



(12)发明专利申请

(10)申请公布号 CN 108137517 A

(43)申请公布日 2018.06.08

(21)申请号 201680058084.1

R·比奥德格尼斯 M·波尔利特

(22)申请日 2016.09.29

(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 11038

(30)优先权数据

代理人 张敏

EP15188234.7 2015.10.02 EP

EP15201433.8 2015.12.18 EP

EP15202189.5 2015.12.22 EP

(51)Int.Cl.

C07D 271/06(2006.01)

A01N 43/82(2006.01)

C07D 413/04(2006.01)

(85)PCT国际申请进入国家阶段日

2018.03.30

(86)PCT国际申请的申请数据

PCT/EP2016/073290 2016.09.29

(87)PCT国际申请的公布数据

W02017/055469 EN 2017.04.06

(71)申请人 先正达参股股份有限公司

地址 瑞士巴塞尔

(72)发明人 D·斯狄尔利 T·J·霍夫曼

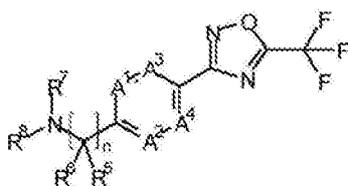
权利要求书3页 说明书100页

(54)发明名称

杀微生物的噁二唑衍生物

(57)摘要

具有化学式(I)的化合物

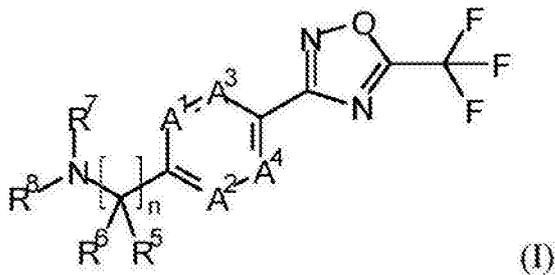


其中取代基是如

(I)

在权利要求1中所定义的,所述化合物作为杀有害生物剂,尤其作为杀真菌剂是有用的。

1. 一种具有化学式(I)的化合物:



其中

n是1或2;

A¹表示N或CR¹,其中R¹是氢、卤素、甲基、乙基、三氟甲基、甲氧基、乙氧基或二氟甲氧基;

A²表示N或CR²,其中R²是氢、卤素、甲基、乙基、三氟甲基、甲氧基、乙氧基或二氟甲氧基;

A³表示N或CR³,其中R³是氢或卤素;

A⁴表示N或CR⁴,其中R⁴是氢或卤素;并且

其中A¹至A⁴中不多于两个是N;

R⁵和R⁶独立地选自氢、C₁₋₄烷基、卤素、氰基、三氟甲基和二氟甲基,或者R⁵和R⁶与它们共有的碳原子一起形成环丙基;

R⁷是氢;

R⁸表示-C(O)R⁹,其中R⁹是氢、C₁₋₆烷基、C₂₋₆烯基、C₂₋₆炔基、氰基C₁₋₆烷基、C₁₋₆卤代烷基、C₂₋₆卤代烯基、羟基C₁₋₆烷基、羟基C₁₋₆卤代烷基、C₁₋₄烷氧基C₁₋₆烷基、C₁₋₄卤代烷氧基C₁₋₆烷基、C₁₋₄烷氧基C₁₋₄烷氧基C₁₋₆烷基、C₂₋₆炔氧基C₁₋₆烷基、氨基C₁₋₆烷基、N-C₁₋₄烷基氨基C₁₋₆烷基、N,N-二C₁₋₄烷基氨基C₁₋₆烷基、C₁₋₆烷基羰基C₁₋₆烷基、C₁₋₆烷基羰基C₂₋₆烯基、C₁₋₆烷氧基羰基C₁₋₆烷基、C₁₋₆烷基羰基氧基C₁₋₆烷基、N-C₁₋₄烷基羰基氨基C₁₋₆烷基、N-C₁₋₄烷基氨基羰基C₁₋₆烷基、N,N-二C₁₋₄烷基氨基羰基C₁₋₆烷基、C₁₋₆烷基硫烷基C₁₋₆烷基、C₁₋₆烷基磺酰基C₁₋₆烷基或C₁₋₆烷基磺酰基氨基C₁₋₆烷基;或者

R⁸表示-C(O)OR¹⁰,其中R¹⁰是氢、C₁₋₈烷基、C₃₋₆烯基、C₃₋₆炔基、氰基C₁₋₆烷基、C₁₋₆卤代烷基、C₃₋₆卤代烯基、羟基C₁₋₆烷基、C₁₋₄烷氧基C₁₋₆烷基、C₁₋₄卤代烷氧基C₁₋₆烷基、C₁₋₄烷氧基C₁₋₄烷氧基C₁₋₆烷基、C₂₋₆炔氧基C₁₋₆烷基、氨基C₁₋₆烷基、N-C₁₋₄烷基氨基C₁₋₆烷基、N,N-二C₁₋₄烷基氨基C₁₋₆烷基、C₁₋₆烷基羰基C₁₋₆烷基、C₁₋₆烷基羰基C₂₋₆烯基、C₁₋₆烷氧基羰基C₁₋₆烷基、C₁₋₆烷基羰基氧基C₁₋₆烷基、N-C₁₋₄烷基氨基羰基C₁₋₆烷基、N,N-二C₁₋₄烷基氨基羰基C₁₋₆烷基、C₁₋₄烷基硫烷基C₁₋₆烷基、C₁₋₆烷基磺酰基C₁₋₆烷基或C₁₋₆烷基磺酰基氨基C₁₋₆烷基;或者

R⁸表示-C(O)NR¹¹R¹²,其中R¹¹是氢、氰基、C₁₋₇烷基、C₂₋₆烯基、C₂₋₆炔基、氰基C₁₋₈烷基、C₁₋₆卤代烷基、C₂₋₆卤代烯基、羟基C₁₋₆烷基、C₁₋₄烷氧基C₁₋₆烷基、C₁₋₄卤代烷氧基C₁₋₆烷基、C₁₋₄烷氧基C₁₋₄烷氧基C₁₋₆烷基、C₂₋₆炔氧基C₁₋₆烷基、氨基C₁₋₆烷基、N-C₁₋₄烷基氨基C₁₋₆烷基、N,N-二C₁₋₄烷基氨基C₁₋₆烷基、C₁₋₆烷基羰基C₁₋₆烷基、C₁₋₆烷基羰基C₂₋₆烯基、C₁₋₆烷氧基羰基C₁₋₆烷基、C₁₋₆烷基羰基氧基C₁₋₆烷基、N-C₁₋₄烷基氨基羰基C₁₋₆烷基、N,N-二C₁₋₄烷基氨基羰基C₁₋₆烷基、C₁₋₄烷基硫烷基C₁₋₆烷基、C₁₋₆烷基磺酰基C₁₋₆烷基或C₁₋₆烷基磺酰基氨基C₁₋₆烷基;

R¹²是氢、C₁₋₄烷基、C₁₋₄烷氧基、C₁₋₄烷氧基C₁₋₆烷基、C₃₋₆烯氧基或C₃₋₆炔氧基;或者

R¹¹和R¹²与它们所共有的氮原子一起形成任选地含有包括O、S或NR¹³的杂原子部分的4元环、5元环或6元环;

R^{13} 是氢、甲基、甲氧基、甲酰基或酰基；或者其盐或N-氧化物；

其条件是所述具有化学式(I)的化合物不是：

叔丁基-N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]氨基甲酸酯。

2. 根据权利要求1所述的化合物，其中：

A^1 是N或 CR^1 ，其中 R^1 表示氢、卤素、甲基或三氟甲基；

A^2 是N或C-H；

A^3 是N或 CR^3 ，其中 R^3 表示氢或卤素；并且

A^4 是C-H。

3. 根据权利要求1或权利要求书2所述的化合物，其中n是1，并且 R^5 和 R^6 独立地选自氢和甲基。

4. 根据权利要求1或权利要求书2所述的化合物，其中n是2，并且 R^5 和 R^6 独立地选自氢和氟。

5. 根据权利要求1至4中任一项所述的化合物，其中：

R^8 是 $-C(O)R^9$ ，其中 R^9 是氢、 C_{1-6} 烷基、 C_{2-6} 烯基、 C_{2-6} 炔基、氰基 C_{1-6} 烷基、 C_{1-6} 卤代烷基、 C_{2-6} 卤代烯基、羟基 C_{1-6} 烷基、羟基 C_{1-6} 卤代烷基、 C_{1-4} 烷氧基 C_{1-6} 烷基、 C_{1-4} 卤代烷氧基 C_{1-6} 烷基、 C_{1-4} 烷氧基 C_{1-4} 烷氧基 C_{1-6} 烷基、 C_{2-4} 炔氧基 C_{1-6} 烷基、氨基 C_{1-6} 烷基、N- C_{1-4} 烷基氨基 C_{1-6} 烷基、 C_{1-2} 烷基羰基 C_{1-4} 烷基或N- C_{1-2} 烷基羰基氨基 C_{1-2} 烷基；或者

R^8 是 $-C(O)OR^{10}$ ，其中 R^{10} 是氢、 C_{1-8} 烷基、 C_{3-6} 烯基、 C_{3-6} 炔基、氰基 C_{1-6} 烷基、 C_{1-6} 卤代烷基、 C_{3-6} 卤代烯基、羟基 C_{1-6} 烷基、 C_{1-4} 烷氧基 C_{1-6} 烷基、 C_{1-4} 卤代烷氧基 C_{1-6} 烷基、 C_{1-4} 烷氧基 C_{1-4} 烷氧基 C_{1-6} 烷基或氨基 C_{1-6} 烷基；或者

R^8 表示 $-C(O)NR^{11}R^{12}$ ，其中 R^{11} 是氢、氰基、 C_{1-6} 烷基、 C_{2-6} 烯基、 C_{2-6} 炔基、氰基 C_{1-8} 烷基、 C_{1-6} 卤代烷基、 C_{2-6} 卤代烯基、羟基 C_{1-6} 烷基、 C_{1-4} 烷氧基 C_{1-6} 烷基、氨基 C_{1-6} 烷基或 C_{1-4} 烷基硫烷基 C_{1-6} 烷基；并且

R^{12} 是氢、 C_{1-4} 烷基或 C_{1-4} 烷氧基。

6. 根据权利要求1至5中任一项所述的化合物，其中 R^9 是 C_{1-6} 烷基、 C_{3-6} 烯基、 C_{3-6} 炔基、氰基 C_{1-4} 烷基、 C_{1-6} 卤代烷基、羟基 C_{1-4} 烷基、羟基 C_{1-4} 卤代烷基、 C_{1-2} 烷氧基 C_{1-4} 烷基、 C_{1-2} 卤代烷氧基 C_{1-4} 烷基、 C_{1-2} 烷基羰基 C_{1-4} 烷基或N- C_{1-2} 烷基羰基氨基 C_{1-2} 烷基。

7. 根据权利要求1至6中任一项所述的化合物，其中 R^9 是 C_{1-6} 烷基、 C_{3-4} 烯基、 C_{3-6} 炔基、 C_{1-4} 氟烷基、 C_{1-4} 氯烷基、 C_{1-2} 烷氧基 C_{1-4} 烷基或 C_{1-2} 氟烷氧基 C_{1-4} 烷基。

8. 根据权利要求1至5中任一项所述的化合物，其中 R^{10} 是 C_{1-8} 烷基、 C_{3-4} 烯基、 C_{3-4} 炔基、 C_{1-4} 卤代烷基或 C_{1-2} 烷氧基 C_{1-4} 烷基。

9. 根据权利要求1至5中任一项所述的化合物，其中 R^{11} 是氢、氰基、 C_{1-6} 烷基、 C_{2-4} 烯基、 C_{2-4} 炔基、氰基 C_{1-4} 烷基、 C_{1-4} 卤代烷基、 C_{2-4} 卤代烯基、羟基 C_{1-4} 烷基、 C_{1-4} 烷氧基 C_{1-4} 烷基、氨基 C_{1-4} 烷基或 C_{1-4} 烷基硫烷基 C_{1-4} 烷基。

10. 根据权利要求1至5或9中任一项所述的化合物，其中 R^{11} 是氢、 C_{1-6} 烷基或 C_{1-4} 烷氧基 C_{1-6} 烷基。

11. 根据权利要求1至5、9或10中任一项所述的化合物，其中 R^{12} 是氢、甲基、乙基、甲氧基或乙氧基。

12. 一种农用化学组合物, 含有杀真菌有效量的根据权利要求1至11中任一项所述的具有化学式(I)的化合物。

13. 根据权利要求12所述的组合物, 进一步包含至少一种另外的活性成分和/或农用化学上可接受的稀释剂或载体。

14. 一种用于控制或预防有用植物被植物病原性微生物侵染的方法, 其中将杀真菌有效量的根据权利要求1至11中任一项所述的具有化学式(I)的化合物, 或包含这种化合物作为活性成分的组合物施用至所述植物、其部分或其场所。

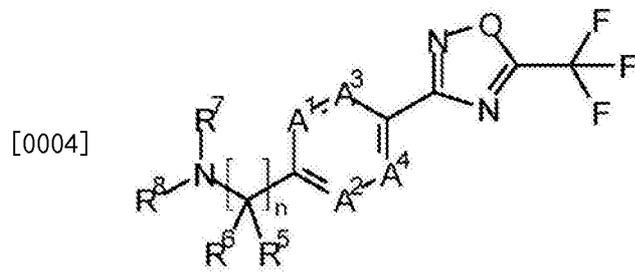
15. 根据权利要求1至11中任一项所述的具有化学式(I)的化合物作为杀真菌剂的用途。

杀微生物的噁二唑衍生物

[0001] 本发明涉及杀微生物的噁二唑衍生物,例如作为活性成分,所述噁二唑衍生物具有杀微生物活性,特别是杀真菌活性。本发明还涉及包含所述噁二唑衍生物中的至少一种的农用化学组合物,涉及这些化合物的制备方法,并且涉及所述噁二唑衍生物或组合物在农业或园艺中用于控制或防止植物、收获的粮食作物、种子或非生命材料被植物病原性微生物、优选真菌侵染的用途。

[0002] 作为杀虫剂和杀螨剂的杀微生物的噁二唑衍生物是已知的,例如从CN 1927860、WO 2013/064079、EP 0 276 432和WO 2015/185485描述了取代的噁二唑用于防治植物病原性真菌的用途。

[0003] 根据本发明,提供了具有化学式 (I) 的化合物:



[0005] 其中

[0006] n是1或2;

[0007] A¹表示N或CR¹,其中R¹是氢、卤素、甲基、乙基、三氟甲基、甲氧基、乙氧基或二氟甲氧基;

[0008] A²表示N或CR²,其中R²是氢、卤素、甲基、乙基、三氟甲基、甲氧基、乙氧基或二氟甲氧基;

[0009] A³表示N或CR³,其中R³是氢或卤素;

[0010] A⁴表示N或CR⁴,其中R⁴是氢或卤素;并且

[0011] 其中A¹至A⁴中不多于两个是N;

[0012] R⁵和R⁶独立地选自氢、C₁₋₄烷基、卤素、氰基、三氟甲基和二氟甲基,或者R⁵和R⁶与它们共有的碳原子一起形成环丙基;

[0013] R⁷是氢;

[0014] R⁸表示-C(O)R⁹,其中R⁹是氢、C₁₋₆烷基、C₂₋₆烯基、C₂₋₆炔基、氰基C₁₋₆烷基、C₁₋₆卤代烷基、C₂₋₆卤代烯基、羟基C₁₋₆烷基、羟基C₁₋₆卤代烷基、C₁₋₄烷氧基C₁₋₆烷基、C₁₋₄卤代烷氧基C₁₋₆烷基、C₁₋₄烷氧基C₁₋₄烷氧基C₁₋₆烷基、C₂₋₆炔氧基C₁₋₆烷基、氨基C₁₋₆烷基、N-C₁₋₄烷基氨基C₁₋₆烷基、N,N-二C₁₋₄烷基氨基C₁₋₆烷基、C₁₋₆烷基羰基C₁₋₆烷基、C₁₋₆烷基羰基C₂₋₆烯基、C₁₋₆烷氧基羰基C₁₋₆烷基、C₁₋₆烷基羰基氧基C₁₋₆烷基、N-C₁₋₄烷基羰基氨基C₁₋₆烷基、N-C₁₋₄烷基氨基羰基C₁₋₆烷基、N,N-二C₁₋₄烷基氨基羰基C₁₋₆烷基、C₁₋₆烷基硫烷基C₁₋₆烷基、C₁₋₆烷基磺酰基C₁₋₆烷基或C₁₋₆烷基磺酰基氨基C₁₋₆烷基;或者

[0015] R⁸表示-C(O)OR¹⁰,其中R¹⁰是氢、C₁₋₈烷基、C₃₋₆烯基、C₃₋₆炔基、氰基C₁₋₆烷基、C₁₋₆卤代烷基、C₃₋₆卤代烯基、羟基C₁₋₆烷基、C₁₋₄烷氧基C₁₋₆烷基、C₁₋₄卤代烷氧基C₁₋₆烷基、C₁₋₄烷氧基

C₁₋₄烷氧基C₁₋₆烷基、C₂₋₆炔氧基C₁₋₆烷基、氨基C₁₋₆烷基、N-C₁₋₄烷基氨基C₁₋₆烷基、N,N-二C₁₋₄烷基氨基C₁₋₆烷基、C₁₋₆烷基羰基C₁₋₆烷基、C₁₋₆烷基羰基C₂₋₆烯基、C₁₋₆烷氧基羰基C₁₋₆烷基、C₁₋₆烷基羰氧基C₁₋₆烷基、N-C₁₋₄烷基氨基羰基C₁₋₆烷基、N,N-二C₁₋₄烷基氨基羰基C₁₋₆烷基、C₁₋₄烷基硫烷基C₁₋₆烷基、C₁₋₆烷基磺酰基C₁₋₆烷基或C₁₋₆烷基磺酰基氨基C₁₋₆烷基；或者

[0016] R⁸表示-C(O)NR¹¹R¹²,其中R¹¹是氢、氰基、C₁₋₆烷基、C₂₋₆烯基、C₂₋₆炔基、氰基C₁₋₈烷基、C₁₋₆卤代烷基、C₂₋₆卤代烯基、羟基C₁₋₆烷基、C₁₋₄烷氧基C₁₋₆烷基、C₁₋₄卤代烷氧基C₁₋₆烷基、C₁₋₄烷氧基C₁₋₄烷氧基C₁₋₆烷基、C₂₋₆炔氧基C₁₋₆烷基、氨基C₁₋₆烷基、N-C₁₋₄烷基氨基C₁₋₆烷基、N,N-二C₁₋₄烷基氨基C₁₋₆烷基、C₁₋₆烷基羰基C₁₋₆烷基、C₁₋₆烷基羰基C₂₋₆烯基、C₁₋₆烷氧基羰基C₁₋₆烷基、C₁₋₆烷基羰氧基C₁₋₆烷基、N-C₁₋₄烷基氨基羰基C₁₋₆烷基、N,N-二C₁₋₄烷基氨基羰基C₁₋₆烷基、C₁₋₄烷基硫烷基C₁₋₆烷基、C₁₋₆烷基磺酰基C₁₋₆烷基或C₁₋₆烷基磺酰基氨基C₁₋₆烷基；

[0017] R¹²是氢、C₁₋₄烷基、C₁₋₄烷氧基、C₁₋₄烷氧基C₁₋₆烷基、C₃₋₆烯氧基或C₃₋₆炔氧基；或者

[0018] R¹¹和R¹²与它们所共有的氮原子一起形成任选地含有包括O、S或NR¹³的杂原子部分的4元环、5元环或6元环；

[0019] R¹³是氢、甲基、甲氧基、甲酰基或酰基；或者

[0020] 其盐或N-氧化物；

[0021] 其条件是具有化学式(I)的化合物不是：

[0022] 叔丁基-N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]氨基甲酸酯。

[0023] 出人意料地,为实际目的,已经发现了具有化学式(I)的新颖化合物有着非常有利水平的生物活性,用来保护植物免受真菌引起的疾病的侵害。

[0024] 根据本发明的第二方面,提供了包含杀真菌有效量的具有化学式(I)的化合物的农用化学组合物。所述组合物可以进一步包含至少一种另外的活性成分和/或农用化学上可接受的稀释剂或载体。

[0025] 根据本发明的第三方面,提供了控制或防止有用植物被植物病原性微生物侵染的方法,其中将杀真菌有效量的具有化学式(I)的化合物或包含这种化合物作为活性成分的组合物施用至所述植物、其部分或其场所。

[0026] 根据本发明的第四方面,提供了具有化学式(I)的化合物作为杀真菌剂的用途。根据本发明的这个特定方面,所述用途可以包括或不包括通过手术或疗法来治疗人体或动物体的方法。

[0027] 如本文使用的,术语“卤素(halogen或halo)”是指氟(fluorine,fluoro)、氯(chlorine,chloro)、溴(bromine,bromo)或碘(iodine,iodo),优选氟、氯或溴。

[0028] 如本文使用的,氰基意指-CN基团。

[0029] 如本文使用的,氨基意指-NH₂基团。

[0030] 如本文使用的,羟基意指-OH基团。

[0031] 如本文使用的,甲酰基意指-C(O)H基团。

[0032] 如本文使用的,酰基意指-C(O)CH₃基团。

[0033] 如本文使用的,术语“C₁₋₈烷基”是指仅由碳原子和氢原子组成的直链的或支链的烃链基团,所述烃链基团不含不饱和现象,具有从一至八个碳原子,并且其通过单键附接至分子的剩余部分。术语“C₁₋₆烷基”和“C₁₋₄烷基”应相应地解释。C₁₋₈烷基的实例包括但不限于甲基、乙基、正丙基、1-甲基乙基(异丙基)、正丁基、2-甲基丙基(异丁基)和正戊基。

[0034] 如本文使用的,术语“C₂₋₆烯基”是指仅由碳原子和氢原子组成的直链的或支链的烃链基团,所述烃链基团含有至少一个可以是(E)-构型或(Z)-构型的双键,具有从二至六个碳原子,其通过单键附接至分子的剩余部分。术语“C₂₋₄烯基”应相应地解释。C₂₋₆烯基的实例包括但不限于乙烯基、丙-1-烯基、丁-1-烯基。

[0035] 如本文使用的,术语“C₂₋₆炔基”是指仅由碳原子和氢原子组成的直链的或支链的烃链基团,所述烃链基团包含至少一个三键,具有从二至六个碳原子,并且其通过单键附接至分子的剩余部分。术语“C₂₋₄炔基”应相应地解释。C₂₋₆炔基的实例包括但不限于乙炔基、丙-1-炔基、丁-1-炔基。

[0036] 如本文使用的,术语“N-C₁₋₄烷基氨基”是指具有化学式-NH-R_a的基团,其中R_a是如上定义的C₁₋₄烷基基团。

[0037] 如本文使用的,术语“N,N-二C₁₋₄烷基氨基”是指具有化学式-N(R_a)-R_a的基团,其中每个R_a是如上定义的可以相同或不同的C₁₋₄烷基基团。

[0038] 如本文使用的,术语“C₁₋₆烷氧基”是指具有化学式-OR_a的基团,其中R_a是如上一般定义的C₁₋₆烷基基团。术语“C₁₋₄烷氧基”应相应地解释。C₁₋₆烷氧基的实例包括但不限于甲氧基、乙氧基、丙氧基、异丙氧基、丁氧基。

[0039] 如本文使用的,术语“C₁₋₆烷基羰基”是指具有化学式-C(O)R_a的基团,其中R_a是如上一般定义的C₁₋₆烷基基团。术语“C₁₋₄烷基羰基”应相应地解释。

[0040] 如本文使用的,术语“C₁₋₆烷氧基羰基”是指具有化学式-C(O)OR_a的基团,其中R_a是如上一般定义的C₁₋₆烷基基团。术语“C₁₋₄烷氧基羰基”应相应地解释。

[0041] 如本文使用的,术语“C₁₋₆烷基羰氧基”是指具有化学式-OC(O)R_a的基团,其中R_a是如上一般定义的C₁₋₆烷基基团。术语“C₁₋₄烷基羰氧基”应相应地解释。

[0042] 如本文使用的,术语“N-C₁₋₄烷基氨基羰基”是指具有化学式-C(O)NHR_a的基团,其中R_a是如上一般定义的C₁₋₄烷基基团。

[0043] 如本文使用的,术语“N,N-二C₁₋₄烷基氨基羰基”是指具有化学式-C(O)NR_a(R_a)的基团,其中每个R_a是如上一般定义的可以相同或不同的C₁₋₄烷基基团。

[0044] 如本文使用的,术语“C₁₋₆烷基硫烷基”是指具有化学式-SR_a的基团,其中R_a是如上一般定义的C₁₋₆烷基基团。术语“C₁₋₄烷基硫烷基”应相应地解释。

[0045] 如本文使用的,术语“C₁₋₆烷基磺酰基”是指具有化学式-S(O)₂R_a的基团,其中R_a是如上一般定义的C₁₋₆烷基基团。术语“C₁₋₄烷基磺酰基”应相应地解释。

[0046] 如本文使用的,术语“C₁₋₆烷基磺酰基氨基”是指具有化学式-NHS(O)₂R_a的基团,其中R_a是如上一般定义的C₁₋₆烷基基团。术语“C₁₋₄烷基磺酰基氨基”应相应地解释。

[0047] 如本文使用的,术语“C₂₋₆烯氧基”是指具有化学式-OR_a的基团,其中R_a是如上一般定义的C₂₋₆烯基基团。术语“C₂₋₄烯氧基”应相应地解释。

[0048] 如本文使用的,术语“C₂₋₆炔氧基”是指具有化学式-OR_a的基团,其中R_a是如上一般定义的C₂₋₆炔基基团。术语“C₂₋₄炔氧基”应相应地解释。

[0049] 如本文使用的,术语“C₁₋₄卤代烷氧基”是指被一个或多个相同的或不同的卤素原子取代的如上定义的C₁₋₄烷氧基基团。C₁₋₄卤代烷氧基的实例包括但不限于氟甲氧基、氟乙氧基(包括2-氟乙氧基)、三氟甲氧基、2,2,2-三氟乙氧基。

[0050] 如本文使用的,术语“氰基C₁₋₆烷基”是指被一个或多个如上定义的氰基基团取代

的如上一一般定义的C₁₋₆烷基基团。术语“氰基C₁₋₄烷基”应相应地解释。氰基C₁₋₆烷基的实例包括但不限于氰基甲基、氰基乙基(包括2-氰基乙基)。

[0051] 如本文使用的,术语“C₁₋₆卤代烷基”是指被一个或多个相同的或不同的卤素原子取代的如上一一般定义的C₁₋₆烷基基团。术语“C₁₋₄卤代烷基”应相应地解释。C₁₋₆卤代烷基的实例包括但不限于氟甲基、氟乙基(包括2-氟乙基)、三氟甲基、2,2,2-三氟乙基。

[0052] 如本文使用的,术语“羟基C₁₋₆卤代烷基”是指被一个或多个如上定义的羟基基团取代的如上一一般定义的C₁₋₆卤代烷基基团。

[0053] 如本文使用的,术语“C₂₋₆卤代烯基”是指被一个或多个相同的或不同的卤素原子取代的如上一一般定义的C₂₋₆烯基基团。术语“C₂₋₄卤代烯基”应相应地解释。

[0054] 如本文使用的,术语“羟基C₁₋₆烷基”是指被一个或多个如上定义的羟基基团取代的如上一一般定义的C₁₋₆烷基基团。术语“羟基C₁₋₄烷基”应相应地解释。

[0055] 如本文使用的,术语“C₁₋₄烷氧基C₁₋₆烷基”是指被如上定义的C₁₋₄烷氧基基团取代的如上一一般定义的C₁₋₆烷基基团。术语“C₁₋₄烷氧基C₁₋₄烷基”应相应地解释。C₁₋₄烷氧基C₁₋₆烷基的实例包括但不限于甲氧基甲基、2-甲氧基乙基。

[0056] 如本文使用的,术语“C₁₋₄卤代烷氧基C₁₋₆烷基”是指被如上定义的C₁₋₄卤代烷氧基基团取代的如上一一般定义的C₁₋₆烷基基团。术语“C₁₋₄卤代烷氧基C₁₋₄烷基”应相应地解释。

[0057] 如本文使用的,术语“C₁₋₄烷氧基C₁₋₄烷氧基C₁₋₆烷基”是指被如上定义的C₁₋₄烷氧基基团取代的如上一一般定义的C₁₋₆烷基基团,所述C₁₋₄烷氧基基团本身被如上定义的相同或不同C₁₋₄烷氧基基团取代。

[0058] 如本文使用的,术语“C₂₋₆炔氧基C₁₋₆烷基”是指被一个或多个如上定义的C₂₋₆炔氧基基团取代的如上一一般定义的C₁₋₆烷基基团。

[0059] 如本文使用的,术语“氨基C₁₋₆烷基”是指被一个或多个如上定义的氨基基团取代的如上一一般定义的C₁₋₆烷基基团。术语“氨基C₁₋₄烷基”应相应地解释。

[0060] 如本文使用的,术语“N-C₁₋₄烷基氨基C₁₋₆烷基”是指被如上定义的C₁₋₄烷基氨基基团取代的如上一一般定义的C₁₋₆烷基基团。术语“C₁₋₄烷基氨基C₁₋₄烷基”应相应地解释。

[0061] 如本文使用的,术语“N,N-二C₁₋₄烷基氨基C₁₋₆烷基”是指被如上定义的N,N-二C₁₋₄烷基氨基基团取代的如上一一般定义的C₁₋₆烷基基团。术语“N,N-二C₁₋₄烷基氨基C₁₋₄烷基”应相应地解释。

[0062] 如本文使用的,术语“C₁₋₆烷基羰基C₁₋₆烷基”是指被如上定义的C₁₋₆烷基羰基基团取代的如上一一般定义的C₁₋₆烷基基团。术语“C₁₋₆烷基羰基C₁₋₄烷基”应相应地解释。

[0063] 如本文使用的,术语“C₁₋₆烷基羰基C₂₋₆烯基”是指被如上定义的C₁₋₆烷基羰基基团取代的如上一一般定义的C₂₋₆烯基基团。术语“C₁₋₆烷基羰基C₂₋₄烯基”应相应地解释。

[0064] 如本文使用的,术语“C₁₋₆烷氧基羰基C₁₋₆烷基”是指被如上定义的C₁₋₆烷氧基羰基基团取代的如上一一般定义的C₁₋₆烷基基团。术语“C₁₋₆烷氧基羰基C₁₋₄烷基”应相应地解释。

[0065] 如本文使用的,术语“C₁₋₆烷基羰氧基C₁₋₆烷基”是指被如上定义的C₁₋₆烷基羰氧基基团取代的如上一一般定义的C₁₋₆烷基基团。术语“C₁₋₆烷基羰氧基C₁₋₄烷基”应相应地解释。

[0066] 如本文使用的,术语“N-C₁₋₄烷基羰基氨基”是指-N(H)C(O)R_a基团,其中R_a是指如上一一般定义的C₁₋₄烷基基团。

[0067] 如本文使用的,术语“N-C₁₋₄烷基羰基氨基C₁₋₆烷基”是指被如上定义的N-C₁₋₄烷基

羰基氨基基团取代的如上一一般定义的C₁₋₆烷基基团。

[0068] 如本文使用的,术语“N-C₁₋₄烷基氨基羰基C₁₋₆烷基”是指被如上定义的N-C₁₋₄烷基氨基羰基基团取代的如上一一般定义的C₁₋₆烷基基团。术语“N-C₁₋₄烷基氨基羰基C₁₋₄烷基”应相应地解释。

[0069] 如本文使用的,术语“N,N-二C₁₋₄烷基氨基羰基C₁₋₆烷基”是指被如上定义的N,N-二C₁₋₄烷基氨基羰基C₁₋₆烷基基团取代的如上一一般定义的C₁₋₆烷基基团。术语“N,N-二C₁₋₄烷基氨基羰基C₁₋₄烷基”应相应地解释。

[0070] 如本文使用的,术语“C₁₋₆烷基硫烷基C₁₋₆烷基”是指被如上定义的C₁₋₆烷基硫烷基基团取代的如上一一般定义的C₁₋₆烷基基团。术语“C₁₋₆烷基硫烷基C₁₋₄烷基”应相应地解释。

[0071] 如本文使用的,术语“C₁₋₆烷基磺酰基C₁₋₆烷基”是指被如上定义的C₁₋₆烷基磺酰基基团取代的如上一一般定义的C₁₋₆烷基基团。术语“C₁₋₆烷基磺酰基C₁₋₄烷基”应相应地解释。

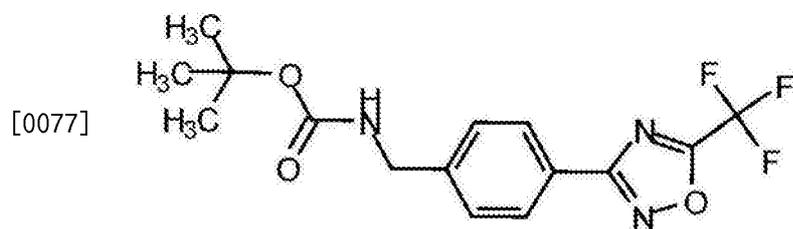
[0072] 如本文使用的,术语“C₁₋₆烷基磺酰基氨基C₁₋₆烷基”是指被如上定义的C₁₋₆烷基磺酰基氨基基团取代的如上一一般定义的C₁₋₆烷基基团。术语“C₁₋₆烷基磺酰基氨基C₁₋₄烷基”应相应地解释。

[0073] 在具有化学式(I)的化合物中一个或多个可能的不对称碳原子的存在意味着所述化合物能以手性异构体形式存在,即对映异构体或非对映异构体的形式。作为围绕单键的受限旋转的结果,还可能存在阻转异构体。化学式(I)旨在包括所有那些可能的异构体形式及其混合物。本发明包括具有化学式(I)的化合物的所有那些可能的异构体形式及其混合物。同样地,当存在时,化学式(I)旨在包括所有可能的互变异构体(包括内酰胺-内酰亚胺互变异构和酮-烯醇互变异构)。本发明包括具有化学式(I)的化合物的所有可能的互变异构体形式。

[0074] 在每种情况下,根据本发明的具有化学式(I)的所述化合物是游离形式、氧化形式(作为N-氧化物)、共价水合形式、或盐形式(如农艺学上可用的或农用化学上可接受的盐形式)。

[0075] N-氧化物是叔胺的氧化形式或含氮杂芳族化合物的氧化形式。例如,A.Albini和S.Pietra于1991年在博卡拉顿(Boca Raton)CRC出版社出版的名为“Heterocyclic N-oxides[杂环N-氧化物]”一书中描述了它们。

[0076] 不是根据本发明的具有化学式(I)的化合物(从WO 2013/066839已知)是:



[0078] 叔丁基-N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]氨基甲酸酯。

[0079] 不是根据本发明的化合物可以在控制或预防有用植物被植物病原性微生物侵染的方法中使用,其中将杀真菌有效量的所述化合物或包含所述化合物作为活性成分的组合物施用至所述植物、其部分或其场所。同样,不是根据本发明的前述化合物可以用作杀真菌剂。

[0080] 以下清单提供了关于具有化学式(I)的化合物的取代基n、A¹、A²、A³、A⁴、R¹、R²、R³、

R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 和 R^8 (当 R^8 是 $-C(O)R^9$ 时) 的定义 (包括优选定义)。对于这些取代基中的任何一个, 以下给出的任何定义都可以结合以下或在本文件中的其他地方给出的任何其他取代基的任何定义。

[0081] n 表示1或2。在本发明的一些实施例中, n 是1。在本发明的其他实施例中, n 是2。优选地, n 是1。

[0082] A^1 表示N或 CR^1 , 其中 R^1 表示氢、卤素、甲基、乙基、三氟甲基、甲氧基、乙氧基或二氟甲氧基。

[0083] A^2 表示N或 CR^2 , 其中 R^2 表示氢、卤素、甲基、乙基、三氟甲基、甲氧基、乙氧基或二氟甲氧基;

[0084] A^3 表示N或 CR^3 , 其中 R^3 表示氢或卤素;

[0085] A^4 表示N或 CR^4 , 其中 R^4 表示氢或卤素; 并且

[0086] 其中 A^1 至 A^4 中不多于两个是N (即 A^1 至 A^4 中的0、1或2个可以是N);

[0087] 优选地, A^1 表示N或 CR^1 , 其中 R^1 选自氢、氟、氯、甲氧基、或三氟甲基。优选地, A^2 表示 CR^2 , 并且 R^2 是氢或氟。优选地, A^3 表示 CR^3 , 并且 R^3 是氢, 并且 A^4 表示 CR^4 并且 R^4 是氢。优选地, A^1 至 A^4 是C-H。

[0088] 在本发明的一些实施例中, A^1 是N或 CR^1 , 其中 R^1 是氢、卤素、甲基或三氟甲基; A^2 是N或C-H; A^3 是N或 CR^3 , 其中 R^3 是氢或卤素; 并且 A^4 是C-H。在其他实施例中, A^1 是N或 CR^1 , 其中 R^1 是氢或氟; A^2 是C-H; A^3 是 CR^3 , 其中 R^3 是氢或氟; 并且 A^4 是C-H。

[0089] 在本发明的一些实施例中, 包含 A^1 至 A^4 的6元环是苯基 (其中 A^1 至 A^4 是C-H)、吡啶基 (其中 A^1 或 A^3 是N且其他A位置是C-H)、嘧啶基 (其中 A^1 和 A^3 是N且其他A位置是C-H)、氟苯基 (其中 A^1 或 A^3 是C-F (优选地 A^3 是C-F) 且其他A位置是C-H) 或二氟苯基 (其中 A^1 和 A^3 是C-F且 A^2 和 A^4 位置是C-H) 基团。

[0090] 在本发明的一些实施例中, R^1 和 R^2 可以独立地选自氢、氯、氟、甲基、甲氧基和三氟甲基。优选地, R^1 和 R^2 可以独立地选自氢和氟。 R^3 和 R^4 可以独立地选自氢和卤素。优选地, R^3 和 R^4 可以独立地选自氢和氟。更优选地, R^3 和 R^4 是氢。在根据化学式 (I) 的化合物中, R^1 、 R^2 、 R^3 和 R^4 中的至少两个可以是氢。优选地, R^1 、 R^2 、 R^3 和 R^4 中的三个是氢, 其中更优选地 R^2 、 R^3 和 R^4 是氢。

[0091] R^5 和 R^6 独立地选自氢、 C_{1-4} 烷基、卤素、氰基、三氟甲基和二氟甲基, 或者 R^5 和 R^6 与它们共有的碳原子一起形成环丙基。优选地, R^5 和 R^6 独立地选自氢和 C_{1-4} 烷基 (例如甲基), 或 R^5 和 R^6 连同它们共有的碳原子一起形成环丙基。更优选地, R^5 和 R^6 独立地选自氢和 C_{1-4} 烷基。甚至更优选地, R^5 和 R^6 是氢, 或 R^5 是氢而 R^6 是 C_{1-4} 烷基, 优选甲基或乙基。仍然更优选地, R^5 和 R^6 是氢。

