



(12) 发明专利申请

(10) 申请公布号 CN 116709917 A

(43) 申请公布日 2023. 09. 05

(21) 申请号 202280010395.6

(22) 申请日 2022.01.23

(30) 优先权数据

280384 2021.01.25 IL

(85) PCT国际申请进入国家阶段日

2023.07.17

(86) PCT国际申请的申请数据

PCT/IL2022/050095 2022.01.23

(87) PCT国际申请的公布数据

W02022/157780 EN 2022.07.28

(71) 申请人 艾格普莱纳斯有限公司

地址 以色列雷霍沃特

(72) 发明人 博阿兹·因巴尔

埃兹奎尔·韦克斯塞尔布拉特

约书亚·弗洛伊德

约阿夫·阿特斯蒙-拉兹

威尔姆斯·洛萨

(74) 专利代理机构 北京安信方达知识产权代理
有限公司 11262

专利代理师 韦昌金 郑霞

(51) Int.Cl.

A01N 43/56 (2006.01)

权利要求书23页 说明书74页 附图2页

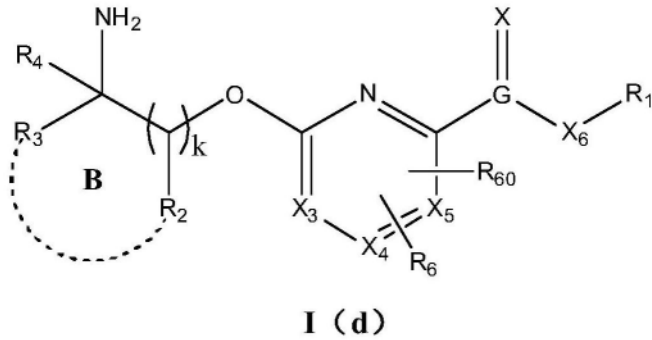
(54) 发明名称

杀虫和除草化合物及其使用方法

(57) 摘要

本发明涉及新型杀虫和/或除草活性化合物、其农用化学组合物、其制备方法及其用于控制例如作物田中的不期望的植物(例如,杂草)的生长的用途。

1. 一种化合物,其由式I (d) 的结构表示:



其中

B环不存在,或是经取代或未经取代的杂芳香族环体系、或经取代或未经取代的 C_3 - C_{10} 环烷基、或经取代或未经取代的 C_3 - C_{10} 杂环(例如,环丙基、环戊基、环己基、吡啶基、吡咯烷基);

R_1 是H、经取代或未经取代的 C_1 - C_{10} 直链或支链或 C_3 - C_8 环状烷基(例如,甲基、乙基、丙基、丁基、 CH_2 -CCH、 CH_2 -COOH、 CH_2CH_2COOH)、 $C(O)-R_{10}$ (例如, $C(O)-CH_3$)、 R_8-OH (例如, CH_2-OH)、 $R_8-COO-R_{10}$ (例如, CH_2-COOH 、 $CH_2-COO-CH_3$ 、 $CH_2-COO-CH_2CH_3$ 、 CH_2-CH_2-COOH 、 $CH_2-CH_2-COO-CH_3$ 、 $CH_2-CH_2-COO-CH_2CH_3$)、 R_8-SH 、 $-R_8-O-R_{10}$ (例如, $-CH_2-O-CH_3$)、 $R_8-(C_3-C_8$ 环烷基)、 $R_8-(3-8$ 元杂环)、 CF_3 、 NH_2 、 NHR 、 $N(R)_2$ 、 $R_8-N(R_{10})(R_{11})$ 、 $C(O)H$ 、 C_1-C_5 直链或支链 $C(O)-$ 卤代烷基(例如, $C(O)-CF_3$)、 $-C(O)NH_2$ 、 $C(O)NHR$ 、 $C(O)N(R_{10})(R_{11})$ 、 C_2-C_5 直链或支链经取代或未经取代的烯基(例如, $CH=C(Ph)_2$)、 C_1-C_5 直链或支链或 C_3-C_8 环状卤代烷基、经取代或未经取代的 C_3-C_8 杂环、经取代或未经取代的芳基(例如,苯基)、或经取代或未经取代的苄基;

R_2 是H、经取代或未经取代的 C_1 - C_{10} 直链或支链或 C_3 - C_8 环状烷基(例如,甲基、乙基、丙基、 CH_2 -CCH)、F、Cl、Br、I、OH、SH、 R_8-OH (例如, CH_2-OH)、 R_8-SH 、 $-R_8-O-R_{10}$ (例如, $-CH_2-O-CH_3$)、 $R_8-(C_3-C_8$ 环烷基)、 $R_8-(3-8$ 元杂环)、 CF_3 、CN、 NO_2 、 $R_8-N(R_{10})(R_{11})$ 、 $C(O)H$ 、 C_1-C_5 直链或支链 $C(O)-$ 卤代烷基(例如, $C(O)-CF_3$)、 $-C(O)NH_2$ 、 $C(O)NHR$ 、 $C(O)N(R_{10})(R_{11})$ 、 C_2-C_5 直链或支链经取代或未经取代的烯基(例如, $CH=C(Ph)_2$)、 C_1-C_5 直链或支链或 C_3-C_8 环状卤代烷基、经取代或未经取代的3-8元杂环、经取代或未经取代的芳基(例如,苯基)、或经取代或未经取代的苄基;

R_3 是H、经取代或未经取代的 C_1 - C_{10} 直链或支链或 C_3 - C_8 环状烷基(例如,甲基、乙基、丙基、 CH_2 -CCH、 $C(H)(OH)(CH_3)$)、F、Cl、Br、I、OH、SH、 R_8-OH (例如, CH_2-OH)、 R_8-SH 、 $-R_8-O-R_{10}$ (例如, $-CH_2-O-CH_3$)、 $R_8-(C_3-C_8$ 环烷基)、 $R_8-(3-8$ 元杂环)、 CF_3 、CN、 NO_2 、 NH_2 、 NHR 、 $N(R)_2$ 、 $R_8-N(R_{10})(R_{11})$ (例如, CH_2-NH_2)、 $C(O)H$ 、 C_1-C_5 直链或支链 $C(O)-$ 卤代烷基(例如, $C(O)-CF_3$)、 $-C(O)NH_2$ 、 $C(O)NHR$ 、 $C(O)N(R_{10})(R_{11})$ 、 C_2-C_5 直链或支链经取代或未经取代的烯基(例如, $CH=C(Ph)_2$)、 C_1-C_5 直链或支链或 C_3-C_8 环状卤代烷基、经取代或未经取代的3-8元杂环、经取代或未经取代的芳基(例如,苯基)、或经取代或未经取代的苄基;

或 R_2 和 R_3 连接以形成如上所述的环B;

R_4 是H、经取代或未经取代的 C_1 - C_{10} 直链或支链或 C_3 - C_8 环状烷基(例如,甲基、乙基、丙基、 CH_2 -CCH)、F、Cl、Br、I、OH、SH、 R_8-OH (例如, CH_2-OH)、 R_8-SH 、 $-R_8-O-R_{10}$ (例如, $-CH_2-O-CH_3$)、 $R_8-(C_3-C_8$ 环烷基)、 $R_8-(3-8$ 元杂环)、 CF_3 、CN、 NO_2 、 NH_2 、 NHR 、 $N(R)_2$ 、 $R_8-N(R_{10})(R_{11})$ (例如, CH_2-

NH_2 、 $\text{C}(\text{O})\text{H}$ 、 C_1 - C_5 直链或支链 $\text{C}(\text{O})$ -卤代烷基(例如, $\text{C}(\text{O})-\text{CF}_3$)、 $-\text{C}(\text{O})\text{NH}_2$ 、 $\text{C}(\text{O})\text{NHR}$ 、 $\text{C}(\text{O})\text{N}(\text{R}_{10})$ (R_{11})、 C_2 - C_5 直链或支链经取代或未经取代的烯基(例如, $\text{CH}=\text{C}(\text{Ph})_2$)、 C_1 - C_5 直链或支链或 C_3 - C_8 环状卤代烷基、经取代或未经取代的3-8元杂环、经取代或未经取代的芳基(例如,苯基)、或经取代或未经取代的苄基;

或 R_3 和 R_4 连接以形成 C_3 - C_8 经取代或未经取代的饱和或不饱和的脂肪族或芳香族碳环或杂环(例如,环丙基)、 $\text{C}=\text{O}$ 或 $=\text{N}-\text{OH}$;

R_6 和 R_{60} 各自独立地是 H 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 OH 、 SH 、 R_8-OH (例如, CH_2-OH)、 R_8-SH 、 $-\text{R}_8-\text{O}-\text{R}_{10}$ (例如, $-\text{CH}_2-\text{O}-\text{CH}_3$)、 $\text{R}_8-(\text{C}_3-\text{C}_8$ 环烷基)、 $\text{R}_8-(3-8$ 元杂环)、 CF_3 、 CD_3 、 OCD_3 、 CN 、 NO_2 、 $-\text{CH}_2\text{CN}$ 、 $-\text{R}_8\text{CN}$ 、 NH_2 、 NHR 、 $\text{N}(\text{R})_2$ 、 $\text{R}_8-\text{N}(\text{R}_{10})$ (R_{11})、 $\text{R}_9-\text{R}_8-\text{N}(\text{R}_{10})$ (R_{11})、 $\text{B}(\text{OH})_2$ 、 $-\text{OC}(\text{O})\text{CF}_3$ 、 $-\text{OCH}_2\text{Ph}$ 、 $\text{NHC}(\text{O})-\text{R}_{10}$ (例如, $\text{NHC}(\text{O})\text{CH}_3$)、 $\text{NHC}(\text{O})-\text{N}(\text{R}_{10})$ (R_{11}) (例如, $\text{NHC}(\text{O})\text{N}(\text{CH}_3)_2$)、 COOH 、 $-\text{C}(\text{O})\text{Ph}$ 、 $\text{C}(\text{O})\text{O}-\text{R}_{10}$ (例如, $\text{C}(\text{O})\text{O}-\text{CH}_3$)、 $\text{R}_8-\text{C}(\text{O})-\text{R}_{10}$ (例如, $\text{CH}_2\text{C}(\text{O})\text{CH}_3$)、 $\text{C}(\text{O})\text{H}$ 、 $\text{C}(\text{O})-\text{R}_{10}$ (例如, $\text{C}(\text{O})-\text{CH}_3$ 、 $\text{C}(\text{O})-\text{CH}_2\text{CH}_3$ 、 $\text{C}(\text{O})-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$)、 C_1 - C_5 直链或支链 $\text{C}(\text{O})$ -卤代烷基(例如, $\text{C}(\text{O})-\text{CF}_3$)、 $-\text{C}(\text{O})\text{NH}_2$ 、 $\text{C}(\text{O})\text{NHR}$ 、 $\text{C}(\text{O})\text{N}(\text{R}_{10})$ (R_{11}) (例如, $\text{C}(\text{O})\text{N}(\text{CH}_3)_2$)、 SO_2R 、 $\text{SO}_2\text{N}(\text{R}_{10})$ (R_{11}) (例如, $\text{SO}_2\text{N}(\text{CH}_3)_2$)、 $\text{SO}_2\text{NHC}(\text{O})\text{CH}_3$)、 C_1 - C_5 直链或支链经取代或未经取代的烷基(例如,甲基、乙基、丙基、异丙基、 t -Bu、异丁基、戊基、苄基)、经取代或未经取代的 C_3 - C_8 环烷基(例如,环丙基、环戊基)、 C_2 - C_5 直链或支链经取代或未经取代的烯基(例如,乙烯基)、 C_2 - C_5 直链或支链经取代或未经取代的炔基(例如,乙炔基、 $\text{CC}-\text{CH}_2$ -环丁基、 $\text{CC}-\text{CF}_3$)、 C_1 - C_5 直链或支链或 C_3 - C_8 环状卤代烷基(例如, CF_3 、 CF_2CH_3 、 CH_2CF_3 、 $\text{CF}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ 、 $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CF}_3$ 、 $\text{CF}_2\text{CH}(\text{CH}_3)_2$ 、 $\text{CF}(\text{CH}_3)-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$)、经取代或未经取代的 C_1 - C_5 直链或支链或 C_3 - C_8 环状烷氧基(例如,甲氧基、乙氧基、丙氧基、异丙氧基、 $\text{O}-\text{CH}_2-\text{CF}_3$)、任选地其中所述烷氧基中的至少一个亚甲基(CH_2)被氧原子取代、 C_1 - C_5 直链或支链硫代烷氧基、 C_1 - C_5 直链或支链卤代烷氧基(例如, OCF_3 、 OCHF_2)、经取代或未经取代的3-8元杂环(例如,噻吩、噁唑、噁二唑、咪唑、呋喃、三唑、四唑、吡啶、嘧啶、吡嗪)、经取代或未经取代的芳基(例如,苯基)、经取代或未经取代的苄基;

X_3 、 X_4 、 X_5 各自独立地是 C 或 N ;

X_6 是 O 、 NH 、 NR 或 CH_2 ;

$\text{G}=\text{X}$ 是 $\text{C}=\text{O}$ 或 SO_2 ,或 $\text{G}(=\text{X})-\text{X}_6-\text{R}_1$ 是四唑部分;

R_8 是 $[\text{CH}_2]_p$,

其中 p 介于1与10之间;

R_9 是 $[\text{CH}]_q$ 、 $[\text{C}]_q$,

其中 q 介于2与10之间;

R_{10} 和 R_{11} 各自独立地是 H 、 CN 、 C_1 - C_5 直链或支链烷基(例如,甲基、乙基)、 $\text{C}(\text{O})\text{R}$ (例如, $\text{C}(\text{O})(\text{OCH}_3)$)或 $\text{S}(\text{O})_2\text{R}$;

或 R_{10} 和 R_{11} 连接以形成经取代或未经取代的3-8元杂环;

R 是 H 、 C_1 - C_5 直链或支链烷基(例如,甲基、乙基)、 C_1 - C_5 直链或支链烷氧基(例如,甲氧基)、苯基、芳基或杂芳基,或两个偕 R 取代基连接在一起以形成5元或6元杂环;

k 是介于1与3之间的整数(例如,1、2);

或其农用化学上可接受的盐、两性离子(内盐)、立体异构体、互变异构体、水合物、 N -氧化物、反向酰胺类似物、同位素变体(例如,氘代类似物)或其任何组合;

或其农用化学上可接受的盐、两性离子(内盐)、水合物、 N -氧化物、同位素变体或其任

何组合；

其中所述化合物不是：6-(2-氨基丙氧基)吡啶甲酸；6-(2-氨基丙氧基)吡嗪-2-羧酸；2-(2-氨基丙氧基)嘧啶-4-羧酸；6-(2-氨基丙氧基)-3-氟吡啶甲酸；6-(2-氨基丙氧基)-4-氟吡啶甲酸；6-(2-氨基丁氧基)吡啶甲酸；6-((2-氨基环戊基)氧基)吡啶甲酸；6-(2-氨基丙氧基)吡啶甲酸甲酯；或6-(2-氨基丙氧基)吡啶甲酸乙酯。

2. 根据权利要求1所述的化合物，其中所述“经取代”是被选自以下的至少一个取代取代：F、Cl、Br、I、C₁-C₅直链或支链烷基、C₂-C₅直链或支链烯基（例如，乙烯基）、C₂-C₅直链或支链炔基、烷基酰胺（即，C(O)NH-R或NHC(O)-R）、COOH、烷基酯（即，COOR或OC(O)-R）、OH、烷氧基、N(R)₂、NH₂、CF₃、芳基、苯基、杂芳基、C₃-C₈环烷基、R₈-(C₃-C₈环烷基)、卤代苯基、CN和NO₂。

3. 根据权利要求1或2所述的化合物，其中R₆和R₆₀中的至少一者不是H或F；X₅是N；R₁不是H、甲基或乙基；R₂和R₃不连接以形成环戊基环；R₃和R₄两者均是H或两者均是甲基；k不是1；或其任何组合。

4. 根据前述权利要求中任一项所述的化合物，其中R₆和R₆₀中的至少一者不是H或F。

5. 根据前述权利要求中任一项所述的化合物，其中R₆和R₆₀中的至少一者是烷基、Cl、CF₃、CN、经取代或未经取代的烷氧基、经取代或未经取代的炔烃、或杂芳香族环。

6. 根据前述权利要求中任一项所述的化合物，其中R₁不是H、甲基或乙基。

7. 根据前述权利要求中任一项所述的化合物，其中R₁是R₈-C(O)O-R₁₀、CH₂CH₂-C(O)O-CH₂CH₃、CH₂-C(O)O-CH₂CH₃、CH₂-C(O)O-CH₃、CH₂-C(O)OH、CH₂CH₂-C(O)OH、CH₂CH₂-C(O)O-CH₃、C₃-C₈烷基、丁基或CH₂-CCH。

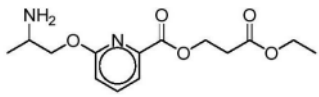
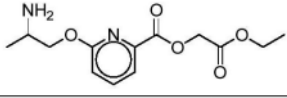
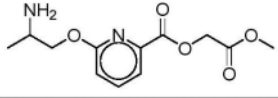
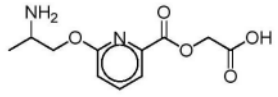
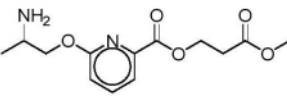
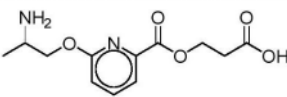
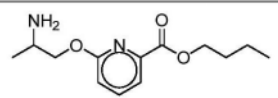
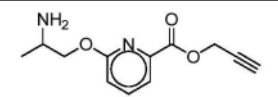
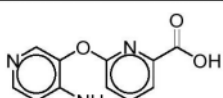
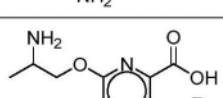
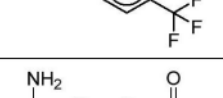
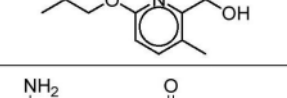
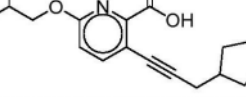
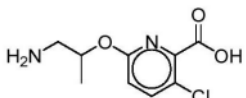
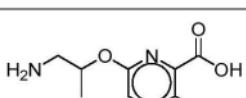
8. 根据前述权利要求中任一项所述的化合物，其中所述化合物是基本上纯的单一立体异构体。

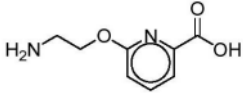
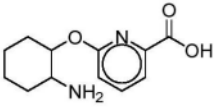
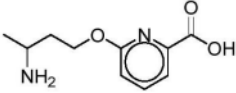
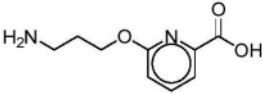
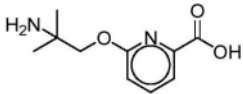
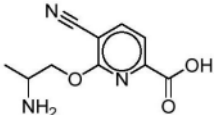
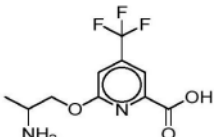
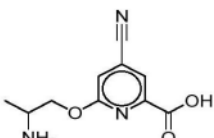
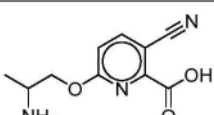
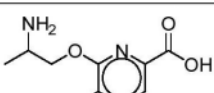
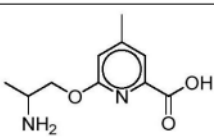
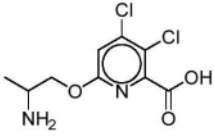
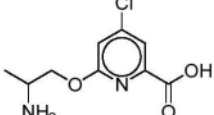
9. 根据前述权利要求中任一项所述的化合物，其中所述化合物包括纯度>80%的单一一对映异构体。

10. 根据前述权利要求中任一项所述的化合物，其中R₃和R₄两者均是H或两者均是甲基，并且R₂是H或甲基。

11. 根据前述权利要求中任一项所述的化合物，其由以下结构中的任何结构表示：

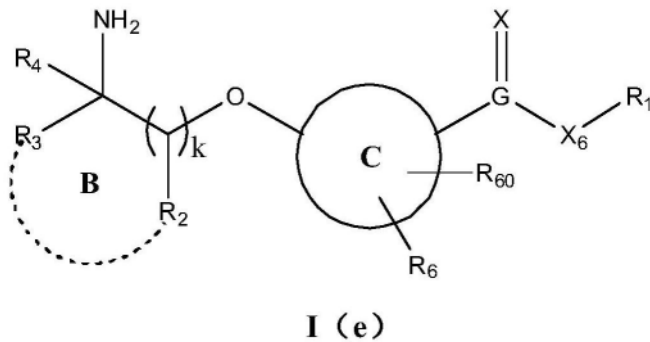
化合物编号	结构
157	
174	
175	
176	

177	
179	
180	
181	
182	
183	
184	
185	
188	
190	
191	
192	
193	
194	
195	

196	
197	
198	
199	
200	
201	
202	
203	
204	
205	
206	
207	
208	

209	
210	
211	
212	
213	
215	
216	

12. 一种化合物,其由式I(e)的结构表示:



其中

B环不存在,或是经取代或未经取代的单一或稠合的芳香族或杂芳香族环体系、或经取代或未经取代的单一或稠合的 C_3 - C_{10} 环烷基、或经取代或未经取代的单一或稠合的 C_3 - C_{10} 杂环;

C环是饱和或不饱和的5元杂环(例如,异噁唑、三唑、吡唑、噁二唑、呋喃、噻唑、吡咯、噻吩)、环己烷或环己烯环;

R_1 是H、经取代或未经取代的 C_1 - C_{10} 直链或支链或 C_3 - C_8 环状烷基(例如,甲基、乙基、丙基、丁基、 CH_2 -CCH、 CH_2 -COOH、 CH_2CH_2COOH)、 $C(O)-R_{10}$ (例如, $C(O)-CH_3$)、 R_8-OH (例如, CH_2-OH)、 $R_8-COO-R_{10}$ (例如, CH_2-COOH 、 $CH_2-COO-CH_3$ 、 $CH_2-COO-CH_2CH_3$ 、 CH_2-CH_2-COOH 、 $CH_2-CH_2-COO-CH_3$ 、 $CH_2-CH_2-COO-CH_2CH_3$)、 R_8-SH 、 $-R_8-O-R_{10}$ (例如, $-CH_2-O-CH_3$)、 $R_8-(C_3-C_8$ 环烷基)、 $R_8-(3-8$ 元杂

环)、 CF_3 、 NH_2 、 NHR 、 $\text{N}(\text{R})_2$ 、 $\text{R}_8\text{-N}(\text{R}_{10})(\text{R}_{11})$ 、 $\text{C}(\text{O})\text{H}$ 、 $\text{C}_1\text{-C}_5$ 直链或支链 $\text{C}(\text{O})$ -卤代烷基(例如, $\text{C}(\text{O})\text{-CF}_3$)、 $\text{-C}(\text{O})\text{NH}_2$ 、 $\text{C}(\text{O})\text{NHR}$ 、 $\text{C}(\text{O})\text{N}(\text{R}_{10})(\text{R}_{11})$ 、 $\text{C}_2\text{-C}_5$ 直链或支链经取代或未经取代的烯基(例如, $\text{CH}=\text{C}(\text{Ph})_2$)、 $\text{C}_1\text{-C}_5$ 直链或支链或 $\text{C}_3\text{-C}_8$ 环状卤代烷基、经取代或未经取代的3-8元杂环、经取代或未经取代的芳基(例如,苯基)、或经取代或未经取代的苄基;

R_2 是H、经取代或未经取代的 $\text{C}_1\text{-C}_{10}$ 直链或支链或 $\text{C}_3\text{-C}_8$ 环状烷基(例如,甲基、乙基、丙基、 $\text{CH}_2\text{-CCH}$)、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 OH 、 SH 、 $\text{R}_8\text{-OH}$ (例如, $\text{CH}_2\text{-OH}$)、 $\text{R}_8\text{-SH}$ 、 $\text{-R}_8\text{-O-R}_{10}$ (例如, $\text{-CH}_2\text{-O-CH}_3$)、 $\text{R}_8\text{-}(\text{C}_3\text{-C}_8\text{环烷基})$ 、 $\text{R}_8\text{-}(\text{3-8元杂环})$ 、 CF_3 、 CN 、 NO_2 、 $\text{R}_8\text{-N}(\text{R}_{10})(\text{R}_{11})$ 、 $\text{C}(\text{O})\text{H}$ 、 $\text{C}_1\text{-C}_5$ 直链或支链 $\text{C}(\text{O})$ -卤代烷基(例如, $\text{C}(\text{O})\text{-CF}_3$)、 $\text{-C}(\text{O})\text{NH}_2$ 、 $\text{C}(\text{O})\text{NHR}$ 、 $\text{C}(\text{O})\text{N}(\text{R}_{10})(\text{R}_{11})$ 、 $\text{C}_2\text{-C}_5$ 直链或支链经取代或未经取代的烯基(例如, $\text{CH}=\text{C}(\text{Ph})_2$)、 $\text{C}_1\text{-C}_5$ 直链或支链或 $\text{C}_3\text{-C}_8$ 环状卤代烷基、经取代或未经取代的3-8元杂环、经取代或未经取代的芳基(例如,苯基)、或经取代或未经取代的苄基;

R_3 是H、经取代或未经取代的 $\text{C}_1\text{-C}_{10}$ 直链或支链或 $\text{C}_3\text{-C}_8$ 环状烷基(例如,甲基、乙基、丙基、 $\text{CH}_2\text{-CCH}$ 、 $\text{C}(\text{H})(\text{OH})(\text{CH}_3)$)、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 OH 、 SH 、 $\text{R}_8\text{-OH}$ (例如, $\text{CH}_2\text{-OH}$)、 $\text{R}_8\text{-SH}$ 、 $\text{-R}_8\text{-O-R}_{10}$ (例如, $\text{-CH}_2\text{-O-CH}_3$)、 $\text{R}_8\text{-}(\text{C}_3\text{-C}_8\text{环烷基})$ 、 $\text{R}_8\text{-}(\text{3-8元杂环})$ 、 CF_3 、 CN 、 NO_2 、 NH_2 、 NHR 、 $\text{N}(\text{R})_2$ 、 $\text{R}_8\text{-N}(\text{R}_{10})(\text{R}_{11})$ (例如, $\text{CH}_2\text{-NH}_2$)、 $\text{C}(\text{O})\text{H}$ 、 $\text{C}_1\text{-C}_5$ 直链或支链 $\text{C}(\text{O})$ -卤代烷基(例如, $\text{C}(\text{O})\text{-CF}_3$)、 $\text{-C}(\text{O})\text{NH}_2$ 、 $\text{C}(\text{O})\text{NHR}$ 、 $\text{C}(\text{O})\text{N}(\text{R}_{10})(\text{R}_{11})$ 、 $\text{C}_2\text{-C}_5$ 直链或支链经取代或未经取代的烯基(例如, $\text{CH}=\text{C}(\text{Ph})_2$)、 $\text{C}_1\text{-C}_5$ 直链或支链或 $\text{C}_3\text{-C}_8$ 环状卤代烷基、经取代或未经取代的3-8元杂环、经取代或未经取代的芳基(例如,苯基)、或经取代或未经取代的苄基;

或 R_2 和 R_3 连接以形成如上所述的环B;

R_4 是H、经取代或未经取代的 $\text{C}_1\text{-C}_{10}$ 直链或支链或 $\text{C}_3\text{-C}_8$ 环状烷基(例如,甲基、乙基、丙基、 $\text{CH}_2\text{-CCH}$)、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 OH 、 SH 、 $\text{R}_8\text{-OH}$ (例如, $\text{CH}_2\text{-OH}$)、 $\text{R}_8\text{-SH}$ 、 $\text{-R}_8\text{-O-R}_{10}$ (例如, $\text{-CH}_2\text{-O-CH}_3$)、 $\text{R}_8\text{-}(\text{C}_3\text{-C}_8\text{环烷基})$ 、 $\text{R}_8\text{-}(\text{3-8元杂环})$ 、 CF_3 、 CN 、 NO_2 、 NH_2 、 NHR 、 $\text{N}(\text{R})_2$ 、 $\text{R}_8\text{-N}(\text{R}_{10})(\text{R}_{11})$ (例如, $\text{CH}_2\text{-NH}_2$)、 $\text{C}(\text{O})\text{H}$ 、 $\text{C}_1\text{-C}_5$ 直链或支链 $\text{C}(\text{O})$ -卤代烷基(例如, $\text{C}(\text{O})\text{-CF}_3$)、 $\text{-C}(\text{O})\text{NH}_2$ 、 $\text{C}(\text{O})\text{NHR}$ 、 $\text{C}(\text{O})\text{N}(\text{R}_{10})(\text{R}_{11})$ 、 $\text{C}_2\text{-C}_5$ 直链或支链经取代或未经取代的烯基(例如, $\text{CH}=\text{C}(\text{Ph})_2$)、 $\text{C}_1\text{-C}_5$ 直链或支链或 $\text{C}_3\text{-C}_8$ 环状卤代烷基、经取代或未经取代的3-8元杂环、经取代或未经取代的芳基(例如,苯基)、或经取代或未经取代的苄基;

或 R_3 和 R_4 连接以形成 $\text{C}_3\text{-C}_8$ 经取代或未经取代的饱和或不饱和的脂肪族或芳香族碳环或杂环(例如,环丙基)、 $\text{C}=\text{O}$ 或 =N-OH ;

R_6 和 R_{60} 各自独立地是H、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 OH 、 SH 、 $\text{R}_8\text{-OH}$ (例如, $\text{CH}_2\text{-OH}$)、 $\text{R}_8\text{-SH}$ 、 $\text{-R}_8\text{-O-R}_{10}$ (例如, $\text{-CH}_2\text{-O-CH}_3$)、 $\text{R}_8\text{-}(\text{C}_3\text{-C}_8\text{环烷基})$ 、 $\text{R}_8\text{-}(\text{3-8元杂环})$ 、 CF_3 、 CD_3 、 OCD_3 、 CN 、 NO_2 、 $\text{-CH}_2\text{CN}$ 、 $\text{-R}_8\text{CN}$ 、 NH_2 、 NHR 、 $\text{N}(\text{R})_2$ 、 $\text{R}_8\text{-N}(\text{R}_{10})(\text{R}_{11})$ 、 $\text{R}_9\text{-R}_8\text{-N}(\text{R}_{10})(\text{R}_{11})$ 、 $\text{B}(\text{OH})_2$ 、 $\text{-OC}(\text{O})\text{CF}_3$ 、 $\text{-OCH}_2\text{Ph}$ 、 $\text{NHC}(\text{O})\text{-R}_{10}$ (例如, $\text{NHC}(\text{O})\text{CH}_3$)、 $\text{NHC}(\text{O})\text{-N}(\text{R}_{10})(\text{R}_{11})$ (例如, $\text{NHC}(\text{O})\text{N}(\text{CH}_3)_2$)、 COOH 、 $\text{-C}(\text{O})\text{Ph}$ 、 $\text{C}(\text{O})\text{O-R}_{10}$ (例如, $\text{C}(\text{O})\text{O-CH}_3$)、 $\text{R}_8\text{-C}(\text{O})\text{-R}_{10}$ (例如, $\text{CH}_2\text{C}(\text{O})\text{CH}_3$)、 $\text{C}(\text{O})\text{H}$ 、 $\text{C}(\text{O})\text{-R}_{10}$ (例如, $\text{C}(\text{O})\text{-CH}_3$ 、 $\text{C}(\text{O})\text{-CH}_2\text{CH}_3$ 、 $\text{C}(\text{O})\text{-CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$)、 $\text{C}_1\text{-C}_5$ 直链或支链 $\text{C}(\text{O})$ -卤代烷基(例如, $\text{C}(\text{O})\text{-CF}_3$)、 $\text{-C}(\text{O})\text{NH}_2$ 、 $\text{C}(\text{O})\text{NHR}$ 、 $\text{C}(\text{O})\text{N}(\text{R}_{10})(\text{R}_{11})$ (例如, $\text{C}(\text{O})\text{N}(\text{CH}_3)_2$)、 SO_2R 、 $\text{SO}_2\text{N}(\text{R}_{10})(\text{R}_{11})$ (例如, $\text{SO}_2\text{N}(\text{CH}_3)_2$)、 $\text{SO}_2\text{NHC}(\text{O})\text{CH}_3$)、 $\text{C}_1\text{-C}_5$ 直链或支链经取代或未经取代的烷基(例如,甲基、乙基、丙基、异丙基、 t-Bu 、异丁基、戊基、苄基)、经取代或未经取代的 $\text{C}_3\text{-C}_8$ 环烷基(例如,环丙基、环戊基)、 $\text{C}_2\text{-C}_5$ 直链或支链经取代或未经取代的烯基(例如,乙烯基)、 $\text{C}_2\text{-C}_5$ 直链或支链经取代或未经取代的炔基(例如,乙炔基、 $\text{CC-CH}_2\text{-环丁基}$ 、 CC-CF_3)、 $\text{C}_1\text{-C}_5$ 直链或支链或 $\text{C}_3\text{-C}_8$ 环状卤代烷基(例如,

CF₃、CF₂CH₃、CH₂CF₃、CF₂CH₂CH₃、CH₂CH₂CF₃、CF₂CH(CH₃)₂、CF(CH₃)₂-CH(CH₃)₂、经取代或未经取代的C₁-C₅直链或支链或C₃-C₈环状烷氧基(例如,甲氧基、乙氧基、丙氧基、异丙氧基、O-CH₂-CF₃),任选地其中所述烷氧基中的至少一个亚甲基(CH₂)被氧原子取代、C₁-C₅直链或支链硫代烷氧基、C₁-C₅直链或支链卤代烷氧基(例如,OCF₃、OCHF₂)、经取代或未经取代的3-8元杂环(例如,噁吩、噁唑、噁二唑、咪唑、呋喃、三唑、四唑、吡啶、嘧啶、吡嗪)、经取代或未经取代的芳基(例如,苯基)、经取代或未经取代的苄基;

X₆是O、NH、NR或CH₂;

G=X是C=O或SO₂,或G(=X)-X₆-R₁是四唑部分;

R₈是[CH₂]_p,

其中p介于1与10之间;

R₉是[CH]_q、[C]_q,

其中q介于2与10之间;

R₁₀和R₁₁各自独立地是H、CN、C₁-C₅直链或支链烷基(例如,甲基、乙基)、C(O)R(例如,C(O)(OCH₃))或S(O)₂R;

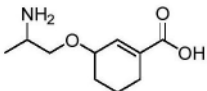
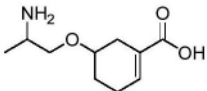
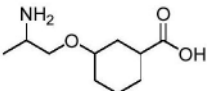
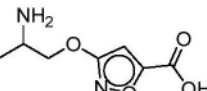
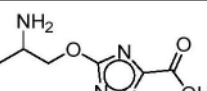
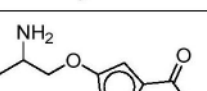
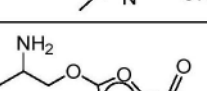
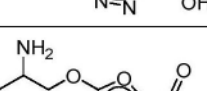

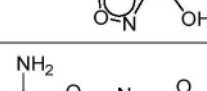

或R₁₀和R₁₁连接以形成经取代或未经取代的3-8元杂环;

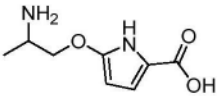
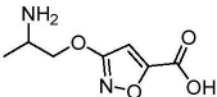
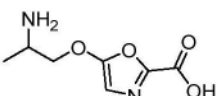
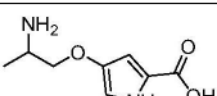
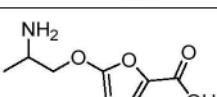
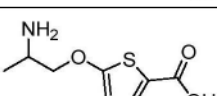
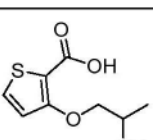
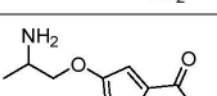
R是H、C₁-C₅直链或支链烷基(例如,甲基、乙基)、C₁-C₅直链或支链烷氧基(例如,甲氧基)、苯基、芳基或杂芳基,或两个偕R取代基连接在一起以形成5元或6元杂环;

k是介于1与3之间的整数(例如,1、2);

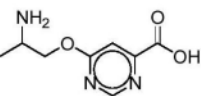
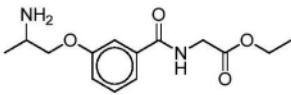
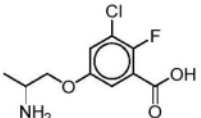
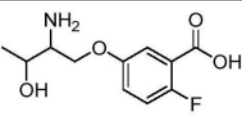
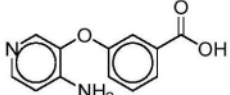
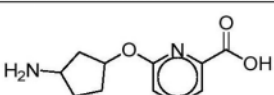
或其农用化学上可接受的盐、两性离子(内盐)、立体异构体、互变异构体、水合物、N-氧化物、反向酰胺类似物、同位素变体(例如,氘代类似物)或其任何组合。

13. 根据权利要求12所述的化合物,其选自以下结构中的任何结构:

化合物编号	结构
169	
170	
171	
400	
401	
402	
403	
404	
405	
406	
407	

408	
409	
410	
411	
412	
413	
414	
415	

14. 一种化合物,其由以下结构中的任何结构表示:

化合物编号	结构
161	
178	
186	
187	
189	
214	

或其农用化学上可接受的盐、两性离子(内盐)、立体异构体、互变异构体、水合物、N-氧化物、反向酰胺类似物、同位素变体或其任何组合。

15. 根据权利要求1至14中任一项所述的化合物,其中所述化合物是除草剂或杀虫剂。

16. 一种农用化学组合物,其包括杀虫和/或除草有效量的根据权利要求1至15中任一项所述的化合物,以及农用化学上可接受的稀释剂或载体。

17. 一种控制不期望的植物的生长的方法,所述方法包括将根据权利要求1至15中任一项所述的化合物或根据权利要求16所述的农用化学组合物应用于作物田。

18. 根据权利要求1至15中任一项所述的化合物或根据权利要求16所述的农用化学组合物,其用于控制不期望的植物的生长。

19. 根据权利要求1至15中任一项所述的化合物,其中所述化合物是基本上纯的单一立体异构体、立体异构体的混合物或外消旋体。

20. 根据权利要求19所述的化合物,其中所述立体异构体是对映异构体。

21. 根据权利要求19或20所述的化合物,其中所述基本上纯的立体异构体的纯度高于90%,优选地高于95%,最优选地高于98%。

22. 根据权利要求17所述的方法,其中所述植物是双子叶植物(eudicot或dicot)或单子叶植物(monocotyledon或monocot)。

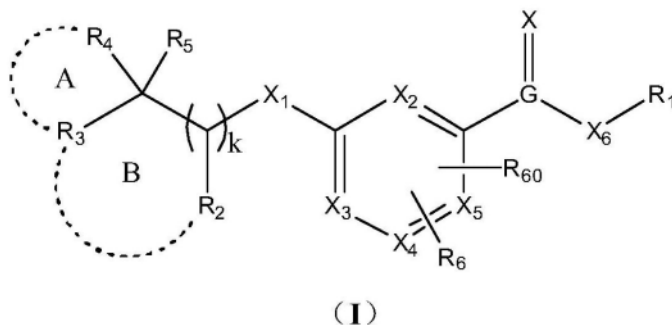
23. 根据权利要求17所述的方法,其中所述植物是杂草。

24. 根据权利要求23所述的方法,其中所述杂草包括:苘麻(*Abutilon theophrasti*)、长芒苋(*Amaranthus palmeri*)、豚草(*Ambrosia artemisiifolia*)、大穗看麦娘(*Alopecurus myosuroides*)、不实野燕麦(*Avena sterilis*)、藜(*Chenopodium album*)、小蓬草(*Conyza Canadensis*)、马唐(*Digitaria sanguinalis*)、光头稗(*Echinochloa colona*)、白苞猩猩草(*Euphorbia heterophylla*)、多年生黑麦草(*Lolium perenne*)、硬直黑麦草(*Lolium rigidum*)、德国洋甘菊(*Matricaria chamomilla*)、奇蒿草(*Phalaris paradoxa*)、早熟禾(*Poa annua*)、马齿苋(*Portulaca oleracea*)、狗尾草(*Setaria viridis*)、龙葵(*Solanum nigrum*)或其任何组合。

25. 根据权利要求22所述的方法,其中所述双子叶植物是拟南芥(*Arabidopsis thaliana*),和/或所述单子叶植物是龙爪茅(*Dactyloctenium aegyptium*)或埃塞俄比亚画眉草(*Eragrostis teff*)。

26. 根据权利要求17或22至25中任一项所述的方法,其用于种植前处理、萌芽前处理、萌芽后处理或其任何组合。

27. 一种用于控制不期望的植物的生长的方法,所述方法包括将化合物或其农用化学组合物应用于作物田,其中所述化合物由式I的结构表示:



其中

A环不存在,或是经取代或未经取代的单一或稠合的芳香族或杂芳香族环体系、或经取代或未经取代的单一或稠合的C₃-C₁₀环烷基、或经取代或未经取代的单一或稠合的C₃-C₁₀杂环(例如,环丙基);

B环不存在,或是经取代或未经取代的单一或稠合的杂芳香族环体系、或经取代或未经取代的单一或稠合的C₃-C₁₀环烷基、或经取代或未经取代的单一或稠合的C₃-C₁₀杂环(例如,环戊基);

R₁是H、经取代或未经取代的C₁-C₁₀直链或支链或C₃-C₈环状烷基(例如,甲基、乙基、丙基、丁基、CH₂-CCH、CH₂-COOH、CH₂CH₂COOH)、C(O)-R₁₀(例如,C(O)-CH₃)、R₈-OH(例如,CH₂-OH)、R₈-COO-R₁₀(例如,CH₂-COOH、CH₂-COO-CH₃、CH₂-COO-CH₂CH₃、CH₂-CH₂-COOH、CH₂-CH₂-COO-CH₃、CH₂-CH₂-COO-CH₂CH₃)、R₈-SH、-R₈-O-R₁₀(例如,-CH₂-O-CH₃)、R₈-(C₃-C₈环烷基)、R₈-(3-8元杂环)、CF₃、NH₂、NHR、N(R)₂、R₈-N(R₁₀)(R₁₁)、C(O)H、C₁-C₅直链或支链C(O)-卤代烷基(例如,C(O)-CF₃)、-C(O)NH₂、C(O)NHR、C(O)N(R₁₀)(R₁₁)、C₂-C₅直链或支链经取代或未经取代的烯基(例如,CH=C(Ph)₂)、C₁-C₅直链或支链或C₃-C₈环状卤代烷基、经取代或未经取代的3-8元杂环、经取代或未经取代的芳基(例如,苯基)、或经取代或未经取代的苄基;

R₂是H、经取代或未经取代的C₁-C₁₀直链或支链或C₃-C₈环状烷基(例如,甲基、乙基、丙基、CH₂-CCH)、F、Cl、Br、I、OH、SH、R₈-OH(例如,CH₂-OH)、R₈-SH、-R₈-O-R₁₀(例如,-CH₂-O-CH₃)、R₈-(C₃-C₈环烷基)、R₈-(3-8元杂环)、CF₃、CN、NO₂、R₈-N(R₁₀)(R₁₁)、C(O)H、C₁-C₅直链或支链C(O)-卤代烷基(例如,C(O)-CF₃)、-C(O)NH₂、C(O)NHR、C(O)N(R₁₀)(R₁₁)、C₂-C₅直链或支链经取代或未经取代的烯基(例如,CH=C(Ph)₂)、C₁-C₅直链或支链或C₃-C₈环状卤代烷基、经取代或未经取代的3-8元杂环、经取代或未经取代的芳基(例如,苯基)、或经取代或未经取代的苄基;

R₃是H、经取代或未经取代的C₁-C₁₀直链或支链或C₃-C₈环状烷基(例如,甲基、乙基、丙基、CH₂-CCH、C(H)(OH)(CH₃))、F、Cl、Br、I、OH、SH、R₈-OH(例如,CH₂-OH)、R₈-SH、-R₈-O-R₁₀(例如,-CH₂-O-CH₃)、R₈-(C₃-C₈环烷基)、R₈-(3-8元杂环)、CF₃、CN、NO₂、NH₂、NHR、N(R)₂、R₈-N(R₁₀)(R₁₁) (例如,CH₂-NH₂)、C(O)H、C₁-C₅直链或支链C(O)-卤代烷基(例如,C(O)-CF₃)、-C(O)NH₂、C(O)NHR、C(O)N(R₁₀)(R₁₁)、C₂-C₅直链或支链经取代或未经取代的烯基(例如,CH=C(Ph)₂)、C₁-C₅直链或支链或C₃-C₈环状卤代烷基、经取代或未经取代的3-8元杂环、经取代或未经取代的芳基(例如,苯基)、或经取代或未经取代的苄基;

或R₂和R₃连接以形成C₃-C₈经取代或未经取代的饱和或不饱和的脂肪族(例如,环戊基、环己基)或芳香族(例如,吡啶)碳环或杂环(例如,吡咯烷);

R₄是H、经取代或未经取代的C₁-C₁₀直链或支链或C₃-C₈环状烷基(例如,甲基、乙基、丙基、CH₂-CCH)、F、Cl、Br、I、OH、SH、R₈-OH(例如,CH₂-OH)、R₈-SH、-R₈-O-R₁₀(例如,-CH₂-O-CH₃)、R₈-(C₃-C₈环烷基)、R₈-(3-8元杂环)、CF₃、CN、NO₂、NH₂、NHR、N(R)₂、R₈-N(R₁₀)(R₁₁) (例如,CH₂-NH₂)、C(O)H、C₁-C₅直链或支链C(O)-卤代烷基(例如,C(O)-CF₃)、-C(O)NH₂、C(O)NHR、C(O)N(R₁₀)(R₁₁)、C₂-C₅直链或支链经取代或未经取代的烯基(例如,CH=C(Ph)₂)、C₁-C₅直链或支链或C₃-C₈环状卤代烷基、经取代或未经取代的3-8元杂环、经取代或未经取代的芳基(例如,苯基)、或经取代或未经取代的苄基;

或R₃和R₄连接以形成C₃-C₈经取代或未经取代的饱和或不饱和的脂肪族或芳香族碳环或

杂环(例如,环丙基)、C=O或=N-OH;

R_5 是H、OH、SH、 NH_2 、 $NHNH_2$ 、NHR、 $N(R_{10})(R_{11})$ (例如, $N(H)CH_3$ 、 $N(H)CH_2CH_3$)、 $R_8-N(R_{10})(R_{11})$ (例如, CH_2-NH_2);或 R_2 和 R_5 连接以形成经取代或未经取代的4-8元杂环(例如,吡咯烷);

