

[19]中华人民共和国专利局

[51]Int.Cl⁶



[12] 发明专利说明书

A01N 43 / 54

C07D405 / 04

C07D239 / 52

[21] ZL 专利号 91104849.9

[45]授权公告日 1997年1月8日

[11] 授权公告号 CN 1033735C

[22]申请日 91.6.6 [24]颁证日 96.10.12

[21]申请号 91104849.9

[30]优先权

[32]90.6.7 [33]US[31]534,794

[32]90.12.21[33]US[31]633,592

[73]专利权人 山道士有限公司

地址 瑞士巴塞尔

[72]发明人 理查德·J·安德逊

伊安·S·克劳斯代尔 T·外间

[74]专利代理机构 中国专利代理(香港)有限公司

代理人 罗才希

审查员 周胡斌

权利要求书 1 页 说明书 57 页 附图页数 0 页

[54]发明名称 含取代的2-苯并[c]呋喃酮的除草组合物及其农业用途

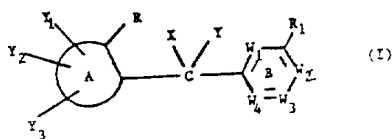
[57]摘要

含除草有效量的取代的2-苯并[C]呋喃酮或其衍生物的除草剂组合物。

1

权利要求书

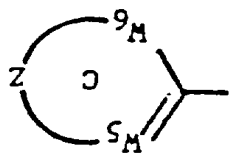
1.一种除草剂组合物,该组合物包括除草有效量的式(I)化合物,式I为:



其中

环A是苯基;

R是氨基,游离酸或盐形式的羧基,氨基甲酰基;COOR₅,其中R₅是C₁₋₅烷基或C₂₋₅链烯基;或CONR₇R₈,其中R₇是C₁₋₁₂烷基,苄基,卤代苄基或苯基;R₈是氢或C₁₋₄烷基,或一个C环



C环中W₅是氮,W₆是氧,Z是具有选自亚甲基,取代的亚甲基的2-节桥;

Y₁,Y₂和Y₃被连接到碳原子上,并分别是氢,C₁₋₈烷氧基,C₂₋₈链烯氧基或苯基C₁₋₈烷氧基,这些基团每一个都可被1至3个选自卤素取代;

W₁和W₄分别是氮;W₂和W₃分别是CR₃;

R₁和R₃分别是氢,卤素,C₁₋₈烷氧基,C₂₋₈链烯基,每一个基团可依次被1-6个卤原子取代;或R₁和R₃分别是可被1-3个卤原子取代的苯氧基;

X和Y分别是氢,羟基,卤素,氨基,C₁₋₈烷基,C₁₋₈烷氧基或C₂₋₈酰氧基,或合在一起表示=O;或

X和R合在一起可形成具有结构式-C(O)-O-的桥,其中羰基连接到A上。

2.根据权利要求1的组合物,其中式(I)化合物中的

R是游离酸或盐形式的羧基,氨基甲酰基;COOR₅,其中R₅是C₁₋₅烷基或C₂₋₅链烯基;或CONR₇R₈,其中R₇是C₁₋₁₂烷基,苄基,卤代苄基或苯基;R₈是氢或C₁₋₄烷基;

X和R合起来形成具有结构式-C(O)-O-的桥,其中羰基连接到A上;和

2

Y₁、Y₂和Y₃连接到碳原子上,并且分别是氢,C₁₋₈烷氧基,卤素,或苯基C₁₋₈烷氧基并且苯基可任意被卤素取代。

3.根据权利要求1或2的组合物,其中式(I)化合物中的

X和Y各分别是氢、羟基、氨基、C₁₋₈烷氧基,C₂₋₈酰氧基,卤素,或合在一起为=O;和

R₁和R₃各分别是卤素、C₁₋₈烷氧基,C₁₋₈卤代烷基或苯氧基,并且其苯基可任意被卤素取代。

4.根据权利要求1的组合物,其中式(I)化合物中的

R是游离酸或盐形式的羧基;氨基甲酰基;COOR₅,其中R₅是C₁₋₅烷基或C₂₋₅链烯基;或CONR₇R₈,其中

R₇是C₁₋₁₂烷基,苄基,卤代苄基或苯基;

R₈是氢或C₁₋₄烷基;

Y₁,Y₂和Y₃分别是氢或卤素;

W₂是CH;

W₃是CR₃其中R₃是C₁₋₅烷氧基;

R₁是C₁₋₅烷氧基;

X是羟基或与Y结合为=O;

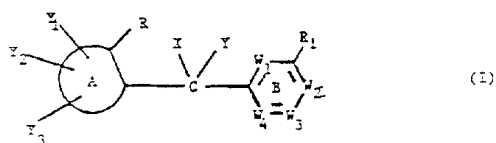
Y是氢或与X结合为=O;或

X和R合在一起形成具有结构式-C(O)-O-的桥,其中羰基连接到A上。

5.一种消灭杂草的方法包括将除草有效量的权利要求1所述的组合物施用到杂草上或有杂草的地方。

本发明涉及取代的2-苯并[c]呋喃酮和杂环2-苯并[c]呋喃酮和它们的衍生物,这些化合物的制备方法,含有这些化合物的组合物以及它们在农业上的应用。

更确切地说,本发明涉及结构式I的化合物。



其中环状系统A选自:

a) 苯基或萘基

3

b) 吡啶基, 它可通过它的 (b) 或 (c) 边结合到苯上

c) 吡啶基-N-氧化物或吡嗪基-N-氧化物

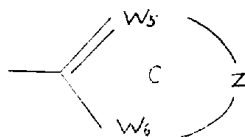
d) 嘧啶基

e) 吡嗪基

f) 3-或 4-噌啉基 (cinnolynyl) 或 2-唑啉基, 和

g) 含有氧、硫或氮作为杂原子的五元芳香杂环, 该环可结合到苯环上或含有氮作为另一个杂原子。

R 是酰基, 甲酰基, $CX_1X_2X_3$, 酮式基团, 可以以游离酸或酯或盐形式的羧基, 可以以游离酸或酯形式的硫代羧基, 氨基甲酰基或单-或双-取代的氨基甲酰基, 羟烷基, 羟苄基, $-CH=NOH_3$, $-CH=NO-$ 低级烷基, 基团 $-CH_2-O-C(O)-$ 和环 A 中相邻碳原子的桥, 或环 C



Y_1, Y_2 和 Y_3 连接在碳原子上, 并分别为氢, 卤素, 羟基, 烷基, 链烯基, 炔基, 烷氧基, 链烯氧基, 炔氧基, 烷基磺酰氧基, 二烷基氨基磺酰氧基, 烷基磺酰基, 烷基亚磺酰基, 二烷基氨基甲酰氧基, 烷硫基, 链烯基硫基或炔基硫基, 这些基团也可被 1-6 个卤素原子取代; 二烷基氧基甲基, 共轭烷氧基, 羟烷基, 羧基, 酰基, 酰基烷基, 酰氧基, 酰氧基烷基, 三烷基甲硅烷氧基, 三烷基甲硅烷基, 氰基, 硝基, 氨基或取代的氨基, 氨基磺酰基, 环烷基, 芳基, 芳烷基, 芳烯基, 芳炔基, 芳氧基, 芳烷氧基 (aralkoxy), 芳基磺酰基, 芳基亚磺酰基, 芳硫基或芳烷硫基, 上述每个基团可以被一至三个选自卤素, 烷基, 卤代烷基, 烷氧基, 卤代烷氧基, 硝基, 氰基, 烷硫基, 酰基, 氨基或取代的氨基的取代基取代; 基团 $-C-R'$ 其中 R' 是氢, 低级烷基, 或低级烷氧基, 或者相邻碳原子上的 Y_1 和 R 结合成为具有 $-C-O-$,



(其中 E 是一个直接键) 结构的桥或具有选自亚甲基, 取代的亚甲基, $-N-$ 和氧的单元的 1 至 3 节

4

连接基, 或者相邻碳原子上的 Y_1 和 Y_2 结合成为含有选自亚甲基, 取代的亚甲基, $-\overset{\text{O}}{\parallel} \text{C} =$, $-\overset{\text{O}}{\parallel} \text{C} =$, $-\overset{\text{H}}{\text{N}}-$, 氧和 $-\overset{\text{H}}{\text{S}}-$ 的 R 单元

元的 3 至 5 节桥; 每个 W_1, W_2, W_3, W_4 和 W_5 分别为 CH, CR_3 为氮; W_6 为 NH 氧, 硫, $-\overset{\text{O}}{\parallel} \text{C} =$, $-\overset{\text{O}}{\parallel} \text{C} =$ 或

$-\overset{\text{O}}{\parallel} \text{C} - \text{Z}$ 是含有选自亚甲基, 取代的亚甲基,

$-\overset{\text{H}}{\text{C}} =$, $-\overset{\text{O}}{\parallel} \text{C} =$, $-\overset{\text{O}}{\parallel} \text{C} -$, $-\overset{\text{H}}{\text{N}}-$, $-\text{N} =$, 氧和 $-\overset{\text{H}}{\text{S}}-$ 的单元

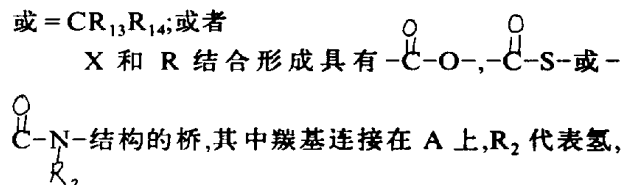
元的 2 或 3 节桥。

每个 R_1 和 R_3 分别是氢, 卤素, 烷基, 链烯基, 炔基, 烷氧基, 链烯氧基, 炔氧基, 烷硫基, 链烯基硫基或炔基硫基, 前面每个基团也可被 1 至 6 个卤原子取代; 环烷基, 杂环烷氧基, 芳氧基, 芳烷氧基或芳烷硫基, 这些基团每个都可被 1 至 3 个选自卤素, 烷基, 卤代烷基, 烷氧基, 卤代烷氧基, 硝基, 氰基, 烷硫基, 酰基, 氨基或取代的氨基的取代基取代; 氨基氧基; 取代的氨基氧基 (aminoxy); 亚氨基氧基 (iminoxy), 取代的亚氨基氧基; 氰基; 取代的氨基; 酰氨基; 取代的酰氨基; 烷基磺酰基甲基; 氰基; 硝基; 或 $-\overset{\text{O}}{\parallel} \text{C} - Y_4$ 其中 Y_4

为氢, 低级烷基, 低级烷氧基, 羟基或未取代的或取代的苯基。

R_1 除了氢外与 Y_1 定义相同。

X 和 Y 分别为氢, 羟基, 卤素, 氰基, 烷基, 烷氧基, 烷氧基羰基, 烷氧基羰氧基, 羟基烷基, 卤代烷基, 酰基, 酰氧基, 氨基甲酰基, 氨基甲酰氧基, 烷硫基, 烷基亚磺酰基, 烷基磺酰基或烷基磺酰氧基; 芳基, 芳氧基, 芳基 $S(O)_p$, 芳烷基, 芳烷氧基, 芳烷基 $(SO)_p$, 芳基磺酰氧基, 这些基团中的每个基团也可被 1 至 3 个选自卤素, 烷基, 卤代烷基, 烷氧基, 卤代烷氧基, 硝基, 氰基, 烷硫基, 酰基的取代基取代; 氨基, 取代的氨基或者 X 和 Y 结合表示 $=O, =S, =NH, =NOR_{12}$ 或 $=CR_{13}R_{14}$; 或者



烷基, 卤代烷基, 烷氧基烷基, 烷氧基, 芳烷氧基, 未取

5

代的或取代的芳基,未取代的或取代的芳烷基。

P 为 0,1 或 2。

X_1, X_2 和 X_3 分别为氢,羟基,烷氧基,烷硫基,羟基烷基或羟基苄基,但是, X_1, X_2 和 X_3 中的至少一个不是氢;或 X_3 代表氢,而 X_1 和 X_2 结合形成含有选自 $-O(CH_2)_nO-$, $-OC(CH_2)_mO-$ 和 $-S(CH_2)_n$, $S-$

的单元的 4 或 5 节桥。

R_{12} 为氢或烷基,

R_{13} 和 R_{14} 分别为氢,烷基或卤素,

m 为 1 或 2,

n' 为 2 或 3,

但须当 R 为游离酯或盐形式的羧基时, X 和 Y 结合为 =O, 环 A 和 B 中的一个含有杂原子。

当 R 为酮式基团时, 优选为 $-C(=O)-R''$, 其中 R'' 为

烷基, 卤代烷基, 烷氧基烷基, 链烯基, 炔基, 未取代的或取代的芳基, 未取代的或取代的芳烷基。

当 R 为酯式的羧基或硫代羧基时, 其优选为 $-COOR_5$ 或 $-COSR_5$ 结构, 其中 R_5 为烷基, 卤代烷基, 烷氧基烷基, 链烯基, 卤代链烯基, 炔基, 卤代炔基, 未取代或取代的芳基, 未取代或取代的芳烷基, 羟烷基, 环烷基, 氟基烷基, 芳烷氧基烷基, 基团 $-N=C(R_{15})(R_{16})$; 基团 $-(CH_2)_n, CH(R_{17})(R_{18})$; 基团 $-CH(R_{19})-O-C(=O)-R_{11}$

R_{15} 和 R_{16} 分别为氢或烷基,

R_{17}, R_{18} 分别为 $S(O)_n$ 烷基, $COOR_9$, 烷氧基, 氨基, 取代的氨基, 苄氧基, 三甲基甲硅烷基, 氟基, $-C(R_{19})SR_{20}$ 或另外它们中的一个可以是氢。

R_{19} 为氢或烷基,

R_{20} 为烷基或芳基,

R_9, R_{10} 和 R_{11} 分别为氢, 烷基, 卤代烷基, 烷氧基烷基, 未取代或取代的芳基或未取代的或取代的芳烷基,

n 和 n' 分别为 0,1 或 2,

X_1 为氧或硫。

当 R 为氨基甲酰基或为单-或双-取代的氨基甲酰基时, 其优选为 $CONR_7R_8$ 结构, 其中 R_7 和 R_8 分别为氢或脂族或饱和或不饱和环或杂环基团, 这些基团中的每一个可以是未取代的或取代的。

R_7 和 R_8 分别优选为 (a) 氢、卤素; (b) 烷

6

基, 链烯基, 炔基, 烷氧基, 烷氧基烷氧基, 链烯氧基, 炔氧基, 烷基 $S(O)_p$, 链烯基 $S(O)_p$, 或炔基 $S(O)_p$, 烷基 $S(O)_p$, 烷基, 链烯基 $S(O)_p$, 烷基, 炔基 $S(O)_p$, 烷基, 这些基团中的每个基团也可被 1 至 6 个卤原子取代, 这些基团的每个基团可通过烷基连接到相邻氮原子上; (c) 酰基, 酰基烷基, 酰氧基, 酰氧基烷基; (d) 环烷基, 环烷基烷基, 杂环基, 杂环烷基, 杂环烷氧基, 芳基, 芳烷基, 芳氧基, 芳烷氧基, 芳基 $S(O)_p$, 芳烷基 $S(O)_p$ 或芳基 $S(O)_p$ 烷基, 这些基团的每个基团可以未被取代或被 1 至 3 个选自下列的取代基取代; (i) 卤素; (ii) 烷基, 链烯基, 炔基, 烷氧基, 烷氧基烷氧基, 链烯氧基, 炔氧基, 烷基 $S(O)_p$, 链烯基 $S(O)_p$ 或炔基 $S(O)_p$, 烷基 $S(O)_p$, 烷基, 链烯基 $S(O)_p$ 烷基或炔基 $S(O)_p$ 烷基, 这些基团的每个基团也可被 1 至 6 个卤原子取代; 和 (iii) 硝基, 氟基, 酰基, 氨基, 取代的氨基, 氨基磺酰基, 氨基烷基或取代的氨基烷基; (c) 氨基, 取代的氨基, 酰氨基, 取代的酰氨基, 氨基磺酰基, 氟基, 硝基, 或 $-(CHR_4')_{n'''}-C(O)Y_4'$, 其中 Y_4' 为氢, 低级烷基, 低级烷氧基或羟基, n''' 为 0,1,2 或 3, p 为 0, 1 或 2。

R_4' 与 Y_1 定义相同。

当 R 是盐形式的羧基时, 优选由下列物质形成的盐: 碱金属, 碱土金属, 任意取代的铵阳离子, 三烷基铯阳离子, 三烷基铷阳离子或铯阳离子, 尤其是碱金属阳离子 (例如 Li 或 Na 阳离子) 或碱土金属阳离子 (如 Ca 或 Mg 阳离子); 铵阳离子; 取代的铵阳离子 [如 C_{1-5} 烷基铵阳离子, 二- C_{1-5} 烷基铵阳离子, 三- C_{1-5} 烷基铵阳离子, 四- C_{1-5} 烷基铵阳离子, (C_{1-5} 烷氧基-烷基) 铵阳离子, (羟基- C_{1-5} 烷基) 铵阳离子]; 铯阳离子; 三 (C_{1-8} 烷基) 铯阳离子, 或三 (C_{1-8} 烷基) 氧化的铯阳离子。

当 Y_1, Y_2 和 / 或 Y_3 为羧基时, 它可以是酯或盐或酰胺 (即氨基甲酰基) 形式, 例如与上述具有这些形式的 R 相同。而当 A 为 g) 时, 它含有 1 至 3 个杂原子, 其代表例有噻吩基, 咪唑基, 吡咯基, 噁唑基, 噻唑基, 异噻唑基, 异噻唑基, 咪唑基, 吡唑基, 噁二唑基或噻二唑基。

