



[12] 发明专利说明书

[21] ZL 专利号 91100182.4

[51]Int.Cl⁵

A01N 43 / 54

[45]授权公告日 1995 年 5 月 24 日

[24]颁证日 95.2.26

[21]申请号 91100182.4

[22]申请日 91.1.11

[30]优先权

[32]90.12.5 [33]JP[31]400475 / 90

[73]专利权人 日产化学工业株式会社

地址 日本东京都千代田区

[72]发明人 佐藤纯 福田宪造 伊藤馨

铃木宏一 绳卷勤 渡边重臣

C07D239 / 54

[74]专利代理机构 中国国际贸易促进委员会专利商
标事务所

代理人 黄革生

说明书页数:

附图页数:

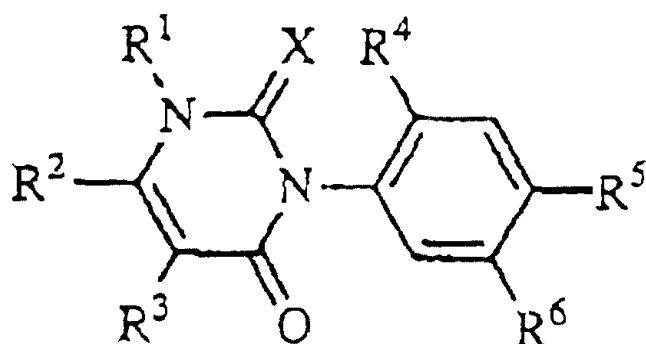
[54]发明名称 含有尿嘧啶衍生物的除草剂组合物

[57]摘要

本文公开了含有尿嘧啶衍生物的除草剂组合物以及 6-位上有一卤代烷基、3-位上有一苯基的尿嘧啶衍生物的制备方法,该衍生物由式(I)表示并显示出渗透易位活性和极高的除草活性,与常规除草化合物相比,该尿嘧啶衍生物既可用于土壤处理也可用于叶处理,即使在极低剂量时也对包括多年生杂草在内的各种杂草产生迅速、有效的除草效果,并具有一定时间的残余作用。

权 利 要 求 书

1. 一种除草组合物,它含有除草有效量的至少一种式(I)所示尿嘧啶衍生物以及除草剂用的载体或稀释剂;



其中:

R¹ 为 H 或 C₁₋₃ 烷基;

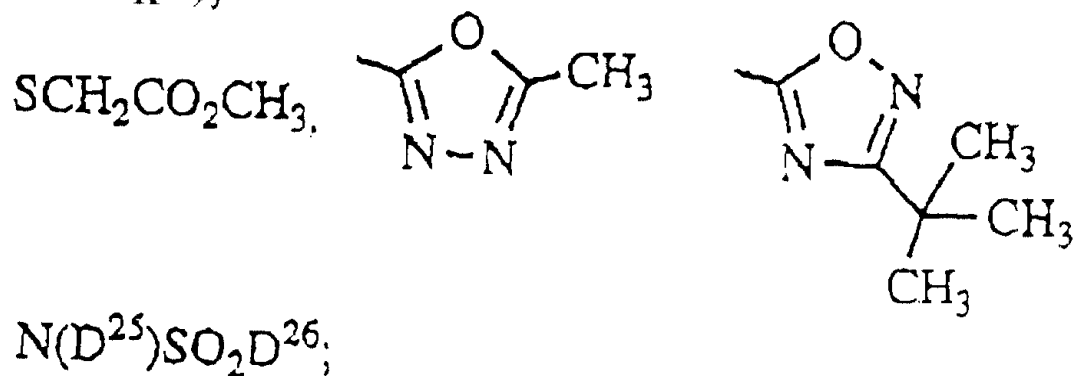
R² 为 C₁₋₃ 卤代烷基;

R³ 为 H;

R⁴ 为 H 或卤素;

R⁵ 为 Cl;

R⁶ 为



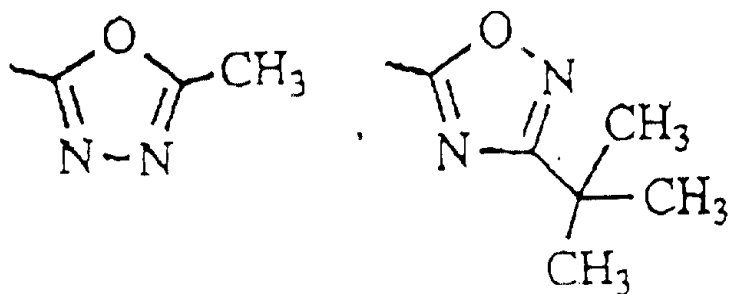
D^{25} 为 H 、 C_{1-3} 烷基、 C_{2-5} 链烯基、 C_{3-5} 炔基、 C_{1-3} 烷氧—
 C_{1-2} 烷基、 C_{2-5} 酰基或 C_{1-4} 烷基磺酰基；

D^{26} 为 C_{1-4} 烷基或 C_{1-3} 卤代烷基；

X 为氧原子。

2. 根据权利要求 1 所述的除草组合物，其中 R^6 为
 $SCH_2CO_2CH_3$ 。

3. 根据权利要求 1 所述的除草组合物，其中 R^6 为



$N(D^{25})SO_2D^{26}$;

其中 D^{25} , D^{26} 定义同权利要求 1。

含有尿嘧啶衍生物的除

草剂组合物

本发明涉及一种具有选择性并含有尿嘧啶衍生物作为活性成分的除草剂组合物，和一种制备该尿嘧啶衍生物的方法。

已制备出多种除草剂，并已实际应用于防止重要的作物（如稻，大豆，谷物，棉花，甜菜等等）受到杂草的侵害和提高这些作物的生产率。根据施用场合，除草剂可粗分为以下三类：(1)山地作物用的除草剂，(2)稻田用的除草剂，和(3)非耕地用的除草剂。按照施用方法，每种除草剂可进一步分为亚类，如掺入土壤处理型、出苗前处理型和出苗后处理型（簇叶处理）。

近年来，随着世界人口的增加，主要作物的生产率对各国食品经济产生了重大影响，这是一个无人否认的事实。所以，提高主要作物的生产率，不用说是目前最为重要的事情了。事实上，对于从事耕作的人来说，仍然更需要开发出能经济和有效地杀死或控制对培育作物植株的确有害的杂草生长的除草剂。

对于这样的除草剂，它们要能满足以下条件：

(1)施用少量除草剂便能获得很高的除草效果。（特别是从环保角度看，必须尽可能少量地使用除草剂来杀死杂草）。

(2) 残余除草作用合适。（近来，人们认识到这样的问题，即在土壤中长期保持其药性的化学药品会对下一代作物植株造成破坏。所以，化学药品在施用后保持合适的残余除草作用是很重要的）。

(3) 施用除草剂后迅速杀死杂草。(在化学药品处理后短时间内播种和移栽下一代作物植株使其成为可能)。

(4) 所需除草剂处理(施药)次数要少。(考虑到农业的利益,要最大限度地减少控制杂草工作的次数)。

(5) 用一种除草剂杀死或控制的杂草种类范围要很宽。(最好是施用一种除草剂便能杀死或控制不同种类的杂草,如宽叶草,似草类和多年生杂草)。

(6) 施用方法多样化。(当以不同的方式施用除草剂,例如土壤处理、簇叶处理等时除草效果相同)。

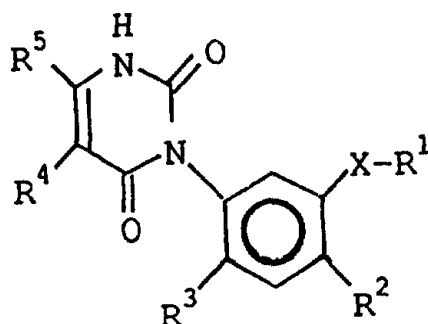
(7) 对作物植株无损害。(在作物植株和杂草共存的耕地,用除草剂选择性地单独杀死杂草是很理想的)。

但是,尚未发现能满足上述所有要求的除草剂。

已知某些尿嘧啶衍生物的化合物具有除草活性。例如,在防疫药手册第8版第89页(英国农作物保护协会出版,1987年)中公开了具有尿嘧啶骨架的除草剂——溴甲另丁尿嘧啶。

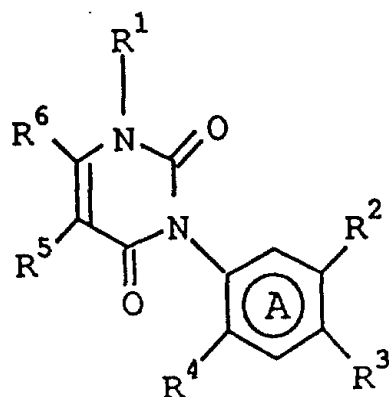
以下杂环衍生物也是公知的,它们可起到除草剂活性成份的作用:

(1) 以下通式表示的3-芳基尿嘧啶-烷基、烯基和炔基醇醚:



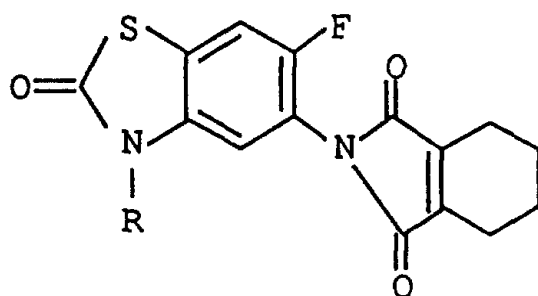
其中 R^1 代表 C_1 - 烷基, C_2 - 烯基, C_2 - 炔基, C_2 - 烷氧基烷基或 $-(CH_2)_m-O-N=C\begin{smallmatrix} R^6 \\ R^7 \end{smallmatrix}$, R^2 代表卤素或氰基, R^3 代表氢或卤素, R^4 代表氢, 氟或 C_1 - 烷基, R^5 代表 C_1 - 烷基或 C_1 - 卤烷基, 或 R^4 和 R^5 可结合起来代表三-或四-亚甲基 (其中 R^6 和 R^7 分别代表 C_1 - 烷基, 且 m 为 1 或 2), 且 X 是 O , $O-C(O)$, $O-C(O)-O$ 或 $C(O)-O$ (日本专利申请 (Kokai) 63-107967)。

(2) 以下通式表示的化合物:



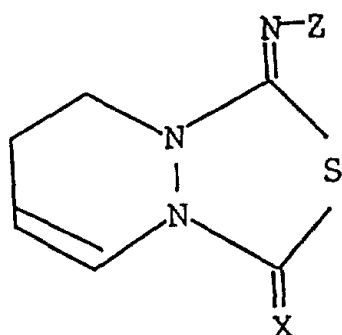
其中 R^1 代表氢, C_1 - 烷基, C_1 - 卤烷基, 甲酰基或 C_2 - 烷酰基, R^2 代表醚或含 (硫代) 羰氧基或磺酰氧基的剩余部分, 该剩余部分通过氧原子直接键连到苯核 A, R^3 代表卤素或氰基, R^4 代表氢或卤素, R^5 代表氢, 卤素或 C_1 - 烷基, 且 R^6 代表 C_1 - 烷基或 C_1 - 卤烷基, 或 R^5 和 R^6 可结合起来代表三-或四-亚甲基, 以及上述通式化合物的盐, 其中 R^1 是氢 (日本专利申请 (Kokai) 63-41466)。

(3) 以下通式表示的苯并噻唑酮衍生物:

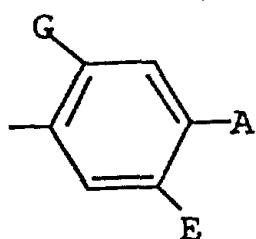


其中 R 代表氢，低级烷基，低级烯基，低级炔基，低级卤代烷基，低级卤代烯基，低级卤代炔基，低级烷氧基—低级烷基，低级烷氧基—低级烷氧基—低级烷基，肉桂基或低级氰基烷基（日本专利申请（Kokai）62—155276）。

(4) 以下通式表示的稠合杂环衍生物：

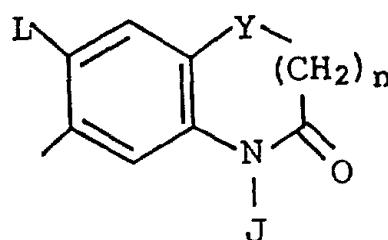


其中 X 代表氧原子或硫原子，Z 代表



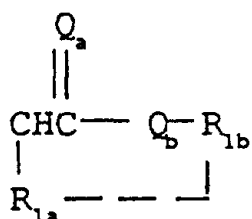
(Z1)

或

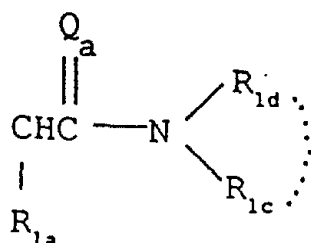


(Z2)

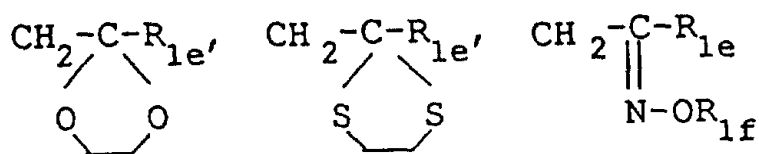
其中 G 代表氢原子或卤原子，A 代表氢原子或 NO_2 ，E 代表氢原子，卤原子， $\text{C}\equiv\text{N}$ ， NO_2 ， NH_2 ， OH ， SH ， OR_1 ，〔其中 R_1 代表 C_1 — C ，烷基， C_3 — C ，环烷基， C_3 — C ，环烷基— (C_1-C_2) 烷基， C_2 — C ，烯基， C_3 — C ，炔基，



(其中 Q_a 和 Q_b 分别代表氧原子或硫原子, R_{1a} 代表氢原子或 C_1 -烷基, 且 R_{1b} 代表氢原子, C_1 -烷基, C_2 -烯基, C_3 -炔基, C_2 -卤烷基, C_1 - C_2 烷氧基-(C_1 - C_2) 烷基, C_3 -环烷基-(C_1 - C_2) 烷基, C_3 -环烷基, CH_2CO_2 -(C_1 -烷基), 或 $CH(CH_3)-CO_2$ -(C_1 - C_2 烷基), 或 R_{1a} 和 R_{1b} 结合成由亚甲基链构成的 4-6 一元环内酯),



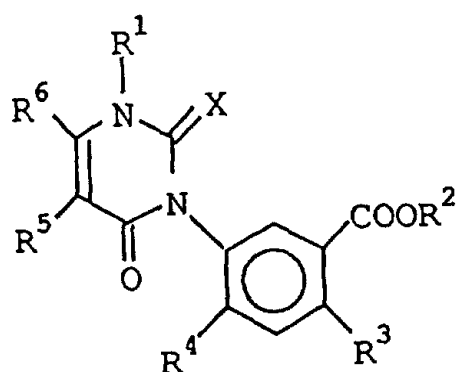
(其中 R_{1a} 和 Q_a 定义如上, R_{1c} 和 R_{1d} 分别代表氢原子, C_1 -烷基, C_2 -烯基, C_3 -炔基, C_2 -卤烷基, C_3 -环烷基或 C_3 -环烷基-(C_1 - C_2) 烷基, 或 R_{1d} 和 R_{1c} 结合成一个由亚甲基链构成的 5~7 一元环), $CH_2C\equiv N$, 四氢吡喃基, 四氢硫代吡喃基, CH_2COR_{1e} ,



(其中 R_{1e} 代表 C_1 -烷基, R_{1f} 代表氢原子, C_1 -烷基, CH_2CO_2 -(C_1 -烷基) 或 $COCH_3$), 或 C_1 - C_2 烷氧基-(C_1 - C_2) 烷基], SR , (其中 R , 定义如上), CO_2R , (其中 R , 代表氢原子, C_1 -烷基, C_3 -环烷基

或 O_{3-6} 环烷基-(O_{1-2})烷基), NHR_6 (其中 R_6 代表 O_{1-5} 烷基, C_1 - C_6 环烷基, C_1 - C_6 环烷基-(C_1 - C_2)烷基, C_2 - C_4 烯基或 C_1 - C_4 炔基), 或 $CH=NO R_7$ (其中 R_7 是氢原子, C_1 - C_6 环烷基, C_1 - C_6 环烷基-(C_1 - C_2)烷基, C_2 - C_4 烯基或 C_1 - C_4 炔基), L 代表氢原子或卤原子, Y 代表氧原子或硫原子, n 是 0 或 1, 且 J 代表氢原子, 卤原子, C_1 - C_6 环烷基, C_1 - C_6 环烷基-(C_1 - C_2)烷基, C_2 - C_4 烯基, C_1 - C_4 炔基, C_1 - C_6 卤烷基, C_1 - C_6 卤烯基, C_1 - C_6 卤炔基, C_1 - C_2 烷氧基-(C_1 - C_2)烷基, $CH_2 C \equiv N$, $CH_2 CO_2 R_8$ (其中 R_8 是氢原子, C_1 - C_6 环烷基或 C_1 - C_6 环烷基-(C_1 - C_2)烷基)烷基, 或 $CH_2 CH_2 CO_2 R$ (其中 R 是氢原子, C_1 - C_6 环烷基或 C_1 - C_6 环烷基-(C_1 - C_2)烷基) (日本专利申请 (Kokai) 1-250388)。

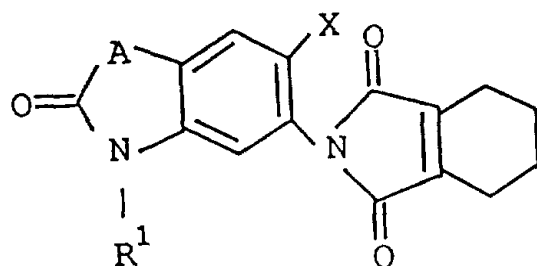
(5) 以下通式表示的化合物



其中 R^1 代表氢, C_1 - C_4 烷基, C_2 - C_4 烯基, C_2 - C_4 炔基, C_2 - C_6 烷氧基烷基, 甲酰基, C_2 - C_6 烷酰基或 C_2 - C_6 烷氧羰基; R^2 代表氢, C_1 - C_6 烷基, C_2 - C_4 炔基, C_2 - C_4 烯基或 C_2 - C_6 烷氧基烷基; R^3 代表卤素或硝基; R^4 代表氢或卤素;

R' 代表氢, 卤素, C_1 —, 烷基, 氟甲基, 溴甲基, 羟甲基, (C_1 —, 烷氧基)甲基, (C_1 —, 烷硫基)甲基, 氰基, 硝基或硫代氰根合基; R^6 代表氢, C_1 —, 烷基或 C_1 —, 氟烷基, 或 R' 和 R^6 结合起来代表三—或四亚甲基, 其中所述亚甲基之一可以用氧或硫取代, 或这些基团可取代有 C_1 —, 烷基; 且 X 代表氧或硫, 其中 (i) 当 R' 是氟时, R^6 是 C_1 —, 烷基或 C_1 —, 氟烷基, 且 (ii) 当 R' 是氰基时, R^6 是氢或 C_1 —, 烷基, 且 X 是氧, 以及上述通式化合物的盐, 其中 R^1 和/或 R^2 代表氢 (日本专利申请 (Kokai) 61—221178)。

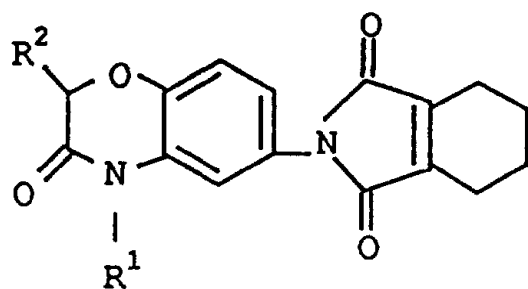
(6) 以下通式表示的四氢酞酰亚胺衍生物,



其中 R^1 代表 C_1 —, 烷基, C_3 —, 烯基, C_3 —, 炔基或 C_1 —, 烷氧基甲基, X 是氢, 氟或氯, 且 A 代表

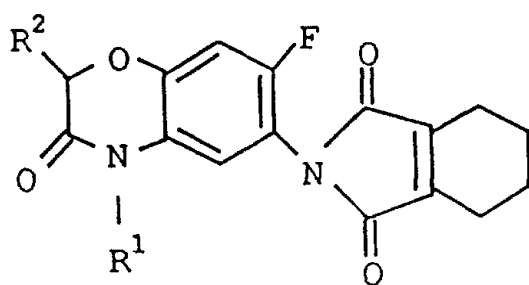
$\begin{array}{c} R^2 \quad R^3 \quad R^2 \\ | \quad | \quad | \\ -CH-N- \text{ 或 } -C=N- \end{array}$ (其中 R^2 代表氢或甲基, R^3 代表氢或甲基, 且氮原子键合到苯环上) (日本专利申请 (Kokai) 61—85385)。

(7) 以下通式表示的四氢酞酰亚胺衍生物



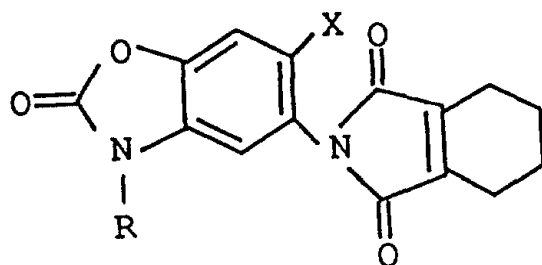
其中 R^1 代表烷基，烯基，炔基，烷氧基烷基或烷氧基烷氧基烷基，
且 R^2 代表氢或甲基（日本专利申请（Kokai）61—30586）

(8) 以下通式表示的四氢酞酰亚胺衍生物：



其中 R^1 代表烷基，炔基，烯基，烷氧基烷基或烷氧基烷氧基烷基，
且 R^2 代表氢或甲基（日本专利申请（Kokai）61—
76486）。

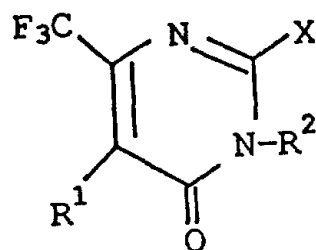
(9) 以下通式表示的四氢酞酰亚胺衍生物：



其中 R 代表 C_1 —，烷基， C_2 —，烯基， C_3 —，炔基或 C_1 —，
烷氧基甲基，且 X 代表氢或氟（日本专利申请（Kokai）61—

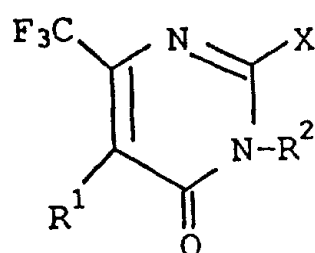
4 3 1 8 8)。

(1 0) 具有以下通式的除草剂化合物：



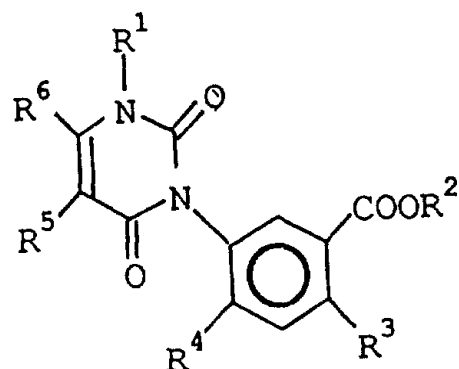
其中 X 是氢或羟基，R¹ 是氢或卤素且 R² 是烷基，环烷基，苯基，烯基，以及上述化合物的取代的衍生物（美国专利 3, 9 8 1, 7 1 5）。

(1 1) 具有以下通式的除草剂化合物：



其中 X 是氢或羟基，R¹ 是氢或卤素且 R² 是烷基，环烷基，苯基，烯基，以及上述化合物的取代的衍生物（美国专利 3, 8 6 9, 4 5 7）。

(1 2) 下式化合物：



其中 R^1 代表氢, C_1 - 烷基, C_3 - 烯基, C_3 - 炔基或

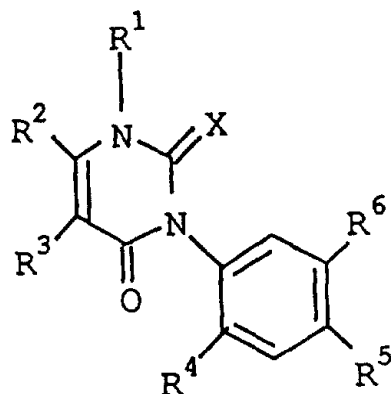
C_1 - 卤烷基, R^2 代表 $\begin{array}{c} R^7 \\ / \\ (C)_n - Q \\ \backslash \\ R^7 \end{array}$, 或当 R^1 代表卤烷基,

氢, C_1 - 烷基, C_2 - 烯基, C_2 - 炔基或 C_2 - 烷氧基烷基时 R^3 代表卤素或氰基, R^4 代表氢或卤素且 R^5 代表氢, 氟或 C_1 - 卤烷基, 以及它们的醇醚和盐 (WO 88 / 10254)。

非常希望能满足上述条件 (1) — (7) 的除草剂问世, 即除草剂显示出有效的选择性, 不会造成对农作物植株的伤害 (杀伤作物), 在低剂量下对多种杂草具有优良的除草活性, 而且还能获得在土壤处理和簇叶处理中所需效果。

本发明人经广泛深入的调查研究后发现, 由下式 (I) 表示的、在 6 一位具有卤烷基且在 3 一位具有苯基的尿嘧啶衍生物具有渗透性的易位活性, 而且具有很高的除草活性; 与传统的除草剂化合物相比, 所述尿嘧啶衍生物既可以用于土壤处理, 也可以用于簇叶处理, 从而即使在很低剂量下, 也能够迅速和高效抑制包括多年生草在内的多种杂草, 而且在一段合适的时间内还具有残余除草作用的特性。本发明正是基于上述发现而完成的。

在本发明的第一方面中, 提供了由式 (I) 表示的尿嘧啶衍生物:

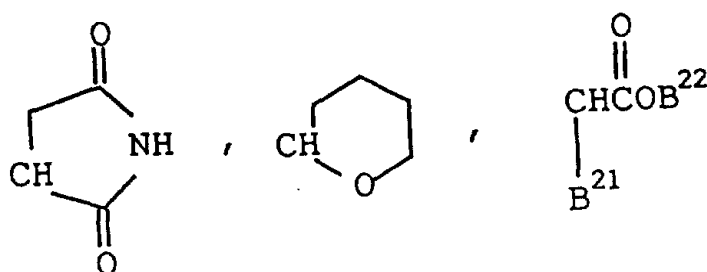


(I)

其中 R^1 代表氢, C_1 —, 烷基, 羟甲基或 C_1 —, 卤烷基; R^2 代表 C_1 —, 卤烷基; R^3 代表氢, C_1 —, 烷基, C_1 —, 卤烷基, 羟甲基, 卤素或硝基; R^4 代表氢或卤素,

(i) 当 R^5 和 R^6 不结合成环时,

R^5 代表氢, 硝基或氰基; R^6 代表 $-S-B^1$ [其中 B^1 代表氢, C_1 —, 烷基, C_2 —, 烯基, C_3 —, 炔基, 氰基甲基, 羟甲基, 氯甲基, 苄基,



[其中 B^{21} 代表氢, C_1 —, 烷基, 甲硫基, 苯硫基或甲氧基甲基, 且 B^{22} 代表氢, 钠, 钾, 铵, 异丙胺, C_1 —, 烷基, C_2 —, 烯基, C_3 —, 炔基, C_3 —, 环烷基, C_3 —, 环烷基— C_1 —, 烷基, C_2 —, 卤烷基, 苄基, α —甲基苄基, 3—二甲氨基丙基, 可取代有一个或多个取代基的苯基 (取代基是卤素, C_1 —, 烷基, C_1 —, 烷氧基, C_1 —, 烷氨基, 二甲氨基, C_1 —, 烷氧基—羰基, C_2 —, 酰基, C_1 —, 卤烷基或 C_1 —, 卤烷氧基中的至少一种), 或可取代有一个或多个取代基的苄基 (取代基是卤素, C_1 —, 烷基, C_1 —, 烷氧基, C_1 —, 烷氨基, 二甲氨基, C_2 —, 酰基, 三氟乙酰基氨基, C_1 —, 烷氧基—羰基, 甲磺酰基, 三氟甲基—磺酰基, C_1 —, 卤烷基或 C_1 —, 卤烷氧基中的至少一种)], CH_2 $\rightarrow$ CH_2 $\rightarrow_n$ $CO_2 B^{22}$ (其中 B^{22} 定义如上, n 是整数 $1 \sim 4$), $CH_2 - Y - B^{23}$ (其中 B^{23} 是氢, C_1 —, 烷基, 氰基乙基,

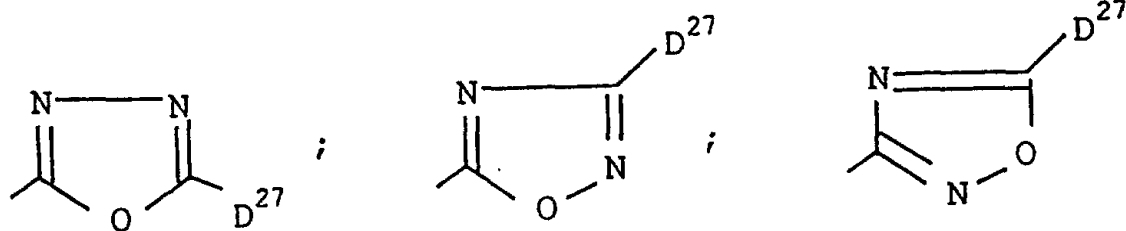
C_2 —, 酰基, 氯乙酰基或二甲基氨基甲酰基, 且 Y 是氧或硫),
 $CH_2 - Y - CH(B^{21})CO_2 B^{22}$ (其中 B^{21} , B^{22} 和 Y 定义
 如上) 或 $CH_2 - Y - CH_2 - (CH_2)_n CO_2 B^{22}$ (其中 B^{22} ,
 n 和 Y 定义如上)];

$\begin{array}{c} D^{21} \\ / \\ -C=NOCH_2CO_2 D^{22} \end{array}$ [其中 D^{21} 代表氢, C_1 —, 烷基,
 C_1 —, 烷氧基或 C_1 —, 烷氧基— C_1 — $_2$ 烷基, 且 D^{22} 代表
 氢, C_1 —, 烷基, C_3 —, 环烷基, C_2 —, 卤烷基, 苯基或苄
 基];

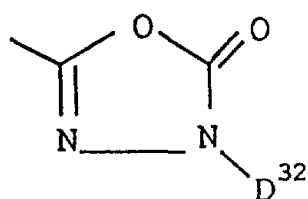
$\begin{array}{c} D^{21} \quad D^{23} \\ / \quad \quad / \\ -C=NN=C CO_2 D^{22} \end{array}$ [其中 D^{21} 和 D^{22} 定义如上, 且 D^{23} 代
 表氢或 C_1 —, 烷基];

$\begin{array}{c} D^{24} \\ / \\ -CH_2 ZCHCO_2 D^{22} \end{array}$ [其中 D^{22} 定义如上, D^{24} 代表氢,
 C_1 —, 烷基或 C_1 —, 烷氧基— C_1 — $_2$ 烷基, 且 Z 代表氧, 硫或
 NH];

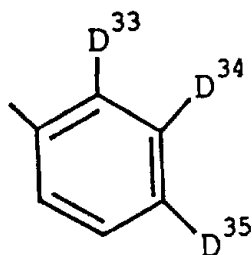
$\begin{array}{c} D^{25} \\ / \\ -N-SO_2 D^{26} \end{array}$ [其中 D^{25} 代表氢, 钠, C_1 —, 烷基, C_2 —,
 烯基, C_3 —, 炔基, C_2 —, 酰基, C_1 —, 烷基磺酰基或
 C_1 —, 烷氧基— C_1 — $_2$ 烷基, 且 D^{26} 代表 C_1 —, 烷基或 C_1 —,
 卤烷基];



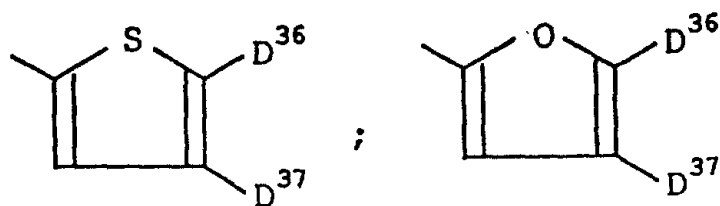
[其中 D^{27} 代表氢, C_1 —, 烷基, C_1 —, 环烷基, C_1 —, 卤烷基, C_1 —, 烷氧基, C_1 —, 烷硫基, C_1 —, 烷氧基—羰基, 巯基, 羟基, C_1 —, 烷氧基— C_1 —, 烷基, C_1 —, 烷氨基, $N D^{28}$ (D^{29}) (其中 D^{28} 和 D^{29} 分别代表 C_1 —, 烷基), 二甲基氨基甲酰基, $CONHSO_2CH_3$, C_1 —, 烷基磺酰基, 或 $N(D^{30})SO_2D^{31}$ (其中 D^{30} 代表氢, 钠, C_1 —, 烷基, C_1 —, 烷基磺酰基, C_1 —, 烷氧基— C_1 —, 烷基, 且 D^{31} 代表 C_1 —, 烷基或 C_1 —, 卤烷基)];



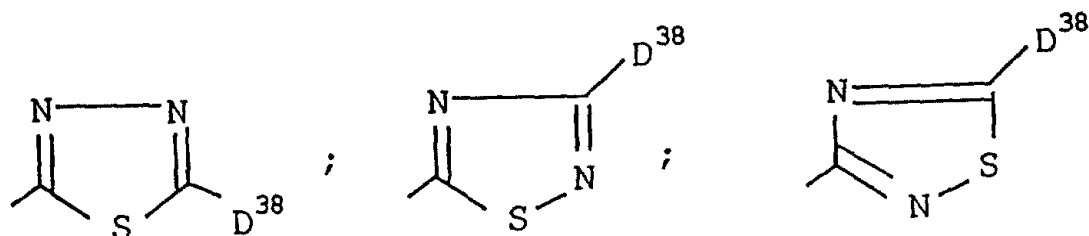
[其中 D^{32} 代表 C_1 —, 烷基或 C_3 —, 烷基];



[其中 D^{33} , D^{34} 和 D^{35} 分别代表氢或 C_1 —, 烷基];

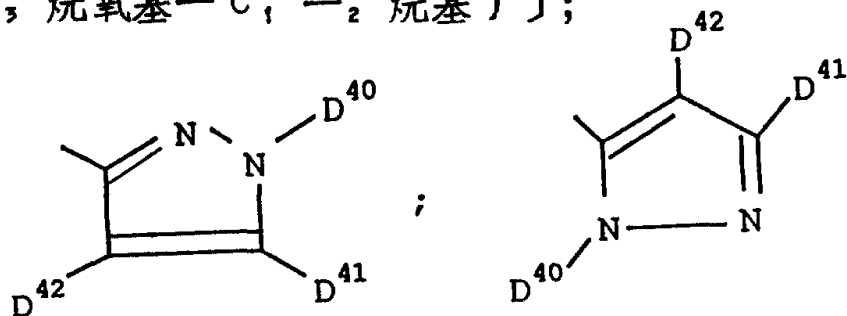


[其中 D^{36} 和 D^{37} 分别代表氢, C_1 - 烷基或二甲氨基] ;

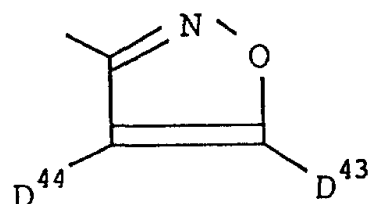


(其中 D^{38} 代表氢, 卤素, 巯基, 羟基, C_1 - 烷基, C_2 - 环烷基, C_1 - 卤烷基, C_1 - 烷氧基, C_1 - 烷硫基, C_1 - 烷氧基-羰基, 二甲基氨基甲酰基, C_1 - 烷氧基- C_1 - 烷基, C_1 - 烷氨基, ND^{28} (D^{29}) (其中 D^{28} 和 D^{29} 定义如上), $CONHSO_2CH_3$, C_1 - 烷基磺酰基, 苯基, 苄基或 $N(D^{39})SO_2D^{31}$ (其中 D^{31} 定义如上, 且 D^{39} 代表氢, C_1 - 烷基, 钠, 钾, C_1 - 烷基磺酰基或

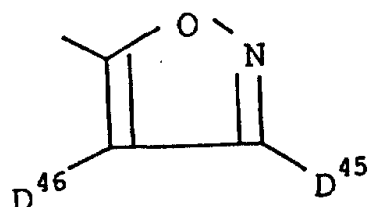
C₁-烷氧基—C₁-烷基)];



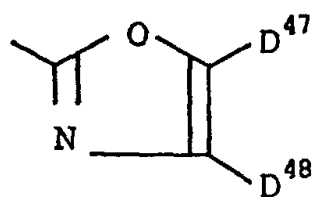
[其中 D⁴⁰ 代表氢, C₁-烷基, C₁-环烷基, 苯基, 苄基或 2-吡啶基, D⁴¹ 代表氢, 卤素, 巯基, 羟基, 氨基, C₁-烷基, C₁-烷氨基, N D²⁸ (D²⁹)(其中 D²⁸ 和 D²⁹ 定义如上), C₁-烷硫基, C O₂ D²⁸ (D²⁸ 定义如上), C₁-烷基磺酰基, C₁-烷氧基或 N (D³⁹) S O₂ D³¹ (其中 D³¹ 和 D³⁹ 定义如上), 且 D⁴² 代表氢, 卤素, 硝基, 氰基, 氨基, C₁-烷基氨基, N (D²⁸) D²⁹ (其中 D²⁸ 和 D²⁹ 定义如上), C₁-烷基羰基或 C₁-烷氧基—羰基];



[其中 D⁴³ 代表氢, 羟基, 甲氧基, 氨基, 苯甲酰基或 C₁-烷基, 且 D⁴⁴ 代表氢, 氰基, 乙酰基, C₁-烷基, 羰基或 C₁-烷氧基羰基];



[其中 D⁴⁵ 和 D⁴⁶ 分别代表氢, 苯基, 羟基, 甲氧基或 C₁-烷基]; 或

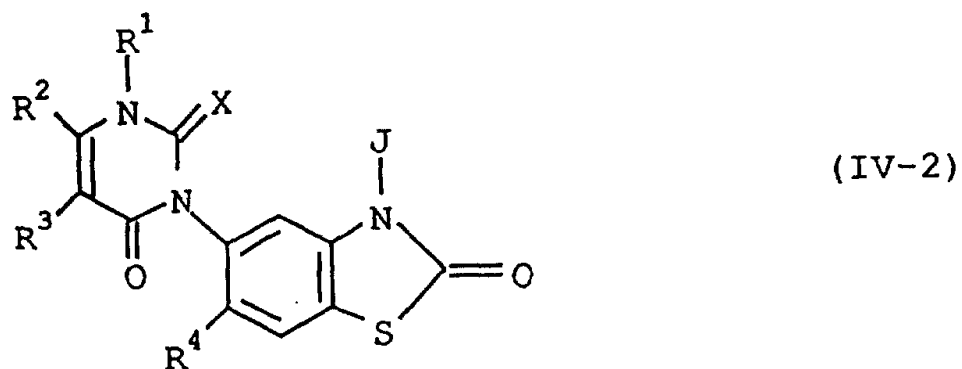
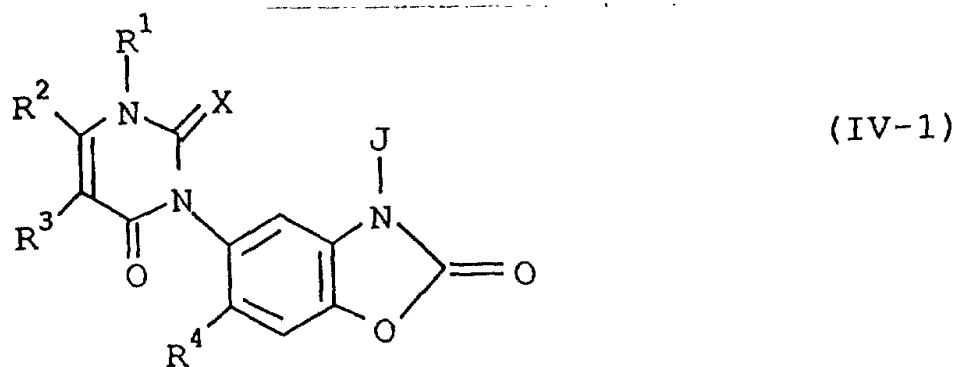
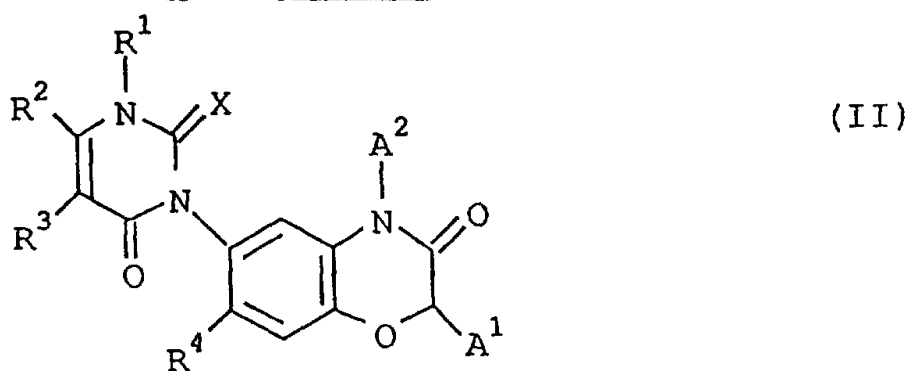