[0092] 在本发明的一些实施例中, 在根据化学式 (I) 的化合物中, n 是1, 并且 R^5 和 R^6 独立地选自氢和甲基。在本发明的其他实施例中, 在根据化学式 (I) 的化合物中, n 是2, 并且 R^5 和 R^6 独立地选自氢和氟。

[0093] R^7 是氢。

[0094] 在具有化学式 (I) 的化合物的一个实施例中, R^8 表示 $-C(O)R^9$ 。

[0095] R^9 是氢、 C_{1-6} 烷基、 C_{2-6} 烯基、 C_{2-6} 炔基、氰基 C_{1-6} 烷基、 C_{1-6} 卤代烷基、 C_{2-6} 卤代烯基、羟基 C_{1-6} 烷基、羟基 C_{1-6} 卤代烷基、 C_{1-4} 烷氧基 C_{1-6} 烷基、 C_{1-4} 卤代烷氧基 C_{1-6} 烷基、 C_{1-4} 烷氧基 C_{1-4}

烷氧基C₁₋₆烷基、C₂₋₆炔氧基C₁₋₆烷基、氨基C₁₋₆烷基、N-C₁₋₄烷基氨基C₁₋₆烷基、N,N-二C₁₋₄烷基氨基C₁₋₆烷基、C₁₋₆烷基羰基C₁₋₆烷基、C₁₋₆烷基羰基C₂₋₆烯基、C₁₋₆烷氧基羰基C₁₋₆烷基、C₁₋₆烷基羰基氧基C₁₋₆烷基、N-C₁₋₄烷基羰基氨基C₁₋₆烷基、N-C₁₋₄烷基氨基羰基C₁₋₆烷基、N,N-二C₁₋₄烷基氨基羰基C₁₋₆烷基、C₁₋₆烷基硫烷基C₁₋₆烷基、C₁₋₆烷基磺酰基C₁₋₆烷基或C₁₋₆烷基磺酰基氨基C₁₋₆烷基。

[0096] 优选地, R⁹是氢、C₁₋₆烷基、C₂₋₆烯基、C₂₋₆炔基、氰基C₁₋₆烷基、C₁₋₆卤代烷基、C₂₋₆卤代烯基、羟基C₁₋₆烷基、羟基C₁₋₆卤代烷基、C₁₋₄烷氧基C₁₋₆烷基、C₁₋₄卤代烷氧基C₁₋₆烷基、C₁₋₄烷氧基C₁₋₄烷氧基C₁₋₆烷基、C₂₋₄炔氧基C₁₋₆烷基、氨基C₁₋₆烷基、N-C₁₋₄烷基氨基C₁₋₆烷基、N,N-二C₁₋₄烷基氨基C₁₋₆烷基、C₁₋₆烷基羰基C₁₋₆烷基、C₁₋₄烷基硫烷基C₁₋₆烷基或C₁₋₆烷基磺酰基C₁₋₆烷基。更优选地, R⁹是C₁₋₆烷基、C₂₋₆烯基、C₂₋₆炔基、氰基C₁₋₆烷基、C₁₋₆卤代烷基、羟基C₁₋₆烷基、羟基C₁₋₆卤代烷基、C₁₋₄烷氧基C₁₋₆烷基、C₁₋₄卤代烷氧基C₁₋₆烷基、C₁₋₄烷基羰基C₁₋₄烷基或N-C₁₋₄烷基羰基氨基C₁₋₆烷基。甚至更优选地, R⁹是C₁₋₆烷基、C₃₋₆烯基、C₃₋₆炔基、氰基C₁₋₄烷基、C₁₋₆卤代烷基、羟基C₁₋₄烷基、羟基C₁₋₄卤代烷基、C₁₋₂烷氧基C₁₋₄烷基、C₁₋₂卤代烷氧基C₁₋₄烷基、C₁₋₂烷基羰基C₁₋₄烷基或N-C₁₋₂烷基羰基氨基C₁₋₂烷基。

[0097] 在其他实施例中, 优选地, R⁹是氢、C₁₋₆烷基、C₂₋₆烯基、C₂₋₆炔基、氰基C₁₋₆烷基、C₁₋₆氟烷基、C₁₋₆氯烷基、羟基C₁₋₆烷基、C₁₋₄烷氧基C₁₋₆烷基、C₁₋₄氟烷氧基C₁₋₆烷基、C₁₋₄烷氧基C₂₋₄烷氧基C₁₋₆烷基或C₁₋₆烷基羰基C₁₋₆烷基。甚至更优选地, R⁹是氢、C₁₋₆烷基、C₂₋₆烯基、C₂₋₆炔基、氰基C₁₋₆烷基、C₁₋₆氟烷基、C₁₋₆氯烷基、羟基C₁₋₆烷基、C₁₋₄烷氧基C₁₋₆烷基、C₁₋₂氟烷氧基C₁₋₆烷基、C₁₋₂烷氧基C₂₋₃烷氧基C₁₋₆烷基或C₁₋₆烷基羰基C₁₋₆烷基。仍然更优选地, R⁹是C₁₋₆烷基、C₂₋₆烯基、C₂₋₆炔基、氰基C₁₋₆烷基、C₁₋₆氟烷基、C₁₋₆氯烷基、C₁₋₄烷氧基C₁₋₆烷基或C₁₋₆烷基羰基C₁₋₆烷基, 或R⁹是C₁₋₆烷基、C₂₋₆烯基、C₂₋₆炔基、C₁₋₆氟烷基、C₁₋₆氯烷基或C₁₋₄烷氧基C₁₋₆烷基。最优选地, R⁹是C₁₋₆烷基(例如甲基、乙基、异丙基、正丁基、戊基)、C₁₋₄烷氧基C₁₋₆烷基或C₂₋₆炔基。

[0098] 在本发明的某些实施例中, R⁹是C₁₋₆烷基、C₃₋₆烯基、C₃₋₆炔基、氰基C₁₋₄烷基、C₁₋₆卤代烷基、羟基C₁₋₄烷基、羟基C₁₋₄卤代烷基、C₁₋₂烷氧基C₁₋₄烷基、C₁₋₂卤代烷氧基C₁₋₄烷基、C₁₋₂烷基羰基C₁₋₄烷基或N-C₁₋₂烷基羰基氨基C₁₋₂烷基。优选地, R⁹是C₁₋₆烷基、C₃₋₄烯基、C₃₋₆炔基、C₁₋₄氟烷基、C₁₋₄氯烷基、C₁₋₂烷氧基C₁₋₄烷基或C₁₋₂氟烷氧基C₁₋₄烷基, 特别地, R⁹是甲基、乙基、正丙基、异丙基、仲丁基(1-甲基丙基)、异丁基(2-甲基丙基)、叔丁基(1,1-二甲基乙基)、2,2-二甲基丙基、(1-甲基-1-乙基)丙基、(1-甲基)乙烯基、(1,1-二甲基)丙-2-炔基、2,2,2-三氟乙基、(1,1-二甲基-2-氯)乙基、甲氧基-(1,1-二甲基)甲基、2-甲氧基乙基、(二氟甲氧基)甲基或2-(二氟甲氧基)乙基。

[0099] 优选地, 在本发明的根据化学式(I)的化合物中,

[0100] A¹是CR¹并且A²是CR², 其中R¹和R²独立地选自氢和氟;

[0101] A³是CR³并且A⁴是CR⁴, 其中R³和R⁴独立地选自氢和氟;

[0102] R⁵和R⁶是氢, 或者R⁵是氢且R⁶是甲基;

[0103] R⁷是氢;

[0104] R⁸是-C(O)R⁹;

[0105] R⁹是C₁₋₆烷基、C₂₋₆烯基、C₂₋₆炔基、氰基C₁₋₆烷基、C₁₋₆卤代烷基、C₁₋₄

[0106] 烷氧基C₁₋₆烷基或C₁₋₆烷基羰基C₁₋₆烷基; 并且

- [0107] n是1。
- [0108] 更优选地, A¹是CR¹, 并且A²是CR², 其中R¹和R²是氢;
- [0109] A³是CR³, 并且A⁴是CR⁴, 其中R³和R⁴是氢;
- [0110] R⁵和R⁶是氢;
- [0111] R⁷是氢; 并且
- [0112] R⁸是-C(O)R⁹;
- [0113] R⁹是C₁₋₆烷基、C₂₋₆烯基、C₂₋₆炔基、C₁₋₆卤代烷基或C₁₋₄烷氧基C₁₋₆烷基;
- [0114] 并且
- [0115] n是1。
- [0116] 甚至更优选地, A¹是CR¹, 并且A²是CR², 其中R¹和R²是氢;
- [0117] A³是CR³, 并且A⁴是CR⁴, 其中R³和R⁴是氢;
- [0118] R⁵和R⁶是氢;
- [0119] R⁷是氢;
- [0120] R⁸是-C(O)R⁹;
- [0121] R⁹是C₁₋₆烷基、C₁₋₄烷氧基C₁₋₆烷基或C₂₋₆炔基; 并且
- [0122] n是1。
- [0123] 以下清单提供了关于具有化学式(I)的化合物的取代基n、A¹、A²、A³、A⁴、R¹、R²、R³、R⁴、R⁵、R⁶、R⁷和R⁸(当R⁸是-C(O)OR¹⁰时)的定义(包括优选定义)。对于这些取代基中的任何一个, 以下给出的任何定义都可以结合以下或在本文件中的其他地方给出的任何其他取代基的任何定义。
- [0124] n表示1或2。在本发明的一些实施例中, n是1。在本发明的其他实施例中, n是2。优选地, n是1。
- [0125] A¹表示N或CR¹, 其中R¹表示氢、卤素、甲基、乙基、三氟甲基、甲氧基、乙氧基或二氟甲氧基;
- [0126] A²表示N或CR², 其中R²表示氢、卤素、甲基、乙基、三氟甲基、甲氧基、乙氧基或二氟甲氧基;
- [0127] A³表示N或CR³, 其中R³表示氢或卤素;
- [0128] A⁴表示N或CR⁴, 其中R⁴表示氢或卤素; 并且
- [0129] 其中A¹至A⁴中不多于两个是N(即A¹至A⁴中的0、1或2个可以是N);
- [0130] 优选地, A¹表示N或CR¹, 其中R¹选自氢、氟、氯、甲氧基、或三氟甲基。优选地, A²表示CR², 并且R²是氢或氟。优选地, A³表示CR³, 并且R³是氢, 并且A⁴表示CR⁴并且R⁴是氢。最优选地, A¹至A⁴是C-H, 或A¹是N并且A²至A⁴是C-H。
- [0131] 在本发明的一些实施例中, 包含A¹至A⁴的6元环是苯基(其中A¹至A⁴是C-H)、吡啶基(其中A¹或A³是N且其他A位置是C-H)、嘧啶基(其中A¹和A³是N且其他A位置是C-H)、氟苯基(其中A¹或A³是C-F(优选地A³是C-F)且其他A位置是C-H)或二氟苯基(其中A¹和A³是C-F且A²和A⁴位置是C-H)基团。
- [0132] R⁵和R⁶独立地选自氢、C₁₋₄烷基、卤素、氰基、三氟甲基和二氟甲基, 或者R⁵和R⁶与它们共有的碳原子一起形成环丙基。优选地, R⁵和R⁶独立地选自氢和C₁₋₄烷基。优选地, R⁵和R⁶是氢, 或R⁵是氢而R⁶是C₁₋₄烷基, 优选甲基或乙基。更优选地, R⁵和R⁶是氢。

[0133] 在本发明的一些实施例中,在根据化学式(I)的化合物中, n 是1,并且 R^5 和 R^6 独立地选自氢和甲基。在本发明的其他实施例中,在根据化学式(I)的化合物中, n 是2,并且 R^5 和 R^6 独立地选自氢和氟。

[0134] R^7 是氢。

[0135] R^8 表示 $-C(O)OR^{10}$,其中 R^{10} 是氢、 C_{1-8} 烷基、 C_{3-6} 烯基、 C_{3-6} 炔基、氰基 C_{1-6} 烷基、 C_{1-6} 卤代烷基、 C_{3-6} 卤代烯基、羟基 C_{1-6} 烷基、 C_{1-4} 烷氧基 C_{1-6} 烷基、 C_{1-4} 卤代烷氧基 C_{1-6} 烷基、 C_{1-4} 烷氧基 C_{1-4} 烷氧基 C_{1-6} 烷基、 C_{2-6} 炔氧基 C_{1-6} 烷基、氨基 C_{1-6} 烷基、 $N-C_{1-4}$ 烷基氨基 C_{1-6} 烷基、 N,N -二 C_{1-4} 烷基氨基 C_{1-6} 烷基、 C_{1-6} 烷基羰基 C_{1-6} 烷基、 C_{1-6} 烷基羰基 C_{2-6} 烯基、 C_{1-6} 烷氧基羰基 C_{1-6} 烷基、 C_{1-6} 烷基羰氧基 C_{1-6} 烷基、 $N-C_{1-4}$ 烷基氨基羰基 C_{1-6} 烷基、 N,N -二 C_{1-4} 烷基氨基羰基 C_{1-6} 烷基、 C_{1-4} 烷基硫烷基 C_{1-6} 烷基、 C_{1-6} 烷基磺酰基 C_{1-6} 烷基或 C_{1-6} 烷基磺酰基氨基 C_{1-6} 烷基。优选地, R^{10} 是氢、 C_{1-8} 烷基、 C_{3-6} 烯基、 C_{3-6} 炔基、氰基 C_{1-6} 烷基、 C_{1-6} 卤代烷基、 C_{3-6} 卤代烯基、羟基 C_{1-6} 烷基、 C_{1-4} 烷氧基 C_{1-6} 烷基、 C_{1-4} 卤代烷氧基 C_{1-6} 烷基、 C_{1-4} 烷氧基 C_{1-4} 烷氧基 C_{1-6} 烷基或氨基 C_{1-6} 烷基。更优选地, R^{10} 是 C_{1-8} 烷基、 C_{3-6} 烯基、 C_{3-6} 炔基、 C_{1-6} 卤代烷基或 C_{1-4} 烷氧基 C_{1-6} 烷基。甚至更优选地, R^{10} 是 C_{1-8} 烷基、 C_{3-4} 烯基、 C_{3-4} 炔基、 C_{1-4} 卤代烷基或 C_{1-2} 烷氧基 C_{1-4} 烷基。仍然更优选地, R^{10} 是甲基、丙基、异丙基、正丁基、异丁基、仲丁基、戊基、己基或 C_{1-4} 烷氧基 C_{1-6} 烷基。

[0136] 在本发明的某些实施例中, R^{10} 可以是甲基、乙基、正丙基、异丙基、正丁基、仲丁基(1-甲基丙基)、叔丁基(1,1-二甲基乙基)、正戊基、2,2-二甲基丙基、正辛基、烯丙基(2-丙烯-1-基)、丙-2-炔-基、丁-2-炔基、2-氟乙基、2-氯乙基、3-氯丙基、4-氯丁基、甲氧基甲基、甲氧基乙基或乙氧基乙基。

[0137] 当 R^{10} 是 C_{1-8} 烷基时,它可以是 C_{1-3} 烷基、正丁基、异丁基、仲丁基或 C_{5-8} 烷基,或可替代地它可以是甲基、乙基、丙基、异丙基、丁基(正丁基、异丁基、仲丁基)、戊基、己基、庚基或辛基。另外还有,当 R^{10} 是 C_{1-8} 烷基时,它可以是甲基、丙基、异丙基、丁基(正丁基、异丁基、仲丁基)、戊基或己基。

[0138] 优选地,在本发明的根据化学式(I)的化合物中:

[0139] A^1 是 N 或 CR^1 ,并且 A^2 是 CR^2 ,其中 R^1 和 R^2 独立地选自氢和氟;

[0140] A^3 是 CR^3 ,并且 A^4 是 CR^4 ,其中 R^3 和 R^4 独立地选自氢和氟;

[0141] R^5 和 R^6 是氢,或者 R^5 是氢且 R^6 是甲基;

[0142] R^7 是氢;

[0143] R^8 是 $-C(O)OR^{10}$;

[0144] R^{10} 是氢、 C_{1-8} 烷基、 C_{3-6} 烯基、 C_{3-6} 炔基、氰基 C_{1-6} 烷基、 C_{1-6} 卤代烷

[0145] 基、 C_{3-6} 卤代烯基、羟基 C_{1-6} 烷基、 C_{1-4} 烷氧基 C_{1-6} 烷基、 C_{1-4} 卤代烷氧基

[0146] C_{1-6} 烷基、 C_{1-4} 烷氧基 C_{1-4} 烷氧基 C_{1-6} 烷基或氨基 C_{1-6} 烷基;并且

[0147] n 是1。

[0148] 更优选地, A^1 是 N 或 CR^1 ,并且 A^2 是 CR^2 ,其中 R^1 和 R^2 是氢;

[0149] A^3 是 CR^3 ,并且 A^4 是 CR^4 ,其中 R^3 和 R^4 是氢;

[0150] R^5 和 R^6 是氢;

[0151] R^7 是氢;

[0152] R^8 是 $-C(O)OR^{10}$;

[0153] R^{10} 是氢、 C_{1-8} 烷基、 C_{3-6} 烯基、 C_{3-6} 炔基、氰基 C_{1-6} 烷基、 C_{1-6} 卤代烷

- [0154] 基、C₃₋₆卤代烯基、羟基C₁₋₆烷基、C₁₋₄烷氧基C₁₋₆烷基、C₁₋₄卤代烷氧基
- [0155] C₁₋₆烷基、C₁₋₄烷氧基C₁₋₄烷氧基C₁₋₆烷基或氨基C₁₋₆烷基；并且
- [0156] n是1。
- [0157] 甚至更优选地，A¹是N或CR¹，并且A²是CR²，其中R¹和R²是氢；
- [0158] A³是CR³，并且A⁴是CR⁴，其中R³和R⁴是氢；
- [0159] R⁵和R⁶是氢；
- [0160] R⁷是氢；
- [0161] R⁸是-C(O)OR¹⁰；
- [0162] R¹⁰是甲基、乙基、正丙基、异丙基、正丁基、仲丁基(1-甲基丙基)、
- [0163] 正戊基、2,2-二甲基丙基、正辛基、烯丙基(2-丙烯-1-基)、丙-2-炔-
- [0164] 基、丁-2-炔基、2-氟乙基、2-氯乙基、3-氯丙基、4-氯丁基、甲氧基甲
- [0165] 基、甲氧基乙基或乙氧基乙基；并且
- [0166] n是1。
- [0167] 以下清单提供了关于具有化学式(I)的化合物的取代基n、A¹、A²、A³、A⁴、R¹、R²、R³、R⁴、R⁵、R⁶、R⁷、R⁸和R¹³(当R⁸是-C(O)NR¹¹R¹²时)的定义(包括优选定义)。对于这些取代基中的任何一个，以下给出的任何定义都可以结合以下或在本文件中的其他地方给出的任何其他取代基的任何定义。
- [0168] n表示1或2。在本发明的一些实施例中，n是1。在本发明的其他实施例中，n是2。优选地，n是1。
- [0169] A¹表示N或CR¹，其中R¹表示氢、卤素、甲基、乙基、三氟甲基、甲氧基、乙氧基或二氟甲氧基；
- [0170] A²表示N或CR²，其中R²表示氢、卤素、甲基、乙基、三氟甲基、甲氧基、乙氧基或二氟甲氧基；
- [0171] A³表示N或CR³，其中R³表示氢或卤素；
- [0172] A⁴表示N或CR⁴，其中R⁴表示氢或卤素；并且
- [0173] 其中A¹至A⁴中不多于两个是N(即A¹至A⁴中的0、1或2个可以是N)；
- [0174] 优选地，A¹表示N或CR¹，其中R¹选自氢、氟、氯、甲氧基、或三氟甲基。优选地，A²表示CR²，并且R²是氢或氟。优选地，A³表示CR³，并且R³是氢，并且A⁴表示CR⁴并且R⁴是氢。最优选地，A¹至A⁴是C-H，或A¹是N并且A²至A⁴是C-H。
- [0175] 在本发明的一些实施例中，包含A¹至A⁴的6元环是苯基(其中A¹至A⁴是C-H)、吡啶基(其中A¹或A³是N且其他A位置是C-H)、嘧啶基(其中A¹和A³是N且其他A位置是C-H)、氟苯基(其中A¹或A³是C-F(优选地A³是C-F)且其他A位置是C-H)或二氟苯基(其中A¹和A³是C-F且A²和A⁴位置是C-H)基团。
- [0176] R⁵和R⁶独立地选自氢、C₁₋₄烷基、卤素、氰基、三氟甲基和二氟甲基，或者R⁵和R⁶与它们共有的碳原子一起形成环丙基。优选地，R⁵和R⁶独立地选自氢和C₁₋₄烷基，或R⁵和R⁶连同它们共有的碳原子一起形成环丙基。优选地，R⁵和R⁶是氢，或R⁵是氢而R⁶是C₁₋₄烷基，优选甲基或乙基。更优选地，R⁵和R⁶是氢。
- [0177] 在本发明的一些实施例中，在根据化学式(I)的化合物中，n是1，并且R⁵和R⁶独立地选自氢和甲基。在本发明的其他实施例中，在根据化学式(I)的化合物中，n是2，并且R⁵和R⁶

独立地选自氢和氟。

[0178] R^7 是氢。

[0179] R^8 表示 $-C(O)NR^{11}R^{12}$,其中 R^{11} 是氢、氰基、 C_{1-7} 烷基、 C_{2-6} 烯基、 C_{2-6} 炔基、氰基 C_{1-6} 烷基、 C_{1-6} 卤代烷基、 C_{2-6} 卤代烯基、羟基 C_{1-6} 烷基、 C_{1-4} 烷氧基 C_{1-6} 烷基、 C_{1-4} 卤代烷氧基 C_{1-6} 烷基、 C_{1-4} 烷氧基 C_{1-4} 烷基、 C_{2-6} 炔氧基 C_{1-6} 烷基、氨基 C_{1-6} 烷基、 $N-C_{1-4}$ 烷基氨基 C_{1-6} 烷基、 N,N -二 C_{1-4} 烷基氨基 C_{1-6} 烷基、 C_{1-6} 烷基羰基 C_{1-6} 烷基、 C_{1-6} 烷基羰基 C_{2-6} 烯基、 C_{1-6} 烷氧基羰基 C_{1-6} 烷基、 C_{1-6} 烷基羰氧基 C_{1-6} 烷基、 $N-C_{1-4}$ 烷基氨基羰基 C_{1-6} 烷基、 N,N -二 C_{1-4} 烷基氨基羰基 C_{1-6} 烷基、 C_{1-4} 烷基硫烷基 C_{1-6} 烷基、 C_{1-6} 烷基磺酰基 C_{1-6} 烷基或 C_{1-6} 烷基磺酰基氨基 C_{1-6} 烷基。优选地, R^{11} 是氢、氰基、 C_{1-6} 烷基、 C_{2-6} 烯基、 C_{2-6} 炔基、氰基 C_{1-4} 烷基、 C_{1-6} 卤代烷基、 C_{2-6} 卤代烯基、羟基 C_{1-6} 烷基、 C_{1-4} 烷氧基 C_{1-6} 烷基、氨基 C_{1-6} 烷基或 C_{1-4} 烷基硫烷基 C_{1-6} 烷基。更优选地, R^{11} 是氢、氰基、 C_{1-6} 烷基、 C_{2-4} 烯基、 C_{2-4} 炔基、氰基 C_{1-4} 烷基、 C_{1-4} 卤代烷基、 C_{2-4} 卤代烯基、羟基 C_{1-4} 烷基、 C_{1-4} 烷氧基 C_{1-4} 烷基、氨基 C_{1-4} 烷基或 C_{1-4} 烷基硫烷基 C_{1-4} 烷基。仍然更优选地, R^{11} 是氢、 C_{1-6} 烷基或 C_{1-4} 烷氧基 C_{1-6} 烷基(包括 C_{1-4} 烷氧基 C_{1-4} 烷基)。

[0180] 在本发明的某些实施例中, R^{11} 可以是氢、氰基、甲基、乙基、正丙基、异丙基(1-甲基乙基)、正丁基、异丁基(2-甲基丙基)、仲丁基(1-甲基丙基)、叔丁基(1,1-二甲基乙基)、正戊基、正庚基、2,2-二甲基丙基、烯丙基(2-丙烯-1-基)、氰基甲基、2-氯乙基、3-氯丙基、2,2,2-三氟乙基、甲氧基甲基、甲氧基乙基、乙氧基羰基甲基或甲基硫烷基乙基。

[0181] R^{12} 是氢、 C_{1-4} 烷基、 C_{1-4} 烷氧基、 C_{1-4} 烷氧基 C_{1-6} 烷基、 C_{3-6} 烯氧基或 C_{3-6} 炔氧基。优选地, R^{12} 是氢、 C_{1-4} 烷基或 C_{1-4} 烷氧基。更优选地, R^{12} 是氢、甲基、乙基、甲氧基或乙氧基。仍然更优选地, R^{12} 是氢、甲基、甲氧基或乙氧基。

[0182] R^{11} 和 R^{12} 连同它们所共有的氮原子一起可以形成任选地含有包括O、S或 NR^{13} 的杂原子的4元环、5元环或6元环,其中 R^{13} 是氢、甲基、甲氧基、甲酰基或酰基。

[0183] 优选地,在本发明的根据化学式(I)的化合物中:

[0184] A^1 是N或 CR^1 ,并且 A^2 是 CR^2 ,其中 R^1 和 R^2 独立地选自氢和氟;

[0185] A^3 是 CR^3 ,并且 A^4 是 CR^4 ,其中 R^3 和 R^4 独立地选自氢和氟;

[0186] R^5 和 R^6 是氢,或者 R^5 是氢且 R^6 是甲基;

[0187] R^7 是氢;

[0188] R^8 是 $-C(O)NR^{11}R^{12}$;

[0189] R^{11} 是氢、氰基、 C_{1-6} 烷基、 C_{2-6} 烯基、 C_{2-6} 炔基、氰基 C_{1-4} 烷基、 C_{1-6} 卤

[0190] 代烷基、 C_{2-6} 卤代烯基、羟基 C_{1-6} 烷基、 C_{1-4} 烷氧基 C_{1-6} 烷基、氨基 C_{1-6}

[0191] 烷基或 C_{1-4} 烷基硫烷基 C_{1-6} 烷基;

[0192] R^{12} 是氢、甲基、甲氧基或乙氧基;并且

[0193] n是1。

[0194] 更优选地, A^1 是N或 CR^1 ,并且 A^2 是 CR^2 ,其中 R^1 和 R^2 是氢;

[0195] A^3 是 CR^3 ,并且 A^4 是 CR^4 ,其中 R^3 和 R^4 是氢;

[0196] R^5 和 R^6 是氢;

[0197] R^7 是氢;

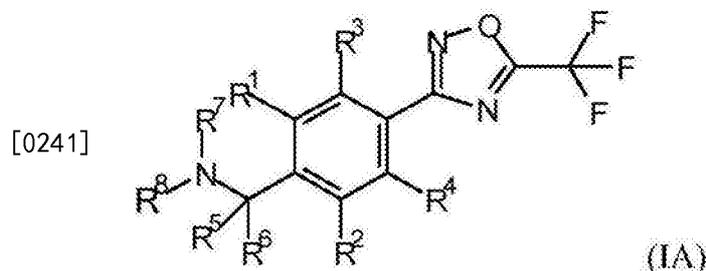
[0198] R^8 是 $-C(O)NR^{11}R^{12}$;

[0199] R^{11} 是氢、 C_{1-4} 烷基或 C_{1-4} 烷氧基 C_{1-4} 烷基;

- [0200] R^{12} 是氢、氰基、 C_{1-6} 烷基、 C_{2-6} 烯基、氰基 C_{1-4} 烷基、 C_{1-6} 卤代烷基、 C_{1-4}
- [0201] 烷氧基 C_{1-6} 烷基或 C_{1-4} 烷基硫烷基 C_{1-6} 烷基；并且
- [0202] n 是1。
- [0203] 甚至更优选地， A^1 是N或 CR^1 ，并且 A^2 是 CR^2 ，其中 R^1 和 R^2 是氢；
- [0204] A^3 是 CR^3 ，并且 A^4 是 CR^4 ，其中 R^3 和 R^4 是氢；
- [0205] R^5 和 R^6 是氢；
- [0206] R^7 是氢；
- [0207] R^8 是 $-C(O)NR^{11}R^{12}$ ；
- [0208] R^{11} 是氢、氰基、甲基、乙基、正丙基、异丙基(1-甲基乙基)、正丁
- [0209] 基、异丁基(2-甲基丙基)、仲丁基(1-甲基丙基)、叔丁基(1,1-二甲
- [0210] 基乙基)、正戊基、正庚基、2,2-二甲基丙基、烯丙基(2-丙烯-1-基)、
- [0211] 氰基甲基、2-氯乙基、3-氯丙基、2,2,2-三氟乙基、甲氧基甲基、甲氧基
- [0212] 乙基、乙氧基羰基甲基或甲基硫烷基乙基；
- [0213] R^{12} 是氢、甲基、甲氧基或乙氧基；并且
- [0214] n 是1。
- [0215] 优选地，根据化学式(I)的化合物选自：
- [0216] 2-甲氧基-2-甲基-N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]丙酰胺；
- [0217] 2-(二氟甲氧基)-N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]乙酰胺；
- [0218] N-[[2,3-二氟-4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]-3,3,3-三氟-丙酰胺；
- [0219] N-[[2,3-二氟-4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]-2-甲基-丁酰胺；
- [0220] N-[[2,3-二氟-4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]丁酰胺；
- [0221] 3,3,3-三氟-N-[[2-氟-4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]丙酰胺；
- [0222] 3,3,3-三氟-N-[[3-氟-4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]丙酰胺；
- [0223] 2-氟乙基N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]氨基甲酸酯；
- [0224] 1,1-二乙基-3-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]脒；
- [0225] 2-(二氟甲氧基)-N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]丙酰胺；
- [0226] 1-甲氧基-1-甲基-3-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]脒；
- [0227] 2-乙基-2-甲基-N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]丁酰胺；
- [0228] 3,3-二甲基-N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]丁酰胺；
- [0229] 3-氯-2,2-二甲基-N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]丙酰胺；
- [0230] 2,2-二甲基-N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]丁-3-炔酰

胺；

- [0231] 1-乙氧基-3-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]脲；
 [0232] 甲基N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]氨基甲酸酯；
 [0233] 2-甲氧基-N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]丙酰胺；
 [0234] 2-甲基-N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]丁酰胺；
 [0235] 3-甲基-N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]丁酰胺；
 [0236] N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]丁酰胺；
 [0237] 2,2-二甲基-N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]丙酰胺；
 [0238] N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]丙酰胺；
 [0239] 丙-2-炔基N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]氨基甲酸酯；
 或2-甲基-N-[2-[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]乙基]丙酰胺。
 [0240] 具有化学式(I)的化合物可以是根据化学式(IA)的化合物：



- [0242] 其中
 [0243] R^1 和 R^2 独立地选自氢、氯、氟、甲基、甲氧基和三氟甲基；并且
 [0244] R^3 和 R^4 独立地选自氢和卤素；
 [0245] 其中 R^1 、 R^2 、 R^3 和 R^4 中的至少两个是氢；
 [0246] R^5 和 R^6 独立地选自氢和 C_{1-4} 烷基；
 [0247] R^7 是氢；并且
 [0248] R^8 表示 $-C(O)R^9$ ，其中 R^9 是氢、 C_{1-6} 烷基、 C_{2-6} 烯基、 C_{2-6} 炔基、氰基 C_{1-6} 烷基、 C_{1-6} 卤代烷基、 C_{2-6} 卤代烯基、羟基 C_{1-6} 烷基、 C_{1-4} 烷氧基 C_{1-6} 烷基、 C_{1-4} 卤代烷氧基 C_{1-6} 烷基、 C_{1-4} 烷氧基 C_{1-4} 烷氧基 C_{1-6} 烷基、 C_{2-6} 炔氧基 C_{1-6} 烷基、氨基 C_{1-6} 烷基、 $N-C_{1-4}$ 烷基氨基 C_{1-6} 烷基、 N,N -二 C_{1-4} 烷基氨基 C_{1-6} 烷基、 C_{1-6} 烷基羰基 C_{1-6} 烷基、 C_{1-6} 烷基羰基 C_{2-6} 烯基、 C_{1-6} 烷氧基羰基 C_{1-6} 烷基、 C_{1-6} 烷基羰氧基 C_{1-6} 烷基、 $N-C_{1-4}$ 烷基氨基羰基 C_{1-6} 烷基、 N,N -二 C_{1-4} 烷基氨基羰基 C_{1-6} 烷基、 C_{1-6} 烷基硫烷基 C_{1-6} 烷基、 C_{1-6} 烷基磺酰基 C_{1-6} 烷基或 C_{1-6} 烷基磺酰基氨基 C_{1-6} 烷基；或者
 [0249] 其盐或 N -氧化物。
 [0250] 在具有化学式(IA)的化合物中，优选地 R^1 和 R^2 独立地选自氢和氟。
 [0251] 在具有化学式(IA)的化合物中，优选地 R^3 和 R^4 独立地选自氢和氟。更优选地， R^3 和 R^4 是氢。
 [0252] 在具有化学式(IA)的化合物中， R^1 、 R^2 、 R^3 和 R^4 中的三个可以是氢，其中更优选地 R^2 、 R^3 和 R^4 是氢。
 [0253] 在具有化学式(IA)的化合物中，优选地 R^5 和 R^6 是氢，或者 R^5 是氢且 R^6 是 C_{1-4} 烷基，优选甲基或乙基。更优选地， R^5 和 R^6 是氢。
 [0254] 在具有化学式(IA)的化合物中，优选地 R^9 是氢、 C_{1-6} 烷基、 C_{2-6} 烯基、 C_{2-6} 炔基、氰基

C₁₋₆烷基、C₁₋₆卤代烷基、C₂₋₆卤代烯基、羟基C₁₋₆烷基、C₁₋₄烷氧基C₁₋₆烷基、C₁₋₄卤代烷氧基C₁₋₆烷基、C₁₋₄烷氧基C₂₋₄烷氧基C₁₋₆烷基、C₂₋₄炔氧基C₁₋₆烷基、氨基C₁₋₆烷基、N-C₁₋₄烷基氨基C₁₋₆烷基、或N,N-二C₁₋₄烷基氨基C₁₋₆烷基、C₁₋₆烷基羰基C₁₋₆烷基、C₁₋₄烷基硫烷基C₁₋₆烷基或C₁₋₆烷基磺酰基C₁₋₆烷基。更优选地, R⁹是氢、C₁₋₆烷基、C₂₋₆烯基、C₂₋₆炔基、氰基C₁₋₆烷基、C₁₋₆氟烷基、C₁₋₆氯烷基、羟基C₁₋₆烷基、C₁₋₄烷氧基C₁₋₆烷基、C₁₋₄氟烷氧基C₁₋₆烷基、C₁₋₄烷氧基C₂₋₄烷氧基C₁₋₆烷基或C₁₋₆烷基羰基C₁₋₆烷基。甚至更优选地, R⁹是氢、C₁₋₆烷基、C₂₋₆烯基、C₂₋₆炔基、氰基C₁₋₆烷基、C₁₋₆氟烷基、C₁₋₆氯烷基、羟基C₁₋₆烷基、C₁₋₂烷氧基C₁₋₆烷基、C₁₋₂氟烷氧基C₁₋₆烷基、C₁₋₂烷氧基C₂₋₃烷氧基C₁₋₆alky或C₁₋₆烷基羰基C₁₋₆烷基。仍然更优选地, R⁹是C₁₋₆烷基、C₂₋₆烯基、C₂₋₆炔基、氰基C₁₋₆烷基、C₁₋₆氟烷基、C₁₋₆氯烷基、C₁₋₄烷氧基C₁₋₆烷基或C₁₋₆烷基羰基C₁₋₆烷基, 或R⁹是C₁₋₆烷基、C₂₋₆烯基、C₂₋₆炔基、C₁₋₆氟烷基、C₁₋₆氯烷基或C₁₋₄烷氧基C₁₋₆烷基。最优选地, R⁹是C₁₋₆烷基 (例如甲基、乙基、异丙基、正丁基、戊基)、C₁₋₄烷氧基C₁₋₆烷基或C₂₋₆炔基。

[0255] 在具有化学式 (IA) 的化合物中, 优选地R¹和R²独立地选自氢和氟;

[0256] R³和R⁴独立地选自氢和氟;

[0257] R⁵和R⁶是氢, 或者R⁵是氢且R⁶是甲基;

[0258] R⁷是氢;

[0259] R⁸是-C(O)R⁹; 并且

[0260] R⁹是C₁₋₆烷基、C₂₋₆烯基、C₂₋₆炔基、氰基C₁₋₆烷基、C₁₋₆卤代烷基、C₁₋₄

[0261] 烷氧基C₁₋₆烷基或C₁₋₆烷基羰基C₁₋₆烷基。

[0262] 在具有化学式 (IA) 的化合物中, 更优选地, R¹和R²是氢;

[0263] R³和R⁴是氢;

[0264] R⁵和R⁶是氢;

[0265] R⁷是氢;

[0266] R⁸是-C(O)R⁹; 并且

[0267] R⁹是C₁₋₆烷基、C₂₋₆烯基、C₂₋₆炔基、C₁₋₆卤代烷基或C₁₋₄烷氧基C₁₋₆烷基。

[0268] 在具有化学式 (IA) 的化合物中, 甚至更优选地, R¹和R²是氢;

[0269] R³和R⁴是氢;

[0270] R⁵和R⁶是氢;

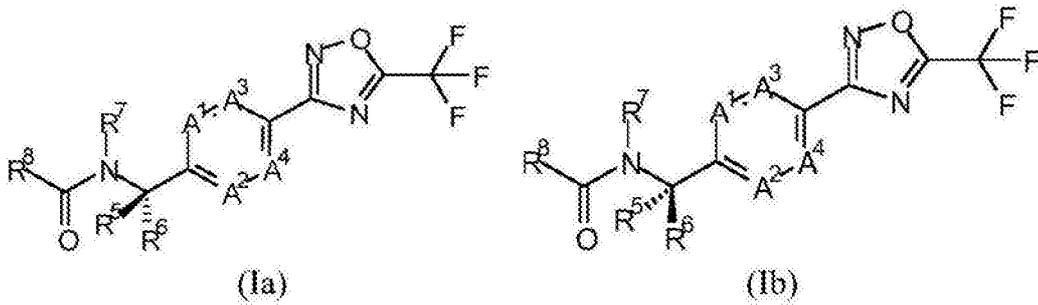
[0271] R⁷是氢;

[0272] R⁸是-C(O)R⁹; 并且

[0273] R⁹是C₁₋₆烷基、C₁₋₄烷氧基C₁₋₆烷基或C₂₋₆炔基。

[0274] 本发明的化合物可以是如由化学式 (Ia) 或化学式 (Ib) 表示的具有化学式 (I) 的化合物的对映异构体, 当n是1时, 其中R⁵和R⁶不同 (见下文), 或者确实当n是2时并且仅在与R⁵和R⁶结合的两个碳位置之一处, R⁵和R⁶不同。