当 A 是上述 b) 至 g) 的杂芳族代表物时, 取代的

杂环较好地选自吡啶基, 喹啉基, 吡啶基-N-氧化物, 嘧啶基, 吡嗪基, 噻吩基或咪唑基, 最好选自吡啶基或噻吩基。

除另有说明, 烷基部分含有 1 至 8 个碳原子, 优选 1 至 5, 尤其是 1 至 4, 如 1 或 2 个碳原子, 低级烷基部分含有 1 至 4 个, 如 1 或 2 个碳原子。作为或存在于 R_5, R_7 或 R_8 中的烷基部分含有 1 至 24 个, 优选 1 至 12 个, 尤其是 1 至 6 个碳原子, 而当 R_7 和 R_8 中的一个为烷基时, 另一个优选为氢。

作为桥基的烷基部分可以是直链或支链的, 并优选含有 1 至 4 个如 1 或 2 个碳原子。它们可以被芳基或取代的芳基任意取代, 并且可以被任意断开或由氧或硫原子任意相接。

“共轭烷氧基”代表在烷基部分被一个或多个氧原子间断的烷氧基, 例如烷氧基烷氧基, 烷氧基烷氧基烷氧基等。

链烯基和炔基部分含有 2 至 8 个, 优选 2 至 4 个, 最好 2 或 3 个碳原子。

卤素优选 F, Cl 或 Br, 最好是 Cl。

芳基部分优选环状系统 A 的 a) 至 g) 或环 B 所定义的基团以及每个优选的基团, 尤其是苯基。这些芳基部分可以是未取代的或取代的, 在取代的情况下, 除另有说明, 该芳基部分带有 1 至 3 个如 Y_1 所定义的取代基。

取代的氨基, -酰氨基, -氨氧基, -氨基烷基, -亚氨氧基, -氨基甲酰基 (不同于 R) 优选被 1 或 2 个选自烷基烷氧基, 卤代烷基, 酰基, 烷氧基烷基, 未取代的或取代的芳基或未取代的或取代的芳烷基的取代基取代。

取代的亚甲基优选被一个或两个如 Y_1 所定义的基团取代。

作为取代基或取代基的部分的酰基适合是 $-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{R}'''$, 其中 R''' 为如 Y_1 所定义的基团 (例如,

烷基, 卤代烷基, 环烷基, 烷氧基烷基, 未取代的或取代的芳基 (尤其是苯基)。酰基的例子包括乙酰基, 丙酰, 丁酰基, 未取代或取代的苯甲酰基, 新戊酰基或氯乙酰, 尤其是乙酰基或未取代或取代的苯甲酰基。

环烷基优选含有 3 至 6 个碳原子, 尤其是环丙基, 环戊基或环己基, 杂环优选为 5 或 6 元, 如环状系统 A 的 b) 至 g) 所定义的基团以及优选基团

或饱和基团, 并含有 O, S 或 N 作为杂原子, 如四氢咪唑, 哌啶基, 吗啉基。

为了方便起见, 将桥节 (bridging members) 写成如 $-\overset{\text{H}}{\underset{\text{H}}{\text{C}}}=$, 但应知道也包括 $=\overset{\text{H}}{\underset{\text{H}}{\text{C}}}-$ 。

氨基甲酰基或取代的氨基甲酰基部分被连接到所说分子上, 它们是通过它们的羰基来取代, 酰氨基或取代的酰氨基部分被连接到所说分子上, 它们是通过它们的氮原子来取代。

结构式 I 的一类特定化合物 (化合物 I a) 包括那些其中环状结构 A 是选自苯基, 吡啶基或吡啶基-N-氧化物的化合物。

R 是可以游离酸或酯或盐形式的羧基, 可以游离酸或酯形式的硫代羧基, 氨基甲酰基或单-或双-取代的氨基甲酰基。

Y_1, Y_2 和 Y_3 连接在碳原子上, 并分别为氢, 卤素, 烷基, 烷氧基;

每个 W_1, W_2, W_3, W_4 和 W_5 分别为 CH, CR_3 或氮;

W_6 为 NH 或氧;

Z 为由选自亚甲基, 取代的亚甲基或 $-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-$ 的单

元组成的 2-或 3-节桥;

R_1 和 R_3 各分别为氢, 卤素, 烷基, 烷氧基, 芳氧基或芳烷基。

X 和 Y 各分别为氢, 羟基, 氰基, 烷氧基, 酰氧基或 X 和 Y 结合代表 $=\text{O}$; 或

X 和 R 结合形成具有 $-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{O}-$ 或 $-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{N}-$ 结构的桥, 其中羰基连接到 A 上。

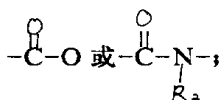
当 R 为酯形式的羧基或硫代羧基时, 其优选为结构 $-\text{COOR}_5$ 或 COSR_5 ;

其中每个 R_5 分别为烷基, 烷氧基烷基, 链烯基, 炔基, 取代的芳基或未取代的或取代的芳烷基。

当 R 为盐形式的羧基或硫代羧基时, 优选由下列物质形成的盐: 碱金属, 碱土金属, 任意取代的铵阳离子, 尤其是碱金属的阳离子 (如 Li 或 Na 阳离子) 或碱土金属的阳离子 (如 Ca 或 Mg 阳离子); 铵阳离子; 取代的铵阳离子 [如 C_{1-5} 烷基铵阳离子, 二- C_{1-5} 烷基铵阳离子, 三- C_{1-5} 烷基铵阳离子, 四- C_{1-5} 烷基铵阳离子]。

当 R 为氨基甲酰基或单-或双-取代的氨基甲酰基时, 它优选为结构 CONR_7R_8 , 其中 R_7 为氢, 烷基, 卤代烷基, 烷氧基烷基, 未取代的或取代的芳基或未取代的或取代的芳烷基, R_8 为氢, 烷基, NH_2 , NHR_6 或 OR_6 , 其中 R_6 与 R_7 的定义相同。

一类特定的化合物 (化合物 Ib) 包括那些结构式 I 的化合物, 其中环状结构 A 代表苯基, 吡啶基或噻吩基; B 代表嘧啶基或三嗪基; R 代表环 C, 尤其是咪唑, 咪唑酮, 咪唑烷或咪唑烷酮; 游离酸或酯或盐形式的羧基; 取代的氨基甲酰基, 氰基或 R 与 X 结合代表



Y_1, Y_2 和 Y_3 各分别代表氢, 卤素, 烷基, 烷氧基, 烷硫基或芳硫基。

X, Y 各分别代表氢, 羟基, 烷氧基, 酰氧基, 环 B, 卤素, 烷硫基或芳硫基或 X, Y 结合为 $=\text{O}$ 或 $=\text{NH}$,

R_1 和 R_3 各分别代表卤素, 烷氧基, 烷基, 卤代烷氧基, 任意取代的芳氧基, 芳烷氧基, 链烯基氧基, 炔氧基。

另一类化合物包括化合物 Ib, 其中 Y_1, Y_2 和 Y_3 又各分别代表芳烷氧基, 链烯基氧基或炔氧基。

B 尤其为嘧啶基, 特别是 4, 6-二甲氧基-2-嘧啶基。

A 尤其为如上定义的被取代的苯基或吡啶基。

X 和 Y 优选为氢, 卤素, 氰基, 羟基, 烷氧基或 X 和 Y 结合是 $=\text{O}$, 尤其是氢, 羟基或与 X 和 Y 结合是 $=\text{O}$ 。

根据本发明的另一类化合物 (化合物 Ic) 包括结构式 I 的那些化合物, 其中环状结构 A 为吡啶基,

R 为 CONR_7R_8 ,

其中 R_7' 和 R_8' 分别代表氢, 烷氧基, 烷基; 或芳基或芳烷基, 每个基团可未被取代或被取代,

X 为氢

Y 为 OR_3, SR_3 , 或 OCOR_3 ,

其中 R_3' 为烷基, 或芳基; 或芳烷基, 每个基团可以未被取代或被取代,

或 X 和 Y 结合代表 $=\text{O}$ 或 $=\text{S}$, 环状结构 B 为 m- CF_3 苯基。

在这类 Ic 化合物中, 优选的化合物是其中的 X 为 OH, Y 为 H, 或 X 和 Y 结合代表 $=\text{O}$, A 为 2-或 3-吡啶, R_7 为氢, 或烷基, 尤其是甲基, R_8 为苯基或苯甲酰基, 这些基团可以是未被取代或被取代, 例如, 被卤素, 烷基和 / 或烷氧基取代 1-3 次。

下列所示基团对每个取代基来说分别是优选的。

A) a) a) 和 b) 所示的基团

b) 苯基

c) 吡啶基

R a) 以游离酸或盐或酯形式的羧基或氨基甲酰基或单-或双-取代的氨基甲酰基

b) COOR_5 , 其中 R_5 为氢, 烷基, COO^-Ma^+ , 其中 Ma 为碱金属阳离子或 CONR_7R_8 , 其中 R_7 为氢或烷基, R_8 为烷基, 芳基或取代的芳基

c) $\text{COO}^-\text{Na}^+, \text{COOCH}_3, \text{CONHC}_6\text{H}_{13}, \text{CONH}(\text{CH}_3)$ 苯基

Y_1 a) 氢, 卤素, 烷基或烷氧基

b) 卤素, 尤其是氟或氯

Y_2, Y_3 a) 氢或卤素, 烷基或烷氧基

b) 氢或卤素

c) 氢

W_1 N

W_2 a) CH 或 N

b) CH

W_3 CR_3

W_4 N

W_5 a) CH 或 N

b) N

W_6 a) O

b) NH

Z a) 选自亚甲基, 取代的亚甲基, $-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-$ 的单元

b) $-\text{CH}_3-\text{C}-$; $-\text{C}-\text{CH}_2-$

X_1, X_2 a) 烷氧基, 尤其是甲氧基

b) 羟基

11

- X₃ a) 氢
b) 烷氧基, 尤其是甲氧基
- R₁R₃ a) 烷氧基, 尤其是甲氧基
- R₁ a) 卤素, 尤其是氯
b) 烷基, 尤其是甲基
- R₂ a) 烷基, 尤其是甲基
b) 氢
- R₅ a) 烷基, 链烯基或炔基
b) C₁₋₄ 烷基, 尤其是甲基或乙基
c) C₂₋₄ 链烯基
d) C₂₋₄ 炔基, 尤其是炔丙基
- R₆R₇ a) 烷基
b) 甲基, 乙基
- R₈ a) 氢
b) 烷基, 尤其是甲基或乙基
c) 芳基, 尤其是苯基
- R₉R₁₀ a) 氢或烷基
- R₁₂, R₁₅, R₁₉ b) 氢或甲基
- R₁₁ a) 烷基
b) 丙基 (正-或异-)
- Y₁ a) 烷基或烷氧基
b) CH₃ 或 CH₃O
- R₁₃, R₁₄ a) 氢或卤素
b) 氢或氟
- R₁₅ a) 烷基
b) C₁₋₄ 烷基, 尤其是甲基或乙基
- R₁₇ a) S(O)_n 烷基或 COOR₉
b) SO₂CH₃ 或 COOCH₃
- R₁₈ a) 氢
- R₂₀ a) 烷基或苯基
b) 甲基或苯基
- n a) 2
b) 0
- n' a) 2
b) 3
- n'' a) 1
b) 0
- m a) 1
b) 2
- X a) 羟基
b) 氢
c) 与 Y 结合, =O

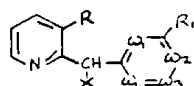
12

- d) 酰氧基
e) 烷氧基羰氧基
f) 氨基甲酰氧基
g) 磺酰氧基
- Y a) 与 X 结合, =O
b) 氢
- $$\text{X} + \text{R} - \overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}} - \text{O} -$$
- R' a) 烷基
b) 烷氧基
- R'' a) 烷基
b) 甲基
- R''' a) 烷基
b) 芳基, 尤其是苯基
- 环 A, 环 B a) 至少一个含有一个杂原子
b) 环 A = 苯基或吡啶
环 B = 噁啶, 尤其是 3, 5-甲氧基噁啶
- 上述所列的优选基团的组合物是特别优选的。一种这样的组合物包括结构式 (I) 的化合物, 其中
- A 为苯或吡啶基
- R 为以游离酸或盐形式的羧基; 氨基甲酰基; COOR₅'', 其中 R₅'' 为 C₁₋₅ 烷基或为 C₂₋₅ 链烯基或 CONR₇''R₈'' 其中
- R₇'' 为 C₁₋₁₂ 烷基, 氨基, C₁₋₄ 烷基氨基, 苯胺基, 卤代苯胺基, 苄基, 卤代苄基, C₁₋₄ 烷基苄基, C₁₋₄ 烷氧基苄基, 苯基, 卤代苯基, C₁₋₄ 烷基苯基或 C₁₋₄ 烷氧基苯基;
- R₈'' 为氢或 C₁₋₄ 烷基;
- Y₁, Y₂ 和 Y₃ 分别为氢或卤素;
- W₁ 和 W₄ 为 N;
- W₂ 为 CH;
- W₃ 为 CR₃ 其中 R₃ 为 C₁₋₅ 烷氧基;
- R₁ 为 C₁₋₅ 烷氧基;
- X 为羟基或 C₁₋₄ 烷氧基羰氧基或与 Y 结合为 =O;
- Y 为氢或与 X 结合为 =O; 或
- X 和 R 结合形成具有 -C(O)O- 结构的桥, 其中羰基连接在 A 上, Y 为氢或 C₂₋₈ 酰氧基。
- 本发明优选的化合物的例子是化合物编号如下的化合物; 13, 40, 53, 55, 58, 64, 77, 78,

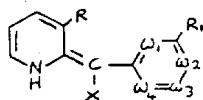
13

82, 91, 103, 111, 124, 125, 130, 143, 149, 163, 170, 175, 183, 199, 204, 205, 211, 219, 220, 224, 247, 249, 258, 262, 263, 265, 266, 267, 273 和 277。

具有如下结构的化合物

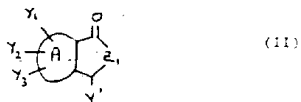


尤其是那些其中 X 为 CN 并可以交替互变的形式存在的化合物

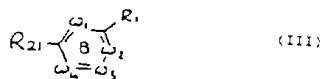


本发明的结构式 I 的化合物可如下制备。

a) 当 X 和 R 结合形成上述定义的桥基, 并 Y 为氢, 氰基, 芳硫基, 芳基亚硫酰基或芳基磺酰基时, 结构式 II 的化合物

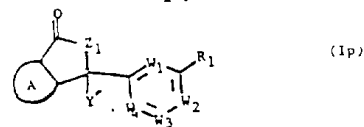


(其中 A 如上定义, Y'代表氢, 氰基, 芳硫基, 芳基亚硫酰基或芳基磺酰基, Z₁ 代表氧, 硫或 NR₂, 其中 R₂ 除了氢以外与上述定义的相同) 与结构式 III 的化合物反应



(其中 W₁, W₂, W₃, W₄ 与上述定义的相同, R₂₁ 代表甲基磺酰基或卤素) 得到结构式 Ip 的相应化合物

14



b) 处理结构式 Ip 的化合物, 其中 Y'代表氰基或芳基磺酰基, Z₁ 代表氧, 其他符号与上述定义相同。

(i) 通过水解能得到结构式 I 的相应化合物, 其中 R 和 X 形成桥, Y 为羟基, 或得到结构式 I 的化合物, 其中 X 和 Y 结合形成 =O

(ii) 用胺处理得到结构式 I 的相应化合物, 其中 R 为任意取代的氨基甲酰基, X 和 Y 结合形成 =O

(iii) 用一类 MOR₂₂ (其中 M 为碱金属, R₂₂ 为氢或烷基) 处理得到相应的化合物, 其中 R 和 X 形成桥, Y 为羟基或烷氧基

c) 水解结构式 Ip 的化合物 (其中 Y'代表氢, Z₁ 代表氧) 得到结构式 I 的化合物 (其中 R 为以任意盐形式的羧盐, X 为氢, Y 为羟基)

d) 开环结构式 Ip 的化合物 (其中 Y'代表羟基, Z₁ 代表氧) 得到结构式 I 的化合物, 其中 R 为以任意盐形式的羧基, X 和 Y 结合为 =O

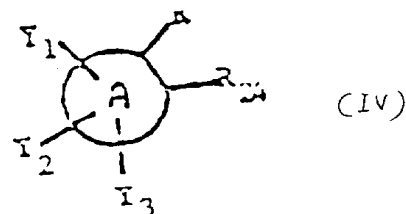
e) 酯化结构式 I 的化合物 (其中 R 为以任意盐形式的羧盐, X 和 Y 为 =O) 得到相应的化合物, 其中 R 为酯形式的羧基

f) 卤化结构式 Ip 的化合物 (其中 Y'代表羟基) 得到结构式 I 的化合物, 其中 X 和 R 结合形成桥基, Y'为卤素

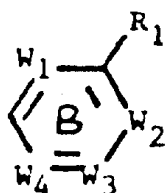
g) 结构式 Ip 的化合物 (其中 Z₁ 为氧, Y'为卤素) 与一类 R₂NH₂ 和一类 HOR₂₃ (其中 R₂₃ 代表烷基, 酰基或芳基, R₂ 与上述定义相同) 反应得到相应的化合物, 其中 Z₁ 为 NR₂, Y'为烷氧基, 芳氧基或酰氧基

h) 氧化结构式 Ip 的化合物 (其中 Y'代表氢) 得到相应的化合物, 其中 Y'代表羟基

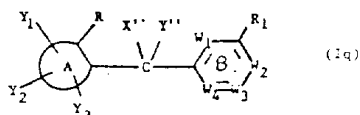
i) 结构式 IV 的化合物



与结构式 V 的化合物



反应制得结构式 Iq 的化合物



其中 A, R, R₁, W₁, W₂, W₃, W₄, Y₁, Y₂ 和 Y₃ 与上述定义的相同, X''和 Y''为氢, R₂₁ 为烷基, 尤其是甲基

j)单-或双-卤代结构式 Iq 的化合物 (其中 X''和 Y''为氢) 制得结构式 Iq 的相应化合物, 其中 X''和 Y''中的一个或两个都为卤素

k)氧化结构式 Iq 的化合物 (其中 X''和 Y''都为氢或 X''为卤素, Y''为氢) 制得相应的化合物, 其中 X''和 Y''结合代表 =O 或一个代表氢另一个代表羟基

l)烷基化结构式 Iq 的化合物 (其中 X''代表氢, Y''代表氢) 制得相应的化合物, 其 X''代表烷基, Y''代表氢

m)将烷氧基或烷硫基引入结构式 Iq 的化合物中 (其中 X''代表卤素, Y''代表氢) 制得相应的化合物, 其中 X''代表烷氧基或烷硫基, Y''代表氢

n)酰基化结构式 Iq 的化合物 (其中 X''代表羧基, Y''代表氢) 制得相应的化合物, 其中 X''代表酰氧基, Y''代表氢

O)结构式 Iq 的化合物 (其中 Z₁ 为氧, Y'为氢) 与一类 R₇NH₂(其中 R₇ 与上述定义相同) 反应得到结构式 I 的化合物, 其中 R 为单取代的氨基甲酰基, X 为氢, Y 为羟基

p)磺酰基化、氨基甲酰基化、酰基化或烷酯基化结构式 Iq 的化合物 (其中 Z₁ 为氧, Y'为羟基) 制得结构式 I 的相应化合物, 其中 R 和 X 形成了 -C(=O)-O- 桥, Y 代表磺酰氧基, 氨基甲酰氧基, 酰

