(19)日本国特許庁(JP)

(12)特許公報(B2)

(11)特許番号
特許第7236598号
(P7236598)

(45)発行日　令和5年3月9日(2023.3.9)

(24)登録日　令和5年3月1日(2023.3.1)

(51)国際特許分類

C07C 41/16 (2006.01)	C07C	41/16
C07C 43/205 (2006.01)	C07C	43/205
C07C 235/42 (2006.01)	C07C	235/42
C07C 231/12 (2006.01)	C07C	231/12
C07C 231/24 (2006.01)	C07C	231/24

FI
A

請求項の数　19　（全571頁）　最終頁に続く

(21)出願番号　特願2022-548060(P2022-548060)
(86)(22)出願日　令和4年1月6日(2022.1.6)
(86)国際出願番号　PCT/JP2022/003468
(87)国際公開番号　WO2022/149618
(87)国際公開日　令和4年7月14日(2022.7.14)
審査請求日　令和4年8月5日(2022.8.5)
(31)優先権主張番号　特願2021-1134(P2021-1134)
(32)優先日　令和3年1月6日(2021.1.6)
(33)優先権主張国・地域又は機関
日本国(JP)
早期審査対象出願

(73)特許権者　000003311
中外製薬株式会社
東京都北区浮間５丁目５番１号
(74)代理人　100118902
弁理士　山本 修
(74)代理人　100106208
弁理士　宮前 徹
(74)代理人　100196508
弁理士　松尾 淳一
(74)代理人　100122644
弁理士　寺地 拓己
(72)発明者　早瀬 忠克
静岡県御殿場市駒門１丁目１３５番地
中外製薬株式会社内
(72)発明者　土屋 智史

最終頁に続く

(54)【発明の名称】　酸性官能基のアルキル化方法

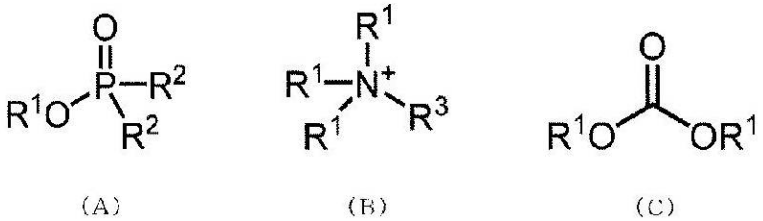
(57)【特許請求の範囲】

【請求項１】

アルキル化された酸性官能基を有する化合物の製造方法であって

酸性官能基を有する２種類以上の化合物を基質として含む混合物中で、塩基の存在下、式Ａ、式Ｂ、または式Ｃ：

【化１】



（A）　（B）　（C）

[式中、R^1はＸより選択される１以上の置換基により置換されていてもよいC_{1-6}アルキルから独立して選択され；

Ｘは、C_{3-6}シクロアルキル、C_{2-7}アルケニル、C_{2-7}アルキニル、およびC_{6-10}アリールから独立して選択され、ここで前記アリールは、ハロゲン原子、C_{1-4}アルキル、またはC_{1-4}アルコキシから独立して選択される１以上の置換基により置換されていてもよく；

R^2は－OR^1およびアリールから独立して選択され、ここで前記アリールは、ハロゲン原子、C_{1-4}アルキルおよびC_{1-4}アルコキシから独立して選択される１以上の置換基により置換されていてもよく；

R^3はＸより選択される１以上の置換基により置換されていてもよいC_{1-6}アルキル、およびアリールから独立して選択され、ここで前記アリールは、ハロゲン原子、C_{1-4}アルキル、およびC_{1-4}アルコキシから独立して選択される１以上の置換基により置換されていてもよい］

により表される化合物から選択されるアルキル化剤と前記化合物を反応させて、酸性官能基をアルキル化することを含み、前記塩基が、アセトニトリル中での共役酸のｐＫａが２３～３４である有機塩基、および水中での共役酸のｐＫａが９～２０である無機塩基からなる群より選択される塩基であり、

酸性官能基がカルボキシル基または芳香環に置換した水酸基である、前記方法。

【請求項２】

アルキル化の後、不純物を除去することを含む、請求項１に記載の方法。

【請求項３】

塩基のジメチルホルムアミド（ＤＭＦ）への溶解度が２５℃で１２０ｍｇ／ｍＬ以上である、請求項１または２に記載の方法。

【請求項４】

塩基が、有機塩基より選択される、請求項１～３のいずれか１項に記載の方法。

【請求項５】

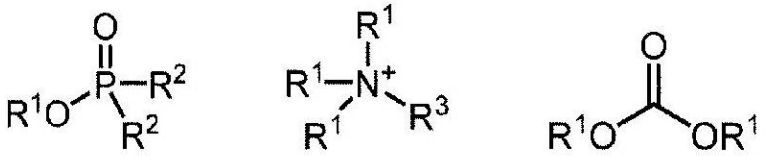
塩基が、ホスファゼン類より選択される、請求項１～４のいずれか１項に記載の方法。

【請求項６】

アルコキシ置換芳香環を有する化合物を製造する方法であって

芳香環に置換した水酸基を含む化合物を、塩基の存在下、式Ａ、式Ｂ、または式Ｃ：

【化２】



（A）　（B）　（C）

［式中、R^1はＸより選択される１以上の置換基により置換されていてもよいC_{1-6}アルキルから独立して選択され；

Ｘは、C_{3-6}シクロアルキル、C_{2-7}アルケニル、C_{2-7}アルキニル、およびC_{6-10}アリールから独立して選択され、ここで前記アリールは、ハロゲン原子、C_{1-4}アルキル、またはC_{1-4}アルコキシから独立して選択される１以上の置換基により置換されていてもよく；

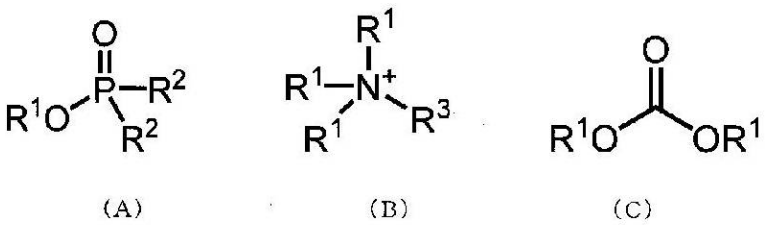
R^2は－OR^1およびアリールから独立して選択され、ここで前記アリールは、ハロゲン原子、C_{1-4}アルキルおよびC_{1-4}アルコキシから独立して選択される１以上の置換基により置換されていてもよく；

R^3はＸより選択される１以上の置換基により置換されていてもよいC_{1-6}アルキル、およびアリールから独立して選択され、ここで前記アリールは、ハロゲン原子、C_{1-4}アルキル、およびC_{1-4}アルコキシから独立して選択される１以上の置換基により置換されていてもよい］

により表される化合物から選択されるアルキル化剤と前記化合物を反応させて、芳香環に置換した水酸基をアルキル化することを含み、前記塩基が、ホスファゼン類から選択される、前記方法。

【請求項７】

エステル化合物を製造する方法であって
カルボキシル基を含む化合物を、塩基の存在下、式Ａ、式Ｂ、または式Ｃ：
【化３】



（Ａ）　（Ｂ）　（Ｃ）

［式中、R^1はＸより選択される１以上の置換基により置換されていてもよいC_{1-6}アルキルから独立して選択され；
Ｘは、C_{3-6}シクロアルキル、C_{2-7}アルケニル、C_{2-7}アルキニル、およびC_{6-10}アリールから独立して選択され、ここで前記アリールは、ハロゲン原子、C_{1-4}アルキル、またはC_{1-4}アルコキシから独立して選択される１以上の置換基により置換されていてもよく；
R^2は－ＯR^1およびアリールから独立して選択され、ここで前記アリールは、ハロゲン原子、C_{1-4}アルキルおよびC_{1-4}アルコキシから独立して選択される１以上の置換基により置換されていてもよく；
R^3はＸより選択される１以上の置換基により置換されていてもよいC_{1-6}アルキル、およびアリールから独立して選択され、ここで前記アリールは、ハロゲン原子、C_{1-4}アルキル、およびC_{1-4}アルコキシから独立して選択される１以上の置換基により置換されていてもよい］
により表される化合物から選択されるアルキル化剤と前記化合物を反応させて、カルボキシル基をアルキル化することを含み、前記塩基が、ホスファゼン類から選択される、前記方法。
【請求項８】
アルキル化により生じるアルコキシまたはエステルが－CH_2－Ｏ－の構造を有する、請求項６または７に記載の方法。
【請求項９】
アルキル化により生じるアルコキシがメトキシ、エトキシまたはアリルオキシであるか、アルキル化により生じるエステルがメチルエステル、エチルエステルまたはアリルエステルである、請求項６～８のいずれか１項に記載の方法。
【請求項１０】
アルキル化剤が、請求項１に記載の式ＡおよびＢで表されるアルキル化剤からなる群より選択される、請求項１～９のいずれか１項に記載の方法。
【請求項１１】
アルキル化剤が、リン酸トリメチル、リン酸トリエチルおよびリン酸トリアリルからなる群より選択される、請求項１～１０のいずれか１項に記載の方法。
【請求項１２】
塩基が、１－エチル－２，２，４，４，４－ペンタキス（ジメチルアミノ）－２λ^5，４λ^5－カテナジ（ホスファゼン）（Ｐ２Ｅｔ）、１－ｔｅｒｔ－ブチル－２，２，４，４，４－ペンタキス（ジメチルアミノ）－２λ^5，４λ^5－カテナジ（ホスファゼン）（Ｐ２ｔＢｕ）、ｔｅｒｔ－ブチルイミノ－トリス（ジメチルアミノ）ホスホラン（Ｐ１ｔＢｕ）、２－ｔｅｒｔ－ブチルイミノ－２－ジエチルアミノ－１，３－ジメチルパーヒドロ－１，３，２－ジアザホスホリン（ＢＥＭＰ）、ｔｅｒｔ－ブチルイミノ－トリ（ピロリジノ）ホスホラン（ＢＴＰＰ）からなる群より選択される少なくとも一つである、請求項１～１１のいずれか１項に記載の方法。
【請求項１３】

基質が酸性官能基としてフェノール性水酸基とアルキル化されうる窒素原子を含む１以上の化合物を含み、該基質の中で最もアルキル化が進行する窒素原子を有する化合物において、フェノール性水酸基のアルキル化（アルキル化Ａ）と窒素原子のアルキル化（アルキル化Ｃ）による生成物の生成比（アルキル化Ａ／アルキル化Ｃ）が１．５以上である、請求項１～６および８～１２のいずれか１項に記載の方法。

【請求項１４】

基質が酸性官能基としてカルボキシル基とアルキル化されうる窒素原子を含む１以上の化合物を含み、該基質の中で最もアルキル化が進行する窒素原子を有する化合物において、カルボキシル基のアルキル化（アルキル化Ｄ）と窒素原子のアルキル化（アルキル化Ｅ）による生成物の生成比（アルキル化Ｄ／アルキル化Ｅ）が１．５以上である、請求項１～５および７～１２のいずれか１項に記載の方法。

【請求項１５】

アルキル化Ｃまたはアルキル化Ｅが、ジアリールアミン、アルキルアリールアミン、アニリン、３級アミン、アミド、スルホンアミド、アシルスルホンアミド、およびピリジンから選択される窒素含有構造に含まれる窒素原子のアルキル化である、請求項１３または１４に記載の方法。

【請求項１６】

化合物ライブラリを構成する化合物の製造方法であって、請求項１～１５のいずれか１項に記載の方法によりアルキル化された化合物を製造することを含む、前記方法。

【請求項１７】

１０以上の化合物を含む混合物として製造される、請求項１～１６のいずれか１項に記載の方法。

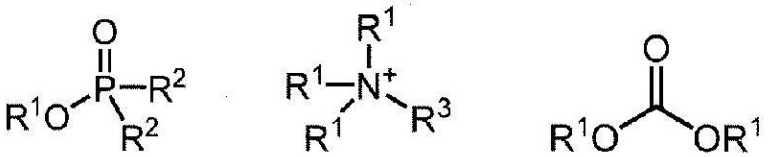
【請求項１８】

固相担体からの切り出しにより酸性官能基を有する化合物を調製することをさらに含む、請求項１～１７のいずれか１項に記載の方法。

【請求項１９】

式Ａ、式Ｂ、または式Ｃ：

【化４】



（A）　（B）　（C）

［式中、R^1はＸより選択される１以上の置換基により置換されていてもよいC_{1-6}アルキルから独立して選択され；

Ｘは、C_{3-6}シクロアルキル、C_{2-7}アルケニル、C_{2-7}アルキニル、およびC_{6-10}アリールから独立して選択され、ここで前記アリールは、ハロゲン原子、C_{1-4}アルキル、またはC_{1-4}アルコキシから独立して選択される１以上の置換基により置換されていてもよく；

R^2は－ＯR^1およびアリールから独立して選択され、ここで前記アリールは、ハロゲン原子、C_{1-4}アルキルおよびC_{1-4}アルコキシから独立して選択される１以上の置換基により置換されていてもよく；

R^3はＸより選択される１以上の置換基により置換されていてもよいC_{1-6}アルキル、およびアリールから独立して選択され、ここで前記アリールは、ハロゲン原子、C_{1-4}アルキル、およびC_{1-4}アルコキシから独立して選択される１以上の置換基により置換されていてもよい］

により表される化合物を含有する、アルキル化された化合物の製造方法において使用する

ためのアルキル化剤であって、該方法が請求項１～１８のいずれか１項に記載の方法である、前記アルキル化剤。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【０００１】

本発明は、酸性官能基のアルキル化方法に関する。さらに本発明は、酸性官能基をアルキル化する工程を含む化合物の製造方法に関する。

【背景技術】

【０００２】

酸性官能基のアルキル化は化合物の合成において広く用いられる反応である。酸性官能基として、例えばフェノール性水酸基をアルキル化する場合において、アルキル化剤としてヨードメタン、塩基として炭酸カリウムを使用する方法が知られているが（非特許文献１）、目的のフェノール性水酸基のアルキル化に加えて、副反応として３級アミンがアルキル化される（非特許文献２）。

【０００３】

フェノール性水酸基を選択的にアルキル化するために、より反応性の低いアルキル化剤、例えば、トリアルキルリン酸エステルをアルキル化剤として用いる方法や、テトラアルキルアンモニウム塩をアルキル化剤として用いる方法が挙げられる。これらの先行技術では、塩基として炭酸カリウム（特許文献１）や、水酸化カリウム（特許文献２）などの無機塩基を用いている。

【０００４】

酸性官能基としてカルボキシ基をアルキル化（すなわちエステル化）する場合において、例えばアルコール中に酸触媒で高温に加熱し脱水縮合する方法が知られる。より低温下で行う方法として、アルキル化剤としてヨードメタン、塩基として炭酸カリウムを用いる方法が知られている（非特許文献３）。しかしながら、フェノール性水酸基のアルキル化と同様、３級アミンがアルキル化される反応条件であることも知られている（非特許文献２）。

【０００５】

より反応性の低いアルキル化剤として、トリアルキルリン酸エステルをアルキル化剤として用いる方法が挙げられる。これらの先行技術では先にカルボン酸のナトリウム塩を調製して反応を行っている（非特許文献４、５）。

【先行技術文献】

【特許文献】

【０００６】

【文献】ＵＳ４，４５３，０１７
特開２００６－２１３６９２

【非特許文献】

【０００７】

【文献】Ｊ．Ａｍ．Ｃｈｅｍ．Ｓｏｃ．２００７，１２９，１５８３０．
Ｂｉｏｏｒｇ．Ｍｅｄ．Ｃｈｅｍ．Ｌｅｔｔ．２００４，１４，３０１３．
Ｊ．Ｍｅｄ．Ｃｈｅｍ．２０１１，５４，１７５２．
Ｊ．Ａｍ．Ｃｈｅｍ．Ｓｏｃ．１９９０，１１２，２９７．
Ｊ．Ｃｈｅｍ．Ｓｏｃ．ＰＥＲＫＩＮ ＴＲＡＮＳ．Ｉ，１９８９，８０７．

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【０００８】

化合物ライブラリの製造において、固相から切り出される際に生じる酸性官能基の構造変換は、化合物ライブラリにおける化合物群の物性をコントロールするとともに、構造多様性の拡大にも繋がる。酸性官能基のアルキル化は構造変換方法の一つであり、特に化合物の混合物を基質としてアルキル化する場合には、多様な官能基が反応系内に存在する中

、目的の酸性官能基のみをアルキル化するための選択性の極めて高い手法が必要となる。

【０００９】

酸性官能基をアルキル化する方法は幾つか知られているものの、高品質な化合物ライブラリの製造に適用するためには、以下に示す（１）～（３）を考慮する必要がある。

【００１０】

（１）アルキル化後の後処理において、試薬および試薬から発生する不純物を、目的とする化合物ライブラリから簡便な方法（液液抽出、減圧留去または固相試薬を用いる方法）によって除去できる。

【００１１】

（２）アルキル化のための試薬の溶解度が低い場合は、化合物の混合物を基質とする時の反応性にばらつきが生じる原因となる。

（３）基質となる化合物は標的の酸性官能基以外のアルキル化が可能な官能基を含む場合があり、例えば、アルコール性水酸基および含窒素構造（アミド、３級アミン、ピリジン、ピリダジンなど）を有する化合物を基質とすると、副反応としてアルコール性水酸基、含窒素構造（アミド、３級アミン、ピリジン、ピリダジンなど）へのアルキル化も進行することが懸念される。

【００１２】

例えば、ライブラリ合成において多数の化合物を含む混合物を基質としたアルキル化において、高品質な化合物ライブラリを得る観点から、より高い反応性および選択性を有するアルキル化方法が求められている。すなわち、特許文献１および２の記載に基づいてフェノール性水酸基のアルキル化を行った場合、収率が低いか安定せず、求める結果を得ることができなかった。低反応性および再現性の低い原因として、撹拌効率が１つの因子であることが判明したことから、反応混合物においてアルキル化に使用した試薬の溶解度の低さに原因があると推察された。本発明は、新規なアルキル化方法を提供することを目的の一つとし、特に、高い収率と高い位置選択性を有するアルキル化方法を提供することを目的の一つとする。さらに本発明は、広い基質適応範囲を持ち、特に化合物ライブラリ合成において複数の化合物を含む混合物を基質として利用可能な酸性官能基のアルキル化方法を提供することを目的の一つとする。

【課題を解決するための手段】

【００１３】

本発明者らは、好ましい反応性を有するアルキル化方法を見いだし、本発明を完成するに至った。本発明者らは、該方法が複数の化合物を含む混合物を基質として適用可能であることを見いだし、例えば、化合物ライブラリの製造において、固相から切り出される際に生じる酸性官能基の選択的なアルキル化に適用可能であることを確認した。

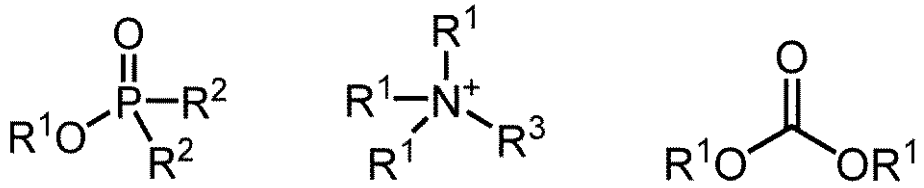
【００１４】

本発明の一つの側面において、以下の発明が提供される。

［１］アルキル化された酸性官能基を有する化合物の製造方法であって

酸性官能基を有する２種類以上の化合物を基質として含む混合物中で、塩基の存在下、式Ａ、式Ｂ、または式Ｃ：

【化１】



（Ａ）　（Ｂ）　（Ｃ）

【００１５】

［式中、R^1はＸより選択される１以上の置換基により置換されていてもよいC_{1-6}アルキルから独立して選択され；
Ｘは、C_{3-6}シクロアルキル、C_{2-7}アルケニル、C_{2-7}アルキニル、およびC_{6-10}アリールから独立して選択され、ここで前記アリールは、ハロゲン原子、C_{1-4}アルキル、またはC_{1-4}アルコキシから独立して選択される１以上の置換基により置換されていてもよく；
R^2は－OR^1およびアリールから独立して選択され、ここで前記アリールは、ハロゲン原子、C_{1-4}アルキルおよびC_{1-4}アルコキシから独立して選択される１以上の置換基により置換されていてもよく；
R^3はＸより選択される１以上の置換基により置換されていてもよいC_{1-6}アルキル、およびアリールから独立して選択され、ここで前記アリールは、ハロゲン原子、C_{1-4}アルキル、およびC_{1-4}アルコキシから独立して選択される１以上の置換基により置換されていてもよい］
により表される化合物から選択されるアルキル化剤と前記化合物を反応させて、酸性官能基をアルキル化することを含み、前記塩基が、アセトニトリル中での共役酸のｐＫａが２３～３４である有機塩基、および水中での共役酸のｐＫａが９～２０である無機塩基からなる群より選択される塩基である、前記方法。

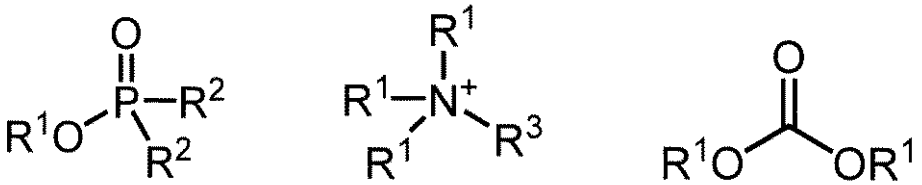
【００１６】

［２］アルキル化の後、不純物を除去することを含む、［１］に記載の方法。
［３］塩基のジメチルホルムアミド（ＤＭＦ）への溶解度が２５℃で１２０ｍｇ／ｍＬ以上である、［１］または［２］に記載の方法。

【００１７】

［４］塩基が、有機塩基より選択される、［１］～［３］のいずれかに記載の方法。
［５］塩基が、ホスファゼン類より選択される、［１］～［４］のいずれかに記載の方法。
［６］アルコキシ置換芳香環を有する化合物を製造する方法であって
芳香環に置換した水酸基を含む化合物を、塩基の存在下、式Ａ、式Ｂ、または式Ｃ：

【化２】



（Ａ）　（Ｂ）　（Ｃ）

［式中、R^1はＸより選択される１以上の置換基により置換されていてもよいC_{1-6}アルキルから独立して選択され；
Ｘは、C_{3-6}シクロアルキル、C_{2-7}アルケニル、C_{2-7}アルキニル、およびC_{6-10}アリールから独立して選択され、ここで前記アリールは、ハロゲン原子、C_{1-4}アルキル、またはC_{1-4}アルコキシから独立して選択される１以上の置換基により置換されていてもよく；
R^2は－OR^1およびアリールから独立して選択され、ここで前記アリールは、ハロゲン原子、C_{1-4}アルキルおよびC_{1-4}アルコキシから独立して選択される１以上の置換基により置換されていてもよく；
R^3はＸより選択される１以上の置換基により置換されていてもよいC_{1-6}アルキル、およびアリールから独立して選択され、ここで前記アリールは、ハロゲン原子、C_{1-4}アルキル、およびC_{1-4}アルコキシから独立して選択される１以上の置換基により置換されていてもよい］

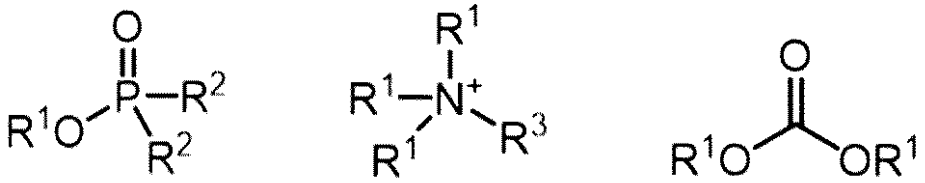
により表される化合物から選択されるアルキル化剤と前記化合物を反応させて、芳香環に置換した水酸基をアルキル化することを含み、前記塩基が、ホスファゼン類から選択される、前記方法。

【００１８】

［７］エステル化合物を製造する方法であって

カルボキシ基を含む化合物を、塩基の存在下、式Ａ、式Ｂ、または式Ｃ：

【化３】



（Ａ）　（Ｂ）　（Ｃ）

［式中、R^1はＸより選択される１以上の置換基により置換されていてもよいC_{1-6}アルキルから独立して選択され；

Ｘは、C_{3-6}シクロアルキル、C_{2-7}アルケニル、C_{2-7}アルキニル、およびC_{6-10}アリールから独立して選択され、ここで前記アリールは、ハロゲン原子、C_{1-4}アルキル、またはC_{1-4}アルコキシから独立して選択される１以上の置換基により置換されていてもよく；

R^2は－ＯR^1およびアリールから独立して選択され、ここで前記アリールは、ハロゲン原子、C_{1-4}アルキルおよびC_{1-4}アルコキシから独立して選択される１以上の置換基により置換されていてもよく；

R^3はＸより選択される１以上の置換基により置換されていてもよいC_{1-6}アルキル、およびアリールから独立して選択され、ここで前記アリールは、ハロゲン原子、C_{1-4}アルキル、およびC_{1-4}アルコキシから独立して選択される１以上の置換基により置換されていてもよい]

により表される化合物から選択されるアルキル化剤と前記化合物を反応させて、カルボキシ基をアルキル化することを含み、前記塩基が、ホスファゼン類から選択される、前記方法。

【００１９】

［８］アルキル化剤が、請求項１に記載の式ＡおよびＢで表されるアルキル化剤からなる群より選択される、［１］～［７］のいずれかに記載の方法。

［９］アルキル化剤が、リン酸トリメチル、リン酸トリエチルおよびリン酸トリアリルからなる群より選択される、［１］～［８］のいずれかに記載の方法。

【００２０】

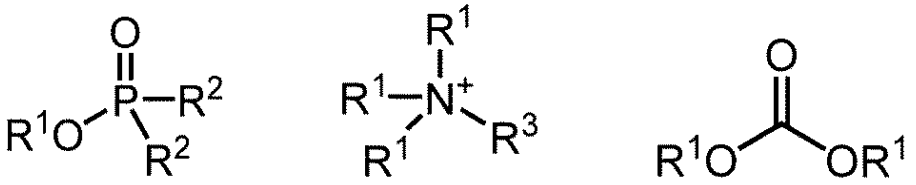
［１０］塩基が、１－エチル－２，２，４，４，４－ペンタキス（ジメチルアミノ）－２λ^5，４λ^5－カテナジ（ホスファゼン）（Ｐ２Ｅｔ）、１－ｔｅｒｔ－ブチル－２，２，４，４，４－ペンタキス（ジメチルアミノ）－２λ^5，４λ^5－カテナジ（ホスファゼン）（Ｐ２ｔＢｕ）、ｔｅｒｔ－ブチルイミノ－トリス（ジメチルアミノ）ホスホラン（Ｐ１ｔＢｕ）、２－ｔｅｒｔ－ブチルイミノ－２－ジエチルアミノ－１，３－ジメチルパーヒドロ－１，３，２－ジアザホスホリン（ＢＥＭＰ）、ｔｅｒｔ－ブチルイミノ－トリ（ピロリジノ）ホスホラン（ＢＴＰＰ）からなる群より選択される少なくとも一つである、［１］～［９］のいずれか１項に記載の方法。

【００２１】

［１１］酸性官能基が芳香環に置換した水酸基および／またはカルボキシ基である、［１］～［１０］のいずれかに記載の方法。

［１２］酸性官能基が芳香環に置換した水酸基である、［１］～［１１］のいずれかに

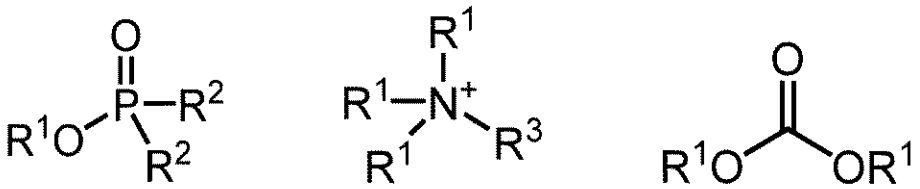
記載の方法。
［１３］基質が酸性官能基としてフェノール性水酸基とアルキル化されうる窒素原子を含む１以上の化合物を含み、該基質の中で最もアルキル化が進行する窒素原子を有する化合物において、フェノール性水酸基のアルキル化（アルキル化Ａ）と窒素原子のアルキル化（アルキル化Ｃ）による生成物の生成比（アルキル化Ａ／アルキル化Ｃ）が１．５以上である、［１］～［１２］のいずれかに記載の方法。
【００２２】
［１４］酸性官能基がカルボキシ基である、［１］～［１０］のいずれかに記載の方法。
［１５］基質が酸性官能基としてカルボキシ基とアルキル化されうる窒素原子を含む１以上の化合物を含み、該基質の中で最もアルキル化が進行する窒素原子を有する化合物において、カルボキシ基のアルキル化（アルキル化Ｄ）と窒素原子のアルキル化（アルキル化Ｅ）による生成物の生成比（アルキル化Ｄ／アルキル化Ｅ）が１．５以上である、［１］～［１０］、および［１４］のいずれかに記載の方法。
【００２３】
［１６］アルキル化Ｃまたはアルキル化Ｄが、ジアリールアミン、アルキルアリールアミン、アニリン、３級アミン、アミド、スルホンアミド、アシルスルホンアミド、およびピリジンから選択される窒素含有構造に含まれる窒素原子のアルキル化である、［１］～［１５］のいずれかに記載の方法。
［１７］化合物ライブラリを構成する化合物の製造方法であって、［１］～［１６］のいずれか項に記載の方法によりアルキル化された化合物を製造することを含む、前記方法。
［１８］１０以上の化合物を含む混合物として製造される、［１］～［１７］のいずれかに記載の方法。
【００２４】
［１９］式Ａ、式Ｂ、または式Ｃ：
【化４】



（Ａ）　（Ｂ）　（Ｃ）

［式中、R^1はＸより選択される１以上の置換基により置換されていてもよいC_{1-6}アルキルから独立して選択され；
Ｘは、C_{3-6}シクロアルキル、C_{2-7}アルケニル、C_{2-7}アルキニル、およびC_{6-10}アリールから独立して選択され、ここで前記アリールは、ハロゲン原子、C_{1-4}アルキル、またはC_{1-4}アルコキシから独立して選択される１以上の置換基により置換されていてもよく；
R^2は－ＯR^1およびアリールから独立して選択され、ここで前記アリールは、ハロゲン原子、C_{1-4}アルキルおよびC_{1-4}アルコキシから独立して選択される１以上の置換基により置換されていてもよく；
R^3はＸより選択される１以上の置換基により置換されていてもよいC_{1-6}アルキリ、およびアリールから独立して選択され、ここで前記アリールは、ハロゲン原子、C_{1-4}アルキル、およびC_{1-4}アルコキシから独立して選択される１以上の置換基により置換されていてもよい］
により表される化合物を含有する、アルキル化された化合物の製造方法において使用するためのアルキル化剤であって、該方法が［１］～［１８］のいずれかに記載の方法である、前記アルキル化剤。

【００２５】
［Ａ１］アルキル化された酸性官能基を有する化合物の製造方法であって
酸性官能基を有する２種類以上の化合物を基質として含む混合物中で、塩基の存在下、式Ａ、式Ｂ、または式Ｃ：
【化５】



（Ａ）　（Ｂ）　（Ｃ）

［式中、R^1はＸより選択される１以上の置換基により置換されていてもよいC_{1-6}アルキルから独立して選択され；
Ｘは、C_{3-6}シクロアルキル、C_{2-7}アルケニル、C_{2-7}アルキニル、およびC_{6-10}アリールから独立して選択され、ここで前記アリールは、ハロゲン原子、C_{1-4}アルキル、またはC_{1-4}アルコキシから独立して選択される１以上の置換基により置換されていてもよく；
R^2は－ＯR^1およびアリールから独立して選択され、ここで前記アリールは、ハロゲン原子、C_{1-4}アルキルおよびC_{1-4}アルコキシから独立して選択される１以上の置換基により置換されていてもよく；
R^3はＸより選択される１以上の置換基により置換されていてもよいC_{1-6}アルキル、およびアリールから独立して選択され、ここで前記アリールは、ハロゲン原子、C_{1-4}アルキル、およびC_{1-4}アルコキシから独立して選択される１以上の置換基により置換されていてもよい］
により表される化合物から選択されるアルキル化剤と前記化合物を反応させて、酸性官能基をアルキル化することを含み、前記塩基が、アセトニトリル中での共役酸のｐＫａが２３～３４である有機塩基、および水中での共役酸のｐＫａが９～２０である無機塩基からなる群より選択される塩基である、前記方法。
【００２６】
［Ａ２］アルキル化の後、不純物を除去することを含む、［Ａ１］に記載の方法。
［Ａ３］前記不純物の除去が、液液分離、減圧留去、固相試薬を用いる方法からなる群より選択される少なくとも一つである、［Ａ２］に記載の方法。
［Ａ４］前記不純物を除去する工程が、液液分離である、［Ａ２］または［Ａ３］に記載の方法。
【００２７】
［Ａ５］前記不純物を除去する工程が、減圧留去である、［Ａ２］または［Ａ３］に記載の方法。
［Ａ６］前記不純物を除去する工程が、固相試薬を用いる方法である、［Ａ２］または［Ａ３］に記載の方法。
［Ａ７］前記不純物が、アルキル化後に残留するアルキル化剤、塩基、アルキル化剤由来の不純物、塩基由来の不純物、および溶媒からなる群より選択される少なくとも一つである、［Ａ２］～［Ａ６］のいずれかに記載の方法。
【００２８】
［Ａ８］塩基のジメチルホルムアミド（ＤＭＦ）への溶解度が２５℃で１２０ｍｇ／ｍＬ以上である、［Ａ１］～［Ａ７］のいずれかに記載の方法。
［Ａ９］塩基が、有機塩基より選択される、［Ａ１］～［Ａ８］のいずれかに記載の方法。

［Ａ１０］前記塩基が、アセトニトリル中での共役酸のｐＫａが２４～３４、２５～３４、または２８～３４である有機塩基からなる群より選択される塩基である、［Ａ１］～［Ａ９］のいずれかに記載の方法。

【００２９】

［Ａ１１］前記塩基が、アセトニトリル中での共役酸のｐＫａが、２－ｔｅｒｔ－ブチル－１，１，３，３－テトラメチルグアニジン（ＢＴＭＧ）のｐＫａ値以上、および／または１－ｔｅｒｔ－ブチル－２，２，４，４，４－ペンタキス（ジメチルアミノ）－２λ^{5}，４λ^{5}－カテナジ（ホスファゼン）（Ｐ２ｔＢｕ）のｐＫａ値以下である有機塩基からなる群より選択される塩基である、［Ａ１］～［Ａ１０］のいずれかに記載の方法。

［Ａ１２］塩基が、ホスファゼン類より選択される、［Ａ１］～［Ａ９］のいずれかに記載の方法。

［Ａ１３］アルキル化により生じるアルコキシが－ＣＨ$_{2}$－Ｏ－の構造を有する、［Ａ１］～［Ａ１２］のいずれかに記載の方法。

【００３０】

［Ａ１４］アルキル化により生じるアルコキシがメトキシ、エトキシまたはアリルオキシである、［Ａ１］～［Ａ１３］のいずれかに記載の方法。

［Ａ１５］アルキル化により－ＣＨ$_{2}$－Ｏ－（Ｃ＝Ｏ）－の構造を有するエステルが生じる、［Ａ１］～［Ａ１４］のいずれかに記載の方法。

［Ａ１６］アルキル化により、メチルエステル、エチルエステルまたはアリルエステルが生じる、［Ａ１］～［Ａ１５］のいずれかに記載の方法。

【００３１】

［Ａ１７］前記反応が溶媒中で行われる、［Ａ１］～［Ａ１６］のいずれかに記載の方法。

［Ａ１８］前記溶媒が、テトラヒドロフラン（ＴＨＦ）、２－メチルテトラヒドロフラン、４－メチルテトラヒドロピラン、１，４－ジオキサン、１，２－ジメトキシエタン（ＤＭＥ）、ｔ－ブチルメチルエーテル（ＴＢＭＥ）、シクロペンチルメチルエーテル（ＣＰＭＥ）、イソソルビドジメチルエーテルなどのエーテル系溶媒、酢酸エチル、酢酸プロピル、酢酸イソプロピル、酢酸ブチル、酢酸イソブチル、ＧＶＬ（γ－バレロラクトン）などのエステル系溶媒、ジクロロメタン（ＤＣＭ）、１，２－ジクロロエタン（ＤＣＥ）、クロロホルムなどのハロゲン系溶媒、およびＮ，Ｎ－ジメチルホルムアミド（ＤＭＦ）、Ｎ－メチル－２－ピロリドン（ＮＭＰ）、Ｎ，Ｎ－ジメチルアセトアミド（ＤＭＡ）、Ｎ－エチル－２－ピロリドン（ＮＥＰ）、Ｎ－ブチル－２－ピロリドン（ＮＢＰ）などのアミド系溶媒、Ｎ，Ｎ，Ｎ’，Ｎ’－テトラメチル尿素（ＴＭＵ）、Ｎ，Ｎ’－ジメチルプロピレン尿素（ＤＭＰＵ）、１，３－ジメチル－２－イミダゾリジノン（ＤＭＩ）などのウレア系溶媒、ジメチルスルホキシド（ＤＭＳＯ）などのスルホキシド系溶媒、アニソール、トルエン、α，α，α－トリフルオロトルエン、１，２－ジクロロベンゼン、ベンゼンなどの芳香族系溶媒から選択される少なくとも一つの溶媒を含む、［Ａ１７］に記載の方法。

【００３２】

［Ａ１９］前記反応が、２５～１３０℃、４０～１２０℃、６０～１００℃、または７５～８５℃で行われる、［Ａ１］～［Ａ１８］のいずれかに記載の方法。

［Ａ２０］アルキル化剤が酸性官能基に対して、１．０～１００．０当量、２．０～５０．０当量、３．０～３０．０当量、５．０～２５．０当量、１０．０～２０．０当量、または１２．５～１７．５当量使用される、［Ａ１］～［Ａ１９］のいずれかに記載の方法。

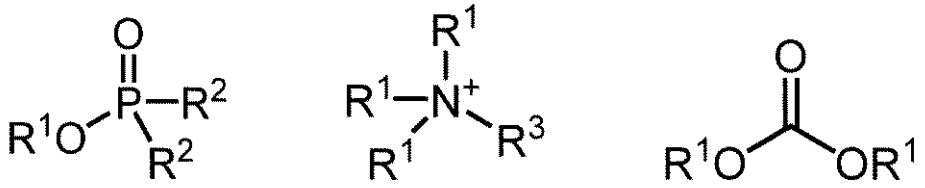
［Ａ２１］塩基が酸性官能基に対して、１．０～１００．０当量、１．５～５０．０当量、１．５～３０．０当量、３．０～２５．０当量、８．０～２０．０当量、または１２．５～１７．５当量使用される、［Ａ１］～［Ａ２０］のいずれかに記載の方法。

【００３３】

［Ａ２２］アルキル化剤が、［Ａ１］に記載の式ＡおよびＢで表される化合物からなる

群より選択される、［Ａ１］～［Ａ２１］のいずれかに記載の方法。
［Ａ２３］アルキル化剤が、［Ａ１］に記載の式Ａで表される化合物からなる群より選択される、［Ａ１］～［Ａ２２］のいずれかに記載の方法。
［Ａ２４］アルキル化剤が、リン酸トリメチル、リン酸トリエチルおよびリン酸トリアリルからなる群より選択される、［Ａ１］～［Ａ２３］のいずれかに記載の方法。
【００３４】
［Ａ２５］塩基が、１－エチル－２，２，４，４，４－ペンタキス（ジメチルアミノ）－２λ^{5}，４λ^{5}－カテナジ（ホスファゼン）（Ｐ２Ｅｔ）、１－ｔｅｒｔ－ブチル－２，２，４，４，４－ペンタキス（ジメチルアミノ）－２λ^{5}，４λ^{5}－カテナジ（ホスファゼン）（Ｐ２ｔＢｕ）、ｔｅｒｔ－ブチルイミノ－トリス（ジメチルアミノ）ホスホラン（Ｐ１ｔＢｕ）、２－ｔｅｒｔ－ブチルイミノ－２－ジエチルアミノ－１，３－ジメチルパーヒドロ－１，３，２－ジアザホスホリン（ＢＥＭＰ）、ｔｅｒｔ－ブチルイミノ－トリ（ピロリジノ）ホスホラン（ＢＴＰＰ）、１，１，３，３－テトラメチルグアニジン（ＴＭＧ）、２－ｔｅｒｔ－ブチル－１，１，３，３－テトラメチルグアニジン（ＢＴＭＧ）、１，８－ジアザビシクロ［５．４．０］ウンデカ－７－エン（ＤＢＵ）、７－メチル－１，５，７－トリアザビシクロ［４．４．０］デカ－５－エン（ＭＴＢＤ）、１，５，７－トリアザビシクロ［４．４．０］デカ－５－エン（ＴＢＤ）および炭酸セシウム（Cs_2CO_3）からなる群より選択される少なくとも一つである、［Ａ１］～［Ａ２４］のいずれかに記載の方法。
【００３５】
［Ａ２６］酸性官能基が芳香環に置換した水酸基である、［Ａ１］～［Ａ２５］のいずれかに記載の方法。
［Ａ２７］酸性官能基がベンゼン環またはピリジン環に置換する水酸基である、［Ａ１］～［Ａ２６］のいずれかに記載の方法。
［Ａ２８］基質が酸性官能基としてフェノール性水酸基とアルキル化されうる窒素原子を含む１以上の化合物を含み、該基質の中で最もアルキル化が進行する窒素原子を有する化合物において、フェノール性水酸基のアルキル化（アルキル化Ａ）と窒素原子のアルキル化（アルキル化Ｃ）による生成物の生成比（アルキル化Ａ／アルキル化Ｃ）が１．５以上、３以上、５以上、７以上、９以上、１０以上、１２以上、１５以上、２０以上、３０以上、または５０以上である、［Ａ１］～［Ａ２７］のいずれかに記載の方法。
【００３６】
［Ａ２９］アルキル化Ｃが、ジアリールアミン、アルキルアリールアミン、アニリン、３級アミン、アミド、スルホンアミド、アシルスルホンアミド、およびピリジンから選択される窒素含有構造に含まれる窒素原子のアルキル化である、［Ａ１］～［Ａ２８］のいずれかに記載の方法。
［Ａ３０］酸性官能基がカルボキシ基である、［Ａ１］～［Ａ２５］のいずれかに記載の方法。
【００３７】
［Ａ３１］基質が酸性官能基としてカルボキシ基とアルキル化されうる窒素原子を含む１以上の化合物を含み、該基質の中で最もアルキル化が進行する窒素原子を有する化合物において、カルボキシ基のアルキル化（アルキル化Ｄ）と窒素原子のアルキル化（アルキル化Ｅ）による生成物の生成比（アルキル化Ｄ／アルキル化Ｅ）が１．５以上、３以上、５以上、７以上、９以上、１０以上、１２以上、１５以上、２０以上、３０以上、または５０以上である、［Ａ１］～［Ａ２５］および［Ａ３０］のいずれかに記載の方法。
【００３８】
［Ａ３２］アルキル化Ｅが、ジアリールアミン、アルキルアリールアミン、アニリン、３級アミン、アミド、スルホンアミド、アシルスルホンアミド、およびピリジンから選択される窒素含有構造に含まれる窒素原子のアルキル化である、［Ａ３１］に記載の方法。
［Ａ３３］基質が酸性官能基として１以上のフェノール性水酸基および１以上のカルボキシ基を含み、１以上のフェノール性水酸基および１以上のカルボキシ基のいずれの酸性

官能基をアルキル化する、［Ａ１］～［Ａ３２］のいずれかに記載の方法。
［Ａ３４］酸性官能基として１以上のフェノール性水酸基および１以上のカルボキシ基を含む基質において、１以上のフェノール性水酸基および１以上のカルボキシ基の酸性官能基をいずれもアルキル化した後に、１以上のアルキル化したカルボキシ基をカルボキシ基に変換することをさらに含む、［Ａ１］～［Ａ３３］のいずれかに記載の方法。
【００３９】
［Ａ３５］酸性官能基として１以上のフェノール性水酸基および１以上のカルボキシ基を含む基質において、１以上のフェノール性水酸基および１以上のカルボキシ基の酸性官能基をいずれもアルキル化した後に、１以上のアルキル化したカルボキシ基をカルボキシ基に変換することにより、１以上のフェノール性水酸基のみをアルキル化する、［Ａ１］～［Ａ３４］のいずれかに記載の方法。
［Ａ３６］化合物ライブラリを構成する化合物の製造のための、［Ａ１］～［Ａ３５］のいずれかに記載の方法。
【００４０】
［Ａ３７］前記混合物が１０種類以上の化合物を基質として含む、［Ａ１］～［Ａ３６］のいずれかに記載の方法。
［Ａ３８］固相担体からの切り出しにより酸性官能基を有する化合物を調製することをさらに含む、［Ａ１］～［Ａ３７］のいずれかに記載の方法。
【００４１】
［Ｂ１］アルコキシ置換芳香環を有する化合物を製造する方法であって
芳香環に置換した水酸基を含む化合物を、塩基の存在下、式Ａ、式Ｂ、または式Ｃ：
【化６】



（Ａ）　（Ｂ）　（Ｃ）

［式中、R^1はＸより選択される１以上の置換基により置換されていてもよいC_{1-6}アルキルから独立して選択され；
Ｘは、C_{3-6}シクロアルキル、C_{2-7}アルケニル、C_{2-7}アルキニル、およびC_{6-10}アリールから独立して選択され、ここで前記アリールは、ハロゲン原子、C_{1-4}アルキル、またはC_{1-4}アルコキシから独立して選択される１以上の置換基により置換されていてもよく；
R^2は－ＯR^1およびアリールから独立して選択され、ここで前記アリールは、ハロゲン原子、C_{1-4}アルキルおよびC_{1-4}アルコキシから独立して選択される１以上の置換基により置換されていてもよく；
R^3はＸより選択される１以上の置換基により置換されていてもよいC_{1-6}アルキル、およびアリールから独立して選択され、ここで前記アリールは、ハロゲン原子、C_{1-4}アルキル、およびC_{1-4}アルコキシから独立して選択される１以上の置換基により置換されていてもよい］
により表される化合物から選択されるアルキル化剤と前記化合物を反応させて、芳香環に置換した水酸基をアルキル化することを含み、前記塩基が、ホスファゼン類から選択される、前記方法。
【００４２】
［Ｂ２］アルキル化の後、不純物を除去することを含む、［Ｂ１］に記載の方法。

［Ｂ３］前記不純物の除去が、液液分離、減圧留去、固相試薬を用いる方法からなる群より選択される少なくとも一つである、［Ｂ１］に記載の方法。
［Ｂ４］前記不純物を除去する工程が、液液分離である、［Ｂ２］または［Ｂ３］に記載の方法。
［Ｂ５］前記不純物を除去する工程が、減圧留去である、［Ｂ２］または［Ｂ３］に記載の方法。
［Ｂ６］前記不純物を除去する工程が、固相試薬を用いる方法である、［Ｂ２］または［Ｂ３］に記載の方法。
【００４３】
［Ｂ７］前記不純物が、アルキル化後に残留するアルキル化剤、塩基、アルキル化剤由来の不純物、塩基由来の不純物、溶媒からなる群より選択される少なくとも一つである、［Ｂ１］～［Ｂ６］のいずれかに記載の方法。
［Ｂ８］アルキル化により生じるアルコキシが－ＣＨ$_2$－Ｏ－の構造を有する、［Ｂ１］～［Ｂ７］のいずれかに記載の方法。
【００４４】
［Ｂ９］アルキル化により生じるアルコキシがメトキシ、エトキシまたはアリルオキシである、［Ｂ１］～［Ｂ８］のいずれかに記載の方法。
［Ｂ１０］前記反応が溶媒中で行われる、［Ｂ１］～［Ｂ９］のいずれかに記載の方法。
［Ｂ１１］前記溶媒が、テトラヒドロフラン（ＴＨＦ）、２－メチルテトラヒドロフラン、４－メチルテトラヒドロピラン、１，４－ジオキサン、１，２－ジメトキシエタン（ＤＭＥ）、ｔ－ブチルメチルエーテル（ＴＢＭＥ）、シクロペンチルメチルエーテル（ＣＰＭＥ）、イソソルビドジメチルエーテルなどのエーテル系溶媒、酢酸エチル、酢酸プロピル、酢酸イソプロピル、酢酸ブチル、酢酸イソブチル、ＧＶＬ（γ－バレロラクトン）などのエステル系溶媒、ジクロロメタン（ＤＣＭ）、１，２－ジクロロエタン（ＤＣＥ）、クロロホルムなどのハロゲン系溶媒、およびＮ，Ｎ－ジメチルホルムアミド（ＤＭＦ）、Ｎ－メチル－２－ピロリドン（ＮＭＰ）、Ｎ，Ｎ－ジメチルアセトアミド（ＤＭＡ）、Ｎ－エチル－２－ピロリドン（ＮＥＰ）、Ｎ－ブチル－２－ピロリドン（ＮＢＰ）などのアミド系溶媒、Ｎ，Ｎ，Ｎ′，Ｎ′－テトラメチル尿素（ＴＭＵ）、Ｎ，Ｎ’－ジメチルプロピレン尿素（ＤＭＰＵ）、１，３－ジメチル－２－イミダゾリジノン（ＤＭＩ）などのウレア系溶媒、ジメチルスルホキシド（ＤＭＳＯ）などのスルホキシド系溶媒、アニソール、トルエン、α，α，α－トリフルオロトルエン、１，２－ジクロロベンゼン、ベンゼンなどの芳香族系溶媒からなる群より選択される少なくとも一つである、［Ｂ１］～［Ｂ１０］のいずれかに記載の方法。
【００４５】
［Ｂ１２］前記反応が、２５～１３０℃、４０～１２０℃、６０～１００℃、または７５～８５℃で行われる、［Ｂ１］～［Ｂ１１］のいずれかに記載の方法。
［Ｂ１３］アルキル化剤が水酸基に対して、１．０～１００．０当量、２．０～５０．０当量、３．０～３０．０当量、５．０～２５．０当量、１０．０～２０．０当量、または１２．５～１７．５当量使用される、［Ｂ１］～［Ｂ１２］のいずれかに記載の方法。
【００４６】
［Ｂ１４］塩基が水酸基に対して、１．０～１００．０当量、１．５～５０．０当量、１．５～３０．０当量、３．０～２５．０当量、８．０～２０．０当量、または１２．５～１７．５当量使用される、［Ｂ１］～［Ｂ１３］のいずれかに記載の方法。
［Ｂ１５］アルキル化剤が、［Ｂ１］に記載の式ＡおよびＢで表されるアルキル化剤からなる群より選択される、［Ｂ１］～［Ｂ１４］のいずれかに記載の方法。
［Ｂ１６］アルキル化剤が、リン酸トリメチル、リン酸トリエチルおよびリン酸トリアリルからなる群より選択される、［Ｂ１］～［Ｂ１５］のいずれかに記載の方法。
【００４７】
［Ｂ１７］塩基が、１－エチル－２，２，４，４，４－ペンタキス（ジメチルアミノ）－２λ^5，４λ^5－カテナジ（ホスファゼン）（Ｐ２Ｅｔ）、１－ｔｅｒｔ－ブチル－２

，２，４，４，４－ペンタキス（ジメチルアミノ）－２λ^5，４λ^5－カテナジ（ホスファゼン）（Ｐ２ｔＢｕ）、ｔｅｒｔ－ブチルイミノ－トリス（ジメチルアミノ）ホスホラン（Ｐ１ｔＢｕ）、２－ｔｅｒｔ－ブチルイミノ－２－ジエチルアミノ－１，３－ジメチルパーヒドロ－１，３，２－ジアザホスホリン（ＢＥＭＰ）およびｔｅｒｔ－ブチルイミノ－トリ（ピロリジノ）ホスホラン（ＢＴＰＰ）からなる群より選択される少なくとも一つである、［Ｂ１］～［Ｂ１６］のいずれかに記載の方法。

［Ｂ１８］芳香環に置換した水酸基が、ベンゼン環、ピリジン環、ピリミジン環、ピラジン環、トリアジン環、ピラゾール環、イミダゾール環、フラン環、チオフェン環、オキサゾール環、チアゾール環、ナフタレン環、キノリン環、インドール環、インダゾール環、イソキノリン環、から選択される芳香環に置換した水酸基である、［Ｂ１］～［Ｂ１７］のいずれかに記載の方法。

【００４８】

［Ｂ１９］芳香環に置換した水酸基が、ベンゼン環またはピリジン環に置換する水酸基である、［Ｂ１］～［Ｂ１８］のいずれかに記載の方法。

［Ｂ２０］２以上の化合物を基質として反応が行われ、該基質が酸性官能基としてフェノール性水酸基とアルキル化されうる窒素原子を含む１以上の化合物を含み、該基質の中で最もアルキル化が進行する窒素原子を有する化合物において、フェノール性水酸基のアルキル化（アルキル化Ａ）と窒素原子のアルキル化（アルキル化Ｃ）による生成物の生成比（アルキル化Ａ／アルキル化Ｃ）が１．５以上、３以上、５以上、７以上、９以上、１０以上、１２以上、１５以上、２０以上、３０以上、または５０以上である、［Ｂ１］～［Ｂ１９］のいずれかに記載の方法。

【００４９】

［Ｂ２１］化合物ライブラリを構成する化合物の製造のための、［Ｂ１］～［Ｂ２０］のいずれかに記載の方法。

［Ｂ２２］前記混合物が１０種類以上の化合物を基質として含む、［Ｂ１］～［Ｂ２１］のいずれかに記載の方法。

［Ｂ２３］固相担体からの切り出しにより水酸基を有する化合物を調製することをさらに含む、［Ｂ１］～［Ｂ２２］のいずれかに記載の方法。

【００５０】

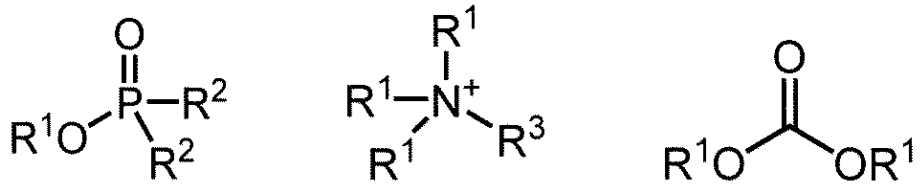
［Ｃ１］化合物ライブラリを構成する化合物の製造方法であって、［Ａ１］～［Ａ３８］、［Ｂ１］～［Ｂ２３］および［Ｅ１］～［Ｅ２１］のいずれかに記載の方法によりアルキル化された化合物を製造することを含む、前記方法。

［Ｃ２］１０以上、５０以上、１００以上、５００以上または１０００以上の化合物を含む混合物として製造される、［Ｃ１］に記載の方法。

【００５１】

［Ｄ１］式Ａ、式Ｂ、または式Ｃ：

【化７】

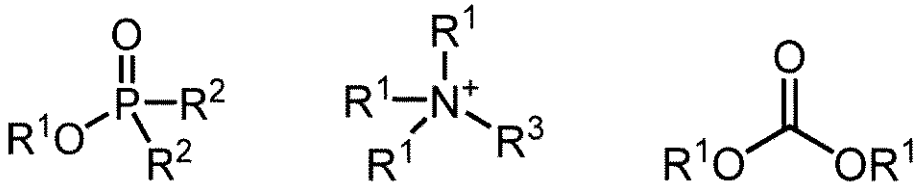


（Ａ）　（Ｂ）　（Ｃ）

［式中、Ｒ^{1}はＸより選択される１以上の置換基により置換されていてもよいＣ$_{1-6}$アルキルから独立して選択され；

Ｘは、Ｃ$_{3-6}$シクロアルキル、Ｃ$_{2-7}$アルケニル、Ｃ$_{2-7}$アルキニル、およびＣ$_{6-10}$アリールから独立して選択され、ここで前記アリールは、ハロゲン原子、Ｃ$_{1-4}$アル

キル、またはC_{1-4}アルコキシから独立して選択される１以上の置換基により置換されていてもよく；
R^2は－OR^1およびアリールから独立して選択され、ここで前記アリールは、ハロゲン原子、C_{1-4}アルキルおよびC_{1-4}アルコキシから独立して選択される１以上の置換基により置換されていてもよく；
R^3はＸより選択される１以上の置換基により置換されていてもよいC_{1-6}アルキル、およびアリールから独立して選択され、ここで前記アリールは、ハロゲン原子、C_{1-4}アルキル、およびC_{1-4}アルコキシから独立して選択される１以上の置換基により置換されていてもよい]
により表される化合物を含有する、アルキル化された化合物の製造方法において使用するためのアルキル化剤であって、該方法が［Ａ１］～［Ａ３８］、［Ｂ１］～［Ｂ２３］、および［Ｅ１］～［Ｅ２１］のいずれかに記載の方法である、前記アルキル化剤。
【００５２】
［Ｅ１］エステル化合物を製造する方法であって
カルボキシ基を含む化合物を、塩基の存在下、式Ａ、式Ｂ、または式Ｃ：
【化８】



（Ａ）　（Ｂ）　（Ｃ）

［式中、R^1はＸより選択される１以上の置換基により置換されていてもよいC_{1-6}アルキルから独立して選択され；
Ｘは、C_{3-6}シクロアルキル、C_{2-7}アルケニル、C_{2-7}アルキニル、およびC_{6-10}アリールから独立して選択され、ここで前記アリールは、ハロゲン原子、C_{1-4}アルキル、またはC_{1-4}アルコキシから独立して選択される１以上の置換基により置換されていてもよく；
R^2は－OR^1およびアリールから独立して選択され、ここで前記アリールは、ハロゲン原子、C_{1-4}アルキルおよびC_{1-4}アルコキシから独立して選択される１以上の置換基により置換されていてもよく；
R^3はＸより選択される１以上の置換基により置換されていてもよいC_{1-6}アルキル、およびアリールから独立して選択され、ここで前記アリールは、ハロゲン原子、C_{1-4}アルキル、およびC_{1-4}アルコキシから独立して選択される１以上の置換基により置換されていてもよい]
により表される化合物から選択されるアルキル化剤と前記化合物を反応させて、カルボキシ基をアルキル化することを含み、前記塩基が、ホスファゼン類から選択される、前記方法。
【００５３】
［Ｅ２］アルキル化の後、不純物を除去することを含む、［Ｅ１］に記載の方法。
［Ｅ３］前記不純物の除去が、液液分離、減圧留去、固相試薬を用いる方法からなる群より選択される少なくとも一つである、［Ｅ１］に記載の方法。
［Ｅ４］前記不純物を除去する工程が、液液分離である、［Ｅ２］または［Ｅ３］に記載の方法。
［Ｅ５］前記不純物を除去する工程が、減圧留去である、［Ｅ２］または［Ｅ３］に記載の方法。

［Ｅ６］前記不純物を除去する工程が、固相試薬を用いる方法である、［Ｅ２］または［Ｅ３］に記載の方法。

【００５４】

［Ｅ７］前記不純物が、アルキル化後に残留するアルキル化剤、塩基、アルキル化剤由来の不純物、塩基由来の不純物、溶媒からなる群より選択される少なくとも一つである、［Ｅ１］～［Ｅ６］のいずれかに記載の方法。

［Ｅ８］アルキル化により生じるエステルが－ＣＨ$_2$－Ｏ－（Ｃ＝Ｏ）－の構造を有する、［Ｅ１］～［Ｅ７］のいずれかに記載の方法。

［Ｅ９］アルキル化により生じるエステルがメチルエステル、エチルエステルまたはアリルエステルである、［Ｅ１］～［Ｅ８］のいずれかに記載の方法。

【００５５】

［Ｅ１０］前記反応が溶媒中で行われる、［Ｅ１］～［Ｅ９］のいずれかに記載の方法。

［Ｅ１１］前記溶媒が、テトラヒドロフラン（ＴＨＦ）、２－メチルテトラヒドロフラン、４－メチルテトラヒドロピラン、１，４－ジオキサン、１，２－ジメトキシエタン（ＤＭＥ）、ｔ－ブチルメチルエーテル（ＴＢＭＥ）、シクロペンチルメチルエーテル（ＣＰＭＥ）、イソソルビドジメチルエーテルなどのエーテル系溶媒、酢酸エチル、酢酸プロピル、酢酸イソプロピル、酢酸ブチル、酢酸イソブチル、ＧＶＬ（γ－バレロラクトン）などのエステル系溶媒、ジクロロメタン（ＤＣＭ）、１，２－ジクロロエタン（ＤＣＥ）、クロロホルムなどのハロゲン系溶媒、およびＮ，Ｎ－ジメチルホルムアミド（ＤＭＦ）、Ｎ－メチル－２－ピロリドン（ＮＭＰ）、Ｎ，Ｎ－ジメチルアセトアミド（ＤＭＡ）、Ｎ－エチル－２－ピロリドン（ＮＥＰ）、Ｎ－ブチル－２－ピロリドン（ＮＢＰ）などのアミド系溶媒、Ｎ，Ｎ，Ｎ′，Ｎ′－テトラメチル尿素（ＴＭＵ）、Ｎ，Ｎ’－ジメチルプロピレン尿素（ＤＭＰＵ）、１，３－ジメチル－２－イミダゾリジノン（ＤＭＩ）などのウレア系溶媒、ジメチルスルホキシド（ＤＭＳＯ）などのスルホキシド系溶媒、アニソール、トルエン、α，α，α－トリフルオロトルエン、１，２－ジクロロベンゼン、ベンゼンなどの芳香族系溶媒からなる群より選択される少なくとも一つである、［Ｅ１］～［Ｅ１０］のいずれかに記載の方法。

【００５６】

［Ｅ１２］前記反応が、２５～１３０℃、４０～１２０℃、６０～１００℃、または７５～８５℃で行われる、［Ｅ１］～［Ｅ１１］のいずれかに記載の方法。

［Ｅ１３］アルキル化剤が水酸基に対して、１．０～１００．０当量、２．０～５０．０当量、３．０～３０．０当量、５．０～２５．０当量、１０．０～２０．０当量、または１２．５～１７．５当量使用される、［Ｅ１］～［Ｅ１２］のいずれかに記載の方法。

【００５７】

［Ｅ１４］塩基が水酸基に対して、１．０～１００．０当量、１．５～５０．０当量、１．５～３０．０当量、３．０～２５．０当量、８．０～２０．０当量、または１２．５～１７．５当量使用される、［Ｅ１］～［Ｅ１３］のいずれかに記載の方法。

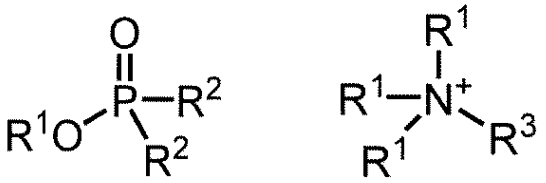
［Ｅ１５］アルキル化剤が、［Ｂ１］に記載の式ＡおよびＢで表されるアルキル化剤からなる群より選択される、［Ｅ１］～［Ｅ１４］のいずれかに記載の方法。

［Ｅ１６］アルキル化剤が、リン酸トリメチル、リン酸トリエチルおよびリン酸トリアリルからなる群より選択される、［Ｅ１］～［Ｅ１５］のいずれかに記載の方法。

【００５８】

［Ｅ１７］塩基が、１－エチル－２，２，４，４，４－ペンタキス（ジメチルアミノ）－２λ^5，４λ^5－カテナジ（ホスファゼン）（Ｐ２Ｅｔ）、１－ｔｅｒｔ－ブチル－２，２，４，４，４－ペンタキス（ジメチルアミノ）－２λ^5，４λ^5－カテナジ（ホスファゼン）（Ｐ２ｔＢｕ）、ｔｅｒｔ－ブチルイミノ－トリス（ジメチルアミノ）ホスホラン（Ｐ１ｔＢｕ）、２－ｔｅｒｔ－ブチルイミノ－２－ジエチルアミノ－１，３－ジメチルパーヒドロ－１，３，２－ジアザホスホリン（ＢＥＭＰ）およびｔｅｒｔ－ブチルイミノ－トリ（ピロリジノ）ホスホラン（ＢＴＰＰ）からなる群より選択される少なくとも一つである、［Ｅ１］～［Ｅ１６］のいずれかに記載の方法。

【００５９】
［Ｅ１８］２以上の化合物を基質として反応が行われ、該基質が酸性官能基としてカルボキシ基とアルキル化されうる窒素原子を含む１以上の化合物を含み、該基質の中で最もアルキル化が進行する窒素原子を有する化合物において、カルボキシ基のアルキル化（アルキル化Ｄ）と窒素原子のアルキル化（アルキル化Ｅ）による生成物の生成比（アルキル化Ｄ／アルキル化Ｅ）が１．５以上、３以上、５以上、７以上、９以上、１０以上、１２以上、１５以上、２０以上、３０以上、または５０以上である、［Ｅ１］～［Ｅ１７］のいずれかに記載の方法。
【００６０】
［Ｅ１９］化合物ライブラリを構成する化合物の製造のための、［Ｅ１］～［Ｅ１８］のいずれかに記載の方法。
［Ｅ２０］前記混合物が１０種類以上の化合物を基質として含む、［Ｅ１］～［Ｅ１９］のいずれかに記載の方法。
［Ｅ２１］固相担体からの切り出しによりカルボキシ基を有する化合物を調製することをさらに含む、［Ｅ１］～［Ｅ２０］のいずれかに記載の方法。
【００６１】
［Ｆ１］アルキル化された酸性官能基を含む側鎖を有する固相合成用樹脂の製造方法であって
酸性官能基を有する２種類以上の側鎖を含む樹脂を基質として含み、塩基の存在下、式Ａ、式Ｂ、または式Ｃ：
【化９】



（Ａ）　（Ｂ）　（Ｃ）

［式中、R^1はＸより選択される１以上の置換基により置換されていてもよいC_{1-6}アルキルから独立して選択され；
Ｘは、C_{3-6}シクロアルキル、C_{2-7}アルケニル、C_{2-7}アルキニル、およびC_{6-10}アリールから独立して選択され、ここで前記アリールは、ハロゲン原子、C_{1-4}アルキル、またはC_{1-4}アルコキシから独立して選択される１以上の置換基により置換されていてもよく；
R^2は－ＯR^1およびアリールから独立して選択され、ここで前記アリールは、ハロゲン原子、C_{1-4}アルキルおよびC_{1-4}アルコキシから独立して選択される１以上の置換基により置換されていてもよく；
R^3はＸより選択される１以上の置換基により置換されていてもよいC_{1-6}アルキル、およびアリールから独立して選択され、ここで前記アリールは、ハロゲン原子、C_{1-4}アルキル、およびC_{1-4}アルコキシから独立して選択される１以上の置換基により置換されていてもよい］
により表される化合物から選択されるアルキル化剤と前記樹脂を反応させて、酸性官能基をアルキル化することを含み、前記塩基が、アセトニトリル中での共役酸のｐＫａが２３～３４である有機塩基、および水中での共役酸のｐＫａが９～２０である無機塩基からなる群より選択される塩基である、前記方法。
【００６２】
［Ｆ２］アルキル化の後、不純物を除去することを含む、［Ｆ１］に記載の方法。
［Ｆ３］前記不純物の除去が、液液分離、減圧留去、固相試薬を用いる方法からなる群

より選択される少なくとも一つである、［Ｆ２］に記載の方法。
［Ｆ４］前記不純物を除去する工程が、液液分離である、［Ｆ２］または［Ｆ３］に記載の方法。
［Ｆ５］前記不純物を除去する工程が、減圧留去である、［Ｆ２］または［Ｆ３］に記載の方法。
［Ｆ６］前記不純物を除去する工程が、固相試薬を用いる方法である、［Ｆ２］または［Ｆ３］に記載の方法。
【００６３】
［Ｆ７］前記不純物が、アルキル化後に残留するアルキル化剤、塩基、アルキル化剤由来の不純物、塩基由来の不純物、および溶媒からなる群より選択される少なくとも一つである、［Ｆ２］～［Ｆ６］のいずれかに記載の方法。
［Ｆ８］塩基のジメチルホルムアミド（ＤＭＦ）への溶解度が２５℃で１２０ｍｇ／ｍＬ以上である、［Ｆ１］～［Ｆ７］のいずれかに記載の方法。
［Ｆ９］塩基が、有機塩基より選択される、［Ｆ１］～［Ｆ８］のいずれかに記載の方法。
［Ｆ１０］前記塩基が、アセトニトリル中での共役酸のｐＫａが２４～３４、２５～３４、または２８～３４である有機塩基からなる群より選択される塩基である、［Ｆ１］～［Ｆ９］のいずれかに記載の方法。
【００６４】
［Ｆ１１］前記塩基が、アセトニトリル中での共役酸のｐＫａが、２－ｔｅｒｔ－ブチル－１，１，３，３－テトラメチルグアニジン（ＢＴＭＧ）のｐＫａ値以上、および／または１－ｔｅｒｔ－ブチル－２，２，４，４，４－ペンタキス（ジメチルアミノ）－２λ^{5}，４λ^{5}－カテナジ（ホスファゼン）（Ｐ２ｔＢｕ）のｐＫａ値以下である有機塩基からなる群より選択される塩基である、［Ｆ１］～［Ｆ１０］のいずれかに記載の方法。
［Ｆ１２］塩基が、ホスファゼン類より選択される、［Ｆ１］～［Ｆ９］のいずれかに記載の方法。
［Ｆ１３］アルキル化により生じるアルコキシが－ＣＨ$_{2}$－Ｏ－の構造を有する、［Ｆ１］～［Ｆ１２］のいずれかに記載の方法。
［Ｆ１４］アルキル化により生じるアルコキシがメトキシ、エトキシまたはアリルオキシである、［Ｆ１］～［Ｆ１３］のいずれかに記載の方法。
［Ｆ１５］アルキル化により－ＣＨ$_{2}$－Ｏ－（Ｃ＝Ｏ）－の構造を有するエステルが生じる、［Ｆ１］～［Ｆ１４］のいずれかに記載の方法。
【００６５】
［Ｆ１６］アルキル化により、メチルエステル、エチルエステルまたはアリルエステルが生じる、［Ｆ１］～［Ｆ１５］のいずれかに記載の方法。
［Ｆ１７］前記反応が溶媒中で行われる、［Ｆ１］～［Ｆ１６］のいずれかに記載の方法。
［Ｆ１８］前記溶媒が、テトラヒドロフラン（ＴＨＦ）、２－メチルテトラヒドロフラン、４－メチルテトラヒドロピラン、１，４－ジオキサン、１，２－ジメトキシエタン（ＤＭＥ）、ｔ－ブチルメチルエーテル（ＴＢＭＥ）、シクロペンチルメチルエーテル（ＣＰＭＥ）、イソソルビドジメチルエーテルなどのエーテル系溶媒、酢酸エチル、酢酸プロピル、酢酸イソプロピル、酢酸ブチル、酢酸イソブチル、ＧＶＬ（γ－バレロラクトン）などのエステル系溶媒、ジクロロメタン（ＤＣＭ）、１，２－ジクロロエタン（ＤＣＥ）、クロロホルムなどのハロゲン系溶媒、およびＮ，Ｎ－ジメチルホルムアミド（ＤＭＦ）、Ｎ－メチル－２－ピロリドン（ＮＭＰ）、Ｎ，Ｎ－ジメチルアセトアミド（ＤＭＡ）、Ｎ－エチル－２－ピロリドン（ＮＥＰ）、Ｎ－ブチル－２－ピロリドン（ＮＢＰ）などのアミド系溶媒、Ｎ，Ｎ，Ｎ’，Ｎ’－テトラメチル尿素（ＴＭＵ）、Ｎ，Ｎ’－ジメチルプロピレン尿素（ＤＭＰＵ）、１，３－ジメチル－２－イミダゾリジノン（ＤＭＩ）などのウレア系溶媒、ジメチルスルホキシド（ＤＭＳＯ）などのスルホキシド系溶媒、アニソール、トルエン、α，α，α－トリフルオロトルエン、１，２－ジクロロベンゼン、ベンゼン

などの芳香族系溶媒から選択される少なくとも一つの溶媒を含む、［Ｆ１７］に記載の方法。

【００６６】

［Ｆ１９］前記反応が、２５～１３０℃、４０～１２０℃、６０～１００℃、または７５～８５℃で行われる、［Ｆ１］～［Ｆ１８］のいずれかに記載の方法。

［Ｆ２０］アルキル化剤が酸性官能基に対して、１．０～１００．０当量、２．０～５０．０当量、３．０～３０．０当量、５．０～２５．０当量、１０．０～２０．０当量、または１２．５～１７．５当量使用される、［Ｆ１］～［Ｆ１９］のいずれかに記載の方法。

［Ｆ２１］塩基が酸性官能基に対して、１．０～１００．０当量、１．５～５０．０当量、１．５～３０．０当量、３．０～２５．０当量、８．０～２０．０当量、または１２．５～１７．５当量使用される、［Ｆ１］～［Ｆ２０］のいずれかに記載の方法。

【００６７】

［Ｆ２２］アルキル化剤が、［Ｆ１］に記載の式ＡおよびＢで表される化合物からなる群より選択される、［Ｆ１］～［Ｆ２１］のいずれかに記載の方法。

［Ｆ２３］アルキル化剤が、［Ｆ１］に記載の式Ａで表される化合物からなる群より選択される、［Ｆ１］～［Ｆ２２］のいずれかに記載の方法。

［Ｆ２４］アルキル化剤が、リン酸トリメチル、リン酸トリエチルおよびリン酸トリアリルからなる群より選択される、［Ｆ１］～［Ｆ２３］のいずれかに記載の方法。

【００６８】

［Ｆ２５］塩基が、１－エチル－２，２，４，４，４－ペンタキス（ジメチルアミノ）－２λ^5，４λ^5－カテナジ（ホスファゼン）（Ｐ２Ｅｔ）、１－ｔｅｒｔ－ブチル－２，２，４，４，４－ペンタキス（ジメチルアミノ）－２λ^5，４λ^5－カテナジ（ホスファゼン）（Ｐ２ｔＢｕ）、ｔｅｒｔ－ブチルイミノ－トリス（ジメチルアミノ）ホスホラン（Ｐ１ｔＢｕ）、２－ｔｅｒｔ－ブチルイミノ－２－ジエチルアミノ－１，３－ジメチルパーヒドロ－１，３，２－ジアザホスホリン（ＢＥＭＰ）、ｔｅｒｔ－ブチルイミノ－トリ（ピロリジノ）ホスホラン（ＢＴＰＰ）、１，１，３，３－テトラメチルグアニジン（ＴＭＧ）、２－ｔｅｒｔ－ブチル－１，１，３，３－テトラメチルグアニジン（ＢＴＭＧ）、１，８－ジアザビシクロ［５．４．０］ウンデカ－７－エン（ＤＢＵ）、７－メチル－１，５，７－トリアザビシクロ［４．４．０］デカ－５－エン（ＭＴＢＤ）、１，５，７－トリアザビシクロ［４．４．０］デカ－５－エン（ＴＢＤ）および炭酸セシウム（Cs_2CO_3）からなる群より選択される少なくとも一つである、［Ｆ１］～［Ｆ２４］のいずれかに記載の方法。

【００６９】

［Ｆ２６］酸性官能基が芳香環に置換した水酸基である、［Ｆ１］～［Ｆ２５］のいずれかに記載の方法。

［Ｆ２７］酸性官能基がベンゼン環またはピリジン環に置換する水酸基である、［Ｆ１］～［Ｆ２６］のいずれかに記載の方法。

［Ｆ２８］固相合成用樹脂が酸性官能基としてフェノール性水酸基とアルキル化されうる窒素原子を含む１以上の側鎖を含み、該樹脂の中で最もアルキル化が進行する窒素原子を有する化合物において、フェノール性水酸基のアルキル化（アルキル化Ａ）と窒素原子のアルキル化（アルキル化Ｃ）による生成物の生成比（アルキル化Ａ／アルキル化Ｃ）が１．５以上、３以上、５以上、７以上、９以上、１０以上、１２以上、１５以上、２０以上、３０以上、または５０以上である、［Ｆ１］～［Ｆ２７］のいずれかに記載の方法。

【００７０】

［Ｆ２９］アルキル化Ｃが、ジアリールアミン、アルキルアリールアミン、アニリン、３級アミン、アミド、スルホンアミド、アシルスルホンアミド、およびピリジンから選択される窒素含有構造に含まれる窒素原子のアルキル化である、［Ｆ１］～［Ｆ２８］のいずれかに記載の方法。

［Ｆ３０］酸性官能基がカルボキシ基である、［Ｆ１］～［Ｆ２５］のいずれかに記載

の方法。
【００７１】
［Ｆ３１］固相合成用樹脂が酸性官能基としてカルボキシ基とアルキル化されうる窒素原子を含む１以上の側鎖を含み、該樹脂の中で最もアルキル化が進行する窒素原子を有する側鎖において、カルボキシ基のアルキル化（アルキル化Ｄ）と窒素原子のアルキル化（アルキル化Ｅ）による生成物の生成比（アルキル化Ｄ／アルキル化Ｅ）が１．５以上、３以上、５以上、７以上、９以上、１０以上、１２以上、１５以上、２０以上、３０以上、または５０以上である、［Ｆ１］～［Ｆ２５］および［Ｆ３０］のいずれかに記載の方法。
［Ｆ３２］アルキル化Ｅが、ジアリールアミン、アルキルアリールアミン、アニリン、３級アミン、アミド、スルホンアミド、アシルスルホンアミド、およびピリジンから選択される窒素含有構造に含まれる窒素原子のアルキル化である、［Ｆ３１］に記載の方法。
［Ｆ３３］固相合成用樹脂が酸性官能基として１以上のフェノール性水酸基および１以上のカルボキシ基を側鎖に含み、１以上のフェノール性水酸基および１以上のカルボキシ基のいずれの酸性官能基をアルキル化する、［Ｆ１］～［Ｆ３２］のいずれかに記載の方法。
【００７２】
［Ｆ３４］酸性官能基として１以上のフェノール性水酸基および１以上のカルボキシ基を含む固相合成用樹脂において、１以上のフェノール性水酸基および１以上のカルボキシ基の酸性官能基をいずれもアルキル化した後に、１以上のアルキル化したカルボキシ基をカルボキシ基に変換することをさらに含む、［Ｆ１］～［Ｆ３３］のいずれかに記載の方法。
［Ｆ３５］酸性官能基として１以上のフェノール性水酸基および１以上のカルボキシ基を含む固相合成用樹脂において、１以上のフェノール性水酸基および１以上のカルボキシ基の酸性官能基をいずれもアルキル化した後に、１以上のアルキル化したカルボキシ基をカルボキシ基に変換することにより、１以上のフェノール性水酸基のみをアルキル化する、［Ｆ１］～［Ｆ３４］のいずれかに記載の方法。
［Ｆ３６］化合物ライブラリを構成する化合物の製造のための、［Ｆ１］～［Ｆ３５］のいずれかに記載の方法。
［Ｆ３７］側鎖が、酸素官能基を有する化合物をリンカーを介して樹脂に結合させる化学構造を有し、リンカーが分解可能である、［Ｆ１］～［Ｆ３６］のいずれかに記載の方法。
【００７３】
［Ｆ３８］リンカーを、酸性条件下での反応、アルカリ性条件下での反応、水素添加反応、酸化剤を使用した反応、またはルイス酸との反応により分解することにより、アルキル化された酸性官能基を含む化合物を製造することをさらに含む、［Ｆ３７］のいずれかに記載の方法。
［Ｆ３７］前記樹脂が、リンカーを介して樹脂に結合した１０種類以上の化合物を含む、［Ｆ３７］または［Ｆ３８］に記載の方法。
【００７４】
［Ｆ３８］固相合成用樹脂１単位に１種類の化合物がリンカーを介して結合し、異なる化合物が結合する樹脂の混合物を基質とする、［Ｆ１］～［Ｆ３７］のいずれかに記載の方法。
［Ｆ３９］固相合成用樹脂１単位に２種類以上の異なる化合物がリンカーを介して結合する樹脂を基質とする、［Ｆ１］～［Ｆ３７］のいずれかに記載の方法。
【発明の効果】
【００７５】
本明細書により、複数の化合物を含む混合物を基質として適用可能である高反応性および高選択性のアルキル化方法が提供される。
【図面の簡単な説明】
【００７６】

【図１】図１は本発明の方法により製造されるライブラリを構成する化合物について、「コアブロックの多様性」と「リンカーの多様性」を示す図であり、実施例６において製造した化合物を示す図である。
【図２】図２は、実施例６－６で製造した１０００化合物の構造を示す図である。
【図３】図３は、実施例６－８で製造した５００化合物の構造を示す図である。
【発明を実施するための形態】
【００７７】
本発明の一つの側面において、アルキル化された酸性官能基を有する化合物の製造方法に関する。ここでアルキル化は特に限定されないが、例えば、C_{1-6}アルコキシを形成するアルキル化、具体的には、メトキシ、エトキシ、１－プロポキシ、２－プロポキシ、ｎ－ブトキシ、ｉ－ブトキシ、ｓｅｃ－ブトキシ、ｔ－ブトキシ、１－ペンチルオキシ、および１－ヘキシルオキシなどを形成するアルキル化、より具体的にはメトキシ、エトキシなどを形成するアルキル化が挙げられる。
【００７８】
酸性官能基としては、酸性のプロトンを有する基であれば特に限定されず、例えば、芳香環に置換した水酸基、カルボン酸などが挙げられる。ここで芳香環は炭素環であってもヘテロ原子を含むヘテロ環であってもよく、芳香環との縮合環、非芳香環との縮合環で合ってもよい。芳香環としては、例えば、５～１０員の単環または縮合環の芳香環が挙げられ、その例として、例えばピロール環、チオフェン環、フラン環、ピリジン環、チアゾール環、イソチアゾール環、ピラゾール環、オキサゾール環、イソキサゾール環、イミダゾール環、トリアゾール環、ピリミジン環、ウリジン環、ピラジン環、ピリダジン環、キノリン環、イソキノリン環、４Ｈ－キノリジン環、フタラジン環、ナフチリジン環、キノキサリン環、キナゾリン環、シンノリン環、プテリジン環、インドール環、インドリン環、ベンゾチオフェン環、１－メチル－１Ｈ－インドール環、ベンゾフラン環、ベンゾイソチアゾール環、ベンゾイソオキサゾール環、インダゾール環、ベンゾイミダゾール環、ベンゾトリアゾール環、アザインドール環、イミダゾピリジン環などが挙げられる。本発明の一つの態様において、酸性官能基は芳香環に置換した水酸基、例えば、ベンゼン環、ピリジン環、インドール環、キノリン環、ピラゾール環に置換した水酸基、具体的には、ベンゼン環、またはピリジン環に置換した水酸基である。
【００７９】
本明細書において「C_{1-6}アルキル」とは、炭素数１～６の直鎖状および分枝鎖状の飽和脂肪族炭化水素から任意の水素原子を１個除いて誘導される１価の基である。具体的にはメチル、エチル、ｎ－プロピル、イソプロピル、ｎ－ブチル、イソブチル、ｓｅｃ－ブチル、ｔ－ブチル、１－メチルプロピル、ｎ－ペンチル、イソペンチル、２－メチルブチル、１，１－ジメチルプロピル、１－エチルプロピル、ヘキシル、４－メチルペンチル、および２－エチルブチルなどが挙げられる。
【００８０】
本明細書において「C_{1-4}アルキル」とは、炭素数１～４の直鎖状および分枝鎖状の飽和脂肪族炭化水素から任意の水素原子を１個除いて誘導される１価の基である。具体的にはメチル、エチル、ｎ－プロピル、イソプロピル、ｎ－ブチル、イソブチル、ｓｅｃ－ブチル、ｔ－ブチル、および１－メチルプロピルなどが挙げられる。
【００８１】
本明細書において「C_{1-6}アルコキシ」とは、C_{1-6}アルキル－Ｏ－基を意味し、ここでC_{1-6}アルキルは既に定義したとおりである。具体例には、メトキシ、エトキシ、１－プロポキシ、２－プロポキシ、ｎ－ブトキシ、ｉ－ブトキシ、ｓｅｃ－ブトキシ、ｔ－ブトキシ、１－ペンチルオキシ、および１－ヘキシルオキシなどが含まれる。
【００８２】
本明細書において「C_{1-4}アルコキシ」とは、C_{1-4}アルキル－Ｏ－基を意味し、ここでC_{1-4}アルキルは既に定義したとおりである。具体例には、メトキシ、エトキシ、１－プロポキシ、２－プロポキシ、ｎ－ブトキシ、ｉ－ブトキシ、ｓｅｃ－ブトキシ、およ

びｔ－ブトキシなどが含まれる。
本明細書において「C_{3-6}シクロアルキル」とは、炭素数が３～６の環状の飽和脂肪族炭化水素基を意味する。具体的には、シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、およびシクロヘキシルなどが挙げられる。
【００８３】
本明細書において「C_{2-7}アルケニル」とは炭素数２～７の直鎖又は分枝鎖状のアルケニル基を意味し、例えば、エテニル（ビニル）、１－プロペニル、２－プロペニル（アリル）、プロペン－２－イル、および３－ブテニル（ホモアリル）、などが含まれる。
本明細書において「C_{2-7}アルキニル」とは炭素数２～７の直鎖又は分岐鎖状のアルキニル基を意味し、例えば、エチニル、１－プロピニル、２－プロピニル、１－ブチニル、２－ブチニル、および３－ブチニル、などが含まれる。
【００８４】
本発明において「C_{6-10}アリール」とは、１価の芳香族炭化水素環基を意味する。C_{6-10}アリールとしては、例えば、フェニル、１－ナフチル、および２－ナフチルなどが挙げられる。
本明細書において「ハロゲン原子」とは、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子などを意味する。本発明においてハロゲン原子が、アリール、ヘテロアリールなどの置換基となる場合、好ましいハロゲン原子として、フッ素原子、塩素原子および臭素原子が挙げられる。本発明においてハロゲン原子がアルキル、またはアルキルをその一部に含む基（アルコキシ、アルケニル、アルキルチオなど）の置換基となる場合、好ましいハロゲン原子として、フッ素原子が挙げられる。ハロゲン原子を置換基として有する基の具体例としては、トリフルオロメチル、ペンタフルオロエチル、トリフルオロメトキシ、ペンタフルオロエトキシ、トリフルオロメチルチオ、およびペンタフルオロエチルチオなどが挙げられる。
【００８５】
本明細書の式Ａ、式Ｂ、または式Ｃの定義において、所定の基が１以上の置換基で置換されている場合、当該基の数は１～置換可能な箇所数までの範囲でよく、例えば１～５の、１～４の、１～３の、１または２の、または１つの置換基であってもよい。
本明細書で芳香族ヘテロ環を構成するヘテロ原子は、例えば窒素原子、酸素原子、硫黄原子から選択される１以上、具体的には１～３個の原子であってよい。
本発明において、式Ａ、式Ｂ、または式Ｃから選択される化合物をアルキル化剤として使用することができる。例えば、式ＡにおいてはR^2が$-OR^1$である化合物を使用することができる。式ＢにおいてはR^3は、例えば、アリール、具体的にはフェニルが挙げられる。
R^1としては、例えば、C_{1-6}アルキル、具体的にはC_{1-5}アルキル、より具体的には、C_{1-4}アルキルが挙げられる。
【００８６】
式Ａで表されるアルキル化剤としては、リン酸トリメチル、リン酸トリエチル、フェニルホスホン酸ジメチル、フェニルホスホン酸ジエチル、ジフェニルホスフィン酸メチル、ジフェニルホスフィン酸エチルなどが挙げられ、それらの中で、リン酸トリメチル、リン酸トリエチル、リン酸トリプロピル、リン酸トリアリルなどが好ましく挙げられる。
式Ｂで表されるアルキル化剤としては、トリメチルフェニルアンモニウムクロリド、トリメチルフェニルアンモニウムブロミド、トリメチルフェニルアンモニウムヨージド、トリエチルフェニルアンモニウムクロリド、トリエチルフェニルアンモニウムブロミド、トリエチルフェニルアンモニウムヨージド、テトラメチルアンモニウムクロリド、テトラメチルアンモニウムブロミド、テトラメチルアンモニウムヨージド、テトラエチルアンモニウムクロリド、テトラエチルアンモニウムブロミド、テトラエチルアンモニウムヨージド、ベンジルトリメチルアンモニウムクロリド、ベンジルトリメチルアンモニウムブロミド、ベンジルトリメチルアンモニウムヨージド、ベンジルトリエチルアンモニウムクロリド、ベンジルトリエチルアンモニウムブロミド、ベンジルトリエチルアンモニウムヨージド

などが挙げられ、それらの中で、トリメチルフェニルアンモニウムクロリド、トリエチルフェニルアンモニウムヨージドなどが好ましく挙げられる。

【００８７】

式Ｃで表されるアルキル化剤としては、炭酸ジメチル、炭酸ジエチル、炭酸ジ－ｎ－プロピル、炭酸ジイソプロピル、炭酸ジ－ｎ－ブチル、炭酸ジ－ｔｅｒｔ－ブチルなどが挙げられ、それらの中で、炭酸ジメチル、炭酸ジエチルなどが好ましく挙げられる。

本発明の一つの態様において、製造方法はアルキル化の後、不純物を除去することを含む。不純物除去は、本発明の技術分野で通常行われる方法により行うことができる。ここで不純物は、反応に消費された反応試薬に由来する不純物、未反応の反応試薬、反応により生じる分解物、共存する塩基がアルキル化剤によってアルキル化された生成物、反応溶媒などが挙げられる。特に具体的には、不純物として、リン酸トリエチル、リン酸ジエチル、ｔｅｒｔ－ブチルイミノ－トリ（ピロリジノ）ホスホラン（ＢＴＰＰ）、ＢＴＰＰのアルキル化体、１，３－ジメチル－２－イミダゾリジノン（ＤＭＩ）などが挙げられる。不純物の除去方法としては、例えば、液液分離、減圧留去、固相試薬を用いる方法、順相、または逆相シリカゲルカラムクロマトグラフィーによる精製、ＧＰＣ（分子ふるい）による精製などが挙げられる。

【００８８】

不純物除去のための液液分離は、本発明の技術分野で通常行われる方法により行うことができる。液液分離は、所望の生成物群と不純物（不要物）群とを分離する目的で、複数の層に分離する溶媒の組み合わせであれば特に制限はない。例えば、酢酸エチル、酢酸イソプロピルなどのエステル系溶媒、ジエチルエーテル、ジイソプロピルエーテル、ｔ－ブチルメチルエーテル（ＴＢＭＥ）、シクロペンチルメチルエーテル（ＣＰＭＥ）、２－メチルテトラヒドロフラン、４－メチルテトラヒドロピランなどのエーテル系溶媒、ジクロロメタン、クロロホルム、１，２－ジクロロエタンなどのハロゲン系溶媒、ベンゼン、トルエンなどの芳香族炭化水素系溶媒、ヘキサン、シクロヘキサン、ヘプタンなどの炭化水素系溶媒などから選択される溶媒と、水、塩酸水溶液などの酸性水溶液、炭酸水素ナトリウム水溶液などの塩基性水溶液から選択される溶媒を組み合わせて行うことができる。単一の溶媒を用いてもよいし、複数の溶媒を組み合わせた混媒を用いてもよい。また、所望の生成物群と不純物（不要物）群とを分離する目的に合致する場合には、ヘキサンとアセトニトリルの組み合わせなど、層分離する有機溶媒どうしを組み合わせて行うことができる。

不純物除去のための減圧留去は、本発明の技術分野で通常行われる方法により行うことができる。減圧留去の条件は除去する不純物によって適宜設定することができ、例えば圧力は、１００～４００ｍｂａｒ、５０～１００ｍｂａｒ、５～５０ｍｂａｒまたは０．１～５ｍｂａｒなどで、温度は２０～１００℃、２５～５０℃、または３５～４５℃などであってもよい。

【００８９】

固相試薬を用いた不純物の除去は、本発明の技術分野で通常行われる方法により行うことができる。ここで固相試薬としては、例えば、マクロ多孔質トリエチルアンモニウムメチルポリスチレン炭酸塩、マクロ多孔質ポリスチレンスルホン酸、アミン担持シリカゲル、カルボン酸担持シリカゲルなどが挙げられる。

【００９０】

本発明の一つの側面において、アルキル化反応に用いる塩基は、アセトニトリル中での共役酸のｐＫａが２３～３４である有機塩基、および水中での共役酸のｐＫａが９～２０である無機塩基からなる群より選択される塩基を用いることができる。ここでアセトニトリル中での塩基の共役酸のｐＫａは、公知文献Ｊ．Ｏｒｇ．Ｃｈｅｍ．１９９８，６３，７８６８－７８７４に記載の方法により測定温度２５℃において測定することができる。また無機塩基の共役酸の水中でのｐＫａは、実験化学講座５「熱的測定および平衡」、４６０頁（日本化学会編、丸善株式会社発行）に記載の方法により２５℃において測定した値を用いることができる。また参考値として、Ａｄｖａｎｃｅｄ　Ｃｈｅｍｉｓｔｒｙ　Ｄ

ｅｖｅｌｏｐｍｅｎｔ（ＡＣＤ／Ｌａｂｓ）Ｓｏｆｔｗａｒｅ Ｖ１１．０２（▲Ｃ▼１９９４－２０１９ ＡＣＤ／Ｌａｂｓ）、ＡＤＭＥＴ ｐｒｅｄｉｃｔｏｒ（ｖｅｒｓｉｏｎ ９．５）を用いた計算値、公知文献Ｅｕｒ．Ｊ．Ｏｒｇ．Ｃｈｅｍ．２０１９，６７３５－６７４８、Ｏｒｇ．Ｂｉｏｍｏｌ．Ｃｈｅｍ．２０１７，１５，４０８１－４０８５、Ｃｈｅｍ．Ｅｕｒ．Ｊ．２０２０，Ａｃｃｅｐｔｅｄ Ａｒｔｉｃｌｅ（ＤＯＩ：Ｃｈｅｍ．Ｅｕｒ．Ｊ １０．１００２／ｃｈｅｍ．２０２００３５８０，２０２０／１２／２５現在）に記載の値、またはＳｉｇｍａ－Ａｌｄｒｉｃｈ社のカタログ記載の値を適宜参照することができる。Ｓｉｇｍａ－Ａｌｄｒｉｃｈ社のカタログ記載のＭｅＣＮ中の共役酸のｐＫａ値は、例えばホスファゼン塩基では、１－エチル－２，２，４，４，４－ペンタキス（ジメチルアミノ）－２λ^5，４λ^5－カテナジ（ホスファゼン）（Ｐ２Ｅｔ）が３２．９、１－ｔｅｒｔ－ブチル－２，２，４，４，４－ペンタキス（ジメチルアミノ）－２λ^5，４λ^5－カテナジ（ホスファゼン）（Ｐ２ｔＢｕ）は３３．５、ｔｅｒｔ－ブチルイミノ－トリス（ジメチルアミノ）ホスホラン（Ｐ１ｔＢｕ）は２６．９、２－ｔｅｒｔ－ブチルイミノ－２－ジエチルアミノ－１，３－ジメチルパーヒドロ－１，３，２－ジアザホスホリン（ＢＥＭＰ）は２７．６、およびｔｅｒｔ－ブチルイミノ－トリ（ピロリジノ）ホスホラン（ＢＴＰＰ）が２８．４である。また、公知文献Ｅｕｒ．Ｊ．Ｏｒｇ．Ｃｈｅｍ．２０１９，６７３５－６７４８に記載のＭｅＣＮ中の共役酸のｐＫａ値は、アミジン塩基では１，８－ジアザビシクロ［５．４．０］ウンデカ－７－エン（ＤＢＵ）は２４．３、グアニジン塩基類では、１，１，３，３－テトラメチルグアニジン（ＴＭＧ）は２３．４、７－メチル－１，５，７－トリアザビシクロ［４．４．０］デカ－５－エン（ＭＴＢＤ）は２５．５、１，５，７－トリアザビシクロ［４．４．０］デカ－５－エン（ＴＢＤ）は２６．０である。公知文献Ｃｈｅｍ．Ｅｕｒ．Ｊ．２０２０，Ａｃｃｅｐｔｅｄ Ａｒｔｉｃｌｅ（ＤＯＩ：Ｃｈｅｍ．Ｅｕｒ．Ｊ １０．１００２／ｃｈｅｍ．２０２００３５８０，２０２０／１２／２５現在）に記載の２－ｔｅｒｔ－ブチル－１，１，３，３－テトラメチルグアニジン（ＢＴＭＧ）のＭｅＣＮ中の共役酸のｐＫａ値は、２３．６である。公知文献Ｏｒｇ．Ｂｉｏｍｏｌ．Ｃｈｅｍ．２０１７，１５，４０８１－４０８５に記載のCs_2CO_3の水中の共役酸のｐＫａ値は、１０．３である。

【００９１】

本発明の一つの態様において、アルキル化反応に用いる塩基は、ジメチルホルムアミド（ＤＭＦ）への溶解度が２５℃で１２０ｍｇ／ｍＬ以上であることが好ましい。溶解度は本発明の技術分野で通常行われる方法により行うことができる。ここで塩基は、例えば有機塩基を使用することができる。また、公知文献Ｊ．Ｏｒｇ．Ｃｈｅｍ．１９８４，４９，１１２２－１１２５に記載のCs_2CO_3のジメチルホルムアミド（ＤＭＦ）への溶解度は、２５℃で１１９ｍｇ／ｍＬである。

【００９２】

本発明の一つの態様において、アルキル化反応においてホスファゼン類、アミジン類もしくはグアニジン類を塩基として用いることができる。ホスファゼン類、アミジン類もしくはグアニジン類は塩基として用いることができるものであれば特に限定されない。本発明の一つの態様において、アルキル化反応において用いる塩基は、ホスファゼン類では１－エチル－２，２，４，４，４－ペンタキス（ジメチルアミノ）－２λ^5，４λ^5－カテナジ（ホスファゼン）（Ｐ２Ｅｔ）、１－ｔｅｒｔ－ブチル－２，２，４，４，４－ペンタキス（ジメチルアミノ）－２λ^5，４λ^5－カテナジ（ホスファゼン）（Ｐ２ｔＢｕ）、ｔｅｒｔ－ブチルイミノ－トリス（ジメチルアミノ）ホスホラン（Ｐ１ｔＢｕ）、２－ｔｅｒｔ－ブチルイミノ－２－ジエチルアミノ－１，３－ジメチルパーヒドロ－１，３，２－ジアザホスホリン（ＢＥＭＰ）およびｔｅｒｔ－ブチルイミノ－トリ（ピロリジノ）ホスホラン（ＢＴＰＰ）からなる群より、アミジン類では１，８－ジアザビシクロ［５．４．０］ウンデカ－７－エン（ＤＢＵ）、グアニジン類では１，１，３，３－テトラメチルグアニジン（ＴＭＧ）、２－ｔｅｒｔ－ブチル－１，１，３，３－テトラメチルグアニジン（ＢＴＭＧ）、、７－メチル－１，５，７－トリアザビシクロ［４．４．０］デカ－５－エン（ＭＴＢＤ）、１，５，７－トリアザビシクロ［４．４．０］デカ－５－エン（

ＴＢＤ）からなる群より選択される。

【００９３】

式Ａのアルキル化剤を用いるアルキル化反応は、本明細書の記載に基づき適宜条件を選択して実施することができる。本発明の一つの態様において、式Ａのアルキル化剤を用いるアルキル化反応は、例えば、テトラヒドロフラン（ＴＨＦ）、２－メチルテトラヒドロフラン、４－メチルテトラヒドロピラン、１，４－ジオキサン、１，２－ジメトキシエタン（ＤＭＥ）、ｔ－ブチルメチルエーテル（ＴＢＭＥ）、シクロペンチルメチルエーテル（ＣＰＭＥ）、イソソルビドジメチルエーテルなどのエーテル系溶媒、酢酸エチル、酢酸プロピル、酢酸イソプロピル、酢酸ブチル、酢酸イソブチル、ＧＶＬ（γ－バレロラクトン）などのエステル系溶媒、ジクロロメタン（ＤＣＭ）、１，２－ジクロロエタン（ＤＣＥ）、クロロホルムなどのハロゲン系溶媒、およびＮ，Ｎ－ジメチルホルムアミド（ＤＭＦ）、Ｎ－メチル－２－ピロリドン（ＮＭＰ）、Ｎ，Ｎ－ジメチルアセトアミド（ＤＭＡ）、Ｎ－エチル－２－ピロリドン（ＮＥＰ）、Ｎ－ブチル－２－ピロリドン（ＮＢＰ）などのアミド系溶媒、Ｎ，Ｎ，Ｎ′，Ｎ′－テトラメチル尿素（ＴＭＵ）、Ｎ，Ｎ’－ジメチルプロピレン尿素（ＤＭＰＵ）、１，３－ジメチル－２－イミダゾリジノン（ＤＭＩ）などのウレア系溶媒、ジメチルスルホキシド（ＤＭＳＯ）などのスルホキシド系溶媒、アニソール、トルエン、α，α，α－トリフルオロトルエン、１，２－ジクロロベンゼン、ベンゼンなどの芳香族系溶媒から選択される溶媒中（単一の溶媒を用いてもよいし、複数の溶媒を組み合わせた混媒を用いてもよい）で、４０～１２０℃、６０～１００℃、または７５～８５℃の温度で、１－エチル－２，２，４，４，４－ペンタキス（ジメチルアミノ）－２λ^5，４λ^5－カテナジ（ホスファゼン）（Ｐ２Ｅｔ）、１－ｔｅｒｔ－ブチル－２，２，４，４，４－ペンタキス（ジメチルアミノ）－２λ^5，４λ^5－カテナジ（ホスファゼン）（Ｐ２ｔＢｕ）、ｔｅｒｔ－ブチルイミノ－トリス（ジメチルアミノ）ホスホラン（Ｐ１ｔＢｕ）、２－ｔｅｒｔ－ブチルイミノ－２－ジエチルアミノ－１，３－ジメチルパーヒドロ－１，３，２－ジアザホスホリン（ＢＥＭＰ）、ｔｅｒｔ－ブチルイミノ－トリ（ピロリジノ）ホスホラン（ＢＴＰＰ）、ｔｅｒｔ－ブチルイミノ－トリ（ピロリジノ）ホスホラン（ＢＴＰＰ）、１，１，３，３－テトラメチルグアニジン（ＴＭＧ）、２－ｔｅｒｔ－ブチル－１，１，３，３－テトラメチルグアニジン（ＢＴＭＧ）、１，８－ジアザビシクロ［５．４．０］ウンデカ－７－エン（ＤＢＵ）、７－メチル－１，５，７－トリアザビシクロ［４．４．０］デカ－５－エン（ＭＴＢＤ）、１，５，７－トリアザビシクロ［４．４．０］デカ－５－エン（ＴＢＤ）および炭酸セシウム（Cs_2CO_3）から選択される塩基を用いて行うことができる。

【００９４】

式Ｂのアルキル化剤を用いるアルキル化反応は、本明細書の記載に基づき適宜条件を選択して実施することができる。本発明の一つの態様において、式Ｂのアルキル化剤を用いるアルキル化反応は、例えば、テトラヒドロフラン（ＴＨＦ）、２－メチルテトラヒドロフラン、４－メチルテトラヒドロピラン、１，４－ジオキサン、１，２－ジメトキシエタン（ＤＭＥ）、ｔ－ブチルメチルエーテル（ＴＢＭＥ）、シクロペンチルメチルエーテル（ＣＰＭＥ）、イソソルビドジメチルエーテルなどのエーテル系溶媒、酢酸エチル、酢酸プロピル、酢酸イソプロピル、酢酸ブチル、酢酸イソブチル、ＧＶＬ（γ－バレロラクトン）などのエステル系溶媒、ジクロロメタン（ＤＣＭ）、１，２－ジクロロエタン（ＤＣＥ）、クロロホルムなどのハロゲン系溶媒、およびＮ，Ｎ－ジメチルホルムアミド（ＤＭＦ）、Ｎ－メチル－２－ピロリドン（ＮＭＰ）、Ｎ，Ｎ－ジメチルアセトアミド（ＤＭＡ）、Ｎ－エチル－２－ピロリドン（ＮＥＰ）、Ｎ－ブチル－２－ピロリドン（ＮＢＰ）などのアミド系溶媒、Ｎ，Ｎ，Ｎ′，Ｎ′－テトラメチル尿素（ＴＭＵ）、Ｎ，Ｎ’－ジメチルプロピレン尿素（ＤＭＰＵ）、１，３－ジメチル－２－イミダゾリジノン（ＤＭＩ）などのウレア系溶媒、ジメチルスルホキシド（ＤＭＳＯ）などのスルホキシド系溶媒、アニソール、トルエン、α，α，α－トリフルオロトルエン、１，２－ジクロロベンゼン、ベンゼンなどの芳香族系溶媒から選択される溶媒中（単一の溶媒を用いてもよいし、複数の溶媒を組み合わせた混媒を用いてもよい）で、４０～１２０℃、６０～１００℃、または

７５～８５℃の温度で、１－エチル－２，２，４，４，４－ペンタキス（ジメチルアミノ）－２λ^5，４λ^5－カテナジ（ホスファゼン）（Ｐ２Ｅｔ）、１－ｔｅｒｔ－ブチル－２，２，４，４，４－ペンタキス（ジメチルアミノ）－２λ^5，４λ^5－カテナジ（ホスファゼン）（Ｐ２ｔＢｕ）、ｔｅｒｔ－ブチルイミノ－トリス（ジメチルアミノ）ホスホラン（Ｐ１ｔＢｕ）、２－ｔｅｒｔ－ブチルイミノ－２－ジエチルアミノ－１，３－ジメチルパーヒドロ－１，３，２－ジアザホスホリン（ＢＥＭＰ）、ｔｅｒｔ－ブチルイミノ－トリ（ピロリジノ）ホスホラン（ＢＴＰＰ）、ｔｅｒｔ－ブチルイミノ－トリ（ピロリジノ）ホスホラン（ＢＴＰＰ）、１，１，３，３－テトラメチルグアニジン（ＴＭＧ）、２－ｔｅｒｔ－ブチル－１，１，３，３－テトラメチルグアニジン（ＢＴＭＧ）、１，８－ジアザビシクロ［５．４．０］ウンデカ－７－エン（ＤＢＵ）、７－メチル－１，５，７－トリアザビシクロ［４．４．０］デカ－５－エン（ＭＴＢＤ）、１，５，７－トリアザビシクロ［４．４．０］デカ－５－エン（ＴＢＤ）および炭酸セシウム（Cs_2CO_3）から選択される塩基を用いて行うことができる。

【００９５】

式Ｃのアルキル化剤を用いるアルキル化反応は、本明細書の記載に基づき適宜条件を選択して実施することができる。本発明の一つの態様において、式Ｃのアルキル化剤を用いるアルキル化反応は、例えば、テトラヒドロフラン（ＴＨＦ）、２－メチルテトラヒドロフラン、４－メチルテトラヒドロピラン、１，４－ジオキサン、１，２－ジメトキシエタン（ＤＭＥ）、ｔ－ブチルメチルエーテル（ＴＢＭＥ）、シクロペンチルメチルエーテル（ＣＰＭＥ）、イソソルビドジメチルエーテルなどのエーテル系溶媒、酢酸エチル、酢酸プロピル、酢酸イソプロピル、酢酸ブチル、酢酸イソブチル、ＧＶＬ（γ－バレロラクトン）などのエステル系溶媒、ジクロロメタン（ＤＣＭ）、１，２－ジクロロエタン（ＤＣＥ）、クロロホルムなどのハロゲン系溶媒、およびＮ，Ｎ－ジメチルホルムアミド（ＤＭＦ）、Ｎ－メチル－２－ピロリドン（ＮＭＰ）、Ｎ，Ｎ－ジメチルアセトアミド（ＤＭＡ）、Ｎ－エチル－２－ピロリドン（ＮＥＰ）、Ｎ－ブチル－２－ピロリドン（ＮＢＰ）などのアミド系溶媒、Ｎ，Ｎ，Ｎ′，Ｎ′－テトラメチル尿素（ＴＭＵ）、Ｎ，Ｎ’－ジメチルプロピレン尿素（ＤＭＰＵ）、１，３－ジメチル－２－イミダゾリジノン（ＤＭＩ）などのウレア系溶媒、ジメチルスルホキシド（ＤＭＳＯ）などのスルホキシド系溶媒、アニソール、トルエン、α，α，α－トリフルオロトルエン、１，２－ジクロロベンゼン、ベンゼンなどの芳香族系溶媒から選択される溶媒中（単一の溶媒を用いてもよいし、複数の溶媒を組み合わせた混媒を用いてもよい）で、４０～１２０℃、６０～１００℃、または７５～８５℃の温度で、１－エチル－２，２，４，４，４－ペンタキス（ジメチルアミノ）－２λ^5，４λ^5－カテナジ（ホスファゼン）（Ｐ２Ｅｔ）、１－ｔｅｒｔ－ブチル－２，２，４，４，４－ペンタキス（ジメチルアミノ）－２λ^5，４λ^5－カテナジ（ホスファゼン）（Ｐ２ｔＢｕ）、ｔｅｒｔ－ブチルイミノ－トリス（ジメチルアミノ）ホスホラン（Ｐ１ｔＢｕ）、２－ｔｅｒｔ－ブチルイミノ－２－ジエチルアミノ－１，３－ジメチルパーヒドロ－１，３，２－ジアザホスホリン（ＢＥＭＰ）、ｔｅｒｔ－ブチルイミノ－トリ（ピロリジノ）ホスホラン（ＢＴＰＰ）、ｔｅｒｔ－ブチルイミノ－トリ（ピロリジノ）ホスホラン（ＢＴＰＰ）、１，１，３，３－テトラメチルグアニジン（ＴＭＧ）、２－ｔｅｒｔ－ブチル－１，１，３，３－テトラメチルグアニジン（ＢＴＭＧ）、１，８－ジアザビシクロ［５．４．０］ウンデカ－７－エン（ＤＢＵ）、７－メチル－１，５，７－トリアザビシクロ［４．４．０］デカ－５－エン（ＭＴＢＤ）、１，５，７－トリアザビシクロ［４．４．０］デカ－５－エン（ＴＢＤ）および炭酸セシウム（Cs_2CO_3）から選択される塩基を用いて行うことができる。

【００９６】

本発明の一つの側面において、アルキル化されうる窒素原子が存在する基質において選択的にフェノール性水酸基をアルキル化することができ、目的の化合物を高収率で得て、副生成物の発生を抑制することができる。一つの態様において、基質が酸性官能基としてフェノール性水酸基とアルキル化されうる窒素原子を含む１以上の化合物を含み、該基質の中で最もアルキル化が進行する窒素原子を有する化合物において、フェノール性水酸基

のアルキル化（アルキル化Ａ）と窒素原子のアルキル化（アルキル化Ｃ）による生成物の生成比（アルキル化Ａ／アルキル化Ｃ）が１．５以上、３以上、５以上、７以上、９以上、１０以上、１２以上、１５以上、２０以上、３０以上、または５０以上である。ここで、生成比はアルキル化Ａによる生成物とアルキル化Ｃによる生成物のそれぞれの生成量を通常行われる分析方法、例えば、ＨＰＬＣを用いての定量分析により求めることができる。アルキル化されうる窒素原子は、本発明のアルキル化反応の条件によりアルキル化が進行する窒素原子であれば特に限定されず、例えば、ピリジン環の環窒素原子、３級アミンの窒素原子、アシルスルホンアミドの窒素原子、ジアリールアミンの窒素原子、アルキルアリールアミンの窒素原子、アニリンの窒素原子、アミドの窒素原子、スルホンアミドの窒素原子などが例示される。特に、ピリジン環の環窒素原子のアルキル化により副生成物が発生することが確認されており、本発明の一つの態様において、アルキル化Ｃはピリジン環の環窒素原子のアルキル化である。アルキル化Ａとアルキル化Ｃの生成比は反応終了時に確認することができ、例えば、フェノール性水酸基を有するアルキル化Ａの原料が消失した時点において生成比を測定することができる。

【００９７】

以下に、本発明を参考例及び実施例を用いてより詳細に説明するが、本発明はこれら実施例に限定されるものではない。なお、本明細書において、「フェノール」と記載した場合、フェノールそのものに加えて、フェノール骨格の任意の箇所に任意の置換基を有する化合物を意味する場合がある。さらに、本明細書において、「ピリジノール」と記載した場合には、ピリジン環の任意の炭素上に水酸基を有する化合物のことを意味し、該化合物は任意の箇所に任意の置換基を有する場合がある。

【実施例】

【００９８】

全ての出発物質、試薬および溶媒は商業的供給業者から入手、もしくは公知の方法を用いて合成した。試薬および溶媒は試薬品質またはそれ以上を有し、別記されない限り、様々な商業的供給元から得られたまま使用した。

化合物のＨＰＬＣ精製時にはＵＶ－Ｄｉｒｅｃｒｅｄ ＡｕｔｏＰｕｒｉｆｉｃａｔｉｏｎＳｙｓｔｅｍ、ＭＳ－Ｄｉｒｅｃｒｅｄ ＡｕｔｏＰｕｒｉｆｉｃａｔｉｏｎ Ｓｙｓｔｅｍ（Ｗａｔｅｒｓ製，２５４５，２５４５－ＳＱＤ２＆２５４５－ＳＱＤ２－ＥＬＳＤ）もしくはＴｒｉｌｕｔｉｏｎ（Ｇｉｌｓｏｎ社製）などを用いて行った。

【００９９】

カラムクロマトグラフィーのシリカゲルはＳＨＯＫＯ Ｓｃｉｅｎｔｉｆｉｃ Ｐｕｒｉｆ－Ｐａｃｋ（登録商標）ＳＩ（６０μｍ），ＳＨＯＫＯ Ｐｕｒｉｆ－Ｐａｃｋ（登録商標）－ＥＸ ＳＩ（５０μｍ）、Ｂｉｏｔａｇｅ（登録商標）ＳＮＡＰ Ｃａｒｔｒｉｄｇｅ ＫＰ－Ｓｉｌ、Ｂｉｏｔａｇｅ（登録商標）、ＳＮＡＰ Ｕｌｔｒａ、Ｂｉｏｔａｇｅ（登録商標）Ｓｆａｅｒ Ｄ（Ｄｕｏ）（６０μｍ）もしくはＢｉｏｔａｇｅ（登録商標）Ｓｆａｅｒ ＨＣ Ｄ（Ｄｕｏ）（２０μｍ）などを適宜用いた。

【０１００】

カラムクロマトグラフィーのアミノシリカゲルは、ＳＨＯＫＯ Ｐｕｒｉｆ－Ｐａｃｋ（登録商標）－ＥＸ ＮＨ（５０μｍ）、Ｂｉｏｔａｇｅ（登録商標）ＳＮＡＰ Ｉｓｏｌｕｔｅ ＮＨ２（５０μｍ）もしくはＢｉｏｔａｇｅ（登録商標）ＳＮＡＰ Ｃａｒｔｒｉｄｇｅ ＫＰ－ＮＨなどを適宜用いた。

カラムクロマトグラフィーの逆相シリカゲルは、ＳＨＯＫＯ Ｐｕｒｉｆ－Ｐａｃｋ（登録商標）－ＥＸ ＯＤＳ（５０μｍ）、Ｂｉｏｔａｇｅ（登録商標）ＳＮＡＰ Ｕｌｔｒａ Ｃ１８（２５μｍ）もしくはＢｉｏｔａｇｅ（登録商標）Ｓｆａｅｒ Ｃ１８（３０μｍ）などを適宜用いた。

【０１０１】

^{1}Ｈ－ＮＭＲ、^{13}Ｃ－ＮＭＲスペクトルは内部標準物質としてMe_4Siを使用し、もしくは使用せずに、ＥＣＰ－４００（ＪＥＯＬ社製）、Ａｇｉｌｅｎｔ４００－ＭＲ（アジレント・テクノロジー社製）、ＡＶＡＮＣＥ３ Ｃｒｙｏ－ＴＣＩ，ＡＶＡＮＣＥ３ ４０

０，ＡＶＡＮＣＥ３ ＨＤ ４００，ＡＶＡＮＣＥ ＮＥＯ ４００，ＡＶＡＮＣＥ３ ＨＤ ３００，ＡＶＡＮＣＥ３ ３００，ＡＶＡＮＣＥ２ ３００もしくは ＡＶＡＮＣＥ ＮＥＯ ３００（Ｂｒｕｋｅｒ社製）などを適宜用いて測定した（ｓ＝シングレット、ｂｒｓ＝ブロードシングレッド、ｄ＝ダブレット、ｔ＝トリプレット、ｑ＝カルテット、ｄｄ＝ダブルダブレット、ｄｄｄ＝ダブルダブルダブレット、ｄｔ＝ダブルトリプレット、ｔｄ＝トリプルダブレット、ｍ＝マルチプレット）。

【０１０２】

反応追跡ならびに純度測定は、特に記載がない限り、質量分析装置、ＳＱＤ（Ｗａｔｅｒｓ製）もしくは２０２０（Ｓｈｉｍａｄｚｕ製）を用いて以下の表に示した分析条件により、保持時間の測定と質量分析を実施することで行った。

【０１０３】

実施例中では以下の略号を使用した。

【表１】

ＡＣ	炭酸水素アンモニウム
ＡｃＯＨ	酢酸
ａｒｅａ％	ＵＶ面積％
ＡＳ－ＭＳ	アフィニティセレクション質量分析
ＢＥＭＰ	2-tert-ブチルイミノ-2-ジエチルアミノ-1,3-ジメチルペルヒドロ-1,3,2-ジアザホスホリン CAS: 98015-45-3
ＢＩＮＡＰ	2,2′-ビス（ジフェニルホスフィノ）-1,1′-ビナフチル CAS: 98327-87-8
Ｂｏｃ	tert-ブトキシカルボニル基
ｂｒｉｎｅ	飽和食塩水
ＢＴＰＰ	tert-ブチルイミノ-トリ(ピロリジノ)ホスホラン　または

	ホスファゼン塩基P1-t-Bu-トリス(テトラメチレン) CAS: 161118-67-8
CH_3CN	アセトニトリル
Cs_2CO_3	炭酸セシウム
CsF	フッ化セシウム CAS: 13400-13-0
CuI	ヨウ化銅
DCE	1，2－ジクロロエタン
DCM	ジクロロメタン
DHP	3，4－ジヒドロ－2H－ピラン CAS: 110-87-2
DIC	N，N'-ジイソプロピルカルボジイミド
Dioxane	1，4－ジオキサン
DIPEA	N，N－ジイソプロピルエチルアミン
DMAP	N，N－ジメチル－4－アミノピリジン
DME	1，2－ジメトキシエタン
DMF	N，N－ジメチルホルムアミド
DMI	1，3－ジメチル－2－イミダゾリジノン
DMSO	ジメチルスルホキシド
EDCI・HCl	1－エチル－3－（3－ジメチルアミノプロピル）カルボジイミド塩酸塩
EtOAc	酢酸エチル
EtOH	エタノール
Et_3PO_4	リン酸トリエチル
FA	ギ酸
HATU	O－（7－アザ－1H－ベンゾトリアゾール－1－イル）－N，N，N′，N′－テトラメチルウロニウム　ヘキサフルオロリン酸塩
HCl	塩酸
H_2O	水

HOAt	1-ヒドロキシベンゾトリアゾール
K_2CO_3	炭酸カリウム
KOtBu	カリウム　ｔｅｒｔ－ブトキシド
K_3PO_4	リン酸三カリウム
$K_3PO_4—H_2O$	リン酸三カリウム一水和物
ＬｉＯＨ	水酸化リチウム
ＭｅＣＮ	アセトニトリル
ＭｅＯＨ	メタノール
４－ＭｅＴＨＰ	4-メチルテトラヒドロピラン
$NaBH_3CN$	シアノ水素化ホウ素ナトリウム
ＮａＢＨ（ＯＡｃ）$_3$	ナトリウムトリアセトキシボロヒドリド
ＮＡＣ	Ｎ－アセチル－Ｌ－システイン
Na_2CO_3	炭酸ナトリウム
ＮａＨ	水素化ナトリウム
$NaHCO_3$	炭酸水素ナトリウム
ＮａＯＨ	水酸化ナトリウム
ＮａＯｔＢｕ	ナトリウム　ｔｅｒｔ－ブトキシド
Na_2SO_4	硫酸ナトリウム
NH_4Cl	塩化アンモニウム
NH_4HCO_3	炭酸水素アンモニウム
ＮＭＰ	Ｎ－メチル－２－ピロリドン
$P(Cy)_3Pd$　Ｇ３	トリシクロヘキシルホスフィン　パラジウム 第３世代触媒前駆体
［ＰｄＣｌ（ａｌｌｙｌ）］$_2$	アリルパラジウム(II)クロリド ダイマー CAS: 12012-95-2
$PdCl_2$（ＰＰｈ	ビス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(ＩＩ)ジクロリド CAS:

3）$_2$	13965-03-2
Pd_2（dba）$_3$－$CHCl_3$	トリス(ジベンジリデンアセトン)二パラジウム(0)(クロロホルム付加物) CAS: 52522-40-4
Pd（dppf）Cl_2・DCM	［1，1’－ビス（ジフェニルホスフィノ）フェロセン］ジクロロパラジウム（ＩＩ）ジクロロメタン複合体（１：１） CAS: 95464-05-4
Pd（dppf）Cl_2	１，１’－ビス（ジフェニルホスフィノ）フェロセンジクロロパラジウム（ＩＩ） ＣＡＳ：72287-26-4
Pd（PPh_3）$_4$	テトラキストリフェニルホスフィンパラジウム（０）
ｐｅｔ ｅｔｈｅｒ	石油エーテル
Ｐ２Ｅｔ	テトラメチル(トリス(ジメチルアミノ)ホスホラニリデン)リン酸トリアミド-エチル-イミン または、 1- エチル-2,2,4,4,4-ペンタキス(ジメチルアミノ)-2λ^5、4λ^5-カテナジ(ホスファゼン) もしくは、 ホスファゼン塩基Ｐ２Ｅｔ CAS: 165535-45-5
$pKBH^+$	塩基共役酸のｐＫａ
（PMB）$_2$NH	ビス（４－メトキシベンジル）アミン CAS: 17061-62-0
PPh_3	トリフェニルホスフィン
ＰＰＴＳ	ｐ－トルエンスルホン酸ピリジニウム
Ｐ１ｔＢｕ	tert-ブチルイミノ-トリス(ジメチルアミノ)ホスホラン CAS: 81675-81-2
Ｐ２ｔＢｕ	1- tert-ブチル-2,2,4,4,4-ペンタキス(ジメチルアミノ)-2λ^5,4λ^5-カテナジ(ホスファゼン) または、 ホスファゼン塩基Ｐ２－ｔ－Ｂｕ CAS: 111324-03-9
Ｒｏｃｈｅｌｌｅ塩	酒石酸ナトリウムカリウム 四水和物

tBu_3P	トリ-ｔｅｒｔ－ブチルホスフィン CAS: 13716-12-6
ＴＥＡ	トリエチルアミン
Ｔｅｍｐ.	温度
ＴＦＡ	トリフルオロ酢酸
ＴＨＦ	テトラヒドロフラン
ＴＨＰ	テトラヒドロピラニル基
$Ti(OtBu)_4$	オルトチタン酸テトラｔｅｒｔ－ブチル　ＣＡＳ：3087-39-6
ＴＭＡＦ	テトラメチルアンモニウム フルオリド CAS: 373-68-2
ＴＭＳ	トリメチルシリル基
Ｘａｎｔｐｈｏｓ Ｐｄ Ｇ４	Xantphos パラジウム 第４世代触媒前駆体 CAS: 1621274-19-8
Ｘｐｈｏｓ Ｐｄ Ｇ４	(2-ジシクロヘキシルホスフィノ-2′,4′,6′-トリイソプロピル-1,1′-ビフェニル)[2-(2′-アミノ-1,1′-ビフェニル)　パラジウム 第４世代触媒前駆体　CAS: 1599466-81-5

【０１０４】
ＬＣＭＳの分析条件は表ＬＣ０１、表ＬＣ０２、および表ＬＣ０３に記載した。
[表ＬＣ０１]

【表２】

	分析名	装置	カラム	移動相		勾配	note		
				A	B		波長	Temp (℃)	Flow rate (mL/min)
FA	PH-FA-01	Shimadzu -2020	HALO 2.0 um C18 90A 3.0 mm I.D.x30 mm L 2.0 um	0.1% FA H_2O	0.1% FA MeCN	A/B = 95/5 to 5/95 (1.10 min) → 5/95 to 5/95 (0.5 min) → 5/95 to 95/5 (0.1 min)	(PDA total) 190 ~ 400 nm	40	1.5
	PH-FA-02	Shimadzu -2020	Ascentis Express C18 2.1 mm I.D. x 50 mm L 2.7 um	0.1% FA H_2O	0.1% FA MeCN	A/B = 95/5 to 0/100 (1.0 min) → 0/100 to 0/100 (0.5 min) → 0/100 to 95/5 (0.1 min)	(PDA total) 190 ~ 400 nm	40	1.0
	PH-FA-03	Shimadzu -2020	Ascentis Express C18 2.1 mm I.D. x 50 mm L 2.7 um	0.1% FA H_2O	0.1% FA MeCN	A/B = 95/5 to 5/95 (2.0 min) → 5/95 to 5/95 (0.7 min) → 5/95 to 95/5 (0.1 min)	(PDA total) 190 ~ 400 nm	40	1.0
	PH-FA-04	Shimadzu -2020	YMC-TriartC18 3.0 mm I.D. x 50 mm L 2.5 um	0.1% FA H_2O	0.1% FA MeCN	A/B = 95/5 to 5/95 (1.1 min) → 5/95 to 5/95 (0.6 min) → 5/95 to 95/5 (0.05 min)	(PDA total) 190 ~ 400 nm	40	1.2
	PH-FA-05	Shimadzu -2020	Halo C18 2.1 mm I.D.x50 mm L 2.0 um	0.1% FA H_2O	0.1% FA MeCN	A/B = 95/5 to 0/100 (0.7 min) → 0/100 to 0/100 (0.4 min) → 0/100 to 95/5 (0.1 min)	(PDA total) 190 ~ 400 nm	40	1.0
	PH-FA-06	Shimadzu -2020	Halo C18 2.1 mm I.D.x30 mm L 2.0 um	0.1% FA H_2O	0.1% FA MeCN	A/B = 95/5 to 0/100 (1.2 min) → 0/100 to 0/100 (0.6 min) → 0/100 to 95/5 (0.1 min)	(PDA total) 190 ~ 400 nm	40	1.0
	PH-FA-07	Shimadzu -2020	HALO C18 90A 3.0 mm I.D.x30 mm L 2.0 um	0.1% FA H_2O	0.1% FA MeCN	A/B = 95/5 to 0/100 (1.0 min) → 0/100 to 0/100 (0.5 min) → 0/100 to 95/5 (0.1 min)	(PDA total) 190 ~ 400 nm	40	1.5
TFA	PH-TFA-01	Shimadzu -2020	Shim-pack XR ODS-C18 3.0 mm I.D.x50 mm L 2.2 um	0.05% TFA H_2O	0.05% TFA MeCN	A/B = 95/5 to 5/95 (1.1 min) → 5/95 to 5/95 (0.6 min) → 5/95 to 95/5 (0.05 min)	(PDA total) 190 ~ 400 nm	40	1.2
	PH-TFA-02	Shimadzu -2020	Shim-pack XR ODS-C18 3.0 mm I.D.x50 mm L 2.2 um	0.05% TFA H_2O	0.05% TFA MeCN	A/B = 95/5 to 5/95 (1.0 min) → 5/95 to 5/95 (0.55 min) → 5/95 to 95/5 (0.10 min)	(PDA total) 190 ~ 400 nm	40	1.2
	PH-TFA-03	Shimadzu -2020	Shim-pack XR ODS-C18 3.0 mm I.D.x50 mm L 2.2 um	0.05% TFA H_2O	0.05% TFA MeCN	A/B = 95/5 to 5/95 (2.0 min) → 5/95 to 5/95 (0.7 min) → 5/95 to 95/5 (0.05 min)	(PDA total) 190 ~ 400 nm	40	1.2
	PH-TFA-04	Shimadzu -2020	Shim-pack XR ODS-C18 3.0 mm I.D.x50 mm L 2.2 um	0.05% TFA H_2O	0.05% TFA MeCN	A/B = 95/5 to 30/70 (3.0 min) → 30/70 to 5/95 (0.3 min) → 5/95 to 5/95 (0.45 min) → 5/95 to 95/5 (0.05min)	(PDA total) 190 ~ 400 nm	40	1.2

【０１０５】

【表３】

TFA	PH-TFA-05	Shimadzu-2020	Shim-pack XR ODS-C18 3.0 mm I.D.x50 mm L 2.2 um	0.05% TFA H_2O	0.05% TFA MeCN	A/B = 95/5 to 40/60 (4.0 min) → 40/60 to 5/95 (0.3 min) → 5/95 to 5/95 (0.45 min) → 5/95 to 95/5 (0.05min)	(PDA total) 190 ~ 400 nm	40	1.2
	PH-TFA-06	Shimadzu-2020	Shim-pack XR ODS-C18 3.0 mm I.D.x50 mm L 2.2 um	0.05% TFA H_2O	0.05% TFA MeCN	A/B = 70/30 to 30/70 (3.6 min) → 30/70 to 5/95 (0.4 min) → 5/95 to 5/95 (0.6 min) → 5/95 to 95/5 (0.15min)	(PDA total) 190 ~ 400 nm	40	1.2
	PH-TFA-07	Shimadzu-2020	Shim-pack XR ODS-C18 3.0 mm I.D.x50 mm L 2.2 um	0.05% TFA H_2O	0.05% TFA MeCN	A/B = 70/30 to 30/70 (3.8 min) → 30/70 to 0/100 (0.3 min) → 0/100 to 0/100 (0.5 min) → 0/100 to 95/5 (0.1 min)	(PDA total) 190 ~ 400 nm	40	1.2
	PH-TFA-08	Shimadzu-2020	Shim-pack XR ODS-C18 3.0 mm I.D.x50 mm L 2.2 um	0.05% TFA H_2O	0.05% TFA MeCN	A/B = 70/30 to 5/95 (2.2 min) → 5/95 to 5/95 (0.5 min) → 5/95 to 95/5 (0.05 min)	(PDA total) 190 ~ 400 nm	40	1.2
	PH-TFA-09	Shimadzu-2020	Halo C18 2.1 mm I.D.x30 mm L 2.0 um	0.05% TFA H_2O	0.05% TFA MeCN	A/B = 95/5 to 0/100 (0.7 min) → 0/100 to 0/100(0.25 min) → 0/100 to 95/5 (0.03 min)	(PDA total) 190 ~ 400 nm	40	0.8
	PH-TFA-10	Shimadzu-2020	Ascentis Express C18 3.0 mm I.D.x50 mm L 2.7 um	0.05% TFA H_2O	0.05% TFA MeCN	A/B = 95/5 to 0/100 (1.1 min) → 0/100 to 0/100(0.5 min) → 0/100 to 95/5 (0.1 min)	(PDA total) 190 ~ 400 nm	40	1.0
	PH-TFA-11	Shimadzu-2020	Ascentis Express C18 3.0 mm I.D.x50 mm L 2.7 um	0.05% TFA H_2O	0.05% TFA MeCN	A/B = 95/5 to 5/95 (1.1 min) → 5/95 to 5/95 (0.6 min) → 95/5 to 5/95 (0.05 min)	(PDA total) 190 ~ 400 nm	40	1.0
	PH-TFA-12	Shimadzu-2020	Ascentis Express C18 3.0 mm I.D.x50 mm L 2.7 um	0.05% TFA H_2O	0.05% TFA MeCN	A/B = 95/5 to 5/95 (1.1 min) → 5/95 to 5/95 (0.5 min) → 95/5 to 5/95 (0.05 min)	(PDA total) 190 ~ 400 nm	40	1.0
	PH-TFA-13	Shimadzu-2020	HALO C18 90A 3.0 mm I.D.x30 mm L 2.0 um	0.05% TFA H_2O	0.05% TFA MeCN	A/B = 95/5 to 0/100 (1.1 min) → 0/100 to 0/100(0.6 min) → 0/100 to 95/5 (0.1 min)	(PDA total) 190 ~ 400 nm	40	1.3
AC	PH-AC-01	Shimadzu-2020	Kinetex EVO C18 2.1 mm I.D.x 50 mm L 2.6 um	H_2O + 6.5 mM NH_4HCO_3 pH10-	MeCN	A/B = 90/10 to 5/95 (2.0 min) → 5/95 to 5/95 (0.7 min) → 5/95 to 90/10 (0.1 min)	(PDA total) 190 ~ 400 nm	35	1.0
	PH-AC-02	Shimadzu-2020	Kinetex EVO C18 2.1 mm I.D. x 50 mm L 2.6 um	H_2O + 6.5 mM NH_4HCO_3 pH10-	MeCN	A/B = 90/10 to 40/60 (3.0 min) → 40/60 to 5/95 (0.3 min) → 5/95 to 5/95 (0.45 min) → 5/95 to 90/10 (0.05 min)	(PDA total) 190 ~ 400 nm	35	1.0
	PH-AC-03	Shimadzu-2020	Kinetex EVO 3.0 mm I.D.x 50 mm L 2.6 um	H_2O + 5 mM NH_4HCO_3	MeCN	A/B = 90/10 to 5/95 (1.10 min) → 5/95 to 5/95 (0.7 min) → 5/95 to 90/10 (0.05 min)	(PDA total) 190 ~ 400 nm	40	1.0

【０１０６】
［表ＬＣ０２］

【表４】

分析メソッド名	装置	カラム	移動相		勾配	Flow rate	波長
			A	B			
SMD－FA05－1	nexera/2020	Ascentis Express C18 2.1mmI.D.x50mm,2.7um	0.1% FA H_2O	0.1% FA MeCN	A/B = 95/5→0/100(1.5min) → 0/100(0.5min)	1 mL/min	(PDA total) 210 ~ 400 nm
SMD－FA05－long25min	nexera/2020	Ascentis Express C18 2.1mmI.D.x150mm,2.7um	0.1% FA H_2O	0.1% FA MeCN	A/B = 95/5→95/5(1min)→ 0/100(15min)→0/100(4min)	0.5mL/min	(PDA total) 210 ~ 400 nm
SMD－FA05－long25min	nexera/2020	Ascentis Express C18 2.1mmI.D.x150mm,2.7um	0.1% FA H_2O	0.1% FA MeCN	A/B = 95/5→0/100(15min)→ 0/100(5min)	0.5mL/min	(PDA total) 210 ~ 400 nm
SMD－FA05－RP	nexera/2020	Ascentis Express RP-Amide 2.1mmI.D.x50mm,2.7um	0.1% FA H_2O	0.1% FA MeCN	A/B = 95/5→0/100(1.5min)→ 0/100(0.5min)	1 mL/min	(PDA total) 210 ~ 400 nm
SMD－AC05－1	nexera/2020	Ascentis Express C18 2.1mmI.D.x50mm,2.7um	10 mM NH_4HCO_3 H_2O	MeCN	A/B = 95/5→5/95(1.5min)→ 5/95(0.5min)	1 mL/min	(PDA total) 210 ~ 400 nm
SMD－TFA05－long	nexera/2020	Ascentis Express RP-Amide 2.1mmI.D.x50mm,2.7um	0.05%TFA H2O	0.05%TFA MeCN	A/B = 95/5→0/100(4.5min)→ 0/100(0.5min)	1 mL/min	(PDA total) 210 ~ 400 nm
SQD－FA05－2	Acquity UPLC/SQD 2	Ascentis Express C18 2.1mmI.D.x50mm,2.7um	0.1% FA H_2O	0.1% FA MeCN	A/B = 95/5→0/100(1.0min)→ 0/100(0.4min)	1 mL/min	(PDA total) 210 ~ 400 nm

【０１０７】

［表ＬＣ０３］

【表５】

	分析名	装置	カラム	移動相		勾配	note		
				A	B		波長	Temp (℃)	Flow rate (mL/min)
FA	PH-FA-08	Shimadzu-2020	HALO C18 90A 3.0 mm I.D.x30 mm L 2.0 um	0.1% FA H_2O	0.1% FA MeCN	A/B = 95/5 to 5/95 (1.1 min) → 5/95 to 5/95 (0.6 min) → 5/95 to 95/5 (0.05 min)	(PDA total) 190 ~ 400 nm	40	1.5
TFA	PH-TFA-14	Shimadzu-2020	Shim-pack XR ODS-C18 3.0 mm I.D.x 50 mm L 2.2 um	0.05% TFA H_2O	0.05% TFA MeCN	A/B = 95/5 to 0/100 (1.1 min) → 0/100 to 0/100(0.6 min) → 0/100 to 95/5 (0.05 min)	(PDA total) 190 ~ 400 nm	40	1.2
	PH-TFA-15	Shimadzu-2020	Shim-pack XR ODS-C18 3.0 mm I.D.x 50 mm L 2.2 um	0.05% TFA H_2O	0.05% TFA MeCN	A/B = 95/5 to 0/100 (2.0 min) → 0/100 to 0/100(0.7 min) → 0/100 to 95/5 (0.05 min)	(PDA total) 190 ~ 400 nm	40	1.2
	PH-TFA-16	Shimadzu-2020	HALO C18 90A 3.0 mm I.D.x30 mm L 2.0 um	0.05% TFA H_2O	0.05% TFA MeCN	A/B = 70/30 to 30/70 (1.7 min) → 30/70 to 0/100 (0.6 min) → 0/100 to 0/100 (0.5 min) → 0/100 to 95/5 (0.03 min)	(PDA total) 190 ~ 400 nm	40	1.2
	PH-TFA-17	Shimadzu-2020	HALO C18 90A 3.0 mm I.D.x30 mm L 2.0 um	0.05% TFA H_2O	0.05% TFA MeCN	A/B = 80/20 to 40/60 (1.7 min) → 40/60 to 0/100 (0.6 min) → 0/100 to 0/100 (0.5 min) → 0/100 to 95/5 (0.03 min)	(PDA total) 190 ~ 400 nm	40	1.2
AC	PH-AC-04	Shimadzu-2020	Poroshell HPH-C18 3.0 mm I.D.x 50 mm L 2.7 um	H_2O + 5 mM NH_4HCO_3	MeCN	A/B = 90/10 to 5/95 (1.20 min) → 5/95 to 5/95 (0.5 min) → 5/95 to 90/10 (0.05 min)	(PDA total) 190 ~ 400 nm	40	1.2

【０１０８】

実施例中におけるＬＣＭＳの分析結果に表記しているｍ／ｚ［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$および（Ｍ＋Ｈ）$^{+}$という記載は、特に記載がない限り、すべてポジティブモードで検出された値を記載した。またＬＣＭＳにおけるＵＶ面積％は、特に記載がない限り、ＰＤＡ（１９０－４００ｎｍ、もしくは２１０－４００ｎｍ）における値を示した。特定の波長（例えば、２９０ｎｍ）を記載している場合には、記載した波長を中心に＋／－４ｎｍまでの波長におけるＵＶ面積％を記載した。

【０１０９】

「濃縮」、「減圧濃縮」または「減圧下濃縮」という表現は、ロータリー・エバポレーター、機械式オイル真空ポンプもしくは機械式オイルフリー真空ポンプによる減圧下での溶媒の蒸発除去を示す。

「Ｇｅｎｅｖａｃにて溶媒を減圧下留去」または「留去」という表現は、または、同時に複数の試料に対しては、遠心エバポレータシステム（Ｇｅｎｅｖａｃ社製、ＥＺ－２Ｅｌｉｔｅ、ＨＴ－６もしくはＨＴ－１２）を使用した溶媒の蒸発除去を示す。

【０１１０】

「減圧下で一晩乾燥」という表現は、ロータリー・エバポレーター、機械式オイル真空ポンプもしくは機械式オイルフリー真空ポンプによる減圧下での溶媒の蒸発除去を示す。

「一晩」、「終夜」という表現は、特に記載がない限り、８～１４時間程度を指すがこの限りではない。

【０１１１】

固相反応は、任意の適切な容器、例えばテフロンパッキンを備えたキャップにより密栓が可能なガラスバイアル、フリットフィルタおよび適切な栓を有するカラム中で実施することができる。容器サイズは、溶媒にとって十分な空間が存在し、かつ、ある一定の樹脂は、有機溶媒で処理すると、著しく膨潤する可能性があることを考慮して、樹脂が効果的に撹拌されるのに十分な余地があるようなサイズを適宜選択する。

固相反応における撹拌は、樹脂上での反応の成功に重要であると一般に認められる因子である十分な混合を確保するのに適切なシェーカー（例えば、東京理化機械社、ＥＹＥＬＡ、ＭＭＳ－３２０、ＭＭＳ－２２０Ｈ、もしくはアズワン、ＭｙＢＬ－１００ＣＳ、もしくはＴＡＩＴＥＣ、Ｍ・ＢＲ－１０４）を適宜用いて５０－２００ｒｐｍで実施した。

【０１１２】

固相反応において基質が混合物である場合の試薬類の当量は、固相側の混合物の各化合物が有する反応に用いる官能基のモル数の総和に対して、何倍（何当量）のモル数の試薬を用いるかを表す。例えば、１０当量と記載する場合には、固相側の混合物の各化合物が有する反応に用いる官能基のモル数の総和に対して、１０倍（１０当量）のモル数の試薬を用いることを表す。

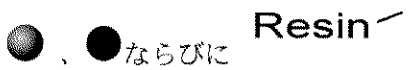
【０１１３】

また、液相反応において基質が混合物である場合の試薬類の当量は、混合物の各化合物が有する反応に用いる官能基のモル数の総和に対して、何倍（何当量）のモル数の試薬を用いるかを表す。例えば、１０当量と記載する場合には、混合物の各化合物が有する反応に用いる官能基のモル数の総和に対して、１０倍（１０当量）のモル数の試薬を用いることを表す。

【０１１４】

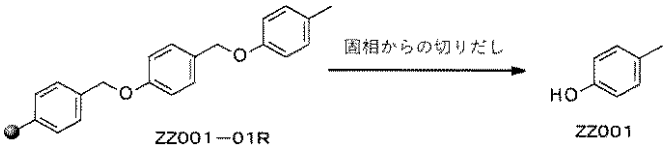
なお、混合物のモル数については、例えば、以下の場合が考えられる。特に記載がない限り、いずれの値を採用してもよい。あらかじめモル数が判明している個別の化合物を混合した場合には、その総和を混合物のモル数と考えてよい。また、固相合成において混合物を合成する場合には、調製した固相担持基質の担持量（ｍｍｏｌ／ｇ）に対し、使用した固相担持基質の量を乗じた値を足し合わせた総和を、混合物のモル数と考えてよい。その際、固相上での反応で複数工程を経た場合においても、それぞれの工程の変換率を１００％（すなわち、理論量）として考えてよく、また、固相から切り出した際には、切り出し効率１００％（すなわち、理論量が切り出された）として考え、続く液相での反応をおこなってもよい。

【０１１５】
固相反応における溶媒の使用量は、反応に使用したレジンの重量に対して任意の倍量の容量（ｖ／ｗ）を利用した。たとえば、２０ｍｇのレジンを使用し、２０ｖ／ｗの溶媒を使用した場合には、２０ｍｇ×２０ｖ／ｗ＝４００μＬの溶媒を使用した。
【０１１６】
反応後のレジンを洗浄する際に使用した溶媒の使用量は、反応に使用したレジンの重量に対して任意の倍量の容量（ｖ／ｗ）を利用した。たとえば、２０ｍｇのレジンを使用し、２０ｖ／ｗの溶媒を使用した場合には、２０ｍｇ×２０ｖ／ｗ＝４００μＬの溶媒を使用した。
【０１１７】
固相上での反応の進行をモニタリングするためには、反応容器からレジンを採取する必要がある。その際には、先端から適切な長さを切断したピペットチップを装着したマイクロピペットを用いて、必ずレジンが含まれるようにおよそ５－２０μＬ吸引することでレジンを採取し、フィルター付きのピペットチップ（例えば、Ｔｈｅｒｍｏ　Ｓｃｉｅｎｔｉｆｉｃ、ＡＲＴフィルター付チップＡＲＴ２０Ｐ、２１４９Ｐ－０５）のフィルター上に移した。その後、フィルター上のレジンについての下記の代表的な手順によってレジン上に担持された化合物をレジンから切断した。ＮＭＰで３回、ＭｅＯＨで３回、ＤＣＭで３回連続して洗浄し、その後、例えば０．０５Ｍトリメチルベンゼンを含む１０％ＴＦＡ／ＤＣＭ溶液（５０μＬ）をフィルターチップに加えて、３－１０分間レジンを浸した。フィルターチップの上から空気または窒素圧をかけて溶液をろ過し、ろ液をＮＭＰもしくはＤＭＩ（２５０μＬ）に溶解させた。その溶液（５０μＬ）をアセトニトリル（２５０μＬ）にて希釈することでＬＣサンプルを調製し、ＵＰＬＣ－ＭＳ測定により分析し、反応進行度を測定した。
【０１１８】
固相からの「切り出し」という表現は、レジンに担持された化合物のレジンからの脱離を示し、例えば０．０５Ｍトリメチルベンゼンを含む１０％ＴＦＡ／ＤＣＭ溶液などによってレジンを処理し、溶液中への担持化合物の回収を示す。
【０１１９】
実施例中にて使用している化合物番号は、任意のアルファベットと数字ならびに記号の組み合わせで示した。固相上に担持されている状態の化合物に対しては、末尾に「Ｒ」を付与し、例えば、「ＺＺ００１－０１Ｒ」と示した。これに対して固相から切り出した化合物は、「－０１Ｒ」を除いた「ＺＺ００１」と示した。
【０１２０】
実施例中の化学構造表記にて使用している、
【化１０】

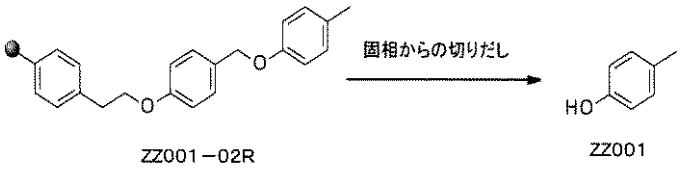


の表記はポリスチレン樹脂を示しており、化合物が固相上に担持されている状態を示す。
【０１２１】
実施例中にて使用している固相に担持された化合物出ることを示す「－０１Ｒ」のうち数字は用いたレジンの種類を示した。例えば、「－０１Ｒ」の「０１」は臭素化（ｂｒｏｍｉｎａｔｅｄ）Ｗａｎｇレジン、４－（ブロモメチル）フェノキシメチルポリスチレン（例えば、Ｍｅｒｃｋ社、４－（ベンジルオキシ）ベンジルブロミド，ポリマー担持）に対して、担持した状態の化合物を示す。「－０２Ｒ」の「０２」は、４－（ブロモメチル）フェノキシエチルポリスチレン（例えば、Ｍｅｒｃｋ社、２－（４－ブロモメチルフェノキシ）エチルポリスチレン、実施例中では修飾Ｗａｎｇレジンと表記することもある）に対して、担持した状態の化合物を示す。
【０１２２】

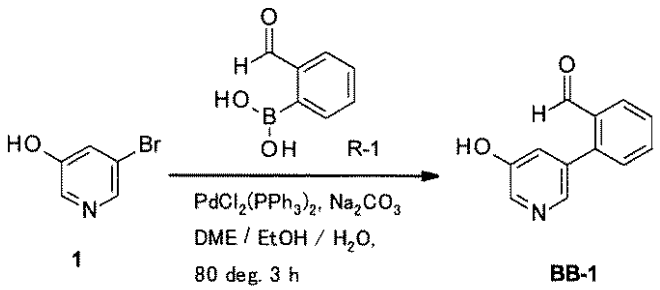
「－０１Ｒ」の表記例
【化１１】



【０１２３】
「－０２Ｒ」の表記例
【化１２】



【０１２４】
固相合成に用いた固相担持化合物には担持量（ｍｍｏｌ／ｇ）を示しているが、これは出発物質を固相に担持した際に算出した担持量（初期の担持量）を示している。ビルディングブロックの連結反応によって分子量の変化が生しるため、反応後の担持量は初期担持量とは異なることがあるが、合成工程を通じて初期の担持量を用いた。
固相担持された化合物が同一の場合においてもロットによって担持量は異なることもあるが、化合物番号については同一の化合物番号を用いていることもある。
【０１２５】
実施例１：本明細書中にて使用する化合物の合成
実施例１－１：アレノール化合物Ｂ－００１～Ｂ－０１５の合成法
実施例２以降で使用した基質（アレノール、モデル化合物）の合成法を、初めにアレノール化合物（Ｂ－００１～Ｂ－０１５）の合成に使用したビルディングブロックＢＢ－１～ＢＢ－６と中間体（ＩＮＴ１～ＩＮＴ７）の合成法から示す。
【０１２６】
実施例１－１－１：ビルディングブロックＢＢ－１～ＢＢ－６の合成
２－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）ベンズアルデヒド：ＢＢ－１の合成
【化１３】



【０１２７】
窒素雰囲気下５０ｍＬフラスコに、３－ヒドロキシー５－ブロモピリジン（１）（０．５ｇ，２．９ｍｍｏｌ，１．０ｅｑ）、２－ホルミルベンゼンボロン酸（Ｒ－１）（８６１．７ｍｇ，５．７ｍｍｏｌ，２．０ｅｑ）、Na_2CO_3（４５６．８ｍｇ，４．３ｍｍｏｌ，１．５ｅｑ）とＤＭＥ／ＥｔＯＨ／H_2O（４．０／４．０／１．７ｍＬ）の混合溶液を加えた。この懸濁液に、$PdCl_2$（PPh_3）$_2$（１００．８ｍｇ，１４０．０μｍｏｌ，０．０５ｅｑ）を加え、得られた反応混合物を窒素雰囲気下８０℃で３時間撹

拌した。室温に冷却後反応液をセライトでろ過し、セライトを酢酸エチル（２５ｍＬ）で３回洗浄した。ろ液を減圧下濃縮し、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製（０～８０％酢酸エチル／石油エーテル）し、２－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）ベンズアルデヒド（ＢＢ－１）を褐色固体として得た（３００ｍｇ，５１．４％）。

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：２００［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。

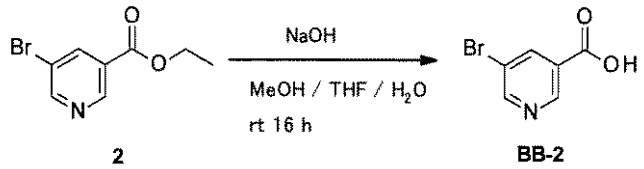
保持時間：０．３６７分。

分析条件：ＰＨ－ＦＡ－０１。

【０１２８】

５－ブロモピリジン－３－カルボン酸：ＢＢ－２の合成

【化１４】



2　　BB-2

【０１２９】

窒素雰囲気下２００ｍＬフラスコに、エチル　５－ブロモピリジン－３－カルボキシレート（２）（５．０ｇ，２１．８ｍｍｏｌ，１．０ｅｑ）とＭｅＯＨ／ＴＨＦ／Ｈ$_{2}$Ｏ（４０ｍＬ／４０ｍＬ／４０ｍＬ）の混合溶液を加えた。この溶液にＮａＯＨ（２．６ｇ，６５．５ｍｍｏｌ，３．０ｅｑ）を加え、得られた反応混合物を室温で１６時間撹拌し、減圧下濃縮した。

残渣を水（５０ｍＬ）に溶解し、クエン酸を用いｐＨを５－６の酸性に調整した。得られた固体をろ過し、フィルター上の固体を水（２０ｍＬ）で３回洗浄し、減圧下、定温乾燥機を使用して３０℃で１６時間乾燥し、５－ブロモピリジン－３－カルボン酸（ＢＢ－２）をオフホワイト固体として得た（３．４ｇ）。得られた固体はこれ以上の精製は行わずに、次の工程に使用した。

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：２０２，２０４［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。

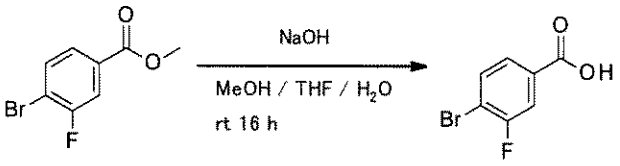
保持時間：０．６７３分。

分析条件：ＰＨ－ＦＡ－０２。

【０１３０】

４－ブロモ－３－フルオロ安息香酸：ＢＢ－３の合成

【化１５】



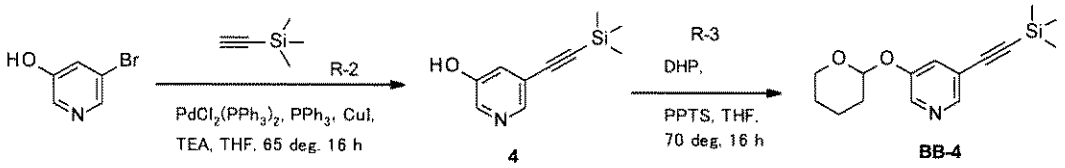
3　　BB-3

【０１３１】

窒素雰囲気下１００ｍＬフラスコに、メチル　４－３－フルオロベンゾアート（３）（１．０ｇ，４．３ｍｍｏｌ，１．０ｅｑ）とＭｅＯＨ／ＴＨＦ／Ｈ$_{2}$Ｏ（７．０ｍＬ／７．０ｍＬ／７．０ｍＬ）の混合溶液を加えた。この溶液にＮａＯＨ（０．５ｇ，１２．９ｍｍｏｌ，３．０ｅｑ）を加え、得られた反応混合物を室温で１６時間撹拌し、減圧下濃縮した。

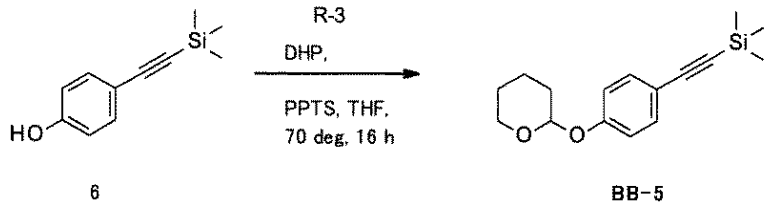
残渣を水（２０ｍＬ）に溶解し、２Ｍ　ＨＣｌを用いｐＨを５－６の酸性に調整した。得られた固体をろ過し、フィルター上の固体を水（１０ｍＬ）で３回洗浄し、減圧下、定温乾燥機を使用して５０℃で１６時間乾燥し、４－ブロモ－３－フルオロ安息香酸（ＢＢ－

３）をオフホワイト固体として得た（０．９ｇ，９５．８％）。
ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：親イオンが検出されなかった。
保持時間：０．８７４分。
分析条件：ＰＨ－ＦＡ－０２。
【０１３２】
トリメチル－［２－［５－（オキサン－２－イルオキシ）ピリジン－３－イル］エチニル］シラン：ＢＢ－４の合成
【化１６】



【０１３３】
第一工程：５－（２－トリメチルシリルエチニル）ピリジン－３－オール：化合物４の合成
窒素雰囲気下５０ｍＬフラスコに、３－ヒドロキシ－５－ブロモピリジン（１）（１．０ｇ，５．７ｍｍｏｌ，１．０ｅｑ）、ＴＥＡ（８．０ｍＬ）とＴＨＦ（１０ｍＬ）を加えた。この溶液にトリメチルシリルアセチレン（Ｒ－２）（８５０ｍｇ，８．６ｍｍｏｌ，１．５ｅｑ）、ＣｕＩ（１１０ｍｇ，０．６ｍｍｏｌ，０．１ｅｑ），PPh_3（１５０ｍｇ，０．６ｍｍｏｌ，０．１ｅｑ）と、$PdCl_2(PPh_3)_2$（４００ｍｇ，０．６ｍｍｏｌ，０．１ｅｑ）を加え、得られた反応混合物を窒素雰囲気下６５℃で１６時間撹拌した。室温に冷却後反応液をセライトでろ過し、セライトを酢酸エチル（２５ｍＬ）で７回洗浄した。ろ液を減圧下濃縮し、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製（０～１０％ＭｅＯＨ／ＤＣＭ）し、５－（２－トリメチルシリルエチニル）ピリジン－３－オール（化合物４）を褐色固体として得た（５．１ｇ，６６．０％）。
ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：１９２［Ｍ＋Ｈ］$^+$。
保持時間：０．８１８分。
分析条件：ＰＨ－ＦＡ－０１。
【０１３４】
第二工程：トリメチル－［２－［５－（オキサン－２－イルオキシ）ピリジン－３－イル］エチニル］シラン：化合物ＢＢ－４の合成
窒素雰囲気下２００ｍＬフラスコに、５－（２－トリメチルシリルエチニル）ピリジン－３－オール（化合物４）（２．６ｇ，１３．６ｍｍｏｌ，１．０ｅｑ）、ＤＨＰ（Ｒ－３）（８．０ｇ，９５．１ｍｍｏｌ，７．０ｅｑ）とＴＨＦ（５０ｍＬ）を加えた。この溶液にＰＰＴＳ（１７０ｍｇ，０．７ｍｍｏｌ，０．０５ｅｑ）を加え、得られた反応混合物を７０℃で１６時間撹拌した。室温に冷却後、反応液を減圧下濃縮した。残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製（０～８０％酢酸エチル／石油エーテル）し、トリメチル－［２－［５－（オキサン－２－イルオキシ）ピリジン－３－イル］エチニル］シラン（ＢＢ－４）を黄色オイルとして得た（２．７ｇ，７２．０％）。
ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：２７６（Ｍ＋Ｈ）$^+$。
保持時間：１．２１４分。
分析条件：ＰＨ－ＦＡ－０２。
【０１３５】
トリメチル－［２－［４－（オキサン－２－イルオキシ）フェニル］エチニル］シラン：ＢＢ－５の合成

【化１７】



6　　BB-5

【０１３６】

窒素雰囲気下１００ｍＬフラスコに、４－（２－トリメチルシリルエチニル）フェノール（化合物６）（２．０ｇ，１０．５ｍｍｏｌ，１．０ｅｑ）、ＤＨＰ（Ｒ－３）（２．６ｇ，７．０ｅｑ）とＴＨＦ（２０ｍＬ）を加えた。この溶液にＰＰＴＳ（１３２．３ｍｇ，０．５ｍｍｏｌ，０．０５ｅｑ）を加え、得られた反応混合物を７０℃で１６時間撹拌した。室温に冷却後、反応液を減圧下濃縮した。残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー（０～２０％酢酸エチル／石油エーテル）で精製し、トリメチル－［２－［４－（オキサン－２－イルオキシ）フェニル］エチニル］シラン（ＢＢ－５）を褐色オイルとして得た（２．２ｇ，７６．０％）。

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：親イオンが検出されなかった。

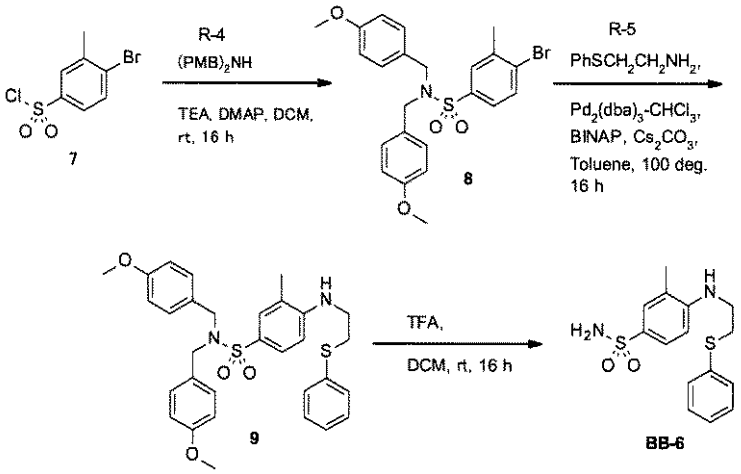
保持時間：１．３１３分。

分析条件：ＰＨ－ＦＡ－０２。

【０１３７】

３－メチル－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）ベンゼンスルホンアミド：ＢＢ－６の合成

【化１８】



【０１３８】

第一工程：４－ブロモ－Ｎ，Ｎ－ビス［（４－メトキシフェニル）メチル］－３－メチルベンゼンスルホンアミド（化合物８）の合成

窒素雰囲気下５００ｍＬフラスコに、４ブロモ－３－メチルベンゼンスルホン酸クロライド（７）（１０．０ｇ，３７．１ｍｍｏｌ，１．０ｅｑ）とＤＣＭ（２２０ｍＬ）を加えた。この溶液に（ＰＭＢ）$_2$ＮＨ（Ｒ－４）（１．４ｇ，５５．６ｍｍｏｌ，１．５ｅｑ），ＴＥＡ（７．５ｇ，７４．２ｍｍｏｌ，２．０ｅｑ）とＤＭＡＰ（４５３．２ｍｇ，３．７ｍｍｏｌ，０．１ｅｑ）を加え、得られた反応混合物を室温で１６時間撹拌した。反応液に水（１００ｍＬ）を添加し、ＤＣＭ（１５０ｍＬ）で３回抽出した。

【０１３９】

有機溶媒を混合し、Ｎａ$_2$ＳＯ$_4$で乾燥後ろ過し、ろ液を減圧下濃縮した。

残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製（０～４０％酢酸エチル／石油エーテル）し、４－ブロモ－Ｎ，Ｎ－ビス［（４－メトキシフェニル）メチル］－３－メチルベンゼンスルホンアミド（化合物８）をオフホワイト固体として得た（９．０ｇ，８９．９％）。

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：親イオンが検出されなかった。

保持時間：１．２３５分。

分析条件：ＰＨ－ＦＡ－０２。

【０１４０】

第二工程：Ｎ，Ｎ－ビス［（４－メトキシフェニル）メチル］－３－メチル－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）ベンゼンスルホンアミド（化合物９）の合成

窒素雰囲気下１００ｍＬフラスコに、４－ブロモ－Ｎ，Ｎ－ビス［（４－メトキシフェニル）メチル］－３－メチルベンゼンスルホンアミド（化合物８）（９．０ｇ，１８．３ｍｍｏｌ，１．０ｅｑ），２－（ベンゼンスルファニル）エタンアミン（Ｒ－５）（３．５ｇ，２２．９ｍｍｏｌ，１．２５ｅｑ）とCs_2CO_3（１７．９ｇ，５５．０ｍｍｏｌ，３．０ｅｑ）とトルエン（３０ｍＬ）を加えた。この懸濁液に$Pd_2(dba)_3$－$CHCl_3$（１．９ｇ，１．８ｍｍｏｌ，０．２ｅｑ）とＢＩＮＡＰ（２．３ｇ，３．７ｍｍｏｌ，０．２ｅｑ）を加え、得られた反応混合物を窒素雰囲気下、１００℃で１６時間撹拌した。室温に冷却後反応液をセライトでろ過し、セライトを酢酸エチル（２５ｍＬ）で３回洗浄した。ろ液を減圧下濃縮し、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製（０～８０％酢酸エチル／石油エーテル）し、Ｎ，Ｎ－ビス［（４－メトキシフェニル）メチル］－３－メチル－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）ベンゼンスルホンアミド（化合物９）を褐色オイルとして得た（１０．０ｇ，６７．８％）。

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：５６３．６$[M+H]^+$。

保持時間：１．６３０分。

分析条件：ＰＨ－ＴＦＡ－０１。

【０１４１】

第三工程：３－メチル－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）ベンゼンスルホンアミド：ＢＢ－６の合成

窒素雰囲気下５００ｍＬフラスコに、Ｎ，Ｎ－ビス［（４－メトキシフェニル）メチル］－３－メチル－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）ベンゼンスルホンアミド（化合物９）（１０．０ｇ，１７．８ｍｍｏｌ，１．０ｅｑ）とＤＣＭ（５０ｍＬ）を加えた。この溶液にＴＦＡ（１８０ｍＬ）を加え、得られた反応混合物を室温で１６時間撹拌し、反応液を減圧下濃縮した。残渣を逆相シリカゲルカラムクロマトグラフィー（Ｃ１８）で精製（０～８０％CH_3CN／水）し、３－メチル－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）ベンゼンスルホンアミド（ＢＢ－６）を淡黄色固体として得た（２．５ｇ，４３．６％）。

【０１４２】

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：３２３$[M+H]^+$。

保持時間：１．１７９分。

分析条件：ＰＨ－ＡＣ－０１。

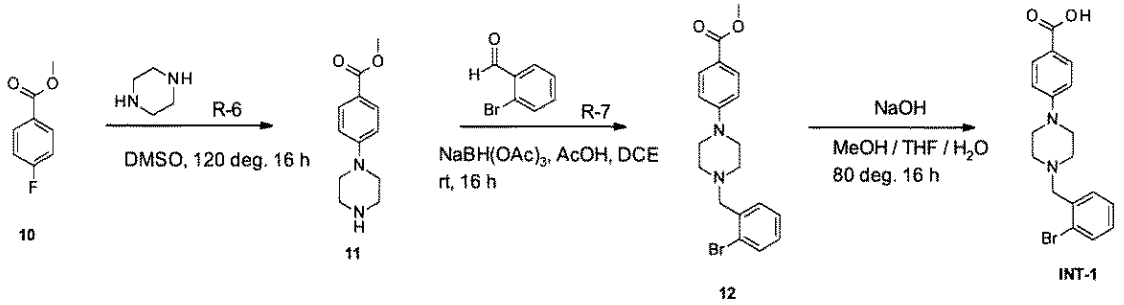
^{1}Ｈ－ＮＭＲ（３００ＭＨｚ，ＤＭＳＯ－d_6）δ７．５３－７．３０（ｍ，６Ｈ），７．２９－７．１６（ｍ，１Ｈ），６．１９（ｄ，Ｊ＝２．４Ｈｚ，２Ｈ），６．５４（ｄ，Ｊ＝８．４Ｈｚ，１Ｈ），５．７８（ｍ，１Ｈ），３．４０（ｍ，２Ｈ），３．１８（ｍ，２Ｈ），２．１０（ｓ，３Ｈ）。

【０１４３】

実施例１－１－２：中間体（ＩＮＴ１～ＩＮＴ７）の合成

４－［４－［（２－ブロモフェニル）メチル］ピペラジン－１－イル］安息香酸：ＩＮＴ１の合成

【化１９】



【０１４４】

第一工程：メチル　４－ピペラジン－１－イルベンゾアト（化合物１１）の合成

窒素雰囲気下５０ｍＬフラスコに、メチル　４－フルオロ－安息香酸（１０）（１．０ｇ，６．５ｍｍｏｌ，１．０ｅｑ）とＤＭＳＯ（１０ｍＬ）を加えた。この溶液に，ピペラジン（Ｒ－６）（１．７ｇ，１９．５ｍｍｏｌ，３．０ｅｑ）を加え、得られた反応混合物を１２０℃で１６時間撹拌した。反応液に水（２０ｍＬ）を添加し、析出した固体をろ過により回収しメチル　４－ピペラジン－１－イルベンゾアト（化合物１１）をオフホワイト固体として得た（１．３ｇ）。得られた固体はこれ以上の精製は行わずに、次の工程に使用した。

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：２２１［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。

保持時間：０．５２１分。

分析条件：ＰＨ－ＴＦＡ－０９。

【０１４５】

第二工程：メチル　４－［４－［（２－ブロモフェニル）メチル］ピペラジン－１－イル］ベンゾアト（化合物１２）の合成

窒素雰囲気下１００ｍＬフラスコに、メチル　４－ピペラジン－１－イルベンゾアト（化合物１１）（１．１ｇ，５．０ｍｍｏｌ，１．０ｅｑ）とＤＣＥ（２５ｍＬ）を加えた。この溶液に、２－ブロモベンズアルデヒド（Ｒ－７）（１．８ｇ，９．９ｍｍｏｌ，２．０ｅｑ）とＡｃＯＨ（０．６ｍＬ）を加え、得られた反応混合物を室温で１時間撹拌した。この反応液に$NaBH(OAc)_3$（４．２ｇ，２０．０ｍｍｏｌ，４．０ｅｑ）を加え、室温で１６時間撹拌した。反応液に飽和NH_4Cl水溶液（２０ｍＬ）を加え、酢酸エチル（５０ｍＬ）で３回抽出した。

有機溶媒を混合し、飽和$NaHCO_3$水溶液（１００ｍＬ）とｂｒｉｎｅ（１００ｍＬ）で洗浄、Na_2SO_4で乾燥後ろ過し、ろ液を減圧下濃縮した。

【０１４６】

残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製（０～５０％酢酸エチル／石油エーテル）し、メチル　４－［４－［（２－ブロモフェニル）メチル］ピペラジン－１－イル］ベンゾアト（化合物１２）をオフホワイト固体として得た（０．９ｇ，４６．３％）。

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：３８９，３９１［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。

保持時間：０．６２３分。

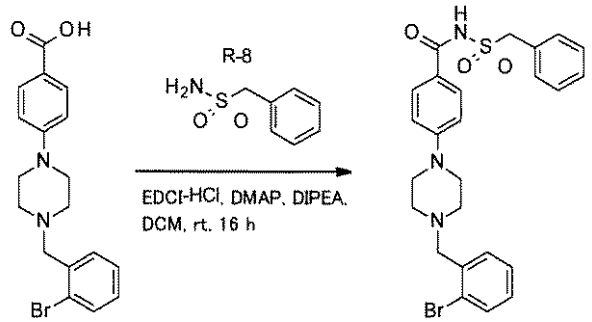
分析条件：ＰＨ－ＴＦＡ－０９。

【０１４７】

第三工程：４－［４－［（２－ブロモフェニル）メチル］ピペラジン－１－イル］安息香酸：ＩＮＴ１の合成

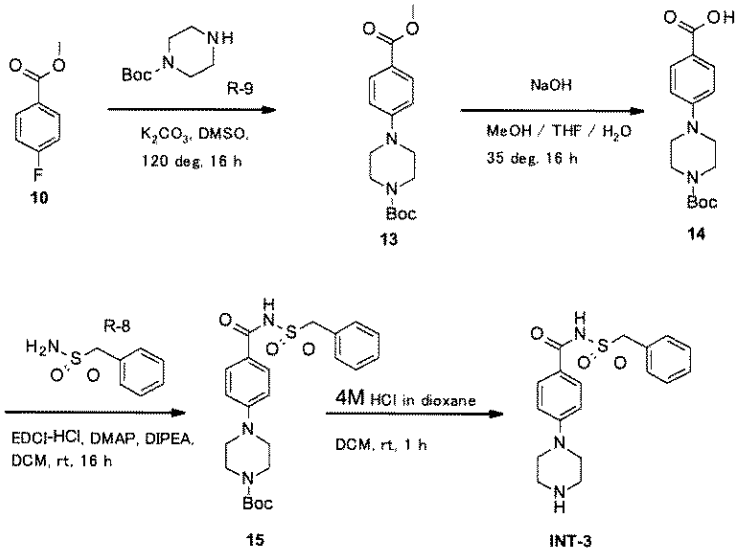
窒素雰囲気下１００ｍＬフラスコに、メチル　４－［４－［（２－ブロモフェニル）メチル］ピペラジン－１－イル］ベンゾアト（化合物１２）（１．１ｇ，２．７ｍｍｏｌ，１．０ｅｑ）とＭｅＯＨ／ＴＨＦ／H_2O（６．０ｍＬ／６．０ｍＬ／６．０ｍＬ）の混合溶液を加えた。この溶液にＮａＯＨ（０．３ｇ，８．２ｍｍｏｌ，３．０ｅｑ）を加え、得られた反応混合物を８０℃で１６時間撹拌し、反応液を室温に冷却後、減圧下濃縮し

た。
残渣を水（２０ｍＬ）に溶解し、濃塩酸を用いｐＨを２－３の酸性に調整した。得られた固体をろ過し、回収した。回収した固体を石油エーテルを使用して粉砕洗浄により精製し、４－［４－［（２－ブロモフェニル）メチル］ピペラジン－１－イル］安息香酸（ＩＮＴ１）をオフホワイト固体として得た（０．９ｇ，９３．０％）。
ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：３７５，３７７［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。
保持時間：０．５９９分。
分析条件：ＰＨ－ＴＦＡ－０９。
【０１４８】
Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［（２－ブロモフェニル）メチル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド：ＩＮＴ２の合成
【化２０】



【０１４９】
窒素雰囲気下２００ｍＬフラスコに、４－［４－［（２－ブロモフェニル）メチル］ピペラジン－１－イル］安息香酸（ＩＮＴ１）（６．０ｇ，１６．０ｍｍｏｌ，１．０ｅｑ）とベンゼンメタンスルホンアミド（Ｒ－８）（２．０ｇ，１１．７ｍｍｏｌ，０．７ｅｑ）、ＤＭＡＰ（１．５ｇ，１２．７ｍｍｏｌ，０．７ｅｑ）とＤＣＭ（５０ｍＬ）を加えた。この溶液に、ＥＤＣＩ・ＨＣｌ（４．８ｇ，２５．１ｍｍｏｌ，２．０ｅｑ）とＤＩＰＥＡ（６．４ｇ，４９．６ｍｍｏｌ，３．０ｅｑ）を加え、得られた反応混合物を室温で１６時間撹拌した。反応液に飽和NH_4Cl水溶液（５０ｍＬ）を加え、ＤＣＭ（５０ｍＬ）で３回抽出した。有機溶媒を混合し、Na_2SO_4で乾燥後ろ過し、ろ液を減圧下濃縮した。
【０１５０】
残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製（０～８０％酢酸エチル／石油エーテル）し、Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［（２－ブロモフェニル）メチル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（ＩＮＴ２）をオフホワイト固体として得た（４．２ｇ，６８．１％）。
ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：５２８，５３０［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。
保持時間：１．０５２分。
分析条件：ＰＨ－ＴＦＡ－０２。
【０１５１】
Ｎ－ベンジルスルホニル－４－ピペラジン－１－イルベンズアミド：ＩＮＴ３の合成

【化２１】



【０１５２】

第一工程：ｔｅｒｔ－ブチル　４－（４－メトキシカルボニルフェニル）ピペラジン－１－カルボキシラート：化合物１３の合成

窒素雰囲気下２００ｍＬフラスコに、メチル　４－フルオロ－安息香酸（１０）（５．０ｇ，３２．４ｍｍｏｌ，１．０ｅｑ）、K_2CO_3（６．７ｇ，４８．６ｍｍｏｌ，１．５ｅｑ）とＤＭＳＯ（５０ｍＬ）を加えた。この懸濁液に、Ｂｏｃ－ピペラジン（Ｒ－９）（６．０ｇ，３２．４ｍｍｏｌ，１．０ｅｑ）を加え、得られた反応混合物を１２０℃で１６時間撹拌した。反応液に水（５０ｍＬ）を添加し、析出した固体をろ過した。ろ過した固体を水（２０ｍＬ）で３回洗浄し、減圧下、定温乾燥機を使用して３０℃で１６時間乾燥し、ｔｅｒｔ－ブチル　４－（４－メトキシカルボニルフェニル）ピペラジン－１－カルボキシラート（化合物１３）を淡黄色固体として得た（３．７ｇ）。得られた固体はこれ以上の精製は行わずに、次の工程に使用した。

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：３２１［Ｍ＋Ｈ］$^+$。

保持時間：１．０９０分。

分析条件：ＰＨ－ＡＣ－０３。

【０１５３】

第二工程：４－［４－［（２－メチルプロパン－２－イル）オキシカルボニル］ピペラジン－１－イル］安息香酸：化合物１４の合成

窒素雰囲気下２００ｍＬフラスコに、ｔｅｒｔ－ブチル　４－（４－メトキシカルボニルフェニル）ピペラジン－１－カルボキシラート（化合物１３）（３．７ｇ，１１．５ｍｍｏｌ，１．０ｅｑ）とＭｅＯＨ／ＴＨＦ／H_2O（２５ｍＬ／２５ｍＬ／２５ｍＬ）の混合溶液を加えた。この溶液にＮａＯＨ（１．４ｇ，３４．６ｍｍｏｌ，３．０ｅｑ）を３５℃で加え、得られた反応混合物を３５℃で１６時間撹拌した。反応液を室温に冷却後、減圧下濃縮した。

【０１５４】

残渣を水（５０ｍＬ）に溶解し、クエン酸を用いｐＨを５－６の酸性に調整した。析出した固体をろ過し、フィルター上の固体を水（２５ｍＬ）で３回洗浄した。得られた個体を減圧下、定温乾燥機を使用して５０℃で１６時間乾燥し、４－［４－［（２－メチルプロパン－２－イル）オキシカルボニル］ピペラジン－１－イル］安息香酸（化合物１４）をオフホワイト固体として得た（３．３ｇ）。得られた固体はこれ以上の精製は行わずに、次の工程に使用した。

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：３０７［Ｍ＋Ｈ］$^+$。

保持時間：０．６０１分。

分析条件：ＰＨ－ＡＣ－０３。

【０１５５】

第三工程：ｔｅｒｔ－ブチル　４－［４－（ベンジルスルホニルカルバモイル）フェニル］ピペラジン－１－カルボキシラート：化合物１５の合成

窒素雰囲気下１００ｍＬフラスコに、４－［４－［（２－メチルプロパン－２－イル）オキシカルボニル］ピペラジン－１－イル］安息香酸（化合物１４）（１．５ｇ，４．９ｍｍｏｌ，１．０ｅｑ）、ベンゼンメタンスルホンアミド（Ｒ－８）（０．８ｇ，４．９ｍｍｏｌ，１．０ｅｑ）、ＤＭＡＰ（０．６ｇ，４．９ｍｍｏｌ，１．０ｅｑ）とＤＣＭ（３０ｍＬ）を加えた。この溶液に、ＥＤＣＩ・ＨＣｌ（１．９ｇ，９．８ｍｍｏｌ，２．０ｅｑ）とＤＩＰＥＡ（２．５ｇ，１９．６ｍｍｏｌ，４．０ｅｑ）を加え、得られた反応混合物を室温で１６時間撹拌した。反応液に飽和NH_4Cl水溶液（３０ｍＬ）を加え、ＤＣＭ（４０ｍＬ）で３回抽出した。有機溶媒を混合し、Na_2SO_4で乾燥後ろ過し、ろ液を減圧下濃縮した。

【０１５６】

残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製（０～８０％酢酸エチル／石油エーテル）し、ｔｅｒｔ－ブチル　４－［４－（ベンジルスルホニルカルバモイル）フェニル］ピペラジン－１－カルボキシラート（化合物１５）を淡黄色固体として得た（８７０ｍｇ，３８．７％）。

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：４６０［Ｍ＋Ｈ］$^+$。

保持時間：０．７４９分。

分析条件：ＰＨ－ＡＣ－０３。

【０１５７】

第四工程：Ｎ－ベンジルスルホニル－４－ピペラジン－１－イルベンズアミド：ＩＮＴ３の合成

窒素雰囲気下５０ｍＬフラスコにｔｅｒｔ－ブチル　４－［４－（ベンジルスルホニルカルバモイル）フェニル］ピペラジン－１－カルボキシラート（化合物１５）（０．９ｇ，１．９ｍｍｏｌ，１．０ｅｑ）とＤＣＭ（２．０ｍＬ）を加えた。この溶液に、４Ｍ－ＨＣｌ　１，４－ジオキサン溶液（１５ｍＬ）を加え、得られた反応混合物を室温で１時間撹拌した。反応液を減圧下濃縮し、得られた残渣を水（１５ｍＬ）に溶解し、アンモニア水を用いｐＨを８－９の塩基性に調整した。析出した固体をろ過し、得られた固体を逆相シリカゲルカラムクロマトグラフィー（Ｃ１８）で精製（０～８０％CH_3CN／０．５ｇ／Ｌ炭酸水素アンモニウム水溶液）し、Ｎ－ベンジルスルホニル－４－ピペラジン－１－イルベンズアミド（ＩＮＴ３）をオフホワイト固体として得た（０．３ｇ，４５．６％）。

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：３６０［Ｍ＋Ｈ］$^+$。

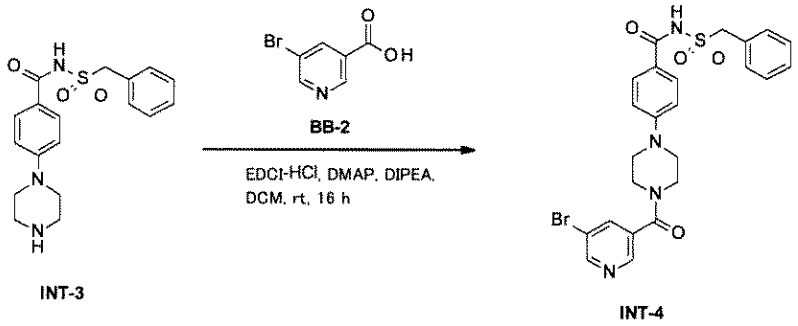
保持時間：０．６３９分。

分析条件：ＰＨ－ＦＡ－０２。

【０１５８】

Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－（５－ブロモピリジン－３－カルボニル）ピペラジン－１－イル］ベンズアミド：ＩＮＴ４の合成

【化２２】



【０１５９】

窒素雰囲気下１００ｍＬフラスコに、Ｎ－ベンジルスルホニル－４－ピペラジン－１－イルベンズアミド（ＩＮＴ３）（２．０ｇ，５．６ｍｍｏｌ，１．０ｅｑ）と５－ブロモピリジン－３－カルボン酸（ＢＢ－２）（１．４ｇ，６．７ｍｍｏｌ，１．２ｅｑ）、ＤＭＡＰ（０．７ｇ，５．６ｍｍｏｌ，１．０ｅｑ）とＤＣＭ（３０ｍＬ）を加えた。この溶液に、ＥＤＣＩ・ＨＣｌ（２．１ｇ，１１．１ｍｍｏｌ，２．０ｅｑ）とＤＩＰＥＡ（２．９ｇ，２２．３ｍｍｏｌ，４．０ｅｑ）を加え、得られた反応混合物を室温で１６時間撹拌した。反応液に飽和NH_4Cl水溶液（３０ｍＬ）を加え、ＤＣＭ（５０ｍＬ）で３回抽出した。有機溶媒を混合し、Na_2SO_4で乾燥後ろ過し、ろ液を減圧下濃縮した。

【０１６０】

残渣を逆相シリカゲルカラムクロマトグラフィー（Ｃ１８）で精製（３０～８０％CH_3CN／水）し、Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－（５－ブロモピリジン－３－カルボニル）ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（ＩＮＴ４）を淡黄色固体として得た（１．１ｇ，３４．６％）。

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：５４３，５４５［Ｍ＋Ｈ］$^+$。

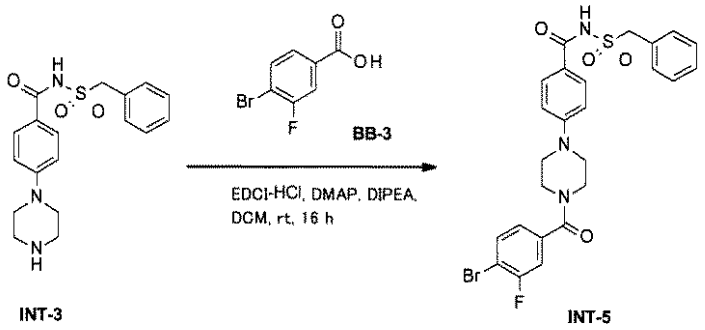
保持時間：０．９２３分。

分析条件：ＰＨ－ＦＡ－０２。

【０１６１】

Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－（４－ブロモ－３－フルオロベンゾイル）ピペラジン－１－イル］ベンズアミド：ＩＮＴ５の合成