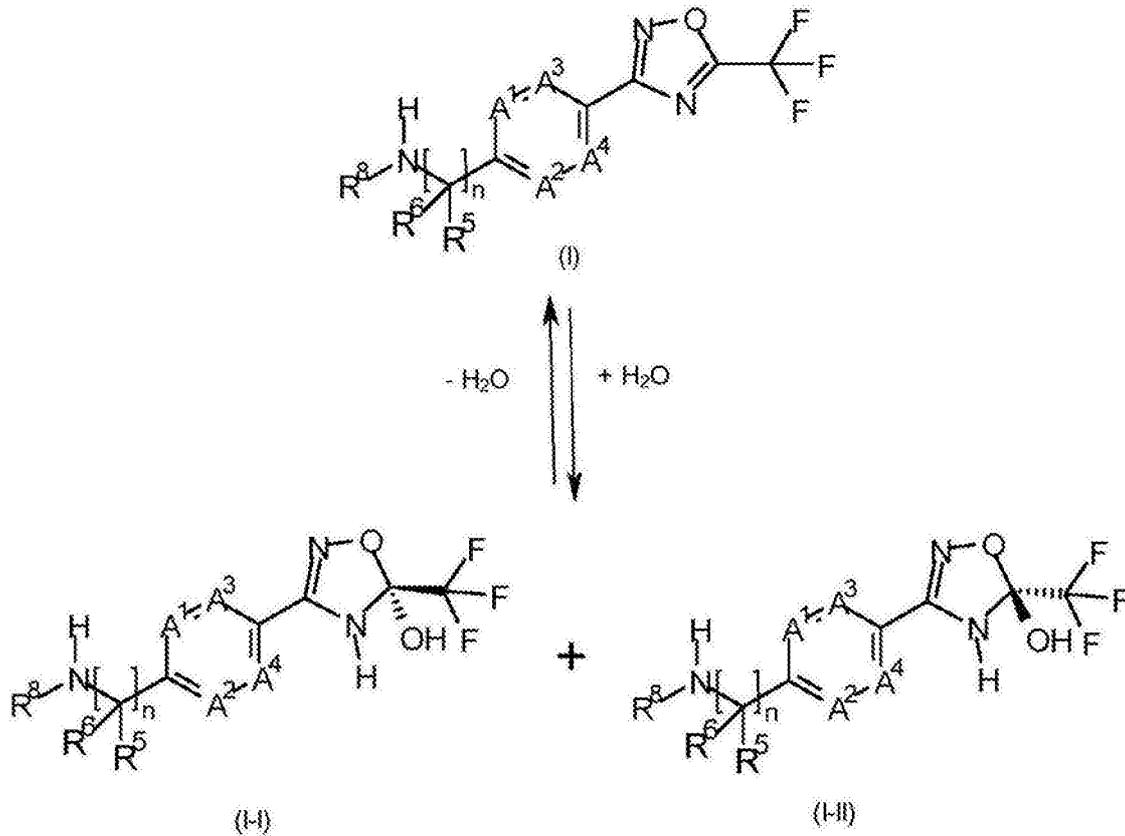
[0275]



[0276] 同样地,本发明的化合物可以是具有化学式(I)的化合物的非对映异构体,当n是2时,并且其中在与R⁵和R⁶结合的两个碳位置中的每一个处,R⁵和R⁶不同。

[0277] 应理解,当在水性介质中时,根据本发明的具有化学式(I)的化合物可以与相应的在CF₃-噁二唑基序处共价水合的形式(即,如下文所示的具有化学式(I-I)和化学式(I-II)的化合物)可逆平衡地存在。此动态平衡对于具有化学式(I)的化合物的生物活性可能是重要的。关于本发明的具有化学式(I)的化合物的n、A¹、A²、A³、A⁴、R¹、R²、R³、R⁴、R⁵、R⁶、R⁷、R⁸、R⁹、R¹⁰、R¹¹、R¹²和R¹³的指定普遍适用于具有化学式(I-I)和化学式(I-II)的化合物,同样适用于如在下表1.1至1.10和2.1至2.10和下表3.1至3.13的化合物、或表T1(下文)中描述的化合物1.1至1.111、或表T2(下文)中描述的化合物2.1至2.36、或表T3(下文)中描述的化合物3.1至3.41中表示的n、A¹、A²、A³、A⁴、R¹、R²、R³、R⁴、R⁵、R⁶、R⁷、R⁸、R⁹、R¹⁰、R¹¹、R¹²和R¹³的组合的具体披露。

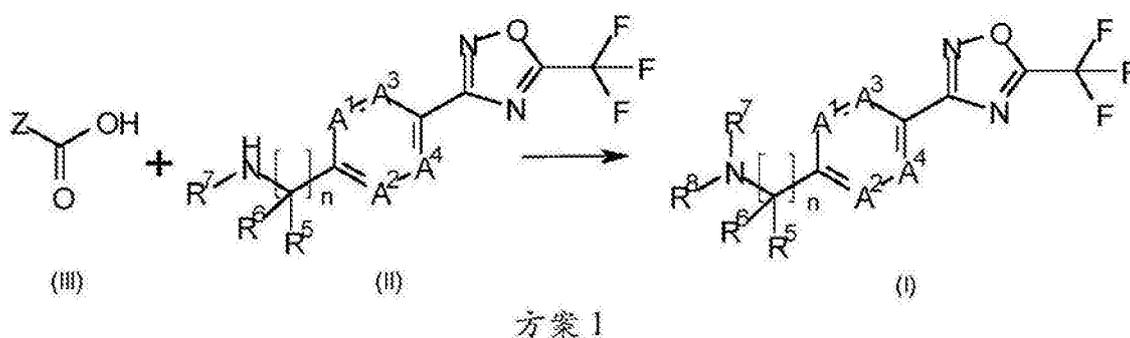
[0278]



[0279] 本发明的化合物可以如在以下方案1至14中所示来制备,其中(除非另外说明)每一变量的定义是如上针对具有化学式(I)的化合物所定义的。

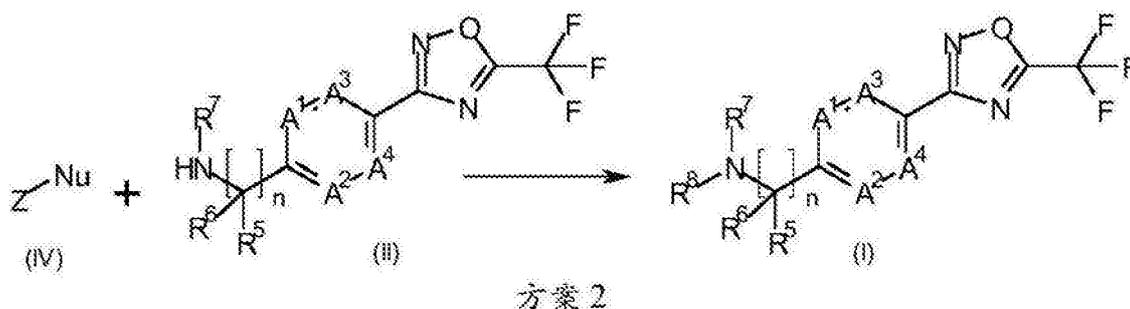
[0280] 具有化学式 (I) 的化合物可以通过与具有化学式 (II) 的化合物和具有化学式 (III) 的化合物 (其中 Z 表示 $-R^9$ 、 $-OR^{10}$ 、或 $-NR^{11}R^{12}$) 进行酰胺偶联转化来获得, 通过活化具有化学式 (III) 的化合物的羧酸官能团, 一个通常通过将羧酸的 $-OH$ 转化为好的离去基团 (如氯化物基团) 而发生的过程, 例如通过在用具有化学式 (II) 的化合物处理之前使用 $(COCl)_2$ 或 $SOCl_2$, 优选地在合适的溶剂 (例如, 二甲基甲酰胺、二氯甲烷或四氢呋喃) 中, 优选地在 $25^\circ C$ 与 $100^\circ C$ 之间的温度下, 并且任选地在碱 (如三乙胺或 N,N -二异丙基乙胺) 的存在下, 或者在文献中针对酰胺偶联描述的条件下。例如, 参见 W02003/028729。具有化学式 (III) 的化合物是可商购的或使用已知方法制备。关于相关实例, 参见: Nelson, T.D 等人 Tetrahedron Lett. [四面体快报] (2004), 45, 8917; Senthil, K. 等人 Pest. Res. Journal [害虫研究杂志] (2009), 21, 133; 和 Crich, D., Zou, Y.J. Org. Chem. [有机化学杂志] (2005), 70, 3309。这示于方案 1 中。

[0281]



[0282] 可替代地, 具有化学式 (I) 的化合物可以从具有化学式 (II) 的化合物制备而来, 通过在合适的溶剂 (例如, 乙酸乙酯、 $CHCl_3$ 或甲苯) 中并在 $65^\circ C$ 与 $100^\circ C$ 之间加热用三光气处理, 随后在 $-78^\circ C$ 与 $25^\circ C$ 之间的温度下在合适的溶剂 (例如, 甲苯、乙醚或四氢呋喃) 中添加合适的具有化学式 (IV) 的亲核试剂, 其中 Z-Nu 是有机金属 (例如, 有机镁、有机锌或有机锂) 试剂。关于相关实例, 参见 Charalambides, Y.C., Moratti, S.C. Synth. Commun. [合成通讯] (2007), 37, 1037; Schaefer, G. 等人 Angew. Chem., Int. Ed. [应用化学国际版] (2012) 51, 9173; Lengyel, I. 等人 Heterocycles [杂环] (2007), 73, 349; 和 Benalil, A 等人 Synthesis [合成] (1991), 9, 787。此外, 具有化学式 (I) 的化合物可以从具有化学式 (II) 的化合物制备而来, 通过在合适的溶剂 (例如, 1,2-二氯乙烷、 $CHCl_3$ 或甲苯) 中用三光气处理, 随后在合适的碱 (如三乙胺) 的存在下添加合适的具有化学式 (IV) 的亲核试剂, 其中 Z-Nu 表示 HOR^{10} 或 $HN(R^{11})R^{12}$ 。此反应示于方案 2 中

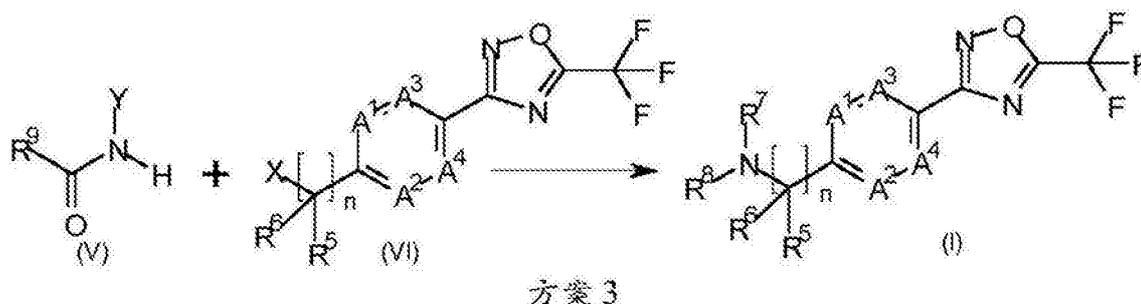
[0283]



[0284] 另外, 具有化学式 (I) 的化合物 (其中 R⁸ 是 $-C(O)R^9$) 可以从具有化学式 (VI) 的化合

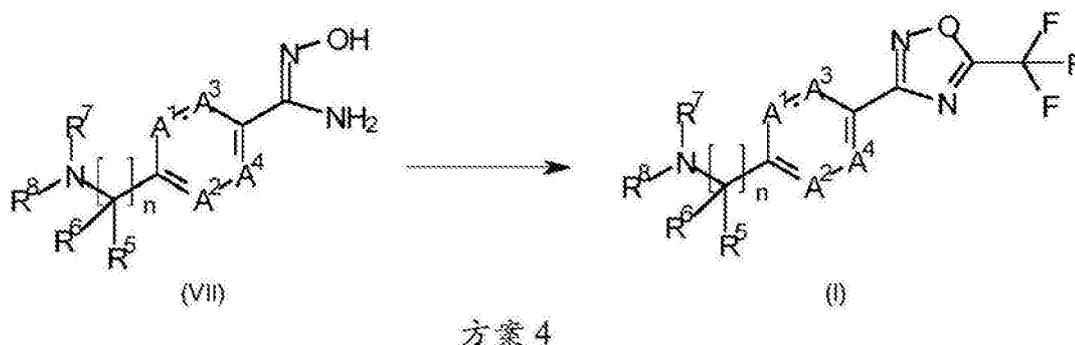
物(其中X是Cl、Br或I)制备而来,通过在0°C与100°C之间的温度下在合适的溶剂(如二甲基甲酰胺)中在合适的碱(如NaH)的存在下用具有化学式(V)的酰胺(其中Y是叔丁基甲酸酯)进行处理。在一些情况下,通过使用催化剂(例如,NaI或4-二甲基氨基吡啶)和微波辐射可以获得更好的反应性能。在合适的溶剂(例如,二噁烷或MeOH)中用HCl或三氟乙酸处理后,除去叔丁基甲酸酯基团并伴随释放具有化学式(I)的苯基酰胺。具有化学式(V)的化合物是可商购的。关于相关实例,参见Miyawaki, K.等人Heterocycles[杂环](2001), 54, 887。此反应示于方案3中。

[0285]



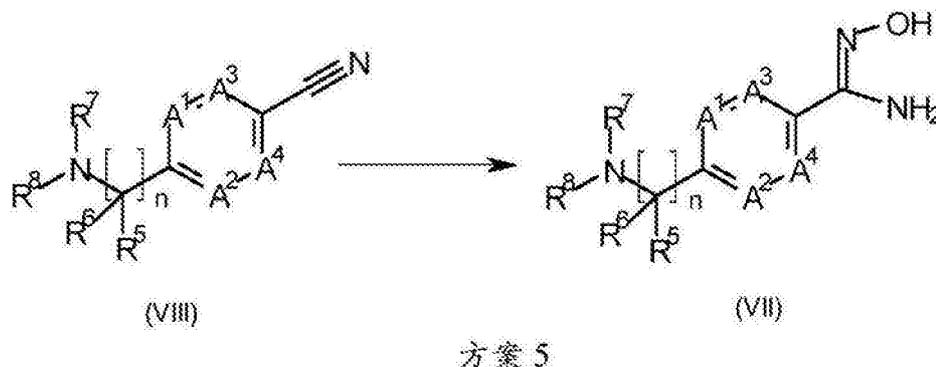
[0286] 另外,具有化学式(I)的化合物可以从具有化学式(VII)的化合物制备而来,通过在25°C与75°C之间的温度下在合适的溶剂(如四氢呋喃或乙醇)中在碱(例如,吡啶或4-二甲基氨基吡啶)的存在下用三氟乙酸酐处理。关于相关实例,参见W0 2003/028729和W0 2010/045251。这示于方案4中。

[0287]



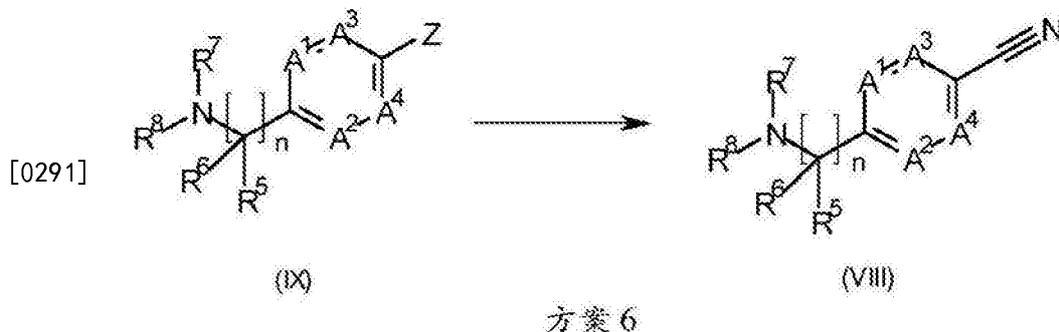
[0288] 具有化学式(VII)的化合物可以从具有化学式(VIII)的化合物制备而来,通过在0°C与100°C之间的温度下在合适的溶剂(如甲醇)中在碱(如三乙胺)的存在下用羟胺盐酸盐处理。关于相关实例,参见Kitamura, S.等人Chem. Pharm. Bull. [化学与药学通报](2001), 49, 268和W0 2013/066838。此反应示于方案5中。

[0289]

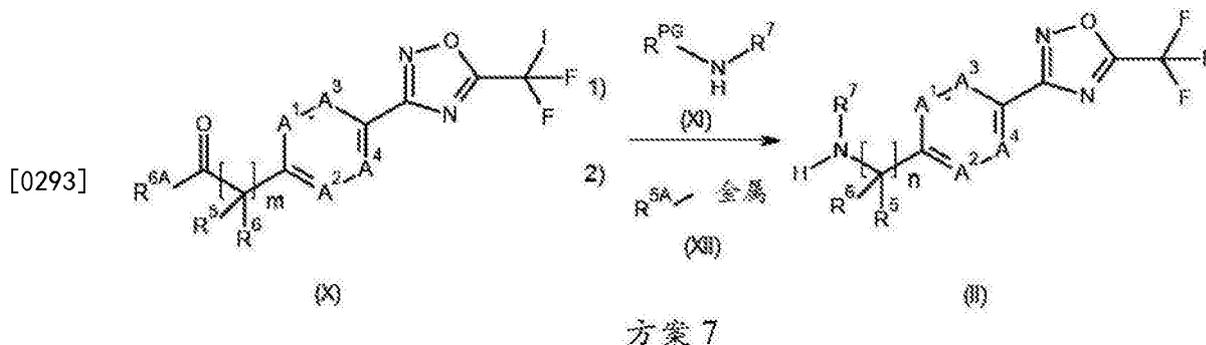


[0290] 具有化学式(VIII)的化合物可以从具有化学式(IX)的化合物(其中Z是Br或I)制

备而来,通过在100°C与120°C之间的升高的温度下在合适的溶剂(例如,二甲基甲酰胺或N-甲基吡咯烷酮)中与合适的氰化物试剂(如Pd(0)/Zn(CN)₂或CuCN)进行金属促进的反应。关于相关实例,参见US2007/0155739和W0 2009/022746。具有化学式(IX)的化合物是可商购的或使用已知方法制备。此反应示于方案6中。

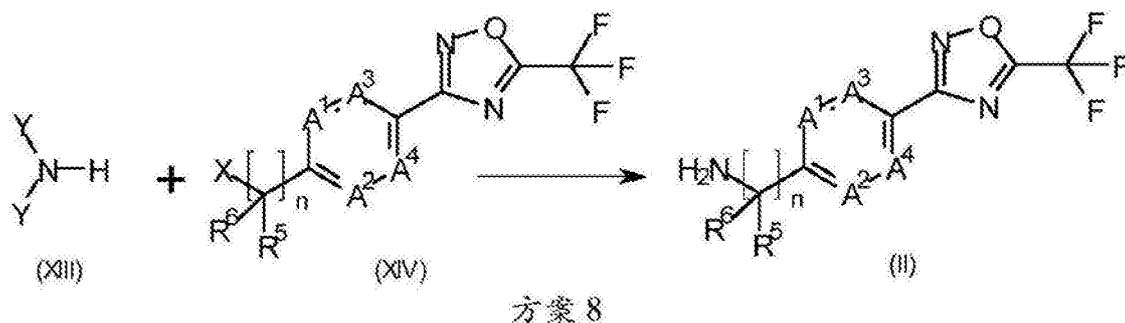


[0292] 具有化学式(II)的化合物(其中n是1或2)可以从具有化学式(X)的羰基化合物(其中当R^{6A}是氢时,m是0或1)制备而来,以在60°C与75°C之间的温度下在合适的溶剂(例如,四氢呋喃)中任选地在活化试剂(例如,Ti(OEt)₄)的存在下通过具有化学式(XI)的化合物(其中R^{PG}是叔丁基亚磺酰胺)进行处理开始,并且随后在0°C与25°C之间的温度下在合适的溶剂(例如,四氢呋喃或乙醇)中添加具有化学式(XII)的试剂(其中R^{5A}是H、氰基或C₁₋₄烷基,如烷基格利雅试剂(例如烷基MgBr)、Me³SiCN或金属氢化物(例如,NaBH₄、NaBH₃CN或LiAlH₄)).在用甲醇HCl处理后,除去叔丁基亚磺酰基基团并伴随释具有化学式(II)的胺化合物。关于相关实例,参见Cogan, D., Ellman J. A. J. Am. Chem. Soc. [美国化学学会杂志] (1999), 121, 268。此反应示于方案7中。

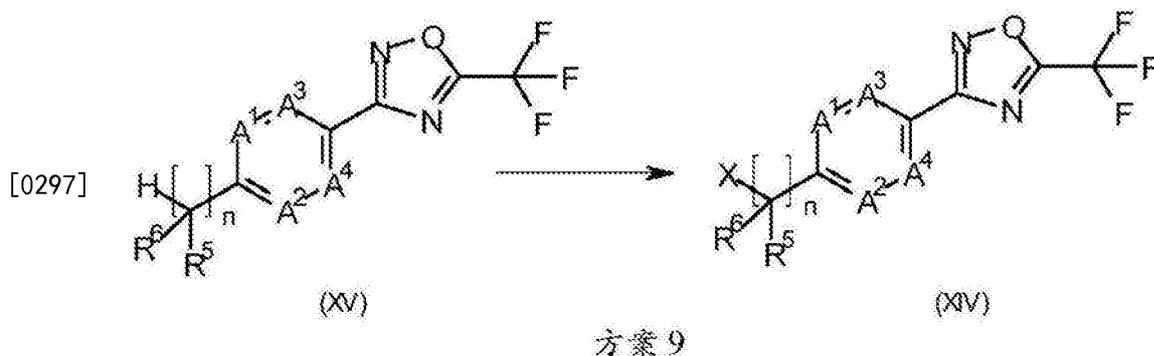


[0294] 另外,具有化学式(II)的化合物可以从具有化学式(XIV)的化合物(其中X是Cl或Br)制备而来,通过在25°C与60°C之间的温度下在合适的溶剂(例如,四氢呋喃)中用具有化学式(XIII)的胺(其中Y是叔丁基甲酸酯)进行处理。在合适的溶剂(例如,二噁烷或MeOH)中用HCl或三氟乙酸处理后,除去叔丁基甲酸酯基团并伴随释放具有化学式(II)的苯胺。关于相关实例,参见Miyawaki, K.等人Heterocycles [杂环] (2001), 54, 887、W02003/028729和W0 2013/066839。此反应示于方案8中。

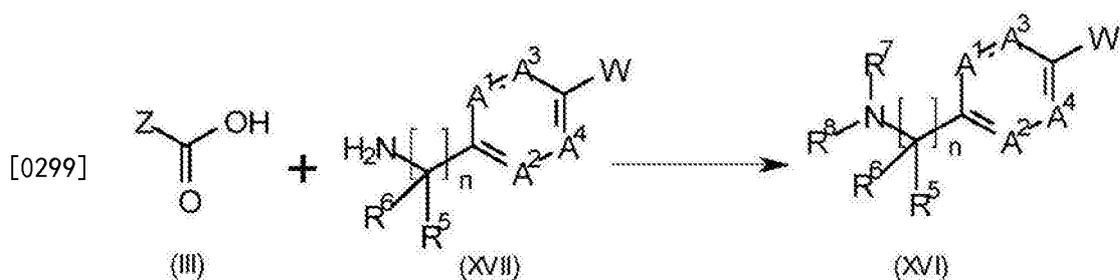
[0295]



[0296] 具有化学式 (XIV) 的化合物 (其中 n 是 1 并且 X 是 Cl 或 Br) 可以从具有化学式 (XV) 的化合物制备而来, 通过在紫外光的存在下在 55°C 与 100°C 之间的温度下在合适的溶剂 (例如四氯甲烷) 中用卤素源 (例如 N -溴代琥珀酰亚胺 (NBS) 或 N -氯代琥珀酰亚胺 (NCS)) 和自由基引发剂 (例如 $(\text{PhCO}_2)_2$ 或偶氮二异丁腈 (AIBN)) 进行处理。关于相关实例, 参见 Liu, S. 等人 *Synthesis* [合成] (2001), 14, 2078 和 Kompella, A. 等人 *Org. Proc. Res. Dev.* [有机加工研究与开发] (2012), 16, 1794。此反应示于方案 9 中。

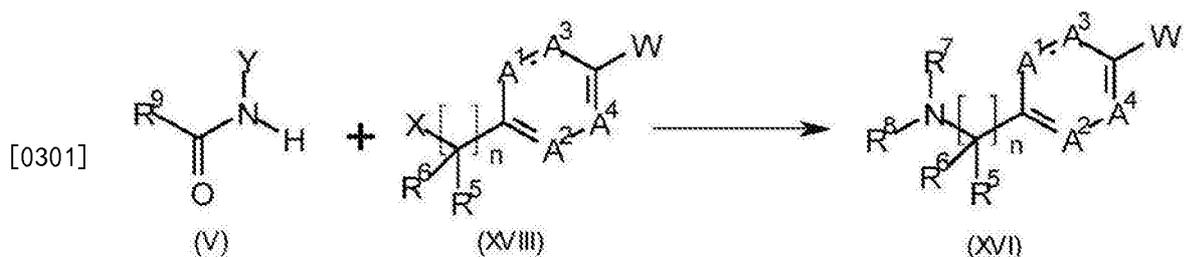


[0298] 具有化学式 (XVI) 的化合物 (其中 W 是 Br、I、或 CN) 可以通过与具有化学式 (III) 的化合物 (其中 Z 表示 $-\text{R}^9$ 、 $-\text{OR}^{10}$ 、或 $-\text{N}(\text{R}^{11})\text{R}^{12}$) 和具有化学式 (XVII) 的化合物进行酰胺偶联转化来获得, 通过活化具有化学式 (III) 的化合物的羧酸官能团, 一个通常通过将羧酸的 $-\text{OH}$ 转化为好的离去基团 (如氯化物基团) 而发生的过程, 例如通过在使用具有化学式 (XVII) 的化合物处理之前使用 $(\text{COCl})_2$ 或 SOCl_2 , 优选地在合适的溶剂 (例如, 二甲基甲酰胺、二氯甲烷或四氢呋喃) 中, 优选地在 25°C 与 100°C 之间的温度下, 并且任选地在碱 (如三乙胺或 N,N -二异丙基乙胺) 的存在下, 或者在文献中针对酰胺偶联描述的条件下。此反应示于下文方案 12 中。例如, 参见 W0 2003/028729; Dosa, S. 等人 *Bioorg. Med. Chem.* [生物有机与药物化学] (2012), 20, 6489; 以及 W0 2014/093378。具有化学式 (III) 的化合物是可商购的或使用已知方法制备。关于相关实例, 参见: Nelson, T. D. 等人 *Tetrahedron Lett.* [四面体快报] (2004), 45, 8917; Senthil, K. 等人 *Pesticide Research Journal* [杀有害生物剂研究杂志] (2009), 21, 133; 和 Crich, D., Zou, Y. J. *Org. Chem.* [有机化学杂志] (2005), 70, 3309。此反应示于方案 10 中。



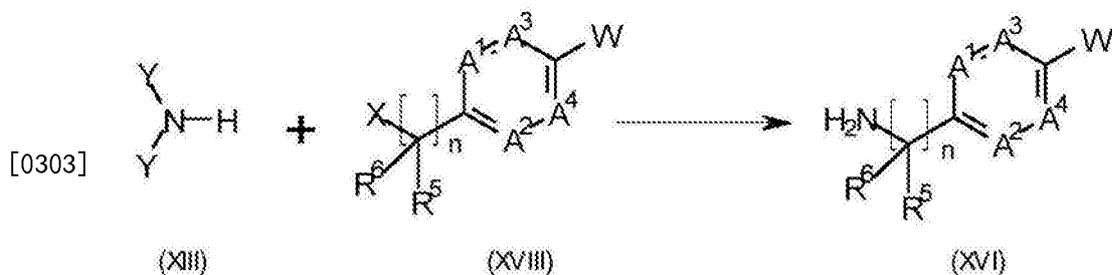
方案 10

[0300] 可替代地,具有化学式 (XVI) 的化合物 (其中 R^8 是 $-C(O)R^9$ 并且 W 是 Br 、 I 、或 CN) 可以从具有化学式 (XVIII) 的化合物 (其中 X 是 Cl 、 Br 或 I) 制备而来,通过在 $0^\circ C$ 与 $100^\circ C$ 之间的温度下在合适的溶剂 (如二甲基甲酰胺) 中在合适的碱 (如 NaH) 的存在下用具有化学式 (V) 的酰胺 (其中 Y 是叔丁基甲酸酯) 进行处理。在一些情况下,通过使用催化剂 (例如, NaI 或4-二甲基氨基吡啶) 和微波辐射可以获得更好的反应性能。在合适的溶剂 (例如,二噁烷或 $MeOH$) 中用 HCl 或三氟乙酸处理后,除去叔丁基甲酸酯基团并伴随释放具有化学式 (XVI) 的苯酰胺。具有化学式 (XVIII) 的化合物是可商购的。关于相关实例,参见Miyawaki, K. 等人 Heterocycles [杂环] (2001), 54, 887。此反应示于方案11中。



方案 11

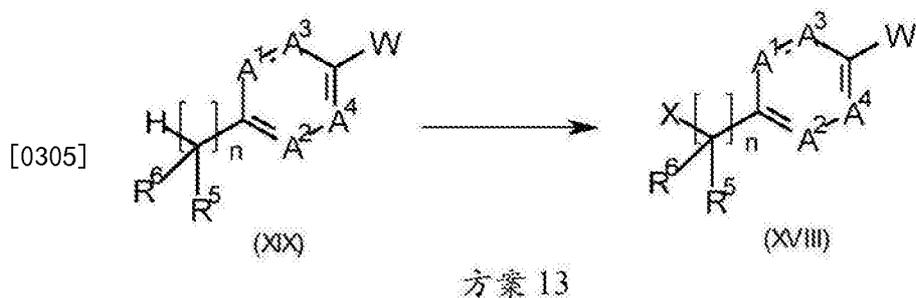
[0302] 可替代地,具有化学式 (XVI) 的化合物 (其中 W 是 Br 、 I 或 CN) 可以从具有化学式 (XVIII) 的化合物 (其中 X 是 Cl 、 Br 、 I 、或 $-OSO_2Me$) 制备而来,通过在 $0^\circ C$ 与 $100^\circ C$ 之间的温度下在合适的溶剂 (例如甲醇或乙醇) 中用具有化学式 (XIII) 的胺 (其中 Y 是叔丁基甲酸酯) 进行处理。在一些情况下,通过使用催化剂 (例如, NaI 或4-二甲基氨基吡啶) 和微波辐射可以获得更好的反应性能。在合适的溶剂 (例如,二噁烷或 $MeOH$) 中用 HCl 或三氟乙酸处理后,除去叔丁基甲酸酯基团并伴随释放具有化学式 (XVI) 的苯胺。关于相关实例,参见 $W0$ 2010/112461、 $W0$ 2008/040492、和 $W0$ 2013/071232。此反应示于方案12中。



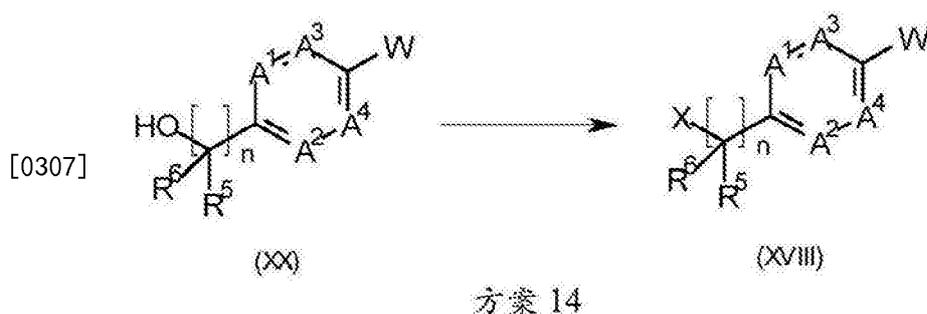
方案 12

[0304] 具有化学式 (XVIII) 的化合物 (其中 W 是 Br 、 I 或 CN 且 X 是 Cl 或 Br) 是可商购的,或者可以从具有化学式 (XIX) 的化合物制备而来,通过在 $55^\circ C$ 与 $100^\circ C$ 之间的温度下在合适的溶剂 (如四氯甲烷) 中在紫外线的存在下用卤素源 (例如, N -溴代琥珀酰亚胺 (NBS) 或 N -氯代琥珀酰亚胺) 进行处理。

珀酰亚胺(NCS))和自由基引发剂(如 $(\text{PhCO}_2)_2$ 或偶氮二异丁腈(AIBN))进行处理。关于相关实例,参见Liu,S.等人Synthesis[合成](2001),14,2078和Kompella,A.等人Org.Proc.Res.Dev.[有机加工研究与开发](2012),16,1794。此反应示于方案13中。



[0306] 可替代地,具有化学式(XVIII)的化合物(其中W是Br、I或CN且X是Cl、Br、I或 OSO_2Me)是可商购的,或者可以从具有化学式(XX)的化合物制备而来,通过在 0°C 与 100°C 之间的温度下在合适的溶剂(例如,二氯甲烷)中在三苯基磷的存在下用卤素源(例如, CBr_4 、 CCl_4 或 I_2)进行处理或者用甲磺酰氯(ClSO_2Me)进行处理。关于相关实例,参见Liu,H.等人Bioorg.Med.Chem.[生物有机与药物化学](2008),16,10013、WO 2014/020350和Kompella,A.等人Bioorg.Med.Chem.Lett.[生物有机与药物化学快报](2001),1,3161。具有化学式(XXII)的化合物是可商购的。此反应示于方案14中。



[0308] 正如已指示,出人意料地,为实际目的,现在已经发现了本发明的具有化学式(I)的新颖化合物有着非常有利水平的生物活性,用来保护植物免受真菌引起的疾病的侵害。

[0309] 可以在农业部门和相关领域中使用具有化学式(I)的化合物,用作例如用于控制植物有害生物的活性成分,或者在非生命材料上使用用于控制腐败微生物或对人潜在有害的有机体。所述新颖化合物的特色是施用比率低但活性高,植物耐受良好以及不危害环境。它们有非常有用的治疗的、预防的和系统性的特质并且可以用于保护无数栽培植株。具有化学式I的化合物可以用于抑制或破坏在不同的有用植物作物的植物或植物部分(果实、花、叶子、茎、块茎、根)上出现的有害生物,同时还保护了例如稍后生长的那些植物部分免于植物病原性微生物的侵害。

[0310] 本发明还涉及用于通过处理植物或植物繁殖材料和/或收获的粮食作物来控制或防止易受微生物攻击的植物或植物繁殖材料和/或收获的食物作物免受侵染的方法,其中将有效量的具有化学式(I)的化合物施用至所述植物、其部分或其场所。

[0311] 还能使用具有化学式(I)的化合物作为杀真菌剂。如本文使用的术语“杀真菌剂”意指控制、修饰或防止真菌生长的化合物。术语“杀真菌有效量”在使用时意指能够对真菌生长产生影响的这样一种化合物或这样的化合物的组合的量。控制或修饰的影响包括所有从自然发育的偏离,如杀死、阻滞等,并且防止包括在植物内或上面防止真菌感染的屏障或

其他防御构造。

[0312] 还能使用具有化学式 (I) 的化合物作为处理植物繁殖材料 (例如, 种子, 如果实、块茎或谷物) 或植物插条的拌种剂, 用于保护对抗真菌感染连同对抗土壤里存在的植物病原性真菌。可以在种植之前将繁殖材料用包含具有化学式 (I) 的化合物的组合物处理, 例如可以在播种之前敷裹种子。还可以通过在液体配制品中浸渍种子或通过用固体配制品包衣它们, 将具有化学式 (I) 的活性化合物施用至谷物 (包衣)。还可以在种植繁殖材料时, 将组合物施用至种植位点, 例如在播种期间施用至种子的犁沟。本发明还涉及处理植物繁殖材料的这样的方法, 并且涉及如此处理的植物繁殖材料。

[0313] 此外, 具有化学式 (I) 的化合物可以用于控制相关领域的真菌, 所述领域是例如在工业材料 (包括木材以及与木材有关的工业产品) 的保护中、在食品存储中、在卫生管理中。

[0314] 此外, 本发明还可以用于保护非生命材料 (例如木料、墙板和涂料) 免受真菌攻击。

[0315] 具有化学式 (I) 的化合物例如针对疾病的真菌和真菌载体以及植物病原性细菌和病毒是有效的。这些疾病的真菌和真菌载体以及植物病原性细菌和病毒是例如:

[0316] 伞枝梨头霉、链格孢属、丝囊霉属、壳二孢属、曲霉属 (包括黄曲霉、烟曲霉、构巢曲霉、黑曲霉、土曲霉)、短梗霉属 (包括出芽短梗霉 (*A. pullulans*))、皮炎芽生菌、小麦白粉病菌、莴苣盘梗霉 (*Bremia lactucae*)、葡萄座腔菌属 (包括葡萄溃疡病菌 (*B. dothidea*)、树花地衣葡萄座腔菌 (*B. obtusa*))、葡萄孢属 (包括灰葡萄孢 (*B. cinerea*))、念珠菌属 (包括白色念珠菌、光滑球念珠菌 (*C. glabrata*)、克鲁斯念珠菌 (*C. krusei*)、葡萄牙念珠菌 (*C. lusitaniae*)、近平滑念珠菌 (*C. parapsilosis*)、热带念珠菌 (*C. tropicalis*))、*Cephalosporium fragrans*、长喙壳属、尾孢属 (包括褐斑病菌 (*C. arachidicola*))、晚斑病菌 (*Cercosporidium personatum*)、枝孢霉属、麦角菌、粗球孢子菌、旋孢腔菌属、炭疽菌属 (包括香蕉炭疽病菌 (*C. musae*))、新型隐球菌、间座壳属 (*Diaporthe* spp)、亚隔孢壳属、内脐蠕孢属、痂囊腔菌属、表皮癣菌属、梨火疫病菌、白粉菌属 (包括菊科白粉菌 (*E. cichoracearum*))、葡萄顶枯病菌 (*Eutypa lata*)、镰刀菌属 (包括大刀镰刀菌、禾谷镰刀菌、*F. langsethiae*、串珠镰刀菌、胶孢镰刀菌、茄病镰刀菌、尖孢镰刀菌、层出镰刀菌)、小麦全蚀病菌 (*Gaeumannomyces graminis*)、藤仓赤霉菌 (*Gibberella fujikuroi*)、煤烟病菌 (*Gloeodes pomigena*)、香蕉炭疽盘长孢菌 (*Gloeosporium musarum*)、苹果炭疽病菌 (*Glomerella cingulate*)、葡萄球座菌 (*Guignardia bidwellii*)、植物受桧胶锈菌 (*Gymnosporangium juniperi-virginianae*)、长蠕孢属、驼孢锈菌属、组织胞浆菌属 (包括荚膜组织胞浆菌 (*H. capsulatum*))、红线病菌、*Leptographium lindbergi*、辣椒白粉病菌 (*Leveillula taurica*)、松针散盘壳 (*Lophodermium seditiosum*)、雪霉叶枯菌 (*Microdochium nivale*)、小孢子菌属、链核盘菌属、毛霉属、球腔菌属 (包括禾生球腔菌、苹果黑点病菌 (*M. Pomi*))、树梢枯病菌、云杉病菌、副球孢子菌属、青霉属 (包括指状青霉、意大利青霉)、霉样真霉属、指霜霉属 (包括玉蜀黍指霜霉、菲律宾霜指霉和高粱指霜霉)、霜霉属、颖枯壳针孢、豆薯层锈菌、桑黄火木针层孔菌 (*Phellinus igniarius*)、瓶霉蚁属、茎点霉属、葡萄生拟茎点菌 (*Phomopsis viticola*)、疫霉菌属 (包括致病疫霉菌)、单轴霉属 (包括霍尔单轴霉菌、葡萄霜霉病菌 (*P. viticola*))、格孢腔菌属、叉丝单囊壳属 (包括白叉丝单囊壳 (*P. leucotricha*))、禾谷多粘菌 (*Polymyxa graminis*)、甜菜多粘菌 (*Polymyxa betae*)、小麦基腐病菌 (*Pseudocercospora herpotrichoides*)、假单胞菌属、假霜霉属