R_6 和 R_{60} 各自独立地是H、F、Cl、Br、I、OH、SH、 R_8-OH (例如, CH_2-OH)、 R_8-SH 、 $-R_8-O-R_{10}$ (例如, $-CH_2-O-CH_3$)、 $R_8-(C_3-C_8$ 环烷基)、 $R_8-(3-8$ 元杂环)、 CF_3 、 CD_3 、 OCD_3 、CN、 NO_2 、 $-CH_2CN$ 、 $-R_8CN$ 、 NH_2 、NHR、 $N(R)_2$ 、 $R_8-N(R_{10})(R_{11})$ 、 $R_9-R_8-N(R_{10})(R_{11})$ 、 $B(OH)_2$ 、 $-OC(O)CF_3$ 、 $-OCH_2Ph$ 、 $NHC(O)-R_{10}$ (例如, $NHC(O)CH_3$)、 $NHC(O)-N(R_{10})(R_{11})$ (例如, $NHC(O)N(CH_3)_2$)、 $COOH$ 、 $-C(O)Ph$ 、 $C(O)O-R_{10}$ (例如, $C(O)O-CH_3$)、 $R_8-C(O)-R_{10}$ (例如, $CH_2C(O)CH_3$)、 $C(O)H$ 、 $C(O)-R_{10}$ (例如, $C(O)-CH_3$ 、 $C(O)-CH_2CH_3$ 、 $C(O)-CH_2CH_2CH_3$)、 C_1-C_5 直链或支链 $C(O)-$ 卤代烷基(例如, $C(O)-CF_3$)、 $-C(O)NH_2$ 、 $C(O)NHR$ 、 $C(O)N(R_{10})(R_{11})$ (例如, $C(O)N(CH_3)_2$)、 SO_2R 、 $SO_2N(R_{10})(R_{11})$ (例如, $SO_2N(CH_3)_2$)、 $SO_2NHC(O)CH_3$)、 C_1-C_5 直链或支链经取代或未经取代的烷基(例如,甲基、乙基、丙基、异丙基、 $t-Bu$ 、异丁基、戊基、苜基)、经取代或未经取代的 C_3-C_8 环烷基(例如,环丙基、环戊基)、 C_2-C_5 直链或支链经取代或未经取代的烯基(例如,乙烯基)、 C_2-C_5 直链或支链经取代或未经取代的炔基(例如,乙炔基、 $CC-CH_2$ -环丁基、 $CC-CF_3$)、 C_1-C_5 直链或支链或 C_3-C_8 环状卤代烷基(例如, CF_3 、 CF_2CH_3 、 CH_2CF_3 、 $CF_2CH_2CH_3$ 、 $CH_2CH_2CF_3$ 、 $CF_2CH(CH_3)_2$ 、 $CF(CH_3)-CH(CH_3)_2$)、经取代或未经取代的 C_1-C_5 直链或支链或 C_3-C_8 环状烷氧基(例如,甲氧基、乙氧基、丙氧基、异丙氧基、 $O-CH_2-CF_3$)、任选地其中所述烷氧基中的至少一个亚甲基(CH_2)被氧原子取代、 C_1-C_5 直链或支链硫代烷氧基、 C_1-C_5 直链或支链卤代烷氧基(例如, OCF_3 、 $OCHF_2$)、经取代或未经取代的3-8元杂环(例如,噻吩、噁唑、噁二唑、咪唑、呋喃、三唑、四唑、吡啶、嘧啶、吡嗪)、经取代或未经取代的芳基(例如,苯基)、经取代或未经取代的苜基;

X_1 是O、S、NH、NR(例如, $N-CH_3$)、 $S=O$ 、 SO_2 ;或 X_1 和 R_4 连接以形成 C_4-C_8 杂环(例如,吡咯烷);

X_2 、 X_3 、 X_4 、 X_5 各自独立地是C或N;

X_6 是O、NH、NR或 CH_2 ;

$G=X$ 是C=O或 SO_2 ,或 $G(=X)-X_6-R_1$ 是四唑部分;

R_8 是 $[CH_2]_p$,

其中p介于1与10之间;

R_9 是 $[CH]_q$ 、 $[C]_q$,

其中q介于2与10之间;

R_{10} 和 R_{11} 各自独立地是H、CN、 C_1-C_5 直链或支链烷基(例如,甲基、乙基)、 $C(O)R$ (例如, $C(O)(OCH_3)$)或 $S(O)_2R$;

或 R_{10} 和 R_{11} 连接以形成经取代或未经取代的3-8元杂环;

R是H、 C_1-C_5 直链或支链烷基(例如,甲基、乙基)、 C_1-C_5 直链或支链烷氧基(例如,甲氧基)、苜基、芳基或杂芳基,或两个偕R取代基连接在一起以形成5元或6元杂环;

k是介于1与3之间的整数(例如,1、2);

或其农用化学上可接受的盐、两性离子(内盐)、立体异构体、互变异构体、水合物、N-氧化物、反向酰胺类似物、同位素变体(例如,氘代类似物)或其任何组合。

28. 根据权利要求27所述的方法,其中环A不存在或是环丙基,或环B不存在或是环戊基或环己基。

29. 根据权利要求27或28所述的方法,其中 R_1 是H、经取代或未经取代的 C_1-C_{10} 直链或支

链或C₃-C₈环状烷基、C(O)-R₁₀、R₈-OH、R₈-COO-R₁₀、或C₂-C₅直链或支链烯基。

30. 根据权利要求29所述的方法,其中所述烷基是甲基、乙基、丙基、丁基、CH₂-CCH、CH₂-COOH或CH₂CH₂COOH;所述C(O)-R₁₀是C(O)-CH₃;所述烯基是乙烯基;所述R₈-OH是CH₂-OH;和/或所述R₈-COO-R₁₀是CH₂-COOH、CH₂-COO-CH₃、CH₂-COO-CH₂CH₃、CH₂-CH₂-COOH、CH₂-CH₂-COO-CH₃或CH₂-CH₂-COO-CH₂CH₃。

31. 根据权利要求27至30中任一项所述的方法,其中k是1或2;R₂是H、经取代或未经取代的C₁-C₁₀直链或支链或C₃-C₈环状烷基(例如,甲基);R₃是H、经取代或未经取代的C₁-C₁₀直链或支链或C₃-C₈环状烷基、或R₈-N(R₁₀)(R₁₁);R₄是H、经取代或未经取代的C₁-C₁₀直链或支链或C₃-C₈环状烷基,或其中R₂和R₃连接以形成8-3元经取代或未经取代的饱和或不饱和的脂肪族或芳香族碳环或杂环,或其中R₃和R₄连接以形成C₄-C₈经取代或未经取代的饱和或不饱和的脂肪族或芳香族碳环或杂环。

32. 根据权利要求31所述的方法,其中所述烷基是甲基、乙基或C(H)(OH)(CH₃);R₈-N(R₁₀)(R₁₁)是CH₂-NH₂;并且所述C₄-C₈经取代或未经取代的饱和或不饱和的脂肪族或芳香族碳环或杂环是环丙基、环戊基、环己基、吡咯烷基或吡啶基。

33. 根据权利要求27至32所述的方法,其中R₃和R₄连接以形成环丙基环、C=O或=N-OH。

34. 根据权利要求27至32中任一项所述的方法,其中R₄是H、经取代或未经取代的C₁-C₁₀直链或支链或C₃-C₈环状烷基,优选地是甲基,或R₄是R₈-N(R₁₀)(R₁₁)(例如,CH₂-NH₂)。

35. 根据权利要求27至34中任一项所述的方法,其中R₅是OH、NH₂、N(R₁₀)(R₁₁)(例如,N(H)CH₃或N(H)CH₂CH₃),或R₅是R₈-N(R₁₀)(R₁₁)(例如,CH₂-NH₂)。

36. 根据权利要求27至35中任一项所述的方法,其中R₆是H、F、Cl、Br、I、CF₃、CN、C₁-C₅直链或支链经取代或未经取代的烷基、C₂-C₅直链或支链经取代或未经取代的烯基、C₂-C₅直链或支链经取代或未经取代的炔基、C₁-C₅直链或支链或C₃-C₈环状卤代烷基、经取代或未经取代的C₁-C₅直链或支链或C₃-C₈环状烷氧基、或经取代或未经取代的3-8元杂环。

37. 根据权利要求36所述的方法,其中所述烷基是甲基或乙基;其中所述烯基是乙烯基,所述C₁-C₅直链或支链或C₃-C₈环状卤代烷基是CF₃,所述烷氧基是甲氧基或O-CH₂-CF₃;所述炔基是乙炔基、CC-CH₂-环丁基或CC-CF₃,其中所述经取代或未经取代的3-8元杂环是吡啶;或其任何组合。

38. 根据权利要求27至37中任一项所述的方法,其中X₁是O、S、NH或N-CH₃;或其中X₁和R₄连接以形成C₄-C₈杂环,优选地是吡咯烷。

39. 根据权利要求27至38中任一项所述的方法,其中X₆是O、NH或NR。

40. 根据权利要求27至39中任一项所述的方法,其中R₆₀是H、Cl或F。

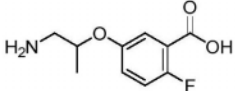
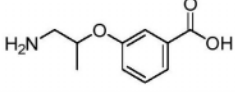
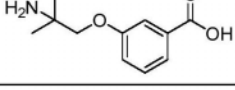
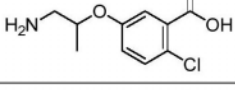
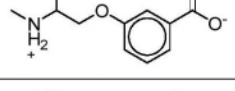
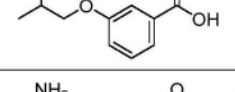
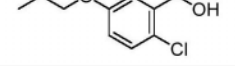
41. 根据权利要求27至40中任一项所述的方法,其中R₆和R₆₀中的至少一者不是H。

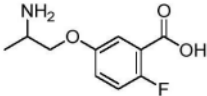
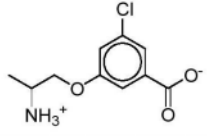
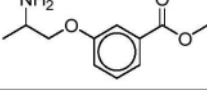
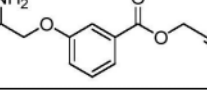
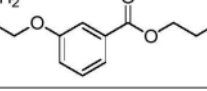
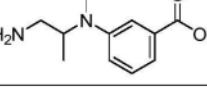
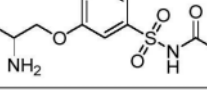
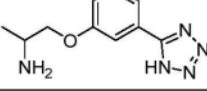
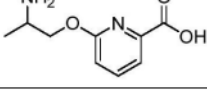
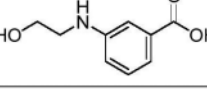
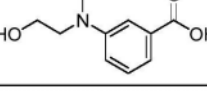
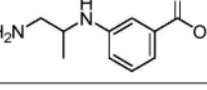
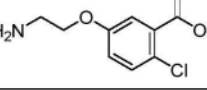
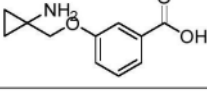
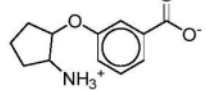
42. 根据权利要求27至41中任一项所述的方法,其中X₂至X₅中的至少一者是N,优选地X₂。

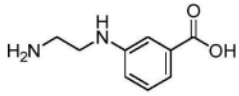
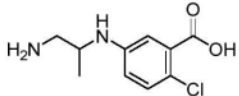
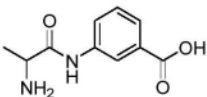
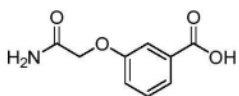
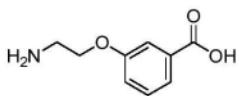
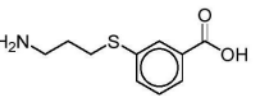
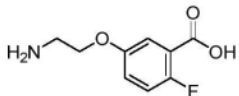
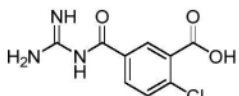
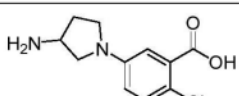
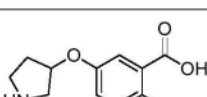
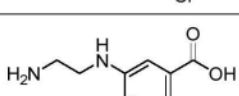
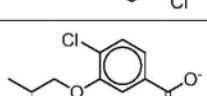
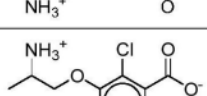
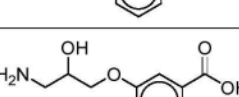
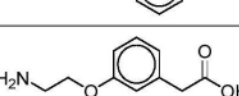
43. 根据权利要求27至42中任一项所述的方法,其中R₁不是H。

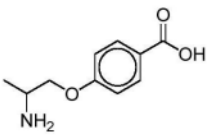
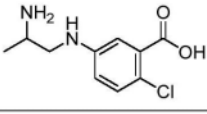
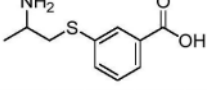
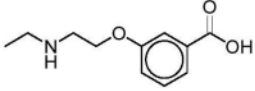
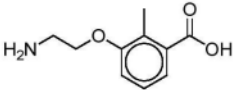
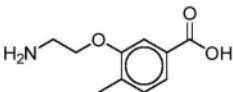
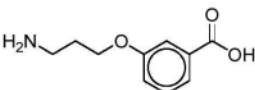
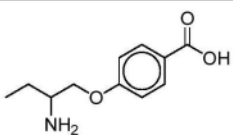
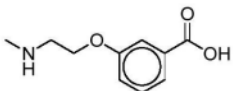
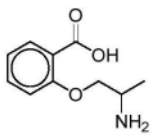
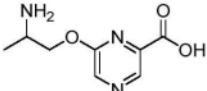
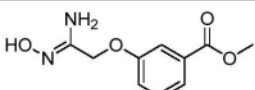
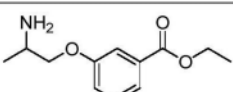
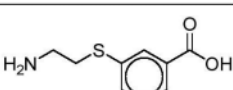
44. 根据权利要求27至43中任一项所述的方法,其中所述化合物是基本上纯的单一立体异构体。

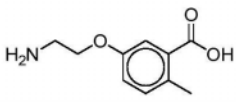
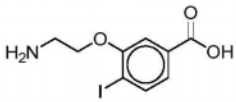
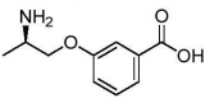
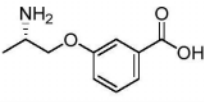
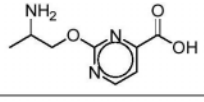
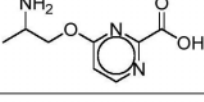
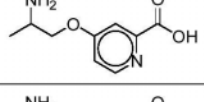
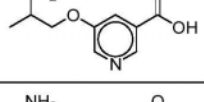
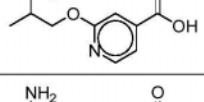
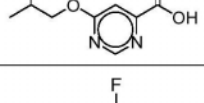
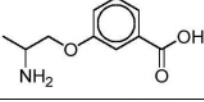
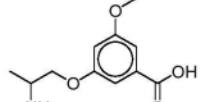
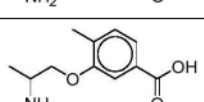
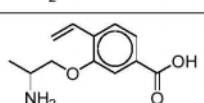
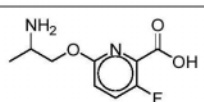
45. 根据权利要求27所述的方法,其中所述化合物由以下结构中的任何结构表示:

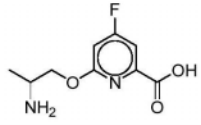
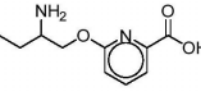
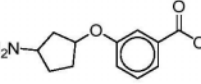
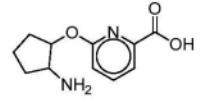
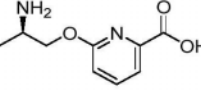
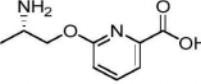
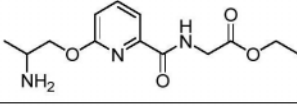
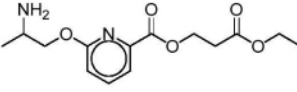
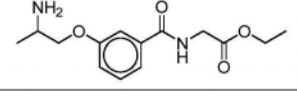
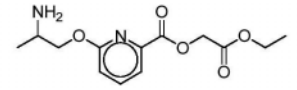
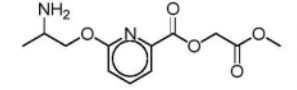
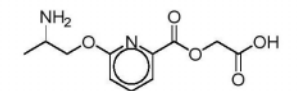
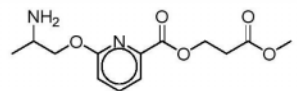
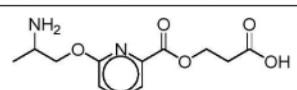
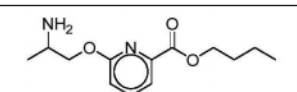
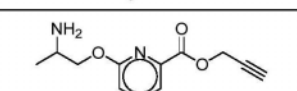
化合物编号	结构
101	
102	
103	
104	
105	
106	
107	

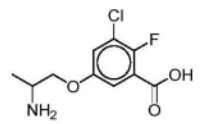
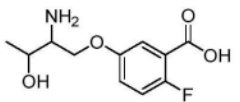
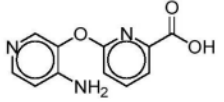
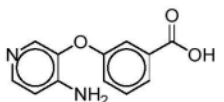
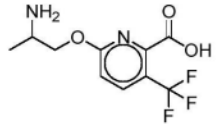
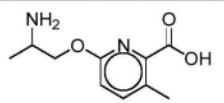
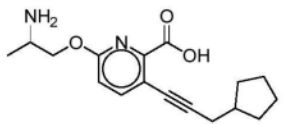
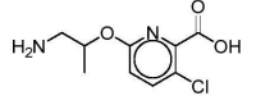
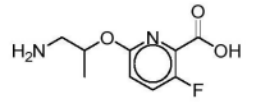
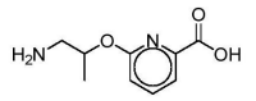
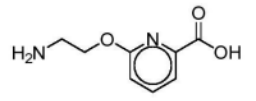
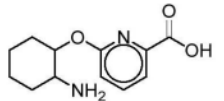
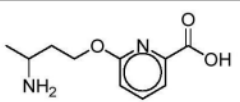
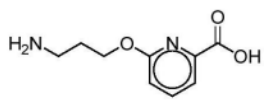
108	
109	
110	
111	
112	
113	
114	
115	
116	
117	
118	
119	
120	
121	
122	

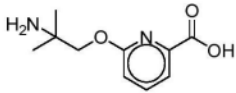
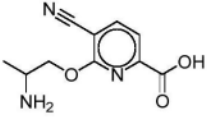
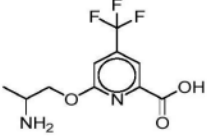
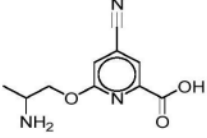
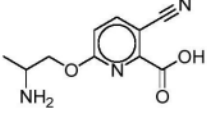
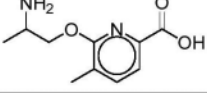
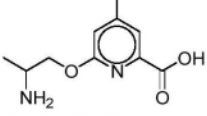
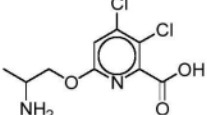
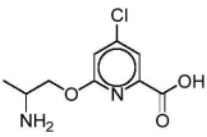
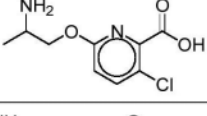
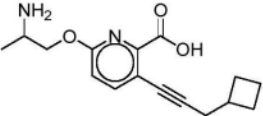
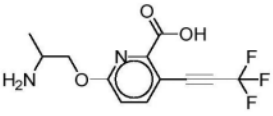
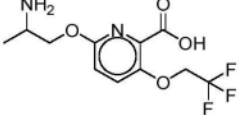
123	
124	
125	
126	
127	
128	
129	
130	
131	
132	
133	
134	
135	
136	
137	

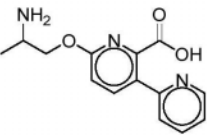
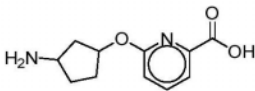
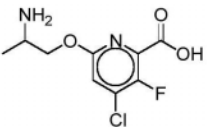
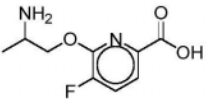
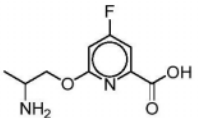
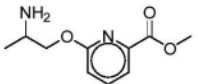
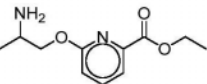
138	
139	
140	
141	
142	
143	
144	
145	
146	
147	
148	
149	
150	
151	

152	
153	
154	
155	
156	
157	
158	
159	
160	
161	
162	
163	
164	
165	
166	

167	
168	
172	
173	
174	
175	
176	
177	
178	
179	
180	
181	
182	
183	
184	
185	

186	
187	
188	
189	
190	
191	
192	
193	
194	
195	
196	
197	
198	
199	

200	
201	
202	
203	
204	
205	
206	
207	
208	
209	
210	
211	
212	

213	
214	
215	
216	
217	
218	
219	

46. 根据权利要求27至45中任一项所述的方法,其中所述化合物是除草剂或杀虫剂。

47. 根据权利要求1至15中任一项所述的化合物或根据权利要求16所述的农用化学组合物,其用于控制不期望的植物的生长。

48. 根据权利要求27至46中任一项所述的方法,其中所述化合物是基本上纯的单一立体异构体、立体异构体的混合物或外消旋体。

49. 根据权利要求48所述的方法,其中所述立体异构体是对映异构体。

50. 根据权利要求48或49所述的方法,其中所述基本上纯的立体异构体的纯度高于90%,优选地高于95%,最优选地高于98%。

51. 根据权利要求27至50中任一项所述的方法,其中所述植物是双子叶植物或单子叶植物。

52. 根据权利要求27至51中任一项所述的方法,其中所述植物是杂草。

53. 根据权利要求52所述的方法,其中所述杂草包括:苘麻、长芒苋、豚草、大穗看麦娘、不实野燕麦、藜、小蓬草、马唐、光头稗、白苞猩猩草、多年生黑麦草、硬直黑麦草、德国洋甘菊、奇藨草、早熟禾、马齿苋、狗尾草、龙葵或其任何组合。

54. 根据权利要求51所述的方法,其中所述双子叶植物是拟南芥,和/或所述单子叶植物是龙爪茅或埃塞俄比亚画眉草。

55. 根据前述权利要求中任一项所述的化合物或方法,其用于种植前处理、萌芽前处理、萌芽后处理或其任何组合。

杀虫和除草化合物及其使用方法

技术领域

[0001] 本发明涉及新型杀虫和/或除草活性化合物、其农用化学组合物、其制备方法及其用于控制例如作物田中的不期望的植物(例如,杂草)的生长的用途。

背景技术

[0002] 杂草经常干扰土地和水资源的有效利用,并且通常与所期望植物竞争水、营养素、光、二氧化碳和空间。许多杂草在美学上也是令人不愉快的,尤其是当杂草出现在一片所期望植物内,如房主草坪上的圣奥古斯丁草(St. Augustine grass)或肯塔基蓝草(Kentucky bluegrass)。杂草还可能阻碍能见度,成为建筑物周围的火灾隐患,并且降低灌溉系统的效率。当杂草出现在如河流和湖泊等河道中时,杂草可能会导致水质变差,从而使水不适合于烹饪和工业用途。此外,一些杂草通过分泌被称为化感性化合物的有毒物质或通过传播可能引起过敏和/或疾病的药剂以有毒的方式作用于其它植物、动物和人类。最后,杂草为传播疾病或在其它方面对所期望植物、动物或人类有害的昆虫和啮齿动物提供庇护。

[0003] 年复一年,杂草对作物造成的农业损失始终超过其它种类的农业害虫造成的损失。除了降低作物的质量之外,杂草侵扰还可能使可实现的作物产量降低至多理论上可实现产量的100%。包含机械、农业、生物和化学技术在内的许多方法已经得到逐步发展,以试图控制杂草侵扰。

[0004] 可以采用机械手段,如手拉、锄地或耕作、深耕、修剪、割草、焚烧和/或犁沟,以试图根除或控制杂草。此外,可以种植覆盖作物以在不生长更有价值的作物时保持地面被覆盖,并且因此通常预期将在裸露的地面区域发生的杂草侵扰通常被最小化。还已经尝试轮作和种植适于比杂草生长更旺盛的“窒息”作物作为控制杂草侵扰的手段。除了这些机械和农业技术之外,还尝试了杂草控制的生物方法,如引入以杂草为食的捕食者种群,并且由此减少杂草种群。

[0005] 杂草控制的机械、农业和生物方法虽然有时有助于降低杂草侵扰的程度,但并不完全令人满意。首先,机械和农业技术是相当劳动密集型的并且需要使用有限的物质和资本资源。此外,超出农民或房主控制的环境因素(如降雨量过多)可能会降低这些机械和农业技术的有效性。同样,如引入捕食者种群等生物技术也不完全令人满意,因为捕食者可能不会仅对杂草种群具有选择性。

[0006] 化学活性除草剂表示另一种潜在的杂草控制技术。这些化学除草剂可以分为萌芽前除草剂和萌芽后除草剂。萌芽前除草剂通常干扰杂草种子的萌芽,而萌芽后除草剂在杂草种子已经萌芽并且杂草开始生长之后杀死杂草。

[0007] 萌芽前除草剂在杂草种子即将萌芽时以所需剂量存在时可能有效。然而,这一问题指出关于萌芽前除草剂的主要问题。具体地,如果在杂草种子萌芽之前未应用或降解萌芽前除草剂,则杂草种子会自由萌芽并且开始生长成成熟杂草。另外,萌芽前除草剂通常是杂草特异性的,并且对于所有类型的杂草并不是同等有效的。萌芽前除草剂存在的时间问题通过采用萌芽后除草剂以及仅在杂草种子已经萌芽并且杂草正在活跃生长之后应

用萌芽后除草剂来避免。然而,许多目前可获得的萌芽后除草剂是非选择性除草剂,并且因此除了杀死杂草之外,还将杀死期望的植物。

[0008] 许多萌芽前除草剂和萌芽后除草剂还面临另一个问题。具体地,许多萌芽前除草剂和萌芽后除草剂对人类和动物具有中度或高度毒性,并且可能由此具有远超出预期杂草控制效果的损害效果。有毒除草剂可能立即或长期地对应用除草剂的人和应用除草剂时在场的人造成伤害。此外,在应用除草剂之后保留在土壤或水中的有毒除草剂的残余浓度在与经处理的区域接触或从所述经处理的区域流出时可能对人类和动物(包含陆基动物和两栖动物和鱼)造成严重威胁。此外,公众对使用有毒化学品作为除草剂及其对环境质量的潜在广泛和长期影响的警觉,要求反对继续使用这些有毒除草剂。

[0009] 需要一种能够避免萌芽前除草剂应用的关键时间问题的杀虫和/或除草溶液。此外,需要一种避免目前可获得的萌芽前和萌芽后除草剂通常对人类、动物和环境的毒性作用的杀虫和/或除草溶液。此外,需要一种经济有效的选择性地控制杂草而不破坏或阻碍所期望植物生长的萌芽后杂草技术。另外,需要一种可减少获得充分杂草控制所需的除草剂的量,同时使对作物植物的损害最小化的组合物。

[0010] 随着更多的杂草变得对除草剂具有抗性,需要具有高杂草控制的替代性组合物。另外,随着免耕农业越来越受欢迎,对有效除草剂的需求也越来越大。具有有效杂草控制和较低剂量率的组合物将导致作物植物产量增加,以及环境、人类和哺乳动物健康问题减少。

发明内容

[0011] 在各个实施例中,本发明涉及一种由式I(d)、I(e)的结构表示的化合物,或如下文表2中定义的化合物中的任何化合物或其农用化学上可接受的盐、两性离子(内盐)、立体异构体、互变异构体、水合物、N-氧化物、反向酰胺类似物、同位素变体(例如,氘代类似物)或其任何组合。

[0012] 在各个实施例中,本发明涉及一种如下文定义的由式I-I(e)的结构表示的杀虫和/或除草化合物或其农用化学上可接受的盐、两性离子(内盐)、立体异构体、互变异构体、水合物、N-氧化物、反向酰胺类似物、同位素变体(例如,氘代类似物)或其任何组合。

[0013] 在各个实施例中,本发明涉及一种用于控制不期望的植物的生长的方法,所述方法包括将如下文定义的由式I-I(e)的结构表示的化合物或其农用化学上可接受的盐、两性离子(内盐)、立体异构体、互变异构体、水合物、N-氧化物、反向酰胺类似物、同位素变体(例如,氘代类似物)或其农用化学组合物应用于作物田。

[0014] 在一些实施例中,本发明涉及一种由下文表1和/或2中呈现的化合物中的任何化合物表示的化合物或其农用化学上可接受的盐、两性离子(内盐)、立体异构体、互变异构体、水合物、N-氧化物、反向酰胺类似物、同位素变体或其任何组合。在各个实施例中,所述化合物不是:6-(2-氨基丙氧基)吡啶甲酸;6-(2-氨基丙氧基)吡啶-2-羧酸;2-(2-氨基丙氧基)嘧啶-4-羧酸;6-(2-氨基丙氧基)-3-氟吡啶甲酸;6-(2-氨基丙氧基)-4-氟吡啶甲酸;6-(2-氨基丁氧基)吡啶甲酸;6-((2-氨基环戊基)氧基)吡啶甲酸;6-(2-氨基丙氧基)吡啶甲酸甲酯;或6-(2-氨基丙氧基)吡啶甲酸乙酯。

[0015] 在各个实施例中,所述化合物是基本上纯的单一立体异构体。在各个实施例中,所述化合物是基本上纯的单一对映异构体。在各个实施例中,所述化合物是立体异构体的混

合物。在各个实施例中,所述基本上纯的立体异构体或对映异构体的纯度高于90%,优选地高于95%,最优选地高于98%。在各个实施例中,所述化合物是除草剂或杀虫剂(即,除草或杀虫化合物)。

[0016] 在各个实施例中,本发明涉及一种农用化学组合物,其包括杀虫和/或除草有效量的根据本发明的化合物,以及农用化学上可接受的稀释剂或载体。在各个实施例中,所述化合物用于控制不期望的植物的生长。在各个实施例中,所述化合物是基本上纯的单一立体异构体、立体异构体的混合物或外消旋体。在各个实施例中,所述立体异构体是对映异构体。在各个实施例中,所述基本上纯的立体异构体的纯度高于90%,优选地高于95%,最优选地高于98%。

[0017] 在各个实施例中,本发明涉及一种控制不期望的植物的生长的方法,所述方法包括将根据本发明的化合物或根据本发明的农用化学组合物应用于作物田。

[0018] 在各个实施例中,本发明涉及一种根据本发明的化合物或根据本发明的农用化学组合物,其用于控制不期望的植物的生长。在一些实施例中,所述植物是双子叶植物(eudicot或dicot)或单子叶植物(monocotyledon或monocot)。在一些实施例中,所述植物是杂草。在一些实施例中,所述杂草包括:苋麻(*Abutilon theophrasti*)、长芒苋(*Amaranthus palmeri*)、豚草(*Ambrosia artemisiifolia*)、大穗看麦娘(*Alopecurus myosuroides*)、不实野燕麦(*Avena sterilis*)、藜(*Chenopodium album*)、小蓬草(*Conyza Canadensis*)、马唐(*Digitaria sanguinalis*)、光头稗(*Echinochloa colona*)、白苞猩猩草(*Euphorbia heterophylla*)、多年生黑麦草(*Lolium perenne*)、硬直黑麦草(*Lolium rigidum*)、德国洋甘菊(*Matricaria chamomilla*)、奇蒿草(*Phalaris paradoxa*)、早熟禾(*Poa annua*)、马齿苋(*Portulaca oleracea*)、狗尾草(*Setaria viridis*)、龙葵(*Solanum nigrum*)或其任何组合。在一些实施例中,所述双子叶植物是拟南芥(*Arabidopsis thaliana*),和/或所述单子叶植物是龙爪茅(*Dactyloctenium aegyptium*)或埃塞俄比亚画眉草(*Eragrostis teff*)。在一些实施例中,所述化合物用于种植前处理、萌芽前处理、萌芽后处理或其任何组合;每一者均表示根据本发明的单独实施例。

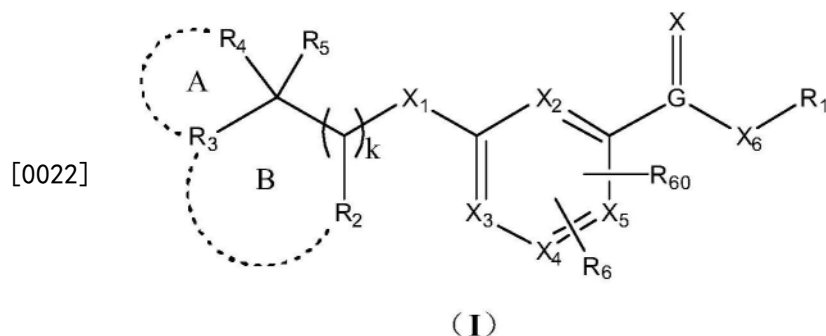
附图说明

[0019] 图1描绘了化合物116的NMR光谱。

[0020] 图2描绘了化合物106的NMR光谱。

具体实施方式

[0021] 在各个实施例中,本发明涉及一种化合物,其由式(I)的结构表示:



[0023] 其中

[0024] A和B环不存在,或各自独立地是经取代或未经取代的芳香族或杂芳香族环体系(例如,B:芳基、吡啶)、或经取代或未经取代的C₃-C₁₀环烷基(A:环丙基、B:环戊基、环己基)、或经取代或未经取代的C₃-C₁₀杂环(例如,吡咯烷);

[0025] R₁是H、经取代或未经取代的C₁-C₁₀直链或支链或C₃-C₈环状烷基(例如,甲基、乙基、丙基、丁基、CH₂-CCH、CH₂-COOH、CH₂CH₂COOH)、C(O)-R₁₀(例如,C(O)-CH₃)、R₈-OH(例如,CH₂-OH)、R₈-COO-R₁₀(例如,CH₂-COOH、CH₂-COO-CH₃、CH₂-COO-CH₂CH₃、CH₂-CH₂-COOH、CH₂-CH₂-COO-CH₃、CH₂-CH₂-COO-CH₂CH₃)、R₈-SH、-R₈-O-R₁₀(例如,-CH₂-O-CH₃)、R₈-(C₃-C₈环烷基)、R₈-(3-8元杂环)、CF₃、NH₂、NHR、N(R)₂、R₈-N(R₁₀)(R₁₁)、C(O)H、C₁-C₅直链或支链C(O)-卤代烷基(例如,C(O)-CF₃)、-C(O)NH₂、C(O)NHR、C(O)N(R₁₀)(R₁₁)、C₂-C₅直链或支链经取代或未经取代的烯基(例如,CH=C(Ph)₂)、C₁-C₅直链或支链或C₃-C₈环状卤代烷基、经取代或未经取代的3-8元杂环、经取代或未经取代的芳基(例如,苯基)、或经取代或未经取代的苄基;

[0026] R₂是H、经取代或未经取代的C₁-C₁₀直链或支链或C₃-C₈环状烷基(例如,甲基、乙基、丙基、CH₂-CCH)、F、Cl、Br、I、OH、SH、R₈-OH(例如,CH₂-OH)、R₈-SH、-R₈-O-R₁₀(例如,-CH₂-O-CH₃)、R₈-(C₃-C₈环烷基)、R₈-(3-8元杂环)、CF₃、CN、NO₂、R₈-N(R₁₀)(R₁₁)、C(O)H、C₁-C₅直链或支链C(O)-卤代烷基(例如,C(O)-CF₃)、-C(O)NH₂、C(O)NHR、C(O)N(R₁₀)(R₁₁)、C₂-C₅直链或支链经取代或未经取代的烯基(例如,CH=C(Ph)₂)、C₁-C₅直链或支链或C₃-C₈环状卤代烷基、经取代或未经取代的3-8元杂环、经取代或未经取代的芳基(例如,苯基)、或经取代或未经取代的苄基;

[0027] R₃是H、经取代或未经取代的C₁-C₁₀直链或支链或C₃-C₈环状烷基(例如,甲基、乙基、丙基、CH₂-CCH、C(H)(OH)(CH₃))、F、Cl、Br、I、OH、SH、R₈-OH(例如,CH₂-OH)、R₈-SH、-R₈-O-R₁₀(例如,-CH₂-O-CH₃)、R₈-(C₃-C₈环烷基)、R₈-(3-8元杂环)、CF₃、CN、NO₂、NH₂、NHR、N(R)₂、R₈-N(R₁₀)(R₁₁) (例如,CH₂-NH₂)、C(O)H、C₁-C₅直链或支链C(O)-卤代烷基(例如,C(O)-CF₃)、-C(O)NH₂、C(O)NHR、C(O)N(R₁₀)(R₁₁)、C₂-C₅直链或支链经取代或未经取代的烯基(例如,CH=C(Ph)₂)、C₁-C₅直链或支链或C₃-C₈环状卤代烷基、经取代或未经取代的3-8元杂环、经取代或未经取代的芳基(例如,苯基)、或经取代或未经取代的苄基;

[0028] 或R₂和R₃连接以形成C₃-C₈经取代或未经取代的饱和或不饱和的脂肪族(例如,环戊基、环己基)或芳香族(例如,吡啶)碳环或杂环(例如,吡咯烷);

[0029] R₄是H、经取代或未经取代的C₁-C₁₀直链或支链或C₃-C₈环状烷基(例如,甲基、乙基、丙基、CH₂-CCH)、F、Cl、Br、I、OH、SH、R₈-OH(例如,CH₂-OH)、R₈-SH、-R₈-O-R₁₀(例如,-CH₂-O-CH₃)、R₈-(C₃-C₈环烷基)、R₈-(3-8元杂环)、CF₃、CN、NO₂、NH₂、NHR、N(R)₂、R₈-N(R₁₀)(R₁₁) (例如,CH₂-NH₂)、C(O)H、C₁-C₅直链或支链C(O)-卤代烷基(例如,C(O)-CF₃)、-C(O)NH₂、C(O)NHR、C(O)N(R₁₀)(R₁₁)、C₂-C₅直链或支链经取代或未经取代的烯基(例如,CH=C(Ph)₂)、C₁-C₅直链或支链或C₃-C₈环状卤代烷基、经取代或未经取代的3-8元杂环、经取代或未经取代的芳基(例如,苯基)、或经取代或未经取代的苄基;

[0030] 或R₃和R₄连接以形成经取代或未经取代的饱和或不饱和的脂肪族或芳香族碳环或杂环3-8元环(例如,环丙基)、C=O或=N-OH;

[0031] R₅是H、OH、SH、NH₂、NHNH₂、NHR、N(R₁₀)(R₁₁) (例如,N(H)CH₃、N(H)CH₂CH₃)、R₈-N(R₁₀)(R₁₁) (例如,CH₂-NH₂);或R₂和R₅连接以形成经取代或未经取代的4-8元杂环(例如,吡咯烷);

[0032] R_6 和 R_{60} 各自独立地是H、F、Cl、Br、I、OH、SH、 R_8 -OH(例如, CH_2 -OH)、 R_8 -SH、 $-R_8-O-R_{10}$ (例如, $-CH_2-O-CH_3$)、 R_8 -(C_3 - C_8 环烷基)、 R_8 -(3-8元杂环)、 CF_3 、 CD_3 、 OCD_3 、CN、 NO_2 、 $-CH_2CN$ 、 $-R_8CN$ 、 NH_2 、 NHR 、 $N(R)_2$ 、 $R_8-N(R_{10})(R_{11})$ 、 $R_9-R_8-N(R_{10})(R_{11})$ 、 $B(OH)_2$ 、 $-OC(O)CF_3$ 、 $-OCH_2Ph$ 、 $NHC(O)-R_{10}$ (例如, $NHC(O)CH_3$)、 $NHC(O)-N(R_{10})(R_{11})$ (例如, $NHC(O)N(CH_3)_2$)、 $COOH$ 、 $-C(O)Ph$ 、 $C(O)O-R_{10}$ (例如, $C(O)O-CH_3$)、 $R_8-C(O)-R_{10}$ (例如, $CH_2C(O)CH_3$)、 $C(O)H$ 、 $C(O)-R_{10}$ (例如, $C(O)-CH_3$ 、 $C(O)-CH_2CH_3$ 、 $C(O)-CH_2CH_2CH_3$)、 C_1 - C_5 直链或支链 $C(O)$ -卤代烷基(例如, $C(O)-CF_3$)、 $-C(O)NH_2$ 、 $C(O)NHR$ 、 $C(O)N(R_{10})(R_{11})$ (例如, $C(O)N(CH_3)_2$)、 SO_2R 、 $SO_2N(R_{10})(R_{11})$ (例如, $SO_2N(CH_3)_2$ 、 $SO_2NHC(O)CH_3$)、 C_1 - C_5 直链或支链经取代或未经取代的烷基(例如, 甲基、乙基、丙基、异丙基、*t*-Bu、异丁基、戊基、苄基)、经取代或未经取代的 C_3 - C_8 环烷基(例如, 环丙基、环戊基)、 C_2 - C_5 直链或支链经取代或未经取代的烯基(例如, 乙烯基)、 C_2 - C_5 直链或支链经取代或未经取代的炔基(例如, 乙炔基、 $CC-CH_2$ -环丁基、 $CC-CF_3$)、 C_1 - C_5 直链或支链或 C_3 - C_8 环状卤代烷基(例如, CF_3 、 CF_2CH_3 、 CH_2CF_3 、 $CF_2CH_2CH_3$ 、 $CH_2CH_2CF_3$ 、 $CF_2CH(CH_3)_2$ 、 $CF(CH_3)-CH(CH_3)_2$)、经取代或未经取代的 C_1 - C_5 直链或支链或 C_3 - C_8 环状烷氧基(例如, 甲氧基、乙氧基、丙氧基、异丙氧基、 $O-CH_2-CF_3$)、任选地其中所述烷氧基中的至少一个亚甲基(CH_2)被氧原子取代、 C_1 - C_5 直链或支链硫代烷氧基、 C_1 - C_5 直链或支链卤代烷氧基(例如, OCF_3 、 $OCHF_2$)、经取代或未经取代的3-8元杂环(例如, 噻吩、噁唑、噁二唑、咪唑、呋喃、三唑、四唑、吡啶、嘧啶、吡嗪)、经取代或未经取代的芳基(例如, 苯基)、经取代或未经取代的苄基;

[0033] X_1 是O、S、NH、NR(例如, $N-CH_3$)、 $S=O$ 、 SO_2 ;或 X_1 和 R_4 连接以形成4-8元杂环(例如, 吡咯烷);

[0034] X_2 、 X_3 、 X_4 、 X_5 各自独立地是C或N;

[0035] X_6 是O、NH、NR或 CH_2 ;

[0036] $G=X$ 是 $C=O$ 或 SO_2 ,或 $G(=X)-X_6-R_1$ 是四唑部分;

[0037] R_8 是 $[CH_2]_p$,

[0038] 其中 p 介于1与10之间;

[0039] R_9 是 $[CH]_q$ 、 $[C]_q$,

[0040] 其中 q 介于2与10之间;

[0041] R_{10} 和 R_{11} 各自独立地是H、CN、 C_1 - C_5 直链或支链烷基(例如, 甲基、乙基)、 $C(O)R$ (例如, $C(O)(OCH_3)$)或 $S(O)_2R$;

[0042] 或 R_{10} 和 R_{11} 连接以形成经取代或未经取代的3-8元杂环,

[0043] R 是H、 C_1 - C_5 直链或支链烷基(例如, 甲基、乙基)、 C_1 - C_5 直链或支链烷氧基(例如, 甲氧基)、苄基、芳基或杂芳基,或两个偕 R 取代基连接在一起以形成5元或6元杂环;

[0044] k 是介于1与3之间的整数(例如, 1、2);

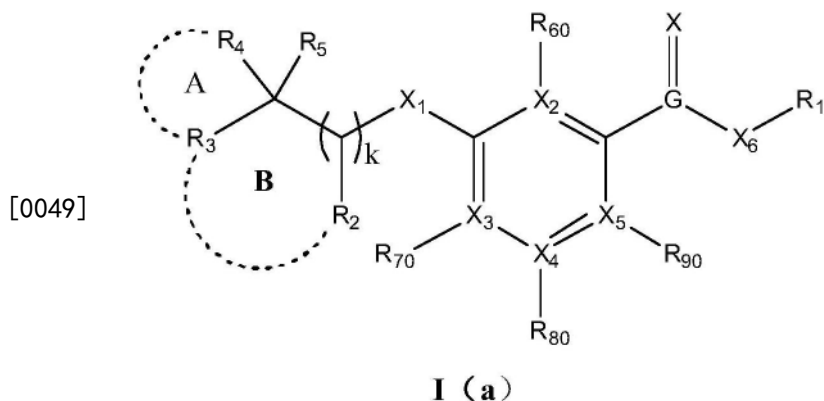
[0045] 或农用化学上可接受的盐、两性离子(内盐)、立体异构体、互变异构体、水合物、 N -氧化物、反向酰胺类似物、同位素变体(例如, 氘代类似物)或其任何组合。

[0046] 在各个实施例中,如果 k 不是1,则 R_2 是H。在各个实施例中,如果 k 是2,则 R_2 是H。在各个实施例中,如果 k 是3,则 R_2 是H。

[0047] 在各个实施例中,术语“经取代”是指被选自以下的至少一个取代基: F、Cl、Br、I、 C_1 - C_5 直链或支链烷基、 C_2 - C_5 直链或支链烯基(例如, 乙烯基)、 C_2 - C_5 直链或支链炔基、烷基酰胺(即, $C(O)NH-R$ 或 $NHC(O)-R$)、烷基酯(即, $COOR$ 或 $OC(O)-R$)、OH、烷氧基、 $N(R)_2$ 、 NH_2 、 CF_3 、

芳基、苯基、杂芳基、 C_3 - C_8 环烷基、卤代苯基、CN和 NO_2 。

[0048] 在各个实施例中，本发明涉及一种化合物，其由式I (a) 的结构表示：



[0050] 其中

[0051] A和B环不存在，或各自独立地是经取代或未经取代的芳香族或杂芳香族环体系（例如，B：芳基、吡啶）、或经取代或未经取代的 C_3 - C_{10} 环烷基（A：环丙基，B：环戊基、环己基）、或经取代或未经取代的3-10元杂环（例如，吡咯烷）；

[0052] R_1 是H、经取代或未经取代的 C_1 - C_{10} 直链或支链或 C_3 - C_8 环状烷基（例如，甲基、乙基、丙基、丁基、 CH_2 -CCH、 CH_2 -COOH、 CH_2CH_2COOH ）、 $C(O)-R_{10}$ （例如， $C(O)-CH_3$ ）、 R_8-OH （例如， CH_2-OH ）、 $R_8-COO-R_{10}$ （例如， CH_2-COOH 、 $CH_2-COO-CH_3$ 、 $CH_2-COO-CH_2CH_3$ 、 CH_2-CH_2-COOH 、 $CH_2-CH_2-COO-CH_3$ 、 $CH_2-CH_2-COO-CH_2CH_3$ ）、 R_8-SH 、 $-R_8-O-R_{10}$ （例如， $-CH_2-O-CH_3$ ）、 $R_8-(C_3-C_8$ 环烷基)、 $R_8-(3-8$ 元杂环)、 CF_3 、 NH_2 、 NHR 、 $N(R)_2$ 、 $R_8-N(R_{10})(R_{11})$ 、 $C(O)H$ 、 C_1-C_5 直链或支链 $C(O)-$ 卤代烷基（例如， $C(O)-CF_3$ ）、 $-C(O)NH_2$ 、 $C(O)NHR$ 、 $C(O)N(R_{10})(R_{11})$ 、 C_2-C_5 直链或支链经取代或未经取代的烯基（例如， $CH=C(Ph)_2$ ）、 C_1-C_5 直链或支链或 C_3-C_8 环状卤代烷基、经取代或未经取代的3-8元杂环、经取代或未经取代的芳基（例如，苯基）、或经取代或未经取代的苄基；