【化２３】

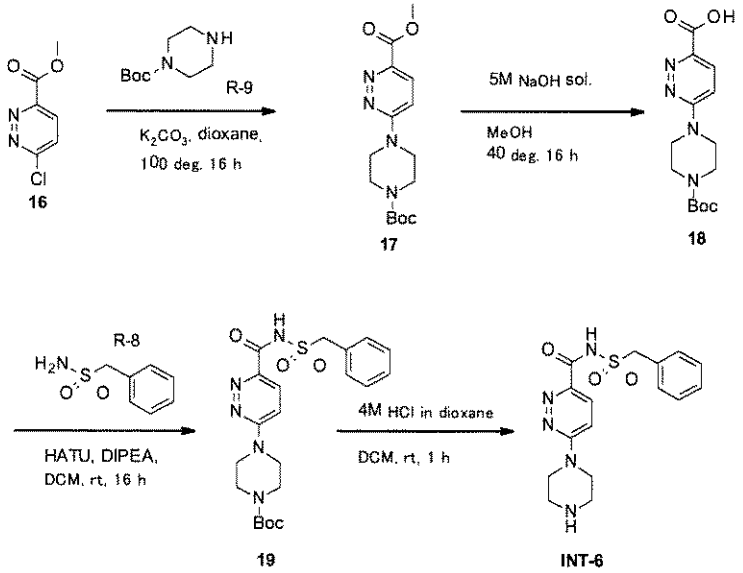


【０１６２】

窒素雰囲気下５０ｍＬフラスコに、Ｎ－ベンジルスルホニル－４－ピペラジン－１－イルベンズアミド（ＩＮＴ３）（０．９ｇ，２．４ｍｍｏｌ，１．０ｅｑ）とＮ－ベンジルスルホニル－４－ピペラジン－１－イルベンズアミド（ＢＢ－３）（０．７ｇ，３．２ｍｍｏｌ，１．３ｅｑ）、ＤＭＡＰ（０．３ｇ，２．４ｍｍｏｌ，１．０ｅｑ）とＤＣＭ（２０ｍＬ）を加えた。この溶液に、ＥＤＣＩ・ＨＣｌ（０．９ｇ，４．９ｍｍｏｌ，２．

０ｅｑ）とＤＩＰＥＡ（１．３ｇ，９．８ｍｍｏｌ，４．０ｅｑ）を加え、得られた反応混合物を室温で１６時間撹拌した。反応液に飽和NH_4Cl水溶液（３０ｍＬ）を加え、ＤＣＭ（５０ｍＬ）で３回抽出した。有機溶媒を混合し、Na_2SO_4で乾燥後ろ過し、ろ液を減圧下濃縮した。
残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製（０～１００％酢酸エチル／石油エーテル、その後０～１０％ＭｅＯＨ／ＤＣＭ）し、Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－（４－ブロモ－３－フルオロベンゾイル）ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（ＩＮＴ５）を淡黄色固体として得た（１．２ｇ，７１．７％）。
ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：５６０，５６２［Ｍ＋Ｈ］$^+$。
保持時間：１．００２分。
分析条件：ＰＨ－ＦＡ－０２。

【０１６３】
Ｎ－ベンジルスルホニル－６－ピペラジン－１－イルピリダジン－３－カルボキサミド：ＩＮＴ６の合成
【化２４】



【０１６４】
第一工程：メチル　６－［４－［（２－メチルプロパン－２－イル）オキシカルボニル］ピペラジン－１－イル］ピリダジン－３－カルボキシラート：化合物１７の合成
窒素雰囲気下１Ｌフラスコに、メチル　６－クロロピリダジンカルボキシレート（１６）（２０ｇ，１１６．３ｍｍｏｌ，１．０ｅｑ）、K_2CO_3（４０ｇ，２９０．７ｍｍｏｌ，２．５ｅｑ）と１，４－ジオキサン（４００ｍＬ）を加えた。この懸濁液に、Ｂｏｃ－ピペラジン（Ｒ－９）（３２．４ｇ，１７４．４ｍｍｏｌ，１．５ｅｑ）を加え、得られた反応混合物を１００℃で１６時間撹拌した。反応混合物をろ過し、ろ過した固体をＤＣＭ（１００ｍＬ）で３回洗浄した。ろ液を水（２５０ｍＬ）で３回洗浄後、Na_2SO_4で乾燥後ろ過し、ろ液を減圧下濃縮した。残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製（０～８０％酢酸エチル／石油エーテル）し、メチル　６－［４－［（２－メチルプロパン－２－イル）オキシカルボニル］ピペラジン－１－イル］ピリダジン－３－カルボキシラート（化合物１７）を淡黄色固体として得た（１１．４ｇ，３０．５％）。
ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：３２３［Ｍ＋Ｈ］$^+$。
保持時間：０．８５２分。
分析条件：ＰＨ－ＦＡ－０２。

【０１６５】
第二工程：６－［４－［（２－メチルプロパン－２－イル）オキシカルボニル］ピペラ

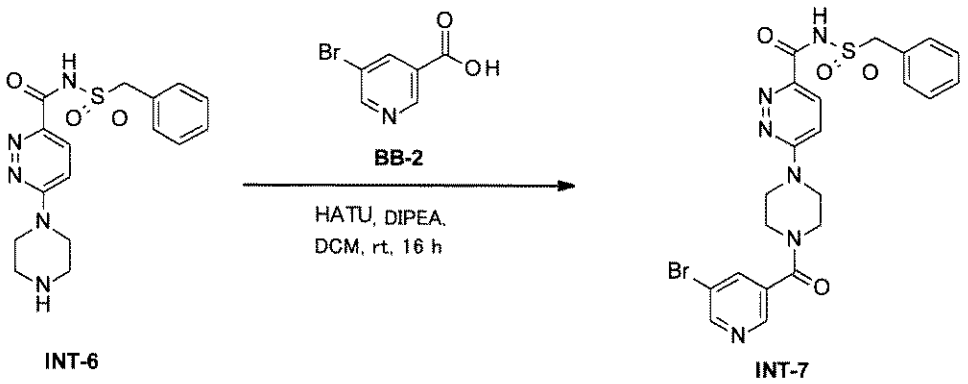
ジン－１－イル］ピリダジン－３－カルボン酸：化合物１８の合成
窒素雰囲気下５００ｍＬフラスコに、メチル　６－［４－［（２－メチルプロパン－２－イル）オキシカルボニル］ピペラジン－１－イル］ピリダジン－３－カルボキシラート（化合物１７）（１１．４ｇ，３５．４ｍｍｏｌ，１．０ｅｑ）とＭｅＯＨ（２００ｍＬ）を加えた。この溶液に５Ｍ－ＮａＯＨ水溶液（３５．４ｍＬ，１７７．１ｍｍｏｌ，５．０ｅｑ）を加え、得られた反応混合物を４０℃で１６時間撹拌した。反応液を室温に冷却後、減圧下濃縮した。
残渣を水（２００ｍＬ）に溶解し、２Ｍ－ＨＣｌ水溶液を用いｐＨを５－６の酸性に調整した。析出した固体をろ過し、フィルター上の固体を水（１００ｍＬ）で３回洗浄した。回収した固体を、減圧下、定温乾燥機を使用して５０℃で１６時間乾燥し、６－［４－［（２－メチルプロパン－２－イル）オキシカルボニル］ピペラジン－１－イル］ピリダジン－３－カルボン酸（化合物１８）を淡黄色固体として得た（５．４ｇ）。得られた固体はこれ以上の精製は行わずに、次の工程に使用した。
【０１６６】
ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：３０９［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。
保持時間：０．７０４分。
分析条件：ＰＨ－ＦＡ－０２。
実施例１－１、ＩＮＴ６の合成で合成法を例示した化合物１８は、本明細書内において、化合物ＡＣ－０１２と表記することもある。
【０１６７】
第三工程：６－［４－［（２－メチルプロパン－２－イル）オキシカルボニル］ピペラジン－１－イル］ピリダジン－３－カルボン酸：化合物１９の合成
窒素雰囲気下３００ｍＬフラスコに、６－［４－［（２－メチルプロパン－２－イル）オキシカルボニル］ピペラジン－１－イル］ピリダジン－３－カルボン酸（化合物１８）（５．４ｇ，１７．５ｍｍｏｌ，１．０ｅｑ）、ベンゼンメタンスルホンアミド（Ｒ－８）（４．５ｇ，２６．３ｍｍｏｌ，１．５ｅｑ）、とＤＣＭ（１２０ｍＬ）を加えた。この溶液に、ＨＡＴＵ（１０．０ｇ，２６．３ｍｍｏｌ，１．５ｅｑ）とＤＩＰＥＡ（９．１ｇ，７０．１ｍｍｏｌ，４．０ｅｑ）を加え、得られた反応混合物を室温で１６時間撹拌した。反応液に飽和NH_4Cl水溶液（７５ｍＬ）を加え、ＤＣＭ（１００ｍＬ）で３回抽出した。有機溶媒を混合し、Na_2SO_4で乾燥後ろ過し、ろ液を減圧下濃縮した。
【０１６８】
残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製（０～１００％酢酸エチル／石油エーテル、その後０～１０％ＭｅＯＨ／ＤＣＭ）し、６－［４－［（２－メチルプロパン－２－イル）オキシカルボニル］ピペラジン－１－イル］ピリダジン－３－カルボン酸（化合物１９）を淡黄色固体として得た（５．１ｇ，６３．１％）。
ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：４６２［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。
保持時間：１．２２０分。
分析条件：ＰＨ－ＴＦＡ－１０。
【０１６９】
第四工程：Ｎ－ベンジルスルホニル－６－ピペラジン－１－イルピリダジン－３－カルボキサミド：ＩＮＴ６の合成
窒素雰囲気下３００ｍＬフラスコに、６－［４－［（２－メチルプロパン－２－イル）オキシカルボニル］ピペラジン－１－イル］ピリダジン－３－カルボン酸（化合物１９）（５．１ｇ，１１．１ｍｍｏｌ，１．０ｅｑ）とＤＣＭ（３０ｍＬ）を加えた。この溶液に、４Ｍ－ＨＣｌ　１，４－ジオキサン溶液（６０ｍＬ）を加え、得られた反応混合物を室温で１時間撹拌した。反応液を減圧下濃縮し、得られた残渣を水（５０ｍＬ）に溶解し、アンモニア水を用いｐＨを８－９の塩基性に調整した。析出した固体をろ過し、得られた固体を水（３０ｍＬ）で３回洗浄した。回収した固体を、減圧下、定温乾燥機を使用して５０℃で１６時間乾燥し、Ｎ－ベンジルスルホニル－６－ピペラジン－１－イルピリダジン－３－カルボキサミド（ＩＮＴ６）をオフホワイト固体として得た（３．７ｇ）。得

られた固体はこれ以上の精製は行わずに、次の工程に使用した。
ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：３６２［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。
保持時間：０．５９４分。
分析条件：ＰＨ－ＦＡ－０２。

【０１７０】

Ｎ－ベンジルスルホニル－６－［４－（５－ブロモピリジン－３－カルボニル）ピペラジン－１－イル］ピリダジン－３－カルボキサミド：ＩＮＴ７の合成

【化２５】



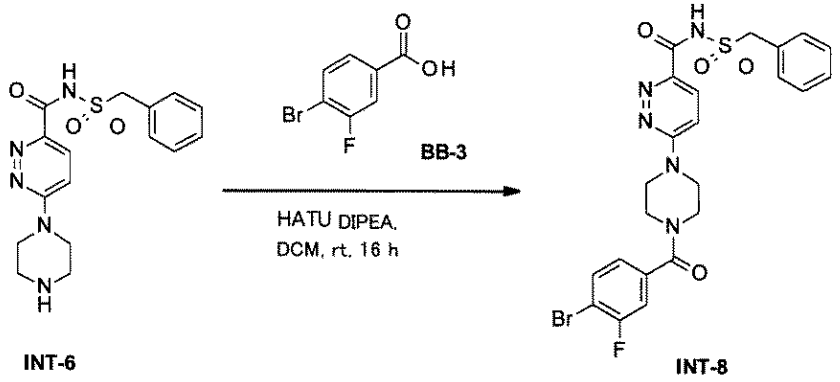
【０１７１】

窒素雰囲気下１００ｍＬフラスコに、Ｎ－ベンジルスルホニル－６－ピペラジン－１－イルピリダジン－３－カルボキサミド（ＩＮＴ６）（２．０ｇ，５．５ｍｍｏｌ，１．０ｅｑ）、５－ブロモピリジン－３－カルボン酸（ＢＢ－２）（１．４ｇ，６．６ｍｍｏｌ，１．２ｅｑ）とＤＣＭ（４０ｍＬ）を加えた。この溶液に、ＨＡＴＵ（３．２ｇ，８．３ｍｍｏｌ，１．５ｅｑ）とＤＩＰＥＡ（２．９ｇ，２２．１ｍｍｏｌ，４．０ｅｑ）を加え、得られた反応混合物を室温で１６時間撹拌した。反応液に飽和NH_4Cl水溶液（３０ｍＬ）を加え、ＤＣＭ（５０ｍＬ）で３回抽出した。有機溶媒を混合し、Na_2SO_4で乾燥後ろ過し、ろ液を減圧下濃縮した。
残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製（０～１０％ＭｅＯＨ／ＤＣＭ）し、Ｎ－ベンジルスルホニル－６－［４－（５－ブロモピリジン－３－カルボニル）ピペラジン－１－イル］ピリダジン－３－カルボキサミド（ＩＮＴ７）を淡黄色固体として得た（１．６ｇ，５０．０％）。
ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：５４５，５４７［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。
保持時間：１．０７５分。
分析条件：ＰＨ－ＴＦＡ－１１。

【０１７２】

Ｎ－ベンジルスルホニル－６－［４－（４－ブロモ－３－フルオロベンゾイル）ピペラジン－１－イル］ピリダジン－３－カルボキサミド：ＩＮＴ８の合成

【化２６】



窒素雰囲気下５０ｍＬフラスコに、Ｎ－ベンジルスルホニル－６－ピペラジン－１－イルピリダジン－３－カルボキサミド（ＩＮＴ６）（１．１ｇ，３．０ｍｍｏｌ，１．０ｅｑ）と４－ブロモ－３－フルオロ安息香酸（ＢＢ－３）（０．９ｇ，４．０ｍｍｏｌ，１．３ｅｑ）とＤＣＭ（２０ｍＬ）を加えた。この溶液に、ＨＡＴＵ（１．７ｇ，４．６ｍｍｏｌ，１．５ｅｑ）とＤＩＰＥＡ（１．６ｇ，１２．２ｍｍｏｌ，４．０ｅｑ）を加え、得られた反応混合物を室温で１６時間撹拌した。反応液に飽和NH_4Cl水溶液（２０ｍＬ）を加え、ＤＣＭ（４０ｍＬ）で３回抽出した。有機溶媒を混合し、Na_2SO_4で乾燥後ろ過し、ろ液を減圧下濃縮した。

残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製（０～１００％酢酸エチル／石油エーテル、その後０～１０％ＭｅＯＨ／ＤＣＭ）し、Ｎ－ベンジルスルホニル－６－［４－（４－ブロモ－３－フルオロベンゾイル）ピペラジン－１－イル］ピリダジン－３－カルボキサミド（ＩＮＴ８）を淡黄色固体として得た（１．３ｇ，７４．８％）。

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：５６２，５６４［Ｍ＋Ｈ］$^+$。

保持時間：０．８８７分。

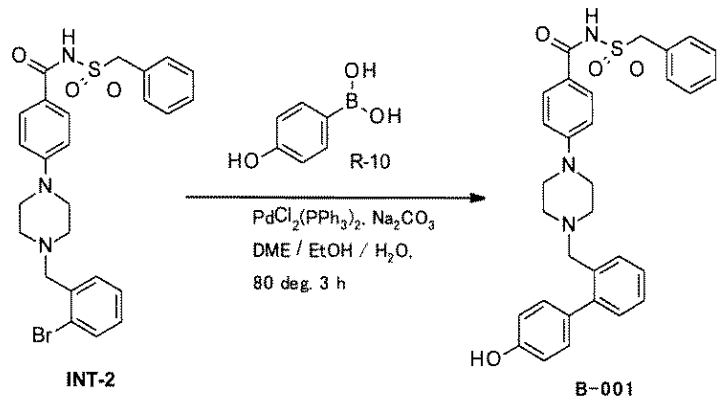
分析条件：ＰＨ－ＴＦＡ－１０。

【０１７３】

実施例１－１－３：アレノール化合物Ｂ－００１～Ｂ－０１５の合成

Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［［２－（４－ヒドロキシフェニル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド：Ｂ－００１の合成

【化２７】



【０１７４】

窒素雰囲気下５０ｍＬフラスコに、４－［４－［（２－ブロモフェニル）メチル］ピペラジン－１－イル］安息香酸（ＩＮＴ－２）（０．５ｇ，０．９ｍｍｏｌ，１．０ｅｑ）、４－ヒドロキシベンゼンボロン酸（Ｒ－１０）（２６１ｍｇ，１．９ｍｍｏｌ，２．０ｅｑ）、Na_2CO_3（１３０ｍｇ，１．２ｍｍｏｌ，１．３ｅｑ）とＤＭＥ／ＥｔＯＨ

／H_2O（４．０ｍＬ／４．０ｍＬ／４．０ｍＬ）の混合溶液を加えた。この懸濁液に、$PdCl_2(PPh_3)_2$（６６．４ｍｇ，０．０９ｍｍｏｌ，０．１０ｅｑ）を加え、得られた反応混合物を窒素雰囲気下８０℃で３時間撹拌した。室温に冷却後反応液をセライトでろ過し、セライトを酢酸エチル（５０ｍＬ）で３回洗浄した。ろ液を減圧下濃縮し、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製（０～１００％酢酸エチル／石油エーテル、その後０～１０％ＭｅＯＨ／ＤＣＭ）した。得られた混合物を、さらに逆相分取ＨＰＬＣ（ＸＢｒｉｄｇｅ　Ｐｒｅｐ　ＯＢＤ　Ｃ１８カラム）により精製（３４～５４％CH_3CN／１０ｍｍｏｌ／Ｌ炭酸水素アンモニウム水溶液）し、Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［［２－（４－ヒドロキシフェニル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（Ｂ－００１）を無色固体として得た（２６３ｍｇ，５１．２％）。

【０１７５】

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：５４２［Ｍ＋Ｈ］$^+$。

保持時間：１．４５７分。

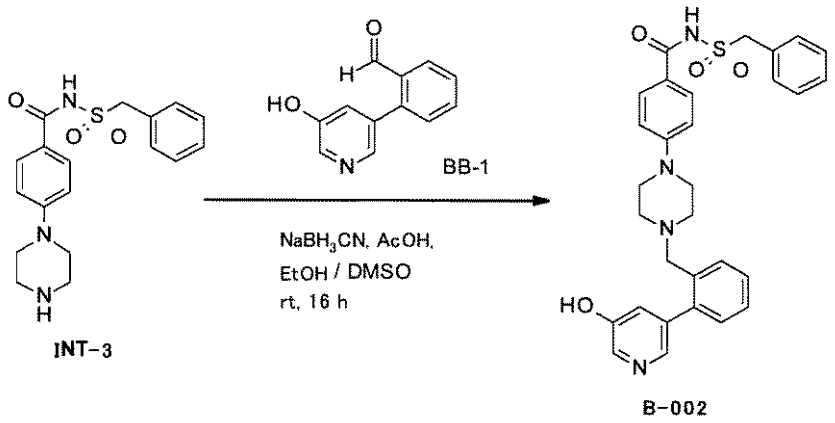
分析条件：ＰＨ－ＴＦＡ－０３。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（３００ＭＨｚ，ＤＭＳＯ－d_6）δ１１．５４（ｓ，１Ｈ），９．４５（ｓ，１Ｈ），７．７９（ｄ，Ｊ＝６．０Ｈｚ，２Ｈ），７．５４－７．５０（ｍ，１Ｈ），７．３７－７．２７（ｍ，７Ｈ），７．２６－７．１９（ｍ，３Ｈ），６．９１（ｄ，Ｊ＝６．０Ｈｚ，２Ｈ），６．８１（ｄ，Ｊ＝６．０Ｈｚ，２Ｈ），４．７０（ｓ，２Ｈ），３．４３（ｓ，２Ｈ），３．３０－３．２３（ｍ，４Ｈ），２．４６－２．３８（ｍ，４Ｈ）。

【０１７６】

Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［［２－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド：Ｂ－００２の合成

【化２８】



【０１７７】

窒素雰囲気下５０ｍＬフラスコに、Ｎ－ベンジルスルホニル－４－ピペラジン－１－イルベンズアミド（ＩＮＴ－３）（０．３ｇ，０．９ｍｍｏｌ，１．０ｅｑ）とＥｔＯＨ／ＤＭＳＯ（５．０ｍＬ／５．０ｍＬ）の混合溶液を加えた。この溶液に、２－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）ベンズアルデヒド（ＢＢ－１）（０．３ｇ，１．７ｍｍｏｌ，２．０ｅｑ）とＡｃＯＨ（０．８ｍＬ）を加え、得られた反応混合物を室温で１時間撹拌した。この反応液に$NaBH_3CN$（０．１ｇ，１．７ｍｍｏｌ，２．０ｅｑ）を加え、室温で１６時間撹拌した。反応液を減圧下濃縮し、得られた残渣を逆相シリカゲルカラムクロマトグラフィー（Ｃ１８）で精製（０～８０％CH_3CN／水）し、さらに逆相分取ＨＰＬＣ（ＸＢｒｉｄｇｅ　Ｐｒｅｐ　ＯＢＤ　Ｃ１８カラム）により精製（１９～３９％CH_3CN／１０ｍｍｏｌ／Ｌ炭酸水素アンモニウム水溶液）し、Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［［２－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（Ｂ－００２）をオフホワイト固体として得た（１４

６．５ｍｇ，３０．５％）。

【０１７８】

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：５４３［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。

保持時間：０．７５２分。

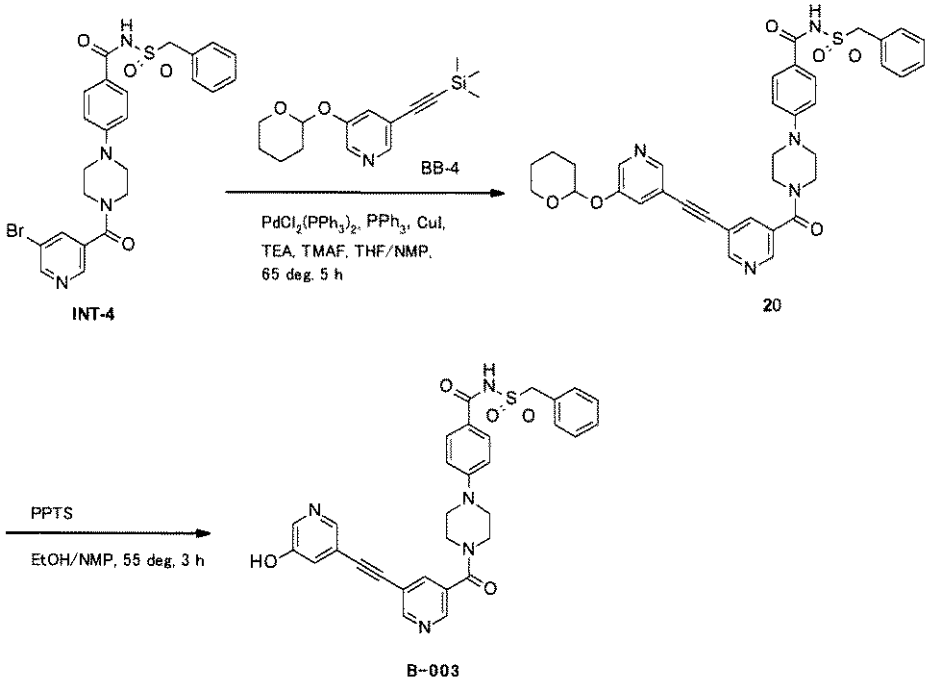
分析条件：ＰＨ－ＡＣ－０１。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（３００ＭＨｚ，ＤＭＳＯ－ｄ$_{6}$）δ１１．５２（ｓ，１Ｈ），９．９４（ｓ，１Ｈ），８．０７（ｄｄ，Ｊ＝２４．９，２．１Ｈｚ，２Ｈ），７．７７（ｄ，Ｊ＝８．７Ｈｚ，２Ｈ），７．５７－７．１９（ｍ，１０Ｈ），６．８７（ｄ，Ｊ＝８．７Ｈｚ，２Ｈ），４．６５（ｓ，２Ｈ），３．３９（ｓ，２Ｈ），３．２６－３．１５（ｍ，４Ｈ），２．４５－２．３３（ｍ，４Ｈ）。

【０１７９】

Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［５－［２－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）エチニル］ピリジン－３－カルボニル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド：Ｂ－００３の合成

【化２９】



【０１８０】

Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［５－［２－［５－（オキサン－２－イルオキシ）ピリジン－３－イル］エチニル］ピリジン－３－カルボニル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド：化合物２０の合成

窒素雰囲気下５０ｍＬフラスコに、Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－（５－ブロモピリジン－３－カルボニル）ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（ＩＮＴ－４）（０．５ｇ，０．９ｍｍｏｌ，１．０ｅｑ）、トリメチル－［２－［５－（オキサン－２－イルオキシ）ピリジン－３－イル］エチニル］シラン（ＢＢ－４）（３８０．１ｍｇ，１．４ｍｍｏｌ，１．５ｅｑ）とＴＥＡ／ＴＨＦ／ＮＭＰ（４．０ｍＬ／５．０ｍＬ／３．０ｍＬ）の混合溶液を加えた。この溶液にＣｕＩ（１７．５ｍｇ，０．０９ｍｍｏｌ，０．１ｅｑ），ＰＰｈ$_{3}$（２４．１ｍｇ，０．０９ｍｍｏｌ，０．１ｅｑ）と、ＰｄＣｌ$_{2}$（ＰＰｈ$_{3}$）$_{2}$（６４．６ｍｇ，０．０９ｍｍｏｌ，０．１ｅｑ）とＴＭＡＦ（１８２．２ｍｇ，１．１ｍｍｏｌ，１．２ｅｑ）を加え、得られた反応混合物を窒素雰囲気下６５℃で５時間撹拌した。室温に冷却後反応液をセライトでろ過し、セライトを酢酸エチル（２５ｍＬ）で３回洗浄した。ろ液を減圧下濃縮し、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製（０～１０％ＭｅＯＨ／ＤＣＭ）し、Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［５

－［２－［５－（オキサン－２－イルオキシ）ピリジン－３－イル］エチニル］ピリジン－３－カルボニル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（化合物２０）を褐色オイルとして得た（０．６ｇ，９２．６％）。
ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：６６６［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。
保持時間：１．０２０分。
分析条件：ＰＨ－ＦＡ－０２。

【０１８１】

Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［５－［２－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）エチニル］ピリジン－３－カルボニル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド：Ｂ－００３の合成

窒素雰囲気下３０ｍＬフラスコに、Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［５－［２－［５－（オキサン－２－イルオキシ）ピリジン－３－イル］エチニル］ピリジン－３－カルボニル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（化合物２０）（０．６ｇ，０．９ｍｍｏｌ，１．０ｅｑ）とＥｔＯＨ／ＮＭＰ（５．０ｍＬ／３．０ｍＬ）の混合溶液を加えた。この溶液に、ＰＰＴＳ（０．５ｇ，１．９ｍｍｏｌ，２．０ｅｑ）を加え、得られた反応混合物を５５℃で３時間撹拌した。反応液を減圧下濃縮し、得られた残渣を逆相分取ＨＰＬＣ（Ｘｓｅｌｅｃｔ　ＣＳＨ　ＯＢＤ　カラム）により精製（２３～５３％CH_3CN／０．１％ギ酸水溶液）し、Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［５－［２－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）エチニル］ピリジン－３－カルボニル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（Ｂ－００３）を淡黄色固体として得た（１７１．２ｍｇ，３０．５％）。

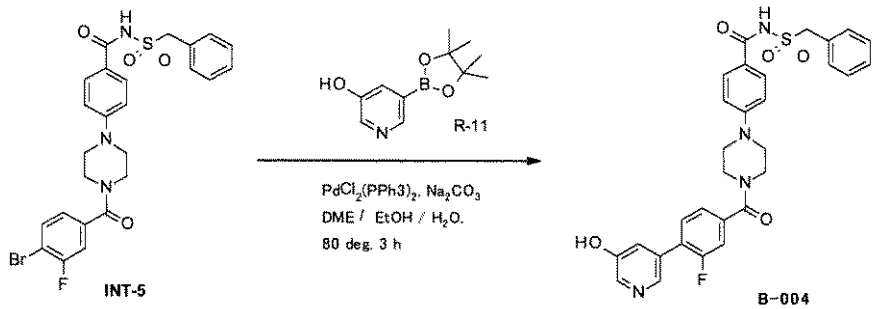
【０１８２】

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：５８２［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。
保持時間：１．４２６分。
分析条件：ＰＨ－ＴＦＡ－０３。
^{1}Ｈ－ＮＭＲ（３００ＭＨｚ，ＤＭＳＯ－d_6）δ１１．６１（ｓ，１Ｈ），１０．３５（ｓ，１Ｈ），８．８７（ｄ，Ｊ＝２．１Ｈｚ，１Ｈ），８．６９（ｄ，Ｊ＝２．１Ｈｚ，１Ｈ），８．２６（ｄ，Ｊ＝１．８Ｈｚ，１Ｈ），８．２３－８．１３（ｍ，１Ｈ），８．１２（ｄ，Ｊ＝２．１Ｈｚ，１Ｈ），７．８３（ｄ，Ｊ＝９．０Ｈｚ，２Ｈ），７．３４（ｍ，Ｊ＝８．８，５．６，２．７Ｈｚ，６Ｈ），６．９８（ｄ，Ｊ＝９．０Ｈｚ，２Ｈ），４．８３（ｓ，２Ｈ），３．７７（ｓ，２Ｈ），３．４６（ｄ，Ｊ＝２０．７Ｈｚ，６Ｈ）。

【０１８３】

Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［３－フルオロ－４－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）ベンゾイル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド：Ｂ－００４の合成

【化３０】



【０１８４】

窒素雰囲気下５０ｍＬフラスコに、Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－（４－ブロモ－３－フルオロベンゾイル）ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（ＩＮＴ－５）（０．３ｇ，０．６ｍｍｏｌ，１．０ｅｑ）、３－ヒドロキシ－５―ピリジンボロン酸ピナコー

ルエステル（Ｒ－１１）（２７６．１ｍｇ，１．２ｍｍｏｌ，２．０ｅｑ）、Na_2CO_3（８６．０ｍｇ，０．８ｍｍｏｌ，１．３ｅｑ）とＤＭＥ／ＥｔＯＨ／H_2O（６．０ｍＬ／６．０ｍＬ／６．０ｍＬ）の混合溶液を加えた。この懸濁液に、$PdCl_2(PPh_3)_2$（４３．８ｍｇ，０．０６ｍｍｏｌ，０．１ｅｑ）を加え、得られた反応混合物を窒素雰囲気下８０℃で３時間撹拌した。室温に冷却後反応液をセライトでろ過し、セライトを酢酸エチル（２５ｍＬ）で３回洗浄した。ろ液を減圧下濃縮し、得られた残渣を逆相シリカゲルカラムクロマトグラフィー（Ｃ１８）で精製（０～８０％CH_3CN／水）し、さらに逆相分取ＨＰＬＣ（ＹＭＣ－Ａｃｔｕｓ　Ｔｒｉａｒｔ　Ｃ１８）により精製（２０～５０％CH_3CN／１０ｍｍｏｌ／Ｌ炭酸水素アンモニウム水溶液）し、Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［３－フルオロ－４－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）ベンゾイル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（Ｂ－００４）をオフホワイト固体として得た（１６８．４ｍｇ，４６．５％）。

【０１８５】

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：５７５［Ｍ＋Ｈ］$^+$。

保持時間：２．１３８分。

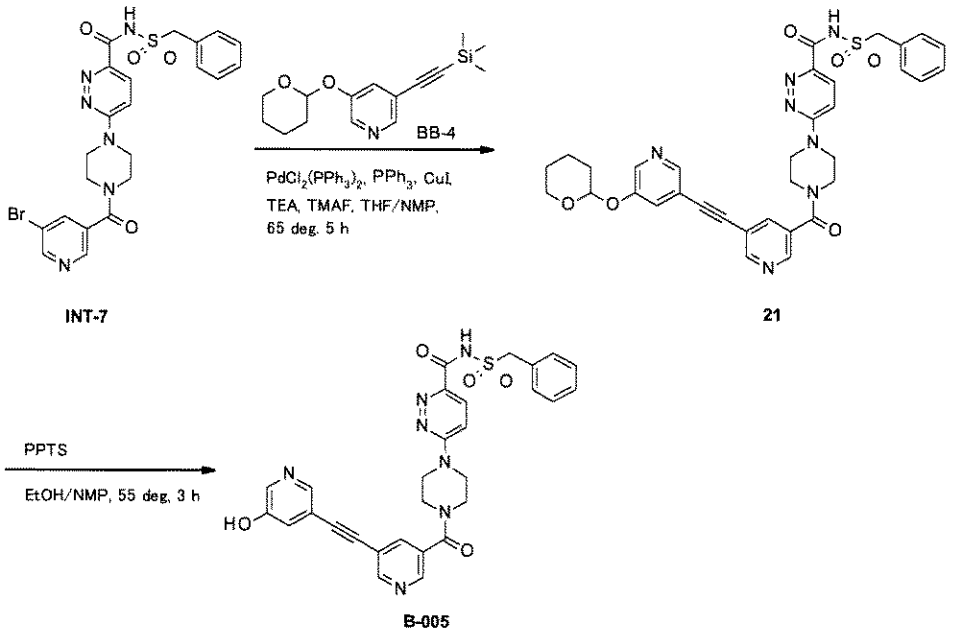
分析条件：ＰＨ－ＴＦＡ－０４。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（３００ＭＨｚ，ＤＭＳＯ－d_6）δ１１．６１（ｓ，１Ｈ），１０．１８（ｓ，１Ｈ），８．２５－８．２０（ｍ，２Ｈ），７．８２（ｄ，Ｊ＝８．７Ｈｚ，２Ｈ），７．６５（ｔ，Ｊ＝８．１Ｈｚ，１Ｈ），７．４９－７．３０（ｍ，８Ｈ），６．９３（ｄ，Ｊ＝８．７Ｈｚ，２Ｈ），４．６４（ｓ，２Ｈ），３．７６－３．３２（ｍ，８Ｈ）。

【０１８６】

Ｎ－ベンジルスルホニル－６－［４－［５－［２－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）エチニル］ピリジン－３－カルボニル］ピペラジン－１－イル］ピリダジン－３－カルボキサミド：Ｂ－００５の合成

【化３１】



【０１８７】

Ｎ－ベンジルスルホニル－６－［４－［５－［２－［５－（オキサン－２－イルオキシ）ピリジン－３－イル］エチニル］ピリジン－３－カルボニル］ピペラジン－１－イル］ピリダジン－３－カルボキサミド：化合物２１の合成

窒素雰囲気下５０ｍＬフラスコに、Ｎ－ベンジルスルホニル－６－［４－（５－ブロモピリジン－３－カルボニル）ピペラジン－１－イル］ピリダジン－３－カルボキサミド（

ＩＮＴ－７）（０．５ｇ，０．９ｍｍｏｌ，１．０ｅｑ）、トリメチル－［２－［５－（オキサン－２－イルオキシ）ピリジン－３－イル］エチニル］シラン（ＢＢ－４）（３８７ｍｇ，１．４ｍｍｏｌ，１．５ｅｑ）とＴＥＡ／ＴＨＦ／ＮＭＰ（４．０ｍＬ／５．０ｍＬ／３．０ｍＬ）の混合溶液を加えた。この溶液にＣｕＩ（１７．８ｍｇ，０．０９ｍｍｏｌ，０．１ｅｑ），PPh_3（２４．５ｍｇ，０．０９ｍｍｏｌ，０．１ｅｑ）と、$PdCl_2(PPh_3)_2$（６６．０ｍｇ，０．０９ｍｍｏｌ，０．１ｅｑ）とＴＭＡＦ（１８５．２ｍｇ，１．１ｍｍｏｌ，１．２ｅｑ）を加え、得られた反応混合物を窒素雰囲気下６５℃で５時間撹拌した。室温に冷却後反応液をセライトでろ過し、セライトを酢酸エチル（２５ｍＬ）で３回洗浄した。ろ液を減圧下濃縮し、残渣を逆相シリカゲルカラムクロマトグラフィー（Ｃ１８）で精製（３０～９５％CH_3CN／水）し、Ｎ－ベンジルスルホニル－６－［４－［５－［２－［５－（オキサン－２－イルオキシ）ピリジン－３－イル］エチニル］ピリジン－３－カルボニル］ピペラジン－１－イル］ピリダジン－３－カルボキサミド（化合物２１）を黄色固体として得た（０．４ｇ，５７．６％）。

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：６６８［Ｍ＋Ｈ］$^+$。

保持時間：０．９８３分。

分析条件：ＰＨ－ＦＡ－０２。

【０１８８】

Ｎ－ベンジルスルホニル－６－［４－［５－［２－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）エチニル］ピリジン－３－カルボニル］ピペラジン－１－イル］ピリダジン－３－カルボキサミド：Ｂ－００５の合成

窒素雰囲気下３０ｍＬフラスコに、Ｎ－ベンジルスルホニル－６－［４－［５－［２－［５－（オキサン－２－イルオキシ）ピリジン－３－イル］エチニル］ピリジン－３－カルボニル］ピペラジン－１－イル］ピリダジン－３－カルボキサミド（化合物２１）（０．４ｇ，０．６ｍｍｏｌ，１．０ｅｑ）とＥｔＯＨ／ＮＭＰ（５．０ｍＬ／３．０ｍＬ）の混合溶液を加えた。この溶液に、ＰＰＴＳ（０．３ｇ，１．２ｍｍｏｌ，２．０ｅｑ）を加え、得られた反応混合物を５５℃で３時間撹拌した。反応液を減圧下濃縮し、得られた残渣を逆相分取ＨＰＬＣ（ＸＢｒｉｄｇｅ Ｃ１８ ＯＢＤ Ｐｒｅｐ Ｃｏｌｕｍｎ）により精製（３３～５０％CH_3CN／０．１％ギ酸水溶液）し、Ｎ－ベンジルスルホニル－６－［４－［５－［２－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）エチニル］ピリジン－３－カルボニル］ピペラジン－１－イル］ピリダジン－３－カルボキサミド（Ｂ－００５）を淡黄色固体として得た（８８．９ｍｇ，２５．３％）。

【０１８９】

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：５８４［Ｍ＋Ｈ］$^+$。

保持時間：１．３５０分。

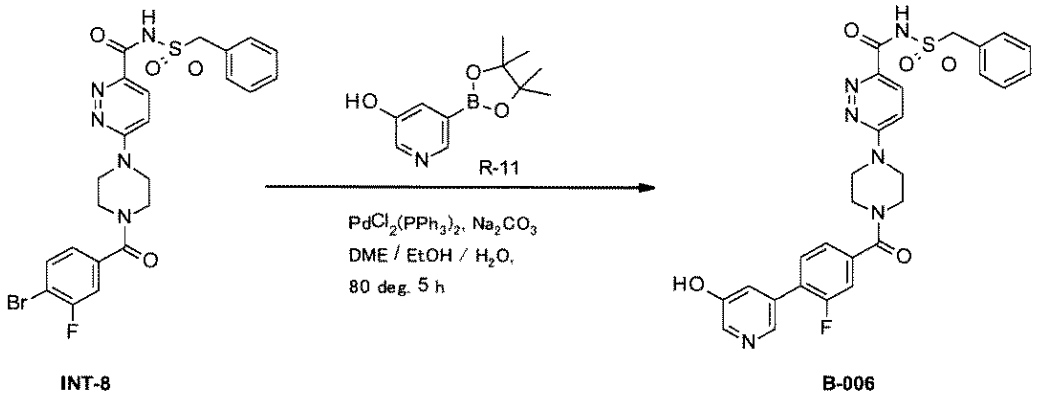
分析条件：ＰＨ－ＴＦＡ－０３。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（４００ＭＨｚ，ＤＭＳＯ－d_6）δ１１．９５（ｂｒ，１Ｈ），１０．３６（ｓ，１Ｈ），８．８８－８．７０（ｍ，２Ｈ），８．４８－８．０５（ｍ，２Ｈ），７．９５（ｄ，Ｊ＝９．６Ｈｚ，１Ｈ），７．６５－７．２０（ｍ，６Ｈ），４．８３（ｓ，２Ｈ），４．１８－３．６７（ｍ，５Ｈ），３．４６－３．０１（ｍ，３Ｈ）。

【０１９０】

Ｎ－ベンジルスルホニル－６－［４－［３－フルオロ－４－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）ベンゾイル］ピペラジン－１－イル］ピリダジン－３－カルボキサミド：Ｂ－００６の合成

【化３２】



INT-8　　B-006

【０１９１】

窒素雰囲気下５０ｍＬフラスコに、Ｎ－ベンジルスルホニル－６－［４－（４－ブロモ－３－フルオロベンゾイル）ピペラジン－１－イル］ピリダジン－３－カルボキサミド（ＩＮＴ－８）（０．３ｇ，０．６ｍｍｏｌ，１．０ｅｑ）、３－ヒドロキシ－５－ピリジンボロン酸ピナコールエステル（Ｒ－１１）（２７５．０ｍｇ，１．２ｍｍｏｌ，２．０ｅｑ）、Na_2CO_3（８５．８ｍｇ，０．８ｍｍｏｌ，１．３ｅｑ）とＤＭＥ／ＥｔＯＨ／H_2O（５．０ｍＬ／５．０ｍＬ／５．０ｍＬ）の混合溶液を加えた。この懸濁液に、$PdCl_2(PPh_3)_2$（４３．９ｍｇ，０．０６ｍｍｏｌ，０．１ｅｑ）を加え、得られた反応混合物を窒素雰囲気下８０℃で５時間撹拌した。室温に冷却後反応液をセライトでろ過し、セライトを酢酸エチル（２５ｍＬ）で３回洗浄した。ろ液を減圧下濃縮し、得られた残渣を逆相シリカゲルカラムクロマトグラフィー（Ｃ１８）で精製（０～８０％CH_3CN／水）し、さらに逆相分取ＨＰＬＣ（ＸＢｒｉｄｇｅ　Ｐｒｅｐ　ＯＢＤ　Ｃ１８カラム）により精製（１０～４１％CH_3CN／１０ｍｍｏｌ／Ｌ炭酸水素アンモニウム水溶液）し、Ｎ－ベンジルスルホニル－６－［４－［３－フルオロ－４－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）ベンゾイル］ピペラジン－１－イル］ピリダジン－３－カルボキサミド（Ｂ－００６）を淡褐色固体として得た（６６．９ｍｇ，１８．６％）。

【０１９２】

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：５７７［Ｍ＋Ｈ］$^+$。

保持時間：２．５７３分。

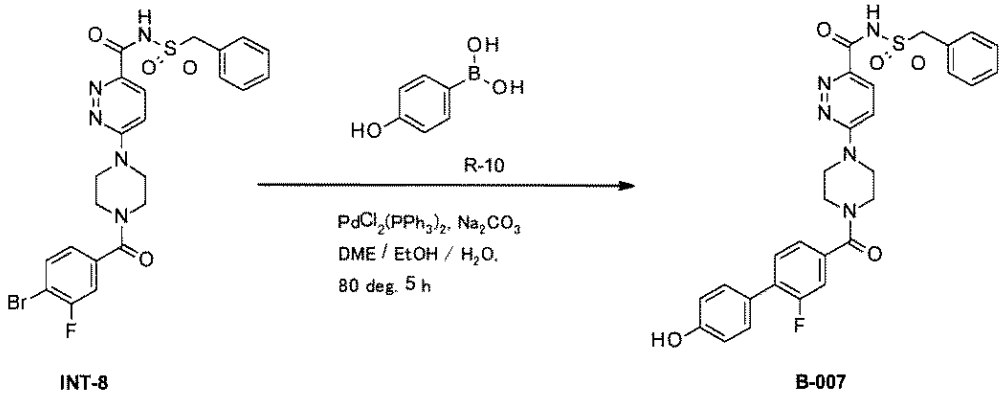
分析条件：ＰＨ－ＴＦＡ－０５。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（３００ＭＨｚ，ＤＭＳＯ－d_6）δ１０．１８（ｓ，１Ｈ），８．２６－８．１９（ｍ，２Ｈ），７．８９（ｄ，Ｊ＝９．６Ｈｚ，１Ｈ），７．６８（ｔ，Ｊ＝８．１Ｈｚ，１Ｈ），７．５３－７．２１（ｍ，１０Ｈ），４．６６（ｓ，２Ｈ），３．９０－３．４４（ｍ，８Ｈ）。

【０１９３】

Ｎ－ベンジルスルホニル－６－［４－［３－フルオロ－４－（４－ヒドロキシフェニル）ベンゾイル］ピペラジン－１－イル］ピリダジン－３－カルボキサミド：Ｂ－００７の合成

【化３３】



INT-8　　B-007

【０１９４】

窒素雰囲気下１００ｍＬフラスコに、Ｎ－ベンジルスルホニル－６－［４－（４－ブロモ－３－フルオロベンゾイル）ピペラジン－１－イル］ピリダジン－３－カルボキサミド（ＩＮＴ－８）（０．５ｇ，１．０ｍｍｏｌ，１．０ｅｑ）、４－ヒドロキシベンゼンボロン酸（Ｒ－１０）（２６９．８ｍｇ，２．０ｍｍｏｌ，２．０ｅｑ）、Na_2CO_3（１３４．７ｍｇ，１．３ｍｍｏｌ，１．３ｅｑ）とＤＭＥ／ＥｔＯＨ／H_2O（７．０ｍＬ／７．０ｍＬ／７．０ｍＬ）の混合溶液を加えた。この懸濁液に、$PdCl_2(PPh_3)_2$（６８．６ｍｇ，０．１ｍｍｏｌ，０．１ｅｑ）を加え、得られた反応混合物を窒素雰囲気下８０℃で５時間撹拌した。室温に冷却後反応液をセライトでろ過し、セライトを酢酸エチル（５０ｍＬ）で３回洗浄した。ろ液を減圧下濃縮し、残渣を逆相シリカゲルカラムクロマトグラフィー（Ｃ１８）で精製（０～８０％CH_3CN／水）した。得られた混合物を、さらに逆相分取ＨＰＬＣ（ＸＢｒｉｄｇｅ Ｐｒｅｐ Ｐｈｅｎｙｌ ＯＢＤカラム）により精製（４４～６０％CH_3CN／１０ｍｍｏｌ／Ｌ炭酸水素アンモニウム水溶液）し、Ｎ－ベンジルスルホニル－６－［４－［３－フルオロ－４－（４－ヒドロキシフェニル）ベンゾイル］ピペラジン－１－イル］ピリダジン－３－カルボキサミド（Ｂ－００７）をオフホワイト固体として得た（５９．８ｍｇ，１０．６％）。

【０１９５】

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：５７６［Ｍ＋Ｈ］$^+$。

保持時間：２．０１８分。

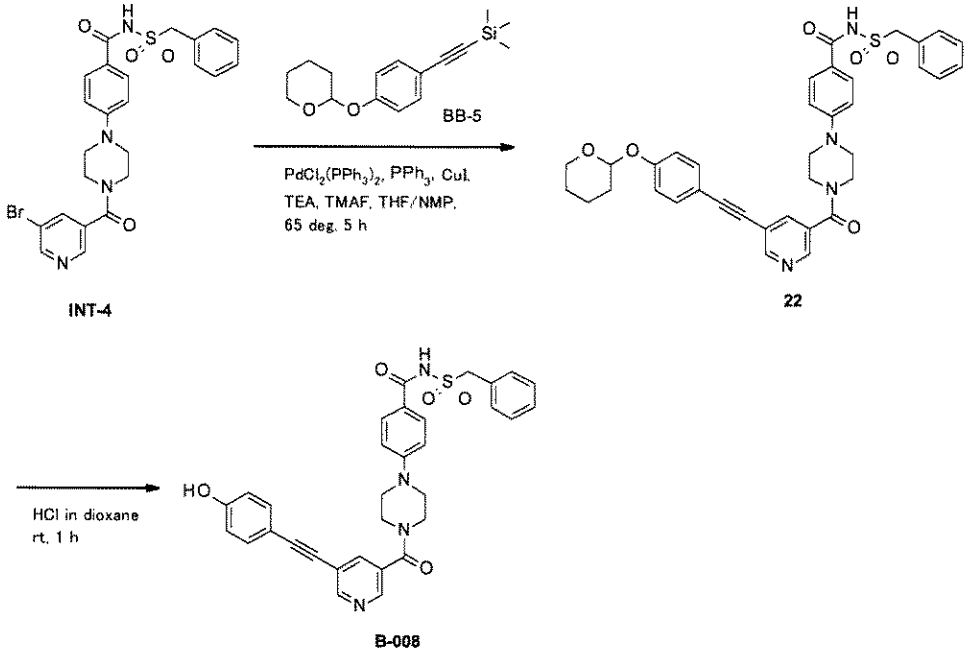
分析条件：ＰＨ－ＴＦＡ－０６。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（３００ＭＨｚ，ＤＭＳＯ－d_6）δ９．７３（ｓ，１Ｈ），７．９２（ｄ，Ｊ＝６．６Ｈｚ，１Ｈ），７．６０－７．５４（ｍ，１Ｈ），７．４４－７．３４（ｍ，１０Ｈ），６．９０－６．８７（ｍ，２Ｈ），４．７８（ｓ，２Ｈ），３．９２－３．５１（ｍ，８Ｈ）。

【０１９６】

Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［５－［２－（４－ヒドロキシフェニル）エチニル］ピリジン－３－カルボニル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド：Ｂ－００８の合成

【化３４】



【０１９７】

Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［５－［２－［４－（オキサン－２－イルオキシ）フェニル］エチニル］ピリジン－３－カルボニル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド：化合物２２の合成

窒素雰囲気下３０ｍＬフラスコに、Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－（５－ブロモピリジン－３－カルボニル）ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（ＩＮＴ－４）（０．５ｇ，０．９ｍｍｏｌ，１．０ｅｑ）、トリメチル－［２－［４－（オキサン－２－イルオキシ）フェニル］エチニル］シラン（ＢＢ－５）（３７８．８ｍｇ，１．４ｍｍｏｌ，１．５ｅｑ）とＴＥＡ／ＴＨＦ／ＮＭＰ（４．０ｍＬ／５．０ｍＬ／３．０ｍＬ）の混合溶液を加えた。この溶液にＣｕＩ（１７．５ｍｇ，０．０９ｍｍｏｌ，０．１ｅｑ），ＰＰｈ$_3$（２４．１ｍｇ，０．０９ｍｍｏｌ，０．１ｅｑ）と、ＰｄＣｌ$_2$（ＰＰｈ$_3$）$_2$（６４．６ｍｇ，０．０９ｍｍｏｌ，０．１ｅｑ）とＴＭＡＦ（１８２．０ｍｇ，１．４ｍｍｏｌ，１．２ｅｑ）を加え、得られた反応混合物を窒素雰囲気下６５℃で５時間撹拌した。室温に冷却後反応液をセライトでろ過し、セライトを酢酸エチル（２５ｍＬ）で３回洗浄した。ろ液を減圧下濃縮し、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製（０～１０％ＭｅＯＨ／ＤＣＭ）しＮ－ベンジルスルホニル－４－［４－［５－［２－［４－（オキサン－２－イルオキシ）フェニル］エチニル］ピリジン－３－カルボニル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（化合物２２）を褐色オイルとして得た（０．７ｇ，９５．０％）。

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：６６５［Ｍ＋Ｈ］$^+$。

保持時間：１．７４４分。

分析条件：ＰＨ－ＦＡ－０３。

【０１９８】

Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［５－［２－（４－ヒドロキシフェニル）エチニル］ピリジン－３－カルボニル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド：Ｂ－００８の合成

窒素雰囲気下３０ｍＬフラスコに、Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［５－［２－［４－（オキサン－２－イルオキシ）フェニル］エチニル］ピリジン－３－カルボニル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（化合物２２）（０．７ｇ，１．０ｍｍｏｌ，１．０ｅｑ）と４Ｍ－ＨＣｌ　１，４－ジオキサン溶液（５ｍＬ）を加えた。この溶液を室温で１時間撹拌した。反応液を減圧下濃縮し、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグ

ラフィーで精製（０～１０％ＭｅＯＨ／ＤＣＭ）し、さらに逆相分取ＨＰＬＣ（ＸＢｒｉｄｇｅ　Ｐｒｅｐ　ＯＢＤ　Ｃ１８カラム）により精製（４６～６３％CH_3CN／１０ｍｍｏｌ／Ｌ炭酸水素アンモニウム水溶液）し、Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［５－［２－（４－ヒドロキシフェニル）エチニル］ピリジン－３－カルボニル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（Ｂ－００８）を淡黄色固体として得た（９４．７ｍｇ，１５．５％）。

【０１９９】

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：５８１［Ｍ＋Ｈ］$^+$。

保持時間：０．８１６分。

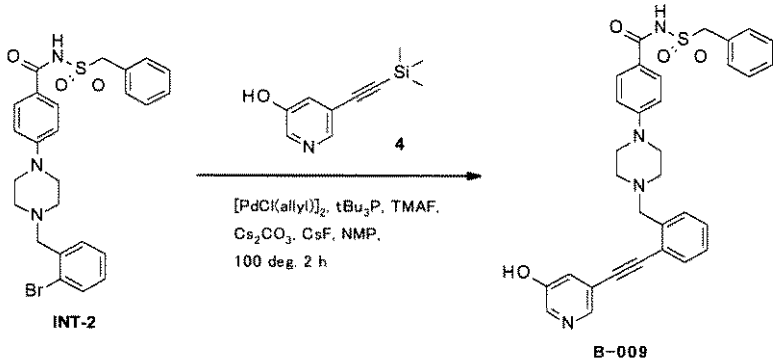
分析条件：ＰＨ－ＡＣ－０１。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（４００ＭＨｚ，ＤＭＳＯ－d_6）δ１１．６１（ｓ，１Ｈ），１０．０５（ｓ，１Ｈ），８．７９（ｄ，Ｊ＝２．０Ｈｚ，１Ｈ），８．６２（ｄ，Ｊ＝２．１Ｈｚ，１Ｈ），８．０２（ｔ，Ｊ＝２．１Ｈｚ，１Ｈ），７．８３（ｄ，Ｊ＝８．５Ｈｚ，２Ｈ），７．４４（ｄ，Ｊ＝８．２Ｈｚ，２Ｈ），７．３２（ｓ，５Ｈ），７．３０（ｄ，Ｊ＝６．３Ｈｚ，１Ｈ），６．９６（ｄ，Ｊ＝８．６Ｈｚ，２Ｈ），６．８３（ｄ，Ｊ＝８．３Ｈｚ，２Ｈ），４．７０（ｓ，２Ｈ），３．７７（ｓ，２Ｈ），３．４２（ｍ，５Ｈ）。

【０２００】

Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［［２－［２－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）エチニル］フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド：Ｂ－００９の合成

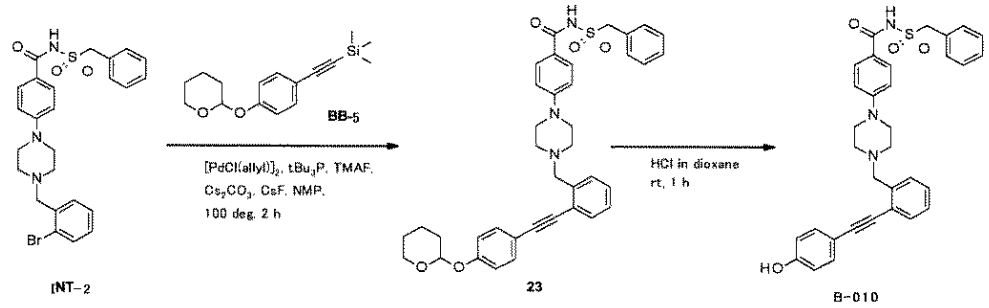
【化３５】



【０２０１】

窒素雰囲気下１００ｍＬフラスコに、Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［（２－ブロモフェニル）メチル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（ＩＮＴ－２）（２．０ｇ，３．８ｍｍｏｌ，１．０ｅｑ）、５－（２－トリメチルシリルエチニル）ピリジン－３－オール（化合物４）（２．９ｇ，１５．１ｍｍｏｌ，４．０ｅｑ）、Cs_2CO_3（３．７ｇ，１１．２ｍｍｏｌ，３．０ｅｑ）とＮＭＰ（２０ｍＬ）を加えた。この溶液に［ＰｄＣｌ（ａｌｌｙｌ）］$_2$（６９．２ｍｇ，０．２ｍｍｏｌ，０．０５ｅｑ），tBu_3P（１５３ｍｇ，０．８ｍｍｏｌ，０．２ｅｑ）と、ＣｓＦ（１．１ｇ，７．６ｍｍｏｌ，２．０ｅｑ）とＴＭＡＦ（７４９ｍｇ，４．５ｍｍｏｌ，１．２ｅｑ）を加え、得られた反応混合物を窒素雰囲気下１００℃で２時間撹拌した。室温に冷却後反応液をセライトでろ過し、セライトを酢酸エチル（２５ｍＬ）で３回洗浄した。ろ液を減圧下濃縮し、逆相シリカゲルカラムクロマトグラフィー（Ｃ１８）で精製（５～９５％CH_3CN／水）、逆相分取ＨＰＬＣ（Ｘｓｅｌｅｃｔ　ＣＳＨ　ＯＢＤ　カラム）による精製（１４～３９％CH_3CN／０．１％ギ酸水溶液）、さらにシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製（０～１０％ＥｔＯＨ／ＤＣＭ）によりＮ－ベンジルスルホニル－４－［４－［［２－［２－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）エチニル］フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（Ｂ－００９）をオフホワイト固体として得た（９１ｍｇ，４

．２％）。
【０２０２】
ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：５６７［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。
保持時間：０．７７２分。
分析条件：ＰＨ－ＡＣ－０１。
^{1}Ｈ－ＮＭＲ（４００ＭＨｚ，ＤＭＳＯ－ｄ$_{6}$）δ１１．４８（ｓ，１Ｈ），１０．２４（ｓ，１Ｈ），８．２３（ｄ，Ｊ＝１．６Ｈｚ，１Ｈ），８．１６（ｄ，Ｊ＝２．８Ｈｚ，１Ｈ），７．８４－７．７６（ｍ，２Ｈ），７．５６（ｍ，２Ｈ），７．４５（ｍ，１Ｈ），７．４１－７．２７（ｍ，７Ｈ），６．９９－６．９２（ｍ，２Ｈ），４．８１（ｓ，２Ｈ），３．７９（ｓ，２Ｈ），３．４５－３．３０（ｍ，４Ｈ），２．６５－２．６０（ｍ，４Ｈ）。
【０２０３】
Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［［２－［２－（４－ヒドロキシフェニル）エチニル］フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド：Ｂ－０１０の合成
【化３６】



【０２０４】
Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［［２－［２－［４－（オキサン－２－イルオキシ）フェニル］エチニル］フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド：化合物２３の合成
窒素雰囲気下３０ｍＬフラスコに、ＩＮＴ－２（０．７ｇ，１．３ｍｍｏｌ，１．０ｅｑ）、ＢＢ－５（１．４ｇ，５．３ｍｍｏｌ，４．０ｅｑ）、Ｃｓ$_{2}$ＣＯ$_{3}$（１．３ｇ，４．０ｍｍｏｌ，３．０ｅｑ）とＮＭＰ（７．０ｍＬ）を加えた。この溶液に［ＰｄＣｌ（ａｌｌｙｌ）］$_{2}$（２４．２ｍｇ，０．０６ｍｍｏｌ，０．０５ｅｑ），ｔＢｕ$_{3}$Ｐ（５３．５ｍｇ，０．３ｍｍｏｌ，０．２ｅｑ）と、ＣｓＦ（４０２ｍｇ，２．６ｍｍｏｌ，２．０ｅｑ）とＴＭＡＦ（２６２ｍｇ，１．６ｍｍｏｌ，１．２ｅｑ）を加え、得られた反応混合物を窒素雰囲気下１００℃で２時間撹拌した。室温に冷却後反応液をセライトでろ過し、セライトを酢酸エチル（２５ｍＬ）で３回洗浄した。ろ液を減圧下濃縮し、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製（０～１００％酢酸エチル／石油エーテル）し、Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［［２－［２－［４－（オキサン－２－イルオキシ）フェニル］エチニル］フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（化合物２３）を褐色固体として得た（６８０ｍｇ，６３．２％）。
ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：６５０［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。
保持時間：０．９２６分。
分析条件：ＰＨ－ＦＡ－０２。
【０２０５】
Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［［２－［２－（４－ヒドロキシフェニル）エチニル］フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド：Ｂ－０１０の合成
窒素雰囲気下３０ｍＬフラスコに、Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［［２－［２－［４－（オキサン－２－イルオキシ）フェニル］エチニル］フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（化合物２３）（０．４ｇ，０．６ｍｍｏｌ，１．０ｅｑ

）と４Ｍ－ＨＣｌ　１，４－ジオキサン溶液（５．０ｍＬ）を加えた。この溶液を室温で１時間撹拌した。反応液を減圧下濃縮し、得られた残渣を逆相分取ＨＰＬＣ（Ｃ１８）による精製（２５～５５％CH_3CN／１０ｍｍｏｌ／Ｌ炭酸水素アンモニウム水溶液）と逆相シリカゲルカラムクロマトグラフィー（ＸＢｒｉｄｇｅ　Ｐｒｅｐ　ＯＢＤ　Ｃ１８カラム）で精製（５～９５％CH_3CN／水）し、Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［［２－［２－（４－ヒドロキシフェニル）エチニル］フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（Ｂ－０１０）を淡黄色固体として得た（９２．５ｍｇ，２３．５％）。

【０２０６】

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：５６６［Ｍ＋Ｈ］$^+$。

保持時間：１．０１０分。

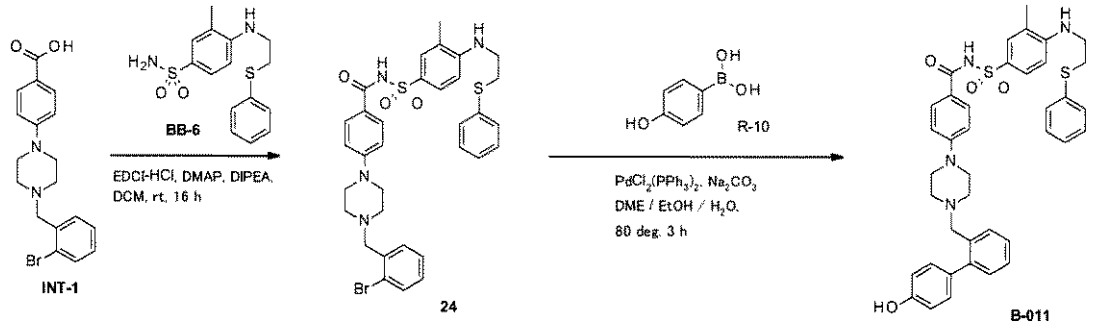
分析条件：ＰＨ－ＡＣ－０１。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（３００ＭＨｚ，ＤＭＳＯ－d_6）δ１１．５０（ｓ，１Ｈ），９．９３（ｓ，１Ｈ），７．８１（ｄ，Ｊ＝８．７Ｈｚ，２Ｈ），７．５１（ｄ，Ｊ＝７．２Ｈｚ，２Ｈ），７．４３－７．２７（ｍ，９Ｈ），６．９６（ｄ，Ｊ＝９．０Ｈｚ，２Ｈ），６．８２（ｄ，Ｊ＝８．７Ｈｚ，２Ｈ），４．８１（ｓ，２Ｈ），３．７９（ｓ，２Ｈ），３．３３（ｓ，４Ｈ），２．６３（ｓ，４Ｈ）。

【０２０７】

４－［４－［［２－（４－ヒドロキシフェニル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－［３－メチル－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニルベンズアミド：Ｂ－０１１の合成

【化３７】



【０２０８】

４－［４－［（２－ブロモフェニル）メチル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－［３－メチル－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニルベンズアミド：化合物２４の合成

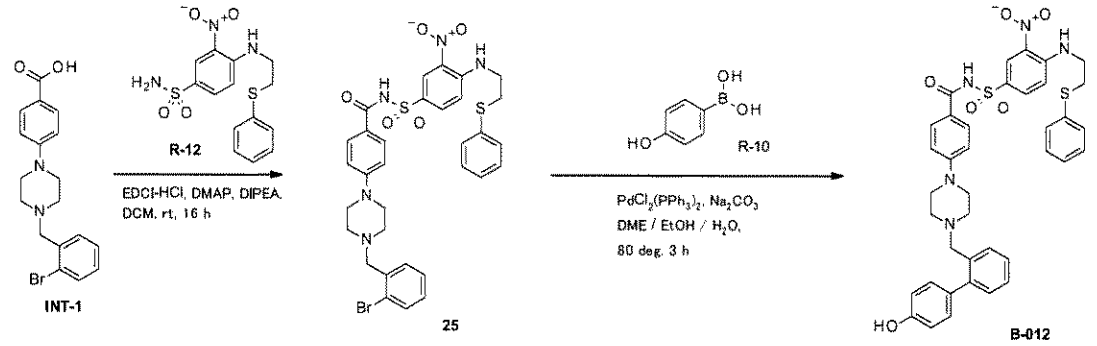
窒素雰囲気下１００ｍＬフラスコに、４－［４－［（２－ブロモフェニル）メチル］ピペラジン－１－イル］安息香酸（ＩＮＴ１）（１．７ｇ，４．６ｍｍｏｌ，１．５ｅｑ）と３－メチル－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）ベンゼンスルホンアミド（ＢＢ－６）（１．０ｇ，３．１ｍｍｏｌ，１．０ｅｑ）、ＤＭＡＰ（０．４ｇ，３．１ｍｍｏｌ，１．０ｅｑ）とＤＣＭ（３４ｍＬ）を加えた。この溶液に、ＥＤＣＩ・ＨＣｌ（１．２ｇ，６．２ｍｍｏｌ，２．０ｅｑ）とＤＩＰＥＡ（１．６ｇ，１２．４ｍｍｏｌ，４．０ｅｑ）を加え、得られた反応混合物を室温で１６時間撹拌した。反応液に飽和NH_4Cl水溶液（３０ｍＬ）を加え、ＤＣＭ（４０ｍＬ）で３回抽出した。有機溶媒を混合し、Na_2SO_4で乾燥後ろ過し、ろ液を減圧下濃縮した。

【０２０９】

残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製（２０～１００％酢酸エチル／石油エーテル）し、４－［４－［（２－ブロモフェニル）メチル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－［３－メチル－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニ

ルベンズアミド（化合物２４）を淡黄色固体として得た（１．１ｇ，４９．６％）。
ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：６７９，６８１［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。
保持時間：１．２４２分。
分析条件：ＰＨ－ＴＦＡ－０１。
【０２１０】
４－［４－［［２－（４－ヒドロキシフェニル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－［３－メチル－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニルベンズアミド：Ｂ－０１１の合成
窒素雰囲気下５０ｍＬフラスコに、４－［４－［（２－ブロモフェニル）メチル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－［３－メチル－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニルベンズアミド（化合物２４）（０．３ｇ，０．４ｍｍｏｌ，１．０ｅｑ）、４－ヒドロキシベンゼンボロン酸（Ｒ－１０）（１２１．８ｍｇ，０．９ｍｍｏｌ，２．０ｅｑ）、Na_2CO_3（６０．８ｍｇ，０．６ｍｍｏｌ，１．３ｅｑ）とＤＭＥ／ＥｔＯＨ／H_2O（４．０ｍＬ／４．０ｍＬ／４．０ｍＬ）の混合溶液を加えた。この懸濁液に、$PdCl_2(PPh_3)_2$（３１．０ｍｇ，０．０４ｍｍｏｌ，０．１ｅｑ）を加え、得られた反応混合物を窒素雰囲気下８０℃で３時間撹拌した。室温に冷却後反応液をセライトでろ過し、セライトを酢酸エチル（５０ｍＬ）で３回洗浄した。ろ液を減圧下濃縮し、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製（０～１００％酢酸エチル／石油エーテル、その後０～１０％ＭｅＯＨ／ＤＣＭ）。得られた粗精製物を、さらに逆相分取ＨＰＬＣ（ＸＢｒｉｄｇｅ　Ｓｈｉｅｌｄ　ＲＰ１８　ＯＢＤカラム）により精製（３７～５９％CH_3CN／１０ｍｍｏｌ／Ｌ炭酸水素アンモニウム水溶液）し、４－［４－［［２－（４－ヒドロキシフェニル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－［３－メチル－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニルベンズアミド（Ｂ－０１１）をオフホワイト固体として得た（３７．９ｍｇ，１２．３％）。
【０２１１】
ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：６９３［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。
保持時間：１．１９６分。
分析条件：ＰＨ－ＡＣ－０１。
^{1}Ｈ－ＮＭＲ（３００ＭＨｚ，ＤＭＳＯ－d_6）δ１１．６６（ｓ，１Ｈ），９．４６（ｓ，１Ｈ），７．７２（ｄ，Ｊ＝８．７Ｈｚ，２Ｈ），７．６１－７．５６（ｍ，１Ｈ），７．５２－７．４６（ｍ，２Ｈ），７．４０－７．２８（ｍ，６Ｈ），７．２６－７．１４（ｍ，４Ｈ），６．８９（ｄ，Ｊ＝９．０Ｈｚ，２Ｈ），６．８６－６．７５（ｍ，２Ｈ），６．５７（ｄ，Ｊ＝８．７Ｈｚ，１Ｈ），５．９９（ｂｓ，１Ｈ），３．４６－３．３６（ｍ，４Ｈ），３．２８－３．２２（ｍ，４Ｈ），３．２１－３．１４（ｍ，２Ｈ），２．４３－２．３７（ｍ，４Ｈ），２．０９（ｓ，３Ｈ）。
【０２１２】
４－［４－［［２－（４－ヒドロキシフェニル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－［３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニルベンズアミド：Ｂ－０１２の合成

【化３８】



【０２１３】

４－［４－［（２－ブロモフェニル）メチル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－［３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニルベンズアミド：化合物２５の合成

窒素雰囲気下１００ｍＬフラスコに、４－［４－［（２－ブロモフェニル）メチル］ピペラジン－１－イル］安息香酸（ＩＮＴ１）（１．１ｇ，２．８ｍｍｏｌ，１．４ｅｑ）と３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）ベンゼンスルホンアミド（Ｒ－１２）（０．７ｇ，２．１ｍｍｏｌ，１．０ｅｑ）、ＤＭＡＰ（０．３ｇ，２．１ｍｍｏｌ，１．０ｅｑ）とＤＣＭ（２０ｍＬ）を加えた。この溶液に、ＥＤＣＩ・ＨＣｌ（０．８ｇ，４．２ｍｍｏｌ，２．０ｅｑ）とＤＩＰＥＡ（１．１ｇ，８．５ｍｍｏｌ，４．０ｅｑ）を加え、得られた反応混合物を室温で１６時間撹拌した。反応液に飽和NH_4Cl水溶液（２０ｍＬ）を加え、ＤＣＭ（３０ｍＬ）で３回抽出した。有機溶媒を混合し、Na_2SO_4で乾燥後ろ過し、ろ液を減圧下濃縮した。

【０２１４】

残渣を逆相シリカゲルカラムクロマトグラフィー（Ｃ１８）で精製（０～８０％CH_3CN／０．５ｇ／Ｌ炭酸水素アンモニウム水溶液）し、４－［４－［（２－ブロモフェニル）メチル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－［３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニルベンズアミド（化合物２５）を黄色固体として得た（５５４．７ｍｇ，３６．８％）。

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：７１０，７１２［Ｍ＋Ｈ］$^+$。

【０２１５】

保持時間：１．１６６分。

分析条件：ＰＨ－ＴＦＡ－０２。

なお、実施例１－１－３，化合物２５の合成法の中で使用された化合物Ｒ－１２は、本明細書内において、化合物ＢＢ４１と表記することもある。

【０２１６】

４－［４－［［２－（４－ヒドロキシフェニル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－［３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニルベンズアミド：Ｂ－０１２の合成

窒素雰囲気下５０ｍＬフラスコに、４－［４－［（２－ブロモフェニル）メチル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－［３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニルベンズアミド（化合物２５）（０．３ｇ，０．４ｍｍｏｌ，１．０ｅｑ）、４－ヒドロキシベンゼンボロン酸（Ｒ－１０）（７２．８ｍｇ，０．５ｍｍｏｌ，１．５ｅｑ）、Na_2CO_3（４８．５ｍｇ，０．５ｍｍｏｌ，１．３ｅｑ）とＤＭＥ／ＥｔＯＨ／H_2O（５．０ｍＬ／５．０ｍＬ／５．０ｍＬ）の混合溶液を加えた。この懸濁液に、$PdCl_2(PPh_3)_2$（２４．７ｍｇ，０．０３ｍｍｏｌ，０．１ｅｑ）を加え、得られた反応混合物を窒素雰囲気下８０℃で３時間撹拌した。室温に冷却後反応液をセライトでろ過し、セライトを酢酸エチル（５０ｍＬ）で３回洗浄した。ろ液を減圧

下濃縮し、残渣を逆相シリカゲルカラムクロマトグラフィー（Ｃ１８）で精製（０～８０％CH_3CN／水）した。得られた粗精製物を、さらに逆相分取ＨＰＬＣ（Ｃ１８）により精製（３４～５４％CH_3CN／１０ｍｍｏｌ／Ｌ炭酸水素アンモニウム水溶液）し、４－［４－［［２－（４－ヒドロキシフェニル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－［３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニルベンズアミド（Ｂ－０１２）を黄色固体として得た（３５．４ｍｇ，１３．８％）。

【０２１７】

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：７２４［Ｍ＋Ｈ］$^+$。

保持時間：２．２４８分。

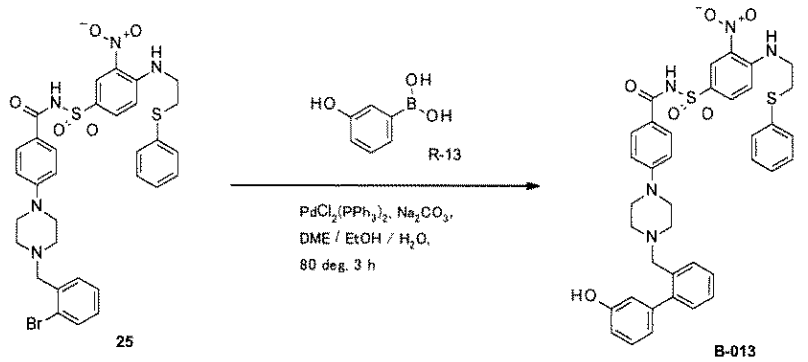
分析条件：ＰＨ－ＡＣ－０２。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（３００ＭＨｚ，ＤＭＳＯ－d_6）δ１１．９０（ｓ，１Ｈ），９．４４（ｓ，１Ｈ），８．６６（ｓ，１Ｈ），８．５５（ｄ，Ｊ＝２．１Ｈｚ，１Ｈ），７．８８（ｄｄ，Ｊ＝９．０，２．４Ｈｚ，１Ｈ），７．７２（ｄ，Ｊ＝８．７Ｈｚ，２Ｈ），７．５５－７．４６（ｍ，１Ｈ），７．４１－７．３４（ｍ，２Ｈ），７．３０（ｍ，３Ｈ），７．２６－７．０７（ｍ，６Ｈ），６．９１－６．７６（ｍ，４Ｈ），３．７０－３．５７（ｍ，２Ｈ），３．４３（ｓ，２Ｈ），３．２８－３．１９（ｍ，６Ｈ），２．４２（ｓ，４Ｈ）。

【０２１８】

４－［４－［［２－（３－ヒドロキシフェニル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－［３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニルベンズアミド：Ｂ－０１３の合成

【化３９】



【０２１９】

窒素雰囲気下５０ｍＬフラスコに、４－［４－［（２－ブロモフェニル）メチル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－［３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニルベンズアミド（化合物２５）（０．２ｇ，０．３ｍｍｏｌ，１．０ｅｑ）、３－ヒドロキシベンゼンボロン酸（Ｒ－１３）（８９．３ｍｇ，０．６ｍｍｏｌ，２．０ｅｑ）、Na_2CO_3（４４．６ｍｇ，０．４ｍｍｏｌ，１．３ｅｑ）とＤＭＥ／ＥｔＯＨ／H_2O（１／１／１，５．０ｍＬ）の混合溶液を加えた。この懸濁液に、$PdCl_2(PPh_3)_2$（２２．７ｍｇ，０．０３ｍｍｏｌ，０．１ｅｑ）を加え、得られた反応混合物を窒素雰囲気下８０℃で３時間撹拌した。室温に冷却後反応液をＥｔＯＡｃ（１００ｍＬ）で希釈し、水（５０ｍＬ）で３回洗浄した。有機溶媒をNa_2SO_4で乾燥し、ろ過後にろ液を減圧下濃縮した。残渣を逆相シリカゲルカラムクロマトグラフィー（Ｃ１８）で精製（５～４０％CH_3CN／水）した。得られた粗精製物を、さらに逆相分取ＨＰＬＣ（ＹＭＣ－Ａｃｔｕｓ　Ｔｒｉａｒｔ　Ｃ１８）により精製（４０～７０％CH_3CN／１０ｍｍｏｌ／Ｌ炭酸水素アンモニウム水溶液）し、４－［４－［［２－（３－ヒドロキシフェニル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－［３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニルベンズアミド

（Ｂ－０１３）を黄色固体として得た（２８．６ｍｇ，１２．２％）。

【０２２０】

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：７２４［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。

保持時間：２．３８２分。

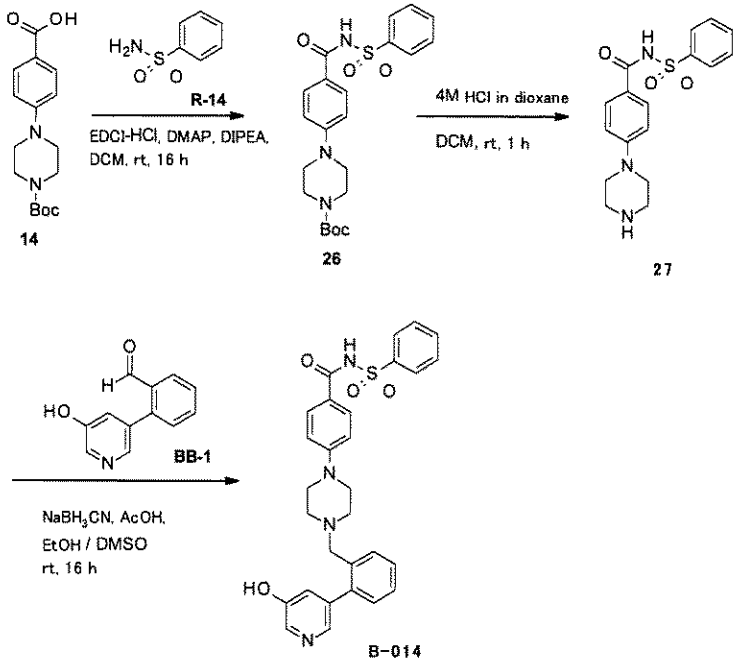
分析条件：ＰＨ－ＴＦＡ－０７。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（３００ＭＨｚ，ＤＭＳＯ－ｄ$_{6}$）δ１１．９２（ｓ，１Ｈ），９．４４（ｓ，１Ｈ），８．７０（ｄ，Ｊ＝６．０Ｈｚ，１Ｈ），８．５５（ｄ，Ｊ＝２．１Ｈｚ，１Ｈ），７．９１－７．８４（ｍ，１Ｈ），７．７１（ｄ，Ｊ＝９．０Ｈｚ，２Ｈ），７．５８－７．４８（ｍ，１Ｈ），７．４０－７．０７（ｍ，１０Ｈ），６．８７（ｄ，Ｊ＝９．０Ｈｚ，２Ｈ），６．８０－６．６９（ｍ，３Ｈ），３．６６－３．６４（ｍ，２Ｈ），３．４６（ｓ，２Ｈ），３．３０－３．２５（ｍ，６Ｈ），２．４１（ｓ，４Ｈ）。

【０２２１】

Ｎ－（ベンゼンスルホニル）－４－［４－［［２－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド：Ｂ－０１４の合成

【化４０】



【０２２２】

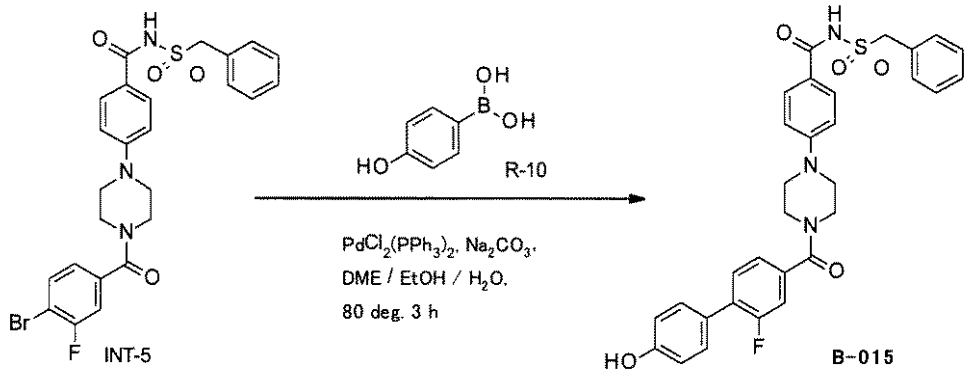
第一工程：ｔｅｒｔ－ブチル　４－［４－（ベンゼンスルホニルカルバモイル）フェニル］ピペラジン－１－カルボキシレート：化合物２６の合成

窒素雰囲気下２００ｍＬフラスコに、４－［４－［（２－メチルプロパン－２－イル）オキシカルボニル］ピペラジン－１－イル］安息香酸（化合物１４）（３．０ｇ，９．８ｍｍｏｌ，１．０ｅｑ）とベンゼンスルホンアミド（Ｒ－１４）（１．５ｇ，９．８ｍｍｏｌ，１．０ｅｑ）、ＤＭＡＰ（１．２ｇ，９．８ｍｍｏｌ，１．０ｅｑ）とＤＣＭ（６０ｍＬ）を加えた。この溶液に、ＥＤＣＩ・ＨＣｌ（３．７ｇ，１９．６ｍｍｏｌ，２．０ｅｑ）とＤＩＰＥＡ（５．１ｇ，３９．２ｍｍｏｌ，４．０ｅｑ）を加え、得られた反応混合物を室温で１６時間撹拌した。反応液に飽和ＮＨ$_{4}$Ｃｌ水溶液（６０ｍＬ）を加え、ＤＣＭ（６０ｍＬ）で３回抽出した。有機溶媒を混合し、Ｎａ$_{2}$ＳＯ$_{4}$で乾燥後ろ過し、ろ液を減圧下濃縮した。

残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製（０～１０％ＭｅＯＨ／ＤＣＭ）し、ｔｅｒｔ－ブチル　４－［４－（ベンゼンスルホニルカルバモイル）フェニル］ピペラジン－１－カルボキシラート（化合物２６）を淡黄色固体として得た（２．２ｇ，５０．４％）。

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：４４６［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。
保持時間：１．０２３分。
分析条件：ＰＨ－ＦＡ－０２。
【０２２３】
第二工程：Ｎ－（ベンゼンスルホニル）－４－ピペラジン－１－イルベンズアミド：化合物２７の合成
窒素雰囲気下１００ｍＬフラスコに、ｔｅｒｔ－ブチル　４－［４－（ベンゼンスルホニルカルバモイル）フェニル］ピペラジン－１－カルボキシラート（化合物２６）（２．２ｇ，４．９ｍｍｏｌ，１．０ｅｑ）とＤＣＭ（８．０ｍＬ）を加えた。この溶液に、４Ｍ－ＨＣｌ　１，４－ジオキサン溶液（４０ｍＬ）を加え、得られた反応混合物を室温で１時間撹拌した。反応液を減圧下濃縮し、得られた残渣を水（４０ｍＬ）に溶解し、アンモニア水を用いｐＨを８－９の塩基性に調整した。析出した固体をろ過し、得られた固体を逆相シリカゲルカラムクロマトグラフィー（Ｃ１８）で精製（０～８０％CH_3CN／０．５ｇ／Ｌ炭酸水素アンモニウム水溶液）し、Ｎ－（ベンゼンスルホニル）－４－ピペラジン－１－イルベンズアミド（化合物２７）を淡黄色固体として得た（１．４ｇ，７９．２％）。
ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：３４６［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。
保持時間：０．６１２分。
分析条件：ＰＨ－ＦＡ－０２。
【０２２４】
第三工程：Ｎ－（ベンゼンスルホニル）－４－［４－［［２－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド：Ｂ－０１４の合成
窒素雰囲気下５０ｍＬフラスコに、Ｎ－（ベンゼンスルホニル）－４－ピペラジン－１－イルベンズアミド（化合物２７）（０．４ｇ，１．０ｍｍｏｌ，１．０ｅｑ）とＥｔＯＨ／ＤＭＳＯ（４．０ｍＬ／６．０ｍＬ）の混合溶液を加えた。この溶液に、２－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）ベンズアルデヒド（ＢＢ－１）（０．４ｇ，２．０ｍｍｏｌ，２．０ｅｑ）とＡｃＯＨ（１．０ｍＬ）を加え、得られた反応混合物を室温で１時間撹拌した。この反応液に$NaBH_3CN$（０．１ｇ，２．０ｍｍｏｌ，２．０ｅｑ）を加え、室温で１６時間撹拌し、反応液を減圧下濃縮した。
【０２２５】
残渣を逆相シリカゲルカラムクロマトグラフィー（Ｃ１８）で精製（０～８０％CH_3CN／水）し、さらに逆相分取ＨＰＬＣ（ＸＢｒｉｄｇｅ　Ｓｈｉｅｌｄ　ＲＰ１８　ＯＢＤカラム）により精製（１９～３３％CH_3CN／１０ｍｍｏｌ／Ｌ炭酸水素アンモニウム水溶液）し、Ｎ－（ベンゼンスルホニル）－４－［４－［［２－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（Ｂ－０１４）をオフホワイト固体として得た（２４８．３ｍｇ，４５．４％）。
【０２２６】
ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：５２９［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。
保持時間：０．６６６分。
分析条件：ＰＨ－ＡＣ－０１。
^{1}Ｈ－ＮＭＲ（３００ＭＨｚ，ＤＭＳＯ－d_6）δ１２．０４（ｓ，１Ｈ），９．９３（ｓ，１Ｈ），８．１１（ｄ，Ｊ＝２．７Ｈｚ，１Ｈ），８．０２（ｄ，Ｊ＝１．８Ｈｚ，１Ｈ），７．９６－７．８７（ｍ，２Ｈ），７．７１（ｄ，Ｊ＝８．７Ｈｚ，２Ｈ），７．６５－７．４６（ｍ，４Ｈ），７．４４－７．３０（ｍ，２Ｈ），７．２９－７．１９（ｍ，２Ｈ），６．８６（ｄ，Ｊ＝８．７Ｈｚ，２Ｈ），３．３９（ｓ，２Ｈ），３．２６－３．１２（ｍ，４Ｈ），２．４４－２．３０（ｍ，４Ｈ）。
【０２２７】
Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［３－フルオロ－４－（４－ヒドロキシフェニル）ベンゾイル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド：Ｂ－０１５の合成

【化４１】



【０２２８】

窒素雰囲気下１００ｍＬフラスコに、Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－（４－ブロモ－３－フルオロベンゾイル）ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（ＩＮＴ－５）（０．５ｇ，０．８ｍｍｏｌ，１．０ｅｑ）、３－ヒドロキシベンゼンボロン酸（Ｒ－１０）（２２１．５ｍｇ，１．６ｍｍｏｌ，２．０ｅｑ）、Na_2CO_3（１１０．６ｍｇ，１．０ｍｍｏｌ，１．３ｅｑ）とＤＭＥ／ＥｔＯＨ／H_2O（７．０ｍＬ／７．０ｍＬ／７．０ｍＬ）の混合溶液を加えた。この懸濁液に、$PdCl_2(PPh_3)_2$（５６．４ｍｇ，０．０８ｍｍｏｌ，０．１ｅｑ）を加え、得られた反応混合物を窒素雰囲気下８０℃で３時間撹拌した。室温に冷却後反応液をセライトでろ過し、セライトを酢酸エチル（５０ｍＬ）で３回洗浄した。ろ液を減圧下濃縮し、残渣を逆相シリカゲルカラムクロマトグラフィー（Ｃ１８）で精製（０～８０％CH_3CN／水）した。得られた粗精製物を、さらに逆相分取ＨＰＬＣ（ＸＢｒｉｄｇｅ　Ｐｒｅｐ　ＯＢＤ　Ｃ１８カラム）により精製（１９～３９％CH_3CN／１０ｍｍｏｌ／Ｌ炭酸水素アンモニウム水溶液）し、Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［３－フルオロ－４－（４－ヒドロキシフェニル）ベンゾイル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（Ｂ－０１５）をオフホワイト固体として得た（１８７．７ｍｇ，４０．８％）。

【０２２９】

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：５７４［Ｍ＋Ｈ］$^+$。

保持時間：１．４８３分。

分析条件：ＰＨ－ＴＦＡ－０８。

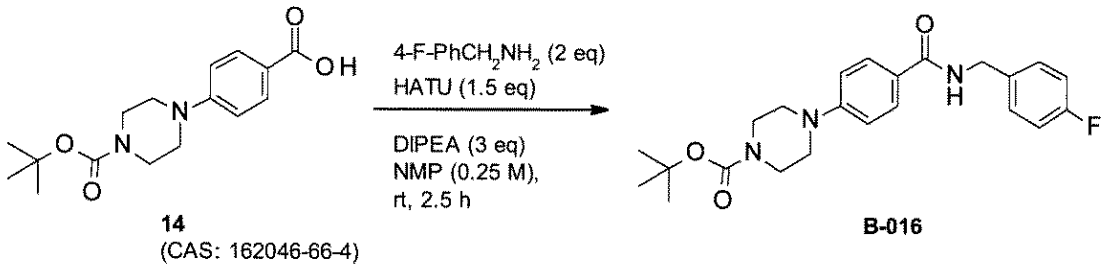
^{1}Ｈ－ＮＭＲ（３００ＭＨｚ，ＤＭＳＯ－d_6）δ１１．６０（ｓ，１Ｈ），９．７２（ｓ，１Ｈ），７．８１（ｄ，Ｊ＝８．７Ｈｚ，２Ｈ），７．５５（ｔ，Ｊ＝８．１Ｈｚ，１Ｈ），７．４６－７．３７（ｍ，２Ｈ），７．３６－７．２３（ｍ，６Ｈ），７．１６－７．００（ｍ，１Ｈ），６．９６－６．８３（ｍ，４Ｈ），４．５９（ｓ，２Ｈ），３．９１－３．４８（ｍ，４Ｈ），３．４５－３．３２（ｍ，４Ｈ）。

【０２３０】

実施例１－２：モデル基質合成

実施例１－２－１：化合物Ｂ－０１６（ｔｅｒｔ－ブチル　４－［４－［（４－フルオロフェニル）メチルカルバモイル］フェニル］ピペラジン－１－カルボキシレート）の合成

【化４２】



14
(CAS: 162046-66-4)

B-016

【０２３１】

窒素雰囲気下、４－［４－［（２－メチルプロパン－２－イル）オキシカルボニル］ピペラジン－１－イル］安息香酸（化合物１４，ＣＡＳ：１６２０４６－６６－４）（０．５ｇ，１．５ｍｍｏｌ）とＤＩＰＥＡ（７８４．０μＬ，４．５ｍｍｏｌ，３．０当量）をＮＭＰ（６．０ｍＬ）に懸濁させた。その懸濁液にＨＡＴＵ（８５６．０ｍｇ，２．３ｍｍｏｌ，１．５当量）を室温下徐々に加えた。５分撹拌後、反応液に４－フルオロフェニルメチルアミン（３４３．０μＬ，３．０ｍｍｏｌ，２．０当量）を滴下した。得られた反応溶液を室温で２．５時間撹拌した。

反応終了後、反応液に水（４０ｍＬ）を室温で滴下し、反応液を加熱ブロックを使用して８０℃で５分撹拌した。得られた懸濁溶液を加熱ブロックから外し、室温下１０分撹拌した。得られた沈殿を桐山ロートを用いてろ過し、得られた固体を水（２０ｍＬ）で５回、混合溶媒（CH_3CN-H_2O，１：１，２０ｍＬ）で２回洗浄した。得られた固体を減圧下乾燥し、薄赤色固体の標題化合物（ｔｅｒｔ－ブチル　４－［４－［（４－フルオロフェニル）メチルカルバモイル］フェニル］ピペラジン－１－カルボキシラート）（化合物Ｂ－０１６）（５４３．０ｍｇ，８８．０％）を得た。

【０２３２】

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：４１４．１［Ｍ＋Ｈ］$^+$。

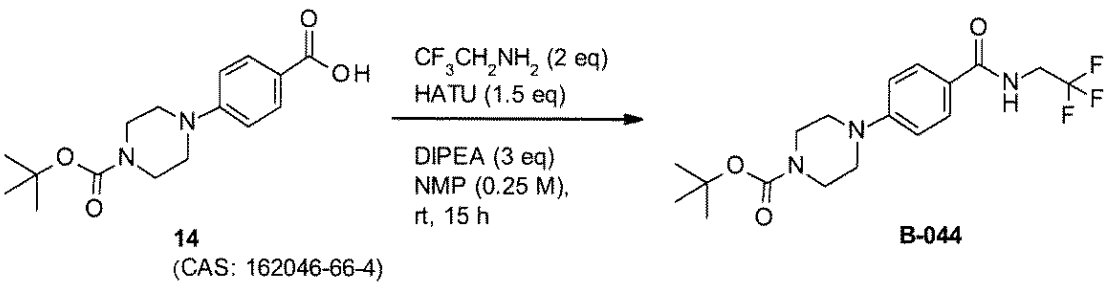
保持時間：１．１７３分（分析条件　ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（４００ＭＨｚ，ＤＭＳＯ－d_6）δ８．７７０（ｔ，Ｊ＝５．７Ｈｚ，１Ｈ），７．７８２（ｄ，Ｊ＝９．０Ｈｚ，２Ｈ），７．７８２（ｄｄ，Ｊ＝５．８，８．８Ｈｚ，２Ｈ），７．１３３（ｔ，Ｊ＝８．８Ｈｚ，２Ｈ），６．９６９（ｄ，Ｊ＝９．０Ｈｚ，２Ｈ），４．４２１（ｄ，Ｊ＝５．７Ｈｚ，２Ｈ），３．４５４（ｔ，Ｊ＝５．１Ｈｚ，４Ｈ），３．２３７（ｔ，Ｊ＝５．１Ｈｚ，４Ｈ），１．４２２（ｓ，９Ｈ）。

【０２３３】

実施例１－２－２：ｔｅｒｔ－ブチル　４－［４－［（４－フルオロフェニル）メチルカルバモイル］フェニル］ピペラジン－１－カルボキシレート：化合物Ｂ－０４４の合成

【化４３】



14
(CAS: 162046-66-4)

B-044

【０２３４】

窒素雰囲気下、４－［４－［（２－メチルプロパン－２－イル）オキシカルボニル］ピペラジン－１－イル］安息香酸（化合物１４，ＣＡＳ：１６２０４６－６６－４）（０．４ｇ，１．３ｍｍｏｌ）とＤＩＰＥＡ（６５３．０μＬ，３．８ｍｍｏｌ，３．０当量）

をＮＭＰ（５．０ｍＬ）に懸濁させた。その懸濁液にＨＡＴＵ（７１３．０ｍｇ、１．９ｍｍｏｌ，１．５当量）を室温下徐々に加えた。５分撹拌後、反応液に２，２，２－トリフルオロエチルアミン（１９６．０μＬ，２．５ｍｍｏｌ，２．０当量）を滴下した。得られた反応溶液を室温で１５時間撹拌した。

反応終了後、反応液に水（４０ｍＬ）を室温で滴下し、反応液を加熱ブロックを使用して８０℃で５分撹拌した。得られた懸濁溶液を加熱ブロックから外し、室温下１０分撹拌した。得られた沈殿を桐山ロートを用いてろ過した。得られた固体を水（２０ｍＬ）で５回、混合溶媒（CH_3CN-H_2O，１：１，２０ｍＬ）で２回洗浄した。得られた固体を減圧下乾燥し、無色固体の標題化合物（ｔｅｒｔ－ブチル　４－［４－［（４－フルオロフェニル）メチルカルバモイル］フェニル］ピペラジン－１－カルボキシラート）（化合物Ｂ－０４４）（４０６．７ｍｇ，８４．０％）を得た。

【０２３５】

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：３８８．１［Ｍ＋Ｈ］$^+$。

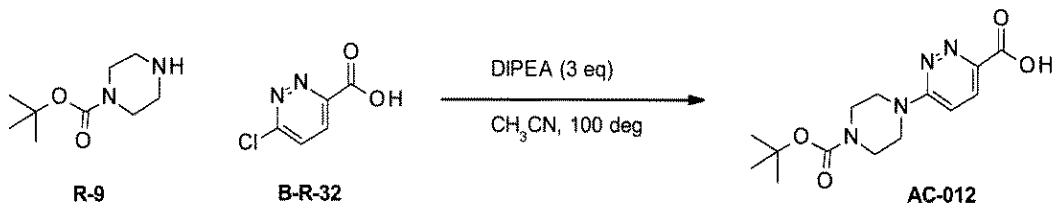
保持時間：１．１０４分（分析条件　ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（４００ＭＨｚ，ＤＭＳＯ－d_6）δ８．７６１（ｔ，Ｊ＝６．４Ｈｚ，１Ｈ），７．７８８（ｄ，Ｊ＝９．２Ｈｚ，２Ｈ），６．９８４（ｄ，Ｊ＝９，２Ｈｚ，２Ｈ），４．０８４－３．９９６（ｍ，２Ｈ），３．４５５（ｔ，Ｊ＝５．２Ｈｚ，４Ｈ），３．２６５（ｔ，Ｊ＝５．２Ｈｚ，４Ｈ），１．４２３（ｓ，９Ｈ）。

【０２３６】

実施例１－２－３：６－［４－［（２－メチルプロパン－２－イル）オキシカルボニル］ピペラジン－１－イル］ピリダジン－３－カルボン酸：化合物ＡＣ－０１２の合成

【化４４】



【０２３７】

５０ｍＬのナスフラスコに６－クロロピリダジン－３－カルボン酸（Ｂ－Ｒ－３２，ＣＡＳ：５０９６－７３－１）（１．０ｇ，６．３ｍｍｏｌ）、１－Ｂｏｃピペラジン（Ｒ－９，ＣＡＳ：５７２６０－７１－６）（１．８ｇ，９．５ｍｍｏｌ，１．５当量）、ＤＩＰＥＡ（３．３ｍＬ，１８．９ｍｍｏｌ，３．０当量）とCH_3CN（１５ｍＬ）を加え、フラスコを減圧脱気後、窒素導入により反応混合物内を窒素雰囲気下に変換した。反応液を１００℃で１６時間加熱した。反応溶液を室温まで冷却後、反応溶媒を減圧下で濃縮した。得られた残渣を逆相シリカゲルカラムクロマトグラフィー（Ｃ１８）にて精製（１５－５０％，０．１％ギ酸　CH_3CN／０．１％ギ酸水溶液）し、淡黄色アモルファスの標題化合物（６－［４－［（２－メチルプロパン－２－イル）オキシカルボニル］ピペラジン－１－イル］ピリダジン－３－カルボン酸）（ＡＣ－０１２）（１．３ｇ，６６．３％）を得た。

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：３０９．２［Ｍ＋Ｈ］$^+$。

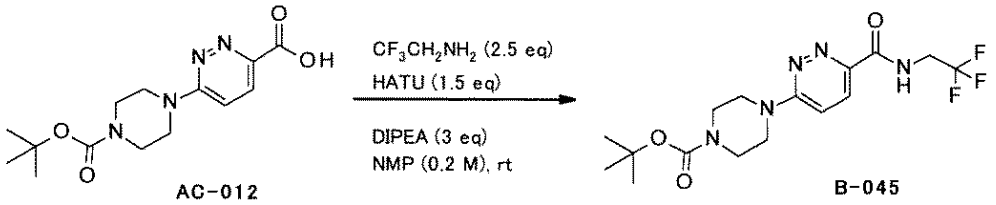
保持時間：０．７０２分（分析条件　ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（４００ＭＨｚ，ＣＤＣｌ$_3$）δ８．０１１（ｄ，Ｊ＝９．８Ｈｚ，１Ｈ），６．９８７（ｄ，Ｊ＝９．０Ｈｚ，１Ｈ），３．８１４（ｂｓ，４Ｈ），３．６１６（ｂｓ，４Ｈ），１．４８９（ｓ，９Ｈ）。

【０２３８】

実施例１－２－４：ｔｅｒｔ－ブチル　４－［６－（２，２，２－トリフルオロエチルカルバモイル）ピリダジン－３－イル］ピペラジン－１－カルボキシレート：化合物Ｂ－０４５の合成

【化４５】



【０２３９】

窒素雰囲気下、６－［４－［（２－メチルプロパン－２－イル）オキシカルボニル］ピペラジン－１－イル］ピリダジン－３－カルボン酸（化合物ＡＣ－０１２）（０．３ｇ，１．０ｍｍｏｌ）とＤＩＰＥＡ（５２３．０μＬ，３．０ｍｍｏｌ，３．０当量）をＮＭＰ（５．０ｍＬ）に懸濁させた。その懸濁液にＨＡＴＵ（５７０．０ｍｇ，１．５ｍｍｏｌ，１．５当量）を室温下徐々に加えた。５分撹拌後、反応液に２，２，２－トリフルオロエチルアミン（１９６．０μＬ，２．５ｍｍｏｌ，２．５当量）を滴下した。得られた反応溶液を室温で１５時間撹拌した。

反応終了後、反応液に水（４０ｍＬ）を室温で滴下し、反応液を加熱ブロックを使用して８０℃で５分撹拌した。得られた懸濁溶液を加熱ブロックから外し、室温下１０分撹拌した。得られた沈殿を桐山ロートを用いてろ過した。得られた固体を水（２０ｍＬ）で５回、混合溶媒（CH_3CN-H_2O，１：１，２０ｍＬ）で２回洗浄した。得られた固体を減圧下乾燥し、無色固体の標題化合物（ｔｅｒｔ－ブチル　４－［６－（２，２，２－トリフルオロエチルカルバモイル）ピリダジン－３－イル］ピペラジン－１－カルボキシラート）（化合物Ｂ－０４５）（２５９．０ｍｇ，６６．５％）を得た。

【０２４０】

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：３９０［Ｍ＋Ｈ］$^+$。

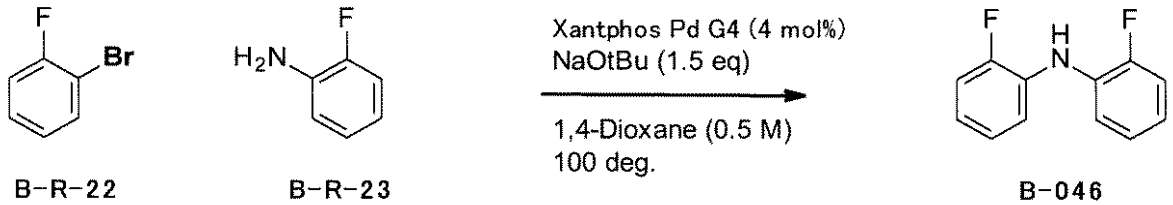
保持時間：１．０２９分（分析条件　ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（４００ＭＨｚ，$DMSO-d_6$）δ９．３９９（ｔ，Ｊ＝６．４Ｈｚ，１Ｈ），７．８９５（ｄ，Ｊ＝９．６Ｈｚ，１Ｈ），７．３６６（ｄ，Ｊ＝９．６Ｈｚ，１Ｈ），４．１１８－４．０２９（ｍ，２Ｈ），３．７４４（ｔ，Ｊ＝５．４Ｈｚ，４Ｈ），３．４８０（ｔ，Ｊ＝５．４Ｈｚ，４Ｈ），１．４３２（ｓ，９Ｈ）。

【０２４１】

実施例１－２－５：２－フルオロ－Ｎ－（２－フルオロフェニル）アニリン：Ｂ－０４６の合成

【化４６】



【０２４２】

窒素雰囲気下１０ｍＬバイアルに、２－フルオロブロモベンゼン（Ｂ－Ｒ－２２）（２７３．０μＬ，２．５ｍｍｏｌ），２－フルオロアニリン（Ｂ－Ｒ－２３）（２９０．０μＬ，３．０ｍｍｏｌ，１．２当量），Ｘａｎｔｐｈｏｓ　Ｐｄ　Ｇ４（９６．０ｍｇ，０．１ｍｍｏｌ，４ｍｏｌ％），ＮａＯｔＢｕ（３６０．０ｍｇ，３．７ｍｍｏｌ，１．５当量）と１，４－ジオキサン（５．０ｍＬ）を加え、反応混合物を１００℃で２１時間撹拌した。反応液をセライトでろ過し、酢酸エチル（２０ｍＬ）で４回洗浄し、ろ液を減圧下濃縮した。残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製（０～２０％酢酸エチル

／ヘキサン）し、無色オイルの標題化合物（２－フルオロ－Ｎ－（２－フルオロフェニル）アニリン）（化合物Ｂ－０４６）（３７５．３ｍｇ，７３．２％）を得た。

【０２４３】

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：２０５．９［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。

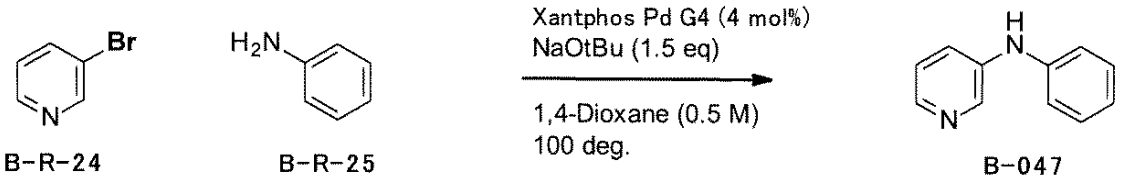
保持時間：１．２３６分（分析条件　ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（４００ＭＨｚ，ＤＭＳＯ－ｄ$_{6}$）δ７．７１９（ｂｓ，１Ｈ），７．２０７（ｄｄ，Ｊ＝８．２，１．４Ｈｚ，１Ｈ），７．１７７（ｄｄ，Ｊ＝８．２，１．４Ｈｚ，１Ｈ），７．０７１（ｄｄｄ，Ｊ＝７．４，７．４，１．４Ｈｚ，２Ｈ），７．０１５－６．９１７（ｍ，４Ｈ）。

【０２４４】

実施例１－２－６：Ｎ－フェニルピリジン－３－アミン：Ｂ－０４７の合成

【化４７】



【０２４５】

３－ブロモピリジン（Ｂ－Ｒ－２４）（２４１．０μＬ，２．５ｍｍｏｌ），アニリン（Ｂ－Ｒ－２５）（２７３．０μＬ，３．０ｍｍｏｌ，１．２当量）を使用し、実施例１－２－５と同様の方法で合成し、オフホワイト固体の標題化合物（Ｎ－フェニルピリジン－３－アミン）（化合物Ｂ－０４７）（３５８．０ｍｇ，８４．０％）を得た。

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：１７０．９［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。

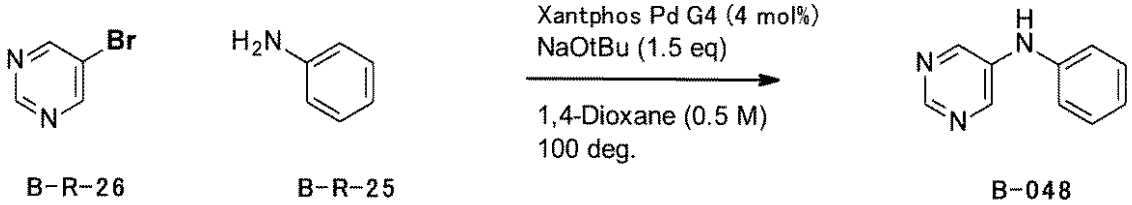
保持時間：０．４７１分（分析条件　ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（４００ＭＨｚ，ＤＭＳＯ－ｄ$_{6}$）δ８．３３５（ｂｓ，２Ｈ），８．０１９（ｄｄ，Ｊ＝４．６，１．４Ｈｚ，１Ｈ），７．４５７（ｄｄｄ，Ｊ＝８．０，１．４，１．４Ｈｚ，１Ｈ），７．２９０－７．２０５（ｍ，３Ｈ），７．１０３－７．０８２（ｍ，２Ｈ），６．９０５－６．８６６（ｍ，１Ｈ）。

【０２４６】

実施例１－２－７：Ｎ－フェニルピリミジン－５－アミン：Ｂ－０４８の合成

【化４８】



【０２４７】

５－ブロモピリミジン（Ｂ－Ｒ－２６）（３９７．０ｍｇ，２．５ｍｍｏｌ），アニリン（Ｂ－Ｒ－２５）（２７３．０μＬ，３．０ｍｍｏｌ，１．２当量）を使用し、実施例１－２－５と同様の方法で合成し、茶色固体の標題化合物（Ｎ－フェニルピリミジン－５－アミン）（化合物Ｂ－０４８）（７３．９ｍｇ，１７．０％）を得た。

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：１７１．９［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。

保持時間：０．７２５分（分析条件　ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。

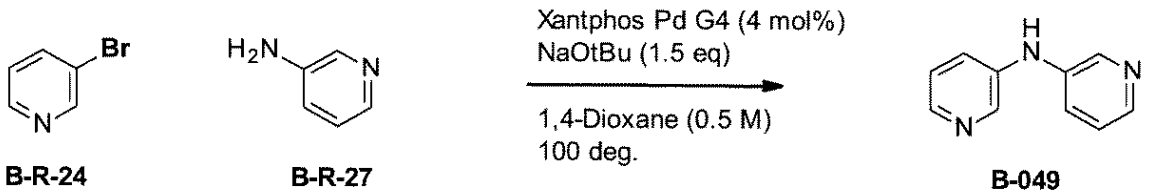
^{1}Ｈ－ＮＭＲ（４００ＭＨｚ，ＤＭＳＯ－ｄ$_{6}$）δ８．６３０（ｓ，１Ｈ），８．５４．０（ｓ，２Ｈ），８．５２２（ｓ，１Ｈ），７．３０４（ｄｄ，Ｊ＝８．０，７．２Ｈｚ，２Ｈ），７．１４８（ｄ，Ｊ＝８．０Ｈｚ，２Ｈ），６．９５４（ｔ，Ｊ＝７．２Ｈｚ

，１Ｈ）。

【０２４８】

実施例１－２－８：Ｎ－ピリジン－３－イルピリジン－３－アミン：Ｂ－０４９の合成

【化４９】



３－ブロモピリジン（Ｂ－Ｒ－２４）（２４１．０μＬ，２．５ｍｍｏｌ），３－アミノピリジン（Ｂ－Ｒ－２７）（２８２．０ｍｇ，３．０ｍｍｏｌ，１．２当量）を使用し、実施例１－２－５と同様の方法で合成し、茶色固体の標題化合物（Ｎ－ピリジン－３－イルピリジン－３－アミン）（化合物Ｂ－０４９）（３５４．８ｍｇ，８３．０％）を得た。

【０２４９】

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：１７２［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。

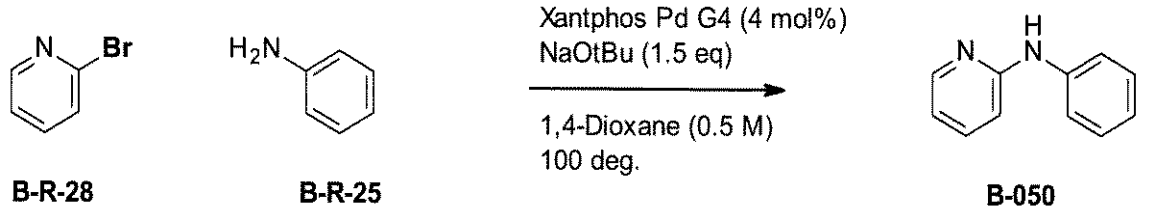
保持時間：０．１３６分（分析条件　ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（４００ＭＨｚ，ＤＭＳＯ－ｄ$_{6}$）δ８．５３６（ｓ，１Ｈ），８．３７０（ｄ，Ｊ＝２．４Ｈｚ，２Ｈ），８．０９０（ｄｄ，Ｊ＝４．７，１．４Ｈｚ，２Ｈ），７．５０４（ｄｄｄ，Ｊ＝８．２，１．４，１．４Ｈｚ，２Ｈ），７．２６６（ｄｄ，Ｊ＝８．２，４．７Ｈｚ，２Ｈ）。

【０２５０】

実施例１－２－９：Ｎ－フェニルピリジン－２－アミン：Ｂ－０５０の合成

【化５０】



２－ブロモピリジン（Ｂ－Ｒ－２８）（２３８．０μＬ，２．５ｍｍｏｌ），アニリン（Ｂ－Ｒ－２５）（２７３．０μＬ，３．０ｍｍｏｌ，１．２当量）を使用し、実施例１－２－５と同様の方法で合成し、オフホワイト固体の標題化合物（Ｎ－フェニルピリジン－２－アミン）（化合物Ｂ－０５０）（５７．５ｍｇ，１３．５％）を得た。

【０２５１】

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：１７０．９［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。

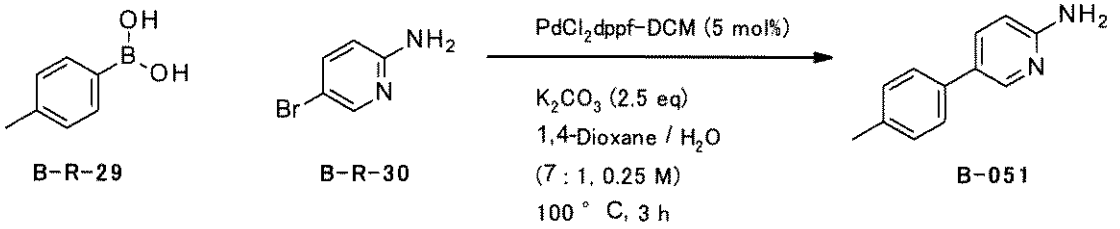
保持時間：０．４３４分（分析条件　ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（４００ＭＨｚ，ＤＭＳＯ－ｄ$_{6}$）δ８．９８０（ｓ，１Ｈ），８．１４４（ｄｄ，Ｊ＝５．０，１．０Ｈｚ，１Ｈ），７．６７５（ｄ，Ｊ＝９．６Ｈｚ，２Ｈ），７．５６９－７．５２６（ｍ，１Ｈ），７．２５２（ｄｄ，Ｊ＝７．６，７．６Ｈｚ，２Ｈ），６．８９２－６．８５３（ｍ，１Ｈ），６．８３０（ｄ，８．０Ｈｚ、１Ｈ），６．７４２－６．７１１（ｍ，１Ｈ）。

【０２５２】

実施例１－２－１０：５－（４－メチルフェニル）ピリジン－２－アミン：Ｂ－０５１の合成

【化５１】



B-R-29　　B-R-30　　B-051

【０２５３】

窒素雰囲気下１２ｍＬバイアルに、２－アミノ－５－ブロモピリジン（Ｂ－Ｒ－３０）（３４６．０ｍｇ，２．０ｍｍｏｌ），ｐ－トルエンボロン酸（Ｂ－Ｒ－２９）（３２６．０ｍｇ，２．４ｍｍｏｌ，１．２当量），ＰｄＣｌ$_2$（ｄｐｐｆ）・ＤＣＭ（８２．０ｍｇ，０．１ｍｍｏｌ，５ｍｏｌ％），Ｋ$_2$ＣＯ$_3$（６９１．０ｍｇ，５．０ｍｍｏｌ，２．５当量）、１，４－ジオキサン（７．０ｍＬ）とＨ$_2$Ｏ（１．０ｍＬ）を加え、反応混合物を１００℃で３時間撹拌した。反応液をセライトでろ過し、酢酸エチル（２０ｍＬ）で４回洗浄し、ろ液を減圧下濃縮した。残渣をアミノ修飾シリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製（０～１００％酢酸エチル／ヘキサン）し、オフホワイト固体の標題化合物（５－（４－メチルフェニル）ピリジン－２－アミン）（化合物Ｂ－０５１）（２８２．３ｍｇ，７７．０％）を得た。

【０２５４】

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：１８４．９［Ｍ＋Ｈ］$^+$。

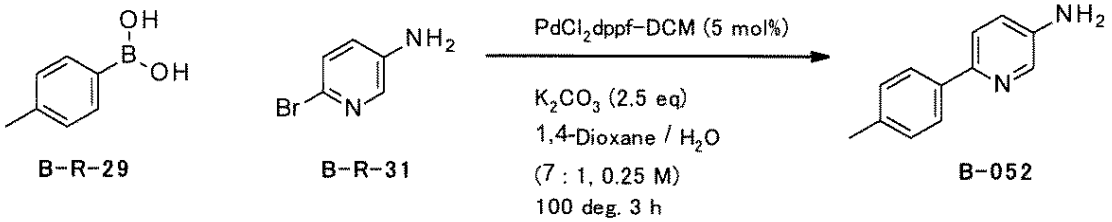
保持時間：０．５８０分（分析条件　ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（４００ＭＨｚ，ＤＭＳＯ－ｄ$_6$）δ８．２０５（ｄ，Ｊ＝２．５Ｈｚ，１Ｈ），７．６５６（ｄｄ，Ｊ＝８．６，２．５Ｈｚ，１Ｈ），７．４４１（ｄ，Ｊ＝８．０Ｈｚ，２Ｈ），７．２０３（ｄ，Ｊ＝８．０Ｈｚ，２Ｈ），６．５１１（ｄ，Ｊ＝８．６Ｈｚ，１Ｈ），５．９９３（ｓ，２Ｈ），２．３０８（ｓ，３Ｈ）。

【０２５５】

実施例１－２－１１：６－（４－メチルフェニル）ピリジン－３－アミン：Ｂ－０５２の合成

【化５２】



B-R-29　　B-R-31　　B-052

【０２５６】

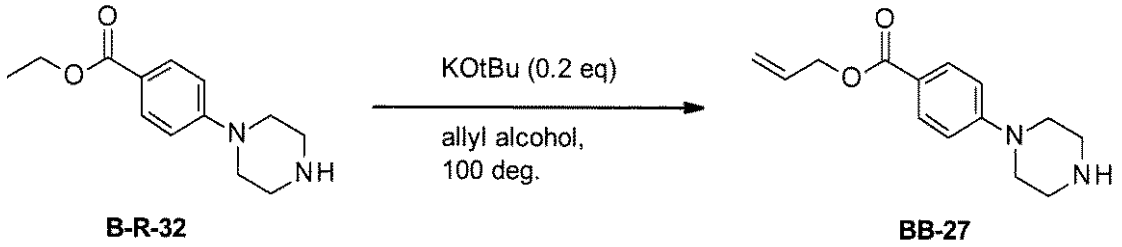
３－アミノ－６－ブロモピリジン（Ｂ－Ｒ－３１）（３４６．０ｍｇ，２．０ｍｍｏｌ）を使用し、実施例１－２－１０と同様の方法で合成し、オフホワイト固体の標題化合物（６－（４－メチルフェニル）ピリジン－３－アミン）（化合物Ｂ－０５２）（２４６．７ｍｇ，６６．９％）を得た。

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：１８５．０［Ｍ＋Ｈ］$^+$。

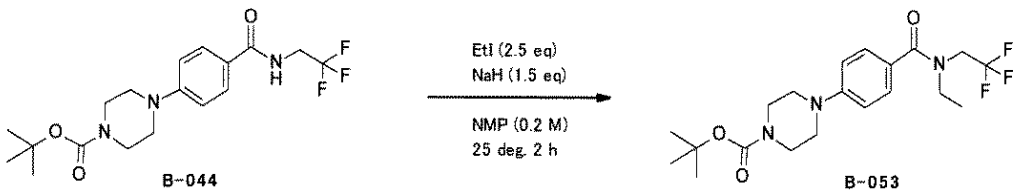
保持時間：０．５２７分（分析条件　ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（４００ＭＨｚ，ＤＭＳＯ－ｄ$_6$）δ８．０１３（ｄ，Ｊ＝２．６Ｈｚ，１Ｈ），７．８０４（ｄ，Ｊ＝８．２Ｈｚ，２Ｈ），７．５７６（ｄ，Ｊ＝８．４Ｈｚ，１Ｈ），７．１９０（ｄ，Ｊ＝８．２Ｈｚ，２Ｈ），６．９８５（ｄｄ，Ｊ＝８．４，２．６Ｈｚ，１Ｈ），５．３９９（ｓ，２Ｈ），２．３１０（ｓ，３Ｈ）。

【０２５７】
実施例１－２－１２：プロプ－２－エニル　４－ピペラジン－１－イルベンゾエート：ＢＢ２７の合成
【化５３】



【０２５８】
５０ｍＬのナスフラスコにアリルアルコール（１０ｍＬ）とＫＯｔＢｕ（９６．０ｍｇ，０．８ｍｍｏｌ，０．２当量）を加え、窒素雰囲気下１０分撹拌した。この混合物にエチル　４－ピペラジン－１－イルベンゾアト化合物（Ｂ－Ｒ－３２，ＣＡＳ：８０５１８－５７－６）（１．０ｇ，４．３ｍｍｏｌ，１．０当量）を一度に加え、得られた混合物を１００℃で１時間加熱した。反応溶液を室温まで冷却後、反応溶媒を減圧下で濃縮した。得られた残渣にアリルアルコール（１２ｍＬ）を加え１００℃でさらに１６．５時間加熱した。反応溶液を室温まで冷却後、反応溶媒を減圧下で濃縮した。得られた残渣をアミノ修飾シリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し（５０－１００％酢酸エチル／ヘキサン）、無色ワックス状固体の標題化合物（プロプ－２－エニル　４－ピペラジン－１－イルベンゾアト）（ＢＢ２７）（７２０ｍｇ，６９．０％）を得た。
【０２５９】
ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：２４７．１［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。
保持時間：０．５９５分（分析条件　ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。
^{1}Ｈ－ＮＭＲ（４００ＭＨｚ，ＤＭＳＯ－ｄ$_{6}$）δ７．７９５（ｄ，Ｊ＝９．０Ｈｚ，２Ｈ），６．９５６（ｄ，Ｊ＝９．０Ｈｚ，２Ｈ），６．０７２－５．９７７（ｍ，１Ｈ），５．３８７－５．３３２（ｍ，１Ｈ），５．２６２－５．２２５（ｍ，１Ｈ），４．７３７－４．７１６（ｍ，２Ｈ），３．２２９－３．２０４（ｍ，４Ｈ），２．８１６－２．７９０（ｍ，４Ｈ），２．３２３（ｂｓ，１Ｈ）。
【０２６０】
実施例１－３：モデル基質のエチル化体標品：Ｂ－０５３～Ｂ０７５の合成
モデル基質のエチル化体標品を実施例１－３－１から１－３－４に示す４通りの方法で合成し、ＬＣＭＳにより保持時間の測定と質量分析を行った
【０２６１】
実施例１－３－１：ＮａＨを塩基として使用したエチル化反応：合成法Ａ
モデル基質（ｔｅｒｔ－ブチル　４－［４－（２，２，２－トリフルオロエチルカルバモイル）フェニル］ピペラジン－１－カルボキシレート：Ｂ－０４４）に対する反応を、ＮａＨを塩基として使用したエチル化反応の代表例として示す。
【化５４】



【０２６２】
窒素雰囲気下、１．５ｍＬガラスバイアルにｔｅｒｔ－ブチル　４－［４－（２，２，

２－トリフルオロエチルカルバモイル）フェニル］ピペラジン－１－カルボキシラート（Ｂ－０４４）（３９．０ｍｇ，０．１ｍｍｏｌ）とＮＭＰ（０．５ｍＬ）を加えた。その溶液にＮａＨ（６．０ｍｇ，０．１５ｍｍｏｌ，１．５当量）を室温下で加えた。５分撹拌後、反応液にヨードエタン（２０．０μＬ，０．２５ｍｍｏｌ，２．５当量）を加えた。得られた反応溶液を室温で２時間撹拌した。

【０２６３】

反応追跡

反応開始から２時間経過時に、グローブバッグ中にて反応液を５μＬサンプリングしてCH_3CN（１０００μＬ）で希釈し、ＬＣサンプルを調製した。ＬＣＭＳにより保持時間の測定と質量分析を行った。

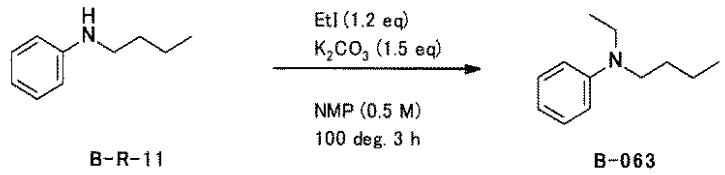
合成法Ａに従い、表１－３に示した基質量、溶媒を使用して反応を行い、ＬＣＭＳにより保持時間の測定と質量分析を行った。

【０２６４】

実施例１－３－２：K_2CO_3を塩基として使用したエチル化反応：合成法Ｂ

試薬（Ｎ－ブチルアニリン：Ｂ－Ｒ－１１）に対する反応を、K_2CO_3を塩基として使用したエチル化反応の代表例として示す。

【化５５】



【０２６５】

窒素雰囲気下、２．０ｍＬガラスバイアルにＮ－ブチルアニリン（Ｂ－Ｒ－１１）（７５．０ｍｇ，０．５ｍｍｏｌ）、K_2CO_3（１０４．０ｍｇ，０．７５ｍｍｏｌ，１．５当量）とＮＭＰ（１．３ｍＬ）を加えた。その懸濁液にヨードエタン（４８．０μＬ，０．６ｍｍｏｌ，１．２当量）を加えた。得られた反応溶液を１００℃で３時間撹拌した。

【０２６６】

反応追跡

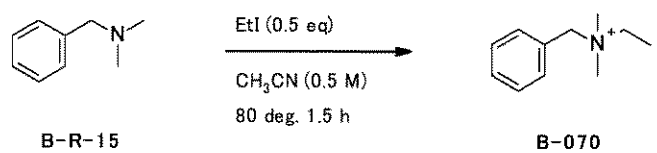
反応開始から３時間経過時に、グローブバッグ中にて反応液を５μＬサンプリングしてCH_3CN（１０００μＬ）で希釈し、ＬＣサンプルを調製した。ＬＣＭＳにより保持時間の測定と質量分析を行った。

合成法Ｂに従い、表１－３に示した基質量、溶媒、反応温度にて反応を行い、ＬＣＭＳにより保持時間の測定と質量分析を行った。

【０２６７】

実施例１－３－３：塩基を使用しないエチル化反応：合成法Ｃ

【化５６】



【０２６８】

窒素雰囲気下、２．０ｍＬガラスバイアルにＮ，Ｎ－ジメチルベンジルアミン（Ｂ－Ｒ－１）５（６８．０ｍｇ，０．５ｍｍｏｌ）とCH_3CN（１．０ｍＬ）を加えた。その懸濁液にヨードエタン（２０．０μＬ，０．２５ｍｍｏｌ，０．５当量）を加えた。得られた反応溶液を８０℃で１．５時間撹拌した。

【０２６９】

反応追跡

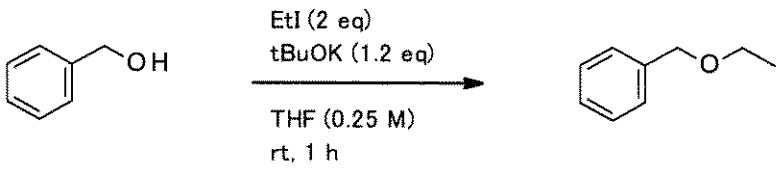
反応開始から１．５時間経過時に、グローブバッグ中にて反応液を５μＬサンプリングしてCH_3CN（１０００μＬ）で希釈し、ＬＣサンプルを調製した。ＬＣＭＳにより保持時間の測定と質量分析を行った。

実施例１－３－４：ＫｔＯＢｕを塩基として使用したエチル化反応：合成法Ｄ

試薬（ベンジルアルコール：Ｂ－Ｒ－１６）に対する反応を、ＫｔＯＢｕを塩基として使用したエチル化反応の代表例として示す。

【０２７０】

【化５７】



B-R-16　　B-071

窒素雰囲気下、３．０ｍＬガラスバイアル中、ベンジルアルコール（Ｂ－Ｒ－１６）（２７．０ｍｇ，０．２５ｍｍｏｌ）とＴＨＦ（１．０ｍＬ）の溶液に、ＫＯｔＢｕ（３４．０ｍｇ，０．３ｍｍｏｌ，１．２当量）を加え５分撹拌した。得られた反応液にヨードエタン（４０．０μＬ，０．５ｍｍｏｌ，２．０当量）を加え、反応溶液を室温で１時間撹拌した。

【０２７１】

反応追跡

反応開始から１時間経過時に、グローブバッグ中にて反応液を５μＬサンプリングしてCH_3CN（１０００μＬ）で希釈し、ＬＣサンプルを調製した。ＬＣＭＳにより保持時間の測定を行った。

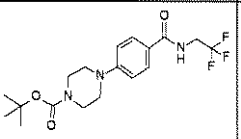
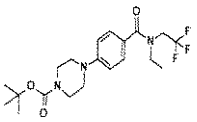
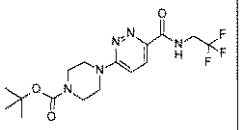
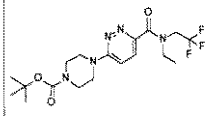
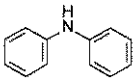
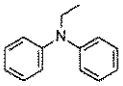
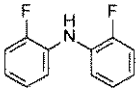
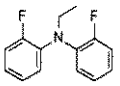
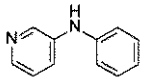
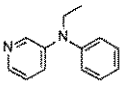
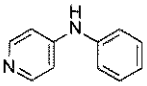
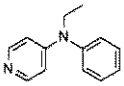
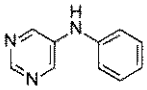
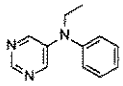
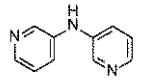
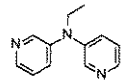
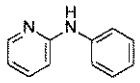
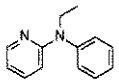
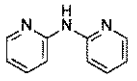
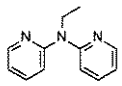
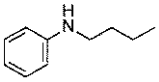
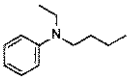
合成法Ｄに従い、表１－３に示した基質量にて反応を行い、ＬＣＭＳにより保持時間の測定を行った。

【０２７２】

これらの結果を表１－３に示す。

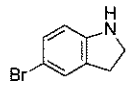
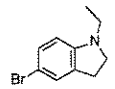
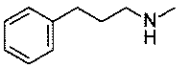
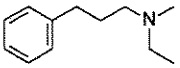
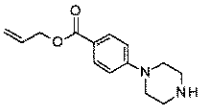
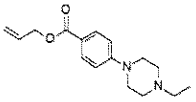
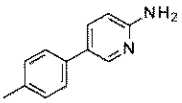
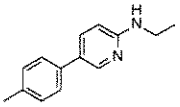
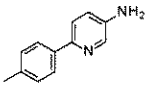
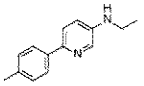
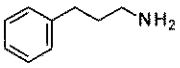
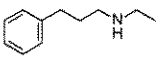
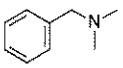
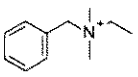
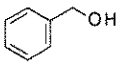
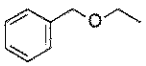
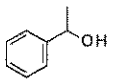
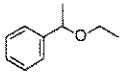
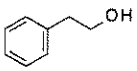
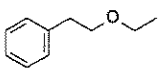
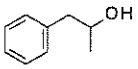
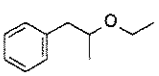
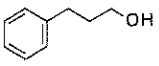
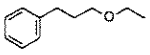
［表１－３］

【表６】

Run	Substrate	Substrate (structure)	Substrate (mg, mmol)	Method	Solvent (M)	Temp (°C)	Time (h)	Ethylated compound	Ethylated compound (structure)	m/z [M+H]+	Retention time	Analysis method
1	B-044		39, 0.1	A	NMP (0.2)	rt	2.0	B-053		416	1.240	SMD-FA05-1
2	B-045		39 , 0.1	A	NMP (0.2)	rt	2.0	B-054		418	1.087	SMD-FA05-1
3	B-R-08		42, 0.25	A	NMP (0.25)	rt	1.5	B-055		198	1.432	SMD-FA05-1
4	B-046		51, 0.25	A	NMP (0.25)	rt	2.0	B-056		234	1.372	SMD-FA05-1
5	B-047		43, 0.25	A	DMF (0.25)	rt	1.5	B-057		199	1.047, 0.667	SMD-AC05-1
6	B-R-09		43, 0.25	A	DMF (0.25)	rt	1.5	B-058		199	0.935, 0.667	SMD-AC05-1
7	B-048		21, 0.125	A	DMF (0.25)	rt	1.5	B-059		200	0.893, 0.927	SMD-AC05-1
8	B-049		43, 0.25	A	DMF (0.25)	rt	1.5	B-060		200	0.737, 0.397	SMD-AC05-1
9	B-050		43, 0.25	A	NMP (0.25)	rt	2.0	B-061		199	0.548	SMD-FA05-1
10	B-R-10		43, 0.25	A	NMP (0.25)	rt	1.5	B-062		200	0.463	SMD-FA05-1
11	B-R-11		75, 0.5	B	NMP (0.5)	100	3.0	B-063		178	0.612	SMD-FA05-1

【０２７３】

【表７】

12	B-R-12		50, 0.25	A	NMP (0.25)	rt	2.0	B-064		226	1.301	SMD-FA05-1
13	B-R-13		37, 0.25	B	CH3CN (0.25)	80	1.5	B-065		178	0.516	SMD-FA05-1
14	BB27		62, 0.25	B	CH3CN (0.25)	80	2.0	B-066		275	1.120	SMD-AC05-1
15	B-051		46, 0.25	A	THF (0.25)	rt	5.0	B-067		213	0.641	SMD-FA05-1
16	B-052		46, 0.25	A	THF (0.25)	rt	5.0	B-068		213	0.640	SMD-FA05-1
17	B-R-14		68, 0.5	B	Dioxane (0.25)	80	1.5	B-069		164	0.506	SMD-FA05-1
18	B-R-15		68, 0.075	C	CH3CN (0.5)	80	1.5	B-070		164[a]	0.416	SMD-AC05-1
19	B-R-16		27, 0.25	D	THF (0.25)	rt	1.0	B-071		ND	1.089	SMD-FA05-1
20	B-R-17		31, 0.25	D	THF (0.25)	rt	1.0	B-072		ND	1.181	SMD-FA05-1
21	B-R-18		31, 0.25	D	THF (0.25)	rt	1.0	B-073		ND	1.157	SMD-FA05-1
22	B-R-19		34, 0.25	D	THF (0.25)	rt	1.0	B-074		ND	1.241	SMD-FA05-1
23	B-R-20		34, 0.25	D	THF (0.25)	rt	0.5	B-075		ND	1.256	SMD-FA05-1

[a]: [M]$^+$

【０２７４】

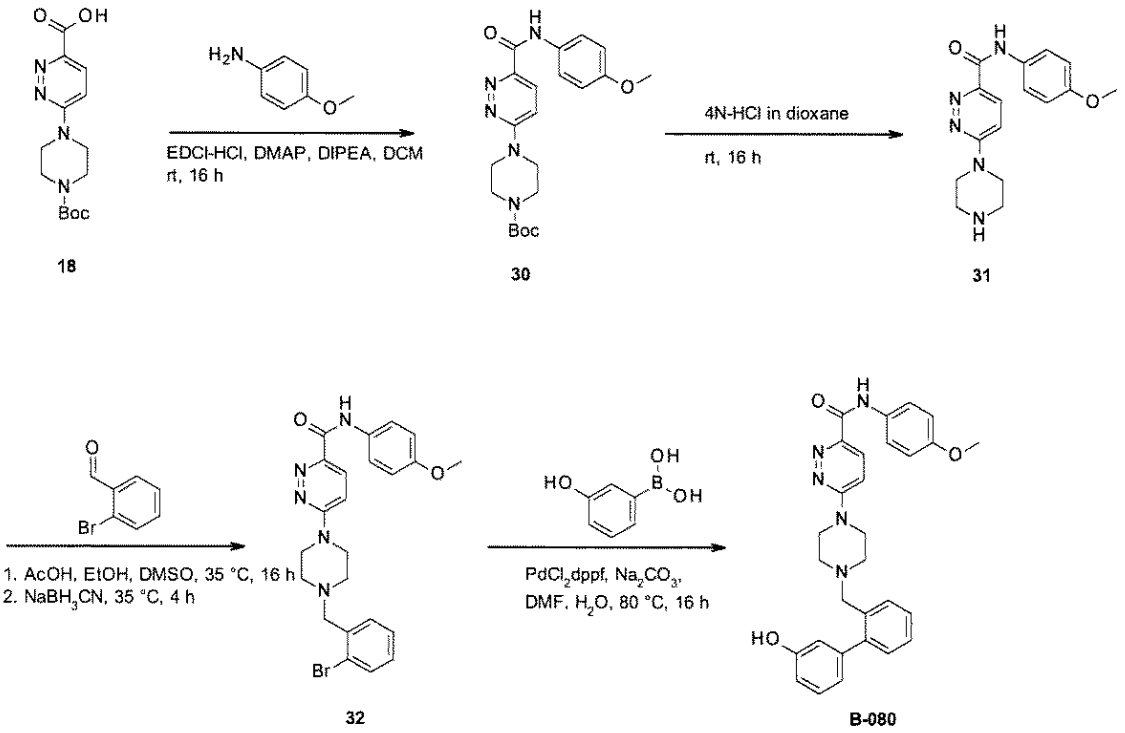
なお、表１－３，Ｒｕｎ１，２のエチル化体はＮ－エチル体として表記しているが、Ｏ－エチル体の可能性もある。また、Ｒｕｎ５～１０においてもジアリールアミン－Ｎ－エチル体と表記しているが、反応点が２以上あるため、Ｎ－エチル体以外の可能性もある。特に、Ｒｕｎ５～８では、モノエチル体が２種類観測されるため、２つの保持時間を表記した。

【０２７５】

実施例１－４：アレノール化合物Ｂ－０８０（６－［４－［［２－（３－ヒドロキシフェニル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－（４－メトキシフェニル）ピリダジン－３－カルボキサミド）の合成法

【０２７６】

【化５８】



【０２７７】

第一工程：ｔｅｒｔ－ブチル　４－［６－［（４－メトキシフェニル）カルバモイル］ピリダジン－３－イル］ピペラジン－１－カルボキシラート：化合物３０の合成

窒素雰囲気下２００ｍＬフラスコに、６－［４－［（２－メチルプロパン－２－イル）オキシカルボニル］ピペラジン－１－イル］ピリダジン－３－カルボン酸（化合物１８）（６．０ｇ，１９．５ｍｍｏｌ，１．０ｅｑ）、４－メトキシアニリン（２．４ｇ，１９．５ｍｍｏｌ，１．０ｅｑ）、とＤＣＭ（６０ｍＬ）を加えた。この溶液に、ＥＤＣＩ・ＨＣｌ（７．５ｇ，３８．９ｍｍｏｌ，２．０ｅｑ）、ＤＭＡＰ（２．４ｇ，１９．５ｍｍｏｌ，１．０ｅｑ）とＤＩＰＥＡ（１．０ｇ，７７．８ｍｍｏｌ，４．０ｅｑ）を加え、得られた反応混合物を室温で１６時間撹拌した。反応液に飽和NH_4Cl水溶液（５０ｍＬ）を加え、ＤＣＭ（１００ｍＬ）で３回抽出した。有機溶媒を混合し、Na_2SO_4で乾燥後ろ過し、ろ液を減圧下濃縮した。

【０２７８】

残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製（０～６０％酢酸エチル／石油エーテル）し、ｔｅｒｔ－ブチル　４－［６－［（４－メトキシフェニル）カルバモイル］ピリダジン－３－イル］ピペラジン－１－カルボキシラート（化合物３０）を黄色固体として得た（１．４ｇ，１６．５％）。

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：４１４［Ｍ＋Ｈ］$^+$。

保持時間：１．２８３分。

分析条件：ＰＨ－ＴＦＡ－１４。

【０２７９】

第二工程：Ｎ－（４－メトキシフェニル）－６－ピペラジン－１－イルピリダジン－３－カルボキサミド：化合物３１の合成

窒素雰囲気下１００ｍＬフラスコに、ｔｅｒｔ－ブチル　４－［６－［（４－メトキシフェニル）カルバモイル］ピリダジン－３－イル］ピペラジン－１－カルボキシラート（化合物３０）（１．４ｇ，３．４ｍｍｏｌ，１．０ｅｑ）とＤＣＭ（３０ｍＬ）を加えた。この溶液に、４Ｍ－ＨＣｌ　１，４－ジオキサン溶液（２０ｍＬ）を加え、得られた反応混合物を室温で１６時間撹拌した。反応液を減圧下濃縮し、得られた残渣を水（２０ｍ

Ｌ）に溶解し、アンモニア水を用いｐＨを８－９の塩基性に調整した。析出した固体をろ過し、得られた固体を水（２０ｍＬ）で３回洗浄した。回収した固体を、減圧下、定温乾燥機を使用して５０℃で１６時間乾燥し、Ｎ－（４－メトキシフェニル）－６－ピペラジン－１－イルピリダジン－３－カルボキサミド（化合物３１）を黄色固体として得た（８９０ｍｇ）。得られた固体はこれ以上の精製は行わずに、次の工程に使用した。

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：３１４［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。

保持時間：０．９１５分。

分析条件：ＰＨ－ＴＦＡ－１４。

【０２８０】

第三工程：６－［４－［（２－ブロモフェニル）メチル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－（４－メトキシフェニル）ピリダジン－３－カルボキサミド：化合物３２の合成

窒素雰囲気下５０ｍＬフラスコに、Ｎ－（４－メトキシフェニル）－６－ピペラジン－１－イルピリダジン－３－カルボキサミド（化合物３１）（０．９ｇ，２．９ｍｍｏｌ，１．０ｅｑ）とＥｔＯＨ／ＤＭＳＯ（９．０ｍＬ／９．０ｍＬ）の混合溶液を加えた。この溶液に、２－ブロモベンズアルデヒド（１．１ｇ，５．７ｍｍｏｌ，２．０ｅｑ）とＡｃＯＨ（０．５ｍＬ，７．５ｍｍｏｌ，２．７ｅｑ）を加え、得られた反応混合物を３５℃で１６時間撹拌した。この反応液に$NaBH_3CN$（３６１ｍｇ，５．７ｍｍｏｌ，２．０ｅｑ）を加え、３５℃で１６時間撹拌した。反応液を減圧下濃縮し、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製（０～６０％酢酸エチル／石油エーテル）し、６－［４－［（２－ブロモフェニル）メチル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－（４－メトキシフェニル）ピリダジン－３－カルボキサミド（化合物３２）をオフホワイト固体として得た（０．９ｇ，５９．８％）。

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：４８２，４８４［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。

保持時間：１．４２９分。

分析条件：ＰＨ－ＡＣ－０４。

【０２８１】

第四工程：６－［４－［［２－（３－ヒドロキシフェニル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－（４－メトキシフェニル）ピリダジン－３－カルボキサミド：アレノール化合物Ｂ－０８０の合成

窒素雰囲気下５０ｍＬフラスコに、６－［４－［（２－ブロモフェニル）メチル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－（４－メトキシフェニル）ピリダジン－３－カルボキサミド（化合物３２）（１．４ｇ，２．９ｍｍｏｌ，１．０ｅｑ）、３－ヒドロキシベンゼンボロン酸（１．６ｇ，１１．６ｍｍｏｌ，４．０ｅｑ）、Na_2CO_3（９２２．８ｍｇ，８．７ｍｍｏｌ，３．０ｅｑ）とＤＭＦ／H_2O（１４．０ｍＬ／１．４ｍＬ）の混合溶液を加えた。この懸濁液に、$PdCl_2$（ｄｐｐｆ）（１２７．４ｍｇ，０．２ｍｍｏｌ，０．０６ｅｑ）を加え、得られた反応混合物を窒素雰囲気下８０℃で１６時間撹拌した。室温に冷却後反応液をセライトでろ過し、セライトを酢酸エチル（５０ｍＬ）で３回洗浄した。ろ液を水（５０ｍＬ）で３回洗浄し、Na_2SO_4で乾燥した。固体をろ過後ろ液を減圧下濃縮した。残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製（０～１０％ＭｅＯＨ／ＤＣＭ）し、６－［４－［［２－（３－ヒドロキシフェニル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－（４－メトキシフェニル）ピリダジン－３－カルボキサミド（Ｂ－０８０）を黄色固体として得た（５６４．９ｍｇ，３８．５％）。

【０２８２】

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：４９６［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。

保持時間：１．３８１分。

分析条件：ＰＨ－ＴＦＡ－１５。

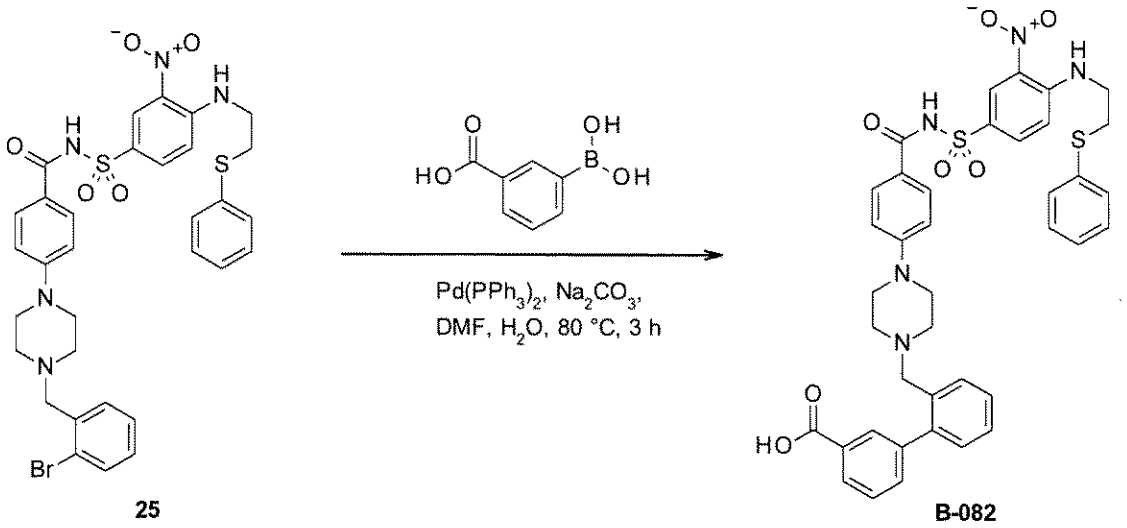
^{1}Ｈ－ＮＭＲ（３００ＭＨｚ，ＤＭＳＯ－d_6）δ１０．５７（ｓ，１Ｈ），９．４５（ｓ，１Ｈ），７．９２（ｄ，Ｊ＝９．６Ｈｚ，１Ｈ），７．８７－７．７６（ｍ，２Ｈ），７．５７（ｄ，Ｊ＝７．２Ｈｚ，１Ｈ），７．３９－７．３１（ｍ，３Ｈ），７．２４－７．２０（ｍ，２Ｈ），６．９７－６．８７（ｍ，２Ｈ），６．８４－６．７２（ｍ，

３Ｈ），３．７４－３．７０（ｍ，６Ｈ），３．４５（ｓ，２Ｈ），２．４８－２．４３（ｍ，４Ｈ）。

【０２８３】

実施例１－５：カルボン酸化合物Ｂ－０８２（３－［２－［［４－［４－［［３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニルカルバモイル］フェニル］ピペラジン－１－イル］メチル］フェニル］安息香酸）の合成法

【化５９】



25　　B-082

【０２８４】

３－［２－［［４－［４－［［３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニルカルバモイル］フェニル］ピペラジン－１－イル］メチル］フェニル］安息香酸：カルボン酸化合物Ｂ－０８２の合成

窒素雰囲気下５０ｍＬフラスコに、４－［４－［（２－ブロモフェニル）メチル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－［３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニルベンズアミド（化合物２５）（０．４ｇ，０．６ｍｍｏｌ，１．０ｅｑ）、３－ボロノ安息香酸（１８６．８ｍｇ，１．１ｍｍｏｌ，２．０ｅｑ）、Na_2CO_3（１７９．０ｍｇ，１．７ｍｍｏｌ，３．０ｅｑ）とＤＭＦ／H_2O（８．０ｍＬ，１０：１）の混合溶液を加えた。この懸濁液に、Ｐｄ（ＰＰｈ$_3$）$_2$Ｃｌ$_2$（３９．５ｍｇ，０．０６ｍｍｏｌ，０．１ｅｑ）を加え、得られた反応混合物を窒素雰囲気下８０℃で３時間撹拌した。室温に冷却後反応液をセライトでろ過し、セライトを酢酸エチル（５０ｍＬ）で３回洗浄した。ろ液を水（５０ｍＬ）で３回洗浄し、Na_2SO_4で乾燥した。固体をろ過後ろ液を減圧下濃縮した。残渣を逆相シリカゲルカラムクロマトグラフィー（Ｃ１８）で精製（０～４５％CH_3CN／０．１％NH_4HCO_3水溶液）し、さらに逆相シリカゲルカラムクロマトグラフィー（Ｃ１８）により精製（０～３０％CH_3CN／０．１％ギ酸水溶液）し、３－［２－［［４－［４－［［３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニルカルバモイル］フェニル］ピペラジン－１－イル］メチル］フェニル］安息香酸（Ｂ－０８２）を黄色固体として得た（１３８．３ｍｇ，３２．３％）。

【０２８５】

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：７５２［Ｍ＋Ｈ］$^+$。

保持時間：１．１７１分。

分析条件：ＰＨ－ＴＦＡ－１６。

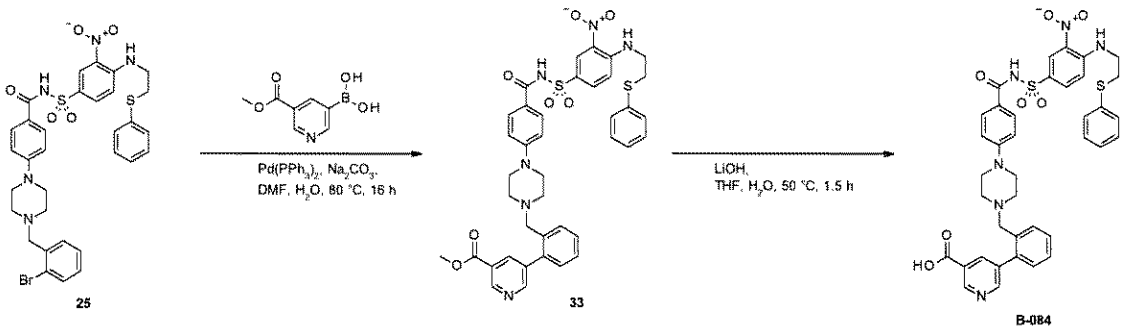
^{1}Ｈ－ＮＭＲ（３００ＭＨｚ，ＤＭＳＯ－ｄ$_6$）δ１２．９３（ｓ，１Ｈ），１１．９２（ｓ，１Ｈ），８．７３（ｔ，Ｊ＝６．０Ｈｚ，１Ｈ），８．５６（ｄ，Ｊ＝２．３Ｈｚ，１Ｈ），８．１２（ｔ，Ｊ＝１．８Ｈｚ，１Ｈ），７．９４－７．８６（ｍ，２Ｈ），

７．７３－７．６１（ｍ，３Ｈ），７．５９－７．４７（ｍ，２Ｈ），７．４２－７．１４（ｍ，９Ｈ），６．８９－６．８６（ｍ，２Ｈ），３．６７－３．６０（ｍ，２Ｈ），３．３６－３．２４（ｍ，８Ｈ），２．４８－２．４１（ｍ，４Ｈ）。

【０２８６】

実施例１－６：カルボン酸化合物Ｂ－０８４（５－［２－［［４－［４－［［３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニルカルバモイル］フェニル］ピペラジン－１－イル］メチル］フェニル］ピリジン－３－カルボン酸）の合成法

【化６０】



【０２８７】

第一工程：メチル５－［２－［［４－［４－［［３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニルカルバモイル］フェニル］ピペラジン－１－イル］メチル］フェニル］ピリジン－３－カルボキシラート：化合物３３の合成

窒素雰囲気下５０ｍＬフラスコに、４－［４－［（２－ブロモフェニル）メチル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－［３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニルベンズアミド（化合物２５）（０．２ｇ，０．３ｍｍｏｌ，１．０ｅｑ）、（５－メトキシカルボニルピリジン－３－イル）ボロン酸（０．３ｇ，１．４ｍｍｏｌ，５．０ｅｑ）、Na_2CO_3（８９．５ｍｇ，０．８ｍｍｏｌ，３．０ｅｑ）とＤＭＦ／H_2O（４．０ｍＬ，１０：１）の混合溶液を加えた。この懸濁液に、Ｐｄ（ＰＰｈ$_3$）$_2$Ｃｌ$_2$（１９．８ｍｇ，０．０３ｍｍｏｌ，０．１ｅｑ）を加え、得られた反応混合物を窒素雰囲気下８０℃で１６時間撹拌した。室温に冷却後反応液をセライトでろ過し、セライトを酢酸エチル（２５ｍＬ）で３回洗浄した。ろ液を水（２５ｍＬ）で３回洗浄し、Na_2SO_4で乾燥した。固体をろ過後ろ液を減圧下濃縮した。残渣を逆相シリカゲルカラムクロマトグラフィー（Ｃ１８）により精製（５～７０％CH_3CN／０．１％ギ酸水溶液）し、メチル５－［２－［［４－［４－［［３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニルカルバモイル］フェニル］ピペラジン－１－イル］メチル］フェニル］ピリジン－３－カルボキシラート（化合物３３）を黄色固体として得た（１９３．０ｍｇ，８９．６％）。

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：７６７［Ｍ＋Ｈ］$^+$。

保持時間：０．８２３分。

分析条件：ＰＨ－ＦＡ－０８。

【０２８８】

第二工程：５－［２－［［４－［４－［［３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニルカルバモイル］フェニル］ピペラジン－１－イル］メチル］フェニル］ピリジン－３－カルボン酸：カルボン酸化合物Ｂ－０８４の合成

窒素雰囲気下３０ｍＬフラスコに、メチル５－［２－［［４－［４－［［３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニルカルバモイル］フェニル］ピペラジン－１－イル］メチル］フェニル］ピリジン－３－カルボキシラート（化合物３３）（０．４ｇ，０．５ｍｍｏｌ，１．０ｅｑ）とＴＨＦ（８．０ｍＬ）を加えた。この反応液に、ＬｉＯＨ水溶液（２ｍＬ，６２．５ｍｇ，２．６ｍｍｏｌ，５ｅｑ）

を加え、得られた反応混合物を窒素雰囲気下５０℃で１．５時間撹拌した。室温に冷却後反応液を減圧下濃縮した。残渣を逆相シリカゲルカラムクロマトグラフィー（Ｃ１８）で精製（０～４５％CH_3CN／０．１％NH_4HCO_3水溶液）し、さらに逆相シリカゲルカラムクロマトグラフィー（Ｃ１８）により精製（０～３０％CH_3CN／０．１％ギ酸水溶液）し、５－［２－［［４－［４－［［３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニルカルバモイル］フェニル］ピペラジン－１－イル］メチル］フェニル］ピリジン－３－カルボン酸（Ｂ－０８４）を黄色固体として得た（１００．０ｍｇ，２５．２％）。

【０２８９】

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：７５３［Ｍ＋Ｈ］$^+$。

保持時間：１．４２８分。

分析条件：ＰＨ－ＴＦＡ－１７。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（３００ＭＨｚ，ＤＭＳＯ－d_6）δ１３．３７（ｓ，１Ｈ），１１．９８（ｓ，１Ｈ），９．０４（ｄ，Ｊ＝２．０Ｈｚ，１Ｈ），８．８１－８．７８（ｍ，２Ｈ），８．５７－８．５４（ｍ，２Ｈ），７，８８（ｄｄ，Ｊ＝９．２，２．３Ｈｚ，１Ｈ），７．７１（ｄ，Ｊ＝８．８Ｈｚ，２Ｈ），７．４５－７．３３（ｍ，６Ｈ），７．２７－７．１３（ｍ，４Ｈ），６．８９－６．８６（ｍ，２Ｈ），３．６７－３．６１（ｍ，２Ｈ），３．３６－３．２２（ｍ，８Ｈ），２．４８－２．４０（ｍ，４Ｈ）。

【０２９０】

<u>実施例２：分子中に様々な官能基を有する基質に対するアレノールのＯ－選択的なメチル化検討</u>

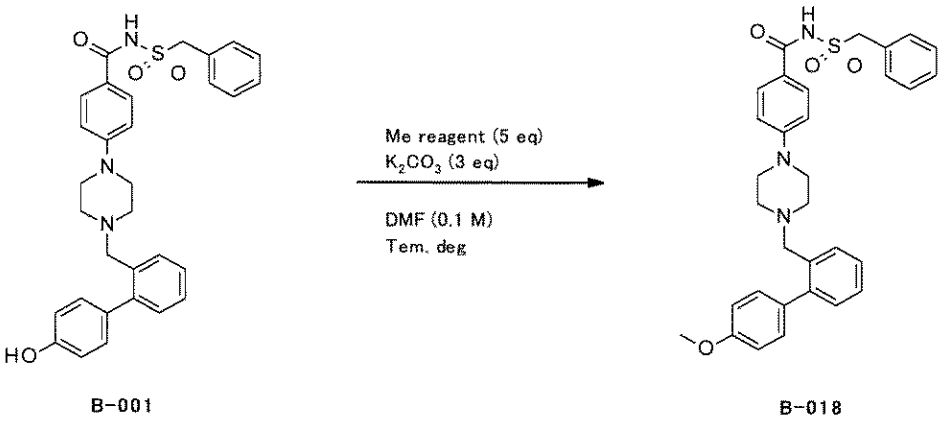
<u>実施例２－１：基質として化合物Ｂ－００１：Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［［２－（４－ヒドロキシフェニル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（フェノール）を用いた各種メチル化剤の検討</u>

様々な官能基を有する基質に対してアレノールのＯ－選択的なメチル化を行う場合には、メチル化剤（求電子剤）の選択が重要である。まずは適用可能なメチル化剤の範囲について、確認を行った。なお、本明細書において、「フェノール」と記載した場合、フェノールそのものに加えて、フェノール骨格の任意の箇所に任意の置換基が付加したものも「フェノール」と記載することがある。

【０２９１】

<u>実施例２－１－１：トリメチルフェニルアンモニウムクロリドＢ－Ｒ－０１を用いたフェノールのメチル化</u>

【化６１】



B-001　　B-018

【０２９２】

窒素置換されたグローブバッグ中、０．６ｍＬのスクリューキャップバイアルに、Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［［２－（４－ヒドロキシフェニル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（Ｂ－００１）（２．７ｍｇ，５．０μｍｏｌ，

１．０当量）とＤＭＦ（５０．０μＬ）を加えた。得られた溶液にK_2CO_3（２．１ｍｇ，１５．０μｍｏｌ，３．０当量）を加え１５～２０秒混ぜ合わせた後に、トリメチルフェニルアンモニウムクロリド（Ｂ－Ｒ－０１）（４．３ｍｇ，２５．０μｍｏｌ，５．０当量）を加えた。得られた反応混合物を８０℃で１４００ｒｐｍで撹拌した。なお、ｒｐｍは「ｒｏｔａｔｉｏｎｓ　ｐｅｒ　ｍｉｎｕｔｅ」の略であり、１分間の回転数を示す。「１４００ｒｐｍで撹拌」とは１分間に１４００回転で撹拌することを示す。

【０２９３】

反応追跡

途中、反応開始から３時間経過時に、窒素雰囲気下にて反応液を５μＬサンプリングしてＣＨ$_3$ＣＮ（１０００μＬ）で希釈し、ＬＣサンプルを調製した。ＬＣＭＳ測定を行うことで反応進行度を測定した。結果は表２－１、Ｒｕｎ１の通りである。

Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［［２－（４－メトキシフェニル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド：化合物Ｂ－０１８。

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：５５６［Ｍ＋Ｈ］$^+$。

保持時間：０．６２分（分析条件ＳＱＤ－ＦＡ０５－２）。

（原料ＡｒＯＨの保持時間は、０．５５分（分析条件ＳＱＤ－ＦＡ０５－２）。

【０２９４】

実施例２－１－２：炭酸ジメチルＢ－Ｒ－０２，リン酸トリメチルＢ－Ｒ－０３，パラ－トルエンスルホン酸メチルＢ－Ｒ－０４を用いたフェノールのメチル化

実施例２－１－１と同様の方法で、トリメチルフェニルアンモニウムクロリド（Ｂ－Ｒ－０１）の替わりに、炭酸ジメチル（Ｂ－Ｒ－０２）（２．３ｍｇ，２５．０μｍｏｌ，５．０当量）、リン酸トリメチル（Ｂ－Ｒ－０３）（２．９μＬ，２５．０μｍｏｌ，５．０当量）パラ－トルエンスルホン酸メチル（Ｂ－Ｒ－０４）（４．７ｍｇ，２５．０μｍｏｌ，５．０当量）をそれぞれ使用して反応を行った。

【０２９５】

反応追跡

実施例２－１－１と同様の方法で反応進行度を測定した。

反応進行度の結果を表２－１に示す。

［表２－１］

【表８】

Run	Me reagent (25.0 μmol)	Temp. (℃)	Time (h)	SM (B-001) (area%)	TM (B-018) (area%)	Di-Me (area%)
1	Me_3PhN-Cl (B-R-01) (4.3 mg)	80	3	ND	100	ND
2	Me_2CO_3 (B-R-02) (2.3 mg)	80	18	89.3	10.7	ND
3	Me_3PO_4 (B-R-03) (2.9 μL)	80	18	ND	92.7	ND
4	MeOTs (B-R-04) (4.7 mg)	rt	18	ND	12.1	70.0

【０２９６】

以上の結果より、一般的なメチル化剤として使用されるパラ－トルエンスルホン酸メチル（Ｂ－Ｒ－０４）は、その高い反応性により官能基選択性が低下し、基質内にて２箇所

がメチル化されてしまうことが確認できた（分子のどの位置で２箇所メチル化されたかは未同定）。そのため、本目的でのパラ－トルエンスルホン酸メチル（Ｂ－Ｒ－０４）の使用は不適切であることが確認できた（表２－１、Ｒｕｎ４）。一方、メチルアンモニウム塩、リン酸トリメチル、炭酸ジメチルについては、分子内に３級アミンやアシルスルホンアミドを有する基質においても高選択的なアレノールのＯ－メチル化が達成できることが確認できた（表２－１、Ｒｕｎ１～３）。

【０２９７】

実施例２－２：基質として化合物Ｂ－００２：Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［［２－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（ピリジノール）を用いた各種メチル化剤と塩基の組み合わせ検討

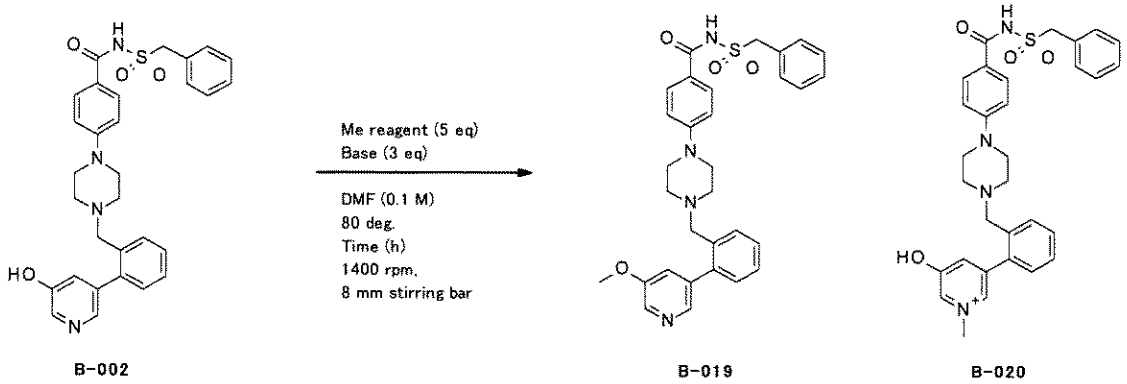
実施例２－１において、適するメチル化剤の範囲が特定できた。本実施例では、基質Ｂ－００１（フェノール）よりもさらに他の官能基の種類が増えた基質Ｂ－００２（ピリジノール）を用い、特定した範囲のメチル化剤および塩基について確認を行った。

なお、本明細書において、「ピリジノール」と記載した場合には、ピリジン環の任意の炭素上にヒドロキシ基を有する化合物のことを指す。このとき、ピリジン環を構成するそれ以外の炭素上に任意の置換基がついたものも指す。

【０２９８】

実施例２－２－１：トリメチルフェニルアンモニウムクロリド（Ｂ－Ｒ－０１）を用いたピリジノールＢ－００２：Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［［２－（４－メトキシフェニル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミドのメチル化（撹拌子の大きさと回転数の違いによる変換率との相関）（表２－２、Ｒｕｎ１（３５０ｒｐｍ））

【化６２】



【０２９９】

窒素置換されたグローブバッグ中、０．６ｍＬのスクリューキャップバイアルに、Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［［２－（４－メトキシフェニル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（Ｂ－００２）（３．８ｍｇ，７．０μｍｏｌ，１．０当量）とＤＭＦ（７０．０μＬ）を加えた。得られた溶液にCs_2CO_3（６．８ｍｇ，２１．０μｍｏｌ，３．０当量）を加え混合を確認後、トリメチルフェニルアンモニウムクロリド（Ｂ－Ｒ－０１）（６．０ｍｇ，３５．０μｍｏｌ，５．０当量）を加えた。得られた反応混合物を３５０ｒｐｍの回転数で８０℃で撹拌した。

【０３００】

反応追跡

途中、反応開始から３時間経過時に、グローブバッグ中にて反応液を５μＬサンプリングしてCH_3CN（１０００μＬ）で希釈し、ＬＣサンプルを調製した。ＬＣＭＳ測定を行うことで反応進行度を測定した。

Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［［２－（５－メトキシピリジン－３－イル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド：化合物Ｂ－０１９。

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：５５７．２［Ｍ＋Ｈ］$^+$。

保持時間：０．７４５分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。
（原料ＡｒＯＨの保持時間は、０．６４８分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。
【０３０１】
Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［［２－（５－ヒドロキシ－１－メチルピリジン－１－イウム－３－イル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド：化合物Ｂ－０２０。
ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：５５７．２［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。
保持時間：０．６００分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。
【０３０２】
実施例２－２－２：トリメチルフェニルアンモニウムクロリドＢ－Ｒ－０１を用いたピリジノールＢ－００２：Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［［２－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミドのメチル化（撹拌子の大きさと回転数の違いによる変換率との相関）（表２－２、Ｒｕｎ２（１４００ｒｐｍ））
窒素置換されたグローブバッグ中、０．６ｍＬのスクリューキャップバイアルに、Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［［２－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（Ｂ－００２）（３．８ｍｇ，７．０μｍｏｌ，１．０当量）とＤＭＦ（７０．０μＬ）を加えた。得られた溶液にCs_2CO_3（６．８ｍｇ，２１．０μｍｏｌ，３．０当量）を加え混合を確認後、トリメチルフェニルアンモニウムクロリド（Ｂ－Ｒ－０１）（６．０ｍｇ，３５．０μｍｏｌ，５．０当量）を加えた。得られた反応混合物を１４００ｒｐｍの回転数で８０℃で３時間撹拌した。
【０３０３】
反応追跡
実施例２－２－１と同様の方法で反応進行度を測定した。
【０３０４】
実施例２－２－３：トリメチルフェニルアンモニウムクロリドＢ－Ｒ－０１を用いたピリジノールＢ－００２：Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［［２－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミドのメチル化（ホスファゼン塩基検討）（表２－２、Ｒｕｎ３－５）
窒素置換されたグローブバッグ中、０．６ｍＬのスクリューキャップバイアルに、Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［［２－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（Ｂ－００２）（３．８ｍｇ，７．０μｍｏｌ，１．０当量）とＤＭＦ（７０．０μＬ）を加えた。得られた溶液にホスファゼン塩基Ｐ１ｔＢｕ（５．３μＬ，２１．０μｍｏｌ，３．０当量，Ｒｕｎ３）を加え混合を確認後、トリメチルフェニルアンモニウムクロリド（Ｂ－Ｒ－０１）（６．０ｍｇ，３５．０μｍｏｌ，５．０当量）を加えた。得られた反応混合物を１４００ｒｐｍの回転数で８０℃で３時間撹拌させた。
なお、上記ホスファゼン塩基Ｐ１ｔＢｕの替わりに、ＢＥＭＰ（６．１μＬ，２１．０μｍｏｌ，３．０当量，Ｒｕｎ４）もしくは、Ｐ２Ｅｔ（７．０μＬ，２１．０μｍｏｌ，３．０当量，Ｒｕｎ５）を用いた反応も同様に実施した。
【０３０５】
反応追跡
実施例２－２－１と同様の方法で反応進行度を測定した。
【０３０６】
実施例２－２－４：Ｐ２Ｅｔを塩基として使用したピリジノールＢ－００２：Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［［２－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド：のメチル化（Ｍｅ化剤検討）（表２－２、Ｒｕｎ６－７）
窒素置換されたグローブバッグ中、０．６ｍＬのスクリューキャップバイアルに、Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［［２－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）フェニ

ル］メチル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（Ｂ－００２）（３．８ｍｇ，７．０μｍｏｌ，１．０当量）とＤＭＦ（７０．０μＬ）を加えた。得られた溶液にＰ２Ｅｔ（７．０μＬ，２１．０μｍｏｌ，３．０当量）を加え混合を確認後、Ｍｅ化剤としてリン酸トリメチル（Ｂ－Ｒ－０３）（４．１μＬ，３５．０μｍｏｌ，５．０当量，Ｒｕｎ６）をバイアルに加えた。得られた反応混合物を１４００ｒｐｍの回転数で８０℃で表２－２に示した反応時間撹拌させた。

なお、上記リン酸トリメチル（Ｂ－Ｒ－０３）の替わりに、炭酸ジメチル（Ｂ－Ｒ－０２）（３．０μＬ，３５．０μｍｏｌ，５．０当量，Ｒｕｎ７）を用いた反応も同様に実施した。

【０３０７】

反応追跡

実施例２－２－１と同様の方法で反応進行度を測定した。

反応進行度の結果を表２－２に示す。なお、表２－２中に表記しているCH_3CN中のｐＫＢＨ$^+$値はＡｌｄｒｉｃｈ社ウエブＰｈｏｓｐｈａｚｅｎｅ　Ｂａｓｅｓサイト（ｈｔｔｐｓ：／／ｗｗｗ．ｓｉｇｍａａｌｄｒｉｃｈ．ｃｏｍ／ｃｈｅｍｉｓｔｒｙ／ｃｈｅｍｉｃａｌ－ｓｙｎｔｈｅｓｉｓ／ｔｅｃｈｎｏｌｏｇｙ－ｓｐｏｔｌｉｇｈｔｓ／ｐｈｏｓｐｈａｚｅｎｅｓ．ｈｔｍｌ）（２０２０年１２月２日閲覧）から転記した。

【０３０８】

［表２－２］

【表９】

Run	Me reagent	Base	Base / pKBH$^+$ (CH_3CN)	Time (h)	SM (B-002) (area%)	TM (B-019) (area%)	N-Me (B020) (area%)	Byproducts (area%)
1[a]	Me_3PhN-Cl (B-R-01)	Cs_2CO_3		3	86.5	2.6	10.5	ND
2	Me_3PhN-Cl (B-R-01)	Cs_2CO_3		3	ND	86.6	12.1	1.3
3	Me_3PhN-Cl (B-R-01)	P1tBu	26.9	3	40.8	38.2	21.0	ND
4	Me_3PhN-Cl (B-R-01)	BEMP	27.6	3	9.7	54.9	35.4	ND
5	Me_3PhN-Cl (B-R-01)	P2Et	32.9	3	ND	88.4	11.6	ND
6	Me_3PO_4 (B-R-03)	P2Et	32.9	1	ND	85.0	13.2	1.8
7	Me_2CO_3 (B-R-02)	P2Et	32.9	23	55.8	32.9	11.2	ND

[a]: 5 mm stirring bar, 350 rpm

【０３０９】

本結果より、塩基として炭酸セシウムを使用した際には、加えた塩基は完全に溶解していないものの、撹拌数の制御によって反応速度の再現性を向上させられることが示された（表２－２、Ｒｕｎ１＆２）。一方、完全に溶解する有機塩基を用いることで、反応の再現性への懸念は払拭できる（表２－２、Ｒｕｎ３～７）。

また、メチル化剤としてメチルアンモニウム塩、リン酸トリメチル、炭酸ジメチル、塩基として炭酸塩やホスファゼン塩基の種々の組み合わせにおいて、良好な結果を与えることが示された（表２－２、Ｒｕｎ５～７）。

特に、メチル化剤としては、トリメチルフェニルアンモニウム塩もしくはリン酸トリメ

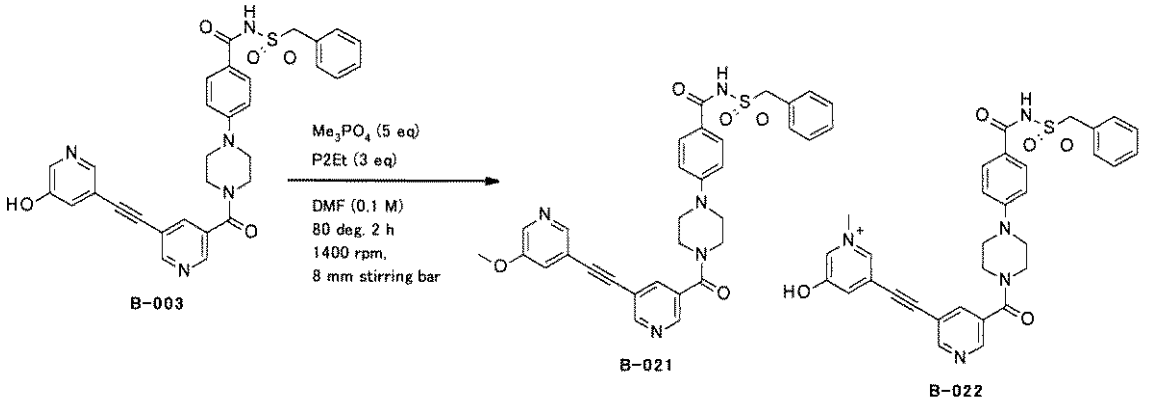
チル、塩基としては、Cs_2CO_3もしくはＰ２Ｅｔを用いた際に、３時間以内に反応が完結し、目的物（化合物Ｂ－０１９）とＮ－メチル化体（化合物Ｂ－０２０）の選択性が良好であることが確認できた（表２－２、Ｒｕｎ２，５，６）。

【０３１０】

実施例２－３：基質として化合物Ｂ－００３：Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［５－［２－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）エチニル］ピリジン－３－カルボニル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（ピリジノール）を用いたメチル化の検討

実施例２－２にて確認されたメチル化の反応条件に関して、さらに基質Ｂ－００３：Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［５－［２－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）エチニル］ピリジン－３－カルボニル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミドを用いて反応の官能基選択性を確認した。

【化６３】



【０３１１】

窒素置換されたグローブバッグ中、０．６ｍＬのスクリューキャップバイアルに、Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［５－［２－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）エチニル］ピリジン－３－カルボニル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（Ｂ－００３）（４．１ｍｇ，７．０μｍｏｌ，１．０当量）とＤＭＦ（７０．０μＬ）を加えた。得られた溶液にＰ２Ｅｔ（７．０μＬ，２１．０μｍｏｌ，３．０当量）を加え混合を確認後、リン酸トリメチル（Ｂ－Ｒ－０３）（４．１μＬ，３５．０μｍｏｌ，５．０当量）を加えた。得られた反応混合物を１４００ｒｐｍの回転数で８０℃で撹拌させた。

【０３１２】

反応追跡

途中、反応開始から２時間経過時に、グローブバッグ中にて反応液を５μＬサンプリングしてCH_3CN（１０００μＬ）で希釈し、ＬＣサンプルを調製した。ＬＣＭＳ測定（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）を行うことで反応進行度を測定した。その結果、目的物（Ｂ－０２１）の生成を８９．１ａｒｅａ％、Ｎ－メチル化体（Ｂ－０２２）の生成を８．３ａｒｅａ％確認した。

【０３１３】

Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［５－［２－（５－メトキシピリジン－３－イル）エチニル］ピリジン－３－カルボニル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド：化合物Ｂ－０２１。

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：５９６．１［Ｍ＋Ｈ］$^+$。

保持時間：１．０１１分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。

（原料ＡｒＯＨの保持時間は、０．８８８分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。

【０３１４】

Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［５－［２－（５－ヒドロキシ－１－メチルピリジン－１－イウム－３－イル）エチニル］ピリジン－３－カルボニル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド：化合物Ｂ－０２２。

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：５９６．１［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。
保持時間：０．７１４分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。

【０３１５】

以上の結果より、アセチレン基やピリジン環を含む基質Ｂ－００３（ピリジノール：Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［５－［２－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）エチニル］ピリジン－３－カルボニル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド）を用いた場合においても本反応条件は高選択的なアレノールのＯ－メチル化法として適用可能であることが示された。

以上、実施例２において、多くのメチル化され得る官能基（具体的には、ピリジン環、３級アミン、アシルスルホンアミド）を有する基質に対し、アレノールのＯ－選択的メチル化が達成できることが示された。この結果は、分子内に様々な官能基を有する単一の基質への適用のみならず、これらの官能基群が含まれる複数の基質を含む化合物ライブラリに対しても、高選択的なＯ－選択的メチル化が可能であることを示している。

【０３１６】

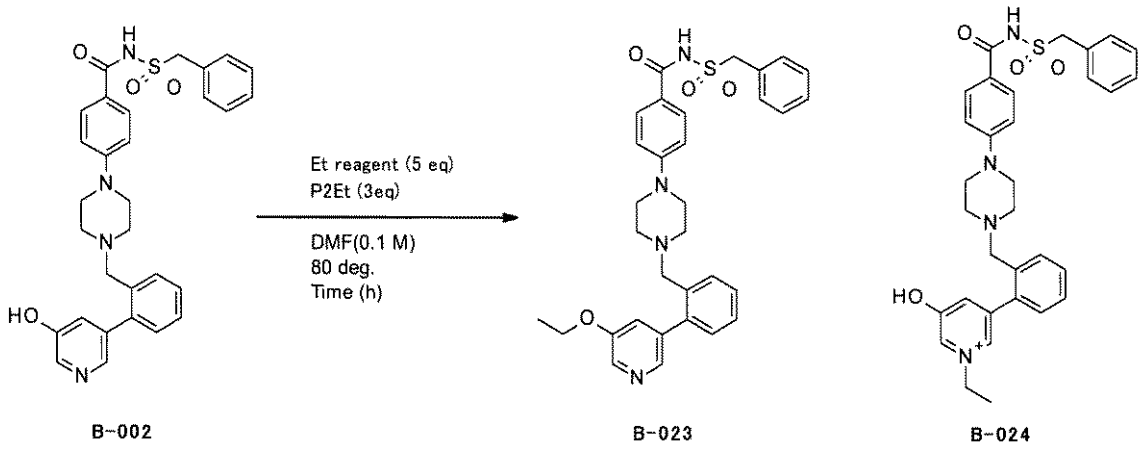
実施例３：分子中に様々な官能基を有する基質に対するアレノールのＯ－選択的なエチル化検討

実施例２で示したように、アレノールのＯ－選択的メチル化を有機塩基／トリメチルアンモニウム塩、もしくはリン酸トリメチルをメチル化剤として使用することで達成できた。この知見を基に、Ｏ－選択的エチル化をアンモニウム塩、リン酸トリエチルを用いて検討を行った。

【０３１７】

実施例３－１：基質として化合物Ｂ－００２：Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［［２－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（ピリジノール）を用いたピリジノールのＯ－選択的なエチル化

【化６４】



【０３１８】

実施例３－１－１：アンモニウム塩をエチル化剤として使用した化合物Ｂ－００２：Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［［２－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（ピリジノール）のＯ－選択的なエチル化

窒素置換されたグローブバッグ中、０．６ｍＬのスクリューキャップバイアルに、Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［［２－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（Ｂ－００２）（３．８ｍｇ，７．０μｍｏｌ，１．０当量）とＤＭＦ（７０．０μＬ）を加えた。得られた溶液にＰ２Ｅｔ（７．０μＬ，２１．０μｍｏｌ，３．０当量）を加え混合を確認後、トリエチルフェニルアンモニウムヨージド（Ｂ－Ｒ－０７）（１０．７ｍｇ，３５．０μｍｏｌ，５．０当量）を加えた。得られた反応混合物を８００ｒｐｍの回転数で８０℃で撹拌させた。

【０３１９】
反応追跡
反応開始から９．５時間経過時に、グローブバッグ中にて反応液を５μＬサンプリングしてCH_3CN（１０００μＬ）で希釈し、ＬＣサンプルを調製した。ＬＣＭＳ測定を行うことで反応進行度を測定した。結果は、表３－１、Ｒｕｎ１に示す通りだった。
Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［［２－（５－エトキシピリジン－３－イル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド：化合物Ｂ－０２３。
ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：５７１．２［Ｍ＋Ｈ］$^+$。
保持時間：０．７８９分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。
（原料ＡｒＯＨの保持時間は、０．６５８分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。
【０３２０】
Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［［２－（１－エチル－５－ヒドロキシピリジン－１－イウム－３－イル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド：化合物Ｂ－０２４。
ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：５７１．２［Ｍ＋Ｈ］$^+$。
保持時間：０．６２６分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。
実施例３－１－２：リン酸トリエチルをエチル化剤として使用した基質Ｂ－００２：Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［［２－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド：Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［［２－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（ピリジノール）のＯ－選択的なエチル化
【０３２１】
窒素置換されたグローブバッグ中、０．６ｍＬのスクリューキャップバイアルにＮ－ベンジルスルホニル－４－［４－［［２－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（Ｂ－００２）（３．８ｍｇ，７．０μｍｏｌ，１．０当量）とＤＭＦ（７０．０μＬ）を加えた。得られた溶液にＰ２Ｅｔ（７．０μＬ，２１．０μｍｏｌ，３．０当量）を加え混合を確認後、リン酸トリエチル（Ｂ－Ｒ－０５）（６．０μＬ，３５．０μｍｏｌ，５．０当量）を加えた。得られた反応混合物を８００ｒｐｍの回転数で８０℃で撹拌させた。
【０３２２】
反応追跡
途中、反応開始から１，２．５，５，１９時間経過時に、グローブバッグ中にて反応液を５μＬサンプリングしてCH_3CN（１０００μＬ）で希釈し、ＬＣサンプルを調製した。ＬＣＭＳ測定を行うことで反応進行度を測定した。結果は、表３－１、Ｒｕｎ２に示す通りだった。
【０３２３】
実施例３－１－３：嵩高いホスファゼン塩基であるＰ２ｔＢｕを用い、リン酸トリエチルをエチル化剤として使用した基質Ｂ－００２：Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［［２－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（ピリジノール）のＯ－選択的なエチル化
窒素置換されたグローブバッグ中、０．６ｍＬのスクリューキャップバイアルに、Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［［２－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（Ｂ－００２）（３．８ｍｇ，７．０μｍｏｌ，１．０当量）とＤＭＦ（７０．０μＬ）を加えた。得られた溶液にＰ２ｔＢｕ（１０．５μＬ，２．０ｍｏｌ／Ｌ，２１．０μｍｏｌ，３．０当量）を加え混合を確認後、リン酸トリエチル（Ｂ－Ｒ－０５）（６．０μＬ，３５．０μｍｏｌ，５．０当量）を加えた。得られた反応混合物を８００ｒｐｍの回転数で８０℃で撹拌させた。
【０３２４】
反応追跡
途中、反応開始から１，２．５，５，２１時間経過時に、グローブバッグ中にて反応液

