

[19] 中华人民共和国国家知识产权局

[51] Int. Cl⁷



[12] 发明专利申请公开说明书

[21] 申请号 03819890.8

C07D249/04

C07D409/12

C07D405/12

C07D403/12

C07D307/00

C07D209/94

A01N 43/647

[43] 公开日 2005 年 10 月 5 日

[11] 公开号 CN 1678593A

[22] 申请日 2003.8.18 [21] 申请号 03819890.8

[30] 优先权

[32] 2002. 8. 22 [33] GB [31] 0219612.9

[32] 2003. 5. 7 [33] GB [31] 0310464.3

[86] 国际申请 PCT/EP2003/009111 2003.8.18

[87] 国际公布 WO2004/018438 英 2004.3.4

[85] 进入国家阶段日期 2005.2.22

[71] 申请人 辛根塔参与股份公司

地址 瑞士巴塞尔

[72] 发明人 J·艾伦弗利昂德 H·拖布勒

H·沃尔特

[74] 专利代理机构 中国国际贸易促进委员会专利商
标事务所

代理人 张敏

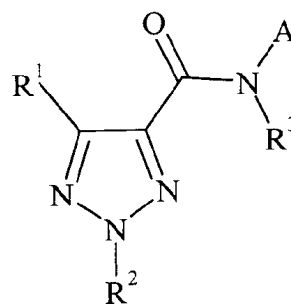
权利要求书 6 页 说明书 86 页

[54] 发明名称 杀微生物(例如杀菌)的 1,2,3-三唑衍生物

[57] 摘要

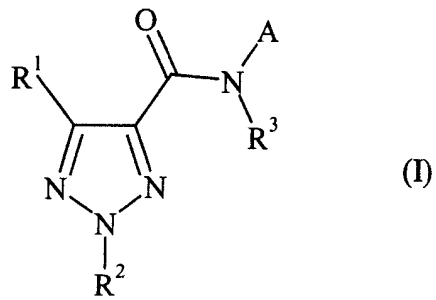
式(I)化合物: 其中 A 为选自多种指定环的邻位取代环; R¹为卤素, 氰基, 硝基, C₁₋₄烷基, C₁₋₄卤代烷基, C₁₋₄烷氧基或 C₁₋₄卤代烷氧基或任选取代的 C₁₋₄链烯基, 任选取代的 C₂₋₄炔基或任选取代的 SO₂(C₁₋₄)烷基(其中的任选取代部分各自具有多达 3 个的取代基, 各取代基独立地选自卤素和 C₁₋₄烷氧基); R²为 C₁₋₄烷基, C₁₋₄卤代烷基, C₁₋₄烷氧基(C₁₋₄)烷基或 C₁₋₄烷硫基(C₁₋₄)烷基或[任选取代的芳基](C₁₋₄)烷基-或[任选取代的芳基]氧基(C₁₋₄)烷基(其中任选取代的芳基部分各自可具有多达 3 个的取代基, 各取代基独立选自卤素和 C₁₋₄烷氧基); R³为氢, CH₂C≡CR⁴, CH₂CR⁴=C(H)R⁴, CH=C=CH₂或 COR⁵或任选取代的 C₁₋₄烷基, 任选取代的 C₁₋₄烷氧基或任选取代的(C₁₋₄)烷基 C(=O)O(其中任选取代的部分可各自具有多

达 3 个的取代基, 各取代基独立选自卤素和 C₁₋₄烷氧基, C₁₋₄烷基, C₁₋₂卤代烷氧基, 羟基, 氰基, 羧基, 甲氧基羰基, 乙氧基羰基, 甲磺酰基和乙磺酰基)。式(I)化合物具有杀微生物活性, 尤其是杀菌活性。

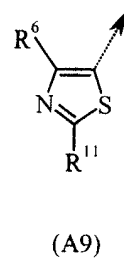
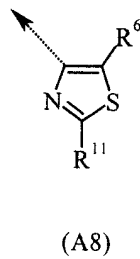
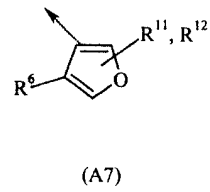
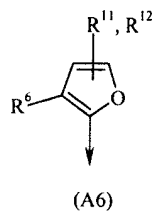
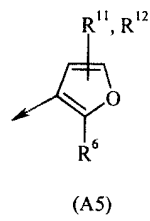
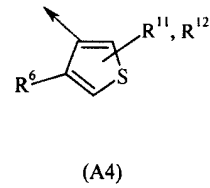
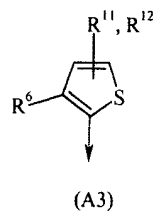
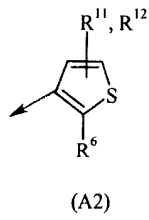
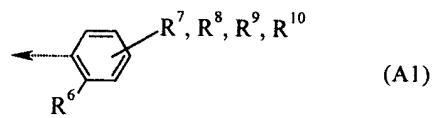


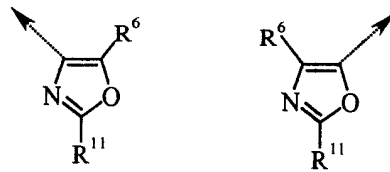
(I)

1. 式 I 化合物:



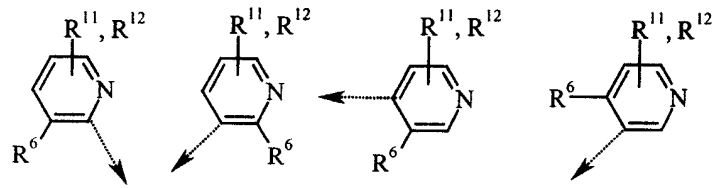
其中 A 为选自 (A1)-(A22) 的邻位取代环:





(A10)

(A11)

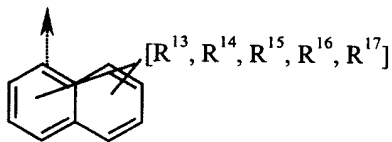


(A12)

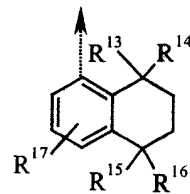
(A13)

(A14)

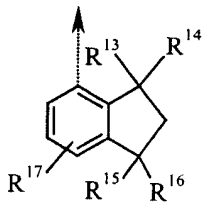
(A15)



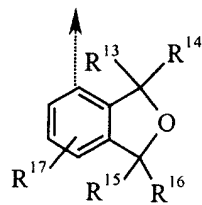
(A16)



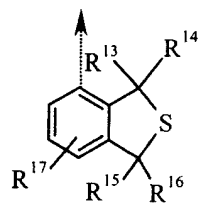
(A17)



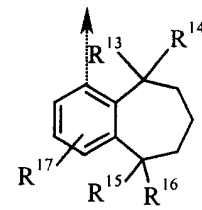
(A18)



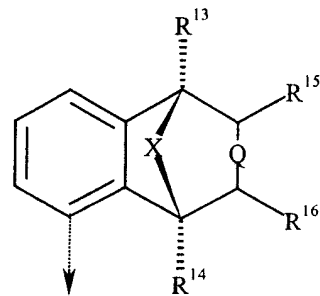
(A19)



(A20)



(A21)



(A22)

Q 为单键或双键; X 为 O, N(R¹⁸), S 或 C(R¹⁹R²⁰)(CR²¹R²²)_n(CR²³R²⁴)_n; R¹ 为卤素, 氰基, 硝基, C₁₋₄ 烷基, C₁₋₄ 卤代烷基, C₁₋₄ 烷氧基, C₁₋₄ 卤代烷氧基或任选取代的 C₂₋₄ 链烯基, 任选取代的 C₂₋₄ 炔基或任选取代的 SO₂(C₁₋₄) 烷基(其中各个任选取代的基团可具有多达 3 个的取代基, 并且各取代基独立地选自卤素和 C₁₋₄ 烷氧基); R² 为 C₁₋₄ 烷基, C₁₋₄ 卤代烷基, C₁₋₄ 烷氧基(C₁₋₄) 烷基或 C₁₋₄ 烷硫基(C₁₋₄) 烷基或[任选取代的芳基](C₁₋₄) 烷基-或[任选取代的芳基]氧基(C₁₋₄) 烷基-(其中各个任选取代的芳基部分可具有多达 3 个的取代基, 并且各取代基独立选自卤素和 C₁₋₄ 烷氧基); R³ 为氢, CH₂C≡CR⁴, CH₂CR⁴=C(H)R⁴, CH=C=CH₂ 或 COR⁵ 或任选取代的 C₁₋₄ 烷基, 任选取代的 C₁₋₄ 烷氧基或任选取代的(C₁₋₄) 烷基 C(=O)O(其中各个任选取代的部分可具有多达 3 个的取代基, 并且各取代基独立选自卤素, C₁₋₄ 烷氧基, C₁₋₄ 烷基, C₁₋₂ 卤代烷氧基, 羟基, 氰基, 羧基, 甲氧基羰基, 乙氧基羰基, 甲磺酰基和乙磺酰基); 各个 R⁴ 独立地为氢, 卤素, C₁₋₄ 烷基, C₁₋₄ 卤代烷基, C₁₋₄ 烷氧基或 C₁₋₄ 烷氧基(C₁₋₄) 烷基; R⁵ 为氢或任选取代的 C₁₋₆ 烷基, 任选取代的 C₁₋₄ 烷氧基, 任选取代的 C₁₋₄ 烷氧基(C₁₋₄) 烷基, 任选取代的 C₁₋₄ 烷硫基(C₁₋₄) 烷基或任选取代的芳基(其中各个任选取代的部分可具有多达 3 个的取代基, 并且各取代基独立选自卤素、C₁₋₆ 烷氧基、C₁₋₆ 卤代烷氧基、氰基、羟基、甲氧基羰基和乙氧基羰基); R⁶ 为苯基[任选被多达 3 个的取代基取代, 并且各取代基独立选自卤素、氰基、硝基、C₁₋₄ 烷基、C₁₋₄ 卤代烷基、C₁₋₄ 烷氧基、C₁₋₄ 卤代烷氧基、C₁₋₄ 卤代烷硫基、C(H)=N-OH、C(H)=N-O(C₁₋₆ 烷基)、C(C₁₋₆ 烷基)=N-OH、C(C₁₋₆ 烷基)=N-O-(C₁₋₆ 烷基)、(Z)_pC≡CR²⁵ 和 (Z)_pCR²⁸=CR²⁶R²⁷], 5-6 元杂环[其中所述环包含 1-3 个杂原子(各自独立选自氧、硫和氮), 并且该环任选被多达 3 个的取代基取代, 各取代基独立选自卤素、氰基、硝基、C₁₋₄ 烷基、C₁₋₄ 卤代烷基、C₁₋₄ 烷氧基、C₁₋₄ 卤代烷氧基、C(H)=N-O-(C₁₋₆ 烷基)和 C(C₁₋₆ 烷基)=N-O-(C₁₋₆ 烷基)], C₃₋₁₂ 烷基[任选被多达 6 个的取代基取代, 各取代基独立选自卤素、氰基、C₁₋₄ 烷氧基、C₁₋₄ 烷硫基、COO-C₁₋₄ 烷基、=N-OH、=N-O-(C₁₋₄ 烷基)、C₃₋₈ 环烷基(其本身任选被多达 3 个的取代基取代,

各取代基独立选自 C_{1-4} 烷基、卤素、 C_{1-4} 烷氧基和 C_{1-4} 卤代烷氧基) 和 C_{4-8} 环烯基 (其本身任选被多达 3 个的取代基取代, 各取代基独立选自 C_{1-4} 烷基、卤素、 C_{1-4} 烷氧基和 C_{1-4} 卤代烷氧基)], C_{2-12} 链烯基 [任选被多达 6 个的取代基取代, 各取代基独立选自卤素、氰基、 C_{1-4} 烷氧基、 C_{1-4} 烷硫基、 $COO-(C_{1-4}$ 烷基)、 $=N-OH$ 、 $=N-O-(C_{1-4}$ 烷基)、 C_{3-8} 环烷基 (其本身任选被多达 3 个的取代基取代, 各取代基独立选自 C_{1-4} 烷基、卤素、 C_{1-4} 烷氧基和 C_{1-4} 卤代烷氧基) 和 C_{4-8} 环烯基 (其本身任选被多达 3 个的取代基取代, 各取代基独立选自 C_{1-4} 烷基、卤素、 C_{1-4} 烷氧基和 C_{1-4} 卤代烷氧基)], C_{2-12} 炔基 [任选被多达 6 个的取代基取代, 各取代基独立选自卤素、氰基、 C_{1-4} 烷氧基、 C_{1-4} 烷硫基、 $COO-C_{1-4}$ 烷基、 $=N-OH$ 、 $=N-O-(C_{1-4}$ 烷基)、 C_{3-8} 环烷基 (其本身任选被多达 3 个的取代基取代, 各取代基独立选自 C_{1-4} 烷基、卤素、 C_{1-4} 烷氧基和 C_{1-4} 卤代烷氧基)、 $Si(CH_3)_3$ 和 C_{4-8} 环烯基 (其本身任选被多达 3 个的取代基取代, 各取代基独立选自 C_{1-4} 烷基、卤素、 C_{1-4} 烷氧基和 C_{1-4} 卤代烷氧基)], C_{3-8} 环烷基 [任选被多达 3 个的取代基取代, 各取代基独立选自卤素、 C_{1-4} 烷基、 C_{1-4} 卤代烷基、 C_{1-4} 烷氧基、 C_{1-4} 卤代烷氧基、 C_{1-4} 烷硫基、 C_{3-6} 环烷基 [其本身任选被多达 3 个的取代基取代, 各取代基独立选自 C_{1-4} 烷基、卤素、 C_{1-4} 烷氧基和 C_{1-4} 卤代烷氧基) 和苯基 (其本身任选被多达 5 个独立选择的卤原子取代)], C_{4-8} 环烯基 [任选被多达 3 个的取代基取代, 各取代基独立选自卤素、 C_{1-4} 烷基、 C_{1-4} 卤代烷基、 C_{1-4} 烷氧基、 C_{1-4} 卤代烷氧基、 C_{1-4} 烷硫基、 C_{3-6} 环烷基 [其本身任选被多达 3 个的取代基取代, 各取代基独立选自 C_{1-4} 烷基、卤素、 C_{1-4} 烷氧基和 C_{1-4} 卤代烷氧基) 和苯基 (其本身任选被多达 5 个独立选择的卤原子取代)], C_{6-12} 二环烷基 [任选被多达 3 个的取代基取代, 各取代基独立选自卤素、 C_{1-4} 烷基和 C_{1-4} 卤代烷基] 或饱和或不饱和的脂族基 [该基团包含 3-13 个碳原子和至少一个硅原子并任选包含 1-3 个各自独立选自氧、氮和硫的杂原子, 而且该基团任选被多达 4 个独立选择的卤原子取代]; R^7 、 R^8 、 R^9 、 R^{10} 、 R^{11} 和 R^{12} 各自独立地为氢, 卤素, 氰基, 硝基, C_{1-4} 烷基, C_{1-4} 卤代烷基, C_{1-4} 烷氧基, C_{1-4} 卤代烷氧基, C_{1-4} 烷硫基或 C_{1-4} 卤代烷硫基; R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} 、

R^{16} 和 R^{17} 各自独立地为氢, 卤素, C_{1-4} 烷基, $C(O)CH_3$, C_{1-4} 卤代烷基, C_{1-4} 烷氧基, C_{1-4} 卤代烷氧基, C_{1-4} 烷硫基, C_{1-4} 卤代烷硫基, 羟甲基或 C_{1-4} 烷氧基甲基; R^{18} 为氢, C_{1-4} 烷基, C_{1-4} 烷氧基 (C_{1-4}) 烷基, 甲酰基, $C(=O)C_{1-4}$ 烷基 (任选被卤素或 C_{1-4} 烷氧基取代) 或 $C(=O)O-C_{1-6}$ 烷基 (任选被卤素、 C_{1-4} 烷氧基或 CN 取代); R^{19} 、 R^{20} 、 R^{21} 、 R^{22} 、 R^{23} 和 R^{24} 各自独立地为 C_{1-6} 烷基, C_{1-6} 链烯基 [二者任选被以下基团取代: 卤素、羟基、 $=O$ 、 C_{1-4} 烷氧基、 $O-C(O)-C_{1-4}$ 烷基、芳基或 3-7 元碳环 (其本身任选被多达 3 个的甲基取代)], 3-7 元碳环 (任选被多达 3 个的甲基取代, 并且任选包含一个选自氮和氧的杂原子), 氢, 卤素, 羟基或 C_{1-4} 烷氧基; 或者 $R^{19}R^{20}$ 与它们所连接的碳原子一起形成羰基, 3-5 元碳环 (任选被多达 3 个的甲基取代), C_{1-6} 亚烷基 (任选被多达 3 个的甲基取代) 或 C_{3-6} 亚环烷基 (任选被多达 3 个的甲基取代); R^{25} 为氢, 卤素, C_{1-4} 烷基, C_{1-4} 卤代烷基, C_{1-4} 烷氧基 (C_{1-4}) 烷基, C_{1-4} 卤代烷氧基 (C_{1-4}) 烷基或 $Si(C_{1-4} \text{ 烷基})_3$; R^{26} 和 R^{27} 各自独立地为氢, 卤素, C_{1-4} 烷基或 C_{1-4} 卤代烷基; R^{28} 为氢, C_{1-4} 烷基或 C_{1-4} 卤代烷基; m 为 0 或 1; n 为 0 或 1; p 为 0 或 1; 以及 Z 为 C_{1-4} 亚烷基。

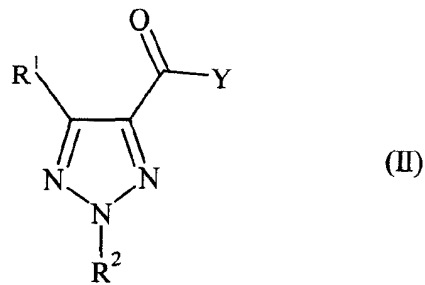
2. 权利要求 1 所述的式 (I) 化合物, 其中 A 选自式 (A1), (A2), (A3), (A16), (A17), (A18), (A19), (A20) 和 (A22)。

3. 权利要求 1 或 2 所述的式 (I) 化合物, 其中 R^1 为 C_{1-4} 烷基, C_{1-4} 卤代烷基, NO_2 , CN 或 OCF_3 。

4. 权利要求 1、2 或 3 所述的式 (I) 化合物, 其中 R^2 为 C_{1-4} 烷基, C_{1-4} 卤代烷基, C_{1-4} 烷氧基 (C_{1-4}) 烷基或 C_{1-4} 烷硫基 (C_{1-4}) 烷基。

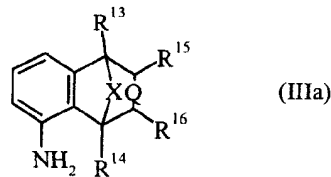
5. 权利要求 1、2、3 或 4 所述的式 (I) 化合物, 其中 R^3 为氢, $CH_2C \equiv CR^4$, $CH_2CR^4=C(H)R^4$, $CH=C=CH_2$ 或 COR^5 。

6. 式(II)化合物:



其中 R^1 和 R^2 如权利要求 1 中定义, 且 Y 为卤素, 羟基或 C_{1-5} 烷氧基; 但条件是: 当 R^1 为氯和 R^2 为 $4-CH_3O-C_6H_4-CH_2-$ 时, Y 不能为 C_2H_5O ; 当 R^1 为 CH_3O 和 R^2 为 CH_3 时, Y 不能为 C_2H_5O ; 当 R^1 为溴和 R^2 为 CH_3OCH_2 时, Y 不能为 CH_3O ; 以及当 R^1 为 CH_3 和 R^2 为 C_2H_5 时, Y 不能为 OH 。

7. 式(IIIa)化合物:



其中 R^{13} , R^{14} , R^{15} , R^{16} , X 和 Q 如权利要求 1 中定义; 但条件是: 当 R^{13} , R^{14} , R^{15} 和 R^{16} 各自为 H 时, 如果 Q 为双键则 X 不能为 CH_2 , 如果 Q 为单键或双键则 X 不能为 CH_2CH_2 ; 以及当 R^{13} 为 CH_3 , R^{14} 为 OCH_3 和 R^{15} 与 R^{16} 都为 H 时, 如果 Q 为单键, 则 X 不能为 CH_2CH_2 。

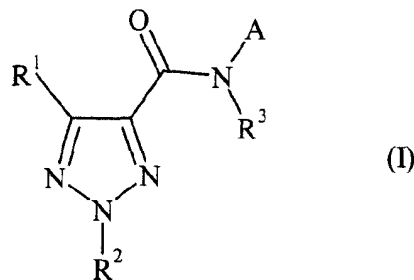
8. 一种用于防治微生物和预防植物受微生物侵袭或侵染的组合物, 其包括作为活性成分的权利要求 1 的式(I)化合物和适当载体。

9. 防治或预防植物病原微生物侵染栽培植物的方法, 该方法包括对植物、植物的各个部位或其生长场所施用权利要求 1 所述的式(I)化合物。

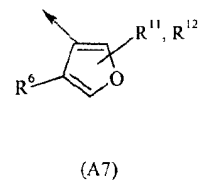
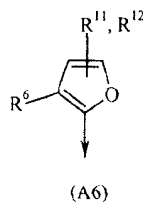
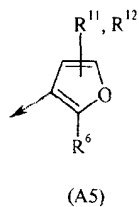
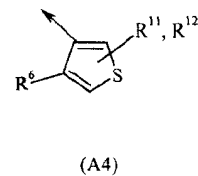
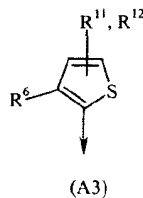
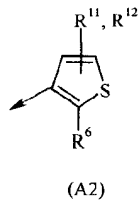
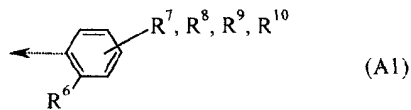
杀微生物(例如杀菌)的1,2,3-三唑衍生物

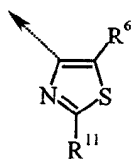
本发明涉及新的1,2,3-三唑衍生物,它们具有杀微生物活性,尤其是杀菌的活性。本发明也涉及制备这些化合物用的新中间体、包括至少一种这些新化合物作为活性成分的农药组合物、以及所述活性成分或组合物在农业或园艺领域防治或预防植物病原微生物(尤其是真菌)侵染植物方面的应用。

本发明提供式(I)化合物:

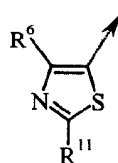


其中 A 为选自 (A1)-(A22) 的邻位取代环:

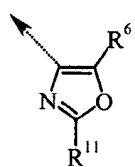




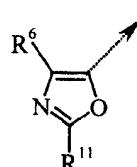
(A8)



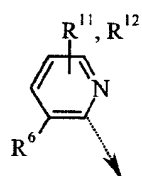
(A9)



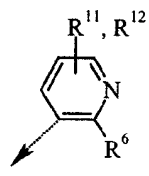
(A10)



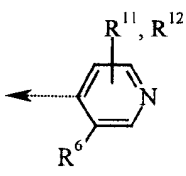
(A11)



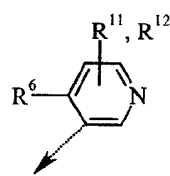
(A12)



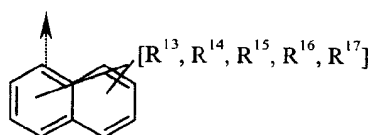
(A13)



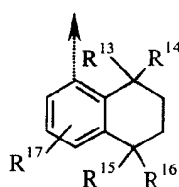
(A14)



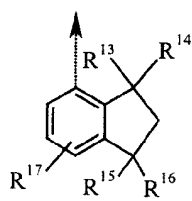
(A15)



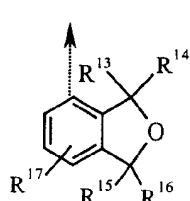
(A16)



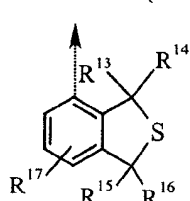
(A17)



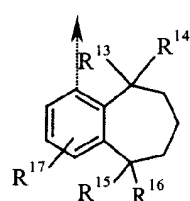
(A18)



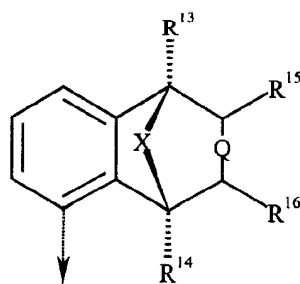
(A19)



(A20)



(A21)



(A22)

Q 为单键或双键; X 为 O, N(R¹⁸), S 或 C(R¹⁹R²⁰)(CR²¹R²²)_m(CR²³R²⁴)_n; R¹ 为卤素, 氰基, 硝基, C₁₋₄ 烷基, C₁₋₄ 卤代烷基, C₁₋₄ 烷氧基, C₁₋₄ 卤代烷氧基或任选取代的 C₂₋₄ 链烯基, 任选取代的 C₂₋₄ 炔基或任选取代的 SO₂(C₁₋₄) 烷基(其中各个任选取代的基团可具有多达 3 个的取代基, 且各取代基独立地选自卤素和 C₁₋₄ 烷氧基); R² 为 C₁₋₄ 烷基, C₁₋₄ 卤代烷基, C₁₋₄ 烷氧基(C₁₋₄) 烷基或 C₁₋₄ 烷硫基(C₁₋₄) 烷基或[任选取代的芳基](C₁₋₄) 烷基-或[任选取代的芳基]氧基(C₁₋₄) 烷基-(其中各个任选取代的芳基部分可具有多达 3 个的取代基, 且各取代基独立选自卤素和 C₁₋₄ 烷氧基); R³ 为氢, CH₂C≡CR⁴, CH₂CR⁴=C(H)R⁴, CH=C=CH₂ 或 COR⁵ 或任选取代的 C₁₋₄ 烷基, 任选取代的 C₁₋₄ 烷氧基或任选取代的 (C₁₋₄) 烷基 C(=O)O (其中各个任选取代的基团可具有多达 3 个的取代基, 且各取代基独立选自卤素, C₁₋₄ 烷氧基, C₁₋₄ 烷基, C₁₋₂ 卤代烷氧基, 羟基, 氰基, 羧基, 甲氧基羰基, 乙氧基羰基, 甲磺酰基和乙磺酰基); 各个 R⁴ 独立地为氢, 卤素, C₁₋₄ 烷基, C₁₋₄ 卤代烷基, C₁₋₄ 烷氧基或 C₁₋₄ 烷氧基(C₁₋₄) 烷基; R⁵ 为氢或任选取代的 C₁₋₆ 烷基, 任选取代的 C₁₋₄ 烷氧基, 任选取代的 C₁₋₄ 烷氧基(C₁₋₄) 烷基, 任选取代的 C₁₋₄ 烷硫基(C₁₋₄) 烷基或任选取代的芳基(其中各个任选取代的基团可具有多达 3 个的取代基, 且各取代基独立选自卤素、C₁₋₆ 烷氧基、C₁₋₆ 卤代烷氧基、氰基、羟基、甲氧基羰基和乙氧基羰基); R⁶ 为苯基[任选被多达 3 个取代基所取代, 且各取代基独立选自卤素、氰基、硝基、C₁₋₄ 烷基、C₁₋₄ 卤代烷基、C₁₋₄ 烷氧基、C₁₋₄ 卤代烷氧基、C₁₋₄ 卤代烷硫基、C(H)=N-OH、C(H)=N-O(C₁₋₆ 烷基)、C(C₁₋₆ 烷基)=N-OH、C(C₁₋₆ 烷基)=N-O-(C₁₋₆ 烷基)、(Z)_pC≡CR²⁵ 和

(Z)_pCR²⁸=CR²⁶R²⁷], 5-6 元杂环[其中所述环包含 1-3 个杂原子(各自独立选自氧、硫和氮), 并且所述环任选被多达 3 个的取代基取代, 各取代基独立选自卤素、氰基、硝基、C₁₋₄烷基、C₁₋₄卤代烷基、C₁₋₄烷氧基、C₁₋₄卤代烷氧基、C(H)=N-O-(C₁₋₆烷基)和 C(C₁₋₆烷基)=N-O-(C₁₋₆烷基)], C₃₋₁₂烷基[任选被多达 6 个的取代基取代, 各取代基独立选自卤素、氰基、C₁₋₄烷氧基、C₁₋₄烷硫基、COO-C₁₋₄烷基、=N-OH、=N-O-(C₁₋₄烷基)、C₃₋₈环烷基(其本身任选被多达 3 个的取代基取代, 各取代基独立选自 C₁₋₄烷基、卤素、C₁₋₄烷氧基和 C₁₋₄卤代烷氧基)和 C₄₋₈环烯基(其本身任选被多达 3 个的取代基取代, 各取代基独立选自 C₁₋₄烷基、卤素、C₁₋₄烷氧基和 C₁₋₄卤代烷氧基)], C₂₋₁₂链烯基[任选被多达 6 个的取代基取代, 各取代基独立选自卤素、氰基、C₁₋₄烷氧基、C₁₋₄烷硫基、COO-(C₁₋₄烷基)、=N-OH、=N-O-(C₁₋₄烷基)、C₃₋₈环烷基(其本身任选被多达 3 个的取代基取代, 各取代基独立选自 C₁₋₄烷基、卤素、C₁₋₄烷氧基和 C₁₋₄卤代烷氧基)和 C₄₋₈环烯基(其本身任选被多达 3 个的取代基取代, 各取代基独立选自 C₁₋₄烷基、卤素、C₁₋₄烷氧基和 C₁₋₄卤代烷氧基)], C₂₋₁₂炔基[任选被多达 6 个的取代基取代, 各取代基独立选自卤素、氰基、C₁₋₄烷氧基、C₁₋₄烷硫基、COO-C₁₋₄烷基、=N-OH、=N-O-(C₁₋₄烷基)、C₃₋₈环烷基(其本身任选被多达 3 个的取代基取代, 各取代基独立选自 C₁₋₄烷基、卤素、C₁₋₄烷氧基和 C₁₋₄卤代烷氧基)、Si(CH₃)₃和 C₄₋₈环烯基(其本身任选被多达 3 个的取代基取代, 各取代基独立选自 C₁₋₄烷基、卤素、C₁₋₄烷氧基和 C₁₋₄卤代烷氧基)], C₃₋₈环烷基[任选被多达 3 个的取代基取代, 各取代基独立选自卤素、C₁₋₄烷基、C₁₋₄卤代烷基、C₁₋₄烷氧基、C₁₋₄卤代烷氧基、C₁₋₄烷硫基、C₃₋₆环烷基[其本身任选被多达 3 个的取代基取代, 各取代基独立选自 C₁₋₄烷基、卤素、C₁₋₄烷氧基和 C₁₋₄卤代烷氧基)和苯基(其本身任选被多达 5 个独立选择的卤原子取代)], C₄₋₈环烯基[任选被多达 3 个的取代基取代, 各取代基独立选自卤素、C₁₋₄烷基、C₁₋₄卤代烷基、C₁₋₄烷氧基、C₁₋₄卤代烷氧基、C₁₋₄烷硫基、C₃₋₆环烷基[其本身任选被多达 3 个的取代基取代, 各取代基独立选自 C₁₋₄烷基、卤素、C₁₋₄烷氧基和 C₁₋₄卤代烷氧基)和苯基(其本身任选被多达 5

