

發明專利說明書

(本說明書格式、順序及粗體字，請勿任意更動，※記號部分請勿填寫)

※ 申請案號：97123268

C07D 241/18 (2006.01)

※ 申請日期：97.6.20

※IPC 分類：~~C07D, A01N~~

C07D 487/04 (2006.01)

一、發明名稱：(中文/英文)

具有除草作用之哌啶化合物

A01N 43/60 (2006.01)

PIPERAZINE COMPOUNDS HAVING HERBICIDAL ACTION

A01N 43/90 (2006.01)

二、申請人：(共 1 人)

A01P 13/00 (2006.01)

姓名或名稱：(中文/英文)

德商巴地斯顏料化工廠
BASF SE

代表人：(中文/英文)

1. 貝蕾爾
BIELLER
2. 寇斯特
KOESTER

住居所或營業所地址：(中文/英文)

德國勞域沙芬市
67056 LUDWIGSHAFEN, GERMANY

國 籍：(中文/英文)

德國 GERMANY

三、發明人：(共 15 人)

姓 名：(中文/英文)

1. 艾柯 胡珀
HUPE, EIKE
2. 湯瑪士 塞茲
SEITZ, THOMAS
3. 瑪夏斯 維茲契爾
WITSCHER, MATTHIAS
4. 迪忠 宋
SONG, DSCHUN
5. 威廉 卡爾 莫柏
MOBERG, WILLIAM KARL
6. 莉莉安娜 帕拉 拉帕都
PARRA RAPADO, LILIANA
7. 法蘭克 史特瑟爾
STELZER, FRANK
8. 安竺亞 威斯柯維
VESCOVI, ANDREA
9. 催弗 威廉 紐湯
NEWTON, TREVOR WILLIAM
10. 羅柏 雷因哈德
REINHARD, ROBERT
11. 柏恩德 希維尼區
SIEVERNICH, BERND
12. 克勞斯 葛羅斯曼
GROSSMANN, KLAUS
13. 湯瑪斯 俄哈德
EHRHARDT, THOMAS
14. 麥可 拉克
RACK, MICHAEL
15. 伊莫 基勒
KIBLER, ELMAR

國 籍：(中文/英文)

- | | |
|--------|---------|
| 1. 德國 | GERMANY |
| 2. 德國 | GERMANY |
| 3. 德國 | GERMANY |
| 4. 德國 | GERMANY |
| 5. 美國 | U.S.A. |
| 6. 西班牙 | SPAIN |
| 7. 德國 | GERMANY |
| 8. 義大利 | ITALY |
| 9. 英國 | U.K. |
| 10. 德國 | GERMANY |
| 11. 德國 | GERMANY |
| 12. 德國 | GERMANY |
| 13. 德國 | GERMANY |
| 14. 德國 | GERMANY |
| 15. 德國 | GERMANY |

四、聲明事項：

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

☒ 申請前已向下列國家（地區）申請專利：

【格式請依：受理國家（地區）、申請日、申請案號 順序註記】

☒ 有主張專利法第二十七條第一項國際優先權：

1. 歐洲專利機構；2007年06月22日；07110913.6

2.

☐ 無主張專利法第二十七條第一項國際優先權：

1.

2.

☐ 主張專利法第二十九條第一項國內優先權：

【格式請依：申請日、申請案號 順序註記】

☐ 主張專利法第三十條生物材料：

☐ 須寄存生物材料者：

國內生物材料 【格式請依：寄存機構、日期、號碼 順序註記】

國外生物材料 【格式請依：寄存國家、機構、日期、號碼 順序註記】

☐ 不須寄存生物材料者：

所屬技術領域中具有通常知識者易於獲得時，不須寄存。

九、發明說明：

【發明所屬之技術領域】

本發明係關於下文所定義之通式I之哌啶化合物及其作為除草劑之用途。此外，本發明係關於用於作物保護之組合物及一種控制不良植被之方法。

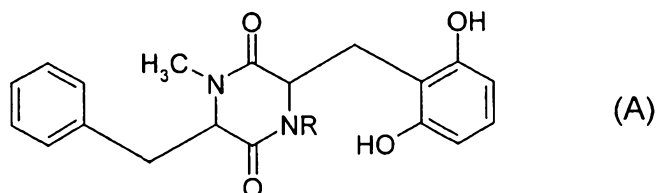
【先前技術】

由植物病原體馬鈴薯瘡痂病菌(*S. scabies*)產生之賽特敏(thaxtomin) A及B(King R. R.等人, J. Agric. Food Chem. (1992) 40, 834-837)為具有於3位帶有4-硝基吡啶-3-基甲基且於2位帶有視情況經OH取代之苄基的中心哌啶-2,5-二酮環之天然產物。由於其具有損害植物之活性，亦研究此類化合物用作除草劑之可能性(King R. R.等人, J. Agric. Food Chem. (2001) 49, 2298-2301)。

EP-A 181152及EP-A 243122描述具有類似結構之哌啶化合物及其作為血小板活化因子之拮抗劑的用途。

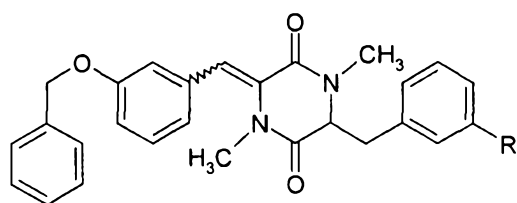
WO 99/48889、WO 01/53290及WO 2005/011699描述於3位及6位中之一者處具有經由亞甲基或次甲基連接之4-吡啶基且於另一3位或6位處具有苄基或亞苄基的2,5-二酮基哌啶化合物。此等化合物具有抗腫瘤活性。

US 2003/0171379 A1描述麥塔醯胺(mactanamide)，即式A之抑真菌二酮基哌啶作為消炎藥於藥品中之用途：



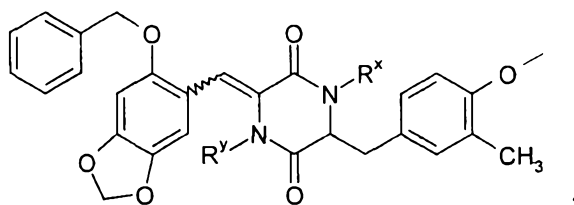
其中R為H或甲基。

在關於製備賽特敏(thaxtomin) A及B之合成研究的情況下，J. Gelin等人，J. Org. Chem. 58, 1993，第3473-3475頁及J. Moyroud等人，Tetrahedron 52, 1996，第8525-8543頁描述脫氫賽特敏(dehydrothaxtomin)衍生物。尤其描述下式之化合物：



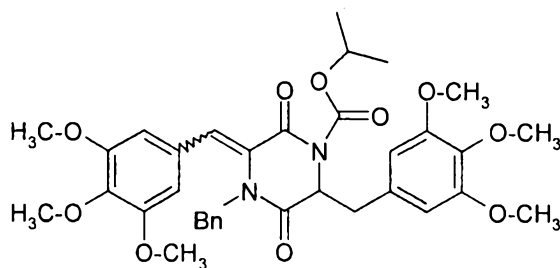
其中R為氫或NO₂。

N. Saito等人，J. Chem. Soc. Perkin Trans 1997，第53-69頁尤其描述作為用於製備海鞘素(ecteinascidin)之前驅體的下式之化合物：

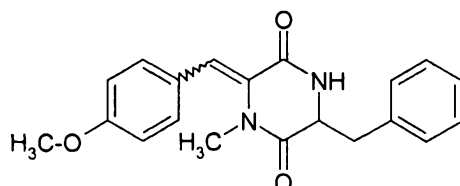


其中R^y為氫或苄基且R^x為氫、乙醯基或異丙氧基羰基。

在關於製備伏樂錠(phthalascidin)之合成研究的情況下，Z.Z. Liu等人，Chinese Chem. Lett. 13(8) 2002，第701-704頁描述下式之中間物，其中Bn為苄基：



J. Bryans 等人，Journal of Antibiotics 49(10), 1996，第 1014-1021 頁描述下式之化合物：



早期專利申請案 PCT/EP2007/050067(=WO 2007/077247) 描述於 3 位具有經由次甲基連接之芳基或雜芳基且於 6 位具有經由亞甲基連接之芳基或雜芳基的 2,5-二酮基哌啶化合物。

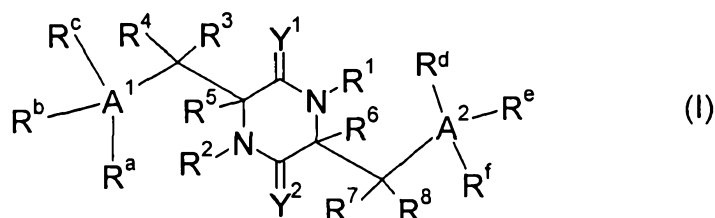
早期專利申請案 PCT/EP2006/070271(=WO 2007/077201) 描述於 3 位及 6 位兩處具有經由亞甲基連接之芳基或雜芳基的 2,5-二酮基哌啶化合物。

本發明之目的在於提供具有除草作用之化合物。尤其提供尤其甚至在低施用率下具有高除草活性且足以與商業用途之作物植物相容的化合物。

此等及其他目的係藉由下文所定義之式 I 化合物及藉由其農業上合適之鹽來達成。

【發明內容】

因此，本發明提供通式 I 之哌啶化合物：



其中：

A^1 、 A^2 彼此獨立地為芳基或雜芳基，其中 R^a 在 A^1 之連接點的鄰位處連接至 A^1 之碳原子或氮原子；

Y^1 為氧、硫或基團 NR^{y1} ，其中 R^{y1} 係選自由氫、 C_1 - C_6 烷基、 C_3 - C_6 烯基、 C_3 - C_6 炔基、 C_3 - C_6 環烷基、 C_3 - C_6 環烷基甲基、OH、 C_1 - C_6 烷氧基、 C_3 - C_6 烯氧基、 C_3 - C_6 炔氧基、 C_3 - C_6 環烷氧基及 C_3 - C_6 環烷基甲氧基組成之群；

Y^2 為氧、硫或基團 NR^{y2} ，其中 R^{y2} 係選自由氫、 C_1 - C_6 烷基、 C_3 - C_6 烯基、 C_3 - C_6 炔基、 C_3 - C_6 環烷基、 C_3 - C_6 環烷基甲基、OH、 C_1 - C_6 烷氧基、 C_3 - C_6 烯氧基、 C_3 - C_6 炔氧基、 C_3 - C_6 環烷氧基及 C_3 - C_6 環烷基甲氧基組成之群；

其中取代基 Y^1 及 Y^2 之上文所提及之脂族或環狀部分係未經取代或可部分或完全經鹵化及/或可帶有以下基團中之一至三者：氰基、羥基、 C_1 - C_4 烷基、 C_1 - C_4 鹵烷基、 C_3 - C_6 環烷基、 C_1 - C_4 烷氧基、 C_1 - C_4 烷硫基、二- $(C_1$ - C_4 烷基)-胺基、 C_1 - C_4 烷基羰基、羥基羰基、 C_1 - C_4 烷氧羰基、胺基羰基、 C_1 - C_4 烷基胺基羰基、二- $(C_1$ - C_4 烷基)胺基羰基或 C_1 - C_4 烷基羰氧基；

R^a

係選自由以下各基組成之群：鹵素、氰基、硝基、SF₅、C₁-C₆烷基、C₃-C₆環烷基、C₂-C₆烯基、C₅-C₈環烯基、C₅-C₈環炔基、C₃-C₆環烷基-(C₁-C₆)烷基、C₅-C₈環烯基-(C₁-C₆)烷基、C₅-C₈環炔基-(C₁-C₆)烷基、C₃-C₆環烷基-(C₂-C₆)烯基、C₅-C₈環烯基-(C₂-C₆)烯基、C₅-C₈環炔基-(C₂-C₆)-烯基、C₃-C₆環烷基-(C₂-C₆)炔基、C₅-C₈環烯基-(C₂-C₆)炔基、C₅-C₈環炔基-(C₂-C₆)炔基、C₄-C₁₀二烯基、C₂-C₆炔基、[三-(C₁-C₆)烷基矽烷基]-(C₂-C₆)炔基、三-(C₁-C₆)烷基矽烷基、C₇-C₈環炔基、芳基、苯基-(C₁-C₆)烷基、苯基-(C₂-C₆)烯基、苯基-(C₂-C₆)炔基、苯磺醯基-(C₁-C₆)烷基、雜環基、雜環基-(C₁-C₆)烷基、雜環基-(C₂-C₆)烯基、雜環基-(C₂-C₆)炔基、苯基-[C₁-C₆烷氧羰基]-(C₁-C₆)烷基、Z¹P(O)(OR⁹)₂、Z¹P(O)(OR⁹)(R^{9a})、Z²B(OR¹⁰)₂、Z³COR¹¹、Z⁴NR¹²R¹³、Z⁵CH=N-O-R¹⁴、Z⁶OR¹⁵、Z⁷SR¹⁶、Z⁷S(O)R¹⁶及Z⁷SO₂R¹⁶；

其中取代基R^a之上文所提及之脂族、環狀或芳族部分係未經取代或可部分或完全經鹵化及/或可帶有以下基團中之一至三者：氰基、羥基、C₁-C₄烷基、C₁-C₄鹵烷基、C₃-C₆環烷基、C₁-C₄烷氧基、C₁-C₄烷硫基、二-(C₁-C₄烷基)-

胺基、 C_1 - C_4 烷基羰基、羥基羰基、 C_1 - C_4 烷氧羰基、胺基羰基、 C_1 - C_4 烷基胺基羰基、二- $(C_1$ - C_4 烷基)胺基羰基或 C_1 - C_4 烷基羰氧基；

R^b 、 R^c 、 R^d 、 R^e 及 R^f 各自彼此獨立地為氫或具有對於 R^a 所給含義之一者；且

其中連接至 A^1 之相鄰環原子的兩個基團 R^a 、 R^b 或 R^c 或連接至 A^2 之相鄰環原子的兩個基團 R^d 、 R^e 或 R^f 亦可為直鏈 C_3 - C_6 伸烷基，其可部分或完全經鹵化且可帶有以下基團中之一至三者：氰基、羥基、 C_1 - C_4 烷基、 C_1 - C_4 鹵烷基、 C_3 - C_6 環烷基、 C_1 - C_4 烷氧基、 C_1 - C_4 烷硫基、二- $(C_1$ - C_4 烷基)-胺基、 C_1 - C_4 烷基羰基、羥基羰基、 C_1 - C_4 烷氧羰基、胺基羰基、 C_1 - C_4 烷基胺基羰基、二- $(C_1$ - C_4 烷基)胺基羰基或 C_1 - C_4 烷基羰氧基，其中 C_3 - C_6 伸烷基中之 CH_2 基團可由羰基、硫羰基或磺醯基置換且其中 C_3 - C_6 伸烷基中之一或兩個非相鄰 CH_2 基團可在各種情況下由氧、硫或基團 NR^{34} 置換，其中 R^{34} 具有對於 R^{12} 所給含義之一者；

R^1 及 R^2 彼此獨立地選自由以下各基組成之群：

氰基、 C_1 - C_6 烷基、 C_3 - C_6 環烷基、 C_3 - C_6 烯基、 C_5 - C_8 環烯基、 C_3 - C_6 炔基、 C_7 - C_8 環炔基、 C_3 - C_6 環烷基- $(C_1$ - $C_6)$ 烷基、 C_5 - C_8 環烯基- $(C_1$ - $C_6)$ 烷基、 C_5 - C_8 環炔基- $(C_1$ - $C_6)$ 烷基、 C_3 - C_6 環烷

基 $-(C_2-C_6)$ 烯基、 C_5-C_8 環烯基 $-(C_2-C_6)$ 烯基、 C_5-C_8 環炔基 $-(C_2-C_6)-$ 烯基、 C_3-C_6 環烷基 $-(C_2-C_6)$ 炔基、 C_5-C_8 環烯基 $-(C_2-C_6)$ 炔基、 C_5-C_8 環炔基 $-(C_2-C_6)$ 炔基、苯基、苯基 $-(C_1-C_6)$ 烷基、苯基 $-(C_2-C_6)$ 烯基、苯基 $-(C_2-C_6)$ 炔基、雜環基、雜環基 $-(C_1-C_6)$ 烷基、雜環基 $-(C_2-C_6)$ 烯基、雜環基 $-(C_2-C_6)$ 炔基、苯基 $-[C_1-C_6$ 烷氧羰基 $](C_1-C_6)$ 烷基、 $C(O)R^{21}$ 、 $NR^{22}R^{23}$ 、 OR^{24} 、 SR^{24} 、 $S(O)R^{25}$ 、 SO_2R^{25} 及 $Si(R^{25a})_3$ ；

其中 R^1 可另外為氫且

其中取代基 R^1 及 R^2 之上文所提及之脂族、環狀或芳族部分彼此獨立地未經取代或可部分或完全經鹵化及 / 或可帶有以下基團中之一至三者：氰基、羥基、 C_1-C_4 烷基、 C_1-C_4 鹵烷基、 C_3-C_6 環烷基、 C_1-C_4 烷氧基、 C_1-C_4 烷硫基、二 $-(C_1-C_4)$ 烷基)-胺基、 C_1-C_4 烷基羰基、羥基羰基、 C_1-C_4 烷氧羰基、胺基羰基、 C_1-C_4 烷基胺基羰基、二 $-(C_1-C_4)$ 烷基)胺基羰基或 C_1-C_4 烷基羰氧基；

R^3 為鹵素、氰基、硝基或基團 R^{26} 、 OR^{27} 、 SR^{28} 、 $S(O)R^{28}$ 、 SO_2R^{28} 、 $NR^{29}R^{30}$ 或 $N(OR^{31})R^{32}$ ；

R^4 為氫、鹵素、氰基、 C_1-C_6 烷基、 C_3-C_6 環烷基、 C_2-C_6 烯基、 C_5-C_8 環烯基、 C_2-C_6 炔基、

C_5-C_8 環炔基、苯基、苯基- (C_1-C_6) 烷基、雜環基、雜環基- (C_1-C_6) 烷基、苯基- $[C_1-C_6$ 烷氧羰基]- (C_1-C_6) 烷基或基團 COR^{21} 、 OR^{27} 、 SR^{28} 、 $S(O)R^{28}$ 、 SO_2R^{28} 、 $NR^{29}R^{30}$ 或 $N(OR^{31})R^{32}$ ；

其中取代基 R^4 之上文所提及之脂族、環狀或芳族部分彼此獨立地未經取代或可部分或完全經鹵化及/或可帶有以下基團中之一至三者：氰基、羥基、 C_1-C_4 烷基、 C_1-C_4 鹵烷基、 C_3-C_6 環烷基、 C_1-C_4 烷氧基、 C_1-C_4 烷硫基、二- $(C_1-C_4$ 烷基)-胺基、 C_1-C_4 烷基羰基、羥基羰基、 C_1-C_4 烷氧羰基、胺基羰基、 C_1-C_4 烷基胺基羰基、二- $(C_1-C_4$ 烷基)胺基羰基或 C_1-C_4 烷基羰氧基；

R^5 為氫、鹵素、氰基、硝基、羥基、 C_1-C_8 烷基、 C_2-C_8 烯基、 C_3-C_8 環烷基、 C_5-C_8 環烯基、 C_2-C_8 炔基、 C_4-C_8 二烯基、 C_7-C_8 環炔基、 C_5-C_8 環烯基- (C_1-C_6) 烷基、 C_5-C_8 環炔基- (C_1-C_6) 烷基、 C_3-C_6 環烷基- (C_2-C_6) 烯基、 C_5-C_8 環烯基- (C_2-C_6) 烯基、 C_5-C_8 環炔基- (C_2-C_6) -烯基、 C_3-C_6 環烷基- (C_2-C_6) 炔基、 C_5-C_8 環烯基- (C_2-C_6) 炔基、 C_5-C_8 環炔基- (C_2-C_6) 炔基、三- (C_1-C_6) -烷基矽烷基、[三- (C_1-C_6) 烷基矽烷基]- (C_2-C_6) 炔基、苯基、苯基- (C_1-C_6) 烷基、苯基- (C_2-C_6) 烯基、苯基- (C_2-C_6) 炔基、雜環基、雜環

基 $-(C_1-C_6)$ 烷基、雜環基 $-(C_2-C_6)$ 烯基、雜環基 $-(C_2-C_6)$ 炔基、苯基 $-[C_1-C_6$ 烷氧羰基 $](C_1-C_6)$ 烷基、 $C(O)R^{61}$ 、 $Z^8NR^{62}R^{63}$ 、 $Z^{11}CH=N-O-R^{64}$ 、 OR^{65} 、 Z^9SR^{65a} 、 $Z^9S(O)R^{66}$ 、 $Z^9S(O)_2R^{66}$ 或 $Z^{10}P(O)(OR^{67})_2$ ；或

R^3 連同 R^5 一起為化學鍵；

R^6 為鹵素、氰基、硝基、 C_2-C_8 烯基、 C_3-C_8 環烷基、 C_5-C_8 環烯基、 C_2-C_8 炔基、 C_4-C_8 二烯基、 C_7-C_8 環炔基、 C_5-C_8 環烯基 $-(C_1-C_6)$ 烷基、 C_5-C_8 環炔基 $-(C_1-C_6)$ 烷基、 C_3-C_6 環烷基 $-(C_2-C_6)$ 烯基、 C_5-C_8 環烯基 $-(C_2-C_6)$ 烯基、 C_5-C_8 環炔基 $-(C_2-C_6)$ 烯基、 C_3-C_6 環烷基 $-(C_2-C_6)$ 炔基、 C_5-C_8 環烯基 $-(C_2-C_6)$ 炔基、 C_5-C_8 環炔基 $-(C_2-C_6)$ 炔基、三 $-(C_1-C_6)$ -烷基矽烷基、[三 $-(C_1-C_6)$ 烷基矽烷基] $-(C_2-C_6)$ 炔基、苯基、苯基 $-(C_1-C_6)$ 烷基、苯基 $-(C_2-C_6)$ 烯基、苯基 $-(C_2-C_6)$ 炔基、雜環基、雜環基 $-(C_1-C_6)$ 烷基、雜環基 $-(C_2-C_6)$ 烯基、雜環基 $-(C_2-C_6)$ 炔基、苯基 $-[C_1-C_6$ 烷氧羰基 $](C_1-C_6)$ 烷基、 $C(O)R^{61}$ 、 $Z^8NR^{62}R^{63}$ 、 $Z^{11}CH=N-O-R^{64}$ 、 OR^{65} 、 Z^9SR^{65a} 、 $Z^9S(O)R^{66}$ 、 $Z^9S(O)_2R^{66}$ 或 $Z^{10}P(O)(OR^{67})_2$ ；

其中取代基 R^4 、 R^5 及 R^6 之上文所提及之脂族、環狀或芳族部分彼此獨立地可部分或完全經鹵化及 / 或可帶有以下基團中之一至三者：氰

基、羥基、 C_1 - C_4 烷基、 C_1 - C_4 鹵烷基、 C_3 - C_6 環烷基、 C_1 - C_4 烷氧基、 C_1 - C_4 烷硫基、二- $(C_1$ - C_4 烷基)-胺基、 C_1 - C_4 烷基羰基、羥基羰基、 C_1 - C_4 烷氧羰基、胺基羰基、 C_1 - C_4 烷基胺基羰基、二- $(C_1$ - C_4 烷基)胺基羰基或 C_1 - C_4 烷基羰氧基；

R^7 為鹵素、氰基、硝基或基團 R^{26} 、 OR^{27} 、 SR^{28} 、 $S(O)R^{28}$ 、 SO_2R^{28} 、 $NR^{29}R^{30}$ 或 $N(OR^{31})R^{32}$ ；

R^8 具有對於 R^4 所給含義之一者；

R^9 、 R^{10} 及 R^{67} 各自彼此獨立地為氫或 C_1 - C_6 烷基且 $Z^2B(OR^{10})_2$ 中之基團 R^{10} 可共同形成 C_2 - C_4 伸烷基鏈；或

R^{9a} 為 C_1 - C_6 烷基；

R^{11} 、 R^{61} 彼此獨立地為氫、 C_1 - C_6 烷基、 C_3 - C_6 環烷基、 C_2 - C_6 烯基、 C_5 - C_8 環烯基、 C_2 - C_6 炔基、 C_7 - C_8 環炔基、羥基、 C_1 - C_6 烷氧基、 C_3 - C_6 烯氧基、 C_3 - C_6 炔氧基、胺基、 C_1 - C_6 烷基胺基、二- $(C_1$ - C_6 烷基)胺基、 C_1 - C_6 烷氧基胺基、二- $(C_1$ - C_6 烷氧基)胺基、 C_1 - C_6 烷基磺醯基胺基、 C_1 - C_6 烷基胺基磺醯基胺基、[二- $(C_1$ - C_6 烷基)胺基]磺醯基胺基、 C_3 - C_6 烯基胺基、 C_3 - C_6 炔基胺基、 N -(C_2 - C_6 烯基)- N -(C_1 - C_6 烷基)-胺基、 N -(C_2 - C_6 炔基)- N -(C_1 - C_6 烷基)-胺基、 N -(C_1 - C_6 烷氧基)- N -

(C₁-C₆烷基)-胺基、N-(C₂-C₆烯基)-N-(C₁-C₆烷氧基)-胺基、N-(C₂-C₆炔基)-N-(C₁-C₆烷氧基)-胺基、苯基、苯氧基、苯基胺基、萆基或雜環基；

R¹²及R⁶²彼此獨立地為氫、C₁-C₆烷基、C₁-C₆烷氧基、C₃-C₆環烷基、C₃-C₆環烷氧基、C₃-C₆烯基、C₃-C₆烯氧基、C₅-C₈環烯基、C₃-C₆炔基、C₃-C₆炔氧基、C₇-C₈環炔基、C₁-C₆烷基羰基、C₃-C₆環烷基羰基、二-(C₁-C₆烷基)胺基羰基、C₁-C₆烷氧羰基、C₁-C₆烷氧羰基-(C₁-C₆)烷基、C₁-C₆烷基磺醯基、C₁-C₆烷基胺基磺醯基、二-(C₁-C₆烷基)胺基磺醯基、苯基羰基、苯基胺基羰基、苯磺醯基、苯磺醯基胺基羰基或雜環基羰基；

R¹³及R⁶³彼此獨立地為氫、C₁-C₆烷基、C₃-C₆環烷基、C₃-C₆烯基、C₅-C₈環烯基、C₃-C₆炔基、C₃-C₆炔氧基、C₇-C₈環炔基、C₁-C₆烷基羰基、C₃-C₆環烷基羰基、二-(C₁-C₆烷基)胺基羰基、C₁-C₆烷氧羰基、C₁-C₆烷氧羰基-(C₁-C₆)烷基、C₁-C₆烷基磺醯基、C₁-C₆烷基胺基磺醯基、二-(C₁-C₆烷基)胺基磺醯基、苯基羰基、苯基胺基羰基、苯磺醯基、苯磺醯基胺基羰基或雜環基羰基；

R¹⁴、R⁶⁴彼此獨立地為氫、C₁-C₆烷基、C₂-C₆烯基或苯

基；

R^{15} 、 R^{65a} 彼此獨立地為氫、 C_1 - C_6 烷基、 C_3 - C_6 環烷基、 C_3 - C_6 烯基、 C_5 - C_8 環烯基、 C_3 - C_6 炔基、 C_7 - C_8 環炔基、 C_3 - C_6 環烷基-(C_1 - C_6)烷基、 C_5 - C_8 環烯基-(C_1 - C_6)烷基、 C_5 - C_8 環炔基-(C_1 - C_6)烷基、 C_3 - C_6 環烷基-(C_2 - C_6)烯基、 C_5 - C_8 環烯基-(C_2 - C_6)烯基、 C_5 - C_8 環炔基-(C_2 - C_6)-烯基、 C_3 - C_6 環烷基-(C_2 - C_6)炔基、 C_5 - C_8 環烯基-(C_2 - C_6)炔基、 C_5 - C_8 環炔基-(C_2 - C_6)炔基、 C_1 - C_6 烷基羰基、 C_1 - C_6 烷氧羰基-(C_1 - C_6)烷基、[二-(C_1 - C_6)烷氧羰基]-(C_1 - C_6)烷基、苯基、苯基-(C_1 - C_6)-烷基、雜芳基或雜芳基-(C_1 - C_6)烷基；

R^{65} 為 C_1 - C_6 烷基、 C_3 - C_6 環烷基、 C_3 - C_6 烯基、 C_5 - C_8 環烯基、 C_3 - C_6 炔基、 C_7 - C_8 環炔基、 C_3 - C_6 環烷基-(C_1 - C_6)烷基、 C_5 - C_8 環烯基-(C_1 - C_6)烷基、 C_5 - C_8 環炔基-(C_1 - C_6)烷基、 C_3 - C_6 環烷基-(C_2 - C_6)烯基、 C_5 - C_8 環烯基-(C_2 - C_6)烯基、 C_5 - C_8 環炔基-(C_2 - C_6)-烯基、 C_3 - C_6 環烷基-(C_2 - C_6)炔基、 C_5 - C_8 環烯基-(C_2 - C_6)炔基、 C_5 - C_8 環炔基-(C_2 - C_6)炔基、 C_1 - C_6 烷基羰基、 C_1 - C_6 烷氧羰基-(C_1 - C_6)烷基、[二-(C_1 - C_6)烷氧羰基]-(C_1 - C_6)烷基、苯基或苯基-(C_1 - C_6)烷基；

R^{16} 、 R^{66} 彼此獨立地為 C_1 - C_6 烷基、 C_1 - C_6 烷氧基、苯基或苯氧基；

Z^1 、 Z^2 、 Z^3 、 Z^4 、 Z^5 、 Z^6 、 Z^7 、 Z^8 、 Z^9 、 Z^{10} 及 Z^{11} 彼此獨立地為一鍵、 $-\text{CH}_2-$ 、 $-\text{CH}_2-\text{CH}_2-$ 、 $-\text{O}-\text{CH}(\text{R}^{17})-$ 、 $-\text{S}-\text{CH}(\text{R}^{18})-$ 、 $-\text{S}(\text{O})-\text{CH}(\text{R}^{19})-$ 或 $-\text{SO}_2\text{CH}(\text{R}^{20})-$ ，其中 R^{17} 、 R^{18} 、 R^{19} 及 R^{20} 彼此獨立地為氫或 C_1 - C_6 烷基；

R^{21} 為氫、 C_1 - C_6 烷基、 C_3 - C_6 環烷基、 C_2 - C_6 烯基、 C_5 - C_8 環烯基、 C_2 - C_6 炔基、 C_7 - C_8 環炔基、羥基、 C_1 - C_6 烷氧基、 C_3 - C_6 烯氧基、 C_3 - C_6 炔氧基、氨基、 C_1 - C_6 烷基氨基、二- $(\text{C}_1$ - C_6 烷基)氨基、 C_3 - C_6 烯基氨基、 C_3 - C_6 炔基氨基、 C_1 - C_6 烷基磺醯基氨基、 $\text{N}-(\text{C}_2$ - C_6 烯基)- $\text{N}-(\text{C}_1$ - C_6 烷基)-氨基、 $\text{N}-(\text{C}_2$ - C_6 炔基)- $\text{N}-(\text{C}_1$ - C_6 烷基)-氨基、 $\text{N}-(\text{C}_1$ - C_6 烷氧基)- $\text{N}-(\text{C}_1$ - C_6 烷基)-氨基、 $\text{N}-(\text{C}_2$ - C_6 烯基)- $\text{N}-(\text{C}_1$ - C_6 烷氧基)-氨基、 $\text{N}-(\text{C}_2$ - C_6 炔基)- $\text{N}-(\text{C}_1$ - C_6 烷氧基)-氨基、苯基、苯基氨基、苯氧基、萘基或雜環基；或

R^{22} 及 R^{23} 彼此獨立地為氫、 C_1 - C_6 烷基、 C_3 - C_6 環烷基、 C_3 - C_6 烯基、 C_5 - C_8 環烯基、 C_3 - C_6 炔基、 C_7 - C_8 環炔基或 C_1 - C_6 烷基羰基；或

R^{24} 為氫、 C_1 - C_6 烷基、 C_3 - C_6 環烷基、 C_3 - C_6 烯基、 C_5 - C_8 環烯基、 C_3 - C_6 炔基、 C_7 - C_8 環炔基、 C_3 - C_6 環烷基- $(\text{C}_1$ - $\text{C}_6)$ 烷基、 C_5 - C_8 環烯基- $(\text{C}_1$ - $\text{C}_6)$ 烷基、 C_5 - C_8 環炔基- $(\text{C}_1$ - $\text{C}_6)$ 烷基、 C_3 - C_6 環烷基- $(\text{C}_2$ - $\text{C}_6)$ 烯基、 C_5 - C_8 環烯基- $(\text{C}_2$ - $\text{C}_6)$ 烯基、

C₅-C₈環炔基-(C₂-C₆)-烯基、C₃-C₆環烷基-(C₂-C₆)炔基、C₅-C₈環烯基-(C₂-C₆)炔基、C₅-C₈環炔基-(C₂-C₆)炔基、苯基或苯基-(C₁-C₆)烷基；或

R²⁵ 為 C₁-C₆烷基、C₁-C₆烷氧基、苯基或苯氧基；

R^{25a} 為 C₁-C₆烷基、C₃-C₆環烷基、C₃-C₆烯基、C₅-C₈環烯基、C₃-C₆炔基、C₇-C₈環炔基、苯基或苯基-(C₁-C₆)烷基；或

其中取代基 R⁹、R^{9a}、R¹⁰、R¹¹、R¹²、R¹³、R¹⁴、R¹⁵、R¹⁶、R¹⁷、R¹⁸、R¹⁹、R²⁰、R²¹、R²²、R²³、R²⁴、R²⁵、R^{25a}、R⁶¹、R⁶²、R^{62a}、R⁶³、R⁶⁴、R⁶⁵、R^{65a}、R⁶⁶及 R⁶⁷ 之上文所提及之脂族、環狀或芳族部分彼此獨立地未經取代或可部分或完全經鹵化及/或可帶有以下基團中之一至三者：氰基、羥基、C₁-C₄烷基、C₁-C₄鹵烷基、C₃-C₆環烷基、C₁-C₄烷氧基、C₁-C₄烷硫基、二-(C₁-C₄烷基)-胺基、C₁-C₄烷基羰基、羥基羰基、C₁-C₄烷氧羰基、胺基羰基、C₁-C₄烷基胺基羰基、二-(C₁-C₄烷基)胺基羰基或 C₁-C₄烷基羰氧基；

R²⁶、R²⁷、R²⁸、R²⁹及 R³² 彼此獨立地為氫、C₁-C₆烷基、C₃-C₆環烷基、C₃-C₆烯基、C₃-C₆炔基、甲酯基、C₁-C₆烷基羰基、C₃-C₆環烷基羰基、C₂-C₆烯基羰基、C₂-C₆炔基羰基、C₁-C₆烷氧基-(C₁-

C_6)烷基、 C_1 - C_6 烷氧羰基、 C_2 - C_6 烯氧基羰基、
 C_3 - C_6 炔氧基羰基、 C_1 - C_6 烷基胺基羰基、 C_3 - C_6
 烯基胺基羰基、 C_3 - C_6 炔基胺基羰基、 C_1 - C_6 烷
 基磺醯基胺基羰基、 C_1 - C_6 烷基胺基羰基、二-
 (C_1 - C_6 烷基)胺基羰基、N-(C_3 - C_6 烯基)-N-(C_1 -
 C_6 烷基)-胺基羰基、N-(C_3 - C_6 炔基)-N-(C_1 - C_6 烷
 基)-胺基羰基、N-(C_1 - C_6 烷氧基)-N-(C_1 - C_6 烷
 基)-胺基羰基、N-(C_3 - C_6 烯基)-N-(C_1 - C_6 烷氧
 基)-胺基羰基、N-(C_3 - C_6 炔基)-N-(C_1 - C_6 烷氧
 基)-胺基羰基、二-(C_1 - C_6 烷基)-胺基硫基羰
 基、 C_1 - C_6 烷基羰基- C_1 - C_6 烷基、 C_1 - C_6 烷氧基
 亞胺基- C_1 - C_6 烷基、N-(C_1 - C_6 烷基胺基)-亞胺
 基- C_1 - C_6 烷基、N-(二- C_1 - C_6 烷基胺基)-亞胺基-
 C_1 - C_6 烷基或[三-(C_1 - C_4)烷基]矽烷基，其中取
 代基之上文所提及之脂族或異環狀部分可部分
 或完全經鹵化及/或可帶有以下基團中之一至
 三者：氰基、羥基、 C_1 - C_4 烷基、 C_1 - C_4 鹵烷
 基、 C_3 - C_6 環烷基、 C_1 - C_4 烷氧基、 C_1 - C_4 烷硫
 基、二-(C_1 - C_4 烷基)-胺基、 C_1 - C_4 烷基羰基、
 羥基羰基、 C_1 - C_4 烷氧羰基、胺基羰基、 C_1 - C_4
 烷基胺基羰基、二-(C_1 - C_4 烷基)胺基羰基、 C_1 -
 C_4 烷基羰氧基、苯基、苯基- C_1 - C_6 烷基、苯基
 羰基、苯基羰基- C_1 - C_6 烷基、苯氧基羰基、苯
 基胺基羰基、苯磺醯基胺基羰基、N-(C_1 - C_6 烷

基)-N-(苯基)-胺基羰基、苯基-C₁-C₆烷基羰基、雜環基、雜環基-C₁-C₆烷基、雜環基羰基、雜環基羰基-C₁-C₆烷基、雜環基氧基羰基、雜環基胺基羰基、雜環基磺醯基胺基羰基、N-(C₁-C₆烷基)-N-(雜環基)-胺基羰基或雜環基-C₁-C₆烷基羰基，其中取代基之苯基或雜環基部分可部分或完全經鹵化及/或可帶有以下基團中之一至三者：硝基、氰基、C₁-C₄烷基、C₁-C₄鹵烷基、C₁-C₄烷氧基或C₁-C₄鹵烷氧基；或

$S(O)_nR^{33}$ ，其中n為1或2；

R^{30} 及 R^{31} 彼此獨立地為氫、C₁-C₆烷基、C₃-C₆環烷基、C₂-C₆烯基或C₂-C₆炔基，其中取代基 R^{30} 及 R^{31} 之脂族或異環狀部分彼此獨立地未經取代或可部分或完全經鹵化及/或可帶有以下基團中之一至三者：氰基、羥基、C₁-C₄烷基、C₁-C₄鹵烷基、C₃-C₆環烷基、C₁-C₄烷氧基、C₁-C₄烷硫基、二-(C₁-C₄烷基)-胺基、C₁-C₄烷基羰基、羥基羰基、C₁-C₄烷氧羰基、胺基羰基、C₁-C₄烷基胺基羰基、二-(C₁-C₄烷基)胺基羰基或C₁-C₄烷基羰氧基，

為苯基、苯基-C₁-C₆烷基、雜環基或雜環基-C₁-C₆烷基，其中取代基之苯基或雜環基部分可部分或完全經鹵化及/或可帶有以下基團中

之一至三者：硝基、氰基、 C_1 - C_4 烷基、 C_1 - C_4 鹵烷基、 C_1 - C_4 烷氧基或 C_1 - C_4 鹵烷氧基；且
 R^{33} 為 C_1 - C_6 烷基、 C_1 - C_6 鹵烷基或苯基，其中苯基取代基可部分或完全經鹵化及/或可帶有以下基團中之一至三者：硝基、氰基、 C_1 - C_4 烷基、 C_1 - C_4 鹵烷基、 C_1 - C_4 烷氧基或 C_1 - C_4 鹵烷氧基；且

其中亦需符合以下情況中之一或兩者：

- a) R^1 連同基團 R^2 或基團 R^5 一起為 1、2、3 或 4 員碳鏈，其中一個碳原子可由 O、S 或基團 NR^A 置換，其中該等碳原子中之一者可帶有羰基氧原子及/或其中該等碳原子除氫以外可帶有 1、2、3 或 4 個選自由鹵素、氰基、羥基、 C_1 - C_4 烷基、 C_1 - C_4 鹵烷基、 C_1 - C_4 烷氧基及 C_1 - C_4 鹵烷氧基組成之群之基團；
- b) R^1 連同在 A^2 之連接點的鄰位連接至 A^2 之碳原子或氮原子的基團 R^d 一起為共價鍵或 1、2、3 或 4 員碳鏈，其中一個碳原子可由 O、S 或基團 NR^B 置換，其中該等碳原子中之一者可帶有羰基氧原子及/或其中該等碳原子除氫以外可帶有 1、2、3 或 4 個選自由鹵素、氰基、羥基、 C_1 - C_4 烷基、 C_1 - C_4 鹵烷基、 C_1 - C_4 烷氧基及 C_1 - C_4 鹵烷氧基組成之群之基團；
- c) R^1 連同基團 R^8 或基團 R^{y1} (若存在) 一起為 2、3 或 4 員碳鏈，其中一個碳原子可由 O、S 或基團 NR^C 置換，其中該等碳原子中之一者可帶有羰基氧原子及/或其中

該等碳原子除氫以外可帶有1、2、3或4個選自由鹵素、氰基、羥基、 C_1 - C_4 烷基、 C_1 - C_4 鹵烷基、 C_1 - C_4 烷氧基及 C_1 - C_4 鹵烷氧基組成之群之基團；

- d) R^1 連同基團 R^6 一起為3、4或5員碳鏈，其中一個碳原子可由O、S或基團 NR^D 置換，其中該等碳原子中之一者可帶有羰基氧原子及/或其中該等碳原子除氫以外可帶有1、2、3或4個選自由鹵素、氰基、羥基、 C_1 - C_4 烷基、 C_1 - C_4 鹵烷基、 C_1 - C_4 烷氧基及 C_1 - C_4 鹵烷氧基組成之群之基團；
- e) R^2 連同基團 R^6 一起為1、2、3或4員碳鏈，其中一個碳原子可由O、S或基團 NR^E 置換，其中該等碳原子中之一者可帶有羰基氧原子及/或其中該等碳原子除氫以外可帶有1、2、3或4個選自由鹵素、氰基、羥基、 C_1 - C_4 烷基、 C_1 - C_4 鹵烷基、 C_1 - C_4 烷氧基及 C_1 - C_4 鹵烷氧基組成之群之基團；
- f) R^2 連同基團 R^a 或 R^b 中之一者一起為共價鍵或1、2、3或4員碳鏈，其中一個碳原子可由O、S或基團 NR^F 置換，其中該等碳原子中之一者可帶有羰基氧原子及/或其中該等碳原子除氫以外可帶有1、2、3或4個選自由鹵素、氰基、羥基、 C_1 - C_4 烷基、 C_1 - C_4 鹵烷基、 C_1 - C_4 烷氧基及 C_1 - C_4 鹵烷氧基組成之群之基團；
- g) R^2 連同基團 R^4 或基團 R^{y2} (若存在) 一起為2、3或4員碳鏈，其中一個碳原子可由O、S或基團 NR^G 置換，其

中該等碳原子中之一者可帶有羰基氧原子及/或其中該等碳原子除氫以外可帶有1、2、3或4個選自由鹵素、氰基、羥基、 C_1 - C_4 烷基、 C_1 - C_4 鹵烷基、 C_1 - C_4 烷氧基及 C_1 - C_4 鹵烷氧基組成之群之基團；

- h) R^2 連同基團 R^5 一起為3、4或5員碳鏈，其中一個碳原子可由O、S或基團 NR^H 置換，其中該等碳原子中之一者可帶有羰基氧原子及/或其中該等碳原子除氫以外可帶有1、2、3或4個選自由鹵素、氰基、羥基、 C_1 - C_4 烷基、 C_1 - C_4 鹵烷基、 C_1 - C_4 烷氧基及 C_1 - C_4 鹵烷氧基組成之群之基團；
- i) R^3 連同基團 R^5 一起為1、2、3或4員碳鏈，其中一個碳原子可由O、S或基團 NR^I 置換，其中該等碳原子中之一者可帶有羰基氧原子及/或其中該等碳原子除氫以外可帶有1、2、3或4個選自由鹵素、氰基、羥基、 C_1 - C_4 烷基、 C_1 - C_4 鹵烷基、 C_1 - C_4 烷氧基及 C_1 - C_4 鹵烷氧基組成之群之基團；
- k) R^3 連同基團 R^4 一起為2、3、4或5員碳鏈，其中一個碳原子可由O、S或基團 NR^K 置換，其中該等碳原子中之一者可帶有羰基氧原子及/或其中該等碳原子除氫以外可帶有1、2、3或4個選自由鹵素、氰基、羥基、 C_1 - C_4 烷基、 C_1 - C_4 鹵烷基、 C_1 - C_4 烷氧基及 C_1 - C_4 鹵烷氧基組成之群之基團；
- l) R^4 連同基團 R^a 一起為2、3、4或5員碳鏈，其中一個碳原子可由O、S或基團 NR^L 置換，其中該等碳原子

中之一者可帶有羰基氧原子及/或其中該等碳原子除氫以外可帶有1、2、3或4個選自由鹵素、氰基、羥基、C₁-C₄烷基、C₁-C₄鹵烷基、C₁-C₄烷氧基及C₁-C₄鹵烷氧基組成之群之基團；

m) R⁵連同基團R^a一起為2、3、4或5員碳鏈，其中一個碳原子可由O、S或基團NR^M置換，其中該等碳原子中之一者可帶有羰基氧原子及/或其中該等碳原子除氫以外可帶有1、2、3或4個選自由鹵素、氰基、羥基、C₁-C₄烷基、C₁-C₄鹵烷基、C₁-C₄烷氧基及C₁-C₄鹵烷氧基組成之群之基團；

n) R⁵連同基團R⁶一起為1、2、3、4或5員碳鏈，其中一個碳原子可由O、S或基團NR^N置換，其中該等碳原子中之一者可帶有羰基氧原子及/或其中該等碳原子除氫以外可帶有1、2、3或4個選自由鹵素、氰基、羥基、C₁-C₄烷基、C₁-C₄鹵烷基、C₁-C₄烷氧基及C₁-C₄鹵烷氧基組成之群之基團；

o) R⁶連同在A²之連接點之鄰位處連接至A²之碳原子或氮原子的基團R^d一起為1、2、3或4員碳鏈，其中一個碳原子可由O、S或基團NR^O置換，其中該等碳原子中之一者可帶有羰基氧原子及/或其中該等碳原子除氫以外可帶有1、2、3或4個選自由鹵素、氰基、羥基、C₁-C₄烷基、C₁-C₄鹵烷基、C₁-C₄烷氧基及C₁-C₄鹵烷氧基組成之群之基團；

p) R⁶連同基團R^{y2}(若存在)一起為2、3、4或5員碳鏈，

其中一個碳原子可由 O、S 或基團 NR^{P} 置換，其中該等碳原子中之一者可帶有羰基氧原子及/或其中該等碳原子除氫以外可帶有 1、2、3 或 4 個選自由鹵素、氰基、羥基、 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 烷基、 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 鹵烷基、 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 烷氧基及 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 鹵烷氧基組成之群之基團；

- q) R^6 連同基團 R^7 一起為 1、2、3 或 4 員碳鏈，其中一個碳原子可由 O、S 或基團 NR^{Q} 置換，其中該等碳原子中之一者可帶有羰基氧原子及/或其中該等碳原子除氫以外可帶有 1、2、3 或 4 個選自由鹵素、氰基、羥基、 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 烷基、 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 鹵烷基、 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 烷氧基及 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 鹵烷氧基組成之群之基團；
- r) R^7 連同基團 R^8 一起為 2、3、4 或 5 員碳鏈，其中一個碳原子可由 O、S 或基團 NR^{R} 置換，其中該等碳原子中之一者可帶有羰基氧原子及/或其中該等碳原子除氫以外可帶有 1、2、3 或 4 個選自由鹵素、氰基、羥基、 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 烷基、 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 鹵烷基、 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 烷氧基及 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 鹵烷氧基組成之群之基團；
- s) R^8 連同在 A^2 之連接點的鄰位處連接至 A^2 之碳原子或氮原子的基團 R^{d} 一起為 2、3、4 或 5 員碳鏈，其中一個碳原子可由 O、S 或基團 NR^{S} 置換，其中該等碳原子中之一者可帶有羰基氧原子及/或其中該等碳原子除氫以外可帶有 1、2、3 或 4 個選自由鹵素、氰基、羥基、 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 烷基、 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 鹵烷基、 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 烷氧基及 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 鹵烷氧基組成之群之基團；

- t) R^8 連同基團 R^{y2} (若存在) 一起為 2、3、4 或 5 員碳鏈，其中一個碳原子可由 O、S 或基團 NR^T 置換，其中該等碳原子中之一者可帶有羰基氧原子及/或其中該等碳原子除氫以外可帶有 1、2、3 或 4 個選自由鹵素、氰基、羥基、 C_1 - C_4 烷基、 C_1 - C_4 鹵烷基、 C_1 - C_4 烷氧基及 C_1 - C_4 鹵烷氧基組成之群之基團；

其中 R^A 、 R^B 、 R^C 、 R^D 、 R^E 、 R^F 、 R^G 、 R^H 、 R^I 、 R^K 、 R^L 、 R^M 、 R^N 、 R^O 、 R^P 、 R^Q 、 R^R 、 R^S 及 R^T 彼此獨立地選自由氫、氰基、 C_1 - C_4 烷基、 C_1 - C_4 鹵烷基、苯基及苄基組成之群，其中苯基或苄基中之苯環可部分或完全經鹵化及/或可帶有以下基團中之一至三者：硝基、氰基、 C_1 - C_4 烷基、 C_1 - C_4 鹵烷基、 C_1 - C_4 烷氧基或 C_1 - C_4 鹵烷氧基；

- u) R^3 及 R^4 共同形成酮基或基團 NR^{3a} ，其中 R^{3a} 係選自由氫、 C_1 - C_6 烷基、 C_1 - C_6 鹵烷基、 C_3 - C_6 烯基、 C_3 - C_6 炔基、 C_3 - C_6 環烷基、 C_3 - C_6 環烷基甲基、OH、 C_1 - C_6 烷氧基、 C_1 - C_6 鹵烷氧基、 C_3 - C_6 烯氧基、 C_3 - C_6 炔氧基、 C_3 - C_6 環烷氧基及 C_3 - C_6 環烷基甲氧基組成之群；