を５μＬサンプリングしてＣＨ$_3$ＣＮ（１０００μＬ）で希釈し、ＬＣサンプルを調製した。ＬＣＭＳ測定を行うことで反応進行度を測定した。結果は、表３－１、Ｒｕｎ３に示す通りだった。
なお、表３－１中に表記しているＣＨ$_3$ＣＮ中のｐＫＢＨ$^+$値はＡｌｄｒｉｃｈ社 ウェブＰｈｏｓｐｈａｚｅｎｅ Ｂａｓｅｓサイト（ｈｔｔｐｓ：／／ｗｗｗ．ｓｉｇｍａａｌｄｒｉｃｈ．ｃｏｍ／ｃｈｅｍｉｓｔｒｙ／ｃｈｅｍｉｃａｌ－ｓｙｎｔｈｅｓｉｓ／ｔｅｃｈｎｏｌｏｇｙ－ｓｐｏｔｌｉｇｈｔｓ／ｐｈｏｓｐｈａｚｅｎｅｓ．ｈｔｍｌ）（２０２０年１２月２日閲覧）から転記した。

【０３２５】

なお、表３－１に示したＲａｔｉｏ（Ｏ－／Ｎ－）は、（Ｏ－エチル化体（Ｂ－０２３）のａｒｅａ％）／（Ｎ－エチル化体（Ｂ－０２４）のａｒｅａ％）として算出した。

実施例３－１の結果を表３－１に示す。

［表３－１］

【表１０】

Run	Et reagent	Base / pKBH$^+$ (CH_3CN)	Time (h)	SM (B-002) (area%)	O-Et (B-023) (area%)	N-Et (B-024) (area%)	Ratio (O-/N-)	Byproducts
1	Et_3PhN-I (B-R-07)	P2Et (32.9)	9.5	28.5	53.3	5.2	10.2	13.0
2	Et_3PO_4 (B-R-05)	P2Et (32.9)	1	34.5	62.5	3.0	20.8	ND
			2.5	4.8	91.0	4.2	21.7	ND
			5	0.1	96.1	3.8	25.3	ND
			19	ND	96.7	3.3	29.3	ND
3	Et_3PO_4 (B-R-05)	P2tBu (33.5)	1	14.1	82.3	3.6	22.8	ND
			2.5	1.4	94.9	3.7	25.6	ND
			5	ND	96.6	3.1	31.2	ND
			21	ND	97.9	1.7	57.6	ND

【０３２６】

表３－１に示したように、リン酸トリエチル／Ｐ２Ｅｔを使用した反応条件において、基質Ｂ－００２はＯ－選択的なエチル化を達成した（表３－１、Ｒｕｎ２）。また、塩基性（ｐＫＢＨ$^+$値）が同程度でＰ２Ｅｔよりも嵩高いＰ２ｔＢｕを塩基として用いることでもＯ－選択的エチル化を達成できた（表３－１、Ｒｕｎ３）。

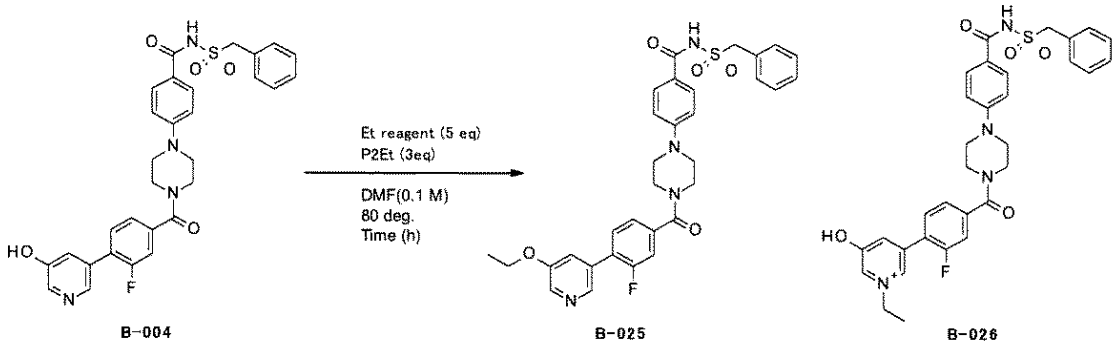
【０３２７】

なお、上記条件下において経時的にＯ－選択性が向上することも確認した。特定の理論に限定されるものではないが、この選択性向上は反応系中においてＮ－エチル化体Ｂ－０２４が塩基の作用により脱離反応が進行しその結果、原料であるＢ－００２に変換され、再度Ｏ－エチル化が進行した結果である。

【０３２８】

実施例３－２：基質として化合物Ｂ－００４：Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［３－フルオロ－４－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）ベンゾイル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミドを用いたピリジノールのＯ－選択的なエチル化

【化６５】



【０３２９】

実施例３－２－１：アンモニウム塩をエチル化剤として使用した基質Ｂ－００４：Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［３－フルオロ－４－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）ベンゾイル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド）（ピリジノール）のＯ－選択的なエチル化

窒素置換されたグローブバッグ中、０．６ｍＬのスクリューキャップバイアルに、Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［３－フルオロ－４－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）ベンゾイル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド）（Ｂ－００４）（４．０ｍｇ，７．０μｍｏｌ，１．０当量）を用い、実施例３－１－１と同様の方法で反応を実施し、反応進行度を測定した。結果は、表３－２、Ｒｕｎ１に示す通りだった。

【０３３０】

Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［４－（５－エトキシピリジン－３－イル）－３－フルオロベンゾイル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド：化合物Ｂ－０２５。

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：６０３．２［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。

保持時間：１．０５２分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。

（原料ＡｒＯＨの保持時間は、０．８３１分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。

【０３３１】

Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［４－（１－エチル－５－ヒドロキシピリジン－１－イウム－３－イル）－３－フルオロベンゾイル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド：化合物Ｂ－０２６。

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：６０３．２［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。

保持時間：０．７５６分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。

【０３３２】

実施例３－２－２：リン酸トリエチルをエチル化剤として使用した基質Ｂ－００４：ピリジノール，Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［３－フルオロ－４－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）ベンゾイル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミドのＯ－選択的なエチル化

窒素置換されたグローブバッグ中、０．６ｍＬのスクリューキャップバイアルに、ピリジノール，Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［３－フルオロ－４－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）ベンゾイル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（Ｂ－００４）（４．０ｍｇ，７．０μｍｏｌ，１．０当量）を用い、実施例３－１－２と同様の方法で反応を実施し、反応進行度を測定した。結果は、表３－２、Ｒｕｎ２に示す通りだった。

【０３３３】

実施例３－２の結果を表３－２に示す。なお、表３－２に示したＲａｔｉｏ（Ｏ－／Ｎ－）は、（Ｏ－エチル化体（Ｂ－０２５）のａｒｅａ％）／（Ｎ－エチル化体（Ｂ－０２６）のａｒｅａ％）として算出した。

【０３３４】

［表３－２］

【表１１】

Run	Et reagent	Time (h)	SM (B-004) (area%)	O-Et (B-025) (area%)	N-Et (B-026) (area%)	Ratio (O-/N-)	Byproducts (area%)
1	Et_3PhN-I (B-R-07)	9.5	24.1	66.6	2.6	25.6	6.6
2	Et_3PO_4 (B-R-05)	1	42.4	55.9	1.7	32.9	ND
		2.5	9.7	88.0	1.9	46.3	ND
		5	2.2	96.0	1.2	80.0	ND
		19	ND	99.0	0.6	165.0	ND

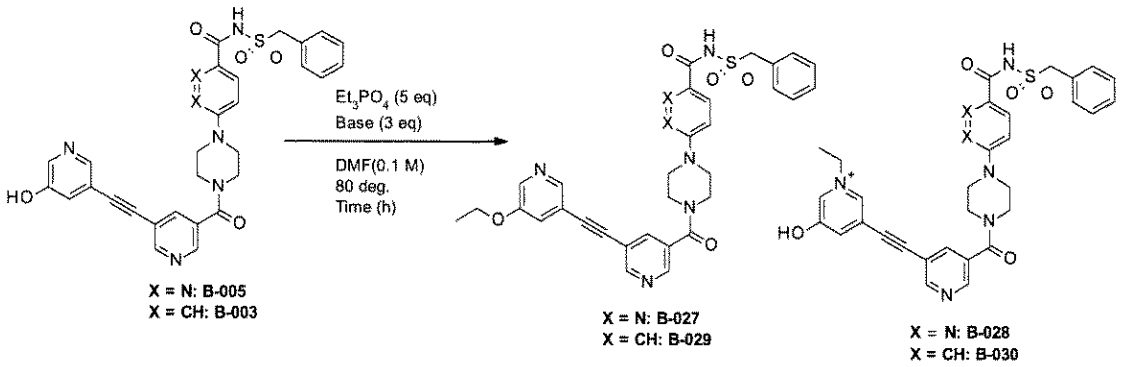
【０３３５】

表３－２に示したように、リン酸トリエチル／Ｐ２Ｅｔを使用した反応条件において、基質Ｂ－００４もＯ－選択的なエチル化が可能であることを示した（表３－２、Ｒｕｎ２）。特定の理論に限定されるものではないが、基質Ｂ－００２に対して基質Ｂ－００４のピリジンは隣接するベンゼン環上のフルオロ基およびアミド基（カルボニル基）の影響で、より電子不足となり、その影響でＮ－エチル化が抑制された。その結果、Ｏ－選択性がＢ－００２を基質とした場合よりも向上した。

【０３３６】

実施例３－３：アセチレン官能基を有する化合物として、基質Ｂ－００３：Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［５－［２－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）エチニル］ピリジン－３－カルボニル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド，Ｂ－００５：Ｎ－ベンジルスルホニル－６－［４－［５－［２－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）エチニル］ピリジン－３－カルボニル］ピペラジン－１－イル］ピリダジン－３－カルボキサミドを用いたピリジノールのＯ－選択的なエチル化

【化６６】



【０３３７】

実施例３－３－１：リン酸トリエチルをエチル化剤として使用した基質Ｂ－００５：Ｎ－ベンジルスルホニル－６－［４－［５－［２－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）エチニル］ピリジン－３－カルボニル］ピペラジン－１－イル］ピリダジン－３－カルボキサミド（ピリジノール）のＯ－選択的なエチル化

【０３３８】

窒素置換されたグローブバッグ中、０．６ｍＬのスクリューキャップバイアルに、Ｎ－ベンジルスルホニル－６－［４－［５－［２－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）エチニル］ピリジン－３－カルボニル］ピペラジン－１－イル］ピリダジン－３－カルボキサミド（Ｂ－００５）（４．１ｍｇ，７．０μｍｏｌ，１．０当量）とＤＭＦ（７０．０

μＬ）を加えた。得られた溶液にＰ２Ｅｔ（７．０μＬ，２１．０μｍｏｌ，３．０当量）を加え混合を確認後、リン酸トリエチル（Ｂ－Ｒ－０５）（６．０μＬ，３５．０μｍｏｌ，５．０当量）を加えた。得られた反応混合物を８００ｒｐｍの回転数で８０℃で撹拌させた。

【０３３９】

反応追跡

途中、反応開始から３，５，２０時間経過時に、グローブバッグ中にて反応液を５μＬサンプリングしてＣＨ$_3$ＣＮ（１０００μＬ）で希釈し、ＬＣサンプルを調製した。ＬＣＭＳ測定を行うことで反応進行度を測定した。結果は、表３－３、Ｒｕｎ１に示すとおりだった。

Ｎ－ベンジルスルホニル－６－［４－［５－［２－（５－エトキシピリジン－３－イル）エチニル］ピリジン－３－カルボニル］ピペラジン－１－イル］ピリダジン－３－カルボキサミド：化合物Ｂ－０２７。

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：６１２．１［Ｍ＋Ｈ］$^+$。

保持時間：１．０１４分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。

（原料ＡｒＯＨの保持時間は、０．８３１分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。

【０３４０】

Ｎ－ベンジルスルホニル－６－［４－［５－［２－（１－エチル－５－ヒドロキシピリジン－１－イウム－３－イル）エチニル］ピリジン－３－カルボニル］ピペラジン－１－イル］ピリダジン－３－カルボキサミド：化合物Ｂ－０２８。

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：６１２．２［Ｍ＋Ｈ］$^+$。

保持時間：０．６９３分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。

化合物Ｂ－０３１（Ｂ－０２７－Ｐ２Ｅｔ付加体：Ｂ－０２７にＰ２Ｅｔが付加したＭＳ（Ｅｘａｃｔ　ＭＳ：９５１．４４）を示す化合物であり、構造は未決定）。

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：９５１．４［Ｍ］$^+$。

保持時間：０．９０９分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。

【０３４１】

実施例３－３－２：Ｐ２Ｅｔを塩基として使用したリン酸トリエチルによる基質Ｂ－００３：Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［５－［２－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）エチニル］ピリジン－３－カルボニル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（ピリジノール）のＯ－選択的なエチル化

窒素置換されたグローブバッグ中、０．６ｍＬのスクリューキャップバイアルに、Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［５－［２－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）エチニル］ピリジン－３－カルボニル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（Ｂ－００３）（４．１ｍｇ，７．０μｍｏｌ，１．０当量）とＤＭＦ（７０．０μＬ）を加えた。得られた溶液にＰ２Ｅｔ（７．０μＬ，２１．０μｍｏｌ，３．０当量）を加え混合を確認後、リン酸トリエチル（Ｂ－Ｒ－０５）（６．０μＬ，３５．０μｍｏｌ，５．０当量）を加えた。得られた反応混合物を８００ｒｐｍの回転数で８０℃で撹拌させた。

【０３４２】

反応追跡

途中、反応開始から２．５，５，２１時間経過時に、グローブバッグ中にて反応液を５μＬサンプリングしてＣＨ$_3$ＣＮ（１０００μＬ）で希釈し、ＬＣサンプルを調製した。ＬＣＭＳ測定を行うことで反応進行度を測定した。結果は、表３－３、Ｒｕｎ２に示すとおりだった。

Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［５－［２－（５－エトキシピリジン－３－イル）エチニル］ピリジン－３－カルボニル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド：化合物Ｂ－０２９。

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：　６１０．２［Ｍ＋Ｈ］$^+$。

保持時間：１．０６９分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。

（原料ＡｒＯＨの保持時間は、０．８８９分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。

【０３４３】
Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［５－［２－（１－エチル－５－ヒドロキシピリジン－１－イウム－３－イル）エチニル］ピリジン－３－カルボニル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド：化合物Ｂ－０３０。
ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：６１０［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。
保持時間：０．７３７分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。
化合物Ｂ－０３２（Ｂ－０２９－Ｐ２Ｅｔ付加体：Ｂ－０２９にＰ２Ｅｔが付加したＭＳ（Ｅｘａｃｔ　ＭＳ：９４９．４５）を示す化合物であり、構造は未決定）。
ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：９４９．４［Ｍ］$^{+}$。
保持時間：０．９２９分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。
【０３４４】
実施例３－３－１および実施例３－３－２の結果より、これらのアセチレンを有する基質（Ｂ－００５，Ｂ－００３）に対しＰ２Ｅｔを塩基として使用してエチル化を行うと、構造未決定だが、目的化合物のＯ－エチル化体Ｂ－０２７，もしくはＢ－０２９にＰ２Ｅｔが付加したと推定される副生成物（それぞれ、Ｂ－０３１，もしくはＢ－０３２）が観測された。これらの副反応を回避するために、共役酸のｐＫａ（ｐＫＢＨ$^{+}$）がＰ２Ｅｔと同程度で、嵩が高いＰ２ｔＢｕを塩基として使用してエチル化を検討した。
【０３４５】
実施例３－３－３：嵩高いホスファゼン塩基であるＰ２ｔＢｕを用い、リン酸トリエチルをエチル化剤として使用した基質Ｂ－００３：Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［５－［２－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）エチニル］ピリジン－３－カルボニル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（ピリジノール）のＯ－選択的なエチル化（塩基付加体の生成を回避）
窒素置換されたグローブバッグ中、０．６ｍＬのスクリューキャップバイアルに、Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［５－［２－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）エチニル］ピリジン－３－カルボニル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（Ｂ－００３）（４．１ｍｇ，７．０μｍｏｌ，１．０当量）とＤＭＦ（７０．０μＬ）を加えた。得られた溶液にＰ２ｔＢｕ（１０．５μＬ，２ｍｏｌ／Ｌ，２１．０μｍｏｌ，３．０当量）を加え混合を確認後、リン酸トリエチル（Ｂ－Ｒ－０５）（６．０μＬ，３５．０μｍｏｌ，５．０当量）を加えた。得られた反応混合物を８００ｒｐｍの回転数で８０℃で撹拌させた。
【０３４６】
反応追跡
途中、反応開始から２．５，５，２１時間経過時に、グローブバッグ中にて反応液を５μＬサンプリングしてＣＨ$_3$ＣＮ（１０００μＬ）で希釈し、ＬＣサンプルを調製した。ＬＣＭＳ測定を行うことで反応進行度を測定した。結果は、表３－３、Ｒｕｎ３に示すとおりだった。
実施例３－３の結果を表３－３に示す。なお、表３－３中に表記しているＣＨ$_3$ＣＮ中のｐＫＢＨ$^{+}$値はＡｌｄｒｉｃｈ社ウエブＰｈｏｓｐｈａｚｅｎｅ　Ｂａｓｅｓサイト（ｈｔｔｐｓ：／／ｗｗｗ．ｓｉｇｍａａｌｄｒｉｃｈ．ｃｏｍ／ｃｈｅｍｉｓｔｒｙ／ｃｈｅｍｉｃａｌ－ｓｙｎｔｈｅｓｉｓ／ｔｅｃｈｎｏｌｏｇｙ－ｓｐｏｔｌｉｇｈｔｓ／ｐｈｏｓｐｈａｚｅｎｅｓ．ｈｔｍｌ）（２０２０年１２月２日閲覧）から転記した。
【０３４７】
なお、表３－３に示したＲａｔｉｏ（Ｏ－／Ｎ－）は、（Ｏ－エチル化体のａｒｅａ％）／（Ｎ－エチル化体のａｒｅａ％）として算出した。
［表３－３］

【表１２】

Run	Substrate	X	Base / pKBH$^+$ (CH_3CN)	Time (h)	SM (area%)	O-Et (area%)	N-Et (area%)	Ratio (O-/N-)	Byproduct (base-adduct) (area%)
1	B-005	N	P2Et (32.9)	3	26.0	70.1	0.8	87.6	3.0
				5	11.0	84.1	0.2	420.5	4.2
				20	ND	92.5	0.04	2312.5	4.4
2	B-003	CH	P2Et (32.9)	2.5	36.1	59.1	0.3	197.0	4.4
				5	12.6	79.2	<0.1	>100	8.0
				21	ND	90.3	ND	>100	9.2
3	B-003	CH	P2tBu (33.5)	2.5	17.8	82.2	ND	>100	ND
				5	3.4	96.3	ND	>100	ND
				21	ND	98.3	ND	>100	ND

【０３４８】

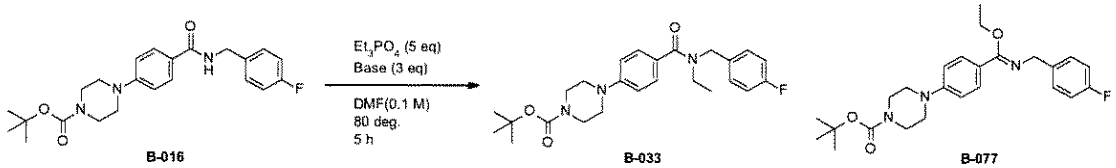
表３－３，Ｒｕｎ３に示したように、嵩高い塩基を使用することでアセチレンへのホスファゼン塩基の付加反応によると思われる不純物（Ｂ－０３２）の生成を回避でき、かつＯ－選択的なエチル化を達成できることを示した。

【０３４９】

実施例３－４：エチル化の際のアミド基に対する選択性の確認実験

これまで示したリン酸トリエチル／ホスファゼン塩基との組み合わせによるアレノールのＯ－選択的エチル化条件が、アミド基存在下実施できるかを確認した。具体的には、実施例３－１～３－３にて確認したようにひとつの分子内にアレノールとその他の官能基を共存させた基質にて選択性の評価をするのではなく、ここではアミド基質（ｔｅｒｔ－ブチル　４－［４－［（４－フルオロフェニル）メチルカルバモイル］フェニル］ピペラジン－１－カルボキシレート）（Ｂ－０１６）をモデル基質として用い、アレノールを選択的にエチル化できる実施例３－３にて見いだした条件下において、アミド基質Ｂ－０１６がエチル化されないことを示すことで確認することとした。

【化６７】



【０３５０】

実施例３－４－１：Ｐ２ｔＢｕを塩基とし、リン酸トリエチルをエチル化剤として使用したｔｅｒｔ－ブチル　４－［４－［（４－フルオロフェニル）メチルカルバモイル］フェニル］ピペラジン－１－カルボキシレート（Ｂ－０１６）（アミドモデル基質）のエチル化

窒素置換されたグローブバッグ中、０．６ｍＬのスクリューキャップバイアルに、ｔｅｒｔ－ブチル　４－［４－［（４－フルオロフェニル）メチルカルバモイル］フェニル］ピペラジン－１－カルボキシラート（Ｂ－０１６）（４．１ｍｇ，１０．０μｍｏｌ，１．０当量）とＤＭＦ（１００．０μＬ）を加えた。得られた溶液にＰ２ｔＢｕ（１５．０μＬ，２．０ｍｏｌ／Ｌ，３０．０μｍｏｌ，３．０当量）を加え混合を確認後、リン酸トリエチル（Ｂ－Ｒ－０５）（８．５μＬ，５０．０μｍｏｌ，５．０当量）を加えた。得られた反応混合物を８００ｒｐｍの回転数で８０℃で撹拌させた。

【０３５１】

反応追跡

途中、反応開始から１．５，３，５時間経過時に、グローブバッグ中にて反応液を５μＬサンプリングしてＣＨ$_3$ＣＮ（１０００μＬ）で希釈し、ＬＣサンプルを調製した。ＬＣＭＳ測定を行うことで反応進行度を測定した。結果は表３－４、Ｒｕｎ１に示すとおりだった。

ｔｅｒｔ－ブチル　４－［４－［エチル－［（４－フルオロフェニル）メチル］カルバモイル］フェニル］ピペラジン－１－カルボキシレート：化合物Ｂ－０３３。

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：　４４２［Ｍ＋Ｈ］$^+$。

保持時間：１．３０８分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。

（原料アミドの保持時間は、１．１７２分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。

【０３５２】

実施例３－４－２：Ｐ２Ｅｔを塩基とし、リン酸トリエチルをエチル化剤として使用したｔｅｒｔ－ブチル　４－［４－［（４－フルオロフェニル）メチルカルバモイル］フェニル］ピペラジン－１－カルボキシレート（Ｂ－０１６）（アミドモデル基質）のエチル化

窒素置換されたグローブバッグ中、０．６ｍＬのスクリューキャップバイアルに、ｔｅｒｔ－ブチル　４－［４－［（４－フルオロフェニル）メチルカルバモイル］フェニル］ピペラジン－１－カルボキシラート（Ｂ－０１６）（４．１ｍｇ，１０．０μｍｏｌ，１．０当量）とＤＭＦ（１００．０μＬ）を加えた。得られた溶液に、Ｐ２Ｅｔ（１０．０μＬ，３０．０μｍｏｌ，３．０当量）を加え混合を確認後、リン酸トリエチル（Ｂ－Ｒ－０５）（８．５μＬ，５０．０μｍｏｌ，５．０当量）を加えた。得られた反応混合物を８００ｒｐｍの回転数で８０℃で撹拌させた。

【０３５３】

反応追跡

途中、反応開始から１．５，３，５時間経過時に、グローブバッグ中にて反応液を５μＬサンプリングしてＣＨ$_3$ＣＮ（１０００μＬ）で希釈し、ＬＣサンプルを調製した。ＬＣＭＳ測定を行うことで反応進行度を測定した。結果は表３－４、Ｒｕｎ２に示すとおりだった。

【０３５４】

実施例３－４－３：ｐＫＢＨ$^+$（共役酸のｐＫａ）が３０以下のホスファゼン（ＢＥＭＰ，Ｐ１ｔＢｕ）を塩基とし、リン酸トリエチルをエチル化剤として使用したｔｅｒｔ－ブチル　４－［４－［（４－フルオロフェニル）メチルカルバモイル］フェニル］ピペラジン－１－カルボキシレート（Ｂ－０１６）（アミドモデル基質）のエチル化

実施例３－４－２と同様の方法で、Ｐ２Ｅｔの替わりに、ＢＥＭＰ（８．７μＬ，３０．０μｍｏｌ，３．０当量，Ｒｕｎ３）、Ｐ１ｔＢｕ（７．６μＬ，３０．０μｍｏｌ，３．０当量，Ｒｕｎ４）をそれぞれ使用して反応を行った。

【０３５５】

反応追跡

実施例３－４－２と同様の方法で反応進行度を測定した。結果は表３－４、Ｒｕｎ３，４に示すとおりだった。

実施例３－４の結果を表３－４に示す。なお、表３－４中に表記しているＣＨ$_3$ＣＮ中のｐＫＢＨ$^+$値はＡｌｄｒｉｃｈ社 ウエブＰｈｏｓｐｈａｚｅｎｅ　Ｂａｓｅｓサイト（ｈｔｔｐｓ：／／ｗｗｗ．ｓｉｇｍａａｌｄｒｉｃｈ．ｃｏｍ／ｃｈｅｍｉｓｔｒｙ／ｃｈｅｍｉｃａｌ－ｓｙｎｔｈｅｓｉｓ／ｔｅｃｈｎｏｌｏｇｙ－ｓｐｏｔｌｉｇｈｔｓ／ｐｈｏｓｐｈａｚｅｎｅｓ．ｈｔｍｌ）（２０２０年１２月２日閲覧）から転記した。

【０３５６】

［表３－４］

【表１３】

Run	Base / pKBH$^+$ (CH_3CN)	Time (h)	SM (B-016) (area%)	TM (B-033) or (B-077) (area%)
1	P2tBu (33.5)	5	89.4	10.6
2	P2tEt (32.9)	5	91.1	8.9
3	BEMP (27.6)	5	100.0	ND
4	P1tBu (26.9)	5	100.0	ND

【０３５７】

表３－４、Ｒｕｎ１＆２に示すようにｐＫＢＨ$^+$（共役酸のｐＫａ）が３０以上の塩基性が高い塩基が存在する場合、アミドはリン酸トリエチルと反応し、Ｎ－もしくは－Ｏエチル化体を与えた。これは、ｐＫＢＨ$^+$が３０以上の塩基性条件ではアミド官能基はエチル化条件に耐えられないことを示している。

一方、Ｒｕｎ３＆４に示すようにｐＫＢＨ$^+$が３０以下の塩基が反応に存在する場合、アミドのエチル化は進行しなかった。

本実験の結果は、基質がアミド結合を有する場合には、ｐＫＢＨ$^+$（共役酸のｐＫａ）が３０以下の塩基を用いれば、アミド基が共存する基質においても高選択的なアレノールのＯ－選択的エチル化が行えることを示している。

【０３５８】

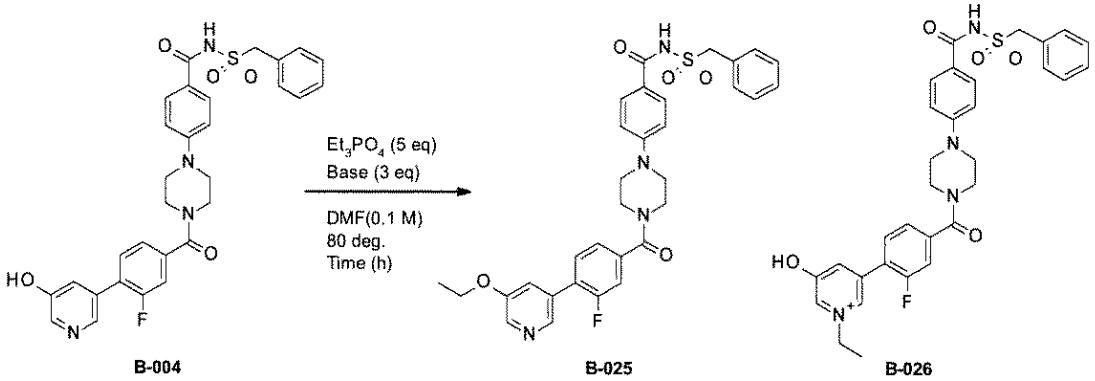
実施例３－５：基質内にアミド結合を有することを想定した場合の、エチル化反応の最適条件確認

実施例３－４で示したような、ｐＫＢＨ$^+$（共役酸のｐＫａ）が３０以下の塩基を用い、アレノールのＯ－選択的なエチル化を、Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［３－フルオロ－４－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）ベンゾイル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（Ｂ－００４）とＮ－ベンジルスルホニル－４－［４－［５－［２－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）エチニル］ピリジン－３－カルボニル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（Ｂ－００３）を基質として用い検討した。

【０３５９】

実施例３－５－１：Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［３－フルオロ－４－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）ベンゾイル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（Ｂ－００４）（ピリジノール）を基質として用いたＯ－選択的エチル化における最適塩基検討

【化６８】



B-004　　B-025　　B-026

【０３６０】
窒素置換されたグローブバッグ中、０．６ｍＬのスクリューキャップバイアルに、Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［３－フルオロ－４－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）ベンゾイル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（Ｂ－００４）（４．０ｍｇ，７．０μｍｏｌ，１．０当量）とＤＭＦ（７０．０μＬ）を加えた。その溶液にＰ１ｔＢｕ（５．３μＬ，２１．０μｍｏｌ，３．０当量，Ｒｕｎ１）を加え混合を確認後、リン酸トリエチル（Ｂ－Ｒ－０５）（６．０μＬ，３５．０μｍｏｌ，５．０当量）を加えた。得られた反応混合物を８００ｒｐｍの回転数で８０℃で撹拌させた。なお、Ｐ１ｔＢｕの替わりにＢＥＭＰ（６．１μＬ，２１．０μｍｏｌ，３．０当量，Ｒｕｎ２）、もしくはＢＴＰＰ（６．４μＬ，２１．０μｍｏｌ，３．０当量，Ｒｕｎ３）を用いて同様の反応を実施した。

【０３６１】
反応追跡
途中、反応開始から２．５，５，２３，２９時間経過時に、グローブバッグ中にて反応液を５μＬサンプリングしてＣＨ$_3$ＣＮ（１０００μＬ）で希釈し、ＬＣサンプルを調製した。ＬＣＭＳ測定を行うことで反応進行度を測定した。
実施例３－５－１の結果を表３－５－１に示す。なお、表３－５－１中に表記しているＣＨ$_3$ＣＮ中のｐＫＢＨ$^+$値はＡｌｄｒｉｃｈ社ウエブＰｈｏｓｐｈａｚｅｎｅ　Ｂａｓｅｓサイト（ｈｔｔｐｓ：／／ｗｗｗ．ｓｉｇｍａａｌｄｒｉｃｈ．ｃｏｍ／ｃｈｅｍｉｓｔｒｙ／ｃｈｅｍｉｃａｌ－ｓｙｎｔｈｅｓｉｓ／ｔｅｃｈｎｏｌｏｇｙ－ｓｐｏｔｌｉｇｈｔｓ／ｐｈｏｓｐｈａｚｅｎｅｓ．ｈｔｍｌ）（２０２０年１２月２日閲覧）から転記した。

【０３６２】
また、表３－５－１に示したＲａｔｉｏ（Ｏ－／Ｎ－）は、（Ｏ－エチル化体（Ｂ－０２５）のａｒｅａ％）／（Ｎ－エチル化体（Ｂ－０２６）のａｒｅａ％）として算出した。

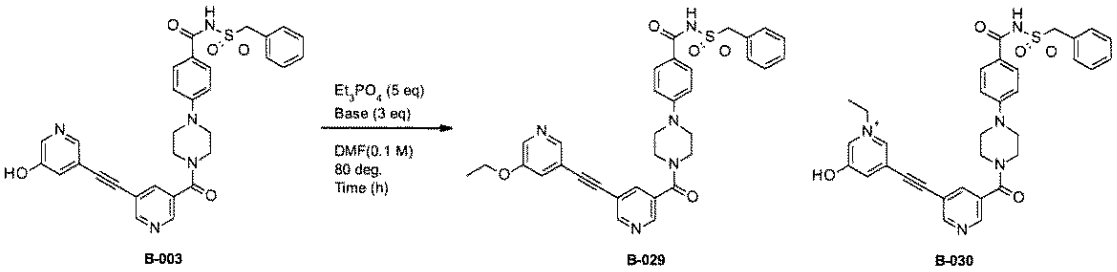
［表３－５－１］
【表１４】

Run	Base / pKBH$^+$ (CH_3CN)	Time (h)	SM (B-004) (area%)	O-Et (B-025) (area%)	N-Et (B-026) (area%)	Ratio (O-/N-)	Byproducts (area%)
1	P1tBu (26.9)	2.5	87.2	11.1	1.6	6.9	ND
		5	74.5	22.4	3.1	7.2	ND
		23	25.1	66.3	8.0	8.3	ND
		29	19.3	72.1	8.0	9.0	ND
2	BEMP (27.6)	2.5	82.2	16.1	1.7	9.5	ND
		5	67.6	29.4	2.9	10.1	ND
		23	13.3	79.3	6.8	11.7	ND
		29	7.8	84.6	6.9	12.3	ND
3	BTPP (28.4)	2.5	71.1	26.9	1.9	14.1	ND
		5	46.2	50.3	3.5	14.4	ND
		23	0.8	93.5	4.8	19.5	ND
		29	0.2	94.3	4.5	20.9	ND

【０３６３】
実施例３－５－２：アセチレン結合を有するＮ－ベンジルスルホニル－４－［４－［５－［２－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）エチニル］ピリジン－３－カルボニル］ピ

ペラジン－１－イル］ベンズアミド（Ｂ－００３）（ピリジノール）を基質として用いたＯ－選択的エチル化における最適塩基検討

【化６９】



【０３６４】

窒素置換されたグローブバッグ中、０．６ｍＬのスクリューキャップバイアルに、Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［５－［２－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）エチニル］ピリジン－３－カルボニル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（Ｂ－００３）（４．１ｍｇ，７．０μｍｏｌ，１．０当量）とＤＭＦ（７０．０μＬ）を加えた。その溶液にＰ１ｔＢｕ（５．３μＬ，２１．０μｍｏｌ，３．０当量，Ｒｕｎ１）を加え混合を確認後、リン酸トリエチル（Ｂ－Ｒ－０５）（６．０μＬ，３５．０μｍｏｌ，５．０当量）を加えた。得られた反応混合物を８００ｒｐｍの回転数で８０℃で撹拌させた。なお、Ｐ１ｔＢｕの替わりにＢＥＭＰ（６．１μＬ，２１．０μｍｏｌ，３．０当量，Ｒｕｎ２）、もしくはＢＴＰＰ（６．４μＬ，２１．０μｍｏｌ，３．０当量，Ｒｕｎ３）を用いて同様の反応を実施した。

【０３６５】

反応追跡

途中、反応開始から１，５，２２，３０時間経過時に、グローブバッグ中にて反応液を５μＬサンプリングしてCH_3CN（１０００μＬ）で希釈し、ＬＣサンプルを調製した。ＬＣＭＳ測定を行うことで反応進行度を測定した。

実施例３－５－２の結果を表３－５－２に示す。なお、表３－５－２中に表記しているCH_3CN中のｐＫＢＨ$^+$値はＡｌｄｒｉｃｈ社ウエブＰｈｏｓｐｈａｚｅｎｅ Ｂａｓｅｓサイト（ｈｔｔｐｓ：／／ｗｗｗ．ｓｉｇｍａａｌｄｒｉｃｈ．ｃｏｍ／ｃｈｅｍｉｓｔｒｙ／ｃｈｅｍｉｃａｌ－ｓｙｎｔｈｅｓｉｓ／ｔｅｃｈｎｏｌｏｇｙ－ｓｐｏｔｌｉｇｈｔｓ／ｐｈｏｓｐｈａｚｅｎｅｓ．ｈｔｍｌ）（２０２０年１２月２日閲覧）から転記した。

また、表３－５－２に示したＲａｔｉｏ（Ｏ－／Ｎ－）は、（Ｏ－エチル化体（Ｂ－０２９）のａｒｅａ％）／（Ｎ－エチル化体（Ｂ－０３０）のａｒｅａ％）として算出した。

【０３６６】

［表３－５－２］

【表１５】

Run	Base / pKBH$^+$ (CH_3CN)	Time (h)	SM (B-003) (area%)	O-Et (B-029) (area%)	N-Et (B-030) (area%)	Ratio (O-/N-)	Byproducts (area%)
1	P1tBu (26.9)	1	93.1	6.5	0.3	21.7	ND
		5	62.5	35.5	1.7	20.9	ND
		22	7.1	89.7	2.7	33.2	ND
		30	2.7	94.3	2.3	41.0	ND
2	BEMP (27.6)	1	91.2	8.5	0.3	28.3	ND
		5	52.4	45.8	1.7	26.9	ND
		22	1.5	96.0	1.8	53.3	ND
		30	0.3	97.6	1.3	75.0	ND
3	BTPP (28.4)	1	83.4	16.0	0.6	26.7	ND
		5	27.1	70.9	1.7	41.7	ND
		22	ND	98.8	0.2	494.0	ND

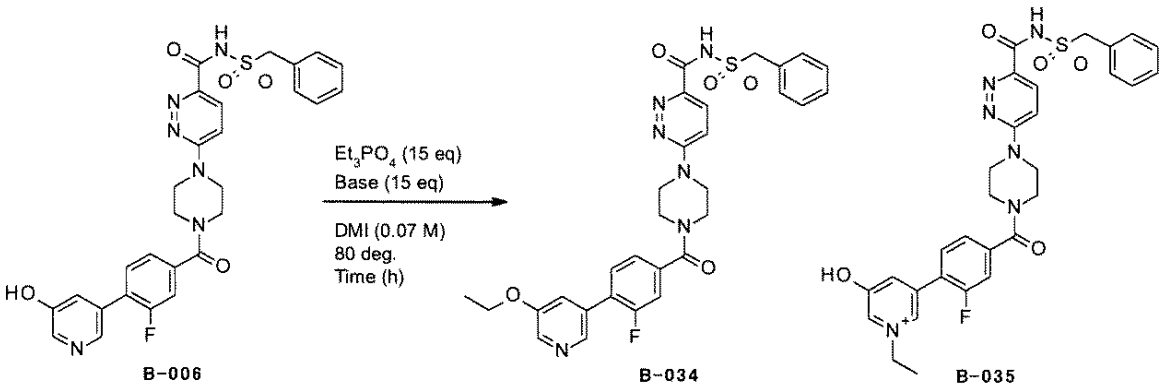
【０３６７】

以上の結果より（表３－５－１、３－５－２）、ｐＫＢＨ$^+$（共役酸のｐＫａ）が３０以下の塩基において、幅広い官能基選択性を担保した上で、反応の高変換率を達成できることが示された。エチル化され得るアミド結合を有する場合には、反応に用いる塩基としてｐＫＢＨ$^+$（共役酸のｐＫａ）（アセトニトリル中）が３０以下の塩基を用いる点は、実施例３－４にて示した通りである。実施例３－５の結果は、反応に用いる塩基がｐＫＢＨ$^+$３０以下において嵩高い塩基、特にＢＴＰＰを塩基として選択した場合に、合成に十分な反応速度と、高いＯ－選択性を達成できることを示している（表３－５－１、Ｒｕｎ３、表３－５－２、Ｒｕｎ３）。

【０３６８】

実施例３－５－３：ピリダジンを有する基質としてＮ－ベンジルスルホニル－６－［４－［３－フルオロ－４－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）ベンゾイル］ピペラジン－１－イル］ピリダジン－３－カルボキサミド（Ｂ－００６）を用いたＯ－選択的エチル化における最適塩基検討

【化７０】



【０３６９】

窒素置換されたグローブバッグ中、０．６ｍＬのスクリューキャップバイアルに、Ｎ－ベンジルスルホニル－６－［４－［３－フルオロ－４－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）ベンゾイル］ピペラジン－１－イル］ピリダジン－３－カルボキサミド（Ｂ－００

６）（４．０ｍｇ，７．０μｍｏｌ，１．０当量）とＤＭＩ（１０１．０μＬ）を加えた。その溶液にＰ２Ｅｔ（３４．９μＬ，１０５．０μｍｏｌ，１５．０当量）を加え混合を確認後、リン酸トリエチル（Ｂ－Ｒ－０５）（１７．９μＬ，１０５．０μｍｏｌ，１５．０当量）を加えた。得られた反応混合物を８００ｒｐｍの回転数で８０℃で撹拌させた。

【０３７０】

また、Ｐ２Ｅｔの替わりに、ＢＴＰＰ（３２．１μＬ，１０５．０μｍｏｌ，１５．０当量，Ｒｕｎ２）、Ｐ１ｔＢｕ（２６．７μＬ，１０５．０μｍｏｌ，１５．０当量，Ｒｕｎ３）、ＴＢＤ（１，５，７－トリアザビシクロ［４．４．０］デカ－５－エン）（１４．６ｍｇ，１０５．０μｍｏｌ，１５．０当量，Ｒｕｎ４）、ＭＴＢＤ（７－メチル－１，５，７－トリアザビシクロ［４，４．０］デカ－５－エン）（１５．１μＬ，１０５．０μｍｏｌ，１５．０当量，Ｒｕｎ５）、ＤＢＵ（１，８－ジアザビシクロ［５．４．０］ウンデカ－７－エン）（１５．７μＬ，１０５．０μｍｏｌ，１５．０当量，Ｒｕｎ６）、ＢＴＭＧ（２－ｔｅｒｔ－ブチル－１，１，３，３－テトラメチルグアニジン）（２０．９μＬ，１０５．０μｍｏｌ，１５．０当量，Ｒｕｎ７）、ＤＩＰＥＡ（ジイソプロピルエチルアミン）（１８．３μＬ，１０５．０μｍｏｌ，１５．０当量，Ｒｕｎ８）を用いて、同様に反応を実施した。

【０３７１】

反応追跡

途中、反応開始から１．５，２１時間経過時に、グローブバッグ中にて反応液を５μＬサンプリングしてCH_3CN（１０００μＬ）で希釈し、ＬＣサンプルを調製した。ＬＣＭＳ測定を行うことで反応進行度を測定した。結果は表３－５－３、Ｒｕｎ１に示すとおりだった。

Ｎ－ベンジルスルホニル－６－［４－［４－（５－エトキシピリジン－３－イル）－３－フルオロベンゾイル］ピペラジン－１－イル］ピリダジン－３－カルボキサミド：化合物Ｂ－０３４。

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：６０５．１［Ｍ＋Ｈ］$^+$。

保持時間：０．９８４分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。

（原料ＡｒＯＨの保持時間は、０．７６４分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。

【０３７２】

Ｎ－ベンジルスルホニル－６－［４－［４－（１－エチル－５－ヒドロキシピリジン－１－イウム－３－イル）－３－フルオロベンゾイル］ピペラジン－１－イル］ピリダジン－３－カルボキサミド：化合物Ｂ－０３５。

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：６０５，１［Ｍ＋Ｈ］$^+$。

保持時間：０．７０７分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。

実施例３－５－３の結果を表３－５－３に示す。なお、表３－５－３に示したＲａｔｉｏ（Ｏ－／Ｎ－）は、（Ｏ－エチル化体（Ｂ－０３４）のａｒｅａ％）／（Ｎ－エチル化体（Ｂ－０３５）のａｒｅａ％）として算出した。また、表３－５－３中に表記しているCH_3CN中の$pKBH^+$値はＡｌｄｒｉｃｈ社ウエブＰｈｏｓｐｈａｚｅｎｅ Ｂａｓｅｓサイト（ｈｔｔｐｓ：／／ｗｗｗ．ｓｉｇｍａａｌｄｒｉｃｈ．ｃｏｍ／ｃｈｅｍｉｓｔｒｙ／ｃｈｅｍｉｃａｌ－ｓｙｎｔｈｅｓｉｓ／ｔｅｃｈｎｏｌｏｇｙ－ｓｐｏｔｌｉｇｈｔｓ／ｐｈｏｓｐｈａｚｅｎｅｓ．ｈｔｍｌ）（２０２０年１２月２日閲覧）、並びに非特許文献（Ｃｈｅｍ．Ｅｕｒ．Ｊ．２０２１，２７，４２１６－４２２９）から転記した。

【０３７３】

［表３－５－３］

【表１６】

Run	Base / pKBH$^+$ (CH_3CN)	Time (h)	SM (B-006) (area%)	O-Et (B-034) (area%)	N-Et (B-035) (area%)	Ratio (O-/N-)	Byproducts (area%)
1	P2Et (32.9)	1.5	5.9	91.1	1.1	82.8	1.9
		21	ND	90.6	ND	>100	9.4
2	BTPP (28.4)	1.5	58.7	38.0	2.0	19.0	1.3
		21	ND	93.5	3.4	27.5	3.1
3	P1tBu (26.9)	1.5	77.0	20.8	2.0	10.4	0.2
		21	2.9	91.3	5.3	17.2	0.5
4	TBD (26.0)	1.5	81.2	17.3	1.3	13.3	0.2
		21	8.0	87.7	3.9	22.5	0.4
5	MTBD (25.5)	1.5	81.3	17.0	1.5	11.3	0.2
		21	4.3	89.7	5.5	16.3	0.5
6	DBU (24.3)	1.5	92.2	6.1	0.7	8.7	1.0
		21	37.4	56.3	4.0	14.0	2.3
7	BTMG (23.6)	1.5	81.2	16.4	1.7	9.6	0.7
		21	3.6	89.7	5.6	16.1	1.1
8	DIPEA (18.8)	1.5	99.3	ND	0.4	ND	0.3
		21	94.6	ND	4.4	ND	1.0

【０３７４】

表３－５－３に示したように、CH_3CN中のｐＫＢＨ$^+$値が２８より大きい塩基（Ｐ２Ｅｔ，ＢＴＰＰ）を用いた場合は２１ｈで原料が消失する反応速度を観測し、CH_3CN中のｐＫＢＨ$^+$値が２３～２８の塩基（ＢＴＭＧ，ＭＴＢＤ，ＴＢＤ，Ｐ１ｔＢｕ）の場合は、反応速度がＢＴＰＰよりも低下するものの、Ｏ－選択的エチル化が進行することを確認した。またCH_3CN中のｐＫＢＨ$^+$値が１８．８のＤＩＰＥＡの場合は反応が進行しないことも確認した。CH_3CN中のｐＫＢＨ$^+$値が２３～２８の範囲内であるＤＢＵを用いた反応では、他のｐＫＢＨ$^+$値が範囲内の塩基の反応よりも反応進行が遅くなった。特定の理論に限定されるものではないが、これはＤＢＵがリン酸トリエチルと反応してエチル化剤が消費されることで反応の進行が阻害された結果である。

【０３７５】

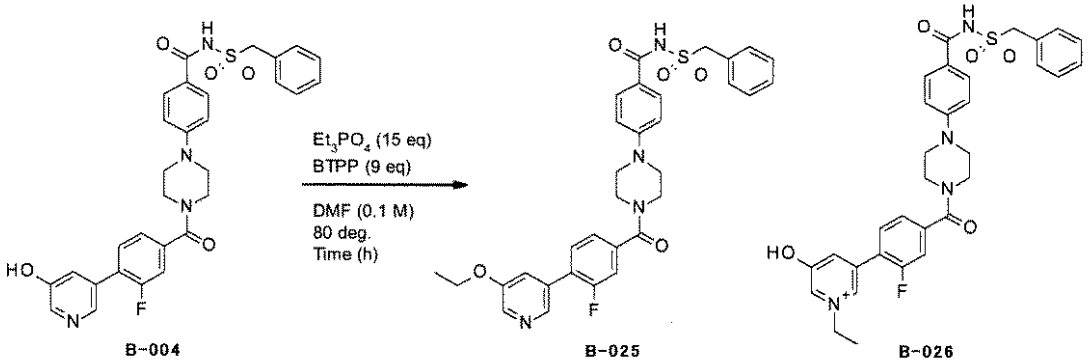
実施例３－６：複数の基質混合物である化合物ライブラリを想定した、基質に対して試薬を大過剰用いた場合の影響確認

複数の基質が混合されている場合には、ひとつの基質あたりに対する試薬は大過剰が存在することになる。以下では、試薬が大過剰に存在する際の影響を、Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［３－フルオロ－４－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）ベンゾイル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（Ｂ－００４）を基質として用いて確認した。

【０３７６】

実施例３－６－１：Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［３－フルオロ－４－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）ベンゾイル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（Ｂ－００４）（ピリジノール）を基質として用いた、過剰試薬条件下におけるＯ－選択的なエチル化検討

【化７１】



【０３７７】

窒素置換されたグローブバッグ中、０．６ｍＬのスクリューキャップバイアルに、Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［３－フルオロ－４－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）ベンゾイル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（Ｂ－００４）（４．０ｍｇ，７．０μｍｏｌ，１．０当量）とＤＭＦ（７０．０μＬ）を加えた。その溶液にＢＴＰＰ（１９．３μＬ，６３．０μｍｏｌ，９．０当量）を加え混合を確認後、リン酸トリエチル（Ｂ－Ｒ－０５）（１７．９μＬ，１０５．０μｍｏｌ，１５．０当量）を加えた。得られた反応混合物を８００ｒｐｍの回転数で８０℃で撹拌させた。結果は表３－６、Ｒｕｎ１に示すとおりだった。

【０３７８】

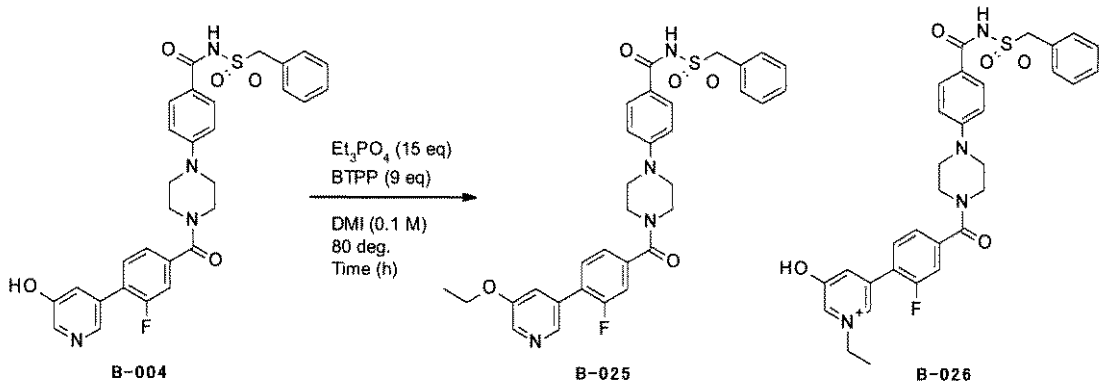
反応追跡

途中、反応開始から２．５，７，２３時間経過時に、グローブバッグ中にて反応液を５μＬサンプリングしてCH_3CN（１０００μＬ）で希釈し、ＬＣサンプルを調製した。ＬＣＭＳ測定を行うことで反応進行度を測定した。

【０３７９】

実施例３－６－２：Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［３－フルオロ－４－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）ベンゾイル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（Ｂ－００４）（ピリジノール）を基質として用いた、ＤＭＩを反応溶媒として使用したＯ－選択的なエチル化検討

【化７２】



ＤＭＩ（７０．０μＬ）を反応溶媒として用い、実施例３－６－１と同様の方法で反応を実施した。

【０３８０】

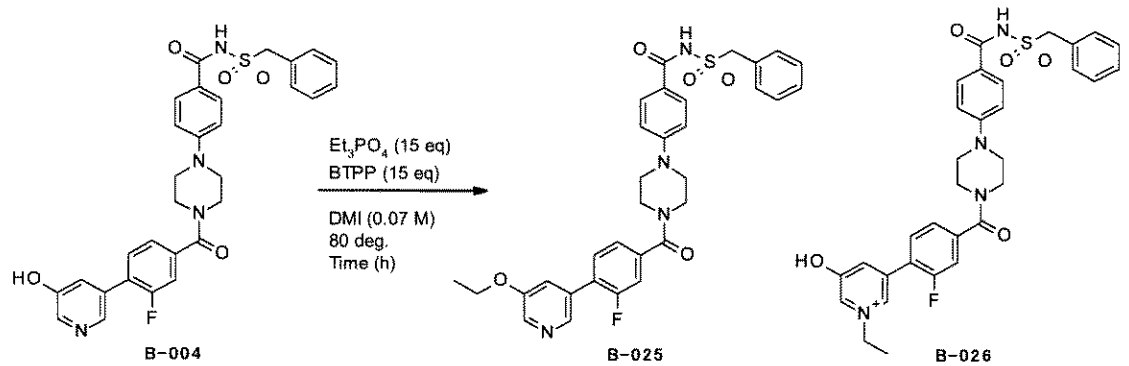
反応追跡

途中、反応開始から２．５，５，２３時間経過時に、実施例３－６－１と同様の方法で反応進行度を測定した。結果は表３－６、Ｒｕｎ２に示すとおりだった。

【０３８１】

実施例３－６－３：Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［３－フルオロ－４－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）ベンゾイル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（Ｂ－００４）（ピリジノール）を基質として用い、ＤＭＩを反応溶媒として使用した、過剰試薬条件下におけるＯ－選択的なエチル化検討

【化７３】



【０３８２】

窒素置換されたグローブバッグ中、０．６ｍＬのスクリューキャップバイアルに、Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［３－フルオロ－４－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）ベンゾイル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（Ｂ－００４）（４．０ｍｇ，７．０μｍｏｌ，１．０当量）とＤＭＩ（１０１．０μＬ）を加えた。その溶液にＢＴＰＰ（３２．１μＬ，１０５．０μｍｏｌ，１５．０当量）を加え混合を確認後、リン酸トリエチル（Ｂ－Ｒ－０５）（１７．９μＬ，１０５．０μｍｏｌ，１５．０当量）を加えた。得られた反応混合物を８００ｒｐｍの回転数で８０℃で撹拌させた。

【０３８３】

反応追跡

途中、反応開始から２．５，５，２３時間経過時に、グローブバッグ中にて反応液を５μＬサンプリングしてCH_3CN（１０００μＬ）で希釈し、ＬＣサンプルを調製した。ＬＣＭＳ測定を行うことで反応進行度を測定した。結果は表３－６、Ｒｕｎ３に示すとおりだった。

実施例３－６の結果を表３－６に示す。なお、表３－６に示したＲａｔｉｏ（Ｏ－／Ｎ－）は、（Ｏ－エチル化体（Ｂ－０２５）のａｒｅａ％）／（Ｎ－エチル化体（Ｂ－０２６）のａｒｅａ％）として算出した。

【０３８４】

［表３－６］

【表１７】

Run	Solvent (M)	Et_3PO_4 (eq)	BTPP (eq)	Time (h)	SM (B-004) (area%)	O-Et (B-025) (area%)	N-Et (B-026) (area%)	Ratio (O-/N-)
1	DMF (0.1 M)	15	9	2.5	26.0	69.3	4.0	17.3
				7	1.4	93.2	4.4	21.2
				23	ND	95.9	2.6	36.9
2	DMI (0.1 M)	15	9	2.5	20.6	75.2	3.3	22.8
				5	2.5	92.7	3.6	25.7
				23	ND	96.9	1.7	57.0
3	DMI (0.07 M)	15	15	2.5	28.6	67.8	2.7	25.1
				5	11.0	85.0	3.0	28.3
				23	ND	97.0	1.7	57.0

【０３８５】

以上の結果より、１種類の基質に対して大過剰の試薬が存在した場合にも、官能基選択性の低減は見られず、複数の基質混合物である化合物ライブラリへの適用が問題なく実施できることが確認できた（表３－６、Ｒｕｎ１～３）。

なお、溶媒としてＤＭＦに加えてＤＭＩを用いても、反応の選択性、反応の変換率ともに遜色なく実施可能であることが確認できた（表３－６、Ｒｕｎ２～３）。

【０３８６】

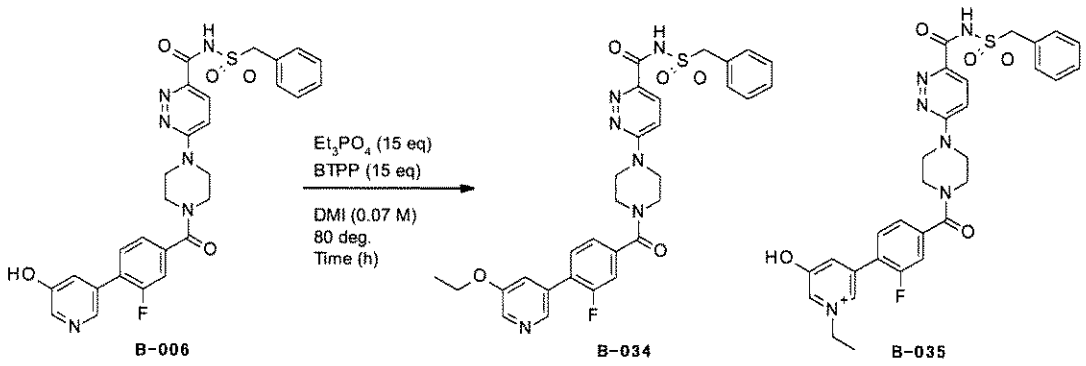
実施例３－７：実施例３－６－３で設定した反応条件における基質一般性の確認

実施例３－６－３で設定した反応条件を、各種官能基を有する基質に適応し、基質一般性を確認した。

【０３８７】

実施例３－７－１：ピリダジンを有する基質としてＮ－ベンジルスルホニル－６－［４－［３－フルオロ－４－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）ベンゾイル］ピペラジン－１－イル］ピリダジン－３－カルボキサミド（Ｂ－００６）を用いたＯ－選択的なエチル化確認

【化７４】



【０３８８】

窒素置換されたグローブバッグ中、０．６ｍＬのスクリューキャップバイアルに、Ｎ－ベンジルスルホニル－６－［４－［３－フルオロ－４－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）ベンゾイル］ピペラジン－１－イル］ピリダジン－３－カルボキサミド（Ｂ－００６）（４．０ｍｇ，７．０μｍｏｌ，１．０当量）とＤＭＩ（１０１．０μＬ）を加えた。その溶液にＢＴＰＰ（３２．１μＬ，１０５．０μｍｏｌ，１５．０当量）を加え混合を確認後、リン酸トリエチル（Ｂ－Ｒ－０５）（１７．９μＬ，１０５．０μｍｏｌ，１

５．０当量）を加えた。得られた反応混合物を８００ｒｐｍの回転数で８０℃で撹拌させた。

【０３８９】

反応追跡

途中、反応開始から２．５，５，２１時間経過時に、グローブバッグ中にて反応液を５μＬサンプリングしてＣＨ$_3$ＣＮ（１０００μＬ）で希釈し、ＬＣサンプルを調製した。ＬＣＭＳ測定を行うことで反応進行度を測定した。結果は表３－７－１、Ｒｕｎ１に示すとおりだった。

Ｎ－ベンジルスルホニル－６－［４－［４－（５－エトキシピリジン－３－イル）－３－フルオロベンゾイル］ピペラジン－１－イル］ピリダジン－３－カルボキサミド：化合物Ｂ－０３４。

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：６０５．２［Ｍ＋Ｈ］$^+$。

保持時間：０．９８６分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。

（原料ＡｒＯＨの保持時間は、０．７６４分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。

【０３９０】

Ｎ－ベンジルスルホニル－６－［４－［４－（１－エチル－５－ヒドロキシピリジン－１－イウム－３－イル）－３－フルオロベンゾイル］ピペラジン－１－イル］ピリダジン－３－カルボキサミド：化合物Ｂ－０３５。

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：６０５．１［Ｍ＋Ｈ］$^+$。

保持時間：０．７０７分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。

【０３９１】

実施例３－７－１の結果を表３－７－１に示す。なお、表３－７－１に示したＲａｔｉｏ（Ｏ－／Ｎ－）は、（Ｏ－エチル化体（Ｂ－０３４）のａｒｅａ％）／（Ｎ－エチル化体（Ｂ－０３５）のａｒｅａ％）として算出した。

［表３－７－１］

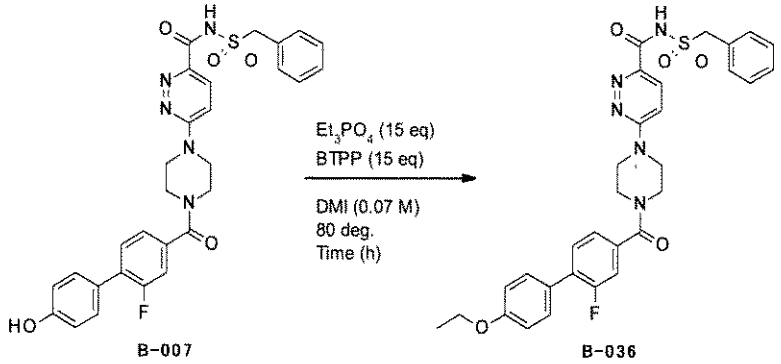
【表１８】

Run	Time (h)	SM (B-006) (area%)	O-Et (B-034) (area%)	N-Et (B-035) (area%)	Ratio (O-/N-)	Byproducts (area%) (not identified)
1	2.5	34.1	62.4	3.1	20.1	ND
	5	9.2	86.5	3.7	23.4	0.5
	21	ND	94.8	2.7	35.1	0.7

【０３９２】

実施例３－７－２：ピリダジンを有する基質としてＮ－ベンジルスルホニル－６－［４－［３－フルオロ－４－（４－ヒドロキシフェニル）ベンゾイル］ピペラジン－１－イル］ピリダジン－３－カルボキサミド（Ｂ－００７）を用いたＯ－選択的なエチル化確認

【化７５】



【０３９３】

Ｎ－ベンジルスルホニル－６－［４－［３－フルオロ－４－（４－ヒドロキシフェニル）ベンゾイル］ピペラジン－１－イル］ピリダジン－３－カルボキサミド（Ｂ－００７）（４．０ｍｇ，７．０μｍｏｌ，１．０当量）を用いて実施例３－７－１と同様に反応を実施し、反応進行度を測定した。結果は表３－７－２、Ｒｕｎ１に示すとおりだった。

Ｎ－ベンジルスルホニル－６－［４－［４－（４－エトキシフェニル）－３－フルオロベンゾイル］ピペラジン－１－イル］ピリダジン－３－カルボキサミド：Ｂ－０３６。

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：６０４．２［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。

保持時間：１．２２５分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。

（原料ＡｒＯＨの保持時間は、１．０００分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。

【０３９４】

実施例３－７－２の結果を表３－７－２に示す。

［表３－７－２］

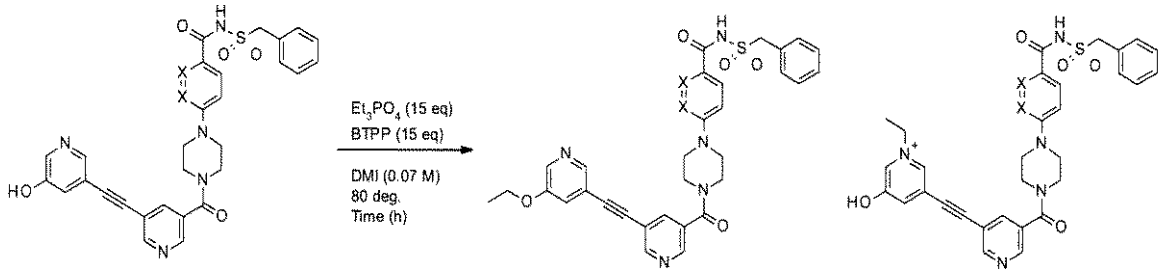
【表１９】

Run	Time (h)	SM (B-007) (area%)	O-Et (B-036) (area%)	Byproducts (area%) (not identified)
1	2.5	43.5	55.7	ND
	5	19.3	79.6	0.5
	21	ND	96.9	1.8

【０３９５】

実施例３－７－３：アセチレン官能基を有する基質としてＮ－ベンジルスルホニル－６－［４－［５－［２－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）エチニル］ピリジン－３－カルボニル］ピペラジン－１－イル］ピリダジン－３－カルボキサミド（Ｂ－００５）とＮ－ベンジルスルホニル－４－［４－［５－［２－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）エチニル］ピリジン－３－カルボニル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（Ｂ－００３）を用いたピリジノールのＯ－選択的なエチル化

【化７６】



X = N: B-005
X = CH: B-003

X = N: B-027
X = CH: B-029

X = N: B-029
X = CH: B-030

【０３９６】

Ｎ－ベンジルスルホニル－６－［４－［５－［２－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）エチニル］ピリジン－３－カルボニル］ピペラジン－１－イル］ピリダジン－３－カルボキサミド（Ｂ－００５）（４．１ｍｇ，７．０μｍｏｌ，１．０当量，表３－７－３，Ｒｕｎ１）、またはＮ－ベンジルスルホニル－４－［４－［５－［２－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）エチニル］ピリジン－３－カルボニル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（Ｂ－００３）（４．１ｍｇ，７．０μｍｏｌ，１．０当量，表３－７－３，Ｒｕｎ２）を用いて実施例３－７－１と同様に反応を実施し、反応進行度を測定した。結果は表３－７－３、Ｒｕｎ１，Ｒｕｎ２に示すとおりだった。

【０３９７】

実施例３－７－３の結果を表３－７－３に示す。なお、表３－７－３に示したＲａｔｉｏ（Ｏ－／Ｎ－）は、（Ｏ－エチル化体のａｒｅａ％）／（Ｎ－エチル化体のａｒｅａ％）として算出した。

【０３９８】

［表３－７－３］

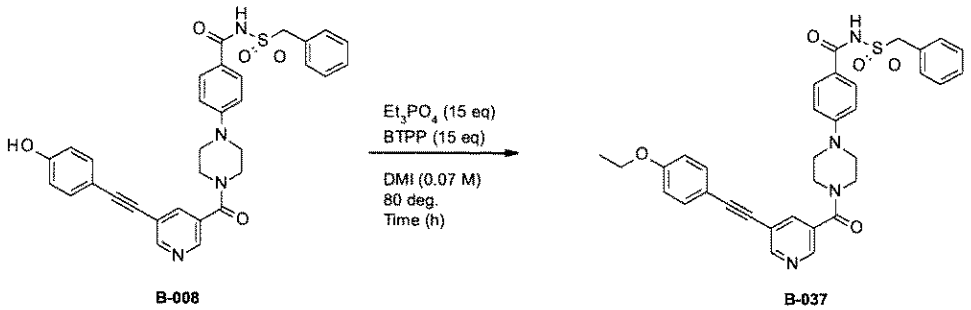
【表２０】

Run	Substrate	X	Time (h)	SM (OH) (area%)	O-Et (area%)	N-Et (area%)	Ratio (O-/N-)	Byproducts (area%) (not identified)
1	B-005	N	2.5	30.0	67.0	1.5	44.7	ND
			5	8.2	88.5	1.5	58.9	ND
			21	ND	95.9	ND	>100	1.8
2	B-003	CH	2.5	30.0	68.2	1.2	56.8	0.4
			5	8.7	90.0	0.8	112.5	0.5
			21	ND	99.2	ND	>100	0.6

【０３９９】

実施例３－７－４：アセチレン官能基を有する基質としてＮ－ベンジルスルホニル－４－［４－［５－［２－（４－ヒドロキシフェニル）エチニル］ピリジン－３－カルボニル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（Ｂ－００８）を用いたフェノールのＯ－選択的なエチル化

【化７７】



B-008　　B-037

【０４００】

Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－５－［２－（４－ヒドロキシフェニル）エチニル］ピリジン－３－カルボニル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（Ｂ－００８）（４．１ｍｇ，７．０μｍｏｌ，１．０当量）を用いて実施例３－７－１と同様に反応を実施し、反応進行度を測定した。結果は表３－７－４、Ｒｕｎ１に示すとおりだった。

Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［５－［２－（４－エトキシフェニル）エチニル］ピリジン－３－カルボニル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド：化合物Ｂ－０３７。

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：６０９．２［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。

保持時間：１．２２９分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。

（原料ＡｒＯＨの保持時間は、１．０１１分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。

【０４０１】

実施例３－７－４の結果を表３－７－４に示す。

［表３－７－４］

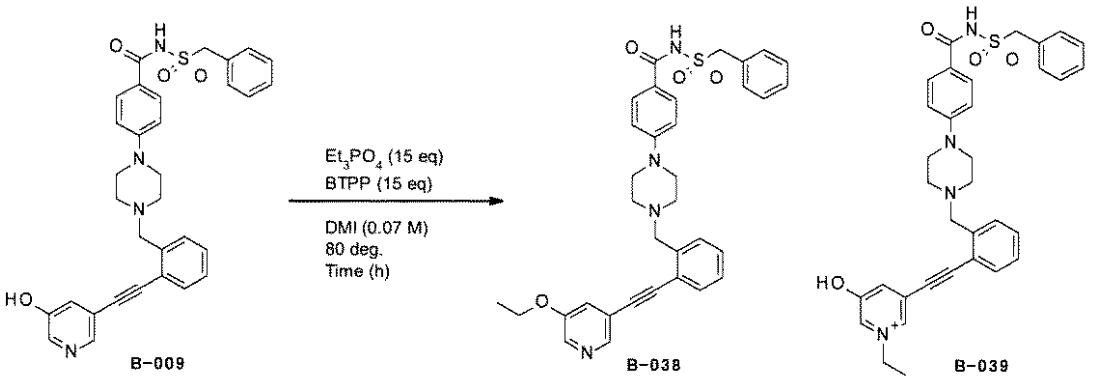
【表２１】

Run	Time (h)	SM (B-008) (area%)	O-Et (B-037) (area%)	Byproducts (area%) (not identified)
1	2.5	34.2	64.4	0.7
	5	6.8	91.4	0.8
	21	ND	98.0	0.7

【０４０２】

実施例３－７－５：アセチレン官能基を有する基質としてＮ－ベンジルスルホニル－４－［４－［［２－［２－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）エチニル］フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（Ｂ－００９）を用いたピリジノールのＯ－選択的なエチル化

【化７８】



【０４０３】

Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［［２－［２－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）エチニル］フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（Ｂ－００９）（４．０ｍｇ，７．０μｍｏｌ，１．０当量）を用いて実施例３－７－１と同様に反応を実施し、反応進行度を測定した。結果は表３－７－５、Ｒｕｎ１に示すとおりだった。

【０４０４】

Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［［２－［２－（５－エトキシピリジン－３－イル）エチニル］フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド：化合物Ｂ－０３８。

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：５９５．２［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。

保持時間：０．８７９分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。

（原料ＡｒＯＨの保持時間は、０．７４９分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。

【０４０５】

Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［［２－［２－（５－エトキシピリジン－３－イル）エチニル］フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド：化合物Ｂ－０３９。

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：５９５．２［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。

保持時間：０．６３６分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。

【０４０６】

実施例３－７－５の結果を表３－７－５に示す。なお、表３－７－５に示したＲａｔｉｏ（Ｏ－／Ｎ－）は、（Ｏ－エチル化体（Ｂ－０３８）のａｒｅａ％）／（Ｎ－エチル化体（Ｂ－０３９）のａｒｅａ％）として算出した。

［表３－７－５］

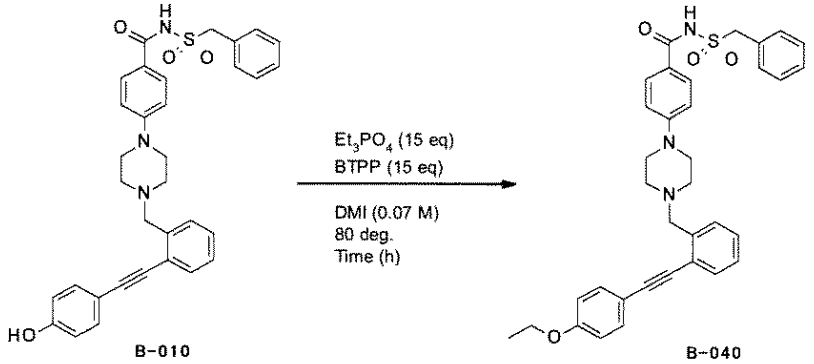
【表２２】

Run	Time (h)	SM (B-009) (area%)	O-Et (B-038) (area%)	N-Et (B-039) (area%)	Ratio (O-/N-)	Byproducts (area%) (not identified)
1	2.5	21.3	76.5	1.7	45.0	ND
	5	1.5	96.8	1.0	96.8	ND
	21	ND	98.4	ND	>100	ND

【０４０７】

実施例３－７－６：アセチレン官能基を有する基質としてＮ－ベンジルスルホニル－４－［４－［［２－［２－（４－ヒドロキシフェニル）エチニル］フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（Ｂ－０１０）を用いたフェノールのＯ－選択的なエチル化

【化７９】

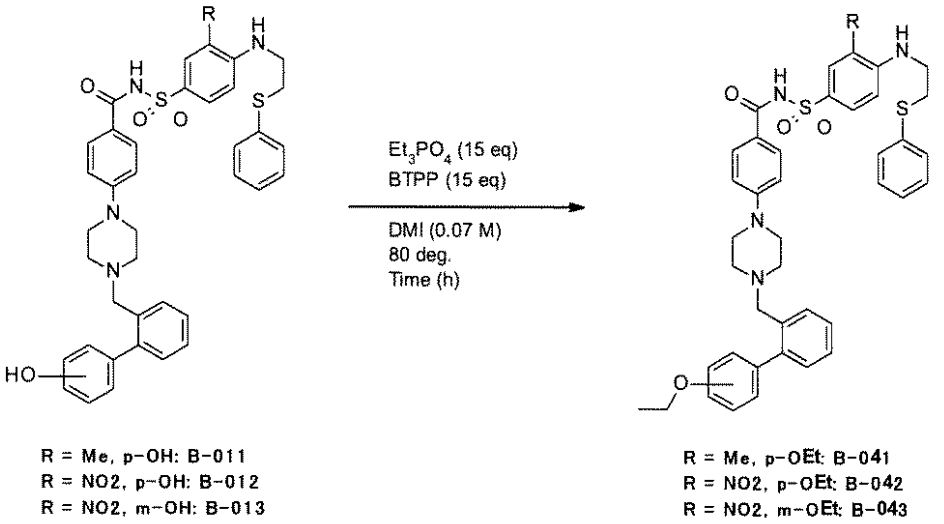


【０４０８】
Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［［２－［２－（４－ヒドロキシフェニル）エチニル］フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（Ｂ－０１０）（４．０ｍｇ，７．０μｍｏｌ，１．０当量）を用いて実施例３－７－１と同様に反応を実施し、反応進行度を測定した。結果は表３－７－６、Ｒｕｎ１に示すとおりだった。
【０４０９】
Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［［２－［２－（４－エトキシフェニル）エチニル］フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド：化合物Ｂ－０４０。
ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：５９４．２［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。
保持時間：０．９７６分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。
（原料ＡｒＯＨの保持時間は、０．８４６分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。
【０４１０】
実施例３－７－６の結果を表３－７－６に示す。
［表３－７－６］
【表２３】

Run	Time (h)	SM (B-010) (area%)	O-Et (B-040) (area%)	Byproducts (area%) (not identified)
1	2.5	23.6	75.8	ND
	5	3.6	95.8	ND
	21	ND	99.4	ND

【０４１１】
実施例３－７－７：アニリンＮＨ基を有する基質として４－［４－［［２－（４－ヒドロキシフェニル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－［３－メチル－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニルベンズアミド（Ｂ－０１１）、４－［４－［［２－（４－ヒドロキシフェニル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－［３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニルベンズアミド（Ｂ－０１２）と、４－［４－［［２－（３－ヒドロキシフェニル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－［３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニルベンズアミド（Ｂ－０１３）を用いたフェノールのＯ－選択的なエチル化

【化８０】



R = Me, p-OH: B-011
R = NO2, p-OH: B-012
R = NO2, m-OH: B-013

R = Me, p-OEt: B-041
R = NO2, p-OEt: B-042
R = NO2, m-OEt: B-043

【０４１２】

４－［４－［［２－（４－ヒドロキシフェニル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－［３－メチル－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニルベンズアミド（Ｂ－０１１）（４．８ｍｇ，７．０μｍｏｌ，１．０当量，表３－７－７，Ｒｕｎ１）、４－［４－［［２－（４－ヒドロキシフェニル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－［３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニルベンズアミド（Ｂ－０１２）（５．１ｍｇ，７．０μｍｏｌ，１．０当量，表３－７－７，Ｒｕｎ２）、もしくは４－［４－［［２－（３－ヒドロキシフェニル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－［３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニルベンズアミド（Ｂ－０１３）（５．１ｍｇ，７．０μｍｏｌ，１．０当量，表３－７－７，Ｒｕｎ３）、を用いて実施例３－７－１と同様に反応を実施し、反応進行度を測定した。結果は表３－７－７、Ｒｕｎ１～Ｒｕｎ３に示すとおりだった。

【０４１３】

４－［４－［［２－（４－エトキシフェニル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－［３－メチル－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニルベンズアミド：化合物Ｂ－０４１。

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：７２１．２［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。

保持時間：１．０６８分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。

（原料ＡｒＯＨの保持時間は、０．９５４分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。

【０４１４】

４－［４－［［２－（４－エトキシフェニル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－［３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニルベンズアミド：化合物Ｂ－０４２。

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：７５２．２［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。

保持時間：１．０７０分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。

（原料ＡｒＯＨの保持時間は、０．９５３分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。

【０４１５】

４－［４－［［２－（３－エトキシフェニル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－［３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニルベンズアミド：Ｂ－０４３。

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：７５２．２［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。

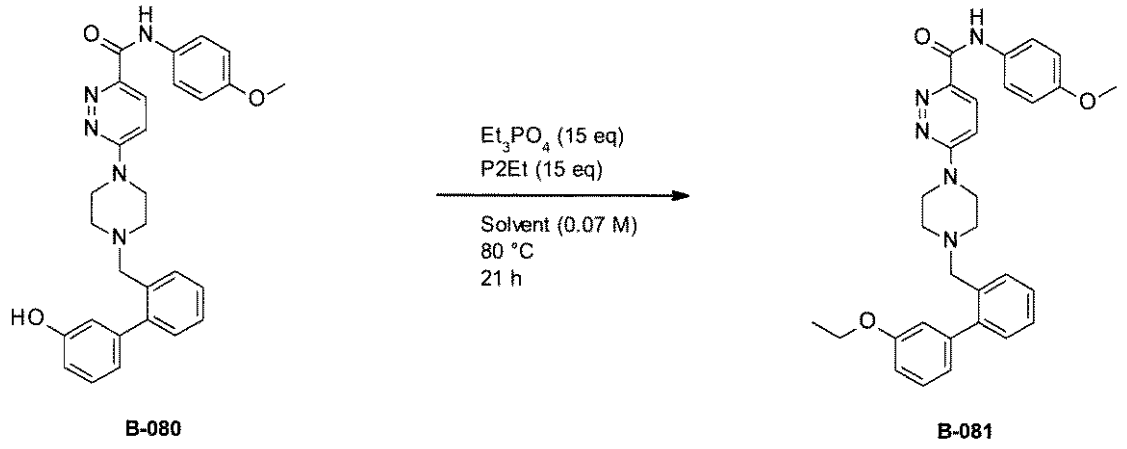
保持時間：１．０７７分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。

（原料ＡｒＯＨの保持時間は、０．９６０分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。

【０４１６】
実施例３－７－７で例示した反応によって生成したＢ－０４３は、本明細書内において、化合物Ｂ２Ｑ０４５－０１、もしくはＡＧ００５と表記することもある。
実施例３－７－７の結果を表３－７－７に示す。
[表３－７－７]
【表２４】

Run	Substrate	R	OH (position)	Time (h)	SM (OH) (area%)	O-Et (area%)	Di-Et (area%)	Byproducts (area%) (not identified)
1	B-011	Me	*p*-	2.5	53.8	42.8	0.4	ND
				5	34.6	62.3	0.3	ND
				23	1.8	94.3	0.4	ND
2	B-012	NO2	*p*-	2.5	76.3	23.4	ND	ND
				5	43.5	55.0	ND	ND
				30	1.0	97.9	ND	ND
3	B-013	NO2	*m*-	2.5	76.8	22.1	ND	ND
				5	47.5	51.2	ND	ND
				30	1.4	96.8	ND	ND

【０４１７】
以上、表３－７－１～３－７－７に示したように、実施例３－６－３で設定した反応条件は、種々の官能基を有するアレノールに対し、Ｏ－選択的にエチル化を行うことができる事を確認した。具体的には、３級アミン、アシルスルホンアミド、アニリン、アルキン、ピリジン環といった官能基共存下での、アレノールのＯ－選択的なエチル化条件を見いだした。なお、本発明の本手法は、本実施例に例示した官能基に限定されずに、広く適用可能な手法である。
【０４１８】
実施例３－７－８：ピリダジンアミドＮＨ基を有する基質として６－［４－［［２－（３－ヒドロキシフェニル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－（４－メトキシフェニル）ピリダジン－３－カルボキサミド（Ｂ－０８０）を用いたフェノールのＯ－選択的なエチル化におけるエタノールの添加効果
【化８１】



B-080　　B-081

【０４１９】

Ｒｕｎ　１：ＤＭＦ溶媒反応

窒素置換されたグローブバッグ中、０．６ｍＬのスクリューキャップバイアルに、６－［４－［［２－（３－ヒドロキシフェニル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－（４－メトキシフェニル）ピリダジン－３－カルボキサミド（Ｂ－０８０）（３．５ｍｇ，７．０μｍｏｌ，１．０当量）とＤＭＦ（１００．０μＬ）を加えた。その溶液にＢＴＰＰ（３２．１μＬ，１０５．０μｍｏｌ，１５．０当量）を加え混合を確認後、リン酸トリエチル（Ｂ－Ｒ－０５）（１７．９μＬ，１０５．０μｍｏｌ，１５．０当量）を加えた。得られた反応混合物を８００ｒｐｍの回転数で８０℃で撹拌させた。

【０４２０】

反応追跡

途中、反応開始から２，２１時間経過時に、グローブバッグ中にて反応液を５μＬサンプリングしてCH_3CN（１０００μＬ）で希釈し、ＬＣサンプルを調製した。ＬＣＭＳ測定を行うことで反応進行度を測定した。結果は表３－７－８、Ｒｕｎ１に示すとおりだった。

６－［４－［［２－（３－エトキシフェニル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－（４－メトキシフェニル）ピリダジン－３－カルボキサミド：化合物Ｂ－０８１。

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：５２４．２［Ｍ＋Ｈ］$^+$。

保持時間：０．９０１分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。

（原料ＡｒＯＨの保持時間は、０．７５１分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。

【０４２１】

Ｒｕｎ　２：ＤＭＦ－ＥｔＯＨ混合溶媒反応

窒素置換されたグローブバッグ中、０．６ｍＬのスクリューキャップバイアルに、６－［４－［［２－（３－ヒドロキシフェニル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－（４－メトキシフェニル）ピリダジン－３－カルボキサミド（Ｂ－０８０）（３．５ｍｇ，７．０μｍｏｌ，１．０当量）とＤＭＦ（８４．０μＬ）とＥｔＯＨ（１７．０μＬ）を加えた（ＤＭＦ：ＥｔＯＨ＝５：１）。実施例３－７－８、Ｒｕｎ１と同様に反応を実施し、反応進行度を測定した。結果は表３－７－８、Ｒｕｎ１～Ｒｕｎ２に示すとおりだった。

【０４２２】

実施例３－７－８の結果を表３－７－８に示す。

［表３－７－８］

【表２５】

Run	Solvent	Time (h)	SM (B-080) (area%)	O-Et (B-081) (area%)	Byproducts (area%) (not identified)
1	DMF	2	45.6	52.6	1.8
		21	ND	97.8	2.2
2	DMF-EtOH	2	26.1	71.8	2.1
	5 : 1	21	ND	97.6	2.4

【０４２３】

表３－７－８に示したように、ＥｔＯＨを溶媒として添加してもアレノールのＯ－選択的エチル化を実施出来ることを確認した。

【０４２４】

実施例３－８：実施例３－６－３で設定した反応条件における、さらなる官能基選択性の確認

実施例３－７において、実施例３－６－３で設定した反応条件は多くの官能基が共存する場合にも選択的にアレノールのＯ－エチル化が行えることが確認できた。本反応条件において、さらなる官能基選択性の確認を行った。確認の方法は、官能基を有する化合物をフェノールのモデル基質（４－ヒドロキシ－４’－メトキシビフェニル（Ｂ－Ｒ－２１）（ｐＫａ[a]＝９．９４））のエチル化反応に添加し、官能基を有する化合物のエチル化が進行するかを検討した。つまり、添加した官能基を有する化合物に対して、４－ヒドロキシ－４’－メトキシビフェニル（Ｂ－Ｒ－２１）のヒドロキシ基が選択的にエチル化された場合に、官能基選択性が確認されたことになる。

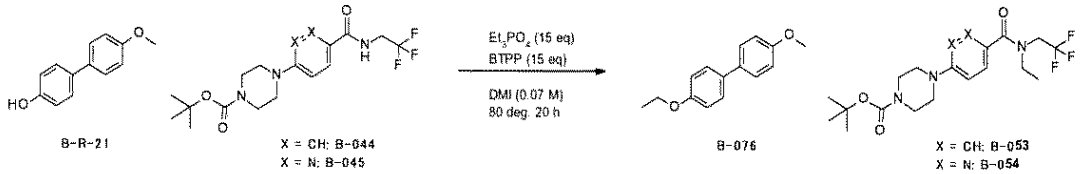
[a]：ＡＤＭＥＴ　ｐｒｅｄｉｃｔｏｒ（ｖｅｒｓｉｏｎ９．５）により算出

【０４２５】

実施例３－８－１：酸性度がフェノールと同程度のアミド存在下でのエチル化反応確認

フェノールと同程度の酸性度を示す官能基の一例として２級―アミド官能基のＮＨ基が挙げられる。実施例３－６－３で設定した反応条件下において、２級－アミド官能基のＮＨ基がエチル化される可能性を検討した。

【化８２】



【０４２６】

表３－８－１，Ｒｕｎ１：窒素置換されたグローブバッグ中、１．５ｍＬのスクリューキャップバイアルに、４－ヒドロキシ－４’－メトキシビフェニル（Ｂ－Ｒ－２１）（７．０ｍｇ，３５．０μｍｏｌ，１．０当量）、アミド基を有する化合物ｔｅｒｔ－ブチル　４－［４－（２，２，２－トリフルオロエチルカルバモイル）フェニル］ピペラジン－１－カルボキシラート（Ｂ－０４４）（６．８ｍｇ，１８．０μｍｏｌ，０．５当量）とＤＭＩ（０．５ｍＬ）を加えた。その溶液にＢＴＰＰ（１６１．０μＬ，５２５．０μｍｏｌ，１５．０当量）を加え混合を確認後、リン酸トリエチル（Ｂ－Ｒ－０５）（８９．０μＬ，５２５．０μｍｏｌ，１５．０当量）を加えた。得られた反応混合物を８００ｒｐｍの回転数で８０℃で撹拌させた。

【０４２７】

反応追跡

反応開始から２０時間経過時に、グローブバッグ中にて反応液を５μＬサンプリングしてＣＨ$_3$ＣＮ（１０００μＬ）で希釈し、ＬＣサンプルを調製した。ＬＣＭＳ測定を行うことで反応進行度を測定した。結果は表３－８－１、Ｒｕｎ１に示すとおりだった。

１－エトキシ－４－（４－メトキシフェニル）ベンゼン：化合物Ｂ－０７６。

保持時間：１．３４０分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。

（原料ＡｒＯＨの保持時間は、０．９９３分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。

【０４２８】

表３－８－１，Ｒｕｎ２では、ｔｅｒｔ－ブチル　４－［４－（２，２，２－トリフルオロエチルカルバモイル）フェニル］ピペラジン－１－カルボキシラート（Ｂ－０４４）の替わりにｔｅｒｔ－ブチル　４－［６－（２，２，２－トリフルオロエチルカルバモイル）ピリダジン－３－イル］ピペラジン－１－カルボキシラート（Ｂ－０４５）（６．８ｍｇ，１８．０μｍｏｌ，０．５当量）を用い、表３－８－１，Ｒｕｎ１と同様に反応実施、反応進行度を測定した。結果は表３－８－１、Ｒｕｎ２に示すとおりだった。

【０４２９】

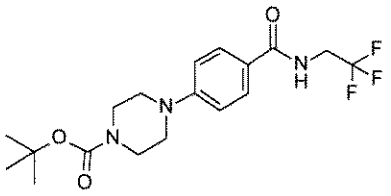
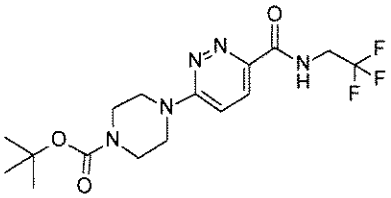
実施例３－８－１の結果を表３－８－１に示す。なお、表３－８－１に示したｃｏｎｖｅｒｓｉｏｎ　ｒａｔｅ（％）（Ｂ－Ｒ－２１／Ｂ－０７６）は、（Ｂ－Ｒ－２１，ａｒｅａ％）／〔（Ｂ－Ｒ－２１，ａｒｅａ％）＋（Ｂ－０７６，ａｒｅａ％）〕×１００と

して算出した。また、ｃｏｎｖｅｒｓｉｏｎ ｒａｔｅ（％）（ａｄｄｉｔｉｖｅ）は、（ａｄｄｉｔｉｖｅのエチル化体，ａｒｅａ％）／〔（ａｄｄｉｔｉｖｅのエチル化体，ａｒｅａ％）＋（ａｄｄｉｔｉｖｅ，ａｒｅａ％）〕×１００として算出した。ａｄｄｉｔｉｖｅがエチル化された際の標品は実施例１－３に示した通り合成し、表１－３のＲｅｔｅｎｔｉｏｎ ｔｉｍｅと検出ＭＳを参照しながら確認した。

【０４３０】

［表３－８－１］

【表２６】

Run	Additive		pKa[a]	Conversion rate (%) B-R-21 / B-076	Conversion rate (%) (Additive)
1	B-044		11.03	96.1	0
2	B-045		10.92	99.4	0

[a]：ＡＤＭＥＴ ｐｒｅｄｉｃｔｏｒ（ｖｅｒｓｉｏｎ９．５）により算出

【０４３１】

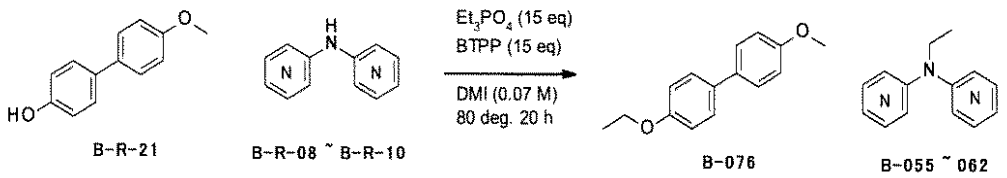
表３－８－１に示すように、フェノールのモデル基質（Ｂ－Ｒ－２１）は本条件でエチル化が進行したが、添加したアミド体（Ｂ－０４４，Ｂ－０４５）はいずれも反応進行しなかった。これにより、ある一態様において、本条件を適用することでフェノールと同程度の酸性度を有するアミド官能基に対し、アレノールがＯ－選択的にアルキル化を実施できることを確認した。

【０４３２】

実施例３－８－２：ジアリールアミン存在下でのエチル化反応確認

反応中に２級－ジアリールアミンのＮＨ基が存在する場合における、ジアリールアミンのＮ－エチル化の可能性を検討した。以下に、ジアリールアミン官能基の適用可能な範囲の特定方法を、一例として例示する。

【化８３】



【０４３３】

窒素置換されたグローブバッグ中、１．５ｍＬのスクリューキャップバイアルに、４－ヒドロキシ－４’－メトキシビフェニル（Ｂ－Ｒ－２１）（７．０ｍｇ，３５．０μｍｏｌ，１．０当量）、ジフェニルアミン（Ｂ－Ｒ－０８）（５．９ｍｇ，３５．０μｍｏｌ，１．０当量，Ｒｕｎ１）とＤＭＩ（０．５ｍＬ）を加えた。その溶液にＢＴＰＰ（１６１

．０μＬ，５２５．０μｍｏｌ，１５．０当量）を加え混合を確認後、リン酸トリエチル（Ｂ－Ｒ－０５）（８９．０μＬ，５２５．０μｍｏｌ，１５．０当量）を加えた。得られた反応混合物を８００ｒｐｍの回転数で８０℃で撹拌させた。

【０４３４】

また、ジフェニルアミン（Ｂ－Ｒ－０８）の替わりに、２－フルオロ－Ｎ－（２－フルオロフェニル）アニリン（Ｂ－４６）（７．２ｍｇ，３５．０μｍｏｌ，１．０当量，Ｒｕｎ２）、Ｎ－フェニルピリジン－３－アミン（Ｂ－４７）（６．０ｍｇ，３５．０μｍｏｌ，１．０当量，Ｒｕｎ３）、４－アニリノピリジン（Ｂ－Ｒ－０９）（６．０ｍｇ，３５．０μｍｏｌ，１．０当量，Ｒｕｎ４）、Ｎ－フェニルピリミジン－５－アミン（Ｂ－０４８）（６．０ｍｇ，３５．０μｍｏｌ，１．０当量，Ｒｕｎ５）、Ｎ－ピリジン－３－イルピリジン－３－アミン（Ｂ－０４９）（６．０ｍｇ，３５．０μｍｏｌ，１．０当量，Ｒｕｎ６）、Ｎ－フェニルピリジン－２－アミン（Ｂ－０５０）（６．０ｍｇ，３５．０μｍｏｌ，１．０当量，Ｒｕｎ７）、２，２’－ジピリジルアミン（Ｂ－Ｒ－１０）（６．０ｍｇ，３５．０μｍｏｌ，１．０当量，Ｒｕｎ８）を用いて、同様に反応を実施した。

【０４３５】

反応追跡

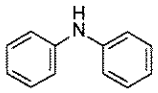
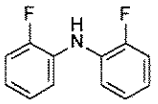
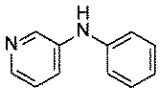
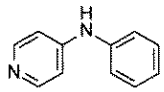
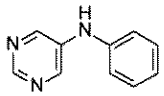
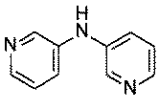
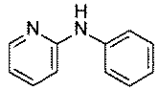
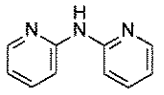
反応開始から２０時間経過時に、グローブバッグ中にて反応液を５μＬサンプリングしてＣＨ$_3$ＣＮ（１０００μＬ）で希釈し、ＬＣサンプルを調製した。ＬＣＭＳ測定を行うことで反応進行度を測定した。結果は表３－８－２に示すとおりだった。

実施例３－８－２の結果を表３－８－２に示す。なお、表３－８－２に示したｃｏｎｖｅｒｓｉｏｎ　ｒａｔｅ（％）（Ｂ－Ｒ－２１／Ｂ－０７６）は、（Ｂ－Ｒ－２１，ａｒｅａ％）／〔（Ｂ－Ｒ－２１，ａｒｅａ％）＋（Ｂ－０７６，ａｒｅａ％）〕×１００として算出した。また、ｃｏｎｖｅｒｓｉｏｎ　ｒａｔｅ（％）（ａｄｄｉｔｉｖｅ）は、（ａｄｄｉｔｉｖｅのエチル化体，ａｒｅａ％）／〔（ａｄｄｉｔｉｖｅのエチル化体，ａｒｅａ％）＋（ａｄｄｉｔｉｖｅ，ａｒｅａ％）〕×１００として算出した。ａｄｄｉｔｉｖｅがエチル化された際の標品は実施例１－３に示した通り合成し、表１－３のＲｅｔｅｎｔｉｏｎ　ｔｉｍｅと検出ＭＳを参照しながら確認した。

【０４３６】

［表３－８－２］

【表２７】

Run	Additive		pKa[a]	Conversion rate (%) B-R-21 / B-076	Conversion rate (%) (Additive)
1	B-R-08		2.58	99.4	< 0.1
2	B-046		1.22	99.1	< 0.1
3	B-047		0.52	99.6	< 0.1
4	B-R-09		0.07	99.2	5.1
5	B-048		-0.25	99.6	0.7
6	B-049		-1.04	99.7	1.1
7	B-050		-1.99	99.7	< 0.1
8	B-R-10		-4.7	99.8	< 0.1

[a]：ＡＤＭＥＴ　ｐｒｅｄｉｃｔｏｒ（ｖｅｒｓｉｏｎ　９．５）により算出

【０４３７】

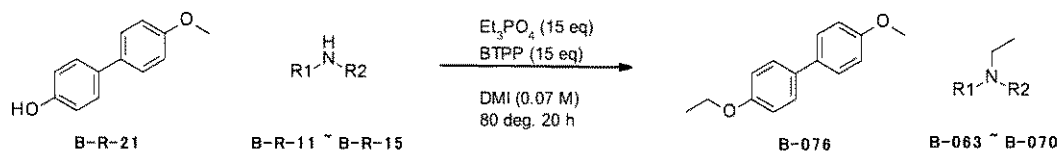
表３－８－２に示すように、４－ヒドロキシ－４’－メトキシビフェニル（Ｂ－Ｒ－２１）は本条件でエチル化が進行したが、添加したジアリールアミン体は５％以下の反応変換率であったことを確認した。この結果から、本発明の本手法は、本実施例に例示したジアリールアミンに限定されず、ジアリールアミン体が反応系中に存在した場合においてもアレノールがＯ－選択的にアルキル化を実施できることを示している。

【０４３８】

実施例３－８－３：各種アミン存在下でのエチル化反応確認

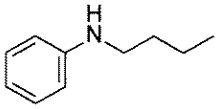
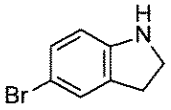
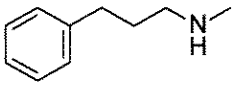
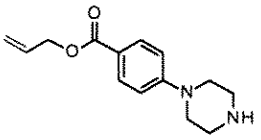
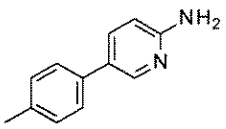
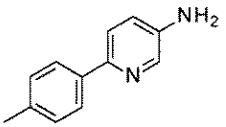
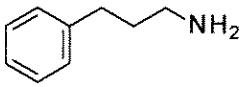
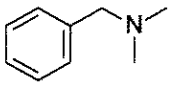
反応中に各種アミンが存在する場合における、アミンのＮ－エチル化の可能性を検討した。以下に、各種アミン官能基の適用可能な範囲の特定方法を、一例として例示する。

【化８４】



【０４３９】
窒素置換されたグローブバッグ中、１．５ｍＬのスクリューキャップバイアルに、４－ヒドロキシ－４’－メトキシビフェニル（Ｂ－Ｒ－２１）（７．０ｍｇ，３５．０μｍｏｌ，１．０当量）、Ｎ－ブチルアニリン（Ｂ－Ｒ－１１）（１１．０μＬ，７０．０μｍｏｌ，２．０当量）とＤＭＩ（０．５ｍＬ）を加えた。その溶液にＢＴＰＰ（１６１．０μＬ，５２５．０μｍｏｌ，１５．０当量）を加え混合を確認後、リン酸トリエチル（Ｂ－Ｒ－０５）（８９．０μＬ，５２５．０μｍｏｌ，１５．０当量）を加えた。得られた反応混合物を８００ｒｐｍの回転数で８０℃で撹拌させた。
【０４４０】
また、Ｎ－ブチルアニリン（Ｂ－Ｒ－１１）の替わりに、５－ブロモインドリン（Ｂ－Ｒ－１２）（１０．４ｍｇ，５３．０μｍｏｌ，１．５当量，Ｒｕｎ２）、（３－フェニルプロピル）メチルアミン（Ｂ－Ｒ－１３）（１４．０μＬ，８８．０μｍｏｌ，２．５当量，Ｒｕｎ３）、プロプ－２－エニル　４－ピペラジン－１－イルベンゾアト（ＢＢ－２７）（８．６ｍｇ，３５．０μｍｏｌ，１．０当量，Ｒｕｎ４）、５－（４－メチルフェニル）ピリジン－２－アミン（Ｂ－０５１）（６．５ｍｇ，３５．０μｍｏｌ，１．０当量，Ｒｕｎ５）、６－（４－メチルフェニル）ピリジン－３－アミン（Ｂ－０５２）（６．５ｍｇ，３５．０μｍｏｌ，１．０当量，Ｒｕｎ６）、３―フェニル－１－プロピルアミン（Ｂ－Ｒ－１４）（１２．０μＬ，８８．０μｍｏｌ，２．５当量，Ｒｕｎ７）、Ｎ，Ｎ－ジメチルベンジルアミン（Ｂ－Ｒ－１５）（１３．０μＬ，８８．０μｍｏｌ，２．５当量，Ｒｕｎ８）を用いて、同様に反応を実施した。
【０４４１】
反応追跡
反応開始から２０時間経過時に、グローブバッグ中にて反応液を５μＬサンプリングしてCH_3CN（１０００μＬ）で希釈し、ＬＣサンプルを調製した。ＬＣＭＳ測定を行うことで反応進行度を測定した。結果は表３－８－３に示すとおりだった。
【０４４２】
実施例３－８－３の結果を表３－８－３に示す。なお、表３－８－３に示したｃｏｎｖｅｒｓｉｏｎ　ｒａｔｅ（％）（Ｂ－Ｒ－２１／Ｂ－０７６）は、（Ｂ－Ｒ－２１，ａｒｅａ％）／〔（Ｂ－Ｒ－２１，ａｒｅａ％）＋（Ｂ－０７６，ａｒｅａ％）〕×１００として算出した。また、ｃｏｎｖｅｒｓｉｏｎ　ｒａｔｅ（％）（ａｄｄｉｔｉｖｅ）は、（ａｄｄｉｔｉｖｅのエチル化体，ａｒｅａ％）／〔（ａｄｄｉｔｉｖｅのエチル化体，ａｒｅａ％）＋（ａｄｄｉｔｉｖｅ，ａｒｅａ％）〕×１００として算出した。ａｄｄｉｔｉｖｅがエチル化された際の標品は実施例１－３に示した通り合成し、表１－３のＲｅｔｅｎｔｉｏｎ　ｔｉｍｅと検出ＭＳを参照しながら確認した。
【０４４３】
［表３－８－３］

【表２８】

Run	Additive			Additive (equivalent)	Conversion rate (%) B-R-21 / B-076	Conversion rate (%) (Additive)
1	sec-acyclic ArNH	B-R-11		2.0	99.6	< 0.1
2	sec-cyclic ArNH	B-R-12		1.5	99.6	2.3
3	sec-acyclic amine	B-R-13		2.5	99.0	13.9
4	sec-cyclic amine	BB27		1.0	99.6	32.6
5	pri-ArNH2	B-051		1.0	99.6	< 0.1
6	pri-ArNH2	B-052		1.0	99.5	0.15
7	pri-amine	B-R-14		2.5	98.7	11.4
8	tert-amine	B-R-15		2.5	98.2	< 0.1

【０４４４】

特定の理論に限定されないが、アミン官能基自身の反応性が高い場合（例えば２級非環状アミン、２級環状アミン、１級アミン）は、本条件においてアミン官能基のアルキル化が観測された（表３－８－３，Ｒｕｎ３，Ｒｕｎ４，Ｒｕｎ７）。これらのアミン官能基は、アレノールのアルキル化をする場合は保護が必要であることを示している。

【０４４５】

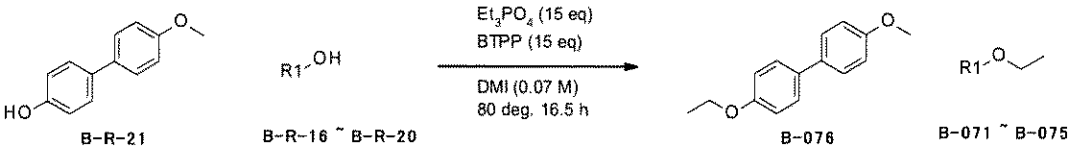
また、それら以外のアミン官能基（２級アニリン、１級アニリン、３級アミン）は本条件においてもアルキル化の進行が５％以下であることから、本実施例にて例示したアミン官能基に限定されず、アミン官能基が存在していてもアレノールを選択的にアルキル化できる事を確認した。

【０４４６】

実施例３－８－４：各種アルコール存在下でのエチル化反応確認

反応中に各種アルコールが存在する場合における、アルコールのＯ－エチル化の可能性を検討した。以下に、各種アルコール官能基の適用可能な範囲の特定方法を、一例として例示する。

【化８５】



【０４４７】

窒素置換されたグローブバッグ中、１．５ｍＬのスクリューキャップバイアルに、４－ヒドロキシ－４’－メトキシビフェニル（Ｂ－０２１）（７．０ｍｇ，３５．０μｍｏｌ，１．０当量）、ベンジルアルコール（Ｂ－Ｒ－１６）（３．６μＬ，３５．０μｍｏｌ，１．０当量）とＤＭＩ（０．５ｍＬ）を加えた。その溶液にＢＴＰＰ（１６１．０μＬ，５２５．０μｍｏｌ，１５．０当量）を加え混合を確認後、リン酸トリエチル（Ｂ－Ｒ－０５）（８９．０μＬ，５２５．０μｍｏｌ，１５．０当量）を加えた。得られた反応混合物を８００ｒｐｍの回転数で８０℃で１６．５時間撹拌させた。

また、ベンジルアルコール（Ｂ－Ｒ－１６）の替わりに、１－フェニルエタノール（Ｂ－Ｒ－１７）（４．２μＬ，３５．０μｍｏｌ，１．０当量，Ｒｕｎ２）、２－フェニルエタノール（Ｂ－Ｒ－１８）（４．２μＬ，３５．０μｍｏｌ，１．０当量，Ｒｕｎ３）、１－フェニル－２－プロパノール（Ｂ－Ｒ－１９）（４．９μＬ，３５．０μｍｏｌ，１．０当量，Ｒｕｎ４）、３－フェニル－１－プロパノール（Ｂ－Ｒ－２０）（４．８μＬ，３５．０μｍｏｌ，１．０当量，Ｒｕｎ５）を用いて、同様に反応を実施した。

【０４４８】

反応追跡

反応開始から１６．５時間経過時に、グローブバッグ中にて反応液を５μＬサンプリングしてCH_3CN（１０００μＬ）で希釈し、ＬＣサンプルを調製した。ＬＣＭＳ測定を行うことで反応進行度を測定した。

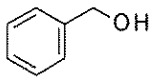
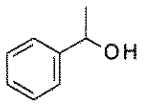
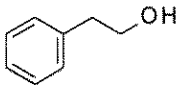
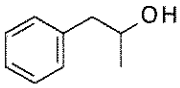
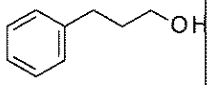
【０４４９】

実施例３－８－４の結果を表３－８－４に示す。なお、表３－８－４に示したｃｏｎｖｅｒｓｉｏｎ　ｒａｔｅ（％）（Ｂ－Ｒ－２１／Ｂ－０７６）は、（Ｂ－Ｒ－２１，ａｒｅａ％）／〔（Ｂ－Ｒ－２１，ａｒｅａ％）＋（Ｂ－０７６，ａｒｅａ％）〕×１００として算出した。また、ｃｏｎｖｅｒｓｉｏｎ　ｒａｔｅ（％）（ａｄｄｉｔｉｖｅ）は、（ａｄｄｉｔｉｖｅのエチル化体，ａｒｅａ％）／〔（ａｄｄｉｔｉｖｅのエチル化体，ａｒｅａ％）＋（ａｄｄｉｔｉｖｅ，ａｒｅａ％）〕×１００として算出した。ａｄｄｉｔｉｖｅがエチル化された際の標品は実施例１－３に示した通り合成し、表１－３のＲｅｔｅｎｔｉｏｎ　ｔｉｍｅを参照しながら確認した。

【０４５０】

［表３－８－４］

【表２９】

Run	Additive		Conversion rate (%) B-R-21 / B-076	Conversion rate (%) (Additive)
1	B-R-16		99.7	3.4
2	B-R-17		99.2	< 0.1
3	B-R-18		97.9	< 0.1
4	B-R-19		98.3	< 0.1
5	B-R-20		98.5	< 0.1

【０４５１】

表３－８－４に示したように、アルコール官能基は本条件においてもアルキル化の進行が５％以下であることから、本実施例にて例示したアルコール官能基に限定されず、アルコール官能基が存在していてもアレノールを選択的にアルキル化できる事を確認した。

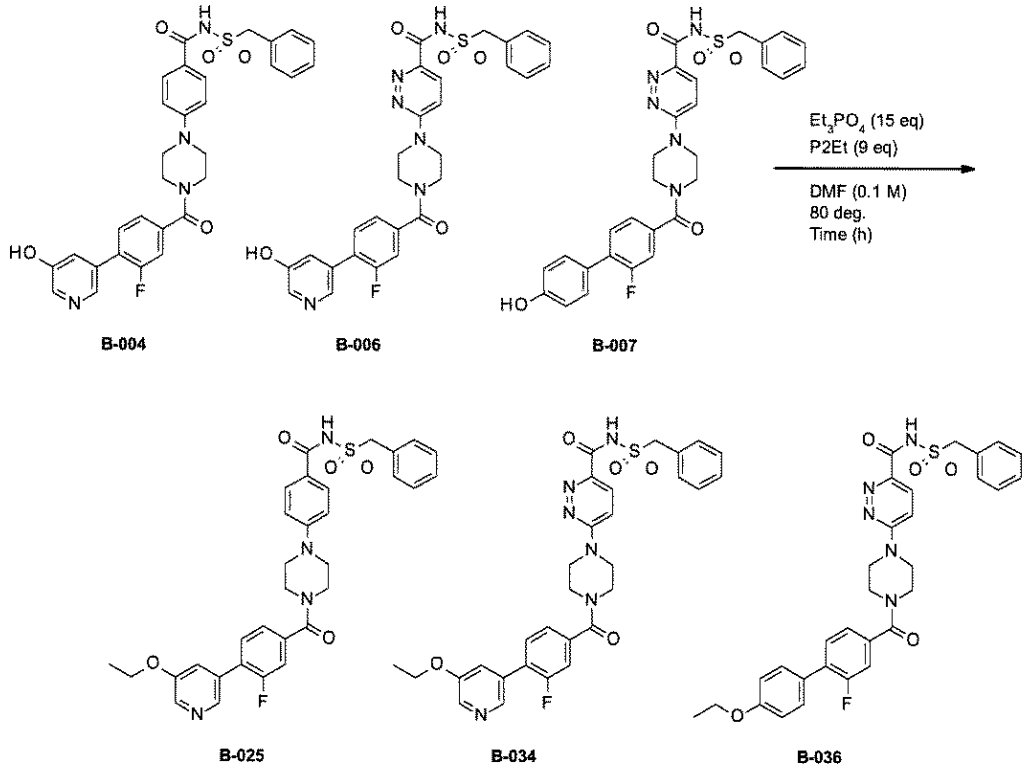
【０４５２】

以上、実施例３－８の結果から、本実施例にて例示したアミド、ジアリールアミン、２級アニリン、１級アニリン、３級アミン、アルコールなどの官能基に限定されず、これらの官能基が共存する場合においても官能基選択的にアレノールのＯ－エチル化が進行することを確認した。

実施例３－９：３種類の基質の混合物における、アレノールのＯ－選択的なエチル化

実施例３中の知見を用い、実際に基質の混合物、Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［３－フルオロ－４－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）ベンゾイル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（Ｂ－００４），Ｎ－ベンジルスルホニル－６－［４－［３－フルオロ－４－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）ベンゾイル］ピペラジン－１－イル］ピリダジン－３－カルボキサミド（Ｂ－００６），Ｎ－ベンジルスルホニル－６－［４－［３－フルオロ－４－（４－ヒドロキシフェニル）ベンゾイル］ピペラジン－１－イル］ピリダジン－３－カルボキサミド（Ｂ－００７）に対して、アレノールのＯ－選択的なエチル化を試みた。

【化８６】



【０４５３】

窒素置換されたグローブバッグ中、１．５ｍＬのスクリューキャップバイアルに、（Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［３－フルオロ－４－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）ベンゾイル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（Ｂ－００４）（４．０ｍｇ，７．０μｍｏｌ，１．０当量）、Ｎ－ベンジルスルホニル－６－［４－［３－フルオロ－４－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）ベンゾイル］ピペラジン－１－イル］ピリダジン－３－カルボキサミド（Ｂ－００６）（４．０ｍｇ，７．０μｍｏｌ，１．０当量）、Ｎ－ベンジルスルホニル－６－［４－［３－フルオロ－４－（４－ヒドロキシフェニル）ベンゾイル］ピペラジン－１－イル］ピリダジン－３－カルボキサミド（Ｂ－００７）（４．０ｍｇ，７．０μｍｏｌ，１．０当量）とＤＭＦ（２１０．０μＬ）を加えた。その溶液にＰ２Ｅｔ（２１．０μＬ，６３．０μｍｏｌ，９．０当量）を加え混合を確認後、リン酸トリエチル（Ｂ－Ｒ－０５）（１７．９μＬ，１０５．０μｍｏｌ，１５．０当量）を加えた。得られた反応混合物を８００ｒｐｍの回転数で８０℃で撹拌させた。

【０４５４】

反応追跡

途中、反応開始から１，２．５，５，２１時間経過時に、グローブバッグ中にて反応液を５μＬサンプリングしてCH_3CN（１０００μＬ）で希釈し、ＬＣサンプルを調製した。ＬＣＭＳ測定を行うことで反応進行度を測定した。

【０４５５】

実施例３－９の結果を表３－９に示す。なお、表３－９に示したＲａｔｉｏ（Ｏ－／Ｎ－）は、（Ｏ－エチル化体のａｒｅａ％）／（Ｎ－エチル化体のａｒｅａ％）として算出した。

［表３－９］

【表３０】

Time (h)	B-004 (area%)	O-Et (B-025) (area%)	N-Et (B-026) (area%)	B-006 (area%)	OEt (B-034) (area%)	N-Et (B-035) (area%)	B-007 (area%)	O-Et (B-036) (area%)
0	33.1	ND	ND	34.0	ND	ND	32.8	ND
1	16.3	15.5	0.3	16.9	16.8	0.6	8.6	25.0
2.5	6.9	24.5	0.4	6.6	25.9	0.7	2.4	32.5
5	2.1	29.4	0.3	1.2	32.3	0.4	ND	34.1
21	ND	31.5	0.2	ND	33.5	0.2	ND	34.1
		Ratio (O- / N-): 131			Ratio (O- / N-): 139			

【０４５６】

本結果より、基質が実際に混合物であったとしても、単一の基質を用いた場合の検討結果からの想定通り、多くの官能基が共存する中でアレノールのＯ－選択的なエチル化が可能であることが示された。本反応条件においては、複数の基質が混合していることに由来する問題はみられない。

【０４５７】

実施例４：複数の基質混合物に対してエチル化を行った際の残留試薬や試薬由来不純物の除去検討

複数の基質混合物に対して反応を行う際には、官能基選択的な反応条件を設定することに加えて、残留試薬や試薬由来不純物の除去を適切に行うことが必要である。例えば、一態様において、実験室にて一般的に利用されている順相および逆相カラムでの精製は、必ずしも最適な分離法として適用できるとは限らない。以下において、不要試薬類の除去について検討を行った。

【０４５８】

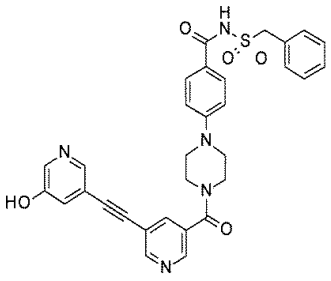
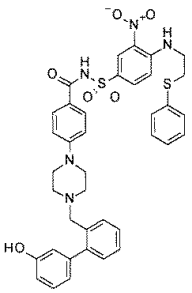
実施例４－１：複数の基質の混合物にてエチル化を行った際の減圧留去および固相試薬を用いた不要試薬の除去検討

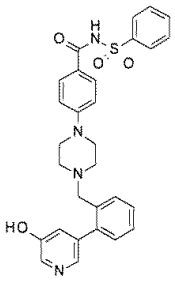
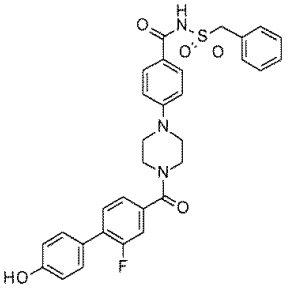
表４－１に示す複数の基質、Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［５－［２－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）エチニル］ピリジン－３－カルボニル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（Ｂ－００３）、４－［４－［［２－（３－ヒドロキシフェニル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－［３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニルベンズアミド（Ｂ－０１３）、Ｎ－（ベンゼンスルホニル）－４－［４－［［２－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（Ｂ－０１４）、Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［３－フルオロ－４－（４－ヒドロキシフェニル）ベンゾイル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（Ｂ－０１５）の混合物を用いてエチル化反応を行った後に、試薬を除去する方法の検討を実施した。使用した基質中には、実施例６に記載するライブラリの中に含まれる化合物の中から幅広い範囲の酸性度（ｃｐＫａ）及び共役酸の酸性度（ｃｐＫＢＨ$^{+}$）を示す化合物を選択した。なお、ｃｐＫａ及びｃｐＫＢＨ$^{+}$は、ｐＫａの計算値及びｐＫＢＨ$^{+}$の計算値を示し、ＡＤＭＥＴ　ｐｒｅｄｉｃｔｏｒ（ｖｅｒｓｉｏｎ　９．５）を用いて計算した値を利用した。またエチル化を実施する際にはライブラリ合成における利用を想定し、エチル化に使用する基質に混入する可能性のある酸成分（ここでは一例として、アレノール化合物がＷａｎｇレジンに担持されていることを想定して、固相からの切り出し工程に一般的に使用される可能性があるＴＦＡ）を共存させてエチル化を実施した。操作の一例を示す。

【０４５９】

［表４－１］

【表３１】

化合物番号	B-003	B-013
構造式		
化合物名	N－ベンジルスルホニル－４－［４－［５－［２－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）エチニル］ピリジン－３－カルボニル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド	４－［４－［［２－（３－ヒドロキシフェニル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－［３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニルベンズアミド
exact MS	581.17	723.22
lowest cpKa	5.95	5.08
higest cpKBH+	4.01	6.96

化合物番号	B-014	B-015
構造式		
化合物名	N－（ベンゼンスルホニル）－４－［４－［［２－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド	N－ベンジルスルホニル－４－［４－［３－フルオロ－４－（４－ヒドロキシフェニル）ベンゾイル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド
exact MS	528.18	573.17
lowest cpKa	5.53	6.09
higest cpKBH+	6.92	4.08

【０４６０】

窒素置換されたグローブバッグ中、４．０ｍＬのスクリューキャップバイアルに、Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［５－［２－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）エチニル］ピリジン－３－カルボニル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（Ｂ－００３）（４．８ｍｇ，８３．０μｍｏｌ）、４－［４－［［２－（３－ヒドロキシフェニル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－［３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニルベンズアミド（Ｂ－０１３）（６．０ｍｇ，８３．０μｍｏｌ）、Ｎ－（ベンゼンスルホニル）－４－［４－［［２－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（

Ｂ－０１４）（４．４ｍｇ，８３．０μｍｏｌ）、Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［３－フルオロ－４－（４－ヒドロキシフェニル）ベンゾイル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（Ｂ－０１５）（４．７ｍｇ，８３．０μｍｏｌ）とＤＭＩ（５５０．０μＬ）を加えた。その溶液にＢＴＰＰ（１５１．０μＬ，４９５．０μｍｏｌ）を加え、混合を確認後、リン酸トリエチル（Ｂ－Ｒ－０５）（８４．０μＬ，４９５．０μｍｏｌ）を加えた。得られた反応液を８０℃で３０時間撹拌させた。３０時間後、反応液を３μＬサンプリングしてＭｅＣＮ（１０００μＬ）で希釈し、ＬＣサンプルを調製しＬＣＭＳ測定を行った。この溶液を試薬除去操作時の初期溶液として用いた。その後、反応液にメシチレン（１５１．０μＬ，３３．０μｍｏｌ）を加え、反応液を１０μＬサンプリングし、ＤＭＳＯ－d_6（５８０．０μＬ）で希釈し、^{1}Ｈ－ＮＭＲによる試薬残存量確認用の初期溶液とした。

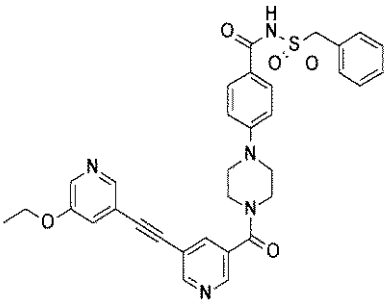
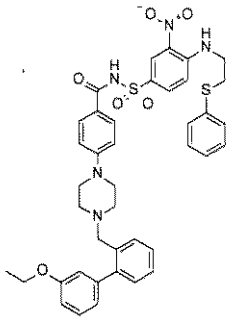
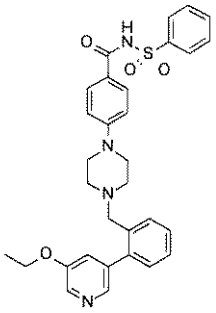
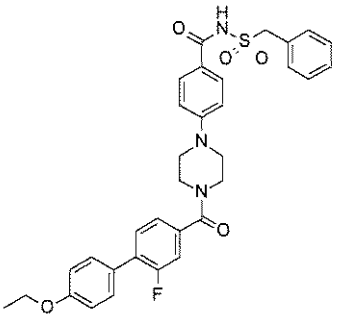
【０４６１】

反応液をＭｅＣＮ（２５０．０μＬ）で洗いこみながら、反応に用いた塩基（ＢＴＰＰ）を吸着させ除去する目的でカルボン酸担持シリカゲル（Ｂｉｏｔａｇｅ社製ＩＳＯＬＵＴＥ（登録商標）ＣＢＡ，１ｇ／６ｍＬ，０．７ｍｅｑ／ｇ）に吸着させ、１０分間静置した。ＭｅＣＮ（１．０ｍＬ）を加え、加圧し濾液を試験管にて回収した。カルボン酸担持シリカゲルをＭｅＣＮ（１．０ｍＬ）で２回洗浄加圧ろ過し、全ての濾液を併せて集め、溶液Ａを作成した。また、カルボン酸担持シリカゲルへの基質群（Ｂ－００３，Ｂ－０１３，Ｂ－０１４，Ｂ－０１５）もしくは生成物群（Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［５－［２－（５－エトキシピリジン－３－イル）エチニル］ピリジン－３－カルボニル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（Ｂ－０２９），４－［４－［［２－（３－エトキシフェニル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－［３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニルベンズアミド（Ｂ－０４３），Ｎ－（ベンゼンスルホニル）－４－［４－［［２－（５－エトキシピリジン－３－イル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（Ｂ－０７７），Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［４－（４－エトキシフェニル）－３－フルオロベンゾイル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（Ｂ－０７８））の吸着による損失の程度を評価する目的で、カルボン酸担持シリカゲルを２Ｍ　ＴＥＡのＭｅＣＮ溶液（１．０ｍＬ）で３回洗浄加圧ろ過し、全ての濾液を併せて集め、溶液Ｂを作成した。溶液ＡとＢの容積を同程度になるまでＭｅＣＮで希釈した後、２５μＬをサンプリングしてＭｅＣＮ（１０００μＬ）で希釈した。ＬＣサンプルを調製しＬＣＭＳ測定を行うことで、溶液Ａならびに Ｂに含まれる化合物の割合を算出し、溶液Ａで回収できた各化合物の回収率とした。試験管に窒素を吹き付けて一部の溶媒を留去したのち、遠心エバポレーター（Ｇｅｎｅｖａｃ社）（４０℃，低沸点溶媒の留去が終了したと検知されるまで５０－２００ｍｂａｒで減圧した後に、４０℃，＜０．５ｍｂａｒで１６時間）にて溶媒を減圧下留去し、表４―２に示す化合物（Ｂ－０２９，Ｂ－０４３，Ｂ－０７７，Ｂ－０７８）の混合物をオイル状物質として得た。得られた物質をＤＭＳＯ－d_6に溶解し、^{1}Ｈ－ＮＭＲを測定することで試薬の残存について比較した。

【０４６２】

［表４―２］エチル化により得られた化合物の構造

【表３２】

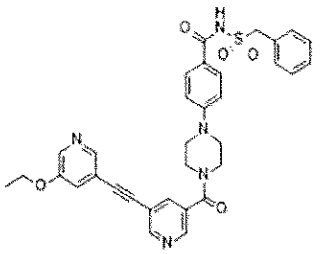
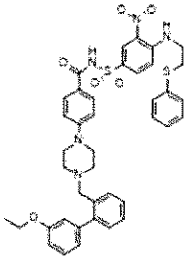
化合物番号	構造式	化合物名	retention time (min)	exact MS
B-029		Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［５－［２－（５－エトキシピリジン－３－イル）エチニル］ピリジン－３－カルボニル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド	1.05	609.20
B-043		４－［４－［［２－（３－エトキシフェニル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－［３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニルベンズアミド	1.00	751.25
B-077		Ｎ－（ベンゼンスルホニル）－４－［４－［［２－（５－エトキシピリジン－３－イル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド	0.72	556.21
B-078		Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［［２－（４－プロプ－２－エノキシフェニル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド	1.22	601.20

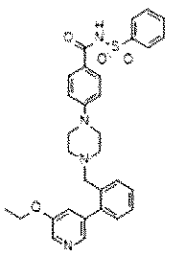
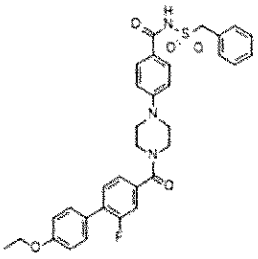
【０４６３】

カルボン酸担持シリカゲル処理を行った際のＬＣＭＳによる分析結果について表４－３に示す。

［表４－３］

【表３３】

化合物番号	B-029	B-043
構造式		
初期溶液中におけるＵＶ面積％（３１０nm）	28.5	14.0
溶液Ａ中におけるＵＶ面積％（３１０nm）	30.4	14.2
a；溶液Ａ中のUV面積（３１０nm）	99384	46570
b；溶液Ｂ中のUV面積（３１０nm）	nd	367
溶液Ａ中への回収率％（a/(a+b) x 100）	100	99.2
分析条件	SMD-FA05-RP	

化合物番号	B-077	B-078
構造式		
初期溶液中におけるＵＶ面積％（３１０nm）	21.6	21.1
溶液Ａ中におけるＵＶ面積％（３１０nm）	21.5	22.1
a；溶液Ａ中のUV面積（３１０nm）	70390	72281
b；溶液Ｂ中のUV面積（３１０nm）	1351	nd
溶液Ａ中への回収率％（a/(a+b) x 100）	98.1	100
分析条件	SMD-FA05-RP	

【０４６４】

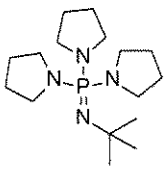
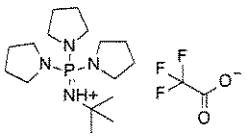
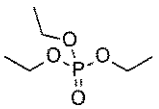
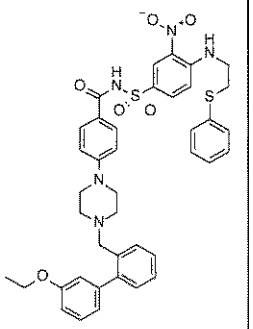
カルボン酸担持シリカゲル処理後に得た溶液Ａ中におけるＵＶ面積％は、初期溶液中における各化合物のＵＶ面積％と比較して顕著な変化がないことが確認された。特定の化合物が特異的にシリカゲルに吸着されてしまうことがないことを示している。また、溶液Ａ中ならびにＢ中の各化合物のＵＶ面積を比較し、溶液Ａ中への回収率＝溶液Ａ中のＵＶ面積（３１０ｎｍ）／｛溶液Ａ中のＵＶ面積（３１０ｎｍ）＋溶液Ｂ中のＵＶ面積（３１０ｎｍ）｝を算出した。この結果各化合物とも９８．１％以上を溶液Ａ中に回収できていることが明らかになった。以上の結果より、各化合物間で様々な酸性度、塩基性度を有しているにもかかわらず、カルボン酸担持シリカゲル処理を行っても吸着されることなく回収可能であることが明らかになった。

カルボン酸担持シリカゲル処理を行った際の^{1}Ｈ－ＮＭＲによる分析結果について表４－４に示す。

【０４６５】

［表４－４］

【表３４】

解析対象化合物	BTPP	BTPP-TFA	Et_3PO_4	B-043
解析対象化合物構造式				
解析対象ピーク(ppm)	1.729		3.998	8.863
解析対象ピーク形状、該当プロトン数	br-s, 12H	br-m 12H	m 8H	d, 1H
初期溶液中における積分値	1051.2	nd	505.2	1.00
初期溶液中におけるモル比	87.6	nd	84.2	1.0
濃縮処理後における積分値	nd	11.3	5.01	1.00
濃縮処理後におけるモル比	nd	0.94	0.835	1.0

【０４６６】

反応終了後に調製した初期溶液中の^{1}Ｈ－ＮＭＲデータの解析から、４－［４－［［２－（３－エトキシフェニル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－［３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニルベンズアミド（Ｂ－０４３）に対して大過剰のＢＴＰＰ（８７．６倍程度のモル数）ならびにEt_3PO_4（８４．２倍程度のモル数）が存在していることが確認できた。一方で、カルボン酸担持シリカゲル処理ならびに濃縮作業を実施したオイル状物質から調製した溶液の^{1}Ｈ－ＮＭＲデータの解析からは、ＢＴＰＰの遊離体は検出されず、完全に除去できていることが確認できた。また、ＢＴＰＰのＴＦＡとの塩がＢ－０４３に対して０．９４倍程度のモル数まで低減できること、Et_3PO_4が０．８３５倍程度のモル数で確認される程度まで大幅に除去されていることが確認できた。基質に予め共存させていたＴＦＡと塩を形成したため、ＢＴＰＰは一定量確認されたものの、本手法によって供給される化合物群の生物学的実験での評価時にはバッファーが用いられるため、影響はごく軽微である。さらにＴＦＡ非存在下においては問題にならない。なお、特定の理論に限定されないが、Et_3PO_4（沸点：２１６℃、東京化成社ウェブ（ｈｔｔｐｓ：／／ｗｗｗ．ｔｃｉｃｈｅｍｉｃａｌｓ．ｃｏｍ／ＪＰ／ｊａ／ｐ／Ｐ０２７０）、２０２０年１１月１８日閲覧）は中性化合物であるため、カルボン酸担持シリカゲルによって除去されたのではなく、減圧濃縮によって除去された。

【０４６７】

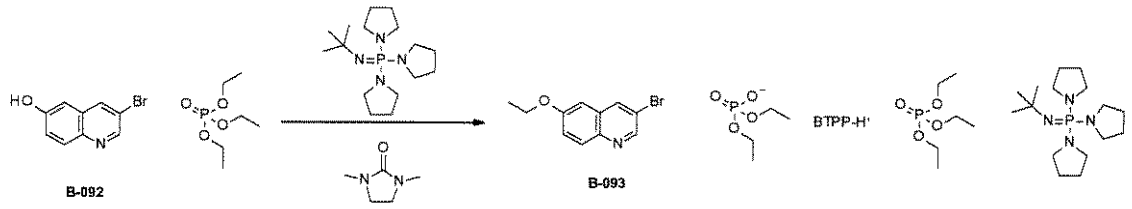
以上のように、複数の基質の混合物にてエチル化を行った場合においても、固相試薬の利用及び減圧留去を実施することで、不要試薬の除去が可能であることが例示された。本発明中のエチル化の方法は、残留試薬や試薬由来不純物の除去を適切に行うことが可能であり、混合物ライブラリの合成にも適用可能な方法であることが特定された。

【０４６８】

実施例４－２：複数の基質の混合物にてエチル化を行った際の液液分離および減圧留去による不要試薬の除去検討

実施例４－２－１：酢酸エチルを有機溶媒として用い、酸性溶液として飽和塩化アンモニウム水溶液を用いた液液分離および減圧留去による不溶試薬の除去

【化８７】



窒素置換されたグローブバッグ中、２．０ｍＬのスクリューキャップバイアルに、３－ブロモキノリン－６－オール（Ｂ－０９２）（１５．７ｍｇ，７０．０μｍｏｌ）、とＤＭＩ（１．０ｍＬ）を加えた。その溶液にＢＴＰＰ（６４．２μＬ，２１０μｍｏｌ，３．０当量）を加え、混合を確認後、リン酸トリエチル（Ｂ－Ｒ－０５）（５９．５μＬ，３５０μｍｏｌ，５．０当量）を加えた。得られた反応液を８０℃で２２時間撹拌させた。

【０４６９】

反応追跡

反応開始から２２時間経過時に、グローブバッグ中にて反応液を５μＬサンプリングしてＣＨ$_3$ＣＮ（１０００μＬ）で希釈し、ＬＣサンプルを調製した。ＬＣＭＳ測定を行うことで反応進行度を測定した結果、原料の３－ブロモキノリン－６－オール（Ｂ－０９２）が消失し、３－ブロモ－６－エトキシキノリン（Ｂ－０９３）が９７．２ａｒｅａ％生成していることを確認した。

３－ブロモ－６－エトキシキノリン：化合物Ｂ－０９３。

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：２５１．９，２５３．９［Ｍ＋Ｈ］$^+$。

保持時間：１．１７６分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。

（原料ＡｒＯＨの保持時間は、０．７８９分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。

【０４７０】

液液分離

反応液を酢酸エチル（１０ｍＬ，ＤＭＩに対して１０倍量）で希釈しながら５０ｍＬ分液ロートに移し、反応に用いた塩基（ＢＴＰＰ）を酸性水溶液で洗浄除去する目的で飽和塩化アンモニウム水溶液（３ｍＬ，ＤＭＩに対して３倍量）を加えて液液分離を行った。水溶液を排出後、酢酸エチル溶液に対し飽和塩化アンモニウム水溶液（３ｍＬ，ＤＭＩに対して３倍量）を加えて洗浄による液液分離を８回繰り返した（合計９回洗浄）。

【０４７１】

９回洗浄後の酢酸エチル溶液から１００μＬサンプリングしてＣＨ$_3$ＣＮ（７５０μＬ）で希釈し、ＬＣサンプルを調製した。９回目の洗浄水溶液から２００μＬサンプリングして水（８００μＬ）で希釈し、ＬＣサンプルを調製した。ＬＣＭＳ測定を行うことで酢酸エチル溶液中のＢＴＰＰの残存具合、ならびに水溶液中のＢＴＰＰの除去程度を測定した結果、有機溶液にはＢＴＰＰのｍ／ｚは観測されなかった。また、水溶液中にＢＴＰＰのｍ／ｚを観測した。

【０４７２】

酢酸エチル溶液を水（５ｍＬ）で洗浄後、硫酸ナトリウムで乾燥、ろ過後のろ液を減圧下濃縮した。得られた７５．８ｍｇの液体状の残渣から１０ｍｇをサンプリングしてＤＭ

ＳＯ－ｄ$_6$（７５０．０μＬ）で希釈し、^{1}Ｈ－ＮＭＲ測定を行い試薬残存量を確認した。結果を表４－５に示す。表４－５の液液分離濃縮体におけるモル比欄に示すように、飽和塩化アンモニウム水溶液で反応溶液の酢酸エチル溶液を洗浄することでＢＴＰＰの残存量をＢ－０９３に対しモル比０．０２倍程度まで減少させられることを確認した。一方、中性化合物であるリン酸トリエチルとＤＭＩはＢ－０９３に対しそれぞれモル比が３．４倍程度、１．６倍程度残存していることが観測された。

【０４７３】

液液分離後の^{1}Ｈ－ＮＭＲ測定を実施したサンプルを回収し、液液分離濃縮体に残存している中性化合物（リン酸トリエチルとＤＭＩ）を除去する目的で、遠心エバポレーター（Ｇｅｎｅｖａｃ社）（４０℃，低沸点溶媒の留去が終了したと検知されるまで５０－２００ｍｂａｒで減圧した後に、４０℃，＜０．５ｍｂａｒで１６時間）にて溶媒を減圧下留去し、Ｂ－０９３をワックス様固体物質として得た。得られた物質をＤＭＳＯ－ｄ$_6$に溶解し、^{1}Ｈ－ＮＭＲを測定することで試薬の残存について確認した。

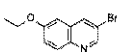
【０４７４】

濃縮処理後のワックス様固体物質から調製した^{1}Ｈ－ＮＭＲデータの解析結果を表４－５に示す。解析結果から、リン酸トリエチルは検出されず完全に除去できていることが確認できた。３－ブロモ－６－エトキシキノリン（Ｂ－０９３）に対してＢＴＰＰが０．０６倍程度のモル比で、またＤＭＩは０．０８５倍程度のモル比で確認される程度にまで除去されていることが確認できた。

【０４７５】

［表４－５］

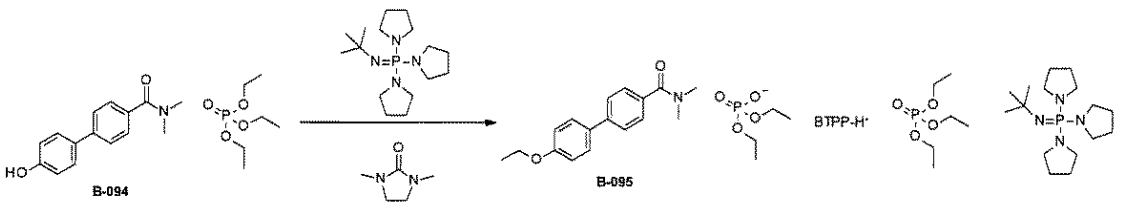
【表３５】

解析対象化合物	BTPP	Et_3PO_4	DM	B-093
解析対象化合物構造式				
解析対象ピーク(ppm)	1.722	1.239	3.199	7.353
解析対象ピーク形状、該当プロトン数	br-s、12H	t、9H	s、4H	d、1H
液液分離後濃縮体における積分値	0.27	30.53	6.39	1.00
液液分離後濃縮体におけるモル比	0.02	3.4	1.6	1.0
濃縮処理後における積分値	0.67	ND	0.34	1.00
濃縮処理後におけるモル比	0.06	ND	0.085	1.0

【０４７６】

<u>実施例４－２－２：酢酸エチルを有機溶媒として用い、酸性溶液として５％硫酸水素カリウム水溶液を用いた液液分離および減圧留去による不溶試薬の除去</u>

【化８８】



【０４７７】

窒素置換されたグローブバッグ中、２．０ｍＬのスクリューキャップバイアルに、４－（４－ヒドロキシフェニル）－Ｎ，Ｎ－ジメチルベンズアミド（Ｂ－０９４）（１６．９ｍｇ，７０．０μｍｏｌ）、とＤＭＩ（１．０ｍＬ）を加えた。その溶液にＢＴＰＰ（６４．２μＬ，２１０μｍｏｌ，３．０当量）を加え、混合を確認後、リン酸トリエチル（Ｂ－Ｒ－０５）（５９．５μＬ，３５０μｍｏｌ，５．０当量）を加えた。得られた反応液を８０℃で２２時間撹拌させた。反応進行確認後、反応液にＢＴＰＰ（２５７．０μＬ

，８４０μｍｏｌ，１２．０当量）とリン酸トリエチル（Ｂ－Ｒ－０５）（１１９．０μＬ，７００μｍｏｌ，１０．０当量）を加えて８０℃で２１時間撹拌させた。

【０４７８】

反応追跡

反応開始から２２時間と試薬追加後２１時間経過時に、グローブバッグ中にて反応液を５μＬサンプリングしてCH_3CN（１０００μＬ）で希釈し、ＬＣサンプルを調製した。ＬＣＭＳ測定を行うことで反応進行度を測定した結果、反応開始時から２２時間時には原料の４－（４－ヒドロキシフェニル）－Ｎ，Ｎ－ジメチルベンズアミド（Ｂ－０９４）が１５．５ａｒｅａ％残存し、４－（４－エトキシフェニル）－Ｎ，Ｎ－ジメチルベンズアミド（Ｂ－０９５）が８３．３ａｒｃａ％生成していた。試薬追加後２１時間経過時では、原料の４－（４－ヒドロキシフェニル）－Ｎ，Ｎ－ジメチルベンズアミド（Ｂ－０９４）が消失し、４－（４－エトキシフェニル）－Ｎ，Ｎ－ジメチルベンズアミド（Ｂ－０９５）が９８．３ａｒｅａ％生成していることを確認した。

【０４７９】

４－（４－エトキシフェニル）－Ｎ，Ｎ－ジメチルベンズアミド：化合物Ｂ－０９５。

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：２７０．１$[M+H]^+$。

保持時間：１．０６３分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。

（原料ＡｒＯＨの保持時間は、０．７６０分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。

【０４８０】

液液分離

反応液を酢酸エチル（１５ｍＬ，ＤＭＩに対して１５倍量）で希釈しながら５０ｍＬ分液ロートに移し、反応に用いた塩基（ＢＴＰＰ）を酸性水溶液で洗浄除去する目的で５％硫酸水素カリウム水溶液（４ｍＬ，ＤＭＩに対して４倍量）を加えて液液分離を行った。水溶液を排出後、酢酸エチル溶液に対し５％硫酸水素カリウム水溶液（４ｍＬ，ＤＭＩに対して４倍量）を加えて洗浄による液液分離を５回繰り返した（合計６回洗浄）。

【０４８１】

６回洗浄後の酢酸エチル溶液から１００μＬサンプリングしてCH_3CN（７５０μＬ）で希釈し、ＬＣサンプルを調製した。６回目の洗浄水溶液から２００μＬサンプリングして水（８００μＬ）で希釈し、ＬＣサンプルを調製した。ＬＣＭＳ測定を行うことで酢酸エチル溶液中のＢＴＰＰの残存具合、ならびに水溶液中のＢＴＰＰの除去程度を測定した結果、有機溶液にはＢＴＰＰのｍ／ｚは観測されなかった。また、水溶液中にＢＴＰＰのｍ／ｚを観測した。

【０４８２】

酢酸エチル溶液を水（５ｍＬ）で洗浄後、硫酸ナトリウムで乾燥、ろ過後のろ液を減圧下濃縮した。得られた１３２．５ｍｇのワックス状の残渣から１０ｍｇをサンプリングして$DMSO-d_6$（７５０．０μＬ）で希釈し、^1H－ＮＭＲ測定を行い試薬残存量を確認した。結果を表４－６に示す。

【０４８３】

表４－６の液液分離濃縮体におけるモル比欄に示すように、５％硫酸水素カリウム水溶液で反応溶液の酢酸エチル溶液を洗浄することでＢＴＰＰの残存量をＢ－０９５に対しモル比０．０３倍程度まで減少させられることを確認した。一方、中性化合物であるリン酸トリエチルとＤＭＩはＢ－０９５に対しそれぞれモル比が３．５倍程度、０．２倍程度残存していることが観測された。

【０４８４】

液液分離後の^1H－ＮＭＲ測定を実施したサンプルを回収し、液液分離濃縮体に残存している中性化合物（リン酸トリエチルとＤＭＩ）を除去する目的で、遠心エバポレーター（Ｇｅｎｅｖａｃ社）（４０℃，低沸点溶媒の留去が終了したと検知されるまで５０－２００ｍｂａｒで減圧した後に、４０℃，＜０．５ｍｂａｒで１６時間）にて溶媒を減圧下留去し、Ｂ－０９５をワックス様固体物質として得た。得られた物質を$DMSO-d_6$に溶解し、^1H－ＮＭＲを測定することで試薬の残存について確認した。

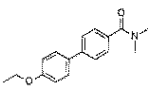
【０４８５】

濃縮処理後のワックス様固体物質から調製した^{1}Ｈ－ＮＭＲデータの解析結果を表４－６に示す。解析結果から、リン酸トリエチルは検出されず完全に除去できていることが確認できた。４－（４－エトキシフェニル）－Ｎ，Ｎ－ジメチルベンズアミド（Ｂ－０９５）に対してＢＴＰＰが０．０５倍程度のモル比で、またＤＭＩは０．１５倍程度のモル比で確認される程度にまで除去されていることが確認できた。

【０４８６】

［表４－６］

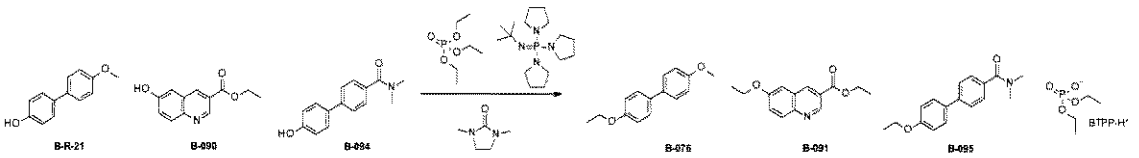
【表３６】

解析対象化合物	BTPP	Et_3PO_4	DM	B-095
解析対象化合物構造式				
解析対象ピーク(ppm)	1.722	4.000	3.199	7.454
解析対象ピーク形状、該当プロトン数	br-s、12H	qui.tet、6H	s、4H	d、2H
液液分離後濃縮体における積分値	0.32	21.21	0.83	2.00
液液分離後濃縮体におけるモル比	0.03	3.5	0.2	1.0
濃縮処理後における積分値	0.64	ND	0.62	2.00
濃縮処理後におけるモル比	0.05	ND	0.15	1.0

【０４８７】

<u>実施例４－２－３：複数の基質の混合物にてエチル化を行った際の液液分離および減圧留去による不溶試薬の除去</u>

【化８９】



【０４８８】

窒素置換されたグローブバッグ中、３．０ｍＬのスクリューキャップバイアルに、４－ヒドロキシ－４’－メトキシビフェニル（Ｂ－Ｒ－２１）（１４．０ｍｇ，７０．０μｍｏｌ，１．０当量）、エチル　６－ヒドロキシキノリン－３－カルボキシラート（Ｂ－０９０）（１５．０ｍｇ，７０．０μｍｏｌ，１．０当量）、４－（４－ヒドロキシフェニル）－Ｎ，Ｎ－ジメチルベンズアミド（Ｂ－０９４）（１７．０ｍｇ，７０．０μｍｏｌ，１．０当量）とＤＭＩ（１．０ｍＬ）を加えた。その溶液にＢＴＰＰ（３２１．０μＬ，１．０５ｍｍｏｌ，１５．０当量）を加え、混合を確認後、リン酸トリエチル（Ｂ－Ｒ－０５）（１７９．０μＬ，１．０５ｍｍｏｌ，１５．０当量）を加えた。得られた反応液を８０℃で２４時間撹拌させた。

【０４８９】

<u>反応追跡</u>

反応開始から２，２４時間経過時に、グローブバッグ中にて反応液を５μＬサンプリングしてCH_3CN（１０００μＬ）で希釈し、ＬＣサンプルを調製した。ＬＣＭＳ測定を行うことで反応進行度を測定した結果、２４時間経過時に原料の４－ヒドロキシ－４’－メトキシビフェニル（Ｂ－Ｒ－２１）が１．３ａｒｅａ％残存し、エチル６－ヒドロキシキノリン－３－カルボキシラート（Ｂ－０９０）と４－（４－ヒドロキシフェニル）－Ｎ，Ｎ－ジメチルベンズアミド（Ｂ－０９４）の消失を確認した。また、１－エトキシ－４－（４－メトキシフェニル）ベンゼン（Ｂ－０７６）が２４．１ａｒｅａ％、エチル　６－エトキシキノリン－３－カルボキシラート（Ｂ－０９１）が４９．５ａｒｅａ％、４－（４－エトキシフェニル）－Ｎ，Ｎ－ジメチルベンズアミド（Ｂ－０９５）が２３．１ａｒ

ｅａ％生成していることを確認した。

【０４９０】

エチル　６－エトキシキノリン－３－カルボキシラート：化合物Ｂ－０９１。

ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：２４６．１［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。

保持時間：１．０７６分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。

（原料ＡｒＯＨの保持時間は、０．７０８分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。

【０４９１】

液液分離

反応液を酢酸エチル（１５ｍＬ，ＤＭＩに対して１５倍量）で希釈しながら５０ｍＬ分液ロートに移し、反応に用いた塩基（ＢＴＰＰ）を酸性水溶液で洗浄除去する目的で５％硫酸水素カリウム水溶液（４ｍＬ，ＤＭＩに対して４倍量）を加えて液液分離を行った。水溶液を排出後、酢酸エチル溶液に対し５％硫酸水素カリウム水溶液（４ｍＬ，ＤＭＩに対して４倍量）を加えて洗浄による液液分離を５回繰り返した（合計６回洗浄）。

【０４９２】

６回洗浄後の酢酸エチル溶液から１００μＬサンプリングしてCH_3CN（７５０μＬ）で希釈し、ＬＣサンプルを調製した。６回目の洗浄水溶液から２００μＬサンプリングして水（８００μＬ）で希釈し、ＬＣサンプルを調製した。ＬＣＭＳ測定を行うことで酢酸エチル溶液中のＢＴＰＰの残存具合、ならびに水溶液中のＢＴＰＰの除去程度を測定した結果、有機溶液にはＢＴＰＰのｍ／ｚは観測されなかった。また、水溶液中にＢＴＰＰのｍ／ｚを観測した。

【０４９３】

酢酸エチル溶液を水（５ｍＬ）で洗浄後、硫酸ナトリウムで乾燥、ろ過後のろ液を減圧下濃縮した。得られた１９３．０ｍｇのワックス状固体の残渣から１０ｍｇをサンプリングして$DMSO-d_6$（７５０．０μＬ）で希釈し、^{1}H－ＮＭＲ測定を行い試薬残存量を確認した。結果を表４－７に示す。

表４－７の液液分離濃縮体におけるモル比欄に示すように、５％硫酸水素カリウム水溶液で反応溶液の酢酸エチル溶液を洗浄することでＢＴＰＰの残存量をＢ－０９１に対しモル比０．０５倍程度まで減少させられることを確認した。一方、中性化合物であるリン酸トリエチルとＤＭＩはＢ－０９１に対しそれぞれモル比が８．７倍程度、１．３倍程度残存していることが観測された。

【０４９４】

液液分離後の^{1}H－ＮＭＲ測定を実施したサンプルを回収し、液液分離濃縮体に残存している中性化合物（リン酸トリエチルとＤＭＩ）を除去する目的で、遠心エバポレーター（Ｇｅｎｅｖａｃ社）（４０℃，低沸点溶媒の留去が終了したと検知されるまで５０－２００ｍｂａｒで減圧した後に、４０℃，＜０．５ｍｂａｒで１６時間）にて溶媒を減圧下留去し、Ｂ－０７６、Ｂ－０９１とＢ－０９５の混合物をワックス様固体物質として得た。得られた物質を$DMSO-d_6$に溶解し、^{1}H－ＮＭＲを測定することで試薬の残存について確認した。

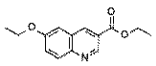
【０４９５】

濃縮処理後のワックス様固体物質から調製した^{1}H－ＮＭＲデータの解析結果を表４－７に示す。解析結果から、リン酸トリエチルは検出されず完全に除去できていることが確認できた。エチル　６－エトキシキノリン－３－カルボキシラート（Ｂ－０９１）に対してＢＴＰＰが０．０５倍程度のモル比で、またＤＭＩは１．０倍程度のモル比で確認される程度にまで除去されていることが確認できた。

【０４９６】

［表４－７］

【表３７】

解析対象化合物	BTPP	Et_3PO_4	DM	B-091
解析対象化合物構造式				
解析対象ピーク(ppm)	1.722	4.000	3.199	8.873
解析対象ピーク形状、該当プロトン数	br-s 12H	quintet 6H	s 4H	d 1H
液液分離後濃縮体における積分値	0.58	52.35	5.03	1.00
液液分離後濃縮体におけるモル比	0.05	8.7	1.3	1.0
濃縮処理後における積分値	0.56	ND	4.21	1.00
濃縮処理後におけるモル比	0.05	ND	1.05	1.0

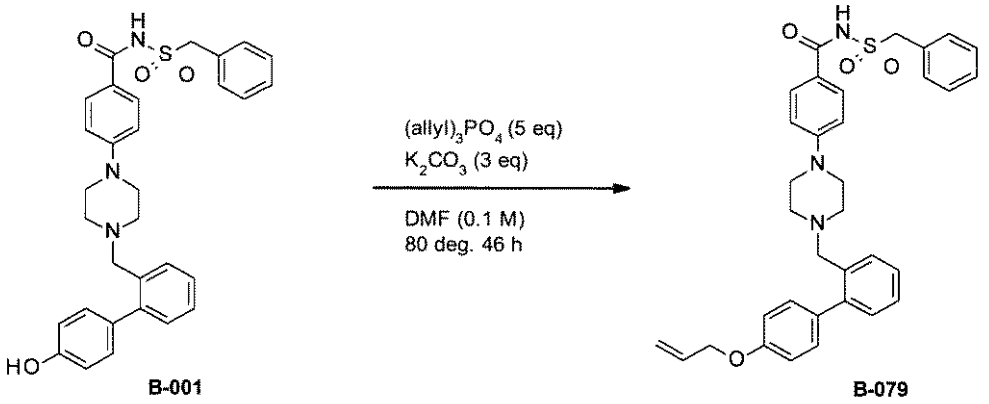
【０４９７】

以上のように、複数の基質の混合物にてエチル化を行った場合においても、有機溶媒で希釈後に酸性水溶液との液液分離利用および減圧留去を実施することで、不要試薬の除去が可能であることが例示された。本発明中のエチル化の方法は、残留試薬や試薬由来不純物の除去を適切に行うことが可能であり、混合物ライブラリの合成にも適用可能な方法であることが特定された。

【０４９８】

実施例５：分子中に複数の反応性官能基を有する基質に対するアレノールのＯ－選択的なアリル化検討

【化９０】



【０４９９】

窒素置換されたグローブバッグ中、０．６ｍＬのスクリューキャップバイアルに、Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［［２－（４－ヒドロキシフェニル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（Ｂ－００１）（２．７ｍｇ，５．０μｍｏｌ，１．０当量）とＤＭＦ（５０．０μＬ）を加えた。得られた溶液にK_2CO_3（２．１ｍｇ，１５．０μｍｏｌ，３．０当量）を加え１５～２０秒混合させた後に、リン酸トリアリル（５．１μＬ，２５．０μｍｏｌ，５．０当量）を加えた。得られた反応混合物を１４００ｒｐｍで８０℃で４６時間撹拌させた。

【０５００】

反応追跡

途中、反応開始から４６時間経過時に、グローブバッグ中にて反応液を５μＬサンプリングしてCH_3CN（１０００μＬ）で希釈し、ＬＣサンプルを調製した。ＬＣＭＳ測定を行うことで反応進行度を測定した。その結果、１００ａｒｅａ％のＮ－ベンジルスルホニル－４－［４－［［２－（４－プロプ－２－エノキシフェニル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド（化合物Ｂ－０７９）の生成を観測した。

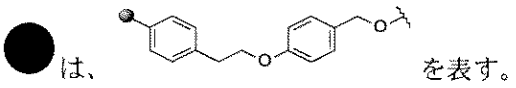
【０５０１】

Ｎ－ベンジルスルホニル－４－［４－［［２－（４－プロプ－２－エノキシフェニル）

フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］ベンズアミド：化合物Ｂ－０７９。
ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：５８２［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。
保持時間：０．６６分（分析条件ＳＱＤ－ＦＡ０５－２）。
（原料ＡｒＯＨの保持時間は、０．５５分（分析条件ＳＱＤ－ＦＡ０５－２）。
以上の結果より、複数の反応性官能基を有する基質に対するアレノールのＯ－選択的なアルキル化として、アリル化も適用可能であることが示された。

【０５０２】

実施例６：アレノールのＯ－選択的なエチル化法を用いた、官能基に多様性を有する化合物ライブラリの製造例

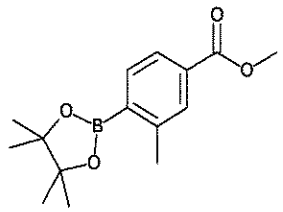
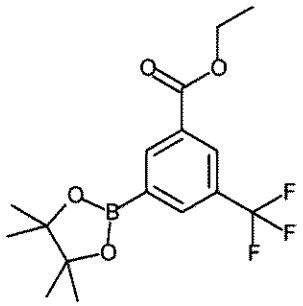
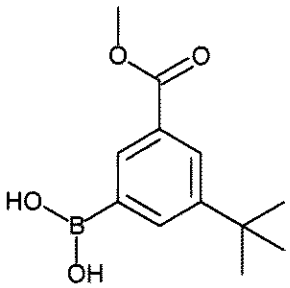
実施例６では、実施例２～５において得られた知見を活用し、種々の反応性官能基を有するアレノールに対して高選択的なエチル化を行い、カラムによる精製操作が不要な後処理を実施することで、官能基に多様性を有する化合物ライブラリの合成に適用した一例を示す。本発明の方法を用いて調製した化合物ライブラリが実用可能であることを例示するとともに、所望の化合物群が得られていることを実証する目的で、合成した混合物のＡＳ－ＭＳを用いたＢｃｌ－２に対する結合評価（実施例７）、ＡＳ－ＭＳにより同定されたＢｃｌ－２結合化合物の個別合成（実施例８）、個別合成した化合物の表面プラズモン共鳴（ＳＰＲ）によるＢｃｌ－２に対する結合評価（実施例９）を実施した。ライブラリに含まれる化合物を構成するコアブロックならびにリンカーについて図１に示す。
図１中において、
【化９１】


【０５０３】
図１に示したコアブロックならびにリンカーの組み合わせによる多様な化合物の中から、一例として１，２００化合物をライブラリ化合物として設定し、混合物ライブラリの合成を実施した。なお、本手法にて提供される混合物ライブラリがＡＳ－ＭＳでの評価時に適切に機能することを確認する目的で、このライブラリ化合物の中には、実施例８にて示した方法で事前に合成し、実施例９にて示すＳＰＲによる結合評価を行った４化合物、Ｂ２Ｑ０４５－０１（K_D＝１．２μＭ）、Ｂ２Ｑ０４６－０１（K_D＝８．１μＭ）、Ｂ２Ｒ０４５－０１（K_D＝＞２０μＭ）、Ｂ２Ｒ０４６－０１（K_D＝＞２０μＭ）を含ませるように設定した。事前に結合能を評価した化合物Ｂ２Ｑ０４５－０１、Ｂ２Ｑ０４６－０１、Ｂ２Ｒ０４５－０１、Ｂ２Ｒ０４６－０１は、公知文献（Ｅｘｐｅｒｔ Ｏｐｉｎｉｏｎ ｏｎ Ｄｒｕｇ Ｄｉｓｃｏｖｅｒｙ ２００８，３（９），１１２３－１１４３．Ｊ．Ｍｅｄ．Ｃｈｅｍ．２００８，５１，６９０２－６９１５．）により、Ｂｃｌ－２に対する結合能を維持すると推測された化合物であり、実際に結合が確認できた。

【０５０４】
ライブラリ合成にあたっては、各ビルディングブロックの導入後、すなわちリンカー形成反応後に、ビルディングブロック上に存在する反応性官能基の種類ごとに混合物を調製し、続くリンカー形成反応を実施する方法にて行った。
以下にその方法を示し、リンカーの多様性を有する混合物ライブラリ合成方法の一例として示す。
以下に示すライブラリ合成においては、［表ＬＢＢ０２］に示すビルディングブロックを使用した。

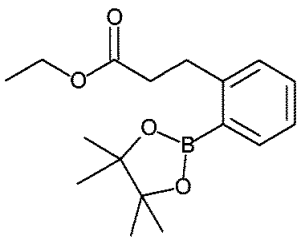
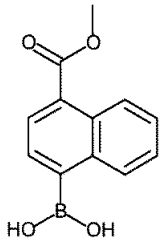
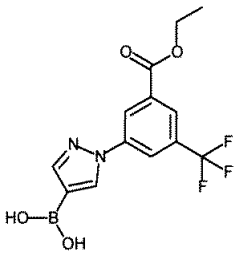
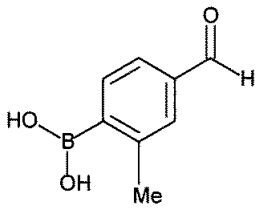
【０５０５】
［表ＬＢＢ０２］

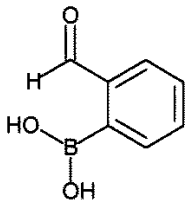
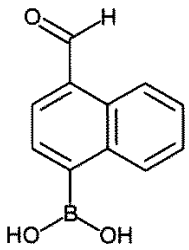
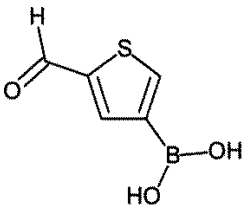
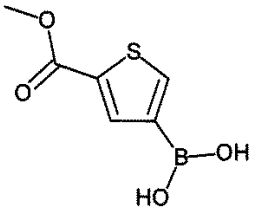
【表３８】

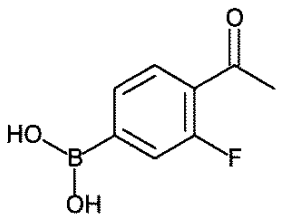
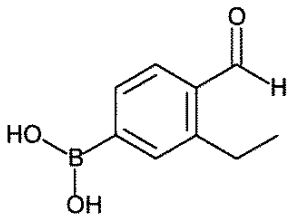
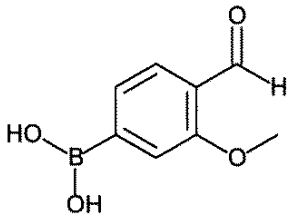
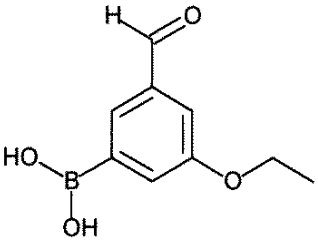
化合物番号	構造式	化合物名
BB01		３－メチル－４－（４，４，５，５－テトラメチル－１，３，２－ジオキサボロラン－２－イル）安息香酸メチル
BB02		エチル　３－（４，４，５，５－テトラメチル－１，３，２－ジオキサボロラン－２－イル）－５－（トリフルオロメチル）ベンゾアート
BB03		（３－ｔｅｒｔ－ブチル－５－メトキシカルボニルフェニル）ボロン酸

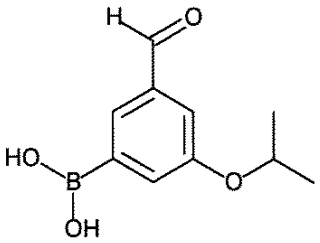
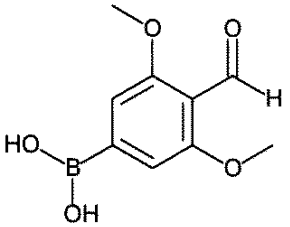
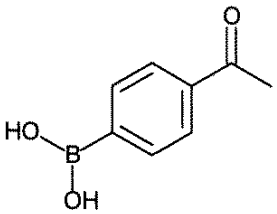
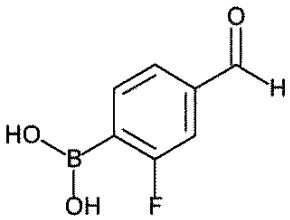
【０５０６】

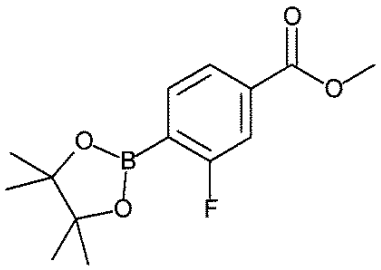
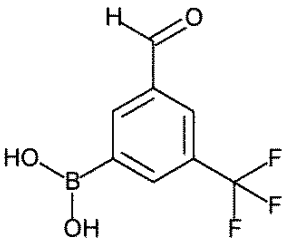
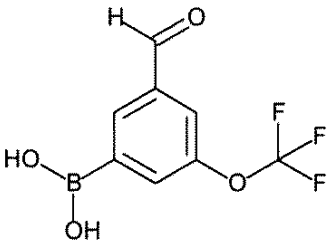
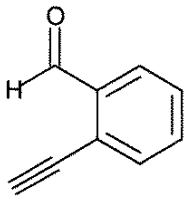
【表３８－１】

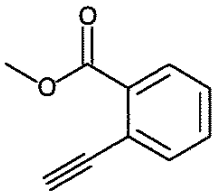
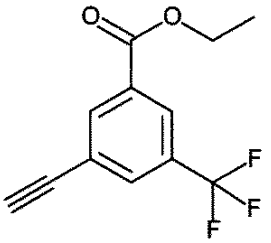
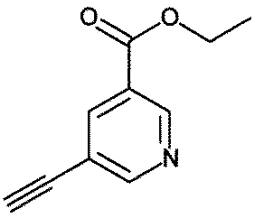
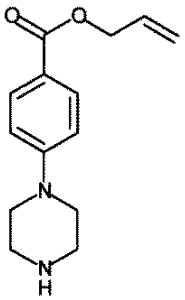
BB04		エチル　３－［２－（４，４，５，５－テトラメチル－１，３，２－ジオキサボロラン－２－イル）フェニル］プロパノアート
BB05		（４－メトキシカルボニルナフタレン－１－イル）ボロン酸
BB06		{１－［３－エトキシカルボニル－５－（トリフルオロメチル）フェニル］ピラゾール－４－イル}ボロン酸
BB07		（４－ホルミル－２－メチルフェニル）ボロン酸

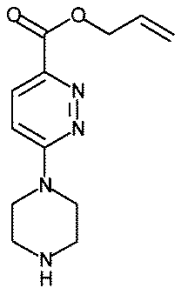
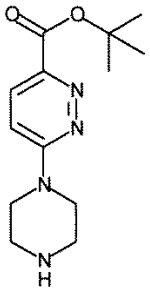
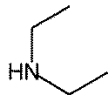
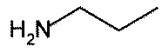
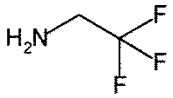
BB08		（２－ホルミルフェニル）ボロン酸
BB09		（４－ホルミルナフタレン－１－イル）ボロン酸
BB10		(5-ホルミルチオフェン-3-イル)ボロン酸
BB11		(5-(メトキシカルボニル)チオフェン-3-イル)ボロン酸

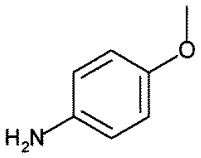
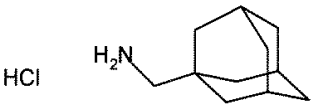
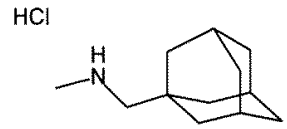
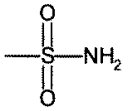
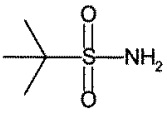
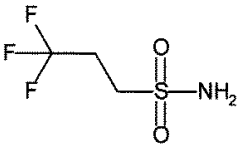
BB12		（４－アセチル－３－フルオロフェニル）ボロン酸
BB13		（３－エチル－４－ホルミルフェニル）ボロン酸
BB14		（４－ホルミル－３－メトキシフェニル）ボロン酸
BB15		（３－エトキシ－５－ホルミルフェニル）ボロン酸

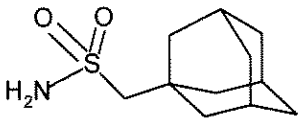
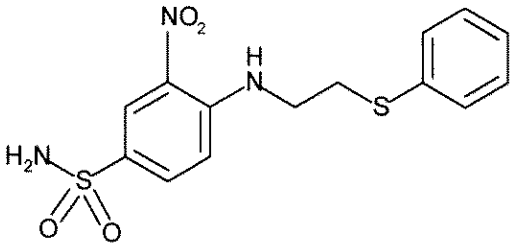
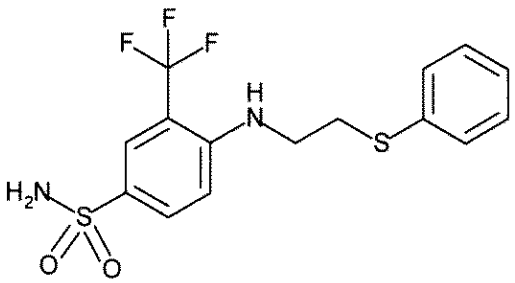
BB16		（３－ホルミル－５－プロパン－２－イルオキシフェニル）ボロン酸
BB17		（４－ホルミル－３，５－ジメトキシフェニル）ボロン酸
BB18		（４－アセチルフェニル）ボロン酸
BB19		（２－フルオロ－４－ホルミルフェニル）ボロン酸

BB20		３－フルオロ－４－（４，４，５，５－テトラメチル－１，３，２－ジオキサボロラン－２－イル）安息香酸メチル
BB21		［３－ホルミル－５－（トリフルオロメチル）フェニル］ボロン酸
BB22		［３－ホルミル－５－（トリフルオロメトキシ）フェニル］ボロン酸
BB23		２－エチニルベンズアルデヒド

BB24		メチル　２－エチニルベンゾアート
BB25		エチル　３－エチニル－５－（トリフルオロメチル）ベンゾアート
BB26		エチル　５－エチニルピリジン－３－カルボキシラート
BB27		４－（ピペラジン－１－イル）安息香酸アリル

BB28		６－（ピペラジン－１－イル）ピリダジン－３－カルボン酸アリル
BB29		６－（ピペラジン－１－イル）ピリダジン－３－カルボン酸ｔｅｒｔ－ブチル
BB30		Ｎ－エチルエタンアミン
BB31		プロパン－１－アミン
BB32		２，２，２－トリフルオロエタンアミン

BB33		４－メトキシアニリン
BB34		１－アダマンチルメタンアミン塩酸塩
BB35		１－（１－アダマンチル）－Ｎ－メチルメタンアミン塩酸塩
BB36		メタンスルホンアミド
BB37		２－メチルプロパン－２－スルホンアミド
BB38		３，３，３－トリフルオロプロパン－１－スルホンアミド

BB40		１－アダマンチルメタンスルホンアミド
BB41		３－ニトロ－４－｛［２－（フェニルチオ）エチル］アミノ｝ベンゼンスルホンアミド
BB42		４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）－３－（トリフルオロメチル）ベンゼンスルホンアミド

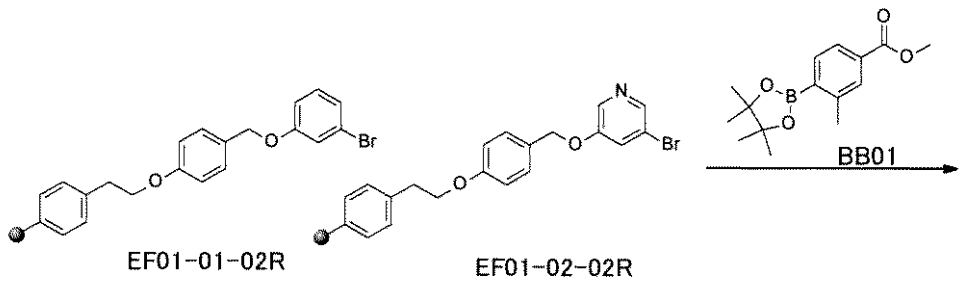
【０５０７】

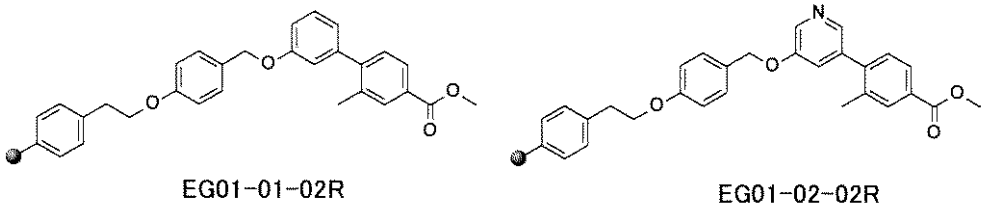
本実施例６において、臭素化修飾Ｗａｎｇレジン：４－（ブロモメチル）フェノキシエチルポリスチレン、例えば、Ｍｅｒｃｋ社、２－（４－ブロモメチルフェノキシエチルポリスチレンに対して、担持した化合物を使用し、固相に担持された化合物の化合物番号の末尾に「－０２Ｒ」を表記した。実施例６中の表において、固相担持された化合物における変換の反応においても切り出し後の化合物名のみを表記していることもあり、「－０２Ｒ」を除いた化合物番号で表記していることもある。

【０５０８】

実施例６－１－１－Ａ：混合物ｍｉｘＥＧ０１－０２Ｒ～ｍｉｘＥＧ０４－０２Ｒ，ｍｉｘＥＧ１８－０２Ｒの合成

【化９２】





【０５０９】

窒素雰囲気下、４ｍＬのガラスバイアルに化合物ＥＦ０１－０１－０２Ｒ（５７ｍｇ，担持量０．５５６ｍｍｏｌ／ｇ，０．０３２ｍｍｏｌ）と化合物ＥＦ０１－０２－０２Ｒ（４３ｍｇ，担持量０．７３３ｍｍｏｌ／ｇ，０．０３２ｍｍｏｌ）、ＮＭＰ（１．９５ｍＬ）を加え室温で１時間振とうした。窒素雰囲気下、３－メチル－４－（４，４，５，５－テトラメチル－１，３，２－ジオキサボロラン－２－イル）安息香酸メチル（ＢＢ０１）（１０７ｍｇ，０．３８７ｍｍｏｌ）、K_3PO_4水溶液（１．７Ｍ，２２８μＬ，０．３８７ｍｍｏｌ）、Ｐ（Ｃｙ）$_3$Ｐｄ　Ｇ３のＮＭＰ溶液（０．０４Ｍ，３２３μＬ，１３μｍｏｌ）を加え、９０℃で２０時間振とうした。反応液とレジンの懸濁液をＮＭＰを使用してフィルター付きシリンジに移し、ＮＭＰ（２ｍＬ）で３回、ＮＡＣ（１０ｍｇ／ｍＬ）入りＮＭＰ：水（１：１）溶液（２ｍＬ）で３回、水（２ｍＬ）で３回、ＭｅＯＨ（２ｍＬ）で３回、ＤＣＭ（２ｍＬ）で３回、ヘプタン（２ｍＬ）で３回繰り返して洗浄した後に減圧下でレジンを乾燥し、［表ＥＧ０１］に示した標題化合物を得た。用いたビルディングブロックと得られた混合物に含まれる化合物について［表ＥＧ０１］に示す。

【０５１０】

１．７ＭのK_3PO_4水溶液は、窒素雰囲気下、５ｍＬのメスフラスコを使用し、K_3PO_4（１．８ｇ，８．４８ｍｍｏｌ）を蒸留水でメスアップして調製した。

０．０４ＭのＰ（Ｃｙ）$_3$Ｐｄ　Ｇ３のＮＭＰ溶液は、窒素雰囲気下、２ｍＬのガラスバイアルにＰ（Ｃｙ）$_3$Ｐｄ　Ｇ３（２６ｍｇ，０．０４ｍｍｏｌ）にＮＭＰ（１ｍＬ）を加えて振とうすることで溶解し調製した。

【０５１１】

実施例６－１－１－Ｂ：混合物ｍｉｘＥＧ０２－０２Ｒ～ｍｉｘＥＧ０４－０２Ｒ，ｍｉｘＥＧ１８－０２Ｒの合成

化合物ＥＦ０１－０１－０２Ｒ（５７ｍｇ，担持量０．５５６ｍｍｏｌ／ｇ，０．０３２ｍｍｏｌ）と化合物ＥＦ０１－０２－０２Ｒ（４３ｍｇ，担持量０．７３３ｍｍｏｌ／ｇ，０．０３２ｍｍｏｌ）と［表ＬＢＢ０２］に示したボロン酸またはボロン酸エステル試薬（ＢＢ０２～０４，１８）を用いて、実施例６－１－１－Ａと同様の方法［表ＥＧ０１］に示した標題化合物を合成した。用いたビルディングブロックと得られた混合物に含まれる化合物、反応時間について［表ＥＧ０１］に示す。

【０５１２】

［表ＥＧ０１］

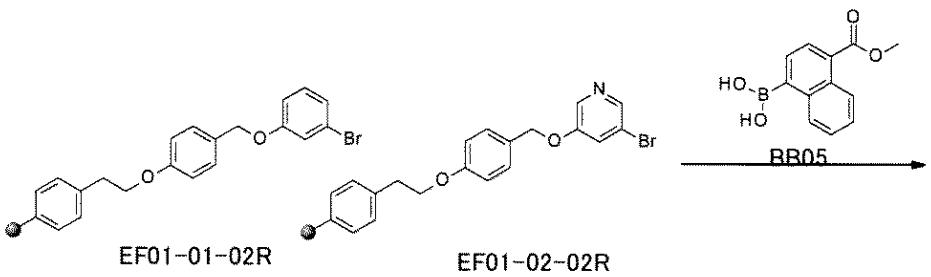
【表３９】

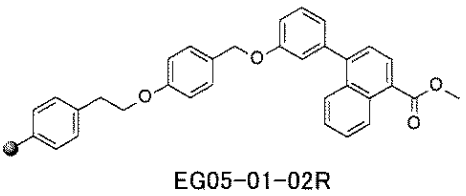
使用したBBの番号	合成した混合物の番号	レジン化合物番号	切り出し後の混合物の番号	切り出し後の化合物番号	化合物名	反応時間（時間）
BB01	mixEG01-02R	EG01-01-02R	mixEG01	EG01-01	メチル 4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルベンゾアト	20
		EG01-02-02R		EG01-02	メチル 4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾアト	
BB02	mixEG02-02R	EG01-03-02R	mixEG02	EG01-03	エチル 3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾアト	20
		EG01-04-02R		EG01-04	エチル 3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾアト	
BB03	mixEG03-02R	EG01-05-02R	mixEG03	EG01-05	メチル 3-tert-ブチル-5-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾアト	20
		EG01-06-02R		EG01-06	メチル 3-tert-ブチル-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾアト	
BB04	mixEG04-02R	EG01-07-02R	mixEG04	EG01-07	エチル 3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]プロパノエート	20
		EG01-08-02R		EG01-08	エチル 3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノエート	
BB18	mixEG18-02R	EG01-09-02R	mixEG18	EG01-09	1-[4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]エタノン	20
		EG01-10-02R		EG01-10	1-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]エタノン	

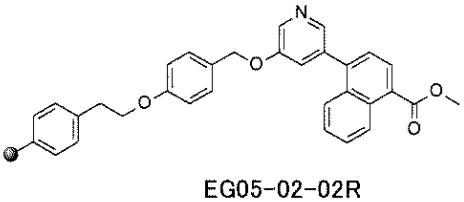
【０５１３】

実施例６－１－２－Ａ：混合物ｍｉｘＥＧ０５－０２Ｒの合成

【化９３】







【０５１４】

窒素雰囲気下、４ｍＬのガラスバイアルに化合物ＥＦ０１－０１－０２Ｒ（５７ｍｇ，担持量０．５５６ｍｍｏｌ／ｇ，０．０３２ｍｍｏｌ）と化合物ＥＦ０１－０２－０２Ｒ（４３ｍｇ，担持量０．７３３ｍｍｏｌ／ｇ，０．０３２ｍｍｏｌ）、ＮＭＰ（１．９５ｍＬ）を加え室温で１時間振とうした。窒素雰囲気下、（４－メトキシカルボニルナフタレン－１－イル）ボロン酸（ＢＢ０５）（１７８ｍｇ，０．７７４ｍｍｏｌ）、K_3PO_4

水溶液（１．７Ｍ，２２８μＬ，０．３８７ｍｍｏｌ）、Ｐ（Ｃｙ）$_3$Ｐｄ　Ｇ３のＮＭＰ溶液（０．０４Ｍ，３２３μＬ，１３μｍｏｌ）を加え、９０℃で２０時間振とうした。反応液とレジンの懸濁液をＮＭＰを使用してフィルター付きシリンジに移し、ＮＭＰ（２ｍＬ）で３回、ＮＡＣ（１０ｍｇ／ｍＬ）入りＮＭＰ：水（１：１）溶液（２ｍＬ）で３回、水（２ｍＬ）で３回、ＭｅＯＨ（２ｍＬ）で３回、ＤＣＭ（２ｍＬ）で３回、ヘプタン（２ｍＬ）で３回繰り返して洗浄した後に減圧下でレジンを乾燥し、［表ＥＧ０５］に示した標題化合物を得た。用いたビルディングブロックと得られた混合物に含まれる化合物、反応時間について［表ＥＧ０５］に示す。

【０５１５】

実施例６－１－２－Ｂ：混合物ｍｉｘＥＧ０６－０２Ｒの合成

化合物ＥＦ０１－０１－０２Ｒ（５７ｍｇ，担持量０．５５６ｍｍｏｌ／ｇ，０．０３２ｍｍｏｌ）と化合物ＥＦ０１－０２－０２Ｒ（４３ｍｇ，担持量０．７３３ｍｍｏｌ／ｇ，０．０３２ｍｍｏｌ）と［表ＬＢＢ０２］に示した［１－［３－エトキシカルボニル－５－（トリフルオロメチル）フェニル］ピラゾル－４－イル］ボロン酸（ＢＢ０６）を用いて、実施例６－１－２－Ａと同様の方法で［表ＥＧ０５］に示した標題化合物を合成した。用いたビルディングブロックと得られた混合物に含まれる化合物、反応時間について［表ＥＧ０５］に示す。

【０５１６】

［表ＥＧ０５］

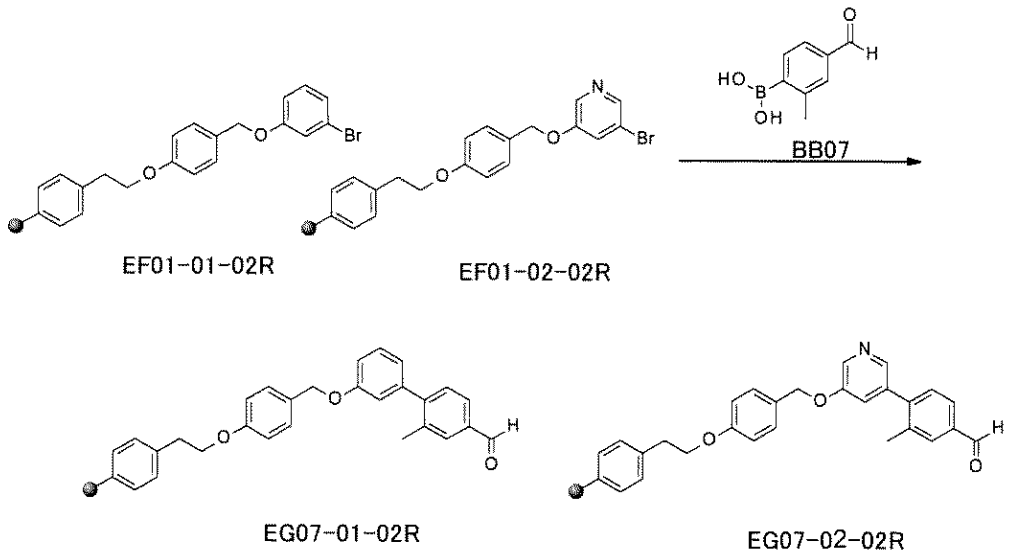
【表４０】

使用したBBの番号	合成した混合物の番号	レジン化合物番号	切り出し後の混合物の番号	切り出し後の化合物番号	化合物名	反応時間(時間)
BB05	mixEG05-02R	EG05-01-02R	mixEG05	EG05-01	メチル 4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-カルボキシラート	20
		EG05-02-02R		EG05-02	メチル 4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボキシラート	
BB06	mixEG06-02R	EG05-03-02R	mixEG06	EG05-03	エチル 3-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾアト	20
		EG05-04-02R		EG05-04	エチル 3-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾアト	

