



(12) 发明专利

(10) 授权公告号 CN 103717581 B

(45) 授权公告日 2016.04.06

(21) 申请号 201280038161.9

(22) 申请日 2012.07.30

(30) 优先权数据

11176378.5 2011.08.03 EP

(85) PCT国际申请进入国家阶段日

2014.01.29

(86) PCT国际申请的申请数据

PCT/EP2012/064863 2012.07.30

(87) PCT国际申请的公布数据

W02013/017559 DE 2013.02.07

(73) 专利权人 拜耳知识产权有限责任公司

地址 德国蒙海姆

(72) 发明人 R·布劳恩 S·多纳-瑞平

A·科恩 H·阿伦斯 S·莱尔

A·范阿尔姆西克 I·豪瑟尔-哈恩

H·迪特里希 E·加茨魏勒

I·海涅曼 C·H·罗辛格

(74) 专利代理机构 北京北翔知识产权代理有限公司

公司 11285

代理人 王媛 钟守期

(51) Int. Cl.

C07D 249/14(2006.01)

C07D 257/06(2006.01)

C07D 401/12(2006.01)

A01N 43/713(2006.01)

A01N 43/653(2006.01)

(56) 对比文件

CN 1449247 A, 2003.10.15, 说明书第1-51页.

US 5021081 A, 1991.06.04, 第1-32栏.

US 5266555 A, 1993.11.30, 说明书第1-28栏.

WO 03010143 A1, 2003.02.06, 全文.

WO 03010153 A1, 2003.02.06, 全文.

CN 103282354 A, 2013.09.04, 说明书第[0187]-[0197]、[0311]-[0332]、[0400]-[0404]、[0439]-[0442]段, 权利要求4-13.

刘远雄,等. 除草剂研究开发的新进展与发展趋势.《农药》.2007,第46卷(第10期),第649-652页.

审查员 李小宏

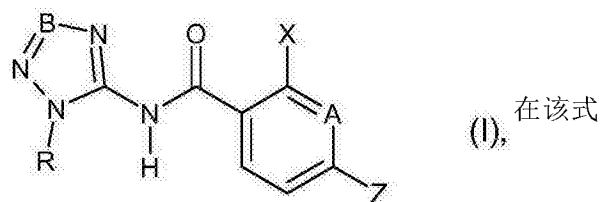
权利要求书3页 说明书54页

(54) 发明名称

N-(四唑-5-基)芳基甲酰胺和N-(三唑-5-基)芳基甲酰胺及其作为除草剂的用途

(57) 摘要

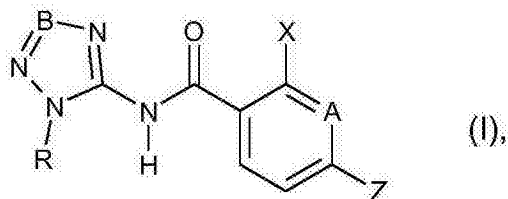
本发明描述了作为除草剂的通式(I)的N-(四唑-5-基)芳基甲酰胺和N-(三唑-5-基)芳基甲酰胺。



(I), 在该式

(I) 中, X、Y、Z 和 R 代表例如氢的基团、例如烷基的有机基团和例如卤素的其他基团。A 和 B 代表 N 和 CY。

1. 式 (I) 的 N-(四唑-5-基)芳基甲酰胺或 N-(三唑-5-基)芳基甲酰胺或其盐



其中

A 代表 N 或 CY,

B 代表 N 或 CH,

X 代表硝基、卤素、 (C_1-C_6) 烷基、 OR^1 、 OSO_2R^2 、 $S(O)_nR^2$ 或 (C_1-C_6) 烷基 $-OR^1$,

Y 代表氢、卤素、 (C_1-C_6) 烷基、 OR^1 、 $S(O)_nR^2$ 、 (C_1-C_6) 烷基 $-OR^1$ 、 $N(R^1)_2$ 、 (C_1-C_6) 烷基-杂环基、杂芳基或杂环基,其中杂环基为含有 3-6 个环原子的饱和、部分饱和或完全不饱和的环状基团,环原子中的 1-4 个原子选自氧、氮和硫,且杂环基带有 n 个氧代基团,以及其中杂芳基为含有 3-6 个环原子的芳环基团,环原子中的 1-4 个原子选自氧、氮和硫,

Z 代表卤素、卤代 $-(C_1-C_6)$ 烷基、 $S(O)_nR^2$ 或杂芳基,其中杂芳基为含有 3-6 个环原子的芳环基团,环原子中的 1-4 个原子选自氧、氮和硫,或

Z 在 Y 代表基团 $S(O)_nR^2$ 时,其还可代表 H 或 (C_1-C_6) 烷基,

R 代表 CH_2R^6 , 或

代表 (C_2-C_6) 烷基,其被 u 个选自 (C_1-C_6) 烷氧基和 Q-苄基的基团取代,

Q 代表 O,

R^1 代表氢、 (C_1-C_6) 烷基、 (C_1-C_6) 卤代烷基、 (C_2-C_6) 烯基、 (C_2-C_6) 炔基、 (C_1-C_6) 烷基 $-O-(C_1-C_6)$ 烷基、 (C_3-C_6) 环烷基 $-(C_1-C_6)$ 烷基、其中最后提及的 6 个基团被 s 个选自卤素、 OR^3 、 $S(O)_nR^4$ 和 $CON(R^3)_2$ 的基团取代,

R^2 代表 (C_1-C_6) 烷基,

R^3 代表 (C_1-C_6) 烷基,

R^4 代表 (C_1-C_6) 烷基,

R^6 代表氰基,

n 代表 0、1 或 2,

s 代表 0、1、2 或 3,

u 代表 1、2、3、4 或 5。

2. 如权利要求 1 所述的 N-(四唑-5-基)芳基甲酰胺或 N-(三唑-5-基)芳基甲酰胺,其中

A 代表 N 或 CY,

B 代表 N 或 CH,

X 代表硝基、卤素、 (C_1-C_6) 烷基、 OR^1 、 OSO_2R^2 、 $S(O)_nR^2$ 或 (C_1-C_6) 烷基 $-OR^1$,

Y 代表氢、卤素、 (C_1-C_6) 烷基、 OR^1 、 $S(O)_nR^2$ 、 $N(R^1)_2$ 、 (C_1-C_6) 烷基 $-OR^1$ 、 (C_1-C_6) 烷基-杂环基、杂芳基或杂环基,其中杂环基为含有 3-6 个环原子的饱和、部分饱和或完全不饱和的环状基团,环原子中的 1-4 个原子选自氧、氮和硫,且杂环基带有 n 个氧代基团,以及其中杂芳基为含有 3-6 个环原子的芳环基团,环原子中的 1-4 个原子选自氧、氮和硫,

Z 代表卤素、卤代 $-(C_1-C_6)$ 烷基、 $S(O)_nR^2$ 或 1, 2, 4- 三唑 -1- 基, 或

Z 在 Y 代表基团 $S(O)_nR^2$ 时, 其还可代表氢或 (C_1-C_6) 烷基,

R 代表 CH_2R^6 , 或

代表 (C_2-C_6) 烷基, 其被 u 个选自 (C_1-C_6) 烷氧基和 Q- 苄基的基团取代,

Q 代表 0,

R^1 代表氢、 (C_1-C_6) 烷基、 (C_2-C_6) 烯基、 (C_2-C_6) 炔基、 (C_3-C_6) 环烷基 $-(C_1-C_6)$ 烷基或 (C_1-C_6) 烷基 $-O-(C_1-C_6)$ 烷基, 其中最后提及的 5 个基团被 s 个选自卤素、 OR^3 、 $S(O)_nR^4$ 和 $CON(R^3)_2$ 的基团取代,

R^2 代表 (C_1-C_6) 烷基,

R^3 代表 (C_1-C_6) 烷基,

R^4 代表 (C_1-C_6) 烷基,

R^6 代表氰基,

n 代表 0、1 或 2,

s 代表 0、1、2 或 3,

u 代表 1、2、3、4 或 5。

3. 如权利要求 1 或 2 所述的 N-(四唑 -5- 基) 芳基甲酰胺或 N-(三唑 -5- 基) 芳基甲酰胺, 其中

A 代表 N 或 CY,

B 代表 N 或 CH,

X 代表硝基、卤素、 (C_1-C_6) 烷基、 OR^1 、 $S(O)_nR^2$ 或 (C_1-C_6) 烷基 $-OR^1$,

Y 代表氢、卤素、 (C_1-C_6) 烷基、 OR^1 、 $S(O)_nR^2$ 、 $N(R^1)_2$ 、 (C_1-C_6) 烷基 $-OR^1$ 、 (C_1-C_6) 烷基 - 杂环基、杂芳基或杂环基, 其中杂环基为含有 3-6 个环原子的饱和、部分饱和或完全不饱和的环状基团, 环原子中的 1-4 个原子选自氧、氮和硫, 且杂环基带有 n 个氧代基团, 以及其中杂芳基为含有 3-6 个环原子的芳环基团, 环原子中的 1-4 个原子选自氧、氮和硫,

Z 代表卤素、卤代 $-(C_1-C_6)$ 烷基、 $S(O)_nR^2$ 或 1, 2, 4- 三唑 -1- 基,

或

Z 在 Y 代表基团 $S(O)_nR^2$ 时, 其还可代表氢或甲基,

R 代表 CH_2R^6 , 或

代表 (C_2-C_6) 烷基, 其被 u 个选自 (C_1-C_6) 烷氧基和 Q- 苄基的基团取代,

Q 为 0,

R^1 代表氢、 (C_1-C_6) 烷基、 (C_2-C_6) 烯基、 (C_2-C_6) 炔基、 (C_3-C_6) 环烷基 $-(C_1-C_6)$ 烷基或 (C_1-C_6) 烷基 $-O-(C_1-C_6)$ 烷基, 其中最后提及的 5 个基团被 s 个选自卤素、 OR^3 、 $S(O)_nR^4$ 和 $CON(R^3)_2$ 的基团取代,

R^2 代表 (C_1-C_6) 烷基,

R^3 代表 (C_1-C_6) 烷基,

R^4 代表 (C_1-C_6) 烷基,

R^6 代表氰基,

n 代表 0、1 或 2,

s 代表 0、1、2 或 3,

u 代表 1、2、3、4 或 5。

4. 一种除草组合物,其特征在于,所述组合物包含除草有效量的权利要求 1-3 任一项所述的至少一种式 (I) 化合物。

5. 如权利要求 4 所述的除草组合物,其为与制剂助剂的混合物。

6. 如权利要求 4 或 5 所述的除草组合物,包含至少一种选自杀昆虫剂、杀螨剂、除草剂、杀真菌剂、安全剂和生长调节剂的其他农药活性化合物。

7. 如权利要求 6 所述的除草组合物,包含安全剂。

8. 如权利要求 7 所述的除草组合物,包含环丙磺酰胺、解毒唑、吡唑解草酯或双苯恶唑酸。

9. 如权利要求 6 所述的除草组合物,包含其他除草剂。

10. 一种用于防治不想要的植物的方法,其特征在于,包括:将有效量的权利要求 1-3 任一项所述的至少一种式 (I) 化合物或权利要求 4 至 9 任一项所述的除草组合物施用于不想要的植物的植株或位点。

11. 如权利要求 1-3 任一项所述的式 (I) 化合物或权利要求 4-9 任一项所述的除草组合物用于防治不想要的植物的用途。

12. 如权利要求 11 所述的用途,其特征在于,将所述式 (I) 化合物用于防治有用植物作物中的不想要的植物。

13. 如权利要求 12 所述的用途,其特征在于,所述有用植物是转基因有用植物。

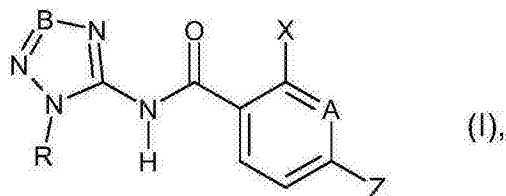
N-(四唑-5-基)芳基甲酰胺和N-(三唑-5-基)芳基甲酰胺及其作为除草剂的用途

[0001] 本发明涉及除草剂技术领域,特别是用于选择性防治有用植物作物中的阔叶杂草和禾本科杂草的除草剂技术领域。

[0002] W02003/010143 和 W02003/010153 公开了 N-(四唑-5-基)苯甲酰胺和 N-(三唑-5-基)苯甲酰胺及其药理学作用。EP101748937——其具有较早的优先权但未在先公开——公开了某些作为除草剂的 N-(四唑-5-基)苯甲酰胺、N-(四唑-5-基)烟酰胺、N-(三唑-5-基)苯甲酰胺和 N-(三唑-5-基)烟酰胺。现已发现,在四唑环或三唑环的 1-位上带有特定取代基的 N-(四唑-5-基)芳基甲酰胺、N-(四唑-5-基)烟酰胺、N-(三唑-5-基)芳基甲酰胺和 N-(三唑-5-基)烟酰胺特别适合作为除草剂。

[0003] 因此,本发明提供式 (I) 的 N-(四唑-5-基)芳基甲酰胺和 N-(三唑-5-基)芳基甲酰胺或其盐

[0004]



[0005] 其中

[0006] A 代表 N 或 CY,

[0007] B 代表 N 或 CH,

[0008] X 代表硝基、卤素、氰基、甲酰基、氰硫基、(C₁-C₆) 烷基、卤代-(C₁-C₆) 烷基、(C₂-C₆) 烯基、卤代-(C₂-C₆) 烯基、(C₂-C₆) 炔基、卤代-(C₃-C₆) 炔基、(C₃-C₆) 环烷基、卤代-(C₃-C₆) 环烷基、(C₃-C₆) 环烷基-(C₁-C₆) 烷基、卤代-(C₃-C₆) 环烷基-(C₁-C₆) 烷基、COR¹、COOR¹、OCOOR¹、NR¹COOR¹、C(O)N(R¹)₂、NR¹C(O)N(R¹)₂、OC(O)N(R¹)₂、C(O)NR¹OR¹、OR¹、OCOR¹、OSO₂R²、S(O)_nR²、SO₂OR¹、SO₂N(R¹)₂、NR¹SO₂R²、NR¹COR¹、(C₁-C₆) 烷基-S(O)_nR²、(C₁-C₆) 烷基-OR¹、(C₁-C₆) 烷基-OCOR¹、(C₁-C₆) 烷基-OSO₂R²、(C₁-C₆) 烷基-CO₂R¹、(C₁-C₆) 烷基-SO₂OR¹、(C₁-C₆) 烷基-CON(R¹)₂、(C₁-C₆) 烷基-SO₂N(R¹)₂、(C₁-C₆) 烷基-NR¹COR¹、(C₁-C₆) 烷基-NR¹SO₂R²、NR¹R₂、P(O)(OR⁵)₂、CH₂P(O)(OR⁵)₂、(C₁-C₆) 烷基-杂芳基、(C₁-C₆) 烷基-杂环基,其中最后提及的两种基团各自被 s 个选自卤素、(C₁-C₆) 烷基、卤代-(C₁-C₆) 烷基、S(O)_n-(C₁-C₆) 烷基、(C₁-C₆) 烷氧基、卤代-(C₁-C₆) 烷氧基的基团取代,且其中杂环基带有 n 个氧代基团,

[0009] Y 代表氢、硝基、卤素、氰基、氰硫基、(C₁-C₆) 烷基、卤代-(C₁-C₆) 烷基、(C₂-C₆) 烯基、卤代-(C₂-C₆) 烯基、(C₂-C₆) 炔基、卤代-(C₂-C₆) 炔基、(C₃-C₆) 环烷基、(C₃-C₆) 环烯基、卤代-(C₃-C₆) 环烷基、(C₃-C₆) 环烷基-(C₁-C₆) 烷基、卤代-(C₃-C₆) 环烷基-(C₁-C₆) 烷基、COR¹、COOR¹、OCOOR¹、NR¹COOR¹、C(O)N(R¹)₂、NR¹C(O)N(R¹)₂、OC(O)N(R¹)₂、CO(NOR¹)R¹、NR¹SO₂R²、NR¹COR¹、OR¹、OSO₂R²、S(O)_nR²、SO₂OR¹、SO₂N(R¹)₂、(C₁-C₆) 烷基-S(O)_nR²、(C₁-C₆) 烷基-OR¹、(C₁-C₆) 烷基-OCOR¹、(C₁-C₆) 烷基-OSO₂R²、(C₁-C₆) 烷基-CO₂R¹、(C₁-C₆) 烷基-CN、(C₁-C₆) 烷基-SO₂OR¹、(C₁-C₆) 烷基-CON(R¹)₂、(C₁-C₆) 烷基-SO₂N(R¹)₂、(C₁-C₆) 烷基-NR¹COR¹、(C₁-C₆)

烷基- $\text{NR}^1\text{SO}_2\text{R}^2$ 、 $\text{N}(\text{R}^1)_2$ 、 $\text{P}(\text{O})(\text{OR}^5)_2$ 、 $\text{CH}_2\text{P}(\text{O})(\text{OR}^5)_2$ 、 (C_1-C_6) 烷基-苯基、 (C_1-C_6) 烷基-杂芳基、 (C_1-C_6) 烷基-杂环基、苯基、杂芳基或杂环基,其中最后提及的 6 个基团各自被 s 个选自卤素、硝基、氰基、 (C_1-C_6) 烷基、卤代- (C_1-C_6) 烷基、 (C_3-C_6) 环烷基、 $\text{S}(\text{O})_n-(\text{C}_1-\text{C}_6)$ 烷基、 (C_1-C_6) 烷氧基、卤代- (C_1-C_6) 烷氧基、 (C_1-C_6) 烷氧基- (C_1-C_4) 烷基和氰甲基的基团取代,且其中杂环基带有 n 个氧代基团,

[0010] Z 代表卤素、氰基、氰硫基、卤代- (C_1-C_6) 烷基、 (C_2-C_6) 烯基、卤代- (C_2-C_6) 烯基、 (C_2-C_6) 炔基、卤代- (C_2-C_6) 炔基、 (C_3-C_6) 环烷基、卤代- (C_3-C_6) 环烷基、 (C_3-C_6) 环烷基- (C_1-C_6) 烷基、卤代- (C_3-C_6) 环烷基- (C_1-C_6) 烷基、 COR^1 、 COOR^1 、 OCOR^1 、 NR^1COOR^1 、 $\text{C}(\text{O})\text{N}(\text{R}^1)_2$ 、 $\text{NR}^1\text{C}(\text{O})\text{N}(\text{R}^1)_2$ 、 $\text{OC}(\text{O})\text{N}(\text{R}^1)_2$ 、 $\text{C}(\text{O})\text{NR}^1\text{OR}^1$ 、 OSO_2R^2 、 $\text{S}(\text{O})_n\text{R}^2$ 、 SO_2OR^1 、 $\text{SO}_2\text{N}(\text{R}^1)_2$ 、 $\text{NR}^1\text{SO}_2\text{R}^2$ 、 NR^1COR^1 、 (C_1-C_6) 烷基- $\text{S}(\text{O})_n\text{R}^2$ 、 (C_1-C_6) 烷基- OR^1 、 (C_1-C_6) 烷基- OCOR^1 、 (C_1-C_6) 烷基- OSO_2R^2 、 (C_1-C_6) 烷基- CO_2R^1 、 (C_1-C_6) 烷基- SO_2OR^1 、 (C_1-C_6) 烷基- $\text{CON}(\text{R}^1)_2$ 、 (C_1-C_6) 烷基- $\text{SO}_2\text{N}(\text{R}^1)_2$ 、 (C_1-C_6) 烷基- NR^1COR^1 、 (C_1-C_6) 烷基- $\text{NR}^1\text{SO}_2\text{R}^2$ 、 $\text{N}(\text{R}^1)_2$ 、 $\text{P}(\text{O})(\text{OR}^5)_2$ 、杂芳基、杂环基或苯基,其中最后提及的 3 个基团各自被 s 个选自卤素、硝基、氰基、 (C_1-C_6) 烷基、卤代- (C_1-C_6) 烷基、 (C_3-C_6) 环烷基、 $\text{S}(\text{O})_n-(\text{C}_1-\text{C}_6)$ 烷基、 (C_1-C_6) 烷氧基和卤代- (C_1-C_6) 烷氧基的基团取代,且其中杂环基带有 n 个氧代基团,或

[0011] Z 在 Y 代表基团 $\text{S}(\text{O})_n\text{R}^2$ 时,其还可代表氢、 (C_1-C_6) 烷基或 (C_1-C_6) 烷氧基,

[0012] R 代表 CH_2R^6 ,

[0013] 被 m 个氧代基团取代的 CH_2 -杂环基,

[0014] 被 t 个 (C_1-C_6) 烷基取代的 (C_3-C_7) 环烷基,

[0015] (C_2-C_6) 烷基、 (C_3-C_7) 环烷基、卤代- (C_2-C_6) 烷基、 (C_2-C_6) 烯基、卤代- (C_2-C_6) 烯基、 (C_2-C_6) 炔基或卤代- (C_2-C_6) 炔基,所述基团各自被 u 个选自硝基、氰基、羟基、氧代、 SiR^5_3 、 $\text{PO}(\text{OR}^5)_2$ 、 $\text{S}(\text{O})_n-(\text{C}_1-\text{C}_6)$ 烷基、 (C_1-C_6) 烷氧基、卤代- (C_1-C_6) 烷氧基、 $\text{N}(\text{R}^3)_2$ 、 COR^3 、 OCOR^3 、 NR^3COR^3 、 $\text{NR}^3\text{SO}_2\text{R}^4$ 、 (C_3-C_6) 环烷基、杂芳基、杂环基、苯基、 Q -杂芳基、 Q -杂环基、 Q -苯基和 Q -苄基的基团取代,其中所述基团 (C_3-C_6) 环烷基、杂芳基、杂环基、苯基、 Q -杂芳基、 Q -杂环基、 Q -苯基和 Q -苄基各自被 s 个选自甲基、乙基、甲氧基、氰基、硝基、三氟甲基和卤素的基团取代,且其中杂环基和环烷基带有 n 个氧代基团,

[0016] Q 代表 O 、 S 或 NR^3 ,

[0017] R^1 代表氢、 (C_1-C_6) 烷基、 (C_1-C_6) 卤代烷基、 (C_2-C_6) 烯基、 (C_2-C_6) 卤代烯基、 (C_2-C_6) 炔基、 (C_2-C_6) 卤代炔基、 (C_3-C_6) 环烷基、 (C_3-C_6) 环烯基、 (C_3-C_6) 卤代环烷基、 (C_1-C_6) 烷基- $O-(\text{C}_1-\text{C}_6)$ 烷基、 (C_3-C_6) 环烷基- (C_1-C_6) 烷基、苯基、苯基- (C_1-C_6) 烷基、杂芳基、 (C_1-C_6) 烷基-杂芳基、杂环基、 (C_1-C_6) 烷基-杂环基、 (C_1-C_6) 烷基- O -杂芳基、 (C_1-C_6) 烷基- O -杂环基、 (C_1-C_6) 烷基- NR^3 -杂芳基、 (C_1-C_6) 烷基- NR^3 -杂环基,其中最后提及的 21 个基团被 s 个选自氰基、卤素、硝基、氰硫基、 OR^3 、 $\text{S}(\text{O})_n\text{R}^4$ 、 $\text{N}(\text{R}^3)_2$ 、 NR^3OR^3 、 COR^3 、 OCOR^3 、 SCOR^4 、 NR^3COR^3 、 $\text{NR}^3\text{SO}_2\text{R}^4$ 、 CO_2R^3 、 COSR^4 、 $\text{CON}(\text{R}^3)_2$ 和 (C_1-C_4) 烷氧基- (C_2-C_6) 烷氧基羰基的基团取代,且其中杂环基带有 n 个氧代基团,

[0018] R^2 代表 (C_1-C_6) 烷基、 (C_1-C_6) 卤代烷基、 (C_2-C_6) 烯基、 (C_2-C_6) 卤代烯基、 (C_2-C_6) 炔基、 (C_2-C_6) 卤代炔基、 (C_3-C_6) 环烷基、 (C_3-C_6) 环烯基、 (C_3-C_6) 卤代环烷基、 (C_1-C_6) 烷基- $O-(\text{C}_1-\text{C}_6)$ 烷基、 (C_3-C_6) 环烷基- (C_1-C_6) 烷基、苯基、苯基- (C_1-C_6) 烷基、杂芳基、 (C_1-C_6) 烷基-杂芳基、杂环基、 (C_1-C_6) 烷基-杂环基、 (C_1-C_6) 烷基- O -杂芳基、 (C_1-C_6) 烷基- O -杂