- v) R^7 及 R^8 共同形成酮基或基團 NR^{7a} ，其中 R^{7a} 係選自由氫、 C_1 - C_6 烷基、 C_1 - C_6 鹵烷基、 C_3 - C_6 烯基、 C_3 - C_6 炔基、 C_3 - C_6 環烷基、 C_3 - C_6 環烷基甲基、OH、 C_1 - C_6 烷氧基、 C_1 - C_6 鹵烷氧基、 C_3 - C_6 烯氧基、 C_3 - C_6 炔氧基、 C_3 - C_6 環烷氧基及 C_3 - C_6 環烷基甲氧基組成之

群；

其中 R^6 亦可為氫、OH或可部分或完全經鹵化及/或可帶有以下基團中之一至三者的 C_1-C_6 烷基：

氰基、羥基、 C_1-C_4 烷基、 C_1-C_4 鹵烷基、 C_3-C_6 環烷基、 C_1-C_4 烷氧基、 C_1-C_4 烷硫基、二- $(C_1-C_4$ 烷基)胺基、 C_1-C_4 烷基羰基、羥基羰基、 C_1-C_4 烷氧羰基、胺基羰基、 C_1-C_4 烷基胺基羰基、[二- $(C_1-C_4$ 烷基)胺基]羰基或 C_1-C_4 烷基羰氧基；

若

i) 符合條件 a) 至 c)、f) 至 m) 或 r) 至 v) 中之至少一者，

及/或

ii) 兩個基團 Y^1 、 Y^2 中之至少一者為不同於氧之基團，

及/或

iii) R^5 為不同於氫、羥基或 C_1-C_6 烷基之基團，其中 C_1-

C_6 烷基係未經取代或可部分或完全經鹵化及/或可帶有以下基團中之一至三者：氰基、羥基、 C_1-C_4 烷基、 C_1-C_4 鹵烷基、 C_3-C_6 環烷基、 C_1-C_4 烷氧基、 C_1-C_4 烷硫基、二- $(C_1-C_4$ 烷基)胺基、 C_1-C_4 烷基羰基、羥基羰基、 C_1-C_4 烷氧羰基、胺基羰基、 C_1-C_4 烷基胺基羰基、[二- $(C_1-C_4$ 烷基)胺基]羰基或 C_1-C_4 烷基羰氧基；

及/或

iv) 基團 R^7 、 R^8 中之一或兩者為不同於氫、羥基、 C_1-C_6

烷基、 C_1-C_6 烷氧基之基團，其中 C_1-C_6 烷基及 C_1-C_6

烷氧基係未經取代或可部分或完全經鹵化及/或可帶有以下基團中之一至三者：氰基、羥基、 C_1 - C_4 烷基、 C_1 - C_4 鹵烷基、 C_3 - C_6 環烷基、 C_1 - C_4 烷氧基、 C_1 - C_4 烷硫基、二- $(C_1$ - C_4 烷基)胺基、 C_1 - C_4 烷基羰基、羥基羰基、 C_1 - C_4 烷氧羰基、胺基羰基、 C_1 - C_4 烷基胺基羰基、[二- $(C_1$ - C_4 烷基)胺基]羰基或 C_1 - C_4 烷基羰氧基；

及/或

v) 基團 R^1 、 R^2 中之一或兩者為 SR^{24} 、 $S(O)R^{25}$ 、 C_3 - C_6 環烷基- $(C_1$ - $C_6)$ 烷基、 C_5 - C_8 環烯基- $(C_1$ - $C_6)$ 烷基、 C_5 - C_8 環炔基- $(C_1$ - $C_6)$ 烷基、 C_3 - C_6 環烷基- $(C_2$ - $C_6)$ 烯基、 C_5 - C_8 環烯基- $(C_2$ - $C_6)$ 烯基、 C_5 - C_8 環炔基- $(C_2$ - $C_6)$ 烯基、 C_3 - C_6 環烷基- $(C_2$ - $C_6)$ 炔基、 C_5 - C_8 環烯基- $(C_2$ - $C_6)$ 炔基、 C_5 - C_8 環炔基- $(C_2$ - $C_6)$ 炔基、苯基- $(C_2$ - $C_6)$ 烯基、苯基- $(C_2$ - $C_6)$ 炔基、雜環基- $(C_2$ - $C_6)$ 烯基或雜環基- $(C_2$ - $C_6)$ 炔基，其中取代基 R^1 及 R^2 之上文所提及之脂族、環狀或芳族部分彼此獨立地未經取代或可部分或完全經鹵化及/或可帶有以下基團中之一至三者：氰基、羥基、 C_1 - C_4 烷基、 C_1 - C_4 鹵烷基、 C_3 - C_6 環烷基、 C_1 - C_4 烷氧基、 C_1 - C_4 烷硫基、二- $(C_1$ - C_4 烷基)胺基、 C_1 - C_4 烷基羰基、羥基羰基、 C_1 - C_4 烷氧羰基、胺基羰基、 C_1 - C_4 烷基胺基羰基、二- $(C_1$ - C_4 烷基)胺基羰基或 C_1 - C_4 烷基羰氧基；

及/或

vi) R^a 為 SF_5 、 $Z^1P(O)(OR^9)(R^{9a})$ 、 C_3-C_6 環烷基- (C_1-C_6) 烷基、 C_5-C_8 環烯基- (C_1-C_6) 烷基、 C_5-C_8 環炔基- (C_1-C_6) 烷基、 C_3-C_6 環烷基- (C_2-C_6) 烯基、 C_5-C_8 環烯基- (C_2-C_6) 烯基、 C_5-C_8 環炔基- (C_2-C_6) 烯基、 C_3-C_6 環烷基- (C_2-C_6) 炔基、 C_5-C_8 環烯基- (C_2-C_6) 炔基、 C_5-C_8 環炔基- (C_2-C_6) 炔基、苯基- (C_2-C_6) 炔基、雜環基- (C_2-C_6) 烯基或雜環基- (C_2-C_6) 炔基，其中取代基 R^a 之上文所提及之脂族、環狀或芳族部分彼此獨立地未經取代或可部分或完全經鹵化及/或可帶有以下基團中之一至三者：氰基、羥基、 C_1-C_4 烷基、 C_1-C_4 鹵烷基、 C_3-C_6 環烷基、 C_1-C_4 烷氧基、 C_1-C_4 烷硫基、二- $(C_1-C_4$ 烷基)胺基、 C_1-C_4 烷基羰基、羥基羰基、 C_1-C_4 烷氧羰基、胺基羰基、 C_1-C_4 烷基胺基羰基、二- $(C_1-C_4$ 烷基)胺基羰基或 C_1-C_4 烷基羰氧基；

且其中 R^6 不為可部分或完全經鹵化及/或可帶有以下基團中之一至三者的 C_1-C_6 烷氧基：

氰基、羥基、 C_1-C_4 烷基、 C_1-C_4 鹵烷基、 C_3-C_6 環烷基、 C_1-C_4 烷氧基、 C_1-C_4 烷硫基、二- $(C_1-C_4$ 烷基)胺基、 C_1-C_4 烷基羰基、羥基羰基、 C_1-C_4 烷氧羰基、胺基羰基、 C_1-C_4 烷基胺基羰基、[二- $(C_1-C_4$ 烷基)胺基]羰基或 C_1-C_4 烷基羰氧基；

若 R^3 連同 R^5 一起為化學鍵；

及其鹽。

本發明亦提供通式I之哌啶化合物或式I之哌啶化合物之

農業上適用之鹽作為除草劑(亦即用於控制有害植物)的用途。

本發明亦提供包含至少一種式I之哌啶化合物或I之農業上適用之鹽及慣常用於調配作物保護劑之助劑。

此外，本發明提供一種控制不良植被之方法，其中使除草有效量之至少一種式I之哌啶化合物或I之農業上適用之鹽作用於植物、其種子及/或其生境。

【實施方式】

本發明之其他實施例自申請專利範圍、說明書及實例顯而易見。應理解，本發明標的物之上文所提及及仍待下文說明之特徵在不偏離本發明範疇之情況下不僅可以各特定情況下所給之組合來應用，且亦可以其他組合來應用。

視取代模式而定，式I化合物可包含一或多個對掌性中心，在該情況下其係以對映異構體或非對映異構體之混合物形式存在。本發明提供純對映異構體或非對映異構體及其混合物。

若 R^3 連同 R^5 一起為化學鍵，則式I化合物可相對於由此形成之環外雙鍵而以E異構體或Z異構體之形式存在。本發明提供純E異構體與Z異構體及其混合物。

式I化合物亦可以其農業上適用之鹽形式存在，該鹽之性質一般無關緊要。一般而言，合適之鹽為陽離子及陰離子分別對化合物I之除草作用無不利影響之彼等酸的陽離子或酸加成鹽。

合適之陽離子尤其為鹼金屬(較佳為鋰、鈉及鉀)、鹼土

金屬(較佳為鈣及鎂)及過渡金屬(較佳為錳、銅、鋅及鐵)以及銨之離子，其中若必要，則一至四個氫原子可經C₁-C₄烷基、羥基-C₁-C₄烷基、C₁-C₄烷氧基-C₁-C₄烷基、羥基-C₁-C₄烷氧基-C₁-C₄烷基、苯基或苄基置換，較佳為銨、二甲基銨、二異丙基銨、四甲基銨、四丁基銨、2-(2-羥基乙-1-氧基)乙-1-基銨、二(2-羥基乙-1-基)銨、三甲基苄基銨；此外為磷離子、銩離子，較佳為三(C₁-C₄烷基)銩及氧化銩離子，較佳為三(C₁-C₄烷基)氧化銩。

適用酸加成鹽之陰離子主要為氯離子、溴離子、氟離子、硫酸氫根、硫酸根、磷酸二氫根、磷酸氫根、硝酸根、碳酸氫根、碳酸根、六氟矽酸根、六氟磷酸根、苯甲酸根及C₁-C₄烷酸之陰離子，較佳為甲酸鹽、乙酸鹽、丙酸鹽及丁酸鹽。

對於本發明化合物之取代基所提及之有機部分為用於特定群成員之個別列舉的集體術語。所有烴鏈均可為直鏈或支鏈，諸如烷基、鹵烷基以及氰基烷基、烷氧基、鹵烷氧基、烷硫基、鹵烷硫基、烷基亞磺醯基、鹵烷基亞磺醯基、烷基磺醯基、鹵烷基磺醯基、N-烷基胺基磺醯基、N,N-二烷基胺基磺醯基、二烷基胺基、N-烷基磺醯基胺基、N-鹵烷基磺醯基胺基、N-烷基-N-烷基磺醯基胺基、N-烷基-N-鹵烷基磺醯基胺基、烷基羰基、鹵烷基羰基、烷氧羰基、鹵烷氧羰基、烷基胺基羰基、二烷基胺基羰基、二烷基胺基硫基羰基、烷氧基烷基、二烷氧基烷基、烷硫基烷基、二烷基胺基烷基、二烷基肼基烷

基、烷基亞胺基氧基烷基、烷基羰基烷基、烷氧基亞胺基烷基、N-(烷基胺基)-亞胺基烷基、N-(二烷基胺基)-亞胺基烷基、烷氧羰基烷基、二烷基胺基羰基烷基、苯基烯基羰基、雜環基烯基羰基、N-烷氧基-N-烷基胺基羰基、N-烷基-N-苯基胺基羰基、N-烷基-N-雜環基胺基羰基、苯基烷基、雜環基芳基、苯基羰基烷基、雜環基羰基烷基、二烷基胺基烷氧羰基、烷氧基烷氧羰基、烯基羰基、烯氧基羰基、烯基胺基羰基、N-烯基-N-烷基胺基羰基、N-烯基-N-烷氧基胺基羰基、炔基羰基、炔氧基羰基、炔基胺基羰基、N-炔基-N-烷基胺基羰基、N-炔基-N-烷氧基胺基羰基、烯基、炔基、鹵烯基、鹵炔基及烷氧基烷氧基部分中之烷基部分。字首 C_n - C_m 指示烴部分之各別碳數。除非另有指示，否則經鹵化之取代基較佳帶有一至五個相同或不同之鹵素原子，尤其為氟原子或氯原子。

術語鹵素在各種情況下表示氟、氯、溴或碘。

其他含義之實例為：

烷基以及例如烷氧基、烷硫基、烷基亞磺醯基及烷基磺醯基、烷基羰基、烷基胺基、三烷基矽烷基、苯基烷基、苯磺醯基烷基、雜環基烷基中之烷基部分：具有一或多個碳原子(例如 1 至 2 個、1 至 4 個或 1 至 6 個)之飽和直鏈或支鏈烴基，例如 C_1 - C_6 烷基，諸如甲基、乙基、丙基、1-甲基乙基、丁基、1-甲基丙基、2-甲基丙基、1,1-二甲基乙基、戊基、1-甲基丁基、2-甲基丁基、3-甲基丁基、2,2-二甲基丙基、1-乙基丙基、己基、1,1-二甲基丙基、1,2-二甲基

丙基、1-甲基戊基、2-甲基戊基、3-甲基戊基、4-甲基戊基、1,1-二甲基丁基、1,2-二甲基丁基、1,3-二甲基丁基、2,2-二甲基丁基、2,3-二甲基丁基、3,3-二甲基丁基、1-乙基丁基、2-乙基丁基、1,1,2-三甲基丙基、1,2,2-三甲基丙基、1-乙基-1-甲基丙基及1-乙基-2-甲基丙基。在根據本發明之一實施例中，烷基表示諸如 C_1 - C_4 烷基之小烷基。在根據本發明之另一實施例中，烷基表示諸如 C_5 - C_6 烷基之相對大烷基。

鹵烷基：氫原子部分或完全經諸如氟、氯、溴及/或碘之鹵素原子取代的如上文所提及之烷基，例如氯甲基、二氯甲基、三氯甲基、氟甲基、二氟甲基、三氟甲基、氯氯甲基、二氯氟甲基、氯二氟甲基、2-氟乙基、2-氯乙基、2-溴乙基、2-碘乙基、2,2-二氟乙基、2,2,2-三氟乙基、2-氯-2-氟乙基、2-氯-2,2-二氟乙基、2,2-二氯-2-氟乙基、2,2,2-三氯乙基、五氟乙基、2-氟丙基、3-氟丙基、2,2-二氟丙基、2,3-二氟丙基、2-氯丙基、3-氯丙基、2,3-二氯丙基、2-溴丙基、3-溴丙基、3,3,3-三氟丙基、3,3,3-三氯丙基、2,2,3,3,3-五氟丙基、六氟丙基、1-(氟甲基)-2-氟乙基、1-(氯甲基)-2-氯乙基、1-(溴乙基)-2-溴甲基、4-氟丁基、4-氯丁基、4-溴丁基及九氟丁基。

環烷基以及例如環烷氧基或環烷基羰基中之環烷基部分：具有三個或三個以上碳原子(例如3至6個碳環成員)之單環飽和烴基，諸如環丙基、環丁基、環戊基及環己基。

烯基以及例如苯基-(C_2 - C_6)烯基或烯基胺基中之烯基部

分：具有兩個或兩個以上碳原子(例如2至4個、2至6個或3至6個碳原子)及位於任何位置之雙鍵的單不飽和直鏈或支鏈烴基，例如C₂-C₆烯基，諸如乙烯基、1-丙烯基、2-丙烯基、1-甲基乙烯基、1-丁烯基、2-丁烯基、3-丁烯基、1-甲基-1-丙烯基、2-甲基-1-丙烯基、1-甲基-2-丙烯基、2-甲基-2-丙烯基、1-戊烯基、2-戊烯基、3-戊烯基、4-戊烯基、1-甲基-1-丁烯基、2-甲基-1-丁烯基、3-甲基-1-丁烯基、1-甲基-2-丁烯基、2-甲基-2-丁烯基、3-甲基-2-丁烯基、1-甲基-3-丁烯基、2-甲基-3-丁烯基、3-甲基-3-丁烯基、1,1-二甲基-2-丙烯基、1,2-二甲基-1-丙烯基、1,2-二甲基-2-丙烯基、1-乙基-1-丙烯基、1-乙基-2-丙烯基、1-己烯基、2-己烯基、3-己烯基、4-己烯基、5-己烯基、1-甲基-1-戊烯基、2-甲基-1-戊烯基、3-甲基-1-戊烯基、4-甲基-1-戊烯基、1-甲基-2-戊烯基、2-甲基-2-戊烯基、3-甲基-2-戊烯基、4-甲基-2-戊烯基、1-甲基-3-戊烯基、2-甲基-3-戊烯基、3-甲基-3-戊烯基、4-甲基-3-戊烯基、1-甲基-4-戊烯基、2-甲基-4-戊烯基、3-甲基-4-戊烯基、4-甲基-4-戊烯基、1,1-二甲基-2-丁烯基、1,1-二甲基-3-丁烯基、1,2-二甲基-1-丁烯基、1,2-二甲基-2-丁烯基、1,2-二甲基-3-丁烯基、1,3-二甲基-1-丁烯基、1,3-二甲基-2-丁烯基、1,3-二甲基-3-丁烯基、2,2-二甲基-3-丁烯基、2,3-二甲基-1-丁烯基、2,3-二甲基-2-丁烯基、2,3-二甲基-3-丁烯基、3,3-二甲基-1-丁烯基、3,3-二甲基-2-丁烯基、1-乙基-1-丁烯基、1-乙基-2-丁烯基、1-乙基-3-丁烯基、2-乙基-1-

丁烯基、2-乙基-2-丁烯基、2-乙基-3-丁烯基、1,1,2-三甲基-2-丙烯基、1-乙基-1-甲基-2-丙烯基、1-乙基-2-甲基-1-丙烯基、1-乙基-2-甲基-2-丙烯基。

在根據本發明之一實施例中，利用諸如 C_2 - C_6 烯基之烯基。在根據本發明之另一實施例中，使用諸如 C_3 - C_6 烯基之烯基。

環烯基以及環烯基烷基、環烯基烯基及環烯基炔基中之環烯基部分：具有三個或三個以上碳原子(例如5至8個、較佳5至6個碳環成員)之單環、單不飽和烴基，諸如環戊烯-1-基、環戊烯-3-基、環己烯-1-基、環己烯-3-基、環己烯-4-基。

炔基以及例如三- (C_1-C_6) 烷基矽烷基- (C_2-C_6) 炔基或炔基胺基中之炔基部分：具有兩個或兩個以上碳原子(例如2至4個、2至6個或3至6個碳原子)及一或兩個位於任何位置之參鍵(但不彼此相鄰)的直鏈或支鏈烴基，例如 C_2 - C_6 炔基，諸如乙炔基、1-丙炔基、2-丙炔基、1-丁炔基、2-丁炔基、3-丁炔基、1-甲基-2-丙炔基、1-戊炔基、2-戊炔基、3-戊炔基、4-戊炔基、1-甲基-2-丁炔基、1-甲基-3-丁炔基、2-甲基-3-丁炔基、3-甲基-1-丁炔基、1,1-二甲基-2-丙炔基、1-乙基-2-丙炔基、1-己炔基、2-己炔基、3-己炔基、4-己炔基、5-己炔基、1-甲基-2-戊炔基、1-甲基-3-戊炔基、1-甲基-4-戊炔基、2-甲基-3-戊炔基、2-甲基-4-戊炔基、3-甲基-1-戊炔基、3-甲基-4-戊炔基、4-甲基-1-戊炔基、4-甲基-2-戊炔基、1,1-二甲基-2-丁炔基、1,1-二甲

基-3-丁炔基、1,2-二甲基-3-丁炔基、2,2-二甲基-3-丁炔基、3,3-二甲基-1-丁炔基、1-乙基-2-丁炔基、1-乙基-3-丁炔基、2-乙基-3-丁炔基、1-乙基-1-甲基-2-丙炔基。

環炔基以及環炔基烷基、環炔基烯基及環炔基炔基中之環炔基部分：具有三個或三個以上碳原子(例如7至8個碳環成員)及一個參鍵之單環烴基，諸如環庚炔-1-基、環庚炔-3-基、環庚炔-4-基。

C_4-C_{10} 二烯基：具有四個或四個以上碳原子及兩個位於任何(但非相鄰)位置之雙鍵(例如4至10個碳原子及兩個位於任何位置之雙鍵(但不彼此相鄰))的雙不飽和直鏈或支鏈烴基，例如1,3-丁二烯基、1-甲基-1,3-丁二烯基、2-甲基-1,3-丁二烯基、戊-1,3-二烯-1-基、己-1,4-二烯-1-基、己-1,4-二烯-3-基、己-1,4-二烯-6-基、己-1,5-二烯-1-基、己-1,5-二烯-3-基、己-1,5-二烯-4-基、庚-1,4-二烯-1-基、庚-1,4-二烯-3-基、庚-1,4-二烯-6-基、庚-1,4-二烯-7-基、庚-1,5-二烯-1-基、庚-1,5-二烯-3-基、庚-1,5-二烯-4-基、庚-1,5-二烯-7-基、庚-1,6-二烯-1-基、庚-1,6-二烯-3-基、庚-1,6-二烯-4-基、庚-1,6-二烯-5-基、庚-1,6-二烯-2-基、辛-1,4-二烯-1-基、辛-1,4-二烯-2-基、辛-1,4-二烯-3-基、辛-1,4-二烯-6-基、辛-1,4-二烯-7-基、辛-1,5-二烯-1-基、辛-1,5-二烯-3-基、辛-1,5-二烯-4-基、辛-1,5-二烯-7-基、辛-1,6-二烯-1-基、辛-1,6-二烯-3-基、辛-1,6-二烯-4-基、辛-1,6-二烯-5-基、辛-1,6-二烯-2-基、癸-1,4-二烯基、癸-1,5-二烯基、癸-1,6-二烯基、癸-1,7-二烯基、癸-1,8-二烯基、

癸-2,5-二烯基、癸-2,6-二烯基、癸-2,7-二烯基、癸-2,8-二烯基。

烷氧基或例如苯基烷氧基、烷氧基胺基、烷氧羰基中之烷氧基部分：經由氧原子連接之如上文所定義之烷基：例如甲氧基、乙氧基、正丙氧基、1-甲基乙氧基、丁氧基、1-甲基丙氧基、2-甲基丙氧基或1,1-二甲基乙氧基、戊氧基、1-甲基丁氧基、2-甲基丁氧基、3-甲基丁氧基、1,1-二甲基丙氧基、1,2-二甲基丙氧基、2,2-二甲基丙氧基、1-乙基丙氧基、己氧基、1-甲基戊氧基、2-甲基戊氧基、3-甲基戊氧基、4-甲基戊氧基、1,1-二甲基丁氧基、1,2-二甲基丁氧基、1,3-二甲基丁氧基、2,2-二甲基丁氧基、2,3-二甲基丁氧基、3,3-二甲基丁氧基、1-乙基丁氧基、2-乙基丁氧基、1,1,2-三甲基丙氧基、1,2,2-三甲基丙氧基、1-乙基-1-甲基丙氧基或1-乙基-2-甲基丙氧基。

在根據本發明之一實施例中，利用諸如 C_1 - C_4 烷氧基之小烷氧基。在根據本發明之另一實施例中，使用諸如 C_5 - C_6 烷氧基之相對大烷氧基。

烯氧基：經由氧原子連接之如上文所提及之烯基，例如 C_3 - C_6 烯氧基，諸如1-丙烯氧基、2-丙烯氧基、1-甲基乙烯氧基、1-丁烯氧基、2-丁烯氧基、3-丁烯氧基、1-甲基-1-丙烯氧基、2-甲基-1-丙烯氧基、1-甲基-2-丙烯氧基、2-甲基-2-丙烯氧基、1-戊烯氧基、2-戊烯氧基、3-戊烯氧基、4-戊烯氧基、1-甲基-1-丁烯氧基、2-甲基-1-丁烯氧基、3-甲基-1-丁烯氧基、1-甲基-2-丁烯氧基、2-甲基-2-丁烯氧基

基、3-甲基-2-丁烯氧基、1-甲基-3-丁烯氧基、2-甲基-3-丁烯氧基、3-甲基-3-丁烯氧基、1,1-二甲基-2-丙烯氧基、1,2-二甲基-1-丙烯氧基、1,2-二甲基-2-丙烯氧基、1-乙基-1-丙烯氧基、1-乙基-2-丙烯氧基、1-己烯氧基、2-己烯氧基、3-己烯氧基、4-己烯氧基、5-己烯氧基、1-甲基-1-戊烯氧基、2-甲基-1-戊烯氧基、3-甲基-1-戊烯氧基、4-甲基-1-戊烯氧基、1-甲基-2-戊烯氧基、2-甲基-2-戊烯氧基、3-甲基-2-戊烯氧基、4-甲基-2-戊烯氧基、1-甲基-3-戊烯氧基、2-甲基-3-戊烯氧基、3-甲基-3-戊烯氧基、4-甲基-3-戊烯氧基、1-甲基-4-戊烯氧基、2-甲基-4-戊烯氧基、3-甲基-4-戊烯氧基、4-甲基-4-戊烯氧基、1,1-二甲基-2-丁烯氧基、1,1-二甲基-3-丁烯氧基、1,2-二甲基-1-丁烯氧基、1,2-二甲基-2-丁烯氧基、1,2-二甲基-3-丁烯氧基、1,3-二甲基-1-丁烯氧基、1,3-二甲基-2-丁烯氧基、1,3-二甲基-3-丁烯氧基、2,2-二甲基-3-丁烯氧基、2,3-二甲基-1-丁烯氧基、2,3-二甲基-2-丁烯氧基、2,3-二甲基-3-丁烯氧基、3,3-二甲基-1-丁烯氧基、3,3-二甲基-2-丁烯氧基、1-乙基-1-丁烯氧基、1-乙基-2-丁烯氧基、1-乙基-3-丁烯氧基、2-乙基-1-丁烯氧基、2-乙基-2-丁烯氧基、2-乙基-3-丁烯氧基、1,1,2-三甲基-2-丙烯氧基、1-乙基-1-甲基-2-丙烯氧基、1-乙基-2-甲基-1-丙烯氧基及1-乙基-2-甲基-2-丙烯氧基。在根據本發明之一實施例中，利用諸如C₃-C₄烯氧基之小烯氧基。在根據本發明之另一實施例中，使用諸如C₅-C₆烯氧基之相對大烯氧基。

炔氧基：經由氧原子連接之如上文所提及之炔基，例如 C_3-C_6 炔氧基，諸如 2-丙炔氧基、2-丁炔氧基、3-丁炔氧基、1-甲基-2-丙炔氧基、2-戊炔氧基、3-戊炔氧基、4-戊炔氧基、1-甲基-2-丁炔氧基、1-甲基-3-丁炔氧基、2-甲基-3-丁炔氧基、1-乙基-2-丙炔氧基、2-己炔氧基、3-己炔氧基、4-己炔氧基、5-己炔氧基、1-甲基-2-戊炔氧基、1-甲基-3-戊炔氧基。在根據本發明之一實施例中，利用諸如 C_3-C_4 炔氧基之小炔氧基。在根據本發明之另一實施例中，使用諸如 C_5-C_6 炔氧基之相對大炔氧基。

烷硫基：經由硫原子連接之如上文所定義之烷基。

烷基亞磺醯基：經由 SO 基團連接之如上文所定義之烷基。

烷基磺醯基：經由 $S(O)_2$ 基團連接之如上文所定義之烷基。

烷基羰基：經由 $(C=O)$ 基團連接之如上文所定義之烷基，例如 甲基羰基、乙基羰基、丙基羰基、1-甲基乙基羰基、丁基羰基、1-甲基丙基羰基、2-甲基丙基羰基或 1,1-二甲基乙基羰基、戊基羰基、1-甲基丁基羰基、2-甲基丁基羰基、3-甲基丁基羰基、2,2-二甲基丙基羰基、1-乙基丙基羰基、己基羰基、1,1-二甲基丙基羰基、1,2-二甲基丙基羰基、1-甲基戊基羰基、2-甲基戊基羰基、3-甲基戊基羰基、4-甲基戊基羰基、1,1-二甲基丁基羰基、1,2-二甲基丁基羰基、1,3-二甲基丁基羰基、2,2-二甲基丁基羰基、2,3-二甲基丁基羰基、3,3-二甲基丁基羰基、1-乙基丁

基羰基、2-乙基丁基羰基、1,1,2-三甲基丙基羰基、1,2,2-三甲基丙基羰基、1-乙基-1-甲基丙基羰基或1-乙基-2-甲基丙基羰基。

烯基羰基：經由(C=O)基團連接之如上文所定義之烯基，例如1-乙烯基羰基。

炔基羰基：經由(C=O)基團連接之如上文所定義之炔基，例如1-丙炔基羰基。

雜環基：具有三個或三個以上(例如3至10個)環原子之單環或雙環飽和、部分不飽和或芳族雜環：

- 例如單環3、4、5、6或7員雜環，其含有一至四個相同或不同之選自由氧、硫及氮組成之群之雜原子且其可經由碳或氮連接，例如：

經由碳連接之3或4員飽和或不飽和環，諸如2-氧呋基、2-氧雜環丁烷基、3-氧雜環丁烷基、2-氮丙啶基、3-硫雜環丁烷基、1-吡啶基、2-吡啶基；

經由碳連接之5員飽和環，諸如：

四氫呋喃-2-基、四氫呋喃-3-基、四氫噻吩-2-基、四氫噻吩-3-基、四氫吡咯-2-基、四氫吡咯-3-基、四氫吡啶-3-基、四氫吡啶-4-基、四氫異噁唑-3-基、四氫異噁唑-4-基、四氫異噁唑-5-基、1,2-氧雜硫脒-3-基、1,2-氧雜硫脒-4-基、1,2-氧雜硫脒-5-基、四氫異噻唑-3-基、四氫異噻唑-4-基、四氫異噻唑-5-基、1,2-二硫脒-3-基、1,2-二硫脒-4-基、四氫咪唑-2-基、四氫咪唑-4-基、四氫噁唑-2-基、四氫噁唑-4-基、四氫噁唑-5-基、四氫噻

唑-2-基、四氫噻唑-4-基、四氫噻唑-5-基、1,3-二氧戊環-2-基、1,3-二氧戊環-4-基、1,3-氧雜硫啉-2-基、1,3-氧雜硫啉-4-基、1,3-氧雜硫啉-5-基、1,3-二硫啉-2-基、1,3-二硫啉-4-基、1,3,2-二氧雜硫啉-4-基；

經由碳連接之6員飽和環，諸如：

四氫哌喃-2-基、四氫哌喃-3-基、四氫哌喃-4-基、哌啶-2-基、哌啶-3-基、哌啶-4-基、四氫硫哌喃-2-基、四氫硫哌喃-3-基、四氫硫哌喃-4-基、1,3-二噁烷-2-基、1,3-二噁烷-4-基、1,3-二噁烷-5-基、1,4-二噁烷-2-基、1,3-二噻烷-2-基、1,3-二噻烷-4-基、1,3-二噻烷-5-基、1,4-二噻烷-2-基、1,3-噁噻烷-2-基、1,3-噁噻烷-4-基、1,3-噁噻烷-5-基、1,3-噁噻烷-6-基、1,4-噁噻烷-2-基、1,4-噁噻烷-3-基、1,2-二噻烷-3-基、1,2-二噻烷-4-基、六氫嘧啶-2-基、六氫嘧啶-4-基、六氫嘧啶-5-基、六氫吡嗪-2-基、六氫噻嗪-3-基、六氫噻嗪-4-基、四氫-1,3-噁吡-2-基、四氫-1,3-噁吡-4-基、四氫-1,3-噁吡-5-基、四氫-1,3-噁吡-6-基、四氫-1,3-噻吡-2-基、四氫-1,3-噻吡-4-基、四氫-1,3-噻吡-5-基、四氫-1,3-噻吡-6-基、四氫-1,4-噻吡-2-基、四氫-1,4-噻吡-3-基、四氫-1,4-噁吡-2-基、四氫-1,4-噁吡-3-基、四氫-1,2-噁吡-3-基、四氫-1,2-噁吡-4-基、四氫-1,2-噁吡-5-基、四氫-1,2-噁吡-6-基；

經由氮連接之5員飽和環，諸如：

四氫吡咯-1-基、四氫吡唑-1-基、四氫異噁唑-2-基、四

氮異噻唑-2-基、四氮咪唑-1-基、四氮噁唑-3-基、四氮噻唑-3-基；

經由氮連接之6員飽和環，諸如：

哌啶-1-基、六氮嘧啶-1-基、六氮吡嗪-1-基、六氮噻嗪-1-基、四氮-1,3-噁吡-3-基、四氮-1,3-噻吡-3-基、四氮-1,4-噻吡-4-基、四氮-1,4-噁吡-4-基、四氮-1,2-噁吡-2-基；

經由碳連接之5員部分不飽和環，諸如：

2,3-二氮呋喃-2-基、2,3-二氮呋喃-3-基、2,5-二氮呋喃-2-基、2,5-二氮呋喃-3-基、4,5-二氮呋喃-2-基、4,5-二氮呋喃-3-基、2,3-二氮噻吩-2-基、2,3-二氮噻吩-3-基、2,5-二氮噻吩-2-基、2,5-二氮噻吩-3-基、4,5-二氮噻吩-2-基、4,5-二氮噻吩-3-基、2,3-二氮-1H-吡咯-2-基、2,3-二氮-1H-吡咯-3-基、2,5-二氮-1H-吡咯-2-基、2,5-二氮-1H-吡咯-3-基、4,5-二氮-1H-吡咯-2-基、4,5-二氮-1H-吡咯-3-基、3,4-二氮-2H-吡咯-2-基、3,4-二氮-2H-吡咯-3-基、3,4-二氮-5H-吡咯-2-基、3,4-二氮-5H-吡咯-3-基、4,5-二氮-1H-吡唑-3-基、4,5-二氮-1H-吡唑-4-基、4,5-二氮-1H-吡唑-5-基、2,5-二氮-1H-吡唑-3-基、2,5-二氮-1H-吡唑-4-基、2,5-二氮-1H-吡唑-5-基、4,5-二氮異噁唑-3-基、4,5-二氮異噁唑-4-基、4,5-二氮異噁唑-5-基、2,5-二氮異噁唑-3-基、2,5-二氮異噁唑-4-基、2,5-二氮異噁唑-5-基、2,3-二氮異噁唑-3-基、2,3-二氮異噁唑-4-基、2,3-二氮異噁唑-5-基、4,5-二氮異噻唑-3-基、

4,5-二氫異噻唑-4-基、4,5-二氫異噻唑-5-基、2,5-二氫異噻唑-3-基、2,5-二氫異噻唑-4-基、2,5-二氫異噻唑-5-基、2,3-二氫異噻唑-3-基、2,3-二氫異噻唑-4-基、2,3-二氫異噻唑-5-基、 Δ^3 -1,2-二硫醇-3-基、 Δ^3 -1,2-二硫醇-4-基、 Δ^3 -1,2-二硫醇-5-基、4,5-二氫-1H-咪唑-2-基、4,5-二氫-1H-咪唑-4-基、4,5-二氫-1H-咪唑-5-基、2,5-二氫-1H-咪唑-2-基、2,5-二氫-1H-咪唑-4-基、2,5-二氫-1H-咪唑-5-基、2,3-二氫-1H-咪唑-2-基、2,3-二氫-1H-咪唑-4-基、4,5-二氫噁唑-2-基、4,5-二氫噁唑-4-基、4,5-二氫噁唑-5-基、2,5-二氫噁唑-2-基、2,5-二氫噁唑-4-基、2,5-二氫噁唑-5-基、2,3-二氫噁唑-2-基、2,3-二氫噁唑-4-基、2,3-二氫噁唑-5-基、4,5-二氫噻唑-2-基、4,5-二氫噻唑-4-基、4,5-二氫噻唑-5-基、2,5-二氫噻唑-2-基、2,5-二氫噻唑-4-基、2,5-二氫噻唑-5-基、2,3-二氫噻唑-2-基、2,3-二氫噻唑-4-基、2,3-二氫噻唑-5-基、1,3-間二氧雜環戊烯-2-基、1,3-間二氧雜環戊烯-4-基、1,3-二硫醇-2-基、1,3-二硫醇-4-基、1,3-氧硫唑-2-基、1,3-氧硫唑-4-基、1,3-氧硫唑-5-基、1,2,3- Δ^2 -噁二唑啉-4-基、1,2,3- Δ^2 -噁二唑啉-5-基、1,2,4- Δ^4 -噁二唑啉-3-基、1,2,4- Δ^4 -噁二唑啉-5-基、1,2,4- Δ^2 -噁二唑啉-3-基、1,2,4- Δ^2 -噁二唑啉-5-基、1,2,4- Δ^3 -噁二唑啉-3-基、1,2,4- Δ^3 -噁二唑啉-5-基、1,3,4- Δ^2 -噁二唑啉-2-基、1,3,4- Δ^2 -噁二唑啉-5-基、1,3,4- Δ^3 -噁二唑啉-2-基、1,3,4-噁二唑啉-2-基、1,2,4- Δ^4 -噻二唑啉-3-基、1,2,4-

Δ^4 -噻二唑啉-5-基、1,2,4- Δ^3 -噻二唑啉-3-基、1,2,4- Δ^3 -噻二唑啉-5-基、1,2,4- Δ^2 -噻二唑啉-3-基、1,2,4- Δ^2 -噻二唑啉-5-基、1,3,4- Δ^2 -噻二唑啉-2-基、1,3,4- Δ^2 -噻二唑啉-5-基、1,3,4- Δ^3 -噻二唑啉-2-基、1,3,4-噻二唑啉-2-基、1,2,3- Δ^2 -三唑啉-4-基、1,2,3- Δ^2 -三唑啉-5-基、1,2,4- Δ^2 -三唑啉-3-基、1,2,4- Δ^2 -三唑啉-5-基、1,2,4- Δ^3 -三唑啉-3-基、1,2,4- Δ^3 -三唑啉-5-基、1,2,4- Δ^1 -三唑啉-2-基、1,2,4-三唑啉-3-基、3H-1,2,4-二噻唑-5-基、2H-1,3,4-二噻唑-5-基、2H-1,3,4-噁噻唑-5-基；

經由碳連接之6員部分不飽和環，諸如：

2H-3,4-二氫哌喃-6-基、2H-3,4-二氫哌喃-5-基、2H-3,4-二氫哌喃-4-基、2H-3,4-二氫哌喃-3-基、2H-3,4-二氫哌喃-2-基、2H-3,4-二氫哌喃-6-基、2H-3,4-二氫硫哌喃-5-基、2H-3,4-二氫硫哌喃-4-基、2H-3,4-二氫哌喃-3-基、2H-3,4-二氫哌喃-2-基、1,2,3,4-四氫吡啶-6-基、1,2,3,4-四氫吡啶-5-基、1,2,3,4-四氫吡啶-4-基、1,2,3,4-四氫吡啶-3-基、1,2,3,4-四氫吡啶-2-基、2H-5,6-二氫哌喃-2-基、2H-5,6-二氫哌喃-3-基、2H-5,6-二氫哌喃-4-基、2H-5,6-二氫哌喃-5-基、2H-5,6-二氫哌喃-6-基、2H-5,6-二氫硫哌喃-2-基、2H-5,6-二氫硫哌喃-3-基、2H-5,6-二氫硫哌喃-4-基、2H-5,6-二氫硫哌喃-5-基、2H-5,6-二氫硫哌喃-6-基、1,2,5,6-四氫吡啶-2-基、1,2,5,6-四氫吡啶-3-基、1,2,5,6-四氫吡啶-4-基、1,2,5,6-四氫吡啶-5-基、1,2,5,6-四氫吡啶-6-基、2,3,4,5-四氫吡啶-2-基、

2,3,4,5-四氫吡啶-3-基、2,3,4,5-四氫吡啶-4-基、
2,3,4,5-四氫吡啶-5-基、2,3,4,5-四氫吡啶-6-基、4H-哌
喃-2-基、4H-哌喃-3-基、4H-哌喃-4-基、4H-硫哌喃-2-
基、4H-硫哌喃-3-基、4H-硫哌喃-4-基、1,4-二氫吡啶-
2-基、1,4-二氫吡啶-3-基、1,4-二氫吡啶-4-基、2H-哌
喃-2-基、2H-哌喃-3-基、2H-哌喃-4-基、2H-哌喃-5-
基、2H-哌喃-6-基、2H-硫哌喃-2-基、2H-硫哌喃-3-
基、2H-硫哌喃-4-基、2H-硫哌喃-5-基、2H-硫哌喃-6-
基、1,2-二氫吡啶-2-基、1,2-二氫吡啶-3-基、1,2-二氫
吡啶-4-基、1,2-二氫吡啶-5-基、1,2-二氫吡啶-6-基、
3,4-二氫吡啶-2-基、3,4-二氫吡啶-3-基、3,4-二氫吡啶-
4-基、3,4-二氫吡啶-5-基、3,4-二氫吡啶-6-基、2,5-二
氫吡啶-2-基、2,5-二氫吡啶-3-基、2,5-二氫吡啶-4-基、
2,5-二氫吡啶-5-基、2,5-二氫吡啶-6-基、2,3-二氫吡啶-
2-基、2,3-二氫吡啶-3-基、2,3-二氫吡啶-4-基、2,3-二
氫吡啶-5-基、2,3-二氫吡啶-6-基、2H-5,6-二氫-1,2-噁
吡-3-基、2H-5,6-二氫-1,2-噁吡-4-基、2H-5,6-二氫-1,2-
噁吡-5-基、2H-5,6-二氫-1,2-噁吡-6-基、2H-5,6-二氫-
1,2-噻吡-3-基、2H-5,6-二氫-1,2-噻吡-4-基、2H-5,6-二
氫-1,2-噻吡-5-基、2H-5,6-二氫-1,2-噻吡-6-基、4H-5,6-
二氫-1,2-噁吡-3-基、4H-5,6-二氫-1,2-噁吡-4-基、4H-
5,6-二氫-1,2-噁吡-5-基、4H-5,6-二氫-1,2-噁吡-6-基、
4H-5,6-二氫-1,2-噻吡-3-基、4H-5,6-二氫-1,2-噻吡-4-
基、4H-5,6-二氫-1,2-噻吡-5-基、4H-5,6-二氫-1,2-噻吡-

6-基、2H-3,6-二氫-1,2-噁吡-3-基、2H-3,6-二氫-1,2-噁
吡-4-基、2H-3,6-二氫-1,2-噁吡-5-基、2H-3,6-二氫-1,2-
噁吡-6-基、2H-3,6-二氫-1,2-噻吡-3-基、2H-3,6-二氫-
1,2-噻吡-4-基、2H-3,6-二氫-1,2-噻吡-5-基、2H-3,6-二
氫-1,2-噻吡-6-基、2H-3,4-二氫-1,2-噁吡-3-基、2H-3,4-
二氫-1,2-噁吡-4-基、2H-3,4-二氫-1,2-噁吡-5-基、2H-
3,4-二氫-1,2-噁吡-6-基、2H-3,4-二氫-1,2-噻吡-3-基、
2H-3,4-二氫-1,2-噻吡-4-基、2H-3,4-二氫-1,2-噻吡-5-
基、2H-3,4-二氫-1,2-噻吡-6-基、2,3,4,5-四氫噻吡-3-
基、2,3,4,5-四氫噻吡-4-基、2,3,4,5-四氫噻吡-5-基、
2,3,4,5-四氫噻吡-6-基、3,4,5,6-四氫噻吡-3-基、
3,4,5,6-四氫噻吡-4-基、1,2,5,6-四氫噻吡-3-基、
1,2,5,6-四氫噻吡-4-基、1,2,5,6-四氫噻吡-5-基、
1,2,5,6-四氫噻吡-6-基、1,2,3,6-四氫噻吡-3-基、
1,2,3,6-四氫噻吡-4-基、4H-5,6-二氫-1,3-噁吡-2-基、
4H-5,6-二氫-1,3-噁吡-4-基、4H-5,6-二氫-1,3-噁吡-5-
基、4H-5,6-二氫-1,3-噁吡-6-基、4H-5,6-二氫-1,3-噻吡-
2-基、4H-5,6-二氫-1,3-噻吡-4-基、4H-5,6-二氫-1,3-噻
吡-5-基、4H-5,6-二氫-1,3-噻吡-6-基、3,4,5,6-四氫嘧
啉-2-基、3,4,5,6-四氫嘧啉-4-基、3,4,5,6-四氫嘧啉-5-
基、3,4,5,6-四氫嘧啉-6-基、1,2,3,4-四氫吡啶-2-基、
1,2,3,4-四氫吡啶-5-基、1,2,3,4-四氫嘧啉-2-基、
1,2,3,4-四氫嘧啉-4-基、1,2,3,4-四氫嘧啉-5-基、
1,2,3,4-四氫嘧啉-6-基、2,3-二氫-1,4-噻吡-2-基、2,3-二

氮-1,4-噻吡-3-基、2,3-二氮-1,4-噻吡-5-基、2,3-二氮-
 1,4-噻吡-6-基、2H-1,2-噁吡-3-基、2H-1,2-噁吡-4-基、
 2H-1,2-噁吡-5-基、2H-1,2-噁吡-6-基、2H-1,2-噻吡-3-
 基、2H-1,2-噻吡-4-基、2H-1,2-噻吡-5-基、2H-1,2-噻
 吡-6-基、4H-1,2-噁吡-3-基、4H-1,2-噁吡-4-基、4H-
 1,2-噁吡-5-基、4H-1,2-噁吡-6-基、4H-1,2-噻吡-3-基、
 4H-1,2-噻吡-4-基、4H-1,2-噻吡-5-基、4H-1,2-噻吡-6-
 基、6H-1,2-噁吡-3-基、6H-1,2-噁吡-4-基、6H-1,2-噁
 吡-5-基、6H-1,2-噁吡-6-基、6H-1,2-噻吡-3-基、6H-
 1,2-噻吡-4-基、6H-1,2-噻吡-5-基、6H-1,2-噻吡-6-基、
 2H-1,3-噁吡-2-基、2H-1,3-噁吡-4-基、2H-1,3-噁吡-5-
 基、2H-1,3-噁吡-6-基、2H-1,3-噻吡-2-基、2H-1,3-噻
 吡-4-基、2H-1,3-噻吡-5-基、2H-1,3-噻吡-6-基、4H-
 1,3-噁吡-2-基、4H-1,3-噁吡-4-基、4H-1,3-噁吡-5-基、
 4H-1,3-噁吡-6-基、4H-1,3-噻吡-2-基、4H-1,3-噻吡-4-
 基、4H-1,3-噻吡-5-基、4H-1,3-噻吡-6-基、6H-1,3-噁
 吡-2-基、6H-1,3-噁吡-4-基、6H-1,3-噁吡-5-基、6H-
 1,3-噁吡-6-基、6H-1,3-噻吡-2-基、6H-1,3-噁吡-4-基、
 6H-1,3-噁吡-5-基、6H-1,3-噻吡-6-基、2H-1,4-噁吡-2-
 基、2H-1,4-噁吡-3-基、2H-1,4-噁吡-5-基、2H-1,4-噁
 吡-6-基、2H-1,4-噻吡-2-基、2H-1,4-噻吡-3-基、2H-
 1,4-噻吡-5-基、2H-1,4-噻吡-6-基、4H-1,4-噁吡-2-基、
 4H-1,4-噁吡-3-基、4H-1,4-噻吡-2-基、4H-1,4-噻吡-3-
 基、1,4-二氮噻吡-3-基、1,4-二氮噻吡-4-基、1,4-二氮

噻吡-5-基、1,4-二氫噻吡-6-基、1,4-二氫吡吡-2-基、
1,2-二氫吡吡-2-基、1,2-二氫吡吡-3-基、1,2-二氫吡吡-
5-基、1,2-二氫吡吡-6-基、1,4-二氫嘧啶-2-基、1,4-二
氫嘧啶-4-基、1,4-二氫嘧啶-5-基、1,4-二氫嘧啶-6-基、
3,4-二氫嘧啶-2-基、3,4-二氫嘧啶-4-基、3,4-二氫嘧啶-
5-基或3,4-二氫嘧啶-6-基；

經由氮連接之5員部分不飽和環，諸如：

2,3-二氫-1H-吡咯-1-基、2,5-二氫-1H-吡咯-1-基、4,5-
二氫-1H-吡唑-1-基、2,5-二氫-1H-吡唑-1-基、2,3-二氫-
1H-吡唑-1-基、2,5-二氫異噁唑-2-基、2,3-二氫異噁唑-
2-基、2,5-二氫異噁唑-2-基、2,3-二氫異噁唑-2-基、
4,5-二氫-1H-咪唑-1-基、2,5-二氫-1H-咪唑-1-基、2,3-
二氫-1H-咪唑-1-基、2,3-二氫噁唑-3-基、2,3-二氫噁唑-
3-基、1,2,4- Δ^4 -噁二唑啉-2-基、1,2,4- Δ^2 -噁二唑啉-4-
基、1,2,4- Δ^3 -噁二唑啉-2-基、1,3,4- Δ^2 -噁二唑啉-4-基、
1,2,4- Δ^5 -噁二唑啉-2-基、1,2,4- Δ^3 -噁二唑啉-2-基、
1,2,4- Δ^2 -噁二唑啉-4-基、1,3,4- Δ^2 -噁二唑啉-4-基、
1,2,3- Δ^2 -三唑啉-1-基、1,2,4- Δ^2 -三唑啉-1-基、1,2,4- Δ^2 -
三唑啉-4-基、1,2,4- Δ^3 -三唑啉-1-基、1,2,4- Δ^1 -三唑啉-
4-基；

經由氮連接之6員部分不飽和環，諸如：

1,2,3,4-四氫吡啶-1-基、1,2,5,6-四氫吡啶-1-基、1,4-二
氫吡啶-1-基、1,2-二氫吡啶-1-基、2H-5,6-二氫-1,2-噁
吡-2-基、2H-5,6-二氫-1,2-噁吡-2-基、2H-3,6-二氫-1,2-