(包括黄瓜霜霉病菌、菝草假霜霉)、*Pseudopeziza tracheiphila*、霜霉属属(包括大麦柄锈菌(*P. hordei*)、小麦叶锈病菌(*P. recondita*)、条形柄锈菌(*P. Striiformis*)、小麦褐锈菌(*P. triticina*)、埋核盘菌属、核腔菌属、梨孢属(包括稻瘟病菌(*P. oryzae*))、腐霉属(包括终极腐霉菌)、柱隔孢属、丝核菌属、微小根毛霉(*Rhizomucor pusillus*)、少根根霉、喙孢属、丝孢菌属(包括尖端赛多孢子菌和多育赛多孢子菌)、煤点病(*Schizothyrium pomi*)、核盘菌属、小核菌属、壳针孢属(包括颖枯壳针孢(*S. nodorum*)、小麦壳针孢(*S. tritici*))、草莓白粉病菌(*Sphaerotheca macularis*)、棕丝单囊壳(*Sphaerotheca fusca*) (黄瓜白粉病菌(*Sphaerotheca fuliginea*))、孢子丝菌属(*Sporothrix*)、颖枯壳多孢(*Stagonospora nodorum*)、匍柄霉属(*Stemphylium*)、毛韧革菌(*Stereum hirsutum*)、水稻枯纹病菌(*Thanatephorus cucumeris*)、根串珠霉(*Thielaviopsis basicola*)、腥黑粉菌属、木霉属(包括哈茨木霉、拟康氏木霉、绿色木霉)、毛癣菌属、核瑚菌属、葡萄钩丝壳、条黑粉菌属(*Urocystis*)、黑粉菌属(*Ustilago*)、黑星菌属(包括苹果黑星菌(*V. inaequalis*))、轮枝孢属以及黄单胞菌属。

[0317] 具有化学式(I)的化合物可以用于例如草坪,观赏植物如花卉、灌木、阔叶树木或常绿植物,例如松柏类,以及树木注入、有害生物管理等。

[0318] 在本发明的范围内,有待保护的目标作物和/或有用植物典型地包括多年生和一年生作物,如浆果植物,例如黑莓、蓝莓、蔓越莓、树莓以及草莓;谷类,例如大麦、玉米(maize, corn)、小米、燕麦、水稻、黑麦、高粱、黑小麦以及小麦;纤维植物,例如棉花、亚麻、大麻、黄麻以及剑麻;大田作物,例如糖甜菜和饲料甜菜、咖啡豆、啤酒花、芥菜、油菜(卡诺拉)、罌粟、甘蔗、向日葵、茶以及烟草;果树,例如苹果、杏、鳄梨、香蕉、樱桃、柑橘、油桃、桃、梨以及李子;草,例如百慕大草、蓝草、本特草、蜈蚣草、牛毛草、黑麦草、圣奥古斯丁草以及结缕草;药草,如罗勒、琉璃苣、细香葱、胡荽、薰衣草、独活草、薄荷、牛至、荷兰芹、迷迭香、鼠尾草以及百里香;豆类,例如菜豆、小扁豆、豌豆以及大豆;坚果,例如杏仁、腰果、落花生、榛子、花生、山核桃、开心果以及核桃;棕榈植物,例如油棕榈;观赏植物,例如花卉、灌木和树;其他树木,例如可可、椰子、橄榄以及橡胶;蔬菜,例如芦笋、茄子、西兰花、卷心菜、胡萝卜、黄瓜、大蒜、莴苣、西葫芦、甜瓜、秋葵、洋葱、胡椒、马铃薯、南瓜、大黄、菠菜以及番茄;以及葡萄藤,例如葡萄。

[0319] 术语“有用植物”应当理解为还包括由于常规育种方法或基因工程致使其对除草剂(像溴草腈)或除草剂类(例如像HPPD抑制剂、ALS抑制剂,例如氟嘧磺隆、氟丙磺隆和三氟啶磺隆、EPSPS(5-烯醇-丙酮-莽草酸-3-磷酸-合成酶)抑制剂、GS(谷氨酰胺合成酶)抑制剂或PPO(原卟啉原氧化酶)抑制剂)耐受的有用植物。已经通过常规育种方法(诱变)致使对咪唑啉酮(例如甲氧咪草烟)耐受的作物的实例是Clearfield®夏季油菜(卡诺拉)。已经通过基因工程方法致使对除草剂或除草剂类耐受的作物的实例包括草甘膦和草丁膦抗性玉米品种,它们在RoundupReady®、Herculex I®和LibertyLink®商标名下是可商购的。

[0320] 术语“有用植物”应当理解为还包括已经通过使用重组DNA技术而被这样转化使其能够合成一种或多种选择性作用毒素的有用植物,所述毒素是如已知例如来自于产毒素细菌,尤其是芽孢杆菌属的那些细菌。

[0321] 这样的植物的实例是:YieldGard®(玉米品种,表达CryIA(b)毒素);YieldGard Rootworm®(玉米品种,表达CryIII B(b1)毒素);YieldGardPlus®(玉米品种,表达CryIA

(b) 和CryIIIB(b1) 毒素); **Starlink®** (玉米品种, 表达Cry9(c) 毒素); **Herculex I®** (玉米品种, 表达CryIF(a2) 毒素以及实现对除草剂草丁膦铵的耐受性的酶膦丝菌素N-乙酰转移酶(PAT)); **NuCOTN33B®** (棉花品种, 表达CryIA(c) 毒素); **Bollgard I®** (棉花品种, 表达CryIA(c) 毒素); **Bollgard II®** (棉花品种, 表达CryIA(c) 和CryIIA(b) 毒素); **VIPCOT®** (棉花品种, 表达VIP毒素); **NewLeaf®** (马铃薯品种, 表达CryIIIA毒素); **NatureGard®Agrisure®** GT Advantage (GA21耐草甘膦性状), **Agrisure®** CB Advantage (Bt11玉米螟(CB) 性状), **Agrisure®** Rw (玉米根虫性状) 以及 **Protecta®**。

[0322] 术语“作物”应当理解为还包括已经通过使用重组DNA技术而被这样转化使其能够合成一种或多种选择性作用毒素的作物植物, 所述毒素是如已知例如来自于产毒素细菌, 尤其是芽孢杆菌属的那些细菌。

[0323] 可以通过这样的转基因植物表达的毒素包括例如来自蜡样芽孢杆菌或日本甲虫芽孢杆菌的杀虫蛋白; 或来自苏云金芽孢杆菌的杀虫蛋白, 如 δ -内毒素, 例如Cry1Ab、Cry1Ac、Cry1F、Cry1Fa2、Cry2Ab、Cry3A、Cry3Bb1或Cry9C, 或营养期杀虫蛋白(Vip), 例如Vip1、Vip2、Vip3或Vip3A; 或线虫寄生性细菌的杀虫蛋白, 例如光杆状菌属或致病杆菌属, 如发光光杆状菌、嗜线虫致病杆菌; 由动物产生的毒素, 如蝎毒素、蜘蛛毒素、黄蜂毒素和其他昆虫特异性神经毒素; 由真菌产生的毒素, 如链霉菌毒素; 植物凝集素, 如豌豆凝集素、大麦凝集素或雪花莲凝集素; 凝集素类; 蛋白酶抑制剂, 如胰蛋白酶抑制剂、丝氨酸蛋白酶抑制剂、马铃薯贮存蛋白(patatin)、半胱氨酸蛋白酶抑制剂、木瓜蛋白酶抑制剂; 核糖体失活蛋白(RIP), 如蓖麻蛋白、玉米-RIP、相思豆毒蛋白、丝瓜籽毒蛋白、皂草毒素蛋白或异株泻根毒蛋白; 类固醇代谢酶, 如3-羟基类固醇氧化酶、蜕皮类固醇-UDP-糖基-转移酶、胆固醇氧化酶、蜕皮激素抑制剂、HMG-CoA-还原酶; 离子通道阻断剂, 如钠通道或钙通道阻断剂; 保幼激素酯酶、利尿激素受体、萜合酶、联苯合酶、几丁酶以及葡聚糖酶。

[0324] 进一步地, 在本发明的背景下, δ -内毒素(例如Cry1Ab、Cry1Ac、Cry1F、Cry1Fa2、Cry2Ab、Cry3A、Cry3Bb1或Cry9C) 或营养期杀虫蛋白(Vip)(例如Vip1、Vip2、Vip3或Vip3A) 应理解为显然还包括混合型毒素、截短的毒素和经修饰的毒素。混合型毒素是通过那些蛋白的不同结构域的新组合重组产生的(参见例如, W0 02/15701)。截短的毒素(例如截短的Cry1Ab) 是已知的。在经修饰的毒素的情况下, 天然存在的毒素的一个或多个氨基酸被置换。在这样的氨基酸置换中, 优选地将非天然存在的蛋白酶识别序列插入毒素中, 例如像在Cry3A055的情况下, 组织蛋白酶-G-识别序列被插入Cry3A毒素中(参见W0 03/018810)。

[0325] 这样的毒素或能够合成这样的毒素的转基因植物的实例披露于例如EP-A-0 374 753、W0 93/07278、W0 95/34656、EP-A-0 427 529、EP-A-451 878以及W0 03/052073中。

[0326] 用于制备这样的转基因植物的方法通常是本领域技术人员已知的并且描述在例如以上提及的公开物中。CryI型脱氧核糖核酸及其制备例如从W0 95/34656、EP-A-0 367 474、EP-A-0 401 979和W0 90/13651中已知。

[0327] 包含在转基因植物中的毒素使得植物对有害昆虫有耐受性。这样的昆虫可以存在于任何昆虫分类群, 但尤其常见于甲虫(鞘翅目)、双翅昆虫(双翅目) 和蛾(鳞翅目)。

[0328] 包含一个或多个编码杀虫剂抗性并且表达一种或多种毒素的基因的转基因植物是已知的并且其中一些是可商购的。这样的植物的实例是: **YieldGard®** (玉米品种, 表达Cry1Ab毒素); **YieldGard Rootworm®** (玉米品种, 表达Cry3Bb1毒素); **YieldGard Plus®** (玉

米品种,表达Cry1AB以及Cry3Bb1毒素);Starlink®(玉米品种,表达Cry9C毒素);Herculex I®(玉米品种,表达Cry1Fa2毒素以及实现对除草剂草丁膦铵的耐受性的酶磷丝菌素N-乙酰转移酶(PAT));NuCOTN33B®(棉花品种,表达Cry1Ac毒素);BollgardI®(棉花品种,表达Cry1Ac毒素);BollgardII®(棉花品种,表达Cry1Ac和Cry2Ab毒素);VipCot®(棉花品种,表达Vip3A和Cry1Ab毒素);NewLeaf®(马铃薯品种,表达Cry3A毒素);NatureGard®, Agrisure®GT Advantage (GA21耐草甘膦性状),Agrisure®CB Advantage (Bt11玉米螟(CB)性状)以及Protecta®。

[0329] 这样的转基因作物的其他实例是:

[0330] 1. Bt11玉米,来自先正达种子子公司,霍比特路27,F-31 790圣苏维尔,法国,登记号C/FR/96/05/10。遗传修饰的玉蜀黍,通过转基因表达截短的Cry1Ab毒素,使之能抵抗欧洲玉米螟(玉米螟和粉茎螟)的侵袭。Bt11玉米还转基因地表达PAT酶以达到对除草剂草丁膦铵的耐受性。

[0331] 2. Bt176玉米,来自先正达种子子公司,霍比特路27,F-31 790圣苏维尔,法国,登记号C/FR/96/05/10。遗传修饰的玉蜀黍,通过转基因表达Cry1Ab毒素,使之能抵抗欧洲玉米螟(玉米螟和粉茎螟)的侵袭。Bt176玉米还转基因地表达PAT酶以达到对除草剂草丁膦铵的耐受性。

[0332] 3. MIR604玉米,来自先正达种子子公司,霍比特路27,F-31 790圣苏维尔,法国,登记号C/FR/96/05/10。通过转基因表达经修饰的Cry3A毒素使之具有昆虫抗性的玉米。此毒素是通过插入组织蛋白酶-G-蛋白酶识别序列而经修饰的Cry3A055。这样的转基因玉米植物的制备描述于W0 03/018810中。

[0333] 4. MON 863玉米,来自孟山都欧洲公司(Monsanto Europe S.A.),270-272特弗伦大道(Avenue de Tervuren),B-1150布鲁塞尔,比利时,登记号C/DE/02/9。MON 863表达Cry3Bb1毒素,并且对某些鞘翅目昆虫有抗性。

[0334] 5. IPC 531棉花,来自孟山都欧洲公司,270-272特弗伦大道,B-1150布鲁塞尔,比利时,登记号C/ES/96/02。

[0335] 6. 1507玉米,来自先锋海外公司(Pioneer Overseas Corporation),特德斯科大道路(Avenue Tedesco),7B-1160布鲁塞尔,比利时,登记号C/NL/00/10。遗传修饰的玉米,表达蛋白质Cry1F以获得对某些鳞翅目昆虫的抗性,并且表达PAT蛋白以获得对除草剂草丁膦铵的耐受性。

[0336] 7. NK603×MON 810玉米,来自孟山都欧洲公司,270-272特弗伦大道,B-1150布鲁塞尔,比利时,登记号C/GB/02/M3/03。通过将遗传修饰的品种NK603和MON 810杂交,由常规育种的杂交玉米品种构成。NK603×MON810玉米转基因地表达由土壤杆菌属菌株CP4获得的蛋白质CP4EPSPS,使之耐除草剂Roundup®(含有草甘膦),以及由苏云金芽孢杆菌库尔斯塔克亚种获得的Cry1Ab毒素,使之耐某些鳞翅目昆虫,包括欧洲玉米螟。

[0337] 如本文使用的术语“场所”意指植物在其中或其上生长的地方,或栽培植物的种子被播种的地方,或种子将要被置于土壤中的地方。它包括土壤、种子以及幼苗,连同建立的植被。

[0338] 术语“植物”是指植物的所有有形部分,包括种子、幼苗、幼树、根、块茎、茎、秆、叶

和果实。

[0339] 术语“植物繁殖材料”应当理解为表示植物的生殖部分,如种子,所述部分可以用于所述植物的繁殖,以及营养性材料,如插条或块茎(例如马铃薯)。可以提及例如种子(在严格意义上)、根、果实、块茎、球茎、根茎以及植物的部分。还可以提及在发芽后或破土后将被移植的发芽植物和幼小植物。这些幼小植物可以通过浸渍进行完全或部分处理而在移植之前进行保护。优选地,“植物繁殖材料”应当理解为表示种子。

[0340] 具有化学式I的化合物能以未修饰的形式使用,或者优选地,与配制品领域中常规使用的佐剂一起使用。为此目的,它们可以按已知方式便利地配制为可乳化的浓缩物、可包衣的糊剂、直接可喷雾的或可稀释的溶液或悬浮液、稀释乳液、可湿性粉剂、可溶性粉剂、尘剂、颗粒以及还有封装物,例如在聚合物的物质中。对于所述组合物的类型,根据预期的目的以及盛行环境来选择施用方法,如喷洒、雾化、撒粉、播散、包衣或倾倒。所述组合物还可以含有另外的佐剂,如稳定剂、消泡剂、粘度调节剂、粘合剂或增粘剂,以及肥料、微量营养素供体或其他用于获得特殊效果的配制品。

[0341] 合适的载体以及佐剂(例如对于农业用途)可以是固体或液体的并且是在配制品技术中有用的物质,例如天然或再生的矿物物质、溶剂、分散体、湿润剂、增粘剂、增稠剂、粘合剂或肥料。这样的载体例如描述在WO 97/33890中。

[0342] 悬浮液浓缩物是活性化合物的高度分散的固体颗粒悬浮于其中的水性配制品。这样的配制品包括抗沉降剂和分散剂,并且可以进一步包括湿润剂,以增强活性,以及消泡剂和晶体生长抑制剂。在使用时,将这些浓缩物稀释在水中,并且通常作为喷雾剂施用至有待处理的区域。活性成分的量的范围可以从所述浓缩物的0.5%到95%。

[0343] 可湿性粉剂是处于在水中或其他液态载体中容易分散的高度分散的颗粒形式。所述颗粒含有保存在固体基质里的活性成分。典型的固体基质包括漂白土、高岭土、硅石和其他容易湿化的有机或无机固体。可湿性粉剂通常含有从5%到95%的活性成分加上少量的润湿剂、分散剂或乳化剂。

[0344] 可乳化的浓缩物是在水中或其他液体中可分散的均匀的液体组合物并且可以完全由活性化合物与液体或固体乳化剂组成,或者还可以含有液态载体,如二甲苯、重芳族石脑油、异佛尔酮和其他不挥发有机溶剂。在使用时,将这些浓缩物分散在水中或其他液体中,并且通常作为喷雾剂施用至有待处理的区域。活性成分的量的范围可以从所述浓缩物的0.5%到95%。

[0345] 颗粒配制品包括挤出物和较粗颗粒两者,并且通常不用稀释地施用至需要处理的区域。用于颗粒配制品的典型载体包括沙、漂白土、凹凸棒石粘土、膨润土、蒙脱土、蛭石、珍珠岩、碳酸钙、砖、浮石、叶蜡石、高岭土、白云石、灰泥、木粉、碎玉米穗轴、碎花生壳、糖、氯化钠、硫酸钠、硅酸钠、硼酸钠、氧化镁、云母、氧化铁、氧化锌、氧化钛、氧化锑、冰晶石、石膏、硅藻土、硫酸钙以及其他有机或无机的吸收活性化合物或被活性化合物包衣的材料。颗粒配制品通常含有5%到25%的活性成分,所述成分可以包括表面活性剂,如重芳族石脑油、煤油和其他石油馏分、或者植物油;和/或粘着剂,如糊精、胶粘剂或合成树脂。

[0346] 尘剂是活性成分与高度分散的固体(如滑石、粘土、面粉以及其他有机与无机的作为分散剂和载体的固体)的可自由流动的混合物。

[0347] 微囊典型地为包裹在惰性多孔壳内的活性成分的微滴或颗粒,所述惰性多孔壳允

许以可控的速率让包住的材料逃逸到环境中。包裹的微滴的直径典型地为1微米到50微米。包裹的液体典型地构成胶囊重量的50%至95%并且除了活性化合物外还可以包括溶剂。包裹的颗粒通常是多孔颗粒,其中多孔膜将颗粒孔口密封,从而将活性种类以液体形式保存在颗粒孔内部。颗粒的直径的范围典型地是从1毫米至1厘米并且优选地1毫米至2毫米。颗粒通过挤出、凝聚或成球形成,或者是天然存在的。这样的材料的实例为蛭石、烧结粘土、高岭土、凹凸棒石粘土、锯屑和碳精粒。壳或膜材料包括天然和合成橡胶、纤维材料、苯乙烯-丁二烯共聚物、聚丙烯腈、聚丙烯酸酯、聚酯、聚酰胺、聚脲、聚氨酯和淀粉黄原酸酯。

[0348] 用于农用化学应用的其他有用配制品包括活性成分在溶剂(如丙酮、烷基化萘、二甲苯和其他有机溶剂)中的简单溶液,在所述溶剂中活性成分以所希望的浓度完全溶解。也可以使用加压的喷雾剂,其中由于低沸点分散剂溶剂载体的蒸发活性成分以高度分散的形式分散。

[0349] 在上述配制品类型中对于配制本发明的组合物有用的合适的农用佐剂和载体是本领域的普通技术人员熟知的。

[0350] 可以利用的液态载体包括例如水、甲苯、二甲苯、石脑油、作物油、丙酮、甲基乙基酮、环己酮、乙酸酐、乙腈、乙酰苯、乙酸戊酯、2-丁酮、氯苯、环己烷、环己醇、乙酸烷基酯、二丙酮醇、1,2-二氯丙烷、二乙醇胺、对-二乙基苯、二甘醇、松香酸二甘醇酯、二甘醇丁基醚、二甘醇乙醚、二甘醇甲醚、N,N-二甲基甲酰胺、二甲基亚砷、1,4-二噁烷、二丙二醇、二丙二醇甲醚、二丙二醇二苯甲酸酯、二丙二醇(diproxitol)、烷基吡咯烷酮、乙酸乙酯、2-乙基己醇、碳酸亚乙酯、1,1,1-三氯乙烷、2-庚酮、 α -蒎烯、d-蒎烯、乙二醇、乙二醇丁醚、乙二醇甲醚、 γ -丁内酯、甘油、甘油二乙酸酯、甘油一乙酸酯、甘油三乙酸酯、十六烷、己二醇、乙酸异戊酯、乙酸异冰片酯、异辛烷、异佛尔酮、异丙苯、肉豆蔻酸异丙酯、乳酸、月桂胺、异丙叉丙酮、甲氧基丙醇、甲基异戊酮、甲基异丁基酮、月桂酸甲酯、辛酸甲酯、油酸甲酯、二氯甲烷、间二甲苯、正己烷、正辛胺、十八酸、乙酸辛胺酯、油酸、油胺、邻二甲苯、苯酚、聚乙二醇(PEG400)、丙酸、丙二醇、丙二醇单甲醚、对二甲苯、甲苯、磷酸三乙酯、三甘醇、二甲苯磺酸、石蜡、矿物油、三氯乙烯、全氯乙烯、乙酸乙酯、乙酸戊酯、乙酸丁酯、甲醇、乙醇、异丙醇、以及更高分子量的醇类如戊醇、四氢糠醇、己醇、辛醇等,乙二醇、丙二醇、甘油以及N-甲基-2-吡咯烷酮。水通常是用以稀释浓缩物的选用载体。

[0351] 合适的固体载体包括例如滑石、二氧化钛、叶腊石粘土、硅石、凹凸棒石粘土、硅藻土(kieselguhr)、白垩、硅藻土(diatomaceous earth)、石灰、碳酸钙、膨润土、漂白土、棉子壳、小麦粉、大豆粉、浮石、木粉、核桃壳粉以及木质素。

[0352] 在所述液体和固体组合物中可有利地采用广泛的表面活性剂,尤其是被设计为可在施用前用载体稀释的那些。这些试剂在使用时通常按重量计组成配制品的从0.1%到15%。它们在性质上可以是阴离子的、阳离子的、非离子的或聚合的并且可以作为乳化剂、润湿剂、悬浮剂或以其他目的采用。典型的表面活性剂包括烷基硫酸酯的盐,如十二烷基硫酸二乙醇铵;烷基芳基磺酸盐,如十二烷基苯磺酸钙;烷基酚-环氧烷加成产物,如壬基酚C₁₈乙氧基化物;醇-环氧烷加成产物,如十三烷基醇-C₁₆乙氧基化物;皂,如硬脂酸钠;烷基萘磺酸盐,如二丁基萘磺酸钠;磺基琥珀酸盐的二烷基酯,如二(2-乙基己基)磺基琥珀酸钠;山梨糖醇酯,如山梨糖醇油酸酯;季胺类,如氯化十二烷基三甲基铵;脂肪酸的聚乙二醇酯,如聚乙二醇硬脂酸酯;环氧乙烷和环氧丙烷的嵌段共聚物;以及单和二烷基磷酸酯盐。

[0353] 通常在农业组合物中使用的其他佐剂包括结晶作用抑制剂、粘度改性剂、悬浮剂、喷雾液滴改性剂、颜料、抗氧化剂、发泡剂、防泡剂、遮光剂、相容性试剂、消泡剂、掩蔽剂、中和剂和缓冲剂、腐蚀抑制剂、染料、增味剂、铺展剂、渗透助剂、微量营养素、柔润剂、润滑剂以及固着剂。

[0354] 此外,进一步地,其他杀生物的活性成分或组合物可以与本发明的组合物组合,并且用于本发明的方法中并且同时地或顺序地随着本发明的组合物施用。当同时施用时,这些另外的活性成分可以连同本发明的组合物一起配制或混合于例如喷雾罐中。这些另外的杀生物的活性成分可以是杀真菌剂、除草剂、杀昆虫剂、杀细菌剂、杀螨剂、杀线虫剂和/或植物生长调节剂。

[0355] 本文提及的使用其俗名的杀有害生物剂是已知的,例如,从“The Pesticide Manual [杀有害生物剂手册]”,第15版,英国作物保护委员会(British Crop Protection Council) 2009。

[0356] 此外,本发明的组合物还可以与一种或多种系统获得性抗性诱导剂(“SAR”诱导剂)一起施用。SAR诱导剂是已知的并且描述于例如美国专利号US 6,919,298中,并且包括例如水杨酸盐以及商用的SAR诱导剂阿拉酸式苯-S-甲基。

[0357] 具有化学式(I)的化合物通常以农用化学组合物的形式使用并且可以与另外的化合物同时地或顺序地施用至作物区域或有待处理的作物。例如,这些另外的化合物可以是影响植物生长的肥料或微量营养素供体或其他制剂。它们还可以是选择性除草剂或非选择性除草剂,连同杀昆虫剂、杀真菌剂、杀细菌剂、杀线虫剂、杀软体动物剂或几种这些制剂的混合物,如果希望的话与配制品领域中通常使用的另外的载体、表面活性剂或促进施用的佐剂一起。

[0358] 具有化学式(I)的化合物可以按控制或保护对抗植物病原性微生物的(杀真菌的)组合物的形式使用,所述组合物包含至少一种具有化学式(I)的化合物或至少一种优选的如本文所定义的个别化合物作为活性成分(处于游离形式或处于农用化学上可用的盐形式)和上述佐剂中的至少一种。

[0359] 因此,本发明提供了包含至少一种具有化学式(I)的化合物、农业上可接受的载体和任选地佐剂的组合物,优选杀真菌组合物。农业上可接受的载体是例如适合农业用途的载体。农业载体在本领域是熟知的。优选地,除了具有化学式(I)的化合物,所述组合物还可以包含至少一种或多种杀有害生物活性化合物,例如另外的杀真菌活性成分。

[0360] 具有化学式(I)的化合物可以是组合物的唯一活性成分,或者适当时它可以与一种或多种另外的活性成分(如杀有害生物剂、杀真菌剂、增效剂、除草剂或植物生长调节剂)混合。在一些情况下,另外的活性成分会导致出人意料的协同活性。

[0361] 合适的另外的活性成分的实例包括以下项:无环氨基酸(acycloamino acid)杀真菌剂、脂肪族氮杀真菌剂、酰胺杀真菌剂、苯胺杀真菌剂、抗生素杀真菌剂、芳香族杀真菌剂、含砷杀真菌剂、芳基苯基酮杀真菌剂、苯甲酰胺杀真菌剂、苯甲酰苯胺杀真菌剂、苯并咪唑杀真菌剂、苯并噻唑杀真菌剂、植物杀真菌剂、桥联苯基杀真菌剂、氨基甲酸酯杀真菌剂、苯氨基甲酸酯杀真菌剂、康唑杀真菌剂、铜杀真菌剂、二甲酰亚胺杀真菌剂、二硝基苯酚杀真菌剂、二硫代氨基甲酸酯杀真菌剂、二硫戊环杀真菌剂、糠酰胺杀真菌剂、糠苯胺杀真菌剂、酰肼真菌剂、咪唑杀真菌剂、汞杀真菌剂、吗啉杀真菌剂、有机磷杀真菌剂、有机锡杀真

菌剂、氧硫杂环己二烯(oxathiin)杀真菌剂、噁唑杀真菌剂、苯硫酰胺杀真菌剂、多硫化物杀真菌剂、吡唑杀菌剂、吡啶杀真菌剂、嘧啶杀真菌剂、吡咯杀真菌剂、季铵杀真菌剂、喹啉杀真菌剂、醌杀真菌剂、喹啉杀真菌剂、嗜球果伞素杀真菌剂、磺酰苯胺(sulfonanilide)杀真菌剂、噻二唑杀真菌剂、噻唑杀真菌剂、噻唑烷杀真菌剂、硫代氨基甲酸酯杀真菌剂、噻吩杀真菌剂、三嗪杀真菌剂、三唑杀真菌剂、三唑并嘧啶杀真菌剂、尿素杀真菌剂、缬氨酰胺(valinamide)杀真菌剂以及锌杀真菌剂。

[0362] 合适的另外的活性成分的实例也包括以下项:3-二氟甲基-1-甲基-1H-吡唑-4-甲酸(9-二氯亚甲基-1,2,3,4-四氢-1,4-甲撑-萘-5-基)-酰胺、3-二氟甲基-1-甲基-1H-吡唑-4-甲酸甲氧基-[1-甲基-2-(2,4,6-三氯苯基)-乙基]-酰胺、1-甲基-3-二氟甲基-1H-吡唑-4-甲酸(2-二氯亚甲基-3-乙基-1-甲基-茛满-4-基)-酰胺(1072957-71-1)、1-甲基-3-二氟甲基-1H-吡唑-4-甲酸(4'-甲基磺酰基-联苯基-2-基)-酰胺、1-甲基-3-二氟甲基-4H-吡唑-4-甲酸[2-(2,4-二氯-苯基)-2-甲氧基-1-甲基-乙基]-酰胺、(5-氯-2,4-二甲基-吡啶-3-基)-(2,3,4-三甲氧基-6-甲基-苯基)-甲酮、(5-溴-4-氯-2-甲氧基-吡啶-3-基)-(2,3,4-三甲氧基-6-甲基-苯基)-甲酮、2-{2-[(E)-3-(2,6-二氯-苯基)-1-甲基-丙-2-烯-(E)-亚氨基氧基甲基]-苯基}-2-[(Z)-甲氧基亚氨基]-N-甲基-乙酰胺、3-[5-(4-氯-苯基)-2,3-二甲基-异噁唑烷-3-基]-吡啶、(E)-N-甲基-2-[2-(2,5-二甲基苯氧基甲基)苯基]-2-甲氧基-亚氨基乙酰胺、4-溴-2-氰基-N,N-二甲基-6-三氟甲基苯并咪唑-1-磺胺、 α -[N-(3-氯-2,6-二甲苯基)-2-甲氧基乙酰胺基]- γ -丁内酯、4-氯-2-氰基-N,N-二甲基-5-对甲苯基咪唑-1-磺胺、N-烯丙基-4,5,-二甲基-2-三甲基甲硅烷基噻吩-3-甲酰胺、N-(1-氰基-1,2-二甲基丙基)-2-(2,4-二氯苯氧基)丙酰胺、N-(2-甲氧基-5-吡啶基)-环丙烷甲酰胺、(.+.-)-顺式-1-(4-氯苯基)-2-(1H-1,2,4-三唑-1-基)-环庚醇、2-(1-叔丁基)-1-(2-氯苯基)-3-(1,2,4-三唑-1-基)-丙-2-醇、2',6'-二溴-2-甲基-4-三氟甲氧基-4'-三氟甲基-1,3-噻唑-5-甲酰苯胺、1-咪唑基-1-(4'-氯苯氧基)-3,3-二甲基丁-2-酮、(E)-2-[2-[6-(2-氰基苯氧基)嘧啶-4-基氧基]苯基]3-甲氧基丙烯酸甲酯、(E)-2-[2-[6-(2-氨基苯氧基)嘧啶-4-基氧基]苯基]-3-甲氧基丙烯酸甲酯、(E)-2-[2-[6-(2-氟苯氧基)嘧啶-4-基氧基]苯基]-3-甲氧基丙烯酸甲酯、(E)-2-[2-[6-(2,6-二氟苯氧基)嘧啶-4-基氧基]苯基]-3-甲氧基丙烯酸甲酯、(E)-2-[2-[3-(嘧啶-2-基氧基)苯氧基]苯基]-3-甲氧基丙烯酸甲酯、(E)-2-[2-[3-(5-甲基嘧啶-2-基氧基)-苯氧基]苯基]-3-甲氧基丙烯酸甲酯、(E)-2-[2-[3-(苯基-磺酰基氧基)苯氧基]苯基]-3-甲氧基丙烯酸甲酯、(E)-2-[2-[3-(4-硝基苯氧基)苯氧基]苯基]-3-甲氧基丙烯酸甲酯、(E)-2-[2-苯氧基苯基]-3-甲氧基丙烯酸甲酯、(E)-2-[2-(3,5-二甲基-苯甲酰基)吡咯-1-基]-3-甲氧基丙烯酸甲酯、(E)-2-[2-(3-甲氧基苯氧基)苯基]-3-甲氧基丙烯酸甲酯、(E)-2[2-(2-苯基乙烯-1-基)-苯基]-3-甲氧基丙烯酸甲酯、(E)-2-[2-(3,5-二氯苯氧基)吡啶-3-基]-3-甲氧基丙烯酸甲酯、(E)-2-(2-(3-(1,1,2,2-四氟乙氧基)苯氧基)苯基)-3-甲氧基丙烯酸甲酯、(E)-2-(2-[3-(α -羟基苄基)苯氧基]苯基)-3-甲氧基丙烯酸甲酯、(E)-2-(2-(4-苯氧基吡啶-2-基氧基)苯基)-3-甲氧基丙烯酸甲酯、(E)-2-[2-(3-正丙基氧基-苯氧基)苯基]3-甲氧基丙烯酸甲酯、(E)-2-[2-(3-异丙基氧基苯氧基)苯基]-3-甲氧基丙烯酸甲酯、(E)-2-[2-[3-(2-氟苯氧基)苯氧基]苯基]-3-甲氧基丙烯酸甲酯、(E)-2-[2-(3-乙氧基苯氧基)苯基]-3-甲氧基丙烯酸甲酯、(E)-2-[2-(4-叔丁基-吡啶-2-基氧基)苯基]-3-甲氧基丙烯酸甲酯、(E)-2-[2-[3-(3-氰基

苯氧基]苯氧基]苯基]-3-甲氧基丙烯酸甲酯、(E)-2-[2-[(3-甲基-吡啶-2-基氧基甲基)苯基]-3-甲氧基丙烯酸甲酯、(E)-2-[2-[6-(2-甲基-苯氧基)吡啶-4-基氧基]苯基]-3-甲氧基丙烯酸甲酯、(E)-2-[2-(5-溴-吡啶-2-基氧基甲基)苯基]-3-甲氧基丙烯酸甲酯、(E)-2-[2-(3-(3-碘吡啶-2-基氧基)苯氧基)苯基]-3-甲氧基丙烯酸甲酯、(E)-2-[2-[6-(2-氯吡啶-3-基氧基)吡啶-4-基氧基]苯基]-3-甲氧基丙烯酸甲酯、(E), (E)-2-[2-(5,6-二甲基吡啶-2-基甲基肟基甲基)苯基]-3-甲氧基丙烯酸甲酯、(E)-2-[2-[6-(6-甲基吡啶-2-基氧基)吡啶-4-基氧基]苯基]-3-甲氧基-丙烯酸甲酯、(E), (E)-2-[2-(3-甲氧基苯基)甲基肟基甲基]-苯基]-3-甲氧基丙烯酸甲酯、(E)-2-[2-(6-(2-叠氮基苯氧基)-吡啶-4-基氧基]苯基]-3-甲氧基丙烯酸甲酯、(E), (E)-2-[2-[6-苯基吡啶-4-基]-甲基肟基甲基]苯基]-3-甲氧基丙烯酸甲酯、(E), (E)-2-[2-[(4-氯苯基)-甲基肟基甲基]-苯基]-3-甲氧基丙烯酸甲酯、(E)-2-[2-[6-(2-正丙基苯氧基)-1,3,5-三嗪-4-基氧基]苯基]-3-甲氧基丙烯酸甲酯、(E), (E)-2-[2-[(3-硝基苯基)甲基肟基甲基]苯基]-3-甲氧基丙烯酸甲酯、3-氯-7-(2-氮杂-2,7,7-三甲基-辛-3-烯-5-ine)、2,6-二氯-N-(4-三氟甲基苄基)-苯甲酰胺、3-碘-2-丙炔醇、4-氯苯基-3-碘炔丙基缩甲醛、3-溴-2,3-二碘-2-丙烯基乙基氨基甲酸酯、2,3,3-三碘烯丙醇、3-溴-2,3-二碘-2-丙烯醇、3-碘-2-丙炔基正丁基氨基甲酸酯、3-碘-2-丙炔基正己基氨基甲酸酯、3-碘-2-丙炔基环己基-氨基甲酸酯、3-碘-2-丙炔基苯基氨基甲酸酯；苯酚衍生物，如三溴苯酚、四氯酚、3-甲基-4-氯酚、3,5-二甲基-4-氯酚、苯氧乙醇、二氯酚、邻苯基苯酚、间苯基苯酚、对苯基苯酚、2-苄基-4-氯酚、5-羟基-2(5H)-咪唑酮；4,5-二氯二噻唑啉酮、4,5-苯并二噻唑啉酮、4,5-三亚甲基二噻唑啉酮、4,5-二氯-(3H)-1,2-二硫基1-3-酮、3,5-二甲基-四氢-1,3,5-噻二嗪-2-硫酮、N-(2-对氯苯甲酰乙基)-氯化六甲撑四胺、活化酯、八九十混酸(acypetacs)、棉铃威、阿苯达唑、杀螟丹(aldimorph)、蒜素、烯丙醇、辛唑啉菌胺、吡唑磺菌胺、阿姆巴(amobam)、氨丙膦酸(ampropylfos)、敌菌灵、福美砷(asomate)、金色制霉素(aureofungin)、阿扎康唑、阿扎芬定(azafendin)、氧化福美双杀菌剂(azithiram)、噻菌酯、钡多硫化物、苯霜灵、苯霜灵-M、麦锈灵(benodanil)、苯菌灵、敌菌胺、丙唑草隆(bentaluron)、苯噻菌胺、苯噻硫氰、氯化苄烷铵、节烯酸(benzamacril)、苯杂吗(benzamorf)、苯甲羟肟酸、苯并烯氟菌唑(benzovindiflupyr)、黄连素、百杀辛(bethoxazin)、双苯三唑醇(biloxazol)、乐杀螨、联苯基、联苯三唑醇、硫双二氯酚、联苯吡菌胺(bixafen)、杀稻瘟菌素-S、啉酰菌胺、溴菌腈、糠菌唑、乙嘧酚磺酸酯、丁硫啉、丁胺多硫化钙、敌菌丹、克菌丹、吗菌威、多菌灵、多菌灵盐酸盐、萎锈灵、加普胺、香芹酮、CGA41396、CGA41397、灭螨猛、壳聚糖、灭痕唑(chlobenthiazole)、双胺灵、氯醌、氯芬唑、地茂散、氯化苦、百菌清、克氯得(chlorozolinate)、乙菌利、氯咪巴唑、克霉唑、克拉康(clozylacon)、含铜的化合物如乙酸铜、碳酸铜、氢氧化铜、环烷酸铜、油酸铜、氯化铜、氧基喹啉铜、硅酸铜、硫酸铜、树脂酸铜、铬酸铜锌和波尔多混合物、甲酚、硫杂灵、福美铜氯(cuprobam)、亚铜的氧化物、氰霜唑、环菌胺(cyclafuramid)、放线菌酮、环氟菌胺、霜脲氰、氰菌灵(cypendazole)、环唑醇、噻菌环胺、棉隆、咪菌威、癸磷锡、脱氢乙酸、二-2-吡啶基二硫化物1,1'-二氧化物、抑菌灵(dichlofluanid)、哒菌清、二氯萘醌、氯硝胺、双氯酚、菌核利、苄氯三唑醇、双氯氰菌胺、乙霉威、苯醚甲环唑、野燕枯、二氟林、0,0-二异-丙基-S-苄基硫代磷酸盐、地美福唑(dimetfluzole)、菌核净、地美康唑(dimetconazole)、烯酰吗啉、二甲噻酚、烯唑醇、烯唑醇-M、敌螨通、敌螨普、邻敌螨消、硝戊酯(dinopenton)、硝辛酯