环基、 (C_1-C_6) 烷基 $-NR^3-$ 杂芳基、 (C_1-C_6) 烷基 $-NR^3-$ 杂环基, 其中最后提及的 21 个基团被 s 个选自氰基、卤素、硝基、氰硫基、 OR^3 、 $S(O)_nR^4$ 、 $N(R^3)_2$ 、 NR^3OR^3 、 COR^3 、 $OCOR^3$ 、 $SCOR^4$ 、 NR^3COR^3 、 $NR^3SO_2R^4$ 、 CO_2R^4 、 $COSR^4$ 、 $CON(R^3)_2$ 和 (C_1-C_4) 烷氧基 $-(C_2-C_6)$ 烷氧基羰基的基团取代, 且其中杂环基带有 n 个氧代基团,

[0019] R^3 代表氢、 (C_1-C_6) 烷基、 (C_2-C_6) 烯基、 (C_2-C_6) 炔基、 (C_3-C_6) 环烷基或 (C_3-C_6) 环烷基 $-(C_1-C_6)$ 烷基,

[0020] R^4 代表 (C_1-C_6) 烷基、 (C_2-C_6) 烯基或 (C_2-C_6) 炔基、 (C_3-C_6) 环烷基或 (C_3-C_6) 环烷基 $-(C_1-C_6)$ 烷基,

[0021] R^5 代表 (C_1-C_4) 烷基,

[0022] R^6 代表 $OCOR^4$ 、 NR^4COOR^4 、 $S(O)_n-(C_1-C_6)$ 烷基、 $S(O)_n-(C_1-C_6)$ 卤代烷基、硝基、氰基、 SiR^5_3 、 $PO(OR^5)_2$ 、杂环基或环烷基, 其中最后提及的 2 个基团带有 m 个氧代基团或羟基,

[0023] m 代表 1 或 2,

[0024] n 代表 0、1 或 2,

[0025] s 代表 0、1、2 或 3,

[0026] t 代表 1、2、3 或 4,

[0027] u 代表 1、2、3、4 或 5。

[0028] 在式 (I) 和所有下式中, 含有大于 2 个碳原子的烷基可为直链或支链的。烷基为, 例如, 甲基、乙基、正丙基或异丙基、正丁基、异丁基、叔丁基或 2-丁基、戊基、己基 (例如正己基、异己基和 1,3-二甲基丁基)。类似地, 烯基为, 例如, 烯丙基、1-甲基丙-2-烯-1-基、2-甲基丙-2-烯-1-基、丁-2-烯-1-基、丁-3-烯-1-基、1-甲基丁-3-烯-1-基和 1-甲基丁-2-烯-1-基。炔基为, 例如, 炔丙基、丁-2-炔-1-基、丁-3-炔-1-基、1-甲基丁-3-炔-1-基。在每种情况下, 多重键可在不饱和基团的任意位置。环烷基为含有 3-6 个碳原子的碳环饱和环系, 例如环丙基、环丁基、环戊基或环己基。类似地, 环烯基为含有 3-6 个碳环原子的单环烯基, 例如环丙烯基、环丁烯基、环戊烯基和环己烯基, 其中双键可在任意位置。

[0029] 卤素代表氟、氯、溴或碘。

[0030] 杂环基为含有 3-6 个环原子的饱和、部分饱和或完全不饱和的环状基团, 环原子中的 1-4 个原子选自氧、氮和硫, 且其还可以稠合至苯环。杂环基为, 例如哌啶基、吡咯烷基、四氢呋喃基、二氢呋喃基和氧杂环丁烷基。杂芳基为含有 3-6 个环原子的芳环基团, 环原子中的 1-4 个原子选自氧、氮和硫, 且其还可稠合至苯环。杂芳基为, 例如, 苯并咪唑-2-基、呋喃基、咪唑基、异噁唑基、异噻唑基、噁唑基、吡嗪基、嘧啶基、哒嗪基、吡啶基、苯并异噁唑基、噻唑基、吡咯基、吡唑基、噻吩基、1,2,3-噁二唑基、1,2,4-噁二唑基、1,2,5-噁二唑基、1,3,4-噁二唑基、1,2,4-三唑基、1,2,3-三唑基、1,2,5-三唑基、1,3,4-三唑基、1,2,4-三唑基、1,2,4-噻二唑基、1,3,4-噻二唑基、1,2,3-噻二唑基、1,2,5-噻二唑基、2H-1,2,3,4-四唑基、1H-1,2,3,4-四唑基、1,2,3,4-噁三唑基、1,2,3,5-噁三唑基、1,2,3,4-噻三唑基和 1,2,3,5-噻三唑基。

[0031] 当一个基团被多个基团取代时, 这意味着这个基团被一个或多个相同或不同的所提及基团的代表所取代。

[0032] 取决于取代基的性质和连接方式, 式 (I) 的化合物可以以立体异构体的形式存

在。如果,例如存在一个或多个不对称取代的碳原子,则可能存在对映异构体和非对映异构体。如果 n 为 1 (亚砷),也可能存在立体异构体。可以从制备所得的混合物中使用常规分离方法例如色谱分离技术获得立体异构体。也可以采用光学活性的起始原料和 / 或助剂,通过使用立体选择性反应来选择性地制备立体异构体。本发明还涉及式 (I) 所涵盖的但并未具体定义的所有立体异构体及其混合物。

[0033] 优选式 (I) 的化合物,其中

[0034] A 代表 N 或 CY,

[0035] B 代表 N 或 CH,

[0036] X 代表硝基、卤素、氰基、氰硫基、 (C_1-C_6) 烷基、卤代 $-(C_1-C_6)$ 烷基、 (C_2-C_6) 烯基、卤代 $-(C_2-C_6)$ 烯基、 (C_2-C_6) 炔基、卤代 $-(C_3-C_6)$ 炔基、 (C_3-C_6) 环烷基、卤代 $-(C_3-C_6)$ 环烷基、 (C_1-C_6) 烷基 $-O-(C_1-C_6)$ 烷基、 (C_3-C_6) 环烷基 $-(C_1-C_6)$ 烷基、卤代 $-(C_3-C_6)$ 环烷基 $-(C_1-C_6)$ 烷基、 COR^1 、 OR^1 、 $OCOR^1$ 、 OSO_2R^2 、 $S(O)_nR^2$ 、 SO_2OR^1 、 $SO_2N(R^1)_2$ 、 $NR^1SO_2R^2$ 、 NR^1COR^1 、 (C_1-C_6) 烷基 $-S(O)_nR^2$ 、 (C_1-C_6) 烷基 $-OR^1$ 、 (C_1-C_6) 烷基 $-OCOR^1$ 、 (C_1-C_6) 烷基 $-OSO_2R^2$ 、 (C_1-C_6) 烷基 $-CO_2R^1$ 、 (C_1-C_6) 烷基 $-SO_2OR^1$ 、 (C_1-C_6) 烷基 $-CON(R^1)_2$ 、 (C_1-C_6) 烷基 $-SO_2N(R^1)_2$ 、 (C_1-C_6) 烷基 $-NR^1COR^1$ 或 (C_1-C_6) 烷基 $-NR^1SO_2R^2$ 、 (C_1-C_6) 烷基 $-$ 杂芳基、 (C_1-C_6) 烷基 $-$ 杂环基,其中最后提及的 2 个基团各自被 s 个选自卤素、 (C_1-C_6) 烷基、卤代 $-(C_1-C_6)$ 烷基、 $S(O)_n-(C_1-C_6)$ 烷基、 (C_1-C_6) 烷氧基、卤代 $-(C_1-C_6)$ 烷氧基的基团取代,且其中杂环基带有 n 个氧代基团,

[0037] Y 代表氢、硝基、卤素、氰基、氰硫基、 (C_1-C_6) 烷基、卤代 $-(C_1-C_6)$ 烷基、 (C_2-C_6) 烯基、卤代 $-(C_2-C_6)$ 烯基、 (C_2-C_6) 炔基、卤代 $-(C_3-C_6)$ 炔基、 (C_3-C_6) 环烷基、 (C_3-C_6) 环烯基、卤代 $-(C_3-C_6)$ 环烷基、 (C_3-C_6) 环烷基 $-(C_1-C_6)$ 烷基、卤代 $-(C_3-C_6)$ 环烷基 $-(C_1-C_6)$ 烷基、 COR^1 、 OR^1 、 $COOR^1$ 、 OSO_2R^2 、 $S(O)_nR^2$ 、 SO_2OR^1 、 $SO_2N(R^1)_2$ 、 $N(R^1)_2$ 、 $NR^1SO_2R^2$ 、 NR^1COR^1 、 (C_1-C_6) 烷基 $-S(O)_nR^2$ 、 (C_1-C_6) 烷基 $-OR^1$ 、 (C_1-C_6) 烷基 $-OCOR^1$ 、 (C_1-C_6) 烷基 $-OSO_2R^2$ 、 (C_1-C_6) 烷基 $-CO_2R^1$ 、 (C_1-C_6) 烷基 $-SO_2OR^1$ 、 (C_1-C_6) 烷基 $-CON(R^1)_2$ 、 (C_1-C_6) 烷基 $-SO_2N(R^1)_2$ 、 (C_1-C_6) 烷基 $-NR^1COR^1$ 、 (C_1-C_6) 烷基 $-NR^1SO_2R^2$ 、 (C_1-C_6) 烷基 $-$ 苯基、 (C_1-C_6) 烷基 $-$ 杂芳基、 (C_1-C_6) 烷基 $-$ 杂环基、苯基、杂芳基或杂环基,其中最后提及的 6 个基团各自被 s 个选自卤素、硝基、氰基、 (C_1-C_6) 烷基、卤代 $-(C_1-C_6)$ 烷基、 (C_3-C_6) 环烷基、 $S(O)_n-(C_1-C_6)$ 烷基、 (C_1-C_6) 烷氧基、卤代 $-(C_1-C_6)$ 烷氧基、 (C_1-C_6) 烷氧基 $-(C_1-C_4)$ 烷基和氰甲基的基团取代,且其中所述杂环基带有 n 个氧代基团,

[0038] Z 代表卤素、氰基、氰硫基、卤代 $-(C_1-C_6)$ 烷基、 (C_2-C_6) 烯基、卤代 $-(C_2-C_6)$ 烯基、 (C_2-C_6) 炔基、卤代 $-(C_3-C_6)$ 炔基、 (C_3-C_6) 环烷基、卤代 $-(C_3-C_6)$ 环烷基、 (C_3-C_6) 环烷基 $-(C_1-C_6)$ 烷基、卤代 $-(C_3-C_6)$ 环烷基 $-(C_1-C_6)$ 烷基、 COR^1 、 $COOR^1$ 、 $C(O)N(R^1)_2$ 、 $C(O)NR^1OR^1$ 、 OSO_2R^2 、 $S(O)_nR^2$ 、 SO_2OR^1 、 $SO_2N(R^1)_2$ 、 $NR^1SO_2R^2$ 、 NR^1COR^1 、 (C_1-C_6) 烷基 $-S(O)_nR^2$ 、 (C_1-C_6) 烷基 $-OR^1$ 、 (C_1-C_6) 烷基 $-OCOR^1$ 、 (C_1-C_6) 烷基 $-OSO_2R^2$ 、 (C_1-C_6) 烷基 $-CO_2R^1$ 、 (C_1-C_6) 烷基 $-SO_2OR^1$ 、 (C_1-C_6) 烷基 $-CON(R^1)_2$ 、 (C_1-C_6) 烷基 $-SO_2N(R^1)_2$ 、 (C_1-C_6) 烷基 $-NR^1COR^1$ 、 (C_1-C_6) 烷基 $-NR^1SO_2R^2$ 、1, 2, 4- 三唑-1-基,或

[0039] Z 在 Y 代表基团 $S(O)_nR^2$ 时,其还可代表氢、 (C_1-C_6) 烷基或 (C_1-C_6) 烷氧基,

[0040] R 代表 CH_2R^6 ,

[0041] 被 m 个氧代基团取代的 CH_2- 杂环基、

[0042] (C_2-C_6) 烷基、 (C_3-C_7) 环烷基、卤代 $-(C_2-C_6)$ 烷基、 (C_2-C_6) 烯基、卤代 $-(C_2-C_6)$ 烯

基、 (C_2-C_6) 炔基或卤代 $-(C_2-C_6)$ 炔基, 所述基团各自被 u 个选自硝基、氰基、羟基、氧代、 SiR^5_3 、 $PO(OR^5)_2$ 、 $S(O)_n$ 、 (C_1-C_6) 烷基、 (C_1-C_6) 烷氧基、卤代 $-(C_1-C_6)$ 烷氧基、 $N(R^3)_2$ 、 COR^3 、 $OCOR^3$ 、 NR^3COR^3 、 $NR^3SO_2R^4$ 、 (C_3-C_6) 环烷基、杂芳基、杂环基、苯基、 Q -杂芳基、 Q -杂环基、 Q -苯基和 Q -苄基的基团取代, 其中所述基团 (C_3-C_6) 环烷基、杂芳基、杂环基、苯基、 Q -杂芳基、 Q -杂环基、 Q -苯基和 Q -苄基各自被 s 个选自甲基、乙基、甲氧基、氰基、硝基、三氟甲基和卤素的取代基取代, 且其中杂环基和环烷基带有 n 个氧代基团,

[0043] Q 代表 O 、 S 或 NR^3 ,

[0044] R^1 代表氢、 (C_1-C_6) 烷基、 (C_2-C_6) 烯基、 (C_2-C_6) 炔基、 (C_3-C_6) 环烷基、 (C_3-C_6) 环烷基 $-(C_1-C_6)$ 烷基、 (C_1-C_6) 烷基 $-O-(C_1-C_6)$ 烷基、苯基、苯基 $-(C_1-C_6)$ 烷基、杂芳基、 (C_1-C_6) 烷基 $-$ 杂芳基、杂环基、 (C_1-C_6) 烷基 $-$ 杂环基、 (C_1-C_6) 烷基 $-O-$ 杂芳基、 (C_1-C_6) 烷基 $-O-$ 杂环基、 (C_1-C_6) 烷基 $-NR^3-$ 杂芳基或 (C_1-C_6) 烷基 $-NR^3-$ 杂环基, 其中最后提及的 16 个基团被 s 个选自氰基、卤素、硝基、 OR^3 、 $S(O)_nR^4$ 、 $N(R^3)_2$ 、 NR^3OR^3 、 COR^3 、 $OCOR^3$ 、 NR^3COR^3 、 $NR^3SO_2R^4$ 、 CO_2R^3 、 $CON(R^3)_2$ 和 (C_1-C_4) 烷氧基 $-(C_2-C_6)$ 烷氧基羰基的基团取代, 且其中杂环基带有 n 个氧代基团,

[0045] R^2 代表 (C_1-C_6) 烷基、 (C_2-C_6) 烯基、 (C_2-C_6) 炔基、 (C_3-C_6) 环烷基、 (C_3-C_6) 环烷基 $-(C_1-C_6)$ 烷基、 (C_1-C_6) 烷基 $-O-(C_1-C_6)$ 烷基、苯基、苯基 $-(C_1-C_6)$ 烷基、杂芳基、 (C_1-C_6) 烷基 $-$ 杂芳基、杂环基、 (C_1-C_6) 烷基 $-$ 杂环基、 (C_1-C_6) 烷基 $-O-$ 杂芳基、 (C_1-C_6) 烷基 $-O-$ 杂环基、 (C_1-C_6) 烷基 $-NR^3-$ 杂芳基或 (C_1-C_6) 烷基 $-NR^3-$ 杂环基, 其中这些基团被 s 个选自氰基、卤素、硝基、 OR^3 、 $S(O)_nR^4$ 、 $N(R^3)_2$ 、 NR^3OR^3 、 $NR^3SO_2R^4$ 、 COR^3 、 $OCOR^3$ 、 NR^3COR^3 、 CO_2R^3 、 $CON(R^3)_2$ 和 (C_1-C_4) 烷氧基 $-(C_2-C_6)$ 烷氧基羰基的基团取代, 且其中杂环基带有 n 个氧代基团,

[0046] R^3 代表氢、 (C_1-C_6) 烷基、 (C_2-C_6) 烯基、 (C_2-C_6) 炔基、 (C_3-C_6) 环烷基或 (C_3-C_6) 环烷基 $-(C_1-C_6)$ 烷基,

[0047] R^4 代表 (C_1-C_6) 烷基、 (C_2-C_6) 烯基或 (C_2-C_6) 炔基,

[0048] R^5 代表甲基或乙基,

[0049] R^6 代表 $OCOOR^4$ 、 NR^4COOR^4 、 $S(O)_n$ 、 (C_1-C_6) 烷基、 $S(O)_n$ 、 (C_1-C_6) 卤代烷基、硝基、氰基、 SiR^5_3 、 $PO(OR^5)_2$ 或带有 m 个氧代基团的杂环基,

[0050] m 代表 1 或 2,

[0051] n 代表 0、1 或 2,

[0052] s 代表 0、1、2 或 3,

[0053] u 代表 1、2、3、4 或 5。

[0054] 特别优选式 (I) 的化合物, 其中

[0055] A 代表 N 或 CY ,

[0056] B 代表 N 或 CH ,

[0057] X 代表硝基、卤素、氰基、 (C_1-C_6) 烷基、卤代 $-(C_1-C_6)$ 烷基、 (C_3-C_6) 环烷基、 OR^1 、 $S(O)_nR^2$ 、 (C_1-C_6) 烷基 $-S(O)_nR^2$ 、 (C_1-C_6) 烷基 $-OR^1$ 、 (C_1-C_6) 烷基 $-CON(R^1)_2$ 、 (C_1-C_6) 烷基 $-SO_2N(R^1)_2$ 、 (C_1-C_6) 烷基 $-NR^1COR^1$ 、 (C_1-C_6) 烷基 $-NR^1SO_2R^2$ 、 (C_1-C_6) 烷基 $-$ 杂芳基、 (C_1-C_6) 烷基 $-$ 杂环基, 其中最后提及的 2 个基团各自被 s 个选自卤素、 (C_1-C_6) 烷基、卤代 $-(C_1-C_6)$ 烷基、 $S(O)_n$ 、 (C_1-C_6) 烷基、 (C_1-C_6) 烷氧基、卤代 $-(C_1-C_6)$ 烷氧基的基团取代, 且其中杂环基带有 n 个氧代基团,

[0058] Y 代表氢、硝基、卤素、氰基、 (C_1-C_6) 烷基、 (C_1-C_6) 卤代烷基、 OR^1 、 $S(O)_nR^2$ 、 $SO_2N(R^1)_2$ 、 $N(R^1)_2$ 、 $NR^1SO_2R^2$ 、 NR^1COR^1 、 (C_1-C_6) 烷基 $-S(O)_nR^2$ 、 (C_1-C_6) 烷基 $-OR^1$ 、 (C_1-C_6) 烷基 $-CON(R^1)_2$ 、 (C_1-C_6) 烷基 $-SO_2N(R^1)_2$ 、 (C_1-C_6) 烷基 $-NR^1COR^1$ 、 (C_1-C_6) 烷基 $-NR^1SO_2R^2$ 、 (C_1-C_6) 烷基-苯基、 (C_1-C_6) 烷基-杂芳基、 (C_1-C_6) 烷基-杂环基、苯基、杂芳基或杂环基，其中最后提及的 6 个基团各自被 s 个选自卤素、硝基、氰基、 (C_1-C_6) 烷基、卤代- (C_1-C_6) 烷基、 (C_3-C_6) 环烷基、 $S(O)_n-(C_1-C_6)$ 烷基、 (C_1-C_6) 烷氧基、卤代- (C_1-C_6) 烷氧基、 (C_1-C_6) 烷氧基- (C_1-C_4) 烷基和氰甲基的基团取代，且其中杂环基带有 n 个氧代基团，

[0059] Z 代表卤素、氰基、卤代- (C_1-C_6) 烷基、 (C_3-C_6) 环烷基、 $S(O)_nR^2$ 、1,2,4-三唑-1-基，或在 Y 代表基团 $S(O)_nR^2$ 时，Z 还可代表氢、甲基、甲氧基或乙氧基，

[0060] R 代表 CH_2R^6 ，

[0061] CH_2- 杂环基，其中杂环基带有 m 个氧代基团，

[0062] (C_2-C_6) 烷基、 (C_3-C_7) 环烷基、卤代- (C_2-C_6) 烷基、 (C_2-C_6) 烯基、卤代- (C_2-C_6) 烯基、 (C_2-C_6) 炔基或卤代- (C_2-C_6) 炔基，所述基团各自被 u 个选自硝基、氰基、羟基、氧代、 SiR^5_3 、 $PO(OR^5)_2$ 、 $S(O)_n-(C_1-C_6)$ 烷基、 (C_1-C_6) 烷氧基、卤代- (C_1-C_6) 烷氧基、 $N(R^3)_2$ 、 COR^3 、 $OCOR^3$ 、 NR^3COR^3 、 $NR^3SO_2R^4$ 、 (C_3-C_6) 环烷基、杂芳基、杂环基、苯基、Q-杂芳基、Q-杂环基、Q-苯基和 Q-苄基的基团取代，其中所述基团 (C_3-C_6) 环烷基、杂芳基、杂环基、苯基、Q-杂芳基、Q-杂环基、Q-苯基和 Q-苄基各自被 s 个选自甲基、乙基、甲氧基、氰基、硝基、三氟甲基和卤素的基团取代，且其中杂环基和环烷基带有 n 个氧代基团，

[0063] Q 代表 O、S 或 NR^3 ，

[0064] R^1 代表氢、 (C_1-C_6) 烷基、 (C_2-C_6) 烯基、 (C_2-C_6) 炔基、 (C_3-C_6) 环烷基、 (C_3-C_6) 环烷基- (C_1-C_6) 烷基、 (C_1-C_6) 烷基- $O-(C_1-C_6)$ 烷基、苯基、苯基- (C_1-C_6) 烷基、杂芳基、 (C_1-C_6) 烷基-杂芳基、杂环基、 (C_1-C_6) 烷基-杂环基、 (C_1-C_6) 烷基- $O-$ 杂芳基、 (C_1-C_6) 烷基- $O-$ 杂环基、 (C_1-C_6) 烷基- NR^3- 杂芳基或 (C_1-C_6) 烷基- NR^3- 杂环基，其中最后提及的 16 个基团被 s 个选自氰基、卤素、硝基、 OR^3 、 $S(O)_nR^4$ 、 $N(R^3)_2$ 、 NR^3OR^3 、 COR^3 、 $OCOR^3$ 、 NR^3COR^3 、 $NR^3SO_2R^4$ 、 CO_2R^3 、 $CON(R^3)_2$ 和 (C_1-C_4) 烷氧基- (C_2-C_6) 烷氧基羰基的基团取代，且其中杂环基带有 n 个氧代基团，

[0065] R^2 代表 (C_1-C_6) 烷基、 (C_3-C_6) 环烷基或 (C_3-C_6) 环烷基- (C_1-C_6) 烷基，其中以上提及的 3 个基团各自被 s 个选自卤素和 OR^3 的基团取代，

[0066] R^3 代表氢或 (C_1-C_6) 烷基，

[0067] R^4 代表 (C_1-C_6) 烷基，

[0068] R^5 代表甲基或乙基，

[0069] R^6 代表 $OCOR^4$ 、 NR^4COOR^4 、 $S(O)_n-(C_1-C_6)$ 烷基、 $S(O)_n-(C_1-C_6)$ 卤代烷基、硝基、氰基、 SiR^5_3 、 $PO(OR^5)_2$ ，

