text{SO}_2\text{CH}_3)$ 以及 $\text{NH}(\text{CH}[\text{CH}_3]_2)$, 及/或 Y 係為選自由 Cl, Br 以及乙烯基組成之群組, 及/或 Z 係選自由 CO_2H , CO_2CH_3 , 以及 $\text{CO}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ 組成之群組。

更佳的式(IA)化合物為那些其中 A 係選自由選自視需要經取代的噻吩, 視需要經取代的吡唑, 視需要經取代的吡啶, 視需要經取代的嘧啶, 視需要經取代的苯並噻吩, 視需要經取代的異噁唑, 以及視需要經取代的異喹啉所組成之組群, 及/或 X 係為選自 NH_2 或者 Cl, 及/或 Y 係為選自 Cl 以及乙烯基所組成之組群, 及/或 Z 係為選自由 CO_2H , CO_2CH_3 , 以及 $\text{CO}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ 所組成之組群。

以下所述化合物係用於例示本發明的新穎化合物。以下表 1 提供 196 個化合物, 其分別被命名為編號為 1-1 至 1-196 的式(I)化合物, 其中 X 為 NH_2 , Y 為 Cl, Z 為 COOH , 以及其中 A 具如下表中所賦予者。

表 1

化合物編號	A
1-1	噻吩-2-基
1-2	5-氯噻吩-2-基
1-3	5-氯基噻吩-2-基

化合物編號	A
1-4	5-甲基噻吩-2-基
1-5	5-溴噻吩-2-基
1-6	3-甲基噻吩-2-基
1-7	5-甲氧基噻吩-2-基
1-8	4-氰基噻吩-2-基
1-9	5-甲基羰基噻吩-2-基
1-10	4-三甲基甲矽烷基噻吩-2-基
1-11	5-三甲基甲矽烷基噻吩-2-基
1-12	4-溴-5-氯噻吩-2-基
1-13	4-溴噻吩-2-基
1-14	4-氯噻吩-2-基
1-15	4-甲基噻吩-2-基
1-16	噻吩-3-基
1-17	4-甲基噻吩-3-基
1-18	2-氯噻吩-3-基
1-19	2, 5-二氯噻吩-3-基
1-20	2-氰基噻吩-3-基
1-21	2-甲基噻吩-3-基
1-22	5-溴-2-氯噻吩-3-基
1-23	5-溴-2-氰基噻吩-3-基
1-24	4-溴-2, 5-二甲基噻吩-3-基
1-25	2-溴噻吩-3-基
1-26	2-氯-5-三甲基甲矽烷基噻吩-3-基
1-27	5-甲基噻吩-3-基
1-28	5-氯噻吩-3-基
1-29	呋喃-2-基
1-30	5-甲基呋喃-2-基
1-31	5-氯呋喃-2-基
1-32	4-氯呋喃-2-基
1-33	4-甲基呋喃-2-基
1-34	呋喃-3-基
1-35	2-氰基-5-甲基呋喃-3-基
1-36	5-甲基呋喃-3-基
1-37	5-氯呋喃-3-基
1-38	吡咯-1-基
1-39	3-甲基吡咯-1-基
1-40	3-氯吡咯-1-基
1-41	吡咯-2-基

化合物編號	A
1-42	4-甲基羰基吡咯-2-基
1-43	4-甲基吡咯-2-基
1-44	4-氯吡咯-2-基
1-45	5-氯吡咯-2-基
1-46	5-甲基吡咯-2-基
1-47	吡咯-3-基
1-48	1-三異丙基甲矽烷基吡咯-3-基
1-49	1-三級-丁氧基羰基吡咯-3-基
1-50	5-氯吡咯-3-基
1-51	5-甲基吡咯-3-基
1-52	1-甲基吡咯-3-基
1-53	苯並呋喃-2-基
1-54	苯並噻吩-2-基
1-55	5-甲基苯並噻吩-2-基
1-56	苯並噻吩-3-基
1-57	5-甲基苯並噻吩-3-基
1-58	吲哚-2-基
1-59	1-甲基吲哚-2-基
1-60	1-三級-丁氧基羰基吲哚-2-基
1-61	1-苯基磺醯基吲哚-2-基
1-62	1-苯基磺醯基吲哚-3-基
1-63	1-三級-丁氧基羰基吲哚-3-基
1-64	吲哚-3-基
1-65	吡唑-1-基
1-66	3-甲基吡唑-1-基
1-67	3-氯吡唑-1-基
1-68	4-甲基吡唑-1-基
1-69	4-氯吡唑-1-基
1-70	吡唑-4-基
1-71	1-甲基吡唑-4-基
1-72	3, 5-二甲基吡唑-4-基
1-73	1, 3, 5-三甲基吡唑-4-基
1-74	4-溴-1-甲基吡唑-5-基
1-75	1-甲基吡唑-5-基
1-76	1-二甲基胺基羰基吡唑-4-基
1-77	1-甲基吡唑-3-基
1-78	5-甲基吡唑-3-基
1-79	5-氯吡唑-3-基

化合物編號	A
1-80	5-氯-1-甲基吡唑-3-基
1-81	1,5-二甲基吡唑-3-基
1-82	3-甲基異噁唑-5-基
1-83	3-氯異噁唑-5-基
1-84	5-甲基異噁唑-3-基
1-85	5-氯異噁唑-3-基
1-86	3,5-二甲基異噁唑-4-基
1-87	3-甲基異噻唑-5-基
1-88	3-氯異噻唑-5-基
1-89	5-甲基異噻唑-3-基
1-90	5-氯異噻唑-3-基
1-91	噁唑-5-基
1-92	2-甲基噁唑-5-基
1-93	2-氯噁唑-5-基
1-94	5-氯噁唑-2-基
1-95	5-甲基噁唑-2-基
1-96	2-甲基噁唑-4-基
1-97	2-氯噁唑-4-基
1-98	4-氯噁唑-2-基
1-99	4-甲基噁唑-2-基
1-100	2-甲基噻唑-5-基
1-101	2-氯噻唑-5-基
1-102	5-甲基噻唑-2-基
1-103	5-氯噻唑-2-基
1-104	2-甲基噻唑-4-基
1-105	2-氯噻唑-4-基
1-106	4-甲基噻唑-2-基
1-107	4-氯噻唑-2-基
1-108	咪唑-1-基
1-109	4-甲基咪唑-1-基
1-110	4-氯咪唑-1-基
1-111	2-溴-1-甲基咪唑-5-基
1-112	1-甲基咪唑-5-基
1-113	1-二甲基胺基磺醯基咪唑-4-基
1-114	2-甲基咪唑-4-基
1-115	2-氯咪唑-4-基
1-116	4-甲基咪唑-2-基
1-117	4-氯咪唑-2-基

化合物編號	A
1-118	5-氯-1, 3, 4-噻二唑-2-基
1-119	5-甲基-1, 3, 4-噻二唑-2-基
1-120	3-甲基-1, 2, 4-噻二唑-5-基
1-121	3-氯-1, 2, 4-噻二唑-5-基
1-122	5-甲基-1, 2, 4-噻二唑-3-基
1-123	5-氯-1, 2, 4-噻二唑-3-基
1-124	5-氯-1, 3, 4-噁二唑-2-基
1-125	5-甲基-1, 3, 4-噁二唑-2-基
1-126	3-甲基-1, 2, 4-噁二唑-5-基
1-127	3-氯-1, 2, 4-噁二唑-5-基
1-128	5-甲基-1, 2, 4-噁二唑-3-基
1-129	5-氯-1, 2, 4-噁二唑-3-基
1-130	1, 2, 3-三唑-1-基
1-131	1, 2, 3-三唑-2-基
1-132	4-甲基-1, 2, 3-三唑-1-基
1-133	4-氯-1, 2, 3-三唑-1-基
1-134	4-甲基-1, 2, 3-三唑-2-基
1-135	4-氯-1, 2, 3-三唑-2-基
1-136	1, 2, 4-三唑-1-基
1-137	1, 2, 4-三唑-4-基
1-138	3-甲基-1, 2, 4-三唑-1-基
1-139	3-氯-1, 2, 4-三唑-1-基
1-140	5-甲基-1, 2, 4-三唑-3-基
1-141	5-氯-1, 2, 4-三唑-3-基
1-142	1-甲基-1, 2, 4-三唑-3-基
1-143	2-甲基四唑-5-基
1-144	5-甲基四唑-2-基
1-145	5-氯四唑-2-基
1-146	咪唑[1, 5-a]吡啶-3-基 1-三級-丁氧基羰基-1H-吡咯 o[2, 3-b]吡啶 -3-基
1-147	-3-基
1-148	7-氯-1H-吡咯並[2, 3-c]吡啶-2-基
1-149	吡啶-2-基
1-150	5-三氟甲基吡啶-2-基
1-151	5-氯吡啶-2-基
1-152	5-甲基吡啶-2-基
1-153	吡啶-3-基
1-154	2-甲氧基吡啶-3-基

化合物編號	A
1-155	6-甲氧基吡啶-3-基
1-156	6-氯吡啶-3-基
1-157	6-氟吡啶-3-基
1-158	6-氰基吡啶-3-基
1-159	2, 6-二甲氧基吡啶-3-基
1-160	6-甲基吡啶-3-基
1-161	2-氟-6-甲基吡啶-3-基
1-162	4-甲氧基吡啶-3-基
1-163	6-胺基吡啶-3-基
1-164	6-(六氫吡啶-1-基)-吡啶-3-基
1-165	4-三氟甲基吡啶-3-基
1-166	2-(2, 2, 2-三氟乙氧基)-吡啶-3-基
1-167	6-溴吡啶-3-基
1-168	6-硝基吡啶-3-基
1-169	6-(哌啶-1-基)-吡啶-3-基
1-170	6-(嗎啉-1-基)-吡啶-3-基
1-171	5-溴吡啶-3-基
1-172	2-氟吡啶-3-基
1-173	6-甲基羰基胺基吡啶-3-基
1-174	吡啶-4-基
1-175	3-氯吡啶-4-基
1-176	3, 5-二氯吡啶-4-基
1-177	2, 3-二氯吡啶-4-基
1-178	6-(哌啶-1-基)-吡啶-4-基
1-179	2, 6-二氯吡啶-4-基
1-180	5-甲基嘧啶-2-基
1-181	5-氯嘧啶-2-基
1-182	2-甲氧基嘧啶-5-基
1-183	2, 4-二甲氧基嘧啶-5-基
1-184	2-甲基嘧啶-5-基
1-185	2-氯嘧啶-5-基
1-186	6-氯吡啶-3-基
1-187	6-甲基吡啶-3-基
1-188	5-甲基嗒吡啶-2-基
1-189	5-氯嗒吡啶-2-基
1-190	6-甲基-1, 2, 4-三吡啶-3-基
1-191	6-氯-1, 2, 4-三吡啶-3-基
1-192	3-甲基-1, 2, 4-三吡啶-6-基

化合物編號	A
1-193	3-氯-1, 2, 4-三吡-6-基
1-194	6-甲基-1, 2, 4, 5-四吡-3-基
1-195	喹啉-3-基
1-196	異喹啉-4-基

196 個式(I)化合物，其中 X 係為 NH_2 ，Y 係為氯，Z 係為 CO_2CH_3 ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 2-1 至 2-196。

196 個式(I)化合物，其中 X 係為 NH_2 ，Y 係為氯，Z 係為 $\text{CO}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 3-1 至 3-196。

196 個式(I)化合物，其中 X 係為 NH_2 ，Y 係為溴，Z 係為 CO_2H ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 4-1 至 4-196。

196 個式(I)化合物，其中 X 係為 NH_2 ，Y 係為溴，Z 係為 CO_2CH_3 ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 5-1 至 5-196。

196 個式(I)化合物，其中 X 係為 NH_2 ，Y 係為溴，Z 係為 $\text{CO}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 6-1 至 6-196。

196 個式(I)化合物，其中 X 係為 NHCH_3 ，Y 係為氯，Z 係為 CO_2H ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 7-1 至 7-196。

196 個式(I)化合物，其中 X 係為 NHCH_3 ，Y 係為氯，Z 係為 CO_2CH_3 ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196

所定義者，分別被命名為化合物編號第 8-1 至 8-196。

196 個式(I)化合物，其中 X 係為 NHCH_3 ，Y 係為氯，Z 係為 $\text{CO}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 9-1 至 9-196。

196 個式(I)化合物，其中 X 係為 NHCH_3 ，Y 係為溴，Z 係為 CO_2H ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 10-1 至 10-196。

196 個式(I)化合物，其中 X 係為 NHCH_3 ，Y 係為溴，Z 係為 CO_2CH_3 ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 11-1 至 11-196。

196 個式(I)化合物，其中 X 係為 NHCH_3 ，Y 係為溴，Z 係為 $\text{CO}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 12-1 至 12-196。

196 個式(I)化合物，其中 X 係為 $\text{N}(\text{CH}_3)_2$ ，Y 係為氯，Z 係為 CO_2H ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 13-1 至 13-196。

196 個式(I)化合物，其中 X 係為 $\text{N}(\text{CH}_3)_2$ ，Y 係為氯，Z 係為 CO_2CH_3 ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 14-1 至 14-196。

196 個式(I)化合物，其中 X 係為 $\text{N}(\text{CH}_3)_2$ ，Y 係為氯，Z 係為 $\text{CO}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 15-1 至 15-196。

196 個式(I)化合物，其中 X 係為 $\text{N}(\text{CH}_3)_2$ ，Y 係為溴，Z 係為 CO_2H ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 16-1 至 16-196。

196 個式(I)化合物，其中 X 係為 $\text{N}(\text{CH}_3)_2$ ，Y 係為溴，Z 係為 CO_2CH_3 ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 17-1 至 17-196。

196 個式(I)化合物，其中 X 係為 $\text{N}(\text{CH}_3)_2$ ，Y 係為溴，Z 係為 $\text{CO}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 18-1 至 18-196。

196 個式(I)化合物，其中 X 係為 $\text{NH}(\text{COCH}_3)$ ，Y 係為氯，Z 係為 CO_2H ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 19-1 至 19-196。

196 個式(I)化合物，其中 X 係為 $\text{NH}(\text{COCH}_3)$ ，Y 係為氯，Z 係為 CO_2CH_3 ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 20-1 至 20-196。

196 個式(I)化合物，其中 X 係為 $\text{NH}(\text{COCH}_3)$ ，Y 係為氯，Z 係為 $\text{CO}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 21-1 至 21-196。

196 個式(I)化合物，其中 X 係為 $\text{NH}(\text{COCH}_3)$ ，Y 係為溴，Z 係為 CO_2H ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 22-1 至 22-196。

196 個式 (I) 化合物，其中 X 係為 $\text{NH}(\text{COCH}_3)$ ，Y 係為溴，Z 係為 CO_2CH_3 ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 23-1 至 23-196。

196 個式 (I) 化合物，其中 X 係為 $\text{NH}(\text{COCH}_3)$ ，Y 係為溴，Z 係為 $\text{CO}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 24-1 至 24-196。

196 個式 (I) 化合物，其中 X 係為 $\text{NH}(\text{CO}_2\text{CH}_3)$ ，Y 係為氯，Z 係為 CO_2H ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 25-1 至 25-196。

196 個式 (I) 化合物，其中 X 係為 $\text{NH}(\text{CO}_2\text{CH}_3)$ ，Y 係為氯，Z 係為 CO_2CH_3 ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 26-1 至 26-196。

196 個式 (I) 化合物，其中 X 係為 $\text{NH}(\text{CO}_2\text{CH}_3)$ ，Y 係為氯，Z 係為 $\text{CO}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 27-1 至 27-196。

196 個式 (I) 化合物，其中 X 係為 $\text{NH}(\text{CO}_2\text{CH}_3)$ ，Y 係為溴，Z 係為 CO_2H ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 28-1 至 28-196。

196 個式 (I) 化合物，其中 X 係為 $\text{NH}(\text{CO}_2\text{CH}_3)$ ，Y 係為溴，Z 係為 CO_2CH_3 ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至

1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 29-1 至 29-196。

196 個式(I)化合物，其中 X 係為 $\text{NH}(\text{CO}_2\text{CH}_3)$ ，Y 係為溴，Z 係為 $\text{CO}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 30-1 至 30-196。

196 個式(I)化合物，其中 X 係為 $\text{NH}(\text{SO}_2\text{CH}_3)$ ，Y 係為氯，Z 係為 CO_2H ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 31-1 至 31-196。

196 個式(I)化合物，其中 X 係為 $\text{NH}(\text{SO}_2\text{CH}_3)$ ，Y 係為氯，Z 係為 CO_2CH_3 ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 32-1 至 32-196。

196 個式(I)化合物，其中 X 係為 $\text{NH}(\text{SO}_2\text{CH}_3)$ ，Y 係為氯，Z 係為 $\text{CO}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 33-1 至 33-196。

196 個式(I)化合物，其中 X 係為 $\text{NH}(\text{SO}_2\text{CH}_3)$ ，Y 係為溴，Z 係為 CO_2H ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 34-1 至 34-196。

196 個式(I)化合物，其中 X 係為 $\text{NH}(\text{SO}_2\text{CH}_3)$ ，Y 係為溴，Z 係為 CO_2CH_3 ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 35-1 至 35-196。

196 個式(I)化合物，其中 X 係為 $\text{NH}(\text{SO}_2\text{CH}_3)$ ，Y 係為溴，Z 係為 $\text{CO}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 36-1 至 36-196。

196 個式(I)化合物，其中 X 係為 $\text{NCH}_3(\text{COCH}_3)$ ，Y 係為氯，Z 係為 CO_2H ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 37-1 至 37-196。

196 個式(I)化合物，其中 X 係為 $\text{NCH}_3(\text{COCH}_3)$ ，Y 係為氯，Z 係為 CO_2CH_3 ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 38-1 至 38-196。

196 個式(I)化合物，其中 X 係為 $\text{NCH}_3(\text{COCH}_3)$ ，Y 係為氯，Z 係為 $\text{CO}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 39-1 至 39-196。

196 個式(I)化合物，其中 X 係為 $\text{NCH}_3(\text{COCH}_3)$ ，Y 係為溴，Z 係為 CO_2H ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 40-1 至 40-196。

196 個式(I)化合物，其中 X 係為 $\text{NCH}_3(\text{COCH}_3)$ ，Y 係為溴，Z 係為 CO_2CH_3 ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 41-1 至 41-196。

196 個式(I)化合物，其中 X 係為 $\text{NCH}_3(\text{COCH}_3)$ ，Y 係為溴，Z 係為 $\text{CO}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 42-1 至 42-196。

196 個式(I)化合物，其中 X 係為 $\text{NCH}_3(\text{CO}_2\text{CH}_3)$ ，Y 係為氯，Z 係為 CO_2H ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 43-1 至 43-196。

196 個式(I)化合物，其中 X 係為 $\text{NCH}_3(\text{CO}_2\text{CH}_3)$ ，Y 係為氯，Z 係為 CO_2CH_3 ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 44-1 至 44-196。

196 個式(I)化合物，其中 X 係為 $\text{NCH}_3(\text{CO}_2\text{CH}_3)$ ，Y 係為氯，Z 係為 $\text{CO}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 45-1 至 45-196。

196 個式(I)化合物，其中 X 係為 $\text{NCH}_3(\text{CO}_2\text{CH}_3)$ ，Y 係為溴，Z 係為 CO_2H ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 46-1 至 46-196。

196 個式(I)化合物，其中 X 係為 $\text{NCH}_3(\text{CO}_2\text{CH}_3)$ ，Y 係為溴，Z 係為 CO_2CH_3 ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 47-1 至 47-196。

196 個式(I)化合物，其中 X 係為 $\text{NCH}_3(\text{CO}_2\text{CH}_3)$ ，Y 係為溴，Z 係為 $\text{CO}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 48-1 至 48-196。

196 個式(I)化合物，其中 X 係為 $\text{NCH}_3(\text{SO}_2\text{CH}_3)$ ，Y 係為氯，Z 係為 CO_2H ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 49-1 至 49-196。

196 個式(I)化合物，其中 X 係為 $\text{NCH}_3(\text{SO}_2\text{CH}_3)$ ，Y 係為氯，Z 係為 CO_2CH_3 ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 50-1 至 50-196。

196 個式(I)化合物，其中 X 係為 $\text{NCH}_3(\text{SO}_2\text{CH}_3)$ ，Y 係為氯，Z 係為 $\text{CO}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 51-1 至 51-196。

196 個式(I)化合物，其中 X 係為 $\text{NCH}_3(\text{SO}_2\text{CH}_3)$ ，Y 係為溴，Z 係為 CO_2H ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 52-1 至 52-196。

196 個式(I)化合物，其中 X 係為 $\text{NCH}_3(\text{SO}_2\text{CH}_3)$ ，Y 係為溴，Z 係為 CO_2CH_3 ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 53-1 至 53-196。

196 個式(I)化合物，其中 X 係為 $\text{NCH}_3(\text{SO}_2\text{CH}_3)$ ，Y 係為溴，Z 係為 $\text{CO}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 54-1 至 54-196。

196 個式(I)化合物，其中 X 係為 $\text{NH}(\text{CH}[\text{CH}_3]_2)$ ，Y 係為氯，Z 係為 CO_2H ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 55-1 至 55-196。

196 個式(I)化合物，其中 X 係為 $\text{NH}(\text{CH}[\text{CH}_3]_2)$ ，Y 係為氯，Z 係為 CO_2CH_3 ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 56-1 至 56-196。

196 個式(I)化合物，其中 X 係為 $\text{NH}(\text{CH}[\text{CH}_3]_2)$ ，Y 係為氯，Z 係為 $\text{CO}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 57-1 至 57-196。

196 個式(I)化合物，其中 X 係為 $\text{NH}(\text{CH}[\text{CH}_3]_2)$ ，Y 係為溴，Z 係為 CO_2H ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 58-1 至 58-196。

196 個式(I)化合物，其中 X 係為 $\text{NH}(\text{CH}[\text{CH}_3]_2)$ ，Y 係為溴，Z 係為 CO_2CH_3 ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 59-1 至 59-196。

196 個式(I)化合物，其中 X 係為 $\text{NH}(\text{CH}[\text{CH}_3]_2)$ ，Y 係為溴，Z 係為 $\text{CO}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 60-1 至 60-196。

196 個式(I)化合物，其中 X 係為氯，Y 係為氯，Z 係為 CO_2H ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 61-1 至 61-196。

196 個式(I)化合物，其中 X 係為氯，Y 係為氯，Z 係為 CO_2CH_3 ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 62-1 至 62-196。

196 個式(I)化合物，其中 X 係為氯，Y 係為氯，Z 係為 $\text{CO}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 63-1 至 63-196。

196 個式(I)化合物，其中 X 係為氯，Y 係為溴，Z 係為 CO_2H ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 64-1 至 64-196。

196 個式(I)化合物，其中 X 係為氯，Y 係為溴，Z 係為 CO_2CH_3 ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 65-1 至 65-196。

196 個式(I)化合物，其中 X 係為氯，Y 係為溴，Z 係為 $\text{CO}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 66-1 至 66-196。

196 個式(I)化合物，其中 X 係為 NH_2 ，Y 係為乙烯基，Z 係為 CO_2H ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196

所定義者，分別被命名為化合物編號第 67-1 至 67-196。

196 個式(I)化合物，其中 X 係為 NH_2 ，Y 係為乙烯基，Z 係為 CO_2CH_3 ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 68-1 至 68-196。

196 個式(I)化合物，其中 X 係為 NH_2 ，Y 係為乙烯基，Z 係為 $\text{CO}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 69-1 至 69-196。

196 個式(I)化合物，其中 X 係為 NHCH_3 ，Y 係為乙烯基，Z 係為 CO_2H ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 70-1 至 70-196。

196 個式(I)化合物，其中 X 係為 NHCH_3 ，Y 係為乙烯基，Z 係為 CO_2CH_3 ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 71-1 至 71-196。

196 個式(I)化合物，其中 X 係為 NHCH_3 ，Y 係為乙烯基，Z 係為 $\text{CO}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 72-1 至 72-196。

196 個式(I)化合物，其中 X 係為 $\text{N}(\text{CH}_3)_2$ ，Y 係為乙烯基，Z 係為 CO_2H ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 73-1 至 73-196。

196 個式(I)化合物，其中 X 係為 $\text{N}(\text{CH}_3)_2$ ，Y 係為乙烯基，Z 係為 CO_2CH_3 ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至

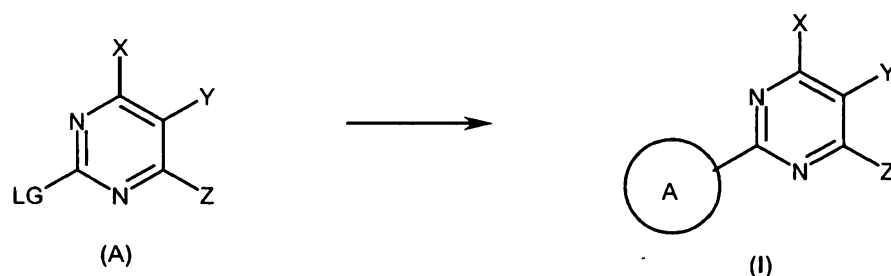
1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 74-1 至 74-196。

196 個式(I)化合物，其中 X 係為 $\text{N}(\text{CH}_3)_2$ ，Y 係為乙烯基，Z 係為 $\text{CO}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ ，以及 A 的值係如表 1 的化合物 1-1 至 1-196 所定義者，分別被命名為化合物編號第 75-1 至 75-196。

製備式(I)化合物的通用方法如以下所述。除非本文中另為陳述，取代基 A，X，Y 以及 Z(包括 U、V、T、m 及 n 之定義)係如以上所定義者。本文中縮寫 LG 係意指任何合適的離去基團，且包括鹵素原子，磺酸鹽和砜基團。本文中所用 R 基團係彼此獨立地為烷基或經取代的烷基。基團 R' 可彼此獨立地為視其所存在的分子的特殊結構而從取其值；熟習此技藝人士將能理解何種值適用於每一種情況，特別是鑑於如以上關於式(I)化合物所定義者。

式(I)化合物可如以下反應流程 1 所顯示者製備自式 A 化合物。

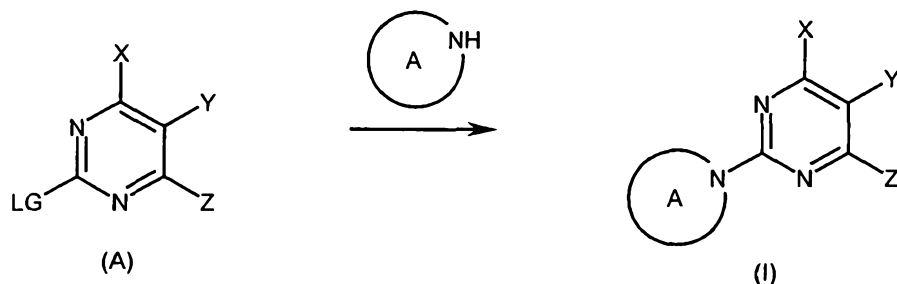
反應流程 1



例如，式(I)化合物(其中 A 為經由氮原子連結於嘧啶環者)可藉由式(A)化合物與 A-H(例如吡咯)、視需要在合適鹼(例如胺鹼，例如三乙胺)存在下、於合適的溶劑(例如醇類，例如甲醇)中反應—參見以下的反應流程 2。該反應可在環

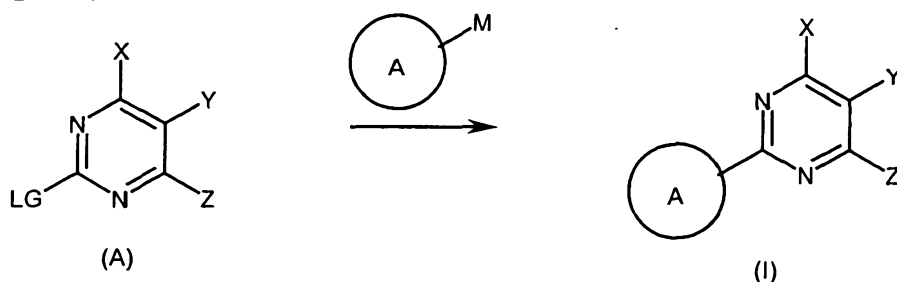
境溫度之下或者較佳在高溫之下進行。此轉換反應亦可在合適的金屬(例如鈀)觸媒、視需要經任何適合的配位體(例如膦配位體，例如 Josiphos)錯合之下進行。

反應流程 2



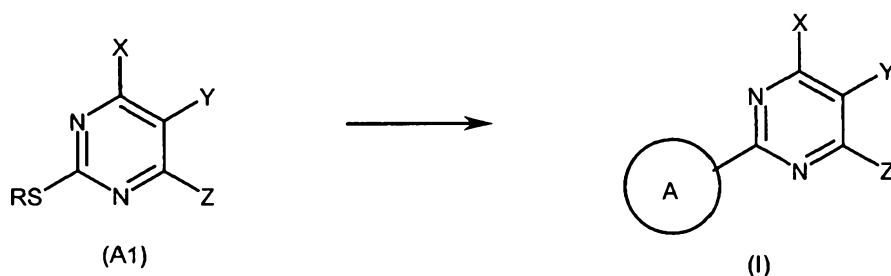
在第二實施例中(參見反應流程 3)，式(I)化合物(其中 A 為經由碳原子連接的基團)可製備於使合適的金屬或類金屬衍生物 A-M(例如硼酸或酯，三烷基錫衍生物，鋅衍生物或格納德試劑)與式(A)化合物在合適的鹼(例如無機鹼，例如磷酸鉀或氟化鈉，或有機鹼，例如三乙胺)、金屬來源(例如鈀來源例如 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$)存在下、視需要地，金屬的配位體(例如單一溶劑例如乙腈，或混合的溶劑系統，例如二甲氧基乙烷和水的混合物)之下進行反應。金屬觸媒和配位體亦可以單一、預成形的錯合物(例如鈀/膦錯合物，例如四三苯基磷鈀，雙(三苯基膦)鈀二氯化物或[1,1'-雙(二苯基膦基)二茂鐵]二氯化鈀)被添加。

反應流程 3



在另外實施例中，式(I)化合物可製備於式(A1)化合物，式(A1)化合物係為式 A 化合物，其中 LG 為烷硫基(參見以下反應流程 4)。

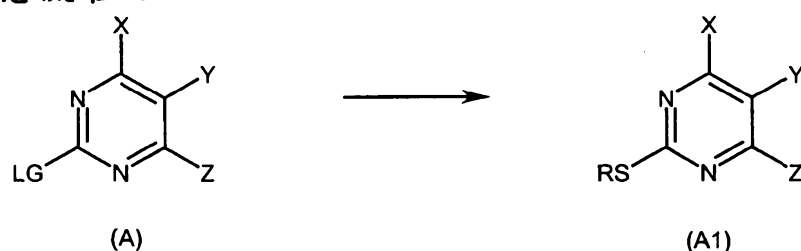
反應流程 4



例如，此類轉換作用係在金屬來源(例如鈀來源例如 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$)存在下、以及視需要金屬的配位體(例如膦配位體，例如三(2-呋喃基)膦，另外在合適溶劑(例如醚，例如四氫呋喃)中的金屬來源(例如銅錯合物，例如銅噻吩-2-羧酸鹽)下與環 A 的金屬或類金屬衍生物(例如硼酸或硼酸酯)反應而進行。金屬觸媒和配位體亦可以單一、預成形的錯合物(例如鈀/膦錯合物，例如四三苯基磷鈀，雙(三苯基膦)鈀二氯化物或[1,1'-雙(二苯基膦基)二茂鐵]二氯化鈀)被添加。

式(A1)化合物可製備於使式(A)化合物與烷硫醇鹽(例如甲烷硫醇鈉)在合適的溶劑(例如極性溶劑，例如甲醇)中反應。參見以下反應流程 5。

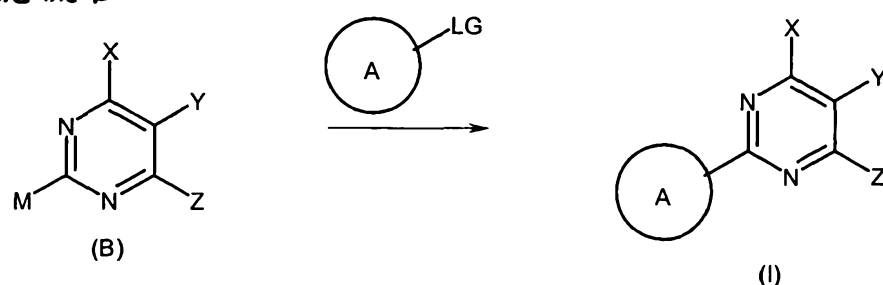
反應流程 5



式(I)化合物亦可製備於式(B)化合物(其中 M 代表合適

的金屬或類金屬衍生物(例如硼酸或酯，三烷基錫基團，適合的經取代矽烷基，鋅衍生物或鹵化鎂)與化合物 A-LG 的反應，其中 LG 代表離去基團例如鹵原子或磺酸酯(參見以下的反應流程 5)。

反應流程 6

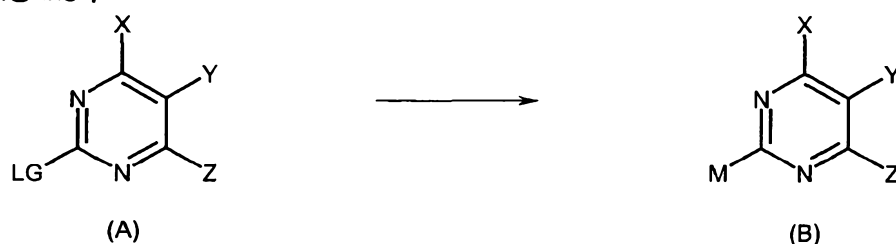


例如，式(I)化合物可製備於式(B)化合物(其中 M 代表硼酸基團)與化合物 A-LG 在金屬觸媒(例如鈀衍生物，例如 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$)存在下、視需要與合適的配位體(例如膦，例如 X-Phos)以及鹼(例如磷酸鉀或氟化鈉)進行反應。

式(B)化合物可自不同的式(B)化合物及使用轉換金屬化反應加以製備。例如，式(B)化合物(其中 M 為硼酸者)可藉由式(B)化合物(其中 M 為鹵化鎂)與三烷基硼酸酯反應，接著藉水解(例如在酸性條件下)而加以製備。

可替代地，式(B)化合物可製備於式(A)化合物(如反應流程 7 所圖式者)。

反應流程 7



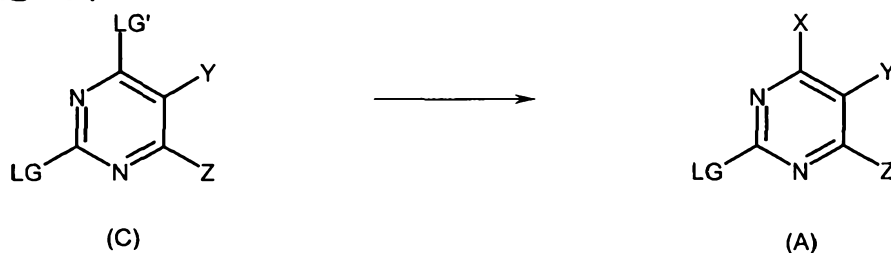
例如，式(B)化合物(其中 M 為硼酸酯或三烷基錫)可使用合適的含 M 試劑(例如頻那醇硼烷，雙戊醯二硼，六烷基

二錫)、在金屬觸媒(例如鈀物質, 例如雙(二苯基膦)二氯化鈀)存在下、於合適的溶劑(例如醚, 例如二噁烷)中處理式(A)化合物而加以製備。

可替代地, 式(B)化合物(其中 M 為鹵化鎂)可使用合適的格納德試劑(例如異丙基鹵化鎂, 例如異丙基氯化鎂)在合適的溶劑中處理式(A)化合物而加以製備。

式(A)化合物可製備自式(C)化合物(其中 LG' 為第二離去基, 該離去基可與 LG 相同或不相同(反應流程 8)。

反應流程 8



例如, 式(A)化合物可製備自式(C)化合物與試劑 X-H 或 X⁻在合適溶劑(例如醚溶劑, 例如四氫呋喃)中的反應。試劑 X⁻可藉由添加合適的鹼至 X-H 而原地製備, 或者其可經個別製備且以合適的鹽添加。

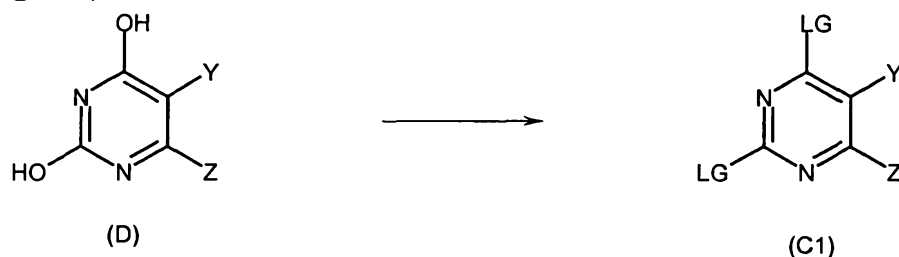
在一替代性實施例中, 可使用被保護的 X-H(例如肟可作為被保護的羥基胺版以合成化合物中 X 為=ONH₂)-選擇合適的保護基團以及用於除去其等的條件對此技藝人士係熟習的。

作為額外實施例, 式(A)化合物可製備自式(C)化合物與試劑 X-H 在合適觸媒(例如金屬觸媒, 例如鈀來源)以及視需要的合適配位體(例如膦配位體, 例如 Josiphos)於合適的溶

劑中進行處理而加以製備。

式(C1)化合物(其係為式(C)化合物，其中 LG 為與 LG' 相同且為，例如鹵原子或磺酸鹽)可製備於式(D)化合物(反應流程 9)。

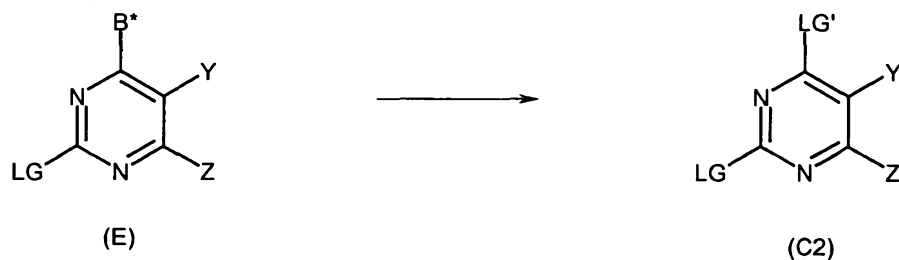
反應流程 9



例如，式(C1)化合物(其中 LG 為鹵原子者)可製備於在視需要的合適鹼(例如有機鹼，例如 N,N-二乙苯胺)以合適的試劑(例如磷氧基鹵化物，例如磷醯氯(phosphorus oxychloride))處理式(D)化合物而加以製備。

