

## 광역동 6-Benzofuryl-2-[1-(alkoxyimino)alkyl]-3-hydroxycyclohex-2-en-1-one 유도체의 제초활성에 미치는 N-alkoxy기의 영향

성낙도\* · 송종환<sup>1</sup> · 김형래<sup>1</sup>

충남대학교 농업생명과학대학 응용생물화학부\*, 한국화학연구원 생명의약연구부<sup>1</sup>

**요약** : 광역동 제초성 6-benzofuryl-2-[1-(alkoxyimino)alkyl]-3-hydroxycyclohex-2-en-1-one 유도체 중 2,3-dihydro-2,2,4,5,7-pentamethylbenzofuryl(I) 및 2,3-dihydro-2-ethyl-2,4,5,7-tetramethylbenzofuryl(II) 치환체들을 합성하여 발아 전 후, 벼(*Oryza sativa* L., 직파 및 3엽기 이양)와 강피(*Echinochloa crus-galli*) 그리고 물달개비(*Monochoria vaginalis* presl.)에 대한 제초활성을 측정된 결과, (I)은 0.25~0.0007kg/ha.의 농도 수준에서 벼의 발아 후, 3엽기와 강피 간에 선택적인 제초활성이 관찰되었다. 또한, N-alkoxy-기가 변화함에 따라 제초활성에 미치는 영향을 정량적으로 검토한 바, 직파 벼와 강피 사이에 선택성 조건은 폭에 관한  $B_3$  상수의 적정 값( $B_3$ )<sub>opt.</sub>=4.41을 벗어난 쌍극자능율이 큰 치환체이어야 할 것으로 예상되었으며 (II)가 (I)보다 다소 우세한 제초활성을 나타내었다 (2002년 4월 21일 접수, 2002년 6월 14일 수리).

**Key words** : 6-Benzofuryl-2-[1-(alkoxyimino)alkyl]-3-hydroxycyclohex-2-en-1-ones, herbicidal activity, *Oryza sativa* L., *Echinochloa crus-galli*, *Monochoria vaginalis* presl. QSAR.

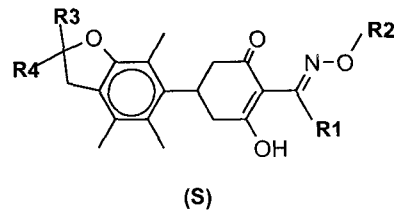
### 서론

광역동 제초성(Pallett, 1991) 화합물로서 cyclohexenedione계 화합물(Kirkwood, 1998)인 5-benzofuryl-2-[1-(alkoxyimino)alkyl]-3-hydroxycyclohex-2-en-1-one 유도체들의 구조와 제초활성 관계(성 등, 2000a,b)에 따르면 벼(*Oryza sativa* L.)와 강피(*Echinochloa crus-galli*) 간의 선택성 조건은 소수성(logP)과  $R_2$ -기의 길이(L)와  $R_1$ -기의 폭( $B_1$ )이 큰 형태의 분자이어야 함을 보고한 바 있다. 또한, 2,3-dihydro-2,3,4,6,7-pentamethylbenzofuran-5-yl 치환체(성 등, 2001)에서는  $R_1$ -기가 ethyl-기이고  $R_2$ -기는 비대칭성(L/ $B_1$ )일 경우에 벼와 강피 사이에 선택성이 예상되었다.

본 연구에서는 벼와 강피 그리고 물달개비(*Monochoria vaginalis* Presl.)의 제초활성에 미치는 6-benzofuryl-2-[1-(alkoxyimino)alkyl]-3-hydroxycyclohex-2-en-1-one 유도체(그림 1)의 2,3-dihydro-2,2,4,5,7-penta-methylbenzo furyl(I) 및 2,3-dihydro-2-ethyl-2,4,5,7-tetramethylbenzofuryl(II) 치환체들 중 N-alkoxy기가 변화함에 따른 영향에 대하여 검토하였

\*연락처자

다.



