

發明專利說明書

200539808

(本說明書格式、順序及粗體字，請勿任意更動，※記號部分請勿填寫)

※ 申請案號：84107231

※ 申請日期：94.3.10

※IPC 分類：A01N 43/64

A01N 43/90

一、發明名稱：(中文/英文)

5,6-二烷基-7-胺基三唑并嘧啶，彼等之製備及用於控制有害真菌之用途以及包含彼等化合物之組合物

5,6-DIALKYL-7-AMINOTRIAZOLOPYRIMIDINES, THEIR PREPARATION AND THEIR USE FOR CONTROLLING HARMFUL FUNGI, AND COMPOSITIONS COMPRISING THESE COMPOUNDS

二、申請人：(共 1 人)

姓名或名稱：(中文/英文)

德商巴地斯顏料化工廠

BASF AKTIENGESELLSCHAFT

代表人：(中文/英文)

1. 貝蕾爾

BIELLER

2. 寇斯特

KOESTER

住居所或營業所地址：(中文/英文)

德國來恩河勞域沙芬市卡羅玻斯克街

CARL-BOSCH-STRASSE, 67056 LUDWIGSHAFEN, GERMANY

國籍：(中文/英文)

德國 GERMANY

三、發明人：(共 16 人)

姓 名：(中文/英文)

1. 喬狄 托默 I 布拉斯柯
BLASCO, JORDI TORMO I
2. 卡斯登 布雷特諾
BLETTNER, CARSTEN
3. 本德 慕勒
MUELLER, BERND
4. 馬庫斯 吉維爾
GEWEHR, MARKUS
5. 瓦希琉斯 葛蘭梅諾
GRAMMENOS, WASSILIOS
6. 湯瑪士 葛洛帝
GROTE, THOMAS
7. 裘秦 雷恩海默
RHEINHEIMER, JOACHIM
8. 彼德 夏菲爾
SCHAEFER, PETER
9. 法蘭克 史奇威克
SCHIEWECK, FRANK
10. 安亞 史奇伍革勒
SCHWOEGLER, ANJA
11. 奧利佛 瓦格諾
WAGNER, OLIVER
12. 瑪夏斯 尼登布魯克
NIEDENBRUECK, MATTHIAS

13. 瑪麗亞 史奇勒

SCHERER, MARIA

14. 希格弗雷德 史揣斯曼

STRATHMANN, SIEGFRIED

15. 歐里齊 史丘佛

SCHOEFL, ULRICH

16. 雷恩哈德 史堤爾

STIERL, REINHARD

國 籍：(中文/英文)

1. 西班牙 SPAIN

2-4., 6.-16. 均德國 GERMANY

5. 希臘 GREECE

四、聲明事項：

☐ 主張專利法第二十二條第二項 ☐ 第一款或 ☐ 第二款規定之事實，其事實發生日期為： 年 月 日。

☒ 申請前已向下列國家（地區）申請專利：

【格式請依：受理國家（地區）、申請日、申請案號 順序註記】

☒ 有主張專利法第二十七條第一項國際優先權：

1. 德國；2004年03月10日；102004012021.8

2.

☐ 無主張專利法第二十七條第一項國際優先權：

1.

2.

☐ 主張專利法第二十九條第一項國內優先權：

【格式請依：申請日、申請案號 順序註記】

☐ 主張專利法第三十條生物材料：

☐ 須寄存生物材料者：

國內生物材料 【格式請依：寄存機構、日期、號碼 順序註記】

國外生物材料 【格式請依：寄存國家、機構、日期、號碼 順序註記】

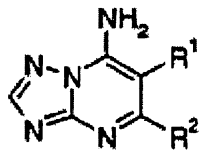
☐ 不須寄存生物材料者：

所屬技術領域中具有通常知識者易於獲得時，不須寄存。

九、發明說明：

【發明所屬之技術領域】

本發明係關於式I之5,6-二烷基-7-胺基三唑并嘧啶



其中該等取代基定義如下：

R^1 係 C_1 - C_5 -烷基或 C_1 - C_{10} -烷氧基- C_1 - C_{10} -烷基，

R^2 係 C_5 - C_{12} -烷基，

其中 R^1 及/或 R^2 可藉由一至三個下列基團取代：

氟基、硝基、羥基、 C_3 - C_6 -環烷基， C_1 - C_6 -烷硫基或 NR^aR^b ；

R^a 、 R^b 係氫或 C_1 - C_6 -烷基。

另外，本發明係關於製備該等化合物之製程，亦係關於包含彼等之組合物且係關於彼等用於控制植物病原有害真菌之用途。

【先前技術】

5,6-二烷基-7-胺基三唑并嘧啶概括地提出於 GB 1 148 629 中。自 EP-A 141 317 可瞭解個別具殺真菌活性的5,6-二烷基-7-胺基三唑并嘧啶。然而，其活性在許多情況下皆不能令人滿意。基於此，一本發明之目的係提供具有經改良活性及/或一廣譜活性之化合物。

【發明內容】

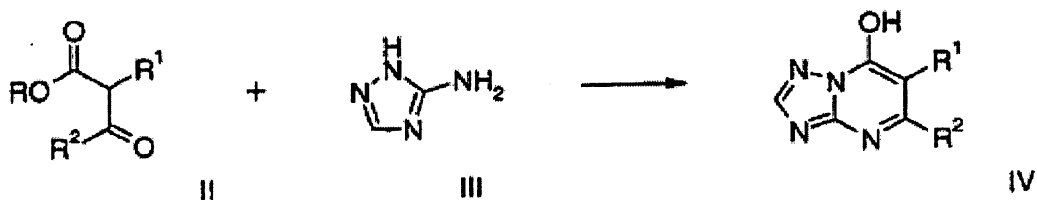
已發現，該目的可藉由開篇處所定義之化合物達成。另

外，亦已發現用於彼等之製備之製程及中間物、包含彼等之組合物及利用該等化合物I控制有害真菌之方法。

該等式I化合物與上述公開案中之彼等在三唑并嘧啶骨架5位上取代基之具體排列方面不同。

與該等習知化合物比較，該等式I化合物可更有效地抵抗有害真菌。

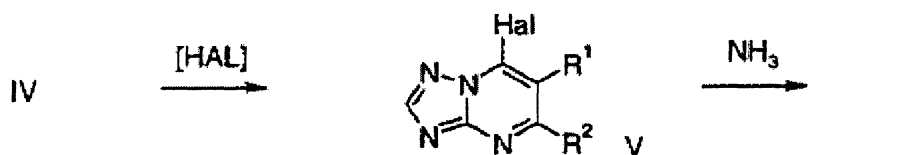
本發明之化合物可藉由不同途徑獲得。較佳地，本發明化合物係藉由以下獲得：經取代的式II之 β -酮酯與式III之3-胺基-1,2,4-三唑反應，生成式IV之7-羥基三唑并嘧啶。式II及式IV中之 R^1 及 R^2 係如式I中之定義，而式II中之基團R係 C_1 - C_4 -烷基；從實際角度考慮，此處較佳者為甲基、乙基或丙基。