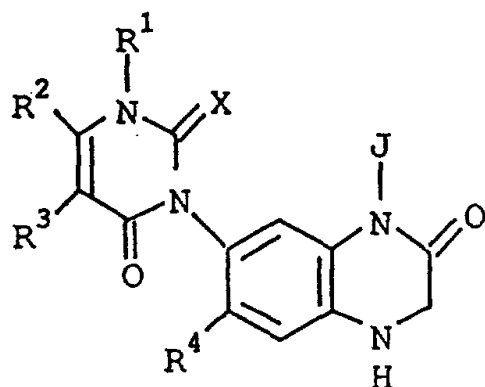
[其中 D^{47} 和 D^{48} 分别代表氢或 C_1 - 烷基] 以及

X 代表氧或硫,

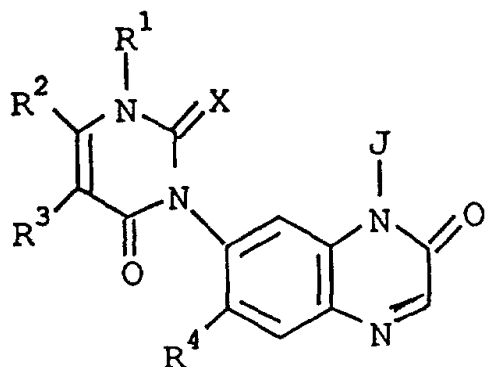
(i i) 当 R^5 和 R^6 成环时,

所述尿嘧啶衍生物由下式 (II)、(IV-1)、(IV-2)、(IV-3) 或 (IV-4 之一表示:



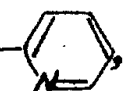


(IV-3)



(IV-4)

其中 R^1 , R^2 , R^3 , R^4 和 X 定义如上, A^1 代表氢和 C_1 -烷基, A^2 代表氢, C_1 -烷基, C_2 -烯基, C_3 -炔基, C_6 -环烷基- C_1 -烷基, C_1 -卤烷基, C_1 -卤烯基, C_1 -卤炔基, 氰基甲基, 羟甲基, 氯甲基, C_1 -烷氧基- C_1 -烷基, $-CH_2CO_2A^{21}$ [其中 A^{21} 代表氢, C_1 -烷基, 钠, 可取代有卤素的苯基, 或可取代有卤素的苄基] $-CH_2CON(A^{22})A^{23}$ [其中 A^{22} 和 A^{23} 分别代表氢或 C_1 -烷基], 可取代的苯基 (取代基是 C_1 -烷基, C_1 -卤烷基, C_1 -烷氧基或卤素), 可取代的苄基 (取代基是 C_1 -烷基, C_1 -卤烷基, C_1 -烷氧基, C_1 -烷氧基-羰基, C_1 -烷氧基- C_1 -烷基或卤素) 或 $-CH_2A^{24}$ [其中 A^{24} 代表可取代的吡啶基 (取代基是 C_1 -烷基或卤素), 可取代的 2-噁嗪基 (取代基是 C_1 -烷基或卤素), 3-异噻唑或 3-异噁唑], 以及

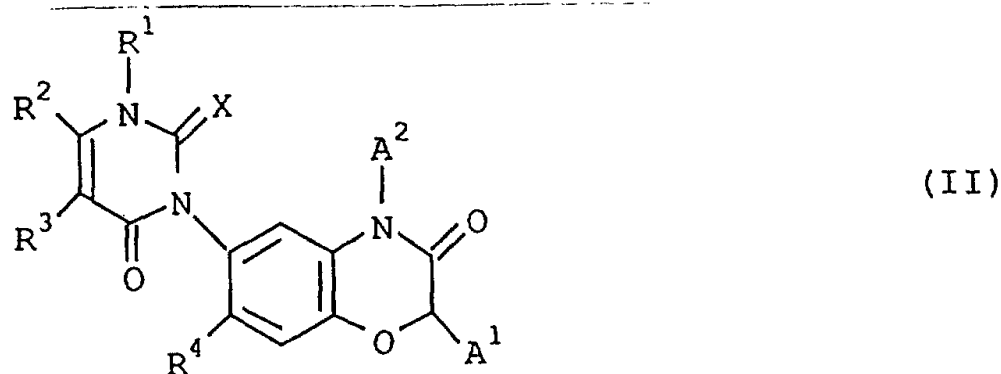
J 代表氢, C_1 —, 烷基, C_2 —, 烯基, C_3 —, 炔基, 羟甲基, 氯甲基, 氨基甲酰基甲基, 氰甲基, C_1 —, 烷氧基—羰基甲酰基甲基, CH_2 — , C_3 —, 环烷基, CH_2 — , C_3 —, 环烷基— C_1 —, 烷基, C_1 —, 烷氧基— C_1 —, 烷基, 可取代的苯基 (取代基是 C_1 —, 烷基, C_1 —, 烷氧基, C_1 —, 烷氧基—羰基, C_1 —, 烷氧基— C_1 —, 烷基或卤素), 或可取代的苄基 (取代基是 C_1 —, 烷基, C_1 —, 烷氧基, C_1 —, 烷氧基—羰基, C_1 —, 烷氧基— C_1 —, 烷基或卤素)。

在本发明的第二个方面中, 提供了一种除草剂组合物, 它含有除草有效量的、在第一个方面中定义的一种尿嘧啶衍生物和除草剂用载体或稀释剂。

在本发明的第三个方面中, 提供了一种杀死杂草或抑制杂草生长的方法, 该方法包括施用第一方面中定义的除草有效量的尿嘧啶衍生物。

上式 (I) 所代表的本发明的尿嘧啶衍生物是新型的。

在式 I 表示的尿嘧啶衍生物中, 本发明优选式 (II), (III) 和 (IV) 的化合物。即以下规定的式 (II) 代表的尿嘧啶衍生物:



其中 R^1 代表氢, C_1 —, 烷基, 羟甲基或卤甲基,

R^2 代表 C_1 —, 卤烷基,

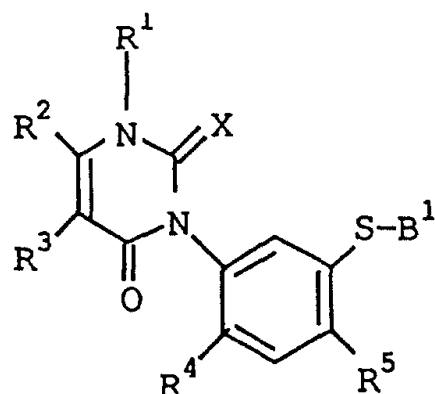
R^3 代表氢, C_1 —, 烷基, C_1 —, 卤烷基, 羟甲基, 卤素或硝基,

R^4 代表氢或卤素,

A^1 代表氢或 C_1 —, 烷基, A^2 代表氢, C_1 —, 烷基, C_2 —, 烯基, C_3 —, 炔基, C_3 —, 环烷基— C_1 —, 炔基, C_1 —, 卤烷基, C_1 —, 卤烯基, C_1 —, 卤炔基, 氰甲基, 羟甲基, 氧甲基, C_1 —, 烷氧基— C_1 —, 烷基, — CH_2 — CO_2 — A^{21} [其中 A^{21} 代表氢, C_1 —, 烷基, 钠, 可取代有卤素的苯基, 或可取代有卤素的苄基], — CH_2 — CO —(A^{22})— A^{23} [其中 A^{22} 和 A^{23} 分别代表氢或 C_1 —, 烷基], 可取代的苯基 (取代基是 C_1 —, 烷基, C_1 —, 卤烷基, C_1 —, 烷氧基或卤素), 可取代的苄基 (取代基是 C_1 —, 烷基, C_1 —, 卤烷基, C_1 —, 烷氧基, C_1 —, 烷氧基—羰基, C_1 —, 烷氧基— C_1 —, 烷基或卤素), 或 — CH_2 — A^{24} [其中 A^{24} 代表可取代的 2—吡啶基 (取代基是 C_1 —, 烷基或卤素), 可取代的 2—咪唑基 (取代基是 C_1 —, 烷基或卤素), 3—异噻唑或 3—异恶唑], 以及

X 代表氧或硫。

以下规定了式 (III) 表示的尿嘧啶衍生物:



(III)

其中 R^1 代表氢, C_1 —, 烷基, 羟甲基或卤甲基,

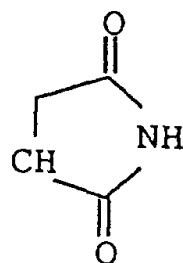
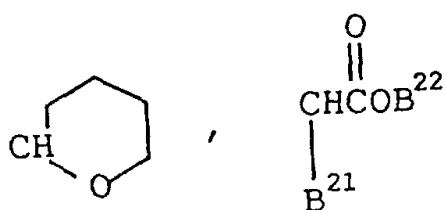
R^2 代表 C_1 —, 卤烷基,

R^3 代表氢, C_1 —, 烷基, C_1 —, 卤烷基, 羟甲基, 卤素或硝基,

R^4 代表氢或卤素,

R^5 代表氢, 硝基或氰基,

B^1 代表氢, C_1 —, 烷基, C_3 —, 环烷基, C_2 —, 烯基, C_3 —, 炔基, 氰甲基, 羟甲基, 氯甲基, 苄基,

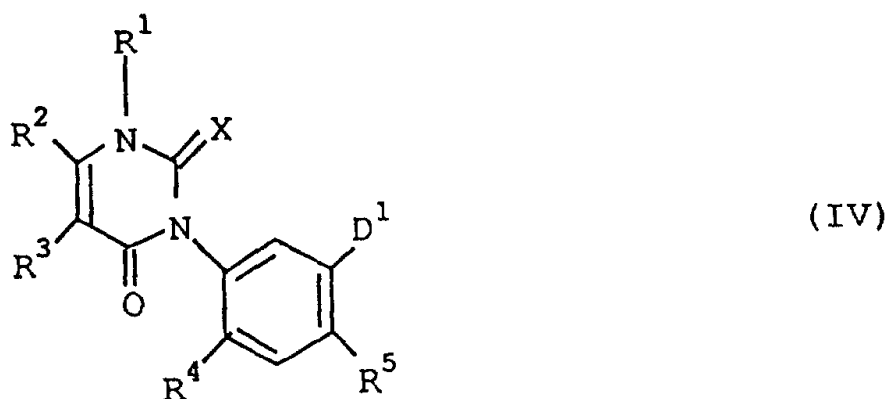


[其中 B^{21} 代表氢, C_1 —, 烷基, 甲硫基, 苯硫基或甲氧基甲基, 且 B^{22} 代表氢, 钠, 钾, 铵, 异丙胺, C_1 —, 烷基, C_2 —, 烯基, C_3 —, 炔基, C_3 —, 环烷基, C_3 —, 环烷基— C_1 —, 烷基, C_2 —, 卤烷基, 苄基, α —甲基苄基, 3—二甲氨基丙基, 可取代有一个或多个取代基的苯基 (取代基是卤素, C_1 —, 烷基, C_1 —, 烷氧基, C_1 —, 烷氨基, 二甲氨基, C_1 —, 烷氧基—羰基, C_2 —, 酰基, C_1 —, 卤烷基或 C_1 —, 卤烷氧基中的至少一种), 或可取代有一个或多个取代基的苄基 (取代基是卤素, C_1 —, 烷基, C_1 —, 烷氧基, C_1 —, 烷氨基, 二甲氨基, C_2 —, 酰基, 三氟乙酰基氨基, C_1 —, 烷氧基羰基, 甲磺酰基, 三氟甲磺酰基, C_1 —, 卤烷基或 C_1 —, 卤烷氧基中的至少一

种)], $\text{CH}_2 \leftarrow \text{CH}_2 \rightarrow_n \text{CO}_2 \text{B}^{22}$ [其中 B^{22} 定义如上, n 是整数 $1 \sim 4$], $\text{CH}_2 - \text{Y} - \text{B}^{23}$ [其中 B^{23} 代表氢, $\text{C}_1 -$, 烷基, 氰甲基, $\text{C}_2 -$, 酰基, 氯乙酰基或二甲基-氨基甲酰基, 且 Y 是氧或硫], $\text{CH}_2 - \text{Y} - \text{CH}(\text{B}^{21})\text{CO}_2 \text{B}^{22}$ [其中 B^{21} , B^{22} 和 Y 定义如上], 或 $\text{CH}_2 - \text{Y} - \text{CH}_2 \leftarrow \text{CH}_2 \rightarrow_n \text{CO}_2 \text{B}^{22}$ [其中 B^{22} , n 和 Y 定义如上], 以及

X 代表氧或硫。

以下规定了式 (IV) 表示的尿嘧啶衍生物:



其中 R^1 代表氢, $\text{C}_1 -$, 烷基或 $\text{C}_1 -$, 卤烷基,

R^2 代表 $\text{C}_1 -$, 卤烷基,

R^3 代表氢, $\text{C}_1 -$, 烷基, $\text{C}_1 -$, 卤烷基, 羟甲基, 卤素或硝基,

R^4 代表氢或卤素,

(i) 当 R^3 和 D^1 不成环时,

R^3 代表氢, 硝基或氰基,

D^1 代表 $\text{C} \begin{smallmatrix} \text{D}^{21} \\ / \end{smallmatrix} = \text{NOCH}_2\text{CO}_2 \text{D}^{22}$ [其中 D^{21} 代表氢,

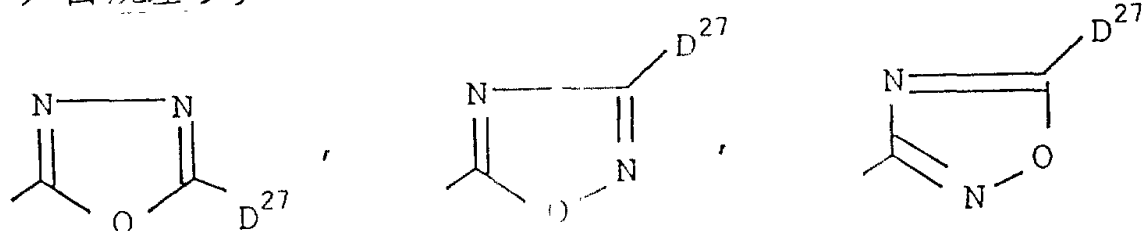
$\text{C}_1 -$, 烷基, $\text{C}_1 -$, 烷氧基或 $\text{C}_1 -$, 烷氧基- $\text{C}_1 -$, 烷基,

且 D^{22} 代表氢, C_1 —, 烷基, C_3 —, 环烷基, C_2 —, 卤烷基,

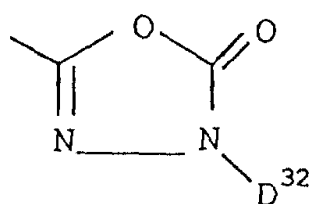
基, 苯基或苄基], $-C \begin{smallmatrix} D^{21} \\ / \end{smallmatrix} = N N = C \begin{smallmatrix} D^{23} \\ / \end{smallmatrix} (O_2 D^{22})$ [其中 D^{21} 和 D^{22} 定义如上, 且 D^{23} 代表氢或 C_1 —, 烷基],

$-CH_2 \begin{smallmatrix} D^{24} \\ / \end{smallmatrix} Z CH O_2 D^{22}$ [其中 D^{22} 定义如上, D^{24} 代表氢, C_1 —, 烷基或 C_1 —, 烷氧基— C_1 —, 烷基, 且 Z 代表氧, 硫或

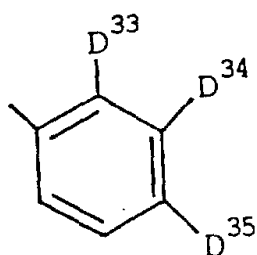
NH], $-N \begin{smallmatrix} D^{25} \\ / \end{smallmatrix} - SO_2 D^{26}$ [其中 D^{25} 代表氢, 钠, C_1 —, 烷基, C_2 —, 烯基, C_3 —, 炔基, C_2 —, 酰基, C_1 —, 烷磺酰基或 C_1 —, 烷氧基— C_1 —, 烷基, 且 D^{26} 代表 C_1 —, 烷基或 C_1 —, 卤烷基],



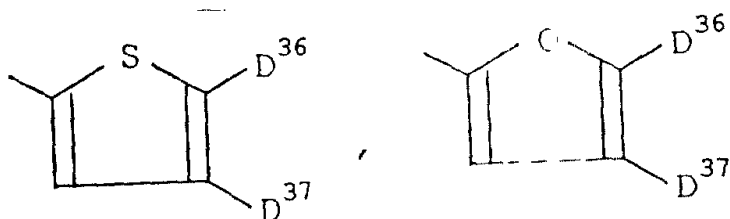
[其中 D^{27} 代表氢, C_1 —, 烷基, C_3 —, 环烷基, C_1 —, 卤烷基, C_1 —, 烷氧基, C_1 —, 烷硫基, C_1 —, 烷氧基—羰基, 巯基, 羟基, C_1 —, 烷氧基— C_1 —, 烷基, C_1 —, 烷氨基, $N D^{28} (D^{29})$ (其中 D^{28} 和 D^{29} 分别代表 C_1 —, 烷基), 二甲基氨基甲酰基, $CONHSO_2 C H_3$, C_1 —, 烷基磺酰基, 或 $N (D^{30}) SO_2 D^{31}$ (其中 D^{31} 代表氢, 钠, C_1 —, 烷基, C_1 —, 烷磺酰基或 C_1 —, 烷氧基— C_1 —, 烷基, 且 D^{31} 代表 C_1 —, 烷基或 C_1 —, 卤烷基)],



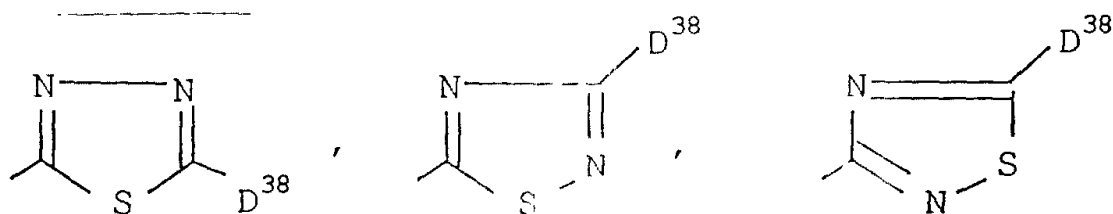
[其中 D^{32} 代表 C_1 - 烷基或 C_1 - 环烷基],



[其中 D^{33} , D^{34} 和 D^{35} 分别代表氢或 C_1 - 烷基],

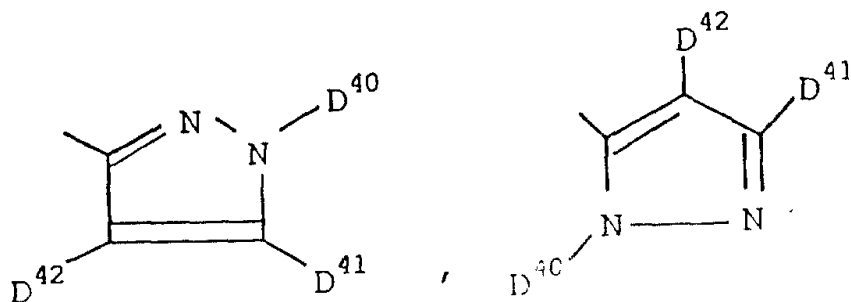


[其中 D^{36} 和 D^{37} 分别代表氢, C_1 - 烷基或二甲氨基],



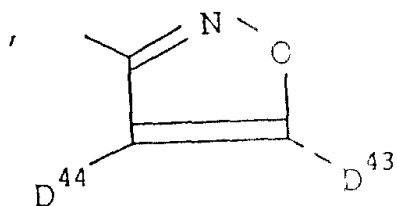
[其中 D^{38} 代表氢, 卤素, 巯基, 羟基, C_1 - 烷基, C_3 - 环烷基, C_1 - 卤烷基, C_1 - 烷氧基, C_1 - 烷硫基, C_1 - 烷氧基-羰基, 二甲基氨基甲酰基, C_1 - 烷氧基- C_1 - 烷基, C_1 - 烷氨基, $N D^{28}$ (D^{29}) (其中 D^{28} 和 D^{29} 定义如上), $CONHSO_2CH_3$, C_1 - 烷磺酰基, 苯基, 苄基或

$N(D^{39})SO_2D^{31}$ (其中 D^{31} 定义如上, 且 D^{39} 代表氢, C_1 -烷基, 钠, 钾, C_1 -烷磺酰基或 C_1 -烷氧基- C_1 -烷基)],

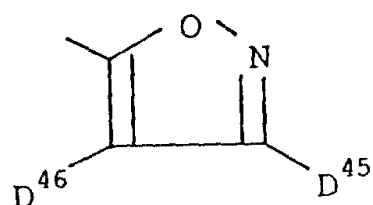


[其中 D^{40} 代表氢, C_1 -烷基, C_1 -环烷基, 苯基, 苄基或 2-吡啶基, D^{41} 代表氢, 卤素, 巯基, 羟基, 氨基, C_1 -烷基, C_1 -烷氨基, $ND^{28}(D^{29})$ (其中 D^{28} 和 D^{29} 定义如上), C_1 -烷硫基, CO_2D^{28} (其中 D^{28} 定义如上),

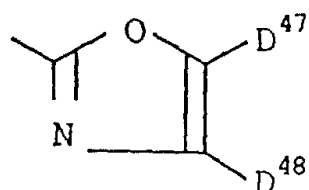
C_1 -烷磺酰基, C_1 -烷氧基或 $N(D^{39})SO_2D^{31}$ (其中 D^{31} 和 D^{39} 定义如上) 且 D^{42} 代表氢, 卤素, 硝基, 氨基, 氰基, C_1 -烷氨基, $ND^{28}(D^{29})$ (其中 D^{28} 和 D^{29} 定义如上), C_1 -烷基羰基或 C_1 -烷氧基-羰基],



[其中 D^{43} 代表氢, 羟基, 甲氧基, 氨基, 苯甲酰基或 C_1 -烷基, 且 D^{44} 代表氢, 氰基, 乙酰基, C_1 -烷基, 羰基或 C_1 -烷氧基-羰基];



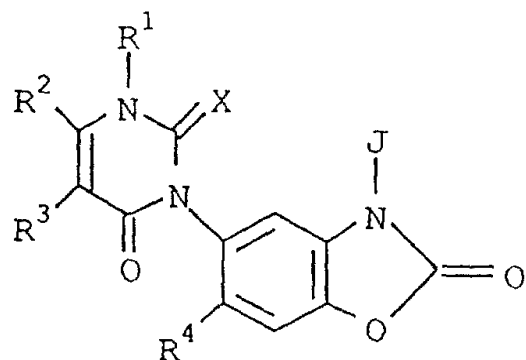
〔其中 D^{45} 和 D^{46} 分别代表氢，苯基，羟基，甲氧基或 C_1 —烷基〕或



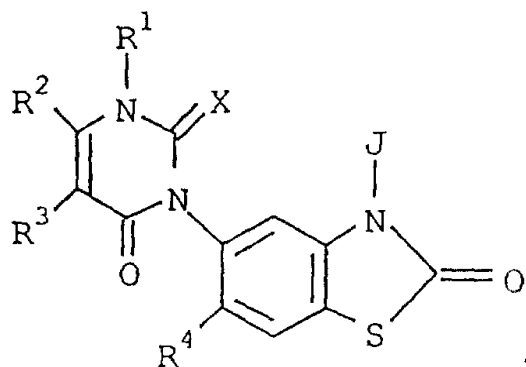
〔其中 D^{47} 和 D^{48} 分别代表氢或 C_1 —烷基〕，以及
X 代表氧或硫，

(ii) 当 R' 和 D' 成环时，

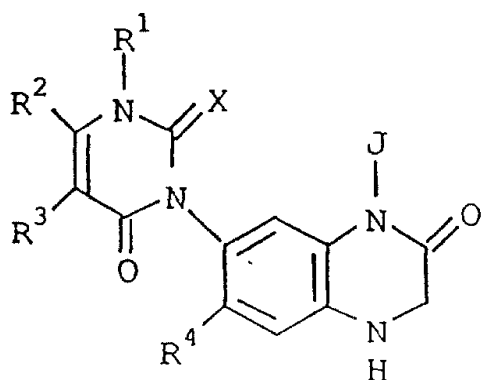
所述尿嘧啶衍生物由以下式 (IV-1)，(IV-2)，
(IV-3) 或 (IV-4) 之一表示：



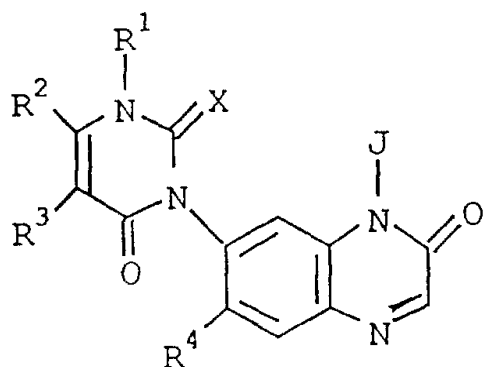
(IV-1)



(IV-2)

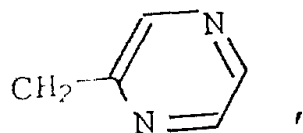


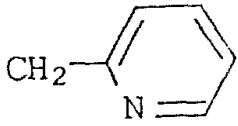
(IV-3)



(IV-4)

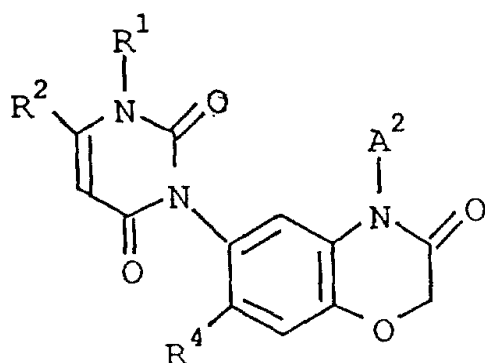
其中 R^1 , R^2 , R^3 , R^4 和定义如上, 且 J 代表氢, C_1 - 烷基, C_2 - 烯基, C_3 - 炔基, 羟甲基, 氯甲基, 氨基甲酰基甲基, 氰甲基, C_1 - 烷氧基-羰基甲基,



C_3 - 环烷基, , C_3 - 环烷基- C_1 - 烷基, C_1 - 烷氧基- C_1 - 烷基, 可取代的苯基 (取代基是 C_1 - 烷基, C_1 - 烷氧基, C_1 - 烷氧基-羰基, C_1 - 烷氧基- C_1 - 烷基或卤素) 或可取代的苄基 (取代基是 C_1 - 烷基, C_1 - 烷氧基, C_1 - 烷氧基-羰基, C_1 - 烷氧基- C_1 - 烷基或卤素)。

在式 (II) , (III) 和 (IV) 表示的化合物中, 更优选的是以下化合物。

式 (II ') 表示的尿嘧啶衍生物:



(II ')

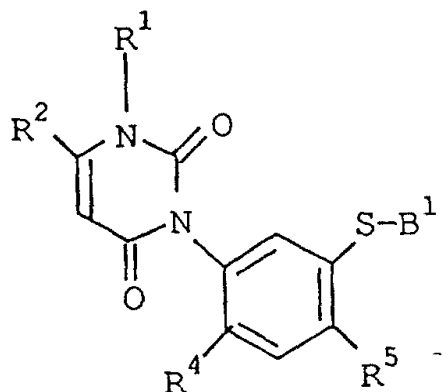
其中 R^1 代表氢或 C_1 - , 烷基,

R^2 代表 C_1 - , 卤烷基,

R^4 代表氢或卤素, 以及

A^2 代表氢, C_1 - , 烷基, C_2 - , 烯基, C_3 - , 炔基, C_3 - , 环烷基 - C_1 - C_2 烷基, 氰甲基, 羟甲基, 氯甲基, C_1 - , 烷氧基 - C_1 - C_2 烷基, $-CH_2-CO_2-A^{21}$ [其中 A^{21} 代表氢或 C_1 - , 烷基], $-CH_2-CO-N(A^{22})A^{23}$ [其中 A^{22} 和 A^{23} 分别代表氢或 C_1 - , 烷基], 可取代的苄基 (取代基是 C_1 - , 烷基, C_1 - , 卤烷基, C_1 - , 烷氧基或卤素, 或 $-CH_2-A^{24}$ [其中 A^{24} 代表可取代的 2 - 吡啶基 (取代基是 C_1 - , 烷基或卤素)]) 。

式 (III ') 表示的尿嘧啶衍生物:



(III ')

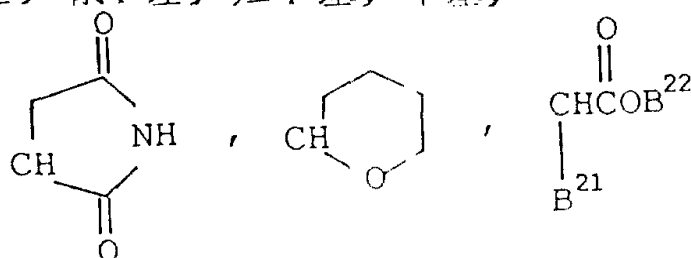
其中 R^1 代表氢或 C_1 - 烷基,

R^2 代表 C_1 - 卤烷基,

R^4 代表氢或卤素,

R^5 代表氯或硝基, 以及

B^1 代表氢, C_1 - 烷基, C_2 - 烯基, C_3 - 炔基, 氰甲基, 羟甲基, 苄基,



[其中 B^{21} 代表氢, C_1 - 烷基或羟甲基, 且 B^{22} 代表氢,

C_1 - 烷基, C_2 - 烯基, C_3 - 炔基, C_3 - 环烷基,

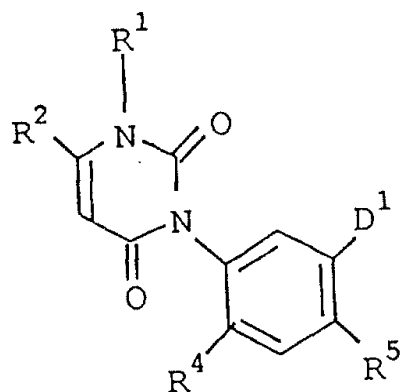
C_3 - 环烷基- C_1 - 烷基, C_2 - 卤烷基或可取代有一个或多个取代基的苄基 (取代基是卤素, C_1 - 烷基, C_1 - 烷氧基, 二甲氨基, C_2 - 酰基, C_1 - 烷氧基羰基, C_1 - 卤烷基或 C_1 - 卤烷氧基)], CH_2 - $(CH_2)_n$ - CO_2 - B^{22} [其中

B^{22} 定义如上, n 是整数 $1 \sim 3$], CH_2 - O - B^{23} [其中 B^{23}

代表氢, C_1 - 烷基, 氰甲基, C_2 - 酰基, 氯乙酰基或二甲基氨基甲酰基], 或 CH_2 - O - $CH(B^{21})CO_2$ - B^{22} [其中

B^{21} 和 B^{22} 定义如上]。

式 (IV') 表示的尿嘧啶衍生物:



(IV')

其中 R^1 代表氢或 C_1 —, 烷基,

R^2 代表 C_1 —, 卤烷基,

R^3 代表氢或卤素,

(i) 当 R^1 和 D^1 不成环时,

R^3 代表氯或硝基, 且

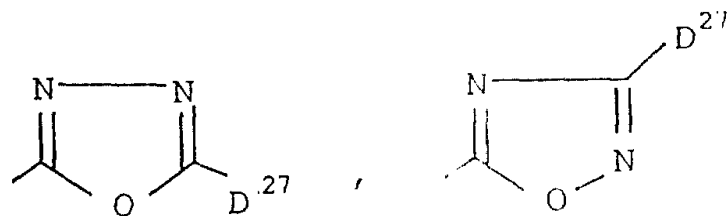
D^1 代表 $-\overset{D^{21}}{C}=\overset{R^2}{N}OCH_2CO_2D^{22}$ [其中 D^{21} 代表氢, 甲基, 甲氧基或甲氧基甲基, 且 D^{22} 代表氢, C_1 —, 烷基, C_3 —, 环烷基或苄基],

$-\overset{D^{21}}{C}=\overset{R^2}{N}N=\overset{D^{23}}{C}CO_2D^{22}$ [其中 D^{21} 和 D^{22} 定义如上, 且 D^{23} 是

氢或甲基], $-\overset{D^{24}}{CH_2}ZCHCO_2D^{22}$ [其中 D^{22} 定义如上, D^{24}

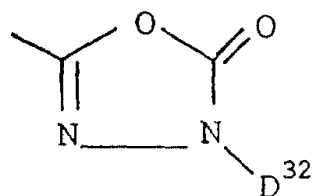
代表氢, 甲基或甲氧基甲基, 且 Z 是氧, 硫或 NH], $-\overset{D^{25}}{N}-SO_2D^{26}$

[其中 D^{25} 代表氢, C_1 —, 烷基, C_2 —, 烯基, C_3 —, 炔基, 或 C_1 —, 烷基磺酰基, 以及 D^{26} 代表 C_1 —, 烷基],

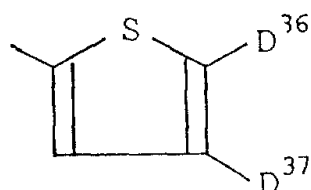


[其中 D^{27} 代表氢, C_1 —, 烷基, C_1 —, 烷氧基, C_1 —, 烷氧基—羰基, 巯基, 羟基, C_1 —, 烷氧基— C_1 —, 烷基, C_1 —, 烷基氨基, ND^{28} (D^{29}) (其中 D^{28} 和 D^{29} 分别代表 C_1 —, 烷基), 二甲基氨基甲酰基, $CONHCO_2CH_3$, 或 $N(D^{30})$

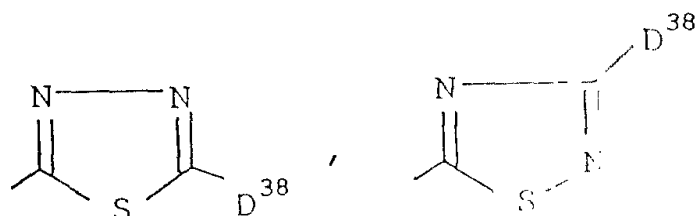
$\text{SO}_2 \text{D}^{31}$ (其中 D^{30} 代表氢, C_1 — $_4$ 烷基或 C_1 — $_4$ 烷磺酰基, 且 D^{31} 代表 C_1 — $_4$ 烷基)],



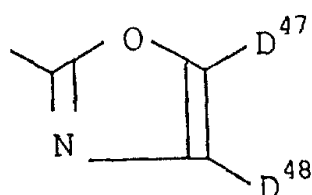
[其中 D^{32} 代表 C_1 — $_6$ 烷基],



[其中 D^{36} 和 D^{37} 分别代表氢或 C_1 — $_6$ 烷基],



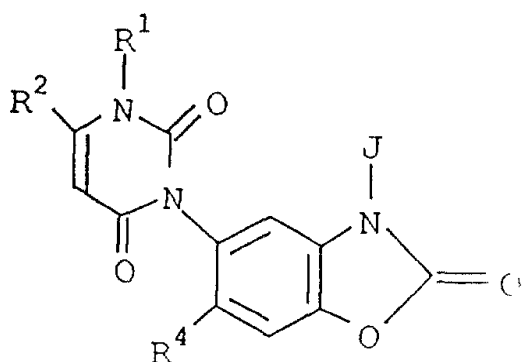
[其中 D^{38} 代表氢, C_1 — $_6$ 烷基, C_1 — $_4$ 烷氧基, C_1 — $_4$ 烷氧基羰基, 巯基, 羟基, C_1 — $_3$ 烷氧基— C_1 — $_2$ 烷基, C_1 — $_4$ 烷氨基, ND^{28} (D^{29}) (其中 D^{28} 和 D^{29} 定义如上, $\text{CONHSO}_2\text{CH}_3$ 或 $\text{N}(\text{D}^{39})-\text{SO}_2\text{D}^{31}$ (其中 R^{31} 定义如上, 且 D^{39} 代表氢, C_1 — $_4$ 烷基或 C_1 — $_4$ 烷磺酰基)] ,



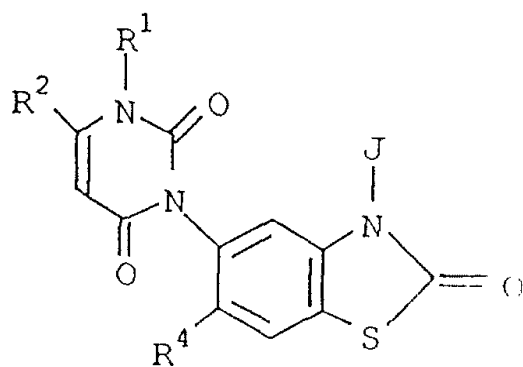
[其中 D^{47} 和 D^{48} 分别代表氢或 C_1 - 烷基],

(i i) 当 R' 和 D' 成环时,

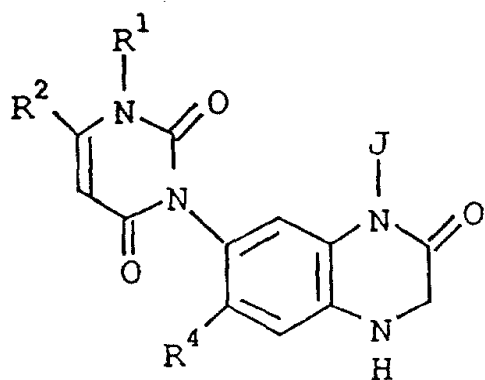
所述尿嘧啶衍生物由下式 (I V ' - 1), (I V ' - 2) 或 (I V ' - 3) 表示:



(IV'-1)

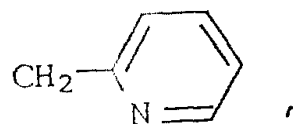


(IV'-2)



(IV'-3)

其中 R^1 , R^2 和 R^4 定义如上, 且 J 代表氢, C_1 -烷基, C_2 -烯基, C_3 -炔基, 羟甲基, 氯甲基, 氨基甲酰基甲基, 氰甲基, C_1 -烷氧基-羰基-甲基,

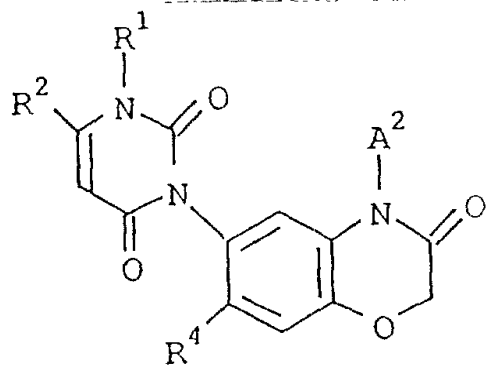


C_3 -环烷基, C_3 -环烷基- C_1 -烷基, C_1 -烷氧基- C_1 -烷基, 或可取代的苄基 (取代基是 C_1 -烷基,

C_1 -烷氧基, C_1 -烷氧基-羰基, 甲氧基甲基或卤素)。

在式 (II') (III') 和 (I'') 表示的化合物中, 以下化合物特别优选。

式 (II'') 表示的尿嘧啶衍生物:



(II'')

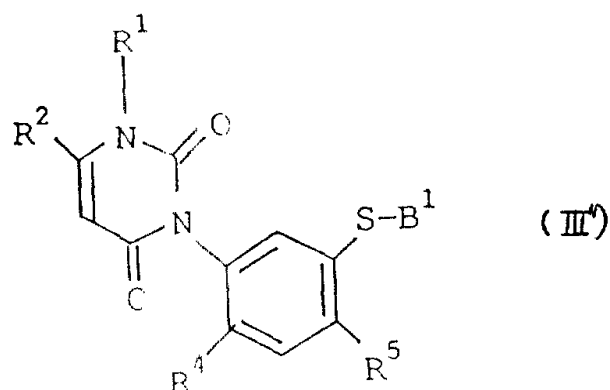
其中 R^1 代表氢或甲基,

R^2 代表 C_1 -卤烷基,

R^4 代表氢或氟, 以及

A^2 代表氢, C_1 —, 烷基, C_2 —, 烯基, C_3 —, 炔基, 氰甲基, 甲氧基甲基, $-CH_2CONH_2$, 可取代的苄基 (取代基是 C_1 —, 烷基, 三氟甲基, 甲氧基或卤素) 或 $-CH_2A^{24}$ [其中 A^{24} 代表 2-吡啶基]。