(dinosulfon)、硝丁酯(dinoterbon)、二苯胺、双吡硫翁、戒酒硫、灭菌磷(ditalimfos)、二噻农、二硫基醚、十二烷基二甲基氯化铵、十二环吗啉、多地辛、多果定、十二烷基胍醋酸盐、敌菌酮、敌瘟磷、烯肟菌酯、氟环唑、乙环唑、代森硫(etem)、噻唑菌胺、乙嘧酚、乙氧喹、乙蒜素(ethilicin)、(Z)-N-苄基-N([甲基(甲基-硫代亚乙基氨基-氧基羰基)氨基]硫基)-β-氨基丙酸乙酯、土菌灵、恶唑菌酮、咪唑菌酮、地克松、咪菌腈、氯苯嘧啶醇、腈苯唑、甲呋酰胺、环酰菌胺、种衣酯、氰菌胺、拌种咯、苯锈啶、丁苯吗啉、胺苯吡菌酮、三苯锡醋酸盐、三苯基氢氧化锡、福美铁、嘧菌脞、氟啶胺、咯菌腈、氟美托、氟吗啉、氟吡菌胺(flupicolide)、氟吡菌酰胺、唑呋草、三氟苯唑(flutriazole)、氟嘧菌酯、氟喹唑、氟硅唑、磺菌胺、氟酰胺(flutanol)、氟酰胺、粉唑醇、氟唑菌酰胺、灭菌丹、甲醛、三乙膦酸、麦穗宁、呋霜灵、福拉比、二甲呋酰胺、呋菌唑、糠醛、茂谷乐、呋菌隆、果绿定、灰黄霉素、双胍辛胺、丙烯酸喹啉酯(halacrinat)、六氯苯、六氯丁二烯、六氯酚、己唑醇、环己硫磷(hexylthiofos)、汞加芬(hydrargaphen)、羟基异噁唑、恶霉灵、抑霉唑、抑霉唑硫酸盐、亚胺唑、双胍辛胺、双胍辛胺三乙酸酯、枯瘟净(inezin)、碘代丙炔基丁基甲胺酸酯(iodocarb)、种菌唑、ipfentrifluconazole、异稻瘟净、异菌脞、丙森锌、异丙基丁基氨基甲酸酯、稻瘟灵、吡唑萘菌胺、异噻菌胺、氯苯咪菌酮(isovalledione)、浸种磷(izopamfos)、春雷霉素、醚菌酯-甲基、LY186054、LY211795、LY248908、代森锰锌、双炔酰菌胺、代森锰、邻酰胺、咪卡病西(mecarbinzid)、精甲霜灵、mefentrifluconazole、嘧菌胺、灭锈胺、氯化汞、氯化亚汞、消螨多(meptyldinocap)、甲霜灵、精甲霜灵-M、威百亩、胂叉噁唑酮(metazoxolon)、叶菌唑、磺菌威、呋菌胺、甲基溴、甲基碘、异硫氰酸甲酯、代森联、代森联-锌、苯氧菌胺、苯菌酮、噻菌胺、代森环(milneb)、吗啉胍(moroxydine)、腈菌唑、甲菌利(myclozolin)、代森钠(nabam)、那他霉素、田安、福美镍、硝基苯乙烯、酞菌酯、氟苯嘧啶醇、异噻菌酮、呋酰胺、有机汞化合物类、肟醚菌胺、蛇床子素(osthol)、噁霜灵、环氧嘧磺隆、奥辛-铜(oxine-copper)、噁唑酸、欧伯克唑(oxpoconazole)、氧化萎锈灵、苯吡醇(parinol)、稻瘟酯、戊菌唑、戊菌隆、戊苯吡菌胺、五氯酚、吡噻菌胺、氰烯菌酯、叶枯净、氯瘟磷(phosdiphen)、疫霉灵-AI、磷酸类、苯酞、啉氧菌酯、粉病灵、多氨基甲酸酯、多氧菌素D、多氧瑞莫(polyoxrim)、代森联(polyram)、烯丙苯噻唑、咪鲜胺、腐霉利、普罗帕脞(propamidine)、霜霉威、丙环唑、丙森锌、丙酸、丙氧喹啉、硫菌威(prothiocarb)、丙硫菌唑、氟唑菌酰羟胺(pydiflumetofen)、比锈灵、唑菌胺酯、唑胺菌酯(pyrametrostrobin)、唑菌酯、定菌磷、吡菌苯威、啉菌腈(pyridinitril)、啉斑肟、嘧霉胺、吡奥芬酮(pyriofenone)、咯唑酮、吡氯灵(pyroxychlor)、氯吡呋醚、吡咯尼林、季铵化合物、羟基喹啉基乙酮(quinacetol)、醌菌脞(quinazamid)、唑喹菌酮(quinconazole)、灭螨猛、喹氧灵、五氯硝基苯、吡咪唑(rabenzazole)、蛔蒿素(santonin)、环苯吡菌胺(sedaxane)、硅噻菌胺、硅氟唑、西克唑(sipconazole)、五氯酚钠、螺环菌胺、链霉素、硫、戊苯砒(sultropen)、戊唑醇、异丁乙氧喹啉(tebfloquin)、叶枯酞、四氯硝基苯、tecoram、氟醚唑、噻苯达唑、噻二氟(thiadifluor)、噻菌腈(thicyofen)、噻氟菌胺、2-(硫氰基甲硫基)苯并噻唑、硫菌灵-甲基、克杀螨(thioquinox)、塞仑、噻酰菌胺、亚胺唑(timibenconazole)、硫氰苯甲酰胺(tioxymid)、立枯磷-甲基、对甲抑菌灵、三唑酮、三唑醇、威菌磷(triamiphos)、嘧菌醇(triarimol)、丁三唑、咪唑嗪、三环唑、十三吗啉、肟菌酯、啉虫咪(triflumazole)、噻氨灵、氟菌唑、灭菌唑、烯效唑、福美甲肟(urbacide)、井冈霉素、霜霉灭(valifenalate)、威百、乙烯菌核利、氰菌胺

(zarilamid)、代森锌、福美锌以及苯酰菌胺。

[0363] 本发明的化合物也可以与驱蠕虫药剂组合使用。这样的驱蠕虫药剂包括选自大环内酯类化合物的化合物,如伊维菌素、阿维菌素、阿巴美丁、依马克丁、依立诺克丁、多拉克汀、司拉克丁、莫昔克丁、奈马克丁以及米尔倍霉素衍生物,如在EP-357460、EP-444964以及EP-594291中所述。另外的驱蠕虫药剂包括半合成及生物合成阿维菌素/米尔倍霉素衍生物,如在US-5015630、W0-9415944以及W0-9522552中所述的那些。另外的驱蠕虫药剂包括苯并咪唑类,如阿苯达唑、坎苯达唑、芬苯达唑、氟苯达唑、甲苯达唑、奥芬达唑、奥苯达唑、帕苯达唑、以及所述类别的其他成员。另外的驱蠕虫药剂包括咪唑并噻唑类以及四氢嘧啶类,如四咪唑、左旋咪唑、双羟萘酸噻嘧啶、奥克太尔或莫仑太尔。另外的驱蠕虫药剂包括杀吸虫剂(如三氯苯达唑和氯舒隆)以及杀绦虫剂(如吡喹酮和依西太尔)。

[0364] 本发明的化合物可以与对郝青酰胺(paraherquamide)/马可氟汀(marcfortine)类驱蠕虫药剂的衍生物及类似物以及抗寄生虫噁唑啉(如在US-5478855、US-4639771和DE-19520936中所披露的)组合使用。

[0365] 本发明的化合物可以与如W0 96/15121中所述的一般种类二氧代吗啉抗寄生虫剂的衍生物及类似物以及还与驱蠕虫活性的环状缩酚肽(如W0 96/11945、W0 93/19053、W0 93/25543、EP 0 626 375、EP 0 382 173、W0 94/19334、EP 0 382 173和EP 0 503 538中所述的那些)组合使用。

[0366] 本发明的化合物可以与其他杀体外寄生虫药组合使用;例如氟虫腈;拟除虫菊酯;有机磷酸酯;昆虫生长调节剂(如虱螨脲);蜕皮激素促效剂(如虫酰肼等);新烟碱(如吡虫啉等)。

[0367] 本发明的化合物可以与萜烯生物碱类组合使用,例如国际专利申请公开号W0 95/19363或W0 04/72086中所述的那些,特别是其中所披露的化合物。

[0368] 可以与本发明的化合物组合使用的这样的生物活性化合物的其他实例包括但不限于以下项:

[0369] 有机磷酸酯:乙酰甲胺磷、甲基吡啶磷、乙基谷硫磷、甲基谷硫磷、溴硫磷、乙基溴硫磷、硫线磷、四氯乙磷(chlorethoxyphos)、毒死蜱、氯芬磷、氯甲磷、内吸磷、内吸磷-S-甲基、内吸磷-S-甲基砜、氯亚胺硫磷、二嗪磷、敌敌畏、百治磷、乐果、乙拌磷、乙硫磷、灭线磷、氧嘧啶磷、伐灭磷、苯线磷、杀螟硫磷、丰索磷、倍硫磷、吡氟硫磷、地虫磷、安果、噻唑磷、庚烯磷、氯唑磷、异丙磷、异噁唑磷、马拉硫磷、虫螨畏、甲胺磷、杀扑磷、甲基对硫磷、速灭磷、久效磷、二溴磷、氧乐果、甲基氧代内吸磷、对氧磷、对硫磷、甲基对硫磷、稻丰散、伏杀硫磷、硫环磷、磷克、亚胺硫磷、磷胺、甲拌磷、肟硫磷、虫螨磷、虫螨磷-甲基、丙溴磷、丙虫磷、proetamphos、丙硫磷、吡唑硫磷、哒嗪硫磷、啶硫磷、硫灭克磷、替美磷、特丁磷、丁基嘧啶磷、司替罗磷、二甲硫吸磷(thimeton)、三唑磷、敌百虫、灭蚜硫磷。

[0370] 氨基甲酸酯:棉铃威、涕灭威、2-仲丁苯基甲基氨基甲酸酯、丙硫克百威、甲萘威、克百威、丁硫克百威、地虫威、乙硫苯威、苯氧威、芬硫克、呋线威、HCN-801、异丙威、茚虫威、灭虫威、灭多虫、5-甲基-间-异丙苯基丁炔基(甲基)氨基甲酸酯、杀线威、抗蚜威、残杀威、硫双威、久效威、啞蚜威、UC-51717。

[0371] 拟除虫菊酯:氟丙菊酯、烯丙菊酯、 α -氯氰菊酯(alphametrin)、5-苄基-3-咪喃基甲基(E)-(1R)-顺式-2,2-二甲基-3-(2-氧硫杂环戊-3-亚基甲基)环丙烷甲酸酯、联苯菊

酯、β-氟氯氰菊酯、氟氯氰菊酯、α-氯氰菊酯(α-cypermethrin)、β-氯氰菊酯、生物烯丙菊酯、生物烯丙菊酯((S)-环戊基异构体)、生物苄呋菊酯、联苯菊酯、NCI-85193、乙氰菊酯、氯氟氰菊酯、cythithrin、苯醚氰菊酯、溴氰菊酯、炔戊菊酯、高氰戊菊酯、醚菊酯、五氟苯菊酯、甲氰菊酯、氰戊菊酯、氟氰菊酯、氟氯苯菊酯、氟胺氰菊酯(D异构体)、炔咪菊酯、氯氟氰菊酯、λ-氯氟氰菊酯、氯菊酯、苯醚菊酯、炔丙菊酯、除虫菊酯(天然产物)、苄呋菊酯、胺菊酯、四氟苯菊酯、θ-氯氰菊酯、氟硅菊酯、t-氟胺氰菊酯、七氟菊酯、四溴菊酯、ζ-氯氰菊酯。

[0372] 节肢动物生长调节剂:a) 甲壳质合成抑制剂:苯甲酰脲:定虫隆、除虫脲、氟佐隆、氟螯脲、氟虫脲、氟铃脲、虱螯脲、双苯氟脲、伏虫脲、杀虫脲、噻嗪酮、苯虫醚、噻螯酮、乙螯唑、四螯唑(chlorfentazine);b) 蜕皮激素拮抗剂:氯虫酰肼、甲氧虫酰肼、虫酰肼;c) 保幼激素类似物:吡丙醚、烯虫酯(包括S-烯虫酯)、苯氧威;d) 脂质生物合成抑制剂:螺螯酯。

[0373] 其他抗寄生虫药:灭螨醌、双甲脒、AKD-1022、ANS-118、印楝素、苏云金芽孢杆菌、杀虫磺、联苯肼酯、乐杀螨、溴螨酯、BTG-504、BTG-505、毒杀芬、杀螟丹、敌螨酯、杀虫脒、溴虫腈、环虫酰肼、噻虫胺、赛灭净、噻虫嗪(diacloden)、杀螨隆、DBI-3204、二活菌素、二羟基甲基二羟基吡咯烷、敌螨通、敌螨普、硫丹、乙虫腈、醚菊酯、啉螯醚、氟螯嗪(flumite)、MTI-800、啉螯酯、啉螯酯、氟螯嗪、溴氟菊酯、氟螯嗪、三氟醚、苄螯醚(fluproxyfen)、苄螯醚(halofenprox)、氟蚁腓、IKI-220、水硅钠石、NC-196、印度薄荷草(neem guard)、尼敌诺特呋喃(nidinortefuran)、烯啉虫胺、SD-35651、WL-108477、啉虫丙醚、克螯特、普罗芬布特(protrifenbute)、吡蚜酮、啉螯酮、啉螯醚、NC-1111、R-195、RH-0345、RH-2485、RYI-210、S-1283、S-1833、SI-8601、氟硅菊酯、硅罗玛汀(silomadin)、多杀菌素、吡螯胺、三氯杀螯砒、四抗菌素、噻虫啉、杀虫环、噻虫嗪、啉虫酰胺、啉蚜威、三乙多杀菌素、三活菌素、增效炔醚、波塔雷克(vertalec)、YI-5301。

[0374] 生物剂:苏云金芽孢杆菌亚莎华亚种(*Bacillus thuringiensis* ssp *aizawai*)、苏云金芽孢杆菌库斯塔克亚种(*kurstaki*)、苏云金芽孢杆菌δ内毒素、杆状病毒、昆虫病原细菌、病毒以及真菌。

[0375] 杀细菌剂:金霉素、土霉素、链霉素。

[0376] 其他生物剂:恩氟沙星、非班太尔、喷沙西林、美洛昔康、头孢氨苄、卡那霉素、匹莫苯、克仑特罗、奥美拉唑、硫姆林、贝那普利、皮瑞普(pyriprole)、头孢喹肟、氟苯尼考、布舍瑞林、头孢维星、托拉菌素、头孢噻吩、卡洛芬、美氟脞、吡啉酮、三氯苯达唑。

[0377] 本发明的另一个方面涉及具有化学式(I)的化合物的、或优选的如本文所定义的个别化合物的、包含至少一种具有化学式(I)的化合物或至少一种优选的如以上定义的个别化合物的组合物的、或包含至少一种具有化学式(I)的化合物或至少一种优选的如以上定义的个别化合物的与如上所述的其他杀真菌剂或杀昆虫剂混合的杀真菌或杀昆虫混合物的用于控制或防止植物(例如有用植物(如作物植物))、其繁殖材料(例如种子)、收获的作物(例如收获的粮食作物)、或非生命材料免于被昆虫或植物病原性微生物(优选真菌有机体)侵染的用途。

[0378] 本发明的另一方面涉及控制或防止植物(例如有用植物(如作物植物))、其繁殖材料(例如种子)、收获的作物(例如收获的粮食作物)、或非生命材料免于被昆虫或植物病原性或腐败微生物或对人潜在有害的有机体(尤其是真菌有机体)侵染的方法,所述方法包括将具有化学式(I)的化合物或优选的如以上定义的个别化合物作为活性成分施用至所述植

物、所述植物的部分或至其场所、其繁殖材料、或所述非生命材料的任何部分。

[0379] 控制或防止意指被植物病原性或腐败微生物或对人潜在有害的有机体(尤其是真菌有机体)的侵染减少至这样一个被证明改进的水平。

[0380] 控制或防止作物植物被植物病原性微生物(尤其是真菌有机体)或昆虫侵染的优选方法是叶面施用,所述方法包括施用具有化学式(I)的化合物或含有所述化合物中的至少一种的农用化学组合物。施用频率和施用比率将取决于受相应的病原体或昆虫侵染的风险。然而,具有化学式(I)的化合物还可以通过用液体配制品浸泡所述植物的场所或者通过将处于固体形式的化合物例如以颗粒形式施用到土壤(土壤施用)而经由土壤通过根(内吸作用)渗透所述植物。在水稻作物中,可以将这样的颗粒施用到灌水的稻田中。具有化学式I的化合物还可以通过用杀真菌剂的液体配制品浸渍种子或块茎或者通过用固体配制品对它们进行包衣而施用到种子(包衣)。

[0381] 配制品(例如含有具有化学式(I)的化合物、以及(如果希望的话)固体或液体佐剂或用于包衣具有化学式(I)的化合物的单体的组合物)可以按已知方式制备,典型地通过将化合物与增充剂(例如溶剂、固体载体以及,任选地表面活性化合物(表面活性剂))进行密切地混合和/或研磨。

[0382] 有利的施用比率通常是从5g至2kg的活性成分(a.i.)/公顷(ha)、优选地从10g至1kg a.i./ha、最优选地从20g至600g a.i./ha。当作为种子浸泡试剂使用时,适宜的剂量是从10mg至1g活性物质/kg种子。

[0383] 当本发明的组合用于处理种子时,比率为0.001g至50g具有化学式I的化合物/kg种子、优选地从0.01g至10g/kg种子,这一般是足够的。

[0384] 适当地,预防性(意指在疾病发展之前)或治愈性(意指疾病发展之后)施用根据本发明的具有化学式(I)的化合物的组合物。

[0385] 本发明的组合物能以任何常规形式使用,例如,以双包装、干种子处理用的粉剂(DS)、种子处理用的乳液(ES)、种子处理用的可流动性浓缩物(FS)、种子处理用的溶液(LS)、种子处理用的水分散性粉剂(WS)、种子处理用的胶囊悬浮液(CF)、种子处理用的凝胶(GF)、乳液浓缩物(EC)、悬浮浓缩物(SC)、悬浮乳液(SE)、胶囊悬浮液(CS)、水分散性粒剂(WG)、可乳化性粒剂(EG)、油包水型乳液(EO)、水包油型乳液(EW)、微乳液(ME)、分散性油悬剂(OD)、油悬剂(OF)、油溶性液剂(OL)、可溶性浓缩物(SL)、超低容量悬浮液(SU)、超低容量液剂(UL)、母药(TK)、可分散性浓缩物(DC)、可湿性粉剂(WP)或与农业上可接受的佐剂组合的任何技术上可行的配制品的形式。

[0386] 能以常规方式生产这样的组合物,例如通过混合活性成分与适当的配制惰性剂(稀释剂、溶剂、填充剂及任选地其他配制成分,如表面活性剂、杀生物剂、防冻剂、粘着剂、增稠剂及提供辅佐效果的化合物)。还可以使用意欲长期持续药效的常规缓释配制品。特别地,有待以喷雾形式(如水分散性浓缩物(例如EC、SC、DC、OD、SE、EW、EO等)、可湿性粉剂及颗粒)施用的配制品可以含有表面活性剂(如湿润剂和分散剂)及提供辅佐效果的其他化合物,例如甲醛与萘磺酸盐、烷基芳基磺酸盐、木质素磺酸盐、脂肪烷基硫酸盐及乙氧基化烷基酚和乙氧基化脂肪醇的缩合产物。

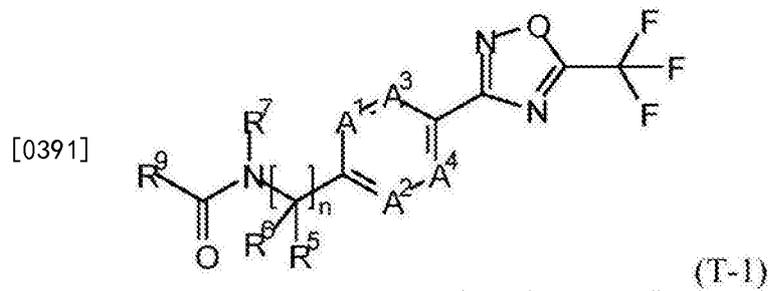
[0387] 使用本发明的组合及稀释剂,以合适的拌种配制品形式,例如具有对种子的良好粘着性的水性悬浮液或干粉剂形式,用自身已知的方式将拌种配制品施用至种子。这样的

拌种配制品在本领域是已知的。拌种配制品可以含有包裹形式的单一活性成分或活性成分的组合,例如作为缓释胶囊或微胶囊。

[0388] 通常,所述配制品包括按重量计从0.01%至90%的活性剂、从0至20%的农业上可接受的表面活性剂及10%至99.99%的固体或液体配制惰性剂和一种或多种佐剂,所述活性剂由至少具有化学式(I)的化合物任选地与其他活性剂(特别是杀微生物剂或防腐剂等)一起组成。按重量计,组合物的浓缩形式通常含有在约2%与80%之间、优选在约5%与70%之间的活性剂。按重量计,配制品的施用形式可以例如含有从0.01%至20%、优选从0.01%至5%的活性剂。然而商用的产品将优选地被配制为浓缩物,最终使用者将通常使用稀释的配制品。

[0389] 然而优选的是将商用的产品配制为浓缩物,最终使用者将通常使用稀释的配制品。

[0390] 表1.1:此表披露了107种具有化学式(T-1)的特定化合物:



[0392] 其中n是1, A¹是C-R¹, A²是C-R², A³是C-R³, A⁴是C-R⁴, 并且R¹、R²、R³、R⁴、R⁵、R⁶、和R⁷是氢, 并且R⁹是如在下表1中定义的。

[0393] 表1.2至1.10(在表1.1之后)中的每一个使得107种具有化学式(T-1)的单独化合物可得, 其中n、A¹、A²、A³、A⁴、R⁵、R⁶和R⁷如在表1.2至1.10中具体定义, 这些表引用表1(其中R⁹是具体定义的)。

[0394] 表1

[0395]

化合物 编号	R ⁹	化合物 编号	R ⁹
1.001	甲基	1.055	2,2,2-三氟乙基
1.002	乙基	1.056	3,3,3-三氟丙基
1.003	丙基	1.057	4,4,4-三氟丁基
1.004	异丙基	1.058	氟甲基
1.005	丁基	1.059	二氟甲基
1.006	仲丁基	1.060	2-氟乙基
1.007	叔丁基	1.061	3-氟丙基
1.008	异丁基	1.062	4-氟丁基
1.009	戊基	1.063	1-氟乙基
1.010	1-乙基丙基	1.064	2-氟丙基
1.011	2-乙基丁基	1.065	氟甲基
1.012	2,2-二甲基丙基	1.066	2-氟乙基
1.013	1,1-二甲基丁基	1.067	甲基硫烷基甲基
1.014	2,2-二甲基丁基	1.068	甲基磺酰基甲基
1.015	乙烯基	1.069	2-甲基硫烷基乙基
1.016	丙烯-2-基	1.070	2-甲基磺酰基乙基
1.017	烯丙基	1.071	甲磺酰胺基甲基
1.018	(E)-丁-2-烯基	1.072	甲磺酰胺基乙基
1.019	2-甲基烯丙基	1.073	2-(甲基氨基)-2-氧代-乙基
1.020	1,1-二甲基烯丙基	1.074	2-(乙基氨基)-2-氧代-乙基
1.021	3-甲基丁-2-烯基	1.075	乙酰胺基甲基
1.022	(E)-1,1-二甲基丁-2-烯基	1.076	乙酰胺基乙基
1.023	丁-3-烯基	1.077	1-甲基-3-氧代-丁基
1.024	丙-2-炔基	1.078	3-甲氧基-1-甲基-3-氧代-丙基
1.025	丁-3-炔基	1.079	3-甲氧基-3-氧代-丙基
1.026	丁-2-炔基	1.080	1-羟基乙基

[0396]

1.027	1-甲基丙-2-炔基	1.081	二氟甲氧基甲基
1.028	1-甲基丁-2-炔基	1.082	1-二氟甲氧基乙基
1.029	1,1-二甲基丙-2-炔基	1.083	2-二氟甲氧基乙基
1.030	氟基甲基	1.084	丙-2-烯基
1.031	2-氟基乙基	1.085	丁-2-烯基
1.032	3-氟基丙基	1.086	5,5,5-三氟戊基
1.033	1-甲氧基甲基	1.087	2-甲基丙烯基
1.034	2-甲氧基乙基	1.088	2-甲基丁基
1.035	3-甲氧基丙基	1.089	2-甲氧基-1,1-二甲基乙基
1.036	4-甲氧基丁基	1.090	2-羟基-2-甲基丙基
1.037	2-乙氧基乙基	1.091	2-羟基-1,1-二甲基乙基
1.038	1-甲氧基乙基	1.092	2-氟-1,1-二甲基乙基
1.039	2-甲氧基丙基	1.093	2-乙酰氧基-1,1-二甲基乙基
1.040	1-(甲氧基甲基)丙基	1.094	2-(三氟甲基)丁基
1.041	2-甲氧基-1,1-二甲基-乙基	1.095	2-(二氟甲氧基)甲基
1.042	2-甲氧基乙氧基甲基	1.096	2-(二氟甲氧基)乙基
1.043	1-乙酰氧基甲基	1.097	1-甲氧基甲基
1.044	2-乙酰氧基乙基	1.098	1-甲基丙基
1.045	2-乙酰氧基-1,1-二甲基-乙基	1.099	1-甲基烯丙基
1.046	2,2-二乙氧基乙基	1.100	1-羟基甲基
1.047	2,2-二甲氧基乙基	1.101	1-羟基-1-甲基乙基
1.048	羟基甲基	1.102	1-乙基-1-甲基丙基
1.049	2-羟基乙基	1.103	1-氟基甲基
1.050	2-羟基丙基	1.104	1-乙酰胺基甲基
1.051	3-羟基丙基	1.105	1-(氟甲基)-2-羟基-1-甲基乙基
1.052	2-羟基-1,1-二甲基-乙基	1.106	(E)-丁-1-烯基
1.053	2-羟基-2-甲基-丙基	1.107	(E)-1-甲基丙-1-烯基
1.054	三氟甲基		

[0397] 表1.2: 此表披露了107种具有化学式(T-1)的特定化合物, 其中A¹是C-R¹, A²是C-

R^2, A^3 是 $C-R^3$, A^4 是 $C-R^4$, 并且 R^2, R^3, R^4, R^5, R^6 、和 R^7 是氢, R^1 是氟, n 是1, 并且 R^9 是如在上文表1中定义的。

[0398] 表1.3: 此表披露了107种具有化学式(T-1)的特定化合物, 其中 A^1 是 $C-R^1$, A^2 是 $C-R^2$, A^3 是 $C-R^3$, A^4 是 $C-R^4$, 并且 R^2, R^3, R^4, R^5, R^6 、和 R^7 是氢, R^1 是氯, n 是1, 并且 R^9 是如在上文表1中定义的。

[0399] 表1.4: 此表披露了107种具有化学式(T-1)的特定化合物, 其中 A^1 是 $C-R^1$, A^2 是 $C-R^2$, A^3 是 $C-R^3$, A^4 是 $C-R^4$, 并且 R^2, R^3, R^4, R^5, R^6 、和 R^7 是氢, R^1 是甲基, n 是1, 并且 R^9 是如在上文表1中定义的。

[0400] 表1.5: 此表披露了107种具有化学式(T-1)的特定化合物, 其中 A^1 是 $C-R^1$, A^2 是 $C-R^2$, A^3 是 $C-R^3$, A^4 是 $C-R^4$, 并且 R^2, R^3, R^4, R^5, R^6 、和 R^7 是氢, R^1 是三氟甲基, n 是1, 并且 R^9 是如在上文表1中定义的。

[0401] 表1.6: 此表披露了107种具有化学式(T-1)的特定化合物, 其中 A^1 是N, A^2 是 $C-R^2$, A^3 是 $C-R^3$, A^4 是 $C-R^4$, 并且 R^2, R^3, R^4, R^5, R^6 、和 R^7 是氢, n 是1, 并且 R^9 是如在上文表1中定义的。

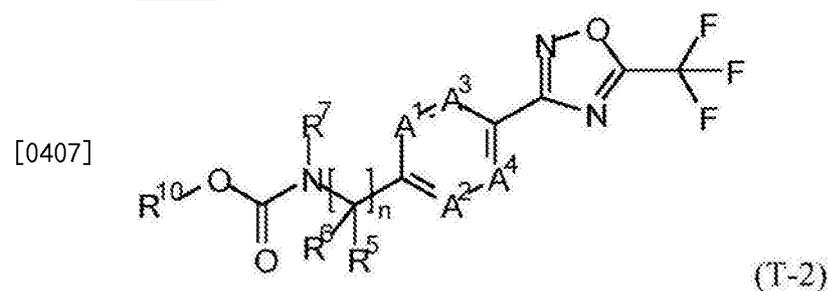
[0402] 表1.7: 此表披露了107种具有化学式(T-1)的特定化合物, 其中 A^1 是 $C-R^1$, A^2 是 $C-R^2$, A^3 是 $C-R^3$, A^4 是 $C-R^4$, 并且 R^1, R^2, R^4, R^5, R^6 、和 R^7 是氢, R^3 是氟, n 是1, 并且 R^9 是如在上文表1中定义的。

[0403] 表1.8: 此表披露了107种具有化学式(T-1)的特定化合物, 其中 A^1 是 $C-R^1$, A^2 是 $C-R^2$, A^3 是 $C-R^3$, A^4 是 $C-R^4$, 并且 R^2, R^4, R^5, R^6 、和 R^7 是氢, R^1 和 R^3 是氟, n 是1, 并且 R^9 是如在上文表1中定义的。

[0404] 表1.9: 此表披露了107种具有化学式(T-1)的特定化合物, 其中 A^1 是 $C-R^1$, A^2 是 $C-R^2$, A^3 是 $C-R^3$, A^4 是 $C-R^4$, 并且 R^3, R^4, R^5, R^6 、和 R^7 是氢, R^1 和 R^2 是氟, n 是1, 并且 R^9 是如在上文表1中定义的。

[0405] 表1.10: 此表披露了107种具有化学式(T-1)的特定化合物, 其中 A^1 是 $C-R^1$, A^2 是 $C-R^2$, A^3 是 $C-R^3$, A^4 是 $C-R^4$, 并且 $R^1, R^2, R^3, R^4, R^5, R^6$ 、和 R^7 是氢, n 是2, 并且 R^9 是如在上文表1中定义的。

[0406] 表2.1: 此表披露了69种具有化学式(T-2)的特定化合物:



[0408] 其中 n 是1, A^1 是 $C-R^1$, A^2 是 $C-R^2$, A^3 是 $C-R^3$, A^4 是 $C-R^4$, 并且 $R^1, R^2, R^3, R^4, R^5, R^6$ 、和 R^7 是氢, 并且 R^{10} 是如在下表2中定义的。

[0409] 表2.2至2.10 (在表2.1之后) 中的每一个使得69种具有化学式(T-2)的单独化合物可得, 其中 $n, A^1, A^2, A^3, A^4, R^5, R^6$ 和 R^7 如在表2.2至2.10中具体定义, 这些表引用表2 (其中 R^{10} 是具体定义的)。

[0410] 表2

[0411]

化合物 编号	R ¹⁰	化合物 编号	R ¹⁰
2.001	甲基	2.036	2,2-二甲氧基乙基
2.002	乙基	2.037	羟基甲基
2.003	丙基	2.038	2-羟基乙基
2.004	异丙基	2.039	2-羟基丙基
2.005	丁基	2.040	3-羟基丙基
2.006	仲丁基	2.041	2-羟基-1,1-二甲基-乙基
2.007	异丁基	2.042	2-羟基-2-甲基-丙基
2.008	烯丙基	2.043	三氟甲基
2.009	2-甲基烯丙基	2.044	2,2,2-三氟乙基
2.010	1,1-二甲基烯丙基	2.045	3,3,3-三氟丙基
2.011	戊基	2.046	4,4,4-三氟丁基
2.012	辛基	2.047	氟甲基
2.013	丙-2-炔基	2.048	二氟甲基
2.014	丁-3-炔基	2.049	2-氟乙基
2.015	丁-2-炔基	2.050	3-氟丙基
2.016	1-甲基丙-2-炔基	2.051	4-氟丁基
2.017	1-甲基丁-2-炔基	2.052	1-氟乙基

[0412]

2.018	1,1-二甲基丙-2-炔基	2.053	2-氟丙基
2.019	氟基甲基	2.054	氟甲基
2.020	2-氟基乙基	2.055	2-氟乙基
2.021	3-氟基丙基	2.056	2-(甲基氨基)-2-氧代-乙基
2.022	1-甲氧基甲基	2.057	2-(乙基氨基)-2-氧代-乙基
2.023	2-甲氧基乙基	2.058	乙酰胺基甲基
2.024	3-甲氧基丙基	2.059	乙酰胺基乙基
2.025	4-甲氧基丁基	2.060	1-甲基-3-氧代-丁基
2.026	2-乙氧基乙基	2.061	3-甲氧基-1-甲基-3-氧代-丙基
2.027	1-甲氧基乙基	2.062	3-甲氧基-3-氧代-丙基
2.028	2-甲氧基丙基	2.063	1-羟基乙基
2.029	1-(甲氧基甲基)丙基	2.064	二氟甲氧基甲基
2.030	2-甲氧基-1,1-二甲基-乙基	2.065	1-二氟甲氧基乙基
2.031	2-甲氧基乙氧基甲基	2.066	2-二氟甲氧基乙基
2.032	1-乙酰氧基甲基	2.067	3-氟丙基
2.033	2-乙酰氧基乙基	2.068	4-氟丁基
2.034	2-乙酰氧基-1,1-二甲基-乙基	2.069	2,2-二甲基丙基
2.035	2,2-二乙氧基乙基		

[0413] 表2.2: 此表披露了69种具有化学式(T-2)的特定化合物, 其中 A^1 是 $C-R^1$, A^2 是 $C-R^2$, A^3 是 $C-R^3$, A^4 是 $C-R^4$, 并且 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、和 R^7 是氢, R^1 是氟, n 是1, 并且 R^{10} 是如在上文表2中定义的。

[0414] 表2.3: 此表披露了69种具有化学式(T-2)的特定化合物, 其中 A^1 是 $C-R^1$, A^2 是 $C-R^2$, A^3 是 $C-R^3$, A^4 是 $C-R^4$, 并且 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、和 R^7 是氢, R^1 是氯, n 是1, 并且 R^{10} 是如在上文表2中定义的。

[0415] 表2.4: 此表披露了69种具有化学式(T-2)的特定化合物, 其中 A^1 是 $C-R^1$, A^2 是 $C-R^2$, A^3 是 $C-R^3$, A^4 是 $C-R^4$, 并且 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、和 R^7 是氢, R^1 是甲基, n 是1, 并且 R^{10} 是如在上文表2中定义的。

[0416] 表2.5: 此表披露了69种具有化学式(T-2)的特定化合物, 其中 A^1 是 $C-R^1$, A^2 是 $C-R^2$, A^3 是 $C-R^3$, A^4 是 $C-R^4$, 并且 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、和 R^7 是氢, R^1 是三氟甲基, n 是1, 并且 R^{10} 是如在上文表2中定义的。

[0417] 表2.6: 此表披露了69种具有化学式(T-2)的特定化合物, 其中 A^1 是 N , A^2 是 $C-R^2$, A^3

是C-R³, A⁴是C-R⁴, 并且R²、R³、R⁴、R⁵、R⁶、和R⁷是氢, n是1, 并且R¹⁰是如在上文表2中定义的。

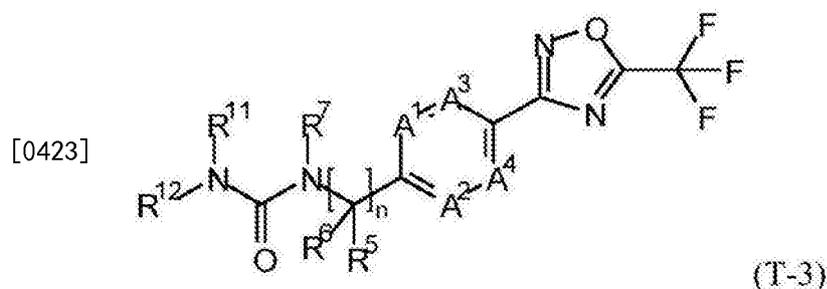
[0418] 表2.7: 此表披露了69种具有化学式(T-2)的特定化合物, 其中A¹是C-R¹, A²是C-R², A³是C-R³, A⁴是C-R⁴, 并且R¹、R²、R⁴、R⁵、R⁶、和R⁷是氢, R³是氟, n是1, 并且R¹⁰是如在上文表2中定义的。

[0419] 表2.8: 此表披露了69种具有化学式(T-2)的特定化合物, 其中A¹是C-R¹, A²是C-R², A³是C-R³, A⁴是C-R⁴, 并且R²、R⁴、R⁵、R⁶、和R⁷是氢, R¹和R³是氟, n是1, 并且R¹⁰是如在上文表2中定义的。

[0420] 表2.9: 此表披露了69种具有化学式(T-2)的特定化合物, 其中A¹是C-R¹, A²是C-R², A³是C-R³, A⁴是C-R⁴, 并且R³、R⁴、R⁵、R⁶、和R⁷是氢, R¹和R²是氟, n是1, 并且R¹⁰是如在上文表2中定义的。