經取代的式II之 β -酮酯與式III胺基唑之反應可於有溶劑或無溶劑之情況下實施。使用起始材料對其實質上呈惰性且可完全或部分溶於其中之溶劑更為有利。適合的溶劑尤其係醇，例如乙醇、丙醇、丁醇、乙二醇或乙二醇單醚、二乙二醇或其單醚；芳烴，例如甲苯、苯或三甲基苯；鹽胺，例如二甲基甲鹽胺、二乙基甲鹽胺、二丁基甲鹽胺、N,N-二甲基乙鹽胺；低碳烴酸，例如甲酸、乙酸、丙酸；或鹼，例如鹼金屬及鹼土金屬氫氧化物、鹼金屬及鹼土金

屬氧化物、鹼金屬及鹼土金屬氫化物、鹼金屬鹼胺、鹼金屬及鹼土金屬碳酸鹽以及鹼金屬碳酸氫鹽；有機金屬化合物，尤其為鹼金屬烷基化物、烷基鹵化鎂以及鹼金屬及鹼土金屬烷氧化物及二甲氧基鎂；此外，有機鹼，舉例而言第三胺，例如三甲基胺、三乙基胺、三異丙基乙基胺、三丁基胺及N-甲基六氫吡啶、N-甲基嗎啉、吡啶、經取代吡啶(例如可力丁、二甲基吡啶及4-二甲胺基吡啶)；以及雙環胺；及該等溶劑與水之混合物。適合的觸媒為鹼，例如彼等上述鹼，或為酸，例如磺酸或無機酸。特別較佳地，該反應係在無溶劑情況下或於氯苯、二甲苯、二甲基亞砷或N-甲基吡咯烷酮中實施。特別佳之鹼為第三胺，例如三異丙基乙基胺、三丁基胺、N-甲基嗎啉或N-甲基六氫吡啶。倘若該反應係於溶液中實施，則溫度係從50至300℃，較佳從50至180℃ [cf. EP-A 770 615; Adv. Het. Chem. 57 (1993), 81ff]。

該等鹼通常係以催化量使用；然而，其亦可以等莫耳量、過量使用或(若適合)作為溶劑使用。



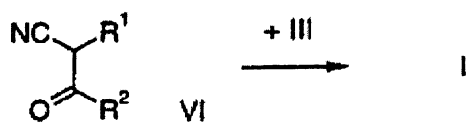
在大多數情況下，所得式IV之縮合物自反應溶液以純淨形式沉澱，於用相同溶液或用水洗滌並隨即乾燥後，其與鹵化劑(特別是氯化劑或溴化劑)起反應，以獲得式V化合物，其中Hal為氯或溴，尤其為氯。較佳地，該反應係用

如磷醯氯、亞硫醯(二)氯或磺醯氯等氯化劑於自 50°C 至 150°C 下實施，較佳係在過量的三氯氧磷中於回流溫度下實施。過量的三氯化磷蒸發後，剩餘物用冰水(如適合可添加與水不混溶的溶劑)處理。大多數情況下，該與經乾燥的有機相分離的氯化產物(如適合於該惰性溶劑蒸發後)純淨極高，隨後使其與氨在惰性溶劑中於自 100°C 至 200°C 下反應以獲得 7-氨基-三唑并[1,5-a]嘧啶。該反應較佳用 1-至 10-莫耳過量的氨於自 1 至 100 巴之壓力下實施。

該新穎的 7-氨基三唑并[1,5-a]嘧啶係(如適合於溶劑蒸發後)藉由於水中消化而以結晶化合物形式析出。

式 II β -酮酯可按 Organic Synthesis(Coll. Vol. 1, p. 248) 中所述製備，及/或其可購得。

或者，式 I 之新穎化合物可藉由經取代的式 VI 醯基氯化物(其中 R^1 及 R^2 係如上所定義)與式 III 之 3-氨基-1,2,4-三唑反應得到。



該反應可於存在或不存在溶劑之情況下實施。使用起始材料對其實質上呈惰性且可完全或部分溶於其中之溶劑更為有利。適合的溶劑具體而言為醇；例如乙醇、丙醇、丁醇、乙二醇或乙二醇單醚、二乙二醇或其單醚；芳烴，例如甲苯、苯或三甲基苯；醯胺，例如二甲基甲醯胺、二乙基甲醯胺、二丁基甲醯胺、N,N-二甲基乙醯胺；低碳烴

酸，例如甲酸、乙酸、丙酸；或鹼，例如彼等上述者；及該等溶劑與水之混合物。倘若該反應係在溶液中實施，則反應溫度係自 50°C 至 300°C，較佳自 50°C 至 150°C。

該新穎的 7-胺基三唑并[1,5-a]嘧啶係(如適合於溶劑蒸發或用水稀釋後)以結晶化合物形式析出。

某些製備 7-胺基三唑[1,5-a]嘧啶所需的經取代式 VI 烷基氰化物已為吾人習知，或者其可藉由已知方法使用強鹼(例如，鹼金屬氰化物、鹼金屬烷氧化物、鹼金屬鹽胺或金屬烷基化物)由烷基氰化物及羧酸酯製得(cf.: J. Amer. Chem. Soc. 73, (1951), p. 3766)。

倘若個別化合物 I 不能藉由上述方法獲得，則其可藉由其他化合物 I 之衍生製得。

倘若該合成產生異構體混合物，通常無需實施分離，因為個別異構體在某些情況下可在使用前處理期間或在施用期間(例如，在光、酸或鹼之作用下)互變。該等轉變亦可於使用後發生，例如，當處理植物時於經處理的植物中發生，或於欲控制之有害真菌中發生。

在上文式中給出符號之定義中，使用了統稱，其通常代表以下取代基：

鹵素：氟、氯、溴及碘；

烷基：具有 1 至 4 個或 5 至 12 個碳原子之飽和直鏈或具單支鏈或雙支鏈烴基，舉例而言，C₁-C₆-烷基，例如甲基、乙基、丙基、1-甲基乙基、丁基、1-甲基丙基、2-甲基丙基、1,1-二甲基乙基、正戊基、1-甲基丁基、2-甲基丁

基、3-甲基丁基、2,2-二甲基丙基、1-乙基丙基、己基、1,1-二甲基丙基、1,2-二甲基丙基、1-甲基戊基、2-甲基戊基、3-甲基戊基、4-甲基戊基、1,1-二甲基丁基、1,2-二甲基乙基、1,3-二甲基丁基、2,2-二甲基丁基、2,3-二甲基丁基、3,3-二甲基丁基、1-乙基丁基、2-乙基丁基、1,1,2-三甲基丙基、1,2,2-三甲基丙基、1-乙基-1-甲基丙基及1-乙基-2-甲基丙基；