[0070] m 代表 1 或 2，

[0071] n 代表 0、1 或 2，

[0072] s 代表 0、1、2 或 3，

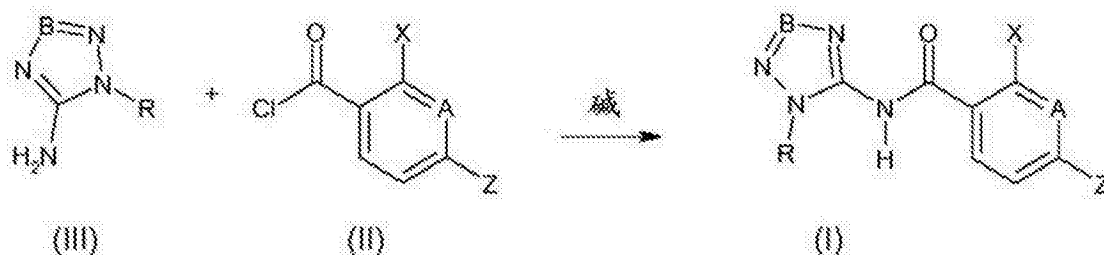
[0073] u 代表 1、2、3、4 或 5。

[0074] 在所有如下给出的式中，除另有定义外，取代基和符号具有如式 (I) 所描述的相同的含义。

[0075] 本发明的化合物可例如通过方案 1 给出的方法由苯甲酰氯 (II) 与 5-氨基-1H-1,2,4-三唑或 5-氨基-1H-四唑 (III) 的碱催化反应而制备:

[0076] 方案 1

[0077]

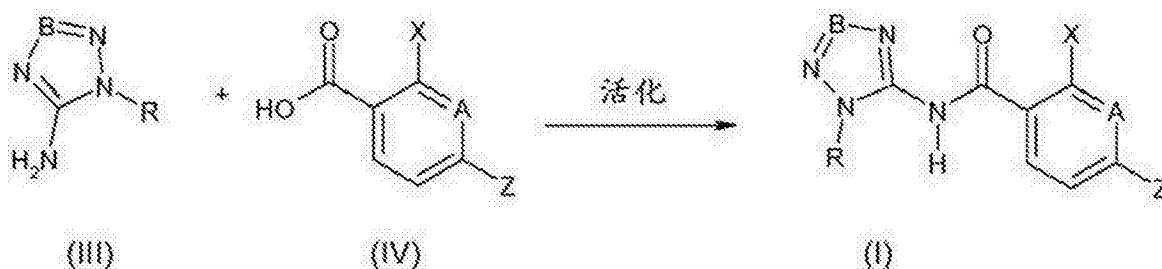


[0078] 式 (II) 的苯甲酰氯或其所基于的苯甲酸为原则上已知的且可例如根据 US6, 376, 429B1、EP1585742A1 和 EP1202978A1 中描述的方法制备。

[0079] 本发明的化合物还可通过方案 2 给出的方法通过使式 (IV) 苯甲酸与 5-氨基-1H-1,2,4-三唑或 5-氨基-1H-四唑 (III) 反应而制备:

[0080] 方案 2

[0081]

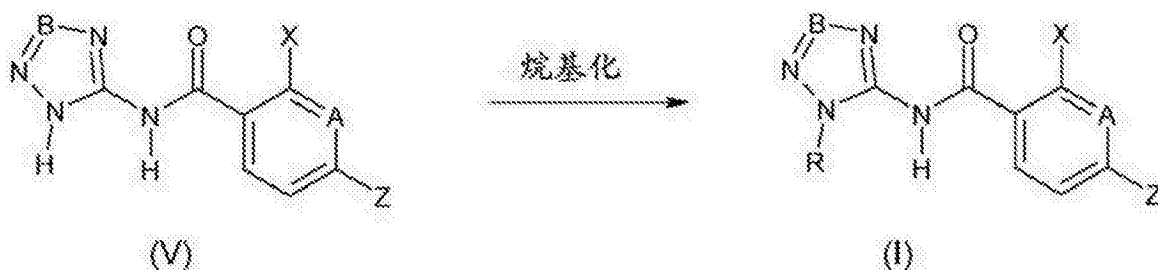


[0082] 对于活化反应,可使用通常用于酰胺化反应的脱水剂,例如 1,1'-羰基二咪唑 (CDI)、二环己基碳二亚胺 (DCC)、2,4,6-三丙基-1,3,5,2,4,6-三氧杂三磷杂环己烷 2,4,6-三氧化物 (T3P) 等。

[0083] 本发明的化合物还可通过方案 3 给出的方法通过使 N-(1H-1,2,4-三唑-5-基)苯甲酰胺、N-(1H-四唑-5-基)苯甲酰胺、N-(1H-1,2,4-三唑-5-基)烟酰胺或 N-(1H-四唑-5-基)烟酰胺反应而制备:

[0084] 方案 3

[0085]



[0086] 对于方案 3 给出的反应,可在碱的存在下使用例如烷基化剂如烷基卤化物、烷基磺酸盐或二烷基硫酸盐。

[0087] 改变反应步骤的顺序可能是有利的。因此,带有亚砷的苯甲酸不能直接转化为其酰氯。本文中,适当地,在硫醚阶段,首先制备出酰胺然后使该硫醚氧化为亚砷。

[0088] 可以类似于从文献中已知的方法制备式 (III) 的 5-氨基-1H-四唑。例如,可根据 Journal of the American Chemical Society(1954),76,923-924 中描述的方法由氨基四唑制备 5-氨基-1-R-四唑:

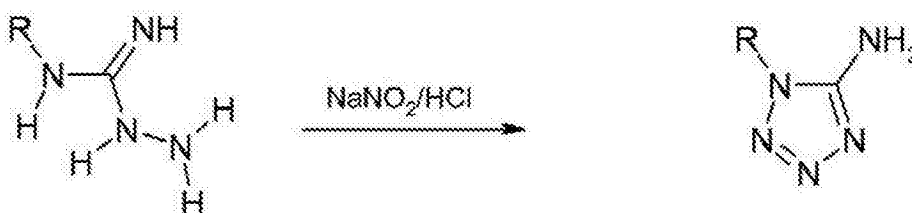
[0089]



[0090] 在以上提及的式中, R 代表例如烷基。

[0091] 可例如如 Journal of the American Chemical Society(1954)76,88-89 所述合成 5-氨基-1-R-四唑:

[0092]



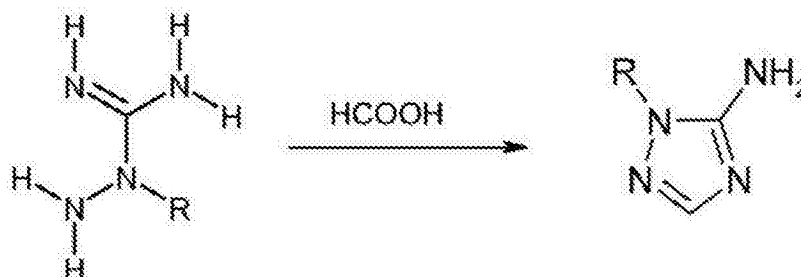
[0093] 可以类似于从文献已知的方法制备式 (III) 的 5-氨基-1H-三唑。例如,可根据 Zeitschrift für Chemie(1990),30(12),436-437 中描述的方法由氨基三唑制备 5-氨基-1-R-三唑:

[0094]



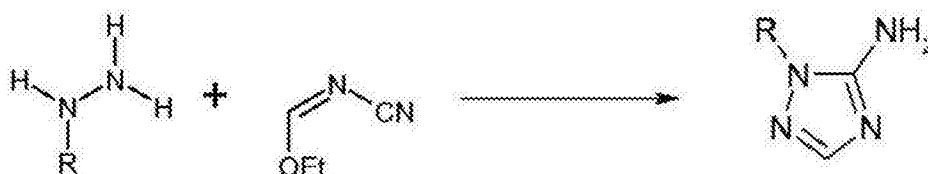
[0095] 还可如 Chemische Berichte(1964),97(2),396-404 所述合成 5-氨基-1-R-三唑:

[0096]



[0097] 还可如 Angewandte Chemie(1963),75,918 所述合成 5-氨基-1-R-三唑:

[0098]



[0099] 可以通过上述反应合成的式 (I) 化合物和 / 或其盐的集合也可以以并行的方式制备,为此可以手动、半自动或全自动方式进行。在这一方面,可以例如使反应过程、后处理或产物和 / 或中间体的纯化自动化。总而言之,这应理解为意指例如由 D.Tiebes 在 Combinatorial Chemistry-Synthesis, Analysis, Screening(editor Günther Jung), Verlag Wiley 1999, on pages 1-34 中所描述的过程。

[0100] 对于并行的反应过程和后处理,可使用一系列市售仪器,例如购自 Barnstead International, Dubuque, Iowa 52004-0797, USA 的 Calpyso 反应模块,或购自 Radleys, Shirehill, Saffron Walden, Essex, CB113AZ, England 的反应站,或购自 Perkin Elmer, Waltham, Massachusetts 02451, USA 的多探针 (MultiPROBE) 自动化工作站。对于通式 (I) 的化合物及其盐或制备过程中产生的中间体的并行纯化,尤其可以使用购自 ISCO, Inc., 4700 Superior Street, Lincoln, NE 68504, USA 的色谱装置。

[0101] 所列装置可进行模块化操作,其中各个单独的方法步骤自动进行,但是在各方法步骤之间必须进行手动操作。这可通过使用半集成或全集成自动化系统——其中各自动化模块由例如机器人操控——而避免。这种自动化系统可购自例如 Caliper, Hopkinton, MA 01748, USA。

[0102] 单个或多个合成步骤的实施可通过使用聚合物负载试剂 / 清除树脂 (scavenger resin) 来支持。专业文献描述了一系列实验方案,例如在 ChemFiles, Vol. 4, No. 1, Polymer-Supported Scavengers and Reagents for Solution-Phase Synthesis (Sigma-Aldrich) 中描述的。

[0103] 除了本文所述的方法之外,通式 (I) 的化合物及其盐的制备可以完全或部分地通过固相负载法进行。为此,将所述合成或适用于相应方法的合成中的单独中间体或全部中间体结合至合成树脂上。固相负载合成法在专业文献中进行了充分描述,例如 Barry A. Bunin 在 “The Combinatorial Index”, Verlag Academic Press, 1998 和 Combinatorial Chemistry-Synthesis, Analysis, Screening(editor Günther Jung), Verlag Wiley, 1999 中描述的。使用固相负载合成法可以实施文献中已知的一系列方案,这些方案也可以手动或以自动的方式进行。所述反应可以例如使用 IRORI 技术在购自 Nexus Biosystems, 12140 Community Road, Poway, CA 92064, USA 的微反应器中进行。

[0104] 在固相上和在液相中进行单个或多个合成步骤可通过使用微波技术进行支持。专业文献中描述了一系列实验方案,例如在 Microwaves in Organic and Medicinal Chemistry(editor C. O. Kappe and A. Stadler), Verlag Wiley, 2005 中。

[0105] 根据本文所述方法的制备产生物质集合形式的式 (I) 化合物及其盐,所述物质集合称为库 (library)。本发明还提供包括至少两种式 (I) 化合物及其盐的库。

[0106] 本发明的式 (I) 化合物 (和 / 或其盐) 在下文中也统称为“本发明的化合物”,其对广谱的经济上重要的单子叶和双子叶一年生有害植物具有优异的除草效力。所述活性化合物甚至有效地作用于从根茎、根状茎和其他多年生器官中发芽且难以防治的多年生有害杂草。

[0107] 因此,本发明还涉及防治不需要的植物或用于调节植物的生长 (优选用于作物植物中) 的方法,其中将本发明的一种或多种化合物施用于植物 (例如有害植物,例如单子叶或双子叶杂草或不需要的作物植物)、施用于种子 (例如谷物、种子或无性繁殖体如块茎或

带芽的幼枝部位)或施用于植物生长的区域(例如耕种区域)。在该上下文中,本发明化合物可以例如在播种前(如果合适,也可以混入土壤中)、发芽前或发芽后施用。可提及一些可通过本发明的化合物防治的单子叶和双子叶杂草群的代表作为具体实例,而以下的列举并不限定于特定物种。

[0108] 以下属的单子叶有害植物:山羊草属(Aegilops)、冰草属(Agropyron)、剪股颖属(Agrostis)、看麦娘属(Alopecurus)、Apera 属、燕麦属(Avena)、臂形草属(Brachiaria)、雀麦属(Bromus)、蒺藜草属(Cenchrus)、鸭跖草属(Commelina)、狗牙根属(Cynodon)、莎草属(Cyperus)、龙爪茅属(Dactyloctenium)、马唐属(Digitaria)、稗属(Echinochloa)、荸荠属(Eleocharis)、蟋蟀草属(Eleusine)、画眉草属(Eragrostis)、野黍属(Eriochloa)、羊茅属(Festuca)、飘拂草属(Fimbristylis)、异蕊花属(Heteranthera)、白茅属(Imperata)、鸭嘴草属(Ischaemum)、千金子属(Leptochloa)、黑麦草属(Lolium)、雨久花属(Monochoria)、黍属(Panicum)、雀稗属(Paspalum)、藨草属(Phalaris)、梯牧草属(Phleum)、早熟禾属(Poa)、筒轴茅属(Rottboellia)、慈姑属(Sagittaria)、莞草属(Scirpus)、狗尾草属(Setaria)、高粱属(Sorghum)。

[0109] 以下属的双子叶杂草:苘麻属(Abutilon)、苋属(Amaranthus)、豚草属(Ambrosia)、Anoda 属、春黄菊属(Anthemis)、Aphanes 属、艾属(Artemisia)、滨藜属(Atriplex)、雏菊属(Bellis)、鬼针属(Bidens)、芥属(Capsella)、飞廉属(Carduus)、决明属(Cassia)、矢车菊属(Centaurea)、藜属(Chenopodium)、蓟属(Cirsium)、旋花属(Convolvulus)、曼陀罗属(Datura)、山蚂蝗属(Desmodium)、刺酸模属(Emex)、糖芥属(Erysimum)、大戟属(Euphorbia)、鼬瓣花属(Galeopsis)、牛膝菊属(Galinsoga)、猪殃殃属(Galium)、芙蓉属(Hibiscus)、番薯属(Ipomoea)、地肤属(Kochia)、野芝麻属(Lamium)、独行菜属(Lepidium)、母草属(Lindernia)、母菊属(Matricaria)、薄荷属(Mentha)、山黧属(Mercurialis)、Mullugo 属、勿忘我属(Myosotis)、罂粟属(Papaver)、牵牛属(Pharbitis)、车前属(Plantago)、蓼属(Polygonum)、马齿苋属(Portulaca)、毛茛属(Ranunculus)、萝卜属(Raphanus)、蔊菜属(Rorippa)、节节菜属(Rotala)、酸模属(Rumex)、猪毛菜属(Salsola)、千里光属(Senecio)、田菁属(Sesbania)、黄花稔属(Sida)、白芥属(Sinapis)、茄属(Solanum)、苦苣菜属(Sonchus)、尖瓣花属(Sphenoclea)、繁缕属(Stellaria)、蒲公英属(Taraxacum)、蔊蓂属(Thlaspi)、车轴草属(Trifolium)、荨麻属(Urtica)、婆婆纳属(Veronica)、堇菜属(Viola)、苍耳属(Xanthium)。

[0110] 如果在发芽前将本发明的化合物施用至土壤,则完全阻止杂草幼苗的发芽,或者使得杂草幼苗生长至达到子叶期,但之后它们停止生长,并最终在三至四周后完全死亡。

[0111] 如果在发芽后将所述活性化合物施用至植物的绿色部位,则在处理后生长停止,并且有害植物停留在施用时间点的生长阶段,或者其在一段时间后完全死亡,从而以这种方式在非常早的时期并以持续的方式消除对作物植物有害的杂草带来的竞争。

[0112] 尽管本发明的化合物表现出出色的对单子叶和双子叶杂草的除草活性,但是经济上重要的作物中的作物植物仅受到微小程度的损害,或者完全不受到损害,这取决于本发明各化合物的结构和其施用率,所述经济上重要的作物中的作物植物例如以下属的双子叶作物:花生属(Arachis)、甜菜属(Beta)、芸苔属(Brassica)、黄瓜属(Cucumis)、南瓜属(Cucurbita)、向日葵属(Helianthus)、胡萝卜属(Daucus)、大豆属

(Glycine)、棉属 (Gossypium)、番薯属 (Ipomoea)、莴苣属 (Lactuca)、亚麻属 (Linum)、番茄属 (Lycopersicon)、烟草属 (Nicotiana)、菜豆属 (Phaseolus)、豌豆属 (Pisum)、茄属 (Solanum)、蚕豆属 (Vicia), 或以下属的单子叶作物: 葱属 (Allium)、凤梨属 (Ananas)、天门冬属 (Asparagus)、燕麦属 (Avena)、大麦属 (Hordeum)、稻属 (Oryza)、黍属 (Panicum)、甘蔗属 (Saccharum)、黑麦属 (Secale)、高粱属 (Sorghum)、小黑麦属 (Triticale)、小麦属 (Triticum)、玉蜀黍属 (Zea), 特别是玉蜀黍属和小麦属。这就是为什么本发明化合物极适用于在作物植物例如农业有用植物或观赏植物中选择性防治不想要的植物生长的原因。

[0113] 此外, 本发明的化合物 (取决于它们各自的结构和施用的施用率) 在作物植物中具有出色的生长调节性能。它们以调节的方式参与植物的新陈代谢, 并且因此可以用于以靶向方式影响植物的成分, 以及用于促进采收, 例如通过引发脱水和使植株矮小生长。此外, 它们通常也适用于防治和抑制不想要的营养生长而在此过程中不破坏植物。据此, 抑制营养生长由于例如可以减少或完全防止倒伏而在许多单子叶和双子叶作物中起到非常重要的作用。

[0114] 由于它们的除草活性和植物生长调节活性, 所述活性化合物也可用于防治转基因植物作物中或通过常规诱变而改性的植物作物中的有害植物。一般地, 转基因植物特征在于具有一些特别有利的性质, 例如对某些农药的抗性, 主要是对于某些除草剂的抗性, 对于植物病害或植物病害的致病微生物——例如某些昆虫或微生物, 例如真菌、细菌或病毒——的抗性。其他特定性质涉及到例如采收物的产量、质量、储存性、组成和特定成分。因此, 淀粉含量增加、或淀粉品质改变, 或者是在采收物中具有不同的脂肪酸组成的转基因植物是已知的。

[0115] 关于转基因作物, 优选在经济上重要的有用植物和观赏性植物的转基因作物中使用本发明的化合物, 所述作物例如谷物, 例如小麦、大麦、黑麦、燕麦、黍、稻和玉米, 或者甜菜、棉花、大豆、油菜、马铃薯、番茄、豌豆以及其他蔬菜的作物。优选将本发明的化合物作为除草剂用在对除草剂的植物毒性作用具有抗性或已通过重组方式产生抗性的有用植物作物中。

[0116] 优选在经济上重要的有用植物和观赏性植物的转基因作物中使用本发明的化合物或其盐, 所述作物例如谷物, 例如小麦、大麦、黑麦、燕麦、黍、稻、木薯和玉米, 或者甜菜、棉花、大豆、油菜、马铃薯、番茄、豌豆以及其他蔬菜的作物。优选将本发明的化合物作为除草剂用在对除草剂的植物毒性作用具有抗性或已通过重组方式产生抗性的有用植物作物中。

[0117] 与已有植物相比, 产生具有改进特性的新植物的常规方法包括例如常规育种方法和突变体产生法。或者, 具有改进特性的新植物可借助重组方法培育 (参见例如, EP-A-0221044、EP-A-0131624)。例如, 在一些方案中描述了以下方法:

[0118] - 通过重组技术修饰作物植物, 目的是对植物中合成的淀粉进行改性 (例如 W092/11376、W092/14827、W091/19806),

[0119] - 对草铵磷 (glufosinate) 类 (参见例如 EP-A-0242236、EP-A-242246) 或草甘膦 (glyphosate) 类 (W092/00377) 或磺酰脲类 (EP-A-0257993、US-A-5013659) 的某些除草剂具有抗性的转基因作物植物,

[0120] - 能产生苏云金杆菌毒素 (Bt 毒素) 的转基因作物植物 (例如棉花), 其使植物对

某些害虫具有抗性 (EP-A-0142924、EP-A-0193259),

[0121] - 具有改变的脂肪酸组成的转基因作物植物 (W091/13972),

[0122] - 具有新成分或次级代谢产物 (例如新型植物抗毒素, 其能够带来增强的抗病能力) 的基因修饰作物植物 (EPA309862、EPA0464461),

[0123] - 具有减少的光呼吸的基因修饰植物, 其具有更高产量和更高胁迫耐受性的特性 (EPA0305398),

[0124] - 生产药理学上或诊断学上重要的蛋白质的转基因作物植物 (“分子药用”).

[0125] - 特征在于更高产量或更好品质的转基因作物,

[0126] - 特征在于例如上述新的特性的结合 (“基因叠加”) 的转基因作物。

[0127] 许多借助其能够产生具有改进性能的新型转基因植物的分子生物技术原则上是已知的; 参见例如 I. Potrykus and G. Spangenberg (eds.) *Gene Transfer to Plants*, Springer Lab Manual (1995), Springer Verlag Berlin, Heidelberg. 或者 Christou, “Trends in Plant Science” 1 (1996) 423-431。

[0128] 为了实施这种重组操作, 可以将能够产生突变或通过重组 DNA 序列产生序列改变的核酸分子引入质粒。借助于标准方法, 可以例如进行碱基取代、可以移除部分序列或可以加入天然的或合成的序列。为了将 DNA 片段彼此连接, 可以向片段加入接头 (adapter) 或连接体 (linker); 参见例如, Sambrook et al., 1989, *Molecular Cloning, A Laboratory Manual*, 2nd ed., Cold Spring Harbor Laboratory Press, Cold Spring Harbor, NY; 或 Winnacker “Gene und Klonen”, VCH Weinheim 2nd ed., 1996。

[0129] 例如, 基因产物活性降低的植物细胞的产生可以通过下列方法实现: 通过表达至少一种相应的反义 RNA、用于实现共抑制作用的正义 RNA, 或者通过表达至少一种特异性切割上述基因产物的转录物的合适地构建的核酶。为此, 可使用包含基因产物的全部编码序列 (包括可能存在的任意侧翼序列) 的 DNA 分子, 还可使用仅包括一部分编码序列的 DNA 分子, 这些部分必须足够长以在细胞中产生反义作用。也可以使用与基因产物的编码序列具有高度同源性但并不完全与其相同的 DNA 序列。

[0130] 当在植物中表达核酸分子时, 所合成的蛋白可被定位在植物细胞的任何所需的区室中。然而, 为了实现在特定区室中的定位, 可以例如将编码区与在特定区室中确保定位的 DNA 序列相连接。这种序列是本领域中技术人员已知的 (参见例如 Braun et al., *EMBO J.* 11 (1992), 3219-3227; Wolter et al., *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* 85 (1988), 846-850; Sonnewald et al., *Plant J.* 1 (1991), 95-106)。核酸分子也可以在植物细胞中的细胞器中表达。

[0131] 转基因植物细胞可以通过已知技术再生以长成完整的植物。原则上, 所述转基因植物可为任何所需植物品种的植物, 即不仅可为单子叶植物, 还可为双子叶植物。

[0132] 因此, 性质改变的转基因植物可以通过对同源 (= 天然) 基因或基因序列的过表达、阻遏或抑制而获得, 或者通过异源 (= 外源) 基因或基因序列的表达而获得。

[0133] 优选将本发明的化合物施用于转基因作物中, 所述施转基因作物对如下物质具有抗性: 生长调节剂, 例如麦草畏; 或者抑制重要的植物酶的除草剂, 所述植物酶例如乙酰乳酸合成酶 (ALS)、EPSP 合成酶、谷氨酰胺合成酶 (GS) 或羟基苯丙酮酸双加氧酶 (HPPD); 或者选自磺酰脲、草甘膦、草铵磷或苯甲酰基异噁唑以及类似的活性化合物的除草剂。

[0134] 当将本发明的活性化合物用在转基因作物中时,除了可在其他作物中观察到的对于有害植物的作用之外,还经常观察到对施用于所述转基因作物的特异性作用,例如改变或特别是拓宽的可以防治的杂草谱、改进的施用时可使用的施用率、与转基因作物对其有抗性的除草剂的更好的相容性,以及对转基因作物植物的生长和产量的作用。

[0135] 因此,本发明还涉及本发明的化合物作为除草剂用于防治转基因作物中的有害植物的用途。

[0136] 本发明的化合物可以可湿性粉剂、悬乳浓缩剂、可喷洒溶液剂、粉剂或颗粒剂的形式用在常规制剂中。因此,本发明还提供含有本发明的化合物的除草和植物生长调节组合物。