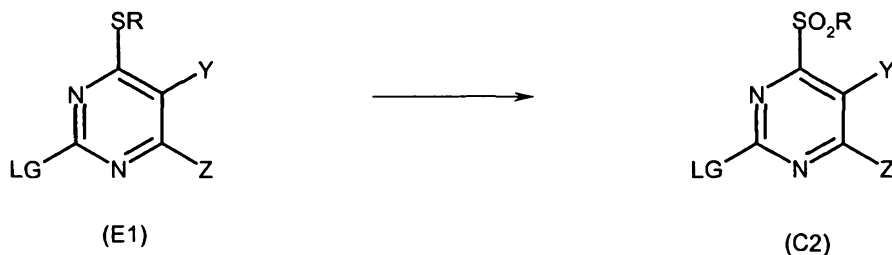
式 C2 化合物(亦即式(C)化合物，其中 LG 和 LG' 係不同的)可製備於式(E)化合物(其中 B*代表至 LG' 的合適前驅物基團(反應流程 10))。

反應流程 10



例如，式(C2)化合物(其中 LG' 為碘者)可製備於式(E1)化合物(其中 B* 為硫醚基團)與合適的氧化劑(例如過酸，例如間-氯過苯甲酸)的反應(反應流程 11)。

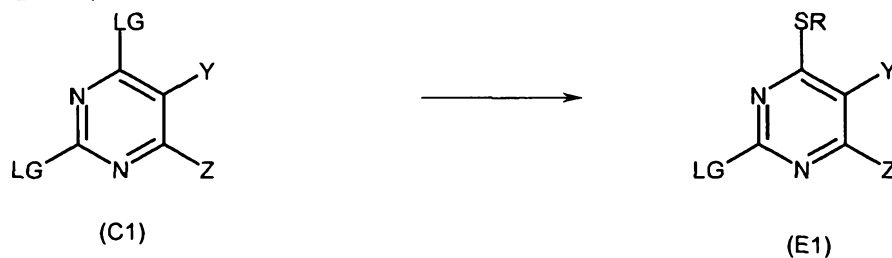
反應流程 11



式(E)化合物可使用 B*-H 或 B*-處理式(C1)化合物而加以製備。

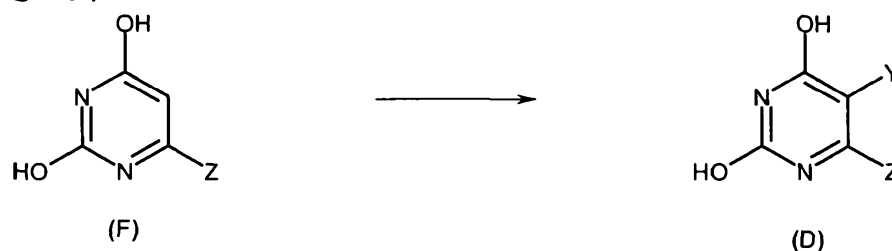
例如，式(E1)化合物可製備於式(C1)化合物與硫醇或硫醇化物陰離子於視需要在合適的鹼及在合適溶劑存在下的反應(參見反應流程 12)。

反應流程 12



式(D)化合可藉由使式(F)化合物與合適的正電性 Y 的來源的反應而加以製備(如以下反應流程 13 所示)。

反應流程 13



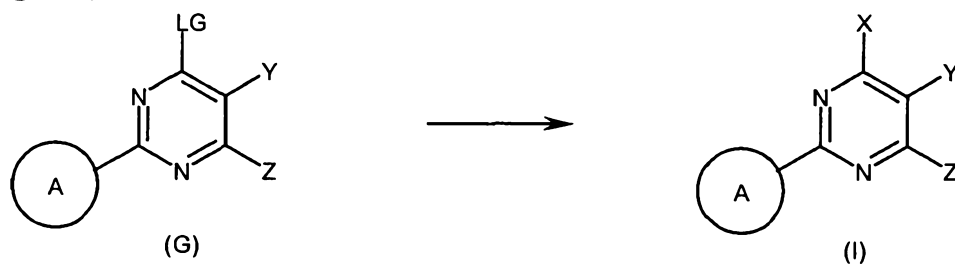
例如，式(D)化合物(其中 Y 為鹵者)可製備於式(F)化合

物與 N-鹵琥珀醯亞胺(例如 N-氯琥珀醯亞胺)的反應。

式(F)化合物係為文獻中所習知者，或者可輕易地自為文獻中習知化合物藉為此技藝人士熟習的例行方法加以製備。

式(I)化合物亦可自式(G)化合物加以製備(如以下反應流程 14 所示)。

反應流程 14



例如，式(I)化合物可製備自式(G)化合物與試劑 X-H 或 X⁻在合適溶劑(例如甲醇或水)中的反應。試劑 X⁻可藉由添加合適的鹼至 X-H 而原地製備，或者其可經個別製備且以合適的鹽添加。

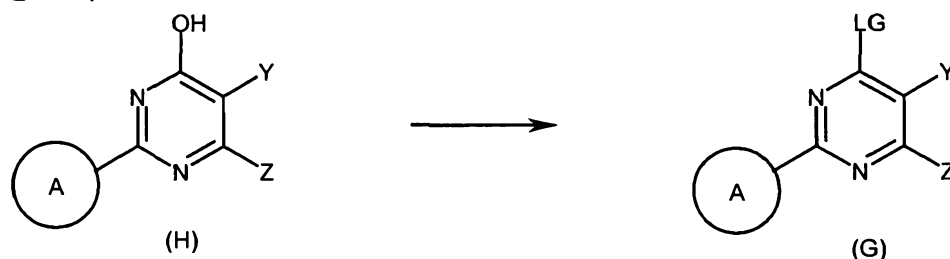
在一替代性實施例中，可使用被保護的 X-H(例如肟可作為被保護的羥基胺版以合成化合物中 X 為=ONH₂)-選擇合適的保護基團以及用於除去其等的條件對此技藝人士係熟習的。

作為另一實施例，式(I)化合物可製備自式(G)化合物與試劑 X-H 在合適觸媒(例如金屬觸媒，例如鈀來源)以及視需要的合適配位體(例如膦配位體，例如 Josiphos)於合適的溶劑中進行處理而加以製備。

式(G)化合物可製備於式(H)化合物，如以下反應流程

15 所示。

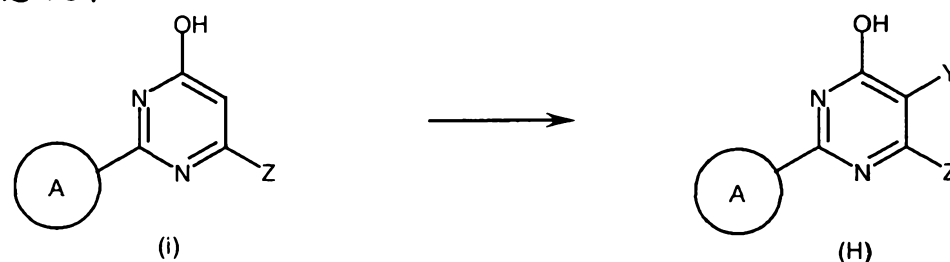
反應流程 15



例如，式(G)化合物(其中 LG 為鹵原子者)可製備於以視需要的合適鹼(例如有機鹼，例如 N,N-二乙苯胺)以合適的試劑(例如磷氧基鹵化物，例如磷醯氯)處理式(H)化合物而加以製備。

式(H)化合物可製備於式(i)化合物，其係藉由與合的正電性 Y 來源的反應，如以下反應流程 16 所示。

反應流程 16

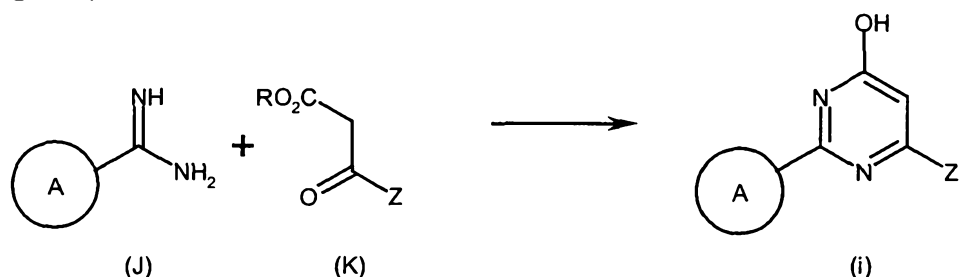


例如，式(H)化合物(其中 Y 為鹵者)可製備於式(i)化合物，其係藉與 N-鹵琥珀醯亞胺(例如 N-氯琥珀醯亞胺)於合適的溶劑(例如二甲基甲醯胺)存在下的反應，或者與金屬次鹵酸鹽(例如次氯酸鈉)於合適的溶劑例如酸性水中反應。

式(i)化合物可製備於式(J)脒與合適的式(K)的酮酯反

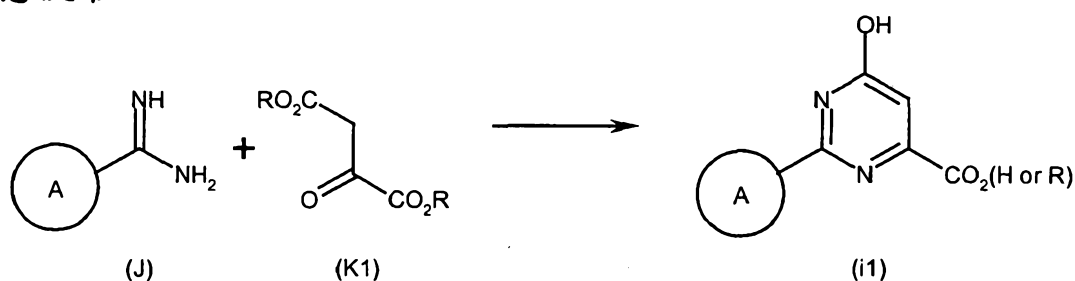
應，如以下流程 17 所示。

反應流程 17



例如，式(i1)化合物(其中式(i)化合物其中 Z 為羧酸或酯)可製備於式(J)脒與式(K1)的草醯乙酸二酯(亦即式(K)化合物，其中 Z 為 CO_2R)、視需要在合適的鹼(例如無機鹼，例如氫氧化鈉)、於合適溶劑(例如水)的存在之下的反應，參見以下反應流程 18。二酯(K1)亦可以鹽的形式(例如鈉鹽)供使用。

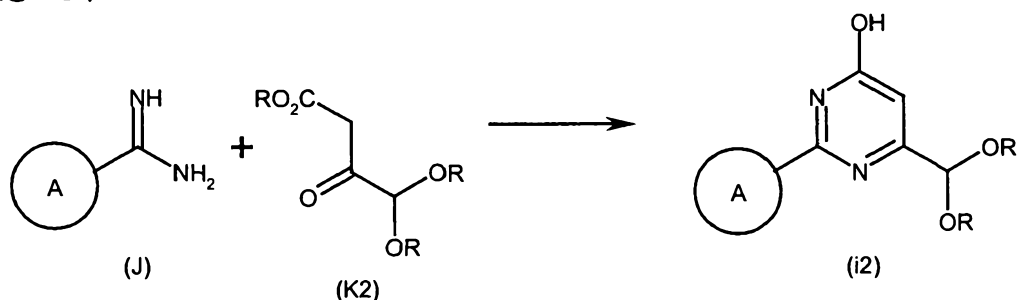
反應流程 18



在額外的實施例中(反應流程 19)，式(i2)化合物(亦即式(i)化合物，其中 Z 為乙醯基團)可製備於式(J)脒與式(K2)酮酯(亦即式(K)化合物，其中 Z 為 $\text{CH}(\text{OR})_2$)在鹼(例如烷氧化物鹼，例如甲氧化鈉)及於合適的溶劑(例如醇類，例如甲醇)

的存在之下縮合反應。

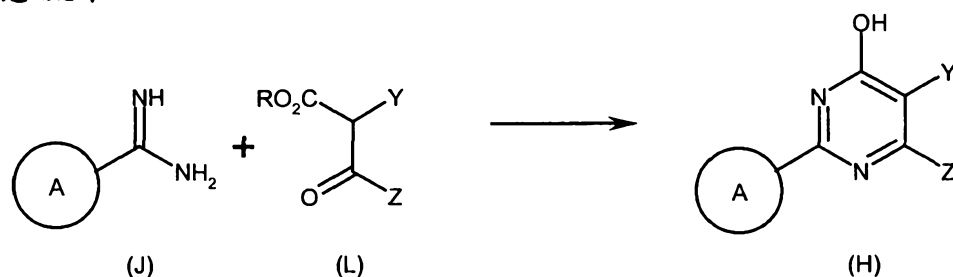
反應流程 19



式(J)化合物和二酯(K)係為文獻中所習知者或者可輕易地自為文獻中習知化合物藉為此技藝人士熟習的例行方法加以製備。

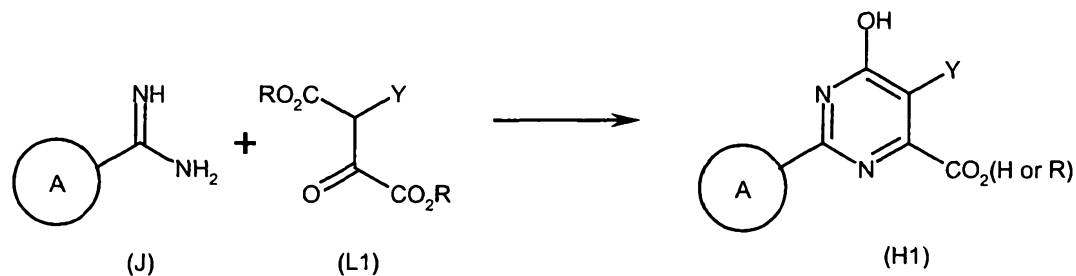
式(H)化合物可製備於式(J)脒與合適的式(L)酮酯的反應(反應流程 20)。

反應流程 20



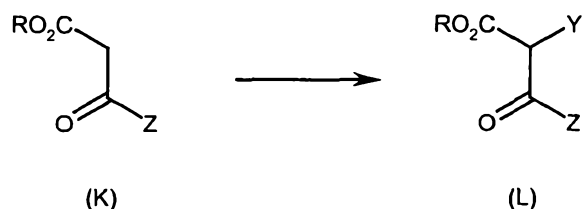
例如，式(H1)化合物(亦即式(H)化合物其中 Z 為羧酸或酯)可製備於式(J)脒與式(L1)的草醯乙酸二酯(亦即式(L)化合物，其中 Z 為 CO_2R)、視需要在合適的鹼(例如無機鹼，例如氫氧化鈉)、於合適溶劑(例如水)的存在之下的反應，參見以下反應流程 21。二酯(L1)亦可以鹽的形式(例如鈉鹽)供使用。

反應流程 21



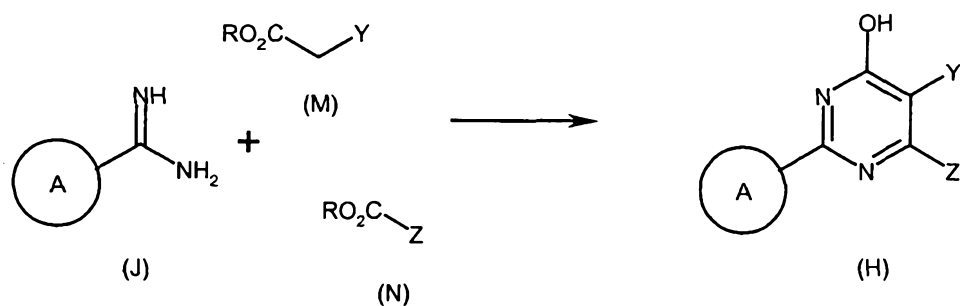
式(L)化合物係為文獻中所習知者，或者可藉由為熟悉此技藝人士所習知的方法製備。

反應流程 22



式(H)化合物可製備於式(J)脒與經取代的式(M)乙酸酯以及式(N)酯(其中 Z 係如以上所定義者)在鹼(例如烷氧化物鹼，例如乙氧化鈉)及合適溶劑(例如醇類，例如乙醇)存在下的縮合反應而加以製備(如在以下的反應流程 23 所圖示者)。

反應流程 23

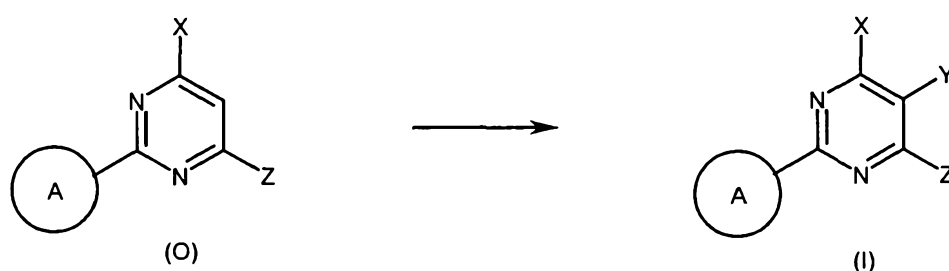


式(H1)化合物可製備於式(J)脒與式(M)的乙酸酯以及式(N1)草酸二乙酯(亦即式(N)化合物中 Z 為羧酸酯)的反應。

式(M)和式(N)化合物係為文獻中所習知者。

式(I)化合物亦可藉由式(O)化合物與合適的親電性 Y 來源的反應而加以製備(反應流程 24)。

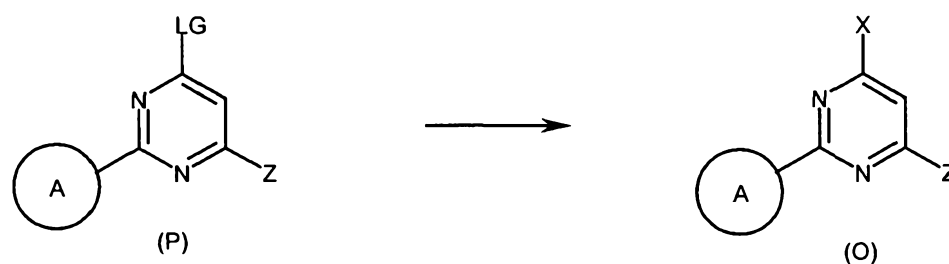
反應流程 24



例如，式(I)化合物(其中 Y 為鹵者)可製備於式(O)化合物，其係藉與 N-鹵琥珀醯亞胺(例如 N-氯琥珀醯亞胺)於合適的溶劑(例如二甲基甲醯胺)存在下的反應。

式(O)化合物亦可製備於式(P)化合物(反應流程 25 所示)，其中 LG 代表離去基團(例如，鹵素，磺酸酯或硼)。

反應流程 25



例如，式(O)化合物可製備自式(P)化合物與試劑 X-H 或 X⁻在合適溶劑(例如醚溶劑，例如四氫呋喃)中的反應。試

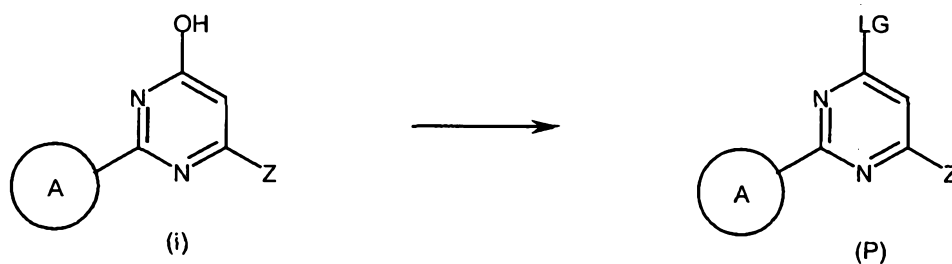
劑 X^- 可藉由添加合適的鹼至 $X-H$ 而原地製備，或者其可經個別製備且以合適的鹽添加。

在一替代性實施例中，可使用被保護的 $X-H$ (例如肟可作為被保護的羥基胺版以合成化合物中 X 為 $=ONH_2$) - 選擇合適的保護基團以及用於除去其等的條件對此技藝人士係熟習的。

作為另一實施例，式 (O) 化合物可製備自式 (P) 化合物與試劑 $X-H$ 在合適觸媒 (例如金屬觸媒，例如鈀來源) 以及視需要的合適配位體 (例如膦配位體，例如 Josiphos) 於合適的溶劑中進行處理而加以製備。

根據以下所示的反應流程，式 (P) 化合物可製備於式 (i) 化合物。

反應流程 26

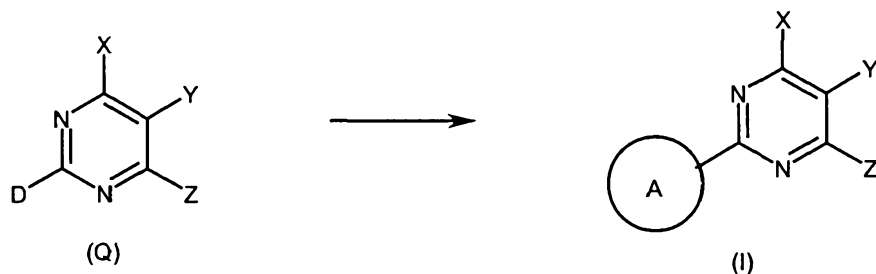


例如，式 (P) 化合物 (其中 LG 為鹵原子者) 可製備於在視需要的合適鹼 (例如有機鹼，例如 N,N -二乙苯胺) 以合適的試劑 (例如磷氧基鹵化物，例如磷醯氯) 處理式 (i) 化合物而加以製備。

式 (I) 化合物 (其中 A 係為環) 亦可製備於式 (Q) 化合物 (其中 D 代表合適的環化前驅物)，其係藉由形成環 A 的反應而完成 (參見反應流程 27)。合適的環化前驅物的實例包

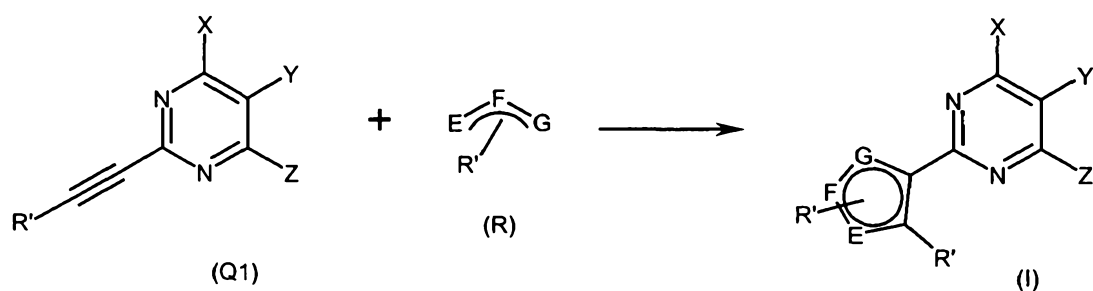
括包含碳-碳的基團以及碳-雜原子雙鍵或參鍵，例如烯類，羰基，肟或炔類。

反應流程 27



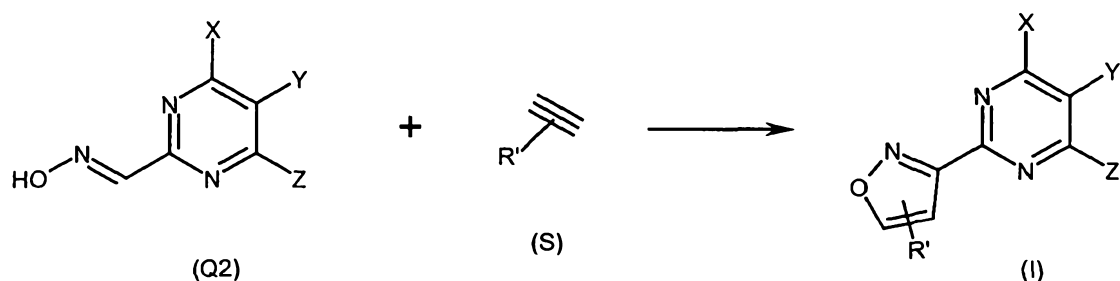
例如(如同反應流程 28 中所示者)，式(I)化合物(其中 A 係為 5-員雜芳香環)可製備於式(Q1)化合物，其係為式(Q)化合物中 D 為炔類，其係藉由與合適的 1,3-偶極物質 R(其中 E、F 和 G 其中一或多個為雜原子，例如疊氮或腈氧化物)反應而製備。

反應流程 28



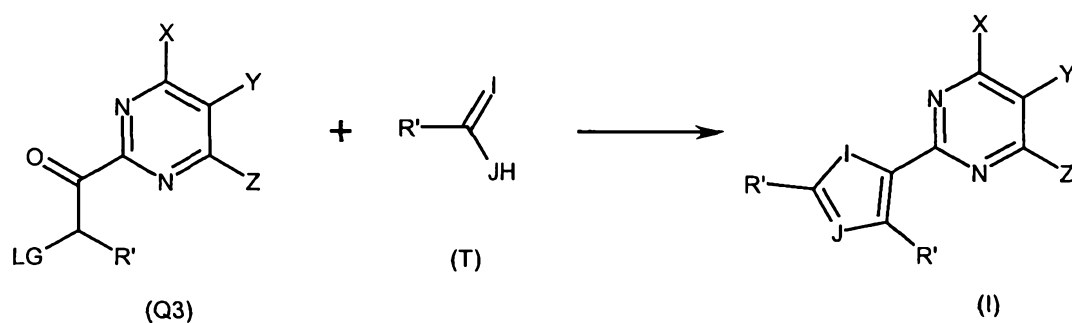
在另外實施例中(參見反應流程 29)，式(I)化合物(其中 A 係為異噁唑)可製備於首先以式(Q2)的肟(亦即式(Q)化合物，其中 D 為乙醛肟)與氧化劑(例如 N-鹵琥珀醯亞胺)於鹼存在下反應，然後與式(S)烯類在合適的條件下反應。

反應流程 29



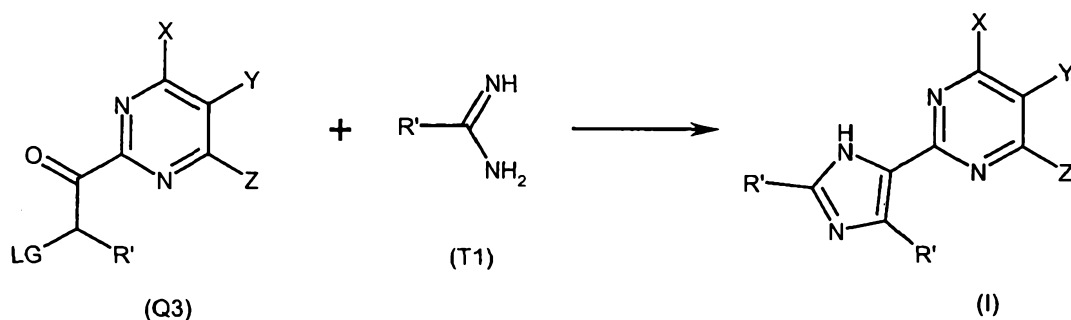
在另外實施例中(反應流程 30)，式(I)化合物可製備於式(Q3)化合物(其係為式(Q)化合物，其中 D 為含離去基的酮，例如鹵原子或磺酸酯)與式(T)酸衍生物的反應。

反應流程 30



例如(參見反應流程 31)，式(I)化合物(其中環 A 係為咪唑)可製備於式(Q3)化合物與式(T1)脒(其中式(T)化合物，其中 I 及 J 同為 N-H 基團)的反應。

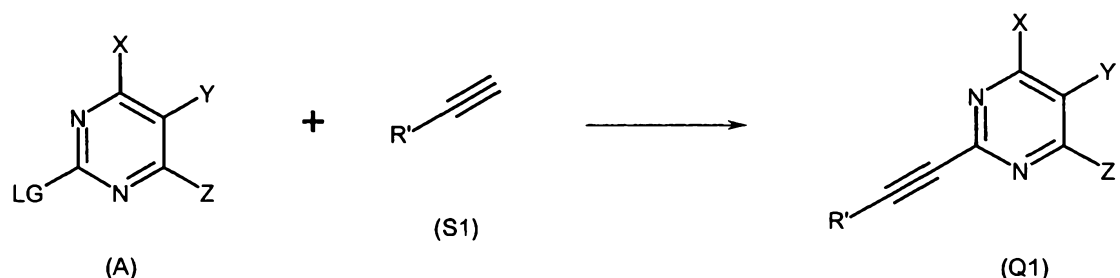
反應流程 31



式(R)，(S)以及(T)化合物為習知者或可使用為此技藝人士所習知的使用輕易的製備。

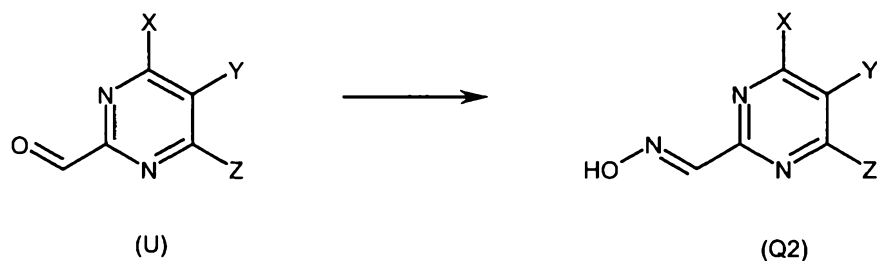
式(Q1)化合物可藉由 Sonogashira 類型反應而製備於式(A)化合物與(S1)炔(亦即式(S)炔，其中至少一取代基為氫原子)的反應(參見反應流程 32)。

反應流程 32



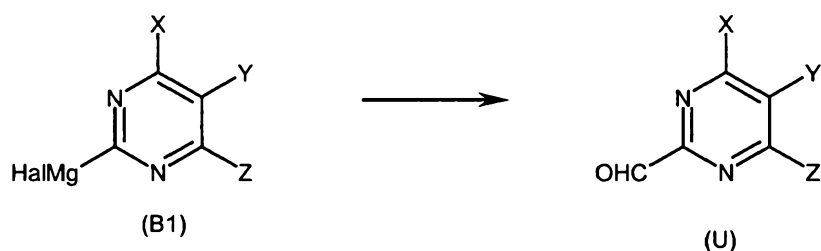
式(Q2)化合物可在鹼(例如有機鹼，例如三乙胺)存在下自式(U)化合物(參見反應流程 33)與羥基胺或羥基胺鹽的反應而加以製備。

反應流程 33



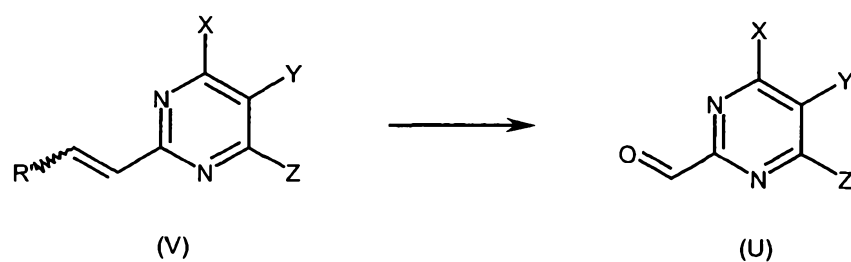
式(U)化合物可製備於式(B1)化合物(其係為式(B)化合物，其中 M 為 MgHal)與甲醯胺例如二甲基甲醯胺的反應而加以製備(參見反應流程 34)。

反應流程 34



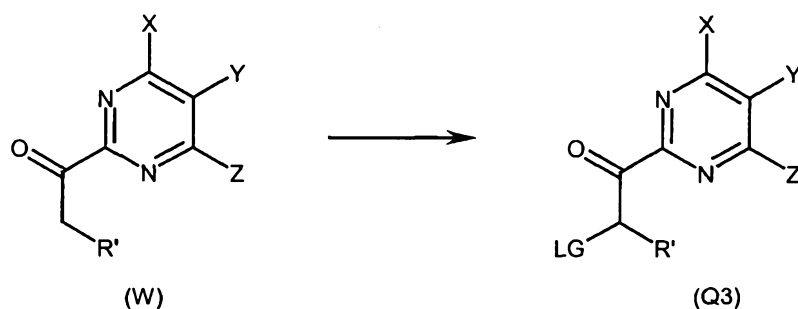
可替代地(反應流程 35)，式(U)化合物可藉由氧化分離雙鍵(例如藉臭氧處理)而製備於式(V)化合物。

反應流程 35



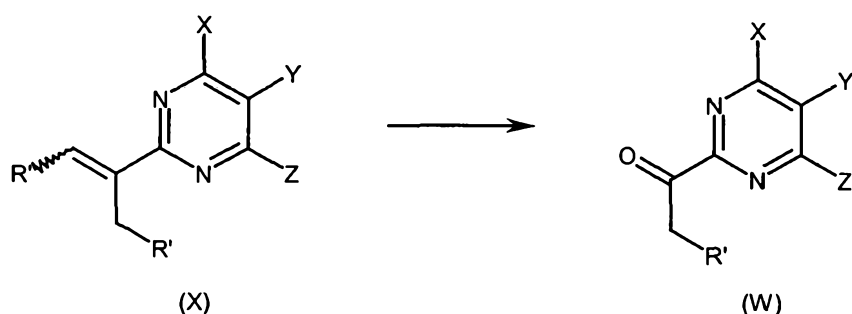
式(Q3)化合物可在視需要合適鹼的存在之下製備於式(W) (參見反應流程 36)與合適氧化劑(例如 N-鹵琥珀醯亞胺，如果 LG 為鹵原子)的反應。

反應流程 36



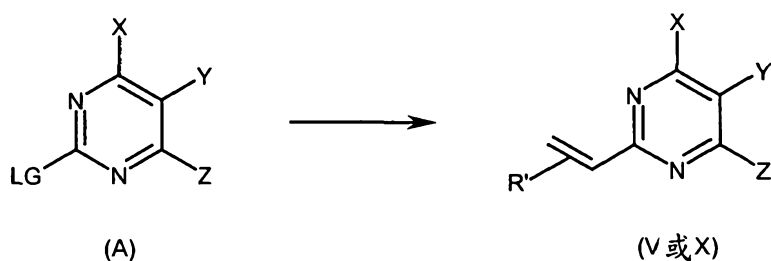
式(W)化合物可藉由氧化分離雙鍵(例如藉臭氧處理)而製備於式(X)化合物(反應流程 37)。

反應流程 37



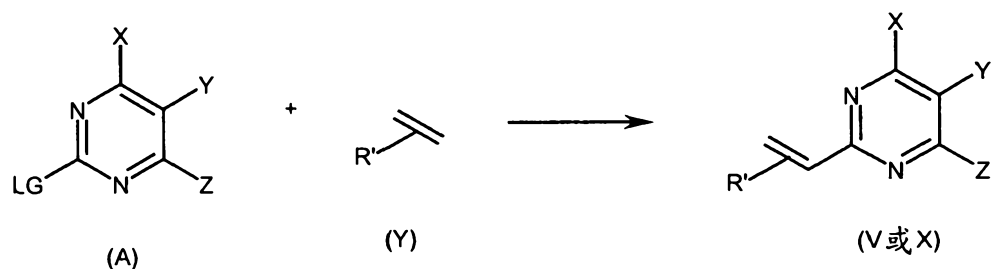
式(V)或式(X)化合物可藉使用許多為文獻中習知的反應之一自式(A)化合物加以製備(如以下反應流程所示者)。

反應流程 38



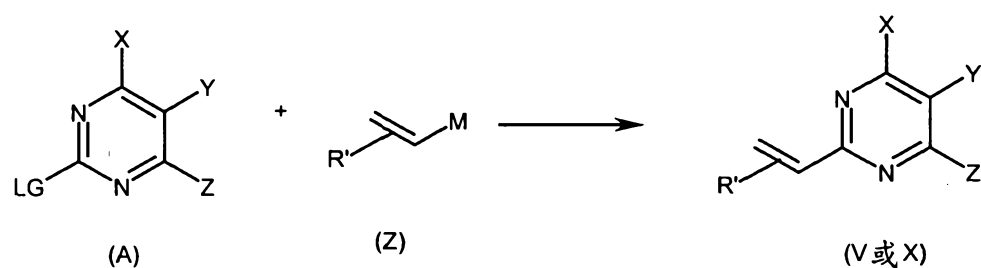
例如(參見反應流程 39), 式(V)或式(X)化合物可在 Heck 反應條件之下製備於式(A)化合物與式(Y)烯類的反應。

反應流程 39



在另外實施例中(參見反應流程 40), 式(V)或式(X)化合物可製備於式(A)化合物與式(Z)化合物(其中 M 代表金屬或類金屬物質(例如硼酸或酯, 三烷基錫基團), 在每一種特定金屬的合適條件下(例如使用用於 Suzuki-Miyaura 反應, 當 M 為硼酸或硼酸酯)的反應。

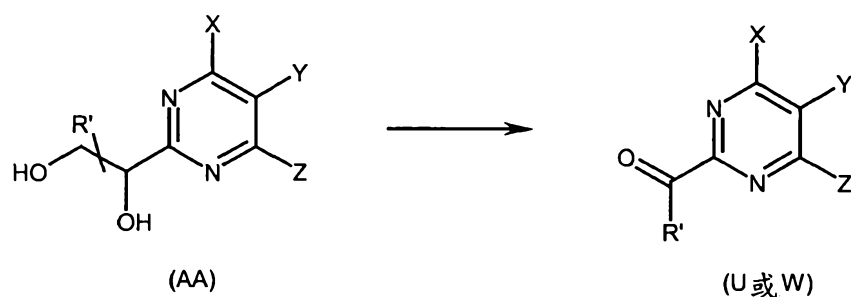
反應流程 40



式(Z)化合物係為習知, 或者可使用文獻中習知的標準方法製備於習知化合物。

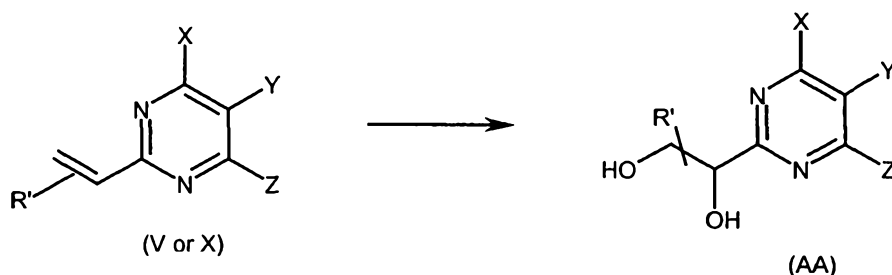
或者, 式(U)或式(W)化合物的製備可使用合適的氧化劑(例如過碘酸鈉)(參見反應流程 41)處理式(AA)化合物而進行。