个独立选择的卤原子取代)], C_{6-12} 二环烷基 [任选被多达 3 个的取代基取代, 各取代基独立选自卤素、 C_{1-4} 烷基和 C_{1-4} 卤代烷基] 或饱和或不饱和的脂族基团 [该基团包含 3-13 个碳原子和至少一个硅原子, 并任选包含 1-3 个各自独立选自氧、氮和硫的杂原子, 而且该基团任选被多达 4 个独立选择的卤原子取代]; R^7 、 R^8 、 R^9 、 R^{10} 、 R^{11} 和 R^{12} 各自独立地为氢, 卤素, 氰基, 硝基, C_{1-4} 烷基, C_{1-4} 卤代烷基, C_{1-4} 烷氧基, C_{1-4} 卤代烷氧基, C_{1-4} 烷硫基或 C_{1-4} 卤代烷硫基; R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} 、 R^{16} 和 R^{17} 各自独立地为氢, 卤素, C_{1-4} 烷基, $C(O)CH_3$, C_{1-4} 卤代烷基, C_{1-4} 烷氧基, C_{1-4} 卤代烷氧基, C_{1-4} 烷硫基, C_{1-4} 卤代烷硫基, 羟甲基或 C_{1-4} 烷氧基甲基; R^{18} 为氢, C_{1-4} 烷基, C_{1-4} 烷氧基 (C_{1-4}) 烷基, 甲酰基, $C(=O)C_{1-4}$ 烷基 (任选被卤素或 C_{1-4} 烷氧基取代) 或 $C(=O)O-C_{1-6}$ 烷基 (任选被卤素、 C_{1-4} 烷氧基或 CN 取代); R^{19} 、 R^{20} 、 R^{21} 、 R^{22} 、 R^{23} 和 R^{24} 各自独立地为 C_{1-6} 烷基, C_{1-6} 链烯基 [二者任选被下述基团取代: 卤素、羟基、 $=O$ 、 C_{1-4} 烷氧基、 $O-C(O)-C_{1-4}$ 烷基、芳基或 3-7 元碳环 (其本身任选被多达 3 个的甲基取代)], 3-7 元碳环 (任选被多达 3 个的甲基取代, 并且任选包含一个选自氮和氧的杂原子), 氢, 卤素, 羟基或 C_{1-4} 烷氧基; 或 $R^{19}R^{20}$ 与它们所连接的碳原子一起形成羰基, 3-5 元碳环 (任选被多达 3 个的甲基取代), C_{1-6} 亚烷基 (任选被多达 3 个的甲基取代) 或 C_{3-6} 亚环烷基 (任选被多达 3 个的甲基取代); R^{25} 为氢, 卤素, C_{1-4} 烷基, C_{1-4} 卤代烷基, C_{1-4} 烷氧基 (C_{1-4}) 烷基, C_{1-4} 卤代烷氧基 (C_{1-4}) 烷基或 $Si(C_{1-4} \text{ 烷基})_3$; R^{26} 和 R^{27} 各自独立地为氢, 卤素, C_{1-4} 烷基或 C_{1-4} 卤代烷基; R^{28} 为氢, C_{1-4} 烷基或 C_{1-4} 卤代烷基; m 为 0 或 1; n 为 0 或 1; p 为 0 或 1; 以及 Z 为 C_{1-4} 亚烷基。

卤素是指氟、氯、溴或碘。

各烷基部分是直链或支链的, 例如为甲基、乙基、正丙基、正丁基、正戊基、正己基、异丙基、仲丁基、异丁基、叔丁基、新戊基、正庚基、1,3-二甲基丁基、1,3-二甲基戊基, 1-甲基-3-乙基-丁基或 1,3,3-三甲基丁基。

卤代烷基部分是指被一个或多个相同或不同的卤原子取代的烷基

部分, 例如 CF_3 , CF_2Cl , CHF_2 , CH_2F , CCl_3 , CF_3CH_2 , CHF_2CH_2 , CH_2FCH_2 , CH_3CHF 或 CH_3CF_2 。

链烯基和炔基部分可以是直链或支链的形式。链烯基部分在适当情况下可以是(E)-或(Z)构型。实例为乙烯基、烯丙基、乙炔基或炔丙基。

亚烷基部分可以是直链或支链的形式。亚烷基包括亚甲基 [$\text{CH}_2=\text{C}$], 亚乙基 [$\text{CH}_3\text{C}(\text{H})=\text{C}$], 正丙叉, 异丙叉 [$(\text{CH}_3)_2\text{C}=\text{C}$], 正丁叉, 异丁叉, 2-丁叉, 正戊叉, 异戊叉, 新戊叉, 2-戊叉, 正己叉, 2-己叉, 3-己叉, 异己叉和新己叉。

环烷基包括环丙基, 环丁基, 环戊基, 环己基, 环庚基和环辛基。

环烯基包括环丁烯基, 环戊烯基, 环己烯基和环庚烯基。

亚环烷基包括环丙叉 [$\text{c}(\text{C}_3\text{H}_4)=\text{C}$], 环丁叉, 环戊叉和环己叉。

二环烷基包括二环[1, 1, 1]戊基, 二环[2, 1, 1]己基, 二环[2, 2, 1]庚基, 二环[2, 2, 2]辛基, 二环[3, 2, 1]辛基和二环[3, 2, 2]壬基。

芳基包括苯基, 萘基, 蒽基, 茛基和 2, 3-二氢化茛基, 但优选苯基。

在本发明的一个实施方式中, A 如上定义, 但不为(A1)。

在本发明的另一个实施方式中, R^6 如上定义, 但不为饱和或不饱和的脂族基[其中该基团包含 3-13 个碳原子和至少一个硅原子, 并且任选包含 1-3 个各自独立选自氧、氮和硫的杂原子, 而且该基团任选被多达 4 个独立选择的卤原子取代]。

在本发明的进一步实施方式中, 当 R^6 为饱和或不饱和的脂族基[其中该基团包含 3-13 个碳原子和至少一个硅原子并任选包含 1-3 个各自独立选自氧、氮和硫的杂原子, 而且该基团任选被多达 4 个独立选择的卤原子取代]时, A 如上定义, 但不为(A1)。

优选 Q 为单键。

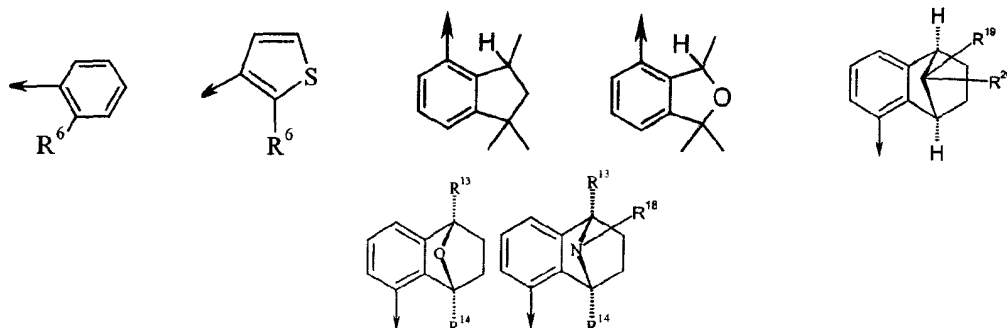
优选 n 为 0。

优选 m 为 0。

优选 A 选自式(A1), (A2), (A3), (A16), (A17), (A18), (A19), (A20)和(A22)。

较优选 A 选自式 (A1), (A2), (A18), (A19) 和 (A22)。

更优选 A 选自下列邻位取代环之一:



其中 R^{13} 和 R^{14} 各自独立选自 H 和 C_{1-4} 烷基。

优选 X 为 O, NR^{18} 或 $(CR^{19}R^{20})(CR^{21}R^{22})_n(CR^{23}R^{24})_n$ 。

较优选 X 为 O 或 $(CR^{19}R^{20})(CR^{21}R^{22})_n(CR^{23}R^{24})_n$ 。

更优选 X 为 $(CR^{19}R^{20})(CR^{21}R^{22})_n(CR^{23}R^{24})_n$ 。

最优选 X 为 $(CR^{19}R^{20})$ 。

优选 R^1 为 C_{1-4} 烷基, C_{1-4} 卤代烷基, NO_2 , CN 或 OCF_3 。

较优选 R^1 为 CHF_2 , CF_3 , CH_2F , CF_2Cl , CH_3 或 C_2H_5 。

更优选 R^1 为 CHF_2 , CF_3 , CH_2F , CF_2Cl 或 CH_3 。

最优选 R^1 为 CHF_2 , CF_3 或 CH_2F 。

优选 R^2 为 C_{1-4} 烷基, C_{1-4} 卤代烷基, C_{1-4} 烷氧基 (C_{1-4}) 烷基或 C_{1-4} 烷基硫基 (C_{1-4}) 烷基。

较优选 R^2 为 CH_3 , CF_3 , C_2H_5 , CH_2OCH_3 或 CH_2SCH_3 。

更优选 R^2 为 CH_3 或 C_2H_5 。

最优选 R^2 为 CH_3 。

优选 R^3 为 氢, $CH_2C \equiv CR^4$, $CH_2CR^4=C(H)R^4$, $CH=C=CH_2$ 或 COR^5 。

较优选 R^3 为 H, $CH_2C \equiv CH$, $CH=C=CH_2$, $CH_2CH=CH_2$ 或 $COCH_3$ 。

进一步优选 R^3 为 H, $CH_2C \equiv CH$, $CH=C=CH_2$ 或 $CH_2CH=CH_2$ 。

更优选 R^3 为 H, $CH_2C \equiv CH$ 或 $CH=C=CH_2$ 。

最优选 R^3 为 H。

优选各个 R^4 独立地为 H, 卤素, C_{1-4} 烷基或 C_{1-4} 烷氧基。

较优选各个 R^4 独立地为 H, Cl, Br, CH_3 或 CH_3O 。

更优选各个 R^4 独立地为 H, Cl 或 CH_3 。

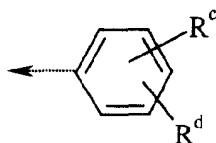
最优选各个 R^4 为 H。

优选 R^5 为 H, C_{1-6} 烷基, C_{1-4} 烷氧基或 C_{1-4} 烷氧基 (C_{1-4}) 烷基。

较优选 R^5 为 H, 甲基, $OC(CH_3)_3$ 或 CH_2OCH_3 。

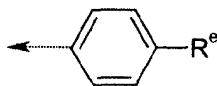
更优选 R^5 为 H 或甲基。

优选 R^6 选自 C_{3-10} 烷基, C_{3-9} 卤代烷基, C_{3-7} 环烷基 [任选被 C_3 环烷基取代 (该 C_3 环烷基本身任选被 C_{1-2} 烷基取代) 或被多达两个的 C_{1-4} 烷基基团取代], 脂族基 [其包含 3-10 个碳原子和至少一个硅原子, 并任选包含一个氧原子], 噻吩基 [任选被卤素取代], 咪唑基 [任选被卤素取代], 吡啶基 [任选被卤素取代], 噁唑基, 异噁唑基和



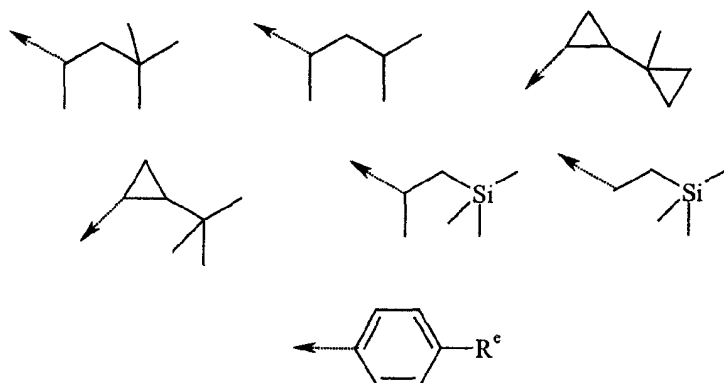
其中 R^c 和 R^d 独立地为 H, Cl, Br, F, I, CN, NO_2 , C_{1-4} 烷基, CF_3 , SCF_3 , OCF_3 , $CH=NOH$, $CH=N-OC_{1-6}$ 烷基, $C\equiv CH$, $C\equiv C-Si(CH_3)_3$, $C(H)=CH_2$ 或 $C(H)=CH(C_{1-4}$ 烷基)。

更优选 R^6 为 C_{3-7} 烷基, C_{3-6} 环烷基 [任选被 C_{1-4} 烷基或 C_3 环烷基取代 (其中的 C_3 环烷基本身任选被 C_{1-2} 烷基取代)], 脂族基 (其包含 3-8 个碳原子和至少一个硅原子), 或



其中 R^e 为 Cl, Br, F, CF_3 , OCF_3 , $CH=N-OC_{1-4}$ 烷基, $C\equiv CH$, $C\equiv C-Si(CH_3)_3$ 或 $C(H)=CH_2$ [在一个方案中, 优选 R^e 为 Cl, Br, F, CF_3 , OCF_3 , $CH=N-OC_{1-4}$ 烷基, $C\equiv CH$ 或 $C(H)=CH_2$]。

更优选 R^6 选自下列基团之一:



其中 R^6 为 Cl, Br, F, CF_3 , $C\equiv CH$, $C\equiv C-Si(CH_3)_3$ 或 $CH=N-OC_{1-4}$ 烷基 [在一个方案中, 优选 R^6 为 Cl, Br, F, CF_3 , $C\equiv CH$ 或 $CH=N-OC_{1-4}$ 烷基]。

优选 R^7 为 H, F 或 CH_3 。

优选 R^8 为 H。

优选 R^9 为 H。

优选 R^{10} 为 H。

优选 R^{11} 为 H。

优选 R^{12} 为 H。

优选 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} 、 R^{16} 各自独立地为 H, CH_3 , C_2H_5 , CF_3 , CH_3O , $C(O)CH_3$ 或 CH_3OCH_2 。

较优选 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} 、 R^{16} 各自独立地为 H 或 CH_3 。

优选 R^{17} 为 H。

优选 R^{18} 为 H, CH_3 , C_2H_5 , $C(O)OC_{1-4}$ 烷基 (任选被卤素或 C_{1-4} 烷氧基取代) 或 COH 。

较优选 R^{18} 为 $C(O)OC_{1-4}$ 烷基 (任选被卤素或 C_{1-4} 烷氧基取代) 或 COH 。

更优选 R^{18} 为 $C(O)OC_{1-4}$ 烷基 (任选被卤素或 C_{1-4} 烷氧基取代)。

最优选 R^{18} 为 $C(O)OC_{1-4}$ 烷基。

优选 R^{19} 和 R^{20} 各自独立地为 H, 卤素, C_{1-5} 烷基, C_{1-3} 烷氧基, CH_2O , C_{3-6} 环烷基, $CH_2O-C(=O)CH_3$, CH_2-C_{3-6} 环烷基或苄基; 或者 R^{19} 和 R^{20} 与它们所连接的碳原子一起形成羰基, 3-5 元碳环, C_{1-5} 亚烷基或 C_{3-6} 亚环烷基。

较优选 R^{19} 和 R^{20} 独立地为 H, CH_3 , C_2H_5 , $n-C_3H_7$, $i-C_3H_7$, $i-C_4H_9$, $CH(C_2H_5)_2$, CH_2 -环丙基或环戊基; 或者 R^{19} 和 R^{20} 与它们所连接的碳原子

一起形成 3 元碳环。

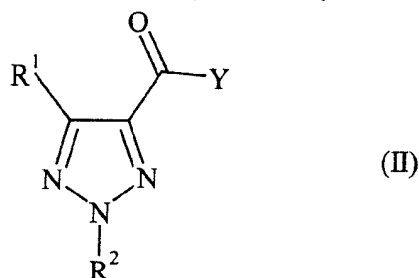
优选 R^{21} 为 H 或 CH_3 。

优选 R^{22} 为 H 或 CH_3 。

优选 R^{23} 为 H 或 CH_3 。

优选 R^{24} 为 H 或 CH_3 。

下面的式 (II) 化合物可用作制备式 (I) 化合物的中间体：



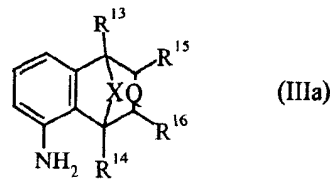
其中 R^1 和 R^2 如上面式 (I) 化合物所定义，且 Y 为卤素，羟基或 C_{1-5} 烷氧基。

一些式 (II) 化合物是文献中已知的 [B. Iddon 等, *J. Chem. Soc. Perkin Trans. 1*, 1341 (1996); M. Begtrup 等, *Acta Chemica Scand.*, 19, 2022 (1965); D. R. Buckle 等, *J. Chem. Res. Syn.* 10, 292 (1982); 和 A. Peratoner 等, *Sci. Fis. Mat. Rend* 5, 16 (1907)], 但其它化合物是新的。

因此，本发明的另一个方面提供了其中 R^1 和 R^2 如上面式 (I) 化合物所定义且 Y 为卤素，羟基或 C_{1-5} 烷氧基的式 (II) 化合物；条件是：当 R^1 为氯和 R^2 为 $4-CH_3O-C_6H_4-CH_2-$ 时，Y 不能为 C_2H_5O ；当 R^1 为 CH_3O 和 R^2 为 CH_3 时，Y 不能为 C_2H_5O ；当 R^1 为溴和 R^2 为 CH_3OCH_2 时，Y 不能为 CH_3O ；以及当 R^1 为 CH_3 和 R^2 为 C_2H_5 时，Y 不能为 OH。

优选 Y 为羟基，氯，氟或 C_{1-3} 烷氧基。

一些式 (IIIa) 化合物也是新的，但某一些却已在文献中有记载 [例如，参见 L. A. Paquette 等, *J. Amer. Chem. Soc.* 99, 3734 (1977); H. Plieninger 等, *Chem. Ber.* 109, 2121 (1976); Kasansski 等, *Zh. Obshch. Khim.* (1959), 29, 2588; 和 A. J. Kirby 等, *J. Chem. Soc., Perkin Trans. 2*, 1997, 1081]。



当 R^{13} , R^{14} , R^{15} , R^{16} , Q 和 X 如上面式 (I) 化合物所定义时, 式 (IIIa) 的苯胺化合物是新的, 但前提是: 当 R^{13} , R^{14} , R^{15} 和 R^{16} 各自为 H 时, 如果 Q 为双键, 则 X 不能为 CH_2 , 以及如果 Q 为单键或双键, 则 X 不能为 CH_2CH_2 ; 以及当 R^{13} 为 CH_3 , R^{14} 为 OCH_3 和 R^{15} 与 R^{16} 都为 H 时, 如果 Q 为单键, 则 X 不能为 CH_2CH_2 。

因此, 在另一个方面, 本发明提供了式 (IIIa) 化合物, 其中 R^{13} , R^{14} , R^{15} , R^{16} , Q 和 X 如上面式 (I) 化合物所定义; 但前提是: 当 R^{13} , R^{14} , R^{15} 和 R^{16} 各自为 H 时, 如果 Q 为双键则 X 不能为 CH_2 , 如果 Q 为单键或双键则 X 不能为 CH_2CH_2 ; 以及当 R^{13} 为 CH_3 , R^{14} 为 OCH_3 和 R^{15} 与 R^{16} 都为 H 时, 如果 Q 为单键, 则 X 不能为 CH_2CH_2 。

式 (I)、(II) 和 (IIIa) 的化合物可以不同的几何异构体或旋光异构体的形式或以不同的互变异构体的形式存在。对于每种通式化合物, 本发明都包括所有这些异构体和互变异构体及其所有比例的混合物以及同位素的形式如氘代化合物。

下面表 1-28 的化合物用来举例说明本发明的化合物。

表 1 提供 59 个式 (II) 化合物, 其中 R^1 , R^2 和 Y 如表 1 所定义。

表 1

化合物 序号	R^1	R^2	Y
1. 01	CHF_2	CH_3	OH
1. 02	CHF_2	CH_3	Cl
1. 03	CHF_2	CH_3	OCH_3
1. 04	CHF_2	CH_3	OC_2H_5
1. 05	CHF_2	CH_3	$OC_3H_7 (n)$
1. 06	CHF_2	CH_3	$OC_3H_7 (i)$
1. 07	CHF_2	C_2H_5	OH
1. 08	CHF_2	C_2H_5	Cl
1. 09	CHF_2	C_2H_5	OCH_3

1.10	CHF ₂	C ₂ H ₅	OC ₂ H ₅
1.11	CHF ₂	C ₂ H ₅	OC ₃ H ₇ (<i>n</i>)
1.12	CHF ₂	C ₂ H ₅	OC ₃ H ₇ (<i>i</i>)
1.13	CF ₃	CH ₃	OH
1.14	CF ₃	CH ₃	Cl
1.15	CF ₃	CH ₃	OCH ₃
1.16	CF ₃	CH ₃	OC ₂ H ₅
1.17	CF ₃	CH ₃	OC ₃ H ₇ (<i>n</i>)
1.18	CF ₃	CH ₃	OC ₃ H ₇ (<i>i</i>)
1.19	CF ₃	C ₂ H ₅	OH
1.20	CF ₃	C ₂ H ₅	Cl
1.21	CF ₃	C ₂ H ₅	OCH ₃
1.22	CF ₃	C ₂ H ₅	OC ₂ H ₅
1.23	CF ₃	C ₂ H ₅	OC ₃ H ₇ (<i>n</i>)
1.24	CF ₃	C ₂ H ₅	OC ₃ H ₇ (<i>i</i>)
1.25	CF ₃	CH ₂ OCH ₃	OH
1.26	CF ₃	CH ₂ OCH ₃	Cl
1.27	CF ₃	CH ₂ OCH ₃	OCH ₃
1.28	CF ₃	CH ₂ OCH ₃	OC ₂ H ₅
1.29	CF ₃	CH ₂ OCH ₃	OC ₃ H ₇ (<i>n</i>)
1.30	CF ₃	CH ₂ OCH ₃	OC ₃ H ₇ (<i>i</i>)
1.31	CF ₃	CH ₃	F
1.32	CHF ₂	CH ₃	F
1.33	CHF ₂	CH ₂ OCH ₃	OH
1.34	CHF ₂	CH ₂ OCH ₃	OCH ₃
1.35	CHF ₂	CH ₂ OCH ₃	OC ₂ H ₅
1.36	CF ₃	CH ₂ SCH ₃	OH
1.37	CF ₃	CH ₂ SCH ₃	OCH ₃
1.38	CN	CH ₃	OCH ₃
1.39	OCF ₃	CH ₃	OCH ₃
1.40	NO ₂	CH ₃	OCH ₃
1.41	CH ₃	CH ₃	OH
1.42	CH ₃	CH ₃	OCH ₃
1.43	CH ₃	CH ₃	Cl

1.44	CH ₃	C ₂ H ₅	OH
1.45	C ₂ F ₅	CH ₃	OCH ₃
1.46	CF ₃	CF ₃	OCH ₃
1.47	CH ₃	CF ₃	OCH ₃
1.48	CH ₂ F	CH ₃	OH
1.49	CH ₂ F	CH ₃	Cl
1.50	CH ₂ F	CH ₃	OCH ₃
1.51	CH ₂ F	CH ₃	OC ₂ H ₅
1.52	CH ₂ F	CH ₃	OC ₃ H ₇ (<i>n</i>)
1.53	CH ₂ F	CH ₃	OC ₃ H ₇ (<i>i</i>)
1.54	CH ₂ F	C ₂ H ₅	OH
1.55	CH ₂ F	C ₂ H ₅	Cl
1.56	CH ₂ F	C ₂ H ₅	OCH ₃
1.57	CH ₂ F	C ₂ H ₅	OC ₂ H ₅
1.58	CH ₂ F	C ₂ H ₅	OC ₃ H ₇ (<i>n</i>)
1.59	CH ₂ F	C ₂ H ₅	OC ₃ H ₇ (<i>i</i>)

表 X 代表表 2 [当 X 为 2 时], 表 3 [当 X 为 3 时], 表 4 [当 X 为 4 时], 表 5 [当 X 为 5 时], 表 6 [当 X 为 6 时] 以及表 7 [当 X 为 7 时].