【０５１７】

実施例６－１－３－Ａ：混合物ｍｉｘＥＧ０７－０２Ｒの合成

【化９４】



【０５１８】

窒素雰囲気下、３ｍＬのガラスバイアルに化合物ＥＦ０１－０１－０２Ｒ（５７ｍｇ，担持量０．５５６ｍｍｏｌ／ｇ，０．０３２ｍｍｏｌ）と化合物ＥＦ０１－０２－０２Ｒ（４３ｍｇ，担持量０．７３３ｍｍｏｌ／ｇ，０．０３２ｍｍｏｌ）、ＮＭＰ（１．４ｍＬ）と水（７２μＬ）を加え室温で１時間振とうした。窒素雰囲気下、（４－ホルミル－２－メチルフェニル）ボロン酸（ＢＢ０７）（６３．５ｍｇ，０．３８７ｍｍｏｌ）、Na_2CO_3（４１ｍｇ，０．３８７ｍｍｏｌ）、Ｐ（Ｃｙ）$_3$Ｐｄ　Ｇ３のＮＭＰ溶液（０．０４Ｍ，３２３μＬ，１３μｍｏｌ）を加え、９０℃で２１時間振とうした。反応液とレジンの懸濁液をＮＭＰを使用してフィルター付きシリンジに移し、ＮＭＰ（２ｍＬ）で３回、ＮＡＣ（１０ｍｇ／ｍＬ）入りＮＭＰ：水（１：１）溶液（２ｍＬ）で３回、水（２ｍＬ）で３回、ＭｅＯＨ（２ｍＬ）で３回、ＤＣＭ（２ｍＬ）で３回、ヘプタン（２ｍＬ）で３回繰り返して洗浄した後に減圧下でレジンを乾燥し、［表ＥＧ０７］に示した標題化合物を得た。用いたビルディングブロックと得られた混合物に含まれる化合物、反応時間について［表ＥＧ０７］に示す。

【０５１９】

実施例６－１－３－Ｂ：混合物ｍｉｘＥＧ０８－０２Ｒ～ｍｉｘＥＧ１７－０２Ｒの合成

化合物ＥＦ０１－０１－０２Ｒ（５７ｍｇ，担持量０．５５６ｍｍｏｌ／ｇ，０．０３２ｍｍｏｌ）、化合物ＥＦ０１－０２－０２Ｒ（４３ｍｇ，担持量０．７３３ｍｍｏｌ／ｇ，０．０３２ｍｍｏｌ）と［表ＬＢＢ０２］に示したボロン酸またはボロン酸エステル試薬（ＢＢ０８～１７）を用いて、実施例６－１－３－Ａと同様の方法で［表ＥＧ０７］に示した標題混合物を合成した。用いたビルディングブロックと得られた混合物に含まれる化合物、反応時間について［表ＥＧ０７］に示す。

【０５２０】

［表ＥＧ０７］

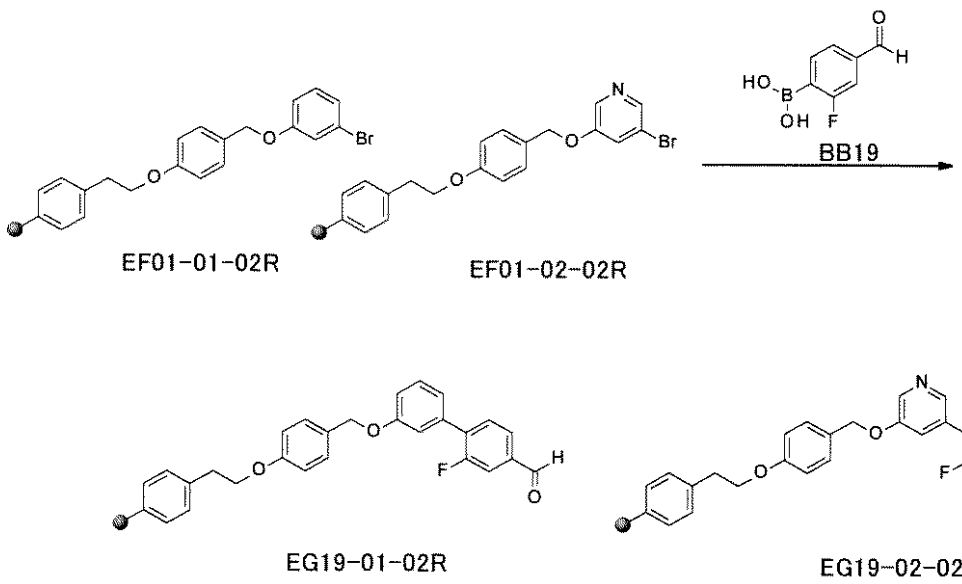
【表４１】

使用したBBの番号	合成した混合物の番号	レジン化合物番号	切り出し後の混合物の番号	切り出し後の化合物番号	化合物名	反応時間(時間)
BB07	mixEG07-02R	EG07-0102R	mixEG07	EG07-01	4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルベンズアルデヒド	21
		EG07-0202R		EG07-02	4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンズアルデヒド	
BB08	mixEG08-02R	EG07-0302R	mixEG08	EG07-03	2-(3-ヒドロキシフェニル)ベンズアルデヒド	21
		EG07-0402R		EG07-04	2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンズアルデヒド	
BB09	mixEG09-02R	EG07-0502R	mixEG09	EG07-05	4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-カルバルデヒド	21
		EG07-0602R		EG07-06	4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルバルデヒド	
BB10	mixEG10-02R	EG07-0702R	mixEG10	EG07-07	4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-カルバルデヒド	21
		EG07-0802R		EG07-08	4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルバルデヒド	
BB11	mixEG11-02R	EG07-0902R	mixEG11	EG07-09	メチル 4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-カルボキシラート	21
		EG07-1002R		EG07-10	メチル 4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボキシラート	
BB12	mixEG12-02R	EG07-1102R	mixEG12	EG07-11	1-[2-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]エタノン	27
		EG07-1202R		EG07-12	1-[2-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]エタノン	
BB13	mixEG13-02R	EG07-1302R	mixEG13	EG07-13	2-エチル-4-(3-ヒドロキシフェニル)ベンズアルデヒド	66
		EG07-1402R		EG07-14	2-エチル-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンズアルデヒド	
BB14	mixEG14-02R	EG07-1502R	mixEG14	EG07-15	4-(3-ヒドロキシフェニル)-2-メトキシベンズアルデヒド	66
		EG07-1602R		EG07-16	4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2-メトキシベンズアルデヒド	
BB15	mixEG15-02R	EG07-1702R	mixEG15	EG07-17	3-エトキシ-5-(3-ヒドロキシフェニル)ベンズアルデヒド	66
		EG07-1802R		EG07-18	3-エトキシ-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンズアルデヒド	
BB16	mixEG16-02R	EG07-1902R	mixEG16	EG07-19	3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシベンズアルデヒド	66
		EG07-2002R		EG07-20	3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシベンズアルデヒド	
BB17	mixEG17-02R	EG07-2102R	mixEG17	EG07-21	4-(3-ヒドロキシフェニル)-2,6-ジメトキシベンズアルデヒド	66
		EG07-2202R		EG07-22	4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシベンズアルデヒド	

【０５２１】

実施例６－１－４－Ａ：混合物ｍｉｘＥＧ１９－０２Ｒの合成

【化９５】



【０５２２】

窒素雰囲気下、４ｍＬのガラスバイアルに化合物ＥＦ０１－０１－０２Ｒ（５７ｍｇ，担持量０．５５６ｍｍｏｌ／ｇ，０．０３２ｍｍｏｌ）と化合物ＥＦ０１－０２－０２Ｒ（４３ｍｇ，担持量０．７３３ｍｍｏｌ／ｇ，０．０３２ｍｍｏｌ）、１，４－ジオキサン（１．８ｍＬ）を加え室温で１時間振とうした。窒素雰囲気下、（２－フルオロ－４－ホルミルフェニル）ボロン酸（ＢＢ１９）（６５ｍｇ，０．３８７ｍｍｏｌ）、K_3PO_4－H_2O（８９ｍｇ，０．３８７ｍｍｏｌ）、ピナコール（４５．７ｍｇ，０．３８７ｍｍｏｌ）、Ｐ（Ｃｙ）$_3$Ｐｄ　Ｇ３の１，４－ジオキサン溶液（０．０４Ｍ，３２３μＬ，１３μｍｏｌ）を加え、９０℃で２２時間振とうした。反応液とレジンの懸濁液をＮＭＰを使用してフィルター付きシリンジに移し、ＮＭＰ（２ｍＬ）で３回、ＮＡＣ（１０ｍｇ／ｍＬ）入りＮＭＰ：水（１：１）溶液（２ｍＬ）で３回、水（２ｍＬ）で３回、ＭｅＯＨ（２ｍＬ）で３回、ＤＣＭ（２ｍＬ）で３回、ヘプタン（２ｍＬ）で３回繰り返して洗浄した後に減圧下でレジンを乾燥し、［表ＥＧ１９］に示した標題化合物を得た。用いたビルディングブロックと得られた混合物に含まれる化合物、反応時間について［表ＥＧ１９］に示す。

【０５２３】

０．０４ＭのＰ（Ｃｙ）$_3$Ｐｄ　Ｇ３の１，４－ジオキサン溶液は、窒素雰囲気下、２ｍＬのガラスバイアルにＰ（Ｃｙ）$_3$Ｐｄ　Ｇ３（２６ｍｇ，０．０４ｍｍｏｌ）に１，４－ジオキサン（１ｍＬ）を加えて振とうすることで溶解し調製した。

【０５２４】

実施例６－１－４－Ｂ：混合物ｍｉｘＥＧ２０－０２Ｒの合成

化合物ＥＦ０１－０１－０２Ｒ（５７ｍｇ，担持量０．５５６ｍｍｏｌ／ｇ，０．０３２ｍｍｏｌ）、化合物ＥＦ０１－０２－０２Ｒ（４３ｍｇ，担持量０．７３３ｍｍｏｌ／ｇ，０．０３２ｍｍｏｌ）と［表ＬＢＢ０２］に示した３－フルオロ－４－（４，４，５，５－テトラメチル－１，３，２－ジオキサボロラン－２－イル）安息香酸メチル（ＢＢ２０）を用いて、実施例６－１－４－Ａと同様の方法で［表ＥＧ１９］に示した標題化合物を合成した。用いたビルディングブロックと得られた混合物に含まれる化合物、反応時間について［表ＥＧ１９］に示す。

【０５２５】

［表ＥＧ１９］

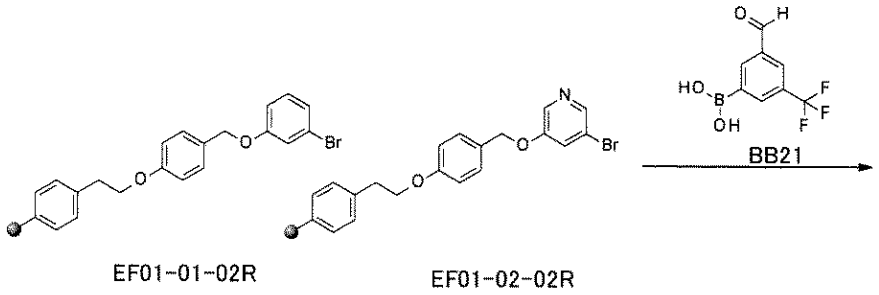
【表４２】

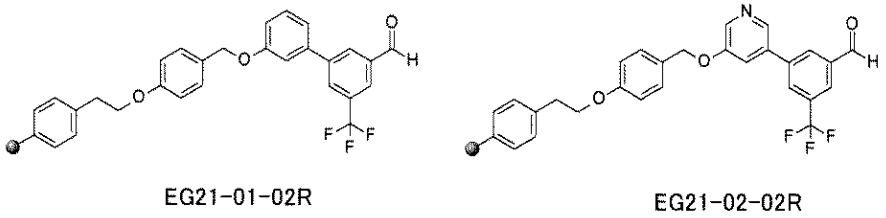
使用したBBの番号	合成した混合物の番号	レジン化合物番号	切り出し後の混合物の番号	切り出し後の化合物番号	化合物名	反応時間（時間）
BB19	mixEG19-02R	EG19-01-02R	mixEG19	EG19-01	3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)ベンズアルデヒド	22
		EG19-02-02R		EG19-02	3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンズアルデヒド	
BB20	mixEG20-02R	EG19-03-02R	mixEG20	EG19-03	メチル 3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾアト	22
		EG19-04-02R		EG19-04	メチル 3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾアト	

【０５２６】

実施例６－１－５：混合物ｍｉｘＥＧ２１－０２Ｒの合成

【化９６】





【０５２７】

窒素雰囲気下、４ｍＬのガラスバイアルに化合物ＥＦ０１－０１－０２Ｒ（５７ｍｇ，担持量０．５５６ｍｍｏｌ／ｇ，０．０３２ｍｍｏｌ）、化合物ＥＦ０１－０２－０２Ｒ（４３ｍｇ，担持量０．７３３ｍｍｏｌ／ｇ，０．０３２ｍｍｏｌ）と４－ＭｅＴＨＰ（１．８ｍＬ）を加え室温で１時間振とうした。窒素雰囲気下、［３－ホルミル－５－（トリフルオロメチル）フェニル］ボロン酸（ＢＢ２１）（８４ｍｇ，０．３８７ｍｍｏｌ）、Na_2CO_3（４１ｍｇ，０．３８７ｍｍｏｌ）、０．０４Ｍ Ｐ（Ｃｙ）$_3$Ｐｄ Ｇ３の４－ＭｅＴＨＰ溶液（３２３μＬ，１３μｍｏｌ）と水（７５μＬ，４．１６ｍｍｏｌ）を加え、９０℃で２２時間振とうした。反応液とレジンの懸濁液をＮＭＰを使用してフィルター付きシリンジに移し、ＮＭＰ（２ｍＬ）で３回、ＮＡＣ（１０ｍｇ／ｍＬ）入りＮＭＰ：水（１：１）溶液（２ｍＬ）で３回、水（２ｍＬ）で３回、ＭｅＯＨ（２ｍＬ）で３回、ＤＣＭ（２ｍＬ）で３回、ヘプタン（２ｍＬ）で３回繰り返して洗浄した後に減圧下でレジンを乾燥し、［表ＥＧ２１］に示した標題混合物ｍｉｘＥＧ２１－０２Ｒを得た。用いたビルディングブロックと得られた混合物に含まれる化合物、反応時間について［表ＥＧ２１］に示す。

【０５２８】
０．０４ＭのＰ（Ｃｙ）$_3$Ｐｄ　Ｇ３の４－ＭｅＴＨＰ溶液は、窒素雰囲気下、２ｍＬのガラスバイアルにＰ（Ｃｙ）$_3$Ｐｄ　Ｇ３（２６ｍｇ，０．０４ｍｍｏｌ）に４－ＭｅＴＨＰ（１ｍＬ）を加えて振とうすることで溶解し調製した。
【０５２９】
［表ＥＧ２１］
【表４３】

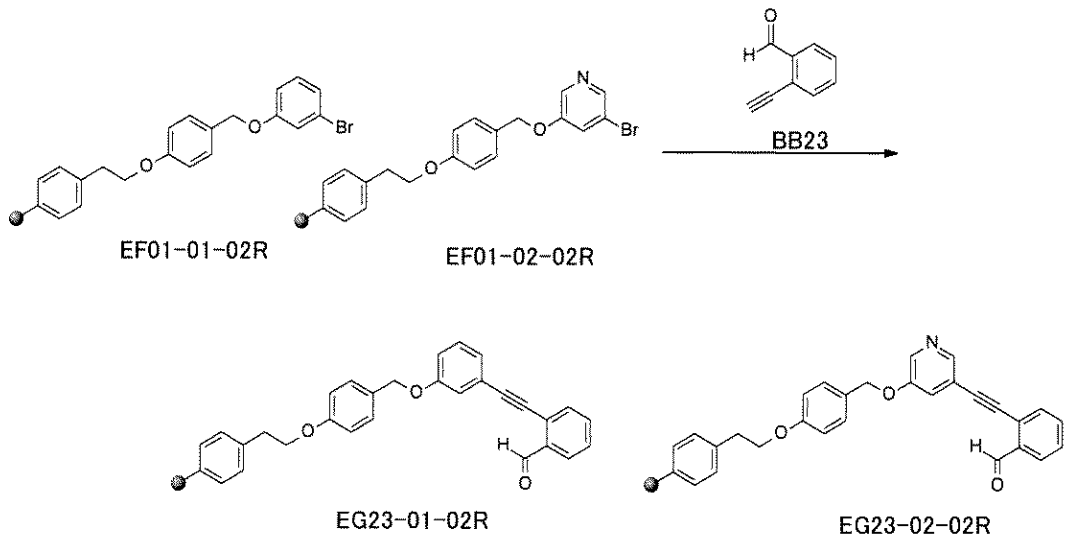
使用したBBの番号	合成した混合物の番号	レジン化合物番号	切り出し後の混合物の番号	切り出し後の化合物番号	化合物名	反応時間（時間）
BB21	mixEG21-02R	EG21-01-02R	mixEG21	EG21-01	3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンズアルデヒド	22
		EG21-02-02R		EG21-02	3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンズアルデヒド	

【０５３０】
実施例６－１－６：混合物ｍｉｘＥＧ２２－０２Ｒの合成
化合物ＥＦ０１－０１－０２Ｒ（５７ｍｇ，担持量０．５５６ｍｍｏｌ／ｇ，０．０３２ｍｍｏｌ）、化合物ＥＦ０１－０２－０２Ｒ（４３ｍｇ，担持量０．７３３ｍｍｏｌ／ｇ，０．０３２ｍｍｏｌ）と［表ＬＢＢ０２］に示したボロン酸試薬（ＢＢ２２）を用いて、実施例６－１－５と同様の方法で合成し、［表ＥＧ２２］に示した標題混合物ｍｉｘＥＧ２２－０２Ｒを得た。用いたビルディングブロックと得られた混合物に含まれる化合物、反応時間について［表ＥＧ２２］に示す。
［表ＥＧ２２］
【表４４】

使用したBBの番号	合成した混合物の番号	レジン化合物番号	切り出し後の混合物の番号	切り出し後の化合物番号	化合物名	反応時間（時間）
BB22	mixEG22-02R	EG21-03-02R	mixEG22	EG21-03	3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)ベンズアルデヒド	22
		EG21-04-02R		EG21-04	3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)ベンズアルデヒド	

【０５３１】
実施例６－１－７－Ａ：混合物ｍｉｘＥＧ２３－０２Ｒの合成

【化９７】



【０５３２】

窒素雰囲気下、３ｍＬのガラスバイアルに化合物ＥＦ０１－０１－０２Ｒ（５７ｍｇ，担持量０．５５６ｍｍｏｌ／ｇ，０．０３２ｍｍｏｌ）と化合物ＥＦ０１－０２－０２Ｒ（４３ｍｇ，担持量０．７３３ｍｍｏｌ／ｇ，０．０３２ｍｍｏｌ）、ＮＭＰ（１．１１ｍＬ）とジイソプロピルアミン（１８８μＬ）を加え室温で１時間振とうした。窒素雰囲気下、２－エチニルベンズアルデヒド（ＢＢ２３）（１７４ｍｇ，１．３４ｍｍｏｌ）、ＸＰｈｏｓ　Ｐｄ　Ｇ４（０．１Ｍ，２００μＬ，２０μｍｏｌ）のＮＭＰ溶液を加えた後、８０℃で３９時間振とうした。反応液とレジンの懸濁液をＮＭＰを使用してフィルター付きシリンジに移し、ＮＭＰ（２ｍＬ）で３回、ＮＡＣ（１０ｍｇ／ｍＬ）入りＮＭＰ：水（１：１）溶液（２ｍＬ）で３回、水（２ｍＬ）で３回、ＭｅＯＨ（２ｍＬ）で３回、ＤＣＭ（２ｍＬ）で３回、ヘプタン（２ｍＬ）で３回繰り返して洗浄した後に減圧下でレジンを乾燥し、［表ＥＧ２３］に示した標題化合物を得た。用いたビルディングブロックと得られた混合物に含まれる化合物について［表ＥＧ２３］に示す。

０．１ＭのＸＰｈｏｓ　Ｐｄ　Ｇ４のＮＭＰ溶液は、窒素雰囲気下、３ｍＬのガラスバイアルにＸＰｈｏｓ　Ｐｄ　Ｇ４（８６ｍｇ，０．１ｍｍｏｌ）にＮＭＰ（１ｍＬ）を加えて振とうすることで溶解し調製した。

【０５３３】

実施例６－１－７－Ｂ：混合物ｍｉｘＥＧ２４－０２Ｒ～ｍｉｘＥＧ２６－０２Ｒの合成

化合物ＥＦ０１－０１－０２Ｒ（５７ｍｇ，担持量０．５５６ｍｍｏｌ／ｇ，０．０３２ｍｍｏｌ）、化合物ＥＦ０１－０２－０２Ｒ（４３ｍｇ，担持量０．７３３ｍｍｏｌ／ｇ，０．０３２ｍｍｏｌ）と［表ＬＢＢ０２］に示したアセチレン試薬（ＢＢ２３～２６）を用いて、実施例６－１－７－Ａと同様の方法で［表ＥＧ２３］に示した標題混合物を合成した。用いたビルディングブロックと得られた混合物に含まれる化合物、反応時間について［表ＥＧ２３］に示す。

【０５３４】

［表ＥＧ２３］

【表４５】

使用したBBの番号	合成した混合物の番号	レジン化合物番号	切り出し後の混合物の番号	切り出し後の化合物番号	化合物名	反応時間（時間）
BB23	mixEG23-02R	EG23-01-02R	mixEG23	EG23-01	2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ベンズアルデヒド	39
		EG23-02-02R		EG23-02	2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンズアルデヒド	
BB24	mixEG24-02R	EG23-03-02R	mixEG24	EG23-03	2-((3-ヒドロキシフェニル)エチニル)安息香酸メチル	22
		EG23-04-02R		EG23-04	2-((5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル)安息香酸メチル	
BB25	mixEG25-02R	EG23-05-02R	mixEG25	EG23-05	エチル 3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾアト	39
		EG23-06-02R		EG23-06	エチル 3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾアト	
BB26	mixEG26-02R	EG23-07-02R	mixEG26	EG23-07	エチル 5-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボキシラート	39
		EG23-08-02R		EG23-08	エチル 5-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボキシラート	

【０５３５】

実施例６－２－１：混合物ｍｉｘＥＨ０１－０２Ｒの合成

【化９８】



【０５３６】

窒素雰囲気下、１０ｍＬのガラスバイアルに［表ＥＧＨ０１］に示した混合物ｍｉｘＥＧＨ０１－０２Ｒ（２２０ｍｇ，担持量０．６５１ｍｍｏｌ／ｇ，０．１４３ｍｍｏｌ）、ＮＭＰ（５．３ｍＬ）とメタノール（１．３ｍＬ）を加え室温で１時間振とうした。５Ｍ水酸化ナトリウム水溶液（１９８μＬ，０．９９２ｍｍｏｌ）を加え室温で１７時間振とうした。反応液とレジンの懸濁液をＮＭＰを使用してフィルター付きシリンジに移し、ＮＭＰ（４ｍＬ）で３回、水（４ｍＬ）で３回、ＮＭＰ（４ｍＬ）で３回、ＨＯＡｔ／ＮＭＰ溶液（０．２Ｍ、４ｍＬ）で３回、ＮＭＰ（４ｍＬ）で３回、ＭｅＯＨ（４ｍＬ）で３回、ＤＣＭ（３ｍＬ）で３回、ヘプタン（４ｍＬ）で３回繰り返して洗浄した後に減圧下でレジンを乾燥し、［表ＥＨ０１］に示した標題の混合物（ｍｉｘＥＨ０１－０２Ｒ）を得た。得られた混合物に含まれる化合物について、［表ＥＨ０１］に示す。

【０５３７】

［表ＥＧＨ０１］：混合物ｍｉｘＥＧＨ０１－０２Ｒ

【表４６】

使用した混合物の番号	混合物の使用量(mg)	レジン化合物番号	切り出し後の化合物番号	化合物名
mixEG01-02R	20.7	EG01-01-02R	EG01-01	メチル 4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルベンゾアト
		EG01-02-02R	EG01-02	メチル 4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾアト
mixEG01-03R	20.0	EG01-03-02R	EG01-03	エチル 3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾアト
		EG01-04-02R	EG01-04	エチル 3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾアト
mixEG01-04R	20.4	EG01-05-02R	EG01-05	メチル 3-tert-ブチル-5-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾアト
		EG01-06-02R	EG01-06	メチル 3-tert-ブチル-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾアト
mixEG01-05R	20.3	EG01-07-02R	EG01-07	エチル 3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]プロパノエート
		EG01-08-02R	EG01-08	エチル 3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノエート
mixEG01-06R	19.9	EG01-09-02R	EG01-09	メチル 4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-カルボキシラート
		EG01-10-02R	EG01-10	メチル 4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボキシラート
mixEG01-07R	20.3	EG01-11-02R	EG01-11	エチル 3-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾアト
		EG01-12-02R	EG01-12	エチル 3-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾアト
mixEG12-02R	20.0	EG08-09-02R	EG08-09	メチル 4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-カルボキシラート
		EG08-10-02R	EG08-10	メチル 4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボキシラート
mixEG20-02R	20.4	EG19-03-02R	EG19-03	メチル 3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾアト
		EG19-04-02R	EG19-04	メチル 3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾアト
mixEG24-02R	19.5	EG23-03-02R	EG23-03	2-((3-ヒドロキシフェニル)エチニル)安息香酸メチル
		EG23-04-02R	EG23-04	2-((5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル)安息香酸メチル
mixEG25-02R	19.5	EG23-05-02R	EG23-05	エチル 3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾアト
		EG23-06-02R	EG23-06	エチル 3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾアト
mixEG26-02R	19.4	EG23-07-02R	EG23-07	エチル 5-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボキシラート
		EG23-08-02R	EG23-08	エチル 5-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボキシラート

【０５３８】

［表ＥＨ０１］混合物番号：ｍｉｘＥＨ０１－０２Ｒ，切り出し後の混合物番号：ｍｉｘＥＨ０１

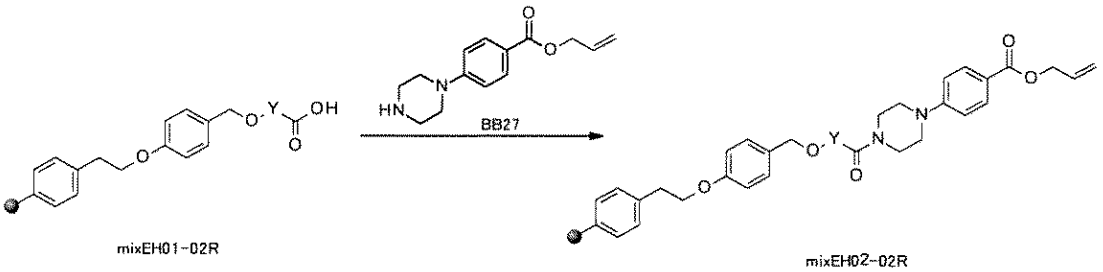
【表４７】

レジン化合物番号	切り出し後の化合物番号	化合物名
EH01-01-02R	EH01-01	4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-カルボン酸
EH01-02-02R	EH01-02	4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボン酸
EH01-03-02R	EH01-03	4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチル安息香酸
EH01-04-02R	EH01-04	4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチル安息香酸
EH01-05-02R	EH01-05	3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)安息香酸
EH01-06-02R	EH01-06	3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)安息香酸
EH01-07-02R	EH01-07	2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]安息香酸
EH01-08-02R	EH01-08	2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]安息香酸
EH01-09-02R	EH01-09	5-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボン酸
EH01-10-02R	EH01-10	5-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボン酸
EH01-11-02R	EH01-11	3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]プロパン酸
EH01-12-02R	EH01-12	3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパン酸
EH01-13-02R	EH01-13	4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-カルボン酸
EH01-14-02R	EH01-14	4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボン酸
EH01-15-02R	EH01-15	3-tert-ブチル-5-(3-ヒドロキシフェニル)安息香酸
EH01-16-02R	EH01-16	3-tert-ブチル-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)安息香酸
EH01-17-02R	EH01-17	3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)安息香酸
EH01-18-02R	EH01-18	3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)安息香酸
EH01-19-02R	EH01-19	3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)安息香酸
EH01-20-02R	EH01-20	3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)安息香酸
EH01-21-02R	EH01-21	3-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)安息香酸
EH01-22-02R	EH01-22	3-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)安息香酸

【０５３９】

実施例６－２－２：混合物ｍｉｘＥＨ０２－０２Ｒの合成

【化９９】



【０５４０】

窒素雰囲気下、８ｍＬのガラスバイアルに［表ＥＨ０１］に示した混合物ｍｉｘＥＨ０１－０２Ｒ（１７３ｍｇ，担持量０．６５１ｍｍｏｌ／ｇ，０．１１３ｍｍｏｌ）とＮＭＰ（４．４ｍＬ）を加え室温で１時間振とうした。４－（ピペラジン－１－イル）安息香酸アリル（ＢＢ２７，８３ｍｇ，０．３３９ｍｍｏｌ）、ＤＩＣ（１０６μＬ，０．６７７ｍｍｏｌ）とＨＯＡｔ（９２ｍｇ，０．６７７ｍｍｏｌ）を加え、４０度で２０時間振とうした。反応液とレジンの懸濁液をＮＭＰを使用してフィルター付きシリンジに移し、ＮＭＰ（４ｍＬ）で３回、ＭｅＯＨ（４ｍＬ）で３回、ＤＣＭ（４ｍＬ）で３回、ヘプタン（４ｍＬ）で３回繰り返して洗浄した後に減圧下でレジンを乾燥し、［表ＥＨ０２］に示した標題の混合物を得た。得られた混合物に含まれる化合物について、［表ＥＨ０２］に示す。

このアミド化反応では、［表ＥＨ０２］に記載した化合物のうち２化合物（ＥＨ０２－０７－０２ＲとＥＨ０２－０８－０２Ｒ）が欠損している可能性がある。

【０５４１】

［表ＥＨ０２］混合物番号：ｍｉｘＥＨ０２－０２Ｒ，切り出し後の混合物番号：ｍｉｘＥＨ０２

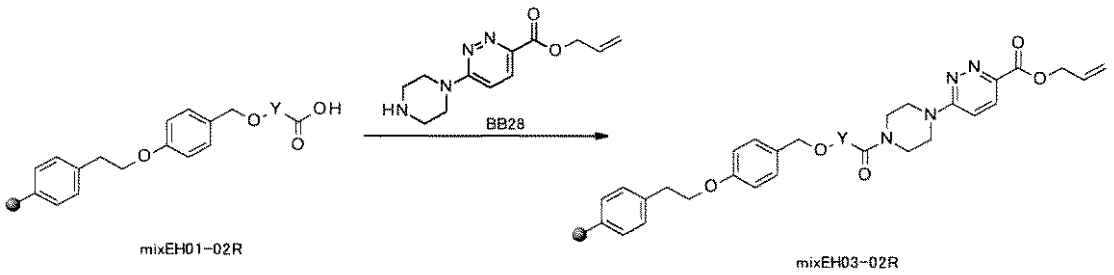
【表４８】

レジン化合物番号	切り出し後の化合物番号	化合物名
EH02-01-02R	EH02-01	プロプ-2-エニル 4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンゾアト
EH02-02-02R	EH02-02	プロプ-2-エニル 4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンゾアト
EH02-03-02R	EH02-03	プロプ-2-エニル 4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンゾアト
EH02-04-02R	EH02-04	プロプ-2-エニル 4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンゾアト
EH02-05-02R	EH02-05	プロプ-2-エニル 4-[4-[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンゾアト
EH02-06-02R	EH02-06	プロプ-2-エニル 4-[4-[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンゾアト
EH02-07-02R	EH02-07	プロプ-2-エニル 4-[4-[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンゾアト
EH02-08-02R	EH02-08	プロプ-2-エニル 4-[4-[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンゾアト
EH02-09-02R	EH02-09	プロプ-2-エニル 4-[4-[5-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンゾアト
EH02-10-02R	EH02-10	プロプ-2-エニル 4-[4-[5-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンゾアト
EH02-11-02R	EH02-11	プロプ-2-エニル 4-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]ベンゾアト
EH02-12-02R	EH02-12	プロプ-2-エニル 4-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]ベンゾアト
EH02-13-02R	EH02-13	プロプ-2-エニル 4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンゾアト
EH02-14-02R	EH02-14	プロプ-2-エニル 4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンゾアト
EH02-15-02R	EH02-15	プロプ-2-エニル 4-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンゾアト
EH02-16-02R	EH02-16	プロプ-2-エニル 4-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンゾアト
EH02-17-02R	EH02-17	プロプ-2-エニル 4-[4-[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンゾアト
EH02-18-02R	EH02-18	プロプ-2-エニル 4-[4-[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンゾアト
EH02-19-02R	EH02-19	プロプ-2-エニル 4-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンゾアト
EH02-20-02R	EH02-20	プロプ-2-エニル 4-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンゾアト
EH02-21-02R	EH02-21	プロプ-2-エニル 4-[4-[3-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンゾアト
EH02-22-02R	EH02-22	プロプ-2-エニル 4-[4-[3-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンゾアト

【０５４２】

実施例６－２－３：混合物ｍｉｘＥＨ０３－０２Ｒの合成

【化１００】



【０５４３】

実施例６－２－２と同様の方法により、６－（ピペラジン－１－イル）ピリダジン－３－カルボン酸アリル（ＢＢ２８）と［表ＥＨ０１］に示した混合物ｍｉｘＥＨ０１－０２Ｒ（１７５ｍｇ，担持量０．６５１ｍｍｏｌ／ｇ，０．１１４ｍｍｏｌ）を用いて、［表ＥＨ０３］に示した標題の混合物を得た。得られた混合物に含まれる化合物について、［表ＥＨ０３］に示す。

【０５４４】

このアミド化反応において、［表ＥＨ０３］に記載した化合物のうち２化合物（ＥＨ０３－０７－０２ＲとＥＨ０３－０８－０２Ｒ）が欠損している可能性がある。

［表ＥＨ０３］混合物番号：ｍｉｘＥＨ０３－０２Ｒ，切り出し後の混合物番号：ｍｉｘＥＨ０３

【表４９】

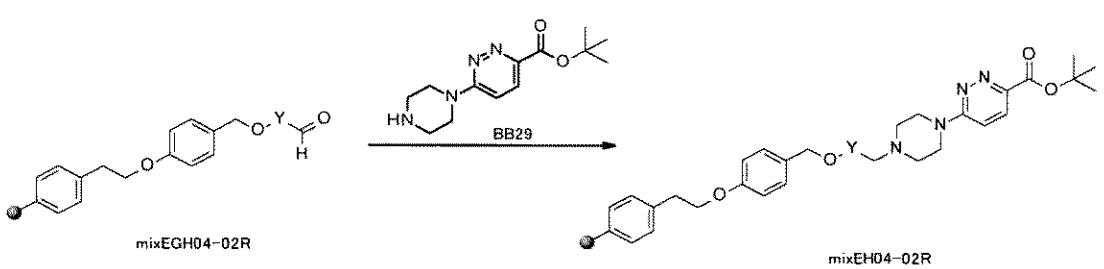
レジン化合物番号	切り出し後の化合物番号	化合物名
EH03-01-02R	EH03-01	プロプ-2-エニル 6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキシラート
EH03-02-02R	EH03-02	プロプ-2-エニル 6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキシラート
EH03-03-02R	EH03-03	プロプ-2-エニル 6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキシラート
EH03-04-02R	EH03-04	プロプ-2-エニル 6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキシラート
EH03-05-02R	EH03-05	プロプ-2-エニル 6-[4-[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキシラート
EH03-06-02R	EH03-06	プロプ-2-エニル 6-[4-[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキシラート
EH03-07-02R	EH03-07	プロプ-2-エニル 6-[4-[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキシラート

EH03-08-02R	EH03-08	プロプ-2-エニル 6-[4-[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキシラート
EH03-09-02R	EH03-09	プロプ-2-エニル 6-[4-[5-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキシラート
EH03-10-02R	EH03-10	プロプ-2-エニル 6-[4-[5-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキシラート
EH03-11-02R	EH03-11	プロプ-2-エニル 6-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキシラート
EH03-12-02R	EH03-12	プロプ-2-エニル 6-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキシラート
EH03-13-02R	EH03-13	プロプ-2-エニル 6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキシラート
EH03-14-02R	EH03-14	プロプ-2-エニル 6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキシラート
EH03-15-02R	EH03-15	プロプ-2-エニル 6-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキシラート
EH03-16-02R	EH03-16	プロプ-2-エニル 6-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキシラート
EH03-17-02R	EH03-17	プロプ-2-エニル 6-[4-[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキシラート
EH03-18-02R	EH03-18	プロプ-2-エニル 6-[4-[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキシラート
EH03-19-02R	EH03-19	プロプ-2-エニル 6-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキシラート
EH03-20-02R	EH03-20	プロプ-2-エニル 6-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキシラート
EH03-21-02R	EH03-21	プロプ-2-エニル 6-[4-[3-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキシラート
EH03-22-02R	EH03-22	プロプ-2-エニル 6-[4-[3-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキシラート

【０５４５】

実施例６－２－４：混合物ｍｉｘＥＨ０４－０２Ｒの合成

【化１０１】



【０５４６】
窒素雰囲気下、［表ＥＧＨ０４］に示すｍｉｘＥＧ０７－０２Ｒ（２０．３ｍｇ）、ｍｉｘＥＧ０８－０２Ｒ（２１．０ｍｇ）、ｍｉｘＥＧ０９－０２Ｒ（２１．６ｍｇ）、ｍｉｘＥＧ１０－０２Ｒ（１９．８ｍｇ）、ｍｉｘＥＧ１３－０２Ｒ（２０．６ｍｇ）、ｍｉｘＥＧ１４－０２Ｒ（２１．１ｍｇ）、ｍｉｘＥＧ１５－０２Ｒ（２０．５ｍｇ）、ｍｉｘＥＧ１６－０２Ｒ（２０．５ｍｇ）、ｍｉｘＥＧ１７－０２Ｒ（２０．５ｍｇ）、ｍｉｘＥＧ１９－０２Ｒ（２０．１ｍｇ）、ｍｉｘＥＧ２１－０２Ｒ（２１．９ｍｇ）、ｍｉｘＥＧ２２－０２Ｒ（２０．４ｍｇ）、ｍｉｘＥＧ２３－０２Ｒ（２０．６ｍｇ）を１０ｍＬのスクリューキャップバイアルに移し、本実施例にて使用する固相担持された芳香族アルデヒドの混合物：ｍｉｘＥＧＨ０４－０２Ｒ（２６５ｍｇ，担持量０．６５１ｍｍｏｌ／ｇ，０．１７２ｍｍｏｌ）とした。ＤＣＥ（５．５７ｍＬ，２１ｖ／ｗ）を加え、１時間室温下振とうした。窒素雰囲気下、ｔｅｒｔ－ブチル６－ピペラジン－１－イルピリダジン－３－カルボキシラート（ＢＢ２９）（１３７ｍｇ）、Ｔｉ（ＯｔＢｕ）$_4$（３３３μＬ）を加え、混合物を６０℃で１時間振とうした。その後、窒素雰囲気下、トリアセトキシ水素化ホウ素ナトリウム（４３９ｍｇ）ならびに２ｖ／ｖ％ＡｃＯＨのＤＣＥ溶液（２．３９ｍＬ）を加え、混合物を室温で２０時間振とうした。ＭｅＯＨ（１ｍＬ）を反応液へ添加した後に、レジンの懸濁液をＭｅＯＨ（１ｍＬ）を使用してフィルター付きシリンジに移し（合計６回繰り返した）、ＭｅＯＨ（５．３ｍＬ）で３回、ＮＭＰ（５．３ｍＬ）で３回、ＮａＨＣＯ$_3$溶液（０．１５Ｍ，ＮＭＰ：Ｈ$_2$Ｏ＝１：５溶液，５．３ｍＬ）で３回、水（５．３ｍＬ）で３回、ＭｅＯＨ（５．３ｍＬ）で３回、ＤＣＭ（５．３ｍＬ）で３回、ヘプタン（５．３ｍＬ）で３回で繰り返し洗浄した後に減圧下で乾燥し、標題混合物ｍｉｘＥＨ０４－０２Ｒを得た。混合物に含まれる化合物について、［表ＥＨ０４］に示す。

【０５４７】
［表ＥＧＨ０４］混合物番号：ｍｉｘＥＧＨ０４－０２Ｒ，切り出し後の混合物番号：ｍｉｘＥＧＨ０４

【表５０】

使用した混合物の番号	レジン化合物番号	切り出し後の化合物番号	化合物名

mixEG07-02R	EG07-0102R	EG07-01	4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルベンズアルデヒド
	EG07-0202R	EG07-02	4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンズアルデヒド
mixEG08-02R	EG07-0302R	EG07-03	2-(3-ヒドロキシフェニル)ベンズアルデヒド
	EG07-0402R	EG07-04	2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンズアルデヒド
mixEG09-02R	EG07-0502R	EG07-05	4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-カルバルデヒド
	EG07-0602R	EG07-06	4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルバルデヒド
mixEG10-02R	EG07-0702R	EG07-07	4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-カルバルデヒド
	EG07-0802R	EG07-08	4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルバルデヒド
mixEG13-02R	EG07-1302R	EG07-13	2-エチル-4-(3-ヒドロキシフェニル)ベンズアルデヒド
	EG07-1402R	EG07-14	2-エチル-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンズアルデヒド
mixEG14-02R	EG07-1502R	EG07-15	4-(3-ヒドロキシフェニル)-2-メトキシベンズアルデヒド
	EG07-1602R	EG07-16	4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2-メトキシベンズアルデヒド
mixEG15-02R	EG07-1702R	EG07-17	3-エトキシ-5-(3-ヒドロキシフェニル)ベンズアルデヒド
	EG07-1802R	EG07-18	3-エトキシ-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンズアルデヒド
mixEG16-02R	EG07-1902R	EG07-19	3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシベンズアルデヒド
	EG07-2002R	EG07-20	3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシベンズアルデヒド
mixEG17-02R	EG07-2102R	EG07-21	4-(3-ヒドロキシフェニル)-2,6-ジメトキシベンズアルデヒド
	EG07-2202R	EG07-22	4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシベンズアルデヒド
mixEG19-02R	EG19-01-02R	EG19-01	3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)ベンズアルデヒド
	EG19-02-02R	EG19-02	3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンズアルデヒド
mixEG21-02R	EG21-01-02R	EG21-01	3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンズアルデヒド
	EG21-02-02R	EG21-02	3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンズアルデヒド
mixEG22-02R	EG21-03-02R	EG21-03	3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)ベンズアルデヒド
	EG21-04-02R	EG21-04	3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)ベンズアルデヒド
mixEG23-02R	EG23-01-02R	EG23-01	2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ベンズアルデヒド
	EG23-02-02R	EG23-02	2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンズアルデヒド

【０５４８】

［表ＥＨ０４］混合物番号：ｍｉｘＥＨ０４－０２Ｒ，切り出し後の混合物番号：ｍｉｘＥＨ０４

【表５１】

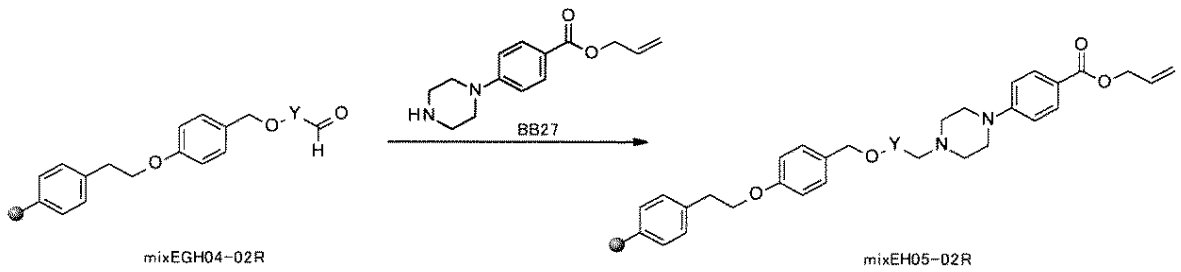
レジン化合物番号	切り出し後の化合物番号	化合物名
EH04-01-02R	EH04-01	tert-ブチル 6-[4-[[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキシラート
EH04-02-02R	EH04-02	tert-ブチル 6-[4-[[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキシラート
EH04-03-02R	EH04-03	tert-ブチル 6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキシラート
EH04-04-02R	EH04-04	tert-ブチル 6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキシラート
EH04-05-02R	EH04-05	tert-ブチル 6-[4-[[2-エチル-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキシラート
EH04-06-02R	EH04-06	tert-ブチル 6-[4-[[2-エチル-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキシラート
EH04-07-02R	EH04-07	tert-ブチル 6-[4-[[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキシラート
EH04-08-02R	EH04-08	tert-ブチル 6-[4-[[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキシラート
EH04-09-02R	EH04-09	tert-ブチル 6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキシラート
EH04-10-02R	EH04-10	tert-ブチル 6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキシラート
EH04-11-02R	EH04-11	tert-ブチル 6-[4-[[3-エトキシ-5-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキシラート
EH04-12-02R	EH04-12	tert-ブチル 6-[4-[[3-エトキシ-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキシラート
EH04-13-02R	EH04-13	tert-ブチル 6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキシラート
EH04-14-02R	EH04-14	tert-ブチル 6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキシラート
EH04-15-02R	EH04-15	tert-ブチル 6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキシラート
EH04-16-02R	EH04-16	tert-ブチル 6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキシラート
EH04-17-02R	EH04-17	tert-ブチル 6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキシラート
EH04-18-	EH04-18	tert-ブチル 6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフル

02R		オロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキシラート
EH04-19-02R	EH04-19	tert-ブチル 6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキシラート
EH04-20-02R	EH04-20	tert-ブチル 6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキシラート
EH04-21-02R	EH04-21	tert-ブチル 6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキシラート
EH04-22-02R	EH04-22	tert-ブチル 6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキシラート
EH04-23-02R	EH04-23	tert-ブチル 6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキシラート
EH04-24-02R	EH04-24	tert-ブチル 6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキシラート
EH04-25-02R	EH04-25	tert-ブチル 6-[4-[[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキシラート
EH04-26-02R	EH04-26	tert-ブチル 6-[4-[[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキシラート

【０５４９】

実施例６－２－５：混合物ｍｉｘＥＨ０５－０２Ｒの合成

【化１０２】



【０５５０】

窒素雰囲気下、［表ＥＧＨ０４］に示すｍｉｘＥＧ０７－０２Ｒ（２０．１ｍｇ）、ｍｉｘＥＧ０８－０２Ｒ（２０．３ｍｇ）、ｍｉｘＥＧ０９－０２Ｒ（２０．４ｍｇ）、ｍｉｘＥＧ１０－０２Ｒ（２０．３ｍｇ）、ｍｉｘＥＧ１３－０２Ｒ（２０．８ｍｇ）、ｍｉｘＥＧ１４－０２Ｒ（２０．６ｍｇ）、ｍｉｘＥＧ１５－０２Ｒ（２０．１ｍｇ）、ｍｉｘＥＧ１６－０２Ｒ（２０．０ｍｇ）、ｍｉｘＥＧ１７－０２Ｒ（２０．３ｍｇ）、ｍｉｘＥＧ１９－０２Ｒ（２０．８ｍｇ）、ｍｉｘＥＧ２１－０２Ｒ（２０．５ｍｇ）、ｍｉｘＥＧ２２－０２Ｒ（２０．８ｍｇ）、ｍｉｘＥＧ２３－０２Ｒ（２０．６ｍｇ）を１０ｍＬのスクリューキャップバイアルに移し、本実施例にて使用する固相担持された芳香族アルデヒドの混合物：ｍｉｘＥＧＨ０４－０２Ｒ（２６０ｍｇ，担持量　０．６５１ｍｍｏｌ／ｇ）とした。ＤＣＥ（５．４６ｍＬ，２１ｖ／ｗ）を加え、１時間室温下振とうした。窒素雰囲気下、アリル　６－ピペラジン－１－イルピリダジン－３－カルボキシラート（ＢＢ２７）（１２５ｍｇ）、Ｔｉ（ＯｔＢｕ）$_4$（３１７μＬ）を加え、混合物を６０℃で１時間振とうした。その後、窒素雰囲気下、トリアセトキシ水素化ホウ素ナトリウム（４３０ｍｇ）ならびに２ｖ／ｖ　％ＡｃＯＨのＤＣＥ溶液（２．３４ｍＬ）を加え、混合物を５０℃で３時間振とうした。室温に冷却した後に、レジンの懸濁液をＭｅＯＨ（１ｍＬ）を使用してフィルター付きカラムに移し（合計６回繰り返した）、ＭｅＯＨ（

５．３ｍＬ）で３回、ＮＭＰ（５．３ｍＬ）で３回、０．１５Ｍ ＮａＨＣＯ$_3$溶液（ＮＭＰ：Ｈ$_2$Ｏ＝１：５溶液，５．３ｍＬ）で３回、水（５．３ｍＬ）で３回、ＭｅＯＨ（５．３ｍＬ）で３回、ＤＣＭ（５．３ｍＬ）で３回、ヘプタン（５．３ｍＬ）で３回で繰り返し洗浄した後に減圧下で乾燥し、［表ＥＨ０５］に示した標題混合物ｍｉｘＥＨ０５－０２Ｒを得た。混合物に含まれる化合物について、［表ＥＨ０５］に示す。

【０５５１】

［表ＥＨ０５］混合物番号：ｍｉｘＥＨ０５－０２Ｒ，切り出し後の混合物番号：ｍｉｘＥＨ０５

【表５２】

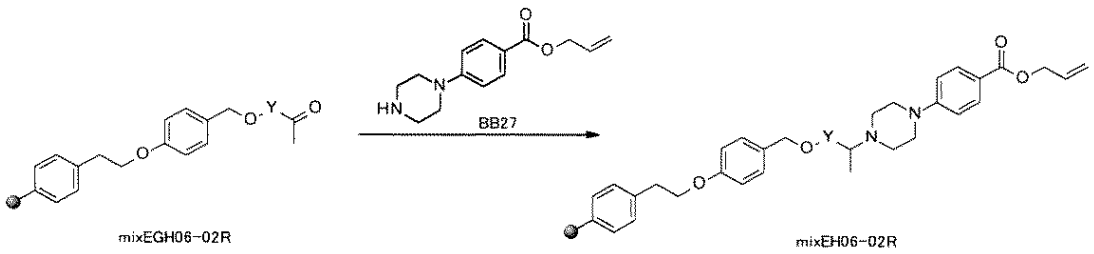
レジン化合物番号	切り出し後の化合物番号	化合物名
EH05-01-02R	EH05-01	プロプ-2-エニル 4-[4-[[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンゾアト
EH05-02-02R	EH05-02	プロプ-2-エニル 4-[4-[[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンゾアト
EH05-03-02R	EH05-03	プロプ-2-エニル 4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンゾアト
EH05-04-02R	EH05-04	プロプ-2-エニル 4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンゾアト
EH05-05-02R	EH05-05	プロプ-2-エニル 4-[4-[[2-エチル-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンゾアト
EH05-06-02R	EH05-06	プロプ-2-エニル 4-[4-[[2-エチル-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンゾアト
EH05-07-02R	EH05-07	プロプ-2-エニル 4-[4-[[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンゾアト
EH05-08-02R	EH05-08	プロプ-2-エニル 4-[4-[[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンゾアト
EH05-09-02R	EH05-09	プロプ-2-エニル 4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンゾアト
EH05-10-02R	EH05-10	プロプ-2-エニル 4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンゾアト
EH05-11-02R	EH05-11	プロプ-2-エニル 4-[4-[[3-エトキシ-5-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンゾアト
EH05-12-02R	EH05-12	プロプ-2-エニル 4-[4-[[3-エトキシ-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンゾアト

EH05-13-02R	EH05-13	プロプ-2-エニル 4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンゾアト
EH05-14-02R	EH05-14	プロプ-2-エニル 4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンゾアト
EH05-15-02R	EH05-15	プロプ-2-エニル 4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンゾアト
EH05-16-02R	EH05-16	プロプ-2-エニル 4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンゾアト
EH05-17-02R	EH05-17	プロプ-2-エニル 4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンゾアト
EH05-18-02R	EH05-18	プロプ-2-エニル 4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンゾアト
EH05-19-02R	EH05-19	プロプ-2-エニル 4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンゾアト
EH05-20-02R	EH05-20	プロプ-2-エニル 4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンゾアト
EH05-21-02R	EH05-21	プロプ-2-エニル 4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンゾアト
EH05-22-02R	EH05-22	プロプ-2-エニル 4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンゾアト
EH05-23-02R	EH05-23	プロプ-2-エニル 4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンゾアト
EH05-24-02R	EH05-24	プロプ-2-エニル 4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンゾアト
EH05-25-02R	EH05-25	プロプ-2-エニル 4-[4-[[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンゾアト
EH05-26-02R	EH05-26	プロプ-2-エニル 4-[4-[[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンゾアト

【０５５２】

実施例６－２－６：混合物ｍｉｘＥＨ０６－０２Ｒの合成

【化１０３】



【０５５３】

窒素雰囲気下、５ｍＬのガラスバイアルに［表ＥＧＨ０６］に示した混合物ｍｉｘＥＧＨ０６－０２Ｒ（６０ｍｇ，担持量０．６４５ｍｍｏｌ／ｇ，０．０３９ｍｍｏｌ）とアニソール（２．２５ｍＬ）を加え室温で１時間振とうした。窒素雰囲気下、４－（ピペラジン－１－イル）安息香酸アリル（ＢＢ２７，１１４ｍｇ，０．４６４ｍｍｏｌ）とＴｉ（ＯｔＢｕ）$_4$（２９９μＬ，０．７７４ｍｍｏｌ）を加え、１４０℃で２０時間振とうした。反応液を室温に冷却後、窒素雰囲気下でトリアセトキシ水素化ホウ素ナトリウム（２４６ｍｇ，１．１６ｍｍｏｌ）を加え、１４０℃で２０時間振とうした。反応容器を室温まで冷却し、ＭｅＯＨ（１．２ｍＬ）を反応液へ添加した。得られた反応液とレジンの懸濁液をＭｅＯＨを使用してフィルター付きシリンジに移し、ＮＭＰ（１．２ｍＬ）で３回、Ｒｏｃｈｅｌｌｅ塩溶液（０．０５Ｍ，ＮＭＰ：水＝１：１溶液，１．２ｍＬ）で３回、水（１．２ｍＬ）で３回、半飽和ＮａＨＣＯ$_3$溶液（１．２ｍＬ）で３回、水（１．

２ｍＬ）で３回、ＮＭＰ（１．２ｍＬ）で６９回、ＭｅＯＨ（１．２ｍＬ）で３回、ＤＣＭ（１．２ｍＬ）で３回、ヘプタン（１．２ｍＬ）で３回繰り返して洗浄した後に減圧下で乾燥し、［表ＥＨ０６］に示した標題化合物を得た。
得られた混合物に含まれる化合物について、［表ＥＨ０６］に示す。

【０５５４】

［表ＥＧＨ０６］混合物番号：ｍｉｘＥＧＨ０６－０２Ｒ，切り出し後の混合物番号：ｍｉｘＥＧＨ０６

【表５３】

使用した混合物の番号	混合物の使用量(mg)	レジン化合物番号	切り出し後の化合物番号	化合物名
mixEG13-02R	30	EG07-13-02R	EG07-13	4-[4-(4-アセチル-3-フルオロフェニル)フェニル]-1-ヒドロキシ-N,N-ジメチルナフタレン-2-カルボキサミド
		EG07-14-02R	EG07-14	4-[5-(4-アセチル-3-フルオロフェニル)ピリジン-2-イル]-1-ヒドロキシ-N,N-ジメチルナフタレン-2-カルボキサミド
mixEG18-02R	30	EG01-13-02R	EG01-13	4-[4-(4-アセチルフェニル)フェニル]-1-ヒドロキシ-N,N-ジメチルナフタレン-2-カルボキサミド
		EG01-14-02R	EG01-14	4-[5-(4-アセチルフェニル)ピリジン-2-イル]-1-ヒドロキシ-N,N-ジメチルナフタレン-2-カルボキサミド

【０５５５】

［表ＥＨ０６］混合物番号：ｍｉｘＥＨ０６－０２Ｒ，切り出し後の混合物番号：ｍｉｘＥＨ０６

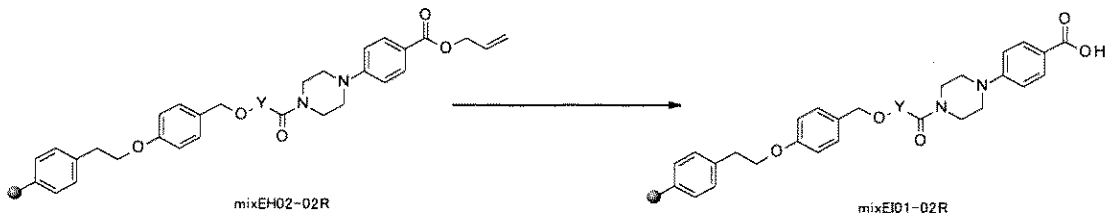
【表５４】

レジン化合物番号	切り出し後の化合物番号	化合物名
EH06-01-02R	EH06-01	プロプ-2-エニル 4-[4-[1-[2-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]ベンゾアト
EH06-02-02R	EH06-02	プロプ-2-エニル 4-[4-[1-[2-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]ベンゾアト
EH06-03-02R	EH06-03	プロプ-2-エニル 4-[4-[1-[4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]ベンゾアト
EH06-04-02R	EH06-04	プロプ-2-エニル 4-[4-[1-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]ベンゾアト

【０５５６】

実施例６－３－１：混合物ｍｉｘＥＩ０１－０２Ｒの合成

【化１０４】



【０５５７】

窒素雰囲気下、８ｍＬのスクリューキャップバイアルに、［表ＥＨ０２］に示した混合物ｍｉｘＥＨ０２－０２Ｒ（１７４ｍｇ，担持量０．６５１ｍｍｏｌ／ｇ，０．１１３ｍｍｏｌ）とＴＨＦ（５．２ｍＬ）を加え、室温で１時間振とうした。窒素雰囲気下、テトラキストリフェニルホスフィンパラジウム（０）（３９．３ｍｇ，３４μｍｏｌ）、モルホリン（４９．４μＬ，０．５６６ｍｍｏｌ）を加え、混合物を室温で２時間４５分振とうした。レジンの懸濁液をＮＭＰを使用してフィルター付きカラムに移し、ＮＭＰ（４ｍＬ）で３回、ＭｅＯＨ（４ｍＬ）で３回、ＮＡＣ溶液（０．３Ｍ，ＮＭＰ：水＝５：１溶液，４ｍＬ）で３回、マロン酸のＮＭＰ溶液（０．０５Ｍ，４ｍＬ）で３回、ＨＯＡｔのＮＭＰ溶液（０．２Ｍ，４ｍＬ）で３回、ＮＭＰ（４ｍＬ）で３回、ＭｅＯＨ（４ｍＬ）で３回、ＤＣＭ（４ｍＬ）で３回、ヘプタン（４ｍＬ）で３回で繰り返し洗浄した後に減圧下で乾燥し、標題混合物を得た。得られた混合物に含まれる化合物について、［表ＥＩ０１］に示す。

【０５５８】

［表ＥＩ０１］混合物番号：ｍｉｘＥＩ０１－０２Ｒ，切り出し後の混合物番号：ｍｉｘＥＩ０１

【表５５】

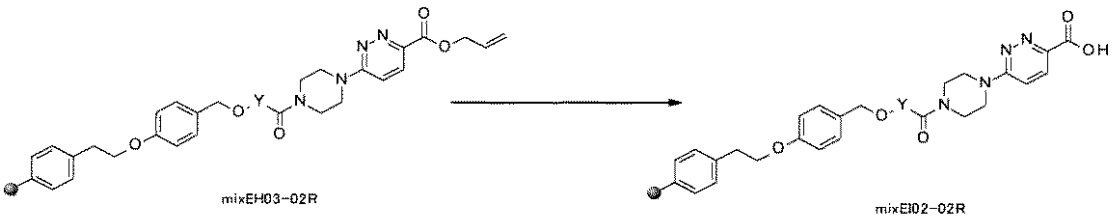
レジン化合物番号	切り出し後の化合物番号	化合物名
EI01-01-02R	EI01-01	4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI01-02-02R	EI01-02	4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI01-03-02R	EI01-03	4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI01-04-02R	EI01-04	4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI01-05-02R	EI01-05	4-[4-[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI01-06-02R	EI01-06	4-[4-[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI01-07-02R	EI01-07	4-[4-[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI01-08-02R	EI01-08	4-[4-[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI01-09-02R	EI01-09	4-[4-[5-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI01-10-02R	EI01-10	4-[4-[5-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI01-11-02R	EI01-11	4-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI01-12-02R	EI01-12	4-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI01-13-02R	EI01-13	4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI01-14-	EI01-14	4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]

02R		ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI01-15-02R	EI01-15	4-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI01-16-02R	EI01-16	4-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI01-17-02R	EI01-17	4-[4-[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI01-18-02R	EI01-18	4-[4-[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI01-19-02R	EI01-19	4-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI01-20-02R	EI01-20	4-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI01-21-02R	EI01-21	4-[4-[3-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI01-22-02R	EI01-22	4-[4-[3-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]安息香酸

【０５５９】

実施例６－３－２：混合物ｍｉｘＥＩ０２－０２Ｒの合成

【化１０５】



【０５６０】

窒素雰囲気下、８ｍＬのガラスバイアルに［表ＥＨ０３］に示した混合物ｍｉｘＥＨ０３－０２Ｒ（１７４ｍｇ，担持量０．６５１ｍｍｏｌ／ｇ，０．１１３ｍｍｏｌ）とＴＨＦ（５．２ｍＬ）を加え室温で１時間振とうした。窒素雰囲気下、Ｐｄ（ＰＰｈ$_3$）$_4$（６．６ｍｇ，５．６６μｍｏｌ）とモルホリン（３４．５μＬ，０．３９７ｍｍｏｌ）を加え、室温で２時間４５分振とうした。レジンの懸濁液をＮＭＰを使用してフィルター付きカラムに移し、ＮＭＰ（４ｍＬ）で３回、ＭｅＯＨ（４ｍＬ）で３回、ＮＡＣ溶液（０．３Ｍ，ＮＭＰ：水＝５：１溶液，４ｍＬ）で３回、マロン酸のＮＭＰ溶液（０．０５Ｍ，４ｍＬ）で３回、ＨＯＡｔのＮＭＰ溶液（０．２Ｍ，４ｍＬ）で３回、ＮＭＰ（４ｍＬ）で３回、ＭｅＯＨ（４ｍＬ）で３回、ＤＣＭ（４ｍＬ）で３回、ヘプタン（４ｍＬ）で３回で繰り返し洗浄した後に減圧下で乾燥し、［表ＥＩ０２］に示した標題混合物を得た。得られた混合物に含まれる化合物について、［表ＥＩ０２］に示す。

【０５６１】

［表ＥＩ０２］混合物番号ｍｉｘＥＩ０２－０２Ｒ，切り出し後の混合物番号ｍｉｘＥＩ０２

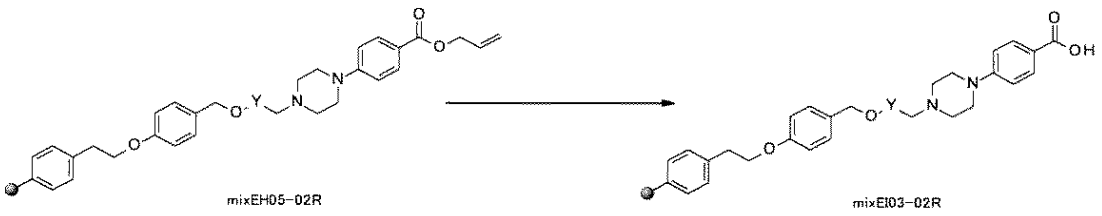
【表５６】

レジン化合物番号	切り出し後の化合物番号	化合物名
EI02-01-02R	EI02-01	6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI02-02-02R	EI02-02	6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI02-03-02R	EI02-03	6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI02-04-02R	EI02-04	6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI02-05-02R	EI02-05	6-[4-[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI02-06-02R	EI02-06	6-[4-[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI02-07-02R	EI02-07	6-[4-[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI02-08-02R	EI02-08	6-[4-[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI02-09-02R	EI02-09	6-[4-[5-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI02-10-02R	EI02-10	6-[4-[5-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI02-11-02R	EI02-11	6-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI02-12-02R	EI02-12	6-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI02-13-02R	EI02-13	6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI02-14-02R	EI02-14	6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI02-15-02R	EI02-15	6-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI02-16-02R	EI02-16	6-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI02-17-02R	EI02-17	6-[4-[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI02-18-02R	EI02-18	6-[4-[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI02-19-02R	EI02-19	6-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI02-20-02R	EI02-20	6-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI02-21-02R	EI02-21	6-[4-[3-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI02-22-02R	EI02-22	6-[4-[3-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸

【０５６２】

実施例６－３－３：混合物ｍｉｘＥＩ０３－０２Ｒの合成

【化１０６】



【０５６３】

窒素雰囲気下、１０ｍＬのスクリューキャップバイアルに、［表ＥＨ０５］に示した混合物ｍｉｘＥＨ０５－０２Ｒ（２６０ｍｇ，担持量０．６５１ｍｍｏｌ／ｇ，０．１６９ｍｍｏｌ）とＴＨＦ（７．８ｍＬ）を加え、室温で１時間振とうした。窒素雰囲気下、テトラキストリフェニルホスフィンパラジウム（０）（５８．７ｍｇ，５１μｍｏｌ）、モルホリン（７３．７μＬ，０．８４６ｍｍｏｌ）を加え、混合物を室温で２時間４５分振とうした。レジンの懸濁液をＮＭＰを使用してフィルター付きカラムに移し、ＮＭＰ（６ｍＬ）で３回、ＭｅＯＨ（６ｍＬ）で３回、ＮＡＣ溶液（０．３Ｍ，ＮＭＰ：水＝５：１溶液，６ｍＬ）で３回、マロン酸のＮＭＰ溶液（０．０５Ｍ，６ｍＬ）で３回、ＨＯＡｔのＮＭＰ溶液（０．２Ｍ，６ｍＬ）で３回、ＮＭＰ（６ｍＬ）で３回、ＭｅＯＨ（６ｍＬ）で３回、ＤＣＭ（６ｍＬ）で３回、ヘプタン（６ｍＬ）で３回で繰り返し洗浄した後に減圧下で乾燥し、標題混合物を得た。得られた混合物に含まれる化合物について、［表ＥＩ０３］に示す。

【０５６４】

［表ＥＩ０３］混合物番号：ｍｉｘＥＩ０３－０２Ｒ，切り出し後の混合物番号：ｍｉｘＥＩ０２

【表５７】

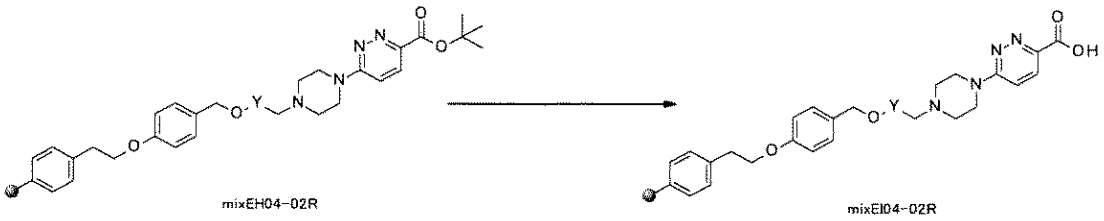
レジン化合物番号	切り出し後の化合物番号	化合物名
EI03-01-02R	EI03-01	4-[4-[[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI03-02-02R	EI03-02	4-[4-[[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI03-03-02R	EI03-03	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI03-04-02R	EI03-04	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI03-05-02R	EI03-05	4-[4-[[2-エチル-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI03-06-02R	EI03-06	4-[4-[[2-エチル-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]安息香酸

EI03-07-02R	EI03-07	4-[4-[[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI03-08-02R	EI03-08	4-[4-[[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI03-09-02R	EI03-09	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI03-10-02R	EI03-10	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI03-11-02R	EI03-11	4-[4-[[3-エトキシ-5-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI03-12-02R	EI03-12	4-[4-[[3-エトキシ-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI03-13-02R	EI03-13	4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI03-14-02R	EI03-14	4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI03-15-02R	EI03-15	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI03-16-02R	EI03-16	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI03-17-02R	EI03-17	4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI03-18-02R	EI03-18	4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI03-19-02R	EI03-19	4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI03-20-02R	EI03-20	4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI03-21-02R	EI03-21	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI03-22-02R	EI03-22	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI03-23-02R	EI03-23	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI03-24-02R	EI03-24	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI03-25-02R	EI03-25	4-[4-[[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI03-26-02R	EI03-26	4-[4-[[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]安息香酸

【０５６５】

実施例６－３－４：混合物ｍｉｘＥＩ０４－０２Ｒの合成

【化１０７】



【０５６６】

窒素雰囲気下、８．０ｍＬのスクリューキャップバイアルに、［表ＥＨ０４］に示す混

合物ｍｉｘＥＨ０４－０２Ｒ（３００ｍｇ，担持量０．６５１ｍｍｏｌ／ｇ）、ＴＨＦ（８．０７ｍＬ，２７ｖ／ｗ）とＭｅＯＨ（８０７μＬ，２．７ｖ／ｗ）を加え、室温で１時間振とうした。窒素雰囲気下、ＬｉＯＨ水溶液（２Ｍ，７８１μＬ）を加え、混合物を室温で８時間振とうした。レジンの懸濁液をＭｅＯＨを使用してフィルター付きカラムに移し、ＮＭＰ（６．０ｍＬ）で３回、$Ｈ_2Ｏ$（６．０ｍＬ）で３回、ＮＭＰ（６．０ｍＬ）で３回、ＨＯＡｔのＮＭＰ溶液（０．２Ｍ，６．０ｍＬ）で３回、ＮＭＰ（６．０ｍＬ）で３回、ＭｅＯＨ（６．０ｍＬ）で３回、ＤＣＭ（６．０ｍＬ）で３回、ヘプタン（６．０ｍＬ）で３回で繰り返し洗浄した後に減圧下で乾燥し、標題混合物ｍｉｘＥＩ０４－０２Ｒを得た。得られた混合物に含まれる化合物について、［表ＥＩ０４］に示す。

【０５６７】

［表ＥＩ０４］混合物番号：ｍｉｘＥＩ０４－０２Ｒ，切り出し後の混合物番号：ｍｉｘＥＩ０４

【表５８】

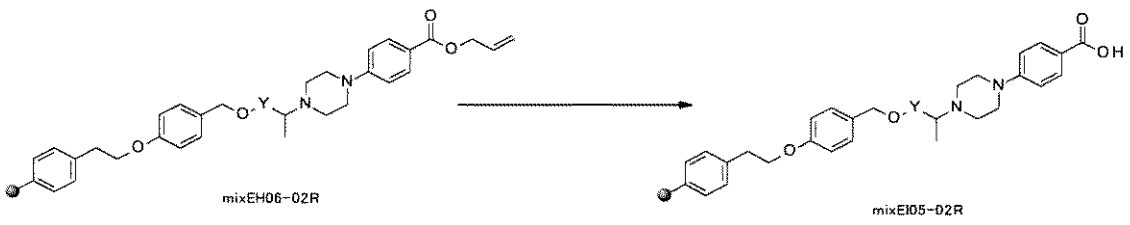
レジン化合物番号	切り出し後の化合物番号	化合物名
EI04-01-02R	EI04-01	6-[4-[[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI04-02-02R	EI04-02	6-[4-[[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI04-03-02R	EI04-03	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI04-04-02R	EI04-04	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI04-05-02R	EI04-05	6-[4-[[2-エチル-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI04-06-02R	EI04-06	6-[4-[[2-エチル-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI04-07-02R	EI04-07	6-[4-[[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI04-08-02R	EI04-08	6-[4-[[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI04-09-02R	EI04-09	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI04-10-02R	EI04-10	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸

EI04-11-02R	EI04-11	6-[4-[[3-エトキシ-5-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI04-12-02R	EI04-12	6-[4-[[3-エトキシ-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI04-13-02R	EI04-13	6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI04-14-02R	EI04-14	tert-ブチル 6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキシラート
EI04-15-02R	EI04-15	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI04-16-02R	EI04-16	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI04-17-02R	EI04-17	6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI04-18-02R	EI04-18	6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI04-19-02R	EI04-19	6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI04-20-02R	EI04-20	6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI04-21-02R	EI04-21	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI04-22-02R	EI04-22	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI04-23-02R	EI04-23	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI04-24-02R	EI04-24	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI04-25-02R	EI04-25	6-[4-[[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI04-26-02R	EI04-26	6-[4-[[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸

【０５６８】

実施例６－３－５：混合物ｍｉｘＥＩ０５－０２Ｒの合成

【化１０８】



【０５６９】

窒素雰囲気下、２ｍＬのスクリューキャップバイアルに、［表ＥＨ０６］に示した混合物ｍｉｘＥＨ０６－０２Ｒ（５０ｍｇ，担持量０．６４５ｍｍｏｌ／ｇ，３２μｍｏｌ）とＴＨＦ（１．５ｍＬ）を加え、室温で１時間振とうした。窒素雰囲気下、テトラキストリフェニルホスフィンパラジウム（０）（１１．２ｍｇ，９．６８μｍｏｌ）、モルホリン（１４．１μＬ，０．１６１ｍｍｏｌ）を加え、混合物を室温で３時間振とうした。レジンの懸濁液をＮＭＰを使用してフィルター付きカラムに移し、ＮＭＰ（１ｍＬ）で３回、ＭｅＯＨ（１ｍＬ）で３回、ＮＡＣ溶液（０．３Ｍ，ＮＭＰ：水＝５：１溶液，１ｍＬ

）で３回、マロン酸のＮＭＰ溶液（０．０５Ｍ，１ｍＬ）で３回、ＨＯＡｔのＮＭＰ溶液（０．２Ｍ，１ｍＬ）で３回、ＮＭＰ（１ｍＬ）で３回、ＭｅＯＨ（１ｍＬ）で３回、ＤＣＭ（１ｍＬ）で３回、ヘプタン（１ｍＬ）で３回で繰り返し洗浄した後に減圧下で乾燥し、標題混合物を得た。得られた混合物に含まれる化合物名について、［表ＥＩ０５］に示す。

【０５７０】

［表ＥＩ０５］混合物番号：ｍｉｘＥＩ０５－０２Ｒ，切り出し後の混合物番号：ｍｉｘＥＩ０５

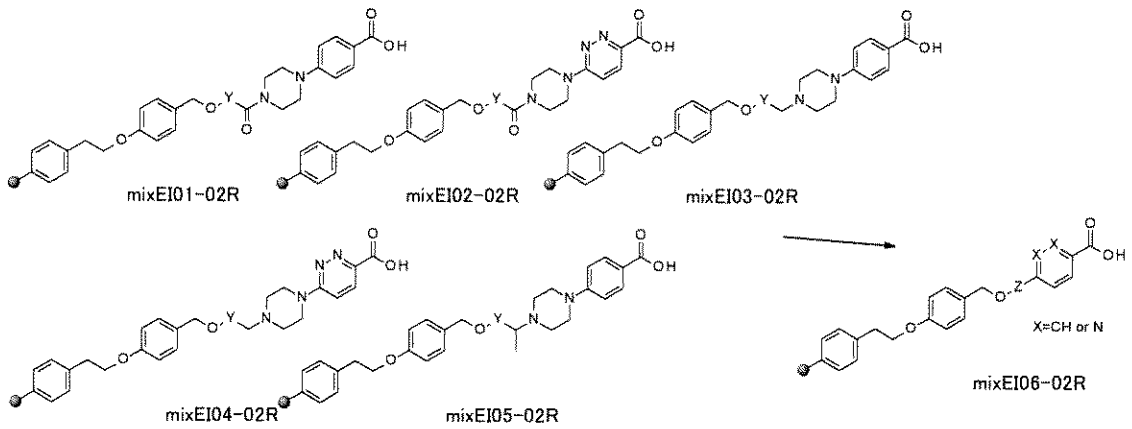
【表５９】

レジン化合物番号	切り出し後の化合物番号	化合物名
EI05-01-02R	EI05-01	4-[4-[1-[2-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI05-02-02R	EI05-02	4-[4-[1-[2-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI05-03-02R	EI05-03	4-[4-[1-[4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI05-04-02R	EI05-04	4-[4-[1-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]安息香酸

【０５７１】

実施例６－３－６：混合物ｍｉｘＥＩ０６－０２Ｒの合成

【化１０９】



【０５７２】

［表ＥＩ０１］、［表ＥＩ０２］、［表ＥＩ０３］、［表ＥＩ０４］、［表ＥＩ０５］に示した混合物ｍｉｘＥＩ０１－０２Ｒ（１５５．９ｍｇ，担持量０．６５１ｍｍｏｌ／ｇ，０．１０１ｍｍｏｌ）、ｍｉｘＥＩ０２－０２Ｒ（１５３．５ｍｇ，担持量０．６５１ｍｍｏｌ／ｇ，９９．９μｍｏｌ）、ｍｉｘＥＩ０３－０２Ｒ（１８２．５ｍｇ，担持量０．６５１ｍｍｏｌ／ｇ，０．１１９ｍｍｏｌ）、ｍｉｘＥＩ０４－０２Ｒ（１８２．９ｍｇ，担持量０．６５１ｍｍｏｌ／ｇ，０．１１９ｍｍｏｌ）、ｍｉｘＥＩ０５－０２Ｒ（２８．６ｍｇ，担持量０．６４５ｍｍｏｌ／ｇ，１８．４μｍｏｌ）をフィルター付きカラムに移し、ＮＭＰ（１４ｍＬ）で３回、ＭｅＯＨ（１４ｍＬ）で３回、ＤＣＭ（１４ｍＬ）で３回、ヘプタン（１４ｍＬ）で３回で繰り返し洗浄した後に減圧下で乾燥し、［表ＥＩ０６］に示した標題混合物ｍｉｘＥＩ０６－０２Ｒ（７０３ｍｇ，担持量０．６４８ｍｍｏｌ／ｇ，０．４５６ｍｍｏｌ）を得た。

【０５７３】

［表ＥＩ０６］混合物番号：ｍｉｘＥＩ０６－０２Ｒ，切り出し後の混合物番号：ｍｉｘＥＩ０６

【表６０】

レジン化合物番号	切り出し後の化合物番号	化合物名
EI01-01-02R	EI01-01	4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI01-02-02R	EI01-02	4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI01-03-02R	EI01-03	4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI01-04-02R	EI01-04	4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI01-05-02R	EI01-05	4-[4-[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI01-06-02R	EI01-06	4-[4-[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI01-07-02R	EI01-07	4-[4-[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI01-08-02R	EI01-08	4-[4-[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI01-09-02R	EI01-09	4-[4-[5-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI01-10-02R	EI01-10	4-[4-[5-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI01-11-02R	EI01-11	4-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI01-12-02R	EI01-12	4-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI01-13-02R	EI01-13	4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI01-14-02R	EI01-14	4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI01-15-02R	EI01-15	4-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI01-16-	EI01-16	4-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]

02R		ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI01-17-02R	EI01-17	4-[4-[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI01-18-02R	EI01-18	4-[4-[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI01-19-02R	EI01-19	4-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI01-20-02R	EI01-20	4-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI01-21-02R	EI01-21	4-[4-[3-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI01-22-02R	EI01-22	4-[4-[3-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI02-01-02R	EI02-01	6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI02-02-02R	EI02-02	6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI02-03-02R	EI02-03	6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI02-04-02R	EI02-04	6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI02-05-02R	EI02-05	6-[4-[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI02-06-02R	EI02-06	6-[4-[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI02-07-02R	EI02-07	6-[4-[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI02-08-02R	EI02-08	6-[4-[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI02-09-02R	EI02-09	6-[4-[5-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI02-10-02R	EI02-10	6-[4-[5-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI02-11-02R	EI02-11	6-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI02-12-02R	EI02-12	6-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI02-13-02R	EI02-13	6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI02-14-02R	EI02-14	6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI02-15-02R	EI02-15	6-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI02-16-02R	EI02-16	6-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI02-17-02R	EI02-17	6-[4-[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI02-18-02R	EI02-18	6-[4-[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI02-19-	EI02-19	6-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチ

02R		ル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI02-20-02R	EI02-20	6-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI02-21-02R	EI02-21	6-[4-[3-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI02-22-02R	EI02-22	6-[4-[3-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI03-01-02R	EI03-01	4-[4-[[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI03-02-02R	EI03-02	4-[4-[[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI03-03-02R	EI03-03	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI03-04-02R	EI03-04	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI03-05-02R	EI03-05	4-[4-[[2-エチル-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI03-06-02R	EI03-06	4-[4-[[2-エチル-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI03-07-02R	EI03-07	4-[4-[[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI03-08-02R	EI03-08	4-[4-[[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI03-09-02R	EI03-09	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI03-10-02R	EI03-10	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI03-11-02R	EI03-11	4-[4-[[3-エトキシ-5-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI03-12-02R	EI03-12	4-[4-[[3-エトキシ-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI03-13-02R	EI03-13	4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI03-14-02R	EI03-14	4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI03-15-02R	EI03-15	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI03-16-02R	EI03-16	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI03-17-02R	EI03-17	4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI03-18-02R	EI03-18	4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI03-19-02R	EI03-19	4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI03-20-02R	EI03-20	4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]安息香酸

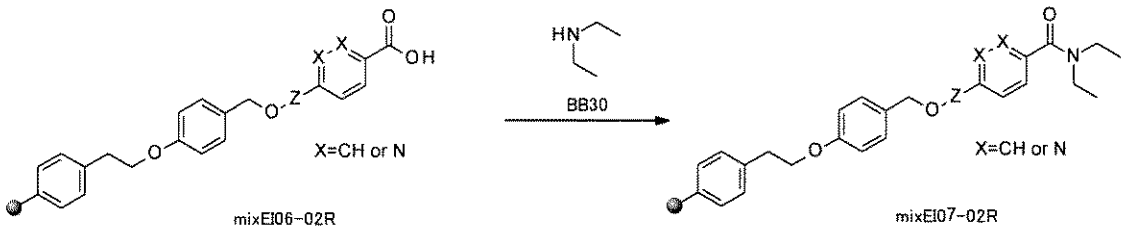
EI03-21-02R	EI03-21	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI03-22-02R	EI03-22	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI03-23-02R	EI03-23	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI03-24-02R	EI03-24	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI03-25-02R	EI03-25	4-[4-[[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI03-26-02R	EI03-26	4-[4-[[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI04-01-02R	EI04-01	6-[4-[[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI04-02-02R	EI04-02	6-[4-[[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI04-03-02R	EI04-03	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI04-04-02R	EI04-04	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI04-05-02R	EI04-05	6-[4-[[2-エチル-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI04-06-02R	EI04-06	6-[4-[[2-エチル-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI04-07-02R	EI04-07	6-[4-[[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI04-08-02R	EI04-08	6-[4-[[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI04-09-02R	EI04-09	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI04-10-02R	EI04-10	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI04-11-02R	EI04-11	6-[4-[[3-エトキシ-5-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI04-12-02R	EI04-12	6-[4-[[3-エトキシ-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI04-13-02R	EI04-13	6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI04-14-02R	EI04-14	6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI04-15-02R	EI04-15	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI04-16-02R	EI04-16	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI04-17-02R	EI04-17	6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI04-18-02R	EI04-18	6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI04-19-02R	EI04-19	6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸

EI04-20-02R	EI04-20	6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI04-21-02R	EI04-21	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI04-22-02R	EI04-22	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI04-23-02R	EI04-23	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI04-24-02R	EI04-24	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI04-25-02R	EI04-25	6-[4-[[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI04-26-02R	EI04-26	6-[4-[[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボン酸
EI05-01-02R	EI05-01	4-[4-[1-[2-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI05-02-02R	EI05-02	4-[4-[1-[2-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI05-03-02R	EI05-03	4-[4-[1-[4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]安息香酸
EI05-04-02R	EI05-04	4-[4-[1-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]安息香酸

【０５７４】

実施例６－３－７－Ａ：混合物ｍｉｘＥＩ０７－０２Ｒの合成

【化１１０】



【０５７５】

２ｍＬのガラスバイアルに、［表ＥＩ０６］に示した混合物ｍｉｘＥＩ０６－０２Ｒ（５０ｍｇ，担持量０．６４８ｍｍｏｌ／ｇ，０．０３２４ｍｍｏｌ）とＮＭＰ（１．２８ｍＬ）を加え室温で１時間振とうした。ジエチルアミン（ＢＢ３０，１０．１μＬ，０．０９７ｍｍｏｌ）、ＤＩＣ（３０．３μＬ，０．１９４ｍｍｏｌ）とＨＯＡｔ（２６．５ｍｇ，０．１９４ｍｍｏｌ）を加え、４０℃で２２時間振とうした。反応液とレジンの懸濁液をＮＭＰを使用してフィルター付きシリンジに移し、ＮＭＰ（１．２ｍＬ）で３回、ＭｅＯＨ（１．２ｍＬ）で３回、ＤＣＭ（１．２ｍＬ）で３回、ヘプタン（１．２ｍＬ）で３回繰り返して洗浄した後に減圧下でレジンを乾燥し、［表ＥＩ０７］に示した標題混合物を得た。得られた混合物に含まれる化合物名を［表ＥＩ０７］に示す。

【０５７６】

［表ＥＩ０７］混合物番号：ｍｉｘＥＩ０７－０２Ｒ，使用したアミン試薬：ＢＢ３０，切り出し後の混合物番号：ｍｉｘＥＩ０７

【表６１】

レジン化合物番号	切り出し後の化合物番号	表EJ01の切り出し後化合物の別名	化合物名
EI07-01-02R	EI07-01	4J01	N,N-ジエチル-6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI07-02-02R	EI07-02	4J02	N,N-ジエチル-6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI07-03-02R	EI07-03	4J03	N,N-ジエチル-6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI07-04-02R	EI07-04	4J04	N,N-ジエチル-6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI07-05-02R	EI07-05	4J05	N,N-ジエチル-6-[4-[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI07-06-02R	EI07-06	4J06	N,N-ジエチル-6-[4-[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI07-07-02R	EI07-07	4J07	N,N-ジエチル-6-[4-[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI07-08-02R	EI07-08	4J08	N,N-ジエチル-6-[4-[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI07-09-02R	EI07-09	4J09	N,N-ジエチル-6-[4-[5-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI07-10-02R	EI07-10	4J10	N,N-ジエチル-6-[4-[5-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI07-11-02R	EI07-11	4J11	N,N-ジエチル-6-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI07-12-02R	EI07-12	4J12	N,N-ジエチル-6-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI07-13-02R	EI07-13	4J13	N,N-ジエチル-6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI07-14-02R	EI07-14	4J14	N,N-ジエチル-6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI07-15-	EI07-15	4J15	6-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイ

02R			ル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルピリダジン-3-カルボキサミド
EI07-16-02R	EI07-16	4J16	6-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルピリダジン-3-カルボキサミド
EI07-17-02R	EI07-17	4J17	N,N-ジエチル-6-[4-[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI07-18-02R	EI07-18	4J18	N,N-ジエチル-6-[4-[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI07-19-02R	EI07-19	4J19	N,N-ジエチル-6-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI07-20-02R	EI07-20	4J20	N,N-ジエチル-6-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI07-21-02R	EI07-21	4J21	N,N-ジエチル-6-[4-[3-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI07-22-02R	EI07-22	4J22	N,N-ジエチル-6-[4-[3-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI07-23-02R	EI07-23	4J23	N,N-ジエチル-4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI07-24-02R	EI07-24	4J24	N,N-ジエチル-4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI07-25-02R	EI07-25	4J25	N,N-ジエチル-4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI07-26-02R	EI07-26	4J26	N,N-ジエチル-4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI07-27-02R	EI07-27	4J27	N,N-ジエチル-4-[4-[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI07-28-02R	EI07-28	4J28	N,N-ジエチル-4-[4-[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI07-29-02R	EI07-29	4J29	N,N-ジエチル-4-[4-[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI07-30-02R	EI07-30	4J30	N,N-ジエチル-4-[4-[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI07-31-02R	EI07-31	4J31	N,N-ジエチル-4-[4-[5-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI07-32-02R	EI07-32	4J32	N,N-ジエチル-4-[4-[5-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI07-33-02R	EI07-33	4J33	N,N-ジエチル-4-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI07-34-02R	EI07-34	4J34	N,N-ジエチル-4-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI07-35-02R	EI07-35	4J35	N,N-ジエチル-4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド

EI07-36-02R	EI07-36	4J36	N,N-ジエチル-4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI07-37-02R	EI07-37	4J37	4-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルベンズアミド
EI07-38-02R	EI07-38	4J38	4-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルベンズアミド
EI07-39-02R	EI07-39	4J39	N,N-ジエチル-4-[4-[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI07-40-02R	EI07-40	4J40	N,N-ジエチル-4-[4-[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI07-41-02R	EI07-41	4J41	N,N-ジエチル-4-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI07-42-02R	EI07-42	4J42	N,N-ジエチル-4-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI07-43-02R	EI07-43	4J43	N,N-ジエチル-4-[4-[3-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI07-44-02R	EI07-44	4J44	N,N-ジエチル-4-[4-[3-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI07-45-02R	EI07-45	4J45	N,N-ジエチル-4-[4-[[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI07-46-02R	EI07-46	4J46	N,N-ジエチル-4-[4-[[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI07-47-02R	EI07-47	4J47	N,N-ジエチル-4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI07-48-02R	EI07-48	4J48	N,N-ジエチル-4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI07-49-02R	EI07-49	4J49	N,N-ジエチル-4-[4-[[2-エチル-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI07-50-02R	EI07-50	4J50	N,N-ジエチル-4-[4-[[2-エチル-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI07-51-02R	EI07-51	4J51	N,N-ジエチル-4-[4-[[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI07-52-02R	EI07-52	4J52	N,N-ジエチル-4-[4-[[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI07-53-02R	EI07-53	4J53	N,N-ジエチル-4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI07-54-02R	EI07-54	4J54	N,N-ジエチル-4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI07-55-02R	EI07-55	4J55	4-[4-[[3-エトキシ-5-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルベンズアミド
EI07-56-02R	EI07-56	4J56	4-[4-[[3-エトキシ-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルベンズアミド
EI07-57-02R	EI07-57	4J57	N,N-ジエチル-4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド

EI07-58-02R	EI07-58	4J58	N,N-ジエチル-4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI07-59-02R	EI07-59	4J59	N,N-ジエチル-4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI07-60-02R	EI07-60	4J60	N,N-ジエチル-4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI07-61-02R	EI07-61	4J61	N,N-ジエチル-4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI07-62-02R	EI07-62	4J62	N,N-ジエチル-4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI07-63-02R	EI07-63	4J63	N,N-ジエチル-4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI07-64-02R	EI07-64	4J64	N,N-ジエチル-4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI07-65-02R	EI07-65	4J65	N,N-ジエチル-4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI07-66-02R	EI07-66	4J66	N,N-ジエチル-4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI07-67-02R	EI07-67	4J67	N,N-ジエチル-4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI07-68-02R	EI07-68	4J68	N,N-ジエチル-4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI07-69-02R	EI07-69	4J69	N,N-ジエチル-4-[4-[[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI07-70-02R	EI07-70	4J70	N,N-ジエチル-4-[4-[[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI07-71-02R	EI07-71	4J71	N,N-ジエチル-6-[4-[[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI07-72-02R	EI07-72	4J72	N,N-ジエチル-6-[4-[[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI07-73-02R	EI07-73	4J73	N,N-ジエチル-6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI07-74-02R	EI07-74	4J74	N,N-ジエチル-6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI07-75-02R	EI07-75	4J75	N,N-ジエチル-6-[4-[[2-エチル-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI07-76-02R	EI07-76	4J76	N,N-ジエチル-6-[4-[[2-エチル-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI07-77-	EI07-77	4J77	N,N-ジエチル-6-[4-[[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニ

02R			ル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI07-78-02R	EI07-78	4J78	N,N-ジエチル-6-[4-[[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI07-79-02R	EI07-79	4J79	N,N-ジエチル-6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI07-80-02R	EI07-80	4J80	N,N-ジエチル-6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI07-81-02R	EI07-81	4J81	6-[4-[[3-エトキシ-5-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルピリダジン-3-カルボキサミド
EI07-82-02R	EI07-82	4J82	6-[4-[[3-エトキシ-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルピリダジン-3-カルボキサミド
EI07-83-02R	EI07-83	4J83	N,N-ジエチル-6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI07-84-02R	EI07-84	4J84	N,N-ジエチル-6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI07-85-02R	EI07-85	4J85	N,N-ジエチル-6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI07-86-02R	EI07-86	4J86	N,N-ジエチル-6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI07-87-02R	EI07-87	4J87	N,N-ジエチル-6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI07-88-02R	EI07-88	4J88	N,N-ジエチル-6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI07-89-02R	EI07-89	4J89	N,N-ジエチル-6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI07-90-02R	EI07-90	4J90	N,N-ジエチル-6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI07-91-02R	EI07-91	4J91	N,N-ジエチル-6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI07-92-02R	EI07-92	4J92	N,N-ジエチル-6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI07-93-02R	EI07-93	4J93	N,N-ジエチル-6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI07-94-	EI07-94	4J94	N,N-ジエチル-6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チ

02R			オフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI07-95-02R	EI07-95	4J95	N,N-ジエチル-6-[4-[[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI07-96-02R	EI07-96	4J96	N,N-ジエチル-6-[4-[[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI07-97-02R	EI07-97	4J97	N,N-ジエチル-4-[4-[1-[4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI07-98-02R	EI07-98	4J98	N,N-ジエチル-4-[4-[1-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI07-99-02R	EI07-99	4J99	N,N-ジエチル-4-[4-[1-[2-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI07-100-02R	EI07-100	4J100	N,N-ジエチル-4-[4-[1-[2-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド

【０５７７】

実施例６－３－７－Ｂ：混合物ｍｉｘＥＩ０８－０２Ｒ～ｍｉｘＥＩ１０－０２Ｒの合成

［表ＥＩ０６］に示した混合物ｍｉｘＥＩ０６－０２Ｒ（５０ｍｇ，担持量０．６４８ｍｍｏｌ／ｇ，０．０３２４ｍｍｏｌ）とアミン試薬（ＢＢ３１～ＢＢ３３）を用いて、実施例６－３－７－Ａと同様の方法で合成し、［表ＥＩ０８］～［表ＥＩ１０］に示した標題混合物を得た。得られた混合物に含まれる化合物名を［表ＥＩ０８］～［表ＥＩ１０］に示す。

【０５７８】

［表ＥＩ０８］混合物番号：ｍｉｘＥＩ０８－０２Ｒ，使用したアミン試薬：ＢＢ３１，切り出し後の混合物番号：ｍｉｘＥＩ０８

【表６２】

レジン化合物番号	切り出し後の化合物番号	表EJ02の切り出し後化合物の別名	化合物名
EI08-01-02R	EI08-01	1M01	6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI08-02-02R	EI08-02	1M02	6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI08-03-02R	EI08-03	1M03	6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI08-04-02R	EI08-04	1M04	6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI08-05-	EI08-05	1M05	6-[4-[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピ

02R			ペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI08-06-02R	EI08-06	1M06	6-[4-[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI08-07-02R	EI08-07	1M07	6-[4-[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI08-08-02R	EI08-08	1M08	6-[4-[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI08-09-02R	EI08-09	1M09	6-[4-[5-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI08-10-02R	EI08-10	1M10	6-[4-[5-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI08-11-02R	EI08-11	1M11	6-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI08-12-02R	EI08-12	1M12	6-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI08-13-02R	EI08-13	1M13	6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI08-14-02R	EI08-14	1M14	6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI08-15-02R	EI08-15	1M15	6-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI08-16-02R	EI08-16	1M16	6-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI08-17-02R	EI08-17	1M17	6-[4-[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI08-18-02R	EI08-18	1M18	6-[4-[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI08-19-02R	EI08-19	1M19	6-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI08-20-02R	EI08-20	1M20	6-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI08-21-02R	EI08-21	1M21	6-[4-[3-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI08-22-02R	EI08-22	1M22	6-[4-[3-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イ

			ル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI08-23-02R	EI08-23	1M23	4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI08-24-02R	EI08-24	1M24	4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI08-25-02R	EI08-25	1M25	4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI08-26-02R	EI08-26	1M26	4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI08-27-02R	EI08-27	1M27	4-[4-[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI08-28-02R	EI08-28	1M28	4-[4-[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI08-29-02R	EI08-29	1M29	4-[4-[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI08-30-02R	EI08-30	1M30	4-[4-[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI08-31-02R	EI08-31	1M31	4-[4-[5-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI08-32-02R	EI08-32	1M32	4-[4-[5-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI08-33-02R	EI08-33	1M33	4-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI08-34-02R	EI08-34	1M34	4-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI08-35-02R	EI08-35	1M35	4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI08-36-02R	EI08-36	1M36	4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI08-37-02R	EI08-37	1M37	4-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI08-38-02R	EI08-38	1M38	4-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI08-39-02R	EI08-39	1M39	4-[4-[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI08-40-02R	EI08-40	1M40	4-[4-[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI08-41-02R	EI08-41	1M41	4-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI08-42-02R	EI08-42	1M42	4-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI08-43-02R	EI08-43	1M43	4-[4-[3-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI08-44-02R	EI08-44	1M44	4-[4-[3-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イ

			ル]-N-プロピルベンズアミド
EI08-45-02R	EI08-45	1M45	4-[4-[[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI08-46-02R	EI08-46	1M46	4-[4-[[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI08-47-02R	EI08-47	1M47	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI08-48-02R	EI08-48	1M48	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI08-49-02R	EI08-49	1M49	4-[4-[[2-エチル-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI08-50-02R	EI08-50	1M50	4-[4-[[2-エチル-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI08-51-02R	EI08-51	1M51	4-[4-[[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI08-52-02R	EI08-52	1M52	4-[4-[[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI08-53-02R	EI08-53	1M53	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI08-54-02R	EI08-54	1M54	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI08-55-02R	EI08-55	1M55	4-[4-[[3-エトキシ-5-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI08-56-02R	EI08-56	1M56	4-[4-[[3-エトキシ-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI08-57-02R	EI08-57	1M57	4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI08-58-02R	EI08-58	1M58	4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI08-59-02R	EI08-59	1M59	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI08-60-02R	EI08-60	1M60	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI08-61-02R	EI08-61	1M61	4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI08-62-02R	EI08-62	1M62	4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI08-63-02R	EI08-63	1M63	4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI08-64-02R	EI08-64	1M64	4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI08-65-02R	EI08-65	1M65	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド

EI08-66-02R	EI08-66	1M66	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI08-67-02R	EI08-67	1M67	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI08-68-02R	EI08-68	1M68	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI08-69-02R	EI08-69	1M69	4-[4-[[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI08-70-02R	EI08-70	1M70	4-[4-[[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI08-71-02R	EI08-71	1M71	6-[4-[[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI08-72-02R	EI08-72	1M72	6-[4-[[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI08-73-02R	EI08-73	1M73	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI08-74-02R	EI08-74	1M74	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI08-75-02R	EI08-75	1M75	6-[4-[[2-エチル-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI08-76-02R	EI08-76	1M76	6-[4-[[2-エチル-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI08-77-02R	EI08-77	1M77	6-[4-[[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI08-78-02R	EI08-78	1M78	6-[4-[[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI08-79-02R	EI08-79	1M79	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI08-80-02R	EI08-80	1M80	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI08-81-02R	EI08-81	1M81	6-[4-[[3-エトキシ-5-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI08-82-02R	EI08-82	1M82	6-[4-[[3-エトキシ-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI08-83-02R	EI08-83	1M83	6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI08-84-02R	EI08-84	1M84	6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド

EI08-85-02R	EI08-85	1M85	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI08-86-02R	EI08-86	1M86	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI08-87-02R	EI08-87	1M87	6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI08-88-02R	EI08-88	1M88	6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI08-89-02R	EI08-89	1M89	6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI08-90-02R	EI08-90	1M90	6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI08-91-02R	EI08-91	1M91	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI08-92-02R	EI08-92	1M92	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI08-93-02R	EI08-93	1M93	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI08-94-02R	EI08-94	1M94	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI08-95-02R	EI08-95	1M95	6-[4-[[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI08-96-02R	EI08-96	1M96	6-[4-[[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI08-97-02R	EI08-97	1M97	4-[4-[1-[4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI08-98-02R	EI08-98	1M98	4-[4-[1-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI08-99-02R	EI08-99	1M99	4-[4-[1-[2-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI08-100-02R	EI08-100	1M100	4-[4-[1-[2-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド

【０５７９】

［表ＥＩ０９］混合物番号：ｍｉｘＥＩ０９－０２Ｒ，使用したアミン試薬：ＢＢ３２，切り出し後の混合物番号：ｍｉｘＥＩ０９

【表６３】

レジン化合物番号	切り出し後の化合物番号	表EJ03の切り出し後化合物の別名	化合物名
EI09-01-02R	EI09-01	IK01	6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI09-02-02R	EI09-02	IK02	6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI09-03-02R	EI09-03	IK03	6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI09-04-02R	EI09-04	IK04	6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI09-05-02R	EI09-05	IK05	6-[4-[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI09-06-02R	EI09-06	IK06	6-[4-[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI09-07-02R	EI09-07	IK07	6-[4-[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI09-08-02R	EI09-08	IK08	6-[4-[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI09-09-02R	EI09-09	IK09	6-[4-[5-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI09-10-02R	EI09-10	IK10	6-[4-[5-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI09-11-02R	EI09-11	IK11	6-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI09-12-02R	EI09-12	IK12	6-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI09-13-02R	EI09-13	IK13	6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI09-14-02R	EI09-14	IK14	6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI09-15-02R	EI09-15	IK15	6-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI09-16-	EI09-16	IK16	6-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベ

02R			ンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI09-17-02R	EI09-17	1K17	6-[4-[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI09-18-02R	EI09-18	1K18	6-[4-[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI09-19-02R	EI09-19	1K19	6-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI09-20-02R	EI09-20	1K20	6-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI09-21-02R	EI09-21	1K21	6-[4-[3-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI09-22-02R	EI09-22	1K22	6-[4-[3-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI09-23-02R	EI09-23	1K23	4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI09-24-02R	EI09-24	1K24	4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI09-25-02R	EI09-25	1K25	4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI09-26-02R	EI09-26	1K26	4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI09-27-02R	EI09-27	1K27	4-[4-[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI09-28-02R	EI09-28	1K28	4-[4-[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI09-29-02R	EI09-29	1K29	4-[4-[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI09-30-02R	EI09-30	1K30	4-[4-[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI09-31-02R	EI09-31	1K31	4-[4-[5-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI09-32-02R	EI09-32	1K32	4-[4-[5-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI09-33-02R	EI09-33	1K33	4-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI09-34-02R	EI09-34	1K34	4-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI09-35-02R	EI09-35	1K35	4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI09-36-02R	EI09-36	1K36	4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI09-37-02R	EI09-37	1K37	4-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド

EI09-38-02R	EI09-38	1K38	4-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI09-39-02R	EI09-39	1K39	4-[4-[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI09-40-02R	EI09-40	1K40	4-[4-[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI09-41-02R	EI09-41	1K41	4-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI09-42-02R	EI09-42	1K42	4-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI09-43-02R	EI09-43	1K43	4-[4-[3-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI09-44-02R	EI09-44	1K44	4-[4-[3-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI09-45-02R	EI09-45	1K45	4-[4-[[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI09-46-02R	EI09-46	1K46	4-[4-[[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI09-47-02R	EI09-47	1K47	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI09-48-02R	EI09-48	1K48	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI09-49-02R	EI09-49	1K49	4-[4-[[2-エチル-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI09-50-02R	EI09-50	1K50	4-[4-[[2-エチル-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI09-51-02R	EI09-51	1K51	4-[4-[[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI09-52-02R	EI09-52	1K52	4-[4-[[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI09-53-02R	EI09-53	1K53	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI09-54-02R	EI09-54	1K54	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI09-55-02R	EI09-55	1K55	4-[4-[[3-エトキシ-5-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI09-56-02R	EI09-56	1K56	4-[4-[[3-エトキシ-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI09-57-02R	EI09-57	1K57	4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI09-58-02R	EI09-58	1K58	4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI09-59-02R	EI09-59	1K59	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド

EI09-60-02R	EI09-60	1K60	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI09-61-02R	EI09-61	1K61	4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI09-62-02R	EI09-62	1K62	4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI09-63-02R	EI09-63	1K63	4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI09-64-02R	EI09-64	1K64	4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI09-65-02R	EI09-65	1K65	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI09-66-02R	EI09-66	1K66	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI09-67-02R	EI09-67	1K67	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI09-68-02R	EI09-68	1K68	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI09-69-02R	EI09-69	1K69	4-[4-[[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI09-70-02R	EI09-70	1K70	4-[4-[[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI09-71-02R	EI09-71	1K71	6-[4-[[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI09-72-02R	EI09-72	1K72	6-[4-[[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI09-73-02R	EI09-73	1K73	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI09-74-02R	EI09-74	1K74	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI09-75-02R	EI09-75	1K75	6-[4-[[2-エチル-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI09-76-02R	EI09-76	1K76	6-[4-[[2-エチル-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI09-77-02R	EI09-77	1K77	6-[4-[[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI09-78-02R	EI09-78	1K78	6-[4-[[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI09-79-	EI09-79	1K79	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メ

02R			チル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI09-80-02R	EI09-80	IK80	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI09-81-02R	EI09-81	IK81	6-[4-[[3-エトキシ-5-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI09-82-02R	EI09-82	IK82	6-[4-[[3-エトキシ-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI09-83-02R	EI09-83	IK83	6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI09-84-02R	EI09-84	IK84	6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI09-85-02R	EI09-85	IK85	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI09-86-02R	EI09-86	IK86	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI09-87-02R	EI09-87	IK87	6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI09-88-02R	EI09-88	IK88	6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI09-89-02R	EI09-89	IK89	6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI09-90-02R	EI09-90	IK90	6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI09-91-02R	EI09-91	IK91	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI09-92-02R	EI09-92	IK92	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI09-93-02R	EI09-93	IK93	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI09-94-02R	EI09-94	IK94	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI09-95-02R	EI09-95	IK95	6-[4-[[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI09-96-	EI09-96	IK96	6-[4-[[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]フェ

02R			ニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
EI09-97-02R	EI09-97	1K97	4-[4-[1-[4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI09-98-02R	EI09-98	1K98	4-[4-[1-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI09-99-02R	EI09-99	1K99	4-[4-[1-[2-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
EI09-100-02R	EI09-100	1K100	4-[4-[1-[2-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド

【０５８０】

［表ＥＩ１０］混合物番号：ｍｉｘＥＩ１０－０２Ｒ，使用したアミン試薬：ＢＢ３３，切り出し後の混合物番号：ｍｉｘＥＩ１０

【表６４】

レジン化合物番号	切り出し後の化合物番号	表EJ01の切り出し後化合物の別名	化合物名
EI10-01-02R	EI10-01	1001	6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI10-02-02R	EI10-02	1002	6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI10-03-02R	EI10-03	1003	6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI10-04-02R	EI10-04	1004	6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI10-05-02R	EI10-05	1005	6-[4-[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI10-06-02R	EI10-06	1006	6-[4-[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI10-07-02R	EI10-07	1007	6-[4-[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI10-08-02R	EI10-08	1008	6-[4-[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI10-09-02R	EI10-09	1009	6-[4-[5-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド

EI10-10-02R	EI10-10	1010	6-[4-[5-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI10-11-02R	EI10-11	1011	6-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI10-12-02R	EI10-12	1012	6-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI10-13-02R	EI10-13	1013	6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI10-14-02R	EI10-14	1014	6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI10-15-02R	EI10-15	1015	6-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI10-16-02R	EI10-16	1016	6-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI10-17-02R	EI10-17	1017	6-[4-[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI10-18-02R	EI10-18	1018	6-[4-[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI10-19-02R	EI10-19	1019	6-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI10-20-02R	EI10-20	1020	6-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI10-21-02R	EI10-21	1021	6-[4-[3-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI10-22-02R	EI10-22	1022	6-[4-[3-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI10-23-02R	EI10-23	1023	4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
EI10-24-02R	EI10-24	1024	4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
EI10-25-02R	EI10-25	1025	4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
EI10-26-02R	EI10-26	1026	4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
EI10-27-02R	EI10-27	1027	4-[4-[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド

EI10-28-02R	EI10-28	1028	4-[4-[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
EI10-29-02R	EI10-29	1029	4-[4-[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
EI10-30-02R	EI10-30	1030	4-[4-[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
EI10-31-02R	EI10-31	1031	4-[4-[5-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
EI10-32-02R	EI10-32	1032	4-[4-[5-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
EI10-33-02R	EI10-33	1033	4-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
EI10-34-02R	EI10-34	1034	4-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
EI10-35-02R	EI10-35	1035	4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
EI10-36-02R	EI10-36	1036	4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
EI10-37-02R	EI10-37	1037	4-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
EI10-38-02R	EI10-38	1038	4-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
EI10-39-02R	EI10-39	1039	4-[4-[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
EI10-40-02R	EI10-40	1040	4-[4-[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
EI10-41-02R	EI10-41	1041	4-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
EI10-42-02R	EI10-42	1042	4-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
EI10-43-02R	EI10-43	1043	4-[4-[3-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
EI10-44-02R	EI10-44	1044	4-[4-[3-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
EI10-45-02R	EI10-45	1045	4-[4-[[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド

EI10-46-02R	EI10-46	1046	4-[4-[[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
EI10-47-02R	EI10-47	1047	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
EI10-48-02R	EI10-48	1048	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
EI10-49-02R	EI10-49	1049	4-[4-[[2-エチル-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
EI10-50-02R	EI10-50	1050	4-[4-[[2-エチル-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
EI10-51-02R	EI10-51	1051	4-[4-[[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
EI10-52-02R	EI10-52	1052	4-[4-[[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
EI10-53-02R	EI10-53	1053	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
EI10-54-02R	EI10-54	1054	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
EI10-55-02R	EI10-55	1055	4-[4-[[3-エトキシ-5-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
EI10-56-02R	EI10-56	1056	4-[4-[[3-エトキシ-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
EI10-57-02R	EI10-57	1057	4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
EI10-58-02R	EI10-58	1058	4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
EI10-59-02R	EI10-59	1059	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
EI10-60-02R	EI10-60	1060	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
EI10-61-02R	EI10-61	1061	4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
EI10-62-02R	EI10-62	1062	4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
EI10-63-	EI10-63	1063	4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキ

02R			シ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
EI10-64-02R	EI10-64	1064	4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
EI10-65-02R	EI10-65	1065	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
EI10-66-02R	EI10-66	1066	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
EI10-67-02R	EI10-67	1067	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
EI10-68-02R	EI10-68	1068	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
EI10-69-02R	EI10-69	1069	4-[4-[[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
EI10-70-02R	EI10-70	1070	4-[4-[[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
EI10-71-02R	EI10-71	1071	6-[4-[[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI10-72-02R	EI10-72	1072	6-[4-[[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI10-73-02R	EI10-73	1073	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI10-74-02R	EI10-74	1074	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI10-75-02R	EI10-75	1075	6-[4-[[2-エチル-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI10-76-02R	EI10-76	1076	6-[4-[[2-エチル-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI10-77-02R	EI10-77	1077	6-[4-[[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI10-78-02R	EI10-78	1078	6-[4-[[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI10-79-02R	EI10-79	1079	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI10-80-	EI10-80	1080	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェ

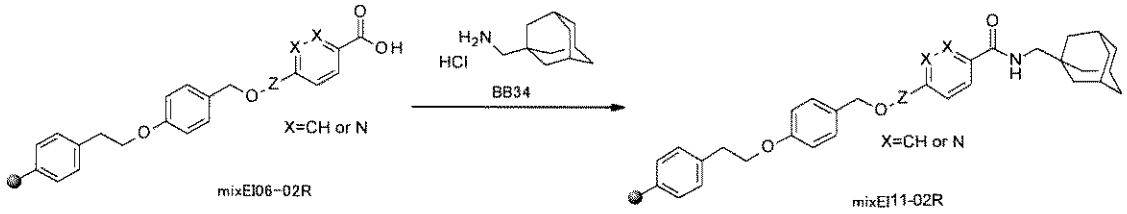
02R			ニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI10-81-02R	EI10-81	1081	6-[4-[[3-エトキシ-5-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI10-82-02R	EI10-82	1082	6-[4-[[3-エトキシ-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI10-83-02R	EI10-83	1083	6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI10-84-02R	EI10-84	1084	6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI10-85-02R	EI10-85	1085	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI10-86-02R	EI10-86	1086	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI10-87-02R	EI10-87	1087	6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI10-88-02R	EI10-88	1088	6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI10-89-02R	EI10-89	1089	6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI10-90-02R	EI10-90	1090	6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI10-91-02R	EI10-91	1091	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI10-92-02R	EI10-92	1092	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI10-93-02R	EI10-93	1093	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI10-94-02R	EI10-94	1094	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI10-95-02R	EI10-95	1095	6-[4-[[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI10-96-02R	EI10-96	1096	6-[4-[[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI10-97-	EI10-97	1097	4-[4-[1-[4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]エチル]ピペ

02R			ラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
EI10-98-02R	EI10-98	1098	4-[4-[1-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
EI10-99-02R	EI10-99	1099	4-[4-[1-[2-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
EI10-100-02R	EI10-100	10100	4-[4-[1-[2-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド

【０５８１】

実施例６－３－８：混合物ｍｉｘＥＩ１１－０２Ｒの合成

【化１１１】



【０５８２】

２ｍＬのガラスバイアルに、［表ＥＩ０６］に示した混合物ｍｉｘＥＩ０６－０２Ｒ（５０ｍｇ，担持量０．６４８ｍｍｏｌ／ｇ，０．０３２４ｍｍｏｌ）とＮＭＰ（１．２８ｍＬ）を加え室温で１時間振とうした。１－アダマンチルメタンアミン塩酸塩（ＢＢ３４，１９．６ｍｇ，９７μｍｏｌ）、ＤＩＣ（３０．３μＬ，０．１９４ｍｍｏｌ）、ＨＯＡｔ（２６．５ｍｇ，０．１９４ｍｍｏｌ）とＤＩＰＥＡ（１７μＬ，９７μｍｏｌ）を加え、４０℃で２２時間振とうした。反応液とレジンの懸濁液をＮＭＰ溶液を使用してフィルター付きシリンジに移した。ＮＭＰ（１．２ｍＬ）で３回、ＭｅＯＨ（１．２ｍＬ）で３回、ＤＣＭ（１．２ｍＬ）で３回、ヘプタン（１．２ｍＬ）で３回繰り返して洗浄した後に減圧下でレジンを乾燥し、［表ＥＩ１１］に示した標題混合物を得た。得られた混合物に含まれる化合物名を［表ＥＩ１１］に示す。

【０５８３】

［表ＥＩ１１］混合物番号：ｍｉｘＥＩ１１－０２Ｒ，使用したアミン試薬：ＢＢ３４，切り出し後の混合物番号：ｍｉｘＥＩ１１

【表６４－１】

レジン化合物番号	切り出し後の化合物番号	表EJ05の切り出し後化合物の別名	化合物名

EI11-01-02R	EI11-01	1A01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI11-02-02R	EI11-02	1A02	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI11-03-02R	EI11-03	1A03	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI11-04-02R	EI11-04	1A04	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI11-05-02R	EI11-05	1A05	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI11-06-02R	EI11-06	1A06	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI11-07-02R	EI11-07	1A07	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI11-08-02R	EI11-08	1A08	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI11-09-02R	EI11-09	1A09	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[5-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI11-10-02R	EI11-10	1A10	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[5-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI11-11-02R	EI11-11	1A11	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI11-12-02R	EI11-12	1A12	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI11-13-02R	EI11-13	1A13	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI11-14-02R	EI11-14	1A14	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI11-15-02R	EI11-15	1A15	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI11-16-02R	EI11-16	1A16	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI11-17-02R	EI11-17	1A17	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド

EI11-18-02R	EI11-18	1A18	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI11-19-02R	EI11-19	1A19	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI11-20-02R	EI11-20	1A20	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI11-21-02R	EI11-21	1A21	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[3-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI11-22-02R	EI11-22	1A22	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[3-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI11-23-02R	EI11-23	1A23	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI11-24-02R	EI11-24	1A24	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI11-25-02R	EI11-25	1A25	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI11-26-02R	EI11-26	1A26	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI11-27-02R	EI11-27	1A27	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI11-28-02R	EI11-28	1A28	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI11-29-02R	EI11-29	1A29	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI11-30-02R	EI11-30	1A30	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI11-31-02R	EI11-31	1A31	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[5-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI11-32-02R	EI11-32	1A32	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[5-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI11-33-02R	EI11-33	1A33	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI11-34-02R	EI11-34	1A34	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI11-35-02R	EI11-35	1A35	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンズア

			ミド
EI11-36-02R	EI11-36	IA36	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI11-37-02R	EI11-37	IA37	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI11-38-02R	EI11-38	IA38	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI11-39-02R	EI11-39	IA39	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI11-40-02R	EI11-40	IA40	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI11-41-02R	EI11-41	IA41	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI11-42-02R	EI11-42	IA42	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI11-43-02R	EI11-43	IA43	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[3-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI11-44-02R	EI11-44	IA44	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[3-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI11-45-02R	EI11-45	IA45	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI11-46-02R	EI11-46	IA46	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI11-47-02R	EI11-47	IA47	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI11-48-02R	EI11-48	IA48	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI11-49-02R	EI11-49	IA49	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[2-エチル-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI11-50-02R	EI11-50	IA50	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[2-エチル-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI11-51-02R	EI11-51	IA51	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI11-52-02R	EI11-52	IA52	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド

EI11-53-02R	EI11-53	1A53	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI11-54-02R	EI11-54	1A54	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI11-55-02R	EI11-55	1A55	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[3-エトキシ-5-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI11-56-02R	EI11-56	1A56	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[3-エトキシ-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI11-57-02R	EI11-57	1A57	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI11-58-02R	EI11-58	1A58	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI11-59-02R	EI11-59	1A59	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI11-60-02R	EI11-60	1A60	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI11-61-02R	EI11-61	1A61	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI11-62-02R	EI11-62	1A62	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI11-63-02R	EI11-63	1A63	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI11-64-02R	EI11-64	1A64	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI11-65-02R	EI11-65	1A65	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI11-66-02R	EI11-66	1A66	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI11-67-02R	EI11-67	1A67	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI11-68-02R	EI11-68	1A68	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI11-69-02R	EI11-69	1A69	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド

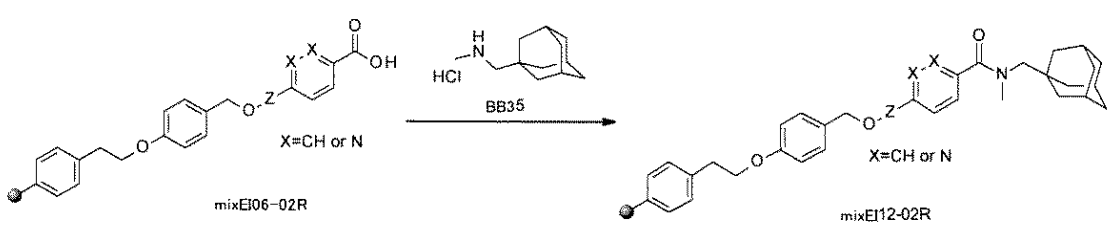
EI11-70-02R	EI11-70	1A70	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI11-71-02R	EI11-71	1A71	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI11-72-02R	EI11-72	1A72	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI11-73-02R	EI11-73	1A73	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI11-74-02R	EI11-74	1A74	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI11-75-02R	EI11-75	1A75	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[2-エチル-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI11-76-02R	EI11-76	1A76	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[2-エチル-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI11-77-02R	EI11-77	1A77	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI11-78-02R	EI11-78	1A78	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI11-79-02R	EI11-79	1A79	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI11-80-02R	EI11-80	1A80	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI11-81-02R	EI11-81	1A81	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[3-エトキシ-5-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI11-82-02R	EI11-82	1A82	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[3-エトキシ-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI11-83-02R	EI11-83	1A83	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI11-84-02R	EI11-84	1A84	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI11-85-02R	EI11-85	1A85	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI11-86-02R	EI11-86	1A86	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド

EI11-87-02R	EI11-87	1A87	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI11-88-02R	EI11-88	1A88	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI11-89-02R	EI11-89	1A89	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI11-90-02R	EI11-90	1A90	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI11-91-02R	EI11-91	1A91	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI11-92-02R	EI11-92	1A92	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI11-93-02R	EI11-93	1A93	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI11-94-02R	EI11-94	1A94	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI11-95-02R	EI11-95	1A95	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI11-96-02R	EI11-96	1A96	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI11-97-02R	EI11-97	1A97	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[1-[4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI11-98-02R	EI11-98	1A98	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[1-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI11-99-02R	EI11-99	1A99	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[1-[2-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI11-100-02R	EI11-100	1A100	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[1-[2-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド

【０５８４】

実施例６－３－９：混合物ｍｉｘＥＩ１２－０２Ｒの合成

【化１１２】



【０５８５】

［表ＥＩ０６］に示した混合物ｍｉｘＥＩ０６－０２Ｒ（５０ｍｇ，担持量０．６４８ｍｍｏｌ／ｇ，０．０３２４ｍｍｏｌ）と１－（１－アダマンチル）－Ｎ－メチルメタンアミン（ＢＢ３５）を用いて、実施例６－３－８と同様の方法で合成し［表ＥＩ１２］に示した標題混合物を得た。得られた混合物に含まれる化合物名を［表ＥＩ１２］に示す。

【０５８６】

［表ＥＩ１２］混合物番号：ｍｉｘＥＩ１２－０２Ｒ，使用したアミン試薬：ＢＢ３５，切り出し後の混合物番号：ｍｉｘＥＩ１２

【表６４－２】

レジン化合物番号	切り出し後の化合物番号	表EJ06の切り出し後化合物の別名	化合物名
EI12-01-02R	EI12-01	3A01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
EI12-02-02R	EI12-02	3A02	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
EI12-03-02R	EI12-03	3A03	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
EI12-04-02R	EI12-04	3A04	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
EI12-05-02R	EI12-05	3A05	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
EI12-06-02R	EI12-06	3A06	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
EI12-07-02R	EI12-07	3A07	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
EI12-08-02R	EI12-08	3A08	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
EI12-09-02R	EI12-09	3A09	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[5-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イ

			ル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
EI12-10-02R	EI12-10	3A10	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[5-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
EI12-11-02R	EI12-11	3A11	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
EI12-12-02R	EI12-12	3A12	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
EI12-13-02R	EI12-13	3A13	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
EI12-14-02R	EI12-14	3A14	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
EI12-15-02R	EI12-15	3A15	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
EI12-16-02R	EI12-16	3A16	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
EI12-17-02R	EI12-17	3A17	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
EI12-18-02R	EI12-18	3A18	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
EI12-19-02R	EI12-19	3A19	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
EI12-20-02R	EI12-20	3A20	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
EI12-21-02R	EI12-21	3A21	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[3-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
EI12-22-02R	EI12-22	3A22	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[3-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
EI12-23-02R	EI12-23	3A23	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
EI12-24-02R	EI12-24	3A24	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
EI12-25-02R	EI12-25	3A25	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベン

			ズアミド
EI12-26-02R	EI12-26	3A26	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
EI12-27-02R	EI12-27	3A27	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
EI12-28-02R	EI12-28	3A28	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
EI12-29-02R	EI12-29	3A29	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
EI12-30-02R	EI12-30	3A30	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
EI12-31-02R	EI12-31	3A31	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[5-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
EI12-32-02R	EI12-32	3A32	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[5-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
EI12-33-02R	EI12-33	3A33	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
EI12-34-02R	EI12-34	3A34	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
EI12-35-02R	EI12-35	3A35	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
EI12-36-02R	EI12-36	3A36	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
EI12-37-02R	EI12-37	3A37	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
EI12-38-02R	EI12-38	3A38	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
EI12-39-02R	EI12-39	3A39	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
EI12-40-02R	EI12-40	3A40	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
EI12-41-02R	EI12-41	3A41	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
EI12-42-02R	EI12-42	3A42	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイ

			ル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
EI12-43-02R	EI12-43	3A43	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[3-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
EI12-44-02R	EI12-44	3A44	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[3-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
EI12-45-02R	EI12-45	3A45	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
EI12-46-02R	EI12-46	3A46	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
EI12-47-02R	EI12-47	3A47	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
EI12-48-02R	EI12-48	3A48	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
EI12-49-02R	EI12-49	3A49	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[2-エチル-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
EI12-50-02R	EI12-50	3A50	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[2-エチル-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
EI12-51-02R	EI12-51	3A51	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
EI12-52-02R	EI12-52	3A52	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
EI12-53-02R	EI12-53	3A53	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
EI12-54-02R	EI12-54	3A54	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
EI12-55-02R	EI12-55	3A55	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[3-エトキシ-5-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
EI12-56-02R	EI12-56	3A56	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[3-エトキシ-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
EI12-57-02R	EI12-57	3A57	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
EI12-58-02R	EI12-58	3A58	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
EI12-59-02R	EI12-59	3A59	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-

			N-メチルベンズアミド
EI12-60-02R	EI12-60	3A60	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
EI12-61-02R	EI12-61	3A61	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
EI12-62-02R	EI12-62	3A62	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
EI12-63-02R	EI12-63	3A63	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
EI12-64-02R	EI12-64	3A64	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
EI12-65-02R	EI12-65	3A65	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
EI12-66-02R	EI12-66	3A66	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
EI12-67-02R	EI12-67	3A67	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
EI12-68-02R	EI12-68	3A68	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
EI12-69-02R	EI12-69	3A69	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
EI12-70-02R	EI12-70	3A70	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
EI12-71-02R	EI12-71	3A71	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
EI12-72-02R	EI12-72	3A72	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
EI12-73-02R	EI12-73	3A73	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
EI12-74-02R	EI12-74	3A74	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
EI12-75-02R	EI12-75	3A75	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[2-エチル-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
EI12-76-02R	EI12-76	3A76	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[2-エチル-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-

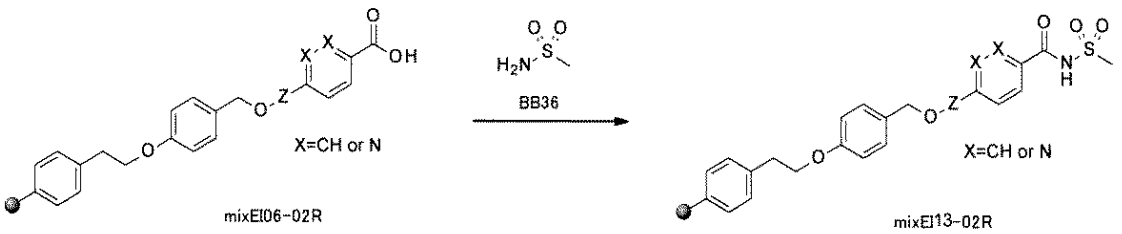
			N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
EI12-77-02R	EI12-77	3A77	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
EI12-78-02R	EI12-78	3A78	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
EI12-79-02R	EI12-79	3A79	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
EI12-80-02R	EI12-80	3A80	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
EI12-81-02R	EI12-81	3A81	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[3-エトキシ-5-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
EI12-82-02R	EI12-82	3A82	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[3-エトキシ-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
EI12-83-02R	EI12-83	3A83	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
EI12-84-02R	EI12-84	3A84	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
EI12-85-02R	EI12-85	3A85	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
EI12-86-02R	EI12-86	3A86	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
EI12-87-02R	EI12-87	3A87	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
EI12-88-02R	EI12-88	3A88	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
EI12-89-02R	EI12-89	3A89	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
EI12-90-02R	EI12-90	3A90	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
EI12-91-02R	EI12-91	3A91	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
EI12-92-02R	EI12-92	3A92	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
EI12-93-02R	EI12-93	3A93	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチ

			ルピリダジン-3-カルボキサミド
EI12-94-02R	EI12-94	3A94	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
EI12-95-02R	EI12-95	3A95	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
EI12-96-02R	EI12-96	3A96	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
EI12-97-02R	EI12-97	3A97	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[1-[4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
EI12-98-02R	EI12-98	3A98	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[1-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
EI12-99-02R	EI12-99	3A99	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[1-[2-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
EI12-100-02R	EI12-100	3A100	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[1-[2-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド

【０５８７】

実施例６－３－１０－Ａ：混合物ｍｉｘＥＩ１３－０２Ｒの合成

【化１１３】



【０５８８】

２ｍＬのガラスバイアルに、［表ＥＩ０６］に示した混合物ｍｉｘＥＩ０６－０２Ｒ（５０ｍｇ，担持量０．６４８ｍｍｏｌ／ｇ，０．０３２４ｍｍｏｌ）とＮＭＰ（１．１３ｍＬ）を加え室温で１時間振とうした。ＨＡＴＵ（７３．９ｍｇ，０．１９４ｍｍｏｌ）と２，６－ルチジン（２２．６μＬ，０．１９４ｍｍｏｌ）を室温で加え、４０℃で３時間振とうした。メタンスルホンアミド（ＢＢ３６，２１．６ｍｇ，０．２２７ｍｍｏｌ）とＰｈｏｓｐｈａｚｅｎｅ Ｂａｓｅ Ｐ１ｔＢｕ（１２４μＬ，０．４８６ｍｍｏｌ）を室温で加え、４０℃で１８時間振とうした。ｎ－プロピルアミン（２７μＬ，０．３２４ｍｍｏｌ）を室温で加え、１時間振とうした。反応液とレジンの懸濁液をＮＭＰを使用してフィルター付きシリンジに移し、ＮＭＰ（１．２ｍＬ）で３回、ＨＯＡｔ／ＮＭＰ（０．２Ｍ，１．２ｍＬ）で３回、ＮＭＰ（１．２ｍＬ）で３回、ＭｅＯＨ（１．２ｍＬ）で３回、ＤＣＭ（１．２ｍＬ）で３回、ヘプタン（１．２ｍＬ）で３回繰り返して洗浄した後に減圧下で乾燥し、［表ＥＩ１３］に示した標題混合物を得た。得られた混合物に含まれる化合物名を［表ＥＩ１３］に示す。

【０５８９】

［表ＥＩ１３］混合物番号：ｍｉｘＥＩ１３－０２Ｒ，使用したアミン試薬：ＢＢ３６，切り出し後の混合物番号：ｍｉｘＥＩ１３

【表６５】

レジン化合物番号	切り出し後の化合物番号	表EJ07の切り出し後化合物の別名	化合物名
EI13-01-02R	EI13-01	2I01	6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI13-02-02R	EI13-02	2I02	6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI13-03-02R	EI13-03	2I03	6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI13-04-02R	EI13-04	2I04	6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI13-05-02R	EI13-05	2I05	6-[4-[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI13-06-02R	EI13-06	2I06	6-[4-[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI13-07-02R	EI13-07	2I07	6-[4-[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI13-08-02R	EI13-08	2I08	6-[4-[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI13-09-02R	EI13-09	2I09	6-[4-[5-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI13-10-02R	EI13-10	2I10	6-[4-[5-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI13-11-02R	EI13-11	2I11	6-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI13-12-02R	EI13-12	2I12	6-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI13-13-	EI13-13	2I13	6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]

02R			ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI13-14-02R	EI13-14	2I14	6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI13-15-02R	EI13-15	2I15	6-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI13-16-02R	EI13-16	2I16	6-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI13-17-02R	EI13-17	2I17	6-[4-[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI13-18-02R	EI13-18	2I18	6-[4-[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI13-19-02R	EI13-19	2I19	6-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI13-20-02R	EI13-20	2I20	6-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI13-21-02R	EI13-21	2I21	6-[4-[3-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI13-22-02R	EI13-22	2I22	6-[4-[3-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI13-23-02R	EI13-23	2I23	4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
EI13-24-02R	EI13-24	2I24	4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
EI13-25-02R	EI13-25	2I25	4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
EI13-26-02R	EI13-26	2I26	4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
EI13-27-02R	EI13-27	2I27	4-[4-[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
EI13-28-02R	EI13-28	2I28	4-[4-[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
EI13-29-02R	EI13-29	2I29	4-[4-[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
EI13-30-02R	EI13-30	2I30	4-[4-[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
EI13-31-02R	EI13-31	2I31	4-[4-[5-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
EI13-32-	EI13-32	2I32	4-[4-[5-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリ

02R			ジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
EI13-33-02R	EI13-33	2I33	4-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
EI13-34-02R	EI13-34	2I34	4-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
EI13-35-02R	EI13-35	2I35	4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
EI13-36-02R	EI13-36	2I36	4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
EI13-37-02R	EI13-37	2I37	4-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
EI13-38-02R	EI13-38	2I38	4-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
EI13-39-02R	EI13-39	2I39	4-[4-[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
EI13-40-02R	EI13-40	2I40	4-[4-[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
EI13-41-02R	EI13-41	2I41	4-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
EI13-42-02R	EI13-42	2I42	4-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
EI13-43-02R	EI13-43	2I43	4-[4-[3-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
EI13-44-02R	EI13-44	2I44	4-[4-[3-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
EI13-45-02R	EI13-45	2I45	4-[4-[[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
EI13-46-02R	EI13-46	2I46	4-[4-[[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
EI13-47-02R	EI13-47	2I47	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
EI13-48-02R	EI13-48	2I48	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
EI13-49-02R	EI13-49	2I49	4-[4-[[2-エチル-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
EI13-50-02R	EI13-50	2I50	4-[4-[[2-エチル-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
EI13-51-02R	EI13-51	2I51	4-[4-[[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド

EI13-52-02R	EI13-52	2I52	4-[4-[[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
EI13-53-02R	EI13-53	2I53	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
EI13-54-02R	EI13-54	2I54	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
EI13-55-02R	EI13-55	2I55	4-[4-[[3-エトキシ-5-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
EI13-56-02R	EI13-56	2I56	4-[4-[[3-エトキシ-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
EI13-57-02R	EI13-57	2I57	4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
EI13-58-02R	EI13-58	2I58	4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
EI13-59-02R	EI13-59	2I59	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
EI13-60-02R	EI13-60	2I60	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
EI13-61-02R	EI13-61	2I61	4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
EI13-62-02R	EI13-62	2I62	4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
EI13-63-02R	EI13-63	2I63	4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
EI13-64-02R	EI13-64	2I64	4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
EI13-65-02R	EI13-65	2I65	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
EI13-66-02R	EI13-66	2I66	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
EI13-67-02R	EI13-67	2I67	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
EI13-68-02R	EI13-68	2I68	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
EI13-69-02R	EI13-69	2I69	4-[4-[[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
EI13-70-02R	EI13-70	2I70	4-[4-[[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベン

			ズアミド
EI13-71-02R	EI13-71	2I71	6-[4-[[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI13-72-02R	EI13-72	2I72	6-[4-[[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI13-73-02R	EI13-73	2I73	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI13-74-02R	EI13-74	2I74	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI13-75-02R	EI13-75	2I75	6-[4-[[2-エチル-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI13-76-02R	EI13-76	2I76	6-[4-[[2-エチル-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI13-77-02R	EI13-77	2I77	6-[4-[[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI13-78-02R	EI13-78	2I78	6-[4-[[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI13-79-02R	EI13-79	2I79	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI13-80-02R	EI13-80	2I80	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI13-81-02R	EI13-81	2I81	6-[4-[[3-エトキシ-5-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI13-82-02R	EI13-82	2I82	6-[4-[[3-エトキシ-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI13-83-02R	EI13-83	2I83	6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI13-84-02R	EI13-84	2I84	6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI13-85-02R	EI13-85	2I85	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI13-86-02R	EI13-86	2I86	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI13-87-02R	EI13-87	2I87	6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニル

			ピリダジン-3-カルボキサミド
EI13-88-02R	EI13-88	2I88	6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI13-89-02R	EI13-89	2I89	6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI13-90-02R	EI13-90	2I90	6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI13-91-02R	EI13-91	2I91	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI13-92-02R	EI13-92	2I92	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI13-93-02R	EI13-93	2I93	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI13-94-02R	EI13-94	2I94	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI13-95-02R	EI13-95	2I95	6-[4-[[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI13-96-02R	EI13-96	2I96	6-[4-[[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI13-97-02R	EI13-97	2I97	4-[4-[1-[4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
EI13-98-02R	EI13-98	2I98	4-[4-[1-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
EI13-99-02R	EI13-99	2I99	4-[4-[1-[2-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
EI13-100-02R	EI13-100	2I100	4-[4-[1-[2-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド

【０５９０】

実施例６－３－１０－Ｂ：混合物ｍｉｘＥＩ１４－０２Ｒ～ｍｉｘＥＩ１８－０２Ｒの合成

［表ＥＩ０６］に示した混合物ｍｉｘＥＩ０６－０２Ｒ（５０ｍｇ，担持量０．６４８ｍｍｏｌ／ｇ，０．０３２４ｍｍｏｌ）とアミン試薬（ＢＢ３７～３８，４０～４２）を用いて、実施例６－３－１０－Ａと同様の方法で合成し［表ＥＩ１４］～［表ＥＩ１８］に示した標題混合物を得た。得られた混合物に含まれる化合物名を［表ＥＩ１４］～［表ＥＩ１８］に示す。

【０５９１】

［表ＥＩ１４］ｍｉｘＥＩ１４－０２Ｒ，使用したアミン試薬：ＢＢ３７，切り出し後の混合物番号：ｍｉｘＥＩ１４

【表６６】

レジン化合物番号	切り出し後の化合物番号	表EJ08の切り出し後化合物の別名	化合物名
EI14-01-02R	EI14-01	2L01	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI14-02-02R	EI14-02	2L02	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI14-03-02R	EI14-03	2L03	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI14-04-02R	EI14-04	2L04	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI14-05-02R	EI14-05	2L05	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI14-06-02R	EI14-06	2L06	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI14-07-02R	EI14-07	2L07	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI14-08-02R	EI14-08	2L08	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI14-09-02R	EI14-09	2L09	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[5-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI14-10-02R	EI14-10	2L10	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[5-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI14-11-02R	EI14-11	2L11	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI14-12-02R	EI14-12	2L12	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI14-13-02R	EI14-13	2L13	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI14-14-02R	EI14-14	2L14	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド

EI14-15-02R	EI14-15	2L15	6-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-tert-ブチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI14-16-02R	EI14-16	2L16	6-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-tert-ブチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI14-17-02R	EI14-17	2L17	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI14-18-02R	EI14-18	2L18	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI14-19-02R	EI14-19	2L19	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI14-20-02R	EI14-20	2L20	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI14-21-02R	EI14-21	2L21	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[3-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI14-22-02R	EI14-22	2L22	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[3-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI14-23-02R	EI14-23	2L23	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI14-24-02R	EI14-24	2L24	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI14-25-02R	EI14-25	2L25	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI14-26-02R	EI14-26	2L26	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI14-27-02R	EI14-27	2L27	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI14-28-02R	EI14-28	2L28	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI14-29-02R	EI14-29	2L29	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI14-30-02R	EI14-30	2L30	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI14-31-02R	EI14-31	2L31	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[5-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI14-32-02R	EI14-32	2L32	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[5-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI14-33-	EI14-33	2L33	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニ

02R			ル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI14-34-02R	EI14-34	2L34	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI14-35-02R	EI14-35	2L35	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI14-36-02R	EI14-36	2L36	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI14-37-02R	EI14-37	2L37	4-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-tert-ブチルスルホニルベンズアミド
EI14-38-02R	EI14-38	2L38	4-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-tert-ブチルスルホニルベンズアミド
EI14-39-02R	EI14-39	2L39	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI14-40-02R	EI14-40	2L40	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI14-41-02R	EI14-41	2L41	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI14-42-02R	EI14-42	2L42	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI14-43-02R	EI14-43	2L43	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[3-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI14-44-02R	EI14-44	2L44	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[3-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI14-45-02R	EI14-45	2L45	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI14-46-02R	EI14-46	2L46	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI14-47-02R	EI14-47	2L47	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI14-48-02R	EI14-48	2L48	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI14-49-02R	EI14-49	2L49	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[2-エチル-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI14-50-02R	EI14-50	2L50	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[2-エチル-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI14-51-	EI14-51	2L51	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[3-フルオロ-4-(3-ヒドロ

02R			キシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI14-52-02R	EI14-52	2L52	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI14-53-02R	EI14-53	2L53	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI14-54-02R	EI14-54	2L54	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI14-55-02R	EI14-55	2L55	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[3-エトキシ-5-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI14-56-02R	EI14-56	2L56	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[3-エトキシ-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI14-57-02R	EI14-57	2L57	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI14-58-02R	EI14-58	2L58	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI14-59-02R	EI14-59	2L59	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI14-60-02R	EI14-60	2L60	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI14-61-02R	EI14-61	2L61	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI14-62-02R	EI14-62	2L62	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI14-63-02R	EI14-63	2L63	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI14-64-02R	EI14-64	2L64	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI14-65-02R	EI14-65	2L65	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI14-66-02R	EI14-66	2L66	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI14-67-02R	EI14-67	2L67	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI14-68-	EI14-68	2L68	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン

02R			-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI14-69-02R	EI14-69	2L69	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI14-70-02R	EI14-70	2L70	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI14-71-02R	EI14-71	2L71	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI14-72-02R	EI14-72	2L72	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI14-73-02R	EI14-73	2L73	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI14-74-02R	EI14-74	2L74	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI14-75-02R	EI14-75	2L75	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[2-エチル-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI14-76-02R	EI14-76	2L76	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[2-エチル-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI14-77-02R	EI14-77	2L77	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI14-78-02R	EI14-78	2L78	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI14-79-02R	EI14-79	2L79	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI14-80-02R	EI14-80	2L80	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI14-81-02R	EI14-81	2L81	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[3-エトキシ-5-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI14-82-02R	EI14-82	2L82	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[3-エトキシ-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI14-83-02R	EI14-83	2L83	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI14-84-02R	EI14-84	2L84	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI14-85-	EI14-85	2L85	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニ

02R			ル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI14-86-02R	EI14-86	2L86	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI14-87-02R	EI14-87	2L87	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI14-88-02R	EI14-88	2L88	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI14-89-02R	EI14-89	2L89	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI14-90-02R	EI14-90	2L90	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI14-91-02R	EI14-91	2L91	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI14-92-02R	EI14-92	2L92	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI14-93-02R	EI14-93	2L93	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI14-94-02R	EI14-94	2L94	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI14-95-02R	EI14-95	2L95	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI14-96-02R	EI14-96	2L96	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI14-97-02R	EI14-97	2L97	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[1-[4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI14-98-02R	EI14-98	2L98	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[1-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI14-99-02R	EI14-99	2L99	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[1-[2-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI14-100-02R	EI14-100	2L100	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[1-[2-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド

【０５９２】

[表ＥＩ１５]ｍｉｘＥＩ１５－０２Ｒ，使用したアミン試薬：ＢＢ３８，切り出し後の混合物番号：ｍｉｘＥＩ１５

【表６７】

レジン化合物番号	切り出し後の化合物番号	表EJ09の切り出し後化合物の別名	化合物名
EI15-01-02R	EI15-01	2K01	6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI15-02-02R	EI15-02	2K02	6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI15-03-02R	EI15-03	2K03	6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI15-04-02R	EI15-04	2K04	6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI15-05-02R	EI15-05	2K05	6-[4-[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI15-06-02R	EI15-06	2K06	6-[4-[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI15-07-02R	EI15-07	2K07	6-[4-[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI15-08-02R	EI15-08	2K08	6-[4-[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI15-09-02R	EI15-09	2K09	6-[4-[5-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI15-10-02R	EI15-10	2K10	6-[4-[5-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI15-11-02R	EI15-11	2K11	6-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI15-12-02R	EI15-12	2K12	6-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI15-13-02R	EI15-13	2K13	6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI15-14-02R	EI15-14	2K14	6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI15-15-02R	EI15-15	2K15	6-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルス

			ルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI15-16-02R	EI15-16	2K16	6-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI15-17-02R	EI15-17	2K17	6-[4-[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI15-18-02R	EI15-18	2K18	6-[4-[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI15-19-02R	EI15-19	2K19	6-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI15-20-02R	EI15-20	2K20	6-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI15-21-02R	EI15-21	2K21	6-[4-[3-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI15-22-02R	EI15-22	2K22	6-[4-[3-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI15-23-02R	EI15-23	2K23	4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
EI15-24-02R	EI15-24	2K24	4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
EI15-25-02R	EI15-25	2K25	4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
EI15-26-02R	EI15-26	2K26	4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
EI15-27-02R	EI15-27	2K27	4-[4-[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
EI15-28-02R	EI15-28	2K28	4-[4-[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
EI15-29-02R	EI15-29	2K29	4-[4-[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
EI15-30-02R	EI15-30	2K30	4-[4-[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
EI15-31-02R	EI15-31	2K31	4-[4-[5-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプ

			ロピルスルホニル)ベンズアミド
EI15-32-02R	EI15-32	2K32	4-[4-[5-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
EI15-33-02R	EI15-33	2K33	4-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
EI15-34-02R	EI15-34	2K34	4-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
EI15-35-02R	EI15-35	2K35	4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
EI15-36-02R	EI15-36	2K36	4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
EI15-37-02R	EI15-37	2K37	4-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
EI15-38-02R	EI15-38	2K38	4-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
EI15-39-02R	EI15-39	2K39	4-[4-[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
EI15-40-02R	EI15-40	2K40	4-[4-[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
EI15-41-02R	EI15-41	2K41	4-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
EI15-42-02R	EI15-42	2K42	4-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
EI15-43-02R	EI15-43	2K43	4-[4-[3-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
EI15-44-02R	EI15-44	2K44	4-[4-[3-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
EI15-45-02R	EI15-45	2K45	4-[4-[[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
EI15-46-02R	EI15-46	2K46	4-[4-[[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
EI15-47-02R	EI15-47	2K47	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
EI15-48-	EI15-48	2K48	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニ

02R			ル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
EI15-49-02R	EI15-49	2K49	4-[4-[[2-エチル-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
EI15-50-02R	EI15-50	2K50	4-[4-[[2-エチル-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
EI15-51-02R	EI15-51	2K51	4-[4-[[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
EI15-52-02R	EI15-52	2K52	4-[4-[[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
EI15-53-02R	EI15-53	2K53	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
EI15-54-02R	EI15-54	2K54	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
EI15-55-02R	EI15-55	2K55	4-[4-[[3-エトキシ-5-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
EI15-56-02R	EI15-56	2K56	4-[4-[[3-エトキシ-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
EI15-57-02R	EI15-57	2K57	4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
EI15-58-02R	EI15-58	2K58	4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
EI15-59-02R	EI15-59	2K59	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
EI15-60-02R	EI15-60	2K60	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
EI15-61-02R	EI15-61	2K61	4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
EI15-62-02R	EI15-62	2K62	4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
EI15-63-02R	EI15-63	2K63	4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
EI15-64-02R	EI15-64	2K64	4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
EI15-65-	EI15-65	2K65	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチ

02R			ル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
EI15-66-02R	EI15-66	2K66	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
EI15-67-02R	EI15-67	2K67	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
EI15-68-02R	EI15-68	2K68	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
EI15-69-02R	EI15-69	2K69	4-[4-[[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
EI15-70-02R	EI15-70	2K70	4-[4-[[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
EI15-71-02R	EI15-71	2K71	6-[4-[[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI15-72-02R	EI15-72	2K72	6-[4-[[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI15-73-02R	EI15-73	2K73	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI15-74-02R	EI15-74	2K74	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI15-75-02R	EI15-75	2K75	6-[4-[[2-エチル-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI15-76-02R	EI15-76	2K76	6-[4-[[2-エチル-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI15-77-02R	EI15-77	2K77	6-[4-[[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI15-78-02R	EI15-78	2K78	6-[4-[[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI15-79-02R	EI15-79	2K79	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI15-80-02R	EI15-80	2K80	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI15-81-02R	EI15-81	2K81	6-[4-[[3-エトキシ-5-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI15-82-	EI15-82	2K82	6-[4-[[3-エトキシ-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェ

02R			ニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI15-83-02R	EI15-83	2K83	6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI15-84-02R	EI15-84	2K84	6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI15-85-02R	EI15-85	2K85	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI15-86-02R	EI15-86	2K86	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI15-87-02R	EI15-87	2K87	6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI15-88-02R	EI15-88	2K88	6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI15-89-02R	EI15-89	2K89	6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI15-90-02R	EI15-90	2K90	6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI15-91-02R	EI15-91	2K91	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI15-92-02R	EI15-92	2K92	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI15-93-02R	EI15-93	2K93	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI15-94-02R	EI15-94	2K94	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI15-95-02R	EI15-95	2K95	6-[4-[[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI15-96-02R	EI15-96	2K96	6-[4-[[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
EI15-97-02R	EI15-97	2K97	4-[4-[1-[4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
EI15-98-	EI15-98	2K98	4-[4-[1-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]エチ

02R			ル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
EI15-99-02R	EI15-99	2K99	4-[4-[1-[2-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
EI15-100-02R	EI15-100	2K100	4-[4-[1-[2-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド

【０５９３】
［表ＥＩ１６］ｍｉｘＥＩ１６－０２Ｒ，使用したアミン試薬：ＢＢ４０，切り出し後の混合物番号：ｍｉｘＥＩ１６
【表６８】

レジン化合物番号	切り出し後の化合物番号	表EJ10の切り出し後化合物の別名	化合物名
EI16-01-02R	EI16-01	2A01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI16-02-02R	EI16-02	2A02	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI16-03-02R	EI16-03	2A03	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI16-04-02R	EI16-04	2A04	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI16-05-02R	EI16-05	2A05	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI16-06-02R	EI16-06	2A06	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI16-07-02R	EI16-07	2A07	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI16-08-02R	EI16-08	2A08	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI16-09-02R	EI16-09	2A09	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[5-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI16-10-02R	EI16-10	2A10	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[5-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド

EI16-11-02R	EI16-11	2A11	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI16-12-02R	EI16-12	2A12	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI16-13-02R	EI16-13	2A13	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI16-14-02R	EI16-14	2A14	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI16-15-02R	EI16-15	2A15	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI16-16-02R	EI16-16	2A16	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI16-17-02R	EI16-17	2A17	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI16-18-02R	EI16-18	2A18	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI16-19-02R	EI16-19	2A19	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI16-20-02R	EI16-20	2A20	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI16-21-02R	EI16-21	2A21	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[3-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI16-22-02R	EI16-22	2A22	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[3-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI16-23-02R	EI16-23	2A23	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI16-24-02R	EI16-24	2A24	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI16-25-02R	EI16-25	2A25	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI16-26-02R	EI16-26	2A26	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド

EI16-27-02R	EI16-27	2A27	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI16-28-02R	EI16-28	2A28	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI16-29-02R	EI16-29	2A29	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI16-30-02R	EI16-30	2A30	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI16-31-02R	EI16-31	2A31	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[5-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI16-32-02R	EI16-32	2A32	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[5-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI16-33-02R	EI16-33	2A33	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI16-34-02R	EI16-34	2A34	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI16-35-02R	EI16-35	2A35	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI16-36-02R	EI16-36	2A36	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI16-37-02R	EI16-37	2A37	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI16-38-02R	EI16-38	2A38	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI16-39-02R	EI16-39	2A39	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI16-40-02R	EI16-40	2A40	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI16-41-02R	EI16-41	2A41	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI16-42-02R	EI16-42	2A42	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI16-43-02R	EI16-43	2A43	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[3-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド

EI16-44-02R	EI16-44	2A44	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[3-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI16-45-02R	EI16-45	2A45	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI16-46-02R	EI16-46	2A46	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI16-47-02R	EI16-47	2A47	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI16-48-02R	EI16-48	2A48	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI16-49-02R	EI16-49	2A49	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[2-エチル-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI16-50-02R	EI16-50	2A50	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[2-エチル-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI16-51-02R	EI16-51	2A51	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI16-52-02R	EI16-52	2A52	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI16-53-02R	EI16-53	2A53	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI16-54-02R	EI16-54	2A54	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI16-55-02R	EI16-55	2A55	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[3-エトキシ-5-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI16-56-02R	EI16-56	2A56	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[3-エトキシ-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI16-57-02R	EI16-57	2A57	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI16-58-02R	EI16-58	2A58	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI16-59-02R	EI16-59	2A59	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI16-60-02R	EI16-60	2A60	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド

EI16-61-02R	EI16-61	2A61	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI16-62-02R	EI16-62	2A62	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI16-63-02R	EI16-63	2A63	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI16-64-02R	EI16-64	2A64	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI16-65-02R	EI16-65	2A65	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI16-66-02R	EI16-66	2A66	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI16-67-02R	EI16-67	2A67	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI16-68-02R	EI16-68	2A68	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI16-69-02R	EI16-69	2A69	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI16-70-02R	EI16-70	2A70	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI16-71-02R	EI16-71	2A71	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI16-72-02R	EI16-72	2A72	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI16-73-02R	EI16-73	2A73	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI16-74-02R	EI16-74	2A74	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI16-75-02R	EI16-75	2A75	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[2-エチル-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI16-76-02R	EI16-76	2A76	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[2-エチル-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI16-77-02R	EI16-77	2A77	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド

EI16-78-02R	EI16-78	2A78	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI16-79-02R	EI16-79	2A79	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI16-80-02R	EI16-80	2A80	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI16-81-02R	EI16-81	2A81	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[3-エトキシ-5-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI16-82-02R	EI16-82	2A82	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[3-エトキシ-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI16-83-02R	EI16-83	2A83	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI16-84-02R	EI16-84	2A84	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI16-85-02R	EI16-85	2A85	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI16-86-02R	EI16-86	2A86	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI16-87-02R	EI16-87	2A87	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI16-88-02R	EI16-88	2A88	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI16-89-02R	EI16-89	2A89	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI16-90-02R	EI16-90	2A90	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI16-91-02R	EI16-91	2A91	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI16-92-02R	EI16-92	2A92	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI16-93-02R	EI16-93	2A93	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI16-94-02R	EI16-94	2A94	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド

EI16-95-02R	EI16-95	2A95	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI16-96-02R	EI16-96	2A96	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
EI16-97-02R	EI16-97	2A97	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[1-[4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI16-98-02R	EI16-98	2A98	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[1-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI16-99-02R	EI16-99	2A99	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[1-[2-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
EI16-100-02R	EI16-100	2A100	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[1-[2-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド

【０５９４】

［表ＥＩ１７］ｍｉｘＥＩ１７－０２Ｒ，使用したアミン試薬：ＢＢ４１，切り出し後の混合物番号：ｍｉｘＥＩ１７

【表６９】

レジン化合物番号	切り出し後の化合物番号	表EJ11の切り出し後化合物の別名	化合物名
EI17-01-02R	EI17-01	2Q01	6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI17-02-02R	EI17-02	2Q02	6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI17-03-02R	EI17-03	2Q03	6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI17-04-02R	EI17-04	2Q04	6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI17-05-02R	EI17-05	2Q05	6-[4-[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド

EI17-06-02R	EI17-06	2Q06	6-[4-[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI17-07-02R	EI17-07	2Q07	6-[4-[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI17-08-02R	EI17-08	2Q08	6-[4-[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI17-09-02R	EI17-09	2Q09	6-[4-[5-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI17-10-02R	EI17-10	2Q10	6-[4-[5-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI17-11-02R	EI17-11	2Q11	6-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI17-12-02R	EI17-12	2Q12	6-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI17-13-02R	EI17-13	2Q13	6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI17-14-02R	EI17-14	2Q14	6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI17-15-02R	EI17-15	2Q15	6-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI17-16-02R	EI17-16	2Q16	6-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI17-17-02R	EI17-17	2Q17	6-[4-[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI17-18-02R	EI17-18	2Q18	6-[4-[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピ

			リダジン-3-カルボキサミド
EI17-19-02R	EI17-19	2Q19	6-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI17-20-02R	EI17-20	2Q20	6-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI17-21-02R	EI17-21	2Q21	6-[4-[3-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI17-22-02R	EI17-22	2Q22	6-[4-[3-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI17-23-02R	EI17-23	2Q23	4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI17-24-02R	EI17-24	2Q24	4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI17-25-02R	EI17-25	2Q25	4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI17-26-02R	EI17-26	2Q26	4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI17-27-02R	EI17-27	2Q27	4-[4-[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI17-28-02R	EI17-28	2Q28	4-[4-[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI17-29-02R	EI17-29	2Q29	4-[4-[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI17-30-02R	EI17-30	2Q30	4-[4-[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI17-31-02R	EI17-31	2Q31	4-[4-[5-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI17-32-02R	EI17-32	2Q32	4-[4-[5-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI17-33-02R	EI17-33	2Q33	4-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルフ

			ァニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI17-34-02R	EI17-34	2Q34	4-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI17-35-02R	EI17-35	2Q35	4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI17-36-02R	EI17-36	2Q36	4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI17-37-02R	EI17-37	2Q37	4-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI17-38-02R	EI17-38	2Q38	4-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI17-39-02R	EI17-39	2Q39	4-[4-[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI17-40-02R	EI17-40	2Q40	4-[4-[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI17-41-02R	EI17-41	2Q41	4-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI17-42-02R	EI17-42	2Q42	4-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI17-43-02R	EI17-43	2Q43	4-[4-[3-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI17-44-02R	EI17-44	2Q44	4-[4-[3-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI17-45-02R	EI17-45	2Q45	4-[4-[[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI17-46-02R	EI17-46	2Q46	4-[4-[[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI17-47-02R	EI17-47	2Q47	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド

EI17-48-02R	EI17-48	2Q48	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI17-49-02R	EI17-49	2Q49	4-[4-[[2-エチル-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI17-50-02R	EI17-50	2Q50	4-[4-[[2-エチル-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI17-51-02R	EI17-51	2Q51	4-[4-[[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI17-52-02R	EI17-52	2Q52	4-[4-[[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI17-53-02R	EI17-53	2Q53	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI17-54-02R	EI17-54	2Q54	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI17-55-02R	EI17-55	2Q55	4-[4-[[3-エトキシ-5-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI17-56-02R	EI17-56	2Q56	4-[4-[[3-エトキシ-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI17-57-02R	EI17-57	2Q57	4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI17-58-02R	EI17-58	2Q58	4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI17-59-02R	EI17-59	2Q59	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI17-60-02R	EI17-60	2Q60	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI17-61-02R	EI17-61	2Q61	4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベン

			ズアミド
EI17-62-02R	EI17-62	2Q62	4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI17-63-02R	EI17-63	2Q63	4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI17-64-02R	EI17-64	2Q64	4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI17-65-02R	EI17-65	2Q65	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI17-66-02R	EI17-66	2Q66	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI17-67-02R	EI17-67	2Q67	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI17-68-02R	EI17-68	2Q68	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI17-69-02R	EI17-69	2Q69	4-[4-[[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI17-70-02R	EI17-70	2Q70	4-[4-[[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI17-71-02R	EI17-71	2Q71	6-[4-[[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI17-72-02R	EI17-72	2Q72	6-[4-[[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI17-73-02R	EI17-73	2Q73	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI17-74-02R	EI17-74	2Q74	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI17-75-	EI17-75	2Q75	6-[4-[[2-エチル-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチ

02R			ル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI17-76-02R	EI17-76	2Q76	6-[4-[[2-エチル-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI17-77-02R	EI17-77	2Q77	6-[4-[[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI17-78-02R	EI17-78	2Q78	6-[4-[[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI17-79-02R	EI17-79	2Q79	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI17-80-02R	EI17-80	2Q80	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI17-81-02R	EI17-81	2Q81	6-[4-[[3-エトキシ-5-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI17-82-02R	EI17-82	2Q82	6-[4-[[3-エトキシ-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI17-83-02R	EI17-83	2Q83	6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI17-84-02R	EI17-84	2Q84	6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI17-85-02R	EI17-85	2Q85	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI17-86-02R	EI17-86	2Q86	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI17-87-02R	EI17-87	2Q87	6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド

EI17-88-02R	EI17-88	2Q88	6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI17-89-02R	EI17-89	2Q89	6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI17-90-02R	EI17-90	2Q90	6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI17-91-02R	EI17-91	2Q91	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI17-92-02R	EI17-92	2Q92	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI17-93-02R	EI17-93	2Q93	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI17-94-02R	EI17-94	2Q94	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI17-95-02R	EI17-95	2Q95	6-[4-[[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI17-96-02R	EI17-96	2Q96	6-[4-[[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI17-97-02R	EI17-97	2Q97	4-[4-[1-[4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI17-98-02R	EI17-98	2Q98	4-[4-[1-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI17-99-02R	EI17-99	2Q99	4-[4-[1-[2-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI17-100-02R	EI17-100	2Q100	4-[4-[1-[2-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド

【０５９５】

［表ＥＩ１８］ｍｉｘＥＩ１８－０２Ｒ，使用したアミン試薬：ＢＢ４２，切り出し後の混合物番号：ｍｉｘＥＩ１８

【表７０】

レジン化合物番号	切り出し後の化合物番号	表EJ12の切り出し後化合物の別名	化合物名
EI18-01-02R	EI18-01	2R01	6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI18-02-02R	EI18-02	2R02	6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI18-03-02R	EI18-03	2R03	6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI18-04-02R	EI18-04	2R04	6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI18-05-02R	EI18-05	2R05	6-[4-[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI18-06-02R	EI18-06	2R06	6-[4-[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI18-07-02R	EI18-07	2R07	6-[4-[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI18-08-02R	EI18-08	2R08	6-[4-[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI18-09-02R	EI18-09	2R09	6-[4-[5-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI18-10-02R	EI18-10	2R10	6-[4-[5-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド

EI18-11-02R	EI18-11	2R11	6-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI18-12-02R	EI18-12	2R12	6-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI18-13-02R	EI18-13	2R13	6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI18-14-02R	EI18-14	2R14	6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI18-15-02R	EI18-15	2R15	6-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI18-16-02R	EI18-16	2R16	6-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI18-17-02R	EI18-17	2R17	6-[4-[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI18-18-02R	EI18-18	2R18	6-[4-[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI18-19-02R	EI18-19	2R19	6-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI18-20-02R	EI18-20	2R20	6-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI18-21-02R	EI18-21	2R21	6-[4-[3-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI18-22-02R	EI18-22	2R22	6-[4-[3-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド

EI18-23-02R	EI18-23	2R23	4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI18-24-02R	EI18-24	2R24	4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI18-25-02R	EI18-25	2R25	4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI18-26-02R	EI18-26	2R26	4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI18-27-02R	EI18-27	2R27	4-[4-[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI18-28-02R	EI18-28	2R28	4-[4-[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI18-29-02R	EI18-29	2R29	4-[4-[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI18-30-02R	EI18-30	2R30	4-[4-[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI18-31-02R	EI18-31	2R31	4-[4-[5-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI18-32-02R	EI18-32	2R32	4-[4-[5-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI18-33-02R	EI18-33	2R33	4-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI18-34-02R	EI18-34	2R34	4-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI18-35-02R	EI18-35	2R35	4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベン

			ズアミド
EI18-36-02R	EI18-36	2R36	4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI18-37-02R	EI18-37	2R37	4-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI18-38-02R	EI18-38	2R38	4-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI18-39-02R	EI18-39	2R39	4-[4-[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI18-40-02R	EI18-40	2R40	4-[4-[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI18-41-02R	EI18-41	2R41	4-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI18-42-02R	EI18-42	2R42	4-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI18-43-02R	EI18-43	2R43	4-[4-[3-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI18-44-02R	EI18-44	2R44	4-[4-[3-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI18-45-02R	EI18-45	2R45	4-[4-[[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI18-46-02R	EI18-46	2R46	4-[4-[[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI18-47-02R	EI18-47	2R47	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI18-48-02R	EI18-48	2R48	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファ

			ニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI18-49-02R	EI18-49	2R49	4-[4-[[2-エチル-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI18-50-02R	EI18-50	2R50	4-[4-[[2-エチル-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI18-51-02R	EI18-51	2R51	4-[4-[[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI18-52-02R	EI18-52	2R52	4-[4-[[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI18-53-02R	EI18-53	2R53	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI18-54-02R	EI18-54	2R54	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI18-55-02R	EI18-55	2R55	4-[4-[[3-エトキシ-5-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI18-56-02R	EI18-56	2R56	4-[4-[[3-エトキシ-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI18-57-02R	EI18-57	2R57	4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI18-58-02R	EI18-58	2R58	4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI18-59-02R	EI18-59	2R59	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI18-60-02R	EI18-60	2R60	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI18-61-	EI18-61	2R61	4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)

02R			フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI18-62-02R	EI18-62	2R62	4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI18-63-02R	EI18-63	2R63	4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI18-64-02R	EI18-64	2R64	4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI18-65-02R	EI18-65	2R65	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI18-66-02R	EI18-66	2R66	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI18-67-02R	EI18-67	2R67	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI18-68-02R	EI18-68	2R68	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI18-69-02R	EI18-69	2R69	4-[4-[[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI18-70-02R	EI18-70	2R70	4-[4-[[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI18-71-02R	EI18-71	2R71	6-[4-[[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI18-72-02R	EI18-72	2R72	6-[4-[[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI18-73-02R	EI18-73	2R73	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド

EI18-74-02R	EI18-74	2R74	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI18-75-02R	EI18-75	2R75	6-[4-[[2-エチル-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI18-76-02R	EI18-76	2R76	6-[4-[[2-エチル-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI18-77-02R	EI18-77	2R77	6-[4-[[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI18-78-02R	EI18-78	2R78	6-[4-[[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI18-79-02R	EI18-79	2R79	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI18-80-02R	EI18-80	2R80	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI18-81-02R	EI18-81	2R81	6-[4-[[3-エトキシ-5-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI18-82-02R	EI18-82	2R82	6-[4-[[3-エトキシ-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI18-83-02R	EI18-83	2R83	6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI18-84-02R	EI18-84	2R84	6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI18-85-02R	EI18-85	2R85	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI18-86-02R	EI18-86	2R86	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニ

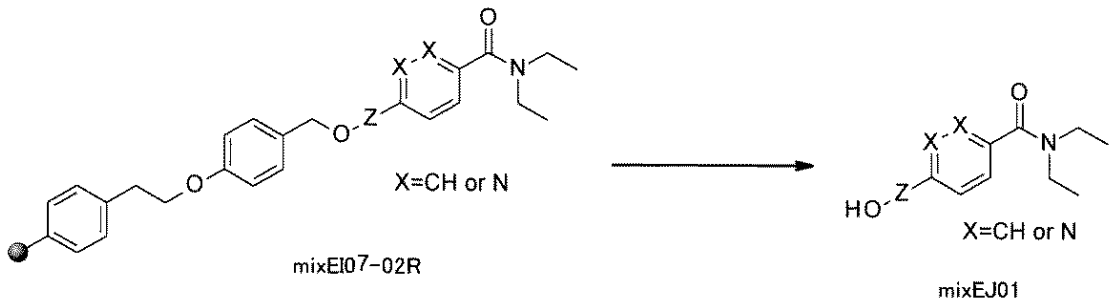
			ル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI18-87-02R	EI18-87	2R87	6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI18-88-02R	EI18-88	2R88	6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI18-89-02R	EI18-89	2R89	6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI18-90-02R	EI18-90	2R90	6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI18-91-02R	EI18-91	2R91	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI18-92-02R	EI18-92	2R92	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI18-93-02R	EI18-93	2R93	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI18-94-02R	EI18-94	2R94	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI18-95-02R	EI18-95	2R95	6-[4-[[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI18-96-02R	EI18-96	2R96	6-[4-[[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
EI18-97-02R	EI18-97	2R97	4-[4-[1-[4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI18-98-02R	EI18-98	2R98	4-[4-[1-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI18-99-02R	EI18-99	2R99	4-[4-[1-[2-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニル

			エチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
EI18-100-02R	EI18-100	2R100	4-[4-[1-[2-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド

【０５９６】

実施例６－４－１：混合物ｍｉｘＥＪ０１の合成

【化１１４】



【０５９７】

窒素雰囲気下、１．６ｍＬのガラスバイアルに［表ＥＩ０７］に示した混合物ｍｉｘＥＩ０７－０２Ｒ（１００化合物が含まれうる混合物，４９．２ｍｇ，担持量０．６４８ｍｍｏｌ／ｇ，３１．９μｍｏｌ）と１，２，３－トリメチルベンゼン／ＤＣＭ（０．２３Ｍ，７００μＬ）を加え室温で１時間振とうした。ＴＦＡ（３００μＬ，３．８９ｍｍｏｌを加え、室温で３時間振とうした。反応液とレジンの懸濁液をＤＣＭ溶液を使用してフィルター付きシリンジに移し、ＤＭＩ（０．５ｍＬ）を入れておいた試験管へ窒素圧をかけてろ過した。ＤＣＭ（０．５ｍＬ）で二回、ＤＭＩ（０．５ｍＬ）で二回、ＤＣＭ（０．５ｍＬ）で二回、ＤＭＩ（０．５ｍＬ）で二回繰り返した。ろ液をＧｅｎｅｖａｃ（４０℃，低沸点溶媒の留去が終了したと検知されるまで５０－２００ｍｂａｒで減圧した後に、４０℃，＜０．５ｍｂａｒで１６時間）にて溶媒を減圧下留去し、［表ＥＩＪ０１］に示した標題混合物ｍｉｘＥＪ０１を得た。分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－ｌｏｎｇ－２５ｍｉｎにて分析し、ＵＶ面積は、ＵＶ波長２９０ｎｍにて確認した。なお混合物の分析結果について、［表ＥＪ０１］に示す。

【０５９８】

［表ＥＩＪ０１］

【表７１】

使用した混合物番号	mixEI07-02R
切り出し後の	mixEJ01

混合物番号	
表EJ01の化合物の番号	化合物名
4J01	N,N-ジエチル-6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
4J02	N,N-ジエチル-6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
4J03	N,N-ジエチル-6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
4J04	N,N-ジエチル-6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
4J05	N,N-ジエチル-6-[4-[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
4J06	N,N-ジエチル-6-[4-[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
4J07	N,N-ジエチル-6-[4-[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
4J08	N,N-ジエチル-6-[4-[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
4J09	N,N-ジエチル-6-[4-[5-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
4J10	N,N-ジエチル-6-[4-[5-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
4J11	N,N-ジエチル-6-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
4J12	N,N-ジエチル-6-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
4J13	N,N-ジエチル-6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
4J14	N,N-ジエチル-6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
4J15	6-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルピリダジン-3-カルボキサミド
4J16	6-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルピリダジン-3-カルボキサミド
4J17	N,N-ジエチル-6-[4-[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
4J18	N,N-ジエチル-6-[4-[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
4J19	N,N-ジエチル-6-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
4J20	N,N-ジエチル-6-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
4J21	N,N-ジエチル-6-[4-[3-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
4J22	N,N-ジエチル-6-[4-[3-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-

	カルボキサミド
4J23	N,N-ジエチル-4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
4J24	N,N-ジエチル-4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
4J25	N,N-ジエチル-4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
4J26	N,N-ジエチル-4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
4J27	N,N-ジエチル-4-[4-[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
4J28	N,N-ジエチル-4-[4-[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
4J29	N,N-ジエチル-4-[4-[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
4J30	N,N-ジエチル-4-[4-[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
4J31	N,N-ジエチル-4-[4-[5-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
4J32	N,N-ジエチル-4-[4-[5-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
4J33	N,N-ジエチル-4-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
4J34	N,N-ジエチル-4-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
4J35	N,N-ジエチル-4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
4J36	N,N-ジエチル-4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
4J37	4-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルベンズアミド
4J38	4-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルベンズアミド
4J39	N,N-ジエチル-4-[4-[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
4J40	N,N-ジエチル-4-[4-[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
4J41	N,N-ジエチル-4-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
4J42	N,N-ジエチル-4-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
4J43	N,N-ジエチル-4-[4-[3-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
4J44	N,N-ジエチル-4-[4-[3-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
4J45	N,N-ジエチル-4-[4-[[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
4J46	N,N-ジエチル-4-[4-[[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
4J47	N,N-ジエチル-4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチ

	ル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
4J48	N,N-ジエチル-4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
4J49	N,N-ジエチル-4-[4-[[2-エチル-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
4J50	N,N-ジエチル-4-[4-[[2-エチル-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
4J51	N,N-ジエチル-4-[4-[[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
4J52	N,N-ジエチル-4-[4-[[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
4J53	N,N-ジエチル-4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
4J54	N,N-ジエチル-4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
4J55	4-[4-[[3-エトキシ-5-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルベンズアミド
4J56	4-[4-[[3-エトキシ-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルベンズアミド
4J57	N,N-ジエチル-4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
4J58	N,N-ジエチル-4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
4J59	N,N-ジエチル-4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
4J60	N,N-ジエチル-4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
4J61	N,N-ジエチル-4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
4J62	N,N-ジエチル-4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
4J63	N,N-ジエチル-4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
4J64	N,N-ジエチル-4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
4J65	N,N-ジエチル-4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
4J66	N,N-ジエチル-4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
4J67	N,N-ジエチル-4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
4J68	N,N-ジエチル-4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
4J69	N,N-ジエチル-4-[4-[[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
4J70	N,N-ジエチル-4-[4-[[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
4J71	N,N-ジエチル-6-[4-[[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
4J72	N,N-ジエチル-6-[4-[[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]

	ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
4J73	N,N-ジエチル-6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
4J74	N,N-ジエチル-6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
4J75	N,N-ジエチル-6-[4-[[2-エチル-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
4J76	N,N-ジエチル-6-[4-[[2-エチル-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
4J77	N,N-ジエチル-6-[4-[[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
4J78	N,N-ジエチル-6-[4-[[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
4J79	N,N-ジエチル-6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
4J80	N,N-ジエチル-6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
4J81	6-[4-[[3-エトキシ-5-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルピリダジン-3-カルボキサミド
4J82	6-[4-[[3-エトキシ-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルピリダジン-3-カルボキサミド
4J83	N,N-ジエチル-6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
4J84	N,N-ジエチル-6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
4J85	N,N-ジエチル-6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
4J86	N,N-ジエチル-6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
4J87	N,N-ジエチル-6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
4J88	N,N-ジエチル-6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
4J89	N,N-ジエチル-6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
4J90	N,N-ジエチル-6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
4J91	N,N-ジエチル-6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
4J92	N,N-ジエチル-6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
4J93	N,N-ジエチル-6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
4J94	N,N-ジエチル-6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
4J95	N,N-ジエチル-6-[4-[[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
4J96	N,N-ジエチル-6-[4-[[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]フェ

	ニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
4J97	N,N-ジエチル-4-[4-[1-[4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
4J98	N,N-ジエチル-4-[4-[1-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
4J99	N,N-ジエチル-4-[4-[1-[2-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
4J100	N,N-ジエチル-4-[4-[1-[2-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド

【０５９９】

［表ＥＪ０１］には、観測されたＵＶピークの保持時間（ｍｉｎ）、そのＵＶピーク中にて観測された（Ｍ＋Ｈ）$^{+}$、ＭＳクロマトグラムにおけるＭＳピークの保持時間、ＵＶピークならびにＭＳピークに帰属された化合物の番号を記載している。実施例６－２－２で２化合物、および実施例６－２－３で２化合物が欠損している可能性があることから、表［ＥＪ０１］に示した１００化合物の内、４化合物が欠損している可能性がある。

【０６００】

［表ＥＪ０１］

【表７２】

混合物番号	mixEJ01						
m/z [M+H]+	MSピークの保持時間 (min)	UVピークの保持時間 (min)	帰属された化合物の番号	m/z [M+H]+	MSピークの保持時間 (min)	UVピークの保持時間 (min)	帰属された化合物の番号
453.207	3.457	3.41	4J94	458.28	6.217	6.17	4J47, 4J97
461.266	3.58	3.54	4J74	529.217	6.29	6.25	4J18, 4J64
465.195	3.667	3.63	4J24, 4J78	504.286	6.297	6.25	4J59, 4J83
477.23	3.763	3.73	4J100, 4J28, 4J80	487.27	6.37	6.34	4J34
447.25	3.883	3.85	4J72	514.306	6.383	6.34	4J37, 4J87
475.245	4.037	3.99	4J04, 4J54, 4J76	517.292	6.5	6.5	4J16
451.216	4.113	4.07	4J68	509.255	6.517	6.5	4J36
507.271	4.17	4.13	4J86	504.286	6.533	6.5	4J59, 4J83
497.266	4.22	4.13	4J92	595.239	6.543	6.5	4J22
459.275	4.257	4.22	4J48, 4J98	472.259	6.55	6.5	4J25, 4J49
491.277	4.27	4.22	4J82	468.265	6.563	6.5	4J69
463.25	4.36	4.32	4J52	530.237	6.573	6.5	4J89
445.26	4.527	4.48	4J46	488.266	6.6	6.5	4J11, 4J55
505.281	4.617	4.56	4J60, 4J84	484.234	6.703	6.67	4J07, 4J32
473.255	4.683	4.65	4J26, 4J50	494.28	6.71	6.67	4J65
467.186	4.8	4.77	4J02	502.306	6.897	6.86	4J57
515.302	4.81	4.77	4J38, 4J88	512.252	6.977	6.94	4J61
475.245	4.843	4.81	4J04, 4J54, 4J76	485.23	7.05	7.02	4J08, 4J09
505.281	4.85	4.81	4J60, 4J84	486.225	7.07	7.02	4J10, 4J33
471.25	4.883	4.81	4J96	528.222	7.15	7.11	4J17, 4J63
495.275	4.89	4.86	4J66	466.191	7.217	7.18	4J01
489.261	4.953	4.93	4J12, 4J56	478.225	7.42	7.38	4J05
479.22	4.957	4.93	4J06	527.226	7.48	7.44	4J40
531.233	4.997	4.96	4J90	515.302	7.547	7.52	4J38, 4J88
452.211	5.15	5.11	4J93	474.25	7.57	7.52	4J03, 4J53, 4J75
446.255	5.257	5.23	4J71	593.248	7.6	7.57	4J44
503.302	5.263	5.23	4J58	484.234	7.82	7.78	4J07, 4J32
489.261	5.367	5.34	4J12, 4J56	553.217	7.82	7.78	4J20
464.2	5.38	5.34	4J23, 4J77	488.266	8.027	7.99	4J11, 4J55
511.245	5.423	5.39	4J14	510.25	8.133	8.1	4J13
513.247	5.493	5.47	4J62	483.239	8.26	8.25	4J30, 4J31
469.26	5.497	5.47	4J70	483.239	8.293	8.25	4J30, 4J31
477.23	5.513	5.47	4J100, 4J28, 4J80	464.2	8.61	8.57	4J23, 4J77
476.234	5.517	5.47	4J27, 4J79, 4J99	528.222	8.657	8.61	4J17, 4J63
460.271	5.527	5.47	4J73	476.234	8.727	8.69	4J27, 4J79, 4J99
459.275	5.567	5.47	4J48, 4J98	476.234	8.76	8.69	4J27, 4J79, 4J99
529.217	5.667	5.64	4J18, 4J64	472.259	8.893	8.86	4J25, 4J49
506.276	5.83	5.8	4J85	474.25	8.9	8.86	4J03, 4J53, 4J75
450.221	5.857	5.8	4J67	482.244	9.05	9.02	4J29
475.245	5.903	5.87	4J04, 4J54, 4J76	551.226	9.06	9.02	4J42
473.255	5.907	5.87	4J26, 4J50	594.243	9.093	9.05	4J21
465.195	5.913	5.87	4J24, 4J78	485.23	9.24	9.23	4J08, 4J09
444.265	5.947	5.87	4J45	486.225	9.257	9.23	4J10, 4J33
490.281	5.977	5.97	4J81	516.297	9.277	9.23	4J15
470.255	6.01	5.97	4J95	508.259	9.407	9.37	4J35
462.255	6.057	6.04	4J51	552.222	9.457	9.41	4J19
458.28	6.07	6.04	4J47, 4J97	526.231	9.87	9.83	4J39
496.271	6.077	6.04	4J91	592.253	10.25	10.21	4J43
477.23	6.15	6.1	4J100, 4J28, 4J80	514.306	10.503	10.47	4J37, 4J87
474.25	6.207	6.17	4J03, 4J53, 4J75	550.231	10.623	10.58	4J41

【０６０１】

実施例６－４－２：混合物ｍｉｘＥＪ０２～ｍｉｘＥＪ１２の合成

［表ＥＩ０８］～［表ＥＩ１８］に示した混合物ｍｉｘＥＩ０８－０２Ｒ～ｍｉｘＥＩ１８－０２Ｒ）を用いて、実施例６－４－１と同様の方法で合成し、［表ＥＩＪ０２］～［表ＥＩＪ１２］に示す標題混合物ｍｉｘＥＪ０２～ｍｉｘＥＪ１２を得た。分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－ｌｏｎｇ－２５ｍｉｎにて分析し、ＵＶ面積は、ＵＶ波長２９０ｎｍにて確認した。なお混合物の分析結果について。なお混合物の分析結果について、［表ＥＪ０２］～［表ＥＪ１２］に示す。

【０６０２】

［表ＥＩＪ０２］

【表７３】

使用した混合物番号	mixEI08-02R
切り出し後の混合物番号	mixEJ02
表EJ02の化合物の番号	化合物名
1M01	6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1M02	6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1M03	6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1M04	6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1M05	6-[4-[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1M06	6-[4-[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1M07	6-[4-[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1M08	6-[4-[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1M09	6-[4-[5-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1M10	6-[4-[5-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1M11	6-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1M12	6-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1M13	6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1M14	6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1M15	6-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1M16	6-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1M17	6-[4-[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1M18	6-[4-[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1M19	6-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベ

	ンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1M20	6-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1M21	6-[4-[3-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1M22	6-[4-[3-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1M23	4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1M24	4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1M25	4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1M26	4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1M27	4-[4-[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1M28	4-[4-[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1M29	4-[4-[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1M30	4-[4-[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1M31	4-[4-[5-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1M32	4-[4-[5-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1M33	4-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1M34	4-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1M35	4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1M36	4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1M37	4-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1M38	4-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1M39	4-[4-[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1M40	4-[4-[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1M41	4-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1M42	4-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド

1M43	4-[4-[3-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1M44	4-[4-[3-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1M45	4-[4-[[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1M46	4-[4-[[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1M47	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1M48	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1M49	4-[4-[[2-エチル-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1M50	4-[4-[[2-エチル-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1M51	4-[4-[[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1M52	4-[4-[[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1M53	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1M54	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1M55	4-[4-[[3-エトキシ-5-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1M56	4-[4-[[3-エトキシ-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1M57	4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1M58	4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1M59	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1M60	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1M61	4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1M62	4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1M63	4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1M64	4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1M65	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1M66	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1M67	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド

1M68	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1M69	4-[4-[[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1M70	4-[4-[[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1M71	6-[4-[[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1M72	6-[4-[[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1M73	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1M74	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1M75	6-[4-[[2-エチル-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1M76	6-[4-[[2-エチル-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1M77	6-[4-[[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1M78	6-[4-[[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1M79	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1M80	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1M81	6-[4-[[3-エトキシ-5-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1M82	6-[4-[[3-エトキシ-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1M83	6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1M84	6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1M85	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1M86	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1M87	6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1M88	6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1M89	6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1M90	6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1M91	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1M92	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド

1M93	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1M94	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1M95	6-[4-[[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1M96	6-[4-[[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1M97	4-[4-[1-[4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1M98	4-[4-[1-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1M99	4-[4-[1-[2-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1M100	4-[4-[1-[2-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド

【０６０３】
［表ＥＩＪ０３］

【表７４】

使用した混合物番号	mixEI09-02R
切り出し後の混合物番号	mixEJ03
表EJ03の化合物の番号	化合物名
1K01	6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1K02	6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1K03	6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1K04	6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1K05	6-[4-[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1K06	6-[4-[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1K07	6-[4-[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1K08	6-[4-[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1K09	6-[4-[5-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1K10	6-[4-[5-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1K11	6-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1K12	6-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラ

	ジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1K13	6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1K14	6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1K15	6-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1K16	6-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1K17	6-[4-[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1K18	6-[4-[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1K19	6-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1K20	6-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1K21	6-[4-[3-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1K22	6-[4-[3-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1K23	4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1K24	4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1K25	4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1K26	4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1K27	4-[4-[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1K28	4-[4-[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1K29	4-[4-[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1K30	4-[4-[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1K31	4-[4-[5-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1K32	4-[4-[5-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1K33	4-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1K34	4-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1K35	4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド

1K36	4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1K37	4-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1K38	4-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1K39	4-[4-[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1K40	4-[4-[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1K41	4-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1K42	4-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1K43	4-[4-[3-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1K44	4-[4-[3-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1K45	4-[4-[[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1K46	4-[4-[[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1K47	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1K48	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1K49	4-[4-[[2-エチル-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1K50	4-[4-[[2-エチル-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1K51	4-[4-[[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1K52	4-[4-[[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1K53	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1K54	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1K55	4-[4-[[3-エトキシ-5-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1K56	4-[4-[[3-エトキシ-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1K57	4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1K58	4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1K59	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1K60	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド

1K61	4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1K62	4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1K63	4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1K64	4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1K65	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1K66	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1K67	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1K68	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1K69	4-[4-[[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1K70	4-[4-[[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1K71	6-[4-[[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1K72	6-[4-[[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1K73	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1K74	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1K75	6-[4-[[2-エチル-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1K76	6-[4-[[2-エチル-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1K77	6-[4-[[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1K78	6-[4-[[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1K79	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1K80	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1K81	6-[4-[[3-エトキシ-5-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1K82	6-[4-[[3-エトキシ-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1K83	6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1K84	6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1K85	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド

1K86	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1K87	6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1K88	6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1K89	6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1K90	6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1K91	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1K92	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1K93	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1K94	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1K95	6-[4-[[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1K96	6-[4-[[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
1K97	4-[4-[1-[4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1K98	4-[4-[1-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1K99	4-[4-[1-[2-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
1K100	4-[4-[1-[2-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド

【０６０４】
[表ＥＩＪ０４]
【表７５】

使用した混合物番号	mixEI10-02R
切り出し後の混合物番号	mixEJ04
表EJ04の化合物の番号	化合物名
1001	6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
1002	6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
1003	6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
1004	6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-

	1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
1005	6-[4-[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
1006	6-[4-[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
1007	6-[4-[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
1008	6-[4-[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
1009	6-[4-[5-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
1010	6-[4-[5-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
1011	6-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
1012	6-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
1013	6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
1014	6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
1015	6-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
1016	6-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
1017	6-[4-[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
1018	6-[4-[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
1019	6-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
1020	6-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
1021	6-[4-[3-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
1022	6-[4-[3-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
1023	4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
1024	4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
1025	4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
1026	4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-

	1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
1027	4-[4-[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
1028	4-[4-[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
1029	4-[4-[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
1030	4-[4-[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
1031	4-[4-[5-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
1032	4-[4-[5-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
1033	4-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
1034	4-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
1035	4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
1036	4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
1037	4-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
1038	4-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
1039	4-[4-[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
1040	4-[4-[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
1041	4-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
1042	4-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
1043	4-[4-[3-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
1044	4-[4-[3-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
1045	4-[4-[[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
1046	4-[4-[[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
1047	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
1048	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
1049	4-[4-[[2-エチル-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド

1050	4-[4-[[2-エチル-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
1051	4-[4-[[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
1052	4-[4-[[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
1053	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
1054	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
1055	4-[4-[[3-エトキシ-5-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
1056	4-[4-[[3-エトキシ-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
1057	4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
1058	4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
1059	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
1060	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
1061	4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
1062	4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
1063	4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
1064	4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
1065	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
1066	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
1067	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
1068	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
1069	4-[4-[[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
1070	4-[4-[[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
1071	6-[4-[[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
1072	6-[4-[[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
1073	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
1074	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド

1075	6-[4-[[2-エチル-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
1076	6-[4-[[2-エチル-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
1077	6-[4-[[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
1078	6-[4-[[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
1079	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
1080	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
1081	6-[4-[[3-エトキシ-5-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
1082	6-[4-[[3-エトキシ-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
1083	6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
1084	6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
1085	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
1086	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
1087	6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
1088	6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
1089	6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
1090	6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
1091	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
1092	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
1093	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
1094	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
1095	6-[4-[[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
1096	6-[4-[[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド

1097	4-[4-[1-[4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
1098	4-[4-[1-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
1099	4-[4-[1-[2-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
10100	4-[4-[1-[2-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド

【０６０５】
［表ＥＩＪ０５］
【表７６】

使用した混合物番号	mixEI11-02R
切り出し後の混合物番号	mixEJ05
表EJ05の化合物の番号	化合物名
1A01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
1A02	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
1A03	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
1A04	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
1A05	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
1A06	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
1A07	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
1A08	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
1A09	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[5-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
1A10	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[5-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
1A11	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
1A12	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
1A13	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
1A14	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド

1A15	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
1A16	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
1A17	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
1A18	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
1A19	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
1A20	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
1A21	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[3-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
1A22	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[3-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
1A23	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
1A24	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
1A25	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
1A26	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
1A27	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
1A28	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
1A29	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
1A30	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
1A31	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[5-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
1A32	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[5-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
1A33	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
1A34	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
1A35	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
1A36	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
1A37	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-ヒドロキシフェニ

	ル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
1A38	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
1A39	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
1A40	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
1A41	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
1A42	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
1A43	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[3-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
1A44	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[3-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
1A45	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
1A46	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
1A47	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
1A48	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
1A49	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[2-エチル-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
1A50	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[2-エチル-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
1A51	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
1A52	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
1A53	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
1A54	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
1A55	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[3-エトキシ-5-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
1A56	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[3-エトキシ-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
1A57	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
1A58	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
1A59	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
1A60	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド

1A61	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
1A62	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
1A63	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
1A64	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
1A65	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
1A66	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
1A67	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
1A68	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
1A69	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
1A70	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
1A71	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
1A72	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
1A73	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
1A74	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
1A75	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[2-エチル-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
1A76	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[2-エチル-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
1A77	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
1A78	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
1A79	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
1A80	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
1A81	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[3-エトキシ-5-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
1A82	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[3-エトキシ-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
1A83	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
1A84	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド

1A85	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
1A86	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
1A87	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
1A88	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
1A89	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
1A90	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
1A91	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
1A92	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
1A93	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
1A94	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
1A95	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
1A96	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
1A97	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[1-[4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
1A98	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[1-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
1A99	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[1-[2-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
1A100	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[1-[2-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド

【０６０６】
［表ＥＩＪ０６］
【表７７】

使用した混合物番号	mixEI12-02R
切り出し後の混合物番号	mixEJ06
表EJ06の化合物の番号	化合物名

3A01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
3A02	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
3A03	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
3A04	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
3A05	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
3A06	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
3A07	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
3A08	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
3A09	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[5-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
3A10	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[5-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
3A11	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
3A12	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
3A13	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
3A14	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
3A15	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
3A16	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
3A17	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
3A18	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
3A19	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
3A20	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エ

	チニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
3A21	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[3-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
3A22	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[3-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
3A23	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
3A24	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
3A25	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
3A26	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
3A27	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
3A28	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
3A29	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
3A30	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
3A31	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[5-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
3A32	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[5-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
3A33	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
3A34	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
3A35	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
3A36	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
3A37	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
3A38	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
3A39	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
3A40	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
3A41	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
3A42	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド

3A43	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[3-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
3A44	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[3-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
3A45	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
3A46	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
3A47	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
3A48	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
3A49	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[2-エチル-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
3A50	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[2-エチル-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
3A51	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
3A52	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
3A53	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
3A54	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
3A55	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[3-エトキシ-5-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
3A56	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[3-エトキシ-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
3A57	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
3A58	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
3A59	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
3A60	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
3A61	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
3A62	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
3A63	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
3A64	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
3A65	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-

	1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
3A66	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
3A67	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
3A68	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
3A69	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
3A70	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
3A71	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
3A72	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
3A73	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
3A74	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
3A75	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[2-エチル-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
3A76	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[2-エチル-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
3A77	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
3A78	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
3A79	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
3A80	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
3A81	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[3-エトキシ-5-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
3A82	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[3-エトキシ-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
3A83	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
3A84	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
3A85	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキ

	サミド
3A86	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
3A87	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
3A88	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
3A89	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
3A90	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
3A91	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
3A92	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
3A93	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
3A94	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
3A95	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
3A96	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
3A97	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[1-[4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
3A98	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[1-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
3A99	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[1-[2-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
3A100	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[1-[2-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド

【０６０７】
[表ＥＩＪ０７]
【表７８】

使用した混合物番号	mixEI13-02R
切り出し後の混合物番号	mixEJ07

表EJ07の化合物の番号	化合物名
2I01	6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2I02	6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2I03	6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2I04	6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2I05	6-[4-[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2I06	6-[4-[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2I07	6-[4-[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2I08	6-[4-[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2I09	6-[4-[5-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2I10	6-[4-[5-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2I11	6-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2I12	6-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2I13	6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2I14	6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2I15	6-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2I16	6-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2I17	6-[4-[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2I18	6-[4-[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2I19	6-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2I20	6-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2I21	6-[4-[3-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2I22	6-[4-[3-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジ

	ン-3-カルボキサミド
2I23	4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
2I24	4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
2I25	4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
2I26	4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
2I27	4-[4-[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
2I28	4-[4-[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
2I29	4-[4-[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
2I30	4-[4-[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
2I31	4-[4-[5-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
2I32	4-[4-[5-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
2I33	4-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
2I34	4-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
2I35	4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
2I36	4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
2I37	4-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
2I38	4-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
2I39	4-[4-[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
2I40	4-[4-[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
2I41	4-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
2I42	4-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
2I43	4-[4-[3-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
2I44	4-[4-[3-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
2I45	4-[4-[[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
2I46	4-[4-[[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド

2I47	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
2I48	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
2I49	4-[4-[[2-エチル-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
2I50	4-[4-[[2-エチル-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
2I51	4-[4-[[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
2I52	4-[4-[[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
2I53	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
2I54	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
2I55	4-[4-[[3-エトキシ-5-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
2I56	4-[4-[[3-エトキシ-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
2I57	4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
2I58	4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
2I59	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
2I60	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
2I61	4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
2I62	4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
2I63	4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
2I64	4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
2I65	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
2I66	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
2I67	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
2I68	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
2I69	4-[4-[[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
2I70	4-[4-[[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
2I71	6-[4-[[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド

2I72	6-[4-[[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2I73	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2I74	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2I75	6-[4-[[2-エチル-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2I76	6-[4-[[2-エチル-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2I77	6-[4-[[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2I78	6-[4-[[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2I79	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2I80	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2I81	6-[4-[[3-エトキシ-5-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2I82	6-[4-[[3-エトキシ-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2I83	6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2I84	6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2I85	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2I86	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2I87	6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2I88	6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2I89	6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2I90	6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2I91	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2I92	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2I93	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2I94	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド

2I95	6-[4-[[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2I96	6-[4-[[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2I97	4-[4-[1-[4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
2I98	4-[4-[1-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
2I99	4-[4-[1-[2-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
2I100	4-[4-[1-[2-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド

【０６０８】
［表ＥＩＪ０８］
【表７９】

使用した混合物番号	mixEI14-02R
切り出し後の混合物番号	mixEJ08
表EJ08の化合物の番号	化合物名
2L01	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2L02	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2L03	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2L04	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2L05	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2L06	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2L07	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2L08	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2L09	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[5-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2L10	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[5-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2L11	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2L12	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド

2L13	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2L14	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2L15	6-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-tert-ブチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2L16	6-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-tert-ブチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2L17	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2L18	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2L19	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2L20	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2L21	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[3-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2L22	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[3-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2L23	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2L24	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2L25	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2L26	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2L27	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2L28	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2L29	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2L30	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2L31	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[5-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2L32	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[5-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2L33	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2L34	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2L35	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-

	カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2L36	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2L37	4-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-tert-ブチルスルホニルベンズアミド
2L38	4-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-tert-ブチルスルホニルベンズアミド
2L39	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2L40	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2L41	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2L42	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2L43	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[3-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2L44	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[3-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2L45	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2L46	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2L47	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2L48	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2L49	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[2-エチル-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2L50	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[2-エチル-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2L51	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2L52	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2L53	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2L54	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2L55	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[3-エトキシ-5-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2L56	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[3-エトキシ-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2L57	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2L58	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド

2L59	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2L60	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2L61	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2L62	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2L63	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2L64	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2L65	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2L66	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2L67	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2L68	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2L69	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2L70	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2L71	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2L72	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2L73	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2L74	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2L75	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[2-エチル-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2L76	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[2-エチル-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2L77	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2L78	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2L79	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2L80	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2L81	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[3-エトキシ-5-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2L82	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[3-エトキシ-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2L83	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキ

	サミド
2L84	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2L85	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2L86	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2L87	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2L88	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2L89	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2L90	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2L91	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2L92	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2L93	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2L94	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2L95	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2L96	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2L97	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[1-[4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2L98	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[1-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2L99	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[1-[2-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2L100	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[1-[2-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド

【０６０９】
[表ＥＩＪ０９]
【表８０】

使用した混合物番号	mixEI15-02R
切り出し後の	mixEJ09

混合物番号	
表EJ09の化合物の番号	化合物名
2K01	6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
2K02	6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
2K03	6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
2K04	6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
2K05	6-[4-[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
2K06	6-[4-[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
2K07	6-[4-[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
2K08	6-[4-[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
2K09	6-[4-[5-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
2K10	6-[4-[5-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
2K11	6-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
2K12	6-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
2K13	6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
2K14	6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
2K15	6-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
2K16	6-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カ

	ルボキサミド
2K17	6-[4-[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
2K18	6-[4-[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
2K19	6-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
2K20	6-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
2K21	6-[4-[3-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
2K22	6-[4-[3-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
2K23	4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
2K24	4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
2K25	4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
2K26	4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
2K27	4-[4-[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
2K28	4-[4-[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
2K29	4-[4-[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
2K30	4-[4-[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
2K31	4-[4-[5-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
2K32	4-[4-[5-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
2K33	4-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
2K34	4-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
2K35	4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
2K36	4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
2K37	4-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド

2K38	4-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
2K39	4-[4-[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
2K40	4-[4-[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
2K41	4-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
2K42	4-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
2K43	4-[4-[3-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
2K44	4-[4-[3-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
2K45	4-[4-[[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
2K46	4-[4-[[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
2K47	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
2K48	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
2K49	4-[4-[[2-エチル-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
2K50	4-[4-[[2-エチル-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
2K51	4-[4-[[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
2K52	4-[4-[[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
2K53	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
2K54	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
2K55	4-[4-[[3-エトキシ-5-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
2K56	4-[4-[[3-エトキシ-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
2K57	4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
2K58	4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニ

	ル)ベンズアミド
2K59	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
2K60	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
2K61	4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
2K62	4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
2K63	4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
2K64	4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
2K65	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
2K66	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
2K67	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
2K68	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
2K69	4-[4-[[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
2K70	4-[4-[[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
2K71	6-[4-[[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
2K72	6-[4-[[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
2K73	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
2K74	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
2K75	6-[4-[[2-エチル-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
2K76	6-[4-[[2-エチル-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
2K77	6-[4-[[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド

2K78	6-[4-[[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
2K79	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
2K80	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
2K81	6-[4-[[3-エトキシ-5-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
2K82	6-[4-[[3-エトキシ-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
2K83	6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
2K84	6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
2K85	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
2K86	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
2K87	6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
2K88	6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
2K89	6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
2K90	6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
2K91	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
2K92	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
2K93	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
2K94	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド

2K95	6-[4-[[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
2K96	6-[4-[[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
2K97	4-[4-[1-[4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
2K98	4-[4-[1-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
2K99	4-[4-[1-[2-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
2K100	4-[4-[1-[2-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド

【０６１０】
［表ＥＩＪ１０］
【表８１】

使用した混合物番号	mixEI16-02R
切り出し後の混合物番号	mixEJ10
表EJ10の化合物の番号	化合物名
2A01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2A02	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2A03	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2A04	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2A05	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2A06	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2A07	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2A08	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2A09	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[5-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボ

	キサミド
2A10	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[5-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2A11	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2A12	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2A13	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2A14	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2A15	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2A16	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2A17	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2A18	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2A19	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2A20	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2A21	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[3-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2A22	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[3-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2A23	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2A24	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2A25	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2A26	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2A27	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2A28	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2A29	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド

2A30	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2A31	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[5-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2A32	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[5-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2A33	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2A34	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2A35	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2A36	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2A37	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2A38	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2A39	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2A40	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2A41	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2A42	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2A43	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[3-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2A44	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[3-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2A45	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2A46	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2A47	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2A48	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2A49	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[2-エチル-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2A50	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[2-エチル-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2A51	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2A52	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシ

	ピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2A53	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2A54	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2A55	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[3-エトキシ-5-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2A56	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[3-エトキシ-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2A57	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2A58	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2A59	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2A60	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2A61	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2A62	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2A63	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2A64	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2A65	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2A66	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2A67	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2A68	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2A69	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2A70	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2A71	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2A72	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2A73	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2A74	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-

	イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2A75	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[2-エチル-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2A76	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[2-エチル-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2A77	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2A78	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2A79	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2A80	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2A81	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[3-エトキシ-5-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2A82	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[3-エトキシ-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2A83	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2A84	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2A85	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2A86	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2A87	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2A88	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2A89	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2A90	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2A91	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド

2A92	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2A93	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2A94	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2A95	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2A96	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
2A97	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[1-[4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2A98	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[1-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2A99	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[1-[2-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
2A100	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[1-[2-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド

【０６１１】
[表ＥＩＪ１１]
【表８２】

使用した混合物番号	mixEI17-02R
切り出し後の混合物番号	mixEJ11
表EJ11の化合物の番号	化合物名
2Q01	6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2Q02	6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2Q03	6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2Q04	6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2Q05	6-[4-[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド

2Q06	6-[4-[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2Q07	6-[4-[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2Q08	6-[4-[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2Q09	6-[4-[5-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2Q10	6-[4-[5-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2Q11	6-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2Q12	6-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2Q13	6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2Q14	6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2Q15	6-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2Q16	6-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2Q17	6-[4-[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2Q18	6-[4-[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2Q19	6-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2Q20	6-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2Q21	6-[4-[3-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2Q22	6-[4-[3-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミ

	ド
2Q23	4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
2Q24	4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
2Q25	4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
2Q26	4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
2Q27	4-[4-[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
2Q28	4-[4-[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
2Q29	4-[4-[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
2Q30	4-[4-[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
2Q31	4-[4-[5-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
2Q32	4-[4-[5-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
2Q33	4-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
2Q34	4-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
2Q35	4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
2Q36	4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
2Q37	4-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
2Q38	4-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
2Q39	4-[4-[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フ

	ェニル]スルホニルベンズアミド
2Q40	4-[4-[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
2Q41	4-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
2Q42	4-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
2Q43	4-[4-[3-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
2Q44	4-[4-[3-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
2Q45	4-[4-[[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
2Q46	4-[4-[[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
2Q47	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
2Q48	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
2Q49	4-[4-[[2-エチル-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
2Q50	4-[4-[[2-エチル-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
2Q51	4-[4-[[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
2Q52	4-[4-[[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
2Q53	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
2Q54	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
2Q55	4-[4-[[3-エトキシ-5-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
2Q56	4-[4-[[3-エトキシ-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)

	フェニル]スルホニルベンズアミド
2Q57	4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
2Q58	4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
2Q59	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
2Q60	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
2Q61	4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
2Q62	4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
2Q63	4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
2Q64	4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
2Q65	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
2Q66	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
2Q67	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
2Q68	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
2Q69	4-[4-[[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
2Q70	4-[4-[[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
2Q71	6-[4-[[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2Q72	6-[4-[[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2Q73	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]

	スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2Q74	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2Q75	6-[4-[[2-エチル-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2Q76	6-[4-[[2-エチル-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2Q77	6-[4-[[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2Q78	6-[4-[[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2Q79	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2Q80	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2Q81	6-[4-[[3-エトキシ-5-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2Q82	6-[4-[[3-エトキシ-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2Q83	6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2Q84	6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2Q85	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2Q86	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2Q87	6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2Q88	6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2Q89	6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2Q90	6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニル

	エチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2Q91	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2Q92	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2Q93	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2Q94	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2Q95	6-[4-[[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2Q96	6-[4-[[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2Q97	4-[4-[1-[4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
2Q98	4-[4-[1-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
2Q99	4-[4-[1-[2-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
2Q100	4-[4-[1-[2-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド

【０６１２】
[表ＥＩＪ１２]
【表８３】

使用した混合物番号	mixEJ18-02R
切り出し後の混合物番号	mixEJ12
表EJ12の化合物の番号	化合物名
2R01	6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2R02	6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド

2R03	6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2R04	6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2R05	6-[4-[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2R06	6-[4-[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2R07	6-[4-[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2R08	6-[4-[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2R09	6-[4-[5-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2R10	6-[4-[5-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2R11	6-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2R12	6-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2R13	6-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2R14	6-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2R15	6-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2R16	6-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2R17	6-[4-[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2R18	6-[4-[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2R19	6-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサ

	ミド
2R20	6-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2R21	6-[4-[3-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2R22	6-[4-[3-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2R23	4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
2R24	4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
2R25	4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
2R26	4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
2R27	4-[4-[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
2R28	4-[4-[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
2R29	4-[4-[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
2R30	4-[4-[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
2R31	4-[4-[5-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
2R32	4-[4-[5-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
2R33	4-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
2R34	4-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
2R35	4-[4-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチ

	ル)フェニル]スルホニルベンズアミド
2R36	4-[4-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
2R37	4-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-ヒドロキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
2R38	4-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
2R39	4-[4-[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
2R40	4-[4-[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
2R41	4-[4-[3-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
2R42	4-[4-[3-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
2R43	4-[4-[3-[4-(3-ヒドロキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
2R44	4-[4-[3-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
2R45	4-[4-[[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
2R46	4-[4-[[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
2R47	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
2R48	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
2R49	4-[4-[[2-エチル-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
2R50	4-[4-[[2-エチル-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
2R51	4-[4-[[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
2R52	4-[4-[[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピ

	ペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
2R53	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
2R54	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
2R55	4-[4-[[3-エトキシ-5-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
2R56	4-[4-[[3-エトキシ-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
2R57	4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
2R58	4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
2R59	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
2R60	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
2R61	4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
2R62	4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
2R63	4-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
2R64	4-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
2R65	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
2R66	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
2R67	4-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
2R68	4-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
2R69	4-[4-[[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジ

	ン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
2R70	4-[4-[[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
2R71	6-[4-[[2-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2R72	6-[4-[[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2R73	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2R74	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2R75	6-[4-[[2-エチル-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2R76	6-[4-[[2-エチル-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2R77	6-[4-[[3-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2R78	6-[4-[[3-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2R79	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2R80	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2R81	6-[4-[[3-エトキシ-5-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2R82	6-[4-[[3-エトキシ-5-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2R83	6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2R84	6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2R85	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド

2R86	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2R87	6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2R88	6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2R89	6-[4-[[3-(3-ヒドロキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2R90	6-[4-[[3-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2R91	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2R92	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2R93	6-[4-[[4-(3-ヒドロキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2R94	6-[4-[[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2R95	6-[4-[[2-[2-(3-ヒドロキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2R96	6-[4-[[2-[2-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
2R97	4-[4-[1-[4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
2R98	4-[4-[1-[4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
2R99	4-[4-[1-[2-フルオロ-4-(3-ヒドロキシフェニル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
2R100	4-[4-[1-[2-フルオロ-4-(5-ヒドロキシピリジン-3-イル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド

【０６１３】

［表ＥＪ０２］～［表ＥＪ１２］には、観測されたＵＶピークの保持時間（ｍｉｎ）、そのＵＶピーク中にて観測された（Ｍ＋Ｈ）$^{+}$、ＭＳクロマトグラムにおけるＭＳピークの保持時間、ＵＶピークならびにＭＳピークに帰属された化合物の番号を記載している。実施例６－２－２で２化合物、および実施例６－２－３で２化合物が欠損している可能性があることから、［表ＥＩＪ０２］～［表ＥＩＪ１２］に示した１１００化合物の内、４４化合物が欠損している可能性がある。

【０６１４】

［表ＥＪ０２］

【表８４】

混合物番号	mixEJO2						
m/z [M+H]+	MSピークの保持時間 (min)	UVピークの保持時間 (min)	帰属された化合物の番号	m/z [M+H]+	MSピークの保持時間 (min)	UVピークの保持時間 (min)	帰属された化合物の番号
439.191	3.66	3.624	1M94	490.27	6.277	6.247	1M59, 1M83
437.201	3.76	3.716	1M68	454.249	6.28	6.247	1M69
451.18	3.88	3.847	1M24, 1M78	458.244	6.303	6.247	1M25, 1M49
445.26	3.917	3.872	1M48, 1M98	482.255	6.343	6.313	1M91
463.214	3.967	3.912	1M100, 1M28, 1M80	474.25	6.37	6.313	1M11, 1M55
449.235	3.98	3.912	1M52	457.235	6.433	6.393	1M96
433.235	4.083	4.045	1M72	481.26	6.463	6.393	1M66
461.23	4.107	4.045	1M04, 1M54, 1M76	480.265	6.473	6.435	1M65
431.244	4.17	4.133	1M46	490.27	6.513	6.473	1M59, 1M83
459.239	4.347	4.323	1M26, 1M50	500.291	6.67	6.633	1M37, 1M87
493.256	4.357	4.323	1M86	515.201	6.673	6.633	1M18, 1M64
483.25	4.463	4.433	1M92	488.291	6.68	6.633	1M57
477.261	4.487	4.433	1M82	498.236	6.75	6.708	1M61
491.265	4.55	4.509	1M60, 1M84	503.277	6.837	6.808	1M16
475.245	4.643	4.599	1M12, 1M56	516.222	6.837	6.808	1M89
491.265	4.807	4.777	1M60, 1M84	581.223	6.88	6.825	1M22
489.286	4.96	4.888	1M58	514.206	6.923	6.88	1M17, 1M63
501.286	5.09	5.051	1M38, 1M88	513.211	7.07	7.024	1M40
453.17	5.093	5.051	1M02	501.286	7.157	7.121	1M38, 1M88
461.23	5.127	5.051	1M04, 1M54, 1M76	579.233	7.223	7.184	1M44
461.23	5.147	5.109	1M04, 1M54, 1M76	445.26	7.293	7.229	1M48, 1M98
499.232	5.193	5.152	1M62	469.223	7.447	7.44	1M30, 1M31
455.244	5.23	5.189	1M70	471.214	7.477	7.44	1M08, 1M09
517.217	5.27	5.231	1M90	452.175	7.697	7.653	1M01
465.204	5.297	5.261	1M06	463.214	7.867	7.844	1M100, 1M28, 1M80
515.201	5.367	5.335	1M18, 1M64	464.209	7.88	7.844	1M05
438.196	5.403	5.368	1M93	470.219	7.887	7.844	1M07, 1M32
432.239	5.477	5.447	1M71	469.223	7.89	7.844	1M30, 1M31
451.18	5.5	5.447	1M24, 1M78	460.234	8.04	8.003	1M03, 1M53, 1M75
459.239	5.513	5.467	1M26, 1M50	450.185	8.157	8.127	1M23, 1M77
436.205	5.567	5.525	1M67	470.219	8.21	8.127	1M07, 1M32
450.185	5.623	5.587	1M23, 1M77	539.201	8.247	8.207	1M20
475.245	5.657	5.619	1M12, 1M56	462.219	8.283	8.251	1M27, 1M79, 1M99
430.249	5.66	5.619	1M45	463.214	8.303	8.251	1M100, 1M28, 1M80
462.219	5.73	5.668	1M27, 1M79, 1M99	458.244	8.447	8.407	1M25, 1M49
447.25	5.76	5.721	1M74	474.25	8.473	8.436	1M11, 1M55
446.255	5.76	5.721	1M73	468.228	8.583	8.52	1M29
497.23	5.763	5.721	1M14	496.234	8.6	8.567	1M13
448.239	5.783	5.733	1M51	537.211	8.617	8.567	1M42
472.209	5.843	5.801	1M10, 1M33	471.214	8.813	8.792	1M08, 1M09
444.265	5.923	5.905	1M47, 1M97	472.209	8.84	8.792	1M10, 1M33
460.234	5.933	5.905	1M03, 1M53, 1M75	494.244	8.93	8.891	1M35
444.265	5.943	5.905	1M47, 1M97	514.206	9.08	9.047	1M17, 1M63
462.219	5.967	5.905	1M27, 1M79, 1M99	512.216	9.413	9.368	1M39
473.255	6.01	5.972	1M34	580.228	9.49	9.457	1M21
492.261	6.06	6.023	1M85	502.281	9.71	9.676	1M15
495.239	6.113	6.076	1M36	578.237	9.81	9.764	1M43
460.234	6.16	6.076	1M03, 1M53, 1M75	538.206	9.863	9.824	1M19
456.239	6.187	6.149	1M95	500.291	9.99	9.956	1M37, 1M87
476.266	6.197	6.149	1M81	536.216	10.157	10.116	1M41

【０６１５】

［表ＥＪ０３］

【表８５】

混合物番号	mixEJ03					
m/z [M+H]+	MSピークの保持時間 (min)	UVピークの保持時間 (min)	帰属された化合物の番号	m/z [M+H]+	MSピークの保持時間 (min)	UVピークの保持時間 (min)	帰属された化合物の番号
479.147	3.777	3.73	1K94	498.2	6.57	6.54	1K25, 1K49
487.206	3.887	3.85	1K74	522.211	6.577	6.54	1K91
477.157	3.93	3.89	1K68	514.206	6.613	6.57	1K11, 1K55
491.136	4.01	3.98	1K24, 1K78	510.175	6.653	6.62	1K07, 1K32
503.17	4.063	4.03	1K100, 1K28, 1K80	530.226	6.717	6.69	1K59, 1K83
485.216	4.087	4.03	1K48, 1K98	520.221	6.737	6.69	1K65
473.191	4.23	4.2	1K72	528.247	6.907	6.87	1K57
501.186	4.297	4.26	1K04, 1K54, 1K76	540.247	6.907	6.87	1K37, 1K87
471.2	4.387	4.36	1K46	555.157	6.987	6.94	1K18, 1K64
501.186	4.42	4.36	1K04, 1K54, 1K76	538.192	7.02	6.98	1K61
533.212	4.49	4.46	1K86	556.178	7.077	7.07	1K89
523.206	4.633	4.6	1K92	484.221	7.087	7.07	1K47, 1K97
517.217	4.637	4.6	1K82	543.233	7.103	7.07	1K16
531.221	4.737	4.71	1K60, 1K84	557.173	7.107	7.07	1K90
521.216	4.817	4.77	1K66	554.162	7.187	7.15	1K17, 1K63
515.201	4.867	4.82	1K12, 1K56	553.167	7.43	7.4	1K40
531.221	4.99	4.95	1K60, 1K84	541.242	7.487	7.45	1K38, 1K88
529.242	5.2	5.16	1K58	619.189	7.533	7.5	1K44
541.242	5.3	5.26	1K38, 1K88	509.18	7.783	7.7	1K30, 1K31
493.126	5.347	5.3	1K02	511.17	7.81	7.77	1K08, 1K09
502.175	5.387	5.35	1K27, 1K79, 1K99	492.131	8.05	8.01	1K01
501.186	5.39	5.35	1K04, 1K54, 1K76	504.165	8.203	8.17	1K05
539.188	5.46	5.42	1K62	503.17	8.213	8.17	1K100, 1K28, 1K80
505.161	5.567	5.53	1K06	510.175	8.25	8.22	1K07, 1K32
555.157	5.647	5.6	1K18, 1K64	509.18	8.253	8.22	1K30, 1K31
472.195	5.67	5.64	1K71	511.17	8.27	8.22	1K08, 1K09
499.195	5.82	5.79	1K26, 1K50	499.195	8.36	8.33	1K26, 1K50
476.161	5.823	5.79	1K67	500.19	8.363	8.33	1K03, 1K53, 1K75
490.141	5.837	5.79	1K23, 1K77	579.157	8.533	8.51	1K20
491.136	5.847	5.79	1K24, 1K78	490.141	8.55	8.51	1K23, 1K77
470.205	5.903	5.88	1K45	502.175	8.667	8.63	1K27, 1K79, 1K99
515.201	5.91	5.88	1K12, 1K56	495.2	8.753	8.63	1K70
502.175	5.923	5.88	1K27, 1K79, 1K99	514.206	8.817	8.78	1K11, 1K55
486.211	5.96	5.92	1K73	498.2	8.823	8.78	1K25, 1K49
537.186	6.027	5.99	1K14	536.19	8.89	8.85	1K13
488.196	6.043	5.99	1K51	508.184	8.937	8.85	1K29
503.17	6.053	6.01	1K100, 1K28, 1K80	512.165	9.213	9.18	1K10, 1K33
489.191	6.053	6.01	1K52	512.165	9.24	9.18	1K10, 1K33
500.19	6.187	6.15	1K03, 1K53, 1K75	534.2	9.29	9.25	1K35
484.221	6.2	6.15	1K47, 1K97	554.162	9.37	9.32	1K17, 1K63
485.216	6.207	6.15	1K48, 1K98	620.184	9.733	9.7	1K21
532.217	6.247	6.21	1K85	621.179	9.733	9.7	1K22
513.211	6.327	6.29	1K34	552.172	9.74	9.7	1K39
497.191	6.367	6.34	1K96	542.237	9.96	9.92	1K15
500.19	6.373	6.34	1K03, 1K53, 1K75	578.162	10.08	10.07	1K19
496.195	6.38	6.34	1K95	618.193	10.11	10.07	1K43
516.222	6.4	6.34	1K81	540.247	10.313	10.28	1K37, 1K87
535.195	6.443	6.41	1K36	577.167	10.44	10.41	1K42
494.205	6.517	6.48	1K69	576.172	10.457	10.41	1K41
530.226	6.517	6.48	1K59, 1K83	478.152	14.887	13.56	1K93

【０６１６】

[表ＥＪ０４]

【表８６】

混合物番号	mixEJ04		
m/z [M+H]+	MSピークの保持時間 (min)	UVピークの保持時間 (min)	帰属された化合物の番号
503.186	4.597	4.58	1O94
501.195	4.62	4.58	1O68
511.245	4.67	4.63	1O74
509.255	4.76	4.71	1O48, 1O98
527.209	4.82	4.78	1O100, 1O28, 1O80
515.175	4.847	4.81	1O24, 1O78
525.224	4.927	4.88	1O04, 1O54, 1O76
495.239	5.05	5.01	1O46
509.255	5.07	5.01	1O48, 1O98
523.234	5.187	5.15	1O26, 1O50
557.251	5.193	5.15	1O86
555.26	5.313	5.28	1O60, 1O84
541.256	5.367	5.31	1O82
545.255	5.4	5.36	1O66
539.24	5.44	5.4	1O12, 1O56
555.26	5.67	5.63	1O60, 1O84
553.281	5.75	5.71	1O58
563.226	6.037	6.01	1O62
579.196	6.203	6.18	1O18, 1O64
581.212	6.213	6.18	1O90
517.165	6.227	6.18	1O02
525.224	6.26	6.22	1O04, 1O54, 1O76
502.191	6.333	6.3	1O93
496.234	6.347	6.3	1O71
500.2	6.37	6.3	1O67
494.244	6.427	6.39	1O45
523.234	6.503	6.46	1O26, 1O50
514.18	6.507	6.46	1O23, 1O77
526.214	6.543	6.52	1O27, 1O79, 1O99
513.23	6.553	6.52	1O52
534.214	6.56	6.52	1O07, 1O32
508.259	6.56	6.52	1O47, 1O97
510.25	6.567	6.52	1O73
512.234	6.59	6.52	1O51
524.229	6.667	6.64	1O03, 1O53, 1O75
508.259	6.677	6.64	1O47, 1O97
539.24	6.703	6.64	1O12, 1O56
526.214	6.713	6.64	1O27, 1O79, 1O99
527.209	6.783	6.75	1O100, 1O28, 1O80
556.255	6.827	6.79	1O85
561.224	6.877	6.85	1O14
537.25	6.937	6.85	1O34
554.265	6.957	6.94	1O59, 1O83
540.261	6.96	6.94	1O81
520.234	6.967	6.94	1O95
518.244	6.977	6.94	1O69
525.224	6.983	6.94	1O04, 1O54, 1O76
521.23	6.983	6.94	1O96
524.229	6.993	6.94	1O03, 1O53, 1O75
522.239	7.02	6.94	1O25, 1O49
538.245	7.05	7.02	1O11, 1O55
536.204	7.063	7.02	1O10, 1O33
546.25	7.173	7.15	1O91
544.259	7.187	7.15	1O65
547.245	7.197	7.15	1O92
554.265	7.247	7.22	1O59, 1O83
552.286	7.33	7.29	1O57
534.214	7.35	7.29	1O07, 1O32
562.231	7.45	7.41	1O61
565.281	7.507	7.49	1O38, 1O88
564.286	7.527	7.49	1O37, 1O87
578.201	7.61	7.56	1O17, 1O63
580.217	7.683	7.65	1O89
579.196	7.827	7.83	1O18, 1O64
645.218	7.85	7.83	1O22
567.271	7.877	7.83	1O16
565.281	8.053	8.03	1O38, 1O88
577.206	8.057	8.03	1O40
643.228	8.077	8.03	1O44
515.175	8.43	8.28	1O24, 1O78
497.23	8.443	8.28	1O72
535.209	8.61	8.57	1O08, 1O09
535.209	8.637	8.57	1O08, 1O09
533.218	8.843	8.8	1O30, 1O31
516.17	8.893	8.86	1O01
529.199	9.033	9	1O06
528.204	9.037	9	1O05
514.18	9.153	9.11	1O23, 1O77
524.229	9.207	9.16	1O03, 1O53, 1O75
527.209	9.247	9.21	1O100, 1O28, 1O80
526.214	9.247	9.21	1O27, 1O79, 1O99
603.196	9.32	9.28	1O20
522.239	9.403	9.37	1O25, 1O49
601.206	9.513	9.48	1O42
533.218	9.527	9.48	1O30, 1O31
532.223	9.537	9.48	1O29
538.245	9.597	9.56	1O11, 1O55
560.229	9.7	9.67	1O13
536.204	9.767	9.73	1O10, 1O33
558.239	9.85	9.81	1O35
559.234	9.853	9.81	1O36
578.201	10.127	10.08	1O17, 1O63
576.21	10.26	10.23	1O39
644.223	10.443	10.4	1O21
519.239	10.587	10.55	1O70
642.232	10.6	10.55	1O43
566.276	10.737	10.7	1O15
602.201	10.79	10.76	1O19
564.286	10.837	10.8	1O37, 1O87
600.21	10.93	10.89	1O41

【０６１７】

［表ＥＪ０５］

【表８７】

混合物番号	mixEJ04						
m/z [M+H]+	MSピークの保持時間 (min)	UVピークの保持時間 (min)	帰属された化合物の番号	m/z [M+H]+	MSピークの保持時間 (min)	UVピークの保持時間 (min)	帰属された化合物の番号
551.338	5.62	5.62	1A48, 1A98	581.323	8.607	8.607	1A12, 1A56
599.334	8.333	8.333	1A86	586.343	8.623	8.623	1A65
597.344	8.37	8.37	1A60, 1A84	568.297	11.383	11.383	1A27, 1A79, 1A99
596.348	8.363	8.363	1A59, 1A83	570.287	11.327	11.327	1A05
598.339	8.32	8.32	1A85	571.283	11.327	11.327	1A06
574.306	11.69	11.69	1A29	568.297	11.357	11.357	1A27, 1A79, 1A99
576.297	11.71	11.71	1A07, 1A32	645.28	11.567	11.567	1A20
563.313	7.57	7.57	1A96	643.289	11.523	11.523	1A42
623.295	7.907	7.907	1A90	565.317	11.533	11.533	1A26, 1A50
542.284	7.933	7.933	1A67	564.322	11.55	11.55	1A25, 1A49
558.253	11.207	11.207	1A01	589.329	7.063	7.063	1A92
566.313	8.593	8.593	1A03, 1A53, 1A75	606.369	12.933	12.933	1A37, 1A87
562.318	8.54	8.54	1A95	642.294	12.873	12.873	1A41
577.292	11.89	11.89	1A08, 1A09	569.292	8.88	8.88	1A100, 1A28, 1A80
580.328	11.883	11.883	1A11, 1A55	604.315	8.873	8.873	1A61
578.287	11.917	11.917	1A10, 1A33	607.364	9.957	9.957	1A38, 1A88
581.323	11.907	11.907	1A12, 1A56	603.308	8.943	8.943	1A14
578.287	11.89	11.89	1A10, 1A33	619.289	10.1	10.1	1A40
583.339	6.98	6.98	1A82	545.269	6.337	6.337	1A94
544.274	8.017	8.017	1A93	543.279	6.357	6.357	1A68
550.343	8.117	8.117	1A47, 1A97	687.301	9.807	9.807	1A22
553.329	8.123	8.123	1A74	557.258	8.46	8.46	1A24, 1A78
557.258	8.117	8.117	1A24, 1A78	565.317	8.453	8.453	1A26, 1A50
556.263	8.123	8.123	1A23, 1A77	582.344	8.46	8.46	1A81
550.343	8.133	8.133	1A47, 1A97	564.322	8.473	8.473	1A25, 1A49
566.313	8.127	8.127	1A03, 1A53, 1A75	594.369	8.68	8.68	1A57
569.292	6.487	6.487	1A100, 1A28, 1A80	588.333	8.823	8.823	1A91
552.333	6.43	6.43	1A73	559.249	8.237	8.237	1A02
551.338	6.427	6.427	1A48, 1A98	567.308	8.273	8.273	1A04, 1A54, 1A76
567.308	6.59	6.59	1A04, 1A54, 1A76	609.355	9.917	9.917	1A16
569.292	8.073	8.073	1A100, 1A28, 1A80	685.311	9.89	9.89	1A44
568.297	8.073	8.073	1A27, 1A79, 1A99	577.292	10.817	10.817	1A08, 1A09
554.318	8.07	8.07	1A51	620.284	9.01	9.01	1A17, 1A63
580.328	8.433	8.433	1A11, 1A55	606.369	9.18	9.18	1A37, 1A87
560.327	8.407	8.407	1A69	567.308	6.823	6.823	1A04, 1A54, 1A76
596.348	8.727	8.727	1A59, 1A83	587.338	7.013	7.013	1A66
575.302	10.913	10.913	1A30, 1A31	538.318	7.967	7.967	1A71
576.297	10.903	10.903	1A07, 1A32	536.327	7.94	7.94	1A45
575.302	10.89	10.89	1A30, 1A31	555.313	6.66	6.66	1A52
561.322	7.543	7.543	1A70	595.364	7.26	7.26	1A58
608.36	13.08	13.08	1A15	686.306	12.583	12.583	1A21
579.333	8.787	8.787	1A34	620.284	12.363	12.363	1A17, 1A63
597.344	6.897	6.897	1A60, 1A84	601.317	9.07	9.07	1A36
605.31	7.63	7.63	1A62	602.313	12.03	12.03	1A13
539.313	6.747	6.747	1A72	622.3	9.32	9.32	1A89
537.322	6.733	6.733	1A46	556.263	11.283	11.283	1A23, 1A77
621.28	7.763	7.763	1A18, 1A64	684.316	12.527	12.527	1A43
607.364	7.757	7.757	1A38, 1A88	644.284	12.973	12.973	1A19
621.28	10.007	10.007	1A18, 1A64	600.322	11.967	11.967	1A35
566.313	8.613	8.613	1A03, 1A53, 1A75	618.294	12.29	12.29	1A39

【０６１８】

［表ＥＪ０６］

【表８８】

混合物番号	mixEJ04						
m/z [M+H]+	MSピークの保持時間 (min)	UVピークの保持時間 (min)	帰属された化合物の番号	m/z [M+H]+	MSピークの保持時間 (min)	UVピークの保持時間 (min)	帰属された化合物の番号
559.285	6.01	5.96	3A94	578.338	8.843	8.8	3A25, 3A49
567.344	6.063	6.01	3A74	579.333	8.853	8.8	3A26, 3A50
571.274	6.3	6.25	3A24, 3A78	600.358	9.013	8.99	3A65
553.329	6.4	6.37	3A72	608.385	9.02	8.99	3A57
613.35	6.5	6.44	3A86	579.333	9.04	8.99	3A26, 3A50
597.355	6.66	6.63	3A82	571.274	9.08	8.99	3A24, 3A78
603.344	6.677	6.63	3A92	618.33	9.293	9.25	3A61
557.294	6.713	6.67	3A68	701.317	9.303	9.25	3A22
565.354	6.767	6.73	3A48, 3A98	623.37	9.343	9.25	3A16
565.354	6.78	6.73	3A48, 3A98	593.349	9.38	9.34	3A34
581.323	6.933	6.89	3A04, 3A54, 3A76	635.295	9.407	9.34	3A18, 3A64
611.359	6.933	6.89	3A60, 3A84	634.3	9.43	9.39	3A17, 3A63
551.338	7.083	7.05	3A46	583.308	9.55	9.51	3A100, 3A28, 3A80
611.359	7.25	7.21	3A60, 3A84	583.308	9.573	9.51	3A100, 3A28, 3A80
595.339	7.34	7.3	3A12, 3A56	615.333	9.757	9.72	3A36
621.38	7.34	7.3	3A38, 3A88	590.313	10.13	10.09	3A07, 3A32
601.354	7.393	7.35	3A66	591.308	10.213	10.18	3A08, 3A09
637.311	7.473	7.44	3A90	591.308	10.237	10.18	3A08, 3A09
609.38	7.6	7.57	3A58	564.358	10.467	10.4	3A47, 3A97
558.29	7.613	7.57	3A93	572.269	10.553	10.57	3A01
552.333	7.627	7.57	3A71	621.38	10.707	10.68	3A38, 3A88
573.264	7.737	7.71	3A02	584.303	10.71	10.68	3A05
570.278	7.75	7.71	3A23, 3A77	633.305	10.847	10.82	3A40
581.323	7.76	7.71	3A04, 3A54, 3A76	580.328	10.883	10.82	3A03, 3A53, 3A75
582.313	7.773	7.71	3A27, 3A79, 3A99	659.295	10.93	10.88	3A20
566.349	7.8	7.71	3A73	590.313	11.147	11.09	3A07, 3A32
575.338	7.88	7.85	3A70	596.36	11.293	11.25	3A81
619.325	8.013	7.98	3A62	594.344	11.303	11.25	3A11, 3A55
612.354	8.023	7.98	3A85	616.328	11.393	11.35	3A13
595.339	8.14	8.11	3A12, 3A56	589.317	11.623	11.6	3A30, 3A31
635.295	8.147	8.11	3A18, 3A64	634.3	11.77	11.73	3A17, 3A63
585.298	8.157	8.11	3A06	700.322	12.037	11.99	3A21
580.328	8.197	8.11	3A03, 3A53, 3A75	589.317	12.06	11.99	3A30, 3A31
550.343	8.293	8.26	3A45	570.278	12.087	12.05	3A23, 3A77
556.299	8.297	8.26	3A67	582.313	12.153	12.11	3A27, 3A79, 3A99
577.329	8.32	8.26	3A96	582.313	12.167	12.11	3A27, 3A79, 3A99
576.333	8.323	8.26	3A95	583.308	12.183	12.11	3A100, 3A28, 3A80
602.349	8.363	8.33	3A91	657.305	12.347	12.34	3A42
610.364	8.4	8.33	3A59, 3A83	578.338	12.367	12.34	3A25, 3A49
617.323	8.413	8.37	3A14	658.3	12.393	12.34	3A19
569.329	8.417	8.37	3A52	622.375	12.45	12.34	3A15
568.333	8.42	8.37	3A51	588.322	12.557	12.52	3A29
581.323	8.45	8.42	3A04, 3A54, 3A76	592.303	12.703	12.67	3A10, 3A33
580.328	8.46	8.42	3A03, 3A53, 3A75	592.303	12.737	12.67	3A10, 3A33
564.358	8.473	8.42	3A47, 3A97	614.338	12.833	12.79	3A35
620.385	8.69	8.67	3A37, 3A87	632.309	13.12	13.08	3A39
610.364	8.72	8.67	3A59, 3A83	698.331	13.33	13.29	3A43
594.344	8.77	8.75	3A11, 3A55	699.327	13.337	13.29	3A44
574.343	8.79	8.75	3A69	656.309	13.693	13.66	3A41
636.316	8.833	8.8	3A89	620.385	13.84	13.79	3A37, 3A87

【０６１９】

［表ＥＪ０７］

【表８９】

混合物番号	mixEJ07					
m/z [M+H]+	MSピークの保持時間 (min)	UVピークの保持時間 (min)	帰属された化合物の番号	m/z [M+H]+	MSピークの保持時間 (min)	UVピークの保持時間 (min)	帰属された化合物の番号
475.122	2.943	2.9	2I94	526.201	5.99	5.96	2I59, 2I83
483.181	3.043	3	2I74	511.176	5.99	5.96	2I12, 2I56
481.19	3.423	3.36	2I48, 2I98	539.207	6.087	6.05	2I16
469.165	3.44	3.4	2I72	516.195	6.117	6.05	2I65
485.165	3.5	3.46	2I52	617.154	6.14	6.11	2I22
497.16	3.61	3.57	2I04, 2I54, 2I76	536.221	6.157	6.11	2I37, 2I87
467.175	3.743	3.7	2I46	524.221	6.327	6.31	2I57
529.186	3.743	3.7	2I86	552.152	6.35	6.31	2I89
513.191	3.817	3.79	2I82	534.167	6.42	6.39	2I61
495.17	3.937	3.9	2I26, 2I50	549.141	6.51	6.47	2I40
527.196	4.147	4.12	2I60, 2I84	551.132	6.6	6.57	2I18, 2I64
517.19	4.15	4.12	2I66	473.131	6.603	6.57	2I68
489.101	4.307	4.27	2I02	550.137	6.607	6.57	2I17, 2I63
497.16	4.353	4.32	2I04, 2I54, 2I76	487.11	6.66	6.63	2I24, 2I78
537.217	4.41	4.38	2I38, 2I88	537.217	6.667	6.63	2I38, 2I88
501.135	4.453	4.41	2I06	507.145	6.667	6.63	2I08, 2I09
525.217	4.53	4.5	2I58	615.163	6.743	6.7	2I44
553.148	4.61	4.58	2I90	488.106	6.83	6.79	2I01
535.162	4.757	4.69	2I62	500.14	7.007	6.97	2I05
468.17	4.847	4.81	2I71	496.165	7.16	7.13	2I03, 2I53, 2I75
474.126	4.92	4.92	2I93	497.16	7.167	7.13	2I04, 2I54, 2I76
533.16	4.95	4.92	2I14	496.165	7.187	7.13	2I03, 2I53, 2I75
511.176	4.96	4.92	2I12, 2I56	507.145	7.32	7.29	2I08, 2I09
495.17	4.97	4.92	2I26, 2I50	505.154	7.327	7.29	2I30, 2I31
486.115	4.983	4.92	2I23, 2I77	506.149	7.333	7.29	2I07, 2I32
499.145	5.093	5.09	2I100, 2I28, 2I80	505.154	7.377	7.29	2I30, 2I31
498.149	5.11	5.09	2I27, 2I79, 2I99	575.132	7.44	7.39	2I20
472.136	5.113	5.09	2I67	486.115	7.567	7.54	2I23, 2I77
482.186	5.14	5.09	2I73	487.11	7.57	7.54	2I24, 2I78
466.18	5.23	5.19	2I45	498.149	7.677	7.66	2I27, 2I79, 2I99
484.17	5.36	5.32	2I51	498.149	7.697	7.66	2I27, 2I79, 2I99
528.191	5.467	5.43	2I85	510.181	7.7	7.66	2I11, 2I55
480.195	5.517	5.49	2I47, 2I97	499.145	7.717	7.66	2I100, 2I28, 2I80
496.165	5.52	5.49	2I03, 2I53, 2I75	532.165	7.73	7.66	2I13
481.19	5.52	5.49	2I48, 2I98	494.174	7.843	7.81	2I25, 2I49
509.185	5.52	5.49	2I34	504.159	8	7.97	2I29
531.17	5.573	5.53	2I36	573.141	8.07	8.04	2I42
493.165	5.627	5.6	2I96	508.14	8.263	8.25	2I10, 2I33
492.17	5.64	5.6	2I95	499.145	8.273	8.25	2I100, 2I28, 2I80
512.196	5.643	5.6	2I81	550.137	8.277	8.25	2I17, 2I63
506.149	5.687	5.65	2I07, 2I32	508.14	8.283	8.25	2I10, 2I33
519.181	5.793	5.77	2I92	530.174	8.343	8.3	2I35
518.186	5.797	5.77	2I91	480.195	8.347	8.3	2I47, 2I97
551.132	5.823	5.77	2I18, 2I64	616.158	8.74	8.7	2I21
526.201	5.847	5.82	2I59, 2I83	548.146	8.86	8.82	2I39
527.196	5.863	5.82	2I60, 2I84	538.212	8.877	8.82	2I15
491.175	5.903	5.87	2I70	574.137	9.09	9.06	2I19
490.18	5.92	5.87	2I69	614.168	9.277	9.25	2I43
494.174	5.92	5.87	2I25, 2I49	536.221	9.43	9.39	2I37, 2I87
510.181	5.99	5.96	2I11, 2I55	572.146	9.627	9.59	2I41

【０６２０】

[表ＥＪ０８]

【表９０】

混合物番号	mixEJ08					
m/z [M+H]+	MSピークの保持時間 (min)	UVピークの保持時間 (min)	帰属された化合物の番号	m/z [M+H]+	MSピークの保持時間 (min)	UVピークの保持時間 (min)	帰属された化合物の番号
517.169	3.873	3.83	2L94	532.226	6.513	6.48	2L69
525.228	3.92	3.88	2L74	536.221	6.56	6.52	2L25, 2L49
515.178	4.04	4	2L68	552.228	6.587	6.52	2L11, 2L55
541.192	4.073	4.04	2L100, 2L28, 2L80	560.233	6.633	6.59	2L91
529.157	4.077	4.04	2L24, 2L78	548.196	6.643	6.59	2L07, 2L32
523.237	4.17	4.12	2L48, 2L98	568.248	6.723	6.69	2L59, 2L83
527.212	4.287	4.24	2L52	558.242	6.737	6.69	2L65
511.212	4.367	4.32	2L72	566.268	6.887	6.86	2L57
539.207	4.437	4.41	2L04, 2L54, 2L76	593.179	6.997	6.97	2L18, 2L64
571.233	4.47	4.41	2L86	578.268	7.01	6.97	2L37, 2L87
509.222	4.483	4.44	2L46	576.214	7.037	6.97	2L61
555.238	4.673	4.65	2L82	581.254	7.123	7.1	2L16
561.228	4.697	4.65	2L92	659.201	7.137	7.1	2L22
559.237	4.853	4.81	2L66	539.207	7.143	7.1	2L04, 2L54, 2L76
569.243	5	4.97	2L60, 2L84	594.199	7.18	7.15	2L89
567.264	5.213	5.18	2L58	592.184	7.207	7.15	2L17, 2L63
533.222	5.36	5.34	2L70	591.188	7.423	7.38	2L40
531.148	5.367	5.34	2L02	579.264	7.473	7.44	2L38, 2L88
579.264	5.38	5.34	2L38, 2L88	657.21	7.513	7.48	2L44
540.196	5.397	5.34	2L27, 2L79, 2L99	549.191	7.833	7.79	2L08, 2L09
539.207	5.417	5.34	2L04, 2L54, 2L76	530.153	8.07	8.03	2L01
577.209	5.493	5.47	2L62	547.201	8.213	8.19	2L30, 2L31
595.194	5.57	5.53	2L90	548.196	8.227	8.19	2L07, 2L32
543.182	5.597	5.53	2L06	542.187	8.227	8.19	2L05
516.173	5.673	5.63	2L93	546.206	8.243	8.19	2L29
593.179	5.683	5.63	2L18, 2L64	538.212	8.39	8.35	2L03, 2L53, 2L75
510.217	5.707	5.67	2L71	528.162	8.503	8.47	2L23, 2L77
537.217	5.823	5.79	2L26, 2L50	617.179	8.56	8.52	2L20
514.183	5.837	5.79	2L67	541.192	8.607	8.59	2L100, 2L28, 2L80
537.217	5.84	5.79	2L26, 2L50	540.196	8.627	8.59	2L27, 2L79, 2L99
528.162	5.863	5.83	2L23, 2L77	535.212	8.77	8.74	2L96
529.157	5.863	5.83	2L24, 2L78	536.221	8.78	8.74	2L25, 2L49
508.226	5.897	5.86	2L45	552.228	8.857	8.82	2L11, 2L55
540.196	5.913	5.86	2L27, 2L79, 2L99	553.223	8.867	8.82	2L12, 2L56
524.233	5.947	5.91	2L73	574.212	8.903	8.88	2L13
553.223	5.953	5.91	2L12, 2L56	547.201	8.933	8.88	2L30, 2L31
575.207	6.023	6	2L14	615.188	8.937	8.88	2L42
526.217	6.043	6	2L51	549.191	9.163	9.14	2L08, 2L09
541.192	6.06	6	2L100, 2L28, 2L80	550.187	9.183	9.14	2L10, 2L33
538.212	6.163	6.13	2L03, 2L53, 2L75	572.221	9.247	9.2	2L35
550.187	6.167	6.13	2L10, 2L33	592.184	9.397	9.36	2L17, 2L63
522.242	6.183	6.13	2L47, 2L97	522.242	9.68	9.67	2L47, 2L97
570.238	6.223	6.19	2L85	590.193	9.707	9.67	2L39
551.232	6.327	6.3	2L34	658.205	9.78	9.74	2L21
538.212	6.403	6.36	2L03, 2L53, 2L75	580.259	10.01	9.97	2L15
554.243	6.407	6.36	2L81	656.215	10.077	10.03	2L43
534.217	6.433	6.39	2L95	616.184	10.13	10.09	2L19
573.217	6.437	6.39	2L36	578.268	10.293	10.25	2L37, 2L87
568.248	6.467	6.39	2L59, 2L83	614.193	10.413	10.38	2L41
569.243	6.477	6.39	2L60, 2L84	523.237	12.043	12	2L48, 2L98

【０６２１】
［表ＥＪ０９］

【表９１】

混合物番号	mixEJ09						
m/z [M+H]+	MSピークの保持時間 (min)	UVピークの保持時間 (min)	帰属された化合物の番号	m/z [M+H]+	MSピークの保持時間 (min)	UVピークの保持時間 (min)	帰属された化合物の番号
557.125	4.003	3.95	2K94	600.189	6.923	6.89	2K91
565.184	4.067	4.03	2K74	591.188	6.933	6.89	2K34
581.148	4.223	4.2	2K100, 2K28, 2K80	608.204	6.947	6.89	2K59, 2K83
555.134	4.487	4.45	2K68	608.204	7.01	6.98	2K59, 2K83
551.168	4.523	4.49	2K72	572.183	7.027	6.98	2K69
563.193	4.603	4.6	2K48, 2K98	613.173	7.053	6.98	2K36
579.163	4.783	4.75	2K04, 2K54, 2K76	576.177	7.067	7.04	2K25, 2K49
595.194	4.867	4.84	2K82	592.184	7.08	7.04	2K11, 2K55
549.178	4.987	4.94	2K46	598.198	7.25	7.21	2K65
577.173	5.11	5.07	2K26, 2K50	633.135	7.277	7.21	2K18, 2K64
609.199	5.213	5.18	2K60, 2K84	618.224	7.31	7.27	2K37, 2K87
609.199	5.237	5.18	2K60, 2K84	588.152	7.337	7.27	2K07, 2K32
599.193	5.347	5.33	2K66	621.21	7.35	7.32	2K16
593.179	5.37	5.33	2K12, 2K56	699.157	7.353	7.32	2K22
571.104	5.56	5.52	2K02	606.224	7.373	7.32	2K57
575.168	5.577	5.52	2K96	588.152	7.373	7.32	2K07, 2K32
579.163	5.607	5.58	2K04, 2K54, 2K76	634.155	7.48	7.44	2K89
619.22	5.63	5.58	2K38, 2K88	616.17	7.557	7.52	2K61
607.22	5.703	5.67	2K58	632.14	7.71	7.67	2K17, 2K63
635.151	5.813	5.78	2K90	631.144	8.033	8.01	2K40
583.138	5.827	5.78	2K06	619.22	8.037	8.01	2K38, 2K88
556.129	5.977	5.94	2K93	697.166	8.05	8.01	2K44
573.178	6.01	5.97	2K70	589.148	8.133	8.09	2K08, 2K09
550.173	6.017	5.97	2K71	570.109	8.35	8.32	2K01
617.165	6.053	5.97	2K62	582.143	8.507	8.47	2K05
568.118	6.173	6.15	2K23, 2K77	578.168	8.647	8.61	2K03, 2K53, 2K75
593.179	6.177	6.15	2K12, 2K56	579.163	8.66	8.61	2K04, 2K54, 2K76
580.152	6.197	6.15	2K27, 2K79, 2K99	657.135	8.8	8.79	2K20
580.152	6.217	6.15	2K27, 2K79, 2K99	587.157	8.823	8.79	2K30, 2K31
633.135	6.23	6.15	2K18, 2K64	589.148	8.823	8.79	2K08, 2K09
564.189	6.25	6.22	2K73	568.118	9.113	9.1	2K23, 2K77
615.163	6.273	6.22	2K14	569.113	9.113	9.1	2K24, 2K78
554.139	6.39	6.36	2K67	592.184	9.117	9.1	2K11, 2K55
577.173	6.44	6.41	2K26, 2K50	614.168	9.143	9.1	2K13
548.183	6.443	6.41	2K45	580.152	9.22	9.18	2K27, 2K79, 2K99
569.113	6.45	6.41	2K24, 2K78	581.148	9.223	9.18	2K100, 2K28, 2K8
590.143	6.46	6.41	2K10, 2K33	576.177	9.353	9.32	2K25, 2K49
610.194	6.5	6.46	2K85	655.144	9.473	9.44	2K42
611.189	6.507	6.46	2K86	586.162	9.52	9.44	2K29
567.168	6.573	6.55	2K52	632.14	9.62	9.59	2K17, 2K63
566.173	6.587	6.55	2K51	590.143	9.76	9.74	2K10, 2K33
563.193	6.663	6.66	2K48, 2K98	612.177	9.777	9.74	2K35
578.168	6.683	6.66	2K03, 2K53, 2K75	698.161	9.977	9.94	2K21
562.198	6.69	6.66	2K47, 2K97	620.215	10.19	10.17	2K15
594.199	6.693	6.66	2K81	630.149	10.213	10.17	2K39
578.168	6.707	6.66	2K03, 2K53, 2K75	656.14	10.3	10.27	2K19
562.198	6.717	6.66	2K47, 2K97	696.171	10.53	10.49	2K43
581.148	6.733	6.7	2K100, 2K28, 2K80	618.224	10.76	10.72	2K37, 2K87
574.173	6.747	6.7	2K95	654.149	10.847	10.82	2K41
601.184	6.91	6.89	2K92	587.157	11.25	10.82	2K30, 2K31

【０６２２】
［表ＥＪ１０］

【表９２】

混合物番号	mixEJ10							
m/z [M+H]+	MSピークの保持時間 (min)	UVピークの保持時間 (min)	帰属された化合物の番号	m/z [M+H]+	MSピークの保持時間 (min)	UVピークの保持時間 (min)	帰属された化合物の番号
617.29	6.513	6.47	2A74	621.22	8.75	8.68	2A24, 2A78
609.231	6.557	6.52	2A94	660.31	8.787	8.76	2A59, 2A83
607.241	6.683	6.65	2A68	658.331	8.853	8.82	2A57
615.3	6.7	6.65	2A48, 2A98	650.305	8.893	8.86	2A65
621.22	6.843	6.8	2A24, 2A78	652.295	8.967	8.94	2A91
632.259	6.983	6.96	2A27, 2A79, 2A99	667.27	8.997	8.94	2A14
631.27	6.987	6.96	2A04, 2A54, 2A76	643.295	9.073	9.03	2A34
603.275	6.997	6.96	2A72	633.254	9.187	9.16	2A100, 2A28, 2A80
601.284	7.063	7.03	2A46	668.276	9.197	9.16	2A61
647.301	7.103	7.07	2A82	669.272	9.197	9.16	2A62
661.305	7.12	7.07	2A60, 2A84	684.246	9.327	9.29	2A17, 2A63
651.3	7.34	7.29	2A66	665.279	9.343	9.29	2A36
661.305	7.367	7.33	2A60, 2A84	642.249	9.357	9.29	2A10, 2A33
659.326	7.513	7.48	2A58	670.331	9.387	9.35	2A37, 2A87
671.326	7.993	7.95	2A38, 2A88	686.262	9.517	9.48	2A89
685.241	8.087	8.07	2A18, 2A64	640.259	9.717	9.64	2A07, 2A32
633.254	8.097	8.07	2A100, 2A28, 2A80	751.263	9.753	9.71	2A22
602.28	8.097	8.07	2A71	673.317	9.853	9.82	2A16
632.259	8.103	8.07	2A27, 2A79, 2A99	685.241	9.977	9.95	2A18, 2A64
633.254	8.117	8.07	2A100, 2A28, 2A80	749.273	10.073	10.05	2A44
687.257	8.12	8.07	2A90	671.326	10.167	10.13	2A38, 2A88
600.289	8.173	8.15	2A45	683.251	10.31	10.28	2A40
616.295	8.183	8.15	2A73	641.254	10.717	10.68	2A08, 2A09
608.236	8.203	8.15	2A93	641.254	10.743	10.68	2A08, 2A09
606.245	8.21	8.15	2A67	639.264	11.013	10.98	2A30, 2A31
620.225	8.257	8.23	2A23, 2A77	638.268	11.033	10.98	2A29
653.29	8.257	8.23	2A92	622.215	11.06	10.98	2A01
630.274	8.287	8.23	2A03, 2A53, 2A75	635.245	11.143	11.11	2A06
663.296	8.31	8.28	2A86	634.249	11.153	11.11	2A05
618.28	8.313	8.28	2A51	709.241	11.303	11.27	2A20
619.275	8.313	8.28	2A52	630.274	11.313	11.27	2A03, 2A53, 2A75
662.301	8.317	8.28	2A85	630.274	11.34	11.27	2A03, 2A53, 2A75
614.305	8.32	8.28	2A47, 2A97	620.225	11.377	11.33	2A23, 2A77
615.3	8.323	8.28	2A48, 2A98	632.259	11.44	11.4	2A27, 2A79, 2A99
614.305	8.343	8.28	2A47, 2A97	640.259	11.46	11.4	2A07, 2A32
623.21	8.36	8.33	2A02	707.251	11.597	11.57	2A42
631.27	8.37	8.33	2A04, 2A54, 2A76	628.284	11.607	11.57	2A25, 2A49
625.284	8.373	8.33	2A70	644.29	11.703	11.68	2A11, 2A55
660.31	8.52	8.5	2A59, 2A83	666.274	11.74	11.68	2A13
646.306	8.537	8.5	2A81	639.264	11.947	11.92	2A30, 2A31
644.29	8.627	8.59	2A11, 2A55	642.249	11.953	11.92	2A10, 2A33
624.289	8.637	8.59	2A69	664.284	11.987	11.95	2A35
626.28	8.687	8.68	2A95	684.246	12.05	12.02	2A17, 2A63
631.27	8.707	8.68	2A04, 2A54, 2A76	750.268	12.253	12.23	2A21
627.275	8.71	8.68	2A96	682.256	12.297	12.26	2A39
628.284	8.71	8.68	2A25, 2A49	748.278	12.513	12.47	2A43
629.279	8.717	8.68	2A26, 2A50	708.246	12.59	12.55	2A19
645.285	8.727	8.68	2A12, 2A56	672.321	12.663	12.62	2A15
629.279	8.733	8.68	2A26, 2A50	706.256	12.82	12.79	2A41
645.285	8.743	8.68	2A12, 2A56	670.331	12.883	12.85	2A37, 2A87

【０６２３】
［表ＥＪ１１］

【表９３】

混合物番号	mixEJ11						
m/z [M+H]+	MSピークの保持時間 (min)	UVピークの保持時間 (min)	帰属された化合物の番号	m/z [M+H]+	MSピークの保持時間 (min)	UVピークの保持時間 (min)	帰属された化合物の番号
763.2	5.617	5.59	2Q30, 2Q31	745.157	8.743	8.71	2Q24, 2Q78
741.227	6.79	6.75	2Q74	752.221	8.75	8.71	2Q25, 2Q49
757.191	6.883	6.83	2Q100, 2Q28, 2Q80	759.181	8.763	8.71	2Q06
731.177	6.943	6.89	2Q68	785.242	8.803	8.76	2Q60, 2Q84
739.237	6.953	6.89	2Q48, 2Q98	784.247	8.81	8.76	2Q59, 2Q83
739.237	6.97	6.89	2Q48, 2Q98	791.206	8.873	8.87	2Q14
755.206	7.063	7.05	2Q04, 2Q54, 2Q76	782.268	8.897	8.87	2Q57
745.157	7.087	7.05	2Q24, 2Q78	774.241	8.9	8.87	2Q65
787.233	7.09	7.05	2Q86	776.232	8.913	8.87	2Q91
755.206	7.167	7.13	2Q04, 2Q54, 2Q76	767.232	9.043	9	2Q34
756.196	7.17	7.13	2Q27, 2Q79, 2Q99	757.191	9.097	9.07	2Q100, 2Q28, 2Q8
744.161	7.203	7.13	2Q23, 2Q77	792.213	9.163	9.15	2Q61
743.212	7.22	7.19	2Q52	793.208	9.177	9.15	2Q62
727.212	7.223	7.19	2Q72	789.216	9.197	9.15	2Q36
753.216	7.287	7.26	2Q26, 2Q50	808.183	9.273	9.24	2Q17, 2Q63
785.242	7.31	7.26	2Q60, 2Q84	794.268	9.287	9.24	2Q37, 2Q87
725.221	7.32	7.26	2Q46	766.186	9.287	9.24	2Q10, 2Q33
777.227	7.41	7.37	2Q92	811.194	9.363	9.35	2Q90
769.222	7.447	7.41	2Q12, 2Q56	810.199	9.387	9.35	2Q89
775.237	7.503	7.48	2Q66	875.2	9.543	9.51	2Q22
783.263	7.65	7.62	2Q58	764.196	9.59	9.51	2Q07, 2Q32
751.212	7.907	7.87	2Q96	797.253	9.597	9.57	2Q16
749.221	7.98	7.94	2Q70	765.191	9.623	9.57	2Q08, 2Q09
795.263	8.057	8.02	2Q38, 2Q88	764.196	9.627	9.57	2Q07, 2Q32
809.178	8.167	8.13	2Q18, 2Q64	809.178	9.763	9.72	2Q18, 2Q64
726.216	8.203	8.17	2Q71	873.209	9.86	9.83	2Q44
756.196	8.203	8.17	2Q27, 2Q79, 2Q99	874.205	9.87	9.83	2Q21
757.191	8.21	8.17	2Q100, 2Q28, 2Q80	795.263	9.91	9.87	2Q38, 2Q88
732.173	8.26	8.17	2Q93	807.188	10.08	10.04	2Q40
740.232	8.27	8.25	2Q73	765.191	10.44	10.4	2Q08, 2Q09
724.226	8.287	8.25	2Q45	872.214	10.523	10.48	2Q43
730.182	8.293	8.25	2Q67	763.2	10.747	10.7	2Q30, 2Q31
744.161	8.33	8.29	2Q23, 2Q77	758.186	10.79	10.73	2Q05
746.152	8.337	8.29	2Q01	754.211	10.873	10.87	2Q03, 2Q53, 2Q75
754.211	8.363	8.29	2Q03, 2Q53, 2Q75	833.178	10.907	10.87	2Q20
747.147	8.367	8.34	2Q02	756.196	11.063	11.02	2Q27, 2Q79, 2Q99
786.237	8.383	8.34	2Q85	752.221	11.173	11.19	2Q25, 2Q49
754.211	8.383	8.34	2Q03, 2Q53, 2Q75	831.188	11.227	11.19	2Q42
742.216	8.407	8.34	2Q51	790.211	11.243	11.19	2Q13
738.241	8.423	8.34	2Q47, 2Q97	768.227	11.29	11.24	2Q11, 2Q55
738.241	8.44	8.34	2Q47, 2Q97	762.205	11.343	11.29	2Q29
771.238	8.563	8.54	2Q82	788.221	11.497	11.47	2Q35
770.243	8.577	8.54	2Q81	766.186	11.563	11.53	2Q10, 2Q33
784.247	8.583	8.54	2Q59, 2Q83	808.183	11.57	11.53	2Q17, 2Q63
768.227	8.673	8.66	2Q11, 2Q55	806.192	11.837	11.8	2Q39
755.206	8.683	8.66	2Q04, 2Q54, 2Q76	832.183	12.057	12.01	2Q19
748.226	8.687	8.66	2Q69	796.258	12.067	12.01	2Q15
750.216	8.693	8.66	2Q95	794.268	12.327	12.29	2Q37, 2Q87
753.216	8.697	8.66	2Q26, 2Q50	830.192	12.347	12.29	2Q41
769.222	8.707	8.66	2Q12, 2Q56	733.168	14.537	14.6	2Q94

【０６２４】

［表ＥＪ１２］

【表９４】

混合物番号	mixEJ12					
m/z [M+H]+	MSピークの保持時間 (min)	UVピークの保持時間 (min)	帰属された化合物の番号	m/z [M+H]+	MSピークの保持時間 (min)	UVピークの保持時間 (min)	帰属された化合物の番号
788.193	3.34	3.34	2R08, 2R09	807.249	9.27	9.23	2R59, 2R83
810.235	6.247	6.21	2R86	805.27	9.293	9.23	2R57
816.211	6.3	6.25	2R62	769.154	9.31	9.23	2R01
786.203	7.023	6.99	2R30, 2R31	768.159	9.33	9.29	2R24, 2R78
767.164	7.127	7.09	2R23, 2R77	792.224	9.33	9.29	2R12, 2R56
763.234	7.24	7.2	2R73	798.239	9.337	9.29	2R66
764.23	7.347	7.32	2R74	797.244	9.34	9.29	2R65
756.17	7.43	7.39	2R94	799.234	9.423	9.39	2R91
780.193	7.443	7.39	2R100, 2R28, 2R80	782.184	9.427	9.39	2R06
762.239	7.493	7.44	2R48, 2R98	814.209	9.527	9.48	2R14
754.18	7.497	7.44	2R68	790.234	9.593	9.57	2R34
778.209	7.74	7.71	2R04, 2R54, 2R76	815.215	9.607	9.57	2R61
766.214	7.753	7.71	2R52	780.193	9.703	9.67	2R100, 2R28, 2R80
808.244	7.803	7.78	2R60, 2R84	831.185	9.703	9.67	2R17, 2R63
776.218	7.807	7.78	2R26, 2R50	812.218	9.77	9.76	2R36
750.214	7.817	7.78	2R72	817.27	9.793	9.76	2R37, 2R87
794.24	7.827	7.78	2R82	833.201	9.903	9.86	2R89
800.23	7.997	7.96	2R92	898.202	10.133	10.1	2R22
806.265	8.137	8.1	2R58	787.198	10.197	10.17	2R07, 2R32
772.223	8.463	8.41	2R70	820.256	10.207	10.17	2R16
834.196	8.61	8.58	2R90	832.181	10.383	10.35	2R18, 2R64
818.265	8.613	8.58	2R38, 2R88	896.212	10.39	10.35	2R44
779.198	8.677	8.58	2R27, 2R79, 2R99	818.265	10.443	10.41	2R38, 2R88
779.198	8.703	8.7	2R27, 2R79, 2R99	830.19	10.637	10.6	2R40
749.219	8.717	8.7	2R71	895.217	10.913	10.78	2R43
747.228	8.74	8.7	2R45	789.188	11.027	10.99	2R10, 2R33
748.223	8.747	8.7	2R46	788.193	11.037	10.99	2R08, 2R09
753.185	8.763	8.7	2R67	786.203	11.257	11.22	2R30, 2R31
755.175	8.793	8.7	2R93	787.198	11.257	11.22	2R07, 2R32
777.214	8.803	8.7	2R03, 2R53, 2R75	781.188	11.36	11.32	2R05
778.209	8.823	8.81	2R04, 2R54, 2R76	856.181	11.487	11.45	2R20
761.244	8.83	8.81	2R47, 2R97	777.214	11.487	11.45	2R03, 2R53, 2R75
809.24	8.84	8.81	2R85	767.164	11.533	11.45	2R23, 2R77
761.244	8.847	8.81	2R47, 2R97	780.193	11.557	11.54	2R100, 2R28, 2R80
765.219	8.85	8.81	2R51	779.198	11.57	11.54	2R27, 2R79, 2R99
768.159	8.85	8.81	2R24, 2R78	775.223	11.687	11.61	2R25, 2R49
762.239	8.86	8.81	2R48, 2R98	854.19	11.72	11.67	2R42
807.249	8.98	8.97	2R59, 2R83	813.214	11.82	11.77	2R13
778.209	9.003	8.97	2R04, 2R54, 2R76	785.207	11.86	11.83	2R29
770.15	9.033	8.97	2R02	791.229	11.867	11.83	2R11, 2R55
793.245	9.05	9.01	2R81	811.223	11.983	11.97	2R35
775.223	9.057	9.01	2R25, 2R49	789.188	12.067	12.03	2R10, 2R33
792.224	9.09	9.01	2R12, 2R56	832.181	12.117	12.09	2R18, 2R64
791.229	9.1	9.07	2R11, 2R55	831.185	12.12	12.09	2R17, 2R63
771.228	9.107	9.07	2R69	897.207	12.297	12.27	2R21
774.214	9.183	9.15	2R96	829.195	12.317	12.27	2R39
773.219	9.19	9.15	2R95	855.185	12.57	12.54	2R19
777.214	9.193	9.15	2R03, 2R53, 2R75	819.26	12.607	12.54	2R15
808.244	9.263	9.23	2R60, 2R84	853.195	12.76	12.73	2R41
776.218	9.267	9.23	2R26, 2R50	817.27	12.79	12.73	2R37, 2R87

【０６２５】

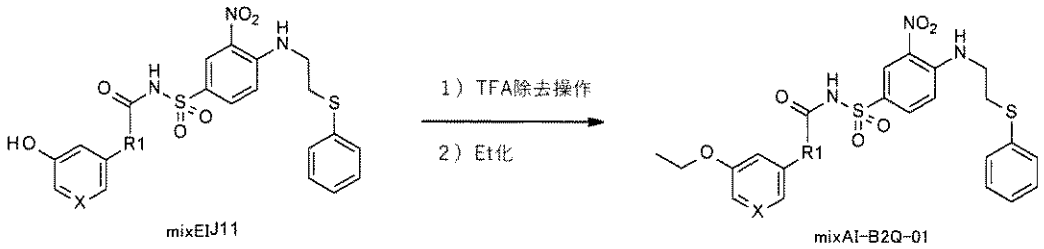
実施例６－５：固相から切出した後の後処理ならびにアレノール部分の選択的エチル化反応

レジンから切り出した混合物に対して、ＴＦＡを除去する操作を実施した後、得られた化合物のアレノール部分に選択的エチル化を実施し、官能基変換を行った。実施例６－４－１と実施例６－４－２で得た［表ＥＩＪ０１］～［表ＥＩＪ１２］に示す混合物ｍｉｘＥＪ０１～ｍｉｘＥＪ１２を用いて、下に示す方法にて実施した。ｍｉｘＥＪ－１１を用いてＴＦＡを除去した後に、エチル化を実施し、ｍｉｘＡＩ－Ｂ２Ｑ－０１を得た実験操作について一例として示す。

【０６２６】

実施例６－５－１：混合物ｍｉｘＡＩ－Ｂ２Ｑ－０１の合成

【化１１５】



【０６２７】

ｍｉｘＥＪ１１（３５．３μｍｏｌ想定）にＤＭＩ（１ｍＬ）、フルオロベンゼン（内部標準として、３０μＬを添加）を加え、ボルテックス撹拌により完全に溶解させた。この溶液を、固相担持されたモルホリン（Ｍｅｒｃｋ，ｃａｔ．Ｎｏ．４９３８１３，モルホリン，ポリマー担持２００－４００ｍｅｓｈ，ｅｘｔｅｎｔ ｏｆ ｌａｂｅｌｉｎｇ：２．７５－３．２５ｍｍｏｌ／ｇ ｌｏａｄｉｎｇ，１％架橋，３００ｍｇ）を詰めたシリンジカラムに移し、ＭｅＣＮ（２５０μＬ）で２回洗いこんだ後に、１０分間静置した。加圧してろ液をカラム下方から試験管にて回収した。固相担持されたモルホリンをＭｅＣＮ（１ｍＬ）で３回洗浄、加圧ろ過し、全てのろ液を併せて集めた。集めた溶液をＧｅｎｅｖａｃにて溶媒を減圧下留去（４０℃，低沸点溶媒の留去が終了したと検知されるまで５０－２００ｍｂａｒで減圧した後に、４０℃，＜０．５ｍｂａｒで１６時間）にて溶媒を減圧下留去した。残渣にＤＭＩ（５００μＬ）を加え撹拌して溶解させた後に、ガラスバイアルに移し、ＤＭＩ（２５０μＬ）で２回洗いこんだ。得られた溶液をＧｅｎｅｖａｃにて溶媒を減圧下留去（４０℃，低沸点溶媒の留去が終了したと検知されるまで５０－２００ｍｂａｒで減圧し、続くエチル化に使用する濃縮物を得た。

【０６２８】

窒素雰囲気下、得られた濃縮物（３１．９μｍｏｌ想定）の入ったガラスバイアルに、ＤＭＩ（５５０μＬ）、ＢＴＰＰ（１５１μＬ）、Et_3PO_4（１５１μＬ）を加え、８０℃で３０時間撹拌した。室温に冷却した後に、反応液をカルボン酸担持シリカゲルカラム（Ｂｉｏｔａｇｅ社製ＩＳＯＬＵＴＥ（登録商標） ＣＢＡ ＳＰＥカラム，１ｇ／６ｍＬ，０．７ｍｅｑ／ｇ，製品番号：５２０－０１００－Ｃ）に吸着させ、１０分間静置した。ＭｅＣＮ（１ｍＬ）を加え、加圧し、ろ液を試験管にて回収した。カルボン酸担持シリカゲルをＭｅＣＮ（１ｍＬ）で２回洗浄加圧ろ過し、ろ液を集めた。ＤＭＳＯ（１ｍＬ）を加えた後に、Ｇｅｎｅｖａｃ（４０℃，低沸点溶媒の留去が終了したと検知されるまで５０－２００ｍｂａｒで減圧した後に、４０℃，＜０．５ｍｂａｒで１６時間）にて溶媒を減圧下留去し、［表ＡＩ－０３－Ｂ２Ｑ－０１］に示す標題の混合物ｍｉｘＡＩ－Ｂ２Ｑ－０１（２５．０ｍｇ）をオイル状物質として得た。

【０６２９】

<u>実施例６－５－２：他１１種類の混合物に対するＴＦＡ除去およびエチル化の実施</u>

［表ＥＪ０１］～［表ＥＪ１０］および［表ＥＪ１２］に示す混合物ｍｉｘＥＪ０１～ｍｉｘＥＪ１０およびｍｉｘＥＪ１２についても、実施例６－５－１と同様の操作を実施し［表ＡＩ－０３－Ｂ４Ｊ－０１］、［表ＡＩ－０３－Ｂ１Ｍ－０１］、［表ＡＩ－０３－Ｂ１Ｋ－０１］、［表ＡＩ－０３－Ｂ１Ｏ－０１］、［表ＡＩ－０３－Ｂ１Ａ－０１］、［表ＡＩ－０３－Ｂ３Ａ－０１］、［表ＡＩ－０３－Ｂ２Ｉ－０１］、［表ＡＩ－０３－Ｂ２Ｌ－０１］、［表ＡＩ－０３－Ｂ２Ｎ－０１］、［表ＡＩ－０３－Ｂ２Ａ－０１］、［表ＡＩ－０３－Ｂ２Ｒ－０１］に示す混合物を得た。

用いた原料の混合物番号、各々より得られる目的物の混合物番号ならびに目的物の混合物に含まれうる化合物の番号、得られた混合物の重量について［表ＡＩ－０３－０１］に示す。

【０６３０】

［表ＡＩ－０３－０１］

【表９５】

表AI-03-01

原料の混合物番号	目的物の混合物番号	目的物の混合物に含まれうる化合物の番号	得られた混合物の重量(mg)
ｍｉｘＥＪ０１	ｍｉｘＡＩ－Ｂ４Ｊ－０１	Ｂ４Ｊ００１－０１～Ｂ４Ｊ１００－０１	21.9
ｍｉｘＥＪ０２	ｍｉｘＡＩ－Ｂ１Ｍ－０１	Ｂ１Ｍ００１－０１～Ｂ１Ｍ１００－０１	22.2
ｍｉｘＥＪ０３	ｍｉｘＡＩ－Ｂ１Ｋ－０１	Ｂ１Ｋ００１－０１～Ｂ１Ｋ１００－０１	24.3
ｍｉｘＥＪ０４	ｍｉｘＡＩ－Ｂ１Ｏ－０１	Ｂ１Ｏ００１－０１～Ｂ１Ｏ１００－０１	22.3
ｍｉｘＥＪ０５	ｍｉｘＡＩ－Ｂ１Ａ－０１	Ｂ１Ａ００１－０１～Ｂ１Ａ１００－０１	18.3
ｍｉｘＥＪ０６	ｍｉｘＡＩ－Ｂ３Ａ－０１	Ｂ３Ａ００１－０１～Ｂ３Ａ１００－０１	27.5
ｍｉｘＥＪ０７	ｍｉｘＡＩ－Ｂ２Ｉ－０１	Ｂ２Ｉ００１－０１～Ｂ２Ｉ１００－０１	30.9
ｍｉｘＥＪ０８	ｍｉｘＡＩ－Ｂ２Ｌ－０１	Ｂ２Ｌ００１－０１～Ｂ２Ｌ１００－０１	28.1
ｍｉｘＥＪ０９	ｍｉｘＡＩ－Ｂ２Ｎ－０１	Ｂ２Ｎ００１－０１～Ｂ２Ｎ１００－０１	25.6
ｍｉｘＥＪ１０	ｍｉｘＡＩ－Ｂ２Ａ－０１	Ｂ２Ａ００１－０１～Ｂ２Ａ１００－０１	23.3
ｍｉｘＥＪ１１	ｍｉｘＡＩ－Ｂ２Ｑ－０１	Ｂ２Ｑ００１－０１～Ｂ２Ｑ１００－０１	25.0
ｍｉｘＥＪ１２	ｍｉｘＡＩ－Ｂ２Ｒ－０１	Ｂ２Ｒ００１－０１～Ｂ２Ｒ１００－０１	28.2

【０６３１】

[表ＡＩ－０３－Ｂ２Ｑ－０１]

【表９６】

混合物番号	mixAI-B2Q-01
含まれうる化合物の番号	化合物名
B2Q001-01	6-[4-[4-(3-エトキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2Q002-01	6-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド

B2Q003-01	6-[4-[4-(3-エトキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2Q004-01	6-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2Q005-01	6-[4-[4-(3-エトキシフェニル)-3-フルオロベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2Q006-01	6-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-フルオロベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2Q007-01	6-[4-[2-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2Q008-01	6-[4-[2-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2Q009-01	6-[4-[5-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2Q010-01	6-[4-[5-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2Q011-01	6-[4-[3-[2-(3-エトキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2Q012-01	6-[4-[3-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2Q013-01	6-[4-[4-(3-エトキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2Q014-01	6-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2Q015-01	6-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-エトキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2Q016-01	6-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-エトキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2Q017-01	6-[4-[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2Q018-01	6-[4-[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2Q019-01	6-[4-[3-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド

B2Q020-01	6-[4-[3-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2Q021-01	6-[4-[3-[4-(3-エトキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2Q022-01	6-[4-[3-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2Q023-01	4-[4-[4-(3-エトキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2Q024-01	4-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2Q025-01	4-[4-[4-(3-エトキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2Q026-01	4-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2Q027-01	4-[4-[4-(3-エトキシフェニル)-3-フルオロベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2Q028-01	4-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-フルオロベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2Q029-01	4-[4-[2-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2Q030-01	4-[4-[2-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2Q031-01	4-[4-[5-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2Q032-01	4-[4-[5-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2Q033-01	4-[4-[3-[2-(3-エトキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2Q034-01	4-[4-[3-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2Q035-01	4-[4-[4-(3-エトキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2Q036-01	4-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド

B2Q037-01	4-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-エトキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2Q038-01	4-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-エトキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2Q039-01	4-[4-[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2Q040-01	4-[4-[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2Q041-01	4-[4-[3-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2Q042-01	4-[4-[3-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2Q043-01	4-[4-[3-[4-(3-エトキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2Q044-01	4-[4-[3-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2Q045-01	4-[4-[[2-(3-エトキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2Q046-01	4-[4-[[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2Q047-01	4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2Q048-01	4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2Q049-01	4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2-エチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2Q050-01	4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2-エチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2Q051-01	4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-3-フルオロフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2Q052-01	4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-フルオロフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2Q053-01	4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド

B2Q054-01	4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2Q055-01	4-[4-[[3-エトキシ-5-(3-エトキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2Q056-01	4-[4-[[3-エトキシ-5-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2Q057-01	4-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2Q058-01	4-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2Q059-01	4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2Q060-01	4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2Q061-01	4-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2Q062-01	4-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2Q063-01	4-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2Q064-01	4-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2Q065-01	4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2Q066-01	4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2Q067-01	4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2Q068-01	4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2Q069-01	4-[4-[[2-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2Q070-01	4-[4-[[2-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド

B2Q071-01	6-[4-[[2-(3-エトキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2Q072-01	6-[4-[[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2Q073-01	6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2Q074-01	6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2Q075-01	6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2-エチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2Q076-01	6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2-エチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2Q077-01	6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-3-フルオロフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2Q078-01	6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-フルオロフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2Q079-01	6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2Q080-01	6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2Q081-01	6-[4-[[3-エトキシ-5-(3-エトキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2Q082-01	6-[4-[[3-エトキシ-5-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2Q083-01	6-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2Q084-01	6-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2Q085-01	6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2Q086-01	6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2Q087-01	6-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド

B2Q088-01	6-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2Q089-01	6-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2Q090-01	6-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2Q091-01	6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2Q092-01	6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2Q093-01	6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2Q094-01	6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2Q095-01	6-[4-[[2-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2Q096-01	6-[4-[[2-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2Q097-01	4-[4-[1-[4-(3-エトキシフェニル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2Q098-01	4-[4-[1-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2Q099-01	4-[4-[1-[4-(3-エトキシフェニル)-2-フルオロフェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2Q100-01	4-[4-[1-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2-フルオロフェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-[3-ニトロ-4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)フェニル]スルホニルベンズアミド

【０６３２】
[表ＡＩ－０３－Ｂ４Ｊ－０１]
【表９７】

混合物番号	mixAI-B4J-01
含まれうる化合物の番号	化合物名
B4J001-01	6-[4-[4-(3-エトキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルピリダジン-3-カルボキサミド

B4J002-01	6-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルピリダジン-3-カルボキサミド
B4J003-01	6-[4-[4-(3-エトキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルピリダジン-3-カルボキサミド
B4J004-01	6-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルピリダジン-3-カルボキサミド
B4J005-01	6-[4-[4-(3-エトキシフェニル)-3-フルオロベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルピリダジン-3-カルボキサミド
B4J006-01	6-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-フルオロベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルピリダジン-3-カルボキサミド
B4J007-01	6-[4-[2-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルピリダジン-3-カルボキサミド
B4J008-01	6-[4-[2-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルピリダジン-3-カルボキサミド
B4J009-01	6-[4-[5-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルピリダジン-3-カルボキサミド
B4J010-01	6-[4-[5-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルピリダジン-3-カルボキサミド
B4J011-01	6-[4-[3-[2-(3-エトキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルピリダジン-3-カルボキサミド
B4J012-01	6-[4-[3-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルピリダジン-3-カルボキサミド
B4J013-01	6-[4-[4-(3-エトキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルピリダジン-3-カルボキサミド
B4J014-01	6-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルピリダジン-3-カルボキサミド
B4J015-01	6-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-エトキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルピリダジン-3-カルボキサミド
B4J016-01	6-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-エトキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルピリダジン-3-カルボキサミド
B4J017-01	6-[4-[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルピリダジン-3-カルボキサミド
B4J018-01	6-[4-[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルピリダジン-3-カルボキサミド
B4J019-01	6-[4-[3-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルピリダジン-3-カルボキサミド
B4J020-01	6-[4-[3-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルピリダジン-3-カルボキサミド
B4J021-01	6-[4-[3-[4-(3-エトキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルピリダジン-3-カルボキサミド
B4J022-01	6-[4-[3-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルピリダジン-3-カルボキサミド
B4J023-01	4-[4-[4-(3-エトキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルベンズアミド
B4J024-01	4-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルベンズアミド
B4J025-01	4-[4-[4-(3-エトキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-

	N,N-ジエチルベンズアミド
B4J026-01	4-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルベンズアミド
B4J027-01	4-[4-[4-(3-エトキシフェニル)-3-フルオロベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルベンズアミド
B4J028-01	4-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-フルオロベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルベンズアミド
B4J029-01	4-[4-[2-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルベンズアミド
B4J030-01	4-[4-[2-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルベンズアミド
B4J031-01	4-[4-[5-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルベンズアミド
B4J032-01	4-[4-[5-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルベンズアミド
B4J033-01	4-[4-[3-[2-(3-エトキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルベンズアミド
B4J034-01	4-[4-[3-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルベンズアミド
B4J035-01	4-[4-[4-(3-エトキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルベンズアミド
B4J036-01	4-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルベンズアミド
B4J037-01	4-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-エトキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルベンズアミド
B4J038-01	4-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-エトキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルベンズアミド
B4J039-01	4-[4-[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルベンズアミド
B4J040-01	4-[4-[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルベンズアミド
B4J041-01	4-[4-[3-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルベンズアミド
B4J042-01	4-[4-[3-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルベンズアミド
B4J043-01	4-[4-[3-[4-(3-エトキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルベンズアミド
B4J044-01	4-[4-[3-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルベンズアミド
B4J045-01	4-[4-[[2-(3-エトキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルベンズアミド
B4J046-01	4-[4-[[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルベンズアミド
B4J047-01	4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルベンズアミド
B4J048-01	4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルベンズアミド
B4J049-01	4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2-エチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルベンズアミド
B4J050-01	4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2-エチルフェニル]メチル]ピペラ

	ジン-1-イル]-N,N-ジエチルベンズアミド
B4J051-01	4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-3-フルオロフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルベンズアミド
B4J052-01	4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-フルオロフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルベンズアミド
B4J053-01	4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルベンズアミド
B4J054-01	4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルベンズアミド
B4J055-01	4-[4-[[3-エトキシ-5-(3-エトキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルベンズアミド
B4J056-01	4-[4-[[3-エトキシ-5-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルベンズアミド
B4J057-01	4-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルベンズアミド
B4J058-01	4-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルベンズアミド
B4J059-01	4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルベンズアミド
B4J060-01	4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルベンズアミド
B4J061-01	4-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルベンズアミド
B4J062-01	4-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルベンズアミド
B4J063-01	4-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルベンズアミド
B4J064-01	4-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルベンズアミド
B4J065-01	4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルベンズアミド
B4J066-01	4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルベンズアミド
B4J067-01	4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルベンズアミド
B4J068-01	4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルベンズアミド
B4J069-01	4-[4-[[2-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルベンズアミド
B4J070-01	4-[4-[[2-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルベンズアミド
B4J071-01	6-[4-[[2-(3-エトキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルピリダジン-3-カルボキサミド
B4J072-01	6-[4-[[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルピリダジン-3-カルボキサミド
B4J073-01	6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルピリダジン-3-カルボキサミド
B4J074-01	6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルピリダジン-3-カルボキサミド
B4J075-01	6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2-エチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-

	イル]-N,N-ジエチルピリダジン-3-カルボキサミド
B4J076-01	6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2-エチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルピリダジン-3-カルボキサミド
B4J077-01	6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-3-フルオロフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルピリダジン-3-カルボキサミド
B4J078-01	6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-フルオロフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルピリダジン-3-カルボキサミド
B4J079-01	6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルピリダジン-3-カルボキサミド
B4J080-01	6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルピリダジン-3-カルボキサミド
B4J081-01	6-[4-[[3-エトキシ-5-(3-エトキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルピリダジン-3-カルボキサミド
B4J082-01	6-[4-[[3-エトキシ-5-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルピリダジン-3-カルボキサミド
B4J083-01	6-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルピリダジン-3-カルボキサミド
B4J084-01	6-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルピリダジン-3-カルボキサミド
B4J085-01	6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルピリダジン-3-カルボキサミド
B4J086-01	6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルピリダジン-3-カルボキサミド
B4J087-01	6-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルピリダジン-3-カルボキサミド
B4J088-01	6-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルピリダジン-3-カルボキサミド
B4J089-01	6-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルピリダジン-3-カルボキサミド
B4J090-01	6-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルピリダジン-3-カルボキサミド
B4J091-01	6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルピリダジン-3-カルボキサミド
B4J092-01	6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルピリダジン-3-カルボキサミド
B4J093-01	6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルピリダジン-3-カルボキサミド
B4J094-01	6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルピリダジン-3-カルボキサミド
B4J095-01	6-[4-[[2-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルピリダジン-3-カルボキサミド
B4J096-01	6-[4-[[2-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルピリダジン-3-カルボキサミド
B4J097-01	4-[4-[1-[4-(3-エトキシフェニル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルベンズアミド
B4J098-01	4-[4-[1-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルベンズアミド
B4J099-01	4-[4-[1-[4-(3-エトキシフェニル)-2-フルオロフェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルベンズアミド
B4J100-01	4-[4-[1-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2-フルオロフェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N,N-ジエチルベンズアミド

【０６３３】

[表ＡＩ－０３－Ｂ１Ｍ－０１]

【表９８】

混合物番号	mixAI-B1M-01
含まれうる化合物の番号	化合物名
B1M001-01	6-[4-[5-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
B1M002-01	4-[4-[5-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
B1M003-01	4-[4-[1-[4-(3-エトキシフェニル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
B1M004-01	4-[4-[1-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
B1M005-01	4-[4-[1-[4-(3-エトキシフェニル)-2-フルオロフェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
B1M006-01	4-[4-[1-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2-フルオロフェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
B1M007-01	6-[4-[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
B1M008-01	4-[4-[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
B1M009-01	4-[4-[[3-エトキシ-5-(3-エトキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
B1M010-01	6-[4-[[3-エトキシ-5-(3-エトキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
B1M011-01	4-[4-[[3-エトキシ-5-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
B1M012-01	6-[4-[[3-エトキシ-5-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
B1M013-01	6-[4-[3-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
B1M014-01	4-[4-[3-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
B1M015-01	4-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
B1M016-01	6-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
B1M017-01	4-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
B1M018-01	6-[4-[3-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
B1M019-01	4-[4-[3-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
B1M020-01	4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジ

	ン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
B1M021-01	6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
B1M022-01	4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
B1M023-01	6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
B1M024-01	6-[4-[3-[4-(3-エトキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
B1M025-01	4-[4-[3-[4-(3-エトキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
B1M026-01	4-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
B1M027-01	6-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
B1M028-01	4-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
B1M029-01	6-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
B1M030-01	6-[4-[3-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
B1M031-01	4-[4-[3-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
B1M032-01	4-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
B1M033-01	6-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
B1M034-01	4-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
B1M035-01	6-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
B1M036-01	6-[4-[4-(3-エトキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
B1M037-01	6-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
B1M038-01	4-[4-[4-(3-エトキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
B1M039-01	4-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
B1M040-01	4-[4-[[2-(3-エトキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
B1M041-01	4-[4-[[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
B1M042-01	6-[4-[[2-(3-エトキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
B1M043-01	6-[4-[[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
B1M044-01	4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-

	イル]-N-プロピルベンズアミド
B1M045-01	6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
B1M046-01	4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
B1M047-01	6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
B1M048-01	4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
B1M049-01	6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
B1M050-01	4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
B1M051-01	6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
B1M052-01	4-[4-[[2-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
B1M053-01	6-[4-[[2-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
B1M054-01	4-[4-[[2-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
B1M055-01	6-[4-[[2-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
B1M056-01	6-[4-[5-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
B1M057-01	4-[4-[5-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
B1M058-01	4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
B1M059-01	6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
B1M060-01	6-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-エトキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
B1M061-01	6-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-エトキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
B1M062-01	4-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-エトキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
B1M063-01	4-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-エトキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
B1M064-01	4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
B1M065-01	6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
B1M066-01	6-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
B1M067-01	6-[4-[3-[2-(3-エトキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
B1M068-01	4-[4-[3-[2-(3-エトキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
B1M069-01	4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2-エチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-

	イル]-N-プロピルベンズアミド
B1M070-01	6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2-エチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
B1M071-01	6-[4-[4-(3-エトキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
B1M072-01	6-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
B1M073-01	4-[4-[4-(3-エトキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
B1M074-01	4-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
B1M075-01	4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2-エチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
B1M076-01	6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2-エチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
B1M077-01	6-[4-[3-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
B1M078-01	4-[4-[3-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
B1M079-01	4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-3-フルオロフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
B1M080-01	6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-3-フルオロフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
B1M081-01	6-[4-[4-(3-エトキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
B1M082-01	6-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
B1M083-01	4-[4-[4-(3-エトキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
B1M084-01	4-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
B1M085-01	4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-フルオロフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
B1M086-01	6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-フルオロフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
B1M087-01	6-[4-[4-(3-エトキシフェニル)-3-フルオロベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
B1M088-01	6-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-フルオロベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
B1M089-01	6-[4-[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
B1M090-01	4-[4-[4-(3-エトキシフェニル)-3-フルオロベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
B1M091-01	4-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-フルオロベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
B1M092-01	4-[4-[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
B1M093-01	4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
B1M094-01	6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-

	1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
B1M095-01	6-[4-[2-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
B1M096-01	6-[4-[2-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド
B1M097-01	4-[4-[2-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
B1M098-01	4-[4-[2-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
B1M099-01	4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルベンズアミド
B1M100-01	6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-プロピルピリダジン-3-カルボキサミド

【０６３４】
［表ＡＩ－０３－Ｂ１Ｋ－０１］
【表９９】

混合物番号	mixAI-B1K-01
含まれうる化合物の番号	化合物名
B1K001-01	6-[4-[4-(3-エトキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B1K002-01	6-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B1K003-01	6-[4-[4-(3-エトキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B1K004-01	6-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B1K005-01	6-[4-[4-(3-エトキシフェニル)-3-フルオロベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B1K006-01	6-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-フルオロベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B1K007-01	6-[4-[2-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B1K008-01	6-[4-[2-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B1K009-01	6-[4-[5-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B1K010-01	6-[4-[5-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B1K011-01	6-[4-[3-[2-(3-エトキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B1K012-01	6-[4-[3-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B1K013-01	6-[4-[4-(3-エトキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B1K014-01	6-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジ

	ン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B1K015-01	6-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-エトキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B1K016-01	6-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-エトキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B1K017-01	6-[4-[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B1K018-01	6-[4-[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B1K019-01	6-[4-[3-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B1K020-01	6-[4-[3-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B1K021-01	6-[4-[3-[4-(3-エトキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B1K022-01	6-[4-[3-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B1K023-01	4-[4-[4-(3-エトキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ベンズアミド
B1K024-01	4-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ベンズアミド
B1K025-01	4-[4-[4-(3-エトキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ベンズアミド
B1K026-01	4-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ベンズアミド
B1K027-01	4-[4-[4-(3-エトキシフェニル)-3-フルオロベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ベンズアミド
B1K028-01	4-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-フルオロベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ベンズアミド
B1K029-01	4-[4-[2-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ベンズアミド
B1K030-01	4-[4-[2-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ベンズアミド
B1K031-01	4-[4-[5-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ベンズアミド
B1K032-01	4-[4-[5-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ベンズアミド
B1K033-01	4-[4-[3-[2-(3-エトキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ベンズアミド
B1K034-01	4-[4-[3-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ベンズアミド
B1K035-01	4-[4-[4-(3-エトキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ベンズアミド
B1K036-01	4-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ベンズアミド

B1K037-01	4-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-エトキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ベンズアミド
B1K038-01	4-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-エトキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ベンズアミド
B1K039-01	4-[4-[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ベンズアミド
B1K040-01	4-[4-[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ベンズアミド
B1K041-01	4-[4-[3-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ベンズアミド
B1K042-01	4-[4-[3-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ベンズアミド
B1K043-01	4-[4-[3-[4-(3-エトキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ベンズアミド
B1K044-01	4-[4-[3-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ベンズアミド
B1K045-01	4-[4-[[2-(3-エトキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ベンズアミド
B1K046-01	4-[4-[[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ベンズアミド
B1K047-01	4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ベンズアミド
B1K048-01	4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ベンズアミド
B1K049-01	4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2-エチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ベンズアミド
B1K050-01	4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2-エチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ベンズアミド
B1K051-01	4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-3-フルオロフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ベンズアミド
B1K052-01	4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-フルオロフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ベンズアミド
B1K053-01	4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ベンズアミド
B1K054-01	4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ベンズアミド
B1K055-01	4-[4-[[3-エトキシ-5-(3-エトキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ベンズアミド
B1K056-01	4-[4-[[3-エトキシ-5-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ベンズアミド
B1K057-01	4-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ベンズアミド
B1K058-01	4-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ベンズアミド
B1K059-01	4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ベンズアミド

B1K060-01	4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ベンズアミド
B1K061-01	4-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ベンズアミド
B1K062-01	4-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ベンズアミド
B1K063-01	4-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ベンズアミド
B1K064-01	4-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ベンズアミド
B1K065-01	4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ベンズアミド
B1K066-01	4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ベンズアミド
B1K067-01	4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ベンズアミド
B1K068-01	4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ベンズアミド
B1K069-01	4-[4-[[2-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ベンズアミド
B1K070-01	4-[4-[[2-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ベンズアミド
B1K071-01	6-[4-[[2-(3-エトキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B1K072-01	6-[4-[[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B1K073-01	6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B1K074-01	6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B1K075-01	6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2-エチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B1K076-01	6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2-エチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B1K077-01	6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-3-フルオロフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B1K078-01	6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-フルオロフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B1K079-01	6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B1K080-01	6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B1K081-01	6-[4-[[3-エトキシ-5-(3-エトキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B1K082-01	6-[4-[[3-エトキシ-5-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ピリダジン-3-カルボキサミド

B1K083-01	6-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B1K084-01	6-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B1K085-01	6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B1K086-01	6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B1K087-01	6-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B1K088-01	6-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B1K089-01	6-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B1K090-01	6-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B1K091-01	6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B1K092-01	6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B1K093-01	6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B1K094-01	6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B1K095-01	6-[4-[[2-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B1K096-01	6-[4-[[2-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B1K097-01	4-[4-[1-[4-(3-エトキシフェニル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ベンズアミド
B1K098-01	4-[4-[1-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ベンズアミド
B1K099-01	4-[4-[1-[4-(3-エトキシフェニル)-2-フルオロフェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ベンズアミド
B1K100-01	4-[4-[1-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2-フルオロフェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-(2,2,2-トリフルオロエチル)ベンズアミド

【０６３５】
[表ＡＩ－０３－Ｂ１０－０１]
【表１００】

混合物番号	mixAI-B10-01

含まれうる化合物の番号	化合物名
B10001-01	6-[4-[4-(3-エトキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B10002-01	6-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B10003-01	6-[4-[4-(3-エトキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B10004-01	6-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B10005-01	6-[4-[4-(3-エトキシフェニル)-3-フルオロベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B10006-01	6-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-フルオロベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B10007-01	6-[4-[2-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B10008-01	6-[4-[2-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B10009-01	6-[4-[5-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B10010-01	6-[4-[5-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B10011-01	6-[4-[3-[2-(3-エトキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B10012-01	6-[4-[3-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B10013-01	6-[4-[4-(3-エトキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B10014-01	6-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B10015-01	6-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-エトキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B10016-01	6-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-エトキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B10017-01	6-[4-[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B10018-01	6-[4-[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B10019-01	6-[4-[3-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B10020-01	6-[4-[3-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B10021-01	6-[4-[3-[4-(3-エトキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド

B10022-01	6-[4-[3-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B10023-01	4-[4-[4-(3-エトキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
B10024-01	4-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
B10025-01	4-[4-[4-(3-エトキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
B10026-01	4-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
B10027-01	4-[4-[4-(3-エトキシフェニル)-3-フルオロベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
B10028-01	4-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-フルオロベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
B10029-01	4-[4-[2-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
B10030-01	4-[4-[2-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
B10031-01	4-[4-[5-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
B10032-01	4-[4-[5-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
B10033-01	4-[4-[3-[2-(3-エトキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
B10034-01	4-[4-[3-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
B10035-01	4-[4-[4-(3-エトキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
B10036-01	4-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
B10037-01	4-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-エトキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
B10038-01	4-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-エトキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
B10039-01	4-[4-[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
B10040-01	4-[4-[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
B10041-01	4-[4-[3-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
B10042-01	4-[4-[3-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
B10043-01	4-[4-[3-[4-(3-エトキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
B10044-01	4-[4-[3-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
B10045-01	4-[4-[[2-(3-エトキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド

B10046-01	4-[4-[[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
B10047-01	4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
B10048-01	4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
B10049-01	4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2-エチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
B10050-01	4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2-エチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
B10051-01	4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-3-フルオロフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
B10052-01	4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-フルオロフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
B10053-01	4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
B10054-01	4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
B10055-01	4-[4-[[3-エトキシ-5-(3-エトキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
B10056-01	4-[4-[[3-エトキシ-5-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
B10057-01	4-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
B10058-01	4-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
B10059-01	4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
B10060-01	4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
B10061-01	4-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
B10062-01	4-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
B10063-01	4-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
B10064-01	4-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
B10065-01	4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
B10066-01	4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
B10067-01	4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
B10068-01	4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
B10069-01	4-[4-[[2-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
B10070-01	4-[4-[[2-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド

B10071-01	6-[4-[[2-(3-エトキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B10072-01	6-[4-[[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B10073-01	6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B10074-01	6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B10075-01	6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2-エチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B10076-01	6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2-エチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B10077-01	6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-3-フルオロフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B10078-01	6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-フルオロフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B10079-01	6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B10080-01	6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B10081-01	6-[4-[[3-エトキシ-5-(3-エトキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B10082-01	6-[4-[[3-エトキシ-5-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B10083-01	6-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B10084-01	6-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B10085-01	6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B10086-01	6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B10087-01	6-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B10088-01	6-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B10089-01	6-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B10090-01	6-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B10091-01	6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B10092-01	6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B10093-01	6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-

	イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B10094-01	6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B10095-01	6-[4-[[2-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B10096-01	6-[4-[[2-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B10097-01	4-[4-[1-[4-(3-エトキシフェニル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
B10098-01	4-[4-[1-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
B10099-01	4-[4-[1-[4-(3-エトキシフェニル)-2-フルオロフェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド
B10100-01	4-[4-[1-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2-フルオロフェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-(4-メトキシフェニル)ベンズアミド

【０６３６】
[表ＡＩ－０３－Ｂ１Ａ－０１]
【表１０１】

混合物番号	mixAI-B1A-01
含まれうる化合物の番号	化合物名
B1A001-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[4-(3-エトキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B1A002-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B1A003-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[4-(3-エトキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B1A004-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B1A005-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[4-(3-エトキシフェニル)-3-フルオロベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B1A006-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-フルオロベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B1A007-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[2-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B1A008-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[2-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B1A009-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[5-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B1A010-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[5-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B1A011-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[3-[2-(3-エトキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B1A012-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[3-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B1A013-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[4-(3-エトキシフェニル)ナフタレン-1-カ

	ルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B1A014-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B1A015-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-エトキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B1A016-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-エトキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B1A017-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B1A018-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B1A019-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[3-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B1A020-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[3-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B1A021-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[3-[4-(3-エトキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B1A022-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[3-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B1A023-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[4-(3-エトキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B1A024-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B1A025-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[4-(3-エトキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B1A026-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B1A027-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[4-(3-エトキシフェニル)-3-フルオロベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B1A028-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-フルオロベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B1A029-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[2-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B1A030-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[2-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B1A031-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[5-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B1A032-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[5-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B1A033-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[3-[2-(3-エトキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B1A034-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[3-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B1A035-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[4-(3-エトキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド

B1A036-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B1A037-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-エトキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B1A038-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-エトキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B1A039-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B1A040-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B1A041-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[3-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B1A042-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[3-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B1A043-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[3-[4-(3-エトキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B1A044-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[3-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B1A045-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[2-(3-エトキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B1A046-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B1A047-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B1A048-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B1A049-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2-エチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B1A050-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2-エチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B1A051-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-3-フルオロフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B1A052-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-フルオロフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B1A053-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B1A054-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B1A055-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[3-エトキシ-5-(3-エトキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B1A056-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[3-エトキシ-5-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B1A057-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B1A058-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B1A059-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2,6-ジメトキ

	シフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B1A060-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B1A061-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B1A062-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B1A063-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B1A064-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B1A065-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B1A066-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B1A067-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B1A068-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B1A069-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[2-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B1A070-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[2-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B1A071-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[2-(3-エトキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B1A072-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B1A073-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B1A074-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B1A075-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2-エチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B1A076-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2-エチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B1A077-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-3-フルオロフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B1A078-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-フルオロフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B1A079-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B1A080-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B1A081-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[3-エトキシ-5-(3-エトキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B1A082-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[3-エトキシ-5-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B1A083-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド

B1A084-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B1A085-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B1A086-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B1A087-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B1A088-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B1A089-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B1A090-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B1A091-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B1A092-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B1A093-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B1A094-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B1A095-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[2-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B1A096-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[2-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B1A097-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[1-[4-(3-エトキシフェニル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B1A098-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[1-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B1A099-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[1-[4-(3-エトキシフェニル)-2-フルオロフェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B1A100-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[1-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2-フルオロフェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド

【０６３７】
[表ＡＩ－０３－Ｂ３Ａ－０１]
【表１０２】

混合物番号	mixAI-B3A-01
含まれうる化合物の番号	化合物名
B3A001-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[4-(3-エトキシフェニル)チオフェン-2-カ

	ルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
B3A002-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
B3A003-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[4-(3-エトキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
B3A004-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
B3A005-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[4-(3-エトキシフェニル)-3-フルオロベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
B3A006-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-フルオロベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
B3A007-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[2-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
B3A008-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[2-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
B3A009-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[5-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
B3A010-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[5-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
B3A011-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[3-[2-(3-エトキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
B3A012-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[3-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
B3A013-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[4-(3-エトキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
B3A014-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
B3A015-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-エトキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
B3A016-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-エトキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
B3A017-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
B3A018-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
B3A019-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[3-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
B3A020-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[3-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド

B3A021-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[3-[4-(3-エトキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
B3A022-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[3-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
B3A023-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[4-(3-エトキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
B3A024-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
B3A025-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[4-(3-エトキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
B3A026-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
B3A027-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[4-(3-エトキシフェニル)-3-フルオロベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
B3A028-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-フルオロベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
B3A029-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[2-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
B3A030-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[2-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
B3A031-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[5-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
B3A032-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[5-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
B3A033-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[3-[2-(3-エトキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
B3A034-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[3-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
B3A035-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[4-(3-エトキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
B3A036-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
B3A037-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-エトキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
B3A038-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-エトキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
B3A039-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
B3A040-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
B3A041-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[3-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
B3A042-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[3-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
B3A043-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[3-[4-(3-エトキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベ

	ンズアミド
B3A044-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[3-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
B3A045-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[2-(3-エトキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
B3A046-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
B3A047-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
B3A048-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
B3A049-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2-エチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
B3A050-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2-エチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
B3A051-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-3-フルオロフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
B3A052-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-フルオロフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
B3A053-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
B3A054-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
B3A055-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[3-エトキシ-5-(3-エトキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
B3A056-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[3-エトキシ-5-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
B3A057-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
B3A058-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
B3A059-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
B3A060-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
B3A061-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
B3A062-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
B3A063-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
B3A064-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
B3A065-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
B3A066-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ナフタ

	レン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
B3A067-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
B3A068-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
B3A069-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[2-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
B3A070-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[[2-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
B3A071-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[2-(3-エトキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
B3A072-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
B3A073-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
B3A074-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
B3A075-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2-エチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
B3A076-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2-エチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
B3A077-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-3-フルオロフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
B3A078-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-フルオロフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
B3A079-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
B3A080-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
B3A081-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[3-エトキシ-5-(3-エトキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
B3A082-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[3-エトキシ-5-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
B3A083-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
B3A084-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
B3A085-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
B3A086-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
B3A087-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオ

	ロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
B3A088-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
B3A089-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
B3A090-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
B3A091-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
B3A092-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
B3A093-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
B3A094-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
B3A095-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[2-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
B3A096-01	N-(1-アダマンチルメチル)-6-[4-[[2-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルピリダジン-3-カルボキサミド
B3A097-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[1-[4-(3-エトキシフェニル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
B3A098-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[1-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
B3A099-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[1-[4-(3-エトキシフェニル)-2-フルオロフェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド
B3A100-01	N-(1-アダマンチルメチル)-4-[4-[1-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2-フルオロフェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルベンズアミド

【０６３８】
[表ＡＩ－０３－Ｂ２Ｉ－０１]
【表１０３】

混合物番号	mixAI-B2I-01
含まれうる化合物の番号	化合物名
B2I001-01	6-[4-[4-(3-エトキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2I002-01	6-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2I003-01	6-[4-[4-(3-エトキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2I004-01	6-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-

	イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2I005-01	6-[4-[4-(3-エトキシフェニル)-3-フルオロベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2I006-01	6-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-フルオロベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2I007-01	6-[4-[2-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2I008-01	6-[4-[2-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2I009-01	6-[4-[5-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2I010-01	6-[4-[5-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2I011-01	6-[4-[3-[2-(3-エトキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2I012-01	6-[4-[3-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2I013-01	6-[4-[4-(3-エトキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2I014-01	6-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2I015-01	6-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-エトキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2I016-01	6-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-エトキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2I017-01	6-[4-[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2I018-01	6-[4-[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2I019-01	6-[4-[3-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2I020-01	6-[4-[3-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2I021-01	6-[4-[3-[4-(3-エトキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2I022-01	6-[4-[3-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2I023-01	4-[4-[4-(3-エトキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
B2I024-01	4-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
B2I025-01	4-[4-[4-(3-エトキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
B2I026-01	4-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
B2I027-01	4-[4-[4-(3-エトキシフェニル)-3-フルオロベンゾイル]ピペラジン-1-イ

	ル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
B2I028-01	4-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-フルオロベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
B2I029-01	4-[4-[2-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
B2I030-01	4-[4-[2-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
B2I031-01	4-[4-[5-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
B2I032-01	4-[4-[5-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
B2I033-01	4-[4-[3-[2-(3-エトキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
B2I034-01	4-[4-[3-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
B2I035-01	4-[4-[4-(3-エトキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
B2I036-01	4-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
B2I037-01	4-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-エトキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
B2I038-01	4-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-エトキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
B2I039-01	4-[4-[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
B2I040-01	4-[4-[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
B2I041-01	4-[4-[3-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
B2I042-01	4-[4-[3-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
B2I043-01	4-[4-[3-[4-(3-エトキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
B2I044-01	4-[4-[3-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
B2I045-01	4-[4-[[2-(3-エトキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
B2I046-01	4-[4-[[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
B2I047-01	4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
B2I048-01	4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
B2I049-01	4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2-エチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
B2I050-01	4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2-エチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
B2I051-01	4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-3-フルオロフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド

B2I052-01	4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-フルオロフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
B2I053-01	4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
B2I054-01	4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
B2I055-01	4-[4-[[3-エトキシ-5-(3-エトキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
B2I056-01	4-[4-[[3-エトキシ-5-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
B2I057-01	4-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
B2I058-01	4-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
B2I059-01	4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
B2I060-01	4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
B2I061-01	4-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
B2I062-01	4-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
B2I063-01	4-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
B2I064-01	4-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
B2I065-01	4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
B2I066-01	4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
B2I067-01	4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
B2I068-01	4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
B2I069-01	4-[4-[[2-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
B2I070-01	4-[4-[[2-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
B2I071-01	6-[4-[[2-(3-エトキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2I072-01	6-[4-[[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2I073-01	6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2I074-01	6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2I075-01	6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2-エチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2I076-01	6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2-エチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド

B2I077-01	6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-3-フルオロフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2I078-01	6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-フルオロフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2I079-01	6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2I080-01	6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2I081-01	6-[4-[[3-エトキシ-5-(3-エトキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2I082-01	6-[4-[[3-エトキシ-5-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2I083-01	6-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2I084-01	6-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2I085-01	6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2I086-01	6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2I087-01	6-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2I088-01	6-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2I089-01	6-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2I090-01	6-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2I091-01	6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2I092-01	6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2I093-01	6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2I094-01	6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2I095-01	6-[4-[[2-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2I096-01	6-[4-[[2-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2I097-01	4-[4-[1-[4-(3-エトキシフェニル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
B2I098-01	4-[4-[1-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
B2I099-01	4-[4-[1-[4-(3-エトキシフェニル)-2-フルオロフェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド
B2I100-01	4-[4-[1-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2-フルオロフェニル]エチル]ピ

	ペラジン-1-イル]-N-メチルスルホニルベンズアミド

【０６３９】

[表ＡＩ－０３－Ｂ２Ｌ－０１]

【表１０４】

混合物番号	mixAI-B2L-01
含まれうる化合物の番号	化合物名
B2L001-01	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[4-(3-エトキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2L002-01	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2L003-01	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[4-(3-エトキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2L004-01	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2L005-01	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[4-(3-エトキシフェニル)-3-フルオロベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2L006-01	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-フルオロベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2L007-01	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[2-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2L008-01	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[2-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2L009-01	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[5-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2L010-01	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[5-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2L011-01	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[3-[2-(3-エトキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2L012-01	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[3-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2L013-01	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[4-(3-エトキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2L014-01	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2L015-01	6-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-エトキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-tert-ブチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2L016-01	6-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-エトキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-tert-ブチルスルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2L017-01	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2L018-01	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2L019-01	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[3-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボ

	キサミド
B2L020-01	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[3-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2L021-01	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[3-[4-(3-エトキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2L022-01	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[3-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2L023-01	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[4-(3-エトキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2L024-01	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2L025-01	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[4-(3-エトキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2L026-01	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2L027-01	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[4-(3-エトキシフェニル)-3-フルオロベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2L028-01	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-フルオロベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2L029-01	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[2-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2L030-01	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[2-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2L031-01	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[5-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2L032-01	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[5-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2L033-01	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[3-[2-(3-エトキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2L034-01	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[3-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2L035-01	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[4-(3-エトキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2L036-01	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2L037-01	4-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-エトキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-tert-ブチルスルホニルベンズアミド
B2L038-01	4-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-エトキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-tert-ブチルスルホニルベンズアミド
B2L039-01	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2L040-01	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2L041-01	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[3-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2L042-01	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[3-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド

B2L043-01	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[3-[4-(3-エトキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2L044-01	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[3-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2L045-01	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[2-(3-エトキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2L046-01	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2L047-01	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2L048-01	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2L049-01	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2-エチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2L050-01	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2-エチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2L051-01	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-3-フルオロフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2L052-01	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-フルオロフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2L053-01	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2L054-01	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2L055-01	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[3-エトキシ-5-(3-エトキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2L056-01	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[3-エトキシ-5-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2L057-01	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2L058-01	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2L059-01	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2L060-01	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2L061-01	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2L062-01	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2L063-01	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2L064-01	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2L065-01	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2L066-01	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2L067-01	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)チオフェン-2-イ

	ル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2L068-01	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2L069-01	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[2-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2L070-01	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[[2-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2L071-01	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[2-(3-エトキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2L072-01	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2L073-01	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2L074-01	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2L075-01	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2-エチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2L076-01	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2-エチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2L077-01	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-3-フルオロフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2L078-01	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-フルオロフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2L079-01	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2L080-01	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2L081-01	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[3-エトキシ-5-(3-エトキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2L082-01	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[3-エトキシ-5-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2L083-01	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2L084-01	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2L085-01	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2L086-01	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2L087-01	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2L088-01	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2L089-01	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサ

	ミド
B2L090-01	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2L091-01	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2L092-01	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2L093-01	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2L094-01	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2L095-01	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[2-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2L096-01	N-tert-ブチルスルホニル-6-[4-[[2-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2L097-01	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[1-[4-(3-エトキシフェニル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2L098-01	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[1-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2L099-01	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[1-[4-(3-エトキシフェニル)-2-フルオロフェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2L100-01	N-tert-ブチルスルホニル-4-[4-[1-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2-フルオロフェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド

【０６４０】
[表ＡＩ－０３－Ｂ２Ｎ－０１]
【表１０５】

混合物番号	mixAI-B2N-01
含まれうる化合物の番号	化合物名
B2N001-01	6-[4-[4-(3-エトキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B2N002-01	6-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B2N003-01	6-[4-[4-(3-エトキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B2N004-01	6-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B2N005-01	6-[4-[4-(3-エトキシフェニル)-3-フルオロベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B2N006-01	6-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-フルオロベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド

B2N007-01	6-[4-[2-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B2N008-01	6-[4-[2-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B2N009-01	6-[4-[5-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B2N010-01	6-[4-[5-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B2N011-01	6-[4-[3-[2-(3-エトキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B2N012-01	6-[4-[3-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B2N013-01	6-[4-[4-(3-エトキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B2N014-01	6-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B2N015-01	6-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-エトキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B2N016-01	6-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-エトキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B2N017-01	6-[4-[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B2N018-01	6-[4-[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B2N019-01	6-[4-[3-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B2N020-01	6-[4-[3-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B2N021-01	6-[4-[3-[4-(3-エトキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B2N022-01	6-[4-[3-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B2N023-01	4-[4-[4-(3-エトキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
B2N024-01	4-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジ

	ン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
B2N025-01	4-[4-[4-(3-エトキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
B2N026-01	4-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
B2N027-01	4-[4-[4-(3-エトキシフェニル)-3-フルオロベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
B2N028-01	4-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-フルオロベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
B2N029-01	4-[4-[2-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
B2N030-01	4-[4-[2-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
B2N031-01	4-[4-[5-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
B2N032-01	4-[4-[5-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
B2N033-01	4-[4-[3-[2-(3-エトキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
B2N034-01	4-[4-[3-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
B2N035-01	4-[4-[4-(3-エトキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
B2N036-01	4-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
B2N037-01	4-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-エトキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
B2N038-01	4-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-エトキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
B2N039-01	4-[4-[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
B2N040-01	4-[4-[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
B2N041-01	4-[4-[3-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
B2N042-01	4-[4-[3-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
B2N043-01	4-[4-[3-[4-(3-エトキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
B2N044-01	4-[4-[3-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
B2N045-01	4-[4-[[2-(3-エトキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
B2N046-01	4-[4-[[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イ

	ル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
B2N047-01	4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
B2N048-01	4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
B2N049-01	4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2-エチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
B2N050-01	4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2-エチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
B2N051-01	4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-3-フルオロフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
B2N052-01	4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-フルオロフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
B2N053-01	4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
B2N054-01	4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
B2N055-01	4-[4-[[3-エトキシ-5-(3-エトキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
B2N056-01	4-[4-[[3-エトキシ-5-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
B2N057-01	4-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
B2N058-01	4-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
B2N059-01	4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
B2N060-01	4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
B2N061-01	4-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
B2N062-01	4-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
B2N063-01	4-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
B2N064-01	4-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
B2N065-01	4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
B2N066-01	4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
B2N067-01	4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド

B2N068-01	4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
B2N069-01	4-[4-[[2-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
B2N070-01	4-[4-[[2-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
B2N071-01	6-[4-[[2-(3-エトキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B2N072-01	6-[4-[[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B2N073-01	6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B2N074-01	6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B2N075-01	6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2-エチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B2N076-01	6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2-エチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B2N077-01	6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-3-フルオロフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B2N078-01	6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-フルオロフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B2N079-01	6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B2N080-01	6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B2N081-01	6-[4-[[3-エトキシ-5-(3-エトキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B2N082-01	6-[4-[[3-エトキシ-5-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B2N083-01	6-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B2N084-01	6-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B2N085-01	6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B2N086-01	6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]

	ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B2N087-01	6-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B2N088-01	6-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B2N089-01	6-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B2N090-01	6-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B2N091-01	6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B2N092-01	6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B2N093-01	6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B2N094-01	6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B2N095-01	6-[4-[[2-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B2N096-01	6-[4-[[2-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ピリダジン-3-カルボキサミド
B2N097-01	4-[4-[1-[4-(3-エトキシフェニル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
B2N098-01	4-[4-[1-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
B2N099-01	4-[4-[1-[4-(3-エトキシフェニル)-2-フルオロフェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド
B2N100-01	4-[4-[1-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2-フルオロフェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-(3,3,3-トリフルオロプロピルスルホニル)ベンズアミド

【０６４１】
[表ＡＩ－０３－Ｂ２Ａ－０１]

【表１０６】

混合物番号	mixAI-B2A-01
含まれうる化合物の番号	化合物名
B2A001-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[4-(3-エトキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2A002-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2A003-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[4-(3-エトキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2A004-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2A005-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[4-(3-エトキシフェニル)-3-フルオロベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2A006-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-フルオロベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2A007-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[2-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2A008-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[2-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2A009-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[5-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2A010-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[5-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2A011-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[3-[2-(3-エトキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2A012-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[3-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2A013-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[4-(3-エトキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2A014-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2A015-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-エトキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2A016-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-エトキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2A017-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2A018-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2A019-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[3-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2A020-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[3-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2A021-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[3-[4-(3-エトキシフェニル)ピ

	ラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2A022-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[3-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2A023-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[4-(3-エトキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2A024-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2A025-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[4-(3-エトキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2A026-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2A027-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[4-(3-エトキシフェニル)-3-フルオロベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2A028-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-フルオロベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2A029-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[2-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2A030-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[2-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2A031-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[5-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2A032-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[5-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2A033-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[3-[2-(3-エトキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2A034-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[3-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2A035-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[4-(3-エトキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2A036-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2A037-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-エトキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2A038-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-エトキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2A039-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2A040-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2A041-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[3-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2A042-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[3-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2A043-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[3-[4-(3-エトキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド

B2A044-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[3-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2A045-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[2-(3-エトキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2A046-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2A047-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2A048-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2A049-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2-エチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2A050-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2-エチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2A051-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-3-フルオロフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2A052-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-フルオロフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2A053-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2A054-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2A055-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[3-エトキシ-5-(3-エトキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2A056-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[3-エトキシ-5-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2A057-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2A058-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2A059-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2A060-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2A061-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2A062-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2A063-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2A064-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2A065-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2A066-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド

B2A067-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2A068-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2A069-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[2-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2A070-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[[2-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2A071-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[2-(3-エトキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2A072-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2A073-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2A074-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2A075-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2-エチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2A076-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2-エチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2A077-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-3-フルオロフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2A078-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-フルオロフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2A079-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2A080-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2A081-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[3-エトキシ-5-(3-エトキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2A082-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[3-エトキシ-5-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2A083-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2A084-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2A085-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2A086-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド

B2A087-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2A088-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2A089-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2A090-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2A091-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2A092-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2A093-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2A094-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2A095-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[2-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2A096-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-6-[4-[[2-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]ピリダジン-3-カルボキサミド
B2A097-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[1-[4-(3-エトキシフェニル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2A098-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[1-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2A099-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[1-[4-(3-エトキシフェニル)-2-フルオロフェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド
B2A100-01	N-(1-アダマンチルメチルスルホニル)-4-[4-[1-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2-フルオロフェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]ベンズアミド

【０６４２】
[表ＡＩ－０３－Ｂ２Ｒ－０１]
【表１０７】

混合物番号	mixAI-B2R-01
含まれうる化合物の番号	化合物名
B2R001-01	6-[4-[4-(3-エトキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2R002-01	6-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロ

	メチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2R003-01	6-[4-[4-(3-エトキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2R004-01	6-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2R005-01	6-[4-[4-(3-エトキシフェニル)-3-フルオロベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2R006-01	6-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-フルオロベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2R007-01	6-[4-[2-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2R008-01	6-[4-[2-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2R009-01	6-[4-[5-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2R010-01	6-[4-[5-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2R011-01	6-[4-[3-[2-(3-エトキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2R012-01	6-[4-[3-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2R013-01	6-[4-[4-(3-エトキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2R014-01	6-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2R015-01	6-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-エトキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2R016-01	6-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-エトキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2R017-01	6-[4-[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2R018-01	6-[4-[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2R019-01	6-[4-[3-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-

	3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2R020-01	6-[4-[3-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2R021-01	6-[4-[3-[4-(3-エトキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2R022-01	6-[4-[3-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2R023-01	4-[4-[4-(3-エトキシフェニル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2R024-01	4-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2R025-01	4-[4-[4-(3-エトキシフェニル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2R026-01	4-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-メチルベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2R027-01	4-[4-[4-(3-エトキシフェニル)-3-フルオロベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2R028-01	4-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-フルオロベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2R029-01	4-[4-[2-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2R030-01	4-[4-[2-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2R031-01	4-[4-[5-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2R032-01	4-[4-[5-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]ピリジン-3-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2R033-01	4-[4-[3-[2-(3-エトキシフェニル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2R034-01	4-[4-[3-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]プロパノイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2R035-01	4-[4-[4-(3-エトキシフェニル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)

	フェニル]スルホニルベンズアミド
B2R036-01	4-[4-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-カルボニル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2R037-01	4-[4-[3-tert-ブチル-5-(3-エトキシフェニル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2R038-01	4-[4-[3-tert-ブチル-5-(5-エトキシピリジン-3-イル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2R039-01	4-[4-[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2R040-01	4-[4-[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2R041-01	4-[4-[3-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2R042-01	4-[4-[3-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2R043-01	4-[4-[3-[4-(3-エトキシフェニル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2R044-01	4-[4-[3-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ピラゾル-1-イル]-5-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2R045-01	4-[4-[[2-(3-エトキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2R046-01	4-[4-[[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2R047-01	4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2R048-01	4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2R049-01	4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2-エチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2R050-01	4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2-エチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2R051-01	4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-3-フルオロフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2R052-01	4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-フルオロフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフル

	オロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2R053-01	4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2R054-01	4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2R055-01	4-[4-[[3-エトキシ-5-(3-エトキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2R056-01	4-[4-[[3-エトキシ-5-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2R057-01	4-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2R058-01	4-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2R059-01	4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2R060-01	4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2R061-01	4-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2R062-01	4-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2R063-01	4-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2R064-01	4-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2R065-01	4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2R066-01	4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2R067-01	4-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2R068-01	4-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2R069-01	4-[4-[[2-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメ

	チル)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2R070-01	4-[4-[[2-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2R071-01	6-[4-[[2-(3-エトキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2R072-01	6-[4-[[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2R073-01	6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2R074-01	6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-メチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2R075-01	6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2-エチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2R076-01	6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2-エチルフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2R077-01	6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-3-フルオロフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2R078-01	6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-3-フルオロフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2R079-01	6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2R080-01	6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2-メトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2R081-01	6-[4-[[3-エトキシ-5-(3-エトキシフェニル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2R082-01	6-[4-[[3-エトキシ-5-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2R083-01	6-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2R084-01	6-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-プロパン-2-イルオキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2R085-01	6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2R086-01	6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2,6-ジメトキシフェニル]メチル]

	ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2R087-01	6-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2R088-01	6-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメチル)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2R089-01	6-[4-[[3-(3-エトキシフェニル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2R090-01	6-[4-[[3-(5-エトキシピリジン-3-イル)-5-(トリフルオロメトキシ)フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2R091-01	6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2R092-01	6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)ナフタレン-1-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2R093-01	6-[4-[[4-(3-エトキシフェニル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2R094-01	6-[4-[[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)チオフェン-2-イル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2R095-01	6-[4-[[2-[2-(3-エトキシフェニル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2R096-01	6-[4-[[2-[2-(5-エトキシピリジン-3-イル)エチニル]フェニル]メチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルピリダジン-3-カルボキサミド
B2R097-01	4-[4-[1-[4-(3-エトキシフェニル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2R098-01	4-[4-[1-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)フェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2R099-01	4-[4-[1-[4-(3-エトキシフェニル)-2-フルオロフェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド
B2R100-01	4-[4-[1-[4-(5-エトキシピリジン-3-イル)-2-フルオロフェニル]エチル]ピペラジン-1-イル]-N-[4-(2-フェニルスルファニルエチルアミノ)-3-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニルベンズアミド

【０６４３】

実施例６－５－３：混合物溶液の調製ならびにＬＣＭＳによる分析

実施例６－５－１および実施例６－５－２にて得られた混合物１２種類に対して、各々ＤＭＳＯを加え、およそ１０ｍＭのＤＭＳＯ溶液を１２種類調製した。そのうち１００μＬを実施例７で示すＡＳ－ＭＳによるＢｃｌ－２に対する結合評価実験に供した。また、１２種類の１０ｍＭのＤＭＳＯ溶液の一部をＭｅＣＮにて希釈し、ＬＣＭＳにて分析した。分析結果については［表ＡＩ－０３－０２］に示す。

【０６４４】

［表ＡＩ－０３－０２］

【表１０８】

混合物番号		mixA1－B1A－01	
m/z	MSピークの保持時間 (min)	UVピークの保持時間 (min)	帰属された化合物の番号
712.347	14.453	14.41	B1A043-01
628.353	14.22	14.17	B1A035-01
646.325	14.2	14.17	B1A039-01
714.337	14.637	14.58	B1A021-01
634.4	11.127	11.09	B1A037-01, B1A087-01
584.294	9.7	9.65	B1A023-01, B1A077-01
603.333	13.047	13.01	B1A031-01
564.358	9.197	9.15	B1A045-01
648.316	10.537	10.5	B1A017-01, B1A063-01
632.346	10.39	10.36	B1A061-01
605.323	13.127	13.08	B1A009-01
637.386	12.733	12.71	B1A016-01
606.319	13.793	13.75	B1A100-01, B1A033-01
629.349	11.683	11.65	B1A036-01
634.4	14.913	14.88	B1A037-01, B1A087-01
670.325	14.91	14.88	B1A041-01
672.316	15.117	15.08	B1A019-01
647.32	12.327	12.31	B1A040-01
713.342	12.353	12.31	B1A044-01
649.311	12.4	12.37	B1A018-01, B1A064-01
715.333	12.4	12.37	B1A022-01
586.285	13.477	13.42	B1A001-01
596.328	13.447	13.42	B1A027-01, B1A079-01, B1A099-01
587.28	10.673	10.63	B1A002-01
593.349	10.903	10.87	B1A026-01, B1A050-01
585.289	10.78	10.75	B1A024-01, B1A078-01
616.385	10.793	10.75	B1A091-01
583.344	7.963	7.92	B1A052-01
594.344	13.927	13.89	B1A003-01, B1A053-01, B1A075-01
635.396	12.607	12.57	B1A038-01, B1A088-01
590.349	10.177	10.13	B1A095-01
614.374	10.177	10.13	B1A065-01
608.36	14.02	13.98	B1A011-01, B1A055-01
631.339	11.737	11.69	B1A014-01
617.36	8.833	8.79	B1A092-01
579.369	7.68	7.65	B1A048-01, B1A098-01
573.301	7.75	7.71	B1A094-01
597.324	7.733	7.71	B1A100-01, B1A028-01, B1A080-01
611.37	8.313	8.28	B1A062-01
630.344	14.43	14.36	B1A013-01
648.316	14.397	14.36	B1A017-01, B1A063-01
615.369	8.493	8.48	B1A066-01
623.396	8.527	8.48	B1A058-01
597.324	11.3	11.25	B1A100-01, B1A028-01, B1A080-01
599.314	11.24	11.25	B1A006-01
650.331	11.277	11.25	B1A089-01
609.355	11.033	11	B1A012-01, B1A056-01
588.358	9.77	9.73	B1A069-01
595.339	10.857	10.81	B1A004-01, B1A054-01, B1A076-01
635.396	9.397	9.36	B1A038-01, B1A088-01
565.354	8.003	7.97	B1A046-01
585.289	8.107	8.07	B1A024-01, B1A078-01
625.375	8.093	8.07	B1A060-01, B1A084-01
571.31	7.607	7.57	B1A068-01
597.324	13.583	13.54	B1A100-01, B1A028-01, B1A080-01
598.319	13.577	13.54	B1A005-01
671.32	13.57	13.54	B1A042-01
592.353	9.887	9.86	B1A025-01, B1A049-01
622.4	9.9	9.86	B1A057-01
607.364	11.08	11.04	B1A034-01
609.355	8.247	8.21	B1A012-01, B1A056-01
578.374	9.35	9.31	B1A047-01, B1A097-01
578.374	9.383	9.31	B1A047-01, B1A097-01
582.348	9.347	9.31	B1A051-01
570.315	9.273	9.23	B1A067-01
594.344	9.247	9.23	B1A003-01, B1A053-01, B1A075-01
595.339	9.283	9.23	B1A004-01, B1A054-01, B1A076-01
636.391	15.18	15.14	B1A015-01
625.375	8.633	8.59	B1A060-01, B1A084-01
595.339	8.41	8.38	B1A004-01, B1A054-01, B1A076-01
567.344	8.203	8.17	B1A072-01
583.349	8.197	8.17	B1A026-01, B1A050-01
610.375	9.83	9.8	B1A081-01
596.328	9.603	9.53	B1A027-01, B1A079-01, B1A099-01
651.327	9.57	9.53	B1A090-01
586.349	9.47	9.43	B1A071-01
581.36	9.49	9.43	B1A074-01
592.353	13.753	13.72	B1A025-01, B1A049-01
604.328	13.763	13.72	B1A032-01
606.319	13.773	13.72	B1A100-01, B1A033-01
649.311	9.123	9.09	B1A018-01, B1A064-01
594.344	10.353	10.31	B1A003-01, B1A053-01, B1A075-01
580.365	9.5	9.46	B1A073-01
624.38	9.513	9.46	B1A059-01, B1A083-01
626.37	9.527	9.46	B1A085-01
627.365	9.507	9.46	B1A086-01
591.344	8.973	8.94	B1A096-01
633.341	8.977	8.94	B1A082-01
624.38	10.13	10.09	B1A059-01, B1A083-01
589.354	8.737	8.7	B1A070-01
584.294	13.37	13.34	B1A023-01, B1A077-01
596.328	13.43	13.34	B1A027-01, B1A079-01, B1A099-01
673.311	13.717	13.67	B1A020-01
572.305	9.67	9.6	B1A093-01
608.36	9.83	9.6	B1A011-01, B1A055-01
579.369	10.067	9.98	B1A048-01, B1A098-01

【０６４５】

【表１０９】

混合物番号		mixAI－B1K－01	
m/z	MSピークの保持時間（min）	UVピークの保持時間（min）	帰属された化合物の番号
539.201	9.893	9.86	B1K009-01
580.203	11.68	11.64	B1K039-01
646.225	12.083	12.05	B1K043-01
582.193	11.327	11.29	B1K017-01, B1K063-01
648.215	11.767	11.73	B1K021-01
528.222	10.577	10.54	B1K003-01, B1K053-01, B1K075-01
532.197	10.34	10.29	B1K005-01
537.211	10.317	10.29	B1K031-01
568.278	8.507	8.46	B1K037-01, B1K087-01
542.237	10.673	10.63	B1K011-01, B1K055-01
606.193	12.23	12.2	B1K019-01
564.222	11.133	11.1	B1K013-01
518.172	7.36	7.31	B1K023-01, B1K077-01
540.197	11.047	10.98	B1K100-01, B1K033-01
540.197	11.023	10.98	B1K100-01, B1K033-01
563.226	8.68	8.64	B1K036-01
584.209	8.673	8.64	B1K089-01
550.242	8.22	8.18	B1K091-01
556.278	8.233	8.18	B1K057-01
562.231	11.513	11.47	B1K035-01
545.248	5.987	5.96	B1K082-01
500.227	7.09	7.05	B1K071-01
583.189	7.09	7.05	B1K018-01, B1K064-01
571.264	9.203	9.14	B1K016-01
649.21	9.177	9.14	B1K022-01
570.269	12.01	11.98	B1K015-01
529.217	7.317	7.27	B1K004-01, B1K054-01, B1K076-01
531.201	7.3	7.27	B1K100-01, B1K028-01, B1K080-01
505.188	12.567	12.52	B1K068-01
604.203	12.557	12.52	B1K041-01
582.193	8.617	8.59	B1K017-01, B1K063-01
583.189	9.07	9.03	B1K018-01, B1K064-01
506.183	7.17	7.11	B1K093-01
521.158	7.143	7.11	B1K002-01
530.206	10.75	10.72	B1K027-01, B1K079-01, B1K099-01
530.206	10.763	10.72	B1K027-01, B1K079-01, B1K099-01
541.242	8.163	8.14	B1K034-01
565.217	8.187	8.14	B1K014-01
522.236	7.877	7.83	B1K069-01
527.226	7.867	7.83	B1K026-01, B1K050-01
519.167	7.74	7.71	B1K024-01, B1K078-01
533.192	7.727	7.71	B1K006-01
544.253	7.76	7.71	B1K081-01
568.278	12.347	12.31	B1K037-01, B1K087-01
529.217	9.63	9.59	B1K004-01, B1K054-01, B1K076-01
569.273	9.657	9.59	B1K038-01, B1K088-01
647.22	9.633	9.59	B1K044-01
543.233	7.667	7.62	B1K012-01, B1K056-01
585.204	7.027	6.99	B1K090-01
501.222	5.597	5.56	B1K072-01
551.238	6.157	6.13	B1K092-01
581.198	9.533	9.5	B1K040-01
528.222	7.543	7.51	B1K003-01, B1K053-01, B1K075-01
499.232	5.757	5.71	B1K046-01
513.247	7.407	7.36	B1K048-01, B1K098-01
514.242	7.407	7.36	B1K073-01
518.172	10.62	10.58	B1K023-01, B1K077-01
529.217	5.847	5.8	B1K004-01, B1K054-01, B1K076-01
567.219	6.93	6.89	B1K062-01
566.224	8.453	8.42	B1K061-01
569.273	8.48	8.42	B1K038-01, B1K088-01
523.232	8.023	8.03	B1K070-01
526.231	8.05	8.03	B1K025-01, B1K049-01
557.273	8.077	8.03	B1K058-01
558.257	8.077	8.03	B1K059-01, B1K083-01
512.252	7.627	7.56	B1K047-01, B1K097-01
512.252	7.6	7.56	B1K047-01, B1K097-01
560.248	7.597	7.56	B1K085-01
531.201	5.37	5.34	B1K100-01, B1K028-01, B1K080-01
528.222	7.957	7.91	B1K003-01, B1K053-01, B1K075-01
530.206	7.953	7.91	B1K027-01, B1K079-01, B1K099-01
542.237	7.937	7.91	B1K011-01, B1K055-01
524.227	7.817	7.78	B1K095-01
525.222	7.8	7.78	B1K096-01
558.257	7.853	7.78	B1K059-01, B1K083-01
520.162	10.163	10.13	B1K001-01
543.233	10.203	10.13	B1K012-01, B1K056-01
549.247	6.297	6.28	B1K066-01
559.253	6.32	6.28	B1K060-01, B1K084-01
561.243	5.783	5.75	B1K086-01
531.201	8.293	8.26	B1K100-01, B1K028-01, B1K080-01
498.236	7.23	7.2	B1K045-01
504.193	7.277	7.2	B1K067-01
515.238	7.26	7.2	B1K074-01
538.206	8.583	8.54	B1K032-01
513.247	9.463	9.43	B1K048-01, B1K098-01
507.178	5.017	4.98	B1K094-01
516.227	7.493	7.46	B1K051-01
517.222	7.503	7.46	B1K052-01
519.167	7.487	7.46	B1K024-01, B1K078-01
526.231	11	10.92	B1K025-01, B1K049-01
527.226	10.983	10.92	B1K026-01, B1K050-01
605.198	10.96	10.92	B1K042-01
548.252	8.26	8.22	B1K065-01
559.253	6.04	6.01	B1K060-01, B1K084-01
607.189	10.563	10.51	B1K020-01

【０６４６】

【表１１０】

混合物番号		mixA1－B1M－01	
m/z	MSピークの保持時間（min）	UVピークの保持時間（min）	帰属された化合物の番号
497.255	9.977	9.94	B1M031-01
531.308	8.92	8.87	B1M016-01
606.269	11.847	11.81	B1M043-01
543.233	6.817	6.76	B1M018-01, B1M064-01
542.237	11.143	11.11	B1M017-01, B1M063-01
526.268	8.153	8.12	B1M061-01
460.271	6.86	6.82	B1M071-01
564.247	12.347	12.31	B1M041-01
542.237	8.32	8.29	B1M017-01, B1M063-01
544.253	8.397	8.36	B1M089-01
484.271	7.593	7.55	B1M095-01
458.28	6.973	6.94	B1M045-01
489.261	6.97	6.94	B1M004-01, B1M054-01, B1M076-01
524.266	10.953	10.91	B1M013-01
490.25	10.427	10.39	B1M027-01, B1M079-01, B1M099-01
502.281	10.41	10.39	B1M011-01, B1M055-01
528.322	8.227	8.19	B1M037-01, B1M087-01
489.261	5.403	5.34	B1M004-01, B1M054-01, B1M076-01
529.317	9.26	9.23	B1M038-01, B1M088-01
607.264	9.263	9.23	B1M044-01
522.275	11.207	11.17	B1M035-01
481.202	11.407	11.37	B1M002-01
540.247	11.403	11.37	B1M039-01
505.292	5.8	5.77	B1M082-01
478.216	7.127	7.09	B1M023-01, B1M077-01
490.25	7.127	7.09	B1M027-01, B1M079-01, B1M099-01
467.222	4.867	4.83	B1M094-01
545.248	6.75	6.71	B1M090-01
499.245	9.61	9.58	B1M009-01
529.317	9.653	9.58	B1M038-01, B1M088-01
519.297	6.14	6.11	B1M060-01, B1M084-01
509.291	6.03	6	B1M066-01
488.266	10.337	10.3	B1M003-01, B1M053-01, B1M075-01
567.233	10.327	10.3	B1M020-01
486.275	7.797	7.75	B1M025-01, B1M049-01
541.242	9.14	9.1	B1M040-01
508.296	7.977	7.94	B1M065-01
510.286	7.97	7.94	B1M091-01
517.317	7.997	7.94	B1M058-01
479.211	7.32	7.27	B1M024-01, B1M078-01
488.266	7.333	7.27	B1M003-01, B1M053-01, B1M075-01
503.277	7.31	7.27	B1M012-01, B1M056-01
492.241	10.08	10.04	B1M005-01
498.25	10.077	10.04	B1M032-01
527.263	10.057	10.04	B1M062-01
478.216	10.273	10.23	B1M023-01, B1M077-01
491.245	7.86	7.82	B1M100-01, B1M028-01, B1M080-01
518.301	7.883	7.82	B1M059-01, B1M083-01
525.261	7.86	7.82	B1M014-01
480.206	9.89	9.85	B1M001-01
482.28	7.63	7.59	B1M068-01
518.301	7.637	7.59	B1M059-01, B1M083-01
608.259	11.623	11.59	B1M021-01
609.254	11.637	11.59	B1M022-01
491.245	5.197	5.17	B1M100-01, B1M028-01, B1M080-01
459.275	5.477	5.43	B1M046-01
477.266	5.457	5.43	B1M052-01
487.27	5.753	5.71	B1M026-01, B1M050-01
511.282	5.937	5.9	B1M092-01
464.237	8.267	8.22	B1M067-01
523.27	8.26	8.22	B1M036-01
472.296	7.383	7.34	B1M047-01, B1M097-01
493.236	7.377	7.34	B1M006-01
543.233	8.763	8.72	B1M018-01, B1M064-01
485.266	10.667	10.64	B1M096-01
486.275	10.677	10.64	B1M025-01, B1M049-01
500.24	10.663	10.64	B1M100-01, B1M033-01
500.24	10.677	10.64	B1M100-01, B1M033-01
565.242	10.65	10.64	B1M042-01
473.291	5.26	5.22	B1M048-01, B1M098-01
465.232	4.99	4.96	B1M068-01
487.27	7.437	7.4	B1M026-01, B1M050-01
490.25	7.463	7.4	B1M027-01, B1M079-01, B1M099-01
519.297	7.5	7.4	B1M060-01, B1M084-01
520.292	7.433	7.4	B1M085-01
466.227	6.907	6.87	B1M093-01
530.313	11.903	11.86	B1M015-01
473.291	7.197	7.19	B1M048-01, B1M098-01
474.286	7.203	7.19	B1M073-01
475.282	7.227	7.19	B1M074-01
476.271	7.217	7.19	B1M051-01
488.266	7.723	7.7	B1M003-01, B1M053-01, B1M075-01
501.286	7.737	7.7	B1M034-01
502.281	7.713	7.7	B1M011-01, B1M055-01
503.277	7.707	7.7	B1M012-01, B1M056-01
489.261	5.623	5.58	B1M004-01, B1M054-01, B1M076-01
491.245	5.633	5.58	B1M100-01, B1M028-01, B1M080-01
521.287	5.61	5.58	B1M086-01
483.275	6.223	6.15	B1M070-01
461.266	5.363	5.29	B1M072-01
472.296	5.343	5.29	B1M047-01, B1M097-01
479.211	5.33	5.29	B1M024-01, B1M078-01
504.297	7.573	7.53	B1M081-01
516.322	8.013	7.97	B1M057-01
528.322	12.107	12.07	B1M037-01, B1M087-01
566.237	12.13	12.07	B1M019-01

【０６４７】

【表１１１】

混合物番号		mixA1－B2Q－01	
m/z	MSピークの保持時間（min）	UVピークの保持時間（min）	帰属された化合物の番号
834.224	13.403	13.37	B2Q0039-01
792.227	11.153	11.11	B2Q0032-01
771.243	8.4	8.33	B2Q0052-01
793.222	12.13	12.1	B2Q0009-01
786.217	12.46	12.41	B2Q0005-01
781.232	12.44	12.41	B2Q0031-01
817.247	11.3	11.26	B2Q0036-01
776.257	9.887	9.84	B2Q0069-01
861.209	12.583	12.55	B2Q0020-01
816.252	13.337	13.31	B2Q0035-01
794.217	13.023	12.99	B2Q100-01, B2Q0033-01
900.246	13.653	13.61	B2Q0043-01
781.247	10.717	10.68	B2Q0026-01, B2Q0050-01
836.214	10.717	10.68	B2Q017-01, B2Q063-01
858.224	14.037	14	B2Q0041-01
836.214	13.157	13.11	B2Q017-01, B2Q063-01
837.209	11.56	11.52	B2Q018-01, B2Q064-01
903.231	11.55	11.52	B2Q022-01
752.257	9.413	9.38	B2Q045-01
782.243	9.4	9.38	B2Q003-01, B2Q053-01, B2Q075-01
782.243	12.677	12.64	B2Q003-01, B2Q053-01, B2Q075-01
775.179	10.22	10.18	B2Q002-01
802.273	10.387	10.35	B2Q065-01
761.199	8.06	8.02	B2Q094-01
780.252	12.983	12.94	B2Q025-01, B2Q049-01
811.294	8.833	8.79	B2Q058-01
803.268	8.923	8.87	B2Q066-01
835.219	11.88	11.84	B2Q040-01
901.241	11.887	11.84	B2Q044-01
902.236	11.863	11.84	B2Q021-01
784.227	12.757	12.72	B2Q027-01, B2Q079-01, B2Q099-01
796.258	12.783	12.72	B2Q011-01, B2Q055-01
773.188	10.627	10.57	B2Q024-01, B2Q078-01
787.213	10.65	10.57	B2Q006-01
804.263	10.6	10.57	B2Q091-01
820.244	10.597	10.57	B2Q061-01
794.217	10.807	10.77	B2Q100-01, B2Q033-01
818.243	13.083	13.03	B2Q013-01
779.243	9.097	9.06	B2Q096-01
777.252	9.04	9	B2Q070-01
795.263	10.923	10.89	B2Q034-01
819.238	10.94	10.89	B2Q014-01
822.299	10.933	10.89	B2Q037-01, B2Q087-01
824.289	10.927	10.89	B2Q015-01
784.227	9.247	9.21	B2Q027-01, B2Q079-01, B2Q099-01
754.248	9.463	9.43	B2Q071-01
768.263	9.46	9.43	B2Q073-01
823.294	9.5	9.43	B2Q038-01, B2Q088-01
837.209	9.467	9.43	B2Q018-01, B2Q064-01
753.252	8.463	8.44	B2Q046-01
755.243	8.477	8.44	B2Q072-01
785.222	8.51	8.44	B2Q100-01, B2Q028-01, B2Q080-01
785.222	11.033	11.01	B2Q100-01, B2Q028-01, B2Q080-01
838.23	11.057	11.01	B2Q089-01
839.225	11.037	11.01	B2Q090-01
797.253	10.543	10.51	B2Q012-01, B2Q056-01
783.238	8.603	8.56	B2Q004-01, B2Q054-01, B2Q076-01
797.253	8.587	8.56	B2Q012-01, B2Q056-01
798.274	8.587	8.56	B2Q081-01
778.248	10.047	10	B2Q095-01
810.299	10.027	10	B2Q057-01
813.273	10.03	10	B2Q060-01, B2Q084-01
770.248	9.617	9.59	B2Q051-01
812.278	9.607	9.59	B2Q059-01, B2Q083-01
813.273	9.593	9.59	B2Q060-01, B2Q084-01
814.269	9.613	9.59	B2Q085-01
805.258	8.967	8.93	B2Q092-01
821.24	9.35	9.31	B2Q062-01
815.264	12.927	12.84	B2Q086-01
859.219	12.883	12.84	B2Q042-01
860.214	12.877	12.84	B2Q019-01
822.299	12.05	12.01	B2Q037-01, B2Q087-01
823.294	12.043	12.01	B2Q038-01, B2Q088-01
825.285	12.037	12.01	B2Q016-01
784.227	9.793	9.74	B2Q027-01, B2Q079-01, B2Q099-01
796.258	9.783	9.74	B2Q011-01, B2Q055-01
799.269	9.77	9.74	B2Q082-01
767.268	6.52	7.74	B2Q048-01, B2Q098-01
769.258	6.837	7.74	B2Q074-01
772.193	9.693	9.66	B2Q023-01, B2Q077-01
772.193	9.717	9.66	B2Q023-01, B2Q077-01
774.183	9.697	9.66	B2Q001-01
783.238	10.3	10.27	B2Q004-01, B2Q054-01, B2Q076-01
785.222	10.313	10.27	B2Q100-01, B2Q028-01, B2Q080-01
759.209	8.1	8.05	B2Q068-01
760.204	8.113	8.05	B2Q093-01
767.268	8.087	8.05	B2Q048-01, B2Q098-01
783.238	8.143	8.05	B2Q004-01, B2Q054-01, B2Q076-01
758.214	9.547	9.49	B2Q067-01
766.273	9.537	9.49	B2Q047-01, B2Q097-01
766.273	9.567	9.49	B2Q047-01, B2Q097-01
812.278	9.59	9.49	B2Q059-01, B2Q083-01
773.188	14.453	14.36	B2Q024-01, B2Q078-01
780.252	10.097	10.06	B2Q025-01, B2Q049-01
781.247	10.093	10.06	B2Q026-01, B2Q050-01
782.243	10.113	10.06	B2Q003-01, B2Q053-01, B2Q075-01

【０６４８】

【表１１２】

混合物番号		mixA1－B1O－01	
m/z	MSピークの保持時間（min）	UVピークの保持時間（min）	爆露された化合物の番号
606.232	12.077	12.03	B1OD17-01, B1OD63-01
564.235	10.68	10.64	B1O100-01, B1OD33-01
574.281	8.87	8.83	B1OD91-01
524.266	7.723	7.68	B1OD71-01
528.232	7.74	7.68	B1OD67-01
604.242	12.157	12.12	B1OD39-01
561.25	10.857	10.81	B1OD31-01
673.249	9.983	9.94	B1OD22-01
606.232	9.003	8.97	B1OD17-01, B1OD63-01
671.259	10.183	10.14	B1OD44-01
672.254	12.44	12.4	B1OD21-01
628.242	12.993	12.96	B1OD41-01
630.232	12.93	12.89	B1OD19-01
556.235	11.127	11.09	B1OD05-01
562.245	11.153	11.09	B1OD32-01
554.245	11.283	11.26	B1OD27-01, B1OD79-01, B1OD99-01
631.228	11.31	11.26	B1OD20-01
588.261	11.953	11.91	B1OD13-01
592.317	9.173	9.14	B1OD37-01, B1OD87-01
593.312	7.54	7.5	B1OD38-01, B1OD88-01
589.258	9.127	9.08	B1OD14-01
523.27	6.337	6.31	B1OD46-01
525.261	6.353	6.31	B1OD72-01
607.228	7.57	7.53	B1OD18-01, B1OD64-01
557.231	8.693	8.62	B1OD06-01
572.291	8.653	8.62	B1OD65-01
607.228	9.917	9.88	B1OD18-01, B1OD64-01
536.291	8.003	7.97	B1OD47-01, B1OD97-01
575.277	6.947	6.91	B1OD92-01
583.291	7.013	6.98	B1OD60-01, B1OD84-01
581.312	7.09	7.04	B1OD58-01
536.291	7.983	7.92	B1OD47-01, B1OD97-01
538.281	7.947	7.92	B1OD73-01
542.211	7.957	7.92	B1OD23-01, B1OD77-01
553.256	6.2	6.16	B1OD04-01, B1OD54-01, B1OD76-01
550.27	11.543	11.52	B1OD25-01, B1OD49-01
564.235	11.56	11.52	B1O100-01, B1OD33-01
552.281	11.4	11.37	B1OD03-01, B1OD53-01, B1OD75-01
573.286	6.887	6.85	B1OD66-01
593.312	10.257	10.22	B1OD38-01, B1OD88-01
595.303	10.09	10.07	B1OD16-01
605.237	10.12	10.07	B1OD40-01
591.258	7.413	7.37	B1OD62-01
587.265	9.33	9.3	B1OD36-01
608.248	9.347	9.3	B1OD89-01
609.243	9.33	9.3	B1OD90-01
544.201	10.987	10.95	B1OD01-01
566.276	11.487	11.44	B1OD11-01, B1OD55-01
629.237	11.457	11.44	B1OD42-01
543.206	8.43	8.4	B1OD24-01, B1OD78-01
548.266	8.413	8.4	B1OD95-01
549.261	8.44	8.4	B1OD96-01
550.27	8.447	8.4	B1OD25-01, B1OD49-01
547.27	12.53	12.49	B1OD70-01
670.264	12.52	12.49	B1OD43-01
537.286	6.077	6.03	B1OD48-01, B1OD98-01
555.24	6.067	6.03	B1O100-01, B1OD28-01, B1OD80-01
539.277	5.973	5.93	B1OD74-01
567.271	6.757	6.72	B1OD12-01, B1OD56-01
545.197	8.11	8.07	B1OD02-01
554.245	8.14	8.07	B1OD27-01, B1OD79-01, B1OD99-01
584.287	8.1	8.07	B1OD85-01
594.307	12.79	12.76	B1OD15-01
546.275	8.297	8.24	B1OD69-01
553.256	8.277	8.24	B1OD04-01, B1OD54-01, B1OD76-01
553.256	8.297	8.24	B1OD04-01, B1OD54-01, B1OD76-01
566.276	8.307	8.24	B1OD11-01, B1OD55-01
568.292	8.27	8.24	B1OD81-01
569.287	8.297	8.24	B1OD82-01
530.222	7.843	7.78	B1OD93-01
554.245	7.82	7.78	B1OD27-01, B1OD79-01, B1OD99-01
551.265	8.56	8.54	B1OD26-01, B1OD50-01
551.265	8.543	8.54	B1OD26-01, B1OD50-01
552.261	8.61	8.54	B1OD03-01, B1OD53-01, B1OD75-01
567.271	8.537	8.54	B1OD12-01, B1OD56-01
580.317	8.58	8.54	B1OD57-01
582.296	8.573	8.54	B1OD59-01, B1OD83-01
583.291	8.583	8.54	B1OD60-01, B1OD84-01
541.261	6.307	6.25	B1OD52-01
543.206	6.287	6.25	B1OD24-01, B1OD78-01
592.317	12.837	12.8	B1OD37-01, B1OD87-01
531.217	8.227	8.17	B1OD94-01
582.296	8.21	8.17	B1OD59-01, B1OD83-01
565.281	8.8	8.77	B1OD34-01
590.263	8.85	8.77	B1OD61-01
537.286	7.943	7.87	B1OD48-01, B1OD98-01
540.266	7.91	7.87	B1OD51-01
552.261	7.94	7.87	B1OD03-01, B1OD53-01, B1OD75-01
555.24	8.97	8.93	B1O100-01, B1OD28-01, B1OD80-01
555.24	6.467	6.39	B1O100-01, B1OD28-01, B1OD80-01
585.282	6.437	6.39	B1OD86-01
529.227	9.657	9.62	B1OD68-01
522.275	7.697	7.65	B1OD45-01
586.27	12.047	11.99	B1OD35-01
542.211	11.173	11.13	B1OD23-01, B1OD77-01

【０６４９】

【表１１３】

混合物番号		mixA1－B3A－01	
m/z	MSピークの保持時間（min）	UVピークの保持時間（min）	帰属された化合物の番号
617.349	13.957	13.92	B3A031-01
660.341	15.067	15.02	B3A039-01
726.363	15.26	15.21	B3A043-01
598.31	9.143	9.1	B3A023-01, B3A077-01
729.348	11.76	11.72	B3A022-01
684.341	15.713	15.67	B3A041-01
728.353	14.123	14.09	B3A021-01
612.334	12.937	12.9	B3A005-01
643.364	12.69	12.65	B3A036-01
644.36	13.813	13.79	B3A013-01
662.331	13.833	13.79	B3A017-01, B3A063-01
649.411	13.663	13.61	B3A038-01, B3A088-01
607.364	11.853	11.82	B3A026-01, B3A050-01
628.39	10.723	10.68	B3A065-01
642.369	15.15	15.11	B3A035-01
589.305	11.703	11.67	B3A024-01, B3A078-01
646.361	10.953	10.92	B3A061-01
606.369	14.703	14.68	B3A025-01, B3A049-01
620.334	14.72	14.68	B3A100-01, B3A033-01
601.296	9.933	9.9	B3A002-01
609.355	10.133	10.08	B3A004-01, B3A054-01, B3A076-01
647.357	9.447	9.4	B3A062-01
610.344	14.367	14.33	B3A027-01, B3A079-01, B3A099-01
611.339	14.387	14.33	B3A100-01, B3A028-01, B3A080-01
685.336	14.47	14.44	B3A042-01
596.365	9.787	9.75	B3A051-01
687.327	13.103	13.06	B3A020-01
650.406	14.62	14.58	B3A015-01
686.331	14.613	14.58	B3A019-01
608.36	13.263	13.25	B3A003-01, B3A053-01, B3A075-01
609.355	13.267	13.25	B3A004-01, B3A054-01, B3A076-01
661.336	13.25	13.25	B3A040-01
727.358	13.297	13.25	B3A044-01
618.344	12.27	12.23	B3A032-01
619.339	12.493	12.45	B3A009-01
620.334	12.48	12.45	B3A100-01, B3A033-01
622.375	13.373	13.34	B3A011-01, B3A055-01
600.3	12.803	12.78	B3A001-01
640.386	9.193	9.16	B3A085-01
638.395	9.867	9.83	B3A059-01, B3A083-01
645.355	11.01	10.96	B3A014-01
610.344	10.067	10.03	B3A027-01, B3A079-01, B3A099-01
630.38	10.07	10.03	B3A091-01
621.38	11.98	11.95	B3A034-01
651.402	12.023	11.95	B3A016-01
599.305	7.64	7.6	B3A024-01, B3A078-01
648.416	15.803	15.76	B3A037-01, B3A087-01
649.411	8.793	8.75	B3A038-01, B3A088-01
606.369	10.39	10.33	B3A025-01, B3A049-01
623.37	10.34	10.33	B3A012-01, B3A056-01
648.416	10.37	10.33	B3A037-01, B3A087-01
578.374	9.637	9.61	B3A045-01
604.365	9.647	9.61	B3A095-01
638.395	9.69	9.61	B3A059-01, B3A083-01
611.339	12.213	12.18	B3A100-01, B3A028-01, B3A080-01
609.355	8.12	8.08	B3A004-01, B3A054-01, B3A076-01
631.376	8.237	8.19	B3A092-01
639.39	8.23	8.19	B3A060-01, B3A084-01
625.386	7.92	7.87	B3A082-01
611.339	7.39	7.35	B3A100-01, B3A028-01, B3A080-01
595.376	7.327	7.28	B3A074-01
602.374	10.267	10.23	B3A069-01
636.416	10.31	10.23	B3A057-01
662.331	11.103	11.06	B3A017-01, B3A063-01
663.327	11.113	11.06	B3A018-01, B3A064-01
580.365	8.977	8.92	B3A071-01
610.344	8.947	8.92	B3A027-01, B3A079-01, B3A099-01
629.385	8.947	8.92	B3A066-01
665.342	8.95	8.92	B3A090-01
587.316	7.28	7.23	B3A094-01
597.36	8.36	8.32	B3A052-01
598.31	14.31	14.27	B3A023-01, B3A077-01
593.385	8.05	8.01	B3A048-01, B3A098-01
585.326	8.01	7.98	B3A068-01
637.411	8.883	8.85	B3A058-01
593.385	10.59	10.49	B3A048-01, B3A098-01
613.33	10.557	10.49	B3A006-01
664.347	10.52	10.49	B3A089-01
608.36	9.597	9.56	B3A003-01, B3A053-01, B3A075-01
663.327	9.597	9.56	B3A018-01, B3A064-01
581.36	7.723	7.68	B3A072-01
641.381	7.707	7.68	B3A086-01
607.364	8.637	8.59	B3A026-01, B3A050-01
623.37	8.603	8.59	B3A012-01, B3A056-01
579.369	8.44	8.41	B3A046-01
605.36	8.487	8.41	B3A096-01
639.39	8.453	8.41	B3A060-01, B3A084-01
584.331	9.73	9.69	B3A067-01
592.39	9.74	9.68	B3A047-01, B3A097-01
592.39	9.72	9.69	B3A047-01, B3A097-01
608.36	9.72	9.69	B3A003-01, B3A053-01, B3A075-01
622.375	10.023	9.99	B3A011-01, B3A055-01
624.391	9.4	9.36	B3A081-01
586.321	9.073	9.04	B3A093-01
594.38	9.09	9.04	B3A073-01
603.369	9.11	9.04	B3A070-01

【０６５０】

【表１１４】

混合物番号		mixA1－B4J－01	
m/z	MSピークの保持時間（min）	UVピークの保持時間（min）	帰属された化合物の番号
623.27	8.463	8.42	B4J022-01
621.28	9.76	9.72	B4J044-01
511.27	10.47	10.43	B4J031-01
538.281	10.473	10.43	B4J013-01
506.256	9.6	9.56	B4J005-01
620.284	12.403	12.36	B4J043-01
513.261	9.163	9.12	B4J009-01
578.263	12.937	12.9	B4J041-01
556.253	10.73	10.69	B4J017-01, B4J063-01
495.217	6.33	6.29	B4J002-01
556.253	8.57	8.52	B4J017-01, B4J063-01
580.253	11.743	11.71	B4J019-01
502.281	9.847	9.81	B4J003-01, B4J053-01, B4J075-01
537.286	8.777	8.74	B4J036-01
500.291	11.263	11.21	B4J025-01, B4J049-01
514.256	11.25	11.21	B4J100-01, B4J033-01
622.275	11.247	11.21	B4J021-01
539.277	7.373	7.33	B4J014-01
481.238	11.973	11.94	B4J094-01
554.263	11.987	11.94	B4J039-01
516.297	9.933	9.9	B4J011-01, B4J055-01
487.307	5.553	5.52	B4J048-01, B4J098-01
503.277	6.497	6.47	B4J004-01, B4J054-01, B4J076-01
492.232	10.833	10.8	B4J023-01, B4J077-01
475.262	8.12	8.13	B4J072-01
522.312	8.223	8.18	B4J065-01
530.338	8.21	8.18	B4J057-01
501.286	6.027	5.99	B4J026-01, B4J050-01
555.258	9.64	9.6	B4J040-01
494.222	9.37	9.34	B4J001-01
581.248	9.9	9.85	B4J020-01
498.286	7.34	7.29	B4J095-01
518.313	7.327	7.29	B4J081-01
533.312	5.913	5.87	B4J060-01, B4J084-01
532.317	7.847	7.8	B4J059-01, B4J083-01
542.338	7.85	7.8	B4J037-01, B4J087-01
492.232	6.84	6.8	B4J023-01, B4J077-01
496.296	7.903	7.88	B4J069-01
501.286	7.927	7.88	B4J026-01, B4J050-01
516.297	7.913	7.88	B4J011-01, B4J055-01
517.292	6.21	6.15	B4J012-01, B4J056-01
543.333	6.183	6.15	B4J038-01, B4J088-01
557.248	7.05	7.01	B4J018-01, B4J064-01
488.302	6.973	6.93	B4J073-01
512.286	8.627	8.58	B4J032-01
557.248	8.28	8.24	B4J018-01, B4J064-01
489.297	4.833	4.8	B4J074-01
505.261	8.35	8.31	B4J100-01, B4J028-01, B4J080-01
543.333	9.817	9.77	B4J038-01, B4J088-01
579.258	11.187	11.15	B4J042-01
503.277	10.963	10.94	B4J004-01, B4J054-01, B4J076-01
504.266	10.973	10.94	B4J027-01, B4J079-01, B4J099-01
505.261	10.953	10.94	B4J100-01, B4J028-01, B4J080-01
499.282	6.097	6.05	B4J096-01
533.312	6.083	6.05	B4J060-01, B4J084-01
534.307	7.197	7.16	B4J085-01
542.338	12.76	12.73	B4J037-01, B4J087-01
474.286	6.553	6.53	B4J071-01
480.243	6.553	6.53	B4J093-01
531.333	6.573	6.53	B4J058-01
490.286	7.45	7.42	B4J051-01
519.308	7.467	7.42	B4J082-01
504.266	6.903	6.85	B4J027-01, B4J079-01, B4J099-01
507.251	6.897	6.85	B4J006-01
517.292	6.887	6.85	B4J012-01, B4J056-01
541.278	6.877	6.85	B4J062-01
473.291	5.777	5.73	B4J046-01
491.282	5.747	5.73	B4J052-01
535.303	11.83	11.8	B4J086-01
536.291	11.84	11.8	B4J035-01
540.283	8.387	8.35	B4J061-01
545.323	8.433	8.35	B4J016-01
500.291	8.027	7.98	B4J025-01, B4J049-01
558.289	8.01	7.98	B4J089-01
559.284	8.023	7.98	B4J090-01
502.281	7.41	7.37	B4J003-01, B4J053-01, B4J075-01
472.296	7.247	7.2	B4J045-01
478.252	7.247	7.2	B4J067-01
515.302	7.25	7.2	B4J034-01
479.248	5.323	5.3	B4J068-01
503.277	5.34	5.3	B4J004-01, B4J054-01, B4J076-01
525.297	5.643	5.6	B4J092-01
486.312	7.597	7.57	B4J047-01, B4J097-01
487.307	7.603	7.57	B4J048-01, B4J098-01
524.302	7.62	7.57	B4J091-01
532.317	7.637	7.57	B4J059-01, B4J083-01
493.227	7.79	7.75	B4J024-01, B4J078-01
497.291	7.74	7.75	B4J070-01
504.266	7.72	7.75	B4J027-01, B4J079-01, B4J099-01
514.256	7.76	7.75	B4J100-01, B4J033-01
544.328	11.46	11.43	B4J015-01
486.312	7.577	7.5	B4J047-01, B4J097-01
502.281	7.537	7.5	B4J003-01, B4J053-01, B4J075-01
493.227	5.027	4.95	B4J024-01, B4J078-01
505.261	4.953	4.88	B4J100-01, B4J028-01, B4J080-01
523.307	6.3	6.26	B4J066-01

【０６５１】

【表１１５】

混合物番号		mixA1－B2A－01	
m/z	MSピークの保持時間 (min)	UVピークの保持時間 (min)	帰属された化合物の番号
647.306	8.303	8.26	B2A052-01
698.362	11.333	11.3	B2A037-01, B2A087-01
662.281	13.107	13.06	B2A005-01
669.285	12.713	12.68	B2A009-01
776.309	14.293	14.25	B2A043-01
778.299	14.103	14.06	B2A021-01
694.306	13.833	13.8	B2A013-01
712.278	13.853	13.8	B2A017-01, B2A063-01
692.315	14.05	14.01	B2A035-01
710.287	14.053	14.01	B2A039-01
696.308	10.823	10.8	B2A061-01
630.311	9.62	9.58	B2A071-01
634.277	9.627	9.58	B2A067-01
688.341	9.623	9.58	B2A059-01, B2A083-01
650.247	13.01	12.96	B2A001-01
667.295	12.997	12.96	B2A031-01
636.267	9.873	9.81	B2A093-01
648.256	9.847	9.81	B2A023-01, B2A077-01
649.251	9.86	9.81	B2A024-01, B2A075-01
689.337	8.733	8.69	B2A060-01, B2A084-01
654.311	10.337	10.3	B2A095-01
668.29	11.513	11.44	B2A032-01
714.293	11.483	11.44	B2A089-01
628.32	9.49	9.44	B2A045-01
698.362	14.7	14.66	B2A037-01, B2A087-01
734.287	14.697	14.66	B2A041-01
670.281	13.703	13.66	B2A100-01, B2A033-01
711.282	12.367	12.34	B2A040-01
777.304	12.387	12.34	B2A044-01
693.311	11.777	11.74	B2A036-01
701.348	12.313	12.27	B2A016-01
656.315	13.647	13.6	B2A025-01, B2A049-01
700.353	14.517	14.48	B2A015-01
736.278	14.52	14.48	B2A019-01
652.32	10.057	10.02	B2A069-01
713.273	12.06	12.02	B2A018-01, B2A064-01
779.295	12.063	12.02	B2A022-01
659.301	10.67	10.63	B2A004-01, B2A054-01, B2A076-01
658.306	13.383	13.33	B2A003-01, B2A053-01, B2A075-01
659.301	13.387	13.33	B2A004-01, B2A054-01, B2A076-01
660.29	13.36	13.33	B2A027-01, B2A079-01, B2A099-01
678.336	10.563	10.53	B2A065-01
672.321	13.503	13.47	B2A011-01, B2A055-01
651.242	10.53	10.49	B2A002-01
659.301	8.603	8.57	B2A004-01, B2A054-01, B2A076-01
686.362	10.103	10.07	B2A057-01
631.306	8.45	8.41	B2A072-01
675.332	8.43	8.41	B2A082-01
735.282	13.473	13.43	B2A042-01
673.317	10.9	10.86	B2A012-01, B2A056-01
642.336	7.79	7.77	B2A047-01, B2A097-01
661.285	7.807	7.77	B2A100-01, B2A028-01, B2A080-01
637.263	10.957	10.93	B2A094-01
649.251	10.957	10.93	B2A024-01, B2A078-01
680.327	10.96	10.93	B2A091-01
712.278	10.96	10.93	B2A017-01, B2A063-01
699.357	12.62	12.59	B2A038-01, B2A088-01
737.273	13.21	13.17	B2A020-01
658.306	10.487	10.45	B2A003-01, B2A053-01, B2A075-01
660.29	9.263	9.23	B2A027-01, B2A079-01, B2A099-01
661.285	9.28	9.23	B2A100-01, B2A028-01, B2A080-01
648.256	13.293	13.25	B2A023-01, B2A077-01
635.272	7.977	7.94	B2A068-01
643.331	7.957	7.94	B2A048-01, B2A098-01
643.331	7.923	7.94	B2A048-01, B2A098-01
679.331	8.89	8.86	B2A066-01
661.285	11.427	11.39	B2A100-01, B2A028-01, B2A080-01
695.301	11.42	11.39	B2A014-01
681.322	9.05	9.01	B2A092-01
658.306	9.397	9.36	B2A003-01, B2A053-01, B2A075-01
697.303	9.383	9.36	B2A062-01
657.311	11.077	11.04	B2A026-01, B2A050-01
663.276	11.047	11.04	B2A006-01
657.311	8.563	8.52	B2A026-01, B2A050-01
642.336	9.55	9.5	B2A047-01, B2A097-01
644.327	9.563	9.5	B2A073-01
645.322	9.533	9.5	B2A074-01
713.273	9.53	9.5	B2A018-01, B2A064-01
671.326	11.263	11.23	B2A034-01
655.306	9.19	9.16	B2A096-01
656.315	10.217	10.16	B2A025-01, B2A049-01
688.341	10.19	10.16	B2A059-01, B2A083-01
689.337	10.203	10.16	B2A060-01, B2A084-01
687.357	8.79	8.75	B2A058-01
629.316	8.38	8.34	B2A046-01
690.332	9.45	9.41	B2A085-01
691.327	9.463	9.41	B2A086-01
673.317	8.513	8.47	B2A012-01, B2A056-01
670.281	11.157	11.12	B2A100-01, B2A033-01
660.29	9.9	9.85	B2A027-01, B2A079-01, B2A099-01
674.337	9.893	9.85	B2A081-01
646.311	9.67	9.63	B2A051-01
699.357	9.66	9.63	B2A038-01, B2A088-01
652.316	9.09	9.05	B2A070-01
672.321	9.84	9.77	B2A011-01, B2A055-01
715.288	9.827	9.77	B2A090-01