噁吡-2-基、2H-3,6-二氫-1,2-噁吡-2-基、2H-3,4-二氫-1,2-噁吡-2-基、2H-3,4-二氫-1,2-噁吡-2-基、2,3,4,5-四氫噻吡-2-基、1,2,5,6-四氫噻吡-1-基、1,2,5,6-四氫噻吡-2-基、1,2,3,6-四氫噻吡-1-基、3,4,5,6-四氫嘧啶-3-基、1,2,3,4-四氫吡啶-1-基、1,2,3,4-四氫嘧啶-1-基、1,2,3,4-四氫嘧啶-3-基、2,3-二氫-1,4-噁吡-4-基、2H-1,2-噁吡-2-基、2H-1,2-噁吡-2-基、4H-1,4-噁吡-4-基、4H-1,4-噁吡-4-基、1,4-二氫噻吡-1-基、1,4-二氫吡啶-1-基、1,2-二氫吡啶-1-基、1,4-二氫嘧啶-1-基或3,4-二氫嘧啶-3-基；

經由碳連接之5員雜芳族環，其一般具有1、2、3或4個氮原子或一個氧或硫原子且(若適當)1、2或3個氮原子作為環成員，諸如：

2-呋喃基、3-呋喃基、2-噻吩基、3-噻吩基、吡咯-2-基、吡咯-3-基、吡唑-3-基、吡唑-4-基、異噁唑-3-基、異噁唑-4-基、異噁唑-5-基、異噻唑-3-基、異噻唑-4-基、異噻唑-5-基、咪唑-2-基、咪唑-4-基、噁唑-2-基、噁唑-4-基、噁唑-5-基、噻唑-2-基、噻唑-4-基、噻唑-5-基、1,2,3-噁二唑-4-基、1,2,3-噁二唑-5-基、1,2,4-噁二唑-3-基、1,2,4-噁二唑-5-基、1,3,4-噁二唑-2-基、1,2,3-噻二唑-4-基、1,2,3-噻二唑-5-基、1,2,4-噻二唑-3-基、1,2,4-噻二唑-5-基、1,3,4-噻二唑-2-基、1,2,3-三唑-4-基、1,2,4-三唑-3-基、四唑-5-基；

經由碳連接之6員雜芳族環，其一般具有1、2、3或4個

氮原子作為環成員，諸如：

吡啶-2-基、吡啶-3-基、吡啶-4-基、噻吩-3-基、噻吩-4-基、嘧啶-2-基、嘧啶-4-基、嘧啶-5-基、吡嗪-2-基、1,3,5-三嗪-2-基、1,2,4-三嗪-3-基、1,2,4-三嗪-5-基、1,2,4-三嗪-6-基、1,2,4,5-四嗪-3-基；

經由氮連接之5員雜芳族環，其一般具有1、2、3或4個氮原子作為環成員，諸如：

吡咯-1-基、吡唑-1-基、咪唑-1-基、1,2,3-三唑-1-基、1,2,4-三唑-1-基、四唑-1-基；

或

- 包含上文所提及之5或6員雜環中之一者及另一稠合飽和、不飽和或芳族碳環(例如苯、環己烷、環己烯或環己二烯環)或另一稠合5或6員雜環的雙環雜環，其中後者同樣可為飽和、不飽和或芳族環。

所提及雜環中之硫原子可經氧化為S=O或S(=O)₂。

因此，雜芳基為具有1、2、3或4個相同或不同之選自由氧、硫及氮組成之群之雜原子作為環成員的5或6員雜芳族基團，其可經由碳或氮連接且其連同另一稠合苯環或5至6員雜芳族一起可形成雙環系統。雜芳基之實例為經由碳連接之上文所提及之5及6員雜芳族環、經由氮連接之上文所提及之5員雜芳族環及雙環雜芳族基團，諸如喹啉基、異喹啉基、喹唑啉基、喹諾啉基、吲哚基、苯并噻吩基、苯并呋喃基、苯并噁唑基、苯并噻唑基、苯并咪唑基、苯并吡唑基、苯并三唑、吲哚基、1,2,4-三唑并[1,5-a]嘧啶

基、1,2,4-三唑并[4,3-a]吡啶基、吡唑并[3,4-b]吡啶基、1,2,4-三唑并[1,5-a]吡啶基、咪唑并[1,2-a]吡啶基、咪唑并[3,4-a]嘧啶基及其類似基團。

芳基：單環或多環芳族碳環，例如具有6至14個環成員之單環或雙環或單環至三環芳族碳環，諸如苯基、萘基或蒽基。

芳基烷基：經由伸烷基、尤其經由亞甲基、1,1-伸乙基或1,2-伸乙基連接之芳基，例如苄基、1-苯基乙基及2-苯基乙基。

苯基烯基：經由伸烯基、尤其經由1,1-伸乙烯基(亞乙烯基)或1,2-伸乙烯基連接之苯基，例如1-苯乙烯基及2-苯乙烯基。

苯基炔基：經由伸炔基(尤其經由1,2-伸乙炔基)連接之苯基。

雜環基烷基以及雜芳基烷基：經由伸烷基、尤其經由亞甲基、1,1-伸乙基或1,2-伸乙基連接之雜環基或雜芳基。

雜環基烯基以及雜芳基烯基：經由伸烯基、尤其經由1,1-伸乙烯基(亞乙烯基)或1,2-伸乙烯基連接之雜環基或雜芳基。

雜環基炔基以及雜芳基炔基：經由伸炔基、尤其經由1,2-伸乙炔基連接之雜環基或雜芳基。

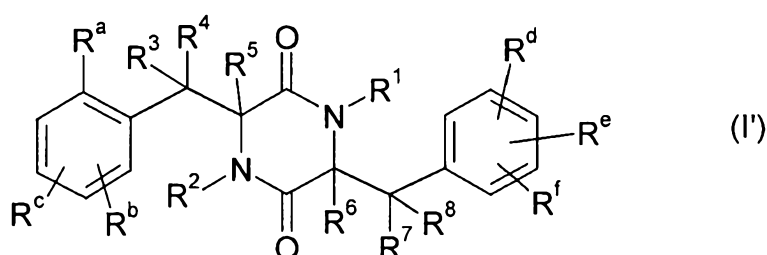
在特定實施例中，式I化合物之變數具有以下含義，此等含義(單獨及相互組合)為式I化合物之特定實施例：

A¹及A²彼此獨立地選自由苯基、呋喃基、噻吩基及吡啶

基組成之群。A¹尤其為苯基或吡啶基。A²尤其為苯基或噻吩基。

Y¹及Y²尤其為O。

本發明之尤其較佳實施例係關於式I化合物及其鹽，其中A¹及A²各自為苯基。在此等化合物中，較佳為其中Y¹及Y²為O之彼等化合物。在下文中，此等化合物亦稱為式I'化合物：



在式I'中，R¹、R²、R³、R⁴、R⁵、R⁶、R⁷、R⁸、R^a、R^b、R^c、R^d、R^e及R^f具有上文所提及含義中之一者及尤其下文所提及為較佳之含義中之一者。

較佳地，式I化合物中之R^a係選自由鹵素、氰基、硝基、C(=O)-R¹¹、苯基及具有1、2、3或4個選自由O、N及S組成之群之雜原子作為環原子的5或6員雜環基組成之群，其中苯基及雜環基係未經取代或可具有1、2、3或4個彼此獨立地選自由鹵素、CN、NO₂、C₁-C₄烷基、C₁-C₄鹵烷基、C₁-C₄烷氧基及C₁-C₄鹵烷氧基組成之群的取代基，其中：

R¹¹為氫、C₁-C₆烷基、羥基、C₁-C₆烷氧基、C₃-C₆烯氧基、C₃-C₆炔氧基、胺基、C₁-C₆烷基胺基、[二-(C₁-C₆)-烷基]胺基、C₁-C₆烷氧基胺基、N-C₁-C₆烷氧基-N-C₁-C₆烷基

胺基、 C_1-C_6 烷基磺醯基胺基、 C_1-C_6 烷基胺基磺醯基胺基、[二- (C_1-C_6) 烷基胺基]磺醯基胺基、苯基、苯氧基、苯基胺基、萘基或雜環基，且

取代基 R^{11} 之上文所提及之脂族、環狀或芳族部分可部分或完全經鹵化。

R^a 尤其為氰基、硝基或如上文所定義之5或6員雜芳族基團，該5或6員雜芳族基團較佳具有1、2或3個氮原子或1個氧或1個硫原子且視情況具有1或2個氮原子作為環成員且其係未經取代或可具有上文所提及取代基中之1或2個。

在本發明之第一較佳實施例中， R^a 為氰基或硝基。

在本發明之另一較佳實施例中， R^a 為如上文所定義之5或6員雜芳族基團，其較佳具有1、2、3或4個氮原子或1個氧或1個硫原子且視情況具有1或2個氮原子作為環成員且其係未經取代或可具有上文所提及取代基中之1或2個。較佳雜芳族基團之實例為噻吡-3-基、噻吡-4-基、嘧啶-2-基、嘧啶-4-基、嘧啶-5-基、吡啶-2-基、2-呋喃基、3-呋喃基、2-噻吩基、3-噻吩基、吡唑-1-基、吡唑-3-基、吡唑-4-基、異噁唑-3-基、異噁唑-4-基、異噁唑-5-基、異噻唑-3-基、異噻唑-4-基、異噻唑-5-基、咪唑-1-基、咪唑-2-基、咪唑-4-基、噁唑-2-基、噁唑-4-基、噁唑-5-基、噻唑-2-基、噻唑-4-基及噻唑-5-基，尤其為經由碳連接之雜芳族基團，諸如吡唑-3-基、咪唑-5-基、噁唑-2-基、噻唑-2-基、噻唑-4-基、噻唑-5-基、吡啶-2-基、吡啶-3-基、吡啶-4-基、嘧啶-2-基、嘧啶-4-基、嘧啶-5-基、噻吡-4-基、

吡咩-2-基、[1H]-四唑-5-基及[2H]-四唑-5-基，其中此處以例示方式所提及之雜環可具有上文所提及取代基中之1或2個。較佳取代基尤其為F、Cl、CN、硝基、甲基、乙基、甲氧基、乙氧基、二氟甲氧基、三氟甲氧基及三氟甲基。

同樣較佳為通式I之化合物及其鹽，其中 R^a 為鹵素且尤其為氯或溴。

在式I化合物中， R^b 較佳選自由氫、鹵素、硝基、氰基、 C_1 - C_4 烷基、 C_1 - C_4 鹵烷基、 C_2 - C_4 烯基、 C_1 - C_4 烷氧基、 C_1 - C_4 鹵烷氧基、苄基或基團 $S(O)_nR^{21}$ 組成之群，其中 R^{21} 為 C_1 - C_4 烷基或 C_1 - C_4 鹵烷基且 n 為0、1或2。

尤其較佳地， R^b 為氫、氟、氯、 C_1 - C_2 烷基、 C_1 - C_2 氟烷基、乙烯基、 C_1 - C_2 烷氧基或 C_1 - C_2 氟烷氧基，尤其為氟、氯、甲基、乙基、甲氧基、乙烯基或三氟甲氧基。 R^b 尤其為氫、氟或氯。

在其中 R^b 不同於氫之式I化合物中，較佳為其中 R^b 位於苯環之連接點之鄰位的彼等化合物。

在尤其較佳實施例中， R^b 為鹵素，尤其為氯或氟，其位於苯環之連接點的鄰位。

在式I化合物中， R^c 較佳為氫或鹵素，尤其為氯或氟。

在其中 R^c 為鹵素之式I化合物中，較佳為其中 R^c 位於基團 R^a 之對位的彼等化合物。

在另一實施例中，同樣較佳地， R^c 為氫。

在式I化合物中， R^d 及 R^e 較佳彼此獨立地選自由氫、鹵素、CN、NO₂、 C_1 - C_4 烷基、 C_1 - C_4 鹵烷基、 C_2 - C_4 烯基、

C_1 - C_4 烷氧基及 C_1 - C_4 鹵烷氧基組成之群。

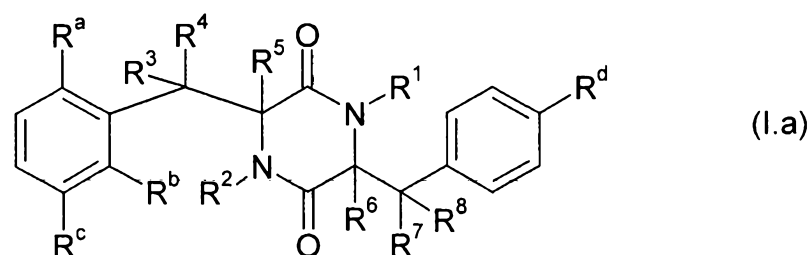
在其中 R^d 為不同於氫之基團的式I化合物中，較佳為其中 R^d 位於基團 CR^7R^8 之對位的彼等化合物。

在其中 R^d 為不同於氫之基團的式I化合物中，較佳為其中 R^d 為鹵素、尤其為氟或氯之彼等化合物。在另一實施例中，同樣較佳地， R^d 為氫。

在通式I之化合物中， R^e 較佳為氫。

在通式I之化合物中， R^f 較佳為氫。

本發明之尤其較佳實施例係關於式I'化合物及其鹽，其中 R^b 位於苯環之連接點的鄰位， R^c 位於基團 R^a 之對位， R^d 位於基團 CR^7R^8 之對位且 R^e 及 R^f 各自為氫。在此等化合物中，較佳為其中 Y^1 及 Y^2 為O之彼等化合物。在下文中，此等化合物亦稱為式I.a化合物：



在式I.a中， R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^a 、 R^b 、 R^c 及 R^d 具有上文或下文所提及為較佳之含義中之一者。

在式I化合物中， R^1 較佳選自由氫、 C_1 - C_6 烷基及 C_1 - C_6 烷基羰基組成之群。 R^1 尤其為氫或甲基。

在式I化合物中， R^2 較佳選自由 C_1 - C_6 烷基及 C_1 - C_6 烷基羰基組成之群。 R^2 尤其為甲基。

在式I化合物中， R^3 較佳為 R^{26} 或 OR^{27} ，其中：

R^{26} 及 R^{27} 彼此獨立地選自由氫、 C_1 - C_6 烷基、 C_1 - C_6 烷基羰基、苯基- C_1 - C_6 烷基、苯基羰基組成之群，其中取代基之上文所提及之脂族或芳族部分可部分或完全經鹵化；或為基團 SO_2R^{33} ，其中 R^{33} 為 C_1 - C_6 烷基或苯基，且其中苯基取代基可部分或完全經鹵化及/或可帶有一至三個 C_1 - C_6 烷基。

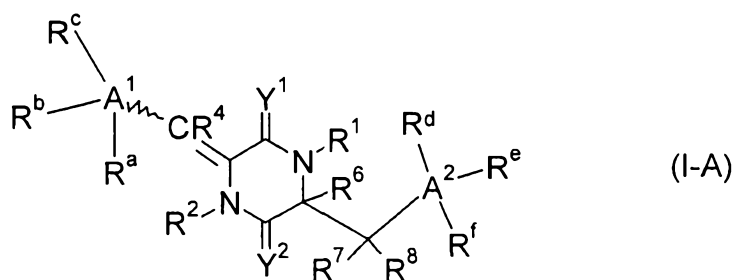
尤其較佳地，通式I之化合物中之 R^3 為氫、 C_1 - C_6 烷基、苯基- C_1 - C_6 烷氧基或 C_1 - C_6 烷基磺醯基。極尤其較佳地， R^3 為氫。

在通式I之化合物中， R^4 較佳為氫。

同樣較佳為其中 R^3 及 R^4 連同其所連接之碳原子一起為羰基之式I化合物。

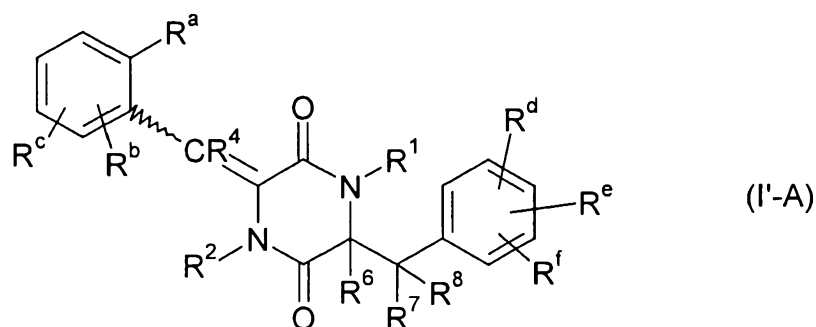
在通式I之化合物中， R^5 較佳為氫、羥基或 C_1 - C_6 烷基且尤其為甲基或羥基。

本發明之較佳實施例係關於通式I之化合物，其中 R^3 連同 R^5 一起為化學鍵。此等化合物係由下式I-A描述：



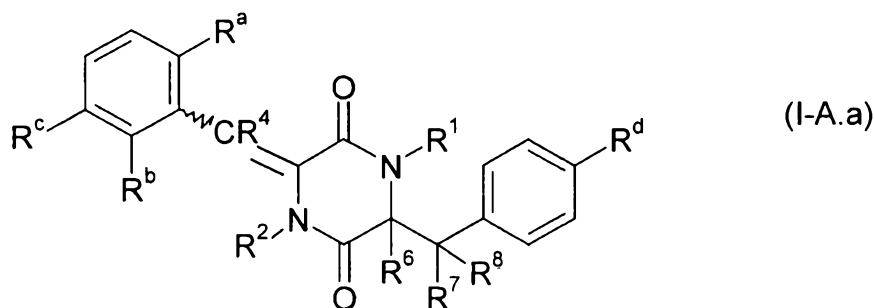
在式I-A中， A^1 、 A^2 、 R^1 、 R^2 、 R^4 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、 R^e 及 R^f 具有上文所提及含義中之一者及尤其具有上文或下文所提及為較佳之含義中之一者。在此等化

合物 I-A 中，尤其較佳為具有通式 I'-A 之特徵的化合物 (式 I'-A 化合物)。



在式 I'-A 中， R^1 、 R^2 、 R^4 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、 R^e 及 R^f 具有上文所提及含義中之一者且尤其為上文或下文所提及為較佳之含義中之一者。

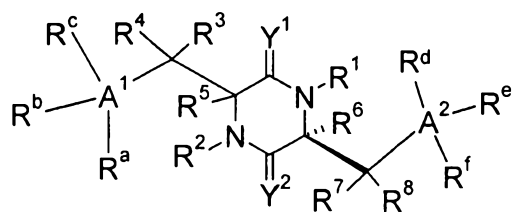
在此等化合物 I'-A 中，尤其較佳為具有通式 I.a 之特徵的化合物。在下文中，此等化合物亦稱為式 I-A.a 之化合物：



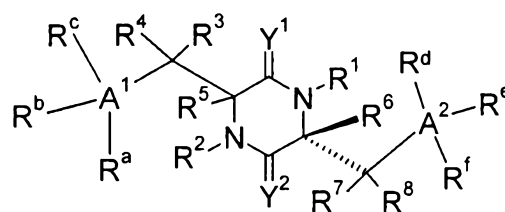
在式 I-A.a 中， R^1 、 R^2 、 R^4 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^a 、 R^b 、 R^c 及 R^d 較佳具有上文或下文所提及為較佳之含義中之一者。

在式 I-A、I'-A 及 I-A.a 之化合物中，較佳為其中嘧啶環中之雙鍵具有 (Z) 構型之彼等化合物。同樣較佳為 (E) 異構體與 (Z) 異構體之混合物，其中 Z 異構體以過量存在，尤其較佳為具有不超過 1:2、尤其不超過 1:5 之 E/Z 比率的異構體混合物。

在式I化合物中，哌啶環之6位，亦即連接基團R⁶之位置具有對掌性中心。在通式I之化合物中，與其對映異構體I-R相比，較佳為式I-S之化合物：



(I-S)

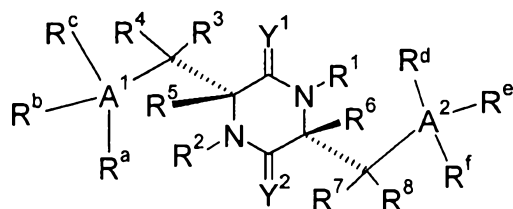


(I-R)

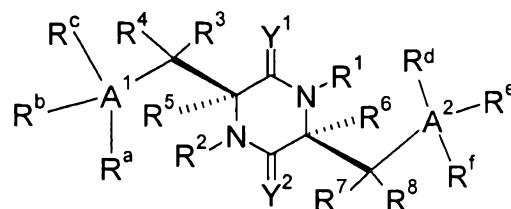
在式 I-S 及 I-R 中， A^1 、 A^2 、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、 R^e 、 R^f 、 Y^1 及 Y^2 具有上文所提及之含義中之一者且尤其為上文或下文所提及為較佳之含義中之一者。同樣較佳為化合物 I-S 與化合物 I-R 之混合物，其中化合物 I-S 以過量存在，尤其較佳為具有至少 2:1、尤其至少 5:1 之 I-S 與 I-R 之比率的混合物。亦合適者為具有較小 I-S 與 I-R 之比率的混合物，例如外消旋混合物。

本發明之另一實施例係關於式I化合物，其中R⁵不連同R³一起為化學鍵。在下文中，此等化合物亦稱為化合物I-B。

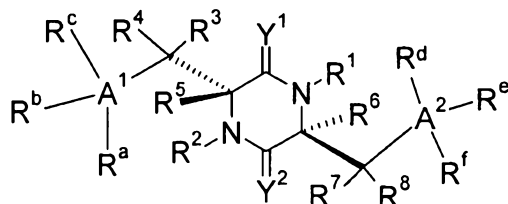
其中R⁵不連同R³一起為化學鍵之式I-B化合物在各種情況下具有位於吡啶環之3及/或6位之碳原子處的對掌性中心。因此，此等化合物可以4種不同立體異構形式存在，如下文所示：



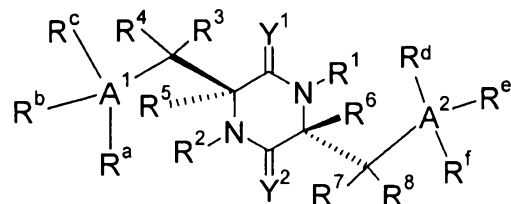
(R,R)-I-B



(S,S)-I-B



(R,S)-I-B



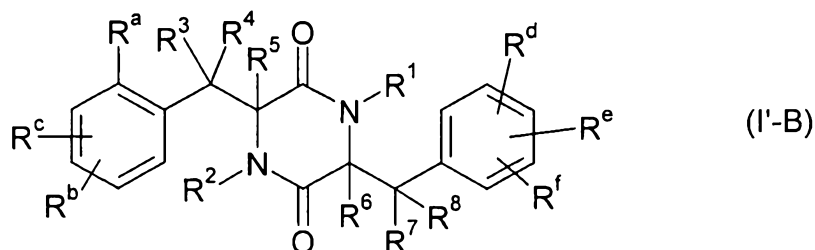
(S,R)-I-B

在式 (R,R)-I-B、(S,S)-I-B、(R,S)-I-B 及 (S,R)-I-B 中， Y^1 、 Y^2 、 A^1 、 A^2 、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、 R^e 及 R^f 具有上文或下文所提及為較佳之含義中之一者。在此等化合物中，較佳為彼等式 I-B 化合物，其中 3 位及 6 位處之苄基具有相對於嘧啶環之順式排列，亦即一般為 S,S 對映異構體 (S,S)-I-B.a 及 R,R 對映異構體 (R,R)-I-B 以及其混合物。同樣較佳為順式化合物與反式化合物之混合物，其中順式化合物以過量存在，尤其為具有至少 2:1、尤其至少 5:1 之順式/反式比率的順式/反式混合物。

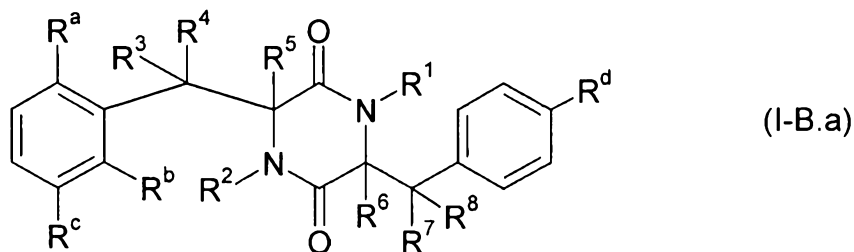
本發明之尤其較佳實施例係關於式 (S,S)-I-B 之對映異構體，以及 I-B 之對映異構體混合物及非對映異構體混合物，其中對映異構體 (S,S)-I-B.a 為主要組份且較佳以至少 70%、尤其至少 80% 且尤其至少 90% 之化合物 I-B 的比例存在。亦較佳為對映異構體 (S,S)-I-B 之農業上合適之鹽及該等鹽之對映異構體混合物及非對映異構體混合物，其中對

映異構體(S,S)-I-B為主要組份且較佳以至少70%、尤其至少80%且尤其至少90%之化合物I-B的比例存在。亦較佳之另一實施例係關於對映異構體(S,S)-I-B與對映異構體(R,R)-I-B之外消旋混合物。

化合物I-B之較佳實施例為以下所示之式I'-B化合物：



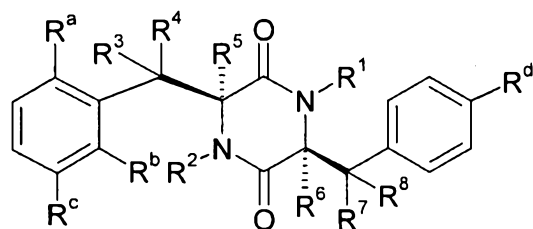
在式I'-B中， R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、 R^e 及 R^f 具有上文所提及之含義中之一者且尤其為上文或下文所提及為較佳之含義中之一者，其中 R^5 不連同 R^3 一起為化學鍵。在化合物I'-B中，尤其較佳為其中 R^d 及 R^e 為氫且就取代基 R^b 、 R^c 及 R^d 而言具有對於式I.a所給出之取代模式的彼等化合物。在下文中，此等化合物亦稱為式I-B.a化合物：



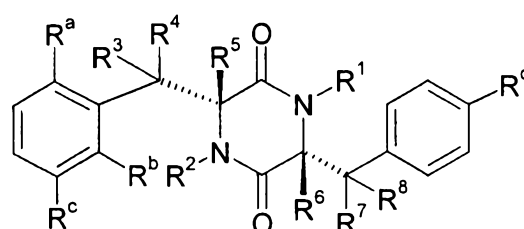
在式I-B.a中， R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^a 、 R^b 、 R^c 及 R^d 較佳具有上文或下文所提及為較佳之含義中之一者，其中 R^5 不連同 R^3 一起為化學鍵。

尤其較佳為下文給出之式(S,S)-I-B.a之純對映異構體，

其中 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^a 、 R^b 、 R^c 及 R^d 具有上文所提及之含義中之一者，尤其為所提及為較佳或為尤其較佳之含義中之一者，以及I-B.a之對映異構體混合物及非對映異構體混合物，其中S,S對映異構體為主要組份且較佳以至少70%、尤其至少80%且尤其至少90%之化合物I-B.a的比例存在。亦較佳為對映異構體(S,S)-I-B.a之農業上合適之鹽及該等鹽之對映異構體混合物及非對映異構體混合物，其中對映異構體(S,S)-I-B為主要組份且較佳以至少70%、尤其至少80%且尤其至少90%之化合物I-B.a的比例存在。亦較佳之另一實施例係關於S,S對映異構體(S,S)-I-B.a與R,R對映異構體(R,R)-I-B.a之外消旋混合物。



(S,S)-I-B.a



(R,R)-I-B.a

在式(S,S)-I-B.a或(R,R)-I-B.a中，基團 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^a 、 R^b 、 R^c 及 R^d 彼此獨立地，但較佳以組合形式尤其具有上文或下文所提及為較佳之含義中之一者。

在通式I之化合物中及在式I.a、I'-A、I-A.a、I'-B及I-B.a之化合物中， R^6 較佳為鹵素、氰基、硝基、 C_2 - C_8 烯基、 C_2 - C_8 炔基或 $C(O)R^{61}$ ，其中 R^{61} 具有上文所提及之含義。較佳地， R^{61} 為 C_1 - C_6 烷基或 C_1 - C_6 鹵烷基。

在通式I之化合物中及在式I.a、I'-A、I-A.a、I'-B及I-B.a之化合物中， R^7 及 R^8 較佳為氫。

同樣較佳為式I化合物或式I.a、I'-A、I-A.a、I'-B及I-B.a之化合物，其中 R^7 及 R^8 連同其所連接之碳原子一起為羰基。

本發明之特定實施例係關於通式I之化合物，其中 R^1 連同基團 R^2 一起為1、2、3或4員碳鏈，其中一個碳原子可由O、S或基團 NR^A 置換，其中該等碳原子中之一者可帶有羰基氧原子及/或其中該等碳原子除氫以外可帶有1、2、3或4個選自由鹵素、氰基、羥基、 C_1 - C_4 烷基、 C_1 - C_4 鹵烷基、 C_1 - C_4 烷氧基及 C_1 - C_4 鹵烷氧基組成之群之基團。此處， R^1 連同基團 R^2 一起較佳為 CH_2 或 CH_2CH_2 。此處，基團 A^1 、 A^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、 R^e 、 R^f 、 Y^1 及 Y^2 具有上文所給含義中之一者，尤其所給為較佳之含義中之一者。

本發明之另一特定實施例係關於通式I之化合物，其中 R^1 連同基團 R^5 一起為1、2、3或4員碳鏈，其中一個碳原子可由O、S或基團 NR^A 置換，其中該等碳原子中之一者可帶有羰基氧原子及/或其中該等碳原子除氫以外可帶有1、2、3或4個選自由鹵素、氰基、羥基、 C_1 - C_4 烷基、 C_1 - C_4 鹵烷基、 C_1 - C_4 烷氧基及 C_1 - C_4 鹵烷氧基組成之群之基團。此處較佳為如請求項24之化合物，其中 R^1 連同基團 R^5 一起為 CH_2 或 CH_2CH_2 。此處，基團 A^1 、 A^2 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、 R^e 、 R^f 、 Y^1 及 Y^2 具有上文所給

含義中之一者，尤其所給為較佳之含義中之一者。

本發明之另一特定實施例係關於通式I之化合物，其中 R^1 連同在 A^2 之連接點之鄰位處連接至 A^2 之碳原子或氮原子的基團 R^d 一起為共價鍵或1、2、3或4員碳鏈，其中一個碳原子可由O、S或基團 NR^B 置換，其中該等碳原子中之一者可帶有羰基氧原子及/或其中該等碳原子除氫以外可帶有1、2、3或4個選自由鹵素、氰基、羥基、 C_1 - C_4 烷基、 C_1 - C_4 鹵烷基、 C_1 - C_4 烷氧基及 C_1 - C_4 鹵烷氧基組成之群之基團。此處， R^1 連同基團 R^d 一起較佳為共價鍵、 CH_2 或 CH_2CH_2 。此處，基團 A^1 、 A^2 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^e 、 R^f 、 Y^1 及 Y^2 具有上文所給含義中之一者，尤其所給為較佳之含義中之一者。

本發明之另一特定實施例係關於通式I之化合物，其中 R^1 連同基團 R^8 一起為2、3或4員碳鏈，其中一個碳原子可由O、S或基團 NR^C 置換，其中該等碳原子中之一者可帶有羰基氧原子及/或其中該等碳原子除氫以外可帶有1、2、3或4個選自由鹵素、氰基、羥基、 C_1 - C_4 烷基、 C_1 - C_4 鹵烷基、 C_1 - C_4 烷氧基及 C_1 - C_4 鹵烷氧基組成之群之基團。此處， R^1 連同基團 R^8 一起較佳為 CH_2CH_2 或 $CH_2CH_2CH_2$ 。此處，基團 A^1 、 A^2 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、 R^e 、 R^f 、 Y^1 及 Y^2 具有上文所給含義中之一者，尤其所給為較佳之含義中之一者。

本發明之另一特定實施例係關於通式I之化合物，其中 R^1 連同基團 R^6 一起為3、4或5員碳鏈，其中一個碳原子可

由 O、S 或基團 NR^{D} 置換，其中該等碳原子中之一者可帶有羰基氧原子及/或其中該等碳原子除氫以外可帶有 1、2、3 或 4 個選自由鹵素、氰基、羥基、 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 烷基、 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 鹵烷基、 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 烷氧基及 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 鹵烷氧基組成之群之基團。此處， R^1 連同基團 R^6 一起較佳為 $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2$ 或 $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2$ ，其中 1、2、3 或 4 個氫原子可由選自由鹵素、氰基、羥基、 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 烷基、 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 鹵烷基、 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 烷氧基及 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 鹵烷氧基組成之群之基團置換。此處，基團 A^1 、 A^2 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^7 、 R^8 、 R^{a} 、 R^{b} 、 R^{c} 、 R^{d} 、 R^{e} 、 R^{f} 、 Y^1 及 Y^2 具有上文所給含義中之一者，尤其所給為較佳之含義中之一者。

本發明之另一特定實施例係關於通式 I 之化合物，其中 R^3 連同基團 R^5 一起為 1、2、3 或 4 員碳鏈，其中一個碳原子可由 O、S 或基團 NR^1 置換，其中該等碳原子中之一者可帶有羰基氧原子及/或其中該等碳原子除氫以外可帶有 1、2、3 或 4 個選自由鹵素、氰基、羥基、 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 烷基、 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 鹵烷基、 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 烷氧基及 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 鹵烷氧基組成之群之基團。此處， R^3 連同基團 R^5 一起較佳為 CH_2 、O 或基團 NR^1 ，其中 R^1 為氫或 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 烷基。此處，基團 A^1 、 A^2 、 R^1 、 R^2 、 R^4 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^{a} 、 R^{b} 、 R^{c} 、 R^{d} 、 R^{e} 、 R^{f} 、 Y^1 及 Y^2 具有上文所給含義中之一者，尤其所給為較佳之含義中之一者。

本發明之另一特定實施例係關於通式 I 之化合物，其中 R^3 連同基團 R^4 一起為 2、3、4 或 5 員碳鏈，其中一個碳原子可由 O、S 或基團 NR^{K} 置換，其中該等碳原子中之一者可帶

有羰基氧原子及/或其中該等碳原子除氫以外可帶有1、2、3或4個選自由鹵素、氰基、羥基、C₁-C₄烷基、C₁-C₄鹵烷基、C₁-C₄烷氧基及C₁-C₄鹵烷氧基組成之群之基團。此處，R³連同基團R⁴一起較佳為CH₂CH₂、CH₂CH₂CH₂或CH₂CH₂CH₂CH₂，其中1、2、3或4個氫原子可由選自由鹵素、氰基、羥基、C₁-C₄烷基、C₁-C₄鹵烷基、C₁-C₄烷氧基及C₁-C₄鹵烷氧基組成之群之基團置換。此處，基團A¹、A²、R¹、R²、R⁵、R⁶、R⁷、R⁸、R^a、R^b、R^c、R^d、R^e、R^f、Y¹及Y²具有上文所給含義中之一者，尤其所給為較佳之含義中之一者。

本發明之另一特定實施例係關於通式I之化合物，其中R⁴連同基團R^a一起為2、3、4或5員碳鏈，其中一個碳原子可由O、S或基團NR^L置換，其中該等碳原子中之一者可帶有羰基氧原子及/或其中該等碳原子除氫以外可帶有1、2、3或4個選自由鹵素、氰基、羥基、C₁-C₄烷基、C₁-C₄鹵烷基、C₁-C₄烷氧基及C₁-C₄鹵烷氧基組成之群之基團。此處，R⁴連同基團R^a一起較佳為C(O)NR^L或C(O)O，其中R^L為氫或C₁-C₄烷基。此處，基團A¹、A²、R¹、R²、R³、R⁵、R⁶、R⁷、R⁸、R^b、R^c、R^d、R^e、R^f、Y¹及Y²具有上文所給含義中之一者，尤其所給為較佳之含義中之一者。

本發明之另一特定實施例係關於通式I之化合物，其中R⁵連同基團R^a一起為2、3、4或5員碳鏈，其中一個碳原子可由O、S或基團NR^M置換，其中該等碳原子中之一者可帶有羰基氧原子及/或其中該等碳原子除氫以外可帶有1、

2、3或4個選自由鹵素、氰基、羥基、 C_1 - C_4 烷基、 C_1 - C_4 鹵烷基、 C_1 - C_4 烷氧基及 C_1 - C_4 鹵烷氧基組成之群之基團。此處， R^5 連同基團 R^a 一起較佳為 CH_2CH_2 或 $CH_2CH_2CH_2$ 。此處，基團 A^1 、 A^2 、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、 R^e 、 R^f 、 Y^1 及 Y^2 具有上文所給含義中之一者，尤其所給為較佳之含義中之一者。

本發明之另一特定實施例係關於通式I之化合物，其中 R^5 連同基團 R^6 一起為1、2、3、4或5員碳鏈，其中一個碳原子可由O、S或基團 NR^N 置換，其中該等碳原子中之一者可帶有羰基氧原子及/或其中該等碳原子除氫以外可帶有1、2、3或4個選自由鹵素、氰基、羥基、 C_1 - C_4 烷基、 C_1 - C_4 鹵烷基、 C_1 - C_4 烷氧基及 C_1 - C_4 鹵烷氧基組成之群之基團。此處， R^5 連同基團 R^6 一起較佳為 CH_2 或 CH_2CH_2 。此處，基團 A^1 、 A^2 、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^7 、 R^8 、 R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、 R^e 、 R^f 、 Y^1 及 Y^2 具有上文所給含義中之一者，尤其所給為較佳之含義中之一者。

本發明之另一特定實施例係關於通式I之化合物，其中 R^6 連同在 A^2 之連接點的鄰位處連接至 A^2 之碳原子或氮原子的基團 R^d 一起為1、2、3或4員碳鏈，其中一個碳原子可由O、S或基團 NR^O 置換，其中該等碳原子中之一者可帶有羰基氧原子及/或其中該等碳原子除氫以外可帶有1、2、3或4個選自由鹵素、氰基、羥基、 C_1 - C_4 烷基、 C_1 - C_4 鹵烷基、 C_1 - C_4 烷氧基及 C_1 - C_4 鹵烷氧基組成之群之基團。此處， R^6 連同基團 R^d 一起較佳為 CH_2 或 CH_2CH_2 。此處，基團 A^1 、

A^2 、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^7 、 R^8 、 R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^e 、 R^f 、 Y^1 及 Y^2 具有上文所給含義中之一者，尤其所給為較佳之含義中之一者。

本發明之另一特定實施例係關於通式I之化合物，其中 R^6 連同基團 R^7 一起為1、2、3或4員碳鏈，其中一個碳原子可由O、S或基團 NR^Q 置換，其中該等碳原子中之一者可帶有羰基氧原子及/或其中該等碳原子除氫以外可帶有1、2、3或4個選自由鹵素、氰基、羥基、 C_1 - C_4 烷基、 C_1 - C_4 鹵烷基、 C_1 - C_4 烷氧基及 C_1 - C_4 鹵烷氧基組成之群之基團。 R^6 連同基團 R^7 一起較佳為 CH_2 、O或基團 NR^Q ，其中 R^Q 為氫或 C_1 - C_4 烷基。此處，基團 A^1 、 A^2 、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^8 、 R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、 R^e 、 R^f 、 Y^1 及 Y^2 具有上文所給含義中之一者，尤其所給為較佳之含義中之一者。

本發明之另一特定實施例係關於通式I之化合物，其中 R^7 連同基團 R^8 一起為2、3、4或5員碳鏈，其中一個碳原子可由O、S或基團 NR^R 置換，其中該等碳原子中之一者可帶有羰基氧原子及/或其中該等碳原子除氫以外可帶有1、2、3或4個選自由鹵素、氰基、羥基、 C_1 - C_4 烷基、 C_1 - C_4 鹵烷基、 C_1 - C_4 烷氧基及 C_1 - C_4 鹵烷氧基組成之群之基團。此處， R^7 連同基團 R^8 一起較佳為 CH_2CH_2 、 $CH_2CH_2CH_2$ 或 $CH_2CH_2CH_2CH_2$ ，其中1、2、3或4個氫原子可由選自由鹵素、氰基、羥基、 C_1 - C_4 烷基、 C_1 - C_4 鹵烷基、 C_1 - C_4 烷氧基及 C_1 - C_4 鹵烷氧基組成之群之基團置換。此處，基團 A^1 、 A^2 、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、 R^e 、

R^f 、 Y^1 及 Y^2 具有上文所給含義中之一者，尤其所給為較佳之含義中之一者。

本發明之另一特定實施例係關於通式I之化合物，其中 R^8 連同在 A^2 之連接點的鄰位處連接至 A^2 之碳原子或氮原子的基團 R^d 一起為2、3、4或5員碳鏈，其中一個碳原子可由O、S或基團 NR^S 置換，其中該等碳原子中之一者可帶有羰基氧原子及/或其中該等碳原子除氫以外可帶有1、2、3或4個選自由氰基、羥基、 C_1 - C_4 烷基、 C_1 - C_4 鹵烷基、 C_1 - C_4 烷氧基、 C_1 - C_4 鹵烷氧基組成之群之基團。此處， R^8 連同基團 R^d 一起較佳為 $C(O)NR^S$ 或 $C(O)O$ ，其中 R^S 為氫或 C_1 - C_4 烷基。此處，基團 A^1 、 A^2 、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^e 、 R^f 、 Y^1 及 Y^2 具有上文所給含義中之一者，尤其所給為較佳之含義中之一者。

尤其就其作為控制不良植被之除草劑及活性化合物的用途而言，較佳為下文表1至88中所彙集之個別化合物，其由下文之通式I-A.a'及I-B.a'所涵蓋。此外，個別表中關於取代基所提及之基團自身為所述取代基之尤其較佳實施例，而與提及該等基團之組合無關。

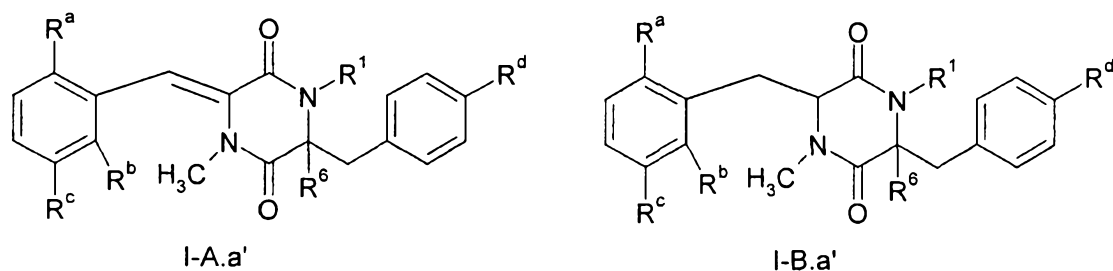


表 1

式 I-A.a' 化合物 (化合物 I-A.a'.1 至 I-A.a'.220)，其中 R^a 為

CN, R^d 為氫且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 2

式 I-A.a' 化合物 (化合物 I-A.a'.221 至 I-A.a'.440), 其中 R^a 為 CN, R^d 為氟且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 3

式 I-A.a' 化合物 (化合物 I-A.a'.441 至 I-A.a'.660), 其中 R^a 為 NO_2 , R^d 為氫且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 4

式 I-A.a' 化合物 (化合物 I-A.a'.661 至 I-A.a'.880), 其中 R^a 為 NO_2 , R^d 為氟且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 5

式 I-A.a' 化合物 (化合物 I-A.a'.881 至 I-A.a'.1100), 其中 R^a 為 Br, R^d 為氫且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 6

式 I-A.a' 化合物 (化合物 I-A.a'.1101 至 I-A.a'.1320), 其中 R^a 為 Br, R^d 為氟且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 7

式 I-A.a' 化合物 (化合物 I-A.a'.1321 至 I-A.a'.1540), 其中

R^a 為碘， R^d 為氫且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表A之一列。

表 8

式 I-A.a' 化合物 (化合物 I-A.a'.1541 至 I-A.a'.1760)，其中 R^a 為碘， R^d 為氟且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表A之一列。

表 9

式 I-A.a' 化合物 (化合物 I-A.a'.1761 至 I-A.a'.1980)，其中 R^a 為噻唑-2-基， R^d 為氫且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表A之一列。

表 10

式 I-A.a' 化合物 (化合物 I-A.a'.1981 至 I-A.a'.2200)，其中 R^a 為噻唑-2-基， R^d 為氟且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表A之一列。

表 11

式 I-A.a' 化合物 (化合物 I-A.a'.2201 至 I-A.a'.2420)，其中 R^a 為噻唑-4-基， R^d 為氫且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表A之一列。

表 12

式 I-A.a' 化合物 (化合物 I-A.a'.2421 至 I-A.a'.2640)，其中 R^a 為噻唑-4-基， R^d 為氟且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表A之一列。

表 13

式 I-A.a' 化合物 (化合物 I-A.a'.2641 至 I-A.a'.2860)，其中

R^a 為噻唑-5-基， R^d 為氫且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 14

式 I-A.a' 化合物 (化合物 I-A.a'.2861 至 I-A.a'.3080)，其中 R^a 為噻唑-5-基， R^d 為氟且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 15

式 I-A.a' 化合物 (化合物 I-A.a'.3081 至 I-A.a'.3300)，其中 R^a 為 4-甲基噻唑-2-基， R^d 為氫且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 16

式 I-A.a' 化合物 (化合物 I-A.a'.3301 至 I-A.a'.3520)，其中 R^a 為 4-甲基噻唑-2-基， R^d 為氟且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 17

式 I-A.a' 化合物 (化合物 I-A.a'.3521 至 I-A.a'.3740)，其中 R^a 為 5-甲基噻唑-2-基， R^d 為氫且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 18

式 I-A.a' 化合物 (化合物 I-A.a'.3741 至 I-A.a'.3960)，其中 R^a 為 5-甲基噻唑-2-基， R^d 為氟且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 19

式 I-A.a' 化合物 (化合物 I-A.a'.3961 至 I-A.a'.4180)，其中

R^a 為噁唑-2-基， R^d 為氫且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 20

式 I-A.a' 化合物 (化合物 I-A.a'.4181 至 I-A.a'.4400)，其中 R^a 為噁唑-2-基， R^d 為氟且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 21

式 I-A.a' 化合物 (化合物 I-A.a'.4401 至 I-A.a'.4620)，其中 R^a 為 4-甲基噁唑-2-基， R^d 為氫且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 22

式 I-A.a' 化合物 (化合物 I-A.a'.4621 至 I-A.a'.4840)，其中 R^a 為 4-甲基噁唑-2-基， R^d 為氟且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 23

式 I-A.a' 化合物 (化合物 I-A.a'.4841 至 I-A.a'.5060)，其中 R^a 為 2,5-二甲基-2H-吡唑-3-基， R^d 為氫且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 24

式 I-A.a' 化合物 (化合物 I-A.a'.5061 至 I-A.a'.5280)，其中 R^a 為 2,5-二甲基-2H-吡唑-3-基， R^d 為氟且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 25

式 I-A.a' 化合物 (化合物 I-A.a'.5281 至 I-A.a'.5500)，其中

R^a 為 1H-四唑-5-基， R^d 為氫且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 26

式 I-A.a' 化合物 (化合物 I-A.a'.5501 至 I-A.a'.5720)，其中 R^a 為 1H-四唑-5-基， R^d 為氟且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 27

式 I-A.a' 化合物 (化合物 I-A.a'.5721 至 I-A.a'.5940)，其中 R^a 為 1-甲基-1H-四唑-5-基， R^d 為氫且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 28

式 I-A.a' 化合物 (化合物 I-A.a'.5941 至 I-A.a'.6160)，其中 R^a 為 1-甲基-1H-四唑-5-基， R^d 為氟且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 29

式 I-A.a' 化合物 (化合物 I-A.a'.6161 至 I-A.a'.6380)，其中 R^a 為 2-甲基-2H-四唑-5-基， R^d 為氫且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 30

式 I-A.a' 化合物 (化合物 I-A.a'.6381 至 I-A.a'.6600)，其中 R^a 為 2-甲基-2H-四唑-5-基， R^d 為氟且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 31

式 I-A.a' 化合物 (化合物 I-A.a'.6601 至 I-A.a'.6820)，其中

R^a 為 3-甲基-3H-咪唑-4-基， R^d 為氫且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 32

式 I-A.a' 化合物 (化合物 I-A.a'.6821 至 I-A.a'.7040)，其中 R^a 為 3-甲基-3H-咪唑-4-基， R^d 為氟且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 33

式 I-A.a' 化合物 (化合物 I-A.a'.7041 至 I-A.a'.7260)，其中 R^a 為吡啶-2-基， R^d 為氫且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 34

式 I-A.a' 化合物 (化合物 I-A.a'.7261 至 I-A.a'.7480)，其中 R^a 為吡啶-2-基， R^d 為氟且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 35

式 I-A.a' 化合物 (化合物 I-A.a'.7481 至 I-A.a'.7700)，其中 R^a 為吡啶-3-基， R^d 為氫且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 36

式 I-A.a' 化合物 (化合物 I-A.a'.7701 至 I-A.a'.7920)，其中 R^a 為吡啶-3-基， R^d 為氟且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 37

式 I-A.a' 化合物 (化合物 I-A.a'.7921 至 I-A.a'.8140)，其中

R^a 為吡啶-4-基， R^d 為氫且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 38

式 I-A.a' 化合物 (化合物 I-A.a'.8141 至 I-A.a'.8360)，其中 R^a 為吡啶-4-基， R^d 為氟且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 39

式 I-A.a' 化合物 (化合物 I-A.a'.8361 至 I-A.a'.8580)，其中 R^a 為嘧啶-5-基， R^d 為氫且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 40

式 I-A.a' 化合物 (化合物 I-A.a'.8581 至 I-A.a'.8800)，其中 R^a 為嘧啶-5-基， R^d 為氟且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 41

式 I-A.a' 化合物 (化合物 I-A.a'.8801 至 I-A.a'.9020)，其中 R^a 為吡嘐-2-基， R^d 為氫且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 42