[0137] 本发明的化合物可以多种方式根据其所需的生物学和 / 或物理化学参数进行配制。可用的制剂包括,例如:可湿性粉剂 (WP)、水溶性粉剂 (SP)、水溶性浓缩剂、悬乳浓缩剂 (EC)、乳剂 (EW) 例如水包油乳剂和油包水乳剂、可喷洒溶液剂、悬浮浓缩剂 (SC)、油基分散剂或水基分散剂、油混溶性溶液剂、胶囊悬浮剂 (CS)、粉剂 (DP)、拌种产品、用于撒播和土壤施用的颗粒剂、呈微颗粒形式的颗粒剂 (GR)、喷洒颗粒剂、包衣颗粒剂和吸附颗粒剂、水分散性颗粒剂 (WG)、水溶性颗粒剂 (SG)、ULV 制剂、微胶囊剂和蜡剂。这些制剂的各个类型原则上均是已知的,并描述于例如:Winnacker-Küchler, " Chemische Technologie" [Chemical technology], Volume 7, C. Hanser Verlag Munich, 4th Ed. 1986、Wade van Valkenburg, " Pesticide Formulations ", Marcel Dekker, N. Y., 1973、K. Martens, " Spray Drying" Handbook, 3rd Ed. 1979, G. Goodwin Ltd. London 中。

[0138] 必要的制剂助剂,例如惰性物质、表面活性剂、溶剂和其他添加剂同样是已知的,并描述于例如:Watkins, " Handbook of Insecticide Dust Diluents and Carriers ", 2nd Ed., Darland Books, Caldwell N. J., H. v. Olphen, " Introduction to Clay Colloid Chemistry "; 2nd Ed., J. Wiley & Sons, N. Y., C. Marsden, " Solvents Guide "; 2nd Ed., Interscience, N. Y. 1963、McCutcheon's " Detergents and Emulsifiers Annual ". MC Publ. Corp., Ridgewood N. J.; Sisley and Wood, " Encyclopedia of Surface Active Agents ", Chem. Publ. Co. Inc., N. Y. 1964、**Schönfeldt, " Grenzflächenaktive Athylenoxidaddukte "** [Interface-active ethylene oxide adducts], Wiss. Verlagsgesell., Stuttgart 1976、Winnacker-Küchler, " Chemische Technologie ", Volume 7, C. Hanser Verlag Munich, 4th Ed. 1986 中。

[0139] 基于这些制剂,可以制备与其它农药活性物质 (例如杀昆虫剂、杀螨剂、除草剂和杀真菌剂) 以及与安全剂、肥料和 / 或生长调节剂的结合物,例如呈成品制剂或桶混形式。合适的安全剂为例如吡啶解草酯 (mefenpyr-diethyl)、环丙磺酰胺 (cyprosulfamid)、双苯恶唑酸 (isoxadifen-ethyl)、解草酯 (cloquintocet-mexyl) 和二氯丙烯胺 (dichlormid)。

[0140] 可湿性粉剂为可均匀分散于水中的制剂,并且其除了活性化合物以外,还含有除稀释剂或惰性物质之外的离子型表面活性剂和 / 或非离子型表面活性剂 (润湿剂、分散剂),例如聚氧乙基化烷基酚、聚氧乙基化脂肪醇、聚氧乙基化脂肪胺、脂肪醇聚乙二醇醚硫酸盐、烷基磺酸盐、烷基苯磺酸盐、木素磺酸钠、2,2'-二萘基甲烷-6,6'-二磺酸钠、二丁基萘磺酸钠或油酰基甲基牛磺酸钠。为了制备可湿性粉剂,例如在常规设备例如锤磨机、鼓风

磨机和喷气磨机中精细研磨具有除草活性的化合物,并同时或随后与制剂助剂相混合。

[0141] 悬乳浓缩剂通过下述过程制备:将活性化合物溶于有机溶剂(例如丁醇、环己酮、二甲基甲酰胺、二甲苯或相对高沸点的芳香族化合物或烃)或有机溶剂混合物中,并加入一种或多种离子型和/或非离子型表面活性剂(乳化剂)。使用的乳化剂可为例如烷基芳基磺酸钙盐,例如十二烷基苯磺酸钙;或非离子型乳化剂,例如脂肪酸聚乙二醇酯、烷基芳基聚乙二醇醚、脂肪醇聚乙二醇醚、环氧丙烷-环氧乙烷缩合物、烷基聚醚、脱水山梨糖醇酯,例如脱水山梨糖醇脂肪酸酯或聚氧乙烯脱水山梨糖醇酯例如聚氧乙烯脱水山梨糖醇脂肪酸酯。

[0142] 粉剂可通过将活性化合物与细分散的固体物质一起研磨而制备,所述固体物质例如滑石、天然粘土例如高岭土、膨润土和叶蜡石或硅藻土。

[0143] 悬浮浓缩剂可为水基或油基的。其可以例如使用市售的球磨机通过湿法研磨制备,在制备过程中可以任选地加入例如上文针对其他剂型列出的表面活性剂。

[0144] 乳剂,例如水包油乳剂(EW),可以通过例如搅拌器、胶体磨机和/或静态混合器使用水性有机溶剂以及任选的例如上文针对其他剂型列出的表面活性剂而制备。

[0145] 颗粒剂可以通过将所述活性化合物喷洒在能够吸附的颗粒状惰性物质上而制备,或通过使用粘合剂将活性化合物浓缩物施用到载体物质表面而制备,所述载体物质例如砂、高岭土或颗粒状惰性材料,所述粘合剂例如聚乙烯醇、聚丙烯酸钠或矿物油。则合适的活性化合物也可以以制备肥料颗粒的常规方式——如果需要、与肥料混合——制粒。

[0146] 水分散性颗粒剂通常可通过常规方法制备,所述常规方法例如喷雾干燥法、流化床制粒法、盘式制粒法、使用高速混合器的混合法以及不使用固体惰性物质的挤出法。

[0147] 对于盘式、流化床、挤出机和喷雾颗粒的制备,参见例如 *Spray-Drying Handbook* 3rd ed. 1979, G. Goodwin Ltd., London; J. E. Browning, "Agglomeration", Chemical and Engineering 1967, pages 147ff; "Perry's Chemical Engineer's Handbook", 5th Ed., McGraw-Hill, New York 1973, p. 8-57 中的方法。

[0148] 关于作物保护组合物制剂的更多细节,参见例如 G. C. Klingman, "Weed Control as a Science", John Wiley and Sons, Inc., New York, 1961, pages 81-96 和 J. D. Freyer, S. A. Evans, "Weed Control Handbook", 5th Ed., Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1968, pages 101-103。

[0149] 所述农业化学制剂通常含有 0.1 至 99 重量%、特别地为 0.1 至 95 重量%的本发明的化合物。

[0150] 在可湿性粉剂中,活性化合物的浓度例如为约 10 至 90 重量%,至 100 重量%的剩余部分由常规制剂组分组成。对于悬乳浓缩剂,活性化合物的浓度可为约 1 至 90 重量%,优选为 5 至 80 重量%。粉剂形式的制剂含有 1 至 30 重量%的活性化合物,优选地通常含有 5 至 20 重量%的活性化合物;可喷洒溶液剂含有约 0.05 至 80 重量%、优选 2 至 50 重量%的活性化合物。对于水分散颗粒剂而言,活性化合物的含量部分取决于所述活性化合物以液体形式还是固体形式存在,以及取决于所使用的粒化助剂、填料等。在水分散性颗粒剂中,活性化合物的含量例如为 1 至 95 重量%,优选为 10 至 80 重量%。

[0151] 此外,提及的活性化合物的制剂任选地含有各自常用的粘合剂、润湿剂、分散剂、乳化剂、渗透剂、防腐剂、抗冻剂和溶剂、填料、载体和染料、消泡剂、蒸发抑制剂和影响 pH

值及粘度的试剂。

[0152] 基于这些制剂,可生产与其他农药活性物质(例如杀昆虫剂、杀螨剂、除草剂和杀真菌剂)以及与安全剂、肥料和/或生长调节剂的结合物,例如呈成品制剂或桶混物的形式。

[0153] 可以与本发明的化合物以混合制剂或桶混形式结合使用的活性化合物为,例如,已知的基于抑制例如以下物质的活性化合物:乙酰乳酸合成酶、乙酰辅酶A羧化酶、纤维素合成酶、烯醇式丙酮酰莽草酸-3-磷酸合成酶、谷氨酰胺合成酶、对羟基苯基丙酮酸双加氧酶、八氢番茄红素去饱和酶、光系统I、光系统II、原卟啉原氧化酶,如记载于例如Weed Research 26(1986)441-445或"The Pesticide Manual",15th edition,The British Crop Protection Council and the Royal Soc.of Chemistry,2009中和其中引用的文献中的。可以与本发明的化合物结合的已知的除草剂或植物生长调节剂为例如以下活性物质(化合物以国际标准化组织(ISO)规定的通用名表示,或以化学名称或其编号表示),且其总是包括所有使用形式,例如包括酸、盐、酯和异构体例如立体异构体和旋光异构体。本文中,以示例的方式提及一种使用形式以及在一些情况下的多种使用形式:乙草胺(acetochlor)、acibenzolar、acibenzolar-S-methyl、三氟羧草醚(acifluorfen)、三氟羧草醚(acifluorfen-sodium)、苯草醚(aclonifen)、甲草胺(alachlor)、草毒死(allidochlor)、禾草灭(alloxydim)、枯杀达(alloxydim-sodium)、莠灭净(amestryl)、氨唑草酮(amicarbazone)、先甲草胺(amidochlor)、酰嘧磺隆(amidosulfuron)、环丙嘧啶酸(aminocyclopyrachlor)、氯氨吡啶酸(aminopyralid)、杀草强(amtrole)、氨基磺酸铵(ammonium sulfamate)、环丙嘧啶醇(ancymidol)、莎稗磷(anilofos)、磺草灵(asulam)、莠去津(atrazine)、唑啶草酮(azafenidin)、四唑嘧磺隆(azimsulfuron)、叠氮津(aziprotryl)、氟丁酰草胺(beflubutamid)、草除灵(benazolin)、草除灵乙酯(benazolin-ethyl)、bencarbazone、乙丁氟灵(benfluralin)、呋草黄(benfuresate)、地散磷(bensulide)、bensulfuron、苄嘧磺隆(bensulfuron-methyl)、灭草松(bentazone)、双苯嘧草酮(benzfendizone)、双环磺草酮(benzobicyclon)、吡草酮(benzofenap)、氟磺胺草(benzofluor)、新燕灵(benzoylprop)、bicyclopyrone、甲羧除草醚(bifenox)、双丙氨膦(bilanafos)、双丙氨膦钠盐(bilanafos-sodium)、双草醚(bispyribac)、双草醚(bispyribac-sodium)、除草定(bromacil)、溴丁酰草胺(bromobutide)、溴酚肟(bromofenoxim)、溴苯腈(bromoxynil)、莠谷隆(bromuron)、特克草(buminafos)、羟草酮(busoxinone)、丁草胺(butachlor)、氟丙嘧草酯(butafenacil)、抑草磷(butamifos)、丁烯草胺(butenachlor)、仲丁灵(butralin)、丁氧环酮(butroxydim)、丁草敌(butylate)、唑草胺(cafenstrole)、双酰草胺(carbetamide)、唑啶草酯(carfentrazone)、唑啶草酯(carfentrazone-ethyl)、甲氧除草醚(chlormethoxyfen)、草灭畏(chloramben)、chlorazifop、chlorazifop-butyl、氯溴隆(chlorbromuron)、氯炔灵(chlorbufam)、伐草克(chlorfenac)、双氯酚酸钠(chlorfenac-sodium)、燕麦酯(chlorfenprop)、氯甲丹(chlorflurenol)、氯甲丹(chlorflurecol-methyl)、氯草敏(chloridazon)、氯嘧磺隆(chlorimuron)、氯嘧磺隆(chlorimuron-ethyl)、矮壮素(chlormeq uat chloride)、草枯醚(chlornitrofen)、4-氯邻苯二甲酸(chlorophthalim)、氯酞酸甲酯(chlorthal-dimethyl)、绿麦隆(chlorotoluron)、氯磺隆(chlorsulfuron)、cinidon、吲

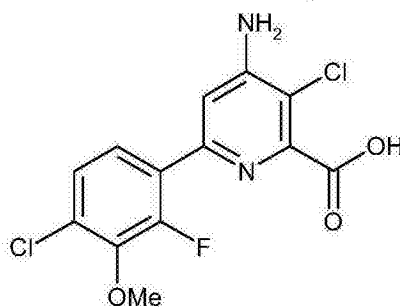
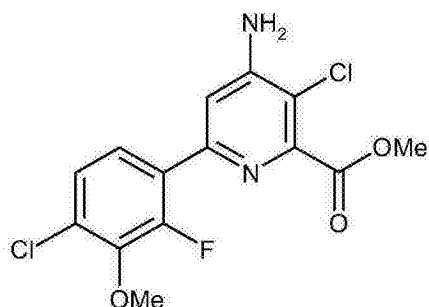
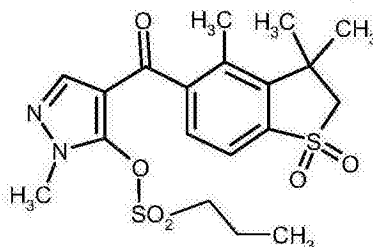
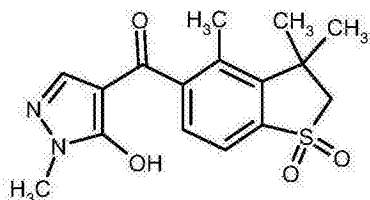
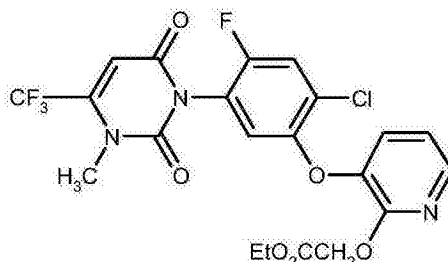
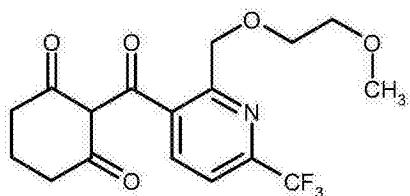
啉酮草酯 (cinidon-ethyl)、环庚草醚 (cinmethylin)、醚磺隆 (cinosulfuron)、烯草酮 (clethodim)、炔草酸 (clodinafop)、炔草酯 (clodinafop-propargyl)、杀雄嗪酸 (clofencet)、异恶草松 (clomazone)、氯甲酰草胺 (clomeprop)、调果酸 (cloprop)、二氯吡啶酸 (clopyralid)、氯酯磺草胺 (cloransulam)、氯酯磺草胺 (cloransulam-methyl)、苜草隆 (cumyluron)、氨基氰 (cyanamide)、氰草津 (cyanazine)、环丙酰胺酸 (cyclanilide)、环草敌 (cycloate)、环丙嘧磺隆 (cyclosulfamuron)、噁草酮 (cycloxydim)、环莠隆 (cycluron)、氰氟草酯 (cyhalofop)、氰氟草酯 (cyhalofop-butyl)、莎草快 (cyperquat)、环丙津 (cyprazine)、环唑草胺 (cyprazole)、2,4-D、2,4-DB、杀草隆 (daimuron/dymron)、茅草枯 (dalapon)、丁酰肼 (daminozide)、棉隆 (dazomet)、正癸醇 (n-decanol)、甜菜安 (desmedipham)、敌草净 (desmetryn)、detosyl-pyrazolate (DTP)、燕麦敌 (diallate)、麦草畏 (dicamba)、敌草腈 (dichlobenil)、2,4-滴丙酸 (dichlorprop)、2,4-滴丙酸 (dichlorprop-P)、二氯苯氧基丙酸 (diclofop)、禾草灵 (diclofop-methyl)、禾草灵 (diclofop-P-methyl)、双氯磺草胺 (diclosulam)、乙酰甲草酸 (diethatyl)、乙酰甲草胺 (diethatyl-ethyl)、枯莠隆 (difenoxuron)、野燕枯 (difenzoquat)、吡氟酰草胺 (diflufenican)、二氟吡隆 (diflufenzopyr)、氟吡草腈 (diflufenzopyr-sodium)、恶唑隆 (dimefuron)、敌草克 (dikegulac-sodium)、恶唑隆 (dimefuron)、呋草丹 (dimepiperate)、二甲草胺 (dimethachlor)、异戊乙净 (dimethametryn)、二甲吩草胺 (dimethenamid)、甲酚噁草胺-P (dimethenamide-P)、噁节因 (dimethipin)、dimetrasulfuron、氨基灵 (dinitramine)、地乐酚 (dinoseb)、特乐酚 (dinoterb)、双苯酰草胺 (diphenamid)、异丙净 (dipropetryn)、敌草快 (diquat)、敌草快 (diquat dibromide)、氟硫草定 (dithiopyr)、敌草隆 (diuron)、二硝酚 (DNOC)、草止津 (eglinazine-ethyl)、茵多酸 (endothal)、扑草灭 (EPTC)、戊草丹 (esprocarb)、乙丁烯氟灵 (ethalfluralin)、胺苯磺隆 (ethametsulfuron)、胺苯磺隆 (ethametsulfuron-methyl)、乙烯利 (ethephon)、磺噁隆 (ethidimuron)、乙噁草酮 (ethiozin)、乙氧呋草黄 (ethofumesate)、氟乳醚 (ethoxyfen)、氯氟草醚乙酯 (ethoxyfen-ethyl)、乙氧嘧磺隆 (ethoxysulfuron)、乙氧苯草胺 (etobenzanid)、F-5331 即 N[2-氯-4-氟-5-[4-(3-氟丙基)4,5-二氢-5-氧代-1H-四唑-1-基]苯基]乙磺酰胺、F-7967 即 3-[7-氯-5-氟-2-(三氟甲基)1H-苯并咪唑-4-基]-1-甲基-6-(三氟甲基)嘧啶-2,4(1H,3H)二酮、2,4,5-涕丙酸 (fenoprop)、噁唑禾草灵 (fenoxaprop)、噁唑禾草灵 (fenoxaprop-P)、噁唑禾草灵 (fenoxaprop-ethyl)、精噁唑禾草灵 (fenoxaprop-P-ethyl)、fenoxasulfone、四唑酰草胺 (fentrazamide)、非草隆 (fenuron)、麦草氟 (flamprop)、麦草氟异丙酯 (flamprop-M-isopropyl)、麦草氟甲酯 (flamprop-M-methyl)、啉嘧磺隆 (flazasulfuron)、双氟磺草胺 (florasulam)、吡氟禾草灵 (fluazifop)、精吡氟禾草灵 (fluazifop-P)、吡氟禾草灵丁酯 (fluazifop-butyl)、精吡氟禾草灵丁酯 (fluazifop-P-butyl)、异丙吡草酯 (fluazolate)、氟唑磺隆 (flucarbazone)、氟酮磺隆 (flucarbazone-sodium)、氟吡磺隆 (flucetosulfuron)、氯乙氟灵 (fluchloralin)、氟噁草胺 (flufenacet (thiaflumide))、氟哒嗪草酯 (flufenpyr)、氟哒嗪草酯 (flufenpyr-ethyl)、氟节胺 (flumetralin)、唑嘧磺草胺 (flumetsulam)、氟烯草酸 (flumiclorac)、氟烯草酸 (flumiclorac-pentyl)、丙炔氟草胺 (flumioxazin)、炔草胺 (flumipropyn)、氟草隆 (fluometuron)、三氟硝草醚

(fluorodifen)、乙羧氟草醚 (fluoroglycofen)、乙羧氟草醚 (fluoroglycofen-ethyl)、氟胺草唑 (flupoxam)、氟丙嘧草酯 (flupropacil)、四氟丙酸 (flupropanoate)、氟吡磺隆 (flupyrsulfuron)、氟吡嘧磺隆 (flupyrsulfuron-methyl-sodium)、抑草丁 (flurenol)、茚丁酯 (flurenol-butyl)、氟啶草酮 (fluridone)、氟咯草酮 (flurochloridone)、氟草烟 (fluroxypyr)、甲基庚酯 (fluroxypyr-meptyl)、呋嘧醇 (flurprimidol)、呋草酮 (flurtamone)、噻草酸 (fluthiacet)、氟噻乙草酯 (fluthiacet-methyl)、噻唑草酰胺 (fluthiamide)、氟磺胺草醚 (fomesafen)、甲酰氨磺隆 (foramsulfuron)、氯吡脲 (forchlorfenuron)、杀木膦 (fosamine)、呋氧草醚 (furyloxyfen)、赤霉素 (gibberillic acid)、草铵膦 (glufosinate)、草铵磷 (glufosinate-ammonium)、精草铵膦 (glufosinate-P)、精草铵膦铵 (glufosinate-P-ammonium)、精草铵膦钠 (glufosinate-P-sodium)、草甘膦 (glyphosate)、草甘膦异丙铵盐 (glyphosate-isopropylammonium)、H-9201 即 0-(2,4-二甲基-6-硝基苯基)0-乙基-异丙基硫代磷酰胺酯、氟硝磺酰胺 (halosafen)、氯吡嘧磺隆 (halosulfuron)、氯吡嘧磺隆 (halosulfuron-methyl)、氟吡禾灵 (haloxyfop)、精氟吡禾灵 (haloxyfop-P)、氯氟乙禾灵 (haloxyfop-ethoxyethyl)、氯氟乙禾灵 (haloxyfop-P-ethoxyethyl)、氟吡甲禾灵 (haloxyfop-methyl)、氟吡甲禾灵 (haloxyfop-P-methyl)、环嗪酮 (hexazinone)、HW-02 即 1-(二甲氧基磷酰基)乙基(2,4-二氯苯氧基)乙酸酯、咪草酸 (imazamethabenz)、咪草酸 (imazamethabenz-methyl)、甲氧咪草烟 (imazamox)、甲氧咪草烟酸铵 (imazamox-ammonium)、甲咪唑烟酸 (imazapic)、咪唑烟酸 (imazapyr)、咪唑烟酸异丙铵 (imazapyr-isopropylammonium)、咪唑喹啉酸 (imazaquin)、咪唑喹啉酸铵 (imazaquin-ammonium)、咪唑乙烟酸 (imazethapyr)、咪唑乙烟酸铵 (imazethapyr-ammonium)、唑吡嘧磺隆 (imazosulfuron)、抗倒胺 (inabenfide)、茚草酮 (indanofan)、碘甲磺隆 (indaziflam)、吲哚乙酸 (indoleacetic acid(IAA))、4-吲哚-3-基丁酸 (IBA)、碘甲磺隆钠盐 (iodosulfuron)、碘甲磺隆钠盐 (iodosulfuron-methyl-sodium)、碘苯腈 (ioxynil)、三哇苯胺除草剂 (ipfencarbazon)、丁脘酰胺 (isocarbamid)、异丙乐灵 (isopropalin)、异丙隆 (isoproturon)、异恶隆 (isouron)、异恶酰草胺 (isoxaben)、异恶氯草酮 (isoxachlortole)、异噁唑草酮 (isoxaflutole)、异恶草醚 (isoxapyrifop)、IKUH-043 即 3-([5-(二氟甲基)1-甲基-3-(三氟甲基)1H-吡唑-4-基]甲基)磺酰基)5,5-二甲基-4,5-二氢-1,2-噁唑、特胺灵 (karbutilate)、ketospiradox、乳氟禾草灵 (lactofen)、环草定 (lenacil)、利谷隆 (linuron)、马来酰肼 (maleic hydrazide)、MCPA、MCPB、MCPB 甲酯 (MCPB-methyl)、MCPB 乙酯 (MCPB-ethyl) 和 MCPB 钠 (MCPB-sodium)、2-甲-4-氯丙酸 (mecoprop)、2-甲-4-氯丙酸钠 (mecoprop-sodium)、2-甲-4-氯丙酸丁氧酯 (mecoprop-butotyl)、高-2-甲-4-氯丙酸丁氧酯 (mecoprop-P-butotyl)、高-2-甲-4-氯丙酸二甲铵 (mecoprop-P-dimethylammonium)、高-2-甲-4-氯丙酸 2-乙基己酯 (mecoprop-P-2-ethylhexyl)、高-2-甲-4-氯丙酸钾 (mecoprop-P-potassium)、苯噻酰草胺 (mefenacet)、氯磺酰草胺 (mefluidide)、甲哌啶 (mepiquat chloride)、甲磺胺磺隆 (mesosulfuron)、甲磺胺磺隆 (mesosulfuron-methyl)、甲基磺草酮 (mesotrione)、甲基苯噻隆 (methabenzthiazuron)、威百亩 (metam)、噁唑酰草胺 (metamifop)、苯噻草酮