式 (III') 表示的尿嘧啶衍生物:



其中 R^1 代表氢或甲基,

R^2 代表 C_1 —, 卤烷基,

R^4 代表氢或氟,

R^5 代表氯, 以及

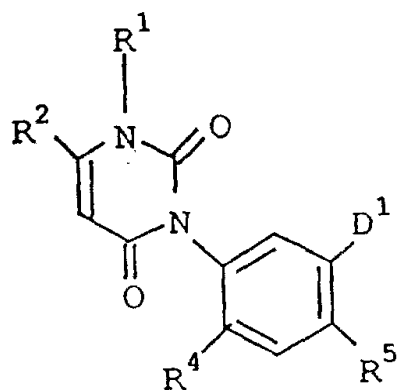
B^1 代表氢, C_1 —, 烷基, C_3 —, 环烷基, C_2 —, 烯基,

C_3 —, 炔基, 苄基, 或 $\begin{array}{c} O \\ || \\ CH \\ | \\ B^{21} \end{array} COB^{22}$ [其中 B^{21} 代表氢或甲基, 且

B^{22} 代表氢, C_1 —, 烷基, C_2 —, 烯基, C_3 —, 炔基,

C_3 —, 环烷基或苄基]。

式 (IV') 表示的尿嘧啶衍生物:



(IV'')

其中 R^1 代表氢或甲基,

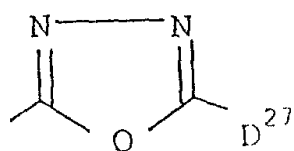
R^2 代表 C_1 — $_2$ 卤烷基,

R^4 代表氢或卤素,

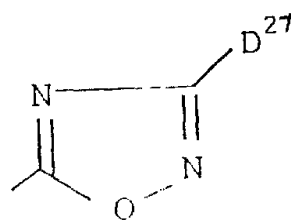
(i) 当 R^5 和 D^1 不成环时,

R^5 代表氢, 且

D^1 代表 $-NH-SO_2-D^{26}$ (其中 D^{26} 代表 C_1 — $_4$ 烷基或 C_1 — $_3$ 卤烷基),



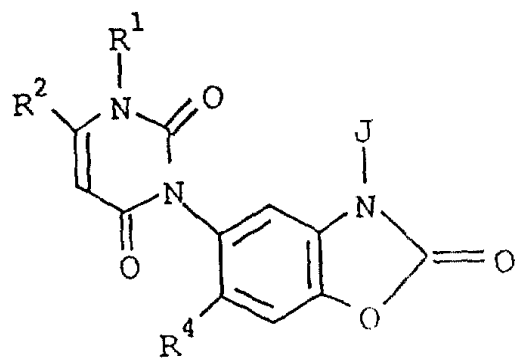
或



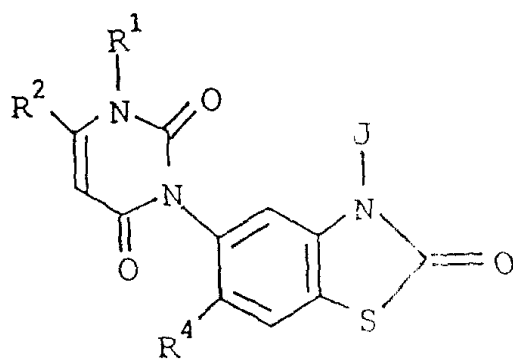
[其中 D^{27} 代表 C_1 — $_6$ 烷基],

(ii) 当 R^5 和 D^1 成环时,

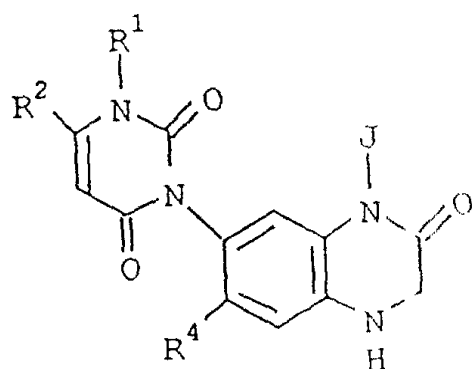
所述尿嘧啶衍生物由下式 (IV''-1), (IV''-2) 或 (IV''-3) 表示:



(IV''-1)

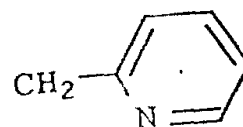


(IV''-2)



(IV''-3)

其中 R^1 , R^2 和 R^4 定义如上, 且 J 代表氢, C_1 -烷基, C_2 -烯基, C_3 -炔基, 氰甲基,

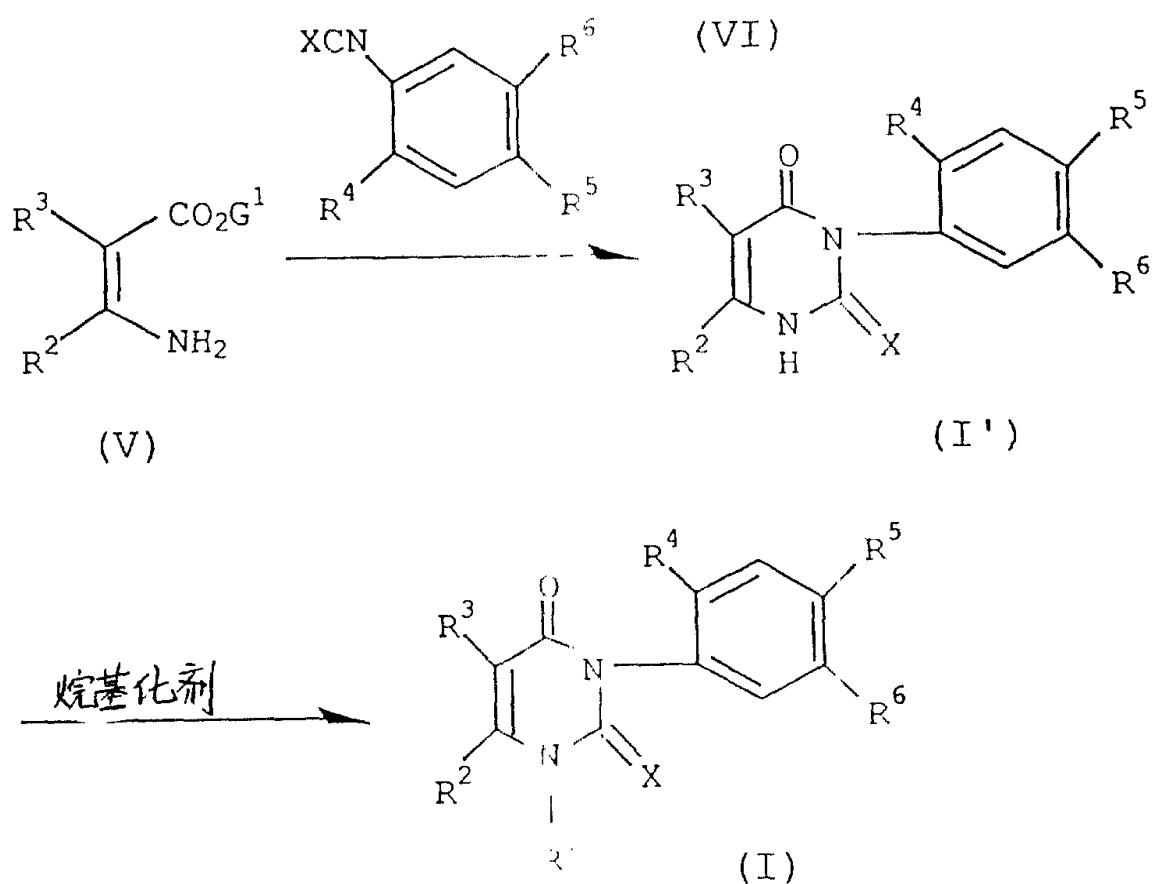


C_1 -烷氧基- C_1 -烷基, 或可取代的苄基 (取代基是 C_1 -烷基, 甲氧基或卤素)。

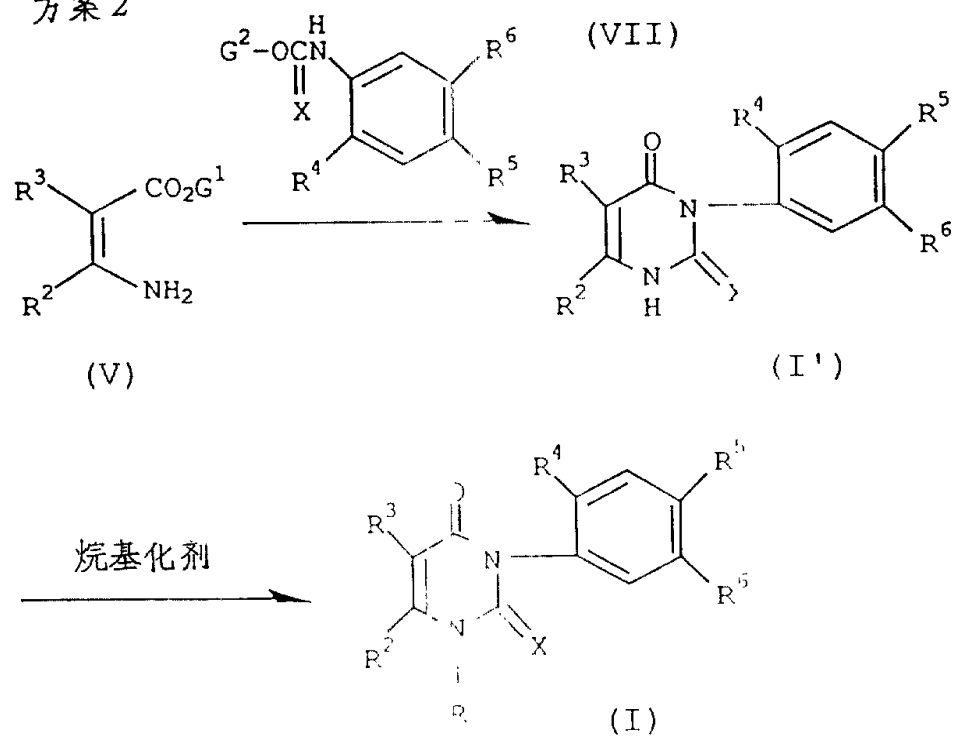
在本发明的化合物中, 化合物 A-1 ~ A-35, B-1, B-2, C-1 ~ C-25 特别优选用作除草剂的活性成分。

本发明的尿嘧啶衍生物可按以下反应方案合成:

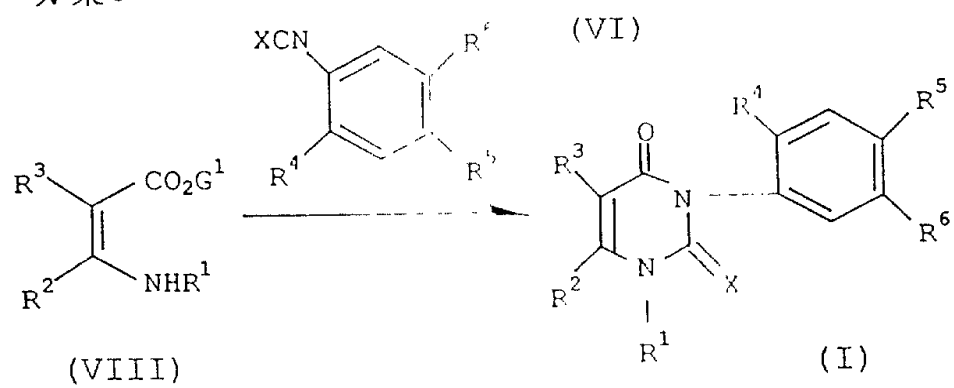
方案 1



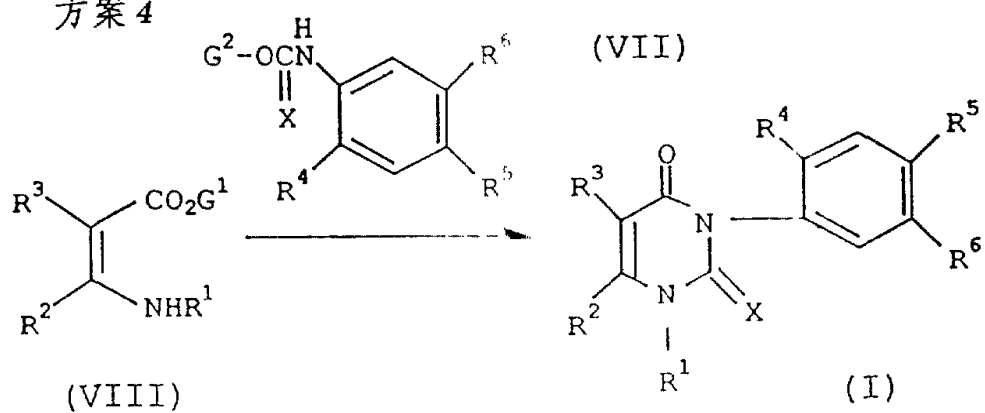
方案 2



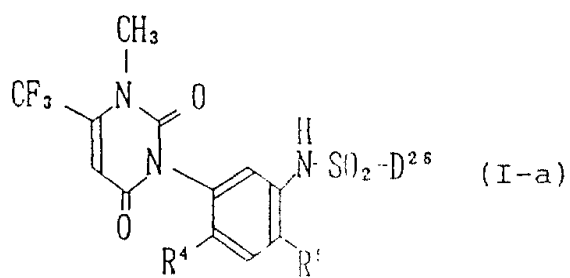
方案 3



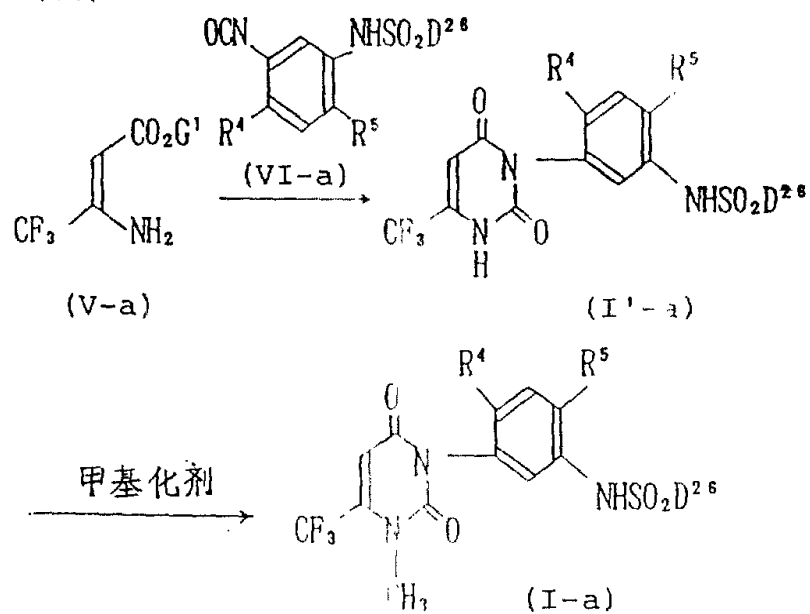
方案 4



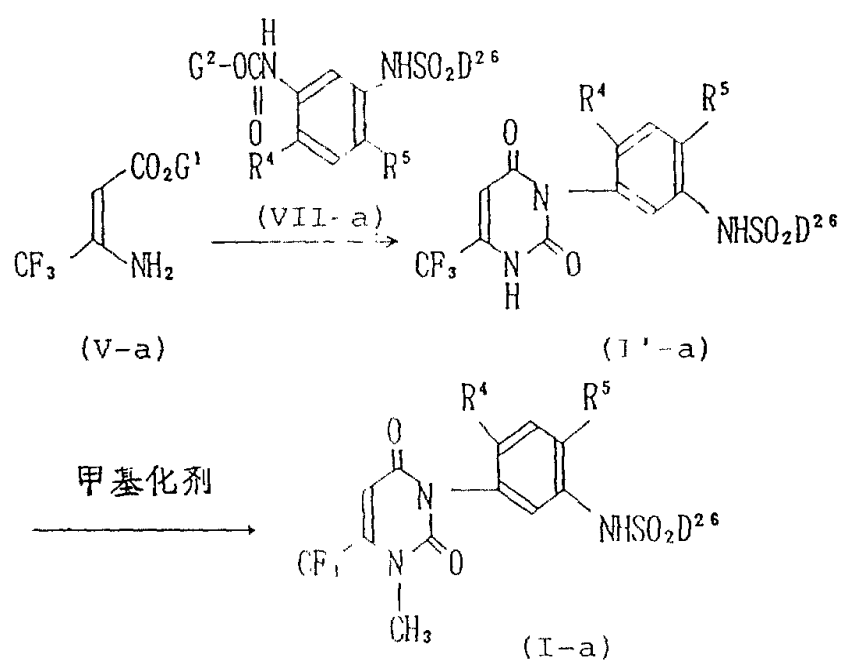
特别地，下式 (I-a) 表示的尿嘧啶衍生物可按照以下方案 5 ~ 11 合成。



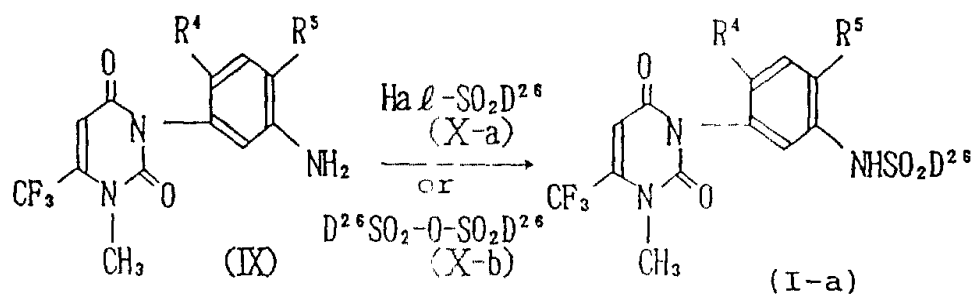
方案 5



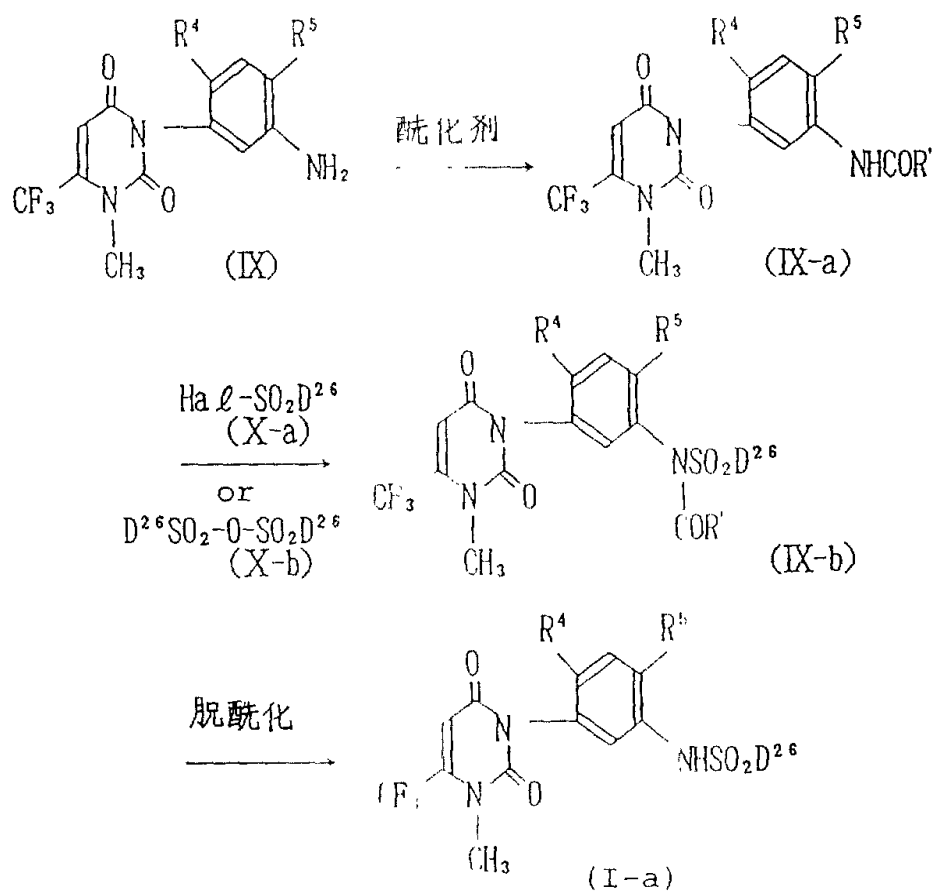
方案 6



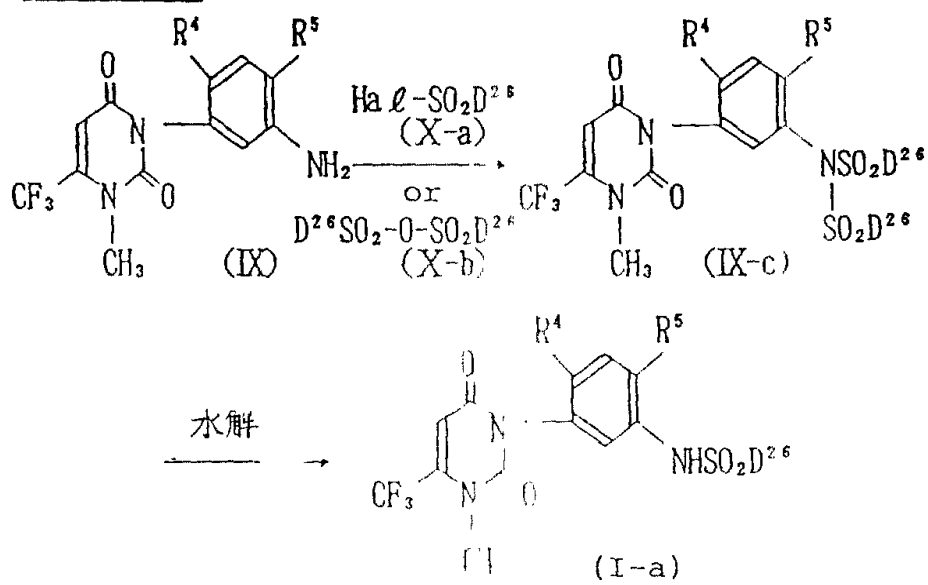
方案 9



方案 10



方案 11



(其中 G^1 代表 C_1 - 烷基, G^2 代表 C_1 - 烷基或苯基, R^1 代表氢, C_1 - 烷基或苯基且 Hal 代表卤素)

(1) 在方案 I 中, 第一步, 异(硫代)氰酸苯酯(VI)与 β -氨基丙酸酯(V)反应, 生成一种尿嘧啶衍生物(I'), 在分离或不分离所述衍生物(I')之后, 在第二步, 将该尿嘧啶环的 1 位烷基化, 得到式(I)的尿嘧啶衍生物。

第一步反应

通常, 异(硫代)氰酸苯酯(VI)的用量是 β -氨基丙酸酯(V)的 0.5 ~ 1.5 当量、最好是 0.8 ~ 1.2 当量。

反应可在无溶剂情况下进行, 但一般使用一种溶剂以促进反应进行。就可用于此反应目的的溶剂来说, 可提到的例子有脂族烃类, 如己烷、庚烷、轻石油和石油醚; 芳族烃类, 如苯、甲苯、二甲苯和氯苯; 卤代烃类, 如氯仿和二氯甲烷; 醚类, 如乙醚、二噁烷和四氢呋喃; 酮类, 如丙酮和甲乙酮; 腈类, 如乙腈和异丁腈; 叔胺类, 如吡啶和 N, N-二乙基苯胺; 酰胺类, 如 N, N-二甲基乙酰胺、N, N-二甲基甲酰胺和 N-甲基吡咯烷酮; 含硫化合物类, 如二甲亚砜和环砜烷; 水; 以及它们的混合物。其中, 优选脂族烃, 芳族烃, 酰胺, 含硫化合物以及它们的混合物。

该反应可在无碱条件下进行, 但一般使用用量相当于 β -氨基丙酸酯(V)的 0.5 ~ 10 当量、最好 1.0 ~ 3.0 当量的一种碱。就该碱来说, 可以使用例如含氮的有机碱类如吡啶、三乙胺, N, N-二甲基苯胺、N, N-二乙基苯胺、4-(N, N-二甲基氨基)吡啶和 1, 4-二氮双环[2, 2, 2]辛烷; 无机碱类, 如

氯化钠、氯化钾、氢氧化钠、氢氧化钾、碳酸钠和碳酸钾；和金属醇化物类，如甲醇钠、乙醇钠和叔丁氧钾。其中优选氯化钠，氢氧化钠和氢氧化钾。

反应温度一般是一70~200℃，最好是一30℃至反应混合物的回流温度。

反应时间一般是5分钟~72小时，最好10分钟~12小时。

反应完全后，通过用一种无机酸（如盐酸）或有机酸（如乙酸，三氟乙酸，对甲苯磺酸等）使反应产物酸化，可分离出衍生物（I'）。

第二步反应

在反应的第二步中，使用用量相当于衍生物（I'）的0.5~1.0当量、最好0.8~5.0当量的一种烷基化剂来烷基化衍生物（I'）。可使用的烷基化剂的例子有烷基磺酸类，如二甲磺酸和二乙磺酸；和烷基卤化物类，例如一氯甲烷、一氯乙烷、一溴甲烷、一溴乙烷、甲基碘和乙基碘。

反应可在无溶剂条件下进行，但一般使用一种溶剂以加速反应。可用于上述反应的溶剂例子有脂族烃类，如己烷、庚烷、轻石油和石油醚；芳族烃类，如苯、甲苯、二甲苯和氯苯；卤代烃类，如氯仿和二氯甲烷；醚类，如乙醚、二噁烷和四氢呋喃；酮类，如丙酮和甲乙酮；腈类，如乙腈和异丁腈；叔胺类，如吡啶和N，N-二乙基苯胺；酰胺类，如N，N-二甲基乙酰胺、N，N-二甲基甲酰胺和N-甲基吡咯烷酮；含硫化合物类，如二甲亚砜和环砜烷；水；以及它们的混合物。其中，优选脂族烃、芳族烃、醚、酮、腈、酰胺，含硫化合物以及它们的混合物。

在以上反应中，一般使用用量相当于衍生物 (I') 0.5~1.0 当量、最好 0.8~3.0 当量的一种碱。就该碱来说，可以使用含氮有机碱，如吡啶、三乙胺、N, N-二甲基苯胺、N, N-二乙基苯胺、4-(N, N-二甲氨基吡啶和 1,4-二氮双环[2, 2]辛烷；以及无机碱类，如氢化钠、氢化钾、氢氧化钠、氢氧化钾、碳酸钠和碳酸钾。其中，优选氢氧化钠和碳酸钾等无机碱。

反应温度一般为 -30~150℃，最好 -10℃~反应混合物的回流温度。

反应时间一般为 10 分钟~96 小时，最好 30 分钟~48 小时。

(2) 按照方案 2，在第一步中，(硫代)氨基甲酸-N-苯酯 (V II) 与 β-氨基丙烯酸酯 (V) 反应，生成尿嘧啶衍生物 (I')，在分离或不分离出衍生物 (I') 之后，在第二步，将尿嘧啶环的 1 位烷基化，得到式 (I) 的尿嘧啶衍生物。

第一步反应

通常使用用量相当于 β-氨基丙烯酸酯 (V) 0.5~1.5 当量、最好 0.8~1.2 当量的氨基甲酸-N-苯酯。

该反应通常需要使用一种溶剂。可以使用的溶剂例子有脂族烃类，如己烷、庚烷、轻石油和石油醚；芳族烃类，如苯、甲苯、二甲苯和氯苯；卤代烃类，如氯仿和二氯甲烷；醚类，如乙醚、二噁烷和四氢呋喃；酮类，如丙酮和甲乙酮；腈类，如乙腈和异丁腈；叔胺类，如吡啶和 N, N-二乙基苯胺；酰胺类，如 N, N-二甲基乙酰胺、N, N-二甲酰胺和 N-甲基吡咯烷酮；含硫化合物类，如二甲亚砜和环砜烷；醇类，如甲醇、乙醇、丙醇和丁醇；水；以及它们的混合

物。其中，优选脂族烃，芳族烃，酰胺，含硫化合物以及它们的混合物。

在上述反应中，通常使用一种碱，其用量相当于 β -氨基丙烯酸酯(V)的0.5~10当量，最好1.0~3.0当量。可用于上述反应的碱包括含氮有机碱类，如吡啶、三乙胺、N,N-二甲基苯胺，N,N-二乙基苯胺，4-(N,N-二乙氨基)[2,2,2]辛烷；无机碱类，如氢化钠、氢化钾、氢氧化钠、氢氧化钾、碳酸钠和碳酸钾；金属醇化物类，如甲醇钠、乙醇钠和叔丁氧钾；以及金属烷基硫醇盐，如甲硫醇钠和乙硫醇钠。其中，优选无机碱（如氢化钠）和金属醇化物（如甲醇钠）。

反应温度一般为0~200℃，最好室温~反应混合物的回流温度。

反应时间一般为10分钟~24小时，最好30分钟~12小时。

反应完毕后，通过用一种无机酸（如盐酸）或有机酸（如乙酸，三氟乙酸和对甲苯磺酸）酸化，可从反应混合物中分离出衍生物(I')。

第二步反应

在与方案1的第二步相同的反应条件下进行衍生物(I')的烷基化。

(3) 在方案3中，异(硫代)氰酸苯酯(VI)与N-取代的 β -氨基丙烯酸酯(VIII)进行一步反应，得到式(I)的尿嘧啶衍生物。可采用方案1所用的同样反应条件。

(4) 在方案4中，(硫代)氨基甲酸-N-苯基酯(VII)与

N-取代的-β-氨基丙烯酸酯 (V III) 进行一步反应, 得到式 (I) 的尿嘧啶衍生物。反应可以在方案 2 所用的同样反应条件下进行。

(5) 在方案 5 中, 在第一步, 异氰酸苯酯 (VI-a) 与 β-氨基丙酸酯 (V-a) 反应, 生成尿嘧啶衍生物 (I'-a), 在分离或不分离出所述衍生物 (I'-ε) 之后, 在第二步, 对尿嘧啶环的 1 位进行甲基化, 得到式 (I-ε) 的尿嘧啶衍生物。

第一步反应

通常, 异氰酸苯酯 (VI-a) 的用量为 β-氨基丙酸酯 (V-a) 的 0.5~1.5 当量、最好 0.8~1.2 当量。

反应可在无溶剂条件下进行, 但一般使用一种溶剂以加速反应。可提到的能用于该反应此目的的溶剂的例子有脂族烃类, 如己烷、庚烷、轻石油和石油醚; 芳族烃类, 如苯、甲苯、二甲苯和氯苯; 卤代烃类, 如氯仿和二氯甲烷; 醚类, 如乙醚、二噁烷和四氢呋喃; 酮类, 如丙酮和甲乙酮; 腈类, 如乙腈和异丁腈; 叔胺类, 如吡啶和 N, N-二乙基苯胺; 酰胺类, 如 N, N-二甲基乙酰胺, N, N-二甲基甲酰胺和 N-甲基吡咯烷酮; 含硫化合物类, 如二甲亚砜和环砜烷; 水; 以及它们的混合物。其中, 脂族烃类, 芳族烃类, 酰胺类, 含硫化合物类以及它们的混合物是优选的。

反应可在无碱条件下进行, 但一般使用一种碱, 其用量相当于 β-氨基丙酸酯 (V-a) 的 0.5~10 当量、最好 1.0~3.0 当量。可使用的碱的例子有含氮有机碱, 如吡啶、三乙胺、N, N-二甲基苯胺、N, N-二乙基苯胺、4-(N, N-二甲氨基) 吡啶和 1, 4-二氮双环[2, 2, 2]辛烷; 无机碱类, 如氢氧化钠、氢

化钾、氢氧化钠、氢氧化钾、碳酸钾和碳酸钠；和金属醇化物类，如甲醇钠、乙醇钠和叔丁氧钾。其中，优选氯化钠，氢氧化钠和氢氧化钾。

反应温度通常为 $-70 \sim 200^{\circ}\text{C}$ ，最好是一 30°C ～反应混合物的回流温度。

反应时间通常为5分钟～72小时，最好10分钟～12小时。

反应完毕之后，用一种无机酸（如盐酸）或有机酸（如乙酸，三氟乙酸，对甲苯磺酸等等）使反应产物酸化，由此可分离出衍生物（I'—a）。

第二步反应

在反应的第二步中，用一种其用量相当于衍生物（I'—a）0.5～10当量、最好0.8～5.0当量的甲基化剂甲基化衍生物（I'—a）。可使用的甲基化剂的例子是二甲基硫酸和甲基卤化物，如氯化甲烷、溴化甲烷和碘代甲烷。

反应可在无溶剂条件下进行，但一般使用一种溶剂以加速反应。可提到的能用于上述反应的溶剂例子有脂族烃类，如己烷，庚烷，轻石油和石油醚；芳族烃类，如甲、甲苯、二甲苯和氯苯；卤代烃类，如氯仿和二氯甲烷；酮类，如丙酮和甲乙酮，腈类，如丙腈和异丁腈；叔胺类，如吡啶和N，N—二甲基乙酰胺、N，N—二甲基甲酰胺和N—甲基吡咯烷酮；含硫化合物类，二甲亚砷和环砷烷；水；以及它们的混合物。其中，优选脂族烃类，芳族烃类，醚类，酮类，腈类，酰胺类，含硫化合物类，以及它们的混合物。

在上述反应中，通常使用一种碱，其用量相当于衍生物（I'—a）的0.5～10当量、最好0.8～3.0当量。可使用的碱

的例子有：含氮有机碱类，如吡啶、三乙胺、N，N-甲基苯胺、N，N-二乙基苯胺、4-(N，N-二甲氨基)吡啶和1，4-二氮双环[2，2，2]辛烷；和无机碱类，如氢化钠、氢化钾、氢氧化钾、氢氧化钠、碳酸钠和碳酸钾。其中，优选氢化钠和碳酸钾之类的无机碱。

反应温度一般为 $-30\sim 150^{\circ}\text{C}$ 、最好 $-10^{\circ}\text{C}\sim$ 反应混合物的回流温度。

反应时间一般为10分钟~96小时，最好30分钟~48小时。

(6) 按照方案6，在第一步，(硫代)氨基甲酸-N-苯酯与 β -氨基丙烯酸酯(V-a)反应，形成尿嘧啶衍生物(I'-a)，在分离或不分离出衍生物(I'-a)之后，在第二步，对尿嘧啶环的1位甲基化，得到式(I-a)的尿嘧啶衍生物。

第一步反应

通常，氨基甲酸-N-苯酯(VII-a)的用量为 β -氨基丙烯酸酯(V-a)的0.5~1.5当量，最好0.8~1.2当量。

反应中一般需要使用一种溶剂，可使用的溶剂的例子是脂族烃类，如己烷、庚烷、轻石油和石油醚；芳族烃类，如苯、甲苯、二甲苯和氯苯，卤代烃类，如氯仿和二氯甲烷，醚类，如乙醚、二噁烷和四氢呋喃；酮类，如丙酮和甲乙酮；腈类，如乙腈和异丁腈；叔胺类，如吡啶和N，N-二乙基苯胺；酰胺类，如N，N-二甲基乙酰胺、N，N-二甲基甲酰胺和N-甲基吡咯烷酮；含硫化合物类，如二甲亚砜和环砜烷；醇类，如甲醇、乙醇、丙醇和丁醇；水；和它们的混合物。其中，优选脂族烃，芳族烃，酰胺、含硫化合物以及它们

的混合物。

在上述反应中，通常使用一种碱，其用量相当于 β -氨基丙烯酸酯(V-a)的0.5~1.0当量、最好1.0~3.0当量。可用于上述反应的碱包括含氮有机碱类，如吡啶、三乙基胺、N,N-二甲基苯胺、N,N-二乙基苯胺、4-(N,N-二甲氨基)吡啶和1,4-二氮双环[2,2,2]辛烷；无机碱类，如氢化钠、氢化钾、氢氧化钠、氢氧化钾、碳酸钠和碳酸钾；金属醇化物，如甲醇钠、乙醇钠和叔丁氧钾；以及金属烷基硫醇盐，如甲硫醇钠和乙硫醇钠。其中，优选无机碱（如氢化钠）和金属醇化物（如甲醇钠）。

反应温度一般为0~200℃，最好室温~反应混合物的回流温度。

反应时间一般为10分钟~24小时，最好30分钟~24小时。

反应完毕后，用一种无机酸（如盐酸）或有机酸（如乙酸，三氟乙酸和对甲苯磺酸）酸化反应产物，从而可从反应混合物中分离出衍生物(I'-a)。

第二步反应

衍生物(I'-a)的烷基化反应可在方案5第二步的同样反应条件下进行。

(7)在方案7中，异氰酸苯酯(VI-a)与N-甲基- β -氨基丙烯酸酯(VIII-a)进行一步反应，得到式(I-a)的尿嘧啶衍生物。可使用方案5所用的同样反应条件。

(8)在方案8中，氨基甲酸-N-苯基酯(VII-a)与N-甲基- β -氨基丙烯酸酯(VIII-a)进行一步反应，得到式(I-a)

的尿嘧啶衍生物。反应可在方案6所用的同样反应条件下进行。

(9) 在方案9中, 磺基卤化物(X-a)或磺酸酐(X-b)与胺化化合物(IX)进行一步反应, 得到式(I-a)的尿嘧啶衍生物。

通常, 磺基卤化物(X-a)或磺酸酐(X-b)的用量为胺化化合物(IX)的0.3~1.0当量、最好0.5~2.0当量。

反应可在无溶剂条件下进行, 但通常使用一种溶剂以加速反应。可用于该反应所述目的溶剂的例子是脂族烃类, 如己烷、庚烷、轻石油和石油醚; 芳族烃类, 如苯、甲苯、二甲苯和氯苯; 卤代烃类, 如氯仿和二氯甲烷; 醚类, 如乙醚、二噁烷和四氢呋喃; 酮类, 丙酮和甲乙酮, 腈类, 如乙腈和异丁腈; 叔胺类, 如吡啶和N,N-二乙基苯胺; 酰胺类, 如N,N-二甲基乙酰胺、N,N-二甲基甲酰胺和N-甲基吡咯烷酮; 含硫化合物类, 如二甲基亚砷和环砷烷; 以及它们的混合物。

反应可在无溶剂条件下进行, 但一般使用一种碱, 其用量相当于胺化化合物(IX)的0.3~1.0当量。而且, 该碱可大大过量地用作溶剂。可使用的碱的例子有: 含氮有机碱类, 如吡啶、三乙胺、N,N-二甲基苯胺、N,N-二乙基苯胺、4-(N,N-二甲基)吡啶和1,4-二氮双[2,2,2]辛烷; 无机碱类, 如氢化钠、氢化钾、氢氧化钠、氢氧化钾、碳酸钠和碳酸钾; 以及金属醇化物类, 如甲氧酸钠、乙醇钠和叔丁氧钾。其中, 优选含氮有机碱和无机碱。

反应温度一般为-30~160°C, 最好-10~130°C。

反应时间一般为10分钟~48小时, 最好30分钟~24小

时。

(10) 在方案10中, 第一步, 胺化化合物(I X)与酰化剂反应, 形成胺化的氨基化合物; 在分离或不分离出胺化的氨基化合物(I X-a)之后, 第二步, 磺酰化酰化的氨基化合物(I X-a), 得到N-酰基氨磺酰化的化合物(I X-b); 在分离或不分离出N-酰基氨磺酰化的化合物(I X-b)之后, 第三步, 对N-酰基氨磺酰化的化合物(I X-b)脱酰化, 得到式(I-a)的尿嘧啶衍生物。

第一步反应

通常, 酰化剂的用量为胺化化合物的0.5~5.0当量、最好0.8~2.0当量。就酰化剂来说, 可以使用乙酰氯、苯甲酰氯、乙酸酐和甲酸, 优选乙酸酐。

反应可在无溶剂条件下进行, 但一般使用一种溶剂以加速反应。可用于此反应的上述目的溶剂例子是脂族烃类, 如己烷、庚烷、轻石油和石油醚; 芳族烃类, 如苯、甲苯、二甲苯和氯苯; 卤代烃类, 如氯仿和二氯甲烷, 叔胺类, 如吡啶和N, N-二乙基苯胺; 酰胺类, 如N, N-二甲基乙酰胺、N, N-二甲基甲酰胺和N-甲基吡咯烷酮, 含硫化合物类, 如二甲亚砜和环砜烷; 有机酸类, 如甲酸、乙酸和丁酸; 以及它们的混合物。其中, 优选脂族烃类, 芳族烃类, 卤代烃类和有机酸类。