[0421] 表2.10: 此表披露了69种具有化学式(T-2)的特定化合物, 其中A¹是C-R¹, A²是C-R², A³是C-R³, A⁴是C-R⁴, 并且R¹、R²、R³、R⁴、R⁵、R⁶、和R⁷是氢, n是2, 并且R¹⁰是如在上文表2中定义的。

[0422] 表3.1: 此表披露了64种具有化学式(T-3)的特定化合物:



[0424] 其中n是1, A¹是C-R¹, A²是C-R², A³是C-R³, A⁴是C-R⁴, 并且n、R¹、R²、R³、R⁴、R⁵、R⁶、R⁷和R¹²是氢, 并且R¹¹是如在下表3中定义的。

[0425] 表3.2至3.13(在表3.1之后)中的每一个使得64种具有化学式(T-3)的单独化合物可得, 其中n、A¹、A²、A³、A⁴、R⁵、R⁶、R⁷和R¹²如在表3.2至3.13中具体定义, 这些表引用表3(其中R¹¹是具体定义的)。

[0426] 表3

[0427]

化合物编号	R ¹¹	化合物编号	R ¹¹
3.001	甲基	3.033	2-甲氧基乙氧基甲基
3.002	乙基	3.034	1-乙酰氧基甲基
3.003	丙基	3.035	2-乙酰氧基乙基
3.004	异丙基	3.036	2-乙酰氧基-1,1-二甲基乙基
3.005	丁基	3.037	2,2-二乙氧基乙基
3.006	仲丁基	3.038	2,2-二甲氧基乙基
3.007	异丁基	3.039	2-甲氧基乙氧基甲基
3.008	叔丁基	3.040	羟基甲基
3.009	戊基	3.041	2-羟基乙基
3.010	2,2-二甲基丙基	3.042	2-羟基丙基
3.011	氧基	3.043	3-羟基丙基
3.012	烯丙基	3.044	2-羟基-1,1-二甲基乙基
3.013	2-甲基烯丙基	3.045	2-羟基-2-甲基丙基
3.014	1,1-二甲基烯丙基	3.046	三氟甲基
3.015	丙-2-炔基	3.047	2,2,2-三氟乙基
3.016	丁-3-炔基	3.048	3,3,3-三氟丙基
3.017	丁-2-炔基	3.049	4,4,4-三氟丁基
3.018	1-甲基丙-2-炔基	3.050	氟甲基
3.019	1-甲基丁-2-炔基	3.051	二氟甲基
3.020	1,1-二甲基丙-2-炔基	3.052	2-氟乙基
3.021	氟基甲基	3.053	2-氟乙基
3.022	2-氟基乙基	3.054	2-甲基硫烷基乙基
3.023	3-氟基丙基	3.055	3-氟丙基
3.024	1-甲氧基甲基	3.056	甲氧基
3.025	2-甲氧基乙基	3.057	乙氧基
3.026	3-甲氧基丙基	3.058	丙氧基
3.027	4-甲氧基丁基	3.059	异丙氧基

[0428]

3.028	2-乙氧基乙基	3.060	丁氧基
3.029	1-甲氧基乙基	3.061	仲丁氧基
3.030	2-甲氧基丙基	3.062	异丁氧基
3.031	1-(甲氧基甲基)丙基	3.063	烯丙基氧基
3.032	2-甲氧基-1,1-二甲基乙基	3.064	丙-2-炔氧基

[0429] 表3.2: 此表披露了64种具有化学式(T-3)的特定化合物, 其中 A^1 是 $C-R^1$, A^2 是 $C-R^2$, A^3 是 $C-R^3$, A^4 是 $C-R^4$, 并且 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 和 R^{12} 是氢, R^1 是氟, n 是1, 并且 R^{11} 是如在上文表3中定义的。

[0430] 表3.3: 此表披露了64种具有化学式(T-3)的特定化合物, 其中 A^1 是 $C-R^1$, A^2 是 $C-R^2$, A^3 是 $C-R^3$, A^4 是 $C-R^4$, 并且 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 和 R^{12} 是氢, R^1 是氯, n 是1, 并且 R^{11} 是如在上文表3中定义的。

[0431] 表3.4: 此表披露了64种具有化学式(T-3)的特定化合物, 其中 A^1 是 $C-R^1$, A^2 是 $C-R^2$, A^3 是 $C-R^3$, A^4 是 $C-R^4$, 并且 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 和 R^{12} 是氢, R^1 是甲基, n 是1, 并且 R^{11} 是如在上文表3中定义的。

[0432] 表3.5: 此表披露了64种具有化学式(T-3)的特定化合物, 其中 A^1 是 $C-R^1$, A^2 是 $C-R^2$, A^3 是 $C-R^3$, A^4 是 $C-R^4$, 并且 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 和 R^{12} 是氢, R^1 是三氟甲基, n 是1, 并且 R^{11} 是如在上文表3中定义的。

[0433] 表3.6: 此表披露了64种具有化学式(T-3)的特定化合物, 其中 A^1 是N, A^2 是 $C-R^2$, A^3 是 $C-R^3$, A^4 是 $C-R^4$, 并且 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 和 R^{12} 是氢, n 是1, 并且 R^{11} 是如在上文表3中定义的。

[0434] 表3.7: 此表披露了64种具有化学式(T-3)的特定化合物, 其中 A^1 是 $C-R^1$, A^2 是 $C-R^2$, A^3 是 $C-R^3$, A^4 是 $C-R^4$, 并且 R^1 、 R^2 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 和 R^{12} 是氢, R^3 是氟, n 是1, 并且 R^{11} 是如在上文表3中定义的。

[0435] 表3.8: 此表披露了64种具有化学式(T-3)的特定化合物, 其中 A^1 是 $C-R^1$, A^2 是 $C-R^2$, A^3 是 $C-R^3$, A^4 是 $C-R^4$, 并且 R^2 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 和 R^{12} 是氢, R^1 和 R^3 是氟, n 是1, 并且 R^{11} 是如在上文表3中定义的。

[0436] 表3.9: 此表披露了64种具有化学式(T-3)的特定化合物, 其中 A^1 是 $C-R^1$, A^2 是 $C-R^2$, A^3 是 $C-R^3$, A^4 是 $C-R^4$, 并且 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 和 R^{12} 是氢, R^1 和 R^2 是氟, n 是1, 并且 R^{11} 是如在上文表3中定义的。

[0437] 表3.10: 此表披露了64种具有化学式(T-3)的特定化合物, 其中 A^1 是 $C-R^1$, A^2 是 $C-R^2$, A^3 是 $C-R^3$, A^4 是 $C-R^4$, 并且 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 和 R^{12} 是氢, n 是2, 并且 R^{11} 是如在上文表3中定义的。

[0438] 表3.11: 此表披露了64种具有化学式(T-3)的特定化合物, 其中 A^1 是N, A^2 是N, A^3 是 $C-R^3$, A^4 是 $C-R^4$, 并且 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 和 R^{12} 是氢, n 是1, 并且 R^{11} 是如在上文表3中定义的。

[0439] 表3.12: 此表披露了64种具有化学式(T-3)的特定化合物, 其中 A^1 是 $C-R^1$, A^2 是 $C-R^2$, A^3 是 $C-R^3$, A^4 是 $C-R^4$, 并且 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、和 R^7 是氢, R^{12} 是甲基, n 是1, 并且 R^{11} 是如在上文表3中定义的。

[0440] 表3.13:此表披露了64种具有化学式(T-3)的特定化合物,其中A¹是C-R¹,A²是C-R²,A³是C-R³,A⁴是C-R⁴,并且R¹、R²、R³、R⁴、R⁵、R⁶、和R⁷是氢,R¹²是乙基,n是1,并且R¹¹是如在上文表3中定义的。

[0441] 实例

[0442] 接下来的实例用来阐明本发明。本发明的化合物与已知的化合物的区别可以在于在低施用率下更大的疗效,这可以由本领域的普通技术人员使用在实例中概述的实验程序,使用更低的施用率(如果必要的话)例如,50ppm、12.5ppm、6ppm、3ppm、1.5ppm、0.8ppm或0.2ppm来证实。

[0443] 具有化学式(I)的化合物(包括根据本发明的那些)可以具有任何数量的益处,尤其包括针对保护植物对抗由真菌引起的疾病的有利水平的生物活性或对于用作农用化学品活性成分的优越特性(例如,更高的生物活性、有利的活性谱、增加的安全性(包括改善的作物耐受性)、改进的物理-化学特性、或增加的生物可降解性)。

[0444] 贯穿本说明书,以摄氏度(°C)给出温度并且“m.p.”是指熔点。

[0445] LC/MS是指液相色谱-质谱,并且所述装置和方法(方法A和B)的描述如下:

[0446] LC/MS装置和方法A的描述是:

[0447] 来自沃特斯的SQ检测器2

[0448] 离子化方法:电喷射

[0449] 极性:正离子和负离子

[0450] 毛细管电压(kV)3.0,锥孔电压(V)30.00,提取器(V)2.00,源温度(°C)150,去溶剂化温度(°C)350,锥孔气体流速(L/Hr)0,去溶剂化气体流速(L/Hr)650

[0451] 质量范围:100Da至900Da

[0452] DAD波长范围(nm):210至500

[0453] 方法:用以下HPLC梯度条件的沃特斯ACQUITY UPLC

[0454] (溶剂A:水/甲醇20:1+0.05%甲酸,以及溶剂B:乙腈+0.05%甲酸)

时间(分钟)	A(%)	B(%)	流速(ml/min)
0	100	0	0.85
1.2	0	100	0.85
1.5	0	100	0.85

[0456] 柱类型:沃特斯ACQUITY UPLC HSS T3;柱长:30mm;柱内径:2.1mm;粒度:1.8微米;温度:60°C。

[0457] LC/MS装置和方法B的描述是:

[0458] 来自沃特斯的SQ检测器2

[0459] 离子化方法:电喷射

[0460] 极性:正离子

[0461] 毛细管电压(kV)3.5,锥孔电压(V)30.00,提取器(V)3.00,源温度(°C)150,去溶剂化温度(°C)400,锥孔气体流速(L/Hr)60,去溶剂化气体流速(L/Hr)700

[0462] 质量范围:140Da至800Da

[0463] DAD波长范围(nm):210至400

[0464] 方法:用以下HPLC梯度条件的沃特斯ACQUITY UPLC

[0465] (溶剂A:水/甲醇9:1+0.1%甲酸,以及溶剂B:乙腈+0.1%甲酸)

	时间 (分钟)	A (%)	B (%)	流速 (ml/min)
	0	100	0	0.75
[0466]	2.5	0	100	0.75
	2.8	0	100	0.75
	3.0	100	0	0.75

[0467] 柱类型:沃特斯ACQUITY UPLC HSS T3;柱长:30mm;柱内径:2.1mm;粒度:1.8微米;温度:60°C。

[0468] 在必要时,在对映异构体意义上纯的最终化合物可以在适当时候从外消旋材料经由标准物理分离技术(例如反相手性色谱)或通过立体选择性合成技术(例如通过使用手性起始材料)获得。

[0469] 配制品实例

	可湿性粉剂	a)	b)	c)
	活性成分[具有化学式(I)的化合物]	25%	50%	75%
	木质素磺酸钠	5%	5%	-
	月桂基硫酸钠	3%	-	5%
[0470]	二异丁基萘磺酸钠	-	6%	10%
	苯酚聚乙二醇醚 (7-8 mol 的环氧乙烷)	-	2%	-
	高度分散的硅酸	5%	10%	10%
	高岭土	62%	27%	-

[0471] 将所述活性成分与所述佐剂充分混合并且将混合物在适当的研磨机中充分研磨,从而获得了可以用水稀释而给出所希望的浓度的悬浮液的可湿性粉剂。

	<u>干种子处理用的粉剂</u>	a)	b)	c)
	活性成分[具有化学式(I)的化合物]	25%	50%	75%
	轻质矿物油	5%	5%	5%
[0472]	高度分散的硅酸	5%	5%	-
	高岭土	65%	40%	-
	滑石	-	-	20%

[0473] 将所述活性成分与所述佐剂充分混合并且将混合物在适当的研磨机中充分研磨,从而提供可以直接用于种子处理的粉剂。

可乳化的浓缩物

	活性成分[具有化学式(I)的化合物]	10%
	辛酚聚乙二醇醚	3%
	(4-5 mol 的环氧乙烷)	
[0474]	十二烷基苯磺酸钙	3%
	蓖麻油聚乙二醇醚 (35 mol 环氧乙烷)	4%
	环己酮	30%
	二甲苯混合物	50%

[0475] 在植物保护中可以使用的具有任何所要求的稀释度的乳液可以通过用水稀释从这种浓缩物获得。

[0476]

<u>尘剂</u>	a)	b)	c)
活性成分[具有化学式(I)的化合物]	5%	6%	4%
滑石	95%	-	-
高岭土	-	94%	-
矿物填充剂	-	-	96%

[0477] 通过将活性成分与载体混合并且将所述混合物在适合的研磨机中研磨而获得即用型尘剂。此类粉剂还可以用于种子的干拌种。

挤出机颗粒剂

	例如, [具有化学式(I)的化合物]	15%
[0478]	木质素磺酸钠	2%
	羧甲基纤维素	1%
	高岭土	82%

[0479] 将活性成分与所述佐剂混合并且研磨,并且将混合物用水润湿。将混合物挤出并且然后在空气流中干燥。

包衣的颗粒剂

	例如, [具有化学式(I)的化合物]	8%
[0480]	聚乙二醇 (分子量 200)	3%
	高岭土	89%

[0481] 将所述精细研磨的活性成分在混合器中均匀地施用到用聚乙二醇湿润的高岭土上。以此方式获得无尘的包衣的颗粒剂。

悬浮液浓缩物

	例如, [具有化学式(I) 的化合物]	40%
	丙二醇	10%
[0482]	壬基酚聚乙二醇醚 (15 mol 的环氧乙烷)	6%
	木质素磺酸钠	10%
	羧甲基纤维素	1%
	硅酮油 (处于在水中 75%的乳液的形式)	1%
	水	32%

[0483] 将精细地研磨的活性成分与佐剂紧密地混合,得到悬浮液浓缩物,从所述悬浮液浓缩物可以通过用水稀释获得任何所希望的稀释度的悬浮液。使用此类稀释物,可以对活的植物连同植物繁殖材料进行处理并且对其针对微生物侵染通过喷洒、浇注或浸渍进行保护。

种子处理用的可流动性浓缩物

	活性成分[具有化学式(I) 的化合物]	40%
	丙二醇	5%
	共聚物丁醇 PO/EO	2%
[0484]	三苯乙烯酚, 具有 10-20 摩尔 EO	2%
	1,2-苯并异噻唑啉-3-酮 (呈在水中 20%的溶液形式)	0.5%
	单偶氮颜料钙盐	5%
	硅酮油 (处于在水中 75%的乳液的形式)	0.2%
	水	45.3%

[0485] 将精细地研磨的活性成分与佐剂紧密地混合,得到悬浮液浓缩物,从所述悬浮液浓缩物可以通过用水稀释获得任何所希望的稀释度的悬浮液。使用此类稀释物,可以对活的植物连同植物繁殖材料进行处理并且对其针对微生物侵染通过喷洒、浇注或浸渍进行保护。

[0486] 缓释的胶囊悬浮液

[0487] 将28份的具有化学式I的化合物的组合与2份的芳香族溶剂以及7份的甲苯二异氰酸酯/多亚甲基-聚苯基异氰酸酯-混合物(8:1)进行混合。将所述混合物在1.2份的聚乙烯醇、0.05份的消泡剂以及51.6份的水的混合物中进行乳化直至达到所希望的颗粒尺寸。向此乳液中添加在5.3份的水中的2.8份的1,6-己二胺混合物。将所述混合物搅拌直至聚合反应完成。

[0488] 将获得的胶囊悬浮液通过添加0.25份的增稠剂以及3份的分散剂进行稳定。所述胶囊悬浮液配制品包含28%的活性成分。所述介质胶囊的直径是8微米-15微米。

[0489] 将所得配制品作为适用于此目的装置中的水性悬浮液施用到种子上。

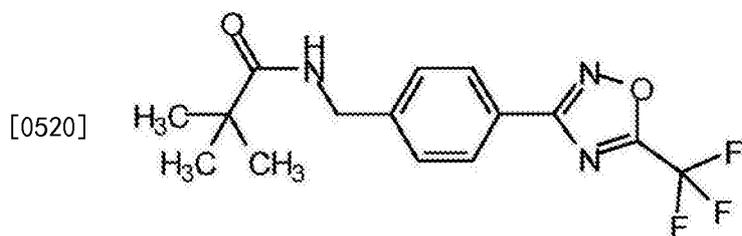
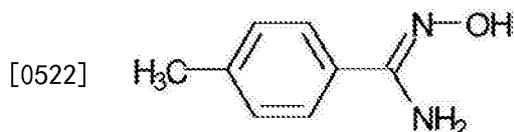
[0490] 制备实例

[0491] 相应地可以使用上述以及下述的合成技术制备具有化学式(I)的化合物。

[0492] 贯穿本说明书,以摄氏度(°C)给出温度并且“mp”是指熔点。LC/MS是指液相色谱-质谱,并且用于LC/MS分析的装置和方法的描述在下文给出。

[0493] 缩写清单:

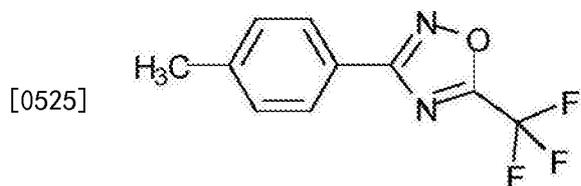
- [0494] AIBN = 偶氮二异丁腈
- [0495] BOP-Cl = 磷酸双(2-氧代噁唑烷基)氯化物
- [0496] CDI = 羰基二咪唑
- [0497] DCE = 1,2-二氯乙烷
- [0498] DCM = 二氯甲烷
- [0499] DIBAL-H = 二异丁基氢化铝
- [0500] DIEA = N-乙基-N-异丙基-丙-2-胺
- [0501] DIPEA = N,N-二异丙基乙胺
- [0502] DMA = 二甲基乙酰胺
- [0503] DMAP = 4-二甲氨基吡啶
- [0504] DMF = 二甲基甲酰胺
- [0505] EdCl = 3-(乙基亚氨基亚甲基氨基)-N,N-二甲基丙-1-胺
- [0506] EtOAc = 乙酸乙酯
- [0507] EtOH = 乙醇
- [0508] HCl = 盐酸
- [0509] HOAt = 1-羟基-7-氮杂苯并三唑
- [0510] HATU = 1-[双(二甲基氨基)亚甲基]-1H-1,2,3-三唑并[4,5-b]吡啶鎓3-氧化物-六氟磷酸酯
- [0511] mp = 熔点
- [0512] MeOH = 甲醇
- [0513] NaOH = 氢氧化钠
- [0514] NBS = N-溴代琥珀酰亚胺
- [0515] RT = 室温
- [0516] TFAA = 三氟乙酸酐
- [0517] THF = 四氢呋喃
- [0519] 实例1: 2,2-二甲基-N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]-丙酰胺(表1的化合物1.2)的制备

[0521] 步骤1: N'-羟基-4-甲基-苯甲脒的制备

[0523] 在室温下,向4-甲基苯甲脒(35g,0.29mol)在乙醇(220mL)和水(440mL)中的搅拌悬浮液中添加羟胺盐酸盐(41.1g,0.58mol)、碳酸钾(65.4g,0.47mol)和8-羟基喹啉

(0.22g, 1.5mmol)。将反应混合物在80℃下加热4小时。将混合物冷却至室温,并用2M HCl稀释至pH 8。在减压下蒸发乙醇。将混合物进行过滤,用水洗涤并在真空下干燥,以提供39.1g标题化合物。LC/MS (方法A) 保留时间=0.23分钟,151.0 (M+H)。

[0524] 步骤2:3-(对甲苯基)-5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑的制备



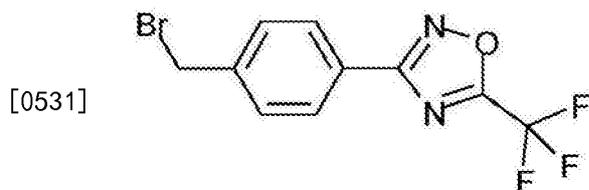
[0526] 在0℃向搅拌的N'-羟基-4-甲基-苯甲脒(38.7g, 0.25mol)在2-甲基四氢呋喃(750mL)中的溶液中添加TFAA。将反应混合物在15℃搅拌两小时,并用水稀释。将有机层分离,依次用碳酸氢钠溶液、氯化铵溶液和水洗涤,经硫酸钠干燥,过滤,并蒸发至干燥。将粗品在硅胶上用庚烷/EtOAc 99:1至90:10进行combiflash色谱,以提供54.1g呈澄清油状物的标题化合物,其在储存时固化。

[0527] LC/MS (方法A) 保留时间=1.15分钟,未检测质量。

[0528] ^1H NMR (400MHz, CDCl_3) δ_{ppm} : 8.00 (d, 2H), 7.32 (d, 2H), 2.45 (s, 3H)。

[0529] ^{19}F NMR (400MHz, CDCl_3) δ_{ppm} : -65.41 (s)。

[0530] 步骤3a:3-[4-(溴甲基)苯基]-5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑的制备

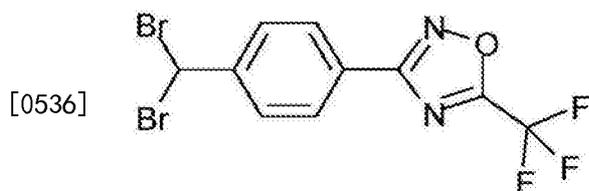


[0532] 在氩气下,将3-(对甲苯基)-5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑(56.0g, 0.24mol)和NBS(45.4g, 0.25mol)在四氯甲烷(480mL)中的搅拌混合物加热至70℃。添加AIBN(4.03g, 24mmol),并将反应混合物在65℃下搅拌18小时。将混合物冷却至25℃并用二氯甲烷和水稀释。将有机层用碳酸氢钠溶液洗涤,经硫酸钠干燥,过滤并蒸发至干燥。将粗品在硅胶(750g预填充柱)上用环己烷/EtOAc 100:0至95:5进行快速色谱,以提供44.7g呈白色固体的标题化合物,mp:58℃-63℃。

[0533] ^1H NMR (400MHz, CDCl_3) δ_{ppm} : 8.11 (d, 2H), 7.55 (d, 2H), 4.53 (s, 2H)。

[0534] ^{19}F NMR (400MHz, CDCl_3) δ_{ppm} : -65.32 (s)。

[0535] 3-[4-(二溴甲基)苯基]-5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑(参见下文)被分离为呈白色固体的副产物(mp 61℃-66℃)。

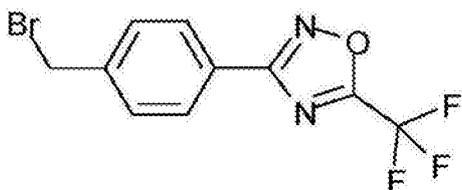


[0537] ^1H NMR (400MHz, CDCl_3) δ_{ppm} : 8.15 (d, 2H), 7.73 (d, 2H), 6.68 (s, 1H)。

[0538] ^{19}F NMR (400MHz, CDCl_3) δ_{ppm} : -65.34 (s)。

[0539] 步骤3b:3-[4-(溴甲基)苯基]-5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑的制备

[0540]



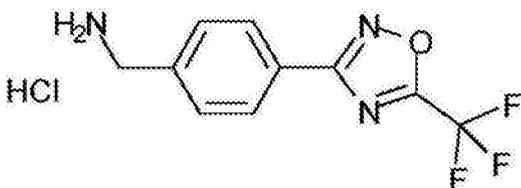
[0541] 在5℃下,向3-[4-(溴甲基)苯基]-5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑和3-[4-(二溴甲基)苯基]-5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑(10.2g)在乙腈(95mL)、水(1.9mL)和DIEA(6.20mL, 35.7mmol)中的搅拌的1:9比例混合物中添加亚磷酸二乙酯(4.7mL, 35.7mmol)。将混合物在5℃-10℃下搅拌两小时,添加水和1M HCl,并且将乙腈在减压下蒸发。将白色浆液用二氯甲烷萃取,并且将合并的有机层经硫酸钠干燥,并过滤。将溶剂在减压下除去,并且使所得粗品在硅胶(40g预填充柱)上用环己烷/EtOAc 99:1至9:1进行快速色谱,以提供7.10g的3-[4-(溴甲基)苯基]-5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑。

[0542] ^1H NMR (400MHz, CDCl_3) δ_{ppm} : 8.11 (d, 2H), 7.55 (d, 2H), 4.53 (s, 2H)。

[0543] ^{19}F NMR (400MHz, CDCl_3) δ_{ppm} : -65.32 (s)。

[0544] 步骤4: [4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲胺盐酸盐的制备

[0545]



[0546] 将干燥烧瓶用氢氧化钠(2当量, 3.13mmol, 60质量%NaH)和四氢呋喃(25mL)装填。向此白色悬浮液中添加叔丁基N-叔丁氧基羰基氨基甲酸酯(1.1当量, 1.72mmol),并且在搅拌5分钟时观察到气体逸出。然后引入3-[4-(溴甲基)苯基]-5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑(0.500g, 1.56mmol),并且将内容物搅拌12小时。在反应完成时,将溶液倒入水中,并用乙酸乙酯(2x30mL)萃取。将有机层合并,并经硫酸钠干燥,过滤,并在减压下浓缩,以产生淡黄色油状物,其在沉落后部分结晶。将黄色材料溶于二噁烷(5mL)中,并逐滴引入氯化氢溶液(15当量, 24.7mmol, 4M在二噁烷中)。在25℃下搅拌过夜之后,将反应溶液用醚稀释,并提供白色沉淀物(70%产率),对沉淀物的分析与报告值匹配,并将所述沉淀物不经进一步纯化而使用。

[0547] mp: >200℃, LC/MS (方法A) 保留时间=0.61分钟, 244 (M+H)。

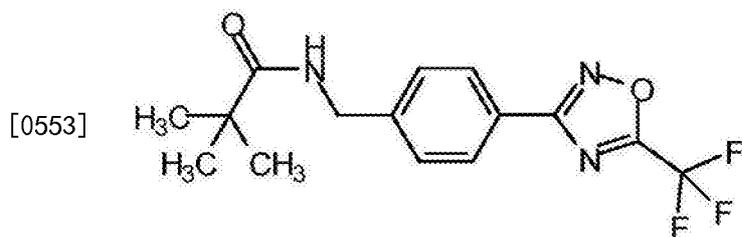
[0548] ^1H NMR (400MHz, $\text{DMSO}-d_6$) δ_{ppm} : 8.56 (s, br, 2H), 8.13 (d, 2H), 7.75 (d, 2H), 4.15 (s, 2H)。

[0549] ^{19}F NMR (400MHz, $\text{DMSO}-d_6$) δ_{ppm} : -64.69 (s)。

[0550] 可替代地,标题化合物可以使用如W0 2013/066839中描述的类似程序制备。

[0551] 向加热至70℃的叔丁基N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]-氨基甲酸酯(23.1g, 65.4mmol)在1,4-二噁烷(196mL)中的搅拌溶液逐滴添加HCl溶液(41mL, 163mmol, 4M 1,4-二噁烷)。白色固体的沉淀和气体逸出在添加后5分钟开始。将混合物在70℃下搅拌6小时。将白色悬浮液冷却低至23℃,过滤,用1,4-二噁烷洗涤,并且在减压下在40℃干燥,以产生17.3g呈黄色固体的[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲胺盐酸盐。

[0552] 步骤5:2,2-二甲基-N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]-丙酰胺的制备

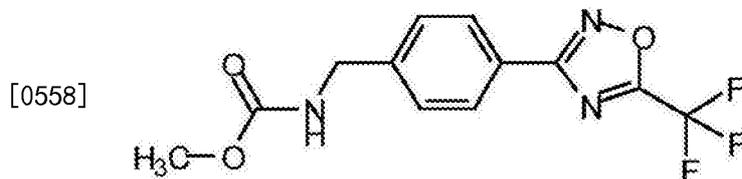


[0554] 在氮气气氛下,在0℃下向[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲胺盐酸盐(0.20g,0.70mmol)在二氯甲烷(3.5mL)中的搅拌悬浮液中添加三乙胺(0.29mL,2.1mmol),然后添加特戊酰氯(0.97mL,0.77mmol)。将反应混合物在室温下搅拌18小时,倒入饱和氯化铵溶液中,并用二氯甲烷萃取。将合并的有机层用水洗涤,经硫酸钠干燥,并且过滤。将溶剂在减压下除去,并且将所得粗残余物在硅胶(环己烷:EtOAc洗脱液梯度9:1至1:1)上进行快速色谱,以提供0.23g呈白色固体的2,2-二甲基-N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]-丙酰胺,mp:183℃-190℃,LC/MS(方法A)保留时间=0.95分钟,未检测质量。

[0555] ^1H NMR (400MHz, CDCl_3) δ ppm: 8.09 (d, 2H), 7.40 (d, 2H), 6.05 (s_{br}, 1H), 4.52 (d, 2H), 1.25 (s, 9H)。

[0556] ^{19}F NMR (400MHz, CDCl_3) δ ppm: -64.5 (s)。

[0557] 实例2:甲基N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]氨基甲酸酯(表T2的化合物2.4)的制备



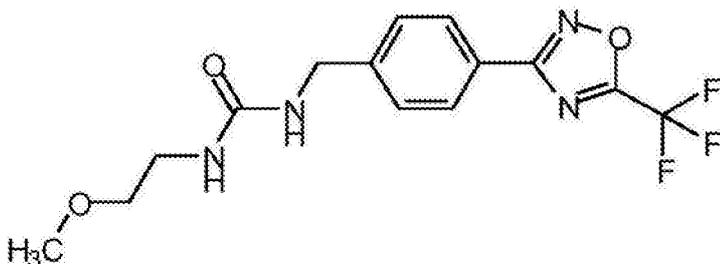
[0559] 向[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲胺盐酸盐(0.10g,0.36mmol)在DCM(1.19mL)中的溶液依次添加氯甲酸甲酯(0.06mL,0.72mmol)、三乙胺(0.15mL,1.07mmol)。将反应混合物在室温下搅拌1小时20分钟,LCMS显示完成。添加饱和碳酸氢钠溶液并将溶液用DCM进行萃取。将合并的有机层经硫酸钠干燥,过滤,浓缩并通过使用环己烷/EtOAc作为洗脱液的combiflash纯化,以给出呈白色固体的甲基N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]氨基甲酸酯。LC/MS(方法A)保留时间=0.97分钟,302(M+H)。

[0560] ^1H NMR (400MHz, $\text{DMSO}-d_6$) δ ppm 8.05 (d, 2H), 7.84 (t, 1H), 7.51 (d, 2H), 4.30 (d, 2H), 3.59 (s, 3H)

[0561] ^{19}F NMR (400MHz, $\text{DMSO}-d_6$) δ ppm: -64.68 (s)

[0562] 实例3:1-(2-甲氧基乙基)-3-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]脲(表T3的化合物3.3)的制备:

[0563]



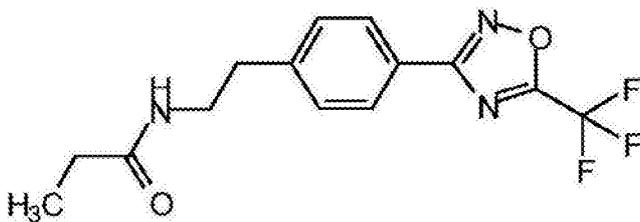
[0564] 向[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲胺盐酸盐(0.10g,0.36mmol)在DCM(1.19mL)中的溶液中依次添加1-异氰酰基-2-甲氧基-乙烷(0.07g,0.72mmol)、三乙胺(0.10mL,0.72mmol)。将反应混合物在室温下搅拌1小时20分钟。LCMS显示完成。添加饱和碳酸氢钠溶液并将溶液用DCM进行萃取。将合并的有机层经硫酸钠干燥,过滤,浓缩并通过Isco combiflash使用DCM/MeOH作为洗脱液来纯化,以给出呈白色固体的1-(2-甲氧基乙基)-3-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]脲。LC/MS(方法A)保留时间=0.88分钟,345(M+H)。

[0565] ^1H NMR(400MHz,DMSO- d_6) δ_{ppm} 8.04(d,2H),7.49(d,2H),6.56(t,1H),6.11(t,1H),4.32(d,2H),3.35(t,2H),3.28(s,3H),3.20(q,2H)。

[0566] ^{19}F NMR(400MHz,DMSO- d_6) δ_{ppm} : -64.70(s)。

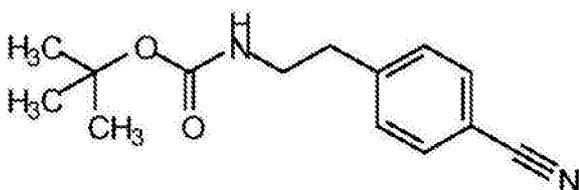
[0567] 实例4:N-[2-[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]乙基]丙酰胺(表T1的化合物1.29)的制备

[0568]



[0569] 步骤1:叔丁基N-[2-(4-氰基苯基)乙基]氨基甲酸酯的制备

[0570]



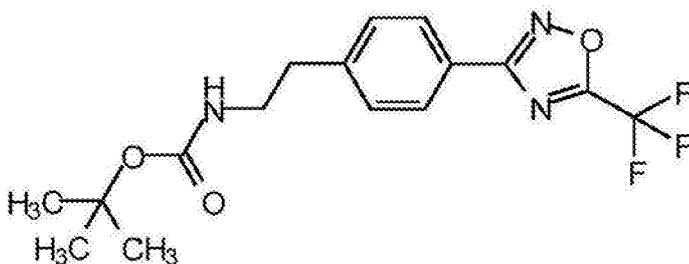
[0571] 向2-(4-氰基苯基)乙基氯化铵(3.0g,16mmol)在THF(70mL)中的溶液中添加三乙胺(6.9mL,49mmol)和DMAP(200mg,1.6mmol)。将所得米色溶液使用冰浴冷却,并且将叔丁氧基羰基叔丁基碳酸酯(5.4g,25mmol)逐滴作为THF溶液(12mL)引入。除去冰浴并继续搅拌过夜。添加冰和水,并用Et₂O(2×40mL)进行萃取。将合并的有机层用盐水洗涤,用Na₂SO₄干燥,过滤,并在减压下浓缩以提供淡黄色固体。将所得粗残余物吸附在isolute上,并经由combiflash柱色谱使用环己烷/乙酸乙酯洗脱液梯度进行纯化,以提供1.56g呈白色固体的叔丁基N-[2-(4-氰基苯基)乙基]氨基甲酸酯。mp.70°C-74°C。LC/MS(方法A)保留时间=0.94min;未检测质量

[0572] ^1H NMR(400MHz,CDC1₃) δ_{ppm} :7.60(d,2H),7.30(d,2H),4.55(brs,1H),3.37(m,2H),2.85(m,2H),1.40(s,9H)。

[0573] 步骤2:叔丁基N-[2-[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]乙基]氨基甲

酸酯的制备

[0574]

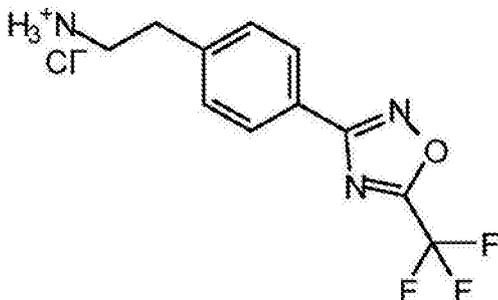


[0575] 向叔丁基N-[2-(4-氰基苯基)乙基]氨基甲酸酯(912mg, 3.7mmol)在乙醇(18.5mL)中的溶液中添加三乙胺(1.04mL, 7.4mmol), 随后分部分引入羟胺盐酸盐(520mg, 7.4mmol)。然后将所述反应混合物加热至80℃持续3.5小时。在将反应混合物冷却至25℃之后, 将乙醇在减压下去除, 并将所得粗叔丁基N-[2-[4-[N'-羟基甲脒基]苯基]乙基]氨基甲酸酯残余物悬浮于THF(37mL)中。引入吡啶(1.2mL, 14.8mL), 并将反应内容物使用冰浴冷却。然后逐滴添加三氟乙酸酐(1.57mL, 11.1mmol)。除去冰浴并继续搅拌过夜。将反应内容物在减压下浓缩, 并引入乙酸二乙酯和水。分离各层, 并将有机部分顺序地用1M NaOH水溶液、水和盐水洗涤, 然后经硫酸钠干燥, 过滤并浓缩, 以给出黄色粗固体, 将其吸收在isolute上, 并通过combiflash柱色谱使用环己烷/乙酸乙酯洗脱液梯度进行纯化, 以提供826mg呈白色固体的叔丁基N-[2-[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]乙基]氨基甲酸酯。mp: 81℃-83℃。LC/MS(方法A)保留时间=1.17min; 未检测质量。

[0576] ^1H NMR (400MHz, CDCl_3) δ_{ppm} : 8.05 (d, 2H), 7.85 (d, 2H), 4.55 (brs, 1H), 3.48 (m, 2H), 2.88 (m, 2H), 1.42 (s, 9H)。

[0577] 步骤3: 2-[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]乙基氯化铵的制备

[0578]

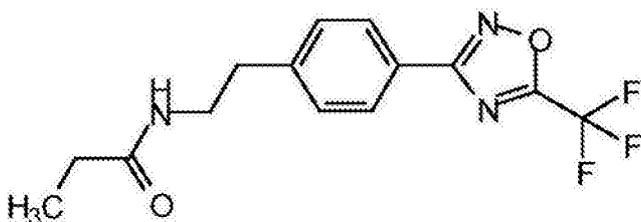


[0579] 向用冰浴冷却的叔丁基N-[2-[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]乙基]氨基甲酸酯(500mg, 1.4mmol)在乙酸乙酯(10mL)中的溶液中逐滴引入4M HCl 1,4-二噁烷溶液(2.8mL, 11.2mmol)。除去冰浴并继续搅拌过夜。细白色悬浮液缓慢形成, 并通过过滤收集, 用乙酸乙酯洗涤两次, 并在真空烘箱中干燥, 以提供378mg呈白色固体的2-[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]乙基氯化铵。mp > 225℃ LC/MS(方法A)保留时间=0.67min; 258[M-Cl]⁺。

[0580] ^1H NMR (400MHz, DMSO) δ_{ppm} : 8.05 (d, 2H), 7.52 (d, 2H), 3.10 (m, 2H), 3.00 (m, 2H)。

[0581] 步骤4: N-[2-[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]乙基]丙酰胺的制备

[0582]