氧基或烷氧基羧基

q)结构式 Iq 的化合物 (其中 Z₁ 为氧, Y'为卤素) 与一类 R₇R₈NH(其中 R₇ 和 R₈ 与上述定义相同; R 和 R₈ ≠ H) 反应制得结构式 I 的化合物, 其中 R 为双取代有氨基甲酰基, X 和 Y 结合代表 =O。

回收其中 R 为游离或酯形式的羧基或硫代羧基的任何化合物和其中 R 为游离或盐形式的羧基的任何化合物。

下表说明了适合的反应条件。(表见文后)

方法 a) 到 p) 也构成了本发明部分。

结构式 II 或 III 的原料是已知的或可用类似已知的方法制备。

结构式 I 的化合物在杂草萌前或萌发后施用于杂草或草地后可观察到其具有除草活性。

术语“除草剂”(或“除草的”)是指有效成分(或效应), 即由于植物生长的调节性或植物毒性, 限制植物生长的, 以致延缓了植物的生长或伤害了植物并足以杀死亡。

可按常规方法将除草有效量的结构式 I 的化合物施用于杂草或草地, 通常用量为 10 克至 10 千克/公顷。

本发明的化合物可在萌前和萌发后用于控制阔叶草和草丛。这些化合物在各种作物中也显示出选择性, 并且适合用于作物中, 以控制如谷物, 棉花, 小麦和大豆中的杂草。

结构式 I 的化合物的最佳应用对本专业普通技术人员来说可通过常规试验如温室试验和小块地试验而容易地测定出。这将取决于所用的化合物, 所需的效应(毒害效应所需化合物的量比植物生长调节效应所需的量更大), 处理的条件等。通常当结构式 I 的化合物以下列用量施用时可得到令人满意的毒害效应, 该用量为 0.01 至 5.0 千克/公顷, 更优选为 0.05 至 2.5 千克/公顷, 如 0.05 至 5.0 千克/公顷, 尤其是 0.1 至 2.5 千克/公顷。

结构式 I 的化合物对广谱性除草来说与其他除草剂混合是有利的。可与本发明的化合物混合的除草剂的例子包括那些选自下列可控制广谱性杂草的除草剂: 氨基甲酸酯, 硫代氨基甲酸酯, 氯代乙酰胺, 二硝基苯胺, 苯甲酸, 甘油醚, 哒嗪酮, 缩氨基脲, 尿嘧啶和尿素。

结构式 I 的化合物通常与农业上可接受的稀释剂结合作为除草组合物而使用。该组合物也是本发明的一个部分。该组合物除了含有结构式 I 的化合物作为活性剂外，也可含有其他的活性剂，如除草剂或具有解毒性、杀真菌性、杀虫性或诱虫性的化合物。组合物可以固体形式或液体形式使用，例如可以与常规稀释剂混合的可湿粉末形式或可乳化的浓缩物形式。该组合物可用常规方法制备，例如，通过有效成分与稀释剂和其他任意的制剂成分如表面活性剂混合制备。

农业上可接受的添加剂可用于除草组合物中以改善有效成分的性能和减少例如发泡，成块和腐蚀。

在此所用的术语“稀释剂”是指农业上可接受的任何液体或固体物质，该稀释剂可分别加到活性成分中，以使其更容易配制或改善应用形式，并具有有效的或所需的活性程度。稀释剂可以是例如滑石，高岭土，硅藻土，二甲苯或水。

在此所用的“表面活性剂”是指农业上可接受的物质，该物质提供了乳化性，扩展性，润湿性，分散性或其他表面改性能。表面活性剂的例子有木素磺酸钠和十二烷基硫酸钠。

以喷涂形式如水分散浓缩物或可湿粉末形式使用的特殊制剂可含有表面活性剂如润湿剂和分散剂，例如甲醛与萘磺酸盐的缩合产物，乙氧基化烷基酚和乙氧基化脂肪醇。

一般，该制剂包括 0.01 至 90%（重量）的活性剂和 0 至 20%（重量）的农业上可接受的表面活性剂，该活性剂含有至少一种结构式 I 的化合物或它们与其他活性剂的混合物。组合物的浓缩物形式通常含有约 2 至 90%（重量），优选约 5 至 70%（重量）的活性剂。制剂的应用形式例如可含有 0.01 至 20%（重量）的活性剂。

本发明的典型除草组合物在下列实施例 A，B 和 C 中得到了说明，实施例中的量为重量份数。

实施例 A 粉剂的制备

将 10 份根据本发明的一种化合物和 90 份粉末状滑石在机械研磨混合器中混合，并研磨至均匀为止，得到所需粒径的自由流动的粉剂。该粉剂适合直接用于杂草蔓延的场地。

实施例 B

可湿粉末的制备

将 25 份本发明的一种化合物与 25 份合成的细二氧化硅，2 份十二烷基硫酸钠，3 份木素磺酸钠和 45 份细分散的高岭土混合并磨细，直到平均粒径为约 5 微米。得到的可湿粉末在使用前用水稀释成具有所需浓度的喷雾水溶液。

实施例 C

可乳化浓缩物 (EC) 的制备

13.37 份本发明化合物与 1.43 份 Toximul360A(主要含有阴离子表面活性剂的阴离子和非离子表面活性剂的混合物)，5.61 份 Toximul360A(主要含有非离子表面活性剂的阴离子和非离子表面活性剂的混合物)，23.79 克二甲基甲酰胺和 55.8 份 Tenneco500-100(主要是烷基化芳族化合物如二甲苯和乙苯的混合物)在烧杯中混合，直到溶解为止。使用时将得到的 EC 用水稀释。

下列实施例说明了本发明的实验操作。温度为摄氏温度。本说明书中使用下列缩写词。

THF = 四氢呋喃

LDA = 二异丙基氨基化锂

RT = 室温

DMF = 二甲基甲酰胺

DDQ = 2, 3-二氯-5, 6-二氰基苯醌

NBS = N-溴丁二酰亚胺

DMSO = 二甲亚砜

MEK = 丁酮

DMAP = 二甲基氨基吡啶

除另有说明，下表 A 至 F 中列出的各个烷基取代基为“正”异构形式。

实施例 1

7-氯-3-(4, 6-二甲氧基-2-嘧啶基)-2-苯并[c]呋喃酮

(表 A，化合物编号 6)

将 1.68 克 (0.01 摩尔) 的 7-氯代 2-苯并[c]呋喃酮加入到 100 毫升的无水四氢呋喃中，并将该混合物冷却到 -70°C。然后在 3 分钟内加入 6.8 毫升 (0.01 摩尔) 的 1.5MLDA 并将反应混合物在 -70°C 下搅拌 15 分钟。然后加入含有 2.18 克 (0.01 摩尔) 2-甲基磺酰基-4, 6-二甲氧基嘧啶的 50 毫升四氢呋喃并将该混合物保持在 -75~-70°C 下搅拌 4 小时。该反应混合物用含 1.5 克 NH₄Cl 的 5 毫升水中和，升温并在转子蒸发器上浓缩。浓

缩物在 $\text{CH}_2\text{CH}_2/\text{H}_2\text{O}$ (各 50 毫升) 中分层, 将含水相分离并进一步用 30 毫升 CH_2Cl_2 处理。合并的 CH_2Cl_2 相用 30 毫升水洗滌, 分离并浓缩。该浓缩物在硅胶上用 80/20 己烷/乙酸乙酯 (500 毫升), 50/50 己烷/乙酸乙酯 (500 毫升) 和 80/20 丙酮/甲醇 (500 毫升) (30 次 \times 50 毫升) 进行闪式色谱分离。从己烷/ CH_2Cl_2 中再结晶后得到白色固体的标题化合物 (9-23 次), 熔点 148-149 $^\circ\text{C}$ 。

实施例 2

5-(4, 6-二甲氧基-2-嘧啶基)-咪喃并[3,4,b]吡啶-7(5H)-酮

(表 B, 化合物编号 40)

将含有 1.3 克 (0.0096 摩尔) 咪喃并[3,4,-b]吡啶-7-(5H)-酮的 50 毫升无水四氢咪喃溶液冷却到 -75 $^\circ\text{C}$, 然后在 5 分钟内逐滴加入 8 毫升 (0.0192 摩尔) 的 2.5M LDA。使该混合物在 -75 $^\circ\text{C}$ 下反应 1 小时, 并在 10 分钟内逐滴加入含有 2.1 克 (0.0096 摩尔) 2-甲基磺酰基-4, 6-二甲氧基嘧啶的 30 毫升无水四氢咪喃。将该混合物升温至室温, 加入 1.6 毫升 HCl 并蒸发掉四氢咪喃。将残余物溶于 75 毫升 CH_2Cl_2 中, 用水 (2 \times 50 毫升) 洗滌并浓缩有机相得到黄白色粘合固体, 将其用 50/50 己烷/乙酸乙酯 (500 毫升)、乙酸乙酯 (500 毫升) 和 80/20 丙酮/甲醇 (1000 毫升) (30 次) 在硅胶柱上进行色谱分离。结晶的残余物 (18-21 次) 为标题化合物, 具有 167-168 $^\circ\text{C}$ 的熔点。

实施例 3

7-氯-3-甲氧基-3-(4, 6-二甲氧基-2-嘧啶基)-2-甲基异氮(杂)茛基-1(3H)-酮 (表 C, 化合物编号 54)

将 0.5 克 7-氯-3-羟基-3-(4, 6-二甲氧基-2-嘧啶基)-2-苯并[c]咪喃酮, 30 毫升 CCl_4 , 2 毫升 SOCl_2 和 4 滴二甲基甲酰胺 (DMF) 的混合物在 65 $^\circ\text{C}$ 下加热 1.5 小时, 然后冷却, 在转子蒸发器上除去过量的 SOCl_2 和 CCl_4 。残余物用 20 毫升 CH_2Cl_2 稀释并在搅拌下在 0.5 小时内加入 5 毫升 40% 含水甲胺和 10 毫升甲醇的混合物。将该混合物放在转子蒸发器上并将残余物用 CH_2Cl_2 和水 (各 50 毫升) 分层。将有机相浓缩并用 50/50 己烷/乙酸乙酯 (800 毫升), 乙酸乙酯 (500 毫

升) 和 80/20 丙酮/甲醇 (200 毫升) (30 次 \times 50 毫升) 在硅胶上进行闪蒸色谱分离。得到黄色胶状产物 (19-21 次)。

实施例 4

7-氯-3-羟基-3-(4, 6-二甲氧基-2-嘧啶基)-2-苯并[c]咪喃酮

(表 A, 化合物编号 13)

将 1.8 克 7-氯-3-氟基-3-(4, 6-二甲氧基-2-嘧啶基)-2-苯并[c]咪喃酮, 50 毫升 1% NaOH 和 50 毫升四氢咪喃的混合物在室温下搅拌 3 小时。蒸发除去四氢咪喃并用水稀释该混合物并用乙酸乙酯萃取 2 次。将该水溶液用 2N- H_2SO_4 酸化。将得到的酸性溶液用 3 \times 100 毫升乙酸乙酯萃取, 混合有机相, 在 Na_2SO_4 上干燥并浓缩得到浅黄色固体。将这个残余物溶解在乙酸乙酯中, 用活性炭处理直到除去黄色基线物质, 从而得到白色固体的标题化合物, 熔点 188-190 $^\circ\text{C}$ 。

实施例 5

7-氯-3-甲氧基-3-(4, 6-二甲氧基-2-嘧啶基)-2-苯并[c]咪喃酮

(表 A, 化合物编号 30)

将 1.0 克 7-氯-3-氟基-3-(4, 6-二甲氧基-2-嘧啶基)-2-苯并[c]咪喃酮加到 20 毫升甲醇中使其成为浆状, 将该溶液用冰冷却并逐滴加入 0.6 毫升甲醇钠。在搅拌 10 分钟后进一步加入 1 毫升甲醇钠并且再持续搅拌 10 分钟, 将该混合物用 2N H_2SO_4 骤冷。用转子蒸发器除去甲醇, 残余物用水和乙酸乙酯分层。有机相放在 Na_2SO_4 上干燥并浓缩。用 25% 乙酸乙酯/己烷在硅胶上将残余物进行闪蒸色谱分离得到熔点为 180-183 $^\circ\text{C}$ 的白色固体。

实施例 6

a) 2-氯-6-(4, 6-二甲氧基-2-嘧啶基) 苯甲酸甲酯

(表 C, 化合物编号 55) 和

b) 7-氯-3-氯-(4, 6-二甲氧基-2-嘧啶基)-2-苯并[c]咪喃酮

(表 A, 化合物编号 21)

将 0.7 克 7-氯-3-羟基-3-(4, 6-二甲氧基-2-嘧啶基)-2-苯并[c]咪喃酮, 30 毫升 CCl_4 , 2 毫升 SOCl_2 和 4 滴二甲基甲酰胺 (DMF) 的混合物

在 60℃ 下回流 1.5 小时。将该混合物冷却，在转子蒸发器上除去过量的 SOCl_2 和 CCl_4 。残余物用 20 毫升 CH_2Cl_2 稀释并向搅拌过的该混合物中加入 10 毫升甲醇和 2 毫升二乙胺。在 2.5 小时后将该混合物在转子蒸发器上汽提从而除去过量的 CH_2Cl_2 和甲醇，残余物用 CH_2Cl_2 (50 毫升) 和水 (50 毫升) 分层。将有机相分离，浓缩，粘合的残余物用 80/20 己烷/乙酸乙酯 (500 毫升)、60/40 己烷/乙酸乙酯 (500 毫升) (28 次 × 50 毫升) 在硅胶上进行闪蒸色谱分离。第 18-20 次得到标题化合物 a)，第 11-16 次得到标题化合物 b)。

实施例 7

7-氯-3-氨基-3-(4, 6-二甲氧基-2-嘧啶基)-2-苯并[c]咪唑酮

(表 A, 化合物编号 27)

将 600 毫克 7-氯-3-氨基-2-苯并[c]咪唑酮加入到冰冷冷却的用己烷洗涤的 60% NaH (160 毫克) 的二甲基甲酰胺 (20 毫升) 悬浮液中，在 15 分钟后加入 710 毫克 2-甲基磺酰基-4, 6-二甲氧基嘧啶。在室温下搅拌 1.5 小时后，将该混合物倒入到用 $2\text{NH}_2\text{SO}_4$ 酸化的 200 毫升冰/水中并搅拌。将沉淀物过滤并在真空烘箱中干燥从而得到标题产物，熔点为 159-161℃。

实施例 8

7-氯-3, 3-二(4, 6-二甲氧基-1, 3, 5-三嗪-2-基)-2-苯并[c]咪唑酮

(表 A, 化合物编号 36)

将 1.48 克 7-氯代-2-苯并[c]咪唑酮溶于 80 毫升四氢呋喃中。将该溶液冷却到 -70℃ 并在 -70℃ 下在 3 分钟内注射含 1.5M LDA 的四氢呋喃 (6 毫升)。在 -70℃ 下持续搅拌 15 分钟，逐滴加入含有 1.54 克 2-氯-4, 6-二甲氧基-1, 3, 5-三嗪的 50 毫升四氢呋喃然后将该混合物升温到 -20℃。将该混合物再次冷却到 -70℃ 并加入溶有 1 毫升浓盐酸的 10 毫升水。将该混合物搅拌 25 分钟并使其升至室温，通过蒸发除去四氢呋喃。残余物用 CH_2Cl_2 和水 (各 50 毫升) 分层，含水相通过加入 30 毫升 CH_2Cl_2 萃取。混合的有机相用 30 毫升水洗滌并浓缩得到黄色胶。将该黄色胶用 60/40 己烷/乙酸乙酯 (1000 毫升)、乙酸乙酯 (400 毫升)，80/20 丙酮/甲醇 (500 毫升) (30 次 × 50 毫升，1 × 200 毫升) 在硅胶上进行闪蒸色谱分

离。第 21 和 22 次得到黄色胶，用己烷再结晶得到黄色固体的标题化合物，熔点 126-127℃。

实施例 9

2-氯-6-(4, 6-二甲氧基- α -羟基-2-嘧啶甲基) 苯甲酸锂

(表 C, 化合物编号 53)