反應流程 41



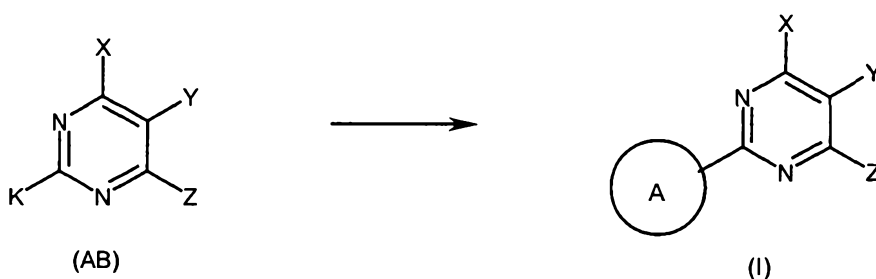
式(AA)化合物的製備可使式(V)或式(X)化合物(參見反應流程 42)與合適的二羥基化劑(例如鐵物質，例如四氧化鐵)反應而製備。

反應流程 42



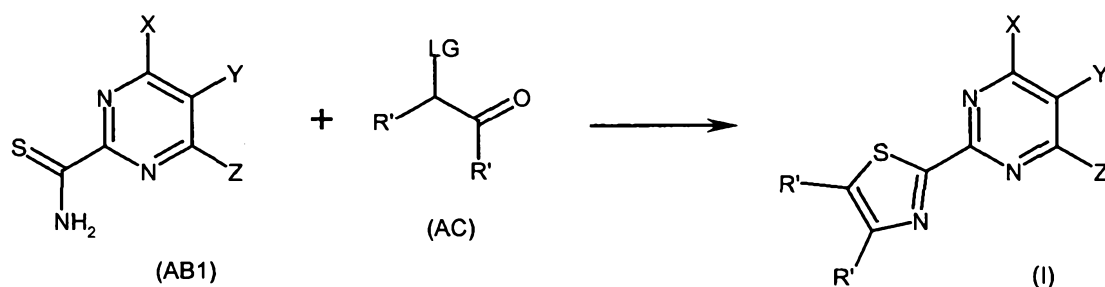
式(I)化合物可製備於使用合適的包含官能基化羧基的化合物式(AB)化合物(其中 K 為羧酸衍生物，例如醯胺或硫醯胺)進行縮合反應(參見以下的反應流程 43)。

反應流程 43



例如(如反應流程 44 所示)，式(I)化合物(其中 A 為噻唑)可製備於使式(AB1)硫醯胺(其係為式(AB)化合物，其中 K 為硫醯胺基團)與式(AC)化合物(其中 LG 為離去基團，例如鹵素或磺酸鹽)反應

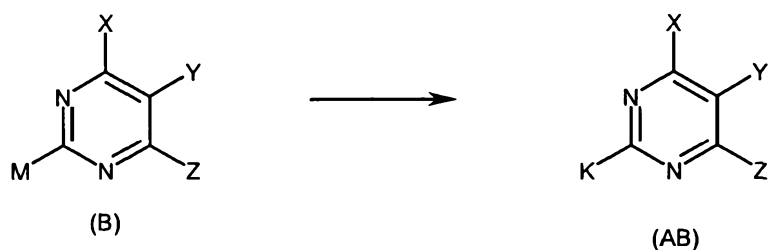
反應流程 44



式(AC)化合物為習知化合物或者可使用為此技藝所習知的例行方法加以製備。

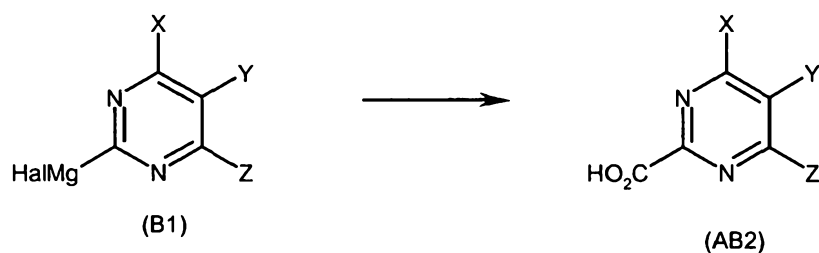
式(AB)化合物可製備於式(B)化合物與 K 基團的親電性來源的反應(參見以下的反應流程 45)。

反應流程 45



例如，式(AB2)化合物(其係為式(AB)化合物，其中 K 為羧酸)可製備於式(B1)化合物與二氧化碳在合適溶劑的反應(反應流程 46)。

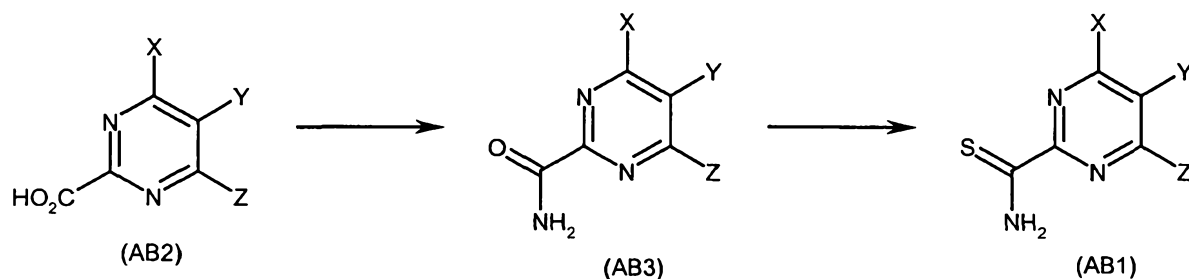
反應流程 46



式(AB)化合物可製備於其他式(AB)化合物，其係使用為此技藝所習知的且為技藝人士所熟悉的轉換作用。例如(參見反應流程 47)，式(AB1)化合物可製備於首先在習知條

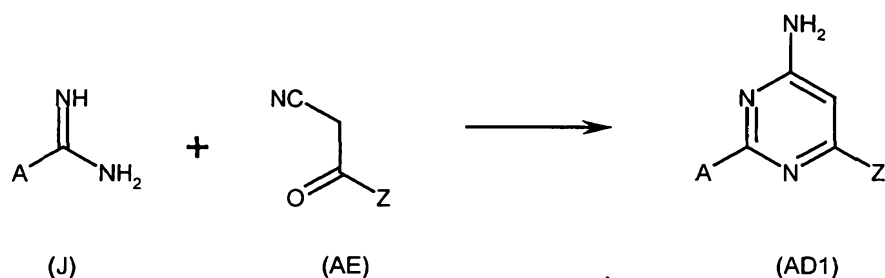
件之下從式(AB2)化合物形成式(AB3)醯胺(其係為式(AB)化合物，其中 K 為離去基團)，接著與合適的硫磺酸鹽試劑例如五硫化磷或 Lawesson 氏試劑進行反應。

反應流程 47



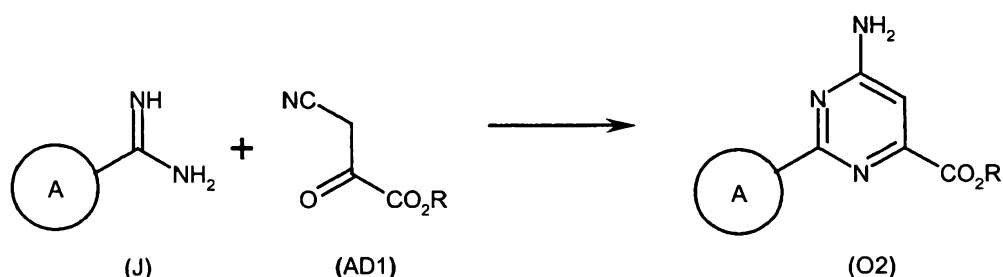
式(O1)化合物(其係為式(O)化合物，其中 $\text{X}=\text{NH}_2$)可製備於(參見反應流程 48)式(J)脒與式(AD)氰酮在鹼(例如烷氧化物鹼，例如甲氧化鈉)及合適溶劑(例如醇類，例如乙醇)存在之下的反應。

反應流程 48



例如(反應流程 49)，式(O2)化合物(其係為式(O)化合物，其中 $\text{X}=\text{NH}_2$ 以及 Z 為 CO_2R)可製備於式(J)脒與式(AD1)氰丙酮酸酯(其係為式(AD)化合物，其中 Z 為 CO_2R)的反應。在一實施例中，式(AD1)化合物可首先與烷基化劑(例如甲基化劑，例如二甲基硫酸鹽)於鹼(例如無機鹼，例如碳酸氫鈉)存在下反應而形成烯醇醚，其然後與式(J)脒於鹼(例如烷氧化物鹼，例如甲氧化鈉)的存在下反應。

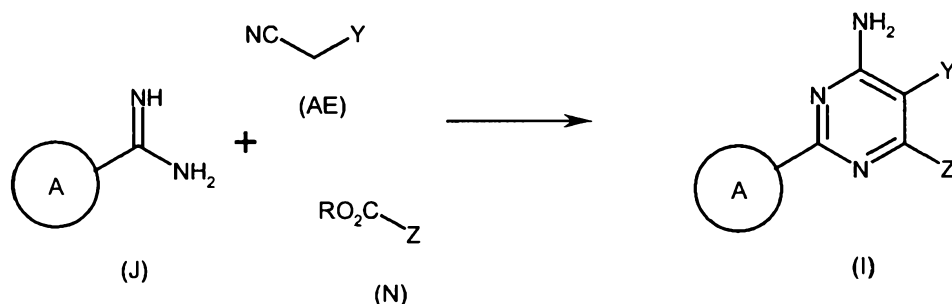
反應流程 49



式(AD)化合物係為習知者或可使用為此技藝人士所熟悉的方法加以製備。

式(I)化合物(其中 $X=\text{NH}_2$)可製備於(參見反應流程 50)式(J)脒與式(AE)經取代的乙腈酸酯以及式(N)酯在鹼(例如烷氧化物鹼，例如乙氧化鈉)及合適溶劑(例如醇類，例如乙醇)存在下的縮合反應而加以製備

反應流程 50

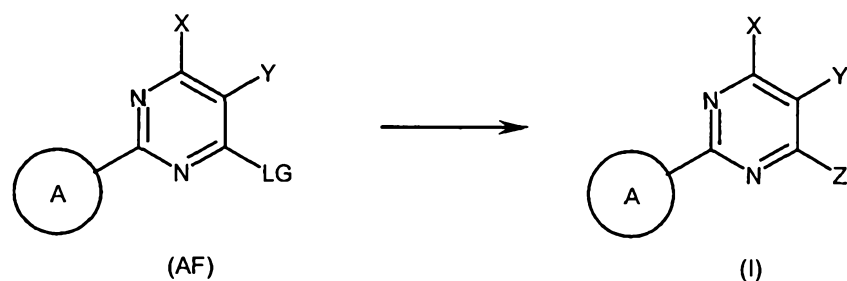


例如，式(I)化合物(其中 $X=\text{NH}_2$ ，以及 Z 為 CO_2R)可製備於式(J)脒與經取代的式(AC)乙腈和式(N1)草酸二酯的反應。

式(AE)化合物係為文獻中所習知的。

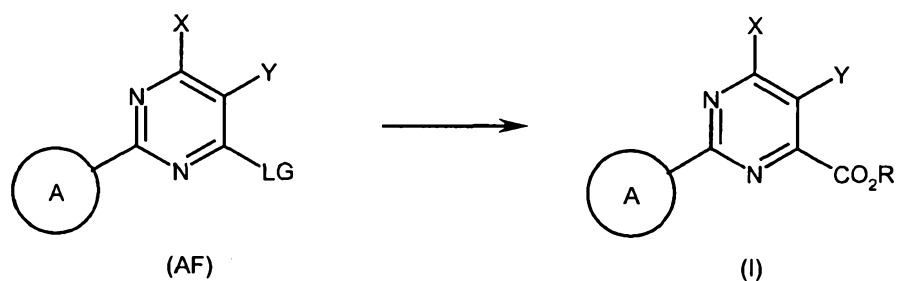
式(I)化合物亦可製備於式(AF)化合物(參見反應流程 51)(其中 LG 為合適的離去基團，例如鹵素原子或磺酸鹽)。

反應流程 51



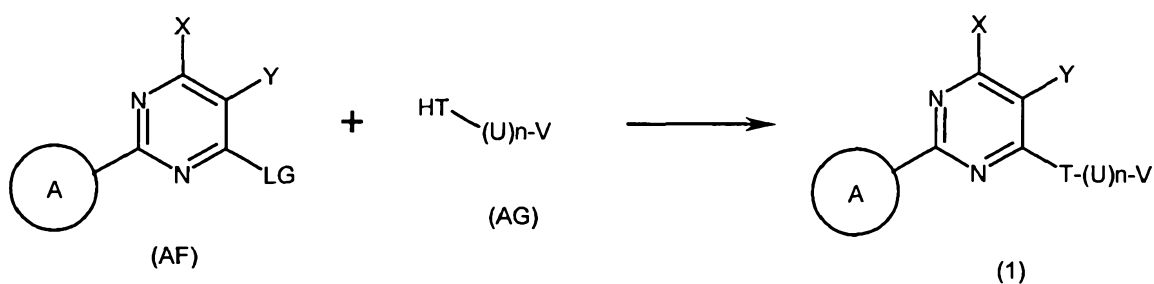
例如(參見反應流程 52), 式(I)化合物(其中 Z 為 CO_2R)可製備於式(AF)化合物與 ROH 醇和一氧化碳在合適的觸媒(例如鈀試劑, 例如雙(三苯基膦)二氯化鈀)和合適鹼(例如有機鹼, 例如三乙胺)存在之下的反應。可方便地在一氧化碳大氣之下或提高壓力下進行。

反應流程 52



可替代地(參見反應流程 53), 式(I)化合物(其中 Z 為 $\text{T}-(\text{U})_n-\text{V}$)可製備於式(AF)化合物與式(AG)化合物在鹼(例如氫化鈉)及合適溶劑(例如醚類, 例如四氫呋喃)存在下的反應。

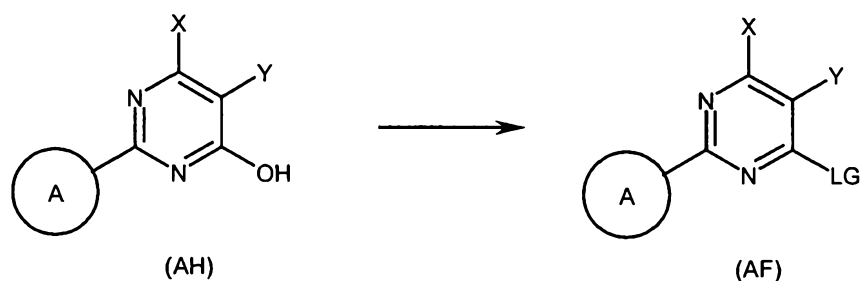
反應流程 53



式(AG)化合物為習知化合物，或者可使用此技藝所習知的方法加以製備。

式(AF)化合物可製備於式(AH)化合物與合適試劑反應而製備(反應流程 54)。

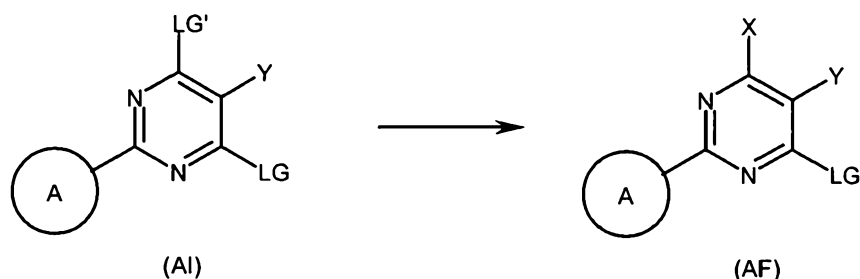
反應流程 54



例如，式(AF)化合物(其中 LG 為鹵原子者，例如氯原子)可製備於式(AH)化合物在視需要合適鹼(例如有機鹼，例如 N,N-二乙苯胺)與相對應磷醯基鹵化物(例如磷醯氯)處反應。

可替代地(參見反應流程 55)，式(AF)化合物亦可製備於式(AI)化合物(其中 LG 及 LG' 可為相同或不同且為離去基團，例如鹵原子或磺酸鹽)。

反應流程 55



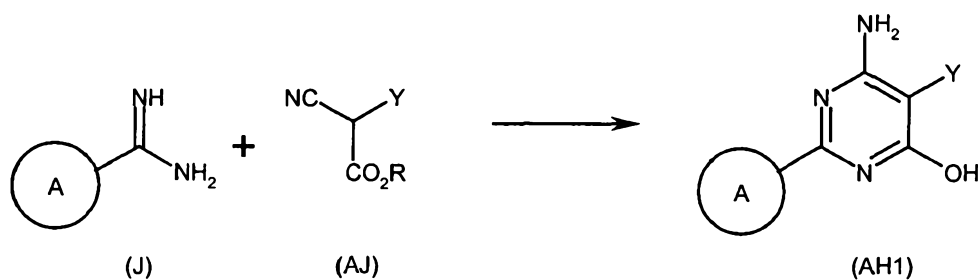
例如，式(AF)化合物可製備自式(AI)化合物與試劑 X-H 或 X⁻在合適溶劑(例如醚溶劑，例如四氫呋喃)中的反應。試劑 X⁻可藉由添加合適的鹼至 X-H 而原地製備，或者其可經個別製備且以合適的鹽添加。

在另一實施例中，可使用被保護的 X-H(例如肟可作為被保護的羥基胺版以合成化合物中 X 為=ONH₂)-選擇合適的保護基團以及用於除去其等的條件對此技藝人士係熟習的。

作為另一實施例，式(AF)化合物可製備自式(AI)化合物與試劑 X-H 在合適觸媒(例如金屬觸媒，例如鈀來源)以及視需要的合適配位體(例如膦配位體，例如 Josiphos)於合適的溶劑中進行處理而加以製備。

式(AH1)化合物(其係為式(AH1)化合物，其中 X=NH₂)可製備於式(J)脒與式(AJ)氰基乙酸酯於合適鹼(例如有機鹼，例如 DBU)於合適溶劑(例如極性非質子溶劑，例如二甲基甲醯胺)中的反應(參見以下反應流程 56)。

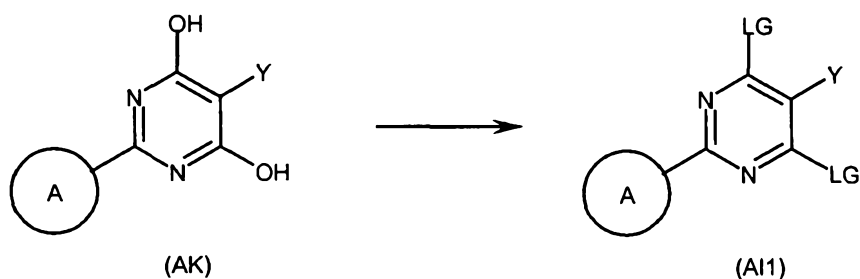
反應流程 56



式(AJ)化合物係為文獻中所習知者，或者可藉文獻中的標準方法加以製備。

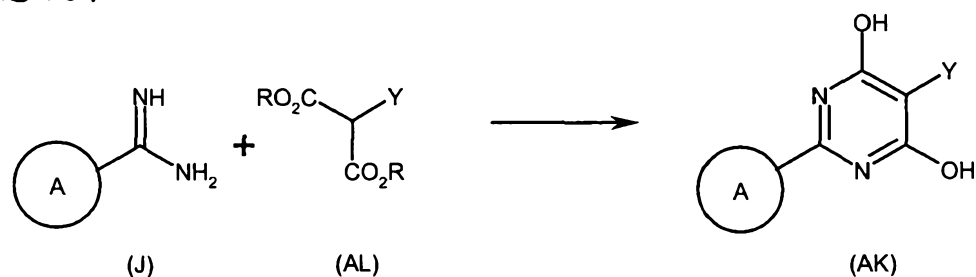
式(AI1)化合物(其係為式(AI)化合物，其中 LG=LG')可製備於式(AK)與合適的試劑例如磷醯基鹵化物或磺醯基酐(參見以下反應流程 57)的反應。

反應流程 57



例如，式(AI1)化合物(其中 LG 和 LG' 為鹵原子者)可製備於視需要在合適鹼(例如有機鹼，例如 N,N-二乙苯胺)存在下以鹵化試劑(例如磷醯基鹵化物，例如磷醯氯)與式(AK)化合物反應而加以製備。式(AK)化合物可製備於式(J)脒與式(AL)丙二醯二酯(參見以下反應流程 587)在合適鹼(例如有機鹼，例如 DBU)存在下以及在合適溶劑(例如極性非質子溶劑，例如 N-甲基吡咯啶酮)的反應。

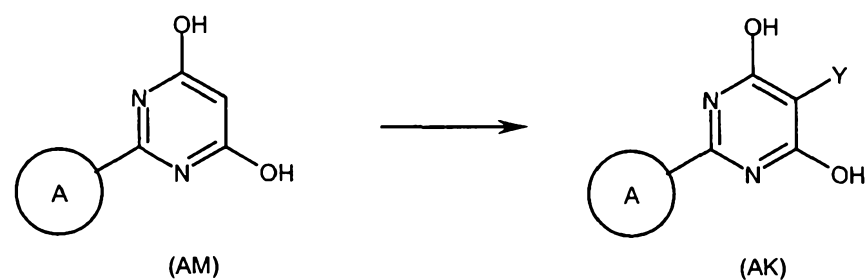
反應流程 58



式(AL)化合物為習知化合物，或者可使用此技藝所習知的方法加以製備。

可替代地，式(AK)化合物可製備於式(AM)化合物與合適正電子 Y 源反應而製備(反應流程 59)。

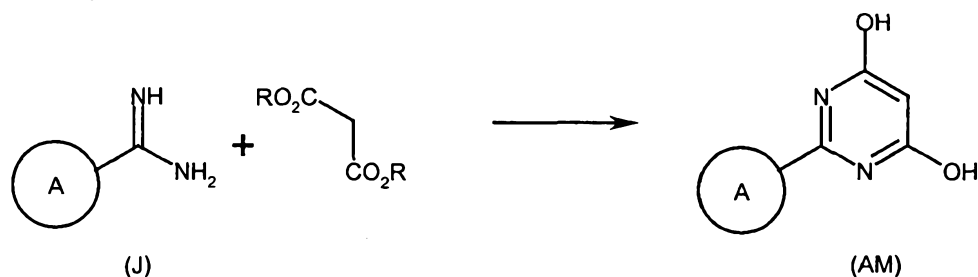
反應流程 59



例如，式(AK)化合物(其中 Y 為鹵素)可製備於式(AM)化合物與鹵化劑(例如 N-鹵琥珀醯亞胺，例如 N-氯琥珀醯亞胺，或元素鹵素，例如溴)的反應。

式(AM)化合物可製備於式(J)脒和丙二醯二酯的反應(反應流程 60)。

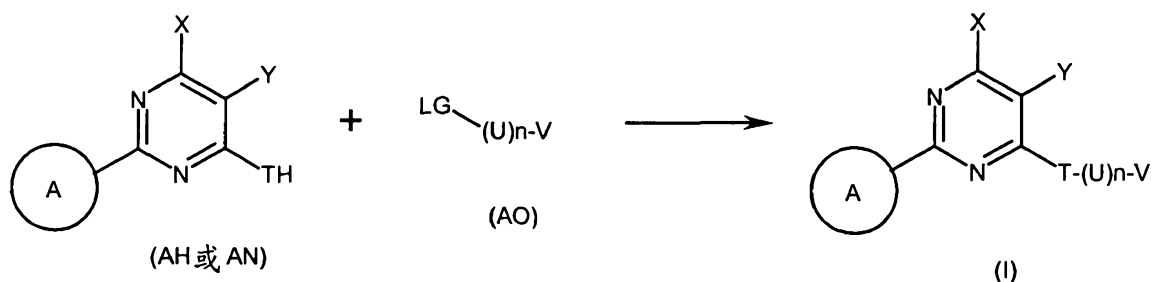
反應流程 60



丙二醯二酯為文獻中所習知者。

式(I)化合物(其中 Z 為 T-(U)_n-V)可製備於式(AH)或式(AN)化合物與式(AO)化合物(參見以下反應流程 61)(其中 LG 為合適的離去基團，例如鹵素或磺酸鹽基團)在鹼(例如氫化鈉)存在下及合適溶劑(例如醚類，例如四氫呋喃)中反應。

反應流程 61

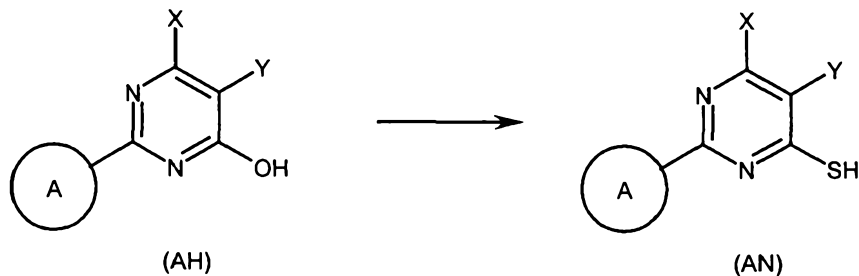


式(AO)化合物習知者或者可自習知化合物，例如自式(AG)化合物及使用為文獻中所習知者加以製備。

式(AN)化合物可在受控條件之下以合適的硫磺酸鹽試

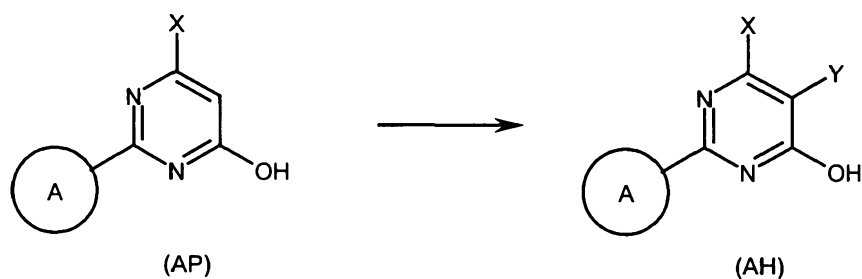
劑(例如五硫化磷或 Lawesson 氏試劑)處理式(AH)化合物而製備(參見反應流程 62)。

反應流程 62



式(AH)化合物可製備於式(AP)化合物與合適正電子 Y 源反應而製備(反應流程 63)。

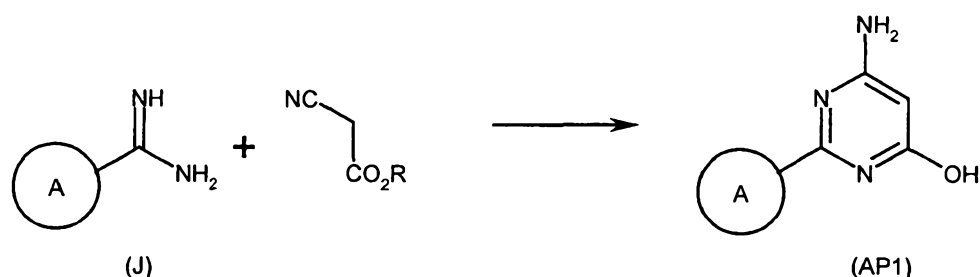
反應流程 63



例如，式(AH)化合物(其中 Y 為鹵素)可製備於使式(AP)化合物鹵化劑(例如 N-鹵琥珀醯亞胺，例如 N-氯琥珀醯亞胺或元素鹵素，例如溴)的反應。

式(AP1)化合物(其係為式(AP)化合物，其中 X 為 NH₂)可製備於式(J)脘與式(AE)氰基乙酸酯於鹼(例如烷氧化物鹼，例如甲氧化鈉)及溶劑(例如醇類，例如甲醇)存在之下的反應(反應流程 64)。

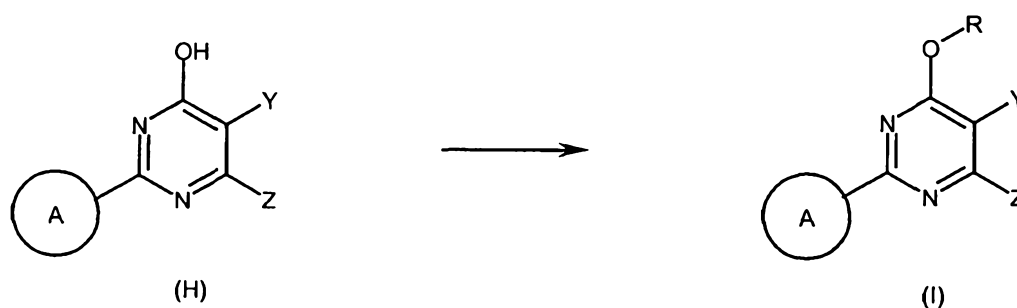
反應流程 64



氨基乙酸酯係為文獻中所習知的。

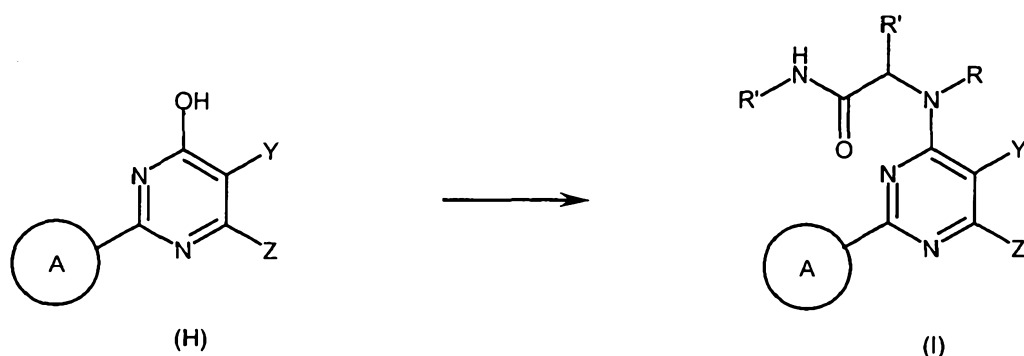
式(I)化合物(其中 X 為 OR)亦可製備於式(H)化合物的烷化作用(反應流程 65)。合適的烷化劑包括烷基鹵化物(例如碘化甲基)或在鹼存在下的磺酸鹽,或重氮化合物(例如重氮甲烷或三甲基矽烷基重氮甲烷)。

反應流程 65



式(I)化合物(其中 X 為 NRCH(R')CONHR')可製備於式(H)化合物與式 RNH₂ 的胺,式 R'CHO 的醛以及式 R'NC 的異脒的反應(參見以下反應流程 66)。

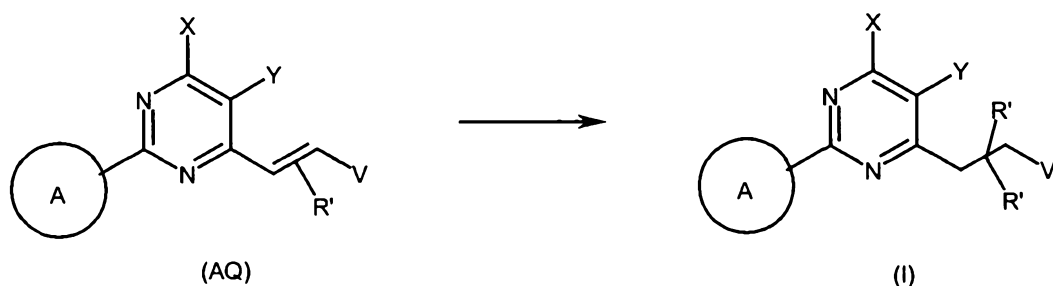
反應流程 66



式(I)化合物(其中 m 為 0 且 n 為 2)可製備於可製備於(反

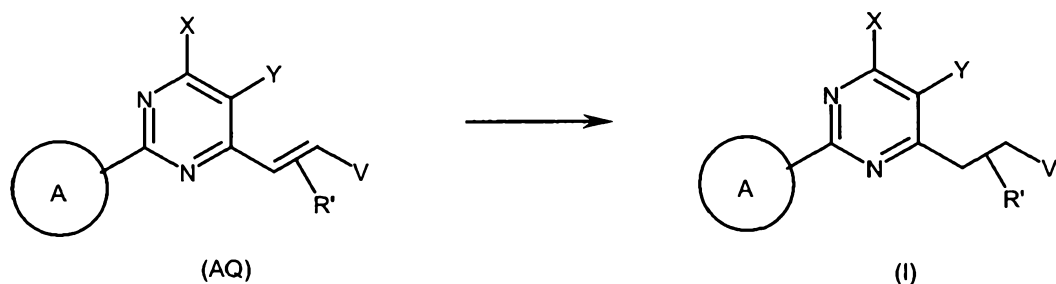
應流程 67) 式 (AQ) 化合物與雙鍵官能基化的試劑反應。

反應流程 67



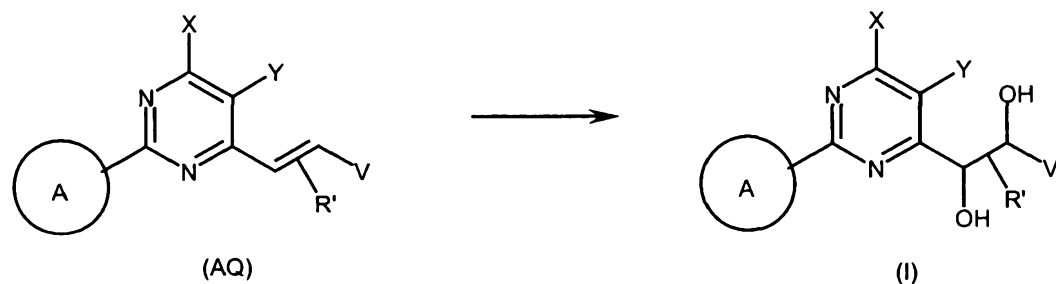
例如，式 (I) 化合物 (其中 R' 為氫) 可製備於式 (AQ) 化合物與合適還原劑 (例如氫氣在金屬觸媒例如載於碳上的鈀的存在下) 反應 (參見以下的流程 68)。

反應流程 68



作為另一實施例 (反應流程 69)，式 (I) 化合物 (其中基團 R' 代表鄰近的羥基基團) 可製備於使二羥基化試劑 (例如四氧化鐵) 與式 (AQ) 化合物的反應。

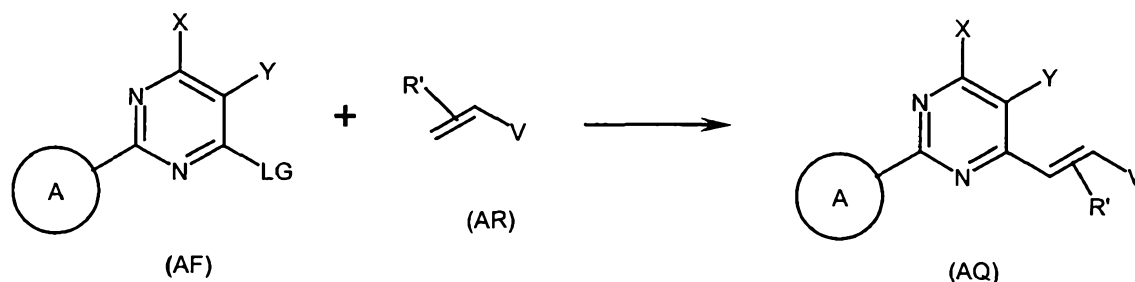
反應流程 69



(AQ) 化合物可製備於式 (AF) 化合物與式 (AR) 化合物於合適金屬觸媒 (例如鈀物質，例如乙酸鈀) 和鹼 (例如有機

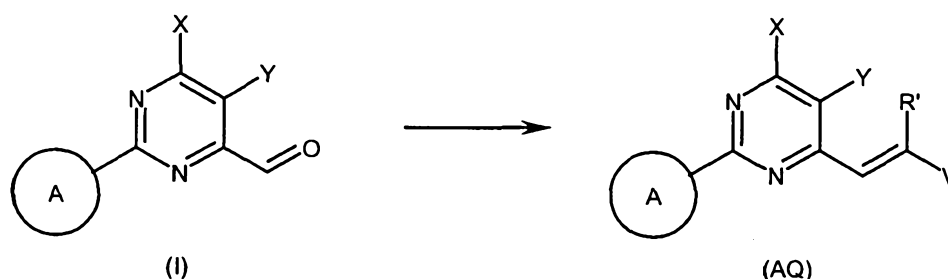
鹼，例如三乙胺)存在下、於合適溶劑中的 Heck 反應(參見反應流程 70)。

反應流程 70



可替代地，式(AQ)化合物可製備於式(I)化合物(其中 Z 為 CHO)在合適的烯烴反應條件下(參見反應流程 71)反應，例如 Wittig, Horner-Emmons 或 Peterson 反應。

反應流程 71



式(I)化合物可製備於不同的式(I)化合物，其係藉由使用為此技藝人士習知的技術將任何取代基 X，Y，及 Z 以及環 A 轉化成為不同的基團 X，Y，Z 或 A。

例如，不飽和基團 A(例如烯類或環烯類)可被還原成為飽和基團(例如烷基或環烷基)。當 A 為不飽和環，其可在標準條件下被氧化成為芳香環。

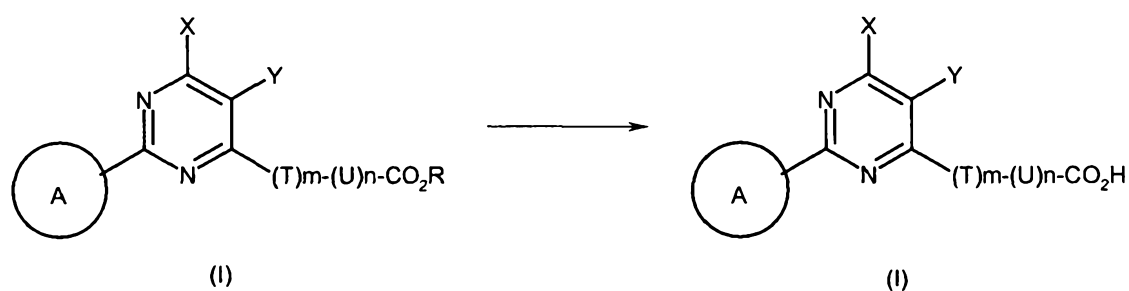
另外的實施例中，化合物(其中 Y 為鹵素或磺酸鹽(例如溴或氯原子)轉化成為化合物(其中 Y 為以碳為基礎基團，例如烷基或視需要經取化的苯基或雜芳基環)。此類轉換可藉由烷基或苯基或雜芳基環的金屬或類金屬衍生物(例如硼酸