(I):  $R_1$ =Et.:1~6 & n-Pr.:7~10,  $R_2$ =Sub.,  $R_3$ = $R_4$ =Me  
 (II):  $R_1$ =Et.:11~16 & n-Pr.:17~20,  $R_2$ =Sub.,  $R_3$ =Me,  $R_4$ =Et

**Fig. 1.** General structure of 6-benzofuryl-2-[1-(alkoxyimino)alkyl]-3-hydroxycyclohex-2-en-1-one derivatives as substrate (S).

### 재료 및 방법

#### 시약과 기기

기질 화합물의 합성 및 제초활성 검증 시에 사용한 시약들과 구조 확인을 위하여 이용된 기기들은 앞서의 보고(성 등, 2000a)와 같다. 대조 약제로는 cyclohexanedione계 화합물로 화본과 잡초에 대하여 약효가 우수한 sethoxydim(Nippon soda제)을 사용하였으며 제초 활성검

정에 이용한 기질 화합물은 다음과 같다.

2,3-dihydro-2,2,4,5,7-pentamethylbenzofuran (Kim 등, 1993)을 출발 물질로 2,3-dihydro-2,2,4,5,7-pentamethylbenzofuran-6-yl-2-[1-(alkoxyimino)alkyl]-3-hydroxycyclohex-2-en-1-ones (I)을 그리고 2,3-dihydro-2-ethyl-2,4,5,7-pentamethylbenzofuran(Kim 등, 1994)을 출발 물질로 2,3-dihydro-2-ethyl-2,4,5,7-tetramethylbenzofuran-6-yl-2-[1-(alkoxyimino)alkyl]-3-hydroxycyclohex-2-en-1-ones (II)를 합성하고 구조를 확인(Song 등, 1993 및 유 등, 1995)한 다음에 제초활성 검정 시험에 사용하였다.

**제초활성 검정**

직파 벼와 3엽기 이앙벼 그리고 강피와 물달개비에 대한 경엽처리는 2~3주간의 생태학적 관찰 결과에 근거하여 평가(송 등, 1999)하였다. 평가된 제초활성 값은 유효성분 별(Kg/ha), 제초활성의 백분율(%)을 ppm 농도로 환산한 다음에 Moving average 방법(Schaper 등, 1994)으로 계산하여 관측된 50% 제초활성 값(Obs.  $pI_{50}$ )을 구하였다.

**구조-활성 관계식의 유도**

기질 화합물, (S)의 소수성(logP), 쌍극자능율(Dm) 및 분자분극율(Pol.) 등은 Hyper-Chem(Ver. 6.0) 프로그램으로 계산하였다. 그리고 STERIMOL 파라미터(A)는 MOL2MOL(Ver. 3.4) 프로그램(Compuchem.)에 적용하여 benzofuryl 고리와 cyclohexenone 고리를 연결하는 결합을 중심축으로 한 분자의 길이(L)와 폭( $B_1 \sim B_5$ ) 그리고 치환기의 비대칭성 상수,  $L/B_1$  및  $B_4/B_1$  값들을 각각 계산하였다. 그리고 구조-활성 관계(SAR) 식은 SAS(Ver. 6.12) 프로그램을 이용하여 유도하고 관련된 통계 값들을 얻었다.

**결과 및 고찰**

**제초활성의 경향**

기질 (S) 화합물(그림 1)은 azomethine 결합의 C원자에  $R_1$ =ethyl 및 n-propyl-기 그리고  $R_3=R_4$ =methyl-치환체를 (I)로,  $R_1$ =ethyl 및 n-propyl 그리고  $R_3$ =methyl,  $R_4$ =ethyl-치환체를 (II)로 각각 구분하였다. 또한 대조약제로 기질 물질과 같은 cyclohexanedione계 화합물로 acetyl CoA carboxylase inhibitor로 알려진

sethoxydim(Tomlin, 1997)을 사용하였다. 대조약제는 물론, 기질분자 중 N-alkoxy-기가 변화함에 따라 강피(ECH)와 벼(ORY) 3엽기 및 직파 벼 그리고 물달개비(MOV)에 대하여 관측된 50% 제초활성 값(Obs.  $pI_{50}$ )을 구하여 표 1에 정리하였다.