式 I-A.a' 化合物 (化合物 I-A.a'.9021 至 I-A.a'.9240)，其中 R^a 為吡嘐-2-基， R^d 為氟且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 43

式 I-A.a' 化合物 (化合物 I-A.a'.9241 至 I-A.a'.9460)，其中

R^a 為噻吡-4-基， R^d 為氫且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表A之一列。

表 44

式 I-A.a' 化合物 (化合物 I-A.a'.9461 至 I-A.a'.9680)，其中 R^a 為噻吡-4-基， R^d 為氟且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表A之一列。

表 45

式 I-B.a' 化合物 (化合物 I-B.a'.1 至 I-B.a'.220)，其中 R^a 為CN， R^d 為氫且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表A之一列。

表 46

式 I-B.a' 化合物 (化合物 I-B.a'.221 至 I-B.a'.440)，其中 R^a 為CN， R^d 為氟且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表A之一列。

表 47

式 I-B.a' 化合物 (化合物 I-B.a'.441 至 I-B.a'.660)，其中 R^a 為 NO_2 ， R^d 為氫且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表A之一列。

表 48

式 I-B.a' 化合物 (化合物 I-B.a'.661 至 I-B.a'.880)，其中 R^a 為 NO_2 ， R^d 為氟且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表A之一列。

表 49

式 I-B.a' 化合物 (化合物 I-B.a'.881 至 I-B.a'.1100)，其中 R^a

為Br， R^d 為氫且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表A之一列。

表 50

式 I-B.a' 化合物 (化合物 I-B.a'.1101 至 I-B.a'.1320)，其中 R^a 為Br， R^d 為氟且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表A之一列。

表 51

式 I-B.a' 化合物 (化合物 I-B.a'.1321 至 I-B.a'.1540)，其中 R^a 為碘， R^d 為氫且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表A之一列。

表 52

式 I-B.a' 化合物 (化合物 I-B.a'.1541 至 I-B.a'.1760)，其中 R^a 為碘， R^d 為氟且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表A之一列。

表 53

式 I-B.a' 化合物 (化合物 I-B.a'.1761 至 I-B.a'.1980)，其中 R^a 為噻唑-2-基， R^d 為氫且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表A之一列。

表 54

式 I-B.a' 化合物 (化合物 I-B.a'.1981 至 I-B.a'.2200)，其中 R^a 為噻唑-2-基， R^d 為氟且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表A之一列。

表 55

式 I-B.a' 化合物 (化合物 I-B.a'.2201 至 I-B.a'.2420)，其中

R^a 為噻唑-4-基， R^d 為氫且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 56

式 I-B.a' 化合物 (化合物 I-B.a'.2421 至 I-B.a'.2640)，其中 R^a 為噻唑-4-基， R^d 為氟且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 57

式 I-B.a' 化合物 (化合物 I-B.a'.2641 至 I-B.a'.2860)，其中 R^a 為噻唑-5-基， R^d 為氫且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 58

式 I-B.a' 化合物 (化合物 I-B.a'.2861 至 I-B.a'.3080)，其中 R^a 為噻唑-5-基， R^d 為氟且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 59

式 I-B.a' 化合物 (化合物 I-B.a'.3081 至 I-B.a'.3300)，其中 R^a 為 4-甲基噻唑-2-基， R^d 為氫且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 60

式 I-B.a' 化合物 (化合物 I-B.a'.3301 至 I-B.a'.3520)，其中 R^a 為 4-甲基噻唑-2-基， R^d 為氟且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 61

式 I-B.a' 化合物 (化合物 I-B.a'.3521 至 I-B.a'.3740)，其中

R^a 為 5-甲基噻唑-2-基， R^d 為 氫且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 62

式 I-B.a' 化合物 (化合物 I-B.a'.3741 至 I-B.a'.3960)，其中 R^a 為 5-甲基噻唑-2-基， R^d 為 氟且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 63

式 I-B.a' 化合物 (化合物 I-B.a'.3961 至 I-B.a'.4180)，其中 R^a 為 噁唑-2-基， R^d 為 氫且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 64

式 I-B.a' 化合物 (化合物 I-B.a'.4181 至 I-B.a'.4400)，其中 R^a 為 噁唑-2-基， R^d 為 氟且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 65

式 I-B.a' 化合物 (化合物 I-B.a'.4401 至 I-B.a'.4620)，其中 R^a 為 4-甲基噁唑-2-基， R^d 為 氫且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 66

式 I-B.a' 化合物 (化合物 I-B.a'.4621 至 I-B.a'.4840)，其中 R^a 為 4-甲基噁唑-2-基， R^d 為 氟且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 67

式 I-B.a' 化合物 (化合物 I-B.a'.4841 至 I-B.a'.5060)，其中

R^a 為 2,5-二甲基-2H-吡唑-3-基， R^d 為氫且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 68

式 I-B.a' 化合物 (化合物 I-B.a'.5061 至 I-B.a'.5280)，其中 R^a 為 2,5-二甲基-2H-吡唑-3-基， R^d 為氟且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 69

式 I-B.a' 化合物 (化合物 I-B.a'.5281 至 I-B.a'.5500)，其中 R^a 為 1H-四唑-5-基， R^d 為氫且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 70

式 I-B.a' 化合物 (化合物 I-B.a'.5501 至 I-B.a'.5720)，其中 R^a 為 1H-四唑-5-基， R^d 為氟且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 71

式 I-B.a' 化合物 (化合物 I-B.a'.5721 至 I-B.a'.5940)，其中 R^a 為 1-甲基-1H-四唑-5-基， R^d 為氫且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 72

式 I-B.a' 化合物 (化合物 I-B.a'.5941 至 I-B.a'.6160)，其中 R^a 為 1-甲基-1H-四唑-5-基， R^d 為氟且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 73

式 I-B.a' 化合物 (化合物 I-B.a'.6161 至 I-B.a'.6380)，其中

R^a 為 2-甲基-2H-四唑-5-基， R^d 為氫且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 74

式 I-B.a' 化合物 (化合物 I-B.a'.6381 至 I-B.a'.6600)，其中 R^a 為 2-甲基-2H-四唑-5-基， R^d 為氟且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 75

式 I-B.a' 化合物 (化合物 I-B.a'.6601 至 I-B.a'.6820)，其中 R^a 為 3-甲基-3H-咪唑-4-基， R^d 為氫且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 76

式 I-B.a' 化合物 (化合物 I-B.a'.6821 至 I-B.a'.7040)，其中 R^a 為 3-甲基-3H-咪唑-4-基， R^d 為氟且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 77

式 I-B.a' 化合物 (化合物 I-B.a'.7041 至 I-B.a'.7260)，其中 R^a 為吡啶-2-基， R^d 為氫且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 78

式 I-B.a' 化合物 (化合物 I-B.a'.7261 至 I-B.a'.7480)，其中 R^a 為吡啶-2-基， R^d 為氟且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 79

式 I-B.a' 化合物 (化合物 I-B.a'.7481 至 I-B.a'.7700)，其中

R^a 為吡啶-3-基， R^d 為氫且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 80

式 I-B.a' 化合物 (化合物 I-B.a'.7701 至 I-B.a'.7920)，其中 R^a 為吡啶-3-基， R^d 為氟且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 81

式 I-B.a' 化合物 (化合物 I-B.a'.7921 至 I-B.a'.8140)，其中 R^a 為吡啶-4-基， R^d 為氫且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 82

式 I-B.a' 化合物 (化合物 I-B.a'.8141 至 I-B.a'.8360)，其中 R^a 為吡啶-4-基， R^d 為氟且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 83

式 I-B.a' 化合物 (化合物 I-B.a'.8361 至 I-B.a'.8580)，其中 R^a 為嘧啶-5-基， R^d 為氫且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 84

式 I-B.a' 化合物 (化合物 I-B.a'.8581 至 I-B.a'.8800)，其中 R^a 為嘧啶-5-基， R^d 為氟且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 85

式 I-B.a' 化合物 (化合物 I-B.a'.8801 至 I-B.a'.9020)，其中

R^a 為吡咩-2-基， R^d 為氫且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 86

式 I-B.a' 化合物 (化合物 I-B.a'.9021 至 I-B.a'.9240)，其中 R^a 為吡咩-2-基， R^d 為氫且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 87

式 I-B.a' 化合物 (化合物 I-B.a'.9241 至 I-B.a'.9460)，其中 R^a 為噻咩-4-基， R^d 為氫且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 88

式 I-B.a' 化合物 (化合物 I-B.a'.9461 至 I-B.a'.9680)，其中 R^a 為噻咩-4-基， R^d 為氫且用於化合物之 R^b 、 R^c 、 R^1 及 R^6 之組合在各種情況下對應於表 A 之一列。

表 A：

	R^b	R^c	R^1	R^6
1.	F	H	H	F
2.	F	H	H	Cl
3.	F	H	H	CN
4.	F	H	H	NO ₂
5.	F	H	H	SCH ₃
6.	F	H	H	-CH=CH ₂
7.	F	H	H	-CH ₂ -CH=CH ₂
8.	F	H	H	-CH(CH ₃)-CH=CH ₂
9.	F	H	H	2-丙炔基
10.	F	H	H	-C(O)CH ₃
11.	F	H	H	-C(O)CF ₃
12.	F	H	CH ₃	F
13.	F	H	CH ₃	Cl
14.	F	H	CH ₃	CN
15.	F	H	CH ₃	NO ₂
16.	F	H	CH ₃	SCH ₃

	R ^b	R ^c	R ^d	R ^e
17.	F	H	CH ₃	-CH=CH ₂
18.	F	H	CH ₃	-CH ₂ -CH=CH ₂
19.	F	H	CH ₃	-CH(CH ₃)-CH=CH ₂
20.	F	H	CH ₃	2-丙炔基
21.	F	H	CH ₃	-C(O)CH ₃
22.	F	H	CH ₃	-C(O)CF ₃
23.	F	F	H	F
24.	F	F	H	Cl
25.	F	F	H	CN
26.	F	F	H	NO ₂
27.	F	F	H	SCH ₃
28.	F	F	H	-CH=CH ₂
29.	F	F	H	-CH ₂ -CH=CH ₂
30.	F	F	H	-CH(CH ₃)-CH=CH ₂
31.	F	F	H	2-丙炔基
32.	F	F	H	-C(O)CH ₃
33.	F	F	H	-C(O)CF ₃
34.	F	F	CH ₃	F
35.	F	F	CH ₃	Cl
36.	F	F	CH ₃	CN
37.	F	F	CH ₃	NO ₂
38.	F	F	CH ₃	SCH ₃
39.	F	F	CH ₃	-CH=CH ₂
40.	F	F	CH ₃	-CH ₂ -CH=CH ₂
41.	F	F	CH ₃	-CH(CH ₃)-CH=CH ₂
42.	F	F	CH ₃	2-丙炔基
43.	F	F	CH ₃	-C(O)CH ₃
44.	F	F	CH ₃	-C(O)CF ₃
45.	Cl	H	H	F
46.	Cl	H	H	Cl
47.	Cl	H	H	CN
48.	Cl	H	H	NO ₂
49.	Cl	H	H	SCH ₃
50.	Cl	H	H	-CH=CH ₂
51.	Cl	H	H	-CH ₂ -CH=CH ₂
52.	Cl	H	H	-CH(CH ₃)-CH=CH ₂
53.	Cl	H	H	2-丙炔基
54.	Cl	H	H	-C(O)CH ₃
55.	Cl	H	H	-C(O)CF ₃
56.	Cl	H	CH ₃	F
57.	Cl	H	CH ₃	Cl
58.	Cl	H	CH ₃	CN
59.	Cl	H	CH ₃	NO ₂
60.	Cl	H	CH ₃	SCH ₃
61.	Cl	H	CH ₃	-CH=CH ₂
62.	Cl	H	CH ₃	-CH ₂ -CH=CH ₂
63.	Cl	H	CH ₃	-CH(CH ₃)-CH=CH ₂
64.	Cl	H	CH ₃	2-丙炔基

	R ^b	R ^c	R ^d	R ^e
65.	Cl	H	CH ₃	-C(O)CH ₃
66.	Cl	H	CH ₃	-C(O)CF ₃
67.	Cl	F	H	F
68.	Cl	F	H	Cl
69.	Cl	F	H	CN
70.	Cl	F	H	NO ₂
71.	Cl	F	H	SCH ₃
72.	Cl	F	H	-CH=CH ₂
73.	Cl	F	H	-CH ₂ -CH=CH ₂
74.	Cl	F	H	-CH(CH ₃)-CH=CH ₂
75.	Cl	F	H	2-丙炔基
76.	Cl	F	H	-C(O)CH ₃
77.	Cl	F	H	-C(O)CF ₃
78.	Cl	F	CH ₃	F
79.	Cl	F	CH ₃	Cl
80.	Cl	F	CH ₃	CN
81.	Cl	F	CH ₃	NO ₂
82.	Cl	F	CH ₃	SCH ₃
83.	Cl	F	CH ₃	-CH=CH ₂
84.	Cl	F	CH ₃	-CH ₂ -CH=CH ₂
85.	Cl	F	CH ₃	-CH(CH ₃)-CH=CH ₂
86.	Cl	F	CH ₃	2-丙炔基
87.	Cl	F	CH ₃	-C(O)CH ₃
88.	Cl	F	CH ₃	-C(O)CF ₃
89.	OCH ₃	H	H	F
90.	OCH ₃	H	H	Cl
91.	OCH ₃	H	H	CN
92.	OCH ₃	H	H	NO ₂
93.	OCH ₃	H	H	SCH ₃
94.	OCH ₃	H	H	-CH=CH ₂
95.	OCH ₃	H	H	-CH ₂ -CH=CH ₂
96.	OCH ₃	H	H	-CH(CH ₃)-CH=CH ₂
97.	OCH ₃	H	H	2-丙炔基
98.	OCH ₃	H	H	-C(O)CH ₃
99.	OCH ₃	H	H	-C(O)CF ₃
100.	OCH ₃	H	CH ₃	F
101.	OCH ₃	H	CH ₃	Cl
102.	OCH ₃	H	CH ₃	CN
103.	OCH ₃	H	CH ₃	NO ₂
104.	OCH ₃	H	CH ₃	SCH ₃
105.	OCH ₃	H	CH ₃	-CH=CH ₂
106.	OCH ₃	H	CH ₃	-CH ₂ -CH=CH ₂
107.	OCH ₃	H	CH ₃	-CH(CH ₃)-CH=CH ₂
108.	OCH ₃	H	CH ₃	2-丙炔基
109.	OCH ₃	H	CH ₃	-C(O)CH ₃
110.	OCH ₃	H	CH ₃	-C(O)CF ₃
111.	OCH ₃	F	H	F
112.	OCH ₃	F	H	Cl

	R ^b	R ^c	R ^d	R ^e
113.	OCH ₃	F	H	CN
114.	OCH ₃	F	H	NO ₂
115.	OCH ₃	F	H	SCH ₃
116.	OCH ₃	F	H	-CH=CH ₂
117.	OCH ₃	F	H	-CH ₂ -CH=CH ₂
118.	OCH ₃	F	H	-CH(CH ₃)-CH=CH ₂
119.	OCH ₃	F	H	2-丙炔基
120.	OCH ₃	F	H	-C(O)CH ₃
121.	OCH ₃	F	H	-C(O)CF ₃
122.	OCH ₃	F	CH ₃	F
123.	OCH ₃	F	CH ₃	Cl
124.	OCH ₃	F	CH ₃	CN
125.	OCH ₃	F	CH ₃	NO ₂
126.	OCH ₃	F	CH ₃	SCH ₃
127.	OCH ₃	F	CH ₃	-CH=CH ₂
128.	OCH ₃	F	CH ₃	-CH ₂ -CH=CH ₂
129.	OCH ₃	F	CH ₃	-CH(CH ₃)-CH=CH ₂
130.	OCH ₃	F	CH ₃	2-丙炔基
131.	OCH ₃	F	CH ₃	-C(O)CH ₃
132.	OCH ₃	F	CH ₃	-C(O)CF ₃
133.	CH ₃	H	H	F
134.	CH ₃	H	H	Cl
135.	CH ₃	H	H	CN
136.	CH ₃	H	H	NO ₂
137.	CH ₃	H	H	SCH ₃
138.	CH ₃	H	H	-CH=CH ₂
139.	CH ₃	H	H	-CH ₂ -CH=CH ₂
140.	CH ₃	H	H	-CH(CH ₃)-CH=CH ₂
141.	CH ₃	H	H	2-丙炔基
142.	CH ₃	H	H	-C(O)CH ₃
143.	CH ₃	H	H	-C(O)CF ₃
144.	CH ₃	H	CH ₃	F
145.	CH ₃	H	CH ₃	Cl
146.	CH ₃	H	CH ₃	CN
147.	CH ₃	H	CH ₃	NO ₂
148.	CH ₃	H	CH ₃	SCH ₃
149.	CH ₃	H	CH ₃	-CH=CH ₂
150.	CH ₃	H	CH ₃	-CH ₂ -CH=CH ₂
151.	CH ₃	H	CH ₃	-CH(CH ₃)-CH=CH ₂
152.	CH ₃	H	CH ₃	2-丙炔基
153.	CH ₃	H	CH ₃	-C(O)CH ₃
154.	CH ₃	H	CH ₃	-C(O)CF ₃
155.	CH ₃	F	H	F
156.	CH ₃	F	H	Cl
157.	CH ₃	F	H	CN
158.	CH ₃	F	H	NO ₂
159.	CH ₃	F	H	SCH ₃
160.	CH ₃	F	H	-CH=CH ₂

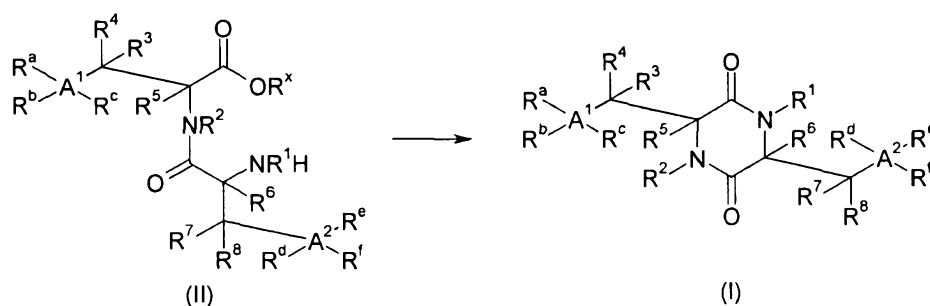
	R ^b	R ^c	R ^l	R ⁶
161.	CH ₃	F	H	-CH ₂ -CH=CH ₂
162.	CH ₃	F	H	-CH(CH ₃)-CH=CH ₂
163.	CH ₃	F	H	2-丙炔基
164.	CH ₃	F	H	-C(O)CH ₃
165.	CH ₃	F	H	-C(O)CF ₃
166.	CH ₃	F	CH ₃	F
167.	CH ₃	F	CH ₃	Cl
168.	CH ₃	F	CH ₃	CN
169.	CH ₃	F	CH ₃	NO ₂
170.	CH ₃	F	CH ₃	SCH ₃
171.	CH ₃	F	CH ₃	-CH=CH ₂
172.	CH ₃	F	CH ₃	-CH ₂ -CH=CH ₂
173.	CH ₃	F	CH ₃	-CH(CH ₃)-CH=CH ₂
174.	CH ₃	F	CH ₃	2-丙炔基
175.	CH ₃	F	CH ₃	-C(O)CH ₃
176.	CH ₃	F	CH ₃	-C(O)CF ₃
177.	CH=CH ₂	H	H	F
178.	CH=CH ₂	H	H	Cl
179.	CH=CH ₂	H	H	CN
180.	CH=CH ₂	H	H	NO ₂
181.	CH=CH ₂	H	H	SCH ₃
182.	CH=CH ₂	H	H	-CH=CH ₂
183.	CH=CH ₂	H	H	-CH ₂ -CH=CH ₂
184.	CH=CH ₂	H	H	-CH(CH ₃)-CH=CH ₂
185.	CH=CH ₂	H	H	2-丙炔基
186.	CH=CH ₂	H	H	-C(O)CH ₃
187.	CH=CH ₂	H	H	-C(O)CF ₃
188.	CH=CH ₂	H	CH ₃	F
189.	CH=CH ₂	H	CH ₃	Cl
190.	CH=CH ₂	H	CH ₃	CN
191.	CH=CH ₂	H	CH ₃	NO ₂
192.	CH=CH ₂	H	CH ₃	SCH ₃
193.	CH=CH ₂	H	CH ₃	-CH=CH ₂
194.	CH=CH ₂	H	CH ₃	-CH ₂ -CH=CH ₂
195.	CH=CH ₂	H	CH ₃	-CH(CH ₃)-CH=CH ₂
196.	CH=CH ₂	H	CH ₃	2-丙炔基
197.	CH=CH ₂	H	CH ₃	-C(O)CH ₃
198.	CH=CH ₂	H	CH ₃	-C(O)CF ₃
199.	CH=CH ₂	F	H	F
200.	CH=CH ₂	F	H	Cl
201.	CH=CH ₂	F	H	CN
202.	CH=CH ₂	F	H	NO ₂
203.	CH=CH ₂	F	H	SCH ₃
204.	CH=CH ₂	F	H	-CH=CH ₂
205.	CH=CH ₂	F	H	-CH ₂ -CH=CH ₂
206.	CH=CH ₂	F	H	-CH(CH ₃)-CH=CH ₂
207.	CH=CH ₂	F	H	2-丙炔基
208.	CH=CH ₂	F	H	-C(O)CH ₃

	R ^b	R ^c	R ¹	R ⁶
209.	CH=CH ₂	F	H	-C(O)CF ₃
210.	CH=CH ₂	F	CH ₃	F
211.	CH=CH ₂	F	CH ₃	Cl
212.	CH=CH ₂	F	CH ₃	CN
213.	CH=CH ₂	F	CH ₃	NO ₂
214.	CH=CH ₂	F	CH ₃	SCH ₃
215.	CH=CH ₂	F	CH ₃	-CH=CH ₂
216.	CH=CH ₂	F	CH ₃	-CH ₂ -CH=CH ₂
217.	CH=CH ₂	F	CH ₃	-CH(CH ₃)-CH=CH ₂
218.	CH=CH ₂	F	CH ₃	2-丙炔基
219.	CH=CH ₂	F	CH ₃	-C(O)CH ₃
220.	CH=CH ₂	F	CH ₃	-C(O)CF ₃

根據本發明之化合物I可藉由有機化學之標準方法來製備。下文，以實例方式說明一些方法。

方法A

其中Y¹及Y²為O之式I化合物可例如以類似於自文獻已知之方法藉由使式II之相應二肽前驅體環化來製備，例如類似於由T. Kawasaki等人，Org. Lett. 2(19) (2000), 3027-3029，Igor L. Rodionov等人，Tetrahedron 58(42) (2002), 8515-8523或A. L. Johnson等人，Tetrahedron 60 (2004), 961-965所述之方法。在下文中，使式II之二肽環化為根據本發明之化合物亦稱為方法A且在以下流程中說明。



在式II中，變數A¹、A²、R¹-R⁸、R^a、R^b、R^c、R^d、R^e及R^f如對於式I所定義。基團OR^x為經由氧連接之合適離去基。此處，R^x為例如C₁-C₆烷基，尤其為甲基或乙基，或

苯基-C₁-C₆烷基，例如苄基。

該環化作用可例如藉由使式II之二肽在酸或鹼存在下反應(酸性或鹼性環化作用)或藉由加熱反應混合物(熱環化作用)來進行。

將鹼或酸以等莫耳量或過量添加至二肽II中。在根據本發明之方法的特定實施例中，利用以二肽計過量之鹼或酸。

二肽II在鹼存在下之反應一般係於0℃至反應混合物之沸點、較佳10℃至50℃、尤其較佳15℃至35℃範圍內之溫度下進行。一般而言，該反應係於溶劑中、較佳於惰性有機溶劑中進行。

合適之惰性有機溶劑包括脂族烴類，諸如戊烷、己烷、環己烷及C₅-C₈烷烴之混合物；芳族烴類，諸如甲苯、鄰二甲苯、間二甲苯及對二甲苯；鹵代烴類，諸如二氯甲烷、二氯乙烷、氯仿及氯苯；醚類，諸如乙醚、二異丙基醚、第三丁基甲基醚、二噁烷、苯甲醚及四氫呋喃；腈類，諸如乙腈及丙腈；酮類，諸如丙酮、甲基乙基酮、二乙基酮及第三丁基甲基酮；醇類，諸如甲醇、乙醇、正丙醇、異丙醇、正丁醇、第三丁醇；水以及二甲亞碲、二甲基甲醯胺及二甲基乙醯胺；以及嗎啉及N-甲基嗎啉。亦可能使用所提及溶劑之混合物。

在本發明之較佳實施例中，反應係於使用例如1:10至10:1(體積份)之混合比率的四氫呋喃-水混合物中進行。

一般而言，合適之鹼為無機化合物，諸如鹼金屬及鹼土

金屬氫氧化物，諸如氫氧化鋰、氫氧化鈉、氫氧化鉀或氫氧化鈣；氫之水溶液；鹼金屬或鹼土金屬氧化物，諸如氧化鋰、氧化鈉、氧化鈣及氧化鎂；鹼金屬及鹼土金屬氫化物，諸如氫化鋰、氫化鈉、氫化鉀及氫化鈣；鹼金屬鹽胺，諸如鹽胺鋰(例如二異丙基鹽胺鋰)、鹽胺鈉及鹽胺鉀；鹼金屬及鹼土金屬碳酸鹽，諸如碳酸鋰、碳酸鉀、碳酸銻及碳酸鈣；以及鹼金屬碳酸氫鹽，諸如碳酸氫鈉；有機金屬化合物，尤其鹼金屬烷基，諸如甲基鋰、丁基鋰及苯基鋰；鹵化烷基鎂，諸如氯化甲基鎂；以及鹼金屬及鹼土金屬烷醇鹽，諸如甲醇鈉、乙醇鈉、乙醇鉀、第三丁醇鉀、第三戊醇鉀及二甲氧基鎂；此外，有機鹼，例如三級胺類，諸如三甲胺、三乙胺、二異丙基乙胺、2-羥基吡啶及N-甲基哌啶、吡啶、經取代之吡啶(諸如三甲基吡啶、二甲基吡啶及4-二甲基胺基吡啶)以及雙環胺類。當然，亦可能使用不同鹼之混合物。

在根據本發明方法之一實施例中，II之反應係在鹼存在下、較佳在鹼第三丁醇鉀、2-羥基吡啶或氫之水溶液或此等鹼之混合物存在下進行。較佳僅使用此等鹼中之一者。在尤其較佳之實施例中，反應係於氫之水溶液中進行，該氫之水溶液例如可為10%至50%濃度(w/v)。

II在酸存在下之反應通常係於10°C至反應混合物之沸點、較佳50°C至沸點範圍內之溫度下、尤其較佳於沸點下於回流下進行。一般而言，反應係於溶劑中、較佳於惰性有機溶劑中進行。

原則上，合適之溶劑為所有亦可用於鹼性環化作用之彼等溶劑，尤其為醇類。在較佳實施例中，反應係於正丁醇中進行。

原則上，用於II環化作用之合適酸為布忍斯特酸(Brönstedt acid)及路易斯酸(Lewis acid)。特定而言，可能利用無機酸，例如氫鹵酸，諸如氫氟酸、鹽酸、氫溴酸；無機含氧酸，諸如硫酸及過氯酸；此外，無機路易斯酸，諸如三氟化硼、三氯化鋁、氯化鐵(III)、氯化錫(IV)、氯化鈦(IV)及氯化鋅(II)；以及有機酸，例如羧酸及羧基羧酸，諸如甲酸、乙酸、丙酸、草酸、檸檬酸及三氟乙酸；以及有機磺酸，諸如甲苯磺酸、苯磺酸、樟腦磺酸及其類似酸。當然，亦可能使用不同酸之混合物。

在根據本發明方法之一實施例中，反應係在有機酸存在下，例如在諸如甲酸、乙酸或三氟乙酸之羧酸或該等酸之混合物存在下進行。較佳僅使用該等酸中之一者。在較佳實施例中，反應係於乙酸中進行。

酸性環化作用之尤其較佳實施例係在正丁醇、N-甲基嗎啉及乙酸存在下於回流條件下進行。

在本發明之另一實施例中，反應僅藉由加熱反應混合物(熱環化作用)來進行。此處，反應通常係於10°C至反應混合物之沸點、較佳50°C至反應混合物之沸點之範圍內的溫度下、尤其較佳於反應混合物之沸點下於回流下進行。一般而言，反應係於溶劑中、較佳於惰性有機溶劑中進行。

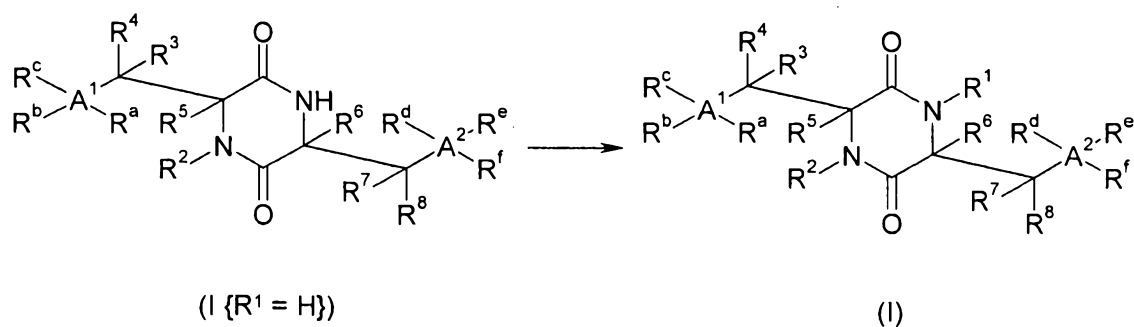
原則上，合適之溶劑為可用於鹼性環化作用之彼等溶

劑。較佳為極性非質子性溶劑，例如二甲亞砜或二甲基甲醯胺或其混合物。在較佳實施例中，反應係於二甲亞砜中進行。

可例如以慣用方式處理根據本發明之方法A之一者所獲得的反應混合物。此可例如藉由與水混合、分離各相及(若適當)層析純化粗產物來進行。獲得一些呈黏性油狀物形式之中間物及終產物，一般可於減壓下及適度高溫下純化或除去揮發性組份。若中間物及終產物係以固體形式獲得，則亦可藉由再結晶或分解來進行純化。

方法B

根據本發明之另一方法(方法B)，其中 Y^1 及 Y^2 為O且 $R^1 \neq$ 氫之式I化合物亦可藉由使其中 R^1 為氫之式I之哌咭化合物與含有不同於氫之基團 R^1 之烷基化劑或醯化劑反應來製備。該等反應可類似於自文獻已知之方法來進行，例如根據由I.O. Donkor等人，Bioorg. Med. Chem. Lett. 11 (19) (2001), 2647-2649，B.B. Snider等人，Tetrahedron 57 (16) (2001), 3301-3307，I. Yasuhiro等人，J. Am. Chem. Soc. 124(47) (2002), 14017-14019，或M. Falorni等人，Europ. J. Org. Chem. (8) (2000), 1669-1675所述之方法。



根據方法B，使其中 R^1 =氫之式I之哌啶化合物與合適之烷基化劑(下文化合物 X^1-R^1)或醯化劑(下文化合物 X^2-R^1)反應，產生其中 $R^1 \neq$ 氫之式I之哌啶化合物。

在烷基化劑 X^1-R^1 中， X^1 可為鹵素或 $O-SO_2-R^m$ ，其中 R^m 具有含義 C_1-C_4 烷基、 C_1-C_4 烷氧基或芳基，其視情況經鹵素、 C_1-C_4 烷基或鹵基- C_1-C_4 烷基取代。在醯化劑 X^2-R^1 中， X^2 可為鹵素，尤其為Cl。此處， $R^1 \neq$ 氫且如上文所定義。

該反應通常係於 -78°C 至反應混合物之沸點、較佳 -50°C 至 65°C 、尤其較佳 -30°C 至 65°C 範圍內之溫度下進行。一般而言，反應係於溶劑中、較佳於惰性有機溶劑中進行。

合適之溶劑為方法A所列舉之化合物，尤其為甲苯、二氯甲烷、四氫呋喃或二甲基甲醯胺或其混合物。較佳地，反應係於四氫呋喃中進行。

在較佳實施例中，使其中 $R^1=H$ 之化合物I與烷基化劑或醯化劑在鹼存在下反應。合適之鹼為方法A所列舉之化合物。一般而言，以等莫耳量利用該等鹼。其亦可過量使用或甚至用作溶劑。在根據本發明方法之較佳實施例中，以等莫耳量或以大體上等莫耳量添加鹼。在另一較佳實施例中，所用之鹼為氫化鈉。

處理一般係以類似於方法A所述之程序來進行。

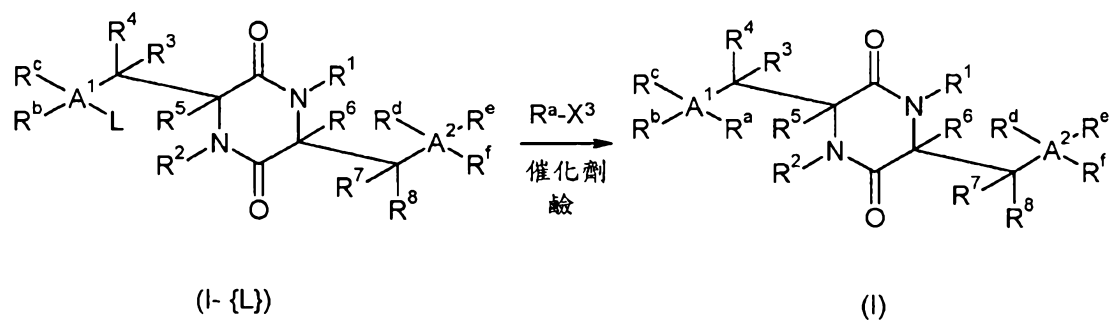
方法C

類似於方法B所述之程序，可能使其中 Y^1 及 Y^2 為O且 R^2 為氫之化合物I與烷基化劑 R^2-X^1 或醯化劑 R^2-X^2 反應，產生

其中 R^2 具有不同於氫之含義的式I化合物(方法C)。根據本發明之方法C之反應條件對應於方法B之彼等條件。

方法D

式I化合物可進一步於基團 R^a 處加以修飾。因此，舉例而言，其中 R^a 為CN、視情況經取代之苯基或視情況經取代之雜環基的式I化合物可由其中 R^a 為鹵素(諸如氯、溴或碘)之化合物I藉由取代基 R^a 之轉化來製備，例如類似於由J. Tsuji, Top. Organomet. Chem. (14) (2005), 第332頁，或J. Tsuji, Organic Synthesis with Palladium Compounds. (1980), 第207頁，Tetrahedron Lett. 42, 2001, S. 7473或Org. Lett. 5, 2003, 1785所述之方法。



為此目的，具有合適離去基L而非取代基 R^a 的式I-{L}之哌啶化合物係藉由與含有基團 R^a (化合物 R^a-X^3)之偶合劑反應而轉化為式I之另一哌啶衍生物。

該反應通常係在催化劑存在下、較佳在過渡金屬催化劑存在下進行。一般而言，反應係在鹼存在下進行。

此反應次序在下文中使用取代基 R^a 之實例來說明且當然可以類似方式用於轉化取代基 R^b 及 R^c 。

合適之離去基L為(例如)鹵素、 $S(O)_nR^k$ 或 $OS(O)_nR^k$ ，其

中 $n=0$ 、 1 、 2 且 R^k 為 C_1 - C_6 烷基、鹵基- $(C_1$ - $C_6)$ 烷基或視情況經鹵化或經 C_1 - C_4 烷基取代之芳基。

合適之偶合劑 X^3 - R^a 尤其為其中若 R^a 為 C_1 - C_6 烷基、 C_2 - C_6 烯基、芳基或雜芳基，則 X^3 表示以下基團中之一者的彼等化合物：

- $Zn-R^l$ ，其中 R^l 為鹵素、 C_1 - C_6 烷基、 C_2 - C_6 烯基、芳基或雜芳基；
- $B(OR^m)_2$ ，其中 R^m 為 H 或 C_1 - C_6 烷基，其中兩個烷基取代基共同可形成 C_2 - C_4 伸烷基鏈；或
- SnR^n_3 ，其中 R^n 為 C_1 - C_6 烷基或芳基；且

若 R^a 為 C_2 - C_6 炔基，則 X^3 亦可為氫。

此處，根據較佳實施例，式 I 化合物中之 L 或 R^a 在 A^1 之連接點之鄰位處連接至 A^1 之碳原子。

此反應通常係於 -78°C 至反應混合物之沸點、較佳 -30°C 至 65°C 範圍內之溫度下、尤其較佳於 30°C 至 65°C 之溫度下進行。一般而言，該反應係於惰性有機溶劑中在鹼存在下進行。

合適之溶劑為方法 A 所列舉之化合物。在根據本發明方法之一實施例中，使用四氫呋喃及催化量之水；在另一實施例中，僅使用四氫呋喃。

合適之鹼為關於使二肽 VIII 環化為哌啶 IV 所提及之化合物。

一般以等莫耳量利用該等鹼。其亦可過量使用或甚至用作溶劑。

在根據本發明方法之較佳實施例中，以等莫耳量添加鹼。在另一較佳實施例中，所用之鹼為三乙胺或碳酸鈉，尤其較佳為碳酸鈉。

用於根據本發明之方法之合適催化劑原則上為過渡金屬Ni、Fe、Pd、Pt、Zr或Cu之化合物。可能使用有機或無機化合物。例如可提及Pd(PPh₃)₂Cl₂、Pd(OAc)₂、PdCl₂或Na₂PdCl₄。此處，Ph為苯基。

不同催化劑可單獨或以混合物形式利用。在本發明之較佳實施例中，使用Pd(PPh₃)₂Cl₂。

為製備其中R^a為CN之化合物I，亦可類似於已知方法使其中L為氯、溴或碘之化合物I與氰化銅反應(參見例如，Organikum，第21版，2001，Wiley, S. 404，Tetrahedron Lett. 42, 2001, S.7473或Org. Lett. 5, 2003, 1785及其中所引用之文獻)。

該等轉化通常係於100°C至反應混合物之沸點、較佳於100°C至250°C範圍內之溫度下進行。一般而言，反應係於惰性有機溶劑中進行。合適之溶劑尤其為非質子性極性溶劑，例如二甲基甲醯胺、N-甲基吡咯啉酮、N,N'-二甲基咪唑啉-2-酮及二甲基乙醯胺。

或者，基團R^a之轉化亦可於化合物I之前驅體上進行。

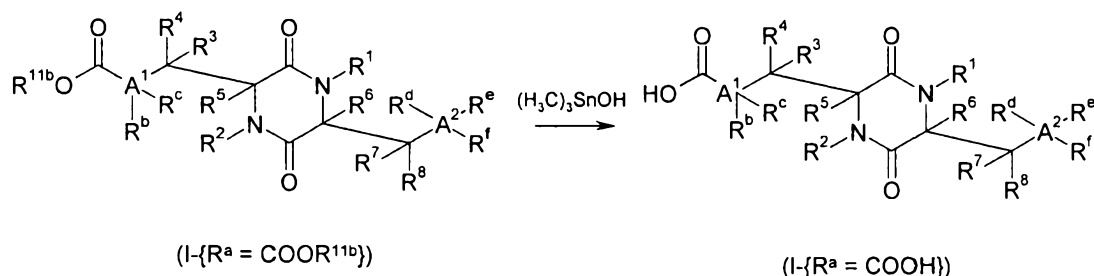
處理可類似於方法A所述之程序來進行。

方法E

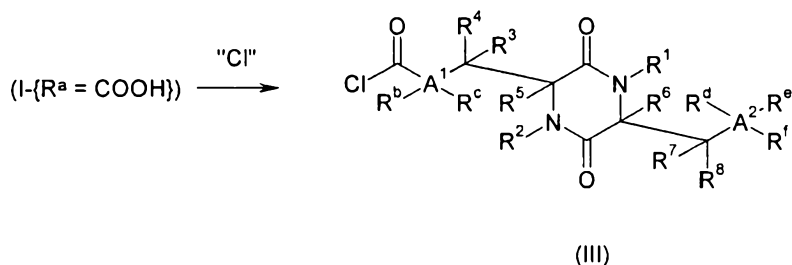
其中Y¹及Y²為O且基團R^a、R^b或R^c中之一者為COOH的式I之哌啶化合物可進一步由其中R^a、R^b或R^c為

COOR^{11b} (其中 R^{11b} 為烷基，例如 CH₃) 的式 I 之哌啶化合物藉由水解酯基來製備。水解可例如藉由與 (H₃C)₃SnOH 反應來執行，例如根據 K. C. Nicolaou 等人，Angew. Chem. Int. Ed. Engl. (44) (2005), 1378。以此方式所獲得之羧酸隨後可藉由有機合成之標準方法 (若適當，在轉化為酸氯化物之後) 藉由與胺 HNR^uR^v 或醇 HOR^w 反應而轉化為相應酯或鹽胺，Organikum, Autorenkollektiv, Leipzig 1993，第 19 版，第 424 頁，第 429 頁。此反應次序在下文使用取代基 R^a 之實例來說明，但當然亦可能以類似方式利用此次序來轉化取代基 R^b 及 R^c。

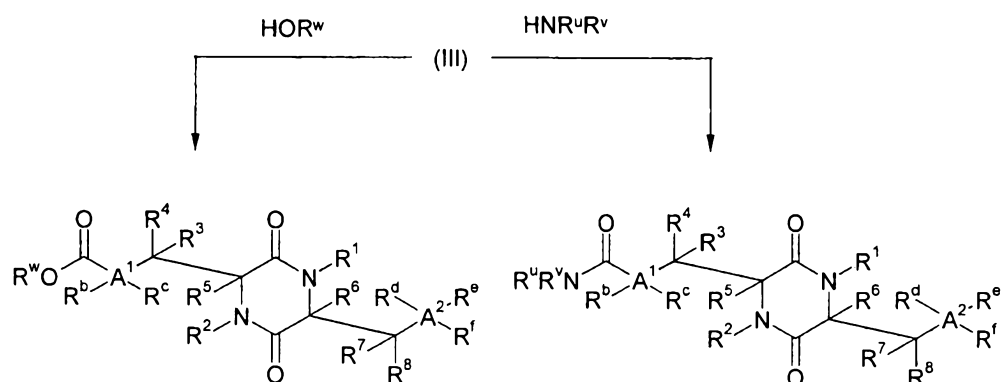
步驟 1：



步驟 2：



步驟 3：



在此流程中，變數 A^1 、 A^2 、 R^1 - R^8 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、 R^e 及 R^f 具有上文所給之含義。 R^u 及 R^v 彼此獨立地為氫、 C_1 - C_6 烷基、 C_2 - C_6 烯基、 C_2 - C_6 炔基、 C_1 - C_6 烷氧基、 C_1 - C_6 烷基磺醯基、 C_1 - C_6 烷基胺基磺醯基、[二- $(C_1$ - C_6)-烷基胺基]磺醯基或視情況經取代之苯基。 R^w 為 C_1 - C_6 烷基、 C_3 - C_6 烯基或 C_3 - C_6 炔基。

在第一步驟中，將哌啶化合物 I $\{R^a=COOR^{11b}\}$ 中之酯基水解。該水解可例如藉由與 $(H_3C)_3SnOH$ 反應來執行，產生 I $\{R^a=COOH\}$ 之游離酸。轉化為游離酸通常係使用過量 $(H_3C)_3SnOH$ 來進行。一般而言，反應係於惰性有機溶劑中進行。合適之溶劑尤其包括二氯乙烷。一般而言，反應係於高溫下(例如於約 $80^\circ C$ 下)進行。

在第二步驟中，將酸 I $\{R^a=COOH\}$ 轉化為其式 III 之酸氯化物。轉化為酸氯化物通常係於 $10^\circ C$ 至 $50^\circ C$ 之溫度下、較佳於室溫下(例如 $25^\circ C$)進行。一般而言，反應係於惰性有機溶劑中進行。最合適之溶劑尤其包括二氯甲烷。在較佳實施例中，反應係於二氯甲烷及催化量之二甲基甲醯胺中進行。許多試劑均適合於氯化反應，例如乙二醯氯或亞硫醯氯。較佳使用大體上等莫耳量之氯化試劑，尤其乙二醯

氣。

在後續反應中與胺 NHR^uR^v 之反應通常係藉由添加過量所述胺來進行。該反應可於 0°C 至 40°C 之溫度範圍內、較佳於室溫下(例如 25°C)進行。

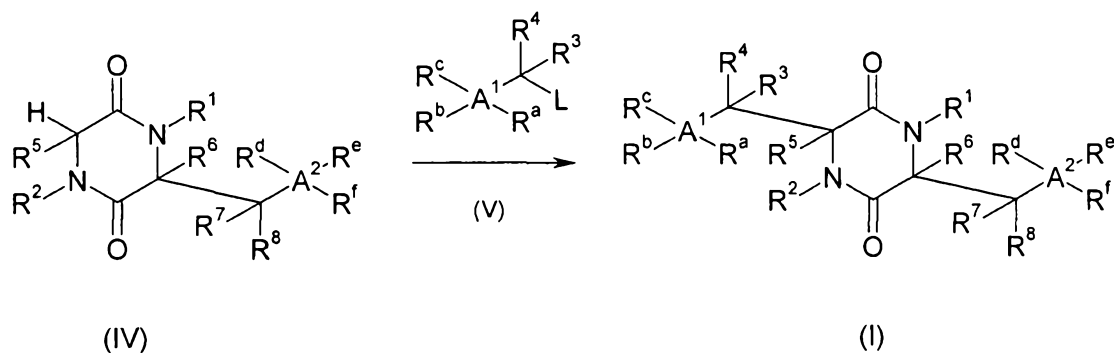
在後續反應中與醇 HOR^w 之反應通常係藉由添加過量所述醇及三乙胺兩者來進行。

該反應可於 0°C 至 40°C 之溫度範圍內、較佳於室溫下(例如 25°C)進行。

處理可類似於方法A所述之程序來進行。

方法F

其中 Y^1 及 Y^2 為O之式I化合物可根據下文所示之合成藉由使通式IV之哌啶化合物與化合物V偶合來製備。IV與V之偶合可類似於自文獻已知之方法來執行，例如根據G. Porzi等人，Tetrahedron 9 (19), (1998), 3411-3420，或C. I. Harding等人，Tetrahedron 60 (35), (2004), 7679-7692，或C. J. Chang等人，J. Chem. Soc. Perk. T. 1 (24), (1994), 3587-3593。



在該流程中，變數 A^1 、 A^2 、 R^1 - R^8 、 R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、 R^e 及 R^f 如上文所定義。L為合適之離去基，諸如鹵素或

OSO_2R^m ，其中 R^m 為 C_1 - C_4 烷基、鹵基- C_1 - C_4 烷基、芳基或經 C_1 - C_4 烷基單取代或三取代之芳基。

一般而言，該反應係於 -78°C 至反應混合物之沸點範圍內、較佳 -78°C 至 40°C 範圍內、尤其較佳 -78°C 至 30°C 範圍內之溫度下進行。

一般而言，該反應係於惰性有機溶劑中在鹼存在下進行。合適之溶劑為方法 A 所列舉之化合物。在根據本發明之方法之較佳實施例中，使用四氫呋喃。

合適之鹼為方法 A 所列舉之化合物。在另一較佳實施例中，所用之鹼為二異丙基醯胺鋰，尤其較佳以大體上等莫耳量，尤其以等莫耳量使用。

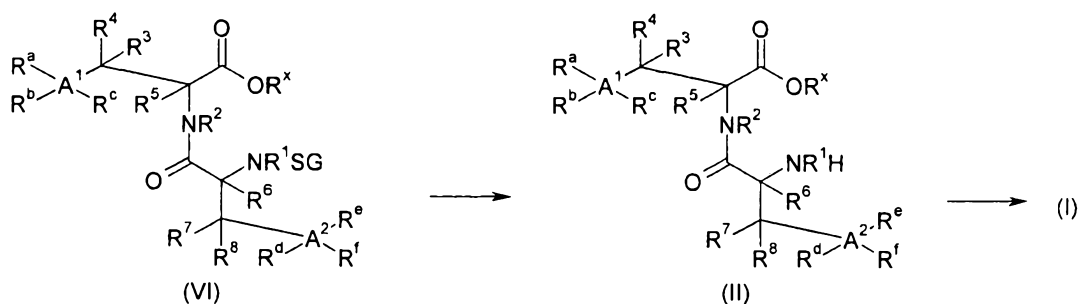
一些式 V 化合物為市售的或可藉由文獻中所述之相應市售前驅體之轉化來製備。

處理可類似於方法 A 所述之程序來進行。

製備式 I 化合物所需之前驅體及中間物中的一些為市售的，自文獻已知或可藉由自文獻已知之方法來製備。

前驅體之合成

式 II 之二肽化合物可例如由通式 VI 之經 N 保護之二肽以類似於自文獻已知之方法來製備，例如根據 Glenn L. Stahl 等人，J. Org. Chem. 43(11), (1978), 2285-6 或 A. K. Ghosh 等人，Org. Lett. 3(4), (2001), 635-638。



在式 II 及 VI 中，變數 A^1 、 A^2 、 R^1 - R^8 、 R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、 R^e 及 R^f 如關於式 I 所定義，SG 為氮保護基，諸如 Boc (= 第三丁氧基羰基)，且 OR^x 為經由氧原子連接之離去基。當然，在各種情況下，用於式 I 化合物之較佳含義相應地適用於式 II 或 IV 之化合物。關於離去基 OR^x ，應用上文關於式 II 之二肽所述之含義。

因此，舉例而言，其中 SG 為 Boc 且 OR^x 為合適離去基 (其中 R^x 為例如 C_1 - C_6 烷基，尤其為甲基、乙基或苄基) 的式 VI 之二肽可在酸存在下轉化為式 II 化合物。