或硼酸酯)的反應，其係可在鹼(例如無機鹼，例如磷酸鉀或氟化銫，或有機鹼，例如三乙胺)、金屬來源(例如鈀來源，例如 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$)，以及視需要配位體或金屬(例如膦配位體，例如 X-Phos)於合適溶劑(例如，單一溶劑，例如乙腈或混合溶劑系統，例如二甲氧基乙烷和水的混合物)存在下進行。金屬觸媒和配位體亦可以單一、預成形、錯合物(例如鈀/膦錯合物，例如四三苯基磷鈀，雙(三苯基膦)鈀二氯化物或[1,1'-雙(二苯基膦基)二茂鐵]二氯化鈀)被添加。

又另外實施例係製備式(I)化合物(其中 X 為 NRCOR')，其係在鹼存在之下使式(I)化合物(其中 X 為 NHR)與醯化劑(例如氯化醯)反應。

在另外的實例中(反應流程 72 所示)，式(I)化合物(其中 V 為羧酸)可製備於式(I)化合物(其中 V 為羧酸酯)，其係藉由在鹼性或酸性條件下的水解，例如經水性氫氧化鈉處理。可替換地，轉換可藉由以親核性，例如烷基硫醇酯，於合適溶劑存在下處理酯。

反應流程 72

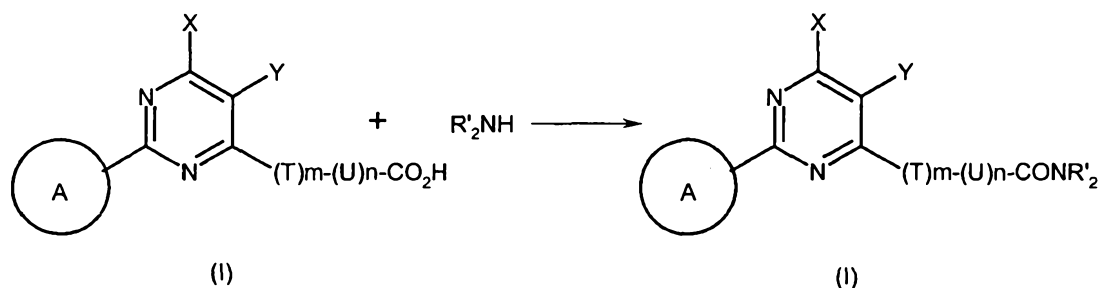


式(I)化合物(其中 V 為羧酸酯)可直接製備於式(I)化合物(其中 V 為羧酸)，其係藉由在標準條件下進行酯化，例如藉由醇 ROH 和酸觸媒處理。該酸觸媒可方便地藉由添加可

與醇反應而產生酸的化合物(例如亞硫醯氯或乙醯氯)而原地產生。可替換地，此轉換可藉由首先製備酸基的活化衍生物，例如醯基鹵化物，接著與醇的反應。

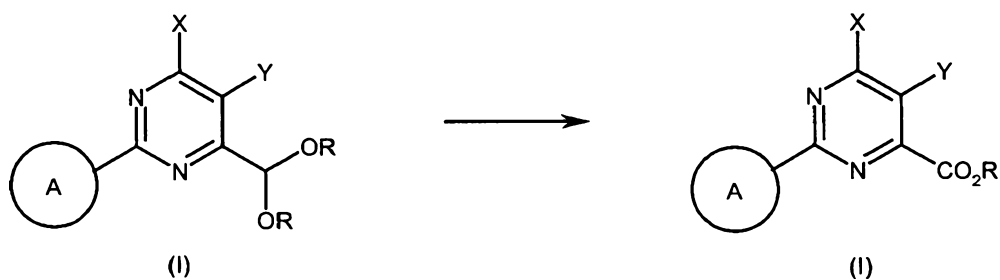
式(I)化合物(其中 V 為羧酸)的其他酸基衍生可藉文獻中所發現的標準方法加以製備。例如，式(I)化合物(其中 V 為醯胺基)可製備於式(I)化合物(其中 V 為羧酸)，其係藉由合適的偶合劑(例如碳二醯亞胺，例如二環己基碳二醯亞胺)和胺 R'_2NH ，以及視需要的添加劑(例如二甲基胺基吡啶)，於合適溶劑(例如二甲基甲醯胺)中的反應(參見反應流程 73)。可替換地，此轉換可首先製備羧酸基團的活化衍生物(例如醯基鹵化物，例如酸氯化物)，然後以胺 $RR'NH$ 處理該經活化的衍生物而進行。

反應流程 73



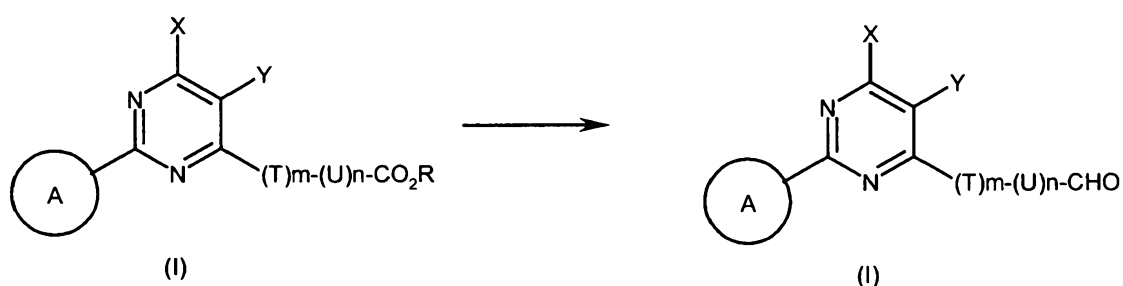
式(I)化合物(其中 Z 為 CO_2R)可製備於式(I)化合物(其中 Z 為 $CH(OR)_2$)，其係藉由以合適的氧化劑例如 N-溴琥珀醯亞胺或過硫酸鹽、於視需要酸(例如硫酸)的存在下予以處理(參見反應流程 74)。

反應流程 74



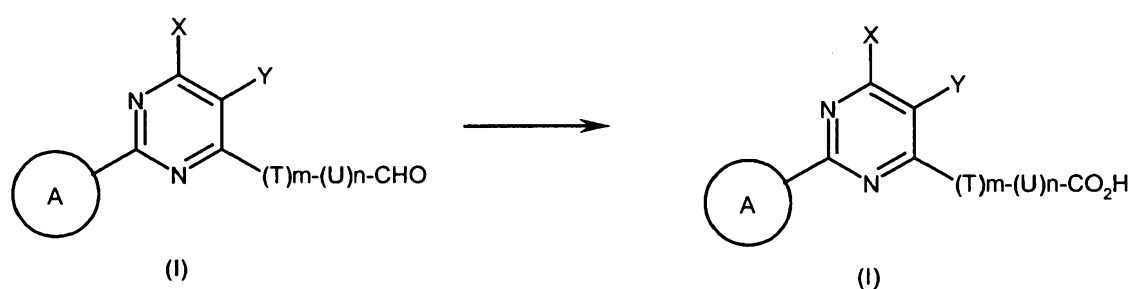
式(I)化合物(其中 V 為 CHO)可製備於式(I)化合物(其中 V 為 CO_2R)(參見反應流程 75)，其係藉以合適的還原劑(例如氫化物還原劑例如 DIBAL-H)予以處理，。

反應流程 75



式(I)化合物(其中 V 為 CO_2H)可製備於以合適的氧化劑(例如次氯酸鈉)處理式(I)化合物(其中 V 為 CHO)，參見反應流程 76。

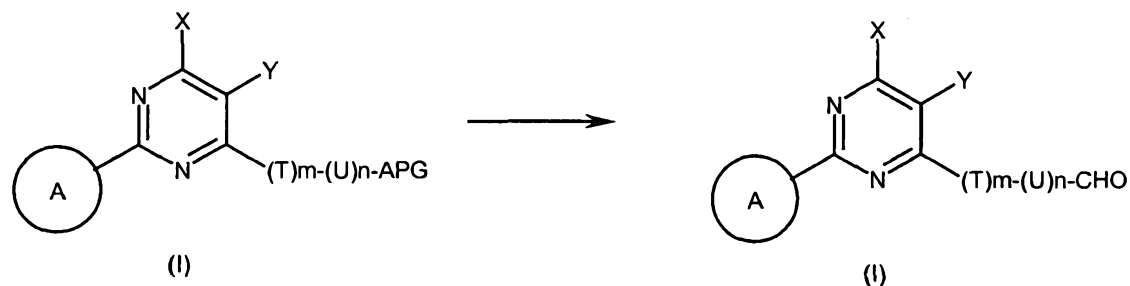
反應流程 76



式(I)化合物(其中 V 為 CHO)可製備於自式(I)化合物(其中 V 為經保護的醛)除去合適的醛保護基團(APG)(反應流程

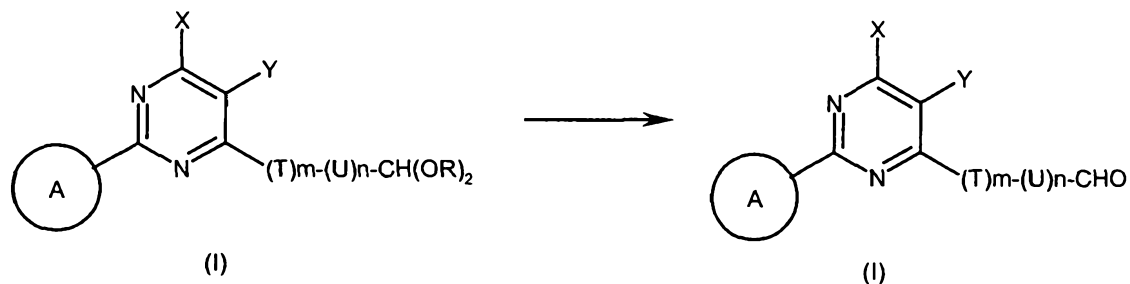
77)。此類保護基團的一些實例為縮醛，硫縮醛或脞。

反應流程 77



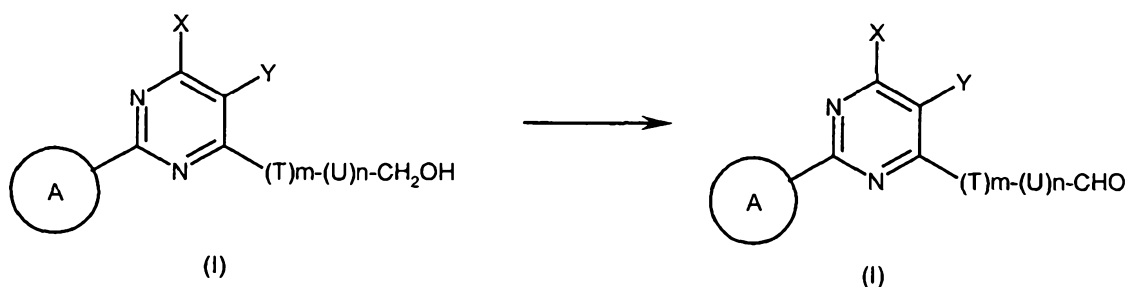
例如(反應流程 78)，式(I)化合物(其中 V 為 CHO)可製備於以酸(例如無機酸，例如水性鹽酸處理式(I)化合物(其中醛保護基團為縮醛，例如二烷基縮醛，例如二乙基縮醛)。

反應流程 78



式(I)化合物(其中 V 為 CHO)可製備於在標準條件下氧化式(I)化合物(其中 V 為 CH₂OH)，參見反應流程 79(例如使用 Swern 反應)。

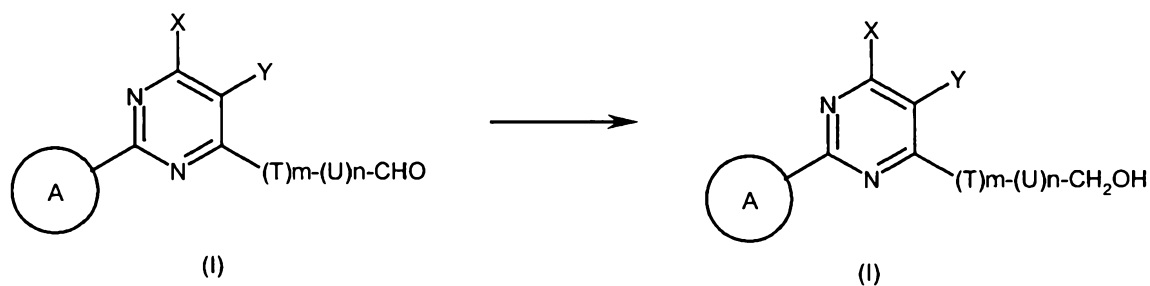
反應流程 79



式(I)化合物(其中 V 為 CHO)可在為文獻所習知的條件之下被轉換成為衍生物(例如縮醛或二硫縮醛)。

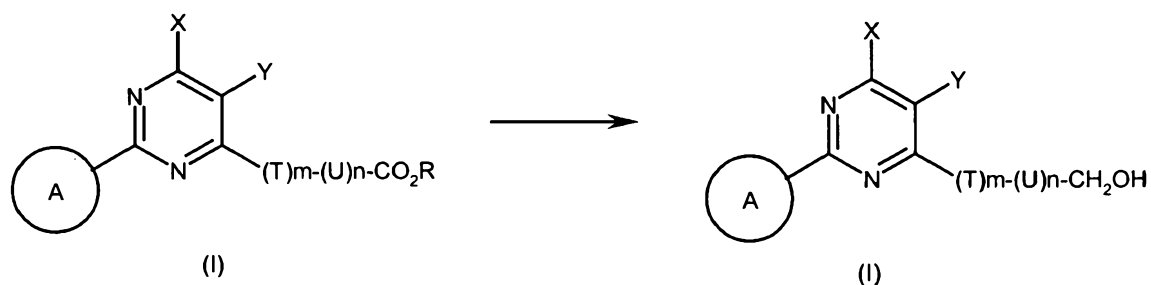
式(I)化合物(其中 V 為 CH₂OH)可藉由式(I)化合物(其中 V 為 CHO)與合適的還原劑(例如金屬氫化物,例如硼氫化鈉)的反應加以製備,參見反應流程 80。

反應流程 80



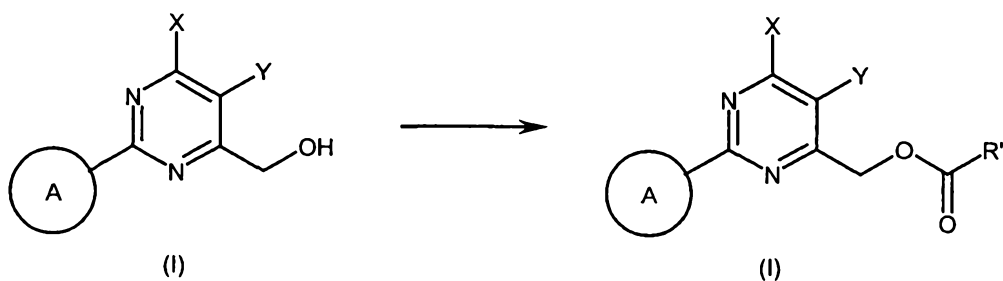
可替換地,式(I)化合物(其中 V 為 CH₂OH)可藉由合適的還原劑(例如金屬氫化物還原劑,例如氫化鋰鋁)處理式(I)化合物(其中 V 為 CO₂R)而加以製備,參見反應流程 81。

反應流程 81



式(I)化合物(其中 V 為 CH₂OC(O)R')可藉由在標準條件之下例如在鹼存在之下藉由以醯基鹵化物處理式(I)化合物(其中 V 為 CH₂OH)加以製備(反應流程 82)。

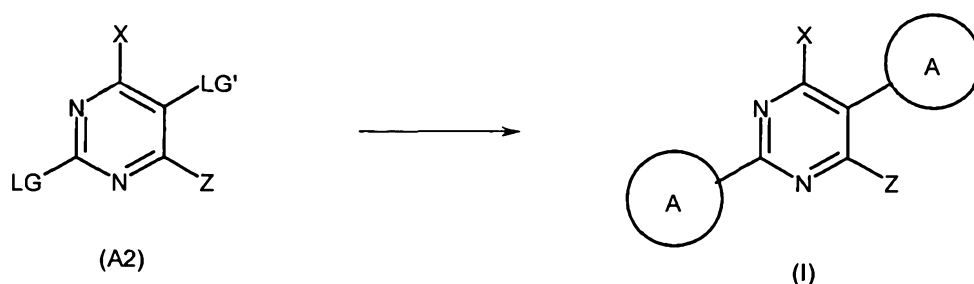
反應流程 82



此技藝人士將會理解此型態的轉換可以良好地在不同的合成路徑之下進行，例如將一種(A)化合物轉換成為不同的式(A)化合物或將一種(H)化合物轉換成為不同的式(H)化合物。

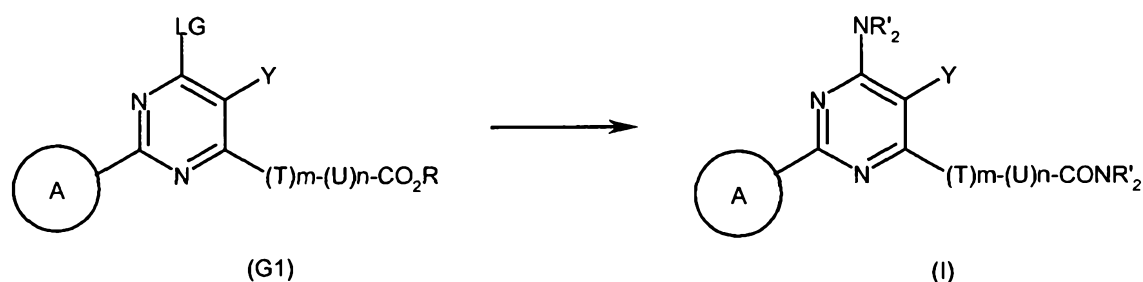
此技藝人士將會理解，在特定情況之下，使用相同的反應條件可同時進行一種以上的轉換。例如(參見反應流程 83)，式(I)化合物(其中 A 和 Y 為相同者)可製備於在金屬觸媒(例如鈀衍生物，例如 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$)，配位體(例如膦配位體例如 X-Phos)和鹼(例如無機鹼，例如磷酸鉀)存在下，以及在合適溶劑(例如單一溶劑、例如乙腈，或混合溶劑系統，例如二甲氧基乙烷和水的混合物)中，以過量的環 A 的金屬或類金屬衍生物，例如硼酸，與式(A2)化合物(亦即式(A)化合物，其中 Y 為離去基例如鹵原子或磺酸鹽，其可為與 LG 相同或不相同)反應(反應流程 83)。

反應流程 83



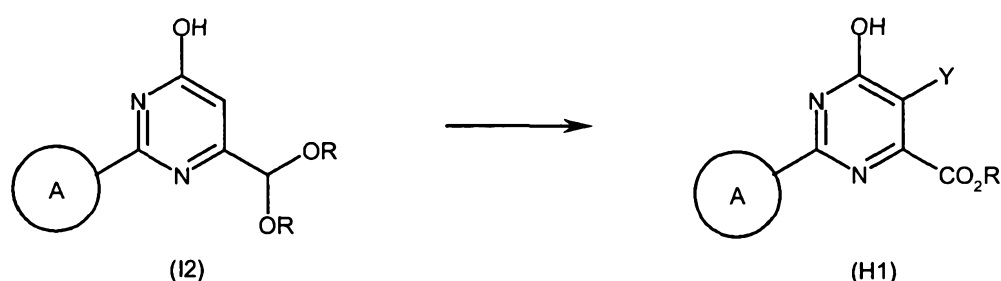
另一實施例(反應流程 84)係製備式(I)化合物(其中 X 為 NR'_2 且 V 為 CONR'_2)，其係在合適的溶劑中以過量的胺 $\text{R}'_2\text{NH}$ 處理式(G1)化合物(亦即式(G)化合物，其中 V 為 CO_2R)。

反應流程 84



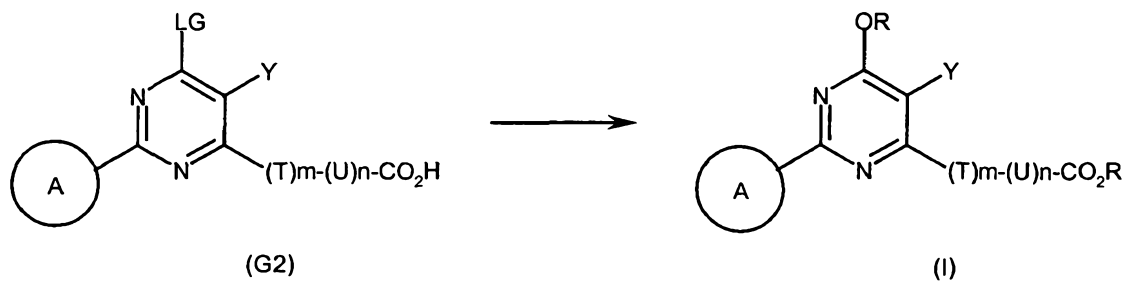
另一實施例(參見反應流程 85)係使用亦會提供正電性 Y 來源的試劑(例如，N-溴琥珀醯亞胺，在此例中 Y 為溴)使式(I2)化合物進行氧化以製備式(H1)化合物。

反應流程 85



另一實施例(參見反應流程 86)係製備式(I)化合物(其中 X 為 OR 且 V 為 CO_2R)，其係使用醇 ROH 與合適酸觸媒(例如濃硫酸)處理式(G2)化合物(其係為式(G)化合物，其中 V 為 CO_2H)。

反應流程 86



此技藝人士將會理解，通常可以改變以上所述轉換進行的順序，或者可以以替代方式予以合併以製備範圍更廣的式(1)化合物。

此技藝人士亦將會理解，一些試劑將會與特定值或取代基 X, Y, Z 以及 A 的組合不相容，且任何額外的步驟例如保護及/或脫保護步驟，將是達到所欲轉換者所必須者。

可使用式(I)化合物，以未經改質之形式被使用，如同在合成時所獲得的，但較佳以各種合適的方式，使用調配佐劑，如載劑、溶劑和表面活性物質，將其等調配，如下所述。

調配物可以是各種物理形式，例如為爽身粉、凝膠、可濕性粉末、水-可分散之顆粒、水-可分散之錠劑、泡騰壓製錠劑、可乳化濃縮物、可微乳化之濃縮物、懸浮物濃縮物、水包油乳化液、可流動的油、水性分散液、油性分散液、懸浮乳化液、膠囊懸浮液、可乳化顆粒、可溶性液體、水-可溶性濃縮物(以水或水-可混溶之有機溶劑作為載劑)、浸漬過的聚合物薄膜之形式，或從 Manual on Development 以及 Use of FAO Specifications f 或者 Plant Protection Products, 第 5 版, 1999 中得知的其他形式。這類調配物可為濃縮物形式，其在使用之前經稀釋，雖然也可以製備成

立即可使用的調配物。可利用例如水、液體肥料、微量養料、生物學有機體、油或溶劑，製備經稀釋物。

例如，可藉著將活性成分與調配佐劑混合，來製備調配物，以便獲得經細分之固體、顆粒、溶液、分散液或乳化液形式的組合物。亦可利用其他的佐劑，例如經細分之固體、礦物油、植物油、經改質之植物油、有機溶劑、水、表面活性物質或其組合，來調配活性成分。亦可將活性成分納入由聚合物組成的極細微膠囊中。微膠囊在多孔載劑中含有活性成分。微膠囊通常具有從 0.1 到 500 微米之直徑。其等以膠囊重量之大約從 25 到 95 重量%的量，含有活性成分。活性成分可以單塊固體之形式、在固態或液態分散液中之細顆粒的形式，或以適當溶液之形式存在。包膠膜包括，例如天然和合成的樹膠、纖維素、苯乙烯/丁二烯共聚物、聚丙烯腈、聚丙烯酸酯、聚酯、聚醯胺、聚脲、聚胺基甲酸酯或經化學改質之聚合物，以及澱粉黃原酸鹽或熟諳此藝者關於此點已知的其他聚合物。可替代的，可能形成極細的微膠囊，其中該活性成分以經細分之顆粒的形式出現在基底物質的固體基質中，但是該微膠囊本身不被包膠。

適用於製備根據本發明之組合物的調配佐劑本身係已知的。在此可供使用的液體載劑為：水、甲苯、二甲苯、石油醚、植物油、丙酮、甲基乙基酮、環己酮、酸酐、乙腈、乙醯苯、乙酸戊酯、2-丁酮、丁烯碳酸酯、氯苯、環己烷、環己醇、乙酸之烷基酯、雙丙酮醇、1，2-二氯丙烷、

二乙醇胺、對-二乙基苯、二乙二醇、二乙二醇癸酸酯(abietate)、二乙二醇丁基醚、二乙二醇乙基醚、二乙二醇甲基醚、N,N-二甲基甲醯胺、二甲亞砷、1,4-二噁烷、二丙二醇、二丙二醇甲基醚、二丙二醇二苯甲酸酯、地普西多(diproxitol)、烷基吡咯烷酮、乙酸乙酯、2-乙基己醇、碳酸伸乙酯、1,1,1-三氯乙烷、2-庚酮、 α -蒎烯、d-萜烯、乳酸乙酯、乙二醇、乙二醇丁基醚、乙二醇甲基醚、 γ -丁內酯、甘油、甘油乙酸酯、甘油二乙酸酯、甘油三乙酸酯、十六烷、己二醇、乙酸異戊酯、乙酸異冰片酯、異辛烷、異佛爾酮、異丙基苯、肉豆蔻酸異丙酯、乳酸、月桂胺、亞異丙基丙酮(mesityl oxide)、甲氧基丙醇、甲基異戊基酮、甲基異丁基酮、月桂酸甲酯、辛酸甲酯、油酸甲酯、二氯甲烷、間-二甲苯、正-己烷、正-辛胺、十八烷酸、乙酸辛胺、油酸、油胺、鄰-二甲苯、酚、聚乙二醇(PEG)、丙酸、乳酸丙酯、碳酸伸丙酯、丙二醇、丙二醇甲基醚、對-二甲苯、甲苯、磷酸三乙酯、三乙二醇、二甲苯磺酸、石蠟、礦物油、三氯乙烯、全氯乙烯、乙酸乙酯、乙酸戊酯、乙酸丁酯、丙二醇甲基醚、二乙二醇甲基醚、甲醇、乙醇、異丙醇，以及較高分子量的醇，如戊醇、四氫呋喃醇、己醇、辛醇、乙二醇、丙二醇、甘油、N-甲基-2-吡咯烷酮以及類似者。水通常是稀釋濃縮物的載劑選擇。適當之固體載劑為，例如滑石、二氧化鈦、葉蠟石黏土、二氧化矽、鎂鋁海泡石黏土(attapulgitic clay)、矽藻土、石灰石、碳酸鈣、膨潤土、鈣蒙脫石、棉籽殼、小麥粗粉、大豆粉、浮

石、木屑、磨碎的胡桃殼、木質素和類似物質，如同在例如 40 CFP 180.910 以及 40 CFR 180.920 中描述的。

數目眾多的表面活性物質可有利地用在調配物中，尤其是在那些被設計在使用前經載劑稀釋的調配物中。表面活性物質可以是陰離子性、陽離子性、非離子性或聚合的，並可使用其等作為乳化劑、濕潤劑或懸浮劑，或為了其他目的。典型的表面活性物質包括，例如硫酸烷基酯的鹽類，例如二乙醇銨硫酸月桂酯；烷芳基磺酸酯的鹽類，例如十二烷基苯磺酸鈣；烷基酚/環氧烷烴加成產物，例如壬基酚乙氧基化物；醇/環氧烷烴加成產物，例如十三烷醇乙氧基化物；肥皂類，例如硬脂酸鈉；烷基萘磺酸酯之鹽類，例如二丁基萘磺酸鈉；磺基琥珀酸鹽的二烷基酯，如二(2-乙己基)磺基琥珀酸鈉；山梨糖醇酯，例如山梨糖醇油酸酯；四級銨，例如氯化月桂基三甲基銨、脂肪酸的聚乙二醇酯，例如聚乙二醇硬脂酸酯；環氧乙烷和環氧丙烷之嵌段共聚物；以及單-和二-烷基磷酸酯之鹽類；還有在例如“麥氏去垢劑和乳化劑年報 (McCutcheon's Detergents and Emulsifiers Annual)”，MC Publoring Corp., Ridgewood, New Jersey, 1981 中描述的更多物質。

經常可用在殺蟲調配物中的更多佐劑，包括結晶抑制劑、黏度改質劑、懸浮劑、染料、抗氧化劑、起泡劑、光吸收劑、混合助劑、消泡劑、錯合劑、中和或 pH 值改質物質和緩衝劑、腐蝕抑制劑、香料、濕潤劑、吸收促進劑、微量養料、增塑劑、滑動劑、潤滑劑、崩解劑、增稠劑、

抗凍劑、殺微生物劑，還有液態和固態肥料。

根據本發明之組合物可額外包含添加物，其包括植物或動物來源的油、礦物油、這類油的烷基酯或這類油和油衍生物的混合物。在根據本發明之組合物中所使用之油添加物的量，基於噴霧混合物，通常是從 0.01 到 10%。例如，可在已經製備好噴霧混合物之後，以想要之濃度將油添加物加至噴霧罐中。較佳的油添加物包括礦物油或植物來源的油，例如菜籽油、橄欖油或向日葵油、經乳化之植物油，如 AMIGO®(Rhône-Poulenc Canada Inc.)、植物來源之油的烷基酯，例如甲基衍生物，或動物來源的油，如魚油或牛油。較佳的添加物含有，例如作為活性組份的基本上 80 重量%之魚油的烷基酯和 15 重量%之甲基化的菜籽油，還有 5 重量%慣用的乳化劑和 pH 值改質劑。特佳的油添加物包括 C₈-C₂₂ 脂肪酸之烷基酯，尤其是 C₁₂-C₁₈ 脂肪酸的甲基衍生物，例如月桂酸、棕櫚酸和油酸的甲基酯是很重要的。已知那些酯類為月桂酸甲酯(CAS-111-82-0)、棕櫚酸甲酯(CAS-112-39-0)和油酸甲酯(CAS-112-62-9)。較佳的脂肪酸甲酯衍生物為 Emery®2230 和 2231(Cognis GmbH)。亦可從除草劑佐劑概要(Compendium of Herbicide Adjuvants)，第 5 版，Southern Illinois University，2000 中得知那些及其他的油添加物。另一種較佳的佐劑為 Adigor®(Syngenta AG)，其係為甲基化的以油菜籽油為主的佐劑。

油添加劑的施予及作用可藉由將彼等與表面活性物質，如非離子、陰離子或陽離子界面活性劑組合而進一步

改進。適合的陰離子、非離子及陽離子界面活性劑的實例列示於 WO 97/34485 的第 7 及 8 頁中。較佳的表面活性物質為十二烷基苯磺酸鹽類型，尤其為其鈣鹽之陰離子界面活性劑，並也為脂肪醇乙氧基化合物類型之非離子界面活性劑。特別優先選擇具有從 5 至 40 之乙氧基化程度之乙氧基化 C_{12} - C_{22} 脂肪醇。市售可取得的界面活性劑的實例為 Genapol 類型 (Clariant AG)。也較佳的是聚矽氧界面活性劑，尤其為聚烷-氧化物改質之七甲基三矽氧烷，其為市售可取得的例如 Silwet L-77®，並也為全氟化界面活性劑。與總添加劑有關的表面活性物質之濃度通常從 1 至 30 重量 %。由油或礦物油或其衍生物與界面活性劑之混合物所組成的油添加劑的實例為 Edenor ME SU®、Turbocharge® (Snygenta AG, CH) 及 Actipron® (BP Oil UK Limited, GB)。

視需要，該表面活性物質也可單獨用在調配物中，換言之，沒有油添加劑。

而且，加入油添加劑 / 界面活性劑混合物中的有機溶劑可貢獻另外的作用增強性。適合的溶劑為，例如 Solvesso® (ESSO) 及 Aromatic Solvent® (Exxon 公司)。該等溶劑的濃度可以總重量計從 10 至 80 重量 %。可與溶劑摻合的該等油添加劑的濃度被敘述在例如 US-A-4 834 908 中。在本文所揭示之市售可取得的油添加劑係以名稱 MERGE® (BASF 公司) 已知。根據本發明較佳的另外的油添加劑為 SCORE® (Syngenta Crop Protection Canada)。

除了上述所列之油添加劑之外，為了增強根據本發明的組成物之活性，故也有可能將烷基吡咯啉酮之調配物（例如，Agrimax®）加入噴霧混合物中。也可使用合成乳膠之調配物，例如聚丙烯醯胺、聚乙烯基化合物或聚-1-對-孟烯（例如，Bond®、Courier®或 Emerald®）。包括丙酸之溶液，例如 Eurogkem Pen-e-trate®也可混合至噴霧混合物中，作為活性增強劑。

本發明除草調配物通常包含從 0.1 至 99 重量%，尤其是從 0.1 至 95 重量%之式(I)化合物以及從 1 至 99.9 重量%之調配物佐劑，其較佳地包括從 0 至 25 重量%之表面活性物質。反之，市售商品較佳地被調配成濃縮劑，而最終使用者一般係使用稀釋的調配物。

較佳的調配物型態和其典型組合物的實例係如以下所述(%係為重量%)。可濕性粉末係如本文所述者為一種特佳型態的調配物供本發明使用。在另一較佳具體實例中，特別是本發明的化合物/組合物/調配物意欲用於草坪、顆粒(惰性或肥料)調配物，如本文中所述係特別適合者。

可乳化濃縮物：

活性成分： 1 到 95%，較佳的是 60 到 90%

表面活性劑： 1 到 30%，較佳的是 5 到 20%

液體載劑： 1 到 80%，較佳的是 1 到 35%

粉劑：

活性成分： 0.1 到 10%，較佳的是 0.1 到 5%

固體載劑： 99.9 到 90%，較佳的是 99.9 到 99%

懸浮液濃縮物：

活性成分： 5 到 75%，較佳的是 10 到 50%

水： 94 到 24%，較佳的是 88 到 30%

表面活性劑： 1 到 40%，較佳的是 2 到 30%

可濕性粉末：

活性成分： 0.5 到 90%，較佳的是 1 到 80%

表面活性劑： 0.5 到 20%，較佳的是 1 到 15%

固體載劑： 5 到 95%，較佳的是 15 到 90%

顆粒：

活性成分： 0.1 到 30%，較佳的是 0.1 到 15%

固體載劑： 99.5 到 70%，較佳的是 97 到 85%

下列的實例進一步解釋，但無意限制本發明。

用於式(I)除草劑的調配物實例(%係為重量%)

F1.可乳化濃縮物	a)	b)	c)	d)
活性成分	5%	10%	25%	50%
十二烷基苯磺酸鈣	6%	8%	6%	8%
蓖麻油聚乙二醇醚	4%	-	4%	4%

(36 莫耳的環氧乙烷)

辛基苯酚聚乙二醇醚	-	4%	-	2%
-----------	---	----	---	----

(7-8 莫耳的環氧乙烷)

NMP	-	-	10%	20%
芳香族烴混合物 C ₉ -C ₁₂	85%	78%	55%	16%

可藉著以水稀釋，從這類濃縮物製備具有任何想要濃度的乳化液。

F2.溶液	a)	b)	c)	d)
活性成分	5%	10%	50%	90%
1-甲氧基-3-(3-甲氧丙氧基)-丙烷	-	20%	20%	-
聚乙二醇 MW400	20%	10%	-	-
NMP	-	-	30%	10%
芳香族烴混合物	75%	60%	-	-
C ₉ -C ₁₂				

該溶液適合以微滴之形式施用。

F3.可濕性粉末	a)	b)	c)	d)
活性成分	5%	25%	50%	80%
木質素磺酸鈉	4%	-	3%	-
十二烷基硫酸鈉	2%	3%	-	4%
二異丁基萘磺酸鈉	-	6%	5%	6%
辛基苯酚聚乙二醇醚	-	1%	2%	-
(7-8 莫耳的環氧乙烷)				
高度分散之矽酸	1%	3%	5%	10%
高嶺土	88%	62%	35%	-

將活性成分與佐劑徹底混合，並在適當的粉碎機中將該混合物徹底磨碎，產生可濕性粉末，可以水將其稀釋，得到具有任何想要濃度的懸浮液。

F4.塗膜顆粒	a)	b)	c)
活性成分	0.1%	5%	15%
高度分散之矽酸	0.9%	2%	2%

無機載劑

(直徑 0.1-1 毫米)例如 CaCO_3 或 SiO_2)

將活性成分溶解於二氯甲烷中，將該溶液噴在載劑上，並隨後在真空中蒸發溶劑。

F5.塗膜顆粒	a)	b)	c)
活性成分	0.1%	5%	15%
聚乙二醇 MW200	1.0%	2%	3%
高度分散之矽酸	0.9%	1%	2%
無機載劑(直徑 0.1-1 毫米)	98.0%	92%	80%

例如 CaCO_3 或 SiO_2

在混合器中，將經過細磨的活性成分均勻地塗佈在以聚乙二醇弄濕的載劑上。這樣子獲得無-粉的塗膜顆粒。

F6.擠出顆粒	a)	b)	c)	d)
活性成分	0.1%	3%	5%	15%
木質素磺酸鈉	1.5%	2%	3%	4%
羧甲基纖維素	1.4%	2%	2%	2%
高嶺土	97.0%	93%	90%	79%

將活性成分與佐劑混合並磨碎，並以水弄濕該混合物。擠出所得的混合物，然後在空氣流中脫水。

F7.粉劑	a)	b)	c)
活性成分	0.1%	1%	5%
滑石	39.9%	49%	35%

高嶺土	60.0%	50%	60%
-----	-------	-----	-----

藉著將活性成分與載劑混合，並在適當的粉碎機中將該混合物磨碎，獲得馬上可使用的粉劑。

F8.懸浮液濃縮物	a)	b)	c)	d)
活性成分	3%	10%	25%	50%
乙二醇	5%	5%	5%	5%
壬基苯酚聚乙二醇醚	-	1%	2%	-
(15 莫耳的環氧乙烷)				
木質素磺酸鈉	3%	3%	4%	5%
羧甲基纖維素	1%	1%	1%	1%
37%含水甲醛溶液	0.2%	0.2%	0.2%	0.2%
聚矽氧油乳化液	0.8%	0.8%	0.8%	0.8%
水	87%	79%	62%	38%

將經過細磨的活性成分與佐劑密切地混合，產生懸浮液濃縮物，可藉著以水稀釋，從其中製備具有任何想要濃度的懸浮液。

本發明化合物(以及包含彼之混合物及/或調配物)在除草劑方面有用，且因此可用於控制植物生長的方法。此類方法涉及對植物或其所在地施用除草上有效數量的該化合物，或包括彼之組合物(或如往後所述的混合物)。本發明因此亦關於一種抑制植物生長的方法，其包括對植物或其所在地施用除草上有效數量的本發明的式(I)化合物，組合物或混合物。特別的是，本發明提供一種控制有用植物的作物上的雜草的方法，其包括對該雜草或該雜草的所在地，