(I) 들은 1.0~0.004 kg/ha.의 농도에서 제초활성이 측정되었으며 특히, 0.25 kg/ha. 이하의 농도에서 5와 10은 ORY, 3엽기와 ECH에 대하여 현저한 선택성을 나타낸 반면에 MOV에 대하여는 제초활성이 나타나지 않았다. 또한, ORY, 3엽기보다 직파 벼에 대하여 제초성이 우수하였으며 methyl-치환체 1( $pI_{50}=5.00$ )이 제일 강한 활성을 나타내었다. 전반적으로 ORY보다 ECH에 대하여 강한 제초활성을 나타내었으나 두 초종 간 가시적인 선택성은 없었다. 그리고 수답과 건답

**Table 1. Observed herbicidal activity ( $pI_{50}$ ) against ORY, ECH and MOV**

No	OR <sub>2</sub>	ORY			ECH	MOV
		3leaf	seed	seed <sup>c)</sup>		
1 <sup>a)</sup>	-OCH <sub>3</sub>	-	5.00	4.96	5.59	0.00
2 <sup>a)</sup>	-OCH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	3.88	4.41	4.37	4.71	0.00
3 <sup>a)</sup>	-OCH <sub>2</sub> CH=CH <sub>2</sub>	3.77	-	4.37	4.40	0.00
4 <sup>a)</sup>	-OCH <sub>2</sub> C≡CH	3.74	4.37	4.49	4.97	0.00
5 <sup>a)</sup>	-OCH <sub>2</sub> C(Cl)=CH <sub>2</sub>	-	3.96	3.94	5.65	0.00
6 <sup>a)</sup>	-OCH <sub>2</sub> -Cypr.	3.32	4.38	4.37	4.38	0.00
7 <sup>b)</sup>	-OCH <sub>3</sub>	3.86	-	4.85	4.38	0.00
8 <sup>b)</sup>	-OCH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	3.58	-	4.49	4.53	0.00
9 <sup>b)</sup>	-OCH <sub>2</sub> CH=CH <sub>2</sub>	3.48	3.86	3.88	-	0.00
10 <sup>b)</sup>	-OCH <sub>2</sub> C(Cl)=CH <sub>2</sub>	0.00	-	4.49	4.47	0.00
11 <sup>a)</sup>	-OCH <sub>3</sub>	0.00	-	5.01	5.06	0.00
12 <sup>a)</sup>	-OCH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	0.00	-	4.55	5.55	0.00
13 <sup>a)</sup>	-OCH <sub>2</sub> CH=CH <sub>2</sub>	0.00	-	4.49	4.79	5.30
14 <sup>a)</sup>	-OCH <sub>2</sub> C(Cl)=CH <sub>2</sub>	0.00	4.60	4.49	-	4.43
15 <sup>a)</sup>	-OCH <sub>2</sub> CH=CHC <sub>3</sub>	0.00	-	0.70	-	5.01
16 <sup>a)</sup>	-OCH <sub>2</sub> -Cypr.	0.00	-	3.04	4.45	4.46
17 <sup>b)</sup>	-OCH <sub>3</sub>	0.00	4.37	4.49	4.43	0.00
18 <sup>b)</sup>	-OCH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	0.00	5.06	4.69	5.17	4.04
19 <sup>b)</sup>	-OCH <sub>2</sub> CH=CH <sub>2</sub>	0.00	4.51	4.77	5.02	0.00
20 <sup>b)</sup>	-OCH <sub>2</sub> CH=CHCH <sub>3</sub>	0.00	5.01	5.03	4.53	0.00
	Sethoxydim	3.93	-	-	4.93	-

Abbreviation: ORY; rice plant, ECH; barnyard grass, MOV; pickerel weed., <sup>a)</sup> $R_1$ =Et, <sup>b)</sup> $R_1$ =n-Pr., <sup>c)</sup>Calculated values by the equation,  $pI_{50}=-4.73 (B_3-4.41)^2+5.00$ ,  $r^2=0.92$ .