表 X

Cmpd. No.	R ²	R ³	R ⁶	R ⁷
X.001	CH ₃	H	苯基	H
X.002	CH ₃	CH ₂ C≡CH	苯基	H
X.003	CH ₃	H	2'-氟苯基	H
X.004	CH ₃	H	3'-氟苯基	H
X.005	CH ₃	H	4'-氟苯基	H
X.006	C ₂ H ₅	H	4'-氟苯基	H
X.007	CH ₂ OCH ₃	H	4'-氟苯基	H
X.008	CH ₃	COCH ₃	4'-氟苯基	H
X.009	CH ₃	COCH ₂ OCH ₃	4'-氟苯基	H

X. 010	CH ₃	CH ₂ C≡CH	4'-氟苯基	H
X. 011	CH ₃	CH=C=CH ₂	4'-氟苯基	H
X. 012	CH ₃	COO- <i>tert</i> -Bu	4'-氟苯基	H
X. 013	CH ₃	H	4'-氟苯基	F
X. 014	CH ₃	H	4'-氟苯基	CH ₃
X. 015	CH ₃	H	2'-氟苯基	H
X. 016	CH ₃	H	3'-氟苯基	H
X. 017	CH ₃	H	4'-氟苯基	H
X. 018	C ₂ H ₅	H	4'-氟苯基	H
X. 019	CH ₂ OCH ₃	H	4'-氟苯基	H
X. 020	CH ₃	COCH ₃	4'-氟苯基	H
X. 021	CH ₃	COCH ₂ OCH ₃	4'-氟苯基	H
X. 022	CH ₃	CH ₂ C≡CH	4'-氟苯基	H
X. 023	CH ₃	CH=C=CH ₂	4'-氟苯基	H
X. 024	CH ₃	COO- <i>tert</i> -Bu	4'-氟苯基	H
X. 025	CH ₃	H	4'-氟苯基	F
X. 026	CH ₃	H	4'-氟苯基	CH ₃
X. 027	CH ₃	H	2'-溴苯基	H
X. 028	CH ₃	H	3'-溴苯基	H
X. 029	CH ₃	H	4'-溴苯基	H
X. 030	C ₂ H ₅	H	4'-溴苯基	H
X. 031	CH ₂ OCH ₃	H	4'-溴苯基	H
X. 032	CH ₃	COCH ₃	4'-溴苯基	H
X. 033	CH ₃	COCH ₂ OCH ₃	4'-溴苯基	H
X. 034	CH ₃	CH ₂ C≡CH	4'-溴苯基	H
X. 035	CH ₃	CH=C=CH ₂	4'-溴苯基	H
X. 036	CH ₃	COO- <i>tert</i> -Bu	4'-溴苯基	H
X. 037	CH ₃	H	4'-溴苯基	F
X. 038	CH ₃	H	4'-溴苯基	CH ₃
X. 039	CH ₃	H	2'-碘苯基	H
X. 040	CH ₃	H	3'-碘苯基	H
X. 041	CH ₃	H	4'-碘苯基	H
X. 042	CH ₃	H	2'-CF ₃ -苯基	H
X. 043	CH ₃	H	3'-CF ₃ -苯基	H

X. 044	CH ₃	H	4'-CF ₃ -苯基	H
X. 045	C ₂ H ₅	H	4'-CF ₃ -苯基	H
X. 046	CH ₂ OCH ₃	H	4'-CF ₃ -苯基	H
X. 047	CH ₃	COCH ₃	4'-CF ₃ -苯基	H
X. 048	CH ₃	COCH ₂ OCH ₃	4'-CF ₃ -苯基	H
X. 049	CH ₃	CH ₂ C≡CH	4'-CF ₃ -苯基	H
X. 050	CH ₃	COO- <i>tert</i> -Bu	4'-CF ₃ -苯基	H
X. 051	CH ₃	H	2'-OCF ₃ -苯基	H
X. 052	CH ₃	H	3'-OCF ₃ -苯基	H
X. 053	CH ₃	H	4'-OCF ₃ -苯基	H
X. 054	C ₂ H ₅	H	4'-OCF ₃ -苯基	H
X. 055	CH ₂ OCH ₃	H	4'-OCF ₃ -苯基	H
X. 056	CH ₃	COCH ₃	4'-OCF ₃ -苯基	H
X. 057	CH ₃	COCH ₂ OCH ₃	4'-OCF ₃ -苯基	H
X. 058	CH ₃	CH ₂ C≡CH	4'-OCF ₃ -苯基	H
X. 059	CH ₃	COO- <i>tert</i> -Bu	4'-OCF ₃ -苯基	H
X. 060	CH ₃	CH=C=CH ₂	4'-OCF ₃ -苯基	H
X. 061	CH ₃	H	4'-SCF ₃ -苯基	H
X. 062	CH ₃	H	2'-CH=NOH-苯基	H
X. 063	CH ₃	H	3'-CH=NOH-苯基	H
X. 064	CH ₃	H	4'-CH=NOH-苯基	H
X. 065	CH ₃	H	2'-CH=NOCH ₃ -苯基	H
X. 066	CH ₃	H	3'-CH=NOCH ₃ -苯基	H
X. 067	CH ₃	H	4'-CH=NOCH ₃ -苯基	H
X. 068	CH ₃	H	2'-CH=NOC ₂ H ₅ -苯基	H
X. 069	CH ₃	H	3'-CH=NOC ₂ H ₅ -苯基	H
X. 070	CH ₃	H	4'-CH=NOC ₂ H ₅ -苯基	H
X. 071	CH ₃	H	2'-CN-苯基	H
X. 072	CH ₃	H	3'-CN-苯基	H
X. 073	CH ₃	H	4'-CN-苯基	H
X. 074	CH ₃	H	2'-NO ₂ -苯基	H
X. 075	CH ₃	H	3'-NO ₂ -苯基	H
X. 076	CH ₃	H	4'-NO ₂ -苯基	H
X. 077	CH ₃	H	3', 4'-二氟苯基	H

X. 078	C ₂ H ₅	H	3', 4'-二氟苯基	H
X. 079	CH ₂ OCH ₃	H	3', 4'-二氟苯基	H
X. 080	CH ₃	COCH ₃	3', 4'-二氟苯基	H
X. 081	CH ₃	COCH ₂ OCH ₃	3', 4'-二氟苯基	H
X. 082	CH ₃	CH ₂ C≡CH	3', 4'-二氟苯基	H
X. 083	CH ₃	COO- <i>tert</i> -Bu	3', 4'-二氟苯基	H
X. 084	CH ₃	CH=C=CH ₂	3', 4'-二氟苯基	H
X. 085	CH ₃	H	3', 4'-二氟苯基	F
X. 086	CH ₃	H	3', 4'-二氟苯基	CH ₃
X. 087	CH ₃	H	3', 4'-二氟苯基	H
X. 088	C ₂ H ₅	H	3', 4'-二氟苯基	H
X. 089	CH ₂ OCH ₃	H	3', 4'-二氟苯基	H
X. 090	CH ₃	COCH ₃	3', 4'-二氟苯基	H
X. 091	CH ₃	COCH ₂ OCH ₃	3', 4'-二氟苯基	H
X. 092	CH ₃	CH ₂ C≡CH	3', 4'-二氟苯基	H
X. 093	CH ₃	COO- <i>tert</i> -Bu	3', 4'-二氟苯基	H
X. 094	CH ₃	CH=C=CH ₂	3', 4'-二氟苯基	H
X. 095	CH ₃	H	3', 4'-二氟苯基	F
X. 096	CH ₃	H	3', 4'-二氟苯基	CH ₃
X. 097	CH ₃	H	4'-氟-3'-氟-苯基	H
X. 098	C ₂ H ₅	H	4'-氟-3'-氟-苯基	H
X. 099	CH ₂ OCH ₃	H	4'-氟-3'-氟-苯基	H
X. 100	CH ₃	COCH ₃	4'-氟-3'-氟-苯基	H
X. 101	CH ₃	COCH ₂ OCH ₃	4'-氟-3'-氟-苯基	H
X. 102	CH ₃	CH ₂ C≡CH	4'-氟-3'-氟-苯基	H
X. 103	CH ₃	COO- <i>tert</i> -Bu	4'-氟-3'-氟-苯基	H
X. 104	CH ₃	CH=C=CH ₂	4'-氟-3'-氟-苯基	H
X. 105	CH ₃	H	4'-氟-3'-氟-苯基	F
X. 106	CH ₃	H	4'-氟-3'-氟-苯基	CH ₃
X. 107	CH ₃	H	3'-氟-4'-氟-苯基	H
X. 108	C ₂ H ₅	H	3'-氟-4'-氟-苯基	H
X. 109	CH ₂ OCH ₃	H	3'-氟-4'-氟-苯基	H
X. 110	CH ₃	COCH ₃	3'-氟-4'-氟-苯基	H
X. 111	CH ₃	COCH ₂ OCH ₃	3'-氟-4'-氟-苯基	H

X. 112	CH ₃	CH ₂ C≡CH	3'-氯-4'-氟-苯基	H
X. 113	CH ₃	COO- <i>tert</i> -Bu	3'-氯-4'-氟-苯基	H
X. 114	CH ₃	CH=C=CH ₂	3'-氯-4'-氟-苯基	H
X. 115	CH ₃	H	3'-氯-4'-氟-苯基	F
X. 116	CH ₃	H	3'-氯-4'-氟-苯基	CH ₃
X. 117	CH ₃	H	2'-4'-二氯-苯基	H
X. 118	CH ₂ OCH ₃	H	2'-4'-二氯-苯基	H
X. 119	CH ₃	H	2'-4'-二氯-苯基	H
X. 120	CH ₂ OCH ₃	H	2'-4'-二氯-苯基	H
X. 121	CH ₃	H	CH ₂ CH ₂ CH ₃	H
X. 122	C ₂ H ₅	H	CH ₂ CH ₂ CH ₃	H
X. 123	CH ₂ OCH ₃	H	CH ₂ CH ₂ CH ₃	H
X. 124	CH ₃	CH ₂ C≡CH	CH ₂ CH ₂ CH ₃	H
X. 125	CH ₃	H	CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H
X. 126	C ₂ H ₅	H	CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H
X. 127	CH ₂ OCH ₃	H	CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H
X. 128	CH ₃	CH ₂ C≡CH	CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	H
X. 129	CH ₃	H	CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	F
X. 130	CH ₃	H	CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	CH ₃
X. 131	CH ₃	H	CH ₂ CH ₂ CH ₂ (C ₂ H ₅)	H
X. 132	C ₂ H ₅	H	CH ₂ CH ₂ CH ₂ (C ₂ H ₅)	H
X. 133	CH ₂ OCH ₃	H	CH ₂ CH ₂ CH ₂ (C ₂ H ₅)	H
X. 134	CH ₃	CH ₂ C≡CH	CH ₂ CH ₂ CH ₂ (C ₂ H ₅)	H
X. 135	CH ₃	H	CH ₂ CH ₂ CH ₂ (C ₂ H ₅)	F
X. 136	CH ₃	H	CH ₂ CH ₂ CH ₂ (C ₂ H ₅)	CH ₃
X. 137	CH ₃	H	CH ₂ CH ₂ CH (CH ₃) ₂	H
X. 138	C ₂ H ₅	H	CH ₂ CH ₂ CH (CH ₃) ₂	H
X. 139	CH ₂ OCH ₃	H	CH ₂ CH ₂ CH (CH ₃) ₂	H
X. 140	CH ₃	COCH ₃	CH ₂ CH ₂ CH (CH ₃) ₂	H
X. 141	CH ₃	COCH ₂ OCH ₃	CH ₂ CH ₂ CH (CH ₃) ₂	H
X. 142	CH ₃	CH ₂ C≡CH	CH ₂ CH ₂ CH (CH ₃) ₂	H
X. 143	CH ₃	COO- <i>tert</i> -Bu	CH ₂ CH ₂ CH (CH ₃) ₂	H
X. 144	CH ₃	CH=C=CH ₂	CH ₂ CH ₂ CH (CH ₃) ₂	H
X. 145	CH ₃	H	CH ₂ CH ₂ CH (CH ₃) ₂	F

X. 146	CH ₃	H	CH ₂ CH ₂ CH (CH ₃) ₂	CH ₃
X. 147	CH ₃	H	CH ₂ CH ₂ CH (CH ₃) (C ₂ H ₅)	H
X. 148	C ₂ H ₅	H	CH ₂ CH ₂ CH (CH ₃) (C ₂ H ₅)	H
X. 149	CH ₂ OCH ₃	H	CH ₂ CH ₂ CH (CH ₃) (C ₂ H ₅)	H
X. 150	CH ₃	COCH ₃	CH ₂ CH ₂ CH (CH ₃) (C ₂ H ₅)	H
X. 151	CH ₃	COCH ₂ OCH ₃	CH ₂ CH ₂ CH (CH ₃) (C ₂ H ₅)	H
X. 152	CH ₃	CH ₂ C≡CH	CH ₂ CH ₂ CH (CH ₃) (C ₂ H ₅)	H
X. 153	CH ₃	COO- <i>tert</i> -Bu	CH ₂ CH ₂ CH (CH ₃) (C ₂ H ₅)	H
X. 154	CH ₃	CH=C=CH ₂	CH ₂ CH ₂ CH (CH ₃) (C ₂ H ₅)	H
X. 155	CH ₃	H	CH ₂ CH ₂ CH (CH ₃) (C ₂ H ₅)	F
X. 156	CH ₃	H	CH ₂ CH ₂ CH (CH ₃) (C ₂ H ₅)	CH ₃
X. 157	CH ₃	H	CH ₂ CH ₂ CH (C ₂ H ₅) ₂	H
X. 158	C ₂ H ₅	H	CH ₂ CH ₂ CH (C ₂ H ₅) ₂	H
X. 159	CH ₂ OCH ₃	H	CH ₂ CH ₂ CH (C ₂ H ₅) ₂	H
X. 160	CH ₃	COCH ₃	CH ₂ CH ₂ CH (C ₂ H ₅) ₂	H
X. 161	CH ₃	COCH ₂ OCH ₃	CH ₂ CH ₂ CH (C ₂ H ₅) ₂	H
X. 162	CH ₃	CH ₂ C≡CH	CH ₂ CH ₂ CH (C ₂ H ₅) ₂	H
X. 163	CH ₃	COO- <i>tert</i> -Bu	CH ₂ CH ₂ CH (C ₂ H ₅) ₂	H
X. 164	CH ₃	CH=C=CH ₂	CH ₂ CH ₂ CH (C ₂ H ₅) ₂	H
X. 165	CH ₃	H	CH ₂ CH ₂ CH (C ₂ H ₅) ₂	F
X. 166	CH ₃	H	CH ₂ CH ₂ CH (C ₂ H ₅) ₂	CH ₃
X. 167	CH ₃	H	CH ₂ CH ₂ C (CH ₃) ₃	H
X. 168	C ₂ H ₅	H	CH ₂ CH ₂ C (CH ₃) ₃	H
X. 169	CH ₂ OCH ₃	H	CH ₂ CH ₂ C (CH ₃) ₃	H
X. 170	CH ₃	COCH ₃	CH ₂ CH ₂ C (CH ₃) ₃	H
X. 171	CH ₃	COCH ₂ OCH ₃	CH ₂ CH ₂ C (CH ₃) ₃	H
X. 172	CH ₃	CH ₂ C≡CH	CH ₂ CH ₂ C (CH ₃) ₃	H
X. 173	CH ₃	COO- <i>tert</i> -Bu	CH ₂ CH ₂ C (CH ₃) ₃	H
X. 174	CH ₃	CH=C=CH ₂	CH ₂ CH ₂ C (CH ₃) ₃	H
X. 175	CH ₃	H	CH ₂ CH ₂ C (CH ₃) ₃	F
X. 176	CH ₃	H	CH ₂ CH ₂ C (CH ₃) ₃	CH ₃
X. 177	CH ₃	H	CH ₂ CH ₂ C (CH ₃) ₂ (C ₂ H ₅)	H
X. 178	C ₂ H ₅	H	CH ₂ CH ₂ C (CH ₃) ₂ (C ₂ H ₅)	H
X. 179	CH ₂ OCH ₃	H	CH ₂ CH ₂ C (CH ₃) ₂ (C ₂ H ₅)	H

X. 180	CH ₃	COCH ₃	CH ₂ CH ₂ C(CH ₃) ₂ (C ₂ H ₅)	H
X. 181	CH ₃	COCH ₂ OCH ₃	CH ₂ CH ₂ C(CH ₃) ₂ (C ₂ H ₅)	H
X. 182	CH ₃	CH ₂ C≡CH	CH ₂ CH ₂ C(CH ₃) ₂ (C ₂ H ₅)	H
X. 183	CH ₃	COO- <i>tert</i> -Bu	CH ₂ CH ₂ C(CH ₃) ₂ (C ₂ H ₅)	H
X. 184	CH ₃	CH=C=CH ₂	CH ₂ CH ₂ C(CH ₃) ₂ (C ₂ H ₅)	H
X. 185	CH ₃	H	CH ₂ CH ₂ C(CH ₃) ₂ (C ₂ H ₅)	F
X. 186	CH ₃	H	CH ₂ CH ₂ C(CH ₃) ₂ (C ₂ H ₅)	CH ₃
X. 187	CH ₃	H	CH ₂ CH ₂ C(CH ₃)(C ₂ H ₅) ₂	H
X. 188	C ₂ H ₅	H	CH ₂ CH ₂ C(CH ₃)(C ₂ H ₅) ₂	H
X. 189	CH ₂ OCH ₃	H	CH ₂ CH ₂ C(CH ₃)(C ₂ H ₅) ₂	H
X. 190	CH ₃	COCH ₃	CH ₂ CH ₂ C(CH ₃)(C ₂ H ₅) ₂	H
X. 191	CH ₃	COCH ₂ OCH ₃	CH ₂ CH ₂ C(CH ₃)(C ₂ H ₅) ₂	H
X. 192	CH ₃	CH ₂ C≡CH	CH ₂ CH ₂ C(CH ₃)(C ₂ H ₅) ₂	H
X. 193	CH ₃	COO- <i>tert</i> -Bu	CH ₂ CH ₂ C(CH ₃)(C ₂ H ₅) ₂	H
X. 194	CH ₃	CH=C=CH ₂	CH ₂ CH ₂ C(CH ₃)(C ₂ H ₅) ₂	H
X. 195	CH ₃	H	CH ₂ CH ₂ C(CH ₃)(C ₂ H ₅) ₂	F
X. 196	CH ₃	H	CH ₂ CH ₂ C(CH ₃)(C ₂ H ₅) ₂	CH ₃
X. 197	CH ₃	H	CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	H
X. 198	C ₂ H ₅	H	CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	H
X. 199	CH ₂ OCH ₃	H	CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	H
X. 200	CH ₃	CH ₂ C≡CH	CH(CH ₃)CH ₂ CH ₃	H
X. 201	CH ₃	H	CH(C ₂ H ₅)CH ₂ CH ₃	H
X. 202	C ₂ H ₅	H	CH(C ₂ H ₅)CH ₂ CH ₃	H
X. 203	CH ₂ OCH ₃	H	CH(C ₂ H ₅)CH ₂ CH ₃	H
X. 204	CH ₃	CH ₂ C≡CH	CH(C ₂ H ₅)CH ₂ CH ₃	H
X. 205	CH ₃	H	CH(CF ₃)CH ₂ CH ₃	H
X. 206	C ₂ H ₅	H	CH(CF ₃)CH ₂ CH ₃	H
X. 207	CH ₂ OCH ₃	H	CH(CF ₃)CH ₂ CH ₃	H
X. 208	CH ₃	CH ₂ C≡CH	CH(CF ₃)CH ₂ CH ₃	H
X. 209	CH ₃	H	CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₃	H
X. 210	C ₂ H ₅	H	CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₃	H
X. 211	CH ₂ OCH ₃	H	CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₃	H
X. 212	CH ₃	CH ₂ C≡CH	CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CH ₃	H
X. 213	CH ₃	H	CH(C ₂ H ₅)CH ₂ CH ₂ CH ₃	H

X. 214	C_2H_5	H	$CH(C_2H_5)CH_2CH_2CH_3$	H
X. 215	CH_2OCH_3	H	$CH(C_2H_5)CH_2CH_2CH_3$	H
X. 216	CH_3	$CH_2C\equiv CH$	$CH(C_2H_5)CH_2CH_2CH_3$	H
X. 217	CH_3	H	$CH(CF_3)CH_2CH_2CH_3$	H
X. 218	C_2H_5	H	$CH(CF_3)CH_2CH_2CH_3$	H
X. 219	CH_3	H	$CH(CH_3)CH_2CH(CH_3)_2$	H
X. 220	C_2H_5	H	$CH(CH_3)CH_2CH(CH_3)_2$	H
X. 221	CH_2OCH_3	H	$CH(CH_3)CH_2CH(CH_3)_2$	H
X. 222	CH_3	$COCH_3$	$CH(CH_3)CH_2CH(CH_3)_2$	H
X. 223	CH_3	$COCH_2OCH_3$	$CH(CH_3)CH_2CH(CH_3)_2$	H
X. 224	CH_3	$CH_2C\equiv CH$	$CH(CH_3)CH_2CH(CH_3)_2$	H
X. 225	CH_3	$COO-tert-Bu$	$CH(CH_3)CH_2CH(CH_3)_2$	H
X. 226	CH_3	$CH=C-CH_2$	$CH(CH_3)CH_2CH(CH_3)_2$	H
X. 227	CH_3	H	$CH(CH_3)CH_2CH(CH_3)_2$	F
X. 228	CH_3	H	$CH(CH_3)CH_2CH(CH_3)_2$	CH_3
X. 229	CH_3	H	$CH(CH_3)CH_2CH(CH_3)(C_2H_5)$	H
X. 230	C_2H_5	H	$CH(CH_3)CH_2CH(CH_3)(C_2H_5)$	H
X. 231	CH_2OCH_3	H	$CH(CH_3)CH_2CH(CH_3)(C_2H_5)$	H
X. 232	CH_3	$COCH_3$	$CH(CH_3)CH_2CH(CH_3)(C_2H_5)$	H
X. 233	CH_3	$COCH_2OCH_3$	$CH(CH_3)CH_2CH(CH_3)(C_2H_5)$	H
X. 234	CH_3	$CH_2C\equiv CH$	$CH(CH_3)CH_2CH(CH_3)(C_2H_5)$	H
X. 235	CH_3	$COO-tert-Bu$	$CH(CH_3)CH_2CH(CH_3)(C_2H_5)$	H
X. 236	CH_3	$CH=C-CH_2$	$CH(CH_3)CH_2CH(CH_3)(C_2H_5)$	H
X. 237	CH_3	H	$CH(CH_3)CH_2CH(CH_3)(C_2H_5)$	F
X. 238	CH_3	H	$CH(CH_3)CH_2CH(CH_3)(C_2H_5)$	CH_3
X. 239	CH_3	H	$CH(CH_3)CH_2CH(C_2H_5)_2$	H
X. 240	C_2H_5	H	$CH(CH_3)CH_2CH(C_2H_5)_2$	H
X. 241	CH_2OCH_3	H	$CH(CH_3)CH_2CH(C_2H_5)_2$	H
X. 242	CH_3	$COCH_3$	$CH(CH_3)CH_2CH(C_2H_5)_2$	H
X. 243	CH_3	$COCH_2OCH_3$	$CH(CH_3)CH_2CH(C_2H_5)_2$	H
X. 244	CH_3	$CH_2C\equiv CH$	$CH(CH_3)CH_2CH(C_2H_5)_2$	H
X. 245	CH_3	$COO-tert-Bu$	$CH(CH_3)CH_2CH(C_2H_5)_2$	H
X. 246	CH_3	$CH=C-CH_2$	$CH(CH_3)CH_2CH(C_2H_5)_2$	H
X. 247	CH_3	H	$CH(CH_3)CH_2CH(C_2H_5)_2$	F

X. 248	CH ₃	H	CH (CH ₃) CH ₂ CH (C ₂ H ₅) ₂	CH ₃
X. 249	CH ₃	H	CH (C ₂ H ₅) CH ₂ CH (CH ₃) ₂	H
X. 250	C ₂ H ₅	H	CH (C ₂ H ₅) CH ₂ CH (CH ₃) ₂	H
X. 251	CH ₂ OCH ₃	H	CH (C ₂ H ₅) CH ₂ CH (CH ₃) ₂	H
X. 252	CH ₃	COCH ₃	CH (C ₂ H ₅) CH ₂ CH (CH ₃) ₂	H
X. 253	CH ₃	COCH ₂ OCH ₃	CH (C ₂ H ₅) CH ₂ CH (CH ₃) ₂	H
X. 254	CH ₃	CH ₂ C≡CH	CH (C ₂ H ₅) CH ₂ CH (CH ₃) ₂	H
X. 255	CH ₃	COO- <i>tert</i> -Bu	CH (C ₂ H ₅) CH ₂ CH (CH ₃) ₂	H
X. 256	CH ₃	CH=C=CH ₂	CH (C ₂ H ₅) CH ₂ CH (CH ₃) ₂	H
X. 257	CH ₃	H	CH (C ₂ H ₅) CH ₂ CH (CH ₃) ₂	F
X. 258	CH ₃	H	CH (C ₂ H ₅) CH ₂ CH (CH ₃) ₂	CH ₃
X. 259	CH ₃	H	CH (C ₂ H ₅) CH ₂ CH (CH ₃) (C ₂ H ₅)	H
X. 260	C ₂ H ₅	H	CH (C ₂ H ₅) CH ₂ CH (CH ₃) (C ₂ H ₅)	H
X. 261	CH ₂ OCH ₃	H	CH (C ₂ H ₅) CH ₂ CH (CH ₃) (C ₂ H ₅)	H
X. 262	CH ₃	CH ₂ C≡CH	CH (C ₂ H ₅) CH ₂ CH (CH ₃) (C ₂ H ₅)	H
X. 263	CH ₃	H	CH (C ₂ H ₅) CH ₂ CH (C ₂ H ₅) ₂	H
X. 264	C ₂ H ₅	H	CH (C ₂ H ₅) CH ₂ CH (C ₂ H ₅) ₂	H
X. 265	CH ₂ OCH ₃	H	CH (C ₂ H ₅) CH ₂ CH (C ₂ H ₅) ₂	H
X. 266	CH ₃	CH ₂ C≡CH	CH (C ₂ H ₅) CH ₂ CH (C ₂ H ₅) ₂	H
X. 267	CH ₃	H	CH (CF ₃) CH ₂ CH (CH ₃) ₂	H
X. 268	C ₂ H ₅	H	CH (CF ₃) CH ₂ CH (CH ₃) ₂	H
X. 269	CH ₂ OCH ₃	H	CH (CF ₃) CH ₂ CH (CH ₃) ₂	H
X. 270	CH ₃	CH ₂ C≡CH	CH (CF ₃) CH ₂ CH (CH ₃) ₂	H
X. 271	CH ₃	H	CH (CF ₃) CH ₂ CH (CH ₃) (C ₂ H ₅)	H
X. 272	CH ₃	H	CH (CF ₃) CH ₂ CH (C ₂ H ₅) ₂	H
X. 273	CH ₃	H	CH (CH ₃) CH ₂ C (CH ₃) ₃	H
X. 274	C ₂ H ₅	H	CH (CH ₃) CH ₂ C (CH ₃) ₃	H
X. 275	CH ₂ OCH ₃	H	CH (CH ₃) CH ₂ C (CH ₃) ₃	H
X. 276	CH ₃	COCH ₃	CH (CH ₃) CH ₂ C (CH ₃) ₃	H
X. 277	CH ₃	COCH ₂ OCH ₃	CH (CH ₃) CH ₂ C (CH ₃) ₃	H
X. 278	CH ₃	CH ₂ C≡CH	CH (CH ₃) CH ₂ C (CH ₃) ₃	H
X. 279	CH ₃	COO- <i>tert</i> -Bu	CH (CH ₃) CH ₂ C (CH ₃) ₃	H
X. 280	CH ₃	CH=C=CH ₂	CH (CH ₃) CH ₂ C (CH ₃) ₃	H
X. 281	CH ₃	H	CH (CH ₃) CH ₂ C (CH ₃) ₃	F

X. 282	CH ₃	H	CH (CH ₃) CH ₂ C (CH ₃) ₃	CH ₃
X. 283	CH ₃	H	CH (CH ₃) CH ₂ C (CH ₃) ₂ (C ₂ H ₅)	H
X. 284	C ₂ H ₅	H	CH (CH ₃) CH ₂ C (CH ₃) ₂ (C ₂ H ₅)	H
X. 285	CH ₂ OCH ₃	H	CH (CH ₃) CH ₂ C (CH ₃) ₂ (C ₂ H ₅)	H
X. 286	CH ₃	COCH ₃	CH (CH ₃) CH ₂ C (CH ₃) ₂ (C ₂ H ₅)	H
X. 287	CH ₃	COCH ₂ OCH ₃	CH (CH ₃) CH ₂ C (CH ₃) ₂ (C ₂ H ₅)	H
X. 288	CH ₃	CH ₂ C≡CH	CH (CH ₃) CH ₂ C (CH ₃) ₂ (C ₂ H ₅)	H
X. 289	CH ₃	COO- <i>tert</i> -Bu	CH (CH ₃) CH ₂ C (CH ₃) ₂ (C ₂ H ₅)	H
X. 290	CH ₃	CH=C=CH ₂	CH (CH ₃) CH ₂ C (CH ₃) ₂ (C ₂ H ₅)	H
X. 291	CH ₃	H	CH (CH ₃) CH ₂ C (CH ₃) ₂ (C ₂ H ₅)	F
X. 292	CH ₃	H	CH (CH ₃) CH ₂ C (CH ₃) ₂ (C ₂ H ₅)	CH ₃
X. 293	CH ₃	H	CH (CH ₃) CH ₂ C (CH ₃) (C ₂ H ₅) ₂	H
X. 294	C ₂ H ₅	H	CH (CH ₃) CH ₂ C (CH ₃) (C ₂ H ₅) ₂	H
X. 295	CH ₂ OCH ₃	H	CH (CH ₃) CH ₂ C (CH ₃) (C ₂ H ₅) ₂	H
X. 296	CH ₃	CH ₂ C≡CH	CH (CH ₃) CH ₂ C (CH ₃) (C ₂ H ₅) ₂	H
X. 297	CH ₃	H	CH (C ₂ H ₅) CH ₂ C (CH ₃) ₃	H
X. 298	C ₂ H ₅	H	CH (C ₂ H ₅) CH ₂ C (CH ₃) ₃	H
X. 299	CH ₂ OCH ₃	H	CH (C ₂ H ₅) CH ₂ C (CH ₃) ₃	H
X. 300	CH ₃	CH ₂ C≡CH	CH (C ₂ H ₅) CH ₂ C (CH ₃) ₃	H
X. 301	CH ₃	H	CH (C ₂ H ₅) CH ₂ C (CH ₃) ₂ (C ₂ H ₅)	H
X. 302	C ₂ H ₅	H	CH (C ₂ H ₅) CH ₂ C (CH ₃) ₂ (C ₂ H ₅)	H
X. 303	CH ₂ OCH ₃	H	CH (C ₂ H ₅) CH ₂ C (CH ₃) ₂ (C ₂ H ₅)	H
X. 304	CH ₃	CH ₂ C≡CH	CH (C ₂ H ₅) CH ₂ C (CH ₃) ₂ (C ₂ H ₅)	H
X. 305	CH ₃	H	CH (C ₂ H ₅) CH ₂ C (CH ₃) (C ₂ H ₅) ₂	H
X. 306	C ₂ H ₅	H	CH (C ₂ H ₅) CH ₂ C (CH ₃) (C ₂ H ₅) ₂	H
X. 307	CH ₂ OCH ₃	H	CH (C ₂ H ₅) CH ₂ C (CH ₃) (C ₂ H ₅) ₂	H
X. 308	CH ₃	CH ₂ C≡CH	CH (C ₂ H ₅) CH ₂ C (CH ₃) (C ₂ H ₅) ₂	H
X. 309	CH ₃	H	CH (CF ₃) CH ₂ C (CH ₃) ₃	H
X. 310	C ₂ H ₅	H	CH (CF ₃) CH ₂ C (CH ₃) ₃	H
X. 311	CH ₂ OCH ₃	H	CH (CF ₃) CH ₂ C (CH ₃) ₃	H
X. 312	CH ₃	CH ₂ C≡CH	CH (CF ₃) CH ₂ C (CH ₃) ₃	H
X. 313	CH ₃	H	CH (CF ₃) CH ₂ C (CH ₃) ₂ (C ₂ H ₅)	H
X. 314	C ₂ H ₅	H	CH (CF ₃) CH ₂ C (CH ₃) ₂ (C ₂ H ₅)	H
X. 315	CH ₂ OCH ₃	H	CH (CF ₃) CH ₂ C (CH ₃) ₂ (C ₂ H ₅)	H