反应可在无碱条件下进行, 但通常使用一种碱, 其用量相当于胺化化合物(I X)的0.5~5.0当量、最好是0.8~2.0当量。可使用的碱的例子是含氮有机碱类, 如吡啶、三乙胺、N, N-二甲基苯胺、N, N-二乙基苯胺、4-(N, N-二甲氨基)吡啶

和 1, 4-二氮双环[2, 2, 2]辛烷; 无机碱类, 如氢氧化钠、氢氧化钾、碳酸钠和碳酸钾; 以及乙酸盐类, 如乙酸钠和乙酸钾。

反应温度一般为 $-30 \sim 200^{\circ}\text{C}$, 最好 $0 \sim 130^{\circ}\text{C}$ 。

反应时间一般为 10 分钟 $\sim$ 24 小时, 最好 30 分钟 $\sim$ 6 小时。

第二步反应

在反应的第二步中, 使用其用量相当于酰化的氨基化合物 (IX-a) 的 0.5 $\sim$ 5.0 当量、最好 0.8 $\sim$ 2.0 当量的磺酰化剂对酰化的氨基化合物 (IX-a) 磺酰化。可使用的磺酰化剂的例子是式 $\text{H a L}-\text{SO}_2 \cdot \text{D}^{26}$ 表示的磺酰卤 (X-a) 和式 $\text{D}^{26}-\text{SO}_2-\text{O}-\text{SO}_2 \cdot \text{D}^{26}$ 表示的磺酸酐 (X-b)。

反应可在无溶剂条件下进行, 但通常使用一种溶剂以加速反应。可用于上述反应中所述目的的溶剂例子是脂族烃类, 如己烷、庚烷、轻石油和石油醚; 芳香烃类, 如苯、甲苯、二甲苯和氯苯; 卤代烃类, 如氯仿和二氯甲烷; 醚类, 如乙醚、二噁烷和四氢呋喃; 酮类, 如丙酮和甲乙酮; 腈类, 如乙腈和异丁腈; 叔胺类; 如吡啶和 N, N-二乙基苯胺; 酰胺类, 如 N, N-二甲基乙酰胺, N, N-二甲基甲酰胺和 N-甲基吡啶烷酮; 含硫化合物类, 如二甲基亚砷和环砷烷; 以及它们的混合物。

在上述反应中, 通常使用一种碱, 其用量相当于酰化的氨基化合物 (IX-a) 的 0.5 $\sim$ 5.0 当量、最好 0.8 $\sim$ 2.0 当量。可使用的碱是含氮有机碱类, 如吡啶、三乙胺、N, N-二甲基苯胺、N, N-二乙基苯胺、4-(N, N-二甲氨基)吡啶和 1, 4-二氮双环[2, 2, 2]辛烷; 无机碱类, 如氢氧化钠、碳酸钾和

碳酸钠以及金属醇化物类，如甲醇钠、乙醇钠和叔丁氧钾。其中，优选含氮有机碱和无机碱。

反应温度一般为 $-30\sim 160^{\circ}\text{C}$ ，最好 $-10\sim 130^{\circ}\text{C}$ 。

反应时间一般为30分钟 $\sim$ 48小时，最好1 $\sim$ 12小时。

第三步反应

一般来说，使用水、碱或酸，其用量相当于N-酰基氨基磺酰化合物(I X-b)的0.5 $\sim$ 3.0当量、最好0.8 $\sim$ 2.0当量。

可提到的碱的例子是无机碱类，如氢化钠、氢化钾、氢氧化钠、氢氧化钾、碳酸钠和碳酸钾；以及金属醇化物类如甲醇钠、乙醇钠和叔丁氧钾。其中，优选无机碱。

可提到的酸的例子是无机酸类，如盐酸和硫酸；以及有机酸类，如乙酸和三氟乙酸。

反应可在无溶剂条件下进行，但通常使用一种溶剂以加速反应。可使用的溶剂的例子是脂族烃类，如己烷、庚烷、轻石油和石油醚；芳香烃类，如苯、甲苯、二甲苯和氯苯；卤代烃类，如氯仿和二氯甲烷；醇类，如甲醇和乙醇，醚类，如乙醚、二噁烷和四氢呋喃；酮类，如丙酮和甲乙酮；腈类，如乙腈和异丁腈；叔胺类，如吡啶、三乙胺、N，N-二甲基苯胺和N，N-二乙基苯胺；酰胺类，如N，N-二甲基乙酰胺、N，N-二甲基甲酰胺和N-甲基吡咯烷酮，有机酸类，如甲酸、乙酸和丁酸；水；以及它们的混合物。其中，优选醇类，醚类，酮类，叔胺类，酰胺类，有机酸类和水。

反应温度通常为 $-30\sim 130^{\circ}\text{C}$ ，最好 $-10\sim 100^{\circ}\text{C}$ 。

反应时间通常为10分钟 $\sim$ 48小时，最好30分钟 $\sim$ 24小

时。

(I 1) 在方案 1 1 中, 第一步, 胺化化合物 (I X) 被磺酰化, 得到二磺酰基胺化化合物 (I X - c); 在分离或不分离出二磺酰基胺化化合物 (I X - c) 后, 第二步, 水解二磺酰基胺化化合物 (I X - c), 得到式 (I - a) 的尿嘧啶衍生物。

第一步反应

通常, 磺酰卤 (X - a) 或磺酸酐 (X - b) 的用量相当于胺化化合物 (I X) 的 1. 0 - 2. 0 当量、最好 2. 0 ~ 5. 0 当量。

反应可在无溶剂条件下进行, 但通常使用一种溶剂以加速反应。可用于上述反应中所述目的的溶剂的例子有脂族烃类, 己烷、庚烷、轻石油和石油醚; 芳香烃类, 如苯、甲苯、二甲苯和氯苯; 卤代烃类, 如氯仿和二氯甲烷; 醚类, 如乙醚、二噁烷和四氢呋喃; 酮类, 如丙酮和甲乙酮; 腈类, 如乙腈和异丁腈; 叔胺类, 如吡啶和 N, N - 二甲基苯胺; 酰胺类, 如二甲基乙酰胺, N, N - 二甲基甲酰胺和 N - 甲基吡咯烷酮; 含硫化合物类, 如二甲亚砜和环砜烷; 以及它们的混合物。

反应可在无碱条件下进行, 但通常使用一种碱, 其用量是胺化化合物 (I X) 的 1. 0 ~ 1. 0 当量、最好 2. 0 ~ 3. 0 当量。可使用的碱的例子有: 含氮有机碱类, 如吡啶、三乙胺、N, N - 二甲基苯胺、N, N - 二乙基苯胺、4 - (N, N - 二甲氨基) 吡啶和 1, 4 - 二氮双环 [2, 2, 2] 辛烷; 无机碱类, 如氢氧化钠、氢氧化钾、氢氧化钠、氢氧化钾、碳酸钠和碳酸钾; 以及金属醇化物类, 如甲醇钠、乙醇钠和叔丁氧钾。其中, 优选含氮有机碱和无机碱。

反应温度通常为 - 3 0 ~ 1 6 0 °C, 最好 - 1 0 ~ 1 3 0 °C。

反应时间通常为30分钟~60小时,最好1~30小时。

第二步反应

使用用量为二磺酰基胺化合物(I X-c)的0.5~3.0当量、最好0.8~2.0当量的水、碱或酸,以便将其水解。

可提到的碱的例子有无机碱类,如氢化钠、氢化钾、氢氧化钠、氢氧化钾、碳酸钠和碳酸钾;以及金属醇化物类,如甲醇钠、甲醇钾和叔丁氧钾。其中,优选无机碱。

可提到的酸的例子有无机酸类,如盐酸和硫酸;和有机酸类,如乙酸和三氟乙酸。

反应可在无溶剂条件下进行,但通常使用一种溶剂以加速反应。可用于上述反应中所述目的溶剂的例子是脂族烃类,如己烷、庚烷、轻石油和石油醚;芳香烃类,如苯、甲苯、二甲苯和氯苯;卤代烃类,如氯仿和二氯甲烷;醇类,如甲醇和乙醇;醚类,如乙醚、二噁烷和四氢呋喃;酮类,如丙酮和甲乙酮,腈类,如乙腈和异丁腈;叔胺类,如吡啶、三甲胺、N,N-二甲基苯胺、N,N-乙基苯胺、4-(N,N-二甲氨基)吡啶和1,4-二氮双环[2,2,2]辛烷;酰胺类,如N,N-二甲基乙酰胺、N,N-二甲基甲酰胺和N-甲基吡咯烷酮;无机酸类,如甲酸、乙酸和丁酸;水;以及它们的混合物。其中,优选醇类,醚类,酮类,叔胺类,酰胺类,有机酸类和水。

反应温度通常为-30~160℃,最好-10~130℃。

反应时间通常为5分钟~48小时,最好30分钟~24小时。

通过土壤处理和簇叶处理,本发明的尿嘧啶衍生物可作为除草剂施用于山地、稻田和非耕种田地。而且,在低剂量下,这类衍生物对

以下草例具有很高的除草活性；茄科宽叶草的耕地草（如 *Solanum nigrum* 和 *Datura stramonium* ），锦葵科草（如 *Abutilon theophrasti* 和 *Sida spinosa* ），旋花科草（如 *Ipomoea purpurea* spp. 和 *Calystegia* spp. ），苋科草（如 *Amaranthus lividus* 和 *Amaranthus retroflexus* ），菊科草（如 *Xanthium Pennsylvanicum*, *Ambrosia artemisiifolia*, *Helianthus annuus*, *Galinsoga ciliata*, *Cirsium arvense*, *Senecio vulgaris*, *Erigeron annuus* 和 *Bidens pilosa* ），十字花科草（如 *Rorippa indica*, *Sinapis arvensis* 和 *Capsella Bursapastoris* ）。蓼科草（如 *Polygonum Blume* 和 *Polygonum convolvulus* ），马齿苋科草（如 *Portulaca oleracea* ），藜科草（如 *Chenopodium album*, *Chenopodium ficifolium* 和 *Kochia scoparia* ），石竹科草（如 *Stellaria media* ），玄参科草（如 *Veronica persica* ），鸭跖草科草（如 *Commelina communis* ），唇形科草（如 *Lamium amplexicaule* 和 *Lamium purpureum* ），大戟科草（如 *Euphorbia supina* 和 *Euphorbia maculata* ），茜草科草（如 *Galium spurium*, *Galium aparine* 和 *Rubiacane* ），堇菜科草（如 *Viola arvensis* ），和豆科草（如 *Sesbania exaltata* 和 *Cassia obtusifolia* ）；似草类杂草（如 *Sorghum bicolor*, *Panicum dichotomiflorum*, *Sorghum halepense*, *Echinochloa crus-galli*, *Digitaria adscendens*, *Avena*

fatua , *Eleusine indica* , *Setaria viridis* 和
Alopecurus aequalis); 莎草科草 (如 *Cyperus rotundus*
 和 *Cyperus esulentus*); 泽泻科草的稻草 (如 *Alisma*
caraliculatum , *Sagittaria trifolia* 和
Sagittaria pygmaea), 莎草科草 (如 *Cyperus*
difformis , *Cyperus serotinus* , *Scirpus juncoid*
es 和 *Eleocharis kuroguwai*), 玄参科草 (如
Lindemia pyxiaaria), 委陵菜科草 (如 *Monochoria*
Vaginalis), 眼子菜科草 (*Potamogeton distinctus*),
 千屈菜科草 (如 *Rotala indica*) 和禾本科草 (如
Echinochloa crus-galli)。而且, 还令人惊异地发现, 本发
 明的尿嘧啶衍生物对小麦、谷物、大麦、大豆、稻子等重要农作物无
 害。特别是, 由于本发明的尿嘧啶衍生物 (I - a) 通过土壤处理或
 混入土壤处理显示出对大豆无毒性, 而且在很低剂量下对以下杂草具
 有很高的除草活性 (*Abutilon theophrasti* , *Xanthium*
pensylvanicum , *Ipomoea purpurea* Spps, *Calysteg*
ia Spps, *Amaranthus retroflexus* *Polygonum*
Blume , *Polygonum Convolvulus* , *portulaca*
Oleracea , *Chenopodium album* , *Datura*
Stramonium , *Ambrosia artemisaefolia* , *Bldens*
pilosa , *Sida Spinosa* , *Sebsania exaltate* 和
Solanum nigrum), 所以, 本发明的尿嘧啶衍生物 (I - a)
 作为除草组合物的活性成分非常有效。

此外, 本发明的尿嘧啶衍生物还可用作脱叶剂。

本发明的化合物用作除草剂时，它们通常与一种载体混合，例如固体载体，如粘土，滑石、膨润土、硅藻土和白炭（细硅粉），或液体载体，如含水醇（异丙醇，丁醇，苄醇，糠醇等），芳烃（甲苯，二甲苯等），醚（苯甲醚等），酮（环己酮，异佛尔酮等），酯（乙酸丁酯等），酰胺（N-甲基吡咯烷酮等）和卤代碳（氯苯等），而且，若需要，它们也可与一种合适的助剂混合，如表面活性剂，乳化剂、分散剂、渗透剂、潮温剂、增稠剂、防冻剂、抗凝剂、稳定剂等等，而且可以不同的配方形式，如液体配方、可乳化浓缩物、可湿粉末、干燥的可流动物、可流动物、粉剂和颗粒提供给实际应用。

在本发明除草剂组合物中，本发明脲嘧啶衍生物的活性成分的量
为 0.1—90 重量份，除草剂可以接收的载体或稀释剂的量为 10
—99.9 重量份（以 100 重量份的除草剂组合物计）。

更具体地说，本发明尿嘧啶衍生物在每一配方中的优选组成如下
所示（以 100 重量份的除草剂组合物计）

可湿粉末

本发明尿嘧啶衍生物：	5—80 重量份
固体载体：	10—85 重量份
表面活性剂：	1—10 重量份
其它载体（如抗凝剂等）：	1—5 重量份

可乳化的浓缩物

本发明尿嘧啶衍生物：	1—30 重量份
液体载体：	30—95 重量份
表面活性剂：	5—15 重量份

流体

本发明的尿嘧啶衍生物：	5—70 重量份
液体载体：	15—65 重量份
表面活性剂：	5—12 重量份
其它载体（如抗冻剂、增稠剂等）：	5—30 重量份

粒状可湿粉末（干燥可流动物）

本发明的尿嘧啶衍生物：20—90 重量份

固体载体：10—60 重量份

表面活性剂：1—20 重量份

颗粒

本发明的尿嘧啶衍生物：0.1—10 重量份

固体载体：90—99.99 重量份

其它载体：1—5 重量份

根据需要，可将本发明的化合物与其它除草剂、各种杀虫剂、杀真菌剂、植物生长调节剂以及协合剂等混合，这种混合可以在制备过程中或在施用时进行。

作为可与本发明化合物混合的除草剂种类，可以提到例如 Farm Chemicals Handbook (1990) 中所述的化合物。

尤其在将本发明化合物应用于大豆的情况下，可与本发明化合物混合的优选化合物的例子有：氟乐灵、Pendimethalin、草不绿、metolachor、赛克津、利谷隆、Chlorimuron ethyl、imazaquin imazethapyr、地乐酚、治草醚以及 Clomazone。

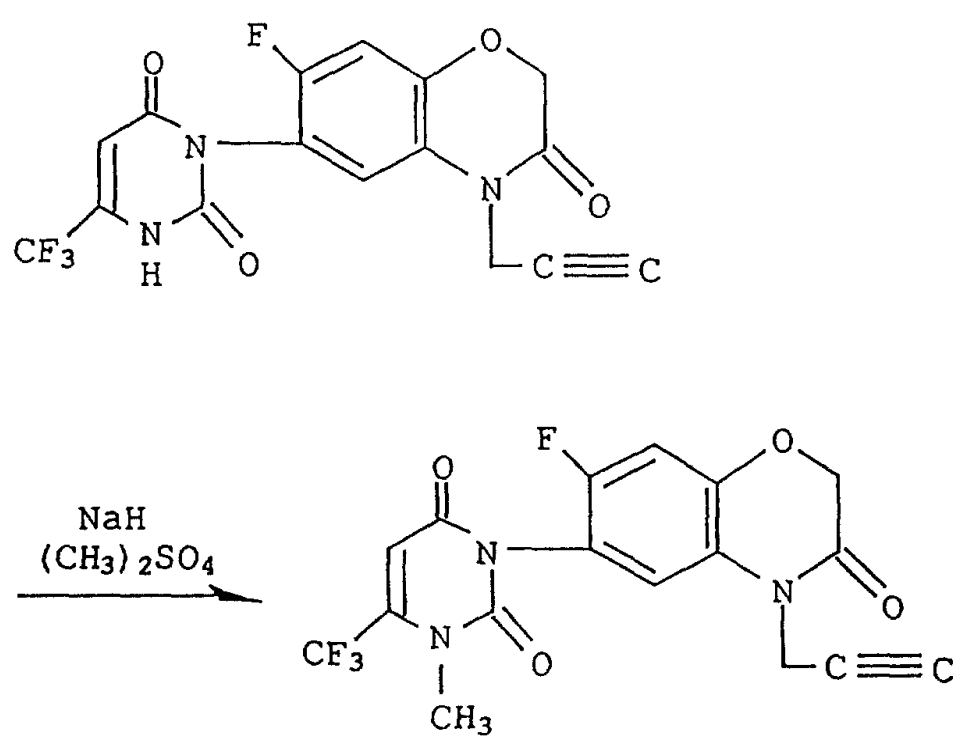
本发明化合物的施用率可根据施用地、施用时间、施用方法以及所处理作物的种类等因素而变化，但通常施用本发明化合物的合适量为约 0.0001—10 kg/ha、优选 0.001—5 kg/ha（测定活性成分的量）。

本发明尿嘧啶衍生物具有优良的渗透性易位活性，在极低剂量时具有极高除草活性，并且对大豆无植物毒性，可以通过土壤处理或土壤结合处理加以施用以对付各种杂草。

以下用实施例更详细地说明本发明，但应当意识到本发明的范围并不限于这些实施例。

实施例 A-1

合成 3-(7-氟-3-氧代-4-炔丙基-2H-1,4-苯并噁嗪-6-基)-1-甲基-6-三氟甲基-2,4-(1H,3H)-嘧啶二酮(化合物 A-1)

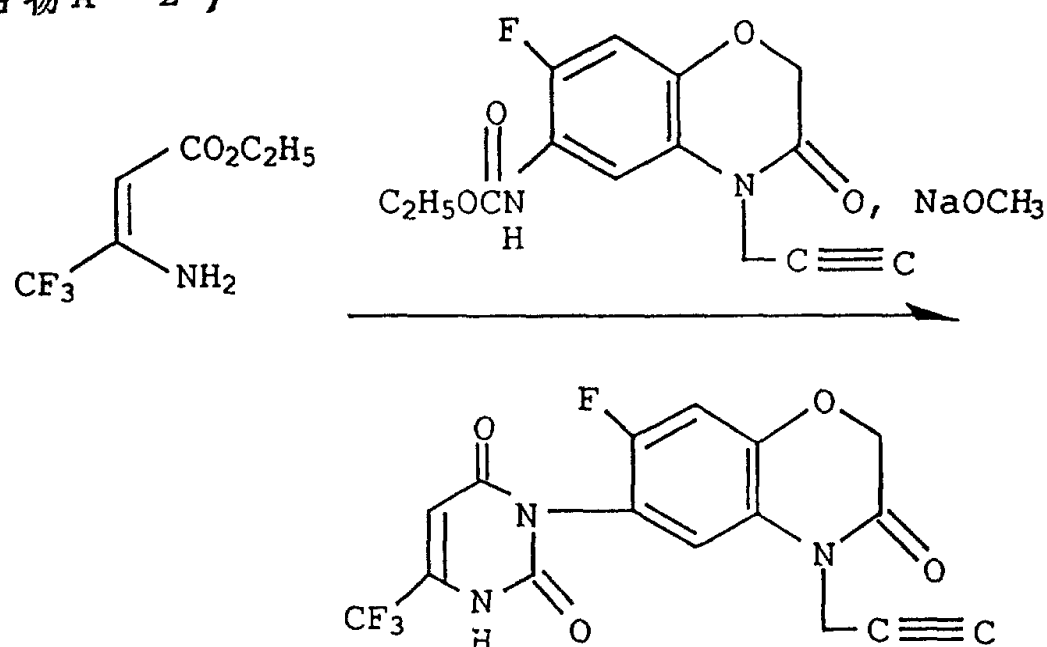


于室温下将 0.18g 3-(7-氟-3-氧代-4-炔丙基-2H-1,4-苯并噁嗪-6-基)-6-三氟甲基-2,4-(1H,3H)-嘧啶二酮加到其中悬浮有 0.02g 氢化钠(纯度:55%)的 2ml 二甲基甲酰胺溶液中,放置 20 分钟后向溶液中再加入

0.09 g 二甲基硫酸并搅拌过夜。然后蒸馏掉二甲基甲酰胺，剩余物通过加水用乙酸乙酯萃取。萃取物用饱和氯化钠水溶液洗涤并于无水硫酸钠上干燥，蒸馏掉乙酸乙酯后得到粗产物。利用己烷/乙酸乙酯（3 : 1）作为展开剂，通过薄层色谱纯化粗产物，得到 0.15 g 无色、粘性、油状目的产物。这种油状物放置时自然凝固。

实施例 A - 2

合成 3 - (7 - 氟 - 3 - 氧代 - 4 - 炔丙基 - 2 H - 1 , 4 - 苯并恶嗪 - 6 - 基) - 6 - 三氟甲基 - 2 , 4 (1 H , 3 H) - 嘧啶二酮 (化合物 A - 2)

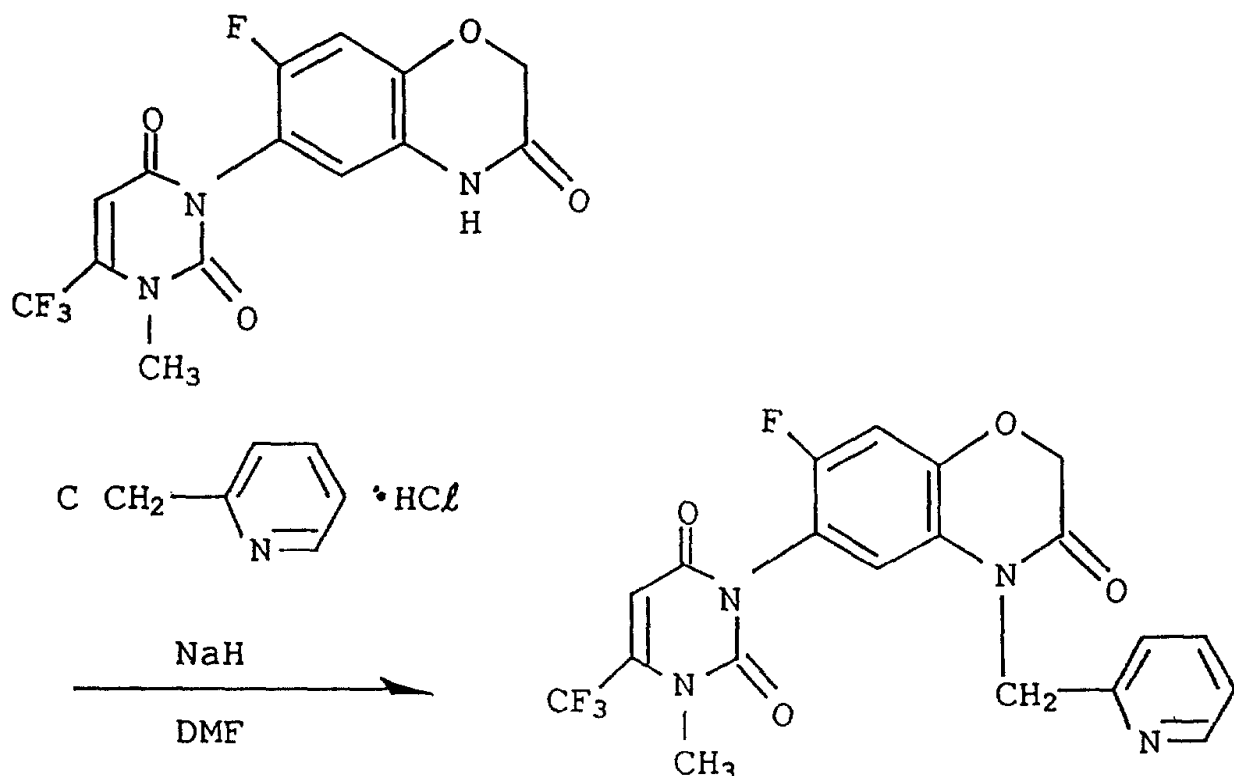


于室温下将 1.10 g 3 - 氨基 - 4 , 4 , 4 - 三氟巴豆酸乙酯加到 0.33 g 甲醇钠和 5 ml 二甲基甲酰胺的混合物中。放置 20 分钟后向该混合物中加入 1.76 g 6 - 乙氧羰基氨基 - 7 - 氟 - 3 - 氧代 - 4 - 炔丙基 - 2 H - 1 , 4 - 苯并恶嗪，于 130 °C 加热 4 小时。在将该溶液冷却至室温后将其倒入冰水，用乙醚萃取所得溶液两次。用稀盐酸将水层调至酸性，并用乙酸乙酯萃取三次。用饱和氯化钠水溶液洗涤乙酸乙酯萃取物，于无水硫酸钠上干燥。蒸馏掉乙

酸乙酯后，用氯仿作展开剂通过柱色谱纯化剩余物，得到 0.20 g 目的产物（浅黄色晶体）。

实施例 A-3

合成 3-(7-氟-3-氧代-4-(2-吡啶-1-基)-2H-1,4-苯并噁嗪-6-基)-1-甲基-6-三氟甲基-2,4-(1H, 3H)-嘧啶二酮（化合物 A-3）

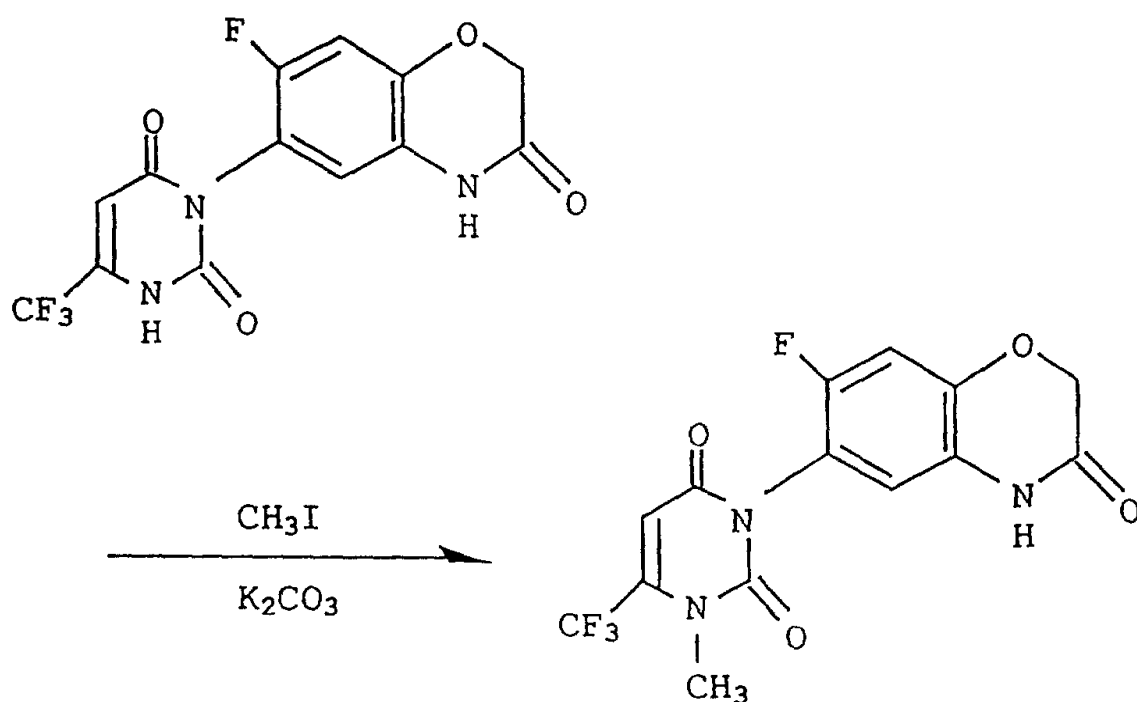


于室温下将 0.20 g 3-(7-氟-3-氧代-2H-1,4-苯并噁嗪-6-基)-1-甲基-6-三氟甲基-2,4-(1H, 3H)-嘧啶二酮加到其中悬浮有 0.05 g 氢化钠（纯度：55%）的 5 ml N,N-二甲基甲酰胺溶液中。放置 20 分钟后向该溶液中加入 0.09 g 2-氯甲基吡啶盐酸盐，并搅拌 4 小时。然后蒸馏掉 N,N-二甲基甲酰胺，残余物通过加水用乙酸乙酯萃取。萃取物经饱和氯化钠水溶液洗涤后置无水硫酸钠上干燥。蒸掉乙酸乙酯后得到粗产物。利用己烷/乙酸乙酯（2：3）作为展开剂通过制备薄层

色谱法纯化粗产物，得到 0.09 g 目的产物（浅黄色晶体）。

实施例 A-4

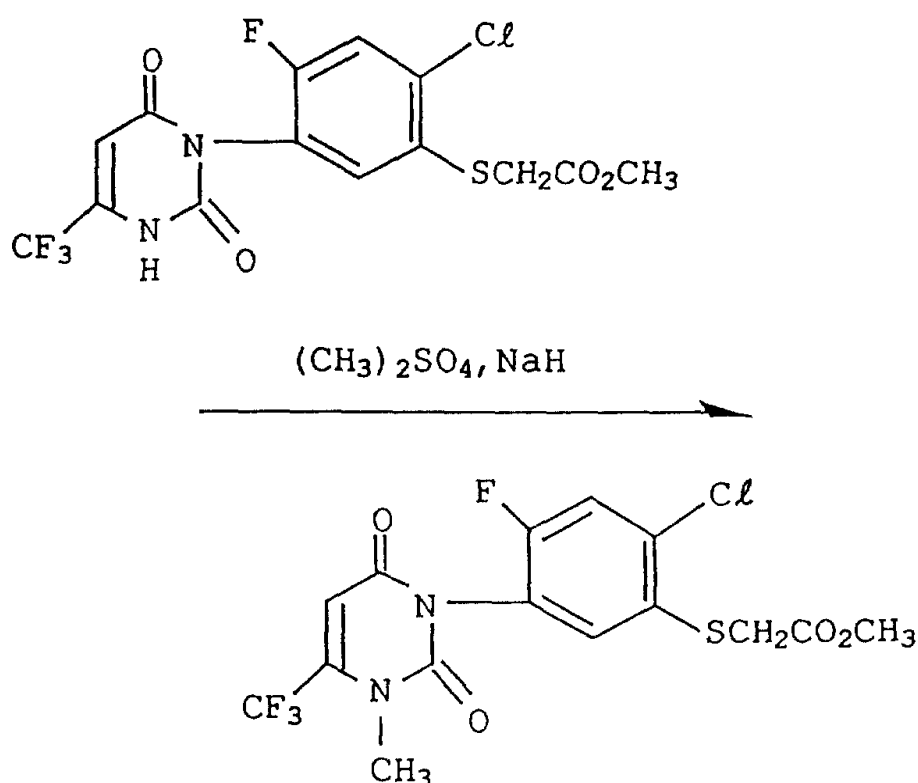
合成 3-（7-氟-3-氧代-2H-1,4-苯并噁嗪-6-基）-1-甲基-6-三氟甲基-2,4（1H,3H）-嘧啶二酮（化合物 A-4）



将 0.85 g 3-（7-氟-3-氧代-2H-1,4-苯并噁嗪-6-基）-6-三氟甲基-2,4（1H,3H）-嘧啶二酮溶于 8.5 ml N,N-二甲基甲酰胺。然后加入 0.17 g 无水碳酸钾和 0.15 ml 甲基碘，并将该混合液搅拌 4 小时。反应完成后蒸馏掉 N,N-二甲基甲酰胺，通过加水用乙酸乙酯萃取残余物。萃取物经饱和氯化钠水溶液洗涤后置于无水硫酸钠上干燥。蒸掉乙酸乙酯后得到粗产物。用氯仿作展开剂通过柱色谱纯化该产物，得到 0.53 g 目的产物（浅黄色晶体）。

实施例 B-1

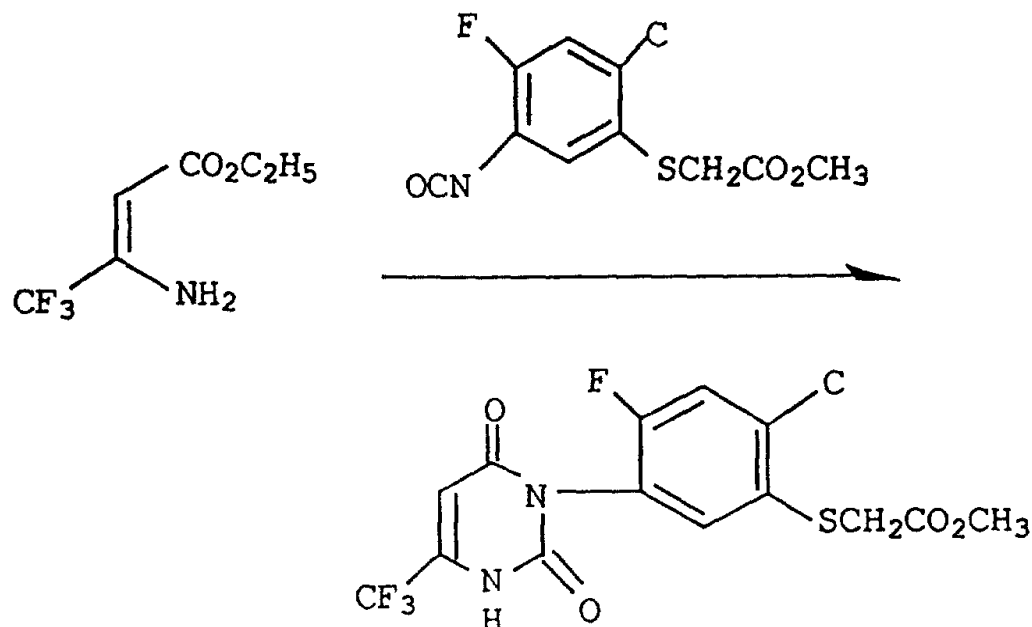
合成 3-(4-氯-2-氟-5-甲氧羰基甲硫苯基)-1-甲基-6-三氟甲基-2,4(1H,3H)-嘧啶二酮(化合物 B-1)



于室温下将 1.5 g 3-(4-氯-2-氟-5-甲氧羰基甲硫苯基)-6-三氟甲基-2,4(1H,3H)-嘧啶二酮在 10 ml 二甲基甲酰胺中的溶液加到 0.16 g 氢化钠(纯度: 55%)的 5 ml 二甲基甲酰胺悬浮液中, 停止放出氢气之后加入 0.59 g 二甲基硫酸, 于室温下将所得溶液搅拌 3 小时。将反应混合物倒入 300 ml 水中, 用乙酸乙酯萃取两次。萃取物经饱和氯化钠水溶液洗涤后置于无水硫酸钠上干燥。蒸掉乙酸乙酯后得到粗产物。通过制备薄层色谱(展开剂: CHCl_3)然后通过制备高效液相色谱〔洗脱剂: $\text{CHCN}/\text{H}_2\text{O}$ (5:1)〕对粗产物进行纯化, 得到 0.1 g 粘性、油状目的产物。

实施例 B-2

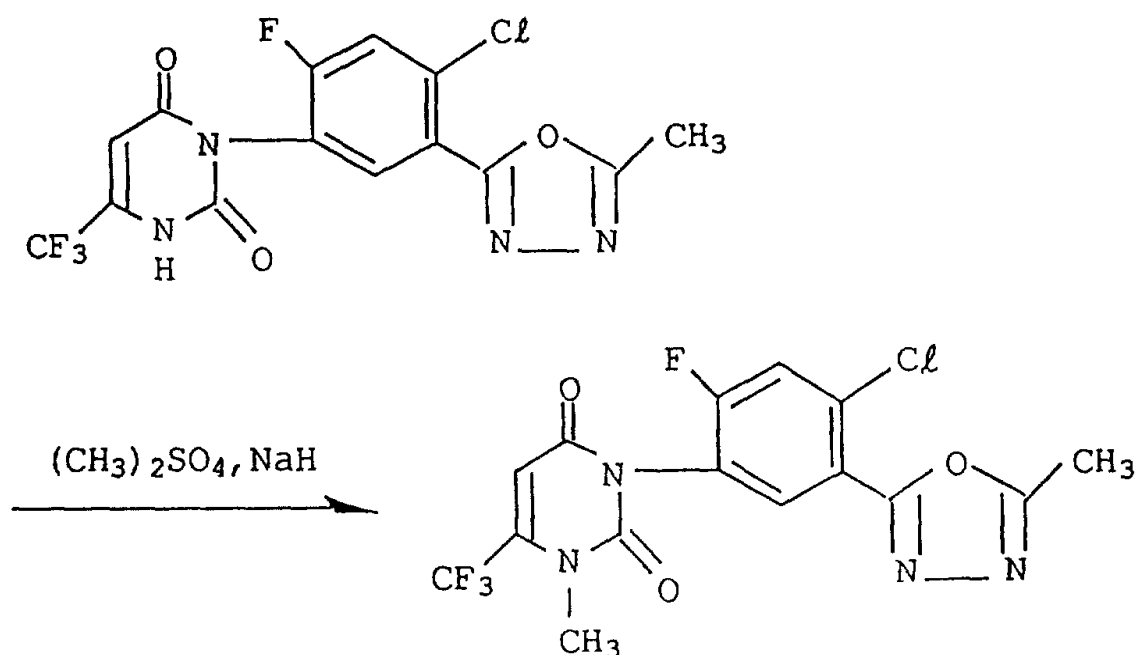
合成 3-(4-氯-2-氟-5-甲氧羰基甲硫苯基)-6-三氟甲基-2,4(1H,3H)-嘧啶二酮(化合物 B-2)



将 4.75 g 3-氨基-4,4,4-三氟巴豆酸乙酯的 50 ml 无水甲苯溶液滴加到通过将 1.14 g 氢氧化钠(纯度: 55%)悬浮于 110 ml 二甲基甲酰胺而制得的溶液中。所说滴加是在 0℃ 搅拌下进行的, 历时 15 分钟。再将所得混合物于 0℃ 继续搅拌 15 分钟。然后将反应混合物冷却至 -30℃, 向其中滴加 6.9 g 4-氯-2-氟-5-甲氧羰基甲硫苯基异氰酸酯的 50 ml 无水甲苯溶液。将所得反应混合物还原至室温并搅拌 2 小时。蒸掉溶剂后剩余溶液用乙酸乙酯萃取, 用 20 ml 2N 盐酸和 500 ml 水的溶液洗涤两次, 再经饱和氯化钠水溶液洗涤后置于硫酸钠上干燥。蒸掉乙酸乙酯, 得到粗产物。用 CHCl₃ 作为展开剂通过硅胶柱色谱对粗产物进行初步纯化, 然后用乙酸乙酯/己烷(3:1)作为展开剂通过硅胶柱色谱进一步纯化, 得到 1.5 g 粘性、油状目的产物。

实施例 C-1

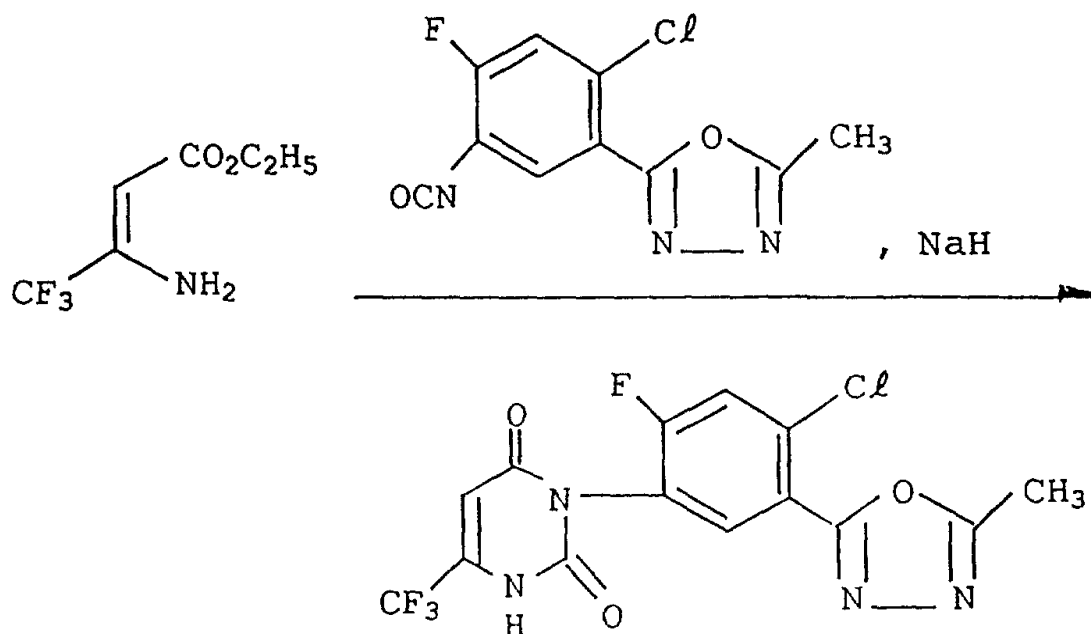
合成 3-(4-氯-2-氟-5-(5-甲基-1,3,4-噁二唑-2-基)苯基)-1-甲基-6-三氟甲基-2,4-(1H,3H)-嘧啶二酮(化合物 C-1)