등, 조건이 다르기는 하지만, ORY, 3엽기의 경우에 기질 화합물들은 대조약제인 sethoxydim보다 낮은

활성을 보였으나 특히, 2-chloro-2-propenyl-치환체, 5는 ECH( $pI_{50}=5.65$ )에 대하여 대조약제 보다도 제초활성이 큰 유의 할만한 활성을 보였다.

ORY 3엽기에 (II)들은 0.25~0.0007kg/ha의 농도에서 제초활성이 나타나지 않는 것으로 관측되었으나 ECH에 대하여는 현저하게 강한 활성을 나타내었다. ORY, 직파 벼와 ECH의 경우에는 대략 0.003kg/ha의 농도에서 활성이 관측되지 않았으며 MOV에 있어서 13~16 및 18을 제외한 나머지 화합물은 제초활성을 나타내지 않았다. (II) 역시 (I)의 경우와 같은 경향으로 ORY, 직파 벼보다는 ECH에 대하여 강한 활성을 보였으며 ethyl-치환체, 12( $pI_{50}=5.55$ )가 가장 높은 활성을 나타내었다.

이 같은 검토로부터 특히, (I)은 ORY, 3엽기와 MOV에 대하여 그리고 sethoxydim은 ORY, 3엽기에 제초 활성을 보인 반면에 (II)는 제초 활성을 나타내지 않았으며 또한, (II)는 ORY, 3엽기와 ECH간에선

택적인 제초 활성을 보였다. 평균적으로 (I)보다 (II)가 약간 우세한 제초활성을 보이는 경향이었으며 ECH에 대하여 1, 5 및 12( $pI_{50}=5.55\sim 5.65$ )가 제일 큰 활성을 나타내었다. 또한, 10~20은 ORY 3엽기에는 활성이 나타나지 않은 반면에 씨앗에는 현저히 큰 제초활성을 보였다. 이는 3엽기와 씨앗의 두 조건에 따라 기질 화합물이 생육에 미치는 요인들이 다를 것이므로 활성에 미치는 영향이나 발현 기작이 상이한 때문으로 추정된다. 그러나 이들 화합물들의 소수성(표 2)은 제초제들이 가지는 가장 보편적인 소수성(Hsu 등, 1990) 값( $\log P=3.0$  내외) 보다 높은( $\log P=4.98\sim 6.94$ ) 화합물이었다.

### 구조와 제초활성 관계

식물체내 엽록소 중 tetrapyrrole의 성질에 의존적인 광역동 살초제(PDH; photodynamic herbicide)로서(Pallett, 1991) cyclic imid계 화합물(Kirkwood, 1991)인 기질(S) 물질의 제초성은 구조상 분자의 폭( $R_1$ )과 길이( $OR_2$ )에 주로 영향을 받는 것으로 보고(성 등, 2000b) 되었다. 이 같은 결과에 근거하여 분자의 폭이 동일하다는 전제하에서 ORY 및 ECH 두 초종에 대한 살초활성과 물리-화학 파라미터와의 관계(Fujita, 1980)로부터 N-alkoxy기의 영향을 검토하였다.