(metamitron)、吡唑草胺 (metazachlor)、双醚氯吡嘧磺隆 (metazosulfuron)、灭草唑 (methazole)、甲硫嘧磺隆 (methiopyrsulfuron)、methiozolin、苯草酮 (methoxyphenone)、甲基杀草隆 (methyldymron)、1-甲基环丙烯 (1-methylcyclopropene)、异硫氰酸甲酯 (methyl isothiocyanate)、吡喃隆 (metobenzuron)、溴谷隆 (metobromuron)、异丙甲草胺 (metolachlor)、S-异丙甲草胺 (S-metolachlor)、磺草唑胺 (metosulam)、甲氧隆 (metoxuron)、噻草酮 (metribuzin)、甲磺隆 (metsulfuron)、甲磺隆 (metsulfuron-methyl)、禾草敌 (molinate)、庚酰草胺 (monalide)、单脲 (monocarbamide)、甲酰胺硫酸盐 (monocarbamide dihydrogensulfate)、绿谷隆 (monolinuron)、单嘧磺隆 (monosulfuron)、单嘧磺酯 (monosulfuron-easter)、灭草隆 (monuron)、MT128 即 6-氯-N-[(2E)3-氯丙-2-烯-1-基]-5-甲基-N-苯基吡嗪-3-胺、MT-5950 即 N[3-氯-4-(1-甲基乙基)苯基]2-甲基戊酰胺、NGGC-011、萘丙胺 (naproanilide)、敌草胺 (napropamide)、萘草胺 (naptalam)、NC310 即 4-(2,4-二氯苯甲酰基)-1-甲基-5-苄氧基吡唑、草不隆 (neburon)、烟嘧磺隆 (nicosulfuron)、氟氯草胺 (nipyraclufen)、甲磺乐灵 (nitralin)、除草醚 (nitrofen)、复硝酚钠 (nitrophenolate-sodium) (异构体混合物)、硝氟草醚 (nitrofluorfen)、正壬酸 (nonanoic acid)、氟草敏 (norflurazon)、坪草丹 (orbencarb)、嘧苯胺磺隆 (orthosulfamuron)、氨磺乐灵 (oryzalin)、丙炔恶草酮 (oxadiargyl)、恶草酮 (oxadiazon)、环氧嘧磺隆 (oxasulfuron)、恶噻草酮 (oxaziclomefone)、乙氧氟草醚 (oxyfluorfen)、多效唑 (paclobutrazol)、百草枯 (paraquat)、百草枯 (paraquat-dichloride)、壬酸 (pelargonic acid (nonanoic acid))、二甲戊灵 (pendimethalin)、4-(叔丁基)-N-(1-乙基-丙基)-2,6-二硝基-苯胺 (pendralin)、五氟磺草胺 (penoxsulam)、甲氯酰草胺 (pentanochlor)、环戊恶草酮 (pentoxazone)、黄草伏 (perfluidone)、烯草胺 (pethoxamid)、棉胺宁 (phenisopham)、甜菜宁 (phenmedipham)、甜菜宁-乙酯 (phenmedipham-ethyl)、氨基吡啶酸 (picloram)、氟吡酰草胺 (picolinafen)、唑啉草酯 (pinoxaden)、哌草磷 (piperophos)、pirifenop、pirifenop-butyl、丙草胺 (pretilachlor)、氟嘧磺隆 (primisulfuron)、氟嘧磺隆 (primisulfuron-methyl)、烯丙苯噻唑 (probenazole)、氟唑草胺 (profluazole)、环丙氰津 (procyazine)、氨氟乐灵 (prodiamine)、环丙氟灵 (prifluralin)、环苯草酮 (profoxydim)、调环酸 (prohexadione)、调环酸 (prohexadione-calcium)、茉莉酮 (prohydrojasmon)、扑灭通 (prometon)、扑草净 (prometryn)、毒草胺 (propachlor)、敌稗 (propanil)、恶草酸 (propaquizafop)、扑灭津 (propazine)、苯胺灵 (propham)、异丙草胺 (propisochlor)、丙苯磺隆 (propoxycarbazone)、丙苯磺隆 (propoxycarbazone-sodium)、噻咪唑嘧磺隆 (propyrisulfuron)、炔苯酰草胺 (propyzamide)、磺亚胺草 (prosulfalin)、苄草丹 (prosulfocarb)、氟磺隆 (prosulfuron)、丙炔草胺 (prynachlor)、双唑草腈 (pyraclonil)、吡草醚 (pyraflufen)、吡草醚 (pyraflufen-ethyl)、pyrasulfotole、吡唑特 (pyrazolynate (pyrazolate))、吡嘧磺隆 (pyrazosulfuron)、吡嘧磺隆乙酯 (pyrazosulfuron-ethyl)、苄草唑 (pyrazoxyfen)、异丙酯草醚 (pyribambenz)、异丙酯草醚 (pyribambenz-isopropyl)、丙酯草醚 (pyribambenz-propyl)、嘧啶肟草醚 (pyribenzoxim)、稗草丹 (pyributicarb)、达草止 (pyridafol)、吡草特 (pyridate)、环酯

草醚 (pyriftalid)、嘧草醚 (pyriminobac)、嘧草醚 (pyriminobac-methyl)、pyrimisulfan、嘧草硫醚 (pyrithiobac)、嘧草硫醚 (pyrithiobac-sodium)、异恶草酮 (pyroxasulfone)、甲氧磺草胺 (pyroxsulam)、二氯喹啉酸 (quinchlorac)、氯甲喹啉酸 (quinmerac)、灭藻醌 (quinoclamine)、喹禾灵 (quizalofop)、喹禾灵乙酯 (quizalofop-ethyl)、精喹禾灵 (quizalofop-P)、精喹禾灵乙酯 (quizalofop-P-ethyl)、喹禾糠酯 (quizalofop-P-tefuryl)、砒嘧磺隆 (rimsulfuron)、苯嘧磺草胺 (saflufenacil)、仲丁通 (secbumeton)、烯禾啉 (sethoxydim)、环草隆 (siduron)、西玛津 (simazine)、西草净 (simetryn)、SN-106279 即 (2R)2({7-[2-氯-4-(三氟甲基)苯氧基]-2-萘基}氧基)丙酸甲酯、磺草酮 (sulcotrione)、草克死 (sulfallate (CDEC))、甲磺草胺 (sulfentrazone)、甲嘧磺隆 (sulfometuron)、甲嘧磺隆 (sulfometuron-methyl)、草硫膦 (sulfosate (glyphosate-trimesium))、磺酰磺隆 (sulfosulfuron)、SYN-523、SYP-249 即 1-乙氧基-3-甲基-1-氧代丁-3-烯-2-基-5-[2-氯-4-(三氟甲基)苯氧基]-2-硝基苯甲酸酯、SYP-300 即 1-[7-氟-3-氧代-4-(丙-2-炔-1-基)3,4-二氢-2H-1,4-苯并噁嗪-6-基]-3-丙基-2-硫酮咪唑烷-4,5-二酮、牧草胺 (tebutam)、丁噻隆 (tebuthiuron)、四氯硝基苯 (tecnazene)、tefuryltrione、环磺酮 (tembotrione)、吡喃草酮 (tepraloxymid)、特草定 (terbacil)、特草灵 (terbucarb)、特丁草胺 (terbuchlor)、特丁通 (terbumeton)、特丁津 (terbuthylazine)、特丁净 (terbutryn)、噻吩草胺 (thenylchlor)、氟噻草胺 (thiaflumide)、噻氟隆 (thiazafluron)、噻唑烟酸 (thiazopyr)、噻二唑草胺 (thidiazimin)、噻苯隆 (thidiazuron)、异草唑酮 (thiencarbazone)、噻酮磺隆 (thiencarbazone-methyl)、噻吩磺隆 (thifensulfuron)、噻吩磺隆 (thifensulfuron-methyl)、禾草丹 (thiobencarb)、仲草丹 (tiocarbazil)、苯吡唑草酮 (topramezone)、三甲苯草酮 (tralkoxydim)、triafamon 野燕畏 (triallate)、醚苯磺隆 (triasulfuron)、三嗪氟草胺 (triaziflam)、triazofenamide、苯磺隆 (tribenuron)、苯磺隆 (tribenuron-methyl)、三氯乙酸 (trichloroacetic acid (TCA))、三氯吡氧乙酸 (triclopyr)、灭草环 (tridiphane)、草达津 (trietazine)、三氟啉磺隆 (trifloxysulfuron)、三氟啉磺隆 (trifloxysulfuron-sodium)、氟乐灵 (trifluralin)、氟胺磺隆 (triflusulfuron)、氟胺磺隆 (triflusulfuron-methyl)、三甲隆 (trimeturon)、抗倒酯 (trinexapac)、抗倒酯 (trinexapac-ethyl)、三氟甲磺隆 (tritosulfuron)、tsitodef、烯效唑 (uniconazole)、精烯效唑 (uniconazole-P)、灭草敌 (vernolate)、ZJ-0166 即 3,4-二氯-N-{2-[(4,6-二甲氧基嘧啶-2-基)氧基]苄基}苯胺和如下化合物：

[0154]



[0155] 为进行施用,如果合适,将以市售形式存在的制剂以常规方式用水稀释,例如在可湿性粉剂、悬乳浓缩剂、分散剂和水分散性颗粒剂的情况下。粉剂、适于土壤施用的颗粒剂或适于撒播的颗粒剂和可喷洒溶液剂形式的制剂通常在施用前不用其他惰性物质稀释。式(I)的化合物的所需施用率根据外界条件——例如特别是温度、湿度和所用除草剂的类型——而变化。所述施用率可以在很宽的范围内变化,例如在 0.001 至 1.0kg/ha 以上的活性物质之间变化;然而,优选 0.005-750g/ha。

[0156] 以下实施例用于说明本发明:

[0157] A. 化学实施例

[0158] 1. 2-氯-4-(甲基磺酰基)N-(1-(2-甲氧基乙基)四唑-5-基)苯甲酰胺的合成, (表中实施例编号 1-12)

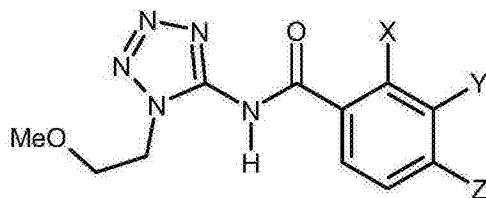
[0159] 将在 2ml 吡啶中的 176mg (0.75mmol) 2-氯-4-(甲基磺酰基)苯甲酰氯、145mg (1.0mmol) 5-氨基-1-(2-甲氧基乙基)四唑在 60℃ 下搅拌 12 小时。然后加入 0.1ml 水,将混合物在 60℃ 下搅拌 30 分钟并加入 EA 和 2N HCl。分离出有机相并用 2N HCl 和盐水洗涤、经 Na₂SO₄ 干燥,浓缩和通过 RP-HPLC (乙腈/水) 纯化。收率为 66mg (23%)。

[0160] 5-氨基-1-(2-甲氧基乙基)四唑的合成

[0161] 将在 10ml 乙醇中的 2.33g (10mmol) S-甲基异硫氨基脲氢碘盐和 751mg (10mmol) 2-甲氧基乙胺的混合物在回流下加热,直至无甲硫醇释放。然后,将混合物充分浓缩,并在搅拌下依次加入 10ml 水、0.3ml 浓硝酸和 1.7g (10mmol) 溶于 2ml 水的硝酸银。搅拌 10min 后,加入 0.5ml 浓盐酸,通过抽滤滤出沉淀并用 3ml 水洗涤,并将 1.5ml 浓盐酸加入滤液中。在 < 5℃ 下,随后将溶于 2ml 水的 0.7g (10mmol) 硝酸钠加入至混合物中,并用 20% 浓度的含水氢氧化钠溶液将 pH 调至 10。将混合物加热至 60℃,保持 30 分钟,

并在冷却后,用乙酸乙酯萃取。将有机相用饱和氯化钠溶液洗涤 3 次,干燥并浓缩,并将残余物溶解在少量乙酸乙酯中,再过滤。浅褐色晶体,收率为 590mg (40%)。NMR (DMSO-d₆): 6.62 (brs, 2H), 4.26 (t, 2H), 3.65 (t, 2H), 3.23 (s, 3H)

[0162] 表 1: 式 (I) 的本发明化合物, 其中 A 代表 CY, B 代表 N 且 R 代表 2- 甲氧基乙基
[0163]



[0164]

编号	X	Y	Z	物理数据 (¹ H-NMR, DMSO-d ₆ , 400 MHz)
1-1	F	H	Cl	
1-2	F	H	Br	
1-3	F	H	SO ₂ Me	
1-4	F	H	SO ₂ Et	

[0165]

编号	X	Y	Z	物理数据 (¹ H-NMR, DMSO-d ₆ , 400 MHz)
1-5	F	H	CF ₃	
1-6	Cl	H	F	
1-7	Cl	H	Cl	8.13 (s,1H), 7.72 (d,1H), 7.61 (dd,1H), 4.55 (t,2H), 3.78 (t,2H), 3.22 (s,3H)
1-8	Cl	H	Br	9.90 (bs,1H), 7.69-7.65 (m,2H), 7.49 (dd,1H), 4.63 (t,2H), 3.83 (t,2H), 3.36 (s,3H)
1-9	Cl	H	I	9.67 (bs,1H), 7.85 (s,1H), 7.77 (dd,1H), 7.51 (d,1H), 4.60 (t,2H), 3.82 (t,2H), 3.36 (s,3H)
1-10	Cl	H	SMe	
1-11	Cl	H	SOMe	
1-12	Cl	H	SO ₂ Me	8.04 (d,1H), 7.98 (dd,1H), 7.83 (s,1H), 4.56 (t,2H), 3.78 (t,2H), 3.37 (s,3H), 3.22 (s,3H)
1-13	Cl	H	SO ₂ CH ₂ Cl	
1-14	Cl	H	SEt	
1-15	Cl	H	SO ₂ Et	
1-16	Cl	H	CF ₃	9.84 (bs,1H), 7.90 (d,1H), 7.74 (s,1H), 7.68 (d,1H), 4.62 (t,2H), 3.83 (t,2H), 3.37 (s,3H)
1-17	Cl	H	CN	
1-18	Cl	H	NMe ₂	
1-19	Cl	H	NHAc	
1-20	Cl	H	吡咯-1-基	
1-21	Cl	H	吡咯烷-1-基	
1-22	Cl	H	吡唑-1-基	
1-23	Cl	H	1,2,4-三唑-1-基	9.62 (bs,1H), 8.66 (s,1H), 8.15 (s,1H), 7.98 (d,1H), 7.92 (s,1H), 7.76 (d,1H), 4.62 (t,2H), 3.84 (t,2H), 3.39 (s,3H)
1-24	Cl	H	4-甲基-3-三氟甲基-1,2,4-三唑啉-5-酮-1-基	
1-25	Br	H	F	
1-26	Br	H	Cl	9.79 (bs,1H), 7.68-7.64 (m,2H), 7.45 (dd,1H), 4.63 (t,2H), 3.83 (t,2H), 3.36 (s,3H)

[0166]

编号	X	Y	Z	物理数据 (¹ H-NMR, DMSO-d ₆ , 400 MHz)
1-27	Br	H	Br	
1-28	Br	H	SMe	9.8 (bs,1H), 7.65 (d,1H), 7.45 (d,1H), 7.26 (dd,1H), 4.65 (t,2H), 3.84 (t,2H), 3.36 (s,3H), 2.52 (s,3H)
1-29	Br	H	SO ₂ Me	
1-30	Br	H	SO ₂ Et	
1-31	Br	H	CF ₃	
1-32	OMe	H	SO ₂ Me	
1-33	SMe	H	F	
1-34	SMe	H	Cl	10.65 (bs,1H), 7.83 (d,1H), 7.31 (d,1H), 7.28 (dd,1H), 4.63 (t,2H), 3.83 (t,2H), 3.34 (s,3H), 2.49 (s,3H)
1-35	SO ₂ Me	H	Cl	
1-36	SMe	H	Br	
1-37	SO ₂ Me	H	Br	
1-38	SMe	H	SMe	
1-39	SO ₂ Me	H	SMe	
1-40	SO ₂ Me	H	SOMe	
1-41	SO ₂ Me	H	SO ₂ Me	
1-42	SMe	H	CF ₃	10.6 (bs,1H), 7.95 (d,1H), 7.57 (s,1H), 7.54 (d,1H), 4.67 (t,2H), 3.85 (t,2H), 3.34 (s,3H), 2.53 (s,3H)
1-43	SOMe	H	CF ₃	
1-44	SO ₂ Me	H	CF ₃	8.18 (s,1H), 8.15 (d,1H), 7.97 (d,1H), 4.42 (m,2H), 3.71 (m,2H), 3.54 (s,3H), 3.21 (s,3H)
1-45	SO ₂ Et	H	Cl	
1-46	SO ₂ Et	H	Br	
1-47	SO ₂ Et	H	SMe	
1-48	SO ₂ Et	H	SOMe	
1-49	SO ₂ Et	H	SO ₂ Me	
1-50	SO ₂ Et	H	CF ₃	
1-51	SO ₂ NMePh	H	Cl	
1-52	SO ₂ NMe ₂	H	CF ₃	
1-53	NO ₂	H	F	
1-54	NO ₂	H	Cl	
1-55	NO ₂	H	Br	

[0167]

编号	X	Y	Z	物理数据 (¹ H-NMR, DMSO-d ₆ , 400 MHz)
1-56	NO ₂	H	I	
1-57	NO ₂	H	CN	
1-58	NO ₂	H	SO ₂ Me	
1-59	NO ₂	H	SO ₂ Et	
1-60	NO ₂	H	CF ₃	10.3 (bs,1H), 8.44 (s,1H), 8.02 (d,1H), 7.82 (d,1H), 4.63 (t,2H), 3.86 (t,2H), 3.44 (s,3H)
1-61	Me	H	F	
1-62	Me	H	OCF ₃	
1-63	Me	H	Cl	
1-64	Me	H	Br	
1-65	Me	H	SO ₂ Me	
1-66	Me	H	SO ₂ CH ₂ Cl	
1-67	Me	H	SO ₂ Et	
1-68	Me	H	CF ₃	
1-69	CH ₂ SMe	H	Br	10.05 (bs,1H), 7.58-7.52 (m,3H), 4.65 (t,2H), 3.96 (s,2H), 3.83 (t,2H), 3.34 (s,3H), 2.05 (s,3H)
1-70	CH ₂ SO ₂ Me	H	Br	9.80 (bs,1H), 7.72-7.68 (m,2H), 7.59 (d,1H), 4.74 (s,2H), 4.62 (t,2H), 3.81 (t,2H), 3.35 (s,3H), 2.98 (s,3H)
1-71	CH ₂ SO ₂ Me	H	CF ₃	
1-72	Et	H	F	
1-73	Et	H	Cl	
1-74	Et	H	Br	
1-75	Et	H	SO ₂ Me	
1-76	Et	H	SO ₂ CH ₂ Cl	
1-77	Et	H	SEt	
1-78	Et	H	SO ₂ Et	
1-79	Et	H	CF ₃	
1-80	CF ₃	H	Cl	10.05 (bs,1H), 7.76 (s,1H), 7.70 (d,1H), 7.67 (d,1H), 4.61 (t,2H), 3.82 (t,2H), 3.33 (s,3H)
1-81	CF ₃	H	Br	
1-82	CF ₃	H	SO ₂ Me	
1-83	CF ₃	H	SO ₂ NMe ₂	10.5 (bs,1H), 8.14 (s,1H), 8.08 (d,1H), 7.89 (d,1H), 4.63 (t,2H), 3.81 (t,2H),

[0168]

编号	X	Y	Z	物理数据 (¹ H-NMR, DMSO-d ₆ , 400 MHz)
				3.34 (s,3H), 2.80 (s,6H)
1-84	CF ₃	H	CF ₃	
1-85	NO ₂	NH ₂	F	
1-86	NO ₂	NHMe	F	
1-87	NO ₂	NMe ₂	F	
1-88	NO ₂	Me	Cl	
1-89	NO ₂	NH ₂	Cl	
1-90	NO ₂	NHMe	Cl	
1-91	NO ₂	NMe ₂	Cl	
1-92	NO ₂	NH ₂	Br	
1-93	NO ₂	NHMe	Br	
1-94	NO ₂	NMe ₂	Br	
1-95	NO ₂	NH ₂	CF ₃	
1-96	NO ₂	NMe ₂	CF ₃	
1-97	NO ₂	NH ₂	SO ₂ Me	
1-98	NO ₂	NH ₂	SO ₂ Et	
1-99	NO ₂	NHMe	SO ₂ Me	
1-100	NO ₂	NMe ₂	SO ₂ Me	
1-101	NO ₂	NMe ₂	SO ₂ Et	
1-102	NO ₂	NH ₂	1H-1,2,4-三唑-1-基	
1-103	NO ₂	NHMe	1H-1,2,4-三唑-1-基	
1-104	NO ₂	NMe ₂	1H-1,2,4-三唑-1-基	
1-105	Me	SMe	H	
1-106	Me	SOMe	H	
1-107	Me	SO ₂ Me	H	
1-108	Me	SEt	H	
1-109	Me	SOEt	H	
1-110	Me	SO ₂ Et	H	
1-111	Me	S(CH ₂) ₂ OMe	H	
1-112	Me	SO(CH ₂) ₂ OMe	H	
1-113	Me	SO ₂ (CH ₂) ₂ OMe	H	
1-114	Me	F	F	
1-115	Me	SEt	F	
1-116	Me	SOEt	F	
1-117	Me	SO ₂ Et	F	
1-118	Me	Me	Cl	9.75 (brs,1H), 7.35 (d,1H), 7.34 (d,1H), 4.62

[0169]

编号	X	Y	Z	物理数据 (¹ H-NMR, DMSO-d ₆ , 400 MHz)
				(t,2H), 3.82 (t,2H), 3.34 (s,3H), 2.46 (s,3H), 2.40 (s,3H)
1-119	Me	NH ₂	Cl	
1-120	Me	NHMe	Cl	
1-121	Me	NMe ₂	Cl	
1-122	Me	O(CH ₂) ₂ OMe	Cl	
1-123	Me	O(CH ₂) ₃ OMe	Cl	9.84 (bs,1H), 7.35 (d,1H), 7.32 (d,1H), 4.62 (t,2H), 4.00 (t,2H), 3.83 (t,2H), 3.64 (t,2H), 3.38 (s,3H), 3.35 (s,3H), 2.49 (s,3H), 2.11 (m,2H)
1-124	Me	O(CH ₂) ₄ OMe	Cl	
1-125	Me	O(CH ₂) ₂ SMe	Cl	11.45 (bs,1H), 7.51 (d,1H), 7.39 (d,1H), 4.54 (t,2H), 4.07 (t,2H), 3.75 (t,2H), 3.22 (s,3H), 2.92 (t,2H), 2.40 (s,3H), 2.16 (s,3H)
1-126	Me	O(CH ₂) ₂ SEt	Cl	
1-127	Me	O(CH ₂) ₃ SMe	Cl	
1-128	Me	OCH ₂ CONMe ₂	Cl	10.27 (brs,1H), 7.39 (d,1H), 7.32 (d,1H), 4.63 (t,2H), 4.60 (s,2H), 3.84 (t,2H), 3.35 (s,3H), 3.06 (s,3H), 3.01 (s,3H), 2.41 (s,3H)
1-129	Me	O(CH ₂) ₂ CONMe ₂	Cl	
1-130	Me	O(CH ₂) ₂ -NH(CO)NMe ₂	Cl	
1-131	Me	O(CH ₂) ₂ NH(CO)NHC O ₂ Et	Cl	
1-132	Me	O(CH ₂) ₂ NHCO ₂ Me	Cl	
1-133	Me	OCH ₂ NHSO ₂ cPr	Cl	
1-134	Me	O(CH ₂) ₅ -(2,4-二甲基 1,2,4-二氧)3H-1,2,4-三 唑-3-酮	Cl	
1-135	Me	O(CH ₂) ₃ ,5-二甲基-1,2- 噻唑-4-基	Cl	
1-136	Me	F	Cl	
1-137	Me	Cl	Cl	
1-138	Me	SMe	Cl	
1-139	Me	SOMe	Cl	
1-140	Me	SO ₂ Me	Cl	