環烷基：具有3至6個碳環原子的單環或雙環飽和烴基基團，例如，環丙基、環丁基、環戊基及環己基。

烷氧基烷基：一由一個氧原子間插的飽和直鏈或具單、雙或三支鏈之烴基鏈，例如C₂-C₁₁-烷氧基烷基：一具有2至11個碳原子之上述烴基鏈，其可於任何位置由一氧原子間插，舉例而言，甲氧基乙基、乙氧基乙基、丙氧基乙基、丁氧基乙基、戊氧基乙基、己氧基乙基、庚氧基乙基、辛氧基乙基、壬氧基乙基、3-(3-乙基己氧基)乙基、3-(2,4,4-三甲基戊氧基)乙基、3-(1-乙基-3-甲基丁氧基)乙基、甲氧基丙基、乙氧基丙基、丙氧基丙基、丁氧基丙基、戊氧基丙基、己氧基丙基、庚氧基丙基、辛氧基丙基、壬氧基丙基、3-(3-乙基己氧基)丙基、3-(2,4,4-三甲基戊氧基)丙基、3-(1-乙基-3-甲基丁氧基)丙基、甲氧基丁基、乙氧基丁基、丙氧基丁基、丁氧基丁基、戊氧基丁基、己氧基丁基、庚氧基丁基、辛氧基丁基、壬氧基丁基、3-(3-乙基己氧基)丁基、3-(2,4,4-三甲基戊氧基)丁基、3-(1-乙基-3-甲基丁氧基)丁基、甲氧基戊基、乙氧基戊基、丙氧基戊

基、丁氧基戊基、戊氧基戊基、己氧基戊基。

本發明之範圍包括式I化合物的具有對掌性中心之(R)-和(S)-異構體及外消旋物。

考慮到式I之三唑并嘧啶之預期用途，優先選擇該等取代基之以下含義，在每一情況下它們皆係獨立或組合使用：

較佳者為化合物I，其中基團 R^1 及 R^2 中碳原子之總數至多為14。

式I之 R^1 及 R^2 中之烷基基團較佳為直鏈或具單、雙或三支鏈之烷基基團。

較佳者為化合物I，其中 R^1 為甲基、乙基、正丙基、異丙基、正丁基或正戊基，尤其為甲基或乙基，其中 R^1 可如開篇處所定義經取代。

較佳者為化合物I，其中 R^1 及 R^2 不具任何取代基。

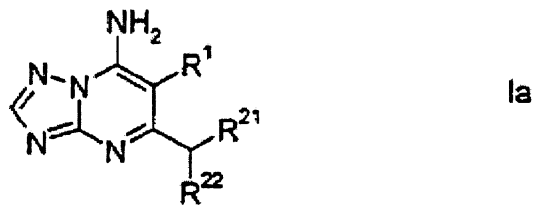
特別佳者為其中 R^1 為 C_5 - C_{12} -烷氧基烷基之化合物I，其中該等碳鏈係未經取代或可如開篇處所定義經取代。

在一化合物I實施例中， R^1 為烷氧基烷基。

在另一化合物I實施例中， R^1 及 R^2 兩基團皆為烷基，其係如開篇處所定義經取代或(較佳)未經取代。

較佳者為其中 R^2 為一直鏈或一具單或雙支鏈且不具任何其他取代基的 C_5 - C_{12} -烷基基團之化合物I。

在另一式I化合物實施例中， R^2 在該 α 碳原子處具支鏈。其可由式Ia描述：



其中 R^{21} 為 C_3 - C_{10} 烷基或 C_2 - C_{10} -烯基且 R^{22} 為 C_1 - C_4 -烷基、尤其為甲基，其中 R^{11} 及 R^{12} 一共具有至多 12 個碳原子且係未經取代或以與式 I 中 R^1 一樣之方式經取代。

倘若 R^1 或 R^2 包含一氰基基團，則該氰基較佳位於末端碳原子處。

特別佳者為化合物 I，其中 R^2 為正戊基、1-甲基丁基、2-甲基丁基、3-甲基丁基、2,2-二甲基丙基、1-乙基丙基、正己基、1,1-二甲基-丙基、1,2-二甲基丙基、1-甲基戊基、2-甲基戊基、3-甲基戊基、4-甲基-戊基、1,1-二甲基丁基、1,2-二甲基丁基、1,3-二甲基丁基、2,2-二甲基丁基、2,3-二甲基丁基、3,3-二甲基丁基、1-乙基丁基、2-乙基丁基、1,1,2-三甲基丙基、1,2,2-三甲基丙基、1-乙基-1-甲基丙基或 1-乙基-2-甲基丙基。

在另一式 I 化合物較佳實施例中， R^2 為正庚基、1-甲基己基、正辛基、1-甲基庚基、正壬基、1-甲基辛基、正癸基、1-甲基壬基、正十一烷基、1-甲基癸基、正十二烷基或 1-甲基十一烷基。

特別是考慮到其用途，較佳者為彙集於下表中的化合物 I。另外，表中所提及適合用作一取代基之基團自身(獨立於該等基團於其中被提及之組合)係一所論述取代基之特別佳之實施例。

表 1

式 I 化合物，其中 R^1 為甲基且 R^2 對於每一化合物對應於表 A 之一行。

表 2

式 I 化合物，其中 R^1 為乙基且 R^2 對於每一化合物對應於表 A 之一行。

表 3

式 I 化合物，其中 R^1 為正丙基且 R^2 對於每一化合物對應於表 A 之一行。

表 4

式 I 化合物，其中 R^1 為異丙基且 R^2 對於每一化合物對應於表 A 之一行。

表 5

式 I 化合物，其中 R^1 為正丁基且 R^2 對於每一化合物對應於表 A 之一行。

表 6

式 I 化合物，其中 R^1 為異丁基且 R^2 對於每一化合物對應於表 A 之一行。

表 7

式 I 化合物，其中 R^1 為第二-丁基且 R^2 對於每一化合物對應於表 A 之一行。

表 8

式 I 化合物，其中 R^1 為正戊基且 R^2 對於每一化合物對應於表 A 之一行。

表 A

編號	R^2
A-1	$\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$
A-2	$\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$
A-3	$\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_3$
A-4	$\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_3$
A-5	$\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)_2$
A-6	$\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_3$
A-7	$\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}(\text{CH}_3)_2$
A-8	$\text{CH}_2\text{C}(\text{CH}_3)_3$
A-9	$\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$
A-10	$\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$
A-11	$\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$
A-12	$\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_3$
A-13	$\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)_2\text{CH}_2$
A-14	$\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)_2$
A-15	$\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_3$
A-16	$\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)_2$
A-17	$\text{CH}_2\text{CH}_2\text{C}(\text{CH}_3)_3$
A-18	$\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_3$
A-19	$\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$
A-20	$\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$
A-21	$\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$
A-22	$\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$

編號	R^2
A-23	$\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_3$
A-24	$\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_3$
A-25	$\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)_2$
A-26	$\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$
A-27	$\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_3$
A-28	$\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{C}(\text{CH}_3)_3$
A-29	$\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_3$
A-30	$\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_3$
A-31	$\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_3$
A-32	$\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$
A-33	$\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$
A-34	$\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$
A-35	$\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$
A-36	$\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$
A-37	$\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_3$
A-38	$\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{C}(\text{CH}_3)_2$
A-39	$\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{C}(\text{CH}_3)_3$
A-40	$\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$
A-41	$\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$
A-42	$\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{C}(\text{CH}_3)_2\text{CH}_2\text{CH}_3$
A-43	$\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$
A-44	$\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$
A-45	$\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_3$