将 1.0 克 7-氯-3-(4, 6-二甲氧基-2-嘧啶基)-2-苯并[c]咪唑酮，0.136 克 $\text{LiOH} \cdot \text{H}_2\text{O}$ ，2 毫升水和 10 毫升甲醇的混合物在室温下搅拌一整夜。将该混合物在转子蒸发器上蒸发至干。将其在干燥枪中进一步干燥得到白色固体的标题化合物，熔点 153-157℃。

实施例 10

3-[(4,6-二甲氧基- α -羟基-2-嘧啶基) 甲基]吡啶-2-羧酸锂 (表 D, 化合物编号 64)

将 0.490 克 5-(4, 6-二甲氧基-2-嘧啶基) 咪唑并[3, 4, b]-吡啶-7 (5H) -酮，0.0768 克 $\text{LiOH} \cdot \text{H}_2\text{O}$ ，10 毫升甲醇和 2 毫升水的混合物在氮气氛下在室温下搅拌 24 小时，汽提掉溶剂。将浅黄色固体进一步干燥 2 小时得到标题产物，熔点 > 250℃ 分解)。

实施例 11

2-氯-6-[(4, 6-二甲氧基-2-嘧啶基) 羰基] 苯甲酸钠

(表 C, 化合物编号 58)

将 1.24 克 7-氯-3-羟基-3-(4, 6-二甲氧基-2-嘧啶基)-2-苯并[c]咪唑酮，154 毫克 NaOH，25 毫升四氢呋喃和 25 毫升水混合直到得到黄色均相溶液。先在转子蒸发器上然后再在 100℃ 的 kugclrohr 上除去溶剂得到黄色固体的标题化合物，熔点 276-278℃。

实施例 12

3-[(4, 6-二甲氧基-2-嘧啶基) 羰基] 吡啶-2-羧酸

(表 D, 化合物编号 63)

将 490 毫克 5-(4, 6-二甲氧基-2-嘧啶基)-咪唑并[3, 4-b]吡啶-7 (5H) -酮溶于 50 毫升甲醇中并将该混合物在 50℃ 下搅拌并加热直到形成均匀溶液 (大约 0.5 小时)。逐滴加入 2.6 克 NaOCl，进一步将该溶液在 55℃ 下加热 0.5 小时。在 55℃ 下加入 0.208 克 50% NaOH 并在这个温度下将该混合物进一步加热 0.5 小时，然后在冰

浴中冷却并用 1 毫升浓 HCl 酸化。蒸发掉溶剂并将残余物用 50 毫升 CH_2Cl_2 和 50 毫升水分层。将有机相浓缩得到白色固体，熔点 71-73℃。

实施例 13

2-[(4, 6-二甲氧基-2-嘧啶基) - α -亚氨基甲基]苯甲酸

(表 C, 化合物编号 51)

将 2.67 克 2-溴代苯甲酸异丙酯溶于 100 毫升无水二乙醚中，将该溶液冷却到 -100℃ 并加入 6.6 毫升 1.6M 正-丁基锂溶液。连续搅拌 10 分钟然后在 -100℃ 下在 2 分钟内加入含有 12 克 2-氨基-4, 6-二甲氧基嘧啶的 60 毫升二乙醚。将该混合物在 -80℃ 下搅拌 0.5 小时，然后使其升至室温。将含 3 克 NH_4Cl 的 30 毫升水加入到该反应混合物中并用冰浴冷却。醚层分离出，用水洗涤 (2×30 毫升) 并浓缩。将胶状残余物溶入 20 毫升 85/15 己烷/乙酸乙酯， CH_2Cl_2 溶液中，然后用 800 毫升 85/15 己烷/乙酸乙酯，500 毫升含 1% 甲醇的乙酸乙酯，500 毫升含 5% 甲醇的乙酸乙酯和 500 毫升 80/20 丙酮/甲醇 (40 次×50 毫升，1 次×200 毫升) 在硅胶上进行闪蒸色谱分离。第 7-10 次得到标题化合物，并用 CH_2Cl_2 重结晶，其熔点 225-235℃。

实施例 14

5-氯-5-(4, 6-二甲氧基-2-嘧啶基) 咪喃并[3, 4, b]吡啶-7 (5H) -酮

(表 B, 化合物编号 68)

将 490 毫克 5-(4, 6-二甲氧基-2-嘧啶基) 咪喃并[3, 4, b]吡啶-7 (5H) 酮和 50 毫升甲醇的混合物在 55℃ 下加热 0.5 小时或直到均相溶液形成。逐滴加入 2.6 克 NaOCl (普通民用漂白剂)。将该混合物溶解在二氯甲烷中，分离有机相并蒸发至干燥得到标题化合物。

实施例 15

3-[(4, 6-二甲氧基-2-嘧啶基) 羰基]吡啶-2-羧酸

(表 E, 化合物编号 63)

在 55℃ 下将 0.208 克 50% NaOH 加入到含 0.551 克 5-氯-5-(4, 6-二甲氧基-2-嘧啶基) -咪喃并[3, 4, b]吡啶 (表 B, 化合物编号 68) 的 50 毫升甲醇中。在 55℃ 下将混合物进一步搅拌 0.5 小时，在冰浴中冷却，用 1 毫升浓 HCl 酸化并

蒸发掉溶剂。残余物在 50 毫升 CH_2Cl_2 和 50 毫升 H_2O 中分层，然后将 CH_2Cl_2 层浓缩从而得到 0.39 克白色固体的标题化合物，熔点 71-73℃。

实施例 16

2-(2-(4, 4-二甲基-咪唑啉-2-基)-苄基)-4, 6-二氯嘧啶

(表 C, 化合物编号 61)

在 N_2 气氛中在 -30℃ 温度下向含 1.25 克 2-邻-甲苯基-4, 4-二甲基-咪唑啉的 20 毫升乙醚混合物中注射加入 4.2 毫升己烷中的 1.6M 正-丁基锂溶液，同时搅拌并在 -10℃ 下持续搅拌 1 小时。然后缓慢地向该反应混合物中加入含 0.98 克 4, 6-二氯嘧啶的 20 毫升乙醚，并在 -45—30℃ 下搅拌 30 分钟，然后进一步在 0℃ 下搅拌 30 分钟。将反应混合物用含乙酸 (0.4 毫升) 和水 (0.1 毫升) 的四氢呋喃 (1.3 毫升) 骤冷，然后用含 1.5 克 2, 3-二氯-5, 6-二氨基苯醌 (DDQ) 的 6 毫升四氢呋喃处理。其温度升为室温，然后在冷却到 0℃ 后将混合物搅拌 5 分钟。加入 7.6 毫升 1N NaOH (冷却的) 并将混合物搅拌 5 分钟。分离有机相，在 Na_2SO_4 上干燥，过滤并除去溶剂。接着进行色谱分离 (10/90 乙醚/己烷) 得到标题化合物。

实施例 17

2-(2-(4, 4-二甲基-咪唑啉-2-基)-苄基)-4, 6-二甲氧基嘧啶

(表 C, 化合物编号 48)

向含 1.7 克 2-(2-(4, 4-二甲基-咪唑啉-2-基)-苄基)-4, 6-二氯嘧啶的 100 毫升甲醇中加入 2.18 克 25% 甲醇的 NaOCH_3 ，在搅拌同时将该混合物在 65℃ 下加热 10 小时。使温度降至 60℃，连续搅拌过夜。汽提掉溶剂并将残余物溶入 80 毫升甲苯和 50 毫升水中。分离甲苯层并用 50 毫升水洗滌，分离并浓缩得到黄色油状标题化合物。

实施例 18

2-2-(4, 4-二甲基-咪唑啉-2-基)- α -溴代苄基)-4, 6-二甲氧基嘧啶

(表 C, 化合物编号 62)

将 0.55 克 2-(2-(4, 4-二甲基-咪唑啉-2-基)-苄基)-4, 6-二甲氧基嘧啶，0.30 克 N-溴代琥珀酰亚胺，0.03 克过氧化苯甲酰溶于 60 毫升

CCl₄中并在75℃下回流加热隔夜。将反应混合物过滤，滤液用5%NaHCO₂溶液(50毫升)，50毫升水洗，分离有机相并浓缩得到标题化合物。

实施例 19

2-(2-(4,4-二甲氧基-咪唑啉-2-基)苯甲酰)4,6-二甲氧基吡啶

(表 C, 化合物编号 49)

在50-60℃并搅拌下将1.2克2-(2-(4,4-二甲氧基-咪唑啉-2-基)- α -溴代苄基)-4,6-二甲氧基吡啶和含2克Na₂CO₃的30毫升DMSO的混合物加热3小时。将该混合物倒入150毫升水中并用甲苯萃取。将甲苯萃取液用水(2×50毫升)洗涤2次并分离和浓缩。然后将得到的胶用800毫升80/20己烷/乙酸乙酯,500毫升70/30己烷/乙酸乙酯,60/40毫升己烷/乙酸乙酯(50毫升次)色谱分离,第29-34次得到标题化合物。

实施例 20

2-氯-6-(4,6-二甲氧基-2-咪唑基羰基)苯甲酸二甲酰胺

(表 C, 化合物编号 57)

将1.0克7-氯-3-氟基-3-(4,6-二甲氧基-2-咪唑基)-2-苯并[c]咪喃酮溶于15毫升四氢咪喃中。然后通过注射加入0.7毫升40%含水二甲胺溶液,溶液随后变黑。在室温下连续搅拌15分钟,然后用水稀释该混合物并用乙酸乙酯和水分层。分离有机相,并用2N H₂SO₄洗涤,然后用盐水洗涤,干燥和浓缩。残余物在硅胶上提纯,并用200毫升50%乙酸乙酯/己烷然后用100%乙酸乙酯洗提液洗提。第12-15次得到标题化合物,熔点141-142℃。

实施例 21

3-乙酰基-7-氯-3-(4,6-二甲氧基-2-咪唑基)-2-苯并[c]咪喃酮

(表 A, 化合物编号 125)

将1.1克7-氯-3-(4,6-二甲氧基-2-咪唑基)-3-羟基-2-苯并[c]咪喃酮溶于20毫升吡啶中并在搅拌下加入0.3毫升乙酰。在搅拌20分钟后,将该混合物倒入2NHCl中并用两份乙酸乙酯萃取。将合并的乙酸乙酯萃取液用2NHCl洗涤一

次,用H₂O洗涤一次,用盐水洗涤一次然后在硫酸镁上干燥。过滤并蒸发得到白色固体的标题化合物,熔点213-215℃。

实施例 22

3-[(4,6-二甲氧基- α -羟基-2-咪唑基)甲基]吡啶-2-羧基酰胺(carboxamide)

(表 E, 化合物编号 82)

将0.5克3-[(4,6-二甲氧基-2-咪唑基)-7-氮杂-2-苯并[c]咪喃酮加入到含0.9克氨的15毫升甲醇溶液中。在室温下搅拌2小时后,在减压下除去甲醇将浓缩物在甲苯中再结晶得到白色固体的标题化合物,熔点135-137℃。

实施例 23

3-[(4,6-二甲氧基-2-羟基-2-咪唑基)甲基]吡啶-2-[羧基-(4-异丙基)N-酰苯胺]

(表 E, 化合物编号 183)

在室温下向含3毫升4-异丙基苯胺的50毫升甲苯溶液中注射4毫升在己烷中的15.6%三甲基铝。将该混合物在室温下搅拌0.5小时,然后加入0.5克3-[(4,6-二甲氧基-2-咪唑基)-7-氮杂-2-苯并[c]咪喃酮。在室温下将该混合物搅拌2小时,在5-10℃下用30毫升10%盐酸酸化。将甲苯溶液分离,用20毫升10%盐酸,20毫升5%碳酸钠和20毫升水洗,干燥并浓缩,浓缩物用己烷再结晶得到白色固体的标题化合物,熔点113-114℃。

实施例 24

3-[(4,6-二甲氧基- α -(乙酯氧基)-2-咪唑基)甲基]吡啶-2-羧基酰胺(carboxamide)

(表 E, 化合物编号 129)

在室温下,向0.5克3-[(4,6-二甲氧基- α -羟基-2-咪唑基)甲基]吡啶-2-羧基酰胺,0.05克4-(二甲基氨基)吡啶,和1毫升三乙胺,20毫升甲苯和10毫升二氯甲烷的溶液中加入1毫升氯甲酸乙酯。在室温下搅拌1小时后,用水(2×30毫升)洗涤该混合物,并在转子蒸发器上干燥并浓缩。在50℃下将浓缩物用10毫升己烷-甲苯(V/V)混合物浸提,冷却到室温并过滤,分离得到0.45克为黄色固体的标题化合物,熔点112-114℃。

实施例 25

3-[(4,6-二甲氧基- α -苯甲酰基)-2-咪唑

基) 甲基]吡啶-2-(N, N-二苯甲酰基) 羧基酰胺

(表 E, 化合物编号 159)

在室温下向含 0.05 克 3-[(4, 6-二甲氧基- α -羟基-2-咪啶基) 甲基]-2-羧基酰胺, 0.5 克 4-(二甲基氨基) 吡啶和 4 毫升三乙胺的 30 毫升二氯甲烷溶液中分两次加入 1.4 克苯甲酰氯。在室温下将反应混合物搅拌 17 小时并用 30 毫升水, 30 毫升 5% 盐酸和 30 毫升水洗涤。将该二氯甲烷溶液浓缩, 浓缩液通过 300 毫升硅胶 (230-400 目), 并用 1 升 70/30 己烷-乙酸乙酯和 500 毫升 50/50 己烷-乙酸乙酯作为洗脱溶剂混合物进行闪蒸色谱分离。得到的第 18-21 次物质从 70/30 己烷乙酸乙酯中再结晶得到为白色固体的标题化合物, 熔点 168-170°C。

实施例 26

3-[(4, 6-二甲氧基- α -(N-甲基氨基甲酰氧基)-2-咪啶基) 甲基]-2-吡啶羧基 (N-烯丙基) 酰胺

(表 E, 化合物编号 133)

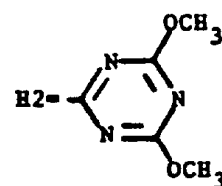
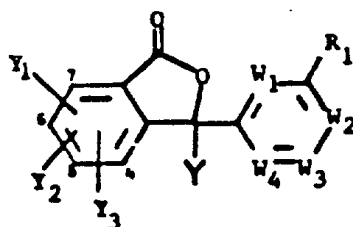
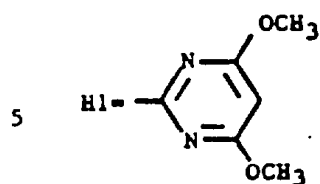
在室温并同时搅拌下向含 0.5 克 3-[(4, 6-二甲氧基- α -羟基-2-咪啶基) 甲基]-2-吡啶羧基 [N-烯丙基] 酰胺和 3 滴三乙胺的 20 毫升二氯甲烷溶液中加入 3 毫升异氰酸甲酯, 在 3 天内分三次加入 (1 毫升/天)。将反应混合物用水 (2 \times 50ml) 洗涤, 干燥并浓缩。浓缩物通过 300 毫升硅胶 (230-400 目), 并用 1 升 50/50 己烷-乙酸乙酯, 50 毫升乙酸乙酯, 500 毫升 80/20 乙酸乙酯甲醇分 34 次 (50m/m) 进行闪蒸色谱分离。第 21-25 次得到 0.4 克为黄色胶的标题产物。

下面的化合物可用类似前面的实施例或在此所述的其他方法制备。

反应条件




反应物	溶剂	温度	其他
a)1)a)碱如 LDA 或 b)碱如 NaH	1)和 2)惰性的 如 DMF,醚,环 醚如 THF ——	a)降低如-70℃ b)室温	
2)III b)i)1)碱如 NaOH 2)酸化	惰性的,如醚, 环醚如 THF 或 醇如甲醇	室温	
b)ii)1)胺	惰性的,如醚, 环醚如 THF		
b)iii)MOR ₂	醇如甲醇,环 醚如 THF		
c)碱如 LiOH	水任意含有醇 或环醚如 THF	室温	
d)碱如 NaOH	同 c)	室温	
e)卤化物如 IR ₅ 碱如 K ₂ CO ₂ ,NaH	惰性的,如 DMF, 2-丁酮(MEK)	升高如 50-80°	
f)卤化剂如 SOCl ₂ , DMF	惰性的,如卤化 烃如 CCl ₄ ,CH ₂ Cl ₂	升高如 50-80°	
g)1)R ₇ NH ₂₂ ;R ₂₃ OH	同 f)	升高如 50-80°	
h)1)氧化剂如 NaOCl 2)碱如 NaOH 3)酸如 HCl	1),2)和 3)惰性的, 如 H ₂ O 任意含有醇如甲醇 甲醇	升高如 50° 室温 室温	
i)1)碱如 LDA 2)AcOH 3)DDQ 4)含水 NaOH	1)无水的,惰性的,如 醚如环醚如 THF 2),3)和 4)醚,H ₂ O	降低如-30° 室温 降低如 0° 升高如 75°	
j)NBS,过氧化苯甲酰	惰性的,如卤代烃 如 CCl ₄	升高如 75°	
k)DMSO,Na ₂ CO ₂	DMSO	升高如 50-60°	
l)碱如 NaH,烷基 卤化物	惰性的,如醚,THF	0° → 室温	
m)MOR ₂₂ ,MSR ₂₂ 如 NaOCH ₂	惰性的,如 DMF,醇	室温 → 50°	
n)酰基氯如 CH ₂ CCl 或酐如 Ac ₂ O;胺 如三乙胺	惰性的,如醚, THF,吡啶	室温 → 30°	
o)胺,如 α-甲基 苄胺 或 胺,如苯胺, CH ₂ SO ₂ NH ₂ ;Mc ₃ Al (催化剂)	醇如甲醇 惰性的,如甲苯 CH ₂ Cl ₂	室温 → 80° 室温	
p)酰基氯如乙酰氯, 氯甲酸乙酯或酐; 胺如 DMAP,三乙胺 或 异氰酸盐如甲基异 氰酸盐,胺如三乙胺 或 磺酰氯如甲磺 酰氯;胺如三乙胺	惰性的,如醚 THF, 吡啶 惰性的,如醚 THF, 吡啶	室温 室温	
q)R ₇ R ₈ NH;三乙胺, DMAP	惰性的,如 CH ₂ Cl ₂	室温	