[0053] R_2 是H、经取代或未经取代的 C_1 - C_{10} 直链或支链或 C_3 - C_8 环状烷基（例如，甲基、乙基、丙基、 CH_2-CCH ）、F、Cl、Br、I、OH、SH、 R_8-OH （例如， CH_2-OH ）、 R_8-SH 、 $-R_8-O-R_{10}$ （例如， $-CH_2-O-CH_3$ ）、 $R_8-(C_3-C_8$ 环烷基）、 $R_8-(3-8$ 元杂环）、 CF_3 、CN、 NO_2 、 $R_8-N(R_{10})(R_{11})$ 、 $C(O)H$ 、 C_1-C_5 直链或支链 $C(O)-$ 卤代烷基（例如， $C(O)-CF_3$ ）、 $-C(O)NH_2$ 、 $C(O)NHR$ 、 $C(O)N(R_{10})(R_{11})$ 、 C_2-C_5 直链或支链经取代或未经取代的烯基（例如， $CH=C(Ph)_2$ ）、 C_1-C_5 直链或支链或 C_3-C_8 环状卤代烷基、经取代或未经取代的3-8元杂环、经取代或未经取代的芳基（例如，苯基）、或经取代或未经取代的苄基；

[0054] R_3 是H、经取代或未经取代的 C_1 - C_{10} 直链或支链或 C_3 - C_8 环状烷基（例如，甲基、乙基、丙基、 CH_2-CCH 、 $C(H)(OH)(CH_3)$ ）、F、Cl、Br、I、OH、SH、 R_8-OH （例如， CH_2-OH ）、 R_8-SH 、 $-R_8-O-R_{10}$ （例如， $-CH_2-O-CH_3$ ）、 $R_8-(C_3-C_8$ 环烷基）、 $R_8-(3-8$ 元杂环）、 CF_3 、CN、 NO_2 、 NH_2 、 NHR 、 $N(R)_2$ 、 $R_8-N(R_{10})(R_{11})$ （例如， CH_2-NH_2 ）、 $C(O)H$ 、 C_1-C_5 直链或支链 $C(O)-$ 卤代烷基（例如， $C(O)-CF_3$ ）、 $-C(O)NH_2$ 、 $C(O)NHR$ 、 $C(O)N(R_{10})(R_{11})$ 、 C_2-C_5 直链或支链经取代或未经取代的烯基（例如， $CH=C(Ph)_2$ ）、 C_1-C_5 直链或支链或 C_3-C_8 环状卤代烷基、经取代或未经取代的3-8元杂环、经取代或未经取代的芳基（例如，苯基）、或经取代或未经取代的苄基；

[0055] 或 R_2 和 R_3 连接以形成 C_3 - C_8 经取代或未经取代的饱和或不饱和的脂肪族（例如，环戊基、环己基）或芳香族（例如，吡啶）碳环或杂环（例如，吡咯烷）；

[0056] R_4 是H、经取代或未经取代的 C_1-C_{10} 直链或支链或 C_3-C_8 环状烷基(例如,甲基、乙基、丙基、 CH_2-CCH)、F、Cl、Br、I、OH、SH、 R_8-OH (例如, CH_2-OH)、 R_8-SH 、 $-R_8-O-R_{10}$ (例如, $-CH_2-O-CH_3$)、 $R_8-(C_3-C_8$ 环烷基)、 $R_8-(3-8$ 元杂环)、 CF_3 、CN、 NO_2 、 NH_2 、NHR、 $N(R)_{10}$ 、 $R_8-N(R_{10})$ (R_{11})(例如, CH_2-NH_2)、C(O)H、 C_1-C_5 直链或支链C(O)-卤代烷基(例如,C(O)- CF_3)、 $-C(O)NH_2$ 、C(O)NHR、C(O)N(R_{10})(R_{11})、 C_2-C_5 直链或支链经取代或未经取代的烯基(例如, $CH=C(Ph)_2$)、 C_1-C_5 直链或支链或 C_3-C_8 环状卤代烷基、经取代或未经取代的3-8元杂环、经取代或未经取代的芳基(例如,苯基)、或经取代或未经取代的苄基;

[0057] 或 R_3 和 R_4 连接以形成经取代或未经取代的饱和或不饱和的脂肪族或芳香族碳环或杂环3-8元环(例如,环丙基)、 $C=O$ 或 $=N-OH$;

[0058] R_5 是H、OH、SH、 NH_2 、 $NHNH_2$ 、NHR、 $N(R_{10})$ (R_{11})(例如, $N(H)CH_3$ 、 $N(H)CH_2CH_3$)、 $R_8-N(R_{10})$ (R_{11})(例如, CH_2-NH_2);或 R_2 和 R_5 连接以形成经取代或未经取代的4-8元杂环(例如,吡咯烷);

[0059] R_{60} 不存在,或是H、F、Cl、Br、I、OH、SH、 R_8-OH (例如, CH_2-OH)、 R_8-SH 、 $-R_8-O-R_{10}$ (例如, $-CH_2-O-CH_3$)、 $R_8-(C_3-C_8$ 环烷基)、 $R_8-(3-8$ 元杂环)、 CF_3 、 CD_3 、 OCD_3 、CN、 NO_2 、 $-CH_2CN$ 、 $-R_8CN$ 、 NH_2 、NHR、 $N(R)_{10}$ 、 $R_8-N(R_{10})$ (R_{11})、 $R_9-R_8-N(R_{10})$ (R_{11})、 $B(OH)_2$ 、 $-OC(O)CF_3$ 、 $-OCH_2Ph$ 、 $NHC(O)-R_{10}$ (例如, $NHC(O)CH_3$)、 $NHC(O)-N(R_{10})$ (R_{11})(例如, $NHC(O)N(CH_3)_2$)、 $COOH$ 、 $-C(O)Ph$ 、 $C(O)O-R_{10}$ (例如, $C(O)O-CH_3$)、 $R_8-C(O)-R_{10}$ (例如, $CH_2C(O)CH_3$)、C(O)H、 $C(O)-R_{10}$ (例如, $C(O)-CH_3$ 、 $C(O)-CH_2CH_3$ 、 $C(O)-CH_2CH_2CH_3$)、 C_1-C_5 直链或支链C(O)-卤代烷基(例如,C(O)- CF_3)、 $-C(O)NH_2$ 、C(O)NHR、C(O)N(R_{10})(R_{11})(例如, $C(O)N(CH_3)_2$)、 SO_2R 、 $SO_2N(R_{10})$ (R_{11})(例如, $SO_2N(CH_3)_2$ 、 $SO_2NHC(O)CH_3$)、 C_1-C_5 直链或支链经取代或未经取代的烷基(例如,甲基、乙基、丙基、异丙基、 $t-Bu$ 、异丁基、戊基、苄基)、经取代或未经取代的 C_3-C_8 环烷基(例如,环丙基、环戊基)、 C_2-C_5 直链或支链经取代或未经取代的烯基(例如,乙烯基)、 C_2-C_5 直链或支链经取代或未经取代的炔基(例如,乙炔基、 $CC-CH_2$ -环丁基、 $CC-CF_3$)、 C_1-C_5 直链或支链或 C_3-C_8 环状卤代烷基(例如, CF_3 、 CF_2CH_3 、 CH_2CF_3 、 $CF_2CH_2CH_3$ 、 $CH_2CH_2CF_3$ 、 $CF_2CH(CH_3)_2$ 、 $CF(CH_3)-CH(CH_3)_2$)、经取代或未经取代的 C_1-C_5 直链或支链或 C_3-C_8 环状烷氧基(例如,甲氧基、乙氧基、丙氧基、异丙氧基、 $O-CH_2-CF_3$),任选地其中所述烷氧基中的至少一个亚甲基(CH_2)被氧原子取代、 C_1-C_5 直链或支链硫代烷氧基、 C_1-C_5 直链或支链卤代烷氧基(例如, OCF_3 、 $OCHF_2$)、经取代或未经取代的3-8元杂环(例如,噻吩、噁唑、噁二唑、咪唑、呋喃、三唑、四唑、吡啶、嘧啶、吡嗪)、经取代或未经取代的芳基(例如,苯基)、经取代或未经取代的苄基;

[0060] R_{70} 不存在,或是H、F、Cl、Br、I、OH、SH、 R_8-OH (例如, CH_2-OH)、 R_8-SH 、 $-R_8-O-R_{10}$ (例如, $-CH_2-O-CH_3$)、 $R_8-(C_3-C_8$ 环烷基)、 $R_8-(3-8$ 元杂环)、 CF_3 、 CD_3 、 OCD_3 、CN、 NO_2 、 $-CH_2CN$ 、 $-R_8CN$ 、 NH_2 、NHR、 $N(R)_{10}$ 、 $R_8-N(R_{10})$ (R_{11})、 $R_9-R_8-N(R_{10})$ (R_{11})、 $B(OH)_2$ 、 $-OC(O)CF_3$ 、 $-OCH_2Ph$ 、 $NHC(O)-R_{10}$ (例如, $NHC(O)CH_3$)、 $NHC(O)-N(R_{10})$ (R_{11})(例如, $NHC(O)N(CH_3)_2$)、 $COOH$ 、 $-C(O)Ph$ 、 $C(O)O-R_{10}$ (例如, $C(O)O-CH_3$)、 $R_8-C(O)-R_{10}$ (例如, $CH_2C(O)CH_3$)、C(O)H、 $C(O)-R_{10}$ (例如, $C(O)-CH_3$ 、 $C(O)-CH_2CH_3$ 、 $C(O)-CH_2CH_2CH_3$)、 C_1-C_5 直链或支链C(O)-卤代烷基(例如,C(O)- CF_3)、 $-C(O)NH_2$ 、C(O)NHR、C(O)N(R_{10})(R_{11})(例如, $C(O)N(CH_3)_2$)、 SO_2R 、 $SO_2N(R_{10})$ (R_{11})(例如, $SO_2N(CH_3)_2$ 、 $SO_2NHC(O)CH_3$)、 C_1-C_5 直链或支链经取代或未经取代的烷基(例如,甲基、乙基、丙基、异丙基、 $t-Bu$ 、异丁基、戊基、苄基)、经取代或未经取代的 C_3-C_8 环烷基(例如,环丙基、环戊基)、 C_2-C_5 直链或支链经取代或未经取代的烯基(例如,乙烯基)、 C_2-C_5 直链或支链经取代或未经取代的炔基(例如,乙炔基、 $CC-CH_2$ -环丁基、 $CC-CF_3$)、 C_1-C_5 直链或支链或 C_3-C_8 环状卤代烷基(例如,

CF₃、CF₂CH₃、CH₂CF₃、CF₂CH₂CH₃、CH₂CH₂CF₃、CF₂CH(CH₃)₂、CF(CH₃)-CH(CH₃)₂、经取代或未经取代的C₁-C₅直链或支链或C₃-C₈环状烷氧基(例如,甲氧基、乙氧基、丙氧基、异丙氧基、0-CH₂-CF₃),任选地其中所述烷氧基中的至少一个亚甲基(CH₂)被氧原子取代、C₁-C₅直链或支链硫代烷氧基、C₁-C₅直链或支链卤代烷氧基(例如,OCF₃、OCHF₂)、经取代或未经取代的3-8元杂环(例如,噻吩、噁唑、噁二唑、咪唑、呋喃、三唑、四唑、吡啶、嘧啶、吡嗪)、经取代或未经取代的芳基(例如,苯基)、经取代或未经取代的苄基;

[0061] R₈₀不存在,或是H、F、Cl、Br、I、OH、SH、R₈-OH(例如,CH₂-OH)、R₈-SH、-R₈-O-R₁₀(例如,-CH₂-O-CH₃)、R₈-(C₃-C₈环烷基)、R₈-(3-8元杂环)、CF₃、CD₃、OCD₃、CN、NO₂、-CH₂CN、-R₈CN、NH₂、NHR、N(R)₂、R₈-N(R₁₀)(R₁₁)、R₉-R₈-N(R₁₀)(R₁₁)、B(OH)₂、-OC(O)CF₃、-OCH₂Ph、NHC(O)-R₁₀(例如,NHC(O)CH₃)、NHC(O)-N(R₁₀)(R₁₁)(例如,NHC(O)N(CH₃)₂)、COOH、-C(O)Ph、C(O)O-R₁₀(例如,C(O)O-CH₃)、R₈-C(O)-R₁₀(例如,CH₂C(O)CH₃)、C(O)H、C(O)-R₁₀(例如,C(O)-CH₃、C(O)-CH₂CH₃、C(O)-CH₂CH₂CH₃)、C₁-C₅直链或支链C(O)-卤代烷基(例如,C(O)-CF₃)、-C(O)NH₂、C(O)NHR、C(O)N(R₁₀)(R₁₁)(例如,C(O)N(CH₃)₂)、SO₂R、SO₂N(R₁₀)(R₁₁)(例如,SO₂N(CH₃)₂)、SO₂NHC(O)CH₃)、C₁-C₅直链或支链经取代或未经取代的烷基(例如,甲基、乙基、丙基、异丙基、t-Bu、异丁基、戊基、苄基)、经取代或未经取代的C₃-C₈环烷基(例如,环丙基、环戊基)、C₂-C₅直链或支链经取代或未经取代的烯基(例如,乙烯基)、C₂-C₅直链或支链经取代或未经取代的炔基(例如,乙炔基、CC-CH₂-环丁基、CC-CF₃)、C₁-C₅直链或支链或C₃-C₈环状卤代烷基(例如,CF₃、CF₂CH₃、CH₂CF₃、CF₂CH₂CH₃、CH₂CH₂CF₃、CF₂CH(CH₃)₂、CF(CH₃)-CH(CH₃)₂)、经取代或未经取代的C₁-C₅直链或支链或C₃-C₈环状烷氧基(例如,甲氧基、乙氧基、丙氧基、异丙氧基、0-CH₂-CF₃),任选地其中所述烷氧基中的至少一个亚甲基(CH₂)被氧原子取代、C₁-C₅直链或支链硫代烷氧基、C₁-C₅直链或支链卤代烷氧基(例如,OCF₃、OCHF₂)、经取代或未经取代的3-8元杂环(例如,噻吩、噁唑、噁二唑、咪唑、呋喃、三唑、四唑、吡啶、嘧啶、吡嗪)、经取代或未经取代的芳基(例如,苯基)、经取代或未经取代的苄基;

[0062] R₉₀不存在,或是H、F、Cl、Br、I、OH、SH、R₈-OH(例如,CH₂-OH)、R₈-SH、-R₈-O-R₁₀(例如,-CH₂-O-CH₃)、R₈-(C₃-C₈环烷基)、R₈-(3-8元杂环)、CF₃、CD₃、OCD₃、CN、NO₂、-CH₂CN、-R₈CN、NH₂、NHR、N(R)₂、R₈-N(R₁₀)(R₁₁)、R₉-R₈-N(R₁₀)(R₁₁)、B(OH)₂、-OC(O)CF₃、-OCH₂Ph、NHC(O)-R₁₀(例如,NHC(O)CH₃)、NHC(O)-N(R₁₀)(R₁₁)(例如,NHC(O)N(CH₃)₂)、COOH、-C(O)Ph、C(O)O-R₁₀(例如,C(O)O-CH₃)、R₈-C(O)-R₁₀(例如,CH₂C(O)CH₃)、C(O)H、C(O)-R₁₀(例如,C(O)-CH₃、C(O)-CH₂CH₃、C(O)-CH₂CH₂CH₃)、C₁-C₅直链或支链C(O)-卤代烷基(例如,C(O)-CF₃)、-C(O)NH₂、C(O)NHR、C(O)N(R₁₀)(R₁₁)(例如,C(O)N(CH₃)₂)、SO₂R、SO₂N(R₁₀)(R₁₁)(例如,SO₂N(CH₃)₂)、SO₂NHC(O)CH₃)、C₁-C₅直链或支链经取代或未经取代的烷基(例如,甲基、乙基、丙基、异丙基、t-Bu、异丁基、戊基、苄基)、经取代或未经取代的C₃-C₈环烷基(例如,环丙基、环戊基)、C₂-C₅直链或支链经取代或未经取代的烯基(例如,乙烯基)、C₂-C₅直链或支链经取代或未经取代的炔基(例如,乙炔基、CC-CH₂-环丁基、CC-CF₃)、C₁-C₅直链或支链或C₃-C₈环状卤代烷基(例如,CF₃、CF₂CH₃、CH₂CF₃、CF₂CH₂CH₃、CH₂CH₂CF₃、CF₂CH(CH₃)₂、CF(CH₃)-CH(CH₃)₂)、经取代或未经取代的C₁-C₅直链或支链或C₃-C₈环状烷氧基(例如,甲氧基、乙氧基、丙氧基、异丙氧基、0-CH₂-CF₃),任选地其中所述烷氧基中的至少一个亚甲基(CH₂)被氧原子取代、C₁-C₅直链或支链硫代烷氧基、C₁-C₅直链或支链卤代烷氧基(例如,OCF₃、OCHF₂)、经取代或未经取代的3-8元杂环(例如,噻吩、噁唑、噁二唑、咪唑、呋喃、三唑、四唑、吡啶、嘧啶、吡嗪)、经取代或未经取代

的芳基(例如,苯基)、经取代或未经取代的苄基;

[0063] X_1 是O、S、NH、NR(例如,N-CH₃)、S=O、SO₂;或 X_1 和 R_4 连接以形成4-8元杂环(例如,吡咯烷);

[0064] X_2 、 X_3 、 X_4 、 X_5 各自独立地是C或N,其中如果 X_2 至 X_5 中的任何一者是N,则相应的 R_{60} - R_{90} 不存在;

[0065] X_6 是O、NH、NR或CH₂;

[0066] $G=X$ 是C=O或SO₂,或 $G(=X)-X_6-R_1$ 是四唑部分;

[0067] R_8 是[CH₂]_p,

[0068] 其中p介于1与10之间;

[0069] R_9 是[CH]_q、[C]_q,

[0070] 其中q介于2与10之间;

[0071] R_{10} 和 R_{11} 各自独立地是H、CN、C₁-C₅直链或支链烷基(例如,甲基、乙基)、C(O)R(例如,C(O)(OCH₃))或S(O)₂R;

[0072] 或 R_{10} 和 R_{11} 连接以形成经取代或未经取代的3-8元杂环;

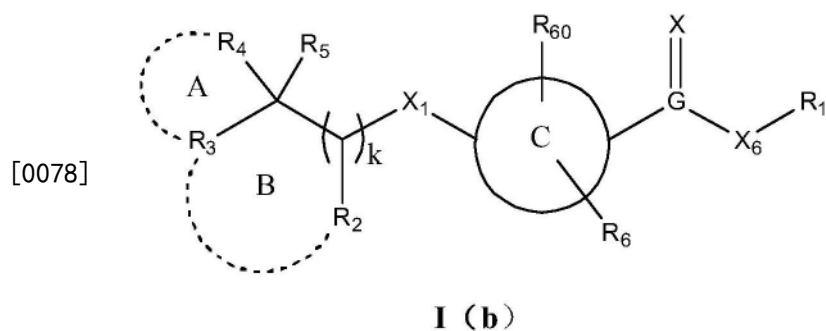
[0073] R是H、C₁-C₅直链或支链烷基(例如,甲基、乙基)、C₁-C₅直链或支链烷氧基(例如,甲氧基)、苯基、芳基或杂芳基,或两个偕R取代基连接在一起以形成5元或6元杂环;

[0074] k是介于1与3之间的整数(例如,1、2);

[0075] 或农用化学上可接受的盐、两性离子(内盐)、立体异构体、互变异构体、水合物、N-氧化物、反向酰胺类似物、同位素变体(例如,氘代类似物)或其任何组合。

[0076] 在各个实施例中,如果k不是1,则 R_2 是H。在各个实施例中,如果k是2,则 R_2 是H。在各个实施例中,如果k是3,则 R_2 是H。

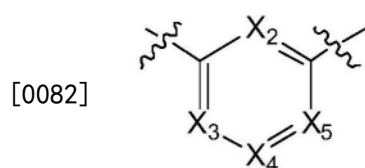
[0077] 在各个实施例中,本发明涉及一种化合物,其由式I(b)的结构表示:



[0079] 其中

[0080] C环是饱和或不饱和的脂肪族或杂环4-7元环(例如,环己基、环己烯基、异噁唑、三唑、吡唑、噁二唑、咪喃、噻唑、吡咯、噻吩);

[0081] 或C由以下结构表示:



[0083] 其中 X_2 、 X_3 、 X_4 和 X_5 各自独立地是N或C,并且

[0084] 其中 X_2 至 X_5 中的至少一者是N;

[0085] A和B环不存在,或各自独立地是经取代或未经取代的芳香族或杂芳香族环体系(例如,芳基、吡啶)、或经取代或未经取代的 C_3 - C_{10} 环烷基(环丙基、环戊基、环己基)、或经取代或未经取代的 C_3 - C_{10} 杂环(例如,吡咯烷);

[0086] R_1 是H、经取代或未经取代的 C_1 - C_{10} 直链或支链或 C_3 - C_8 环状烷基(例如,甲基、乙基、丙基、丁基、 CH_2 -CCH、 CH_2 -COOH、 CH_2CH_2COOH)、 $C(O)-R_{10}$ (例如, $C(O)-CH_3$)、 R_8-OH (例如, CH_2-OH)、 $R_8-COO-R_{10}$ (例如, CH_2-COOH 、 $CH_2-COO-CH_3$ 、 $CH_2-COO-CH_2CH_3$ 、 CH_2-CH_2-COOH 、 $CH_2-CH_2-COO-CH_3$ 、 $CH_2-CH_2-COO-CH_2CH_3$)、 R_8-SH 、 R_8-O-R_{10} (例如, $-CH_2-O-CH_3$)、 $R_8-(C_3-C_8$ 环烷基)、 $R_8-(3-8$ 元杂环)、 CF_3 、 NH_2 、 NHR 、 $N(R)_{10}$ (R_{11})、 $C(O)H$ 、 C_1-C_5 直链或支链 $C(O)$ -卤代烷基(例如, $C(O)-CF_3$)、 $-C(O)NH_2$ 、 $C(O)NHR$ 、 $C(O)N(R_{10})(R_{11})$ 、 C_2-C_5 直链或支链经取代或未经取代的烯基(例如, $CH=C(Ph)_2$)、 C_1-C_5 直链或支链或 C_3-C_8 环状卤代烷基、经取代或未经取代的3-8元杂环、经取代或未经取代的芳基(例如,苯基)、或经取代或未经取代的苄基;

[0087] R_2 是H、经取代或未经取代的 C_1 - C_{10} 直链或支链或 C_3 - C_8 环状烷基(例如,甲基、乙基、丙基、 CH_2 -CCH)、F、Cl、Br、I、OH、SH、 R_8-OH (例如, CH_2-OH)、 R_8-SH 、 R_8-O-R_{10} (例如, $-CH_2-O-CH_3$)、 $R_8-(C_3-C_8$ 环烷基)、 $R_8-(3-8$ 元杂环)、 CF_3 、CN、 NO_2 、 $R_8-N(R_{10})(R_{11})$ 、 $C(O)H$ 、 C_1-C_5 直链或支链 $C(O)$ -卤代烷基(例如, $C(O)-CF_3$)、 $-C(O)NH_2$ 、 $C(O)NHR$ 、 $C(O)N(R_{10})(R_{11})$ 、 C_2-C_5 直链或支链经取代或未经取代的烯基(例如, $CH=C(Ph)_2$)、 C_1-C_5 直链或支链或 C_3-C_8 环状卤代烷基、经取代或未经取代的3-8元杂环、经取代或未经取代的芳基(例如,苯基)、或经取代或未经取代的苄基;

[0088] R_3 是H、经取代或未经取代的 C_1 - C_{10} 直链或支链或 C_3 - C_8 环状烷基(例如,甲基、乙基、丙基、 CH_2 -CCH、 $C(H)(OH)(CH_3)$)、F、Cl、Br、I、OH、SH、 R_8-OH (例如, CH_2-OH)、 R_8-SH 、 R_8-O-R_{10} (例如, $-CH_2-O-CH_3$)、 $R_8-(C_3-C_8$ 环烷基)、 $R_8-(3-8$ 元杂环)、 CF_3 、CN、 NO_2 、 NH_2 、 NHR 、 $N(R)_{10}$ (R_{11}) (例如, CH_2-NH_2)、 $C(O)H$ 、 C_1-C_5 直链或支链 $C(O)$ -卤代烷基(例如, $C(O)-CF_3$)、 $-C(O)NH_2$ 、 $C(O)NHR$ 、 $C(O)N(R_{10})(R_{11})$ 、 C_2-C_5 直链或支链经取代或未经取代的烯基(例如, $CH=C(Ph)_2$)、 C_1-C_5 直链或支链或 C_3-C_8 环状卤代烷基、经取代或未经取代的3-8元杂环、经取代或未经取代的芳基(例如,苯基)、或经取代或未经取代的苄基;

[0089] 或 R_2 和 R_3 连接以形成 C_3 - C_8 经取代或未经取代的饱和或不饱和的脂肪族(例如,环戊基、环己基)或芳香族(例如,吡啶)碳环或杂环(例如,吡咯烷);

[0090] R_4 是H、经取代或未经取代的 C_1 - C_{10} 直链或支链或 C_3 - C_8 环状烷基(例如,甲基、乙基、丙基、 CH_2 -CCH)、F、Cl、Br、I、OH、SH、 R_8-OH (例如, CH_2-OH)、 R_8-SH 、 R_8-O-R_{10} (例如, $-CH_2-O-CH_3$)、 $R_8-(C_3-C_8$ 环烷基)、 $R_8-(3-8$ 元杂环)、 CF_3 、CN、 NO_2 、 NH_2 、 NHR 、 $N(R)_{10}$ (R_{11}) (例如, CH_2-NH_2)、 $C(O)H$ 、 C_1-C_5 直链或支链 $C(O)$ -卤代烷基(例如, $C(O)-CF_3$)、 $-C(O)NH_2$ 、 $C(O)NHR$ 、 $C(O)N(R_{10})(R_{11})$ 、 C_2-C_5 直链或支链经取代或未经取代的烯基(例如, $CH=C(Ph)_2$)、 C_1-C_5 直链或支链或 C_3-C_8 环状卤代烷基、经取代或未经取代的3-8元杂环、经取代或未经取代的芳基(例如,苯基)、或经取代或未经取代的苄基;

[0091] 或 R_3 和 R_4 连接以形成经取代或未经取代的饱和或不饱和的脂肪族或芳香族碳环或杂环3-8元环(例如,环丙基)、 $C=O$ 或 $=N-OH$;

[0092] R_5 是H、OH、SH、 NH_2 、 $NHNH_2$ 、 NHR 、 $N(R_{10})(R_{11})$ (例如, $N(H)CH_3$ 、 $N(H)CH_2CH_3$)、 $R_8-N(R_{10})(R_{11})$ (例如, CH_2-NH_2);或 R_2 和 R_5 连接以形成经取代或未经取代的4-8元杂环(例如,吡咯烷);

[0093] R_6 和 R_{60} 各自独立地是H、F、Cl、Br、I、OH、SH、 R_8-OH (例如, CH_2-OH)、 R_8-SH 、 R_8-O-R_{10}

(例如, $-\text{CH}_2-\text{O}-\text{CH}_3$)、 R_8- (C_3-C_8 环烷基)、 R_8- (3-8元杂环)、 CF_3 、 CD_3 、 OCD_3 、 CN 、 NO_2 、 $-\text{CH}_2\text{CN}$ 、 $-\text{R}_8\text{CN}$ 、 NH_2 、 NHR 、 $\text{N}(\text{R})_2$ 、 $\text{R}_8-\text{N}(\text{R}_{10})(\text{R}_{11})$ 、 $\text{R}_9-\text{R}_8-\text{N}(\text{R}_{10})(\text{R}_{11})$ 、 $\text{B}(\text{OH})_2$ 、 $-\text{OC}(\text{O})\text{CF}_3$ 、 $-\text{OCH}_2\text{Ph}$ 、 $\text{NHC}(\text{O})-\text{R}_{10}$ (例如, $\text{NHC}(\text{O})\text{CH}_3$)、 $\text{NHC}(\text{O})-\text{N}(\text{R}_{10})(\text{R}_{11})$ (例如, $\text{NHC}(\text{O})\text{N}(\text{CH}_3)_2$)、 COOH 、 $-\text{C}(\text{O})\text{Ph}$ 、 $\text{C}(\text{O})\text{O}-\text{R}_{10}$ (例如, $\text{C}(\text{O})\text{O}-\text{CH}_3$)、 $\text{R}_8-\text{C}(\text{O})-\text{R}_{10}$ (例如, $\text{CH}_2\text{C}(\text{O})\text{CH}_3$)、 $\text{C}(\text{O})\text{H}$ 、 $\text{C}(\text{O})-\text{R}_{10}$ (例如, $\text{C}(\text{O})-\text{CH}_3$ 、 $\text{C}(\text{O})-\text{CH}_2\text{CH}_3$ 、 $\text{C}(\text{O})-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$)、 C_1-C_5 直链或支链 $\text{C}(\text{O})$ -卤代烷基 (例如, $\text{C}(\text{O})-\text{CF}_3$)、 $-\text{C}(\text{O})\text{NH}_2$ 、 $\text{C}(\text{O})\text{NHR}$ 、 $\text{C}(\text{O})\text{N}(\text{R}_{10})(\text{R}_{11})$ (例如, $\text{C}(\text{O})\text{N}(\text{CH}_3)_2$)、 SO_2R 、 $\text{SO}_2\text{N}(\text{R}_{10})(\text{R}_{11})$ (例如, $\text{SO}_2\text{N}(\text{CH}_3)_2$ 、 $\text{SO}_2\text{NHC}(\text{O})\text{CH}_3$)、 C_1-C_5 直链或支链经取代或未经取代的烷基 (例如, 甲基、乙基、丙基、异丙基、*t*-Bu、异丁基、戊基、苄基)、经取代或未经取代的 C_3-C_8 环烷基 (例如, 环丙基、环戊基)、 C_2-C_5 直链或支链经取代或未经取代的烯基 (例如, 乙烯基)、 C_2-C_5 直链或支链经取代或未经取代的炔基 (例如, 乙炔基、 $\text{CC}-\text{CH}_2$ -环丁基、 $\text{CC}-\text{CF}_3$)、 C_1-C_5 直链或支链或 C_3-C_8 环状卤代烷基 (例如, CF_3 、 CF_2CH_3 、 CH_2CF_3 、 $\text{CF}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ 、 $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CF}_3$ 、 $\text{CF}_2\text{CH}(\text{CH}_3)_2$ 、 $\text{CF}(\text{CH}_3)-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$)、经取代或未经取代的 C_1-C_5 直链或支链或 C_3-C_8 环状烷氧基 (例如, 甲氧基、乙氧基、丙氧基、异丙氧基、 $\text{O}-\text{CH}_2-\text{CF}_3$)、任选地其中所述烷氧基中的至少一个亚甲基(CH_2)被氧原子取代、 C_1-C_5 直链或支链硫代烷氧基、 C_1-C_5 直链或支链卤代烷氧基 (例如, OCF_3 、 OCHF_2)、经取代或未经取代的3-8元杂环 (例如, 噻吩、噁唑、噁二唑、咪唑、呋喃、三唑、四唑、吡啶、嘧啶、吡嗪)、经取代或未经取代的芳基 (例如, 苯基)、经取代或未经取代的苄基;

[0094] X_1 是O、S、NH、NR (例如, $\text{N}-\text{CH}_3$)、 $\text{S}=\text{O}$ 、 SO_2 ;或 X_1 和 R_4 连接以形成4-8元杂环 (例如, 吡咯烷);

[0095] X_6 是O、NH、NR或 CH_2 ;

[0096] $\text{G}=\text{X}$ 是 $\text{C}=\text{O}$ 或 SO_2 ,或 $\text{G}(\text{X})-\text{X}_6-\text{R}_1$ 是四唑部分;

[0097] R_8 是 $[\text{CH}_2]_p$,

[0098] 其中 p 介于1与10之间;

[0099] R_9 是 $[\text{CH}]_q$ 、 $[\text{C}]_q$,

[0100] 其中 q 介于2与10之间;

[0101] R_{10} 和 R_{11} 各自独立地是H、CN、 C_1-C_5 直链或支链烷基 (例如, 甲基、乙基)、 $\text{C}(\text{O})\text{R}$ (例如, $\text{C}(\text{O})(\text{OCH}_3)$)或 $\text{S}(\text{O})_2\text{R}$;

[0102] 或 R_{10} 和 R_{11} 连接以形成经取代或未经取代的3-8元杂环;

[0103] R 是H、 C_1-C_5 直链或支链烷基 (例如, 甲基、乙基)、 C_1-C_5 直链或支链烷氧基 (例如, 甲氧基)、苄基、芳基或杂芳基,或两个偕 R 取代基连接在一起以形成5元或6元杂环;

[0104] k 是介于1与3之间的整数 (例如, 1、2);

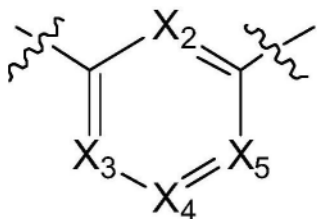
[0105] 或农用化学上可接受的盐、两性离子 (内盐)、立体异构体、互变异构体、水合物、N-氧化物、反向酰胺类似物、同位素变体 (例如, 氘代类似物)或其任何组合。

[0106] 在各个实施例中,如果 k 不是1,则 R_2 是H。在各个实施例中,如果 k 是2,则 R_2 是H。在各个实施例中,如果 k 是3,则 R_2 是H。

[0107] 在各个实施例中,环C是环己烷、环己烯、异噁唑、三唑、吡唑、噁二唑、呋喃、噻唑、吡咯或噻吩;每一者均表示根据本发明的单独实施例。

[0108] 在各个实施例中,环C由以下结构表示:

[0109]

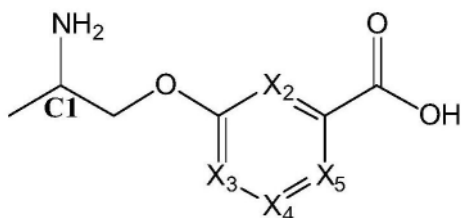


[0110] 其中

[0111] X_2 、 X_3 、 X_4 和 X_5 各自独立地是N或C；[0112] 在各个实施例中， X_2 至 X_5 中的至少一者是N。在各个实施例中， X_2 至 X_5 中的至少两者是N。在各个实施例中， X_2 是N并且 X_3 、 X_4 和 X_5 是C。在各个实施例中， X_2 和 X_5 是N并且 X_3 和 X_4 是C。在各个实施例中， X_3 和 X_5 是N并且 X_2 和 X_4 是C。

[0113] 在各个实施例中，本发明涉及一种化合物，其由式I (c)的结构表示：

[0114]



I (c)

[0115] 其中

[0116] 每个 X_2 、 X_3 、 X_4 和 X_5 独立地是N或C，并且

[0117] C1表示手性碳中心；

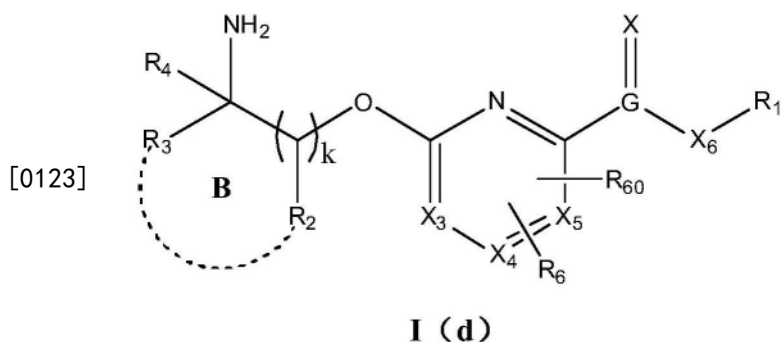
[0118] 或其农用化学上可接受的盐、两性离子(内盐)、水合物、N-氧化物、同位素变体或其任何组合。

[0119] 在各个实施例中，式I (c)化合物是手性的。在各个实施例中，式I (c)化合物是基本上纯的单一对映异构体。在各个实施例中，式I (c)化合物是R对映异构体。在各个实施例中，式I (c)化合物是S对映异构体。在各个实施例中，所述化合物包括纯度>80%的单一对映异构体。在各个实施例中，所述化合物包括纯度>85%的单一对映异构体。在各个实施例中，所述化合物包括纯度>90%的单一对映异构体。在各个实施例中，所述化合物包括纯度>95%的单一对映异构体。在各个实施例中，所述化合物包括纯度>99%的单一对映异构体。

[0120] 在各个实施例中，式I (c)化合物的C1具有R构型。在各个实施例中，C1具有S构型。

[0121] 在各个实施例中，式I (c)化合物的 X_2 至 X_5 中的至少一者是N。在各个实施例中， X_2 至 X_5 中的至少两者是N。在各个实施例中， X_2 是N并且 X_3 、 X_4 和 X_5 是C。在各个实施例中， X_2 和 X_5 是N并且 X_3 和 X_4 是C。在各个实施例中， X_3 和 X_5 是N并且 X_2 和 X_4 是C。

[0122] 在各个实施例中，本发明涉及一种化合物，其由式I (d)的结构表示：



[0124] 其中

[0125] B环不存在,或是经取代或未经取代的芳香族或杂芳香族环体系(例如,芳基、吡啶)、或经取代或未经取代的 C_3 - C_{10} 环烷基(环丙基、环戊基、环己基)、或经取代或未经取代的 C_3 - C_{10} 杂环(例如,吡咯烷);

[0126] R_1 是H、经取代或未经取代的 C_1 - C_{10} 直链或支链或 C_3 - C_8 环状烷基(例如,甲基、乙基、丙基、丁基、 CH_2 -CCH、 CH_2 -COOH、 CH_2CH_2COOH)、 $C(O)-R_{10}$ (例如, $C(O)-CH_3$)、 R_8-OH (例如, CH_2-OH)、 $R_8-COO-R_{10}$ (例如, CH_2-COOH 、 $CH_2-COO-CH_3$ 、 $CH_2-COO-CH_2CH_3$ 、 CH_2-CH_2-COOH 、 $CH_2-CH_2-COO-CH_3$ 、 $CH_2-CH_2-COO-CH_2CH_3$)、 R_8-SH 、 $-R_8-O-R_{10}$ (例如, $-CH_2-O-CH_3$)、 $R_8-(C_3-C_8$ 环烷基)、 $R_8-(3-8$ 元杂环)、 CF_3 、 NH_2 、 NHR 、 $N(R)_2$ 、 $R_8-N(R_{10})(R_{11})$ 、 $C(O)H$ 、 C_1-C_5 直链或支链 $C(O)$ -卤代烷基(例如, $C(O)-CF_3$)、 $-C(O)NH_2$ 、 $C(O)NHR$ 、 $C(O)N(R_{10})(R_{11})$ 、 C_2-C_5 直链或支链经取代或未经取代的烯基(例如, $CH=C(Ph)_2$)、 C_1-C_5 直链或支链或 C_3-C_8 环状卤代烷基、经取代或未经取代的3-8元杂环、经取代或未经取代的芳基(例如,苯基)、或经取代或未经取代的苄基;

[0127] R_2 是H、经取代或未经取代的 C_1 - C_{10} 直链或支链或 C_3 - C_8 环状烷基(例如,甲基、乙基、丙基、 CH_2 -CCH)、F、Cl、Br、I、OH、SH、 R_8-OH (例如, CH_2-OH)、 R_8-SH 、 $-R_8-O-R_{10}$ (例如, $-CH_2-O-CH_3$)、 $R_8-(C_3-C_8$ 环烷基)、 $R_8-(3-8$ 元杂环)、 CF_3 、CN、 NO_2 、 $R_8-N(R_{10})(R_{11})$ 、 $C(O)H$ 、 C_1-C_5 直链或支链 $C(O)$ -卤代烷基(例如, $C(O)-CF_3$)、 $-C(O)NH_2$ 、 $C(O)NHR$ 、 $C(O)N(R_{10})(R_{11})$ 、 C_2-C_5 直链或支链经取代或未经取代的烯基(例如, $CH=C(Ph)_2$)、 C_1-C_5 直链或支链或 C_3-C_8 环状卤代烷基、经取代或未经取代的3-8元杂环、经取代或未经取代的芳基(例如,苯基)、或经取代或未经取代的苄基;

[0128] R_3 是H、经取代或未经取代的 C_1 - C_{10} 直链或支链或 C_3 - C_8 环状烷基(例如,甲基、乙基、丙基、 CH_2 -CCH、 $C(H)(OH)(CH_3)$)、F、Cl、Br、I、OH、SH、 R_8-OH (例如, CH_2-OH)、 R_8-SH 、 $-R_8-O-R_{10}$ (例如, $-CH_2-O-CH_3$)、 $R_8-(C_3-C_8$ 环烷基)、 $R_8-(3-8$ 元杂环)、 CF_3 、CN、 NO_2 、 NH_2 、 NHR 、 $N(R)_2$ 、 $R_8-N(R_{10})(R_{11})$ (例如, CH_2-NH_2)、 $C(O)H$ 、 C_1-C_5 直链或支链 $C(O)$ -卤代烷基(例如, $C(O)-CF_3$)、 $-C(O)NH_2$ 、 $C(O)NHR$ 、 $C(O)N(R_{10})(R_{11})$ 、 C_2-C_5 直链或支链经取代或未经取代的烯基(例如, $CH=C(Ph)_2$)、 C_1-C_5 直链或支链或 C_3-C_8 环状卤代烷基、经取代或未经取代的3-8元杂环、经取代或未经取代的芳基(例如,苯基)、或经取代或未经取代的苄基;

[0129] 或 R_2 和 R_3 连接以形成 C_3 - C_8 经取代或未经取代的饱和或不饱和的脂肪族(例如,环丙基、环戊基、环己基)或芳香族(例如,吡啶)碳环或杂环(例如,吡咯烷);

[0130] R_4 是H、经取代或未经取代的 C_1 - C_{10} 直链或支链或 C_3 - C_8 环状烷基(例如,甲基、乙基、丙基、 CH_2 -CCH)、F、Cl、Br、I、OH、SH、 R_8-OH (例如, CH_2-OH)、 R_8-SH 、 $-R_8-O-R_{10}$ (例如, $-CH_2-O-CH_3$)、 $R_8-(C_3-C_8$ 环烷基)、 $R_8-(3-8$ 元杂环)、 CF_3 、CN、 NO_2 、 NH_2 、 NHR 、 $N(R)_2$ 、 $R_8-N(R_{10})(R_{11})$ (例如, CH_2-NH_2)、 $C(O)H$ 、 C_1-C_5 直链或支链 $C(O)$ -卤代烷基(例如, $C(O)-CF_3$)、 $-C(O)NH_2$ 、 $C(O)NHR$ 、 $C(O)N(R_{10})(R_{11})$ 、 C_2-C_5 直链或支链经取代或未经取代的烯基(例如, $CH=C(Ph)_2$)、 C_1-C_5 直链或支链或 C_3-C_8 环状卤代烷基、经取代或未经取代的3-8元杂环、经取代或未经取代的芳基(例如,苯基)、或经取代或未经取代的苄基;

(O)N(R₁₀)(R₁₁)、C₂-C₅直链或支链经取代或未经取代的烯基(例如,CH=C(Ph)₂)、C₁-C₅直链或支链或C₃-C₈环状卤代烷基、经取代或未经取代的3-8元杂环、经取代或未经取代的芳基(例如,苯基)、或经取代或未经取代的苄基;

[0131] 或R₃和R₄连接以形成经取代或未经取代的饱和或不饱和的脂肪族或芳香族碳环或杂环3-8元环(例如,环丙基)、C=O或=N-OH;

[0132] R₆和R₆₀各自独立地是H、F、Cl、Br、I、OH、SH、R₈-OH(例如,CH₂-OH)、R₈-SH、-R₈-O-R₁₀(例如,-CH₂-O-CH₃)、R₈-(C₃-C₈环烷基)、R₈-(3-8元杂环)、CF₃、CD₃、OCD₃、CN、NO₂、-CH₂CN、-R₈CN、NH₂、NHR、N(R)₂、R₈-N(R₁₀)(R₁₁)、R₉-R₈-N(R₁₀)(R₁₁)、B(OH)₂、-OC(O)CF₃、-OCH₂Ph、NHC(O)-R₁₀(例如,NHC(O)CH₃)、NHC(O)-N(R₁₀)(R₁₁)(例如,NHC(O)N(CH₃)₂)、COOH、-C(O)Ph、C(O)O-R₁₀(例如,C(O)O-CH₃)、R₈-C(O)-R₁₀(例如,CH₂C(O)CH₃)、C(O)H、C(O)-R₁₀(例如,C(O)-CH₃、C(O)-CH₂CH₃、C(O)-CH₂CH₂CH₃)、C₁-C₅直链或支链C(O)-卤代烷基(例如,C(O)-CF₃)、-C(O)NH₂、C(O)NHR、C(O)N(R₁₀)(R₁₁)(例如,C(O)N(CH₃)₂)、SO₂R、SO₂N(R₁₀)(R₁₁)(例如,SO₂N(CH₃)₂、SO₂NHC(O)CH₃)、C₁-C₅直链或支链经取代或未经取代的烷基(例如,甲基、乙基、丙基、异丙基、t-Bu、异丁基、戊基、苄基)、经取代或未经取代的C₃-C₈环烷基(例如,环丙基、环戊基)、C₂-C₅直链或支链经取代或未经取代的烯基(例如,乙烯基)、C₂-C₅直链或支链经取代或未经取代的炔基(例如,乙炔基、CC-CH₂-环丁基、CC-CF₃)、C₁-C₅直链或支链或C₃-C₈环状卤代烷基(例如,CF₃、CF₂CH₃、CH₂CF₃、CF₂CH₂CH₃、CH₂CH₂CF₃、CF₂CH(CH₃)₂、CF(CH₃)-CH(CH₃)₂)、经取代或未经取代的C₁-C₅直链或支链或C₃-C₈环状烷氧基(例如,甲氧基、乙氧基、丙氧基、异丙氧基、O-CH₂-CF₃)、任选地其中所述烷氧基中的至少一个亚甲基(CH₂)被氧原子取代、C₁-C₅直链或支链硫代烷氧基、C₁-C₅直链或支链卤代烷氧基(例如,OCF₃、OCHF₂)、经取代或未经取代的3-8元杂环(例如,噻吩、噁唑、噁二唑、咪唑、呋喃、三唑、四唑、吡啶、嘧啶、吡嗪)、经取代或未经取代的芳基(例如,苯基)、经取代或未经取代的苄基;

[0133] X₃、X₄、X₅各自独立地是C或N;

[0134] X₆是O、NH、NR或CH₂;

[0135] G=X是C=O或SO₂,或G(=X)-X₆-R₁是四唑部分;

[0136] R₈是[CH₂]_p,

[0137] 其中p介于1与10之间;

[0138] R₉是[CH]_q、[C]_q,

[0139] 其中q介于2与10之间;

[0140] R₁₀和R₁₁各自独立地是H、CN、C₁-C₅直链或支链烷基(例如,甲基、乙基)、C(O)R(例如,C(O)(OCH₃))或S(O)₂R;

[0141] 或R₁₀和R₁₁连接以形成经取代或未经取代的3-8元杂环;