編號	R ²
A-46	CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃) ₂
A-47	CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃
A-48	CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃
A-49	CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃
A-50	CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃
A-51	CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃
A-52	CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₃
A-53	CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ C(CH ₃) ₃
A-54	CH(CH ₃)CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃
A-55	CH ₂ CH(CH ₃)CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃
A-56	CH ₂ CH ₂ CH ₂ C(CH ₃) ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃
A-57	CH(CH ₃)CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃
A-58	CH ₂ CH(CH ₃)CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃
A-59	CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₃
A-60	CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ C(CH ₃) ₃
A-61	CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃) ₃
A-62	CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃) ₂
A-63	CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃) ₂
A-64	CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃
A-65	CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃
A-66	CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃
A-67	CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃
A-68	CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂

編號	R^2
A-69	$\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$
A-70	$\text{CH}_2\text{CH}_a\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{C}(\text{CH}_3)_3\text{CH}_2$
A-71	$\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$
A-72	$\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$
A-73	$\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{C}(\text{CH}_3)_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$
A-74	$\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$
A-75	$\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$
A-76	$\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$
A-77	$\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$
A-78	$\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_3$
A-79	$\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)_2$
A-80	$\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{C}(\text{CH}_3)\text{CH}_3$
A-81	$\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_3$
A-82	$\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{C}(\text{CH}_3)_3$
A-83	$\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{C}(\text{CH}_3)_3$
A-84	$\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$
A-85	$\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$
A-86	$\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$
A-87	$\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$
A-88	$\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$
A-89	$\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$
A-90	$\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{C}(\text{CH}_3)_3$
A-91	$\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$

編號	R ²
A-92	CH ₂ CH(CH ₃)CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃
A-93	CH ₂ CH ₂ CH ₂ C(CH ₃) ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃
A-94	CH(CH ₃)CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃
A-95	CH ₂ CH(CH ₃)CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃
A-96	CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃
A-97	CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃
A-98	CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₃
A-99	CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃
A-100	CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃) ₂
A-101	CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃
A-102	CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃
A-103	CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃) ₂
A-104	CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ C(CH ₃) ₃
A-105	CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃
A-106	CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃
A-107	CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃
A-108	CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃
A-109	CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂
A-110	CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃
A-111	CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃
A-112	CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃
A-113	CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₃
A-114	CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃

編號	R ²
A-115	CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃) ₂
A-116	CH(CH ₃)CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃
A-117	CH ₂ CH(CH ₃)CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃
A-118	CH ₂ CH ₂ CH ₂ C(CH ₃) ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃
A-119	CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃
A-120	CH(CH ₃)CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃
A-121	CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃
A-122	CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃
A-123	CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃
A-124	CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₃
A-125	CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃
A-126	CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₃
A-127	CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃
A-128	CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃
A-129	CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ C(CH ₃) ₃
A-130	CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-131	CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-132	CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CN
A-133	CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CN
A-134	CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CN
A-135	CH(CH ₃)CH(CH ₃)CH ₂ CN
A-136	CH(CH ₃)CH(CH ₃)CH ₂ CN
A-137	CH ₂ C(CH ₃) ₂ CH ₂ CN

編號	R ²
A-138	CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-139	CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-140	CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-141	CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CN
A-142	CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃) ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-143	CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CN
A-144	CH(CH ₃)CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CN
A-145	CH(CH ₃)CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CN
A-146	CH ₂ CH ₂ C(CH ₃) ₂ CH ₂ CN
A-147	CH(CH ₃)CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CN
A-148	CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-149	CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-150	CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-151	CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-152	CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CN
A-153	CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CN
A-154	CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CN
A-155	CH(CH ₃)CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-156	CH ₂ CH(CH ₃)CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CN
A-157	CH ₂ CH ₂ CH ₂ C(CH ₃) ₂ CH ₂ CN
A-158	CH(CH ₃)CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CN
A-159	CH ₂ CH(CH ₃)CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CN
A-160	CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CN

編號	R ²
A-161	CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-162	CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-163	CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-164	CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-165	CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-166	CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CN
A-167	CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CN
A-168	CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ C(CH ₃) ₂ CH ₂ CN
A-169	CH(CH ₃)CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-170	CH ₂ CH(CH ₃)CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-171	CH ₂ CH ₂ CH ₂ C(CH ₃) ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-172	CH(CH ₃)CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-173	CH ₂ CH(CH ₃)CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-174	CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CN
A-175	CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CN
A-176	CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-177	CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-178	CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-179	CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-180	CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-181	CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-182	CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ C(CH ₃) ₂ CH ₂ CN
A-183	CH(CH ₃)CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN

編號	R ²
A-184	CH ₂ CH(CH ₃)CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-185	CH ₂ CH ₂ CH ₂ C(CH ₃) ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-186	CH(CH ₃)CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-187	CH ₂ CH(CH ₃)CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-188	CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-189	CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ C(CH ₃) ₂ CH ₂ CN
A-190	CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃) ₂ CH ₂ CN
A-191	CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CN
A-192	CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CN
A-193	CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-194	CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-195	CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-196	CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-197	CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-198	CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-199	CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ C(CH ₃) ₂ CH ₂ CN
A-200	CH(CH ₃)CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-201	CH ₂ CH(CH ₃)CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-202	CH ₂ CH ₂ CH ₂ C(CH ₃) ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-203	CH(CH ₃)CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-204	CH ₂ CH(CH ₃)CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-205	CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-206	CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN

編號	R ²
A-207	CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CN
A-208	CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CN
A-209	CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ C(CH ₃)CH ₂ CN
A-210	CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CN
A-211	CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ C(CH ₃) ₂ CH ₂ CN
A-212	CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ C(CH ₃) ₂ CH ₂ CN
A-213	CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-214	CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-215	CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-216	CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-217	CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-218	CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-219	CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ C(CH ₃) ₂ CH ₂ CN
A-220	CH(CH ₃)CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-221	CH ₂ CH(CH ₃)CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-222	CH ₂ CH ₂ CH ₂ C(CH ₃) ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-223	CH(CH ₃)CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-224	CH ₂ CH(CH ₃)CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-225	CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-226	CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-227	CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-228	CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CN
A-229	CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CN

編號	R ²
A-230	CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CN
A-231	CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CN
A-232	CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CN
A-233	CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ C(CH ₃) ₂ CH ₂ CN
A-234	CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-235	CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-236	CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-237	CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-238	CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-239	CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-240	CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-241	CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-242	CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-243	CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CN
A-244	CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CN
A-245	CH(CH ₃)CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-246	CH ₂ CH(CH ₃)CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-247	CH ₂ CH ₂ CH ₂ C(CH ₃) ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-248	CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-249	CH(CH ₃)CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-250	CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-251	CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-252	CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN

編號	R ²
A-253	CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-254	CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CN
A-255	CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CN
A-256	CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CN
A-257	CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CN
A-258	CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ C(CH ₃) ₂ CH ₂ CN

化合物I適合用作殺真菌劑。其特徵為具抵抗廣譜植物病原真菌(尤其是子囊菌綱(Ascomycetes)、半知菌綱(Deuteromycetes)、卵菌綱(Oomycetes)及擔子菌綱(Basidiomycetes)類真菌,且尤其是卵菌綱類真菌)之顯著功效。某些以內吸收方式有效且其可作為葉片殺真菌劑、拌種用殺真菌劑及土壤殺真菌劑用於植物保護中。