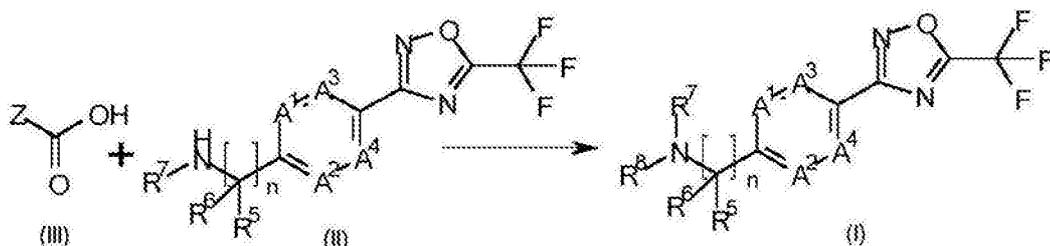


[0583] 向2-[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]乙基氯化铵(0.10g, 0.34mmol)在二氯甲烷(5mL)中的溶液中添加三乙胺(0.19mL, 1.36mmol), 随后添加丙酰氯(0.03mL, 0.36mmol)。将反应混合物搅拌过夜, 然后倒在1M HCl上, 用二氯甲烷稀释。将水相去除, 并将有机层用1M NaOH、然后用盐水洗涤, 经硫酸钠干燥, 过滤, 并在减压下浓缩。将所得粗残余物通过combiflash柱色谱使用环己烷/EtOAc梯度作为洗脱液进行纯化, 以给出100mg呈白色固体的N-[2-[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]乙基]丙酰胺(0.055g)。mp: 133°C-145°C, LC/MS (方法A) 保留时间=0.97分钟, 314 (M+H)⁺。

[0584] ¹H NMR (400MHz, CDCl₃) δ_{ppm}: 8.06 (d, 2H), 7.36 (d, 2H), 5.55 (brs, 1H), 3.56 (q, 2H), 2.92 (t, 2H), 2.18 (q, 2H), 1.13 (t, 3H)。

[0585] 使用适当的结构单元(化合物(II)和(III)), 以组合方式使用以下程序以提供具有化学式(I)的化合物, 其中R⁸是-C(O)R⁹。使用LC/MS方法B分析通过以下组合方案制备的化合物。

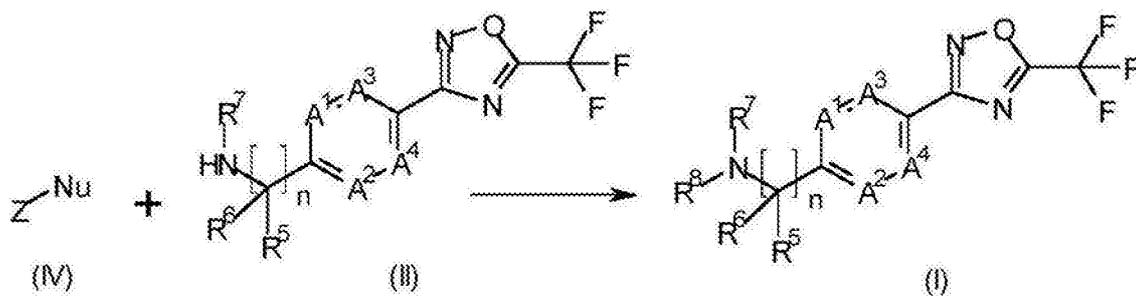
[0586]



[0587] 举例来说, 将具有化学式(III)的酸衍生物(0.0375mmol于375μL DMA中)转移至包含在250μL DMA中的具有化学式(II)的[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]芳基]甲胺衍生物(0.03mmol)和DIPEA(0.09mmol)的96槽深孔板(DWP96)中, 随后添加溶于DMA(250μL)中的BOP-Cl(0.06mmol)。将DWP密封, 并在50°C搅拌18小时。将溶剂在氮气流下去除。将所得粗残余物溶解在MeOH(250μL)和DMA(500μL)的混合物中, 并直接呈递用于制备型LC/MS纯化, 以10%-85%产率提供具有化学式(I)的化合物。

[0588] 可替代地, 使用适当的结构单元(化合物(II)和(IV)), 以组合方式使用以下程序(方案A和方案B)以提供具有化学式(I)的化合物, 其中R⁸是-C(O)OR¹⁰或-C(O)NR¹¹R¹²。使用LC/MS方法B分析通过以下组合方案制备的化合物。

[0589]

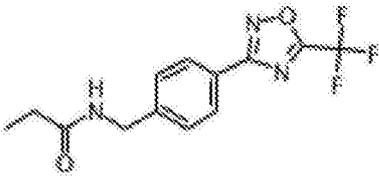
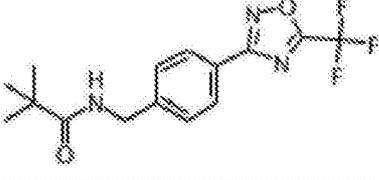
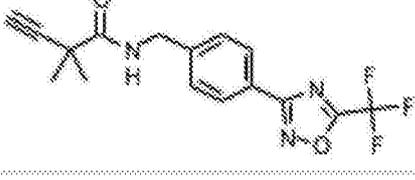
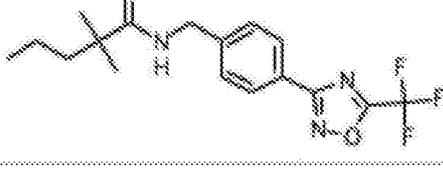


[0590] 方案A:将多份在DCE (0.3mL) 中的三光气 (5.94mg) 在0℃下转移至96槽深孔板 (DWP96) 中,所述板包含在200μL DMA中的具有化学式 (IV) 的醇衍生物 [HOR¹⁰] 或胺衍生物 [HN (R¹¹) R¹²] (0.05mmol) 和三乙胺 (0.12mmol)。将反应混合物在室温下搅拌30分钟。添加在200μL DMA中的具有化学式 (II) 的 [4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基] 芳基] 甲胺衍生物 (0.05mmol) 和三乙胺 (0.12mmol)。将DWP密封,并在室温下搅拌18小时。将DCE在Barkey站下去除。将粗残余物溶解在MeOH (200μL) 和DMA (600μL) 的混合物中,并直接呈递用于制备型LC/MS纯化,以3%-45%产率提供具有化学式 (I) 的化合物。

[0591] 方案B:将在300μL DMA中的具有化学式 (IV) 的醇衍生物 [HOR¹⁰] 或胺衍生物 [HNR¹¹R¹²] (0.05mmol) 和DIPEA (0.25mmol) 在室温下转移到96槽深孔板 (DWP96) 中。添加在DMA (300μL) 中的CDI (0.10mmol), 并搅拌直至溶解。添加在200μL DMA中的具有化学式 (II) 的 [4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基] 芳基] 甲胺衍生物 (0.05mmol) 和三乙胺 (0.12mmol)。将DWP密封,并在室温下搅拌18小时。将DCE在Barkey站下去除。将粗残余物溶解在MeOH (200μL) 和DMA (600μL) 的混合物中,并直接呈递用于制备型LC/MS纯化,以5%-47%产率提供具有化学式 (I) 的化合物。

[0592] 表T1:具有化学式 (I) 的化合物的熔点 (mp) 数据和/或保留时间 (RT)。

[0593]

表条目	化合物名称	结构	RT (分钟)	质荷比 (M+H) ⁺	方法	mp (°C)
1.1	N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基] 苯基] 甲基] 丙酰胺		0.93	300.4	A	138 - 143
1.2	2,2-二甲基-N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基] 苯基] 甲基] 丙酰胺		1.04	328.4	A	120 - 127
1.3	2,2-二甲基-N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基] 苯基] 甲基] 丁-3-炔酰胺		1.06	338.2	A	55 - 60
1.4	2,2-二甲基-N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基] 苯基] 甲基] 戊酰胺		1.82	356	B	

[0594]

表条 目	化合物名称	结构	RT (分 钟)	质荷比 (M+H) ⁺	方 法	mp (°C)
1.5	N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]戊-4-炔酰胺		1.43	329.9	B	
1.6	2-甲基-N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]丙酰胺		1.48	319.9	B	
1.7	N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]戊-4-烯酰胺		1.53	325.9	B	
1.8	N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]己酰胺		1.71	342	B	
1.9	2-甲基-4-氧代-N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]戊酰胺		1.41	356	B	
1.10	N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]丁酰胺		1.49	313.9	B	
1.11	3-甲氧基-N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]丙酰胺		1.34	329.9	B	

[0595]

表条 目	化合物名称	结构	RT (分 钟)	质荷比 (M+H) ⁺	方 法	mp (°C)
1.12	3-甲基-N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]丁酰胺		1.58	329	B	
1.13	3-氯-2,2-二甲基-N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]丙酰胺		1.65	361.9	B	
1.14	N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]戊-3-烯酰胺		1.53	325.9	B	
1.15	3,3-二甲基-N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]丁酰胺		1.69	342	B	
1.16	2-甲基-N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]丙-2-烯酰胺		1.49	311.9	B	
1.17	2-甲基-N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]丁酰胺		1.58	328	B	
1.18	6,6,6-三氟-N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]己酰胺		1.68	396	B	

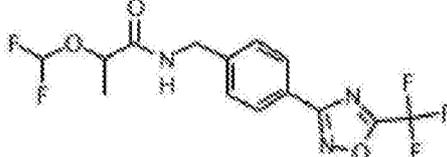
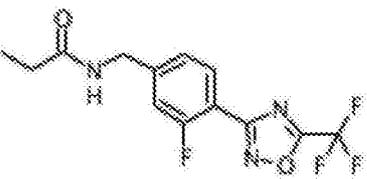
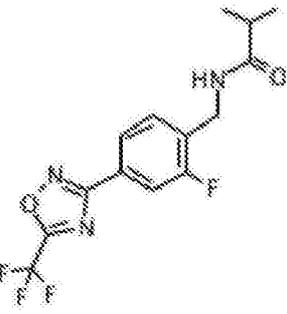
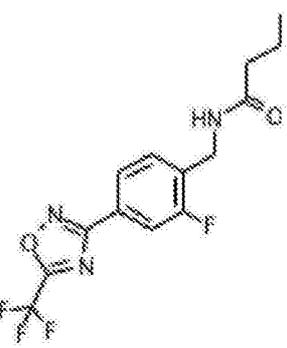
[0596]

表条 目	化合物名称	结构	RT (分 钟)	质荷比 (M+H) ⁺	方 法	mp (°C)
1.19	2-(甲氧基甲基)-N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]丁酰胺		1.53	358	B	
1.20	2-乙基-2-甲基-N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]丁酰胺		1.8	356	B	
1.21	4-甲氧基-N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]丁酰胺		1.39	344	B	
1.22	2-氰基-N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]乙酰胺		1.32	310.9	B	
1.23	2-甲氧基-N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]丙酰胺		1.44	329.9	B	94 - 100
1.24	3-(三氟甲基)-N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]戊酰胺		1.43		B	
1.25	2-甲氧基-N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]乙酰胺		1.41	316.2	B	127 - 128

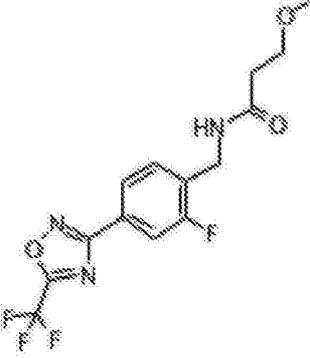
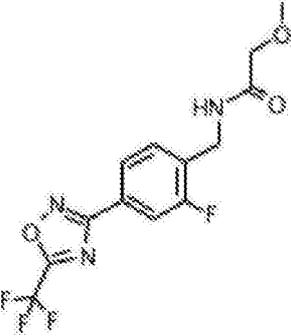
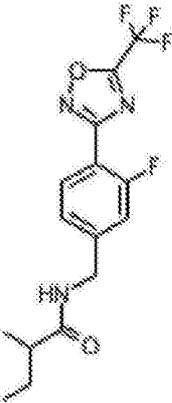
[0597]

表条 目	化合物名称	结构	RT (分 钟)	质荷比 (M+H) ⁺	方 法	mp (°C)
1.26	N-[[2-氟-4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]丙酰胺		1.43	318	B	99 - 110
1.27	2-羟基-N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]乙酰胺					107 - 112
1.28	2-羟基-N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]丙酰胺					90 - 94
1.29	N-[2-[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]乙基]丙酰胺		1.44	314.2	B	133.6 - 135
1.30	N-[[2-甲氧基-4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]丙酰胺		1.45	330	B	163 - 165
1.31	N-[[2-(三氟甲基)-4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]丙酰胺		1.62	368.1	B	100 - 102
1.32	N-[[2-氯-4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]丙酰胺		1.54	334.1	B	126 - 130

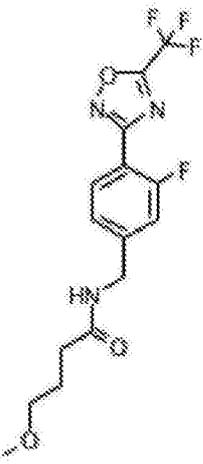
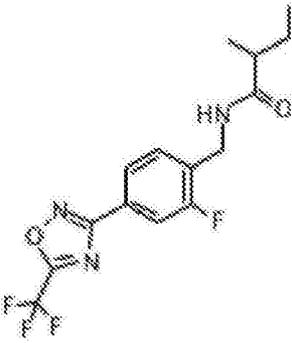
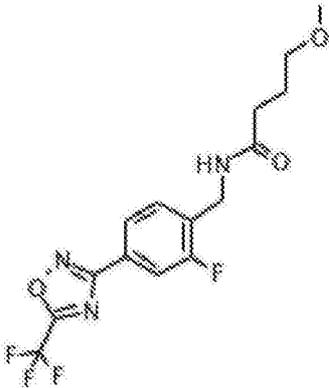
[0598]

表条 目	化合物名称	结构	RT (分 钟)	质荷比 (M+H) ⁺	方 法	mp (°C)
1.33	2-(二氟甲氧基)-N- [[4-[5-(三氟甲基)- 1,2,4-噁二唑-3-基] 苯基]甲基]丙酰胺					66 - 70
1.34	N-[[3-氟-4-[5-(三氟 甲基)-1,2,4-噁二唑- 3-基]苯基]甲基]丙 酰胺		1.44	318.1		108 - 110
1.35	N-[[2-氟-4-[5-(三氟 甲基)-1,2,4-噁二唑- 3-基]苯基]甲基]-2- 甲基-丙酰胺		1.54	332.1	B	
1.36	N-[[2-氟-4-[5-(三氟 甲基)-1,2,4-噁二唑- 3-基]苯基]甲基]丁 酰胺		1.54	332.1	B	

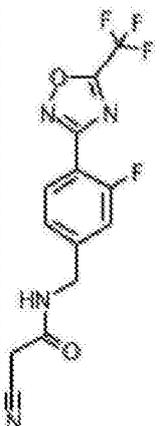
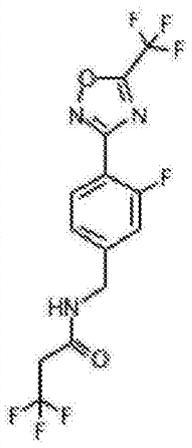
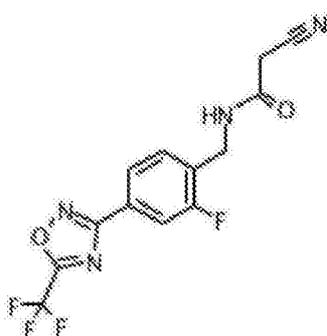
[0599]

表条 目	化合物名称	结构	RT (分 钟)	质荷比 (M+H) ⁺	方 法	mp (°C)
1.37	N-[[2-氟-4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]-3-甲氧基-丙酰胺		1.4	348.1	B	
1.38	N-[[2-氟-4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]-2-甲氧基-乙酰胺		1.42	344.1	B	
1.39	N-[[3-氟-4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]-2-甲基-丁酰胺		1.64	346.2	B	

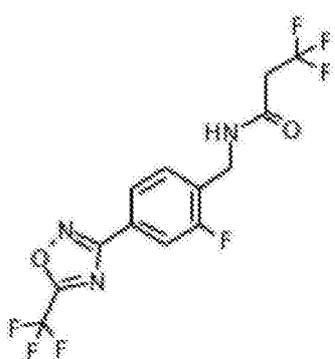
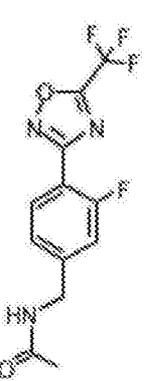
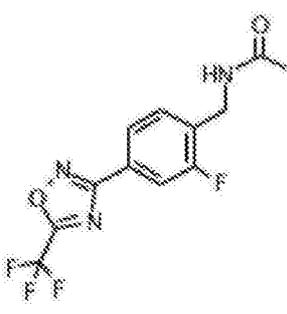
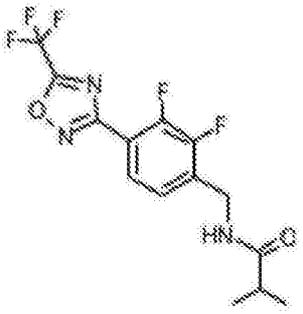
[0600]

表条 目	化合物名称	结构	RT (分 钟)	质荷比 (M+H) ⁺	方 法	mp (°C)
1.40	N-[[3-氟-4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]-4-甲氧基-丁酰胺		1.45	362.1	B	
1.41	N-[[2-氟-4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]-2-甲基-丁酰胺		1.64	346.1	B	
1.42	N-[[2-氟-4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]-4-甲氧基-丁酰胺		1.45	362.1	B	

[0601]

表条 目	化合物名称	结构	RT (分 钟)	质荷比 (M+H) ⁺	方 法	mp (°C)
1.43	2-氨基-N-[[3-氟-4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]乙酰胺		1.36	329.1	B	
1.44	3,3,3-三氟-N-[[3-氟-4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]丙酰胺		1.56	372	B	
1.45	2-氨基-N-[[2-氟-4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]乙酰胺		1.36	329.1	B	

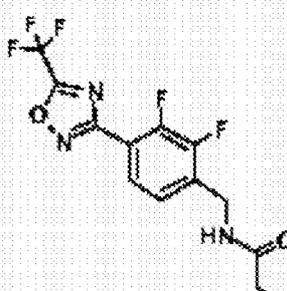
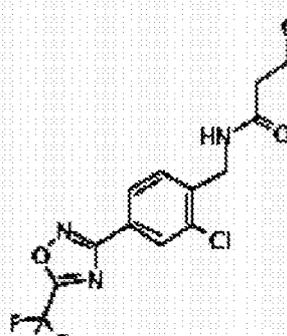
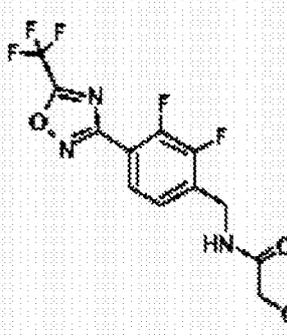
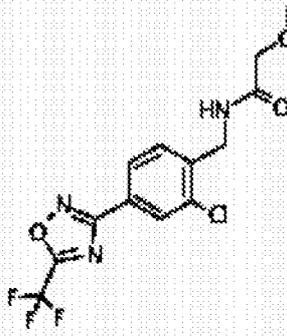
[0602]

表条 目	化合物名称	结构	RT (分 钟)	质荷比 (M+H) ⁺	方 法	mp (°C)
1.46	3,3,3-三氟-N-[[2-氟-4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]丙酰胺		1.56	372.1	B	
1.47	N-[[3-氟-4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]乙酰胺		1.32	304	B	
1.48	N-[[2-氟-4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]乙酰胺		1.32	304.1	B	
1.49	N-[[2,3-二氟-4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]-2-甲基-丙酰胺		1.53	350.1	B	

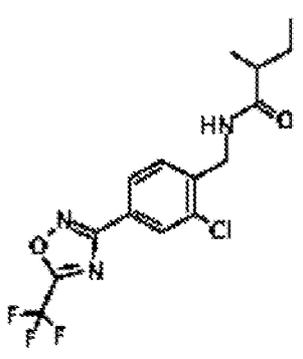
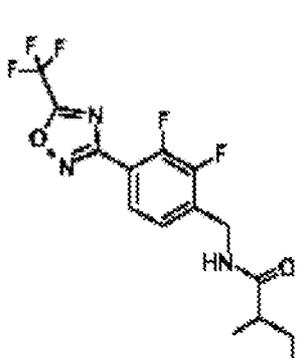
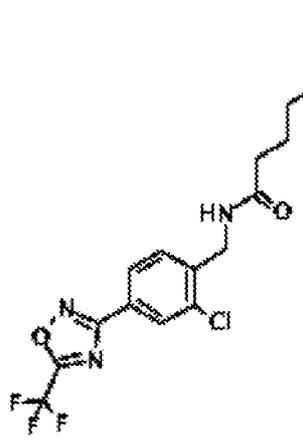
[0603]

表条 目	化合物名称	结构	RT (分 钟)	质荷比 (M+H) ⁺	方 法	mp (°C)
1.50	N-[[2-氯-4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]-2-甲基-丙酰胺		1.64	348.1	B	
1.51	N-[[2,3-二氟-4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]丁酰胺		1.53	350	B	
1.52	N-[[2-氯-4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]丁酰胺		1.65	347.1	B	
1.53	N-[[2,3-二氟-4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]-3-甲氧基-丙酰胺		1.39	366.1	B	

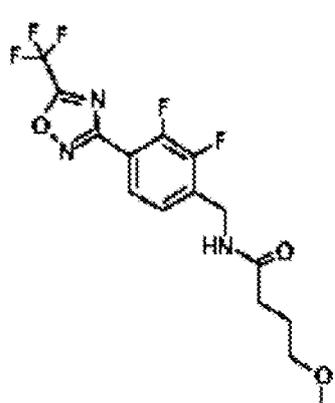
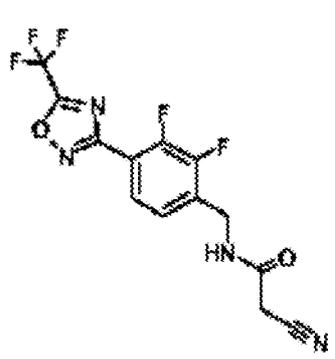
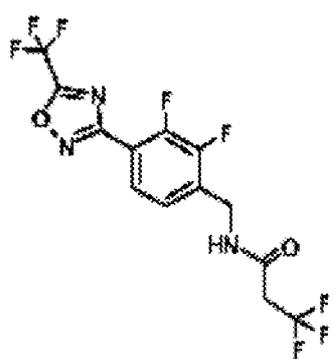
[0604]

表条 目	化合物名称	结构	RT (分 钟)	质荷比 (M+H) ⁺	方 法	mp (°C)
1.54	N-[[2,3-二氟-4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]丙酰胺		1.42	336	B	112 - 118
1.55	N-[[2-氟-4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]-3-甲氧基-丙酰胺		1.5	364.1	B	
1.56	N-[[2,3-二氟-4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]-2-甲氧基-乙酰胺		1.4	352	B	
1.57	N-[[2-氟-4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]-2-甲氧基-乙酰胺		1.53	350.1	B	

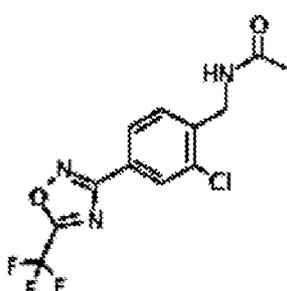
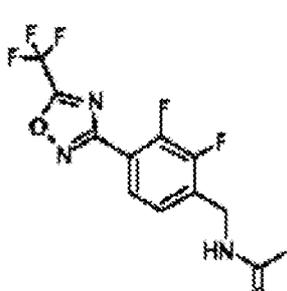
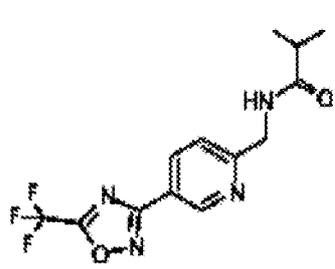
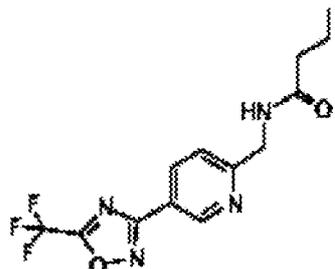
[0605]

表 条 目	化合物名称	结构	RT (分 钟)	质荷比 (M+H) ⁺	方 法	mp (°C)
1.58	N-[[2-氯-4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]-2-甲基-丁酰胺		1.74	362.1	B	
1.59	N-[[2,3-二氟-4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]-2-甲基-丁酰胺		1.62	364.2	B	
1.60	N-[[2-氯-4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]-4-甲氧基-丁酰胺		1.55	378.1	B	

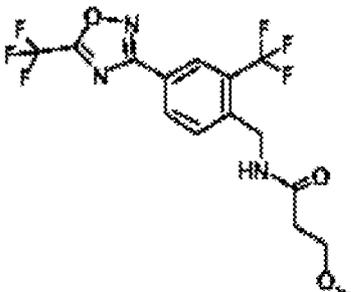
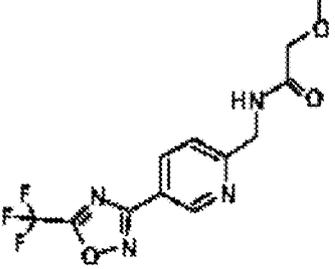
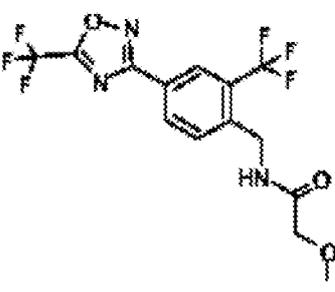
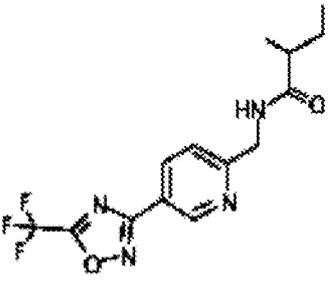
[0606]

表条 目	化合物名称	结构	RT (分 钟)	质荷比 (M+H) ⁺	方 法	mp (°C)
1.61	N-[[2,3-二氟-4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]-4-甲氧基-丁酰胺		1.44	380.1	B	
1.62	2-氰基-N-[[2,3-二氟-4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]乙酰胺		1.35	347	B	
1.63	N-[[2,3-二氟-4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]-3,3,3-三氟-丙酰胺		1.55	390	B	

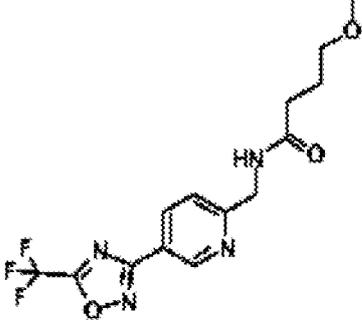
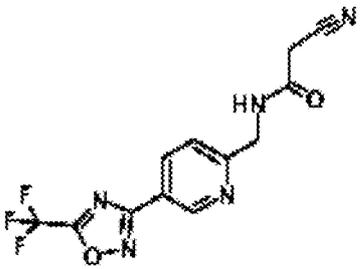
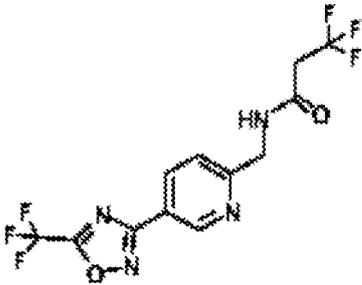
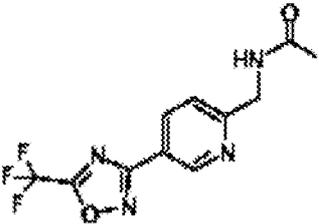
[0607]

表 条 目	化合物名称	结构	RT (分 钟)	质荷比 (M+H) ⁺	方 法	mp (°C)
1.64	N-[[2-氯-4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]乙酰胺		1.43	320	B	
1.65	N-[[2,3-二氟-4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]乙酰胺		1.31	322	B	
1.66	2-甲基-N-[[5-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]-2-吡啶基]甲基]丙酰胺		1.26	315.2	B	
1.67	N-[[5-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]-2-吡啶基]甲基]丁酰胺		1.26	315.2	B	

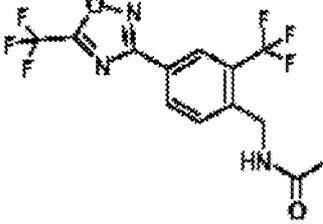
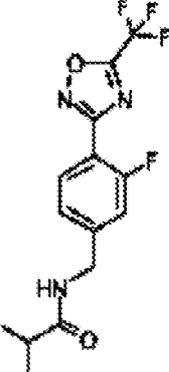
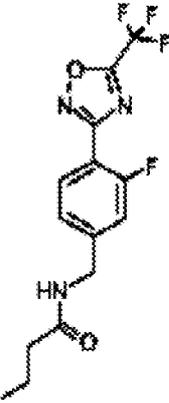
[0608]

表 条 目	化合物名称	结构	RT (分 钟)	质荷比 (M+H) ⁺	方 法	mp (°C)
1.68	3-甲氧基-N-[[2-(三氟甲基)-4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]丙酰胺		1.58	398.1	B	
1.69	2-甲氧基-N-[[5-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]-2-吡啶基]甲基]乙酰胺		1.14	317.1	B	
1.70	2-甲氧基-N-[[2-(三氟甲基)-4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]乙酰胺		1.61	384.1	B	
1.71	2-甲基-N-[[5-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]-2-吡啶基]甲基]丁酰胺		1.38	329.2	B	

[0609]

表 条 目	化合物名称	结构	RT (分 钟)	质荷比 (M+H) ⁺	方 法	mp (°C)
1.72	4-甲氧基-N-[[5-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]-2-吡啶基]甲基]丁酰胺		1.17	345.2	B	
1.73	2-氰基-N-[[5-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]-2-吡啶基]甲基]乙酰胺		1.07	312	B	
1.74	3,3,3-三氟-N-[[5-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]-2-吡啶基]甲基]丙酰胺		1.3	355	B	
1.75	N-[[5-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]-2-吡啶基]甲基]乙酰胺		1.02	287.1	B	

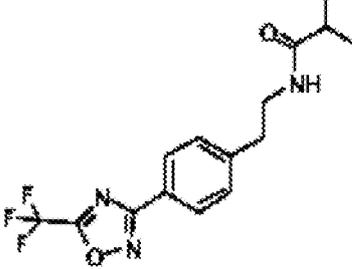
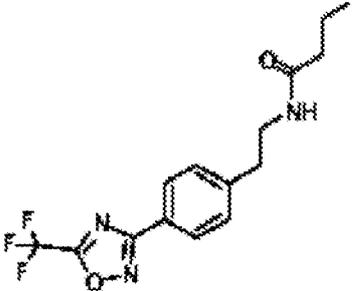
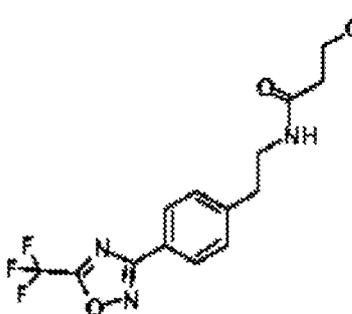
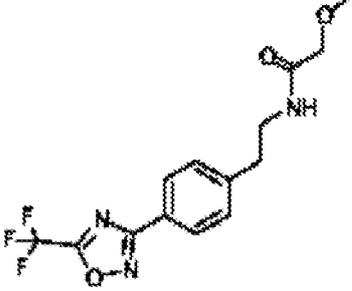
[0610]

表 条 目	化合物名称	结构	RT (分 钟)	质荷比 (M+H) ⁺	方 法	mp (°C)
1.76	N-[[2-(三氟甲基)-4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]乙酰胺		1.51	354	B	
1.77	N-[[3-氟-4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]-2-甲基-丙酰胺		1.54	332.2	B	
1.78	N-[[3-氟-4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]丁酰胺		1.54	332.2	B	

[0611]

表条 目	化合物名称	结构	RT (分 钟)	质荷比 (M+H) ⁺	方 法	mp (°C)
1.79	N-[[3-氟-4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]-3-甲氧基-丙酰胺		1.4	348.1	B	
1.80	N-[[3-氟-4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]-2-甲氧基-乙酰胺		1.42	334.1	B	
1.81	N-[[2-甲基-4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]丙酰胺					140 - 143
1.82	2-乙酰胺基-N-[2-[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]乙基]乙酰胺		1.22	357.2	B	

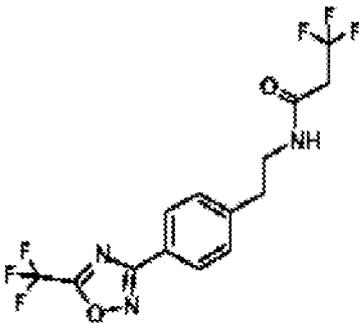
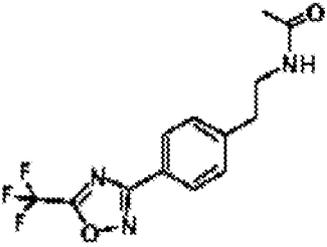
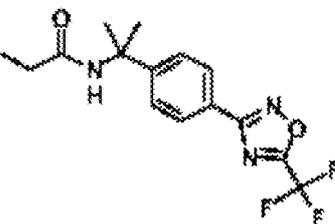
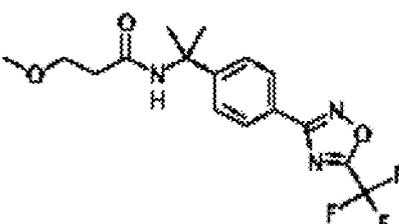
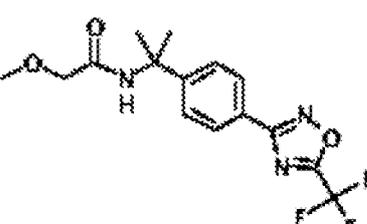
[0612]

表 条 目	化合物名称	结构	RT (分 钟)	质荷比 (M+H) ⁺	方 法	mp (°C)
1.83	2-甲基-N-[2-[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]乙基]丙酰胺		1.55	328.2	B	
1.84	N-[2-[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]乙基]丁酰胺		Jan 54	328.2	B	
1.85	3-甲氧基-N-[2-[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]乙基]丙酰胺		1.41	344.2	B	
1.86	2-甲氧基-N-[2-[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]乙基]乙酰胺		1.43	330.2	B	

[0613]

表 条 目	化合物名称	结构	RT (分 钟)	质荷比 (M+H) ⁺	方 法	mp (°C)
1.87	2-甲基-N-[2-[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]乙基]丁酰胺		1.64	342.2	B	
1.88	2-(氯甲基)-3-羟基-2-甲基-N-[2-[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]乙基]丙酰胺		1.52	392.2	B	
1.89	4-甲氧基-N-[2-[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]乙基]丁酰胺		1.45	348.2	B	
1.90	2-氨基-N-[2-[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]乙基]乙酰胺		1.38	325.1	B	

[0614]

表 条 目	化合物名称	结构	RT (分 钟)	质荷比 (M+H) ⁺	方 法	mp (°C)
1.91	3,3,3-三氟-N-[2-[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]乙基]丙酰胺		1.58	368.1	B	
1.92	N-[2-[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]乙基]乙酰胺		1.34	300.1	B	
1.93	N-[1-甲基-1-[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]乙基]丙酰胺					142 - 146
1.94	3-甲氧基-N-[1-甲基-1-[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]乙基]丙酰胺					94 - 103
1.95	2-甲氧基-N-[1-甲基-1-[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]乙基]乙酰胺		1.01	344	A	

[0615]

表条 目	化合物名称	结构	RT (分 钟)	质荷比 (M+H) ⁺	方 法	mp (°C)
1.96	2-甲氧基-N-[1-[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]环丙基]乙酰胺					95 - 99
1.97	2-(二氟甲氧基)-N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]乙酰胺					92 - 100
1.98	3-甲氧基-N-[1-[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]环丙基]丙酰胺					113 - 118
1.99	N-[1-[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]环丙基]丙酰胺					121 - 128
1.100	N-[氨基-[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]丙酰胺					185 - 186
1.101	N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]乙酰胺					130 - 135

[0616]

表条 目	化合物名称	结构	RT (分 钟)	质荷比 (M+H) ⁺	方 法	mp (°C)
1.102	2,2,2-三氟-N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]乙酰胺					146 - 149
1.103	2-甲氧基-2-甲基-N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]丙酰胺					77 - 80
1.104	2-羟基-2-甲基-N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]丙酰胺					95 - 98
1.105	2-甲氧基-N-[[6-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]-3-吡啶基]甲基]丙酰胺					99 - 103
1.106	2-甲基-N-[[6-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]-3-吡啶基]甲基]丙酰胺					151 - 153
1.107	N-[2-氟-2-[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]乙基]丙酰胺		0.99	332	A	118 - 128
1.108	2-甲氧基-N-[[5-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]嘧啶-2-基]甲基]丙酰胺		0.82	332	A	

[0617]

表 条 目	化合物名称	结构	RT (分 钟)	质荷比 (M+H) ⁺	方 法	mp (°C)
1.109	N-[[2-乙基-4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]-2-甲氧基-丙酰胺		0.89	357	A	
1.110	N-[[5-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]嘧啶-2-基]甲基]丙酰胺		0.76	302	A	
1.111	N-[[2-乙基-4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]丙酰胺		0.85	327	A	

[0618] 表T2:具有化学式(I)的化合物的熔点(mp)数据和/或保留时间(RT):

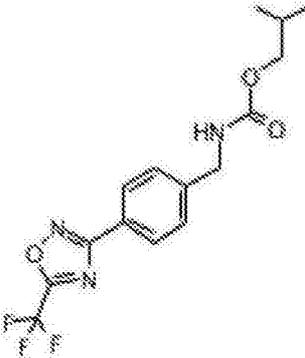
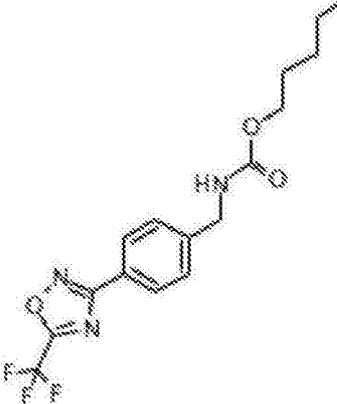
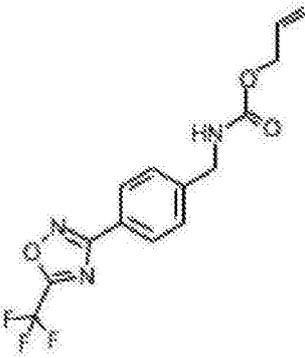
[0619]

表 条 目	化合物名称	结构	RT (分 钟)	质荷比 (M+H) ⁺	方 法	mp (°C)
2.1	叔丁基 N-[2-[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]乙基]氨基甲酸酯					81 - 83.1
2.2	2-乙氧基乙基 N-[[2-(三氟甲基)-4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]氨基甲酸酯					60 - 66