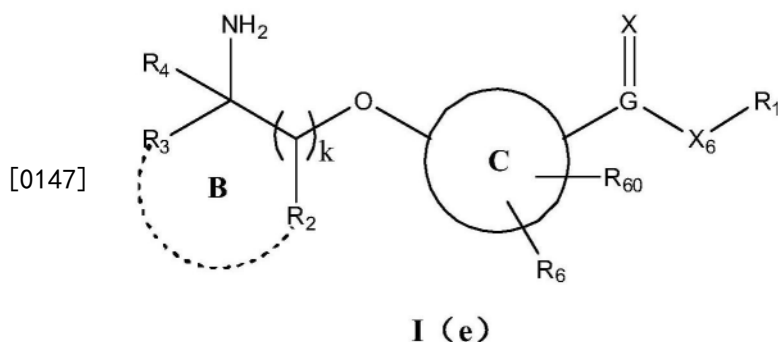
[0142] R是H、C₁-C₅直链或支链烷基(例如,甲基、乙基)、C₁-C₅直链或支链烷氧基(例如,甲氧基)、苄基、芳基或杂芳基,或两个偕R取代基连接在一起以形成5元或6元杂环;

[0143] k是介于1与3之间的整数(例如,1、2);

[0144] 或农用化学上可接受的盐、两性离子(内盐)、立体异构体、互变异构体、水合物、N-氧化物、反向酰胺类似物、同位素变体(例如,氘代类似物)或其任何组合。

[0145] 在各个实施例中,如果k不是1,则R₂是H。在各个实施例中,如果k是2,则R₂是H。在各个实施例中,如果k是3,则R₂是H。

[0146] 在各个实施例中,本发明涉及一种化合物,其由式I(e)的结构表示:



[0148] 其中

[0149] B环不存在,或是经取代或未经取代的芳香族或杂芳香族环体系(例如,芳基、吡啶)、或经取代或未经取代的 C_3 - C_{10} 环烷基(环丙基、环戊基、环己基)、或经取代或未经取代的 C_3 - C_{10} 杂环(例如,吡咯烷);

[0150] C环是饱和或不饱和的5元杂环(例如,异噁唑、三唑、吡唑、噁二唑、咪唑、噻唑、吡咯、噻吩)、环己烷或环己烯环;

[0151] R_1 是H、经取代或未经取代的 C_1 - C_{10} 直链或支链或 C_3 - C_8 环状烷基(例如,甲基、乙基、丙基、丁基、 CH_2 -CCH、 CH_2 -COOH、 CH_2CH_2COOH)、 $C(O)-R_{10}$ (例如, $C(O)-CH_3$)、 R_8-OH (例如, CH_2-OH)、 $R_8-COO-R_{10}$ (例如, CH_2-COOH 、 $CH_2-COO-CH_3$ 、 $CH_2-COO-CH_2CH_3$ 、 CH_2-CH_2-COOH 、 $CH_2-CH_2-COO-CH_3$ 、 $CH_2-CH_2-COO-CH_2CH_3$)、 R_8-SH 、 R_8-O-R_{10} (例如, $-CH_2-O-CH_3$)、 $R_8-(C_3-C_8$ 环烷基)、 $R_8-(3-8$ 元杂环)、 CF_3 、 NH_2 、 NHR 、 $N(R)_{10}$ 、 $C(O)H$ 、 C_1-C_5 直链或支链 $C(O)-$ 卤代烷基(例如, $C(O)-CF_3$)、 $-C(O)NH_2$ 、 $C(O)NHR$ 、 $C(O)N(R)_{10}$ 、 C_2-C_5 直链或支链经取代或未经取代的烯基(例如, $CH=C(Ph)_2$)、 C_1-C_5 直链或支链或 C_3-C_8 环状卤代烷基、经取代或未经取代的3-8元杂环、经取代或未经取代的芳基(例如,苯基)、或经取代或未经取代的苄基;

[0152] R_2 是H、经取代或未经取代的 C_1 - C_{10} 直链或支链或 C_3 - C_8 环状烷基(例如,甲基、乙基、丙基、 CH_2 -CCH)、F、Cl、Br、I、OH、SH、 R_8-OH (例如, CH_2-OH)、 R_8-SH 、 R_8-O-R_{10} (例如, $-CH_2-O-CH_3$)、 $R_8-(C_3-C_8$ 环烷基)、 $R_8-(3-8$ 元杂环)、 CF_3 、CN、 NO_2 、 $R_8-N(R)_{10}$ 、 $C(O)H$ 、 C_1-C_5 直链或支链 $C(O)-$ 卤代烷基(例如, $C(O)-CF_3$)、 $-C(O)NH_2$ 、 $C(O)NHR$ 、 $C(O)N(R)_{10}$ 、 C_2-C_5 直链或支链经取代或未经取代的烯基(例如, $CH=C(Ph)_2$)、 C_1-C_5 直链或支链或 C_3-C_8 环状卤代烷基、经取代或未经取代的3-8元杂环、经取代或未经取代的芳基(例如,苯基)、或经取代或未经取代的苄基;

[0153] R_3 是H、经取代或未经取代的 C_1 - C_{10} 直链或支链或 C_3 - C_8 环状烷基(例如,甲基、乙基、丙基、 CH_2 -CCH、 $C(H)(OH)(CH_3)$)、F、Cl、Br、I、OH、SH、 R_8-OH (例如, CH_2-OH)、 R_8-SH 、 R_8-O-R_{10} (例如, $-CH_2-O-CH_3$)、 $R_8-(C_3-C_8$ 环烷基)、 $R_8-(3-8$ 元杂环)、 CF_3 、CN、 NO_2 、 NH_2 、 NHR 、 $N(R)_{10}$ 、 $C(O)H$ 、 C_1-C_5 直链或支链 $C(O)-$ 卤代烷基(例如, $C(O)-CF_3$)、 $-C(O)NH_2$ 、 $C(O)NHR$ 、 $C(O)N(R)_{10}$ 、 C_2-C_5 直链或支链经取代或未经取代的烯基(例如, $CH=C(Ph)_2$)、 C_1-C_5 直链或支链或 C_3-C_8 环状卤代烷基、经取代或未经取代的3-8元杂环、经取代或未经取代的芳基(例如,苯基)、或经取代或未经取代的苄基;

[0154] 或 R_2 和 R_3 连接以形成如上所述的环B;

[0155] R_4 是H、经取代或未经取代的 C_1 - C_{10} 直链或支链或 C_3 - C_8 环状烷基(例如,甲基、乙基、丙基、 CH_2 -CCH)、F、Cl、Br、I、OH、SH、 R_8-OH (例如, CH_2-OH)、 R_8-SH 、 R_8-O-R_{10} (例如, $-CH_2-O-$

CH_3)、 R_8 - $(\text{C}_3\text{-C}_8\text{环烷基})$ 、 R_8 - $(3\text{-}8\text{元杂环})$ 、 CF_3 、 CN 、 NO_2 、 NH_2 、 NHR 、 $\text{N}(\text{R})_2$ 、 $\text{R}_8\text{-N}(\text{R}_{10})$ (R_{11}) (例如, $\text{CH}_2\text{-NH}_2$)、 $\text{C}(\text{O})\text{H}$ 、 $\text{C}_1\text{-C}_5$ 直链或支链 $\text{C}(\text{O})$ -卤代烷基(例如, $\text{C}(\text{O})\text{-CF}_3$)、 $\text{-C}(\text{O})\text{NH}_2$ 、 $\text{C}(\text{O})\text{NHR}$ 、 $\text{C}(\text{O})\text{N}(\text{R}_{10})$ (R_{11})、 $\text{C}_2\text{-C}_5$ 直链或支链经取代或未经取代的烯基(例如, $\text{CH}=\text{C}(\text{Ph})_2$)、 $\text{C}_1\text{-C}_5$ 直链或支链或 $\text{C}_3\text{-C}_8$ 环状卤代烷基、经取代或未经取代的3-8元杂环、经取代或未经取代的芳基(例如, 苯基)、或经取代或未经取代的苄基;

[0156] 或 R_3 和 R_4 连接以形成经取代或未经取代的饱和或不饱和的脂肪族或芳香族碳环或杂环3-8元环(例如, 环丙基)、 $\text{C}=\text{O}$ 或 $=\text{N-OH}$;

[0157] R_6 和 R_{60} 各自独立地是 H 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 OH 、 SH 、 $\text{R}_8\text{-OH}$ (例如, $\text{CH}_2\text{-OH}$)、 $\text{R}_8\text{-SH}$ 、 $\text{-R}_8\text{-O-R}_{10}$ (例如, $\text{-CH}_2\text{-O-CH}_3$)、 R_8 - $(\text{C}_3\text{-C}_8\text{环烷基})$ 、 R_8 - $(3\text{-}8\text{元杂环})$ 、 CF_3 、 CD_3 、 OCD_3 、 CN 、 NO_2 、 $\text{-CH}_2\text{CN}$ 、 $\text{-R}_8\text{CN}$ 、 NH_2 、 NHR 、 $\text{N}(\text{R})_2$ 、 $\text{R}_8\text{-N}(\text{R}_{10})$ (R_{11})、 $\text{R}_9\text{-R}_8\text{-N}(\text{R}_{10})$ (R_{11})、 $\text{B}(\text{OH})_2$ 、 $\text{-OC}(\text{O})\text{CF}_3$ 、 $\text{-OCH}_2\text{Ph}$ 、 $\text{NHC}(\text{O})\text{-R}_{10}$ (例如, $\text{NHC}(\text{O})\text{CH}_3$)、 $\text{NHC}(\text{O})\text{-N}(\text{R}_{10})$ (R_{11}) (例如, $\text{NHC}(\text{O})\text{N}(\text{CH}_3)_2$)、 COOH 、 $\text{-C}(\text{O})\text{Ph}$ 、 $\text{C}(\text{O})\text{O-R}_{10}$ (例如, $\text{C}(\text{O})\text{O-CH}_3$)、 $\text{R}_8\text{-C}(\text{O})\text{-R}_{10}$ (例如, $\text{CH}_2\text{C}(\text{O})\text{CH}_3$)、 $\text{C}(\text{O})\text{H}$ 、 $\text{C}(\text{O})\text{-R}_{10}$ (例如, $\text{C}(\text{O})\text{-CH}_3$ 、 $\text{C}(\text{O})\text{-CH}_2\text{CH}_3$ 、 $\text{C}(\text{O})\text{-CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$)、 $\text{C}_1\text{-C}_5$ 直链或支链 $\text{C}(\text{O})$ -卤代烷基(例如, $\text{C}(\text{O})\text{-CF}_3$)、 $\text{-C}(\text{O})\text{NH}_2$ 、 $\text{C}(\text{O})\text{NHR}$ 、 $\text{C}(\text{O})\text{N}(\text{R}_{10})$ (R_{11}) (例如, $\text{C}(\text{O})\text{N}(\text{CH}_3)_2$)、 SO_2R 、 $\text{SO}_2\text{N}(\text{R}_{10})$ (R_{11}) (例如, $\text{SO}_2\text{N}(\text{CH}_3)_2$ 、 $\text{SO}_2\text{NHC}(\text{O})\text{CH}_3$)、 $\text{C}_1\text{-C}_5$ 直链或支链经取代或未经取代的烷基(例如, 甲基、乙基、丙基、异丙基、 t-Bu 、异丁基、戊基、苄基)、经取代或未经取代的 $\text{C}_3\text{-C}_8$ 环烷基(例如, 环丙基、环戊基)、 $\text{C}_2\text{-C}_5$ 直链或支链经取代或未经取代的烯基(例如, 乙烯基)、 $\text{C}_2\text{-C}_5$ 直链或支链经取代或未经取代的炔基(例如, 乙炔基、 CC-CH_2 -环丁基、 CC-CF_3)、 $\text{C}_1\text{-C}_5$ 直链或支链或 $\text{C}_3\text{-C}_8$ 环状卤代烷基(例如, CF_3 、 CF_2CH_3 、 CH_2CF_3 、 $\text{CF}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ 、 $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CF}_3$ 、 $\text{CF}_2\text{CH}(\text{CH}_3)_2$ 、 $\text{CF}(\text{CH}_3)\text{-CH}(\text{CH}_3)_2$)、经取代或未经取代的 $\text{C}_1\text{-C}_5$ 直链或支链或 $\text{C}_3\text{-C}_8$ 环状烷氧基(例如, 甲氧基、乙氧基、丙氧基、异丙氧基、 $\text{O-CH}_2\text{-CF}_3$)、任选地其中所述烷氧基中的至少一个亚甲基(CH_2)被氧原子取代、 $\text{C}_1\text{-C}_5$ 直链或支链硫代烷氧基、 $\text{C}_1\text{-C}_5$ 直链或支链卤代烷氧基(例如, OCF_3 、 OCHF_2)、经取代或未经取代的3-8元杂环(例如, 噻吩、噁唑、噁二唑、咪唑、呋喃、三唑、四唑、吡啶、嘧啶、吡嗪)、经取代或未经取代的芳基(例如, 苯基)、经取代或未经取代的苄基;

[0158] X_6 是 O 、 NH 、 NR 或 CH_2 ;

[0159] $\text{G}=\text{X}$ 是 $\text{C}=\text{O}$ 或 SO_2 , 或 $\text{G}(=\text{X})\text{-X}_6\text{-R}_1$ 是四唑部分;

[0160] R_8 是 $[\text{CH}_2]_p$,

[0161] 其中 p 介于1与10之间;

[0162] R_9 是 $[\text{CH}]_q$ 、 $[\text{C}]_q$,

[0163] 其中 q 介于2与10之间;

[0164] R_{10} 和 R_{11} 各自独立地是 H 、 CN 、 $\text{C}_1\text{-C}_5$ 直链或支链烷基(例如, 甲基、乙基)、 $\text{C}(\text{O})\text{R}$ (例如, $\text{C}(\text{O})\text{(OCH}_3\text{)})$ 或 $\text{S}(\text{O})_2\text{R}$;

[0165] 或 R_{10} 和 R_{11} 连接以形成经取代或未经取代的3-8元杂环;

[0166] R 是 H 、 $\text{C}_1\text{-C}_5$ 直链或支链烷基(例如, 甲基、乙基)、 $\text{C}_1\text{-C}_5$ 直链或支链烷氧基(例如, 甲氧基)、苯基、芳基或杂芳基, 或两个偕 R 取代基连接在一起以形成5元或6元杂环; 并且

[0167] K 是介于1与3之间的整数;

[0168] 或其农用化学上可接受的盐、两性离子(内盐)、立体异构体、互变异构体、水合物、 N -氧化物、反向酰胺类似物、同位素变体(例如, 氘代类似物)或其任何组合。

[0169] 在各个实施例中, 如果 k 不是1, 则 R_2 是 H 。在各个实施例中, 如果 k 是2, 则 R_2 是 H 。在各

个实施例中,如果k是3,则R₂是H。

[0170] 在各个实施例中,式I或I(a)-I(e)化合物不是:6-(2-氨基丙氧基)吡啶甲酸。在各个实施例中,所述化合物不是6-(2-氨基丙氧基)吡嗪-2-羧酸。在各个实施例中,所述化合物不是2-(2-氨基丙氧基)嘧啶-4-羧酸。在各个实施例中,所述化合物不是6-(2-氨基丙氧基)-3-氟吡啶甲酸。在各个实施例中,所述化合物不是6-(2-氨基丙氧基)-4-氟吡啶甲酸。在各个实施例中,所述化合物不是6-(2-氨基丁氧基)吡啶甲酸。在各个实施例中,所述化合物不是6-((2-氨基环戊基)氧基)吡啶甲酸。在各个实施例中,所述化合物不是6-(2-氨基丙氧基)吡啶甲酸甲酯。在各个实施例中,所述化合物不是6-(2-氨基丙氧基)吡啶甲酸乙酯。

[0171] 应当理解,根据本发明的化合物也可以以其内盐形式(即,两性离子)存在。因此,在溶液中,将在“母体”分子与其两性离子形式之间建立化学平衡。

[0172] 在各个实施例中,所述化合物是除草剂。在各个实施例中,所述化合物是除草化合物。在各个实施例中,所述化合物是杀虫剂。在各个实施例中,所述化合物是杀虫化合物。

[0173] 在各个实施例中,本发明涉及一种化合物,其由以下结构中的任何结构表示:

[0174] 表1:

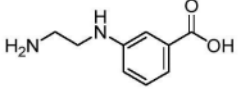
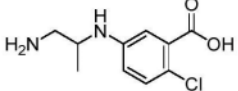
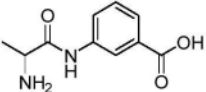
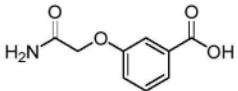
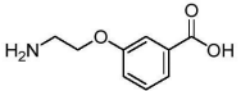
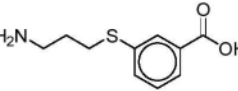
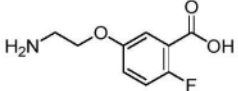
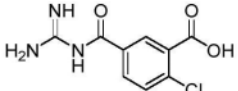
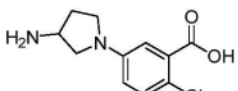
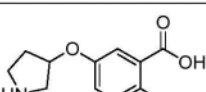
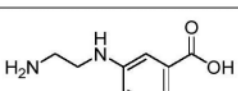
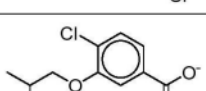
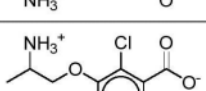
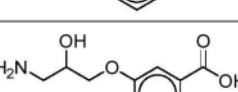
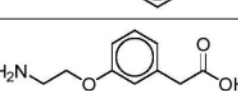
[0175]

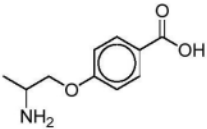
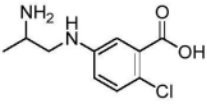
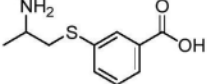
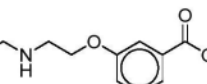
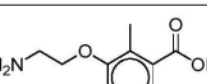
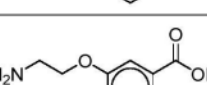
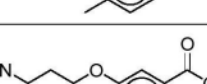

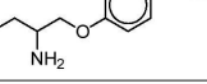
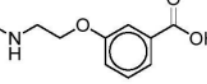
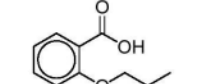
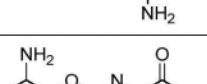
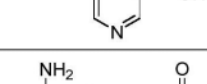
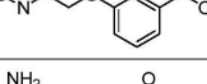
化合物编号	结构
101	
102	
103	
104	
105	
106	
107	

[0176]

108	
109	
110	
111	
112	
113	
114	
115	
116	
117	
118	
119	
120	
121	
122	

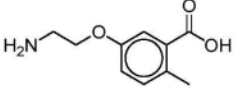
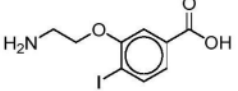
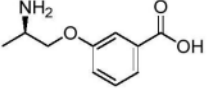
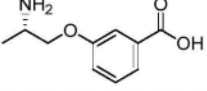
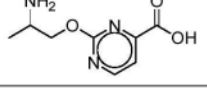
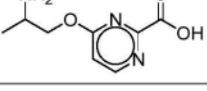
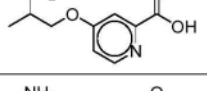
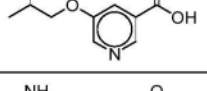
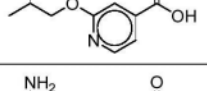
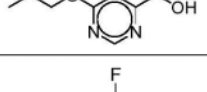
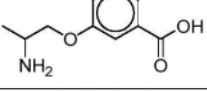
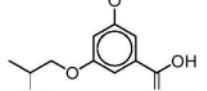
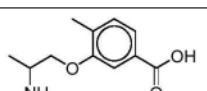
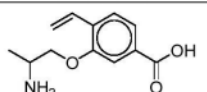
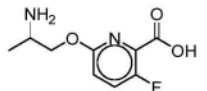
[0177]

123	
124	
125	
126	
127	
128	
129	
130	
131	
132	
133	
134	
135	
136	
137	

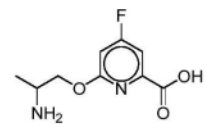
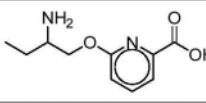
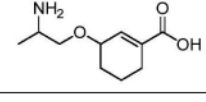
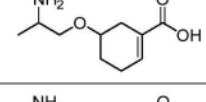
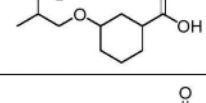
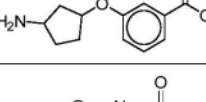
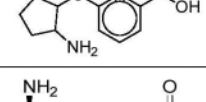
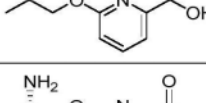
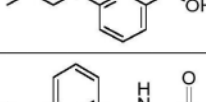
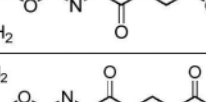
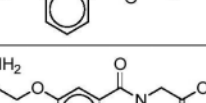
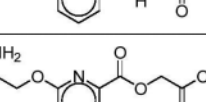
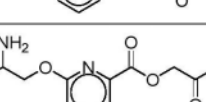
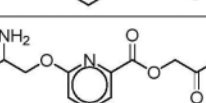
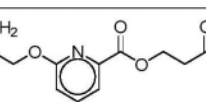

138	
139	
140	
141	
142	
143	
144	
145	
146	
147	
148	
149	
150	
151	

[0178]

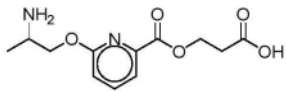
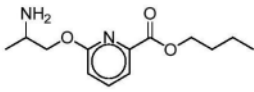
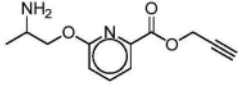
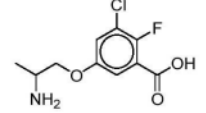
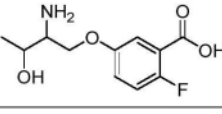
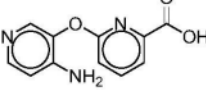
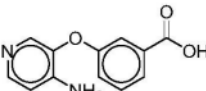
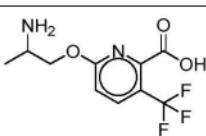
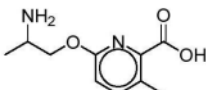
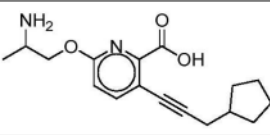
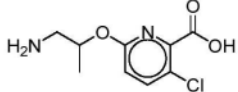
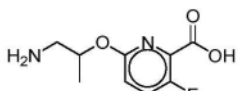
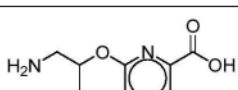
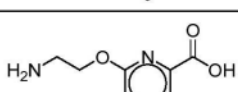
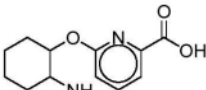
[0179]

152	
153	
154	
155	
156	
157	
158	
159	
160	
161	
162	
163	
164	
165	
166	

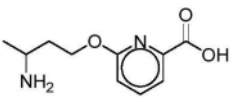
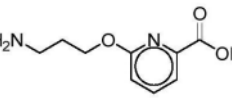
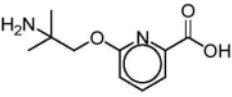
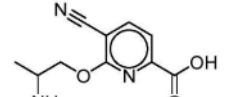
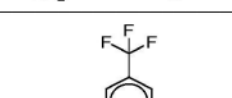
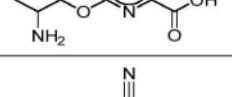
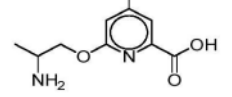
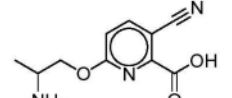
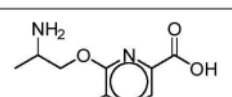
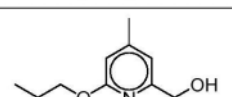
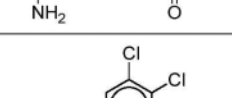
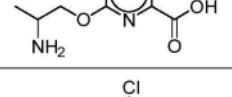
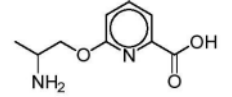
[0180]

167	
168	
169	
170	
171	
172	
173	
174	
175	
176	
177	
178	
179	
180	
181	
182	

[0181]

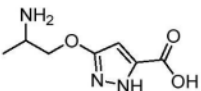
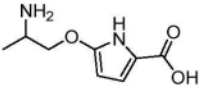
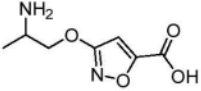
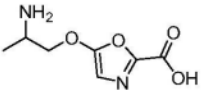
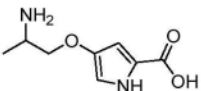
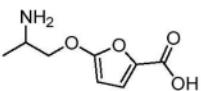
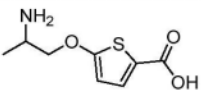
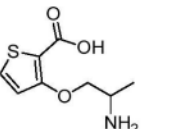
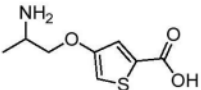
183	
184	
185	
186	
187	
188	
189	
190	
191	
192	
193	
194	
195	
196	
197	

[0182]

198	
199	
200	
201	
202	
203	
204	
205	
206	
207	
208	
209	
210	

[0183]

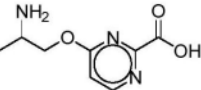
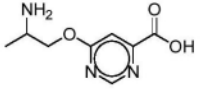
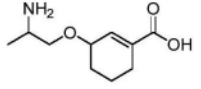
211	
212	
213	
214	
215	
216	
218	
219	
400	
401	
402	
403	
404	
405	
406	

407	
408	
409	
410	
[0184] 411	
412	
413	
414	
415	

[0185] 在各个实施例中,所述化合物是除草剂。在各个实施例中,所述化合物是杀虫剂。
在各个实施例中,所述化合物是除草化合物。在各个实施例中,所述化合物是杀虫化合物。

[0186] 在各个实施例中,本发明涉及一种化合物,其由以下结构中的任何结构表示:

[0187] 表2:

化合物编号	结构
[0188] 157	
161	
169	

170	
171	
174	
175	
176	
177	
179	
180	
181	
182	
183	
184	
185	
188	
190	
191	

[0189]

192	
193	
194	
195	
196	
197	
198	
199	
200	
201	
202	
203	
204	
205	

[0190]

[0191]

206	
207	
208	
209	
210	
211	
212	
213	
215	
216	

[0192] 在各个实施例中,所述化合物是除草剂。在各个实施例中,所述化合物是杀虫剂。在各个实施例中,所述化合物是除草化合物。在各个实施例中,所述化合物是杀虫化合物。

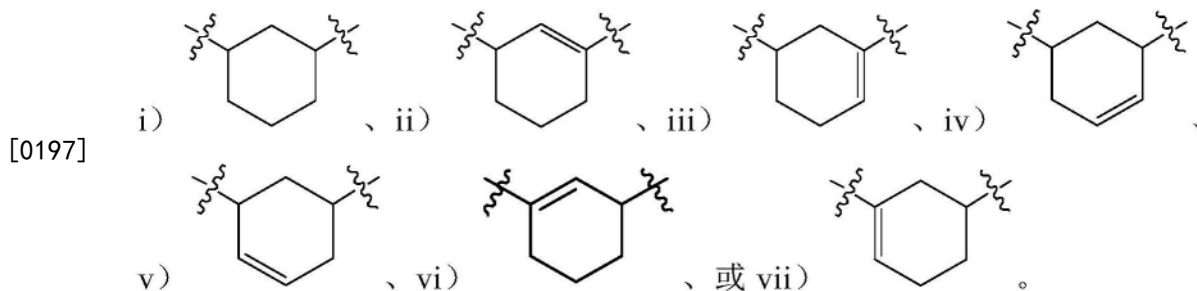
[0193] 在各个实施例中,本发明涉及由表1或2的结构中的任何结构表示的化合物或其农用化学组合物在控制不期望的植物的生长中的用途;每个结构均表示根据本发明的单独实施例。

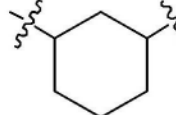
[0194] 在一些实施例中,式I、I(a)、I(b)和/或I(c)的A不存在。在一些实施例中,A是经取代或未经取代的单一或稠合的芳香族或杂芳香族环体系、或经取代或未经取代的单一或稠合的C₃-C₁₀环烷基、或经取代或未经取代的单一或稠合的C₃-C₁₀杂环;每一者均是本发明的单独实施例。在一些实施例中,A是单一芳香族环体系。在一些实施例中,A是单一杂芳香族环。在一些实施例中,A是单一C₃-C₁₀环烷基。在一些实施例中,A是环丙基。在一些实施

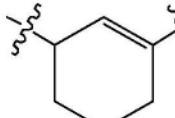
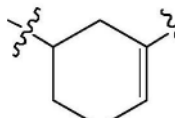
例中,A是单一 C_3-C_{10} 杂环。在一些实施例中,A是稠合的芳香族环体系。在一些实施例中,A是稠合的杂芳香族环体系。在一些实施例中,A是稠合的 C_3-C_{10} 环烷基。在一些实施例中,A是稠合的 C_3-C_{10} 杂环体系。在其它实施例中,A是环丁基、环戊基、环己基、环庚基;每一者均表示根据本发明的单独实施例。在一些实施例中,A环可以进一步被选自以下的至少一个取代基取代: $C(O)-CH_3$ 、 C_1-C_5 直链或支链经取代或未经取代的烷基、甲基、乙基、丙基、异丙基、*t*-Bu、异丁基、戊基、苜基、F、Cl、Br、I、OH、SH、 C_1-C_5 直链或支链烷基、 C_3-C_8 环烷基(例如,环戊基)、 C_2-C_5 直链或支链烯基(例如,乙烯基)、 C_2-C_5 直链或支链炔基、烷基酰胺(即, $C(O)NH-R$ 或 $NHC(O)-R$)、直链、支链或环状烷氧基、COOH、烷基酯(即, $COOR$ 或 $OC(O)-R$)、OH、COO(R)、 $N(R)_2$ 、 NH_2 、 CF_3 、芳基、苯基、杂芳基、 $R_8-(C_3-C_8$ 环烷基)、卤代苯基、CN、 NO_2 或其任何组合;每一者均表示根据本发明的单独实施例。

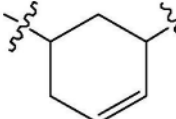
[0195] 在一些实施例中,式I、I(a)、I(b)、I(c)、I(d)和/或I(e)的B不存在。在一些实施例中,环B是经取代或未经取代的单一或稠合的芳香族或杂芳香族环体系、或经取代或未经取代的单一或稠合的 C_3-C_{10} 环烷基、或经取代或未经取代的单一或稠合的 C_3-C_{10} 杂环;每一者均表示根据本发明的单独实施例。在一些实施例中,B是单一芳香族环体系(即,芳烃)。在一些实施例中,B是单一杂芳香族环(例如,吡啶)。在一些实施例中,B是单一 C_3-C_{10} 环烷基(例如,环丙基、环戊基、环己基)。在一些实施例中,B是单一 C_3-C_{10} 杂环(例如,吡咯烷基)。在一些实施例中,B是稠合的芳香族环体系。在一些实施例中,B是稠合的杂芳香族环体系。在一些实施例中,B是稠合的 C_3-C_{10} 环烷基。在一些实施例中,B是稠合的 C_3-C_{10} 杂环体系。在一些实施例中,B是单一 C_3-C_{10} 环烷基。在一些实施例中,B是环戊基。在一些实施例中,B是环己基。在一些实施例中,B是环丙基。在一些实施例中,B可以进一步被选自以下的至少一个取代基取代:F、Cl、Br、I、OH、SH、 R_8-OH 、 R_8-SH 、 $-R_8-O-R_{10}$ 、 CF_3 、CN、 NO_2 、 NH_2 、NHR、 $N(R)_2$ 、 $R_8-N(R_{10})(R_{11})$ 、 $-OC(O)CF_3$ 、 $-OCH_2Ph$ 、 $NHC(O)OBz$ 、 $-NHC(O)-R_{10}$ 、COOH、 $-C(O)Ph$ 、 $C(O)O-R_{10}$ 、 $C(O)H$ 、 $C(O)-R_{10}$ 、 C_1-C_5 直链或支链 $C(O)-$ 卤代烷基、 $-C(O)NH_2$ 、 $C(O)NHR$ 、 $C(O)N(R_{10})(R_{11})$ 、 SO_2R 、 $SO_2N(R_{10})(R_{11})$ 、 C_1-C_5 直链或支链或 C_3-C_8 环状卤代烷基、 C_1-C_5 直链或支链或 C_3-C_8 环状烷氧基、 C_1-C_5 直链或支链硫代烷氧基、 C_1-C_5 直链或支链卤代烷氧基、 C_1-C_5 直链或支链烷氧基烷基、经取代或未经取代的 C_3-C_8 环烷基、经取代或未经取代的3-8元杂环、经取代或未经取代的芳基、 $C(O)-CH_3$ 、 C_1-C_5 直链或支链经取代或未经取代的烷基、甲基、乙基、丙基、异丙基、*t*-Bu、异丁基、戊基、苜基、 C_2-C_5 直链或支链烯基(例如,乙烯基)、 C_2-C_5 直链或支链炔基、烷基酯(即, $COOR$ 或 $OC(O)-R$)、芳基、苯基、 $R_8-(C_3-C_8$ 环烷基)和卤代苯基;每一者均表示根据本发明的单独实施例。

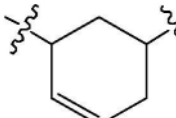
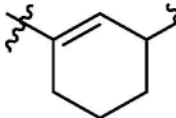
[0196] 在一些实施例中,式I(b)或I(e)的C环是饱和或不饱和的5元杂环。在一些实施例中,C是噁唑。在一些实施例中,C是三唑。在一些实施例中,C是吡唑。在一些实施例中,C是噁二唑。在一些实施例中,C是咪喃。在一些实施例中,C是噻唑。在一些实施例中,C是吡咯。在一些实施例中,C是噻吩。在一些实施例中,C是噁唑、三唑、吡唑、噁二唑、咪喃、噻唑、吡咯、噻吩;每一者均表示根据本发明的单独实施例。在一些实施例中,C环是环己烷。在一些实施例中,C环是环己烯。在一些实施例中,C环由以下结构中的任何结构表示:

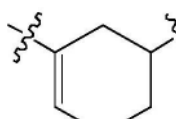
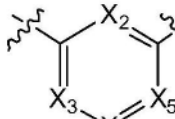


[0198] 在一些实施例中,C环由以下结构表示:  在一些实施例中,C环由以下

结构表示:  在一些实施例中,C环由以下结构表示:  在一些实

施例中,C环由以下结构表示:  在一些实施例中,C环由以下结构表示:

 在一些实施例中,C环由以下结构表示:  在一些实施例中,C

环由以下结构表示:  在一些实施例中,C环由以下结构表示:  ,

其中X₂、X₃、X₄和X₅各自独立地是N或C。在各个实施例中,X₂至X₅中的至少一者是N。在各个实施例中,X₂至X₅中的至少两者是N。在各个实施例中,X₂是N并且X₃、X₄和X₅是C。在各个实施例中,X₂和X₅是N并且X₃和X₄是C。在各个实施例中,X₃和X₅是N并且X₂和X₄是C。

[0199] 在一些实施例中,式I和/或I (a) - I (e) 化合物的R₁是H。在一些实施例中,R₁是经取代或未经取代的C₁-C₁₀直链或支链或C₃-C₈环状烷基。在一些实施例中,R₁是未经取代的C₁-C₁₀直链或支链烷基。在一些实施例中,R₁是甲基。在一些实施例中,R₁是乙基。在一些实施例中,R₁是丙基。在一些实施例中,R₁是异丙基。在一些实施例中,R₁是丁基。在一些实施例中,R₁是丙基、丁基、t-Bu、异丁基、戊基、苄基;每一者均表示根据本发明的单独实施例。在一些实施例中,R₁是经取代的C₁-C₁₀直链或支链烷基。在一些实施例中,R₁是CH₂-CCH。在一些实施例中,R₁是CH₂-COOH。在一些实施例中,R₁是CH₂CH₂COOH。在一些实施例中,R₁是经取代或未经取代的C₃-C₈环状烷基。在一些实施例中,R₁是C(O)-R₁₀。在一些实施例中,R₁是C(O)-CH₃。在一些实施例中,R₁是R₈-OH。在一些实施例中,R₁是CH₂-OH。在一些实施例中,R₁是R₈-COO-R₁₀。在一些实施例中,R₁是CH₂-COOH。在一些实施例中,R₁是CH₂-COO-CH₃。在一些实施例中,R₁是CH₂-COO-CH₂CH₃。在一些实施例中,R₁是CH₂-CH₂-COOH。在一些实施例中,R₁是CH₂-CH₂-COO-CH₃。在一些实施例中,R₁是CH₂-CH₂-COO-CH₂CH₃。R₈-SH、-R₈-O-R₁₀、-CH₂-O-CH₃、R₈-(C₃-C₈环烷基)、R₈-(3-8元杂环)、CF₃、NH₂、NHR、N(R)₂、R₈-N(R₁₀)(R₁₁)、C(O)H、C₁-C₅直链或支链C(O)-卤

代烷基、C(O)-CF₃、-C(O)NH₂、C(O)NHR、C(O)N(R₁₀)(R₁₁)、C₂-C₅直链或支链经取代或未经取代的烯基、CH=C(Ph)₂、C₁-C₅直链或支链或C₃-C₈环状卤代烷基、经取代或未经取代的3-8元杂环、经取代或未经取代的芳基、苯基、或经取代或未经取代的苄基；每一者均表示根据本发明的单独实施例。在一些实施例中，R₁是H、经取代或未经取代的C₁-C₁₀直链或支链或C₃-C₈环状烷基、C(O)-R₁₀、R₈-OH、R₈-COO-R₁₀、或C₂-C₅直链或支链烯基。在一些实施例中，所述烷基是甲基、乙基、丙基、丁基、CH₂-CCH、CH₂-COOH或CH₂CH₂COOH。在一些实施例中，所述C(O)-R₁₀是C(O)-CH₃。在一些实施例中，所述烯基是乙烯基。在一些实施例中，所述R₈-OH是CH₂-OH。在一些实施例中，所述R₈-COO-R₁₀是CH₂-COOH、CH₂-COO-CH₃、CH₂-COO-CH₂CH₃、CH₂-CH₂-COOH、CH₂-CH₂-COO-CH₃或CH₂-CH₂-COO-CH₂CH₃。在一些实施例中，R₁可以进一步被选自以下的至少一个取代取代：F、Cl、Br、I、C₁-C₅直链或支链烷基、C₂-C₅直链或支链烯基（例如，乙烯基）、C₂-C₅直链或支链炔基、烷基酰胺（即，C(O)NH-R或NHC(O)-R）、COOH、烷基酯（即，COOR或OC(O)-R）、OH、烷氧基、N(R)₂、NH₂、CF₃、芳基、苯基、杂芳基、C₃-C₈环烷基、R₈-(C₃-C₈环烷基)、卤代苯基、CN和NO₂；每一者均表示根据本发明的单独实施例。

[0200] 在一些实施例中，式I和/或I(a)-I(e)化合物的R₂是H。在一些实施例中，R₂是经取代或未经取代的C₁-C₁₀直链或支链或C₃-C₈环状烷基。在一些实施例中，R₂是未经取代的C₁-C₁₀直链或支链烷基。在一些实施例中，R₂是甲基、乙基、丙基、异丙基、丁基、t-Bu、异丁基、戊基、苄基；每一者均表示根据本发明的单独实施例。在一些实施例中，R₂是经取代的C₁-C₁₀直链或支链烷基。在一些实施例中，R₂是经取代或未经取代的C₃-C₈环状烷基。在一些实施例中，R₂是F、Cl、Br或I；每一者均表示根据本发明的单独实施例。在一些实施例中，R₂是OH、SH、R₈-OH、CH₂-OH、R₈-SH、-R₈-O-R₁₀、-CH₂-O-CH₃、R₈-(C₃-C₈环烷基)、R₈-(3-8元杂环)、CF₃、CN、NO₂、R₈-N(R₁₀)(R₁₁)、C(O)H、C₁-C₅直链或支链C(O)-卤代烷基、C(O)-CF₃、-C(O)NH₂、C(O)NHR、C(O)N(R₁₀)(R₁₁)、C₂-C₅直链或支链经取代或未经取代的烯基、CH=C(Ph)₂、C₁-C₅直链或支链或C₃-C₈环状卤代烷基、经取代或未经取代的3-8元杂环、经取代或未经取代的芳基、苯基、或经取代或未经取代的苄基；每一者均表示根据本发明的单独实施例。在一些实施例中，R₂是H、经取代或未经取代的C₁-C₁₀直链或支链或C₃-C₈环状烷基。在一些实施例中，R₂可以进一步被选自以下的至少一个取代取代：F、Cl、Br、I、C₁-C₅直链或支链烷基、C₂-C₅直链或支链烯基（例如，乙烯基）、C₂-C₅直链或支链炔基、烷基酰胺（即，C(O)NH-R或NHC(O)-R）、COOH、烷基酯（即，COOR或OC(O)-R）、OH、烷氧基、N(R)₂、NH₂、CF₃、芳基、苯基、杂芳基、C₃-C₈环烷基、R₈-(C₃-C₈环烷基)、卤代苯基、CN和NO₂；每一者均表示根据本发明的单独实施例。

[0201] 在一些实施例中，式I和/或I(a)-I(e)化合物的R₃是H。在一些实施例中，R₃是经取代或未经取代的C₁-C₁₀直链或支链或C₃-C₈环状烷基。在一些实施例中，R₃是未经取代的C₁-C₁₀直链或支链烷基。在一些实施例中，R₃是甲基、乙基、丙基、异丙基、丁基、t-Bu、异丁基、戊基、苄基。在一些实施例中，R₃是经取代的C₁-C₁₀直链或支链烷基。在一些实施例中，R₃是CH₂-CCH、C(H)(OH)(CH₃)；每一者均表示根据本发明的单独实施例。在一些实施例中，R₃是经取代或未经取代的C₃-C₈环状烷基。在一些实施例中，R₃是R₈-N(R₁₀)(R₁₁)。在一些实施例中，R₃是CH₂-NH₂。在一些实施例中，R₃是F、Cl、Br、I、OH、SH、R₈-OH、CH₂-OH、R₈-SH、-R₈-O-R₁₀、-CH₂-O-CH₃、R₈-(C₃-C₈环烷基)、R₈-(3-8元杂环)、CF₃、CN、NO₂、NH₂、NHR、N(R)₂、C(O)H、C₁-C₅直链或支链C(O)-卤代烷基、C(O)-CF₃、-C(O)NH₂、C(O)NHR、C(O)N(R₁₀)(R₁₁)、C₂-C₅直链或支链经取代或未经取代的烯基、C₁-C₅直链或支链或C₃-C₈环状卤代烷基、经取代或未经取代的3-8元杂

环、经取代或未经取代的芳基、苯基、或经取代或未经取代的苄基；每一者均表示根据本发明的单独实施例。在一些实施例中， R_3 是H、经取代或未经取代的 C_1 - C_{10} 直链或支链、或 C_3 - C_8 环状烷基、或 R_8 -N(R_{10}) (R_{11})。在一些实施例中， R_3 可以进一步被选自以下的至少一个取代取代：F、Cl、Br、I、 C_1 - C_5 直链或支链烷基、 C_2 - C_5 直链或支链烯基（例如，乙烯基）、 C_2 - C_5 直链或支链炔基、烷基酰胺（即，C(O)NH-R或NHC(O)-R）、COOH、烷基酯（即，COOR或OC(O)-R）、OH、烷氧基、N(R)₂、NH₂、CF₃、芳基、苯基、杂芳基、 C_3 - C_8 环烷基、 R_8 -(C_3 - C_8 环烷基)、卤代苯基、CN和NO₂；每一者均表示根据本发明的单独实施例。

[0202] 在一些实施例中，式I和/或I(a)-I(e)化合物的 R_2 和 R_3 连接以形成如上所述的环B。在一些实施例中， R_2 和 R_3 连接以形成经取代或未经取代的饱和或不饱和的脂肪族（例如，环戊基、环己基）或芳香族（例如，吡啶）碳环或杂环3-8元环（例如，吡咯烷）。在一些实施例中， R_2 和 R_3 连接以形成未经取代的饱和的脂肪族环。在一些实施例中， R_2 和 R_3 连接以形成环戊基。在一些实施例中， R_2 和 R_3 连接以形成环己基。在一些实施例中， R_2 和 R_3 连接以形成杂芳香族环。在一些实施例中， R_2 和 R_3 连接以形成吡啶。在一些实施例中， R_2 和 R_3 连接以形成杂环3-8元环。在一些实施例中， R_2 和 R_3 连接以形成吡咯烷。在一些实施例中， R_2 和 R_3 连接以形成 C_3 - C_8 经取代或未经取代的脂肪族碳环或杂环。在一些实施例中， R_2 和 R_3 连接以形成 C_4 - C_8 经取代的脂肪族环。在一些实施例中， R_2 和 R_3 连接以形成 C_3 - C_8 经取代的脂肪族环。在一些实施例中， R_2 和 R_3 连接以形成4-8元经取代或未经取代的杂环。在一些实施例中， R_2 和 R_3 连接以形成3-8元经取代或未经取代的杂环。

[0203] 在一些实施例中，式I和/或I(a)-I(e)化合物的 R_4 是H。在一些实施例中， R_4 是经取代或未经取代的 C_1 - C_{10} 直链或支链或 C_3 - C_8 环状烷基。在一些实施例中， R_4 是未经取代的 C_1 - C_{10} 直链或支链烷基。在一些实施例中， R_4 是经取代的 C_1 - C_{10} 直链或支链烷基。在一些实施例中， R_4 是经取代或未经取代的 C_3 - C_8 环状烷基。在一些实施例中， R_4 是甲基、乙基、丙基、异丙基、丁基、t-Bu、异丁基、戊基、苄基；每一者均表示根据本发明的单独实施例。在一些实施例中， R_4 是 R_8 -N(R_{10}) (R_{11})。在一些实施例中， R_4 是CH₂-NH₂。在一些实施例中， R_4 是F、Cl、Br、I、OH、SH、 R_8 -OH、CH₂-OH、 R_8 -SH、- R_8 -O- R_{10} 、-CH₂-O-CH₃、 R_8 -(C_3 - C_8 环烷基)、 R_8 - (3-8元杂环)、CF₃、CN、NO₂、NH₂、NHR、N(R)₂、 R_8 -N(R_{10}) (R_{11})、C(O)H、 C_1 - C_5 直链或支链C(O)-卤代烷基、C(O)-CF₃、-C(O)NH₂、C(O)NHR、C(O)N(R_{10}) (R_{11})、 C_2 - C_5 直链或支链经取代或未经取代的烯基、CH=C(Ph)₂、 C_1 - C_5 直链或支链或 C_3 - C_8 环状卤代烷基、经取代或未经取代的3-8元杂环、经取代或未经取代的芳基、苯基、或经取代或未经取代的苄基；每一者均表示根据本发明的单独实施例。在一些实施例中， R_4 是H、经取代或未经取代的 C_1 - C_{10} 直链或支链或 C_3 - C_8 环状烷基。在一些实施例中， R_4 是 R_8 -N(R_{10}) (R_{11})。在一些实施例中， R_4 是CH₂-NH₂。在一些实施例中， R_4 可以进一步被选自以下的至少一个取代取代：F、Cl、Br、I、 C_1 - C_5 直链或支链烷基、 C_2 - C_5 直链或支链烯基（例如，乙烯基）、 C_2 - C_5 直链或支链炔基、烷基酰胺（即，C(O)NH-R或NHC(O)-R）、COOH、烷基酯（即，COOR或OC(O)-R）、OH、烷氧基、N(R)₂、NH₂、CF₃、芳基、苯基、杂芳基、 C_3 - C_8 环烷基、 R_8 -(C_3 - C_8 环烷基)、卤代苯基、CN和NO₂；每一者均表示根据本发明的单独实施例。