其在控制各種栽培作物,例如小麥、黑麥、大麥、燕麥、稻米、玉米、草、香蕉、棉花、大豆、咖啡、甘蔗、葡萄、水果及觀賞性植物,及蔬菜,例如黃瓜、豆類、西紅柿、馬鈴薯及葫蘆,及該等植物之種子上之大量真菌方面特別重要。

它們尤其適用於控制下述植物疾病:

- 水果及蔬菜上的鏈格孢菌(*Alternaria*)類,
- 穀類、稻米及草地上的離蠕孢菌(*Bipolaris*)及內臍蠕孢菌(*Drechslera*)類,
- 谷類上之禾谷白粉病菌(*Blumeria graminis*)(白粉病),
- 草莓、蔬菜、觀賞性植物及葡萄上的灰葡萄孢(*Botrytis*)

cinerea)(灰黴病)，

- 萵苣上的霜黴病菌 (*Bremia lactucae*)
- 葫蘆上的二孢白粉菌 (*Erysiphe cichoracearum*)及蒼耳單絲殼菌 (*Sphaerotheca fuliginea*)，
- 多種植物上的鐮胞菌 (*Fusarium*)及輪枝孢菌 (*Verticillium*)類，
- 穀類、香蕉及花生上的球腔菌 (*Mycosphaerella*)類，
- 甘藍及鱗莖植物上的霜黴菌 (*Peronospora*)類，
- 大豆上的豆薯層鏽菌 (*Phakopsora pachyrhizi*)及層鏽層假尾孢菌 (*P. meibomiae*)，
- 馬鈴薯及西紅柿上的致病疫黴菌 (*Phytophthora infestans*)，
- 胡椒上的辣椒疫黴菌 (*Phytophthora capsici*)，
- 葡萄上的葡萄霜黴病菌 (*Plasmopara viticola*)，
- 蘋果樹上白叉絲單囊殼菌 (*Podosphaera leucotricha*)，
- 小麥及大麥上的卷毛狀假小尾孢菌 (*Pseudocercospora herpotrichoides*)，
- 啤酒花及黃瓜上的假霜黴菌 (*Pseudoperonospora*)類，
- 穀類上的柄鏽菌 (*Puccinia*)類，
- 稻米上的水稻稻瘟病菌 (*Pyricularia oryzae*)，
- 草地上的胡瓜腐黴病菌 (*Pythium aphanidermatum*)，
- 棉花、稻米及草地上的抗絲核菌 (*Rhizoctonia*)類，
- 小麥上的葉枯病 (*Septoria tritici*)及穎枯殼多孢菌 (*Stagonospora nodorum*)，

- 葡萄上的葡萄白粉病(*Uncinula necator*)，
- 谷類及甘蔗上的黑粉菌(*Ustilago*)類，及
- 蘋果樹及梨樹上的黑星病菌(*Venturia*)類(黑星病)。

化合物I特別適於控制卵菌綱類有害真菌，例如，霜黴菌類、疫病菌類、葡萄霜黴病菌及假霜黴菌類。

化合物I亦適於控制諸如擬青黴菌(*Paecilomyces variotii*)等有害真菌來保護材料(例如，木料、紙、塗料分散液、纖維或織物)及保護所儲存產品。

化合物I之施用方式為用在殺真菌上有效量之該等活性化合物處理真菌或欲加以保護使其不受真菌侵襲之植物、種子、材料或土壤。該施用於材料、植物或種子被真菌感染之前或之後皆可實施。

該等殺真菌組合物通常包含按重量計介於0.1%與95%之間且較佳介於0.5%與90%之間之活性化合物。

當用於植物保護時，端視期望效果，所施用量係介於0.01與2.0公斤每公頃之間之活性化合物。

在種子處理中，通常需要活性化合物之量為1至1000克/100公斤種子、較佳為5至100克/100公斤種子。

當用於材料及所儲存產品之保護時，所施用活性化合物之量係端視施用區域類型及期望效果而定。在材料保護中通常施用之量係(例如)0.001克至2公斤、較佳0.005克至1公斤/立方米經處理材料之活性化合物。

化合物I可製成常規調配物，例如，溶液、乳液、懸浮液、粉末、粉劑、膏糊及顆粒。施用形式端視特定預期用

途而定；在任一狀況下，均應確保本發明化合物得到較佳且均勻的分佈。

該等調配物可以一習知方式製備，舉例而言藉由用溶劑及/或載劑來摻雜活性化合物，若需要，可使用乳化劑及分散劑。

合適之溶劑/輔料主要包括：

- 水、芳族溶劑(例如，Solvesso產品、二甲苯)、石蠟(例如礦物油餾分)、醇類(例如甲醇、丁醇、戊醇、苯甲醇)、酮類(例如環己酮、 γ -丁內酯)、吡咯烷酮(NMP、NOP)、乙酸酯(乙二醇二乙酸酯)、乙二醇、脂肪酸二甲基鹽胺類、脂肪酸及脂肪酸酯。原則上，亦可使用溶劑混合物，
- 載劑，例如經研磨之天然礦物質(例如高嶺土、黏土、滑石、白堊)及經研磨之合成礦物質(例如高分散矽石、矽酸鹽)；乳化劑，例如非離子型及陰離子型乳化劑(例如聚環氧乙烯脂肪醇醚、烷基磺酸鹽及芳基磺酸鹽)；及分散劑，例如木質素亞硫酸鹽廢液及甲基纖維素。

適合之表面活性劑係木質素磺酸、萘磺酸、苯酚磺酸、二丁基萘磺酸、烷基芳基磺酸酯、硫酸烷酯、磺酸烷酯、脂族醇硫酸酯、脂肪酸及經硫酸化之脂肪醇乙二醇醚之鹼金屬鹽、鹼土金屬鹽及銨鹽；此外還有：經磺酸化之萘及萘衍生物與甲醛之縮合物；萘或萘磺酸與苯酚及甲醛之縮合物；聚環氧乙烯辛苯基醚、經乙氧基化之異辛基酚、辛基苯酚、壬基苯酚、烷基苯酚聚乙二醇醚、三丁苯基聚乙

二醇醚、三硬脂醯苯基聚乙二醇醚、烷基芳基聚醚醇、醇及脂肪醇/氧乙烯縮合物；乙氧基化之蓖麻油；聚氧乙烯烷基醚；經乙氧基化之聚環氧丙烷；月桂醇聚乙二醇醚縮醛；山梨醇酯；木質素亞硫酸鹽廢液及甲基纖維素。

適於製備可直接噴灑之溶液、乳液、膏糊或油分散液者係具中至高沸點之礦物油餾分，例如，煤油或柴油；以及煤焦油及植物油或動物油；脂肪烴、環烴及芳烴，例如，甲苯、二甲苯、石蠟、四氫化萘、烷基化萘或其衍生物；甲醇、乙醇、丙醇、丁醇、環己醇、環己酮、異佛爾酮；強極性溶劑，例如，二甲基亞砷、N-甲基吡咯烷酮及水。