[0170]

编号	X	Y	Z	物理数据 (¹ H-NMR, DMSO-d ₆ , 400 MHz)
1-141	Me	SEt	Cl	
1-142	Me	SOEt	Cl	
1-143	Me	SO ₂ Et	Cl	
1-144	Me	S(CH ₂) ₂ OMe	Cl	
1-145	Me	SO(CH ₂) ₂ OMe	Cl	
1-146	Me	SO ₂ (CH ₂) ₂ OMe	Cl	
1-147	Me	NH ₂	Br	
1-148	Me	NHMe	Br	
1-149	Me	NMe ₂	Br	
1-150	Me	OMe	Br	9.94 (bs,1H), 7.53 (d,1H), 7.27 (d,1H), 4.62 (t,2H), 3.85 (s,3H), 3.83 (t,2H), 3.34 (s,3H), 3.22 (s,3H), 2.51 (s,3H)
1-151	Me	OEt	Br	
1-152	Me	O(CH ₂) ₂ OMe	Br	9.86 (bs,1H), 7.52 (d,1H), 7.25 (d,1H), 4.62 (t,2H), 4.10 (t,2H), 3.84-3.78 (m,4H), 3.47 (s,3H), 3.36 (s,3H), 2.53 (s,3H)
1-153	Me	O(CH ₂) ₃ OMe	Br	9.81 (bs,1H), 7.52 (d,1H), 7.24 (d,1H), 4.61 (t,2H), 4.01 (t,2H), 3.83 (t,2H), 3.65 (t,2H), 3.38 (s,3H), 3.35 (s,3H), 2.50 (s,3H), 2.13 (m,2H)
1-154	Me	O(CH ₂) ₂ SMe	Br	11.46 (bs,1H), 7.65 (d,1H), 7.32 (d,1H), 4.54 (t,2H), 4.05 (t,2H), 3.75 (t,2H), 3.22 (s,3H), 2.93 (t,2H), 2.41 (s,3H), 2.17 (s,3H)
1-155	Me	O(CH ₂) ₂ SEt	Br	11.45 (bs,1H), 7.65 (d,1H), 7.32 (d,1H), 4.54 (t,2H), 4.03 (t,2H), 3.75 (t,2H), 3.22 (s,3H), 2.96 (t,2H), 2.63 (q,2H), 2.41 (s,3H), 1.22 (t,3H)
1-156	Me	O(CH ₂) ₃ SMe	Br	
1-157	Me	OCH ₂ CONMe ₂	Br	10.32 (bs,1H), 7.49 (d,1H), 7.32 (d,1H), 4.62 (t,2H), 4.57 (s,2H), 3.83 (t,2H), 3.35 (s,3H), 3.05 (s,3H), 3.01 (s,3H), 2.38 (s,3H)
1-158	Me	O(CH ₂) ₅ -吡咯烷-2-酮	Br	

[0171]

编号	X	Y	Z	物理数据 (¹ H-NMR, DMSO-d ₆ , 400 MHz)
1-159	Me	SMe	Br	
1-160	Me	SOMe	Br	
1-161	Me	SO ₂ Me	Br	
1-162	Me	SEt	Br	9.22 (bs,1H), 7.64 (d,1H), 7.28 (d,1H), 4.60 (t,2H), 3.82 (t,2H), 3.35 (s,3H), 2.88 (q,2H), 2.79 (s,3H), 1.24 (t,3H)
1-163	Me	SOEt	Br	9.60 (bs,1H), 7.56 (d,1H), 7.41 (d,1H), 4.60 (t,2H), 3.82 (t,2H), 3.35 (s,3H), 3.29-3.34 (m,1H), 3.10-3.15 (m,1H), 2.82 (s,3H), 1.42 (t,3H)
1-164	Me	SO ₂ Et	Br	9.38 (bs,1H), 7.78 (d,1H), 7.46 (bs,1H), 4.60 (t,2H), 3.82 (t,2H), 3.50 (q,2H), 3.37 (s,3H), 2.85 (s,3H), 1.39 (t,3H)
1-165	Me	SMe	I	
1-166	Me	SOMe	I	
1-167	Me	SO ₂ Me	I	
1-168	Me	SEt	I	
1-169	Me	SOEt	I	
1-170	Me	SO ₂ Et	I	
1-171	Me	Cl	CF ₃	9.95 (brs,1H), 7.68 (d,H), 7.56 (d,1H), 4.64 (t,2H), 3.83 (t,2H), 3.36 (s,3H), 2.59 (s,3H)
1-172	Me	SMe	CF ₃	7.74 (d,H), 7.68 (d,1H), 4.48 (m,2H), 3.74 (m,2H), 3.22 (s,3H), 2.70 (s,3H), 2.30 (s,3H)
1-173	Me	SOMe	CF ₃	7.90 (s,2H), 4.59 (t,2H), 3.76 (t,2H), 3.24 (s,3H), 3.06 (s,3H), 2.88 (s,3H)
1-174	Me	SO ₂ Me	CF ₃	7.89 (d,1H), 7.82 (d,1H), 4.37 (m,2H), 3.71 (m,2H), 3.37 (s,3H), 3.22 (s,3H), 2.75 (s,3H)
1-175	Me	SEt	CF ₃	
1-176	Me	SOEt	CF ₃	
1-177	Me	SO ₂ Et	CF ₃	
1-178	Me	S(CH ₂) ₂ OMe	CF ₃	
1-179	Me	S(O)(CH ₂) ₂ OMe	CF ₃	

[0172]

编号	X	Y	Z	物理数据 (¹ H-NMR, DMSO-d ₆ , 400 MHz)
1-180	Me	SO ₂ (CH ₂) ₂ OMe	CF ₃	
1-181	Me	SMe	OMe	
1-182	Me	SOMe	OMe	
1-183	Me	SO ₂ Me	OMe	
1-184	Me	SEt	OMe	
1-185	Me	SOEt	OMe	
1-186	Me	SO ₂ Et	OMe	
1-187	Me	Me	SMe	9.75 (brs,1H), 7.45 (d,1H), 7.08 (d,1H), 4.63 (t,2H), 3.83 (t,2H), 3.35 (s,1H), 2.50 (s,3H), 2.46 (s,3H), 2.32 (s,3H)
1-188	Me	Me	SO ₂ Me	9.90 (brs,1H), 8.02 (d,1H), 7.51 (d,1H), 4.64 (t,2H), 3.83 (t,2H), 3.35 (s,1H), 3.13 (s,3H), 2.70 (s,3H), 2.48 (s,3H)
1-189	Me	Me	SEt	
1-190	Me	Me	SO ₂ Et	
1-191	Me	4,5-二氢-1,2-噁唑-3-基	SO ₂ Me	
1-192	Me	4,5-二氢-1,2-噁唑-3-基	SO ₂ Et	
1-193	Me	5-氟甲基-4,5-二氢-1,2-噁唑-3-基	SO ₂ Me	
1-194	Me	5-氟甲基-4,5-二氢-1,2-噁唑-3-基	SO ₂ Et	
1-195	Me	NH ₂	SO ₂ Me	
1-196	Me	NHMe	SO ₂ Me	
1-197	Me	NMe ₂	SO ₂ Me	9.95 (brs,1H), 7.99 (d,1H), 7.51 (d,1H), 4.64 (t,2H), 3.84 (t,2H), 3.37 (s,1H), 3.27 (s,3H), 2.92 (s,6H), 2.50 (s,3H)
1-198	Me	NHEt	SO ₂ Me	
1-199	Me	NHnPr	SO ₂ Me	
1-200	Me	NHiPr	SO ₂ Me	9.87 (brs,1H), 7.80 (d,1H), 7.12 (d,1H), 4.64 (t,2H), 3.83 (t,2H), 3.77 (sept,1H), 3.36 (s,1H), 3.11 (s,3H), 2.41 (s,3H), 1.22 (d,6H)
1-201	Me	NHcPr	SO ₂ Me	9.71 (brs,1H), 7.75 (d,1H), 7.06 (d,1H), 6.25 (bs,1H), 4.64 (t,2H), 3.83 (t,2H), 3.36 (s,1H), 3.00

[0173]

编号	X	Y	Z	物理数据 (¹ H-NMR, DMSO-d ₆ , 400 MHz)
				(s,3H), 2.84 (m,1H), 2.60 (s,3H), 0.81 (m,2H), 0.61 (m,2H)
1-202	Me	NHiBu	SO ₂ Me	
1-203	Me	NHCH ₂ cPr	SO ₂ Me	
1-204	Me	NH(CH ₂) ₂ OMe	SO ₂ Me	9.95 (bs, 1H), 7.81 (d, 1H), 7.15 (d, 1H), 4.64 (t, 2H), 3.84 (t, 2H), 3.60 (t, 2H), 3.42 (t, 2H), 3.40 (s, 3H), 3.36 (s, 3H), 3.20 (s,3H), 2.43 (s, 3H)
1-205	Me	NH(CH ₂) ₂ OEt	SO ₂ Me	
1-206	Me	NH(CH ₂) ₃ OMe	SO ₂ Me	
1-207	Me	NHCH ₂ CH(OMe)Me	SO ₂ Me	
1-208	Me	NHCH ₂ CH(OMe)CH ₂ OMe	SO ₂ Me	
1-209	Me	NH(CH ₂) ₃ OEt	SO ₂ Me	
1-210	Me	NHCH ₂ -四氢呋喃-2-基	SO ₂ Me	9.91 (bs,1H), 7.81 (d,1H), 7.15 (d,1H), 4.64 (t,2H), 4.15 (m,1H), 3.91 (dd,1H), 3.84 (t,2H), 3.79 (dd,1H), 3.43 (dd,1H), 3.36 (s,3H), 3.24 (s,3H), 3.18 (dd,1H), 2.43 (s,3H), 2.09-1.90 (m,3H), 1.72-1.63 (m,1H)
1-211	Me	NHCH ₂ -(4-Me-[1,3]二氧戊环-2-基)	SO ₂ Me	
1-212	Me	NH(CH ₂) ₂ -(4-Me-[1,3]二氧戊环-2-基)	SO ₂ Me	
1-213	Me	NHCH ₂ -[1,3]二噁烷-2-基	SO ₂ Me	
1-214	Me	NHCH ₂ CONHEt	SO ₂ Me	
1-215	Me	吡唑-1-基	SO ₂ Me	11.80 (brs,1H), 8.11 (d,1H), 8.01 (d,1H), 7.99 (d,1H), 7.88 (d,1H), 6.59 (t,1H), 4.58 (t,2H), 3.77 (t,2H), 3.22 (s,3H), 3.05 (s,3H), 1.90 (s,3H)
1-216	Me	3,5-Me ₂ -吡唑-1-基	SO ₂ Me	
1-217	Me	1,2,3-三唑-1-基	SO ₂ Me	
1-218	Me	1,2,4-三唑-1-基	SO ₂ Me	
1-219	Me	OH	SO ₂ Me	
1-220	Me	OMe	SO ₂ Me	10.2 (brs,1H), 7.91 (d,1H), 7.50 (d,1H), 4.65 (t,2H), 3.98 (s,1H), 3.84

[0174]

编号	X	Y	Z	物理数据 (¹ H-NMR, DMSO-d ₆ , 400 MHz)
				(t,2H), 3.37 (s,3H), 3.26 (s,3H), 2.53 (s,3H)
1-221	Me	OMe	SO ₂ Et	
1-222	Me	OEt	SO ₂ Me	
1-223	Me	OEt	SO ₂ Et	
1-224	Me	OiPr	SO ₂ Me	
1-225	Me	OiPr	SO ₂ Et	
1-226	Me	O(CH ₂) ₂ OMe	SO ₂ Me	
1-227	Me	O(CH ₂) ₂ OMe	SO ₂ Et	
1-228	Me	O(CH ₂) ₃ OMe	SO ₂ Me	
1-229	Me	O(CH ₂) ₃ OMe	SO ₂ Et	
1-230	Me	O(CH ₂) ₄ OMe	SO ₂ Me	
1-231	Me	O(CH ₂) ₄ OMe	SO ₂ Et	
1-232	Me	O(CH ₂) ₂ SMe	SO ₂ Me	
1-233	Me	O(CH ₂) ₂ SEt	SO ₂ Me	
1-234	Me	O(CH ₂) ₃ SMe	SO ₂ Me	
1-235	Me	O(CH ₂) ₂ NHSO ₂ Me	SO ₂ Me	
1-236	Me	O(CH ₂) ₂ NHSO ₂ Me	SO ₂ Et	
1-237	Me	OCH ₂ (CO)NMe ₂	SO ₂ Me	10.5 (brs,1H), 7.94 (d,1H), 7.55 (d,1H), 4.82 (s,2H), 4.67 (t,2H), 3.83 (t,2H), 3.40 (s,3H), 3.36 (s,3H), 3.04 (s,3H), 2.95 (s,3H), 2.53 (s,3H)
1-238	Me	OCH ₂ (CO)NMe ₂	SO ₂ Et	
1-239	Me	OCH ₂ -四氢呋喃-2-基	SO ₂ Me	
1-240	Me	OCH ₂ -四氢呋喃-2-基	SO ₂ Et	
1-241	Me	[1,4]二噁烷-2-基甲氧基	SO ₂ Me	
1-242	Me	[1,4]二噁烷-2-基甲氧基	SO ₂ Et	
1-243	Me	F	SMe	
1-244	Me	F	SO ₂ Me	
1-245	Me	Cl	SO ₂ Me	10.05 (brs,1H), 8.11 (d,H), 7.61 (d,1H), 4.64 (t,2H), 3.84 (t,2H), 3.36 (s,3H), 3.32 (s,3H), 2.61 (s,3H)
1-246	Me	SMe	SO ₂ Me	7.99 (d,1H), 7.74 (d,1H), 4.49 (t,2H), 3.74 (t,2H), 3.52 (s,3H), 3.23 (s,3H), 2.69 (s,3H), 2.38 (s,3H)
1-247	Me	SOMe	SO ₂ Me	

[0175]

编号	X	Y	Z	物理数据 (¹ H-NMR, DMSO-d ₆ , 400 MHz)
1-248	Me	SO ₂ Me	SO ₂ Me	11.80 (brs,1H), 8.28 (d,1H), 8.08 (d,1H), 4.59 (t,2H), 3.77 (t,2H), 3.60 (s,1H), 3.58 (s,3H), 3.23 (s,3H), 2.72 (s,3H)
1-249	Me	SO ₂ Me	SO ₂ Et	
1-250	Me	SEt	SO ₂ Me	
1-251	Me	SOEt	SO ₂ Me	
1-252	Me	SO ₂ Et	SO ₂ Me	
1-253	Me	S(CH ₂) ₂ OMe	SO ₂ Me	
1-254	Me	SO(CH ₂) ₂ OMe	SO ₂ Me	
1-255	Me	SO ₂ (CH ₂) ₂ OMe	SO ₂ Me	
1-256	CH ₂ SMe	OMe	SO ₂ Me	
1-257	CH ₂ OMe	OMe	SO ₂ Me	
1-258	CH ₂ O(CH ₂) ₂ OMe	NH(CH ₂) ₂ OEt	SO ₂ Me	
1-259	CH ₂ O(CH ₂) ₂ OMe	NH(CH ₂) ₃ OEt	SO ₂ Me	
1-260	CH ₂ O(CH ₂) ₃ OMe	OMe	SO ₂ Me	
1-261	CH ₂ O(CH ₂) ₂ OMe	NH(CH ₂) ₂ OMe	SO ₂ Me	
1-262	CH ₂ O(CH ₂) ₂ OMe	NH(CH ₂) ₃ OMe	SO ₂ Me	
1-263	Et	NH(CH ₂) ₂ OMe	SO ₂ Me	
1-264	Et	OMe	SO ₂ Me	
1-265	Et	OMe	SO ₂ Et	
1-266	Et	OEt	SO ₂ Me	
1-267	Et	OEt	SO ₂ Et	
1-268	Et	OiPr	SO ₂ Me	
1-269	Et	OiPr	SO ₂ Et	
1-270	Et	O(CH ₂) ₂ OMe	SO ₂ Me	
1-271	Et	O(CH ₂) ₂ OMe	SO ₂ Et	
1-272	Et	O(CH ₂) ₃ OMe	SO ₂ Me	
1-273	Et	O(CH ₂) ₃ OMe	SO ₂ Et	
1-274	Et	F	SO ₂ Me	
1-275	Et	SMe	Cl	
1-276	Et	SOMe	Cl	
1-277	Et	SO ₂ Me	Cl	
1-278	Et	SMe	Br	
1-279	Et	SOMe	Br	

[0176]

编号	X	Y	Z	物理数据 (¹ H-NMR, DMSO-d ₆ , 400 MHz)
1-280	Et	SO ₂ Me	Br	
1-281	Et	SMe	I	
1-282	Et	SOMe	I	
1-283	Et	SO ₂ Me	I	
1-284	Et	SMe	CF ₃	
1-285	Et	SOMe	CF ₃	
1-286	Et	SO ₂ Me	CF ₃	
1-287	Et	SMe	SO ₂ Me	
1-288	Et	SOMe	SO ₂ Me	
1-289	Et	SO ₂ Me	SO ₂ Me	
1-290	nPr	SMe	Cl	
1-291	nPr	SOMe	Cl	
1-292	nPr	SO ₂ Me	Cl	
1-293	nPr	SMe	CF ₃	
1-294	nPr	SOMe	CF ₃	
1-295	nPr	SO ₂ Me	CF ₃	
1-296	iPr	SMe	Cl	
1-297	iPr	SOMe	Cl	
1-298	iPr	SO ₂ Me	Cl	
1-299	iPr	SMe	CF ₃	
1-300	iPr	SOMe	CF ₃	
1-301	iPr	SO ₂ Me	CF ₃	
1-302	cPr	SMe	CF ₃	
1-303	cPr	SO ₂ Me	CF ₃	
1-304	CF ₃	O(CH ₂) ₂ OMe	F	
1-305	CF ₃	O(CH ₂) ₃ OMe	F	
1-306	CF ₃	OCH ₂ CONMe ₂	F	
1-307	CF ₃	[1,4]二噁烷-2-基甲氧基	F	
1-308	CF ₃	O(CH ₂) ₂ OMe	Cl	
1-309	CF ₃	O(CH ₂) ₃ OMe	Cl	
1-310	CF ₃	OCH ₂ CONMe ₂	Cl	
1-311	CF ₃	[1,4]二噁烷-2-基甲氧基	Cl	
1-312	CF ₃	O(CH ₂) ₂ OMe	Br	
1-313	CF ₃	O(CH ₂) ₂ OMe	Br	
1-314	CF ₃	O(CH ₂) ₃ OMe	Br	
1-315	CF ₃	OCH ₂ CONMe ₂	Br	
1-316	CF ₃	[1,4]二噁烷-2-基甲氧基	Br	

[0177]

编号	X	Y	Z	物理数据 (¹ H-NMR, DMSO-d ₆ , 400 MHz)
1-317	CF ₃	O(CH ₂) ₂ OMe	I	
1-318	CF ₃	O(CH ₂) ₃ OMe	I	
1-319	CF ₃	OCH ₂ CONMe ₂	I	
1-320	CF ₃	[1,4]二噁烷-2-基甲氧基	I	
1-321	CF ₃	F	SO ₂ Me	
1-322	CF ₃	F	SO ₂ Et	
1-323	CF ₃	O(CH ₂) ₂ OMe	SO ₂ Me	
1-324	CF ₃	O(CH ₂) ₂ OMe	SO ₂ Et	
1-325	CF ₃	O(CH ₂) ₃ OMe	SO ₂ Me	
1-326	CF ₃	O(CH ₂) ₃ OMe	SO ₂ Et	
1-327	CF ₃	OCH ₂ CONMe ₂	SO ₂ Me	
1-328	CF ₃	OCH ₂ CONMe ₂	SO ₂ Et	
1-329	CF ₃	[1,4]二噁烷-2-基甲氧基	SO ₂ Me	
1-330	CF ₃	[1,4]二噁烷-2-基甲氧基	SO ₂ Et	
1-331	F	SMe	CF ₃	
1-332	F	SOMe	CF ₃	
1-333	F	SO ₂ Me	CF ₃	
1-334	Cl	SMe	H	
1-335	Cl	SOMe	H	
1-336	Cl	SO ₂ Me	H	
1-337	Cl	SEt	H	
1-338	Cl	SOEt	H	
1-339	Cl	SO ₂ Et	H	
1-340	Cl	S(CH ₂) ₂ OMe	H	
1-341	Cl	SO(CH ₂) ₂ OMe	H	
1-342	Cl	SO ₂ (CH ₂) ₂ OMe	H	
1-343	Cl	SMe	Me	7.40-7.42 (m,1H), 7.08-7.10 (m,1H), 4.30-4.60 (m,2H), 3.70-3.75 (m,2H), 3.35-3.50 (m,2H), 2.54 (s,3H), 2.29 (s,3H)
1-344	Cl	SOMe	Me	9.52 (bs,1H), 7.62 (d,1H), 7.30 (d,1H), 4.60 (t,2H), 3.82 (t,2H), 3.37 (s,3H), 2.98 (s,3H), 2.78 (s,3H)
1-345	Cl	SO ₂ Me	Me	9.45 (bs,1H), 7.69 (d,1H), 7.39 (d,1H), 4.59 (t,2H), 3.82 (t,2H), 3.40 (s,3H), 3.29 (s,3H), 2.83 (s,3H)

[0178]

编号	X	Y	Z	物理数据 (¹ H-NMR, DMSO-d ₆ , 400 MHz)
1-346	Cl	SEt	Me	
1-347	Cl	SOEt	Me	
1-348	Cl	SO ₂ Et	Me	
1-349	Cl	Me	Cl	9.71 (brs,1H), 7.49 (d,1H), 7.42 (d,1H), 4.62 (t,2H), 3.83 (t,2H), 3.35 (s,3H), 2.53 (s,3H)
1-350	Cl	CH ₂ -吡咯烷-2-酮-1-基	Cl	9.8 (brs,1H), 7.60 (d,1H), 7.50 (d,1H), 4.83 (s,2H), 4.61 (t,2H), 3.83 (t,2H), 3.38 (s,1H), 3.13 (m,2H), 2.39 (m,2H), 1.96 (m,2H)
1-351	Cl	CH ₂ (4-甲基-3-异丙氧基-1,2,4-三唑啉-5-酮-1-基)	Cl	
1-352	Cl	CH ₂ (4-甲基-3-三氟乙氧基-1,2,4-三唑啉-5-酮-1-基)	Cl	
1-353	Cl	NH ₂	Cl	9.55 (brs,1H), 7.32 (d,1H), 7.01 (d,1H), 4.71 (s,2H), 4.61 (t,2H), 3.82 (t,2H), 3.35 (s,3H)
1-354	Cl	NHAc	Cl	
1-355	Cl	NHCON(Me)OMe	Cl	
1-356	Cl	NHCH ₂ CONHEt	Cl	
1-357	Cl	NHCH ₂ CONHiPr	Cl	
1-358	Cl	NHCHMeCONHEt	Cl	
1-359	Cl	咪唑啉-2-酮-1-基	Cl	11.4 (brs,1H), 7.49 (d,1H), 7.42 (d,1H), 6.02 (brs,1H), 4.64 (t,2H), 3.85-3.68 (m,6H), 3.33 (s,3H)
1-360	Cl	1-甲基-1,2,4-三唑啉-3,5-二酮-4-基)	Cl	10.6 (brs,1H), 9.8 (brs,1H), 7.70 (d,1H), 7.54 (d,1H), 4.65 (t,2H), 3.83 (t,2H), 3.35 (s,3H), 3.33 (s,3H)
1-361	Cl	OMe	Cl	9.85 (bs,1H), 7.48 (d,1H), 7.45 (d,1H), 4.62 (t,2H), 3.94 (s,3H), 3.83 (t,2H), 3.36 (s,3H)
1-362	Cl	OEt	Cl	9.90 (bs,1H), 7.46 (d,1H), 7.44 (d,1H), 4.63 (t,2H), 4.13 (q,2H), 3.83 (t,2H), 3.36 (s,3H), 1.48 (t,3H)
1-363	Cl	OPr	Cl	