[0204] 在一些实施例中，式I和/或I(a)-I(e)化合物的 R_3 和 R_4 连接以形成经取代或未经取代的饱和或不饱和的脂肪族或芳香族碳环或杂环3-8元环。在一些实施例中， R_3 和 R_4 连接以形成经取代或未经取代的饱和脂肪族环。在一些实施例中， R_3 和 R_4 连接以形成环丙基环。在一些实施例中， R_3 和 R_4 连接以形成经取代或未经取代的不饱和的脂肪族环。在一些实施例

中, R_3 和 R_4 连接以形成经取代或未经取代的芳香族环。在一些实施例中, R_3 和 R_4 连接以形成经取代或未经取代的杂环。在一些实施例中, R_3 和 R_4 连接以形成 $=N-OH$ 。在一些实施例中, R_3 和 R_4 连接以形成 $C=O$ 。

[0205] 在一些实施例中, 式I、I (a) 和I (b) 化合物的 R_5 是H。在一些实施例中, R_5 是OH。在一些实施例中, R_5 是SH。在一些实施例中, R_5 是 $-NH_2$ 。在一些实施例中, R_5 是 $-NHNH_2$ 。在一些实施例中, R_5 是NHR。在一些实施例中, R_5 是 $N(R_{10})(R_{11})$ 。在一些实施例中, R_5 是 $N(H)CH_3$ 。在一些实施例中, R_5 是 $N(H)CH_2CH_3$ 。在一些实施例中, R_5 是 $R_8-N(R_{10})(R_{11})$ 。在一些实施例中, R_5 是 CH_2-NH_2 。在一些实施例中, R_2 和 R_5 连接以形成经取代或未经取代的4-8元杂环。在一些实施例中, R_2 和 R_5 连接以形成吡咯烷。在一些实施例中, R_5 是OH、 NH_2 、 $N(R_{10})(R_{11})$; 每一者均表示根据本发明的单独实施例。在一些实施例中, R_5 是 $N(H)CH_3$ 或 $N(H)CH_2CH_3$ 。在一些实施例中, R_5 是 $R_8-N(R_{10})(R_{11})$ 。在一些实施例中, R_5 是 CH_2-NH_2 。

[0206] 在一些实施例中, 式I和I (a) -I (e) 化合物的 R_6 是H。在一些实施例中, R_6 是F。在一些实施例中, R_6 是Cl。在一些实施例中, R_6 是Br。在一些实施例中, R_6 是I。在一些实施例中, R_6 是CN。在一些实施例中, R_6 是 C_1-C_5 直链或支链经取代或未经取代的烷基。在一些实施例中, R_6 是 C_1-C_5 直链或支链未经取代的烷基。在一些实施例中, R_6 是 C_1-C_5 直链或支链经取代的烷基。在一些实施例中, R_6 是甲基、乙基、丙基、异丙基、t-Bu、异丁基、戊基、苄基; 每一者均表示根据本发明的单独实施例。在一些实施例中, R_6 是 C_2-C_5 直链或支链经取代或未经取代的烯基。在一些实施例中, R_6 是 C_2-C_5 直链或支链未经取代的烯基。在一些实施例中, R_6 是 C_2-C_5 直链或支链经取代的烯基。在一些实施例中, R_6 是乙烯基。在一些实施例中, R_6 是 C_1-C_5 直链或支链或 C_3-C_8 环状卤代烷基。在一些实施例中, R_6 是 CF_3 。在一些实施例中, R_6 是 C_1-C_5 直链或支链或 C_3-C_8 环状烷氧基。在一些实施例中, R_6 是 C_2-C_5 直链或支链经取代或未经取代的炔基。在一些实施例中, R_6 是 $CC-CH_2$ -环丁基。在一些实施例中, R_6 是 $CC-CF_3$ 。在一些实施例中, R_6 是经取代或未经取代的 C_1-C_5 直链或支链烷氧基。在一些实施例中, R_6 是甲氧基、乙氧基、丙氧基、异丙氧基; 每一者均表示根据本发明的单独实施例。在一些实施例中, R_6 是甲氧基。在一些实施例中, R_6 是 $O-CH_2-CF_3$ 。在一些实施例中, R_6 是 C_1-C_5 直链或支链或 C_3-C_8 环状烷氧基, 其中所述烷氧基中的至少一个亚甲基(CH_2)被氧原子替代。在一些实施例中, R_6 是经取代或未经取代的3-8元杂环。在一些实施例中, R_6 是噁吩、噁唑、噁二唑、咪唑、呋喃、三唑、四唑、吡啶、嘧啶或吡嗪; 每一者均表示根据本发明的单独实施例。在一些实施例中, R_6 是OH、SH、 R_8-OH 、 CH_2-OH 、 R_8-SH 、 $-R_8-O-R_{10}$ 、 $-CH_2-O-CH_3$ 、 $R_8-(C_3-C_8$ 环烷基)、 $R_8-(3-8$ 元杂环)、 CF_3 、 CD_3 、 OCD_3 、 CN 、 NO_2 、 $-CH_2CN$ 、 $-R_8CN$ 、 NH_2 、NHR、 $N(R)_2$ 、 $R_8-N(R_{10})(R_{11})$ 、 $R_9-R_8-N(R_{10})(R_{11})$ 、 $B(OH)_2$ 、 $-OC(O)CF_3$ 、 $-OCH_2Ph$ 、 $NHC(O)-R_{10}$ 、 $NHC(O)CH_3$ 、 $NHC(O)-N(R_{10})(R_{11})$ 、 $NHC(O)N(CH_3)_2$ 、 $COOH$ 、 $-C(O)Ph$ 、 $C(O)O-R_{10}$ 、 $C(O)O-CH_3$ 、 $R_8-C(O)-R_{10}$ 、 $CH_2C(O)CH_3$ 、 $C(O)H$ 、 $C(O)-R_{10}$ 、 $C(O)-CH_3$ 、 $C(O)-CH_2CH_3$ 、 $C(O)-CH_2CH_2CH_3$ 、 C_1-C_5 直链或支链 $C(O)-$ 卤代烷基、 $C(O)-CF_3$ 、 $-C(O)NH_2$ 、 $C(O)NHR$ 、 $C(O)N(R_{10})(R_{11})$ 、 $C(O)N(CH_3)_2$ 、 SO_2R 、 $SO_2N(R_{10})(R_{11})$ 、 $SO_2N(CH_3)_2$ 、 $SO_2NHC(O)CH_3$ 、经取代或未经取代的 C_3-C_8 环烷基、环丙基、环戊基、 C_2-C_5 直链或支链经取代或未经取代的烯基、乙烯基、 C_2-C_5 直链或支链经取代或未经取代的炔基、乙炔基、 $CC-CH_2$ -环丁基、 $CC-CF_3$ 、 C_1-C_5 直链或支链或 C_3-C_8 环状卤代烷基、 CF_3 、 CF_2CH_3 、 CH_2CF_3 、 $CF_2CH_2CH_3$ 、 $CH_2CH_2CF_3$ 、 $CF_2CH(CH_3)_2$ 、 $CF(CH_3)-CH(CH_3)_2$ 、经取代或未经取代的 C_1-C_5 直链或支链或 C_3-C_8 环状烷氧基、甲氧基、乙氧基、丙氧基、异丙氧基、 $O-CH_2-CF_3$ 、 C_1-C_5 直链或支链硫代烷氧基、 C_1-C_5 直链或支链卤代烷氧基、 OCF_3 、 $OCHF_2$ 、经取代或

未经取代的3-8元杂环、噻吩、噁唑、噁二唑、咪唑、呋喃、三唑、四唑、吡啶、嘧啶、吡嗪、经取代或未经取代的芳基、苯基、或经取代或未经取代的苄基；每一者均表示根据本发明的单独实施例。在一些实施例中， R_6 是H、F、Cl、Br、I、 CF_3 、CN、 C_1 - C_5 直链或支链经取代或未经取代的烷基、 C_2 - C_5 直链或支链经取代或未经取代的烯基、 C_2 - C_5 直链或支链经取代或未经取代的炔基、 C_1 - C_5 直链或支链或 C_3 - C_8 环状卤代烷基、经取代或未经取代的 C_1 - C_5 直链或支链或 C_3 - C_8 环状烷氧基、或经取代或未经取代的3-8元杂环；每一者均表示根据本发明的单独实施例。在一些实施例中，所述烷基是甲基或乙基。在一些实施例中，所述烯基是乙烯基。在一些实施例中，所述 C_1 - C_5 直链或支链或 C_3 - C_8 环状卤代烷基是 CF_3 。在一些实施例中，所述烷氧基是甲氧基或 $O-CH_2-CF_3$ 。在一些实施例中，所述炔基是乙炔基、 $CC-CH_2$ -环丁基或 $CC-CF_3$ 。在一些实施例中，所述经取代或未经取代的3-8元杂环是吡啶。在一些实施例中， R_6 可以进一步被选自以下的至少一个取代基： F 、 Cl 、 Br 、 I 、 C_1 - C_5 直链或支链烷基、 C_2 - C_5 直链或支链烯基（例如，乙烯基）、 C_2 - C_5 直链或支链炔基、烷基酰胺（即， $C(O)NH-R$ 或 $NHC(O)-R$ ）、 $COOH$ 、烷基酯（即， $COOR$ 或 $OC(O)-R$ ）、 OH 、烷氧基、 $N(R)_2$ 、 NH_2 、 CF_3 、芳基、苯基、杂芳基、 C_3 - C_8 环烷基、 R_8 -（ C_3 - C_8 环烷基）、卤代苯基、 CN 和 NO_2 ；每一者均表示根据本发明的单独实施例。

[0207] 在一些实施例中，式I、I(a)和I(b)化合物的 X_1 是O。在一些实施例中， X_1 是S。在一些实施例中， X_1 是NH。在一些实施例中， X_1 是NR。在一些实施例中， X_1 是 $N-CH_3$ 。在一些实施例中， X_1 是 $S=O$ 。在一些实施例中， X_1 是 SO_2 。在一些实施例中， X_1 和 R_4 连接以形成4-8元杂环。在一些实施例中， X_1 和 R_4 连接以形成吡咯烷环。在一些实施例中， X_1 是O、S、NH或 $N-CH_3$ 。在一些实施例中， X_1 和 R_4 连接以形成 C_4 - C_8 杂环。在一些实施例中， X_1 和 R_4 连接以形成吡咯烷。

[0208] 在一些实施例中，式I和/或I(a)-I(c)的 X_2 是C。在其它实施例中， X_2 是N。

[0209] 在一些实施例中，式I和/或I(a)-I(c)的 X_3 是C。在其它实施例中， X_3 是N。

[0210] 在一些实施例中，式I和/或I(a)-I(c)的 X_4 是C。在其它实施例中， X_4 是N。

[0211] 在一些实施例中，式I和/或I(a)-I(c)的 X_5 是C。在其它实施例中， X_5 是N。

[0212] 在一些实施例中，式I和/或I(a)-I(c)的 X_2 至 X_5 中的至少一者是N。在一些实施例中， X_2 至 X_5 中的至少两者是N。在一些实施例中， X_2 和 X_4 是N。在一些实施例中， X_2 和 X_5 是N。在一些实施例中， X_2 和 X_3 是N。在一些实施例中， X_3 和 X_5 是N。

[0213] 在一些实施例中，式I和/或I(a)-I(e)的 X_6 是O。在其它实施例中， X_6 是NH。在其它实施例中， X_6 是NR。在一些实施例中， X_6 是 CH_2 。在一些实施例中， X_6 是O、NH或NR。

[0214] 在一些实施例中，式I和/或I(a)-I(e)的 $G=X$ 是 $C=O$ 。在其它实施例中， $G=X$ 是 SO_2 。在一些实施例中， $G(=X)-X_6-R_1$ 是四唑部分。

[0215] 在一些实施例中，式I和/或I(a)-I(e)化合物的 R_{60} 不存在。在一些实施例中， R_{60} 是H。在一些实施例中， R_{60} 是F。在一些实施例中， R_{60} 是Cl。在一些实施例中， R_{60} 是Br。在一些实施例中， R_{60} 是I。在一些实施例中， R_{60} 是 CF_3 。在一些实施例中， R_{60} 是CN。在一些实施例中， R_{60} 是 C_1 - C_5 直链或支链经取代或未经取代的烷基。在一些实施例中， R_{60} 是 C_1 - C_5 直链或支链未经取代的烷基。在一些实施例中， R_{60} 是甲基、乙基、丙基、异丙基、t-Bu、异丁基、戊基或苄基；每一者均表示根据本发明的单独实施例。在一些实施例中， R_{60} 是烯基。在一些实施例中， R_{60} 是乙烯基。在一些实施例中， R_{60} 是 C_2 - C_5 直链或支链经取代或未经取代的炔基。在一些实施例中， R_{60} 是 $CC-CH_2$ -环丁基。在一些实施例中， R_{60} 是 $CC-CF_3$ 。在一些实施例中， R_{60} 是 C_1 - C_5 直链或支链或 C_3 - C_8 环状卤代烷基。在一些实施例中， R_{60} 是 CF_3 。在一些实施例中， R_{60} 是经取代或未

经取代的C₁-C₅直链或支链或C₃-C₈环状烷氧基。在一些实施例中,R₆₀是甲氧基。在一些实施例中,R₆₀是O-CH₂-CF₃。在一些实施例中,R₆₀是经取代或未经取代的3-8元杂环。在一些实施例中,R₆₀是吡啶。在一些实施例中,R₆₀是H、Cl或F。在一些实施例中,R₆₀是OH、SH、R₈-OH、CH₂-OH、R₈-SH、-R₈-O-R₁₀、-CH₂-O-CH₃、R₈-(C₃-C₈环烷基)、R₈-(3-8元杂环)、CF₃、CD₃、OCD₃、CN、NO₂、-CH₂CN、-R₈CN、NH₂、NHR、N(R)₂、R₈-N(R₁₀)(R₁₁)、R₉-R₈-N(R₁₀)(R₁₁)、B(OH)₂、-OC(O)CF₃、-OCH₂Ph、NHC(O)-R₁₀、NHC(O)CH₃、NHC(O)-N(R₁₀)(R₁₁)、NHC(O)N(CH₃)₂、COOH、-C(O)Ph、C(O)O-R₁₀、C(O)O-CH₃、R₈-C(O)-R₁₀、CH₂C(O)CH₃、C(O)H、C(O)-R₁₀、C(O)-CH₃、C(O)-CH₂CH₃、C(O)-CH₂CH₂CH₃、C₁-C₅直链或支链C(O)-卤代烷基、C(O)-CF₃、-C(O)NH₂、C(O)NHR、C(O)N(R₁₀)(R₁₁)、C(O)N(CH₃)₂、SO₂R、SO₂N(R₁₀)(R₁₁)、SO₂N(CH₃)₂、SO₂NHC(O)CH₃、C₁-C₅直链或支链经取代或未经取代的烷基、甲基、乙基、丙基、异丙基、t-Bu、异丁基、戊基、苄基、经取代或未经取代的C₃-C₈环烷基、环丙基、环戊基、C₂-C₅直链或支链经取代或未经取代的烯基、乙烯基、C₂-C₅直链或支链经取代或未经取代的炔基、乙炔基、CC-CH₂-环丁基、CC-CF₃、C₁-C₅直链或支链或C₃-C₈环状卤代烷基、CF₃、CF₂CH₃、CH₂CF₃、CF₂CH₂CH₃、CH₂CH₂CF₃、CF₂CH(CH₃)₂、CF(CH₃)-CH(CH₃)₂、经取代或未经取代的C₁-C₅直链或支链或C₃-C₈环状烷氧基、甲氧基、乙氧基、丙氧基、异丙氧基、O-CH₂-CF₃、C₁-C₅直链或支链硫代烷氧基、C₁-C₅直链或支链卤代烷氧基、OCF₃、OCHF₂、经取代或未经取代的3-8元杂环、噻吩、噁唑、噁二唑、咪唑、呋喃、三唑、四唑、吡啶、嘧啶、吡嗪、经取代或未经取代的芳基、苯基、或经取代或未经取代的苄基；每一者均是根据本发明的单独实施例。在一些实施例中,R₆₀可以进一步被选自以下的至少一个取代取代:F、Cl、Br、I、C₁-C₅直链或支链烷基、C₂-C₅直链或支链烯基(例如,乙烯基)、C₂-C₅直链或支链炔基、烷基酰胺(即,C(O)NH-R或NHC(O)-R)、COOH、烷基酯(即,COOR或OC(O)-R)、OH、烷氧基、N(R)₂、NH₂、CF₃、芳基、苯基、杂芳基、C₃-C₈环烷基、R₈-(C₃-C₈环烷基)、卤代苯基、CN和NO₂；每一者均表示根据本发明的单独实施例。在一些实施例中,式I、I(a)(-I(e)化合物的R₆和R₆₀中的至少一者不是H。在一些实施例中,R₆₀不是H。在一些实施例中,R₆和R₆₀两者均不是H。

[0216] 在一些实施例中,式I(a)化合物的R₇₀不存在。在一些实施例中,R₇₀是H。在一些实施例中,R₇₀是F。在一些实施例中,R₇₀是Cl。在一些实施例中,R₇₀是Br。在一些实施例中,R₇₀是I。在一些实施例中,R₇₀是CF₃。在一些实施例中,R₇₀是CN。在一些实施例中,R₇₀是C₁-C₅直链或支链经取代或未经取代的烷基。在一些实施例中,R₇₀是C₁-C₅直链或支链未经取代的烷基。在一些实施例中,R₇₀是甲基、乙基、丙基、异丙基、t-Bu、异丁基、戊基或苄基；每一者均表示根据本发明的单独实施例。在一些实施例中,R₇₀是烯基。在一些实施例中,R₇₀是乙烯基。在一些实施例中,R₇₀是C₂-C₅直链或支链经取代或未经取代的炔基。在一些实施例中,R₇₀是CC-CH₂-环丁基。在一些实施例中,R₇₀是CC-CF₃。在一些实施例中,R₇₀是C₁-C₅直链或支链或C₃-C₈环状卤代烷基。在一些实施例中,R₇₀是CF₃。在一些实施例中,R₇₀是经取代或未经取代的C₁-C₅直链或支链或C₃-C₈环状烷氧基。在一些实施例中,R₇₀是甲氧基。在一些实施例中,R₇₀是O-CH₂-CF₃。在一些实施例中,R₇₀是经取代或未经取代的3-8元杂环。在一些实施例中,R₇₀是吡啶。在一些实施例中,R₇₀是OH、SH、R₈-OH、CH₂-OH、R₈-SH、-R₈-O-R₁₀、-CH₂-O-CH₃、R₈-(C₃-C₈环烷基)、R₈-(3-8元杂环)、CF₃、CD₃、OCD₃、CN、NO₂、-CH₂CN、-R₈CN、NH₂、NHR、N(R)₂、R₈-N(R₁₀)(R₁₁)、R₉-R₈-N(R₁₀)(R₁₁)、B(OH)₂、-OC(O)CF₃、-OCH₂Ph、NHC(O)-R₁₀、NHC(O)CH₃、NHC(O)-N(R₁₀)(R₁₁)、NHC(O)N(CH₃)₂、COOH、-C(O)Ph、C(O)O-R₁₀、C(O)O-CH₃、R₈-C(O)-R₁₀、CH₂C(O)CH₃、C(O)H、C(O)-R₁₀、C(O)-CH₃、C(O)-CH₂CH₃、C(O)-CH₂CH₂CH₃、C₁-C₅直链或支链C(O)-卤代烷基、C

(O) -CF₃、-C(O)NH₂、C(O)NHR、C(O)N(R₁₀)(R₁₁)、C(O)N(CH₃)₂、SO₂R、SO₂N(R₁₀)(R₁₁)、SO₂N(CH₃)₂、SO₂NHC(O)CH₃、C₁-C₅直链或支链经取代或未经取代的烷基、甲基、乙基、丙基、异丙基、t-Bu、异丁基、戊基、苄基、经取代或未经取代的C₃-C₈环烷基、环丙基、环戊基、C₂-C₅直链或支链经取代或未经取代的烯基、乙烯基、C₂-C₅直链或支链经取代或未经取代的炔基、乙炔基、CC-CH₂-环丁基、CC-CF₃、C₁-C₅直链或支链或C₃-C₈环状卤代烷基、CF₃、CF₂CH₃、CH₂CF₃、CF₂CH₂CH₃、CH₂CH₂CF₃、CF₂CH(CH₃)₂、CF(CH₃)-CH(CH₃)₂、经取代或未经取代的C₁-C₅直链或支链或C₃-C₈环状烷氧基、甲氧基、乙氧基、丙氧基、异丙氧基、O-CH₂-CF₃、C₁-C₅直链或支链硫代烷氧基、C₁-C₅直链或支链卤代烷氧基、OCF₃、OCHF₂、经取代或未经取代的3-8元杂环、噻吩、噁唑、噁二唑、咪唑、呋喃、三唑、四唑、吡啶、嘧啶、吡嗪、经取代或未经取代的芳基、苯基、或经取代或未经取代的苄基；每一者均是根据本发明的单独实施例。在一些实施例中，R₇₀可以进一步被选自以下的至少一个取代取代：F、Cl、Br、I、C₁-C₅直链或支链烷基、C₂-C₅直链或支链烯基（例如，乙烯基）、C₂-C₅直链或支链炔基、烷基酰胺（即，C(O)NH-R或NHC(O)-R）、COOH、烷基酯（即，COOR或OC(O)-R）、OH、烷氧基、N(R)₂、NH₂、CF₃、芳基、苯基、杂芳基、C₃-C₈环烷基、R₈-(C₃-C₈环烷基)、卤代苯基、CN和NO₂；每一者均表示根据本发明的单独实施例。

[0217] 在一些实施例中，式I(a)化合物的R₈₀不存在。在一些实施例中，R₈₀是H。在一些实施例中，R₈₀是F。在一些实施例中，R₈₀是Cl。在一些实施例中，R₈₀是Br。在一些实施例中，R₈₀是I。在一些实施例中，R₈₀是CF₃。在一些实施例中，R₈₀是CN。在一些实施例中，R₈₀是C₁-C₅直链或支链经取代或未经取代的烷基。在一些实施例中，R₈₀是C₁-C₅直链或支链未经取代的烷基。在一些实施例中，R₈₀是甲基、乙基、丙基、异丙基、t-Bu、异丁基、戊基或苄基；每一者均表示根据本发明的单独实施例。在一些实施例中，R₈₀是烯基。在一些实施例中，R₈₀是乙烯基。在一些实施例中，R₈₀是C₂-C₅直链或支链经取代或未经取代的炔基。在一些实施例中，R₈₀是CC-CH₂-环丁基。在一些实施例中，R₈₀是CC-CF₃。在一些实施例中，R₈₀是C₁-C₅直链或支链或C₃-C₈环状卤代烷基。在一些实施例中，R₈₀是CF₃。在一些实施例中，R₈₀是经取代或未经取代的C₁-C₅直链或支链或C₃-C₈环状烷氧基。在一些实施例中，R₈₀是甲氧基。在一些实施例中，R₈₀是O-CH₂-CF₃。在一些实施例中，R₈₀是经取代或未经取代的3-8元杂环。在一些实施例中，R₈₀是吡啶。在一些实施例中，R₈₀是OH、SH、R₈-OH、CH₂-OH、R₈-SH、-R₈-O-R₁₀、-CH₂-O-CH₃、R₈-(C₃-C₈环烷基)、R₈-(3-8元杂环)、CF₃、CD₃、OCD₃、CN、NO₂、-CH₂CN、-R₈CN、NH₂、NHR、N(R)₂、R₈-N(R₁₀)(R₁₁)、R₉-R₈-N(R₁₀)(R₁₁)、B(OH)₂、-OC(O)CF₃、-OCH₂Ph、NHC(O)-R₁₀、NHC(O)CH₃、NHC(O)-N(R₁₀)(R₁₁)、NHC(O)N(CH₃)₂、COOH、-C(O)Ph、C(O)O-R₁₀、C(O)O-CH₃、R₈-C(O)-R₁₀、CH₂C(O)CH₃、C(O)H、C(O)-R₁₀、C(O)-CH₃、C(O)-CH₂CH₃、C(O)-CH₂CH₂CH₃、C₁-C₅直链或支链C(O)-卤代烷基、C(O)-CF₃、-C(O)NH₂、C(O)NHR、C(O)N(R₁₀)(R₁₁)、C(O)N(CH₃)₂、SO₂R、SO₂N(R₁₀)(R₁₁)、SO₂N(CH₃)₂、SO₂NHC(O)CH₃、C₁-C₅直链或支链经取代或未经取代的烷基、甲基、乙基、丙基、异丙基、t-Bu、异丁基、戊基、苄基、经取代或未经取代的C₃-C₈环烷基、环丙基、环戊基、C₂-C₅直链或支链经取代或未经取代的烯基、乙烯基、C₂-C₅直链或支链经取代或未经取代的炔基、乙炔基、CC-CH₂-环丁基、CC-CF₃、C₁-C₅直链或支链或C₃-C₈环状卤代烷基、CF₃、CF₂CH₃、CH₂CF₃、CF₂CH₂CH₃、CH₂CH₂CF₃、CF₂CH(CH₃)₂、CF(CH₃)-CH(CH₃)₂、经取代或未经取代的C₁-C₅直链或支链或C₃-C₈环状烷氧基、甲氧基、乙氧基、丙氧基、异丙氧基、O-CH₂-CF₃、C₁-C₅直链或支链硫代烷氧基、C₁-C₅直链或支链卤代烷氧基、OCF₃、OCHF₂、经取代或未经取代的3-8元杂环、噻吩、噁唑、噁二唑、咪唑、呋喃、三唑、四唑、吡啶、嘧啶、吡嗪、经取代或未经取代的芳基、苯基、或经

取代或未经取代的苄基；每一者均是根据本发明的单独实施例。在一些实施例中， R_{80} 可以进一步被选自以下的至少一个取代取代：F、Cl、Br、I、 C_1 - C_5 直链或支链烷基、 C_2 - C_5 直链或支链烯基（例如，乙烯基）、 C_2 - C_5 直链或支链炔基、烷基酰胺（即， $C(O)NH-R$ 或 $NHC(O)-R$ ）、 $COOH$ 、烷基酯（即， $COOR$ 或 $OC(O)-R$ ）、 OH 、烷氧基、 $N(R)_2$ 、 NH_2 、 CF_3 、芳基、苯基、杂芳基、 C_3 - C_8 环烷基、 R_8 -（ C_3 - C_8 环烷基）、卤代苯基、 CN 和 NO_2 ；每一者均表示根据本发明的单独实施例。

[0218] 在一些实施例中，式I (a) 化合物的 R_{90} 不存在。在一些实施例中， R_{90} 是H。在一些实施例中， R_{90} 是F。在一些实施例中， R_{90} 是Cl。在一些实施例中， R_{90} 是Br。在一些实施例中， R_{90} 是I。在一些实施例中， R_{90} 是 CF_3 。在一些实施例中， R_{90} 是 CN 。在一些实施例中， R_{90} 是 C_1 - C_5 直链或支链经取代或未经取代的烷基。在一些实施例中， R_{90} 是 C_1 - C_5 直链或支链未经取代的烷基。在一些实施例中， R_{90} 是甲基、乙基、丙基、异丙基、t-Bu、异丁基、戊基或苄基；每一者均表示根据本发明的单独实施例。在一些实施例中， R_{90} 是烯基。在一些实施例中， R_{90} 是乙烯基。在一些实施例中， R_{90} 是 C_2 - C_5 直链或支链经取代或未经取代的炔基。在一些实施例中， R_{90} 是 $CC-CH_2$ -环丁基。在一些实施例中， R_{90} 是 $CC-CF_3$ 。在一些实施例中， R_{90} 是 C_1 - C_5 直链或支链或 C_3 - C_8 环状卤代烷基。在一些实施例中， R_{90} 是 CF_3 。在一些实施例中， R_{90} 是经取代或未经取代的 C_1 - C_5 直链或支链或 C_3 - C_8 环状烷氧基。在一些实施例中， R_{90} 是甲氧基。在一些实施例中， R_{90} 是 $O-CH_2-CF_3$ 。在一些实施例中， R_{90} 是经取代或未经取代的3-8元杂环。在一些实施例中， R_{90} 是吡啶。在一些实施例中， R_{90} 是 OH 、 SH 、 R_8-OH 、 CH_2-OH 、 R_8-SH 、 $-R_8-O-R_{10}$ 、 $-CH_2-O-CH_3$ 、 R_8 -（ C_3 - C_8 环烷基）、 R_8 -（3-8元杂环）、 CF_3 、 CD_3 、 OCD_3 、 CN 、 NO_2 、 $-CH_2CN$ 、 $-R_8CN$ 、 NH_2 、 NHR 、 $N(R)_2$ 、 $R_8-N(R_{10})$ （ R_{11} ）、 $R_9-R_8-N(R_{10})$ （ R_{11} ）、 $B(OH)_2$ 、 $-OC(O)CF_3$ 、 $-OCH_2Ph$ 、 $NHC(O)-R_{10}$ 、 $NHC(O)CH_3$ 、 $NHC(O)-N(R_{10})$ （ R_{11} ）、 $NHC(O)N(CH_3)_2$ 、 $COOH$ 、 $-C(O)Ph$ 、 $C(O)O-R_{10}$ 、 $C(O)O-CH_3$ 、 $R_8-C(O)-R_{10}$ 、 $CH_2C(O)CH_3$ 、 $C(O)H$ 、 $C(O)-R_{10}$ 、 $C(O)-CH_3$ 、 $C(O)-CH_2CH_3$ 、 $C(O)-CH_2CH_2CH_3$ 、 C_1 - C_5 直链或支链 $C(O)-$ 卤代烷基、 $C(O)-CF_3$ 、 $-C(O)NH_2$ 、 $C(O)NHR$ 、 $C(O)N(R_{10})$ （ R_{11} ）、 $C(O)N(CH_3)_2$ 、 SO_2R 、 $SO_2N(R_{10})$ （ R_{11} ）、 $SO_2N(CH_3)_2$ 、 $SO_2NHC(O)CH_3$ 、 C_1 - C_5 直链或支链经取代或未经取代的烷基、甲基、乙基、丙基、异丙基、t-Bu、异丁基、戊基、苄基、经取代或未经取代的 C_3 - C_8 环烷基、环丙基、环戊基、 C_2 - C_5 直链或支链经取代或未经取代的烯基、乙烯基、 C_2 - C_5 直链或支链经取代或未经取代的炔基、乙炔基、 $CC-CH_2$ -环丁基、 $CC-CF_3$ 、 C_1 - C_5 直链或支链或 C_3 - C_8 环状卤代烷基、 CF_3 、 CF_2CH_3 、 CH_2CF_3 、 $CF_2CH_2CH_3$ 、 $CH_2CH_2CF_3$ 、 $CF_2CH(CH_3)_2$ 、 $CF(CH_3)-CH(CH_3)_2$ 、经取代或未经取代的 C_1 - C_5 直链或支链或 C_3 - C_8 环状烷氧基、甲氧基、乙氧基、丙氧基、异丙氧基、 $O-CH_2-CF_3$ 、 C_1 - C_5 直链或支链硫代烷氧基、 C_1 - C_5 直链或支链卤代烷氧基、 OCF_3 、 $OCHF_2$ 、经取代或未经取代的3-8元杂环、噁吩、噁唑、噁二唑、咪唑、呋喃、三唑、四唑、吡啶、嘧啶、吡嗪、经取代或未经取代的芳基、苯基、或经取代或未经取代的苄基；每一者均是根据本发明的单独实施例。在一些实施例中， R_{90} 可以进一步被选自以下的至少一个取代取代：F、Cl、Br、I、 C_1 - C_5 直链或支链烷基、 C_2 - C_5 直链或支链烯基（例如，乙烯基）、 C_2 - C_5 直链或支链炔基、烷基酰胺（即， $C(O)NH-R$ 或 $NHC(O)-R$ ）、 $COOH$ 、烷基酯（即， $COOR$ 或 $OC(O)-R$ ）、 OH 、烷氧基、 $N(R)_2$ 、 NH_2 、 CF_3 、芳基、苯基、杂芳基、 C_3 - C_8 环烷基、 R_8 -（ C_3 - C_8 环烷基）、卤代苯基、 CN 和 NO_2 ；每一者均表示根据本发明的单独实施例。

[0219] 在一些实施例中，如果 X_2 、 X_3 、 X_4 和 X_5 中的任一个是N，则相应取代 R_{60} 、 R_{70} 、 R_{80} 或 R_{90} 不存在。

[0220] 在一些实施例中，式I和/或I (a) - I (e) 的 R_8 是 CH_2 。在其它实施例中， R_8 是 CH_2CH_2 。在其它实施例中， R_8 是 $CH_2CH_2CH_2$ 。

[0221] 在一些实施例中,式I和/或I(a)-I(e)的p是1。在其它实施例中,p是2。在其它实施例中,p是3。

[0222] 在一些实施例中,式I和/或I(a)-I(e)的R₉是C≡C。

[0223] 在一些实施例中,式I和/或I(a)-I(e)的q是2。

[0224] 在一些实施例中,式I和/或I(a)-I(e)的R₁₀是H。在一些实施例中,R₁₀是C₁-C₅直链或支链烷基。在其它实施例中,R₁₀是CH₃。在其它实施例中,R₁₀是CH₂CH₃。在其它实施例中,R₁₀是CH₂CH₂CH₃。在其它实施例中,R₁₀是CN。在其它实施例中,R₁₀是C(O)R。在其它实施例中,R₁₀是S(O)₂R。在其它实施例中,R₁₀是C(O)(OCH₃)。

[0225] 在一些实施例中,式I和/或I(a)-I(e)的R₁₁是C₁-C₅直链或支链烷基。在其它实施例中,R₁₁是H。在其它实施例中,R₁₁是CH₃。在其它实施例中,R₁₁是CH₂CH₃。在其它实施例中,R₁₁是CH₂CH₂CH₃。在其它实施例中,R₁₁是CN。在其它实施例中,R₁₁是C(O)R。在其它实施例中,R₁₁是S(O)₂R。在其它实施例中,R₁₁是C(O)(OCH₃)。

[0226] 在一些实施例中,式I和/或I(a)-I(e)的R₁₀和R₁₁连接以形成经取代或未经取代的3-8元杂环。在其它实施例中,R₁₀和R₁₁连接以形成哌嗪环。在其它实施例中,R₁₀和R₁₁连接以形成哌啶环。在一些实施例中,所述环可以进一步被选自以下的至少一个取代基取代:F、Cl、Br、I、C₁-C₅直链或支链烷基、C₂-C₅直链或支链烯基(例如,乙烯基)、C₂-C₅直链或支链炔基、烷基酰胺(即,C(O)NH-R或NHC(O)-R)、COOH、烷基酯(即,COOR或OC(O)-R)、OH、烷氧基、N(R)₂、NH₂、CF₃、芳基、苯基、杂芳基、C₃-C₈环烷基、R₈-(C₃-C₈环烷基)、卤代苯基、CN和NO₂;每一者均表示根据本发明的单独实施例。

[0227] 在一些实施例中,式I和/或I(a)-I(e)的R是H。在一些实施例中,R是C₁-C₅直链或支链烷基。在其它实施例中,R是甲基。在其它实施例中,R是乙基。在其它实施例中,R是C₁-C₅直链或支链烷氧基。在其它实施例中,R是甲氧基。在其它实施例中,R是苯基。在其它实施例中,R是芳基。在其它实施例中,R是杂芳基。在其它实施例中,两个偕R取代基连接在一起以形成5元或6元杂环。

[0228] 在一些实施例中,k是介于1与3之间的整数。在一些实施例中,k是介于1与2之间的整数。在一些实施例中,k是介于2与3之间的整数。在一些实施例中,k是1。在一些实施例中,k是2。在一些实施例中,k是3。在一些实施例中,如果k不是1,则R₂是H。在一些实施例中,如果k是2或3,则R₂是H。

[0229] 在一些实施例中,如果R₁是H、甲基或乙基;R₄是H;R₃是甲基或乙基;并且k是1,则R₂不是H。在一些实施例中,如果G=X是C=O;X₆是O;R₁是H、甲基或乙基;R₄是H;R₂是H并且R₃是甲基或乙基,或B环是环戊基;R₆₀是H;并且k是1,则R₆不是H或F。在一些实施例中,如果G=X是C=O;X₆是O;R₁是H、甲基或乙基;R₄是H;R₂是H并且R₃是甲基或乙基,或B环是环戊基;R₆₀是H;R₆是H或F;并且k是1,则所述化合物是基本上纯的单一立体异构体。

[0230] 众所周知,在碳原子具有少于4个键的本发明中所呈现的结构中,存在H原子以完成碳的化合价。众所周知,在氮原子具有少于3个键的本发明中所呈现的结构中,存在H原子以完成氮的化合价。

[0231] 在一些实施例中,本发明涉及上文所列举的化合物、其农用化学组合物和/或使用方法,其中所述化合物是农用化学上可接受的盐、立体异构体、光学异构体、互变异构体、水合物、N-氧化物、反向酰胺类似物、同位素变体(氘代类似物)或其任何组合。在一些实施例

中,所述化合物是除草剂。在各个实施例中,所述化合物是杀虫剂。在一些实施例中,所述化合物控制不期望的植物的生长。

[0232] 如本文所使用的,“单一或稠合的芳香族或杂芳香族环体系”可以是任何此类环,包含但不限于苯基、萘基、吡啶基(2-吡啶基、3-吡啶基和4-吡啶基)、喹啉基、嘧啶基、哒嗪基、吡嗪基、三嗪基、四嗪基、噻唑基、异噻唑基、噁唑基、异噁唑基、咪唑基、1-甲基咪唑、吡唑基、吡咯基、呋喃基、噻吩-基、喹啉基、异喹啉基、2,3-二氢茛基、茛基、四氢萘基、3,4-二氢-2H-苯并[b][1,4]二氧杂环庚烯、苯并间二氧杂环戊烯基、苯并[d][1,3]间二氧杂环戊烯、四氢萘基、吡啶基、1H-吡啶、异吡啶基、葱基、苯并咪唑基、2,3-二氢-1H-苯并[d]咪唑基、吡唑基、2H-吡唑、三唑基、4,5,6,7-四氢-2H-吡唑、3H-吡唑-3-酮、嘌呤基、苯并噁唑基、1,3-苯并噁唑基、苯并异噁唑基、苯并噻唑基、1,3-苯并噻唑、4,5,6,7-四氢-1,3-苯并噻唑、喹啉基、喹啉基、1,2,3,4-四氢喹啉、1-(吡啶-1(2H)-基)乙酮、噻吩基、呋喃基、喹啉基、异喹啉基、吡啶基、苯并呋喃基、1-苯并呋喃、异苯并呋喃基、苯并呋喃-2(3H)-酮、苯并噻吩基、苯并噁二唑、苯并[c][1,2,5]噁二唑基、苯并[c]噻吩基、苯并间二氧杂环戊烯基、噻二唑基、[1,3]噁唑并[4,5-b]吡啶、噁二唑基、咪唑并[2,1-b][1,3]噻唑、4H,5H,6H-环戊烯并[d][1,3]噻唑、5H,6H,7H,8H-咪唑并[1,2-a]吡啶、7-氧代-6H,7H-[1,3]噻唑并[4,5-d]嘧啶、[1,3]噻唑并[5,4-b]吡啶、2H,3H-咪唑并[2,1-b][1,3]噻唑、噻吩并[3,2-d]嘧啶-4(3H)-酮、4-氧代-4H-噻吩并[3,2-d][1,3]噻吩、咪唑并[1,2-a]吡啶、1H-咪唑并[4,5-b]吡啶、1H-咪唑并[4,5-c]吡啶、3H-咪唑并[4,5-c]吡啶、吡唑并[1,5-a]吡啶、咪唑并[1,2-a]吡啶、咪唑并[1,2-a]嘧啶、1H-吡咯并[2,3-b]吡啶、吡啶并[2,3-b]吡啶、吡啶并[2,3-b]吡啶-3(4H)-酮、4H-噻吩并[3,2-b]吡咯、喹啉-2(1H)-酮、1H-吡咯并[3,2-b]吡啶、7H-吡咯并[2,3-d]嘧啶、噁唑并[5,4-b]吡啶、噻唑并[5,4-b]吡啶、噻吩并[3,2-c]吡啶、3-甲基-4H-1,2,4-三唑、5-甲基-1,2,4-噁二唑、甲基噁唑烷-2-酮等;每一者均表示根据本发明的单独实施例。

[0233] 如本文所使用的,除非另有说明,否则术语“烷基”可以是含有至多约30个碳的任何直链或支链烷基。在各个实施例中,烷基包含 C_1-C_5 碳。在一些实施例中,烷基包含 C_1-C_6 碳。在一些实施例中,烷基包含 C_1-C_8 碳。在一些实施例中,烷基包含 C_2-C_5 碳。在一些实施例中,烷基包含 C_2-C_8 碳。在一些实施例中,烷基包含 C_1-C_{10} 碳。在一些实施例中,烷基是 C_1-C_{12} 碳。在一些实施例中,烷基是 C_1-C_{20} 碳。在一些实施例中,支链烷基是被具有1至5个碳的烷基侧链取代的烷基。在各个实施例中,烷基可以是未经取代的。在一些实施例中,烷基可以被以下取代:卤素、卤代烷基、羟基、烷氧基、羰基、酰胺基、烷基酰胺基、二烷基酰胺基、氰基、硝基、 CO_2H 、氨基、烷基氨基、二烷基氨基、羧基、硫基、硫代烷基、 C_1-C_5 直链或支链卤代烷氧基、 CF_3 、苯基、卤代苯基、(苄氧基)苯基、 $-CH_2CN$ 、 NH_2 、 NH -烷基、 $N(烷基)_2$ 、 $-OC(O)CF_3$ 、 $-OCH_2Ph$ 、 $-NHC(O)$ -烷基、 $-C(O)Ph$ 、 $C(O)O$ -烷基、 $C(O)H$ 、 $-C(O)NH_2$ 或其任何组合。

[0234] 烷基可以是唯一的取代基或其可以是较大取代基的组分,如在烷氧基、烷氧基烷基、卤代烷基、芳基烷基、烷基氨基、二烷基氨基、烷基酰胺基、烷基脲等中。优选的烷基是甲基、乙基和丙基,并且因此卤代甲基、二卤代甲基、三卤代甲基、卤代乙基、二卤代乙基、三卤代乙基、卤代丙基、二卤代丙基、三卤代丙基、甲氧基、乙氧基、丙氧基、芳基甲基、芳基乙基、芳基丙基、甲基氨基、乙基氨基、丙基氨基、二甲基氨基、二乙基氨基、甲酰胺基、乙酰胺基、丙酰胺基、卤代甲基酰胺基、卤代乙基酰胺基、卤代丙基酰胺基、甲基脲、乙基脲、丙基脲、2-

$\text{CH}_2\text{-C}_6\text{H}_4\text{-Cl}$ 、 $3\text{-CH}_2\text{-C}_6\text{H}_4\text{-Cl}$ 或 $4\text{-CH}_2\text{-C}_6\text{H}_4\text{-Cl}$ 、 $\text{C(OH)(CH}_3\text{)(Ph)}$ 等。

[0235] 如本文所使用的,术语“烯基”可以是含有至多约30个碳的任何直链或支链烯基,如上文针对术语“烷基”和至少一个碳-碳双键所定义。因此,如本文所定义的术语烯基还包含链二烯、链三烯、链四烯等。在一些实施例中,烯基含有一个碳-碳双键。在一些实施例中,烯基含有两个、三个、四个、五个、六个、七个或八个碳-碳双键;每一者均表示根据本发明的单独实施例。烯基的非限制性实例包含:乙烯基、丙烯基、丁烯基(即,1-丁烯基、反式-2-丁烯基、顺式-2-丁烯基和异丁烯基)、戊烯(即,1-戊烯基、顺式-2-戊烯基和反式-2-戊烯基)、己烯(例如,1-己烯基、(E)-2-己烯基、(Z)-2-己烯基、(E)-3-己烯基、(Z)-3-己烯基、2-甲基-1-戊烯等),它们都可以如上文针对术语“烷基”所定义的那样被取代。

[0236] 如本文所使用的,术语“炔基”可以是含有至多约30个碳的任何直链或支链炔基,如上文针对术语“烷基”和至少一个碳-碳三键所定义。因此,如本文所定义的术语炔基还包含烷二炔、烷三炔、烷四炔等。在一些实施例中,炔基含有一个碳-碳三键。在一些实施例中,炔基含有两个、三个、四个、五个、六个、七个或八个碳-碳三键;每一者均表示根据本发明的单独实施例。炔基的非限制性实例包含:乙炔基、丙炔基、丁炔基(即,1-丁炔基、2-丁炔基和异丁炔基)、戊炔(即,1-戊炔基、2-戊炔基)、己炔(例如,1-己炔基、2-己炔基、3-己炔基等),它们都可以如上文针对术语“烷基”所定义的那样被取代。

[0237] 如本文所使用的,术语“芳基”是指与另一个基团直接键合的任何芳香族环并且可以是经取代或未经取代的。芳基可以是唯一的取代基,或者芳基可以是更大的取代基的组分,如在芳基烷基、芳基氨基、芳基酰胺基等中。示例性芳基包含但不限于苯基、甲苯基、二甲苯基、呋喃基、萘基、吡啶基、嘧啶基、哒嗪基、吡嗪基、三嗪基、噻唑基、噁唑基、异噁唑基、吡唑基、咪唑基、噻吩基、吡咯基、吡啶基、苯基甲基、苯基乙基、苯基氨基、苯酰胺基、3-甲基-4H-1,2,4-三唑基、5-甲基-1,2,4-噁二唑基等。取代包含但不限于:F、Cl、Br、I、 $\text{C}_1\text{-C}_5$ 直链或支链烷基、 $\text{C}_1\text{-C}_5$ 直链或支链卤代烷基、 $\text{C}_1\text{-C}_5$ 直链或支链烷氧基、 $\text{C}_1\text{-C}_5$ 直链或支链卤代烷氧基、 CF_3 、苯基、卤代苯基、(苄氧基)苯基、 CN 、 NO_2 、 $-\text{CH}_2\text{CN}$ 、 NH_2 、 NH-烷基 、 N(烷基)_2 、羟基、 $-\text{OC(O)CF}_3$ 、 $-\text{OCH}_2\text{Ph}$ 、 $-\text{NHC(O)-烷基}$ 、 COOH 、 $-\text{C(O)Ph}$ 、 C(O)O-烷基 、 C(O)H 、 $-\text{C(O)NH}_2$ 或其任何组合。

[0238] 如本文所使用的,术语“烷氧基”是指被如上文所定义的烷基取代的醚基。烷氧基是指直链和支链烷氧基两者。烷氧基的非限制性实例是甲氧基、乙氧基、丙氧基、异丙氧基、叔丁氧基。