粉劑，即用於噴施之材料及可撒施產品，可藉由用一固體載劑混合或同時研磨活性物質製備。

顆粒(例如，經塗佈之顆粒、經浸漬之顆粒及均質顆粒)可藉由將活性化合物結合至固體載劑製備。固體載劑之實例係礦物土，例如矽膠、矽酸鹽、雲母、高嶺土、美國活性白土(attaclay)、石灰石、石灰、白堊、紅玄武土、黃土、黏土、白雲石、矽藻土、硫酸鈣、硫酸鎂、氧化鎂、經研磨之合成材料；肥料，例如，硫酸銨、磷酸銨、硝酸銨、尿素類及植物產品，例如，穀類粗粉、樹皮粗粉、木粉及堅果殼粗粉、纖維素粉末及其它固體載劑。

一般言之，調配物包含介於0.01至95重量%間且較佳介於0.1至90重量%間之活性化合物。所用活性化合物之純度介於90%至100%之間，較佳介於95%至100%之間(根據NMR譜)。

【實施方式】

以下為調配物實例：1.用水稀釋的產品

A 水溶性濃縮物(SL)

將10重量份數之本發明化合物溶於水或水溶性溶劑中。作為一替代方案，可添加潤濕劑或其它輔料。用水稀釋時，活性化合物溶解。

B 可分散之濃縮物(DC)

將20重量份數之本發明化合物溶於環己酮中並添加分散劑(例如聚乙炔吡咯烷酮)。用水稀釋獲得一分散液。

C 可乳化之濃縮物(EC)

將15重量份數之本發明化合物溶於二甲苯中並添加十二烷基苯磺酸鈣及乙氧基化蓖麻油(在每一情況下皆係5%)。用水稀釋得到一乳液。

D 乳液(EW、EO)

將40重量份數之本發明化合物溶於二甲苯中並添加十二烷基苯磺酸鈣及乙氧基化蓖麻油(在每一情況下皆係5%)。藉助一乳化機(Ultraturrax)將該混合物引入水中並製成一均質乳液。用水稀釋得到一乳液。

E 懸浮液(SC、OD)

在一攪拌球磨機中，將20重量份數之本發明化合物粉碎並添加分散劑、潤濕劑及水或有機溶劑以獲得高品質活性化合物懸浮液。用水稀釋，獲得該活性化合物之穩定懸浮液。

F 可水分散性顆粒及水溶性顆粒(WG、SG)

將50重量份數之本發明化合物研磨成細粒並添加分散劑及潤濕劑，且藉助技術性裝置(例如，擠壓機、噴霧塔、流化床)製成可水分散性或水溶性顆粒。用水稀釋，獲得該活性化合物之穩定分散液或溶液。

G 可水分散性粉劑及水溶性粉劑(WP、SP)

將75重量份數之本發明化合物於一轉子-定子研磨機中研磨並添加分散劑、潤濕劑及矽膠。用水稀釋，獲得該活性化合物之穩定分散液或溶液。

2. 無需稀釋即可使用的產品

H 可撒施之粉劑(DP)

將5重量份數之本發明化合物研磨成細粉並與95%之微細高嶺土充分混合。由此獲得可撒施產品。

I 顆粒(GR、FG、GG、MG)

將0.5重量份數之本發明化合物研磨成細粒並與95.5%之載劑結合。目前之方法係擠壓、噴霧乾燥或使用流化床。由此獲得無需稀釋即可施用之顆粒。

J ULV溶液(UL)

將10重量份數之本發明化合物溶於一有機溶劑(例如二甲苯)中。由此獲得一無需稀釋即可施用之產品。

該等活性化合物可原樣使用、呈其調配物形式或所製備之使用形式，例如，呈可直接噴灑之溶液、粉劑、懸浮液或分散液、乳液、油分散液、膏糊、可灑施產品、用於撒布之材料或顆粒等形式，活性化合物可藉由噴灑、噴霧、噴撒、撒布或澆注等方式施用。使用方式完全視預期用途

而定；意在確保在任一狀況下本發明之活性化合物皆能得到可能的最佳分佈。

水性使用形式可藉由添加水而自乳液濃縮物、膏糊或可潤濕性粉劑(可噴灑之粉劑、油分散液)來製備。為製備乳液、膏糊或油分散液，呈原狀態或溶於一油或溶劑中之物質可藉由一潤濕劑、增黏劑、分散劑或乳化劑於水中均質化。另外，可製備由活性物質、潤劑濕、增黏劑、分散劑或乳化劑及(若合適)溶劑或油組成之濃縮物，該等濃縮物適於用水稀釋。

即用製劑中活性化合物之濃度可在相當寬廣的範圍內變化。一般言之，其可介於0.0001至10%之間，較佳介於0.01至1%之間。

活性化合物亦可成功地用於超低量方法(ULV)中，藉此有可能施用包含超過95重量%的活性化合物之調配物，或甚至施用不含添加劑之活性化合物。

若適宜，可直至使用(罐混合)前才向活性化合物中添加各種類型之油、潤濕劑、佐劑、除草劑、殺真菌劑、其它殺蟲劑或殺菌劑。該等試劑可以一介於1:10至10:1間之重量比與本發明之試劑混合。

本發明組合物亦可以殺真菌劑之使用形式與其它活性化合物共存，例如，與除草劑、殺蟲劑、生長調節劑、殺真菌劑共存或另外與肥料共存。在許多情況下，將呈殺真菌劑應用形式的化合物I或包含化合物I之組合物與其他殺真菌劑混合會擴展所獲得活性之殺真菌譜。

本發明化合物可與之結合使用的殺真菌劑之以下列表乃欲闡明可能的組合，而非對它們加以限制：

- 醃基丙胺酸類，例如本達樂 (benalaxyl)、滅達樂 (metalaxyl)、呋醃胺 (ofurace) 或惡霜靈 (oxadixyl)，
- 胺衍生物類，例如阿迪嗎啉 (aldimorph)、多寧 (dodine)、嗎菌靈 (dodemorph)、芬普福 (fenpropimorph)、苯鏽啉 (fenpropidin)、雙胍辛胺 (guazatine)、依米諾他定 (iminoctadine)、司拜歐沙明 (spiroxamine) 或三得芬 (tridemorph)，
- 苯胺基嘧啶類，例如嘧黴胺 (pyrimethanil)、嘧菌胺 (mepanipyrim) 或西波定 (cyprodinyl)，
- 抗生素類，例如亞胺環己酮 (cycloheximide)、灰黃黴素 (griseofulvin)、春雷黴素 (kasugamycin)、納他黴素 (natamycin)、多抗黴素 (polyoxin) 或鏈黴素 (streptomycin)，
- 吡咯類，例如白特丹羅 (bitertanol)、溴康唑 (bromoconazole)、環康唑 (cyproconazole)、地芬康唑 (difenoconazole)、二硝基克唑 (dinitroconazole)、安尼康唑 (enilconazole)、環氧康唑 (epoxiconazole)、芬布康唑 (fenbuconazole)、氟喹康唑 (fluquinconazole)、氟矽唑 (flusilazole)、己唑醇 (hexaconazole)、依滅列 (imazalil)、葉菌唑 (metconazole)、麥環丁尼 (myclobutanil)、戊菌唑 (penconazole)、普克利 (propiconazole)、撲克拉 (prochloraz)、撲硫康唑