于 25℃ 将 2.5 g 3-(4-氯-2-氟-5-(5-甲基-1,3,4-噁二唑-2-基)苯基)-6-三氟甲基-2,4-(1H,3H)-嘧啶二酮在 20 ml N,N-二甲基甲酰胺中的溶液滴加到 0.31 g 氢化钠(油状,纯度:55%)在 13 ml 二甲基甲酰胺中的悬浮液中。停止放出氢气后在 15 分钟内加入 1.02 g 二甲基硫酸。在室温下将该混合溶液搅拌 2 小时,并通过加水用乙酸乙酯萃取。将萃取物用无水硫酸钠干燥。然后蒸馏掉溶剂,利用乙腈/水(3:1)作为洗脱剂通过制备高效液相色谱纯化残余物,得到 0.78 g 目的产物。

实施例 C-2

合成 3-(4-氯-2-氟-5-(5-甲基-1,3,4-噁二唑-2-基)苯基)-6-三氟甲基-2,4(1H,3H)-嘧啶二酮(化合物 C-2)

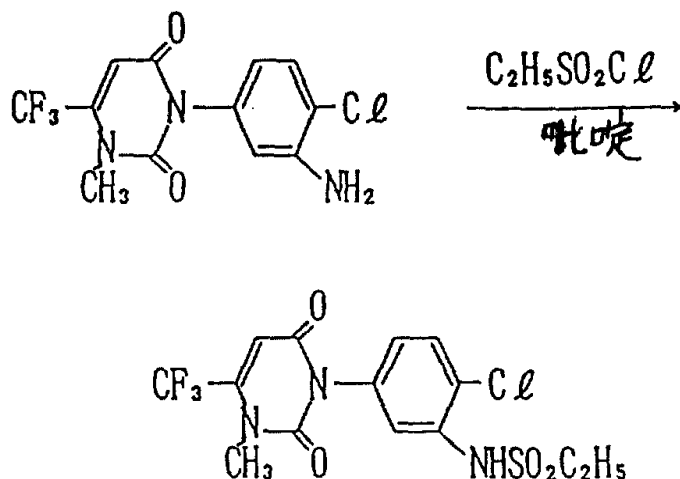


于 0°C 在 15 分钟内将 4.3 g 3-氨基-4,4,4-三氟巴豆酸乙酯的 58 ml 甲苯溶液滴加到 1.04 g 氢化钠(油,纯度:55%)的 75 ml 二甲基甲酰胺悬浮液中。在 0°C 搅拌 15 分钟后将溶液冷却至 -30°C , 滴加 5.7 g 4-氯-2-氟-5-(5-甲基-1,3,4-噁二唑-2-基)苯基异氰酸酯的 60 ml 甲苯溶液。将所得混合溶液在室温下搅拌 3 小时。

然后减压蒸掉溶剂,向所得油状物质中加入由 13.3 ml 2N 盐酸和 300 ml 水组成的溶液,并用乙酸乙酯萃取两次。用饱和氯化钠水溶液洗涤乙酸乙酯层,并在无水硫酸钠上干燥。蒸掉溶剂后用乙腈/水(5:1)作洗脱剂通过制备高效液相色谱纯化所得粗产

实施例 C-3

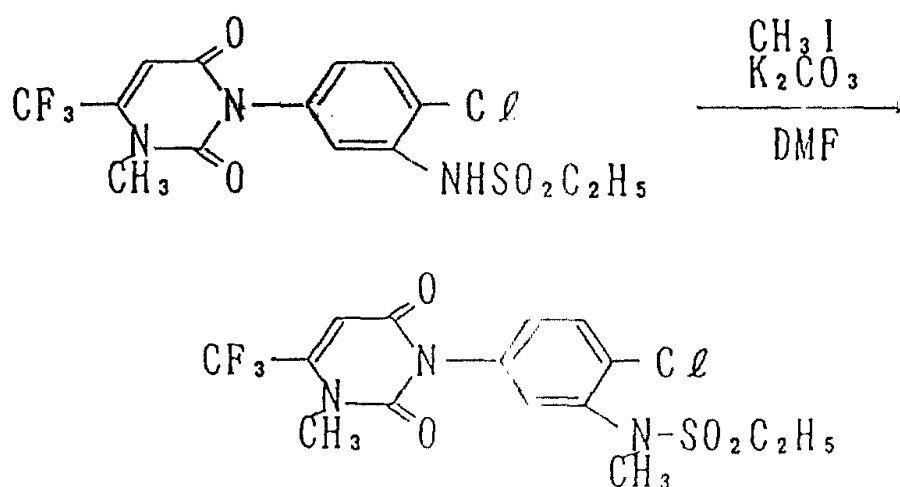
合成 3-(4-氯-3-乙基磺酰氨基苯基)-1-甲基-6-三氟甲基-2,4(1H,3H)-嘧啶二酮(化合物 C-5)



将 0.50 g 3-(3-氨基-4-氯苯基)-1-甲基-6-三氟甲基-2,4(1H,3H)-嘧啶二酮溶于 5 ml 吡啶。在不超过 5 °C 的温度下向得到溶液中滴加 0.16 ml 乙磺酰氯，将混合物搅拌 2 小时。反应完成后，蒸掉吡啶，将剩余物溶于乙酸乙酯，用水、稀盐酸以及饱和氯化钠水溶液洗涤该溶液后，将其置于无水硫酸钠上干燥。然后蒸掉乙酸乙酯，得到粗产物。用二异丙醚洗涤所得产物后得到 0.37 g 为浅棕色晶体的目的产物。

实施例 C-4

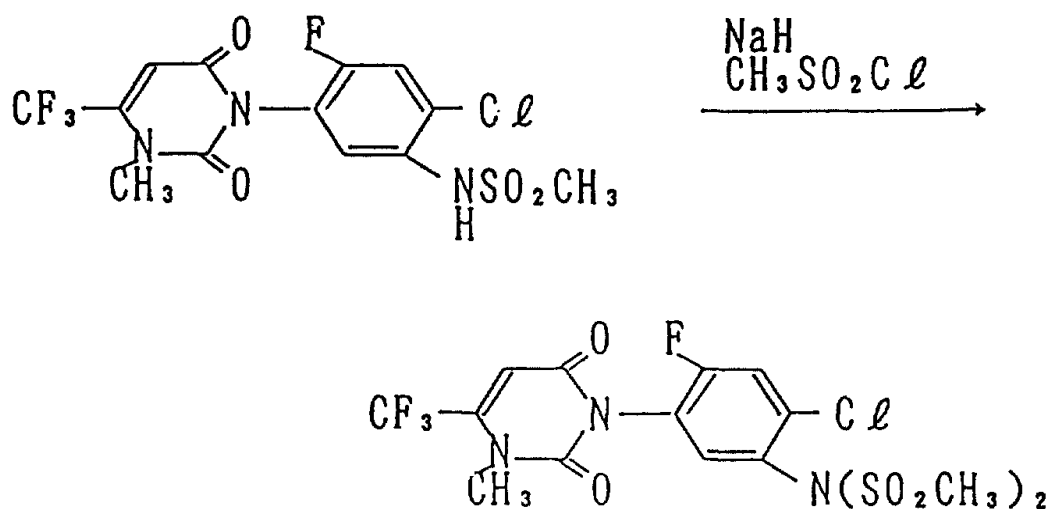
合成 3 - [4 - 氯 - 3 - (N - 甲基) 乙基磺酰氨基苯基] - 1 - 甲基 - 6 - 三氟甲基 - 2 , 4 (1 H , 3 H) - 嘧啶二酮 (化合物 C - 4)



将 0.25 g 3-(4-氯-3-乙基磺酰氨基苯基)-1-甲基-6-三氟甲基-2,4(1H,3H)-嘧啶二酮溶于 3 ml 二甲基甲酰胺。向所得溶液中加入 0.17 g 无水碳酸钾和 0.08 ml 甲基碘，然后将该混合溶液于室温下搅拌过夜。蒸掉二甲基甲酰胺后将剩余物溶于乙酸乙酯。用水和饱和氯化钠水溶液洗涤所得溶液，并置无水硫酸钠上干燥。蒸掉乙酸乙酯后得到粗产物。通过制备薄层色谱（展开剂：己烷/乙酸乙酯-3/2）纯化所得产物，得到 0.18 g 目的产物（白色晶体）。

实施例 C-5

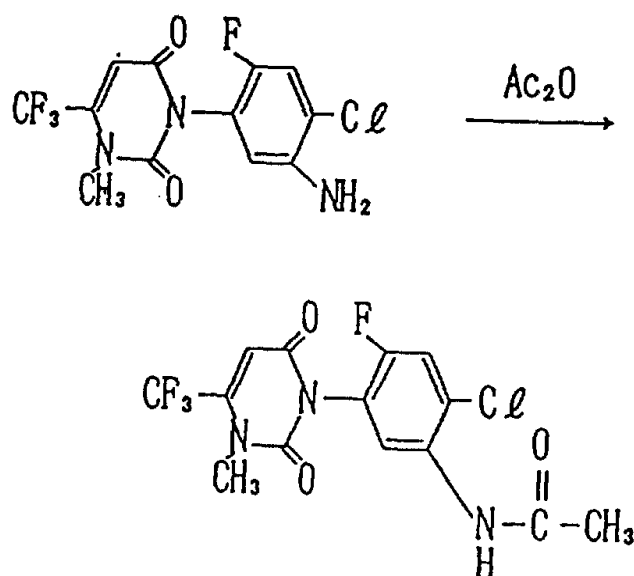
合成 3-[4-氯-2-氟-5-二(甲基磺酰基)氨基苯基]-1-甲基-6-三氟甲基-2,4(1H,3H)-嘧啶二酮（化合物 C-10）



于 0℃ 将 0.5 g 3-(4-氯-2-氟-5-甲基磺酰氨基苯基)-1-甲基-6-三氟甲基-2,4(1H,3H)-嘧啶二酮加入到 0.05 g 氢化钠(纯度: 60%)和 5 ml 四氢呋喃的悬浮液中。然后向所得悬浮液中滴加 0.11 ml 甲基磺酰氯, 搅拌 7 小时后将反应混合物倒入冰水并用乙酸乙酯萃取。乙酸乙酯层的萃取物在用饱和氯化钠水溶液洗涤后置无水硫酸钠上干燥。然后蒸掉乙酸乙酯, 得到粗产物。用二乙基醚洗涤所得产物, 得到 0.50 g 白色晶体状目的产物。

实施例 C-6

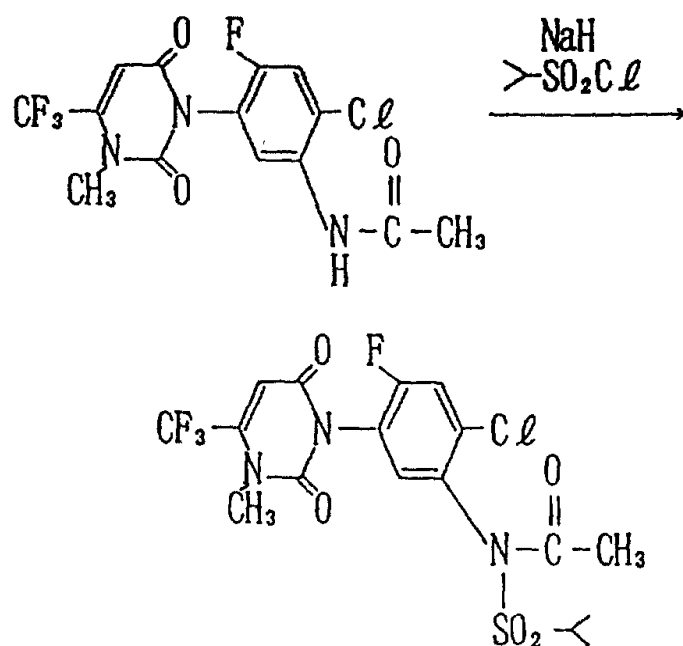
合成 3-(4-氯-2-氟-5-[N-乙酰基]异丙基磺酰氨基苯基)-1-甲基-6-三氟甲基-2,4(1H,3H)-嘧啶二酮(化合物 C-14)



将 2.00 g 3-(5-氨基-4-氯-2-氟苯基)-1-甲基-6-三氟甲基-2,4(1H,3H)-嘧啶二酮溶于 5 ml 苯。向所得溶液中加入 0.61 ml 乙酐后将所产生的溶液回流 1 小时。蒸掉苯后用己烷洗涤所得粗产物，得到白色晶体状 3-(5-乙酰氨基-4-氯-2-氟苯基)-1-甲基-6-三氟甲基-2,4(1H,3H)-嘧啶二酮

m.p.: 263 ~ 266°C

$^1\text{H-NMR}$ ($\text{d}_6\text{-DMSO}$) δ (ppm): 2.15 (3H, s), 3.47 (3H, s),
6.54 (1H, s), 7.70 (1H, d, $J=9\text{Hz}$), 7.90 (1H, d, $J=8\text{Hz}$),
9.56 (1H, brs)

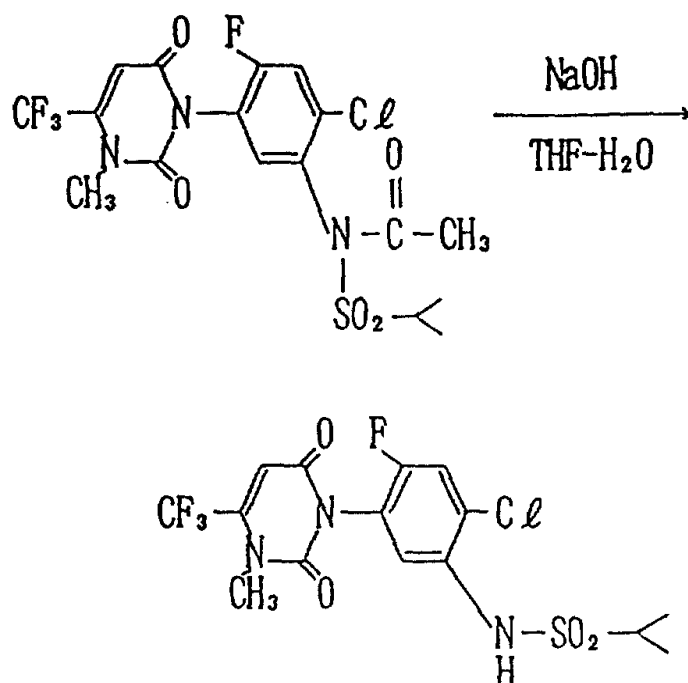


于 0°C 下向 0.11 g 氢化钠 (油状, 纯度: 60%) 的 10 ml 四氢呋喃悬浮液中加入 1.00 g 所得 3-(5-乙酰氨基-4-氯-2-氟苯基)-1-甲基-6-三氟甲基-2,4-嘧啶二酮, 然后向所得悬浮液中滴加 0.30 ml 异丙基磺酰氯。搅拌 2 小时后将反应混合物倒入冰水并用乙酸乙酯萃取。乙酸乙酯层萃取物经用饱和氯化钠水溶液洗涤后置无水硫酸钠上干燥。然后蒸掉乙酸乙酯, 得到粗产物, 所得产物经制备薄层色谱 (展开剂: 己烷/乙酸乙酯 = 2/1) 纯化后得到 0.54 g 3-[4-氯-2-氟-5-(N-乙酰基)异丙基磺酰氨基苯基]-1-甲基-6-三氟甲基-2,4-嘧啶二酮 (无色粘性油状物)。

实施例 C-7

合成 3-(4-氯-2-氟-5-异丙基磺酰氨基苯基)-1-

甲基-6-三氟甲基-2,4(1H,3H)-嘧啶二酮(化合物C-3)

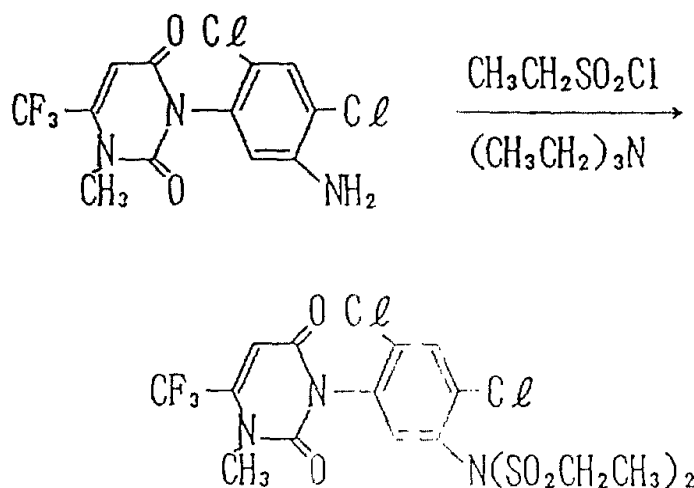


将0.47 g 所得3-[4-氯-2-氟-5-(N-乙酰基)异丙基磺酰氨基苯基]-1-甲基-6-三氟甲基-2,4(1H,3H)-嘧啶二酮溶于5 ml 四氢呋喃。向所得溶液中加入0.04 g 氢氧化钠和0.06 ml 水,并将混合溶液搅拌4小时。反应完成之后,将反应混合物倒入稀盐酸中并用乙酸乙酯萃取。乙酸乙酯层萃取物经用水和饱和氯化钠水溶液洗涤后置无水硫酸钠上干燥。然后蒸掉乙酸乙酯,得到粗产物。再通过制备薄层色谱(展开剂:己烷/乙酸乙酯=3/1)纯化粗产物而得到0.29 g 目的化合物,它无色、粘性油状物。

实施例C-8

合成3-[2,4-二氯-5-双(乙基磺酰基)氨基苯基]-1-甲基-6-三氟甲基-2,4(1H,3H)-嘧啶二酮(化

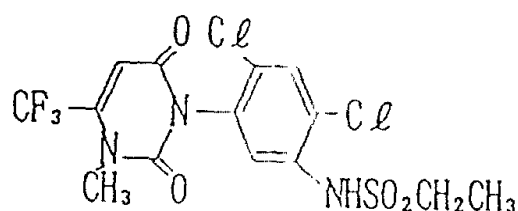
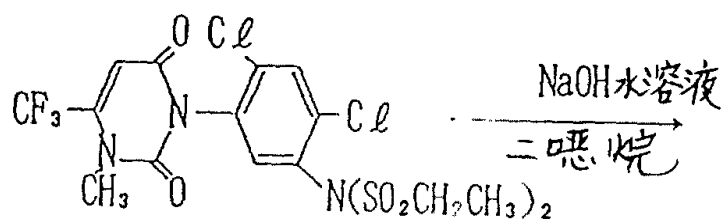
合物 C-24)



在不高于 5 °C 的温度下向 1.00 g 3-(5-氨基-2,4-二氯苯基)-1-甲基-6-三氟甲基-2,4(1H,3H)-嘧啶二酮、0.60 g 三乙胺以及 10 ml 二氯甲烷的混合物中加入 0.56 g 乙基磺酰氯。将所得混合物搅拌过夜。用水洗涤反应混合物两次后再用饱和氯化钠水溶液洗涤，置无水硫酸钠上干燥。蒸掉二氯甲烷，得到粗产物。所得产物经用二异丙醚洗涤后得到 1.40 g 3-[5-双(乙基磺酰基)氨基-2,4-二氯苯基]-1-甲基-6-三氟甲基-2,4(1H,3H)-嘧啶二酮(浅黄色晶体)。

实施例 C-9

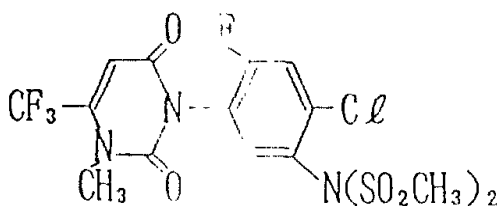
合成 3-(2,4-二氯-5-乙基磺酰基氨基苯基)-1-甲基-6-三氟甲基-2,4(1H,3H)-嘧啶二酮(化合物 C-21)



将 0.80 g 所得的 3-[5-双(乙基磺酰基)氨基-2,4-二氯苯基]-1-甲基-6-三氟甲基-2,4(1H,3H)-嘧啶二酮溶于 8 ml 二噁烷, 然后向所得溶液中加入 0.12 g 氢氧化钠(93%)和 2 ml 水。搅拌 4 小时后向其中加入稀盐酸使所得溶液酸化。用乙酸乙酯萃取反应混合物。所得乙酸乙酯层反应混合物经用水和饱和氯化钠水溶液洗涤后置无水硫酸钠上干燥。然后蒸掉乙酸乙酯, 得到粗产物。通过制备薄层色谱(展开剂: 己烷/乙酸乙酯 = 3/2)纯化所得产物后得到 0.46 g 目的产物(白色晶体)。

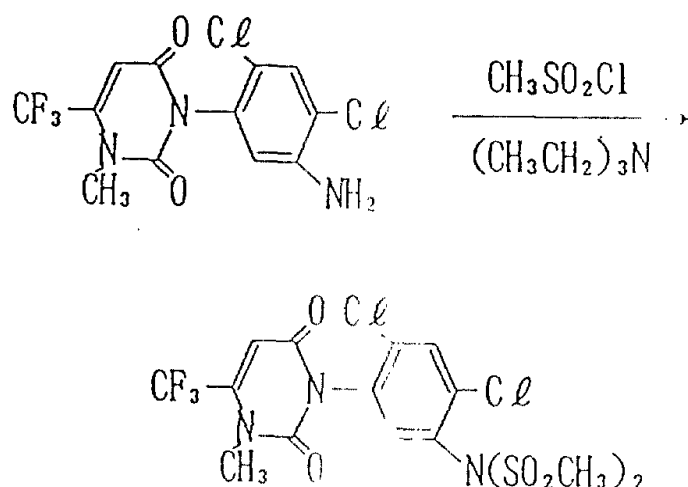
实施例 C-10

合成 3-[5-双(甲基磺酰基)氨基-4-氯-2-氟苯基]-1-甲基-6-三氟甲基-2,4(1H,3H)-嘧啶二酮(化合物 C-10)



实施例 C-11

- 7'8 -



在不高于 5 °C 的温度下，向 1.00 g 3-(5-氨基-2,4-二氯苯基)-1-甲基-6-三氟甲基-2,4(1H,3H)-嘧啶二酮、0.60 g 三乙胺以及 10ml 二氯甲烷的混合物中加入 0.46 g 甲基磺酰氯。将所得混合物搅拌过夜。反应混合物经用水洗涤两次并用饱和氯化钠水溶液洗涤后置于无水硫酸钠上干燥。蒸掉二氯甲烷后所得的粗产物经用二异丙醚洗涤后得到 1.40 g 目的产物（白色晶体）。

按上述实施例以及与上述实施例或方案类似的方法合成的本发明尿嘧啶衍生物示于表 1-A、1-B 和 1-C，且这些化合物的物理性质均示于表 2-A、2-B 和 2-C。但应当了解，按本发明可得到的尿嘧啶衍生物并不仅仅限于下表所示化合物。

表 1 - A

化合物号	结构式
A - 1	
A - 2	
A - 3	

表 1 - A (续)

化合物号	结构式
A - 4	
A - 5	
A - 6	

表 1 - A (续)

化合物号	结构式
A - 7	
A - 8	
A - 9	

表 1 - A (续)

化合物号	结构式
A - 1 0	
A - 1 1	
A - 1 2	

表 1-A (续)

化合物号	结构式
A-13	
A-14	
A-15	

表 1-A (续)

化合物号	结构式
A-16	
A-17	
A-18	

表 1-A (续)

化合物号	结构式
A - 19	
A - 20	
A - 21	

表 1-A (续)

化合物号	结构式
A-22	
A-23	
A-24	

表 1-A (续)

化合物号	结构式
A-25	
A-26	
A-27	

表 1-A (续)

化合物号	结构式
A-28	
A-29	
A-30	

表 1-A (续)

化合物号	结构式
A-31	
A-32	
A-33	
A-34	

表 1-B

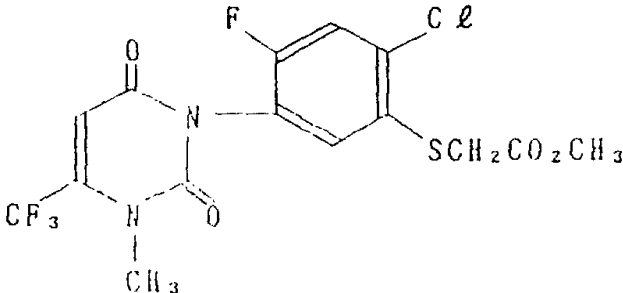
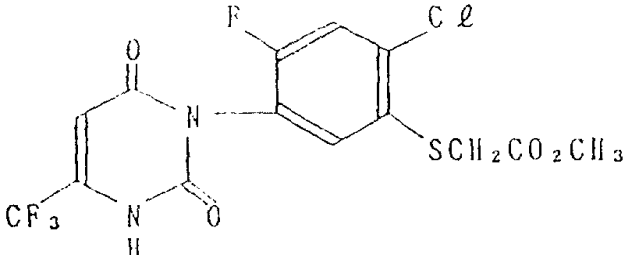
化合物号	结构式
B - 1	
B - 2	

表 1-C

化合物号	结构式
C - 1	
C - 2	
C - 3	

表 1 - C (续)

化合物号	结构式
C - 4	<chem>CC1=C(C(F)(F)F)N(C(=O)N1C(=O)N(C2=CC=C(C=C2)C(=O)NS(=O)(=O)C)C3=CC=CC=C3Cl)C2=CC=CC=C2</chem>
C - 5	<chem>CC1=C(C(F)(F)F)N(C(=O)N1C(=O)N(C2=CC=C(C=C2)C(=O)NS(=O)(=O)CC)C3=CC=CC=C3Cl)C2=CC=CC=C2</chem>
C - 6	<chem>CC1=C(C(F)(F)F)N(C(=O)N1C(=O)N(C2=CC=C(C=C2)C(=O)N(C)S(=O)(=O)CC)C3=CC=CC=C3Cl)C2=CC=CC=C2</chem>

表 1 - C (续)

化合物号	结构式
C - 7	
C - 8	
C - 9	

表 1 - C (续)

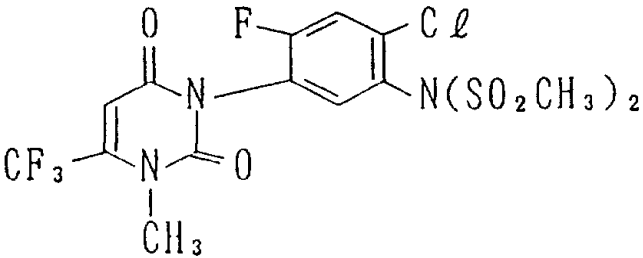
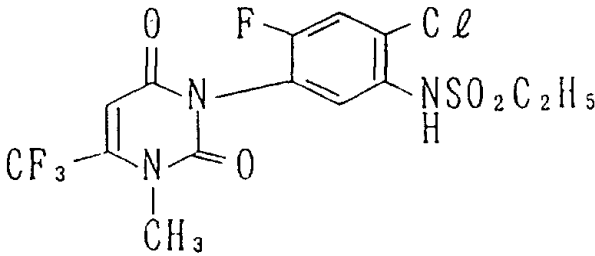
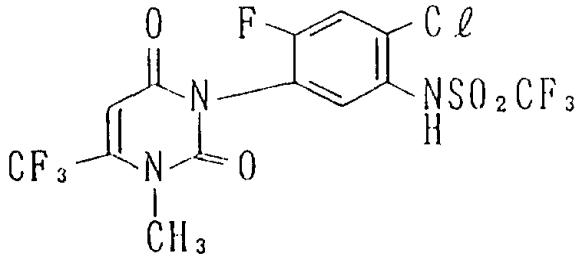
化合物号	结构式
C - 1 0	
C - 1 1	
C - 1 2	

表 1 - C (续)

化合物号	结构式
C - 1 3	
C - 1 4	
C - 1 5	

表 1 - C (续)

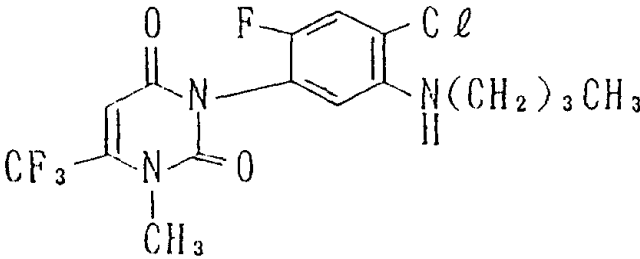
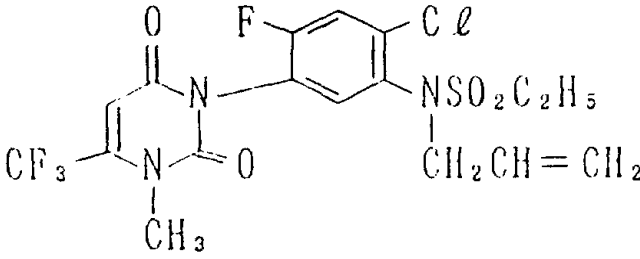
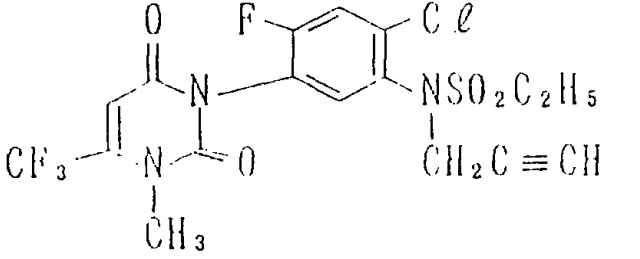
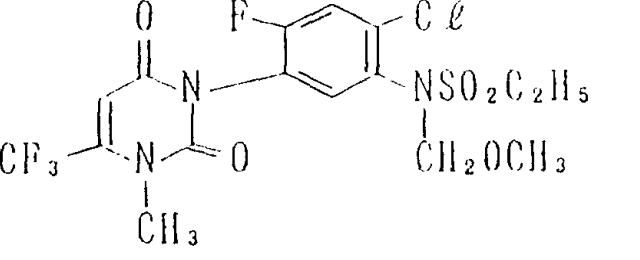
化合物号	结构式
C - 1 6	
C - 1 7	
C - 1 8	
C - 1 9	

表 1 - C (续)

化合物号	结构式
C-20	
C-21	
C-22	
C-23	

表 1 - C (续)

化合物号	结构式
C-24	
C-25	

表 2 - A

化合物号	$^1\text{H-NMR}$ δ [溶剂]	物理性质
A - 1	2.31 (1H, t, J=2Hz), 3.60 (3H, s), 4.69 (2H, d, J=2Hz), 4.73 (2H, s), 6.43 (1H, s), 7.01 (1H, d, J=10Hz), 7.15 (1H, d, J=7Hz) [CDCl ₃]	m.p.: 158-160 °C
A - 2	2.81 (1H, t, J=2Hz), 4.80 (2H, d, J=2Hz), 4.82 (2H, s), 6.01 (1H, s), 6.99 (1H, d, J=10Hz), 7.12 (1H, d, J=7Hz), 13.00 (1H, br s) [d ₆ -DMSO]	m.p.: 189-193 °C
A - 3	3.50 (3H, s), 4.72 (2H, s), 5.18 (2H, d, J=4Hz), 6.28 (1H, s), 6.85 (1H, d, J=10Hz), 7.10 (1H, d, J=8Hz), 7.02-7.41 (2H, m), 7.47-7.80 (1H, m), 8.36-8.60 (1H, m) [CDCl ₃]	m.p.: 161-163 °C
A - 4	3.51 (3H, s), 4.54 (2H, s), 6.32 (1H, s), 6.66 (1H, d, J=8Hz), 6.80 (1H, d, J=10Hz), 9.58 (1H, br, s) [CDCl ₃]	m.p.: 99-105 °C

表 2 - A (续)

化合物号	$^1\text{H-NMR}$ δ (ppm) [溶剂]	物理性质
A - 5	4.65 (2H, s), 6.28 (1H, s), 6.72-7.37 (2H, m), 10.87 (2H, br s) [d_6 -DMSO]	m.p.: $\geq 300^\circ\text{C}$
A - 6	3.28 (3H, s), 3.54 (3H, s), 4.63 (2H, s), 6.35 (1H, s), 6.83 (1H, d, J=8Hz), 6.86 (1H, d, J=10Hz) [CDCl ₃]	m.p.: 147-152°C
A - 7	2.24 (3H, s), 4.77 (2H, s), 5.02 (2H, br s), 6.20 (1H, s), 6.66 ~ 7.29 (3H, m), 7.13 (4H, s) [d_6 -DMSO]	m.p.: $\geq 270^\circ\text{C}$
A - 8	2.25 (3H, s), 3.96 (3H, br s), 4.67 (2H, s), 5.01 (2H, s), 6.22 (1H, s), 6.65 ~ 7.23 (3H, m), 7.02 (4H, s) [CDCl ₃]	m.p.: 245.4-247.0°C
A - 9	2.27 (3H, s), 4.74 (2H, s), 4.88 (2H, s), 6.05 (1H, s), 6.60 ~ 7.23 (7H, m), 12.30 (1H, br s) [d_6 -DMSO]	m.p.: $\geq 300^\circ\text{C}$

表 2 - A (续)

化合物号	$^1\text{H-NMR}$ δ (ppm) [溶剂]	物理性质
A - 1 0	2.33(3H, s), 3.42(3H, s), 4.71(2H, s), 4.98(2H, s), 6.21(1H, s), 6.51(1H, br d, J=2Hz), 6.61~7.24(6H, m) [CDCl ₃]	m.p.: 199-201°C
A - 1 1	4.71(2H, s), 5.04(2H, br s), 6.03(1H, s), 6.72(1H, d, J=7Hz), 6.82(1H, d, J=10Hz), 7.18(5H, br s) [d ₆ -DMSO]	m.p.: 282-287°C
A - 1 2	3.41(3H, br s), 4.66(2H, s), 5.01(2H, br s), 6.29(1H, s), 6.79(1H, d, J=7Hz), 6.91(1H, d, J=10Hz), 7.13(5H, br s) [CDCl ₃]	m.p.: 85- 89°C
A - 1 3	1.20(3H, t, J=7Hz), 3.84(2H, q, J=7Hz), 4.54(2H, s), 6.09(1H, s), 6.66(1H, d, J=7Hz), 6.71(1H, d, J=10Hz) [CDCl ₃]	m.p.: 223-224°C

表 Z-A (续)

化合物号	¹ H-NMR δ (ppm) [溶剂]	物理性质
A - 1 4	1.04(3H, t, J=7Hz), 3.32(3H, br s), 3.70(2H, q, J=7Hz), 4.38(2H, s), 6.08(1H, s), 6.52(1H, d, J=7Hz), 6.58(1H, d, J=10Hz) [CDCl ₃]	m.p.: 168-170°C
A - 1 5	1.03(3H, t, J=7Hz), 1.66(2H, tq, J=7, 7Hz), 3.78(2H, br t, J=7Hz), 4.56(2H, s), 6.11(1H, s), 6.65(1H, d, J=7Hz), 6.73(1H, d, J=10Hz) [CDCl ₃]	m.p.: 204-206°C
A - 1 6	0.92(3H, t, J=7Hz), 1.65(2H, tq, J=7, 7Hz), 3.50(3H, s), 3.78(2H, br t, J=7Hz), 4.57(2H, s), 6.25(1H, s), 6.72(1H, d, J=7Hz), 6.79(1H, d, J=10Hz) [CDCl ₃]	m.p.: 60-62°C
A - 1 7		

表 2-A (续)

化合物号	$^1\text{H-NMR}$ δ (ppm) [溶剂]	物理性质
A - 1 8		
A - 1 9	4.36-4.61(2H, m), 4.65(2H, s), 4.90-5.40(2H, m), 5.48-5.76(1H, m), 6.17(1H, s), 6.75(1H, d, J=7Hz), 6.81(1H, d, J=10Hz), 8.50(1H, br s) [CDCl ₃]	vittrified
A - 2 0	3.49(3H, br s), 4.28-4.57(2H, m), 4.60(2H, s), 4.88-5.37(2H, m), 5.45-5.73(1H, m), 6.24(1H, s), 6.69(1H, d, J=7Hz), 6.78(1H, d, J=10Hz) [CDCl ₃]	m.p.: 113-114°C
A - 2 1	1.53(3H, d, J=7Hz), 2.40(1H, d, J=2Hz), 4.52(2H, s), 5.90(1H, dq, J=7, 2Hz), 6.18(1H, s), 6.75(1H, d, J=10Hz), 7.35(1H, d, J=7Hz) [CDCl ₃]	m.p.: 130-135°C

表 2-A (续)

化合物号	$^1\text{H-NMR}$ δ (ppm) [溶剂]	物理性质
A - 2 2	1.63(3H, d, J=7Hz), 2.49(1H, d, J=2Hz), 3.58(3H, s), 4.62(2H, s), 5.99(1H, dq, J=7, 2Hz), 6.34(1H, s), 6.88(1H, d, J=10Hz), 7.47(1H, d, J=7Hz) [CDCl ₃]	m.p.: 155-158°C
A - 2 3		Decomposition at 160 °C
A - 2 4	3.54(3H, s), 4.73(4H, s), 6.36(1H, s), 6.95(1H, d, J=8Hz), 6.97(1H, d, J=10Hz) [CDCl ₃]	m.p.: 194-196°C
A - 2 5		

表 2 - A (续)

化合物号	$^1\text{H-NMR}$ δ (ppm) [溶剂]	物理性质
A - 2 6	3.34(3H, s), 3.52(3H, br s), 4.63(2H, s), 5.20(2H, s), 6.27(1H, s), 6.80(1H, d, J=10Hz), 7.10(1H, d, J=8Hz) [CDCl_3]	m.p.: 96-100°C
A - 2 7		
A - 2 8		
A - 2 9		

表 2 - A (续)

化合物号	$^1\text{H-NMR}$ δ (ppm) [溶剂]	物理性质
A - 3 0		m.p.: 198-202°C
A - 3 1	2.23(1H, t, J=2Hz), 3.50(3H, br s), 4.56(2H, d, J=2Hz), 4.58(2H, s), 6.28(1H, s), 6.15~7.15(3H, m) [CDCl_3]	m.p.: 207-210°C
A - 3 2	2.24(1H, t, J=2Hz), 3.50(3H, br s), 4.57(2H, d, J=2Hz), 4.59(2H, s), 6.18(1H, s), 6.75(1H, d, J=10Hz), 6.90(1H, d, J=7Hz) [CDCl_3]	m.p.: 190-192°C
A - 3 3		vitriified
A - 3 4	3.50(3H, br s), 4.48(2H, s), 6.26(1H, s), 6.40~7.05(3H, m), 8.85(1H, br s) [CDCl_3]	m.p.: 257~259°C

表 2-B

化合物号	¹ H-NMR δ (ppm) [溶剂]	物理性质
B - 1	3.48(3H, s), 3.59(2H, s), 3.61(3H, s), 6.22(1H, s), 7.21(1H, d, J=9Hz), 7.29(1H, d, J=7Hz) [CDC l ₃]	Oil
B - 2	3.51(2H, s), 3.53(3H, s), 6.04(1H, s), 7.13(1H, d, J=9Hz), 7.23(1H, d, J=8Hz), 7.31(1H, br s) [CDC l ₃]	Oil

表 2-C

化合物号	$^1\text{H-NMR}$ δ (ppm) [溶剂]	物理性质
C - 1	2.57(3H, s), 3.49(3H, s), 6.25(1H, s), 7.36(1H, d, J=9 Hz), 7.84(1H, d, J=7 Hz) [d ₆ -DMSO]	m.p.: 65- 69°C
C - 2	2.62(3H, s), 6.21(1H, s), 7.47(1H, d, J=9Hz), 7.84(1H, br s), 8.01(1H, d, J=8Hz) [d ₆ -DMSO]	m.p.: 116-121°C
C - 3	1.39(9H, s), 3.50(3H, br s), 6.25(1H, s), 7.32(1H, d, J=9Hz), 7.94(1H, d, J=7Hz) [CDCl ₃]	m.p.: 135-139°C