表A




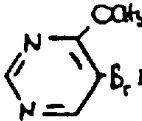

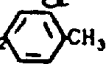



化合物
编号






熔点

	Y ₁	Y ₂	Y ₃	Y	W ₁	W ₂	W ₃	W ₄	R ₁	熔点 (°C)	
10	1	H	H	H	OH	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	136-138
	2	H	H	H	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	102-104
	3	H	H	H	OCCH ₃ O	N	C-Br	C-OCH ₃	N	OCH ₃	215-225
	4	H	H	H	H	N	C-Br	CH	N	OCH ₃	136-138
15	5	H	H	5-Cl	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	151-153
	6	7-Cl	H	H	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	148-149
	7	H	6-Cl	H	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	138-139
	8	H	H	H	H	N	CH	C-Cl	N	OCH ₃	152-153
	9	7-Cl	H	H	H	N	CH	C-Cl	N	OCH ₃	128-130
20	10	H	H	4-Cl	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	98-99
	11	7-CH ₃	H	H	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	138-140
	12	H	H	H	H	N	CH	C-Cl	N	CH ₃	133-135
	13	7-Cl	H	H	OH	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	188-190
	14	7-Cl	H	H	H	N	CH	C-OiC ₃ H ₇	N	OCH ₃	101-102
25	15	7-OCH ₃	H	4-Br	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	126-128
	16	7-Cl	H	H	H	N	CH	C-OCH ₂ CF ₃	N	OCH ₃	112-113
	17	7-Cl	H	H	H	N	CH	C-OCH ₃	N	O- 	136-138
30	18	7-Cl	H	H	H	N	CH	C-O-CH ₂ - 	N	OCH ₃	115-116
	19	7-Cl	H	H	H	N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₂ - 	85-88
	20	7-Cl	H	H	H	N	CH	C-OCH ₃	N	-OC ₂ H ₅	98-100
35	21	7-Cl	H	H	Cl	N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	163-165
	22	7-Cl	H	H	H	N	CH	C-OCH ₂ C=CCH ₃	N	-OCH ₃	131-133




表A(续)

化合物 编号		Y_1	Y_2	Y_3	Y	W_1	W_2	W_3	W_4	R_1	熔点 (°C)
5	23	7-Cl	H	H	SCH ₃	N	CH	C-OCH ₂ C=CCH ₃	N	-OCH ₃	134-136
	24	7-Cl	H	H	H	N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₂ CH=CH ₂	72-75
	25	7-Cl	H	H	H	N	N	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	157-160
	26	7-OCH ₃	H	H	H	N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	152-154
	27	7-Cl	H	H	CN	N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	159-161
10	28	7-Cl	H	H	CN	N	N	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	184-186
	29	7-Cl	6-Cl	H	H	N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	194-195
	30	7-Cl	H	H	OCH ₃	N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	180-183
	31	7-S 	H	H	CN	N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	169-171
	32	7-OCH ₃	6-OCH ₃	H	-S 	N	N	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	134-136
15	33	7-Cl	H	H	H 	N	CH	C-CH ₃	N	-CH ₃	164-166
	34	H	H	H		N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	163-176
	35	H	5-Cl	H	"H1"	N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	151-153
	36	7-Cl	H	H	"H2"	N	N	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	126-127
	37	H	H	H	OH	N	C-Cl	C-OCH ₃	N	OCH ₃	162-165
25	38	7-F	H	H	CN	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	132-134
	69	7-Cl	H	H	OC ₂ H ₅	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	148-151
	72	7-OCH ₃	H	H	CN	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	159-163
	73	H	H	H	CH ₃	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	87-89
	75	H	H	H	"H1"	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	168-170
30	88	7-Cl	H	H	H	N	CH	C-OCH ₂ 	N	-OCH ₃	胶, 核 磁共振
	98	7-Cl	H	H	H	N	CH	C-OCH ₂ 	N	-OCH ₃	97-98
35	101	7-Cl	H	H	H	N	CH	C-OCH ₂ 	N	-OCH ₃	125-127

表A(续)

化合物 编号	Y ₁	Y ₂	Y ₃	Y	W ₁	W ₂	W ₃	W ₄	B ₁	熔点
										(°C)
5										
102	7-Cl	H	H	H	N	CH	C-OCH ₂	N	-OCH ₃	83-85
104	7CH ₃ OC ₂ H ₄ - -OCH ₂ O-	H	H	CN	N	CH	C-OCH ₂	N	-OCH ₃	105-108
105	7CH ₃ OC ₂ H ₄ - -OCH ₂ O-	H	H	OH	N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	109-110
10										
109	7-F	H	H	OCH ₃	N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	172-173.5
113	7-F	H	H	H	N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	138-140
117	7-F	H	H	OH	N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	183.5-185.5
118	7-OH	H	H	OH	N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	121-122
15										
120	7-O-CH ₂ - 	H	H	CN	N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	174-176
125	7-Cl	H	H	乙酰基	N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	213-215
134	7-OH	H	H	OH	N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	138-141
20										分解
135	7CH ₃ SO ₂ O	H	H	CN	N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	159-161
137	7-OCON(C ₂ H ₅) ₂	H	H	CN	N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	123-125
138	7-炔丙 氧基	H	H	CN	N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	174-175
25										
139	7-OCH ₂ - 	H	H	CN	N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	170-171
140	7-OCH ₂ - 	H	H	CN	N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	169-172
145	7-OCH ₂ - 	H	H	H	N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	108-110
30										
146	7-OCH ₂ - 	H	H	H	N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	115-118
147	7-OCH ₃	H	H	OH	N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	174-176
153	7-炔丙 氧基	H	H	H	N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	130-131
35										

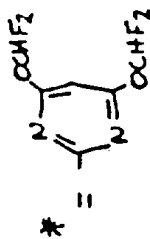
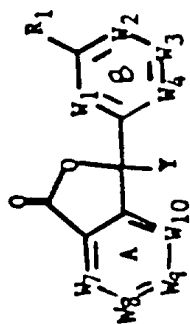
表A(续)

化合物 编号	Y ₁	Y ₂	Y ₃	Y	E ₁	E ₂	E ₃	E ₄	R ₁	熔点	
										(°C)	
5											
154	7-OCH ₂		H	H	CN	N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	182-185 分解
166	7-OCF ₃	H	H	OH	N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	131-132	
167	7-OCH ₃	H	H	乙氧基	N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	201-202	
10											
180	7-OCH₂		H	H	H	N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	133-136
190	7-Oallyl	H	H	H	N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	109-110	
195	7-CF ₃ O	H	H	乙氧基	N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	165-166	
203	7-Cl	H	H	丙酰氧基	N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	178-180	
15	204	7-Cl	H	己酰氧基	N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	131-133	
205	7-Cl	H	H	环丙基	N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	177-179	
208	7-Cl	H	H	羧氧基	N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	192-194	
240	7-Cl	H	H	苯甲酸基	N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	158-160	
20	250	7-Cl	H	巴豆酰氧基	N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	171-175	
253	7-Cl	H	4-Cl	肉桂酰氧基	N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	221-224	
256	7-Cl	H	H	羧基	N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	102-103	
258	7-Cl	H	H	丁烯氧基	N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	102-103	
25	263	7-Cl	H	4-Cl	OCCH ₃	N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	163-164
265	7-Cl	H	4-Cl	OCC ₂ H ₁₁	N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	87-91	
266	7-Cl	H	4-Cl	OC 	N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	137-138	
30	267	7-Cl	H	4-Cl	OCCH=CHCH ₃	N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	128-131
268	7-F	H	4-F	CN	N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	135-136	
269	7-Cl	H	4-Cl	CN	N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	123-126	
35	270	7-Cl	H	4-Cl	H	N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	156-161
307	4-Cl	H	H	OH	N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	146-150	

表A(续)

化合物 编号		X_1	X_2	X_3	Y	W_1	W_2	W_3	W_4	B_1	熔点 (°C)
5	319	4-Cl	H	H	CN	N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	132-133
	320	4-Cl	H	H	OCH ₃	N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	168-168.5
	326	7-Cl	H	H	OC(=O)C ₃ H ₇	N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	142-143
10	409	7-Cl	H	H	OC(=O)C ₄ H ₉	N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	162-163

表B




化合物
编号

化合物 编号	W ₇	W ₈	W ₉	W ₁₀	Y	W ₁₁	W ₂	W ₃	W ₄	W ₅	W ₆	R ₁	熔点 (°C)
10	39	CH	CH	N	H	N	CH	C-OCH ₃	N	N	N	-OCH ₃	149-151
	40	N	CH	CH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	N	N	-OCH ₃	167-168
	41	CH	CH	CH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	N	N	-OCH ₃	油核磁共振
	42	CH	N	CH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	N	N	-OCH ₃	120-126
	43	N	C-Cl	CH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	N	N	-OCH ₃	166-169
15	44	N	CH	C-C ₂ H ₅	H	N	N	C-OCH ₃	N	N	N	-OCH ₃	油核磁共振
	45	N	CH	CH	H	N	N	C-OCH ₃	N	N	N	-OCH ₃	75-80
	46	CH	C-C ₂ H ₅	CH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	N	N	OCH ₃	油核磁共振
	47	CH	CH	CH	CH ₃	N	CH	C-OCH ₃	N	N	N	OCH ₃	98-101
	68	N	CH	CH	Cl	N	CH	C-OCH ₃	N	N	N	OCH ₃	
20	70	N	CH	CH	"H1"	N	CH	C-OCH ₃	N	N	N	OCH ₃	173-176
	89	C-CH ₃	CH	CH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	N	N	-OCH ₃	129-131
	92	N	CH	CH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	N	N	-OCH ₃	116-119

表B (续)

化合物
编号

	<u>M₇</u>	<u>M₆</u>	<u>M₅</u>	<u>M₁₀</u>	<u>Y</u>	<u>M₁₁</u>	<u>M₂</u>	<u>M₃</u>	<u>M₄</u>	<u>R₁</u>	熔点 (°C)
5	93	N	CH	CH	H	N	CH	C-CH ₃	N	-CH ₃	193-195
	94	N	CH	CH	H	N	CH	C-Cl	N	-OCH ₃	147-149
	95	N	CH	CH	H	N	CH	C-OCH ₂ 	N	-OCH ₃	核磁共振 油
	99	N	CH	CH	H	N	CH	C-OC ₂ H ₅	N	-OCH ₃	140-142
	100	N	CH	CH	H	N	CH	C-OC ₂ H ₅	N	-OCH ₃	133-135
10	106	N	CH	CH	H	N	CH	C-Oallyl	N	-OCH ₃	112-114
	107	N	CH	CH	H	N	CH	-OOCCH ₂ -CH-CH ₂ CH ₃	N	-OCH ₃	核磁共振 油
	114	C-Cl	N	CH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	168-170
	121	C-OCH ₃	N	CH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	150-153
15	136	N	CH	CH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	H	分解 158-160
	141	N	CH	CH	*	N	CH	C-OCHF ₂	N	OCHF ₂	145-147
	148	CH	CH	CH	"H1"	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	212-213
	175	CH	CH	CH	OH	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	172-178
	260	C-CH ₃	N	CH	OH	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	203-204

表B(续)

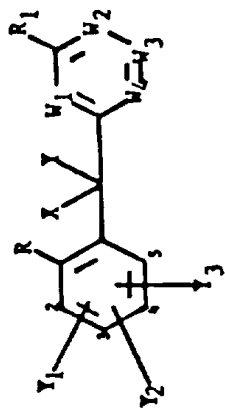
化合物 编号	M ₁	M ₀	M ₆	M ₉	M ₁₀	Y	M ₁₁	M ₂	M ₃	M ₄	R ₁	熔点 (°C)
261	C-COOH	N	CH	CH	CH	OH	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	130-132
317	N	CH	CH	CH	CH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	CH ₃	138-140
408	N	CH	CH	CH	CH	-N(CH ₃)OCH ₃	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	168-170

分解

5

10

表C



5

化合物


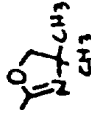
编号

熔点
(°C)

Y ₁	Y ₂	Y ₃	R	X	Y	W ₁	W ₂	W ₃	W ₄	B ₁	核磁共振
48	H	H		H	H	N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	油
49	H	H	—N—	—O—	N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	-OCH ₃	油
50	H	H		H	H	N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	150-152
51	H	H	COOH	—NH—	N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	-OCH ₃	225-235
52	2-Cl	H	CN	H	H	N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	游离酸 94-95
53	2-Cl	H	COOH	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	153-157 Li ⁺ 盐

20


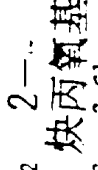
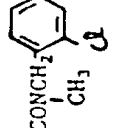
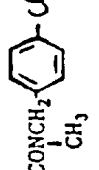
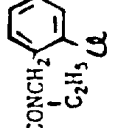
表C(续)

化合物 编号	X ₁	X ₂	X ₃	R	X	Y	M ₁	M ₂	M ₃	M ₄	R ₁	熔点 (°C)	核磁共振
54	2-Cl	H	H	-CO-N- CH ₃	OCH ₃	OCH ₃	N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	油	核磁共振
55	2-Cl	H	H	-COOCH ₃	-O	-O	N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	110-111	
56	2-Cl	H	H	-CONHCH ₃	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	130-132	
57	2-Cl	H	H	-CON(CH ₃) ₂	-O	-O	N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	141-142	
58	2-Cl	H	H	COOH	-O	-O	N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	276-278	Na ⁺ 盐
59	2-Cl	H	H	CONH- 	OCH ₃	H	N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	148-150	
60	H	H	H	COOH	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	-OCH ₃	185	分解
61	H	H	H		H	H	N	CH	C-Cl	N	Cl	Li ⁺ 盐	核磁共振
62	H	H	H	— —	Br	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃		
71	H	H	H	COOH	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	158-160	
74	H	H	H	COOH	OH	CH ₃	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	>250	Li ⁺ 盐
76	2-Cl	H	H	COOC ₂ H ₅	-O	-O	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	66-67	Li ⁺ 盐
77	2Cl	H	H	COOallyl	-O	-O	N	Cl	C-OCH ₃	N	OCH ₃	81-83	

表C(续)

化合物 编号	X_1	Y_2	Y_3	R	X	Y	W_1	W_2	W_3	W_4	R_1	熔点 (°C)
5	78 2Cl 79 2Cl 80 2Cl	H H H	H H H	COO- COO- -CO-N-	丁烯-3-基 苄基	-O -O OH	N N N	CH CH CH	C-OCH ₃ C-OCH ₃ C-OCH ₃	N N N	OCH ₃ OCH ₃ OCH ₃	48-50 99-101 99-101
10	81 2Cl 85 2Cl 86 H 87 H	H H H H	H H H H	-CO-N- -CO-N(C ₂ H ₅) ₂ COO- -CO-N-	1C ₃ H ₇ CH ₃ 苄基 苄基	OH -O OH OH	N N N N	CH CH CH CH	C-OCH ₃ C-OCH ₃ C-OCH ₃ C-OCH ₃	N N N N	OCH ₃ OCH ₃ OCH ₃ OCH ₃	153-154 110-111 核磁共振 161-163
15	96 2-Cl 103 2-Cl 115 2-F 116 2-F 122 H 123 2-Cl	H H H H H H	H H H H H H	-CO-N(C ₂ H ₅) ₂ -CONCH ₃ (苄基) -COOCH ₃ -COO- -COO- -COO 2	OH OH OH OH OH 甲基烯丙基	H -O -O -O -O -O	N N N N N N	CH CH CH CH CH CH	C-OCH ₃ C-OCH ₃ C-OCH ₃ C-OCH ₃ C-OCH ₃ C-OCH ₃	N N N N N N	OCH ₃ OCH ₃ OCH ₃ OCH ₃ OCH ₃ OCH ₃	74-80 105-107 101-104 97-99 92-93 137-139
20	124 2-Cl 126 2-Cl 143 2-Cl 156 2-OCH ₃ 163 2-F	H H H H H	H H H H H	-COO- -COO- -COO- -COO- -COOH	3-甲基 2-烯基 炔丙基 丁-2-烯基	-O -O -O -O H	N N N N N	CH CH CH CH CH	C-OCH ₃ C-OCH ₃ C-OCH ₃ C-OCH ₃ C-OCH ₃	N N N N N	OCH ₃ OCH ₃ OCH ₃ OCH ₃ OCH ₃	54-57 138-140 61-65 142-143 Li ⁺ 盐 220-240 分解

表C(续)

化合物 编号	Y ₁	Y ₂	Y ₃	R	X	Y	M ₁	M ₂	M ₃	M ₄	E ₁	熔点 (°C)
165	2-OCH ₃	H	H	H—COO—	烯丙基	-O	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	100-101 Li ⁺ 盐
181	2-OCH ₂ - 	H	H	COOH	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	158-159 Li ⁺ 盐
191	2-CF ₃ O	H	H	COOCH ₃		-O	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	80-82 分解 Li ⁺ 盐
192	3-Cl	H	H	COOH	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	170-174 分解 Li ⁺ 盐
194	5-Cl	H	H	COOH	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	225-227 分解 Li ⁺ 盐
197	4-Cl	H	H	COOH	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	195-198 分解 Li ⁺ 盐
202	2- 	H	H	COOH	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	>200 分解 Li ⁺ 盐
218	2-Cl	H	H	CONCH ₂ - 	OH	-O	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	油 核磁共振
219	2-Cl	H	H	CONCH ₂ - 	OH	-O	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	127-128
220	2-Cl	H	H	CONCH ₂ - 	OH	-O	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	154-155
222	2-OC ₃ H ₇	H	H	COOH	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	Li ⁺ 盐 >273 分解