或對有用植物的該作物，施用式 I 化合物或包括彼等之組合物或混合物。

本文中所用”所在地”用語係包括不僅雜草已生長的地區，亦包括雜草已發苗處，亦包括已播種有用植物的作用的地區。已播種的地區包括已生長作物植物所在的土地以及意欲供此作物植物生長的土地。

本發明的化合物、組合物及/或混合物可用於出苗前應用及/或出苗後應用以調整其功效。

有用植物的作物其中式(I)化合物、以及調配物及/或包括彼之混合物，而可以用於本發明者，包括多年生作物，例如柑橘，葡萄藤、花生、油棕、橄欖、仁果類水果、核果和橡膠和每年耕作作物，例如穀類，例如大麥和小麥，棉，油菜子，玉米，稻米，大豆，甜菜，甘蔗，向日葵，裝飾植物和植物，特別是穀類和玉米。

式(I)化合物、包括彼之調配物及/或混合物可用於草皮，牧草，牧地，公用路線穿越用地等。特別是，其可用於高爾夫球場，草坪，公園，運動場，跑道和類似者。

應瞭解”作物”一詞，亦包括由於傳統的育種方法或遺傳工程而使其成為對除草劑或某些種類除草劑(例如 ALS-、GS-、EPSPS-、PPO-以及 HPPD 抑制劑)有耐受性的作物。已經藉著傳統的育種方法而成為，例如對咪唑啉酮(如甲氧咪草煙(imazamox))有耐受性之作物的實例，為 Clearfield® 夏季油菜(Canola)。已經藉著遺傳工程方法而成為對除草劑有耐受性之作物的實例，包括例如嘉磷塞(glyphosate)-和固

殺草 (glufosinate)- 抗藥性的玉黍蜀變種，以商標名 RoundupReady®和 LibertyLink®販售，以及藉著遺傳工程而對汰克草(Dicamba)有抵抗力的玉米、大豆和棉花，苯氧基丙酸，吡啶基氧基乙酸及/或吡啶甲酸 auxines。

亦應瞭解作物為已經藉著遺傳工程方法而成為對有害昆蟲有抵抗力的那些，例如 Bt 玉黍蜀(對歐洲玉米螟(European corn borer)有抵抗力)，Bt 棉花(對棉鈴象甲(boll weevil)) 有抵抗力，還有 Bt 馬鈴薯(對科羅拉多馬鈴薯甲蟲(Colorado beetle)有抵抗力)。Bt 玉黍蜀的實例為 NK®的 Bt-176 玉黍蜀雜種(Syngenta Seeds)。Bt 毒素是由蘇雲金芽孢桿菌(*Bacillus thuringiensis*)土壤細菌天然形成的蛋白質。在歐洲專利 -A-451 878、歐洲專利 -A-374 753、WO 93/07278、WO 95/34656、WO 03/052073 和歐洲專利 -A-427 529 中描述了毒素和能夠合成這類毒素之基因轉殖植物的實例。含有一或多個基因(其編碼對殺昆蟲劑之抗藥性並表現一或多個毒素)之基因轉殖植物的實例，為 KnockOut®(玉黍蜀)、Yield Gard®(玉黍蜀)、NuCOTIN33B®(棉花)、Bollgard®(棉花)、NewLeaf®(馬鈴薯)、NatureGard®和 Protexcta®。植物作物及其種子可能是對除草劑有抵抗力的，同時也對昆蟲滋長是有抵抗力的(“層疊的”基因轉殖事件)。例如，種子可能有表現具有殺昆蟲活性之 Cry3 蛋白質的能力，且同時是嘉磷塞-耐受性的。

亦應瞭解“作物”一詞，包含由於傳統之育種方法或遺傳工程，其含有所謂的輸出性狀(例如經改良之味道、儲存穩

定性、營養內含量)而獲得的作物。

本文中所用”雜草”用語意指任何非所欲的植物，且因此不僅包括農化上重要的如下所述的雜草，亦包括自生(volunteer)植物。

式(I)化合物可被用於對抗為數眾多的農化上重要的雜草。可被控制之雜草可以是單子葉或雙子葉雜草，像是例如澤瀉屬(*Alisma spp*)、千金子屬(*Leptochloa*)、繁縷屬(*Stellaria*)、金蓮花(*Nasturtium*)、剪股穎屬(*Agrostis*)、馬唐屬(*Digitaria*)、燕麥屬(*Avena*)、狗尾草屬(*Setaria*)、芥屬(*Sinapis*)、黑麥草(*Lolium*)、茄屬(*Solanum*)、稗屬(*Echinochloa*)、蘆草屬(*Scirpus*)、兩久花屬(*Monochoria*)、慈姑屬(*Sagittaria*)、雀麥屬(*Bromus*)、看麥娘(*Alopecurus*)、黍蜀屬(*Sorghum*)、羅氏草屬(*Rottboellia*)、莎草屬(*Cyperus*)，以及特佳為碎米莎草(*Cyperus iria*)、藎麻屬(*Abutilon*)、金午時花屬(*Sida*)、蒼耳屬(*Xanthium*)、野莧菜屬(*Amaranthus*)、藜屬(*Chenopodium*)、番薯屬(*Ipomoea*)、鬼針草屬(*Bidens*)，猩猩草屬(*Euphorbia*)，菊屬(*Chrysanthemum*)、拉拉藤屬(*Galium*)、堇菜屬(*Viola*)和婆婆納屬(*Veronica*)，白羊草屬(*ischaemum*)，*Sida*，蓼屬(*Polygonum*)，向日葵屬(*Helianthus*)，爬拉草屬(*Panicum*)，野黍屬(*Eriochloa*)，大葉信號草屬(*Brachiaria*)，俄國薊屬(*Cenchrus*)，露草屬(*Commelina*)，*Spermacoce*，決明屬(*Senna*)，長柄菊屬(*Tridax*)，波狀吐根(*Richardia*)，*Chamaesyce*以及毛狀蓬屬(*Conyza*)。

式(I)化合物的施用比例可在寬廣的限制內改變，並視土壤之性質、施用方法(出苗之前或後；浸種；施用於播種畦溝；無耕地應用等等)、作物、欲控制之雜草或草地、流行的氣候條件，以及其他由施用方法、施用時間和目標作物支配的因素而定。通常以 10 到 2000 克/公頃，尤其是從 50 到 1000 克/公頃之施用率施用根據本發明之式 I 化合物，然而，其亦可以甚至更低施用率，例如到 5 至 2000 克/公頃，以及更佳者為 25 至 1000 克/公頃被使用。

任何施用於有用植物的雜草/作物，或其所在地、例行用於的方法農業上的方法皆可供使用，例如藉由合適的稀釋式(I)化合物之後予以噴或散佈方法的施用(無論該化合物經一或更多種另外活性成份及/或安全劑之調配及/或組合，如本文所述)。

本發明式(I)化合物亦可用於與其他活性成份，例如除草劑、及/或殺蟲劑及/或殺蟎劑，及/或殺線蟲，及/或殺軟體動物，及/或殺真菌劑，及/或植物生長劑調節劑併用。此類混合物以及此等混合物對控制雜草及/或非所欲植物生長亦為本明的另一內容。為了避免疑問，本發明的混合物亦包括二或更多種不同式(I)化合物的混合物。

當式(I)化合物係與至少一額外的除草劑併用，以下式(I)化合物的混合物為特佳者。式 I 化合物 + 乙草胺(acetochlor)、式 I 化合物 + 亞喜芬(acifluorfen)、式 I 化合物 + 亞喜芬-鈉、式 I 化合物 + 苯草醚(aclonifen)、式 I 化合物 + 丙烯醛(acrolein)、式 I 化合物 + 拉草(alachlor)、式 I 化

合物+亞汰草(alloxydim)、式 I 化合物+丙烯醇、式 I 化合物+草殺淨(ametryn)、式 I 化合物+氨唑草酮(amicarbazone)、式 I 化合物+噻嘧磺隆(amidosulfuron)、式 I 化合物+氨草啉(aminopyralid)、式 I 化合物+胺基環吡拉羅(aminochlorpyrachlor)、式 I 化合物+殺草強(amitrole)、式 I 化合物+胺基磺酸銨、式 I 化合物+莎稗磷(anilofos)、式 I 化合物+亞速爛(asulam)、式 I 化合物+草脫淨(atrazine)、式 I 化合物+艾維激素(aviglycine)、式 I 化合物+草芬定(azafenidin)、式 I 化合物+四唑嘧磺隆(azimsulfuron)、式 I 化合物+BCPC、式 I 化合物+氟丁草胺(beflubutamid)、式 I 化合物+草除靈(benazolin)、式 I 化合物+苯卡巴松(bencarbazone)、式 I 化合物+氟草胺(benfluralin)、式 I 化合物+呋草磺(benfuresate)、式 I 化合物+免速隆(bensulfuron)、式 I 化合物+免速隆-甲基、式 I 化合物+地散磷(bensulide)、式 I 化合物+本達隆(bentazone)、式 I 化合物+雙苯嘧草酮(benzfendizone)、式 I 化合物+苯並雙環酮(benzobicyclon)、式 I 化合物+吡草酮(benzofenap)、式 I 化合物+必芬諾(bifenox)、式 I 化合物+畢拉草(bilanafos)、式 I 化合物+雙草醚(bispyribac)、式 I 化合物+雙草醚-鈉、式 I 化合物+硼砂(borax)、式 I 化合物+克草(bromacil)、式 I 化合物+溴芬諾(bromobutide)、式 I 化合物+溴酚肟(bromophenoxim)、式 I 化合物+溴苯腈(bromoxynil)、式 I 化合物+丁基拉草(butachlor)、式 I 化合物+氟丙嘧草酯(butafenacil)、式 I 化合物+抑草磷

(butamifos)、式 I 化合物+比達寧(butralin)、式 I 化合物+丁苯草酮(butroxydim)、式 I 化合物+拔敵草(butylate)、式 I 化合物+卡可基酸(cacodylic acid)、式 I 化合物+氯酸鈣、式 I 化合物+苯酮唑(cafenstrole)、式 I 化合物+卡草胺(carbetamide)、式 I 化合物+克繁草(carfentrazone)、式 I 化合物+乙基克繁草、式 I 化合物+CDEA、式 I 化合物+CEPC、式 I 化合物+整形醇(chlorflurenol)、式 I 化合物+甲基整形醇、式 I 化合物+殺草敏(chloridazon)、式 I 化合物+氯嘧磺隆(chlorimuron)、式 I 化合物+乙基氯嘧磺隆、式 I 化合物+氯乙酸、式 I 化合物+綠麥隆(chlorotoluron)、式 I 化合物+克普芬(chlorpropham)、式 I 化合物+氯磺隆(chlorsulfuron)、式 I 化合物+大克草(chlorthal)、式 I 化合物+二甲基大克草、式 I 化合物+吲哚酮草酯(cinidon-ethyl)、式 I 化合物+環庚草醚(cinmethylin)、式 I 化合物+西速隆(cinosulfuron)、式 I 化合物+落草胺(cisanilide)、式 I 化合物+剋草同(clethodim)、式 I 化合物+炔草酸(clodinafop)、式 I 化合物+炔草酯(clodinafop-propargyl)、式 I 化合物+可滅蹤(clomazone)、式 I 化合物+克普草(clomeprop)、式 I 化合物+畢克草(clopyralid)、式 I 化合物+氯酯磺草胺(cloransulam)、式 I 化合物+氯酯磺草胺(cloransulam-methyl)、式 I 化合物+CMA、式 I 化合物+4-CPB、式 I 化合物+CPMF、式 I 化合物+4-CPP、式 I 化合物+CPPC、式 I 化合物+甲酚、式 I 化合物+可滅隆(cumyluron)、式 I 化合物+氰胺(cyanamide)、

式 I 化合物 + 氰乃淨 (cyanazine)、式 I 化合物 + 草滅特 (cycloate)、式 I 化合物 + 環磺隆 (cyclosulfamuron)、式 I 化合物 + 環殺草 (cycloxydim)、式 I 化合物 + 賽伏草 (cyhalofop)、式 I 化合物 + 丁基賽伏草、式 I 化合物 + 2, 4-D、式 I 化合物 + 3, 4-DA、式 I 化合物 + 殺草隆 (daimuron)、式 I 化合物 + 得拉本 (dalapon)、式 I 化合物 + 邁隆 (dazomet)、式 I 化合物 + 2, 4-DB、式 I 化合物 + 3, 4-DB、式 I 化合物 + 2, 4-DEB、式 I 化合物 + 甜菜安 (desmedipham)、式 I 化合物 + 敵草淨 (desmetryn)、式 I 化合物 + 汰克草 (dicamba)、式 I 化合物 + 二氯苯腈 (dichlobenil)、式 I 化合物 + 鄰-二氯苯、式 I 化合物 + 對-二氯苯、式 I 化合物 + 2, 4-滴丙酸 (dichlorprop)、式 I 化合物 + 2, 4-滴丙酸-P、式 I 化合物 + 禾草靈 (diclofop)、式 I 化合物 + 禾草靈 (diclofop-methyl)、式 I 化合物 + 雙氯磺草胺 (diclosulam)、式 I 化合物 + 雙苯唑快 (difenzoquat)、式 I 化合物 + 雙苯唑快甲硫酸鹽、式 I 化合物 + 吡氟草胺 (diflufenican)、式 I 化合物 + 吡氟草腈 (diflufenzopyr)、式 I 化合物 + 噁唑隆 (dimefuron)、式 I 化合物 + 哌草丹 (dimepiperate)、式 I 化合物 + 二甲草胺 (dimethachl 或者)、式 I 化合物 + 愛落殺 (dimethametryn)、式 I 化合物 + 汰草滅 (dimethenamid)、式 I 化合物 + 汰草滅-P、式 I 化合物 + 穫萎得 (dimethipin)、式 I 化合物 + 二甲基次膦酸、式 I 化合物 + 撻乃安 (dinitramine)、式 I 化合物 + 特樂酚 (dinoterb)、式 I 化合物 + 大芬滅 (diphenamid)、式 I 化合物 + 異丙淨 (dipropetryn)、式 I 化合

物 + 大刈特 (diquat)、式 I 化合物 + 戴開特 (diquat dibromide)、式 I 化合物 + 汰硫草 (dithiopyr)、式 I 化合物 + 達有龍 (diuron)、式 I 化合物 + DNOC、式 I 化合物 + 3,4-DP、式 I 化合物 + DSMA、式 I 化合物 + EBEP、式 I 化合物 + 草多索 (endothal)、式 I 化合物 + EPTC、式 I 化合物 + 戊草丹 (esprocarb)、式 I 化合物 + 烯氟靈 (ethalfluralin)、式 I 化合物 + 胺苯磺隆 (ethametsulfuron)、式 I 化合物 + 甲基胺苯磺隆、式 I 化合物 + 益收生長素 (ethephon)、式 I 化合物 + 益覆滅 (ethofumesate)、式 I 化合物 + 氯氟草醚 (ethoxyfen)、式 I 化合物 + 亞速隆 (ethoxysulfuron)、式 I 化合物 + 乙氧苯草胺 (etobenzanid)、式 I 化合物 + 芬殺草 (fenoxaprop-P)、式 I 化合物 + 乙基芬殺草、式 I 化合物 + 四唑醯草胺 (fentrazamide)、式 I 化合物 + 硫酸亞鐵、式 I 化合物 + 麥草伏 (flamprop-M)、式 I 化合物 + 伏速隆 (flazasulfuron)、式 I 化合物 + 雙氟磺草胺 (florasulam)、式 I 化合物 + 伏寄普 (fluazifop)、式 I 化合物 + 丁基伏寄普、式 I 化合物 + 伏寄普 -P、式 I 化合物 + 丁基伏寄普 -P、式 I 化合物 + 異丙吡草酯 (fluazolate)、式 I 化合物 + 氟酮磺隆 (flucarbazone)、式 I 化合物 + 氟酮磺隆 (flucarbazone-sodium)、式 I 化合物 + 氟吡磺隆 (flucetosulfuron)、式 I 化合物 + 氯乙氟靈 (fluchloralin)、式 I 化合物 + 氟噻草胺 (flufenacet)、式 I 化合物 + 氟噻吡草酯 (flufenpyr)、式 I 化合物 + 氟噻吡草酯 (flufenpyr-ethyl)、式 I 化合物 + 氟節胺 (flumetralin)、式 I 化合物 + 唑嘧磺草胺 (flumetsulam)、式 I 化合物 + 氟烯草酸 (flumiclorac)、式 I 化

合物+氟烯草酸(flumiclorac-pentyl)、式 I 化合物+丙炔氟草
 胺(flumioxazin)、式 I 化合物+氟米普平(flumipropin)、式 I
 化合物+伏草隆(fluometuron)、式 I 化合物+乙羧氟草醚
 (fluoroglycofen)、式 I 化合物+乙羧氟草醚
 (fluoroglycofen-ethyl)、式 I 化合物+氟殺普(fluoxaprop)、
 式 I 化合物+氟胺草唑(flupoxam)、式 I 化合物+氟普帕希
 (flupropacil)、式 I 化合物+氟丙酸(flupropanate)、式 I 化
 合物+氟嘧啶磺隆(flupyrsulfuron)、式 I 化合物+氟嘧啶磺隆-
 甲基鈉、式 I 化合物+抑草丁(flurenol)、式 I 化合物+氟啶
 草酮(fluridone)、式 I 化合物+氟咯草酮(flurochloridone)、
 式 I 化合物+氟氯比(fluroxypyr)、式 I 化合物+呋草酮
 (flurtamone)、式 I 化合物+噻草氟(fluthiacet)、式 I 化合物
 +噻草氟(fluthiacet-methyl)、式 I 化合物+氟磺胺草醚
 (fomesafen)、式 I 化合物+甲磺胺磺隆(foramsulfuron)、式
 I 化合物+蔓草磷(fosamine)、式 I 化合物+固殺草、式 I 化
 合物+固殺草(glufosinate-ammonium)、式 I 化合物+嘉磷
 塞、式 I 化合物+氯吡嘧磺隆(halosulfuron)、式 I 化合物+
 氯吡嘧磺隆(halosulfuron-methyl)、式 I 化合物+甲基合氯氟
 (haloxyfop)、式 I 化合物+甲基合氯氟-P、式 I 化合物
 +HC-252、式 I 化合物+菲殺淨(hexazinone)、式 I 化合物+
 咪草酯(imazamethabenz)、式 I 化合物+咪草酸
 (imazamethabenz-methyl)、式 I 化合物+甲氧咪草煙、式 I
 化合物+甲咪唑菸酸(imazapic)、式 I 化合物+依滅草
 (imazapyr)、式 I 化合物+滅草喹(imazaquin)、式 I 化合物+

咪草煙 (imazethapyr) 、 式 I 化 合 物 + 依 速 隆
 (imazosulfuron) 、 式 I 化 合 物 + 節 草 酮 (indanofan) 、 式 I 化
 合 物 + 碘 甲 烷 、 式 I 化 合 物 + 碘 磺 隆 (iodosulfuron) 、 式 I 化
 合 物 + 碘 甲 磺 隆 鈉 (iodosulfuron-methyl-sodium) 、 式 I 化 合
 物 + 碘 苯 腈 (ioxynil) 、 式 I 化 合 物 + 異 丙 隆 (isoproturon) 、 式
 I 化 合 物 + 愛 速 隆 (isouron) 、 式 I 化 合 物 + 異 噁 噠 草 胺
 (isoxaben) 、 式 I 化 合 物 + 氯 草 酮 (isoxachlortole) 、 式 I 化 合
 物 + 異 噁 唑 草 酮 (isoxaflutole) 、 式 I 化 合 物 + 噁 草 醚
 (isoxapyrifop) 、 式 I 化 合 物 + 特 胺 靈 (karbutilate) 、 式 I 化 合
 物 + 乳 氟 禾 草 靈 (lactofen) 、 式 I 化 合 物 + 環 草 定 (lenacil) 、 式
 I 化 合 物 + 理 有 龍 (linuron) 、 式 I 化 合 物 + MAA 、 式 I 化 合
 物 + MAMA 、 式 I 化 合 物 + MCPA 、 式 I 化 合 物 + MCPA-硫 乙
 基 、 式 I 化 合 物 + MCPB 、 式 I 化 合 物 + 二 甲 四 氯 丙 酸
 (mecoprop) 、 式 I 化 合 物 + 二 甲 四 氯 丙 酸 -P 、 式 I 化 合 物 + 滅
 芬 草 (mefenacet) 、 式 I 化 合 物 + 麥 夫 迪 (mefluidide) 、 式 I 化
 合 物 + 甲 基 二 磺 隆 (mesosulfuron) 、 式 I 化 合 物 + 甲 基 二 磺 隆
 (mesosulfuron-methyl) 、 式 I 化 合 物 + 硝 草 酮 (mesotrione) 、
 式 I 化 合 物 + 威 百 畝 (metam) 、 式 I 化 合 物 + 噁 唑 噠 草 胺
 (metamifop) 、 式 I 化 合 物 + 苯 吡 草 酮 (metamitron) 、 式 I 化
 合 物 + 滅 草 胺 (metazachlor) 、 式 I 化 合 物 + 甲 基 苯 噻 隆
 (methabenzthiazuron) 、 式 I 化 合 物 + 滅 草 唑 (methazole) 、 式
 I 化 合 物 + 甲 基 肼 酸 、 式 I 化 合 物 + 甲 基 殺 草 隆
 (methyldymron) 、 式 I 化 合 物 + 異 硫 氰 酸 甲 酯 、 式 I 化 合 物 +
 吡 喃 隆 (metobenzuron) 、 式 I 化 合 物 + 撲 多 草

(metobromuron)、式 I 化合物+莫多草(metolachlor)、式 I 化合物+左旋莫多草(S-metolachlor)、式 I 化合物+磺草唑胺(metosulam)、式 I 化合物+甲氧隆(metoxuron)、式 I 化合物+滅必淨(metribuzin)、式 I 化合物+甲磺隆(metsulfuron)、式 I 化合物+甲磺隆(metsulfuron-methyl)、式 I 化合物+MK-616、式 I 化合物+稻得壯(molinate)、式 I 化合物+綠谷隆(monolinuron)、式 I 化合物+MSMA、式 I 化合物+萘普草(naproanilide)、式 I 化合物+萘丙醯草胺(napropamide)、式 I 化合物+鈉得爛(naptalam)、式 I 化合物+NDA-402989、式 I 化合物+草不隆(neburon)、式 I 化合物+煙密磺隆(nicosulfuron)、式 I 化合物+吡氯草胺(nipyraclofen)、式 I 化合物+正-甲基嘉磷塞、式 I 化合物+壬酸、式 I 化合物+氟草敏(n 或者 flurazon)、式 I 化合物+油酸(脂肪酸)、式 I 化合物+坪草丹(orbencarb)、式 I 化合物+磺醯脲除草劑(orthosulfamuron)、式 I 化合物+歐拉靈(或者 yzalin)、式 I 化合物+稻思達(oxadiargyl)、式 I 化合物+樂滅草(oxadiazon)、式 I 化合物+環氧密磺隆(oxasulfuron)、式 I 化合物+去稗安(oxaziclomefone)、式 I 化合物+復祿芬(oxyfluorfen)、式 I 化合物+巴拉刈(paraquat)、式 I 化合物+巴拉刈二氯鹽、式 I 化合物+克草猛(pebulate)、式 I 化合物+施得圃(pendimethalin)、式 I 化合物+平速爛(penoxsulam)、式 I 化合物+五氯酚、式 I 化合物+戊醯苯草胺(pentanochlor)、式 I 化合物+環戊噁草酮(pentoxazone)、式 I 化合物+烯草胺(pethoxamid)、式 I 化合物+石油、式 I

化合物+甜菜寧(phenmedipham)、式 I 化合物+乙基甜菜寧、
 式 I 化合物+毒莠定(picloram)、式 I 化合物+氟吡草胺
 (picolinafen)、式 I 化合物+聯苯菊酯(pinoxaden)、式 I 化
 合物+哌草磷(piperophos)、式 I 化合物+亞砷酸氫鉀、式 I 化
 合物+疊氮化鉀、式 I 化合物+普拉草(pretilachlor)、式 I 化
 合物+氟嘧磺隆(primisulfuron)、式 I 化合物+甲基氟嘧磺
 隆、式 I 化合物+氨基氟樂靈(prodiamine)、式 I 化合物+氟
 唑草胺(profluazol)、式 I 化合物+環苯草酮(profoxydim)、
 式 I 化合物+調環酸(prohexadion)-鈣、式 I 化合物+撲滅通
 (prometon)、式 I 化合物+佈滅淨(prometryn)、式 I 化合物+
 毒草胺(propachl 或)、式 I 化合物+敵稗(propanil)、式 I 化
 合物+普拔草(propaquizafop)、式 I 化合物+撲滅津
 (propazine)、式 I 化合物+苯胺靈(propham)、式 I 化合物+
 異丙草胺(propisochlor)、式 I 化合物+丙苯磺隆
 (propoxycarbazone)、式 I 化合物+丙苯磺隆鈉、式 I 化合物
 +戊炔草胺(propyzamide)、式 I 化合物+苜草丹
 (prosulfocarb)、式 I 化合物+三氟丙磺隆(prosulfuron)、式
 I 化合物+雙唑草腈(pyraclonil)、式 I 化合物+吡草醚
 (pyraflufen)、式 I 化合物+吡草醚(pyraflufen-ethyl)、式 I
 化合物+哌磺托爾(pyrasulfotole)、式 I 化合物+苜草唑
 (pyrazolynate)、式 I 化合物+百速隆(pyrazosulfuron)、式 I
 化合物+百速隆(pyrazosulfuron-ethyl)、式 I 化合物+苜草唑
 (pyrazoxyfen)、式 I 化合物+嘧啶肟草醚(pyribenzoxim)、式
 I 化合物+稗草畏(pyributicarb)、式 I 化合物+稗達弗

(pyridafol)、式 I 化合物+必汰草(pyridate)、式 I 化合物+環酯草醚(pyriftalid)、式 I 化合物+嘧草醚(pyriminobac)、式 I 化合物+嘧草醚(pyriminobac-methyl)、式 I 化合物+嘧磺芳(pyrimisulfan)、式 I 化合物+嘧草硫醚(pyrithiobac)、式 I 化合物+嘧草硫醚(pyrithiobac-sodium)、式 I 化合物+派咯薩磺酮(pyroxasulfone)(KIH-485)、式 I 化合物+派咯蘇倫(pyroxulam)、式 I 化合物+快克草(quinclorac)、式 I 化合物+喹草酸(quinmerac)、式 I 化合物+滅藻醌(quinoclamine)、式 I 化合物+快伏草(quizalofop)、式 I 化合物+快伏草-P、式 I 化合物+玉嘧磺隆(rimsulfuron)、式 I 化合物+西殺草(sethoxydim)、式 I 化合物+環草隆(siduron)、式 I 化合物+西瑪津(simazine)、式 I 化合物+西草淨(simetryn)、式 I 化合物+SMA、式 I 化合物+亞砷酸鈉、式 I 化合物+疊氮化鈉、式 I 化合物+氯酸鈉、式 I 化合物+磺草酮(sulcotrione)、式 I 化合物+甲磺草胺(sulfentrazone)、式 I 化合物+甲嘧磺隆(sulfometuron)、式 I 化合物+甲嘧磺隆(sulfometuron-methyl)、式 I 化合物+硫復松(sulfosate)、式 I 化合物+磺醯磺隆(sulfosulfuron)、式 I 化合物+硫酸、式 I 化合物+焦油、式 I 化合物+2, 3, 6-TBA、式 I 化合物+TCA、式 I 化合物+TCA-鈉、式 I 化合物+牧草胺(tebutam)、式 I 化合物+得葡隆(tebuthiuron)、式 I 化合物+特呋三酮(tefuryltrione)、式 I 化合物+探波三酮(tembotrione)、式 I 化合物+得殺草(tepraloxydim)、式 I 化合物+特草定(terbacil)、式 I 化合物+甲氧去草淨

(terbumeton)、式 I 化合物+特丁津(terbuthylazine)、式 I 化合物+特丁淨(terbutryn)、式 I 化合物+欣克草(thenylchlor)、式 I 化合物+噻氟隆(thiazafluron)、式 I 化合物+噻草定(thiazopyr)、式 I 化合物+噻磺隆(thifensulfuron)、式 I 化合物+噻卡巴脞(thiencarbazone)、式 I 化合物+噻磺隆(thifensulfuron-methyl)、式 I 化合物+殺丹(thiobencarb)、式 I 化合物+仲草丹(tiocarbazil)、式 I 化合物+妥普米松(topramezone)、式 I 化合物+苯肟草酮(tralkoxydim)、式 I 化合物+野麥畏(triallate)、式 I 化合物+醚苯磺隆(triasulfuron)、式 I 化合物+三吡氟草胺(triaziflam)、式 I 化合物+苯磺隆(tribenuron)、式 I 化合物+苯磺隆(tribenuron-methyl)、式 I 化合物+殺草畏(tricamba)、式 I 化合物+三氯比(triclopyr)、式 I 化合物+草達津(trietazine)、式 I 化合物+三氟定磺隆(trifloxysulfuron)、式 I 化合物+三氟定磺隆鈉、式 I 化合物+三福林(trifluralin)、式 I 化合物+氟胺磺隆(triflusulfuron)、式 I 化合物+氟胺磺隆(triflusulfuron-methyl、式 I 化合物+三羥基三吡(trihydroxytriazine)、式 I 化合物+抗倒酯(trinexapac-ethyl)、式 I 化合物+三氟甲磺隆(tritosulfuron)、式 I 化合物+[3-[2-氯-4-氟-5-(1-甲基-6-三氟甲基-2,4-二噁-1,2,3,4-四氫嘧啶-3-基)丙氧基]-2-吡啶氧基]乙酸乙酯(CAS RN 353292-31-6)、式 I 化合物+4-羥基-3-[[2-[(2-甲氧乙氧基)甲基]-6-(三氟甲基)-3-吡啶基]

羰基]-二環[3.2.1]辛-3-烯-2-酮(CAS RN 352010-68-5)和式 I 化合物+4-羥基-3-[[2-(3-甲氧丙基)-6-(二氟甲基)-3-吡啶基]羰基]二環[3.2.1]辛-3-烯-2-酮。

雖然式(I)化合物和另一種除草劑的二向式混合物已明確地揭示於上文，熟習此技藝人士將會理解本發明亦涵蓋至三向式以及進一步包括以上二向式混合物的多重組合。

在一較佳的具體實例中，式(I)化合物係與以下所述者併用：乙醯乳酸抑制劑(例如，一或多種雙氟磺草胺(florasulam)、美殺福隆(metsulfuron)、噻磺隆(thifensulfuron)、苯磺隆(tribenuron)、醚苯磺隆(triasulfuron)、氟酮磺隆(flucarbazone)、氟嘧啶磺隆(flupyrsulfuron)、碘磺隆(iodosulfuron)、甲基二磺隆(mesosulfuron)、丙苯磺隆(propoxycarbazone)、磺醯磺隆(sulfosulfuron)、派咯蘇倫(pyroxulam)、三氟甲磺隆(tritosulfuron)、以及其鹽或酯)，合成植物生長素除草劑(例如一或多種畢克草(clopyralid)、2,4-D、2,4-DB、汰克草(dicamba)、2,4-滴丙酸(dichlorprop)、氟氯比(fluroxypyr)、MCPA、MCPB，二甲四氯丙酸(mecoprop)、二甲四氯丙酸-P(mecoprop-P)，ACCase-抑制劑除草劑(例如一或多種苯基吡唑啉；聯苯菊酯(pinoxaden)；芳基氧基基丙酸除草劑，例如炔草酸(clodinafop)、賽伏草(cyhalofop)、禾草靈(diclofop)、芬殺草(fenoxaprop)、伏寄普(fluzifop)、甲基合氯氟(haloxifop)、快伏草(quizalofop)、快伏草(quizalofop)、trifop 以及其混合物，以及其異構物，例如芬

殺草 (fenoxaprop-P)、伏寄普 (fluazifop-P)、甲基合氯氯-P (haloxyfop-P)、快伏草 (quizalofop-P)；以及環己烷二酮除草劑，例如亞汰草 (alloxydim)；丁苯草酮 (butoxydim)、剋草同 (clethodim)、環殺草 (cycloxydim)、環苯草酮 (profoxydim)、西殺草 (sethoxydim)、得殺草 (tepraloxym) 以及苯肟草酮 (tralkoxydim)、以及其鹽或酯，及/或植物生長素輸送抑制劑，例如半卡巴肟 (例如吡氯草胺 (diflufenican)、特別是鈉鹽) 或鄰苯醞胺酯 (phthalamate) 化合物 (例如鈉得爛 (naptalam))。

式 (I) 化合物的特佳混合物配對為：雙氯磺草胺 (florasulam)、碘磺隆 (iodosulfuron)-甲基-鈉、甲基二磺隆 (mesosulfuron)-甲基、metsulam-甲基、噻磺隆 (thifensulfuron)、醚苯磺隆 (triasulfuron)、苯磺隆 (tribenuron)-甲基或、派咯蘇倫 (pyroxulam)；汰克草 (dicamba)、氯氯比 (fluroxypyr)、MCPA、二甲四氯丙酸 (mecoprop) 或二甲四氯丙酸 (mecoprop)-P；炔草酸 (clodinafop)-炔丙基、賽伏草 (cyhalofop)-丁基，禾草靈 (diclofop)-甲基，芬殺草 (fenoxaprop)-乙基，芬殺草 (fenoxaprop)-P-乙基、伏寄普 (fluazifop-P)-乙基，伏寄普 (fluazifop)-丁基、伏寄普 (fluazifop)-P-丁基、甲基合氯氯 (haloxyfop)-甲基，甲基合氯氯 (haloxyfop)-P-甲基，聯苯菊酯 (pinoxaden)，啞草酯 (propaquizafop)，快伏草 (quizalofop)-乙基，快伏草 (quizalofop)-P-乙基，苯肟草酮 (tralkoxydim)，trifop-甲基，氯吡草肟 (diflufenzopyr)-鈉和鈉得爛

(naptalam)。

為了避免疑問，即使本文以上並未明確地陳述，式(I)化合物的配對的混合亦可為任何合適的農化上可接受酯或鹽，如在” The Pesticide Manual, Thirteenth Edition, British Crop Protection Council, 2003” 中所述者。

式(I)化合物對混合配對的混合比例較佳為自 1：100 至 1000：1。

混合物可以有利地被用於上述調配物(其中”活性成份”係關於式(I)化合物與混合配對的個別混合物)。

根據本發明式(I)化合物亦可以被用於與一或多種安全劑併用。類似者，根據本發明式(I)化合物與一或多種另外的活性成份、特別是一或多種另外的除草劑的混合物，可以被用於與一或多種安全劑併用。用於與式(I)化合物併用的適合安全劑包括 AD 67(MON 4660)，解草酮(benoxacor)，解毒喹(cloquintocet-mexyl)，解草胺腈(cyometrinil)和相對應的(Z)異構物，塞普磺醯胺(cyprosulfamide)(CAS RN 221667-31-8)，二氯丙烯胺(dichlormid)，解草唑(fenclorazole-ethyl)，解草啞(fenclorim)，解草胺(flurazole)，氟草肟(fluxofenim)，解草噁唑(furilazole)以及相對應的 R 異構物，雙苯噁唑酸(係為 oxadifen-ethyl)，吡啶解草酯(mefenpyr-diethyl)，解草腈(oxabetrinil)，萘酚(CAS RN 81-84-5)以及 N-異丙基-4-(2-甲氧基-苯甲醯基磺醯胺基)-苯甲醯胺(CAS RN 221668-34-4)。用於本發明的特佳的安全劑為解毒喹(cloquintocet-mexyl)，塞普磺醯胺

(cyprosulfamide)，解草唑(fenchlorazole-ethyl)以及吡唑解草酯(mefenpyr-diethyl)。式(I)化合物的安全劑亦可以為酯或鹽形式，例如於” The Pesticide Manual, 13th Edition *supra*”。解毒啞(cloquintocet-mexyl)亦適用於其鋰鹽、鈉鹽、鉀鹽、鈣鹽、鎂鹽、鋁鹽、鐵鹽、銨鹽、季銨鹽、銻鹽或磷鹽，如 WO 02/24048，解草唑(fenchlorazole-ethyl)亦適用於解草唑(fenchlorazole)。

較佳者，式(I)化合物對安全劑的混合比例為自 100：1 至 1：10，特佳為自 20：1 至 1：1。

混合物有利地被用於上述調配物(其中在該例中，”活性成份”係關於式(I)化合物與安全劑的個別混合物)。

式(I)化合物與另外除草劑的較佳混合物包括：式(I)化合物+聯苯菊酯(pinoxaden)+解毒啞(cloquintocet-mexyl)，式(I)化合物+炔草酸(clodinafop)+解毒啞(cloquintocet-mexyl)以及式(I)化合物+炔草酸(clodinafop)-丙炔基+解毒啞(cloquintocet-mexyl)。

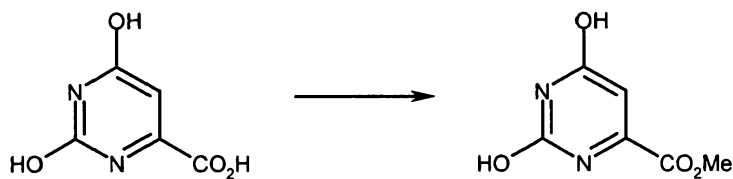
本發明的各種方面內容和具體實例將在以實施例方式更詳細地說明。理應理解的是，對該詳細內容所作的改良將不會偏離本發明範圍。

為了避免疑問，本申請案文中提到的參考文獻，專利申請案或專利，該引證文獻的全部內容以引用方式併入本案。

實施例

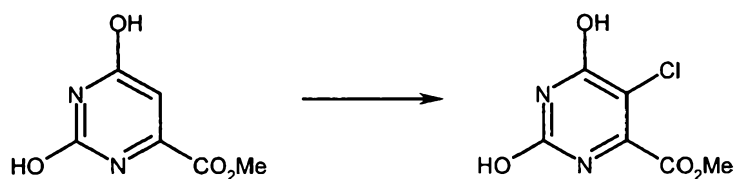
實施例 1 4-胺基-2,5-二氯-6-甲氧基羰基嘧啶的合成

1.1 2, 4-二羥基-6-甲氧基羰基嘧啶(乳清酸甲酯)的製備



將亞硫醯氯(500 毫升)，吡啶(2.5 毫升)以及數滴二甲基甲醯胺加入乳清酸單水合物(78 克，0.44 莫耳)。反應混合物在環境溫度被攪拌 5 天，然後在回流之下被另外加熱 14 小時。在冷卻之後，讓該固態材料沉降，使上層液傾析。固態殘留物經己烷沖洗且乾燥。在伴隨著攪拌之下將甲醇(700 毫升)滴加入該固體。一旦氣體形成速率變慢，將混合物於回流之下加熱整夜，然後被冷卻至 4 至 5 °C。藉過濾移除固體且以甲醇及醚予以沖洗以提供乳清酸甲酯(73 克，97%)。化合物的特徵數據如下：¹H nmr(400MHz, d₆-DMSO) δ_H 11.41 (1H, s), 11.26(1H, s), 6.04(1H, s), 3.84(3H, s) ppm。