먼저, (I)의 "ORY, 3엽기"에 대한 활성의 변이 중 85%( $100r^2$ )가 해석되는 식( $pI_{50}=-0.12(\pm 0.02)Pol.+9.24(\pm 1.07)$ ,  $r^2=0.91$ )으로부터 분자 분극율( $Pol.$ )이 낮을수록 활성에 기여 할 것이나 계수의 크기로 보아 그에 따른 영향은 크지 않을 것으로 예상되었다. 분극율은 전기장 속에 놓인 원자 또는 분자에 유기되는 전기적 쌍극자 모멘트,  $p$ 와 전기장의 강도,  $E$ 와의 비로 정의( $p=aE$ ) 되는 상수로  $a$ 는 체적의 디멘전( $\text{\AA}^3$ )을 가지고 있으며 그 크기는 분자 체적의 정도이다. 단순한 분자에서 분극은 주로 분자분포의 치우침에 유래하지만 복잡한 분자에서는 이온 위치의 층 밀립이나 원자단 등 일부의 변형도 분극율에 기여한다. 여기서 분극율에 의존적이라는 사실은 기질과 수용체 분자간 힘으로 dipole-induced dipole이거나 induced dipole-induced dipole 상호작용에 의한 전기적 효과가 영향을 미친다는 것(Hansch 등 1995)을 의미한다. 그러므로 기질 분자 내 carbonyl 이나 hydroxyl-기 등과 같은 극성기뿐만 아니라,  $OR_2$ -기에서 알킬기는 전자 밀게이고 산소원자는 전기음성도가 큰 까닭에 음 하전

Table 2. Used physicochemical parameters of (S) and  $OR_2$  groups

No	$\log P$	$Pol.^c$	$Dm^{d1}$	L	$B_3$	$L/B_1$	$B_4/B_1$
1 <sup>a)</sup>	4.98	42.82	3.75	10.41	4.31	3.18	1.45
2 <sup>a)</sup>	5.05	43.98	3.75	10.52	4.78	3.22	1.60
3 <sup>a)</sup>	5.44	45.62	3.67	11.31	4.78	3.47	1.58
4 <sup>a)</sup>	4.98	44.71	63.64	10.51	4.75	3.21	1.68
5 <sup>a)</sup>	5.22	47.55	4.34	12.17	4.89	3.51	2.24
6 <sup>a)</sup>	5.69	47.55	3.67	11.14	4.78	3.44	2.09
7 <sup>b)</sup>	5.38	44.66	3.73	10.37	4.22	3.18	1.46
8 <sup>b)</sup>	5.72	46.49	3.76	10.35	4.75	3.16	1.59
9 <sup>b)</sup>	6.12	48.13	3.63	10.45	4.90	3.12	1.65
10 <sup>b)</sup>	5.90	50.06	4.05	10.59	4.75	3.26	1.97
11 <sup>a)</sup>	5.45	44.65	3.75	10.39	4.36	3.18	1.46
12 <sup>a)</sup>	5.79	46.49	3.76	10.32	4.73	3.13	1.64
13 <sup>a)</sup>	6.19	48.13	3.50	10.46	4.75	3.19	1.99
14 <sup>a)</sup>	5.97	50.06	3.93	10.45	4.74	3.17	1.96
15 <sup>a)</sup>	6.54	49.97	3.46	11.57	5.51	3.54	1.96
16 <sup>a)</sup>	6.16	49.39	3.59	10.39	5.06	3.20	1.97
17 <sup>b)</sup>	5.85	46.49	3.73	10.57	4.75	2.98	1.42
18 <sup>b)</sup>	6.19	48.33	3.73	11.50	4.68	3.22	1.41
19 <sup>b)</sup>	6.59	49.97	3.73	10.52	4.64	3.01	1.87
20 <sup>b)</sup>	6.94	51.80	4.01	10.56	4.39	2.80	1.72

<sup>a)</sup> $R_1=Et.$ , <sup>b)</sup> $R_1=n-Pr.$ , <sup>c)</sup>Polarizability ( $\text{\AA}^3$ ), <sup>d)</sup>Dipolemoment (Debye)

을 띄는 OR<sub>2</sub>-기가 전기적인 영향을 미칠 것으로 설명된다. 또한, (II) 에서 ORY, 직파 벼는 길이(L)와 폭(B<sub>1</sub>)이 클수록 그리고 ECH의 경우에는 쌍극자능을(Dm)과 비대칭성(L/B<sub>1</sub>)이 클수록 영향을 미쳤다. 반면에 MOV의 경우에는 2-propenyl-기, **13**(pI<sub>50</sub>=5.30)가 제일 높은 활성을 보였으며 폭이 작을수록(B<sub>3</sub><0) 활성에 영향을 미치는 경향이었으나 상관성이 대체로 낮은(r<sup>2</sup>> 0.73) 편이었다.