(prothioconazole)、得克利(tebuconazole)、三唑酮(triadimefon)、三唑醇(triadimenol)、三氟咪唑(triflumizole)或三替康唑(triticonazole),

- 二羧甲醯亞胺類，例如依普同(iprodione)、甲菌利(myclozolin)、朴滅寧(procymidone)或免克寧(vinclozolin),
- 二硫代胺基甲酸酯類，例如富爾幫(ferbam)、鈉幫(nabam)、錳乃浦(maneb)、錳粉克(mancozeb)、美坦(metam)、免得爛(metiram)、甲基鋅乃浦(propineb)、聚胺基甲酸酯(polycarbamate)、得恩地(thiram)、益穗(ziram)或鋅乃浦(zineb),
- 雜環化合物類，例如敵菌靈(anilazine)、免賴得(benomyl)、波斯卡利(boscalid)、多菌靈(carbendazim)、萎鏽靈(carboxin)、氧化萎鏽靈(oxycarboxin)、賽座滅(cyazofamid)、棉隆(dazomet)、氰硫醯(dithianon)、汎惡同(famoxadone)、芬納米同(fenamidone)、芬瑞莫(fenarimol)、夫伯達唑(fuberidazole)、氟托南尼(flutolanil)、夫南麥特(furametpyr)、稻瘟靈(isoprothiolane)、滅普寧(mepronil)、紐阿利莫(nuarimol)、撲殺熱(probenazole)、普喹疊氮(proquinazid)、比利芬羅(pyrifenox)、百快隆(pyroquilon)、奎諾克西芬(quinoxyfen)、矽托凡(silthiofam)、腐絕(thiabendazole)、西福紫麥(thifluzamide)、甲基多保淨

(thiophanate-methyl)、他得寧(tiadinil)、三賽唑(tricyclazole)或賽福寧(triforine)，

- 含銅之殺真菌劑類，例如波爾多液、乙酸銅、氯氧化銅或鹼式硫酸銅，
- 硝基苯衍生物類，例如，百蟎克(binapacryl)、白粉克(dinocap)、大脫蟎(dinobuton)或硝基酞基-異丙基，
- 苯基吡咯類，例如拌種咯(fenpiclonil)或賽普護汰寧(fludioxonil)，
- 硫，
- 其他殺真菌劑，例如S-甲基阿西苯唑(acibenzolar-S-methyl)、本賽夫利卡(benthiavalicarb)、加普胺(carpropamid)、百菌清(chlorothalonil)、賽扶芬納米(cyflufenamid)、西莫生尼(cymoxanil)、大克美秦(diclomezine)、大克賽米(diclocymet)、二乙芬卡(diethofencarb)、護粒松(edifenphos)、衣沙布山(ethaboxam)、環醯菌胺(fenhexamid)、薯瘟錫(fentin acetate)、芬呖尼(fenoxanil)、噁菌脒(ferimzone)、扶吉胺(fluzinam)、亞磷酸、福賽得(fosetyl)、三乙膦酸鋁(fosetyl-aluminum)、顯徽威(iprovalicarb)、六氯苯、美查芬隆(metrafenone)、賓克隆(pencycuron)、普潘莫卡(propamocarb)、熱必斯(phthalide)、脫克松(tolclofos-methyl)、奎脫辛(quintozene)或唑沙麥(zoxamide)，
- 嗜毬果傘素(strobilurin)類，例如腈噁菌酯(azoxystrobin)、二莫西史卓賓(dimoxystrobin)、

enestroburin、氟呋史卓賓 (fluoxastrobin)、克收欣 (kresoxim-methyl)、苯氧菌胺 (metominostrobin)、奧沙菌酯 (orysastrobin)、啖氧菌酯 (picoxystrobin)、百克敏 (pyraclostrobin) 或三氟敏 (trifloxystrobin) ,

- 次磺酸衍生物類，例如蓋它福 (captan)、蓋普丹 (captan)、抑菌靈 (dichlofluanid)、福爾培 (folpet) 或對甲抑菌靈 (tolylfluanid) ,
- 肉桂醯胺及類似化合物類，例如二甲馬夫 (dimethomorph)、氟滅歐 (flumetover) 或氟馬夫。

合成實例

列示於以下合成實例中之製程，經適當調整起始材料後，用於製備其他化合物 I。以此方式製得之化合物及物理數據列示於下表中。

實施例 1：合成 1-甲基-2-氧代辛烷-1-腈

在 -75°C 下，經 1 小時將 100 毫升 15 重量 % 濃度之丁基鋰溶於己烷之溶液添加至一 8.25 克 (0.15 莫耳) 丙腈溶於 200 毫升無水四氫呋喃 (THF) 之溶液中。保持溫度不變並攪拌 2 小時後，經 1 小時逐滴添加入 21.6 克 (0.15 莫耳) 庚酸甲酯。再經 2 小時攪拌後，使溶液經約 14 小時升溫至約 20-25°C。在 5-10°C 下，將 50 毫升水添加至反應混合物中，並用半濃縮的鹽酸調節 pH 值至 1-2。移除有機相，並用水及稀 NaHCO₃ 溶液洗滌直至呈中性。經乾燥後，蒸餾去除溶劑。此可得到 26.0 克標題化合物，為一褐色油。

實例 2：製備 5-己基-6-甲基-7-胺基三唑并嘧啶 [1-2]

在 190°C 下，將一 10.0 克 (60 毫莫耳) 實例 1 之腈、3.8 克 (45 毫莫耳) 3-胺基-1,2,4-三唑及 1.7 克 (9 毫莫耳) 對甲苯磺酸於 50 毫升三甲基苯中之懸浮液在一水分離器中加熱 4 小時。隨後蒸餾去除三甲基苯，並用二氯甲烷/水消化殘餘物。過濾出殘餘物，乾燥並用二氯甲烷/乙酸乙酯於矽膠上層析之。由此得到 0.5 克呈無色晶體形式的標題化合物。

表 1-式 I 化合物

編號	R ¹	R ²	物理數據 (m.p. [°C])
I-1	CH ₃	(CH ₂) ₄ CH ₃	222-223
I-2	CH ₃	(CH ₂) ₅ CH ₃	193-194
I-3	CH ₃	(CH ₂) ₆ CH ₃	182-183
I-4	CH ₃	(CH ₂) ₇ CH ₃	191-192
I-5	CH ₃	(CH ₂) ₈ CH ₃	181-182
I-6	CH ₃	(CH ₂) ₉ CH ₃	187-188
I-7	CH ₂ CH ₃	(CH ₂) ₇ CH ₃	184-185
I-8	CH ₂ CH ₃	(CH ₂) ₈ CH ₃	178-179
I-9	CH ₂ CH ₃	(CH ₂) ₉ CH ₃	180-181
I-10	CH ₂ CH ₂ CH ₃	(CH ₂) ₇ CH ₃	162-163
I-11	CH ₂ CH ₂ CH ₃	(CH ₂) ₈ CH ₃	161-162
I-12	CH ₂ CH ₂ CH ₃	(CH ₂) ₉ CH ₃	151-152
I-13	CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	(CH ₂) ₆ CH ₃	152-156