【０６５２】

【表１１６】

混合物番号		mixAI－B2I－01	
m/z	MSピークの保持時間（min）	UVピークの保持時間（min）	帰属された化合物の番号
578.168	10.283	10.24	B2I017-01, B2I063-01
643.194	8.707	8.67	B2I044-01
539.207	6.45	6.43	B2I012-01, B2I056-01
494.211	6.56	6.52	B2I045-01
514.146	6.55	6.52	B2I023-01, B2I077-01
510.217	6.663	6.63	B2I073-01
524.196	9.409	9.35	B2I003-01, B2I053-01, B2I075-01
533.185	9.383	9.35	B2I031-01
535.176	8.773	8.74	B2I009-01
578.168	8.08	8.04	B2I017-01, B2I063-01
645.185	8.043	8	B2I022-01
495.206	9.223	9.14	B2I046-01
528.171	9.177	9.14	B2I005-01
562.198	7.9	7.87	B2I061-01
560.196	9.997	9.96	B2I013-01
500.167	10.833	10.78	B2I087-01
576.177	10.83	10.78	B2I039-01
644.19	10.82	10.78	B2I021-01
581.179	6.163	6.13	B2I090-01
496.201	6.243	6.21	B2I071-01
563.193	6.23	6.21	B2I062-01
539.207	9.527	9.49	B2I012-01, B2I056-01
497.197	7.76	7.73	B2I072-01
564.253	7.767	7.73	B2I037-01, B2I087-01
558.206	10.583	10.54	B2I035-01
547.212	11.293	11.25	B2I092-01
602.168	11.263	11.25	B2I019-01
642.199	11.297	11.25	B2I043-01
567.238	7.96	7.92	B2I016-01
580.184	7.947	7.92	B2I089-01
559.201	7.623	7.56	B2I036-01
512.201	6.897	6.86	B2I051-01
556.222	6.907	6.86	B2I085-01
557.218	6.91	6.86	B2I088-01
577.173	8.553	8.52	B2I040-01
518.137	8.963	8.92	B2I001-01
523.201	11.767	11.73	B2I026-01, B2I050-01
600.177	11.773	11.73	B2I041-01
523.201	6.803	6.75	B2I026-01, B2I050-01
553.248	5.95	5.92	B2I058-01
565.248	5.967	5.92	B2I038-01, B2I088-01
534.181	7.583	7.53	B2I032-01
565.248	8.673	8.59	B2I038-01, B2I088-01
520.201	7.073	7.04	B2I095-01
540.228	7.083	7.04	B2I081-01
508.226	7.033	6.99	B2I047-01, B2I097-01
524.196	6.97	6.93	B2I003-01, B2I053-01, B2I075-01
502.158	7.343	7.24	B2I093-01
515.142	7.257	7.24	B2I024-01, B2I078-01
518.211	7.277	7.24	B2I069-01
554.232	7.283	7.24	B2I059-01, B2I083-01
538.212	7.393	7.35	B2I011-01, B2I055-01
541.223	5.193	5.16	B2I082-01
526.181	10.94	10.92	B2I027-01, B2I079-01, B2I099-01
566.243	10.95	10.92	B2I015-01
515.142	7.233	7.17	B2I024-01, B2I078-01
524.196	7.207	7.17	B2I003-01, B2I053-01, B2I075-01
509.222	4.293	4.3	B2I048-01, B2I098-01
564.253	11.473	11.44	B2I037-01, B2I087-01
522.206	10.05	10.03	B2I025-01, B2I049-01
527.176	10.047	10.03	B2I100-01, B2I028-01, B2I080-01
536.171	10.053	10.03	B2I100-01, B2I033-01
536.171	10.077	10.03	B2I100-01, B2I033-01
601.173	10.073	10.03	B2I042-01
525.191	9.813	9.79	B2I004-01, B2I054-01, B2I076-01
525.191	9.84	9.79	B2I004-01, B2I054-01, B2I076-01
526.181	9.83	9.79	B2I027-01, B2I079-01, B2I099-01
526.181	9.853	9.79	B2I027-01, B2I079-01, B2I099-01
527.176	9.803	9.79	B2I100-01, B2I028-01, B2I080-01
579.163	6.417	6.34	B2I018-01, B2I064-01
513.197	9.477	9.44	B2I052-01
538.212	9.51	9.44	B2I011-01, B2I055-01
603.163	9.48	9.44	B2I020-01
554.232	7.417	7.38	B2I059-01, B2I083-01
555.227	7.427	7.38	B2I060-01, B2I084-01
501.162	4.503	4.47	B2I068-01
579.163	7.847	7.81	B2I018-01, B2I064-01
544.226	7.683	7.66	B2I065-01
545.222	7.7	7.66	B2I066-01
552.253	7.707	7.66	B2I057-01
514.146	9.65	9.61	B2I023-01, B2I077-01
529.166	9.647	9.61	B2I006-01
503.153	8.893	8.86	B2I094-01
517.132	7.47	7.44	B2I002-01
519.206	7.49	7.44	B2I070-01
521.197	7.473	7.44	B2I096-01
522.206	7.493	7.44	B2I025-01, B2I049-01
546.217	7.473	7.44	B2I091-01
527.176	7.197	7.13	B2I100-01, B2I028-01, B2I080-01
537.217	7.167	7.13	B2I034-01
509.222	4.033	4.1	B2I048-01, B2I098-01
511.212	10.663	10.62	B2I074-01
555.227	5.387	5.35	B2I060-01, B2I084-01
561.191	6.867	6.82	B2I014-01
525.191	5.987	5.95	B2I004-01, B2I054-01, B2I076-01

【０６５３】

【表１１７】

混合物番号		mixA1－B2L－01	
m/z	MSピークの保持時間（min）	UVピークの保持時間（min）	帰属された化合物の番号
577.223	9.913	9.87	B2L009-01
570.218	10.347	10.31	B2L005-01
622.231	8.887	8.85	B2L089-01
686.237	11.807	11.77	B2L021-01
606.3	8.713	8.68	B2L037-01, B2L087-01
607.295	6.94	6.91	B2L038-01, B2L088-01
562.248	7.94	7.9	B2L095-01
575.232	10.247	10.21	B2L031-01
642.224	12.527	12.49	B2L041-01
687.232	9.203	9.16	B2L022-01
588.264	8.39	8.35	B2L091-01
618.224	11.63	11.59	B2L039-01
538.248	7.163	7.13	B2L071-01
559.179	7.153	7.13	B2L002-01
623.226	7.15	7.13	B2L090-01
602.243	11.173	11.13	B2L013-01
589.259	6.277	6.24	B2L092-01
568.228	10.697	10.67	B2L027-01, B2L079-01, B2L099-01
580.259	10.717	10.67	B2L011-01, B2L055-01
595.295	11.37	11.33	B2L058-01
620.215	11.373	11.33	B2L017-01, B2L063-01
609.285	9.23	9.19	B2L016-01
551.269	7.413	7.4	B2L048-01, B2L098-01
552.264	7.42	7.4	B2L073-01
556.193	7.437	7.4	B2L023-01, B2L077-01
608.29	12.07	12.01	B2L015-01
684.246	12.047	12.01	B2L043-01
606.3	12.317	12.24	B2L037-01, B2L087-01
644.215	12.287	12.24	B2L019-01
607.295	9.607	9.54	B2L038-01, B2L088-01
685.241	9.563	9.54	B2L044-01
539.244	5.697	5.66	B2L072-01
600.253	11.463	11.42	B2L035-01
563.244	6.75	6.69	B2L096-01
621.21	9.093	9.05	B2L018-01, B2L064-01
553.259	5.27	5.25	B2L074-01
557.189	5.603	5.56	B2L024-01, B2L078-01
603.238	8.187	8.15	B2L014-01
579.264	8.127	8.09	B2L034-01
596.279	8.12	8.09	B2L059-01, B2L083-01
571.213	7.733	7.7	B2L006-01
556.193	10.547	10.56	B2L023-01, B2L077-01
566.243	10.603	10.56	B2L003-01, B2L053-01, B2L075-01
645.21	10.587	10.56	B2L020-01
536.256	7.24	7.2	B2L045-01
544.205	7.27	7.2	B2L093-01
537.253	5.807	5.75	B2L046-01
601.248	8.613	8.58	B2L036-01
564.253	10.953	10.92	B2L025-01, B2L049-01
578.218	10.963	10.92	B2L100-01, B2L033-01
578.218	10.973	10.92	B2L100-01, B2L033-01
581.254	6.23	6.13	B2L012-01, B2L056-01
542.214	7.297	7.27	B2L067-01
567.238	7.31	7.27	B2L004-01, B2L054-01, B2L076-01
569.223	7.303	7.27	B2L100-01, B2L026-01, B2L080-01
569.223	8.233	8.18	B2L100-01, B2L028-01, B2L080-01
584.3	8.22	8.18	B2L057-01
557.189	7.697	7.65	B2L024-01, B2L078-01
581.254	7.693	7.65	B2L012-01, B2L056-01
567.238	5.913	5.88	B2L004-01, B2L054-01, B2L076-01
545.2	5.15	5.12	B2L094-01
576.228	8.517	8.48	B2L032-01
604.245	8.52	8.48	B2L061-01
586.273	8.293	8.26	B2L065-01
583.27	6.03	6.01	B2L082-01
597.274	6.047	6.01	B2L060-01, B2L084-01
619.22	9.473	9.43	B2L040-01
564.253	8.067	8.03	B2L025-01, B2L049-01
567.238	8.06	8.03	B2L004-01, B2L054-01, B2L076-01
568.228	8.073	8.03	B2L027-01, B2L079-01, B2L099-01
569.223	5.383	5.34	B2L100-01, B2L026-01, B2L080-01
587.269	6.36	6.36	B2L066-01
597.274	6.39	6.36	B2L060-01, B2L084-01
543.209	10.21	10.14	B2L068-01
558.184	10.19	10.14	B2L001-01
565.248	7.817	7.77	B2L026-01, B2L050-01
566.243	7.817	7.77	B2L003-01, B2L053-01, B2L075-01
582.274	7.8	7.77	B2L081-01
596.279	7.81	7.77	B2L058-01, B2L083-01
605.24	8.7	8.64	B2L062-01
620.215	8.68	8.64	B2L017-01, B2L063-01
560.258	7.89	7.85	B2L069-01
580.259	7.923	7.85	B2L011-01, B2L055-01
550.273	7.58	7.55	B2L047-01, B2L097-01
598.269	7.597	7.55	B2L085-01
599.265	7.597	7.55	B2L086-01
554.248	7.493	7.47	B2L051-01
555.244	7.503	7.47	B2L052-01
566.243	7.51	7.47	B2L003-01, B2L053-01, B2L075-01
568.228	7.513	7.47	B2L027-01, B2L079-01, B2L099-01
561.253	6.817	6.77	B2L070-01
565.248	10.933	10.86	B2L026-01, B2L050-01
643.22	10.9	10.86	B2L042-01
621.21	7.127	7.05	B2L018-01, B2L064-01
550.273	11.953	11.91	B2L047-01, B2L097-01
551.269	11.96	11.91	B2L048-01, B2L098-01

【０６５４】

【表１１８】

混合物番号		mixA|−B2N−01	
m/z	MSピークの保持時間（min）	UVピークの保持時間（min）	帰属された化合物の番号
576.214	7.78	7.73	B2N045-01
724.202	12.373	12.34	B2N043-01
634.256	8.673	8.64	B2N057-01
682.18	12.813	12.78	B2N041-01
658.18	12.01	11.97	B2N039-01
607.194	6.177	6.14	B2N004-01, B2N054-01, B2N076-01
608.184	11.17	11.13	B2N027-01, B2N079-01, B2N099-01
609.179	6.48	6.45	B2N100-01, B2N028-01, B2N080-01
644.201	9.057	9.01	B2N061-01
591.225	6.07	6.02	B2N048-01, B2N098-01
635.251	7.127	7.09	B2N058-01
593.215	8.077	8.03	B2N074-01
617.179	10.133	10.09	B2N009-01
725.198	10.12	10.09	B2N044-01
597.145	8.41	8.35	B2N024-01, B2N078-01
600.214	8.383	8.35	B2N069-01
620.215	8.39	8.35	B2N011-01, B2N055-01
636.235	8.413	8.35	B2N059-01, B2N083-01
641.204	9.27	9.23	B2N036-01
621.21	8.01	7.95	B2N012-01, B2N056-01
605.204	8.53	8.49	B2N026-01, B2N050-01
604.209	8.573	8.54	B2N025-01, B2N049-01
604.209	11.407	11.36	B2N025-01, B2N049-01
627.225	6.977	6.93	B2N066-01
619.22	8.813	8.78	B2N034-01
626.229	8.823	8.78	B2N065-01
606.199	10.757	10.72	B2N003-01, B2N053-01, B2N075-01
615.188	10.76	10.72	B2N031-01
685.166	10.753	10.72	B2N020-01
660.171	11.477	11.44	B2N017-01, B2N063-01
601.209	7.33	7.29	B2N070-01
578.204	7.487	7.45	B2N071-01
577.209	6.38	6.31	B2N046-01
595.2	6.35	6.31	B2N052-01
645.196	7.54	7.49	B2N062-01
621.21	6.79	6.75	B2N012-01, B2N056-01
683.176	11.347	11.31	B2N042-01
590.229	8.06	7.99	B2N047-01, B2N097-01
594.204	8.023	7.99	B2N051-01
611.169	8.047	7.99	B2N006-01
609.179	8.933	8.89	B2N100-01, B2N028-01, B2N080-01
585.156	7.603	7.57	B2N094-01
607.184	7.61	7.57	B2N004-01, B2N054-01, B2N076-01
630.221	11.867	11.85	B2N086-01
726.193	11.883	11.85	B2N021-01
727.188	11.89	11.85	B2N022-01
598.14	10.373	10.33	B2N001-01
602.204	8.233	8.21	B2N095-01
603.2	8.247	8.21	B2N096-01
608.184	8.227	8.21	B2N027-01, B2N079-01, B2N099-01
636.235	8.243	8.21	B2N059-01, B2N083-01
629.215	6.537	6.51	B2N092-01
637.23	6.533	6.51	B2N060-01, B2N084-01
620.215	10.873	10.83	B2N011-01, B2N055-01
646.256	12.643	12.61	B2N037-01, B2N087-01
661.166	9.36	9.32	B2N018-01, B2N064-01
583.166	5.883	5.85	B2N068-01
597.145	5.897	5.85	B2N024-01, B2N078-01
582.17	7.853	7.82	B2N067-01
638.225	7.87	7.82	B2N085-01
599.135	7.19	7.17	B2N002-01
642.199	11.28	11.25	B2N013-01
618.174	11.467	11.4	B2N100-01, B2N033-01
618.174	11.437	11.4	B2N100-01, B2N033-01
579.2	6	5.96	B2N072-01
646.256	9.023	8.97	B2N037-01, B2N087-01
647.251	9.037	8.97	B2N038-01, B2N088-01
592.22	7.73	7.69	B2N073-01
596.15	7.76	7.69	B2N023-01, B2N077-01
661.166	7.717	7.69	B2N018-01, B2N064-01
647.251	10.18	10.15	B2N038-01, B2N088-01
648.246	10.193	10.15	B2N015-01
591.225	11.047	11	B2N048-01, B2N098-01
596.15	11.043	11	B2N023-01, B2N077-01
637.23	10.947	10.89	B2N060-01, B2N084-01
623.226	6.313	6.26	B2N082-01
590.229	7.95	7.92	B2N047-01, B2N097-01
605.204	7.983	7.92	B2N026-01, B2N050-01
606.199	7.977	7.92	B2N003-01, B2N053-01, B2N075-01
607.194	7.957	7.92	B2N004-01, B2N054-01, B2N076-01
643.194	8.48	8.42	B2N014-01
628.22	8.667	8.6	B2N091-01
622.231	8.097	8.06	B2N081-01
606.199	8.35	8.28	B2N003-01, B2N053-01, B2N075-01
584.161	7.59	7.53	B2N093-01
608.184	7.597	7.53	B2N027-01, B2N079-01, B2N099-01
609.179	7.593	7.53	B2N100-01, B2N028-01, B2N080-01
640.209	11.863	11.78	B2N035-01
649.241	9.477	9.43	B2N016-01
659.176	10.053	10.01	B2N040-01
660.171	9.193	9.15	B2N017-01, B2N063-01
684.171	12.33	12.28	B2N019-01
610.174	10.527	10.48	B2N005-01
616.184	9.16	9.13	B2N032-01
662.187	9.183	9.13	B2N089-01
663.182	9.177	9.13	B2N090-01

【０６５５】

【表１１９】

混合物番号		mixAI－B2R－01	
m/z	MSピークの保持時間（min）	UVピークの保持時間（min）	帰属された化合物の番号
814.234	12.897	12.87	B2R031-01
857.226	13.81	13.76	B2R039-01
775.259	9.847	9.81	B2R045-01
816.224	12.68	12.65	B2R009-01
784.202	8.677	8.64	B2R094-01
923.248	14.02	13.98	B2R043-01
841.245	9.233	9.2	B2R013-01
817.22	13.487	13.44	B2R100-01, B2R033-01
803.254	13.403	13.38	B2R025-01, B2R049-01
881.226	14.387	14.35	B2R041-01
859.217	13.63	13.59	B2R017-01, B2R063-01
840.25	11.85	11.81	B2R036-01
839.254	13.77	13.73	B2R035-01
884.212	13.103	13.09	B2R020-01
848.297	12.55	12.52	B2R038-01, B2R088-01
800.255	9.48	9.43	B2R070-01
776.255	8.947	8.89	B2R046-01
858.221	12.367	12.33	B2R040-01
924.243	12.377	12.33	B2R044-01
860.212	12.14	12.1	B2R018-01, B2R064-01
926.234	12.137	12.1	B2R022-01
925.238	13.863	13.82	B2R021-01
825.275	10.807	10.77	B2R065-01
848.287	12.313	12.28	B2R016-01
827.266	11.157	11.1	B2R091-01
828.261	11.14	11.1	B2R092-01
859.217	11.133	11.1	B2R017-01, B2R063-01
819.26	10.157	10.12	B2R011-01, B2R055-01
838.266	8.807	8.77	B2R086-01
807.229	9.667	9.62	B2R027-01, B2R079-01, B2R099-01
808.224	9.67	9.62	B2R100-01, B2R028-01, B2R080-01
799.259	10.277	10.24	B2R069-01
782.211	8.62	8.51	B2R068-01
790.27	8.557	8.51	B2R048-01, B2R098-01
809.22	8.537	8.51	B2R005-01
843.247	11.033	10.99	B2R061-01
844.242	11.057	10.99	B2R062-01
805.245	9.773	9.74	B2R003-01, B2R053-01, B2R075-01
837.271	9.813	9.74	B2R085-01
808.224	11.577	11.54	B2R100-01, B2R028-01, B2R080-01
842.24	11.58	11.54	B2R014-01
861.232	11.58	11.54	B2R089-01
805.245	13.207	13.16	B2R003-01, B2R053-01, B2R075-01
806.24	13.2	13.16	B2R004-01, B2R054-01, B2R076-01
807.229	13.193	13.16	B2R027-01, B2R079-01, B2R099-01
817.22	11.417	11.38	B2R100-01, B2R033-01
805.245	10.737	10.7	B2R003-01, B2R053-01, B2R075-01
798.181	10.89	10.85	B2R002-01
783.206	10.217	10.17	B2R093-01
795.195	10.203	10.17	B2R023-01, B2R077-01
821.276	10.2	10.17	B2R081-01
862.227	10.197	10.17	B2R090-01
847.292	14.183	14.19	B2R015-01
883.217	14.23	14.19	B2R019-01
804.25	9.097	9.05	B2R026-01, B2R050-01
819.26	13.303	13.27	B2R011-01, B2R055-01
882.221	13.307	13.27	B2R042-01
815.229	11.683	11.64	B2R032-01
801.25	10.537	10.46	B2R095-01
802.245	10.537	10.46	B2R096-01
803.254	10.493	10.46	B2R025-01, B2R049-01
835.281	10.467	10.46	B2R059-01, B2R083-01
777.25	9.98	9.95	B2R071-01
781.216	9.987	9.95	B2R067-01
793.25	10.023	9.95	B2R051-01
835.281	9.96	9.95	B2R059-01, B2R083-01
804.25	11.29	11.25	B2R026-01, B2R050-01
806.24	11.283	11.25	B2R004-01, B2R054-01, B2R076-01
810.215	11.307	11.25	B2R008-01
790.27	8.323	8.28	B2R048-01, B2R098-01
791.266	8.32	8.28	B2R073-01
818.265	11.473	11.43	B2R034-01
845.301	11.48	11.43	B2R037-01, B2R087-01
845.301	11.463	11.43	B2R037-01, B2R087-01
846.297	11.457	11.43	B2R038-01, B2R088-01
797.186	8.407	8.4	B2R001-01
808.224	8.453	8.4	B2R100-01, B2R028-01, B2R080-01
778.245	9.05	8.98	B2R072-01
820.256	9.02	8.98	B2R012-01, B2R056-01
822.271	8.997	8.98	B2R082-01
789.275	9.907	9.87	B2R047-01, B2R097-01
789.275	9.933	9.87	B2R047-01, B2R097-01
792.261	9.91	9.87	B2R074-01
836.276	9.94	9.87	B2R060-01, B2R084-01
860.212	9.903	9.87	B2R018-01, B2R064-01
806.24	10.983	10.94	B2R004-01, B2R054-01, B2R076-01
807.229	10.987	10.94	B2R027-01, B2R079-01, B2R099-01
796.19	11.21	11.16	B2R024-01, B2R078-01
796.19	11.193	11.16	B2R024-01, B2R078-01
820.256	11.197	11.16	B2R012-01, B2R056-01
826.27	9.387	9.35	B2R066-01
836.276	9.393	9.35	B2R060-01, B2R084-01
833.301	10.393	10.35	B2R057-01
834.297	10.393	10.35	B2R058-01
794.245	8.89	8.84	B2R052-01
795.195	8.867	8.84	B2R023-01, B2R077-01

【０６５６】

［表ＡＩ－０３－０２］に各化合物が帰属されたＵＶならびにＭＤＳピークの保持時間、その時間帯に検出されたｍ／ｚ（Ｍ＋Ｈ）$^{+}$の値を示す。実施例６－２－２で２化合物、および実施例６－２－３で２化合物が欠損している可能性があることから、それら計４化合物から誘導される４８化合物についても欠損している可能性がある。そのため、「表ＡＩ－０３－０２」に示すように、ライブラリ化合物として設定した１２００化合物の内、１１５２化合物に相当するｍ／ｚ（Ｍ＋Ｈ）$^{+}$ピークを確認することできている。

【０６５７】

以上の結果より、本実施例内にて示される反応条件において、種々の反応性官能基を有

するアレノールに対し高選択的なエチル化を行い、また、カラム精製が不要な後処理を実施することで、化合物数１０００を超え、その９５％以上がＬＣ－ＭＳの保持時間および質量電荷比（ｍ／ｚ）により検出可能な、高品質かつ官能基に多様性を有する化合物ライブラリを構築できることが示された。

【０６５８】

実施例６－６：アレノールのＯ－選択的なエチル化法を用いた、官能基に多様性を有する化合物ライブラリの製造例２

実施例６－１～６－５では、１００化合物が混合されている１２種類の混合物中のアレノールに対する高選択的なエチル化を行い、カラムによる精製操作が不要な後処理を実施することで、官能基に多様性を有する化合物ライブラリの合成に適用した一例を示した。実施例６－６では１０００化合物が含まれる混合物に対して、アレノールに対する高選択的なエチル化反応を実施することでライブラリを構築する例を示す。

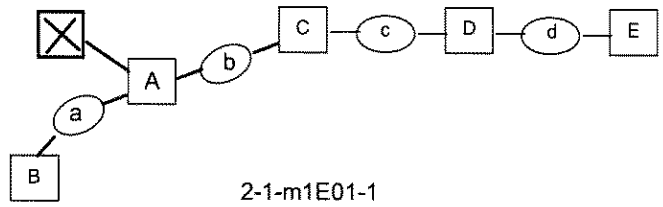
【０６５９】

実施例６－６にて実施する該ライブラリに含む「コアブロックの多様性」と「リンカーの多様性」について図２に、原料として別途調製した混合物２－１－ｍ１Ｅ０１－１中に含まれうる化合物を［表６－６－２］に示す。

表中の表記方法について説明する。［表６－６－２］では、混合物２－１－ｍ１Ｅ０１－１に含まれうるそれぞれの化合物をＩＤで示し、混合物２－１－ｍ１Ｅ０１－１の構造におけるコアブロックとリンカーの組み合わせを記号、もしくは化学式で示している。記号と具体的構造の対応は図２に示す。［表６－６－２］において「▲×▼」は化学式で表す。

【０６６０】

【化１１６】

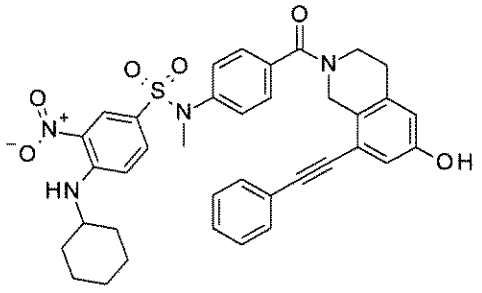


2-1-m1E01-1

【０６６１】

例えば、ＩＤが２－１－ｍ１Ｅ０１－１－０１８１の場合、［表６－６－１］で下記構造式を示す。

【化１１７】



２－１－ｍ１Ｅ０１－１－０１８１

【０６６２】

［表６－６－１］ＩＤ表記（２－１－ｍ１Ｅ０１－１－０１８１）における化合物構造

【表１２０】

ID	☒	a	B	b	C	c	D	d	E
2-1-m1E01-1-0181	OH	a2	B11	b2	C20	c3	D02	d1	E01

【０６６３】

［表６－６－２］混合物２－１－ｍ１Ｅ０１－１中に含まれうる化合物

【表１２１】

ID	Exact Mass	☒	a	B	b	C	c	D	d	E
2-1-m1E01-1-0001	586.258	OH	a2	B11	b1	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0002	587.253	OH	a2	B12	b1	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0003	587.253	OH	a2	B11	b1	C11	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0004	588.249	OH	a2	B11	b1	C10	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0005	588.249	OH	a2	B12	b1	C11	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0006	589.244	OH	a2	B12	b1	C10	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0007	593.210	OH	a2	B11	b1	C12	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0008	594.205	OH	a2	B12	b1	C12	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0009	600.274	OH	a2	B13	b1	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0010	601.269	OH	a2	B13	b1	C11	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0011	602.264	OH	a2	B13	b1	C10	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0012	604.232	OH	a2	B11	b2	C01	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0013	604.249	OH	a2	B14	b1	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0014	605.227	OH	a2	B12	b2	C01	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0015	605.244	OH	a2	B14	b1	C11	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0016	605.264	OH	a1	B01	b1	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0017	606.239	OH	a2	B14	b1	C10	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0018	606.259	OH	a1	B02	b1	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0019	606.259	OH	a1	B01	b1	C11	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0020	607.225	OH	a2	B13	b1	C12	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0021	607.254	OH	a1	B01	b1	C10	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0022	607.254	OH	a1	B02	b1	C11	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0023	608.250	OH	a1	B02	b1	C10	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0024	611.200	OH	a2	B14	b1	C12	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0025	612.215	OH	a1	B01	b1	C12	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0026	613.211	OH	a1	B02	b1	C12	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0027	614.253	OH	a2	B11	b2	C02	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0028	614.289	OH	a2	B15	b1	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0029	615.248	OH	a2	B12	b2	C02	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0030	615.248	OH	a2	B11	b2	C03	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0031	615.285	OH	a2	B15	b1	C11	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0032	616.243	OH	a2	B12	b2	C03	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0033	616.269	OH	a2	B16	b1	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0034	616.280	OH	a2	B15	b1	C10	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0035	617.264	OH	a2	B16	b1	C11	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0036	618.248	OH	a2	B13	b2	C01	c1	D01	d1	E01

2-1-m1E01-1-0037	618.259	OH	a2	B16	b1	C10	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0038	619.279	OH	a1	B03	b1	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0039	620.209	OH	a2	B11	b2	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0040	620.275	OH	a1	B03	b1	C11	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0041	621.205	OH	a2	B12	b2	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0042	621.241	OH	a2	B15	b1	C12	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0043	621.270	OH	a1	B03	b1	C10	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0044	622.223	OH	a2	B14	b2	C01	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0045	622.239	OH	a2	B17	b1	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0046	623.220	OH	a2	B16	b1	C12	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0047	623.234	OH	a2	B17	b1	C11	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0048	623.238	OH	a1	B01	b2	C01	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0049	623.254	OH	a1	B04	b1	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0050	624.230	OH	a2	B17	b1	C10	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0051	624.233	OH	a1	B02	b2	C01	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0052	624.250	OH	a1	B04	b1	C11	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0053	625.245	OH	a1	B04	b1	C10	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0054	626.231	OH	a1	B03	b1	C12	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0055	628.269	OH	a2	B13	b2	C02	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0056	629.191	OH	a2	B17	b1	C12	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0057	629.264	OH	a2	B13	b2	C03	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0058	629.264	OH	a2	B11	b2	C05	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0059	630.206	OH	a1	B04	b1	C12	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0060	630.259	OH	a2	B12	b2	C05	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0061	632.243	OH	a2	B14	b2	C02	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0062	632.243	OH	a2	B11	b2	C04	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0063	632.263	OH	a2	B15	b2	C01	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0064	633.239	OH	a2	B12	b2	C04	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0065	633.239	OH	a2	B14	b2	C03	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0066	633.259	OH	a1	B01	b2	C02	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0067	633.295	OH	a1	B05	b1	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0068	634.225	OH	a2	B13	b2	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0069	634.243	OH	a2	B16	b2	C01	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0070	634.254	OH	a1	B02	b2	C02	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0071	634.254	OH	a1	B01	b2	C03	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0072	634.290	OH	a1	B05	b1	C11	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0073	635.249	OH	a1	B02	b2	C03	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0074	635.274	OH	a1	B06	b1	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0075	635.286	OH	a1	B05	b1	C10	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0076	636.270	OH	a1	B06	b1	C11	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0077	636.274	OH	a2	B18	b1	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0078	637.254	OH	a1	B03	b2	C01	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0079	637.265	OH	a1	B06	b1	C10	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0080	637.269	OH	a2	B18	b1	C11	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0081	638.200	OH	a2	B14	b2	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0082	638.264	OH	a2	B18	b1	C10	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0083	638.264	OH	a2	B11	b1	C13	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0084	639.215	OH	a1	B01	b2	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0085	639.259	OH	a2	B12	b1	C13	c1	D01	d1	E01

2-1-m1E01-1-0086	640.199	OH	a2	B11	b3	C15	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0087	640.210	OH	a1	B02	b2	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0088	640.213	OH	a2	B17	b2	C01	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0089	640.247	OH	a1	B05	b1	C12	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0090	641.194	OH	a2	B12	b3	C15	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0091	641.229	OH	a1	B04	b2	C01	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0092	641.245	OH	a1	B07	b1	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0093	642.226	OH	a1	B06	b1	C12	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0094	642.230	OH	a2	B11	b1	C14	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0095	642.240	OH	a1	B07	b1	C11	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0096	642.251	OH	a2	B11	b2	C33	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0097	642.284	OH	a2	B15	b2	C02	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0098	643.225	OH	a2	B18	b1	C12	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0099	643.225	OH	a2	B12	b1	C14	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0100	643.235	OH	a1	B07	b1	C10	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0101	643.246	OH	a2	B12	b2	C33	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0102	643.279	OH	a2	B15	b2	C03	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0103	643.279	OH	a2	B13	b2	C05	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0104	644.263	OH	a2	B16	b2	C02	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0105	645.259	OH	a2	B16	b2	C03	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0106	646.259	OH	a2	B13	b2	C04	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0107	646.316	OH	a2	B11	b2	C07	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0108	647.254	OH	a2	B14	b2	C05	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0109	647.274	OH	a1	B03	b2	C02	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0110	647.311	OH	a2	B12	b2	C07	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0111	648.197	OH	a1	B07	b1	C12	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0112	648.241	OH	a2	B15	b2	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0113	648.270	OH	a1	B03	b2	C03	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0114	648.270	OH	a1	B01	b2	C05	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0115	649.265	OH	a1	B02	b2	C05	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0116	650.220	OH	a2	B16	b2	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0117	650.220	OH	a2	B11	b3	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0118	650.220	OH	a2	B11	b1	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0119	650.234	OH	a2	B17	b2	C02	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0120	650.234	OH	a2	B14	b2	C04	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0121	651.215	OH	a2	B12	b3	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0122	651.215	OH	a2	B12	b1	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0123	651.215	OH	a2	B11	b1	C11	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0124	651.229	OH	a2	B17	b2	C03	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0125	651.249	OH	a1	B04	b2	C02	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0126	651.249	OH	a1	B01	b2	C04	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0127	651.269	OH	a1	B05	b2	C01	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0128	652.210	OH	a2	B11	b1	C10	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0129	652.210	OH	a2	B12	b1	C11	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0130	652.245	OH	a1	B02	b2	C04	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0131	652.245	OH	a1	B04	b2	C03	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0132	652.280	OH	a2	B13	b1	C13	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0133	653.206	OH	a2	B12	b1	C10	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0134	653.231	OH	a1	B03	b2	C06	c1	D01	d1	E01

2-1-m1E01-1-0135	653.249	OH	a1	B06	b2	C01	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0136	654.215	OH	a2	B13	b3	C15	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0137	654.245	OH	a2	B19	b1	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0138	654.245	OH	a2	B11	b1	C09	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0139	654.248	OH	a2	B18	b2	C01	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0140	655.241	OH	a2	B12	b1	C09	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0141	655.241	OH	a2	B19	b1	C11	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0142	656.176	OH	a2	B11	b3	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0143	656.190	OH	a2	B17	b2	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0144	656.236	OH	a2	B19	b1	C10	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0145	656.246	OH	a2	B13	b1	C14	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0146	656.255	OH	a2	B14	b1	C13	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0147	656.267	OH	a2	B13	b2	C33	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0148	657.172	OH	a2	B12	b3	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0149	657.172	OH	a2	B11	b1	C12	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0150	657.206	OH	a1	B04	b2	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0151	657.270	OH	a1	B01	b1	C13	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0152	657.295	OH	a2	B15	b2	C05	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0153	658.167	OH	a2	B12	b1	C12	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0154	658.190	OH	a2	B14	b3	C15	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0155	658.265	OH	a1	B02	b1	C13	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0156	659.205	OH	a1	B01	b3	C15	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0157	659.219	OH	a1	B07	b2	C01	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0158	659.274	OH	a2	B16	b2	C05	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0159	660.200	OH	a1	B02	b3	C15	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0160	660.221	OH	a2	B14	b1	C14	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0161	660.242	OH	a2	B14	b2	C33	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0162	660.275	OH	a2	B15	b2	C04	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0163	660.331	OH	a2	B13	b2	C07	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0164	661.197	OH	a2	B19	b1	C12	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0165	661.236	OH	a1	B01	b1	C14	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0166	661.257	OH	a1	B01	b2	C33	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0167	661.290	OH	a1	B05	b2	C02	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0168	662.231	OH	a1	B08	b1	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0169	662.231	OH	a1	B02	b1	C14	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0170	662.252	OH	a1	B02	b2	C33	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0171	662.254	OH	a2	B16	b2	C04	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0172	662.256	OH	a2	B11	b1	C30	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0173	662.285	OH	a1	B05	b2	C03	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0174	662.285	OH	a1	B03	b2	C05	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0175	663.226	OH	a1	B08	b1	C11	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0176	663.252	OH	a2	B12	b1	C30	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0177	663.269	OH	a1	B06	b2	C02	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0178	664.222	OH	a1	B08	b1	C10	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0179	664.236	OH	a2	B13	b3	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0180	664.236	OH	a2	B13	b1	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0181	664.236	OH	a2	B11	b2	C20	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0182	664.265	OH	a1	B06	b2	C03	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0183	664.269	OH	a2	B18	b2	C02	c1	D01	d1	E01

2-1-m1E01-1-0184	664.306	OH	a2	B14	b2	C07	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0185	665.231	OH	a2	B13	b1	C11	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0186	665.231	OH	a2	B12	b2	C20	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0187	665.231	OH	a2	B11	b2	C28	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0188	665.245	OH	a2	B17	b2	C05	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0189	665.264	OH	a2	B18	b2	C03	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0190	665.265	OH	a1	B03	b2	C04	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0191	665.321	OH	a1	B01	b2	C07	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0192	666.226	OH	a2	B13	b1	C10	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0193	666.226	OH	a2	B12	b2	C28	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0194	666.260	OH	a1	B04	b2	C05	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0195	666.295	OH	a2	B15	b1	C13	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0196	666.317	OH	a1	B02	b2	C07	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0197	667.246	OH	a1	B05	b2	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0198	668.194	OH	a2	B11	b2	C01	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0199	668.210	OH	a2	B14	b3	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0200	668.210	OH	a2	B14	b1	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0201	668.225	OH	a2	B17	b2	C04	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0202	668.230	OH	a2	B15	b3	C15	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0203	668.261	OH	a2	B13	b1	C09	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0204	668.275	OH	a2	B16	b1	C13	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0205	669.183	OH	a1	B08	b1	C12	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0206	669.189	OH	a2	B12	b2	C01	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0207	669.206	OH	a2	B14	b1	C11	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0208	669.226	OH	a1	B06	b2	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0209	669.226	OH	a1	B01	b3	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0210	669.226	OH	a1	B01	b1	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0211	669.240	OH	a1	B07	b2	C02	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0212	669.240	OH	a1	B04	b2	C04	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0213	670.192	OH	a2	B13	b3	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0214	670.201	OH	a2	B14	b1	C10	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0215	670.210	OH	a2	B16	b3	C15	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0216	670.221	OH	a1	B02	b3	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0217	670.221	OH	a1	B02	b1	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0218	670.221	OH	a1	B01	b1	C11	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0219	670.225	OH	a2	B18	b2	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0220	670.235	OH	a1	B07	b2	C03	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0221	670.240	OH	a2	B20	b1	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0222	670.261	OH	a2	B15	b1	C14	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0223	670.283	OH	a2	B15	b2	C33	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0224	671.187	OH	a2	B13	b1	C12	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0225	671.216	OH	a1	B01	b1	C10	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0226	671.216	OH	a1	B02	b1	C11	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0227	671.236	OH	a2	B20	b1	C11	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0228	671.286	OH	a1	B03	b1	C13	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0229	672.211	OH	a1	B02	b1	C10	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0230	672.220	OH	a2	B19	b2	C01	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0231	672.231	OH	a2	B20	b1	C10	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0232	672.236	OH	a2	B14	b1	C09	c1	D01	d1	E01

2-1-m1E01-1-0233	672.241	OH	a2	B16	b1	C14	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0234	672.262	OH	a2	B16	b2	C33	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0235	673.221	OH	a1	B03	b3	C15	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0236	673.251	OH	a1	B09	b1	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0237	673.251	OH	a1	B01	b1	C09	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0238	674.167	OH	a2	B14	b3	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0239	674.245	OH	a2	B17	b1	C13	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0240	674.246	OH	a1	B02	b1	C09	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0241	674.246	OH	a1	B09	b1	C11	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0242	674.347	OH	a2	B15	b2	C07	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0243	675.162	OH	a2	B14	b1	C12	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0244	675.182	OH	a1	B01	b3	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0245	675.196	OH	a1	B07	b2	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0246	675.242	OH	a1	B09	b1	C10	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0247	675.252	OH	a1	B03	b1	C14	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0248	675.261	OH	a1	B04	b1	C13	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0249	675.273	OH	a1	B03	b2	C33	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0250	676.177	OH	a1	B02	b3	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0251	676.177	OH	a1	B01	b1	C12	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0252	676.180	OH	a2	B17	b3	C15	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0253	676.272	OH	a2	B13	b1	C30	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0254	676.272	OH	a2	B11	b1	C32	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0255	676.301	OH	a1	B05	b2	C05	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0256	676.326	OH	a2	B16	b2	C07	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0257	677.173	OH	a1	B02	b1	C12	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0258	677.192	OH	a2	B20	b1	C12	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0259	677.196	OH	a1	B04	b3	C15	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0260	677.267	OH	a2	B12	b1	C32	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0261	678.211	OH	a2	B17	b1	C14	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0262	678.215	OH	a2	B11	b2	C02	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0263	678.232	OH	a2	B17	b2	C33	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0264	678.251	OH	a2	B15	b3	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0265	678.251	OH	a2	B15	b1	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0266	678.251	OH	a2	B13	b2	C20	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0267	678.251	OH	a2	B11	b2	C22	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0268	678.280	OH	a1	B06	b2	C05	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0269	679.210	OH	a2	B12	b2	C02	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0270	679.210	OH	a2	B11	b2	C03	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0271	679.226	OH	a1	B04	b1	C14	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0272	679.246	OH	a2	B15	b1	C11	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0273	679.246	OH	a2	B12	b2	C22	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0274	679.246	OH	a2	B13	b2	C28	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0275	679.248	OH	a1	B04	b2	C33	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0276	679.279	OH	a2	B18	b2	C05	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0277	679.281	OH	a1	B05	b2	C04	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0278	679.337	OH	a1	B03	b2	C07	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0279	680.203	OH	a1	B09	b1	C12	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0280	680.205	OH	a1	B08	b2	C01	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0281	680.205	OH	a2	B12	b2	C03	c2	D02	d1	E01

2-1-m1E01-1-0282	680.230	OH	a2	B16	b3	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0283	680.230	OH	a2	B16	b1	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0284	680.242	OH	a2	B15	b1	C10	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0285	680.247	OH	a2	B14	b1	C30	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0286	681.226	OH	a2	B16	b1	C11	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0287	681.260	OH	a1	B06	b2	C04	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0288	681.262	OH	a1	B01	b1	C30	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0289	682.210	OH	a2	B13	b2	C01	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0290	682.221	OH	a2	B16	b1	C10	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0291	682.226	OH	a2	B14	b2	C20	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0292	682.226	OH	a2	B11	b2	C24	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0293	682.240	OH	a2	B19	b2	C02	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0294	682.257	OH	a1	B02	b1	C30	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0295	682.259	OH	a2	B18	b2	C04	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0296	682.277	OH	a2	B15	b1	C09	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0297	682.297	OH	a2	B17	b2	C07	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0298	683.221	OH	a2	B12	b2	C24	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0299	683.221	OH	a2	B14	b2	C28	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0300	683.236	OH	a2	B19	b2	C03	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0301	683.241	OH	a1	B03	b3	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0302	683.241	OH	a1	B03	b1	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0303	683.241	OH	a1	B01	b2	C20	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0304	683.312	OH	a1	B04	b2	C07	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0305	684.171	OH	a2	B11	b2	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0306	684.208	OH	a2	B15	b3	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0307	684.237	OH	a1	B03	b1	C11	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0308	684.237	OH	a1	B02	b2	C20	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0309	684.237	OH	a1	B01	b2	C28	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0310	684.251	OH	a1	B07	b2	C05	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0311	684.256	OH	a2	B16	b1	C09	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0312	685.166	OH	a2	B12	b2	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0313	685.203	OH	a2	B15	b1	C12	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0314	685.232	OH	a1	B03	b1	C10	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0315	685.232	OH	a1	B02	b2	C28	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0316	685.301	OH	a1	B05	b1	C13	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0317	686.185	OH	a2	B14	b2	C01	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0318	686.187	OH	a2	B16	b3	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0319	686.201	OH	a2	B17	b3	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0320	686.201	OH	a2	B17	b1	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0321	687.182	OH	a2	B16	b1	C12	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0322	687.196	OH	a2	B17	b1	C11	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0323	687.200	OH	a1	B01	b2	C01	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0324	687.216	OH	a1	B04	b3	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0325	687.216	OH	a1	B04	b1	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0326	687.230	OH	a1	B07	b2	C04	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0327	687.236	OH	a1	B05	b3	C15	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0328	687.267	OH	a1	B03	b1	C09	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0329	687.281	OH	a1	B06	b1	C13	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0330	688.192	OH	a2	B17	b1	C10	c2	D02	d1	E01

2-1-m1E01-1-0331	688.195	OH	a1	B02	b2	C01	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0332	688.197	OH	a2	B19	b2	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0333	688.212	OH	a1	B04	b1	C11	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0334	688.214	OH	a2	B20	b2	C01	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0335	688.280	OH	a2	B18	b1	C13	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0336	689.198	OH	a1	B03	b3	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0337	689.207	OH	a1	B04	b1	C10	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0338	689.216	OH	a1	B06	b3	C15	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0339	689.246	OH	a1	B10	b1	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0340	689.267	OH	a1	B05	b1	C14	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0341	689.288	OH	a1	B05	b2	C33	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0342	690.193	OH	a1	B03	b1	C12	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0343	690.215	OH	a2	B18	b3	C15	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0344	690.226	OH	a1	B08	b2	C02	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0345	690.227	OH	a2	B17	b1	C09	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0346	690.241	OH	a1	B10	b1	C11	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0347	690.288	OH	a2	B15	b1	C30	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0348	690.288	OH	a2	B11	b1	C29	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0349	690.288	OH	a2	B13	b1	C32	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0350	691.221	OH	a1	B08	b2	C03	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0351	691.225	OH	a1	B09	b2	C01	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0352	691.237	OH	a1	B10	b1	C10	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0353	691.242	OH	a1	B04	b1	C09	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0354	691.246	OH	a1	B06	b1	C14	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0355	691.268	OH	a1	B06	b2	C33	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0356	691.283	OH	a2	B12	b1	C29	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0357	692.157	OH	a2	B17	b3	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0358	692.230	OH	a2	B13	b2	C02	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0359	692.246	OH	a2	B18	b1	C14	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0360	692.267	OH	a2	B15	b2	C20	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0361	692.267	OH	a2	B13	b2	C22	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0362	692.267	OH	a2	B16	b1	C30	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0363	692.267	OH	a2	B18	b2	C33	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0364	693.153	OH	a2	B17	b1	C12	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0365	693.173	OH	a1	B04	b3	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0366	693.226	OH	a2	B13	b2	C03	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0367	693.226	OH	a2	B11	b2	C05	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0368	693.251	OH	a1	B07	b1	C13	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0369	693.262	OH	a2	B15	b2	C28	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0370	693.353	OH	a1	B05	b2	C07	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0371	694.168	OH	a1	B04	b1	C12	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0372	694.221	OH	a2	B12	b2	C05	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0373	694.246	OH	a2	B16	b2	C20	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0374	694.246	OH	a2	B11	b2	C26	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0375	694.263	OH	a2	B14	b1	C32	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0376	695.186	OH	a1	B07	b3	C15	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0377	695.241	OH	a2	B12	b2	C26	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0378	695.241	OH	a2	B16	b2	C28	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0379	695.278	OH	a1	B03	b1	C30	c3	D02	d1	E01

2-1-m1E01-1-0380	695.278	OH	a1	B01	b1	C32	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0381	695.332	OH	a1	B06	b2	C07	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0382	696.182	OH	a1	B08	b2	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0383	696.198	OH	a1	B10	b1	C12	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0384	696.205	OH	a2	B14	b2	C02	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0385	696.205	OH	a2	B11	b2	C04	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0386	696.225	OH	a2	B15	b2	C01	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0387	696.242	OH	a2	B14	b2	C22	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0388	696.242	OH	a2	B13	b2	C24	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0389	696.273	OH	a1	B02	b1	C32	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0390	696.331	OH	a2	B18	b2	C07	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0391	697.201	OH	a2	B12	b2	C04	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0392	697.201	OH	a2	B14	b2	C03	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0393	697.217	OH	a1	B07	b1	C14	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0394	697.221	OH	a1	B01	b2	C02	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0395	697.238	OH	a1	B07	b2	C33	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0396	697.251	OH	a2	B19	b2	C05	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0397	697.257	OH	a1	B05	b3	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0398	697.257	OH	a1	B05	b1	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0399	697.257	OH	a1	B03	b2	C20	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0400	697.257	OH	a1	B01	b2	C22	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0401	698.187	OH	a2	B13	b2	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0402	698.205	OH	a2	B16	b2	C01	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0403	698.216	OH	a1	B02	b2	C02	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0404	698.216	OH	a1	B01	b2	C03	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0405	698.235	OH	a2	B20	b2	C02	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0406	698.237	OH	a2	B17	b1	C30	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0407	698.252	OH	a1	B05	b1	C11	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0408	698.252	OH	a1	B02	b2	C22	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0409	698.252	OH	a1	B03	b2	C28	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0410	699.211	OH	a1	B02	b2	C03	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0411	699.230	OH	a2	B20	b2	C03	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0412	699.236	OH	a1	B06	b3	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0413	699.236	OH	a1	B06	b1	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0414	699.248	OH	a1	B05	b1	C10	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0415	699.253	OH	a1	B04	b1	C30	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0416	700.217	OH	a2	B17	b2	C20	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0417	700.217	OH	a2	B14	b2	C24	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0418	700.231	OH	a2	B19	b2	C04	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0419	700.232	OH	a1	B06	b1	C11	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0420	700.236	OH	a2	B18	b3	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0421	700.236	OH	a2	B18	b1	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0422	701.212	OH	a2	B17	b2	C28	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0423	701.216	OH	a1	B03	b2	C01	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0424	701.227	OH	a1	B06	b1	C10	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0425	701.231	OH	a2	B18	b1	C11	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0426	701.232	OH	a1	B04	b2	C20	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0427	701.232	OH	a1	B01	b2	C24	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0428	701.246	OH	a1	B09	b2	C02	c1	D01	d1	E01

2-1-m1E01-1-0429	701.283	OH	a1	B05	b1	C09	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0430	701.302	OH	a1	B07	b2	C07	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0431	702.162	OH	a2	B14	b2	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0432	702.226	OH	a2	B18	b1	C10	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0433	702.226	OH	a2	B11	b1	C13	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0434	702.227	OH	a1	B02	b2	C24	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0435	702.227	OH	a1	B04	b2	C28	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0436	702.241	OH	a1	B09	b2	C03	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0437	703.177	OH	a1	B01	b2	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0438	703.213	OH	a1	B05	b3	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0439	703.221	OH	a2	B12	b1	C13	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0440	703.262	OH	a1	B06	b1	C09	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0441	704.161	OH	a2	B11	b3	C15	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0442	704.172	OH	a1	B02	b2	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0443	704.175	OH	a2	B17	b2	C01	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0444	704.192	OH	a2	B20	b2	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0445	704.209	OH	a1	B05	b1	C12	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0446	704.230	OH	a2	B11	b3	C16	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0447	704.261	OH	a2	B18	b1	C09	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0448	704.303	OH	a2	B13	b1	C29	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0449	704.303	OH	a2	B15	b1	C32	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0450	705.156	OH	a2	B12	b3	C15	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0451	705.190	OH	a1	B04	b2	C01	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0452	705.193	OH	a1	B06	b3	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0453	705.207	OH	a1	B07	b3	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0454	705.207	OH	a1	B07	b1	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0455	705.226	OH	a2	B12	b3	C16	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0456	705.237	OH	a1	B08	b2	C05	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0457	706.188	OH	a1	B06	b1	C12	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0458	706.192	OH	a2	B18	b3	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0459	706.192	OH	a2	B11	b3	C17	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0460	706.192	OH	a2	B11	b1	C14	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0461	706.202	OH	a1	B07	b1	C11	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0462	706.246	OH	a2	B15	b2	C02	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0463	706.252	OH	a2	B19	b1	C13	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0464	706.283	OH	a2	B15	b2	C22	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0465	706.283	OH	a2	B16	b1	C32	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0466	707.187	OH	a2	B12	b3	C17	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0467	707.187	OH	a2	B18	b1	C12	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0468	707.187	OH	a2	B12	b1	C14	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0469	707.197	OH	a1	B07	b1	C10	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0470	707.203	OH	a1	B09	b2	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0471	707.220	OH	a1	B10	b2	C01	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0472	707.241	OH	a2	B15	b2	C03	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0473	707.241	OH	a2	B13	b2	C05	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0474	708.187	OH	a2	B19	b3	C15	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0475	708.217	OH	a1	B08	b2	C04	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0476	708.225	OH	a2	B16	b2	C02	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0477	708.262	OH	a2	B16	b2	C22	c3	D02	d1	E01

2-1-m1E01-1-0478	708.262	OH	a2	B13	b2	C26	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0479	708.278	OH	a2	B14	b1	C29	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0480	709.221	OH	a2	B16	b2	C03	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0481	709.232	OH	a1	B07	b1	C09	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0482	709.293	OH	a1	B05	b1	C30	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0483	709.293	OH	a1	B01	b1	C29	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0484	709.293	OH	a1	B03	b1	C32	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0485	710.217	OH	a2	B19	b1	C14	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0486	710.221	OH	a2	B13	b2	C04	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0487	710.239	OH	a2	B19	b2	C33	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0488	710.257	OH	a2	B15	b2	C24	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0489	710.277	OH	a2	B11	b2	C07	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0490	710.289	OH	a1	B02	b1	C29	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0491	711.163	OH	a1	B07	b3	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0492	711.216	OH	a2	B14	b2	C05	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0493	711.236	OH	a1	B03	b2	C02	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0494	711.273	OH	a2	B12	b2	C07	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0495	711.273	OH	a1	B05	b2	C20	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0496	711.273	OH	a1	B03	b2	C22	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0497	711.273	OH	a1	B06	b1	C30	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0498	712.159	OH	a1	B07	b1	C12	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0499	712.203	OH	a2	B15	b2	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0500	712.232	OH	a1	B03	b2	C03	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0501	712.232	OH	a1	B01	b2	C05	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0502	712.237	OH	a2	B16	b2	C24	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0503	712.237	OH	a2	B14	b2	C26	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0504	712.253	OH	a2	B17	b1	C32	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0505	712.268	OH	a1	B05	b2	C28	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0506	712.272	OH	a2	B18	b1	C30	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0507	713.227	OH	a1	B02	b2	C05	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0508	713.246	OH	a2	B20	b2	C05	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0509	713.252	OH	a1	B06	b2	C20	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0510	713.252	OH	a1	B01	b2	C26	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0511	713.268	OH	a1	B04	b1	C32	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0512	714.182	OH	a2	B16	b2	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0513	714.182	OH	a2	B11	b3	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0514	714.196	OH	a2	B17	b2	C02	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0515	714.196	OH	a2	B14	b2	C04	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0516	714.232	OH	a2	B17	b2	C22	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0517	714.237	OH	a1	B08	b1	C13	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0518	714.247	OH	a1	B02	b2	C26	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0519	714.247	OH	a1	B06	b2	C28	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0520	714.251	OH	a2	B18	b2	C20	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0521	714.303	OH	a2	B19	b2	C07	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0522	715.177	OH	a2	B12	b3	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0523	715.191	OH	a2	B17	b2	C03	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0524	715.211	OH	a1	B04	b2	C02	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0525	715.211	OH	a1	B01	b2	C04	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0526	715.231	OH	a1	B05	b2	C01	c2	D02	d1	E01

2-1-m1E01-1-0527	715.246	OH	a2	B18	b2	C28	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0528	715.248	OH	a1	B04	b2	C22	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0529	715.248	OH	a1	B03	b2	C24	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0530	716.172	OH	a1	B08	b3	C15	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0531	716.206	OH	a1	B02	b2	C04	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0532	716.206	OH	a1	B04	b2	C03	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0533	716.226	OH	a2	B20	b2	C04	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0534	716.242	OH	a2	B13	b1	C13	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0535	716.257	OH	a1	B09	b2	C05	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0536	717.193	OH	a1	B03	b2	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0537	717.210	OH	a1	B06	b2	C01	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0538	717.241	OH	a1	B10	b2	C02	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0539	717.243	OH	a1	B07	b1	C30	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0540	718.177	OH	a2	B13	b3	C15	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0541	718.203	OH	a1	B08	b1	C14	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0542	718.207	OH	a2	B19	b3	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0543	718.207	OH	a2	B19	b1	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0544	718.207	OH	a2	B11	b1	C09	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0545	718.207	OH	a2	B17	b2	C24	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0546	718.210	OH	a2	B18	b2	C01	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0547	718.224	OH	a1	B08	b2	C33	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0548	718.236	OH	a1	B10	b2	C03	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0549	718.246	OH	a2	B13	b3	C16	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0550	718.283	OH	a2	B11	b1	C31	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0551	718.319	OH	a2	B15	b1	C29	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0552	719.203	OH	a2	B12	b1	C09	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0553	719.203	OH	a2	B19	b1	C11	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0554	719.223	OH	a1	B07	b2	C20	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0555	719.223	OH	a1	B04	b2	C24	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0556	719.237	OH	a1	B09	b2	C04	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0557	719.278	OH	a2	B12	b1	C31	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0558	720.138	OH	a2	B11	b3	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0559	720.152	OH	a2	B17	b2	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0560	720.198	OH	a2	B19	b1	C10	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0561	720.208	OH	a2	B13	b3	C17	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0562	720.208	OH	a2	B13	b1	C14	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0563	720.217	OH	a2	B14	b1	C13	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0564	720.218	OH	a1	B07	b2	C28	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0565	720.298	OH	a2	B16	b1	C29	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0566	721.133	OH	a2	B12	b3	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0567	721.168	OH	a1	B04	b2	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0568	721.203	OH	a2	B11	b3	C18	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0569	721.232	OH	a1	B01	b1	C13	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0570	721.257	OH	a2	B15	b2	C05	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0571	722.152	OH	a2	B14	b3	C15	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0572	722.198	OH	a2	B12	b3	C18	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0573	722.221	OH	a2	B14	b3	C16	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0574	722.227	OH	a1	B02	b1	C13	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0575	722.233	OH	a2	B19	b1	C09	c1	D01	d1	E01

2-1-m1E01-1-0576	722.246	OH	a2	B20	b1	C13	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0577	722.277	OH	a2	B15	b2	C26	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0578	722.289	OH	a1	B08	b2	C07	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0579	723.167	OH	a1	B01	b3	C15	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0580	723.181	OH	a1	B07	b2	C01	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0581	723.197	OH	a1	B10	b2	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0582	723.236	OH	a1	B01	b3	C16	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0583	723.236	OH	a2	B16	b2	C05	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0584	723.309	OH	a1	B03	b1	C29	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0585	723.309	OH	a1	B05	b1	C32	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0586	724.162	OH	a1	B02	b3	C15	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0587	724.164	OH	a2	B19	b3	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0588	724.181	OH	a2	B20	b3	C15	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0589	724.183	OH	a2	B14	b3	C17	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0590	724.183	OH	a2	B14	b1	C14	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0591	724.232	OH	a1	B02	b3	C16	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0592	724.237	OH	a2	B15	b2	C04	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0593	724.257	OH	a2	B16	b2	C26	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0594	724.293	OH	a2	B13	b2	C07	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0595	725.159	OH	a2	B19	b1	C12	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0596	725.198	OH	a1	B01	b3	C17	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0597	725.198	OH	a1	B01	b1	C14	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0598	725.252	OH	a1	B05	b2	C02	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0599	725.257	OH	a1	B09	b1	C13	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0600	725.288	OH	a1	B05	b2	C22	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0601	725.288	OH	a1	B06	b1	C32	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0602	726.193	OH	a1	B02	b3	C17	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0603	726.193	OH	a1	B08	b3	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0604	726.193	OH	a1	B08	b1	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0605	726.193	OH	a1	B02	b1	C14	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0606	726.212	OH	a2	B20	b1	C14	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0607	726.216	OH	a2	B16	b2	C04	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0608	726.234	OH	a2	B20	b2	C33	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0609	726.247	OH	a1	B05	b2	C03	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0610	726.247	OH	a1	B03	b2	C05	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0611	726.269	OH	a2	B17	b1	C29	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0612	726.288	OH	a2	B18	b1	C32	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0613	727.188	OH	a1	B08	b1	C11	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0614	727.192	OH	a1	B09	b3	C15	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0615	727.231	OH	a1	B06	b2	C02	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0616	727.268	OH	a1	B06	b2	C22	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0617	727.268	OH	a1	B03	b2	C26	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0618	727.284	OH	a1	B04	b1	C29	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0619	728.184	OH	a1	B08	b1	C10	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0620	728.197	OH	a2	B13	b3	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0621	728.226	OH	a1	B06	b2	C03	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0622	728.230	OH	a2	B18	b2	C02	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0623	728.267	OH	a2	B18	b2	C22	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0624	728.268	OH	a2	B14	b2	C07	c2	D02	d1	E01

2-1-m1E01-1-0625	729.207	OH	a2	B17	b2	C05	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0626	729.223	OH	a1	B09	b1	C14	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0627	729.226	OH	a2	B18	b2	C03	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0628	729.227	OH	a1	B03	b2	C04	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0629	729.244	OH	a1	B09	b2	C33	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0630	729.263	OH	a1	B05	b2	C24	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0631	729.283	OH	a1	B01	b2	C07	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0632	730.219	OH	a1	B08	b1	C09	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0633	730.222	OH	a1	B04	b2	C05	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0634	730.227	OH	a2	B17	b2	C26	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0635	730.244	OH	a2	B19	b1	C30	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0636	730.257	OH	a2	B15	b1	C13	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0637	730.278	OH	a1	B02	b2	C07	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0638	730.298	OH	a2	B20	b2	C07	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0639	731.208	OH	a1	B05	b2	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0640	731.243	OH	a1	B06	b2	C24	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0641	731.243	OH	a1	B04	b2	C26	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0642	731.259	OH	a1	B07	b1	C32	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0643	732.149	OH	a1	B08	b3	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0644	732.172	OH	a2	B14	b3	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0645	732.187	OH	a2	B17	b2	C04	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0646	732.192	OH	a2	B15	b3	C15	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0647	732.223	OH	a2	B13	b1	C09	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0648	732.223	OH	a2	B19	b2	C20	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0649	732.237	OH	a2	B16	b1	C13	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0650	732.242	OH	a2	B18	b2	C24	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0651	732.252	OH	a1	B10	b2	C05	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0652	732.262	OH	a2	B15	b3	C16	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0653	732.298	OH	a2	B13	b1	C31	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0654	733.145	OH	a1	B08	b1	C12	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0655	733.188	OH	a1	B06	b2	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0656	733.188	OH	a1	B01	b3	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0657	733.202	OH	a1	B07	b2	C02	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0658	733.202	OH	a1	B04	b2	C04	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0659	733.218	OH	a2	B19	b2	C28	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0660	733.238	OH	a1	B07	b2	C22	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0661	733.309	OH	a1	B09	b2	C07	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0662	734.154	OH	a2	B13	b3	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0663	734.172	OH	a2	B16	b3	C15	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0664	734.183	OH	a1	B02	b3	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0665	734.187	OH	a2	B18	b2	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0666	734.197	OH	a1	B07	b2	C03	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0667	734.202	OH	a2	B20	b3	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0668	734.202	OH	a2	B20	b1	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0669	734.223	OH	a2	B15	b3	C17	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0670	734.223	OH	a2	B15	b1	C14	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0671	734.241	OH	a2	B16	b3	C16	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0672	735.197	OH	a2	B20	b1	C11	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0673	735.219	OH	a2	B13	b3	C18	c1	D01	d1	E01

2-1-m1E01-1-0674	735.232	OH	a1	B10	b2	C04	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0675	735.248	OH	a1	B03	b1	C13	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0676	736.181	OH	a2	B19	b2	C01	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0677	736.193	OH	a2	B20	b1	C10	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0678	736.198	OH	a2	B14	b1	C09	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0679	736.203	OH	a2	B16	b3	C17	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0680	736.203	OH	a2	B16	b1	C14	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0681	736.273	OH	a2	B14	b1	C31	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0682	737.183	OH	a1	B03	b3	C15	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0683	737.213	OH	a1	B09	b3	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0684	737.213	OH	a1	B09	b1	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0685	737.213	OH	a1	B01	b1	C09	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0686	737.213	OH	a1	B07	b2	C24	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0687	737.252	OH	a1	B03	b3	C16	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0688	737.288	OH	a1	B01	b1	C31	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0689	737.325	OH	a1	B05	b1	C29	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0690	738.129	OH	a2	B14	b3	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0691	738.207	OH	a2	B17	b1	C13	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0692	738.208	OH	a1	B02	b1	C09	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0693	738.208	OH	a1	B09	b1	C11	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0694	738.228	OH	a2	B20	b1	C09	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0695	738.229	OH	a1	B08	b1	C30	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0696	738.284	OH	a1	B02	b1	C31	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0697	738.309	OH	a2	B15	b2	C07	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0698	739.144	OH	a1	B01	b3	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0699	739.158	OH	a1	B07	b2	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0700	739.193	OH	a2	B14	b3	C18	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0701	739.204	OH	a1	B09	b1	C10	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0702	739.213	OH	a1	B03	b3	C17	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0703	739.213	OH	a1	B03	b1	C14	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0704	739.222	OH	a1	B04	b1	C13	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0705	739.304	OH	a1	B06	b1	C29	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0706	740.139	OH	a1	B02	b3	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0707	740.142	OH	a2	B17	b3	C15	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0708	740.159	OH	a2	B20	b3	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0709	740.209	OH	a1	B01	b3	C18	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0710	740.209	OH	a1	B08	b2	C20	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0711	740.212	OH	a2	B17	b3	C16	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0712	740.263	OH	a1	B05	b2	C05	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0713	740.288	OH	a2	B16	b2	C07	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0714	740.303	OH	a2	B18	b1	C29	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0715	741.154	OH	a2	B20	b1	C12	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0716	741.157	OH	a1	B04	b3	C15	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0717	741.204	OH	a1	B02	b3	C18	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0718	741.204	OH	a1	B08	b2	C28	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0719	741.227	OH	a1	B04	b3	C16	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0720	741.239	OH	a1	B09	b1	C09	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0721	741.252	OH	a1	B10	b1	C13	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0722	741.283	OH	a1	B05	b2	C26	c3	D02	d1	E01

2-1-m1E01-1-0723	742.173	OH	a2	B17	b3	C17	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0724	742.173	OH	a2	B17	b1	C14	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0725	742.213	OH	a2	B15	b3	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0726	742.242	OH	a1	B06	b2	C05	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0727	743.170	OH	a1	B09	b3	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0728	743.187	OH	a1	B10	b3	C15	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0729	743.188	OH	a1	B04	b3	C17	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0730	743.188	OH	a1	B04	b1	C14	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0731	743.241	OH	a2	B18	b2	C05	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0732	743.243	OH	a1	B05	b2	C04	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0733	743.262	OH	a1	B06	b2	C26	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0734	743.299	OH	a1	B03	b2	C07	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0735	744.165	OH	a1	B09	b1	C12	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0736	744.167	OH	a1	B08	b2	C01	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0737	744.192	OH	a2	B16	b3	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0738	744.259	OH	a2	B19	b1	C32	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0739	744.262	OH	a2	B18	b2	C26	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0740	745.218	OH	a1	B10	b1	C14	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0741	745.222	OH	a1	B06	b2	C04	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0742	745.239	OH	a1	B10	b2	C33	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0743	745.275	OH	a1	B07	b1	C29	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0744	746.202	OH	a2	B19	b2	C02	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0745	746.221	OH	a2	B18	b2	C04	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0746	746.239	OH	a2	B15	b1	C09	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0747	746.239	OH	a2	B19	b2	C22	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0748	746.239	OH	a2	B20	b1	C30	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0749	746.259	OH	a2	B17	b2	C07	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0750	746.314	OH	a2	B15	b1	C31	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0751	747.197	OH	a2	B19	b2	C03	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0752	747.203	OH	a1	B03	b3	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0753	747.274	OH	a1	B04	b2	C07	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0754	748.170	OH	a2	B15	b3	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0755	748.213	OH	a1	B07	b2	C05	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0756	748.218	OH	a2	B16	b1	C09	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0757	748.218	OH	a2	B20	b2	C20	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0758	748.293	OH	a2	B16	b1	C31	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0759	749.213	OH	a2	B20	b2	C28	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0760	749.233	OH	a1	B07	b2	C26	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0761	749.234	OH	a2	B15	b3	C18	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0762	749.249	OH	a1	B09	b1	C30	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0763	749.263	OH	a1	B05	b1	C13	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0764	749.304	OH	a1	B10	b2	C07	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0765	750.149	OH	a2	B16	b3	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0766	750.163	OH	a2	B17	b3	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0767	750.214	OH	a2	B19	b2	C24	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0768	751.178	OH	a1	B04	b3	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0769	751.192	OH	a1	B07	b2	C04	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0770	751.198	OH	a1	B05	b3	C15	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0771	751.213	OH	a2	B16	b3	C18	c1	D01	d1	E01

2-1-m1E01-1-0772	751.229	OH	a1	B03	b1	C09	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0773	751.229	OH	a1	B09	b2	C20	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0774	751.242	OH	a1	B06	b1	C13	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0775	751.268	OH	a1	B05	b3	C16	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0776	751.304	OH	a1	B03	b1	C31	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0777	752.159	OH	a2	B19	b2	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0778	752.176	OH	a2	B20	b2	C01	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0779	752.224	OH	a1	B09	b2	C28	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0780	752.242	OH	a2	B18	b1	C13	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0781	752.245	OH	a1	B08	b1	C32	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0782	753.160	OH	a1	B03	b3	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0783	753.177	OH	a1	B06	b3	C15	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0784	753.208	OH	a1	B10	b3	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0785	753.208	OH	a1	B10	b1	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0786	753.229	OH	a1	B05	b3	C17	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0787	753.229	OH	a1	B05	b1	C14	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0788	753.247	OH	a1	B06	b3	C16	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0789	754.177	OH	a2	B18	b3	C15	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0790	754.188	OH	a1	B08	b2	C02	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0791	754.188	OH	a2	B17	b1	C09	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0792	754.203	OH	a1	B10	b1	C11	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0793	754.224	OH	a1	B03	b3	C18	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0794	754.224	OH	a1	B08	b2	C22	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0795	754.246	OH	a2	B18	b3	C16	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0796	754.264	OH	a2	B17	b1	C31	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0797	755.183	OH	a1	B08	b2	C03	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0798	755.187	OH	a1	B09	b2	C01	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0799	755.199	OH	a1	B10	b1	C10	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0800	755.204	OH	a1	B04	b1	C09	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0801	755.208	OH	a1	B06	b3	C17	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0802	755.208	OH	a1	B06	b1	C14	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0803	755.279	OH	a1	B04	b1	C31	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0804	756.119	OH	a2	B17	b3	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0805	756.208	OH	a2	B18	b3	C17	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0806	756.208	OH	a2	B18	b1	C14	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0807	757.135	OH	a1	B04	b3	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0808	757.184	OH	a2	B17	b3	C18	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0809	757.213	OH	a1	B07	b1	C13	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0810	757.234	OH	a1	B10	b1	C09	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0811	757.315	OH	a1	B05	b2	C07	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0812	758.199	OH	a1	B04	b3	C18	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0813	758.199	OH	a1	B08	b2	C24	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0814	758.275	OH	a2	B19	b1	C29	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0815	759.148	OH	a1	B07	b3	C15	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0816	759.164	OH	a1	B10	b3	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0817	759.217	OH	a1	B07	b3	C16	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0818	759.294	OH	a1	B06	b2	C07	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0819	760.144	OH	a1	B08	b2	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0820	760.160	OH	a1	B10	b1	C12	c2	D02	d1	E01

2-1-m1E01-1-0821	760.254	OH	a2	B20	b1	C32	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0822	760.293	OH	a2	B18	b2	C07	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0823	761.179	OH	a1	B07	b3	C17	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0824	761.179	OH	a1	B07	b1	C14	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0825	761.213	OH	a2	B19	b2	C05	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0826	761.219	OH	a1	B05	b3	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0827	762.197	OH	a2	B20	b2	C02	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0828	762.234	OH	a2	B20	b2	C22	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0829	762.234	OH	a2	B19	b2	C26	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0830	763.192	OH	a2	B20	b2	C03	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0831	763.198	OH	a1	B06	b3	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0832	763.265	OH	a1	B09	b1	C32	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0833	764.193	OH	a2	B19	b2	C04	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0834	764.197	OH	a2	B18	b3	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0835	765.208	OH	a1	B09	b2	C02	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0836	765.244	OH	a1	B05	b1	C09	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0837	765.244	OH	a1	B09	b2	C22	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0838	765.244	OH	a1	B10	b1	C30	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0839	765.264	OH	a1	B07	b2	C07	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0840	765.320	OH	a1	B05	b1	C31	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0841	766.203	OH	a1	B09	b2	C03	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0842	766.208	OH	a2	B20	b2	C24	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0843	766.261	OH	a1	B08	b1	C29	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0844	767.175	OH	a1	B05	b3	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0845	767.224	OH	a1	B06	b1	C09	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0846	767.224	OH	a1	B10	b2	C20	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0847	767.299	OH	a1	B06	b1	C31	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0848	768.154	OH	a2	B20	b2	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0849	768.192	OH	a2	B11	b3	C16	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0850	768.219	OH	a1	B10	b2	C28	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0851	768.223	OH	a2	B18	b1	C09	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0852	768.240	OH	a1	B05	b3	C18	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0853	768.298	OH	a2	B18	b1	C31	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0854	769.155	OH	a1	B06	b3	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0855	769.169	OH	a1	B07	b3	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0856	769.188	OH	a2	B12	b3	C16	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0857	769.199	OH	a1	B08	b2	C05	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0858	769.219	OH	a1	B09	b2	C24	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0859	770.154	OH	a2	B18	b3	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0860	770.154	OH	a2	B11	b3	C17	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0861	770.213	OH	a2	B19	b1	C13	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0862	770.219	OH	a1	B06	b3	C18	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0863	770.219	OH	a1	B08	b2	C26	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0864	771.149	OH	a2	B12	b3	C17	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0865	771.164	OH	a1	B09	b2	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0866	771.182	OH	a1	B10	b2	C01	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0867	771.219	OH	a2	B18	b3	C18	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0868	772.148	OH	a2	B19	b3	C15	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0869	772.179	OH	a1	B08	b2	C04	c2	D02	d1	E01

2-1-m1E01-1-0870	772.218	OH	a2	B19	b3	C16	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0871	773.194	OH	a1	B07	b1	C09	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0872	773.269	OH	a1	B07	b1	C31	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0873	774.179	OH	a2	B19	b3	C17	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0874	774.179	OH	a2	B19	b1	C14	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0875	774.270	OH	a2	B20	b1	C29	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0876	775.125	OH	a1	B07	b3	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0877	776.190	OH	a1	B07	b3	C18	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0878	777.208	OH	a2	B20	b2	C05	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0879	777.281	OH	a1	B09	b1	C29	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0880	778.199	OH	a1	B08	b1	C13	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0881	778.228	OH	a2	B20	b2	C26	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0882	778.265	OH	a2	B19	b2	C07	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0883	779.260	OH	a1	B10	b1	C32	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0884	780.134	OH	a1	B08	b3	C15	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0885	780.188	OH	a2	B20	b2	C04	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0886	780.204	OH	a1	B08	b3	C16	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0887	780.219	OH	a1	B09	b2	C05	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0888	781.203	OH	a1	B10	b2	C02	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0889	781.239	OH	a1	B10	b2	C22	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0890	781.239	OH	a1	B09	b2	C26	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0891	782.165	OH	a1	B08	b3	C17	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0892	782.165	OH	a1	B08	b1	C14	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0893	782.169	OH	a2	B19	b3	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0894	782.198	OH	a1	B10	b2	C03	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0895	782.208	OH	a2	B13	b3	C16	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0896	783.199	OH	a1	B09	b2	C04	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0897	784.170	OH	a2	B13	b3	C17	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0898	785.165	OH	a2	B11	b3	C18	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0899	785.214	OH	a1	B10	b2	C24	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0900	786.160	OH	a2	B12	b3	C18	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0901	786.183	OH	a2	B14	b3	C16	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0902	786.195	OH	a2	B19	b1	C09	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0903	786.208	OH	a2	B20	b1	C13	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0904	786.251	OH	a1	B08	b2	C07	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0905	786.270	OH	a2	B19	b1	C31	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0906	787.159	OH	a1	B10	b2	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0907	787.198	OH	a1	B01	b3	C16	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0908	788.126	OH	a2	B19	b3	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0909	788.143	OH	a2	B20	b3	C15	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0910	788.144	OH	a2	B14	b3	C17	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0911	788.193	OH	a1	B02	b3	C16	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0912	788.213	OH	a2	B20	b3	C16	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0913	789.160	OH	a1	B01	b3	C17	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0914	789.190	OH	a2	B19	b3	C18	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0915	789.219	OH	a1	B09	b1	C13	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0916	790.155	OH	a1	B02	b3	C17	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0917	790.155	OH	a1	B08	b3	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0918	790.174	OH	a2	B20	b3	C17	c1	D01	d1	E01

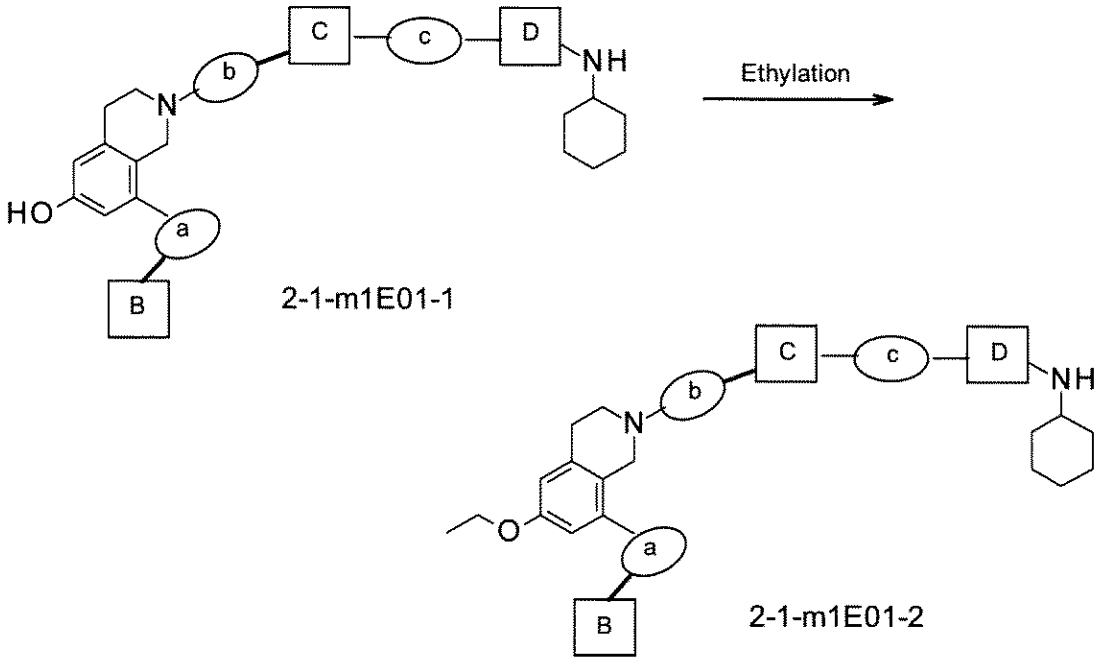
2-1-m1E01-1-0919	790.174	OH	a2	B20	b1	C14	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0920	791.154	OH	a1	B09	b3	C15	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0921	791.224	OH	a1	B09	b3	C16	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0922	793.185	OH	a1	B09	b3	C17	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0923	793.185	OH	a1	B09	b1	C14	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0924	793.276	OH	a1	B10	b1	C29	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0925	794.180	OH	a1	B08	b1	C09	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0926	794.256	OH	a1	B08	b1	C31	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0927	794.260	OH	a2	B20	b2	C07	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0928	796.111	OH	a1	B08	b3	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0929	796.214	OH	a1	B10	b2	C05	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0930	796.224	OH	a2	B15	b3	C16	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0931	797.176	OH	a1	B08	b3	C18	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0932	797.234	OH	a1	B10	b2	C26	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0933	797.271	OH	a1	B09	b2	C07	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0934	798.164	OH	a2	B20	b3	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0935	798.185	OH	a2	B15	b3	C17	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0936	798.203	OH	a2	B16	b3	C16	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0937	799.180	OH	a2	B13	b3	C18	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0938	799.194	OH	a1	B10	b2	C04	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0939	800.164	OH	a2	B16	b3	C17	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0940	801.175	OH	a1	B09	b3	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0941	801.214	OH	a1	B03	b3	C16	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0942	802.190	OH	a2	B20	b1	C09	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0943	802.265	OH	a2	B20	b1	C31	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0944	803.155	OH	a2	B14	b3	C18	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0945	803.175	OH	a1	B03	b3	C17	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0946	804.121	OH	a2	B20	b3	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0947	804.171	OH	a1	B01	b3	C18	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0948	804.174	OH	a2	B17	b3	C16	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0949	805.166	OH	a1	B02	b3	C18	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0950	805.185	OH	a2	B20	b3	C18	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0951	805.189	OH	a1	B04	b3	C16	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0952	805.200	OH	a1	B09	b1	C09	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0953	805.214	OH	a1	B10	b1	C13	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0954	805.276	OH	a1	B09	b1	C31	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0955	806.135	OH	a2	B17	b3	C17	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0956	807.131	OH	a1	B09	b3	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0957	807.149	OH	a1	B10	b3	C15	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0958	807.150	OH	a1	B04	b3	C17	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0959	807.219	OH	a1	B10	b3	C16	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0960	808.196	OH	a1	B09	b3	C18	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0961	809.180	OH	a1	B10	b3	C17	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0962	809.180	OH	a1	B10	b1	C14	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0963	813.196	OH	a2	B15	b3	C18	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0964	813.266	OH	a1	B10	b2	C07	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0965	815.175	OH	a2	B16	b3	C18	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0966	815.229	OH	a1	B05	b3	C16	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0967	817.170	OH	a1	B10	b3	C08	c2	D02	d1	E01

2-1-m1E01-1-0968	817.191	OH	a1	B05	b3	C17	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0969	817.209	OH	a1	B06	b3	C16	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0970	818.186	OH	a1	B03	b3	C18	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0971	818.208	OH	a2	B18	b3	C16	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0972	819.170	OH	a1	B06	b3	C17	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0973	820.170	OH	a2	B18	b3	C17	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0974	821.146	OH	a2	B17	b3	C18	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0975	821.195	OH	a1	B10	b1	C09	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0976	821.271	OH	a1	B10	b1	C31	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0977	822.161	OH	a1	B04	b3	C18	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0978	823.126	OH	a1	B10	b3	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0979	823.179	OH	a1	B07	b3	C16	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0980	824.191	OH	a1	B10	b3	C18	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-1-0981	825.141	OH	a1	B07	b3	C17	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0982	832.202	OH	a1	B05	b3	C18	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0983	834.181	OH	a1	B06	b3	C18	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0984	835.180	OH	a2	B18	b3	C18	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0985	836.180	OH	a2	B19	b3	C16	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0986	838.141	OH	a2	B19	b3	C17	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0987	840.152	OH	a1	B07	b3	C18	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0988	844.166	OH	a1	B08	b3	C16	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0989	846.127	OH	a1	B08	b3	C17	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0990	852.175	OH	a2	B20	b3	C16	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0991	853.152	OH	a2	B19	b3	C18	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0992	854.136	OH	a2	B20	b3	C17	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0993	855.186	OH	a1	B09	b3	C16	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0994	857.147	OH	a1	B09	b3	C17	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0995	861.138	OH	a1	B08	b3	C18	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0996	869.147	OH	a2	B20	b3	C18	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0997	871.180	OH	a1	B10	b3	C16	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0998	872.158	OH	a1	B09	b3	C18	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-0999	873.142	OH	a1	B10	b3	C17	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-1-1000	888.153	OH	a1	B10	b3	C18	c2	D02	d1	E01

【０６６４】

別途調製した混合物２－１－ｍ１Ｅ０１－１を用いてエチル化反応を行った場合の反応式を以下に例示する。

【化１１８】



【０６６５】

別途調製した混合物２－１－ｍ１Ｅ０１－１を用いて、混合物２－１－ｍ１Ｅ０１－２を以下のように合成した。

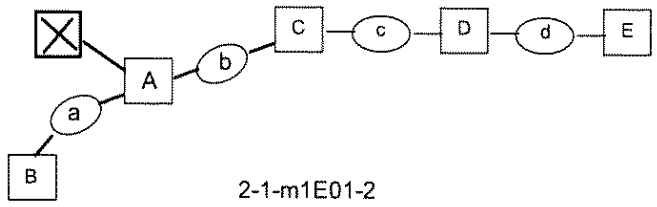
０．５－２ｍＬのマイクロウェーブ容器に入った混合物２－１－ｍ１Ｅ０１－１（９．６ｍｇ，１３．５μｍｏｌ）に、ＤＭＦ（１５４μＬ）、ＥｔＯＨ（３８．６μＬ）、ＢＴＰＰ（４１．３μＬ，０．１３５ｍｍｏｌ）とEt_3PO_4（３４．４μＬ，０．２０３ｍｍｏｌ）を加え、７０℃で２７時間振とうした。反応液をＭｅＣＮ（０．２ｍＬ）を２回使用して、ＩＳＯＬＵＴＥ（登録商標）　ＣＢＡ（０．７ｍｍｏｌ／ｇ，１８９ｍｇ）を詰めた６ｍＬのフィルター付きカラムに移した。１０分後、ＭｅＣＮ（０．５ｍＬ）で５回洗浄し、合わせたろ液を減圧留去（Ｇｅｎｅｖａｃ減圧濃縮装置を用いた）し、混合物２－１－ｍ１Ｅ０１－２を得た。混合物２－１－ｍ１Ｅ０１－２の詳細を［表６－６－４］に示す。

【０６６６】

［表６－６－４］中の表記方法について説明する。［表６－６－４］では、混合物２－１－ｍ１Ｅ０１－２に含まれうるそれぞれの化合物をＩＤで示し、混合物２－１－ｍ１Ｅ０１－２の構造におけるコアブロックとリンカーの組み合わせを記号、もしくは化学式で示している。記号と具体的構造の対応は図２に示す。［表６－６－４］において「▲×▼」は化学式で表す。

【０６６７】

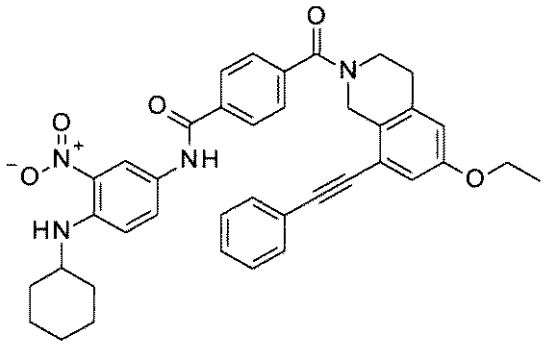
【化１１９】



【０６６８】

例えば、ＩＤが２－１－ｍ１Ｅ０１－２－０００１の場合、［表６－６－３］で下記構造式を示す。

【化１２０】



２－１－ｍ１Ｅ０１－２－０００１

【０６６９】

［表６－６－３］ＩＤ表記における化合物の構造

【表１２２】

ID	☒	a	B	b	C	c	D	d	E
2-1-m1E01-2-0001	OEt	a2	B11	b1	C08	c1	D01	d1	E01

【０６７０】

混合物２－１－ｍ１Ｅ０１－２に含まれうる化合物を［表６－６－４］に示す。

［表６－６－４］混合物２－１－ｍ１Ｅ０１－２中に含まれうる化合物

【表１２３】

ID	Exact Mass	☒	a	B	b	C	c	D	d	E
2-1-m1E01-2-0001	614.289	OEt	a2	B11	b1	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0002	615.285	OEt	a2	B12	b1	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0003	615.285	OEt	a2	B11	b1	C11	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0004	616.280	OEt	a2	B11	b1	C10	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0005	616.280	OEt	a2	B12	b1	C11	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0006	617.275	OEt	a2	B12	b1	C10	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0007	621.241	OEt	a2	B11	b1	C12	c1	D01	d1	E01

2-1-m1E01-2-0008	622.236	OEt	a2	B12	b1	C12	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0009	628.305	OEt	a2	B13	b1	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0010	629.300	OEt	a2	B13	b1	C11	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0011	630.295	OEt	a2	B13	b1	C10	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0012	632.263	OEt	a2	B11	b2	C01	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0013	632.280	OEt	a2	B14	b1	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0014	633.259	OEt	a2	B12	b2	C01	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0015	633.275	OEt	a2	B14	b1	C11	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0016	633.295	OEt	a1	B01	b1	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0017	634.270	OEt	a2	B14	b1	C10	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0018	634.290	OEt	a1	B02	b1	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0019	634.290	OEt	a1	B01	b1	C11	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0020	635.257	OEt	a2	B13	b1	C12	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0021	635.286	OEt	a1	B01	b1	C10	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0022	635.286	OEt	a1	B02	b1	C11	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0023	636.281	OEt	a1	B02	b1	C10	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0024	639.232	OEt	a2	B14	b1	C12	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0025	640.247	OEt	a1	B01	b1	C12	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0026	641.242	OEt	a1	B02	b1	C12	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0027	642.284	OEt	a2	B11	b2	C02	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0028	642.321	OEt	a2	B15	b1	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0029	643.279	OEt	a2	B12	b2	C02	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0030	643.279	OEt	a2	B11	b2	C03	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0031	643.316	OEt	a2	B15	b1	C11	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0032	644.275	OEt	a2	B12	b2	C03	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0033	644.300	OEt	a2	B16	b1	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0034	644.311	OEt	a2	B15	b1	C10	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0035	645.295	OEt	a2	B16	b1	C11	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0036	646.279	OEt	a2	B13	b2	C01	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0037	646.290	OEt	a2	B16	b1	C10	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0038	647.311	OEt	a1	B03	b1	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0039	648.241	OEt	a2	B11	b2	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0040	648.306	OEt	a1	B03	b1	C11	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0041	649.236	OEt	a2	B12	b2	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0042	649.272	OEt	a2	B15	b1	C12	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0043	649.301	OEt	a1	B03	b1	C10	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0044	650.254	OEt	a2	B14	b2	C01	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0045	650.270	OEt	a2	B17	b1	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0046	651.252	OEt	a2	B16	b1	C12	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0047	651.266	OEt	a2	B17	b1	C11	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0048	651.269	OEt	a1	B01	b2	C01	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0049	651.286	OEt	a1	B04	b1	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0050	652.261	OEt	a2	B17	b1	C10	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0051	652.265	OEt	a1	B02	b2	C01	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0052	652.281	OEt	a1	B04	b1	C11	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0053	653.276	OEt	a1	B04	b1	C10	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0054	654.262	OEt	a1	B03	b1	C12	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0055	656.300	OEt	a2	B13	b2	C02	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0056	657.222	OEt	a2	B17	b1	C12	c1	D01	d1	E01

2-1-m1E01-2-0057	657.295	OEt	a2	B13	b2	C03	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0058	657.295	OEt	a2	B11	b2	C05	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0059	658.237	OEt	a1	B04	b1	C12	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0060	658.290	OEt	a2	B12	b2	C05	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0061	660.275	OEt	a2	B14	b2	C02	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0062	660.275	OEt	a2	B11	b2	C04	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0063	660.295	OEt	a2	B15	b2	C01	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0064	661.270	OEt	a2	B12	b2	C04	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0065	661.270	OEt	a2	B14	b2	C03	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0066	661.290	OEt	a1	B01	b2	C02	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0067	661.326	OEt	a1	B05	b1	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0068	662.256	OEt	a2	B13	b2	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0069	662.274	OEt	a2	B16	b2	C01	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0070	662.285	OEt	a1	B02	b2	C02	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0071	662.285	OEt	a1	B01	b2	C03	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0072	662.322	OEt	a1	B05	b1	C11	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0073	663.281	OEt	a1	B02	b2	C03	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0074	663.306	OEt	a1	B06	b1	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0075	663.317	OEt	a1	B05	b1	C10	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0076	664.301	OEt	a1	B06	b1	C11	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0077	664.305	OEt	a2	B18	b1	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0078	665.285	OEt	a1	B03	b2	C01	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0079	665.296	OEt	a1	B06	b1	C10	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0080	665.300	OEt	a2	B18	b1	C11	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0081	666.231	OEt	a2	B14	b2	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0082	666.295	OEt	a2	B18	b1	C10	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0083	666.295	OEt	a2	B11	b1	C13	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0084	667.246	OEt	a1	B01	b2	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0085	667.291	OEt	a2	B12	b1	C13	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0086	668.230	OEt	a2	B11	b3	C15	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0087	668.242	OEt	a1	B02	b2	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0088	668.245	OEt	a2	B17	b2	C01	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0089	668.278	OEt	a1	B05	b1	C12	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0090	669.226	OEt	a2	B12	b3	C15	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0091	669.260	OEt	a1	B04	b2	C01	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0092	669.276	OEt	a1	B07	b1	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0093	670.257	OEt	a1	B06	b1	C12	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0094	670.261	OEt	a2	B11	b1	C14	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0095	670.272	OEt	a1	B07	b1	C11	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0096	670.283	OEt	a2	B11	b2	C33	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0097	670.316	OEt	a2	B15	b2	C02	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0098	671.257	OEt	a2	B18	b1	C12	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0099	671.257	OEt	a2	B12	b1	C14	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0100	671.267	OEt	a1	B07	b1	C10	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0101	671.278	OEt	a2	B12	b2	C33	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0102	671.311	OEt	a2	B15	b2	C03	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0103	671.311	OEt	a2	B13	b2	C05	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0104	672.295	OEt	a2	B16	b2	C02	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0105	673.290	OEt	a2	B16	b2	C03	c1	D01	d1	E01

2-1-m1E01-2-0106	674.290	OEt	a2	B13	b2	C04	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0107	674.347	OEt	a2	B11	b2	C07	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0108	675.286	OEt	a2	B14	b2	C05	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0109	675.306	OEt	a1	B03	b2	C02	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0110	675.342	OEt	a2	B12	b2	C07	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0111	676.228	OEt	a1	B07	b1	C12	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0112	676.272	OEt	a2	B15	b2	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0113	676.301	OEt	a1	B03	b2	C03	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0114	676.301	OEt	a1	B01	b2	C05	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0115	677.296	OEt	a1	B02	b2	C05	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0116	678.251	OEt	a2	B16	b2	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0117	678.251	OEt	a2	B11	b3	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0118	678.251	OEt	a2	B11	b1	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0119	678.265	OEt	a2	B17	b2	C02	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0120	678.265	OEt	a2	B14	b2	C04	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0121	679.246	OEt	a2	B12	b3	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0122	679.246	OEt	a2	B12	b1	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0123	679.246	OEt	a2	B11	b1	C11	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0124	679.261	OEt	a2	B17	b2	C03	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0125	679.281	OEt	a1	B04	b2	C02	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0126	679.281	OEt	a1	B01	b2	C04	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0127	679.301	OEt	a1	B05	b2	C01	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0128	680.242	OEt	a2	B11	b1	C10	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0129	680.242	OEt	a2	B12	b1	C11	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0130	680.276	OEt	a1	B02	b2	C04	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0131	680.276	OEt	a1	B04	b2	C03	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0132	680.311	OEt	a2	B13	b1	C13	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0133	681.237	OEt	a2	B12	b1	C10	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0134	681.262	OEt	a1	B03	b2	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0135	681.280	OEt	a1	B06	b2	C01	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0136	682.246	OEt	a2	B13	b3	C15	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0137	682.277	OEt	a2	B19	b1	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0138	682.277	OEt	a2	B11	b1	C09	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0139	682.279	OEt	a2	B18	b2	C01	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0140	683.272	OEt	a2	B12	b1	C09	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0141	683.272	OEt	a2	B19	b1	C11	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0142	684.208	OEt	a2	B11	b3	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0143	684.222	OEt	a2	B17	b2	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0144	684.267	OEt	a2	B19	b1	C10	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0145	684.277	OEt	a2	B13	b1	C14	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0146	684.286	OEt	a2	B14	b1	C13	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0147	684.298	OEt	a2	B13	b2	C33	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0148	685.203	OEt	a2	B12	b3	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0149	685.203	OEt	a2	B11	b1	C12	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0150	685.237	OEt	a1	B04	b2	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0151	685.301	OEt	a1	B01	b1	C13	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0152	685.326	OEt	a2	B15	b2	C05	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0153	686.198	OEt	a2	B12	b1	C12	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0154	686.221	OEt	a2	B14	b3	C15	c1	D01	d1	E01

2-1-m1E01-2-0155	686.297	OEt	a1	B02	b1	C13	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0156	687.236	OEt	a1	B01	b3	C15	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0157	687.250	OEt	a1	B07	b2	C01	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0158	687.306	OEt	a2	B16	b2	C05	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0159	688.232	OEt	a1	B02	b3	C15	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0160	688.252	OEt	a2	B14	b1	C14	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0161	688.273	OEt	a2	B14	b2	C33	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0162	688.306	OEt	a2	B15	b2	C04	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0163	688.362	OEt	a2	B13	b2	C07	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0164	689.228	OEt	a2	B19	b1	C12	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0165	689.267	OEt	a1	B01	b1	C14	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0166	689.288	OEt	a1	B01	b2	C33	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0167	689.321	OEt	a1	B05	b2	C02	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0168	690.262	OEt	a1	B08	b1	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0169	690.262	OEt	a1	B02	b1	C14	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0170	690.284	OEt	a1	B02	b2	C33	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0171	690.285	OEt	a2	B16	b2	C04	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0172	690.288	OEt	a2	B11	b1	C30	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0173	690.317	OEt	a1	B05	b2	C03	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0174	690.317	OEt	a1	B03	b2	C05	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0175	691.258	OEt	a1	B08	b1	C11	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0176	691.283	OEt	a2	B12	b1	C30	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0177	691.301	OEt	a1	B06	b2	C02	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0178	692.253	OEt	a1	B08	b1	C10	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0179	692.267	OEt	a2	B13	b3	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0180	692.267	OEt	a2	B13	b1	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0181	692.267	OEt	a2	B11	b2	C20	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0182	692.296	OEt	a1	B06	b2	C03	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0183	692.300	OEt	a2	B18	b2	C02	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0184	692.337	OEt	a2	B14	b2	C07	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0185	693.262	OEt	a2	B13	b1	C11	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0186	693.262	OEt	a2	B12	b2	C20	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0187	693.262	OEt	a2	B11	b2	C28	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0188	693.276	OEt	a2	B17	b2	C05	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0189	693.295	OEt	a2	B18	b2	C03	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0190	693.296	OEt	a1	B03	b2	C04	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0191	693.353	OEt	a1	B01	b2	C07	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0192	694.257	OEt	a2	B13	b1	C10	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0193	694.257	OEt	a2	B12	b2	C28	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0194	694.292	OEt	a1	B04	b2	C05	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0195	694.327	OEt	a2	B15	b1	C13	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0196	694.348	OEt	a1	B02	b2	C07	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0197	695.278	OEt	a1	B05	b2	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0198	696.225	OEt	a2	B11	b2	C01	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0199	696.242	OEt	a2	B14	b3	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0200	696.242	OEt	a2	B14	b1	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0201	696.256	OEt	a2	B17	b2	C04	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0202	696.262	OEt	a2	B15	b3	C15	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0203	696.292	OEt	a2	B13	b1	C09	c1	D01	d1	E01

2-1-m1E01-2-0204	696.306	OEt	a2	B16	b1	C13	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0205	697.214	OEt	a1	B08	b1	C12	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0206	697.221	OEt	a2	B12	b2	C01	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0207	697.237	OEt	a2	B14	b1	C11	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0208	697.257	OEt	a1	B06	b2	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0209	697.257	OEt	a1	B01	b3	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0210	697.257	OEt	a1	B01	b1	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0211	697.271	OEt	a1	B07	b2	C02	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0212	697.271	OEt	a1	B04	b2	C04	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0213	698.223	OEt	a2	B13	b3	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0214	698.232	OEt	a2	B14	b1	C10	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0215	698.241	OEt	a2	B16	b3	C15	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0216	698.252	OEt	a1	B02	b3	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0217	698.252	OEt	a1	B02	b1	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0218	698.252	OEt	a1	B01	b1	C11	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0219	698.256	OEt	a2	B18	b2	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0220	698.266	OEt	a1	B07	b2	C03	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0221	698.272	OEt	a2	B20	b1	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0222	698.293	OEt	a2	B15	b1	C14	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0223	698.314	OEt	a2	B15	b2	C33	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0224	699.219	OEt	a2	B13	b1	C12	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0225	699.248	OEt	a1	B01	b1	C10	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0226	699.248	OEt	a1	B02	b1	C11	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0227	699.267	OEt	a2	B20	b1	C11	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0228	699.317	OEt	a1	B03	b1	C13	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0229	700.243	OEt	a1	B02	b1	C10	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0230	700.251	OEt	a2	B19	b2	C01	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0231	700.262	OEt	a2	B20	b1	C10	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0232	700.267	OEt	a2	B14	b1	C09	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0233	700.272	OEt	a2	B16	b1	C14	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0234	700.293	OEt	a2	B16	b2	C33	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0235	701.252	OEt	a1	B03	b3	C15	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0236	701.283	OEt	a1	B09	b1	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0237	701.283	OEt	a1	B01	b1	C09	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0238	702.198	OEt	a2	B14	b3	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0239	702.277	OEt	a2	B17	b1	C13	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0240	702.278	OEt	a1	B02	b1	C09	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0241	702.278	OEt	a1	B09	b1	C11	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0242	702.378	OEt	a2	B15	b2	C07	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0243	703.193	OEt	a2	B14	b1	C12	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0244	703.213	OEt	a1	B01	b3	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0245	703.228	OEt	a1	B07	b2	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0246	703.273	OEt	a1	B09	b1	C10	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0247	703.283	OEt	a1	B03	b1	C14	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0248	703.292	OEt	a1	B04	b1	C13	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0249	703.304	OEt	a1	B03	b2	C33	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0250	704.209	OEt	a1	B02	b3	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0251	704.209	OEt	a1	B01	b1	C12	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0252	704.212	OEt	a2	B17	b3	C15	c1	D01	d1	E01

2-1-m1E01-2-0253	704.303	OEt	a2	B13	b1	C30	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0254	704.303	OEt	a2	B11	b1	C32	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0255	704.332	OEt	a1	B05	b2	C05	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0256	704.357	OEt	a2	B16	b2	C07	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0257	705.204	OEt	a1	B02	b1	C12	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0258	705.223	OEt	a2	B20	b1	C12	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0259	705.227	OEt	a1	B04	b3	C15	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0260	705.298	OEt	a2	B12	b1	C32	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0261	706.243	OEt	a2	B17	b1	C14	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0262	706.246	OEt	a2	B11	b2	C02	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0263	706.264	OEt	a2	B17	b2	C33	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0264	706.283	OEt	a2	B15	b3	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0265	706.283	OEt	a2	B15	b1	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0266	706.283	OEt	a2	B13	b2	C20	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0267	706.283	OEt	a2	B11	b2	C22	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0268	706.311	OEt	a1	B06	b2	C05	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0269	707.241	OEt	a2	B12	b2	C02	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0270	707.241	OEt	a2	B11	b2	C03	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0271	707.258	OEt	a1	B04	b1	C14	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0272	707.278	OEt	a2	B15	b1	C11	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0273	707.278	OEt	a2	B12	b2	C22	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0274	707.278	OEt	a2	B13	b2	C28	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0275	707.279	OEt	a1	B04	b2	C33	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0276	707.311	OEt	a2	B18	b2	C05	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0277	707.312	OEt	a1	B05	b2	C04	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0278	707.368	OEt	a1	B03	b2	C07	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0279	708.234	OEt	a1	B09	b1	C12	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0280	708.237	OEt	a1	B08	b2	C01	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0281	708.237	OEt	a2	B12	b2	C03	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0282	708.262	OEt	a2	B16	b3	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0283	708.262	OEt	a2	B16	b1	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0284	708.273	OEt	a2	B15	b1	C10	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0285	708.278	OEt	a2	B14	b1	C30	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0286	709.257	OEt	a2	B16	b1	C11	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0287	709.291	OEt	a1	B06	b2	C04	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0288	709.293	OEt	a1	B01	b1	C30	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0289	710.241	OEt	a2	B13	b2	C01	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0290	710.252	OEt	a2	B16	b1	C10	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0291	710.257	OEt	a2	B14	b2	C20	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0292	710.257	OEt	a2	B11	b2	C24	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0293	710.272	OEt	a2	B19	b2	C02	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0294	710.289	OEt	a1	B02	b1	C30	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0295	710.290	OEt	a2	B18	b2	C04	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0296	710.308	OEt	a2	B15	b1	C09	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0297	710.328	OEt	a2	B17	b2	C07	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0298	711.253	OEt	a2	B12	b2	C24	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0299	711.253	OEt	a2	B14	b2	C28	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0300	711.267	OEt	a2	B19	b2	C03	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0301	711.273	OEt	a1	B03	b3	C08	c1	D01	d1	E01

2-1-m1E01-2-0302	711.273	OEt	a1	B03	b1	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0303	711.273	OEt	a1	B01	b2	C20	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0304	711.343	OEt	a1	B04	b2	C07	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0305	712.203	OEt	a2	B11	b2	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0306	712.239	OEt	a2	B15	b3	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0307	712.268	OEt	a1	B03	b1	C11	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0308	712.268	OEt	a1	B02	b2	C20	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0309	712.268	OEt	a1	B01	b2	C28	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0310	712.282	OEt	a1	B07	b2	C05	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0311	712.287	OEt	a2	B16	b1	C09	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0312	713.198	OEt	a2	B12	b2	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0313	713.234	OEt	a2	B15	b1	C12	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0314	713.263	OEt	a1	B03	b1	C10	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0315	713.263	OEt	a1	B02	b2	C28	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0316	713.333	OEt	a1	B05	b1	C13	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0317	714.216	OEt	a2	B14	b2	C01	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0318	714.218	OEt	a2	B16	b3	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0319	714.232	OEt	a2	B17	b3	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0320	714.232	OEt	a2	B17	b1	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0321	715.213	OEt	a2	B16	b1	C12	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0322	715.228	OEt	a2	B17	b1	C11	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0323	715.231	OEt	a1	B01	b2	C01	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0324	715.248	OEt	a1	B04	b3	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0325	715.248	OEt	a1	B04	b1	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0326	715.262	OEt	a1	B07	b2	C04	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0327	715.268	OEt	a1	B05	b3	C15	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0328	715.298	OEt	a1	B03	b1	C09	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0329	715.312	OEt	a1	B06	b1	C13	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0330	716.223	OEt	a2	B17	b1	C10	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0331	716.226	OEt	a1	B02	b2	C01	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0332	716.228	OEt	a2	B19	b2	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0333	716.243	OEt	a1	B04	b1	C11	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0334	716.246	OEt	a2	B20	b2	C01	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0335	716.311	OEt	a2	B18	b1	C13	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0336	717.229	OEt	a1	B03	b3	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0337	717.238	OEt	a1	B04	b1	C10	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0338	717.247	OEt	a1	B06	b3	C15	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0339	717.277	OEt	a1	B10	b1	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0340	717.298	OEt	a1	B05	b1	C14	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0341	717.320	OEt	a1	B05	b2	C33	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0342	718.224	OEt	a1	B03	b1	C12	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0343	718.246	OEt	a2	B18	b3	C15	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0344	718.257	OEt	a1	B08	b2	C02	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0345	718.258	OEt	a2	B17	b1	C09	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0346	718.273	OEt	a1	B10	b1	C11	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0347	718.319	OEt	a2	B15	b1	C30	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0348	718.319	OEt	a2	B11	b1	C29	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0349	718.319	OEt	a2	B13	b1	C32	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0350	719.253	OEt	a1	B08	b2	C03	c1	D01	d1	E01

2-1-m1E01-2-0351	719.257	OEt	a1	B09	b2	C01	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0352	719.268	OEt	a1	B10	b1	C10	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0353	719.273	OEt	a1	B04	b1	C09	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0354	719.278	OEt	a1	B06	b1	C14	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0355	719.299	OEt	a1	B06	b2	C33	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0356	719.314	OEt	a2	B12	b1	C29	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0357	720.189	OEt	a2	B17	b3	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0358	720.262	OEt	a2	B13	b2	C02	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0359	720.277	OEt	a2	B18	b1	C14	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0360	720.298	OEt	a2	B15	b2	C20	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0361	720.298	OEt	a2	B13	b2	C22	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0362	720.298	OEt	a2	B16	b1	C30	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0363	720.298	OEt	a2	B18	b2	C33	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0364	721.184	OEt	a2	B17	b1	C12	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0365	721.204	OEt	a1	B04	b3	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0366	721.257	OEt	a2	B13	b2	C03	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0367	721.257	OEt	a2	B11	b2	C05	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0368	721.282	OEt	a1	B07	b1	C13	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0369	721.293	OEt	a2	B15	b2	C28	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0370	721.384	OEt	a1	B05	b2	C07	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0371	722.199	OEt	a1	B04	b1	C12	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0372	722.252	OEt	a2	B12	b2	C05	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0373	722.277	OEt	a2	B16	b2	C20	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0374	722.277	OEt	a2	B11	b2	C26	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0375	722.294	OEt	a2	B14	b1	C32	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0376	723.217	OEt	a1	B07	b3	C15	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0377	723.273	OEt	a2	B12	b2	C26	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0378	723.273	OEt	a2	B16	b2	C28	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0379	723.309	OEt	a1	B03	b1	C30	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0380	723.309	OEt	a1	B01	b1	C32	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0381	723.363	OEt	a1	B06	b2	C07	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0382	724.214	OEt	a1	B08	b2	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0383	724.229	OEt	a1	B10	b1	C12	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0384	724.237	OEt	a2	B14	b2	C02	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0385	724.237	OEt	a2	B11	b2	C04	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0386	724.257	OEt	a2	B15	b2	C01	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0387	724.273	OEt	a2	B14	b2	C22	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0388	724.273	OEt	a2	B13	b2	C24	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0389	724.304	OEt	a1	B02	b1	C32	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0390	724.362	OEt	a2	B18	b2	C07	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0391	725.232	OEt	a2	B12	b2	C04	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0392	725.232	OEt	a2	B14	b2	C03	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0393	725.248	OEt	a1	B07	b1	C14	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0394	725.252	OEt	a1	B01	b2	C02	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0395	725.269	OEt	a1	B07	b2	C33	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0396	725.283	OEt	a2	B19	b2	C05	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0397	725.288	OEt	a1	B05	b3	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0398	725.288	OEt	a1	B05	b1	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0399	725.288	OEt	a1	B03	b2	C20	c3	D02	d1	E01

2-1-m1E01-2-0400	725.288	OEt	a1	B01	b2	C22	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0401	726.218	OEt	a2	B13	b2	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0402	726.236	OEt	a2	B16	b2	C01	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0403	726.247	OEt	a1	B02	b2	C02	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0404	726.247	OEt	a1	B01	b2	C03	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0405	726.267	OEt	a2	B20	b2	C02	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0406	726.269	OEt	a2	B17	b1	C30	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0407	726.284	OEt	a1	B05	b1	C11	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0408	726.284	OEt	a1	B02	b2	C22	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0409	726.284	OEt	a1	B03	b2	C28	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0410	727.242	OEt	a1	B02	b2	C03	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0411	727.262	OEt	a2	B20	b2	C03	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0412	727.268	OEt	a1	B06	b3	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0413	727.268	OEt	a1	B06	b1	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0414	727.279	OEt	a1	B05	b1	C10	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0415	727.284	OEt	a1	B04	b1	C30	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0416	728.248	OEt	a2	B17	b2	C20	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0417	728.248	OEt	a2	B14	b2	C24	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0418	728.262	OEt	a2	B19	b2	C04	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0419	728.263	OEt	a1	B06	b1	C11	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0420	728.267	OEt	a2	B18	b3	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0421	728.267	OEt	a2	B18	b1	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0422	729.243	OEt	a2	B17	b2	C28	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0423	729.247	OEt	a1	B03	b2	C01	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0424	729.258	OEt	a1	B06	b1	C10	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0425	729.262	OEt	a2	B18	b1	C11	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0426	729.263	OEt	a1	B04	b2	C20	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0427	729.263	OEt	a1	B01	b2	C24	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0428	729.277	OEt	a1	B09	b2	C02	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0429	729.314	OEt	a1	B05	b1	C09	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0430	729.334	OEt	a1	B07	b2	C07	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0431	730.193	OEt	a2	B14	b2	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0432	730.257	OEt	a2	B18	b1	C10	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0433	730.257	OEt	a2	B11	b1	C13	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0434	730.258	OEt	a1	B02	b2	C24	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0435	730.258	OEt	a1	B04	b2	C28	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0436	730.273	OEt	a1	B09	b2	C03	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0437	731.208	OEt	a1	B01	b2	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0438	731.245	OEt	a1	B05	b3	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0439	731.253	OEt	a2	B12	b1	C13	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0440	731.293	OEt	a1	B06	b1	C09	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0441	732.192	OEt	a2	B11	b3	C15	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0442	732.204	OEt	a1	B02	b2	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0443	732.207	OEt	a2	B17	b2	C01	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0444	732.223	OEt	a2	B20	b2	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0445	732.240	OEt	a1	B05	b1	C12	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0446	732.262	OEt	a2	B11	b3	C16	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0447	732.292	OEt	a2	B18	b1	C09	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0448	732.335	OEt	a2	B13	b1	C29	c3	D02	d1	E01

2-1-m1E01-2-0449	732.335	OEt	a2	B15	b1	C32	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0450	733.188	OEt	a2	B12	b3	C15	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0451	733.222	OEt	a1	B04	b2	C01	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0452	733.224	OEt	a1	B06	b3	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0453	733.238	OEt	a1	B07	b3	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0454	733.238	OEt	a1	B07	b1	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0455	733.257	OEt	a2	B12	b3	C16	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0456	733.268	OEt	a1	B08	b2	C05	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0457	734.219	OEt	a1	B06	b1	C12	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0458	734.223	OEt	a2	B18	b3	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0459	734.223	OEt	a2	B11	b3	C17	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0460	734.223	OEt	a2	B11	b1	C14	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0461	734.233	OEt	a1	B07	b1	C11	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0462	734.277	OEt	a2	B15	b2	C02	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0463	734.283	OEt	a2	B19	b1	C13	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0464	734.314	OEt	a2	B15	b2	C22	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0465	734.314	OEt	a2	B16	b1	C32	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0466	735.219	OEt	a2	B12	b3	C17	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0467	735.219	OEt	a2	B18	b1	C12	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0468	735.219	OEt	a2	B12	b1	C14	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0469	735.229	OEt	a1	B07	b1	C10	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0470	735.234	OEt	a1	B09	b2	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0471	735.252	OEt	a1	B10	b2	C01	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0472	735.273	OEt	a2	B15	b2	C03	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0473	735.273	OEt	a2	B13	b2	C05	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0474	736.218	OEt	a2	B19	b3	C15	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0475	736.248	OEt	a1	B08	b2	C04	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0476	736.257	OEt	a2	B16	b2	C02	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0477	736.293	OEt	a2	B16	b2	C22	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0478	736.293	OEt	a2	B13	b2	C26	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0479	736.309	OEt	a2	B14	b1	C29	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0480	737.252	OEt	a2	B16	b2	C03	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0481	737.264	OEt	a1	B07	b1	C09	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0482	737.325	OEt	a1	B05	b1	C30	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0483	737.325	OEt	a1	B01	b1	C29	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0484	737.325	OEt	a1	B03	b1	C32	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0485	738.249	OEt	a2	B19	b1	C14	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0486	738.252	OEt	a2	B13	b2	C04	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0487	738.270	OEt	a2	B19	b2	C33	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0488	738.289	OEt	a2	B15	b2	C24	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0489	738.309	OEt	a2	B11	b2	C07	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0490	738.320	OEt	a1	B02	b1	C29	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0491	739.195	OEt	a1	B07	b3	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0492	739.248	OEt	a2	B14	b2	C05	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0493	739.268	OEt	a1	B03	b2	C02	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0494	739.304	OEt	a2	B12	b2	C07	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0495	739.304	OEt	a1	B05	b2	C20	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0496	739.304	OEt	a1	B03	b2	C22	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0497	739.304	OEt	a1	B06	b1	C30	c3	D02	d1	E01

2-1-m1E01-2-0498	740.190	OEt	a1	B07	b1	C12	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0499	740.234	OEt	a2	B15	b2	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0500	740.263	OEt	a1	B03	b2	C03	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0501	740.263	OEt	a1	B01	b2	C05	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0502	740.268	OEt	a2	B16	b2	C24	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0503	740.268	OEt	a2	B14	b2	C26	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0504	740.284	OEt	a2	B17	b1	C32	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0505	740.299	OEt	a1	B05	b2	C28	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0506	740.303	OEt	a2	B18	b1	C30	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0507	741.258	OEt	a1	B02	b2	C05	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0508	741.277	OEt	a2	B20	b2	C05	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0509	741.283	OEt	a1	B06	b2	C20	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0510	741.283	OEt	a1	B01	b2	C26	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0511	741.300	OEt	a1	B04	b1	C32	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0512	742.213	OEt	a2	B16	b2	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0513	742.213	OEt	a2	B11	b3	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0514	742.227	OEt	a2	B17	b2	C02	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0515	742.227	OEt	a2	B14	b2	C04	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0516	742.264	OEt	a2	B17	b2	C22	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0517	742.269	OEt	a1	B08	b1	C13	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0518	742.278	OEt	a1	B02	b2	C26	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0519	742.278	OEt	a1	B06	b2	C28	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0520	742.283	OEt	a2	B18	b2	C20	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0521	742.334	OEt	a2	B19	b2	C07	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0522	743.208	OEt	a2	B12	b3	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0523	743.223	OEt	a2	B17	b2	C03	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0524	743.243	OEt	a1	B04	b2	C02	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0525	743.243	OEt	a1	B01	b2	C04	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0526	743.262	OEt	a1	B05	b2	C01	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0527	743.278	OEt	a2	B18	b2	C28	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0528	743.279	OEt	a1	B04	b2	C22	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0529	743.279	OEt	a1	B03	b2	C24	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0530	744.204	OEt	a1	B08	b3	C15	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0531	744.238	OEt	a1	B02	b2	C04	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0532	744.238	OEt	a1	B04	b2	C03	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0533	744.257	OEt	a2	B20	b2	C04	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0534	744.273	OEt	a2	B13	b1	C13	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0535	744.288	OEt	a1	B09	b2	C05	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0536	745.224	OEt	a1	B03	b2	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0537	745.242	OEt	a1	B06	b2	C01	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0538	745.272	OEt	a1	B10	b2	C02	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0539	745.275	OEt	a1	B07	b1	C30	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0540	746.208	OEt	a2	B13	b3	C15	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0541	746.235	OEt	a1	B08	b1	C14	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0542	746.239	OEt	a2	B19	b3	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0543	746.239	OEt	a2	B19	b1	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0544	746.239	OEt	a2	B11	b1	C09	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0545	746.239	OEt	a2	B17	b2	C24	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0546	746.241	OEt	a2	B18	b2	C01	c2	D02	d1	E01

2-1-m1E01-2-0547	746.256	OEt	a1	B08	b2	C33	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0548	746.268	OEt	a1	B10	b2	C03	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0549	746.277	OEt	a2	B13	b3	C16	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0550	746.314	OEt	a2	B11	b1	C31	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0551	746.350	OEt	a2	B15	b1	C29	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0552	747.234	OEt	a2	B12	b1	C09	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0553	747.234	OEt	a2	B19	b1	C11	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0554	747.254	OEt	a1	B07	b2	C20	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0555	747.254	OEt	a1	B04	b2	C24	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0556	747.268	OEt	a1	B09	b2	C04	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0557	747.309	OEt	a2	B12	b1	C31	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0558	748.170	OEt	a2	B11	b3	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0559	748.184	OEt	a2	B17	b2	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0560	748.229	OEt	a2	B19	b1	C10	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0561	748.239	OEt	a2	B13	b3	C17	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0562	748.239	OEt	a2	B13	b1	C14	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0563	748.248	OEt	a2	B14	b1	C13	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0564	748.249	OEt	a1	B07	b2	C28	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0565	748.329	OEt	a2	B16	b1	C29	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0566	749.165	OEt	a2	B12	b3	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0567	749.199	OEt	a1	B04	b2	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0568	749.234	OEt	a2	B11	b3	C18	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0569	749.263	OEt	a1	B01	b1	C13	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0570	749.288	OEt	a2	B15	b2	C05	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0571	750.183	OEt	a2	B14	b3	C15	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0572	750.229	OEt	a2	B12	b3	C18	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0573	750.252	OEt	a2	B14	b3	C16	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0574	750.258	OEt	a1	B02	b1	C13	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0575	750.264	OEt	a2	B19	b1	C09	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0576	750.278	OEt	a2	B20	b1	C13	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0577	750.309	OEt	a2	B15	b2	C26	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0578	750.320	OEt	a1	B08	b2	C07	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0579	751.198	OEt	a1	B01	b3	C15	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0580	751.212	OEt	a1	B07	b2	C01	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0581	751.229	OEt	a1	B10	b2	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0582	751.268	OEt	a1	B01	b3	C16	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0583	751.268	OEt	a2	B16	b2	C05	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0584	751.340	OEt	a1	B03	b1	C29	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0585	751.340	OEt	a1	B05	b1	C32	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0586	752.193	OEt	a1	B02	b3	C15	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0587	752.195	OEt	a2	B19	b3	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0588	752.213	OEt	a2	B20	b3	C15	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0589	752.214	OEt	a2	B14	b3	C17	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0590	752.214	OEt	a2	B14	b1	C14	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0591	752.263	OEt	a1	B02	b3	C16	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0592	752.268	OEt	a2	B15	b2	C04	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0593	752.288	OEt	a2	B16	b2	C26	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0594	752.324	OEt	a2	B13	b2	C07	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0595	753.190	OEt	a2	B19	b1	C12	c2	D02	d1	E01

2-1-m1E01-2-0596	753.229	OEt	a1	B01	b3	C17	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0597	753.229	OEt	a1	B01	b1	C14	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0598	753.283	OEt	a1	B05	b2	C02	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0599	753.289	OEt	a1	B09	b1	C13	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0600	753.320	OEt	a1	B05	b2	C22	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0601	753.320	OEt	a1	B06	b1	C32	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0602	754.224	OEt	a1	B02	b3	C17	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0603	754.224	OEt	a1	B08	b3	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0604	754.224	OEt	a1	B08	b1	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0605	754.224	OEt	a1	B02	b1	C14	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0606	754.244	OEt	a2	B20	b1	C14	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0607	754.247	OEt	a2	B16	b2	C04	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0608	754.265	OEt	a2	B20	b2	C33	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0609	754.278	OEt	a1	B05	b2	C03	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0610	754.278	OEt	a1	B03	b2	C05	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0611	754.300	OEt	a2	B17	b1	C29	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0612	754.319	OEt	a2	B18	b1	C32	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0613	755.220	OEt	a1	B08	b1	C11	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0614	755.224	OEt	a1	B09	b3	C15	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0615	755.262	OEt	a1	B06	b2	C02	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0616	755.299	OEt	a1	B06	b2	C22	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0617	755.299	OEt	a1	B03	b2	C26	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0618	755.315	OEt	a1	B04	b1	C29	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0619	756.215	OEt	a1	B08	b1	C10	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0620	756.229	OEt	a2	B13	b3	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0621	756.258	OEt	a1	B06	b2	C03	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0622	756.262	OEt	a2	B18	b2	C02	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0623	756.298	OEt	a2	B18	b2	C22	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0624	756.299	OEt	a2	B14	b2	C07	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0625	757.238	OEt	a2	B17	b2	C05	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0626	757.255	OEt	a1	B09	b1	C14	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0627	757.257	OEt	a2	B18	b2	C03	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0628	757.258	OEt	a1	B03	b2	C04	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0629	757.276	OEt	a1	B09	b2	C33	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0630	757.295	OEt	a1	B05	b2	C24	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0631	757.315	OEt	a1	B01	b2	C07	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0632	758.250	OEt	a1	B08	b1	C09	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0633	758.253	OEt	a1	B04	b2	C05	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0634	758.259	OEt	a2	B17	b2	C26	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0635	758.275	OEt	a2	B19	b1	C30	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0636	758.289	OEt	a2	B15	b1	C13	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0637	758.310	OEt	a1	B02	b2	C07	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0638	758.329	OEt	a2	B20	b2	C07	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0639	759.240	OEt	a1	B05	b2	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0640	759.274	OEt	a1	B06	b2	C24	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0641	759.274	OEt	a1	B04	b2	C26	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0642	759.290	OEt	a1	B07	b1	C32	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0643	760.181	OEt	a1	B08	b3	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0644	760.204	OEt	a2	B14	b3	C08	c2	D02	d1	E01

2-1-m1E01-2-0645	760.218	OEt	a2	B17	b2	C04	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0646	760.224	OEt	a2	B15	b3	C15	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0647	760.254	OEt	a2	B13	b1	C09	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0648	760.254	OEt	a2	B19	b2	C20	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0649	760.268	OEt	a2	B16	b1	C13	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0650	760.273	OEt	a2	B18	b2	C24	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0651	760.283	OEt	a1	B10	b2	C05	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0652	760.293	OEt	a2	B15	b3	C16	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0653	760.329	OEt	a2	B13	b1	C31	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0654	761.176	OEt	a1	B08	b1	C12	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0655	761.219	OEt	a1	B06	b2	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0656	761.219	OEt	a1	B01	b3	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0657	761.233	OEt	a1	B07	b2	C02	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0658	761.233	OEt	a1	B04	b2	C04	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0659	761.249	OEt	a2	B19	b2	C28	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0660	761.269	OEt	a1	B07	b2	C22	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0661	761.340	OEt	a1	B09	b2	C07	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0662	762.185	OEt	a2	B13	b3	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0663	762.203	OEt	a2	B16	b3	C15	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0664	762.214	OEt	a1	B02	b3	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0665	762.218	OEt	a2	B18	b2	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0666	762.228	OEt	a1	B07	b2	C03	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0667	762.234	OEt	a2	B20	b3	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0668	762.234	OEt	a2	B20	b1	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0669	762.255	OEt	a2	B15	b3	C17	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0670	762.255	OEt	a2	B15	b1	C14	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0671	762.272	OEt	a2	B16	b3	C16	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0672	763.229	OEt	a2	B20	b1	C11	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0673	763.250	OEt	a2	B13	b3	C18	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0674	763.263	OEt	a1	B10	b2	C04	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0675	763.279	OEt	a1	B03	b1	C13	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0676	764.213	OEt	a2	B19	b2	C01	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0677	764.224	OEt	a2	B20	b1	C10	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0678	764.229	OEt	a2	B14	b1	C09	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0679	764.234	OEt	a2	B16	b3	C17	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0680	764.234	OEt	a2	B16	b1	C14	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0681	764.304	OEt	a2	B14	b1	C31	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0682	765.214	OEt	a1	B03	b3	C15	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0683	765.244	OEt	a1	B09	b3	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0684	765.244	OEt	a1	B09	b1	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0685	765.244	OEt	a1	B01	b1	C09	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0686	765.244	OEt	a1	B07	b2	C24	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0687	765.283	OEt	a1	B03	b3	C16	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0688	765.320	OEt	a1	B01	b1	C31	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0689	765.356	OEt	a1	B05	b1	C29	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0690	766.160	OEt	a2	B14	b3	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0691	766.239	OEt	a2	B17	b1	C13	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0692	766.240	OEt	a1	B02	b1	C09	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0693	766.240	OEt	a1	B09	b1	C11	c2	D02	d1	E01

2-1-m1E01-2-0694	766.259	OEt	a2	B20	b1	C09	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0695	766.261	OEt	a1	B08	b1	C30	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0696	766.315	OEt	a1	B02	b1	C31	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0697	766.340	OEt	a2	B15	b2	C07	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0698	767.175	OEt	a1	B01	b3	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0699	767.190	OEt	a1	B07	b2	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0700	767.225	OEt	a2	B14	b3	C18	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0701	767.235	OEt	a1	B09	b1	C10	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0702	767.245	OEt	a1	B03	b3	C17	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0703	767.245	OEt	a1	B03	b1	C14	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0704	767.254	OEt	a1	B04	b1	C13	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0705	767.335	OEt	a1	B06	b1	C29	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0706	768.171	OEt	a1	B02	b3	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0707	768.174	OEt	a2	B17	b3	C15	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0708	768.190	OEt	a2	B20	b3	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0709	768.240	OEt	a1	B01	b3	C18	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0710	768.240	OEt	a1	B08	b2	C20	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0711	768.243	OEt	a2	B17	b3	C16	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0712	768.294	OEt	a1	B05	b2	C05	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0713	768.319	OEt	a2	B16	b2	C07	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0714	768.335	OEt	a2	B18	b1	C29	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0715	769.185	OEt	a2	B20	b1	C12	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0716	769.189	OEt	a1	B04	b3	C15	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0717	769.235	OEt	a1	B02	b3	C18	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0718	769.235	OEt	a1	B08	b2	C28	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0719	769.258	OEt	a1	B04	b3	C16	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0720	769.270	OEt	a1	B09	b1	C09	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0721	769.284	OEt	a1	B10	b1	C13	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0722	769.315	OEt	a1	B05	b2	C26	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0723	770.204	OEt	a2	B17	b3	C17	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0724	770.204	OEt	a2	B17	b1	C14	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0725	770.244	OEt	a2	B15	b3	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0726	770.273	OEt	a1	B06	b2	C05	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0727	771.201	OEt	a1	B09	b3	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0728	771.219	OEt	a1	B10	b3	C15	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0729	771.220	OEt	a1	B04	b3	C17	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0730	771.220	OEt	a1	B04	b1	C14	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0731	771.273	OEt	a2	B18	b2	C05	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0732	771.274	OEt	a1	B05	b2	C04	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0733	771.294	OEt	a1	B06	b2	C26	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0734	771.330	OEt	a1	B03	b2	C07	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0735	772.196	OEt	a1	B09	b1	C12	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0736	772.199	OEt	a1	B08	b2	C01	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0737	772.224	OEt	a2	B16	b3	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0738	772.291	OEt	a2	B19	b1	C32	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0739	772.293	OEt	a2	B18	b2	C26	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0740	773.249	OEt	a1	B10	b1	C14	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0741	773.253	OEt	a1	B06	b2	C04	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0742	773.271	OEt	a1	B10	b2	C33	c3	D02	d1	E01

2-1-m1E01-2-0743	773.306	OEt	a1	B07	b1	C29	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0744	774.234	OEt	a2	B19	b2	C02	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0745	774.252	OEt	a2	B18	b2	C04	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0746	774.270	OEt	a2	B15	b1	C09	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0747	774.270	OEt	a2	B19	b2	C22	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0748	774.270	OEt	a2	B20	b1	C30	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0749	774.290	OEt	a2	B17	b2	C07	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0750	774.345	OEt	a2	B15	b1	C31	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0751	775.229	OEt	a2	B19	b2	C03	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0752	775.235	OEt	a1	B03	b3	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0753	775.305	OEt	a1	B04	b2	C07	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0754	776.201	OEt	a2	B15	b3	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0755	776.244	OEt	a1	B07	b2	C05	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0756	776.249	OEt	a2	B16	b1	C09	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0757	776.249	OEt	a2	B20	b2	C20	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0758	776.324	OEt	a2	B16	b1	C31	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0759	777.244	OEt	a2	B20	b2	C28	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0760	777.264	OEt	a1	B07	b2	C26	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0761	777.265	OEt	a2	B15	b3	C18	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0762	777.281	OEt	a1	B09	b1	C30	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0763	777.294	OEt	a1	B05	b1	C13	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0764	777.335	OEt	a1	B10	b2	C07	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0765	778.180	OEt	a2	B16	b3	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0766	778.194	OEt	a2	B17	b3	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0767	778.245	OEt	a2	B19	b2	C24	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0768	779.209	OEt	a1	B04	b3	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0769	779.224	OEt	a1	B07	b2	C04	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0770	779.229	OEt	a1	B05	b3	C15	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0771	779.245	OEt	a2	B16	b3	C18	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0772	779.260	OEt	a1	B03	b1	C09	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0773	779.260	OEt	a1	B09	b2	C20	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0774	779.274	OEt	a1	B06	b1	C13	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0775	779.299	OEt	a1	B05	b3	C16	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0776	779.335	OEt	a1	B03	b1	C31	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0777	780.190	OEt	a2	B19	b2	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0778	780.208	OEt	a2	B20	b2	C01	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0779	780.255	OEt	a1	B09	b2	C28	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0780	780.273	OEt	a2	B18	b1	C13	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0781	780.276	OEt	a1	B08	b1	C32	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0782	781.191	OEt	a1	B03	b3	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0783	781.209	OEt	a1	B06	b3	C15	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0784	781.239	OEt	a1	B10	b3	C08	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0785	781.239	OEt	a1	B10	b1	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0786	781.260	OEt	a1	B05	b3	C17	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0787	781.260	OEt	a1	B05	b1	C14	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0788	781.278	OEt	a1	B06	b3	C16	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0789	782.208	OEt	a2	B18	b3	C15	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0790	782.219	OEt	a1	B08	b2	C02	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0791	782.220	OEt	a2	B17	b1	C09	c2	D02	d1	E01

2-1-m1E01-2-0792	782.235	OEt	a1	B10	b1	C11	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0793	782.256	OEt	a1	B03	b3	C18	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0794	782.256	OEt	a1	B08	b2	C22	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0795	782.277	OEt	a2	B18	b3	C16	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0796	782.295	OEt	a2	B17	b1	C31	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0797	783.215	OEt	a1	B08	b2	C03	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0798	783.219	OEt	a1	B09	b2	C01	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0799	783.230	OEt	a1	B10	b1	C10	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0800	783.235	OEt	a1	B04	b1	C09	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0801	783.240	OEt	a1	B06	b3	C17	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0802	783.240	OEt	a1	B06	b1	C14	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0803	783.310	OEt	a1	B04	b1	C31	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0804	784.151	OEt	a2	B17	b3	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0805	784.239	OEt	a2	B18	b3	C17	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0806	784.239	OEt	a2	B18	b1	C14	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0807	785.166	OEt	a1	B04	b3	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0808	785.215	OEt	a2	B17	b3	C18	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0809	785.244	OEt	a1	B07	b1	C13	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0810	785.265	OEt	a1	B10	b1	C09	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0811	785.346	OEt	a1	B05	b2	C07	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0812	786.231	OEt	a1	B04	b3	C18	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0813	786.231	OEt	a1	B08	b2	C24	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0814	786.306	OEt	a2	B19	b1	C29	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0815	787.179	OEt	a1	B07	b3	C15	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0816	787.196	OEt	a1	B10	b3	C06	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0817	787.249	OEt	a1	B07	b3	C16	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0818	787.325	OEt	a1	B06	b2	C07	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0819	788.176	OEt	a1	B08	b2	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0820	788.191	OEt	a1	B10	b1	C12	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0821	788.286	OEt	a2	B20	b1	C32	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0822	788.324	OEt	a2	B18	b2	C07	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0823	789.210	OEt	a1	B07	b3	C17	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0824	789.210	OEt	a1	B07	b1	C14	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0825	789.244	OEt	a2	B19	b2	C05	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0826	789.250	OEt	a1	B05	b3	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0827	790.228	OEt	a2	B20	b2	C02	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0828	790.265	OEt	a2	B20	b2	C22	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0829	790.265	OEt	a2	B19	b2	C26	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0830	791.224	OEt	a2	B20	b2	C03	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0831	791.229	OEt	a1	B06	b3	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0832	791.296	OEt	a1	B09	b1	C32	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0833	792.224	OEt	a2	B19	b2	C04	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0834	792.229	OEt	a2	B18	b3	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0835	793.239	OEt	a1	B09	b2	C02	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0836	793.276	OEt	a1	B05	b1	C09	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0837	793.276	OEt	a1	B09	b2	C22	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0838	793.276	OEt	a1	B10	b1	C30	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0839	793.296	OEt	a1	B07	b2	C07	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0840	793.351	OEt	a1	B05	b1	C31	c3	D02	d1	E01

2-1-m1E01-2-0841	794.235	OEt	a1	B09	b2	C03	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0842	794.240	OEt	a2	B20	b2	C24	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0843	794.292	OEt	a1	B08	b1	C29	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0844	795.207	OEt	a1	B05	b3	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0845	795.255	OEt	a1	B06	b1	C09	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0846	795.255	OEt	a1	B10	b2	C20	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0847	795.330	OEt	a1	B06	b1	C31	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0848	796.185	OEt	a2	B20	b2	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0849	796.224	OEt	a2	B11	b3	C16	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0850	796.250	OEt	a1	B10	b2	C28	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0851	796.254	OEt	a2	B18	b1	C09	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0852	796.271	OEt	a1	B05	b3	C18	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0853	796.329	OEt	a2	B18	b1	C31	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0854	797.186	OEt	a1	B06	b3	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0855	797.200	OEt	a1	B07	b3	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0856	797.219	OEt	a2	B12	b3	C16	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0857	797.230	OEt	a1	B08	b2	C05	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0858	797.251	OEt	a1	B09	b2	C24	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0859	798.185	OEt	a2	B18	b3	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0860	798.185	OEt	a2	B11	b3	C17	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0861	798.245	OEt	a2	B19	b1	C13	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0862	798.251	OEt	a1	B06	b3	C18	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0863	798.251	OEt	a1	B08	b2	C26	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0864	799.180	OEt	a2	B12	b3	C17	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0865	799.196	OEt	a1	B09	b2	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0866	799.213	OEt	a1	B10	b2	C01	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0867	799.250	OEt	a2	B18	b3	C18	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0868	800.180	OEt	a2	B19	b3	C15	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0869	800.210	OEt	a1	B08	b2	C04	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0870	800.249	OEt	a2	B19	b3	C16	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0871	801.226	OEt	a1	B07	b1	C09	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0872	801.301	OEt	a1	B07	b1	C31	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0873	802.211	OEt	a2	B19	b3	C17	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0874	802.211	OEt	a2	B19	b1	C14	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0875	802.301	OEt	a2	B20	b1	C29	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0876	803.156	OEt	a1	B07	b3	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0877	804.221	OEt	a1	B07	b3	C18	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0878	805.239	OEt	a2	B20	b2	C05	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0879	805.312	OEt	a1	B09	b1	C29	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0880	806.230	OEt	a1	B08	b1	C13	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0881	806.260	OEt	a2	B20	b2	C26	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0882	806.296	OEt	a2	B19	b2	C07	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0883	807.291	OEt	a1	B10	b1	C32	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0884	808.166	OEt	a1	B08	b3	C15	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0885	808.219	OEt	a2	B20	b2	C04	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0886	808.235	OEt	a1	B08	b3	C16	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0887	808.250	OEt	a1	B09	b2	C05	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0888	809.234	OEt	a1	B10	b2	C02	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0889	809.271	OEt	a1	B10	b2	C22	c3	D02	d1	E01

2-1-m1E01-2-0890	809.271	OEt	a1	B09	b2	C26	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0891	810.196	OEt	a1	B08	b3	C17	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0892	810.196	OEt	a1	B08	b1	C14	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0893	810.200	OEt	a2	B19	b3	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0894	810.229	OEt	a1	B10	b2	C03	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0895	810.239	OEt	a2	B13	b3	C16	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0896	811.230	OEt	a1	B09	b2	C04	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0897	812.201	OEt	a2	B13	b3	C17	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0898	813.196	OEt	a2	B11	b3	C18	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0899	813.246	OEt	a1	B10	b2	C24	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0900	814.191	OEt	a2	B12	b3	C18	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0901	814.214	OEt	a2	B14	b3	C16	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0902	814.226	OEt	a2	B19	b1	C09	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0903	814.240	OEt	a2	B20	b1	C13	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0904	814.282	OEt	a1	B08	b2	C07	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0905	814.301	OEt	a2	B19	b1	C31	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0906	815.191	OEt	a1	B10	b2	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0907	815.229	OEt	a1	B01	b3	C16	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0908	816.157	OEt	a2	B19	b3	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0909	816.175	OEt	a2	B20	b3	C15	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0910	816.176	OEt	a2	B14	b3	C17	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0911	816.225	OEt	a1	B02	b3	C16	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0912	816.244	OEt	a2	B20	b3	C16	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0913	817.191	OEt	a1	B01	b3	C17	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0914	817.222	OEt	a2	B19	b3	C18	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0915	817.251	OEt	a1	B09	b1	C13	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0916	818.186	OEt	a1	B02	b3	C17	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0917	818.186	OEt	a1	B08	b3	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0918	818.206	OEt	a2	B20	b3	C17	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0919	818.206	OEt	a2	B20	b1	C14	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0920	819.186	OEt	a1	B09	b3	C15	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0921	819.255	OEt	a1	B09	b3	C16	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0922	821.216	OEt	a1	B09	b3	C17	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0923	821.216	OEt	a1	B09	b1	C14	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0924	821.307	OEt	a1	B10	b1	C29	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0925	822.212	OEt	a1	B08	b1	C09	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0926	822.287	OEt	a1	B08	b1	C31	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0927	822.291	OEt	a2	B20	b2	C07	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0928	824.143	OEt	a1	B08	b3	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0929	824.245	OEt	a1	B10	b2	C05	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0930	824.255	OEt	a2	B15	b3	C16	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0931	825.207	OEt	a1	B08	b3	C18	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0932	825.266	OEt	a1	B10	b2	C26	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0933	825.302	OEt	a1	B09	b2	C07	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0934	826.195	OEt	a2	B20	b3	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0935	826.216	OEt	a2	B15	b3	C17	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0936	826.234	OEt	a2	B16	b3	C16	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0937	827.212	OEt	a2	B13	b3	C18	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0938	827.225	OEt	a1	B10	b2	C04	c2	D02	d1	E01

2-1-m1E01-2-0939	828.196	OEt	a2	B16	b3	C17	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0940	829.206	OEt	a1	B09	b3	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0941	829.245	OEt	a1	B03	b3	C16	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0942	830.221	OEt	a2	B20	b1	C09	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0943	830.296	OEt	a2	B20	b1	C31	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0944	831.187	OEt	a2	B14	b3	C18	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0945	831.207	OEt	a1	B03	b3	C17	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0946	832.152	OEt	a2	B20	b3	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0947	832.202	OEt	a1	B01	b3	C18	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0948	832.205	OEt	a2	B17	b3	C16	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0949	833.197	OEt	a1	B02	b3	C18	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0950	833.216	OEt	a2	B20	b3	C18	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0951	833.220	OEt	a1	B04	b3	C16	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0952	833.232	OEt	a1	B09	b1	C09	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0953	833.245	OEt	a1	B10	b1	C13	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0954	833.307	OEt	a1	B09	b1	C31	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0955	834.166	OEt	a2	B17	b3	C17	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0956	835.163	OEt	a1	B09	b3	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0957	835.180	OEt	a1	B10	b3	C15	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0958	835.182	OEt	a1	B04	b3	C17	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0959	835.250	OEt	a1	B10	b3	C16	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0960	836.227	OEt	a1	B09	b3	C18	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0961	837.211	OEt	a1	B10	b3	C17	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0962	837.211	OEt	a1	B10	b1	C14	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0963	841.227	OEt	a2	B15	b3	C18	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0964	841.297	OEt	a1	B10	b2	C07	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0965	843.207	OEt	a2	B16	b3	C18	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0966	843.261	OEt	a1	B05	b3	C16	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0967	845.201	OEt	a1	B10	b3	C08	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0968	845.222	OEt	a1	B05	b3	C17	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0969	845.240	OEt	a1	B06	b3	C16	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0970	846.218	OEt	a1	B03	b3	C18	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0971	846.239	OEt	a2	B18	b3	C16	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0972	847.202	OEt	a1	B06	b3	C17	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0973	848.201	OEt	a2	B18	b3	C17	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0974	849.177	OEt	a2	B17	b3	C18	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0975	849.227	OEt	a1	B10	b1	C09	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0976	849.302	OEt	a1	B10	b1	C31	c3	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0977	850.192	OEt	a1	B04	b3	C18	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0978	851.158	OEt	a1	B10	b3	C06	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0979	851.211	OEt	a1	B07	b3	C16	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0980	852.222	OEt	a1	B10	b3	C18	c1	D01	d1	E01
2-1-m1E01-2-0981	853.172	OEt	a1	B07	b3	C17	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0982	860.233	OEt	a1	B05	b3	C18	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0983	862.212	OEt	a1	B06	b3	C18	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0984	863.212	OEt	a2	B18	b3	C18	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0985	864.211	OEt	a2	B19	b3	C16	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0986	866.173	OEt	a2	B19	b3	C17	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0987	868.183	OEt	a1	B07	b3	C18	c2	D02	d1	E01

2-1-m1E01-2-0988	872.197	OEt	a1	B08	b3	C16	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0989	874.158	OEt	a1	B08	b3	C17	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0990	880.206	OEt	a2	B20	b3	C16	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0991	881.183	OEt	a2	B19	b3	C18	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0992	882.167	OEt	a2	B20	b3	C17	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0993	883.217	OEt	a1	B09	b3	C16	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0994	885.178	OEt	a1	B09	b3	C17	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0995	889.169	OEt	a1	B08	b3	C18	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0996	897.178	OEt	a2	B20	b3	C18	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0997	899.212	OEt	a1	B10	b3	C16	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0998	900.189	OEt	a1	B09	b3	C18	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-0999	901.173	OEt	a1	B10	b3	C17	c2	D02	d1	E01
2-1-m1E01-2-1000	916.184	OEt	a1	B10	b3	C18	c2	D02	d1	E01

【０６７１】

実施例６－７：混合物の分析

実施例６－６にて合成した混合物は、以下に示す分析条件により保持時間の測定と質量分析を実施し、Ｃｏｍｐｏｕｎｄ Ｄｉｓｃｏｖｅｒｅｒ ３．２（Ｔｈｅｒｍｏ Ｆｉｓｈｅｒ Ｓｃｉｅｎｔｉｆｉｃ）を用いて解析した。

【０６７２】

逆相ＬＣ／ＭＳ条件

【表１２４】

Ｖａｎｑｕｉｓｈ ＵＨＰＬＣ （Ｔｈｅｒｍｏ Ｆｉｓｈｅｒ Ｓｃｉｅｎｔｉｆｉｃ）	
Ｏｖｅｎ（℃）	３５
Ｃｏｌｕｍｎ	Ａｓｃｅｎｔｉｓ Ｅｘｐｒｅｓｓ Ｃ１８ ２．１ｍｍＩ．Ｄ．ｘ１５０ｍｍ，２．７μｍ
Ａｕｔｏ Ｓａｍｐｌｅｒ（℃）	２０
移動相	Ａ）０．１％ＦＡ H_2O Ｂ）０．１％ＦＡ ＭｅＣＮ
勾配	Ａ／Ｂ ＝ ９５／５ → ０／１００（１８ｍｉｎ） → ０／１００（２０ｍｉｎ）
流速	０．５ ｍＬ／ｍｉｎ
Ｏｒｂｉｔｒａｐ Ｆｕｓｉｏｎ Ｌｕｍｏｓ Ｔｒｉｂｒｉｄ 質量分析計（Ｔｈｅｒｍｏ Ｆｉｓｈｅｒ Ｓｃｉｅｎｔｉｆｉｃ）	
Ｐｏｌａｒｉｔｙ	Ｐｏｓｉｔｉｖｅ ／ Ｎｅｇａｔｉｖｅ ｍｏｄｅ
Ｄａｔａ Ｔｙｐｅ	ｐｒｏｆｉｌｅ

各混合物の分析結果について［表６－７－１］に示す。

【０６７３】

［表６－７－１］混合物２－１－ｍ１Ｅ０１－２中に含まれうる化合物

【表１２５】

イオン種	m/z $[M+H]^+$ or $[M-H]^-$	MSピークの保持時間 (min)	帰属された化合物の番号 ２－１－ｍ１Ｅ０１－２-を省略して記載
M+H	615.296	17.252	0001
M+H	616.2912	15.766	0002, 0003
M+H	616.2921	16.748	0002, 0003
M+H	617.2864	14.961	0004, 0005
M+H	617.2868	18.132	0004, 0005
M+H	618.2826	16.819	0006
M+H	622.2482	17.910	0007
M+H	623.2421	16.535	0008
M+H	629.3113	17.654	0009
M+H	630.3073	12.138	0010
M+H	631.3014	10.986	0011
M+H	633.2696	16.026	0012
M+H	633.2874	17.173	0013
M+H	634.2657	14.144	0014
M+H	634.2827	16.799	0015
M+H	634.3017	14.716	0016
M+H	635.2768	10.625	0017
M+H	635.2972	13.588	0018, 0019
M+H	635.2966	11.635	0018, 0019
M+H	636.2633	18.390	0020
M+H	636.2922	10.398	0021, 0022
M+H	636.2939	15.822	0021, 0022
M+H	637.2877	13.021	0023
M+H	640.2389	17.848	0024
M+H	641.2543	15.133	0025
M+H	642.2482	12.183	0026
M+H	643.2916	15.790	0027
M+H	643.3284	17.979	0028
M+H	644.2869	14.099	0029, 0030
M+H	644.2863	10.186	0029, 0030
M+H	644.3225	12.769	0031
M+H	645.2822	14.271	0032
M+H	645.3079	17.164	0033
M+H	645.3181	18.758	0034
M+H	646.3018	16.677	0035
M+H	647.2863	16.484	0036
M+H	647.2980	17.961	0037
M+H	648.3182	15.069	0038
M+H	649.2470	16.224	0039
M+H	649.3133	14.027	0040
M+H	650.2432	14.670	0041
M+H	650.2805	17.141	0042
M+H	650.3084	14.535	0043
M+H	651.2604	15.993	0044
M+H	651.2754	13.334	0045

M+H	652.2584	17.776	0046
M+H	652.2725	17.059	0047, 0048
M-H	650.2586	13.796	0047, 0048
M+H	652.2942	11.170	0049
M+H	653.2672	18.198	0050, 0051
M+H	653.2714	10.600	0050, 0051
M+H	653.2870	12.907	0052
M+H	654.2846	15.820	0053
M+H	655.2689	15.546	0054
M+H	657.3065	16.333	0055
M+H	658.2298	18.013	0056
M+H	658.3021	15.741	0057, 0058
M+H	658.3018	10.667	0057, 0058
M+H	659.2446	15.226	0059
M+H	659.2972	14.033	0060
M+H	661.2812	15.924	0061, 0062
M-H	659.2634	15.849	0061, 0062
M+H	661.3017	16.974	0063
M+H	662.2762	10.328	0064, 0065
M+H	662.2770	16.194	0064, 0065
M+H	662.2968	13.437	0066
M+H	662.3338	15.595	0067
M+H	663.2626	16.704	0068
M+H	663.2819	15.859	0069
M+H	663.2916	10.306	0070, 0071
M+H	663.2923	13.796	0070, 0071
M+H	663.3294	14.603	0072
M+H	664.2873	10.637	0073
M+H	664.3120	14.447	0074
M+H	664.3239	12.308	0075
M+H	665.3080	13.566	0076, 0077
M+H	665.3110	17.998	0076, 0077
M+H	666.2917	14.217	0078
M+H	666.3020	15.686	0079
M+H	666.3076	17.731	0079, 0080
M+H	667.2388	14.082	0081
M+H	667.3013	16.569	0082, 0083
M+H	667.3013	16.594	0082, 0083
M+H	668.2530	13.582	0084
M+H	668.2970	14.635	0085
M+H	669.2384	13.926	0086
M+H	669.2485	14.546	0087, 0088
M+H	669.2487	10.568	0087, 0088
M+H	669.2851	15.997	0089
M+H	670.2323	14.607	0090
M+H	670.2656	13.856	0091
M+H	670.2842	15.407	0092
M+H	671.2639	15.095	0093, 0094

M+H	671.2684	17.988	0093, 0094
M+H	671.2786	14.526	0095
M+H	671.2910	15.790	0096
M+H	671.3243	16.814	0097
M+H	672.2627	12.732	0098, 0099
M+H	672.2628	16.856	0098, 0099
M+H	672.2729	16.489	0100
M+H	672.2849	14.072	0101
M+H	672.3176	11.310	0102, 0103
M+H	672.3175	13.583	0102, 0103
M+H	673.3029	15.751	0104
M+H	674.2962	15.999	0105
M+H	675.2965	14.262	0106
M+H	675.3538	16.332	0107
M+H	676.2940	15.826	0108
M-H	674.2946	13.847	0109
M+H	676.3491	14.582	0110
M+H	677.2358	15.817	0111
M+H	677.2772	16.134	0112
M+H	677.3075	14.248	0113, 0114
M+H	677.3075	13.062	0113, 0114
M+H	678.3022	9.947	0115
M+H	679.2574	15.081	0116, 0117, 0118
M+H	679.2573	15.165	0116, 0117, 0118
M+H	679.2596	16.594	0116, 0117, 0118
M+H	679.2701	16.073	0119, 0120
M+H	679.2731	2.379	0119, 0120
M+H	680.2530	14.950	0121, 0122, 0123
M+H	680.2530	15.078	0121, 0122, 0123
M+H	680.2530	13.453	0121, 0122, 0123
M+H	680.2675	16.368	0124
M+H	680.2869	13.492	0125, 0126
M-H	678.2699	13.449	0125, 0126
M+H	680.3065	14.758	0127
M+H	681.2487	14.493	0128, 0129
M+H	681.2481	13.177	0128, 0129
M+H	681.2833	13.846	0130, 0131
M+H	681.2822	13.901	0130, 0131
M+H	681.3201	14.149	0132
M+H	682.2435	15.823	0133
M-H	680.2510	13.985	0134
M+H	682.2901	11.290	0135
M+H	683.2554	14.695	0136
M+H	683.2838	17.684	0137, 0138, 0139
M+H	683.2836	17.160	0137, 0138, 0139
M+H	683.2847	16.868	0137, 0138, 0139
M+H	684.2792	15.811	0140, 0141
M+H	684.2795	15.767	0140, 0141

M+H	685.2129	16.678	0142
M+H	685.2271	16.444	0143
M+H	685.2738	8.939	0144
M+H	685.2839	15.221	0145
M+H	685.2918	16.595	0146
M+H	685.3038	9.451	0147
M+H	686.2109	17.173	0148, 0149
M+H	686.2109	17.107	0148, 0149
M+H	686.2434	13.604	0150
M-H	684.2905	13.503	0151
M+H	686.3343	16.646	0152
M+H	687.2043	15.619	0153
M+H	687.2293	16.187	0154
M+H	687.3029	10.301	0155
M+H	688.2431	14.248	0156
M+H	688.2569	14.352	0157
M+H	688.3120	15.403	0158
M+H	689.2379	11.167	0159
M+H	689.2601	14.356	0160
M+H	689.2813	15.715	0161
M+H	689.3134	17.270	0162
M+H	689.3712	16.897	0163
M+H	690.2344	18.258	0164
M+H	690.2734	15.547	0165
M-H	688.2785	13.425	0166
M+H	690.3284	14.340	0167
M+H	691.2687	12.811	0168, 0169
M+H	691.2681	15.483	0168, 0169
M+H	691.2904	10.453	0170, 0171, 0172
M-H	689.2794	13.125	0170, 0171, 0172
M+H	691.2948	17.722	0170, 0171, 0172
M+H	691.3237	13.408	0173, 0174
M+H	691.3234	12.201	0173, 0174
M+H	692.2646	14.927	0175
M+H	692.2908	16.486	0176
M+H	692.3085	13.956	0177
M+H	693.2600	16.515	0178
M+H	693.2743	17.054	0179, 0180, 0181
M+H	693.2733	15.497	0179, 0180, 0181
M+H	693.2743	17.102	0179, 0180, 0181
M+H	693.3040	13.798	0182, 0183
M+H	693.3059	16.228	0182, 0183
M+H	693.3435	16.356	0184
M+H	694.2689	13.800	0185, 0186, 0187
M+H	694.2700	16.750	0185, 0186, 0187
M+H	694.2706	15.463	0185, 0186, 0187
M+H	694.2823	15.936	0188
M+H	694.3036	13.571	0189, 0190

M+H	694.3031	17.047	0189, 0190
M+H	694.3589	13.823	0191
M+H	695.2660	13.996	0192, 0193
M+H	695.2630	17.693	0192, 0193
M+H	695.2985	13.067	0194
M+H	695.3333	17.611	0195
M-H	693.3377	10.705	0196
M+H	696.2845	14.428	0197
M+H	697.2343	13.973	0198
M+H	697.2486	15.229	0199, 0200
M+H	697.2476	16.563	0199, 0200
M+H	697.2627	17.796	0201
M+H	697.2706	15.025	0202
M+H	697.2985	17.528	0203
M+H	697.3126	16.663	0204
M+H	698.2205	16.015	0205
M+H	698.2275	13.881	0206
M+H	698.2435	13.373	0207
M+H	698.2638	12.925	0208, 0209, 0210
M+H	698.2634	14.362	0208, 0209, 0210
M+H	698.2653	14.127	0208, 0209, 0210
M+H	698.2781	14.027	0211, 0212
M+H	698.2781	14.069	0211, 0212
M-H	697.2124	17.068	0213
M+H	699.2424	14.531	0214
M-H	697.2318	16.580	0215
M+H	699.2587	12.608	0216, 0217, 0218, 0219
M+H	699.2588	11.244	0216, 0217, 0218, 0219
M+H	699.2587	9.851	0216, 0217, 0218, 0219
M+H	699.2669	13.021	0219
M+H	699.2733	14.418	0220
M+H	699.2783	17.769	0220, 0221
M+H	699.3013	10.955	0222
M+H	699.3213	16.740	0223
M+H	700.2244	17.595	0224
M+H	700.2543	10.169	0225, 0226
M+H	700.2543	9.464	0225, 0226
M+H	700.2734	13.050	0227
M+H	700.3243	13.946	0228
M+H	701.2531	10.868	0229
M-H	699.2390	16.637	0229, 0230
M+H	701.2687	12.129	0231
M+H	701.2749	17.155	0232, 0233
M+H	701.2785	17.912	0232, 0233
M+H	701.2996	15.737	0234
M+H	702.2612	14.657	0235
M+H	702.2888	14.967	0236, 0237
M+H	702.2897	15.613	0236, 0237

M-H	701.1874	16.714	0238
M+H	703.2843	12.256	0239, 0240, 0241
M+H	703.2849	14.850	0239, 0240, 0241
M+H	703.2844	14.883	0239, 0240, 0241
M+H	703.3860	17.262	0242
M+H	704.1995	17.107	0243
M+H	704.2211	14.523	0244
M+H	704.2346	14.264	0245
M+H	704.2786	16.543	0246
M+H	704.2886	15.991	0247
M+H	704.2981	13.701	0248
M+H	704.3115	13.846	0249
M-H	703.1988	11.622	0250, 0251, 0252
M+H	705.2171	14.625	0250, 0251, 0252
M+H	705.2155	11.715	0250, 0251, 0252
M+H	705.3087	16.694	0253, 0254
M+H	705.3087	16.784	0253, 0254
M+H	705.3397	13.554	0255
M+H	705.3663	16.330	0256
M+H	706.2104	10.956	0257
M+H	706.2299	18.390	0258, 0259
M+H	706.2354	13.995	0258, 0259
M+H	706.3045	16.547	0260
M+H	707.2516	15.395	0261, 0262
M+H	707.2516	15.294	0261, 0262
M+H	707.2741	17.594	0263
M+H	707.2911	17.449	0264, 0265, 0266, 0267
M+H	707.2881	16.055	0264, 0265, 0266, 0267
M+H	707.2897	17.413	0264, 0265, 0266, 0267
M+H	707.2879	16.206	0264, 0265, 0266, 0267
M+H	707.3182	11.515	0268
M+H	708.2480	13.674	0269, 0270
M-H	706.2298	13.629	0269, 0270
M+H	708.2653	18.019	0271
M+H	708.2852	13.494	0272, 0273, 0274, 0275
M+H	708.2852	13.537	0272, 0273, 0274, 0275
M+H	708.2859	17.166	0272, 0273, 0274, 0275
M+H	708.2873	17.218	0272, 0273, 0274, 0275
M+H	708.3194	13.928	0276, 0277
M+H	708.3178	16.569	0276, 0277
M+H	708.3748	14.255	0278
M+H	709.2434	13.528	0279, 0280, 0281
M+H	709.2432	13.569	0279, 0280, 0281
M-H	707.2259	14.241	0279, 0280, 0281
M+H	709.2676	15.627	0282, 0283
M+H	709.2687	14.726	0282, 0283
M+H	709.2805	17.954	0284, 0285
M+H	709.2828	13.904	0284, 0285

M+H	710.2636	12.816	0286
M+H	710.3007	15.085	0287, 0288
M+H	710.3022	14.517	0287, 0288
M+H	711.2483	16.326	0289
M-H	709.2454	15.742	0290, 0291, 0292
M+H	711.2646	15.742	0291, 0292
M-H	709.2508	12.898	0291, 0292
M+H	711.2766	16.534	0293
M+H	711.2934	12.273	0294, 0295
M+H	711.2990	18.595	0294, 0295
M+H	711.3161	17.849	0296
M+H	711.3362	16.640	0297
M+H	712.2599	14.412	0298, 0299
M+H	712.2599	14.325	0298, 0299
M+H	712.2738	11.572	0300
M+H	712.2792	13.192	0301, 0302, 0303
M+H	712.2792	13.352	0301, 0302, 0303
M+H	712.2792	14.747	0301, 0302, 0303
M+H	712.3493	13.884	0304
M+H	713.2098	16.385	0305
M+H	713.2474	17.450	0306
M+H	713.2754	13.032	0307, 0308, 0309
M+H	713.2745	10.103	0307, 0308, 0309
M+H	713.2754	13.996	0307, 0308, 0309
M+H	713.2878	13.784	0310
M+H	713.2943	17.098	0310, 0311
M+H	714.2041	14.526	0312
M+H	714.2429	17.907	0313
M+H	714.2722	15.223	0314, 0315
M-H	712.2583	13.969	0314, 0315
M+H	714.3410	14.507	0316
M+H	715.2215	15.885	0317, 0318
M-H	713.2116	12.964	0317, 0318
M+H	715.2381	15.275	0319, 0320
M+H	715.2381	15.497	0319, 0320
M+H	716.2211	17.039	0321
M+H	716.2343	15.350	0322, 0323
M-H	714.2205	13.541	0322, 0323
M+H	716.2538	12.974	0324, 0325
M+H	716.2537	13.237	0324, 0325
M+H	716.2684	8.983	0326
M+H	716.2740	15.130	0326, 0327
M-H	714.2864	15.382	0328
M+H	716.3175	13.502	0329
M+H	717.2300	17.430	0330, 0331
M+H	717.2330	10.061	0330, 0331, 0332
M+H	717.2378	16.858	0331, 0332
M+H	717.2490	13.557	0333, 0334

M+H	717.2500	10.113	0333, 0334
M+H	717.3182	17.724	0335
M+H	718.2356	14.959	0336
M+H	718.2480	12.040	0337
M+H	718.2521	13.501	0338
M+H	718.2837	15.700	0339
M+H	718.3066	16.343	0340
M+H	718.3261	14.398	0341
M+H	719.2317	8.899	0342
M+H	719.2517	10.127	0343
M+H	719.2660	14.040	0344, 0345
M-H	717.2462	14.063	0344, 0345
M+H	719.2804	14.865	0346
M+H	719.3294	13.604	0347, 0348, 0349
M+H	719.3256	18.075	0347, 0348, 0349
M+H	719.3256	18.127	0347, 0348, 0349
M+H	720.2588	14.346	0350
M+H	720.2630	14.736	0350, 0351
M+H	720.2733	16.649	0352
M+H	720.2793	14.956	0352, 0353
M+H	720.2840	10.845	0353, 0354
M+H	720.3050	13.477	0355
M+H	720.3205	11.236	0356
M-H	719.1770	16.865	0357
M-H	719.2514	15.916	0358
M+H	721.2808	18.693	0359
M+H	721.3045	17.653	0360, 0361, 0362, 0363
M+H	721.3036	16.492	0360, 0361, 0362, 0363
M+H	721.3039	16.569	0360, 0361, 0362, 0363
M+H	721.3048	16.695	0360, 0361, 0362, 0363
M+H	722.1923	17.233	0364
M+H	722.2112	14.633	0365
M+H	722.2631	15.443	0366, 0367
M+H	722.2627	15.371	0366, 0367
M+H	722.2902	14.358	0368
M+H	722.3000	13.524	0369
M+H	722.3900	14.747	0370
M+H	723.2097	13.742	0371
M+H	723.2605	15.347	0372
M+H	723.2853	15.260	0373, 0374
M-H	721.2659	15.276	0373, 0374
M+H	723.3009	17.688	0375
M+H	724.2233	14.834	0376
M+H	724.2829	13.863	0377, 0378
M+H	724.2797	13.903	0377, 0378
M+H	724.3132	14.323	0379, 0380
M+H	724.3141	14.270	0379, 0380
M+H	724.3702	13.802	0381

M+H	725.2208	14.278	0382
M+H	725.2352	16.106	0383
M+H	725.2420	15.453	0384, 0385
M+H	725.2419	15.349	0384, 0385
M+H	725.2646	14.003	0386
M+H	725.2802	16.128	0387, 0388
M-H	723.2628	16.223	0387, 0388
M+H	725.3143	18.853	0389
M+H	725.3686	17.330	0390
M+H	726.2389	14.366	0391, 0392
M+H	726.2380	14.411	0391, 0392
M+H	726.2588	13.165	0393, 0394
M-H	724.2419	13.209	0393, 0394
M+H	726.2758	14.652	0395
M+H	726.2877	16.453	0396
M+H	726.2950	13.565	0397, 0398, 0399, 0400
M+H	726.2953	15.212	0397, 0398, 0399, 0400
M+H	726.2948	13.834	0397, 0398, 0399, 0400
M+H	726.2945	13.880	0396, 0397, 0398, 0399, 0400
M+H	727.2255	16.932	0401
M+H	727.2434	15.737	0402
M+H	727.2540	10.096	0403, 0404
M-H	725.2375	13.420	0403, 0404
M+H	727.2734	16.672	0405, 0406
M+H	727.2761	17.909	0405, 0406
M+H	727.2904	14.418	0407, 0408, 0409
M+H	727.2901	13.125	0407, 0408, 0409
M+H	727.2913	14.451	0407, 0408, 0409
M+H	728.2488	10.359	0410
M+H	728.2685	11.665	0411
M+H	728.2741	12.900	0412, 0413
M+H	728.2732	12.954	0411, 0412, 0413
M+H	728.2853	12.188	0414
M+H	728.2935	13.526	0415
M+H	729.2557	15.829	0416, 0417
M+H	729.2581	11.289	0416, 0417
M+H	729.2700	9.768	0418, 0419, 0420, 0421
M+H	729.2690	13.441	0418, 0419
M-H	727.2549	16.170	0418, 0419, 0420, 0421
M-H	727.2549	16.105	0418, 0419, 0420, 0421
M-H	728.2362	13.935	0422, 0423
M-H	728.2366	13.971	0422, 0423
M-H	728.2524	13.644	0424, 0425, 0426, 0427
M+H	730.2704	13.613	0424, 0425, 0426, 0427
M+H	730.2700	13.708	0424, 0425, 0426, 0427
M+H	730.2703	13.269	0424, 0425, 0426, 0427
M-H	728.2659	14.445	0428
M+H	730.3214	15.185	0429

M+H	730.3416	14.510	0430
M+H	731.2004	16.421	0431
M+H	731.2647	16.133	0432, 0433, 0434, 0435
M+H	731.2645	10.859	0432, 0433, 0434, 0435
M+H	731.2671	13.380	0432, 0433, 0434, 0435
M+H	731.2631	6.320	0432, 0433, 0434, 0435
M+H	731.2786	14.803	0436
M+H	732.2147	13.681	0437
M+H	732.2504	15.396	0438
M+H	732.2591	13.978	0439
M+H	732.2985	14.968	0440
M+H	733.1993	11.693	0441
M-H	731.1942	16.055	0442, 0443
M+H	733.2103	10.189	0442, 0443
M+H	733.2305	17.026	0444
M+H	733.2472	13.325	0445
M+H	733.2678	14.196	0446
M+H	733.3007	9.881	0447
M+H	733.3402	18.362	0448, 0449
M+H	733.3415	18.427	0448, 0449
M+H	734.1941	14.441	0450
M+H	734.2293	13.610	0451, 0452
M-H	732.2123	13.650	0451, 0452
M-H	732.2290	13.330	0453, 0454
M+H	734.2454	13.271	0453, 0454
M+H	734.2632	16.112	0455
M+H	734.2748	13.716	0456
M-H	733.2118	17.524	0457, 0458, 0459, 0460
M-H	733.2185	11.388	0458, 0459, 0460
M+H	735.2296	17.475	0457, 0458, 0459, 0460
M+H	735.2313	17.142	0457, 0458, 0459, 0460
M+H	735.2408	12.623	0461
M+H	735.2849	16.408	0462
M+H	735.2908	17.223	0463
M+H	735.3204	17.604	0464, 0465
M+H	735.3204	17.678	0464, 0465
M+H	736.2244	16.201	0466, 0467, 0468
M+H	736.2243	16.143	0466, 0467, 0468
M+H	736.2257	16.347	0466, 0467, 0468
M+H	736.2346	15.355	0469
M+H	736.2397	14.557	0469, 0470
M+H	736.2576	14.797	0471
M+H	736.2782	13.662	0472, 0473
M+H	736.2786	15.997	0472, 0473
M-H	735.2092	16.392	0474
M+H	737.2553	11.128	0475
M+H	737.2644	15.365	0476
M+H	737.3003	15.795	0477, 0478

M+H	737.3003	15.733	0477, 0478
M+H	737.3170	17.997	0479
M+H	738.2605	15.261	0480
M+H	738.2694	15.550	0481
M+H	738.3312	10.684	0482, 0483, 0484
M+H	738.3316	15.542	0482, 0483, 0484
M+H	738.3316	15.493	0482, 0483, 0484
M+H	739.2541	18.354	0485
M-H	737.2414	16.003	0485, 0486
M+H	739.2766	16.481	0487
M+H	739.2964	16.793	0488
M-H	737.2974	15.726	0489
M+H	739.3244	12.897	0490
M+H	740.2006	15.136	0491
M+H	740.2550	15.520	0492
M-H	738.2565	13.670	0493
M+H	740.3115	14.031	0494, 0495, 0496, 0497
M+H	740.3114	14.119	0494, 0495, 0496, 0497
M+H	740.3104	14.905	0494, 0495, 0496, 0497
M+H	740.3121	13.952	0494, 0495, 0496, 0497
M+H	741.1997	15.198	0498
M+H	741.2407	17.352	0499
M+H	741.2687	12.877	0500, 0501
M+H	741.2691	13.810	0500, 0501
M+H	741.2752	10.341	0502, 0503
M-H	739.2593	13.762	0500, 0501, 0502, 0503
M+H	741.2914	17.909	0504
M+H	741.3062	8.210	0505, 0506
M-H	739.2960	14.325	0506
M+H	742.2646	9.904	0507
M+H	742.2827	16.586	0508
M+H	742.2901	13.341	0509, 0510
M+H	742.2897	13.387	0509, 0510
M+H	742.3076	15.245	0511
M-H	741.2016	16.465	0512, 0513
M-H	741.2018	16.270	0512, 0513
M+H	743.2332	15.480	0514, 0515
M+H	743.2333	15.726	0514, 0515
M+H	743.2734	13.744	0516, 0517
M+H	743.2791	11.274	0517
M-H	741.2699	16.506	0518, 0519, 0520
M+H	743.2833	2.364	0518, 0519
M-H	741.2756	13.351	0520
M+H	743.3398	16.915	0521
M+H	744.2153	14.886	0522
M-H	742.2119	15.598	0523
M+H	744.2487	13.119	0524, 0525
M+H	744.2485	13.314	0524, 0525

M-H	742.2514	14.502	0526
M+H	744.2858	14.177	0527, 0528, 0529
M+H	744.2864	14.365	0527, 0528, 0529
M+H	744.2839	12.853	0527, 0528, 0529
M+H	745.2106	14.680	0530
M+H	745.2439	10.327	0531, 0532
M+H	745.2437	13.486	0531, 0532
M+H	745.2651	12.033	0533
M+H	745.2791	11.648	0534
M+H	745.2951	14.045	0535
M+H	746.2319	14.179	0536
M+H	746.2509	15.034	0537
M+H	746.2808	14.467	0538, 0539
M+H	746.2808	14.509	0538, 0539
M-H	745.1961	16.589	0540
M+H	747.2445	17.065	0541, 0542, 0543, 0544, 0545, 0546
M-H	745.2282	16.785	0541, 0542, 0543, 0544, 0545, 0546
M-H	745.2266	16.912	0541, 0542, 0543, 0544, 0545
M+H	747.2438	15.942	0541, 0542, 0543, 0544, 0545, 0546
M+H	747.2444	17.158	0541, 0542, 0543, 0544, 0545, 0546
M+H	747.2452	15.897	0541, 0542, 0543, 0544, 0545, 0546
M+H	747.2633	14.097	0547
M+H	747.2749	14.908	0548
M+H	747.2811	11.480	0549
M+H	747.3246	14.547	0550
M+H	747.3560	16.702	0551
M+H	748.2406	15.266	0552, 0553
M+H	748.2398	15.301	0552, 0553
M+H	748.2598	13.870	0554, 0555
M+H	748.2602	13.814	0554, 0555
M-H	746.2574	12.369	0556
M+H	748.3175	16.355	0557
M+H	749.1755	12.361	0558
M+H	749.1883	16.526	0559
M-H	747.2182	17.744	0560
M+H	749.2460	17.843	0561, 0562
M+H	749.2443	15.249	0561, 0562
M+H	749.2548	16.030	0563, 0564
M+H	749.2548	15.977	0563, 0564
M+H	749.3365	17.956	0565
M+H	750.1691	16.944	0566
M+H	750.2044	13.814	0567
M+H	750.2422	14.751	0568
M+H	750.2674	12.696	0569
M+H	750.2961	16.475	0570
M+H	751.1926	11.832	0571
M+H	751.2359	15.481	0572
M+H	751.2590	17.404	0573

M+H	751.2650	9.544	0574
M+H	751.2700	17.535	0574, 0575
M+H	751.2838	17.330	0576
M+H	751.3167	16.568	0577
M+H	751.3265	14.552	0578
M-H	750.1895	14.195	0579
M+H	752.2208	12.527	0580
M-H	750.2169	14.616	0581
M+H	752.2730	15.399	0582, 0583
M-H	750.2560	15.344	0582, 0583
M+H	752.3440	14.742	0584, 0585
M+H	752.3467	11.172	0584, 0585
M-H	751.1820	17.214	0586, 0587
M+H	753.1993	10.920	0586, 0587
M+H	753.2206	17.478	0588, 0589, 0590
M+H	753.2206	17.415	0588, 0589, 0590
M+H	753.2199	17.057	0588, 0589, 0590
M-H	751.2515	12.710	0591
M-H	751.2567	16.381	0591, 0592
M+H	753.2945	13.316	0593
M+H	753.3309	14.545	0594
M+H	754.1977	17.577	0595
M+H	754.2349	15.132	0596, 0597
M+H	754.2351	14.969	0596, 0597
M+H	754.2913	14.171	0598, 0599
M+H	754.2957	14.672	0599
M+H	754.3287	13.455	0600, 0601
M+H	754.3266	15.220	0600, 0601
M+H	755.2314	12.654	0602, 0603, 0604, 0605
M+H	755.2309	13.598	0602, 0603, 0604, 0605
M+H	755.2314	12.127	0602, 0603, 0604, 0605
M+H	755.2322	14.896	0602, 0603, 0604, 0605
M+H	755.2522	15.450	0606, 0607
M+H	755.2523	15.388	0606, 0607
M+H	755.2684	13.027	0608
M+H	755.2851	13.343	0609, 0610
M+H	755.2850	12.008	0609, 0610
M+H	755.3048	17.306	0611
M+H	755.3248	18.391	0612
M+H	756.2259	14.466	0613
M+H	756.2300	12.207	0613, 0614
M-H	754.2531	13.000	0615
M+H	756.3056	13.904	0616, 0617
M+H	756.3059	13.963	0616, 0617
M+H	756.3234	15.556	0618
M+H	757.2211	15.505	0619
M+H	757.2339	12.130	0620
M+H	757.2615	10.939	0621

M+H	757.2698	12.987	0621, 0622
M+H	757.3087	13.847	0623, 0624
M+H	757.3043	15.717	0623, 0624
M-H	756.2261	15.709	0625
M+H	758.2645	12.944	0626, 0627, 0628
M+H	758.2652	10.394	0626, 0627, 0628
M+H	758.2640	13.566	0626, 0627, 0628
M+H	758.2837	14.505	0629
M+H	758.3015	13.195	0630
M+H	758.3207	13.326	0631
M+H	759.2565	15.596	0632, 0633
M+H	759.2595	12.967	0632, 0633
M-H	757.2495	13.649	0633, 0634
M+H	759.2817	18.104	0635
M+H	759.2959	17.264	0636
M+H	759.3163	10.478	0637
M+H	759.3368	17.068	0638
M-H	758.2283	14.724	0639
M-H	758.2686	15.660	0640, 0641
M+H	760.2794	13.733	0640, 0641
M+H	760.2946	11.583	0642
M-H	759.1688	15.118	0643
M+H	761.2116	16.536	0644
M+H	761.2231	15.691	0645
M+H	761.2346	13.503	0646
M+H	761.2627	16.265	0647, 0648
M+H	761.2596	17.152	0647, 0648
M+H	761.2775	15.145	0649, 0650
M+H	761.2779	15.097	0649, 0650
M+H	761.2911	14.124	0651
M+H	761.2991	14.574	0652
M+H	761.3366	17.910	0653
M+H	762.1838	15.260	0654
M-H	760.2085	14.222	0655, 0656
M-H	760.2089	14.282	0655, 0656
M+H	762.2387	13.196	0657, 0658
M-H	760.2214	13.868	0657, 0658
M+H	762.2565	11.893	0659
M+H	762.2741	14.576	0660
M+H	762.3461	14.800	0661
M+H	763.1910	12.939	0662
M+H	763.2206	11.101	0664, 0665
M-H	761.2060	17.305	0664, 0665
M-H	761.2189	17.017	0666
M+H	763.2412	17.010	0667, 0668
M+H	763.2412	17.222	0667, 0668
M+H	763.2614	18.133	0669, 0670
M+H	763.2614	18.206	0669, 0670

M+H	763.2764	14.295	0671
M+H	764.2351	15.924	0672
M+H	764.2547	13.508	0673
M+H	764.2689	12.750	0674
M+H	764.2852	13.411	0675
M-H	763.2016	16.540	0676
M+H	765.2309	17.771	0677
M-H	763.2175	15.955	0677, 0678
M+H	765.2406	17.415	0678, 0679, 0680
M+H	765.2406	17.374	0678, 0679, 0680
M+H	765.3115	17.540	0681
M-H	764.2027	14.588	0682
M+H	766.2512	14.485	0683, 0684, 0685, 0686
M+H	766.2521	13.933	0683, 0684, 0685, 0686
M+H	766.2509	15.065	0683, 0684, 0685, 0686
M+H	766.2521	13.975	0683, 0684, 0685, 0686
M+H	766.2901	15.717	0687
M+H	766.3270	15.191	0688
M+H	766.3651	16.296	0689
M+H	767.1699	10.958	0690
M+H	767.2462	11.813	0691, 0692, 0693
M+H	767.2470	14.580	0691, 0692, 0693
M+H	767.2470	14.525	0691, 0692, 0693
M+H	767.2653	17.611	0694, 0695
M+H	767.2654	17.658	0694, 0695
M+H	767.3212	12.662	0696
M+H	767.3482	16.695	0697
M+H	768.1952	14.453	0699
M+H	768.2297	16.870	0700
M+H	768.2403	15.687	0701
M+H	768.2506	15.456	0702, 0703
M+H	768.2507	15.502	0702, 0703
M+H	768.2604	13.058	0704
M+H	768.3438	14.048	0705
M+H	769.1768	11.480	0706, 0707
M-H	767.1614	16.345	0706, 0707
M-H	767.1782	17.332	0708
M-H	767.2282	13.836	0709, 0710
M-H	767.2281	14.912	0709, 0710
M+H	769.2504	17.583	0709, 0710, 0711
M+H	769.3008	13.788	0712
M-H	767.3089	15.709	0713
M+H	769.3387	12.569	0714
M-H	768.1769	14.243	0715, 0716
M-H	768.1773	14.326	0715, 0716
M-H	768.2254	12.101	0717, 0718
M+H	770.2417	14.216	0717, 0718
M+H	770.2661	15.396	0719

M+H	770.2783	15.736	0720
M+H	770.2895	14.730	0721
M+H	770.3214	14.299	0722
M+H	771.2083	13.960	0723, 0724
M+H	771.2094	17.284	0723, 0724
M+H	771.2552	12.939	0725
M+H	771.2798	12.958	0726
M+H	772.2091	15.375	0727
M+H	772.2256	15.149	0728, 0729, 0730
M-H	770.2087	13.731	0728, 0729, 0730
M-H	770.2087	13.705	0728, 0729, 0730
M+H	772.2819	14.057	0731, 0732
M+H	772.2819	13.999	0731, 0732
M-H	770.2819	8.168	0733
M+H	772.3361	13.756	0734
M+H	773.2043	14.199	0735, 0736
M+H	773.2025	15.481	0735, 0736
M-H	771.2174	11.904	0737
M+H	773.2972	18.076	0738, 0739
M+H	773.2972	18.141	0738, 0739
M+H	774.2564	16.415	0740, 0741
M+H	774.2583	13.204	0740, 0741
M+H	774.2785	14.498	0742
M+H	774.3100	15.191	0743
M+H	775.2399	16.119	0744
M-H	773.2478	14.325	0745
M+H	775.2767	17.470	0746, 0747, 0748
M+H	775.2767	17.409	0746, 0747, 0748
M+H	775.2764	18.202	0746, 0747, 0748
M+H	775.2934	15.586	0749
M+H	775.3510	18.265	0750
M-H	774.2175	15.972	0751
M-H	774.2239	14.689	0751, 0752
M+H	776.3112	13.414	0753
M-H	775.1889	18.527	0754
M+H	777.2501	13.610	0755
M+H	777.2556	15.467	0755, 0756, 0757
M+H	777.2538	16.578	0755, 0756, 0757
M+H	777.3303	17.492	0758
M+H	778.2500	12.212	0759
M+H	778.2739	17.612	0760, 0761
M+H	778.2703	13.103	0760, 0761
M+H	778.2873	18.127	0762
M+H	778.3006	11.472	0763
M+H	778.3417	14.890	0764
M+H	779.2013	16.736	0766
M-H	777.2326	13.021	0767
M-H	778.1974	14.373	0768

