



本PDF文件由 爱化学 IChemistry.cn 免费提供, 全部信息请点击[81777-89-1](#), 若要查询其它化学品请登录[CAS号查询网](#)

如果您觉得本站对您的学习工作有帮助, 请与您的朋友一起分享:) [爱化学www.ichemistry.cn](#)

#### CAS Number:81777-89-1 基本信息

中文名:	异恶草酮; 2-(2-氯苄基)-4,4-二甲基异噁唑-3-酮
英文名:	Clomazone
别名:	2-(2-Chlorobenzyl)-4,4-dimethyl-1,2-oxazolidin-3-one; 2-[(2-Chlorophenyl)methyl]-4,4-dimethyl-3-isoxazolidinone
分子结构:	
分子式:	C <sub>12</sub> H <sub>14</sub> ClNO <sub>2</sub>
分子量:	239.70
CAS登录号:	81777-89-1

#### 物理化学性质

熔点:	25°C
沸点:	275.4°C
密度:	1.192
性质描述:	原药为淡棕色粘稠液体, 相对密度为1.192, 25°C时蒸汽压19.2MPa。在 <b>水</b> 中的溶解度1.1g/L, 易溶于 <b>丙酮</b> , <b>乙腈</b> 、 <b>氯仿</b> 、 <b>环己酮</b> 、 <b>二氯甲烷</b> 、 <b>甲醇</b> 、甲笨等有机溶剂。在碱性及 <b>酸性</b> (pH4.5~9.25) 介质中稳定, 室温下, 原药储存一年无损失。

#### 安全信息

安全说明:	S26: 万一接触眼睛, 立即使用大量清水冲洗并送医诊治。 S36: 穿戴合适的防护服。
危险类别码:	R20/22: 吸入和不慎吞咽有害。 R36/38: 对眼睛和皮肤有刺激作用。

#### CAS#81777-89-1化学试剂供应商(点击生产商链接可查看价格)

阿拉丁试剂 专业从事**81777-89-1**及其他化工产品的生产销售 021-50323709

供应商信息已更新且供应商的链接失效, 请登录爱化学 [CAS No. 81777-89-1](#) 查看

若您是此化学品供应商, 请按照[化工产品收录](#)说明进行免费添加

#### 其他信息

产品应用:	异噁草松是选择性芽前处理剂, 用药时期应掌握在播后苗前土壤封闭处理。该产品主要用于防除大豆田的阔叶杂草和禾本科杂草, 也可用于木薯、玉米、油菜、甘蔗和烟草田。该产品对大豆田的草、藜、苋、狗尾草、苘麻、龙葵、苍耳、反枝苋等一年生杂草有良好的防效。毒性: 异恶草酮为低毒除草剂, 大鼠急性经口LD50>2000mg/kg (雄性), LD501369mg/kg(雄性), 兔急性经皮LD50>2000mg/kg, 对眼和皮肤无刺激。试验条件未见致癌、致畸、致突变作用。对蓝鳃太阳鱼LC5034mg/l (96小时), 虹
剂型:	广灭灵Command(480或720g/L)乳油; 混剂: Coizor(Maag)(本品+牧草胺)。

作用方式：

通过根部或幼芽吸收到植物体内向上传导。大豆的选择性主要起因于对药剂的代谢有差异。对作用方式的研究表明：该化合物能有效地抑制敏感杂草光合成色素的生物合成，虽然敏感杂草能出土，但组织失绿，植物在很短时间就死亡。

作用机理：

属噁唑酮类除草剂，通过抑制异戊二烯化合物合成，阻碍胡萝卜和叶绿素的生物合成。使植物在短期内死亡。但当它被大豆吸收后，经过代谢作用，异噁草酮的有效杀草物质会转变为无杀草能力的降解物，使大豆植株不受其害。

适用作物：

大豆、棉花、木薯、玉米、油菜、甘蔗和烟草。

使用方法：

1. 芽前或植前混土处理 用量为0.1~1.0kg ai/hm<sup>2</sup>，根据土壤类型，在大豆播种前、芽前或在幼苗期，以0.84~1.4kg ai/hm<sup>2</sup>施用能有效地控制龙葵、苍耳及苋属杂草。（表1）