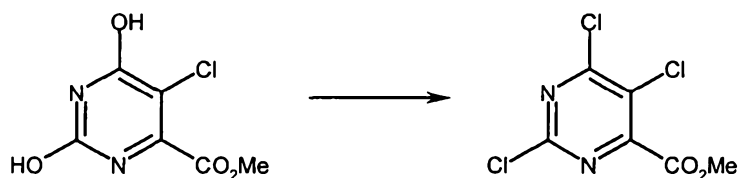
1.2 5-氯-2, 4-二羥基-6-甲氧基羰基嘧啶的製備



將觸媒數量的氯化亞鐵加入乳清酸甲酯(34 克，0.2 莫

耳)在乙酸酐(在冰乙酸中的 5% 溶液, 500 毫升)中的溶液。此混合物經加熱至 90 至 95°C 且滴加入磷醯氯(54 克, 0.40 莫耳)。添加完成之後, 該溶液在攪拌之下被緩慢地回流, 且持續加熱整夜。此溶液被冷卻至 18°C 且固體經過濾被移除。該固體經乙酸沖洗, 然後經水沖洗, 乾燥而製得 5-氯-2, 4-二羥基-6-甲氧基羰基嘧啶(36.0 克, 89%)。此化合物的特徵數據如下: ^1H nmr(400MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$) δ_{H} 11.86(1H, s), 11.62(1H, s), 3.88(3H, s)ppm。

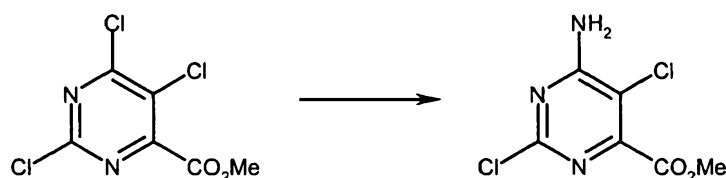
1.3 6-甲氧基羰基-2, 4, 5-三氯嘧啶的製備



在 10°C 將磷醯氯(993 毫升)加入 5-氯-2, 4-二羥基-6-甲氧基羰基嘧啶(30.0 克, 0.146 莫耳), 將所得到的溶液冷卻至 0°C。將 *N,N*-二乙基苯胺(30.9 毫升, 0.193 莫耳)滴加入經攪拌的溶液。在添加完成之後, 讓反應混合物慢慢回溫至環境溫度, 然後在回流下加熱整夜。所得到的溶液經冷卻及在減壓下濃縮。將殘留物倒入碎冰(600 克)且經冷醚萃取。此醚萃取物經鹽水沖洗, 經硫酸鈉乾燥, 過濾且在減壓下蒸發而得到淺棕色固體。此經暖己烷研製而製得 6-甲氧基羰基-2, 4, 5-三氯嘧啶(28 克, 82%)。此化合物的特徵數據如下: ^1H nmr(400 MHz, CDCl_3) δ_{H} 4.02(3H,

s)ppm。

1.44-胺基-2, 5-二氯-6-甲氧基羰基嘧啶的製備



在 0°C 將氨水 (30% 溶液; 8.0 毫升, 0.42 莫耳) 滴加入經攪拌的 6-甲氧基羰基-2, 4, 5-三氯嘧啶 (20.0 克, 0.083 莫耳) 在四氫呋喃 (1000 毫升) 中的溶液。在 0°C 攪拌反應混合物 1 小時, 然後經過濾。在減壓之下使濾液蒸發而製得白色固體, 該固體經己烷沖洗二次且在真空之下經乾燥而得到 4-胺基-2, 5-二氯-6-甲氧基羰基嘧啶 (15.0 克, 82 %)。此化合物的特徵數據如下: ^1H nmr (400 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$) δ_{H} 8.57 (1H, br s), 7.94 (1H, br s), 3.88 (3H, s) ppm。

實施例 2 4-胺基-2, 5-二氯-6-甲氧基羰基嘧啶與芳香系硼酸反應的一般方法

二種不同一般方法敘述如下:

2.1 將四(三苯基膦)鈀 (3 毫克) 加入 4-胺基-2, 5-二氯-6-甲氧基羰基嘧啶 (如實施例 1 所製備者) (444 毫克, 2.0 莫耳), 碳酸鉀 (300 毫克, 2.2 毫莫耳) 以及雜芳香系硼酸 (2.2 毫莫耳) 在乙腈 (4 毫升) 以及二甲基乙醯胺 (2 毫升) 中的懸浮液中。所得到的混合物於 170°C 的微波反應器中加熱 15 分鐘, 然後

使其冷卻，被倒入水中。所得到的混合物經乙酸乙酯萃取，有機萃取物經水沖洗，經硫酸鎂乾燥，過濾，以及在減壓下經乾燥。殘留物經在二氧化矽上以乙酸乙酯/己烷混合物作沖提液經純，提供所欲產物。

2.2 將四(三苯基膦)鉀(3 毫克)加入 4-胺基-2, 5-二氯-6-甲氧基羰基嘧啶(如實施例 1 所製備者)(444 毫克, 2.0 毫莫耳), 三乙胺(1 毫升)以及雜芳香系硼酸(2.2 毫莫耳)在乙腈(4 毫升)的懸浮液中。所得到的混合物於 170°C 的微波反應器中加熱 15 分鐘，然後使其冷卻，在減壓之下蒸發溶劑。殘留物經在二氧化矽上以乙酸乙酯/己烷混合物作沖提液經純，提供所欲產物。

實施例 3 4-胺基-2, 5-二氯-6-甲氧基羰基嘧啶與雜芳香系硼酸酯反應的一般方法

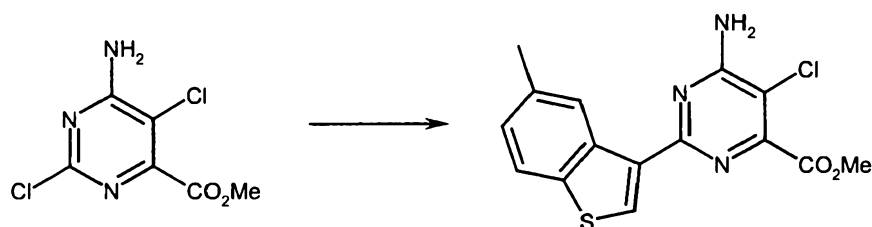
硼酸酯(0.5 毫莫耳), 4-胺基-2, 5-二氯-6-甲氧基羰基嘧啶(如實施例 1 所製備者)(110 毫克, 0.5 毫莫耳), 氟化鉀(151 毫克, 1.0 毫莫耳)以及[1, 1'-雙(二苯基膦基)-萘]二氯鉀(II)錯合物與二氯甲烷(1:1)(41 毫克, 0.05 毫莫耳)置於小瓶中。對此小瓶抽真空，在加入二甲氧基乙烷(1 毫升)以及水(1 毫升)之前回填入氮。反應混合物在 140°C 的微波反應器中加熱 10 分鐘，然後使其冷卻，過濾，以乙酸乙酯(10 毫升)沖洗。有機萃取物經水(10 毫升)以及鹽水(10 毫升)沖洗，經硫酸鎂乾燥，過濾，在減壓之下蒸發。粗製產物係

使用 SCX-2 管柱(捕放方法(catch and release method))及先後使用甲醇以及 2N 氨(甲醇中)沖洗而加以純化。產物進一步經在二氧化矽上及己烷/乙酸乙酯/三乙胺混合物作為沖提液進行純化。

實施例 4 自雜芳香系硼酸製備雜芳香系硼酸酯的一般方法

雜芳香系硼酸(1.8 毫莫耳), 1,3-丙二醇(0.26 毫升, 3.6 毫莫耳)以及 4Å 分子篩在甲苯(10 毫升)中的懸浮液在回流中被加熱 4 小時, 然後被冷卻至室溫。此混合物經過濾且濾液在減壓下被濃縮。殘留物在二氯甲烷(10 毫升)中被製成漿料且經水(2x10 毫升)沖洗。有機相經硫酸鎂乾燥, 過濾且在減壓下蒸發而製得所欲硼酸酯。

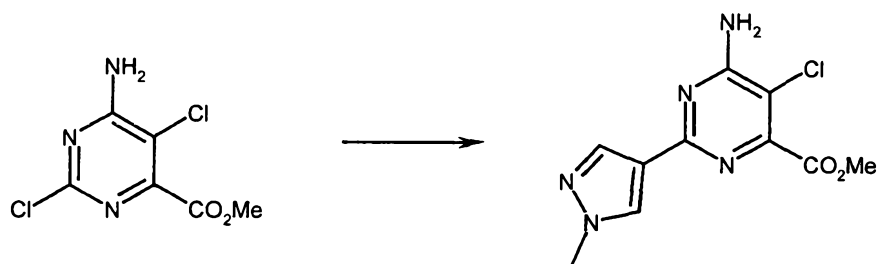
實施例 5 4-胺基-5-氯-6-甲氧基羰基-2-(5-甲基苯並-[b]噻吩-3-基)-嘓啶的製備 (化合物 2-57)



將 5-甲基-苯並[b]噻吩-3-基硼酸(96 毫克, 0.5 毫莫耳), 4-胺基-2,5-二氯-6-甲氧基羰基嘓啶(如實施例 1 所述加以製備)(110 毫克, 0.5 毫莫耳)以及四(三苯基磷)鈰 (58

毫克，0.05 毫莫耳)置於小瓶中。此小瓶經抽真空且在添加三乙胺(77 微升，0.55 毫莫耳)及乙腈(4 毫升)之後被回填氮。此反應混合物在 140°C 的微波反應器中被加熱 10 分鐘，然後被冷卻。此反應混合物在減壓之下經過濾及濃縮而製得棕色油，其在二氧化矽上以己烷/乙酸乙酯梯度作為沖提液經層析純化而製得為橙色固體的 4-胺基-5-氯-6-甲氧基羰基-2-(5-甲基苯並噻吩-3-基)-嘓啶(33 毫克，20%)。此化合物的特徵數據如下：熔點為 164-165°C; ^1H nmr (400 MHz, CDCl_3) δ_{H} 8.13(1H, s), 7.73(1H, d), 7.62 (1H, s), 7.22(1H, d), 5.61(2H, br s), 4.03(3H, s), 2.47(3H, s)ppm; R_f (己烷：乙酸乙酯為)0.25。

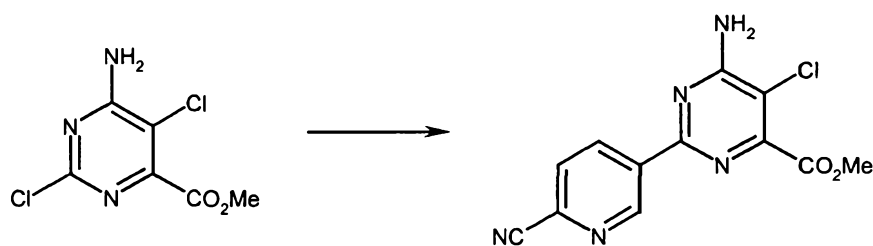
實施例 6 4-胺基-5-氯-6-甲氧基羰基-2-(1-甲基-1H-吡唑-4-基)-嘓啶的合成 (化合物 2-71)



將 1-甲基-4-(4, 4, 5, 5-四甲基-1, 3, 2-二氧雜己硼烷-2-基)-1H-吡唑(104 毫克，0.5 毫莫耳)，4-胺基-2, 5-二氯-6-甲氧基羰基嘓啶(如實施例 1 所述者製備)(110 毫克，0.5 毫莫耳)，氟化鈾(151 毫克，1.0 毫莫耳)以及雙(三苯基磷)氯化鈾(II)(35 毫克，0.05 毫莫耳)置於小瓶中。該小瓶經

抽真空且在添加二甲氧基乙烷(1 毫升)及水(1 毫升)之前經回填氮。此反應混合物在 140°C 的微波反應器中被加熱 10 分鐘，然後使其冷卻。此反應混合物經過濾且經乙酸乙酯(10 毫升)萃取。有機萃取物經水(10 毫升)及鹽水 (10 毫升)沖洗，經硫酸鎂乾燥，過濾以及在減壓下蒸發而提供淺黃色固體，其在二氧化矽上，使用己烷/乙酸乙酯梯度作為沖提液而經層析純化。在二氧化矽上以二氯甲烷/乙酸乙酯梯度作為沖提液而經層析進行進一步的純而提供為灰白色固體的 4-胺基-5-氯-6-甲氧基羰基-2-(1-甲基-1H-吡唑-4-基)-嘧啶(60 毫克，45%)。此化合物的特徵數據如下：熔點為 185-186°C; ^1H nmr (400 MHz, CDCl_3) δ_{H} 8.07(1H, s), 8.02(1H, s), 5.47(2H, br s), 4.00(3H, s), 3.93(3H, s)ppm; R_f (二氯甲烷：乙酸乙酯為 4：6)0.2。

實施例 4-胺基-5-氯-2-(2-氯基吡啶-5-基)-6-甲氧基-羰基嘧啶的合成(化合物 2-158)



將 2-氯基吡啶-5-硼酸頻哪醇酯(101 毫克，0.5 毫莫耳)，4-胺基-2,5-二氯-6-甲氧基羰基嘧啶(如實施例 1 所述者製備)(110 毫克，0.5 毫莫耳)，氟化鉍(151 毫克，1.0 毫

莫耳)以及雙(三苯基膦)氯化鈹(II)(35 毫克, 0.05 毫莫耳)置於小瓶中。此小瓶經抽真空而在添加二甲氧基乙烷(1 毫升)以及水(1 毫升)之前經回填氮。此反應混合物在 140°C 的微波反應器中被加熱 10 分鐘, 然後讓其冷卻。此反應混合物經過濾且經乙酸乙酯(10 毫升)萃取。有機萃取物經水(10 毫升)以及鹽水(10 毫升)沖洗, 經硫酸鎂乾燥, 過濾及在減壓下蒸發而製得棕色油, 其在二氧化矽上以己烷/乙酸乙梯度作為沖提液而經層析純化。使用 SCX-2 管柱(捕放方法)進行進一步純化。在載入粗製產物作為在甲醇中的溶液之前, 此管柱經 1 個 CV (管柱體積)甲醇沖洗。使用 2 個 CV 甲醇, 接著使用 2 個 CV 的 2M 氨(甲醇中)以進行進一步沖洗而提供為灰白色固體的 4-胺基-5-氯-2-(2-氰基吡啶-5-基)-6-甲氧基羰基嘧啶(39 毫克, 27%)。此化合物的特徵數據如下: 熔點為 210-213°C; ^1H nmr (400 MHz, CDCl_3) δ_{H} 9.62(1H, d), 8.76(1H, dd), 7.77(1H, d), 5.71 (2H, brs), 4.04(3H, s) ppm; R_f (己烷: 乙酸乙酯為 1: 1)0.3。

使用實施例 2、3 及 4 中所述方法所製備的其他化合物列於表 2 中。

表 2 在以上實施例 2、3 及 4 中所述而製備的化合物。特徵數據為熔點或 ^1H nmr (400 MHz, CDCl_3) δ_{H} ppm, 或 m/z (LCMS)

化合物編 名稱

結構

特徵數據：

號

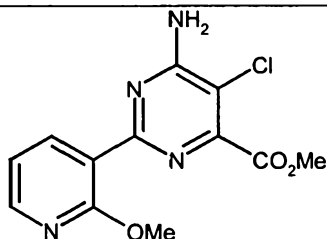
2-154

4-胺基-5-氯-6-

甲氧基羰基

-2-(2-甲氧基吡

啶-3-基)-嘧啶



8.3 (1H, dd),

8.0 (1H, dd),

7.0 (1H, dd),

5.65 (2H, br

s), 4.0 (6H, s)

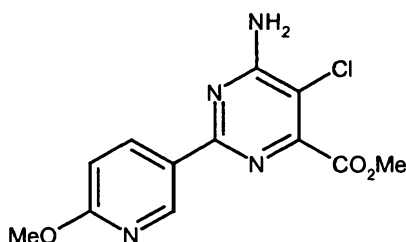
2-155

4-胺基-5-氯-6-

甲氧基羰基

-2-(2-甲氧基吡

啶-5-基)-嘧啶



9.15 (1H, d),

8.5 (1H, dd),

6.8 (1H, d), 5.6

(2H, br s), 4.05

(3H, s), 4.0

(3H, s)

2-159

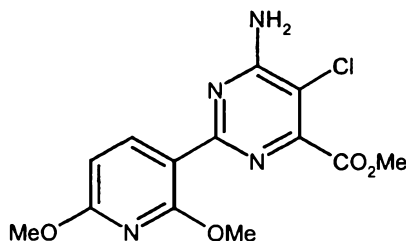
4-胺基-5-氯

-2-(2,6-二甲氧

基吡啶-3-

基)-6-甲氧基羰

基嘧啶



8.1 (1H, d), 6.4

(1H, d), 5.6

(2H, br s), 4.05

(3H, s), 4.00

(3H, s), 3.95

(3H, s)

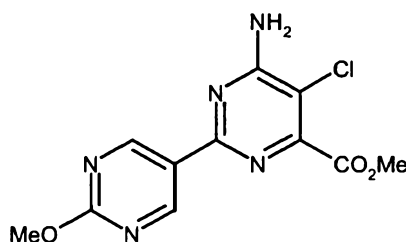
2-182

4-胺基-5-氯-6-

甲氧基羰基

-2-(2-甲氧基嘧

啶-5-基)-嘧啶



9.4 (2H, s), 5.8

(2H, br s), 4.1

(3H, s), 4.0

(3H, s)

化合物編號	名稱	結構	特徵數據：
號			
2-157	4-氨基-5-氯-2-(2-氯吡啶-5-基)-6-甲氧基羰基嘧啶		9.2 (1H, d), 8.7 (1H, m), 7.0 (1H, dd), 5.7 (2H, br s), 4.05 (3H, s)
2-156	4-氨基-5-氯-2-(2-氯吡啶-5-基)-6-甲氧基羰基嘧啶		9.3 (1H, d), 8.6 (1H, dd), 7.4 (1H, d), 5.65 (2H, br s), 4.05 (3H, s)
2-153	4-氨基-5-氯-6-甲氧基羰基-2-吡啶-3-基嘧啶		138-140
2-196	4-氨基-5-氯-2-異喹啉-4-基-6-甲氧基羰基嘧啶		145-146
2-2	4-氨基-5-氯-2-(5-氯噻吩-2-基)-6-甲氧基羰基嘧啶		M+H ⁺ 304, 306, 308

化合物編號	名稱	結構	特徵數據：
號			
2-1	4-氨基-5-氯-6-甲氧基羰基-2-噻吩-2-基嘧啶		$M+H^+$ 270, 272
2-3	4-氨基-5-氯-2-(5-氰基噻吩-2-基)-6-甲氧基羰基嘧啶		$M+H^+$ 295, 297
2-161	4-氨基-5-氯-2-(2-氟-6-甲基吡啶-3-基)-6-甲氧基羰基嘧啶		8.4 (1H, dd), 7.1 (1H, dd), 5.7 (2H, br s), 4.0 (3H, s), 2.5 (3H, s)
2-183	4-氨基-5-氯-2-(2,4-二甲氧基嘧啶-5-基)-6-甲氧基羰基嘧啶		9.0 (1H, s), 5.9 (2H, br s), 4.16 (3H, s), 4.18 (3H, s), 4.05 (3H, s), 4.05 (3H, s)
2-172	4-氨基-5-氯-2-(2-氟吡啶-3-基)-6-甲氧基羰基嘧啶		8.5 (1H, m), 8.3 (1H, m), 7.3 (1H, m), 5.7 (2H, br s), 4.0 (3H, s)

化合物編號	名稱	結構	特徵數據：
號			
2-16	4-胺基-5-氯-6- 甲氧基羰基-2- 噻吩-3-基嘧啶		8.3 (1H, d), 7.8 (1H, dd), 7.3 (1H, m), 6.1 (2H, br s), 4.0 (3H, s)
2-9	4-胺基-5-氯-6- 甲氧基羰基 -2-(5-甲基羰基 噻吩-2-基)-嘧 啶		7.9 (1H, d), 7.7 (1H, d), 5.8 (2H, br s), 4.0 (3H, s), 2.6 (3H, s)
2-56	4-胺基-2-(苯並 噻吩-3-基)-5- 氯-6-甲氧基羰 基嘧啶		9.0 (1H, dd), 8.5 (1H, s), 7.9 (1H, dd), 7.5 (1H, m), 7.4 (1H, m), 5.6 (2H, br s), 4.1 (3H, s)
2-54	4-胺基-2-(苯並 噻吩-2-基)-5- 氯-6-甲氧基羰 基嘧啶		8.2 (1H, s), 7.8 (2H, m), 7.4 (2H, m), 5.6 (2H, br s), 4.0 (3H, s)

化合物編號	名稱	結構	特徵數據：
號			
2-86	4-氨基-5-氯 -2-(3,5-二甲基 異噁唑-4- 基)-6-甲氧基羰 基嘧啶		5.5 (2H, br s), 4.0 (3H, s), 2.7 (3H, s), 2.5 (3H, s)
2-17	4-氨基-5-氯-6- 甲氧基羰基 -2-(4-甲基噻吩 -3-基)-嘧啶		8.2 (1H, s), 7.0 (1H, s), 6.0 (2H, br s), 4.0 (3H, s), 2.6 (3H, s)
2-55	4-氨基-5-氯-6- 甲氧基羰基 -2-(5-甲基苯並 噻吩-2-基)-嘧 啶		8.2 (1H, s), 7.7 (1H, d), 7.6 (1H, s), 7.2 (1H, d), 5.7 (2H, br s), 4.0 (3H, s), 2.5 (3H, s)
2-18	4-氨基-5-氯 -2-(2-氯噻吩-3- 基)-6-甲氧基羰 基嘧啶		7.5 (1H, d), 7.1 (1H, d), 6.0 (2H, br s), 4.0 (3H, s)

化合物編 名稱

結構

特徵數據：

號

2-170

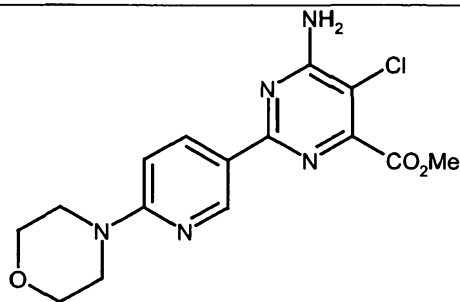
4-胺基-5-氯-6-

甲氧基羰基

-2-(6-[嗎啉-1-

基]-吡啶-3-基)-

嘧啶



9.2 (1H, d), 8.8

(1H, dd), 6.9

(1H, d), 5.9

(2H, br s), 4.0

(3H, s), 3.9

(4H, m), 3.8

(4H, m)

2-166

4-胺基-5-氯-6-

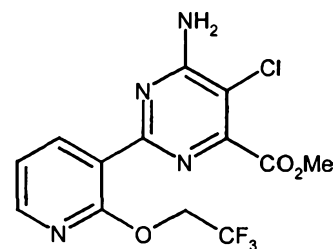
甲氧基羰基

-2-(2-[2,2,2-

三氟乙氧基]-

吡啶-3-基)-嘧

啶



8.4 (1H, m),

8.3 (1H, m),

7.2 (1H, m),

7.0 (2H, br s),

4.8 (2H, q), 4.0

(3H, s)

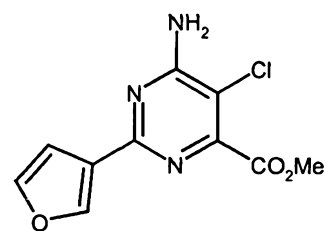
2-34

4-胺基-5-氯

-2-(呋喃-3-

基)-6-甲氧基羰

基嘧啶



8.2 (1H, s), 7.4

(1H, d), 6.9

(1H, d), 5.5

(2H, br s), 4.0

(3H, s)

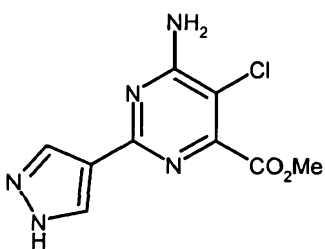
2-70

4-胺基-5-氯-6-

甲氧基羰基

-2-(吡唑-4-基)-

嘧啶



8.1 (1H, s), 7.2

(1H, s), 4.1

(3H, s), 3.9

(1H, br s), 3.2

(2H, br s)

化合物編 名稱

結構

特徵數據：

號

2-72

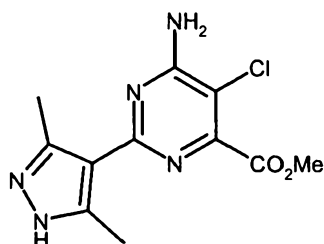
4-氨基-5-氯

-2-(3,5-二甲基

吡唑-4-基)-6-

甲氧基羰基噻

啉



5.8 (2H, br s),

5.5 (1H, br s),

4.0 (3H, s), 2.6

(3H, s), 2.4

(3H, s)

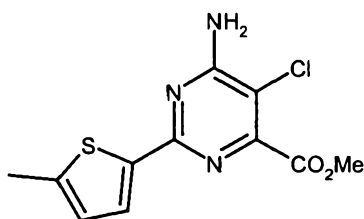
2-4

4-氨基-5-氯-6-

甲氧基羰基

-2-(5-甲基噻吩

-2-基)-噻啉



7.7 (1H, d), 6.8

(1H, m), 6.0

(2H, br s), 4.0

(3H, s), 2.5

(3H, s)

2-173

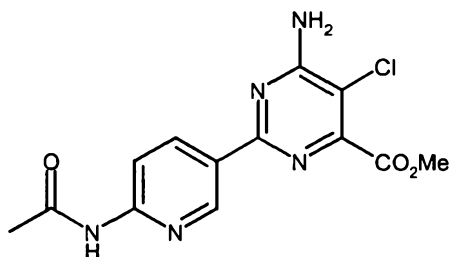
4-氨基-5-氯-6-

甲氧基羰基

-2-(6-甲基羰基

胺基吡啶-3-

基)-噻啉



13.0 (1H, s),

9.2 (1H, d), 9.1

(1H, dd), 8.7

(1H, d), 5.7

(2H, br s), 4.0

(3H, s), 2.4

(3H, s)

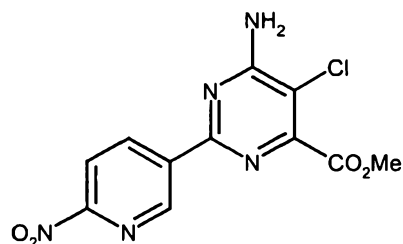
2-168

4-氨基-5-氯-6-

甲氧基羰基

-2-(6-硝基吡啶

-3-基)-噻啉



9.5 (1H, d), 9.0

(1H, dd), 8.3

(1H, d), 5.7

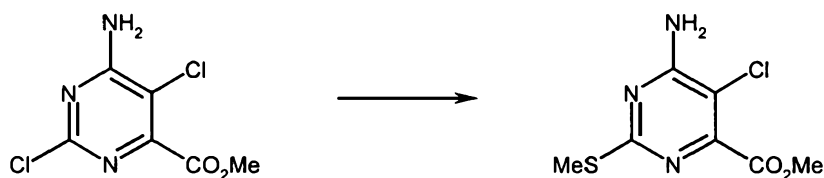
(2H, br s), 4.1

(3H, s)

化合物編號	名稱	結構	特徵數據：
號			
2-7	4-氨基-5-氯-6- 甲氧基羰基 -2-(5-甲氧基噻 吩-2-基)-嘧啶		92-94
2-19	4-氨基-5-氯 -2-(2,5-二氯噻 吩-3-基)-6-甲 氧基羰基嘧啶		83-85
2-146	4-氨基-5-氯 -2-(咪唑[1,5-a] 吡啶-3-基)-6- 甲氧基羰基嘧 啶		9.8 (1H, d), 8.5 (1H, s), 7.7 (1H, d), 7.4 (1H, t), 7.0 (1H, t), 5.6 (2H, br s), 4.1 (3H, s)
2-179	4-氨基-5-氯 -2-(2,6-二氯吡 啶-4-基)-6-甲 氧基羰基嘧啶		8.2 (2H, s), 5.6 (2H, br s), 4.0 (3H, s)

實施例 8 4-胺基-2-(6-氯吡啶-3-基)-5-乙烯基-6-甲氧基羰基-嘧啶的合成(化合物 68-156)

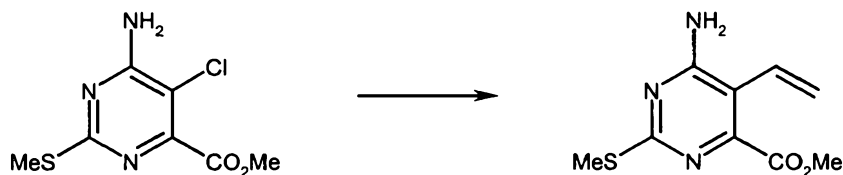
8.1 4-胺基-5-氯-6-甲氧基羰基-2-甲基硫代嘧啶的製備



將甲硫醇鈉(3.0 克，35 毫莫耳)分批加入 4-胺基-2，5-二氯-6-甲氧基羰基嘧啶(4.4 克，20 毫莫耳)(如實施例 1 所述者製備)在甲醇(100 毫升)中的經攪拌溶液中而得到淺黃色溶液。所得到混合物在回流下經攪拌 2 小時，然後使其冷卻 2 小時，經過濾及在減壓下蒸發。殘留物經溶於水和乙酸乙酯中，分離各相，而水相再經乙酸乙酯萃取。經合併的有機相經水和鹽水沖洗，經硫酸鎂乾燥，過濾，且在減壓下蒸發而製得黃色固體的 4-胺基-5-氯-6-甲氧基羰基-2-甲基硫代嘧啶(2.2 克)，其供使用而未經進一步純化。

^1H nmr (400 MHz, CDCl_3) δ_{H} 5.55(2H, br s), 3.95(3H, s), 2.50(3H, s)ppm。

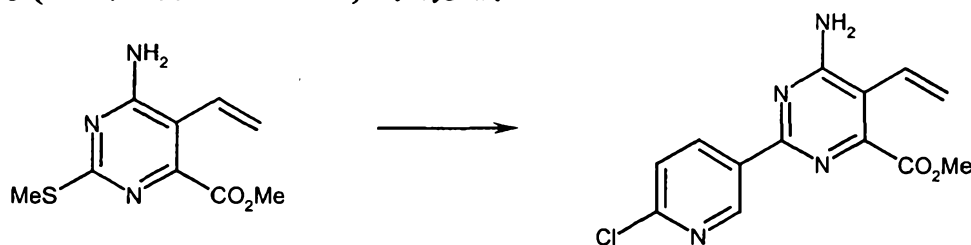
8.2 4-胺基-5-乙烯基-6-甲氧基羰基-2-甲基硫代嘧啶的製備



4-胺基-5-氯-6-甲氧基羰基-2-甲基硫代嘧啶(233 毫克, 1.0 毫莫耳), 乙烯基硼酸硼酸頻哪醇酯(0.4 毫升, 2.0 毫莫耳), 氟化鉍(0.6 克, 1.0 毫莫耳)以及以 1:1 錯合的[1, 1'-雙(二苯基膦基)-萘]二氯鉍(II)氯甲烷(200 毫克, 0.25 毫莫耳)於二甲氧基乙烷(3 毫升)中的溶液在攪拌中加入水(2 毫升)。此混合物在 140°C 的微波反應器中加熱 2 小時, 然後讓其冷卻, 以乙酸乙酯稀釋並以水和鹽水沖洗。有機相經硫酸鎂乾燥, 過濾且在減壓下蒸發而提供棕色油, 其於二氧化矽上使用己烷/乙酸乙酯(4:1)作沖提液經層析純化而製得米黃色固體的 4-胺基-5-乙烯基-6-甲氧基羰基-2-甲基硫代嘧啶(120 毫克, 50%)。

^1H nmr (400 MHz, CDCl_3) δ_{H} 6.70(1H, dd), 5.75 (2H, dd), 5.30(2H, br s), 3.90(3H, s), 2.50(3H, s)ppm。

8.3 4-胺基-2-(6-氯吡啶-3-基)-5-乙烯基-6-甲氧基羰基-嘧啶(化合物 68-156)的製備

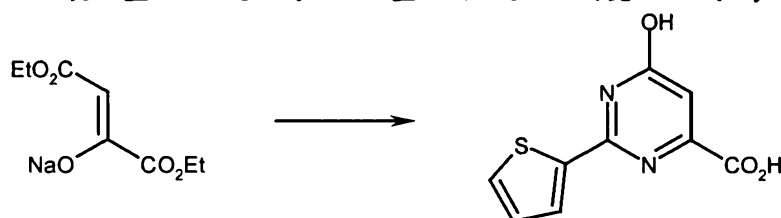


4-胺基-5-乙烯基-6-甲氧基羰基-2-甲基硫代嘧啶(113 毫克, 0.50 毫莫耳), 6-氯吡啶-3-硼酸(85 毫克, 0.55 毫莫耳), 噻吩-2-羧酸銅(125 毫克, 0.65 毫莫耳), 三(2-呋喃基)膦(19 毫克, 80 微莫耳)以及三(二苯亞基丙酮)二鉍氯仿加成物(10 毫克, 10 微莫耳)在四氫呋喃(3 毫升)中的溶液在 100

°C 的微波反應器中被加熱 30 分鐘，然後讓其冷卻。加入醚，所得到的溶液經濃氨水和鹽水沖洗，經硫酸鎂乾燥，過濾以及在減壓下蒸發而提供黃色半固體(0.23 克)。此粗製產物在二氧化矽上使用己烷/乙酸乙酯(4:1)作沖提液進行層析純化而製得呈白色固體的 4-胺基-2-(6-氯吡啶-3-基)-5-乙烯基-6-甲氧基羰基-嘧啶(40 毫克，27%)。熔點為 194 至 195 °C; ^1H nmr(400MHz, CDCl_3) δ_{H} 9.32(1H, s), 8.60(1H, d), 7.40(1H, d), 6.80(1H, dd), 5.65 (2H, m), 5.45(2H, br s), 3.97(3H, s)ppm。

實施例 9 4-胺基-2-噻吩-2-基嘧啶-6-羧酸的合成

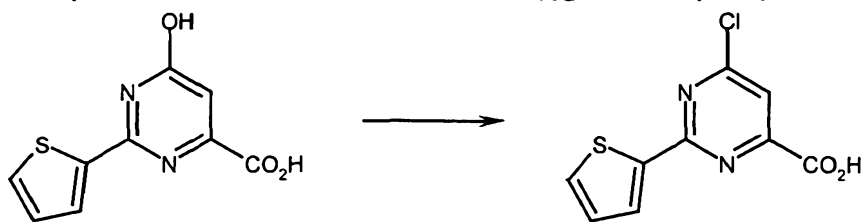
9.1 4-羥基-2-噻吩-2-基嘧啶-6-羧酸的製備



將氫氧化鈉(0.4 克，10 毫莫耳)加入二乙基草乙酸鈉鹽(1.3 克，6.2 毫莫耳)在水(50 毫升)中經攪拌的溶液中，且該混合物經攪拌 30 分鐘。將 2-噻吩脒(1.0 克，7.9 毫莫耳)加入溶液中，將混合物在 70°C 加熱整夜，然後冷卻至 0°C，經酸化至 pH1 且讓其靜置 1 小時。藉過濾分離沉澱物，以水及冰冷乙酸乙酯予以沖洗且經乾燥而製得呈白色固體的 4-羥基-2-噻吩-2-基嘧啶-6-羧酸(0.81 克，60%)。

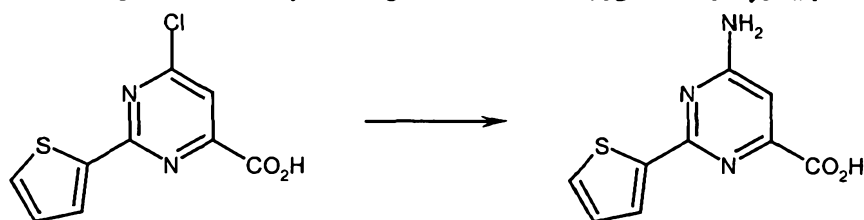
^1H nmr (400 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$) δ_{H} 8.1(1H, m), 7.85 (1H, m), 7.2(1H, m), 6.7(1H, s)ppm(未觀察到可交換的質子)。

9.2 4-氯-2-噻吩-2-基嘧啶-6-羧酸的製備



將磷醯氯(5 毫升)加入 4-羥基-2-噻吩-2-基嘧啶-6-羧酸(0.81 克, 3.6 毫莫耳), 將所得到的懸浮液在 90°C 加熱 1 小時, 然後讓其冷卻, 被滴加入乙腈: 水(1:2, 50 毫升)的經攪拌溶液中, 保持溫度於 50°C 以下。讓所得到的溶液冷卻至環境溫度且藉過濾分離沉澱, 以水沖洗及乾燥而製得 4-氯-2-噻吩-2-基嘧啶-6-羧酸(0.8 克, 90%)。

9.3 4-胺基-2-噻吩-2-基嘧啶-6-羧酸的製備

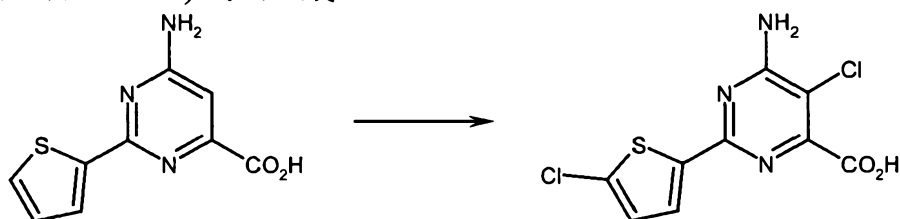


將 4-氯-2-噻吩-2-基嘧啶-6-羧酸(0.8 克, 3.3 毫莫耳)懸浮於氨水(5%, 15 毫升), 將混合物於 90°C 加熱整夜。另外加入氨水(5%, 1 毫升), 持續另外加熱 24 小時。冷卻此混合物, 在減壓下予濃縮至約 10 毫升體積且藉過濾分離沉澱, 以冰水沖洗且在真空中乾燥而製得呈白色固體的 4-胺基-2-噻吩-2-基嘧啶-6-羧酸(0.7 克, 95%)。