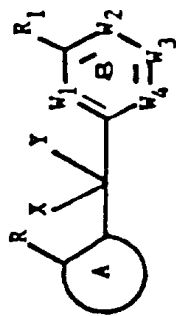
表C(续)

化合物 编号	X ₁	X ₂	X ₃	R	X	Y	M ₁	M ₂	M ₃	N	E ₁	熔点 (°C)
5	228	2-Cl	5-Cl	H	COOH	-O	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	Na ⁺ 盐 >210 分解
	235	2-Cl	5-Cl	H	COOH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	Na ⁺ 盐 >205 分解
	239	2-Cl	H	H	COOCH ₂ - -CH-CH-Cl	-O	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	86-87
10	242	2-Cl	H	H	CON ⁻ H ⁺ CH ₃	OCH ₃	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	112-113
	243	H	H	H	COOH	-O	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	Na ⁺ 盐 >295 分解
15	244	2-F	H	H	COOH	-O	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	Li ⁺ 盐 276 分解
	247	2-Cl	H	H	COOC ₃ H ₇	-O	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	63-65
	249	2-Cl	5-Cl	H	COOCH ₃	-O	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	130-132
	251	2-Cl	H	H	COOCH ₂ CH-CHCl	-O	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	107-108
20	262	2-Cl	5-Cl	H	COO烯丙基	-O	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	89-90 油核磁共振
	264	2-Cl	5-Cl	H	COOC ₁₂ H ₂₅	-O	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	Na ⁺ 盐 >295 分解
	274	2-F	5-F	H	COOH	-O	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	核磁共振
	277	2-Cl	H	H	COOC ₄ H ₉	-O	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	核磁共振
25	281	2-Cl	H	H	COOC ₃ H ₁₁	-O	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	核磁共振
	287	2-Cl	H	H	COOC ₆ H ₁₃	-O	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	70-71
	299	2-Cl	H	H	COOC ₇ H ₁₅	-O	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	核磁共振

表C(续)

化合物 编号	Y ₁	Y ₂	Y ₃	R	X	Y	M ₁	M ₂	M ₃	M ₄	R ₁	熔点 (°C)	核磁共振 Na ⁺ 盐	核磁共振 266-276 分解
5	300	H	H	COOC ₈ H ₁₇		-O	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃		核磁共振	
	306	H	H	COOH		-O	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃		核磁共振	
	308	H	H	COOC ₁₂ H ₂₅		-O	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃		核磁共振	
	314	H	H	COOCH ₂ C ₂ H ₅ CH ₃		-O	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	92-94	核磁共振	
10	315	H	H	CH ₂ OH	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	115-116	核磁共振	
	316	H	H	COOC ₃ H ₇		-O	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	109-110	核磁共振	
	321	H	H	COOCH ₃		-O	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	115-116	核磁共振	

表D


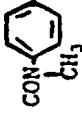
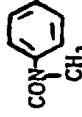


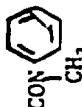



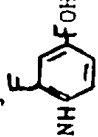

化合物 编号A(反时针方向)*	R	X	Y	V ₁	V ₂	V ₃	V ₄	V ₅	V ₆	熔点 (°C)
10	-S-CH-CH-		H	N	CH	C-OCH ₃	N	C-OCH ₃	OCH ₃	125-127
65	-C(=O)-		H	N	N	C-OCH ₃	N	C-OCH ₃	OCH ₃	油 核磁共振
66	-C(=O)-		H	N	N	C-OCH ₃	N	C-OCH ₃	OCH ₃	油 核磁共振
67	COOH	OH	CH ₃	N	CH	C-OCH ₃	N	C-OCH ₃	OCH ₃	Li ⁺ 盐 >283 分解
119	CONHCH ₃	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	C-OCH ₃	OCH ₃	油 核磁共振
142	COOC ₂ H ₅	CN	H	N	CH	C-OCH ₃	N	C-OCH ₃	OCH ₃	109-111
149	COOH	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	C-OCH ₃	OCH ₃	Li ⁺ 盐 160-165 分解
150	CONHC ₂ H ₅	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	C-OCH ₃	OCH ₃	油 核磁共振
173	COOH	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	C-OCH ₃	OCH ₃	142-145 分解
174	COOCH ₃	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	C-OCH ₃	OCH ₃	油 核磁共振
176	COOCH ₃			N	CH	C-OCH ₃	N	C-OCH ₃	OCH ₃	129-131
178	COOCH ₃	H	H	N	CH	C-OCH ₃	N	C-OCH ₃	OCH ₃	油 核磁共振

表D (续)

化合物 编号	Δ (反时针方向)*	R	X	Y	W ₁	W ₂	W ₃	W ₄	B ₁	熔点 (°C)
5	179	-C-N-CH-CH- OCH ₃	H	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	Li ⁺ 盐 >240 分解 147-149
	186	-C-N-CH-CH- OCH ₃	-O	-O	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	Na ⁺ 盐 235
10	187	-C-N-CH-CH- OCH ₃	-O	-O	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	125-126
	198	-C-N-CH-CH- OCH ₃	Br	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	Na ⁺ 盐 242 分解
	199	-CH-CH-CH-N-	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	油 核磁共振
15	206	-C-N-CH-CH- OCH ₃	acetoxy	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	油 核磁共振
	216	-C-N-CH-CH- OCH ₃	H	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	油 核磁共振
	236	-C-N-CH-CH- CH ₃	Br	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	油 核磁共振
20	237	-C-N-CH-CH- CH ₂ Br	Br	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	油 核磁共振
	238	-C-N-CH-CH- CH ₂ OCOCH ₃	Br	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	油 核磁共振
	248	-C-N-CH-CH- CH ₃	-O	-O	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	油 核磁共振 103-104
25										

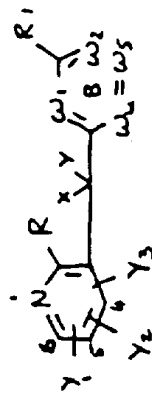
表D(续)

化合物 编号	Δ (反时针方向)*	B	X	Y	M ₁	M ₂	M ₃	M ₄	R ₁	熔点 (°C)
5	254	-C-N-CH-CH- CH ₃	COOH	-O	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	180-185 分解
	301	-CH-CH-CH-N-	CON(C ₂ H ₅) ₂	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	69-72 K ⁺ 盐
	302	-CH-CH-CH-N-	COOH	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	OCH ₃	220-230 分解
10	330	-CH-CH-CH-N-	CON(C ₂ H ₅) ₂	O=C ₆ H ₉	H	N	CH	C-OCH ₃	OCH ₃	油核磁共振
	414	-N-CH-CH-CH-	-C-N- O O-CH ₂ - 	OH	OH	N	CH	C-OCH ₃	OCH ₃	136-138
15	415	-CH-CH-CH-N-	CON- 	-O	CH	CH	CH	CH	CF ₃	
	416	-CH-CH-CH-N-	CON- 	OH	H	CH	CH	CH	CF ₃	
20	417	-CH-CH-CH-N-	CONH- 	OH	H	CH	CH	CH	CF ₃	
	418	-CH-CH-CH-N-	CONH- 	OH	H	CH	CH	CH	CF ₃	
	419	-N-CH-CH-CH-	-CON- 	-O	CH	CH	CH	CH	CF ₃	

化合物 编号		A (反时针方向) ^K		B	X	Y	M ₁	M ₂	M ₃	M ₄	R ₁	熔点 & point (°C)
5	420	-N-CH-CH-CH-	-CONH-		OH	H	CH	CH	CH	CH	CF ₃	
10	421	-N-CH-CH-CH-	-CONH-		OH	H	CH	CH	CH	CH	CF ₃	
	422	-N-CH-CH-CH-	-CONH-		OH	H	CH	CH	CH	CH	CF ₃	

* 左手原子连接在R — 承载碳上

表E



化合物




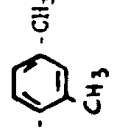

编号	Y ₁	Y ₂	Y ₃	R	X	Y	Y ₁	Y ₂	Y ₃	W ₁	W ₂	W ₃	W ₄	W ₅	熔点
63	H	H	H	COOH	-O	H	N	CH		C-OCH ₃			N	OCH ₃	164-166
64	H	H	H	COOH		H	N	CH		C-OCH ₃			N	OCH ₃	>250 (K·盐)
82	H	H	H	CONH ₂		H	N	CH		C-OCH ₃			N	OCH ₃	135-137
83	H	H	H	CONH ₂ 苄基		H	N	CH		C-OCH ₃			N	OCH ₃	核磁共振
84	H	H	H	CONH ₂ 烯丙基		H	N	CH		C-OCH ₃			N	OCH ₃	核磁共振
91	H	H	H	COOCH ₃		H	N	CH		C-OCH ₃			N	OCH ₃	119-121
97	H	H	H	COO 苄基	-O		N	CH		C-OCH ₃			N	OCH ₃	核磁共振
108	H	H	H	CONHCH ₃		H	N	CH		C-OCH ₃			N	OCH ₃	127-129
110	H	H	H	CONHC ₃ H ₇		H	N	CH		C-OCH ₃			N	OCH ₃	油核磁共振
111	H	H	H	CONHC ₆ H ₁₃		H	N	CH		C-OCH ₃			N	OCH ₃	67-69
112	H	H	H	CONH(1)C ₃ H ₇		H	N	CH		C-OCH ₃			N	OCH ₃	核磁共振
127	H	H	H	CONH ₂ 烯丙基		H	N	CH		C-OCH ₃			N	OCH ₃	核磁共振
128	H	H	H	CONH ₂ 烯丙基		H	N	CH		C-OCH ₃			N	OCH ₃	核磁共振
129	H	H	H	CONH ₂		H	N	CH		C-OCH ₃			N	OCH ₃	112-114

64: 游离酸熔点 90-92° ; 钠盐熔点 >190° ; 钾盐熔点 >230°
 (分解)

化合物









编号

表E(续)

Y ₁	Y ₂	Y ₃	R	X	Y	M ₁	M ₂	M ₃	M ₄	R ₁	熔点
H	H	H	CONHC ₁₂ H ₂₅	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	油 核磁共振
H	H	H	CONHC ₂ H ₄ OCH ₃	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	79-80
H	H	H	CONH ₂ NH ₂	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	75-78
H	H	H	CONH ₂ 烯丙基	OCONHCH ₃	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	核磁共振
H	H	H	CONH ₂ 炔丙基	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	102-104
H	H	H	CONH-CH(^{CH₃}) 	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	油 核磁共振
H	H	H	CONH-CH ₂ - 	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	油 核磁共振
H	H	H	CONHC ₁₆ H ₃₇	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	64-66
H	H	H	CONHCH ₂ - 	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	102-104
H	H	H	CONH ₂	苯甲酰基	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	115-116
H	H	H	CON(苯甲酰基) ₂	苯甲酰基	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	168-170
H	H	H	CONH CH ₂ - 	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	88-90
H	H	H	CONH ₂	OCO-  -C ₂ H ₅	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	138-140





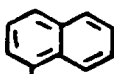

化合物

表E(续)cont.

化合物 编号	X ₁	Y ₁	Y ₂	Y ₃	B	X	Y	M ₁	M ₂	M ₃	M ₄	E ₁	熔点
162	H	H	H	H	CON(CO) C ₆ H ₅) ₂	OCO- 	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	198-200
164	H	H	H	H	CONHCH ₂ -  -OCH ₃	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	91-94
168	H	H	H	H	CONHCH ₂ -  -NO ₂	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	103-106
169	H	H	H	H	 -C(=O)-N-C(=O)-  -C ₂ H ₅		H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	135-137
170	H	H	H	H	CONHNH(c) C ₆ H ₅	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	109-110
171	H	H	H	H	CONHCH ₂ -  -C ₂ H ₅	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	核磁共振
172	H	H	H	H	 -NH ₂ CONHCH ₂	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	140-142
177	H	H	H	H	CONHC ₂ H ₅ N(CH ₃) ₂	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	核磁共振
182	H	H	H	H	CONHNH 	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	117-120

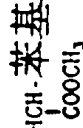

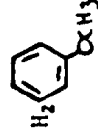



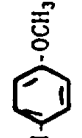

化合物

表E(续)

化合物 编号	Y ₁	Y ₂	Y ₃	R	X	Y	M ₁	M ₂	M ₃	M ₄	R ₁	熔点	
183	H	H	H	CONH-		OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	132-133
184	H	H	H	CONH-		OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	113-114
185	H	H	H	CONHSO ₂ CH ₃	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	133-135	
188	H	H	H	CONH-		OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	115-117
189	H	H	H	CONHCH ₂ COOCH ₃	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	97-99	
193	H	H	H	CONHCHCOOCH ₃ 1C ₃ H ₇	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	油 核磁共振	
196	H	H	H	CONHCH ₂ - 	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	油 核磁共振	
199	H	H	H	COOH	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	Na ⁺ 盐 89-91	
200	H	H	H	CONHCH ₂ - 	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	144-146	
201	H	H	H	CONHCH ₂ - 	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	油 核磁共振	

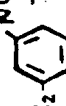

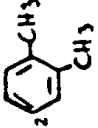






化合物

表E(续)

编号	Y ₁	Y ₂	Y ₃	R	X	Y	M ₁	M ₂	M ₃	M ₄	B ₁	熔点
207	H	H	H	CONH ₂	二氯代乙酸基	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	118-119
209	H	H	H	CONHCH ₂ - 	acetoxyl OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	核磁共振
210	H	H	H	CONHCH ₂ - 	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	119-121
211	H	H	H	CONHCH ₂ - 	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	125-127
212	H	H	H	CONHCH ₂ - 	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	油 核磁共振
213	H	H	H	CONHCH ₂ - 	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	油 核磁共振
214	H	H	H	CONHCH ₂ - 	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	油 核磁共振
215	H	H	H	CONH- 	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	119-120
217	H	H	H	CONH- 	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	182-183

化合物

表E(续)

化合物 编号	Y ₁	Y ₂	Y ₃	R	X	Y	Y ₁	Y ₂	Y ₃	Y ₄	R ₁	熔点
221	H	H	H	CONHCH ₂ 	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	105-106
223	H	H	H	CONHCH ₂ 	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	130-131
224	H	H	H	CONHNH 	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	149-150
225	H	H	H	CONHCH ₂ 	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	98-100
226	H	H	H	CONH-N 	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	40-42
227	H	H	H	CONHC ₂ H ₄ -N 	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	核磁共振
229	H	H	H	CONHNH 	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	121-123
230	H	H	H	CONHNH 	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	130-132
231	H	H	H	CONH 	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	138-140
232	H	H	H	CONH 	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	152-154
233	H	H	H	CONHC ₃ H ₆ (CH ₃) ₂	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	核磁共振
234	H	H	H	CONHC ₂ H ₄ N(C ₂ H ₅) ₂	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	核磁共振

化合物

表E (续)


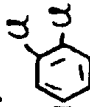
编号	X	Y	Y ₁	Y ₂	Y ₃	R	Z	M ₁	M ₂	M ₃	M ₄	B ₁	熔点 Li ⁺ 盐
	OH	*H ¹	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃						158-160
245	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃						150-154
246	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃						133-134
252	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃						150-151
255	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃						52-54
257	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃						核磁共振
259	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃						54-56
271	OH	N	CH	C-OCH ₃		N	OCH ₃						137-138
272		-O	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃						Li ⁺ 盐
													分解
273		-O	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃						210
													147-149

化合物

编号

表E(续)

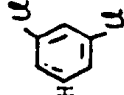
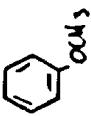


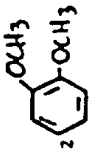
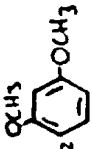
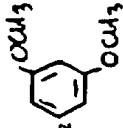
熔点

Y ₁	Y ₂	Y ₃	B	X	Y	M ₁	M ₂	M ₃	M ₄	N	B ₁	熔点
H	H	H	CONHNH	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N		OCH ₃	158-160
												
H	H	H	COOH		-O	N	CH	C-OCH ₃	N		OCH ₃	Na ⁺ 盐 195 分解 K ⁺ 盐 (255 分解 45-47 49-51
H	H	H	CONHC ₉ H ₁₉	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N		OCH ₃	
H	H	H	CONHC ₁₀ H ₂₁	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N		OCH ₃	
H	H	H	CONHNH	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N		OCH ₃	58-62
H	H	H	CONHCH ₂ IPr	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N		OCH ₃	103-105
H	H	H	CONHCH ₂ CH(OCH ₃) ₂	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N		OCH ₃	核磁共振
H	H	H	CONH-C(CH ₃) ₂ -C=CH	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N		OCH ₃	核磁共振
H	H	H	CONHC ₄ H ₉	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N		OCH ₃	核磁共振
H	H	H	CONHCH-CH ₂ OCH ₃ CH ₃	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N		OCH ₃	核磁共振
H	H	H	CONHNH	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N		OCH ₃	182-184
												

化合物

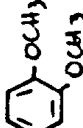






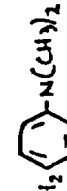
编号

表E(续)

Y ₁	Y ₂	Y ₃	R	X	Y	W ₁	W ₂	W ₃	W ₄	R ₁	熔点
H	H	H	CONHNH	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	181-183
											