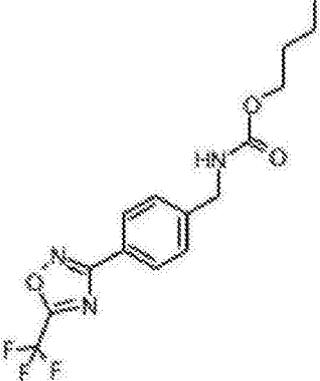
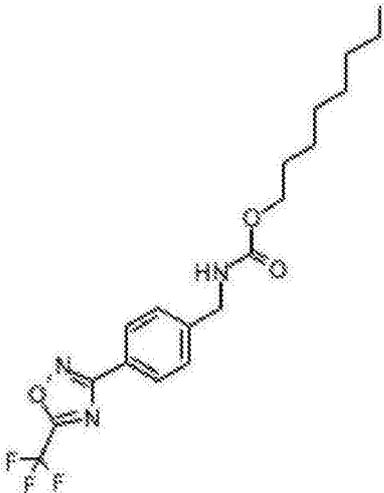
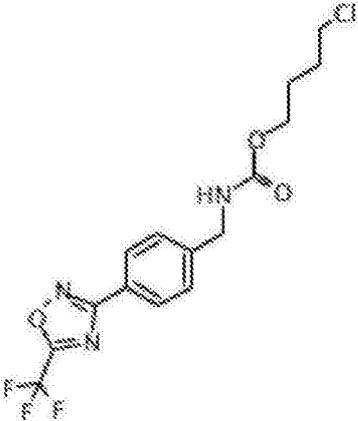
[0620]

表 条目	化合物名称	结构	RT (分 钟)	质荷 比 (M+H) +	方 法	mp (°C)
2.3	2-甲氧基乙基 N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]氨基甲酸酯		1.46	346.2	B	82 - 85
2.4	甲基 N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]氨基甲酸酯					116 - 119
2.5	乙基 N-[2-[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]乙基]氨基甲酸酯					92 - 96
2.6	丙基 N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]氨基甲酸酯					107.8 - 109.7
2.7	丁-2-炔基 N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]氨基甲酸酯		1.63	340.2	B	

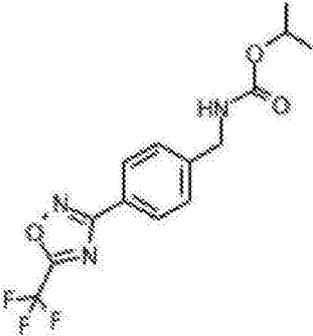
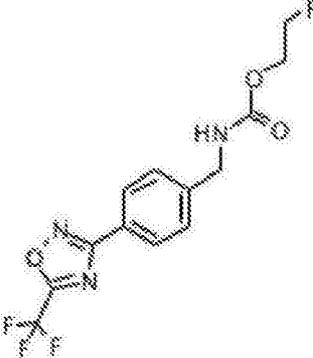
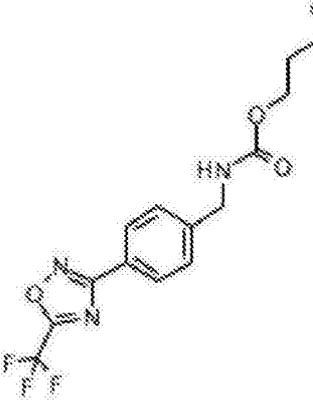
[0621]

表 条目	化合物名称	结构	RT (分 钟)	质荷 比 (M+H) +	方 法	mp (°C)
2.8	异丁基 N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]氨基甲酸酯		1.8	344.2	B	
2.9	戊基 N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]氨基甲酸酯		1.91	358.2	B	
2.10	烯丙基 N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]氨基甲酸酯		1.62	328.2	B	

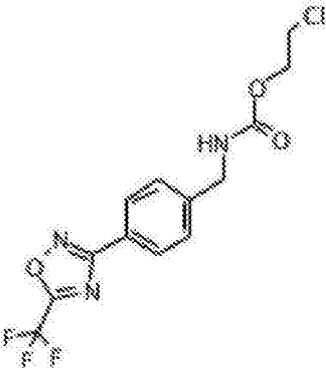
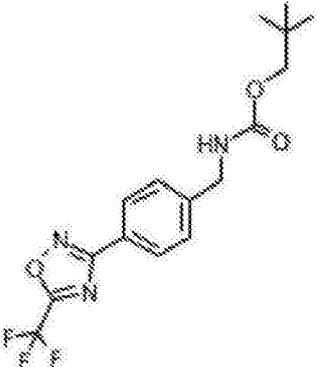
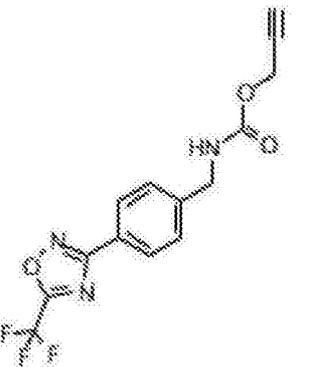
[0622]

表 条目	化合物名称	结构	RT (分 钟)	质荷 比 (M+H) +	方 法	mp (°C)
2.11	丁基 N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]氨基甲酸酯		1.8	344.2	B	
2.12	辛基 N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]氨基甲酸酯		2.2	400.3	B	
2.13	4-氯丁基 N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]氨基甲酸酯		1.75	378.2	B	

[0623]

表 条目	化合物名称	结构	RT (分 钟)	质荷 比 (M+H) +	方 法	mp (°C)
2.14	异丙基 N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]氨基甲酸酯		1.68	330.2	B	
2.15	2-氟乙基 N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]氨基甲酸酯		1.49	334.2	B	
2.16	3-氯丙基 N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]氨基甲酸酯		1.67	364.2	B	

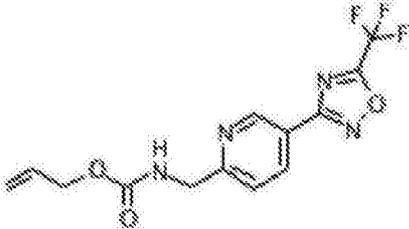
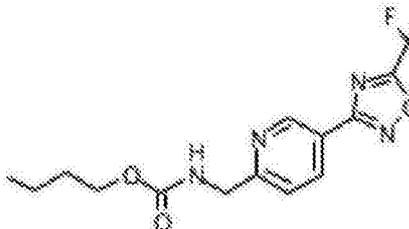
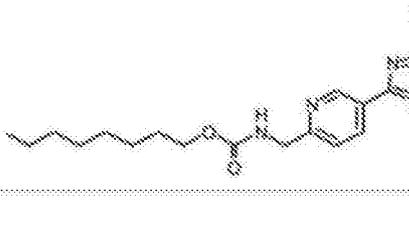
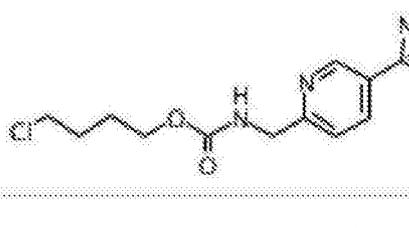
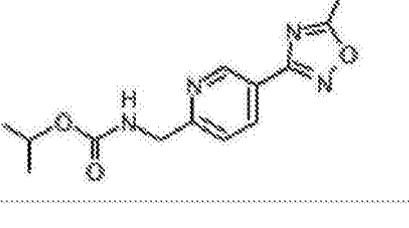
[0624]

表 条目	化合物名称	结构	RT (分 钟)	质荷 比 (M+H) +	方 法	mp (°C)
2.17	2-氯乙基 N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]氨基甲酸酯		1.6	350.1	B	
2.18	2,2-二甲基丙基 N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]氨基甲酸酯		1.88	358.2	B	
2.19	丙-2-炔基 N-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]氨基甲酸酯		1.53	326.2	B	93 - 95

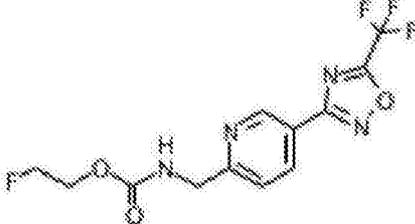
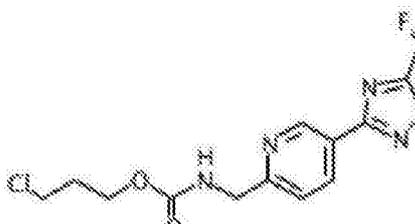
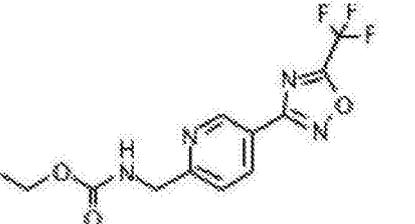
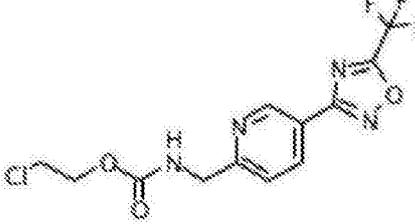
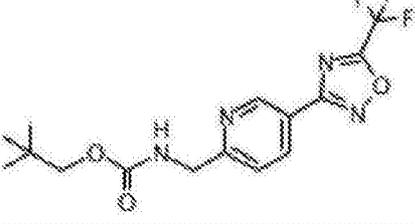
[0625]

表 条目	化合物名称	结构	RT (分 钟)	质荷 比 (M+H) +	方 法	mp (°C)
2.20	丙基 N-[[5-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]-2-吡啶基]甲基]氨基甲酸酯		1.45	331.2	B	
2.21	丁-2-炔基 N-[[5-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]-2-吡啶基]甲基]氨基甲酸酯		1.4	341.2	B	
2.22	异丁基 N-[[5-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]-2-吡啶基]甲基]氨基甲酸酯		1.48	345.2	B	
2.23	戊基 N-[[5-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]-2-吡啶基]甲基]氨基甲酸酯		1.7	359.2	B	
2.24	2-甲氧基乙基 N-[[5-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]-2-吡啶基]甲基]氨基甲酸酯		1.21	347.2	B	

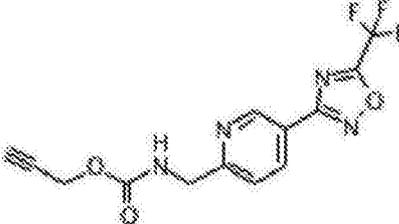
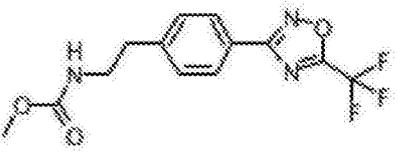
[0626]

表 条目	化合物名称	结构	RT (分 钟)	质荷 比 (M+H) +	方 法	mp (°C)
2.25	烯丙基 N-[[5-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]-2-吡啶基]甲基]氨基甲酸酯		1.38	392.2	B	
2.26	丁基 N-[[5-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]-2-吡啶基]甲基]氨基甲酸酯		1.58	345.2	B	
2.27	辛基 N-[[5-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]-2-吡啶基]甲基]氨基甲酸酯		2.04	401.3	B	
2.28	4-氯丁基 N-[[5-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]-2-吡啶基]甲基]氨基甲酸酯		1.54	379.2	B	
2.29	异丙基 N-[[5-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]-2-吡啶基]甲基]氨基甲酸酯		1.44	331.2	B	

[0627]

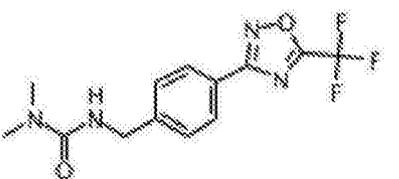
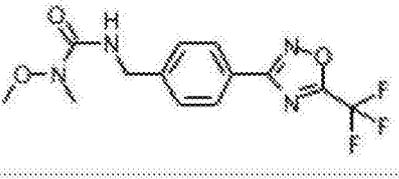
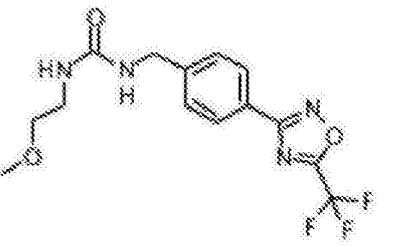
表 条目	化合物名称	结构	RT (分 钟)	质荷 比 (M+H) +	方 法	mp (°C)
2.30	2-氟乙基 N-[[5-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]-2-吡啶基]甲基]氨基甲酸酯		1.24	335.2	B	
2.31	3-氯丙基 N-[[5-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]-2-吡啶基]甲基]氨基甲酸酯		1.46	365.1	B	
2.32	乙基 N-[[5-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]-2-吡啶基]甲基]氨基甲酸酯		1.32	317.2	B	
2.33	2-氯乙基 N-[[5-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]-2-吡啶基]甲基]氨基甲酸酯		1.37	351.1	B	
2.34	2,2-二甲基丙基 N-[[5-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]-2-吡啶基]甲基]氨基甲酸酯		1.68	359.2	B	

[0628]

表 条目	化合物名称	结构	RT (分 钟)	质荷 比 (M+H) +	方法	mp (°C)
2.35	丙-2-炔基 N-[[5-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]-2-吡啶基]甲基]氨基甲酸酯		1.29	327.1	B	
2.36	甲基 N-[2-[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]乙基]氨基甲酸酯					84.8 - 86.5

[0629] 表T3:具有化学式(I)的化合物的熔点(mp)数据和/或保留时间(RT)。

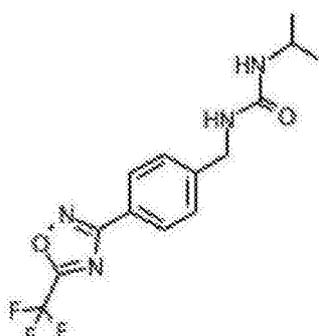
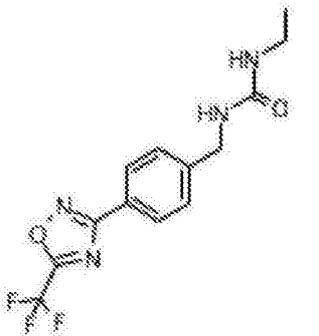
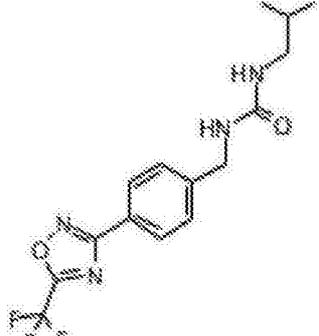
[0630]

表 条目	化合物名称	结构	RT (分 钟)	质荷 比 (M+H) +	方法	mp (°C)
3.1	1,1-二甲基-3-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]脲		1.32	315.2	B	118 - 125
3.2	1-甲氧基-1-甲基-3-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]脲		1.46	331.1	B	90.2 - 93.8
3.3	1-(2-甲氧基乙基)-3-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]脲		1.3	345.1	B	152 - 155

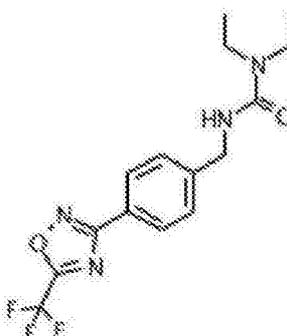
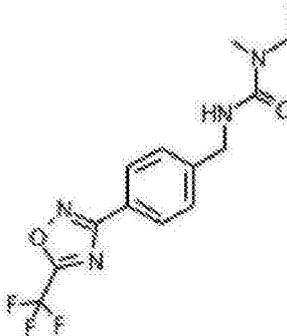
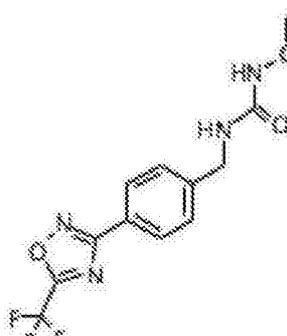
[0631]

表 条目	化合物名称	结构	RT (分 钟)	质荷 比 (M+H) +	方 法	mp (°C)
3.4	1-甲基-3-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]脲					198 - 201
3.5	1-甲氧基-1-甲基-3-[2-[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]乙基]脲					80 - 84
3.6	1-丙基-3-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]脲		1.42	329.2	B	174.1 - 176.4
3.7	1-仲丁基-3-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]脲		1.51	343.2	B	
3.8	1-(2,2-二甲基丙基)-3-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]脲		1.62	357.2	B	

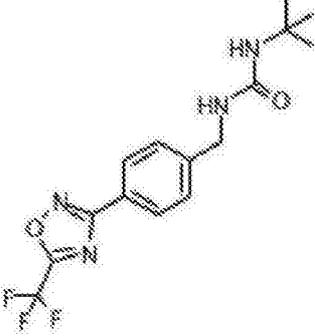
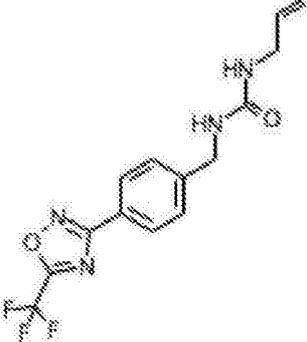
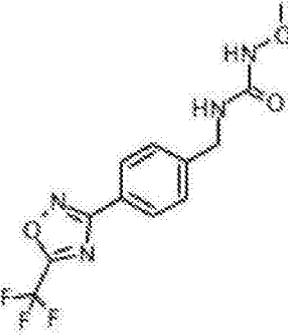
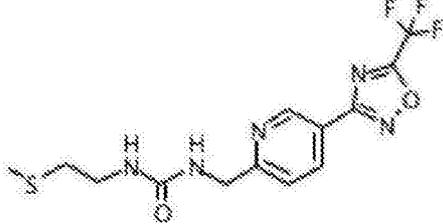
[0632]

表 条目	化合物名称	结构	RT (分 钟)	质荷 比 (M+H) +	方 法	mp (°C)
3.9	1-异丙基-3-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]脲		1.41	329.2	B	
3.10	1-乙基-3-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]脲		1.31	315.2	B	
3.11	1-异丁基-3-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]脲		1.52	353.2	B	

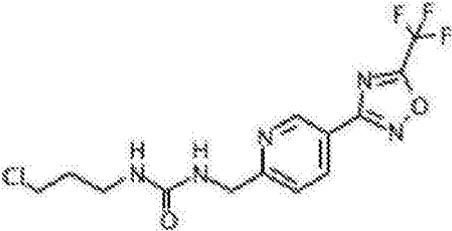
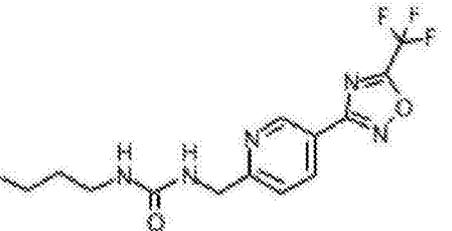
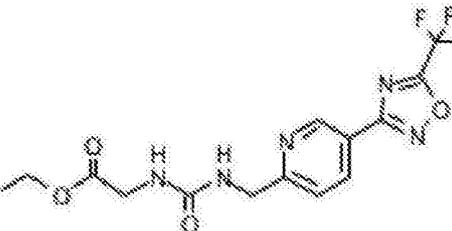
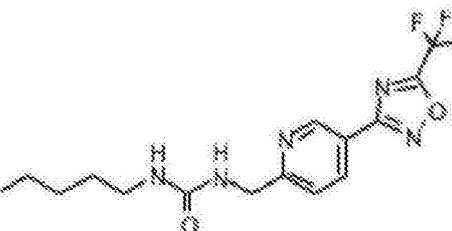
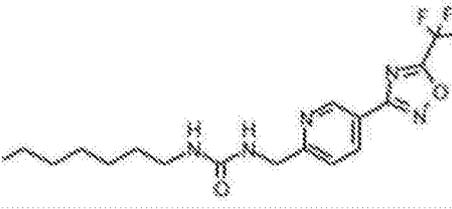
[0633]

表 条目	化合物名称	结构	RT (分 钟)	质荷 比 (M+H) +	方 法	mp (°C)
3.12	1,1-二乙基-3-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]脲		1.53	343.2	B	
3.13	1-乙基-1-甲基-3-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]脲		1.43	329.2	B	
3.14	1-乙氧基-3-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]脲		1.39	331.2	B	

[0634]

表 条目	化合物名称	结构	RT (分 钟)	质荷 比 (M+H) +	方 法	mp (°C)
3.15	1-叔丁基-3-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]脲		1.57	343.2	B	
3.16	1-烯丙基-3-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]脲		1.37	327.2	B	
3.17	1-甲氧基-3-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]脲		1.28	317.2	B	
3.18	1-(2-甲基硫烷基乙基)-3-[[5-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]-2-吡啶基]甲基]脲		1.19	362.2	B	

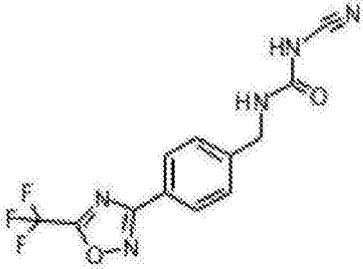
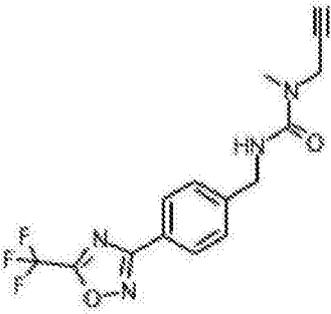
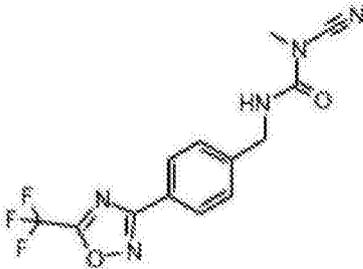
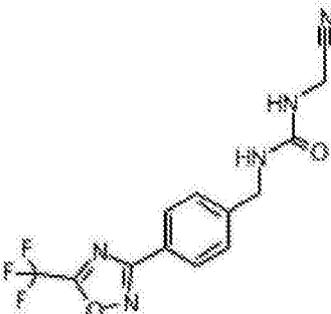
[0635]

表 条目	化合物名称	结构	RT (分 钟)	质荷 比 (M+H) +	方 法	mp (°C)
3.19	1-(3-氯丙基)-3-[[5-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]-2-吡啶基]甲基]脲		1.24	364.1	B	
3.20	1-丁基-3-[[5-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]-2-吡啶基]甲基]脲		1.33	344.2	B	
3.21	乙基 2-[[5-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]-2-吡啶基]甲基氨基甲酰基氨基]乙酸酯		1.14	374.2	B	
3.22	1-戊基-3-[[5-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]-2-吡啶基]甲基]脲		1.45	358.2	B	
3.23	1-庚基-3-[[5-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]-2-吡啶基]甲基]脲		1.69	368.3	B	

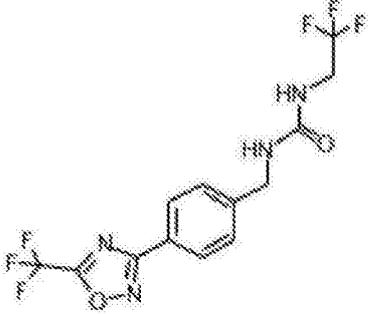
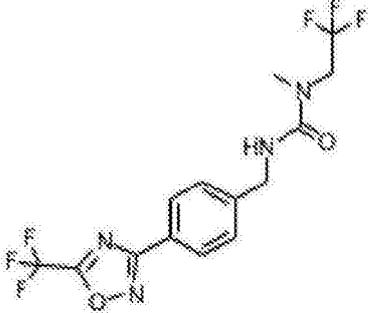
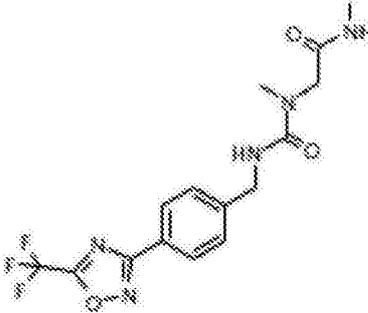
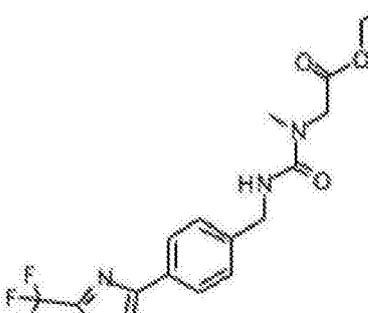
[0636]

表 条目	化合物名称	结构	RT (分 钟)	质荷 比 (M+H) +	方 法	mp (°C)
3.24	1-(2-氯乙基)-3-[[5-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]-2-吡啶基]甲基]脲		1.17	350.1	B	
3.25	1-甲氧基-1-甲基-3-[1-甲基-1-[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]乙基]脲					78 - 83
3.26	1-甲氧基-1-甲基-3-[1-[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]环丙基]脲					81 - 83
3.27	1-(氰基甲基)-1-甲基-3-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]脲		1.34	340.1	B	
3.28	1-丙-2-炔基-3-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]脲		1.33	325.1	B	

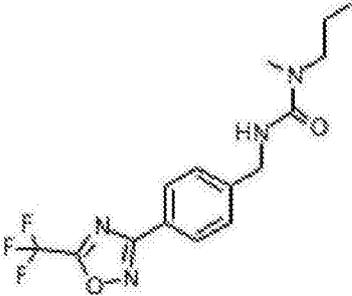
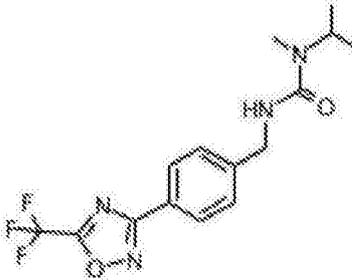
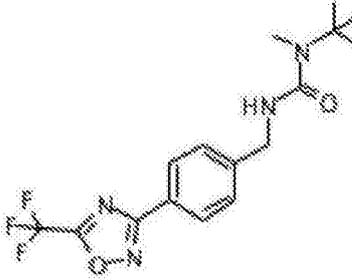
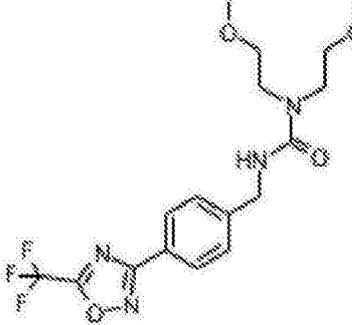
[0637]

表 条目	化合物名称	结构	RT (分 钟)	质荷 比 (M+H) +	方 法	mp (°C)
3.29	1-氰基-3-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]脲		1.27	312.1	B	
3.30	1-甲基-1-丙-2-炔基-3-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]脲		1.44	338.1	B	
3.31	1-氰基-1-甲基-3-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]脲		1.42	325.1	B	
3.32	1-(氰基甲基)-3-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]脲		1.26	326.1	B	

[0638]

表 条目	化合物名称	结构	RT (分 钟)	质荷 比 (M+H) +	方 法	mp (°C)
3.33	1-(2,2,2-三氟乙基)-3-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]脲		1.47	369.1	B	
3.34	1-甲基-1-(2,2,2-三氟乙基)-3-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]脲		1.63	383.1	B	
3.35	N-甲基-2-[甲基-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基氨基甲酰基]氨基]乙酰胺		1.22	372.2	B	
3.36	乙基 2-[甲基-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基氨基甲酰基]氨基]乙酸酯		1.5	387.2	B	

[0639]

表 条目	化合物名称	结构	RT (分 钟)	质荷 比 (M+H) +	方 法	mp (°C)
3.37	1-甲基-1-丙基-3-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]脲		1.59	343.2	B	
3.38	1-异丙基-1-甲基-3-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]脲		1.57	343.2	B	
3.39	1-叔丁基-1-甲基-3-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]脲		1.75	357.2	B	
3.40	1,1-双(2-甲氧基乙基)-3-[[4-[5-(三氟甲基)-1,2,4-噁二唑-3-基]苯基]甲基]脲		1.58	403.22	B	

[0640]

表 条目	化合物名称	结构	RT (分 钟)	质荷 比 (M+H) +	方 法	mp (°C)
3.41	1-烯丙基-1-甲基-3- [[4-[5-(三氟甲基)- 1,2,4-噁二唑-3-基] 苯基]甲基]脲		1.55	341.2	B	

[0641] 生物学实例:

[0642] 在孔板中叶圆片测试的一般实例:

[0643] 从生长于温室中的植物上切割不同植物物种的叶圆片或叶段。将切割的叶圆片或叶段置于多孔板(24孔规格)中的水琼脂上。在接种之前(预防性)或之后(治疗性),将叶圆片用测试溶液喷雾。将待测试的化合物制备成DMSO溶液(最大10mg/ml),将其在就要喷雾之前用0.025% Tween20稀释至适当浓度。根据对应的测试系统,在限定的条件(温度、相对湿度、光等)下孵育接种的叶圆片或叶段。取决于病害系统,孵育3至14天之后,进行疾病水平的单评估。然后计算相对于未处理的检验叶圆片或叶段的疾病控制百分比。

[0644] 在孔板中液体培养测试的一般实例:

[0645] 将一种真菌的菌丝体片段或分生孢子(从所述真菌的液体培养物或从低温储存物新鲜制备)直接混入营养肉汤中。将测试化合物(最大10mg/ml)的DMSO溶液通过因子50用0.025%的Tween20进行稀释,并且将10 μ l的这种溶液用移液管移取到微量滴定板(96孔规格)中。然后将包含所述真菌孢子/菌丝体片段的营养肉汤添加到其中,从而给出所述测试化合物的终浓度。将测试板在24°C和96%相对湿度的黑暗中进行孵育。取决于病害系统,2至7天之后通过光度法测定真菌生长的抑制,并且计算相对于未处理的检验物而言的抗真菌活性百分比。

[0646] 针对小麦隐匿柄锈菌的杀真菌活性/小麦/叶圆片预防法(褐锈病)

[0647] 将小麦叶段栽培品种Kanzler置于多孔板(24孔规格)的琼脂上,并且用稀释在水中的配制的测试化合物喷雾。在施用后1天,用真菌的孢子悬浮液接种叶圆片。在气候室中,在12小时照明/12小时黑暗的光方案下,在19°C和75%相对湿度(rh)下孵育经接种的叶段,并且化合物活性被评估为,在未处理的检验叶段中出现适当水平的疾病损害时(施用后7至9天),与未处理的相比的疾病控制百分比。

[0648] 在这一测试中,当在相同条件下与示出广泛的疾病发展的未处理的对照叶圆片相比时,在施用的配制品中以下化合物在200ppm下给出至少80%的疾病控制。

[0649] 化合物(来自表T1) 1.1、1.2、1.3、1.4、1.5、1.6、1.7、1.8、1.9、1.10、1.11、1.12、1.13、1.14、1.15、1.16、1.17、1.18、1.19、1.20、1.21、1.22、1.23、1.25、1.26、1.27、1.28、

1.29、1.32、1.33、1.34、1.35、1.36、1.37、1.38、1.39、1.40、1.41、1.42、1.43、1.44、1.45、1.46、1.47、1.48、1.49、1.51、1.53、1.54、1.56、1.59、1.60、1.61、1.62、1.63、1.64、1.65、1.66、1.67、1.69、1.71、1.72、1.74、1.75、1.77、1.78、1.79、1.80、1.83、1.84、1.85、1.86、1.87、1.89、1.90、1.91、1.92、1.93、1.94、1.95、1.96、1.97、1.98、1.99、1.100、1.101、1.102、1.103、1.104、1.105、1.106和1.107。

[0650] 化合物(来自表T2) 2.1、2.3、2.4、2.5、2.6、2.7、2.8、2.9、2.10、2.11、2.13、2.14、2.15、2.16、2.17、2.18、2.19、2.20、2.21、2.22、2.23、2.24、2.25、2.26、2.28、2.29、2.30、2.31、2.32、2.33、2.35和2.36。

[0651] 化合物(来自表T3) 3.1、3.2、3.3、3.4、3.5、3.6、3.7、3.8、3.9、3.10、3.11、3.12、3.13、3.14、3.15、3.16、3.17、3.19、3.20、3.25、和3.26。

[0652] 针对小麦隐匿柄锈菌的杀真菌活性/小麦/叶圆片治疗法(褐锈病)

[0653] 将小麦叶段栽培品种Kanzler置于多孔板(24孔规格)内的琼脂上。然后用真菌的孢子悬浮液接种叶段。在19℃和75%相对湿度下,在黑暗中储存板。在接种后1天,施用在水中稀释的经配制的测试化合物。在气候室中,在12小时照明/12小时黑暗的光方案下,在19℃和75%相对湿度下孵育叶段,并且化合物活性被评估为,在未处理的检验叶段中出现适当水平的疾病损害时(施用后6至8天),与未处理的相比的疾病控制百分比。

[0654] 在这一测试中,当在相同条件下与示出广泛的疾病发展的未处理的对照叶圆片相比时,在施用的配制品中以下化合物在200ppm下给出至少80%的疾病控制。

[0655] 化合物(来自表T1) 1.1、1.2、1.3、1.4、1.5、1.6、1.7、1.8、1.9、1.10、1.12、1.13、1.14、1.15、1.17、1.19、1.20、1.21、1.22、1.23、1.25、1.26、1.27、1.28、1.29、1.33、1.34、1.35、1.36、1.37、1.38、1.39、1.40、1.41、1.42、1.43、1.44、1.45、1.46、1.47、1.48、1.49、1.51、1.53、1.54、1.56、1.57、1.60、1.61、1.62、1.63、1.65、1.66、1.67、1.69、1.71、1.72、1.73、1.74、1.75、1.77、1.78、1.79、1.80、1.83、1.84、1.85、1.86、1.87、1.89、1.90、1.92、1.93、1.94、1.95、1.96、1.97、1.98、1.99、1.100、1.101、1.102、1.103、1.104、1.105、1.106和1.107。

[0656] 化合物(来自表T2) 2.1、2.3、2.4、2.5、2.6、2.8、2.10、2.11、2.13、2.14、2.15、2.16、2.17、2.18、2.19、2.20、2.21、2.22、2.24、2.25、2.26、2.28、2.29、2.30、2.31、2.32、2.33、2.34、2.35、和2.36。

[0657] 化合物(来自表T3) 3.1、3.2、3.3、3.4、3.5、3.9、3.10、3.12、3.13、3.14、3.15、3.16、3.17、3.25、和3.26。

[0658] 针对豆薯层锈菌的杀真菌活性/大豆/叶圆片预防法(亚洲大豆锈病)

[0659] 将大豆叶圆片置于多孔板(24孔规格)中的水琼脂上,并且用稀释于水中的配制的测试化合物进行喷雾。施用后一天,通过在下部叶表面喷雾孢子悬浮液来接种叶圆片。在气候室中,在黑暗中以20℃和75%rh下的24-36小时的孵育期之后,用12h照明/天和75%rh将叶圆片保持在20℃。当在未处理的检验叶圆片中出现适当水平的疾病损害时(施用后12至14天),将化合物的活性评估为与未处理的相比的疾病控制百分比。

[0660] 在这一测试中,当在相同条件下与示出广泛的疾病发展的未处理的对照叶圆片相比时,在施用的配制品中以下化合物在200ppm下给出至少80%的疾病控制。

[0661] 化合物(来自表T1) 1.1、1.2、1.3、1.4、1.5、1.6、1.7、1.8、1.9、1.10、1.11、1.12、

1.13、1.14、1.15、1.16、1.17、1.18、1.19、1.20、1.21、1.22、1.23、1.25、1.26、1.28、1.29、1.32、1.33、1.34、1.35、1.36、1.38、1.39、1.41、1.44、1.46、1.47、1.48、1.49、1.51、1.54、1.56、1.59、1.63、1.65、1.77、1.78、1.80、1.82、1.83、1.84、1.85、1.86、1.87、1.88、1.89、1.90、1.91、1.92、1.93、1.94、1.95、1.96、1.97、1.99、1.100、1.101、1.102、1.103和1.107。

[0662] 化合物(来自表T2) 2.3、2.4、2.5、2.6、2.7、2.8、2.10、2.11、2.13、2.14、2.15、2.16、2.17、2.19、和2.36。

[0663] 化合物(来自表T3) 3.1、3.2、3.3、3.4、3.5、3.6、3.7、3.9、3.10、3.12、3.13、3.14、3.16、3.17、3.25、和3.26。

[0664] 针对瓜类小丛壳(瓜类刺盘孢)液体培养物的杀真菌活性/黄瓜/预防法(炭疽病)

[0665] 将来自低温储存的真菌分生孢子直接混入营养肉汤(PDB-马铃薯右旋糖肉汤)中。在将测试化合物的(DMSO)溶液置于微量滴定板(96孔规格)中之后,添加含有真菌孢子的营养肉汤。将测试板在24℃孵育并且在施用后3至4天通过光度法测量对生长的抑制。

[0666] 在这一测试中,当在相同条件下与示出广泛的疾病发展的未处理的对照相比时,在施用的配制品中以下化合物在20ppm下给出至少80%的疾病控制。

[0667] 化合物(来自表T1) 1.1、1.2、1.3、1.4、1.5、1.6、1.7、1.8、1.9、1.10、1.11、1.12、1.13、1.14、1.15、1.16、1.17、1.19、1.20、1.21、1.23、1.25、1.26、1.27、1.28、1.29、1.32、1.33、1.34、1.35、1.36、1.37、1.38、1.39、1.40、1.41、1.42、1.43、1.44、1.45、1.46、1.47、1.48、1.49、1.50、1.51、1.52、1.53、1.54、1.55、1.56、1.57、1.58、1.59、1.60、1.61、1.62、1.63、1.64、1.65、1.66、1.67、1.69、1.70、1.71、1.72、1.73、1.74、1.75、1.77、1.78、1.79、1.80、1.81、1.83、1.84、1.85、1.86、1.87、1.88、1.89、1.90、1.91、1.92、1.93、1.94、1.95、1.96、1.97、1.98、1.99、1.100、1.101、1.102、1.103、1.104、1.105和1.107。

[0668] 化合物(来自表T2) 2.1、2.2、2.3、2.4、2.5、2.6、2.8、2.10、2.11、2.13、2.14、2.15、2.16、2.17、2.18、2.19、2.20、2.21、2.22、2.23、2.24、2.25、2.26、2.28、2.29、2.30、2.31、2.32、2.33、2.34、2.35、和2.36。

[0669] 化合物(来自表T3) 3.1、3.2、3.3、3.4、3.5、3.6、3.7、3.9、3.10、3.11、3.12、3.13、3.14、3.15、3.16、3.17、3.20、3.25、和3.26。

[0670] 针对蚕豆单胞锈菌的杀真菌活性/蚕豆/叶圆片预防法(蚕豆锈病)

[0671] 将蚕豆叶圆片置于多孔板(96孔规格)中的水琼脂上,并将在丙酮中稀释的10 μ l配制的测试化合物和铺展剂用移液管移取到叶圆片上。施用后两小时,通过在下部叶表面喷雾孢子悬浮液来接种叶圆片。将叶圆片在22℃下,以18小时照明/天和70%相对湿度在气候室中孵育。当在未处理的检验叶圆片中出现适当水平的疾病损害时(施用后12天),将化合物的活性评估为与未处理的相比的疾病控制百分比。

[0672] 在这一测试中,当在相同条件下与示出广泛的疾病发展的未处理的对照叶圆片相比时,在施用的配制品中以下化合物在100ppm下给出至少80%的疾病控制。

[0673] 化合物(来自表T1) 1.1、1.2、1.3、1.5、1.11、1.13、1.16、1.18、1.19、1.22、1.23、和1.24。