X. 316	CH ₃	CH ₂ C≡CH	CH (CF ₃) CH ₂ C (CH ₃) ₂ (C ₂ H ₅) ₂	H
X. 317	CH ₃	H	CH (CF ₃) CH ₂ C (CH ₃) (C ₂ H ₅) ₂	H
X. 318	C ₂ H ₅	H	CH (CF ₃) CH ₂ C (CH ₃) (C ₂ H ₅) ₂	H
X. 319	CH ₂ OCH ₃	H	CH (CF ₃) CH ₂ C (CH ₃) (C ₂ H ₅) ₂	H
X. 320	CH ₃	CH ₂ C≡CH	CH (CF ₃) CH ₂ C (CH ₃) (C ₂ H ₅) ₂	H
X. 321	CH ₃	H	2'-叔丁基-环丙基	H
X. 322	C ₂ H ₅	H	2'-叔丁基-环丙基	H
X. 323	CH ₂ OCH ₃	H	2'-叔丁基-环丙基	H
X. 324	CH ₃	CH ₂ C≡CH	2'-叔丁基-环丙基	H
X. 325	CH ₃	H	2'-异丁基-环丙基	H
X. 326	C ₂ H ₅	H	2'-异丁基-环丙基	H
X. 327	CH ₂ OCH ₃	H	2'-异丁基-环丙基	H
X. 328	CH ₃	CH ₂ C≡CH	2'-异丁基-环丙基	H
X. 329	CH ₃	H	4', 4'-二甲基-环丁基	H
X. 330	C ₂ H ₅	H	4', 4'-二甲基-环丁基	H
X. 331	CH ₂ OCH ₃	H	4', 4'-二甲基-环丁基	H
X. 332	CH ₃	CH ₂ C≡CH	4', 4'-二甲基-环丁基	H
X. 333	CH ₃	H	环戊基	H
X. 334	C ₂ H ₅	H	环戊基	H
X. 335	CH ₂ OCH ₃	H	环戊基	H
X. 336	CH ₃	CH ₂ C≡CH	环戊基	H
X. 337	CH ₃	H	3'-甲基-环戊基	H
X. 338	C ₂ H ₅	H	3'-甲基-环戊基	H
X. 339	CH ₂ OCH ₃	H	3'-甲基-环戊基	H
X. 340	CH ₃	CH ₂ C≡CH	3'-甲基-环戊基	H
X. 341	CH ₃	H	环己基	H
X. 342	C ₂ H ₅	H	环己基	H
X. 343	CH ₂ OCH ₃	H	环己基	H
X. 344	CH ₃	CH ₂ C≡CH	环己基	H
X. 345	CH ₃	H	3'-甲基-环己基	H
X. 346	C ₂ H ₅	H	3'-甲基-环己基	H
X. 347	CH ₂ OCH ₃	H	3'-甲基-环己基	H
X. 348	CH ₃	CH ₂ C≡CH	3'-甲基-环己基	H
X. 349	CH ₃	H	4'-甲基-环己基	H

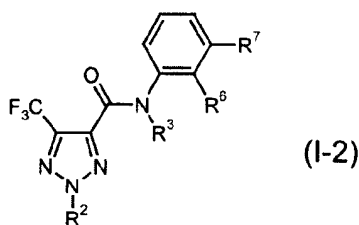
X. 350	C_2H_5	H	4'-甲基-环己基	H
X. 351	CH_2OCH_3	H	4'-甲基-环己基	H
X. 352	CH_3	$CH_2C\equiv CH$	4'-甲基-环己基	H
X. 353	CH_3	H	环庚基	H
X. 354	C_2H_5	H	环庚基	H
X. 355	CH_2OCH_3	H	环庚基	H
X. 356	CH_3	$CH_2C\equiv CH$	环庚基	H
X. 357	CH_3	H	2'-噻吩基	H
X. 358	C_2H_5	H	2'-噻吩基	H
X. 359	CH_2OCH_3	H	2'-噻吩基	H
X. 360	CH_3	$CH_2C\equiv CH$	2'-噻吩基	H
X. 361	CH_3	H	3'-噻吩基	H
X. 362	C_2H_5	H	3'-噻吩基	H
X. 363	CH_2OCH_3	H	3'-噻吩基	H
X. 364	CH_3	$CH_2C\equiv CH$	3'-噻吩基	H
X. 365	CH_3	H	5'-氯-2'-噻吩基	H
X. 366	C_2H_5	H	5'-氯-2'-噻吩基	H
X. 367	CH_2OCH_3	H	5'-氯-2'-噻吩基	H
X. 368	CH_3	$CH_2C\equiv CH$	5'-氯-2'-噻吩基	H
X. 369	CH_3	H	2'-咪喃基	H
X. 370	C_2H_5	H	2'-咪喃基	H
X. 371	CH_2OCH_3	H	2'-咪喃基	H
X. 372	CH_3	$CH_2C\equiv CH$	2'-咪喃基	H
X. 373	CH_3	H	5'-氯-2'-咪喃基	H
X. 374	C_2H_5	H	5'-氯-2'-咪喃基	H
X. 375	CH_2OCH_3	H	5'-氯-2'-咪喃基	H
X. 376	CH_3	$CH_2C\equiv CH$	5'-氯-2'-咪喃基	H
X. 377	CH_3	H	2'-吡啶基	H
X. 378	C_2H_5	H	2'-吡啶基	H
X. 379	CH_2OCH_3	H	2'-吡啶基	H
X. 380	CH_3	$CH_2C\equiv CH$	2'-吡啶基	H
X. 381	CH_3	H	3'-吡啶基	H
X. 382	C_2H_5	H	3'-吡啶基	H
X. 383	CH_2OCH_3	H	3'-吡啶基	H

X. 384	CH ₃	CH ₂ C≡CH	3'-吡啶基	H
X. 385	CH ₃	H	4'-吡啶基	H
X. 386	C ₂ H ₅	H	4'-吡啶基	H
X. 387	CH ₂ OCH ₃	H	4'-吡啶基	H
X. 388	CH ₃	CH ₂ C≡CH	4'-吡啶基	H
X. 389	CH ₃	H	6'-氟-3'-吡啶基	H
X. 390	C ₂ H ₅	H	6'-氟-3'-吡啶基	H
X. 391	CH ₂ OCH ₃	H	6'-氟-3'-吡啶基	H
X. 392	CH ₃	CH ₂ C≡CH	6'-氟-3'-吡啶基	H
X. 393	CH ₃	H	6'-氟-3'-吡啶基	H
X. 394	C ₂ H ₅	H	6'-氟-3'-吡啶基	H
X. 395	CH ₂ OCH ₃	H	6'-氟-3'-吡啶基	H
X. 396	CH ₃	CH ₂ C≡CH	6'-氟-3'-吡啶基	H
X. 397	CH ₃	H	6'-溴-3'-吡啶基	H
X. 398	C ₂ H ₅	H	6'-溴-3'-吡啶基	H
X. 399	CH ₂ OCH ₃	H	6'-溴-3'-吡啶基	H
X. 400	CH ₃	CH ₂ C≡CH	6'-溴-3'-吡啶基	H
X. 401	CH ₃	H	2'-噁唑基	H
X. 402	CH ₃	H	3'-异噁唑基	H
X. 403	CH ₃	H	CH(CH ₃) ₂	H
X. 404	C ₂ H ₅	H	CH(CH ₃) ₂	H
X. 405	CH ₂ OCH ₃	H	CH(CH ₃) ₂	H
X. 406	CH ₃	CH ₂ C≡CH	CH(CH ₃) ₂	H
X. 407	CH ₃	H	4'-CH=NO(<i>n</i>)-C ₆ H ₅ -苯基	H
X. 408	CH ₃	H	4'-CH=NO(<i>iso</i>)-C ₆ H ₅ -苯基	H
X. 409	CH ₃	H	4'-CH=NO(<i>iso</i>)-C ₃ H ₇ -苯基	H
X. 410	CH ₃	H	4'-CH=NO(<i>n</i>)-C ₃ H ₇ -苯基	H
X. 411	CH ₃	H	Si(CH ₃) ₃	H
X. 412	C ₂ H ₅	H	Si(CH ₃) ₃	H
X. 413	CH ₂ OCH ₃	H	Si(CH ₃) ₃	H
X. 414	CH ₃	CH ₂ C≡CH	Si(CH ₃) ₃	H
X. 415	CH ₃	H	CH ₂ Si(CH ₃) ₃	H
X. 416	C ₂ H ₅	H	CH ₂ Si(CH ₃) ₃	H
X. 416	CH ₂ OCH ₃	H	CH ₂ Si(CH ₃) ₃	H

X. 418	CH ₃	CH ₂ C≡CH	CH ₂ Si(CH ₃) ₃	H
X. 419	CH ₃	H	CH(CH ₃)Si(CH ₃) ₃	H
X. 420	C ₂ H ₅	H	CH(CH ₃)Si(CH ₃) ₃	H
X. 421	CH ₂ OCH ₃	H	CH(CH ₃)Si(CH ₃) ₃	H
X. 422	CH ₃	CH ₂ C≡CH	CH(CH ₃)Si(CH ₃) ₃	H
X. 423	CH ₃	H	CH ₂ CH ₂ Si(CH ₃) ₃	H
X. 424	C ₂ H ₅	H	CH ₂ CH ₂ Si(CH ₃) ₃	H
X. 425	CH ₂ OCH ₃	H	CH ₂ CH ₂ Si(CH ₃) ₃	H
X. 426	CH ₃	CH ₂ C≡CH	CH ₂ CH ₂ Si(CH ₃) ₃	H
X. 427	CH ₃	H	CH(CH ₃)CH ₂ Si(CH ₃) ₃	H
X. 428	C ₂ H ₅	H	CH(CH ₃)CH ₂ Si(CH ₃) ₃	H
X. 429	CH ₂ OCH ₃	H	CH(CH ₃)CH ₂ Si(CH ₃) ₃	H
X. 430	CH ₃	CH ₂ C≡CH	CH(CH ₃)CH ₂ Si(CH ₃) ₃	H
X. 431	CH ₃	H	CH ₂ CH ₂ CH ₂ Si(CH ₃) ₃	H
X. 432	C ₂ H ₅	H	CH ₂ CH ₂ CH ₂ Si(CH ₃) ₃	H
X. 433	CH ₂ OCH ₃	H	CH ₂ CH ₂ CH ₂ Si(CH ₃) ₃	H
X. 434	CH ₃	CH ₂ C≡CH	CH ₂ CH ₂ CH ₂ Si(CH ₃) ₃	H
X. 435	CH ₃	H	CH ₂ Si(CH ₃) ₂ C ₂ H ₅	H
X. 436	CH ₃	H	CH ₂ Si(CH ₃) ₂ CH(CH ₃) ₂	H
X. 437	CH ₃	H	CH ₂ Si(CH ₃) ₂ OCH ₃	H
X. 438	CH ₃	H	CH ₂ CH ₂ Si(CH ₃) ₂ OCH ₃	H
X. 439	CH ₃	H	CH(CH ₃)Si(CH ₃) ₂ OCH ₃	H
X. 440	CH ₃	H	CH(CH ₃)CH ₂ Si(CH ₃) ₂ OCH ₃	H
X. 441	CH ₃	H	2'-环丙基-环丙基	H
X. 442	C ₂ H ₅	H	2'-环丙基-环丙基	H
X. 443	CH ₂ OCH ₃	H	2'-环丙基-环丙基	H
X. 444	CH ₃	CH ₂ C≡CH	2'-环丙基-环丙基	H
X. 445	CH ₃	H	2'-(α-CH ₃ -环丙基)-环丙基	H
X. 446	C ₂ H ₅	H	2'-(α-CH ₃ -环丙基)-环丙基	H
X. 447	CH ₂ OCH ₃	H	2'-(α-CH ₃ -环丙基)-环丙基	H
X. 448	CH ₃	CH ₂ C≡CH	2'-(α-CH ₃ -环丙基)-环丙基	H

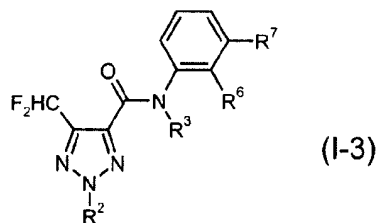
X. 449	CH ₃	H	2'-环丁基-环丙基	H
X. 450	CH ₃	H	2'-环戊基-环丙基	H
X. 451	CH ₃	H	2'-环己基-环丙基	H
X. 452	CH ₃	H	4'-C≡CH-苯基	H
X. 453	C ₂ H ₅	H	4'-C≡CH-苯基	H
X. 454	CH ₃	H	4'-C≡C-Si(CH ₃) ₃ -苯基	H
X. 455	C ₂ H ₅	H	4'-C≡C-Si(CH ₃) ₃ -苯基	H
X. 456	CH ₃	H	4'-C(H)=CH ₂ -苯基	H
X. 457	C ₂ H ₅	H	4'-C(H)=CH ₂ -苯基	H

表 2 提供 457 个式 (I-2) 的化合物:



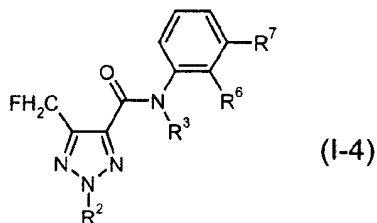
其中 R², R³, R⁶ 和 R⁷ 如表 2 中定义。

表 3 提供 457 个式 (I-3) 的化合物:



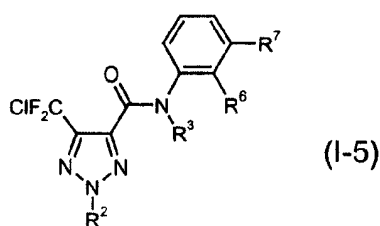
其中 R², R³, R⁶ 和 R⁷ 如表 3 中定义。

表 4 提供 457 个式 (I-4) 的化合物:



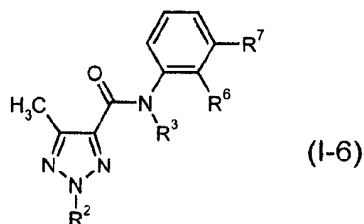
其中 R², R³, R⁶ 和 R⁷ 如表 4 中定义。

表 5 提供 457 个式 (I-5) 的化合物:



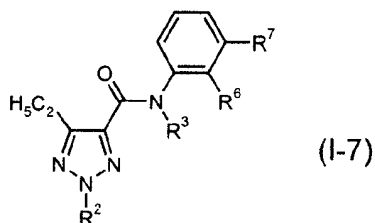
其中 R^2 , R^3 , R^6 和 R^7 如表 5 中定义。

表 6 提供 457 个式 (I-6) 的化合物:



其中 R^2 , R^3 , R^6 和 R^7 如表 6 中定义。

表 7 提供 457 个式 (I-7) 的化合物:



其中 R^2 , R^3 , R^6 和 R^7 如表 7 中定义。

表 Y 代表表 8 [当 Y 为 8 时], 表 9 [当 Y 为 9 时], 表 10 [当 Y 为 10 时], 表 11 [当 Y 为 11 时], 表 12 [当 Y 为 12 时], 表 13 [当 Y 为 13 时], 表 14 [当 Y 为 14 时], 表 15 [当 Y 为 15 时], 表 16 [当 Y 为 16 时], 表 17 [当 Y 为 17 时], 表 18 [当 Y 为 18 时] 以及表 19 [当 Y 为 19 时]。

表 Y

化合物序号	R ²	R ³	R ⁶
Y. 001	CH ₃	H	苯基
Y. 002	CH ₃	CH ₂ C≡CH	苯基
Y. 003	CH ₃	H	2'-氟苯基
Y. 004	CH ₃	H	3'-氟苯基
Y. 005	CH ₃	H	4'-氟苯基
Y. 006	C ₂ H ₅	H	4'-氟苯基
Y. 007	CH ₂ OCH ₃	H	4'-氟苯基
Y. 008	CH ₃	COCH ₃	4'-氟苯基
Y. 009	CH ₃	COCH ₂ OCH ₃	4'-氟苯基
Y. 010	CH ₃	CH ₂ C≡CH	4'-氟苯基
Y. 011	CH ₃	CH=C-CH ₂	4'-氟苯基
Y. 012	CH ₃	COO- <i>tert</i> -Bu	4'-氟苯基
Y. 013	CH ₃	H	2'-氟苯基
Y. 014	CH ₃	H	3'-氟苯基
Y. 015	CH ₃	H	4'-氟苯基
Y. 016	C ₂ H ₅	H	4'-氟苯基
Y. 017	CH ₂ OCH ₃	H	4'-氟苯基
Y. 018	CH ₃	COCH ₃	4'-氟苯基
Y. 019	CH ₃	COCH ₂ OCH ₃	4'-氟苯基
Y. 020	CH ₃	CH ₂ C≡CH	4'-氟苯基
Y. 021	CH ₃	CH=C-CH ₂	4'-氟苯基
Y. 022	CH ₃	COO- <i>tert</i> -Bu	4'-氟苯基
Y. 023	CH ₃	H	2'-溴苯基
Y. 024	CH ₃	H	3'-溴苯基
Y. 025	CH ₃	H	4'-溴苯基
Y. 026	C ₂ H ₅	H	4'-溴苯基
Y. 027	CH ₂ OCH ₃	H	4'-溴苯基
Y. 028	CH ₃	COCH ₃	4'-溴苯基
Y. 029	CH ₃	COCH ₂ OCH ₃	4'-溴苯基
Y. 030	CH ₃	CH ₂ C≡CH	4'-溴苯基
Y. 031	CH ₃	CH=C-CH ₂	4'-溴苯基

Y. 032	CH ₃	COO- <i>tert</i> -Bu	4'-溴苯基
Y. 033	CH ₃	H	2'-碘苯基
Y. 034	CH ₃	H	3'-碘苯基
Y. 035	CH ₃	H	4'-碘苯基
Y. 036	CH ₃	H	2'-CF ₃ -苯基
Y. 037	CH ₃	H	3'-CF ₃ -苯基
Y. 038	CH ₃	H	4'-CF ₃ -苯基
Y. 039	C ₂ H ₅	H	4'-CF ₃ -苯基
Y. 040	CH ₂ OCH ₃	H	4'-CF ₃ -苯基
Y. 041	CH ₃	COCH ₃	4'-CF ₃ -苯基
Y. 042	CH ₃	COCH ₂ OCH ₃	4'-CF ₃ -苯基
Y. 043	CH ₃	CH ₂ C≡CH	4'-CF ₃ -苯基
Y. 044	CH ₃	COO- <i>tert</i> -Bu	4'-CF ₃ -苯基
Y. 045	CH ₃	H	2'-OCF ₃ -苯基
Y. 046	CH ₃	H	3'-OCF ₃ -苯基
Y. 047	CH ₃	H	4'-OCF ₃ -苯基
Y. 048	C ₂ H ₅	H	4'-OCF ₃ -苯基
Y. 049	CH ₂ OCH ₃	H	4'-OCF ₃ -苯基
Y. 050	CH ₃	COCH ₃	4'-OCF ₃ -苯基
Y. 051	CH ₃	COCH ₂ OCH ₃	4'-OCF ₃ -苯基
Y. 052	CH ₃	CH ₂ C≡CH	4'-OCF ₃ -苯基
Y. 053	CH ₃	COO- <i>tert</i> -Bu	4'-OCF ₃ -苯基
Y. 054	CH ₃	CH=C=CH ₂	4'-OCF ₃ -苯基
Y. 055	CH ₃	H	4'-SCF ₃ -苯基
Y. 056	CH ₃	H	2'-CH=NOH-苯基
Y. 057	CH ₃	H	3'-CH=NOH-苯基
Y. 058	CH ₃	H	4'-CH=NOH-苯基
Y. 059	CH ₃	H	2'-CH=NOCH ₃ -苯基
Y. 060	CH ₃	H	3'-CH=NOCH ₃ -苯基
Y. 061	CH ₃	H	4'-CH=NOCH ₃ -苯基
Y. 062	CH ₃	H	2'-CH=NOC ₂ H ₅ -苯基
Y. 063	CH ₃	H	3'-CH=NOC ₂ H ₅ -苯基
Y. 064	CH ₃	H	4'-CH=NOC ₂ H ₅ -苯基
Y. 065	CH ₃	H	2'-CN-苯基

Y. 066	CH ₃	H	3'-CN-苯基
Y. 067	CH ₃	H	4'-CN-苯基
Y. 068	CH ₃	H	2'-NO ₂ -苯基
Y. 069	CH ₃	H	3'-NO ₂ -苯基
Y. 070	CH ₃	H	4'-NO ₂ -苯基
Y. 071	CH ₃	H	3', 4'-二氟苯基
Y. 072	C ₂ H ₅	H	3', 4'-二氟苯基
Y. 073	CH ₂ OCH ₃	H	3', 4'-二氟苯基
Y. 074	CH ₃	COCH ₃	3', 4'-二氟苯基
Y. 075	CH ₃	COCH ₂ OCH ₃	3', 4'-二氟苯基
Y. 076	CH ₃	CH ₂ C≡CH	3', 4'-二氟苯基
Y. 077	CH ₃	COO- <i>tert</i> -Bu	3', 4'-二氟苯基
Y. 078	CH ₃	CH=C=CH ₂	3', 4'-二氟苯基
Y. 079	CH ₃	H	3', 4'-二氟苯基
Y. 080	C ₂ H ₅	H	3', 4'-二氟苯基
Y. 081	CH ₂ OCH ₃	H	3', 4'-二氟苯基
Y. 082	CH ₃	COCH ₃	3', 4'-二氟苯基
Y. 083	CH ₃	COCH ₂ OCH ₃	3', 4'-二氟苯基
Y. 084	CH ₃	CH ₂ C≡CH	3', 4'-二氟苯基
Y. 085	CH ₃	COO- <i>tert</i> -Bu	3', 4'-二氟苯基
Y. 086	CH ₃	CH=C=CH ₂	3', 4'-二氟苯基
Y. 087	CH ₃	H	4'-氟-3'-氟-苯基
Y. 088	C ₂ H ₅	H	4'-氟-3'-氟-苯基
Y. 089	CH ₂ OCH ₃	H	4'-氟-3'-氟-苯基
Y. 090	CH ₃	COCH ₃	4'-氟-3'-氟-苯基
Y. 091	CH ₃	COCH ₂ OCH ₃	4'-氟-3'-氟-苯基
Y. 092	CH ₃	CH ₂ C≡CH	4'-氟-3'-氟-苯基
Y. 093	CH ₃	COO- <i>tert</i> -Bu	4'-氟-3'-氟-苯基
Y. 094	CH ₃	CH=C=CH ₂	4'-氟-3'-氟-苯基
Y. 095	CH ₃	H	3'-氟-4'-氟-苯基
Y. 096	C ₂ H ₅	H	3'-氟-4'-氟-苯基
Y. 097	CH ₂ OCH ₃	H	3'-氟-4'-氟-苯基
Y. 098	CH ₃	COCH ₃	3'-氟-4'-氟-苯基
Y. 099	CH ₃	COCH ₂ OCH ₃	3'-氟-4'-氟-苯基

Y. 100	CH ₃	CH ₂ C≡CH	3'-氟-4'-氟-苯基
Y. 101	CH ₃	COO- <i>tert</i> -Bu	3'-氟-4'-氟-苯基
Y. 102	CH ₃	CH=C=CH ₂	3'-氟-4'-氟-苯基
Y. 103	CH ₃	H	2'-4'-二氟-苯基
Y. 104	CH ₂ OCH ₃	H	2'-4'-二氟-苯基
Y. 105	CH ₃	H	2'-4'-二氟-苯基
Y. 106	CH ₂ OCH ₃	H	2'-4'-二氟-苯基
Y. 107	CH ₃	H	CH ₂ CH ₂ CH ₃
Y. 108	C ₂ H ₅	H	CH ₂ CH ₂ CH ₃
Y. 109	CH ₂ OCH ₃	H	CH ₂ CH ₂ CH ₃
Y. 110	CH ₃	CH ₂ C≡CH	CH ₂ CH ₂ CH ₃
Y. 111	CH ₃	H	CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃
Y. 112	C ₂ H ₅	H	CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃
Y. 113	CH ₂ OCH ₃	H	CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃
Y. 114	CH ₃	CH ₂ C≡CH	CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃
Y. 115	CH ₃	H	CH ₂ CH ₂ CH ₂ (C ₂ H ₅)
Y. 116	C ₂ H ₅	H	CH ₂ CH ₂ CH ₂ (C ₂ H ₅)
Y. 117	CH ₂ OCH ₃	H	CH ₂ CH ₂ CH ₂ (C ₂ H ₅)
Y. 118	CH ₃	CH ₂ C≡CH	CH ₂ CH ₂ CH ₂ (C ₂ H ₅)
Y. 119	CH ₃	H	CH ₂ CH ₂ CH (CH ₃) ₂
Y. 120	C ₂ H ₅	H	CH ₂ CH ₂ CH (CH ₃) ₂
Y. 121	CH ₂ OCH ₃	H	CH ₂ CH ₂ CH (CH ₃) ₂
Y. 122	CH ₃	COCH ₃	CH ₂ CH ₂ CH (CH ₃) ₂
Y. 123	CH ₃	COCH ₂ OCH ₃	CH ₂ CH ₂ CH (CH ₃) ₂
Y. 124	CH ₃	CH ₂ C≡CH	CH ₂ CH ₂ CH (CH ₃) ₂
Y. 125	CH ₃	COO- <i>tert</i> -Bu	CH ₂ CH ₂ CH (CH ₃) ₂
Y. 126	CH ₃	CH=C=CH ₂	CH ₂ CH ₂ CH (CH ₃) ₂
Y. 127	CH ₃	H	CH ₂ CH ₂ CH (CH ₃) (C ₂ H ₅)
Y. 128	C ₂ H ₅	H	CH ₂ CH ₂ CH (CH ₃) (C ₂ H ₅)
Y. 129	CH ₂ OCH ₃	H	CH ₂ CH ₂ CH (CH ₃) (C ₂ H ₅)
Y. 130	CH ₃	COCH ₃	CH ₂ CH ₂ CH (CH ₃) (C ₂ H ₅)
Y. 131	CH ₃	COCH ₂ OCH ₃	CH ₂ CH ₂ CH (CH ₃) (C ₂ H ₅)
Y. 132	CH ₃	CH ₂ C≡CH	CH ₂ CH ₂ CH (CH ₃) (C ₂ H ₅)
Y. 133	CH ₃	COO- <i>tert</i> -Bu	CH ₂ CH ₂ CH (CH ₃) (C ₂ H ₅)

Y. 134	CH ₃	CH=C=CH ₂	CH ₂ CH ₂ CH (CH ₃) (C ₂ H ₅)
Y. 135	CH ₃	H	CH ₂ CH ₂ CH (C ₂ H ₅) ₂
Y. 136	C ₂ H ₅	H	CH ₂ CH ₂ CH (C ₂ H ₅) ₂
Y. 137	CH ₂ OCH ₃	H	CH ₂ CH ₂ CH (C ₂ H ₅) ₂
Y. 138	CH ₃	COCH ₃	CH ₂ CH ₂ CH (C ₂ H ₅) ₂
Y. 139	CH ₃	COCH ₂ OCH ₃	CH ₂ CH ₂ CH (C ₂ H ₅) ₂
Y. 140	CH ₃	CH ₂ C≡CH	CH ₂ CH ₂ CH (C ₂ H ₅) ₂
Y. 141	CH ₃	COO- <i>tert</i> -Bu	CH ₂ CH ₂ CH (C ₂ H ₅) ₂
Y. 142	CH ₃	CH=C=CH ₂	CH ₂ CH ₂ CH (C ₂ H ₅) ₂
Y. 143	CH ₃	H	CH ₂ CH ₂ C (CH ₃) ₃
Y. 144	C ₂ H ₅	H	CH ₂ CH ₂ C (CH ₃) ₃
Y. 145	CH ₂ OCH ₃	H	CH ₂ CH ₂ C (CH ₃) ₃
Y. 146	CH ₃	COCH ₃	CH ₂ CH ₂ C (CH ₃) ₃
Y. 147	CH ₃	COCH ₂ OCH ₃	CH ₂ CH ₂ C (CH ₃) ₃
Y. 148	CH ₃	CH ₂ C≡CH	CH ₂ CH ₂ C (CH ₃) ₃
Y. 149	CH ₃	COO- <i>tert</i> -Bu	CH ₂ CH ₂ C (CH ₃) ₃
Y. 150	CH ₃	CH=C=CH ₂	CH ₂ CH ₂ C (CH ₃) ₃
Y. 151	CH ₃	H	CH ₂ CH ₂ C (CH ₃) ₂ (C ₂ H ₅)
Y. 152	C ₂ H ₅	H	CH ₂ CH ₂ C (CH ₃) ₂ (C ₂ H ₅)
Y. 153	CH ₂ OCH ₃	H	CH ₂ CH ₂ C (CH ₃) ₂ (C ₂ H ₅)
Y. 154	CH ₃	COCH ₃	CH ₂ CH ₂ C (CH ₃) ₂ (C ₂ H ₅)
Y. 155	CH ₃	COCH ₂ OCH ₃	CH ₂ CH ₂ C (CH ₃) ₂ (C ₂ H ₅)
Y. 156	CH ₃	CH ₂ C≡CH	CH ₂ CH ₂ C (CH ₃) ₂ (C ₂ H ₅)
Y. 157	CH ₃	COO- <i>tert</i> -Bu	CH ₂ CH ₂ C (CH ₃) ₂ (C ₂ H ₅)
Y. 158	CH ₃	CH=C=CH ₂	CH ₂ CH ₂ C (CH ₃) ₂ (C ₂ H ₅)
Y. 159	CH ₃	H	CH ₂ CH ₂ C (CH ₃) (C ₂ H ₅) ₂
Y. 160	C ₂ H ₅	H	CH ₂ CH ₂ C (CH ₃) (C ₂ H ₅) ₂
Y. 161	CH ₂ OCH ₃	H	CH ₂ CH ₂ C (CH ₃) (C ₂ H ₅) ₂
Y. 162	CH ₃	COCH ₃	CH ₂ CH ₂ C (CH ₃) (C ₂ H ₅) ₂
Y. 163	CH ₃	COCH ₂ OCH ₃	CH ₂ CH ₂ C (CH ₃) (C ₂ H ₅) ₂
Y. 164	CH ₃	CH ₂ C≡CH	CH ₂ CH ₂ C (CH ₃) (C ₂ H ₅) ₂
Y. 165	CH ₃	COO- <i>tert</i> -Bu	CH ₂ CH ₂ C (CH ₃) (C ₂ H ₅) ₂
Y. 166	CH ₃	CH=C=CH ₂	CH ₂ CH ₂ C (CH ₃) (C ₂ H ₅) ₂
Y. 167	CH ₃	H	CH (CH ₃) CH ₂ CH ₃