該反應通常係於 -30°C 至反應混合物之沸點、較佳 0°C 至 50°C 、尤其較佳 20°C 至 35°C 範圍內之溫度下進行。

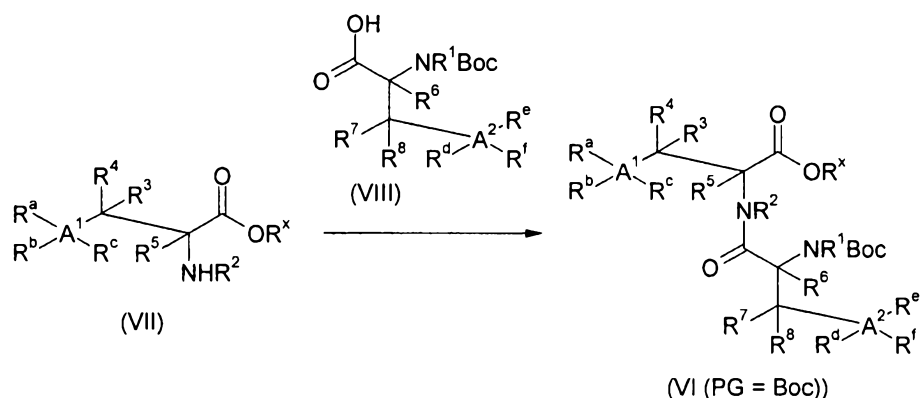
反應可於溶劑中、尤其於惰性有機溶劑中進行。合適之溶劑原則上為關於鹼性環化作用所列舉之化合物，尤其為四氫呋喃或二氯甲烷或其混合物。在較佳實施例中，反應係於二氯甲烷中進行。

所用之酸為關於方法 A 所列舉之酸。

在根據本發明方法之一實施例中，反應係在有機酸存在下，例如在諸如甲酸、乙酸或三氟乙酸之強有機酸或其混合物存在下進行。在較佳實施例中，反應係在三氟乙酸存在下進行。

處理可類似於方法A所述之程序來進行。

經保護之式VI之二肽可類似於自文獻已知之方法來製備，例如根據Wilford L. Mendelson等人，Int. J. Peptide & Protein Research 35(3), (1990), 249-57。典型途徑為經Boc保護之胺基酸VIII與式VII之胺基酸酯的醯胺化作用，如下文流程中所示：



在此流程中，變數如上文所定義。亦可能使用其他胺基保護基來替代Boc。

一般而言，VII與VIII之反應係於-30℃至反應混合物之沸點、較佳0℃至50℃、尤其較佳20℃至35℃範圍內之溫度下進行。該反應可於溶劑中、較佳於惰性有機溶劑中進行。合適之溶劑為方法A關於鹼性環化作用所提及之溶劑。

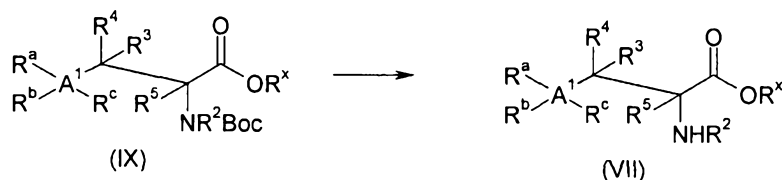
一般而言，反應需要活化劑之存在。合適之活化劑為縮合劑，諸如聚苯乙烯或非聚苯乙烯負載之二環己基碳化二亞胺(DCC)、二異丙基羰化二亞胺、1-乙基-3-(二甲基胺基丙基)碳化二亞胺(EDAC)、羰基二咪唑、氯甲酸酯(諸如氯甲酸甲酯、氯甲酸乙酯、氯甲酸異丙酯、氯甲酸異丁酯、

氯甲酸第二丁酯或氯甲酸烯丙酯)、特戊醯氯、聚磷酸、丙烷膦酸酐、雙(2-側氧基-3-噁唑啉基)-磷醯氯(BOPCl)或磺醯氯(諸如甲烷磺醯氯、甲苯磺醯氯或苯磺醯氯)。另一合適之活化劑為六氟磷酸O-(7-氮雜苯并三唑-1-基)-N,N,N',N'-四甲基鎂(HATU)。根據一實施例，較佳活化劑為EDAC或DCC。

式VII與VIII之化合物之反應較佳係在鹼存在下進行。合適之鹼為方法A所列舉之化合物。在一實施例中，所用之鹼為三乙胺或N-乙基二異丙胺或其混合物，尤其較佳為N-乙基二異丙胺。

處理可類似於方法A所述之程序來進行。

對此而言，式VII化合物可類似於自文獻已知之方法藉由使相應受保護之胺基酸化合物IX去保護來製備，例如根據Glenn L. Stahl等人，J. Org. Chem. 43(11), (1978), 2285-6或A. K. Ghosh等人，Org. Lett. 3(4), (2001), 635-638。由經Boc保護之胺基酸化合物IX製備VII展示於下文流程中。亦可能使用其他胺基保護基來替代Boc基團。



式IX化合物轉化為化合物VII通常係在酸存在下於-30℃至反應混合物之沸點、較佳0℃至50℃、尤其較佳20℃至35℃範圍內之溫度下進行。該反應可於溶劑中、較佳於惰性有機溶劑中進行。

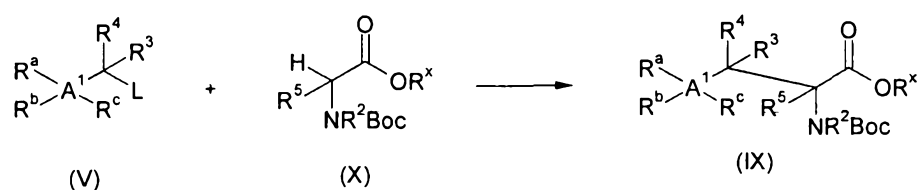
合適之溶劑原則上為關於鹼性環化作用所提及之化合物，尤其為四氫呋喃或二氯甲烷或其混合物。在較佳實施例中，反應係於二氯甲烷中進行。

所用之酸及酸性催化劑為關於方法A所列舉之化合物。

在根據本發明之方法之一實施例中，反應係在有機酸存在下，例如在諸如甲酸、乙酸或三氟乙酸之強有機酸或其混合物存在下進行。在較佳實施例中，反應係在三氟乙酸存在下進行。

處理可類似於方法A所述之程序來進行。

式IX化合物可根據下文流程中所示之反應來製備。化合物V與經保護之胺基酸化合物X之反應可類似於自文獻已知之方法來進行，例如根據I. Ojima等人，J. Am. Chem. Soc., 109(21), (1987), 6537-6538或J. M. McIntosh等人，Tetrahedron 48(30), (1992), 6219-6224。



在此流程中，變數如上文所定義。L為離去基，例如關於方法F所提及之離去基中之一者。亦可能使用其他胺基保護基來替代Boc。

V與X之反應一般係在鹼存在下進行。合適之鹼為方法A所列舉之化合物。在另一較佳實施例中，所用之鹼為二異丙基醯胺鋰，尤其較佳為大體上等莫耳量，尤其為等莫耳量。

通常，反應係於 -78°C 至反應混合物之沸點、較佳 -78°C 至沸點、尤其較佳 -78°C 至 30°C 範圍內之溫度下進行。

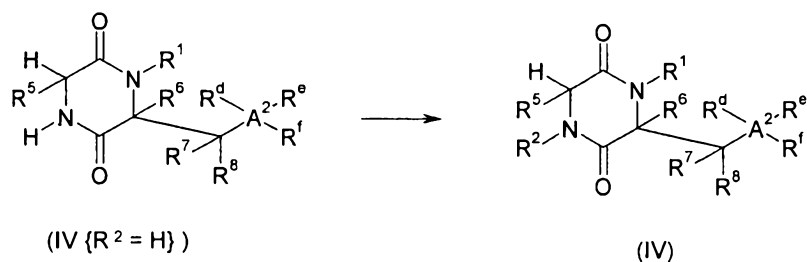
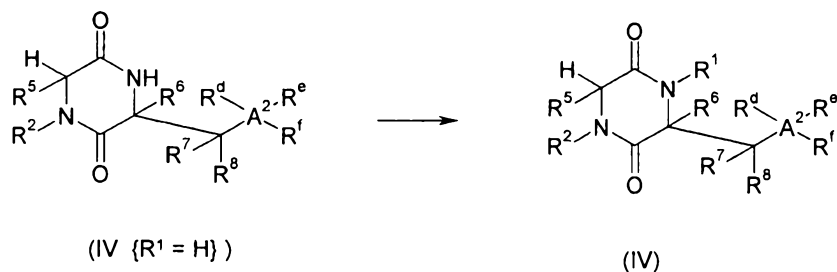
反應可於溶劑中、較佳於惰性有機溶劑中進行。合適之溶劑原則上為關於鹼性環化作用所提及之溶劑，尤其為二氯甲烷或四氫呋喃或其混合物。在較佳實施例中，反應係於四氫呋喃中進行。

處理可類似於方法A所述之程序來進行。

式V化合物中之一些為市售的或可藉由文獻中所述之相應市售前驅體之轉化來製備。

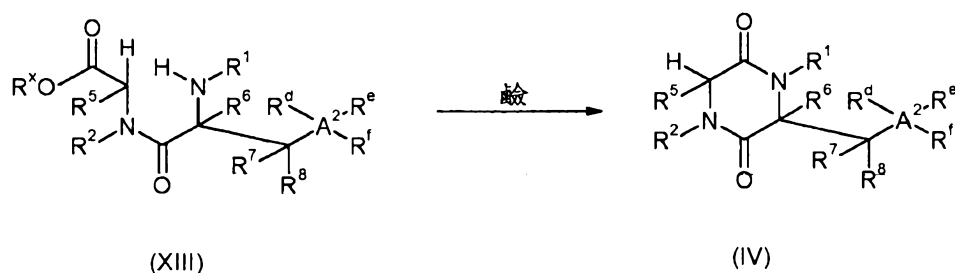
式VIII或X之胺基酸衍生物或下文所述衍生物XV中之一些同樣為市售的或可藉由文獻中所述之相應市售前驅體之轉化來製備。

其中 R^1 具有不同於氫之含義的式IV化合物可藉由使其中 R^1 為氫之式IV之哌啶化合物與含有不同於氫之基團 R^1 之烷基化劑或醯化劑反應來製備。以類似方式，可能藉由使其中 R^2 為氫之式IV之哌啶化合物與含有不同於氫之基團 R^2 之烷基化劑或醯化劑反應來製備其中 $\text{R}^2 \neq$ 氫之化合物IV。該等反應可類似於自文獻已知之方法來進行，例如根據由I.O. Donkor等人，Bioorg. Med. Chem. Lett. 11 (19) (2001), 2647-2649，B.B. Snider等人，Tetrahedron 57 (16) (2001), 3301-3307，I. Yasuhiro等人，J. Am. Chem. Soc. 124(47) (2002), 14017-14019，或M. Falorni等人，Europ. J. Org. Chem. (8) (2000), 1669-1675所述之方法。



關於烷基化劑或醯化劑，以相同方式應用關於方法B及C所述之烷基化劑或醯化劑。關於該等反應之反應條件，同樣應用關於方法B及C所述之條件。

式IV化合物亦可類似於自文獻已知之其他方法，藉由通式XIII之化合物的分子內環化作用來製備，例如根據T. Kawasaki等人，Org. Lett. 2(19) (2000), 3027-3029。



在式XIII中，變數R^x、A²、R¹、R²、R⁵、R⁶、R⁷、R⁸、R^d、R^e及R^f如上文所定義。基團OR^x為經由氧連接之合適之離去基。此處，R^x為例如C₁-C₆烷基，尤其為甲基或乙基，或苯基-C₁-C₆烷基，例如苄基。

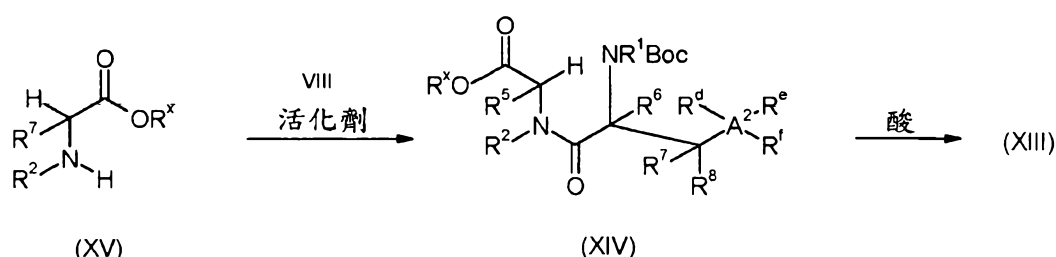
式XIII化合物之環化作用可在鹼存在下進行。在此狀況下，反應一般係於0℃至反應混合物之沸點、較佳10℃至50℃、尤其較佳15℃至35℃範圍內之溫度下進行。反應可

於溶劑中、較佳於惰性有機溶劑中進行。

合適之溶劑原則上為熱環化作用所列舉之化合物，尤其為具有1:10至10:1之混合比率的四氫呋喃-水混合物。

合適之鹼為關於根據方法A之鹼性環化作用所提及之鹼，尤其為第三丁醇鉀、2-羥基吡啶或氨之水溶液或此等鹼之混合物。較佳僅使用此等鹼中之一者。在尤其較佳實施例中，反應係在氨之水溶液存在下進行，其例如可為10%至50%濃度(w/v)。

對此而言，式XIII化合物可藉由下文流程中所說明之合成，以類似於自文獻已知之方法來製備，例如根據Wilford L. Mendelson等人，Int. J. Peptide & Protein Research 35(3), (1990), 249-57，Glenn L. Stahl等人，J. Org. Chem. 43(11), (1978), 2285-6或A. K. Ghosh等人，Org. Lett. 3(4), (2001), 635-638。



在該流程中，變數 R^x 、 A^2 、 R^1 、 R^2 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^d 、 R^e 及 R^f 如上文所定義。在第一步驟中，合成包含胺基酸化合物XV與經Boc保護之胺基酸VIII在活化劑存在下之偶合。

式XV化合物與式VIII化合物之反應通常係於 -30°C 至反應混合物之沸點、較佳 0°C 至 50°C 、尤其較佳 20°C 至 35°C 範

圍內之溫度下進行。該反應可於溶劑中、較佳於惰性有機溶劑中進行。更多詳情參考藉由胺基酸化合物VIII與化合物VII之醯胺化作用來製備化合物VI。

一般而言，反應需要活化劑之存在。合適之活化劑為縮合劑，諸如聚苯乙烯或非聚苯乙烯負載之二環己基碳化二亞胺(DCC)、二異丙基羧化二亞胺、1-乙基-3-(二甲基胺基丙基)碳化二亞胺(EDAC)、羧基二咪唑、氯甲酸酯(諸如氯甲酸甲酯、氯甲酸乙酯、氯甲酸異丙酯、氯甲酸異丁酯、氯甲酸第二丁酯或氯甲酸烯丙酯)、特戊醯氯、聚磷酸、丙烷膦酸酐、雙(2-側氧基-3-噁唑啉基)-磷醯氯(BOPCl)或磺醯氯(諸如甲烷磺醯氯、甲苯磺醯氯或苯磺醯氯)。另一合適之活化劑為六氟磷酸O-(7-氮雜苯并三唑-1-基)-N,N,N',N'-四甲基鎂(HATU)。根據一實施例，較佳活化劑為EDAC或DCC。

XV與VIII之反應較佳係在鹼存在下進行。合適之鹼為方法A所列舉之化合物。在一實施例中，所用之鹼為三乙胺或N-乙基二異丙胺或其混合物，尤其較佳為N-乙基二異丙胺。

處理可類似於方法A所述之程序來進行。

使化合物XIV去保護以產生化合物XIII通常係藉由用酸處理來進行。該反應通常係於-30℃至反應混合物之沸點、較佳0℃至50℃、尤其較佳20℃至35℃範圍內之溫度下進行。該反應可於溶劑中、較佳於惰性有機溶劑中進行。

合適之溶劑原則上為方法A關於鹼性環化作用所提及之

溶劑，尤其為四氫呋喃或二氯甲烷或其混合物。在較佳實施例中，反應係於二氯甲烷中進行。

所用之酸為關於方法A所提及之酸。更多詳情亦參考VI之去保護作用以產生化合物II。彼處所提及之反應條件亦適合於使化合物XIV去保護。在根據本發明之方法之一實施例中，反應係在有機酸存在下，尤其在強有機酸存在下，例如在甲酸、乙酸或三氟乙酸或其混合物之存在下進行。在較佳實施例中，反應係在三氟乙酸存在下進行。

方法F

根據本發明之式I化合物亦可例如由其中 R^6 為氫且其中 R^3 連同 R^5 一起較佳為化學鍵之相應前驅體化合物來提供。基團 R^6 可藉由有機化學之慣用方法來引入，此視所述基團 R^6 之性質而定，例如藉由烷基化作用、醯化作用、硝化作用、與磷鹵素化合物反應、鹵化作用、氰化作用、亞硫醯化作用或磺醯化作用。

為此目的，藉由與鹼反應，在與 $C(=Y^2)N$ 碳相鄰之位置處使前驅體(亦即其中 R^6 為氫而非所給含義之式I化合物)去質子化，且使以此方式獲得之陰離子與化合物 X^6-R^{6a} 反應。此處， X^6 為離去基。 R^{6a} 具有對於 R^6 所給含義中之一者或為基團 R^6 之受保護前驅體。

用於使前驅體去質子化之合適鹼為無機化合物，諸如鹼金屬及鹼土金屬氫氧化物，諸如氫氧化鋰、氫氧化鈉、氫氧化鉀或氫氧化鈣；鹼之水溶液；鹼金屬或鹼土金屬氧化物，諸如氧化鋰、氧化鈉、氧化鈣及氧化鎂；鹼金屬及鹼

土金屬氮化物，諸如氮化鋰、氮化鈉、氮化鉀及氮化鈣；鹼金屬鹽胺，諸如鹽胺鋰(例如二異丙基鹽胺鋰)、鹽胺鈉、鹽胺鉀；及鹼金屬矽氮烷，諸如六甲基二矽氮烷鋰或六甲基二矽氮烷鉀；鹼金屬及鹼土金屬碳酸鹽，諸如碳酸鋰、碳酸鉀、碳酸鈉及碳酸鈣；以及鹼金屬碳酸氫鹽，諸如碳酸氫鈉；有機金屬化合物，尤其鹼金屬烷基及鹼金屬芳基，諸如甲基鋰、丁基鋰及苯基鋰；鹵化烷基鎂，諸如氯化甲基鎂；以及鹼金屬及鹼土金屬烷醇鹽，諸如甲醇鈉、乙醇鈉、乙醇鉀、第三丁醇鉀、第三戊醇鉀及二甲氧基鎂；此外，有機鹼，例如三級胺，諸如三甲胺、三乙胺、二異丙基乙胺、2-羥基吡啶及N-甲基哌啶、吡啶、經取代之吡啶(諸如三甲基吡啶、二甲基吡啶及4-二甲基氨基吡啶)以及雙環胺。一般以等莫耳量利用該等鹼。其亦可過量使用或甚至用作溶劑。在較佳實施例中，以等莫耳量或以基本上等莫耳量利用鹼。較佳地，所用之鹼為鹼金屬氮化物、鹼金屬鹽胺或鹼金屬矽氮烷。

去質子化作用之後，使前驅體與合適之式 X^6-R^{6a} 化合物反應，產生根據本發明之式I之哌啶化合物。在化合物 X^6-R^{6a} 中， X^6 尤其為鹵素(尤其為氯、溴或碘)、基團 $O-C(O)R^m$ 或基團 $O-SO_2-R^m$ ，其中 R^m 為 C_1-C_4 烷基或芳基，其視情況經鹵素、 C_1-C_4 烷基或鹵基- C_1-C_4 烷基取代。

該反應通常係於 -78°C 至反應混合物之沸點、較佳 -50°C 至 65°C 、尤其較佳 -30°C 至 65°C 範圍內之溫度下進行。一般而言，反應係於溶劑中、較佳於惰性有機溶劑中進行。

合適之溶劑為脂族烴類，諸如戊烷、己烷、環己烷及 C_5 - C_8 烷烴之混合物；芳族烴類，諸如甲苯、鄰二甲苯、間二甲苯及對二甲苯；鹵代烴類，諸如二氯甲烷、二氯乙烷、氯仿及氯苯；醚類，諸如乙醚、二異丙基醚、第三丁基甲基醚、二噁烷、苯甲醚及四氫呋喃；腈類，諸如乙腈及丙腈；酮類，諸如丙酮、甲基乙基酮、二乙基酮及第三丁基甲基酮；醇類，諸如甲醇、乙醇、正丙醇、異丙醇、正丁醇、第三丁醇；水、二甲亞碲、N-甲基吡咯啉酮、二甲基甲醯胺及二甲基乙醯胺；以及嗎啉及N-甲基嗎啉及其混合物。較佳溶劑為甲苯、二氯甲烷、四氫呋喃、N-甲基吡咯啉酮或二甲基甲醯胺及其混合物。

另外，為製備其中 R^6 為鹵素、尤其為氯或溴之化合物 I，可以上述方式將其中 R^6 為氫之前驅體轉化為其陰離子且隨後與諸如四氯二溴乙烷、N-溴代丁二醯亞胺或N-氯代丁二醯亞胺之鹵化劑反應。

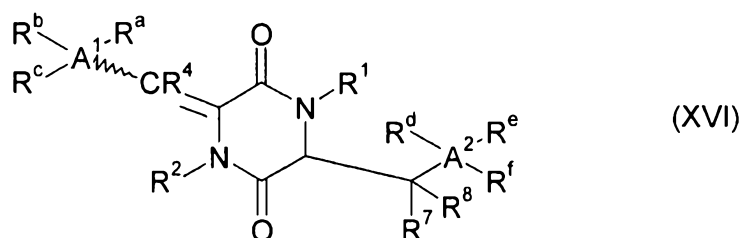
另外，為製備其中 R^6 為氰基之化合物 I，以上述方式將其中 R^6 為氫之前驅體轉化為其陰離子且隨後與溴化氰反應。或者，可在例如鈦化合物(諸如 $RuCl_2(P(C_6H_5)_3)_3$)之過渡金屬催化劑存在下，初始以有機過氧化物或諸如氫過氧化第三丁基之氫過氧化物來氧化其中 R^6 為氫之前驅體。可在隨後氧化產物與氰化三甲基矽烷在四氯化鈦存在下之反應中引入氰基(參見 J. Am. Chem. Soc. 112 (21), 1990, 第 7820-7822 頁)。

其中 R^6 為硝基之化合物 I 的製備可例如類似於 Arch.

Pharm. 326 (11), 1993, 第875-878頁中所給之程序，藉由使其中 R^6 為氫之前驅體與亞硝酸鈉在乙酸存在下反應來進行。

其中 R^6 為基團 OR^{65} 之化合物I的製備可例如根據J. Org. Chem. 65(15), 2000, 第4685-4693頁中所述之程序，藉由以上述方式將其中 R^6 為氫之前驅體轉化為其陰離子，繼而較佳在DMAP存在下以溴化苯基亞硒氧化來進行，其產生其中 R^6 為OH之式I化合物。為引入基團 R^{65} ，可隨後藉由標準方法來烷基化或芳基化OH基團。

在下文中，其中 R^3 及 R^5 共同為化學鍵之相應前驅體稱為式XVI化合物：



此處， A^1 、 A^2 、 R^1 、 R^2 、 R^4 、 R^7 、 R^8 及 R^a 至 R^f 具有上文所給含義中之一者。另外，式XVI中之 R^1 及 R^2 可為保護基或氫。關於保護基，應用上文對於式XIV化合物所述之保護基。

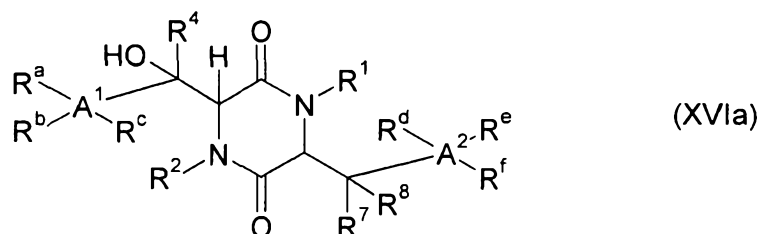
若式XVI中之 R^1 及/或 R^2 為保護基，則將移除該保護基。以此方式，獲得其中 R^1 及(若適當) R^2 為氫之化合物XVI。

隨後使其中 R^1 為氫之化合物XVI與式 R^1-X^1 之烷基化劑或式 R^1-X^2 之醯化劑較佳在鹼存在下反應。若 R^2 為氫，則使化合物XVI與式 R^2-X^1 之烷基化劑或式 R^2-X^2 之醯化劑較佳

在鹼存在下反應。

式 XVI 化合物例如自 PCT/EP2007/050067(=WO 2007/077247)已知，其全部內容以引用的方式包括在本文中。

化合物 XVI 之製備一般係藉由使相應醇 XVIa 脫水來進行：



在式 XVIa 中， A^1 、 A^2 、 R^1 、 R^2 、 R^4 、 R^7 、 R^8 及 R^a 至 R^f 具有上文所提及之含義，尤其所提及為較佳之含義中之一者。在第一變體(變體 F.1)中，初始可將化合物 XVIa 之醇官能基轉化為合適之離去基，且此隨後可以化合物 H-LG 之形式消除。消除反應較佳係在合適鹼之存在下進行。

離去基 LG 為易於自羥基製備之慣用離去基。該等離去基之實例為 4-甲苯磺醯基氧基 (LG = -O-SO₂C₆H₄CH₃)、三氟甲烷磺醯基氧基 (LG = -O-SO₂CF₃) 及甲烷磺醯基氧基 (LG = -O-SO₂CH₃)，後者尤其合適。根據慣用方法引入該離去基，例如藉由使醇 XVIa 與鹼反應且隨後與適當磺醯氯反應，例如與甲烷磺醯氯或三氟甲烷磺醯氯反應來引入。合適之鹼為下文關於消除反應所列之鹼。然而，較佳使用可溶於有機溶劑中之鹼，例如下文所提及之胺或氮雜環。特定而言，使用吡啶或經取代之吡啶，諸如二甲基胺基吡啶、二甲基吡啶或三甲吡啶或其混合物。便利地，選擇有

機鹼以致其亦充當溶劑。

一般而言，適合於消除反應之鹼為無機化合物，諸如鹼金屬及鹼土金屬氫氧化物，諸如氫氧化鋰、氫氧化鈉、氫氧化鉀或氫氧化鈣；鹼之水溶液；鹼金屬或鹼土金屬氧化物，諸如氧化鋰、氧化鈉、氧化鈣及氧化鎂；鹼金屬及鹼土金屬氮化物，諸如氮化鋰、氮化鈉、氮化鉀及氮化鈣；鹼金屬鹽胺，諸如鹽胺鋰(例如二異丙基鹽胺鋰)、鹽胺鈉及鹽胺鉀；鹼金屬及鹼土金屬碳酸鹽，諸如碳酸鋰、碳酸鉀、碳酸鈉及碳酸鈣；以及鹼金屬碳酸氫鹽，諸如碳酸氫鈉；有機金屬化合物，尤其鹼金屬烷基，諸如甲基鋰、丁基鋰及苯基鋰；鹵化烷基鎂，諸如氯化甲基鎂；以及鹼金屬及鹼土金屬烷醇鹽，諸如甲醇鈉、乙醇鈉、乙醇鉀、第三丁醇鉀、第三戊醇鉀及二甲氧基鎂；此外，有機鹼，例如三級胺，諸如三甲胺、三乙胺、二異丙基乙胺、2-羥基吡啶及N-甲基哌啶、吡啶、經取代之吡啶(諸如三甲基吡啶、二甲基吡啶及4-二甲基氨基吡啶)以及雙環胺。當然，亦可能使用不同鹼之混合物。

然而，尤其合適者為具有足夠鹼性、但基本上不具親核性之鹼，例如位阻鹼金屬烷醇鹽，例如鹼金屬第三丁醇鹽，諸如第三丁醇鉀，且尤其為環狀脒，諸如DBU(1,8-二氮雜雙環[5.4.0]十一碳-7-烯)及DBN(1,5-二氮雜雙環[3.4.0]壬-5-烯)。較佳使用最後提及之脒。

消除反應一般係於溶劑中、較佳於惰性有機溶劑中進行。合適之惰性有機溶劑包括芳族烴類，諸如甲苯、鄰二

甲苯、間二甲苯及對二甲苯；鹵代烴類，諸如二氯甲烷、二氯乙烷、氯仿及氯苯；醚類，諸如乙醚、二異丙基醚、第三丁基甲基醚、二噁烷、苯甲醚及四氫呋喃；腈類，諸如乙腈及丙腈；酮類，諸如丙酮、甲基乙基酮、二乙基酮及第三丁基甲基酮；醇類，諸如甲醇、乙醇、正丙醇、異丙醇、正丁醇、第三丁醇；水；以及二甲亞砷、二甲基甲醯胺及二甲基乙醯胺；以及嗎啉及N-甲基嗎啉。亦可能使用所提及溶劑之混合物。較佳使用四氫呋喃。

藉由將醇官能基轉化為良好離去基及隨後進行消除反應而使醇XVIa脫水可類似於先前技術之已知方法來進行，例如類似於Helv. Chim. Acta 1947, 30, 1454; Liebigs Ann. Chem 1992, (7), 687-692, Carbanions. 24. Rearrangements of (E)-and (Z)-2,2-diphenyl-3-pentenylalkali metal compounds; Sch. Chem., Georgia Inst. Technol., Atlanta, GA, USA; J. Org. Chem. 1989, 54(7), 1671-1679; Chemical & Pharmaceutical Bulletin 1986, 34(7), 2786-2798中所述之方法，其全部內容以引用的方式包括在本文中。

在第二變體(變體F.2)中，藉由使化合物XVIa脫水來製備化合物XVI係在合適之脫水劑存在下進行。

合適之脫水劑為(例如)系統三苯基磷/DEAD(DEAD=偶氮二甲酸二乙酯)及柏傑斯試劑(Burgess reagent)。一般而言，三苯基磷與DEAD之組合係用於經羥基取代之對掌性中心處的靶向反轉(三信反應(Mitsunobu reaction))；然而，在親核體存在下，其充當溫和脫水劑。關於化合物

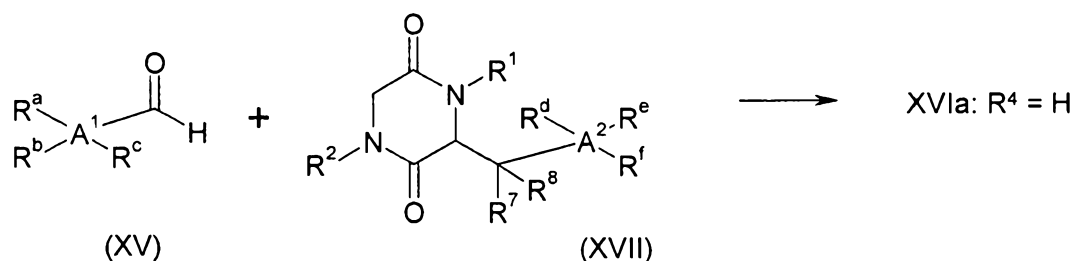
XVIa，較佳以過量利用該系統，其中兩種組份三苯基膦與 DEAD適合以近似等莫耳比率存在。

柏傑斯試劑為兩性離子甲基N-(三乙基銨磺醯基胺基甲酸酯)((C₂H₅)₃N⁺-SO₂-N⁻-COOCH₃)，其係一種溫和脫水劑。關於醇XVI，此可以等莫耳量或以莫耳過量利用。與柏傑斯試劑之反應通常係於惰性有機溶劑中進行。合適之惰性有機溶劑包括芳族烴類，諸如甲苯、鄰二甲苯、間二甲苯及對二甲苯；鹵代烴類，諸如二氯甲烷、二氯乙烷、氯仿及氯苯；醚類，諸如乙醚、二異丙基醚、第三丁基甲基醚、二噁烷、苯甲醚及四氫呋喃；腈類，諸如乙腈及丙腈；及酮類，諸如丙酮、甲基乙基酮、二乙基酮及第三丁基甲基酮。較佳使用芳族烴或其混合物且尤其使用甲苯。

用脫水劑使醇XVIa脫水可類似於先前技術之已知方法來進行，例如類似於Synthesis 2003, 201及J. Indian Sci. 2001, 81, 461中所述之方法，其全部內容以引用的方式包括在本文中。

式XVIa之醇可例如類似於自文獻已知之方法藉由使相應二肽前驅體環化來製備，例如類似於由T. Kawasaki等人，Org. Lett. 2(19) (2000), 3027-3029，Igor L. Rodionov等人，Tetrahedron 58(42) (2002), 8515-8523或A. L. Johnson等人，Tetrahedron 60 (2004), 961-965所述之方法。

其中R⁴為氫之式XVIa之醇亦可藉由在醛醇反應中使式XV之苯甲醛與哌啶化合物XVII偶合來製備，如下文流程中所說明：



在式 XV 及 XVII 中，變數 A^1 、 A^2 、 R^1 、 R^2 、 R^7 、 R^8 及 R^a 至 R^f 具有上文所給含義中之一者。

在醇醛反應之意義上，XV 與 XVII 之反應一般在合適鹼之存在下進行。合適之鹼為通常用於醇醛反應之彼等鹼。合適之反應條件自先前技術已知且例如於 J. Org. Chem. 2000, 65 (24), 8402-8405 中描述，其全部內容以引用的方式包括在本文中。

化合物 XV 與化合物 XVII 之反應亦可直接得到相應醇醛縮合產物，亦即式 XVI 化合物。此為尤其在化合物 XVII 中基團 R^1 及 R^2 為醯基，例如式 $C(O)R^{21}$ 之基團 (其中 R^{21} 具有上文所給含義中之一者且尤其為 C_1 - C_4 烷基，例如甲基) 時之情形。

該醇醛縮合反應可類似於 J. Org. Chem. 2000, 65 (24), 8402-8405, Synlett 2006, 677 及 J. Heterocycl. Chem. 1988, 25, 591 中所述之方法來進行，其全部內容以引用的方式包括在本文中。

醇醛縮合反應通常係在合適鹼之存在下進行。合適之鹼為通常用於醇醛縮合反應之彼等鹼。較佳使用鹼金屬或鹼土金屬碳酸鹽作為鹼，例如碳酸鈉、碳酸鉀或碳酸銨或其混合物。

該反應較佳於惰性、較佳非質子性有機溶劑中進行。合適溶劑之實例尤其為二氯甲烷、二氯乙烷、氯苯；醚類，諸如乙醚、二異丙基醚、第三丁基甲基醚、二噁烷、苯甲醚及四氫呋喃；腈類，諸如乙腈及丙腈；以及二甲亞砜、二甲基甲醯胺、N-甲基吡咯啉酮及二甲基乙醯胺。較佳溶劑尤其係選自由二甲基甲醯胺、N-甲基吡咯啉酮及二甲基乙醯胺組成之群。

醇醛縮合反應所需之溫度一般係在 0°C 至所用溶劑之沸點之範圍內且尤其在 10°C 至 80°C 之範圍內。

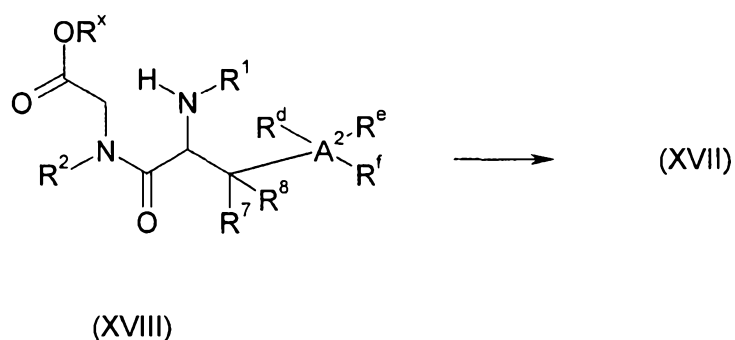
對於XV與XVII之反應，已發現化合物XVII中之基團 R^1 及 R^2 有利地為醯基，例如式 $\text{C}(\text{O})\text{R}^{21}$ 之基團。將該等保護基引入化合物XVII中可類似於保護基化學之已知方法來進行，例如藉由使相應無NH之化合物(式XVII化合物，其中 R^1 、 $\text{R}^2=\text{H}$)與式 $(\text{R}^{21}\text{C}(\text{O}))_2\text{O}$ 之酸酐反應，例如根據由Green, Wuts, Protective Groups in Organic Synthesis, 第3版1999, John Wiley及Sons, 第553頁所述之方法來進行。保護基 R^1 、 R^2 之移除可類似於保護基化學之已知方法來進行。

若化合物XVII中之基團 R^1 及 R^2 為醯基，則將較佳在醇醛縮合反應之後移除該等基團，產生其中 $\text{R}^1=\text{R}^2=\text{H}$ 之式XVI化合物。基團 R^1 及 R^2 一般係藉由水解來移除，基團 R^2 常常已在醇醛縮合反應之條件下裂解。隨後例如藉由N-烷基化將基團 R^1 及(若適當)基團 R^2 引入其中 $\text{R}^1=\text{R}^2=\text{H}$ 之所得化合物XVI中。

類似於上述方法，亦可能提供式I-A化合物，其中 R^4 為氫且 R^3 連同 R^5 一起為化學鍵且 R^6 具有不同於氫之含義。

式XVII化合物可類似於自文獻已知之其他方法，藉由通式XVIII之化合物的分子內環化作用來製備，例如根據T. Kawasaki等人，Org. Lett. 2(19) (2000), 3027-3029，Igor L. Rodionov等人，Tetrahedron 58(42) (2002), 8515-8523或A. L. Johnson等人，Tetrahedron 60 (2004), 961-965。

若適當，繼環化作用之後，若式XVII中之 R^1 及/或 R^2 為氫，則引入不同於氫之基團 R^1 或 R^2 。



在式XVIII中，變數 A^2 、 R^1 、 R^2 、 R^7 、 R^8 及 R^d 至 R^f 具有上文所提及之含義。此處， R^x 為例如 C_1 - C_6 烷基，尤其為甲基或乙基，或苯基- C_1 - C_6 烷基，例如苄基。

式XVII化合物之環化作用可在鹼之存在下進行。在此狀況下，該反應一般係於 0°C 至反應混合物之沸點、較佳 10°C 至 50°C 、尤其較佳 15°C 至 35°C 範圍內之溫度下進行。反應可於溶劑中、較佳於惰性有機溶劑中進行。

合適之惰性有機溶劑包括脂族烴類，諸如戊烷、己烷、環己烷及 C_5 - C_8 烷烴之混合物；芳族烴類，諸如甲苯、鄰二甲苯、間二甲苯及對二甲苯；鹵代烴類，諸如二氯甲

烷、二氯乙烷、氯仿及氯苯；醚類，諸如乙醚、二異丙基醚、第三丁基甲基醚、二噁烷、苯甲醚及四氫呋喃；腈類，諸如乙腈及丙腈；酮類，諸如丙酮、甲基乙基酮、二乙基酮及第三丁基甲基酮；醇類，諸如甲醇、乙醇、正丙醇、異丙醇、正丁醇、2-丁醇、異丁醇、第三丁醇；水；以及二甲亞砷、二甲基甲醯胺及二甲基乙醯胺；以及嗎啉及N-甲基嗎啉。亦可使用所提及溶劑之混合物。較佳溶劑為具有1:10至10:1之混合比率的四氫呋喃/水混合物。

合適之鹼為(例如)無機化合物，諸如鹼金屬及鹼土金屬氫氧化物，諸如氫氧化鋰、氫氧化鈉、氫氧化鉀或氫氧化鈣；鹼之水溶液；鹼金屬或鹼土金屬氧化物，諸如氧化鋰、氧化鈉、氧化鈣及氧化鎂；鹼金屬及鹼土金屬氫化物，諸如氫化鋰、氫化鈉、氫化鉀及氫化鈣；鹼金屬醯胺，諸如醯胺鋰(例如二異丙基醯胺鋰)、醯胺鈉及醯胺鉀；鹼金屬及鹼土金屬碳酸鹽，諸如碳酸鋰、碳酸鉀、碳酸銻及碳酸鈣；以及鹼金屬碳酸氫鹽，諸如碳酸氫鈉；有機金屬化合物，尤其鹼金屬烷基，諸如甲基鋰、丁基鋰及苯基鋰；鹵化烷基鎂，諸如氯化甲基鎂；以及鹼金屬及鹼土金屬烷醇鹽，諸如甲醇鈉、乙醇鈉、乙醇鉀、第三丁醇鉀、第三戊醇鉀及二甲氧基鎂；此外，有機鹼，例如三級胺，諸如三甲胺、三乙胺、二異丙基乙胺、2-羥基吡啶及N-甲基哌啶、吡啶、經取代之吡啶(諸如三甲基吡啶、二甲基吡啶及4-二甲基氨基吡啶)以及雙環胺。當然，亦可能使用不同鹼之混合物。尤其較佳為第三丁醇鉀、2-羥基吡

啖或氨之水溶液或該等鹼之混合物。較佳僅使用該等鹼中之一者。在尤其較佳實施例中，反應係在氨之水溶液存在下進行，其可例如具有10%至50%(w/v)之濃度。在另一尤其較佳實施例中，環化作用係於包含丁醇(例如正丁醇、2-丁醇及/或異丁醇或其混合物)與N-甲基嗎啉之混合物中、較佳於回流條件下進行。

XVIII環化為XVII亦可用酸催化在活化化合物存在下或用熱方法來進行。XVIII在酸存在下之反應通常係於10°C至反應混合物之沸點、較佳50°C至沸點範圍內之溫度下、尤其較佳於沸點下於回流下進行。一般而言，反應係於溶劑中、較佳於惰性有機溶劑中進行。

合適之溶劑原則上為亦可用於鹼性環化作用之彼等溶劑，尤其為醇。在較佳實施例中，反應係於正丁醇或不同丁醇異構體之混合物(例如，正丁醇與2-丁醇及/或異丁醇之混合物)中進行。

用於將XVIII環化為XVII之合適酸原則上為布忍斯特酸及路易斯酸。尤其可使用無機酸，例如氫鹵酸，諸如氫氟酸、鹽酸、氫溴酸；無機含氧酸，諸如硫酸及過氯酸；此外，無機路易斯酸，諸如三氟化硼、三氯化鋁、氯化鐵(III)、氯化錫(IV)、氯化鈦(IV)及氯化鋅(II)；以及有機酸，例如羧酸及羧基羧酸，諸如甲酸、乙酸、丙酸、草酸、檸檬酸及三氟乙酸；以及有機磺酸，諸如甲苯磺酸、苯磺酸、樟腦磺酸及其類似酸。當然，亦可能使用不同酸之混合物。

在根據本發明方法之一實施例中，反應係在有機酸存在下，例如在諸如甲酸、乙酸或三氟乙酸之羧酸或該等酸之混合物存在下進行。較佳僅使用該等酸中之一者。在較佳實施例中，反應係於乙酸中進行。

在尤其較佳實施例中，酸性環化作用係於包含正丁醇或丁醇異構體混合物(例如正丁醇與2-丁醇及/或異丁醇之混合物)、N-甲基嗎啉及乙酸之混合物中、較佳於回流條件下進行。

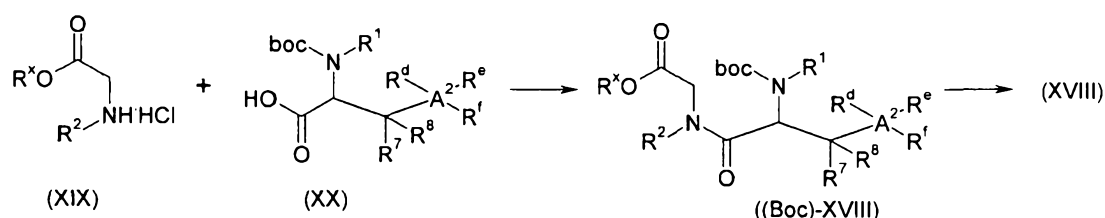
在本發明之另一實施例中，XVIII之轉化係在鹼存在下藉由用活化劑處理來進行。在此狀況下， R^x 為氫。合適活化劑之實例為二-(N-丁二醯亞胺基)碳酸酯。此外，合適活化劑為聚苯乙烯或非聚苯乙烯結合之二環己基碳化二亞胺(DCC)、二異丙基羧化二亞胺、1-乙基-3-(二甲基胺基丙基)碳化二亞胺(EDAC)、羧基二咪唑(CDI)；氯甲酸酯類，諸如氯甲酸甲酯、氯甲酸乙酯、氯甲酸異丙酯、氯甲酸異丁酯、氯甲酸第二丁酯或氯甲酸烯丙酯；特戊醯氯；聚磷酸；丙烷膦酸酐；雙(2-側氧基-3-噁唑啉基)-磷醯氯(BOPCl)或磺醯氯，諸如甲磺醯氯、甲磺醯氯或苯磺醯氯。另一合適之活化劑為六氟磷酸O-(7-氮雜苯并三唑-1-基)-N,N,N',N'-四甲基鎂(HATU)。合適之鹼為關於鹼性環化作用所列之化合物。在一實施例中，所用之鹼為三乙胺或N-乙基二異丙胺或其混合物，尤其較佳為N-乙基二異丙胺。

在本發明之另一實施例中，XVIII之轉化係排他地藉由

加熱反應混合物來進行(熱環化作用)。此處，反應通常係於10℃至反應混合物之沸點、較佳50℃至反應混合物之沸點範圍內之溫度下、尤其較佳於反應混合物之沸點下於回流下進行。反應一般係於溶劑中、較佳於惰性有機溶劑中進行。

原則上，合適之溶劑為可用於鹼性環化作用之彼等溶劑。較佳為極性非質子性溶劑，例如二甲亞砜或二甲基甲醯胺或其混合物。在較佳實施例中，反應係於二甲亞砜中進行。

對此而言，式 XVIII 之化合物可類似於文獻之方法藉由下文所示之流程來製備，例如根據 Wilford L. Mendelson 等人，Int. J. Peptide & Protein Research 35(3), (1990), 249-57，Glenn L. Stahl 等人，J. Org. Chem. 43(11), (1978), 2285-6 或 A. K. Ghosh 等人，Org. Lett. 3(4), (2001), 635-638。

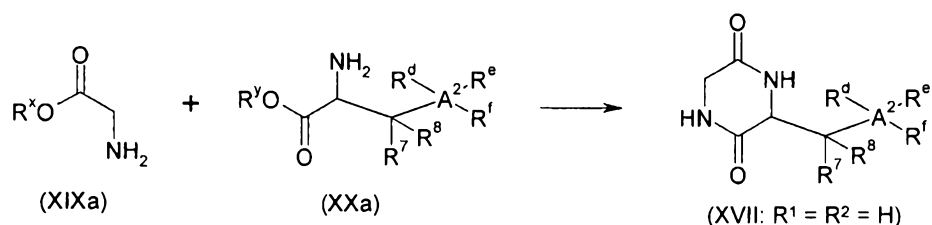


在上文所示之流程中，變數 A^2 、 R^x 、 R^1 、 R^2 、 R^7 、 R^8 及 R^d 至 R^f 具有上文所給含義中之一者。合成包含在第一步驟中式 XIX 之甘胺酸酯化合物與經 Boc 保護之式 XX 化合物在活化劑存在下之偶合。亦可能使用另一胺基保護基來替代 Boc。

關於用於使式 XIX 化合物與式 XX 化合物反應之合適條

件，參考化合物VII與化合物VIII之反應以產生式VI化合物。

若化合物XVII中之基團 R^1 及 R^2 為氫，則化合物XVII亦可根據下文流程藉由甘胺酸酯衍生物XIXa與化合物XXa之分子間環化作用來製備：

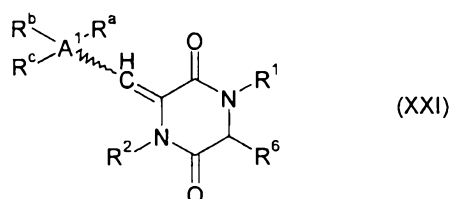


在該等流程中， R^x 、 R^7 、 R^8 及 R^d 至 R^f 具有上文所給含義中之一者。 R^y 為烷基，例如甲基或乙基。分子間環化作用可例如藉由鹼(例如氫)來實現。化合物XIXa及/或XXa亦可以其酸加成鹽之形式(例如以鹽酸鹽形式)利用。

方法G

根據另一實施例(下文稱為方法G)，其中 Y^1 及 Y^2 為O且 R^3 連同 R^5 一起為化學鍵之化合物I的製備包含：

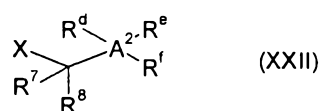
i) 提供通式XXI之化合物：



其中 A^1 、 R^2 、 R^6 及 R^a 至 R^c 具有上文所提及含義中之一者且 R^1 具有不同於氫之上文所提及含義中之一者或為保護基；

ii) 使化合物XXI在鹼存在下與式XXII之苄基化合物反

應：



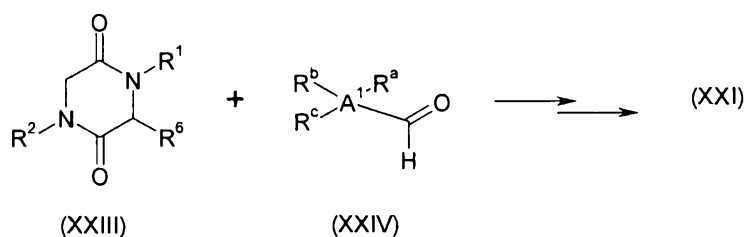
其中 A^2 、 R^7 、 R^8 及 R^d 至 R^f 具有上文所給含義中之一者
且 X 為親核性可替代之離去基；及

iii) 若 R^1 為保護基，則移除該保護基。

在式 XXI 中， R^1 較佳具有不同於氫之關於 R^1 所給含義中之一者。在式 XXII 中，變數 X 較佳具有下列含義中之一者：鹵素，尤其為氯、溴或碘；或 $\text{O}-\text{SO}_2-\text{R}^m$ ，其中 R^m 具有含義 C_1-C_4 烷基或芳基，其視情況經鹵素、 C_1-C_4 烷基或鹵基- C_1-C_4 烷基取代。用於 XXI 中之哌啶環之氮原子的合適保護基尤其為上文所提及之基團 $\text{C}(\text{O})\text{R}^{21}$ ，例如乙醯基。