ECH의 경우에 제조활성의 변이 중, 약 75%(100r<sup>2</sup>)가 해석되는 식(pI<sub>50</sub>(ECH)=-1.08(±0.30)logP+1.32(±0.45)Dm.+5.56(±2.23), r<sup>2</sup>=0.87)에서 소수성의 증가는 활성에 기여하지 않는 반면에 Dm(Lien 등, 1982)은 클수록 활성에 기여 할 것으로 설명된다. Dm은 전정기장 내에서 이끌리는 분자의 세기와 배향을 의미하며 쌍극자 성질은 리간드-수용체 인식에 있어서 일어나는 결합과 상관되어 있다(Msi onlibrary, 2000). 여기에서 소수성이 낮아야 활성에 기여한다는 의미는 전술한 바와 같이 이들 기질 물질이 충분한 정도의 소수성을 이미 유지하고 있기(logP=4.98-6.94) 때문이라고 생각된다. R<sub>1</sub>-기별로 ethyl-기와 n-propyl-기일 경우에는 각각 폭(B<sub>1</sub> 및 B<sub>3</sub>)이 클수록 활성에 기여하나 그 영향은 작을 것으로 예상되었다. 이 같은 검토에 따라 두 초종에 대한 (I) 중 OR<sub>2</sub>-기의 선택성 조건으로는 소수성이 작은 반면에 Dm 값이 커야 할 것으로 믿어진다.

(I)와 (II)를 망라하여 R<sub>1</sub>-기가 동일하다는 조건에서 제조활성을 검토한 결과, ORY, 직파의 경우에는 제조활성의 변이 중, 약 84%(100r<sup>2</sup>)가 해석되는 식(ORY: pI<sub>50</sub>=-4.73(B<sub>3</sub>- 4.41)<sup>2</sup>+4.99(±1.80), r<sup>2</sup>=0.92)으로부터 폭(B<sub>3</sub>) 이 적정 값(B<sub>3</sub>)<sub>opt</sub>=4.41Å을 가질 때 가장 제조활성이 클 것임을 예상할 수 있다. 이 식으로 계산한 값(표1) 과 관측된 두 값들이 작은 오차 범위에서 비슷한 값을 보였다. 그리고 이식에 또 다른 입체상수 이외의 파라미터를 포함한 식의 유도를 시도하였으나 상관성에 유의할 만한 영향을 미치지 않았다.

“ECH”의 경우에도 Pol.과 Dm.에 관한 변수가 활성에 기여하였으며 Pol.에 비하여 Dm.이 크게 영향(Dm > Pol.)을 미치는 것으로 예측되었으나 상관성이 낮았다. 여기에서 상관성이 낮다는 것은 ORY, 직파의 경우와는 달리 R<sub>1</sub>-기가 다름에 따라 서로 다른 요소 즉, 소수성보다는 입체성을 포함한 전자 전달효과 등의 요인들이 제조활성에 영향을 미치고 있을 것으로 예

상된다. 또한, R<sub>1</sub>=ethyl 및 n-propyl-치환체에서 Dm.은 다른 변수들에 비하여 상대적으로 크게 기여하는 경향을 나타내었다.