Y. 168	C ₂ H ₅	H	CH (CH ₃) CH ₂ CH ₃
Y. 169	CH ₂ OCH ₃	H	CH (CH ₃) CH ₂ CH ₃
Y. 170	CH ₃	CH ₂ C≡CH	CH (CH ₃) CH ₂ CH ₃
Y. 171	CH ₃	H	CH (C ₂ H ₅) CH ₂ CH ₃
Y. 172	C ₂ H ₅	H	CH (C ₂ H ₅) CH ₂ CH ₃
Y. 173	CH ₂ OCH ₃	H	CH (C ₂ H ₅) CH ₂ CH ₃
Y. 174	CH ₃	CH ₂ C≡CH	CH (C ₂ H ₅) CH ₂ CH ₃
Y. 175	CH ₃	H	CH (CF ₃) CH ₂ CH ₃
Y. 176	C ₂ H ₅	H	CH (CF ₃) CH ₂ CH ₃
Y. 177	CH ₂ OCH ₃	H	CH (CF ₃) CH ₂ CH ₃
Y. 178	CH ₃	CH ₂ C≡CH	CH (CF ₃) CH ₂ CH ₃
Y. 179	CH ₃	H	CH (CH ₃) CH ₂ CH ₂ CH ₃
Y. 180	C ₂ H ₅	H	CH (CH ₃) CH ₂ CH ₂ CH ₃
Y. 181	CH ₂ OCH ₃	H	CH (CH ₃) CH ₂ CH ₂ CH ₃
Y. 182	CH ₃	CH ₂ C≡CH	CH (CH ₃) CH ₂ CH ₂ CH ₃
Y. 183	CH ₃	H	CH (C ₂ H ₅) CH ₂ CH ₂ CH ₃
Y. 184	C ₂ H ₅	H	CH (C ₂ H ₅) CH ₂ CH ₂ CH ₃
Y. 185	CH ₂ OCH ₃	H	CH (C ₂ H ₅) CH ₂ CH ₂ CH ₃
Y. 186	CH ₃	CH ₂ C≡CH	CH (C ₂ H ₅) CH ₂ CH ₂ CH ₃
Y. 187	CH ₃	H	CH (CF ₃) CH ₂ CH ₂ CH ₃
Y. 188	C ₂ H ₅	H	CH (CF ₃) CH ₂ CH ₂ CH ₃
Y. 189	CH ₃	H	CH (CH ₃) CH ₂ CH (CH ₃) ₂
Y. 190	C ₂ H ₅	H	CH (CH ₃) CH ₂ CH (CH ₃) ₂
Y. 191	CH ₂ OCH ₃	H	CH (CH ₃) CH ₂ CH (CH ₃) ₂
Y. 192	CH ₃	COCH ₃	CH (CH ₃) CH ₂ CH (CH ₃) ₂
Y. 193	CH ₃	COCH ₂ OCH ₃	CH (CH ₃) CH ₂ CH (CH ₃) ₂
Y. 194	CH ₃	CH ₂ C≡CH	CH (CH ₃) CH ₂ CH (CH ₃) ₂
Y. 195	CH ₃	COO- <i>tert</i> -Bu	CH (CH ₃) CH ₂ CH (CH ₃) ₂
Y. 196	CH ₃	CH=C=CH ₂	CH (CH ₃) CH ₂ CH (CH ₃) ₂
Y. 197	CH ₃	H	CH (CH ₃) CH ₂ CH (CH ₃) (C ₂ H ₅)
Y. 198	C ₂ H ₅	H	CH (CH ₃) CH ₂ CH (CH ₃) (C ₂ H ₅)
Y. 199	CH ₂ OCH ₃	H	CH (CH ₃) CH ₂ CH (CH ₃) (C ₂ H ₅)
Y. 200	CH ₃	COCH ₃	CH (CH ₃) CH ₂ CH (CH ₃) (C ₂ H ₅)
Y. 201	CH ₃	COCH ₂ OCH ₃	CH (CH ₃) CH ₂ CH (CH ₃) (C ₂ H ₅)

Y. 202	CH ₃	CH ₂ C≡CH	CH (CH ₃) CH ₂ CH (CH ₃) (C ₂ H ₅)
Y. 203	CH ₃	COO- <i>tert</i> -Bu	CH (CH ₃) CH ₂ CH (CH ₃) (C ₂ H ₅)
Y. 204	CH ₃	CH=C=CH ₂	CH (CH ₃) CH ₂ CH (CH ₃) (C ₂ H ₅)
Y. 205	CH ₃	H	CH (CH ₃) CH ₂ CH (C ₂ H ₅) ₂
Y. 206	C ₂ H ₅	H	CH (CH ₃) CH ₂ CH (C ₂ H ₅) ₂
Y. 207	CH ₂ OCH ₃	H	CH (CH ₃) CH ₂ CH (C ₂ H ₅) ₂
Y. 208	CH ₃	COCH ₃	CH (CH ₃) CH ₂ CH (C ₂ H ₅) ₂
Y. 209	CH ₃	COCH ₂ OCH ₃	CH (CH ₃) CH ₂ CH (C ₂ H ₅) ₂
Y. 210	CH ₃	CH ₂ C≡CH	CH (CH ₃) CH ₂ CH (C ₂ H ₅) ₂
Y. 211	CH ₃	COO- <i>tert</i> -Bu	CH (CH ₃) CH ₂ CH (C ₂ H ₅) ₂
Y. 212	CH ₃	CH=C=CH ₂	CH (CH ₃) CH ₂ CH (C ₂ H ₅) ₂
Y. 213	CH ₃	H	CH (C ₂ H ₅) CH ₂ CH (CH ₃) ₂
Y. 214	C ₂ H ₅	H	CH (C ₂ H ₅) CH ₂ CH (CH ₃) ₂
Y. 215	CH ₂ OCH ₃	H	CH (C ₂ H ₅) CH ₂ CH (CH ₃) ₂
Y. 216	CH ₃	COCH ₃	CH (C ₂ H ₅) CH ₂ CH (CH ₃) ₂
Y. 217	CH ₃	COCH ₂ OCH ₃	CH (C ₂ H ₅) CH ₂ CH (CH ₃) ₂
Y. 218	CH ₃	CH ₂ C≡CH	CH (C ₂ H ₅) CH ₂ CH (CH ₃) ₂
Y. 219	CH ₃	COO- <i>tert</i> -Bu	CH (C ₂ H ₅) CH ₂ CH (CH ₃) ₂
Y. 220	CH ₃	CH=C=CH ₂	CH (C ₂ H ₅) CH ₂ CH (CH ₃) ₂
Y. 221	CH ₃	H	CH (C ₂ H ₅) CH ₂ CH (CH ₃) (C ₂ H ₅)
Y. 222	C ₂ H ₅	H	CH (C ₂ H ₅) CH ₂ CH (CH ₃) (C ₂ H ₅)
Y. 223	CH ₂ OCH ₃	H	CH (C ₂ H ₅) CH ₂ CH (CH ₃) (C ₂ H ₅)
Y. 224	CH ₃	CH ₂ C≡CH	CH (C ₂ H ₅) CH ₂ CH (CH ₃) (C ₂ H ₅)
Y. 225	CH ₃	H	CH (C ₂ H ₅) CH ₂ CH (C ₂ H ₅) ₂
Y. 226	C ₂ H ₅	H	CH (C ₂ H ₅) CH ₂ CH (C ₂ H ₅) ₂
Y. 227	CH ₂ OCH ₃	H	CH (C ₂ H ₅) CH ₂ CH (C ₂ H ₅) ₂
Y. 228	CH ₃	CH ₂ C≡CH	CH (C ₂ H ₅) CH ₂ CH (C ₂ H ₅) ₂
Y. 229	CH ₃	H	CH (CF ₃) CH ₂ CH (CH ₃) ₂
Y. 230	C ₂ H ₅	H	CH (CF ₃) CH ₂ CH (CH ₃) ₂
Y. 231	CH ₂ OCH ₃	H	CH (CF ₃) CH ₂ CH (CH ₃) ₂
Y. 232	CH ₃	CH ₂ C≡CH	CH (CF ₃) CH ₂ CH (CH ₃) ₂
Y. 233	CH ₃	H	CH (CF ₃) CH ₂ CH (CH ₃) (C ₂ H ₅)
Y. 234	CH ₃	H	CH (CF ₃) CH ₂ CH (C ₂ H ₅) ₂
Y. 235	CH ₃	H	CH (CH ₃) CH ₂ C (CH ₃) ₃

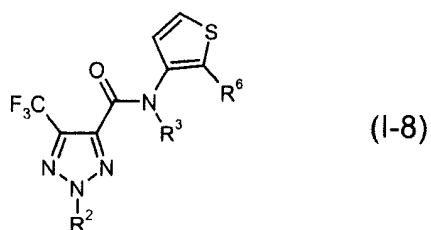
Y. 236	C_2H_5	H	$CH(CH_3)CH_2C(CH_3)_3$
Y. 237	CH_2OCH_3	H	$CH(CH_3)CH_2C(CH_3)_3$
Y. 238	CH_3	$COCH_3$	$CH(CH_3)CH_2C(CH_3)_3$
Y. 239	CH_3	$COCH_2OCH_3$	$CH(CH_3)CH_2C(CH_3)_3$
Y. 240	CH_3	$CH_2C\equiv CH$	$CH(CH_3)CH_2C(CH_3)_3$
Y. 241	CH_3	$COO-tert-Bu$	$CH(CH_3)CH_2C(CH_3)_3$
Y. 242	CH_3	$CH=C=CH_2$	$CH(CH_3)CH_2C(CH_3)_3$
Y. 243	CH_3	H	$CH(CH_3)CH_2C(CH_3)_2(C_2H_5)$
Y. 244	C_2H_5	H	$CH(CH_3)CH_2C(CH_3)_2(C_2H_5)$
Y. 245	CH_2OCH_3	H	$CH(CH_3)CH_2C(CH_3)_2(C_2H_5)$
Y. 246	CH_3	$COCH_3$	$CH(CH_3)CH_2C(CH_3)_2(C_2H_5)$
Y. 247	CH_3	$COCH_2OCH_3$	$CH(CH_3)CH_2C(CH_3)_2(C_2H_5)$
Y. 248	CH_3	$CH_2C\equiv CH$	$CH(CH_3)CH_2C(CH_3)_2(C_2H_5)$
Y. 249	CH_3	$COO-tert-Bu$	$CH(CH_3)CH_2C(CH_3)_2(C_2H_5)$
Y. 250	CH_3	$CH=C=CH_2$	$CH(CH_3)CH_2C(CH_3)_2(C_2H_5)$
Y. 251	CH_3	H	$CH(CH_3)CH_2C(CH_3)(C_2H_5)_2$
Y. 252	C_2H_5	H	$CH(CH_3)CH_2C(CH_3)(C_2H_5)_2$
Y. 253	CH_2OCH_3	H	$CH(CH_3)CH_2C(CH_3)(C_2H_5)_2$
Y. 254	CH_3	$CH_2C\equiv CH$	$CH(CH_3)CH_2C(CH_3)(C_2H_5)_2$
Y. 255	CH_3	H	$CH(C_2H_5)CH_2C(CH_3)_3$
Y. 256	C_2H_5	H	$CH(C_2H_5)CH_2C(CH_3)_3$
Y. 257	CH_2OCH_3	H	$CH(C_2H_5)CH_2C(CH_3)_3$
Y. 258	CH_3	$CH_2C\equiv CH$	$CH(C_2H_5)CH_2C(CH_3)_3$
Y. 259	CH_3	H	$CH(C_2H_5)CH_2C(CH_3)_2(C_2H_5)$
Y. 260	C_2H_5	H	$CH(C_2H_5)CH_2C(CH_3)_2(C_2H_5)$
Y. 261	CH_2OCH_3	H	$CH(C_2H_5)CH_2C(CH_3)_2(C_2H_5)$
Y. 262	CH_3	$CH_2C\equiv CH$	$CH(C_2H_5)CH_2C(CH_3)_2(C_2H_5)$
Y. 263	CH_3	H	$CH(C_2H_5)CH_2C(CH_3)(C_2H_5)_2$
Y. 264	C_2H_5	H	$CH(C_2H_5)CH_2C(CH_3)(C_2H_5)_2$
Y. 265	CH_2OCH_3	H	$CH(C_2H_5)CH_2C(CH_3)(C_2H_5)_2$
Y. 266	CH_3	$CH_2C\equiv CH$	$CH(C_2H_5)CH_2C(CH_3)(C_2H_5)_2$
Y. 267	CH_3	H	$CH(CF_3)CH_2C(CH_3)_3$
Y. 268	C_2H_5	H	$CH(CF_3)CH_2C(CH_3)_3$
Y. 269	CH_2OCH_3	H	$CH(CF_3)CH_2C(CH_3)_3$

Y. 270	CH ₃	CH ₂ C≡CH	CH (CF ₃) CH ₂ C (CH ₃) ₂
Y. 271	CH ₃	H	CH (CF ₃) CH ₂ C (CH ₃) ₂ (C ₂ H ₅)
Y. 272	C ₂ H ₅	H	CH (CF ₃) CH ₂ C (CH ₃) ₂ (C ₂ H ₅)
Y. 273	CH ₂ OCH ₃	H	CH (CF ₃) CH ₂ C (CH ₃) ₂ (C ₂ H ₅)
Y. 274	CH ₃	CH ₂ C≡CH	CH (CF ₃) CH ₂ C (CH ₃) ₂ (C ₂ H ₅)
Y. 275	CH ₃	H	CH (CF ₃) CH ₂ C (CH ₃) (C ₂ H ₅) ₂
Y. 276	C ₂ H ₅	H	CH (CF ₃) CH ₂ C (CH ₃) (C ₂ H ₅) ₂
Y. 277	CH ₂ OCH ₃	H	CH (CF ₃) CH ₂ C (CH ₃) (C ₂ H ₅) ₂
Y. 278	CH ₃	CH ₂ C≡CH	CH (CF ₃) CH ₂ C (CH ₃) (C ₂ H ₅) ₂
Y. 279	CH ₃	H	2'-叔丁基-环丙基
Y. 280	C ₂ H ₅	H	2'-叔丁基-环丙基
Y. 281	CH ₂ OCH ₃	H	2'-叔丁基-环丙基
Y. 282	CH ₃	CH ₂ C≡CH	2'-叔丁基-环丙基
Y. 283	CH ₃	H	2'-异丁基-环丙基
Y. 284	C ₂ H ₅	H	2'-异丁基-环丙基
Y. 285	CH ₂ OCH ₃	H	2'-异丁基-环丙基
Y. 286	CH ₃	CH ₂ C≡CH	2'-异丁基-环丙基
Y. 287	CH ₃	H	4', 4'-二甲基-环丁基
Y. 288	C ₂ H ₅	H	4', 4'-二甲基-环丁基
Y. 289	CH ₂ OCH ₃	H	4', 4'-二甲基-环丁基
Y. 290	CH ₃	CH ₂ C≡CH	4', 4'-二甲基-环丁基
Y. 291	CH ₃	H	环戊基
Y. 292	C ₂ H ₅	H	环戊基
Y. 293	CH ₂ OCH ₃	H	环戊基
Y. 294	CH ₃	CH ₂ C≡CH	环戊基
Y. 295	CH ₃	H	3'-甲基-环戊基
Y. 296	C ₂ H ₅	H	3'-甲基-环戊基
Y. 297	CH ₂ OCH ₃	H	3'-甲基-环戊基
Y. 298	CH ₃	CH ₂ C≡CH	3'-甲基-环戊基
Y. 299	CH ₃	H	环己基
Y. 300	C ₂ H ₅	H	环己基
Y. 301	CH ₂ OCH ₃	H	环己基
Y. 302	CH ₃	CH ₂ C≡CH	环己基
Y. 303	CH ₃	H	3'-甲基-环己基

Y. 304	C ₂ H ₅	H	3'-甲基-环己基
Y. 305	CH ₂ OCH ₃	H	3'-甲基-环己基
Y. 306	CH ₃	CH ₂ C≡CH	3'-甲基-环己基
Y. 307	CH ₃	H	4'-甲基-环己基
Y. 308	C ₂ H ₅	H	4'-甲基-环己基
Y. 309	CH ₂ OCH ₃	H	4'-甲基-环己基
Y. 310	CH ₃	CH ₂ C≡CH	4'-甲基-环己基
Y. 311	CH ₃	H	环庚基
Y. 312	C ₂ H ₅	H	环庚基
Y. 313	CH ₂ OCH ₃	H	环庚基
Y. 314	CH ₃	CH ₂ C≡CH	环庚基
Y. 315	CH ₃	H	2'-噻吩基
Y. 316	C ₂ H ₅	H	2'-噻吩基
Y. 317	CH ₂ OCH ₃	H	2'-噻吩基
Y. 318	CH ₃	CH ₂ C≡CH	2'-噻吩基
Y. 319	CH ₃	H	3'-噻吩基
Y. 320	C ₂ H ₅	H	3'-噻吩基
Y. 321	CH ₂ OCH ₃	H	3'-噻吩基
Y. 322	CH ₃	CH ₂ C≡CH	3'-噻吩基
Y. 323	CH ₃	H	5'-氯-2'-噻吩基
Y. 324	C ₂ H ₅	H	5'-氯-2'-噻吩基
Y. 325	CH ₂ OCH ₃	H	5'-氯-2'-噻吩基
Y. 326	CH ₃	CH ₂ C≡CH	5'-氯-2'-噻吩基
Y. 327	CH ₃	H	2'-呋喃基
Y. 328	C ₂ H ₅	H	2'-呋喃基
Y. 329	CH ₂ OCH ₃	H	2'-呋喃基
Y. 330	CH ₃	CH ₂ C≡CH	2'-呋喃基
Y. 331	CH ₃	H	5'-氯-2'-呋喃基
Y. 332	C ₂ H ₅	H	5'-氯-2'-呋喃基
Y. 333	CH ₂ OCH ₃	H	5'-氯-2'-呋喃基
Y. 334	CH ₃	CH ₂ C≡CH	5'-氯-2'-呋喃基
Y. 335	CH ₃	H	2'-吡啶基
Y. 336	C ₂ H ₅	H	2'-吡啶基
Y. 337	CH ₂ OCH ₃	H	2'-吡啶基

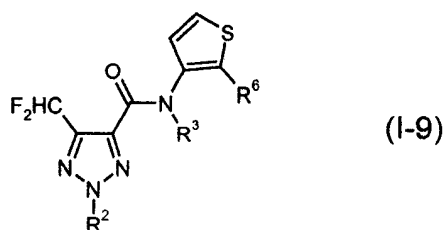
Y. 338	CH ₃	CH ₂ C≡CH	2'-吡啶基
Y. 339	CH ₃	H	3'-吡啶基
Y. 340	C ₂ H ₅	H	3'-吡啶基
Y. 341	CH ₂ OCH ₃	H	3'-吡啶基
Y. 342	CH ₃	CH ₂ C≡CH	3'-吡啶基
Y. 343	CH ₃	H	4'-吡啶基
Y. 344	C ₂ H ₅	H	4'-吡啶基
Y. 345	CH ₂ OCH ₃	H	4'-吡啶基
Y. 346	CH ₃	CH ₂ C≡CH	4'-吡啶基
Y. 347	CH ₃	H	6'-氟-3'-吡啶基
Y. 348	C ₂ H ₅	H	6'-氟-3'-吡啶基
Y. 349	CH ₂ OCH ₃	H	6'-氟-3'-吡啶基
Y. 350	CH ₃	CH ₂ C≡CH	6'-氟-3'-吡啶基
Y. 351	CH ₃	H	6'-氟-3'-吡啶基
Y. 352	C ₂ H ₅	H	6'-氟-3'-吡啶基
Y. 353	CH ₂ OCH ₃	H	6'-氟-3'-吡啶基
Y. 354	CH ₃	CH ₂ C≡CH	6'-氟-3'-吡啶基
Y. 355	CH ₃	H	6'-溴-3'-吡啶基
Y. 356	C ₂ H ₅	H	6'-溴-3'-吡啶基
Y. 357	CH ₂ OCH ₃	H	6'-溴-3'-吡啶基
Y. 358	CH ₃	CH ₂ C≡CH	6'-溴-3'-吡啶基
Y. 359	CH ₃	H	2'-噁唑基
Y. 360	CH ₃	H	3'-异噁唑基
Y. 361	CH ₃	H	CH(CH ₃) ₂
Y. 362	C ₂ H ₅	H	CH(CH ₃) ₂
Y. 363	CH ₂ OCH ₃	H	CH(CH ₃) ₂
Y. 364	CH ₃	CH ₂ C≡CH	CH(CH ₃) ₂

表 8 提供 364 个式 (I-8) 的化合物:



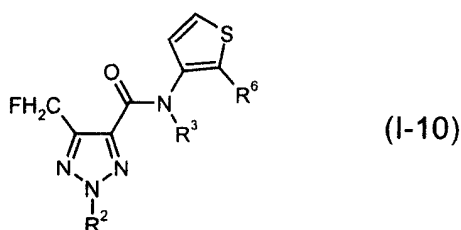
其中 R^2 , R^3 , 和 R^6 如表 8 中定义。

表 9 提供 364 个式 (I-9) 的化合物:



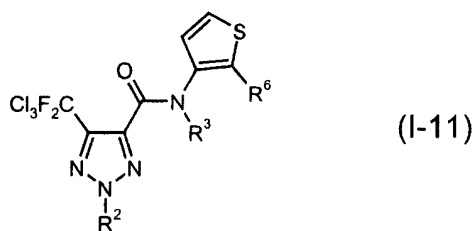
其中 R^2 , R^3 , 和 R^6 如表 9 中定义。

表 10 提供 364 个式 (I-10) 的化合物:



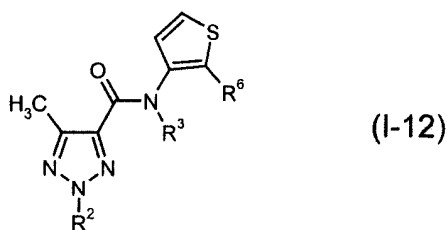
其中 R^2 , R^3 , 和 R^6 如表 10 中定义。

表 11 提供 364 个式 (I-11) 的化合物



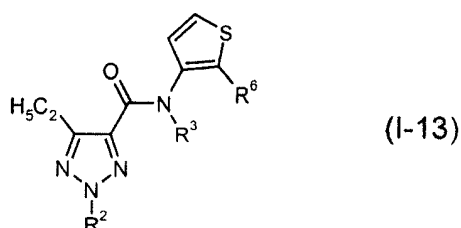
其中 R^2 , R^3 , 和 R^6 如表 11 中定义。

表 12 提供 364 个式 (I-12) 的化合物:



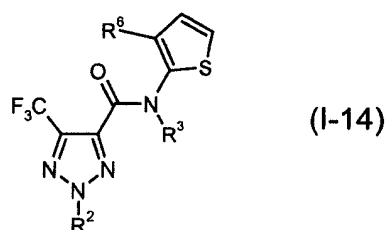
其中 R^2 , R^3 , 和 R^6 如表 12 中定义。

表 13 提供 364 个式 (I-13) 的化合物:



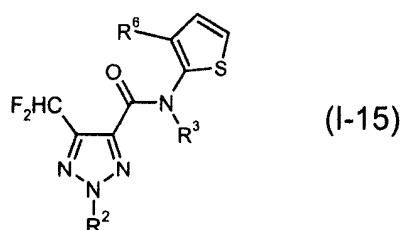
其中 R^2 , R^3 , 和 R^6 如表 13 中定义。

表 14 提供 364 个式 (I-14) 的化合物:



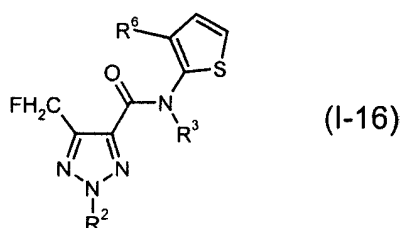
其中 R^2 , R^3 , 和 R^6 如表 14 中定义。

表 15 提供 364 个式 (I-15) 的化合物:



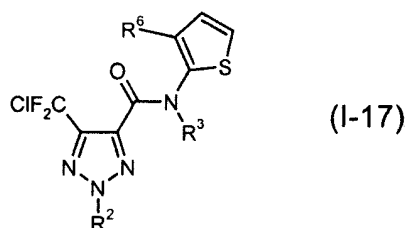
其中 R^2 , R^3 , 和 R^6 如表 15 中定义。

表 16 提供 364 个式 (I-16) 的化合物:



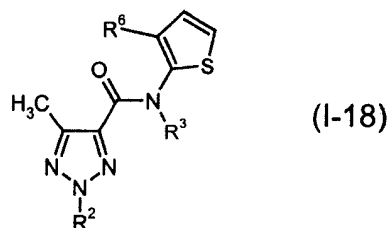
其中 R^2 , R^3 , 和 R^6 如表 16 中定义。

表 17 提供 364 个式 (I-17) 的化合物:



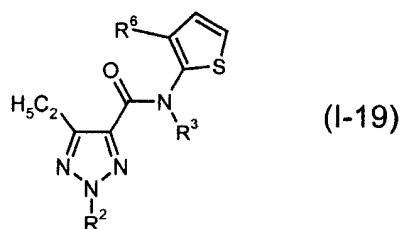
其中 R^2 , R^3 , 和 R^6 如表 17 中定义。

表 18 提供 364 个式 (I-18) 的化合物:



其中 R^2 , R^3 , 和 R^6 如表 18 中定义。

表 19 提供 364 个式 (I-19) 的化合物:

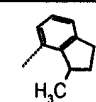
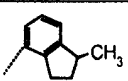
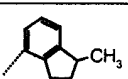
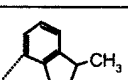
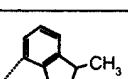
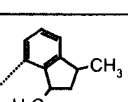
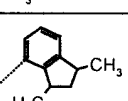
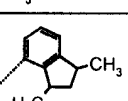
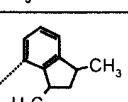
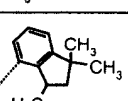
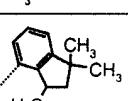
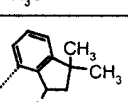
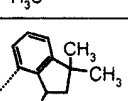
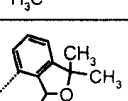
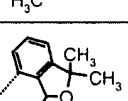
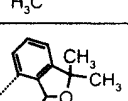
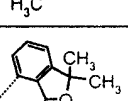


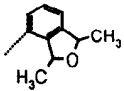
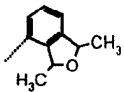
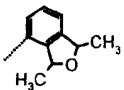
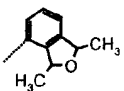




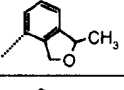
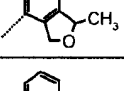
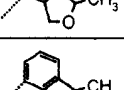
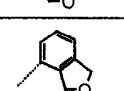




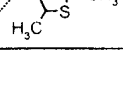

其中 R^2 , R^3 , 和 R^6 如表 19 中定义。

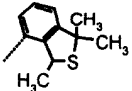
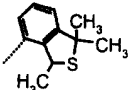
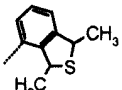
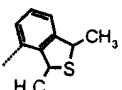
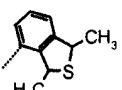
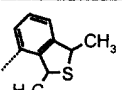
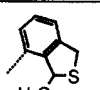
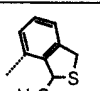
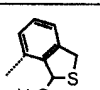
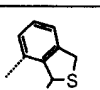
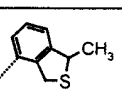
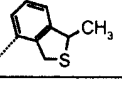
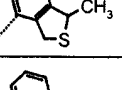
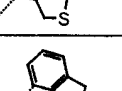
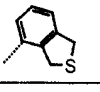
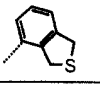
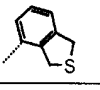
表 Z 代表表 20 [当 Z 为 20 时], 表 21 [当 Z 为 21 时], 表 22 [当 Z 为 22 时], 表 23 [当 Z 为 23 时], 表 24 [当 Z 为 24 时] 以及表 25 [当 Z 为 25 时]。



















表 Z

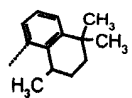
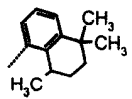
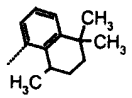
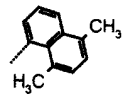
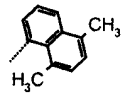
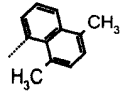
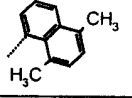
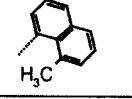
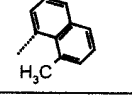
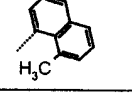
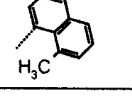
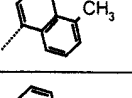
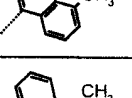
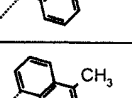
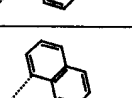
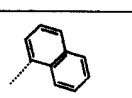