步驟 ii) 中化合物 XXI 與化合物 XXII 之反應可例如類似於 J. Am. Chem. Soc. 105, 1983, 3214 中所述之方法來進行。在較佳實施例中，該反應係在作為鹼之氫化鈉存在下於作為溶劑之 N-甲基吡咯啶酮中進行。

化合物 XXI 可例如藉由使化合物 XXIII 與醛化合物 XXIV 反應來提供，如下文流程中所說明。



此處， A^1 、 R^1 、 R^6 及 R^a 至 R^c 具有上文所提及含義中之一者。 R^2 具有上文所給含義中之一者或為保護基。用於XXIII中之吡啶環之氮原子的合適保護基尤其為上文所提及之基團 $C(O)R^{21}$ ，例如乙醯基。 R^1 及 R^2 尤其為上文所提及之基團 $C(O)R^{21}$ 中之一者，例如乙醯基。

XXIII與XXIV之反應可如上文已述在醇醛縮合反應之條件下進行。該等醇醛縮合反應可類似於J. Org. Chem. 2000, 65 (24), 8402-8405, Synlett 2006, 677 及 J. Heterocycl. Chem. 1988, 25, 591中所述之方法來進行，其全部內容以引用的方式併入本文中。

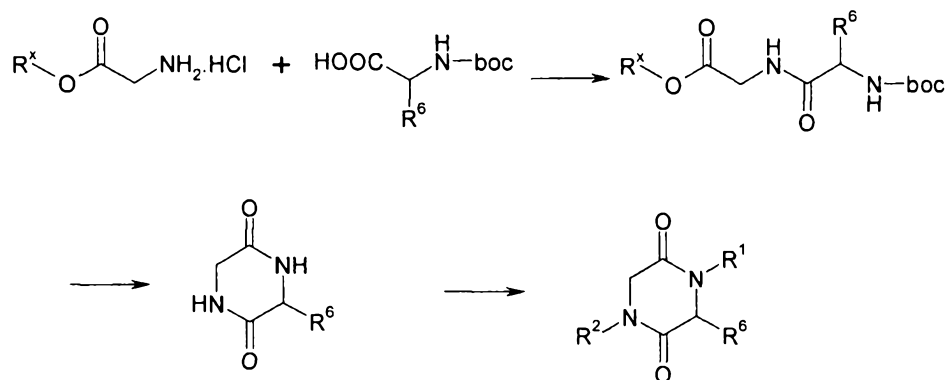
該反應一般係在鹼之存在下進行。所用之鹼較佳為鹼金屬或鹼土金屬碳酸鹽，例如碳酸鈉、碳酸鉀或碳酸鈹或其混合物。

反應較佳於惰性、較佳非質子性有機溶劑中進行。合適溶劑之實例尤其為二氯甲烷、二氯乙烷、氯苯；醚類，諸如乙醚、二異丙基醚、第三丁基甲基醚、二噁烷、苯甲醚及四氫呋喃；腈類，諸如乙腈及丙腈；以及二甲亞砜、二甲基甲醯胺、N-甲基吡咯啉酮及二甲基乙醯胺。

所反應之化合物較佳為彼等化合物XXIII，其中 R^1 及 R^2 為保護基且尤其為醯基 $R^{21}C(O)-(R^{21}=C_1-C_4\text{烷基})$ ，例如乙醯基。因此，繼縮合反應後一般為保護基之移除。保護基 R^1 、 R^2 之移除可類似於保護基化學之已知方法來進行，例如藉由 Green, Wuts, Protective Groups in Organic Synthesis, 第3版1999, John Wiley及Sons, 第553頁中所述

之方法。用於引入基團 R^1 及 / 或 R^2 之後續烷基化反應可以上文所給之方法來進行。

化合物 XXIII 為已知的。其製備可類似於上述化合物 XVII 之製備，根據下文所示之流程來進行：



在此流程中， R^1 、 R^2 及 R^6 具有上文所提及含義中之一者。 R^x 較佳為 C_1 - C_4 烷基或苄基。Boc 為第三丁氧基羰基。

關於第一反應步驟之更多詳情，參考化合物 XIX 或 XIXa 與化合物 XX 或 XXa 之反應。Boc 保護基之後續移除可類似於化合物 IX 轉化為化合物 VII 來進行。所得經去保護化合物之環化作用可使用關於化合物 XVIII 之環化作用所提及之方法來進行。若 R^1 及 R^2 為保護基，例如基團 $C(O)R^{21}$ ，則該等保護基可類似於保護基化學之已知方法來引入，例如藉由與式 $(R^{21}C(O))_2O$ 之酸酐反應，例如藉由 Green, Wuts, Protective Groups in Organic Synthesis, 第 3 版 1999, John Wiley 及 Sons, 第 553 頁中所述之方法。

方法 H

其中 R^3 及 R^5 為氫之式 I 化合物可藉由其中 R^3 連同 R^5 一起為化學鍵之式 I 化合物的氫化作用來製備。

該氫化作用可類似於用於還原C=C雙鍵之已知方法來進行(參見例如, J. March, Advanced Organic Chemistry, 第3版 John Wiley & Sons 1985, 第690-700頁, 以及Peptide Chemistry 17, 1980, 第59-64頁, Tetrahedron Lett. 46, 1979, 第4483-4486頁)。

氫化作用常常係藉由在作為活性金屬物質之例如包含Pt、Pd、Rh或Ru之催化劑的過渡金屬催化劑存在下與氫反應來進行。合適者為諸如負載型Pd或Pt催化劑(例如披鉑碳, 此外PtO₂)之異質催化劑以及均質催化劑。立體選擇性催化劑之使用允許雙鍵之對映選擇性氫化作用(參見Peptide Chemistry 17, 1980, 第59-64頁, Tetrahedron Lett. 46, 1979, 第4483-4486頁)。

氫化作用可以與式XVI化合物類似之方式進行, 亦即在引入不同於氫之基團R⁶之前進行。

若氫化作用得到其中R¹及/或R²為氫之式I或XVI之化合物, 則該等化合物可在上文所示之條件下轉化為其中R¹及R²具有上文所給含義中之一者的式I或XVI之化合物。

方法I

其中Y¹及/或Y²為硫之式I化合物可例如藉由使其中Y¹及/或Y²為氧之相應式I化合物與硫化劑反應而獲得。

合適硫化劑之實例為有機磷硫化物, 諸如拉爾森試劑(Lawesson's reagent)(2,2-雙-(4-甲氧基苯基)-1,3,2,4-二硫雜二磷雜環丁烷-2,4-二硫化物); 有機錫硫化物, 諸如硫化雙(三環己基錫)或五硫化二磷(亦參見J. March,

Advanced Organic Synthesis, 第4版, Wiley Interscience 1992, 第893頁f及其中所引用之文獻)。該反應可於溶劑中或在不存在溶劑之情況下進行。合適溶劑為自先前技術已知之惰性有機溶劑且尤其為吡啶及類似溶劑。反應所需之溫度一般高於室溫且尤其在50°C至200°C之範圍內。

方法J

其中 Y^1 及/或 Y^2 為基團 NR^{y1} 或 NR^{y2} 之式I化合物可例如藉由使其中 Y^1 及/或 Y^2 為氧之相應式I化合物於脫水條件下與式 H_2NR^{y1} 或 H_2NR^{y2} 之一級胺反應來製備。

方法K

其中 R^1 連同 R^2 一起為1、2、3或4員碳鏈(其中一個碳原子可由O、S或基團 NR^A 置換)之式I化合物可例如由其中 R^1 及 R^2 為氫之化合物I的前驅體藉由與其中A為1、2、3或4員碳鏈(其中一個碳原子可由O、S或基團 NR^A 置換且 X^a 為合適之離去基, 諸如碘)之式 X^a-A-X^a 之化合物反應來製備。

方法L

其中 R^3 連同 R^5 一起為1、2、3或4員碳鏈(其中一個碳原子可由O、S或基團 NR^1 置換)之式I化合物可例如由其中 R^3 連同 R^5 一起為化學鍵之化合物I來製備。

舉例而言, 環可藉由使用合適之親電體(electrophile)加成至雙鍵來建構。因此, 其中 R^3 連同 R^5 一起為氧原子之化合物I可藉由相應不飽和化合物之環氧化作用來獲得。

其中 R^3 連同 R^5 一起為視情況經取代之亞甲基的化合物I可藉由已知環丙烷化反應來獲得, 例如藉由將碳烯或類碳

烯加成至化合物I-A中之環外雙鍵來獲得。

以類似方式，亦可能製備其中 R^6 及 R^8 為1、2、3或4員碳鏈(其中一個碳原子可由O、S或基團 NR^1 置換)之化合物I。

方法M

其中 R^a 連同 R^4 一起為2、3、4或5員碳鏈(其中一個碳原子可由O、S或基團 NR^L 置換，其中該等碳原子中之一者可帶有羰基氧原子)之式I化合物可例如藉由分子內邁克爾加成反應(Michael addition)由其中 R^a 為羰基且 R^3 連同 R^5 一起為化學鍵之式I化合物來製備。慣用於此之條件為熟習此項技術者所已知。

方法N

其中 R^a 連同 R^2 一起為化學鍵或1、2、3或4員碳鏈之式I化合物可例如藉由在鹼性條件下反應由其中 R^2 為氫且 R^a 為鹵素(尤其氟)之化合物I的前驅體來製備。合適之反應條件為上文關於二級胺基與適當烷基化劑之反應所提及的彼等條件。

方法O

其中 R^2 連同 R^5 一起且連同該等基團所連接之原子一起為環狀基團之式I化合物可例如由諸如脯胺酸之環狀胺基酸來製備。

以類似方式，亦可能製備其中 R^1 連同 R^6 一起且連同該等基團所連接之原子一起為來自環狀胺基酸之環狀基團的式I化合物。

方法P

其中 R^3 連同 R^4 一起及/或 R^7 連同 R^8 一起為環狀基團之式I化合物可由相應經苯基取代之式V或XXII之化合物來製備。

方法Q

其中 Y^1 及 Y^2 為氧之化合物I-A之製備可進一步類似於所說明之化合物XVI之製備，藉由醇醛加成反應及隨後水之消除反應或較佳為在根據方法F中所說明之合成之醇醛縮合反應的條件下之反應來進行。

化合物I及其農業上適用之鹽適合以異構體混合物之形式及以純異構體之形式作為除草劑。其適合以其原樣或以適當經調配組合物之形式。包含化合物I或Ia之除草組合物尤其在高施用率下對控制非作物區之植被極為有效。其對諸如小麥、水稻、玉米、大豆及棉花之作物中的闊葉雜草及禾草起作用，而對作物植物不造成任何顯著損害。此作用主要在低施用率下觀察到。

視所述施用方法而定，式I化合物或包含其之組合物可另外用於更多之作物植物以除去不良植物。合適作物之實例為以下作物：

洋蔥 (*Allium cepa*)、鳳梨 (*Ananas comosus*)、花生 (*Arachis hypogaea*)、蘆筍 (*Asparagus officinalis*)、燕麥 (*Avena sativa*)、甜菜 (*Beta vulgaris spec. altissima*)、甜菜 (*Beta vulgaris spec. rapa*)、油菜 (*Brassica napus var. napus*)、蕪菁甘藍 (*Brassica napus var. napobrassica*)、蕪菁 (*Brassica rapa var. silvestris*)、羽衣甘藍 (*Brassica*

oleracea)、黑芥(*Brassica nigra*)、茶(*Camellia sinensis*)、紅花(*Carthamus tinctorius*)、美國薄殼山核桃(*Carya illinoensis*)、檸檬(*Citrus limon*)、甜橙(*Citrus sinensis*)、阿拉伯咖啡(*Coffea arabica*)(加納弗拉咖啡(*Coffea canephora*)、賴比瑞亞咖啡(*Coffea liberica*))、黃瓜(*Cucumis sativus*)、狗牙根(*Cynodon dactylon*)、胡蘿蔔(*Daucus carota*)、油棕(*Elaeis guineensis*)、野草莓(*Fragaria vesca*)、大豆(*Glycine max*)、陸地棉(*Gossypium hirsutum*)(亞洲棉(*Gossypium arboreum*)、草棉(*Gossypium herbaceum*)、木棉(*Gossypium vitifolium*))、向日葵(*Helianthus annuus*)、巴西橡膠樹(*Hevea brasiliensis*)、大麥(*Hordeum vulgare*)、啤酒花(*Humulus lupulus*)、甘薯(*Ipomoea batatas*)、核桃(*Juglans regia*)、兵豆(*Lens culinaris*)、亞麻(*Linum usitatissimum*)、番茄(*Lycopersicon lycopersicum*)、蘋果屬(*Malus spec.*)、木薯(*Manihot esculenta*)、苜蓿(*Medicago sativa*)、芭蕉屬(*Musa spec.*)、煙草(*Nicotiana tabacum*)(黃花煙草(*N.rustica*))、洋橄欖(*Olea europaea*)、水稻(*Oryza sativa*)、棉豆(*Phaseolus lunatus*)、菜豆(*Phaseolus vulgaris*)、歐洲雲杉(*Picea abies*)、松屬(*Pinus spec.*)、豌豆(*Pisum sativum*)、甜櫻桃(*Prunus avium*)、桃(*Prunus persica*)、西洋梨(*Pyrus communis*)、杏(*Prunus armeniaca*)、酸櫻桃(*Prunus cerasus*)、扁桃(*Prunus dulcis*)及歐洲李(*Prunus domestica*)、紅穗醋栗(*Ribes sylvestre*)、

蓖麻 (*Ricinus communis*)、甘蔗 (*Saccharum officinarum*)、黑麥 (*Secale cereale*)、白芥 (*Sinapsis alba*)、馬鈴薯 (*Solanum tuberosum*)、高粱 (*Sorghum bicolor/s. vulgare*)、可可樹 (*Theobroma cacao*)、紅三葉 (*Trifolium pratense*)、小麥 (*Triticum aestivum*)、小黑麥屬 (*Triticale*)、硬粒小麥 (*Triticum durum*)、蠶豆 (*Vicia faba*)、葡萄 (*Vitis vinifera*) 及玉蜀黍 (*Zea mays*)。

另外，式I化合物亦可用於由於育種(包括遺傳工程方法)而容許除草劑作用之作物。

另外，式I化合物亦可用於因育種(包括遺傳工程方法)而容許昆蟲或真菌侵襲之作物。

此外，已發現式I化合物亦適合於植物部分之脫葉及/或乾燥，適合於諸如棉花、馬鈴薯、油籽油菜、向日葵、大豆或蠶豆之作物植物，尤其棉花。就此而言，已發現用於植物之乾燥及/或脫葉之組合物、用於製備該等組合物之方法及用於使用式I化合物使植物乾燥及/或脫葉之方法。

作為乾燥劑之式I化合物尤其適合於使諸如馬鈴薯、油籽油菜、向日葵及大豆以及穀物之作物植物之地上部分的乾燥。此使得可能完全機械收穫該等重要作物植物。

在柑橘類果實、橄欖及其他物種及各種有害果實、核果及堅果方面，亦可藉由在一定時間段內集中開裂，或減少與樹之黏著而促進收穫，達成經濟利益。控制有用植物(尤其棉花)之脫葉亦需要此相同機制，亦即促進植物之果實部分或葉片部分與枝條部分之間發展出脫落組織。

此外，縮短個別棉花植物成熟之時間間隔的可增加收穫後之纖維品質。

式I化合物或包含式I化合物之除草組合物可以下列形式：即噴霧型水溶液、粉末、懸浮液、以及高度濃縮水性、油性或其他懸浮液或分散液、乳液、油分散液、糊狀物、粉塵、用於撒播之物質或顆粒，藉助於噴霧、霧化、撒粉、散布或澆灌或處理種子或與種子混合使用。使用形式視所欲目的而定；在任何情況下，其應確保根據本發明之活性成份儘可能均勻分布。

除草組合物包含除草有效量之至少一種式I化合物或式I化合物之農業上適用之鹽及慣用於作物保護劑之調配物的助劑。

慣用於作物保護劑之調配物之助劑的實例為惰性助劑、固體載劑、界面活性劑(諸如分散劑、保護性膠體、乳化劑、濕潤劑及增黏劑)、有機及無機增稠劑、殺細菌劑、防凍劑、消泡劑、視情況選用之著色劑及用於種子調配物之黏著劑。

增稠劑(亦即賦予調配物改良流動特性之化合物，亦即在靜止狀態下為高黏度及在移動狀態下為低黏度)之實例為多醣，諸如三仙膠(來自Kelco之Kelzan®)、Rhodopol® 23(Rhone Poulenc)或Veegum®(來自R.T. Vanderbilt)，以及有機及無機層狀礦物，諸如Attaclay®(來自Engelhardt)。

消泡劑之實例為聚矽氧乳液(諸如來自Rhodia之Silikon® SRE、Wacker或Rhodorsil®)、長鏈醇、脂肪酸、脂肪酸

鹽、有機氟化合物及其混合物。

可添加殺菌劑以使水性除草調配物穩定。殺菌劑之實例為基於雙氯酚及苜醇半縮甲醛之殺菌劑(來自ICI之Proxel®或來自Thor Chemie之Acticide® RS及來自Rohm & Haas之Kathon® MK)，以及異噻唑啉酮衍生物，諸如烷基異噻唑啉酮及苯并異噻唑啉酮(來自Thor Chemie之Acticide MBS)。

防凍劑之實例為乙二醇、丙二醇、尿素或丙三醇。

著色劑之實例為低水溶性顏料與水溶性染料。可提及之實例為以下列名稱已知之染料：若丹明(Rhodamin)B、C.I.顏料紅112、C.I.溶劑紅1、以及顏料藍15:4、顏料藍15:3、顏料藍15:2、顏料藍15:1、顏料藍80、顏料黃1、顏料黃13、顏料紅112、顏料紅48:2、顏料紅48:1、顏料紅57:1、顏料紅53:1、顏料橙43、顏料橙34、顏料橙5、顏料綠36、顏料綠7、顏料白6、顏料棕25、鹼性紫10、鹼性紫49、酸性紅51、酸性紅52、酸性紅14、酸性藍9、酸性黃23、鹼性紅10、鹼性紅108。

黏著劑之實例為聚乙烯吡咯啉酮、聚乙酸乙烯酯、聚乙醇醇及羥乙基纖維素(tylose)。

合適之惰性助劑為(例如)以下助劑：

中沸點至高沸點之礦物油餾份，諸如煤油及柴油；此外煤焦油及植物或動物來源之油；脂族、環狀及芳族烴類，例如石蠟、四氫萘、烷基化萘及其衍生物、烷基化苯及其衍生物；醇類，諸如甲醇、乙醇、丙醇、丁醇及環己醇；

酮類，諸如環己酮；強極性溶劑，例如胺，諸如N-甲基吡咯啉酮；及水。

固體載劑為礦物土，諸如矽石、矽膠、矽酸鹽、滑石、高嶺土、石灰石、石灰、白堊、紅玄武土、黃土、黏土、白雲石、矽藻土、硫酸鈣、硫酸鎂及氧化鎂；經研磨之合成材料；肥料，諸如硫酸銨、磷酸銨、硝酸銨及尿素；及植物來源之產品，諸如穀物粉、樹皮粉、木粉及堅果殼粉；纖維素粉末；或其他固體載劑。

合適之界面活性劑(佐劑、濕潤劑、增黏劑、分散劑以及乳化劑)為例如木質素磺酸(例如 Borrespers 型，Borregaard)、酚磺酸、萘磺酸(Morwet型，Akzo Nobel)及二丁基萘磺酸(Nekal型，BASF AG)之芳族磺酸的鹼金屬鹽、鹼土金屬鹽及銨鹽，及脂肪酸之鹼金屬鹽、鹼土金屬鹽及銨鹽，烷基磺酸鹽及烷基芳基磺酸鹽，烷基硫酸鹽，月桂基醚硫酸鹽及脂肪醇硫酸鹽，及硫酸化十六烷醇、十七烷醇及十八烷醇之鹽，以及脂肪醇二醇醚之鹽，磺化萘及其衍生物與甲醛之縮合物，萘之縮合物或萘磺酸與酚及甲醛之縮合物，聚氧乙烯辛基酚醚，乙氧基化異辛基酚、辛基酚或壬基酚，烷基苯基或三丁基苯基聚乙二醇醚，烷基芳基聚醚醇，異十三烷醇，脂肪醇/氧化乙烯縮合物，乙氧基化蓖麻油，聚氧乙烯烷基醚或聚氧丙烯烷基醚，月桂醇聚乙二醇醚乙酸鹽，山梨糖醇酯，木質素亞硫酸鹽廢液及蛋白，變性蛋白，多醣(例如甲基纖維素)，疏水性改質澱粉，聚乙烯醇(Mowiol型，Clariant)，聚羧酸鹽(BASF

AG, Sokalan型), 聚烷氧基化物, 聚乙烯胺(BASF AG, Lupamine型), 聚乙烯亞胺(BASF AG, Lupasol型), 聚乙烯吡咯啉酮及其共聚物。

粉末、用於撒播之物質及粉塵可藉由將活性成份與固體載劑混合或研磨在一起來製備。

例如塗覆顆粒、浸漬顆粒及均質顆粒之顆粒可藉由將活性成份與固體載劑黏合來製備。

水性使用形式可藉由添加水而由乳液濃縮物、懸浮液、糊狀物、可濕性粉末或水分散性顆粒來製備。為製備乳液、糊狀物或油分散液, 以原樣或溶解於油或溶劑中之形式的式I或Ia之化合物可藉助於濕潤劑、增黏劑、分散劑或乳化劑而在水中均質化。或者, 亦可能製備包含活性化合物、濕潤劑、增黏劑、分散劑或乳化劑及(若需要)溶劑或油之濃縮物, 其適合於以水稀釋。

即用型製劑中之式I化合物的濃度可在較寬範圍內變化。一般而言, 調配物包含約0.001重量%至98重量%、較佳0.01重量%至95重量%之至少一種活性成份。該等活性成份係以90%至100%、較佳95%至100%之純度(根據NMR光譜)來使用。

可例如如下調配根據本發明之化合物I:

1. 用於以水稀釋之產物

A 水溶性濃縮物

將10重量份之活性化合物溶解於90重量份之水或水溶性溶劑中。或者, 添加濕潤劑或其他佐劑。活性化合物經水

稀釋即溶解。此產生具有10重量%之活性化合物含量之調配物。

B 分散性濃縮物

伴隨添加10重量份之分散劑(例如聚乙烯吡咯啉酮)，將20重量份之活性化合物溶解於70重量份之環己酮中。以水稀釋產生分散液。活性化合物含量為20重量%。

C 可乳化濃縮物

伴隨添加十二烷基苯磺酸鈣及蓖麻油乙氧基化物(各自為5重量份)，將15重量份之活性化合物溶解於75重量份之有機溶劑(例如烷基芳烴)中。以水稀釋產生乳液。該調配物具有15重量%之活性化合物含量。

D 乳液

伴隨添加十二烷基苯磺酸鈣及蓖麻油乙氧基化物(各自為5重量份)，將25重量份之活性化合物溶解於35重量份之有機溶劑(例如烷基芳烴)中。藉助於乳化劑(Ultraturrax)將此混合物引入30重量份之水中且製成均質乳液。以水稀釋產生乳液。該調配物具有25重量%之活性化合物含量。

E 懸浮液

在攪拌球磨機中，伴隨添加10重量份之分散劑與濕潤劑及70重量份之水或有機溶劑，將20重量份之活性化合物磨碎以產生精細活性化合物懸浮液。以水稀釋產生活性化合物之穩定懸浮液。該調配物中之活性化合物含量為20重量%。

F 水分散性顆粒及水溶性顆粒

伴隨添加50重量份之分散劑及濕潤劑精細研磨50重量份之活性化合物，且藉助於技術設備(例如擠壓、噴霧塔、流體化床)將其製成水分散性或水溶性顆粒。以水稀釋產生活性化合物之穩定分散液或溶液。該調配物具有50重量%之活性化合物含量。

G 水分散性粉末及水溶性粉末

伴隨添加25重量份之分散劑、濕潤劑及矽膠，將75重量份之活性化合物於轉子-定子研磨機中研磨。以水稀釋產生活性化合物之穩定分散液或溶液。該調配物之活性化合物含量為75重量%。

H 凝膠調配物

在球磨機中，將20重量份之活性化合物、10重量份之分散劑、1重量份之膠凝劑及70重量份之水或有機溶劑混合以產生精細懸浮液。以水稀釋產生具有20重量%之活性化合物含量的穩定懸浮液。

2.不稀釋施用之產物

I 粉塵

將5重量份之活性化合物精細研磨且與95重量份細粉狀高嶺土密切混合。此產生具有5重量%之活性化合物含量的觸殺粉劑。

J 顆粒(GR、FG、GG、MG)

將0.5重量份之活性化合物精細研磨且與99.5重量份之載劑結合。本文當前方法為擠壓、噴霧乾燥或流體化床。此產生具有0.5重量%之活性化合物含量的不稀釋施用顆粒。

K ULV溶液(UL)

將10重量份之活性化合物溶解於90重量份之有機溶劑(例如二甲苯)中。此產生具有10重量%之活性化合物含量的不稀釋施用產物。

式I化合物或包含其之除草組合物可在萌芽前或萌芽後施用，或與作物之種子一起施用。亦可能藉由施用經除草組合物或活性化合物預先處理之作物種子來施用除草組合物或活性化合物。若某些作物植物對活性成份之耐受性不佳，則可使用其中藉助於噴霧設備來噴霧除草組合物的施用技術，以此方式儘可能使其不與敏感作物植物之葉片接觸，而活性成份到達生長在下部之不良植物的葉片或裸露土壤表面(萌芽後定向，最後一道中耕)。

在另一實施例中，式I化合物或除草組合物可藉由處理種子來施用。

種子之處理包含基本上所有熟習此項技術者所熟悉之基於根據本發明之式I化合物或由其製備之組合物的程序(拌種、種子包衣、種子撒粉、浸種、種子包膜、種子多層包衣、種子鑲衣、種子浸掛及種子粒化)。此處，除草組合物可經稀釋施用或不稀釋施用。

術語種子包含所有類型之種子，諸如穀粒、種子、果實、塊莖、秧苗及類似形式。此處，較佳地，術語種子描述穀粒及種子。

所用之種子可為上文所提及之有用植物之種子，以及轉殖基因植物或藉由慣用繁育方法所獲得之植物的種子。

活性化合物之施用率視控制標靶、季節、標靶植物及生長階段而為每公頃 0.001 kg 至 3.0 kg、較佳每公頃 0.01 kg 至 1.0 kg 活性物質 (a.s.)。為處理種子，化合物 I 一般以每 100 公斤種子 0.001 kg 至 10 kg 之量使用。

為拓寬作用範圍且為達成增效效應，可將式 I 化合物與大量其他除草或生長調節活性成份群之代表混合，且隨後相伴施用。混合物之合適組份為 (例如) 1,2,4-噻二唑、1,3,4-噻二唑、醯胺、胺基磷酸及其衍生物、胺基三唑、苯胺、(雜)芳氧基烷酸及其衍生物、苯甲酸及其衍生物、苯并噻二吡酮、2-芳醯基-1,3-環己二酮、2-雜芳醯基-1,3-環己二酮、雜芳基芳基酮、苄基異噁唑啉酮、間-CF₃-苯基衍生物、胺基甲酸酯、喹啉羧酸及其衍生物、氯乙醯苯胺、環己烯酮肟醚衍生物、二吡、二氯丙酸及其衍生物、二氫苯并呋喃、二氫呋喃-3-酮、二硝基苯胺、二硝基苯酚、二苯基醚、聯吡啶、鹵代羧酸及其衍生物、尿素、3-苯基尿嘧啶、咪唑、咪唑啉酮、N-苯基-3,4,5,6-四氫鄰苯二甲醯亞胺、噁二唑、氧呋、苯酚、芳氧基苯氧基丙酸酯及雜芳氧基苯氧基丙酸酯、苯基乙酸及其衍生物、苯基丙酸及其衍生物、吡唑、苯基吡唑、噻吡、吡啶羧酸及其衍生物、嘧啶醚、磺醯胺、磺醯基脲、三吡、三吡酮、三唑啉酮、三唑羧醯胺、尿嘧啶及苯基吡唑啉及異噁唑啉及其衍生物。

此外，可有益地為，將式 I 化合物單獨施用或與其他除草劑組合施用，或以與其他作物保護劑之混合物的形式

(例如與用於控制害蟲或植物病原性真菌或細菌之藥劑一起)來施用。與用於治療營養及痕量元素缺乏之礦物鹽溶液的混溶性亦受到關注。亦可添加諸如非植物毒性油及油濃縮物之其他添加劑。

使用式I化合物與安全劑之組合亦可為有利的。安全劑為防止或減少對有用植物之損害而對式I化合物對不利植物之除草作用無任何實質影響的化合物。其可在播種之前使用(例如用於處理種子，用於插條或用於秧苗)及用於在萌芽前或萌芽後處理有用植物。安全劑及式I化合物可同時或依次施用。合適之安全劑為(例如)(喹啉-8-氧基)乙酸、1-苯基-5-鹵烷基-1H-1,2,4-三唑-3-甲酸、1-苯基-4,5-二氫-5-烷基-1H-吡唑-3,5-二甲酸、4,5-二氫-5,5-二芳基-3-異噁唑甲酸、二氯乙醯胺、 α -羥亞胺基苯基乙腈、乙醯基苯酮肟、4,6-二鹵基-2-苯基嘧啶、N-[[4-(胺基羰基)苯基]磺醯基]-2-苄醯胺、1,8-萘甲酸酐、2-鹵基-4-(鹵烷基)-5-噻唑甲酸、硫代磷酸酯及N-烷基胺基甲酸O-苯酯以及其農業上適用之鹽，及(若其具有酸官能基)其農業上適用之衍生物，諸如醯胺、酯及硫酯。

下文以實例說明式I之哌啶化合物的製備；然而，本發明之標的物並不限於所給之實例。

實例

下文所示之產物係藉由測定熔點，藉由NMR光譜法或藉由用HPLC-MS光譜測定法($[m/z]$)或用滯留時間(RT；[min.])測定之質量來表徵。

[HPLC-MS=高效液相層析聯合質譜法；除非相反規定：
HPLC管柱：RP-18管柱(來自Merck KgaA, Germany之Chromolith Speed ROD)，50×4.6 mm；流動相：乙腈+0.1%三氟乙酸(TFA)/水+0.1% TFA，於40℃下在5分鐘內梯度為5:95至100:0，流動速率為1.8 ml/min；
MS：四極電噴霧電離，80 V(陽離子模式)。]

I. 製備實例

實例 1a/1b：2-(5-苄基-1,4-二甲基-5-甲基硫基-3,6-二側氧基亞呋喃-2-基甲基)苯甲腈

1.1 2-第三丁氧基羰基胺基-3-苯基丙醯基胺基)乙酸甲酯之製備

於0℃下，將乙基二異丙基胺(259 g，2.0 mol)、N-第三丁氧基羰基-L-苯丙胺酸(212 g，0.8 mol)及1-乙基-3-(3'-二甲基胺基丙基)碳化二亞胺(EDAC，230 g，1.2 mol)添加至甘胺酸甲酯鹽酸鹽(100 g，0.8 mol)於四氫呋喃(THF，1000 ml)中之溶液中。隨後將反應混合物於室溫下攪拌24 h。於減壓下使所得反應混合物除去揮發性組份，且將以此方式獲得之殘餘物溶於水(1000 ml)中。用CH₂Cl₂重複萃取水相。將以此方式獲得之有機相合併，用水洗滌，經Na₂SO₄乾燥且過濾，且於減壓下移除溶劑。獲得300 g量之呈黃色油狀物之(2-第三丁氧基羰基胺基-3-苯基丙醯基胺基)乙酸甲酯。在不經進一步純化之情況下使所得粗產物進一步反應。

1.2 3-苄基呋喃-2,5-二酮之製備

於室溫下，將三氟乙酸(342 g, 3 mol)逐滴添加至(2-第三丁氧基羰基胺基-3-苄基丙醯基胺基)乙酸甲酯(300 g, 約0.8 mol)於CH₂Cl₂中之溶液中。將所得反應混合物於室溫下攪拌24 h且隨後於減壓下濃縮。將所獲得之殘餘物溶於THF(500 ml)中，且緩慢添加氨水溶液(25%濃度，500 ml)。將反應混合物於室溫下再攪拌72 h。將沈澱固體藉由過濾分離且用水洗滌。獲得88 g量(產率54%)之3-苄基哌啶-2,5-二酮。

1.3 1,4-二乙醯基-3-苄基哌啶-2,5-二酮之製備

將3-苄基哌啶-2,5-二酮(20.4 g, 0.1 mol)於乙酸酐(200 ml)中之溶液於回流條件下攪拌4 h。於減壓下濃縮所獲得之反應混合物。將殘餘物溶於CH₂Cl₂中，依次用NaHCO₃水溶液及水洗滌，經Na₂SO₄乾燥且過濾，且於減壓下移除溶劑。獲得28.5 g量(定量)之呈黃色油狀物之1,4-二乙醯基-3-苄基哌啶-2,5-二酮且使其以粗產物形式進一步反應。

HPLC-MS [m/z]: 289.1 [M+1]⁺。

1.4 1-乙醯基-6-苄基-3-(2-溴亞苄基)哌啶-2,5-二酮之製備

將2-溴苯甲醛(5.55 g, 0.03 mol)及Cs₂CO₃(9.8 g, 0.03 mol)添加至1,4-二乙醯基-3-苄基哌啶-2,5-二酮(17.4 g, 0.06 mol)於二甲基甲醯胺(DMF, 100 ml)中之溶液中。將反應混合物於室溫下攪拌36 h，隨後添加水(500 ml)及檸檬酸(10 g)且用CH₂Cl₂重複萃取混合物。將以此方式獲得之有機相合併，用水洗滌，經Na₂SO₄乾燥且過濾，且於減

壓下移除溶劑。藉由管柱層析(流動相： CH_2Cl_2)純化後，獲得12 g量(產率48%)之呈黃色油狀物之1-乙醯基-6-苄基-3-(2-溴亞苄基)哌啶-2,5-二酮。

HPLC-MS $[m/z]$ ：413.9 $[M+1]^+$ 。

1.5 3-苄基-6-(2-溴亞苄基)哌啶-2,5-二酮之製備

將稀鹽酸水溶液(5%濃度，250 ml)添加至1-乙醯基-6-苄基-3-(2-溴亞苄基)哌啶-2,5-二酮(12 g，0.03 mol)於THF(50 ml)中之溶液中。將反應混合物於回流條件下攪拌8 h。冷卻反應溶液後，藉由過濾分離沈澱固體。用水及THF洗滌以此方式獲得之固體。獲得8.3 g量(產率75%)之呈無色固體狀之3-苄基-6-(2-溴亞苄基)哌啶-2,5-二酮。

HPLC-MS $[m/z]$ ：371.2 $[M]^+$ 。

1.6 3-苄基-6-(2-溴亞苄基)-1,4-二甲基哌啶-2,5-二酮

於 0°C 下，將NaH(0.8 g，60%純，0.02 mol)添加至於N,N-二甲基甲醯胺(DMF)(50 ml)中之3-苄基-6-(2-溴亞苄基)哌啶-2,5-二酮(3.71 g，0.01 mol)中。將混合物於 0°C 下攪拌1 h，且隨後添加碘代甲烷(14.2 g，0.1 mol)。將反應混合物於室溫下攪拌18 h且隨後引入水(500 ml)及檸檬酸(5 g)之溶液中。用 CH_2Cl_2 重複萃取混合物。將以此方式獲得之有機相用水洗滌，經 Na_2SO_4 乾燥，過濾且濃縮。用二異丙基醚濕磨產生標題化合物(2 g，50%產率)。

HPLC-MS $[m/z]$ ：401.4 $[M+1]^+$ 。

1.7 2-(5-苄基-1,4-二甲基-3,6-二側氧基亞哌啶-2-基甲基)苯甲腈

將 CuCN(0.9 g, 0.01 mol) 添加至於 N-甲基吡咯啉-2-酮 (NMP)(20 ml) 中之 3-苄基-6-(2-溴亞苄基)-1,4-二甲基哌啶-2,5-二酮(2 g, 0.005 mol) 中。將混合物於 150°C 下攪拌 18 h。隨後將混合物引入水(50 ml)及 NaCN(3 g) 之溶液中。用 CH₂Cl₂ 重複萃取混合物。將以此方式獲得之有機相用水洗滌，經 Na₂SO₄ 乾燥，過濾且濃縮。藉由管柱層析純化及用二異丙基醚濕磨後，獲得呈米色固體狀之所需產物(1.2 g, 67%)。

HPLC-MS [m/z]: 346.4 [M+1]⁺。

1.8 2-(5-苄基-1,4-二甲基-5-甲基硫基-3,6-二側氧基亞哌啶-2-基甲基)苯甲腈

於 -78°C 下，於氬氣下將六甲基二矽氮烷鋰(LHMDS)(1.06 M 於 THF 中，5.3 ml，約 5.6 mmol) 逐滴添加至於無水 THF(25 ml) 中之 2-(5-苄基-1,4-二甲基-3,6-二側氧基亞哌啶-2-基甲基)苯甲腈(Z 異構體)(1.5 g, 4.3 mmol) 中。將混合物於 -78°C 下攪拌 1 h，且隨後添加甲烷硫代磺酸甲酯(1.7 g, 13.5 mmol，於 1 ml THF 中)。將反應混合物於 0°C 下攪拌 1 h 且於室溫下攪拌 12 h，且隨後用檸檬酸溶液(5%) 中止。添加 CH₂Cl₂，且用 H₂O 重複洗滌混合物。將以此方式獲得之有機相經 Na₂SO₄ 乾燥，過濾且濃縮。急驟層析(己烷：甲基第三丁基醚 1:1 → 100% 甲基第三丁基醚)後，獲得呈熔點為 161°C (E/Z 約 1:3) 之無色固體(158 mg, 9%) 形式之 E/Z 異構體混合物的標題化合物。

實例 2：2-(5-苄基-1,4-二甲基-5-烯丙基-3,6-二側氧基-亞

哌啶-(Z)-2-基甲基)-苯甲腈

於0℃下，將氫化鈉(45 mg，60%純，約1.1 mmol)添加至DMF(10 ml)中之來自實例1.7之2-(5-苄基-1,4-二甲基-3,6-二側氧基亞哌啶-2-基甲基)苯甲腈(0.3 g，0.87 mmol)中。將混合物於0℃下攪拌1 h，且隨後添加溴化烯丙基(250 mg，2.1 mmol)。將反應混合物於0℃下攪拌1 h且於室溫下攪拌1 h，且隨後用水(50 ml)中止。用第三丁基甲基醚重複萃取水性反應混合物。將所獲得之有機相用水洗滌，經硫酸鈉乾燥，過濾且濃縮。藉由管柱層析純化後，此產生呈熔點為123℃之無色固體狀之標題化合物(173 mg，52%)。

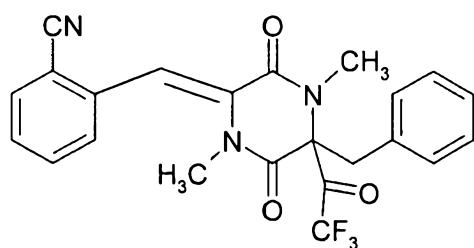
HPLC-MS [m/z]：386.4 [M+1]⁺。

實例3：2-(5-苄基-1,4-二甲基-5-甲基磺基-3,6-二側氧基-亞哌啶-(Z)-2-基甲基)苯甲腈

將二水合鎢酸鈉(10 mg，0.03 mmol)及冰乙酸(3 ml)添加至來自實例1之2-(5-苄基-1,4-二甲基-5-甲基硫基-3,6-二側氧基亞哌啶-2-基甲基)苯甲腈(Z異構體，90 mg，0.23 mmol)中。隨後於室溫下逐滴添加過氧化氫(60 mg，30%濃度溶液，0.53 mmol)，且將混合物攪拌隔夜。隨後添加水，且用碳酸氫鈉中和反應混合物。用乙酸乙酯萃取混合物三次，且用飽和硫代硫酸鈉溶液洗滌有機相直至除去過氧化物且用水萃取三次。乾燥有機相及濃縮之後，使所獲得之殘餘物經受急驟層析(己烷：甲基第三丁基醚1:1→100%甲基第三丁基醚)，產生呈黃色固體狀之標題化

合物 (20 mg, 21%)。

實例 4：2-[5-三氟乙醯基-5-苄基-1,4-二甲基-3,6-二側氧基
亞哌啶-(Z)-2-基甲基]苯甲腈



於 0°C 下及於氬氣氛下，將 LHMDs (1.06 M 於 THF 中，1.5 ml, 1.6 mmol) 緩慢逐滴添加至於 10 ml 無水 THF 中之來自實例 1.7 之 2-(5-苄基-1,4-二甲基-3,6-二側氧基亞哌啶-2-基甲基)苯甲腈 (Z 異構體，300 mg, 0.9 mmol) 中。隨後將混合物攪拌 15 min，且隨後逐滴添加三氟乙酸酐 (1 g, 4.8 mmol)。將混合物於 0°C 下攪拌 1 h 且於室溫下攪拌隔夜。添加甲基第三丁基醚，且將反應混合物用水萃取三次，乾燥且濃縮。使所獲得之殘餘物經受急驟層析 (己烷：甲基第三丁基醚 1:1 → 100% 甲基第三丁基醚)，產生呈熔點為 54°C 之黃色泡沫狀之標題化合物 (80 mg)。

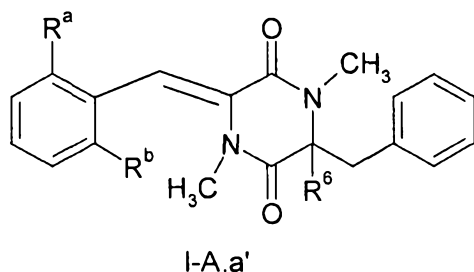
實例 5：2-(5,5-二苄基-1,4-二甲基-3,6-二側氧基-亞哌啶-(Z)-2-基甲基)-苯甲腈

於 0°C 下，將氫化鈉 (45 mg, 60% 純，約 1.1 mmol) 添加至於 DMF (10 ml) 中之來自實例 1.7 之 2-(5-苄基-1,4-二甲基-3,6-二側氧基亞哌啶-2-基甲基)苯甲腈 (Z 異構體，0.3 g, 0.9 mmol) 中。將混合物於 0°C 下攪拌 1 h，且隨後添加苄基溴 (350 mg, 2 mmol)。將反應混合物於 0°C 下攪拌 1 h 且於

室溫下攪拌48 h，且隨後用水(50 ml)中止。用第三丁基甲基醚萃取水性反應混合物三次。將所得有機相用水洗滌三次，經硫酸鈉乾燥，過濾且濃縮。藉由急驟層析(己烷：乙酸乙酯3:1)純化後，此產生呈熔點為175°C之黃色固體狀之標題化合物(182 mg，46%)。

彙集於表B中之式I-A.a'化合物之製備(實例6、7、8、9、10及11a/11b)洗類似於上文所示之實例1a/1b、2、3、4或5來進行。

表B：通式I-A.a'之化合物，其中R^c及R^d各自為氫且R¹為甲基。



實例	R ^a	R ^b	R ⁶	RT HPLC/MS及/或m.p.	異構體*
1a	CN	H	SCH ₃	3.311 min ; m/z=414.0 [M+Na] ⁺	異構體1
1b	CN	H	SCH ₃	3.275 min ; m/z=414.0 [M+Na] ⁺	異構體2
2	CN	H	CH-CH=CH ₂	3.227 min ; m/z=386.4 [M+H] ⁺ 123°C	Z異構體
3	CN	H	-SO ₂ CH ₃	3.286 min ; m/z=446.0 [M+Na] ⁺	Z異構體
4	CN	H	-C(O)CF ₃	3.280 min ; m/z=441.9 [M+H] ⁺ /54°C	Z異構體
5	CN	H	苄基	175°C	Z異構體
6	CN	H	2-丙炔基	3.252 min ; m/z=385 [M+H] ⁺	Z異構體
7	NO ₂	H	2-丙炔基	3.366 min ; m/z=403.9 [M+H] ⁺	Z異構體

實例	R ^a	R ^b	R ⁶	RT HPLC/MS及/或m.p.	異構體*
8	Br	OCH ₃	COOCH ₃	2.673 min ; m/z=414 [M+H] ⁺	Z異構體
9	CN	H	CH ₂ NHCOCH ₃	2.716 min ; m/z=417.1 [M+H] ⁺	Z異構體
10	CN	H	OCH ₃	2.692 min ; m/z=375.8 [M] ⁺	Z異構體
11a	CN	H	COOCH ₃	5.390 min **); m/z=404.07 [M+H] ⁺	Z異構體
11b	CN	H	COOCH ₃	6.075 min **); m/z=404.07 [M+H] ⁺	E異構體

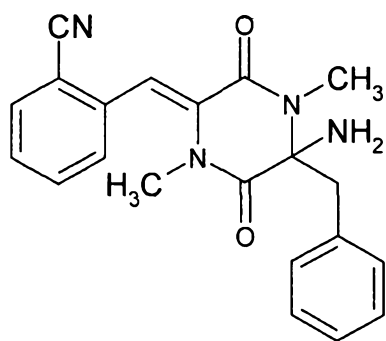
*)此說明係指哌啶骨架處之雙鍵的立體化學；異構體1或異構體2為未指定構型的基本上純之異構體。

**)HPLC管柱：RP-18管柱(來自Waters之XTerra MS 5 mm)，溶離劑：乙腈+0.1%甲酸(A)/水+0.1%甲酸(B)。梯度：在8分鐘內5:95(A/B)至100:0(A/B)，於室溫下。

MS：四極電噴霧電離，80 V(陽離子模式)

m.p.熔點

實例 12：2-[5-胺基-5-苄基-1,4-二甲基-3,6-二側氧基亞哌啶-(2Z)-基甲基]-苯甲腈



於-30℃下，將六甲基二矽氮烷鉀(KHMDS)於甲苯(11.6 ml, 5.8 mmol)中之0.5 M溶液逐滴添加至來自實例1.7之2-[5-苄基-1,4-二甲基-3,6-二側氧基亞哌啶-(2Z)-基甲基]苯甲腈(2 g, 5.8 mmol)於無水THF(23 ml)及1,3-二甲基-3,4,5,6-

四氫-2(1H)-嘧啶酮(DMPU)(34 ml)中之混合物中。將反應混合物於-30℃下攪拌3小時。隨後添加2,4,6-三異丙基苯磺醯基疊氮化物(2.3 g, 7.4 mmol)於THF(10 ml)中之溶液。將反應混合物於-30℃下再攪拌3小時且隨後使其溫至室溫。添加磷酸鹽緩衝溶液(pH=7, 50 ml)且隨後用CH₂Cl₂重複萃取混合物。將所獲得之有機相經Na₂SO₄乾燥，過濾且於減壓下除去溶劑。將所獲得之粗疊氮化物在不經進一步純化之情況下即用於下一步驟中。

將疊氮化物於DMPU及10% Pd/C(22 mg)中之混合物用乙醇(20 ml)稀釋且於氫氣氛下於室溫下攪拌12 h。將反應混合物經由矽藻土過濾，將濾液於減壓下除去溶劑，將所獲得之固體用甲醇攪拌且隨後過濾。管柱層析(矽膠，己烷/乙酸乙酯)後，獲得710 mg量之2-[5-胺基-5-苄基-1,4-二甲基-3,6-二側氧基亞哌啶-(2Z)-基甲基]苯甲腈(35%產率，基於兩個步驟)。

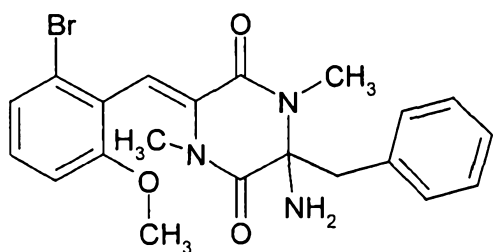
RT HPLC-MS: 4.050 [m/z]: 344.1 [M-NH₃+H]⁺

HPLC管柱: RP-18管柱(來自Waters之XTerra MS 5 mm),

溶離劑: 乙腈+0.1%甲酸(A)/水+0.1%甲酸(B)。梯度: 在8分鐘內5:95(A/B)至100:0(A/B)，於室溫下。

MS: 四極電噴霧電離, 80 V(陽離子模式)

實例 13:



標題化合物之製備係類似於實例12來進行。

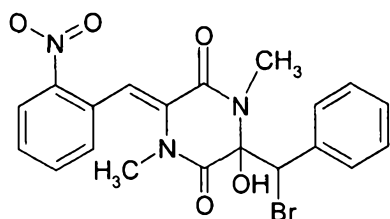
HPLC-MS RT: 5.551 min; $m/z=427.1$ $[M-NH_3+H]^+$

HPLC管柱: RP-18管柱(來自 Waters之 XTerra MS 5 mm),

溶離劑: 乙腈+0.1%甲酸(A)/水+0.1%甲酸(B)。梯度: 在8分鐘內 5:95(A/B)至 100:0(A/B), 於室溫下。

MS: 四極電噴霧電離, 80 V(陽離子模式)

實例 14: 3-(溴-苯基-甲基)-3-羥基-1,4-二甲基-6-[1-(2-硝基苯基)-次甲-(Z)-基]哌啶-2,5-二酮



14.1 1,4-二乙醯基-3-[1-苯基-次甲-(Z)-基]哌啶-2,5-二酮

將苯甲醛(0.03 mol)及 Cs_2CO_3 (0.03 mol)添加至 1,4-二乙醯基-哌啶-2,5-二酮(0.06 mol)於二甲基甲醯胺(DMF)(100 ml)中之溶液中。將反應混合物於室溫下攪拌 36 h, 隨後引入檸檬酸(10 g)於水(500 ml)中之溶液中且用 CH_2Cl_2 重複萃取。將所獲得之有機相合併, 用水洗滌, 經 Na_2SO_4 乾燥, 過濾且於減壓下除去溶劑以獲得標題化合物。