^1H nmr (400 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$) δ_{H} 7.75 (1H, m), 7.55 (1H, m), 7.1(1H, m), 6.85(2H, br s), 6.65(1H, s) ppm (未觀察到酸質子)。

實施例 10 4-胺基-5-氯-2-(5-氯噻吩-2-基)-嘧啶-6-羧酸

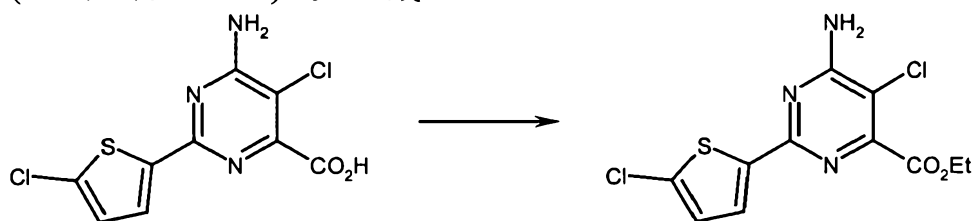
(化合物 1-2)的合成



30 分鐘內分三次將 *N*-氯琥珀醯亞胺(0.26 克，1.9 毫莫耳)加入 4-氨基-2-噻吩-2-基嘧啶-6-羧酸(如實施例 9 所述者製備)(0.4 克，1.8 毫莫耳)於二甲基甲醯胺(5 毫升)中經攪拌的懸浮液中。此反應混合物在 50°C 攪拌 3 小時，然後予以冷卻，經水(100 毫升)稀釋且經乙酸乙酯(3x100 毫升)萃取。經合併的有機萃取物經硫酸鎂乾燥，過濾且在減壓下蒸發，殘留物經製備 HPLC 純化而製得 4-氨基-5-氯-2-(5-氯噻吩-2-基)-嘧啶-6-羧酸(0.23 克，44%)。

^1H nmr (400 MHz, d_6 -DMSO) δ_{H} 7.7(1H, d)7.1, (1H, d)ppm (未觀察到可交換的質子)。

實施例 11 4-氨基-5-氯-2-(5-氯噻吩-2-基)-6-乙氧基羰基-嘧啶 (化合物 3-2)的合成

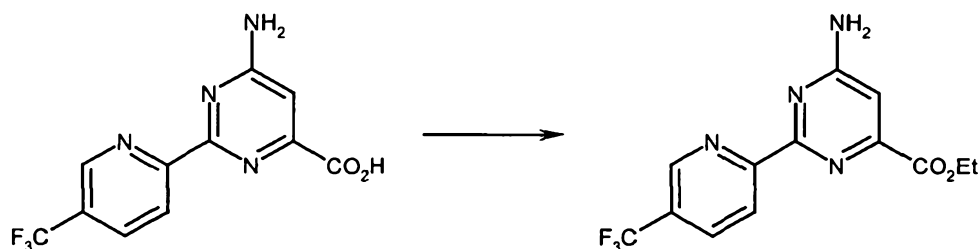


10 分鐘將亞硫醯氯(0.1 毫升)滴加入 4-氨基-5-氯-2-(5-氯噻吩-2-基)-嘧啶-6-羧酸(0.15 克，0.52 毫莫耳)(如實施例 10 所述製備者)在乙醇(10 毫升)中經攪拌的懸浮液中，將該混合物攪拌 3 小時。反應混合物在減壓下經濃縮，殘留物被溶於 1M 含水碳酸鈉(50 毫升)，此溶液經乙酸乙酯萃取

(3x50 毫升)。經合併的有機萃取物經硫酸鎂乾燥，過濾且在壓減下蒸發而製得呈白色固體的 4-胺基-5-氯-2-(5-氯噻吩-2-基)-6-乙氧基羰基嘧啶(0.157 克，95%)。 ^1H nmr (400 MHz, CDCl_3) δ_{H} 7.7(1H, s), 6.9(1H, s), 5.6(2H, br s), 4.5(2H, q), 1.5(3H, t)ppm。

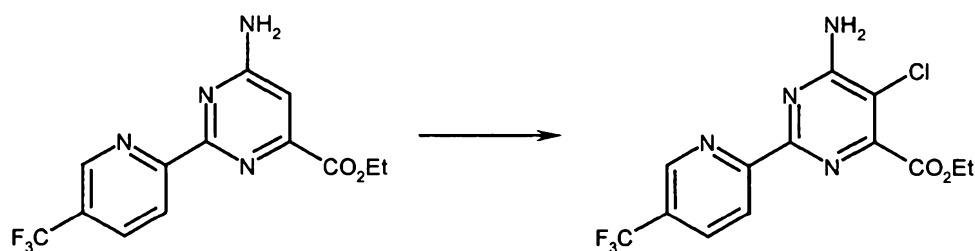
實施例 12 4-胺基-5-氯-6-乙氧基羰基-2-(5-三氟甲基-吡啶-2-基)-嘧啶(化合物 3-150)的合成

12.1 4-胺基-6-乙氧基羰基-2-(5-三氟甲基吡啶-2-基)-嘧啶的製備



將亞硫醯氯(0.1 毫升)滴加入 4-胺基-2-(5-三氟甲基吡啶-2-基)-嘧啶-6-羧酸(0.3 克，1.06 毫莫耳)(如實施例 9 所述者製備)經攪拌的溶液且此混合物在環境溫度經攪拌 3 小時。在減壓下蒸發溶劑，將殘留物溶於 1M 水性碳酸鈉(50 毫升)。混合物經乙酸乙酯萃取(3x100 毫升)，經合併的有機萃取物經硫酸鎂乾燥，過濾及在減壓下蒸發而製得呈白色固體的 4-胺基-6-乙氧基羰基-2-(5-三氟甲基吡啶-2-基)-嘧啶。

12.2 4-胺基-5-氯-6-乙氧基羰基-2-(5-三氟甲基吡啶-2-基)-嘧啶(化合物 3-150)的製備

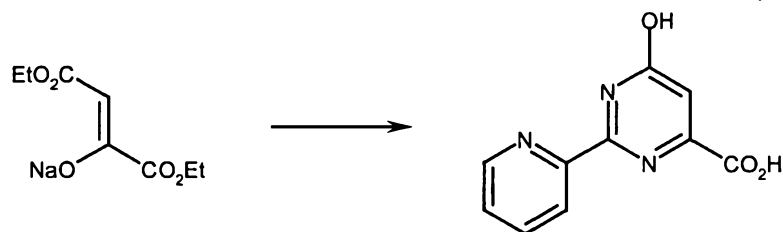


30 分鐘內分三次將 *N*-氯琥珀醯亞胺(0.103 克，0.75 毫莫耳)加入 4-氨基-6-乙氧基羰基-2-(5-三氟甲基吡啶-2-基)-嘓啶(0.2 克，0.64 毫莫耳)在二甲基甲醯胺(5 毫升)中經攪拌的懸浮液中。此反應混合物在 50°C 加熱 3 小時，然後經冷卻且溶於乙酸乙酯(25 毫升)。此溶液經水(3x50 毫升)及鹽水(2x100 毫升)沖洗，經硫酸鎂乾燥，過濾且在減壓下蒸發而留下白色固體，其經二氧化矽上製備 HPLC 純化而製得 4-氨基-5-氯-6-乙氧基羰基-2-(5-三氟甲基吡啶-2-基)-嘓啶(157 毫克，13%)。

M/z (LCMS) $M+H^+$ 347, 349。

實施例 13 4, 5-二氯-2-吡啶-2-基嘓啶-6-羧酸(化合物 61-149)的合成

13.1 4-羥基-2-吡啶-2-基嘓啶-6-羧酸的製備

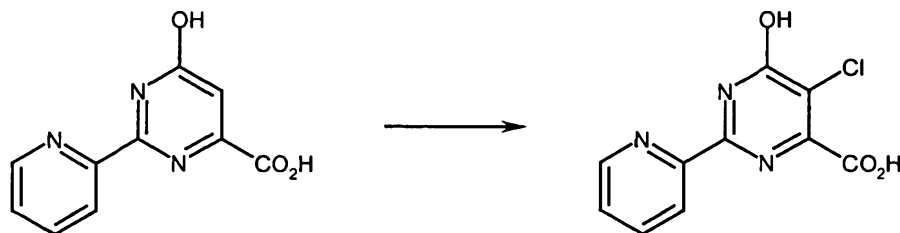


將氫氧化鈉(2.17 克，54 毫莫耳)在水(4.5 毫升)中的溶液加入二乙基草乙酸鈉鹽(6.65 克，31.7 毫莫耳)在水(40 毫升)中的經攪拌的懸浮液中，且此混合物經攪拌 20 分鐘直到所有固體溶解為止。加入 2-吡啶脒(3.85 克，31.8 毫莫耳)，此反應混合物在 70°C 經攪拌整夜，然後讓其冷卻。

加入濃鹽酸使混合物 pH 為 1 且藉過濾移走固體而製得呈灰白色固體的 4-羥基-2-吡啶-2-基嘧啶-6-羧酸(4.00 克, 58%)。

^1H nmr (400 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$) δ_{H} 8.79(1H, m), 8.42(1H, d), 8.12(1H, t), 7.70(1H, m), 7.0 – 5.5 (2H, br s), 6.96(1H, s) ppm。

13.2 5-氯-4-羥基-2-吡啶-2-基嘧啶-6-羧酸的製備

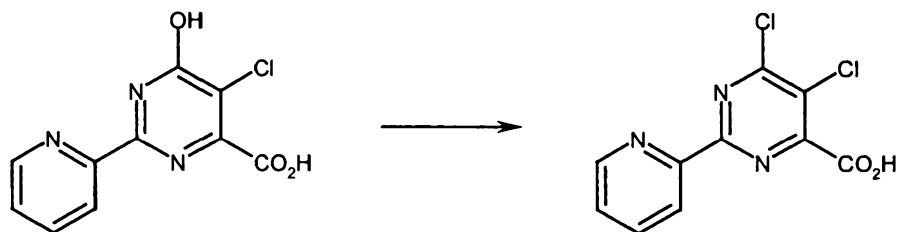


在冷卻之下，將水性次氯酸鈉(11.3 毫升)加入 4-羥基-2-吡啶-2-基嘧啶-6-羧酸(2.00 克, 9.2 毫莫耳)在濃鹽酸(6.6 毫升)與水(10 毫升)混合物中經攪拌的懸浮液中。此反應混合物在環境溫度被攪拌 4 小時，然後在冷卻下加入偏亞硫酸鈉(0.66 克)以及氫氧化鈉(2.82 克)在水(5.6 毫升)中的溶液。所得到的沉澱經過濾且經冰水沖洗。然後，此材料經懸浮於濃鹽酸(3.3 毫升)與水(5 毫升)中。加入水性次氯酸鈉(5.65 毫升)，此混合物在環境溫度被攪拌 7 小時。加入偏亞硫酸鈉(0.33 克)與氫氧化鈉(1.41 克)在水(2.8 毫升)中的溶液。所得到的沉澱經過濾而移走，經冰水沖洗，經乾燥而製得 5-氯-4-羥基-2-吡啶-2-基嘧啶-6-羧酸(1.80 克, 78%)。

^1H nmr (400 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$) δ_{H} 8.78(1H, m), 8.31 (1H, d), 8.06(1H, t), 7.69(1H, m), 4.0 – 3.0(2H, br s)ppm。

13.3 4,5-二氯-2-吡啶-2-基嘧啶-6-羧酸(化合物 61-149)

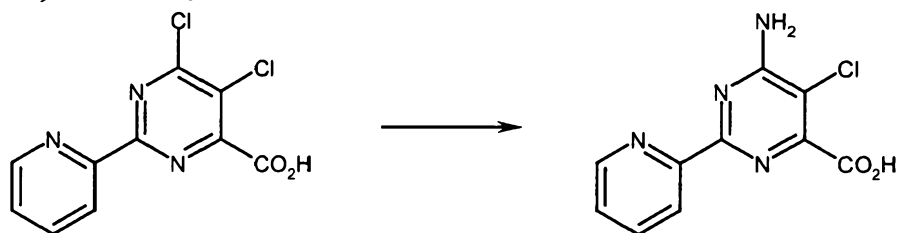
的製備



5-氯-4-羥基-2-吡啶-2-基噻啶-6-羧酸(1.2 克, 4.8 毫莫耳)與磷醯氯(2.5 毫升)的混合物在回流下被加熱 5.5 小時。讓此混合物冷卻,然後將其倒入冰水(8 毫升)與乙腈(4 毫升)混合物中,維持溫度低於 10°C。加入氨水以維持溶液的 pH 為 1-2。所得混合物在減壓下被濃縮而得到有機固體,其經冰水沖洗而製得 4,5-二氯-2-吡啶-2-基噻啶-6-羧酸(0.60 克, 47%)。

^1H nmr (400 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$) δ_{H} 8.84(1H, m), 8.47(1H, d), 8.19(1H, t), 8.0 - 6.5(1H, br s), 7.75(1H, m)。

實施例 14 4-胺基-5-氯-2-吡啶-2-基噻啶-6-羧酸(化合物 1-149)的合成



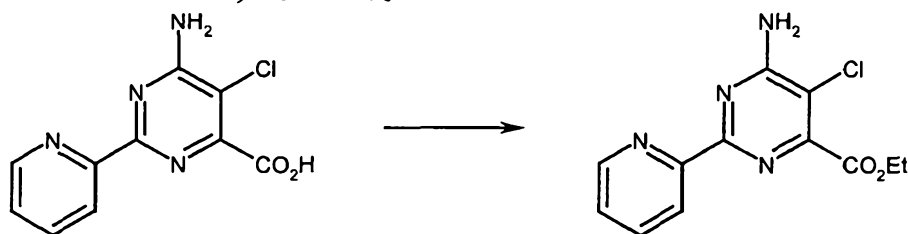
置於小瓶中的 4,5-二氯-2-吡啶-2-基噻啶-4-羧酸(如實施例 13 所述者製備)(0.30 克, 1.1 毫莫耳)在甲醇氨(7M, 2.5 毫升)中的懸浮液於 190°C 的微波反應器中經加熱 30 分鐘。讓此反應混合物冷卻,加入 2N 鹽酸直到所有固體溶解,在減壓下蒸發溶劑。殘留物經冰冷沖洗而製得呈橙色固體的 4-胺基-5-氯-2-吡啶-2-基噻啶-6-羧酸(0.18 克, 64%)。

熔點為 183°C (分解); ^1H nmr (400 MHz, $\text{d}_6\text{-DMSO}$) δ_{H} 8.65(1H, m), 8.21(1H, d), 7.90(1H, t), 7.44(1H, br s), 7.43(1H, m), 7.15(2H, br s)ppm。

實施例 15 可替代地合成 4-胺基-5-氯-2-吡啶-2-基嘧啶-6-羧酸(化合物 1-149)

將氨水(2.5 毫升)加入 4, 5-二氯-2-吡啶-2-基嘧啶-6-羧酸(0.28 克, 1.04 毫莫耳)(如實施例 13 所述者製備), 且此反應混合物 80°C 被加熱 18 小時。然後, 此混合物被冷卻且在減壓下濃縮。所得到的固體經冰水沖洗而提供 4-胺基-5-氯-2-吡啶-2-基嘧啶-4-羧酸(0.15 克, 59%)。

實施例 16 4-胺基-5-氯-6-乙氧基羰基-2-吡啶-2-基嘧啶(化合物 3-149)的合成



將亞硫酸氯(0.04 毫升)加入 4-胺基-5-氯-2-吡啶-2-基嘧啶-6-羧酸(0.15 克, 0.60 毫莫耳)(如實施例 15 所述者製備)在乙醇(1 毫升)中的溶液中, 且此混合物於 70°C 加熱 18 小時。讓此所得溶液冷卻, 然後藉添加飽和水性碳酸氫鈉中和該溶液, 且以乙酸乙酯萃取之。有機萃取物經硫酸鎂乾燥, 過濾及在蒸發而製得呈淺橙色固體的 4-胺基-5-氯-6-乙氧基羰基-2-吡啶-2-基嘧啶(0.11 克, 68%)。熔點為 176-180°C(分解); ^1H nmr(400MHz, CDCl_3) δ_{H} 8.80(1H, m), 8.50(1H, d), 7.85(1H, t), 7.40(1H, m), 5.85(2H,

br s), 4.50(2H, q), 1.47(3H, t)ppm。

實施例 17 出苗前生物功效

將看麥娘屬 (*Alopecurus myosuroides*)(ALOMY), 大狗尾草) (*Setaria faberi*)(SETFA), 稗 (*Echinochloa crus-galli*)(ECHCG), 龍葵 (*Solanum nigrum*)(SOLNI), 反枝苋 (*Amaranthus retroflexus*)(AMARE) 以及碗仔花 (*Ipomea hederaceae*)(IPOHE)的種子播種於在壺中標準土壤中。在溫室的控制條件之下(24/16℃, 日/夜; 14 小時光線; 65%濕度)培育 1 天之後, 植物被噴予水性噴灑溶液, 其係衍生自技術活性成份在包括 0.5%Tween 20(聚氧乙烯山梨醇單月桂酸酯, CAS RN9005-64-5)在丙酮/水(50:50)溶液而製得最終劑量 250 克或 1000 克/公頃的試驗化合物。

然後在控制條件之下使試驗植物在溫室內生長(24/16℃, 日/夜; 14 小時光線; 65%濕度), 每天澆水二次。經過 13 天之後, 對試驗進行評估(100=對植物總傷害; 0=對植物沒有傷害)。結果如以下表 B1 中所示。

表 B1 當在出苗前施用發明化合物對雜草種類所造成的傷害百分率。

化合物編號	劑量 (克/公頃)	種類					
		SOLNI	AMARE	IPOHE	SETFA	ALOMY	ECHCG
1-2	1,000	30	100	0	0	0	0
1-149	1,000	0	0	0	0	0	0
2-1	1,000	0	0	0	0	0	0
2-2	1,000	0	80	20	0	0	0
2-3	1,000	0	0	0	0	0	0
2-7	1,000	0	90	20	20	0	60
2-9	250	0	0	0	0	0	0

2-16	250	30	90	0	0	10	0
2-17	250	0	50	0	0	0	0
2-18	250	0	0	0	0	0	0
2-19	1,000	20	20	30	0	0	0
2-34	1,000	0	0	0	0	0	0
2-54	1,000	20	70	0	20	20	70
2-55	250	0	10	10	0	0	0
2-56	1,000	0	60	0	0	0	0
2-57	1,000	0	0	0	0	0	0
2-71	1,000	0	0	0	0	0	0
2-72	250	0	0	0	0	0	0
2-146	250	0	0	0	0	0	0
2-153	1,000	0	0	0	0	0	0
2-154	1,000	20	0	0	0	0	0
2-155	1,000	20	20	0	0	0	0
2-156	1,000	60	70	0	0	0	0
2-157	1,000	0	0	0	0	0	0
2-158	1,000	0	0	0	0	0	0
2-159	1,000	0	0	0	0	0	0
2-161	1,000	40	60	0	0	0	0
2-166	250	0	0	0	0	0	0
2-172	250	0	0	0	0	0	0
2-179	1,000	0	0	0	0	0	0
2-182	1,000	40	0	0	0	0	0
2-196	1,000	0	0	0	0	0	0
3-2	1,000	0	30	0	0	0	0
3-149	1,000	0	0	0	0	0	0
3-150	1,000	0	0	0	0	0	0
61-149	1,000	0	0	0	0	0	0
68-156	1,000	40	100	40	10	10	0

實施例 18 出苗後生物功效

將看麥娘屬 (*Alopecurus myosuroides*)(ALOMY)，大狗尾草) (*Setaria faberi*)(SETFA)，稗 (*Echinochloa crus-galli*)(ECHCG)，龍葵 (*Solanum nigrum*)(SOLNI)，反枝苋 (*Amaranthus retroflexus*)(AMARE) 以及碗仔花 (*Ipomea*

hederaceae)(IPOHE)的種子播種於在壺中標準土壤中。在溫室的控制條件之下(24/16℃，日/夜；14 小時光線；65%濕度)培育 8 天之後，植物被噴予水性噴灑溶液，其係衍生自技術活性成份在包括 0.5%Tween 20(聚氧乙烯山梨醇單月桂酸酯，CAS RN9005-64-5)在丙酮/水(50：50)溶液而製得最終劑量 250 克或 1000 克/公頃的試驗化合物。

然後在控制條件之下使試驗植物在溫室內生長(24/16℃，日/夜；14 小時光線；65%濕度)，每天澆水二次。經過 13 天之後，對試驗進行評估(100=對植物總傷害；0=對植物沒有傷害)。結果如以下表 B2 中所示。

表 B2 當在出苗後施用發明化合物對雜草種類所造成的傷害百分率。

化合物編號	劑量 (克 / 公頃)	種類					
		SOLNI	AMARE	IPOHE	SETFA	ALOMY	ECHCG
1-2	1,000	80	100	60	50	10	20
1-149	1,000	0	0	0	0	0	0
2-1	1,000	0	0	50	0	0	0
2-2	1,000	90	100	70	0	0	0
2-3	1,000	0	0	0	0	0	0
2-7	1,000	80	100	80	70	0	80
2-9	250	0	0	0	0	0	0
2-16	250	0	0	40	0	20	0
2-17	250	0	0	0	0	0	0
2-18	250	0	20	40	10	10	10
2-19	1,000	70	100	70	30	0	10
2-34	1,000	10	30	50	0	10	0
2-54	1,000	40	70	80	50	0	70
2-55	250	30	70	40	0	10	0

2-56	1,000	40	100	20	10	20	40
2-57	1,000	0	0	20	0	0	0
2-71	1,000	0	0	30	0	0	0
2-72	250	0	0	0	0	0	0
2-146	250	30	30	40	0	0	0
2-153	1,000	0	0	0	0	0	0
2-154	1,000	30	70	20	0	0	0
2-155	1,000	70	100	70	80	0	80
2-156	1,000	80	100	70	40	40	30
2-157	1,000	60	60	70	20	30	0
2-158	1,000	20	0	20	0	0	0
2-159	1,000	50	100	10	30	0	10
2-161	1,000	80	90	100	80	30	60
2-166	250	0	0	0	0	0	0
2-172	250	60	0	10	10	10	0
2-179	1,000	30	30	40	10	0	0
2-182	1,000	70	20	30	10	0	0
2-196	1,000	0	0	0	0	0	0
3-2	1,000	70	80	50	0	0	0
3-149	1,000	0	0	0	0	0	0
3-150	1,000	0	0	0	0	0	0
61-149	1,000	40	0	0	0	0	0
68-156	1,000	90	100	50	0	0	0

【圖式簡單說明】

無

【主要元件符號說明】

無

發明專利說明書

(本說明書格式、順序，請勿任意更動，※記號部分請勿填寫)

※申請案號：98115516

※申請日：98.5.11

※IPC 分類

A01N	43/54	2006.01
A01N	43/90	2006.01
C07D	409/04	2006.01
C07D	403/04	2006.01
C07D	401/04	2006.01
C07D	471/04	2006.01
A01P	13/00	2006.01

一、發明名稱：(中文/英文)

化合物

CHEMICAL COMPOUNDS

二、中文發明摘要：

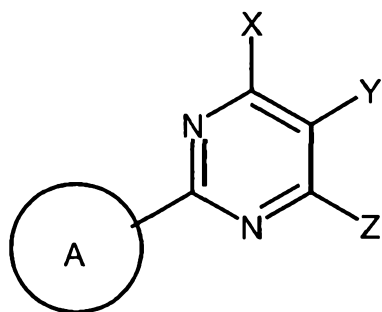
本發明係關於經取代的嘧啶衍生物，以及其 N-氧化物
以及其農化上可接受鹽，以及其在控制不欲的植物生長的
用途，特別是在有用植物作物的用途。本發明涵蓋至包括
此化合物的除草組合物，N-氧化物及／或鹽以及該等與另
外活性成份(例如除草劑，殺真菌劑，殺蟲劑及／或植物生
長調節劑)及／或安全劑的混合物。

三、英文發明摘要：

The present invention relates to substituted pyrimidine derivatives as well as N-oxides and agriculturally acceptable salts thereof, and their use to control undesired plant growth, in particular in crops of useful plants. The invention extends to herbicidal compositions comprising such compounds, N-oxides and/or salts as well as mixtures of the same with one or more further active ingredient (such as, for example, an herbicide, fungicide, insecticide and/or plant growth regulator) and/or a safener.

七、申請專利範圍：

1. 一種控制不欲的植物生長的方法，其包括將式(I)化合物或其鹽或 N-氧化物施用於該不欲的植物



(I)

其中：

A 係為 5-或 6-員雜芳香環，其包括 1 至 4 個雜原子以及視需要經 1 至 4 個基團 R^1 取代，其中該雜原子係選自 O，N 以及 S，其前提是該雜芳香環僅包括一個 O 或個 S 原子；

每一個 R^1 係獨立地為：鹵素，氰基，硝基，疊氮，羥基，視需要經一或多個 R^a 取代的烷基，視需要經一或多個 R^b 取代的烯基，視需要經一或多個 R^c 取代的炔基，視需要經一或多個 R^d ， OR^{aa} ， $S(O)_aR^{bb}$ ， $C(O)R^{cc}$ ， $NR^{dd}R^{ee}$ ， $SiR^{ff}R^{gg}R^{hh}$ ， $P(O)R^{ii}R^{jj}$ ，或 $B(OR^{kk})(OR^{LL})$ 取代的環烷基；或者二個相鄰 R^1 基團與其所連接的原子形成 5 至 7 員環，該環視需要包含 1 或 2 個選自 O，S 以及 N 的雜原子且視需要經 1 至 4 個基團 R^3 取代；

每一個 R^3 係獨立地為：鹵素；氰基；硝基；羥基；視需要經一或多個 R^a 取代的烷基；視需要經一或多個 R^b 取代的烯基；視需要經一或多個 R^c 取代的炔基；視需要經一或多個 R^d 取代的環烷基； OR^{aa} ； $S(O)_aR^{bb}$ ； $C(O)R^{cc}$ ； $NR^{dd}R^{ee}$ ；

$\text{SiR}^{\text{ff}}\text{R}^{\text{gg}}\text{R}^{\text{hh}}$; $\text{P}(\text{O})\text{R}^{\text{ii}}\text{R}^{\text{jj}}$; $\text{B}(\text{OR}^{\text{kk}})(\text{OR}^{\text{LL}})$; 或者任二個變基團 R^3 一起形成選自以下的基團：側氧基； $=\text{CR}^{\text{mm}}\text{R}^{\text{nn}}$ ， $=\text{NOR}^{\text{oo}}$ ，以及 $=\text{NNR}^{\text{pp}}\text{R}^{\text{qq}}$ ；

每一個 R^{a} 係獨立地為：鹵素，氰基，硝基，羥基，環烷基， OR^{aa} ， $\text{S}(\text{O})_{\text{a}}\text{R}^{\text{bb}}$ ， $\text{C}(\text{O})\text{R}^{\text{cc}}$ ，或者 $\text{NR}^{\text{dd}}\text{R}^{\text{ee}}$ ；

每一個 R^{b} 係獨立地為：鹵素，氰基，硝基，羥基，烷氧基， $\text{S}(\text{O})_2\text{R}^{\text{bb}}$ ， $\text{C}(\text{O})\text{R}^{\text{cc}}$ ，或者 $\text{P}(\text{O})\text{R}^{\text{ii}}\text{R}^{\text{jj}}$ ；

每一個 R^{c} 係獨立地為：鹵素，氰基，烷氧基， $\text{S}(\text{O})_2\text{R}^{\text{bb}}$ ， $\text{C}(\text{O})\text{R}^{\text{cc}}$ ，或者 $\text{SiR}^{\text{ff}}\text{R}^{\text{gg}}\text{R}^{\text{hh}}$ ；

每一個 R^{d} 係獨立地為：鹵素，氰基，硝基，羥基，烷基，烯基，炔基，環烷基，烷氧基， $\text{S}(\text{O})_{\text{a}}\text{R}^{\text{bb}}$ ，或者 $\text{C}(\text{O})\text{R}^{\text{cc}}$ ；

每一個 R^{aa} 係獨立地為：烷基，鹵烷基，烷氧基烷基，環烷基烷基，烯基，鹵烯基，炔基，鹵炔基，環烷基，烷基羰基，鹵烷基羰基，烷氧基羰基，鹵烷氧基羰基，烷基磺醯基，鹵烷基磺醯基，胺基羰基，烷基胺基羰基，二烷基胺基羰基，烷基亞胺基，或者二烷基亞胺基；

a 係為選自 0，1 以及 2 的整數；

每一個 R^{bb} 係獨立地為：烷基，鹵烷基，烷氧基烷基，烯基，鹵烯基，炔基，鹵炔基，環烷基，或者烷基羰基胺基；

R^{cc} 係為：氫，羥基，烷基，鹵烷基，烷氧基烷基，烯基，鹵烯基，炔基，鹵炔基，環烷基，烷氧基，鹵烷氧基，烷氧基烷氧基，芳基烷氧基，環烷氧基，胺基，烷基胺基，二烷基胺基，或者烷基磺醯基胺基；

R^{dd} 係為：氫，烷基；鹵烷基，烷氧基烷基，烯基，鹵烯基，炔基，鹵炔基，環烷基，烷基羰基，鹵烷基羰基，烷氧基羰基，鹵烷氧基羰基，烷基磺醯基，鹵烷基磺醯基，胺基羰基，烷基胺基羰基，或者二烷基胺基羰基；

R^{ee} 係為：氫，烷基，鹵烷基，烷氧基烷基，烯基，鹵烯基，炔基，鹵炔基，或者環烷基；

或者 R^{dd} 以及 R^{ee} ，一起與其所連接的 N 原子形成 4 至 6 員環，視需要包含一個另外的選自 O，N 以及 S 的雜原子，該環係視需要經 1 至 4 個選自以下基團所取代：鹵素，烷基，烷氧基，烷基羰基，烷氧基羰基，以及側氧基；

R^{ff} ， R^{gg} ，以及 R^{hh} 係每一個獨立地為烷基或鹵烷基；

R^{ii} 係為烷基，鹵烷基，烷氧基，或鹵烷氧基；

R^{jj} 係為烷氧基或鹵烷氧基；

R^{kk} 以及 R^{LL} 係每一個獨立地為氫或烷基；或者 R^{kk} 以及 R^{LL} 一起與其所連接的 O 原子以及 B 原子形成 5 員或 6 員雜環狀環，其視需要經 1 至 4 個烷基基團所取代；

R^{mm} 係為：氫，鹵素，氰基，硝基，烷基，鹵烷基，烷氧基烷基，環烷基，烷基羰基，鹵烷基羰基，烷氧基羰基，鹵烷氧基羰基，烷基磺醯基，鹵烷基磺醯基，胺基羰基，烷基胺基羰基，或二烷基胺基羰基；

R^{nn} 係為：氫，鹵素，氰基，硝基，烷基，鹵烷基，烷基羰基，鹵烷基羰基，烷氧基羰基，鹵烷氧基羰基，烷基磺醯基，鹵烷基磺醯基，胺基羰基，烷基胺基羰或者二烷基胺基羰基；

R^{oo} 係為：氫，烷基，鹵烷基，烷氧基烷基，環烷基，烷基羰基，鹵烷基羰基，烷氧基羰基，鹵烷氧基羰基，胺基羰基，烷基胺基羰基，或者二烷基胺基羰基；

R^{pp} 係為：氫，烷基，鹵烷基，烷氧基烷基，或者環烷基；

R^{qq} 係為氫，烷基，鹵烷基，烷基羰基，鹵烷基羰基，烷氧基羰基，胺基羰基，烷基胺基羰基，或者

二烷基胺基羰基；或者 R^{pp} 以及 R^{qq} 一起與其連接的氮形成 5 員或 6 員視需要經取代的環，該環視需要包含另外選自 O, S 以及 N 的雜原子，該取代係選自鹵素以及烷基；

X 係為硝基，疊氮，鹵素，視需要經取代的烷氧基，視需要經取代的胺基氧基，或者 NR^5R^6 ，其中：

R^5 係為：氫，視需要經取代的烷基，其前提是該取代不包含環系統，甲醯基，視需要經取代的烷基羰基，其前提是該取代不包含芳基部分，視需要經取代的環烷基羰基，視需要經取代的烯基羰基，視需要經取代的炔基羰基，視需要經取代的苯基羰基，視需要經取代的雜芳基羰基，視需要經取代的胺基羰基，視需要經取代的烷氧基羰基，視需要經取代的烷基磺醯基，視需要經取代的環烷基磺醯基，視需要經取代的烯基磺醯基，視需要經取代的炔基磺醯基，視需要經取代的苯基磺醯基，視需要經取代的胺基，羥基，視需要經取代的烷氧基，視需要經取代的環烷氧基，視需要經取代的烷基羰基氧基，視需要經取代的烷氧基羰基氧基，視需要經取代的胺基羰基氧基，視需要經取代的

烯基，其前提係該取代不包含環系統，視需要經取代的炔基，其前提係該取代不包含環系統， $N=CR^gR^h$ ，氰基，視需要經取代的甲矽烷基，或者視需要經取代的膦鹽基；

以及 R^6 係為：氫，視需要經取代的烷基，其前提係該取代不包含環系統，視需要經取代的烯基，其前提係該取代不包含環系統，或者視需要經取代的炔基，其前提係該取代不包含環系統；或者 R^5 以及 R^6 一起形成基團 $=C(R^i)OR^j$ ， $=C(R^k)SR^L$ ， $=C(R^m)NR^nR^o$ ；或者 R^5 以及 R^6 一起與其所連接的 N 原子形成 3 至 8 員視需要經取代的環系統，該環系統視需要包含 1 至 3 個另外的獨立地選自 O，S 以及 N 的雜原子；

R^g 係為：氫，視需要經取代的烷基，視需要經取代的環烷基，視需要經取代的苯基，視需要經取代的雜芳基，視需要經取代的胺基，視需要經取代的烷氧基，視需要經取代的苯氧基，視需要經取代的烷基硫基，或者視需要經取代的苯基硫基；

R^h 係為：視需要經取代的烷基，視需要經取代的環烷基，視需要經取代的苯基，視需要經取代的雜芳基，視需要經取代的胺基，視需要經取代的烷氧基，或者視需要經取代的烷基硫基；或者 R^g 以及 R^h 一起與其所連接的 C 原子形成 5 至 7 員環系統；

R^i 係為氫，視需要經取代的烷基，其前提係該取代不包含環系統，視需要經取代的胺基，視需要經取代的烷氧基，或者視需要經取代的烷基硫基；

R^j 係為視需要經取代的烷基或者視需要經取代的環烷基；

R^k 係為氫，視需要經取代的烷基，其前提係該取代不包含環系統，視需要經取代的胺基，或者視需要經取代的烷基硫基；

R^l 係為視需要經取代的烷基，或者視需要經取代的環烷基；

R^m 係為氫，視需要經取代的烷基，視需要經取代的環烷基，視需要經取代的苯基，視需要經取代的雜芳基，或者視需要經取代的胺基；

R^n 以及 R^o 係每一個獨立地為氫，視需要經取代的烷基或者視需要經取代的環烷基；

Y 係為：鹵素，氰基，視需要經取代的烷基，視需要經取代的環烷基，視需要經取代的烯基，視需要經取代的炔基，視需要經取代的苯基，視需要經取代的雜芳基，視需要經取代的烷氧基，視需要經取代的烷基硫基，視需要經取代的烷基亞磺醯基，視需要經取代的烷基磺醯基，視需要經取代的二烷基膦醯基，或者視需要經取代的三烷基甲矽烷基；

Z 係為： $(T)_m-(U)_n-V$ ；其中，

m 係為 0 或 1 的整數； n 係為選自 0，1，2 以及 3 的整數，以及 $n \geq m$ ；

T 係為氧或硫原子；

U 係為 CR^wR^x ；

每一個 R^w 係獨立地為氫，鹵素，羥基，視需要經取代的烷基，視需要經取代的烷氧基羰基，或者 OR^y 以及其中每一個 R^y 係獨立地為視需要經取代的烷基或視需要經取代的烷基羰基；

每一個 R^x 係獨立地為氫，鹵素，視需要經取代的烷基，或者 OR^z 其中每一個 R^z 係獨立地為視需要經取代的烷基；

或者任何孳位 R^w 以及 R^x 一起形成選自側氧基，或者 $=NOR^{ca}$ ，其中 R^{ca} 係為氫或者視需要經取代的烷基；或者任何孳位，相鄰或非相鄰 R^w 及/或 R^x 一起與其所連接的 C 原子以及任何插入(intervening)原子形成視需要經取代的 3 至 6 員環；

或者其中當至少一個 R^w 係為 OR^y 且至少一個 R^x 係為 OR^z ，該 OR^y 以及 OR^z 基團一起與其所連接的 C 原子及任何插入原子形成視需要經取代的 5 至 6 員雜環狀環；

V 係為 $C(O)R^{cb}$ ， $C(S)R^{cd}$ ， $C(=NR^{ce})R^{cf}$ ， $CHR^{cg}R^{ch}$ ， $CH(S[O]_pR^{ci})(S[O]_qR^{cj})$ ， $CR^{ck}R^{cl}R^{cm}$ ，或者 CH_2OR^{cn} ；

R^{cb} 係為氫，羥基，視需要經取代的烷氧基，視需要經取代的環烷氧基，視需要經取代的烷基硫基，或者視需要經取代的胺基；

R^{cd} 係為視需要經取代的烷氧基，視需要經取代的環烷氧基，視需要經取代的烷基硫基，或者視需要經取代的胺基；

R^{ce} 係為氫，視需要經取代的烷基，視需要經取代的烷氧基，視需要經取代的環烷氧基，或者視需要經取代的胺

基；

R^{cf} 係為氫，視需要經取代的烷氧基，視需要經取代的環烷氧基，視需要經取代的烷基硫基，或者視需要經取代的胺基；

R^{cg} 以及 R^{ch} 係每一個獨立地為視需要經取代的烷氧基基團；或者 R^{cg} 以及 R^{ch} ，一起與其所連接的碳形成二氧雜環戊烷(dioxolane)或者二噁烷環，該環係視需要經取代的；

R^{ci} 以及 R^{cj} 係每一個獨立地為視需要經取代的烷基基團；或者 R^{ci} 以及 R^{cj} 一起與其所連接的碳原子和硫原子形成視需要經取代的 5 至 6 員環；

p 以及 q 係每一個獨立地為 0，1，或 2 的整數；

R^{ck} ， R^{cl} ，以及 R^{cm} 係每一個獨立地為視需要經取代的烷氧基基團；或者 R^{ck} 以及 R^{cl} 以及 R^{cm} 一起與其連接的碳形成視需要經取代的三氧噁二環[2.2.2]辛烷環系統；