化合物序号	R^2	R^3	A
Z. 001	CH ₃	H	
Z. 002	C ₂ H ₅	H	
Z. 003	CH ₂ OCH ₃	H	
Z. 004	CH ₃	CH ₂ C≡CH	
Z. 005	CH ₃	H	
Z. 006	C ₂ H ₅	H	
Z. 007	CH ₂ OCH ₃	H	
















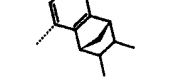
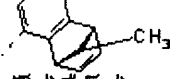
Z. 008	CH ₃	CH ₂ C≡CH	
Z. 009	CH ₃	H	
Z. 010	C ₂ H ₅	H	
Z. 011	CH ₂ OCH ₃	H	
Z. 012	CH ₃	CH ₂ C≡CH	
Z. 013	CH ₃	H	
Z. 014	C ₂ H ₅	H	
Z. 015	CH ₂ OCH ₃	H	
Z. 016	CH ₃	CH ₂ C≡CH	
Z. 017	CH ₃	H	
Z. 018	C ₂ H ₅	H	
Z. 019	CH ₂ OCH ₃	H	
Z. 020	CH ₃	CH ₂ C≡CH	
Z. 021	CH ₃	H	
Z. 022	C ₂ H ₅	H	
Z. 023	CH ₂ OCH ₃	H	
Z. 024	CH ₃	CH ₂ C≡CH	

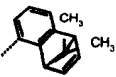
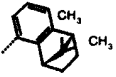















Z. 025	CH ₃	H	
Z. 026	C ₂ H ₅	H	
Z. 027	CH ₂ OCH ₃	H	
Z. 028	CH ₃	CH ₂ C≡CH	
Z. 029	CH ₃	H	
Z. 030	C ₂ H ₅	H	
Z. 031	CH ₂ OCH ₃	H	
Z. 032	CH ₃	CH ₂ C≡CH	
Z. 033	CH ₃	H	
Z. 034	C ₂ H ₅	H	
Z. 035	CH ₂ OCH ₃	H	
Z. 036	CH ₃	CH ₂ C≡CH	
Z. 037	CH ₃	H	
Z. 038	C ₂ H ₅	H	
Z. 039	CH ₂ OCH ₃	H	
Z. 040	CH ₃	CH ₂ C≡CH	
Z. 041	CH ₃	H	
Z. 042	C ₂ H ₅	H	


















Z. 043	CH_2OCH_3	H	
Z. 044	CH_3	$\text{CH}_2\text{C}\equiv\text{CH}$	
Z. 045	CH_3	H	
Z. 046	C_2H_5	H	
Z. 047	CH_2OCH_3	H	
Z. 048	CH_3	$\text{CH}_2\text{C}\equiv\text{CH}$	
Z. 049	CH_3	H	
Z. 050	C_2H_5	H	
Z. 051	CH_2OCH_3	H	
Z. 052	CH_3	$\text{CH}_2\text{C}\equiv\text{CH}$	
Z. 053	CH_3	H	
Z. 054	C_2H_5	H	
Z. 055	CH_2OCH_3	H	
Z. 056	CH_3	$\text{CH}_2\text{C}\equiv\text{CH}$	
Z. 057	CH_3	H	
Z. 058	C_2H_5	H	
Z. 059	CH_2OCH_3	H	

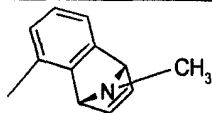
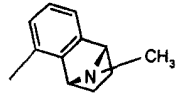
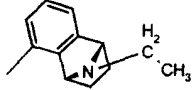
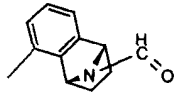
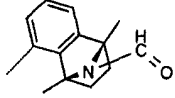
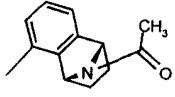
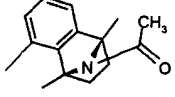
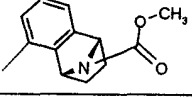
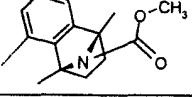
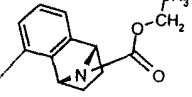
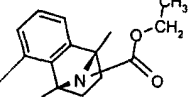
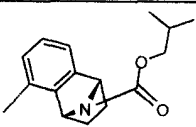
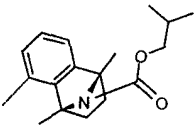
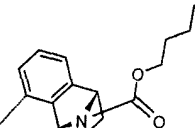
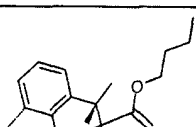
Z. 060	CH ₃	CH ₂ C≡CH	
Z. 061	CH ₃	H	
Z. 062	C ₂ H ₅	H	
Z. 063	CH ₂ OCH ₃	H	
Z. 064	CH ₃	CH ₂ C≡CH	
Z. 065	CH ₃	H	
Z. 066	C ₂ H ₅	H	
Z. 067	CH ₃ OCH ₃	H	
Z. 068	CH ₃	CH ₂ C≡CH	
Z. 069	CH ₃	H	
Z. 070	C ₂ H ₅	H	
Z. 071	CH ₂ OCH ₃	H	
Z. 072	CH ₃	CH ₂ C≡CH	
Z. 073	CH ₃	H	
Z. 074	C ₂ H ₅	H	
Z. 075	CH ₂ OCH ₃	H	
Z. 076	CH ₃	CH ₂ C≡CH	
Z. 077	CH ₃	H	

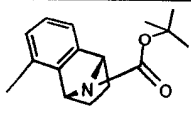
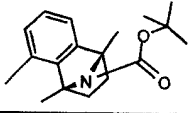
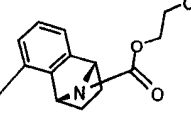
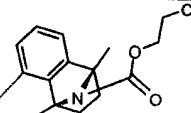
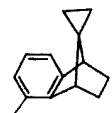
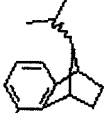
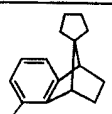
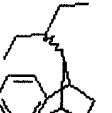
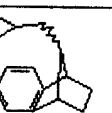

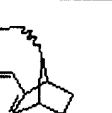
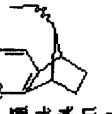
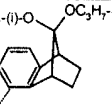
Z. 078	C_2H_5	H	
Z. 079	CH_2OCH_3	H	
Z. 080	CH_3	$CH_2C\equiv CH$	
Z. 081	CH_3	H	
Z. 082	C_2H_5	H	
Z. 083	CH_2OCH_3	H	
Z. 084	CH_3	$CH_2C\equiv CH$	
Z. 085	CH_3	H	
Z. 086	C_2H_5	H	
Z. 087	CH_2OCH_3	H	
Z. 088	CH_3	$CH_2C\equiv CH$	
Z. 089	CH_3	H	
Z. 090	C_2H_5	H	
Z. 091	CH_2OCH_3	H	
Z. 092	CH_3	$CH_2C\equiv CH$	
Z. 093	CH_3	H	
Z. 094	C_2H_5	H	

Z. 095	CH_2OCH_3	H	
Z. 096	CH_3	$\text{CH}_2\text{C}\equiv\text{CH}$	
Z. 097	CH_3	H	
Z. 098	C_2H_5	H	
Z. 099	CH_2OCH_3	H	
Z. 100	CH_3	$\text{CH}_2\text{C}\equiv\text{CH}$	
Z. 101	CH_3	H	
Z. 102	C_2H_5	H	
Z. 103	CH_2OCH_3	H	
Z. 104	CH_3	$\text{CH}_2\text{C}\equiv\text{CH}$	
Z. 105	CH_3	H	
Z. 106	CH_3	H	
Z. 107	CH_3	H	
Z. 108	CH_3	H	
Z. 109	CH_3	H	
Z. 110	CH_3	H	 顺式或反式
Z. 111	CH_3	H	 顺式或反式

Z. 112	CH ₃	H	
Z. 113	CH ₃	H	
Z. 114	CH ₃	H	
Z. 115	CH ₃	H	
Z. 116	C ₂ H ₅	H	
Z. 117	CH ₂ OCH ₃	H	
Z. 118	CH ₃	CH ₂ C≡CH	
Z. 119	CH ₃	H	
Z. 120	CH ₃	H	
Z. 121	C ₂ H ₅	H	
Z. 122	CH ₂ OCH ₃	H	
Z. 123	CH ₃	CH ₂ C≡CH	
Z. 124	CH ₃	H	
Z. 125	CH ₃	H	
Z. 126	CH ₃	H	
Z. 127	CH ₃	H	
Z. 128	CH ₃	H	

Z. 129	CH ₃	H	
Z. 130	CH ₃	H	
Z. 131	CH ₃	H	
Z. 132	C ₂ H ₅	H	
Z. 133	CH ₂ OCH ₃	H	
Z. 134	CH ₃	CH ₂ C≡CH	
Z. 135	CH ₃	H	
Z. 136	CH ₃	H	
Z. 137	C ₂ H ₅	H	
Z. 138	CH ₂ OCH ₃	H	
Z. 139	CH ₃	CH ₂ C≡CH	
Z. 140	CH ₃	H	
Z. 141	CH ₃	H	
Z. 142	CH ₃	H	
Z. 143	CH ₃	H	
Z. 144	CH ₃	H	
Z. 145	CH ₃	H	

Z. 146	CH ₃	H	
Z. 147	CH ₃	H	
Z. 148	CH ₃	H	
Z. 149	CH ₃	H	
Z. 150	CH ₃	H	
Z. 151	CH ₃	H	
Z. 152	CH ₃	H	
Z. 153	CH ₃	H	
Z. 154	CH ₃	H	
Z. 155	CH ₃	H	
Z. 156	CH ₃	H	
Z. 157	CH ₃	H	
Z. 158	CH ₃	H	
Z. 159	CH ₃	H	
Z. 160	CH ₃	H	

Z. 161	CH ₃	H	
Z. 162	CH ₃	H	
Z. 163	CH ₃	H	
Z. 164	CH ₃	H	
Z. 165	CH ₃	H	
Z. 166	CH ₃	H	 顺式或反式
Z. 167	CH ₃	H	
Z. 168	CH ₃	H	 顺式或反式
Z. 169	CH ₃	H	 顺式或反式
Z. 170	CH ₃	H	 顺式或反式
Z. 171	CH ₃	H	 顺式或反式
Z. 172	CH ₃	H	 顺式或反式
Z. 173	CH ₃	H	 C ₃ H ₇ (-)-O OC ₃ H ₇ (-)

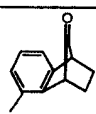
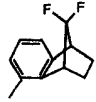



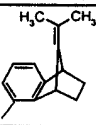
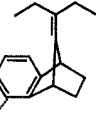
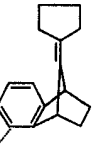
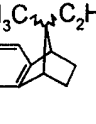
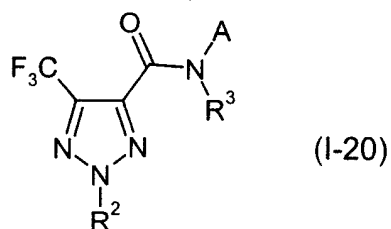
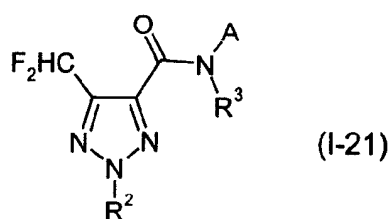
Z. 174	CH ₃	H	
Z. 175	CH ₃	H	
Z. 176	CH ₃	H	 顺式或反式
Z. 177	CH ₃	H	 顺式或反式
Z. 178	CH ₃	H	 顺式或反式
Z. 179	CH ₃	H	 H ₃ C-CH-CH ₃
Z. 180	CH ₃	H	
Z. 181	CH ₃	H	
Z. 182	CH ₃	H	 H ₃ C-CH(OH)-C ₂ H ₅ 两种构型之一

表 20 提供 182 个式 (I-20) 的化合物:



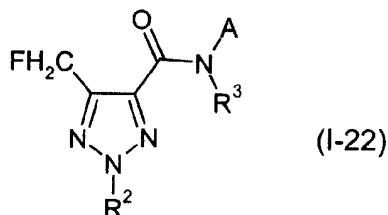
其中 R², R³ 和 A 如表 20 中定义。

表 21 提供 182 个式 (I-21) 的化合物:



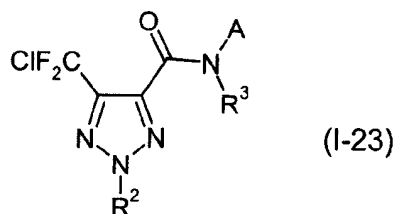
其中 R², R³ 和 A 如表 21 中定义。

表 22 提供 182 个式 (I-22) 的化合物:



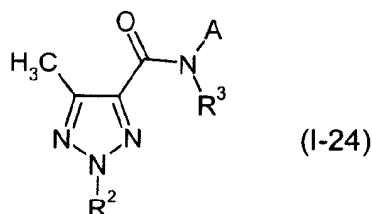
其中 R², R³ 和 A 如表 22 中定义。

表 23 提供 182 个式 (I-23) 的化合物:



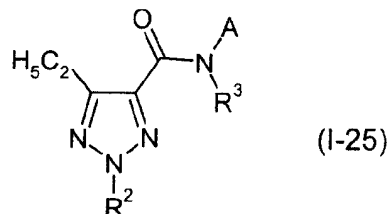
其中 R², R³ 和 A 如表 23 中定义。

表 24 提供 182 个式 (I-24) 的化合物:



其中 R², R³ 和 A 如表 24 中定义。

表 25 提供 182 个式 (I-25) 的化合物:



其中 R², R³ 和 A 如表 25 中定义。

表 26 提供 133 个式 (IIIa) 化合物, 其中 R¹³, R¹⁴, R¹⁵, R¹⁶, Q 和

X 如表 26 中所定义。Q 是单键(-)或双键(=)。

表 26

化合物 No.	R ¹³	R ¹⁴	R ¹⁵	R ¹⁶	Q	X
26.001	CH ₃	CH ₃	H	H	=	0
26.002	CH ₃	H	H	H	=	0
26.003	H	CH ₃	H	H	=	0
26.004	CH ₃	CH ₃	C(O)CH ₃	H	=	0
26.005	CH ₃	CH ₃	H	C(O)CH ₃	=	0
26.006	CH ₃	C(O)CH ₃	H	H	=	0
26.007	H	H	H	H	=	0
26.008	CF ₃	CF ₃	H	H	=	0
26.009	OCH ₃	OCH ₃	H	H	=	0
26.010	H	H	CH ₃	CH ₃	=	0
26.011	C ₂ H ₅	C ₂ H ₅	H	H	=	0
26.012	CH ₃	H	CH ₃	H	=	0
26.013	H	CH ₃	H	CH ₃	=	0
26.014	CH ₃	CH ₃	H	H	-	0
26.015	CH ₃	H	H	H	-	0
26.016	H	CH ₃	H	H	-	0
26.017	CH ₃	CH ₃	C(O)CH ₃	H	-	0
26.018	CH ₃	CH ₃	H	C(O)CH ₃	-	0
26.019	CH ₃	C(O)CH ₃	H	H	-	0
26.020	H	H	H	H	-	0
26.021	CF ₃	CF ₃	H	H	-	0
26.022	OCH ₃	OCH ₃	H	H	-	0
26.023	H	H	CH ₃	CH ₃	-	0
26.024	C ₂ H ₅	C ₂ H ₅	H	H	-	0
26.025	CH ₃	H	CH ₃	H	-	0
26.026	H	H	H	H	-	CH ₂
26.027	CH ₃	H	CH ₃	H	-	CH ₂
26.028	CH ₃	H	CH ₃	H	=	CH ₂
26.029	H	CH ₃	H	CH ₃	-	CH ₂
26.030	H	CH ₃	H	CH ₃	=	CH ₂

26.031	CH ₃	CH ₃	CH ₃	CH ₃	=	CH ₂
26.032	CH ₃	CH ₃	CH ₃	CH ₃	-	CH ₂
26.033	CH ₃	CH ₃	CH ₃	CH ₃	=	CH(CH ₃) 顺式或反式
26.034	CH ₃	CH ₃	CH ₃	CH ₃	-	CH(CH ₃) 顺式或反式
26.035	H	H	H	H	=	CH(CH ₃) 顺式或反式
26.036	H	H	H	H	-	CH(CH ₃) 顺式或反式
26.037	H	H	H	H	-	CH(C ₂ H ₅) 顺式或反式
26.038	H	H	H	H	-	CH ₂ CH ₂
26.039	CH ₃	CH ₃	H	H	=	CH ₂ CH ₂
26.040	CH ₃	CH ₃	H	H	-	CH ₂ CH ₂
26.041	H	H	CH ₃	CH ₃	=	CH ₂ CH ₂
26.042	H	H	CH ₃	CH ₃	-	CH ₂ CH ₂
26.043	H	H	OCH ₃	H	-	CH ₂ CH ₂
26.044	H	H	H	OCH ₃	-	CH ₂ CH ₂
26.045	H	H	H	H	-	CH ₂ CH ₂ CH ₂
26.046	H	H	H	H	=	CH ₂ CH ₂ CH ₂
26.047	H	H	CH ₃	CH ₃	=	C(CH ₃) ₂
26.048	H	H	CH ₃	CH ₃	-	C(CH ₃) ₂
26.049	CH ₃	CH ₃	CH ₃	CH ₃	=	C(CH ₃) ₂
26.050	CH ₃	CH ₃	CH ₃	CH ₃	-	C(CH ₃) ₂
26.051	CH ₃	H	CH ₃	H	-	C(CH ₃) ₂
26.052	H	CH ₃	H	CH ₃	-	C(CH ₃) ₂
26.053	CH ₃	H	CH ₃	H	=	C(CH ₃) ₂
26.054	H	CH ₃	H	CH ₃	=	C(CH ₃) ₂
26.055	CH ₃	CH ₃	CH ₃	CH ₃	-	C(CH ₃)(C ₂ H ₅)
26.056	H	H	H	H	-	C(CH ₃) ₂
26.057	H	H	H	H	=	C(CH ₃) ₂
26.058	CH ₃	CH ₃	H	H	-	C(CH ₃) ₂
26.059	CH ₃	CH ₃	H	H	=	C(CH ₃) ₂
26.060	H	H	H	H	=	C(OCH ₃) ₂

26.061	H	H	H	H	-	CH(OCH ₃)
26.062	H	H	H	H	=	S
26.063	H	H	H	H	-	S
26.064	CH ₃	CH ₃	H	H	=	S
26.065	CH ₃	CH ₃	H	H	-	S
26.066	H	H	CH ₃	CH ₃	=	S
26.067	H	H	CH ₃	CH ₃	-	S
26.068	OCH ₃	OCH ₃	H	H	=	S
26.069	OCH ₃	OCH ₃	H	H	-	S
26.070	H	CH ₃	H	H	=	S
26.071	H	CH ₃	H	H	-	S
26.072	CH ₃	H	H	H	=	S
26.073	CH ₃	H	H	H	-	S
26.074	CH ₃	H	CH ₃	H	=	S
26.075	CH ₃	H	CH ₃	H	-	S
26.076	H	CH ₃	H	CH ₃	=	S
26.077	H	CH ₃	H	CH ₃	-	S
26.078	H	OCH ₃	H	H	=	S
26.079	H	OCH ₃	H	H	-	S
26.080	OCH ₃	H	H	H	=	S
26.081	OCH ₃	H	H	H	-	S
26.082	CH ₃	H	CH ₃	CH ₃	=	S
26.083	CH ₃	H	CH ₃	CH ₃	-	S
26.084	H	CH ₃	CH ₃	CH ₃	=	S
26.085	H	CH ₃	CH ₃	CH ₃	-	S
26.086	H	H	CH ₃	H	=	S
26.087	H	H	CH ₃	H	-	S
26.088	H	H	H	CH ₃	=	S
26.089	H	H	H	CH ₃	-	S
26.090	H	H	OCH ₃	H	=	S
26.091	H	H	OCH ₃	H	-	S
26.092	H	H	H	OCH ₃	=	S
26.093	H	H	H	OCH ₃	-	S
26.094	H	H	H	H	=	N(CH ₃)

26.095	H	H	H	H	-	N(CH ₃)
26.096	CH ₃	CH ₃	H	H	=	N(CH ₃)
26.097	CH ₃	CH ₃	H	H	-	N(CH ₃)
26.098	H	H	H	H	=	N(C ₂ H ₅)
26.099	H	H	H	H	-	N(C ₂ H ₅)
26.100	H	H	H	H	-	NH
26.101	H	H	H	H	-	NC(O)OC(CH ₃) ₃
26.102	CH ₃	CH ₃	H	H	-	NC(O)OC(CH ₃) ₃
26.103	H	H	H	H	-	N(CHO)
26.104	H	H	H	H	-	N(C(O)CH ₃)
26.105	CH ₃	CH ₃	H	H	-	N(C(O)CH ₃)
26.106	H	H	H	H	-	N(C(O)OCH ₃)
26.107	CH ₃	CH ₃	H	H	-	N(C(O)OCH ₃)
26.108	H	H	H	H	-	N(C(O)OC ₂ H ₅)
26.109	CH ₃	CH ₃	H	H	-	N(C(O)OC ₂ H ₅)
26.110	H	H	H	H	-	N(C(O)OCH ₂ CH ₂ Cl)
26.111	CH ₃	CH ₃	H	H	-	N(C(O)OCH ₂ CH ₂ Cl)
26.112	H	H	H	H	-	N(C(O)OC ₄ H ₉ -(<i>n</i>))
26.113	CH ₃	CH ₃	H	H	-	N(C(O)OC ₄ H ₉ -(<i>n</i>))
26.114	H	H	H	H	-	N(C(O)OC ₄ H ₉ -(<i>i</i>))
26.115	CH ₃	CH ₃	H	H	-	N(C(O)OC ₄ H ₉ -(<i>i</i>))
26.116	H	H	H	H	-	CH(C ₃ H ₇ -(<i>i</i>)) 顺式或反式
26.117	H	H	H	H	-	CH(C ₃ H ₇ -(<i>n</i>)) 顺式或反式
26.118	H	H	H	H	-	CH(C ₄ H ₉ -(<i>i</i>)) 顺式或反式
26.119	H	H	H	H	-	C(C ₂ H ₅ -(<i>c</i>))
26.120	H	H	H	H	-	C(C ₄ H ₉ -(<i>c</i>))
26.121	H	H	H	H	-	CHCH(C ₂ H ₅) ₂ 顺式或反式
26.122	H	H	H	H	-	CHCH ₂ (C ₃ H ₅ -(<i>c</i>)) 顺式或反式
26.123	H	H	H	H	-	CH(C ₅ H ₉ -(<i>c</i>)) 顺式或反式

26.124	H	H	H	H	-	CHCH ₂ OC(=O)CH ₃ 顺式或反式
26.125	H	H	H	H	-	CH(CH=O) 顺式或反式
26.126	H	H	H	H	-	CHCH ₂ OH
26.127	H	H	H	H	-	C(OC ₃ H ₇ - <i>n</i>) ₂
26.128	H	H	H	H	-	C=O
26.129	H	H	H	H	-	CHCH ₂ -C ₆ H ₅ 顺式或 反式
26.130	H	H	H	H	-	C=C(CH ₃) ₂
26.131	H	H	H	H	-	C=C(C ₂ H ₅) ₂
26.132	H	H	H	H	-	环戊基茚
26.133	H	H	H	H	-	C(CH ₃)(C ₂ H ₅) 两种构型之一

表 ZZ 代表表 27 (当 ZZ 为 27 时) 和表 28 (当 ZZ 为 28 时)。

表 ZZ

化合物序号	R ³	R ⁶	R ²	R ¹
ZZ.1	H	SiMe ₃	Me	CF ₃
ZZ.2	H	SiMe ₃	Me	CF ₂ H
ZZ.3	H	CH ₂ SiMe ₃	Me	CF ₃
ZZ.4	H	CH ₂ SiMe ₃	Me	CF ₂ H
ZZ.5	炔丙基	CH ₂ SiMe ₃	Me	CF ₃
ZZ.6	H	CHMeSiMe ₃	Me	CF ₃
ZZ.7	H	CHMeSiMe ₃	Me	CF ₂ H
ZZ.8	炔丙基	CHMeSiMe ₃	Me	CF ₃
ZZ.9	丙二烯基	CHMeSiMe ₃	Me	CF ₃
ZZ.10	COMe	CHMeSiMe ₃	Me	CF ₃
ZZ.11	H	CHMeSiMe ₃	Me	Me
ZZ.12	H	(CH ₂) ₂ SiMe ₃	Me	CF ₃
ZZ.13	H	(CH ₂) ₂ SiMe ₃	Me	CF ₂ H
ZZ.14	炔丙基	(CH ₂) ₂ SiMe ₃	Me	CF ₃

ZZ. 15	H	$(\text{CH}_2)_2\text{SiMe}_3$	Me	Me
ZZ. 16	H	$(\text{CH}_2)_2\text{SiMe}_3$	CF_3	CF_3
ZZ. 17	H	$\text{CHMeCH}_2\text{SiMe}_3$	Me	CF_3
ZZ. 18	H	$\text{CHMeCH}_2\text{SiMe}_3$	Me	CF_2H
ZZ. 19	炔丙基	$\text{CHMeCH}_2\text{SiMe}_3$	Me	CF_3
ZZ. 20	炔丙基	$\text{CHMeCH}_2\text{SiMe}_3$	Me	CF_2H
ZZ. 21	H	$\text{CHMeCH}_2\text{SiMe}_3$	Me	Me
ZZ. 22	H	$\text{CHMeCH}_2\text{SiMe}_3$	CF_3	CF_3
ZZ. 23	COMe	$\text{CHMeCH}_2\text{SiMe}_3$	Me	CF_3
ZZ. 24	H	$(\text{CH}_2)_3\text{SiMe}_3$	Me	CF_3
ZZ. 25	H	$(\text{CH}_2)_3\text{SiMe}_3$	Me	CF_2H
ZZ. 26	H	$\text{CH}_2\text{Si}(\text{Me}_2)\text{Et}$	Me	CF_3
ZZ. 27	H	$\text{CH}_2\text{Si}(\text{Me}_2)\text{Et}$	Me	CF_2H
ZZ. 28	H	$\text{CH}_2\text{Si}(\text{Me}_2)\text{CHMe}_2$	Me	CF_3
ZZ. 29	H	$\text{CH}_2\text{Si}(\text{Me}_2)\text{CHMe}_2$	Me	CF_2H
ZZ. 30	H	$\text{CH}_2\text{CHMeSiMe}_3$	Me	CF_3
ZZ. 31	H	$\text{CH}_2\text{CHMeSiMe}_3$	Me	CF_2H
ZZ. 32	H	$\text{CMe}_2\text{CH}_2\text{SiMe}_3$	Me	CF_3
ZZ. 33	H	$\text{CMe}_2\text{CH}_2\text{SiMe}_3$	Me	CF_2H
ZZ. 34	H	CHMeCHMeSiMe_3	Me	CF_2H
ZZ. 35	H	CHMeCHMeSiMe_3	Me	CF_3
ZZ. 36	H	$\text{CH}_2\text{CMe}_2\text{SiMe}_3$	Me	CF_3
ZZ. 37	H	$\text{CH}_2\text{CMe}_2\text{SiMe}_3$	Me	CF_2H
ZZ. 38	H	$\text{CHMe}(\text{CH}_2)_2\text{SiMe}_3$	Me	CF_2H
ZZ. 39	H	$\text{CHMe}(\text{CH}_2)_2\text{SiMe}_3$	Me	CF_3
ZZ. 40	H	$(\text{CH}_2)_2\text{SiMe}_3$	CH_2OMe	CH_2Me
ZZ. 41	H	$(\text{CH}_2)_2\text{SiMe}_3$	$\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{Me}$	CH_2Me
ZZ. 42	H	$\text{SiMe}_2\text{CH}_2\text{CHMe}_2$	Me	CF_3

表 27 提供 42 个式 (I-27) 的化合物, 其中 R^1 , R^2 , R^3 和 R^6 如表 9 中定义。

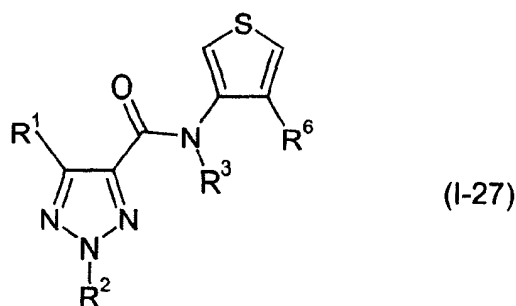
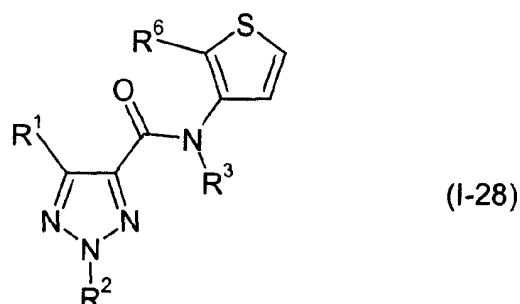


表 28 提供 42 个式 (I-28) 的化合物, 其中 R^1 , R^2 , R^3 和 R^6 如表 10 中定义。



在本说明书中, 温度以摄氏度表示, "NMR" 表示核磁共振光谱; MS 表示质谱; "%" 指重量百分比, 除非相应的浓度以其它单位表示; "顺式" 是指相关取代基相对于稠合苯环呈顺式构型; 而"反式" 则指相关取代基相对于稠合苯环呈反式构型。