14.2 3-[1-(2-硝基苯基)-次甲-(Z)-基]-6-[1-苯基次甲-(Z)-基]-哌啶-2,5-二酮

將 2-硝基苯甲醛 (3.8 g, 0.037 mol) 及 K_2CO_3 (5.2 g, 0.037 mol) 添加至 1,4-二乙醯基-3-[1-苯基-次甲-(Z)-基] 哌啶-2,5-二酮 (7.17 g, 0.025 mol) 於 DMF (100 ml) 中之溶液中。將反應混合物於室溫下攪拌隔夜，添加檸檬酸飽和水溶液且用乙酸乙酯重複萃取混合物。將有機相合併，用水洗滌，經 Na_2SO_4 乾燥，過濾且於減壓下除去溶劑。獲得 3.4 g 量 (產率 41%) 之呈異構體混合物之 3-[1-(2-硝基苯基)-次甲-(Z)-基]-6-[1-苯基次甲-(Z)-基]-哌啶-2,5-二酮且在未經進一步純化之情況下即將其用於下一步驟中。

HPLC-MS [m/z]: 336.2 [M+H]⁺。

14.3 1,4-二甲基-3-[1-(2-硝基苯基)-次甲-(Z)-基]-6-[1-苯基-次甲-(Z)-基]-哌啶-2,5-二酮

於 0°C 下，將 NaH (0.4 g, 60%, 0.01 mol) 添加至 3-[1-(2-硝基苯基)-次甲-(Z)-基]-6-[1-苯基次甲-(Z)-基]-哌啶-2,5-二酮 (1.67 g, 0.005 mol) 於 DMF (30 ml) 中之溶液中。將反應混合物於 0°C 下攪拌 4 h 且隨後添加碘代甲烷 (2.13 g, 0.015 mol)。將反應混合物於室溫下再攪拌 18 小時，添加檸檬酸飽和水溶液且用乙酸乙酯重複萃取混合物。將有機相合併，用水洗滌，經 Na_2SO_4 乾燥，過濾且於減壓下除去溶劑。管柱層析 (RP, 甲醇/水, 7:3) 後，獲得 0.45 g 量 (產率 24%) 之 1,4-二甲基-3-[1-(2-硝基苯基)-次甲-(Z)-基]-6-[1-苯基-次甲-(Z)-基]-哌啶-2,5-二酮。HPLC-MS [m/z]: 364.1 [M+H]⁺。

14.4 3-(溴-苯基-甲基)-3-羥基-1,4-二甲基-6-[1-(2-硝基苯

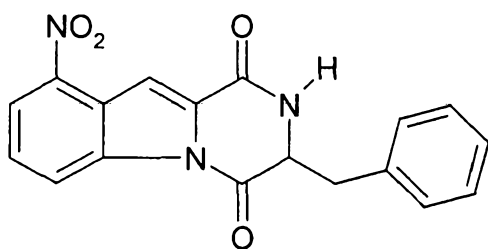
基)-次甲-(Z)-基]哌啶-2,5-二酮

將 1,4-二甲基-3-[1-(2-硝基苯基)-次甲-(Z)-基]-6-[1-苯基-次甲-(Z)-基]-哌啶-2,5-二酮 (0.156 g, 0.00043 mol) 與 N-溴代丁二醯亞胺 (NBS, 0.078 g, 0.0004 mol) 於二噁烷 (10 ml) 中之混合物於室溫下攪拌 18 h。將溶液於減壓下除去溶劑，將殘餘物溶解於乙酸乙酯中且用水洗滌數次。將有機相經 Na_2SO_4 乾燥，過濾且於減壓下除去溶劑。獲得呈異構體混合物 (1:1) (0.191 g, 96%) 之 3-(溴-苯基-甲基)-3-羥基-1,4-二甲基-6-[1-(2-硝基苯基)-次甲-(Z)-基]哌啶-2,5-二酮。使用管柱層析 (矽膠，己烷/乙酸乙酯，2:1) 純化得到化合物 14a 及 14b。

化合物 14a: RT HPLC/MS: 3.055 min; $m/z=462.0$ $[\text{M}+\text{H}]^+$

化合物 14b: RT HPLC/MS: 3.115 min; $m/z=462.0$ $[\text{M}+\text{H}]^+$

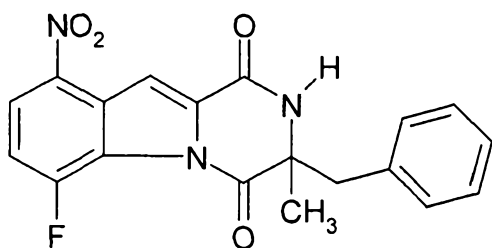
實例 15:



將 0.42 g 3-苄基-6-(2-溴-6-硝基亞苄基)哌啶-2,5-二酮與 0.18 g CuCN 於 10 ml NMP 中之混合物於 140°C 下攪拌 18 h。使反應混合物冷卻且引入 250 ml 乙酸乙酯中。用水萃取混合物 5 次且將有機相經硫酸鈉乾燥，過濾且濃縮。藉由急驟層析 (甲基第三丁基醚) 純化粗產物產生黃色固體 (0.11 g)。

RT HPLC/MS : 2.956 min ; $m/z=336.4$ $[M+H]^+$

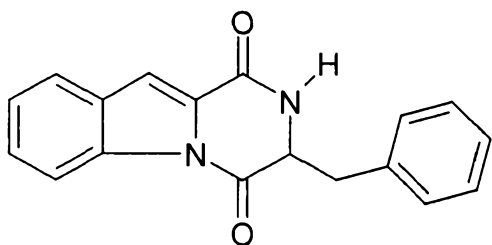
實例 16 :



於 0°C 下，將氫化鈉 (0.26 g, 2.5 當量) 添加至 3-苄基-6-(2,3-二氟-6-硝基亞苄基)吲哚-2,5-二酮 (1 g ; 類似於實例 1.5 製備) 於 DMF (20 ml) 中之混合物中。將混合物於 0°C 下攪拌 1 h，且隨後添加碘代甲烷 (1.8 g)。將反應混合物於 0°C 下攪拌 1 h 且於室溫下攪拌 1 h，且隨後用水 (50 ml) 中止。用第三丁基甲基醚重複萃取水性反應混合物。將所得有機相洗滌，經硫酸鈉乾燥，過濾且濃縮。藉由管柱層析純化後，此產生 0.35 g 標題化合物。

RT HPLC/MS : 3.403 min. , 382.1 $[M+H]^+$

實例 17 :

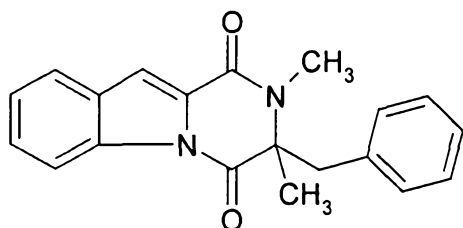


將 CuCN (0.54 g) 添加至於 NMP (10 ml) 中之來自實例 1.5 之 3-苄基-6-(2-溴亞苄基)吲哚-2,5-二酮 (1.11 g) 中。將反應混合物於 140°C 下攪拌 14 h 且隨後使其冷卻。隨後將反應混合物引入 250 ml 水中。用 CH_2Cl_2 萃取混合物五次。將以此方

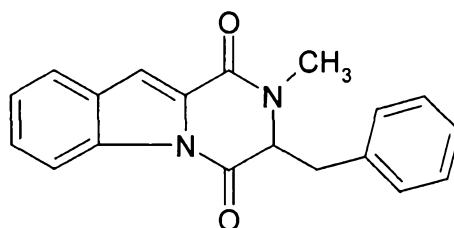
式獲得之有機相用水洗滌兩次，經 Na_2SO_4 乾燥，過濾且濃縮。此產生棕色油狀物(0.6 g)，其在靜置後凝固。熔點： 167°C 。

RT HPLC/MS：2.903 min.，290.9 $[\text{M}+\text{H}]^+$

實例 18



18a



18b

於氫下且於 -15°C 下，將氫化鈉(80 mg，60%純)添加至於5 ml DMF中之來自實例17之化合物(0.32 g)中，將混合物於 -15°C 下攪拌3 h且隨後添加碘代甲烷(1.42 g)。將反應混合物於 -15°C 下攪拌3 h且於室溫下攪拌18 h且隨後引入檸檬酸(1 g)於水(50 ml)中之溶液中。用二氯甲烷萃取水性反應混合物四次。將所獲得之有機相用水洗滌兩次，經硫酸鈉乾燥，過濾且濃縮。藉由急驟層析(甲基第三丁基醚)純化產生標題化合物18a(130 mg)及標題化合物18b(40 mg)。

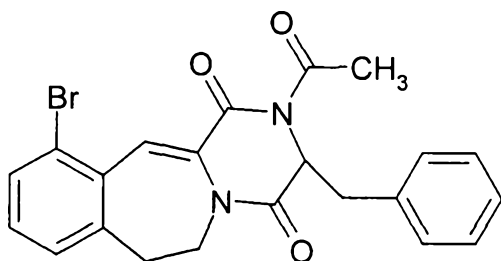
化合物 18a：

RT HPLC/MS：3.339 min.，319.4 $[\text{M}+\text{H}]^+$

化合物 18b：

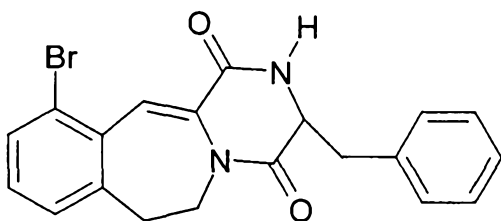
RT HPLC/MS：3.088 min.，304.9 $[\text{M}+\text{H}]^+$

實例 19：



將 K_2CO_3 (9.1 g) 添加至 2-溴-6-乙炔基苯甲醛 (9.9 g) 及來自實例 1.3 之 1,4-二乙醯基-3-苄基哌啶-2,5-二酮 (14.0 g) 於 100 ml DMF 中之混合物中。將反應混合物於室溫下攪拌 12 h，隨後添加水且用 CH_2Cl_2 重複萃取混合物。將以此方式獲得之有機相合併，用水洗滌，經 Na_2SO_4 乾燥且過濾，且於減壓下移除溶劑。藉由管柱層析 (乙酸乙酯：己烷 1:5 $\rightarrow$ 1:1) 純化產生 15.7 g 高度不純之標題化合物。

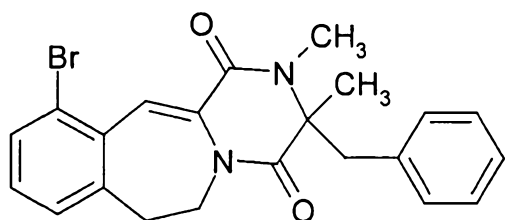
實例 20：



將稀鹽酸 (5% 濃度，150 ml) 添加至 15.7 g 來自實例 19 之化合物於 100 ml THF 中之混合物中。將反應混合物於回流下加熱 8 h 且隨後過濾。濾液產生第一沈澱物，用水及 THF 洗滌該沈澱物。此產生 8.1 g 標題化合物。

RT HPLC/MS：3.032 min.，399.0 $[M+H]^+$

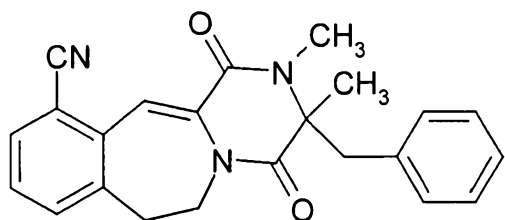
實例 21：



於 0℃ 下，將 NaH(60% 純，0.02 mol) 添加至於 DMF(50 ml) 中之來自實例 20 之化合物(0.01 mol) 中。將混合物於 0℃ 下攪拌 1 h，且隨後添加碘代甲烷(0.1 mol)。將反應混合物於室溫下攪拌 18 h 且隨後引入水(500 ml) 及檸檬酸(5 g) 之溶液中。用 CH₂Cl₂ 重複萃取混合物。將以此方式獲得之有機相用水洗滌，經 Na₂SO₄ 乾燥，過濾且濃縮。用二異丙基醚濕磨產生標題化合物。

RT HPLC/MS：3.447 min.，426.0 [M+H]⁺

實例 22：

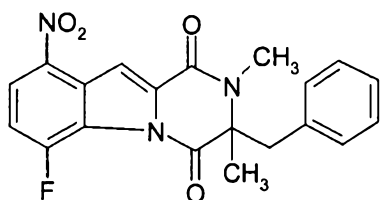


將 0.63 g CuCN(0.007 mol) 添加至於 20 ml NMP 中之來自實例 21 之化合物(1 g) 中。將混合物於 150℃ 下攪拌 18 h 且隨後引入水(50 ml) 及 NaCN(3 g) 之溶液中。用乙酸乙酯重複萃取混合物。將以此方式獲得之有機相用水洗滌，經 Na₂SO₄ 乾燥，過濾且濃縮。藉由管柱層析純化及用二異丙基醚濕磨後，獲得呈熔點為 136-138℃ 之固體狀(0.45 g) 之所需產物。

RT HPLC/MS：3.093 min.，372.1 [M+H]⁺

來自實例 23 至 25 之化合物的製備係類似於上文所示之實例 15 至 22 來進行。

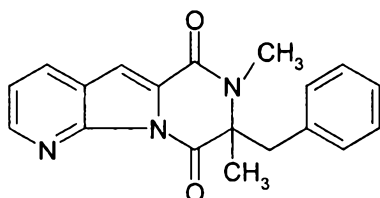
實例 23：



mp. : 170-172°C ; RT HPLC/MS : 3.403 min. ; m/z=382.1

[M+H]

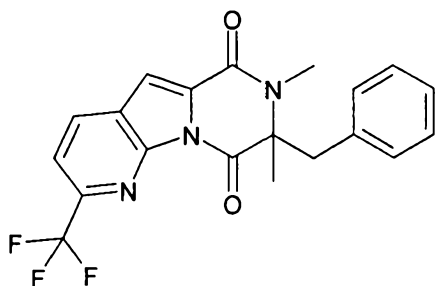
實例 24：



mp. : 180°C ; RT HPLC/MS : 2.514 min. ; m/z=320.0

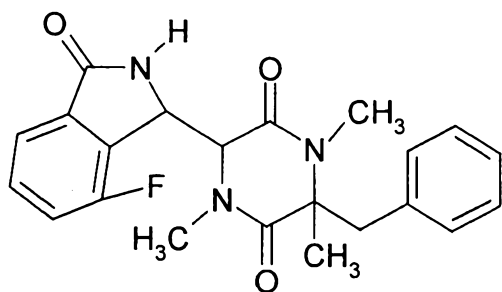
[M+H]⁺

實例 25：



RT HPLC/MS : 3.191 min. ; m/z=388.1 ; [M+H]⁺

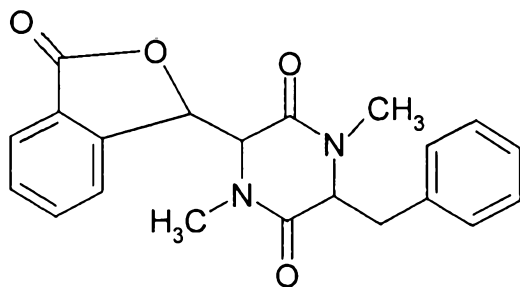
實例 26： 3-苄基-6-(7-氟-3-側氧基-2,3-二氫-1H-異吲哚-1-基)-1,3,4-三甲基-哌啶-2,5-二酮



將 CuCN(8.1 g)添加至於 50 ml NM 中之 3-苄基-6-(2-氟-6-溴亞苄基)-1,4,5-三甲基吡啶-2,5-二酮(19.4 g)(類似於實例 1.6 用過量氫化鈉及碘代甲烷製備)中。將混合物於 150°C 下攪拌 18 h 且隨後引入水(50 ml)及 NaCN(3 g)之溶液中。用乙酸乙酯重複萃取混合物。將以此方式獲得之有機相用水洗滌，經 Na₂SO₄ 乾燥，過濾且濃縮。藉由管柱層析純化及用二異丙基醚濕磨後，獲得呈熔點為 183-185°C 之固體狀的所需產物。

RT HPLC/MS : 2.343 min. , 396.1 [M+H]⁺

實例 27： 3-苄基-1,4-二甲基-6-(3-側氧基-1,3-二氫異苯并呋喃-1-基)-哌咍-2,5-二酮

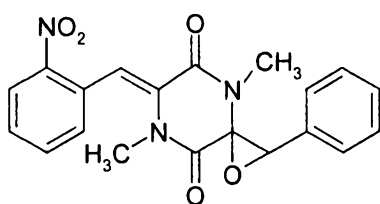


於 -78°C 下，將於 THF 中之二異丙基醯胺鋰 (LDA) (20 ml, 2 莫耳濃度於 THF 中, 0.04 mol) 添加至 1,4-二甲基-3-苄基哌咍-2,5-二酮 (9.30 g, 0.04 mol, 來自實例 1.3) 於 200 ml 無水 THF 中之混合物中。將混合物於 -78°C 下攪拌 5 h, 且隨後經 30 min 之時期添加 2-甲醯基苯甲酸甲酯 (13 g,

0.08 mol)於THF(50 ml)中之溶液。將反應混合物於 -78°C 下攪拌2 h且於室溫下攪拌18 h。將混合物用1%濃度鹽酸溶液酸化且濃縮，且將殘餘物溶於乙酸乙酯中。用碳酸氫鈉溶液洗滌混合物四次，且將有機相經硫酸鈉乾燥並濃縮。用少量丙酮濕磨所獲得之殘餘物，產生熔點為 225°C 之白色固體(0.35 g)。

RT HPLC/MS : 2.448 min. , 365.1 $[\text{M}+\text{H}]^{+}$

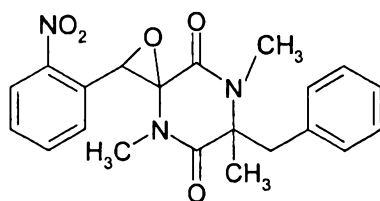
實例 28 :



將來自實例 14 之 3-(溴-苯基-甲基)-3-羥基-1,4-二甲基-6-[1-(2-硝基苯基)-次甲-(Z)-基]哌啶-2,5-二酮 (0.190 g , 0.0004 mol)、三乙胺 (0.5 ml) 及乙酸乙酯 (20 ml) 之混合物回流 4 h。將反應混合物冷卻，用水洗滌，經 Na_2SO_4 乾燥，過濾且於減壓下除去溶劑。藉由管柱層析 (矽膠，己烷/乙酸乙酯，1:1) 純化產生 0.023 g 量 (產率 15%) 之標題化合物。

RT HPLC-MS : 2.466 min. ; $m/z=398.1$ $[\text{M}+\text{H}_2\text{O}]^{+}$ 。

實例 29 :

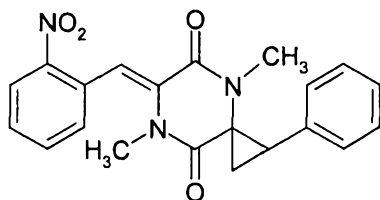


標題化合物之製備係類似於實例28來進行。

RT HPLC/MS : 2.637 min. ; $m/z=395.9$ $[M+H]^+$ 。

實例 30 :

6-[1-(2-硝基苯基)-次甲-(Z)-基]-4,7-二甲基-1-苯基-4,7-二氮雜螺[2.5]辛烷-5,8-二酮

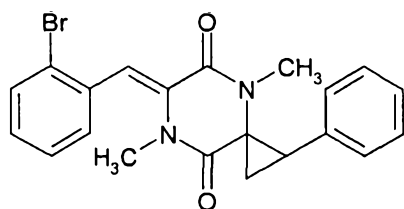


標題化合物之製備係類似於實例1之步驟1.1至1.6，自1-胺基-2-苯基環丙烷甲酸(如自 Davies, Huw M.L.; McAfee, Melinda J.; Oldenburg, Claes E.M. (1989) Journal of Organic Chemistry 54, 930-936所述製備)起始來進行。

mp. : 145°C ; RT HPLC/MS 3.161 min. , $m/z=378.1$ $[M+H]^+$

實例31至34之化合物的製備係類似於實例30來進行。

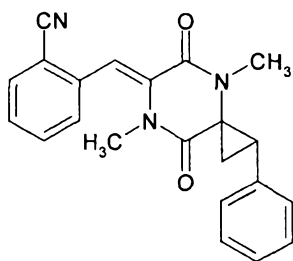
實例 31 :



Z 異構體 ; mp. 78°C ; RT HPLC/MS : 3.555 min. ;

$m/z=413.2$ $[M+H]^+$

實例 32 :

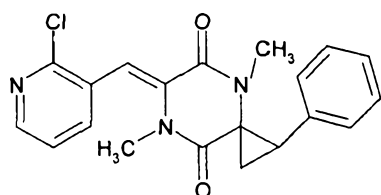


獲得兩種異構體，其中在各自情況下哌啶環處之外雙鍵具有(Z)構型。

(Z)-異構體 1：mp.：190℃；RT HPLC/MS：3.235 min；
m/z=358.2 [M+H]⁺；

(Z)-異構體 2：mp.：184℃；RT HPLC/MS：3.175 min，
m/z=358.2 [M+H]⁺

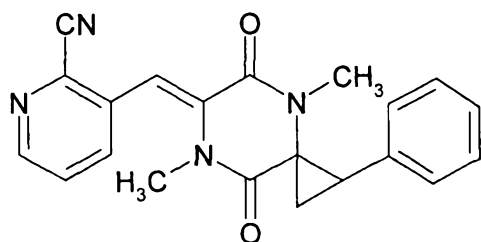
實例 33：



Z 異構體；

mp.：169℃；RT HPLC/MS：2.826 min，m/z=368.0
[M+H]⁺

實例 34：



獲得兩種異構體，其中在各自情況下哌啶環處之外雙鍵具有(Z)構型。

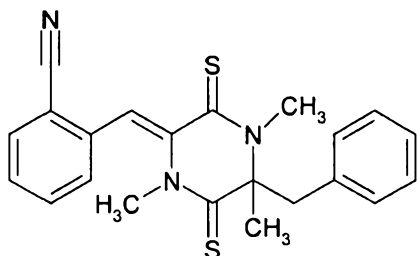
(Z)-異構體 1：mp.：185℃；RT HPLC/MS：2.755 min，

$m/z=359.1$ $[M+H]^+$

(Z)-異構體 2 : mp. : 224°C ; RT HPLC/MS 2.827 min

$m/z=381.1$ $[M+Na]^+$

實例 35 : 2-[5-苄基-1,4,5-三甲基-3,6-二硫酮基亞哌啶-
(2Z)-基甲基]苯甲腈



將來自實例 1.7 之 2-[5-苄基-1,4-二甲基-3,6-二側氧基亞哌啶-(2Z)-基甲基]-苯甲腈 (1.4 g, 3.8 mmol) 與五硫化二磷 (5.12 g, 11.5 mmol) 於甲苯 (40 ml) 中之混合物回流 3.5 h。將反應混合物用乙酸乙酯 (50 ml) 稀釋且經由矽膠過濾。將濾液於減壓下除去溶劑且藉由管柱層析 (矽膠, 己烷/乙酸乙酯) 純化。獲得 505 mg (產率 : 34%) 呈異構體混合物 (兩種異構體) 之標題化合物。

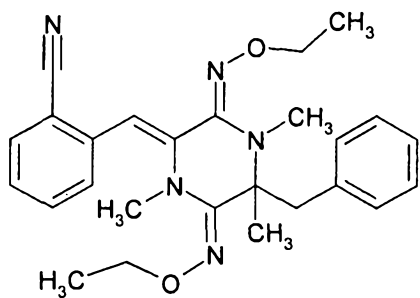
RT HPLC-MS : 3.872 min 及 3.995 min, $[m/z]$: 391.8
 $[M+H]^+$

HPLC 管柱 : RP-18 管柱 (來自 Waters 之 XTerra MS 5 mm),

溶離劑 : 乙腈 + 0.1% 甲酸 (A) / 水 + 0.1% 甲酸 (B)。梯度 : 在 8 分鐘內 5:95 (A/B) 至 100:0 (A/B), 於室溫下。

MS : 四極電噴霧電離, 80 V (陽離子模式)

實例 36 : 2-[5-苄基-3,6-雙[乙氧基亞胺基]-1,4,5-三甲基亞哌啶-(2Z)-基甲基]-苯甲腈



將來自實例35之2-[5-苄基-1,4,5-三甲基-3,6-二硫酮基亞
 哌啶-(2Z)-基甲基]-苯甲腈(0.21 g, 0.5 mmol)、O-乙基羥
 基胺鹽酸鹽(0.17 g, 1.7 mmol)、乙酸汞(II)(0.38 g, 1.2
 mmol)及二異丙基乙胺(0.9 g, 7.0 mmol)於乙腈(15 ml)中
 之混合物於室溫下攪拌24 h。再次添加O-乙基羥基胺鹽酸
 鹽(0.17 g, 1.7 mmol)、乙酸汞(II)(0.38 g, 1.2 mmol)及二
 異丙基乙胺(0.9 g, 7.0 mmol)且將反應混合物再攪拌24小
 時。隨後添加三氯甲烷(20 ml)及飽和NH₄Cl水溶液(20
 ml)。將混合物過濾且用三氯甲烷重複萃取水相。將有機
 相合併，用水洗滌，經Na₂SO₄乾燥，過濾且於減壓下除去
 溶劑。藉由管柱層析(矽膠，己烷/乙酸乙酯)純化後，獲得
 147 mg(產率：61%)呈異構體混合物(三種異構體)之標題
 化合物。

HPLC-MS RT : 8.483 min , 8.271 min , 8.030 min ;

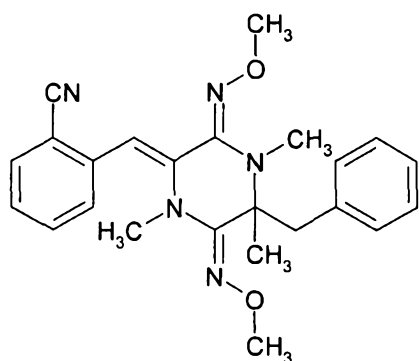
[m/z] : 446.2 [M+H]⁺

HPLC管柱：RP-18管柱(來自Waters之XTerra MS 5 mm)，

溶離劑：乙腈+0.1%甲酸(A)/水+0.1%甲酸(B)。梯度：在8
 分鐘內5:95(A/B)至100:0(A/B)，於室溫下。

MS：四極電噴霧電離，80 V(陽離子模式)

實例 37：



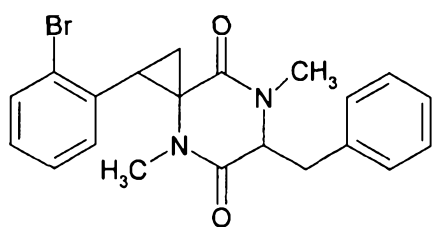
標題化合物之製備係類似於實例 36 來進行。

兩種異構體；RT HPLC MS：7.617 min 及 7.335 min；
m/z=418.2 [M+H]⁺

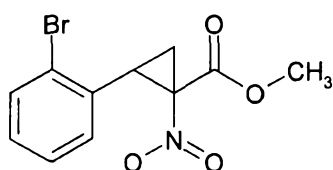
HPLC 管柱：RP-18 管柱 (來自 Waters 之 XTerra MS 5 mm)，溶離劑：乙腈 + 0.1% 甲酸 (A) / 水 + 0.1% 甲酸 (B)。梯度：在 8 分鐘內 5:95 (A/B) 至 100:0 (A/B)，於室溫下。

MS：四極電噴霧電離，80 V (陽離子模式)

實例 38：6-苄基-1-(2-溴苯基)-4,7-二甲基-4,7-二氮雜螺 [2.5] 辛烷-5,8-二酮



38.1 2-(2-溴苯基)-1-硝基環丙烷甲酸甲酯



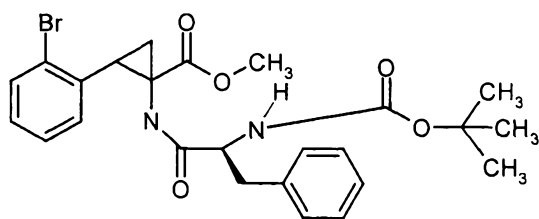
於室溫下將重氮硝基乙酸甲酯 (如 O'Bannon, P.E.; Dailey,

W.P., Tetrahedron, 1990, 46(21), 7341-7358 中所述製備) (11.9 g, 0.82 mol) 緩慢添加至 2-溴苯乙烯 (15 g, 0.82 mol) 與四乙酸二銻(II) (0.5 g, 0.001 mol) 於 CH_2Cl_2 (500 ml) 中之混合物中。將反應混合物於室溫下攪拌 1 h 且隨後於減壓下除去溶劑。藉由管柱層析 (矽膠, 己烷/乙酸乙酯, 20:1) 純化後, 獲得 11.3 g 量 (產率 46%) 之呈油狀物之 2-(2-溴苯基)-1-硝基環丙烷甲酸甲酯。HPLC-MS $[m/z]$: 301.1 $[M+H]^+$

38.2 1-胺基-2-(2-溴苯基)-環丙烷甲酸甲酯

於室溫下將稀鹽酸 (5% 濃度, 450 ml) 及鋅粉 (77 g, 1.18 mol) 逐份添加至 2-(2-溴苯基)-1-硝基環丙烷甲酸甲酯 (17.6 g, 0.59 mol) 於異丙醇 (450 ml) 中之混合物中。將反應混合物於室溫下攪拌 30 min 且隨後添加飽和碳酸氫鈉水溶液以用於中和。將沈澱固體經由矽膠吸乾且用乙酸乙酯重複洗滌。將有機相合併, 用水洗滌, 經 Na_2SO_4 乾燥, 過濾且於減壓下除去溶劑。藉由管柱層析 (矽膠, 己烷/乙酸乙酯, 1:1) 分離所獲得之異構體混合物。獲得 3.10 g (產率 20%) 順式異構體及 7.1 g (產率 45%) 反式異構體。

38.3 2-(2-溴苯基)-1-(1-第三丁氧基羰基胺基-2-苯基-乙氧基羰基胺基)-環丙烷甲酸甲酯



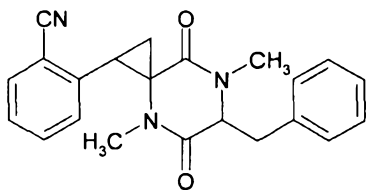
將於CH₂Cl₂(75 ml)中之1-胺基-2-(2-溴苯基)-環丙烷甲酸甲酯(3 g, 0.011 mol)、Boc-L-苯丙胺酸(3.15 g, 0.012 mol)、六氟磷酸O-(7-氮雜苯并三唑-1-基)-N,N,N',N'-四甲基鏽(HATU)(4.35 g, 0.014 mol)及二異丙基乙胺(4.5 g, 0.035 mol)於室溫下攪拌隔夜且隨後添加飽和檸檬酸水溶液。用乙酸乙酯重複萃取混合物。將有機相合併，用水洗滌，經Na₂SO₄乾燥，過濾且於減壓下除去溶劑。獲得5.7 g (產率：99%)呈明亮油狀物之標題化合物。

此合成之剩餘步驟係類似於實例1來進行。

獲得四種異構體；

RT HPLC MS：2.936 min；3.117 min；2.879 min；2.874 min；m/z=414.7 [M+H]⁺

實例39：



標題化合物之製備係類似於實例1.7，自實例38之化合物起始來進行。

獲得四種異構體：RT HPLC MS：2.500 min；2.511 min；2.690 min；2.689 min；m/z=359.8 [M+H]⁺

部分B：使用實例

式I化合物之除草活性係藉由下列溫室實驗來證明：

所用之培養容器為含有具有約3.0%腐殖質作為基質之壤質砂土的塑膠花盆。對於每一物種而言，將測試植物之種

子分開播種。

對於萌芽前處理而言，在藉助於精細分配噴嘴播種後直接施用已懸浮或乳化於水中之活性成份。緩和澆灌該等容器以促進發芽及生長，且隨後用透明塑料罩覆蓋直至植物生根。除非已受到活性成份損害，否則此覆蓋使得測試植物均勻發芽。

對於萌芽後處理而言，首先視植物習性而定使測試植物生長至3至15 cm之高度，且隨後僅用已懸浮或乳化於水中之活性成份來處理。為此目的，直接將測試植物播種且使其生長於相同容器中，或使其首先作為秧苗分開生長且在處理之前數天移植至測試容器中。

視物種而定，將植物保持於10-25℃或20-35℃下。測試期延續2至4週。在此期間，照料該等植物且評估其對個別處理之反應。

使用0至100之等級進行評估。100意謂植物未發芽，或至少地面以上部分完全破壞，且0意謂無損害，或生長正常進行。給與良好除草活性為至少70之值且給與極好除草活性為至少85之值。

該等溫室實驗中所用之植物屬於以下物種：

Bayer代碼	學名	通用名稱
APESV	阿披拉草(<i>Apera spica-venti</i>)	知風草
SETFA	法式狗尾草(<i>Setaria faberi</i>)	穀莠子

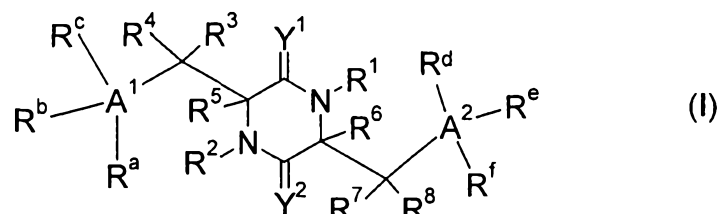
藉由萌芽前方法以0.5 kg/ha之施用率施用之實例1a/1b(Z/E異構體混合物，Z/E比率=3:1)及4的化合物展示

抵抗 APESV 之良好至極好的除草活性。藉由萌芽前方法以 1.0 kg/ha 之施用率施用之實例 2 的化合物展示抵抗 APESV 之極好除草活性。

藉由萌芽前方法以 1.0 kg/ha 之施用率施用之實例 2 的化合物展示抵抗 SETFA 之良好除草活性。藉由萌芽前方法以 0.5 kg/ha 之施用率施用之實例 4 的化合物展示抵抗 SETFA 之良好除草活性。

五、中文發明摘要：

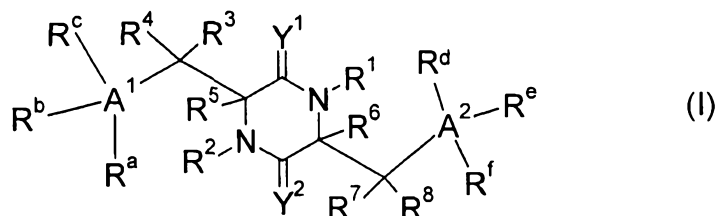
本發明係關於下文所定義之通式I之哌啶化合物及其作為除草劑之用途。此外，本發明係關於用於作物保護之組合物及一種控制不良植被之方法。



在式I中， A^1 、 A^2 彼此獨立地為芳基或雜芳基，其中 R^a 在 A^1 之連接點的鄰位處連接至 A^1 之碳原子或氮原子， Y^1 、 Y^2 為氧、硫或基團 NR^{y1} ，且變數 R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、 R^e 、 R^f 、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 及 R^8 具有申請專利範圍及說明書中所提及之含義。

六、英文發明摘要：

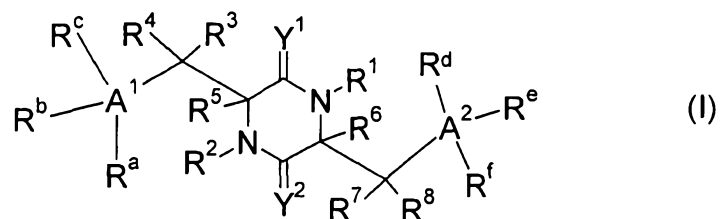
The present invention relates to piperazine compounds of the general formula I defined below and to their use as herbicides. Moreover, the invention relates to compositions for crop protection and to a method for controlling unwanted vegetation.



In formula I, A^1 , A^2 independently of one another are aryl or heteroaryl, where R^a is attached in the ortho-position to the point of attachment of A^1 to a carbon atom or a nitrogen atom of A^1 , Y^1 , Y^2 are oxygen, sulfur or a group NR^{y1} , and the variables R^a , R^b , R^c , R^d , R^e , R^f , R^1 , R^2 , R^3 , R^4 , R^5 , R^6 , R^7 and R^8 have the meanings mentioned in the claims and the description.

十、申請專利範圍：

1. 一種式I之嘓咩化合物：



其中：

A^1 、 A^2 彼此獨立地為芳基或雜芳基，其中 R^a 在 A^1 之連接點的鄰位處連接至 A^1 之碳原子或氮原子；

Y^1 為氧、硫或基團 NR^{y1} ，其中 R^{y1} 係選自由氫、 C_1 - C_6 烷基、 C_3 - C_6 烯基、 C_3 - C_6 炔基、 C_3 - C_6 環烷基、 C_3 - C_6 環烷基甲基、OH、 C_1 - C_6 烷氧基、 C_3 - C_6 烯氧基、 C_3 - C_6 炔氧基、 C_3 - C_6 環烷氧基及 C_3 - C_6 環烷基甲氧基組成之群；

Y^2 為氧、硫或基團 NR^{y2} ，其中 R^{y2} 係選自由氫、 C_1 - C_6 烷基、 C_3 - C_6 烯基、 C_3 - C_6 炔基、 C_3 - C_6 環烷基、 C_3 - C_6 環烷基甲基、OH、 C_1 - C_6 烷氧基、 C_3 - C_6 烯氧基、 C_3 - C_6 炔氧基、 C_3 - C_6 環烷氧基及 C_3 - C_6 環烷基甲氧基組成之群；

其中該等取代基 Y^1 及 Y^2 之上文所提及之脂族或環狀部分係未經取代或可部分或完全經鹵化及/或可帶有以下基團中之一至三者：氰基、羥基、 C_1 - C_4 烷基、 C_1 - C_4 鹵烷基、 C_3 - C_6 環烷基、 C_1 - C_4 烷氧基、 C_1 - C_4 烷硫基、二- $(C_1$ - C_4 烷基)-胺基、 C_1 - C_4 烷基羰基、羥基羰基、 C_1 - C_4 烷氧

羰基、胺基羰基、 C_1 - C_4 烷基胺基羰基、二-
(C_1 - C_4 烷基)胺基羰基或 C_1 - C_4 烷基羰氧基；

R^a

係選自由以下各基組成之群：鹵素、氰基、硝基、 SF_5 、 C_1 - C_6 烷基、 C_3 - C_6 環烷基、 C_2 - C_6 烯基、 C_5 - C_8 環烯基、 C_5 - C_8 環炔基、 C_3 - C_6 環烷基-(C_1 - C_6)烷基、 C_5 - C_8 環烯基-(C_1 - C_6)烷基、 C_5 - C_8 環炔基-(C_1 - C_6)烷基、 C_3 - C_6 環烷基-(C_2 - C_6)烯基、 C_5 - C_8 環烯基-(C_2 - C_6)烯基、 C_5 - C_8 環炔基-(C_2 - C_6)-烯基、 C_3 - C_6 環烷基-(C_2 - C_6)炔基、 C_5 - C_8 環烯基-(C_2 - C_6)炔基、 C_5 - C_8 環炔基-(C_2 - C_6)炔基、 C_4 - C_{10} 二烯基、 C_2 - C_6 炔基、[三-(C_1 - C_6)烷基矽烷基]-(C_2 - C_6)炔基、三-(C_1 - C_6)烷基矽烷基、 C_7 - C_8 環炔基、芳基、苯基-(C_1 - C_6)烷基、苯基-(C_2 - C_6)烯基、苯基-(C_2 - C_6)炔基、苯磺醯基-(C_1 - C_6)烷基、雜環基、雜環基-(C_1 - C_6)烷基、雜環基-(C_2 - C_6)烯基、雜環基-(C_2 - C_6)炔基、苯基-[C_1 - C_6 烷氧羰基]-(C_1 - C_6)烷基、 $Z^1P(O)(OR^9)_2$ 、 $Z^1P(O)(OR^9)(R^{9a})$ 、 $Z^2B(OR^{10})_2$ 、 Z^3COR^{11} 、 $Z^4NR^{12}R^{13}$ 、 $Z^5CH=N-O-R^{14}$ 、 Z^6OR^{15} 、 Z^7SR^{16} 、 $Z^7S(O)R^{16}$ 及 $Z^7SO_2R^{16}$ ；

其中該取代基 R^a 之上文所提及之脂族、環狀或芳族部分係未經取代或可部分或完全經鹵化及/或可帶有以下基團中之一至三者：氰基、羥基、 C_1 - C_4 烷基、 C_1 - C_4 鹵烷基、 C_3 - C_6 環烷基、

C₁-C₄烷基氧基、C₁-C₄烷基硫基、二-(C₁-C₄烷基)-胺基、C₁-C₄烷基羰基、羥基羰基、C₁-C₄烷基氧羰基、胺基羰基、C₁-C₄烷基胺基羰基、二-(C₁-C₄烷基)胺基羰基或C₁-C₄烷基羰氧基；

R^b、R^c、R^d、R^e及R^f各自彼此獨立地為氫或具有關於R^a所給含義中之一者；且

其中連接至A¹之相鄰環原子的兩個基團R^a、R^b或R^c或連接至A²之相鄰環原子的兩個基團R^d、R^e或R^f亦可為直鏈C₃-C₆伸烷基，其可部分或完全經鹵化且可帶有以下基團中之一至三者：氰基、羥基、C₁-C₄烷基、C₁-C₄鹵烷基、C₃-C₆環烷基、C₁-C₄烷基氧基、C₁-C₄烷基硫基、二-(C₁-C₄烷基)-胺基、C₁-C₄烷基羰基、羥基羰基、C₁-C₄烷基氧羰基、胺基羰基、C₁-C₄烷基胺基羰基、二-(C₁-C₄烷基)胺基羰基或C₁-C₄烷基羰氧基，其中C₃-C₆伸烷基中之CH₂基團可由羰基、硫羰基或磺醯基置換且其中C₃-C₆伸烷基中之一或兩個非相鄰CH₂基團可在各自情況下由氧、硫或基團NR³⁴置換，其中R³⁴具有關於R¹²所給含義中之一者；

R¹及R²彼此獨立地選自由以下各基組成之群：

氰基、C₁-C₆烷基、C₃-C₆環烷基、C₃-C₆烯基、C₅-C₈環烯基、C₃-C₆炔基、C₇-C₈環炔基、C₃-C₆環烷基-(C₁-C₆)烷基、C₅-C₈環烯基-(C₁-C₆)烷

基、 C_5-C_8 環炔基- (C_1-C_6) 烷基、 C_3-C_6 環烷基- (C_2-C_6) 烯基、 C_5-C_8 環烯基- (C_2-C_6) 烯基、 C_5-C_8 環炔基- (C_2-C_6) -烯基、 C_3-C_6 環烷基- (C_2-C_6) 炔基、 C_5-C_8 環烯基- (C_2-C_6) 炔基、 C_5-C_8 環炔基- (C_2-C_6) 炔基、苯基、苯基- (C_1-C_6) 烷基、苯基- (C_2-C_6) 烯基、苯基- (C_2-C_6) 炔基、雜環基、雜環基- (C_1-C_6) 烷基、雜環基- (C_2-C_6) 烯基、雜環基- (C_2-C_6) 炔基、苯基- $[C_1-C_6$ 烷氧羰基]- (C_1-C_6) 烷基、 $C(O)R^{21}$ 、 $NR^{22}R^{23}$ 、 OR^{24} 、 SR^{24} 、 $S(O)R^{25}$ 、 SO_2R^{25} 及 $Si(R^{25a})_3$ ；

其中 R^1 可另外為氫且

其中該等取代基 R^1 及 R^2 之上文所提及之脂族、環狀或芳族部分彼此獨立地未經取代或可部分或完全經鹵化及/或可帶有以下基團中之一至三者：氰基、羥基、 C_1-C_4 烷基、 C_1-C_4 鹵烷基、 C_3-C_6 環烷基、 C_1-C_4 烷氧基、 C_1-C_4 烷硫基、二- $(C_1-C_4$ 烷基)-胺基、 C_1-C_4 烷基羰基、羥基羰基、 C_1-C_4 烷氧羰基、胺基羰基、 C_1-C_4 烷基胺基羰基、二- $(C_1-C_4$ 烷基)胺基羰基或 C_1-C_4 烷基羰氧基；

R^3 為鹵素、氰基、硝基或基團 R^{26} 、 OR^{27} 、 SR^{28} 、 $S(O)R^{28}$ 、 SO_2R^{28} 、 $NR^{29}R^{30}$ 或 $N(OR^{31})R^{32}$ ；

R^4 為氫、鹵素、氰基、 C_1-C_6 烷基、 C_3-C_6 環烷基、 C_2-C_6 烯基、 C_5-C_8 環烯基、 C_2-C_6 炔基、

C_5-C_8 環炔基、苯基、苯基- (C_1-C_6) 烷基、雜環基、雜環基- (C_1-C_6) 烷基、苯基- $[C_1-C_6$ 烷氧羰基]- (C_1-C_6) 烷基或基團 COR^{21} 、 OR^{27} 、 SR^{28} 、 $S(O)R^{28}$ 、 SO_2R^{28} 、 $NR^{29}R^{30}$ 或 $N(OR^{31})R^{32}$ ；

其中該取代基 R^4 之上文所提及之脂族、環狀或芳族部分彼此獨立地未經取代或可部分或完全經鹵化及/或可帶有以下基團中之一至三者：氰基、羥基、 C_1-C_4 烷基、 C_1-C_4 鹵烷基、 C_3-C_6 環烷基、 C_1-C_4 烷氧基、 C_1-C_4 烷硫基、二- $(C_1-C_4$ 烷基)-胺基、 C_1-C_4 烷基羰基、羥基羰基、 C_1-C_4 烷氧羰基、胺基羰基、 C_1-C_4 烷基胺基羰基、二- $(C_1-C_4$ 烷基)胺基羰基或 C_1-C_4 烷基羰氧基；

R^5

為氫、鹵素、氰基、硝基、羥基、 C_1-C_8 烷基、 C_2-C_8 烯基、 C_3-C_8 環烷基、 C_5-C_8 環烯基、 C_2-C_8 炔基、 C_4-C_8 二烯基、 C_7-C_8 環炔基、 C_5-C_8 環烯基- (C_1-C_6) 烷基、 C_5-C_8 環炔基- (C_1-C_6) 烷基、 C_3-C_6 環烷基- (C_2-C_6) 烯基、 C_5-C_8 環烯基- (C_2-C_6) 烯基、 C_5-C_8 環炔基- (C_2-C_6) -烯基、 C_3-C_6 環烷基- (C_2-C_6) 炔基、 C_5-C_8 環烯基- (C_2-C_6) 炔基、 C_5-C_8 環炔基- (C_2-C_6) 炔基、三- (C_1-C_6) -烷基矽烷基、[三- (C_1-C_6) 烷基矽烷基]- (C_2-C_6) 炔基、苯基、苯基- (C_1-C_6) 烷基、苯基- (C_2-C_6) 烯基、苯基- (C_2-C_6) 炔基、雜環基、雜環基- (C_1-C_6) 烷基、雜環基- (C_2-C_6) 烯基、雜環基- (C_2-C_6) 炔基

基、苯基-[C₁-C₆烷氧羰基]-(C₁-C₆)烷基、
 C(O)R⁶¹、Z⁸NR⁶²R⁶³、Z¹¹CH=N-O-R⁶⁴、OR⁶⁵、
 Z⁹SR^{65a}、Z⁹S(O)R⁶⁶、Z⁹S(O)₂R⁶⁶或
 Z¹⁰P(O)(OR⁶⁷)₂；或

R³連同R⁵一起為化學鍵；

R⁶ 為鹵素、氰基、硝基、C₂-C₈烯基、C₃-C₈環烷基、C₅-C₈環烯基、C₂-C₈炔基、C₄-C₈二烯基、C₇-C₈環炔基、C₅-C₈環烯基-(C₁-C₆)烷基、C₅-C₈環炔基-(C₁-C₆)烷基、C₃-C₆環烷基-(C₂-C₆)烯基、C₅-C₈環烯基-(C₂-C₆)烯基、C₅-C₈環炔基-(C₂-C₆)-烯基、C₃-C₆環烷基-(C₂-C₆)炔基、C₅-C₈環烯基-(C₂-C₆)炔基、C₅-C₈環炔基-(C₂-C₆)炔基、三-(C₁-C₆)-烷基矽烷基、[三-(C₁-C₆)烷基矽烷基]-(C₂-C₆)炔基、苯基、苯基-(C₁-C₆)烷基、苯基-(C₂-C₆)烯基、苯基-(C₂-C₆)炔基、雜環基、雜環基-(C₁-C₆)烷基、雜環基-(C₂-C₆)烯基、雜環基-(C₂-C₆)炔基、苯基-[C₁-C₆烷氧羰基]-(C₁-C₆)烷基、C(O)R⁶¹、Z⁸NR⁶²R⁶³、Z¹¹CH=N-O-R⁶⁴、OR⁶⁵、Z⁹SR^{65a}、Z⁹S(O)R⁶⁶、Z⁹S(O)₂R⁶⁶或Z¹⁰P(O)(OR⁶⁷)₂；

其中該等取代基R⁴、R⁵及R⁶之上文所提及之脂族、環狀或芳族部分彼此獨立地可部分或完全經鹵化及/或可帶有以下基團中之一至三者：氰基、羥基、C₁-C₄烷基、C₁-C₄鹵烷基、C₃-C₆環

烷基、 C_1 - C_4 烷氧基、 C_1 - C_4 烷硫基、二- $(C_1$ - C_4 烷基)-胺基、 C_1 - C_4 烷基羰基、羥基羰基、 C_1 - C_4 烷氧羰基、胺基羰基、 C_1 - C_4 烷基胺基羰基、二- $(C_1$ - C_4 烷基)胺基羰基或 C_1 - C_4 烷基羰氧基；