M+H	780.2309	13.765	0769
M-H	778.2180	15.077	0769, 0770
M+H	780.2514	14.040	0771
M+H	780.2659	14.745	0772, 0773
M+H	780.2659	14.799	0772, 0773
M+H	780.2802	12.967	0774
M+H	780.3071	16.064	0775
M+H	780.3408	15.546	0776
M+H	781.1981	17.137	0777
M-H	779.1955	16.691	0778
M+H	781.2656	18.580	0779
M+H	781.2822	15.961	0780, 0781
M+H	781.2810	11.326	0780, 0781
M-H	780.1791	16.531	0782
M-H	780.2036	10.063	0783
M+H	782.2463	15.274	0784, 0785
M+H	782.2473	13.985	0784, 0785
M+H	782.2663	15.732	0786, 0787
M+H	782.2659	15.795	0786, 0787
M+H	782.2860	15.362	0788
M-H	781.2031	16.851	0789
M-H	781.2102	13.738	0790, 0791
M-H	781.2102	13.768	0790, 0791
M+H	783.2406	14.626	0792
M+H	783.2600	15.092	0793, 0794
M+H	783.2614	14.013	0793, 0794
M+H	783.2843	18.073	0795
M+H	783.3019	17.731	0796
M-H	782.2073	14.579	0797, 0798
M-H	782.2073	14.627	0797, 0798
M+H	784.2409	14.182	0799, 0800
M+H	784.2430	14.450	0800, 0801, 0802
M-H	782.2337	14.030	0801, 0802
M+H	784.2451	14.267	0800, 0801, 0802
M+H	784.3165	15.245	0803
M+H	785.2443	18.194	0805, 0806
M-H	783.2271	17.875	0805, 0806
M-H	784.1536	16.231	0807
M+H	786.2233	17.042	0808
M+H	786.2510	13.861	0809
M+H	786.2724	15.793	0810
M+H	786.3520	14.243	0811
M+H	787.2365	14.932	0812, 0813
M+H	787.2370	14.886	0812, 0813
M+H	787.3109	18.399	0814
M-H	786.1678	14.909	0815
M+H	788.2024	15.486	0816
M+H	788.2553	15.882	0817

M+H	788.3305	13.358	0818
M+H	789.1837	14.553	0819
M+H	789.2016	15.550	0820
M+H	789.2920	18.131	0821
M-H	787.3133	16.707	0822
M+H	790.2173	15.628	0823, 0824
M+H	790.2173	15.671	0823, 0824
M+H	790.2496	16.231	0825
M-H	788.2395	15.083	0825, 0826
M+H	791.2380	16.305	0827
M+H	791.2730	17.048	0828, 0829
M+H	791.2728	18.064	0828, 0829
M+H	792.2286	16.119	0830
M-H	790.2187	14.277	0830, 0831
M+H	792.3008	15.006	0832
M+H	793.2303	14.468	0833
M-H	791.2199	9.963	0833, 0834
M-H	792.2284	14.251	0835
M+H	794.2824	13.752	0836, 0837, 0838
M+H	794.2821	15.198	0836, 0837, 0838
M+H	794.2827	15.285	0836, 0837, 0838
M+H	794.3037	14.019	0839
M+H	794.3568	15.981	0840
M-H	793.2241	14.376	0841
M+H	795.2468	14.253	0841, 0842
M+H	795.2960	11.823	0843
M+H	796.2145	17.260	0844
M+H	796.2617	14.213	0845, 0846
M+H	796.2617	14.263	0845, 0846
M+H	796.3350	15.180	0847
M+H	797.1931	17.272	0848
M+H	797.2291	16.795	0849
M-H	795.2412	17.509	0850, 0851
M+H	797.2610	17.424	0850, 0851
M+H	797.2773	15.362	0852
M+H	797.3355	18.245	0853
M-H	796.1755	17.162	0854
M-H	796.1881	14.866	0855
M+H	798.2257	15.286	0856
M+H	798.2371	13.648	0857
M+H	798.2577	14.357	0858
M+H	799.1943	17.989	0859, 0860
M-H	797.1779	15.980	0859, 0860
M+H	799.2523	16.847	0861
M+H	799.2571	14.399	0862, 0863
M+H	799.2567	14.848	0861, 0862, 0863
M-H	798.1692	16.682	0864
M-H	798.1855	14.926	0865

M-H	798.2013	14.704	0866
M+H	800.2564	17.674	0867
M-H	799.1727	17.791	0868
M+H	801.2160	13.854	0869
M+H	801.2539	15.248	0870
M+H	802.2328	13.526	0871
M-H	800.2903	14.629	0872
M+H	803.2180	17.842	0873, 0874
M+H	803.2180	17.908	0873, 0874
M+H	803.3068	18.391	0875
M+H	804.1641	14.591	0876
M-H	803.2088	15.449	0877
M+H	806.2439	16.263	0878
M+H	806.3193	16.106	0879
M+H	807.2373	13.949	0880
M+H	807.2680	16.532	0881
M+H	807.3032	16.388	0882
M+H	808.2968	16.042	0883
M+H	809.1720	14.741	0884
M+H	809.2256	13.202	0885
M+H	809.2408	15.897	0886
M+H	809.2566	13.999	0887
M+H	810.2416	14.334	0888
M+H	810.2765	14.918	0889, 0890
M+H	810.2757	13.791	0889, 0890
M+H	811.2028	15.672	0891, 0892, 0893
M-H	809.1879	17.069	0891, 0892, 0893
M+H	811.2355	14.430	0894
M+H	811.2441	14.264	0895
M+H	812.2381	14.174	0896
M-H	812.1905	18.086	0898
M-H	812.2369	15.522	0899
M-H	813.1842	11.388	0900
M+H	815.2220	16.789	0901
M+H	815.2320	14.825	0902
M+H	815.2444	17.030	0903
M+H	815.2898	14.033	0904
M+H	815.3085	17.910	0905
M-H	814.1800	14.884	0906
M+H	816.2344	14.574	0907
M-H	815.1449	18.556	0908
M-H	815.1631	17.928	0909, 0910
M+H	817.1818	12.938	0909, 0910
M+H	817.2316	11.741	0911
M+H	817.2514	17.826	0912
M+H	818.1967	15.553	0913
M-H	816.2095	17.287	0914
M+H	818.2566	14.217	0915

M+H	819.1926	12.219	0916, 0917
M+H	819.1932	14.866	0916, 0917
M+H	819.2128	17.907	0918, 0919
M-H	817.1941	17.633	0918, 0919
M+H	820.1922	15.292	0920
M+H	820.2600	16.113	0921
M+H	822.2237	15.853	0922, 0923
M+H	822.2237	15.902	0922, 0923
M+H	822.3129	12.100	0924
M+H	823.2185	15.045	0925
M+H	823.2935	15.902	0926, 0927
M-H	821.2800	16.468	0926, 0927
M-H	823.1303	16.851	0928
M+H	825.2520	14.072	0929
M+H	825.2600	12.075	0930
M+H	826.2134	15.425	0931
M+H	826.2767	10.428	0932
M+H	826.3091	14.327	0933
M+H	827.2024	17.103	0934
M-H	825.2058	12.497	0935
M+H	827.2441	10.795	0936
M-H	826.2068	18.212	0937
M+H	828.2300	14.242	0938
M+H	829.2041	17.907	0939
M-H	828.1945	15.205	0940
M+H	830.2517	14.976	0941
M-H	829.2101	17.264	0942
M+H	831.3038	17.956	0943
M-H	830.1793	14.422	0944
M-H	830.1943	15.956	0945
M-H	831.1913	16.968	0947
M+H	833.2083	9.790	0947, 0948
M+H	834.2039	12.195	0949
M+H	834.2274	14.605	0950, 0951
M-H	832.2097	14.668	0950, 0951
M-H	832.2251	12.090	0952
M+H	834.2519	14.275	0953
M+H	834.3144	15.984	0954
M-H	833.1565	12.228	0955
M-H	834.1530	14.879	0956
M-H	834.1680	15.316	0957
M+H	836.1885	15.733	0957, 0958
M+H	836.2561	16.138	0959
M+H	837.2324	15.633	0960
M+H	838.2156	15.817	0961, 0962
M+H	838.2158	12.870	0961, 0962
M-H	840.2155	13.268	0963
M+H	842.3032	14.393	0964

M-H	842.1947	14.445	0965
M-H	842.2489	15.381	0966
M-H	844.1926	13.276	0967
M+H	846.2262	16.539	0968
M+H	846.2488	14.604	0969
M+H	847.2240	10.015	0970
M-H	845.2291	15.305	0971
M-H	846.1922	18.550	0972
M-H	847.1959	14.830	0973
M-H	848.1668	14.979	0974
M+H	850.2319	15.302	0975
M+H	850.3056	16.045	0976
M+H	852.1639	17.447	0978
M+H	852.2180	15.176	0979
M+H	853.2274	15.737	0980
M+H	854.1781	16.302	0981
M-H	859.2250	10.481	0982
M+H	863.2161	15.436	0983
M-H	862.2001	15.938	0984
M+H	865.2189	17.273	0985
M-H	865.1611	19.710	0986
M+H	869.1892	18.089	0987
M+H	873.2025	15.158	0988
M-H	873.1458	16.398	0989
M+H	881.2129	17.314	0990
M-H	880.1714	15.221	0991
M-H	882.2044	15.477	0993
M-H	884.1676	15.524	0994
M+H	890.1761	18.189	0995
M-H	898.1998	15.541	0997
M+H	901.1952	18.349	0998
M-H	900.1606	16.582	0999
M-H	915.1751	14.882	1000

【０６７４】

実施例６－８：アレノールのＯ－選択的なエチル化法を用いた、官能基に多様性を有する化合物ライブラリの製造例３

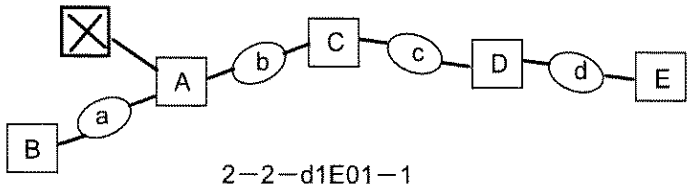
実施例６－８では５００化合物が含まれる混合物に対して、エチル化反応を実施することでライブラリを構築する例を示す。実施例６－８にて実施する該ライブラリに含む「コアブロックの多様性」と「リンカーの多様性」について図３に、原料としてのアレノールが含まれる別途調製した混合物２－２－ｄ１Ｅ０１－１を［表６－８－２］に示す。

【０６７５】

表中の表記方法について説明する。［表６－８－２］では、混合物２－２－ｄ１Ｅ０１－１に含まれうるそれぞれの化合物をＩＤで示し、混合物２－２－ｄ１Ｅ０１－１の構造におけるコアブロックとリンカーの組み合わせを記号、もしくは化学式で示している。記号と具体的構造の対応は図３に示す。［表６－８－２］において「▲×▼」は化学式で表す。

【０６７６】

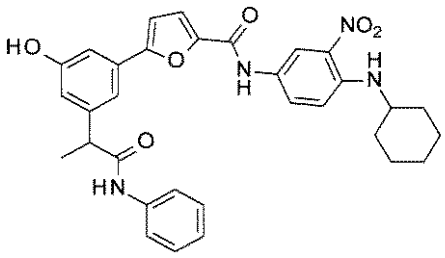
【化１２１】



2－2－d1E01－1

例えば、ＩＤが２－２－ｄ１Ｅ０１－１－０００１の場合、［表６－８－１］で下記構造式を示す。

【化１２２】



２－２－ｄ１Ｅ０１－１－０００１

【０６７７】

［表６－８－１］ＩＤ表記における化合物表記例

【表１２６】

ID	☒	A	a	B	b	C	c	D	d	E
2-2-d1E01-1-0001	OH	A01	a1	B01	b1	C01	c1	D01	d1	E01

【０６７８】

［表６－８－２］混合物２－２－ｄ１Ｅ０１－１中に含まれうる化合物

【表１２７】

ID	Exact Mass	☒	A	a	B	b	C	c	D	d	E
2-2-d1E01-1-0001	568.232	OH	A01	a1	B01	b1	C01	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0002	572.300	OH	A01	a1	B01	b4	C12	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0003	574.279	OH	A01	a1	B01	b4	C13	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0004	578.253	OH	A01	a1	B01	b1	C02	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0005	578.253	OH	A01	a1	B01	b1	C03	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0006	579.248	OH	A01	a1	B01	b1	C04	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0007	582.248	OH	A01	a1	B02	b1	C01	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0008	584.209	OH	A01	a1	B01	b1	C05	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0009	585.222	OH	A01	a1	B01	b3	C08	c1	D01	d1	E01

2-2-d1E01-1-0010	586.223	OH	A01	a1	B03	b1	C01	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0011	586.316	OH	A01	a1	B02	b4	C12	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0012	588.295	OH	A01	a1	B02	b4	C13	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0013	590.290	OH	A01	a1	B03	b4	C12	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0014	592.269	OH	A01	a1	B02	b1	C02	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0015	592.269	OH	A01	a1	B02	b1	C03	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0016	592.270	OH	A01	a1	B03	b4	C13	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0017	593.264	OH	A01	a1	B02	b1	C04	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0018	594.248	OH	A02	a1	B01	b1	C01	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0019	596.238	OH	A01	a1	B01	b3	C09	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0020	596.243	OH	A01	a1	B03	b1	C02	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0021	596.243	OH	A01	a1	B03	b1	C03	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0022	597.239	OH	A01	a1	B03	b1	C04	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0023	598.225	OH	A01	a1	B02	b1	C05	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0024	598.254	OH	A01	a1	B01	b1	C14	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0025	598.316	OH	A02	a1	B01	b4	C12	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0026	599.238	OH	A01	a1	B02	b3	C08	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0027	600.295	OH	A02	a1	B01	b4	C13	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0028	601.200	OH	A01	a1	B01	b3	C10	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0029	602.200	OH	A01	a1	B03	b1	C05	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0030	602.253	OH	A01	a1	B01	b2	C02	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0031	602.253	OH	A01	a1	B01	b2	C03	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0032	603.213	OH	A01	a1	B03	b3	C08	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0033	603.248	OH	A01	a1	B01	b2	C04	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0034	603.248	OH	A01	a1	B01	b2	C06	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0035	603.248	OH	A01	a1	B01	b2	C07	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0036	604.269	OH	A02	a1	B01	b1	C02	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0037	604.269	OH	A02	a1	B01	b1	C03	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0038	605.264	OH	A02	a1	B01	b1	C04	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0039	607.279	OH	A01	a1	B01	b1	C15	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0040	608.263	OH	A02	a1	B02	b1	C01	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0041	608.275	OH	A01	a1	B01	b1	C16	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0042	609.270	OH	A01	a1	B01	b1	C17	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0043	610.225	OH	A02	a1	B01	b1	C05	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0044	610.254	OH	A01	a1	B02	b3	C09	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0045	610.279	OH	A01	a1	B01	b4	C01	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0046	611.238	OH	A02	a1	B01	b3	C08	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0047	612.238	OH	A02	a1	B03	b1	C01	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0048	612.270	OH	A01	a1	B02	b1	C14	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0049	612.331	OH	A02	a1	B02	b4	C12	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0050	614.229	OH	A01	a1	B03	b3	C09	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0051	614.231	OH	A01	a1	B01	b1	C18	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0052	614.310	OH	A02	a1	B02	b4	C13	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0053	615.215	OH	A01	a1	B02	b3	C10	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0054	616.245	OH	A01	a1	B03	b1	C14	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0055	616.269	OH	A01	a1	B02	b2	C02	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0056	616.269	OH	A01	a1	B02	b2	C03	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0057	616.306	OH	A02	a1	B03	b4	C12	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0058	617.264	OH	A01	a1	B02	b2	C04	c1	D01	d1	E01

2-2-d1E01-1-0059	617.264	OH	A01	a1	B02	b2	C06	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0060	617.264	OH	A01	a1	B02	b2	C07	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0061	618.284	OH	A02	a1	B02	b1	C02	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0062	618.284	OH	A02	a1	B02	b1	C03	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0063	618.285	OH	A02	a1	B03	b4	C13	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0064	619.190	OH	A01	a1	B03	b3	C10	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0065	619.279	OH	A02	a1	B02	b1	C04	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0066	620.243	OH	A01	a1	B03	b2	C02	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0067	620.243	OH	A01	a1	B03	b2	C03	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0068	620.300	OH	A01	a1	B01	b4	C02	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0069	621.239	OH	A01	a1	B03	b2	C04	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0070	621.239	OH	A01	a1	B03	b2	C06	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0071	621.239	OH	A01	a1	B03	b2	C07	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0072	621.295	OH	A01	a1	B02	b1	C15	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0073	622.254	OH	A02	a1	B01	b3	C09	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0074	622.259	OH	A02	a1	B03	b1	C02	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0075	622.259	OH	A02	a1	B03	b1	C03	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0076	622.290	OH	A01	a1	B02	b1	C16	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0077	623.254	OH	A02	a1	B03	b1	C04	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0078	623.286	OH	A01	a1	B02	b1	C17	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0079	624.241	OH	A02	a1	B02	b1	C05	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0080	624.270	OH	A02	a1	B01	b1	C14	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0081	624.295	OH	A01	a1	B02	b4	C01	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0082	625.200	OH	A01	a1	B04	b1	C01	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0083	625.254	OH	A02	a1	B02	b3	C08	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0084	625.270	OH	A01	a1	B03	b1	C15	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0085	626.256	OH	A01	a1	B01	b4	C05	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0086	626.265	OH	A01	a1	B03	b1	C16	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0087	627.215	OH	A02	a1	B01	b3	C10	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0088	627.261	OH	A01	a1	B03	b1	C17	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0089	628.216	OH	A02	a1	B03	b1	C05	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0090	628.247	OH	A01	a1	B02	b1	C18	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0091	628.269	OH	A02	a1	B01	b2	C02	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0092	628.269	OH	A02	a1	B01	b2	C03	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0093	628.270	OH	A01	a1	B03	b4	C01	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0094	629.229	OH	A02	a1	B03	b3	C08	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0095	629.264	OH	A02	a1	B01	b2	C04	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0096	629.264	OH	A02	a1	B01	b2	C06	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0097	629.264	OH	A02	a1	B01	b2	C07	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0098	629.267	OH	A01	a1	B04	b4	C12	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0099	631.246	OH	A01	a1	B04	b4	C13	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0100	632.194	OH	A01	a1	B01	b1	C01	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0101	632.222	OH	A01	a1	B03	b1	C18	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0102	633.295	OH	A02	a1	B01	b1	C15	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0103	634.243	OH	A01	a1	B01	b3	C11	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0104	634.290	OH	A02	a1	B01	b1	C16	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0105	634.316	OH	A01	a1	B02	b4	C02	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0106	635.220	OH	A01	a1	B04	b1	C02	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0107	635.220	OH	A01	a1	B04	b1	C03	c1	D01	d1	E01

2-2-d1E01-1-0108	635.286	OH	A02	a1	B01	b1	C17	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0109	636.215	OH	A01	a1	B04	b1	C04	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0110	636.220	OH	A01	a1	B05	b1	C01	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0111	636.262	OH	A01	a1	B01	b4	C12	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0112	636.270	OH	A02	a1	B02	b3	C09	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0113	636.295	OH	A02	a1	B01	b4	C01	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0114	638.241	OH	A01	a1	B01	b4	C13	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0115	638.285	OH	A02	a1	B02	b1	C14	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0116	638.290	OH	A01	a1	B03	b4	C02	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0117	640.245	OH	A02	a1	B03	b3	C09	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0118	640.247	OH	A02	a1	B01	b1	C18	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0119	640.272	OH	A01	a1	B02	b4	C05	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0120	640.287	OH	A01	a1	B05	b4	C12	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0121	641.177	OH	A01	a1	B04	b1	C05	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0122	641.231	OH	A02	a1	B02	b3	C10	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0123	642.190	OH	A01	a1	B04	b3	C08	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0124	642.215	OH	A01	a1	B01	b1	C02	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0125	642.215	OH	A01	a1	B01	b1	C03	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0126	642.260	OH	A02	a1	B03	b1	C14	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0127	642.267	OH	A01	a1	B05	b4	C13	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0128	642.284	OH	A02	a1	B02	b2	C02	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0129	642.284	OH	A02	a1	B02	b2	C03	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0130	643.210	OH	A01	a1	B01	b1	C04	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0131	643.279	OH	A02	a1	B02	b2	C04	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0132	643.279	OH	A02	a1	B02	b2	C06	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0133	643.279	OH	A02	a1	B02	b2	C07	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0134	644.247	OH	A01	a1	B03	b4	C05	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0135	645.206	OH	A02	a1	B03	b3	C10	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0136	646.210	OH	A01	a1	B02	b1	C01	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0137	646.240	OH	A01	a1	B05	b1	C02	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0138	646.240	OH	A01	a1	B05	b1	C03	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0139	646.259	OH	A02	a1	B03	b2	C02	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0140	646.259	OH	A02	a1	B03	b2	C03	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0141	646.316	OH	A02	a1	B01	b4	C02	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0142	647.236	OH	A01	a1	B05	b1	C04	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0143	647.254	OH	A02	a1	B03	b2	C04	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0144	647.254	OH	A02	a1	B03	b2	C06	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0145	647.254	OH	A02	a1	B03	b2	C07	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0146	647.311	OH	A02	a1	B02	b1	C15	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0147	648.171	OH	A01	a1	B01	b1	C05	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0148	648.258	OH	A01	a1	B02	b3	C11	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0149	648.306	OH	A02	a1	B02	b1	C16	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0150	649.184	OH	A01	a1	B01	b3	C08	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0151	649.301	OH	A02	a1	B02	b1	C17	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0152	650.185	OH	A01	a1	B03	b1	C01	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0153	650.277	OH	A01	a1	B02	b4	C12	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0154	650.310	OH	A02	a1	B02	b4	C01	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0155	651.215	OH	A02	a1	B04	b1	C01	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0156	651.286	OH	A02	a1	B03	b1	C15	c1	D01	d1	E01

2-2-d1E01-1-0157	652.197	OH	A01	a1	B05	b1	C05	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0158	652.233	OH	A01	a1	B03	b3	C11	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0159	652.257	OH	A01	a1	B02	b4	C13	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0160	652.272	OH	A02	a1	B01	b4	C05	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0161	652.281	OH	A02	a1	B03	b1	C16	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0162	653.206	OH	A01	a1	B04	b3	C09	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0163	653.210	OH	A01	a1	B05	b3	C08	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0164	653.276	OH	A02	a1	B03	b1	C17	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0165	654.252	OH	A01	a1	B03	b4	C12	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0166	654.262	OH	A02	a1	B02	b1	C18	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0167	654.285	OH	A02	a1	B03	b4	C01	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0168	655.221	OH	A01	a1	B04	b1	C14	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0169	655.283	OH	A02	a1	B04	b4	C12	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0170	656.230	OH	A01	a1	B02	b1	C02	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0171	656.230	OH	A01	a1	B02	b1	C03	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0172	656.232	OH	A01	a1	B03	b4	C13	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0173	657.226	OH	A01	a1	B02	b1	C04	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0174	657.262	OH	A02	a1	B04	b4	C13	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0175	658.167	OH	A01	a1	B04	b3	C10	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0176	658.210	OH	A02	a1	B01	b1	C01	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0177	658.237	OH	A02	a1	B03	b1	C18	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0178	659.220	OH	A01	a1	B04	b2	C02	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0179	659.220	OH	A01	a1	B04	b2	C03	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0180	660.200	OH	A01	a1	B01	b3	C09	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0181	660.205	OH	A01	a1	B03	b1	C02	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0182	660.205	OH	A01	a1	B03	b1	C03	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0183	660.215	OH	A01	a1	B04	b2	C04	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0184	660.215	OH	A01	a1	B04	b2	C06	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0185	660.215	OH	A01	a1	B04	b2	C07	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0186	660.258	OH	A02	a1	B01	b3	C11	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0187	660.331	OH	A02	a1	B02	b4	C02	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0188	661.201	OH	A01	a1	B03	b1	C04	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0189	661.236	OH	A02	a1	B04	b1	C02	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0190	661.236	OH	A02	a1	B04	b1	C03	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0191	662.187	OH	A01	a1	B02	b1	C05	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0192	662.216	OH	A01	a1	B01	b1	C14	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0193	662.231	OH	A02	a1	B04	b1	C04	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0194	662.235	OH	A02	a1	B05	b1	C01	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0195	662.277	OH	A02	a1	B01	b4	C12	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0196	662.322	OH	A01	a1	B01	b1	C19	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0197	663.200	OH	A01	a1	B02	b3	C08	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0198	664.226	OH	A01	a1	B05	b3	C09	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0199	664.247	OH	A01	a1	B04	b1	C15	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0200	664.257	OH	A02	a1	B01	b4	C13	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0201	664.306	OH	A02	a1	B03	b4	C02	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0202	665.161	OH	A01	a1	B01	b3	C10	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0203	665.242	OH	A01	a1	B04	b1	C16	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0204	666.162	OH	A01	a1	B03	b1	C05	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0205	666.215	OH	A01	a1	B01	b2	C02	c2	D02	d1	E01

2-2-d1E01-1-0206	666.215	OH	A01	a1	B01	b2	C03	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0207	666.237	OH	A01	a1	B04	b1	C17	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0208	666.241	OH	A01	a1	B05	b1	C14	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0209	666.288	OH	A02	a1	B02	b4	C05	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0210	666.303	OH	A02	a1	B05	b4	C12	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0211	667.175	OH	A01	a1	B03	b3	C08	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0212	667.192	OH	A02	a1	B04	b1	C05	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0213	667.210	OH	A01	a1	B01	b2	C04	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0214	667.210	OH	A01	a1	B01	b2	C06	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0215	667.210	OH	A01	a1	B01	b2	C07	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0216	667.246	OH	A01	a1	B04	b4	C01	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0217	668.205	OH	A02	a1	B04	b3	C08	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0218	668.230	OH	A02	a1	B01	b1	C02	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0219	668.230	OH	A02	a1	B01	b1	C03	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0220	668.282	OH	A02	a1	B05	b4	C13	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0221	669.187	OH	A01	a1	B05	b3	C10	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0222	669.226	OH	A02	a1	B01	b1	C04	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0223	670.240	OH	A01	a1	B05	b2	C02	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0224	670.240	OH	A01	a1	B05	b2	C03	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0225	670.263	OH	A02	a1	B03	b4	C05	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0226	671.198	OH	A01	a1	B04	b1	C18	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0227	671.236	OH	A01	a1	B05	b2	C04	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0228	671.236	OH	A01	a1	B05	b2	C06	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0229	671.236	OH	A01	a1	B05	b2	C07	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0230	671.241	OH	A01	a1	B01	b1	C15	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0231	672.225	OH	A02	a1	B02	b1	C01	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0232	672.237	OH	A01	a1	B01	b1	C16	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0233	672.256	OH	A02	a1	B05	b1	C02	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0234	672.256	OH	A02	a1	B05	b1	C03	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0235	673.232	OH	A01	a1	B01	b1	C17	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0236	673.251	OH	A02	a1	B05	b1	C04	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0237	674.187	OH	A02	a1	B01	b1	C05	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0238	674.216	OH	A01	a1	B02	b3	C09	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0239	674.241	OH	A01	a1	B01	b4	C01	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0240	674.274	OH	A02	a1	B02	b3	C11	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0241	675.200	OH	A02	a1	B01	b3	C08	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0242	675.267	OH	A01	a1	B05	b1	C15	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0243	676.200	OH	A02	a1	B03	b1	C01	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0244	676.232	OH	A01	a1	B02	b1	C14	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0245	676.262	OH	A01	a1	B05	b1	C16	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0246	676.293	OH	A02	a1	B02	b4	C12	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0247	676.337	OH	A01	a1	B02	b1	C19	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0248	677.257	OH	A01	a1	B05	b1	C17	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0249	677.267	OH	A01	a1	B04	b4	C02	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0250	678.191	OH	A01	a1	B03	b3	C09	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0251	678.193	OH	A01	a1	B01	b1	C18	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0252	678.212	OH	A02	a1	B05	b1	C05	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0253	678.249	OH	A02	a1	B03	b3	C11	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0254	678.267	OH	A01	a1	B05	b4	C01	c1	D01	d1	E01

2-2-d1E01-1-0255	678.272	OH	A02	a1	B02	b4	C13	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0256	679.177	OH	A01	a1	B02	b3	C10	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0257	679.221	OH	A02	a1	B04	b3	C09	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0258	679.225	OH	A02	a1	B05	b3	C08	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0259	680.206	OH	A01	a1	B03	b1	C14	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0260	680.230	OH	A01	a1	B02	b2	C02	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0261	680.230	OH	A01	a1	B02	b2	C03	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0262	680.268	OH	A02	a1	B03	b4	C12	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0263	680.312	OH	A01	a1	B03	b1	C19	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0264	681.226	OH	A01	a1	B02	b2	C04	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0265	681.226	OH	A01	a1	B02	b2	C06	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0266	681.226	OH	A01	a1	B02	b2	C07	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0267	681.237	OH	A02	a1	B04	b1	C14	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0268	682.219	OH	A01	a1	B05	b1	C18	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0269	682.246	OH	A02	a1	B02	b1	C02	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0270	682.246	OH	A02	a1	B02	b1	C03	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0271	682.247	OH	A02	a1	B03	b4	C13	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0272	683.152	OH	A01	a1	B03	b3	C10	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0273	683.224	OH	A01	a1	B04	b4	C05	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0274	683.241	OH	A02	a1	B02	b1	C04	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0275	684.182	OH	A02	a1	B04	b3	C10	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0276	684.205	OH	A01	a1	B03	b2	C02	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0277	684.205	OH	A01	a1	B03	b2	C03	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0278	684.262	OH	A01	a1	B01	b4	C02	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0279	685.201	OH	A01	a1	B03	b2	C04	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0280	685.201	OH	A01	a1	B03	b2	C06	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0281	685.201	OH	A01	a1	B03	b2	C07	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0282	685.236	OH	A02	a1	B04	b2	C02	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0283	685.236	OH	A02	a1	B04	b2	C03	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0284	685.257	OH	A01	a1	B02	b1	C15	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0285	686.216	OH	A02	a1	B01	b3	C09	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0286	686.221	OH	A02	a1	B03	b1	C02	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0287	686.221	OH	A02	a1	B03	b1	C03	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0288	686.231	OH	A02	a1	B04	b2	C04	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0289	686.231	OH	A02	a1	B04	b2	C06	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0290	686.231	OH	A02	a1	B04	b2	C07	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0291	686.252	OH	A01	a1	B02	b1	C16	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0292	687.216	OH	A02	a1	B03	b1	C04	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0293	687.248	OH	A01	a1	B02	b1	C17	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0294	688.203	OH	A02	a1	B02	b1	C05	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0295	688.232	OH	A02	a1	B01	b1	C14	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0296	688.257	OH	A01	a1	B02	b4	C01	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0297	688.287	OH	A01	a1	B05	b4	C02	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0298	688.337	OH	A02	a1	B01	b1	C19	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0299	689.161	OH	A01	a1	B04	b1	C01	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0300	689.216	OH	A02	a1	B02	b3	C08	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0301	689.232	OH	A01	a1	B03	b1	C15	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0302	690.218	OH	A01	a1	B01	b4	C05	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0303	690.227	OH	A01	a1	B03	b1	C16	c2	D02	d1	E01

2-2-d1E01-1-0304	690.241	OH	A02	a1	B05	b3	C09	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0305	690.262	OH	A02	a1	B04	b1	C15	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0306	691.177	OH	A02	a1	B01	b3	C10	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0307	691.210	OH	A01	a1	B04	b3	C11	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0308	691.222	OH	A01	a1	B03	b1	C17	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0309	691.258	OH	A02	a1	B04	b1	C16	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0310	692.177	OH	A02	a1	B03	b1	C05	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0311	692.209	OH	A01	a1	B02	b1	C18	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0312	692.230	OH	A02	a1	B01	b2	C02	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0313	692.230	OH	A02	a1	B01	b2	C03	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0314	692.232	OH	A01	a1	B03	b4	C01	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0315	692.253	OH	A02	a1	B04	b1	C17	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0316	692.257	OH	A02	a1	B05	b1	C14	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0317	693.190	OH	A02	a1	B03	b3	C08	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0318	693.226	OH	A02	a1	B01	b2	C04	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0319	693.226	OH	A02	a1	B01	b2	C06	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0320	693.226	OH	A02	a1	B01	b2	C07	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0321	693.229	OH	A01	a1	B04	b4	C12	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0322	693.262	OH	A02	a1	B04	b4	C01	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0323	694.244	OH	A01	a1	B05	b4	C05	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0324	695.203	OH	A02	a1	B05	b3	C10	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0325	695.208	OH	A01	a1	B04	b4	C13	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0326	696.184	OH	A01	a1	B03	b1	C18	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0327	696.256	OH	A02	a1	B05	b2	C02	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0328	696.256	OH	A02	a1	B05	b2	C03	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0329	697.214	OH	A02	a1	B04	b1	C18	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0330	697.251	OH	A02	a1	B05	b2	C04	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0331	697.251	OH	A02	a1	B05	b2	C06	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0332	697.251	OH	A02	a1	B05	b2	C07	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0333	697.257	OH	A02	a1	B01	b1	C15	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0334	698.205	OH	A01	a1	B01	b3	C11	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0335	698.252	OH	A02	a1	B01	b1	C16	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0336	698.277	OH	A01	a1	B02	b4	C02	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0337	699.182	OH	A01	a1	B04	b1	C02	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0338	699.182	OH	A01	a1	B04	b1	C03	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0339	699.248	OH	A02	a1	B01	b1	C17	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0340	700.177	OH	A01	a1	B04	b1	C04	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0341	700.181	OH	A01	a1	B05	b1	C01	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0342	700.232	OH	A02	a1	B02	b3	C09	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0343	700.257	OH	A02	a1	B01	b4	C01	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0344	701.283	OH	A02	a1	B05	b1	C15	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0345	702.230	OH	A01	a1	B05	b3	C11	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0346	702.247	OH	A02	a1	B02	b1	C14	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0347	702.252	OH	A01	a1	B03	b4	C02	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0348	702.278	OH	A02	a1	B05	b1	C16	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0349	702.353	OH	A02	a1	B02	b1	C19	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0350	703.273	OH	A02	a1	B05	b1	C17	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0351	703.283	OH	A02	a1	B04	b4	C02	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0352	704.206	OH	A02	a1	B03	b3	C09	c2	D02	d1	E01

2-2-d1E01-1-0353	704.209	OH	A02	a1	B01	b1	C18	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0354	704.234	OH	A01	a1	B02	b4	C05	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0355	704.249	OH	A01	a1	B05	b4	C12	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0356	704.282	OH	A02	a1	B05	b4	C01	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0357	705.139	OH	A01	a1	B04	b1	C05	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0358	705.193	OH	A02	a1	B02	b3	C10	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0359	706.152	OH	A01	a1	B04	b3	C08	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0360	706.222	OH	A02	a1	B03	b1	C14	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0361	706.228	OH	A01	a1	B05	b4	C13	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0362	706.246	OH	A02	a1	B02	b2	C02	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0363	706.246	OH	A02	a1	B02	b2	C03	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0364	706.328	OH	A02	a1	B03	b1	C19	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0365	707.241	OH	A02	a1	B02	b2	C04	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0366	707.241	OH	A02	a1	B02	b2	C06	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0367	707.241	OH	A02	a1	B02	b2	C07	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0368	708.209	OH	A01	a1	B03	b4	C05	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0369	708.234	OH	A02	a1	B05	b1	C18	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0370	709.168	OH	A02	a1	B03	b3	C10	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0371	709.239	OH	A02	a1	B04	b4	C05	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0372	710.202	OH	A01	a1	B05	b1	C02	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0373	710.202	OH	A01	a1	B05	b1	C03	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0374	710.221	OH	A02	a1	B03	b2	C02	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0375	710.221	OH	A02	a1	B03	b2	C03	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0376	710.277	OH	A02	a1	B01	b4	C02	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0377	711.197	OH	A01	a1	B05	b1	C04	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0378	711.216	OH	A02	a1	B03	b2	C04	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0379	711.216	OH	A02	a1	B03	b2	C06	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0380	711.216	OH	A02	a1	B03	b2	C07	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0381	711.273	OH	A02	a1	B02	b1	C15	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0382	712.220	OH	A01	a1	B02	b3	C11	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0383	712.268	OH	A02	a1	B02	b1	C16	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0384	713.263	OH	A02	a1	B02	b1	C17	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0385	714.272	OH	A02	a1	B02	b4	C01	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0386	714.303	OH	A02	a1	B05	b4	C02	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0387	715.177	OH	A02	a1	B04	b1	C01	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0388	715.248	OH	A02	a1	B03	b1	C15	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0389	716.159	OH	A01	a1	B05	b1	C05	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0390	716.195	OH	A01	a1	B03	b3	C11	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0391	716.234	OH	A02	a1	B01	b4	C05	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0392	716.243	OH	A02	a1	B03	b1	C16	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0393	717.168	OH	A01	a1	B04	b3	C09	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0394	717.172	OH	A01	a1	B05	b3	C08	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0395	717.226	OH	A02	a1	B04	b3	C11	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0396	717.238	OH	A02	a1	B03	b1	C17	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0397	718.224	OH	A02	a1	B02	b1	C18	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0398	718.247	OH	A02	a1	B03	b4	C01	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0399	719.183	OH	A01	a1	B04	b1	C14	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0400	719.245	OH	A02	a1	B04	b4	C12	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0401	719.289	OH	A01	a1	B04	b1	C19	c1	D01	d1	E01

2-2-d1E01-1-0402	720.259	OH	A02	a1	B05	b4	C05	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0403	721.224	OH	A02	a1	B04	b4	C13	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0404	722.129	OH	A01	a1	B04	b3	C10	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0405	722.199	OH	A02	a1	B03	b1	C18	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0406	723.182	OH	A01	a1	B04	b2	C02	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0407	723.182	OH	A01	a1	B04	b2	C03	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0408	724.177	OH	A01	a1	B04	b2	C04	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0409	724.177	OH	A01	a1	B04	b2	C06	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0410	724.177	OH	A01	a1	B04	b2	C07	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0411	724.220	OH	A02	a1	B01	b3	C11	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0412	724.293	OH	A02	a1	B02	b4	C02	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0413	725.198	OH	A02	a1	B04	b1	C02	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0414	725.198	OH	A02	a1	B04	b1	C03	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0415	726.193	OH	A02	a1	B04	b1	C04	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0416	726.197	OH	A02	a1	B05	b1	C01	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0417	726.284	OH	A01	a1	B01	b1	C19	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0418	728.188	OH	A01	a1	B05	b3	C09	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0419	728.209	OH	A01	a1	B04	b1	C15	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0420	728.246	OH	A02	a1	B05	b3	C11	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0421	728.268	OH	A02	a1	B03	b4	C02	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0422	729.204	OH	A01	a1	B04	b1	C16	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0423	730.199	OH	A01	a1	B04	b1	C17	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0424	730.203	OH	A01	a1	B05	b1	C14	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0425	730.249	OH	A02	a1	B02	b4	C05	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0426	730.265	OH	A02	a1	B05	b4	C12	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0427	730.309	OH	A01	a1	B05	b1	C19	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0428	731.154	OH	A02	a1	B04	b1	C05	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0429	731.208	OH	A01	a1	B04	b4	C01	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0430	732.167	OH	A02	a1	B04	b3	C08	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0431	732.244	OH	A02	a1	B05	b4	C13	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0432	733.149	OH	A01	a1	B05	b3	C10	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0433	734.202	OH	A01	a1	B05	b2	C02	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0434	734.202	OH	A01	a1	B05	b2	C03	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0435	734.224	OH	A02	a1	B03	b4	C05	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0436	735.160	OH	A01	a1	B04	b1	C18	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0437	735.197	OH	A01	a1	B05	b2	C04	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0438	735.197	OH	A01	a1	B05	b2	C06	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0439	735.197	OH	A01	a1	B05	b2	C07	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0440	736.218	OH	A02	a1	B05	b1	C02	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0441	736.218	OH	A02	a1	B05	b1	C03	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0442	737.213	OH	A02	a1	B05	b1	C04	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0443	738.236	OH	A02	a1	B02	b3	C11	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0444	739.229	OH	A01	a1	B05	b1	C15	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0445	740.224	OH	A01	a1	B05	b1	C16	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0446	740.299	OH	A01	a1	B02	b1	C19	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0447	741.219	OH	A01	a1	B05	b1	C17	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0448	741.229	OH	A01	a1	B04	b4	C02	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0449	742.174	OH	A02	a1	B05	b1	C05	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0450	742.211	OH	A02	a1	B03	b3	C11	c2	D02	d1	E01

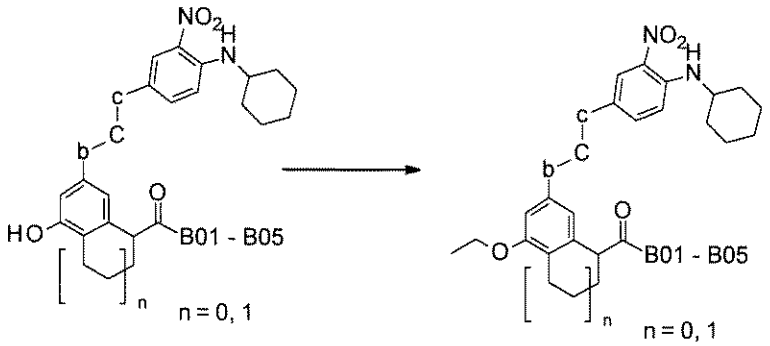
2-2-d1E01-1-0451	742.228	OH	A01	a1	B05	b4	C01	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0452	743.183	OH	A02	a1	B04	b3	C09	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0453	743.187	OH	A02	a1	B05	b3	C08	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0454	744.274	OH	A01	a1	B03	b1	C19	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0455	745.199	OH	A02	a1	B04	b1	C14	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0456	745.305	OH	A02	a1	B04	b1	C19	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0457	746.180	OH	A01	a1	B05	b1	C18	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0458	747.186	OH	A01	a1	B04	b4	C05	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0459	748.144	OH	A02	a1	B04	b3	C10	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0460	749.198	OH	A02	a1	B04	b2	C02	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0461	749.198	OH	A02	a1	B04	b2	C03	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0462	750.193	OH	A02	a1	B04	b2	C04	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0463	750.193	OH	A02	a1	B04	b2	C06	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0464	750.193	OH	A02	a1	B04	b2	C07	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0465	752.249	OH	A01	a1	B05	b4	C02	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0466	752.299	OH	A02	a1	B01	b1	C19	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0467	754.203	OH	A02	a1	B05	b3	C09	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0468	754.224	OH	A02	a1	B04	b1	C15	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0469	755.172	OH	A01	a1	B04	b3	C11	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0470	755.220	OH	A02	a1	B04	b1	C16	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0471	756.215	OH	A02	a1	B04	b1	C17	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0472	756.219	OH	A02	a1	B05	b1	C14	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0473	756.325	OH	A02	a1	B05	b1	C19	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-1-0474	757.224	OH	A02	a1	B04	b4	C01	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0475	758.206	OH	A01	a1	B05	b4	C05	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0476	759.164	OH	A02	a1	B05	b3	C10	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0477	760.218	OH	A02	a1	B05	b2	C02	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0478	760.218	OH	A02	a1	B05	b2	C03	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0479	761.176	OH	A02	a1	B04	b1	C18	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0480	761.213	OH	A02	a1	B05	b2	C04	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0481	761.213	OH	A02	a1	B05	b2	C06	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0482	761.213	OH	A02	a1	B05	b2	C07	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0483	765.244	OH	A02	a1	B05	b1	C15	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0484	766.192	OH	A01	a1	B05	b3	C11	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0485	766.240	OH	A02	a1	B05	b1	C16	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0486	766.315	OH	A02	a1	B02	b1	C19	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0487	767.235	OH	A02	a1	B05	b1	C17	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0488	767.245	OH	A02	a1	B04	b4	C02	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0489	768.244	OH	A02	a1	B05	b4	C01	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0490	770.290	OH	A02	a1	B03	b1	C19	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0491	772.196	OH	A02	a1	B05	b1	C18	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0492	773.201	OH	A02	a1	B04	b4	C05	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0493	778.265	OH	A02	a1	B05	b4	C02	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0494	781.188	OH	A02	a1	B04	b3	C11	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0495	783.251	OH	A01	a1	B04	b1	C19	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0496	784.221	OH	A02	a1	B05	b4	C05	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0497	792.208	OH	A02	a1	B05	b3	C11	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0498	794.271	OH	A01	a1	B05	b1	C19	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-1-0499	809.267	OH	A02	a1	B04	b1	C19	c2	D02	d1	E01

2-2-d1E01-1-0500	820.287	OH	A02	a1	B05	b1	C19	c2	D02	d1	E01

【０６７９】

別途調製した混合物２－２－ｄ１Ｅ０１－１を用いてエチル化反応を行った場合の反応式を以下に例示する。

【化１２３】



【０６８０】

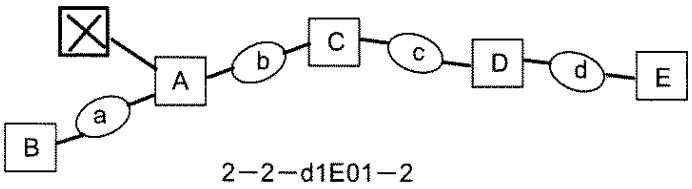
０．５－２ｍＬのマイクロウェーブ容器に入った混合物２－２－ｄ１Ｅ０１－１（８．７５μｍｏｌ）に、ＤＭＦ（１００μＬ）、ＥｔＯＨ（２５．０μＬ）、ＢＴＰＰ（２６．８μＬ，０．０８８ｍｍｏｌ）とＥｔ$_3$ＰＯ$_4$（２２．３μＬ，０．１３１ｍｍｏｌ）を加え、７０℃で２７時間振とうした。反応液をＭｅＣＮ（０．２ｍＬ）を２回使用してＩＳＯＬＵＴＥ（登録商標）　ＣＢＡ（２００ｍｇ，０．７ｍｍｏｌ／ｇ）に移した。１０分後、ＭｅＣＮ（０．５ｍＬ）で３回洗浄し、合わせたろ液を１５ｍｍ＊７５ｍｍの試験管に受けた。溶液を減圧留去し（Ｇｅｎｅｖａｃ減圧濃縮装置を用いた）、混合物２－２－ｄ１Ｅ０１－２を得た。混合物２－２－ｄ１Ｅ０１－２の詳細を［表６－８－４］に示す。

【０６８１】

表中の表記方法について説明する。［表６－８－４］では、混合物２－２－ｄ１Ｅ０１－２に含まれうるそれぞれの化合物をＩＤで示し、混合物２－２－ｄ１Ｅ０１－２の構造におけるコアブロックとリンカーの組み合わせを記号もしくは化学式で示している。記号と具体的構造の対応は図３に示す。［表６－８－４］において「▲×▼」は化学式で表す。

【０６８２】

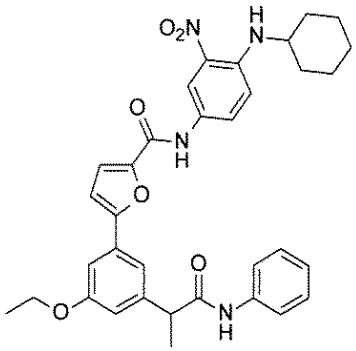
【化１２４】



例えば、ＩＤが２－２－ｄ１Ｅ０１－２－０００１の場合、［表６－８－３］で下記構造式を示す。

【０６８３】

【化１２５】



２－２－ｄ１Ｅ０１－２－０００１

【０６８４】

［表６－８－３］ＩＤ表記における化合物構造表記例

【表１２８】

ID	Exact Mass	☒	A	a	B	b	C	c	D	d	E
2-2-d1E01-2-0001	596.263	OEt	A01	a1	B01	b1	C01	c1	D01	d1	E01

【０６８５】

混合物２－２－ｄ１Ｅ０１－２に含まれ得る化合物を［表６－８－４］に示す。

［表６－８－４］混合物２－２－ｄ１Ｅ０１－２中に含まれうる化合物

【表１２９】

ID	Exact Mass	☒	A	a	B	b	C	c	D	d	E
2-2-d1E01-2-0001	596.263	OEt	A01	a1	B01	b1	C01	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0002	600.331	OEt	A01	a1	B01	b4	C12	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0003	602.310	OEt	A01	a1	B01	b4	C13	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0004	606.284	OEt	A01	a1	B01	b1	C02	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0005	606.284	OEt	A01	a1	B01	b1	C03	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0006	607.279	OEt	A01	a1	B01	b1	C04	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0007	610.279	OEt	A01	a1	B02	b1	C01	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0008	612.241	OEt	A01	a1	B01	b1	C05	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0009	613.254	OEt	A01	a1	B01	b3	C08	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0010	614.254	OEt	A01	a1	B03	b1	C01	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0011	614.347	OEt	A01	a1	B02	b4	C12	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0012	616.326	OEt	A01	a1	B02	b4	C13	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0013	618.322	OEt	A01	a1	B03	b4	C12	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0014	620.300	OEt	A01	a1	B02	b1	C02	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0015	620.300	OEt	A01	a1	B02	b1	C03	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0016	620.301	OEt	A01	a1	B03	b4	C13	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0017	621.295	OEt	A01	a1	B02	b1	C04	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0018	622.279	OEt	A02	a1	B01	b1	C01	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0019	624.270	OEt	A01	a1	B01	b3	C09	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0020	624.275	OEt	A01	a1	B03	b1	C02	c1	D01	d1	E01

2-2-d1E01-2-0021	624.275	OEt	A01	a1	B03	b1	C03	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0022	625.270	OEt	A01	a1	B03	b1	C04	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0023	626.256	OEt	A01	a1	B02	b1	C05	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0024	626.285	OEt	A01	a1	B01	b1	C14	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0025	626.347	OEt	A02	a1	B01	b4	C12	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0026	627.269	OEt	A01	a1	B02	b3	C08	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0027	628.326	OEt	A02	a1	B01	b4	C13	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0028	629.231	OEt	A01	a1	B01	b3	C10	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0029	630.231	OEt	A01	a1	B03	b1	C05	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0030	630.284	OEt	A01	a1	B01	b2	C02	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0031	630.284	OEt	A01	a1	B01	b2	C03	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0032	631.244	OEt	A01	a1	B03	b3	C08	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0033	631.279	OEt	A01	a1	B01	b2	C04	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0034	631.279	OEt	A01	a1	B01	b2	C06	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0035	631.279	OEt	A01	a1	B01	b2	C07	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0036	632.300	OEt	A02	a1	B01	b1	C02	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0037	632.300	OEt	A02	a1	B01	b1	C03	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0038	633.295	OEt	A02	a1	B01	b1	C04	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0039	635.311	OEt	A01	a1	B01	b1	C15	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0040	636.295	OEt	A02	a1	B02	b1	C01	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0041	636.306	OEt	A01	a1	B01	b1	C16	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0042	637.301	OEt	A01	a1	B01	b1	C17	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0043	638.256	OEt	A02	a1	B01	b1	C05	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0044	638.285	OEt	A01	a1	B02	b3	C09	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0045	638.310	OEt	A01	a1	B01	b4	C01	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0046	639.269	OEt	A02	a1	B01	b3	C08	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0047	640.270	OEt	A02	a1	B03	b1	C01	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0048	640.301	OEt	A01	a1	B02	b1	C14	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0049	640.362	OEt	A02	a1	B02	b4	C12	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0050	642.260	OEt	A01	a1	B03	b3	C09	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0051	642.262	OEt	A01	a1	B01	b1	C18	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0052	642.342	OEt	A02	a1	B02	b4	C13	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0053	643.246	OEt	A01	a1	B02	b3	C10	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0054	644.276	OEt	A01	a1	B03	b1	C14	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0055	644.300	OEt	A01	a1	B02	b2	C02	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0056	644.300	OEt	A01	a1	B02	b2	C03	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0057	644.337	OEt	A02	a1	B03	b4	C12	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0058	645.295	OEt	A01	a1	B02	b2	C04	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0059	645.295	OEt	A01	a1	B02	b2	C06	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0060	645.295	OEt	A01	a1	B02	b2	C07	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0061	646.316	OEt	A02	a1	B02	b1	C02	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0062	646.316	OEt	A02	a1	B02	b1	C03	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0063	646.317	OEt	A02	a1	B03	b4	C13	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0064	647.221	OEt	A01	a1	B03	b3	C10	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0065	647.311	OEt	A02	a1	B02	b1	C04	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0066	648.275	OEt	A01	a1	B03	b2	C02	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0067	648.275	OEt	A01	a1	B03	b2	C03	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0068	648.331	OEt	A01	a1	B01	b4	C02	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0069	649.270	OEt	A01	a1	B03	b2	C04	c1	D01	d1	E01

2-2-d1E01-2-0070	649.270	OEt	A01	a1	B03	b2	C06	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0071	649.270	OEt	A01	a1	B03	b2	C07	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0072	649.326	OEt	A01	a1	B02	b1	C15	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0073	650.285	OEt	A02	a1	B01	b3	C09	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0074	650.290	OEt	A02	a1	B03	b1	C02	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0075	650.290	OEt	A02	a1	B03	b1	C03	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0076	650.322	OEt	A01	a1	B02	b1	C16	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0077	651.286	OEt	A02	a1	B03	b1	C04	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0078	651.317	OEt	A01	a1	B02	b1	C17	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0079	652.272	OEt	A02	a1	B02	b1	C05	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0080	652.301	OEt	A02	a1	B01	b1	C14	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0081	652.326	OEt	A01	a1	B02	b4	C01	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0082	653.231	OEt	A01	a1	B04	b1	C01	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0083	653.285	OEt	A02	a1	B02	b3	C08	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0084	653.301	OEt	A01	a1	B03	b1	C15	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0085	654.288	OEt	A01	a1	B01	b4	C05	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0086	654.297	OEt	A01	a1	B03	b1	C16	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0087	655.246	OEt	A02	a1	B01	b3	C10	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0088	655.292	OEt	A01	a1	B03	b1	C17	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0089	656.247	OEt	A02	a1	B03	b1	C05	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0090	656.278	OEt	A01	a1	B02	b1	C18	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0091	656.300	OEt	A02	a1	B01	b2	C02	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0092	656.300	OEt	A02	a1	B01	b2	C03	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0093	656.301	OEt	A01	a1	B03	b4	C01	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0094	657.260	OEt	A02	a1	B03	b3	C08	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0095	657.295	OEt	A02	a1	B01	b2	C04	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0096	657.295	OEt	A02	a1	B01	b2	C06	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0097	657.295	OEt	A02	a1	B01	b2	C07	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0098	657.298	OEt	A01	a1	B04	b4	C12	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0099	659.278	OEt	A01	a1	B04	b4	C13	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0100	660.225	OEt	A01	a1	B01	b1	C01	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0101	660.253	OEt	A01	a1	B03	b1	C18	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0102	661.326	OEt	A02	a1	B01	b1	C15	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0103	662.274	OEt	A01	a1	B01	b3	C11	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0104	662.322	OEt	A02	a1	B01	b1	C16	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0105	662.347	OEt	A01	a1	B02	b4	C02	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0106	663.252	OEt	A01	a1	B04	b1	C02	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0107	663.252	OEt	A01	a1	B04	b1	C03	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0108	663.317	OEt	A02	a1	B01	b1	C17	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0109	664.247	OEt	A01	a1	B04	b1	C04	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0110	664.251	OEt	A01	a1	B05	b1	C01	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0111	664.293	OEt	A01	a1	B01	b4	C12	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0112	664.301	OEt	A02	a1	B02	b3	C09	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0113	664.326	OEt	A02	a1	B01	b4	C01	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0114	666.272	OEt	A01	a1	B01	b4	C13	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0115	666.317	OEt	A02	a1	B02	b1	C14	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0116	666.322	OEt	A01	a1	B03	b4	C02	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0117	668.276	OEt	A02	a1	B03	b3	C09	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0118	668.278	OEt	A02	a1	B01	b1	C18	c1	D01	d1	E01

2-2-d1E01-2-0119	668.303	OEt	A01	a1	B02	b4	C05	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0120	668.319	OEt	A01	a1	B05	b4	C12	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0121	669.208	OEt	A01	a1	B04	b1	C05	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0122	669.262	OEt	A02	a1	B02	b3	C10	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0123	670.221	OEt	A01	a1	B04	b3	C08	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0124	670.246	OEt	A01	a1	B01	b1	C02	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0125	670.246	OEt	A01	a1	B01	b1	C03	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0126	670.292	OEt	A02	a1	B03	b1	C14	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0127	670.298	OEt	A01	a1	B05	b4	C13	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0128	670.316	OEt	A02	a1	B02	b2	C02	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0129	670.316	OEt	A02	a1	B02	b2	C03	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0130	671.241	OEt	A01	a1	B01	b1	C04	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0131	671.311	OEt	A02	a1	B02	b2	C04	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0132	671.311	OEt	A02	a1	B02	b2	C06	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0133	671.311	OEt	A02	a1	B02	b2	C07	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0134	672.278	OEt	A01	a1	B03	b4	C05	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0135	673.237	OEt	A02	a1	B03	b3	C10	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0136	674.241	OEt	A01	a1	B02	b1	C01	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0137	674.272	OEt	A01	a1	B05	b1	C02	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0138	674.272	OEt	A01	a1	B05	b1	C03	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0139	674.290	OEt	A02	a1	B03	b2	C02	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0140	674.290	OEt	A02	a1	B03	b2	C03	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0141	674.347	OEt	A02	a1	B01	b4	C02	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0142	675.267	OEt	A01	a1	B05	b1	C04	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0143	675.286	OEt	A02	a1	B03	b2	C04	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0144	675.286	OEt	A02	a1	B03	b2	C06	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0145	675.286	OEt	A02	a1	B03	b2	C07	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0146	675.342	OEt	A02	a1	B02	b1	C15	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0147	676.203	OEt	A01	a1	B01	b1	C05	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0148	676.290	OEt	A01	a1	B02	b3	C11	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0149	676.337	OEt	A02	a1	B02	b1	C16	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0150	677.216	OEt	A01	a1	B01	b3	C08	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0151	677.333	OEt	A02	a1	B02	b1	C17	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0152	678.216	OEt	A01	a1	B03	b1	C01	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0153	678.309	OEt	A01	a1	B02	b4	C12	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0154	678.342	OEt	A02	a1	B02	b4	C01	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0155	679.246	OEt	A02	a1	B04	b1	C01	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0156	679.317	OEt	A02	a1	B03	b1	C15	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0157	680.228	OEt	A01	a1	B05	b1	C05	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0158	680.265	OEt	A01	a1	B03	b3	C11	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0159	680.288	OEt	A01	a1	B02	b4	C13	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0160	680.303	OEt	A02	a1	B01	b4	C05	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0161	680.312	OEt	A02	a1	B03	b1	C16	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0162	681.237	OEt	A01	a1	B04	b3	C09	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0163	681.241	OEt	A01	a1	B05	b3	C08	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0164	681.307	OEt	A02	a1	B03	b1	C17	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0165	682.284	OEt	A01	a1	B03	b4	C12	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0166	682.294	OEt	A02	a1	B02	b1	C18	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0167	682.317	OEt	A02	a1	B03	b4	C01	c1	D01	d1	E01

2-2-d1E01-2-0168	683.253	OEt	A01	a1	B04	b1	C14	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0169	683.314	OEt	A02	a1	B04	b4	C12	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0170	684.262	OEt	A01	a1	B02	b1	C02	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0171	684.262	OEt	A01	a1	B02	b1	C03	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0172	684.263	OEt	A01	a1	B03	b4	C13	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0173	685.257	OEt	A01	a1	B02	b1	C04	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0174	685.293	OEt	A02	a1	B04	b4	C13	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0175	686.198	OEt	A01	a1	B04	b3	C10	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0176	686.241	OEt	A02	a1	B01	b1	C01	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0177	686.269	OEt	A02	a1	B03	b1	C18	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0178	687.252	OEt	A01	a1	B04	b2	C02	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0179	687.252	OEt	A01	a1	B04	b2	C03	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0180	688.232	OEt	A01	a1	B01	b3	C09	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0181	688.237	OEt	A01	a1	B03	b1	C02	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0182	688.237	OEt	A01	a1	B03	b1	C03	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0183	688.247	OEt	A01	a1	B04	b2	C04	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0184	688.247	OEt	A01	a1	B04	b2	C06	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0185	688.247	OEt	A01	a1	B04	b2	C07	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0186	688.290	OEt	A02	a1	B01	b3	C11	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0187	688.362	OEt	A02	a1	B02	b4	C02	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0188	689.232	OEt	A01	a1	B03	b1	C04	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0189	689.267	OEt	A02	a1	B04	b1	C02	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0190	689.267	OEt	A02	a1	B04	b1	C03	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0191	690.218	OEt	A01	a1	B02	b1	C05	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0192	690.247	OEt	A01	a1	B01	b1	C14	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0193	690.262	OEt	A02	a1	B04	b1	C04	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0194	690.267	OEt	A02	a1	B05	b1	C01	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0195	690.309	OEt	A02	a1	B01	b4	C12	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0196	690.353	OEt	A01	a1	B01	b1	C19	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0197	691.231	OEt	A01	a1	B02	b3	C08	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0198	692.257	OEt	A01	a1	B05	b3	C09	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0199	692.278	OEt	A01	a1	B04	b1	C15	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0200	692.288	OEt	A02	a1	B01	b4	C13	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0201	692.337	OEt	A02	a1	B03	b4	C02	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0202	693.193	OEt	A01	a1	B01	b3	C10	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0203	693.273	OEt	A01	a1	B04	b1	C16	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0204	694.193	OEt	A01	a1	B03	b1	C05	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0205	694.246	OEt	A01	a1	B01	b2	C02	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0206	694.246	OEt	A01	a1	B01	b2	C03	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0207	694.269	OEt	A01	a1	B04	b1	C17	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0208	694.273	OEt	A01	a1	B05	b1	C14	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0209	694.319	OEt	A02	a1	B02	b4	C05	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0210	694.334	OEt	A02	a1	B05	b4	C12	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0211	695.206	OEt	A01	a1	B03	b3	C08	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0212	695.224	OEt	A02	a1	B04	b1	C05	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0213	695.241	OEt	A01	a1	B01	b2	C04	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0214	695.241	OEt	A01	a1	B01	b2	C06	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0215	695.241	OEt	A01	a1	B01	b2	C07	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0216	695.278	OEt	A01	a1	B04	b4	C01	c1	D01	d1	E01

2-2-d1E01-2-0217	696.237	OEt	A02	a1	B04	b3	C08	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0218	696.262	OEt	A02	a1	B01	b1	C02	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0219	696.262	OEt	A02	a1	B01	b1	C03	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0220	696.313	OEt	A02	a1	B05	b4	C13	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0221	697.218	OEt	A01	a1	B05	b3	C10	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0222	697.257	OEt	A02	a1	B01	b1	C04	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0223	698.272	OEt	A01	a1	B05	b2	C02	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0224	698.272	OEt	A01	a1	B05	b2	C03	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0225	698.294	OEt	A02	a1	B03	b4	C05	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0226	699.230	OEt	A01	a1	B04	b1	C18	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0227	699.267	OEt	A01	a1	B05	b2	C04	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0228	699.267	OEt	A01	a1	B05	b2	C06	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0229	699.267	OEt	A01	a1	B05	b2	C07	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0230	699.273	OEt	A01	a1	B01	b1	C15	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0231	700.257	OEt	A02	a1	B02	b1	C01	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0232	700.268	OEt	A01	a1	B01	b1	C16	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0233	700.287	OEt	A02	a1	B05	b1	C02	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0234	700.287	OEt	A02	a1	B05	b1	C03	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0235	701.263	OEt	A01	a1	B01	b1	C17	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0236	701.283	OEt	A02	a1	B05	b1	C04	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0237	702.218	OEt	A02	a1	B01	b1	C05	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0238	702.247	OEt	A01	a1	B02	b3	C09	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0239	702.272	OEt	A01	a1	B01	b4	C01	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0240	702.305	OEt	A02	a1	B02	b3	C11	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0241	703.231	OEt	A02	a1	B01	b3	C08	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0242	703.298	OEt	A01	a1	B05	b1	C15	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0243	704.232	OEt	A02	a1	B03	b1	C01	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0244	704.263	OEt	A01	a1	B02	b1	C14	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0245	704.293	OEt	A01	a1	B05	b1	C16	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0246	704.324	OEt	A02	a1	B02	b4	C12	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0247	704.369	OEt	A01	a1	B02	b1	C19	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0248	705.289	OEt	A01	a1	B05	b1	C17	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0249	705.298	OEt	A01	a1	B04	b4	C02	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0250	706.222	OEt	A01	a1	B03	b3	C09	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0251	706.224	OEt	A01	a1	B01	b1	C18	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0252	706.244	OEt	A02	a1	B05	b1	C05	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0253	706.280	OEt	A02	a1	B03	b3	C11	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0254	706.298	OEt	A01	a1	B05	b4	C01	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0255	706.304	OEt	A02	a1	B02	b4	C13	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0256	707.208	OEt	A01	a1	B02	b3	C10	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0257	707.253	OEt	A02	a1	B04	b3	C09	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0258	707.257	OEt	A02	a1	B05	b3	C08	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0259	708.238	OEt	A01	a1	B03	b1	C14	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0260	708.262	OEt	A01	a1	B02	b2	C02	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0261	708.262	OEt	A01	a1	B02	b2	C03	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0262	708.299	OEt	A02	a1	B03	b4	C12	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0263	708.344	OEt	A01	a1	B03	b1	C19	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0264	709.257	OEt	A01	a1	B02	b2	C04	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0265	709.257	OEt	A01	a1	B02	b2	C06	c2	D02	d1	E01

2-2-d1E01-2-0266	709.257	OEt	A01	a1	B02	b2	C07	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0267	709.268	OEt	A02	a1	B04	b1	C14	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0268	710.250	OEt	A01	a1	B05	b1	C18	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0269	710.277	OEt	A02	a1	B02	b1	C02	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0270	710.277	OEt	A02	a1	B02	b1	C03	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0271	710.279	OEt	A02	a1	B03	b4	C13	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0272	711.183	OEt	A01	a1	B03	b3	C10	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0273	711.255	OEt	A01	a1	B04	b4	C05	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0274	711.273	OEt	A02	a1	B02	b1	C04	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0275	712.214	OEt	A02	a1	B04	b3	C10	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0276	712.237	OEt	A01	a1	B03	b2	C02	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0277	712.237	OEt	A01	a1	B03	b2	C03	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0278	712.293	OEt	A01	a1	B01	b4	C02	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0279	713.232	OEt	A01	a1	B03	b2	C04	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0280	713.232	OEt	A01	a1	B03	b2	C06	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0281	713.232	OEt	A01	a1	B03	b2	C07	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0282	713.267	OEt	A02	a1	B04	b2	C02	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0283	713.267	OEt	A02	a1	B04	b2	C03	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0284	713.288	OEt	A01	a1	B02	b1	C15	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0285	714.247	OEt	A02	a1	B01	b3	C09	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0286	714.252	OEt	A02	a1	B03	b1	C02	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0287	714.252	OEt	A02	a1	B03	b1	C03	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0288	714.262	OEt	A02	a1	B04	b2	C04	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0289	714.262	OEt	A02	a1	B04	b2	C06	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0290	714.262	OEt	A02	a1	B04	b2	C07	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0291	714.284	OEt	A01	a1	B02	b1	C16	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0292	715.248	OEt	A02	a1	B03	b1	C04	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0293	715.279	OEt	A01	a1	B02	b1	C17	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0294	716.234	OEt	A02	a1	B02	b1	C05	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0295	716.263	OEt	A02	a1	B01	b1	C14	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0296	716.288	OEt	A01	a1	B02	b4	C01	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0297	716.319	OEt	A01	a1	B05	b4	C02	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0298	716.369	OEt	A02	a1	B01	b1	C19	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0299	717.193	OEt	A01	a1	B04	b1	C01	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0300	717.247	OEt	A02	a1	B02	b3	C08	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0301	717.263	OEt	A01	a1	B03	b1	C15	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0302	718.249	OEt	A01	a1	B01	b4	C05	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0303	718.258	OEt	A01	a1	B03	b1	C16	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0304	718.273	OEt	A02	a1	B05	b3	C09	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0305	718.294	OEt	A02	a1	B04	b1	C15	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0306	719.208	OEt	A02	a1	B01	b3	C10	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0307	719.241	OEt	A01	a1	B04	b3	C11	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0308	719.254	OEt	A01	a1	B03	b1	C17	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0309	719.289	OEt	A02	a1	B04	b1	C16	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0310	720.209	OEt	A02	a1	B03	b1	C05	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0311	720.240	OEt	A01	a1	B02	b1	C18	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0312	720.262	OEt	A02	a1	B01	b2	C02	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0313	720.262	OEt	A02	a1	B01	b2	C03	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0314	720.263	OEt	A01	a1	B03	b4	C01	c2	D02	d1	E01

2-2-d1E01-2-0315	720.284	OEt	A02	a1	B04	b1	C17	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0316	720.288	OEt	A02	a1	B05	b1	C14	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0317	721.222	OEt	A02	a1	B03	b3	C08	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0318	721.257	OEt	A02	a1	B01	b2	C04	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0319	721.257	OEt	A02	a1	B01	b2	C06	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0320	721.257	OEt	A02	a1	B01	b2	C07	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0321	721.260	OEt	A01	a1	B04	b4	C12	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0322	721.293	OEt	A02	a1	B04	b4	C01	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0323	722.275	OEt	A01	a1	B05	b4	C05	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0324	723.234	OEt	A02	a1	B05	b3	C10	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0325	723.240	OEt	A01	a1	B04	b4	C13	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0326	724.215	OEt	A01	a1	B03	b1	C18	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0327	724.287	OEt	A02	a1	B05	b2	C02	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0328	724.287	OEt	A02	a1	B05	b2	C03	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0329	725.245	OEt	A02	a1	B04	b1	C18	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0330	725.283	OEt	A02	a1	B05	b2	C04	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0331	725.283	OEt	A02	a1	B05	b2	C06	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0332	725.283	OEt	A02	a1	B05	b2	C07	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0333	725.288	OEt	A02	a1	B01	b1	C15	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0334	726.236	OEt	A01	a1	B01	b3	C11	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0335	726.284	OEt	A02	a1	B01	b1	C16	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0336	726.309	OEt	A01	a1	B02	b4	C02	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0337	727.213	OEt	A01	a1	B04	b1	C02	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0338	727.213	OEt	A01	a1	B04	b1	C03	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0339	727.279	OEt	A02	a1	B01	b1	C17	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0340	728.209	OEt	A01	a1	B04	b1	C04	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0341	728.213	OEt	A01	a1	B05	b1	C01	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0342	728.263	OEt	A02	a1	B02	b3	C09	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0343	728.288	OEt	A02	a1	B01	b4	C01	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0344	729.314	OEt	A02	a1	B05	b1	C15	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0345	730.261	OEt	A01	a1	B05	b3	C11	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0346	730.278	OEt	A02	a1	B02	b1	C14	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0347	730.284	OEt	A01	a1	B03	b4	C02	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0348	730.309	OEt	A02	a1	B05	b1	C16	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0349	730.384	OEt	A02	a1	B02	b1	C19	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0350	731.304	OEt	A02	a1	B05	b1	C17	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0351	731.314	OEt	A02	a1	B04	b4	C02	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0352	732.238	OEt	A02	a1	B03	b3	C09	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0353	732.240	OEt	A02	a1	B01	b1	C18	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0354	732.265	OEt	A01	a1	B02	b4	C05	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0355	732.280	OEt	A01	a1	B05	b4	C12	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0356	732.313	OEt	A02	a1	B05	b4	C01	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0357	733.170	OEt	A01	a1	B04	b1	C05	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0358	733.224	OEt	A02	a1	B02	b3	C10	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0359	734.183	OEt	A01	a1	B04	b3	C08	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0360	734.253	OEt	A02	a1	B03	b1	C14	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0361	734.260	OEt	A01	a1	B05	b4	C13	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0362	734.277	OEt	A02	a1	B02	b2	C02	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0363	734.277	OEt	A02	a1	B02	b2	C03	c2	D02	d1	E01

2-2-d1E01-2-0364	734.359	OEt	A02	a1	B03	b1	C19	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0365	735.273	OEt	A02	a1	B02	b2	C04	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0366	735.273	OEt	A02	a1	B02	b2	C06	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0367	735.273	OEt	A02	a1	B02	b2	C07	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0368	736.240	OEt	A01	a1	B03	b4	C05	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0369	736.265	OEt	A02	a1	B05	b1	C18	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0370	737.199	OEt	A02	a1	B03	b3	C10	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0371	737.271	OEt	A02	a1	B04	b4	C05	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0372	738.234	OEt	A01	a1	B05	b1	C02	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0373	738.234	OEt	A01	a1	B05	b1	C03	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0374	738.252	OEt	A02	a1	B03	b2	C02	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0375	738.252	OEt	A02	a1	B03	b2	C03	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0376	738.309	OEt	A02	a1	B01	b4	C02	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0377	739.229	OEt	A01	a1	B05	b1	C04	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0378	739.248	OEt	A02	a1	B03	b2	C04	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0379	739.248	OEt	A02	a1	B03	b2	C06	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0380	739.248	OEt	A02	a1	B03	b2	C07	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0381	739.304	OEt	A02	a1	B02	b1	C15	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0382	740.252	OEt	A01	a1	B02	b3	C11	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0383	740.299	OEt	A02	a1	B02	b1	C16	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0384	741.294	OEt	A02	a1	B02	b1	C17	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0385	742.304	OEt	A02	a1	B02	b4	C01	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0386	742.334	OEt	A02	a1	B05	b4	C02	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0387	743.208	OEt	A02	a1	B04	b1	C01	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0388	743.279	OEt	A02	a1	B03	b1	C15	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0389	744.190	OEt	A01	a1	B05	b1	C05	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0390	744.227	OEt	A01	a1	B03	b3	C11	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0391	744.265	OEt	A02	a1	B01	b4	C05	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0392	744.274	OEt	A02	a1	B03	b1	C16	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0393	745.199	OEt	A01	a1	B04	b3	C09	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0394	745.203	OEt	A01	a1	B05	b3	C08	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0395	745.257	OEt	A02	a1	B04	b3	C11	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0396	745.269	OEt	A02	a1	B03	b1	C17	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0397	746.256	OEt	A02	a1	B02	b1	C18	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0398	746.279	OEt	A02	a1	B03	b4	C01	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0399	747.215	OEt	A01	a1	B04	b1	C14	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0400	747.276	OEt	A02	a1	B04	b4	C12	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0401	747.320	OEt	A01	a1	B04	b1	C19	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0402	748.291	OEt	A02	a1	B05	b4	C05	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0403	749.255	OEt	A02	a1	B04	b4	C13	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0404	750.160	OEt	A01	a1	B04	b3	C10	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0405	750.231	OEt	A02	a1	B03	b1	C18	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0406	751.213	OEt	A01	a1	B04	b2	C02	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0407	751.213	OEt	A01	a1	B04	b2	C03	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0408	752.209	OEt	A01	a1	B04	b2	C04	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0409	752.209	OEt	A01	a1	B04	b2	C06	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0410	752.209	OEt	A01	a1	B04	b2	C07	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0411	752.252	OEt	A02	a1	B01	b3	C11	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0412	752.324	OEt	A02	a1	B02	b4	C02	c2	D02	d1	E01

2-2-d1E01-2-0413	753.229	OEt	A02	a1	B04	b1	C02	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0414	753.229	OEt	A02	a1	B04	b1	C03	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0415	754.224	OEt	A02	a1	B04	b1	C04	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0416	754.228	OEt	A02	a1	B05	b1	C01	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0417	754.315	OEt	A01	a1	B01	b1	C19	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0418	756.219	OEt	A01	a1	B05	b3	C09	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0419	756.240	OEt	A01	a1	B04	b1	C15	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0420	756.277	OEt	A02	a1	B05	b3	C11	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0421	756.299	OEt	A02	a1	B03	b4	C02	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0422	757.235	OEt	A01	a1	B04	b1	C16	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0423	758.230	OEt	A01	a1	B04	b1	C17	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0424	758.235	OEt	A01	a1	B05	b1	C14	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0425	758.281	OEt	A02	a1	B02	b4	C05	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0426	758.296	OEt	A02	a1	B05	b4	C12	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0427	758.340	OEt	A01	a1	B05	b1	C19	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0428	759.186	OEt	A02	a1	B04	b1	C05	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0429	759.240	OEt	A01	a1	B04	b4	C01	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0430	760.199	OEt	A02	a1	B04	b3	C08	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0431	760.275	OEt	A02	a1	B05	b4	C13	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0432	761.180	OEt	A01	a1	B05	b3	C10	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0433	762.234	OEt	A01	a1	B05	b2	C02	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0434	762.234	OEt	A01	a1	B05	b2	C03	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0435	762.256	OEt	A02	a1	B03	b4	C05	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0436	763.192	OEt	A01	a1	B04	b1	C18	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0437	763.229	OEt	A01	a1	B05	b2	C04	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0438	763.229	OEt	A01	a1	B05	b2	C06	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0439	763.229	OEt	A01	a1	B05	b2	C07	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0440	764.249	OEt	A02	a1	B05	b1	C02	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0441	764.249	OEt	A02	a1	B05	b1	C03	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0442	765.244	OEt	A02	a1	B05	b1	C04	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0443	766.267	OEt	A02	a1	B02	b3	C11	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0444	767.260	OEt	A01	a1	B05	b1	C15	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0445	768.255	OEt	A01	a1	B05	b1	C16	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0446	768.331	OEt	A01	a1	B02	b1	C19	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0447	769.251	OEt	A01	a1	B05	b1	C17	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0448	769.260	OEt	A01	a1	B04	b4	C02	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0449	770.206	OEt	A02	a1	B05	b1	C05	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0450	770.242	OEt	A02	a1	B03	b3	C11	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0451	770.260	OEt	A01	a1	B05	b4	C01	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0452	771.215	OEt	A02	a1	B04	b3	C09	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0453	771.219	OEt	A02	a1	B05	b3	C08	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0454	772.305	OEt	A01	a1	B03	b1	C19	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0455	773.230	OEt	A02	a1	B04	b1	C14	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0456	773.336	OEt	A02	a1	B04	b1	C19	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0457	774.212	OEt	A01	a1	B05	b1	C18	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0458	775.217	OEt	A01	a1	B04	b4	C05	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0459	776.176	OEt	A02	a1	B04	b3	C10	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0460	777.229	OEt	A02	a1	B04	b2	C02	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0461	777.229	OEt	A02	a1	B04	b2	C03	c2	D02	d1	E01

2-2-d1E01-2-0462	778.224	OEt	A02	a1	B04	b2	C04	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0463	778.224	OEt	A02	a1	B04	b2	C06	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0464	778.224	OEt	A02	a1	B04	b2	C07	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0465	780.280	OEt	A01	a1	B05	b4	C02	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0466	780.331	OEt	A02	a1	B01	b1	C19	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0467	782.235	OEt	A02	a1	B05	b3	C09	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0468	782.256	OEt	A02	a1	B04	b1	C15	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0469	783.203	OEt	A01	a1	B04	b3	C11	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0470	783.251	OEt	A02	a1	B04	b1	C16	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0471	784.246	OEt	A02	a1	B04	b1	C17	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0472	784.250	OEt	A02	a1	B05	b1	C14	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0473	784.356	OEt	A02	a1	B05	b1	C19	c1	D01	d1	E01
2-2-d1E01-2-0474	785.255	OEt	A02	a1	B04	b4	C01	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0475	786.237	OEt	A01	a1	B05	b4	C05	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0476	787.196	OEt	A02	a1	B05	b3	C10	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0477	788.249	OEt	A02	a1	B05	b2	C02	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0478	788.249	OEt	A02	a1	B05	b2	C03	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0479	789.207	OEt	A02	a1	B04	b1	C18	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0480	789.244	OEt	A02	a1	B05	b2	C04	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0481	789.244	OEt	A02	a1	B05	b2	C06	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0482	789.244	OEt	A02	a1	B05	b2	C07	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0483	793.276	OEt	A02	a1	B05	b1	C15	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0484	794.223	OEt	A01	a1	B05	b3	C11	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0485	794.271	OEt	A02	a1	B05	b1	C16	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0486	794.346	OEt	A02	a1	B02	b1	C19	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0487	795.266	OEt	A02	a1	B05	b1	C17	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0488	795.276	OEt	A02	a1	B04	b4	C02	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0489	796.275	OEt	A02	a1	B05	b4	C01	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0490	798.321	OEt	A02	a1	B03	b1	C19	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0491	800.227	OEt	A02	a1	B05	b1	C18	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0492	801.232	OEt	A02	a1	B04	b4	C05	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0493	806.296	OEt	A02	a1	B05	b4	C02	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0494	809.219	OEt	A02	a1	B04	b3	C11	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0495	811.282	OEt	A01	a1	B04	b1	C19	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0496	812.253	OEt	A02	a1	B05	b4	C05	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0497	820.239	OEt	A02	a1	B05	b3	C11	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0498	822.302	OEt	A01	a1	B05	b1	C19	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0499	837.298	OEt	A02	a1	B04	b1	C19	c2	D02	d1	E01
2-2-d1E01-2-0500	848.318	OEt	A02	a1	B05	b1	C19	c2	D02	d1	E01

【０６８６】

実施例６－９：混合物の分析

実施例６－８にて合成した混合物は、以下に示す分析条件により保持時間の測定と質量分析を実施し、Ｃｏｍｐｏｕｎｄ Ｄｉｓｃｏｖｅｒｅｒ ３．２（Ｔｈｅｒｍｏ Ｆｉｓｈｅｒ Ｓｃｉｅｎｔｉｆｉｃ）を用いて解析した。

【０６８７】

逆相ＬＣ／ＭＳ条件

【表１３０】

Vanquish UHPLC (Thermo Fisher Scientific)	
Oven (℃)	35
Column	Ascentis Express C18 2.1mmI.D.x150mm, 2.7μm
Auto Sampler (℃)	20
移動相	A) 0.1%FA H_2O B) 0.1%FA MeCN
勾配	A/B = 95/5 → 0/100 (18min) → 0/100 (20min)
流速	0.5 mL/min
Orbitrap Fusion Lumos Tribrid 質量分析計 (Thermo Fisher Scientific)	
Polarity	Positive / Negative mode
Data Type	profile

【０６８８】

各混合物の分析結果について［表６－９－１］に示す。表には観測されたＭＳピークのｍ／ｚと保持時間、ならびに各ＭＳピークに帰属することのできる化合物の番号を示す。

［表６－９－１］混合物２－２－ｄ１Ｅ０１－２中に含まれうる化合物

【表１３１】

イオン種	m/z $[M+H]^+$ or $[M-H]^-$	MSピークの保持時間 (min)	帰属された化合物の番号 (2-2-d1E01-2を省略して表記)
M+H	597.2700	14.696	0001
M+H	601.3383	14.482	0002
M+H	603.3171	14.204	0003
M+H	607.2905	15.122	0004, 0005
M+H	607.2905	14.919	0004, 0005
M+H	608.2866	13.889	0006
M+H	611.2861	15.147	0007
M+H	613.2482	15.043	0008
M+H	614.2617	12.974	0009
M+H	615.2623	6.987	0010
M+H	615.3532	14.889	0011
M+H	617.3328	14.608	0012
M+H	619.3288	14.504	0013
M+H	621.3088	14.296	0014, 0015, 0016
M+H	621.3067	12.096	0014, 0015, 0016
M+H	621.3088	14.243	0014, 0015, 0016
M+H	622.3028	14.428	0017
M+H	623.2859	15.272	0018
M-H	623.2639	14.887	0019, 0020, 0021
M+H	625.2816	15.016	0019, 0020, 0021
M+H	625.2814	14.960	0019, 0020, 0021

M+H	626.2767	13.968	0022
M+H	627.2627	15.423	0023
M+H	627.2915	14.537	0024
M+H	627.3539	15.297	0025
M+H	628.2769	14.293	0026
M+H	629.3326	14.949	0027
M+H	630.2375	15.081	0028
M+H	631.2380	15.134	0029
M+H	631.2908	15.614	0030, 0031
M+H	631.2908	15.539	0030, 0031
M+H	632.2531	12.889	0032
M+H	632.2860	14.807	0033, 0034, 0035
M+H	632.2867	15.907	0033, 0034, 0035
M+H	632.2869	16.259	0033, 0034, 0035
M+H	633.3050	15.475	0036, 0037
M+H	633.3047	15.351	0036, 0037
M+H	634.3025	14.455	0038
M+H	636.3179	13.740	0039
M+H	637.3019	14.694	0040
M+H	637.3126	15.729	0041
M+H	638.3083	14.688	0042
M+H	639.2632	9.250	0043
M-H	637.2761	14.198	0044
M+H	639.3184	15.051	0045
M+H	640.2791	8.682	0046
M+H	641.2769	15.285	0047
M-H	639.2912	14.958	0048
M+H	641.3694	15.778	0049
M+H	643.2702	15.072	0050, 0051
M+H	643.2702	15.134	0050, 0051
M+H	643.3494	15.327	0052
M+H	644.2537	15.412	0053
M+H	645.2824	14.576	0054
M+H	645.3068	12.028	0055, 0056
M+H	645.3064	15.933	0055, 0056
M+H	645.3437	13.261	0057
M+H	646.3015	16.241	0058, 0059, 0060
M+H	646.3016	16.181	0058, 0059, 0060
M+H	646.3018	10.947	0058, 0059, 0060
M+H	647.3231	15.003	0061, 0062, 0063
M+H	647.3228	14.900	0061, 0062, 0063
M+H	647.3224	12.930	0061, 0062, 0063
M+H	648.2294	15.058	0064
M+H	648.3180	12.665	0065
M+H	649.2832	15.579	0066, 0067
M+H	649.2819	11.785	0066, 0067
M+H	649.3388	15.645	0068
M+H	650.2763	14.860	0069, 0070, 0071
M+H	650.2765	15.940	0069, 0070, 0071

M+H	650.2766	16.250	0069, 0070, 0071
M+H	650.3334	14.163	0072
M-H	649.2795	15.455	0073, 0074, 0075
M+H	651.2961	15.404	0073, 0074, 0075
M+H	651.2962	15.363	0073, 0074, 0075
M+H	651.3290	16.039	0076
M+H	652.2933	14.579	0077
M+H	652.3244	15.070	0078
M+H	653.2792	10.757	0079
M+H	653.3093	15.101	0080
M+H	653.3326	15.480	0081
M+H	654.2384	15.324	0082
M-H	652.2744	13.889	0083
M+H	654.3060	14.751	0084
M+H	655.2942	15.238	0085
M+H	655.3032	15.710	0086
M+H	656.2560	12.823	0087
M+H	656.2988	14.704	0088
M+H	657.2539	15.572	0089
M+H	657.2854	15.486	0090
M+H	657.3065	16.078	0091, 0092, 0093
M+H	657.3064	15.895	0091, 0092, 0093
M+H	657.3062	15.939	0091, 0092, 0093
M+H	658.2699	13.281	0094
M+H	658.3030	15.335	0095, 0096, 0097, 0098
M+H	658.3051	14.256	0095, 0096, 0097, 0098
M+H	658.3016	16.313	0095, 0096, 0097, 0098
M+H	658.3066	15.104	0095, 0096, 0097, 0098
M+H	660.2847	14.853	0099
M-H	659.2151	14.191	0100
M+H	661.2592	15.175	0101
M+H	662.3324	16.234	0102
M+H	663.2809	15.337	0103
M+H	663.3287	12.907	0104
M+H	663.3537	15.934	0105
M+H	664.2590	15.542	0106, 0107
M+H	664.2584	15.402	0106, 0107
M+H	664.3226	15.155	0108
M+H	665.2532	14.524	0109, 0110
M+H	665.2612	15.651	0110
M+H	665.2999	14.028	0111
M+H	665.3079	11.568	0112
M+H	665.3321	15.756	0113
M+H	667.2789	13.746	0114
M+H	667.3238	15.460	0115
M+H	667.3290	15.686	0116
M+H	669.2821	11.183	0117, 0118
M+H	669.2885	13.655	0118
M+H	669.3091	15.739	0119

M-H	667.3071	15.463	0120
M+H	670.2146	15.630	0121
M+H	670.2711	12.694	0122
M+H	671.2284	12.538	0123
M+H	671.2531	14.488	0124, 0125
M+H	671.2522	14.279	0124, 0125
M+H	671.3001	15.109	0126
M+H	671.3035	15.238	0126, 0127
M+H	671.3218	16.387	0128, 0129
M+H	671.3216	16.247	0128, 0129
M-H	670.2322	13.571	0130
M+H	672.3181	15.682	0131, 0132, 0133
M+H	672.3179	16.914	0131, 0132, 0133
M+H	672.3175	16.691	0131, 0132, 0133
M+H	673.2842	15.482	0134
M+H	674.2440	15.552	0135
M+H	675.2477	14.586	0136
M+H	675.2789	15.772	0137, 0138
M+H	675.2789	15.811	0137, 0138
M+H	675.2966	16.078	0139, 0140
M+H	675.2966	15.904	0139, 0140
M+H	675.3543	16.185	0141
M+H	676.2744	15.052	0142
M+H	676.2923	15.347	0143, 0144, 0145
M+H	676.2920	16.367	0143, 0144, 0145
M+H	676.2920	16.644	0143, 0144, 0145
M+H	676.3493	13.106	0146
M+H	677.2086	14.513	0147
M+H	677.2965	15.678	0148
M+H	677.3478	9.909	0149
M+H	678.2221	13.975	0150
M+H	678.3387	15.361	0151
M+H	679.2236	14.310	0152
M+H	679.3150	14.404	0153
M+H	679.3488	16.081	0154
M+H	680.2535	15.948	0155
M+H	680.3219	8.435	0156
M+H	681.2343	15.911	0157
M+H	681.2700	15.406	0158
M+H	681.2944	14.111	0159
M+H	681.3110	16.047	0160
M+H	681.3208	16.272	0161
M+H	682.2436	14.958	0162, 0163
M+H	682.2471	11.698	0162, 0163
M+H	682.3142	15.112	0164
M-H	681.2722	11.935	0165
M+H	683.2999	9.765	0166
M+H	683.3224	15.803	0167
M+H	684.2598	15.116	0168

M-H	682.3025	15.958	0169
M+H	685.2700	13.853	0170, 0171, 0172
M+H	685.2689	14.638	0170, 0171, 0172
M+H	685.2699	13.808	0170, 0171, 0172
M+H	686.2637	14.054	0173
M+H	686.2999	14.704	0174
M-H	685.1864	15.538	0175
M-H	685.2309	13.716	0176
M+H	687.2749	15.625	0177
M+H	688.2579	16.053	0178, 0179
M+H	688.2575	16.154	0178, 0179
M+H	689.2409	13.919	0180, 0181, 0182
M+H	689.2429	14.344	0180, 0181, 0182
M+H	689.2432	14.503	0180, 0181, 0182
M+H	689.2534	15.387	0183, 0184, 0185
M+H	689.2544	16.398	0183, 0184, 0185
M+H	689.2546	16.431	0183, 0184, 0185
M+H	689.2943	13.377	0186
M+H	689.3677	16.559	0187
M+H	690.2391	13.728	0188
M+H	690.2752	15.893	0189, 0190
M+H	690.2755	15.972	0189, 0190
M+H	691.2248	14.868	0191
M+H	691.2539	13.847	0192
M+H	691.2686	15.128	0193
M-H	689.2561	16.054	0193, 0194
M+H	691.3149	14.892	0195
M+H	691.3597	14.749	0196
M+H	692.2393	14.420	0197
M+H	693.2641	14.062	0198
M+H	693.2839	15.780	0199
M+H	693.2937	14.578	0200
M+H	693.3420	15.743	0201
M+H	694.1984	14.328	0202
M+H	694.2799	16.231	0203
M+H	695.1989	14.625	0204
M+H	695.2519	14.981	0205, 0206
M+H	695.2518	14.926	0205, 0206
M+H	695.2759	15.337	0207, 0208
M+H	695.2786	15.481	0207, 0208
M-H	693.3088	14.896	0209
M+H	695.3424	16.141	0210
M+H	696.2156	12.557	0211
M+H	696.2310	16.112	0212
M+H	696.2493	15.089	0213, 0214, 0215
M+H	696.2474	15.166	0213, 0214, 0215
M-H	694.2321	15.038	0213, 0214, 0215
M+H	696.2854	14.913	0216
M+H	697.2457	15.654	0217

M+H	697.2725	5.181	0218, 0219
M-H	695.2539	12.461	0218, 0219
M+H	697.3196	15.865	0220
M+H	698.2246	15.891	0221
M+H	698.2637	12.413	0222
M+H	699.2769	16.374	0223, 0224
M+H	699.2758	13.030	0223, 0224
M+H	699.3023	16.038	0225
M+H	700.2372	15.658	0226
M+H	700.2730	15.730	0227, 0228, 0229
M+H	700.2727	16.669	0227, 0228, 0229
M+H	700.2724	16.620	0227, 0228, 0229
M+H	700.2789	14.266	0227, 0228, 0229, 0230
M+H	701.2637	15.166	0231
M+H	701.2745	15.051	0232
M+H	701.2929	16.231	0233, 0234
M+H	701.2928	16.280	0233, 0234
M+H	702.2704	13.795	0235
M+H	702.2886	15.433	0236
M+H	703.2235	14.063	0237
M-H	701.2362	14.398	0238
M+H	703.2793	14.448	0239
M+H	703.3118	16.165	0240
M+H	704.2366	14.606	0241
M+H	704.3046	14.926	0242
M+H	705.2379	14.804	0243
M+H	705.2697	14.218	0244
M+H	705.2996	16.506	0245
M-H	703.3129	15.277	0246
M+H	705.3754	15.121	0247
M+H	706.2959	15.598	0248
M+H	706.3063	16.173	0249
M+H	707.2322	14.452	0250, 0251
M+H	707.2319	14.508	0250, 0251
M+H	707.2520	13.875	0252
M+H	707.2881	15.809	0253
M+H	707.3038	15.953	0254
M-H	705.2944	14.965	0254, 0255
M+H	708.2143	14.707	0256
M+H	708.2591	15.778	0257, 0258
M+H	708.2606	15.857	0257, 0258
M+H	709.2441	13.937	0259
M+H	709.2694	15.348	0260, 0261
M+H	709.2691	15.246	0260, 0261
M+H	709.3085	14.748	0262
M+H	709.3497	14.787	0263
M+H	710.2637	15.481	0264, 0265, 0266
M+H	710.2665	15.431	0264, 0265, 0266
M+H	710.2647	13.700	0264, 0265, 0266

M+H	710.2752	15.677	0267
M+H	711.2562	15.986	0268
M+H	711.2840	14.603	0269, 0270, 0271
M+H	711.2844	14.518	0269, 0270, 0271
M-H	709.2669	14.548	0269, 0270, 0271
M-H	710.1717	14.399	0272
M+H	712.2617	15.261	0273
M+H	712.2798	14.674	0274
M+H	713.2196	16.047	0275
M+H	713.2433	15.014	0276, 0277
M+H	713.2435	15.153	0276, 0277
M+H	713.2988	15.066	0278
M+H	714.2385	15.203	0279, 0280, 0281
M-H	712.2210	15.134	0279, 0280, 0281
M+H	714.2409	12.704	0279, 0280, 0281
M+H	714.2731	16.447	0282, 0283
M+H	714.2727	16.603	0282, 0283
M+H	714.2978	13.061	0284
M-H	713.2410	14.812	0285, 0286, 0287
M+H	715.2626	13.342	0286, 0287
M+H	715.2589	14.890	0285, 0286, 0287
M+H	715.2688	15.932	0288, 0289, 0290
M+H	715.2708	16.887	0288, 0289, 0290
M+H	715.2700	17.146	0288, 0289, 0290
M+H	715.2897	15.426	0291
M+H	716.2548	14.298	0292
M+H	716.2858	14.182	0293
M+H	717.2704	14.547	0295
M+H	717.2943	14.853	0296
M+H	717.3243	16.392	0297
M+H	717.3742	15.211	0298
M+H	718.2005	14.775	0299
M+H	718.2547	14.934	0300
M+H	718.2731	14.594	0301
M+H	719.2564	14.813	0302
M+H	719.2662	15.123	0303
M+H	719.2816	12.000	0304
M+H	719.3001	15.940	0305
M+H	720.2122	14.882	0306
M+H	720.2518	13.301	0307
M+H	720.2608	13.843	0308
M+H	720.2963	16.834	0309
M+H	721.2140	15.169	0310
M+H	721.2463	14.882	0311
M-H	719.2510	14.566	0312, 0313, 0314
M+H	721.2697	15.587	0312, 0313, 0314
M+H	721.2697	15.532	0312, 0313, 0314
M+H	721.2913	15.838	0315, 0316
M+H	721.2929	15.893	0315, 0316

M-H	720.2103	14.686	0317
M+H	722.2631	15.756	0318, 0319, 0320, 0321
M+H	722.2669	13.721	0318, 0319, 0320, 0321
M-H	720.2467	15.631	0318, 0319, 0320
M-H	720.2508	13.815	0318, 0319, 0320, 0321
M+H	722.2992	16.317	0322
M+H	723.2815	16.199	0323
M+H	724.2387	16.305	0324
M+H	724.2471	14.392	0325
M+H	725.2211	14.578	0326
M+H	725.2955	16.695	0327, 0328
M+H	725.2958	16.581	0327, 0328
M+H	726.2520	16.158	0329
M+H	726.2903	17.016	0330, 0331, 0332
M+H	726.2903	16.972	0330, 0331, 0332
M+H	726.2903	16.934	0330, 0331, 0332
M+H	726.2940	12.059	0330, 0331, 0332, 0333
M-H	725.2258	14.954	0334
M+H	727.2903	12.454	0335
M+H	727.3138	11.980	0336
M+H	728.2205	14.848	0337, 0338
M+H	728.2207	15.005	0337, 0338
M+H	728.2862	12.117	0339
M+H	729.2151	14.346	0340, 0341
M+H	729.2192	15.189	0340, 0341
M+H	729.2687	12.745	0342
M-H	727.2771	15.127	0343
M+H	730.3212	15.568	0344
M+H	731.2691	16.181	0345
M+H	731.2845	14.894	0346
M+H	731.2898	15.085	0346, 0347
M+H	731.3160	16.894	0348
M+H	731.3908	15.617	0349
M+H	732.3112	16.048	0350
M+H	732.3211	16.756	0351
M+H	733.2442	12.441	0352, 0353
M-H	731.2352	13.634	0353
M+H	733.2703	15.165	0354
M-H	731.2705	14.969	0355
M+H	733.3203	16.456	0356
M+H	734.1764	15.150	0357
M+H	734.2307	6.846	0358
M+H	735.1901	14.625	0359
M-H	733.2482	14.775	0360, 0361
M-H	733.2482	14.709	0360, 0361
M+H	735.2835	15.936	0362, 0363
M+H	735.2845	15.878	0362, 0363
M+H	735.3650	15.263	0364
M+H	736.2789	16.108	0365, 0366, 0367

M+H	736.2790	16.173	0365, 0366, 0367
M+H	736.2785	15.980	0365, 0366, 0367
M+H	737.2462	14.908	0368
M+H	737.2719	16.369	0369
M-H	736.1887	14.918	0370
M+H	738.2766	16.576	0371
M+H	739.2393	15.398	0372, 0373
M+H	739.2407	15.336	0372, 0373
M+H	739.2604	15.597	0374, 0375
M+H	739.2604	15.511	0374, 0375
M-H	737.2974	15.716	0376
M+H	740.2356	14.904	0377
M+H	740.2531	15.819	0378, 0379, 0380
M+H	740.2537	15.781	0378, 0379, 0380
M+H	740.2537	15.671	0378, 0379, 0380
M+H	740.3100	12.806	0381
M+H	741.2568	15.288	0382
M+H	741.3096	9.676	0383
M+H	742.3002	14.779	0384
M+H	743.3116	15.527	0385
M-H	741.3232	16.856	0386
M+H	744.2160	15.309	0387
M+H	744.2853	12.163	0388
M+H	745.1982	15.543	0389
M+H	745.2339	15.023	0390
M+H	745.2703	14.506	0391
M+H	745.2809	15.569	0392
M+H	746.2049	14.573	0393
M-H	744.1920	15.052	0393, 0394
M+H	746.2646	16.389	0395
M+H	746.2754	12.248	0396
M+H	747.2625	9.439	0397
M+H	747.2836	15.210	0398
M+H	748.2211	14.478	0399
M+H	748.2840	15.497	0400
M+H	748.3258	15.401	0401
M+H	749.2987	16.751	0402
M+H	750.2619	15.160	0403
M+H	751.1658	14.867	0404
M+H	751.2370	15.002	0405
M+H	752.2206	15.544	0406, 0407
M+H	752.2206	15.636	0406, 0407
M+H	753.2157	15.755	0408, 0409, 0410
M+H	753.2147	15.684	0408, 0409, 0410
M+H	753.2151	15.986	0408, 0409, 0410
M-H	751.2414	13.907	0411
M+H	753.3296	16.027	0412
M+H	754.2363	15.412	0413, 0414
M+H	754.2326	14.937	0413, 0414

M+H	755.2312	14.911	0415, 0416
M+H	755.2321	15.191	0415, 0416
M+H	755.3214	14.186	0417
M-H	755.2071	14.990	0418
M+H	757.2458	14.884	0419
M+H	757.2832	16.458	0420
M-H	755.2882	15.716	0421
M+H	758.2430	15.587	0422
M+H	759.2373	14.515	0423, 0424
M+H	759.2415	12.819	0423, 0424
M+H	759.2869	15.865	0425
M+H	759.3062	14.828	0426
M+H	759.3477	15.654	0427
M+H	760.1927	15.691	0428
M+H	760.2460	14.238	0429
M+H	761.2066	15.112	0430
M-H	759.2638	15.440	0431
M-H	760.1697	15.288	0432
M+H	763.2394	15.922	0433, 0434
M+H	763.2386	15.828	0433, 0434
M+H	763.2633	15.550	0435
M+H	764.1980	15.051	0436
M+H	764.2380	16.243	0437, 0438, 0439
M+H	764.2354	16.176	0437, 0438, 0439
M-H	762.2194	15.943	0437, 0438, 0439
M+H	765.2536	15.816	0440, 0441
M+H	765.2537	15.682	0440, 0441
M+H	766.2520	15.404	0442
M+H	767.2719	15.780	0443
M+H	768.2659	15.162	0444
M+H	769.2614	15.866	0445
M+H	769.3378	14.525	0446
M+H	770.2595	14.886	0447
M+H	770.2678	15.601	0448
M+H	771.2112	15.992	0449
M+H	771.2525	15.556	0450
M+H	771.2674	15.347	0451
M+H	772.2210	15.190	0452, 0453
M+H	772.2260	15.349	0452, 0453
M+H	773.3114	14.271	0454
M+H	774.2370	15.074	0455
M+H	774.3417	15.892	0456
M+H	775.2194	15.392	0457
M+H	776.2236	14.575	0458
M+H	777.1824	15.363	0459
M+H	778.2366	16.114	0460, 0461
M+H	778.2366	15.987	0460, 0461
M+H	779.2302	16.395	0462, 0463, 0464
M+H	779.2316	16.251	0462, 0463, 0464

M+H	779.2294	16.318	0462, 0463, 0464
M-H	779.2695	15.859	0465
M+H	781.3363	17.162	0466
M-H	781.2268	11.623	0467
M+H	783.2632	15.427	0468
M+H	784.2102	15.552	0469
M+H	784.2603	16.192	0470
M+H	785.2568	15.351	0471, 0472
M+H	785.2561	15.321	0471, 0472
M+H	785.3619	16.075	0473
M+H	786.2610	15.756	0474
M-H	785.2274	15.237	0475
M-H	786.1838	15.730	0476
M-H	787.2369	16.313	0477, 0478
M-H	787.2369	16.178	0477, 0478
M+H	790.2144	15.617	0479
M+H	790.2533	12.709	0480, 0481, 0482
M+H	790.2533	12.658	0480, 0481, 0482
M+H	790.2500	16.711	0480, 0481, 0482
M+H	794.2830	13.227	0483
M+H	795.2302	15.869	0484
M+H	795.2762	16.377	0485
M+H	795.3538	15.107	0486
M+H	796.2764	15.337	0487
M+H	796.2826	16.237	0488
M+H	797.2821	15.929	0489
M+H	799.3282	14.758	0490
M-H	799.2175	11.809	0491
M+H	802.2412	16.026	0492
M-H	805.2846	16.379	0493
M+H	810.2230	12.284	0494
M+H	812.2878	14.822	0495
M-H	811.2443	15.464	0496
M+H	821.2457	16.239	0497
M+H	823.3086	15.090	0498
M+H	838.3043	15.376	0499
M+H	849.3260	15.594	0500

【０６８９】

以上の結果より、本実施例内にて示される反応条件において、種々の反応性官能基を有するアレノールに対し高選択的なエチル化を行い、また、カラム等の操作不要な後処理を実施することで、官能基に多様性を有する５００化合物、または１０００化合物が混合している化合物ライブラリを構築できることが示された。

【０６９０】

なお、前述（実施例６－５－１，６－５－２）の通り、本発明の本手法によってエチル化された化合物群が、実際に混合物ライブラリとして実用可能であることを例示するとともに、所望の化合物群が得られていることを実証する目的で、合成した混合物のＡＳ－ＭＳを用いたＢｃｌ－２に対する結合評価（実施例７）、ＡＳ－ＭＳにより同定されたＢｃｌ－２結合化合物の個別合成（実施例８）、個別合成した化合物の表面プラズモン共鳴（ＳＰＲ）によるＢｃｌ－２に対する結合評価（実施例９）を実施した。

【０６９１】

実施例７：ＡＳ－ＭＳを用いたＢｃｌ－２に対する合成混合物ライブラリ化合物（実施例６－５－１と実施例６－５－２）にて調製した、１１５２化合物の存在が確認されている混合物ライブラリ）の結合評価

ＭＩＣＲＯＰＬＡＴＥ，９６ウェル，ＰＰ，Ｖ－ＢＯＴＴＯＭ（Ｇｒｅｉｎｅｒ ｂｉｏ－ｏｎｅ，６５１２０１）の１ウェルに対して，実施例６中に示す［表ＡＩ－０３－Ｂ４Ｊ－０１］、［表ＡＩ－０３－Ｂ１Ｍ－０１］、［表ＡＩ－０３－Ｂ１Ｋ－０１］、［表ＡＩ－０３－Ｂ１Ｏ－０１］、［表ＡＩ－０３－Ｂ１Ａ－０１］、［表ＡＩ－０３－Ｂ３Ａ－０１］、［表ＡＩ－０３－Ｂ２Ｉ－０１］、［表ＡＩ－０３－Ｂ２Ｌ－０１］、［表ＡＩ－０３－Ｂ２Ｎ－０１］、［表ＡＩ－０３－Ｂ２Ａ－０１］、［表ＡＩ－０３－Ｂ２Ｑ－０１］、［ＡＩ－０３－Ｂ２Ｒ－０１］に記した、各々１００化合物が混合された１２種類の混合物、ｍｉｘＡＩ－Ｂ４Ｊ－０１、ｍｉｘＡＩ－Ｂ１Ｍ－０１、ｍｉｘＡＩ－Ｂ１Ｋ－０１、ｍｉｘＡＩ－Ｂ１Ｏ－０１、ｍｉｘＡＩ－Ｂ１Ａ－０１、ｍｉｘＡＩ－Ｂ３Ａ－０１、ｍｉｘＡＩ－Ｂ２Ｉ－０１、ｍｉｘＡＩ－Ｂ２Ｌ－０１、ｍｉｘＡＩ－Ｂ２Ｎ－０１、ｍｉｘＡＩ－Ｂ２Ａ－０１、ｍｉｘＡＩ－Ｂ２Ｑ－０１、ｍｉｘＡＩ－Ｂ２Ｒ－０１のＤＭＳＯ溶液（各混合物の平均分子量からの計算に基づき、およそ０．５８ｍＭに調製）を各々分注し、合計１２ウェルに分注した。ＬＡＢＣＹＴＥ ＥＣＨＯ（登録商標）５５５アコースティック分注システム（ＢＥＣＫＭＡＮ ＣＯＵＬＴＥＲ）を用いて１２ウェルからそれぞれ７０ｎＬずつ任意の１ウェル中に集め、１２００化合物（実施例６－５－３において調製した際には、１１５２化合物は存在を特定済み）が混合された状態のサンプル溶液を調製した。（本明細書においては、この１ウェル中に集めた混合物を１つのライブラリと呼ぶ。）さらに予めＴｒｉｓ－ＨＣｌバッファー（２５ｍＭ Ｔｒｉｓ－ＨＣｌ ｐＨ７．４，１５０ｍＭ ＮａＣｌ，０．０２５％Ｔｗｅｅｎ－２０，１ｍＭ ＤＴＴ）を用いて２０．９μＭに調製したＢｃｌ－２タンパク質（Ｎｏｖｕｓ，ＮＢＰ２－３４８８９，Ｒｅｃｏｍｂｉｎａｎｔ Ｈｕｍａｎ Ｂｃｌ－２ Ｐｒｏｔｅｉｎ，Ｌｏｔ Ｅ６０１４５０５１）（１９．２μＬ）を１２００化合物（実施例６－５－３において調製した際には、１１５２化合物は存在を特定済み）が分注されたウェルに加え（最終化合物濃度２０ｎｍ，最終Ｂｃｌ－２濃度２０μＭ）、暗所にて２３℃で１時間インキュベーションした。つぎに膨潤させておいた９６ウェルＭａｃｒｏＳｐｉｎカラム，Ｐ－２ Ｍａｔｅｒｉａｌ（Ｈａｒｖａｒｄ，７４－５６５５）を用いてアッセイバッファー（２５ｍＭ Ｔｒｉｓ－ＨＣｌ ｐＨ７．４，１５０ｍＭ ＮａＣｌ，０．０２５％Ｔｗｅｅｎ－２０，１ｍＭ ＤＴＴ）２００μＬ，２０００ＸＧ，４℃，２分間遠心にて３回行い９６ウェルＭａｃｒｏＳｐｉｎカラムのコンディショニングを実施した。その次に，インキュベーション後のサンプル２０μＬをコンディショニング完了後の９６ウェルＭａｃｒｏＳｐｉｎカラム，Ｐ－２ Ｍａｔｅｒｉａｌに添加し２０００ＸＧ，２分間遠心にてＳＥＣ処理をした。ＳＥＣからの通液にアセトニトリルとメタノール（ＬＣ／ＭＳグレード，富士フイルム和光純薬工業（株））１：１の混合液を３２μＬ加え１８００ＸＧ，４℃，５分間遠心し上澄みを分析サンプルＡＳＭＳ（Ａ）とし，同様の操作で１２００化合物／ウェルで調製し、Ｂｃｌ－２タンパク質が入っていないＴｒｉｓ－ＨＣｌバッファーのみを加えたサンプルを同一条件でインキュベーションし，９６ウェルＭａｃｒｏＳｐｉｎカラム処理をせず，同一の有機溶媒を加え遠心操作によって得られた上澄み液をＳＴＤ（Ｂ）とした。次に同様の操作で１２００化合物／ウェルで調製し，Ｂｃｌ－２タンパク質が入っていないＴｒｉｓ－ＨＣｌバッファーのみを加えたサンプルを同一条件でインキュベーションし，同様に９６ウェルＭａｃｒｏＳｐｉｎカラム処理を実施し，同一の有機溶媒を加え遠心操作によって得られた上澄み液をＢＫ（Ｃ）とし，逆相ＬＣ／ＭＳにて測定した。

【０６９２】

そして，ＴｒａｃｅＦｉｎｄｅｒ５．１（Ｔｈｅｒｍｏ Ｆｉｓｈｅｒ Ｓｃｉｅｎｔｉｆｉｃ）およびＣＨＡＮＣＥ Ｓｏｆｔｗａｒｅ（ｉｎ－ｈｏｕｓｅ）で１２００化合物の解析をサンプルＡ，ＢおよびＣについて行い，以下の計算式よりＡＳＭＳ Ｒａｔｉｏ（％）を算出した。

計算式　ＡＳＭＳ　Ｒａｔｉｏ（％）＝（Ａ－Ｃ）／Ｂ×１００

【０６９３】

逆相ＬＣ／ＭＳ条件

【表１３２】

Vanquish UHPLC (Thermo Fisher Scientific)	
Oven (℃)	40
Column	ODS オクタデシルシリル基で表面が修飾された化学結合型多孔性球状シリカゲルが固定相として充填されているカラム
Auto Sampler (℃)	4
Orbitrap Fusion Lumos Tribrid 質量分析計 (Thermo Fisher Scientific)	
Polarity	Positive mode
Data Type	profile

【０６９４】

結果を［表ＡＪ－０１］に示す。

［表ＡＪ－０１］

【表１３３】

化合物番号	分子式	m/z (expected)	ASMS ratio(%)	
			n=1	n=2
B1A001-01	C33H39N5O3S	586.2846	17.6	-0.7
B1A002-01	C32H38N6O3S	587.2799	0.0	4.9
B1A003-01	C36H43N5O3	594.3439	7.5	5.8
B1A004-01	C35H42N6O3	595.3391	-6.2	2.6
B1A005-01	C35H40FN5O3	598.3188	7.0	-10.7
B1A006-01	C34H39FN6O3	599.314	2.4	9.1
B1A007-01	C37H41N5O3	604.3282	0.0	na
B1A008-01	C36H40N6O3	605.3235	3.0	0.0
B1A009-01	C36H40N6O3	605.3235	3.0	0.0
B1A010-01	C35H39N7O3	606.3187	na	0.0
B1A011-01	C37H45N5O3	608.3595	11.2	-13.2
B1A012-01	C36H44N6O3	609.3548	0.0	0.0
B1A013-01	C39H43N5O3	630.3439	-1.7	2.4
B1A014-01	C38H42N6O3	631.3391	8.1	0.0
B1A015-01	C39H49N5O3	636.3908	-0.9	-20.6
B1A016-01	C38H48N6O3	637.3861	12.1	-4.6
B1A017-01	C36H40F3N5O3	648.3156	5.4	5.4
B1A018-01	C35H39F3N6O3	649.3109	-6.5	9.9
B1A019-01	C38H40F3N5O3	672.3156	-3.9	-7.5
B1A020-01	C37H39F3N6O3	673.3109	-4.3	-10.5
B1A021-01	C39H42F3N7O3	714.3374	-1.3	-3.7
B1A022-01	C38H41F3N8O3	715.3327	8.0	7.7
B1A023-01	C35H41N3O3S	584.2941	4.0	0.8
B1A024-01	C34H40N4O3S	585.2894	4.1	1.2
B1A025-01	C38H45N3O3	592.3534	7.4	-16.1
B1A026-01	C37H44N4O3	593.3486	3.0	-2.9
B1A027-01	C37H42FN3O3	596.3283	6.7	-7.8
B1A028-01	C36H41FN4O3	597.3236	-1.6	-4.7
B1A029-01	C39H43N3O3	602.3377	-22.3	-13.0
B1A030-01	C38H42N4O3	603.333	6.9	-1.8
B1A031-01	C38H42N4O3	603.333	6.9	-1.8
B1A032-01	C37H41N5O3	604.3282	0.0	-9.1
B1A033-01	C39H47N3O3	606.369	3.3	-13.3
B1A034-01	C38H46N4O3	607.3643	5.2	-3.2
B1A035-01	C41H45N3O3	628.3534	14.9	-7.0
B1A036-01	C40H44N4O3	629.3486	0.4	3.1
B1A037-01	C41H51N3O3	634.4003	3.3	-5.0
B1A038-01	C40H50N4O3	635.3956	6.5	-6.4
B1A039-01	C38H42F3N3O3	646.3251	6.3	-8.4
B1A040-01	C37H41F3N4O3	647.3204	10.4	8.4
B1A041-01	C40H42F3N3O3	670.3251	-2.4	-4.0
B1A042-01	C39H41F3N4O3	671.3204	12.5	-8.5
B1A043-01	C41H44F3N5O3	712.3469	3.8	-2.9
B1A044-01	C40H43F3N6O3	713.3422	2.6	-1.9
B1A045-01	C37H45N3O2	564.3585	1.1	-2.2
B1A046-01	C36H44N4O2	565.3537	0.0	0.0
B1A047-01	C38H47N3O2	578.3741	3.2	2.5
B1A048-01	C37H46N4O2	579.3694	1.5	3.6
B1A049-01	C39H49N3O2	592.3898	4.1	-9.1
B1A050-01	C38H48N4O2	593.385	0.6	3.0
B1A051-01	C37H44FN3O2	582.349	-5.4	-4.2
B1A052-01	C36H43FN4O2	583.3443	4.2	-6.2
B1A053-01	C38H47N3O3	594.369	13.2	4.8
B1A054-01	C37H46N4O3	595.3643	0.0	0.0
B1A055-01	C39H49N3O3	608.3847	-0.1	-14.4
B1A056-01	C38H48N4O3	609.3799	9.7	4.0
B1A057-01	C40H51N3O3	622.4003	0.0	0.0
B1A058-01	C39H50N4O3	623.3956	na	0.0
B1A059-01	C39H49N3O4	624.3796	7.7	-5.5
B1A060-01	C38H48N4O4	625.3748	0.0	na
B1A061-01	C38H44F3N3O2	632.3458	5.3	1.1
B1A062-01	C37H43F3N4O2	633.3411	-0.3	-9.7
B1A063-01	C38H44F3N3O3	648.3408	-1.0	-11.0
B1A064-01	C37H43F3N4O3	649.336	5.2	-1.6
B1A065-01	C41H47N3O2	614.3741	-32.6	-10.4
B1A066-01	C40H46N4O2	615.3694	8.2	7.7
B1A067-01	C35H43N3O2S	570.3149	3.6	-7.8
B1A068-01	C34H42N4O2S	571.3101	12.2	3.3
B1A069-01	C39H45N3O2	588.3585	8.3	0.8
B1A070-01	C38H44N4O2	589.3537	0.0	0.0

化合物番号	分子式	m/z (expected)	ASMS ratio(%)	
			n=1	n=2
B1A071-01	C35H43N5O2	566.349	-0.3	-3.3
B1A072-01	C34H42N6O2	567.3442	3.9	-0.2
B1A073-01	C36H45N5O2	580.3646	3.2	-4.7
B1A074-01	C35H44N6O2	581.3599	3.2	-0.1
B1A075-01	C37H47N5O2	594.3803	31.3	28.6
B1A076-01	C36H46N6O2	595.3755	na	na
B1A077-01	C35H42FN5O2	584.3395	6.6	-1.3
B1A078-01	C34H41FN6O2	585.3348	4.7	1.2
B1A079-01	C36H45N5O3	596.3595	3.9	-3.9
B1A080-01	C35H44N6O3	597.3548	3.4	0.0
B1A081-01	C37H47N5O3	610.3752	-10.9	-5.5
B1A082-01	C36H46N6O3	611.3704	3.0	0.2
B1A083-01	C38H49N5O3	624.3908	-0.3	0.5
B1A084-01	C37H48N6O3	625.3861	2.1	-2.7
B1A085-01	C37H47N5O4	626.3701	10.6	10.8
B1A086-01	C36H46N6O4	627.3653	0.0	-14.8
B1A087-01	C36H42F3N5O2	634.3363	na	na
B1A088-01	C35H41F3N6O2	635.3316	18.7	-7.1
B1A089-01	C36H42F3N5O3	650.3313	0.0	na
B1A090-01	C35H41F3N6O3	651.3265	3.3	-1.0
B1A091-01	C39H45N5O2	616.3646	0.0	15.4
B1A092-01	C38H44N6O2	617.3599	2.6	-2.4
B1A093-01	C33H41N5O2S	572.3054	-5.3	0.0
B1A094-01	C32H40N6O2S	573.3006	6.2	-0.7
B1A095-01	C37H43N5O2	590.349	0.3	-17.1
B1A096-01	C36H42N6O2	591.3442	0.0	7.4
B1A097-01	C38H47N3O2	578.3741	3.2	2.5
B1A098-01	C37H46N4O2	579.3694	na	na
B1A099-01	C38H46FN3O2	596.3647	0.9	-0.9
B1A100-01	C37H45FN4O2	597.3599	6.4	2.3
B1K001-01	C24H24F3N5O3S	520.1625	0.0	0.0
B1K002-01	C23H23F3N6O3S	521.1577	0.0	0.0
B1K003-01	C27H28F3N5O3	528.2217	0.1	-0.2
B1K004-01	C26H27F3N6O3	529.217	0.0	0.6
B1K005-01	C26H25F4N5O3	532.1966	-0.1	0.6
B1K006-01	C25H24F4N6O3	533.1919	-0.6	0.0
B1K007-01	C28H26F3N5O3	538.2061	0.0	1.3
B1K008-01	C27H25F3N6O3	539.2013	0.0	0.0
B1K009-01	C27H25F3N6O3	539.2013	na	na
B1K010-01	C26H24F3N7O3	540.1966	0.0	0.0
B1K011-01	C28H30F3N5O3	542.2374	-0.1	0.3
B1K012-01	C27H29F3N6O3	543.2326	0.0	-0.4
B1K013-01	C30H28F3N5O3	564.2217	0.0	1.4
B1K014-01	C29H27F3N6O3	565.217	-0.3	0.0
B1K015-01	C30H34F3N5O3	570.2687	2.9	-1.8
B1K016-01	C29H33F3N6O3	571.2639	0.0	0.0
B1K017-01	C27H25F6N5O3	582.1934	0.0	0.0
B1K018-01	C26H24F6N6O3	583.1887	-0.6	0.5
B1K019-01	C29H25F6N5O3	606.1934	0.0	0.0
B1K020-01	C28H24F6N6O3	607.1887	2.9	-3.8
B1K021-01	C30H27F6N7O3	648.2152	-0.5	-1.9
B1K022-01	C29H26F6N8O3	649.2105	1.4	0.1
B1K023-01	C26H26F3N3O3S	518.172	4.3	1.3
B1K024-01	C25H25F3N4O3S	519.1672	0.0	0.0
B1K025-01	C29H30F3N3O3	526.2312	0.3	-0.8
B1K026-01	C28H29F3N4O3	527.2265	4.2	0.2
B1K027-01	C28H27F4N3O3	530.2061	-0.8	-3.6
B1K028-01	C27H26F4N4O3	531.2014	0.0	0.0
B1K029-01	C30H28F3N3O3	536.2156	na	na
B1K030-01	C29H27F3N4O3	537.2108	0.0	0.9
B1K031-01	C29H27F3N4O3	537.2108	0.0	0.0
B1K032-01	C28H26F3N5O3	538.2061	na	na
B1K033-01	C30H32F3N3O3	540.2469	2.3	-0.6
B1K034-01	C29H31F3N4O3	541.2421	-0.3	0.0
B1K035-01	C32H30F3N3O3	562.2312	4.8	4.5
B1K036-01	C31H29F3N4O3	563.2265	1.1	-0.4
B1K037-01	C32H36F3N3O3	568.2782	0.8	1.9
B1K038-01	C31H35F3N4O3	569.2734	0.6	-1.8
B1K039-01	C29H27F6N3O3	580.2029	3.5	3.9
B1K040-01	C28H26F6N4O3	581.1982	0.0	0.0

na = not available

【0695】

【表１３４】

化合物番号	分子式	m/z (expected)	ASMS ratio(%)	
			n=1	n=2
B1K041-01	C31H27F6N3O3	604.2029	0.0	0.0
B1K042-01	C30H26F6N4O3	605.1982	5.0	-0.1
B1K043-01	C32H29F6N5O3	646.2247	3.8	1.9
B1K044-01	C31H28F6N6O3	647.22	2.6	1.0
B1K045-01	C28H30F3N3O2	498.2363	1.5	-0.1
B1K046-01	C27H29F3N4O2	499.2315	-0.1	0.5
B1K047-01	C29H32F3N3O2	512.2519	3.3	0.5
B1K048-01	C28H31F3N4O2	513.2472	0.1	1.2
B1K049-01	C30H34F3N3O2	526.2676	-3.3	1.5
B1K050-01	C29H33F3N4O2	527.2628	0.0	0.0
B1K051-01	C28H29F4N3O2	516.2269	2.8	2.0
B1K052-01	C27H28F4N4O2	517.2221	-3.3	0.5
B1K053-01	C29H32F3N3O3	528.2469	-0.5	-3.3
B1K054-01	C28H31F3N4O3	529.2421	0.0	0.0
B1K055-01	C30H34F3N3O3	542.2625	-0.8	0.0
B1K056-01	C29H33F3N4O3	543.2578	3.3	0.2
B1K057-01	C31H36F3N3O3	556.2782	1.0	-2.6
B1K058-01	C30H35F3N4O3	557.2734	1.3	0.1
B1K059-01	C30H34F3N3O4	558.2574	3.0	-1.9
B1K060-01	C29H33F3N4O4	559.2527	0.0	0.0
B1K061-01	C29H29F6N3O2	566.2237	2.8	-1.3
B1K062-01	C28H28F6N4O2	567.2189	1.2	-0.3
B1K063-01	C29H29F6N3O3	582.2186	3.9	0.4
B1K064-01	C28H28F6N4O3	583.2138	1.4	0.7
B1K065-01	C32H32F3N3O2	548.2519	5.9	-5.6
B1K066-01	C31H31F3N4O2	549.2472	1.8	-0.7
B1K067-01	C26H28F3N3O2S	504.1927	5.1	1.8
B1K068-01	C25H27F3N4O2S	505.188	2.6	-1.4
B1K069-01	C30H30F3N3O2	522.2363	3.5	-1.4
B1K070-01	C29H29F3N4O2	523.2315	0.0	0.0
B1K071-01	C26H28F3N5O2	500.2268	1.6	-0.9
B1K072-01	C25H27F3N6O2	501.222	-0.6	1.7
B1K073-01	C27H30F3N5O2	514.2424	3.1	-1.9
B1K074-01	C26H29F3N6O2	515.2377	0.0	0.0
B1K075-01	C28H32F3N5O2	528.2581	1.4	-3.8
B1K076-01	C27H31F3N6O2	529.2533	na	0.0
B1K077-01	C26H27F4N5O2	518.2174	2.4	-0.2
B1K078-01	C25H26F4N6O2	519.2126	0.8	-0.2
B1K079-01	C27H30F3N5O3	530.2374	2.2	-1.3
B1K080-01	C26H29F3N6O3	531.2326	0.0	0.0
B1K081-01	C28H32F3N5O3	544.253	2.3	-0.4
B1K082-01	C27H31F3N6O3	545.2483	0.0	0.0
B1K083-01	C29H34F3N5O3	558.2687	0.0	0.0
B1K084-01	C28H33F3N6O3	559.2639	0.0	0.0
B1K085-01	C28H32F3N5O4	560.2479	4.2	-0.2
B1K086-01	C27H31F3N6O4	561.2432	na	0.0
B1K087-01	C27H27F6N5O2	568.2142	1.8	-0.1
B1K088-01	C26H26F6N6O2	569.2094	2.2	-0.2
B1K089-01	C27H27F6N5O3	584.2091	2.0	1.0
B1K090-01	C26H26F6N6O3	585.2043	-0.6	-1.9
B1K091-01	C30H30F3N5O2	550.2424	3.6	-4.2
B1K092-01	C29H29F3N6O2	551.2377	4.1	-0.7
B1K093-01	C24H26F3N5O2S	506.1832	2.7	-0.4
B1K094-01	C23H25F3N6O2S	507.1785	1.4	-0.1
B1K095-01	C28H28F3N5O2	524.2268	3.5	-0.6
B1K096-01	C27H27F3N6O2	525.222	0.0	0.0
B1K097-01	C29H32F3N3O2	512.2519	-2.1	-3.1
B1K098-01	C28H31F3N4O2	513.2472	-1.1	-2.4
B1K099-01	C29H31F4N3O2	530.2425	0.0	0.0
B1K100-01	C28H30F4N4O2	531.2378	0.0	0.0
B1M001-01	C25H29N5O3S	480.2064	0.0	0.0
B1M002-01	C24H28N6O3S	481.2016	-0.7	-1.5
B1M003-01	C28H33N5O3	488.2656	-1.9	2.0
B1M004-01	C27H32N6O3	489.2609	0.0	0.0
B1M005-01	C27H30FN5O3	492.2405	0.0	1.4
B1M006-01	C26H29FN6O3	493.2358	0.0	0.0
B1M007-01	C29H31N5O3	498.25	0.3	0.3
B1M008-01	C28H30N6O3	499.2452	na	0.0
B1M009-01	C28H30N6O3	499.2452	na	0.0
B1M010-01	C27H29N7O3	500.2405	0.0	0.0

化合物番号	分子式	m/z (expected)	ASMS ratio(%)	
			n=1	n=2
B1M011-01	C29H35N5O3	502.2813	18.6	7.5
B1M012-01	C28H34N6O3	503.2765	-3.5	-2.3
B1M013-01	C31H33N5O3	524.2656	2.9	-1.1
B1M014-01	C30H32N6O3	525.2609	4.1	0.4
B1M015-01	C31H39N5O3	530.3126	-2.4	-3.0
B1M016-01	C30H38N6O3	531.3078	0.0	0.0
B1M017-01	C28H30F3N5O3	542.2374	-0.1	0.3
B1M018-01	C27H29F3N6O3	543.2326	0.0	0.0
B1M019-01	C30H30F3N5O3	566.2374	1.5	0.0
B1M020-01	C29H29F3N6O3	567.2326	0.0	0.0
B1M021-01	C31H32F3N7O3	608.2592	0.0	0.0
B1M022-01	C30H31F3N8O3	609.2544	-13.6	6.7
B1M023-01	C27H31N3O3S	478.2159	1.4	-3.0
B1M024-01	C26H30N4O3S	479.2111	0.0	0.0
B1M025-01	C30H35N3O3	486.2751	3.6	-1.2
B1M026-01	C29H34N4O3	487.2704	0.9	0.9
B1M027-01	C29H32FN3O3	490.2501	1.0	0.4
B1M028-01	C28H31FN4O3	491.2453	0.0	0.0
B1M029-01	C31H33N3O3	496.2595	3.0	-0.6
B1M030-01	C30H32N4O3	497.2547	0.0	-5.9
B1M031-01	C30H32N4O3	497.2547	0.0	-2.4
B1M032-01	C29H31N5O3	498.25	0.3	0.3
B1M033-01	C31H37N3O3	500.2908	0.3	0.0
B1M034-01	C30H36N4O3	501.286	-0.3	-0.2
B1M035-01	C33H35N3O3	522.2751	2.9	-1.7
B1M036-01	C32H34N4O3	523.2704	6.7	-1.2
B1M037-01	C33H41N3O3	528.3221	-1.5	2.3
B1M038-01	C32H40N4O3	529.3173	0.0	1.7
B1M039-01	C30H32F3N3O3	540.2469	2.3	-0.6
B1M040-01	C29H31F3N4O3	541.2421	-0.3	0.0
B1M041-01	C32H32F3N3O3	564.2469	0.7	-3.5
B1M042-01	C31H31F3N4O3	565.2421	0.0	0.0
B1M043-01	C33H34F3N5O3	606.2687	2.2	-3.1
B1M044-01	C32H33F3N6O3	607.2639	1.0	1.1
B1M045-01	C29H35N3O2	458.2802	2.5	-2.3
B1M046-01	C28H34N4O2	459.2755	0.7	-1.2
B1M047-01	C30H37N3O2	472.2959	1.1	0.3
B1M048-01	C29H36N4O2	473.2911	0.9	0.3
B1M049-01	C31H39N3O2	486.3115	-0.9	-0.4
B1M050-01	C30H38N4O2	487.3068	-2.0	-0.2
B1M051-01	C29H34FN3O2	476.2708	0.7	1.9
B1M052-01	C28H33FN4O2	477.266	27.6	20.2
B1M053-01	C30H37N3O3	488.2908	-3.0	-3.1
B1M054-01	C29H36N4O3	489.286	0.9	0.0
B1M055-01	C31H39N3O3	502.3064	3.9	-1.2
B1M056-01	C30H38N4O3	503.3017	0.5	0.0
B1M057-01	C32H41N3O3	516.3221	-0.7	1.4
B1M058-01	C31H40N4O3	517.3173	-1.4	-1.5
B1M059-01	C31H39N3O4	518.3013	-5.5	-7.2
B1M060-01	C30H38N4O4	519.2966	0.0	0.0
B1M061-01	C30H34F3N3O2	526.2676	-3.3	-13.1
B1M062-01	C29H33F3N4O2	527.2628	1.6	-1.7
B1M063-01	C30H34F3N3O3	542.2625	0.4	-1.1
B1M064-01	C29H33F3N4O3	543.2578	5.4	-4.3
B1M065-01	C33H37N3O2	508.2959	0.2	-6.4
B1M066-01	C32H36N4O2	509.2911	0.0	4.4
B1M067-01	C27H33N3O2S	464.2366	-1.6	-87.4
B1M068-01	C26H32N4O2S	465.2319	1.1	0.0
B1M069-01	C31H35N3O2	482.2802	-0.2	-4.4
B1M070-01	C30H34N4O2	483.2755	0.0	0.0
B1M071-01	C27H33N5O2	460.2707	34.0	24.4
B1M072-01	C26H32N6O2	461.266	0.0	1.9
B1M073-01	C28H35N5O2	474.2864	0.4	-0.5
B1M074-01	C27H34N6O2	475.2816	-1.6	0.9
B1M075-01	C29H37N5O2	488.302	77.3	46.1
B1M076-01	C28H36N6O2	489.2973	0.5	1.5
B1M077-01	C27H32FN5O2	478.2613	-0.7	3.1
B1M078-01	C26H31FN6O2	479.2565	0.0	0.0
B1M079-01	C28H35N5O3	490.2813	8.1	0.0
B1M080-01	C27H34N6O3	491.2765	0.0	0.0

na = not available

【0696】

【表１３５】

化合物番号	分子式	m/z (expected)	ASMS ratio(%) n=1	n=2
B1M081-01	C29H37N5O3	504.2969	0.0	0.0
B1M082-01	C28H36N6O3	505.2922	0.0	0.0
B1M083-01	C30H39N5O3	518.3126	0.0	-0.3
B1M084-01	C29H38N6O3	519.3078	0.0	0.0
B1M085-01	C29H37N5O4	520.2918	0.0	0.0
B1M086-01	C28H36N6O4	521.2871	0.0	0.0
B1M087-01	C28H32F3N5O2	528.2581	3.8	3.2
B1M088-01	C27H31F3N6O2	529.2533	0.0	0.0
B1M089-01	C28H32F3N5O3	544.253	3.9	0.2
B1M090-01	C27H31F3N6O3	545.2483	0.0	0.0
B1M091-01	C31H35N5O2	510.2864	0.0	0.0
B1M092-01	C30H34N6O2	511.2816	na	0.0
B1M093-01	C25H31N5O2S	466.2271	0.0	0.0
B1M094-01	C24H30N6O2S	467.2224	-1.5	-2.1
B1M095-01	C29H33N5O2	484.2707	0.0	0.0
B1M096-01	C28H32N6O2	485.266	na	0.0
B1M097-01	C30H37N3O2	472.2959	1.1	0.3
B1M098-01	C29H36N4O2	473.2911	0.9	0.3
B1M099-01	C30H36FN3O2	490.2864	-0.7	-0.3
B1M100-01	C29H35FN4O2	491.2817	0.5	-1.5
B1O001-01	C29H29N5O4S	544.2013	-0.1	-3.1
B1O002-01	C28H28N6O4S	545.1966	2.2	2.6
B1O003-01	C32H33N5O4	552.2605	0.0	0.0
B1O004-01	C31H32N6O4	553.2558	2.8	0.4
B1O005-01	C31H30FN5O4	556.2355	3.6	-2.5
B1O006-01	C30H29FN6O4	557.2307	4.7	0.8
B1O007-01	C33H31N5O4	562.2449	4.5	0.9
B1O008-01	C32H30N6O4	563.2401	1.1	1.3
B1O009-01	C32H30N6O4	563.2401	1.1	1.3
B1O010-01	C31H29N7O4	564.2354	0.0	0.0
B1O011-01	C33H35N5O4	566.2762	0.0	4.3
B1O012-01	C32H34N6O4	567.2714	0.8	-0.9
B1O013-01	C35H33N5O4	588.2605	2.2	-4.0
B1O014-01	C34H32N6O4	589.2558	2.5	0.2
B1O015-01	C35H39N5O4	594.3075	6.0	-2.7
B1O016-01	C34H38N6O4	595.3027	6.6	0.7
B1O017-01	C32H30F3N5O4	606.2323	2.5	0.0
B1O018-01	C31H29F3N6O4	607.2275	1.0	3.2
B1O019-01	C34H30F3N5O4	630.2323	0.6	0.2
B1O020-01	C33H29F3N6O4	631.2275	8.6	-0.5
B1O021-01	C35H32F3N7O4	672.2541	2.9	-1.2
B1O022-01	C34H31F3N8O4	673.2493	5.6	-1.2
B1O023-01	C31H31N8O4S	542.2108	12.4	-0.3
B1O024-01	C30H30N4O4S	543.2061	3.6	2.3
B1O025-01	C34H35N8O4	550.27	-0.4	-4.5
B1O026-01	C33H34N4O4	551.2653	1.7	-1.5
B1O027-01	C33H32FN3O4	554.245	3.8	2.1
B1O028-01	C32H31FN4O4	555.2402	4.9	0.4
B1O029-01	C35H33N3O4	560.2544	0.0	0.0
B1O030-01	C34H32N4O4	561.2496	1.8	-2.0
B1O031-01	C34H32N4O4	561.2496	-1.3	-4.1
B1O032-01	C33H31N5O4	562.2449	4.5	0.9
B1O033-01	C35H37N3O4	564.2857	1.9	4.2
B1O034-01	C34H36N4O4	565.2809	0.1	0.2
B1O035-01	C37H35N3O4	586.27	4.3	-3.7
B1O036-01	C36H34N4O4	587.2653	4.8	0.9
B1O037-01	C37H41N3O4	592.317	4.7	-1.7
B1O038-01	C36H40N4O4	593.3122	2.8	-0.7
B1O039-01	C34H32F3N3O4	604.2418	5.1	0.2
B1O040-01	C33H31F3N4O4	605.237	1.8	0.3
B1O041-01	C36H32F3N3O4	628.2418	10.4	-2.8
B1O042-01	C35H31F3N4O4	629.237	2.8	2.1
B1O043-01	C37H34F3N5O4	670.2636	2.2	-5.0
B1O044-01	C36H33F3N6O4	671.2588	5.8	0.4
B1O045-01	C33H35N3O3	522.2751	0.0	0.0
B1O046-01	C32H34N4O3	523.2704	0.6	1.3
B1O047-01	C34H37N3O3	536.2908	4.1	1.5
B1O048-01	C33H36N4O3	537.286	-0.3	-1.6
B1O049-01	C35H39N3O3	550.3064	6.1	0.0
B1O050-01	C34H38N4O3	551.3017	10.3	-5.8

化合物番号	分子式	m/z (expected)	ASMS ratio(%) n=1	n=2
B1O051-01	C33H34FN3O3	540.2657	3.9	-1.9
B1O052-01	C32H33FN4O3	541.261	1.6	0.4
B1O053-01	C34H37N3O4	552.2857	2.2	-1.0
B1O054-01	C33H36N4O4	553.2809	2.6	3.2
B1O055-01	C35H39N3O4	566.3013	3.0	-4.2
B1O056-01	C34H38N4O4	567.2966	6.7	-0.9
B1O057-01	C36H41N3O4	580.317	4.1	-2.2
B1O058-01	C35H40N4O4	581.3122	-3.5	4.4
B1O059-01	C35H39N3O5	582.2963	2.0	-1.9
B1O060-01	C34H38N4O5	583.2915	0.6	-1.8
B1O061-01	C34H34F3N3O3	590.2625	1.9	-1.5
B1O062-01	C33H33F3N4O3	591.2578	1.3	4.6
B1O063-01	C34H34F3N3O4	606.2574	3.5	-4.1
B1O064-01	C33H33F3N4O4	607.2527	0.7	-4.0
B1O065-01	C37H37N3O3	572.2908	7.5	0.8
B1O066-01	C36H36N4O3	573.286	12.1	2.7
B1O067-01	C31H33N3O3S	528.2315	0.0	0.0
B1O068-01	C30H32N4O3S	529.2268	1.9	-1.1
B1O069-01	C35H35N3O3	546.2751	6.2	-2.4
B1O070-01	C34H34N4O3	547.2704	8.8	2.3
B1O071-01	C31H33N5O3	524.2656	2.9	-1.1
B1O072-01	C30H32N6O3	525.2609	4.1	0.4
B1O073-01	C32H35N5O3	538.2813	2.0	3.7
B1O074-01	C31H34N6O3	539.2765	3.9	-0.9
B1O075-01	C33H37N5O3	552.2969	9.3	0.8
B1O076-01	C32H36N6O3	553.2922	4.4	1.1
B1O077-01	C31H32FN5O3	542.2562	4.1	0.4
B1O078-01	C30H31FN6O3	543.2514	4.8	1.8
B1O079-01	C32H35N5O4	554.2762	4.5	1.3
B1O080-01	C31H34N6O4	555.2714	1.4	3.4
B1O081-01	C33H37N5O4	568.2918	3.2	-2.2
B1O082-01	C32H36N6O4	569.2871	1.5	2.6
B1O083-01	C34H39N5O4	582.3075	7.2	1.0
B1O084-01	C33H38N6O4	583.3027	6.8	2.0
B1O085-01	C33H37N5O5	584.2868	-1.1	-3.1
B1O086-01	C32H36N6O5	585.282	na	-0.4
B1O087-01	C32H32F3N5O3	592.253	2.2	-0.5
B1O088-01	C31H31F3N6O3	593.2483	3.1	1.4
B1O089-01	C32H32F3N5O4	608.2479	3.8	-5.3
B1O090-01	C31H31F3N6O4	609.2432	3.3	-2.0
B1O091-01	C35H35N5O3	574.2813	4.5	-2.2
B1O092-01	C34H34N6O3	575.2765	6.3	-1.4
B1O093-01	C29H31N5O3S	530.222	0.0	0.6
B1O094-01	C28H30N6O3S	531.2173	2.2	-0.7
B1O095-01	C33H33N5O3	548.2656	2.7	0.0
B1O096-01	C32H32N6O3	549.2609	0.0	3.5
B1O097-01	C34H37N3O3	536.2908	4.2	2.2
B1O098-01	C33H36N4O3	537.286	-42.7	-0.2
B1O099-01	C34H36FN3O3	554.2814	4.7	1.7
B1O100-01	C33H35FN4O3	555.2766	-19.7	11.1
B3A001-01	C34H41N5O3S	600.3003	0.0	-8.4
B3A002-01	C33H40N6O3S	601.2955	1.9	-1.2
B3A003-01	C37H45N5O3	608.3595	6.5	4.9
B3A004-01	C36H44N6O3	609.3548	3.5	-0.5
B3A005-01	C36H42FN5O3	612.3344	-1.5	-4.8
B3A006-01	C35H41FN6O3	613.3297	0.0	0.0
B3A007-01	C38H43N5O3	618.3439	9.1	-5.1
B3A008-01	C37H42N6O3	619.3391	0.6	-0.3
B3A009-01	C37H42N6O3	619.3391	0.6	-0.3
B3A010-01	C36H41N7O3	620.3344	0.0	0.0
B3A011-01	C38H47N5O3	622.3752	4.5	2.0
B3A012-01	C37H46N6O3	623.3704	1.4	-2.7
B3A013-01	C40H45N5O3	644.3595	10.2	-20.0
B3A014-01	C39H44N6O3	645.3548	0.6	0.8
B3A015-01	C40H51N5O3	650.4065	8.9	3.0
B3A016-01	C39H50N6O3	651.4017	2.8	0.1
B3A017-01	C37H42F3N5O3	662.3313	6.9	-6.3
B3A018-01	C36H41F3N6O3	663.3265	5.0	1.8
B3A019-01	C39H42F3N5O3	686.3313	2.6	-2.3
B3A020-01	C38H41F3N6O3	687.3265	7.5	-3.2

na = not available

【０６９７】

【表１３６】

化合物番号	分子式	m/z (expected)	ASMS ratio(%)	
			n=1	n=2
B3A021-01	C40H44F3N2O8	728.3531	12.5	-8.4
B3A022-01	C39H43F3N8O8	729.3483	4.9	7.2
B3A023-01	C36H43N8O8S	598.3098	2.4	1.7
B3A024-01	C35H42N4O8S	599.305	1.6	-0.4
B3A025-01	C39H47N8O8	606.369	15.7	-19.6
B3A026-01	C38H46N4O8	607.3643	4.4	0.6
B3A027-01	C38H44FN8O8	610.344	-0.7	-1.6
B3A028-01	C37H43FN4O8	611.3392	9.8	1.6
B3A029-01	C40H45N8O8	616.3534	0.0	0.0
B3A030-01	C39H44N4O8	617.3486	8.4	-15.2
B3A031-01	C39H44N4O8	617.3486	8.4	-15.2
B3A032-01	C38H43N5O8	618.3439	9.1	-5.1
B3A033-01	C40H49N8O8	620.3847	1.1	-0.6
B3A034-01	C39H48N4O8	621.3799	1.3	-0.6
B3A035-01	C42H47N8O8	642.369	9.7	4.4
B3A036-01	C41H46N4O8	643.3643	2.8	-3.3
B3A037-01	C42H53N8O8	648.416	0.0	0.0
B3A038-01	C41H52N4O8	649.4112	2.5	-2.9
B3A039-01	C39H44F3N8O8	660.3408	3.8	0.0
B3A040-01	C38H43F3N4O8	661.336	3.5	-6.7
B3A041-01	C41H44F3N8O8	684.3408	na	425.9
B3A042-01	C40H43F3N4O8	685.336	-0.2	-1.2
B3A043-01	C42H46F3N5O8	726.3626	0.5	-0.3
B3A044-01	C41H45F3N6O8	727.3578	12.3	-12.4
B3A045-01	C38H47N8O2	578.3741	3.2	2.5
B3A046-01	C37H46N4O2	579.3694	1.5	3.6
B3A047-01	C39H49N8O2	592.3898	1.8	-5.9
B3A048-01	C38H48N4O2	593.385	7.3	-8.8
B3A049-01	C40H51N8O2	606.4054	na	na
B3A050-01	C39H50N4O2	607.4007	6.1	-4.3
B3A051-01	C38H46FN8O2	596.3647	21.3	-4.2
B3A052-01	C37H45FN4O2	597.3599	na	na
B3A053-01	C39H49N8O8	608.3847	12.5	9.9
B3A054-01	C38H48N4O8	609.3799	0.0	0.0
B3A055-01	C40H51N8O8	622.4003	10.8	-12.7
B3A056-01	C39H50N4O8	623.3956	na	0.0
B3A057-01	C41H53N8O8	636.416	6.3	2.5
B3A058-01	C40H52N4O8	637.4112	5.9	-7.6
B3A059-01	C40H51N8O4	638.3952	-1.9	-8.0
B3A060-01	C39H50N4O4	639.3905	0.9	0.0
B3A061-01	C39H46F3N8O2	646.3615	na	421.3
B3A062-01	C38H45F3N4O2	647.3567	2.2	2.8
B3A063-01	C39H46F3N8O8	662.3564	na	390.0
B3A064-01	C38H45F3N4O8	663.3517	-7.5	-5.5
B3A065-01	C42H49N8O2	628.3898	0.0	0.0
B3A066-01	C41H48N4O2	629.385	6.3	-2.9
B3A067-01	C36H45N8O2S	584.3305	-7.3	4.0
B3A068-01	C35H44N4O2S	585.3258	1.4	-3.6
B3A069-01	C40H47N8O2	602.3741	na	12872.1
B3A070-01	C39H46N4O2	603.3694	7.7	-8.1
B3A071-01	C36H45N6O2	580.3646	3.2	-4.7
B3A072-01	C35H44N6O2	581.3599	11.6	3.1
B3A073-01	C37H47N6O2	594.3803	31.3	28.6
B3A074-01	C36H46N6O2	595.3755	10.7	-17.2
B3A075-01	C38H49N6O2	608.3959	-5.8	-16.0
B3A076-01	C37H48N6O2	609.3912	6.5	-0.9
B3A077-01	C36H44FN6O2	598.3552	4.1	-2.8
B3A078-01	C35H43FN6O2	599.3504	4.5	-1.5
B3A079-01	C37H47N6O8	610.3752	-5.8	5.4
B3A080-01	C36H46N6O8	611.3704	1.7	-1.8
B3A081-01	C38H49N6O8	624.3908	13.4	-14.2
B3A082-01	C37H48N6O8	625.3861	-0.9	4.4
B3A083-01	C39H51N6O8	638.4065	3.9	-18.6
B3A084-01	C38H50N6O8	639.4017	-17.6	-7.4
B3A085-01	C38H49N6O4	640.3857	5.3	-7.1
B3A086-01	C37H48N6O4	641.381	-2.7	-1.9
B3A087-01	C37H44F3N5O2	648.352	0.4	1.4
B3A088-01	C36H43F3N6O2	649.3472	2.5	2.4
B3A089-01	C37H44F3N5O8	664.3469	-5.5	-7.2
B3A090-01	C36H43F3N6O8	665.3422	5.8	-0.2

化合物番号	分子式	m/z (expected)	ASMS ratio(%)	
			n=1	n=2
B3A091-01	C40H47N5O2	630.3803	-1.0	-16.5
B3A092-01	C39H46N6O2	631.3755	1.1	-1.9
B3A093-01	C34H43N5O2S	586.321	-3.8	0.0
B3A094-01	C33H42N6O2S	587.3163	3.7	0.5
B3A095-01	C38H45N5O2	604.3646	-4.9	-3.5
B3A096-01	C37H44N6O2	605.3599	7.7	2.4
B3A097-01	C39H49N3O2	592.3898	1.8	-5.9
B3A098-01	C38H48N4O2	593.385	0.6	3.0
B3A099-01	C39H48FN3O2	610.3803	-2.6	25.2
B3A100-01	C38H47FN4O2	611.3756	-39.8	0.0
B4J001-01	C26H31N5O8S	494.222	0.0	0.0
B4J002-01	C25H30N6O8S	495.2173	-2.7	2.1
B4J003-01	C29H35N5O8	502.2813	0.0	0.0
B4J004-01	C28H34N6O8	503.2765	-2.2	0.4
B4J005-01	C28H32FN5O8	506.2562	-0.4	2.1
B4J006-01	C27H31FN6O8	507.2514	0.0	0.0
B4J007-01	C30H33N5O8	512.2656	-1.0	1.5
B4J008-01	C29H32N6O8	513.2609	0.0	0.0
B4J009-01	C29H32N6O8	513.2609	0.0	0.0
B4J010-01	C28H31N7O8	514.2561	0.0	2.3
B4J011-01	C30H37N5O8	516.2969	-0.1	-0.9
B4J012-01	C29H36N6O8	517.2922	-1.1	-0.8
B4J013-01	C32H35N5O8	538.2813	2.0	3.7
B4J014-01	C31H34N6O8	539.2765	0.0	-0.8
B4J015-01	C32H41N5O8	544.3282	0.0	0.0
B4J016-01	C31H40N6O8	545.3235	0.0	0.9
B4J017-01	C29H32F3N5O8	556.253	-0.3	-0.5
B4J018-01	C28H31F3N6O8	557.2483	-0.5	-1.7
B4J019-01	C31H32F3N5O8	580.253	-0.5	-2.1
B4J020-01	C30H31F3N6O8	581.2483	0.0	0.0
B4J021-01	C32H34F3N7O8	622.2748	0.0	0.0
B4J022-01	C31H33F3N8O8	623.2701	0.2	-0.7
B4J023-01	C28H33N8O8S	492.2315	3.5	-3.4
B4J024-01	C27H32N4O8S	493.2268	-0.6	6.8
B4J025-01	C31H37N8O8	500.2908	3.6	-0.3
B4J026-01	C30H36N4O8	501.286	-3.6	-5.9
B4J027-01	C30H34FN8O8	504.2657	-0.5	0.2
B4J028-01	C29H33FN4O8	505.261	-1.0	0.9
B4J029-01	C32H35N8O8	510.2751	0.0	0.0
B4J030-01	C31H34N4O8	511.2704	0.1	0.8
B4J031-01	C31H34N4O8	511.2704	0.1	0.8
B4J032-01	C30H33N5O8	512.2656	-7.2	1.5
B4J033-01	C32H39N8O8	514.3064	0.0	-0.9
B4J034-01	C31H38N4O8	515.3017	-0.7	0.9
B4J035-01	C34H37N8O8	536.2908	4.1	1.5
B4J036-01	C33H36N4O8	537.286	-0.3	-1.6
B4J037-01	C34H43N3O8	542.3377	2.7	-1.5
B4J038-01	C33H42N4O8	543.333	0.8	0.0
B4J039-01	C31H34F3N8O8	554.2625	2.2	0.1
B4J040-01	C30H33F3N4O8	555.2578	-0.5	-1.2
B4J041-01	C33H34F3N8O8	578.2625	2.8	1.7
B4J042-01	C32H33F3N4O8	579.2578	1.0	0.0
B4J043-01	C34H36F3N5O8	620.2843	3.8	3.2
B4J044-01	C33H35F3N6O8	621.2796	1.8	0.3
B4J045-01	C30H37N8O2	472.2959	1.1	0.3
B4J046-01	C29H36N4O2	473.2911	0.0	0.0
B4J047-01	C31H39N8O2	486.3115	-6.6	0.0
B4J048-01	C30H38N4O2	487.3068	1.2	-2.1
B4J049-01	C32H41N8O2	500.3272	7.1	-1.4
B4J050-01	C31H40N4O2	501.3224	2.1	0.6
B4J051-01	C30H36FN8O2	490.2864	-9.6	-10.2
B4J052-01	C29H35FN4O2	491.2817	0.5	-1.5
B4J053-01	C31H39N8O8	502.3064	-0.1	-6.0
B4J054-01	C30H38N4O8	503.3017	0.0	-1.1
B4J055-01	C32H41N8O8	516.3221	-0.7	1.4
B4J056-01	C31H40N4O8	517.3173	-1.4	-1.5
B4J057-01	C33H43N8O8	530.3377	5.3	-0.1
B4J058-01	C32H42N4O8	531.333	2.2	0.5
B4J059-01	C32H41N8O4	532.317	-0.1	-6.0
B4J060-01	C31H40N4O4	533.3122	0.0	0.0

na = not available

【0698】

【表１３７】

化合物番号	分子式	m/z (expected)	ASM6 ratio(%)	
			n=1	n=2
B4J061-01	C31H36F3N8O2	540.2832	1.6	-1.8
B4J062-01	C30H35F3N4O2	541.2785	0.0	0.0
B4J063-01	C31H36F3N8O3	556.2782	4.5	0.1
B4J064-01	C30H35F3N4O3	557.2734	1.6	0.0
B4J065-01	C34H39N8O2	522.3115	0.0	0.0
B4J066-01	C33H38N4O2	523.3068	0.0	-1.5
B4J067-01	C28H35N8O2S	478.2523	-11.0	-5.5
B4J068-01	C27H34N4O2S	479.2475	0.7	0.0
B4J069-01	C32H37N8O2	496.2959	1.8	-0.8
B4J070-01	C31H36N4O2	497.2911	0.0	0.0
B4J071-01	C28H35N5O2	474.2864	0.4	-0.5
B4J072-01	C27H34N6O2	475.2816	-1.6	0.9
B4J073-01	C29H37N5O2	488.302	2.1	0.0
B4J074-01	C28H36N6O2	489.2973	0.0	0.0
B4J075-01	C30H39N5O2	502.3177	0.0	0.0
B4J076-01	C29H38N6O2	503.3129	0.0	0.0
B4J077-01	C28H34FN5O2	492.2769	1.2	-5.5
B4J078-01	C27H33FN6O2	493.2722	-0.5	0.9
B4J079-01	C29H37N5O3	504.2969	0.0	0.0
B4J080-01	C28H36N6O3	505.2922	0.0	0.0
B4J081-01	C30H39N5O3	518.3126	0.0	0.0
B4J082-01	C29H38N6O3	519.3078	0.0	0.0
B4J083-01	C31H41N5O3	532.3282	0.0	0.0
B4J084-01	C30H40N6O3	533.3235	0.0	-0.6
B4J085-01	C30H39N5O4	534.3075	0.0	2.8
B4J086-01	C29H38N6O4	535.3027	0.0	0.0
B4J087-01	C29H34F3N5O2	542.2737	0.9	0.3
B4J088-01	C28H33F3N6O2	543.269	0.0	0.0
B4J089-01	C29H34F3N5O3	558.2687	3.9	0.4
B4J090-01	C28H33F3N6O3	559.2639	1.4	-1.5
B4J091-01	C32H37N5O2	524.302	3.7	1.5
B4J092-01	C31H36N6O2	525.2973	-1.4	0.3
B4J093-01	C26H33N5O2S	480.2428	-2.1	0.6
B4J094-01	C25H32N6O2S	481.238	-1.3	0.1
B4J095-01	C30H35N5O2	498.2864	1.5	0.0
B4J096-01	C29H34N6O2	499.2816	na	0.0
B4J097-01	C31H39N3O2	486.3115	-0.9	-0.4
B4J098-01	C30H38N4O2	487.3068	-2.0	-0.2
B4J099-01	C31H38FN3O2	504.3021	na	0.0
B4J100-01	C30H37FN4O2	505.2973	0.0	0.0
B2QD01-01	C36H35N7O2S3	774.1833	0.0	0.0
B2QD02-01	C35H34N8O2S3	775.1785	24.5	17.2
B2QD03-01	C39H39N7O2S2	782.2425	8.2	6.9
B2QD04-01	C38H38N8O2S2	783.2378	10.7	8.7
B2QD05-01	C38H36FN7O2S2	786.2174	12.5	15.3
B2QD06-01	C37H35FN8O2S2	787.2127	9.5	2.2
B2QD07-01	C40H37N7O2S2	792.2269	4.2	-8.3
B2QD08-01	C39H36N8O2S2	793.2221	16.5	0.5
B2QD09-01	C39H36N8O2S2	793.2221	16.5	0.5
B2QD10-01	C38H35N8O2S2	794.2174	13.3	8.9
B2QD11-01	C40H41N7O2S2	796.2582	25.0	-1.1
B2QD12-01	C39H40N8O2S2	797.2534	21.4	22.5
B2QD13-01	C42H39N7O2S2	818.2425	0.0	0.0
B2QD14-01	C41H38N8O2S2	819.2378	9.3	14.5
B2QD15-01	C42H45N7O2S2	824.2895	17.1	13.2
B2QD16-01	C41H44N8O2S2	825.2847	10.6	6.5
B2QD17-01	C39H36F3N7O2S2	836.2143	12.8	0.2
B2QD18-01	C38H35F3N8O2S2	837.2095	na	0.0
B2QD19-01	C41H36F3N7O2S2	860.2143	0.7	14.1
B2QD20-01	C40H35F3N8O2S2	861.2095	6.1	5.6
B2QD21-01	C42H38F3N8O2S2	902.2361	0.0	0.0
B2QD22-01	C41H37F3N10O2S	903.2313	13.8	23.6
B2QD23-01	C38H37N5O2S3	772.1928	0.0	0.0
B2QD24-01	C37H36N6O2S3	773.188	4.5	7.5
B2QD25-01	C41H41N5O2S2	780.252	-5.7	0.0
B2QD26-01	C40H40N6O2S2	781.2473	4.4	0.4
B2QD27-01	C40H38FN5O2S2	784.2269	0.2	-2.5
B2QD28-01	C39H37FN6O2S2	785.2222	0.0	-3.7
B2QD29-01	C42H39N5O2S2	790.2364	na	na
B2QD30-01	C41H38N6O2S2	791.2316	6.6	-4.1

化合物番号	分子式	m/z (expected)	ASM6 ratio(%)	
			n=1	n=2
B2QD31-01	C41H38N6O2S2	791.2316	6.6	-4.1
B2QD32-01	C40H37N7O2S2	792.2269	-0.2	-374.2
B2QD33-01	C42H43N5O2S2	794.2677	4.2	-2.3
B2QD34-01	C41H42N6O2S2	795.2629	0.0	0.0
B2QD35-01	C44H41N5O2S2	816.252	9.9	-13.7
B2QD36-01	C43H40N6O2S2	817.2473	0.0	-6.0
B2QD37-01	C44H47N5O2S2	822.299	10.9	-1.5
B2QD38-01	C43H46N6O2S2	823.2942	3.3	0.4
B2QD39-01	C41H38F3N5O2S2	834.2238	7.2	4.6
B2QD40-01	C40H37F3N6O2S2	835.219	3.9	1.5
B2QD41-01	C43H38F3N5O2S2	858.2238	2.6	0.2
B2QD42-01	C42H37F3N6O2S2	859.219	26.1	19.5
B2QD43-01	C44H40F3N7O2S2	900.2456	12.4	-13.4
B2QD44-01	C43H39F3N8O2S2	901.2408	11.0	-1.3
B2QD45-01	C40H41N5O6S2	752.2571	49.9	49.9
B2QD46-01	C39H40N6O6S2	753.2524	20.3	20.5
B2QD47-01	C41H43N5O6S2	766.2728	142.5	326.4
B2QD48-01	C40H42N6O6S2	767.268	61.6	90.8
B2QD49-01	C42H45N5O6S2	780.2884	-2.4	-4.8
B2QD50-01	C41H44N6O6S2	781.2837	0.0	0.0
B2QD51-01	C40H40FN5O6S2	770.2477	22.6	2.1
B2QD52-01	C39H39FN6O6S2	771.2429	22.8	13.9
B2QD53-01	C41H43N5O7S2	782.2677	22.4	15.5
B2QD54-01	C40H42N6O7S2	783.2629	44.1	65.0
B2QD55-01	C42H45N5O7S2	796.2833	9.0	-8.3
B2QD56-01	C41H44N6O7S2	797.2786	7.3	2.8
B2QD57-01	C43H47N5O7S2	810.299	17.5	4.4
B2QD58-01	C42H46N6O7S2	811.2942	3.7	3.7
B2QD59-01	C42H45N5O8S2	812.2782	9.8	7.0
B2QD60-01	C41H44N6O8S2	813.2735	0.0	0.0
B2QD61-01	C41H40F3N5O6S2	820.2445	15.6	-17.9
B2QD62-01	C40H39F3N6O6S2	821.2397	9.4	-3.3
B2QD63-01	C41H40F3N5O7S2	836.2394	13.3	-25.5
B2QD64-01	C40H39F3N6O7S2	837.2347	8.6	-1.6
B2QD65-01	C44H43N5O6S2	802.2728	30.6	-1.6
B2QD66-01	C43H42N6O6S2	803.268	40.7	36.9
B2QD67-01	C38H39N5O6S3	758.2135	na	na
B2QD68-01	C37H38N6O6S3	759.2088	na	na
B2QD69-01	C42H41N5O6S2	776.2571	8.8	11.0
B2QD70-01	C41H40N6O6S2	777.2524	14.3	-9.0
B2QD71-01	C38H39N7O6S2	754.2476	25.0	11.2
B2QD72-01	C37H38N8O6S2	755.2429	10.2	11.4
B2QD73-01	C39H41N7O6S2	768.2633	0.0	0.0
B2QD74-01	C38H40N8O6S2	769.2585	18.8	15.4
B2QD75-01	C40H43N7O6S2	782.2789	0.0	0.0
B2QD76-01	C39H42N8O6S2	783.2742	0.0	na
B2QD77-01	C38H38FN7O6S2	772.2382	14.7	17.2
B2QD78-01	C37H37FN8O6S2	773.2334	15.6	12.1
B2QD79-01	C39H41N7O7S2	784.2582	17.6	0.0
B2QD80-01	C38H40N8O7S2	785.2534	12.6	3.6
B2QD81-01	C40H43N7O7S2	798.2738	-4.8	0.6
B2QD82-01	C39H42N8O7S2	799.2691	21.3	8.5
B2QD83-01	C41H45N7O7S2	812.2895	na	0.0
B2QD84-01	C40H44N8O7S2	813.2847	12.6	-4.9
B2QD85-01	C40H43N7O8S2	814.2687	14.9	0.7
B2QD86-01	C39H42N8O8S2	815.264	-39.4	0.0
B2QD87-01	C39H38F3N7O6S2	822.235	17.6	-2.1
B2QD88-01	C38H37F3N8O6S2	823.2302	13.8	9.1
B2QD89-01	C39H38F3N7O7S2	838.2299	25.0	-15.0
B2QD90-01	C38H37F3N8O7S2	839.2252	21.8	13.2
B2QD91-01	C42H41N7O6S2	804.2633	17.2	-5.0
B2QD92-01	C41H40N8O6S2	805.2585	10.4	4.8
B2QD93-01	C36H37N7O6S3	760.204	na	na
B2QD94-01	C35H36N8O6S3	761.1993	7.2	2.5
B2QD95-01	C40H39N7O6S2	778.2476	19.9	11.9
B2QD96-01	C39H38N8O6S2	779.2429	na	na
B2QD97-01	C41H43N5O6S2	766.2728	142.5	326.4
B2QD98-01	C40H42N6O6S2	767.268	61.6	90.8
B2QD99-01	C41H42FN5O6S2	784.2633	na	0.0
B2QD100-01	C40H41FN6O6S2	785.2586	0.0	10.7

na = not available

【０６９９】

【表１３８】

化合物番号	分子式	m/z (expected)	ASMS ratio(%)	
			n=1	n=2
B2A001-01	C33H39N5O5S2	650.2465	0.0	0.0
B2A002-01	C32H38N6O5S2	651.2418	0.0	0.0
B2A003-01	C36H43N5O5S	658.3058	21.0	11.0
B2A004-01	C35H42N6O5S	659.301	0.0	0.0
B2A005-01	C35H40FN5O5S	662.2807	4.7	12.4
B2A006-01	C34H39FN6O5S	663.2759	0.0	0.0
B2A007-01	C37H41N5O5S	668.2901	na	0.0
B2A008-01	C36H40N6O5S	669.2854	3.1	7.2
B2A009-01	C36H40N6O5S	669.2854	3.1	7.2
B2A010-01	C35H39N7O5S	670.2806	0.0	0.0
B2A011-01	C37H45N5O5S	672.3214	9.0	0.3
B2A012-01	C36H44N6O5S	673.3167	1.5	1.9
B2A013-01	C39H43N5O5S	694.3058	11.6	17.8
B2A014-01	C38H42N6O5S	695.301	7.7	2.2
B2A015-01	C39H49N5O5S	700.3527	5.9	9.7
B2A016-01	C38H48N6O5S	701.348	0.0	2.5
B2A017-01	C36H40F3N5O5S	712.2775	18.6	7.5
B2A018-01	C35H39F3N6O5S	713.2728	5.1	0.0
B2A019-01	C38H40F3N5O5S	736.2775	7.4	5.0
B2A020-01	C37H39F3N6O5S	737.2728	3.4	8.9
B2A021-01	C39H42F3N7O5S	778.2993	14.4	9.4
B2A022-01	C38H41F3N8O5S	779.2946	27.0	3.7
B2A023-01	C35H41N5O5S2	648.256	0.0	0.0
B2A024-01	C34H40N4O5S2	649.2513	-1.9	0.0
B2A025-01	C38H45N5O5S	656.3153	4.6	-2.7
B2A026-01	C37H44N6O5S	657.3105	0.8	-2.1
B2A027-01	C37H42FN5O5S	660.2902	5.5	-3.9
B2A028-01	C36H41FN6O5S	661.2855	-1.0	1.2
B2A029-01	C39H43N5O5S	666.2996	na	na
B2A030-01	C38H42N6O5S	667.2949	0.0	0.3
B2A031-01	C38H42N6O5S	667.2949	0.0	0.3
B2A032-01	C37H41N5O5S	668.2901	0.0	0.0
B2A033-01	C39H47N5O5S	670.3309	1.7	-4.5
B2A034-01	C38H46N6O5S	671.3262	1.6	0.3
B2A035-01	C41H45N5O5S	692.3153	6.2	-9.8
B2A036-01	C40H44N6O5S	693.3105	2.0	-0.4
B2A037-01	C41H51N5O5S	698.3622	3.0	0.0
B2A038-01	C40H50N6O5S	699.3575	1.8	-3.5
B2A039-01	C38H42F3N5O5S	710.287	7.4	-10.4
B2A040-01	C37H41F3N6O5S	711.2823	0.0	0.0
B2A041-01	C40H42F3N5O5S	734.287	0.0	-3.7
B2A042-01	C39H41F3N6O5S	735.2823	10.1	-0.9
B2A043-01	C41H44F3N5O5S	776.3088	14.0	4.4
B2A044-01	C40H43F3N6O5S	777.3041	0.7	-0.2
B2A045-01	C37H45N3O4S	628.3204	6.5	-2.9
B2A046-01	C36H44N4O4S	629.3156	-2.7	-22.1
B2A047-01	C38H47N3O4S	642.336	9.7	0.4
B2A048-01	C37H46N4O4S	643.3313	18.2	2.1
B2A049-01	C39H49N3O4S	656.3517	-3.0	6.2
B2A050-01	C38H48N4O4S	657.3469	-1.1	1.6
B2A051-01	C37H44FN3O4S	646.3109	-0.3	3.6
B2A052-01	C36H43FN4O4S	647.3062	0.0	0.0
B2A053-01	C38H47N3O5S	658.3309	0.0	0.0
B2A054-01	C37H46N4O5S	659.3262	17.5	-0.9
B2A055-01	C39H49N3O5S	672.3466	5.8	-7.3
B2A056-01	C38H48N4O5S	673.3418	-3.9	0.2
B2A057-01	C40H51N3O5S	686.3622	-4.8	-5.3
B2A058-01	C39H50N4O5S	687.3575	4.8	-10.6
B2A059-01	C39H49N3O6S	688.3415	0.0	-42.2
B2A060-01	C38H48N4O6S	689.3367	0.0	0.0
B2A061-01	C38H44F3N3O4S	696.3077	1.7	-5.6
B2A062-01	C37H43F3N4O4S	697.303	-5.2	3.6
B2A063-01	C38H44F3N3O5S	712.3027	0.5	3.3
B2A064-01	C37H43F3N4O5S	713.2979	0.0	-0.3
B2A065-01	C41H47N3O4S	678.336	10.5	-2.9
B2A066-01	C40H46N4O4S	679.3313	3.2	0.0
B2A067-01	C35H43N3O4S2	634.2768	0.0	0.0
B2A068-01	C34H42N4O4S2	635.272	0.0	0.0
B2A069-01	C39H45N3O4S	652.3204	4.6	-4.6
B2A070-01	C38H44N4O4S	653.3156	na	0.0

化合物番号	分子式	m/z (expected)	ASMS ratio(%)	
			n=1	n=2
B2A071-01	C35H43N5O4S	630.3109	16.1	5.6
B2A072-01	C34H42N6O4S	631.3061	12.2	14.7
B2A073-01	C36H45N5O4S	644.3265	16.2	13.5
B2A074-01	C35H44N6O4S	645.3218	9.2	1.9
B2A075-01	C37H47N5O4S	658.3422	4.6	4.4
B2A076-01	C36H46N6O4S	659.3374	23.4	11.4
B2A077-01	C35H42FN5O4S	648.3014	14.3	21.9
B2A078-01	C34H41FN6O4S	649.2967	15.2	9.3
B2A079-01	C36H45N5O5S	660.3214	na	na
B2A080-01	C35H44N6O5S	661.3167	0.0	0.0
B2A081-01	C37H47N5O5S	674.3371	18.6	16.7
B2A082-01	C36H46N6O5S	675.3323	na	na
B2A083-01	C38H49N5O5S	688.3527	10.3	0.0
B2A084-01	C37H48N6O5S	689.348	13.3	11.9
B2A085-01	C37H47N5O6S	690.332	0.0	0.0
B2A086-01	C36H46N6O6S	691.3272	0.0	0.0
B2A087-01	C36H42F3N5O4S	698.2982	7.2	12.7
B2A088-01	C35H41F3N6O4S	699.2935	12.0	14.0
B2A089-01	C36H42F3N5O5S	714.2932	10.5	0.5
B2A090-01	C35H41F3N6O5S	715.2884	22.0	4.7
B2A091-01	C39H45N5O4S	680.3265	-2.6	3.8
B2A092-01	C38H44N6O4S	681.3218	20.8	16.6
B2A093-01	C33H41N5O4S2	636.2673	13.0	0.0
B2A094-01	C32H40N6O4S2	637.2625	0.0	0.0
B2A095-01	C37H43N5O4S	654.3109	1.6	13.8
B2A096-01	C36H42N6O4S	655.3061	na	na
B2A097-01	C38H47N3O4S	642.336	9.7	0.4
B2A098-01	C37H46N4O4S	643.3313	18.2	2.1
B2A099-01	C38H46FN3O4S	660.3266	0.0	0.0
B2A100-01	C37H45FN4O4S	661.3218	0.0	0.0
B2I001-01	C23H25N5O5S2	516.137	0.0	na
B2I002-01	C22H24N6O5S2	517.1322	0.0	0.0
B2I003-01	C26H29N5O5S	524.1962	0.0	0.0
B2I004-01	C25H28N6O5S	525.1915	0.9	-0.3
B2I005-01	C25H26FN5O5S	528.1711	0.0	0.0
B2I006-01	C24H25FN6O5S	529.1664	0.0	0.0
B2I007-01	C27H27N5O5S	534.1806	-1.6	-1.6
B2I008-01	C26H26N6O5S	535.1758	0.0	0.0
B2I009-01	C26H26N6O5S	535.1758	0.0	0.0
B2I010-01	C25H25N7O5S	536.1711	na	na
B2I011-01	C27H31N5O5S	538.2119	0.0	0.0
B2I012-01	C26H30N6O5S	539.2071	-4.0	-0.2
B2I013-01	C29H29N5O5S	560.1962	0.0	0.0
B2I014-01	C28H28N6O5S	561.1915	1.0	2.3
B2I015-01	C29H35N5O5S	566.2432	0.0	0.0
B2I016-01	C28H34N6O5S	567.2384	0.0	0.0
B2I017-01	C26H26F3N5O5S	578.168	0.0	0.0
B2I018-01	C25H25F3N6O5S	579.1632	0.0	0.0
B2I019-01	C28H26F3N5O5S	602.168	0.0	na
B2I020-01	C27H25F3N6O5S	603.1632	0.0	0.0
B2I021-01	C29H28F3N7O5S	644.1898	0.0	0.0
B2I022-01	C28H27F3N6O5S	645.185	0.0	0.0
B2I023-01	C25H27N3O5S2	514.1465	0.0	0.0
B2I024-01	C24H26N4O5S2	515.1417	0.0	0.0
B2I025-01	C28H31N3O5S	522.2057	0.0	0.0
B2I026-01	C27H30N4O5S	523.201	-2.6	-0.2
B2I027-01	C27H28FN3O5S	526.1807	0.0	0.0
B2I028-01	C26H27FN4O5S	527.1759	0.0	0.0
B2I029-01	C29H29N3O5S	532.1901	0.0	0.0
B2I030-01	C28H28N4O5S	533.1853	0.0	0.0
B2I031-01	C28H28N4O5S	533.1853	0.0	0.0
B2I032-01	C27H27N5O5S	534.1806	-1.6	-1.6
B2I033-01	C29H33N3O5S	536.2214	0.0	0.0
B2I034-01	C28H32N4O5S	537.2166	0.0	1.6
B2I035-01	C31H31N3O5S	558.2057	0.0	1.6
B2I036-01	C30H30N4O5S	559.201	-0.7	1.5
B2I037-01	C31H37N3O5S	564.2527	0.0	3.3
B2I038-01	C30H36N4O5S	565.2479	0.0	0.0
B2I039-01	C28H28F3N3O5S	576.1775	0.0	0.0
B2I040-01	C27H27F3N4O5S	577.1727	0.0	-2.7

na = not available

【0700】

【表１３９】

化合物番号	分子式	m/z (expected)	ASMS ratio/%	
			n=1	n=2
B2L041-01	C30H28F3N3O5S	600.1775	0.0	0.0
B2L042-01	C29H27F3N4O5S	601.1727	0.0	0.0
B2L043-01	C31H30F3N5O5S	642.1993	0.0	0.0
B2L044-01	C30H29F3N6O5S	643.1945	0.0	0.0
B2L045-01	C27H31N3O4S	494.2108	-0.3	0.2
B2L046-01	C26H30N4O4S	495.2061	-0.6	1.5
B2L047-01	C28H33N3O4S	508.2265	0.8	1.4
B2L048-01	C27H32N4O4S	509.2217	0.0	0.0
B2L049-01	C29H35N3O4S	522.2421	0.0	0.0
B2L050-01	C28H34N4O4S	523.2374	0.0	-1.5
B2L051-01	C27H30FN3O4S	512.2014	0.0	0.0
B2L052-01	C26H29FN4O4S	513.1966	0.0	0.0
B2L053-01	C28H33N3O5S	524.2214	0.0	0.0
B2L054-01	C27H32N4O5S	525.2166	0.0	0.0
B2L055-01	C29H35N3O5S	538.237	0.0	0.0
B2L056-01	C28H34N4O5S	539.2323	0.0	0.0
B2L057-01	C30H37N3O5S	552.2527	0.0	0.0
B2L058-01	C29H36N4O5S	553.2479	0.0	0.0
B2L059-01	C29H35N3O5S	554.2319	0.0	0.0
B2L060-01	C28H34N4O5S	555.2272	0.0	0.0
B2L061-01	C28H30F3N3O4S	562.1982	-0.8	0.5
B2L062-01	C27H29F3N4O4S	563.1934	0.0	0.0
B2L063-01	C28H30F3N3O5S	578.1931	0.9	0.0
B2L064-01	C27H29F3N4O5S	579.1884	0.0	0.0
B2L065-01	C31H33N3O4S	544.2265	0.0	0.0
B2L066-01	C30H32N4O4S	545.2217	0.0	0.0
B2L067-01	C25H29N3O4S2	500.1672	0.0	0.0
B2L068-01	C24H28N4O4S2	501.1625	0.0	0.0
B2L069-01	C29H31N3O4S	518.2108	0.0	-2.2
B2L070-01	C28H30N4O4S	519.2061	na	0.0
B2L071-01	C25H29N5O4S	496.2013	-1.2	-1.9
B2L072-01	C24H28N6O4S	497.1966	0.8	1.3
B2L073-01	C26H31N5O4S	510.217	0.0	0.0
B2L074-01	C25H30N6O4S	511.2122	0.0	-8.4
B2L075-01	C27H33N5O4S	524.2326	0.0	0.0
B2L076-01	C26H32N6O4S	525.2279	0.2	-3.2
B2L077-01	C25H28FN5O4S	514.1919	0.0	0.0
B2L078-01	C24H27FN6O4S	515.1871	0.0	0.0
B2L079-01	C26H31N5O5S	526.2119	0.0	0.0
B2L080-01	C25H30N6O5S	527.2071	0.0	na
B2L081-01	C27H33N5O5S	540.2275	0.0	0.0
B2L082-01	C26H32N6O5S	541.2228	0.0	1.9
B2L083-01	C28H35N5O5S	554.2432	0.0	0.0
B2L084-01	C27H34N6O5S	555.2384	-0.9	-1.5
B2L085-01	C27H33N5O6S	556.2224	0.0	0.0
B2L086-01	C26H32N6O6S	557.2177	0.0	0.0
B2L087-01	C26H28F3N5O4S	564.1887	1.3	-0.9
B2L088-01	C25H27F3N6O4S	565.1839	0.0	0.0
B2L089-01	C26H28F3N5O5S	580.1836	1.4	0.0
B2L090-01	C25H27F3N6O5S	581.1789	0.0	0.0
B2L091-01	C29H31N5O4S	546.217	na	na
B2L092-01	C28H30N6O4S	547.2122	2.6	0.3
B2L093-01	C23H27N5O4S2	502.1577	na	na
B2L094-01	C22H26N6O4S2	503.153	0.0	0.0
B2L095-01	C27H29N5O4S	520.2013	0.0	0.0
B2L096-01	C26H28N6O4S	521.1966	0.0	0.0
B2L097-01	C28H33N3O4S	508.2265	0.8	1.4
B2L098-01	C27H32N4O4S	509.2217	0.0	0.0
B2L099-01	C28H32FN3O4S	526.217	na	0.0
B2L100-01	C27H31FN4O4S	527.2123	0.0	0.0
B2L001-01	C26H31N5O5S2	558.1839	-67.5	0.0
B2L002-01	C25H30N6O5S2	559.1792	0.0	0.0
B2L003-01	C29H35N5O5S	566.2432	0.0	0.0
B2L004-01	C28H34N6O5S	567.2384	5.5	9.3
B2L005-01	C28H32FN5O5S	570.2181	0.0	0.0
B2L006-01	C27H31FN6O5S	571.2133	0.0	0.0
B2L007-01	C30H33N5O5S	576.2275	0.0	-1.0
B2L008-01	C29H32N6O5S	577.2228	0.0	0.0
B2L009-01	C29H32N6O5S	577.2228	0.0	0.0
B2L010-01	C28H31N7O5S	578.218	0.0	0.0