抗有害真菌作用之實例

式 I 化合物之殺真菌作用藉由以下試驗來驗證：

將該等活性化合物製成一包含 25 毫克活性化合物之儲備

溶液，其係用一丙酮及/或DMSO與乳化劑Uniperol® EL 9(具有乳化及分散作用之潤濕劑，基於經乙氧基化之烷基苯酚)按溶劑：乳化劑為99：1之體積比混合之混合物補足至10毫升。然後用水將該混合物補足至100毫升。用所述溶劑/乳液/水之混合物將此儲備溶液稀釋至下述活性化合物濃度。

用途實例1：抗由致病疫黴菌引起的西紅柿晚疫病之活性，保護性處理

用該等活性化合物之水性懸浮液噴灑盆栽西紅柿植株之葉片至流泄點。次日，用致病疫黴菌之孢子囊水性懸浮液感染該等葉片。然後將該等植株置於一溫度介於18與20℃間的經水蒸汽飽和之室中。6天后，未經處理但已感染的對照植物上之晚疫病已發展至可憑視覺確定感染百分率之程度。

於此測試中，該等已用250 ppm之I-1或I-2化合物處理之植株顯示一至多10%之感染，然而，該等未經處理植株90%受到感染。

用途實例2-抗由葡萄霜黴病菌引起的葡萄霜黴病之活性，5日保護性施用

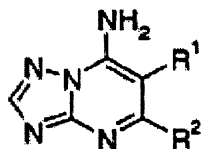
用具有下述活性化合物濃度之水性懸浮液噴灑盆栽葡萄樹之葉片至流泄點。施用5日後，用葡萄霜黴病菌之孢子囊水性懸浮液對葉片下表面實施接種。隨後，先將葡萄樹置於一24℃之經水蒸汽飽和之室中48小時，繼而置於一溫度為20℃至30℃溫室中5天。此後，再次將該等植株置於

一潮濕室中16小時，以促進孢囊柄萌出。然後目測確定葉片下表面之感染發展程度。

於此測試中，該等已用250 ppm之I-1、I-2、I-10或I-13活性化合物處理之植株顯示一至多10%之感染，然而，該等未經處理植株80%受到感染。

五、中文發明摘要：

本發明係關於式I之5,6-二烷基-7-胺基三唑并嘧啶：



其中該等取代基定義如下：

R¹ 係烷基或烷氧基烷基，

R² 係烷基，

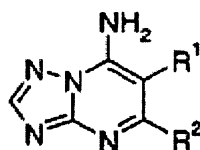
其中 R¹ 及 / 或 R² 可如說明中所定義般經取代；

本發明係關於用於製備該等化合物之方法、包含彼等之組合物及彼等用於控制植物病原有害真菌之用途。

六、英文發明摘要：

十、申請專利範圍：

1. 一種式I之三唑并嘧啶，



其中該等取代基定義如下：

R^1 為 C_1 - C_5 -烷基或 C_1 - C_{10} -烷氧基- C_1 - C_{10} -烷基，

R^2 為 C_5 - C_{12} -烷基，

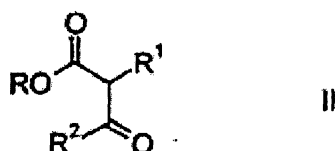
其中 R^1 及 / 或 R^2 可經 1 至 3 個以下基團取代：

氟基、硝基、羥基、 C_3 - C_6 -環烷基、 C_1 - C_6 -烷硫基、
 NR^aR^b ；

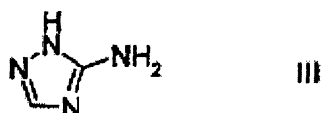
R^a 、 R^b 為氫或 C_1 - C_6 -烷基。

2. 如請求項 1 之式 I 化合物，其中 R^1 及 R^2 係未經取代且共具有至多 14 個碳原子。
3. 如請求項 1 之式 I 化合物，其中 R^1 為甲基、乙基、正丙基、異丙基、正丁基或正戊基，其中該等碳鏈係未經取代或可如請求項 1 經取代。
4. 如請求項 1 之式 I 化合物，其中 R^2 為正庚基、正辛基、正壬基或 1-甲基辛基。
5. 一種下列化合物，
 - 6-甲基-5-戊基-[1,2,4]三唑并[1,5-a]嘧啶-7-基胺；
 - 5-己基-6-甲基-[1,2,4]三唑并[1,5-a]嘧啶-7-基胺；
 - 5-庚基-6-甲基-[1,2,4]三唑并[1,5-a]嘧啶-7-基胺；
 - 6-甲基-5-辛基-[1,2,4]三唑并[1,5-a]嘧啶-7-基胺；

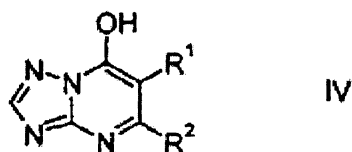
- 6-甲基-5-壬基-[1,2,4]三唑并[1,5-a]嘧啶-7-基胺；
 6-乙基-5-辛基-[1,2,4]三唑并[1,5-a]嘧啶-7-基胺；
 6-乙基-5-壬基-[1,2,4]三唑并[1,5-a]嘧啶-7-基胺；
 5-癸基-6-乙基-[1,2,4]三唑并[1,5-a]嘧啶-7-基胺；
 5-辛基-6-丙基-[1,2,4]三唑并[1,5-a]嘧啶-7-基胺；
 5-壬基-6-丙基-[1,2,4]三唑并[1,5-a]嘧啶-7-基胺；
 5-癸基-6-丙基-[1,2,4]三唑并[1,5-a]嘧啶-7-基胺。
6. 一種用於製備如請求項1至5中任一項之式I化合物之方法，其中使式II之 β -酮酯：



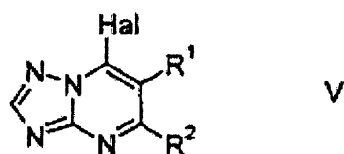
其中R為C₁-C₄-烷基，與式III之3-胺基-1,2,4-三唑反應：



製得式IV之7-羥基三唑并嘧啶：

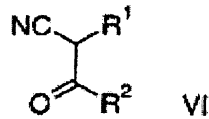


使該7-羥基三唑并嘧啶鹵化以製得式V化合物：



式 V 中，Hal 為氯或溴，並使 V 與氨反應。

7. 一種用於製備如請求項 1 至 5 中任一項之式 I 化合物之方法，其中使式 VI 之醯基氰化物：



與如請求項 6 之式 III 之 3-胺基-1,2,4-三唑反應。

8. 一種殺真菌組合物，其包含一固體或液體載劑及如請求項 1 至 5 中任一項之式 I 化合物。
9. 一種種子，其以每 100 公斤為 1 至 1000 克之量包含如請求項 1 至 5 中任一項之式 I 化合物。
10. 一種用於控制植物病原有害真菌之方法，其中係使用有效量之如請求項 1 至 5 中任一項之式 I 化合物處理該等真菌或欲保護使其免受真菌侵襲之材料、植物、土壤或種子。

七、指定代表圖：

(一)本案指定代表圖為：(無)

(二)本代表圖之元件符號簡單說明：

八、本案若有化學式時，請揭示最能顯示發明特徵的化學式：