表 2-C (续)

化合物号	$^1\text{H-NMR}$ δ (ppm) [溶剂]	物理性质
C - 4	2.94(3H, s), 3.45(3H, s), 6.21(1H, s), 6.68~7.00(1H, m) 7.07~7.59(3H, m) (d_6 -DMSO)	m.p.: 174~177°C
C - 5	1.33(3H, t, J=7Hz), 3.12(2H, q, J=7Hz), 3.52(3H, s), 6.25(1H, s), 6.71~7.17(2H, m), 7.26~7.64(2H, m) (d_6 -DMSO)	m.p.: 177~180°C
C - 6	1.40(3H, t, J=7Hz), 3.11(2H, q, J=7Hz), 3.28(3H, s), 3.49(3H, s), 6.33(1H, s), 7.03~7.63(3H, m) (d_6 -DMSO)	m.p.: 157~158°C

表 2-C (续)

化合物号	$^1\text{H-NMR}$ δ (ppm) [溶剂]	物理性质
C - 7	2.95(3H, s), 3.43(3H, s), 6.29(1H, s), 7.39(1H, d, J=9Hz), 7.44(1H, d, J=7Hz), 9.28(1H, br s) (d_6 -DMSO)	m.p.: 168~171°C
C - 8	3.01(3H, s), 3.19(3H, s), 3.46(3H, s), 6.39(1H, s), 7.46(1H, d, J=9Hz), 7.56(1H, d, J=7Hz) (d_6 -DMSO)	m.p.: 198~201°C
C - 9	1.09(3H, t, J=7Hz), 3.24(3H, s), 3.47(3H, s), 3.60(2H, q, J=7Hz), 6.33(1H, s), 7.50(1H, d, J=9Hz), 7.55(1H, d, J=7Hz) (d_6 -DMSO)	m.p.: 254~257°C
C - 10	3.54(6H, s), 4.22(3H, s), 6.48(1H, s), 7.79(1H, d, J=9Hz), 7.98(1H, d, J=7Hz) (d_6 -DMSO)	m.p.: 282~285°C
C - 11	1.32(3H, t, J=7Hz), 3.06(2H, q, J=7Hz), 3.43(3H, s), 6.23(1H, s), 7.29(1H, d, J=9Hz), 7.41(1H, d, J=7Hz), 9.11(1H, br s) (d_6 -DMSO)	m.p.: 165~167°C

表 2-C (续)

化合物号	$^1\text{H-NMR}$ δ (ppm) [溶剂]	物理性质
C - 1 2	3.48(3H, s), 6.26(1H, s), 7.12(1H, d, J=9Hz), 7.57(1H, br s), 8.12(1H, d, J=7Hz) (CDCl_3)	Viscous oil
C - 1 3	1.34(6H, d, J=7Hz), 3.22(1H, qq, J=7Hz), 3.48(3H, s), 6.22(1H, s), 6.90(1H, br s), 7.17(1H, d, J=9Hz), 7.56(1H, d, J=7Hz) (CDCl_3)	Viscous oil
C - 1 4	1.45(6H, d, J=7Hz), 1.97(3H, s), 3.47(3H, s), 4.10(1H, qq, J=7Hz), 6.23(1H, s), 7.29(1H, d, J=7Hz), 7.36(1H, d, J=9Hz) (CDCl_3)	Viscous oil
C - 1 5	1.00(3H, t, J=7Hz), 1.25~2.19(2H, m), 2.80~3.28(2H, m), 3.54(3H, s), 6.35(1H, s), 7.16(1H, br s), 7.40(1H, d, J=9Hz), 7.70(1H, d, J=7Hz) (CDCl_3)	m.p.: 113~115°C
C - 1 6	0.70~2.19(7H, m), 2.88~3.24(2H, m), 3.49(3H, s), 6.22(1H, s), 6.91(1H, br s), 7.20(1H, d, J=8Hz), 7.50(1H, d, J=7Hz) (CDCl_3)	m.p.: 115~117°C

表 2-C (续)

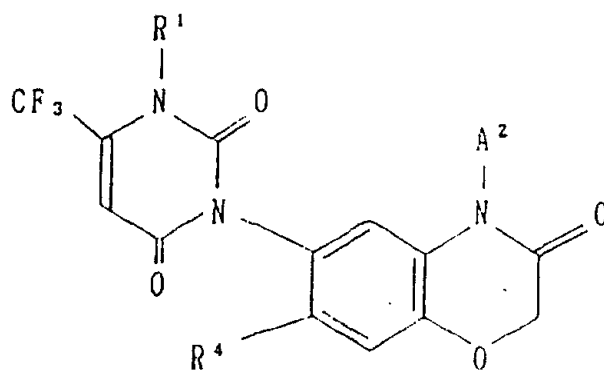
化合物号	$^1\text{H-NMR}$ δ (ppm) [溶剂]	物理性质
C - 1 7	1.38(3H, t, J=7Hz), 3.15(2H, q, J=7Hz), 3.53(3H, s), 4.08~4.41(2H, m), 4.91~5.31(2H, m), 5.50~6.10(1H, m), 6.30(1H, s), 7.29(1H, d, J=3Hz) 7.45(1H, s) (CDCl_3)	m.p.: 156~158°C
C - 1 8	1.40(3H, t, J=7Hz), 2.40(1H, t, J=2Hz), 3.20(2H, q, J=7Hz), 3.52(3H, s), 4.38(2H, d, J=2Hz), 6.30(1H, s), 7.41(1H, d, J=9Hz), 7.59(1H, d, J=7Hz) (CDCl_3)	m.p.: 145~147°C
C - 1 9	1.39(3H, t, J=7Hz), 3.11(2H, q, J=7Hz), 3.35(3H, s), 3.51(3H, br s), 4.90(2H, br s), 6.25(1H, s), 7.30(1H, d, J=9Hz), 7.43(1H, d, J=7Hz) (CDCl_3)	m.p.: 163~165°C
C - 2 0	3.06(3H, s), 3.50(3H, s), 6.42(1H, s), 7.62(1H, s), 7.74(1H, s), 10.00(br s) ($\text{d}_6\text{-DMSO}$)	m.p.: 172~173 °C

表 2-C (续)

化合物号	$^1\text{H-NMR}$ δ (ppm) [溶剂]	物理性质
C-21	1.31(3H, t, $J=7\text{Hz}$), 3.10(2H, q, $J=7\text{Hz}$), 3.52(3H, s), 6.34(1H, s), 7.21(1H, s), 7.59(1H, s), 7.66(1H, s) [CDCl_3]	m.p.: 152.5~153.5 °C
C-22	3.46(3H, s), 3.94(2H, q, $J=9\text{Hz}$), 5.15(1H, br s), 6.23(1H, s), 7.25(1H, d, $J=9\text{Hz}$), 7.40(1H, d, $J=7\text{Hz}$) [CDCl_3]	m.p.: 181~184 °C
C-23	2.05-2.45(2H, m), 3.21(2H, t, $J=8\text{Hz}$), 3.47(3H, s), 3.61(2H, t, $J=8\text{Hz}$), 6.32(1H, s), 7.35(1H, d, $J=8\text{Hz}$), 7.36(1H, br s), 7.60(1H, d, $J=7\text{Hz}$) [CDCl_3]	vittrified
C-24	1.48(6H, t, $J=7\text{Hz}$), 3.49(3H, s), 3.61(4H, q, $J=7\text{Hz}$), 6.27(1H, s), 7.56(1H, s), 7.67(1H, s) [d_6 -DMSO]	m.p.: 221~223 °C
C-25	3.50(6H, s), 4.20(3H, s), 6.35(1H, s), 7.55(1H, s), 7.65(1H, s) [d_6 -DMSO]	m.p.: not less than 300 °C

按上述实施例及与上述实施例或方案类似方式合成的本发明尿嘧啶衍生物示于表 3-A-1 至 3-C-10。但按本发明方法可得到的化合物并不仅仅限于下表所示化合物。

表 3 — A — 1



R^4	R^1	A^2
F	CH ₃	H
F	CH ₃	CH ₂ CH ₃
F	CH ₃	CH ₂ CH=CH ₂
F	CH ₃	CH ₂ C≡CH
F	H	H
F	H	CH ₂ CH ₃
F	H	CH ₂ CH=CH ₂
F	H	CH ₂ C≡CH
H	CH ₃	CH ₂ C≡CH
H	H	CH ₂ C≡CH

表3 -- A -- I (续)

R^4	R^1	A^2
F	CH_3	CH_2CONH_2
F	CH_3	$CH_2CON(CH_3)_2$
F	CH_3	CH_2CO_2H
F	CH_3	$CH_2CO_2CH_3$
F	CH_3	$CH_2CO_2C_6H_5$
F	CH_3	$CH_2CO_2CH_2C_6H_5$
F	CH_3	$CH_2CO_2(C_6H_4-2Cl)$
F	CH_3	$CH_2CO_2CH_2(C_6H_4-4Cl)$
F	CH_3	CH_2CN
F	CH_3	$CH_2C_6H_5$
F	CH_2OH	C_2H_5
F	CH_2Cl	C_2H_5
F	CH_3	$-CH_2(C_6H_4-4Cl)$
F	CH_3	$-CH_2(C_6H_4-2Cl)$
F	CH_3	$-CH_2(C_6H_4-3Cl)$
F	CH_3	CH_2CO_2Na

表3 - A - 1 (续)

R^4	R^1	A^2
H	CH_3	H
F	CH_3	CH_2OH
F	CH_3	$CH_2C\ell$
F	CH_3	$CH_2CH_2CH_3$
F	CH_3	$CH(CH_3)_2$
F	CH_3	$CH_2CH_2CH_2CH_3$
F	CH_3	$CH(CH_3)CH_2CH_3$
F	CH_3	$CH_2CH(CH_3)_2$
F	CH_3	$CH_2C(CH_3)_3$
F	CH_3	$CH_2(CH_2)_3CH_3$
F	CH_3	$CH_2CH_2CH(CH_3)_2$
F	CH_3	$CH(CH_3)CH_2CH_2CH_3$
F	CH_3	$CH_2CH(CH_3)CH_2CH_3$
F	CH_3	$CH(C_2H_5)_2$
F	CH_3	CH_3
F	CH_3	$CH(CH_3)C\equiv CH$

表B -- A -- 1 (续)

R^4	R^1	A^2
F	CH_3	$C(CH_3)_2C \equiv CH$
F	CH_3	$CH(CH_3)CH = CH_2$
F	CH_3	$C(CH_3)_2CH = CH_2$
F	CH_3	$CH_2CONHCH_3$
F	CH_3	$CH_2CONHC_2H_5$
F	CH_3	$CH_2CON(C_2H_5)_2$
F	CH_3	$CH_2CON(CH_2CH_2CH_3)_2$
F	CH_3	$CH_2CON(CH(CH_3)_2)_2$
F	CH_3	$CH_2CONHCH_2CH_2CH_3$
F	CH_3	$CH_2CONHCH(CH_3)_2$
F	CH_3	$CH_2CO_2C_2H_5$
F	CH_3	$CH_2CO_2CH_2CH_2CH_3$
F	CH_3	$CH_2CO_2CH(CH_3)_2$
F	CH_3	$CH_2CO_2CH_2(CH_2)_2CH_3$
F	CH_3	$CH_2CO_2CH_2CH(CH_3)_2$
F	CH_3	$CH_2CO_2CH(CH_3)CH_2CH_3$

表3 — A — 1 (续)

R^4	R^1	A^2
F	CH_3	$CH_2CO_2C(CH_3)_3$
F	CH_3	$CH_2C \equiv CCH_3$
F	CH_3	$CH_2CH_2C \equiv CH$
F	CH_3	$CH_2C \equiv CCH_2CH_3$
F	CH_3	$CH(CH_3)CH_2C \equiv CH$
F	CH_3	$CH_2CH(CH_3)C \equiv CH$
F	CH_3	$CH_2CH=CHCH_3$ (cis)
F	CH_3	$CH_2CH=CHCH_3$ (trans)
F	CH_3	$CH_2CH_2CH=CH_2$
F	CH_3	$CH_2CH_2CH=CHCH_3$ (cis)
F	CH_3	$CH_2CH_2CH=CHCH_3$ (trans)
F	CH_3	$CH(CH_3)CH=CHCH_3$ (cis)
F	CH_3	$CH(CH_3)CH=CHCH_3$ (trans)
F	CH_3	$CH_2CH=CHCH_2CH_3$ (cis)
F	CH_3	$CH_2CH=CHCH_2CH_3$ (trans)
F	H	$CH_2CH_2CH_3$

表 3-A-1 (续)

R^4	R^1	A^2
F	H	$CH(CH_3)_2$
F	H	$CH_2CH_2CH_2CH_3$
F	H	$CH(CH_3)CH_2CH_3$
F	H	$CH_2CH(CH_3)_2$
F	H	$CH_2C(CH_3)_3$
F	H	$CH_2(CH_2)_3CH_3$
F	H	$CH_2CH_2CH(CH_3)_2$
F	H	$CH(CH_3)CH_2CH_2CH_3$
F	H	$CH_2CH(CH_3)CH_2CH_3$
F	H	$CH(C_2H_5)_2$
F	H	CH_3
F	H	$CH(CH_3)C \equiv CH$
F	H	$C(CH_3)_2C \equiv CH$
F	H	$CH(CH_3)CH = CH_2$
F	H	$C(CH_3)_2CH = CH_2$
F	H	$CH_2CONHCH_3$

表3 - A - 1 (续)

R^4	R^1	A^2
F	H	$CH_2CONHC_2H_5$
F	H	$CH_2CON(C_2H_5)_2$
F	H	$CH_2CON(CH_2CH_2CH_3)_2$
F	H	$CH_2CON(CH(CH_3)_2)_2$
F	H	$CH_2CONHCH_2CH_2CH_3$
F	H	$CH_2CONHCH(CH_3)_2$
F	H	$CH_2CO_2C_2H_5$
F	H	$CH_2CO_2CH_2CH_2CH_3$
F	H	$CH_2CO_2CH(CH_3)_2$
F	H	$CH_2CO_2CH_2(CH_2)_2CH_3$
F	H	$CH_2CO_2CH_2CH(CH_3)_2$
F	H	$CH_2CO_2CH(CH_3)CH_2CH_3$
F	H	$CH_2CO_2C(CH_3)_3$
F	H	$CH_2C \equiv CCH_3$
F	H	$CH_2CH_2C \equiv CH$
F	H	$CH_2C \equiv CCH_2CH_3$

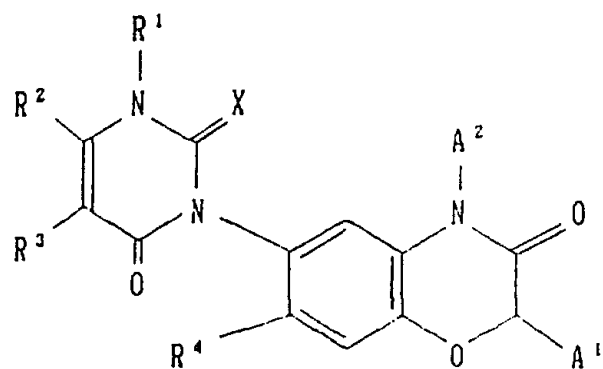
表 3 - A - 1 (续)

R^4	R^1	A^2
F	H	$CH(CH_3)CH_2C \equiv CH$
F	H	$CH_2CH(CH_3)C \equiv CH$
F	H	$CH_2CH=CHCH_3$ (cis)
F	H	$CH_2CH=CHCH_3$ (trans)
F	H	$CH_2CH_2CH=CH_2$
F	H	$CH_2CH_2CH=CHCH_3$ (cis)
F	H	$CH_2CH_2CH=CHCH_3$ (trans)
F	H	$CH(CH_3)CH=CHCH_3$ (cis)
F	H	$CH(CH_3)CH=CHCH_3$ (trans)
F	H	$CH_2CH=CHCH_2CH_3$ (cis)
F	H	$CH_2CH=CHCH_2CH_3$ (trans)
H	CH_3	CH_2CH_3
H	CH_3	$CH_2C \equiv N$
H	CH_3	$CH_2CH=CH_2$
H	CH_3	$CH(CH_3)C \equiv CH$
H	CH_3	CH_2CONH_2

表3 A-1 (续)

R^4	R^1	A^2
H	CH_3	$CH_2CO_2CH_3$
H	CH_3	$CH_2CO_2C_2H_5$
H	CH_3	$CH_2C_6H_5$
H	CH_3	$CH_2CH_2CH_3$
H	CH_3	$CH(CH_3)CH=CH_2$
F	H	$CH_2C_6H_5$
F	H	$CH_2C \equiv N$

表 3-A-2



X	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	A ¹	A ²
O	CH ₃	CF ₃	F	F	H	CH ₂ C≡CH
O	CH ₃	CF ₃	Cl	F	H	CH ₂ C≡CH
O	CH ₃	CF ₃	Br	F	H	CH ₂ C≡CH
O	CH ₃	CF ₃	NO ₂	F	H	CH ₂ C≡CH
O	CH ₃	CF ₃	CH ₃	F	H	CH ₂ C≡CH
O	CH ₃	CF ₃	CH ₂ CH ₃	F	H	CH ₂ C≡CH
O	CH ₃	CF ₃	CH ₂ CH ₂ CH ₃	F	H	CH ₂ C≡CH
O	CH ₃	CF ₃	CH(CH ₃) ₂	F	H	CH ₂ C≡CH
O	CH ₃	CF ₃	CF ₃	F	H	CH ₂ C≡CH
O	CH ₃	CF ₃	HOCH ₂	F	H	CH ₂ C≡CH
O	CH ₃	CF ₃	Cl	F	H	CH(CH ₃)C≡CH

表 3 -- A -- 2 (续)

X	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	A ¹	A ²
O	CH ₃	CF ₃	Cℓ	F	H	CH ₂ CH=CH ₂
O	CH ₃	CF ₃	Cℓ	F	H	CH ₂ C≡N
O	CH ₃	CF ₃	Cℓ	F	H	CH ₂ CH ₃
O	CH ₃	CF ₃	Cℓ	F	H	CH ₂ CH ₂ CH ₃
O	CH ₃	CF ₃	CH ₃	F	H	CH(CH ₃)C≡CH
O	CH ₃	CF ₃	CH ₃	F	H	CH ₂ CH=CH ₂
O	CH ₃	CF ₃	CH ₃	F	H	CH ₂ C≡N
O	CH ₃	CF ₃	CH ₃	F	H	CH ₂ CH ₃
O	CH ₃	CF ₃	CH ₃	F	H	CH ₂ CH ₂ CH ₃
S	CH ₃	CF ₃	H	F	H	CH ₂ C≡CH
S	CH ₃	CF ₃	H	F	H	CH(CH ₃)C≡CH
S	CH ₃	CF ₃	H	F	H	CH ₂ CH=CH ₂
S	CH ₃	CF ₃	H	F	H	CH ₂ C≡N
S	CH ₃	CF ₃	H	F	H	CH ₂ CH ₃
S	CH ₃	CF ₃	H	F	H	CH ₂ CH ₂ CH ₃
S	CH ₃	CF ₃	H	H	H	CH ₂ C≡CH

表3 - A - 2 (续)

X	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	A ¹	A ²
O	CH ₃	CF ₃	H	F	CH ₃	CH ₂ C≡CH
S	CH ₃	CF ₃	H	F	CH ₃	CH ₂ C≡CH
S	CH ₃	CF ₃	CH ₃	F	H	CH ₂ C≡CH
O	CH ₃	CF ₃	H	F	H	CH ₂ OCH ₃
O	CH ₃	CF ₃	H	F	H	CH ₂ OCH ₂ CH ₃
O	CH ₃	CF ₃	H	F	H	CH ₂ CH ₂ OCH ₃
O	CH ₃	CF ₃	H	F	H	o-CH ₃ -benzyl
O	CH ₃	CF ₃	H	F	H	m-CH ₃ -benzyl
O	CH ₃	CF ₃	H	F	H	p-CH ₃ -benzyl
O	CH ₃	CF ₃	H	H	H	o-CH ₃ -benzyl
O	CH ₃	CF ₃	H	H	H	m-CH ₃ -benzyl
O	CH ₃	CF ₃	H	H	H	p-CH ₃ -benzyl
O	CH ₃	CF ₃	H	F	H	o-CH ₃ O-benzyl
O	CH ₃	CF ₃	H	F	H	m-CH ₃ O-benzyl
O	CH ₃	CF ₃	H	F	H	p-CH ₃ O-benzyl

表 3 - A - 2 (续)

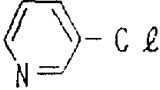
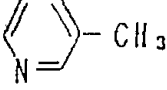
X	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	A ¹	A ²
0	CH ₃	CF ₃	H	F	H	CH ₂ 
0	CH ₃	CF ₃	H	F	H	CH ₂  Cl
0	CH ₃	CF ₃	H	F	H	CH ₂  CH ₃
0	CH ₃	CF ₃	H	F	H	CH ₂ 
0	CH ₃	CF ₃	H	F	H	CH ₂ 
0	CH ₃	CF ₃	H	F	H	CH ₂ 
0	CH ₃	CF ₃	H	F	H	o-CF ₃ -benzyl
0	CH ₃	CF ₃	H	F	H	m-CF ₃ -benzyl
0	CH ₃	CF ₃	H	F	H	p-CF ₃ -benzyl

表 3 - A - 2 (续)

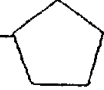
X	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	A ¹	A ²
0	CH ₃	CF ₃	H	F	H	CH ₂ - 
0	CH ₃	CF ₃	H	F	H	CH ₂ - 
0	CH ₃	CF ₃	H	F	H	CH ₂ - 
0	CH ₃	CF ₃	H	F	H	CH ₂ - 
0	CH ₃	CF ₃	H	F	H	CH ₂ CH ₂ - 
0	CH ₃	CF ₃	H	F	H	CH(CH ₃)- 
0	CH ₃	CF ₃	H	F	H	CH(CH ₃)- 
0	CH ₃	CF ₃	H	F	H	CH(CH ₃)- 
0	CH ₃	CF ₃	Cl	F	H	CH(CH ₃)- 

表 3 - A - 2 (续)

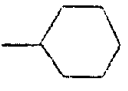
X	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	A ¹	A ²
0	CH ₃	CF ₃	H	F	H	CH(CH ₃)— 
0	CH ₃	CF ₃	H	F	H	CH(CH ₃)— 
0	CH ₃	CF ₃	H	F	H	CH ₂ CH ₂ — 
0	CH ₃	CF ₃	H	F	H	CH ₂ CH ₂ — 
0	CH ₃	CF ₃	H	F	H	CH ₂ CH ₂ — 
0	CH ₃	CF ₃	H	F	H	C ₆ H ₅
0	CH ₃	CF ₃	H	F	H	o-CH ₃ -phenyl
0	CH ₃	CF ₃	H	F	H	m-CH ₃ -phenyl
0	CH ₃	CF ₃	H	F	H	p-CH ₃ -phenyl
0	CH ₃	CF ₃	H	F	H	o-CH ₃ O-phenyl
0	CH ₃	CF ₃	H	F	H	m-CH ₃ O-phenyl

表 3 - A - 2 (续)

X	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	A ¹	A ²
0	CH ₃	CF ₃	H	F	H	p-CH ₃ O-phenyl
0	CH ₃	CF ₃	H	F	H	o-Cl-phenyl
0	CH ₃	CF ₃	H	F	H	m-Cl-phenyl
0	CH ₃	CF ₃	H	F	H	p-Cl-phenyl
0	CH ₃	CF ₃	H	F	H	o-CF ₃ -phenyl
0	CH ₃	CF ₃	H	F	H	m-CF ₃ -phenyl
0	CH ₃	CF ₃	H	F	H	p-CF ₃ -phenyl
0	CH ₃	CF ₃ CF ₂	H	F	H	H
0	CH ₃	CF ₃ CF ₂	H	F	H	CH ₃
0	CH ₃	CF ₃ CF ₂	H	F	H	CH ₂ CH ₃
0	CH ₃	CF ₃ CF ₂	H	F	H	CH ₂ CH ₂ CH ₃
0	CH ₃	CF ₃ CF ₂	H	F	H	CH ₂ CH=CH ₂
0	CH ₃	CF ₃ CF ₂	H	F	H	CH ₂ C≡CH
0	CH ₃	CF ₃ CF ₂	H	F	H	CH(CH ₃)C≡CH
0	CH ₃	CF ₃ CF ₂	H	F	H	C ₆ H ₅
0	CH ₃	CF ₃ CF ₂	H	F	H	C ₁₀ H ₇

表3 -- A -- 2 (续)

X	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	A ¹	A ²
S	CH ₃	CF ₃ CF ₂	H	F	H	CH ₂ C≡CH
O	CH ₃	CF ₃ CF ₂	Cl	F	H	CH ₂ C≡CH
O	CH ₃	CF ₃ CF ₂	CH ₃	F	H	CH ₂ C≡CH
O	CH ₃	CF ₃ CF ₂	H	H	H	CH ₂ C≡CH
O	CH ₃	CF ₃ CF ₂	H	F	CH ₃	CH ₂ C≡CH
O	CH ₃	CF ₃ CH ₂	H	F	H	H
O	CH ₃	CF ₃ CH ₂	H	F	H	CH ₂ CH ₃
O	CH ₃	CF ₃ CH ₂	H	F	H	CH ₂ CH ₂ CH ₃
O	CH ₃	CF ₃ CH ₂	H	F	H	CH ₂ CH=CH ₂
O	CH ₃	CF ₃ CH ₂	H	F	H	CH ₂ C≡CH
O	CH ₃	CF ₃ CF ₂ CF ₂	H	F	H	H
O	CH ₃	CF ₃ CF ₂ CF ₂	H	F	H	CH ₂ CH ₃
O	CH ₃	CF ₃ CF ₂ CF ₂	H	F	H	CH ₂ CH ₂ CH ₃
O	CH ₃	CF ₃ CF ₂ CF ₂	H	F	H	CH ₂ CH=CH ₂
O	CH ₃	CF ₃ CF ₂ CF ₂	H	F	H	CH ₂ C≡CH
O	CH ₃	(CF ₃) ₂ CF	H	F	H	CH ₂ CH ₃

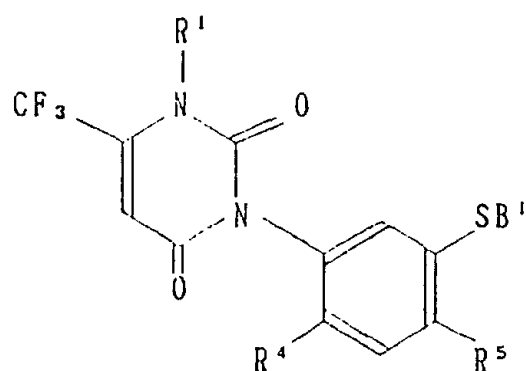
表3 - A - 2 (续)

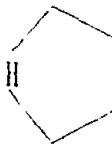
X	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	A ¹	A ²
O	CH ₃	(CF ₃) ₂ CF	H	F	H	CH ₂ C≡CH
O	CH ₃	CCℓ ₃	H	F	H	CH ₂ C≡CH
O	CH ₃	CCℓ ₃	H	F	H	H
S	CH ₃	CF ₃	H	F	H	H
S	CH ₃	CF ₃	H	F	CH ₃	H
S	CH ₃	CF ₃	CH ₃	F	H	H
S	CH ₃	CF ₃	H	H	H	H
S	CH ₃	CF ₃	H	H	CH ₃	H
S	CH ₃	CF ₃	CH ₃	H	H	H
O	CH ₃	CF ₃	H	Cℓ	H	CH ₂ C≡CH
O	CH ₃	CF ₃	H	Br	H	CH ₂ C≡CH
O	CH ₂ CH ₃	CF ₃	H	F	H	CH ₂ C≡CH
O	CH ₃	HCF ₂	H	F	H	H
O	CH ₃	HCF ₂	H	H	H	CH ₂ C≡CH
O	CH ₃	HCF ₂	H	F	H	CH ₂ C≡CH
O	CH ₃	HCF ₂	H	F	H	CH ₂ CH ₃

表 5 - A - 2 (续)

X	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	A ¹	A ²
0	CH ₃	HCF ₂	H	F	H	CH ₂ CH ₂ CH ₃
0	H	CF ₃	H	H	H	o-CH ₃ -benzyl
0	H	CF ₃	H	H	H	m-CH ₃ -benzyl
0	H	CF ₃	H	H	H	p-CH ₃ -benzyl
0	H	CF ₃	H	F	H	CH ₂ OCH ₃
0	H	CH ₃	CH ₃	F	H	CH ₂ C≡CH
0	H	CF ₃ CF ₂	H	F	H	CH ₂ C≡CH
0	H	CF ₃	H	F	CH ₃	CH ₂ C≡CH
0	H	CF ₃ CH ₂	H	F	H	CH ₂ C≡CH
0	CH ₃	(CF ₃) ₂ CH	H	F	H	CH ₂ C≡CH

表 3 - B - 1



R ¹	R ⁴	R ⁵	B ¹
CH ₃	F	Cl	CH ₂ CO ₂ H
CH ₃	F	Cl	CH ₂ CO ₂ Na
CH ₃	F	Cl	CH ₂ CO ₂ CH ₃
CH ₃	F	Cl	CH ₂ CO ₂ C ₂ H ₅
CH ₃	F	Cl	CH ₂ CO ₂ CH(CH ₃) ₂
CH ₃	F	Cl	CH ₂ CO ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃
CH ₃	F	Cl	CH ₂ CO ₂ CH ₂ (CH ₂) ₂ CH ₃
CH ₃	F	Cl	CH ₂ CO ₂ CH ₂ (CH ₂) ₃ CH ₃
CH ₃	F	Cl	CH ₂ CO ₂ CH 

表B-1-1 (续)

R ¹	R ⁴	R ⁵	B ¹
CH ₃	F	Cl	CH ₂ CO ₂ CH 
CH ₃	F	Cl	CH(CH ₃)CO ₂ CH ₃
CH ₃	F	Cl	CH(CH ₃)CO ₂ C ₂ H ₅
CH ₃	H	Cl	CH ₂ CO ₂ CH ₃
CH ₃	H	Cl	CH(CH ₃)CO ₂ CH ₃
CH ₃	F	NO ₂	CH ₂ CO ₂ CH ₃
CH ₃	F	Br	CH ₂ CO ₂ CH ₃
H	F	Cl	CH ₂ CO ₂ CH ₃
H	F	Cl	CH(CH ₃)CO ₂ CH ₃
H	H	Cl	CH ₂ CO ₂ CH ₃
H	H	Cl	CH(CH ₃)CO ₂ CH ₃
C ₂ H ₅	F	Cl	CH ₂ C≡CH
CH ₂ OH	F	Cl	CH ₃
CH ₂ Cl	F	Cl	C ₂ H ₅
CH ₂ Br	F	Cl	CH(CH ₃) ₂
CH ₂ I	F	Cl	CH(CH ₃) ₂

表3-B-1 (续)

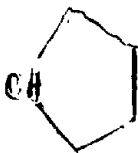
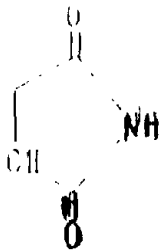
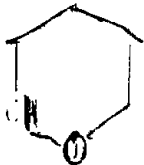
R ¹	R ⁴	R ⁵	B ¹
CH ₃	F	Cl	CH(CH ₃) ₂
CH ₃	F	Cl	CH ₂ C≡CH
CH ₃	F	Cl	CH ₂ C ₆ H ₅
CH ₃	F	Cl	CH ₂ OH
CH ₃	F	Cl	CH ₂ Cl
CH ₃	F	Cl	CH ₂ CN
CH ₃	F	Cl	
CH ₃	F	Cl	
CH ₃	F	Cl	

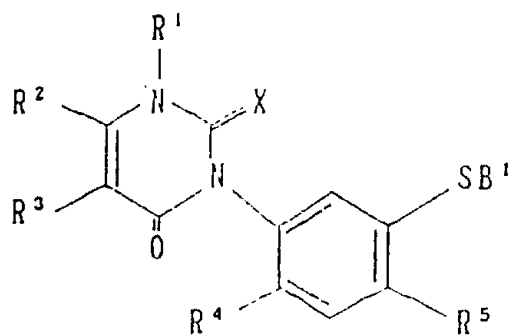
表 3 - B - I (续)

R^1	R^4	R^5	B^1
CH_3	F	Cℓ	$CH(SCH_3)CO_2CH_3$
CH_3	F	Cℓ	$CH(SC_6H_5)CO_2CH_3$
CH_3	F	Cℓ	$CH(CH_2OCH_3)CO_2CH_3$
CH_3	F	Cℓ	$CH(CH_2OCH_3)CO_2C_2H_5$
CH_3	F	Cℓ	$CH_2CO_2C_6H_5$
CH_3	F	Cℓ	$CH_2CO_2CH_2C_6H_5$
CH_3	F	Cℓ	$CH_2CO_2CH_2CH_2CH_2N(CH_3)_2$
CH_3	F	Cℓ	$CH_2CO_2-(2-Cℓ-benzyl)$
CH_3	F	Cℓ	$CH_2CO_2-(2-F-benzyl)$
CH_3	F	Cℓ	$CH_2CH_2CO_2CH_3$
CH_3	F	Cℓ	$(CH_2)_3CO_2CH_3$
CH_3	F	Cℓ	$(CH_2)_4CO_2CH_3$
CH_3	F	Cℓ	$(CH_2)_5CO_2CH_3$
CH_3	F	Cℓ	CH_2OCH_3
CH_3	F	Cℓ	CH_2OCH_2CN
CH_3	F	Cℓ	CH_2OCOCH_3
CH_3	F	Cℓ	$CH_2OCH_2CO_2CH_3$

表3 -- B - 1 (续)

R^1	R^4	R^5	B^1
CH_3	F	Cℓ	$CH_2OCH(CH_3)CO_2CH_3$
CH_3	F	Cℓ	$CH_2SCH_2CO_2CH_3$
CH_3	F	Cℓ	$CH_2SCH_2CH_2CO_2CH_3$
CH_3	F	Cℓ	$CH_2OCH_2CH_2CO_2CH_3$
CH_3	H	Cℓ	$CH_2CO_2CH_2CH_3$
CH_3	H	Cℓ	$CH(CH_3)CO_2CH_2CH_3$
H	F	Cℓ	H
H	F	Cℓ	CH_3
CH_3	F	Cℓ	$CH(CH_3)CO_2H$
H	F	Cℓ	$CH(CH_2OCH_3)CO_2CH_3$
H	F	Cℓ	$CH(CH_2OCH_3)CO_2CH_2CH_3$

表 3-B-2



X	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	B ¹
S	CH ₃	CF ₃	H	F	Cℓ	CH ₂ CO ₂ CH ₃
S	CH ₃	CF ₃	H	F	Cℓ	CH ₂ CO ₂ CH ₂ CH ₃
S	CH ₃	CF ₃	H	F	Cℓ	CH(CH ₃)CO ₂ CH ₃
S	CH ₃	CF ₃	H	F	Cℓ	CH(CH ₃)CO ₂ CH ₂ CH ₃
S	CH ₃	CF ₃	H	F	Cℓ	CH ₃
O	CH ₃	CF ₃	CH ₃	F	Cℓ	CH ₂ CO ₂ CH ₃
O	CH ₃	CF ₃	CH ₃	F	Cℓ	CH ₂ CO ₂ CH ₂ CH ₃
O	CH ₃	CF ₃	CH ₃	F	Cℓ	CH(CH ₃)CO ₂ CH ₃
O	CH ₃	CF ₃	CH ₃	F	Cℓ	CH(CH ₃)CO ₂ CH ₂ CH ₃
O	CH ₃	CF ₃	CH ₃	F	Cℓ	CH ₃
O	CH ₃	CF ₃	Cℓ	F	Cℓ	CH ₂ CO ₂ CH ₃
O	CH ₃	CF ₃	Cℓ	F	Cℓ	CH(CH ₃)CO ₂ CH ₂ CH ₃

表 3-13-2 (续)

X	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	B ¹
O	CH ₃	CF ₃	Br	F	Cl	CH ₂ CO ₂ CH ₃
O	CH ₃	CF ₃	Br	F	Cl	CH(CH ₃)CO ₂ CH ₂ CH ₃
O	CH ₃	CF ₃	F	F	Cl	CH ₂ CO ₂ CH ₃
O	CH ₃	CF ₃	F	F	Cl	CH(CH ₃)CO ₂ CH ₂ CH ₃
O	CH ₃	CF ₃	NO ₂	F	Cl	CH ₂ CO ₂ CH ₃
O	CH ₃	CF ₃	NO ₂	F	Cl	CH(CH ₃)CO ₂ CH ₂ CH ₃
O	CH ₃	CF ₃	HOCH ₂	F	Cl	CH ₂ CO ₂ CH ₃
O	CH ₃	CF ₃	HOCH ₂	F	Cl	CH(CH ₃)CO ₂ CH ₂ CH ₃
O	CH ₃	CF ₃	CH ₂ CH ₃	F	Cl	CH ₂ CO ₂ CH ₃
O	CH ₃	CF ₃	CH ₂ CH ₃	F	Cl	CH(CH ₃)CO ₂ CH ₂ CH ₃
O	CH ₃	CF ₃	CF ₃	F	Cl	CH ₂ CO ₂ CH ₃
O	CH ₃	CF ₃	CF ₃	F	Cl	CH(CH ₃)CO ₂ CH ₂ CH ₃
O	CH ₃	CF ₃	H	F	CN	CH ₃
O	CH ₃	CF ₃	H	F	CN	CH ₂ CO ₂ CH ₃
O	CH ₃	CF ₃	H	F	CN	CH(CH ₃)CO ₂ CH ₂ CH ₃
O	CH ₃	CF ₃ CF ₂	H	F	Cl	CH ₃

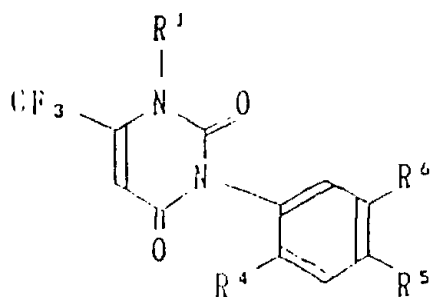
表 3 - B - 2 (续)

X	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	B ¹
0	CH ₃	CF ₃ CF ₂	H	F	Cℓ	CH(CH ₃) ₂
0	CH ₃	CF ₃ CF ₂	H	F	Cℓ	CH ₂ CO ₂ CH ₃
0	CH ₃	CF ₃ CF ₂	H	F	Cℓ	CH ₂ CO ₂ CH ₂ CH ₃
0	CH ₃	CF ₃ CF ₂	H	F	Cℓ	CH(CH ₃)CO ₂ CH ₃
0	CH ₃	CF ₃ CF ₂	H	F	Cℓ	CH(CH ₃)CO ₂ CH ₂ CH ₃
0	CH ₃	CF ₃ CF ₂	H	F	Cℓ	CH(CH ₂ CH ₃)CO ₂ CH ₃
0	CH ₃	CF ₃ CF ₂	H	F	Cℓ	CH(CH ₂ CH ₃)CO ₂ CH ₂ CH ₃
0	CH ₃	CF ₃ CF ₂	H	F	Cℓ	CH ₂ CO ₂ CH 
0	CH ₃	CF ₃ CF ₂	H	F	Cℓ	CH ₂ CN
0	CH ₃	CF ₃ CF ₂	H	F	Cℓ	CH ₂ OCH ₃
0	CH ₃	CF ₃ CF ₃ CF ₂	H	F	Cℓ	CH ₃
0	CH ₃	CF ₃ CF ₃ CF ₂	H	F	Cℓ	CH ₂ CO ₂ CH ₃
0	CH ₃	CF ₃ CF ₃ CF ₂	H	F	Cℓ	CH(CH ₃)CO ₂ CH ₂ CH ₃
0	CH ₃	(CF ₃) ₂ CF	H	F	Cℓ	CH ₃

表 3 - B - 2 (续)