[0239] 在一些实施例中,“卤代烷基”是指如上文所定义的烷基,其被一个或多个卤素原子,例如被F、Cl、Br或I取代。术语“卤代烷基”包含但不限于氟代烷基,即带有至少一个氟原子的烷基。卤代烷基的非限制性实例是 CF_3 、 CF_2CF_3 、 CF_2CH_3 、 CH_2CF_3 、 $\text{CF}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ 、 $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CF}_3$ 、 $\text{CF}_2\text{CH(CH}_3\text{)}_2$ 和 $\text{CF(CH}_3\text{)-CH(CH}_3\text{)}_2$ 。

[0240] 在一些实施例中,“卤代苯基”是指被一个或多个卤素原子,例如被F、Cl、Br或I取代的苯基取代基。在一个实施例中,卤代苯基是4-氯代苯基。

[0241] 在一些实施例中,“烷氧基烷基”是指如上文所定义的烷基,其被如上文所定义的烷氧基,例如被甲氧基、乙氧基、丙氧基、异丙氧基、叔丁氧基等取代。烷氧基烷基的非限制性实例是 $-\text{CH}_2\text{-O-CH}_3$ 、 $-\text{CH}_2\text{-O-CH(CH}_3\text{)}_2$ 、 $-\text{CH}_2\text{-O-C(CH}_3\text{)}_3$ 、 $-\text{CH}_2\text{-CH}_2\text{-O-CH}_3$ 、 $-\text{CH}_2\text{-CH}_2\text{-O-CH(CH}_3\text{)}_2$ 、 $-\text{CH}_2\text{-CH}_2\text{-O-C(CH}_3\text{)}_3$ 。

[0242] 在各个实施例中，“环烷基(cycloalkyl)”、“环状烷基(cyclic alkyl)”或“碳环”基团是指包括碳原子作为环原子的环结构，其可以是饱和或不饱和的、经取代或未经取代的、单一或稠合的。在一些实施例中，环烷基是3-10元环。在一些实施例中，环烷基是3-12元环。在一些实施例中，环烷基是6元环。在一些实施例中，环烷基是5-7元环。在一些实施例中，环烷基是3-8元环。在一些实施例中，环烷基可以是未经取代的或被以下取代：卤素、烷基、卤代烷基、羟基、烷氧基、羰基、酰胺基、烷基酰胺基、二烷基酰胺基、氰基、硝基、CO₂H、氨基、烷基氨基、二烷基氨基、羧基、硫基、硫代烷基、C₁-C₅直链或支链卤代烷氧基、CF₃、苯基、卤代苯基、(苄氧基)苯基、-CH₂CN、NH₂、NH-烷基、N(烷基)₂、-OC(O)CF₃、-OCH₂Ph、-NHC(O)-烷基、-C(O)Ph、C(O)O-烷基、C(O)H、-C(O)NH₂或其任何组合。在一些实施例中，环烷基环可以与另一饱和或不饱和环烷基或杂环3-8元环稠合。在一些实施例中，环烷基环是饱和环。在一些实施例中，环烷基环是不饱和环。环烷基的非限制性实例包括环己基、环己烯基、环丙基、环丙烯基、环戊基、环戊烯基、环丁基、环丁烯基、环辛基、环辛二烯基(COD)、环辛烯(COE)等。

[0243] 在各个实施例中，“杂环(heterocycle)”或“杂环(heterocyclic)”基团是指除了碳原子之外还包括硫、氧、氮或其任何组合作为环的一部分的环结构。在各个实施例中，“杂芳香族环”是指除了碳原子之外还包括硫、氧、氮、硒或其任何组合作为环的一部分的芳香族环结构。在一些实施例中，杂环或杂芳香族环是3-10元环。在一些实施例中，杂环或杂芳香族环是3-12元环。在一些实施例中，杂环或杂芳香族环是6元环。在一些实施例中，杂环或杂芳香族环是5-7元环。在一些实施例中，杂环或杂芳香族环是3-8元环。在一些实施例中，杂环基团或杂芳香族环可以是未经取代的或被以下取代：卤素、烷基、卤代烷基、羟基、烷氧基、羰基、酰胺基、烷基酰胺基、二烷基酰胺基、氰基、硝基、CO₂H、氨基、烷基氨基、二烷基氨基、羧基、硫醇、硫代烷基、C₁-C₅直链或支链卤代烷氧基、CF₃、苯基、卤代苯基、(苄氧基)苯基、-CH₂CN、NH₂、NH-烷基、N(烷基)₂、-OC(O)CF₃、-OCH₂Ph、-NHC(O)-烷基、-C(O)Ph、C(O)O-烷基、C(O)H、-C(O)NH₂或其任何组合。在一些实施例中，杂环或杂芳香族环可以与另一饱和或不饱和环烷基或杂环3-8元环稠合。在一些实施例中，杂环是饱和环。在一些实施例中，杂环是不饱和环。杂环或杂芳香族环体系的非限制性实例包括吡啶、哌啶、吗啉、哌嗪、噻吩、吡咯、苯并间二氧杂环戊烯、苯并呋喃-2(3H)-酮、苯并[d][1,3]间二氧杂环戊烯、吡啶、噁唑、异噁唑、咪唑和1-甲基咪唑、呋喃、三唑、嘧啶、吡嗪、氧杂环丁烷(1-氧杂环丁烷或2-氧杂环丁烷)、萘、四氢噻吩1,1-二氧化物、噻唑、苯并咪唑、哌啶、1-甲基哌啶、异喹啉、1,3-二氢异苯并呋喃、苯并呋喃、3-甲基-4H-1,2,4-三唑、5-甲基-1,2,4-噁二唑、噁唑烷-2-酮、甲基噁唑烷-2-酮或吡啶；每一者均是根据本发明的单独实施例。

[0244] 在各个实施例中，本发明提供了本发明的化合物或其农用化学上可接受的盐、两性离子(内盐)、立体异构体、光学异构体、互变异构体、水合物、N-氧化物、反向酰胺类似物、同位素变体(例如，氘代类似物)或其任何组合。在各个实施例中，本发明提供了本发明的化合物的单一立体异构体。在一些实施例中，本发明提供了本发明的化合物的光学异构体。在一些实施例中，本发明提供了本发明的化合物的农用化学上可接受的盐。在一些实施例中，本发明提供了本发明的化合物的互变异构体。在一些实施例中，本发明提供了本发明的化合物的水合物。在一些实施例中，本发明提供了本发明的化合物的N-氧化物。在一些实施例中，本发明提供了本发明的化合物的反向酰胺类似物。在一些实施例中，本发明提供了本发

明的化合物的同位素变体(包括但不限于氘代类似物)。在一些实施例中,本发明提供了本发明的化合物的多晶型物。在一些实施例中,本发明提供了本发明的化合物的晶体。在一些实施例中,本发明提供了一种农用化学组合物,其包括如本文所述的本发明的化合物或在一些实施例中,本发明的化合物的立体异构体、光学异构体、农用化学上可接受的盐、互变异构体、水合物、N-氧化物、同位素变体(氘代类似物)、多晶型物或晶体的任何组合。

[0245] 在各个实施例中,术语“异构体”包含但不限于立体异构体,所述立体异构体包含光学异构体和类似物、结构异构体和类似物、构象异构体和类似物等。在一些实施例中,所述异构体是立体异构体。在另一个实施例中,所述异构体是光学异构体。

[0246] 在各个实施例中,本发明涵盖本发明的化合物的各种立体异构体的用途。本领域的技术人员将理解,本发明的化合物可以含有至少一个手性中心。因此,用于在本发明的方法中使用的化合物可以以光学活性或外消旋形式存在且以所述形式分离。根据本发明的化合物可以进一步作为立体异构体存在,所述立体异构体也可以是光学活性异构体(例如,对映异构体,如(R)或(S))、作为对映异构体富集的混合物、外消旋混合物、或作为单一非对映异构体、非对映异构体混合物、或任何其它立体异构体,包含但不限于:(R) (R)、(R) (S)、(S) (S)、(S) (R)、(R) (R) (R)、(R) (R) (S)、(R) (S) (R)、(S) (R) (R)、(R) (S) (S)、(S) (R) (S)、(S) (S) (R)或(S) (S) (S)立体异构体。一些化合物还可以展现出多态现象。应当理解,本发明涵盖任何外消旋、光学活性、多晶型或立体异构形式或其混合物,所述形式具有可用于控制本文所述的各种不期望的植物的生长的性质。

[0247] 本领域中众所周知的是如何制备光学活性形式(例如,通过利用再结晶技术解析外消旋形式、通过由光学活性起始材料合成、通过手性合成或通过使用手性固定相进行色谱分离)。

[0248] 本发明的化合物还可以以外消旋混合物的形式存在,其含有基本上等量的立体异构体。在一些实施例中,本发明的化合物可以使用已知程序来制备或以其它方式分离,以获得基本上不含其对应立体异构体(即,基本上纯的)的立体异构体。基本上纯的是指立体异构体的纯度为至少约95%,更优选地纯度为至少约98%,最优选地纯度为至少约99%。

[0249] 在各个实施例中,根据本发明的化合物包括基本上纯的立体异构体。在各个实施例中,所述化合物是立体异构体的混合物。在各个实施例中,所述化合物是外消旋体。在各个实施例中,所述立体异构体是对映异构体。在各个实施例中,所述化合物是基本上纯的单一对映异构体。基本上纯的是指立体异构体的纯度为至少约80%,更优选地纯度为至少约90%,甚至更优选地纯度为至少约95%,甚至更优选地纯度为至少约98%,最优选地纯度为至少约99%。在各个实施例中,所述化合物包括纯度>80%、>85%、>90%、>91%、>92%、>93%、>94%、>95%、>96%、>97%、>98%、>99%、>99.5%对映异构体过量(ee)的单一对映异构体;每一者均表示根据本发明的单独实施例。在各个实施例中,所述化合物包括纯度>80%、>85%、>90%、>91%、>92%、>93%、>94%、>95%、>96%、>97%、>98%、>99%、>99.5%对映异构体比率(er)的单一对映异构体;每一者均表示根据本发明的单独实施例。在各个实施例中,所述化合物包括纯度高于80%、85%、90%、91%、92%、93%、94%、95%、96%、97%、98%、99%、99.5%的单一立体异构体;每一者均表示根据本发明的单独实施例。

[0250] 在各个实施例中,所述化合物是基本上纯的单一对映异构体。在各个实施例中,所

述化合物是基本上纯的R对映异构体。在各个实施例中,所述化合物是基本上纯的S对映异构体。在各个实施例中,所述化合物包括对映异构体的混合物。在各个实施例中,所述化合物是外消旋体。在各个实施例中,所述化合物包括立体异构体的混合物。

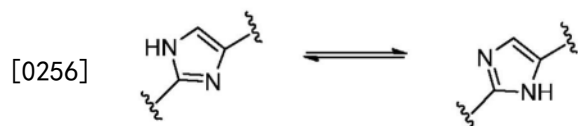
[0251] 在各个实施例中,所述化合物具有两个手性中心。在各个实施例中,所述化合物包括立体异构体的混合物。在各个实施例中,所述化合物包括2种、3种或4种立体异构体的混合物;每一者均表示根据本发明的单独实施例。在各个实施例中,所述化合物是单一立体异构体。在各个实施例中,所述化合物是基本上纯的单一立体异构体。在各个实施例中,所述化合物是基本上纯的RR立体异构体。在各个实施例中,所述化合物是基本上纯的SS立体异构体。在各个实施例中,所述化合物是基本上纯的RS立体异构体。在各个实施例中,所述化合物是基本上纯的SR立体异构体。

[0252] 本发明的化合物还可以呈水合物形式,这意味着所述化合物进一步包含通过非共价分子间力结合的化学计量或非化学计量的量的水。

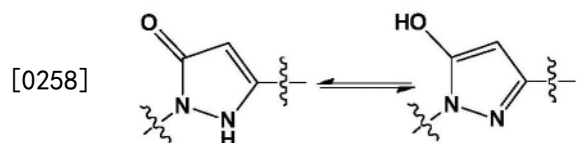
[0253] 如本文所使用的,当一些化学官能团(例如,烷基或芳基)被称为“取代”时,本文定义一个或多个取代是可能的。在一些实施例中,这些取代包含但不限于选自以下的至少一者:F、Cl、Br、I、 C_1 - C_5 直链或支链烷基、 C_2 - C_5 直链或支链烯基(例如,乙烯基)、 C_2 - C_5 直链或支链炔基、烷基酰胺(即, $C(O)NH-R$ 或 $NHC(O)-R$)、烷基酯(即, $COOR$ 或 $OC(O)-R$)、OH、烷氧基、 $N(R)_2$ 、 NH_2 、 CF_3 、芳基、苯基、杂芳基、 C_3 - C_8 环烷基、卤代苯基、CN和 NO_2 。

[0254] 本发明的化合物可以以一种或多种可能的互变异构体的形式存在,并且取决于病状,有可能将一些或所有互变异构体分离成单独且不同的实体。应当理解,本文涵盖所有可能的互变异构体,包含所有另外的烯醇和酮互变异构体和/或异构体。例如,包含以下互变异构体(但不限于这些互变异构体):

[0255] 咪唑环的互变异构化



[0257] 吡唑啉酮环的互变异构化:



[0259] 本发明包含本发明的化合物的“农用化学上可接受的盐”,所述盐可以通过本发明的化合物与酸或碱发生反应而产生。某些化合物,特别是具有酸性或碱性基团的化合物,也可以呈盐的形式,优选地是农用化学上可接受的盐。术语“农用化学上可接受的盐”是指保留游离碱或游离酸的农用化学有效性和性质的那些盐,其在农用化学上或其它方面都不是非所需的。盐由无机酸和有机酸形成,所述无机酸如盐酸、氢溴酸、硫酸、硝酸、磷酸等,所述有机酸如乙酸、丙酸、乙醇酸、丙酮酸、草酸、马来酸、丙二酸、琥珀酸、富马酸、酒石酸、柠檬酸、苯甲酸、肉桂酸、扁桃酸、甲磺酸、乙磺酸、对甲苯磺酸、水杨酸、N-乙酰半胱氨酸等。其它盐是本领域的技术人员已知的并且可以容易地适用于根据本发明使用。

[0260] 本发明的化合物的胺的合适的农用化学上可接受的盐可以由无机酸或有机酸制

备。在各个实施例中,胺的无机盐的实例是硫酸氢盐、硼酸盐、溴化物、氯化物、半硫酸盐、氢溴酸盐、盐酸盐、2-羟乙基磺酸盐(羟基乙烷磺酸盐)、碘酸盐、碘化物、异硫代硫酸盐(isothionate)、硝酸盐、过硫酸盐、磷酸盐、硫酸盐、氨基磺酸盐、磺胺酸盐、磺酸(烷基磺酸盐、芳基磺酸盐、经卤素取代的烷基磺酸盐、经卤素取代的芳基磺酸盐)、磺酸盐和硫氰酸盐。

[0261] 在各个实施例中,胺的有机盐的实例可以选自脂肪族、脂环族、芳香族、芳脂族、杂环、羧酸和磺酸类的有机酸,其实例为乙酸盐、天冬氨酸盐、抗坏血酸盐、己二酸盐、邻氨基苯甲酸盐、藻酸盐(algenate)、烷烃羧酸盐、经取代的烷烃羧酸盐、海藻酸盐、苯磺酸盐、苯甲酸盐、硫酸氢盐、丁酸盐、碳酸氢盐、酒石酸氢盐、柠檬酸盐、樟脑酸盐、樟脑磺酸盐、环己基氨基磺酸盐、环戊烷丙酸盐、依地酸钙(calcium edetate)、樟脑磺酸盐(camsylate)、碳酸盐、克拉维酸盐(clavulanate)、肉桂酸盐、二羧酸盐、二葡萄糖酸盐、十二烷基磺酸盐、二盐酸盐、癸酸盐、庚酸盐、乙磺酸盐(ethanesulfonate)、依地酸盐、乙二磺酸盐、丙酸酯十二烷基硫酸盐(estolate)、乙磺酸盐(esylate)、富马酸盐、甲酸盐、氟化物、半乳糖醛酸盐、葡糖酸盐、谷氨酸盐、乙醇酸盐(glycolate)、葡糖酸盐(glucorate)、葡庚糖酸盐(glucoheptanoate)、甘油磷酸盐、葡庚糖酸盐(gluceptate)、对羟乙酰氨基苯砷酸盐(glycollylarsanilate)、戊二酸盐、谷氨酸盐、庚酸盐、己酸盐、羟基马来酸盐、羟基羧酸、己基间苯二酚盐、羟基苯甲酸盐、羟基萘甲酸盐、氢氟酸盐、乳酸盐、乳糖酸盐、月桂酸盐、苹果酸盐、马来酸盐、亚甲基双(β -氧萘甲酸盐)(methylenebis(beta-oxynaphthoate))、丙二酸盐、扁桃酸盐、甲磺酸盐(mesylate)、甲烷磺酸盐(methane sulfonate)、甲基溴化物、甲基硝酸盐、甲基磺酸盐、马来酸单钾盐、粘酸盐(muicate)、单羧酸盐、萘磺酸盐(naphthalenesulfonate)、2-萘磺酸盐、烟酸盐、硝酸盐、萘磺酸盐(napsylate)、N-甲基葡糖胺、草酸盐、辛酸盐、油酸盐、双羟萘酸盐、苯乙酸盐、苦味酸盐、苯基苯甲酸盐、三甲基乙酸盐(pivalate)、丙酸盐、邻苯二甲酸盐、苯乙酸盐、果胶酸盐、苯丙酸盐、棕榈酸盐、泛酸盐、聚半乳糖酸盐、丙酮酸盐、奎尼酸盐、水杨酸盐、琥珀酸盐、硬脂酸盐、磺胺酸盐、碱式乙酸盐、酒石酸盐、茶碱乙酸盐、对甲苯磺酸盐(甲苯磺酸盐)、三氟乙酸盐、对苯二甲酸盐、单宁酸盐(tannate)、氯茶碱盐(teoclolate)、三卤乙酸盐、三乙基碘(triethiodide)、三羧酸盐、十一碳酸盐(undecanoate)和戊酸盐。

[0262] 在各个实施例中,羧酸或羟基的无机盐的实例可以选自铵、碱金属(包含锂、钠、钾、铯);碱土金属(包含钙、镁、铝;锌、钡、胆碱、季铵)。

[0263] 在一些实施例中,羧酸或羟基的有机盐的实例可以选自精氨酸;有机胺,包含脂肪族有机胺、脂环族有机胺、芳香族有机胺;苄星青霉素(benzathine)、叔丁胺、苄乙苄胺(N-苄基苄乙胺)、二环己胺、二甲胺、二乙醇胺、乙醇胺、乙二胺、海巴胺(hydrabamine)、咪唑、赖氨酸、甲胺、葡甲胺(meglamine)、N-甲基-D-葡糖胺、N,N'-二苄基乙二胺、烟酰胺、有机胺、鸟氨酸、吡啶、皮考啉(picolines)、哌嗪、普鲁卡因(procain)、三(羟甲基)甲胺、三乙胺、三乙醇胺、三甲胺、氨基丁三醇和尿素。

[0264] 在各个实施例中,盐可以通过常规方式形成,如通过使游离碱或游离酸形式的产物与适当的酸或碱的一个或多个等效物在盐不可溶的溶剂或介质中或者在溶剂(如水)中反应,所述溶剂在真空中或通过冷冻干燥或通过将现有盐的离子交换用于另一离子或合适离子交换树脂而去除。

[0265] 农用化学组合物

[0266] 本发明的另一个方面涉及一种农用化学组合物,所述农用化学组合物包含农用化学上可接受的载体或稀释剂和根据本发明的各方面的化合物。农用化学组合物可以含有一种或多种本发明的上述鉴定的化合物。通常,本发明的农用化学组合物将包含本发明的化合物或其农用化学上可接受的盐以及农用化学上可接受的载体或稀释剂。术语“农用化学上可接受的载体”是指任何合适的佐剂、载体、赋形剂或稳定剂,并且可以呈固体或液体形式,如喷雾剂、气溶胶、粉末、溶液、悬浮液或乳液。

[0267] 根据本发明的化合物可以以未改性的形式用作杀虫剂或除草剂,但是所述化合物通常使用如载体、溶剂和表面活性物质等调配物佐剂以各种方式调配成组合物。调配物可以呈各种物理形式,例如,呈撒粉剂、凝胶、可湿性粉末、水可分散性颗粒、水可分散性片剂、泡腾团粒、可乳化浓缩物、微可乳化浓缩物、水包油乳液、油流动剂(oil-flowable)、水性分散体、油性分散体、悬乳剂(suspo-emulsion)、胶囊悬浮液、可乳化颗粒、可溶性液体、水可溶性浓缩物(以水或与水混溶性有机溶剂作为载体)、浸渍的聚合物膜的形式或呈其它已知形式。此类调配物可以直接使用或在使用前稀释。稀释液可以例如由水、液体肥料、微量营养素、生物有机体、油或溶剂制成。

[0268] 通常,组合物将含有约0.01%至99%,优选地约20%至75%的活性化合物以及佐剂、载体和/或赋形剂。尽管个体需要可能有所不同,但确定每种组分的有效量的最佳范围在本领域技术范围内。

[0269] 调配物可以例如通过将活性成分与调配物佐剂混合来制备,以便获得细粉状固体、颗粒、溶液、分散体或乳液形式的组合物。活性成分也可以与其它佐剂一起调配,如细粉状固体、矿物油、植物或动物来源的油、植物或动物来源的改性油、有机溶剂、水、表面活性物质或其组合。

[0270] 活性成分还可以包含在非常细的微胶囊中。微胶囊含有多孔载体中的活性成分。这使得活性成分能够以受控量释放到环境中(例如,缓释)。微胶囊的直径通常为0.1至500微米。所述微胶囊含有胶囊重量的约25重量%至95重量%的量的活性成分。活性成分可以呈整体固体的形式、固体或液体分散体中的细颗粒的形式或合适溶液的形式。包封膜可以包括例如天然或合成橡胶、纤维素、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、聚氨酯或化学改性聚合物和淀粉黄原酸酯或本领域的技术人员已知的其它聚合物。可替代地,可以形成非常细的微胶囊,其中活性成分以细粉状颗粒的形式包含在基础物质的固体基质中,但微胶囊本身不包封。

[0271] 适用于制备根据本发明的组合物的调配物佐剂本身是已知的。作为液体载体,可以使用:水、甲苯、二甲苯、石油醚、植物油、丙酮、甲基乙基酮、环己酮、酸酐、乙腈、苯乙酮、乙酸戊酯、2-丁酮、碳酸亚丁酯、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、二甘醇松香酸酯、二甘醇丁醚、二甘醇乙醚、二甘醇甲醚、二甲基甲酰胺(DMF)、二甲基亚砷(DMSO)、1,4-二噁烷、二丙二醇、二丙二醇甲醚、二丙二醇二苯甲酸酯、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-柠檬烯、乳酸乙酯、乙二醇、乙二醇丁醚、乙二醇甲醚、 γ -丁内酯、甘油、乙酸甘油酯、二乙酸甘油酯、三乙酸甘油酯、十六烷、己二醇、乙酸异戊酯、乙酸异冰片酯、异辛烷、异佛尔酮、异丙基苯、肉豆蔻酸异丙酯、乳酸、月桂胺、异亚丙基丙酮、甲氧

基丙醇、甲基异戊基酮、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、十八烷酸、乙酸辛胺、油酸、油胺、邻二甲苯、苯酚、聚乙二醇、丙酸、乳酸丙酯、碳酸丙烯酯、丙二醇、丙二醇甲醚、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、丙二醇甲醚、二乙二醇甲醚、甲醇、乙醇、异丙醇和具有更高分子量的醇，如戊醇、四氢糠醇、己醇、辛醇、乙二醇、丙二醇、甘油、甲基-2-吡咯烷酮等。

[0272] 合适的固体载体是例如滑石、二氧化钛、叶蜡石粘土、二氧化硅、凹凸棒石粘土、硅藻土、石灰石、碳酸钙、膨润土、钙蒙脱石、棉籽壳、小麦粉、大豆粉、浮石、木粉、磨碎的核桃壳、木质素和类似物质。

[0273] 大量的表面活性物质可以有利地用于固体调配物和液体调配物两者中，尤其是在使用前可以用载体稀释的那些调配物中。表面活性物质可以是阴离子的、阳离子的、非离子的或聚合物的，并且所述表面活性物质可以用作乳化剂、润湿剂或悬浮剂或用于其它目的。典型的表面活性物质包含例如，烷基硫酸酯的盐，如月桂基硫酸二乙醇铵；烷基芳基磺酸盐的盐，如十二烷基苯磺酸钙；烷基酚/环氧烷加成产物，如壬基酚乙氧基化物；醇/环氧烷加成产物，如十三烷醇乙氧基化物；皂类，如硬脂酸钠；烷基萘磺酸盐的盐，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；山梨醇酯，如山梨醇油酸酯；季胺，如月桂基三甲基氯化铵；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；以及单烷基磷酸酯和二烷基磷酸酯的盐；以及本领域技术人员已知的另外的物质。

[0274] 可以用于杀虫和/或除草调配物的另外的佐剂包含结晶抑制剂、粘度改性剂、悬浮剂、染料、抗氧化剂、起泡剂、光吸收剂、混合助剂、消泡剂、络合剂、中和或pH调节物质和缓冲液、腐蚀抑制剂、香料、润湿剂、吸收增强剂、微量营养素、增塑剂、助流剂、润滑剂、分散剂、增稠剂、防冻剂、杀微生物剂以及液体和固体肥料。

[0275] 根据本发明的组合物可以包含添加剂，所述添加剂包括植物或动物来源的油、矿物油、此类油的烷基酯或此类油和油衍生物的混合物。基于待应用的混合物，根据本发明的组合物中的油添加剂的量通常为0.01%至10%。例如，在已经制备喷雾混合物之后，可以将油添加剂以期望浓度添加到喷雾罐中。优选的油添加剂包括矿物油或植物来源的油，例如，菜籽油、橄榄油或葵花油、乳化植物油、植物来源的油的烷基酯，例如甲基衍生物，或动物来源的油，如鱼油或牛油。优选的油添加剂包括C₈-C₂₂脂肪酸的烷基酯，尤其是C₁₂-C₁₈脂肪酸的甲基衍生物，例如，月桂酸、棕榈酸和油酸的甲酯（分别为月桂酸甲酯、棕榈酸甲酯和油酸甲酯）。其它油衍生物是本领域的技术人员已知的，例如，来自《除草剂佐剂纲要 (Compendium of Herbicide Adjuvants)》，第10版，南伊利诺伊大学 (Southern Illinois University)，2010的油衍生物。

[0276] 杀虫和/或除草组合物通常包括0.1重量%至99重量%，尤其是0.1重量%至95重量%的根据本发明的化合物以及1重量%至99.9重量%的调配物佐剂，所述调配物佐剂优选地包含0重量%至25重量%的表面活性物质。本发明的组合物通常包括0.1重量%至99重量%，尤其是0.1重量%至95重量%的本发明的化合物以及1重量%至99.9重量%的调配物佐剂，所述调配物佐剂优选地包含0重量%至25重量%的表面活性物质。尽管市售产品可以优选地被调配成浓缩物，但最终用户通常采用稀释的调配物。

[0277] 应用比率具有较大变化幅度,并且取决于土壤的性质、应用方法、作物植物、要控制的害虫、主要气候条件以及由应用方法、应用时间和目标作物决定的其它因素。作为一般准则,化合物可以以11/ha至20001/ha,尤其是101/ha至10001/ha的比率应用。优选的调配物可以具有以下组成(重量%):

[0278] 可乳化浓缩物:

[0279] • 活性成分:1%至95%,优选地60%至90%

[0280] • 表面活性剂:1%至30%,优选地5%至20%

[0281] • 液体载体:1%至80%,优选地1%至35%

[0282] 灰尘:

[0283] • 活性成分:0.1%至10%,优选地0.1%至5%

[0284] • 固体载体:90%至99.9%,优选地99%至99.9%

[0285] 悬浮液浓缩物:

[0286] • 活性成分:5%至75%,优选地10%至50%

[0287] • 水:24%至94%,优选地30%至88%

[0288] • 表面活性剂:1%至40%,优选地2%至30%

[0289] 可湿性粉末:

[0290] • 活性成分:0.5%至90%,优选地1%至80%

[0291] • 表面活性剂0.5%至20%,优选地1%至15%

[0292] • 固体载体:5%至95%,优选地15%至90%

[0293] 颗粒:

[0294] • 活性成分:0.1%至30%,优选地0.1%至15%

[0295] • 固体载体:70%至99.5%,优选地85%至97%

[0296] 当施用本发明的化合物或农用化学组合物来控制不期望的植物的生长时,农用化学组合物还可以含有或可以与目前已知的或下文研发的用于各种类型植物的生长控制的其它农用化学药剂或处理方案结合施用。

[0297] 因此,本发明的组合物可以进一步包括至少一种另外的杀虫剂,包括但不限于除草剂。例如,根据本发明的化合物也可以与其它杀虫剂、除草剂或植物生长调节剂组合使用。在优选的实施例中,另外的杀虫剂是除草剂和/或除草剂安全剂。

[0298] 可以与本发明的化合物组合使用的除草剂的实例包括但不限于:乙草胺(acetochlor)、氟锁草醚(acifluorfen)(包含三氟羧草醚(acifluorfen-sodium))、苯草醚(aclonifen)、甲草胺(alachlor)、禾草灭(alloxydim)、莠灭净(amestryl)、氨唑草酮(amicarbazone)、酰嘧磺隆(amidosulfuron)、氯丙嘧啶酸(aminocyclopyrachlor)、氯氨吡啶酸(aminopyralid)、杀草强(amtrole)、黄草灵(asulam)、莠去津(atrazine)、苄嘧磺隆(bensulfuron)(包含免速隆(bensulfuron-methyl))、灭草松(bentazone)、氟吡草酮(bicyclopyrone)、双丙氨膦(bilanafos)、治草醚(bifenox)、双草醚(bispyribac-sodium)、二氯异噁草酮(bixlozone)、除草定(bromacil)、溴草腈(bromoxynil)、丁草胺(butachlor)、氟丙嘧草酯(butafenacil)、唑草胺(cafenstrole)、唑草酮(carfentrazone)(包含唑草酮草酯(carfentrazone-ethyl))、氯酯磺草胺酸(cloransulam)(包含氯酯磺草胺(cloransulam-methyl))、氯嘧磺隆(chlorimuron)(包含氯嘧磺隆(chlorimuron-ethyl))、

绿麦隆(chlorotoluron)、醚磺隆(cinosulfuron)、氯磺隆(chlorsulfuron)、环庚草醚(cinmethylin)、氯酰草膦(clacyfos)、烯草酮(clethodim)、炔草酯(clodinafop)(包含炔草酸(clodinafop-propargyl))、广灭灵(clomazone)、二氯吡啶酸(clopyralid)、cyclopyranil、cyclopyrimorate、环丙嘧磺隆(cyclosulfamuron)、氰氟草酸(cyhalofop)(包含氰氟草酯(cyhalofop-butyl))、2,4-D(包含胆碱盐和其2-乙基己基酯)、2,4-DB、杀草隆(daimuron)、甜菜安(desmedipham)、麦草畏(dicamba)(包含其铝、氨基丙基、双氨基丙基甲基、胆碱、二氯丙、二甘醇胺、二甲胺、二甲基铵、钾盐和钠盐)、禾草灵(diclofop-methyl)、双氯磺草胺(diclosulam)、吡氟酰草胺(diflufenican)、野燕枯(difenzoquat)、吡氟酰草胺(diflufenican)、氟吡草腓(diflufenzopyr)、二甲草胺(dimethachlor)、精二甲吩草胺(dimethenamid-P)、敌草快(diquat dibromide)、敌草隆(diuron)、戊草丹(esprocarb)、乙丁烯氟灵(ethalfluralin)、甜菜味(ethofumesate)、噁唑禾草灵(fenoxaprop)(包含精唑禾草灵(fenoxaprop-P-ethyl))、苯磺噁唑草(fenoxasulfone)、fenquinotriene、四唑酰草胺(fentrazamide)、啶嘧磺隆(flazasulfuron)、双氟磺草胺(florasulam)、氯氟吡啶酯(floryprauxifen)、吡氟禾草灵(fluzifop)(包含精吡氟禾草灵(fluzifop-P-butyl))、氟酮磺隆(flucarbazone)(包含氟唑磺隆(flucarbazone-sodium))、氟噁草胺(flufenacet)、氟节胺(flumetralin)、唑嘧磺草胺(flumetsulam)、丙炔氟草胺(flumioxazin)、氟啶嘧磺隆(flupyrsulfuron)(包含氟啶嘧磺隆钠(flupyrsulfuron-methyl-sodium))、使它隆(fluroxypyr)(包含氯氟吡氧乙酸(fluroxypyr-meptyl))、噻草酸甲酯(fluthiacet-methyl)、氟磺胺草醚(fomesafen)、甲酰胺磺隆(foramsulfuron)、草铵膦(glyphosate)(包含其铵盐)、草甘膦(glyphosate)(包含其二铵、异丙基铵和钾盐)、氟氯吡啶酸(halauxifen)(包含氟氯吡啶酯(halauxifen-methyl))、氯吡嘧磺隆(halosulfuron-methyl)、吡氟氯禾灵(haloxypyr)(包含氟吡甲禾灵(haloxypyr-methyl))、环嗪酮(hexazinone)、hydantocidin、甲氧咪草烟(imazamox)、甲咪唑烟酸(imazapic)、灭草烟(imazapyr)、咪唑喹啉酸(imazaquin)、咪唑乙烟酸(imazethapyr)、茚噻氟草胺(indaziflam)、碘甲磺隆(iodosulfuron)(包含碘甲磺隆钠盐(iodosulfuron-methyl-sodium))、iofensulfuron、iofensulfuron钠、碘苯腈(ioxynil)、三唑酰草胺(ipfencarbazone)、异丙隆(isoproturon)、异噁酰草胺(isoxaben)、异噁唑草酮(isoxaflutole)、乳氟禾草灵(lactofen)、lancotriene、利谷隆(linuron)、MCPA、MCPB、mecoprop-P、苯噁草胺(mefenacet)、甲基二磺隆(mesosulfuron)、甲磺胺磺隆(mesosulfuron-methyl)、硝磺草酮(mesotrione)、苯嗪草酮(metamitron)、吡草胺(metazachlor)、异噁唑啉除草剂(methiozolin)、秀谷隆(metobromuron)、异丙甲草胺(metolachlor)、磺草唑胺(metosulam)、甲氧隆(metoxuron)、赛克津(metribuzin)、甲磺隆(metsulfuron)、草达灭(molinate)、敌草胺(napropamide)、烟嘧磺隆(nicosulfuron)、达草灭(norflurazon)、甲嘧啶磺隆(orthosulfamuron)、丙炔噁草酮(oxadiargyl)、噁草灵(oxadiazon)、环氧嘧磺隆(oxasulfuron)、乙氧氟草醚(oxyfluorfen)、百草枯二氯盐(paraquat dichloride)、二甲戊乐灵(pendimethalin)、五氟磺草胺(penoxsulam)、甜菜宁(phenmedipham)、毒莠定(picloram)、氟吡酰草胺(picolinafen)、唑啉草酯(pinoxaden)、丙草胺(pretilachlor)、甲基氟嘧磺隆(primisulfuron-methyl)、氨基乐灵(prodiamine)、扑草净(prometryn)、毒草安(propachlor)、敌稗(propanil)、啞草酯(propaquizafop)、苯

胺灵 (propham)、丙嗪嘧磺隆 (propyrisulfuron)、拿草特 (propyzamide)、苜草丹 (prosulfocarb)、氟磺隆 (prosulfuron)、双唑草腈 (pyraclonil)、吡草醚 (pyraflufen) (包含氟唑草酯 (pyraflufen-ethyl))、磺酰草吡唑 (pyrasulfotole)、吡唑特 (pyrazolynate)、吡嘧磺隆 (pyrazosulfuron-ethyl)、嘧啶肟草醚 (pyribenzoxim)、吡草特 (pyridate)、环酯草醚 (pyriftalid)、吡丙醚 (pyrimisulfan)、嘧草硫醚 (pyrithiobac-sodium)、罗克杀草砜 (pyroxasulfone)、啶磺草胺 (pyroxsulam)、快杀稗 (quinclorac)、氯甲喹啉酸 (quinmerac)、喹禾灵 (quizalofop) (包含精喹禾灵 (quizalofop-P-ethyl) 和喹禾糠酯 (quizalofop-P-tefuryl))、玉嘧磺隆 (rimsulfuron)、苯嘧磺草胺 (saflufenacil)、稀禾定 (sethoxydim)、西玛津 (simazine)、精异丙甲草胺 (S-metolachlor)、磺草酮 (sulcotrione)、甲磺草胺 (sulfentrazone)、磺酰磺隆 (sulfosulfuron)、丁噻隆 (tebuthiuron)、呋喃磺草酮 (tefuryltrione)、环磺酮 (tembotrione)、特丁津 (terbuthylazine)、去草净 (terbutryn)、噻酮磺隆 (thiencarbazone)、噻吩磺隆 (thifensulfuron)、氟嘧硫草酯 (tiafenacil)、tolpyralate、苯吡唑草酮 (topramezone)、肟草酮 (tralkoxydim)、氟酮磺草胺 (triafamone)、野麦畏 (triallate)、醚苯磺隆 (triasulfuron)、苯黄隆 (tribenuron) (包含苯磺隆 (tribenuron-methyl))、绿草定 (triclopyr)、三氟啶磺隆 (trifloxysulfuron) (包含三氟啶磺隆钠盐 (trifloxysulfuron-sodium))、三氟草嗪 (trifludimoxazin)、氟乐灵 (trifluralin)、氟胺磺隆 (triflusulfuron)、三氟甲磺隆 (tritosulfuron)、4-羟基-1-甲氧基-5-甲基-3-[4-(三氟甲基)-2-吡啶基]咪唑烷-2-酮、4-羟基-1,5-二甲基-3-[4-(三氟甲基)-2-吡啶基]咪唑烷-2-酮、5-乙氧基-4-羟基-1-甲基-3-[4-(三氟甲基)-2-吡啶基]咪唑烷-2-酮、4-羟基-1-甲基-3-[4-(三氟甲基)-2-吡啶基]咪唑烷-2-酮、4-羟基-1,5-二甲基-3-[1-甲基-5-(三氟甲基)吡唑-3-基]咪唑烷-2-酮、(4R)1-(5-叔丁基异噁唑-3-基)-4-乙氧基-5-羟基-3-甲基-咪唑烷-2-酮、3-[2-(3,4-二甲氧基苯基)-6-甲基-3-氧代-哒嗪-4-羰基]二环[3.2.1]辛烷-2,4-二酮、2-[2-(3,4-二甲氧基苯基)-6-甲基-3-氧代-哒嗪-4-羰基]-5-甲基-环己烷-1,3-二酮、2-[2-(3,4-二甲氧基苯基)-6-甲基-3-氧代-哒嗪-4-羰基]环己烷-1,3-二酮、2-[2-(3,4-二甲氧基苯基)-6-甲基-3-氧代-哒嗪-4-羰基]-5,5-二甲基-环己烷-1,3-二酮、6-[2-(3,4-二甲氧基苯基)-6-甲基-3-氧代-哒嗪-4-羰基]-2,2,4,4-四甲基-环己烷-1,3,5-三酮、2-[2-(3,4-二甲氧基苯基)-6-甲基-3-氧代-哒嗪-4-羰基]-5-乙基-环己烷-1,3-二酮、2-[2-(3,4-二甲氧基苯基)-6-甲基-3-氧代-哒嗪-4-羰基]-4,4,6,6-四甲基-环己烷-1,3-二酮、2-[6-环丙基-2-(3,4-二甲氧基苯基)-3-氧代-哒嗪-4-羰基]-5-甲基-环己烷-1,3-二酮、3-[6-环丙基-2-(3,4-二甲氧基苯基)-3-氧代-哒嗪-4-羰基]二环[3.2.1]辛烷-2,4-二酮、2-[6-环丙基-2-(3,4-二甲氧基苯基)-3-氧代-哒嗪-4-羰基]-5,5-二甲基-环己烷-1,3-二酮、6-[6-环丙基-2-(3,4-二甲氧基苯基)-3-氧代-哒嗪-4-羰基]-2,2,4,4-四甲基-环己烷-1,3,5-三酮、2-[6-环丙基-2-(3,4-二甲氧基苯基)-3-氧代-哒嗪-4-羰基]环己烷-1,3-二酮、4-[2-(3,4-二甲氧基苯基)-6-甲基-3-氧代-哒嗪-4-羰基]-2,2,6,6-四甲基-四氢吡喃-3,5-二酮和I+4-[6-环丙基-2-(3,4-二甲氧基苯基)-3-氧代-哒嗪-4-羰基]-2,2,6,6-四甲基-四氢吡喃-3,5-二酮。这些另外的药剂还可以以其酯或盐的形式存在。

[0299] 本发明的化合物还可以与除草剂安全剂组合。除草剂安全剂的实例包含但不限

于:解草酮(benoxacor)、喹氧乙酸(cloquintocet) (包含解草喹(cloquintocet-mexyl))、环丙磺酰胺(cyprosulfamide)、二氯丙烯胺(dichlormid)、解草唑(fenclorazole) (包含解草唑(fenclorazole-ethyl))、解草啉(fenclorim)、氟草肟(fluxofenim)、解草噁唑(furilazole)、双苯噁唑酸(isoxadifen) (包含双苯噁唑酸(isoxadifen-ethyl))、吡唑解草酸(mefenpyr) (包含吡唑解草酯(mefenpyr-diethyl))、metcamifen、N-(2-甲氧基苯甲酰基)-4-[(甲基氨基羰基)氨基]苯磺酰胺和解草腈(oxabetrinil);所有这些都可以呈其酯或盐的形式。

[0300] 本发明的化合物还可以与如杀真菌剂、杀线虫剂或杀虫剂等其它农用化学品混合使用,其实例是本领域技术人员已知的。

[0301] 本发明的化合物与另外的药剂的混合比优选地为1:100至1000:1。优选地,本发明的化合物与安全剂的混合比为100:1至1:10,尤其是20:1至1:1。

[0302] 混合物可以有利地用于上述调配物中(在这种情况下,“活性成分”涉及本发明的化合物与另外的药剂的相应混合物)。

[0303] 除草活性

[0304] 在各个实施例中,本发明提供了用于本发明的方法中的任何方法的化合物和组合物,包含本文所述的任何实施例。在各个实施例中,本发明的化合物或包括所述化合物的组合物的用途将在抑制、遏制、增强或刺激期望反应方面具有效用,如本领域的技术人员将理解的。在一些实施例中,组合物可以进一步包括另外的活性成分,所述另外的活性成分的活性对于施用本发明的化合物的特定应用是有用的。

[0305] 本发明的化合物可用作杀虫剂和/或除草剂。因此,本发明进一步包括用于控制不期望的植物的生长的方法,所述方法包括在有效控制有用植物的作物中的不期望的植物的生长(特别是杂草的生长)的条件下,向植物或包括所述植物的所在地应用有效量的根据本发明的化合物或其农用化学组合物。

[0306] 在一些实施例中,根据本发明的“控制”是指杀死、减少或阻滞生长或防止或减少萌芽。通常,要控制的植物是不需要的植物(杂草)。

[0307] 在一些实施例中,“所在地”是指植物正在生长或将生长的区域。

[0308] 本发明的化合物的应用比率可以具有较大变化幅度,并且取决于土壤的性质、应用方法(例如:种植前;萌芽前;萌芽后;应用至种沟;免耕应用等)、作物植物、要控制的杂草、主要气候条件以及由应用方法、应用时间和目标作物决定的其它因素。本发明的化合物通常以10g/ha至2000g/ha,尤其是50g/ha至1000g/ha的比率应用。

[0309] 在一些实施例中,通过喷洒组合物,对于大面积而言,通常通过拖拉机悬挂式喷雾器来进行应用,但也可以使用其它方法,如撒粉(对于粉末)、滴灌或浸灌。

[0310] 在一些实施例中,根据本发明的组合物可以在其上使用的有用植物包含作物,如谷类,包含但不限于大麦和小麦、棉花、油菜、向日葵、玉米、水稻、大豆、甜菜、甘蔗和草皮。

[0311] 在一些实施例中,作物植物还包含树,如果树、棕榈树、椰子树或其它坚果。还包含藤本植物,如葡萄、水果灌木、水果植物和蔬菜。

[0312] 在一些实施例中,作物是抗性作物。因此,根据一些实施例,作物还包含已经通过常规育种方法或通过基因工程使得对除草剂或除草剂类别(包含但不限于ALS-抑制剂、GS-抑制剂、EPSPS-抑制剂、PPO-抑制剂、ACCase-抑制剂和HPPD-抑制剂)具有耐受性的那些作

物。通过基因工程方法使得对除草剂具有耐受性的作物的实例包含但不限于可以商品名 RoundupReady®和 LibertyLink®商购获得的抗草甘膦和抗草铵膦的玉米品种。根据其它实施例,作物还包含通过基因工程方法使得对有害昆虫具有抗性的作物,此类作物的实例包含但不限于: Bt玉米(抗欧洲玉米螟)、Bt棉花(抗棉铃象甲)和Bt马铃薯(抗科罗拉多甲虫)。Bt玉米的非限制性实例包含 NK®(先正达种子(Syngenta Seeds))的Bt 176玉米杂交体。包括编码杀虫抗性并且表达一种或多种毒素的一种或多种基因的非限制性实例是: KnockOut®(玉米)、Yield Gard®(玉米)、NuCOTIN33B®(棉花)、Bollgard®(棉花)、NewLeaf®(马铃薯)、NatureGard®和Protexcta®。植物作物或其种子材料可能对除草剂具有抗性,并且同时对昆虫取食具有抗性(“堆叠的”转基因事件)。

[0313] 在一些实施例中,作物包含通过常规育种方法或基因工程获得的作物,并且含有所谓的输出特性(例如,改善的储存稳定性、更高的营养价值和改善的风味)。其它有用的植物包含例如高尔夫球场、草坪、公园和路边的草坪草,或商业生长的草皮,以及观赏植物,如花或灌木。

[0314] 除草化合物或化学活性除草剂可以分为种植前除草剂、萌芽前除草剂和萌芽后除草剂。种植前和萌芽前除草剂通常干扰杂草种子的萌芽,并且分别在种植或播种之前和之后但在种子萌芽之前应用,而萌芽后除草剂在杂草种子萌芽并且杂草生长开始之后杀死杂草。

[0315] 当施用本发明的化合物时,所述化合物可以在种植前或萌芽前处理中、萌芽后处理中或两者中施用。

[0316] 在各个实施例中,本发明涉及一种控制不期望的植物的生长的方法,所述方法包括将根据本发明的化合物或其农用化学组合物应用于作物田。在一些实施例中,化合物是种植前除草剂。在一些实施例中,化合物是萌芽前除草剂。在一些实施例中,化合物是萌芽后除草剂。因此,在一些实施例中,在不期望的植物萌芽之前将化合物应用于作物田(即,萌芽前或种植前除草剂)。在一些实施例中,在不期望的植物萌芽之后,将化合物应用于作物田(即,萌芽后除草剂)。