本说明书中使用下列缩写:

m. p. =	熔点	b. p. =	沸点
s =	单峰	br =	宽峰
d =	二重峰	dd =	双二重峰
t =	三重峰	q =	四重峰
m =	多重峰	ppm =	百万分之一

表 29 示出精选的表 1-28 中化合物的熔点数据。

表 29

化合物序号	m. p. / (°C)
1. 03	56-57
1. 13	176-177
1. 15	液体
1. 50	64-66
2. 005	146-147
2. 017	148
2. 029	148-149
2. 067	165-166
2. 070	139-142
2. 219	94. 6-95. 4
2. 273	125-126
2. 321	124-125
2. 411	117-118
2. 427	103-105
2. 423	105
2. 445 (反式)	98-99
2. 452	123-125
2. 454	161-163
2. 456	122-123
3. 005	143-145
3. 017	155-156
3. 029	154-155
3. 067	144-145
3. 070	136-137
3. 219	71-73
3. 273	87-88
3. 321	121-122
3. 407	83-85
3. 411	91-93

3.427	75-76
3.423	121-122
3.445	94-95
3.452	161-162
3.454	144-145
3.456	133-135
4.017	158-159
4.273	89-91
4.411	84-86
4.445	84-85
4.452	143-144
4.456	122-124
8.189	104-106
9.189	82-83
20.017	167-169
20.021	121-122
20.065	144-145
20.073	157-158
20.097	108-109
20.101	155-157
20.115	137-139
20.120	160-161
20.147	159-162 (分解)
20.148	133-139
20.149	无定形物
20.161	无定形物
20.166 (顺式:反式 90:10)	150-153
20.166 (顺式:反式 34:66)	111-116
20.168 (顺式:反式 40:60)	102-120
20.169 (顺式:反式 86:14)	105-109
20.170 (顺式:反式 74:26)	无定形物

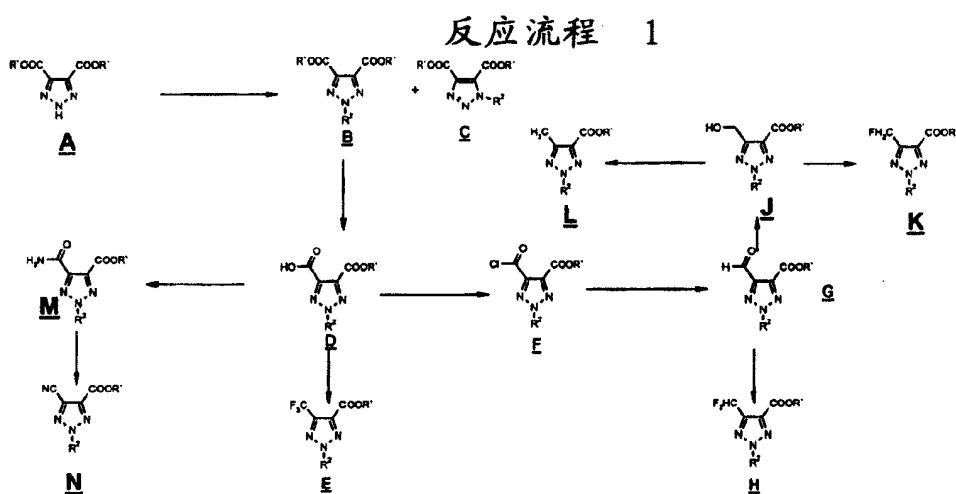
20.171 (顺式:反式 16: 84)	106-107
20.171 (顺式:反式 81:19)	无定形物
20.176 (顺式:反式 80:20)	126-129
20.179	187-189
20.180	109-110
21.097	107-109
21.101	120-122
21.017	175-177
21.021	125-126
21.065	114-116
21.073	135-137
21.105	140-143
21.114	189-191
21.115	164-166
21.120	172-175
21.148	134-136
21.152	170-172
21.153	无定形物
21.154	120-122
21.155	无定形物
21.161	无定形物
21.165(顺式)	106-108
21.166 (顺式:反式 90:10)	148-149
22.101	97-98
22.115	135-138
22.147	粘性物
22.148	130-132
22.149	无定形物
22.161	无定形物
26.001	92-96
26.007	121-124

26.014	92-93
26.015	115-116
26.016	92-93
26.020	75-76
26.026	63-64
26.038	74-75
26.095	139-140
26.099	粘性物
26.100	粘性物
26.101	89-90
26.102	94-95
26.103	176-177
26.105	110-111
26.106	104-105
26.107	114-115
26.108	粘性物
26.110	粘性物
26.112	粘性物
26.114	粘性物
26.116 (顺式:反式 86:14)	蜡状固体
26.116 (顺式:反式 35:65)	油状物
26.118 (顺式:反式 10:90)	粘性物
26.118 (顺式:反式 82:18)	粘性物
26.119	油状物
26.121 (顺式:反式 50:50)	油状物
26.122 (顺式:反式 84:14)	油状物
26.123 (顺式:反式 75:25)	73-78
26.128 (顺式:反式 74:26)	油状物
26.129	81-82
26.130	油状物

式(I)化合物可按照下面的反应流程制备。

(a) 式(II)化合物的制备

流程 1、2 和 3 表明, 式 E、H、K、L、N、O、P、R、S、T、U、V、W、Y 或 Z [其中 R^1 和 R^2 如上面式(II)所定义; 且 R' 为 C_{1-5} 烷基] {这些化合物各自是上文所定义的式(II)化合物} 可以式 A 的 1, 2, 3-三唑-4, 5-二羧酸二酯(优选二甲酯)为原料[Y. Tanaka 等, Tetrahedron, 29, 3271 (1973)] [其中每个 R' 独立地为 C_{1-5} 烷基], 通过连续反应制备。



于室温至高温的条件下, 在碱[如 K_2CO_3 , Na_2CO_3 或 NEt_3]的存在下, 在适当溶剂中[譬如乙腈、DMF 或二甲基乙酰胺]用烷基化剂[如 R^2 -卤素(其中 R^2 如上面式(II)所定义; 且卤素优选为碘)或适当的硫酸酯、磺酸酯或碳酸酯]处理 A, 生成式 B 和 C 的区域异构体混合物, 进而用常规方法分离。在质子溶剂[譬如甲醇]中, 用多达 1 当量的碱[譬如 KOH 、 $NaOH$ 或 $LiOH$]皂化式 B 化合物(优选在回流条件下进行), 生成式 D 的单-酯。随后在氢氟酸的存在下使式 D 化合物与氟化剂[譬如 DAST (二乙基氨基三氟化硫)或, 优选, SF_4]进行反应, 生成式 E 的 5- CF_3 -1, 2, 3-三唑-4-羧酸酯。

或者, 在标准条件下用氯化剂[如亚硫酸氯或光气]处理式 D 化合物, 生成式 F 的酰氯, 进而在碱[例如 Hünig 碱]的存在下在惰性溶剂[例如乙酸乙酯或 THF]中催化还原, 生成式 G 的醛酯(改进的 *Rosenmund* 条件)。随后在高温下, 使用 DAST、二甲氧基-DAST 或 SF_4 在氢氟酸存

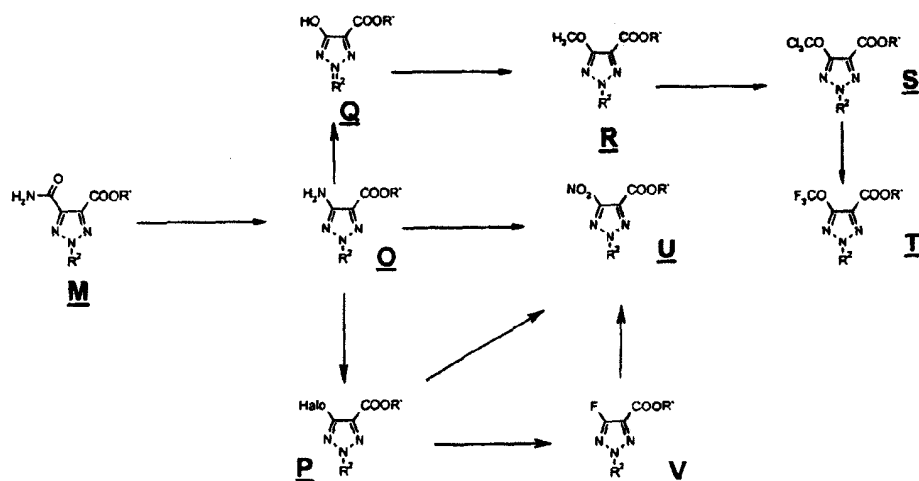
在下对式 G 化合物进行氟化(任选使用溶剂), 生成式 H 的 5-二氟甲基-1, 2, 3-三唑-4-羧酸酯。

在甲醇中使用金属氢化物[例如 NaBH_4 或 LiBH_4]还原式 G 化合物, 生成式 J 的 5-羟甲基-1, 2, 3-三唑, 再于温和条件下, 优选在低温下 (0 至 -78°C), 在惰性溶剂[如二氯甲烷]中优选使用 DAST 进行氟化, 得到式 K 的 5-氟甲基衍生物。

或者, 按照常规方法用氢化物还原式 J 化合物[例如经由其甲磺酸酯、甲苯磺酸酯或碘化物进行], 得到式 L 的 5-甲基-1, 2, 3-三唑。

氟化式 D 化合物[例如使用亚硫酸氟], 接着用氨(优选溶在质子溶剂[如水、甲醇或乙醇]中)处理, 生成式 M 的酰胺, 再用脱水剂[如三氯化磷]处理, 得到式 N 的 5-氟基-1, 2, 3-三唑。

流程 2



制备式 (II) 化合物[其中 R^1 和 R^2 如上面式 (I) 定义; Y 为 OR' 且 R' 为 C_{1-5} 烷基]的其它转化方法包括在 NaOH 的存在下用 NaOBr 或 NaOCl 对式 M 酰胺进行 Hofmann 重排, 生成式 O 的 5-氨基-1, 2, 3-三唑。

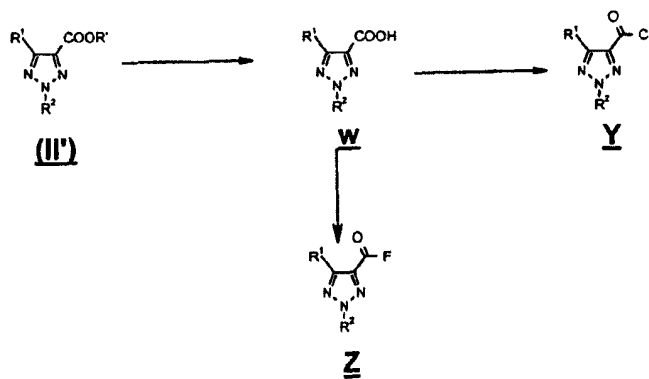
在卤化剂[如 CuCl 或 CuBr]存在下, 在含水酸性条件下[例如硫酸]使用亚硝酸钠, 或在有机溶剂中[如丙酮、二氯甲烷或 THF]使用亚硝酸酯[例如亚硝酸异戊酯]重氮化式 O 化合物, 生成式 P 的 5-卤代-1, 2, 3-三唑[其中卤素为 Cl 或 Br], 再用氟化剂[如 KF 或 CsF]处理(优选在高温条件下在 DMF 或 N-甲基吡咯烷酮中进行), 得到式 V 的 5-氟

-1, 2, 3-三唑。

通过对式 Q 化合物进行重氮化处理, 随后在加热下进行酸性水解, 可以得到式 Q 的 5-羟基-1, 2, 3-三唑。在极性溶剂中 [例如 DMF, DMSO 或 CH₃CN], 用烷基化剂 [如碘甲烷、硫酸二甲酯或碳酸二甲酯] 和碱 [例如 NaH, K₂CO₃ 或 Na₂CO₃] 处理式 Q 化合物, 生成式 R 的 5-甲氧基-1, 2, 3-三唑。再在偶氮二异丁腈 (AIBN) 存在下或在高温、紫外线照射下, 用氯化剂 [如氯气] 处理而转化成式 S 的三氟甲氧基衍生物。随后用氟化剂 [例如 KF 或 SbF₃] 处理式 S 化合物, 制得式 T 的 5-三氟甲氧基-1, 2, 3-三唑。

使用氧化剂 [例如过硼酸钠] 氧化或按照 A. Sudalai 等所述 [Angew. Chem. Int. Ed. 40, 405 (2001)] 处理式 Q 化合物, 得到式 U 的 5-硝基衍生物。另一方面, 式 U 化合物也可以通过在极性溶剂 [例如 DMF、环丁砜或 N-甲基吡咯烷酮] 中使用 NaNO₂ 高温处理式 P 或 V 的化合物而得到。

流程 3



转化式 (II') 化合物 [其中 R¹ 和 R² 如式 (I) 中定义; Y 为 OR'; 且 R' 为 C₁₋₅ 烷基] 生成式 (II) 化合物 [其中 R¹ 和 R² 如式 (I) 中定义且 Y 为卤素或羟基] 的方法包括在室温至高温的条件下, 在质子溶剂中 [例如甲醇、乙醇或水] 用碱 [如 KOH 或 NaOH] 进行皂化, 从而得到式 W 的 1, 2, 3-三唑-4-羧酸。在标准条件下 [例如使用亚硫酸氯、光气或草酰氯] 氯化式

W的化合物，得到式Y的酰氯。

在温和条件下[低温至室温温度]，优选在惰性溶剂中[例如二氯甲烷]，使用 DAST 或 SF₄ 氯化式 W 的化合物，生成式 Z 的酰氯。

(b) 式 (III) 化合物的制备

式 (III) 化合物可用作制备式 (I) 化合物的中间体：

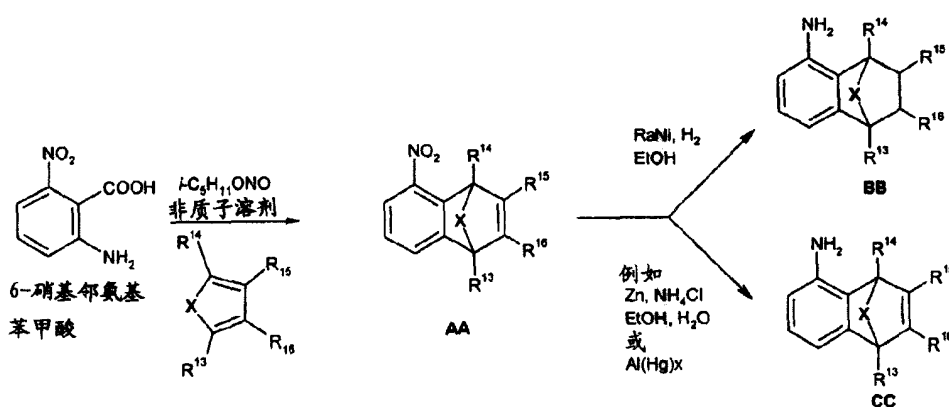


其中 A 如上面式 (I) 化合物所定义。

式 (III) 邻位取代的氨基-芳烃和氨基-杂芳烃大部分是文献中已知的，但也有一些是新化合物。

式 (IIIa) 化合物可按照反应流程 4 制得：

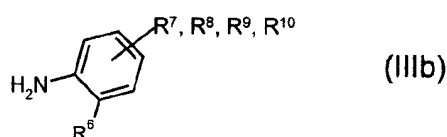
流程 4



在氯化铵或铝汞合金的存在下，在质子溶剂中[譬如乙醇或水]用 Zn 处理式 AA 的邻位取代的硝基苯并降冰片二烯(其中 R¹³、R¹⁴、R¹⁵、R¹⁶ 和 X 如上面式 (I) 化合物所定义)[该化合物由就地生成的苯炔(例如以 6-硝基邻氨基苯甲酸为原料按照 L. Paquett 等所述方法形成 (*J. Amer. Chem. Soc.* 99, 3734 (1977)) 或以其它适当的苯炔前体为原料形成(参见 H. Pellissier 等 *Tetrahedron*, 59, 701 (2003)) 与 5-7 元的 1,4-环二烯按照下列文献方法或其类似方法进行狄尔斯-阿德耳 (Diels-Alder) 加成反应制得: L. Paquette 等, *J. Amer. Chem. Soc.* 99, 3734 (1977), D. Gravel 等, *Can. J. Chem.* 69, 1193 (1991), J. R. Malpass 等, *Tetrahedron*, 48, 861 (1992), D. E. Lewis 等,

Synthetic Communications, 23, 993 (1993), R. N. Warrener 等, *Molecules*, 6, 353 (2001), R. N. Warrener 等, *Molecules*, 6, 194 (2001) 或 I. Fleming 等, *J. Chem. Soc., Perkin Trans. 1*, 2645 (1998)], 生成式 CC 的苯胺, 进而在溶剂存在下 [例如 THF, 乙酸乙酯, 甲醇或乙醇] 使用例如 RaNi , Pd/C 或 Rh/C 催化氢化式 AA 化合物, 则得到式 BB 的苯胺。

式 (IIIb) 化合物

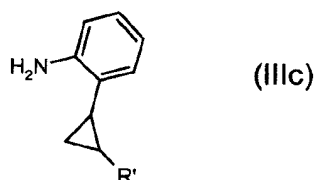


[其中 R^6 为饱和或不饱和的脂族或脂环族基团 [该基团包含 3-13 个碳原子和至少一个硅原子并任选包含 1-3 个各自独立选自氧、氮和硫的杂原子, 并且该基团任选被多达 4 个独立选择的卤原子取代] 和 R^{7-10} 如式 (I) 所定义], 可以用和文献所述类似的方法制备。例如, 这些文献包括 E. A. Chernyshev 等, *Bull. Acad. Sci. USSR*, 1960, 1323; K. T. Kang 等, *Tetrahedron Letters* 32, 4341 (1991), *Synthetic Comm.* 24, 1507 (1994); M. Murata 等, *Tetrahedron Letters* 40, 9255 (1999); A. Falcou 等, *Tetrahedron* 56, 225 (2000); A. Arcadi 等, *Tetrahedron Letters* 27, 6397 (1986); K. C. Nicolaou 等, *Chem. Eur. J.* 1, 318 (1995); N. Chatani 等, *J. Org. Chem.* 60, 834 (1995); T. Stuedemann 等, *Tetrahedron* 54, 1299 (1998); P. F. Hurdlik 等, *J. Org. Chem.* 54, 5613 (1989); K. Karabelas 等, *J. Org. Chem.* 51, 5286 (1986); T. Jeffery, *Tetrahedron Letters* 40, 1673 (1999) 和 *Tetrahedron Letters* 41, 8445 (2000); K. Olofson 等, *J. Org. Chem.* 63, 5076 (1998); H. Uirata 等, *Bull. Chem. Soc. Jap.* 57, 607 (1984); 和 G. Maas 等, *Tetrahedron* 49, 881 (1983); 以及其中所引用的文献。

有关在苯衍生物中引入含硅官能团的方法的最新综述可参见 “The Chemistry of Organosilicon Compounds”, Vols. 1-3, S. Patai, Z. Rappaport 和 Z. Rappaport, Y. Apeloid 编辑, Wiley, 1989, 1998,

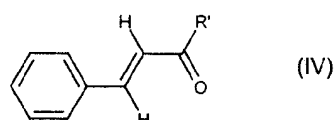
2001 和 “Houben-Weyl Science and Synthesis”, Organometallics Vol. 4, I. Fleming 编辑, G. Thieme 2002.

另一组苯胺包括式 (IIIc) 化合物:

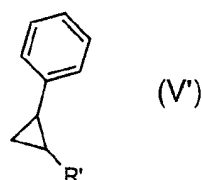


其中 R' 代表 C₂₋₄ 烷基, C₂₋₄ 卤代烷基或 C₃₋₆ 环烷基 (其本身任选被多达 3 个的取代基取代, 各取代基独立选自卤素、C₁₋₃ 烷基、C₁₋₃ 卤代烷基和 C₁₋₄ 卤代烷氧基)。

式 (IIIc) 化合物可通过下列连续反应制备, 首先在 NaOH 或 KOH 的存在下, 在溶剂 (如水或乙醇) 中使苯甲醛与式 CH₃C(O)R' 的酮 [其中 R' 如上面式 (IIIc) 化合物定义] 进行交叉醛醇缩合, 该反应通常在回流条件下进行; 或者在标准条件下使苯甲醛与维悌希试剂反应。所生成的式 (IV) 的 α, β-不饱和酮 [其中 R' 如上面式 (IIIc) 化合物定义]:

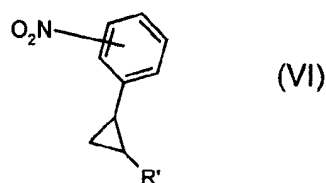


随后可通过先在回流条件下在乙醇中与水合肼反应、然后在 KOH 存在下加热 (150-250°C) (蒸除溶剂) 的方式转化为式 (V') 化合物 [其中 R' 如上面式 (IIIc) 定义]:



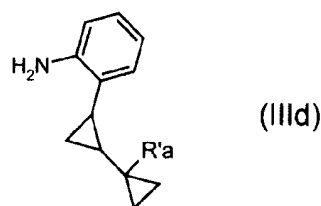
在冷容器中 (-30°C 至 0°C) 用 HNO₃-H₂O 或 HNO₃-乙酸酐进行硝化处理, 得到式 (VI) 硝基苯的邻/对位混合物 [其中 R' 如上面式 (IIIc) 化合物定

义]:

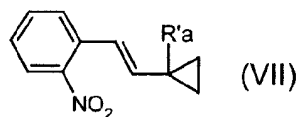


然后分离, 再在溶剂(如甲醇、乙醇或 THF)中室温催化还原(Pt/C/H₂ 或 Ra-Ni/H₂), 得到式(IIIc)化合物。

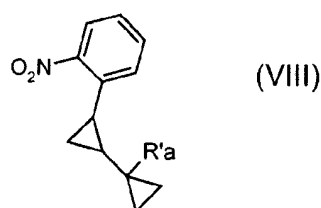
另一方面, 式(IIIId)化合物[其中 R'^a 为氢或甲基]:



的合成可以通过由邻硝基苯甲醛与叶立德进行的维悌希反应为首的系列反应实现, 其中的叶立德是在强碱[如 NaH]存在下由环丙基甲基三苯基溴化磷在溶剂(如 DMSO)中于 0-85°C 反应制得。所生成的式(VII)化合物的 E/Z 混合物:



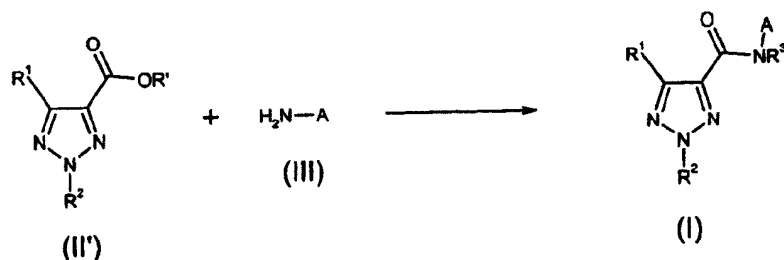
[其中 R'^a 为氢或甲基]可以按下所述转化为式(VIII)化合物:



即对式(VII)化合物的烯基进行 Simmons Smith 反应(Zn-Cu, CH₂I₂, 乙醚作为溶剂), 生成式(VIII)化合物。还原式(VIII)化合物的硝基部分生成式(IIIc)化合物的反应可以采用和上面式(VI)化合物所述的相同条件来进行。

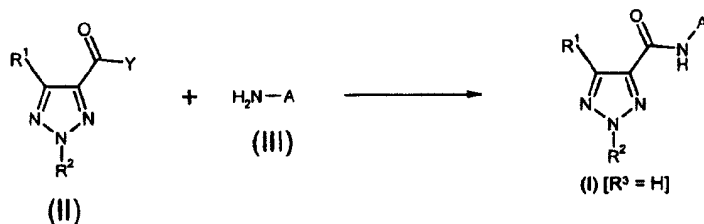
(c) 式(I)化合物的制备

流程 5



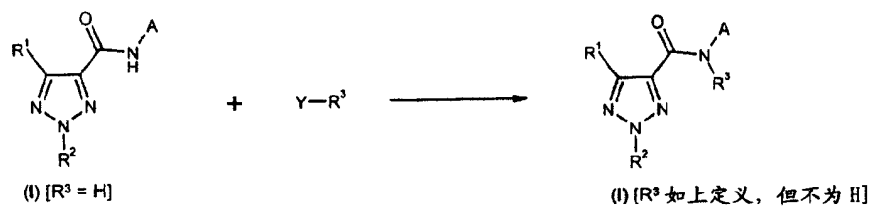
如 J. Wang 等人所述 (*Synlett*, 2001, 1485), 在 -10°C 至室温下, 优选在无水 THF 中, 通过式 (II') 化合物 [其中 R^1 和 R^2 如上定义且 R^1 为 C_{1-5} 烷基] 与式 (III) 苯胺 [其中 A 如上面式 (I) 化合物所定义] 在 $\text{NaN}(\text{TMS})_2$ 存在下反应, 可以合成得到式 (I) 化合物 [其中 A, R^1 和 R^2 如上定义且 R^3 为 H]。

流程 6



另一方面, 式 (I) 化合物 [其中 A, R^1 和 R^2 如上定义且 R^3 为 H] 也可以制备如下: 在活化剂 [例如 BOP-Cl] 和两当量的碱 [例如 NEt_3] 存在下, 使式 (II) 化合物 [其中 R^1 和 R^2 如上定义且 Y 为 OH] 与式 (III) 化合物反应 [其中 A 如上面式 (I) 化合物所定义]; 或者在一当量的碱 [譬如 NEt_3 , NaHCO_3 , KHCO_3 , Na_2CO_3 或 K_2CO_3] 存在下, 使式 (II) 化合物 [其中 Y 为 Cl, Br 或 F] 与式 (III) 化合物在溶剂 [譬如二氯甲烷、乙酸乙酯或 DMF] 中反应, 反应温度优选于 -10 至 30°C 。

流程 7



在碱 [例如 NaH , NEt_3 , NaHCO_3 或 K_2CO_3] 存在下, 于 -10 至 30°C , 使

式(I)化合物[其中 R^3 为氢]与化合物 $Y-R^3$ [其中 R^3 如式(I)所定义, 只是不为氢; 且 Y 为卤素, 优选 Cl, Br 或 I; 或者 Y 为能使 $Y-R^3$ 代表酸酐的基团: 即当 R^3 为 COR' 时, Y 为 $OCOR'$]在适当溶剂[如乙酸乙酯]中或在两相混合物[如二氯甲烷/水混合物]中反应, 可以制备这些式(I)化合物[其中 R^3 如上面式(I)所定义, 但氢除外]。

令人惊奇的是, 现已发现式(I)新化合物在实践中具有非常有用的活性谱, 用于保护植物抵抗由真菌以及细菌和病毒所致的病害。

式(I)化合物可以作为活性成分在农业方面以及相关领域中用于防治植物病虫害。这些新化合物的突出之处在于它们在低施用量下具有优越的活性, 良好的植物耐受性和环境安全性。它们具有非常有用的治愈、预防和内吸性质, 可用于保护多种栽培植物。式(I)化合物可用于抑制或杀灭出现在各种有用作物的植株或植株部分(果实、花、叶、茎、块茎、根)上的有害生物, 同时亦能保护以后生长的植株部分, 例如使其免受植物病原微生物的侵害。

也可以使用式(I)化合物作为拌种剂用于处理植物繁殖材料, 尤其是种子(果实、块茎、谷粒)和植物扦插物(例如稻), 以防御真菌侵染和土壤中存在的植物病原真菌。

此外, 本发明的化合物还可以用于防治例如工业材料(包括木材和与木材有关的工业产品)的保护、食物储存、卫生保健管理等相关领域中的真菌。

例如, 式(I)化合物对下列种类的植物病原真菌有效: 半知菌类(例如葡萄孢属、梨孢属(*Pyricularia*)、长孺孢属、镰孢属、壳针孢属、尾孢属和链格孢属)和担子菌纲(如丝核菌属、驼孢锈菌属、柄锈菌属)。另外, 它们还对子囊菌纲(例如黑星菌属和白粉菌属、叉丝单囊壳属、链核盘菌属、钩丝壳属)以及卵菌纲(如疫霉属、腐霉属、单轴霉属)有效。已经观察到对白粉菌(白粉菌属)具有显著活性。此外, 式 I 新化合物对植物病原细菌和病毒(例如对黄单胞菌属、假单胞菌属、解淀粉欧文氏菌以及烟草花叶病毒)也都有效。

在本发明范围内, 要保护的靶标作物通常包括下列种属植物: 禾谷

类(小麦、大麦、黑麦、燕麦、水稻、玉米、高粱及有关种类);甜菜(糖用甜菜和饲用甜菜);梨果、核果和浆果(苹果、梨、李、桃、杏、樱桃、草莓、树莓和黑莓);豆科植物(菜豆类、扁豆类、豌豆类、大豆类);油科植物(油菜、芥菜、罌粟、橄榄、向日葵、椰子、蓖麻、可可豆、落花生);瓜类植物(南瓜、黄瓜、甜瓜);纤维类植物(棉花、亚麻、大麻、黄麻);桔果(橙、柠檬、葡萄、柑橘);蔬菜类(菠菜、莴苣、芦笋、圆白菜、胡萝卜、洋葱、番茄、马铃薯、红辣椒);樟科(鳄梨、肉桂、樟脑)或诸如烟草、坚果、咖啡、茄、甘蔗、茶、胡椒、葡萄、忽布、香蕉和天然橡胶植物之类植物,以及观赏植物。