R^7 為鹵素、氰基、硝基或基團 R^{26} 、 OR^{27} 、 SR^{28} 、 $S(O)R^{28}$ 、 SO_2R^{28} 、 $NR^{29}R^{30}$ 或 $N(OR^{31})R^{32}$ ；

R^8 具有關於 R^4 所給含義中之一者；

R^9 、 R^{10} 及 R^{67} 各自彼此獨立地為氫或 C_1 - C_6 烷基且 $Z^2B(OR^{10})_2$ 中之基團 R^{10} 可共同形成 C_2 - C_4 伸烷基鏈；或

R^{9a} 為 C_1 - C_6 烷基；

R^{11} 、 R^{61} 彼此獨立地為氫、 C_1 - C_6 烷基、 C_3 - C_6 環烷基、 C_2 - C_6 烯基、 C_5 - C_8 環烯基、 C_2 - C_6 炔基、 C_7 - C_8 環炔基、羥基、 C_1 - C_6 烷氧基、 C_3 - C_6 烯氧基、 C_3 - C_6 炔氧基、胺基、 C_1 - C_6 烷基胺基、二- $(C_1$ - C_6 烷基)胺基、 C_1 - C_6 烷氧基胺基、二- $(C_1$ - C_6 烷氧基)胺基、 C_1 - C_6 烷基磺醯基胺基、 C_1 - C_6 烷基胺基磺醯基胺基、[二- $(C_1$ - C_6 烷基)胺基]磺醯基胺基、 C_3 - C_6 烯基胺基、 C_3 - C_6 炔基胺基、 N -(C_2 - C_6 烯基)- N -(C_1 - C_6 烷基)-胺基、 N -(C_2 - C_6 炔基)- N -(C_1 - C_6 烷基)-胺基、 N -(C_1 - C_6 烷氧基)- N -(C_1 - C_6 烷基)-胺基、 N -(C_2 - C_6 烯基)- N -(C_1 - C_6 烷氧基)-胺基、 N -(C_2 - C_6 炔基)- N -(C_1 - C_6 烷氧基)-胺基、苯基、苯氧基、苯基胺基、萘基或雜環

基；

R^{12} 及 R^{62} 彼此獨立地為氫、 C_1 - C_6 烷基、 C_1 - C_6 烷氧基、 C_3 - C_6 環烷基、 C_3 - C_6 環烷氧基、 C_3 - C_6 烯基、 C_3 - C_6 烯氧基、 C_5 - C_8 環烯基、 C_3 - C_6 炔基、 C_3 - C_6 炔氧基、 C_7 - C_8 環炔基、 C_1 - C_6 烷基羰基、 C_3 - C_6 環烷基羰基、二- $(C_1$ - C_6 烷基)胺基羰基、 C_1 - C_6 烷氧羰基、 C_1 - C_6 烷氧羰基- $(C_1$ - $C_6)$ 烷基、 C_1 - C_6 烷基磺醯基、 C_1 - C_6 烷基胺基磺醯基、二- $(C_1$ - C_6 烷基)胺基磺醯基、苯基羰基、苯基胺基羰基、苯磺醯基、苯磺醯基胺基羰基或雜環基羰基；

R^{13} 及 R^{63} 彼此獨立地為氫、 C_1 - C_6 烷基、 C_3 - C_6 環烷基、 C_3 - C_6 烯基、 C_5 - C_8 環烯基、 C_3 - C_6 炔基、 C_3 - C_6 炔氧基、 C_7 - C_8 環炔基、 C_1 - C_6 烷基羰基、 C_3 - C_6 環烷基羰基、二- $(C_1$ - C_6 烷基)胺基羰基、 C_1 - C_6 烷氧羰基、 C_1 - C_6 烷氧羰基- $(C_1$ - $C_6)$ 烷基、 C_1 - C_6 烷基磺醯基、 C_1 - C_6 烷基胺基磺醯基、二- $(C_1$ - C_6 烷基)胺基磺醯基、苯基羰基、苯基胺基羰基、苯磺醯基、苯磺醯基胺基羰基或雜環基羰基；

R^{14} 、 R^{64} 彼此獨立地為氫、 C_1 - C_6 烷基、 C_2 - C_6 烯基或苯基；

R^{15} 、 R^{65a} 彼此獨立地為氫、 C_1 - C_6 烷基、 C_3 - C_6 環烷基、 C_3 - C_6 烯基、 C_5 - C_8 環烯基、 C_3 - C_6 炔基、 C_7 - C_8

環炔基、 C_3-C_6 環烷基- (C_1-C_6) 烷基、 C_5-C_8 環烯基- (C_1-C_6) 烷基、 C_5-C_8 環炔基- (C_1-C_6) 烷基、 C_3-C_6 環烷基- (C_2-C_6) 烯基、 C_5-C_8 環烯基- (C_2-C_6) 烯基、 C_5-C_8 環炔基- (C_2-C_6) -烯基、 C_3-C_6 環烷基- (C_2-C_6) 炔基、 C_5-C_8 環烯基- (C_2-C_6) 炔基、 C_5-C_8 環炔基- (C_2-C_6) 炔基、 C_1-C_6 烷基羰基、 C_1-C_6 烷氧羰基- (C_1-C_6) 烷基、[二- (C_1-C_6) 烷氧羰基]- (C_1-C_6) 烷基、苯基、苯基- (C_1-C_6) -烷基、雜芳基或雜芳基- (C_1-C_6) 烷基；

R^{65} 為 C_1-C_6 烷基、 C_3-C_6 環烷基、 C_3-C_6 烯基、 C_5-C_8 環烯基、 C_3-C_6 炔基、 C_7-C_8 環炔基、 C_3-C_6 環烷基- (C_1-C_6) 烷基、 C_5-C_8 環烯基- (C_1-C_6) 烷基、 C_5-C_8 環炔基- (C_1-C_6) 烷基、 C_3-C_6 環烷基- (C_2-C_6) 烯基、 C_5-C_8 環烯基- (C_2-C_6) 烯基、 C_5-C_8 環炔基- (C_2-C_6) -烯基、 C_3-C_6 環烷基- (C_2-C_6) 炔基、 C_5-C_8 環烯基- (C_2-C_6) 炔基、 C_5-C_8 環炔基- (C_2-C_6) 炔基、 C_1-C_6 烷基羰基、 C_1-C_6 烷氧羰基- (C_1-C_6) 烷基、[二- (C_1-C_6) 烷氧羰基]- (C_1-C_6) 烷基、苯基或苯基- (C_1-C_6) 烷基；

R^{16} 、 R^{66} 彼此獨立地為 C_1-C_6 烷基、 C_1-C_6 烷氧基、苯基或苯氧基；

Z^1 、 Z^2 、 Z^3 、 Z^4 、 Z^5 、 Z^6 、 Z^7 、 Z^8 、 Z^9 、 Z^{10} 及 Z^{11} 彼此獨立地為一鍵、 $-CH_2-$ 、 $-CH_2-CH_2-$ 、 $-O-CH(R^{17})-$ 、 $-S-CH(R^{18})-$ 、 $-S(O)-CH(R^{19})-$ 或 $-SO_2CH(R^{20})-$

，其中 R^{17} 、 R^{18} 、 R^{19} 及 R^{20} 彼此獨立地為氫或 C_1 - C_6 烷基；

R^{21} 為氫、 C_1 - C_6 烷基、 C_3 - C_6 環烷基、 C_2 - C_6 烯基、 C_5 - C_8 環烯基、 C_2 - C_6 炔基、 C_7 - C_8 環炔基、羥基、 C_1 - C_6 烷氧基、 C_3 - C_6 烯氧基、 C_3 - C_6 炔氧基、胺基、 C_1 - C_6 烷基胺基、二- $(C_1$ - C_6 烷基)胺基、 C_3 - C_6 烯基胺基、 C_3 - C_6 炔基胺基、 C_1 - C_6 烷基磺醯基胺基、 N -(C_2 - C_6 烯基)- N -(C_1 - C_6 烷基)-胺基、 N -(C_2 - C_6 炔基)- N -(C_1 - C_6 烷基)-胺基、 N -(C_1 - C_6 烷氧基)- N -(C_1 - C_6 烷基)-胺基、 N -(C_2 - C_6 烯基)- N -(C_1 - C_6 烷氧基)-胺基、 N -(C_2 - C_6 炔基)- N -(C_1 - C_6 烷氧基)-胺基、苯基、苯基胺基、苯氧基、萘基或雜環基；或

R^{22} 及 R^{23} 彼此獨立地為氫、 C_1 - C_6 烷基、 C_3 - C_6 環烷基、 C_3 - C_6 烯基、 C_5 - C_8 環烯基、 C_3 - C_6 炔基、 C_7 - C_8 環炔基或 C_1 - C_6 烷基羰基；或

R^{24} 為氫、 C_1 - C_6 烷基、 C_3 - C_6 環烷基、 C_3 - C_6 烯基、 C_5 - C_8 環烯基、 C_3 - C_6 炔基、 C_7 - C_8 環炔基、 C_3 - C_6 環烷基- $(C_1$ - $C_6)$ 烷基、 C_5 - C_8 環烯基- $(C_1$ - $C_6)$ 烷基、 C_5 - C_8 環炔基- $(C_1$ - $C_6)$ 烷基、 C_3 - C_6 環烷基- $(C_2$ - $C_6)$ 烯基、 C_5 - C_8 環烯基- $(C_2$ - $C_6)$ 烯基、 C_5 - C_8 環炔基- $(C_2$ - $C_6)$ -烯基、 C_3 - C_6 環烷基- $(C_2$ - $C_6)$ 炔基、 C_5 - C_8 環烯基- $(C_2$ - $C_6)$ 炔基、 C_5 - C_8 環炔基- $(C_2$ - $C_6)$ 炔基、苯基或苯基- $(C_1$ - $C_6)$ 烷基；或

- R^{25} 為 C_1 - C_6 烷基、 C_1 - C_6 烷氧基、苯基或苯氧基；
- R^{25a} 為 C_1 - C_6 烷基、 C_3 - C_6 環烷基、 C_3 - C_6 烯基、 C_5 - C_8 環烯基、 C_3 - C_6 炔基、 C_7 - C_8 環炔基、苯基或苯基-(C_1 - C_6)烷基；或
- 其中該等取代基 R^9 、 R^{9a} 、 R^{10} 、 R^{11} 、 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} 、 R^{16} 、 R^{17} 、 R^{18} 、 R^{19} 、 R^{20} 、 R^{21} 、 R^{22} 、 R^{23} 、 R^{24} 、 R^{25} 、 R^{25a} 、 R^{61} 、 R^{62} 、 R^{62a} 、 R^{63} 、 R^{64} 、 R^{65} 、 R^{65a} 、 R^{66} 及 R^{67} 之上文所提及之脂族、環狀或芳族部分彼此獨立地未經取代或可部分或完全經鹵化及/或可帶有以下基團中之一至三者：氰基、羥基、 C_1 - C_4 烷基、 C_1 - C_4 鹵烷基、 C_3 - C_6 環烷基、 C_1 - C_4 烷氧基、 C_1 - C_4 烷硫基、二-(C_1 - C_4 烷基)-胺基、 C_1 - C_4 烷基羰基、羥基羰基、 C_1 - C_4 烷氧羰基、胺基羰基、 C_1 - C_4 烷基胺基羰基、二-(C_1 - C_4 烷基)胺基羰基或 C_1 - C_4 烷基羰氧基；
- R^{26} 、 R^{27} 、 R^{28} 、 R^{29} 及 R^{32} 彼此獨立地為氫、 C_1 - C_6 烷基、 C_3 - C_6 環烷基、 C_3 - C_6 烯基、 C_3 - C_6 炔基、甲醯基、 C_1 - C_6 烷基羰基、 C_3 - C_6 環烷基羰基、 C_2 - C_6 烯基羰基、 C_2 - C_6 炔基羰基、 C_1 - C_6 烷氧基-(C_1 - C_6)烷基、 C_1 - C_6 烷氧羰基、 C_2 - C_6 烯氧基羰基、 C_3 - C_6 炔氧基羰基、 C_1 - C_6 烷基胺基羰基、 C_3 - C_6 烯基胺基羰基、 C_3 - C_6 炔基胺基羰基、 C_1 - C_6 烷基磺醯基胺基羰基、二-

(C₁-C₆烷基)胺基羰基、N-(C₃-C₆烯基)-N-(C₁-C₆烷基)-胺基羰基、N-(C₃-C₆炔基)-N-(C₁-C₆烷基)-胺基羰基、N-(C₁-C₆烷氧基)-N-(C₁-C₆烷基)-胺基羰基、N-(C₃-C₆烯基)-N-(C₁-C₆烷氧基)-胺基羰基、N-(C₃-C₆炔基)-N-(C₁-C₆烷氧基)-胺基羰基、二-(C₁-C₆烷基)-胺基硫基羰基、C₁-C₆烷基羰基-C₁-C₆烷基、C₁-C₆烷氧基亞胺基-C₁-C₆烷基、N-(C₁-C₆烷基胺基)-亞胺基-C₁-C₆烷基、N-(二-C₁-C₆烷基胺基)-亞胺基-C₁-C₆烷基或[三-(C₁-C₄)烷基]矽烷基，其中該等取代基之上文所提及之脂族或異環狀部分可部分或完全經鹵化及/或可帶有以下基團中之一至三者：氰基、羥基、C₁-C₄烷基、C₁-C₄鹵烷基、C₃-C₆環烷基、C₁-C₄烷氧基、C₁-C₄烷硫基、二-(C₁-C₄烷基)-胺基、C₁-C₄烷基羰基、羥基羰基、C₁-C₄烷氧羰基、胺基羰基、C₁-C₄烷基胺基羰基、二-(C₁-C₄烷基)胺基羰基、C₁-C₄烷基羰氧基、苯基、苯基-C₁-C₆烷基、苯基羰基、苯基羰基-C₁-C₆烷基、苯氧基羰基、苯基胺基羰基、苯磺醯基胺基羰基、N-(C₁-C₆烷基)-N-(苯基)-胺基羰基、苯基-C₁-C₆烷基羰基、雜環基、雜環基-C₁-C₆烷基、雜環基羰基、雜環基羰基-C₁-C₆烷基、雜環基氧基羰基、雜環基胺基羰基、雜環基磺醯基胺基羰基

基、N-(C₁-C₆烷基)-N-(雜環基)-胺基羰基或雜環基-C₁-C₆烷基羰基，其中該等取代基之苯基或雜環基部分可部分或完全經鹵化及/或可帶有以下基團中之一至三者：硝基、氰基、C₁-C₄烷基、C₁-C₄鹵烷基、C₁-C₄烷氧基或C₁-C₄鹵烷氧基；或

S(O)_nR³³，其中n為1或2；

R³⁰及R³¹彼此獨立地為氫、C₁-C₆烷基、C₃-C₆環烷基、C₂-C₆烯基或C₂-C₆炔基，其中該等取代基R³⁰及R³¹之脂族或異環狀部分彼此獨立地未經取代或可部分或完全經鹵化及/或可帶有以下基團中之一至三者：氰基、羥基、C₁-C₄烷基、C₁-C₄鹵烷基、C₃-C₆環烷基、C₁-C₄烷氧基、C₁-C₄烷硫基、二-(C₁-C₄烷基)-胺基、C₁-C₄烷基羰基、羥基羰基、C₁-C₄烷氧羰基、胺基羰基、C₁-C₄烷基胺基羰基、二-(C₁-C₄烷基)胺基羰基或C₁-C₄烷基羰氧基，

為苯基、苯基-C₁-C₆烷基、雜環基或雜環基-C₁-C₆烷基，其中該等取代基之苯基或雜環基部分可部分或完全經鹵化及/或可帶有以下基團中之一至三者：硝基、氰基、C₁-C₄烷基、C₁-C₄鹵烷基、C₁-C₄烷氧基或C₁-C₄鹵烷氧基；且

R³³為C₁-C₆烷基、C₁-C₆鹵烷基或苯基，其中該苯基取代基可部分或完全經鹵化及/或可帶有以下

基團中之一至三者：硝基、氰基、 C_1-C_4 烷基、 C_1-C_4 鹵烷基、 C_1-C_4 烷氧基或 C_1-C_4 鹵烷氧基；且

其中亦需符合以下限制條件中之一或兩者：

- a) R^1 連同該基團 R^2 或該基團 R^5 一起為1、2、3或4員碳鏈，其中一個碳原子可由O、S或基團 NR^A 置換，其中該等碳原子中之一者可帶有羰基氧原子及/或其中該等碳原子除氫以外可帶有1、2、3或4個選自由鹵素、氰基、羥基、 C_1-C_4 烷基、 C_1-C_4 鹵烷基、 C_1-C_4 烷氧基及 C_1-C_4 鹵烷氧基組成之群之基團；
- b) R^1 連同在 A^2 之連接點的鄰位處連接至 A^2 之碳原子或氮原子的基團 R^d 一起為共價鍵或1、2、3或4員碳鏈，其中一個碳原子可由O、S或基團 NR^B 置換，其中該等碳原子中之一者可帶有羰基氧原子及/或其中該等碳原子除氫以外可帶有1、2、3或4個選自由鹵素、氰基、羥基、 C_1-C_4 烷基、 C_1-C_4 鹵烷基、 C_1-C_4 烷氧基及 C_1-C_4 鹵烷氧基組成之群之基團；
- c) R^1 連同該基團 R^8 或該基團 R^{y1} (若存在)一起為2、3或4員碳鏈，其中一個碳原子可由O、S或基團 NR^C 置換，其中該等碳原子中之一者可帶有羰基氧原子及/或其中該等碳原子除氫以外可帶有1、2、3或4個選自由鹵素、氰基、羥基、 C_1-C_4 烷基、 C_1-C_4 鹵烷基、 C_1-C_4 烷氧基及 C_1-C_4 鹵烷氧基組成之群之基團；
- d) R^1 連同該基團 R^6 一起為3、4或5員碳鏈，其中一個碳

原子可由 O、S 或基團 NR^{D} 置換，其中該等碳原子中之一者可帶有羰基氧原子及/或其中該等碳原子除氫以外可帶有 1、2、3 或 4 個選自由鹵素、氰基、羥基、 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 烷基、 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 鹵烷基、 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 烷氧基及 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 鹵烷氧基組成之群之基團；

- e) R^2 連同該基團 R^6 一起為 1、2、3 或 4 員碳鏈，其中一個碳原子可由 O、S 或基團 NR^{E} 置換，其中該等碳原子中之一者可帶有羰基氧原子及/或其中該等碳原子除氫以外可帶有 1、2、3 或 4 個選自由鹵素、氰基、羥基、 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 烷基、 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 鹵烷基、 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 烷氧基及 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 鹵烷氧基組成之群之基團；
- f) R^2 連同該等基團 R^{a} 或 R^{b} 中之一者一起為共價鍵或 1、2、3 或 4 員碳鏈，其中一個碳原子可由 O、S 或基團 NR^{F} 置換，其中該等碳原子中之一者可帶有羰基氧原子及/或其中該等碳原子除氫以外可帶有 1、2、3 或 4 個選自由鹵素、氰基、羥基、 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 烷基、 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 鹵烷基、 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 烷氧基及 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 鹵烷氧基組成之群之基團；
- g) R^2 連同該基團 R^4 或該基團 $\text{R}^{\text{y}2}$ (若存在) 一起為 2、3 或 4 員碳鏈，其中一個碳原子可由 O、S 或基團 NR^{G} 置換，其中該等碳原子中之一者可帶有羰基氧原子及/或其中該等碳原子除氫以外可帶有 1、2、3 或 4 個選自由鹵素、氰基、羥基、 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 烷基、 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 鹵烷基、 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 烷氧基及 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 鹵烷氧基組成之群之基團；
- h) R^2 連同該基團 R^5 一起為 3、4 或 5 員碳鏈，其中一個碳

原子可由 O、S 或基團 NR^{H} 置換，其中該等碳原子中之一者可帶有羰基氧原子及/或其中該等碳原子除氫以外可帶有 1、2、3 或 4 個選自由鹵素、氰基、羥基、 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 烷基、 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 鹵烷基、 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 烷氧基及 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 鹵烷氧基組成之群之基團；

- i) R^3 連同該基團 R^5 一起為 1、2、3 或 4 員碳鏈，其中一個碳原子可由 O、S 或基團 NR^{I} 置換，其中該等碳原子中之一者可帶有羰基氧原子及/或其中該等碳原子除氫以外可帶有 1、2、3 或 4 個選自由鹵素、氰基、羥基、 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 烷基、 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 鹵烷基、 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 烷氧基及 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 鹵烷氧基組成之群之基團；
- k) R^3 連同該基團 R^4 一起為 2、3、4 或 5 員碳鏈，其中一個碳原子可由 O、S 或基團 NR^{K} 置換，其中該等碳原子中之一者可帶有羰基氧原子及/或其中該等碳原子除氫以外可帶有 1、2、3 或 4 個選自由鹵素、氰基、羥基、 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 烷基、 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 鹵烷基、 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 烷氧基及 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 鹵烷氧基組成之群之基團；
- l) R^4 連同該基團 R^{a} 一起為 2、3、4 或 5 員碳鏈，其中一個碳原子可由 O、S 或基團 NR^{L} 置換，其中該等碳原子中之一者可帶有羰基氧原子及/或其中該等碳原子除氫以外可帶有 1、2、3 或 4 個選自由鹵素、氰基、羥基、 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 烷基、 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 鹵烷基、 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 烷氧基及 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 鹵烷氧基組成之群之基團；
- m) R^5 連同該基團 R^{a} 一起為 2、3、4 或 5 員碳鏈，其中一

個碳原子可由 O、S 或基團 NR^{M} 置換，其中該等碳原子中之一者可帶有羰基氧原子及/或其中該等碳原子除氫以外可帶有 1、2、3 或 4 個選自由鹵素、氰基、羥基、 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 烷基、 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 鹵烷基、 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 烷氧基及 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 鹵烷氧基組成之群之基團；

- n) R^5 連同該基團 R^6 一起為 1、2、3、4 或 5 員碳鏈，其中一個碳原子可由 O、S 或基團 NR^{N} 置換，其中該等碳原子中之一者可帶有羰基氧原子及/或其中該等碳原子除氫以外可帶有 1、2、3 或 4 個選自由鹵素、氰基、羥基、 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 烷基、 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 鹵烷基、 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 烷氧基及 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 鹵烷氧基組成之群之基團；
- o) R^6 連同在 A^2 之連接點的鄰位處連接至 A^2 之碳原子或氮原子的基團 R^{d} 一起為 1、2、3 或 4 員碳鏈，其中一個碳原子可由 O、S 或基團 NR^{O} 置換，其中該等碳原子中之一者可帶有羰基氧原子及/或其中該等碳原子除氫以外可帶有 1、2、3 或 4 個選自由鹵素、氰基、羥基、 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 烷基、 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 鹵烷基、 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 烷氧基及 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 鹵烷氧基組成之群之基團；
- p) R^6 連同基團 $\text{R}^{\text{y}2}$ (若存在) 一起為 2、3、4 或 5 員碳鏈，其中一個碳原子可由 O、S 或基團 NR^{P} 置換，其中該等碳原子中之一者可帶有羰基氧原子及/或其中該等碳原子除氫以外可帶有 1、2、3 或 4 個選自由鹵素、氰基、羥基、 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 烷基、 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 鹵烷基、 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 烷氧基及 $\text{C}_1\text{-C}_4$ 鹵烷氧基組成之群之基團；

- q) R^6 連同該基團 R^7 一起為 1、2、3 或 4 員碳鏈，其中一個碳原子可由 O、S 或基團 NR^Q 置換，其中該等碳原子中之一者可帶有羰基氧原子及/或其中該等碳原子除氫以外可帶有 1、2、3 或 4 個選自由鹵素、氰基、羥基、 C_1 - C_4 烷基、 C_1 - C_4 鹵烷基、 C_1 - C_4 烷氧基及 C_1 - C_4 鹵烷氧基組成之群之基團；
- r) R^7 連同該基團 R^8 一起為 2、3、4 或 5 員碳鏈，其中一個碳原子可由 O、S 或基團 NR^R 置換，其中該等碳原子中之一者可帶有羰基氧原子及/或其中該等碳原子除氫以外可帶有 1、2、3 或 4 個選自由鹵素、氰基、羥基、 C_1 - C_4 烷基、 C_1 - C_4 鹵烷基、 C_1 - C_4 烷氧基及 C_1 - C_4 鹵烷氧基組成之群之基團；
- s) R^8 連同在 A^2 之連接點的鄰位處連接至 A^2 之碳原子或氮原子的基團 R^d 一起為 2、3、4 或 5 員碳鏈，其中一個碳原子可由 O、S 或基團 NR^S 置換，其中該等碳原子中之一者可帶有羰基氧原子及/或其中該等碳原子除氫以外可帶有 1、2、3 或 4 個選自由鹵素、氰基、羥基、 C_1 - C_4 烷基、 C_1 - C_4 鹵烷基、 C_1 - C_4 烷氧基及 C_1 - C_4 鹵烷氧基組成之群之基團；
- t) R^8 連同基團 R^{y2} (若存在) 一起為 2、3、4 或 5 員碳鏈，其中一個碳原子可由 O、S 或基團 NR^T 置換，其中該等碳原子中之一者可帶有羰基氧原子及/或其中該等碳原子除氫以外可帶有 1、2、3 或 4 個選自由鹵素、氰基、羥基、 C_1 - C_4 烷基、 C_1 - C_4 鹵烷基、 C_1 - C_4 烷氧

基及 C_1-C_4 鹵烷氧基組成之群之基團；

其中 R^A 、 R^B 、 R^C 、 R^D 、 R^E 、 R^F 、 R^G 、 R^H 、 R^I 、 R^K 、 R^L 、 R^M 、 R^N 、 R^O 、 R^P 、 R^Q 、 R^R 、 R^S 及 R^T 彼此獨立地選自由氫、氰基、 C_1-C_4 烷基、 C_1-C_4 鹵烷基、苯基及苄基組成之群，其中該苯基或苄基中之苯環可部分或完全經鹵化及/或可帶有以下基團中之一至三者：硝基、氰基、 C_1-C_4 烷基、 C_1-C_4 鹵烷基、 C_1-C_4 烷氧基或 C_1-C_4 鹵烷氧基；

- u) R^3 及 R^4 共同形成酮基或基團 NR^{3a} ，其中 R^{3a} 係選自由氫、 C_1-C_6 烷基、 C_1-C_6 鹵烷基、 C_3-C_6 烯基、 C_3-C_6 炔基、 C_3-C_6 環烷基、 C_3-C_6 環烷基甲基、OH、 C_1-C_6 烷氧基、 C_1-C_6 鹵烷氧基、 C_3-C_6 烯氧基、 C_3-C_6 炔氧基、 C_3-C_6 環烷氧基及 C_3-C_6 環烷基甲氧基組成之群；
- v) R^7 及 R^8 共同形成酮基或基團 NR^{7a} ，其中 R^{7a} 係選自由氫、 C_1-C_6 烷基、 C_1-C_6 鹵烷基、 C_3-C_6 烯基、 C_3-C_6 炔基、 C_3-C_6 環烷基、 C_3-C_6 環烷基甲基、OH、 C_1-C_6 烷氧基、 C_1-C_6 鹵烷氧基、 C_3-C_6 烯氧基、 C_3-C_6 炔氧基、 C_3-C_6 環烷氧基及 C_3-C_6 環烷基甲氧基組成之群；

其中 R^6 亦可為氫、OH 或可部分或完全經鹵化及/或可帶有以下基團中之一至三者的 C_1-C_6 烷基：

氰基、羥基、 C_1-C_4 烷基、 C_1-C_4 鹵烷基、 C_3-C_6 環烷基、 C_1-C_4 烷氧基、 C_1-C_4 烷硫基、二- $(C_1-C_4$ 烷基)胺基、 C_1-C_4 烷基羰基、羥基羰基、 C_1-C_4 烷氧羰基、胺基羰基、 C_1-C_4 烷基胺基羰基、[二- $(C_1-C_4$ 烷基)胺基]

羰基或 C_1-C_4 烷基羰氧基；

若

i) 符合該等條件 a) 至 c)、f) 至 m) 或 r) 至 v) 中之至少一者，

及/或

ii) 該兩個基團 Y^1 、 Y^2 中之至少一者為不同於氧之基團，

及/或

iii) R^5 為不同於氫、羥基或 C_1-C_6 烷基之基團，其中 C_1-C_6 烷基係未經取代或可部分或完全經鹵化及/或可帶有以下基團中之一至三者：氰基、羥基、 C_1-C_4 烷基、 C_1-C_4 鹵烷基、 C_3-C_6 環烷基、 C_1-C_4 烷氧基、 C_1-C_4 烷硫基、二- $(C_1-C_4$ 烷基)胺基、 C_1-C_4 烷基羰基、羥基羰基、 C_1-C_4 烷氧羰基、胺基羰基、 C_1-C_4 烷基胺基羰基、[二- $(C_1-C_4$ 烷基)胺基]羰基或 C_1-C_4 烷基羰氧基；

及/或

iv) 該等基團 R^7 、 R^8 中之一或兩者為不同於氫、羥基、 C_1-C_6 烷基、 C_1-C_6 烷氧基之基團，其中 C_1-C_6 烷基及 C_1-C_6 烷氧基係未經取代或可部分或完全經鹵化及/或可帶有以下基團中之一至三者：氰基、羥基、 C_1-C_4 烷基、 C_1-C_4 鹵烷基、 C_3-C_6 環烷基、 C_1-C_4 烷氧基、 C_1-C_4 烷硫基、二- $(C_1-C_4$ 烷基)胺基、 C_1-C_4 烷基羰基、羥基羰基、 C_1-C_4 烷氧羰基、胺基羰基、 C_1-C_4 烷基胺基羰基、[二- $(C_1-C_4$ 烷基)胺基]羰基或 C_1-C_4 烷基

羰氧基；

及/或

- v) 該等基團 R^1 、 R^2 中之一或兩者為 SR^{24} 、 $S(O)R^{25}$ 、 C_3 - C_6 環烷基-(C_1 - C_6)烷基、 C_5 - C_8 環烯基-(C_1 - C_6)烷基、 C_5 - C_8 環炔基-(C_1 - C_6)烷基、 C_3 - C_6 環烷基-(C_2 - C_6)烯基、 C_5 - C_8 環烯基-(C_2 - C_6)烯基、 C_5 - C_8 環炔基-(C_2 - C_6)烯基、 C_3 - C_6 環烷基-(C_2 - C_6)炔基、 C_5 - C_8 環烯基-(C_2 - C_6)炔基、 C_5 - C_8 環炔基-(C_2 - C_6)炔基、苯基-(C_2 - C_6)烯基、苯基-(C_2 - C_6)炔基、雜環基-(C_2 - C_6)烯基或雜環基-(C_2 - C_6)炔基，其中該等取代基 R^1 及 R^2 之上文所提及之脂族、環狀或芳族部分彼此獨立地未經取代或可部分或完全經鹵化及/或可帶有以下基團中之一至三者：氰基、羥基、 C_1 - C_4 烷基、 C_1 - C_4 鹵烷基、 C_3 - C_6 環烷基、 C_1 - C_4 烷氧基、 C_1 - C_4 烷硫基、二-(C_1 - C_4 烷基)胺基、 C_1 - C_4 烷基羰基、羥基羰基、 C_1 - C_4 烷氧羰基、胺基羰基、 C_1 - C_4 烷基胺基羰基、二-(C_1 - C_4 烷基)胺基羰基或 C_1 - C_4 烷基羰氧基；

及/或

- vi) R^a 為 SF_5 、 $Z^1P(O)(OR^9)(R^{9a})$ 、 C_3 - C_6 環烷基-(C_1 - C_6)烷基、 C_5 - C_8 環烯基-(C_1 - C_6)烷基、 C_5 - C_8 環炔基-(C_1 - C_6)烷基、 C_3 - C_6 環烷基-(C_2 - C_6)烯基、 C_5 - C_8 環烯基-(C_2 - C_6)烯基、 C_5 - C_8 環炔基-(C_2 - C_6)烯基、 C_3 - C_6 環烷基-(C_2 - C_6)炔基、 C_5 - C_8 環烯基-(C_2 - C_6)炔基、 C_5 - C_8 環炔基-(C_2 - C_6)炔基、苯基-(C_2 - C_6)炔基、雜環基-(C_2 - C_6)

烯基或雜環基-(C₂-C₆)炔基，其中該取代基R^a之上文所提及之脂族、環狀或芳族部分彼此獨立地未經取代或可部分或完全經鹵化及/或可帶有以下基團中之一至三者：氰基、羥基、C₁-C₄烷基、C₁-C₄鹵烷基、C₃-C₆環烷基、C₁-C₄烷氧基、C₁-C₄烷硫基、二-(C₁-C₄烷基)胺基、C₁-C₄烷基羰基、羥基羰基、C₁-C₄烷氧羰基、胺基羰基、C₁-C₄烷基胺基羰基、二-(C₁-C₄烷基)胺基羰基或C₁-C₄烷基羰氧基；

且其中R⁶不為可部分或完全經鹵化及/或可帶有以下基團中之一至三者的C₁-C₆烷氧基：

氰基、羥基、C₁-C₄烷基、C₁-C₄鹵烷基、C₃-C₆環烷基、C₁-C₄烷氧基、C₁-C₄烷硫基、二-(C₁-C₄烷基)胺基、C₁-C₄烷基羰基、羥基羰基、C₁-C₄烷氧羰基、胺基羰基、C₁-C₄烷基胺基羰基、[二-(C₁-C₄烷基)胺基]羰基或C₁-C₄烷基羰氧基；

若R³連同R⁵一起為化學鍵；

或其鹽。

2. 如請求項1之化合物，其中A¹及A²係彼此獨立地選自由苯基、呋喃基、噻吩基及吡啶基組成之群。
3. 如請求項1或2之化合物，其中A¹為苯基或吡啶基。
4. 如請求項1或2之化合物，其中A²為苯基或噻吩基。
5. 如請求項1或2之化合物，其中A¹及A²各自為苯基。
6. 如請求項1或2之化合物，其中：

R^a 係選自由鹵素、氰基、硝基、C(=O)-R¹¹、苯基及具

有 1、2、3 或 4 個選自由 O、N 及 S 組成之群之雜原子作為環原子的 5 或 6 員雜環基組成之群，其中苯基及該雜環基係未經取代或可具有 1、2、3 或 4 個彼此獨立地選自由鹵素、CN、NO₂、C₁-C₄烷基、C₁-C₄鹵烷基、C₁-C₄烷氧基及 C₁-C₄鹵烷氧基組成之群的取代基，其中：

R¹¹ 為氫、C₁-C₆烷基、羥基、C₁-C₆烷氧基、C₃-C₆烯氧基、C₃-C₆炔氧基、胺基、C₁-C₆烷基胺基、[二-(C₁-C₆)-烷基]胺基、C₁-C₆烷氧基胺基、N-C₁-C₆烷氧基-N-C₁-C₆烷基胺基、C₁-C₆烷基磺醯基胺基、C₁-C₆烷基胺基磺醯基胺基、[二-(C₁-C₆)-烷基胺基]磺醯基胺基、苯基、苯氧基、苯基胺基、萘基或雜環基，

且該取代基 R¹¹ 之上文所提及之脂族、環狀或芳族部分可部分或完全經鹵化。

7. 如請求項 1 或 2 之化合物，其中：

R^b 為氫、鹵素、硝基、氰基、C₁-C₄烷基、C₁-C₄鹵烷基、C₂-C₄烯基、C₁-C₄烷氧基、C₁-C₄鹵烷氧基、苄基或基團 S(O)_nR^{16a}，其中 R^{16a} 為 C₁-C₄烷基或 C₁-C₄鹵烷基且 n 為 0、1 或 2；且

R^c 為氫或鹵素。

8. 如請求項 1 或 2 之化合物，其中：

R^d、R^e 係彼此獨立地選自由氫、鹵素、CN、NO₂、C₁-C₄烷基、C₁-C₄鹵烷基、C₂-C₄烯基、C₁-C₄烷氧基及 C₁-C₄鹵烷氧基組成之群；且

R^f 為氫。

9. 如請求項1或2之化合物，其中 Y^1 及 Y^2 為氧。

10. 如請求項1或2之化合物，其中：

R^1 為氫、 C_1-C_6 烷基或 C_1-C_6 烷基羰基。

11. 如請求項1或2之化合物，其中：

R^2 為 C_1-C_6 烷基或 C_1-C_6 烷基羰基。

12. 如請求項1或2之化合物，其中：

R^3 為 R^{26} 或 OR^{27} ，其中：

R^{26} 及 R^{27} 係彼此獨立地選自由氫、 C_1-C_6 烷基、 C_1-C_6 烷基羰基、苯基- C_1-C_6 烷基、苯基羰基組成之群，其中該等取代基之上文所提及之脂族或芳族部分可部分或完全經鹵化；或為基團 SO_2R^{33} ，其中：

R^{33} 為 C_1-C_6 烷基或苯基，且其中該苯基取代基可部分或完全經鹵化及/或可帶有一至三個 C_1-C_6 烷基。

13. 如請求項12之化合物，其中 R^3 為氫。

14. 如請求項1或2之化合物，其中 R^4 為氫。

15. 如請求項1或2之化合物，其中 R^5 為氫、甲基或羥基。

16. 如請求項15之化合物，其中該等基團 CR^3R^4 及 CR^7R^8 具有相對於哌啶環之順式排列。

17. 如請求項1或2之化合物，其中 R^3 連同 R^5 一起為化學鍵。

18. 如請求項17之化合物，其中該哌啶環中之外雙鍵具有(Z)構型。

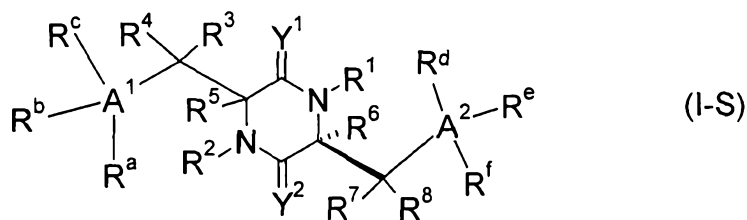
19. 如請求項1或2之化合物，其中：

R^6 為鹵素、氰基、硝基、 C_2-C_8 烯基、 C_2-C_8 炔基或 $C(O)R^{61}$ ，其中

R^{61} 具有上文所提及之含義。

20. 如請求項 1 或 2 之化合物，其中 R^7 及 R^8 為氫。

21. 如請求項 1 或 2 之化合物，其具有式 I-S：



其中 A^1 、 A^2 、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^a 、 R^b 、 R^c 、 R^d 、 R^e 、 R^f 、 Y^1 及 Y^2 具有上文所提及含義中之一者。

22. 如請求項 1 或 2 之化合物，其中 R^1 連同該基團 R^2 一起為 1、2、3 或 4 員碳鏈，其中一個碳原子可由 O、S 或基團 NR^A 置換，其中該等碳原子中之一者可帶有羰基氧原子及/或其中該等碳原子除氫以外可帶有 1、2、3 或 4 個選自由鹵素、氰基、羥基、 C_1-C_4 烷基、 C_1-C_4 鹵烷基、 C_1-C_4 烷氧基及 C_1-C_4 鹵烷氧基組成之群之基團。

23. 如請求項 22 之化合物，其中 R^1 連同該基團 R^2 一起為 CH_2 或 CH_2CH_2 。

24. 如請求項 1 或 2 之化合物，其中 R^1 連同該基團 R^5 一起為 1、2、3 或 4 員碳鏈，其中一個碳原子可由 O、S 或基團 NR^A 置換，其中該等碳原子中之一者可帶有羰基氧原子及/或其中該等碳原子除氫以外可帶有 1、2、3 或 4 個選自由鹵素、氰基、羥基、 C_1-C_4 烷基、 C_1-C_4 鹵烷基、 C_1-C_4

烷氧基及C₁-C₄鹵烷氧基組成之群之基團。

25. 如請求項24之化合物，其中R¹連同該基團R⁵一起為CH₂或CH₂CH₂。
26. 如請求項1或2之化合物，其中R¹連同在A²之連接點的鄰位處連接至A²之碳原子或氮原子的基團R^d一起為共價鍵或1、2、3或4員碳鏈，其中一個碳原子可由O、S或基團NR^B置換，其中該等碳原子中之一者可帶有羰基氧原子及/或其中該等碳原子除氫以外可帶有1、2、3或4個選自由鹵素、氰基、羥基、C₁-C₄烷基、C₁-C₄鹵烷基、C₁-C₄烷氧基及C₁-C₄鹵烷氧基組成之群之基團。
27. 如請求項26之化合物，其中R¹連同該基團R^d一起為共價鍵、CH₂或CH₂CH₂。
28. 如請求項1或2之化合物，其中R¹連同基團R⁸一起為2、3或4員碳鏈，其中一個碳原子可由O、S或基團NR^C置換，其中該等碳原子中之一者可帶有羰基氧原子及/或其中該等碳原子除氫以外可帶有1、2、3或4個選自由鹵素、氰基、羥基、C₁-C₄烷基、C₁-C₄鹵烷基、C₁-C₄烷氧基及C₁-C₄鹵烷氧基組成之群之基團。
29. 如請求項28之化合物，其中R¹連同該基團R⁸一起為CH₂CH₂或CH₂CH₂CH₂。
30. 如請求項1或2之化合物，其中R¹連同基團R⁶一起為3、4或5員碳鏈，其中一個碳原子可由O、S或基團NR^D置換，其中該等碳原子中之一者可帶有羰基氧原子及/或其中該等碳原子除氫以外可帶有1、2、3或4個選自由鹵

素、氰基、羥基、 C_1 - C_4 烷基、 C_1 - C_4 鹵烷基、 C_1 - C_4 烷氧基及 C_1 - C_4 鹵烷氧基組成之群之基團。

31. 如請求項30之化合物，其中 R^1 連同該基團 R^6 一起為 $CH_2CH_2CH_2$ 或 $CH_2CH_2CH_2CH_2$ ，其中1、2、3或4個氫原子可由選自由鹵素、氰基、羥基、 C_1 - C_4 烷基、 C_1 - C_4 鹵烷基、 C_1 - C_4 烷氧基及 C_1 - C_4 鹵烷氧基組成之群之基團置換。
32. 如請求項1或2之化合物，其中 R^3 連同該基團 R^5 一起為1、2、3或4員碳鏈，其中一個碳原子可由O、S或基團 NR^1 置換，其中該等碳原子中之一者可帶有羰基氧原子及/或其中該等碳原子除氫以外可帶有1、2、3或4個選自由鹵素、氰基、羥基、 C_1 - C_4 烷基、 C_1 - C_4 鹵烷基、 C_1 - C_4 烷氧基及 C_1 - C_4 鹵烷氧基組成之群之基團。
33. 如請求項32之化合物，其中 R^3 連同該基團 R^5 一起為 CH_2 、O或基團 NR^1 ，其中 R^1 為氫或 C_1 - C_4 烷基。
34. 如請求項1或2之化合物，其中 R^3 連同該基團 R^4 一起為2、3、4或5員碳鏈，其中一個碳原子可由O、S或基團 NR^K 置換，其中該等碳原子中之一者可帶有羰基氧原子及/或其中該等碳原子除氫以外可帶有1、2、3或4個選自由鹵素、氰基、羥基、 C_1 - C_4 烷基、 C_1 - C_4 鹵烷基、 C_1 - C_4 烷氧基及 C_1 - C_4 鹵烷氧基組成之群之基團。
35. 如請求項34之化合物，其中 R^3 連同該基團 R^4 一起為 CH_2CH_2 、 $CH_2CH_2CH_2$ 或 $CH_2CH_2CH_2CH_2$ ，其中1、2、3或4個氫原子可由選自由鹵素、氰基、羥基、 C_1 - C_4 烷

基、 C_1 - C_4 鹵烷基、 C_1 - C_4 烷氧基及 C_1 - C_4 鹵烷氧基組成之群之基團置換。

36. 如請求項1或2之化合物，其中 R^4 連同該基團 R^a 一起為2、3、4或5員碳鏈，其中一個碳原子可由O、S或基團 NR^L 置換，其中該等碳原子中之一者可帶有羰基氧原子及/或其中該等碳原子除氫以外可帶有1、2、3或4個選自由鹵素、氰基、羥基、 C_1 - C_4 烷基、 C_1 - C_4 鹵烷基、 C_1 - C_4 烷氧基及 C_1 - C_4 鹵烷氧基組成之群之基團。

37. 如請求項36之化合物，其中 R^4 連同該基團 R^a 一起為 $C(O)NR^L$ 或 $C(O)O$ ，其中 R^L 為氫或 C_1 - C_4 烷基。

38. 如請求項1或2之化合物，其中 R^5 連同該基團 R^a 一起為2、3、4或5員碳鏈，其中一個碳原子可由O、S或基團 NR^M 置換，其中該等碳原子中之一者可帶有羰基氧原子及/或其中該等碳原子除氫以外可帶有1、2、3或4個選自由鹵素、氰基、羥基、 C_1 - C_4 烷基、 C_1 - C_4 鹵烷基、 C_1 - C_4 烷氧基及 C_1 - C_4 鹵烷氧基組成之群之基團。

39. 如請求項38之化合物，其中 R^5 連同該基團 R^a 一起為 CH_2CH_2 或 $CH_2CH_2CH_2$ 。

40. 如請求項1或2之化合物，其中 R^5 連同該基團 R^6 一起為1、2、3、4或5員碳鏈，其中一個碳原子可由O、S或基團 NR^N 置換，其中該等碳原子中之一者可帶有羰基氧原子及/或其中該等碳原子除氫以外可帶有1、2、3或4個選自由鹵素、氰基、羥基、 C_1 - C_4 烷基、 C_1 - C_4 鹵烷基、 C_1 - C_4 烷氧基及 C_1 - C_4 鹵烷氧基組成之群之基團。

41. 如請求項40之化合物，其中 R^5 連同該基團 R^6 一起為 CH_2 或 CH_2CH_2 。
42. 如請求項1或2之化合物，其中 R^6 連同在 A^2 之連接點的鄰位處連接至 A^2 之碳原子或氮原子的基團 R^d 一起為1、2、3或4員碳鏈，其中一個碳原子可由O、S或基團 NR^O 置換，其中該等碳原子中之一者可帶有羰基氧原子及/或其中該等碳原子除氫以外可帶有1、2、3或4個選自由鹵素、氰基、羥基、 C_1 - C_4 烷基、 C_1 - C_4 鹵烷基、 C_1 - C_4 烷氧基及 C_1 - C_4 鹵烷氧基組成之群之基團。
43. 如請求項42之化合物，其中 R^6 連同該基團 R^d 一起為 CH_2 或 CH_2CH_2 。
44. 如請求項1或2之化合物，其中 R^6 連同基團 R^7 一起為1、2、3或4員碳鏈，其中一個碳原子可由O、S或基團 NR^Q 置換，其中該等碳原子中之一者可帶有羰基氧原子及/或其中該等碳原子除氫以外可帶有1、2、3或4個選自由鹵素、氰基、羥基、 C_1 - C_4 烷基、 C_1 - C_4 鹵烷基、 C_1 - C_4 烷氧基及 C_1 - C_4 鹵烷氧基組成之群之基團。
45. 如請求項44之化合物，其中 R^6 連同該基團 R^7 一起為 CH_2 、O或基團 NR^Q ，其中 R^Q 為氫或 C_1 - C_4 烷基。
46. 如請求項1或2之化合物，其中 R^7 連同該基團 R^8 一起為2、3、4或5員碳鏈，其中一個碳原子可由O、S或基團 NR^R 置換，其中該等碳原子中之一者可帶有羰基氧原子及/或其中該等碳原子除氫以外可帶有1、2、3或4個選自由鹵素、氰基、羥基、 C_1 - C_4 烷基、 C_1 - C_4 鹵烷基、 C_1 - C_4

烷氧基及C₁-C₄鹵烷氧基組成之群之基團。

47. 如請求項46之化合物，其中R⁷連同該基團R⁸一起為CH₂CH₂、CH₂CH₂CH₂或CH₂CH₂CH₂CH₂，其中1、2、3或4個氫原子可由選自由鹵素、氰基、羥基、C₁-C₄烷基、C₁-C₄鹵烷基、C₁-C₄烷氧基及C₁-C₄鹵烷氧基組成之群之基團置換。
48. 如請求項1或2之化合物，其中R⁸連同在A²之連接點的鄰位處連接至A²之碳原子或氮原子的基團R^d一起為2、3、4或5員碳鏈，其中一個碳原子可由O、S或基團NR^s置換，其中該等碳原子中之一者可帶有羰基氧原子及/或其中該等碳原子除氫以外可帶有1、2、3或4個選自由氰基、羥基、C₁-C₄烷基、C₁-C₄鹵烷基、C₁-C₄烷氧基及C₁-C₄鹵烷氧基組成之群之基團。
49. 如請求項48之化合物，其中R⁸連同該基團R^d一起為C(O)NR^s或C(O)O，其中R^s為氫或C₁-C₄烷基。
50. 一種組合物，其包含除草有效量之至少一種如請求項1至49中任一項之式I之哌啶化合物或I之農業上適用之鹽及慣常用於調配作物保護劑之助劑。
51. 一種製備如請求項50之組合物的方法，其中將除草有效量之至少一種如請求項1至49中任一項之式I之哌啶化合物或I之農業上適用之鹽與慣常用於調配作物保護劑之助劑混合。
52. 一種如請求項1至49中任一項之式I之哌啶化合物或I之農業上適用之鹽的用途，其係用於控制不良植被。

53. 一種控制不良植被之方法，其中使除草有效量之至少一種如請求項1至49中任一項之式I之哌啶化合物或I之農業上適用之鹽作用於植物、其種子及/或其生境。

七、指定代表圖：

(一)本案指定代表圖為：(無)

(二)本代表圖之元件符號簡單說明：

八、本案若有化學式時，請揭示最能顯示發明特徵的化學式：