H	H	H	CONH	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	核磁共振
											
H	H	H	CONHC ₆ H ₁₂ N(CH ₃) ₂	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	核磁共振
H	H	H	CONHC ₄ H ₈ N(CH ₃) ₂	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	核磁共振
H	H	H	CONHNH	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	131-132
											
H	H	H	CONHNH	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	124-126
											
H	H	H	CONHCH ₂	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	核磁共振
											
H	H	H	CONHCH ₂	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	88-90
											
H	H	H	CONHCH ₂	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	核磁共振
											


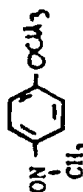
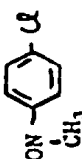

化合物

表E(续)

编号	Y ₁	Y ₂	Y ₃	R	X	Y	W ₁	W ₂	W ₃	W ₄	R ₁	熔点	核磁共振
298	H	H	H	CONHCH ₂ CHCH ₃ OH	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃		
303	H	H	H	CONH- 	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃		核磁共振
304	H	H	H	CONH- 	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	54-56	
305	H	H	H	CONHC- 	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃		D(+) 64-68 L(-)核磁共振
309	H	H	H	CONH- 	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	133-134	
310	H	H	H	CONH- 	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	102-104	
311	H	H	H	CONH- 	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	122-123	
312	H	H	H	CONHNH- 	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	126-128	
313	H	H	H	CONHCH ₂ - 	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	106-108	

化合物

表E(续)

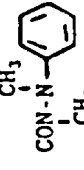
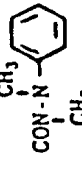
化合物 编号	Y ₁	Y ₂	Y ₃	R	X	Y	M ₁	M ₂	M ₃	M ₄	R ₁	熔点 Li ⁺ 盐	分解
318	H	H	H	COOH	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	CH ₃	185-188	Li ⁺ 盐 分解
322	H	H	H	COOH	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	CH ₃	>195	Li ⁺ 盐 分解
323	H	H	H	COOH	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	H	>225	Li ⁺ 盐 分解
324	H	H	H	COOH	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OC ₂ H ₅	195	Li ⁺ 盐 分解
325	H	H	H	COOH	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	Cl	225	Li ⁺ 盐 分解
327	H	H	H	CONH 	H	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	96-98	分解
328	H	H	H	CON 	H	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	114-116	分解
329	H	H	H	CON 	-O	-O	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	146-148	分解
379	H	H	H	CON(C ₂ H ₅) ₂	-O	-O	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃		
380	H	H	H	CON(C ₂ H ₅) ₂	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃		
381	H	H	H	CON(C ₃ H ₇) ₂	-O	-O	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃		
382	H	H	H	CON(C ₃ H ₇) ₂	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃		
383	H	H	H	CON  -OCH ₃	-O	-O	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃		

化合物

编号

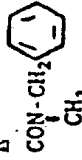
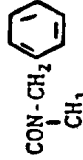
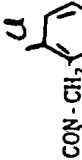
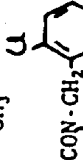
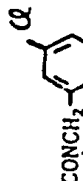
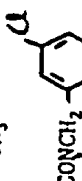


表E(续)

熔点

Y ₁	Y ₂	Y ₃	B	X	Y	M ₁	M ₂	M ₃	M ₄	R ₁
H	H	H	CON-OCH ₃ CH ₃	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃
H	H	H	CON(CH ₃) ₂			N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃
H	H	H	CON(CH ₃) ₂	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃
H	H	H				N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃
H	H	H		OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃
H	H	H	CON			N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃
H	H	H	CON	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃
H	H	H	CON			N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃
H	H	H	CON	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃
H	H	H	CONC ₆ H ₁₃ CH ₃			N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃
H	H	H	CONC ₆ H ₁₃ CH ₃	OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃

化合物
编号

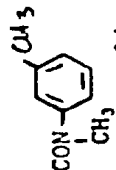
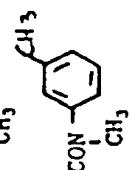
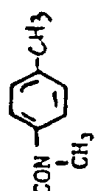
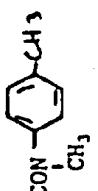

表E(续)

化合物 编号	Y ₁	Y ₂	Y ₃	R	X	Y	M ₁	M ₂	M ₃	M ₄	R ₁	熔点
395	H	H	H		OH	-O	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	
396	H	H	H		OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	
397	H	H	H		OH	-O	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	
398	H	H	H		OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	
399	H	H	H		OH	-O	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	
400	H	H	H		OH	H	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	
401	H	H	H		OH	-O	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	
402	H	H	H		OH	II	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	

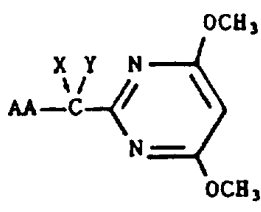
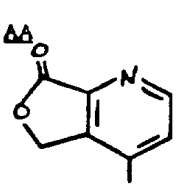
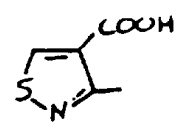
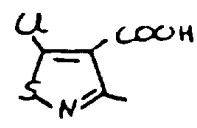
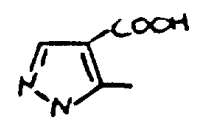
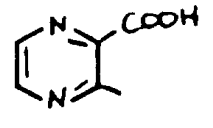
化合物

编号

表E(续)

Y ₁	Y ₂	Y ₃	B	X	Y	M ₁	M ₂	M ₃	M ₄	R ₁	熔点
403	H	H	H	CON- 	-O	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	
404	H	H	H	CON- 	OH	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	
405	H	H	H	CON- 	-O	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	
406	H	H	H	CON- 	OH	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	
407	H	H	H	CONHC ₂ H ₄ S 	OH	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	核磁共振 胶
411	H	H	H	CONHC ₂ H ₄ S _n C ₄ H ₉	OH	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	核磁共振 胶
413	H	H	H	CON-CH ₂ -C=CH CH ₃	-O	N	CH	C-OCH ₃	N	OCH ₃	核磁共振 胶

表F

化合物 编号		X	Y	熔点
90		H	H	123-125
331			-O	
332	— H —	OH	H	
333			-O	
334	— H —	OH	H	
335			-O	
336	— H —	OH	H	
337			-O	
338	— H —	OH	H	

化合物
编号

AA

表F(续)

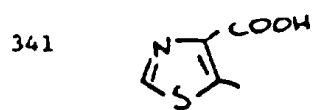
X Y 熔点



-O



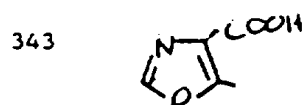
OH H



-O



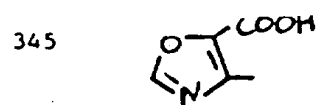
OH H



-O



OH H



-O



OH H



-O



OH H



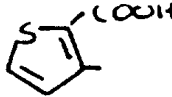
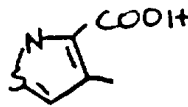
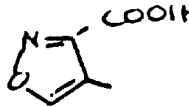
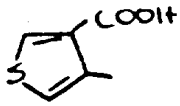
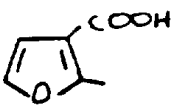
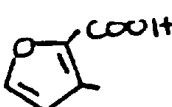
-O



OH H

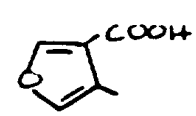
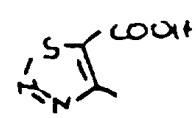
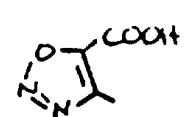
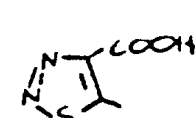
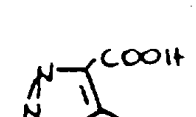
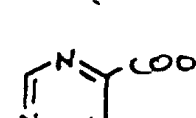
化合物
编号

表F(续)

化合物 编号	Δ	Y	熔点
351			-0
352	—— ——	OH	H
353			-0
354	—— ——	OH	H
355			-0
356	—— ——	OH	H
357			-0
358	—— ——	OH	H
359			-0
360	—— ——	OH	H
361			-0
362	—— ——	OH	H

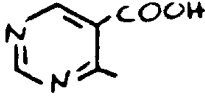
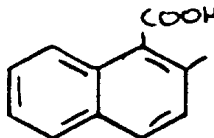
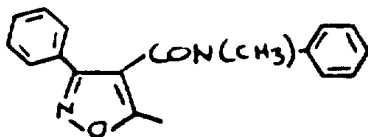
化合物
编号

表F(续)

化合物 编号	AA	X	Y	熔点
363			-O	
364	— —	OH	H	
365			-O	
366	— —	OH	H	
367			-O	
368	— —	OH	H	
369			-O	
370	— —	OH	H	
371			-O	
372	— —	OH	H	
373			-O	
374	— —	OH	H	

化合物
编号 ΔΔ

表F(续)

化合物 编号 ΔΔ	X	Y	熔点
375 		-O	
376 — " —	OH	H	
377 		-O	
378 — " —	OH	H	
410 	H	H	122-123
412 — " —	H	OtC ₆ H ₅	胶 核 磁共振

表F化合物中的COOH可用其它意义的R例如在上面表C, D和E中的R所取代, 且表F中的化合物可用类似的方法制备。

核磁共振 δ (^1H nmr (CDCl₃))核磁共振 δ (^1H nmr (CDCl₃))
化合物编号

- 5 41 δ : 3.95 (s, 6H, OCH₃), 5.95 (s, 1H, 嘧啶 H), 6.45 (s, 1H, OCH), 7.7-9.1 (m, 3H, 吡啶 H).
- 44 δ : 1.32 (t, 3H, CH₃), 2.87 (q, 2H, CH₂), 4.05 (s, 6H, OCH₃), 6.3 (s, 1H, OCH), 7.82 (d, 1H, 芳族的), 8.72 (d, 1H, 芳族的).
- 10 46 δ : 1.32 (t, 3H, CH₃), 2.85 (q, 2H, CH₂), 3.87 (s, 6H, OCH₃), 5.97 (s, 1H, 嘧啶 H), 6.32 (s, 1H, OCH), 8.08 (d, 1H, 吡啶 H), 8.71 (d, 1H, 吡啶 H).
- 48 δ : 1.25 (s, 6H, CH₃), 3.85 (s, 6H, OCH₃), 3.95 (2H, OCH₂), 4.65 (s, 2H, CH₂), 5.85 (s, 1H, 嘧啶 H), 7.2-8.0 (4H, 芳族的).
- 15 49 δ : 1.00 (s, 6H, CH₃), 3.65 and 3.75 (d of d, 2H, OCH₂), 6.05 (s, 1H, 嘧啶 H), 7.2-8.1 (4H, 芳族的 H).
- 54 δ : 2.9 (s, 3H, CH₃N), 3.10 (s, 3H, CH₃O), 3.90 (s, 6H 芳族的 OCH₃), 6.10 (s, 1H, 嘧啶 H), 7.2-7.9 (3H, 芳族的 H).
- 61 δ : 1.24 (s, 6H, CH₃), 3.98 (s, 2H, CH₂O), 4.74 (s, 2H, CH₂), 7.16 (s, 1H, 嘧啶 H).
- 20 65 δ : 3.96 (s, 6H, OCH₃), 5.96 (s, 1H, 嘧啶 H), 6.32 (s, 1H, OCH), 7.27 (d, 1H, 嘧吩基 H), 7.85 (d, 1H, 嘧吩基 H).
- 66 δ : 4.08 (s, 6H, OCH₃), 6.27 (s, 1H, OCH), 7.18 (d, 1H, 嘧吩基 H), 7.95 (d, 1H, 嘧吩基 H).
- 76 δ : 1.63 (t, 3H, CH₂CH₃), 3.91 (s, 6H, OCH₃), 4.1 (q, 2H, OCH₂), 6.08 (s, 1H, 嘧啶 H), 7.2-7.8 (m, 3H, 芳族的 H).
- 25 83 δ : 3.85 (s, 6H, OCH₃), 4.52-4.63 (d, 2H, NCH₂), 5.21-5.42 (s, 1H, OH), 5.80 (s, 1H, OCH), 6.82 (s, 1H, 嘧啶 H), 7.25 (s, 5H, 芳族的), 7.31-7.52 (m, 1H, 吡啶 H), 7.80-8.12 (d, 1H, 吡啶 H), 8.35-8.55 (d, 1H, 吡啶 H), 8.58-8.88 (s, 1H, NH).
- 30 84 δ : 3.85 (s, 6H, OCH₃), 4.05 (t, 2H, NCH₂), 5.0-5.45 (m, 3H, CH=CH₂), 5.85 (s, 1H, 嘧啶 H), 6.80 (s, 1H, OCH), 7.2-8.6 (m, 3H, 吡啶dine).
- 86 δ : 3.85 (s, OCH₃), 5.37 (s, OCH₂Ar), 5.85 (s, 嘧啶 H), 6.80 (d, OCH), 7.2-8.2 (m, 芳族的), 与化合物40的混合物
- 35 88 δ : 4.00 (s, 3H, OCH₃), 5.50 (s, 2H, OCH₂), 6.05 (s, 1H, 嘧啶 H), 6.27 (s, 1H, O-CH) 7.1-7.7 (m, 8H, 芳族的 H).
- 95 δ : 3.85 (s, 6H, OCH₃), 5.42 (s, 2H, OCH₂), 6.05 (s, 1H, OCH), 6.42 (s, 1H, 嘧啶 H), 7.05-7.35 (s, 5H, 芳族的), 7.35-7.768 (m, 11H, 吡啶 H), 7.78-8.1 (d, 1H, 吡啶 H), 8.81-9.01 (d, 1H, 吡啶 H).
- 40 97 δ : 3.80 (s, 6H, OCH₃), 5.35 (s, 2H, OCH₂Ar), 6.85 (s, 1H, 嘧啶 H), 6.65 (s, 1H, OCH), 7.15-8.6 (m, 8H, 芳族的), mixture 与化合物40的混合物

- 107 δ : 1.92 (s, 3H, C=CCH₃), 3.98 (s, 6H, OCH₃), 4.92 (s, 2H, OCH₂), 6.07 (s, 1H, OCH), 6.58 (s, 1H, 嘧啶), 7.52-7.88 (m, 1H, 吡啶), 8.10-8.32 (d, 1H, 吡啶), 8.90-8.91 (d, 1H, 吡啶).
- 5 110 δ : 0.75-1.12 (t, 3H, CH₃), 3.18-3.48 (m, 2H, CH₂), 3.81 (s, 6H, OCH₃), 4.42-4.91 (m, 3H, OH 和 NCH₂), 5.82 (s, 1H, OCH), 6.72 (s, 1H, 嘧啶), 7.21-7.52 (m, 1H, 吡啶), 7.82-8.08 (d, 1H, 吡啶), 8.32-8.61 (d, 1H, 吡啶).
- 10 112 δ : 1.12-1.31 (d, 6H, CH₃), 3.81 (s, 6H, OCH₃), 4.12-4.32 (m, 1H, NCH), 5.85 (s, 1H, OCH), 6.71 (s, 1H, 嘧啶), 7.21-7.52 (q, 1H, 吡啶), 7.81-8.09 (d, 1H, 吡啶), 8.12-8.31 (m, 1H, NH), 8.39-8.55 (d, 1H, 吡啶).
- 15 119 δ : 3.05 (d, 3H, NCH₃), 3.94 (s, 6H, OCH₃), 5.20 (s, 1H, OH), 5.75 (s, 1H, OCH), 5.98 (s, 1H, 嘧啶 H), 7.26 (d, 1H, 吡啶 H), 7.82 (q, 1H, NH), 8.28 (d, 1H, 吡啶 H).
- 127 δ : 3.75 (s, 6H, OCH₃), 4.05 (t, 2H, NCH₂), 5.05-5.5 (m, 3H, CH=CH₂), 5.85 (s, 1H, 嘧啶), 7.2-8.6 (m, 9H, 芳族的 + OCH).
- 128 δ : 2.20 (s, 3H, CH₃), 3.75 (s, 6H, OCH₃), 4.10 (t, 2H, NCH₂), 5.0-6.6 (m, 3H, CH=CH₂), 5.85 (s, 1H, 嘧啶), 7.2-8.6 (m, 5H, 吡啶 + NH, OCH).
- 20 130 δ : 0.75-1.61 (m, 15H, 脂族的), 1.61-3.02 (m, 8H, 脂族的), 3.15-3.61 (m, 2H, NCH₂), 3.81 (s, 6H, OCH₃), 5.82 (s, 1H, OCH), 6.81 (s, 1H, 嘧啶), 7.21-7.52 (q, 1H, 吡啶), 7.92-8.15 (d, 1H, 吡啶), 8.17-8.32 (m, 1H, NH), 8.35-8.52 (d, 1H, 吡啶).
- 25 133 δ : 2.85 (d, 3H, NCH₃), 3.85 (s, 6H, OCH₃), 4.10 (t, 2H, NCH₂), 5.0-6.0 (m, 3H, CH=CH₂), 5.85 (s, 1H, 嘧啶), 7.2-8.6 (m, 4H, 吡啶 + OCH).
- 30 150 δ : 0.96 (t, 3H, CH₃), 1.68 (m, 2H, CH₂CH₂CH₃), 3.50 (m, 2H, NCH₂), 3.93 (s, 6H, OCH₃), 5.92 (s, 1H, 嘧啶 H), 6.17 (d, 1H, OCH), 7.21 (d of d, 1H, 吡啶 H), 8.07 (d of d, 1H, 吡啶 H), 8.57 (d of d, 1H, 吡啶 H), 8.66 (t, 1H, NH).
- 35 151 δ : 1.41-1.61 (d, 3H, CH₃), 3.82 (s, 6H, OCH₃), 4.92-5.35 (m, 2H, NCH, OH), 5.81 (s, 1H, OCH), 5.85 (s, 1H, 嘧啶), 7.12-7.51 (m, 6H, 芳族的和吡啶), 7.82-8.10 (d, 1H, 吡啶), 8.38-8.50 (d, 1H, 吡啶), 8.51-8.82 (m, 1H, NH).
- 40 152 δ : 2.25 (s, 3H, CH₃), 3.89 (s, 6H, OCH₃), 3.42-3.61 (d, 2H, NCH₂), 5.81 (s, 1H, OCH), 6.85 (s, 1H, 嘧啶), 7.03 (s, 4H, 芳族的), 7.12-7.52 (q, 1H, 吡啶), 7.85-8.12 (d, 1H, 吡啶), 8.40-8.51 (d, 1H, 吡啶), 8.58-8.72 (m, 1H, NH).
- 171 δ : 1.24 (t, 3H, CH₃), 2.60 (q, 2H, CH₂), 3.86 (s, 6H, OCH₃), 4.62 (d, 2H, NCH₂), 5.86 (s, 1H, 嘧啶 H), 6.90 (d, 1H, OCH), 7.0-8.54 (m, 7H, 芳族的 H), 8.60 (bs, 1H, NH).
- 174 δ : 3.83 (s, 3H, OCH₃), 3.90 (s, 6H, OCH₃), 5.83 (s, 1H, 嘧啶 H), 6.60 (d, 1H, OCH), 7.30 (d of d, 1H, 吡啶 H), 8.23 (d of d, 1H, 吡啶 H), 8.70 (d of d, 1H, 吡啶 H).