以及 R^{cn} 係為氫或者視需要經取代的烷基羰基基團。

2.根據申請專利範圍第 1 項的方法，其中：

A 係為環系統，其係選自：

噻吩，呋喃，吡咯，異噁唑，異噻唑，噁唑，噻唑，咪唑，吡唑，1，2，3-噁二唑，1，2，4-噁二唑，1，2，5-噁二唑，1，3，4-噁二唑，1，2，3-噻二唑，1，2，4-噻二唑，1，2，5-噻二唑，1，3，4-噻二唑，1，2，3-三唑，1，2，4-三唑，1，2，3，4-噁三唑，1，2，3，4-噻三唑，四唑，吡啶，嗒吡，嘧啶，吡吡，1，2，3-三吡，1，2，4-三吡，1，3，5-三吡，以及 1，2，4，5-四吡，其中該環

系統係視需要經 1 至 3 個基團 R^1 取代。

每一個 R^1 係獨立地為：鹵素；氰基；硝基；羥基；視需要經 1 至 4 個 R^a 基團取代的 C_{1-6} 烷基；視需要經 1 至 4 個 R^a 基團取代的 C_{1-6} 鹵烷基； OR^{aa} ； $S(O)_aR^{bb}$ ； $C(O)R^{cc}$ ； $NR^{dd}R^{ee}$ ；或者 2 個相鄰基團 R^1 一起與其所連接的原子形成 5 至 6 員環，其視需要地包含 1 或 2 個選自 O，N 以及 S 的雜原子，該 5 至 6 員環係視需要經 1 至 4 個 R^3 基團取代。

每一個 R^3 係獨立地為：鹵素；氰基；硝基；羥基；視需要經 1 至 4 個 R^a 基團取代的 C_{1-6} 烷基；視需要經 1 至 4 個 R^a 基團取代的 C_{1-6} 鹵烷基； OR^{aa} ； $S(O)_aR^{bb}$ ； $C(O)R^{cc}$ ； $NR^{dd}R^{ee}$ ；或者任二個孿位基團 R^3 一起形成選自以下的基團：側氧基， $=CR^{mm}R^{nn}$ ， $=NOR^{oo}$ ，以及 $=NNR^{pp}R^{qq}$ ；

每一個 R^a 係獨立地為：氰基，羥基， C_{3-6} 環烷基， OR^{aa} ， $S(O)_aR^{bb}$ ， $C(O)R^{cc}$ ，或者 $NR^{dd}R^{ee}$ ；

每一個 R^{aa} 係獨立地為： C_{1-6} 烷基， C_{1-6} 鹵烷基， C_{2-8} 烷氧基烷基，或者 C_{1-6} 烷基羰基；

每一個 R^{bb} 係獨立地為： C_{1-6} 烷基， C_{1-6} 鹵烷基， C_{2-6} 烯基， C_{2-6} 炔基， C_{3-6} 環烷基，或者 C_{1-6} 烷基羰基胺基；

a 係定義如申請專利範圍第 1 項；

R^{cc} 係獨立地為：氫，羥基， C_{1-6} 烷基， C_{1-6} 鹵烷基， C_{3-6} 環烷基， C_{1-6} 烷氧基，苯基 C_{1-6} 烷氧基， C_{3-6} 環烷氧基，胺基， C_{1-6} 烷基胺基， C_{2-8} 二烷基胺基，或者 C_{1-6} 烷基磺醯基胺基；

R^{dd} 係為氫， C_{1-6} 烷基， C_{1-6} 烷基羰基， C_{2-6} 烷氧基羰基，

C_{1-6} 烷基磺醯基， C_{1-6} 鹵烷基磺醯基，胺基羰基， C_{1-6} 烷基胺基羰基，或者 C_{2-8} 二烷基胺基羰基；

R^{ee} 係獨立地為：氫， C_{1-6} 烷基，或者 C_{3-6} 環烷基；

或者 R^{dd} 以及 R^{ee} ，一起與其所連接的 N 原子形成 5- 或 6-員飽和環，其視需要地包含另一個選自 O，N 以及 S 的雜原子，該環係視需要經 1 至 2 個選自 C_{1-6} 烷基以及側氧基基團所取代；

R^{mm} 係獨立地為：氫，鹵素，氰基，硝基， C_{1-6} 烷基， C_{3-6} 環烷基， C_{1-6} 烷基羰基， C_{1-6} 烷氧基羰基， C_{1-6} 烷基磺醯基，或者胺基羰基；

R^{nn} 係獨立地為：氫，鹵素，氰基，硝基， C_{1-6} 烷基， C_{1-6} 烷基羰基， C_{1-6} 烷氧基羰基， C_{1-6} 烷基磺醯基，或者胺基羰基；

R^{oo} 以及 R^{pp} 係獨立地為氫， C_{1-6} 烷基，或者 C_{3-6} 環烷基；

R^{qq} 係獨立地為氫或者 C_{1-6} 烷基；

X 係為 NR^5R^6 ，其中

R^5 係為：氫；視需要經一或多個 R^p 取代的烷基；視需要經一或多個 R^t 取代的烯基；視需要經一或多個 R^u 基團取代的炔基； OR^{rr} ； SO_2R^{ss} ； $C(O)R^{uu}$ ； $NR^{vv}R^{ww}$ ； $N=CR^gR^h$ ；氰基；三烷基甲矽烷基；或者二烷基膦醯基；

R^6 係為氫，視需要經一或多個 R^p 取代的烷基，視需要經一或多個 R^t 取代的烯基，或者視需要經一或多個基團 R^u 取代的炔基；或者 R^5 以及 R^6 一起形成基團 $=C(R^i)OR^j$ ，

$=C(R^k)SR^L$, $=C(R^m)NR^nR^o$; 或者 R^5 以及 R^6 一起與其所連接的 N 原子形成 3 至 8 員環系統, 該環系統視需要地包含 1 至 3 個另外獨立地選自 O, N 以及 S 的雜原子且該環系統係視需要經 1 至 4 個基團 R^v 取代;

R^g 以及 R^h 係每一個獨立地為: 氫; 視需要經一或多個 R^{xx} 取代的烷基; 經一或多個 R^{yy} 取代的環烷基; 經一或多個 R^{zz} 取代的苯基; 經一或多個 R^{ab} 取代的雜芳基; $NR^{ac}R^{ad}$; OR^{ae} ; 或者 SR^{af} ; 或者 R^g 以及 R^h 一起與其所連接的 C 原子形成 5 至 7 員環系統, 其視需要經 1 至 4 個基團 R^{ag} 取代;

R^i 係為: 氫; 視需要經一或多個 R^{xx} 取代的烷基; $NR^{ac}R^{ad}$; OR^{ae} ; 或者 SR^{af} ;

R^j 係為視需要經一或多個 R^{ah} 取代的烷基或者經一或多個 R^{ai} 取代的環烷基;

R^k 係為: 氫; 視需要經一或多個 R^{xx} 取代的烷基; $NR^{ac}R^{ad}$; 或者 SR^{af} ;

R^L 係為視需要經一或多個 R^{ah} 取代的烷基或者視需要經一或多個 R^{ai} 取代的環烷基;

R^m 係為: 氫; 視需要經一或多個 R^{xx} 取代的烷基; 視需要經一或多個 R^{yy} 取代的環烷基; 視需要經一或多個 R^{zz} 取代的苯基; 經一或多個 R^{ab} 取代的雜芳基; 或者 $NR^{ac}R^{ad}$;

R^n 以及 R^o 係每一個獨立地為氫, 視需要經一或多個 R^{ah} 取代的烷基, 或者視需要經一或多個 R^{ai} 取代的環烷基;

R^p 係為鹵素, 氰基, 硝基, 羥基, 烷氧基, 烷氧基烷

氧基， $S(O)_bR^{am}$ ， $C(O)R^{an}$ ，或者 $NR^{ao}R^{ap}$ ；

R^t 係為鹵素，氰基，或者烷氧基羰基；

R^u 係為鹵素，氰基，烷氧基，或者烷氧基羰基；

每一個 R^v 係獨立地為：鹵素；氰基；硝基；羰基；視需要經一或多個 R^{aq} 取代的烷基；視需要經一或多個 R^{ar} 取代的烯基；視需要經一或多個 R^{as} 取代的炔基；經一或多個 R^{at} 取代的環烷基； OR^{al} ； $S(O)_bR^{am}$ ； $C(O)R^{an}$ ；或者 $NR^{au}R^{av}$ ；或者任二個孿位基團 R^v 一起形成側氧基基團；

每一個 R^{rr} 係為氫，烷基，鹵烷基，環烷基，烷基羰基，鹵烷基羰基，烷氧基羰基，胺基羰基，烷基胺基羰基，二烷基胺基羰基，或者視需要經一或多個 R^{zz} 基團取代的苯基；

每一個 R^{ss} 係為烷基，鹵烷基，烯基，鹵烯基，炔基，鹵炔基，環烷基，或者視需要經一或多個 R^{zz} 基團取代的苯基；

每一個 R^{uu} 係為：氫；視需要經一或多個 R^{xx} 取代的烷基；視需要經一或多個 R^{yy} 取代的環烷基；視需要經一或多個 R^{zz} 取代的苯基；視需要經一或多個 R^{ab} 取代雜芳基； $NR^{ac}R^{ad}$ 雜芳基；或者 OR^{ae} ；

每一個 R^{vv} 係獨立地為：氫；視需要經一或多個 R^{xx} 取代的烷基；視需要經一或多個 R^{yy} 取代的環烷基；視需要經一或多個 R^{zz} 取代的苯基；視需要經一或多個 R^{ab} 取代的雜芳基； SO_2R^{ss} ；或者 $C(O)R^{uu}$ ；

每一個 R^{ww} 係獨立地為：氫，視需要經一或多個 R^{xx}

取代的烷基；視需要經一或多個 R^{yy} 取代的環烷基；視需要經一或多個 R^{zz} 取代的苯基；或者視需要經一或多個 R^{ab} 取代雜的芳基；或者 R^{vv} 以及 R^{ww} 一起與其所連接的 N 原子形成 5 至 6 員環，該環視需要地包含另一個選自 O，S 以及 N 的雜原子且視需要經 1 至 2 個選自烷基以及烷基羰基基團取代；

每一個 R^{xx} 係獨立地為鹵素，氰基，烷氧基，或者烷氧基羰基；

每一個 R^{yy} 係獨立地為：鹵素；氰基；烷基；環烷基；視需要經一或多個 R^{zz} 取代的苯基；視需要經一或多個 R^{ab} 取代的雜芳基；或者烷氧基羰基；

每一個 R^{zz} 係獨立地為：鹵素；氰基；硝基；羥基；視需要經一或多個 R^{aq} 取代的烷基；視需要經一或多個 R^{ar} 取代的烯基，視需要經一或多個 R^{as} 取代的炔基； OR^{al} ， $S(O)_bR^{am}$ ；或者 $C(O)R^{an}$ ；

每一個 R^{ab} 係獨立地為：鹵素；氰基；羥基；視需要經一或多個 R^{aq} 取代的烷基；視需要經一或多個 R^{ar} 取代的烯基，視需要經一或多個 R^{as} 取代的炔基； OR^{al} ， $S(O)_bR^{am}$ ；或者 $C(O)R^{an}$ ；

R^{ac} 係為氫，烷基，鹵烷基，烷氧基烷基，烷基羰基，烷氧基羰基，或者視需要經一或多個 R^{zz} 取代的苯基；

R^{ad} 係為氫，烷基，鹵烷基，烷氧基烷基，或者視需要經一或多個 R^{zz} 取代的苯基；

R^{ae} 係為烷基，視需要經一或多個 R^{zz} 取代的苯基烷基，

或者視需要經一或多個 R^{zz} 取代的苯基；

R^{af} 係為烷基或者苯基；

每一個 R^{ag} 係獨立地為烷基或者鹵烷基；

每一個 R^{ah} 係獨立地為鹵素或者苯基；

每一個 R^{ai} 係獨立地為鹵素或者烷基；

R^{al} 係為烷基，鹵烷基，烷氧基烷基，或者烷基磺醯基；

R^{am} 係為烷基，鹵烷基，烯基，炔基，苯基，或者烷基羰基胺基；

b 係為選自 0、1 或 2 的整數；

R^{an} 係為氫，烷基，鹵烷基，烷氧基，鹵烷氧基，胺基，烷基胺基，二烷基胺基，或者烷基磺醯基胺基；

R^{ao} 係為氫，烷基，烷氧基烷基，苯基烷基，甲醯基，烷基羰基，烷氧基羰基，胺基羰基，烷基胺基羰基，二烷基胺基羰基；

R^{ap} 係為氫，烷基，烷氧基烷基，或者苯基烷基；

每一個 R^{aq} 係獨立地為鹵素，烷氧基，氰基，烷氧基羰基，或者烷基磺醯基；

每一個 R^{ar} 係獨立地為鹵素，氰基，硝基，烷氧基，烷基羰基，烷氧基羰基，胺基羰基，烷基磺醯基，或者二烷基膦醯基；

每一個 R^{as} 係獨立地為鹵素，氰基，三烷基甲矽烷基，烷基羰基，烷氧基羰基，胺基羰基，或者烷基磺醯基；

每一個 R^{at} 係獨立地為鹵素，烷基，或者烷氧基羰基；

R^{au} 係為氫，烷基，鹵烷基，烷氧基烷基，烷基羰基，

烷氧基羰基，胺基羰基，或者視需要經一或多個 R^{zz} 取代的苯基；

R^{av} 係為氫，烷基，鹵烷基，烷氧基烷基或者或者視需要經一或多個 R^{zz} 取代的苯基；或者， R^{au} 以及 R^{av} 一起與其所連接的 N 原子形成 5 至 6 員環，該環視需要地包含另一個選自 O，S 以及 N 的雜原子且視需要經 1 至 2 個選自烷基以及烷氧基羰基的基團取代；

Y 係為鹵素；氰基；視需要經 1 至 3 個基團 R^{ba} 取代的 C_{1-6} 烷基；視需要經 1 至 3 個基團 R^{ba} 取代的 C_{1-6} 鹵烷基；視需要經 1 至 3 個基團 R^{bc} 取代的 C_{3-6} 環烷基；視需要經 1 至 3 個基團 R^{bd} 取代的 C_{2-6} 烯基；視需要經 1 至 3 個基團 R^{be} 取代的 C_{2-6} 炔基；視需要經 1 至 4 個基團 R^{bf} 取代的苯基；視需要經 1 至 3 個基團 R^{bg} 取代的雜芳基； OR^{bh} ； $NR^{bi}R^{bj}$ ； $S(O)_cR^{bk}$ ； C_{2-8} 二烷基磺醯基；或者 C_{3-12} 三烷基甲矽烷基，其中

每一個 R^{ba} 係獨立地為：氰基；硝基；羥基； C_{1-4} 烷氧基； C_{1-4} 烷基硫基； C_{1-4} 烷基羰基；或者 C_{1-4} 烷氧基羰基；

每一個 R^{bc} 係獨立地為：鹵素；氰基； C_{1-4} 烷基； C_{1-4} 烷氧基；或者 C_{1-4} 氧基羰基；

每一個 R^{bd} 係獨立地為：鹵素；氰基； C_{1-4} 烷基羰基；或者 C_{1-4} 烷氧基羰基；

每一個 R^{be} 係獨立地為：鹵素；氰基；羥基； C_{1-4} 烷氧基羰基；或者 C_{3-12} 三烷基甲矽烷基；

每一個 R^{bf} 以及 R^{bg} 係獨立地為：鹵素；氰基； C_{1-4} 烷

基； C_{1-4} 鹵烷基； C_{2-8} 烷氧基烷基； C_{1-4} 烷氧基； C_{1-4} 鹵烷氧基； C_{1-4} 烷基磺醯基；或者 C_{1-4} 烷氧基羰基；

每一個 R^{bh} 係獨立地為： C_{1-4} 烷基； C_{1-4} 鹵烷基；或者 C_{1-4} 烷基磺醯基；

R^{bi} 係獨立地為：氫； C_{1-4} 烷基； C_{1-4} 烷基羰基； C_{2-4} 烷氧基羰基；胺基羰基； C_{1-4} 烷基胺基羰基；或者 C_{2-8} 二烷基胺基羰基；

R^{bj} 係獨立地為氫或者 C_{1-4} 烷基；

R^{bk} 係獨立地為 C_{1-4} 烷基或者 C_{1-4} 鹵烷基；

c 係為選自 0、1 或 2 的整數；

Z 係為 $(O)_m-(U)_n-V$ ；

m 及 n 係如申請專利範圍第 1 項所定義；

U 係為 CR^wR^x ；

R^w 係為氫，鹵素，羥基， C_{1-4} 烷基， C_{1-4} 鹵烷基， C_{1-3} 烷氧基(C_{1-3})烷基， C_{1-6} 烷氧基羰基， C_{1-4} 烷氧基，或者 C_{1-4} 烷基羰基氧基；

R^x 係為氫，鹵素， C_{1-4} 烷基， C_{1-4} 鹵烷基， C_{2-6} 烷氧基烷基； C_{1-4} 烷氧基；或者任何孿位 R^w 以及 R^x 一起形成選自側氧基，或者 $=NOR^{ca}$ 基團，其中 R^{ca} 係為氫或 C_{1-4} 烷基；

V 係為 $C(O)R^{cb}$ ， $C(S)R^{cd}$ ， $C(=NR^{ce})R^{cf}$ ， $CHR^{cg}R^{ch}$ ， $CH(S[O]_pR^{ci})(S[O]_qR^{cj})$ ， $CR^{ck}R^{cl}R^{cm}$ ，或者 CH_2OR^{cn} ；

R^{cb} 係為氫，羥基， C_{1-10} 烷基硫基，胺基， C_{1-6} 烷基胺基，二(C_{1-4})烷基胺基，或者 OR^{co} ；

R^{cd} 係為 C_{1-20} 烷氧基， C_{1-10} 烷基硫基，胺基， C_{1-6} 烷基

胺基，或者二(C₁₋₄)烷基胺基；

R^{ce} 係為氫，C₁₋₆ 烷基，胺基，C₁₋₆ 烷基胺基，二(C₁₋₄)
烷基胺基，C₁₋₆ 烷氧基，或者 C₃₋₆ 環烷氧基；

R^{cf} 係為氫，C₁₋₆ 烷氧基，C₁₋₆ 烷基硫基，胺基，C₁₋₆
烷基胺基，或者二(C₁₋₄)烷基胺基；

R^{cg} 以及 R^{ch} 係每一個獨立地為 C₁₋₄ 烷氧基；或者 R^{cg} 以
及 R^{ch}，一起與其所連接的碳形成二氧雜環戊烷或者二噁烷
環，該環係視需要經 1 至 2 個 C₁₋₂ 烷基基團取代；

R^{ci} 以及 R^{cj} 係每一個獨立地為 C₁₋₄ 烷基；或者 R^{ci} 以
及 R^{cj} 係一起與其所連接的碳原子及硫原子形成 5 至 6 員
環，該環視需要經 1 或 2 個 C₁₋₂ 烷基基團取代；

p 以及 q 係獨立地為 0 或 1，

R^{ck}，R^{cl}，以及 R^{cm} 係每一個獨立地為 C₁₋₄ 烷氧基；

R^{cn} 係為氫或者 C₁₋₄ 烷基羰基；

R^{co} 係為視需要經 1 至 3 個基團 R^{cq} 取代的 C₁₋₂₀ 烷基；
視需要經 1 至 3 個基團 R^{cq} 取代的 C₁₋₂₀ 鹵烷基；或者 C₃₋₆
環烷基；

每一個 R^{cq} 係獨立地為：C₃₋₆ 環烷基，C₁₋₆ 烷氧基，視
需要經 1 至 4 個基團 R^{cr} 取代的苯基，或者視需要經 1 至 3
個基團 R^{cs} 取代的雜芳基；以及

每一個 R^{cr} 與 R^{cs} 係獨立地為：鹵素，氰基，C₁₋₄ 烷基，
C₁₋₄ 鹵烷基，C₁₋₃ 烷氧基(C₁₋₃)烷基，C₁₋₄ 烷氧基，C₁₋₄ 鹵烷
氧基，C₁₋₄ 烷基磺醯基，C₁₋₄ 烷氧基羰基，或者胺基。

3. 根據申請專利範圍第 1 或 2 項，其中：

A 係為環系統，其係選自：

噻吩，呋喃，吡咯，異噻唑，異噻唑，噻唑，噻唑，咪唑，吡唑，1, 2, 4-噻二唑，1, 3, 4-噻二唑，1, 2, 4-噻二唑，1, 3, 4-噻二唑，1, 2, 3-三唑，1, 2, 4-三唑，吡啶，嗒吡，嘧啶，吡吡，1, 2, 4-三吡，以及 1, 3, 5-三吡，其中該環系統係視需要經 1 至 3 個基團 R^1 取代；

每一個 R^1 係獨立地為：鹵素，氰基， C_{1-4} 烷基， C_{1-4} 鹵烷基， C_{1-4} 烷氧基， C_{1-4} 鹵烷氧基，胺基， C_{1-4} 烷基胺基，二(C_{1-2} 烷基)胺基， C_{1-4} 烷基硫基，或者 C_{1-4} 鹵烷基硫基；或者 2 個相鄰 R^1 基團一起與其所連接的原子形成 6 員芳香族環，其視需要經 1 至 2 個獨立地選自鹵素，氰基， C_{1-4} 烷基， C_{1-4} 鹵烷基， C_{1-4} 烷氧基， C_{1-4} 鹵烷氧基， C_{1-4} 烷基硫基，以及 C_{1-4} 鹵烷基硫基的基團所取代；

X 係為 NR^5R^6 ，其中

R^5 係為：氫；視需要經 1 至 4 個基團 R^p 取代的 C_{1-6} 烷基；視需要經 1 至 4 個基團 R^p 取代的 C_{1-6} 鹵烷基； SO_2R^{ss} ；或者 $C(O)R^{uu}$ ；

R^6 係為氫；視需要經 1 至 4 個基團 R^p 取代的 C_{1-6} 烷基；或者視需要經 1 至 4 個基團 R^p 取代的 C_{1-6} 鹵烷基；或者 R^5 以及 R^6 一起與其所連接的 N 原子形成 3 至 8 員環系統，該環系統視需要地包含 1 或 2 個另外獨立地的選自 O, N 以及 S 的雜原子且視需要經 1 至 2 個基團 R^v 取代；或者 R^5 以及 R^6 一起形成基團 $=C(R^i)OR^j$ ， $=C(R^k)SR^l$ ，或者 $=C(R^m)NR^nR^o$ ，

R^i 係為：氫；視需要經 1 至 4 個基團 R^{xx} 取代的 C_{1-4} 烷基；視需要經 1 至 4 個基團 R^{xx} 取代的 C_{1-4} 鹵烷基； C_{1-4} 烷氧基， C_{1-4} 烷基硫基；或者 $NR^{ac}R^{ad}$ ；

R^j 係為 C_{1-4} 烷基，或者 C_{1-4} 鹵烷基；

R^k 係為：氫；視需要經 1 至 4 個基團 R^{xx} 取代的 C_{1-4} 烷基；視需要經 1 至 4 個基團 R^{xx} 取代的 C_{1-4} 鹵烷基； C_{1-4} 烷基硫基；或者 $NR^{ac}R^{ad}$ ；

R^L 係為 C_{1-4} 烷基，或者 C_{1-4} 鹵烷基；

R^m 係為：氫；視需要經 1 至 4 個基團 R^{xx} 取代的 C_{1-4} 烷基；視需要經 1 至 4 個基團 R^{xx} 取代的 C_{1-4} 鹵烷基；視需要經 1 至 4 個基團 R^{yy} 取代的 C_{3-6} 環烷基；視需要經 1 至 3 個基團 R^{zz} 取代的苯基；或者 $NR^{ac}R^{ad}$ ；

R^n 係為氫， C_{1-4} 烷基，或者 C_{1-4} 鹵烷基；

R^o 係為氫， C_{1-4} 烷基，或者 C_{1-4} 鹵烷基；

R^p 係為鹵素，氰基，羥基， C_{1-4} 烷氧基，或者 C_{2-8} 烷氧基烷氧基；

每一個 R^v 係獨立地為：鹵素；氰基；羥基； C_{1-4} 烷基； C_{1-4} 鹵烷基； C_{2-8} 烷氧基烷基；視需要經一或多個 R^{ar} 取代的 C_{2-4} 烯基； C_{1-4} 烷氧基； C_{1-4} 鹵烷氧基； C_{1-4} 烷基磺醯基； C_{1-4} 鹵烷基磺醯基；或者 $C(O)R^{an}$ ；或者任二個學位基團 R^v 一起形成側氧基基團；

R^{ss} 係為 C_{1-4} 烷基，視需要經 1 至 3 個基團 R^{zz} 取代的苯基，或者 C_{1-4} 鹵烷基；

R^{uu} 係為：氫；視需要經 1 至 4 個基團 R^{xx} 取代的 C_{1-4}

烷基；視需要經 1 至 4 個基團 R^{xx} 取代的 C_{1-4} 鹵烷基；視需要經 1 至 4 個基團 R^{yy} 取代的 C_{3-6} 環烷基，視需要經 1 至 3 個基團 R^{zz} 取代的苯基；視需要經 1 至 3 個基團 R^{ab} 取代的雜芳基； $NR^{ac}R^{ad}$ ；或者 OR^{ae} ；

每一個 R^{xx} 係獨立地為氰基， C_{1-4} 烷氧基，或者 C_{1-4} 烷氧基羰基；

每一個 R^{yy} 係獨立地為鹵素，氰基或者 C_{1-4} 烷基；

每一個 R^{zz} 以及每一個 R^{ab} 係獨立地為鹵素，氰基，硝基， C_{1-4} 烷基， C_{1-4} 鹵烷基， C_{2-8} 烷氧基烷基， C_{1-4} 烷氧基， C_{1-4} 鹵烷氧基， C_{1-4} 烷基磺醯基， C_{1-4} 鹵烷基磺醯基或者 $C(O)R^{an}$ ；

R^{ac} 係為氫， C_{1-4} 烷基， C_{1-4} 鹵烷基，或者 C_{2-8} 烷氧基烷基；

R^{ad} 係為氫， C_{1-4} 烷基， C_{1-4} 鹵烷基，或者 C_{2-8} 烷氧基烷基；

R^{ae} 係為： C_{1-4} 烷基；視需要經 1 至 3 個基團 R^{zz} 取代的苯基 C_{1-4} 烷基；或者視需要經 1 至 3 個基團 R^{zz} 取代的苯基；

R^{an} 係為 C_{1-4} 烷基， C_{1-4} 鹵烷基， C_{1-4} 烷氧基， C_{1-4} 鹵烷氧基，胺基， C_{1-4} 烷基胺基，或者 C_{2-8} 二烷基胺基；

每一個 R^{ar} 係獨立地為鹵素，氰基，硝基，或者 C_{1-4} 烷氧基羰基；

Y 係為鹵素， C_{1-3} 烷基， C_{1-3} 鹵烷基， C_{2-5} 烷氧基烷基，視需要經 1 至 2 個基團 R^{bc} 取代的環丙基， C_{2-4} 烯基， C_{2-4}

鹵烯基，視需要經 1 至 2 個基團 R^{bc} 取代的 C_{2-4} 炔基；

其中每一個 R^{bc} 係獨立地為鹵素或者 C_{1-2} 烷基，以及每一個 R^{bc} 係獨立地為鹵素或者 C_{3-9} 三烷基甲矽烷基；

Z 係為 $(O)_m-(CR^wR^x)_n-C(O)R^{cb}$ ，其中：

m 係為 0 或 1 的整數， n 係為 0 或 1 的整數，且 $n \geq m$ ；

R^w 係為氫或 C_{1-4} 烷基以及 R^x 係為氫；

每一個 R^{cb} 係為羥基， C_{1-10} 烷基硫基，或者 OR^{co} ；

R^{co} 係為視需要經 1 至 2 個基團 R^{cq} 取代的 C_{1-20} 烷基或者視需要經 1 至 2 個基團 R^{cq} 取代的 C_{1-20} 鹵烷基；

每一個 R^{cq} 係獨立地為視需要經 1 至 3 個基團 R^{cr} 取代的苯基，或者視需要經 1 至 2 個基團 R^{cs} 取代的雜芳基；

每一個 R^{cr} 係獨立地為鹵素，氰基， C_{1-4} 烷基， C_{1-4} 鹵烷基， C_{1-3} 烷氧基(C_{1-3})烷基， C_{1-4} 烷氧基， C_{1-4} 鹵烷氧基， C_{1-4} 烷基磺醯基，或者 C_{1-4} 烷氧基羰基；以及

每一個 R^{cs} 係獨立地為鹵素，氰基， C_{1-4} 烷基， C_{1-4} 鹵烷基， C_{1-3} 烷氧基(C_{1-3})烷基， C_{1-4} 烷氧基， C_{1-4} 鹵烷氧基， C_{1-4} 烷基磺醯基，或者 C_{1-4} 烷氧基羰基。

4. 根據申請專利範圍第 1 或 2 項，其中：

A 係為環，其係選自：噻吩，噻唑，1, 2, 3-三唑，以及吡啶，其中該環係視需要經 1 至 3 個基團 R^1 取代；

每一個 R^1 係獨立地選自：鹵素，氰基， C_{1-2} 烷基， C_{1-2} 鹵烷基， C_{1-2} 烷氧基， C_{1-2} 鹵烷氧基，以及二(C_{1-2} 烷基)胺基；或者 2 個相鄰 R^1 基團與其所連接的原子形成 6 員芳香族環，其視需要經 1 至 2 個獨立地選自鹵素，氰基， C_{1-2}

烷基， C_{1-2} 鹵烷基， C_{1-2} 烷氧基，以及 C_{1-2} 鹵烷氧基取代；

X 係為 NR^5R^6 ，

X 係為 NR^5R^6 ，其中

R^5 係為：氫；視需要經 1 至 2 個基團 R^p 取代的 C_{1-4} 烷基；視需要經 1 至 2 個基團 R^p 取代的 C_{1-4} 鹵烷基； SO_2R^{ss} ；或者 $C(O)R^{uu}$ ；

R^6 係為：氫；視需要經 1 至 2 個基團 R^p 取代的 C_{1-4} 烷基；或者視需要經 1 至 2 個基團 R^p 取代的 C_{1-4} 鹵烷基；或者 R^5 以及 R^6 一起與其所連接的 N 原子形成 4 至 6 員環系統，該環系統係視需要地包含 1 個另外選自 O，S 以及 N 的雜原子且視需要經 1 至 2 個基團 R^v 取代；或者 R^5 以及 R^6 一起形成選自以下的基團： $=C(R^i)OR^j$ ， $=C(R^k)SR^L$ ，以及 $=C(R^m)NR^nR^o$ ；

R^i 係為氫， C_{1-4} 烷基， C_{1-4} 烷氧基， C_{1-4} 烷基硫基，或者 $NR^{ac}R^{ad}$ ；

R^j 係為 C_{1-4} 烷基；

R^k 係為氫， C_{1-4} 烷基， C_{1-4} 烷基硫基，或者 $NR^{ac}R^{ad}$ ；

R^L 係為 C_{1-4} 烷基；

R^m 係為氫， C_{1-4} 烷基， C_{3-6} 環烷基，苯基，或者 $NR^{ac}R^{ad}$ ；

R^n 以及 R^o 係每一個獨立地為氫，或者 C_{1-4} 烷基；

每一個 R^p 係為鹵素，羥基，或者 C_{1-4} 烷氧基；

每一個 R^v 係獨立地為鹵素，或者 C_{1-4} 烷基；

R^{ss} 係為 C_{1-4} 烷基，或者視需要經 1 至 3 個基團 R^{zz} 取代的苯基；

R^{uu} 係為： C_{1-4} 烷基；視需要經 1 至 3 個基團 R^{zz} 取代的苯基； C_{1-4} 烷氧基；或者 $NR^{ac}R^{ad}$ ；

R^{zz} 係為鹵素， C_{1-4} 烷基， C_{1-4} 烷氧基，或者 C_{1-4} 烷基磺醯基；

R^{ac} 以及 R^{ad} 係獨立地為氫或者 C_{1-4} 烷基；

Y 係為鹵素， C_{1-2} 烷基， C_{1-2} 鹵烷基， C_{2-3} 烷氧基烷基，或者 C_{2-3} 烯基；

Z 係為 $C(O)R^{cb}$ ，其中 R^{cb} 係為羥基， C_{1-10} 烷氧基，或者苯基(C_{1-2})烷氧基。

5. 根據申請專利範圍第 3 項，其中：

A 係為環，其係選自：噻吩，噻唑，1, 2, 3-三唑，以及吡啶，其中該環係視需要經 1 至 3 個基團 R^1 取代；

每一個 R^1 係獨立地選自：鹵素，氰基， C_{1-2} 烷基， C_{1-2} 鹵烷基， C_{1-2} 烷氧基， C_{1-2} 鹵烷氧基，以及二(C_{1-2} 烷基)胺基；或者 2 個相鄰 R^1 基團與其所連接的原子形成 6 員芳香族環，其視需要經 1 至 2 個獨立地選自鹵素，氰基， C_{1-2} 烷基， C_{1-2} 鹵烷基， C_{1-2} 烷氧基，以及 C_{1-2} 鹵烷氧基取代；

X 係為 NR^5R^6 ，其中

R^5 係為：氫；視需要經 1 至 2 個基團 R^p 取代的 C_{1-4} 烷基；視需要經 1 至 2 個基團 R^p 取代的 C_{1-4} 鹵烷基； SO_2R^{ss} ；或者 $C(O)R^{uu}$ ；

R^6 係為：氫；視需要經 1 至 2 個基團 R^p 取代的 C_{1-4} 烷基；或者視需要經 1 至 2 個基團 R^p 取代的 C_{1-4} 鹵烷基；或者 R^5 以及 R^6 一起與其所連接的 N 原子形成 4 至 6 員環系

統，該環系統係視需要地包含 1 個另外選自 O，N 以及 S 的雜原子且視需要經 1 至 2 個基團 R^v 取代；或者 R^5 以及 R^6 一起形成選自以下的基團： $=C(R^i)OR^j$ ， $=C(R^k)SR^L$ ，以及 $=C(R^m)NR^nR^o$ ；

R^i 係為氫， C_{1-4} 烷基， C_{1-4} 烷氧基， C_{1-4} 烷基硫基，或者 $NR^{ac}R^{ad}$ ；

R^j 係為 C_{1-4} 烷基；

R^k 係為氫， C_{1-4} 烷基， C_{1-4} 烷基硫基，或者 $NR^{ac}R^{ad}$ ；

R^L 係為 C_{1-4} 烷基；

R^m 係為氫， C_{1-4} 烷基， C_{3-6} 環烷基，苯基，或者 $NR^{ac}R^{ad}$ ；

R^n 以及 R^o 係每一個獨立地為氫，或者 C_{1-4} 烷基；

每一個 R^p 係為鹵素，羥基，或者 C_{1-4} 烷氧基；

每一個 R^v 係獨立地為鹵素，或者 C_{1-4} 烷基；

R^{ss} 係為 C_{1-4} 烷基，或者視需要經 1 至 3 個基團 R^{zz} 取代的苯基；

R^{uu} 係為： C_{1-4} 烷基；視需要經 1 至 3 個基團 R^{zz} 取代的苯基； C_{1-4} 烷氧基；或者 $NR^{ac}R^{ad}$ ；

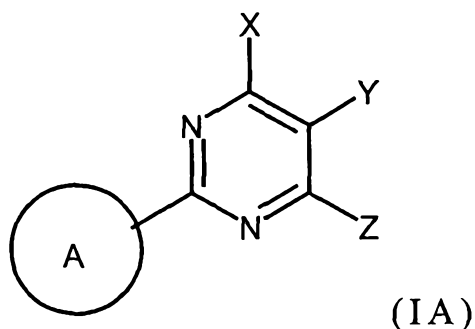
R^{zz} 係為鹵素， C_{1-4} 烷基， C_{1-4} 烷氧基，或者 C_{1-4} 烷基磺基；

R^{ac} 以及 R^{ad} 係獨立地為氫或者 C_{1-4} 烷基；

Y 係為鹵素， C_{1-2} 烷基， C_{1-2} 鹵烷基， C_{2-3} 烷氧基烷基，或者 C_{2-3} 烯基；

Z 係為 $C(O)R^{cb}$ ，其中 R^{cb} 係為羥基， C_{1-10} 烷氧基，或者苯基(C_{1-2})烷氧基。

6. 一種式 (IA) 化合物，



其中 A, Y, 以及 Z 係根據申請專利範圍第 1 至 5 項中任一項所定義, Y 係為 NR^5R^6 或者鹵素, 且 R^5 以及 R^6 係根據申請專利範圍第 1 項所定義。

7. 一種除草組合物, 其包括如申請專利範圍第 6 項所定義的式 (IA) 化合物以及至少一種農業上可接受的調配物佐劑或稀釋劑。

8. 根據申請專利範圍第 7 項之除草組合物, 其另外包括作物安全劑。

9. 一種經摻混著至少一種選自由殺昆蟲劑、殺蟎劑、殺線蟲劑、殺軟體動物劑、除草劑、殺真菌劑和植物生長調節劑組成之群的活性成份的根據申請專利範圍第 1 至 5 項中任一項所定義的式 (I) 化合物、根據申請專利範圍第 6 項的式 (IA) 化合物或根據申請專利範圍第 7 或 8 項的除草組合物。

10. 一種根據申請專利範圍第 1 至 5 項中任一項的式 (I) 化合物、或根據申請專利範圍第 6 項的式 (IA) 化合物在作為除草劑的用途。

11. 一種控制不欲植物生長的方法, 其包括噴予該不欲植物根據申請專利範圍第 6 項所定義的式 (IA) 化合物、或根

據申請專利範圍第 7 或 8 項所定義的除草組合物，或根據申請專利範圍第 9 項混合物。

12. 一種控制有用植物作物中的雜草的方法，其包括噴予該雜草或該雜草所在地，或該有用植物作物根據申請專利範圍第 1 至 5 項中任一項所定義的式(I)化合物、根據申請專利範圍第 6 項的式(IA)化合物、根據申請專利範圍第 7 或 8 項的除草組合物，或根據申請專利範圍第 9 項混合物。

八、圖式：

(無)

據申請專利範圍第 7 或 8 項所定義的除草組合物，或根據申請專利範圍第 9 項混合物。

12. 一種控制有用植物作物中的雜草的方法，其包括噴予該雜草或該雜草所在地，或該有用植物作物根據申請專利範圍第 1 至 5 項中任一項所定義的式(I)化合物、根據申請專利範圍第 6 項的式(IA)化合物、根據申請專利範圍第 7 或 8 項的除草組合物，或根據申請專利範圍第 9 項混合物。

八、圖式：

(無)

四、指定代表圖：

(一)本案指定代表圖為：第（ 無 ）圖。

(二)本代表圖之元件符號簡單說明：

無

五、本案若有化學式時，請揭示最能顯示發明特徵的化學式：