[0317] 在各个实施例中,根据本发明的化合物和其农用化学组合物用于控制不期望的植物,所述植物包含各种单子叶和双子叶杂草物种。

[0318] 在一些实施例中,所述不期望的植物是杂草。在一些实施例中,所述不期望的植物是双子叶植物(eudicot或dicotyledonous或dicot)。在一些实施例中,所述不期望的植物是单子叶植物(monocotyledon或monocotyledon或monocot)。

[0319] 通常可以控制的单子叶植物物种的非限制性实例包含:大穗看麦娘、野燕麦(Avena fatua)、车前臂形草(Brachiaria plantaginea)、旱雀麦(Bromus tectorum)、油莎草(Cyperus esculentus)、马唐、稗(Echinochloa crus-galli)、多年生黑麦草、多花黑麦草(Lolium multiflorum)、黍稷(Panicum miliaceum)、早熟禾、狗尾草、大狗尾草(Setaria faberi)和高粱(Sorghum bicolor);每一者均表示根据本发明的单独实施例。

[0320] 可以控制的双子叶植物物种的非限制性实例包含苘麻、反枝苋(Amaranthus retroflexus)、三叶鬼针草(Bidens pilosa)、藜、白苞猩猩草、猪殃殃(Galium aparine)、碗仔花(Ipomoea hederacea)、地肤(Kochia scoparia)、卷茎蓼(Polygonum convolvulus)、刺黄花棊(Sida spinosa)、芥子(Sinapis arvensis)、龙葵、繁缕

(*Stellaria media*)、阿拉伯婆婆纳(*Veronica persica*)和苍耳(*Xanthium strumarium*)；每一者均表示根据本发明的单独实施例。

[0321] 在一些实施例中,所述不期望的植物是苘麻、长芒苋、豚草、大穗看麦娘、不实野燕麦、藜、小蓬草、马唐、光头稗、白苞猩猩草、多年生黑麦草、硬直黑麦草、德国洋甘菊、奇蒿草、早熟禾、马齿苋、狗尾草、龙葵或其任何组合。在一些实施例中,所述化合物是表1和2中列出的化合物中的任何化合物;每种化合物表示根据本发明的单独实施例。

[0322] 在一些实施例中,根据本发明的化合物和组合物用于控制水稻中的不期望的植被。在某些实施例中,不期望的植被是宽叶臂形草(*Brachiaria platyphylla* (Groseb.) Nash(阔叶信号草(broadleaf signalgrass),BRAPP)、马唐(*Digitaria sanguinalis* (L.) Scop)(大马唐草(large crabgrass),DIGSA)、稗(*Echinochloa crus-galli* (L.) P.Beauv.) (稗(bamyardgrass),ECHCG)、光头稗(*Echinochloa colonum* (L.) LINK)(芒稗(junglerice),ECHCO)、水田稗(*Echinochloa oryzoides* (Ard.) Fritsch)(早水草,ECHOR)、稻稗(*Echinochloa oryzicola* (Vasinger) Vasinger)(晚水草,ECHPH)、田间鸭嘴草(*Ischaemum rugosum* Salisb.) (鸭嘴草(saramollagrass),ISCRU)、千金子(*Leptochloa chinensis* (L.) Nees)(中文千金子属,LEFCH)、丛生千金子(*Leptochloa fascicularis* (Lam.) Gray)(有芒千金子(bearded sprangletop),LEFFA)、类黍千金子(*Leptochloa panicoides* (Presl.) Hitchc.) (亚马逊千金子(Amazon sprangletop),LEFPA)、洋野黍(*Panicum dichotomiflorum* (L.) Michx.) (秋黍子(fall panicum),PANDI)、毛花雀稗(*Paspalum dilatatum* Poir.) (雀稗草(dallisgrass),PASDI)、莎草目(*Cyperus difformis* L.) (小花莎草(smallflower flatsedge),CYPDI)、油莎草(*Cyperus esculentus* L.) (黄莎草(yellow nutsedge),CYPES)、碎米莎草(*Cyperus iria* L.) (米莎草(rice flatsedge),CYPPIR)、香附子(*Cyperus rotundus* L.) (紫莎草(purple nutsedge),CYPRO)、荸荠属物种(*Eleocharis species*) (ELOSS)、水虱草(*Fimbristylis miliacea* (L.) Vahl)(飘拂草(globe fringerush),FIMMI)、萤蔺(*Schoenoplectus juncooides* Roxb.) (日本芦苇(Japanese bulrush),SCPJU)、马蹄莲(*Schoenoplectus maritimus* L.) (海芦苇(sea clubrush),SCPMA)、水毛花(*Schoenoplectus mucronatus* L.) (稻田芦苇(ricefield bulrush),SCPMU)、合萌属物种(*Aeschynomene species*) (合萌(jointvetch),AESSS)、喜旱莲子草(*Alternanthera philoxeroides* (Mart.) Griseb.) (空心莲子草(alligatorweed),ALRPH)、泽泻水生车前草属(*Alisma plantago-aquatica* L.) (普通水生车前草(common waterplantain),ALSPA)、苋属物种(*Amaranthus species*) (藜(pigweeds)和苋(amaranths),AMASS)、红水苋(*Ammannia coccinea* Rottb.) (红茎(redstem),AMMCO)、旱莲草(*Eclipta alba* (L.) Hassk.) (美国假菊(American false daisy),ECLAL)、沼生异蕊花(*Heteranthera limosa* (SW.) Willd./Vahl)(鸭沙拉(ducksalad),HETLI)、肾形异蕊花(*Heteranthera reniformis* R.&P.) (圆叶异蕊花属(roundleaf mudplantain),HETRE)、碗仔花(*Ipomoea hederacea* (L.) Jacq.) (裂叶牵牛(ivyleaf momingglory),IPOHE)、美洲母草(*Lindernia dubia* (L.) Pennell)(低陌上菜(low false pimpernel),LIDDU)、雨久花(*Monochoria korsakowii* Regel&Maack)(雨久花属(monochoria),MOOKA)、鸭舌草(*Monochoria vaginalis* (Burm.F.) C.Presl ex Kuhth)(雨久花属(monochoria),MOOVA)、裸花水竹叶(*Murdannia nudiflora* (L.) Brenan)(鸽草

(doveweed), MUDNU)、宾夕法尼亚蓼属(*Polygonum pensylvanicum* L.) (宾夕法尼亚荨麻(*Pennsylvania smartweed*), POLPY)、春蓼(*Polygonum persicaria* L.) (桃叶蓼(*ladysthumb*), POLPE)、杠板归(*Polygonum hydropiperoides* Michx.) (POLHP, 软蓼(*mild smartweed*))、节节菜(*Rotala indica* (Willd.) Koehne) (印度紫水菹菜(*Indian toothcup*), ROTIN)、慈姑属物种(*Sagittaria* species) (慈姑(*arrowhead*), SAGSS)、田菁(*Sesbania exaltata* (Raf) Cory/Rydb. Ex Hill) (大麻田菁属(*hemp sesbania*), SEBEX) 或大麻田菁属(*Sphenoclea zeylanica* Gaertn.) (鹅草(*gooseweed*), SPDZE); 每一者均是根据本发明的单独实施例。在一些实施例中, 所述化合物是表1和2中列出的化合物中的任何化合物; 每种化合物表示根据本发明的单独实施例。

[0323] 在一些实施例中, 根据本发明的化合物和组合物用于控制谷类中的不期望的植被。在某些实施例中, 所述不期望的植被是大穗看麦娘(*Alopecurus myosuroides* Huds.) (黑草(*blackgrass*), ALOMY)、阿坡拉草(*Apera spica-venti* (L.) Beauv.) (风之草(*windgrass*), APESV)、野燕麦(*Avena fatua* L.) (野燕麦(*wild oat*), AVEFA)、旱雀麦(*Bromus tectorum* L.) (丘原雀麦草(*downy brome*), BROTE)、多花黑麦草(*Lolium multiflorum* Lam.) (意大利黑麦草(*Italian ryegrass*), LOLMU)、小子藨草(*Phalaris minor* Retz.) (小种金丝雀草(*littleseed canarygrass*), PHAMI)、早熟禾(*Poa annua* L.) (年生蓝草(*annual bluegrass*), POAAN)、金狗尾草(*Setaria pumila* (Poir.) Roemer & J.A. Schultes) (黄色狗尾草(*yellow foxtail*), SETLU)、狗尾草(*Setaria viridis* (L.) Beauv.) (绿色狗尾草(*green foxtail*), SETVI)、丝路蓟(*Cirsium arvense* (L.) Scop.) (加拿大蓟(*Canada thistle*), CIRARy)、猪殃殃(*Galium aparine* L.) (八仙草(*catchweed bedstraw*), GALAP)、地肤(*Kochia scoparia* (L.) Schrad.) (地肤属(*kochia*), KCHSC)、紫花野芝麻(*Lamium purpureum* L.) (紫色枯荨麻(*purple deadnettle*), LAMPU)、母菊(*Matricaria recutita* L.) (野甘菊(*wild chamomile*), MATCH)、同花母菊(*Matricaria matricarioides* (Less.) Porter) (香甘菊(*pineappleweed*), MATMT)、虞美人(*Papaver rhoeas* L.) (普通罂粟(*common poppy*), PAPRH)、卷茎蓼(*Polygonum convolvulus* L.) (野生荞麦(*wild buckwheat*), POLCO)、刺沙蓬(*Salsola tragus* L.) (俄罗斯蓟(*Russian thistle*), SASKR)、繁缕(*Stellaria media* (L.) Vill) (普通繁缕(*common chickweed*), STEME)、阿拉伯婆婆纳(*Veronica persica* Poir.) (波斯婆婆纳(*Persian speedwell*), VERPE)、野生堇菜(*Viola arvensis* Murr.) (田地紫罗兰(*field violet*), VIOAR) 或三色堇(*Viola tricolor* L.) (野生紫罗兰(*wild violet*), VIOTR); 每一者均是根据本发明的单独实施例。在一些实施例中, 所述化合物是表1和2中列出的化合物中的任何化合物; 每种化合物表示根据本发明的单独实施例。

[0324] 在一些实施例中, 根据本发明的化合物和组合物用于控制牧区和牧场中的不期望的植被。在某些实施例中, 所述不期望的植被是豚草(*Ambrosia artemisiifolia* L.) (普通豚草(*common ragweed*), AMBEL)、钝叶决明(*Cassia obtusifolia*) (镰果灯心草豆(*sickle pod*), CASOB)、斑点矢车菊(*Centaurea maculosa* auct. non-Lam.) (小路边的斑点矢车菊(*spotted knapweed*), CENMA)、丝路蓟(加拿大蓟, CIRAR)、田旋花(*Convolvulus arvensis* L.) (野生旋花(*field bindweed*), CONAR)、乳浆大戟(*Euphorbia esula* L.) (乳浆大戟(*leafy spurge*), EPHEs)、刺萁苣(*Lactuca serriola* L./Tom.) (多刺萁苣(*prickly*

lettuce), LACSE)、长叶车前 (*Plantago lanceolata* L.) (鹿角车前 (buckhorn plantain), PLALA)、钝叶酸模 (*Rumex obtusifolius* L.) (阔叶羊蹄 (broadleaf dock), RUMOB)、刺金午时花 (*Sida spinosa* L.) (刺黄花稔 (prickly sida), SIDSP)、野欧白芥 (*Sinapis arvensis* L.) (野生芥菜 (wild mustard), SINAR)、苜蓿菜 (*Sonchus arvensis* L.) (多年生苜蓿菜 (perennial sowthistle), SONAR)、一枝黄花属物种 (*Solidago* species) (秋麒麟草属 (goldenrod), SOOSS)、药用蒲公英 (*Taraxacum officinale* G.H.Weber ex Wiggers) (蒲公英 (dandelion), TAROF)、白车轴草 (*Trifolium repens* L.) (白三叶草 (white clover), TRFRE) 或异株荨麻 (*Urtica dioica* L.) (普通荨麻 (common nettle), URTDI); 每一者均是根据本发明的单独实施例。在一些实施例中, 所述化合物是表1和2中列出的化合物中的任何化合物; 每种化合物表示根据本发明的单独实施例。

[0325] 在一些实施例中, 根据本发明的化合物和组合物用于防治在行间作物中发现的不期望的植被。在某些实施例中, 所述不期望的植被是大穗看麦娘 (黑草, ALOMY)、野燕麦 (野燕麦, AVEFA)、宽叶臂形草 Nash (阔叶信号草, BRAPP)、马唐 (大马唐草, DIGSA)、稗 (稗, ECHCG)、光头稗 (芒稗, ECHCO)、多花黑麦草 (意大利黑麦草, LOLMU)、洋野黍 (*Panicum dichotomiflorum* Michx.) (秋黍子, PANDI)、黍稷 (*Panicum miliaceum* L.) (野生小米黍 (wild-proso millet), PANMI)、大狗尾草 (*Setaria faberi* Herrm.) (大狗尾草 (giant foxtail), SETFA)、狗尾草 (绿色狗尾草, SETVI)、詹森草 (*Sorghum halepense* (L.) Pers.) (詹森草 (Johnsongrass), SORHA)、蜀黍 (*Sorghum bicolor* (L.) Moench ssp. *Arundinaceum*) (shattercane, SORVU)、油莎草 (黄莎草, CYPES)、香附子 (紫莎草, CYPRO)、苘麻 (*Abutilon theophrasti* Medik.) (绒毛叶 (velvetleaf)、ABUTH)、苋属物种 (藜和苋, AMASS)、豚草 (普通豚草, AMBEL)、多年生豚草 (*Ambrosia psilostachya* DC.) (西方豚草 (western ragweed), AMBPS)、三裂叶豚草 (*Ambrosia trifida* L.) (大豚草 (giant ragweed), AMBTR)、叙利亚马利筋 (*Asclepias syriaca* L.) (普通乳草 (common milkweed), ASCSY)、藜 (*Chenopodium album* L.) (普通灰菜 (common lambsquarters), CHEAL)、丝路蓟 (加拿大蓟, CIRAR)、圆叶鸭跖草 (*Commelina benghalensis* L.) (热带紫露草 (tropical spiderwort), COMBE)、曼陀罗 (*Datura stramonium* L.) (曼陀罗 (jimsonweed), DATST)、胡萝卜 (*Daucus carota* L.) (野生胡萝卜 (wild carrot), DAUCA)、白苞猩猩草 (*Euphorbia heterophylla* L.) (野生一品红 (wild poinsettia), EPHHL)、野塘蒿 (*Erigeron bonariensis* L.) (毛飞蓬 (hairy fleabane), ERIBO)、加拿大蓬 (*Erigeron canadensis* L.) (加拿大飞蓬 (Canadian fleabane), ERICA)、向日葵 (*Helianthus annuus* L.) (普通向日葵 (common sunflower), HELAN)、小花假牵牛 (*Jacquemontia tamnifolia* (L.) Griseb.) (小花牵牛花 (smallflower morningglory), IAQTA)、碗仔花 (裂叶牵牛, IPOHE)、小白花牵牛 (*Ipomoea lacunosa* L.) (白牵牛 (white morningglory), IPOLA)、刺莧苣 (多刺莧苣, LACSE)、马齿苋 (*Portulaca oleracea* L.) (普通马齿苋 (common purslane), POROL)、刺金午时花 (*Sida spinosa* L.) (刺黄花稔, SIDSP)、野欧白芥 (野生芥菜, SINAR)、东方龙葵 (*Solanum ptychanthum* Dunal) (东方龙葵 (eastern black nightshade), SOLPT) 或苍耳 (*Xanthium strumarium* L.) (普通苍耳 (common cocklebur), XANST); 每一者均是根据本发明的单独实施例。在一些实施例中, 所述化合物是表1和2中列出的化合物中的任何化合物; 每种化合物表示根据本发明的单独实施例。

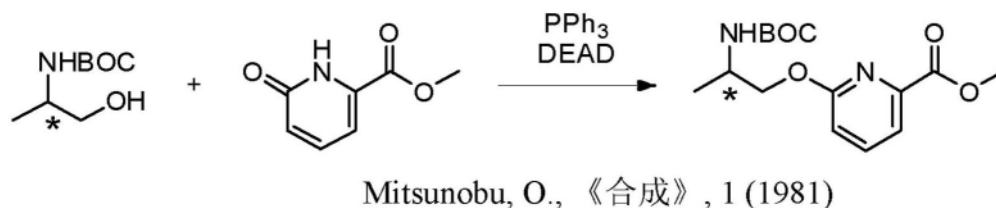
[0326] 呈现以下实例是为了更全面地展示本发明的优选实施例。然而,所述实例决不应被解释为限制本发明的广泛范围。

[0327] 实例

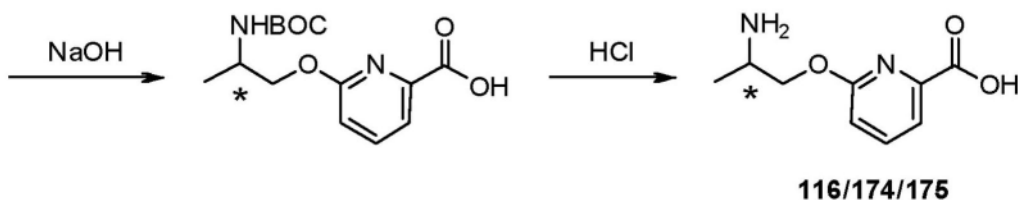
[0328] 实例1

[0329] 本发明的化合物的合成细节

[0330] 化合物116、174、175及其类似物是如以下方案1所描绘进行合成的。第一步骤涉及羟基吡啶与期望的氨基保护的氨基醇之间的光延偶联(Mitsunobu coupling) (Mitsunobu, O.,《合成(Synthesis)》,1(1981))。此偶联之后是两个去保护步骤:酯的碱性水解和氨基的酸性裂解。化合物116的NMR光谱描绘于图1中。

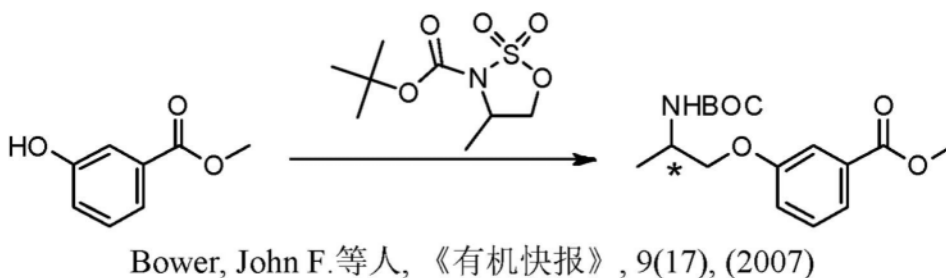


[0331]

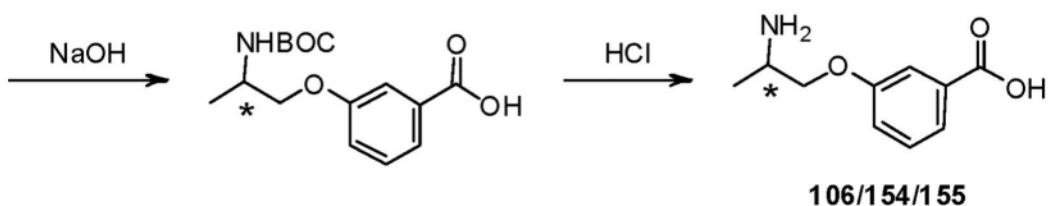


[0332] 方案1:化合物116/174/175的合成

[0333] 化合物106、154、155及其类似物是如以下方案2所描绘进行合成的。第一步骤涉及对如在Bower等人[Bower, John F.等人,《有机快报(Org Lett)》,9(17), (2007)]中所描述的期望的适当保护的氨基醇的酚类亲核攻击。此反应之后是两个去保护步骤:酯的碱性水解和氨基的酸性裂解。化合物106的NMR光谱描绘于图2中。

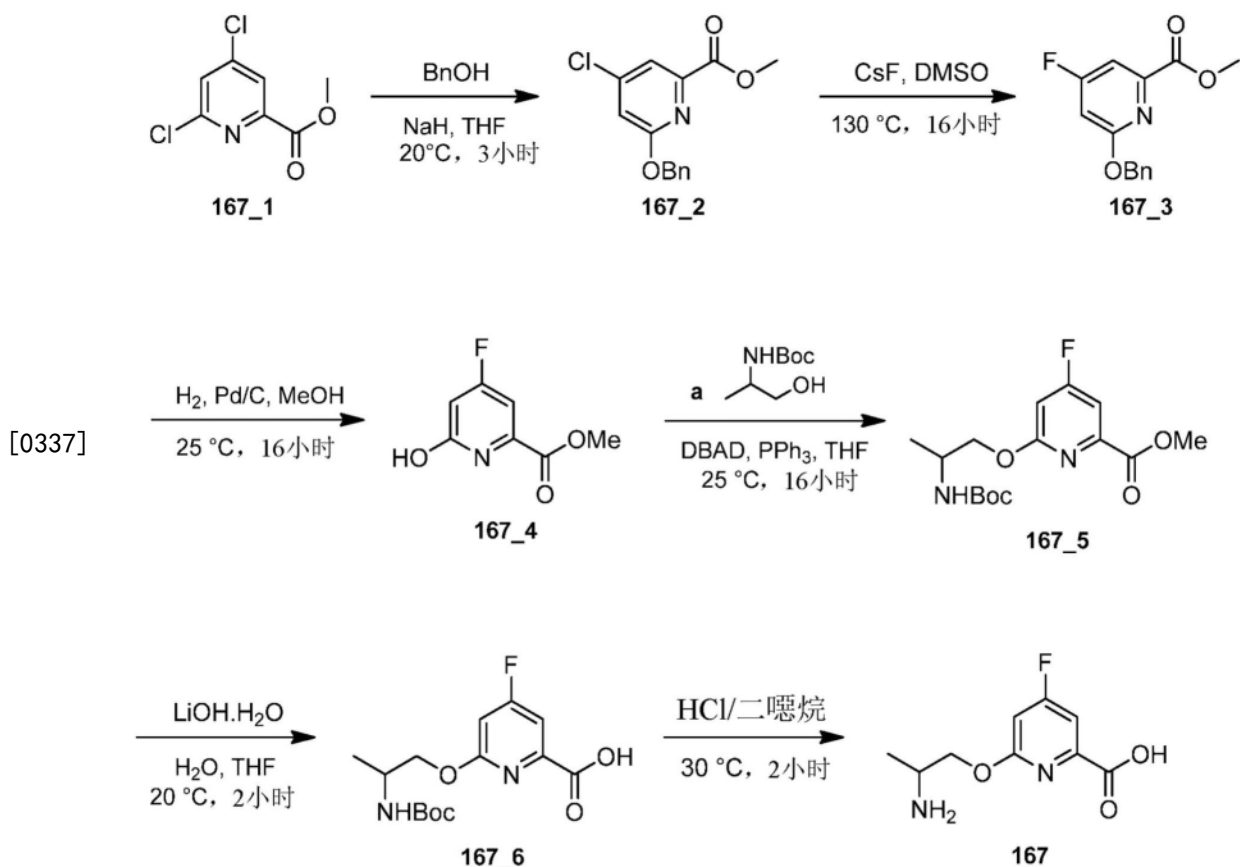


[0334]



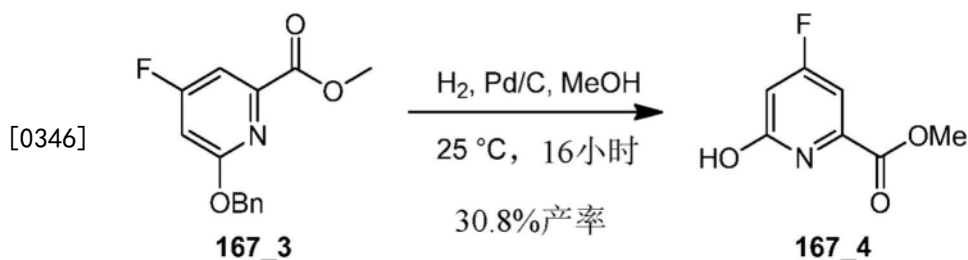
[0335] 方案2:化合物106/154/155的合成

[0336] 化合物167的合成



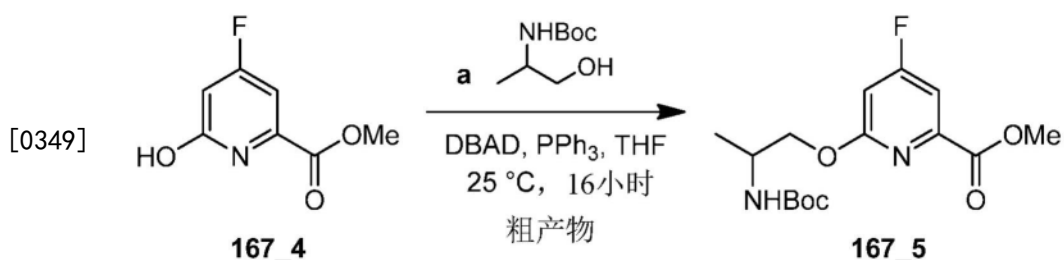
[0344] 向化合物167_2(10g, 36.01mmol, 1当量)于DMSO(25mL)中的溶液中一次性添加CsF(16.41g, 108.03mmol, 3.98mL, 3当量)。将反应混合物在130℃下搅拌16小时。LCMS显示起始材料被消耗, 并且形成19.6%的期望产物。将反应混合物倒入水(50mL)中并过滤。将滤液用EtOAc(50mL*3)萃取。将合并的有机层经MgSO₄干燥, 过滤并浓缩, 以得到粗产物。通过柱色谱法(SiO₂, 乙酸乙酯:石油醚=0至7/93)对粗产物进行纯化, 以得到呈黄色固体的化合物167_3(3g, 4.70mmol, 13.04%产率, 40.9%纯度)。

[0345] 步骤3-化合物167_4的合成



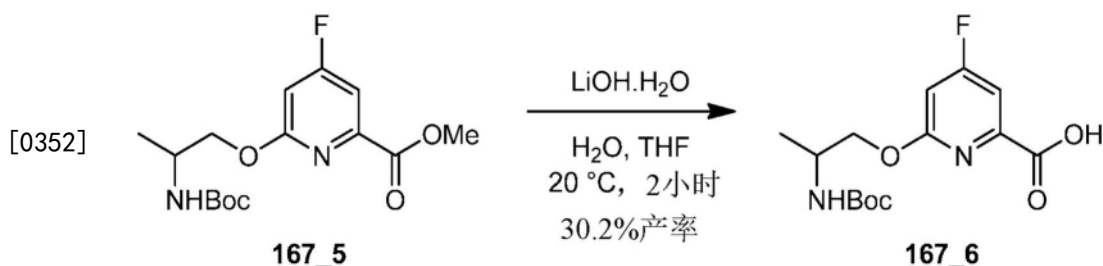
[0347] 在25℃下在N₂下, 向化合物167_3(3.00g, 11.48mmol, 1当量)于MeOH(20mL)中的溶液中添加Pd/C(2.00g, 1.88mmol, 10%纯度, 1.64e-1当量)。将悬浮液在真空下脱气并用H₂吹扫若干次。将混合物在H₂(15psi)下在25℃下搅拌16小时。LCMS显示起始材料被消耗, 并且形成32.6%的期望产物。将混合物用硅藻土过滤并且将滤液在减压下浓缩, 以得到无色油。通过柱色谱法(SiO₂, 四氢呋喃/石油醚=0至46/54)对粗产物进行纯化, 以得到呈白色固体的化合物167_4(0.682g, 3.55mmol, 30.89%产率, 89%纯度), 经LCMS证实。

[0348] 步骤4-化合物167_5的合成



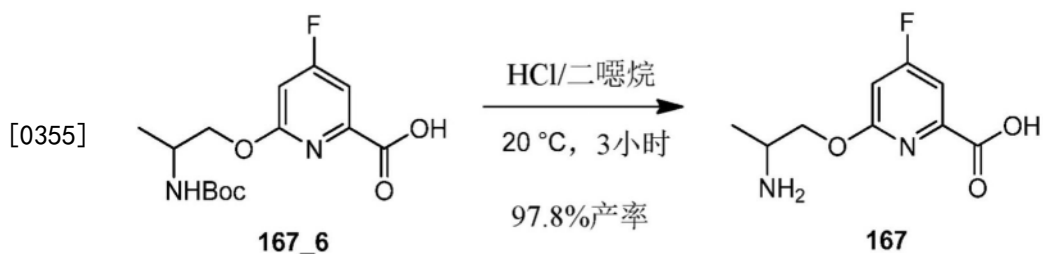
[0350] 在0-10℃下, 向化合物167_4(680mg, 3.97mmol, 1当量)、化合物a(1.04g, 5.96mmol, 1.5当量)和PPh₃(1.56g, 5.96mmol, 1.5当量)于THF(14mL)中的混合物中分批添加DBAD(1.37g, 5.96mmol, 1.5当量)。在添加之后, 将反应混合物在25℃下搅拌16小时。LCMS显示起始材料被消耗, 并且形成18.1%的期望产物。将反应混合物倒入水(50mL)中并用EtOAc(50mL*3)萃取, 用盐水(50mL*2)洗涤。将合并的有机层经MgSO₄干燥, 过滤并浓缩, 以得到粗产物, 通过柱色谱法(SiO₂, 乙酸乙酯/石油醚=0至9/91)对所述粗产物进行纯化, 以得到呈白色固体的化合物167_5(2.00g, 粗产物), 经LCMS证实(94.76%)。

[0351] 步骤5-化合物167_6的合成



[0353] 在20°C下,向化合物167_5(2g,6.09mmol,1当量)于THF(20mL)和H₂O(20mL)中的溶液中添加LiOH·H₂O(383.39mg,9.14mmol,1.5当量)。将反应在20°C下搅拌2小时。LCMS显示起始材料被消耗,并且形成94.4%的期望产物。将反应混合物倒入水(50mL)中并用MTBE(50mL*3)萃取。将水相用1M HCl酸化至pH=4并用EtOAc(50mL*3)萃取。将合并的有机层经MgSO₄干燥,过滤并浓缩,以得到呈黄色固体的化合物167_6(0.594g,1.84mmol,30.25%产率,97.5%纯度),经LCMS证实(97.5%)。

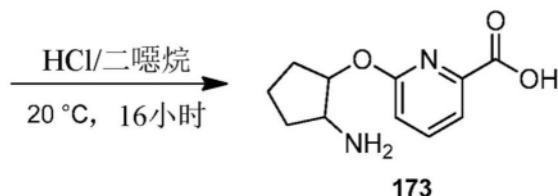
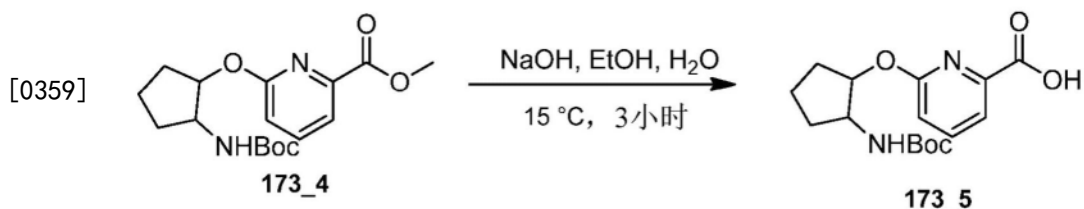
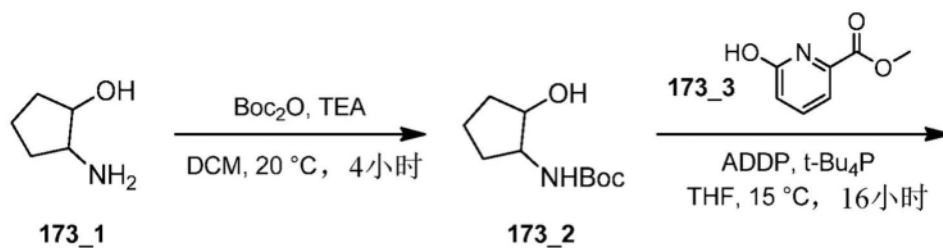
[0354] 步骤6-化合物167的合成



[0356] 在0-10°C下,向化合物167_6(0.594g,1.89mmol,1当量)于二噁烷(6mL)中的溶液中逐滴添加HCl/二噁烷(4M,6mL,12.70当量)。将反应混合物在20°C下搅拌3小时。LCMS显示起始材料被消耗,并且形成99.0%的期望产物。将反应混合物浓缩,以得到呈白色固体的化合物167(0.468g,1.85mmol,97.81%产率,99.0%纯度,HCl)。

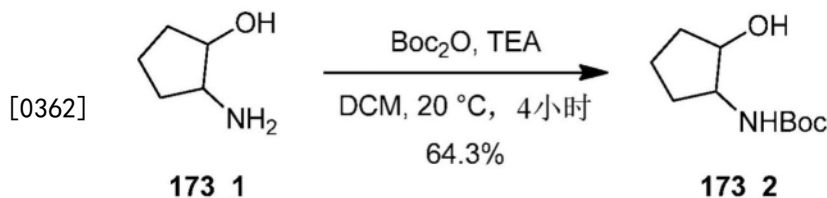
[0357] ¹H NMR(400MHz,DMSO-d₆) δ8.64-8.12(m,3H),7.69-7.45(m,1H),7.15-6.89(m,1H),4.50-4.45(m,1H),4.41-4.37(m,1H),3.66-3.60(m,1H),1.36-1.20(m,3H)

[0358] 化合物173的合成



[0360] 方案4: 化合物173的合成。

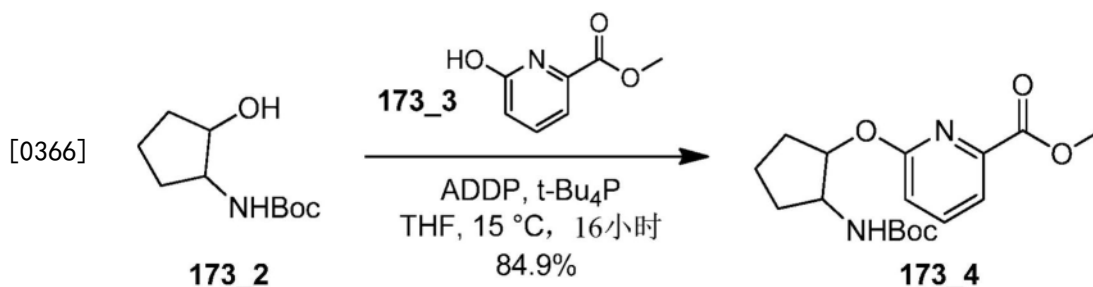
[0361] 步骤1-化合物173_2的合成



[0363] 向化合物173_1于DCM (50mL) 中的溶液中添加TEA (7.50g, 74.2mmol) 和Boc₂O (8.09g, 37.1mmol)。将混合物在20 °C下搅拌4小时。TLC (PE:EtOAc=1:1, SM R_f=0.0, 产物R_f=0.5) 指示反应物173_1被完全消耗, 并且检测到一个具有较大极性的主要新斑点。将反应混合物在减压下浓缩以去除THF。通过快速硅胶色谱法 (ISCO®; 40g SepaFlash® 硅胶快速柱, 在50毫升/分钟下的0~50% 乙酸乙酯/石油醚梯度的洗脱液) 对残余物进行纯化。获得呈白色固体的化合物173_2 (3.20g, 64.3% 产率)。

[0364] ¹H NMR: (400MHz, CDCl₃) δ 4.70 (br s, 1H), 4.04-3.94 (m, 1H), 3.70-3.58 (m, 1H), 2.14-2.06 (m, 1H), 2.03-1.96 (m, 1H), 1.84-1.58 (m, 4H), 1.45 (s, 9H)

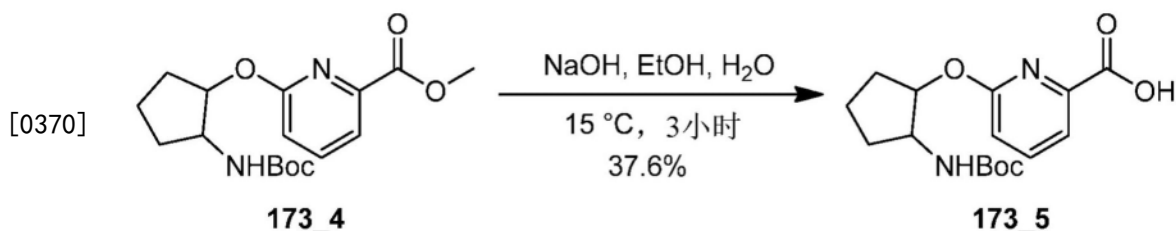
[0365] 步骤2-化合物173_4的合成



[0367] 向化合物173_3(1.20g, 7.83mmol)、化合物173_2(1.50g, 7.45mmol)于THF(30mL)中的溶液中添加ADDP(3.95g, 15.7mmol)和三丁基膦(4.52g, 22.4mmol)。将混合物在15℃下搅拌16小时。LC-MS显示反应物173_3被完全消耗,并且检测到期望质量。将反应混合物在减压下浓缩以去除THF。将残余物用H₂O(20mL)稀释并用EtOAc(10mL*3)萃取。将合并的有机层过滤并在减压下浓缩以得到残余物。将粗产物用MTBE(25mL)研磨30分钟。产物在滤液中。通过快速硅胶色谱法(ISCO®; 12g SepaFlash®硅胶快速柱,在20毫升/分钟下的0~20%乙酸乙酯/石油醚梯度的洗脱液)对残余物进行纯化。获得呈黄色油的化合物173_4(2.13g, 84.9%产率)。

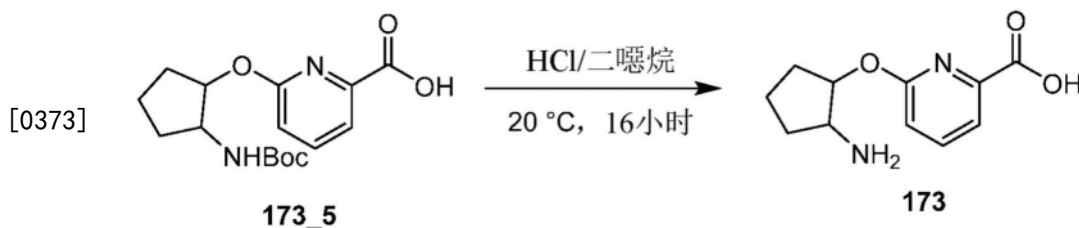
[0368] ¹H NMR: (400MHz, DMSO-d₆) δ7.87-7.82(m, 1H), 7.63(d, J=7.1Hz, 1H), 7.01(d, J=8.0Hz, 1H), 6.71(br d, J=7.9Hz, 1H), 3.87-3.82(m, 3H), 2.06-1.81(m, 2H), 1.77-1.48(m, 5H), 1.30-1.17(m, 9H)

[0369] 步骤3-化合物173_5的合成



[0371] 向化合物173_4(1.00g, 2.97mmol)于EtOH(10mL)和H₂O(10mL)中的溶液中添加NaOH(357mg, 8.92mmol)。将混合物在15℃下搅拌3小时。LC-MS显示反应物173_4被完全消耗,并且检测到一个具有期望质量的主峰。将反应混合物通过添加1M HCl(5mL)酸化至3,并且然后用EtOAc(30mL*3)萃取。将合并的有机层用盐水(40mL)洗涤,经MgSO₄干燥,过滤并在减压下浓缩以得到残余物。通过制备型HPLC(柱:Xtimate C18 150*40mm*10um;流动相:[水(0.05% HCl)-ACN];B%:40%-70%,10分钟)对残余物进行纯化。获得呈白色固体的化合物173_5(360mg, 37.6%产率)。

[0372] 步骤4-化合物173的合成

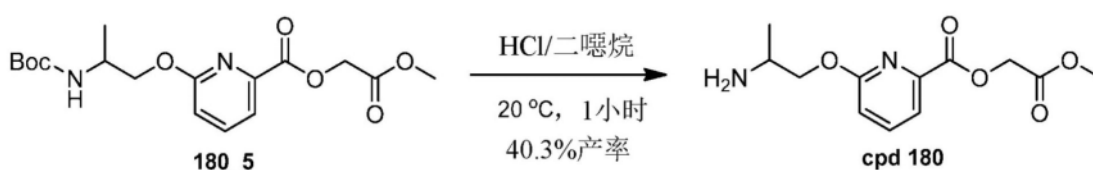
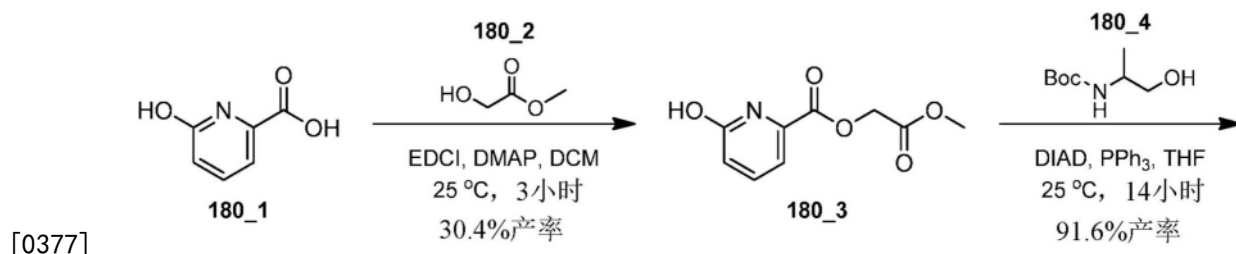


[0374] 向化合物173_5(326mg, 1.01mmol)于二噁烷(3mL)中的溶液中添加HCl/二噁烷(3mL)。将混合物在20℃下搅拌16小时。LC-MS显示反应物173_5被完全消耗,并且检测到一

个具有期望质量的主峰。将反应混合物在减压下浓缩以去除溶剂。将粗产物用EtOAc (10mL) 研磨16小时。获得呈白色固体的CPD 173 (269mg, 粗产物, HCl)。

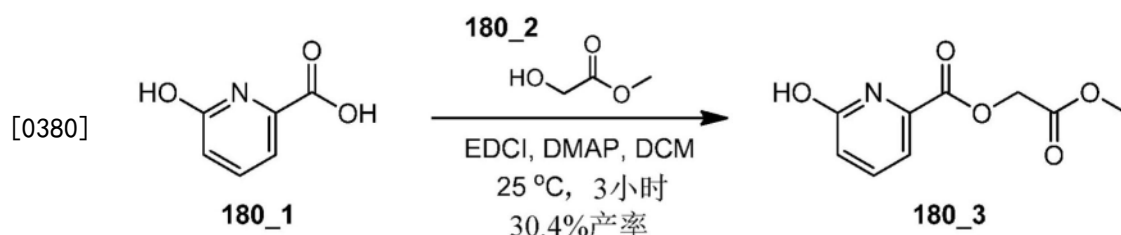
[0375] $^1\text{H NMR}$: (400MHz, DMSO- d_6) δ 8.32 (br s, 3H), 7.95-7.86 (m, 1H), 7.69 (d, $J=7.0\text{Hz}$, 1H), 7.09 (d, $J=8.1\text{Hz}$, 1H), 5.49-5.41 (m, 1H), 3.75-3.63 (m, 1H), 2.17-2.00 (m, 2H), 1.91-1.74 (m, 3H), 1.69-1.53 (m, 1H)

[0376] 化合物180的合成



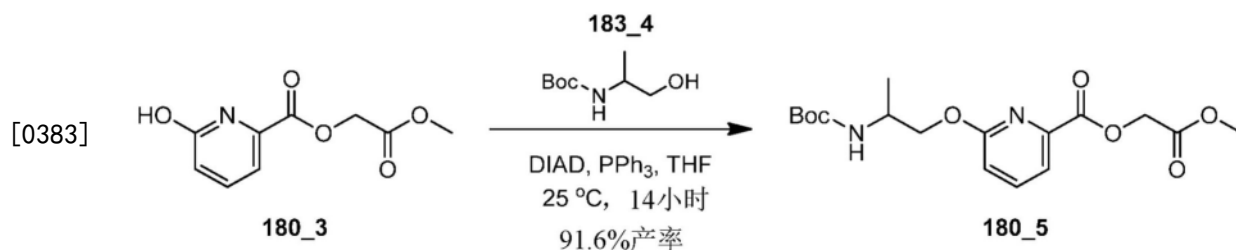
[0378] 方案5: 化合物180的合成

[0379] 步骤1-化合物180_3的合成



[0381] 向化合物180_1 (3.00g, 21.6mmol) 于DCM (60mL) 中的溶液中添加化合物180_2 (1.94g, 21.6mmol, 1.66mL) 和EDCI (5.37g, 28.0mmol)、DMAP (263mg, 2.16mmol)。将混合物在25°C下搅拌3小时。TLC (石油醚: 乙酸乙酯=3:1, $R_f=0.4$) 指示化合物180_2被完全消耗, 并且形成一个具有较大极性的新斑点。将反应混合物在减压下浓缩以去除溶剂。将残余物用水 (30mL) 稀释并用DCM (30mL*3) 萃取。将合并的有机层用盐水 (90mL) 洗涤, 经 MgSO_4 干燥, 过滤并在减压下浓缩以得到残余物。通过快速硅胶色谱法 (ISCO®; 40g SepaFlash® 硅胶快速柱, 在40毫升/分钟下的0~2% DCM/MeOH梯度的洗脱液) 对残余物进行纯化, 以得到呈白色固体的化合物180_3 (1.40g, 6.56mmol, 30.4%产率, 99%纯度)。

[0382] 步骤2-化合物180_5的合成

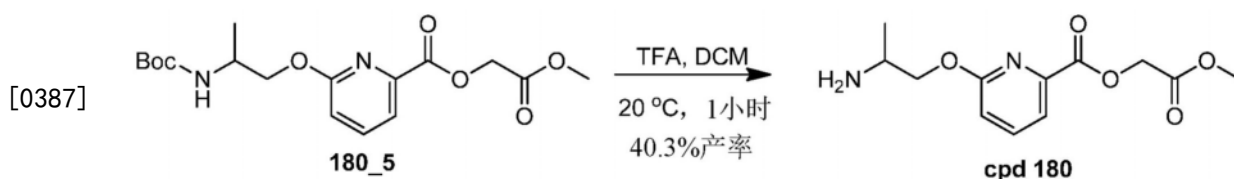


[0384] 在0°C下在 N_2 下, 向化合物180_3 (1.40g, 6.63mmol) 和化合物183_4 (1.16g,

6.63mmol) 于干燥THF (40mL) 中的混合物中添加PPh₃ (1.74g, 6.63mmol), 随后添加DIAD (1.34g, 6.63mmol, 1.29mL), 并且然后将混合物在N₂气氛下在25℃下搅拌14小时。LC-MS显示化合物183_4被完全消耗, 并且检测到一个具有期望质量的主峰。将反应混合物在减压下浓缩以去除溶剂。将残余物用水 (30mL) 稀释并用乙酸乙酯 (30mL*3) 萃取。将合并的有机层用盐水 (90mL) 洗涤, 经Na₂SO₄干燥并在减压下浓缩, 以得到残余物。通过快速硅胶色谱法 (ISCO®; 60g SepaFlash® 硅胶快速柱, 在40毫升/分钟下的0~19% 乙酸乙酯/石油醚梯度的洗脱液) 对残余物进行纯化, 以得到呈白色固体的化合物180_5 (2.3g, 6.06mmol, 91.6% 产率, 97% 纯度)。