表1 在大豆芽前和播前混土施用推荐用量

土壤类型	kg ai/hm <sup>2</sup> 有机质含量		
	<2%	2%~3%	>3%
粗粒土壤(轻)	0.56	0.84	0.84~1.12
(砂质土、壤砂土、砂壤土)			
中质土壤			
(壤土、粉砂壤土、粉砂土、	0.84	0.84~1.12	1.12~1.4
砂质粘壤土、砂粘土)			
细土(重)			
(粉砂粘土、粘壤土、粉砂粘	1.12~1.4	1.12~1.4	1.12~1.4
壤土、粘土)			

单用难以防除的杂草有：轮生粟米草、三裂豚草、大果田菁、番薯属、芸苔属、钝叶决明、野田芥、野向日葵、大戟科杂草等。

本品可以和赛克津或利谷隆混用。这样本品对阔叶杂草的活性就补充了赛克津或利谷隆的杀草谱，并且可以减少赛克津和利谷隆的使用量。减少赛克津的用量能提高赛克津在大豆作物上的安全性。将本品与赛克津/利谷隆桶混可防除另外一些杂草：本品+赛克津，防除野向日葵、野田芥、钝叶决明、轮生粟米草、大果田菁等等；本品+利谷隆，防除芥菜属、鸭跖草、轮生粟米草、牛膝菊、野生萝卜、繁缕等。与上述推荐量的本品混用的赛克津和利谷隆的建议用量如表2。

表2 与赛克津或利谷隆混用效果

土壤类型	(kg ai/hm <sup>2</sup> ，大豆)	
	赛克津2.3	利谷隆
粗粒土壤	0.112~0.28	0.38~1.12
中质土壤	0.21~0.42	0.54~1.4

注1：根据土壤结构中轻质至重质土的类型来选择上述范围内较低至较高的用量。土壤中有有机质含量高则用量也高。

注2：防除大果田菁，其用量范围为0.28~0.7kg ai/hm<sup>2</sup>，用量高低取决于土壤的类型和有机质的含量；防除钝叶决明，用量为0.42~1.0kg ai/hm<sup>2</sup>，用量高低也取决于土壤类型和有机质含量。

注3：有机质含量小于0.5%的土壤或沙质土中，不能和赛克津桶混，在有机质含量低于1%的粗粒土中赛克津的用量要低于0.28kg/hm<sup>2</sup>(有效成分)，否则赛克津将引起对大豆的药害。

本品也可以和下列除草剂桶混防除大豆田杂草：草天平、甲草胺、氟乐灵、二甲戊灵、甲氧草安、黄草消和烯氟乐灵。

2. 其他作物(1)马铃薯：马铃薯有耐药性，以0.56~1.4kg ai/hm<sup>2</sup>的剂量单独施用作为芽前除草剂；也可和利谷隆桶混，其用量两者均为0.84~1.12kg ai/hm<sup>2</sup>；和赛克津桶混，FMC57020用量0.56~1.12kg ai/hm<sup>2</sup>，赛克津用量0.28~0.56kg ai/hm<sup>2</sup>。(2)烟草：烤烟也有耐药性，以0.56~1.4kg ai/hm<sup>2</sup>的剂量作为芽前施用或植前混土施用的除草剂。(3)棉花：棉花亦有耐药性，可以在植后直接喷雾，其用量为0.84~1.4kg ai/hm<sup>2</sup>。

生产方法及其他:

**异恶草酮(81777-89-1)的制备方法:**

(1)2-[氯苄甲醛](#)用羟胺转变成肟,经还原得到2-氨基苄胺,然后与氯代特丁酰氯反应,得到 $\text{ClCH}_2\text{C}(\text{CH}_3)_2\text{CON}(\text{OH})\text{CH}_2\text{C}_6\text{H}_4\text{Cl}_2$ ,再在碱的存在下闭环,得到异恶草酮。