X	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	B ¹
O	CH ₃	(CF ₃) ₂ CF	H	F	Cl	CH ₂ CO ₂ CH ₃
O	CH ₃	(CF ₃) ₂ CF	H	F	Cl	CH(CH ₃)CO ₂ CH ₂ CH ₃
O	CH ₃	CF ₃ CH ₂	H	F	Cl	CH ₃
O	CH ₃	CF ₃ CH ₂	H	F	Cl	CH ₂ CO ₂ CH ₃
O	CH ₃	CF ₃ CH ₂	H	F	Cl	CH(CH ₃)CO ₂ CH ₂ CH ₃
O	CH ₃	CCl ₃	H	F	Cl	CH ₃
O	CH ₃	CCl ₃	H	F	Cl	CH ₂ CO ₂ CH ₃
O	CH ₃	CCl ₃	H	F	Cl	CH(CH ₃)CO ₂ CH ₂ CH ₃
O	CH ₃	HCF ₂	H	F	Cl	CH ₂ CO ₂ CH ₃

表 3 - C - 1



R ¹	R ⁴	R ⁵	R ⁶
CH ₃	F	Cl	CHNOCH ₂ CO ₂ CH ₃
CH ₃	F	Cl	C(CH ₃)NOCH ₂ CO ₂ C ₂ H ₅
CH ₃	F	Cl	C(CH ₂ OCH ₃)NOCH ₂ CO ₂ CH ₃
CH ₃	F	Cl	C(OCH ₃)NOCH ₂ CO ₂ C ₂ H ₅
CH ₃	H	Cl	C(CH ₃)NOCH ₂ CO ₂ C ₂ H ₅
CH ₃	H	Cl	C(CH ₂ OCH ₃)NOCH ₂ CO ₂ CH ₃
H	F	Cl	C(CH ₃)NOCH ₂ CO ₂ C ₂ H ₅
H	H	Cl	C(CH ₃)NOCH ₂ CO ₂ C ₂ H ₅
CH ₃	F	Cl	C(CH ₃)NNC(CH ₃)CO ₂ CH ₃
CH ₃	F	Cl	C(OCH ₃)NNC(CH ₃)CO ₂ CH ₃
CH ₃	F	Cl	C(OCH ₃)NNCHCO ₂ C ₂ H ₅
CH ₃	H	Cl	C(CH ₃)NNC(CH ₃)CO ₂ CH ₃
H	F	Cl	C(CH ₃)NNC(CH ₃)CO ₂ CH ₃

表3 - C - 1 (续)

R^1	R^4	R^5	R^6
H	H	Cℓ	$C(CH_3)NNC(CH_3)CO_2CH_3$
CH_3	F	Cℓ	$CH_2OCH_2CO_2C_2H_5$
CH_3	F	Cℓ	$CH_2OCH(CH_3)CO_2C_2H_5$
CH_3	F	Cℓ	$CH_2OCH(CH_2OCH_3)CO_2CH_3$
CH_3	F	Cℓ	$CH_2SCH_2CO_2CH_3$
CH_3	F	Cℓ	$CH_2SCH(CH_3)CO_2C_2H_5$
CH_3	F	Cℓ	$CH_2NHCH_2CO_2CH_3$
CH_3	F	Cℓ	$CH_2NHCH(CH_3)CO_2C_2H_5$
CH_3	F	Cℓ	$CH_2NHCH(CH_2OCH_3)CO_2C_2H_5$
CH_3	H	Cℓ	$CH_2OCH_2CO_2C_2H_5$
CH_3	H	Cℓ	$CH_2SCH(CH_3)CO_2C_2H_5$
CH_3	H	Cℓ	$CH_2NHCH_2CO_2CH_3$
H	F	Cℓ	$CH_2OCH_2CO_2C_2H_5$
H	H	Cℓ	$CH_2NHCH_2CO_2CH_3$
CH_3	F	Cℓ	$NHSO_2CH_3$
CH_3	F	Cℓ	$NHSO_2C_2H_5$

表3 - C - 1 (续)

R ¹	R ⁴	R ⁵	R ⁶
CH ₃	F	Cℓ	NHSO ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃
CH ₃	F	Cℓ	N(SO ₂ CH ₃) ₂
CH ₃	F	Cℓ	N(SO ₂ C ₂ H ₅) ₂
CH ₃	F	Cℓ	N(SO ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃) ₂
CH ₃	F	Cℓ	N(SO ₂ CH ₃)CH ₃
CH ₃	F	Cℓ	N(SO ₂ CH ₃)C ₄ H ₉ ⁿ
CH ₃	F	Cℓ	N(SO ₂ CH ₃)CH ₂ OCH ₃
CH ₃	F	Cℓ	N(SO ₂ C ₂ H ₅)CH ₂ OCH ₃
CH ₃	H	Cℓ	N(SO ₂ C ₂ H ₅)CH ₂ OCH ₃
CH ₃	H	Cℓ	N(SO ₂ CH ₃) ₂
H	F	Cℓ	N(SO ₂ CH ₃) ₂
H	F	Cℓ	N(SO ₂ C ₂ H ₅) ₂
H	H	Cℓ	N(SO ₂ CH ₃) ₂
CH ₃	F	Cℓ	C(CH ₃)NOCH ₂ CO ₂ CH ₃
CH ₃	F	Cℓ	C(CH ₂ OCH ₃)NOCH ₂ CO ₂ C ₂ H ₅
CH ₃	F	Cℓ	C(OCH ₃)NOCH ₂ CO ₂ CH ₃

表3 -- C -- 1 (续)

R ¹	R ⁴	R ⁵	R ⁶
CH ₃	H	Cl	C(CH ₃)NOCH ₂ CO ₂ CH ₃
CH ₃	H	Cl	C(CH ₂ OCH ₃)NOCH ₂ CO ₂ C ₂ H ₅
CH ₃	H	Cl	C(OCH ₃)NOCH ₂ CO ₂ CH ₃
CH ₃	F	Cl	CH ₂ OCH ₂ CO ₂ CH ₃
CH ₃	F	Cl	CH ₂ OCH(CH ₃)CO ₂ CH ₃
CH ₃	F	Cl	CH ₂ SCH ₂ CO ₂ C ₂ H ₅
CH ₃	F	Cl	CH ₂ SCH(CH ₃)CO ₂ CH ₃
CH ₃	F	Cl	CH ₂ NHCH ₂ CO ₂ C ₂ H ₅
CH ₃	F	Cl	CH ₂ NHCH(CH ₃)CO ₂ CH ₃
CH ₃	F	Cl	N(CH ₂ CH=CH ₂)SO ₂ CH ₃
CH ₃	F	Cl	N(CH ₂ CH=CH ₂)SO ₂ C ₂ H ₅
CH ₃	F	Cl	N(CH ₂ C≡CH)SO ₂ CH ₃
CH ₃	F	Cl	N(CH ₂ C≡CH)SO ₂ C ₂ H ₅
CH ₃	F	Cl	N(COCH ₃)SO ₂ CH ₃
CH ₃	F	Cl	N(COC ₂ H ₅)SO ₂ CH ₃
CH ₃	F	Cl	NHSO ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃

表 3 - C - 1 (续)

R^1	R^4	R^5	R^6
CH_3	F	Cl	$NHSO_2CH_2CH(CH_3)_2$
CH_3	F	Cl	$NHSO_2CH(CH_3)CH_2CH_3$
CH_3	F	Cl	$NHSO_2C(CH_3)_3$
CH_3	F	Cl	$NHSO_2CF_3$
CH_3	F	Cl	$N(SO_2CF_3)_2$

表3 - C - 1 (续)

R^1	R^4	R^5	R^6
CH_3	H	$C\ell$	$NHSO_2CH_3$
CH_3	H	$C\ell$	$NHSO_2C_2H_5$
CH_3	H	$C\ell$	$N(CH_3)SO_2CH_3$
CH_3	H	$C\ell$	$N(CH_3)SO_2C_2H_5$
CH_3	H	$C\ell$	$NHSO_2CH(CH_3)_2$
CH_3	H	$C\ell$	$NHSO_2(CH_2)_2CH_3$
CH_3	H	$C\ell$	$NHSO_2(CH_2)_3CH_3$
CH_3	F	$C\ell$	$N(C_2H_5)SO_2CH_3$
CH_3	F	$C\ell$	$N(COCH_3)SO_2CH(CH_3)_2$
CH_3	F	$C\ell$	$N(COCH_3)SO_2C(CH_3)_3$
CH_3	F	$C\ell$	$N(COCH_3)SO_2CH(CH_3)CH_2CH_3$
CH_3	F	$C\ell$	$N(COCH_3)SO_2CH_2CH(CH_3)_2$
CH_3	F	$C\ell$	$NHSO_2CH_2CH_2C\ell$
CH_3	H	$C\ell$	$NHSO_2C(CH_3)_3$
CH_3	H	$C\ell$	$NHSO_2CH_2CH(CH_3)_2$
CH_3	H	$C\ell$	$NHSO_2CH(CH_3)C_2H_5$
CH_3	H	$C\ell$	$N(COCH_3)SO_2CH(CH_3)_2$
CH_3	H	$C\ell$	$NHSO_2CH_2CH_2C\ell$
CH_3	H	$C\ell$	$NHSO_2CH_2C\ell$
CH_3	H	$C\ell$	$N(SO_2C_2H_5)_2$
CH_3	H	$C\ell$	$N(CH_2OCH_3)SO_2CH(CH_3)_2$
CH_3	H	$C\ell$	$N(CH_2C\equiv CH)SO_2C_2H_5$
CH_3	H	$C\ell$	$N(CH_2CH=CH_2)SO_2C_2H_5$
CH_3	H	$C\ell$	$NNaSO_2C_2H_5$

表3 - C - 1 (续)

R^1	R^4	R^5	R^6
CH_3	H	Cℓ	$NNaSO_2CH(CH_3)_2$
CH_3	H	Cℓ	$NNaSO_2CH_2CH_2CH_3$
CH_3	Cℓ	Cℓ	$NHSO_2CH(CH_3)_2$
CH_3	Cℓ	Cℓ	$NHSO_2C_2H_5$
CH_3	H	NO_2	$NHSO_2C_2H_5$
CH_3	H	NO_2	$NHSO_2CH(CH_3)_2$
CH_3	H	NO_2	$NHSO_2CH_2CH_2CH_3$
CH_3	H	CN	$NHSO_2C_2H_5$
CH_3	H	CN	$NHSO_2CH(CH_3)_2$
CH_3	H	CN	$NHSO_2CH_2CH_2CH_3$
CH_3	F	NO_2	$NHSO_2C_2H_5$
CH_3	F	NO_2	$NHSO_2CH(CH_3)_2$
CH_3	F	NO_2	$NHSO_2CH_2CH_2CH_3$
CH_3	F	CN	$NHSO_2C_2H_5$
CH_3	F	CN	$NHSO_2CH(CH_3)_2$
CH_3	F	CN	$NHSO_2CH_2CH_2CH_3$
CH_3	F	Cℓ	$NNaSO_2C_2H_5$
CH_3	F	Cℓ	$NNaSO_2CH(CH_3)_2$
CH_3	F	Cℓ	$NNaSO_2CH_2CH_2CH_3$
H	F	Cℓ	$NHSO_2C_2H_5$
CH_3	F	Cℓ	$NHSO_2CH(CH_3)_2$
CH_3	F	Cℓ	$N(CH_2OCH_3)SO_2CH(CH_3)_2$

表 3 - C - 1 (续)

R^1	R^4	R^5	R^6
CH_3	F	Cℓ	$N(CH_2OCH_3)SO_2CH_2CH_2CH_3$
CH_3	F	Cℓ	$N(CH_2OCH_3)SO_2(CH_2)_3CH_3$
CH_3	F	Cℓ	$N(CH_2OCH_3)SO_2CH(CH_3)C_2H_5$
CH_3	F	Cℓ	$N(CH_2OCH_3)SO_2CH_2CH(CH_3)_2$
CH_3	F	Cℓ	$N(CH_2OCH_3)SO_2C(CH_3)_3$
CH_3	F	Cℓ	$N(CH_2C \equiv CH)SO_2CH(CH_3)_2$
CH_3	F	Cℓ	$N(CH_2C \equiv CH)SO_2CH_2CH_2CH_3$
CH_3	F	Cℓ	$N(CH_2C \equiv CH)SO_2(CH_2)_2CH_3$
CH_3	F	Cℓ	$N(CH_2C \equiv CH)SO_2CH(CH_3)C_2H_5$
CH_3	F	Cℓ	$N(CH_2C \equiv CH)SO_2CH_2CH(CH_3)_2$
CH_3	F	Cℓ	$N(CH_2C \equiv CH)SO_2C(CH_3)_3$
CH_3	F	Cℓ	$N(CH_2CH=CH_2)SO_2CH_2CH_2CH_3$
CH_3	F	Cℓ	$N(CH_2CH=CH_2)SO_2(CH_2)_3CH_3$
CH_3	F	Cℓ	$N(CH_2CH=CH_2)SO_2CH(CH_3)C_2H_5$
CH_3	F	Cℓ	$N(CH_2CH=CH_2)SO_2CH_2CH(CH_3)_2$
CH_3	F	Cℓ	$N(CH_2CH=CH_2)SO_2C(CH_3)_3$
CH_3	F	Cℓ	$N(SO_2C_2H_5)SO_2CH(CH_3)_2$
CH_3	F	Cℓ	$N(SO_2C_2H_5)SO_2CH_2CH_2CH_3$
CH_3	F	Cℓ	$NHSO_2CH_2CF_3$

表 J - C - 1 (续)

R^1	R^4	R^5	R^6
CH_3	H	Cℓ	$NHSO_2CH_2CF_3$
CH_3	Cℓ	Cℓ	$NHSO_2CH_3$
CH_3	Cℓ	Cℓ	$NHSO_2CH_2CH_2CH_3$
CH_3	Cℓ	Cℓ	$NHSO_2CH(CH_3)_2$
CH_3	Cℓ	Cℓ	$NHSO_2CH_2CH_2CH_2CH_3$
CH_3	Cℓ	Cℓ	$NHSO_2CH(CH_3)CH_2CH_3$
CH_3	Cℓ	Cℓ	$NHSO_2C(CH_3)_3$
CH_3	Cℓ	Cℓ	$NHSO_2CH_2CF_3$
CH_3	Cℓ	Cℓ	$NHSO_2CH_2CH_2CH_2Cl$
CH_3	F	Cℓ	$NHSO_2CH_2CH_2CH_2Cl$
CH_3	H	Cℓ	$NHSO_2CH_2CH_3$

表 3 - C - 1 (续)

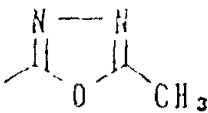
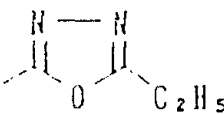
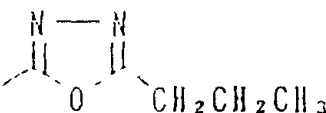
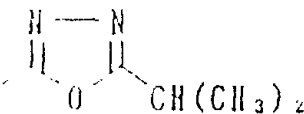
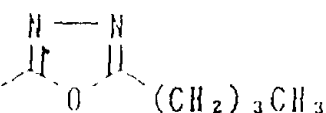
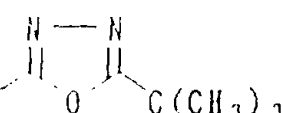
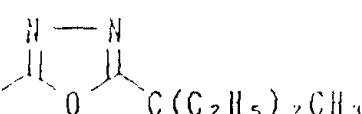
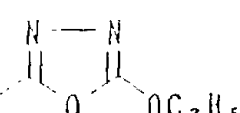
R^1	R^4	R^5	R^6
CH_3	F	Cl	
CH_3	F	Cl	
CH_3	F	Cl	
CH_3	F	Cl	
CH_3	F	Cl	
CH_3	F	Cl	
CH_3	F	Cl	
CH_3	F	Cl	

表 3-3-1 (续)

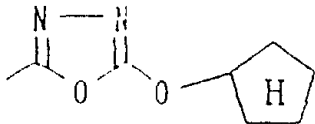
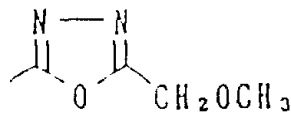
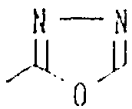
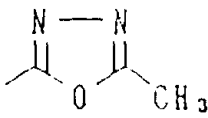
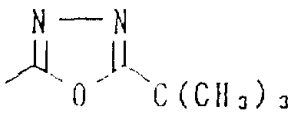
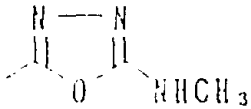
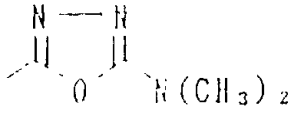
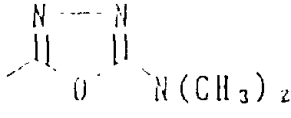
R^1	R^4	R^5	R^6
CH_3	F	Cl	
CH_3	F	Cl	
CH_3	F	Cl	
H	F	Cl	
H	F	Cl	
CH_3	F	Cl	
CH_3	F	Cl	
H	F	Cl	

表 3 -- C -- 1 (续)

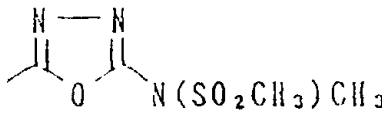
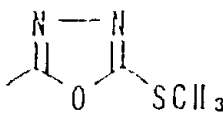
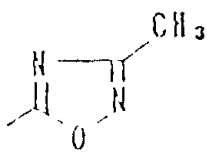
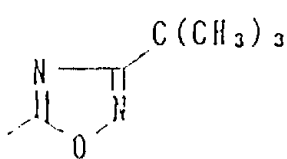
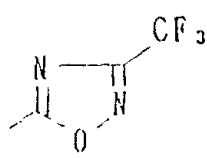
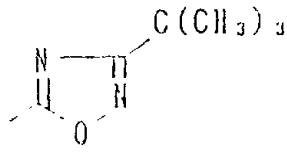
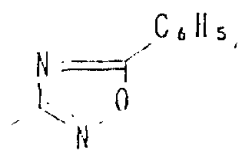
R^1	R^4	R^5	R^6
CH_3	F	Cl	
CH_3	F	Cl	
CH_3	F	Cl	
CH_3	F	Cl	
CH_3	F	Cl	
H	F	Cl	
CH_3	F	Cl	

表 3 - C - 1 (续)

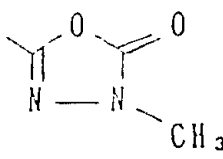
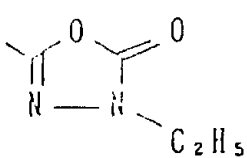
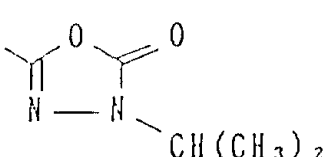
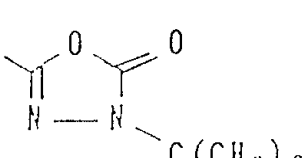
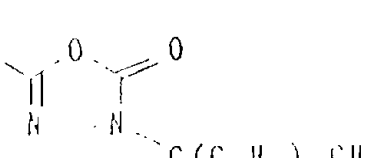
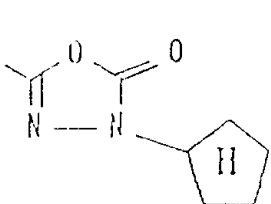
R^1	R^4	R^5	R^6
CH_3	F	Cℓ	
CH_3	F	Cℓ	
CH_3	F	Cℓ	
CH_3	F	Cℓ	
CH_3	F	Cℓ	
CH_3	F	Cℓ	

表 3 - C - 1 (续)

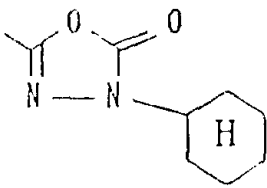
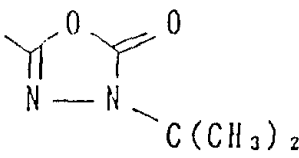
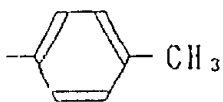
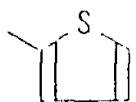
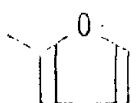
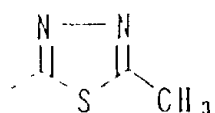
R^1	R^4	R^5	R^6
CH_3	F	Cℓ	
H	F	Cℓ	
CH_3	F	Cℓ	C_6H_5
CH_3	F	Cℓ	
CH_3	F	Cℓ	
CH_3	F	Cℓ	
CH_3	F	Cℓ	

表 3 - C - 1 (续)

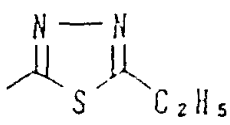
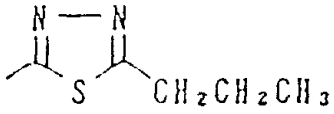
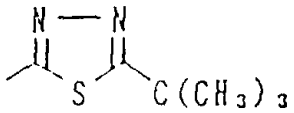
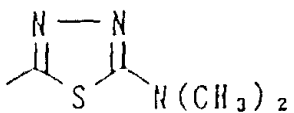
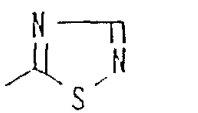
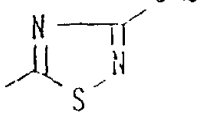
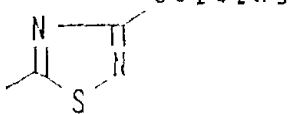
R^1	R^4	R^5	R^6
CH_3	F	Cl	
CH_3	F	Cl	
CH_3	F	Cl	
CH_3	F	Cl	
CH_3	F	Cl	
CH_3	F	Cl	
CH_3	F	Cl	

表 3 - C - 1 (续)

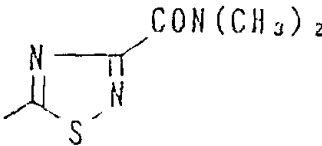
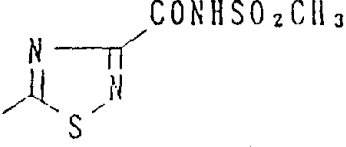
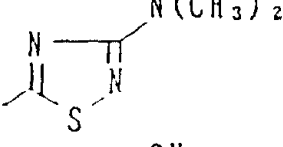
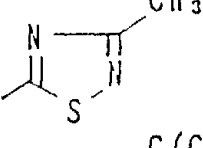
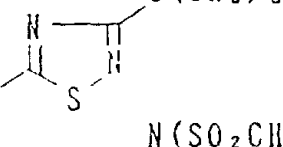
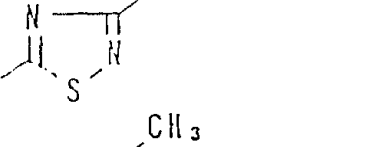
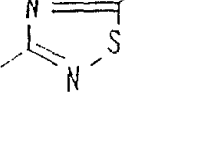
R^1	R^4	R^5	R^6
CH_3	F	Cl	
CH_3	F	Cl	
CH_3	F	Cl	
CH_3	F	Cl	
CH_3	F	Cl	
CH_3	F	Cl	
CH_3	F	Cl	

表 3 - C - 1 (续)

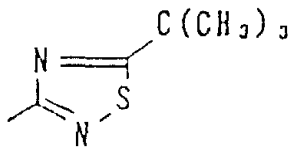
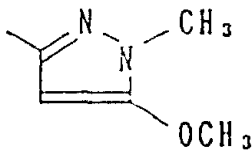
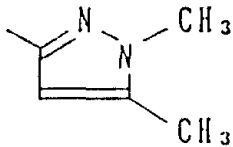
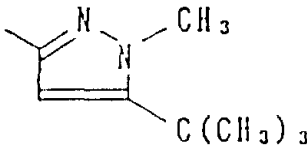
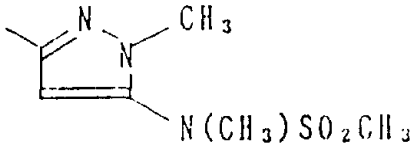
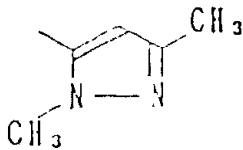
R^1	R^4	R^5	R^6
CH_3	F	Cl	
CH_3	F	Cl	
CH_3	F	Cl	
CH_3	F	Cl	
CH_3	F	Cl	
CH_3	F	Cl	

表 3 - C - 1 (续)

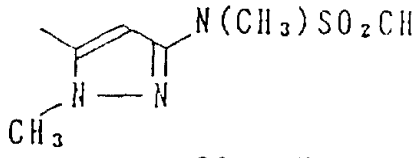
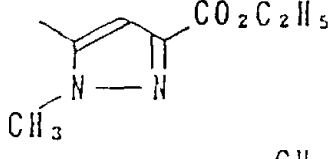
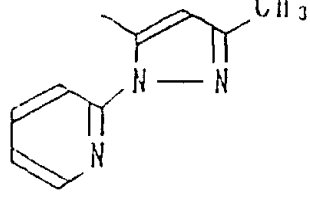
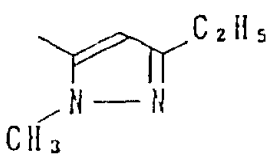
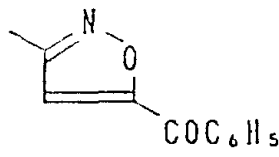
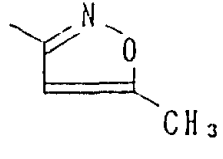
R^1	R^4	R^5	R^6
CH_3	F	Cl	
CH_3	F	Cl	
CH_3	F	Cl	
CH_3	F	Cl	
CH_3	F	Cl	
CH_3	F	Cl	

表 3 - C - 1 (续)

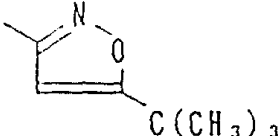
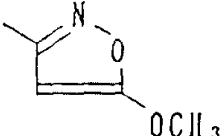
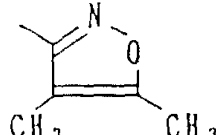
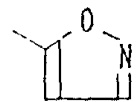
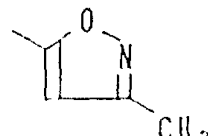
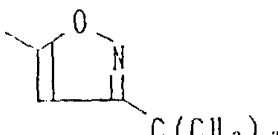
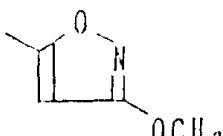
R^1	R^4	R^5	R^6
CH_3	F	Cl	
CH_3	F	Cl	
CH_3	F	Cl	
CH_3	F	Cl	
CH_3	F	Cl	
CH_3	F	Cl	
CH_3	F	Cl	

表 3 - C - 1 (续)

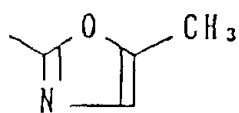
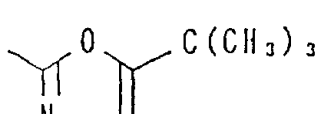
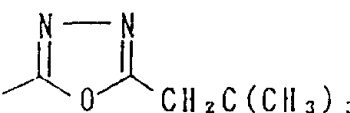
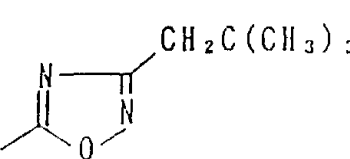
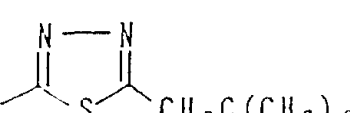
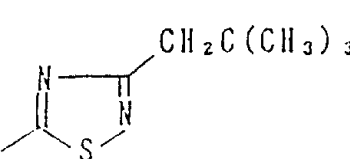
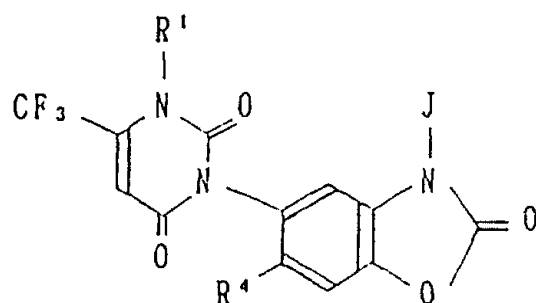
R^1	R^4	R^5	R^6
CH_3	F	Cℓ	
CH_3	F	Cℓ	
CH_3	F	Cℓ	
CH_3	F	Cℓ	
CH_3	F	Cℓ	
CH_3	F	Cℓ	

表 3-C-2



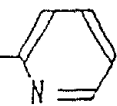
R ¹	R ⁴	J
CH ₃	F	H
CH ₃	F	C ₂ H ₅
CH ₃	F	CH ₂ CH=CH ₂
CH ₃	F	CH ₂ C≡CH
CH ₃	F	CH ₂ C≡N
CH ₃	F	CH ₂ C ₆ H ₅
CH ₃	F	CH ₂ - 
CH ₃	H	CH ₂ C≡CH
CH ₃	F	C ₆ H ₅
H	F	CH ₂ C≡CH

表3-0-2 (续)

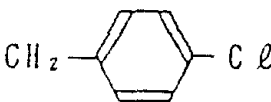
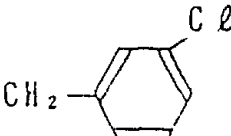
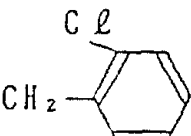
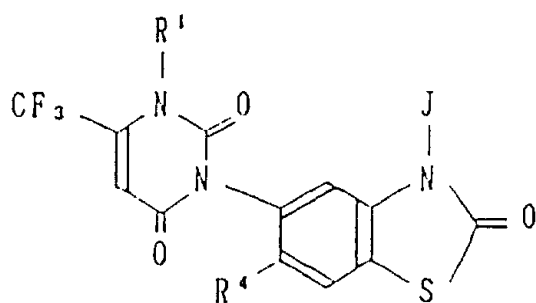
R ¹	I, ⁴	J
CH ₃	F	
CH ₃	F	
CH ₃	F	
CH ₃	F	CH ₂ OCH ₃
CH ₃	Cℓ	CH ₂ C≡CH
CH ₃	F	CH ₂ CH ₂ CH ₃
CH ₃	F	CH(CH ₃)C≡CH
CH ₃	F	CH ₂ OCH ₂ CH ₃
CH ₃	F	CH ₂ CONH ₂
CH ₃	F	CH ₂ CO ₂ CH ₃
CH ₃	F	CH ₂ CO ₂ CH ₂ CH ₃
CH ₃	F	CH(CH ₃)CH=CH ₂

表 3-C-3



R^1	R^4	J
CH_3	F	H
CH_3	F	CH_3
CH_3	F	C_2H_5
CH_3	F	$CH_2CH_2CH_3$
CH_3	F	$CH_2CH=CH_2$
CH_3	F	$CH_2C \equiv CH$
CH_3	F	$CH_2C \equiv CCH_3$
CH_3	F	$CH_2C \equiv N$
CH_3	F	CH_2OH
CH_3	F	CH_2Cl
CH_3	F	$CH_2CO_2CH_3$
CH_3	F	$CH_2CO_2C_2H_5$
CH_3	F	CH_2OCH_3

表3 - C - 3 (续)

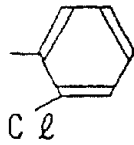
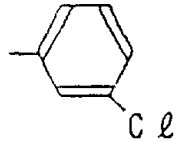
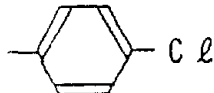
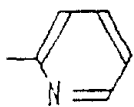
R^1	R^4	J
CH_3	F	C_6H_5
CH_3	F	$CH_2C_6H_5$
CH_3	F	CH_2 - 
CH_3	F	CH_2 - 
CH_3	F	CH_2 - 
CH_3	F	CH_2 - 
CH_3	H	C_2H_5
CH_3	H	$CH_2CH=CH_2$
CH_3	H	$CH_2C\equiv CH$
CH_3	H	CH_2OCH_3
CH_3	H	$CH_2C_6H_5$
H	F	$CH_2C\equiv CH$
H	F	$CH_2C_6H_5$

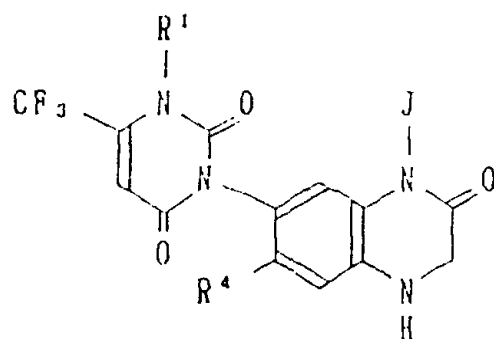
表 3 - C - 3 (续)

R^1	R^4	J
CH_3	F	$CH(CH_3)C \equiv CH$
CH_3	F	$CH_2CH_2C \equiv CH$
CH_3	F	$CH(CH_3)CH_2CH_3$
CH_3	F	$CH(CH_3)CH = CH_2$
CH_3	F	$CH_2OCH_2CH_3$
CH_3	F	$CH_2CH_2OCH_3$
CH_3	F	$CH(CH_3)OCH_3$
CH_3	F	$CH(CH_3)OCH_2CH_3$
CH_3	F	<i>o</i> - CH_3 -benzyl
CH_3	F	<i>m</i> - CH_3 -benzyl
CH_3	F	<i>p</i> - CH_3 -benzyl
CH_3	F	<i>o</i> - CF_3 -benzyl
CH_3	F	<i>m</i> - CF_3 -benzyl
CH_3	F	<i>p</i> - CF_3 -benzyl
CH_3	F	<i>o</i> - CH_3 -phenyl
CH_3	F	<i>m</i> - CH_3 -phenyl

表 3-0-3 (续)

R ¹	R ⁴	J
CH ₃	F	p-CH ₃ -phenyl
CH ₃	F	o-Cl-phenyl
CH ₃	F	m-Cl-phenyl
CH ₃	F	p-Cl-phenyl
CH ₃	F	o-CF ₃ -phenyl
CH ₃	F	m-CF ₃ -phenyl
CH ₃	F	p-CF ₃ -phenyl
CH ₃	F	o-Cl-benzyl
CH ₃	F	m-Cl-benzyl
CH ₃	F	p-Cl-benzyl
H	F	H

表 3-C-4



R^1	R^4	J
CH_3	F	CH_3
CH_3	F	C_2H_5
CH_3	F	$CH_2CH=CH_2$
CH_3	F	$CH_2C \equiv CH$
CH_3	F	$CH_2C_6H_5$
CH_3	F	H
CH_3	F	C_6H_5
CH_3	F	$CH_2C \equiv N$
CH_3	H	C_2H_5
CH_3	H	$CH_2C \equiv CH$
CH_3	H	$CH_2C_6H_5$
CH_3	H	$CH_2CH=CH_2$

表 3 - C - 4 (续)

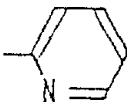
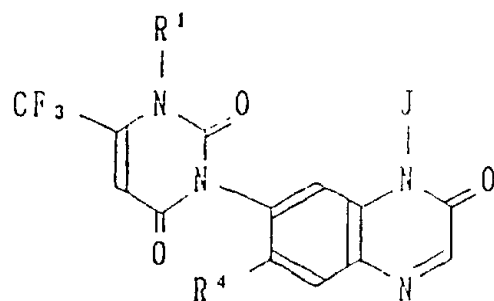
R^1	R^4	J
CH_3	F	
CH_3	F	$CH_2CO_2C_2H_5$
H	F	$CH_2C \equiv CH$
CH_3	F	$CH(CH_3)C \equiv CH$
CH_3	F	$CH_2C \equiv CCH_3$
CH_3	F	$CH_2CH_2C \equiv CH$
CH_3	F	$CH(CH_3)CH=CH_2$
CH_3	F	$CH_2CH_2CH_3$
CH_3	F	$CH(CH_3)CH_2CH_3$
CH_3	F	<i>o</i> - CH_3 -benzyl
CH_3	F	<i>m</i> - CH_3 -benzyl
CH_3	F	<i>p</i> - CH_3 -benzyl
CH_3	F	<i>o</i> -Cl-benzyl
CH_3	F	<i>m</i> -Cl-benzyl
CH_3	F	<i>p</i> -Cl-benzyl

表 3 — C — 4 (续)

R^1	R^4	J
CH_3	F	o- CH_3 -phenyl
CH_3	F	m- CH_3 -phenyl
CH_3	F	p- CH_3 -phenyl
CH_3	F	o-Cl-phenyl
CH_3	F	m-Cl-phenyl
CH_3	F	p-Cl-phenyl
CH_3	F	CH_2OCH_3
CH_3	F	$CH_2OCH_2CH_3$
CH_3	F	$CH(CH_3)OCH_3$
CH_3	F	$CH(CH_3)OCH_2CH_3$
H	F	H
H	H	H
H	F	$CH(CH_3)C \equiv CH$
H	F	$CH_2C \equiv N$
H	F	$CH_2C_6H_5$

表 3-C-5

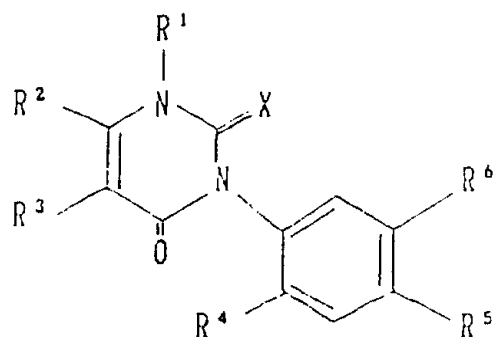


R ¹	R ⁴	J
CH ₃	F	H
CH ₃	F	CH ₃
CH ₃	F	C ₂ H ₅
CH ₃	F	CH ₂ CH=CH ₂
CH ₃	F	CH ₂ C≡CH
CH ₃	F	CH ₂ C ₆ H ₅
CH ₃	F	CH ₂ C≡N
CH ₃	F	CH ₂ OCH ₃
CH ₃	H	CH ₂ C≡CH
CH ₃	H	CH ₂ C ₆ H ₅
H	F	CH ₂ C≡CH
H	H	CH ₂ C≡CH

表 3 - C - 5 (续)

R^1	R^2	J
CH_3	H	C_2H_5
H	H	C_2H_5
H	F	C_2H_5
CH_3	F	$CH_2CH_2CH_3$
CH_3	F	$CH(CH_3)C \equiv CH$
CH_3	F	$CH(CH_3)CH = CH_2$
CH_3	F	$CH_2CO_2CH_3$
CH_3	F	C_6H_5
CH_3	F	<i>o</i> - CH_3 -benzyl
CH_3	F	<i>m</i> - CH_3 -benzyl
CH_3	F	<i>p</i> - CH_3 -benzyl
H	F	H
H	H	H
H	F	$CH_2CH_2CH_3$
H	F	$CH_2C_6H_5$
H	F	$CH_2C \equiv N$

表 3-C-6



X	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	R ⁶
S	CH ₃	CF ₃	H	F	Cl	C(CH ₃)NOCH ₂ CO ₂ CH ₂ CH ₃
S	CH ₃	CF ₃	H	F	Cl	C(OCH ₃)NOCH ₂ CO ₂ CH ₂ CH ₃
S	CH ₃	CF ₃	H	F	Cl	C(CH ₃)NNCHCO ₂ CH ₂ CH ₃
S	CH ₃	CF ₃	H	F	Cl	CH ₂ OCH ₂ CO ₂ CH ₂ CH ₃
S	CH ₃	CF ₃	H	F	Cl	CH ₂ NHCH ₂ CO ₂ CH ₂ CH ₃
S	CH ₃	CF ₃	H	F	Cl	NHSO ₂ CH ₃
S	CH ₃	CF ₃	H	F	Cl	NHSO ₂ CH ₂ CH ₃
S	CH ₃	CF ₃	H	F	Cl	NHSO ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃
O	CH ₃	CF ₃	Cl	F	Cl	C(CH ₃)NOCH ₂ CO ₂ CH ₂ CH ₃
O	CH ₃	CF ₃	CH ₃	F	Cl	C(CH ₃)NOCH ₂ CO ₂ CH ₂ CH ₃
O	CH ₃	CF ₃	CH ₃	F	Cl	C(CH ₂ OCH ₃)NOCH ₂ CO ₂ CH ₂ CH ₃

表3 -- C - 6 (续)

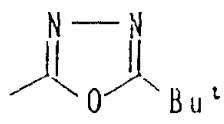
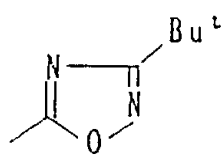
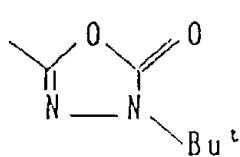
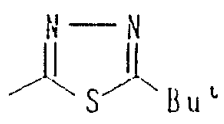
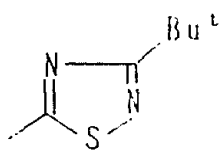
X	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	R ⁶
O	CH ₃	CF ₃	H	F	CN	C(CH ₃)NOCH ₂ CO ₂ CH ₂ CH ₃
O	CH ₃	CF ₃	CH ₃	F	Cl	NHSO ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃
O	CH ₃	CF ₃	CH ₃	F	Cl	CH ₂ OCH ₂ CO ₂ CH ₂ CH ₃
O	CH ₃	CF ₃ CF ₂	H	F	Cl	C(CH ₃)NOCH ₂ CO ₂ CH ₂ CH ₃
S	CH ₃	CF ₃	H	F	Cl	
S	CH ₃	CF ₃	H	F	Cl	
S	CH ₃	CF ₃	H	F	Cl	
S	CH ₃	CF ₃	H	F	Cl	
S	CH ₃	CF ₃	H	F	Cl	