[0179]

编号	X	Y	Z	物理数据 (¹ H-NMR, DMSO-d ₆ , 400 MHz)
1-364	Cl	O-烯丙基	Cl	
1-365	Cl	OCH ₂ CHF ₂	Cl	
1-366	Cl	O(CH ₂) ₂ OMe	Cl	9.32 (bs,1H), 7.47 (d,1H), 7.45 (d,1H), 4.59 (t,2H), 4.21 (t,2H), 3.81 (q,2H), 3.46 (s,3H), 3.36 (s,3H)
1-367	Cl	O(CH ₂) ₃ OMe	Cl	
1-368	Cl	OCH ₂ (CO)NMe ₂	Cl	9.95 (brs,1H), 7.80 (d,1H), 7.44 (d,1H), 4.68 (s,2H), 4.60 (t,2H), 3.83 (t,2H), 3.36 (s,1H) 3.09 (s,3H), 3.01 (s,3H)
1-369	Cl	O(CH ₂) ₅ -吡咯烷-2-酮	Cl	
1-370	Cl	Cl	Cl	9.95 (brs,1H), 7.58 (d,1H), 7.54 (d,1H), 4.64 (t,2H), 3.84 (t,2H), 3.37 (s,1H)
1-371	Cl	SMe	Cl	
1-372	Cl	SOMe	Cl	
1-373	Cl	SO ₂ Me	Cl	
1-374	Cl	SEt	Cl	
1-375	Cl	SOEt	Cl	
1-376	Cl	SO ₂ Et	Cl	
1-377	Cl	Me	Br	
1-378	Cl	CH ₂ (4-甲基-3-异丙氧基-1,2,4-三唑啉-5-酮-1-基)	Br	
1-379	Cl	CH ₂ (4-甲基-3-三氟乙氧基-1,2,4-三唑啉-5-酮-1-基)	Br	
1-380	Cl	NHAc	Br	
1-381	Cl	NHCON(Me)OMe	Br	
1-382	Cl	NHCH ₂ CONHEt	Br	
1-383	Cl	NHCH ₂ CONHiPr	Br	
1-384	Cl	NHCHMeCONHEt	Br	
1-385	Cl	OMe	Br	9.49 (bs,1H), 7.62 (d,1H), 7.40 (d,1H), 4.60 (t,2H), 3.92 (s,3H), 3.82 (t,2H), 3.37 (s,3H),
1-386	Cl	OEt	Br	
1-387	Cl	OPr	Br	
1-388	Cl	OAllyl	Br	
1-389	Cl	OCH ₂ CHF ₂	Br	

[0180]

编号	X	Y	Z	物理数据 (¹ H-NMR, DMSO-d ₆ , 400 MHz)
1-390	Cl	O(CH ₂) ₂ OMe	Br	11.71 (bs,1H), 7.81 (d,1H), 7.40 (d,1H), 4.56 (t,2H), 4.24 (t,2H), 3.77 (t,2H), 3.74 (t,2H), 3.35 (s,3H), 3.23 (s,3H)
1-391	Cl	O(CH ₂) ₃ OMe	Br	
1-392	Cl	OCH ₂ (CO)NMe ₂	Br	
1-393	Cl	O(CH ₂) ₅ -吡咯烷-2-酮	Br	
1-394	Cl	Cl	Br	
1-395	Cl	SMe	Br	
1-396	Cl	SOMe	Br	
1-397	Cl	SO ₂ Me	Br	
1-398	Cl	SEt	Br	
1-399	Cl	SOEt	Br	
1-400	Cl	SO ₂ Et	Br	
1-401	Cl	Me	SMe	
1-402	Cl	Me	SO ₂ Me	
1-403	Cl	Me	SO ₂ Et	
1-404	Cl	CO ₂ H	SO ₂ Me	
1-405	Cl	COOMe	SO ₂ Me	
1-406	Cl	CONMe ₂	SO ₂ Me	
1-407	Cl	CONMe(OMe)	SO ₂ Me	
1-408	Cl	CH ₂ N(OMe)Et	SO ₂ Me	
1-409	Cl	CH ₂ OMe	SO ₂ Me	
1-410	Cl	CH ₂ OMe	SO ₂ Et	
1-411	Cl	CH ₂ OEt	SO ₂ Me	
1-412	Cl	CH ₂ OEt	SO ₂ Et	
1-413	Cl	CH ₂ OiPr	SO ₂ Me	
1-414	Cl	CH ₂ O 环戊基	SO ₂ Me	
1-415	Cl	CH ₂ OCH ₂ CHF ₂	SO ₂ Me	
1-416	Cl	CH ₂ OCH ₂ CF ₃	SMe	9.74 (bs,1H), 7.70 (d,1H), 7.27 (d,1H), 4.99 (s,2H), 4.61 (t,2H), 4.27 (q,2H), 3.72 (t,2H), 3.29 (s,3H), 3.22 (s,3H)
1-417	Cl	CH ₂ OCH ₂ CF ₃	SO ₂ Me	7.99 (d,1H), 7.75 (d,1H), 5.24 (s,2H), 4.37 (t,2H), 3.92 (q,2H), 3.81 (t,2H), 3.35 (s,3H), 2.55 (s,3H)
1-418	Cl	CH ₂ OCH ₂ CF ₃	SO ₂ Et	
1-419	Cl	CH ₂ OCH ₂ CF ₂ CHF ₂	SO ₂ Me	
1-420	Cl	CH ₂ O(CH ₂) ₂ OMe	SO ₂ Me	

[0181]

编号	X	Y	Z	物理数据 (¹ H-NMR, DMSO-d ₆ , 400 MHz)
1-421	Cl	CH ₂ PO ₃ Me ₂	SO ₂ Me	
1-422	Cl	CH ₂ O-四氢呋喃-3-基	SO ₂ Me	
1-423	Cl	CH ₂ O-四氢呋喃-3-基	SO ₂ Et	
1-424	Cl	CH ₂ OCH ₂ -四氢呋喃-2-基	SO ₂ Me	9.65 (bs,1H), 8.18 (d,1H), 7.77 (d,1H), 5.20 (s,2H), 4.61 (t,2H), 4.08 (m,1H), 3.83 (t,2H), 3.82-3.58 (m,4H), 3.37 (s,3H), 3.33 (s,3H), 2.0-1.8 (m,3H), 1.63-1.5 (m,1H),
1-425	Cl	CH ₂ OCH ₂ -四氢呋喃-2-基	SO ₂ Et	
1-426	Cl	CH ₂ OCH ₂ -四氢呋喃-3-基	SO ₂ Me	
1-427	Cl	CH ₂ OCH ₂ -四氢呋喃-3-基	SO ₂ Et	
1-428	Cl	4,5-二氢-1,2-噁唑-3-基	SMe	
1-429	Cl	4,5-二氢-1,2-噁唑-3-基	SO ₂ Me	
1-430	Cl	4,5-二氢-1,2-噁唑-3-基	SO ₂ Et	
1-431	Cl	5-氟甲基-4,5-二氢-1,2-噁唑-3-基	SO ₂ Me	
1-432	Cl	5-氟甲基-4,5-二氢-1,2-噁唑-3-基	SO ₂ Et	10.35 (bs,1H), 8.14 (d,1H), 7.93 (d,1H), 5.16 (m,1H), 4.65 (t,2H), 3.84 (t,2H), 3.73 (dd,1H), 3.38 (s,3H), 3.37 (q,2H), 3.27 (dd,1H), 2.95 (dd, 1H), 2.85 (dd,1H), 1.31 (t,3H)
1-433	Cl	5-(MeOCH ₂)4,5-二氢-1,2-噁唑-3-基	SO ₂ Me	
1-434	Cl	5-(MeOCH ₂)4,5-二氢-1,2-噁唑-3-基	SO ₂ Et	
1-435	Cl	5-Me-5-(MeOCH ₂)4,5-二氢-1,2-噁唑-3-基	SO ₂ Me	
1-436	Cl	5-Me-5-(MeOCH ₂)4,5-二氢-1,2-噁唑-3-基	SO ₂ Et	
1-437	Cl	NH ₂	SO ₂ Me	
1-438	Cl	NHMe	SO ₂ Me	
1-439	Cl	NMe ₂	SO ₂ Me	
1-440	Cl	NH(CH ₂) ₂ OMe	SO ₂ Me	
1-441	Cl	NH(CH ₂) ₂ OMe	SO ₂ Et	
1-442	Cl	NH(CH ₂) ₂ OEt	SO ₂ Me	
1-443	Cl	NH(CH ₂) ₃ OMe	SO ₂ Me	

[0182]

编号	X	Y	Z	物理数据 (¹ H-NMR, DMSO-d ₆ , 400 MHz)
1-444	Cl	NH(CH ₂) ₃ OMe	SO ₂ Et	
1-445	Cl	NH(CH ₂) ₄ OMe	SO ₂ Me	
1-446	Cl	NH(CH ₂) ₄ OMe	SO ₂ Et	
1-447	Cl	吡唑-1-基	SO ₂ Me	
1-448	Cl	OMe	SO ₂ Me	
1-449	Cl	OMe	SO ₂ Et	
1-450	Cl	OEt	SO ₂ Me	9.41 (bs,1H), 8.02 (d,1H), 7.56 (bd,1H), 4.61 (t,2H), 4.32 (q,2H), 3.84 (t,2H), 3.39 (s,3H), 3.29 (s,3H), 1.42 (t,3H)
1-451	Cl	OEt	SO ₂ Et	
1-452	Cl	OPr	SO ₂ Me	9.56 (bs,1H), 8.02 (d,1H), 7.55 (bd,1H), 4.62 (t,2H), 4.22 (t,2H), 3.84 (t,2H), 3.39 (s,3H), 3.28 (s,3H), 1.95 (quin,2H), 1.09 (t,3H)
1-453	Cl	OPr	SO ₂ Et	11.86 (bs,1H), 7.93 (d,1H), 7.71 (d,1H), 4.58 (t,2H), 4.15 (t,2H), 3.78 (t,2H), 3.51 (q,2H), 3.24 (s,3H), 1.88 (sex,2H), 1.13 (t,3H), 1.05 (t,3H)
1-454	Cl	OiPr	SO ₂ Me	
1-455	Cl	OiPr	SO ₂ Et	
1-456	Cl	O 烯丙基	SO ₂ Me	9.35 (bs,1H), 8.03 (d,1H), 7.58 (bd,1H), 6.19 (m,1H), 5.51 (dd,1H), 5.37 (dd,1H), 4.75 (d,2H), 4.61 (t,2H), 3.84 (t,2H), 3.40 (s,3H), 3.28 (s,3H)
1-457	Cl	O 烯丙基	SO ₂ Et	
1-458	Cl	O 炔丙基	SO ₂ Me	9.63 (bs,1H), 8.03 (d,1H), 7.61 (bd,1H), 4.92 (s,2H), 4.63 (t,2H), 3.84 (t,2H), 3.40 (s,3H), 3.32 (s,3H), 2.66 (t,1H)
1-459	Cl	O 炔丙基	SO ₂ Et	
1-460	Cl	O(CH ₂) ₂ F	SO ₂ Me	9.50 (bs,1H), 8.04 (d,1H), 7.52 (bd,1H), 3.89-3.91 (m,1H), 4.77-4.79 (m,1H), 4.62 (t,2H), 4.55 (bs,1H), 4.48 (bs,1H), 3.84 (t,2H), 3.40 (s,3H), 3.31 (s,3H)
1-461	Cl	O(CH ₂) ₂ F	SO ₂ Et	

[0183]

编号	X	Y	Z	物理数据 (¹ H-NMR, DMSO-d ₆ , 400 MHz)
1-462	Cl	O(CH ₂) ₂ Cl	SO ₂ Me	9.56 (bs,1H), 8.04 (d,1H), 7.52 (bd,1H), 4.62 (t,2H), 4.51 (t,2H), 3.95 (t,2H), 3.84 (t,2H), 3.41 (s,3H), 3.32 (s,3H)
1-463	Cl	O(CH ₂) ₂ Cl	SO ₂ Et	9.61 (bs,1H), 8.02 (d,1H), 7.60 (bd,1H), 4.62 (t,2H), 4.50 (t,2H), 3.94 (t,2H), 3.84 (t,2H), 3.48 (q,2H), 3.40 (s,3H), 1.28 (t,3H)
1-464	Cl	OCH ₂ cPr	SO ₂ Me	9.42 (bs,1H), 8.02 (d,1H), 7.55 (d,1H), 4.61 (t,2H), 4.09 (d,2H), 3.83 (t,2H), 3.39 (s,3H), 3.33 (s,3H), 1.40-1.49 (m,1H), 0.65-0.70 (m,2H), 0.45-0.50 (m,2H)
1-465	Cl	OCH ₂ cPr	SO ₂ Et	9.50 (bs,1H), 8.00 (d,1H), 7.56 (d,1H), 4.62 (t,2H), 4.08 (d,2H), 3.84 (t,2H), 3.51 (q,2H), 3.38 (s,3H), 1.42-1.46 (m,1H), 1.27 (t,3H), 0.65-0.70 (m,2H), 0.44-0.48 (m,2H)
1-466	Cl	OCH ₂ cBu	SO ₂ Me	9.41 (bs,1H), 8.02 (d,1H), 7.55 (d,1H), 4.62 (t,2H), 4.24 (d,2H), 3.84 (t,2H), 3.39 (s,3H), 3.27 (s,3H), 2.89-2.98 (m,1H), 2.13-2.21 (m,2H), 1.90-2.05 (m,4H)
1-467	Cl	OCH ₂ cBu	SO ₂ Et	
1-468	Cl	O(CH ₂) ₂ OMe	SO ₂ Me	7.76 (d,1H), 7.47 (d,1H), 4.33 (t,2H), 4.27 (t,2H), 3.77 (q,2H), 3.71 (t,2H), 3.36 (s,6H), 3.29 (s,3H)
1-469	Cl	O(CH ₂) ₂ OMe	SO ₂ Et	
1-470	Cl	O(CH ₂) ₂ OEt	SO ₂ Me	
1-471	Cl	O(CH ₂) ₃ OMe	SO ₂ Me	
1-472	Cl	O(CH ₂) ₃ OMe	SO ₂ Et	
1-473	Cl	O(CH ₂) ₄ OMe	SO ₂ Me	
1-474	Cl	O(CH ₂) ₄ OMe	SO ₂ Et	

[0184]

编号	X	Y	Z	物理数据 (¹ H-NMR, DMSO-d ₆ , 400 MHz)
1-475	Cl	O(CH ₂) ₂ OCF ₃	SO ₂ Me	11.88 (bs,1H), 7.97 (d,1H), 7.75 (d,1H), 4.57 (q,2H), 4.54-4.56 (m,2H), 4.43-4.48 (m,2H), 3.78 (t,2H), 3.40 (s,3H), 3.24 (s,3H)
1-476	Cl	O(CH ₂) ₂ OCF ₃	SO ₂ Et	11.88 (bs,1H), 7.96 (d,1H), 7.76 (d,1H), 4.58 (t,2H), 4.53-4.56 (m,2H), 4.43-4.46 (m,2H), 3.78 (t,2H), 3.42 (q,2H), 3.24 (s,3H), 1.15 (t,3H)
1-477	Cl	O(CH ₂) ₂ SMe	SO ₂ Me	
1-478	Cl	O(CH ₂) ₂ SEt	SO ₂ Me	
1-479	Cl	O(CH ₂) ₃ SMe	SO ₂ Me	
1-480	Cl	OCH ₂ -四氢呋喃-2-基	SO ₂ Me	
1-481	Cl	OCH ₂ -四氢呋喃-2-基	SO ₂ Et	
1-482	Cl	[1,4]二噁烷-2-基甲氧基	SO ₂ Me	
1-483	Cl	[1,4]二噁烷-2-基甲氧基	SO ₂ Et	
1-484	Cl	OCH ₂ (CO)NMe ₂	SO ₂ Me	10.6 (brs,1H), 8.02 (d,1H), 7.63 (d,1H), 4.94 (s,2H), 4.64 (t,2H), 3.84 (t,2H), 3.44 (s,3H), 3.37 (s,3H), 3.03 (s,3H), 2.93 (s,3H)
1-485	Cl	OCH ₂ (CO)NMe ₂	SO ₂ Et	10.7 (bs,1H), 8.00 (d,1H), 7.63 (d,1H), 4.93 (s,2H), 4.65 (t,2H), 3.83 (t,2H), 3.64 (q,2H), 3.36 (s,3H), 3.02 (s,3H), 2.94 (s,3H), 1.26 (t,3H)
1-486	Cl	F	SMe	
1-487	Cl	Cl	SO ₂ Me	9.9 (brs,1H), 8.21 (d,1H), 7.74 (d,1H), 4.63 (t,2H), 3.84 (t,2H), 3.39 (s,3H), 3.33 (s,3H)
1-488	Cl	SMe	SO ₂ Me	11.9 (brs,1H), 8.15 (d,1H), 7.94 (d,1H), 4.58 (t,2H), 3.78 (t,2H), 3.59 (s,3H), 3.24 (s,3H), 2.50 (s,3H)
1-489	Cl	SOMe	SO ₂ Me	11.8 (brs,1H), 8.05 (d,1H), 7.89 (d,1H), 4.42 (t,2H), 3.73 (t,2H), 3.51 (s,3H), 3.22 (s,3H), 3.18 (s,3H),

[0185]

编号	X	Y	Z	物理数据 (¹ H-NMR, DMSO-d ₆ , 400 MHz)
1-490	Cl	SO ₂ Me	SO ₂ Me	12.0 (brs,1H), 8.39 (d,1H), 8.27 (d,1H), 4.59 (t,2H), 3.78 (t,2H), 3.67 (s,3H), 3.58 (s,3H), 3.24 (s,3H),
1-491	Br	OMe	Br	9.80 (brs,1H), 7.65 (d,1H), 7.30 (d,1H), 4.65 (t,2H), 3.92 (s,3H), 3.84 (t,2H), 3.36 (s,3H)
1-492	Br	O(CH ₂) ₂ OMe	Br	
1-493	Br	O(CH ₂) ₃ OMe	Br	
1-494	Br	OMe	SO ₂ Me	9.60 (brs,1H), 7.89 (d,1H), 7.23 (d,1H), 4.66 (t,2H), 4.06 (s,3H), 3.82 (t,2H), 3.41 (s,3H), 3.22 (s,3H)
1-495	Br	OMe	SO ₂ Et	
1-496	Br	OEt	SO ₂ Me	
1-497	Br	OEt	SO ₂ Et	
1-498	Br	OPr	SO ₂ Me	
1-499	Br	OPr	SO ₂ Et	
1-500	Br	O(CH ₂) ₂ OMe	SO ₂ Me	
1-501	Br	O(CH ₂) ₂ OMe	SO ₂ Et	
1-502	Br	O(CH ₂) ₃ OMe	SO ₂ Me	
1-503	Br	O(CH ₂) ₃ OMe	SO ₂ Et	
1-504	Br	O(CH ₂) ₄ OMe	SO ₂ Me	
1-505	Br	O(CH ₂) ₄ OMe	SO ₂ Et	
1-506	Br	[1,4]二噁烷-2-基甲氧基	SO ₂ Me	
1-507	Br	[1,4]二噁烷-2-基甲氧基	SO ₂ Et	
1-508	I	O(CH ₂) ₂ OMe	SO ₂ Me	
1-509	I	O(CH ₂) ₂ OMe	SO ₂ Et	
1-510	I	O(CH ₂) ₃ OMe	SO ₂ Me	
1-511	I	O(CH ₂) ₃ OMe	SO ₂ Et	
1-512	I	O(CH ₂) ₄ OMe	SO ₂ Me	
1-513	I	O(CH ₂) ₄ OMe	SO ₂ Et	
1-514	I	[1,4]二噁烷-2-基甲氧基	SO ₂ Me	
1-515	I	[1,4]二噁烷-2-基甲氧基	SO ₂ Et	
1-516	OH	SO ₂ Me	CF ₃	
1-517	OMe	SMe	CF ₃	7.76 (d,H), 7.68 (d,1H),

[0186]

编号	X	Y	Z	物理数据 (¹ H-NMR, DMSO-d ₆ , 400 MHz)
				4.53 (t,2H), 3.96 (s,3H), 3.77 (t,2H), 3.24 (s,3H), 2.44 (s,3H)
1-518	OMe	SOMe	CF ₃	7.76 (d,1H), 7.68 (d,1H), 4.53 (t,2H), 3.96 (s,3H), 3.77 (t,2H), 3.24 (s,3H), 2.44 (s,3H)
1-519	OMe	SO ₂ Me	CF ₃	
1-520	OMe	SEt	CF ₃	
1-521	OMe	SOEt	CF ₃	
1-522	OMe	SO ₂ Et	CF ₃	
1-523	OMe	S(CH ₂) ₂ OMe	CF ₃	
1-524	OMe	SO(CH ₂) ₂ OMe	CF ₃	
1-525	OMe	SO ₂ (CH ₂) ₂ OMe	CF ₃	
1-526	OMe	CH ₂ N(SO ₂ Me)Et	Cl	
1-527	OMe	NHCOMe	Cl	10.26 (bs,1H), 7.99 (d,1H), 7.38 (d,1H), 4.57 (t,2H), 3.95 (s,3H), 3.80 (t,2H), 3.30 (s,3H), 2.30 (bs,3H)
1-528	OMe	NHCOEt	Cl	
1-529	OMe	NHCOiPr	Cl	
1-530	OMe	NHCOcycPr	Cl	
1-531	OMe	NHCOCHCMe ₂	Cl	
1-532	OMe	NHCOPh	Cl	
1-533	OMe	SMe	Cl	
1-534	OMe	SOMe	Cl	
1-535	OMe	SO ₂ Me	Cl	
1-536	OMe	SEt	Cl	
1-537	OMe	SOEt	Cl	
1-538	OMe	SO ₂ Et	Cl	
1-539	OMe	S(CH ₂) ₂ OMe	Cl	
1-540	OMe	SO(CH ₂) ₂ OMe	Cl	
1-541	OMe	SO ₂ (CH ₂) ₂ OMe	Cl	
1-542	OEt	SMe	Cl	
1-543	OEt	SOMe	Cl	
1-544	OEt	SO ₂ Me	Cl	
1-545	OCH ₂ c-Pr	SMe	CF ₃	
1-546	OCH ₂ c-Pr	SOMe	CF ₃	
1-547	OCH ₂ c-Pr	SO ₂ Me	CF ₃	
1-548	OCH ₂ c-Pr	SEt	CF ₃	

[0187]

编号	X	Y	Z	物理数据 (¹ H-NMR, DMSO-d ₆ , 400 MHz)
1-549	OCH ₂ c-Pr	SOEt	CF ₃	
1-550	OCH ₂ c-Pr	SO ₂ Et	CF ₃	
1-551	OCH ₂ c-Pr	S(CH ₂) ₂ OMe	CF ₃	
1-552	OCH ₂ c-Pr	SO(CH ₂) ₂ OMe	CF ₃	
1-553	OCH ₂ c-Pr	SO ₂ (CH ₂) ₂ OMe	CF ₃	
1-554	OCH ₂ c-Pr	SMe	Cl	
1-555	OCH ₂ c-Pr	SOMe	Cl	
1-556	OCH ₂ c-Pr	SO ₂ Me	Cl	
1-557	OCH ₂ c-Pr	SEt	Cl	
1-558	OCH ₂ c-Pr	SOEt	Cl	
1-559	OCH ₂ c-Pr	SO ₂ Et	Cl	
1-560	OCH ₂ c-Pr	S(CH ₂) ₂ OMe	Cl	
1-561	OCH ₂ c-Pr	SO(CH ₂) ₂ OMe	Cl	
1-562	OCH ₂ c-Pr	SO ₂ (CH ₂) ₂ OMe	Cl	
1-563	OCH ₂ c-Pr	SMe	SO ₂ Me	
1-564	OCH ₂ c-Pr	SOMe	SO ₂ Me	
1-565	OCH ₂ c-Pr	SO ₂ Me	SO ₂ Me	
1-566	OCH ₂ c-Pr	SEt	SO ₂ Me	
1-567	OCH ₂ c-Pr	SOEt	SO ₂ Me	
1-568	OCH ₂ c-Pr	SO ₂ Et	SO ₂ Me	
1-569	OCH ₂ c-Pr	S(CH ₂) ₂ OMe	SO ₂ Me	
1-570	OCH ₂ c-Pr	SO(CH ₂) ₂ OMe	SO ₂ Me	
1-571	OCH ₂ c-Pr	SO ₂ (CH ₂) ₂ OMe	SO ₂ Me	
1-572	OSO ₂ Me	SMe	CF ₃	11.87 (brs,1H), 7.98 (d,1H), 7.94 (d,1H), 4.57 (t,2H), 3.78 (t,2H), 3.61 (s,3H), 3.24 (s,3H), 2.52 (s,3H)
1-573	OSO ₂ Me	SOMe	CF ₃	
1-574	OSO ₂ Me	SO ₂ Me	CF ₃	
1-575	SMe	SMe	H	
1-576	SO ₂ Me	SO ₂ Me	H	
1-577	SMe	SMe	F	
1-578	SMe	SEt	F	
1-579	SO ₂ Me	NHEt	Cl	
1-580	SMe	OCH ₂ CHF ₂	Br	
1-581	SO ₂ Me	F	CF ₃	
1-582	SO ₂ Me	NH ₂	CF ₃	
1-583	Cl	SMe	CF ₃	11.9 (brs,1H), 7.98 (d,1H), 7.93 (d,1H), 4.59