[0385] ¹H NMR (400MHz, CDCl₃) δ7.83-7.77 (m, 1H), 7.76-7.69 (m, 1H), 7.04-6.96 (m, 1H), 5.08-4.92 (m, 4H), 4.91 (s, 2H), 4.42-4.33 (m, 2H), 4.20-4.06 (m, 1H), 3.81 (s, 3H), 1.45 (s, 9H)。

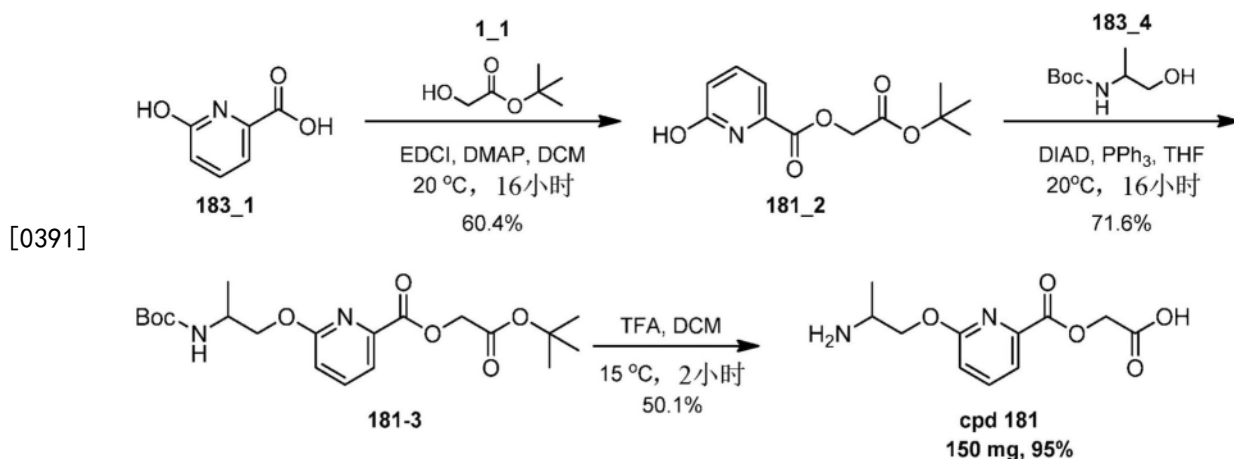
[0386] 步骤3-化合物180的合成



[0388] 将化合物180_5 (1.00g, 2.71mmol) 和4M HCl/二噁烷 (20mL) 的混合物在20℃下搅拌1小时。LC-MS显示化合物180_5被完全消耗, 并且检测到一个具有期望质量的主峰。将反应混合物在减压下浓缩以去除溶剂。将残余物用DCM (10mL) 稀释并用水 (10mL*3) 萃取。将水相在真空中冷冻干燥以得到残余物。通过制备型HPLC [HCl条件, 柱:Xtimate C18 150*40mm*10um; 流动相:[水 (0.05% HCl) -ACN]; B%:0%-30.0%, 10分钟] 对残余物进行纯化, 以得到呈白色固体的cpd 180 (300mg, 1.09mmol, 40.3% 产率, 97.8% 纯度)。

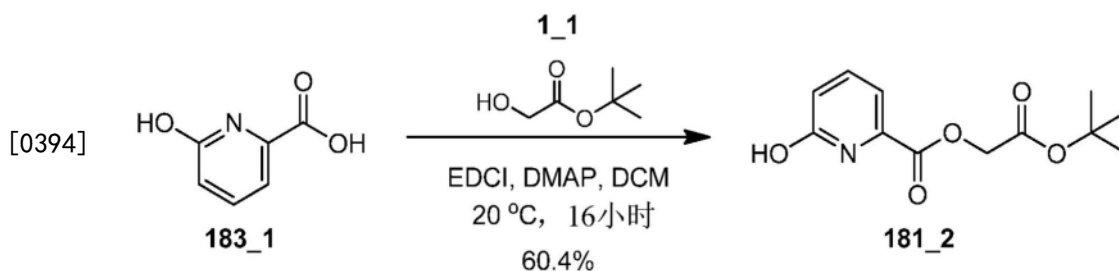
[0389] ¹H NMR (400MHz, DMSO-d₆) δ8.37 (br s, 3H), 8.01-7.94 (m, 1H), 7.78 (dd, J=2.2, 7.1Hz, 1H), 7.18 (dd, J=4.1, 8.3Hz, 1H), 4.96 (s, 1H), 4.84 (s, 2H), 4.44-4.37 (m, 2H), 3.71 (s, 2H), 3.63 (br s, 1H), 1.31 (d, J=6.8Hz, 3H)。

[0390] 化合物181的合成



[0392] 方案6: 化合物181的合成

[0393] 步骤1-化合物181_2的合成

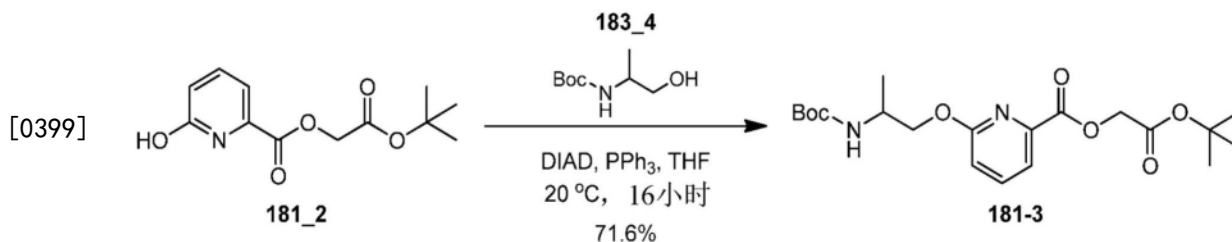


[0395] 向化合物183_1 (500mg, 3.59mmol) 和化合物1_1 (475mg, 3.59mmol) 于DCM (2mL) 中的溶液中添加EDCI (896mg, 4.67mmol) 和DMAP (44.0mg, 359 μ mol)。将混合物在20 $^\circ$ C下搅拌16小时。LC-MS显示反应完成, 并且检测到一个具有期望质量的主峰。将反应混合物用H₂O (50mL) 稀释并用EtOAc (50mL*3) 萃取。将合并的有机层用盐水 (100mL) 洗涤, 经MgSO₄干燥, 过滤并在减压下浓缩以得到残余物。通过快速硅胶色谱法 (ISCO®; 20g SepaFlash® 硅胶快速柱, 在20毫升/分钟下的0~20% DCM/MeOH的洗脱液) 对残余物进行纯化, 以得到呈白色固体的化合物181_2 (550mg, 60.4% 产率)。

[0396] ¹H NMR: (400MHz, DMSO-d₆)

[0397] δ 11.56 (br d, J=2.8Hz, 1H), 7.71 (dd, J=7.3, 8.5Hz, 1H), 7.30 (br d, J=6.0Hz, 1H), 6.80 (d, J=8.8Hz, 1H), 4.79 (s, 2H), 1.43 (s, 9H)。

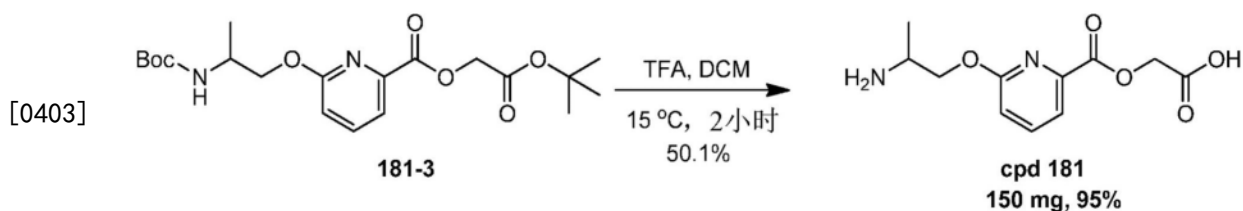
[0398] 步骤2-化合物181_3的合成



[0400] 向化合物181_2 (500mg, 1.97mmol) 和化合物183_4 (346mg, 1.97mmol) 于THF (15mL) 中的溶液中添加DIAD (399mg, 1.97mmol) 和PPh₃ (517mg, 1.97mmol)。将混合物在20 $^\circ$ C下搅拌16小时。LC-MS显示反应完成, 并且检测到一个具有期望质量的主峰。将反应混合物用H₂O (50mL) 稀释并用EtOAc (50mL*3) 萃取。将合并的有机层用盐水 (100mL) 洗涤, 经MgSO₄干燥, 过滤并在减压下浓缩以得到残余物。通过快速硅胶色谱法 (ISCO®; 20g SepaFlash® 硅胶快速柱, 在20毫升/分钟下的0~20% 乙酸乙酯/石油醚梯度的洗脱液) 对残余物进行纯化, 以得到呈白色固体的化合物181_3 (580mg, 71.6% 产率)。

[0401] ¹H NMR: (400MHz, DMSO-d₆) δ 7.92 (dd, J=7.4, 8.2Hz, 1H), 7.73 (d, J=6.8Hz, 1H), 7.12 (d, J=8.1Hz, 1H), 6.92 (br d, J=8.1Hz, 1H), 4.81 (s, 2H), 4.16 (br d, J=6.0Hz, 2H), 3.93-3.81 (m, 1H), 1.44 (s, 9H), 1.38 (s, 9H), 1.12 (d, J=6.8Hz, 3H)。

[0402] 步骤3-化合物181的合成

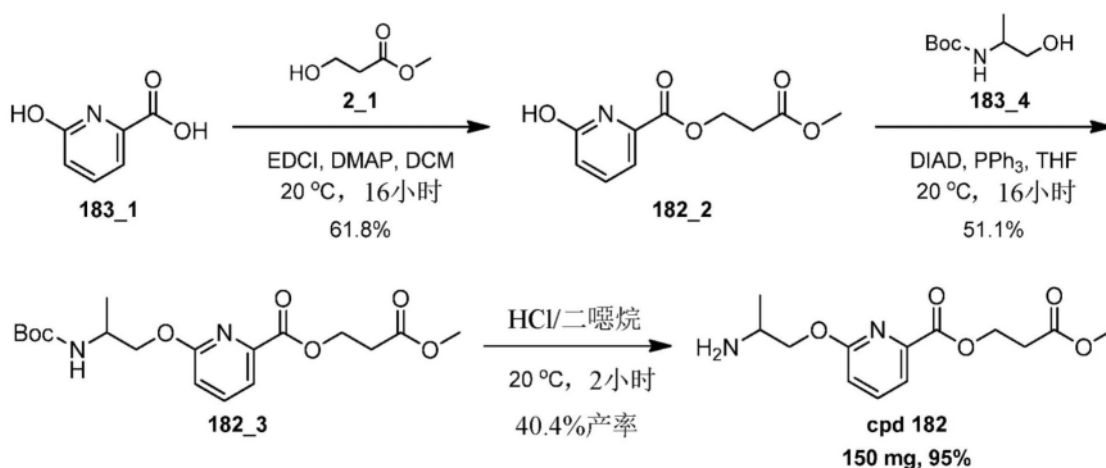


[0404] 向化合物181_3 (500mg, 1.22mmol) 于DCM (5mL) 中的溶液中添加TFA (1mL)。将混合

物在15℃下搅拌2小时。LC-MS显示反应物被完全消耗,并且检测到一个具有期望质量的主峰。将反应混合物过滤并在减压下浓缩以得到残余物。通过制备型HPLC (HCl条件;柱: Xtimate C18 150*40mm*10um;流动相:[水(0.05% HCl) -ACN];B%:0%-30%,10分钟)对残余物进行纯化,以得到呈白色固体的化合物181(155mg,50.1%产率)。

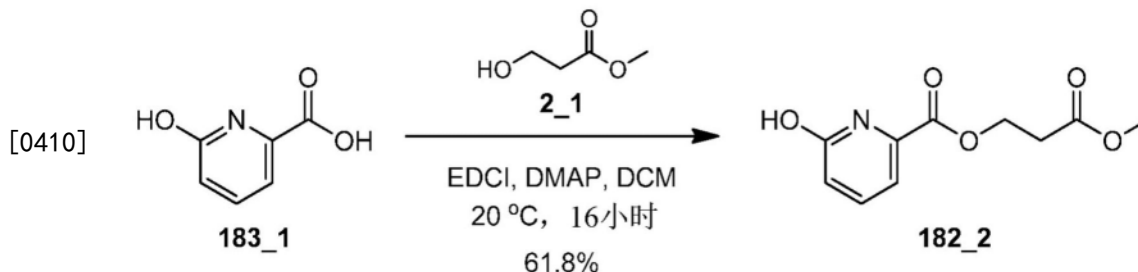
[0405] $^1\text{H NMR}$: (400MHz, DMSO- d_6) δ 8.37 (br s, 3H), 7.98 (t, $J=7.8\text{Hz}$, 1H), 7.79 (d, $J=7.1\text{Hz}$, 1H), 7.19 (d, $J=8.3\text{Hz}$, 1H), 4.85 (s, 2H), 4.45-4.32 (m, 2H), 3.64 (br s, 1H), 1.32 (br d, $J=6.6\text{Hz}$, 3H)

[0406] 化合物182的合成



[0408] 方案7:化合物182的合成

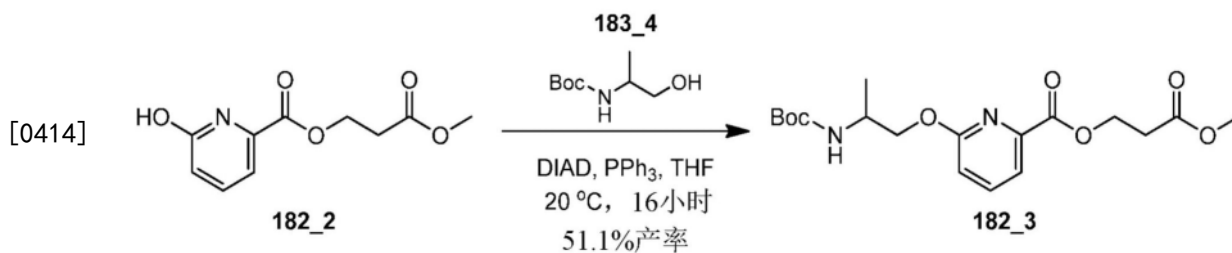
[0409] 步骤1-化合物182_2的合成



[0411] 向化合物183_1 (1g, 7.19mmol) 和化合物2_1 (748.5mg, 7.19mmol) 于DCM (20mL) 中的溶液中添加EDCI (1.79g, 9.35mmol) 和DMAP (87.8mg, 719 μ mol)。将混合物在20℃下搅拌16小时。LC-MS显示化合物183_1被完全消耗,并且检测到一个具有期望质量的主峰。将反应混合物用H₂O (50mL) 稀释并用EtOAc (50mL*3) 萃取。将合并的有机层用盐水 (100mL) 洗涤,经MgSO₄干燥,过滤并在减压下浓缩以得到残余物。通过快速硅胶色谱法 (ISCO®; 20g SepaFlash®硅胶快速柱,在20毫升/分钟下的0~7% DCM/MeOH的洗脱液)对残余物进行纯化,以得到呈白色固体的化合物182_2 (1.00g, 61.8%产率)。

[0412] $^1\text{H NMR}$: (400MHz, DMSO- d_6) δ 11.58 (br s, 1H), 7.68-7.60 (m, 1H), 7.19-7.07 (m, 1H), 6.73 (d, $J=8.8\text{Hz}$, 1H), 4.47 (t, $J=6.1\text{Hz}$, 2H), 3.64 (s, 4H), 2.83 (t, $J=6.1\text{Hz}$, 2H)。

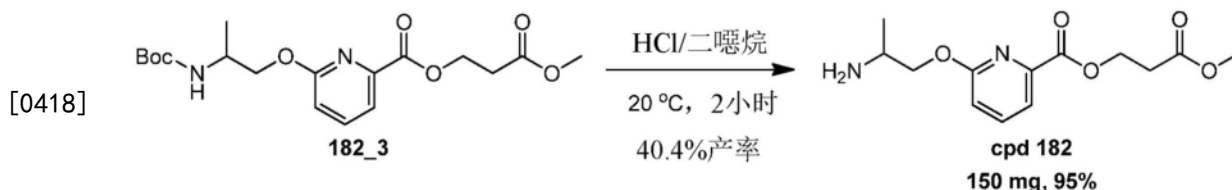
[0413] 步骤2-化合物182_3的合成



[0415] 向化合物182_2(1.17g, 6.66mmol)和化合物183_4(1.00g, 4.44mmol)于THF(15mL)中的溶液中添加DIAD(97.9mg, 4.44mmol)和PPh₃(1.16g, 4.44mmol)。将混合物在20℃下搅拌16小时。TLC(石油醚:乙酸乙酯=4:1, R_f=0.19)显示反应完成。将反应混合物用H₂O(50mL)稀释并用EtOAc(50mL*3)萃取。将合并的有机层用盐水(100mL)洗涤,经MgSO₄干燥,过滤并在减压下浓缩以得到残余物。通过快速硅胶色谱法(ISCO®; 80g SepaFlash®硅胶快速柱,在80毫升/分钟下的0~17%乙酸乙酯/石油醚梯度的洗脱液)对残余物进行纯化,以得到呈白色固体的化合物182_3(1.30g, 3.40mmol, 51.1%产率)。

[0416] ¹H NMR: (400MHz, CDCl₃) δ7.75-7.67(m, 2H), 7.00-6.92(m, 1H), 4.64(t, J=6.4Hz, 2H), 4.46-4.29(m, 2H), 4.10(br s, 1H), 3.75(s, 3H), 2.85(t, J=6.4Hz, 2H), 1.44(s, 9H), 1.26(s, 3H)。

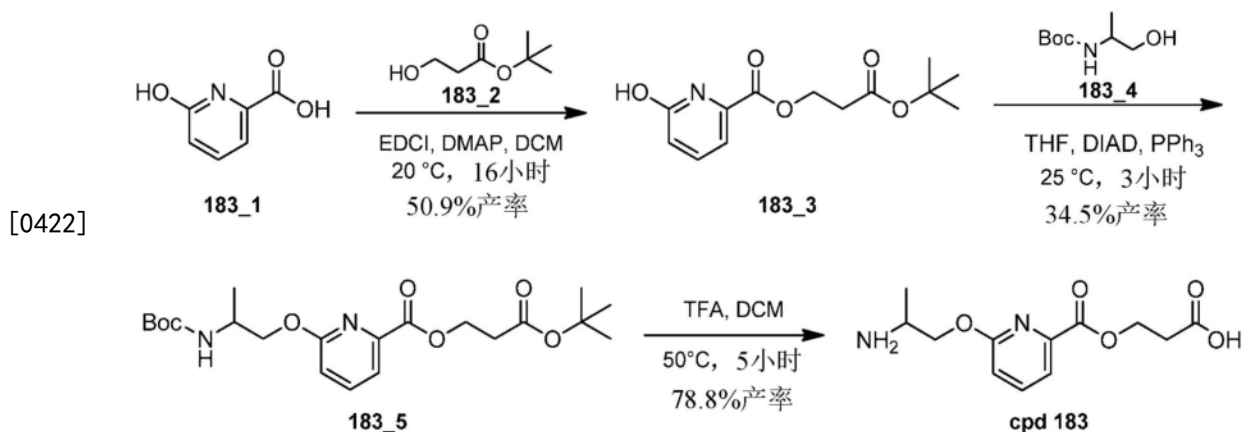
[0417] 步骤3-化合物182的合成



[0419] 将182_3(0.50g, 1.31mmol)于4M HCl/二噁烷(5mL)中的溶液在20℃下搅拌2小时。LCMS显示反应完成。将反应混合物在减压下浓缩以得到残余物,将残余物再溶解于水(20mL)中,用DCM(15mL*3)洗涤,将水相在真空下浓缩以得到残余物。通过制备型HPLC(HCl条件,柱:Xtimate C18 150*40mm*10um;流动相:[水(0.05% HCl)-ACN];B%:0%-35%,10分钟)对残余物进行纯化,以得到呈白色固体的cpd 182(300mg, 1.06mmol, 40.4%产率, 99.4%纯度)。

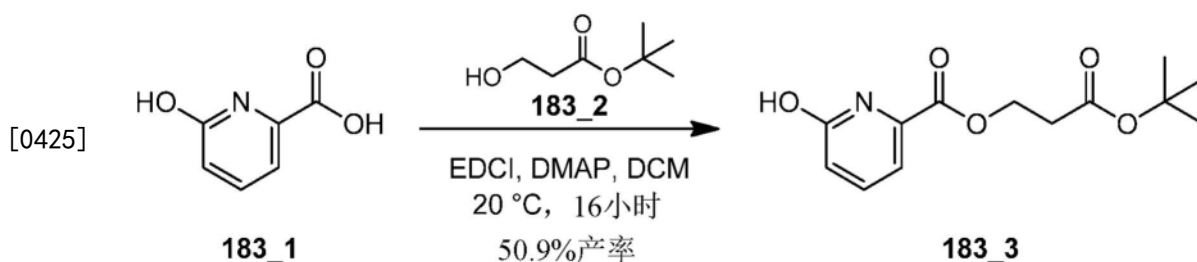
[0420] ¹H NMR: (400MHz, DMSO-d₆) δ8.39(br s, 3H), 7.95(t, J=8.0Hz, 1H), 7.74-7.64(m, 1H), 7.15(d, J=8.0Hz, 1H), 4.52-4.40(m, 4H), 4.37-4.30(m, 1H), 3.64(s, 3H), 2.86-2.70(m, 2H), 1.31(d, J=6.6Hz, 3H)。

[0421] 化合物183的合成



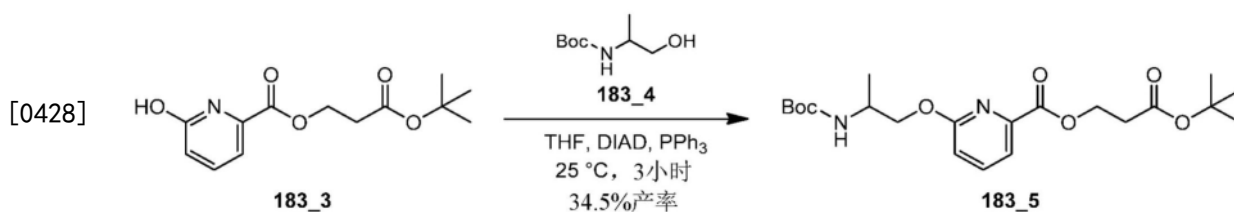
[0423] 方案8:化合物183的合成

[0424] 步骤1-化合物183_3的合成



[0426] 向化合物183_1 (952mg, 6.84mmol) 于DCM (40mL) 中的溶液中添加化合物183_2 (1.00g、6.84mmol, 1.01mL)、EDCI (1.70g, 8.89mmol) 和DMAP (83.6mg, 684 μ mol)。将混合物在20 $^\circ$ C下搅拌16小时。TLC (石油醚:乙酸乙酯=10:1, $R_f=0.3$) 指示化合物183_2被完全消耗, 并且形成一个具有较大极性的新斑点。根据TLC, 反应是干净的。将反应混合物在减压下浓缩以去除溶剂。将残余物用水 (30mL) 稀释并用DCM (30mL*3) 萃取。将合并的有机层用盐水 (90mL) 洗涤, 经MgSO₄干燥, 过滤并在减压下浓缩以得到残余物。通过快速硅胶色谱法 (ISCO[®]; 40.0g SepaFlash[®]硅胶快速柱, 在10.0毫升/分钟下的0~2% MeOH/DCM的洗脱液) 对残余物进行纯化, 以得到呈白色固体的化合物183_3 (930mg, 3.48mmol, 50.9%产率)。

[0427] 步骤2-化合物183_5的合成

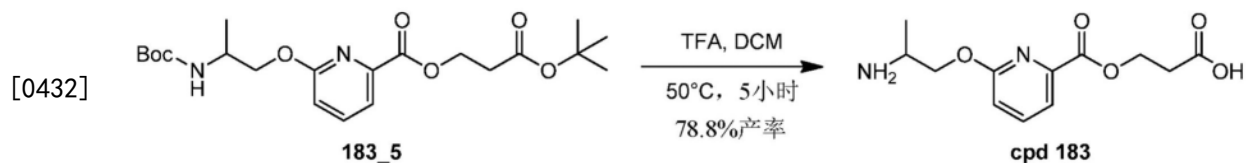


[0429] 在0 $^\circ$ C下在N₂下, 向化合物183_3 (930mg, 3.48mmol) 和化合物183_4 (670mg, 3.83mmol) 于干燥THF (10mL) 中的混合物中添加PPh₃ (1.00g, 3.83mmol), 随后添加DIAD (774mg, 3.83mmol, 744 μ L), 并且然后将混合物在N₂气氛下在25 $^\circ$ C下搅拌3小时。LC-MS显示化合物183_4被完全消耗, 并且检测到一个具有期望质量的主峰。将反应混合物在减压下浓缩以去除溶剂。将残余物用水 (30mL) 稀释并用DCM (30mL*3) 萃取。将合并的有机层用盐水 (90mL) 洗涤, 经MgSO₄干燥, 过滤并在减压下浓缩以得到残余物。通过快速硅胶色谱法 (ISCO[®]; 20.0g SepaFlash[®]硅胶快速柱, 在20毫升/分钟下的0~17%乙酸乙酯/石油醚梯度的洗脱液) 对残余物进行纯化, 以得到呈白色固体的化合物183_5 (510mg, 1.20mmol, 34.5%)。

产率)。

[0430] $^1\text{H NMR}$: (400MHz, CDCl_3) δ 7.65-7.58 (m, 2H), 6.90-6.84 (m, 1H), 5.13-4.76 (m, 1H), 4.52 (t, $J=6.5\text{Hz}$, 2H), 4.37-4.19 (m, 2H), 4.01 (br s, 1H), 2.65 (s, 2H), 1.37 (d, $J=10.1\text{Hz}$, 18H), 1.18 (d, $J=6.8\text{Hz}$, 3H)。

[0431] 步骤3-化合物183的合成



[0433] 向化合物183_5 (600mg, 1.41mmol) 于DCM (8mL) 中的溶液中添加TFA (3.08g, 27.0mmol, 2.00mL)。将混合物在50°C下搅拌5小时。LC-MS显示化合物183_5被完全消耗,并且检测到一个具有期望质量的主峰。将反应混合物在减压下浓缩以去除溶剂。将残余物溶解于DCM (10mL) 中并用水 (10mL*3) 萃取。将水相在真空中冷冻干燥以得到残余物。通过制备型HPLC [柱: Xtimate C18 150*40mm*10 μm ; 流动相: [水 (0.05% HCl) - ACN]; B%: 0% - 30%, 10分钟) 对残余物进行纯化, 以得到呈白色固体的cpd 183 (300mg, 1.11mmol, 78.8%产率, 99.6%纯度)。

[0434] $^1\text{H NMR}$: (400MHz, $\text{DMSO}-d_6$) δ 8.35 (br s, 3H), 7.95 (dd, $J=7.4, 8.2\text{Hz}$, 1H), 7.69 (d, $J=7.3\text{Hz}$, 1H), 7.15 (d, $J=8.3\text{Hz}$, 1H), 4.49-4.40 (m, 4H), 3.67-3.59 (m, 1H), 2.73 (t, $J=6.2\text{Hz}$, 2H), 1.31 (d, $J=6.6\text{Hz}$, 3H)。

[0435] 实例2

[0436] 除草活性数据

[0437] 在杂草小组上的应用

[0438] 化合物(活性成分; A. I.) 的除草活性通过以下温室实验来证明:

[0439] 植物原位低通量筛选 (LTP) 结果

[0440] 萌芽后处理

[0441] 将八种杂草物种的基本小组 (表3) 播种在4 \times 4 \times 7cm的含有花园混合物 (klasmann 公司 (klasmann)) 的塑料花盆中。将每个物种播种在单独的花盆中。在每个花盆中, 根据物种活力播种10-15粒种子。在1-2片真叶期确定应用时间。将植物在受控温室 (白天26 \pm 2°C, 夜晚20 \pm 2°C) 中生长30天。漫灌 (自来水+Shefer 5:3:8 8mM) 是以50重量%的水含量进行的。在应用前两天, 所测试的植物间苗至每个花盆三株植物。化合物可溶于水 (DDW), 并且市售除草剂对照可溶于调配物B (表4)。在应用之前, 将1% (v/v) 的作物油和0.02% (v/v) 的表面活性剂 (TergitolTM 15-S-7) 添加到溶液中。用工业喷雾器 (TeeJet 6502E喷嘴) 以2kg/ha的比率和480l/ha的喷量进行应用。在3个时间点 (应用后4天、8天、12天 (DAA)) 对植物进行评估。在每个时间点, 使用0-6级 (0: 无可见效果, 6: 最大效果) 记录视觉表型分型。在12DAA, 收获植物叶子, 干燥并称重, 以进行干重分析。

[0442] 萌芽后高级剂量反应实验包含4种物种: SETVI、ECHCO、AMAPA、ABUTH (表3、5)。以介于0.6kg/ha-0.0187kg/ha之间的六个比率和480l/ha的喷量进行应用。在4个时间点 (6、12、18和26DAA) 对植物进行评估。在每个时间点, 使用0-6级 (0: 无可见效果, 6: 最大效果) 记录视觉表型分型。在26DAA, 收获植物叶子, 干燥并称重, 以进行干重分析。

[0443] 萌芽后高级宽小组实验包含24种杂草物种(表5)。以2kg/ha和0.25kg/ha的2个比率和480l/ha的喷量进行应用。在4、11、17和20DAA,使用0-6级(0:无可见效果,6:最大效果)记录视觉表型分型。在21DAA,收获植物叶子,干燥并称量,以进行干重分析。所有实验包含未处理的对照、溶剂对照和阳性对照(市售除草剂A.I.)。通过 ≥ 3.5 的中值和费希尔检验(Fisher test) ($pval \leq 0.05$) 确定视觉表型分型的统计分析。通过抑制 $\% \geq 50$ 和T检验($pval \leq 0.05$)以及威尔科克斯检验(Wilcox test) ($pval \leq 0.05$) 确定干重的统计分析。

[0444] 萌芽前处理

[0445] 将8种杂草物种的基本小组(表3)播种在 $4 \times 4 \times 7$ cm的含有惰性沙(甜沙)的塑料花盆中,用渗透水充分洗涤。将每个物种播种在单独的花盆中。在每个花盆中,根据物种活力播种10-15粒种子。在应用前一天进行播种。将植物在受控温室(白天 $26 \pm 2^\circ\text{C}$,夜晚 $20 \pm 2^\circ\text{C}$)中生长21天。漫灌(自来水+Shefer 5:3:8 8mM)是以50重量%的水含量进行的。化合物可溶于水(DDW),并且市售除草剂对照可溶于调配物B(表4)。用工业喷雾器(TeeJet 6502E喷嘴)以2kg/ha的比率和480l/ha的喷量进行应用。

[0446] 以介于1kg/ha-0.0312kg/ha之间的六个比率和480l/ha的喷量进行萌芽前高级剂量反应实验应用。在15DAA评估萌芽百分比。在18DAA,使用0-6级(0:无可见效果,6:最大效果)记录视觉表型分型。所有实验包含未处理的对照、溶剂对照和阳性对照(市售除草剂A.I.)。通过 ≥ 3.5 的中值和费希尔检验($pval \leq 0.05$) 确定视觉表型分型的统计分析。通过萌芽 $\% \geq 50$ 和T检验($pval \leq 0.05$)以及威尔科克斯检验($pval \leq 0.05$) 确定植物萌芽的统计分析。

[0447] 表3:基本杂草小组物种

拜耳代码	学名
ABUTH	苘麻
AMBEL	豚草
AMAPA	长芒苋
MATCH	德国洋甘菊
ALOMY	大穗看麦娘
POAAN	早熟禾
LOLPE	多年生黑麦草
SETVI	狗尾草

[0449] 表4:调配物

调配物	成分
A	100% DDW
B	48.5%丙酮 40% DDW
	10%异丙醇 1.5% DMSO

[0452] 表5:高级杂草小组物种

拜耳代码	学名
------	----

ABUTH	苘麻
AMBEL	豚草
AMAPA	长芒苋
MATCH	德国洋甘菊
ERICA	小蓬草
EPHHL	白苞猩猩草
AMARE	反枝苋
SOLNI	龙葵
CHEAL	藜
POROL	马齿苋
GLXMA	大豆(Glycine max)
BRSNN	欧洲油菜(Brassica napus)
ALOMY	大穗看麦娘
POAAN	早熟禾
LOLPE	多年生黑麦草
SETVI	狗尾草
DIGSA	马唐
ECHCO	光头稗
LOLRI	硬直黑麦草
PHAPA	奇蒿草
ZEAMX	玉蜀黍
AVEST	不实野燕麦
TRZAX	普通小麦(Triticum aestivum)
ORYSA	稻

[0454] 小型双子叶植物模型植物上的萌芽后应用

[0455] 将拟南芥种子播种在填充有使用自来水洗涤掉盐和矿物质的灌溉甜沙(10% >粘土)的96孔板中。将5-10个种子播种在每个孔的中心。播种后7-8天,在2片真叶期,进行间苗以确保在每孔单株植物上进行化合物应用。将板以随机顺序置于受控温室中的浴盆内,所述浴盆允许用补充有肥料的自来水进行漫灌。将所应用的化合物溶解在50%丙酮、49.9% DDW、0.1%吐温-20的最终溶液中。

[0456] 将96孔板用作用于制备8个重复的应用溶液的储备板。每行含有每种化学品的不同浓度。用于应用的最大浓度为1.5Kg/Ha,并且稀释系数为2.5。在化学罩中间苗后一天进行化学应用。使用12个通道移液管将5μL应用于每个孔中的前两个真叶上。数据收集:使用照相机记录每孔绿地面积的RGB(红、绿、蓝)数据。在实验期间的几个时间点收集数据:间苗后一天以及在化学应用之前,应用后两天、六天或九天。在最后两次记录期间,进行了视觉表型分型。数据分析:给定RGB结果和视觉表型评分,进行学生t检验以比较连续数据(RGB)的处理和对照表现,并且进行费希尔精确检验以分析非连续数据(表型评分)。将处理的对数浓度范围用作因变量和归一化的绿地面积,为每种处理产生剂量-反应曲线以推断ED₅₀和最大抑制参数。

[0457] 在双子叶植物和单子叶植物模型植物上的萌芽前应用

[0458] 类似地进行这些实验,除了播种拟南芥或埃塞俄比亚画眉草种子(分别为5-10粒或5-7粒),不进行植物间苗,将化合物溶解在50%丙酮、49.9% DDW的最终溶液中,在植物萌芽之前以每孔30 μ L的体积直接在播种的土壤上应用化合物,并且分别在双子叶植物或单子叶植物上进行化学应用后10或7天收集数据。

[0459] 成像、RGB和统计分析

[0460] 在11和18DAA进行板成像。记录每孔绿地面积的RGB数据,并且将所述数据用于提取抑制%。将处理的对数浓度范围用作自变量并且将归一化的绿地面积用作因变量,为每种处理建立剂量-反应曲线以推断ED₅₀、ED₇₅和ED₉₀参数。给定RGB结果并且使用学生t检验(p-val \leq 0.05),将处理与对照表现进行比较。

[0461] 结果:

[0462] 所选择化合物的植物体内HTPS(土壤上的高通量)和体外抑制结果呈现于下表6中:

[0463] 表6:根据本发明的化合物的除草活性(体外和植物体内)。

[0464]

化合物编号	体外		HTPS-双子叶植物-萌芽后		HTPS-双子叶植物-萌芽前		HTPS-单子叶植物-萌芽前	
	热移位(°C)	K _d (mM)	ED ₅₀ (g/ha)	最大效果(%)	ED ₅₀ (g/ha)	最大效果(%)	ED ₅₀ (g/ha)	最大效果(%)
108	16	TBD	31	100	31	100	290	80
122	16	TBD	19	100			TBD	89
116	16	TBD	3	100	10	100	10	100
107	14	7.3	400	100	127	100	660	45
109	14	TBD	TBD	TBD			681	80
106	13	2.5	102	100	33	100	380	87
102	13	8.5	127	92	127	100	650	62
154	13	TBD	16	100			150	100
155	13	TBD	56	100	60	100	170	100
101	13	TBD	N/R	24	N/R	20	N/R	12
148	12	TBD	N/R	17	N/R	28	TBD	100
121	11	TBD	256	99				

	139	9	5.8	TBD	TBD	256	100		
	127	9	TBD	134	100	180	100	TBD	94
	129	9	TBD	45	81			550	86
	103	8	TBD	157	100				
	119	7	TBD	N/R	33	N/R	22	N/R	3
	133	6	TBD	N/R	40	N/R	5	N/R	0
	150	6	TBD			150	100		
	140	5	TBD	N/R	15	N/R	0	N/R	33
	110	4	TBD	38	100	80	100		
	112	4	TBD	300	100	20	100		
	111	4	TBD	51	100	24	100		
	152	4	TBD						
	151	5	TBD	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A
	186	16	15.5	200	100				
[0465]	173	14	3.8	463	100				
	174	15	20.2	44	100	3.8	100		
	175	15	13.3	7	100	3.8	100		
	219	3	TBD	48	100				
	185	10	221.7	30	100				
	184	5	65.7	36	100				
	168	15	16.8	22	100				
	218	8	TBD	14	100				
	183	14	25.9	17	100				
	182	14	TBD	72	100				
	181	14	22.5	23	100				
	180	12	TBD	13	100				
	179	9	TBD	22	100				
	178	1	TBD	39	100				
	177	6	TBD	27	100				
	176	2	TBD	85	100				

[0466] N/A: 无活性

[0467] N/R: 不相关

[0468] TBD: 待确定

[0469] 体外结果证实了目标,如通过由除草化合物与其结合引起的热移位确定的。一般来说,当以萌芽前和/或萌芽后的方式施用,这些化合物对双子叶植物表现出很强的除草活性。此外,单子叶植物的萌芽前处理导致大多数化合物的强烈生长抑制。

[0470] 所选择化合物的植物体内LTP(低通量)结果呈现于下表7和表8中:

[0471] 表7:根据本发明的化合物的通过表型确定的除草活性(植物体内,LTP-萌芽前)(括号中显示的是效果%)。

植物	单子叶植物 (M) / 双子叶植物 (D)	116	106	110	102	108	129
SETVI	M	DE ⁶ (100)	IG ¹ (100), DE (100)	IG (80)	IG (100), DE (100)	IG (100), DE (100)	IG (40)
ALOMY	M	IG (100), W ⁵ (100)					
LOLPE	M	DE (100)	DE (60)				IG (40)
POAAN	M	DE (100)	IG (100), DE (100)		IG (60)	IG (80), DE (80)	IG (80) DE (80)
ECHCO	M	DE (100)					
DIGSA	M	DE (100)					
SOLNI	D	IG (80), DAB ² (80)					
EPPHL	D	IG (60), BL (80), DAB (80)					
AMAPA	D	IG (80), C ³ (60), DAB (100)	DAB(60), IG (60)		IG (60)	IG (60)	IG (40)
MATCA	D	IG (80), BL ⁴ (40), DAB (60)					
ABUTH	D	IG (80), BI (80), DAB (80)					
CHEAL	D	IG (80), DAB (80)					

[0472]

[0473]

植物	单子叶植物 (M) / 双子叶植物 (D)	154	109	148	111	112
SETVI	M	DE (100)	DE (100)	DRD ⁷ (100), DE (100), IG (100)	DE (100), IG (100)	DE (80), IG (100)
ALOMY	M	DE (40), IG (80), DAB (60), BL (60)		DRD (60)	IG (40)	
LOLPE	M	IG (60)				IG (40)

	POAAN	M	DE (100)	DE (100), IG (100)	IG (40), DRD (40)	DE (100), IG (100)	DE (100), IG (100)
[0474]	ECHCO	M					
	DIGSA	M					
	SOLNI	D					
	EPPHL	D					
	AMAPA	D	IG (60)	IG (60)		IG (60)	IG (60)
	MATCA	D			DE (40)		IG (60)

[0475] ¹.IG 生长受抑制

[0476] ².DAB 顶芽受干扰

[0477] ³.C 萎黄病

[0478] ⁴.BL 漂白

[0479] ⁵.W 萎蔫

[0480] ⁶.DE 萌芽受干扰

[0481] ⁷.DRD 根系发育受干扰

[0482] 表8:根据本发明的化合物的通过表型确定的除草活性(植物体内,LTP-萌芽后)(括号中显示的是效果%)。

	植物	单子叶植物 (M) / 双子叶植物(D)	106	129	154	109	111	112
[0483]	SETVI	M			IG (60)		IG (60)	B (40)
	POAAN	M			IG (60)			
	ECHCO	M	IG ¹ (60)					
	AMAPA	D	BL ² (60)		BL (60)	BL (40)	BL (40)	IG (60), B (40)
	MATCA	D		LOD ³ (40)				
	ABUTH	D	BL (60)				BL (40)	

[0484] ¹.IG 生长受抑制

[0485] ².BL 漂白

[0486] ³.LOD 倒伏

[0487] 结果显示,当以萌芽前或萌芽后的方式应用时,这些化合物可以有效地控制双子叶植物和单子叶植物杂草的生长。经处理的杂草大部分表现出萌芽受干扰、生长受抑制和顶芽受干扰。

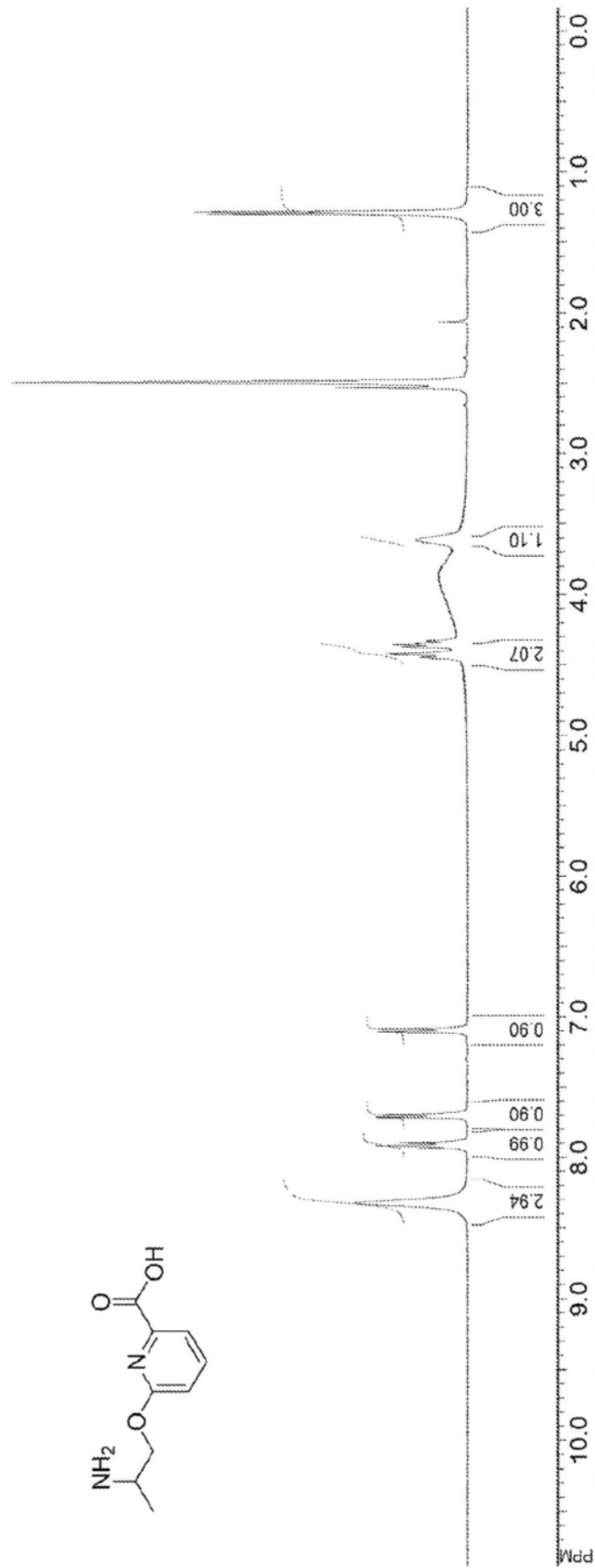


图1

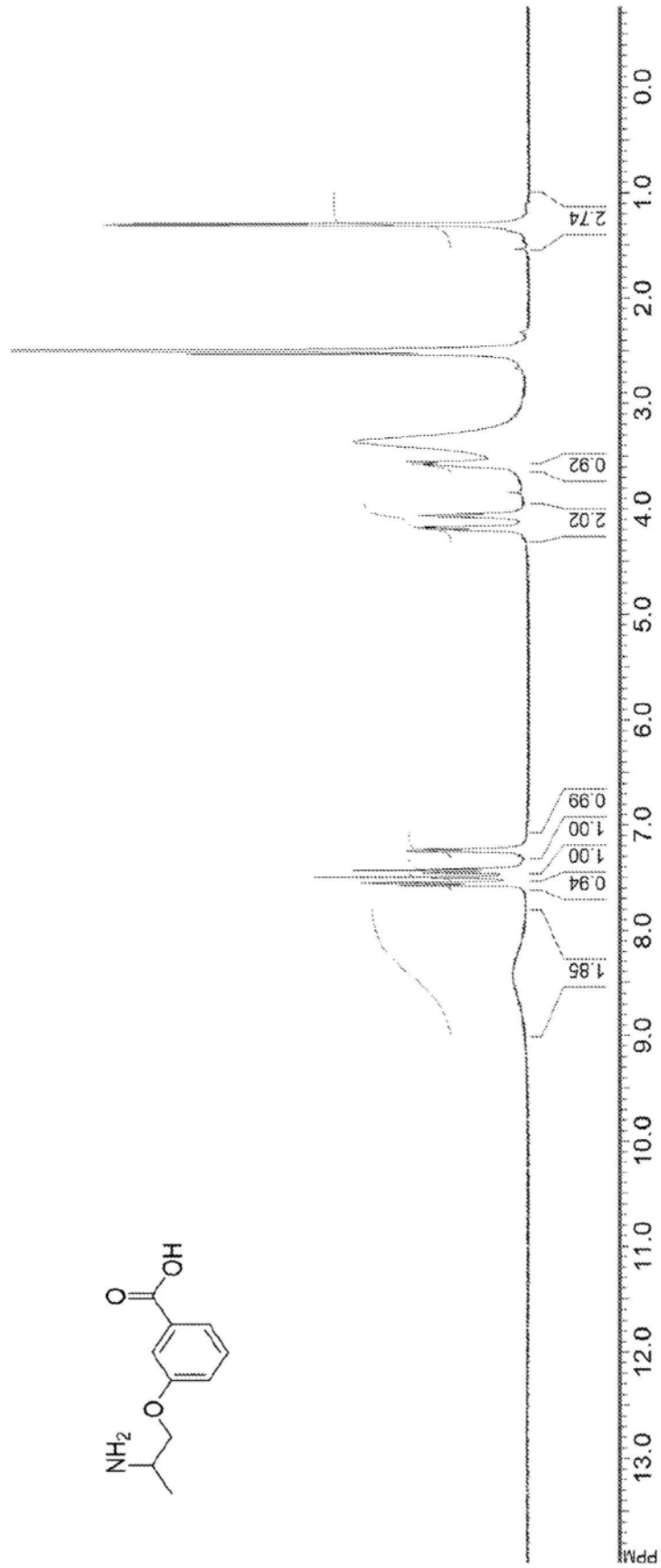


图2