表 3 - C - 6 (续)

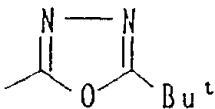
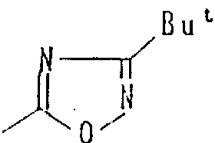
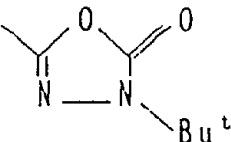
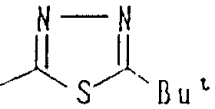
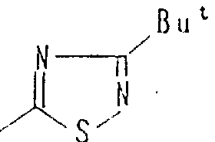
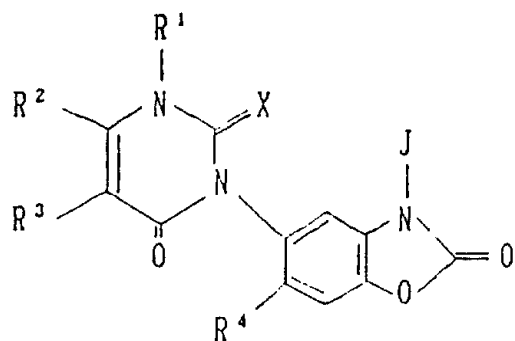
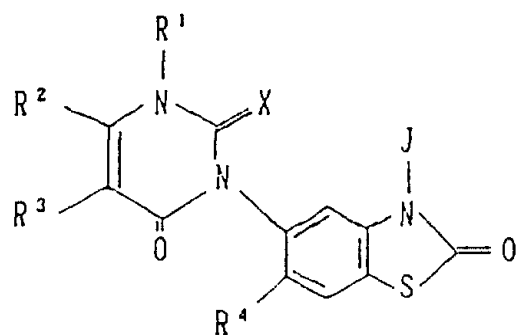
X	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	R ⁶
O	CH ₃	CF ₃ CF ₂	H	F	Cl	
O	CH ₃	CF ₃ CF ₂	H	F	Cl	
O	CH ₃	CF ₃ CF ₂	H	F	Cl	
O	CH ₃	CF ₃ CF ₂	H	F	Cl	
O	CH ₃	CF ₃ CF ₂	H	F	Cl	

表 3-C-7



X	R^1	R^2	R^3	R^4	J
S	CH_3	CF_3	H	F	$CH_2C \equiv CH$
S	CH_3	CF_3	H	F	CH_2CH_3
S	CH_3	CF_3	H	F	$CH_2CH = CH_2$
O	CH_3	CF_3CF_2	H	F	$CH_2C \equiv CH$
O	CH_3	CF_3CF_2	H	F	CH_2CH_3
O	CH_3	CF_3CF_2	H	F	$CH_2CH = CH_2$
O	CH_3	CF_3	Cl	F	$CH_2C \equiv CH$
O	CH_3	CF_3	CH_3	F	$CH_2C \equiv CH$
O	CH_3	CF_3	CH_3	F	CH_2CH_3
O	CH_3	CF_3	H	F	$CH(CH_3)C \equiv CH$

表 3-C-8

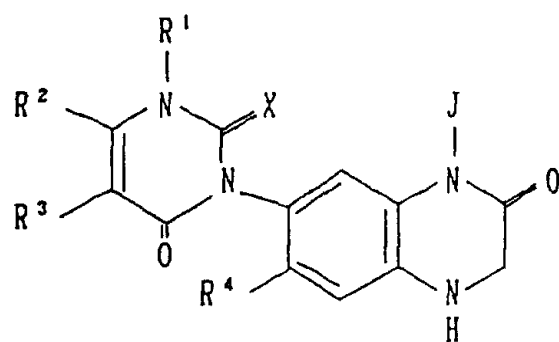


X	R^1	R^2	R^3	R^4	J
S	CH_3	CF_3	H	F	$CH_2C \equiv CH$
S	CH_3	CF_3	H	F	CH_2CH_3
S	CH_3	CF_3	H	F	$CH_2CH_2CH_3$
S	CH_3	CF_3	H	F	$CH(CH_3)C \equiv CH$
S	CH_3	CF_3	H	F	CH_2OCH_3
S	CH_3	CF_3	H	F	$CH_2C_6H_5$
O	CH_3	CF_3	F	F	$CH_2C \equiv CH$
O	CH_3	CF_3	Cl	F	$CH_2C \equiv CH$
O	CH_3	CF_3	Br	F	$CH_2C \equiv CH$
O	CH_3	CF_3	I	F	$CH_2C \equiv CH$
O	CH_3	CF_3	CH_3	F	$CH_2C \equiv CH$

表3 - C - 8 (续)

X	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	J
O	CH ₃	CF ₃	CH ₂ CH ₃	F	CH ₂ C≡CH
O	CH ₃	CF ₃ CF ₂	H	F	CH ₂ C≡CH
O	CH ₃	CF ₃ CF ₂	H	F	CH(CH ₃)C≡CH
O	CH ₃	CF ₃ CF ₂	H	F	CH ₂ CH=CH ₂
O	CH ₃	CF ₃ CF ₂	H	F	CH(CH ₃)C≡CH
S	CH ₃	CF ₃ CF ₂	H	F	CH ₂ C≡CH
O	CH ₃	CF ₃ CF ₂	H	H	CH ₂ C≡CH
O	CH ₃	CF ₃ CF ₂	H	F	CH ₂ CH ₂ CH ₃
O	CH ₃	CF ₃ CH ₂	H	F	CH ₂ C≡CH
O	CH ₃	CF ₃ CH ₂	H	F	CH(CH ₃)C≡CH
O	CH ₃	CF ₃ CH ₂	H	F	CH ₂ CH ₃
O	CH ₃	CF ₃ CH ₂	H	F	CH ₂ CH ₂ CH ₃
S	CH ₃	CF ₃	H	H	CH ₂ C≡CH
S	CH ₃	CF ₃	H	H	H
S	CH ₃	CF ₃ CF ₂	H	F	H
O	CH ₃	CCl ₃	H	F	CH ₂ C≡CH
O	CH ₃	HCF ₂	H	F	CH ₂ C≡CH

表 3-C-9

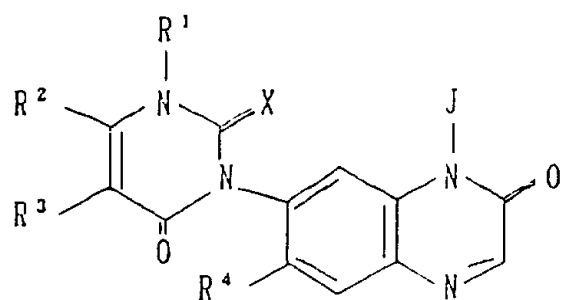


X	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	J
S	CH ₃	CF ₃	H	F	CH ₂ C≡CH
S	CH ₃	CF ₃	H	F	CH(CH ₃)C≡CH
S	CH ₃	CF ₃	H	F	CH ₂ CH ₃
S	CH ₃	CF ₃	H	F	CH ₂ CH ₂ CH ₃
S	CH ₃	CF ₃	H	F	CH ₂ CH=CH ₂
O	CH ₃	CF ₃	F	F	CH ₂ C≡CH
O	CH ₃	CF ₃	Cl	F	CH ₂ C≡CH
O	CH ₃	CF ₃	Br	F	CH ₂ C≡CH
O	CH ₃	CF ₃	CH ₃	F	CH ₂ C≡CH
O	CH ₃	CF ₃	CH ₂ CH ₃	F	CH ₂ C≡CH
O	CH ₃	CF ₃	CH(CH ₃) ₂	F	CH ₂ C≡CH

表 3 - C - 9 (续)

X	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	J
O	CH ₃	CF ₃ CF ₂	H	F	H
O	CH ₃	CF ₃ CF ₂	H	F	CH ₂ C≡CH
S	CH ₃	CF ₃	H	H	H
S	CH ₃	CF ₃	H	H	CH ₂ C≡CH
O	CH ₃	HCF ₂	H	F	CH ₂ C≡CH
O	CH ₃	CCl ₃	H	F	CH ₂ C≡CH
O	CH ₃	CCl ₃	H	F	H
O	H	CCl ₃	H	F	CH ₂ C≡CH

表 3-C-10



X	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	J
S	CH ₃	CF ₃	H	F	H
S	CH ₃	CF ₃	H	F	CH ₂ C≡CH
S	CH ₃	CF ₃	H	F	CH ₂ CH ₃
S	CH ₃	CF ₃	H	F	CH ₂ CH ₂ CH ₃
O	CH ₃	CF ₃	F	F	CH ₂ C≡CH
O	CH ₃	CF ₃	Cl	F	CH ₂ C≡CH
O	CH ₃	CF ₃	Br	F	CH ₂ C≡CH
O	CH ₃	CF ₃	CH ₃	F	CH ₂ C≡CH
O	CH ₃	CF ₃ CF ₂	H	F	CH ₂ C≡CH
O	CH ₃	HCF ₂	H	F	CH ₂ C≡CH
O	CH ₃	CCl ₃	H	F	CH ₂ C≡CH

以下所示的是使用本发明化合物的配制例，但不用说符合本发明意图的配方并不仅仅限于这些。在以下对配制例的叙述中，除非另有说明所有的“份”均指重量。

配制例 1：可湿粉末

本发明化合物 A - 1	50 份
Zeeklite PFP (高岭型粘土， Zeeklite Industries Co Ltd 产)	43 份
Sorpol 5050 (阴离子型表面活性剂， Toho Chemical Co., Ltd. 产)	2 份
Runox 1000C (阴离子型表面活性剂， Toho Chemical, Ltd 产)	3 份
Carplex #80 (防冻剂，白炭， Shionogi Pharmaceutical Co Ltd 产)	2 份

将以上物质均匀混合并研磨，配成可湿粉末。

配制例 2：可乳化浓缩物

本发明化合物 A - 1	3 份
二甲苯	76 份
异佛尔酮	15 份
Sorpol 3005 X (非离子型表面活性剂与 阴离子型表面活性剂的混合物，Toho Chemical Co., Ltd. 产)	6 份

配制例 3：可流动物

本发明化合物 A - 1	35 份
Agризole S-711 (非离子型表面活性剂， Kao Corporation 产)	8 份

Runox 1000 C (阴离子型表面活性剂, Toho Chemical Co., Ltd. 产)	0.5 份
1% Rodopol 水 (增稠剂, Rhone-Poulenc 产)	20 份
乙二醇 (防冻剂)	8 份
水	28.5 份

将上述物质均匀混合, 配成可流动物。

配制例 4: 颗粒状可湿粉末 (可流动干物)

本发明化合物 A - 1	75 份
Isobam No. 1 (阴离子型表面活性剂, Kuraray Isoprene Chemical Co., Ltd. 产)	10 份
Vanilex N (阴离子型表面活性剂, San'yo Kokusaku Pulp K. K. 产)	5 份
Carplex #80 (白炭, Shionogi Pharmaceutical Co., Ltd. 产)	10 份

将以上物质均匀混合并粉碎成可流动干物。

配制例 5: 可湿粉末

本发明化合物 B - 1	50 份
Zeeklite PFP (高岭型粘土, Zeeklite Ind Co., Ltd. 产)	43 份
Sorpol 5050 (阴离子型表面活性剂, Toho Chemical Co., Ltd. 产)	2 份
Runox 1000 C (阴离子型表面活性剂, Toho Chemical Co., Ltd. 产)	3 份

Carplex 80 (防冻剂) (白炭,	
Shionogi pharm. Co., Ltd. 产)	2份

将以上物质均匀混合并研磨以形成可湿粉末。

配制例 6：可乳化浓缩物

本发明化合物 B-1	3 份
二甲苯	7 6 份
异佛尔酮	1 5 份
Sorpol 3005 X (非离子型表面活性剂与阴	
离子型表面活性剂的混合物, Toho Chemical	6 份
Co., Ltd. 产)	

将以上物质混合均匀以制备可乳化浓缩物。

配制例 7：可流动物

本发明化合物 B-1	3 5 份
Agризole S-711 (非离子型表面活性剂,	8 份
Kao Corp. 产)	
Runox 1000 C (阴离子型表面活性剂, Toho	
Chemical Co., Ltd. 产)	0. 5 份
1% Rodopol 水 (增稠剂, Rhone-poulenc产)	20 份
乙二醇 (防冻剂)	8 份
水	2 8.5 份

均匀混合以上成分以制成可流动物。

配制例 8：颗粒

本发明化合物 B-1	0. 1 份
膨润土	5 5.0 份

滑石 44.9份

将以上物质均匀混合并研磨，加少量水搅拌捏合，用挤出造粒机造粒，干燥后，形成颗粒。

配制例9：粒状可湿粉末（可流动干物）

本发明化合物B-1 75份

Isobam No. 1（阴离子型表面活性剂，
Kuraray Isoprene Chemical Co., Ltd产） 10份

Vanilex N（阴离子表面活性剂，San'yo
Kokusaku puco K. K. 产） 5份

Carplex # 80（白炭，Shionogi
Pharm. Co., Ltd. 产） 10份

将以上物质均匀混合并研磨，得到可流动的干物质。

配制例10：可湿粉末

本发明化合物C-1 50份

Zeeklite PFP（高岭类粘土，Zeeklite
Industries Co., Ltd 产） 43份

Sorpol 5050（阴离子型表面活性剂，Tono
Chemical Co., Ltd. 产） 2份

Runox 1000 C（阴离子型表面活性剂，
Toho Chemical Co., Ltd. 产） 3份

Carplex # 80（防冻剂）（白炭，
Shionogi pnarm. Co., Ltd 产） 2份

将以上物质混合均匀并研磨，形成可湿粉末。

配制例11：可乳化浓缩物

本发明化合物C-1 3份

二甲苯	7.6 份
异佛尔酮	1.5 份
Sorpol 3005 X (非离子型表面活性剂与阴离子型表面活性剂的混合物, Toho Chemical Co., Ltd. 产)	6 份

将以上物质均匀混合后制成可乳化浓缩物。

配制例 1.2: 可流动物

本发明化合物 C-1	3.5 份
Agrizole S-711 (非离子型表面活性剂, Kao Corp 产)	8 份
Runox 1000 C (阴离子型表面活性剂, Toho Chemical Co., Ltd. 产)	0.5 份
1% Rodopol 水 (增稠剂, Rohone-poulenc 产)	20 份
乙二醇 (防冻剂)	8 份
水	28.5 份

将以上物质均匀混合, 制成可流动物。

配制例 1.3: 颗粒

本发明化合物 C-1	0.1 份
膨润土	55.0 份
滑石	44.9 份

将以上物质均匀混合并研磨, 然后加少量水搅拌捏合, 用挤出造粒机造粒并干燥, 形成颗粒。

配制例 1.4: 粒状可湿粉末 (干燥的可流动物)

本发明化合物 C-1	7.5 份
------------	-------

Isobam No. 1 (阴离子型表面活性剂,	10份
Kuraray Isoprene Chemical Co., Ltd产)	
Vanilex N (阴离子型表面活性剂,	5份
Sanyo Kokusaku Pulp K. K. 产)	
Carpalex #80 (白炭, Shionogi Pharm	10份
Co., Ltd. 产)	

将以上物质均匀混合并粉碎, 形成可流动干物质。

配制例 15: 可湿粉末

本发明化合物 C-7	50份
Zeeklite PFP (高岭型粘土,	43份
Zeeklite Industries Co., Ltd. 产)	
Sorpol 5050 (阴离子型表面活性剂,	2份
Toho Chemical Co., Ltd. 产)	
Runox 1000C (阴离子型表面活性剂,	3份
Toho Chemical Co., Ltd. 产)	
Carpalex #80 (防冻剂) (白炭,	2份
Shionogi Pharm. Co., Ltd. 产)	

将以上物质均匀混合并研磨, 形成可湿粉末。

配制例 16: 可乳化浓缩物

本发明化合物 C-7	3份
二甲苯	76份
异佛尔酮	15份

Sorpol 3005X (非离子型表面活性剂与 阴离子型表面活性剂的混合物, Toho Chemical Co., Ltd. 产)	6 份
--	-----

将以上物质均匀混合以制备可乳化浓缩物。

配制例 17: 可流动物

本发明化合物 C-7	3.5 份
Agrizole S-711 (非离子型表面活性剂, Kao Corp 产)	8 份
Runox 1000C (阴离子型表面活性剂, Toho Chemical Co., Ltd. 产)	0.5 份
1% Rodopol 水 (增稠剂, Rohone- Poulenc 产)	2.0 份
1, 2-亚乙基二醇 (防冻剂)	8 份
水	28.5 份

将以上物质均匀混合以制备可流动物。

配制例 18: 颗粒

本发明化合物 C-7	0.1 份
膨润土	55.0 份
滑石	44.9 份

将以上物质均匀混合并研磨后, 通过加少量水搅拌捏和, 用挤出造粒机造粒, 干燥后形成颗粒。

配制例 19：粒状可湿粉末（干燥的可流动物）

本发明化合物 C-7	7.5 份
Isobam No. 1（阴离子型表面活性剂， Kuraray Isoprene Chemical Co., Ltd 产）	10 份
Vanilex N（阴离子型表面活性剂，Sanyo Kokusaku Pulp K. K. 产）	5 份
Carplex #80（白炭，Shionogi Pharm Co., Ltd 产）	10 份

将以上物质均匀混合并研磨，形成可流动干物质。

配制例 20：可湿粉末

本发明化合物 C-11	50 份
Zeeklite PFP（高岭型粘土， Zeeklite Industries Co., Ltd. 产）	43 份
Sorpol 5050（阴离子型表面活性剂， Toho Chemical Co., Ltd. 产）	2 份
Runox 1000C（阴离子型表面活性剂， Toho Chemical Co., Ltd. 产）	3 份
Carplex #80（防冻剂）（白炭， Shionogi Pharm. Co., Ltd. 产）	2 份

将以上物质均匀混合并研磨，形成可湿粉末。

配制例 21：可乳化浓缩物

本发明化合物 C-11	3 份
-------------	-----

二甲苯	7 6 份
异佛尔酮	1 5 份
Sorpol 3005X (非离子型表面活性剂与 阴离子型表面活性剂的混合物, Toho Chemical Co., Ltd. 产)	6 份

将以上物质均匀混合以制备可乳化浓缩物。

配制例 2 2 : 可流动物

本发明化合物 C-1 1	3 5 份
Agризole S-7 1 1 (非离子型表面活 性剂, Kao Corp. 产)	8 份
Runox 1000C (阴离子型表面活性剂, Toho Chemical Co., Ltd. 产)	0. 5 份
1% Rodopol 水 (增稠剂, Rhone- Poulenc. 产)	2 0 份
1, 2-亚乙基二醇 (防冻剂)	8 份
水	2 8. 5 份

以上物质经均匀混合, 制成可流动物

配制例 2 3 : 颗粒

本发明化合物 C-1 1	0. 1 份
膨润土	5 5. 0 份
滑石	4 4. 9 份

将以上物质均匀混合并研磨，然后用少量水搅拌捏和，用挤压造粒机造粒，干燥后形成颗粒。

配制例 24：粒状可湿粉末（干燥的可流动物）

本发明化合物 C-11	75 份
Isobam No. 1（阴离子型表面活性剂， Kuraray Isoprene Chemical Co, Ltd. 产）	10 份
Vanilex N（阴离子型表面活性剂，Sanyo Kokusaku Pulp K. K. 产）	5 份
Carplex #80（白炭，Shionogi Pharm. Co., Ltd. 产）	10 份

将以上物质均匀混合并研磨，形成可流动干物质。

在以上配方的实际应用中，通常是用水将可湿粉末、可乳化浓缩物、可流动物以及粒状可湿粉末稀释 50—1000 倍后再应用，从而使活性成分以每公顷 0.0001—10 kg 的量提供。

从以下所述的试验例的结果可以清楚地意识到本发明化合物作为除草剂活性成分的应用。

试验例 1：通过土壤处理测定除草效果

将无菌洪积层土置于 15 Cm×22 Cm×6 Cm 塑料盒中，然后将稗子（*Echinochloa crus-galli*）、马唐（*Digitaria adscendens*）、一年生苔草（*Cyperus microiria*）、黑龙葵（*Solanum nigrum*）、牛膝菊（*Galinsoga ciliate*）、假蒺藜（*Rorippa indica*）、水稻（*Oryza sativa*）、玉

米 (*Zea mays*)、小麦 (*Triticum aestivum*)、大豆 (*Glycine max*) 及棉花 (*Cossipium herbaceum*) 的种子混合播种于该盒中，并盖上 1Cm 厚的土。然后用一小型喷雾器将试验液体除草剂均匀地喷到土壤表面，以便活性成分能够按预定比例施用。每一试验液体除草剂是通过用水稀释按以上所述的相关配制例制备的配方而制备的。施用 (喷雾) 试验液体除草剂三周后，测定它们对所说各种杂草和农作物的除草作用，并按以下标准等级进行评估。所得结果示于表 4 - A - 1，4 - A - 2，4 - B，4 - C - 1 和 4 - C - 2。

标准等级

- 5：生长控制率大于 90% (杂草几乎完全枯萎)。
- 4：生长控制率为 70 - 90%。
- 3：生长控制率为 40 - 70%。
- 2：生长控制率为 20 - 40%。
- 1：生长控制率小于 5% (几乎无效)。

生长控制率是在测定了处理区和未处理地上部分植物重量后通过以下公式确定的：

$$\text{生长控制率} = \left(1 - \frac{\text{处理区地上植物部分的重量}}{\text{未处理区地上植物部分的重量}} \right) \times 100$$

试验例 2：通过叶处理测定除草效果

将稗子 (*Echinochloa crus-galli*)、马唐 (*Digitaria adscendens*)、一年生苔草 (*Cyperus microiria*)、黑龙葵 (*Solanum nigrum*)、牛膝菊 (*Galinsoga ciliate*)、假樟菜 (*Rorippa indica*)、水稻 (*Oryza sativa*)、玉米 (*Zaamays*)、小麦 (*Triticum aestivum*)、大豆 (*Glycine max*)、棉花 (*Cossipium herbaceum*) 以及糖用甜菜 (*Beta vulgaris*) 的种子播种到装有无菌洪积层土的 $15\text{ cm} \times 22\text{ cm} \times 6\text{ cm}$ 塑料盒中，然后盖上约 1 cm 的土。当植物生长至 2—3 叶期时，将试验液体除草剂均匀喷洒到植物叶片上以使活性成分按预定比例施用。

每一试验液体除草剂都是通过用水稀释按上述配制例制备的配方而制备的，并且是用小型喷雾器将它们喷到杂草的整个族叶上。喷洒试验液体除草剂 4 周后，测定它们对所选种类的杂草以及有用植物的除草效果，并按试验例 1 所用标准等级进行评估。所得结果示于表 5-A-1, 5-A-2, 5-B, 5-C-1 和 5-C-2。

试验例 3：在灌溉地中测定除草效果

将洪积层土放到 $1/5000$ 公亩的 Wagner 盆中，然后向其中倒水以捏合土壤并形成一个土壤上有 2 cm 厚水的小型稻田模型。然后将稗 (*Echinochloa crus-galli*)、ducksalad (*Monochoria vaginalis*)、齿萼 (*Rotala indica*) 以及

灯心草 (*Scirpus juncoides*) 的种子混合播种到该罐中, 将多年生沼泽地苔草 (*Cyperus serotinus*) 以及箭头蕨 (*Sagittaria pygmaea*) 的试管也置于土床层中, 然后移植 2.5 叶稻苗。将该盆放到 25 - 30 °C 的温室中任其正常生长。播种后第 2 天用刻度滴管将经稀释的被测试除草液体滴入各盘水表面, 使施用的化合物为预定数量。施用液体除草剂三周后测定它们对水稻和所说的除草效果, 并按试验例 1 所用的标准等级进行评定, 所得结果示于表 6。

表中划线符号分别代表:

N: 稗草 (*Echinochloa crus-galli*)

M: 马唐 (*Digitaria adscendens*)

K: 一年生苔草 (*Cyperus microiria*)

H: 黑龙葵 (*Solanum nigrum*)

D: 牛膝菊 (*Galinsoga ciliate*)

I: 假蒺菜 (*Rorippa indica*)

R: 水稻 (*Oryza sativa*)

T: 玉米 (*Zea mays*)

W: 小麦 (*Triticum aestivum*)

S: 大豆 (*Glycine max*)

C: 棉花 (*Cossipium herbaceum*)

B: 糖用甜菜 (*Beta vulgaris*)

具有以下结构式的溴甲⁴丁尿嘧啶被用作对照化合物,

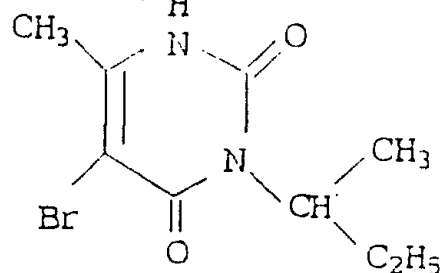


表 4 - A - - 1

化合物号	施用量 (g/ha)	<u>N</u>	<u>M</u>	<u>K</u>	<u>H</u>	<u>D</u>	<u>I</u>
A - 1	1 0	5	5	5	5	5	5
	2 0	5	5	5	5	5	5
	4 0	5	5	5	5	5	5

表 4 A-2

化合物号	施用量											
	(g/ha)	<u>N</u>	<u>M</u>	<u>K</u>	<u>H</u>	<u>D</u>	<u>I</u>	<u>R</u>	<u>T</u>	<u>W</u>	<u>S</u>	<u>C</u>
A-3	10	5	5	5	5	5	5	2	1	1	0	1
	20	5	5	5	5	5	5	4	3	2	0	2
	40	5	5	5	5	5	5	5	5	5	0	4
A-4	10	5	5	5	5	5	5	0	1	0	2	2
	20	5	5	5	5	5	5	1	2	1	3	3
	40	5	5	5	5	5	5	3	4	3	4	4
A-6	10	5	5	5	5	5	5	3	3	1	1	1
	20	5	5	5	5	5	5	4	4	2	2	2
	40	5	5	5	5	5	5	5	5	4	3	4
A-8	40	3	5	5	5	5	5	1	0	0	0	0
	80	4	5	5	5	5	5	2	1	1	0	0
	160	5	5	5	5	5	5	3	3	2	1	2

表4 -- A - 2 (续)

化合物号	施用量 (g/ha)												
		<u>N</u>	<u>M</u>	<u>K</u>	<u>H</u>	<u>D</u>	<u>I</u>	<u>R</u>	<u>T</u>	<u>W</u>	<u>S</u>	<u>C</u>	
A-20	10	5	5	5	5	5	5	2	3	2	1	2	
	20	5	5	5	5	5	5	3	4	3	2	3	
	40	5	5	5	5	5	5	4	5	4	3	4	
A-22	10	5	5	5	5	5	5	3	5	5	0	3	
	20	5	5	5	5	5	5	4	5	5	1	4	
	40	5	5	5	5	5	5	5	5	5	3	5	
A-24	10	5	2	5	5	5	5	1	0	0	0	0	
	20	5	4	5	5	5	5	2	1	0	1	1	
	40	5	5	5	5	5	5	4	4	2	3	4	
A-26	10	5	5	5	5	5	5	5	4	4	4	4	
	20	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	
	40	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	
A-31	10	5	4	5	5	5	5	5	3	3	2	4	
	20	5	5	5	5	5	5	5	4	4	3	5	
	40	5	5	5	5	5	5	5	5	5	4	5	

表 4 - A - 2 (续)

化合物号	施用量											
	(g/ha)	<u>N</u>	<u>M</u>	<u>K</u>	<u>H</u>	<u>D</u>	<u>I</u>	<u>R</u>	<u>T</u>	<u>W</u>	<u>S</u>	<u>C</u>
A-32	10	5	5	3	5	5	5	2	4	1	0	2
	20	5	5	4	5	5	5	3	5	2	1	4
	40	5	5	5	5	5	5	4	5	5	2	5
A-34	10	1	1	5	2	5	5	0	0	0	0	0
	20	3	3	5	4	5	5	1	0	0	0	0
	40	5	5	5	5	5	5	3	1	1	1	1

表 4-B

化合物号	施用量													
	(g/ha)	<u>N</u>	<u>M</u>	<u>K</u>	<u>H</u>	<u>D</u>	<u>I</u>	<u>R</u>	<u>T</u>	<u>W</u>	<u>S</u>	<u>C</u>	<u>B</u>	
B - 1	1 0	5	5	5	5	5	5	0	0	0	0	2	4	
	2 0	5	5	5	5	5	5	1	1	0	0	3	5	
	4 0	5	5	5	5	5	5	2	2	1	1	4	5	

表 4-C-1

化合物号	施用量 (g/ha)	<u>N</u>	<u>M</u>	<u>K</u>	<u>H</u>	<u>D</u>	<u>I</u>
C - 1	1 0	4	4	5	5	5	5
	2 0	5	5	5	5	5	5
	4 0	5	5	5	5	5	5
Comparative compound	4 0	2	0	2	4	5	4

表 4-C-2

化合物号	施用量 (g/ha)	<u>N</u>	<u>M</u>	<u>K</u>	<u>H</u>	<u>D</u>	<u>I</u>	<u>R</u>	<u>T</u>	<u>W</u>	<u>S</u>	<u>C</u>
C - 3	1 0	5	5	5	5	5	5	0	1	0	0	0
	2 0	5	5	5	5	5	5	0	2	1	0	0
	4 0	5	5	5	5	5	5	1	3	2	0	0

表 4 - C - 2 (续)

化合物号	施用量											
	(g/ha)	<u>N</u>	<u>M</u>	<u>K</u>	<u>H</u>	<u>D</u>	<u>I</u>	<u>R</u>	<u>T</u>	<u>W</u>	<u>S</u>	<u>C</u>
C - 4	10	0	0	2	4	5	5	0	0	0	0	0
	20	1	1	3	5	5	5	0	0	0	0	0
	40	2	2	4	5	5	5	0	0	0	0	1
C - 5	10	0	0	2	3	5	5	0	0	0	0	0
	20	1	1	3	4	5	5	0	0	0	0	0
	40	2	2	4	5	5	5	0	0	0	0	1
C - 6	40	2	1	4	4	5	5	0	0	0	1	1
C - 7	10	5	5	5	5	5	5	4	0	0	0	1
	20	5	5	5	5	5	5	5	1	0	0	2
	40	5	5	5	5	5	5	5	2	1	0	5
C - 8	10	0	0	5	5	5	5	0	0	0	2	4
	20	2	2	5	5	5	5	1	1	0	3	5
	40	4	4	5	5	5	5	2	3	1	3	5
C - 9	10	2	3	5	5	5	5	0	0	0	0	3
	20	3	4	5	5	5	5	1	1	0	1	4
	40	4	5	5	5	5	5	2	2	1	2	5
C - 10	10	2	4	5	5	5	5	0	0	0	0	3
	20	4	5	5	5	5	5	2	1	0	1	3
	40	5	5	5	5	5	5	4	2	2	2	4

表 4 - 0 - 2 (续)

化合物号	施用量 (g/ha)											
		<u>N</u>	<u>M</u>	<u>K</u>	<u>H</u>	<u>D</u>	<u>I</u>	<u>R</u>	<u>T</u>	<u>W</u>	<u>S</u>	<u>C</u>
C-11	10	5	3	5	5	5	5	0	0	0	0	2
	20	5	4	5	5	5	5	1	0	0	0	4
	40	5	5	5	5	5	5	3	0	0	0	5

表4 -- C - 2 (续)

化合物号	施用量											
	(g/ha)	N	M	K	H	D	I	R	T	W	S	C
C-13	10	4	4	5	5	5	5	1	1	0	0	4
	20	5	5	5	5	5	5	2	2	0	0	5
	40	5	5	5	5	5	5	4	3	1	0	5
C-15	10	3	2	5	5	5	5	1	0	0	0	4
	20	4	4	5	5	5	5	2	1	0	0	5
	40	5	5	5	5	5	5	4	2	1	0	5
C-16	10	3	4	5	5	5	5	0	0	0	0	2
	20	4	5	5	5	5	5	1	1	0	0	3
	40	5	5	5	5	5	5	2	2	1	0	4
C-20	20	5	5	5	5	5	5	4	0	0	0	1
	40	5	5	5	5	5	5	5	1	0	0	2
	80	5	5	5	5	5	5	5	2	1	0	5
C-21	20	5	3	5	5	5	5	0	0	0	0	2
	40	5	4	5	5	5	5	1	0	0	0	4
	80	5	5	5	5	5	5	3	0	0	0	5
C-22	10	4	4	5	5	5	5	1	1	0	0	3
	20	5	5	5	5	5	5	2	2	0	0	4
	40	5	5	5	5	5	5	4	3	1	0	5
C-23	10	4	4	5	5	5	5	0	0	0	0	3
	20	5	5	5	5	5	5	2	1	0	0	4
	40	5	5	5	5	5	5	3	3	1	0	5

表 5-A-1

化合物号	施用量 (g/ha)	<u>N</u>	<u>M</u>	<u>K</u>	<u>H</u>	<u>D</u>	<u>I</u>
A - 1	1 0	5	5	5	5	5	5
	2 0	5	5	5	5	5	5
	4 0	5	5	5	5	5	5

表 5-A-2

化合物号	施用量												
	(g/ha)	<u>N</u>	<u>M</u>	<u>K</u>	<u>H</u>	<u>D</u>	<u>I</u>	<u>R</u>	<u>T</u>	<u>W</u>	<u>S</u>	<u>C</u>	<u>B</u>
A-3	10	5	3	5	5	5	5	4	4	2	4	4	5
	20	5	4	5	5	5	5	5	5	4	5	5	5
	40	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
A-4	10	3	4	5	5	5	5	4	2	2	5	5	5
	20	4	5	5	5	5	5	5	3	3	5	5	5
	40	5	5	5	5	5	5	5	4	4	5	5	5
A-6	10	2	2	5	5	5	5	3	2	2	4	5	5
	20	4	4	5	5	5	5	4	3	2	5	5	5
	40	5	5	5	5	5	5	5	4	3	5	5	5
A-8	40	0	2	5	5	5	5	0	1	0	2	1	1
	80	1	2	5	5	5	5	0	2	1	2	2	2
	160	2	3	5	5	5	5	1	3	2	3	3	2

表 5 - A 2 (续)

化合物号	施用量 (g/ha)												
	<u>N</u>	<u>M</u>	<u>K</u>	<u>H</u>	<u>D</u>	<u>I</u>	<u>R</u>	<u>T</u>	<u>W</u>	<u>S</u>	<u>C</u>	<u>B</u>	
A-10	4 0	2	1	5	5	3	2	1	1	2	2	5	2
	8 0	3	2	5	5	4	4	2	2	3	3	5	3
	1 6 0	5	3	5	5	5	5	4	4	4	4	5	3
A-12	1 0	4	3	5	5	5	5	2	3	2	3	5	4
	2 0	5	4	5	5	5	5	3	4	3	4	5	5
	4 0	5	5	5	5	5	5	4	5	4	5	5	5
A-14	1 0	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
	2 0	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
	4 0	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
A-16	1 0	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
	2 0	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
	4 0	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5

表 5 — A 2 (续)

化合物号	施用量 (g/ha)												
		<u>N</u>	<u>M</u>	<u>K</u>	<u>H</u>	<u>D</u>	<u>I</u>	<u>R</u>	<u>T</u>	<u>W</u>	<u>S</u>	<u>C</u>	<u>B</u>
A-20	10	3	2	3	5	5	4	4	3	3	3	5	3
	20	4	3	4	5	5	5	5	4	4	4	5	4
	40	5	4	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
A-22	10	3	3	3	5	5	4	5	4	5	5	5	3
	20	4	4	4	5	5	5	5	5	5	5	5	4
	40	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
A-24	10	1	1	2	5	5	5	3	2	0	3	5	4
	20	2	2	4	5	5	5	4	3	1	4	5	5
	40	4	5	5	5	5	5	4	4	2	5	5	5
A-26	10	5	5	5	5	5	5	4	4	4	5	5	5
	20	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
	40	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
A-31	10	5	5	5	5	5	5	4	4	4	4	5	5
	20	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
	40	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5

表 5 -- A -- 2 (续)

化合物号	施用量												
	(g/ha)	<u>N</u>	<u>M</u>	<u>K</u>	<u>H</u>	<u>D</u>	<u>I</u>	<u>R</u>	<u>T</u>	<u>W</u>	<u>S</u>	<u>C</u>	<u>B</u>
A-32	10	3	3	5	5	5	5	4	4	5	5	5	4
	20	4	4	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
	40	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
A-34	10	0	0	1	5	4	3	1	2	1	4	4	3
	20	1	1	3	5	5	4	1	2	1	5	5	4
	40	2	2	5	5	5	5	2	3	2	5	5	4

衣 5-B

化合物号	施用量												
	(g/ha)	<u>N</u>	<u>M</u>	<u>K</u>	<u>H</u>	<u>D</u>	<u>I</u>	<u>R</u>	<u>T</u>	<u>W</u>	<u>S</u>	<u>C</u>	<u>B</u>
B-1	10	5	5	5	5	5	5	2	1	0	1	5	5
	20	5	5	5	5	5	5	3	2	1	2	5	5
	40	5	5	5	5	5	5	4	3	2	3	5	5

表 5-C-1

化合物号	施用量 (g/ha)	<u>N</u>	<u>M</u>	<u>K</u>	<u>H</u>	<u>D</u>	<u>I</u>
C - 1	1 0	4	5	5	5	5	5
	2 0	5	5	5	5	5	5
	4 0	5	5	5	5	5	5
Comparative compound	4 0	0	0	1	4	2	3

表 5-C-2

化合物号	施用量 (g/ha)	<u>N</u>	<u>M</u>	<u>K</u>	<u>H</u>	<u>D</u>	<u>I</u>	<u>R</u>	<u>T</u>	<u>W</u>	<u>S</u>	<u>C</u>	<u>B</u>
C - 3	1 0	2	1	5	5	5	5	0	2	0	5	5	5
	2 0	4	2	5	5	5	5	1	3	1	5	5	5
	4 0	5	3	5	5	5	5	3	3	2	5	5	5

表 5 - C - 2 (续)

化合物号	施用量												
	(g/ha)	<u>N</u>	<u>M</u>	<u>K</u>	<u>H</u>	<u>D</u>	<u>I</u>	<u>R</u>	<u>T</u>	<u>W</u>	<u>S</u>	<u>C</u>	<u>B</u>
C-4	10	0	0	0	4	4	4	0	0	0	0	2	2
	20	0	0	1	5	5	5	0	0	0	0	3	3
	40	1	1	2	5	5	5	1	0	0	1	4	4
C-5	10	0	0	0	4	4	4	0	0	0	0	3	3
	20	0	0	1	5	5	5	0	0	0	0	4	4
	40	1	1	2	5	5	5	1	1	0	1	5	5
C-6	40	2	1	1	5	5	5	2	1	1	4	5	5
C-7	10	1	1	5	5	5	5	2	0	0	2	5	5
	20	2	2	5	5	5	5	3	1	0	3	5	5
	40	4	3	5	5	5	5	4	3	1	3	5	5

表 5 - C - 2 (续)

化合物号	施用量												
	(g/ha)	<u>N</u>	<u>M</u>	<u>K</u>	<u>H</u>	<u>D</u>	<u>I</u>	<u>R</u>	<u>T</u>	<u>W</u>	<u>S</u>	<u>C</u>	<u>B</u>
C-8	10	1	1	2	5	5	5	1	1	0	0	4	5
	20	2	2	4	5	5	5	3	3	1	1	5	5
	40	2	5	5	5	5	5	4	4	3	2	5	5
C-9	10	1	0	3	5	5	5	0	0	0	2	3	4
	20	2	1	4	5	5	5	0	1	0	3	4	5
	40	3	2	5	5	5	5	2	3	2	4	5	5
C-10	10	1	0	2	5	5	5	0	0	0	2	4	4
	20	2	1	4	5	5	5	1	1	0	3	5	5
	40	3	2	5	5	5	5	2	2	1	3	5	5
C-11	10	1	1	4	5	5	5	2	0	0	1	5	4
	20	2	2	5	5	5	5	2	0	0	2	5	5
	40	3	2	5	5	5	5	3	1	1	3	5	5

表 6

化合物号	施用量 (g/ha)	稗子	灯心草	鸭色拉 (Duck salad)	齿 萼	多年生沼泽 地苔草	箭头薹	移植水稻
A-1	2	4	4	5	5	5	5	0
	4	5	5	5	5	5	5	0
	8	5	5	5	5	5	5	0
C-3	5	5	4	5	5	2	4	0
	10	5	5	5	5	3	5	0
	20	5	5	5	5	4	5	0