①3-乙氧基-2,2-二甲基丙酸(2)的合成:在配有分水器和回流冷凝管的圆底烧瓶中,以[苯](#)为溶剂,加入3-羟基-2,2-二甲基丙醛及[乙酸](#),分水酯化7小时,蒸去苯及少量乙酸。减压蒸馏(85℃/1.87kPa)得2-乙酰氧基-2,2-二甲基丙醛(1)。产率83%。上述产品溶于丙酮中,通氧反应2小时,反应完后,蒸去丙酮,粗产品用丙酮重结晶得2-乙酰氧基-2,2-二甲基丙酸,熔点60~61℃,产率75%。

②3-溴-2,2-二甲基丙酰氯(4)的合成:将上述产物投入圆底烧瓶中,加入适量氢溴酸,加热回流10小时,[石油醚](#)萃取,蒸去石油醚,得3-溴-2,2-二甲基丙酸(3),收率80%,熔点48℃。3-溴-2,2-二甲基丙酸与二氯亚砷混合,回流反应4小时,蒸去二氯亚砷,减压蒸馏(98~100℃/8.66kPa)得3-溴-2,2-二甲基丙酰氯。收率98%。

③N-羟基-3-溴-2,2-二甲基丙酰胺(5)的合成:取[盐酸](#)羟胺溶于水中,滴加等摩尔的Na-OH水溶液。然后,滴加3-溴-2,2-二甲基丙酰氯。搅拌反应16小时,过滤,水洗并干燥,得N-羟基-3-溴-2,2-二甲基丙酰胺。熔点153~155℃。收率60%, $\text{IR}(\text{cm}^{-1})$ :3280,2917,1623,1522,1474,660。 $\text{C}_5\text{H}_{10}\text{BrNO}$ (计算值:C,30.61;H,5.10;N,7.14。实测值:C,30.62;H,5.29;N,6.96)。

④4,4-二甲基-3-异噁唑酮(6)的合成:将N-羟基-3-溴-2,2-二甲基丙酰胺溶解在[甲醇](#)中,滴加[氢氧化钠](#)的甲醇溶液。搅拌过夜,加水稀释后,用二氯甲烷萃取。蒸去二氯甲烷,得到4,4-二甲基-3-异噁唑酮,收率75%,熔点64~67℃。 $\text{IR}(\text{cm}^{-1})$ :3057,1462,1392。 $\text{NMR}$ :9.50(-NH-),4.0(-CH<sub>2</sub>-),1.16(-CH<sub>3</sub>)。 $\text{C}_5\text{H}_9\text{NO}_2$ (计算值:C,52.16;H,7.88;N,12.16。实测值:C,51.68;H,7.97;N,11.70)。

⑤2-(2-氯苄基)-4,4-二甲基-3-异噁唑酮(7)的合成:将等摩尔的4,4-二甲基-3-异噁唑酮和[邻氯氯苄](#)投入到圆底烧瓶中,虽入N,N-[二甲基甲酰胺](#)及适量 $\text{K}_2\text{CO}_3$ 室温下搅拌反应18小时。减压除去二甲基甲酰胺。用二氯甲烷萃取。蒸去二氯甲烷。得到2-(2-氯苄基)-4,4-二甲基-3-异噁唑酮。产品为油物,收率40%。 $\text{IR}(\text{cm}^{-1})$ :3070,2924,1707,1467,754。 $\text{C}_{12}\text{H}_{14}\text{ClNO}_2$ (计算值C,60.13;H,5.89;N,5.84;实测值,C,59.78,H,5.99,N,5.11)。

**分析方法:**

产品分析和残留物测定均用HPLC。

## 相关化学品信息

[81779-30-8 L-谷氨酰-1-萘胺](#) [8-十五烷酮](#) [81601-52-7 限制性核酸内切酶 AVA I \(高浓度品\)](#) [81569-41-7](#) [81539-57-3 右洛非西定](#) [81587-38-4](#) [819075-35-9](#) [81771-86-0](#) [818-57-5](#) [81265-32-9 二乙基膦酸](#) [4-氨基-4-萘-1-基丁酸甲酯盐酸盐](#) 434

生成时间2014-2-16 15:12:25