이상과 같은 검토로부터 두 초종, ORY와 ECH에 대한 OR<sub>2</sub>-기에 의한 선택성 조건은 다음과 같다. 즉, R<sub>1</sub>=n-Propyl-치환체에 있어서 “ORY, 직파”의 경우에 B<sub>3</sub>의 계수가 음(B<sub>3</sub><0)인 반면에 “ECH”에서는 양(B<sub>3</sub>>0)의 상반된 값을 나타내므로 적정 값(B<sub>3</sub>)<sub>opt</sub>=4.41Å보다 큰 값을 갖는 B<sub>3</sub>와 Dm. 상수 값이 큰 치환체가 도입되어야 할 것으로 예상되었다. 진보(성 등, 2000a,b)에 따르면 벼와 강피간의 선택성 조건은 R<sub>2</sub>-기의 길이(L)와 R<sub>1</sub>-기의 폭(B<sub>1</sub>)이 큰 형태 이어야하며 2,3-dihydro-2,3,4,6,7-pentamethylbenzofuran-5-yl 치환체(성 등, 2001)에서 R<sub>2</sub>-기는 비대칭성(L/B<sub>1</sub>)일 경우에 벼와 강피 사이에 선택성이 예상되었다. 그러므로 본 연구와 비교 시 제조활성이 입체상수인 STERIMOL 파라미터에 의존성을 나타내는 유사한 결과이었으나 일치하지 않는 이유는 benzofuryl 고리상 치환체들이 상이함에 따른 영향인 것으로 보여진다.

다음 연구로는 benzofuryl 고리의 구조가 상이한 2,3-dihydro-2,2,4,5,6,-pentamethylbenzofuran-5-yl 치환체들의 변화에 따라 ORY 및 ECH, 두 초종에 미치는 상호 활성관계에 대하여 검토하고자 한다.

## 인용문헌

- Fujita, T. (1980) Structure-Activity Relationships, Quantitative approaches: The applications to drug design and mode of action studies, Ch.2., pp. 140. Nankodo, Tokyo.
- Hansch, C. and T. Fujita (1995) Classical and Three-Dimensional QSAR in Agrochemistry. ACS Symposium series 606. Ch. 6. ACS, Washinton, DC.
- HyperChem (1993) HyperChem for windows (Ver. 6.5), Ch. 7., Chemical calculation, Hyper Cube Inc., Ontario, Canada.
- Hsu, F. C., R. L. Marxmiller and A. Y. S. Yang (1990) Study of root uptake and xylem translocation of cinmethylin and related compounds in detopped soybean roots using a pressure chamber technique. Plant Physiol. 93: 1573~1578.
- Kim, K. M., H. R. Kim and E. K. Ryu (1993) One-