[0188]

编号	X	Y	Z	物理数据 (¹ H-NMR, DMSO-d ₆ , 400 MHz)
				(t,2H), 3.78 (t,2H), 3.24 (s,3H), 2.45 (s,3H)
1-584	Cl	SOMe	CF ₃	11.9 (brs,1H), 8.07 (s,2H), 4.59 (t,2H), 3.78 (t,2H), 3.24 (s,3H), 3.16 (s,3H)
1-585	Cl	SO ₂ Me	CF ₃	12.0 (brs,1H), 8.21 (2d, 2H), 4.59 (t,2H), 3.78 (t,2H), 3.54 (s,3H), 3.24 (s,3H)
1-586	Cl	OCHF ₂	SO ₂ Me	10.95 (bs,1H), 8.11 (d,1H) 7.74 (bd,1H), 6.84 (t,1H), 4.64 (t,2H), 3.84 (t,2H), 3.40 (s,3H), 3.28 (s,3H)
1-587	Cl	OCHF ₂	SO ₂ Et	10.05 (bs,1H), 8.09 (d,1H), 7.75 (bd,1H), 6.86 (t,1H), 4.64 (t,2H), 3.84 (t,2H), 3.40 (q,2H), 3.40 (s,3H), 1.30 (t,3H)
1-588	Me	O(CH ₂) ₂ SOEt	Br	9.41 (bs,1H), 7.53 (d,1H), 7.23 (d,1H), 4.60 (t,2H), 4.31-4.42 (m,2H), 3.83 (t,2H), 3.37 (s,3H), 3.23-3.30 (m,1H), 3.02-3.09 (m,1H), 2.83-2.94 (m,2H), 2.54 (s,3H), 1.42 (t,3H)
1-589	Me	O(CH ₂) ₂ SO ₂ Et	Br	9.58 (bs,1H), 7.55 (d,1H), 7.24 (d,1H), 4.62 (t,2H), 4.35 (t,2H), 3.83 (t,2H), 3.50 (t,2H), 3.37 (s,3H), 3.29 (q,2H), 2.53 (s,3H), 1.48 (t,3H)
1-590	Cl	O(CH ₂) ₂ SMe	Cl	9.71 (bs,1H), 7.47 (s,2H), 4.61 (t,2H), 4.21 (t,2H), 3.82 (t,2H), 3.36 (s,3H), 2.98 (t,2H), 2.22 (s,3H)
1-591	Et	SEt	CF ₃	7.70 (d,1H), 7.57 (d,1H), 4.63 (t,2H), 3.83 (t,2H), 3.34 (s,3H), 3.27 (q,2H), 2.80 (q,2H), 1.29 – 1.23 (m,6H)
1-592	Et	SOEt	CF ₃	7.74 – 7.62 (m,2H), 4.62 (t,2H), 3.83 (t,2H), 3.63 (m,1H), 3.52 – 3.25 (m,2H), 3.35 (s,3H), 2.95 (m,1H), 1.46 (t,3H), 1.29 (t,3H)
1-593	Et	SO ₂ Et	CF ₃	7.91 (d,1H), 7.76 (m,1H), 4.61 (t,2H), 3.83 (t,2H), 3.50 – 3.13 (m,7H), 1.50

[0189]

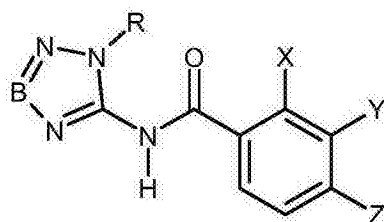
编号	X	Y	Z	物理数据 (¹ H-NMR, DMSO-d ₆ , 400 MHz)
				(t,3H), 1.34 (t,3H)
1-594	cPr	SOMe	CF ₃	
1-595	Et	SEt	Cl	
1-596	Et	SOEt	Cl	
1-597	Et	SO ₂ Et	Cl	
1-598	OMe	SMe	CHF ₂	8.21 (d,1H), 7.64 (d,1H), 7.23 (t,1H), 4.60 (t,2H), 4.12 (s,3H), 3.82 (t,2H), 3.35 (s,3H), 2.46 (s,3H) in CDCl ₃
1-599	OMe	SOMe	CHF ₂	
1-600	OMe	SO ₂ Me	CHF ₂	
1-601	OMe	SEt	CHF ₂	
1-602	OMe	SOEt	CHF ₂	
1-603	OMe	SO ₂ Et	CHF ₂	
1-604	OMe	S(CH ₂) ₂ OMe	CHF ₂	
1-605	OMe	SO(CH ₂) ₂ OMe	CHF ₂	
1-606	OMe	SO ₂ (CH ₂) ₂ OMe	CHF ₂	
1-607	CH ₂ OMe	SMe	Cl	
1-608	CH ₂ OMe	SOMe	Cl	
1-609	CH ₂ OMe	SO ₂ Me	Cl	
1-610	CH ₂ OMe	SEt	Cl	
1-611	CH ₂ OMe	SOEt	Cl	
1-612	CH ₂ OMe	SO ₂ Et	Cl	
1-613	CH ₂ OMe	S(CH ₂) ₂ OMe	Cl	
1-614	CH ₂ OMe	SO(CH ₂) ₂ OMe	Cl	
1-615	CH ₂ OMe	SO ₂ (CH ₂) ₂ OMe	Cl	
1-616	CH ₂ OMe	SMe	CF ₃	
1-617	CH ₂ OMe	SOMe	CF ₃	
1-618	CH ₂ OMe	SO ₂ Me	CF ₃	
1-619	CH ₂ OMe	SEt	CF ₃	
1-620	CH ₂ OMe	SOEt	CF ₃	
1-621	CH ₂ OMe	SO ₂ Et	CF ₃	
1-622	CH ₂ OMe	S(CH ₂) ₂ OMe	CF ₃	
1-623	CH ₂ OMe	SO(CH ₂) ₂ OMe	CF ₃	
1-624	CH ₂ OMe	SO ₂ (CH ₂) ₂ OMe	CF ₃	
1-625	CH ₂ OMe	SMe	SO ₂ Me	
1-626	CH ₂ OMe	SOMe	SO ₂ Me	
1-627	CH ₂ OMe	SO ₂ Me	SO ₂ Me	
1-628	CH ₂ OMe	SEt	SO ₂ Me	

[0190]

编号	X	Y	Z	物理数据 (¹ H-NMR, DMSO-d ₆ , 400 MHz)
1-629	CH ₂ OMe	SOEt	SO ₂ Me	
1-630	CH ₂ OMe	SO ₂ Et	SO ₂ Me	
1-631	CH ₂ OMe	S(CH ₂) ₂ OMe	SO ₂ Me	
1-632	CH ₂ OMe	SO(CH ₂) ₂ OMe	SO ₂ Me	
1-633	CH ₂ OMe	SO ₂ (CH ₂) ₂ OMe	SO ₂ Me	
1-634	Et	SEt	SO ₂ Me	
1-635	Et	SOEt	SO ₂ Me	
1-636	Et	SO ₂ Et	SO ₂ Me	
1-637	Cl	S(CH ₂) ₂ OMe	Cl	
1-638	Cl	SO(CH ₂) ₂ OMe	Cl	
1-639	Cl	SO ₂ (CH ₂) ₂ OMe	Cl	
1-640	Cl	SEt	SO ₂ Me	
1-641	Cl	SOEt	SO ₂ Me	
1-642	Cl	SO ₂ Et	SO ₂ Me	
1-643	Cl	S(CH ₂) ₂ OMe	SO ₂ Me	
1-644	Cl	SO(CH ₂) ₂ OMe	SO ₂ Me	
1-645	Cl	SO ₂ (CH ₂) ₂ OMe	SO ₂ Me	
1-646	Cl	SEt	CF ₃	
1-647	Cl	SOEt	CF ₃	
1-648	Cl	SO ₂ Et	CF ₃	
1-649	Cl	S(CH ₂) ₂ OMe	CF ₃	
1-650	Cl	SO(CH ₂) ₂ OMe	CF ₃	
1-651	Cl	SO ₂ (CH ₂) ₂ OMe	CF ₃	

[0191] 表 2 : 式 (I) 的本发明化合物, 其中 A 代表 CY

[0192]



[0193]

编号	B	R	X	Y	Z	物理数据 (¹ H-NMR, DMSO-d ₆ , 400 MHz)
2-1	N	(CH ₂) ₂ OH	Me	SO ₂ Me	CF ₃	7.81 (d,1H), 7.72 (d,1H), 4.35 (brs,1H), 4.15 (t,2H), 3.72 (t,2H), 3.35 (s,3H), 2.74 (s,3H)
2-2	N	(CH ₂) ₂ OEt	Me	SO ₂ Me	CF ₃	11.8 (brs,1H), 8.07

[0194]

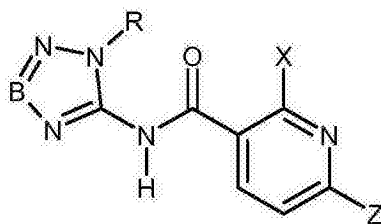
编号	B	R	X	Y	Z	物理数据 (¹ H-NMR, DMSO-d ₆ , 400 MHz)
						(d,H), 8.03 (d,1H), 4.58 (t,2H), 3.79 (t,2H), 3.49 (s,3H), 3.41 (q,2H), 2.76 (s,3H), 1.02 (t,3H)
2-3	CH	(CH ₂) ₂ OMe	Me	SO ₂ Me	CF ₃	
2-4	N	(CH ₂) ₂ OBn	Me	SO ₂ Me	CF ₃	7.90 (d,1H), 7.82 (d,1H), 7.34-7.21 (m,5H), 4.52 (t,2H), 4.47 (s,2H), 3.83 (t,2H), 3.39 (s,3H), 2.72 (s,3H)
2-5	N	CH ₂ CMe ₂ OMe	Me	SO ₂ Me	CF ₃	11.6 (brs,1H), 7.96 (d,H), 7.84 (d,1H), 4.34 (s,2H), 3.40 (s,3H), 3.13 (s,3H), 2.75 (s,3H), 1.13 (s,6H)
2-6	N	(CH ₂) ₃ OMe	Me	SO ₂ Me	CF ₃	7.97(d,1H), 7.92 (d,1H), 4.30 (m,2H), 3.39 (s,3H), 3.29 (m,2H), 3.21 (s,3H), 2.76 (s,3H), 2.05 (m,2H)
2-7	N	CH ₂ CN	Me	SO ₂ Me	CF ₃	8.15 (d,1H), 8.11 (d,1H), 5.79 (s,2H), 3.45 (s,3H), 2.75 (s,3H)
2-8	N	(CH ₂) ₂ NMe ₂	Me	SO ₂ Me	CF ₃	7.88 (d,1H), 7.82 (d,1H), 4.27 (m,2H), 3.71 (m,2H), 3.36 (s,3H), 2.75 (m,2H), 2.15 (s,6H)
2-9	N	CH ₂ SiMe ₃	Me	SO ₂ Me	CF ₃	7.95-7.89 (m,2H), 3.73 (s,2H), 3.39 (s,3H), 2.76 (s,3H), 0.13 (s,9H)
2-10	N	(CH ₂) ₂ SiMe ₃				
2-11	N	CH ₂ PO(OEt) ₃				
2-12	N	CH ₂ SMe				
2-13	N	(CH ₂) ₂ SMe	Me	SO ₂ Me	CF ₃	11.9 (brs,1H), 8.06 (s,2H), 4.58 (t,2H), 3.44 (s,3H), 3.02 (t,2H), 2.76 (s,3H), 2.07 (s,3H)
2-14	N	(CH ₂) ₂ SOMe	Me	SO ₂ Me	CF ₃	8.13 (d,1H), 8.06 (d,1H), 4.85-4.78 (m,2H), 3.48-3.38 (m,2H), 3.44 (s,3H), 2.77 (s,3H), 2.63 (s,3H)
2-15	N	(CH ₂) ₂ SO ₂ Me	Me	SO ₂ Me	CF ₃	7.98 (brs,2H), 4.73 (t,2H), 3.81 (t,2H), 3.40 (s,3H), 3.05 (s,3H), 2.76 (s,3H)
2-16	N	(CH ₂) ₂ CN	Me	SO ₂ Me	CF ₃	
2-17	N	(CH ₂) ₂ NO ₂	Me	SO ₂ Me	CF ₃	

[0195]

编号	B	R	X	Y	Z	物理数据 (¹ H-NMR, DMSO-d ₆ , 400 MHz)
2-18	N	CH ₂ (2-氧代吡咯烷-1-基)	Me	SO ₂ Me	CF ₃	
2-19	N	CH ₂ CMeOMe	Me	SO ₂ Me	CF ₃	11.71 (brs,1H), 8.07 (d,H), 8.00 (d,1H), 4.54 (dd,1H), 4.40 (dd,1H), 3.78 (m,1H), 3.44 (s,3H), 3.16 (s,3H), 2.76 (s,3H), 1.14 (d,3H)

[0196] 表 3 :式 (I) 的本发明化合物,其中 A 代表 N

[0197]



[0198]

编号	B	R	X	Z	物理数据 (¹ H-NMR, DMSO-d ₆ , 400 MHz)
3-1	CH	C ₂ H ₄ OMe	Me	CF ₃	
3-2	N	C ₂ H ₄ OMe	Me	CF ₃	10.6 (brs,1H), 8.17 (d,1H), 7.68 (d,1H), 4.69 (t,2H), 3.85 (t,2H), 3.36 (s,3H), 2.84 (s,3H)
3-3	N	C ₂ H ₄ OMe	iPr	CF ₃	
3-4	CH	C ₂ H ₄ OMe	CH ₂ OMe	CF ₃	
3-5	N	C ₂ H ₄ OMe	CH ₂ OMe	CF ₃	11.8 (brs,1H), 8.34 (d,1H), 8.02 (d,1H), 4.78 (s,2H), 4.51 (t,2H), 3.77 (t,2H), 3.28 (s,3H), 3.23 (s,3H)
3-6	N	C ₂ H ₄ OMe	CH ₂ OEt	CF ₃	
3-7	N	C ₂ H ₄ OMe	CH ₂ OiPr	CF ₃	
3-8	CH	C ₂ H ₄ OMe	CH ₂ O(CH ₂) ₂ OMe	CF ₃	
3-9	N	C ₂ H ₄ OMe	CH ₂ O(CH ₂) ₂ OMe	CF ₃	
3-10	N	C ₂ H ₄ OMe	CH ₂ O(CH ₂) ₃ OMe	CF ₃	
3-11	N	C ₂ H ₄ OMe	CH ₂ OCH ₂ CF ₃	CF ₃	
3-12	N	C ₂ H ₄ OMe	CH ₂ OCH ₂ cPr	CF ₃	
3-13	N	C ₂ H ₄ OMe	CH ₂ (3-甲基-咪唑啉-2-酮-1-基)	CF ₃	

[0199]

编号	B	R	X	Z	物理数据 (¹ H-NMR, DMSO-d ₆ , 400 MHz)
3-14	N	C ₂ H ₄ OMe	CH ₂ (3-甲氧基-4-甲基-1,2,4-三唑啉-5-酮-1-基)	CF ₃	12.17 (brs,1H), 8.24 (d,1H), 7.77 (d,1H), 5.28 (s,2H), 4.73 (t,2H), 4.05 (s,3H), 3.78 (t,2H), 3.27 (s,3H), 3.12 (s,3H)
3-15	N	C ₂ H ₄ OMe	CH ₂ SMe	CF ₃	
3-16	CH	C ₂ H ₄ OMe	Cl	CF ₃	
3-17	N	C ₂ H ₄ OMe	Cl	CF ₃	11.99 (brs,1H), 8.55 (brs,1H), 8.20 (brs,1H), 4.37 (m,2H), 3.72 (m,2H), 2.39 (s,3H)
3-18	N	C ₂ H ₄ OMe	Br	CF ₃	
3-19	N	C ₂ H ₄ OMe	Br	CF ₃	
3-20	N	C ₂ H ₄ OMe	SMe	CF ₃	8.37 (d,1H), 7.62 (d,1H), 4.59 (m,2H), 3.78 (m,2H), 3.23 (s,3H),
3-21	N	C ₂ H ₄ OMe	F	F	
3-22	N	C ₂ H ₄ OMe	F	F	
3-23	CH	C ₂ H ₄ OMe	Cl	Cl	
3-24	N	C ₂ H ₄ OMe	Cl	Cl	9.95 (bs,1H), 8.16 (d,1H), 7.46 (d,1H), 4.61 (t,2H), 3.83 (t,2H), 3.39 (s,3H)
3-25	CH	C ₂ H ₄ OMe	Me	Cl	
3-26	N	C ₂ H ₄ OMe	Me	Cl	
3-27	N	C ₂ H ₄ OMe	SMe	Cl	
3-28	N	C ₂ H ₄ OMe	SO ₂ Me	Cl	
3-29	CH	C ₂ H ₄ OMe	Cl	SMe	
3-30	N	C ₂ H ₄ OMe	Cl	SMe	
3-31	CH	C ₂ H ₄ OMe	Me	SO ₂ Me	
3-32	N	C ₂ H ₄ OMe	Me	SO ₂ Me	
3-33	N	C ₂ H ₄ OMe	SMe	SMe	
3-34	N	C ₂ H ₄ OMe	SO ₂ Me	SO ₂ Me	

[0200] B. 制剂实施例

[0201] a) 通过如下方法获得粉剂:将 10 重量份式 (I) 的化合物和 / 或其盐与 90 重量份作为惰性物质的滑石混合,并将混合物在锤磨机中粉碎。

[0202] b) 通过如下方法获得易分散于水中的可湿性粉剂:将 25 重量份式 (I) 的化合物和 / 或其盐、64 重量份作为惰性物质的含高岭土的石英、10 重量份的木素磺酸钾和 1 重量份的作为润湿剂和分散剂的油酰基甲基牛磺酸钠混合,将混合物在销盘式研磨机 (pinned-disk mill) 中研磨。

[0203] c) 通过如下方法获得易分散于水中的分散浓缩剂:将 20 重量份式 (I) 的化合物和 / 或其盐与 6 重量份的烷基苯酚聚乙二醇醚 (®**Triton X 207**)、3 重量份的异十三烷

醇聚乙二醇醚 (8EO) 和 71 重量份石蜡矿物油 (沸点范围为例如约 255℃ 至高于 277℃) 混合, 并将混合物在球磨机中研磨至低于 5 微米的细度。

[0204] d) 通过如下方法获得悬乳浓缩剂: 将 15 重量份式 (I) 的化合物和 / 或其盐、75 重量份作为溶剂的环己酮和 10 重量份作为乳化剂的乙氧基化壬基苯酚混合。

[0205] e) 通过如下方法得到水分散性颗粒剂:

[0206] 将如下物质混合

[0207] 75 重量份式 (I) 的化合物和 / 或其盐、

[0208] 10 重量份的木素磺酸钙、

[0209] 5 重量份的十二烷基硫酸钠、

[0210] 3 重量份的聚乙烯醇和

[0211] 7 重量份的高岭土,

[0212] 将混合物在销盘式研磨机中研磨, 并在流化床中通过在其上

[0213] 喷洒作为制粒液体的水而粒化该粉末。

[0214] f) 通过如下方法获得水分散性颗粒剂:

[0215] 将下述物质在胶体磨机中均匀化并预粉碎

[0216] 25 重量份式 (I) 的化合物和 / 或其盐、

[0217] 5 重量份的 2,2'-二萘基甲烷-6,6'-二磺酸钠、

[0218] 2 重量份的油酰基甲基牛磺酸钠、

[0219] 1 重量份的聚乙烯醇、

[0220] 17 重量份的碳酸钙和

[0221] 50 重量份的水,

[0222] 随后在球磨机中研磨该混合物, 并将所得悬浮液在喷雾塔中通过单料喷嘴雾化并干燥。

[0223] C. 生物学实施例

[0224] 1. 抵抗有害植物的芽前除草作用

[0225] 将单子叶或双子叶杂草植物或作物植物的种子种植于盛有沙质壤土的木质纤维盆中, 并用土壤覆盖。然后, 将以可湿性粉剂 (WP) 或乳液浓缩剂 (EC) 形式配置制剂的本发明的化合物以水悬浮液或乳液——水施用率为 600 至 800 l/ha (经换算) 且添加 0.2% 的润湿剂——施用至覆盖土壤表面。处理后, 将盆置于温室中并保持在适于所测试的植物良好生长的条件下。在 3 周测试期后, 通过与未处理的对照组比较, 目测评估对测试植物的损害程度 (以百分比计的除草活性 (%)): 100% 活性 = 植物已死亡、0% 活性 = 与对照植物相似)。此时, 例如, 在 320 g/ha 的施用率下, 编号为 1-16、1-44、1-60、1-125、1-154、1-162、1-163、1-174、1-187、1-191、1-197、1-200、1-204、1-215、1-245、1-246、1-248、1-343、1-345、1-361、1-366、1-368、1-417、1-450、1-452、1-453、1-456、1-458、1-460、1-463、1-464、1-465、1-468、1-475、1-476、1-488、1-494、1-517、1-572、1-583、2-2、2-4、2-5、2-6、2-7、2-19、3-2 和 3-16 的化合物各自对苘麻 (*Abutilon theophrasti*)、反枝苋 (*Amaranthus retroflexus*)、淡甘菊 (*Matricaria inodora*)、繁缕 (*Stellaria media*)、阿拉伯婆婆纳 (*Veronica persica*) 和三色堇 (*Viola tricolor*) 表现出至少 90% 的活性。

[0226] 2. 抵抗有害植物的芽后除草作用

[0227] 将单子叶和双子叶杂草和作物植物的种子置于盛有沙质壤土的木质纤维盆中，用土壤覆盖，并置于温室中在良好生长条件下栽培。在播种 2-3 周后，对一叶期时的测试植物进行处理。然后，将以可湿性粉剂 (WP) 或乳液浓缩剂 (EC) 形式配置制剂的本发明的化合物以水悬浮液或乳液——水施用率为 600 至 800 l/ha (经换算) 且添加 0.2% 的润湿剂——施用至植物的绿色部位。测试植物在温室中于最佳生长条件下放置约 3 周后，与未处理的对照组比较，目测评估制剂的活性 (以百分比计的除草活性 (%)) : 100% 活性 = 植物已死亡、0% 活性 = 与对照植物相似)。此时，例如，在 80 g/ha 的施用率下，编号为 1-23、1-44、1-125、1-128、1-154、1-157、1-162、1-188、1-197、1-200、1-215、1-220、1-245、1-246、1-344、1-345、1-350、1-366、1-368、1-417、1-450、1-453、1-456、1-460、1-465、1-468、1-475、1-487、1-488、1-494、1-517、1-518、1-583、2-2、2-4、2-5、2-6、2-19、3-2、3-5 和 3-23 的化合物各自对苘麻、淡甘菊、圆叶牵牛、繁缕、阿拉伯婆婆纳和三色堇表现出至少 90% 的活性。