- 177 δ : 2.20 (s, 6H, CH₃), 2.31-2.60 (m, 2H, CH₂N), 3.31-3.75 (q, 2H, NCH₂), 3.78 (s, 6H, OCH₃), 5.75 (s, 1H, OCH), 6.61 (s, 1H, 嘧啶), 7.13-7.42 (q, 1H, 吡啶), 7.71-7.91 (d, 1H, 吡啶), 8.31-8.51 (d, 1H, 吡啶).
- 5 178 δ : 3.85 (s, 9H, OCH₃), 3.95 (s, 3H, OCH₃), 4.14 (s, 2H, CH₂), 5.82 (s, 1H, 嘧啶), 6.90 (d, 1H, 吡啶), 8.12 (d, 1H, 吡啶).
- 187 δ : 3.70 (s, 9H, OCH₃), 5.82 (s, 1H, 嘧啶), 6.80 (d, 1H, 吡啶), 8.10 (d, 1H, 吡啶).
- 10 193 δ : 0.85-1.05 (d, 6H, CH₃), 3.85 (s, 6H, OCH₃), 4.53-4.82 (q, 1H, CH), 5.25-5.55 (m, 2H, OH and NCH), 5.82 (s, 1H, OCH), 6.88 (s, 1H, 嘧啶), 7.25-7.51 (q, 1H, 吡啶), 7.83-8.05 (d, 1H, 吡啶), 8.41-8.60 (d, 1H, 吡啶), 8.72-8.85 (d, 1H, NH).
- 15 196 δ : 3.78 (s, 6H, OCH₃), 4.51-4.78 (d, 2H, NCH₂), 5.35 (s, 1H, OH), 5.81 (s, 1H, OCH), 6.28 (s, 2H, 糖基), 6.81 (s, 1H, 嘧啶), 7.12-7.43 (m, 2H, 糖基), 7.82-8.05 (d, 1H, 吡啶), 8.31-8.43 (d, 1H, 吡啶), 8.52-8.71 (m, 1H, NH).
- 20 201 δ : 1.87-2.04 (m, 4H, CH₂ 和四氢呋喃), 3.71-3.92 (m, 9H, OCH₃ 和四氢呋喃), 5.86-5.87 (m, 2H, OCH 和 OH), 6.71 (d, 1H, 嘧啶), 7.31-7.42 (d, 1H, 吡啶), 7.81-7.92 (d, 1H, 吡啶), 8.41-8.50 (d, 2H, NH 和吡啶).
- 206 δ : 2.22 (s, 1H, CH₃), 3.85 (s, 6H, OCH₃), 3.92 (s, 3H, OCH₃), 3.97 (s, 3H, OCH₃), 5.86 (s, 1H, 嘧啶), 6.80 (s, 1H, OCH), 7.10 (d, 1H, 吡啶), 8.16 (d, 1H, 吡啶).
- 25 209 δ : 3.63-3.74 (t, 9H, OCH₃), 5.48-5.81 (m, 4H, CHO, OH, COCH), 6.88-7.42 (m, 8H, 苯基, 嘧啶, 吡啶), 7.94-7.97 (d, 1H, 吡啶), 8.45-8.47 (d, 1H, 吡啶), 9.24-9.26 (d, 1H, NH).
- 30 212 δ : 3.85 (s, 6H, OCH₃), 4.41-4.52 (m, 2H, NCH₂), 5.21-5.72 (d, s, 4H, NH₂, OCH, OH), 6.61 (s, 1H, 嘧啶), 7.12-7.32 (m, 3H, 吡啶), 7.71-7.80 (m, 3H, 吡啶, 二苯砜), 8.3 (d, 1H, 吡啶), 8.71 (m, 1H, NH).
- 35 213 δ : 3.61 (s, 6H, OCH₃), 4.60-5.18 (m, 3H, ArCH₂, OH), 5.72 (s, 1H, OCH), 6.72 (s, 1H, 嘧啶), 7.15-7.17 (t, 5H, 吡啶), 7.84-7.86 (d, 1H, 吡啶), 8.38-8.44 (d, 2H, 吡啶), 9.12 (s, 1H, NH).
- 40 214 δ : 3.75 (s, 6H, OCH₃), 4.72-4.74 (d, 2H, NCH₂), 5.84 (s, 1H, OCH), 6.86-6.96 (d, 3H, 嘧啶, 苯硫基), 7.14-7.16 (d, 1H, 吡啶), 7.32-7.36 (d, 1H, 吡啶), 7.94-7.97 (d, 吡啶), 8.39-8.40 (d, 1H, 吡啶), 8.71 (d, 1H, NH).
- 216 δ : 1.31 (t, 3H, CH₃), 2.62 (s, 3H, CH₃), 3.87 (s, 6H, OCH₃), 4.21 (s, 2H, CH₂), 4.40 (q, 2H, OCH₂), 5.83 (s, 1H, 嘧啶), 7.13 (d, 1H, 吡啶), 8.44 (d, 1H, 吡啶).
- 218 δ : 2.84 (3.08) (s, 3H, NCH₃), 3.92 (s, 6H, OCH₃), 4.50-5.03 (m, 2H, NCH₂), 6.10 (s, 1H, 嘧啶), 7.10-7.80 (m, 7H, 芳族的).

- 227 δ : 1.50 (m, 6H, CH₂), 2.40 (m, 6H, NCH₂), 3.55 (q, 2H, NCH₂), 3.80 (s, 6H, OCH₃), 5.85 (s, 1H, 嘧啶-H), 6.70 (s, 1H, OCH), 7.15-8.60 (m, 1H, 3 吡啶: H + NH).
- 5 233 δ : 1.80 (q, 2H, CH₂), 2.25 (s, 6H, NCH₃), 2.35 (q, 2H, NCH₂), 3.45 (q, 2H, NCH₂), 3.80 (s, 6H, CH₃), 5.80 (s, 1H, 吡啶-H), 6.65 (s, 1H, OCH), 7.15-8.50 (m, 3H, 吡啶: -).
- 234 δ : 1.00 (t, 6H, CH₃), 2.60 (m, 6H, NCH₂), 3.50 (q, 2H, NCH₂), 3.92 (s, 6H, OCH₃), 5.80 (s, 1H, 嘧啶-H), 6.80 (s, 1H, OCH), 7.15-8.7 (m, 3H, 吡啶: -).
- 10 236 δ : 1.37 (t, 3H, CH₃), 2.56 (s, 3H, CH₃), 3.87 (s, 6H, OCH₃), 4.43 (q, 2H, OCH₂), 5.87 (s, 1H, 嘧啶-H), 6.12 (s, 1H, CHBr), 7.90 (d, 1H, 吡啶-H), 8.56 (d, 1H, 吡啶-H).
- 237 δ : 1.40 (t, 3H, CH₃), 3.87 (s, 6H, OCH₃), 4.43 (q, 2H, OCH₂), 4.70 (s, 2H, CH₂Br), 5.88 (s, 1H, 嘧啶-H), 6.23 (s, 1H, CHBr), 8.07 (d, 1H, 吡啶-H), 8.65 (d, 1H, 吡啶-H).
- 15 238 δ : 1.37 (t, 3H, CH₃), 2.06 (s, 3H, CH₃), 3.88 (s, 6H, OCH₃), 4.40 (q, 2H, OCH₂), 5.28 (s, 2H, OCH₂), 5.87 (s, 1H, 嘧啶-H), 6.23 (s, 1H, CHBr), 8.04 (d, 1H, 吡啶-H), 8.64 (d, 1H, 吡啶-H).
- 20 257 δ : 3.82 (s, 6H, OCH₃), 4.06 (s, 2H, NCH₂), 5.05-5.10 (s, 1H, OH), 5.42-5.45 (s, 1H, NH), 5.87 (s, 1H, OCH), 6.76-6.86 (s, 1H, 嘧啶-H), 7.32-7.38 (m, 6H, 吡啶, 芳族的), 7.94-7.98 (d, 吡啶), 8.45-8.49 (d, 1H, 吡啶), 9.55 (s, 1H, NH).
- 264 δ : 0.8-1.9 (br s, 25H, 脂族的), 3.85-3.90 (s, 6H, 2XOMe), 6.15 (s, 1H, ArH, 嘧啶), 7.4 (s, 2H, ArH).
- 25 277 δ : 0.90 (t, 3H, CH₃), 1.2-1.7 (m, 4H, 脂族的), 3.95 (s, 6H, OCH₃), 4.08 (t, 2H, OCH₂), 6.15 (s, 1H, 嘧啶-H), 7.5-7.7 (m, 3H, 芳族的).
- 281 δ : 0.90 (t, 3H, CH₃), 1.3 (m, 4H, 脂族的), 1.6 (m, 2H, 脂族的), 3.95 (s, 6H, OCH₃), 4.08 (t, 2H, OCH₂), 6.15 (s, 1H, 嘧啶-H), 7.4-7.7 (m, 3H, 芳族的).
- 30 283 δ : 3.40 (s, 6H, OCH₃), 3.43 (m, 2H, NCH₂), 3.82 (s, 6H, OCH₃), 4.47 (t, 1H, CH), 5.86 (s, 2H, OCH, OH), 6.77 (s, 1H, 嘧啶-H), 7.41-7.43 (m, 1H, 吡啶), 7.94-7.98 (d, 1H, 吡啶), 8.47-8.48 (d, 1H, NH).
- 35 284 δ : 1.71-1.76 (s, 6H, CH₃), 2.31 (s, 1H, C=CH), 3.82 (s, 6H, OCH₃), 5.61-5.63 (d, 1H, OH), 5.85 (s, 1H, OCH), 6.86-6.96 (d, 1H, 嘧啶-H), 7.44-7.48 (m, 1H, 吡啶), 7.94-7.98 (d, 1H, 吡啶), 8.44-8.45 (d, 2H, NH).
- 40 285 δ : 0.75-1.13 (m, 4H, 芳族的), 1.28-1.77 (m, 3H, 芳族的), 3.23-3.52 (m, 2H, NCH₂), 3.82 (s, 6H, OCH₃), 5.73-5.88 (m, 2H, OH, OCH), 6.60-6.81 (d, 1H, 嘧啶-H), 7.21-7.45 (q, 1H, 吡啶), 7.78-8.01 (d, 1H, 吡啶), 8.32-8.55 (d, 2H, 吡啶, NH).

- 286 δ : 1.21-1.32 (d, 2H, CH₂O), 3.38-3.58 (d, 6H, CH₃), 3.85 (s, 6H, OCH₃), 4.18-4.48 (m, 2H, NCH, OH), 5.88 (s, 1H, OCH), 6.73 (s, 1H, 嘧啶), 7.28-7.52 (q, 1H, 吡啶), 7.81-8.08 (d, 1H, 吡啶), 8.43-8.62 (d, 2H, 吡啶, NH).
- 5 290 δ : 3.74 (s, 9H, OCH₃), 5.44 (bs, 1H, OH), 5.73 (s, 1H, 嘧啶), 6.62 (bs, 1H, OCH), 6.9-8.6 (m, 芳族的, 7H), 10.22 (s, 1H, NH).
- 291 δ : 1.40 (m, 8H, CH₂), 2.28 (s, 6H, NCH₃), 2.68 (m, 2H, NCH₂), 3.40 (m, 2H, NCH₂), 3.80 (s, 6H, OCH₃), 5.80 (s, 1H, 嘧啶), 6.70 (s, 1H, OCH), 7.2-8.6 (m, 4H, 吡啶-H + OH).
- 10 292 δ : 1.60 (m, 4H, CH₂), 2.25 (s, 6H, NCH₃), 2.25 (m, 2H, NCH₂), 3.48 (m, 2H, NCH₂), 3.65 (s, 6H, OCH₃), 5.80 (s, 1H, 嘧啶), 6.65 (s, 1H, OCH), 7.2-8.6 (m, 4H, 吡啶 + OH).
- 295 δ : 3.74 (s, 6H, OCH₃), 3.80 (s, 6H, OCH₃), 4.50 (d, 2H, NCH₂), 5.84 (s, 1H, 嘧啶), 6.5-8.6 (m, 8H, 芳族的, OCH, NH).
- 15 297 δ : 3.65 (s, 6H, OCH₃), 3.77 (s, 6H, OCH₃), 4.50 (d, 2H, NCH₂), 5.64 (d, 1H, OH), 5.80 (s, 1H, 嘧啶), 6.25-6.60 (m, 3H, 芳族的), 6.8 (d, 1H, OCH), 7.2-8.6 (m, 3H, 吡啶).
- 298 δ : 3.82 (s, 6H, OCH₃), 5.81 (s, 1H, OCH), 6.29-7.58 (m, 8H, OH, NH, 嘧啶, 芳族的, 吡啶), 7.80-8.25 (d, 1H, 吡啶), 8.48-8.62 (d, 1H, 吡啶), 9.74-9.93 (br, 1H, NH).
- 20 299 δ : 0.85 (t, 3H, CH₃), 1.2 (m, 8H, 脂族的), 1.6 (m, 2H, 脂族的), 3.95 (s, 6H, OCH₃), 4.08 (t, 2H, OCH₂), 6.15 (s, 1H, 嘧啶-H), 7.4-7.7 (m, 3H, 芳族的).
- 25 300 δ : 0.90 (t, 3H, CH₃), 1.2 (m, 10H, 脂族的), 1.6 (m, 2H, 脂族的), 3.95 (s, 6H, OCH₃), 4.08 (t, 2H, OCH₃), 4.08 (t, 2H, OCH₂), 6.15 (s, 1H, 嘧啶-H), 7.4-7.7 (m, 3H, 芳族的).
- 303 δ : 3.80 (s, 6H, OCH₃), 3.90 (d, 6H, OCH₃), 5.45 (d, 1H, OH), 5.80 (s, 1H, 嘧啶), 6.85 (s, 1H, OCH), 7.0-8.6 (m, 6H, 芳族的), 10.2 (s, 1H, NH).
- 30 305L(-) δ : 1.60 (d, 3H, CH₃), 3.75 (2s, 6H, OCH₃), 5.25 (m, 1H, OH), 5.75 (s, 1H, 嘧啶), 6.75 (d, 1H, OCH), 7.2-8.6 (m, 8H, 芳族的).
- 308 δ : 0.88 (t, 3H, CH₃), 1.25 (bs, 18H, 脂族的), 1.6 (m, 2H, 脂族的), 3.95 (s, 6H, OCH₃), 4.07 (t, 2H, O-CH₂), 6.15 (s, 1H, 嘧啶-H), 7.55-7.7 (m, 3H, 芳族的).
- 35 330 δ : 1.05 (m, 6H, NCH₂CH₃), 1.27 (s, 9H, C(CH₃)₂), 2.3 (m, 4H, NCH₂), 3.8 (s, 6H, OCH₃), 5.8 (s, 1H, 嘧啶-H), 5.9 (s, 1H, CH-Ot-Bu), 7.18 (d of d, 1H, 吡啶-H), 7.45 (d of d, 1H, 吡啶-H), 8.6 (d of d, 1H, 吡啶-H).
- 40 407 δ : 3.18 (m, 2H, CH₂S), 3.65 (m, 2H, CH₂N), 3.95 (s, 6H, OCH₃), 5.85 (s, 1H, 嘧啶), 6.80 (s, 1H, OCH), 7.0-8.7 (m, 8H, 芳族的).
- 411 δ : 1.90 (t, 3H, CH₃), 1.55 (m, 4H, CH₂), 2.65 (m, 4H, CH₂S), 3.62 (m, 2H, CH₂N), 3.82 (s, 6H, CH₃O), 5.90 (s, 1H, 嘧啶), 6.75 (s, OCH), 7.2-8.65 (m, 3H, 吡啶).

- 412 δ : 1.37 (s, 9H, tBuO), 3.30 (s, 3H, CH₃N), 3.90 (s, 6H, CH₃), 5.95 (s, 1H, 嘧啶), 5.97 (s, 1H, OCH), 6.5-7.6 (m, 10H, 芳族的).
- 413 δ : 2.23 (s, 1H, C=CH), 3.12-3.23 (d, 3H, N-CH₃), 3.93 (s, 8H, OCH₃, N-CH₂C=), 6.155 (s, 1H, 嘧啶), 7.47-7.52 (m, 1H, 吡啶), 8.142-8.168 (m, 1H, 吡啶), 8.69-8.709 (t, 1H, 吡啶).

5