- pot synthesis of 2,3-di-hydro-2,2-dimethyl benzofuran derivatives, *Heterocycles*, 36:479~505.
- Kim, K. M., H. R. Kim, K. H. Chung, J. H. Song and E. K. Ryu (1994) Facile synthesis of 2-alkyl-2,3-dihydro-2-methylbenzofuran derivatives, *Syn. Com.*, 24: 1859~1870.
- Kirkwood, R. C. (1991) *Target Sites for Herbicide Action*. Ch. 5, pp.138, Plenum Press, New York.
- Lien, E. J., Z. R. Guo, R. L. Li and C. T. Su (1982) Use of dipole moment as a parameter in drug receptor., *Interaction and QSAR studies*, *J. Pharm. Sci.*, 71: 641~655.
- Msi onlibrary (2000) Cerius<sup>2</sup> (Release 4.5) <http://www.sinica.edu.tw/~scimathmsi/cerius45/qsar/QSAR40TOC.html>, Ch.4., Theory:QSAR+Descriptor, Molecular Simulations Inc.
- MOL2MOL (Ver.3.4) CompuChem. Software for chemistry., Vogtherrstr. 10, D-74676, Niedernhall, Germany.
- Pallett, K. E. (1991) Other primary target sites for herbicides. pp.138, *In Target Sites for Herbicide Action* (ed. Ralph C. Kirkwood), Plenum Press., New York.
- SAS (Ver. 6.12) (1996) Proprietary Software, SAS Institute Inc. Cary, NC., U.S.A.
- Schaper, M M., R. D. Thompson and C. S. Weil (1994) Computer programs for calculation of median effective dose (LD<sub>50</sub> or ED<sub>50</sub>) using the method of moving average interpolation, *Arch. Toxicol.*, 68:332~337.
- Song, J. H., E. K. Ryu, K. M. Kim, H. R. Kim, J. N., Kim and J. S Kim (1993) Herbicidal cyclohexane-1,3-dione derivatives and their preparation process, U.S. Patent, No. 5,631,208.
- Tomlin, C. D. S. ed. (1997) *The pesticide Manual* (11th Ed.), pp. 1101. British Crop Protection Council, 49 Dowing St., Farnham, Surrey CU9 7PH, UK.
- 송종환, 이수영, 홍경식, 성낙도, 유응걸 (1999) 새로운 Quinolinyamidoxime 유도체의 합성과 제조활성, *한국농약과학회지*, 3(3):1~5.
- 성낙도, 송종환, 김형래 (2000a) 5-Benzofuryl-2-[1-(alkoxyimino)propyl]-3-hydroxycyclo-hex-2-en-1-ones 유도체 중 2,3-dihydro-2,2,4,6,7-pentamethylbenzofuran-5-yl 치환체들의 제조활성에 관한 구조-활성관계, *한국농약과학회지* 4(3):47~51.
- 성낙도, 송종환, 김정만 (2000b) 5-Benzofuryl-2-[1-(alkoxyimino)propyl]-3-hydroxycyclo-hex-2-en-1-ones 유도체 중 2,3-dihydro-2-ethyl-2,4,6,7-tetramethylbenzofuran-5-yl 치환체들의 제조활성에 관한 구조-활성관계, *한국농약과학회지* 4(3):34~39.
- 성낙도, 송종환, 전동주 (2001) 5-Benzofuryl-2-[1-(alkoxyimino)alkyl]-3-hydroxycyclohex-2-en-1-ones 유도체 중 2,3-dihydro-2,3,4,6,7-pentamethylbenzofuran-5-yl 치환체들의 구조와 제조활성과의 관계, *한국농약과학회지* 5(3):12~17.
- 유응걸, 김정만, 김형래, 송종환, 김재녕, 김진석 (1995) 제조성 시클로헥산-1,3-디온 유도체와 그 제조방법, 특허 (KB) 번호:제087165호.

---

**Influence of N-alkoxy groups on the activity of photodynamic herbicidal 6-benzofuryl-2-[1-(alkoxyimino)alkyl]-3-hydroxycyclohex-2-en-1-one derivatives**

Nack-Do Sung\*, Jong-Hwan Song<sup>1</sup> and Hyung-Rae Kim<sup>1</sup> (Division of Applied Biology & Chemistry, College of Agriculture & Life Sciences, Chung-nam National University, Taejon 305-764, Korea., <sup>1</sup>Korea Research Institute of Chemical Technology, P. O. Box 107, Yusong, Taejon 305-606, Korea)

**Abstract** : New photodynamic herbicidal 2,3-dihydro-2,2,4,5,6-pentamethylbenzofuran-5-yl, (I) and 2,3-dihydro-2-ethyl-2,4,5,6-tetramethylbenzofuran-5-yl, (II) substituents in 6-benzofuryl-2-[1-(alkoxyimino)alkyl]-3-hydroxycyclohex-2-en-1-one derivatives were synthesized and their herbicidal activities against rice plant (*Oryza sativa* L.), barnyard grass (*Echinochloa crus-galli*) and pickerel weed (*Monochoria vaginalis* Presl.) were measured under submerged pre and post-emergence conditions. Particularly, a series of (I) compounds showed good selective herbicidal activities between the 3 leaf stage of rice plant and barnyard grass at rates of 0.25~0.0007kg/ha. The structure activity relationships (SAR) on the herbicidal activity with changing N-alkoxy groups were discussed quantitatively. According to the SAR results, it was expected that the selectivity factor between seed of rice plant and barnyard grass should be rely on the N-alkoxy groups with bigger dipole moment and bigger (or smaller)  $B_3$  constant than optimal value ( $B_3$ )<sub>opt.</sub> = 4.41 Å. Compared with (I), the (II) substituents showed more superior herbicidal activities.

---

\*Corresponding author (Fax : +82-42-825-3306, E-mail : ndsung@cnu.ac.kr)