式 I 化合物可以以其原有形式、或者(优选)与加工配制领域常用的辅助剂一起使用。为此,它们可以用已知方法很方便地加工成乳油、可涂布性糊剂、可直接喷雾或可稀释的溶液剂、稀乳剂、可湿性粉剂、可溶性粉剂、撒粉剂、颗粒剂、以及微囊剂(如在聚合物中的微囊剂)。与选择组合物类型的情形一样,根据预定目的和主要条件来选择施用方法,例如喷雾、弥雾、喷粉、撒粉、涂敷或浇泼。所述组合物也可以包含其它助剂如稳定剂、消泡剂、粘度调节剂、粘合剂或增稠剂以及肥料、微量营养元素供体或能获得特定效果的其它制剂。

合适的载体和辅助剂可以是固态或液态的,并且是加工配制领域有用的物质,例如天然或再生矿物质、溶剂、分散剂、湿润剂、粘着剂、增稠剂、粘合剂或肥料。这些载体在例如 W0 97/33890 中有记载。

式 (I) 化合物通常以组合物形式使用,并且可以与其它化合物同时或依次施于欲处理的作物区或植物上。这些其它化合物可以是例如肥料或微量营养元素供体或能影响植物生长的其它制剂。它们也可以是选择性的除草剂以及杀虫剂、杀真菌剂、杀细菌剂、杀线虫剂、杀软体动物剂或数种这些制剂的混合物,如果需要,还含有其它载体、表面活性剂或配制加工领域惯用的促施用助剂。

式 I 化合物可以与其它杀真菌剂一起混用,结果在一些情形下能产生意想不到的协同活性。特别优选的混用组分为唑类,例如戊环唑、

BAY 14120、双苯三唑醇、糠菌唑、环唑醇、噁醚唑、烯唑醇、氧唑菌、腈苯唑、喹唑菌酮、氟硅唑、粉唑醇、己唑醇、烯菌灵、酰胺唑、环戊唑醇、环戊唑菌、腈菌唑、稻瘟酯、戊菌唑、啉斑肟、丙氟灵、丙环唑、simeconazole、戊唑醇、氟醚唑、三唑酮、唑菌醇、氟菌唑、戊叉唑菌；嘧啶基甲醇类，例如嘧啶醇、异嘧菌醇、氟苯嘧啶醇；2-氨基嘧啶类，例如磺嘧菌灵、甲菌定、乙菌定；吗啉类，例如吗菌灵、苯锈啉、丁苯吗啉、螺噁茂胺、克啉菌；苯氨基嘧啶类，例如环丙嘧啶、嘧菌胺、二甲嘧菌胺；吡咯类，例如拌种咯、氟噁菌；苯基酰胺类，例如苯霜灵、呋氨丙灵、甲霜灵、R-甲霜灵、甲呋酰胺、噁霜灵；苯并咪唑类，例如苯菌灵、多菌灵、双乙氧咪唑威、麦穗宁、涕必灵；二酰胺类，例如乙菌利、菌核利、异丙定、甲菌利、杀菌利、烯菌酮；酰胺类，例如萎锈灵、呋菌胺、氟酰胺、丙氧灭锈胺、氧化萎锈灵、溴氟唑菌；胍类，例如双胍盐、多果定、iminocytidine；strobilurines，例如腈嘧菌酯、亚胺菌、叉氟苯酰胺、SSF-129、trifloxystrobin、picoxystrobin、BAS 500F（建议名 pyraclostrobin）、BAS 520；二硫代氨基甲酸类，例如福美铁、代森锰锌、代森锰、代森联、甲基代森锌、福美双、代森锌、福美锌；N-卤素甲硫基邻苯二甲酰亚胺类，例如敌菌丹、克菌丹、抑菌灵、氟菌安、灭菌丹、对甲抑菌灵；铜化合物，例如波尔多液、氢氧化铜、王铜、硫酸铜、氧化亚铜、锰铜混剂、喹啉铜；硝基苯酚衍生物，例如敌螨普、异丙消；有机磷衍生物，例如克瘟散、异稻瘟净、稻瘟灵、双氟苯磷、定菌磷、甲基立枯磷；其他，例如 acibenzolar-S-methyl、敌菌灵、benthiavalicarb、灭瘟素、灭螨猛、地茂散、百菌清、cyflufenamid、清菌脲、二氟萘醌、啉菌清、氟硝胺、乙霉威、烯酰吗啉、SYP-L190（建议名 flumorph）、二噻农、ethaboxam、氟唑灵、噁唑酮菌、fenamidone、fenoxanil、三苯锡基、嘧菌脲、氟啉胺、磺菌胺、fenhexamid、藻菌磷、土菌消、iprovalicarb、IKF-916（cyazofamid）、春雷霉素、磺菌威、metrafenone、nicobifen、戊菌隆、四氟苯酞、多氧霉素、噻菌灵、百维灵、咯唑酮、喹氧灵、五氟硝基苯、硫、唑菌嗪、三环唑、噻氧

灵、有效霉素、zoxamide (RH7281)。

施用式(I)化合物或包含至少一种所述化合物的农药组合物的优选方法是叶面施用。施用次数和施用量取决于相应病原引起的侵染危险性。但式 I 化合物也可以通过用液体制剂喷湿植物所在场所,或者通过将固体形式(如颗粒形式)的化合物施于土壤(土施),经土壤通过根部进入植物体内(内吸)。在水稻作物中,这类颗粒剂可以施用到灌水稻田中。式 I 化合物也可以通过用杀菌剂的液体制剂浸渍种子或块茎、或用固体制剂包涂它们而施药于种子(包衣)。

制剂[即包含式 I 化合物和如果需要还含有固体或液体助剂的组合物]使用已知方法制备,典型的制法是将化合物与增量剂如溶剂、固体载体以及任意的表面活性化合物(表面活性剂)致密混合和/或研磨。

农药制剂中通常含有 0.1 - 99%重量、优选 0.1-95%重量的式 I 化合物, 99.9-1%重量、优选 99.8 - 5%重量的固体或液体助剂, 以及 0-25%重量、优选 0.1 - 25%重量的表面活性剂。

有利的施用量通常为每公顷(ha) 5g - 2kg 活性成分(a. i.), 优选 10g - 1 kg a. i./ha, 最优选为 20g - 600g a. i./ha。当用作浸种剂时, 适宜剂量为每千克种子 10mg - 1g 活性物质。

虽然市售产品优选配制成浓缩物形式,但最终用者通常要使用稀释制剂。

上述本发明用下列非限制性实施例详细说明。

实施例 1

本实施例说明化合物 1.115 [2-甲基-5-三氟甲基-2H-1, 2, 3-三唑-4-羧酸甲酯]和化合物 1.113 [2-甲基-5-三氟甲基-2H-1, 2, 3-三唑-4-羧酸]的制备

a) 2-甲基-2H-1, 2, 3-三唑-4, 5-二羧酸二甲酯和 1-甲基-1H-1, 2, 3-三唑-4, 5-二羧酸二甲酯的制备

使 1, 2, 3-三唑-4, 5-二羧酸二甲酯(Y. Tanaka 等. Tetrahedron 29, 3271 (1973)) (74.06g; 0.40 mol)、碳酸钾(110.57g, 0.80 mol)和

碘甲烷 (73.81g; 0.52 mol) 在乙腈 (1000 ml) 中于 40°C 反应 20 分钟, 然后于室温反应 20 小时。将混合物倾入冰水中, 用乙醚提取, 得到粗产物 (70.66g), 为不同异构体的混合物。经硅胶分离 (乙酸乙酯-己烷; 2:3) 得到 36.51g (46%) 2-甲基-2H-1,2,3-三唑-4,5-二羧酸二甲酯 [m. p. 86-87°C; $^1\text{H-NMR}$ (300 MHz, DMSO-d_6), δ (ppm): 4.27 (s, 3H), 3.88 (s, 6H)] 和 26.92g (34%) 1-甲基-1H-1,2,3-三唑-4,5-二羧酸二甲酯 [m. p. 63-64°C; $^1\text{H-NMR}$ (300MHz, DMSO-d_6), δ (ppm): 4.19 (s, 3H), 3.93 (s, 3H), 3.87 (s, 3H)]。

b) 2-甲基-2H-1,2,3-三唑-4,5-二羧酸单甲酯的制备

向 2-甲基-2H-1,2,3-三唑-4,5-二羧酸二甲酯 (1.2g; 6 mmol) 在 30ml 甲醇中的溶液内加入 358mg KOH (检定 86%; 5.5mmol)。于回流温度下加热混合物 48 小时。蒸发溶剂, 残留物然后吸收到水中, 用乙酸乙酯提取 (3 次)。合并的有机相含有未反应的起始原料。水相用 2N HCl 酸化 (pH 2-3), 继用乙酸乙酯提取 (3 次)。合并提取物, 干燥 (无水硫酸镁), 蒸发至干, 得到 803mg (72%) 需要化合物 (m. p. 125-126 °C; $^1\text{H-NMR}$ (300 MHz, DMSO-d_6), δ (ppm): 13.7 (br. s, 1H, 可与 D_2O 发生交换), 4.24 (s, 3H), 3.84 (s, 3H)。

c) 2-甲基-5-三氟甲基-2H-1,2,3-三唑-4-羧酸甲酯 [化合物 1.15] 的制备

将 2-甲基-2H-1,2,3-三唑-4,5-二羧酸单甲酯 (2.9g; 15.66mmol) 和二氟甲烷 (160 ml) 放入 0.3 升 Monel 高压釜中。在惰性氛围和干冰冷却下, 于 -50°C 通入 HF 气体 (27g), 接着通入气体 SF_4 (蒸馏过, 6.9g; 64.23mol)。加热高压釜到 80°C 保持 6 小时。最大压力等于 9.8 巴。冷却到室温后将反应混合物倒入冰-二氟甲烷中, 用碳酸氢钠水溶液调节到 pH 7。用二氟甲烷提取 (3 次), 硫酸钠干燥, 减压蒸发, 得到粗产物。在 3 毫巴和约 180°C 下通过 Kugelrohr-蒸馏纯化, 得到 2.8g (85%) 化合物 1.15, 为淡黄色液体。

$^1\text{H-NMR}$ (300 MHz, CDCl_3), δ (ppm): 4.29 (s, 3H), 3.97 (s, 3H);

$^{19}\text{F-NMR}$ (235 MHz, CDCl_3), δ (ppm): -61.7.

$^{13}\text{C-NMR}$ (125 MHz, CDCl_3), δ (ppm): 159.05, 139.65 (q, $J_{C(S)F} = 40.8$ Hz), 137.20, 119.63 (q, $J_{CF} = 269.4$ Hz, CF_3), 52.96, 43.01.

d) 2-甲基-5-三氟甲基-2H-1,2,3-三唑-4-羧酸 [化合物 1.13] 的制备

于回流温度加热 2-甲基-5-三氟甲基-2H-1,2,3-三唑-4-羧酸甲酯 [化合物 1.15] (2.09g; 0.01 mol) 和 KOH (86%; 0.783g; 1.2 eq.) 在 THF (50ml) 中的溶液 3.5 小时。蒸发所得溶液, 将残留物溶于水中, 用 HCl (1M) 酸化至 pH 1-2。蒸发该水溶液, 接着在乙酸乙酯中连续提取 20 小时, 得到化合物 1.13 (2.11g; 100%), 为结晶固体。

$^1\text{H-NMR}$ (400 MHz, DMSO-d_6), δ (ppm): 4.19 (s, 3H).

$^{19}\text{F-NMR}$ (235 MHz, DMSO-d_6), δ (ppm): -59.3.

$^{13}\text{C-NMR}$ (125 MHz, DMSO-d_6), δ (ppm): 160.74, 144.08, 135.81 (q, $J_{C(S)F} = 38.1$ Hz), 120.63 (q, $J_{CF} = 268.4$ Hz, CF_3), 42.20.

实施例 2

本实施例说明化合物 1.03 [2-甲基-5-二氟甲基-2H-1,2,3-三唑-5-羧酸甲酯] 的制备。

a) 5-氟羰基-2-甲基-2H-1,2,3-三唑-4-羧酸甲酯的制备

于 20°C, 使 2-甲基-1,2,3-三唑-4,5-二羧酸甲酯 (2.3g; 0.011 mol) 与草酰氯 (1.46ml; 0.014 mol) 和 2 滴 DMF 在二氯甲烷 (20 ml) 中反应。当剧烈反应平息后, 升温回流 15 小时。蒸发混合物至干, 得到 2.7g 固体酰氯。 $^1\text{H-NMR}$ (300 MHz, CDCl_3), δ (ppm): 4.48 (s, H), 4.0 (s, 3H).

b) 5-甲酰基-2-甲基-2H-1,2,3-三唑-4-羧酸甲酯的制备

向新制备的 5-氟羰基-2-甲基-2H-1,2,3-三唑-4-羧酸甲酯 (2.7g;

约 13 mmol) 的 THF (270 ml) 溶液中加入乙基-二异丙基-胺 (1.88g; 1.1eq)。在 2.7g 10% Pd/C 存在下, 于 0-5℃ 常压氢化混合物 2.5 小时, 随后滤除催化剂。蒸发所得清亮溶液, 得到固体粗产物, 再溶于乙酸乙酯, 与硅胶一起搅拌两分钟。过滤, 蒸发, 得到 1.77g (84%) 纯产物, 为黄白色结晶 [m. p. 107-108℃; $^1\text{H-NMR}$ (300 MHz, CDCl_3), δ (ppm): 10.43 (s, 1H), 4.33 (s, 3H), 4.01 (s, 3H)]。

c) 制备 2-甲基-5-二氟甲基-2H-1, 2, 3-三唑-5-羧酸甲酯 [化合物 1.03]

在室温至 50℃ 下, 使 5-甲酰基-2-甲基-2H-1, 2, 3-三唑-4-羧酸甲酯 (600mg; 3.5mmol) 在 0.5ml CHCl_3 中与 (双(2-甲氧基乙基)氨基)三氟化硫 (1350mg; 6.1mmol) 反应 6 天。生成的橙色溶液用 6ml 饱和碳酸氢钠水溶液小心猝灭 (剧烈反应), 继用乙酸乙酯提取 (两次)。合并的有机相用碳酸氢钠水溶液洗涤, 无水硫酸镁干燥, 蒸发得到 351mg (52%) 无色结晶。

$^1\text{H-NMR}$ (300MHz, CDCl_3), δ (ppm): 7.15 (t, $J_{\text{HF}} = 53.5$ Hz, 1H, H-CF₂), 4.30 (s, 3H), 3.98 (s, 3H); $^{19}\text{F-NMR}$ (235 MHz, CDCl_3), δ (ppm): -116.1; $^{13}\text{C-NMR}$ (125MHz, CDCl_3), δ (ppm): 160.0, 143.6 (t, $J_{\text{C(S)F}} = 25.6$ Hz), 137.2, 108.0 (t, $J_{\text{(CF)}} = 237.8$ Hz, CHF₂), 52.6, 42.7]

实施例 3

本实施例说明化合物 1.50 [2-甲基-5-氟甲基-2H-1, 2, 3-三唑-5-羧酸甲酯] 的制备。

a) 5-羟甲基-2-甲基-2H-1, 2, 3-三唑-4-羧酸甲酯的制备

室温、搅拌下, 将 2.6g (13.3mmol) 5-甲酰基-2-甲基-2H-1, 2, 3-三唑-4-羧酸甲酯 (参见实施例 2a) 在甲醇 (100 ml) 中用 NaBH_4 (601mg) 处理 1 小时。反应混合物用饱和氯化铵水溶液猝灭, 用乙酸乙酯提取, 硫酸钠干燥, 蒸发得到油状粗产物。经硅胶纯化 (乙酸乙酯: 己烷 (2:1)), 得到 1.85g (81%) 结晶产物, m. p. 112-113℃。

$^1\text{H-NMR}$ (300 MHz, CDCl_3), δ (ppm): 4.86 (d, $J=6.9\text{Hz}$, 1H), 4.22 (s, 3H), 3.98 (s, 3H), 3.53 (t; $J=6.9\text{Hz}$, 可与 D_2O 发生交换).

b) 制备 2-甲基-5-氟甲基-2H-1,2,3-三唑-5-羧酸甲酯 [化合物 1.50]

于 -40°C , 使 5-羟甲基-2-甲基-2H-1,2,3-三唑-4-羧酸甲酯 (200mg; 1.1mmol) 的二氯甲烷 (15ml) 溶液与 0.26ml 二乙基氨基三氟化硫 (2mmol) 一起反应 15 分钟, 接着室温再反应 15 小时。蒸发之后, 将粗产物通过硅胶纯化 (乙酸乙酯: 己烷 (3:1)), 得到 181mg (95%) 所需产物, m. p. $64-66^\circ\text{C}$.

$^1\text{H-NMR}$ (300MHz, CDCl_3), δ (ppm): 5.66 (d, $J_{\text{HF}} = 47.5\text{ Hz}$, 2H, $\text{H}_2\text{-CF}$), 4.26 (s, 3H), 3.96 (s, 3H).

$^{19}\text{F-NMR}$ (235 MHz, CDCl_3), δ (ppm): -214 .

$^{13}\text{C-NMR}$ (125MHz, CDCl_3), δ (ppm): 161.6, 145.86 (d, $J_{\text{C(F)}} = 18.7\text{ Hz}$), 137.09, 74.82 (d, $J_{\text{CF}} = 166.6\text{ Hz}$, CH_2F), 52.2, 42.3.

实施例 4

本实施例说明化合物 3.017 [5-二氟甲基-2-甲基-2H-1,2,3-三唑-4-羧酸 (4'-氟-联苯-2-基)-酰胺] 的制备。

0°C 、1.5 分钟内, 利用注射器向 2-甲基-5-二氟甲基-2H-1,2,3-三唑-5-羧酸甲酯 (300mg; 1.57mmol) 和 4'-氟-联苯-2-胺 (320mg; 1.57mmol) 在 THF (3ml) 中的溶液内加入双 (三甲基甲硅烷基) 氨基钠 (0.88ml, 2M 的 THF 溶液; 1.76mmol; 1.12 eq.)。 0°C 搅拌反应混合物 15 分钟, 接着在室温下搅拌 22 小时。随后倒入饱和氯化铵冷溶液中, 用乙酸乙酯提取。盐水洗涤之后进行干燥 (无水硫酸镁), 蒸发至干, 所得固体物用己烷研制。过滤无色结晶产物并加以干燥: 300mg (53%) [m. p. $155-156^\circ\text{C}$; $^1\text{H-NMR}$ (300 MHz, CDCl_3), δ (ppm): 8.5 (br, 可与 D_2O 发生交换, 1H), 8.4 (d, 1H), 7.5-7.2 (m, 7H), 7.38 (t, $J_{\text{HF}}=52.5\text{ Hz}$, 1H, CHF_2), 4.2 (s, 3H), LC-MS: 363 (M+H)].

实施例 5

本实施例说明化合物 2.219 [2-甲基-5-三氟甲基-2H-1,2,3-三唑-4-羧酸[2-(1,3-二甲基-丁基)-苯基]-酰胺]的制备。

室温下,利用注射器向 2-甲基-5-三氟甲基-2H-1,2,3-三唑-4-羧酸甲酯(150mg; 0.75mmol)和 2-(1,3-二甲基-丁基)-苯胺(133mg; 0.75mmol)在 1.5 ml THF 中的溶液内加入双(三甲基甲硅烷基)-氨基钠(0.638ml, 2M 的 THF 溶液; 1.7 eq)。搅拌反应混合物 20 小时,然后倒入饱和氯化铵冷溶液中,用乙酸乙酯提取。盐水洗涤之后进行干燥(无水硫酸镁),蒸发至干得到粗产物,进而通过硅胶纯化(环己烷-乙酸乙酯(18:1))。在己烷中研制所得结晶产物,过滤,真空干燥,得到 130mg (49%)的化合物 2.219 [mp 94.6-95.4°C; ¹H-NMR (300 MHz, CDCl₃), δ (ppm): 8.5 (br. s, 可与 D₂O 发生交换, 1H), 8.0 (d, 1H), 7.3-7.15 (m, 3H), 4.33 (s, 3H), 3.0 (m, 1H), 1.55-1.35 (m, 3H), 1.26 (d, 3H), 0.9 (2d, 6H); LC-MS: 355.6 (M+H)]。

实施例 6

本实施例说明化合物 26.014 [1,8-二甲基-11-氧杂-三环[6.2.1.0^{2.7}]十一碳-2,4,6-三烯-3-基-胺]的制备。

室温,在 RaNi (1.1g)存在下氢化 1,4-二甲基-5-硝基-1,4-二氢-1,4-环氧萘 (5.49g; 25.27mmol) (参见 T.Nishiyama 等, *Rikagaku-hen*, 28, 37-43 (2000))在 55ml THF 中的溶液。18 小时后氢气吸收量为 2.23 升(97%)。滤除催化剂,然后蒸发滤液,再吸收到乙醚中,用碳酸氢钠水溶液洗涤,干燥(硫酸钠)得到 4.60g 油状粗产物。用己烷研制,总共得到 4.5g (94%)含有痕量乙醚的淡红色结晶产物, m. p. 92-93°C。

¹H-NMR (300 MHz, CDCl₃), δ (ppm): 7.05 (t, 1H), 6.7 (t, 2H), 约 5 (br, 可与 D₂O 发生交换, 2H), 2.0 (s, 3H), 1.9 (m, 2H), 1.8 (s, 3H), 1.7 (m, 1H), 1.5 (m, 1H)。

实施例 7

本实施例说明化合物 26.001 [1,8-二甲基-11-氧杂-三环 [6.2.1.0^{2.7}]十一碳-2,4,6,9-四烯-3-基-胺]的制备。

于 47°C, 向 1,4-二甲基-5-硝基-1,4-二氢-1,4-环氧萘 (4.22g; 19.43mmol) (参见实施例 6) 的乙醇 (60ml) 溶液中加入氯化铵 (2.08g) 的水 (5.2ml) 溶液。在剧烈搅拌下, 于 5 分钟内分数批加入锌粉 (9.10g, 0.14mol)。加热回流该悬浮液 5.5 小时, 然后通过 Hyflo™ 过滤, 得到清亮透明的黄色滤液。蒸发之后, 粗产物的量为 4.57g, 为粘性油状物。硅胶柱层析 (乙酸乙酯-己烷 (1:4)) 得到 1.24g (34%) 需要产物, 为微棕色结晶, m. p. 92-96°C。

¹H-NMR (300 MHz, CDCl₃), δ (ppm): 6.85 和 6.7 (两个多重峰, 2x2H), 6.47 (t, 1H), 约 5-3 (br, 可与 D₂O 发生交换, 2H), 2.07 (s, 3H), 1.85 (s, 3H)。

式 (I) 化合物的制剂实施例

制备式 I 化合物的制剂如乳油、溶液、颗粒剂、粉剂和可湿性溶剂的加工方法见 WO 97/33890 中所述。

生物实施例: 杀真菌作用

实施例 B-1: 抗小麦叶锈病 (*Puccinia recondita*) 作用

在喷雾室内, 用试验化合物的加工制剂 (0.02% 活性成分) 处理 1 周龄 “Arina” 品种小麦植株。施药 1 天后, 向试验植株喷洒孢子悬浮液 (1x10⁵ 夏孢子/ml) 对小麦植株进行接种。在 20°C 和 95% 相对湿度 (r. h.) 下培育植株 2 天后, 再在温室中于 20°C 和 60% r. h. 下培育 8 天。接种 10 天后评价病害发生情况。

下列化合物基本上能完全防止真菌的侵染 (0-5% 侵染率): 化合物 2.273, 3.219, 3.273, 3.321, 8.189, 9.189, 20.017, 20.022, 21.017 和 21.022。

实施例 B-2: 抗苹果梢白粉病 (*Podosphaera leucotricha*) 作用

在喷雾室内, 用试验化合物的加工制剂 (0.02%活性成分) 处理 5 周龄 “McIntosh” 品种葡萄幼苗。施药 1 天后, 通过在试验植枝上方摇动侵染苹果白粉病的枝条对苹果植株进行接种。在 14/10 小时 (明/暗) 光照条件下于 22℃ 和 60% 相对湿度 (r. h.) 下培育 12 天后, 评价病害发生情况。

化合物 2.005, 3.017, 3.219 和 9.189 均显示强大效力 (<20% 侵染率)。

实施例 B-3: 抗苹果黑星病 (*Venturia inaequalis*) 作用

在喷雾室内, 用试验化合物的加工制剂 (0.02%活性成分) 处理 4 周龄 “McIntosh” 品种苹果幼苗。施药 1 天后, 向试验植株喷洒孢子悬浮液 (4×10^5 分生孢子/ml) 对苹果植株进行接种。在 21℃ 和 95% r. h. 下培育植株 4 天后, 再在温室中于 21℃ 和 60% r. h. 下培育 4 天。经进一步在 21℃ 和 95% r. h. 下培育 4 天后, 评价病害发生情况。

化合物 3.017, 3.219 和 9.189 均显示强大效力 (<20% 侵染率)。

实施例 B-4: 抗大麦白粉病 (*Erysiphe graminis*) 作用

在喷雾室内, 用试验化合物的加工制剂 (0.02%活性成分) 处理 1 周龄 “Regina” 品种大麦植株。施药 1 天后, 通过在试验植枝上方摇动侵染白粉病的植株对大麦植株进行接种。在 20℃/18℃ (昼/夜) 和 60% r. h. 下温室培育 6 天后, 评价病害发生情况。

化合物 2.017, 2.029, 2.273, 3.005, 3.017, 3.029, 3.067, 3.070, 3.219, 3.273, 3.321, 3.407, 8.189, 9.189 和 21.017 均显示强大效力 (<20% 侵染率)。

实施例 B-5: 抗葡萄灰霉病 (*Botrytis cinerea*) 作用

在喷雾室内, 用试验化合物的加工制剂 (0.02%活性成分) 处理 5 周龄 “Gutedel” 品种葡萄幼苗。施药 2 天后, 向试验植株喷洒孢子悬浮

液 (1×10^6 分生孢子/ml) 对葡萄植株进行接种。在温室中于 21°C 和 95% r. h. 下培育 4 天后, 评价病害发生情况。

化合物 2.029, 3.017 和 3.219 均显示强大效力 (<50% 病害发生率)。

实施例 B-6: 抗番茄灰霉病 (*Botrytis cinerea*) 作用

在喷雾室内, 用试验化合物的加工制剂 (0.02% 活性成分) 处理 4 周龄 “Roter Gnom” 品种番茄植株。施药 2 天后, 向试验植株喷洒孢子悬浮液 (1×10^5 分生孢子/ml) 对番茄植株进行接种。在温室中于 20°C 和 95% r. h. 下培育 4 天后, 评价病害发生情况。

化合物 2.029, 3.005, 3.029, 3.067, 3.070, 3.219, 3.273, 9.189 和 20.017 均显示良好效力 (<50% 病害发生率)。

实施例 B-7: 抗小麦叶枯病 (*Septoria nodorum*) 作用

在喷雾室内, 用试验化合物的加工制剂 (0.02% 活性成分) 处理 1 周龄 “Arina” 品种小麦植株。施药 1 天后, 向试验植株喷洒孢子悬浮液 (5×10^5 分生孢子/ml) 对小麦植株进行接种。在 20°C 和 95% r. h. 下培育植株 1 天后, 再在温室中于 20°C 和 60% r. h. 下培育 10 天。接种 11 天后评价病害发生情况。

化合物 3.273 和 9.189 在本试验中均显示良好活性 (<50% 病害发生率)。

实施例 B-8: 抗大麦网斑病 (*Helminthosporium teres*) 作用

在喷雾室内, 用试验化合物的加工制剂 (0.02% 活性成分) 处理 1 周龄 “Regina” 品种大麦植株。施药两天后, 向试验植株喷洒孢子悬浮液 (3×10^4 分生孢子/ml) 对大麦植株进行接种。在温室中于 20°C 和 95% r. h. 下培育 4 天后, 评价病害发生情况。

化合物 2.005, 2.017, 2.029, 2.067, 2.070, 2.273, 3.005, 3.017, 3.029, 3.067, 3.070, 3.219, 3.407, 9.189 和 21.017 在本试验中均显示良好活性 (<20% 病害发生率)。

实施例 B-9: 抗番茄早疫病 (*Alternaria solani*) 作用

在喷雾室内, 用试验化合物的加工制剂 (0.02%活性成分) 处理 4 周龄 “Roter Gnom” 品种番茄植株。施药两天后, 向试验植株喷洒孢子悬浮液 (2×10^5 分生孢子/ml) 对番茄植株进行接种。在生长室中于 20°C 和 95% r. h. 下培育 3 天后, 评价病害发生情况。

化合物 2.005, 2.029, 3.005, 3.017, 3.029 和 9.189 在本试验中均显示良好活性 (<20%病害发生率)。

实施例 B-10: 抗葡萄白粉病 (*Uncinula necator*) 作用

在喷雾室内, 用试验化合物的加工制剂 (0.02%活性成分) 处理 5 周龄 “Gutedel” 品种葡萄幼苗。施药 1 天后, 通过在试验植株上方摇动侵染葡萄白粉病的植株对葡萄幼苗进行接种。按照 14/10 小时 (明/暗) 光照方案于 26°C 和 60% r. h. 培育 7 天后, 评价病害发生情况。

化合物 3.017, 3.219 和 9.189 在本试验中均显示良好活性 (<20%病害发生率)。