化合物番号	分子式	m/z (expected)	ASMS ratio/%	
			n=1	n=2
B2L011-01	C30H37N5O5S	580.2588	0.0	0.0
B2L012-01	C29H36N6O5S	581.2541	4.3	7.3
B2L013-01	C32H35N5O5S	602.2432	0.0	0.0
B2L014-01	C31H34N6O5S	603.2384	0.3	0.5
B2L015-01	C32H41N5O5S	608.2901	0.0	0.0
B2L016-01	C31H40N6O5S	609.2854	0.0	-5.4
B2L017-01	C29H32F3N5O5S	620.2149	0.0	0.0
B2L018-01	C28H31F3N6O5S	621.2102	-1.9	-2.5
B2L019-01	C31H32F3N5O5S	644.2149	na	na
B2L020-01	C30H31F3N6O5S	645.2102	0.0	0.0
B2L021-01	C32H34F3N7O5S	686.2367	0.0	-14.9
B2L022-01	C31H33F3N8O5S	687.232	0.0	0.0
B2L023-01	C28H33N3O6S2	556.1934	0.0	0.0
B2L024-01	C27H32N4O6S2	557.1887	0.0	0.0
B2L025-01	C31H37N3O6S	564.2527	0.0	0.0
B2L026-01	C30H36N4O6S	565.2479	0.0	0.0
B2L027-01	C30H34FN3O6S	568.2276	0.0	0.0
B2L028-01	C29H33FN4O6S	569.2229	0.0	0.0
B2L029-01	C32H35N3O6S	574.237	0.0	na
B2L030-01	C31H34N4O6S	575.2323	0.0	0.0
B2L031-01	C31H34N4O6S	575.2323	0.0	0.0
B2L032-01	C30H33N5O6S	576.2275	0.0	-1.0
B2L033-01	C32H39N3O6S	578.2683	0.0	0.0
B2L034-01	C31H38N4O6S	579.2636	1.6	3.5
B2L035-01	C34H37N3O6S	600.2527	0.0	na
B2L036-01	C33H36N4O6S	601.2479	0.0	0.0
B2L037-01	C34H43N3O6S	606.2996	0.0	0.0
B2L038-01	C33H42N4O6S	607.2949	0.0	0.0
B2L039-01	C31H34F3N3O6S	618.2244	0.0	0.0
B2L040-01	C30H33F3N4O6S	619.2197	-0.2	1.0
B2L041-01	C33H34F3N3O6S	642.2244	0.0	na
B2L042-01	C32H33F3N4O6S	643.2197	0.0	0.0
B2L043-01	C34H36F3N5O6S	684.2462	0.0	0.0
B2L044-01	C33H35F3N6O6S	685.2415	0.0	0.0
B2L045-01	C30H37N3O4S	536.2578	0.0	0.0
B2L046-01	C29H36N4O4S	537.253	0.0	0.0
B2L047-01	C31H39N3O4S	550.2734	0.0	0.0
B2L048-01	C30H38N4O4S	551.2687	3.9	-5.0
B2L049-01	C32H41N3O4S	564.2891	na	0.0
B2L050-01	C31H40N4O4S	565.2843	0.0	0.0
B2L051-01	C30H36FN3O4S	554.2483	0.0	0.0
B2L052-01	C29H35FN4O4S	555.2436	2.7	1.0
B2L053-01	C31H39N3O5S	566.2683	0.0	0.0
B2L054-01	C30H38N4O5S	567.2636	0.0	0.0
B2L055-01	C32H41N3O5S	580.284	0.0	0.0
B2L056-01	C31H40N4O5S	581.2792	0.0	0.0
B2L057-01	C33H43N3O5S	594.2996	0.0	0.0
B2L058-01	C32H42N4O5S	595.2949	0.0	0.0
B2L059-01	C32H41N3O6S	596.2789	0.0	0.0
B2L060-01	C31H40N4O6S	597.2741	na	0.0
B2L061-01	C31H36F3N3O4S	604.2451	4.6	-11.1
B2L062-01	C30H35F3N4O4S	605.2404	0.0	0.0
B2L063-01	C31H36F3N3O5S	620.2401	0.0	0.0
B2L064-01	C30H35F3N4O5S	621.2353	0.0	0.0
B2L065-01	C34H39N3O4S	586.2734	na	na
B2L066-01	C33H38N4O4S	587.2687	0.0	0.0
B2L067-01	C28H35N3O4S2	542.2142	0.0	0.0
B2L068-01	C27H34N4O4S2	543.2094	0.0	0.0
B2L069-01	C32H37N3O4S	560.2578	0.0	0.0
B2L070-01	C31H36N4O4S	561.253	4.9	-4.2
B2L071-01	C28H35N5O4S	538.2483	1.2	0.0
B2L072-01	C27H34N6O4S	539.2435	-10.7	8.3
B2L073-01	C29H37N5O4S	552.2639	0.0	0.0
B2L074-01	C28H36N6O4S	553.2592	-1.0	1.4
B2L075-01	C30H39N5O4S	566.2796	0.0	33.9
B2L076-01	C29H38N6O4S	567.2748	1.8	-0.3
B2L077-01	C28H34FN5O4S	556.2388	0.0	0.0
B2L078-01	C27H33FN6O4S	557.2341	1.1	-0.7
B2L079-01	C29H37N5O5S	568.2588	0.0	0.0
B2L080-01	C28H36N6O5S	569.2541	0.0	0.0

na = not available

【０７０１】

【表１４０】

化合物番号	分子式	m/z (expected)	ASMS ratio(%)	
			n=1	n=2
B2L081-01	C30H39N5O5S	582.2745	0.0	0.0
B2L082-01	C29H38N6O5S	583.2697	2.6	-1.2
B2L083-01	C31H41N5O5S	596.2901	0.0	0.0
B2L084-01	C30H40N6O5S	597.2854	-3.0	-1.9
B2L085-01	C30H39N5O6S	598.2694	0.0	0.0
B2L086-01	C29H38N6O6S	599.2646	na	0.0
B2L087-01	C29H34F3N5O4S	606.2356	1.9	-24.6
B2L088-01	C28H33F3N6O4S	607.2309	0.0	2.8
B2L089-01	C29H34F3N5O5S	622.2306	0.0	0.0
B2L090-01	C28H33F3N6O5S	623.2258	0.0	0.0
B2L091-01	C32H37N5O4S	588.2639	0.0	0.0
B2L092-01	C31H36N6O4S	589.2592	5.5	7.8
B2L093-01	C26H33N5O4S2	544.2047	na	0.0
B2L094-01	C25H32N6O4S2	545.1999	0.2	1.8
B2L095-01	C30H35N5O4S	562.2483	0.0	0.0
B2L096-01	C29H34N6O4S	563.2435	0.0	0.0
B2L097-01	C31H39N5O4S	550.2734	0.0	0.0
B2L098-01	C30H38N6O4S	551.2687	3.9	-5.0
B2L099-01	C31H38FN5O4S	568.264	na	na
B2L100-01	C30H37FN4O4S	569.2592	0.0	0.0
B2N001-01	C25H26F3N5O5S2	598.14	na	0.0
B2N002-01	C24H25F3N6O5S2	599.1353	0.0	0.0
B2N003-01	C28H30F3N5O5S	606.1993	0.0	0.0
B2N004-01	C27H29F3N6O5S	607.1945	1.2	-2.0
B2N005-01	C27H27F4N5O5S	610.1742	na	na
B2N006-01	C26H26F4N6O5S	611.1694	na	na
B2N007-01	C29H28F3N5O5S	616.1836	0.0	0.0
B2N008-01	C28H27F3N6O5S	617.1789	0.0	-0.4
B2N009-01	C28H27F3N6O5S	617.1789	0.0	-0.4
B2N010-01	C27H26F3N7O5S	618.1741	0.0	0.0
B2N011-01	C29H32F3N5O5S	620.2149	0.0	0.0
B2N012-01	C28H31F3N6O5S	621.2102	0.0	0.0
B2N013-01	C31H30F3N5O5S	642.1993	0.0	0.0
B2N014-01	C30H29F3N6O5S	643.1945	0.0	0.0
B2N015-01	C31H36F3N5O5S	648.2462	na	na
B2N016-01	C30H35F3N6O5S	649.2415	0.0	0.0
B2N017-01	C28H27F6N5O5S	660.171	na	na
B2N018-01	C27H26F6N6O5S	661.1662	0.0	1.0
B2N019-01	C30H27F6N5O5S	684.171	na	na
B2N020-01	C29H26F6N6O5S	685.1662	0.0	0.0
B2N021-01	C31H29F6N7O5S	726.1928	na	0.0
B2N022-01	C30H28F6N6O5S	727.188	0.0	0.0
B2N023-01	C27H28F3N6O5S2	596.1495	0.0	0.0
B2N024-01	C26H27F3N7O5S2	597.1448	0.0	0.0
B2N025-01	C30H32F3N6O5S	604.2088	0.0	0.0
B2N026-01	C29H31F3N7O5S	605.204	-1.5	-0.7
B2N027-01	C29H29F4N6O5S	608.1837	na	na
B2N028-01	C28H28F4N7O5S	609.1789	-0.7	-0.9
B2N029-01	C31H30F3N6O5S	614.1931	na	na
B2N030-01	C30H29F3N7O5S	615.1884	0.0	0.0
B2N031-01	C30H29F3N7O5S	615.1884	0.0	0.0
B2N032-01	C29H28F3N6O5S	616.1836	-0.4	-1.0
B2N033-01	C31H34F3N6O5S	618.2244	0.0	0.0
B2N034-01	C30H33F3N7O5S	619.2197	-0.2	1.0
B2N035-01	C33H32F3N6O5S	640.2088	0.0	0.0
B2N036-01	C32H31F3N7O5S	641.204	0.0	0.4
B2N037-01	C33H38F3N6O5S	646.2557	0.0	0.0
B2N038-01	C32H37F3N7O5S	647.251	0.0	0.0
B2N039-01	C30H29F6N6O5S	658.1805	na	na
B2N040-01	C29H28F6N7O5S	659.1757	0.0	0.0
B2N041-01	C32H29F6N6O5S	682.1805	na	na
B2N042-01	C31H28F6N7O5S	683.1757	0.0	0.0
B2N043-01	C33H31F6N6O5S	724.2023	-1.4	0.1
B2N044-01	C32H30F6N7O5S	725.1975	0.2	1.4
B2N045-01	C29H32F3N6O4S	576.2138	0.0	0.1
B2N046-01	C28H31F3N7O4S	577.2091	0.0	-1.2
B2N047-01	C30H34F3N6O4S	590.2295	0.0	0.0
B2N048-01	C29H33F3N7O4S	591.2247	0.0	-0.7
B2N049-01	C31H36F3N6O4S	604.2451	0.0	0.0
B2N050-01	C30H35F3N7O4S	605.2404	0.0	na

化合物番号	分子式	m/z (expected)	ASMS ratio(%)	
			n=1	n=2
B2N051-01	C29H31F4N6O4S	594.2044	0.0	0.0
B2N052-01	C28H30F4N7O4S	595.1997	0.0	-0.5
B2N053-01	C30H34F3N6O5S	606.2244	0.0	1.4
B2N054-01	C29H33F3N7O5S	607.2197	0.0	0.0
B2N055-01	C31H36F3N6O5S	620.2401	0.0	0.0
B2N056-01	C30H35F3N7O5S	621.2353	0.0	0.0
B2N057-01	C32H38F3N6O5S	634.2557	0.0	-1.8
B2N058-01	C31H37F3N7O5S	635.251	0.0	0.0
B2N059-01	C31H36F3N6O6S	636.235	0.0	0.0
B2N060-01	C30H35F3N7O6S	637.2302	0.0	0.0
B2N061-01	C30H31F6N6O4S	644.2012	0.0	0.0
B2N062-01	C29H30F6N7O4S	645.1965	0.0	0.0
B2N063-01	C30H31F6N6O5S	660.1961	-0.3	-3.8
B2N064-01	C29H30F6N7O5S	661.1914	0.0	0.0
B2N065-01	C33H34F3N6O4S	626.2295	0.0	0.0
B2N066-01	C32H33F3N7O4S	627.2247	0.0	0.0
B2N067-01	C27H30F3N6O4S2	582.1703	0.0	0.0
B2N068-01	C26H29F3N7O4S2	583.1655	0.0	0.5
B2N069-01	C31H32F3N6O4S	600.2138	-1.8	-1.5
B2N070-01	C30H31F3N7O4S	601.2091	0.0	0.0
B2N071-01	C27H30F3N5O4S	578.2043	0.0	0.0
B2N072-01	C26H29F3N6O4S	579.1996	0.0	0.1
B2N073-01	C28H32F3N5O4S	592.22	0.0	0.0
B2N074-01	C27H31F3N6O4S	593.2152	0.0	0.0
B2N075-01	C29H34F3N5O4S	606.2356	na	na
B2N076-01	C28H33F3N6O4S	607.2309	0.0	0.0
B2N077-01	C27H29F4N5O4S	596.1949	0.0	0.0
B2N078-01	C26H28F4N6O4S	597.1902	0.0	0.0
B2N079-01	C28H32F3N5O5S	608.2149	0.0	0.0
B2N080-01	C27H31F3N6O5S	609.2102	0.0	0.0
B2N081-01	C29H34F3N5O5S	622.2306	0.0	0.0
B2N082-01	C28H33F3N6O5S	623.2258	2.5	2.8
B2N083-01	C30H36F3N5O5S	636.2462	0.0	0.0
B2N084-01	C29H35F3N6O5S	637.2415	0.0	0.0
B2N085-01	C29H34F3N5O6S	638.2255	0.0	0.0
B2N086-01	C28H33F3N6O6S	639.2207	0.0	0.0
B2N087-01	C28H29F6N5O4S	646.1917	0.0	0.0
B2N088-01	C27H28F6N6O4S	647.187	0.0	0.0
B2N089-01	C28H29F6N5O5S	662.1866	na	0.0
B2N090-01	C27H28F6N6O5S	663.1819	0.0	0.0
B2N091-01	C31H32F3N5O4S	628.22	0.0	0.0
B2N092-01	C30H31F3N6O4S	629.2152	0.0	0.0
B2N093-01	C25H28F3N5O4S2	584.1608	0.0	na
B2N094-01	C24H27F3N6O4S2	585.156	0.0	0.0
B2N095-01	C29H30F3N5O4S	602.2043	0.0	0.0
B2N096-01	C28H29F3N6O4S	603.1996	na	na
B2N097-01	C30H34F3N6O4S	590.2295	0.0	0.0
B2N098-01	C29H33F3N7O4S	591.2247	0.0	-0.7
B2N099-01	C30H33F4N6O4S	608.2201	0.0	0.0
B2N100-01	C29H32F4N7O4S	609.2153	0.0	0.0
B2R001-01	C37H35F3N6O5S2	797.1856	na	na
B2R002-01	C36H34F3N7O5S2	798.1808	0.0	0.0
B2R003-01	C40H39F3N6O5S2	805.2448	21.6	0.0
B2R004-01	C39H38F3N7O5S2	806.2401	0.0	0.0
B2R005-01	C39H36F4N6O5S2	809.2198	44.0	39.5
B2R006-01	C38H35F4N7O5S2	810.215	na	na
B2R007-01	C41H37F3N6O5S2	815.2292	0.0	na
B2R008-01	C40H36F3N7O5S2	816.2244	0.0	19.5
B2R009-01	C40H36F3N7O5S2	816.2244	0.0	19.5
B2R010-01	C39H35F3N8O5S2	817.2197	0.0	0.0
B2R011-01	C41H41F3N6O5S2	819.2605	17.7	-1.3
B2R012-01	C40H40F3N7O5S2	820.2557	15.8	13.5
B2R013-01	C43H39F3N6O5S2	841.2448	7.5	7.7
B2R014-01	C42H38F3N7O5S2	842.2401	18.6	15.1
B2R015-01	C43H45F3N6O5S2	847.2918	9.7	0.0
B2R016-01	C42H44F3N7O5S2	848.287	9.1	2.7
B2R017-01	C40H36F6N6O5S2	859.2166	32.9	27.2
B2R018-01	C39H35F6N7O5S2	860.2118	5.1	7.8
B2R019-01	C42H36F6N6O5S2	883.2166	5.2	14.0
B2R020-01	C41H35F6N7O5S2	884.2118	10.8	-17.7

na = not available

【0702】

【表１４１】

化合物番号	分子式	m/z (expected)	ASMS ratio(%)	
			n=1	n=2
B2R021-01	C43H38F6N8O5S2	925.2384	13.0	0.0
B2R022-01	C42H37F6N9O5S2	926.2336	14.5	15.8
B2R023-01	C39H37F3N4O5S3	795.1951	0.0	-15.5
B2R024-01	C38H36F3N5O5S3	796.1903	0.0	-1.2
B2R025-01	C42H41F3N4O5S2	803.2543	-1.0	-2.4
B2R026-01	C41H40F3N5O5S2	804.2496	1.7	-4.6
B2R027-01	C41H38F4N4O5S2	807.2293	-3.7	1.2
B2R028-01	C40H37F4N5O5S2	808.2245	4.1	-0.5
B2R029-01	C43H39F3N4O5S2	813.2387	na	0.0
B2R030-01	C42H38F3N5O5S2	814.2339	0.0	4.8
B2R031-01	C42H38F3N5O5S2	814.2339	0.0	4.8
B2R032-01	C41H37F3N6O5S2	815.2292	6.4	0.0
B2R033-01	C43H43F3N4O5S2	817.27	3.6	-6.6
B2R034-01	C42H42F3N5O5S2	818.2652	0.1	-1.3
B2R035-01	C45H41F3N4O5S2	839.2543	8.3	0.9
B2R036-01	C44H40F3N5O5S2	840.2496	3.2	-0.8
B2R037-01	C45H47F3N4O5S2	845.3013	6.3	-7.0
B2R038-01	C44H46F3N5O5S2	846.2965	7.1	-6.0
B2R039-01	C42H38F6N4O5S2	857.2261	9.7	-4.8
B2R040-01	C41H37F6N5O5S2	858.2213	2.6	0.2
B2R041-01	C44H38F6N4O5S2	881.2261	18.0	0.0
B2R042-01	C43H37F6N5O5S2	882.2213	3.4	6.0
B2R043-01	C45H40F6N6O5S2	923.2479	3.4	-9.0
B2R044-01	C44H39F6N7O5S2	924.2431	-3.7	-4.1
B2R045-01	C41H41F3N4O4S2	775.2594	4.8	-3.4
B2R046-01	C40H40F3N5O4S2	776.2547	-0.2	0.0
B2R047-01	C42H43F3N4O4S2	789.2751	6.6	-7.8
B2R048-01	C41H42F3N5O4S2	790.2703	9.2	7.5
B2R049-01	C43H45F3N4O4S2	803.2907	7.5	-5.5
B2R050-01	C42H44F3N5O4S2	804.286	0.0	0.0
B2R051-01	C41H40F4N4O4S2	793.25	12.7	-1.8
B2R052-01	C40H39F4N5O4S2	794.2452	0.0	-7.4
B2R053-01	C42H43F3N4O5S2	805.27	-15.0	0.0
B2R054-01	C41H42F3N5O5S2	806.2652	3.3	-0.8
B2R055-01	C43H45F3N4O5S2	819.2856	-3.3	6.3
B2R056-01	C42H44F3N5O5S2	820.2809	na	-63.9
B2R057-01	C44H47F3N4O5S2	833.3013	5.7	-5.1
B2R058-01	C43H46F3N5O5S2	834.2965	13.0	4.8
B2R059-01	C43H45F3N4O6S2	835.2805	0.0	0.0
B2R060-01	C42H44F3N5O6S2	836.2758	3.9	0.0

化合物番号	分子式	m/z (expected)	ASMS ratio(%)	
			n=1	n=2
B2R061-01	C42H40F6N4O4S2	843.2468	9.1	-6.0
B2R062-01	C41H39F6N5O4S2	844.242	0.0	0.0
B2R063-01	C42H40F6N4O5S2	859.2417	8.2	4.6
B2R064-01	C41H39F6N5O5S2	860.237	4.2	-7.4
B2R065-01	C45H43F3N4O4S2	825.2751	3.8	0.3
B2R066-01	C44H42F3N5O4S2	826.2703	19.8	-10.7
B2R067-01	C39H39F3N4O4S3	781.2158	8.0	0.0
B2R068-01	C38H38F3N5O4S3	782.2111	0.0	0.0
B2R069-01	C43H41F3N4O4S2	799.2594	12.3	-18.5
B2R070-01	C42H40F3N5O4S2	800.2547	na	na
B2R071-01	C39H39F3N6O4S2	777.2499	14.3	-9.0
B2R072-01	C38H38F3N7O4S2	778.2452	21.4	11.4
B2R073-01	C40H41F3N6O4S2	791.2656	24.0	0.0
B2R074-01	C39H40F3N7O4S2	792.2608	22.4	25.4
B2R075-01	C41H43F3N6O4S2	805.2812	8.6	0.0
B2R076-01	C40H42F3N7O4S2	806.2765	3.9	19.7
B2R077-01	C39H38F4N6O4S2	795.2405	0.0	0.0
B2R078-01	C38H37F4N7O4S2	796.2357	15.8	11.7
B2R079-01	C40H41F3N6O5S2	807.2605	na	na
B2R080-01	C39H40F3N7O5S2	808.2557	16.7	21.2
B2R081-01	C41H43F3N6O5S2	821.2761	21.1	-8.8
B2R082-01	C40H42F3N7O5S2	822.2714	0.0	0.0
B2R083-01	C42H45F3N6O5S2	835.2918	31.9	-11.1
B2R084-01	C41H44F3N7O5S2	836.287	na	na
B2R085-01	C41H43F3N6O6S2	837.271	na	na
B2R086-01	C40H42F3N7O6S2	838.2663	0.0	0.0
B2R087-01	C40H38F6N6O4S2	845.2373	3.8	7.1
B2R088-01	C39H37F6N7O4S2	846.2325	35.3	13.1
B2R089-01	C40H38F6N6O5S2	861.2322	3.4	-9.2
B2R090-01	C39H37F6N7O5S2	862.2275	22.4	5.3
B2R091-01	C43H41F3N6O4S2	827.2656	-3.5	1.8
B2R092-01	C42H40F3N7O4S2	828.2608	16.0	-1.3
B2R093-01	C37H37F3N6O4S3	783.2063	56.5	0.0
B2R094-01	C36H36F3N7O4S3	784.2016	18.8	11.9
B2R095-01	C41H39F3N6O4S2	801.2499	42.2	5.5
B2R096-01	C40H38F3N7O4S2	802.2452	na	na
B2R097-01	C42H43F3N4O4S2	789.2751	6.6	-7.8
B2R098-01	C41H42F3N5O4S2	790.2703	9.2	7.5
B2R099-01	C42H42F4N4O4S2	807.2656	-12.6	-7.5
B2R100-01	C41H41F4N5O4S2	808.2609	0.6	10.1

na = not available

【０７０３】

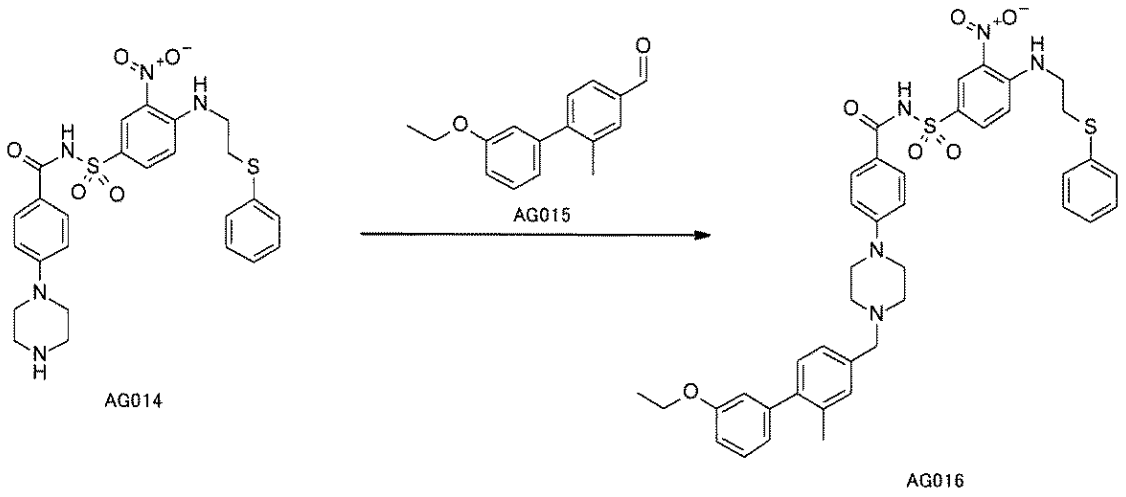
ポジティブコントロールとして含ませた２化合物Ｂ２Ｑ０４５－０１（４９．９％，４９．９％）、Ｂ２Ｑ０４６－０１（２０．３％，２０．５％）に加えて、複数の化合物についてＢｃｌ－２に対する結合が検出された。それらの化合物のうち、１１化合物、Ｂ２Ｑ０４７－０１（１４２．５％，３２６．４％）、Ｂ２Ｑ０９７－０１（１４２．５％，３２６．４％）、Ｂ２Ｑ０４８－０１（６１．６％，９０．８％）、Ｂ２Ｑ０９８－０１（６１．６％，９０．８％）、Ｂ２Ｑ０５３－０１（２２．４％，１５．５％）、Ｂ２Ｑ０５４－０１（４４．１％，６５．０％）、Ｂ２Ｑ０６６－０１（４０．７％，３６．９％）、Ｂ１Ａ０７５－０１（３１．３％，２８．６％）、Ｂ３Ａ０７３－０１（３１．３％，２８．６％）、Ｂ２Ｒ０７４－０１（２２．４％，２５．４％）、Ｂ２Ｑ０１２－０１（２１．４％，２２．５％）については、別途個別合成し（実施例８に記載）、実施例９においてＳＰＲによる結合確認実験を実施した。

【０７０４】

実施例８：ＡＳ－ＭＳ実験により同定されたＢｃｌ－２結合化合物の個別化合物合成

実施例８－１－１：４－［４－［［４－（３－エトキシフェニル）－３－メチルフェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－［３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニルベンズアミド［ＡＧ０１６（Ｂ２Ｑ０４７－０１）］の合成

【化１２６】



【０７０５】

Ｎ－［３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニル－４－ピペラジン－１－イルベンズアミド（ＡＧ０１４，ＣＡＳ：４０６２３３－７５－８）（１５０．００ｍｇ，０．２７７ｍｍｏｌ）と４－（３－エトキシフェニル）－３－メチルベンズアルデヒド（ＡＧ０１５，ＣＡＳ：１５０６２０５－９１－９）（７９．８６ｍｇ，０．３３２ｍｍｏｌ）、酢酸（０．２０ｍＬ，３．４９０ｍｍｏｌ）のＤＭＳＯ／エタノール＝１／１（３．００ｍＬ）溶液を室温で２時間撹拌した。シアノ水素化ホウ素ナトリウム（３４．８１ｍｇ，０．５５４ｍｍｏｌ）を加え、室温で２時間撹拌した。混合物を濃縮後、得られた残渣を逆相カラムクロマトグラフィー（Ｃ１８，５－７５％アセトニトリル／１０ｍＭ 炭酸水素アンモニウム水溶液）で精製した。得られた粗生成物を分取ＨＰＬＣ（Ｘｓｅｌｅｃｔ ＣＳＨ ＯＢＤカラム，４９－５９％アセトニトリル／１０ｍＭ 炭酸水素アンモニウム水溶液）で精製し、標題化合物ＡＧ０１６（５０ｍｇ，２３．１％）を黄色固体として得た。

【０７０６】

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（３００ＭＨｚ，ＣＤＣｌ$_{3}$）δ８．８８（ｓ，１Ｈ），８．６７（ｓ，１Ｈ），８．１５（ｄ，Ｊ＝９．０Ｈｚ，１Ｈ），７．６９（ｄ，Ｊ＝８．４Ｈｚ，２Ｈ），７．４５－７．３０（ｍ，５Ｈ），７．２４（ｄ，Ｊ＝１２．９Ｈｚ，４Ｈ），６．９２－６．８０（ｍ，５Ｈ），４．０８（ｑ，Ｊ＝７．２Ｈｚ，２Ｈ），３．６６－３．５６（ｍ，４Ｈ），３．３８－３．２０（ｍ，４Ｈ），３．２１（ｓ，２Ｈ），２．７１（ｓ，４Ｈ），２．２９（ｓ，３Ｈ），１．４５（ｔ，Ｊ＝６．９Ｈｚ，３Ｈ）。

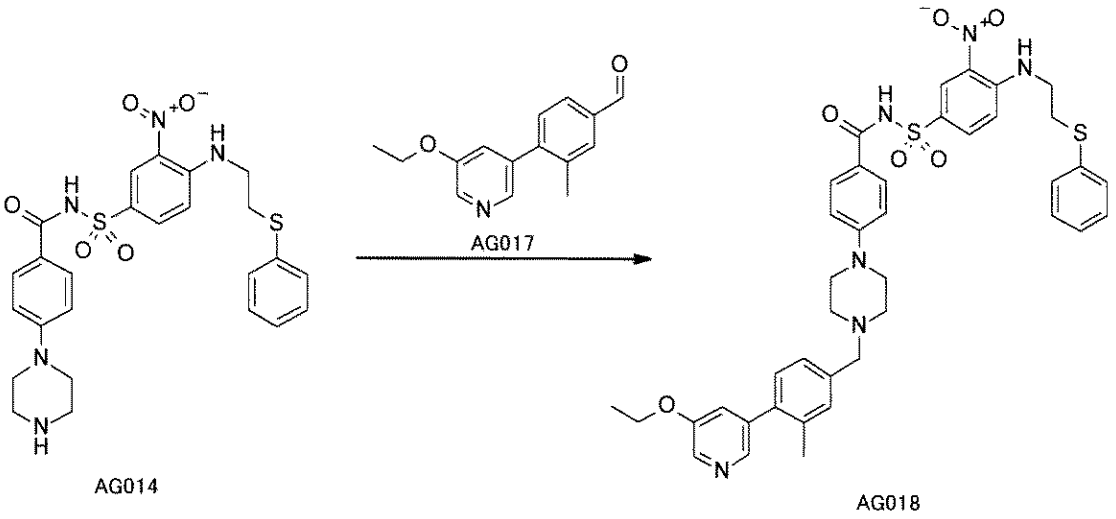
ＬＣＭＳ（ＥＳＩ）：ｍ／ｚ ７６６［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。

実施例８－１－１で合成法を例示したＡＧ０１６は、本明細書内において、化合物Ｂ２Ｑ０４７－０１と表記することもある。

【０７０７】

実施例８－２－１：４－［４－［［４－（５－エトキシピリジン－３－イル）－３－メチルフェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－［３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニルベンズアミド［ＡＧ０１８（Ｂ２Ｑ０４８－０１）］の合成

【化１２７】



【０７０８】

Ｎ－［３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニル－４－ピペラジン－１－イルベンズアミド（ＡＧ０１４，ＣＡＳ：４０６２３３－７５－８）（１００．００ｍｇ，０．１８５ｍｍｏｌ）と４－（５－エトキシピリジン－３－イル）－３－メチルベンズアルデヒド（ＡＧ０１７，ＣＡＳ：１５４５０１４－８１－０）（８９．１０ｍｇ，０．３７０ｍｍｏｌ）、酢酸（０．０５ｍＬ，０．８７３ｍｍｏｌ）のＤＭＳＯ／エタノール（１ｍＬ／１ｍＬ）溶液を室温で１時間撹拌した。シアノ水素化ホウ素ナトリウム（２３．２０ｍｇ，０．３７０ｍｍｏｌ）を加え、室温で１６時間撹拌した。混合物を濃縮後、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー（０－１００％酢酸エチル／石油エーテル）で精製した。得られた粗生成物を分取ＨＰＬＣ（ＸＢｒｉｄｇｅ Ｓｈｉｅｌｄ ＲＰ１８ ＯＢＤカラム，４２－６１％アセトニトリル／１０ｍＭ 炭酸水素アンモニウム＋０．０５％５Ｍアンモニア水溶液）で精製し、標題化合物ＡＧ０１８（６４．１ｍｇ，４３．８７％）を黄色固体として得た。

【０７０９】

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（４００ＭＨｚ，ＤＭＳＯ－ｄ$_{6}$）δ８．６８（ｓ，１Ｈ），８．５５（ｄ，Ｊ＝２．０Ｈｚ，１Ｈ），８．２８（ｄ，Ｊ＝２．８Ｈｚ，１Ｈ），８．１４（ｄ，Ｊ＝２．０Ｈｚ，１Ｈ），７．９１－７．８５（ｍ，１Ｈ），７．７５（ｄ，Ｊ＝８．８Ｈｚ，２Ｈ），７．４２－７．３４（ｍ，３Ｈ），７．２８－７．２５（ｍ，５Ｈ），７．１９－７．０９（ｍ，１Ｈ），７．１１（ｄ，Ｊ＝９．６Ｈｚ，１Ｈ），６．９０（ｄ，Ｊ＝８．８Ｈｚ，２Ｈ），４．１６（ｑ，Ｊ＝８．０Ｈｚ，２Ｈ），３．６８－３．６１（ｍ，４Ｈ），３．３３－３．２５（ｍ，６Ｈ），２．７０－２．５１（ｍ，４Ｈ），２．２６（ｓ，３Ｈ），１．３２（ｔ，Ｊ＝８．０Ｈｚ，３Ｈ）。

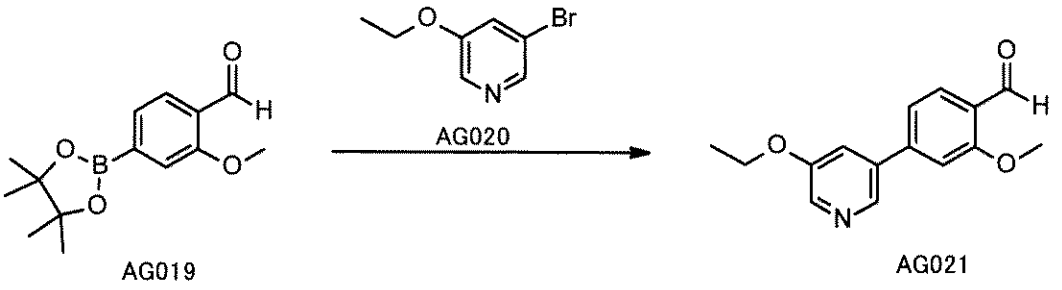
ＬＣＭＳ（ＥＳＩ）：ｍ／ｚ ７６７［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。

実施例８－２－１で合成法を例示したＡＧ０１８は、本明細書内において、化合物Ｂ２Ｑ０４８－０１と表記することもある。

【０７１０】

<u>実施例８－３－１：４－（５－エトキシピリジン－３－イル）－２－メトキシベンズアルデヒド（ＡＧ０２１）の合成</u>

【化１２８】



【０７１１】

窒素雰囲気下、２－メトキシ－４－（４，４，５，５－テトラメチル－１，３，２－ジオキサボロラン－２－イル）ベンズアルデヒド（ＡＧ０１９，ＣＡＳ：９５６４３１－０１－９）（３００ｍｇ，１．１４５ｍｍｏｌ）の１，４－ジオキサン／水（６ｍＬ／０．６ｍＬ）溶液に、３－ブロモ－５－エトキシピリジン（ＡＧ０２０，ＣＡＳ：１７１１７－１７－８）（２７７．５ｍｇ，１．３７４ｍｍｏｌ）と酢酸カリウム（２２４．７ｍｇ，２．２９０ｍｍｏｌ）、Ｐｄ（ｄｐｐｆ）Cl_2（８３．８ｍｇ，０．１１５ｍｍｏｌ）を加え、９０℃で３時間撹拌した。混合物をろ過し、ろ液を濃縮後、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー（０－２０％酢酸エチル／石油エーテル）で精製し、標題化合物ＡＧ０２１（２５０ｍｇ，８０．７％）を白色固体として得た。

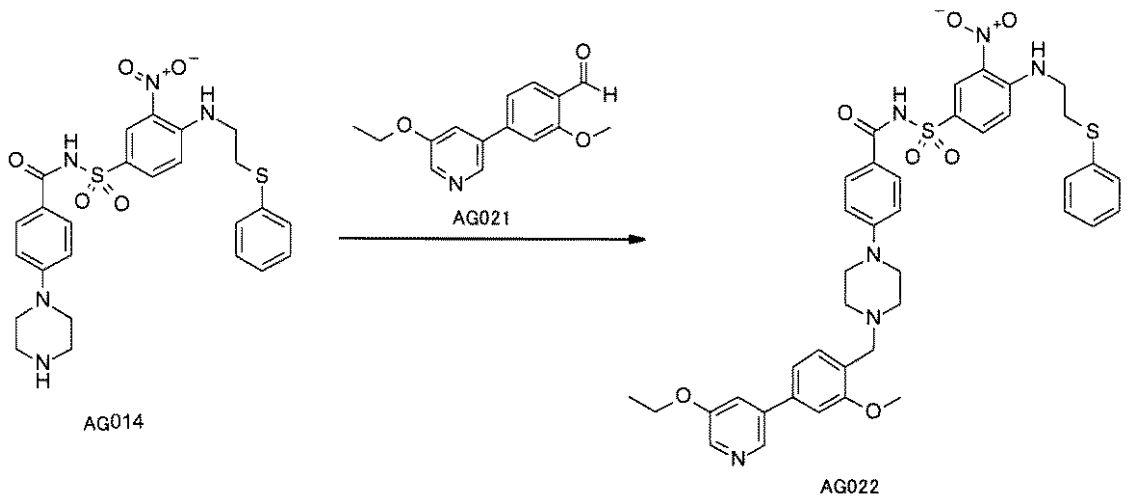
ＬＣＭＳ（ＥＳＩ）：ｍ／ｚ　２５８［Ｍ＋Ｈ］$^+$。

保持時間：０．８４５分（分析条件ＰＨ－ＴＦＡ－１３）。

【０７１２】

実施例８－３－２：４－［４－［［４－（５－エトキシピリジン－３－イル）－２－メトキシフェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－［３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニルベンズアミド［ＡＧ０２２（Ｂ２Ｑ０５４－０１）］の合成

【化１２９】



【０７１３】

Ｎ－［３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニル－４－ピペラジン－１－イルベンズアミド（ＡＧ０１４，ＣＡＳ：４０６２３３－７５－８）（１５０ｍｇ，０．２７７ｍｍｏｌ）と４－（５－エトキシピリジン－３－イル）－２－メトキシベンズアルデヒド（ＡＧ０２１）（１０６．９ｍｇ，０．４１６ｍｍｏｌ）、酢酸（０．２０ｍＬ，３．４９０ｍｍｏｌ）のＤＭＳＯ／エタノール（３ｍＬ／３ｍＬ）溶液を室温で１時間撹拌した。シアノ水素化ホウ素ナトリウム（３４．８１ｍｇ，

０．５５４ｍｍｏｌ）を加え、室温で１６時間撹拌した。混合物を濃縮後、得られた残渣を逆相カラムクロマトグラフィー（Ｃ１８，０－８０％アセトニトリル／水）で精製し、標題化合物ＡＧ０２２（３０ｍｇ，１３．５％）を白色固体として得た。

【０７１４】

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（３００ＭＨｚ，ＤＭＳＯ－ｄ$_{6}$）δ１１．２５（ｓ，１Ｈ），８．６９（ｔ，Ｊ＝６．０Ｈｚ，１Ｈ），８．５９－８．５２（ｍ，２Ｈ），８．２８（ｄ，Ｊ＝２．７Ｈｚ，１Ｈ），７．９１－７．８７（ｍ，１Ｈ），７．７４（ｄ，Ｊ＝８．７Ｈｚ，２Ｈ），７．６４－７．６３（ｍ，１Ｈ），７．４９－７．４６（ｍ，１Ｈ），７．３９－７．３１（ｍ，４Ｈ），７．３０－７．２４（ｍ，２Ｈ），７．２０－７．０９（ｍ，２Ｈ），６．９１（ｄ，Ｊ＝８．７Ｈｚ，２Ｈ），４．２０（ｑ，Ｊ＝６．９Ｈｚ，２Ｈ），３．９２（ｓ，３Ｈ），３．７９－３．７４（ｍ，２Ｈ），３．６７－３．６０（ｍ，２Ｈ），３．３９－３．２３（ｍ，６Ｈ），２．７２－２．６８（ｍ，４Ｈ），１．３７（ｔ，Ｊ＝６．９Ｈｚ，３Ｈ）。

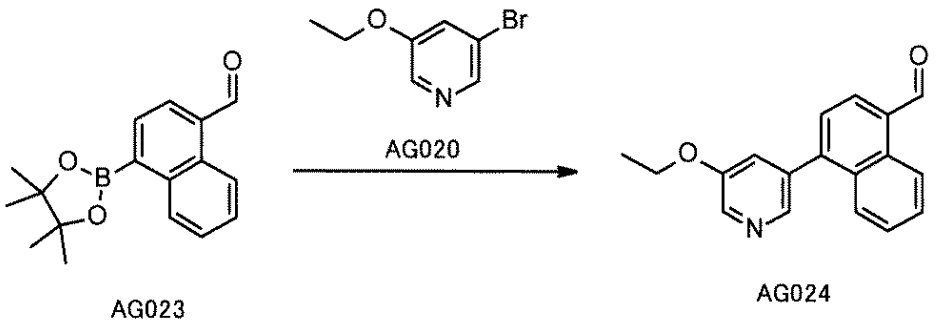
ＬＣＭＳ（ＥＳＩ）：ｍ／ｚ　７８３［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。

実施例８－３－２で合成法を例示したＡＧ０２２は、本明細書内において、化合物Ｂ２Ｑ０５４－０１と表記することもある。

【０７１５】

実施例８－４－１：４－（５－エトキシピリジン－３－イル）ナフタレン－１－カルバルデヒド（ＡＧ０２４）の合成

【化１３０】



【０７１６】

窒素雰囲気下、４－（４，４，５，５－テトラメチル－１，３，２－ジオキサボロラン－２－イル）ナフタレン－１－カルバルデヒド（ＡＧ０２３，ＣＡＳ：１００８３６１－７１－４）（３００ｍｇ，１．０６３ｍｍｏｌ）と３－ブロモ－５－エトキシピリジン（ＡＧ０２０，ＣＡＳ：１７１１７－１７－８）（１７９ｍｇ，０．８８６ｍｍｏｌ）、Ｐｄ（ｄｐｐｆ）Ｃｌ$_{2}$・ＤＣＭ（７２．２ｍｇ，０．０８９ｍｍｏｌ）、酢酸カリウム（１７３．８９ｍｇ，１．７７２ｍｍｏｌ）の１，４－ジオキサン／水（６ｍＬ／０．６０ｍＬ）溶液を９０℃で２時間撹拌した。混合物をろ過し、ろ液を濃縮後、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー（０－４０％酢酸エチル／石油エーテル）で精製し、標題化合物ＡＧ０２４（２４０ｍｇ，９１％）を薄黄色液体として得た。

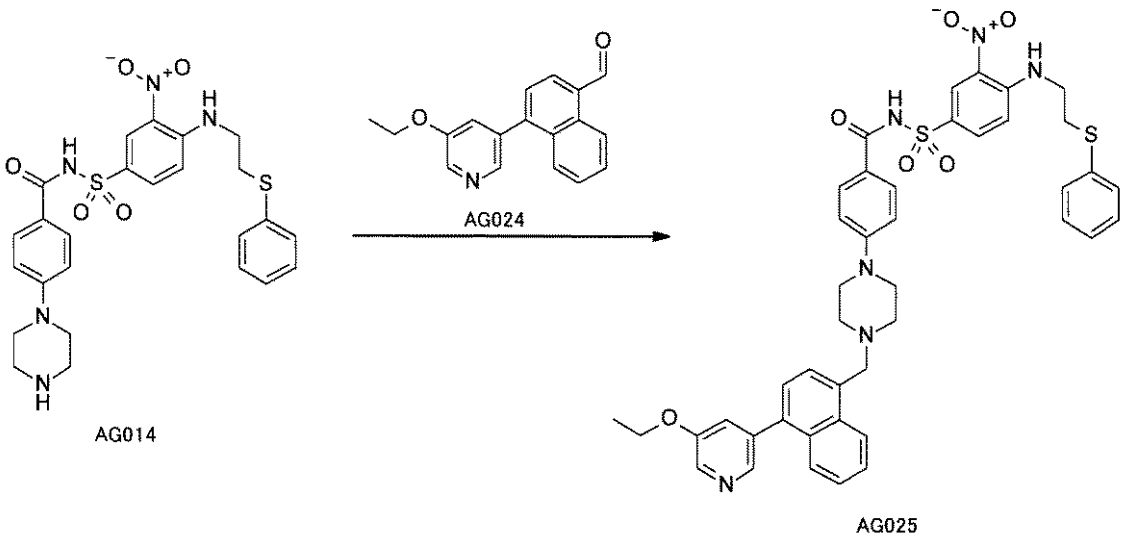
ＬＣＭＳ（ＥＳＩ）：ｍ／ｚ　２７８［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。

保持時間：０．７６９分（分析条件ＰＨ－ＦＡ－０５）。

【０７１７】

実施例８－４－２：４－［４－［［４－（５－エトキシピリジン－３－イル）ナフタレン－１－イル］メチル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－［３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニルベンズアミド［ＡＧ０２５（Ｂ２Ｑ０６６－０１）］の合成

【化１３１】



【０７１８】

Ｎ－［３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニル－４－ピペラジン－１－イルベンズアミド（ＡＧ０１４，ＣＡＳ：４０６２３３－７５－８）（１８０ｍｇ，０．３３２ｍｍｏｌ）と４－（５－エトキシピリジン－３－イル）ナフタレン－１－カルバルデヒド（ＡＧ０２４）（１８４ｍｇ，０．６６４ｍｍｏｌ）、酢酸（０．０５ｍＬ，０．８７３ｍｍｏｌ）のＤＭＳＯ／エタノール（２ｍＬ／２ｍＬ）溶液を室温で１時間撹拌した。シアノ水素化ホウ素ナトリウム（４１．７７ｍｇ，０．６６４ｍｍｏｌ）を加え、室温で１６時間撹拌した。混合物を濃縮後、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー（０－１００％酢酸エチル／石油エーテル、続いて０－１０％メタノール／ジクロロメタン）で精製した。得られた粗生成物を分取ＨＰＬＣ（ＸＢｒｉｄｇｅ　Ｐｒｅｐ　ＯＢＤ　Ｃ１８カラム，４１－７１％アセトニトリル／１０ｍＭ炭酸水素アンモニウム水溶液）で精製し、標題化合物ＡＧ０２５（４９．１ｍｇ，１７．９％）を黄色固体として得た。

【０７１９】

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（３００ＭＨｚ，ＤＭＳＯ－ｄ$_{6}$）δ８．７３（ｓ，１Ｈ），８．５８（ｄ，Ｊ＝２．３Ｈｚ，１Ｈ），８．４３（ｄ，Ｊ＝８．４Ｈｚ，１Ｈ），８．３８（ｄ，Ｊ＝２．８Ｈｚ，１Ｈ），８．２４（ｄ，Ｊ＝１．７Ｈｚ，１Ｈ），７．８９（ｄｄ，Ｊ＝９．２，２．３Ｈｚ，１Ｈ），７．７６（ｄｄ，Ｊ＝１２．７，８．９Ｈｚ，３Ｈ），７．６６－７．４９（ｍ，３Ｈ），７．５０－７．４２（ｍ，２Ｈ），７．４１－７．３３（ｍ，２Ｈ），７．２７（ｔ，Ｊ＝７．６Ｈｚ，２Ｈ），７．２０－７．１１（ｍ，２Ｈ），６．９２（ｄ，Ｊ＝８．７Ｈｚ，２Ｈ），４．１８（ｑ，Ｊ＝７．０Ｈｚ，２Ｈ），４．０７－４．００（ｍ，２Ｈ），３．６８－３．６０（ｍ，２Ｈ），３．３２－３．２１（ｍ，６Ｈ），２．６８－２．６０（ｍ，４Ｈ），１．３７（ｔ，Ｊ＝６．９Ｈｚ，３Ｈ）。

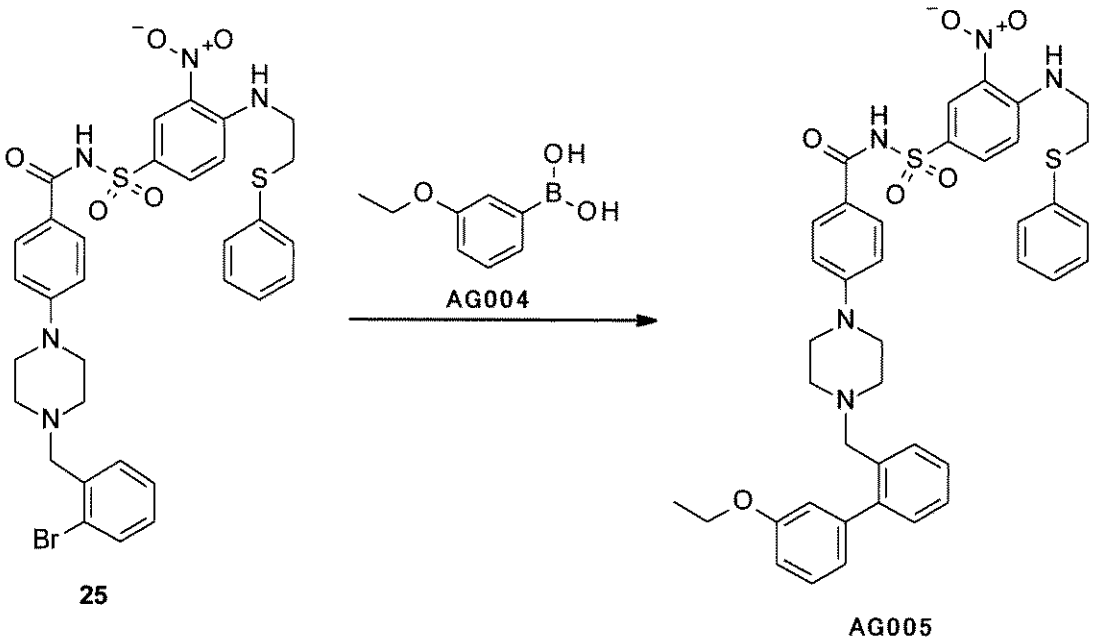
ＬＣＭＳ（ＥＳＩ）：ｍ／ｚ　８０３［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。

実施例８－４－２で合成法を例示したＡＧ０２５は、本明細書内において、化合物Ｂ２Ｑ０６６－０１と表記することもある。

【０７２０】

<u>実施例８－５－１：４－［４－［［２－（３－エトキシフェニル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－［３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニルベンズアミド［ＡＧ００５（Ｂ２Ｑ０４５－０１）］の合成</u>

【化１３２】



【０７２１】

窒素雰囲気下、４－［４－［（２－ブロモフェニル）メチル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－［３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニルベンズアミド（化合物２５）（２５０ｍｇ，０．３５２ｍｍｏｌ）と（３－エトキシフェニル）ボロン酸（ＡＧ００４，ＣＡＳ：９０５５５－６６－１）（１１６．８ｍｇ，０．７０４ｍｍｏｌ）、Ｐｄ（ＰＰｈ$_3$）$_2$Ｃｌ$_2$（２４．７ｍｇ，０．０３５ｍｍｏｌ）、炭酸ナトリウム（４８．５ｍｇ，０．４５７ｍｍｏｌ）のジメトキシエタン／エタノール／水＝１／１／１（５ｍＬ）溶液を、８０℃で３時間撹拌した。混合物をろ過し、ろ液を酢酸エチルで薄め、水を加えた。有機層を抽出し、硫酸ナトリウムで乾燥した。濃縮後、得られた残渣を逆相カラムクロマトグラフィー（Ｃ１８，５－６０％アセトニトリル／水）で精製した。得られた粗生成物を分取ＨＰＬＣ（ＹＭＣ－Ａｃｔｕｓ　Ｔｒｉａｒｔ　Ｃ１８，５０－８０％アセトニトリル／１０ｍＭ　炭酸水素アンモニウム水溶液）で精製し、標題化合物ＡＧ００５（４５ｍｇ，０．０６０ｍｍｏｌ，１６．９％）を黄色固体として得た。

【０７２２】

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（３００ＭＨｚ，ＤＭＳＯ－ｄ$_6$）δ１１．９３（ｓ，１Ｈ），８．７２（ｓ，１Ｈ），８．５５（ｄ，Ｊ＝２．４Ｈｚ，１Ｈ），７．９２－７．８３（ｍ，１Ｈ），７．７１（ｄ，Ｊ＝８．７Ｈｚ，２Ｈ），７．５２（ｄ，Ｊ＝７．２Ｈｚ，１Ｈ），７．４６－７．１６（ｍ，８Ｈ），７．２１－７．０６（ｍ，２Ｈ），７．０５－６．６９（ｍ，５Ｈ），４．０３（ｑ，Ｊ＝６．９Ｈｚ，２Ｈ），３．６３（ｄ，Ｊ＝６．６Ｈｚ，２Ｈ），３．４５（ｓ，２Ｈ），３．２６（ｔ，Ｊ＝６．６Ｈｚ，６Ｈ），２．４１（ｓ，４Ｈ），１．３０（ｔ，Ｊ＝６．９Ｈｚ，３Ｈ）。

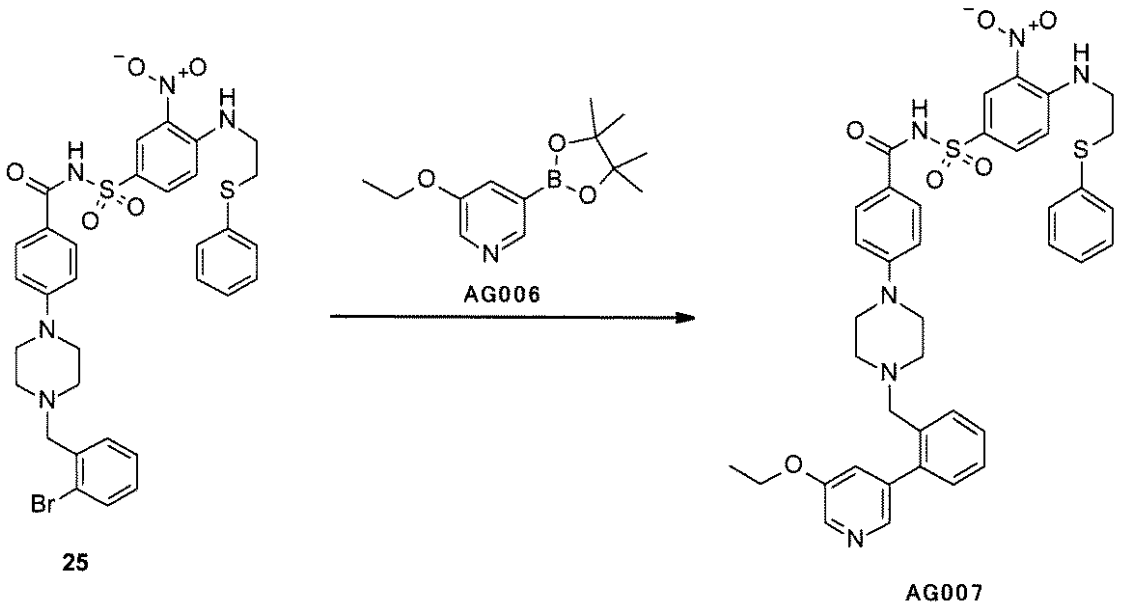
ＬＣＭＳ（ＥＳＩ）：ｍ／ｚ　７５２［Ｍ＋Ｈ］$^+$。

実施例８－５－１で合成法を例示したＡＧ００５は、本明細書内において、化合物Ｂ２Ｑ０４５－０１と表記することもある。

【０７２３】

<u>実施例８－６－１：４－［４－［［２－（５－エトキシピリジン－３－イル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－［３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニルベンズアミド［ＡＧ００７（Ｂ２Ｑ０４６－０１）］の合成</u>

【化１３３】



【０７２４】

窒素雰囲気下、４－［４－［（２－ブロモフェニル）メチル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－［３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニルベンズアミド（化合物２５）（３５０ｍｇ，０．４９２ｍｍｏｌ）と３－エトキシ－５－（４，４，５，５－テトラメチル－１，３，２－ジオキサボロラン－２－イル）ピリジン（ＡＧ００６，ＣＡＳ：１１７１８９２－４０－２）（２４５．４ｍｇ，０．９８５ｍｍｏｌ）、Ｐｄ（ＰＰｈ$_3$）$_2$Ｃｌ$_2$（３４．６ｍｇ，０．０４９ｍｍｏｌ）、炭酸ナトリウム（６８．５ｍｇ，０．６４０ｍｍｏｌ）のジメトキシエタン／エタノール／水＝１／１／１（６ｍＬ）溶液を、８０℃で３時間撹拌した。混合物をろ過し、ろ液を酢酸エチルで薄め、水を加えた。有機層を抽出し、硫酸ナトリウムで乾燥した。濃縮後、得られた残渣を逆相カラムクロマトグラフィー（Ｃ１８，５－８０％アセトニトリル／水）で精製した。得られた粗生成物を分取ＨＰＬＣ（ＸＢｒｉｄｇｅ Ｓｈｉｅｌｄ ＲＰ１８ ＯＢＤカラム，３７－５２％アセトニトリル／１０ｍＭ 炭酸水素アンモニウム水溶液）で精製し、標題化合物ＡＧ００７（２８．４ｍｇ，０．０３８ｍｍｏｌ，７．６％）を黄色固体として得た。

【０７２５】

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（３００ＭＨｚ，ＤＭＳＯ－ｄ$_6$）δ１１．９７（ｓ，１Ｈ），８．６８（ｓ，１Ｈ），８．５３（ｄ，Ｊ＝２．１Ｈｚ，１Ｈ），８．２５（ｄ，Ｊ＝２．７Ｈｚ，１Ｈ），８．１６（ｄ，Ｊ＝１．８Ｈｚ，１Ｈ），７．９０－７．８３（ｍ，１Ｈ），７．７１（ｄ，Ｊ＝９．０Ｈｚ，２Ｈ），７．５９－７．４６（ｍ，２Ｈ），７．４６－７．１７（ｍ，７Ｈ），７．１７－６．９５（ｍ，２Ｈ），６．８５（ｄ，Ｊ＝８．７Ｈｚ，２Ｈ），４．１１（ｑ，Ｊ＝６．９Ｈｚ，２Ｈ），３．６８－３．５６（ｍ，２Ｈ），３．４２（ｓ，２Ｈ），３．２３（ｓ，５Ｈ），２．３９（ｓ，４Ｈ），１．３２（ｔ，Ｊ＝６．９Ｈｚ，３Ｈ）。

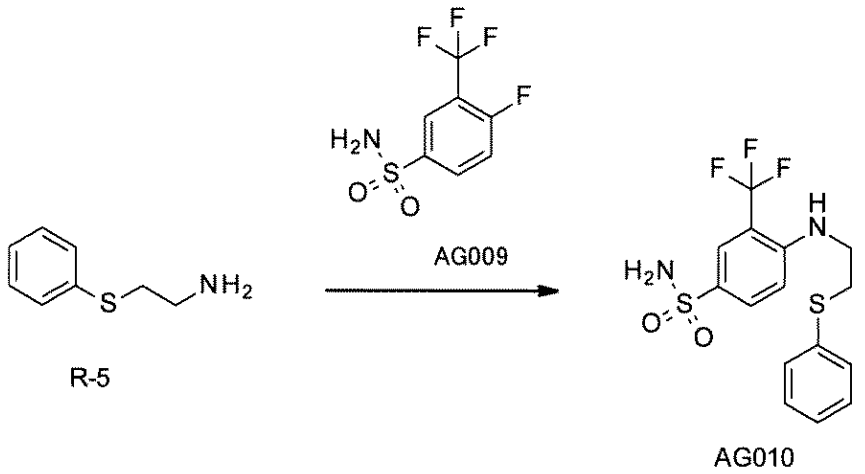
ＬＲＭＳ（ＥＳＩ）：ｍ／ｚ ７５３［Ｍ＋Ｈ］$^+$。

実施例８－６－１で合成法を例示したＡＧ００７は、本明細書内において、化合物Ｂ２Ｑ０４６－０１と表記することもある。

【０７２６】

<u>実施例８－７－１：４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）－３－（トリフルオロメチル）ベンゼンスルホンアミド［ＡＧ０１０（ＢＢ４２）］の合成</u>

【化１３４】



【０７２７】

２－フェニルスルファニルエタンアミン（Ｒ－５，ＣＡＳ：２０１４－７５－７）（３．００ｇ，１９．４８ｍｍｏｌ）と４－フルオロ－３－（トリフルオロメチル）ベンゼンスルホンアミド（ＡＧ００９，ＣＡＳ：１００８３０４－８７－７）（４．７６ｇ，１９．４８ｍｍｏｌ）のＤＭＳＯ（３０ｍＬ）溶液に、ＤＩＰＥＡ（５．０６ｇ，３８．９６ｍｍｏｌ）を加え、７０℃で１６時間撹拌した。混合物を逆相カラムクロマトグラフィー（Ｃ１８，５－８０％アセトニトリル／水）で精製し、標題化合物ＡＧ０１０（３．８ｇ，１０．１ｍｍｏｌ，５０．５％）を得た。

【０７２８】

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（４００ＭＨｚ，ＤＭＳＯ－ｄ$_{6}$）δ７．８２（ｄ，Ｊ＝２．０Ｈｚ，１Ｈ），７．７９－７．７３（ｍ，１Ｈ），７．４５－７．３８（ｍ，２Ｈ），７．３６－７．３０（ｍ，２Ｈ），７．２６－７．１９（ｍ，１Ｈ），７．１５（ｓ，２Ｈ），６．８９（ｄ，Ｊ＝８．０Ｈｚ，１Ｈ），６．３７（ｔ，Ｊ＝４．０Ｈｚ，１Ｈ），３．５２－３．４４（ｍ，２Ｈ），３．３２－３．１４（ｍ，２Ｈ）。

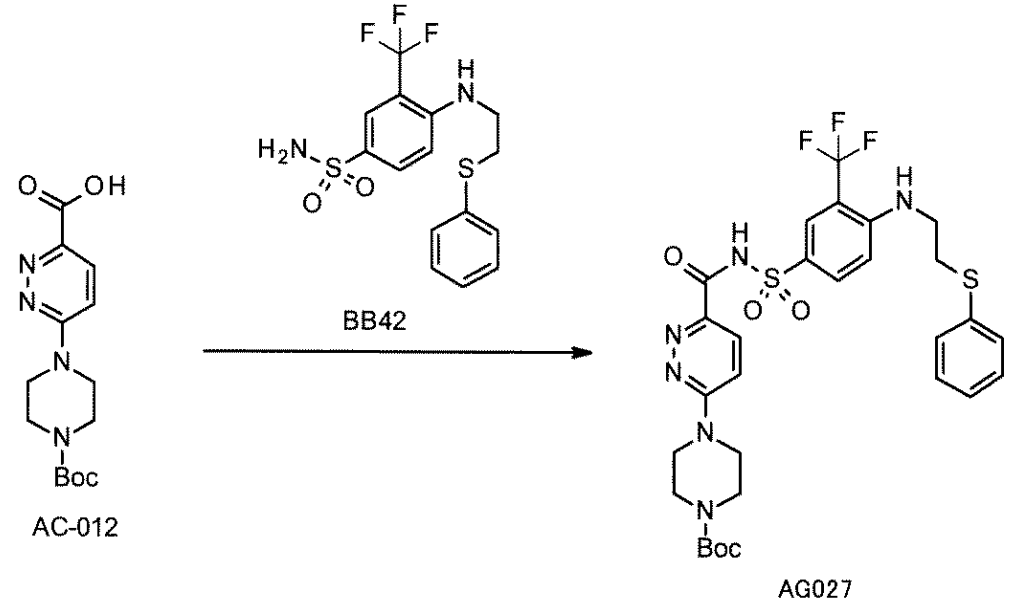
ＬＣＭＳ（ＥＳＩ）：ｍ／ｚ　３７７［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。

実施例８－７－１で合成法を例示したＡＧ０１０は、本実施例内において化合物ＢＢ４２と表記することもある。

【０７２９】

<u>実施例８－７－２：ｔｅｒｔ－ブチル　４－［６－［［４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）－３－（トリフルオロメチル）フェニル］スルホニルカルバモイル］ピリダジン－３－イル］ピペラジン－１－カルボキシラート（ＡＧ０２７）の合成</u>

【化１３５】



【０７３０】

６－［４－［（２－メチルプロパン－２－イル）オキシカルボニル］ピペラジン－１－イル］ピリダジン－３－カルボン酸（ＡＣ－０１２，ＣＡＳ：１６９０９４８－００－５）（４００ｍｇ，１．２９７ｍｍｏｌ）と４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）－３－（トリフルオロメチル）ベンゼンスルホンアミド（ＢＢ４２）（４８８ｍｇ，１．２９７ｍｍｏｌ）、ＥＤＣＩ（４９７ｍｇ，２．５９４ｍｍｏｌ）、ＤＭＡＰ（１５８ｍｇ，１．２９７ｍｍｏｌ）のジクロロメタン（５ｍＬ）溶液に、ＤＩＰＥＡ（６７１ｍｇ，５．１８８ｍｍｏｌ）を加え、室温で１６時間撹拌した。混合物に水を加え、有機層を酢酸エチルで３回抽出し、硫酸ナトリウムで乾燥した。濃縮後、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー（０－１００％酢酸エチル／石油エーテル、続いて０－１０％メタノール／ジクロロメタン）で精製し、標題化合物ＡＧ０２７（４００ｍｇ，４３．９％）を薄黄色固体として得た。

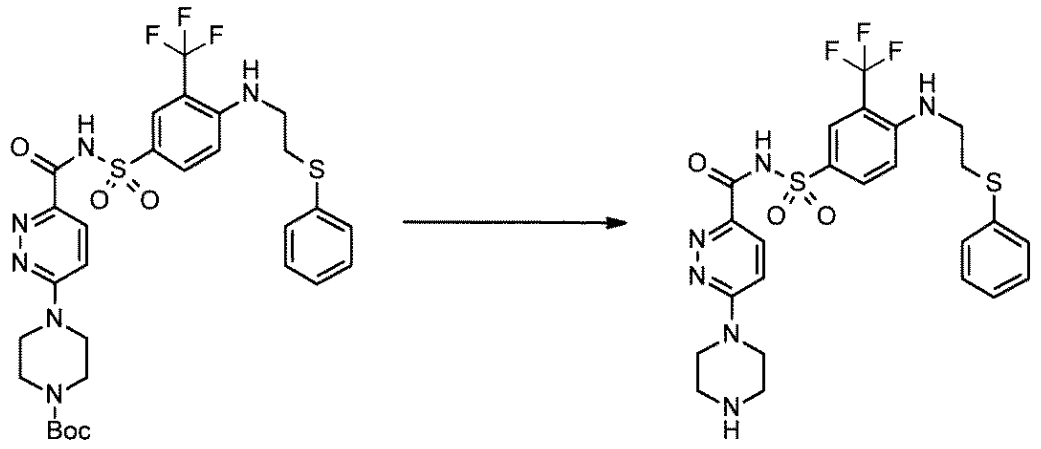
ＬＣＭＳ（ＥＳＩ）：ｍ／ｚ　６６７［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。

保持時間：１．１８５分（分析条件ＰＨ－ＦＡ－０６）。

【０７３１】

<u>実施例８－７－３：Ｎ－［４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）－３－（トリフルオロメチル）フェニル］スルホニル－６－ピペラジン－１－イルピリダジン－３－カルボキサミド（ＡＧ０２８）の合成</u>

【化１３６】



【０７３２】

ｔｅｒｔ－ブチル　４－［６－［［４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）－３－（トリフルオロメチル）フェニル］スルホニルカルバモイル］ピリダジン－３－イル］ピペラジン－１－カルボキシラート（ＡＧ０２７）（２００．００ｍｇ，０．３００ｍｍｏｌ）のジクロロメタン（４ｍＬ）溶液にＨＣｌ１，４－ジオキサン溶液（４Ｍ，２ｍＬ）を加え、室温で１６時間撹拌した。混合物を濃縮後、水に溶解し、炭酸水素ナトリウム水溶液を加えてｐＨ８とした。生じた固体をろ過後、水で洗い、５０℃で１６時間乾燥し、標題化合物ＡＧ０２８（１５０ｍｇ）を薄茶色固体として得た。

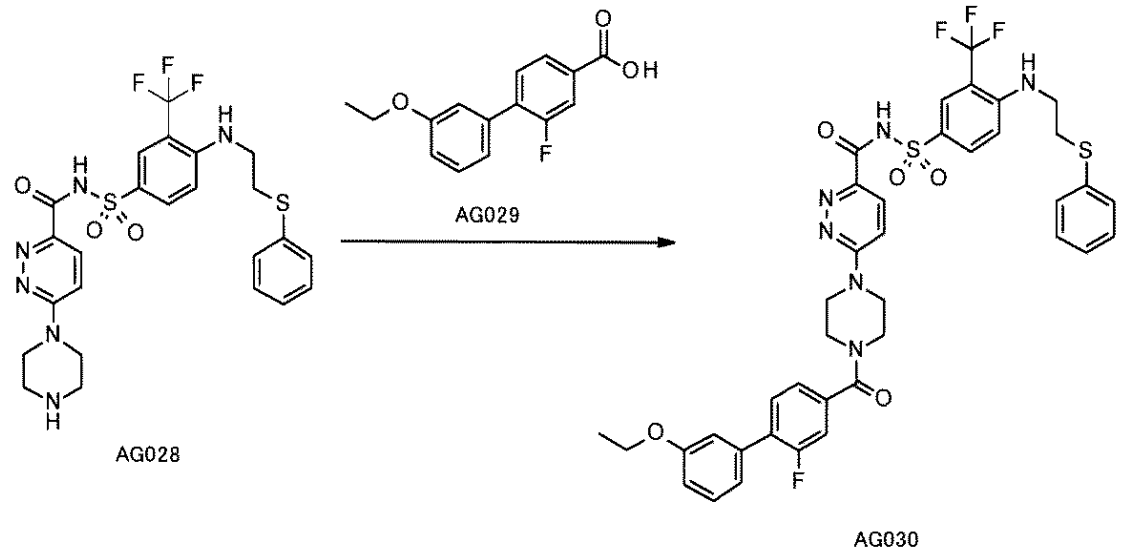
ＬＣＭＳ（ＥＳＩ）：ｍ／ｚ　５６７［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。

保持時間：０．８８３分（分析条件ＰＨ－ＦＡ－０６）。

【０７３３】

実施例８－７－４：６－［４－［４－（３－エトキシフェニル）－３－フルオロベンゾイル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－［４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）－３－（トリフルオロメチル）フェニル］スルホニルピリダジン－３－カルボキサミド［ＡＧ０３０（Ｂ２Ｒ００５－０１）］の合成

【化１３７】



【０７３４】

Ｎ－［４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）－３－（トリフルオロメチル）フェニル］スルホニル－６－ピペラジン－１－イルピリダジン－３－カルボキサミド（Ａ

Ｇ０２８）（７０ｍｇ，０．１２４ｍｍｏｌ）と４－（３－エトキシフェニル）－３－フルオロ安息香酸（ＡＧ０２９，ＣＡＳ：１２６１９６４－１６－２）（３２．２ｍｇ，０．１２４ｍｍｏｌ）、ＥＤＣＩ（４７．４ｍｇ，０．２４８ｍｍｏｌ）、ＤＭＡＰ（１５．１ｍｇ，０．１２４ｍｍｏｌ）のジクロロメタン（２ｍＬ）溶液に、ＤＩＰＥＡ（６３．９ｍｇ，０．４９６ｍｍｏｌ）を加え、室温で１６時間撹拌した。混合物を濃縮後、得られた残渣を逆相カラムクロマトグラフィー（Ｃ１８，０－５０％アセトニトリル／１０ｍＭ　炭酸水素アンモニウム水溶液）で精製した。得られた粗生成物を分取ＨＰＬＣ（ＸＢｒｉｄｇｅ　Ｐｒｅｐ　ＯＢＤ　Ｃ１８カラム，３６－６６％アセトニトリル／１０ｍＭ炭酸水素アンモニウム水溶液）で精製し、標題化合物ＡＧ０３０（２０ｍｇ，１９．６％）を白色固体として得た。

【０７３５】

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（３００ＭＨｚ，ＤＭＳＯ－ｄ$_{6}$）δ７．９７（ｓ，１Ｈ），７．８５（ｔ，Ｊ＝１２．６Ｈｚ，２Ｈ），７．６４（ｔ，Ｊ＝８．１Ｈｚ，１Ｈ），７．５６－７．２０（ｍ，８Ｈ），７．２４－７．０４（ｍ，３Ｈ），７．００（ｄ，Ｊ＝８．１Ｈｚ，１Ｈ），６．８６（ｄ，Ｊ＝９．０Ｈｚ，１Ｈ），６．４５（ｓ，１Ｈ），４．０９（ｑ，Ｊ＝７．２Ｈｚ，２Ｈ），３．８５－３．７３（ｍ，５Ｈ），３．５９－３．４５（ｍ，５Ｈ），３．２０－３．１３（ｍ，２Ｈ），１．３５（ｔ，Ｊ＝６．９Ｈｚ，３Ｈ）。

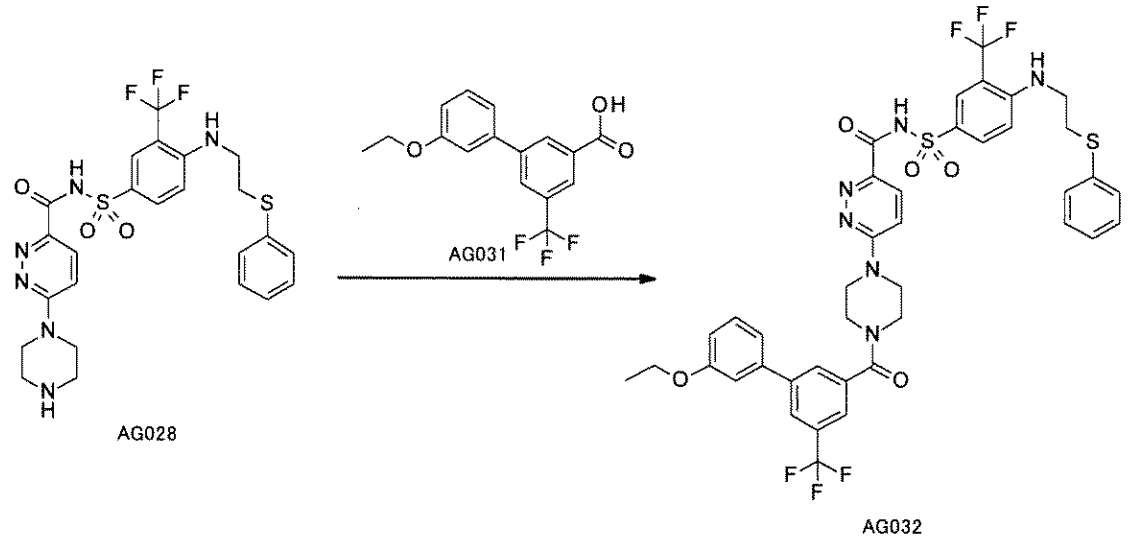
ＬＣＭＳ（ＥＳＩ）：ｍ／ｚ　８０９［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。

実施例８－７－４で合成法を例示したＡＧ０３０は、本明細書内において、化合物Ｂ２Ｒ００５－０１と表記することもある。

【０７３６】

実施例８－８－１：６－［４－［３－（３－エトキシフェニル）－５－（トリフルオロメチル）ベンゾイル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－［４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）－３－（トリフルオロメチル）フェニル］スルホニルピリダジン－３－カルボキサミド［ＡＧ０３２（Ｂ２Ｒ０１７－０１）］の合成

【化１３８】



【０７３７】

Ｎ－［４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）－３－（トリフルオロメチル）フェニル］スルホニル－６－ピペラジン－１－イルピリダジン－３－カルボキサミド（ＡＧ０２８）（７０ｍｇ，０．１２４ｍｍｏｌ）と３－（３－エトキシフェニル）－５－（トリフルオロメチル）安息香酸（ＡＧ０３１，ＣＡＳ：１２６１９０７－６０－１）（６９．００ｍｇ，０．２２３ｍｍｏｌ）、ＥＤＣＩ（４７．３７ｍｇ，０．２４８ｍｍｏｌ）、ＤＭＡＰ（１５．０９ｍｇ，０．１２４ｍｍｏｌ）のジクロロメタン（２ｍＬ）溶液に、ＤＩＰＥＡ（６３．８７ｍｇ，０．４９６ｍｍｏｌ）を加え、室温で１６時間撹拌し

た。混合物を濃縮後、得られた残渣を逆相カラムクロマトグラフィー（Ｃ１８，０－４５％アセトニトリル／１０ｍＭ炭酸水素アンモニウム水溶液）で精製した。得られた粗生成物を分取ＨＰＬＣ（Ｘｓｅｌｅｃｔ　ＣＳＨ　ＯＢＤカラム，６８－８３％アセトニトリル／０．１％ギ酸水溶液）で精製し、標題化合物ＡＧ０３２（３０ｍｇ，２８．２％）を白色固体として得た。

【０７３８】

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（３００ＭＨｚ，ＤＭＳＯ－ｄ$_{6}$）δ１２．２２（ｓ，１Ｈ），８．１２（ｄ，Ｊ＝１１．７Ｈｚ，１Ｈ），８．０６（ｓ，１Ｈ），８．００（ｄ，Ｊ＝２．１Ｈｚ，１Ｈ），７．９４－７．８７（ｍ，１Ｈ），７．８２（ｄ，Ｊ＝９．６Ｈｚ，２Ｈ），７．５０－７．２７（ｍ，８Ｈ），７．２４－７．１７（ｍ，１Ｈ），７．０５－６．９８（ｍ，１Ｈ），６．９３（ｄ，Ｊ＝９．０Ｈｚ，１Ｈ），６．６４（ｓ，１Ｈ），４．１４（ｑ，Ｊ＝６．９Ｈｚ，２Ｈ），３．９６－３．７６（ｍ，６Ｈ），３．５９－３．４３（ｍ，４Ｈ），３．２２－３．１３（ｍ，２Ｈ），１．３６（ｔ，Ｊ＝６．９Ｈｚ，３Ｈ）。

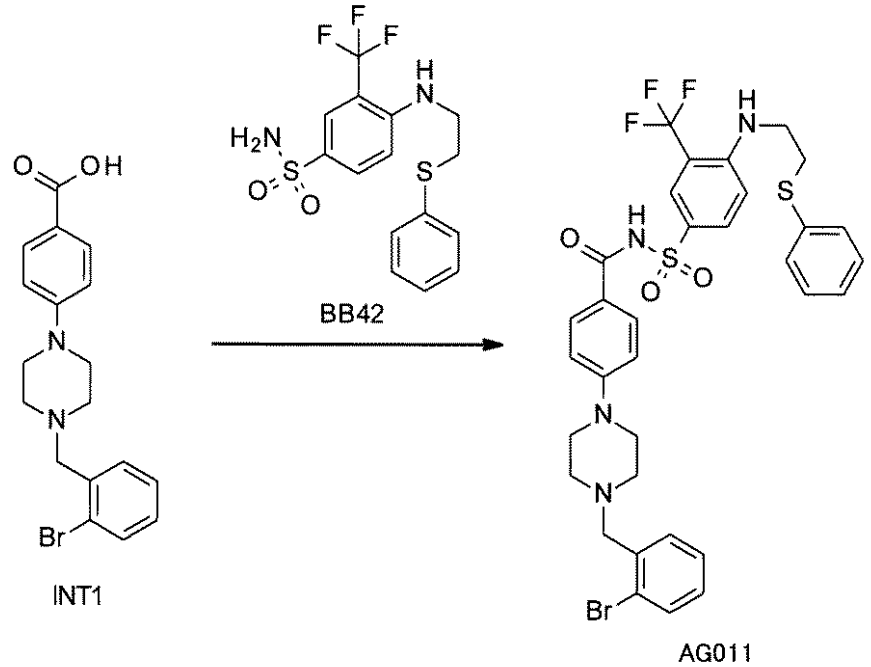
ＬＣＭＳ（ＥＳＩ）：ｍ／ｚ　８５９［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。

実施例８－８－１で合成法を例示したＡＧ０３２は、本実施例内において、化合物Ｂ２Ｒ０１７－０１と表記することもある。

【０７３９】

実施例８－９－１：４－［４－［（２－ブロモフェニル）メチル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－［４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）－３－（トリフルオロメチル）フェニル］スルホニルベンズアミド（ＡＧ０１１）の合成

【化１３９】



【０７４０】

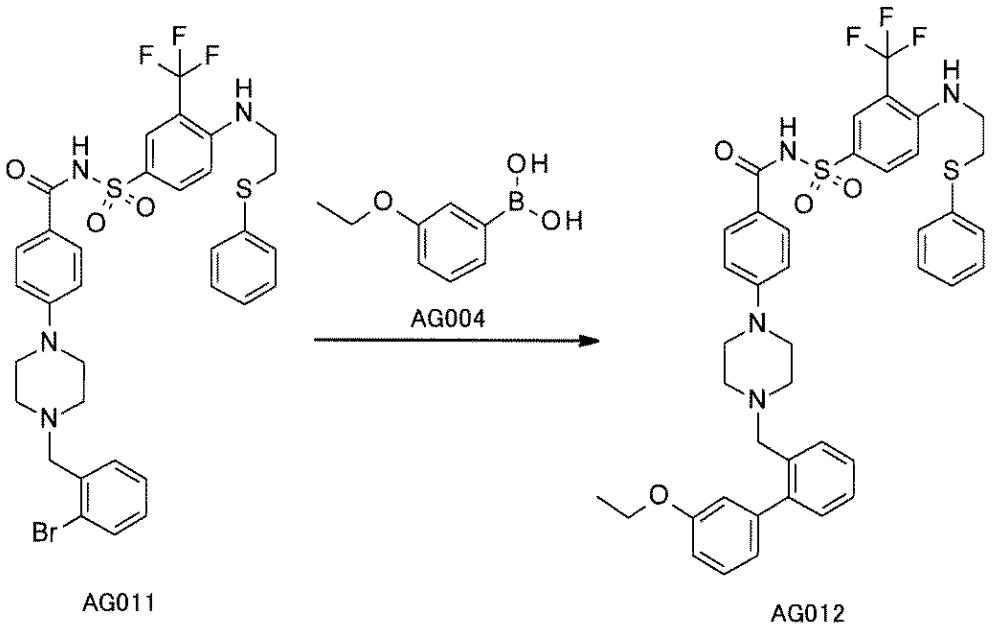
４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）－３－（トリフルオロメチル）ベンゼンスルホンアミド（ＢＢ４２）（０．８０ｇ，２．１２５ｍｍｏｌ）と４－［４－［（２－ブロモフェニル）メチル］ピペラジン－１－イル］安息香酸（ＩＮＴ１）（１．２０ｇ，３．１８８ｍｍｏｌ）、ＥＤＣＩ（０．８１ｇ，４．２５１ｍｍｏｌ）、ＤＭＡＰ（０．２６ｇ，２．１２５ｍｍｏｌ）のジクロロメタン（１６ｍＬ）溶液に、ＤＩＰＥＡ（１．１０ｇ，８．５０１ｍｍｏｌ）を加え、室温で１６時間撹拌した。混合物に塩化アンモニウム水溶液を加えた。有機層をジクロロメタンで３回抽出し、硫酸ナトリウムで乾燥した。濃縮後、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー（０－１００％酢酸エ

チル／石油エーテル）で精製し、標題化合物ＡＧ０１１（１．３ｇ，１．７７ｍｍｏｌ，８３．４％）を黄色固体として得た。
ＬＣＭＳ（ＥＳＩ）：ｍ／ｚ　７３３［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。
保持時間：１．３１９分（分析条件ＰＨ－ＦＡ０５－２）。

【０７４１】

実施例８－９－２：４－［４－［［２－（３－エトキシフェニル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－［４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）－３－（トリフルオロメチル）フェニル］スルホニルベンズアミド［ＡＧ０１２（Ｂ２Ｒ０４５－０１）］の合成

【化１４０】



【０７４２】

窒素雰囲気下、４－［４－［（２－ブロモフェニル）メチル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－［４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）－３－（トリフルオロメチル）フェニル］スルホニルベンズアミド（ＡＧ０１１）（１６５ｍｇ，０．２２５ｍｍｏｌ）と（３－エトキシフェニル）ボロン酸（ＡＧ００４，ＣＡＳ：９０５５５－６６－１）（７４．７ｍｇ，０．４５０ｍｍｏｌ）、Ｐｄ（ＰＰｈ$_3$）$_2$Ｃｌ$_2$（１５．８ｍｇ，０．０２２ｍｍｏｌ）、炭酸ナトリウム（３１．０ｍｇ，０．２９２ｍｍｏｌ）のジメトキシエタン／エタノール／水＝１／１／１（４ｍＬ）溶液を、８０℃で３時間撹拌した。混合物をろ過し、ろ液を酢酸エチルで薄め、水を加えた。有機層を抽出し、硫酸ナトリウムで乾燥した。濃縮後、得られた残渣を逆相カラムクロマトグラフィー（Ｃ１８，５－９０％アセトニトリル／水）で精製した。得られた粗生成物を分取ＨＰＬＣ（ＹＭＣ－Ａｃｔｕｓ　Ｔｒｉａｒｔ　Ｃ１８，５３－８３％アセトニトリル／１０ｍＭ　炭酸水素アンモニウム水溶液）で精製し、標題化合物ＡＧ０１２（１９．７ｍｇ，０．０２５ｍｍｏｌ，１１．３％）を白色固体として得た。

【０７４３】

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（４００ＭＨｚ，ＤＭＳＯ－ｄ$_6$）δ１１．８４（ｓ，１Ｈ），７．９４（ｄ，Ｊ＝２．０Ｈｚ，１Ｈ），７．８９－７．８４（ｍ，１Ｈ），７．７２（ｄ，Ｊ＝８．０Ｈｚ，２Ｈ），７．５７－７．５０（ｍ，１Ｈ），７．４５－７．２５（ｍ，７Ｈ），７．２６－７．１７（ｍ，２Ｈ），７．０５－６．８１（ｍ，６Ｈ），６．６０（ｓ，１Ｈ），４．０４（ｑ，Ｊ＝８Ｈｚ，２Ｈ），３．５７－３．４２（ｍ，４Ｈ），３．２６（ｔ，Ｊ＝４Ｈｚ，４Ｈ），３．２２－３．１２（ｍ，２Ｈ），２．４２（ｄ，Ｊ＝５．７Ｈｚ，４Ｈ），１．３２（ｔ，Ｊ＝８Ｈｚ，３Ｈ）。

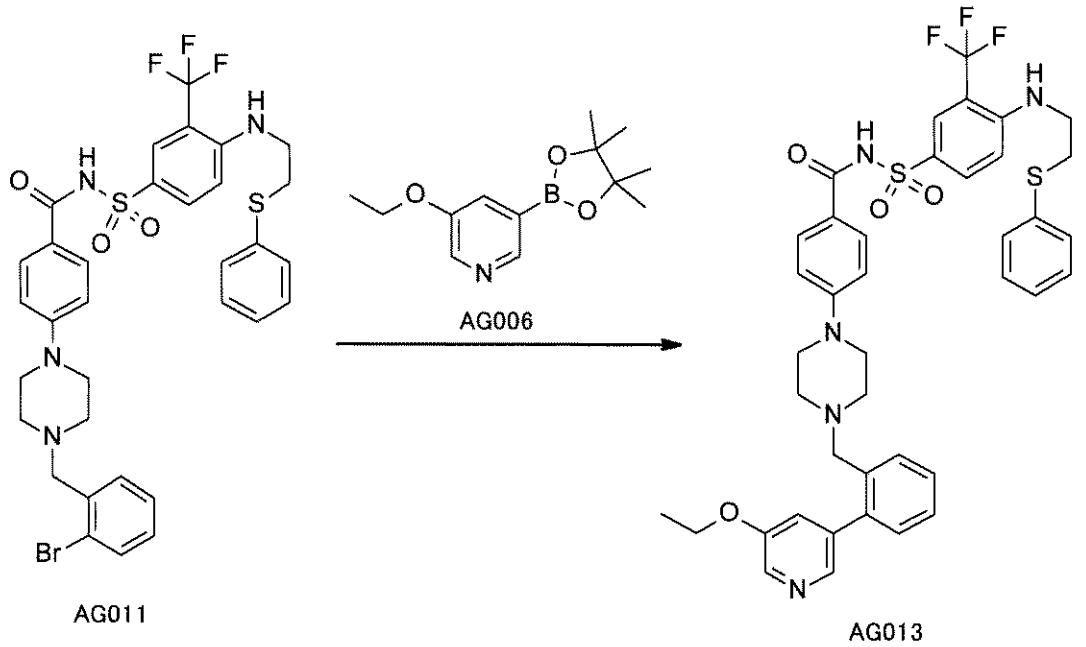
ＬＣＭＳ（ＥＳＩ）：ｍ／ｚ　７７５［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。

実施例８－９－２で合成法を例示したＡＧ０１２は、本明細書内において、化合物Ｂ２Ｒ０４５－０１と表記することもある。

【０７４４】

実施例８－１０－１：４－［４－［［２－（５－エトキシピリジン－３－イル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－［４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）－３－（トリフルオロメチル）フェニル］スルホニルベンズアミド［ＡＧ０１３（Ｂ２Ｒ０４６－０１）］

【化１４１】



【０７４５】

窒素雰囲気下、４－［４－［（２－ブロモフェニル）メチル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－［４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）－３－（トリフルオロメチル）フェニル］スルホニルベンズアミド（ＡＧ０１１）（２５０ｍｇ，０．３４１ｍｍｏｌ）と３－エトキシ－５－（４，４，５，５－テトラメチル－１，３，２－ジオキサボロラン－２－イル）ピリジン（ＡＧ００６，ＣＡＳ：１１７１８９２－４０－２）（１６９．８ｍｇ，０．６８２ｍｍｏｌ）、Ｐｄ（ＰＰｈ$_3$）$_2$Ｃｌ$_2$（２３．９ｍｇ，０．０３４ｍｍｏｌ）、炭酸ナトリウム（４７．０ｍｇ，０．４４３ｍｍｏｌ）のジメトキシエタン／エタノール／水＝１／１／１（５ｍＬ）溶液を、８０℃で１６時間撹拌した。混合物をろ過し、ろ液を酢酸エチルで薄め、水を加えた。有機層を抽出し、硫酸ナトリウムで乾燥した。溶媒留去後、得られた残渣を逆相カラムクロマトグラフィー（Ｃ１８，５－８０％アセトニトリル／水）で精製した。得られた粗生成物を分取ＨＰＬＣ（ＸＢｒｉｄｇｅ　Ｐｒｅｐ　ＯＢＤ　Ｃ１８カラム，４５－７５％アセトニトリル／１０ｍＭ炭酸水素アンモニウム水溶液）で精製し、標題化合物ＡＧ０１３（３４．２ｍｇ，０．０４４ｍｍｏｌ，１２．８％）を灰色固体として得た。

【０７４６】

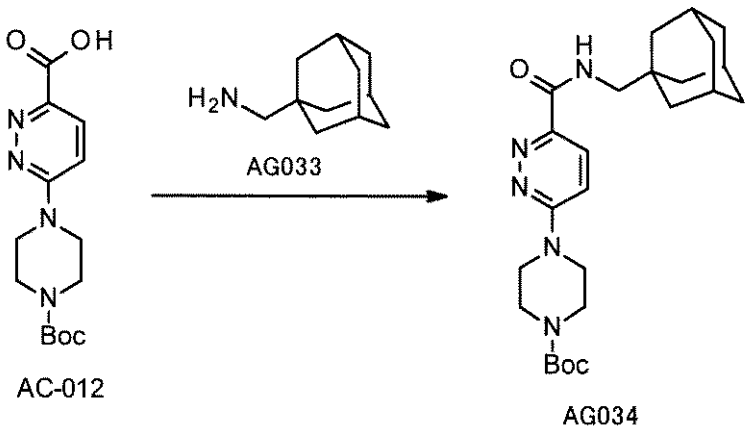
^{1}Ｈ－ＮＭＲ（３００ＭＨｚ，ＤＭＳＯ－ｄ$_6$）δ１１．９８（ｓ，１Ｈ），８．２５（ｄ，Ｊ＝２．７Ｈｚ，１Ｈ），８．１６（ｄ，Ｊ＝１．８Ｈｚ，１Ｈ），７．８９（ｄ，Ｊ＝２．１Ｈｚ，１Ｈ），７．８０（ｄ，Ｊ＝９．３Ｈｚ，１Ｈ），７．７０（ｄ，Ｊ＝８．７Ｈｚ，２Ｈ），７．５５－７．４７（ｍ，２Ｈ），７．４８－７．２３（ｍ，７Ｈ），７．２２－７．１５（ｍ，１Ｈ），６．８３（ｄ，Ｊ＝８．６Ｈｚ，３Ｈ），６．３７（ｓ，１Ｈ），４．１２（ｑ，Ｊ＝６．９Ｈｚ，２Ｈ），３．４０（ｓ，４Ｈ），３．１７（ｓ，４Ｈ），３．１３（ｄ，Ｊ＝８．４Ｈｚ，２Ｈ），２．３８（ｓ，４Ｈ），１

．３２（ｔ，Ｊ＝７．２Ｈｚ，３Ｈ）。
ＬＣＭＳ（ＥＳＩ）：ｍ／ｚ　７７６［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。
実施例８－１０－１で合成法を例示したＡＧ０１３は、本明細書内において、化合物Ｂ２Ｒ０４６－０１と表記することもある。

【０７４７】

実施例８－１１－１：ｔｅｒｔ－ブチル　４－［６－（１－アダマンチルメチルカルバモイル）ピリダジン－３－イル］ピペラジン－１－カルボキシラート（ＡＧ０３４）の合成

【化１４２】



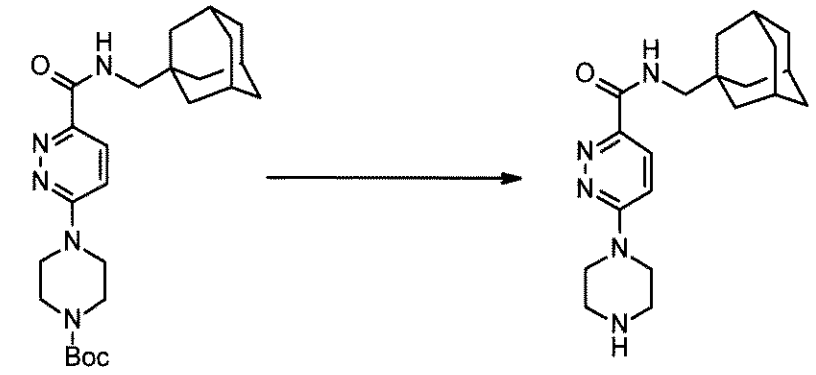
【０７４８】

６－［４－［（２－メチルプロパン－２－イル）オキシカルボニル］ピペラジン－１－イル］ピリダジン－３－カルボン酸（ＡＣ－０１２，ＣＡＳ：１６９０９４８－００－５）（２００ｍｇ，０．６４９ｍｍｏｌ）と１－アダマンチルメタンアミン（ＡＧ０３３，ＣＡＳ：１７７６８－４１－１）（１６０．８ｍｇ，０．９７３ｍｍｏｌ）、ＥＤＣＩ（２４８．７ｍｇ，１．２９７ｍｍｏｌ）、ＤＭＡＰ（７９．２４ｍｇ，０．６４９ｍｍｏｌ）のジクロロメタン（４ｍＬ）溶液に、ＤＩＰＥＡ（３３５．３ｍｇ，２．５９６ｍｍｏｌ）を加え、室温で１６時間撹拌した。混合物に塩化アンモニウム水溶液を加えた。有機層をジクロロメタンで３回抽出し、硫酸ナトリウムで乾燥した。濃縮後、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー（０－１００％酢酸エチル／石油エーテル、続いて０－１０％メタノール／ジクロロメタン）で精製し、標題化合物ＡＧ０３４（１８０ｍｇ，６０．９％）を白色固体として得た。
ＬＣＭＳ（ＥＳＩ）：ｍ／ｚ　４５６［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。
保持時間：１．２３８分（分析条件ＰＨ－ＴＦＡ－１３）。

【０７４９】

実施例８－１１－２：Ｎ－（１－アダマンチルメチル）－６－ピペラジン－１－イルピリダジン－３－カルボキサミド（ＡＧ０３５）の合成

【化１４３】



AG034　　AG035

【０７５０】

ｔｅｒｔ－ブチル　４－［６－（１－アダマンチルメチルカルバモイル）ピリダジン－３－イル］ピペラジン－１－カルボキシラート（ＡＧ０３４）（１８０ｍｇ，０．３９５ｍｍｏｌ）のジクロロメタン（２ｍＬ）溶液にＨＣｌ１，４－ジオキサン溶液（４Ｍ，５ｍＬ）を加え、室温で１時間撹拌した。混合物を濃縮後、水に溶解し、炭酸水素ナトリウム水溶液を加えてｐＨ８－９とした。生じた固体をろ過後、水で３回洗い、５０℃で１６時間乾燥し、標題化合物ＡＧ０３５（１００ｍｇ，８５％）を灰色固体として得た。

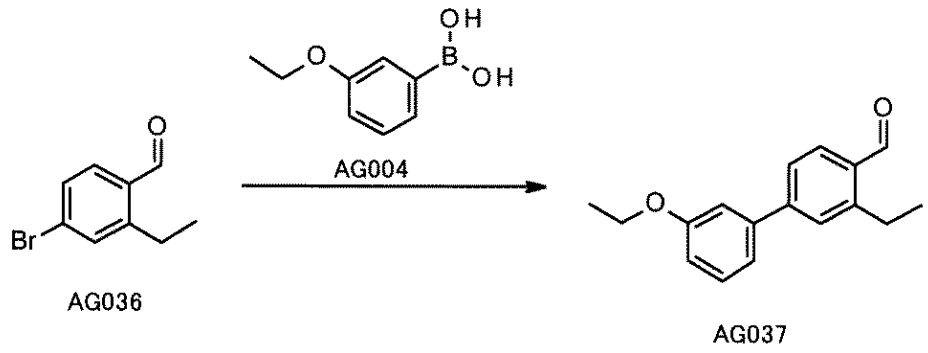
ＬＣＭＳ（ＥＳＩ）：ｍ／ｚ３５６［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。

保持時間：０．９１７分（分析条件ＰＨ－ＴＦＡ－１３）。

【０７５１】

実施例８－１１－３：４－（３－エトキシフェニル）－２－エチルベンズアルデヒド（ＡＧ０３７）の合成

【化１４４】



AG036　　AG037

【０７５２】

４－ブロモ－２－エチルベンズアルデヒド（ＡＧ０３６，ＣＡＳ：１１１４８０８－８９－７）（１．００ｇ，４．６９３ｍｍｏｌ）と（３－エトキシフェニル）ボロン酸（ＡＧ００４，ＣＡＳ：９０５５５－６６－１）（１．０１ｇ，６．０８５ｍｍｏｌ）、Ｐｄ（ＰＰｈ$_3$）$_2$Ｃｌ$_2$（３２９．４２ｍｇ，０．４６９ｍｍｏｌ）、炭酸ナトリウム（６４６．６５ｍｇ，６．１０１ｍｍｏｌ）のジメトキシエタン／エタノール／水＝１／１／１（２０ｍＬ）溶液を、８０℃で３時間撹拌した。混合物に塩化アンモニウム水溶液を加え、有機層を酢酸エチルで３回抽出し、硫酸ナトリウムで乾燥した。濃縮後、得られた残渣を分取ＴＬＣ（２０％酢酸エチル／石油エーテル）で精製し、標題化合物ＡＧ０３７（９００ｍｇ，７３．９％）を薄黄色液体として得た。

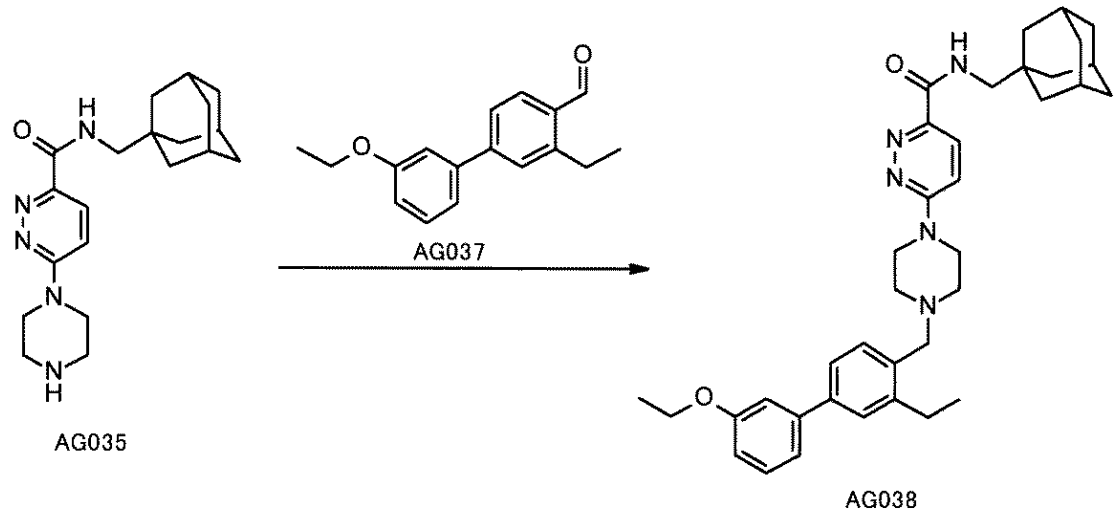
ＬＣＭＳ（ＥＳＩ）：ｍ／ｚ　２５５［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。

保持時間：１．１８４分（分析条件ＰＨ－ＦＡ－０６）。

【０７５３】

実施例８－１１－４：Ｎ－（１－アダマンチルメチル）－６－［４－［［４－（３－エトキシフェニル）－２－エチルフェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］ピリダジン－３－カルボキサミド［ＡＧ０３８（Ｂ１Ａ０７５－０１）］の合成

【化１４５】



【０７５４】

Ｎ－（１－アダマンチルメチル）－６－ピペラジン－１－イルピリダジン－３－カルボキサミド（ＡＧ０３５）（１５０ｍｇ，０．４２２ｍｍｏｌ）と４－（３－エトキシフェニル）－２－エチルベンズアルデヒド（ＡＧ０３７）（１２８．８ｍｇ，０．５０６ｍｍｏｌ）、酢酸（０．２ｍＬ）のＤＭＳＯ／エタノール（３ｍＬ／３ｍＬ）溶液を室温で１時間撹拌した。シアノ水素化ホウ素ナトリウム（５３．０３ｍｇ，０．８４４ｍｍｏｌ）を加え、室温で１６時間撹拌した。混合物を濃縮後、得られた残渣を逆相カラムクロマトグラフィー（Ｃ１８，０－８０％アセトニトリル／水）で精製し、標題化合物ＡＧ０３８（３８．２ｍｇ，１４．９％）を白色固体として得た。

【０７５５】

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（３００ＭＨｚ，ＤＭＳＯ－ｄ$_{6}$）δ８．５２（ｔ，Ｊ＝６．６Ｈｚ，１Ｈ），７．８３（ｄ，Ｊ＝９．６Ｈｚ，１Ｈ），７．５０－７．４３（ｍ，２Ｈ），７．３８－７．３１（ｍ，３Ｈ），７．２３－７．１５（ｍ，２Ｈ），６．９２－６．８９（ｍ，１Ｈ），４．０９（ｑ，Ｊ＝６．９Ｈｚ，２Ｈ），３．７２－３．６７（ｍ，４Ｈ），３．５５（ｓ，２Ｈ），３．３２－３．２８（ｍ，１Ｈ），３．０２（ｄ，Ｊ＝６．６Ｈｚ，２Ｈ），２．８２－２．７５（ｍ，２Ｈ），２．５６－２．５０（ｍ，３Ｈ），１．９２（ｓ，３Ｈ），１．６８－１．５５（ｍ，６Ｈ），１．５０－１．４６（ｍ，６Ｈ），１．３５（ｔ，Ｊ＝６．９Ｈｚ，３Ｈ），１．２４（ｔ，Ｊ＝７．８Ｈｚ，３Ｈ）。

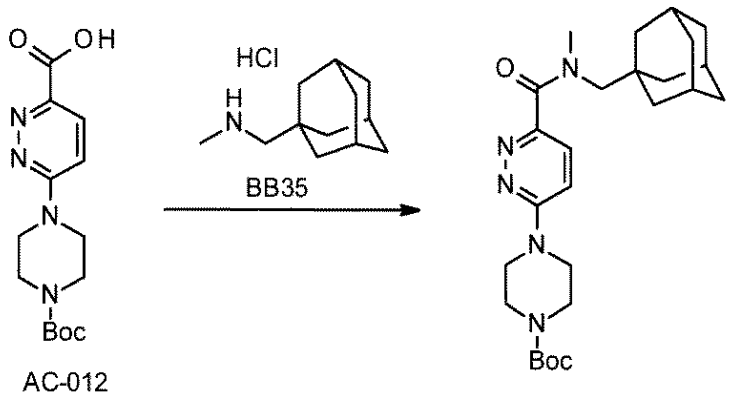
ＬＣＭＳ（ＥＳＩ）：ｍ／ｚ　５９４［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。

実施例８－１１－４で合成法を例示したＡＧ０３８は、本明細書内において、化合物Ｂ１Ａ０７５－０１と表記することもある。

【０７５６】

実施例８－１２－１：ｔｅｒｔ－ブチル　４－［６－［１－アダマンチルメチル（メチル）カルバモイル］ピリダジン－３－イル］ピペラジン－１－カルボキシラート（ＡＧ０４０）

【化１４６】



【０７５７】

６－［４－［（２－メチルプロパン－２－イル）オキシカルボニル］ピペラジン－１－イル］ピリダジン－３－カルボン酸（ＡＣ－０１２，ＣＡＳ：１６９０９４８－００－５）（１５０ｍｇ，０．４８６ｍｍｏｌ）と１－（１－アダマンチル）－Ｎ－メチルメタンアミン塩酸塩（ＢＢ３５，ＣＡＳ：１７７３－９９－５）（１７４．５ｍｇ，０．９７３ｍｍｏｌ）、ＥＤＣＩ（１８６．５２ｍｇ，０．９７３ｍｍｏｌ）、ＤＭＡＰ（５９．４ｍｇ，０．４８６ｍｍｏｌ）のジクロロメタン（６ｍＬ）溶液に、ＤＩＰＥＡ（２５１．５ｍｇ，１．９４６ｍｍｏｌ）を加え、室温で１６時間撹拌した。混合物に塩化アンモニウム水溶液を加えた。有機層をジクロロメタンで３回抽出し、硫酸ナトリウムで乾燥した。濃縮後、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー（０－１００％酢酸エチル／石油エーテル、続いて０－１０％メタノール／ジクロロメタン）で精製し、標題化合物ＡＧ０４０（１５０ｍｇ，６３％）を白色固体として得た。

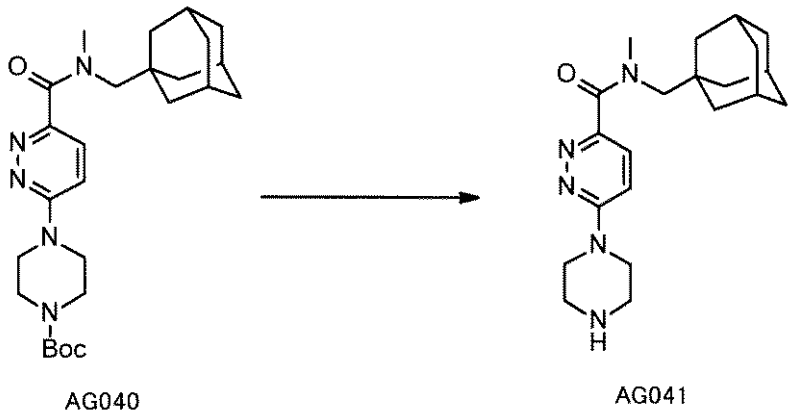
ＬＣＭＳ（ＥＳＩ）：ｍ／ｚ　４７０［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。

保持時間：１．１５５分（分析条件ＰＨ－ＴＦＡ－１３）。

【０７５８】

実施例８－１２－２：Ｎ－（１－アダマンチルメチル）－Ｎ－メチル－６－ピペラジン－１－イルピリダジン－３－カルボキサミド（ＡＧ０４１）の合成

【化１４７】



【０７５９】

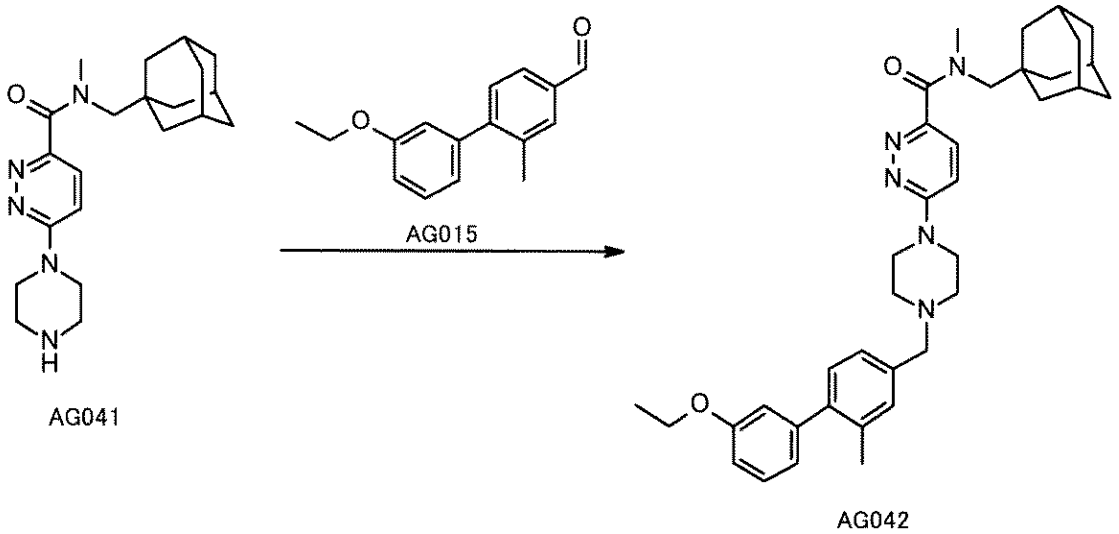
ｔｅｒｔ－ブチル　４－［６－［１－アダマンチルメチル（メチル）カルバモイル］ピリダジン－３－イル］ピペラジン－１－カルボキシラート（ＡＧ０４０）（１５０ｍｇ，０．３１９ｍｍｏｌ）のジクロロメタン（３ｍＬ）溶液にＨＣｌ１，４－ジオキサン溶液（４Ｍ，６ｍＬ）を加え、室温で１時間撹拌した。混合物を濃縮後、水に溶解し、炭酸水素ナトリウム水溶液を加えてｐＨを８－９とした。生じた固体をろ過後、水で３回洗い、

５０℃で１６時間乾燥し、標題化合物ＡＧ０４１（１００ｍｇ）を黄色固体として得た。
ＬＣＭＳ（ＥＳＩ）：ｍ／ｚ　３７０［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。
保持時間：０．８８２分（分析条件ＰＨ－ＴＦＡ－１３）。

【０７６０】

実施例８－１２－３：Ｎ－（１－アダマンチルメチル）－６－［４－［［４－（３－エトキシフェニル）－３－メチルフェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－メチルピリダジン－３－カルボキサミド［ＡＧ０４２（Ｂ３Ａ０７３－０１）］の合成

【化１４８】



【０７６１】

Ｎ－（１－アダマンチルメチル）－Ｎ－メチル－６－ピペラジン－１－イルピリダジン－３－カルボキサミド（ＡＧ０４１）（１８０ｍｇ，０．４８７ｍｍｏｌ）と４－（３－エトキシフェニル）－３－メチルベンズアルデヒド（ＡＧ０１５，ＣＡＳ：１５０６２０５－９１－９）（１７５．６ｍｇ，０．７３１ｍｍｏｌ）、酢酸（０．６ｍＬ）のＤＭＳＯ／エタノール（３ｍＬ／３ｍＬ）溶液を室温で１時間撹拌した。シアノ水素化ホウ素ナトリウム（６１．２ｍｇ，０．９７４ｍｍｏｌ）を加え、室温で１６時間撹拌した。混合物を濃縮後、得られた残渣を逆相カラムクロマトグラフィー（Ｃ１８，０－８０％アセトニトリル／水）で精製し、標題化合物ＡＧ０４２（７０ｍｇ，２３．７％）を白色固体として得た。

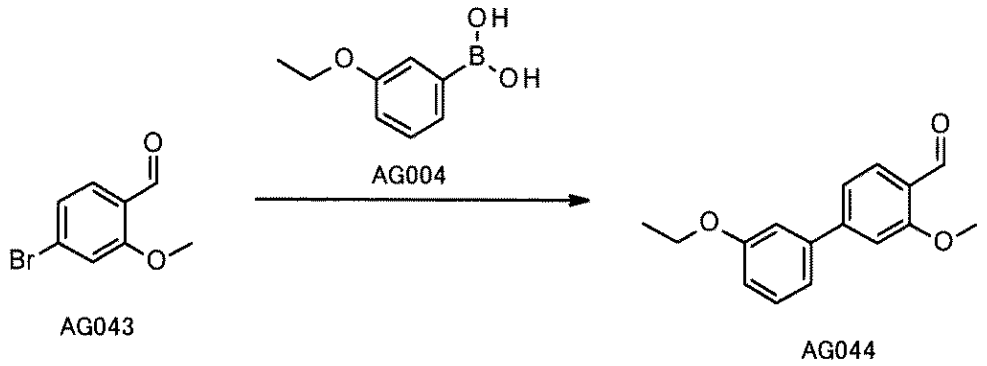
【０７６２】

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（３００ＭＨｚ，ＤＭＳＯ－ｄ$_{6}$）δ７．５６－７．５１（ｍ，１Ｈ），７．３５－７．２９（ｍ，２Ｈ），７．２５－７．２３（ｍ，１Ｈ），７．２１－７．１６（ｍ，２Ｈ），６．９２－６．８３（ｍ，３Ｈ），４．０５（ｑ，Ｊ＝６．９Ｈｚ，２Ｈ），３．７０－３．６５（ｍ，４Ｈ），３．５３（ｓ，３Ｈ），３．３３（ｓ，２Ｈ），３．１１－３．０６（ｍ，３Ｈ），２．５３－２．５０（ｍ，２Ｈ），２．３１（ｓ，３Ｈ），１．９７－１．９１（ｍ，２Ｈ），１．８４（ｓ，１Ｈ），１．７０－１．４５（ｍ，１１Ｈ），１．３３（ｔ，Ｊ＝６．９Ｈｚ，３Ｈ），１．２７－１．２３（ｍ，２Ｈ）。
ＬＣＭＳ（ＥＳＩ）：ｍ／ｚ　５９４［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。
実施例８－１２－３で合成法を例示したＡＧ０４２は、本明細書内において、化合物Ｂ３Ａ０７３－０１と表記することもある。

【０７６３】

実施例８－１３－１：４－（３－エトキシフェニル）－２－メトキシベンズアルデヒド（ＡＧ０４４）の合成

【化１４９】



【０７６４】

窒素雰囲気下、４－ブロモ－２－メトキシベンズアルデヒド（ＡＧ０４３，ＣＡＳ：４３１９２－３３－２）（２００ｍｇ，０．９３０ｍｍｏｌ）と（３－エトキシフェニル）ボロン酸（ＡＧ００４，ＣＡＳ：９０５５５－６６－１）（３０８．７ｍｇ，１．８６０ｍｍｏｌ）、Ｐｄ（ＰＰｈ$_3$）$_2$Ｃｌ$_2$（６５．２８ｍｇ，０．０９３ｍｍｏｌ）、炭酸ナトリウム（１２８．１４ｍｇ，１．２０９ｍｍｏｌ）のジメトキシエタン／エタノール／水＝１／１／１（６ｍＬ）溶液を、８０℃で３時間撹拌した。混合物をろ過し、ろ液を濃縮した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー（０－２０％酢酸エチル／石油エーテル）で精製し、標題化合物ＡＧ０４４（２１４．０ｍｇ，５４．０％）を黄色液体として得た。

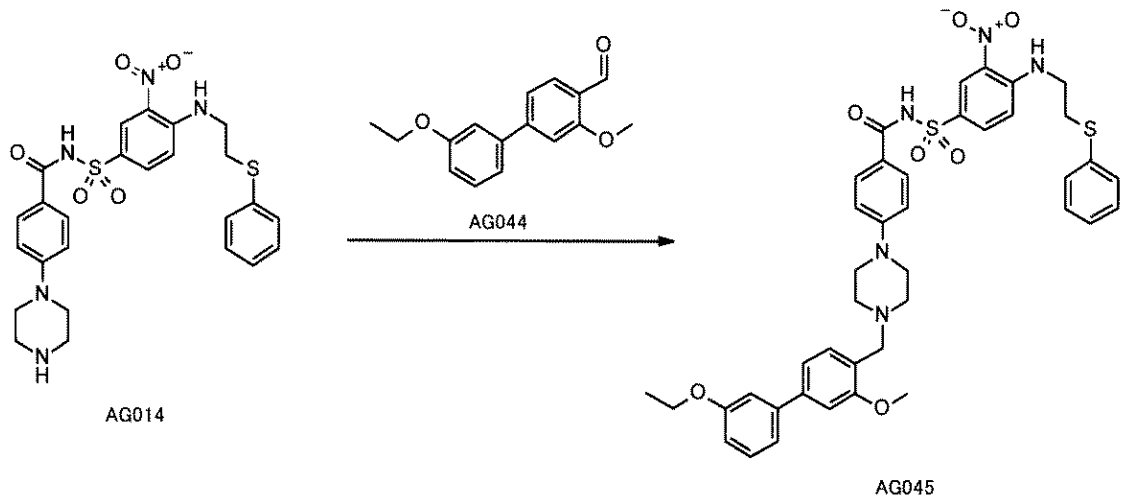
ＬＣＭＳ（ＥＳＩ）：ｍ／ｚ　２５７［Ｍ＋Ｈ］$^+$。

保持時間：０．８３９分（分析条件ＰＨ－ＦＡ－０５）。

【０７６５】

実施例８－１３－２：４－［４－［［４－（３－エトキシフェニル）－２－メトキシフェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－［３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニルベンズアミド［ＡＧ０４５（Ｂ２Ｑ０５３－０１）］の合成

【化１５０】



【０７６６】

Ｎ－［３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニル－４－ピペラジン－１－イルベンズアミド（ＡＧ０１４，ＣＡＳ：４０６２３３－７５－８）（１００．００ｍｇ，０．１８５ｍｍｏｌ）と４－（３－エトキシフェニル）－２－メトキシベンズアルデヒド（ＡＧ０４４）（９４．６４ｍｇ，０．３６９ｍｍｏｌ）、酢酸（０．０５ｍＬ）とＤＭＳＯ／エタノール（２ｍＬ／２ｍＬ）溶液を室温で１時間

撹拌した。シアノ水素化ホウ素ナトリウム（２３．２ｍｇ，０．３６９ｍｍｏｌ）を加え、室温で１６時間撹拌した。混合物を濃縮後、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー（０－９５％酢酸エチル／石油エーテル）で精製した。得られた粗生成物を逆相カラムクロマトグラフィー（Ｃ１８，１０－７０％アセトニトリル／水）で精製し、標題化合物ＡＧ０４５（３７ｍｇ，２５．４％）を黄色固体として得た。

【０７６７】

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（３００ＭＨｚ，ＤＭＳＯ－ｄ$_{6}$）δ８．６８（ｓ，１Ｈ），８．５５（ｄ，Ｊ＝２．１Ｈｚ，１Ｈ），７．８９（ｄ，Ｊ＝９．６Ｈｚ，１Ｈ），７．７６（ｄ，Ｊ＝８．７Ｈｚ，２Ｈ），７．４９－７．３３（ｍ，４Ｈ），７．３３－７．１４（ｍ，７Ｈ），７．１１（ｄ，Ｊ＝９．３Ｈｚ，１Ｈ），６．９３－６．８７（ｍ，３Ｈ），４．１１（ｑ，Ｊ＝６．９Ｈｚ，２Ｈ），３．９１（ｓ，３Ｈ），３．８１－３．７８（ｍ，２Ｈ），３．７７－３．６８（ｍ，２Ｈ），３．６８－３．５８（ｍ，２Ｈ），３．３０－３．２５（ｍ，４Ｈ），２．７８－２．６９（ｍ，４Ｈ），１．３６（ｔ，Ｊ＝６．９Ｈｚ，３Ｈ）。

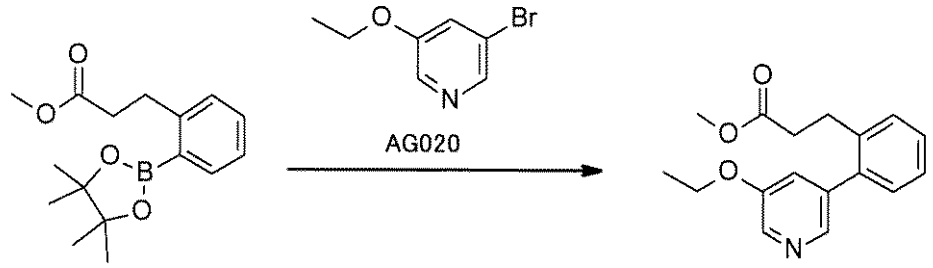
ＬＣＭＳ（ＥＳＩ）：ｍ／ｚ　７８２［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。

実施例８－１３－３で合成法を例示したＡＧ０４５は、本明細書内において、化合物Ｂ２Ｑ０５３－０１と表記することもある。

【０７６８】

実施例８－１４－１：メチル　３－［２－（５－エトキシピリジン－３－イル）フェニル］プロパノエート（ＡＧ０４７）の合成

【化１５１】



AG046　　AG047

【０７６９】

メチル　３－［２－（４，４，５，５－テトラメチル－１，３，２－ジオキサボロラン－２－イル）フェニル］プロパノエート（ＡＧ０４６，ＣＡＳ：１２８２６６０－７１－２）（２５０ｍｇ，０．８６２ｍｍｏｌ）の１，４－ジオキサン／水（６ｍＬ／０．６ｍＬ）溶液に、３－ブロモ－５－エトキシピリジン（ＡＧ０２０，ＣＡＳ：１７１１７－１７－８）（１９１．５ｍｇ，０．９４８ｍｍｏｌ）と酢酸カリウム（１６９．１ｍｇ，１．７２４ｍｍｏｌ）、Ｐｄ（ｄｐｐｆ）Ｃｌ$_{2}$（６３．０ｍｇ，０．０８６ｍｍｏｌ）を加え、９０℃で３時間撹拌した。混合物をろ過し、ろ液を濃縮後、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー（０－２０％酢酸エチル／石油エーテル）で精製し、標題化合物ＡＧ０４７（２００ｍｇ，７７．２％）を白色固体として得た。

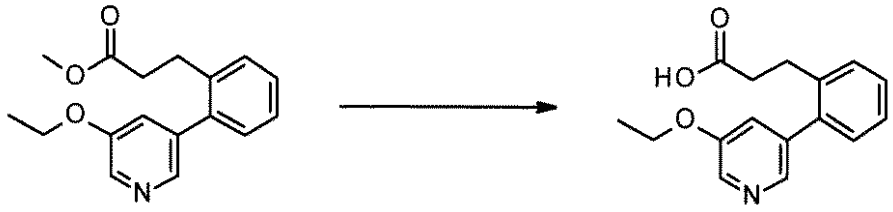
ＬＣＭＳ（ＥＳＩ）：ｍ／ｚ　２８６［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。

保持時間：０．８７７分（分析条件ＰＨ－ＦＡ－０２）。

【０７７０】

実施例８－１４－２：３－［２－（５－エトキシピリジン－３－イル）フェニル］プロパン酸（ＡＧ０４８）の合成

【化１５２】



AG047　　AG048

【０７７１】

メチル　３－［２－（５－エトキシピリジン－３－イル）フェニル］プロパノエート（ＡＧ０４７）（３３０ｍｇ，１．１５７ｍｍｏｌ）のメタノール／水（３０ｍＬ／３ｍＬ）溶液に、水酸化リチウム（２７６．９ｍｇ，１１．５７０ｍｍｏｌ）を加え、３５℃で１６時間撹拌した。混合物を濃縮後、水に溶解し、クエン酸を加えてｐＨ５－６とした。生じた固体をろ過後、水で３回洗い、５０℃で１６時間乾燥し、標題化合物ＡＧ０４８（２００ｍｇ）を灰色固体として得た。

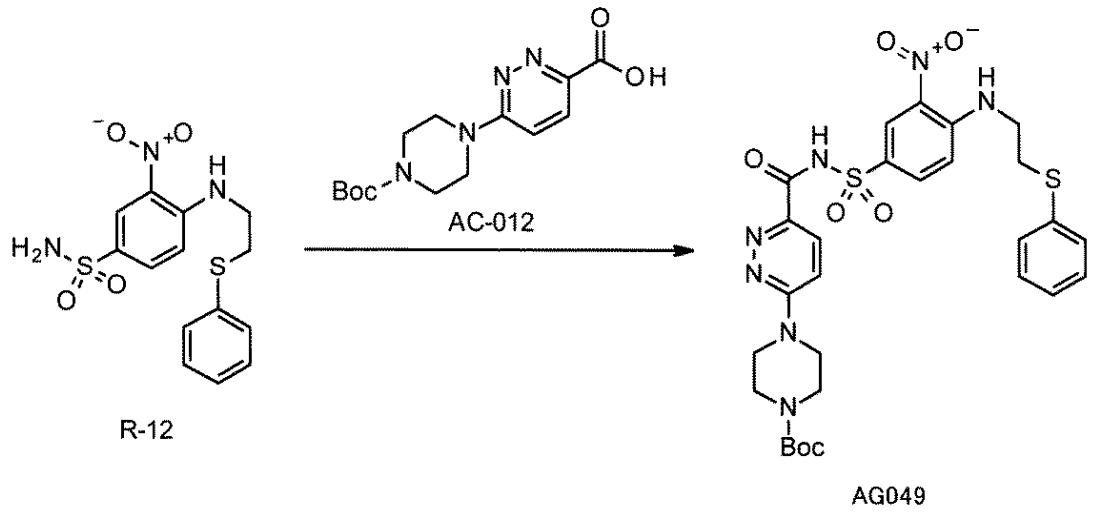
ＬＣＭＳ（ＥＳＩ）：ｍ／ｚ　２７２［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。

保持時間：０．７６５分（分析条件ＰＨ－ＦＡ－０７）。

【０７７２】

実施例８－１４－３：ｔｅｒｔ－ブチル　４－［６－［［３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニルカルバモイル］ピリダジン－３－イル］ピペラジン－１－カルボキシラート（ＡＧ０４９）の合成

【化１５３】

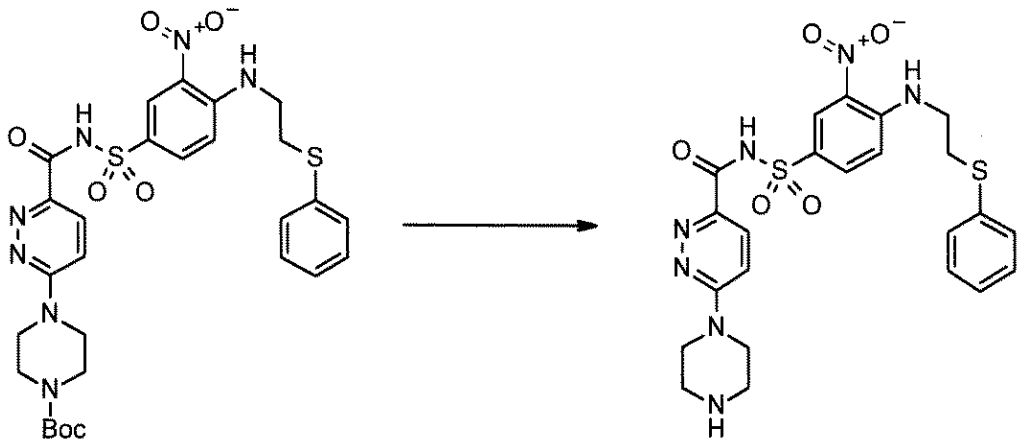


R-12　　AC-012　　AG049

【０７７３】

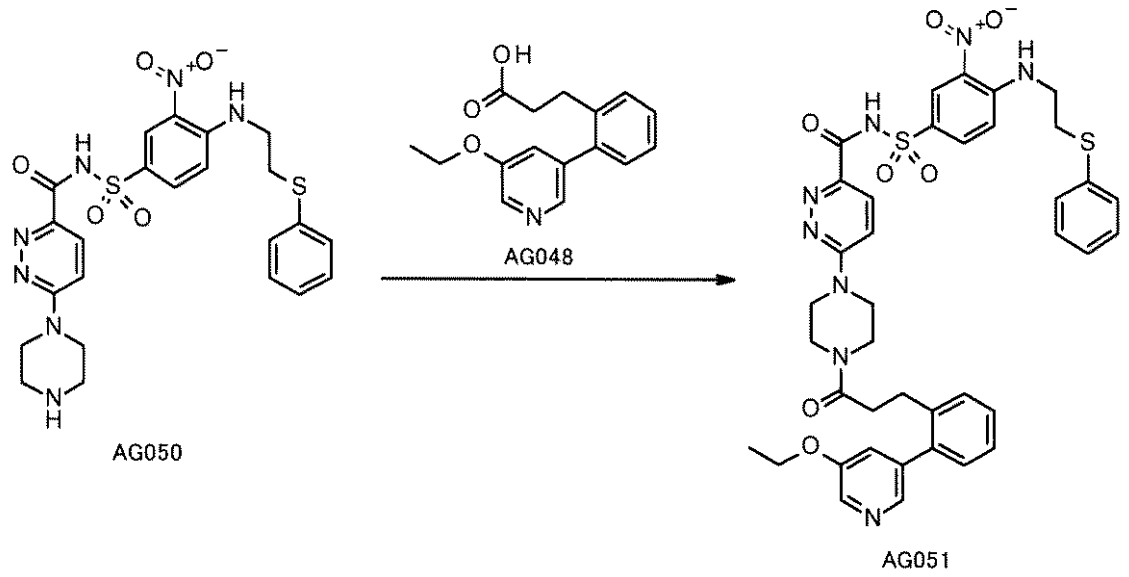
６－［４－［（２－メチルプロパン－２－イル）オキシカルボニル］ピペラジン－１－イル］ピリダジン－３－カルボン酸（ＡＣ－０１２，ＣＡＳ：１６９０９４８－００－５）（２００ｍｇ，０．６４９ｍｍｏｌ）と３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）ベンゼンスルホンアミド（Ｒ－１２，ＣＡＳ：４０６２３３－１３－４）（３４４．０ｍｇ，０．９７４ｍｍｏｌ）、ＥＤＣＩ（２４９．３ｍｇ，１．２９８ｍｍｏｌ）、ＤＭＡＰ（７９．２ｍｇ，０．６４ｍｍｏｌ）のジクロロメタン（４ｍＬ）溶液に、ＤＩＰＥＡ（３３４．９ｍｇ，２．５９６ｍｍｏｌ）を加え、室温で１６時間撹拌した。混合物に塩化アンモニウム水溶液を加えた。有機層をジクロロメタンで３回抽出し、硫酸ナトリウムで乾燥した。濃縮後、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー（０－１００％酢酸エチル／石油エーテル、続いて０－１０％メタノール／ジクロロメ

タン）で精製し、標題化合物ＡＧ０４９（２４０ｍｇ，５７．６％）を白色固体として得た。
ＬＣＭＳ（ＥＳＩ）：ｍ／ｚ　６４４［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。
保持時間：１．２１１分（分析条件ＰＨ－ＴＦＡ－１３）。
【０７７４】
実施例８－１４－４：Ｎ－［３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニル－６－ピペラジン－１－イルピリダジン－３－カルボキサミド（ＡＧ０５０）の合成
【化１５４】



【０７７５】
ｔｅｒｔ－ブチル　４－［６－［［３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニルカルバモイル］ピリダジン－３－イル］ピペラジン－１－カルボキシラート（ＡＧ０４９）（５０．０ｍｇ，０．０７８ｍｍｏｌ）のジクロロメタン（２ｍＬ）溶液にＨＣｌ１，４－ジオキサン溶液（４Ｍ，４ｍＬ）を加え、室温で１時間撹拌した。混合物を濃縮後、水に溶解し、炭酸水素ナトリウム水溶液を加えてｐＨ８－９とした。生じた固体をろ過後、水で３回洗い、５０℃で１６時間乾燥し、標題化合物ＡＧ０５０（５０ｍｇ）を灰色固体として得た。
ＬＣＭＳ（ＥＳＩ）：ｍ／ｚ　５４４［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。
保持時間：０．９６０分（分析条件ＰＨ－ＦＡ－０２）。
【０７７６】
実施例８－１４－５：６－［４－［３－［２－（５－エトキシピリジン－３－イル）フェニル］プロパノイル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－［３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニルピリダジン－３－カルボキサミド［ＡＧ０５１（Ｂ２Ｑ０１２－０１）］の合成

【化１５５】



【０７７７】

Ｎ－［３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニル－６－ピペラジン－１－イルピリダジン－３－カルボキサミド（ＡＧ０５０）（１００ｍｇ，０．１８４ｍｍｏｌ）と３－［２－（５－エトキシピリジン－３－イル）フェニル］プロパン酸（ＡＧ０４８）（７４．９ｍｇ，０．２７６ｍｍｏｌ）、ＥＤＣＩ（７０．５ｍｇ，０．３６８ｍｍｏｌ）、ＤＭＡＰ（２２．５ｍｇ，０．１８４ｍｍｏｌ）のジクロロメタン（２ｍＬ）溶液に、ＤＩＰＥＡ（９５．１ｍｇ，０．７３６ｍｍｏｌ）を加え、室温で１６時間撹拌した。混合物に塩化アンモニウム水溶液を加えた。有機層をジクロロメタンで３回抽出し、硫酸ナトリウムで乾燥した。濃縮後、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー（０－１００％酢酸エチル／石油エーテル、続いて０－１０％メタノール／ジクロロメタン）で精製し、標題化合物ＡＧ０５１（４０ｍｇ，２６．７％）を白色固体として得た。

【０７７８】

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（３００ＭＨｚ，ＤＭＳＯ－ｄ$_{6}$）δ８．５４－８．４８（ｍ，１Ｈ），８．２９－８．２４（ｍ，１Ｈ），８．１３－８．０７（ｍ，１Ｈ），７．８９－７．７６（ｍ，１Ｈ），７．４５－７．２６（ｍ，７Ｈ），７．２２－７．１２（ｍ，２Ｈ），７．０３－７．９２（ｍ，３Ｈ），４．１８－４．０８（ｍ，２Ｈ），３．６３－３．５１（ｍ，５Ｈ），３．４５－３．３８（ｍ，２Ｈ），３．２８－３．２２（ｍ，２Ｈ），２．８１－２．７１（ｍ，２Ｈ），２．５９－２．５０（ｍ，６Ｈ），１．３５－１．２５（ｍ，３Ｈ）。

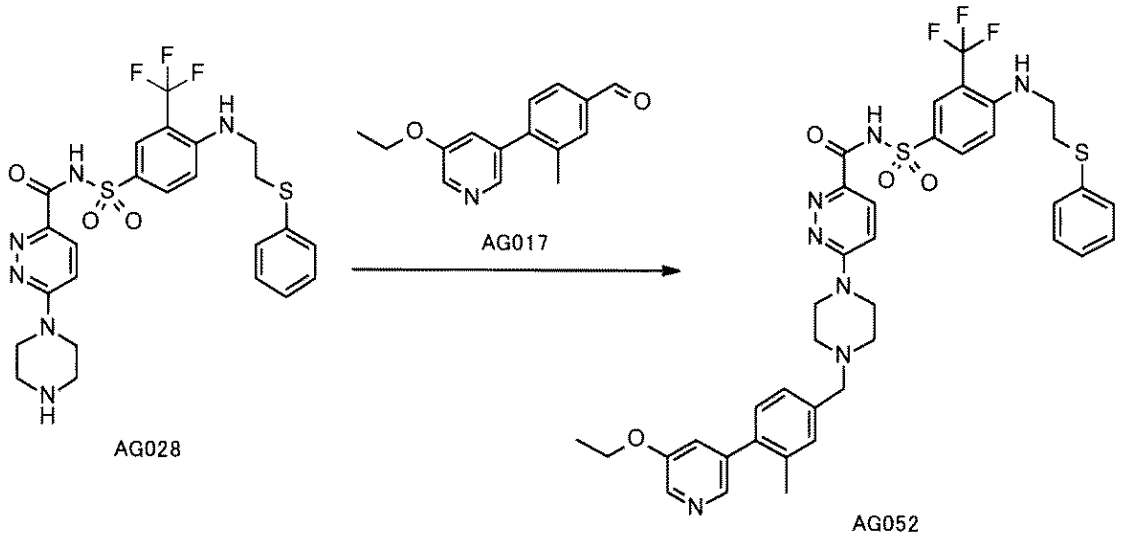
ＬＣＭＳ（ＥＳＩ）：ｍ／ｚ　７９７［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。

実施例８－１４－５で合成法を例示したＡＧ０５１は、本明細書内において、化合物Ｂ２Ｑ０１２－０１と表記することもある。

【０７７９】

実施例８－１５－１：６－［４－［［４－（５－エトキシピリジン－３－イル）－３－メチルフェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－［４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）－３－（トリフルオロメチル）フェニル］スルホニルピリダジン－３－カルボキサミド［ＡＧ０５２（Ｂ２Ｒ０７４－０１）］の合成

【化１５６】



【０７８０】

Ｎ－［４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）－３－（トリフルオロメチル）フェニル］スルホニル－６－ピペラジン－１－イルピリダジン－３－カルボキサミド（ＡＧ０２８）（３１０．００ｍｇ，０．５４７ｍｍｏｌ）と４－（５－エトキシピリジン－３－イル）－３－メチルベンズアルデヒド（ＡＧ０１７，ＣＡＳ：１５４５０１４－８１－０）（２６４．０２ｍｇ，１．０９４ｍｍｏｌ）、酢酸（０．０５ｍＬ）、ＤＭＳＯ／エタノール（３ｍＬ／３ｍＬ）溶液を室温で１時間撹拌した。シアノ水素化ホウ素ナトリウム（６８．７６ｍｇ，１．０９４ｍｍｏｌ）を加え、室温で１６時間撹拌した。混合物を逆相カラムクロマトグラフィー（Ｃ１８，５－７０％アセトニトリル／水）で精製した。得られた粗生成物を分取ＨＰＬＣ（ＸＢｒｉｄｇｅ　Ｐｒｅｐ　ＯＢＤ　Ｃ１８カラム，３４－６４％アセトニトリル／１０ｍＭ　炭酸水素アンモニウム水溶液）で精製し、標題化合物ＡＧ０５２（３７．７ｍｇ，８．６％）を灰色固体として得た。

【０７８１】

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（３００ＭＨｚ，ＤＭＳＯ－ｄ$_{6}$）δ８．２６（ｄ，Ｊ＝２．７Ｈｚ，１Ｈ），８．１２（ｄ，Ｊ＝１．８Ｈｚ，１Ｈ），７．９９－７．９６（ｍ，１Ｈ），７．９０－７．８５（ｍ，１Ｈ），７．８０－７．４９（ｍ，１Ｈ），７．４１－７．３６（ｍ，２Ｈ），７．３５－７．２６（ｍ，５Ｈ），７．２５－７．１７（ｍ，３Ｈ），６．８７（ｄ，Ｊ＝９．０Ｈｚ，１Ｈ），６．５５－６．４９（ｍ，１Ｈ），４．１５（ｑ，Ｊ＝６．９Ｈｚ，２Ｈ），３．７８－３．７１（ｍ，４Ｈ），３．５８（ｓ，２Ｈ），３．５１－３．４３（ｍ，３Ｈ），３．１９－３．１２（ｍ，２Ｈ），２．５９－２．５３（ｍ，４Ｈ），２．１３（ｓ，３Ｈ），１．３５（ｔ，Ｊ＝６．９Ｈｚ，３Ｈ）。

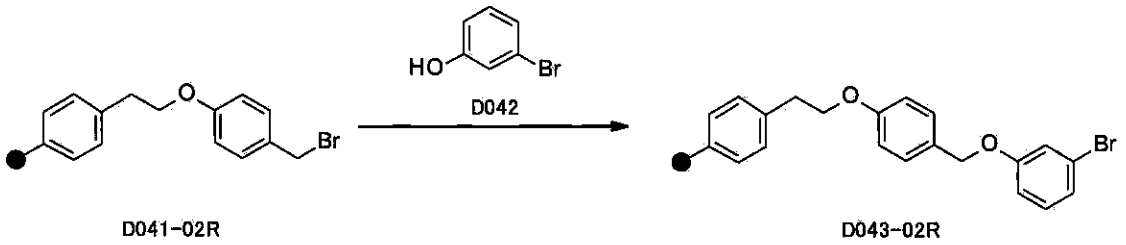
ＬＣＭＳ（ＥＳＩ）：ｍ／ｚ　７９２［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。

実施例８－１５－１で合成法を例示したＡＧ０５２は、本明細書内において、化合物Ｂ２Ｒ０７４－０１と表記することもある。

【０７８２】

実施例８－１６－１：固相担持ＡｒＢｒ（化合物Ｄ０４３－０２Ｒ）の合成

【化１５７】



D041-02R　　D043-02R

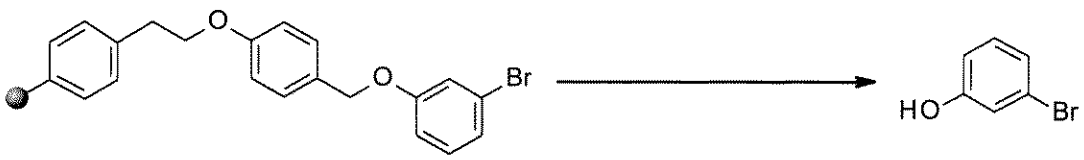
【０７８３】

窒素雰囲気下、１５０ｍＬガラスバイアルに修飾Ｗａｎｇレジン（化合物Ｄ０４１－０２Ｒ，５３４４７，Ｓｉｇｍａ－Ａｌｄｒｉｃｈ，ブロミナテド，１００－２００ｍｅｓｈ，担持量：１．２５ｍｍｏｌ／ｇ，コポリマー（スチレン－１％ＤＶＢ），５．００ｇ，６．２５ｍｍｏｌ）とＮＭＰ（５０ｍＬ）を加え室温で１時間振とうした。窒素雰囲気下、３－ブロモフェノール（化合物Ｄ０４２，ＣＡＳ：５９１－２０－８，２．１６ｇ，１２．５ｍｍｏｌ）とｔＢｕＯＫ（１．３３ｇ，１１．９ｍｍｏｌ）を加え室温で２０時間振とうした。ＮＭＰ（１００ｍＬ）を使用して反応液をフィルター付きシリンジに移し、ＮＭＰ（１００ｍＬ）で２回レジンの洗浄を行った。さらにＮＭＰ／水（１／１，１００ｍＬ）で３回、水（１００ｍＬ）で３回、ＮＭＰ（１００ｍＬ）で３回、メタノール（１００ｍＬ）で３回、ＤＣＭ（１００ｍＬ）で３回、ヘプタン（１００ｍＬ）で３回繰り返しレジンの洗浄を行い、得られたレジンを減圧下で一晩乾燥させることで標題化合物Ｄ０４３－０２Ｒ（４．９５ｇ）を得た。

【０７８４】

実施例８－１６－２：固相担持ＡｒＢｒ（化合物Ｄ０４３－０２Ｒ）の担持量は以下の方法で決定した。

【化１５８】



D043-02R　　D042

【０７８５】

窒素雰囲気下、３ｍＬガラスバイアルに化合物Ｄ０４３－０２Ｒ（２２．６ｍｇ）とトリメチルベンゼンを含む３０％ＴＦＡ／ＤＣＭ（０．０８Ｍ，１ｍＬ）に１５分間浸した。切り出し液をろ過し、レジンをＮＭＰ（５００μＬ）で洗浄した。得られた３－ブロモフェノール（Ｄ０４２）のＵＶ面積をもとに、検量線を用いて３－ブロモフェノール（Ｄ０４２）の濃度を定量し、レジンに担持されている３－ブロモフェノール（Ｄ０４２）の量を求めた。その結果、Ｄ０４３－０２Ｒの担持量を０．５３２ｍｍｏｌ／ｇと算出した。

化合物Ｄ０４２

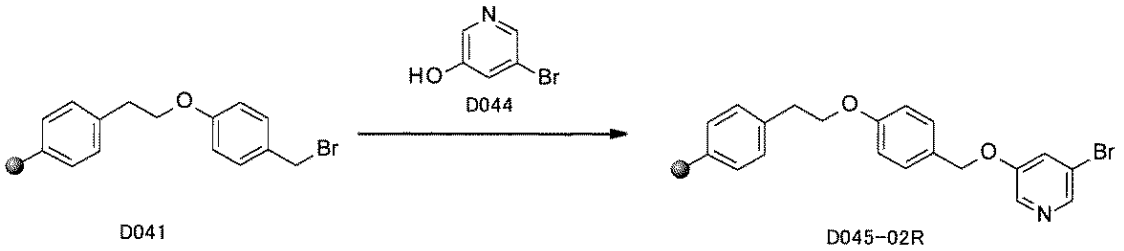
保持時間：０．８９３分（分析条件　ＳＭＤ－ＦＡ０５－１，２９０ｎｍ）。

極大吸収波長：２７６ｎｍ。

【０７８６】

実施例８－１６－３：固相担持ＡｒＢｒ（化合物Ｄ０４５－０２Ｒ）の合成

【化１５９】



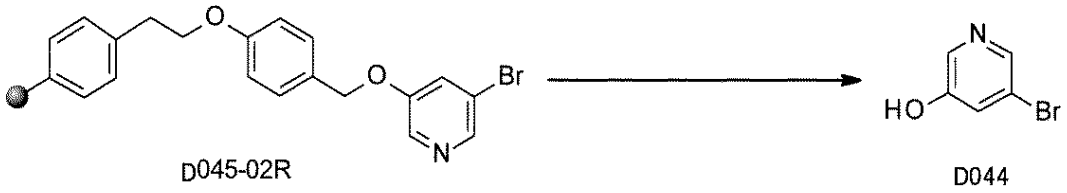
【０７８７】

５－ブロモピリジン－３－オール（化合物Ｄ０４４，ＣＡＳ：７４１１５－１３－２，２．１８ｇ，１２．５ｍｍｏｌ）を用いて、実施例８－１２－１における化合物Ｄ０４３－０２Ｒと同様の方法で合成し、固相担持ＡｒＢｒ（化合物Ｄ０４５－０２Ｒ）（５．０１ｇ）を得た。

【０７８８】

実施例８－１６－４：固相担持ＡｒＢｒ（化合物Ｄ０４５－０２Ｒ）の担持量は以下の方法で決定した。

【化１６０】



【０７８９】

化合物Ｄ０４５－０２Ｒ（２２．６ｍｇ）を用いて、実施例８－１２－２（化合物Ｄ０４２）と同様の方法でＤ０４４の担持量を算出した。その結果、Ｄ０４５－０２Ｒの担持量を０．７３５ｍｍｏｌ／ｇと算出した。

化合物Ｄ０４４

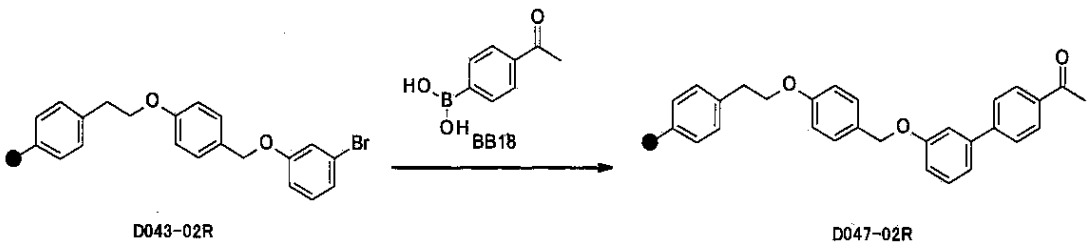
ＬＣＭＳ：ｍ／ｚ　１７４［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。

保持時間：０．５７３分（分析条件　ＳＭＤ－ＦＡ０５－１，２９０ｎｍ）。

【０７９０】

実施例８－１６－５：固相担持ケトン（化合物Ｄ０４７－０２Ｒ）の合成

【化１６１】



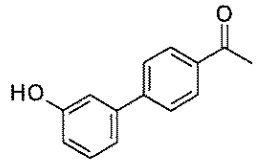
【０７９１】

窒素雰囲気下、４ｍＬのガラスバイアルに固相担持ＡｒＢｒ（化合物Ｄ０４３－０２Ｒ）（１００ｍｇ，担持量０．５３２ｍｍｏｌ／ｇ，０．０５３２ｍｍｏｌ）とＮＭＰ（１．９ｍＬ）を加え室温で１時間振とうした。窒素雰囲気下、（４－アセチルフェニル）ボロン酸（ＢＢ１８，ＣＡＳ：１４９１０４－９０－５）（５２．３ｍｇ，０．３１９ｍｍｏｌ）、K_3PO_4水溶液（１．７Ｍ，１８８μＬ，０．３１９ｍｍｏｌ）、Ｐ（Ｃｙ）$_3$Ｐｄ　Ｇ３のＮＭＰ溶液（０．０４Ｍ，２６６μＬ，１０．６μｍｏｌ）を加え、９０℃

で２時間振とうした。反応液とレジンの懸濁液をＮＭＰ（２ｍＬ）を使用してフィルター付きシリンジに移し、ＮＭＰ（２ｍＬ）で２回、ＮＡＣ（０．０５Ｍ）入りＮＭＰ：H_2O（１：１）溶液（２ｍＬ）で３回、水（２ｍＬ）で３回、ＮＭＰ（２ｍＬ）で３回、ＭｅＯＨ（２ｍＬ）で３回、ＤＣＭ（２ｍＬ）で３回、ヘプタン（２ｍＬ）で３回繰り返して洗浄した後に減圧下でレジンを乾燥し、標題化合物Ｄ０４７－０２Ｒ（１０７．６ｍｇ）を得た。化合物Ｄ０４７－０２Ｒの一部をレジンをフィルター付きマイクロピペットチップ上に移し、０．０８Ｍペンタメチルベンゼンを含む１０％ＴＦＡ／ＤＣＭ溶液（５０μＬ）に５分間浸した。切り出し液をろ過し、固相をＮＭＰ（５０μＬ）で洗浄した。得られたろ液をＭｅＣＮ（５００μＬ）で希釈することでＬＣサンプルを調製し、ＬＣＭＳ測定を行うことで、Ｄ０４７の生成を確認した。

【０７９２】

【化１６２】



D047

化合物Ｄ０４７

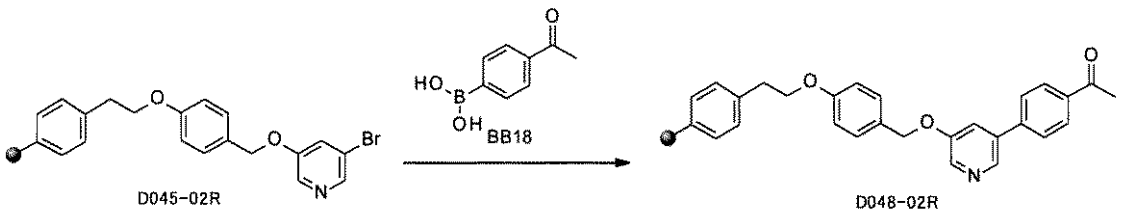
ＬＣＭＳ：ｍ／ｚ　２１３［Ｍ＋Ｈ］$^+$。

保持時間：０．９２７分（分析条件　ＳＭＤ－ＦＡ０５－１，２９０ｎｍ）。

【０７９３】

実施例８－１６－６：固相担持ケトン（化合物Ｄ０４８－０２Ｒ）の合成

【化１６３】

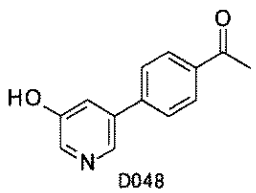


【０７９４】

固相担持ＡｒＢｒ（化合物Ｄ０４５－０２Ｒ，担持量：０．７３５ｍｍｏｌ／ｇ，１００ｍｇ）を用いて、実施例８－１６－５（化合物Ｄ０４７－０２Ｒ）と同様の方法で合成し、標題化合物Ｄ０４８－０２Ｒ（１０８．３ｍｇ）を得た。実施例８－１６－５と同様の切り出し操作を行い、Ｄ０４８の生成を確認した。

【０７９５】

【化１６４】



D048

化合物Ｄ０４８

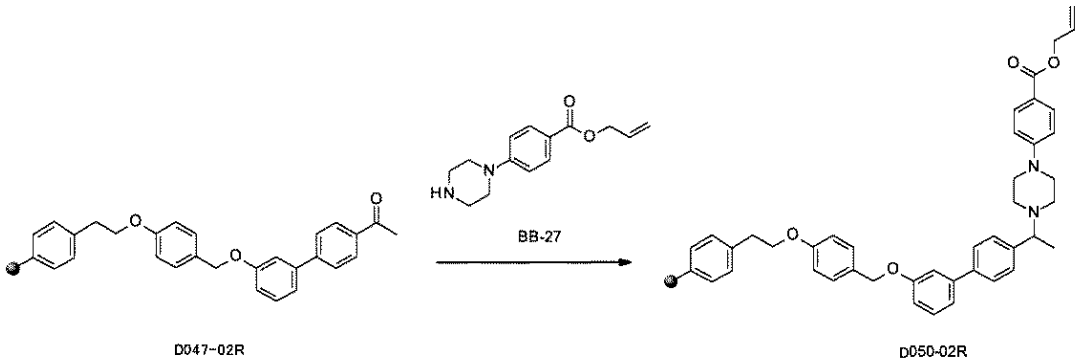
ＬＣＭＳ：ｍ／ｚ　２１４［Ｍ＋Ｈ］$^+$。

保持時間：０．５３４分（分析条件　ＳＭＤ－ＦＡ０５－１，２９０ｎｍ）。

【０７９６】

実施例８－１６－７：固相担持アリルエステル（化合物Ｄ０５０－０２Ｒ）の合成

【化１６５】

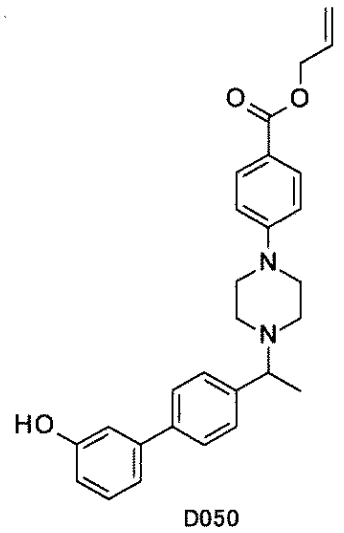


【０７９７】

窒素雰囲気下、３ｍＬのガラスバイアルに固相担持ケトン（化合物Ｄ０４７－０２Ｒ，１００ｍｇ，担持量０．５３２ｍｍｏｌ／ｇ，０．０５３２ｍｍｏｌ）とアニソール（３．７５ｍＬ）を加え室温で１時間振とうした。窒素雰囲気下、アリル　４－ピペラジン－１－イルベンゾアト（ＢＢ－２７，１５７ｍｇ，０．６３８ｍｍｏｌ）とＴｉ（ＯｔＢｕ）$_4$（０．４１１ｍＬ，１．０６ｍｍｏｌ）を加え、１４０℃で１９時間振とうした。反応液を室温に冷却後、窒素雰囲気下トリアセトキシ水素化ホウ素ナトリウム（３３８ｍｇ，１．６０ｍｍｏｌ）を加え、１４０℃で１７時間振とうした。反応容器を室温まで冷却し、ＭｅＯＨ（２ｍＬ）を反応液へ添加した。得られた反応液とレジンの懸濁液をＭｅＯＨ（２ｍＬ）を使用してフィルター付きシリンジに移し、ＮＭＰ（２ｍＬ）で３回、０．０５Ｍ　Ｒｏｃｈｅｌｌｅ塩溶液（ＮＭＰ：水＝１：１，２ｍＬ）で３回、水（２ｍＬ）で３回、ＮＭＰ（２ｍＬ）で３回、半飽和ＮａＨＣＯ$_3$溶液（２ｍＬ）で３回、水（２ｍＬ）で３回、ＮＭＰ（２ｍＬ）で３回、ＭｅＯＨ（２ｍＬ）で３回、ＤＣＭ（２ｍＬ）で３回、ヘプタン（２ｍＬ）で３回繰り返して洗浄した後に減圧下でレジンを乾燥し、標題化合物Ｄ０５０－０２Ｒ（１０３．２ｍｇ）を得た。実施例８－１６－５と同様の切り出し操作を行い、Ｄ０５０の生成を確認した。

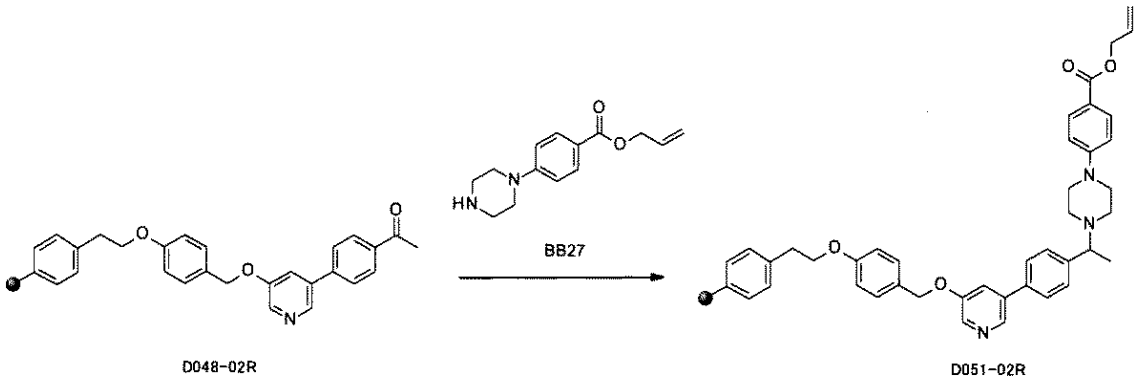
【０７９８】

【化１６６】

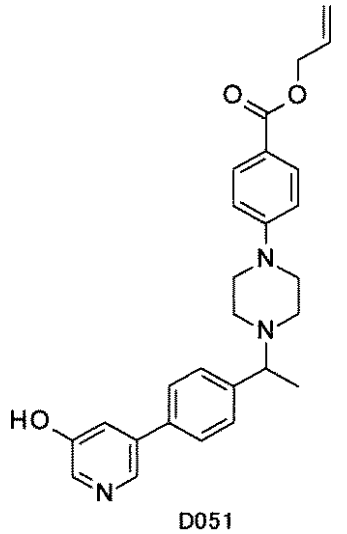


化合物Ｄ０５０

ＬＣＭＳ：ｍ／ｚ　４４３［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。
保持時間：０．７９７分（分析条件　ＳＭＤ－ＦＡ０５－１，２９０ｎｍ）。
【０７９９】
実施例８－１６－８：固相担持アリルエステル（化合物Ｄ０５１－０２Ｒ）の合成
【化１６７】



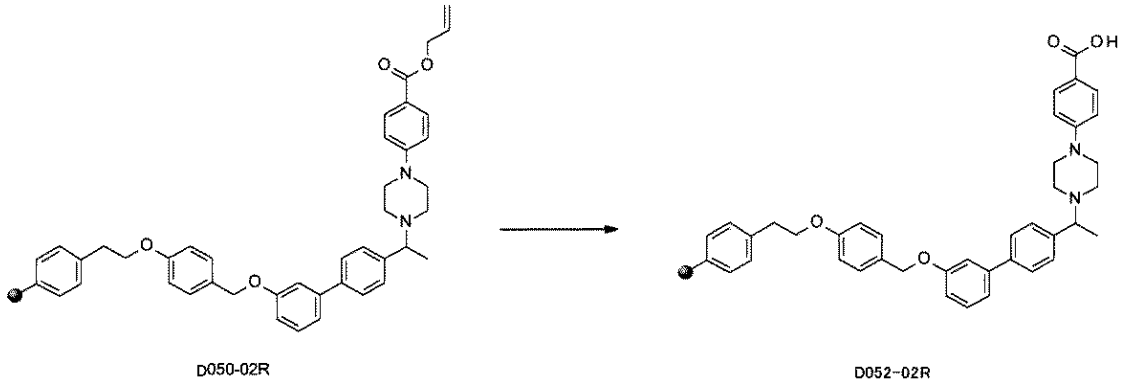
【０８００】
固相担持ケトン（化合物Ｄ０４８－０２Ｒ，担持量：０．７３５ｍｍｏｌ／ｇ，１００ｍｇ）を用いて、実施例８－１６－７（化合物Ｄ０５０－０２Ｒ）と同様の方法で合成し、標題化合物Ｄ０５１－０２Ｒ（１０５．８ｍｇ）を得た。実施例８－１６－５と同様の切り出し操作を行い、Ｄ０５１の生成を確認した。
【０８０１】
【化１６８】



化合物Ｄ０５１

ＬＣＭＳ：ｍ／ｚ　４４４［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。
保持時間：０．６１０分（分析条件　ＳＭＤ－ＦＡ０５－１，２９０ｎｍ）。
【０８０２】
実施例８－１６－９：固相担持カルボン酸（化合物Ｄ０５２－０２Ｒ）の合成

【化１６９】

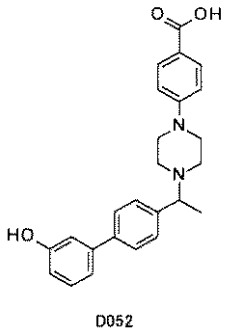


【０８０３】

窒素雰囲気下、３ｍＬのガラスバイアルに固相担持アリルエステル（化合物Ｄ０５０－０２Ｒ，９９．４ｍｇ，担持量０．５３２ｍｍｏｌ／ｇ，０．０５３２ｍｍｏｌ）、ＮＭＰ（１．２ｍＬ）とＭｅＯＨ（０．３０ｍＬ）を加え室温で１時間振とうした。水酸化ナトリウム水溶液（２Ｍ，２５０μＬ，０．６６０ｍｍｏｌ）を加え８０℃で７時間振とうした。得られた反応液とレジンの懸濁液をＮＭＰ（２ｍＬ）を使用してフィルター付きシリンジに移し、ＮＭＰ（２ｍＬ）で３回、水（２ｍＬ）で３回、ＮＭＰ（２ｍＬ）で３回、ＨＯＡｔ入りＮＭＰ溶液（０．２Ｍ，２ｍＬ）で３回、ＮＭＰ（２ｍＬ）で３回、ＭｅＯＨ（２ｍＬ）で３回、ＤＣＭ（２ｍＬ）で３回、ヘプタン（２ｍＬ）で３回繰り返して洗浄した後に減圧下でレジンを乾燥し、標題化合物Ｄ０５２－０２Ｒ（８２．６ｍｇ）を得た。実施例８－１６－５と同様の切り出し操作を行い、Ｄ０５２の生成を確認した。

【０８０４】

【化１７０】



化合物Ｄ０５２

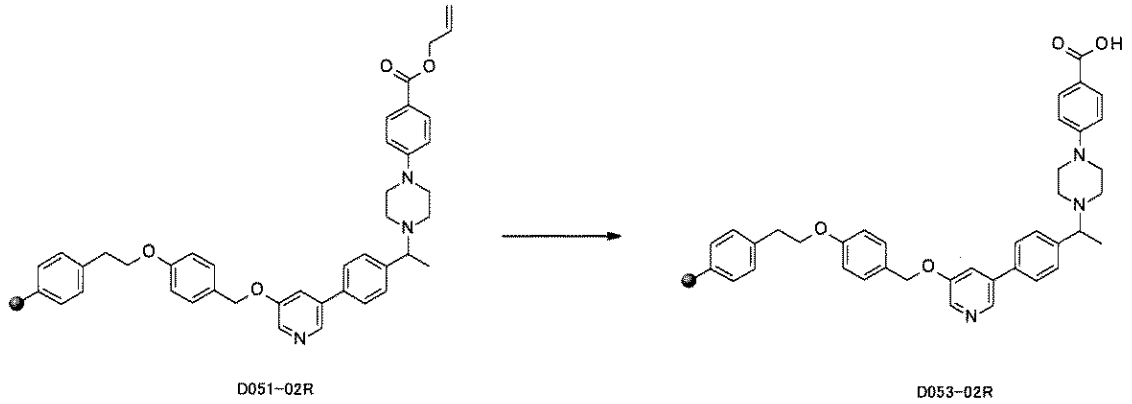
ＬＣＭＳ：ｍ／ｚ　４０３［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。

保持時間：０．６４９分（分析条件　ＳＭＤ－ＦＡ０５－１，２９０ｎｍ）。

【０８０５】

実施例８－１６－１０：固相担持カルボン酸（化合物Ｄ０５３－０２Ｒ）の合成

【化１７１】



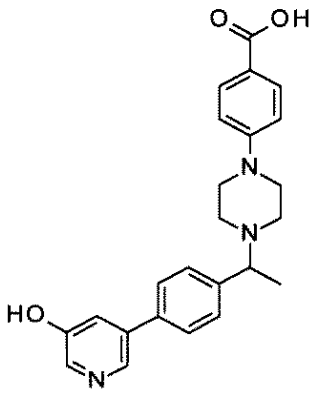
D051-02R　　D053-02R

【０８０６】

窒素雰囲気下、３ｍＬのガラスバイアルに固相担持アリルエステル（化合物Ｄ０５１－０２Ｒ，１００．２ｍｇ，担持量：０．７３６ｍｍｏｌ／ｇ，０．０７３７ｍｍｏｌ）、ＮＭＰ（１．２ｍＬ）とＭｅＯＨ（０．３０ｍＬ）を加え室温で１時間振とうした。水酸化ナトリウム水溶液（２Ｍ，２５０μＬ，０．６６０ｍｍｏｌ）を加え室温で７時間振とうした。窒素雰囲気下、反応溶液に水酸化ナトリウム水溶液（２Ｍ，２５０μＬ，０．６６０ｍｍｏｌ）を加え室温で１１時間振とうした。得られた反応液とレジンの懸濁液をＮＭＰ（２ｍＬ）を使用してフィルター付きシリンジに移し、ＮＭＰ（２ｍＬ）で３回、水（２ｍＬ）で３回、ＮＭＰ（２ｍＬ）で３回、ＨＯＡｔ入りＮＭＰ溶液（０．２Ｍ，２ｍＬ）で３回、ＮＭＰ（２ｍＬ）で３回、ＭｅＯＨ（２ｍＬ）で３回、ＤＣＭ（２ｍＬ）で３回、ヘプタン（２ｍＬ）で３回繰り返して洗浄した後に減圧下でレジンを乾燥し、標題化合物Ｄ０５３－０２Ｒ（９０．１ｍｇ）を得た。実施例８－１６－５と同様の切り出し操作を行い、Ｄ０５３の生成を確認した。

【０８０７】

【化１７２】



D053

化合物Ｄ０５３

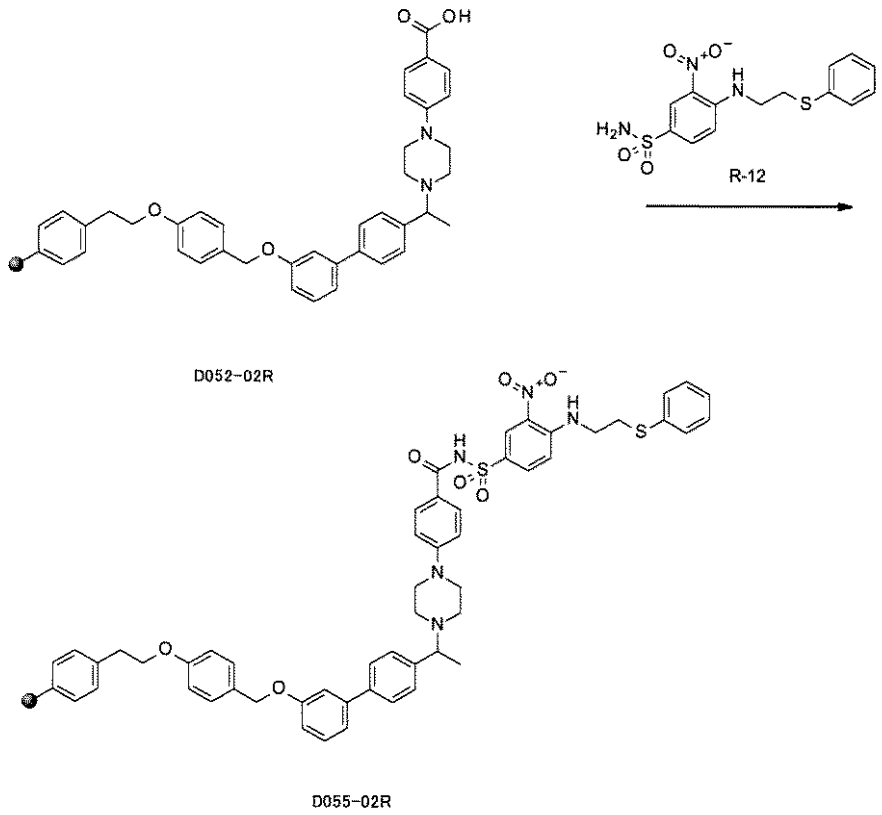
ＬＣＭＳ：ｍ／ｚ　４０４［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。

保持時間：０．４５７（分析条件　ＳＭＤ－ＦＡ０５－１，２９０ｎｍ。）

【０８０８】

実施例８－１６－１１：化合物Ｄ０５５－０２Ｒの合成

【化１７３】

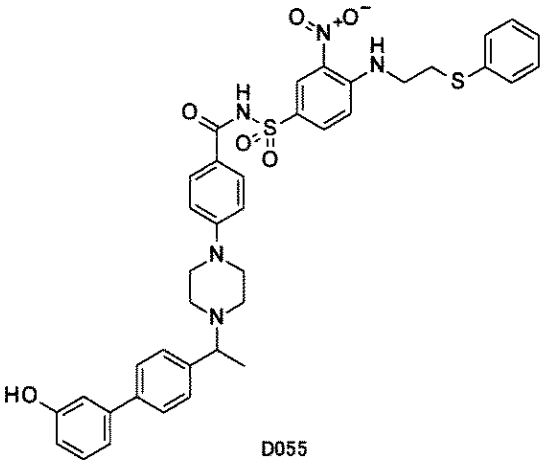


【０８０９】

窒素雰囲気下、３ｍＬのガラスバイアルに固相担持カルボン酸（化合物Ｄ０５２－０２Ｒ，８１．５ｍｇ，担持量０．５３２ｍｍｏｌ／ｇ，０．０４３４ｍｍｏｌ）とＮＭＰ（１．８ｍＬ）を加え室温で１時間振とうした。ＨＡＴＵ（９９．０ｍｇ，０．２６０ｍｍｏｌ）と２，６－ルチジン（３０．３μＬ，０．２６０ｍｍｏｌ）を室温で加え、４０℃で３時間振とうした。３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）ベンゼンスルホンアミド（Ｒ－１２，１０７ｍｇ，０．３０４ｍｍｏｌ）とＰ１－ｔＢｕ（１６５μＬ，０．６５０ｍｍｏｌ）を室温で加え、４０℃で３時間振とうした。得られた反応液とレジンの懸濁液をＮＭＰ（２ｍＬ）を使用してフィルター付きシリンジに移し、ＮＭＰ（２ｍＬ）で２回、ＨＯＡｔ入りＮＭＰ（０．２Ｍ，２ｍＬ）で３回、ＮＭＰ（２ｍＬ）で３回、ＭｅＯＨ（２ｍＬ）で３回、ＤＣＭ（２ｍＬ）で３回、ヘプタン（２ｍＬ）で３回繰り返して洗浄した後に減圧下で乾燥し、標題化合物Ｄ０５５－０２Ｒ（８２．４ｍｇ）を得た。実施例８－１６－５と同様の切り出し操作を行い、Ｄ０５５の生成を確認した。

【０８１０】

【化１７４】



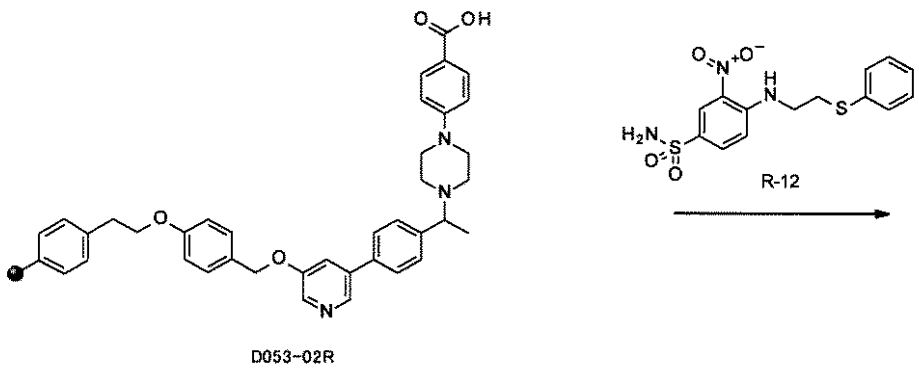
化合物Ｄ０５５

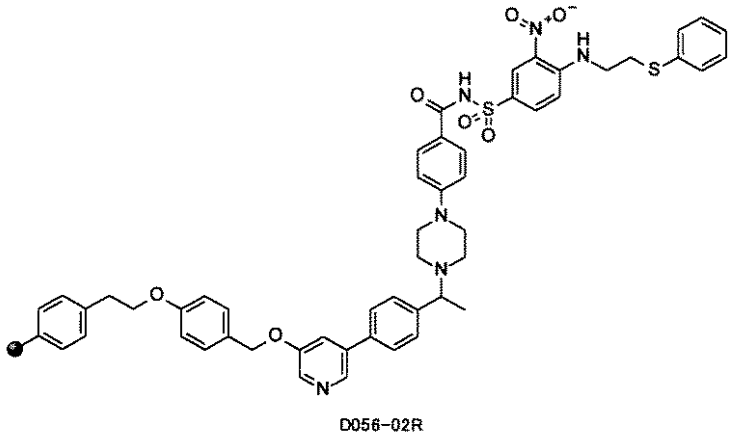
ＬＣＭＳ：ｍ／ｚ　７３８［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。
保持時間：０．９３２分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１，２９０ｎｍ）。

【０８１１】

実施例８－１６－１２：化合物Ｄ０５６－０２Ｒの合成

【化１７５】

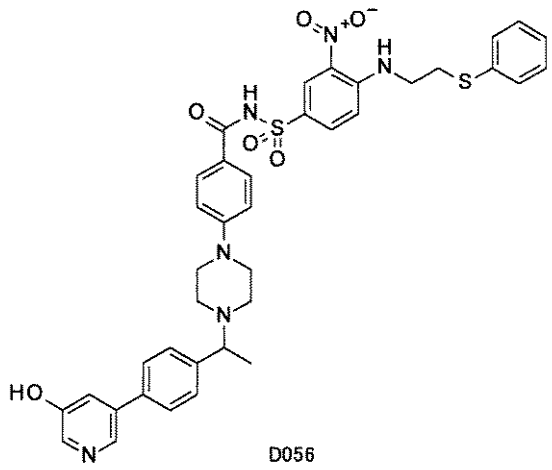




【０８１２】

固相担持カルボン酸（化合物Ｄ０５３－０２Ｒ，担持量：０．７３５ｍｍｏｌ／ｇ，６７．１ｍｇ）を用いて、実施例８－１６－１２（化合物Ｄ０５５－０２Ｒ）と同様の方法で合成し、標題化合物Ｄ０５６－０２Ｒ（７３．４ｍｇ）を得た。実施例８－１６－５と同様の切り出し操作を行い、Ｄ０５６の生成を確認した。

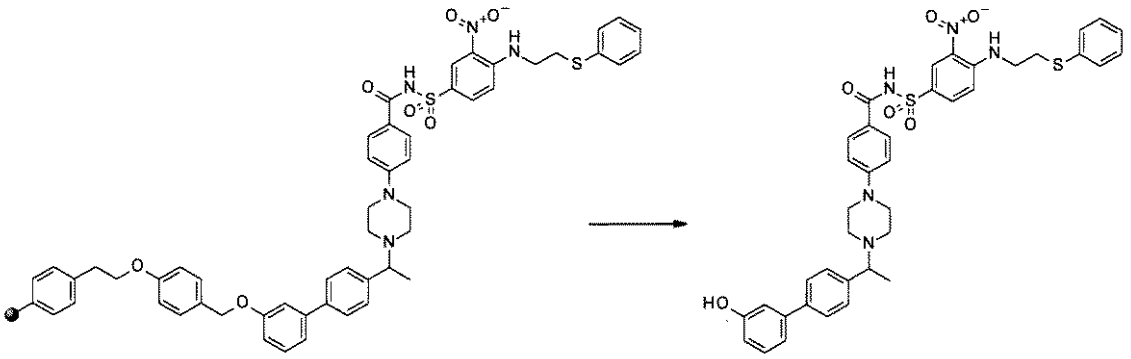
【０８１３】
【化１７６】



化合物Ｄ０５６

ＬＣＭＳ：ｍ／ｚ　７３９［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。
保持時間：１．８６６分（分析条件　ＳＭＤ－ＴＦＡ０５－ｌｏｎｇ，２９０ｎｍ）。

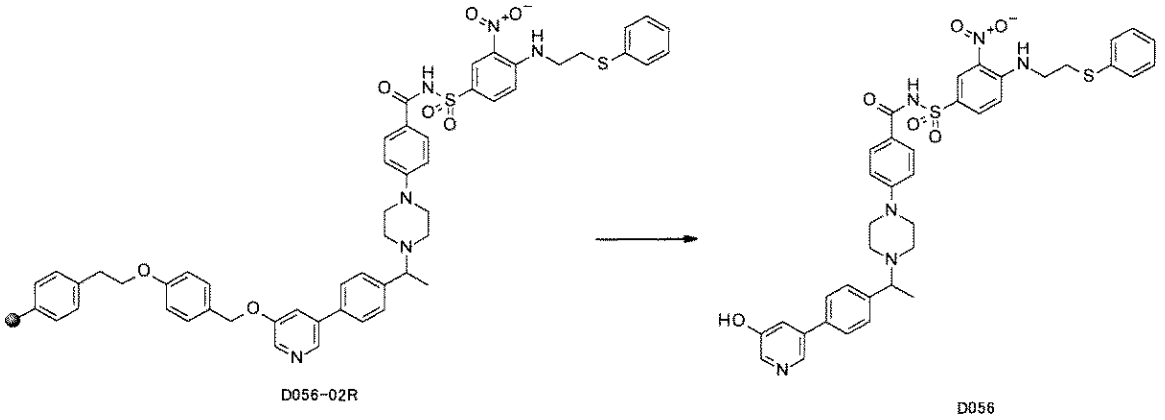
【０８１４】
実施例８－１６－１３：４－［４－［１－［４－（３－ヒドロキシフェニル）フェニル］エチル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－［３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニルベンズアミド（化合物Ｄ０５５）の合成
【化１７７】



【０８１５】
窒素雰囲気下、３ｍＬのガラスバイアルに化合物Ｄ０５５－０２Ｒ（８１．２ｍｇ，担持量０．５３２ｍｍｏｌ／ｇ，０．０４３２ｍｍｏｌ）と１，２，３－トリメチルベンゼン入りＤＣＭ（０．２３Ｍ，１．１４ｍＬ）を加え室温で１時間振とうした。ＴＦＡ（４８７μＬ，６．３２ｍｍｏｌ）と１－ブロモ－４－ヨードベンゼン（Ｄ０５７，１２．２ｍｇ，０．０４３ｍｍｏｌ，内部標準として添加）を加え、室温で３時間振とうした。得られた反応液とレジンの懸濁液をＤＣＭ（０．８ｍＬ）を使用してフィルター付きシリンジに移し、ろ過した。レジンをＤＣＭ（０．８ｍＬ）で洗浄し、得られたろ液にＤＭＳＯ（０．８ｍＬ）とH_2O（０．２ｍＬ）を加え、減圧下濃縮した。得られた残渣を逆相カラムクロマトグラフィー（Ｃ１８，０－１００％０．１％ＴＦＡアセトニトリル溶液／０．１％ＴＦＡ水溶液）で精製し、標題化合物Ｄ０５５（１５．１ｍｇ，０．０２０ｍｍｏｌ，４７．４％）を黄色固体として得た。
【０８１６】

実施例８－１６－１４：４－［４－［１－［４－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）フェニル］エチル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－［３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニルベンズアミド（化合物Ｄ０５６）の合成

【化１７８】



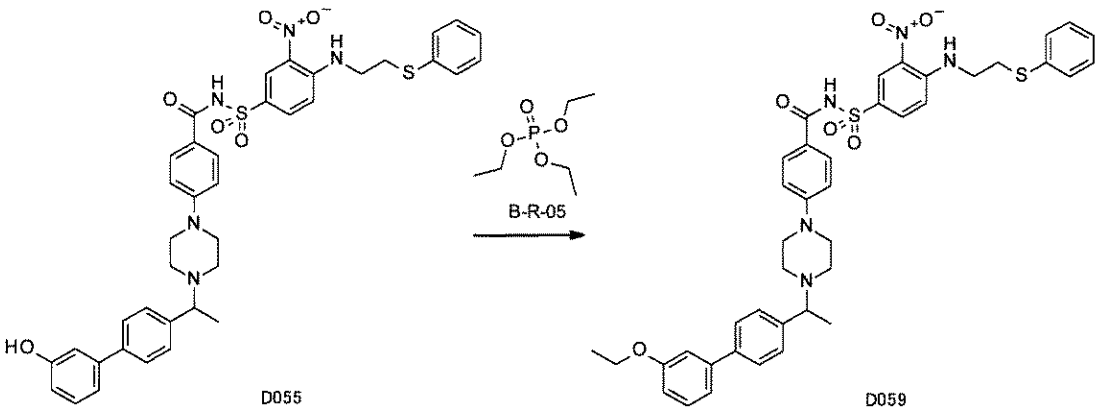
【０８１７】

窒素雰囲気下、３ｍＬのガラスバイアルに化合物Ｄ０５６－０２Ｒ（８５．９ｍｇ，担持量０．７３５ｍｍｏｌ／ｇ，０．０６３１ｍｍｏｌ）と１，２，３－トリメチルベンゼン入りＤＣＭ（０．２３Ｍ，１．２０ｍＬ）を加え室温で１時間振とうした。ＴＦＡ（５１５μＬ，６．６９ｍｍｏｌ）と１－フルオロ－４－（４－フルオロフェニル）ベンゼン（Ｄ０５８，１２．０ｍｇ，０．０６３ｍｍｏｌ，内部標準として添加）を加え、室温で３時間振とうした。得られた反応液とレジンの懸濁液をＤＣＭ（０．８ｍＬ）を使用してフィルター付きシリンジに移し、ろ過した。レジンをＤＣＭ（０．８ｍＬ）で洗浄した。ろ液にＤＭＳＯ（０．８ｍＬ）と水（０．２ｍＬ）を加え、減圧下濃縮した。得られた残渣を逆相カラムクロマトグラフィー（Ｃ１８，０－１００％０．１％ＴＦＡアセトニトリル溶液／０．１％ＴＦＡ水溶液）で精製し、標題化合物Ｄ０５６（１３．４ｍｇ，０．０１８１ｍｍｏｌ，２８．７％）を黄色固体として得た。

【０８１８】

実施例８－１６－１５：４－［４－［１－［４－（３－エトキシフェニル）フェニル］エチル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－［３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニルベンズアミド［Ｄ０５９（Ｂ２Ｑ０９７－０１）］の合成

【化１７９】



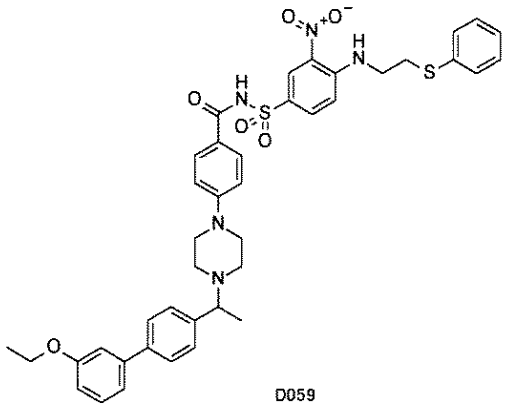
【０８１９】

窒素雰囲気下、１ｍＬのスクリューキャップバイアルに４－［４－［１－［４－（３－

ヒドロキシフェニル）フェニル］エチル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－［３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニルベンズアミド（Ｄ０５５，１５．１ｍｇ，０．０２０ｍｍｏｌ）とＤＭＩ（０．２９ｍＬ）を加えた。その溶液にＢＴＰＰ（９４．０μＬ，０．３０７ｍｍｏｌ）とリン酸トリエチル（Ｂ－Ｒ－０５，５２．３μＬ，３０７ｍｍｏｌ）を加え、８０℃で３０時間攪拌した。得られた残渣にギ酸（１７．８μＬ，０．４０９ｍｍｏｌ）を加え、逆相カラムクロマトグラフィー（Ｃ１８，０－８０％０．１％ギ酸アセトニトリル溶液／０．１％ギ酸水溶液）で精製し、標題化合物Ｄ０５９（２．０ｍｇ，２．６μｍｏｌ，１３％）を黄色固体として得た。

【０８２０】

【化１８０】



化合物Ｄ０５９

【０８２１】

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（４００ＭＨｚ，CD_2Cl_2）δ８．８１（ｄ，Ｊ＝２．０Ｈｚ，１Ｈ），８．６３（ｔ，Ｊ＝５．２Ｈｚ，１Ｈ），８．０６（ｄｄ，Ｊ＝９．２，２．０Ｈｚ，１Ｈ），７．６４（ｄ，Ｊ＝８．８Ｈｚ，２Ｈ），７．５６（ｄ，Ｊ＝８．０Ｈｚ，２Ｈ），７．４１－７．３９（ｍ，４Ｈ），７．３５－７．２２（ｍ，４Ｈ），７．１６（ｄ，Ｊ＝７．６Ｈｚ，１Ｈ），７．１１（ｔ，Ｊ＝２．０Ｈｚ，１Ｈ），６．８８－６．８１（ｍ，４Ｈ），４．０８（ｑ，Ｊ＝７．２Ｈｚ，２Ｈ），３．５９（ｑ，Ｊ＝６．４Ｈｚ，２Ｈ），３．５０－３．４５（ｍ，１Ｈ），３．３２－３．３１（ｍ，２Ｈ），３．２３（ｔ，Ｊ＝６．４Ｈｚ，２Ｈ），３．０９－３．０４（ｍ，２Ｈ），２．６８－２．６４（ｍ，２Ｈ），２．５８－２．５２（ｍ，２Ｈ），１．４４－１．４０（ｍ，６Ｈ）。

ＬＣＭＳ：ｍ／ｚ　７６６［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。

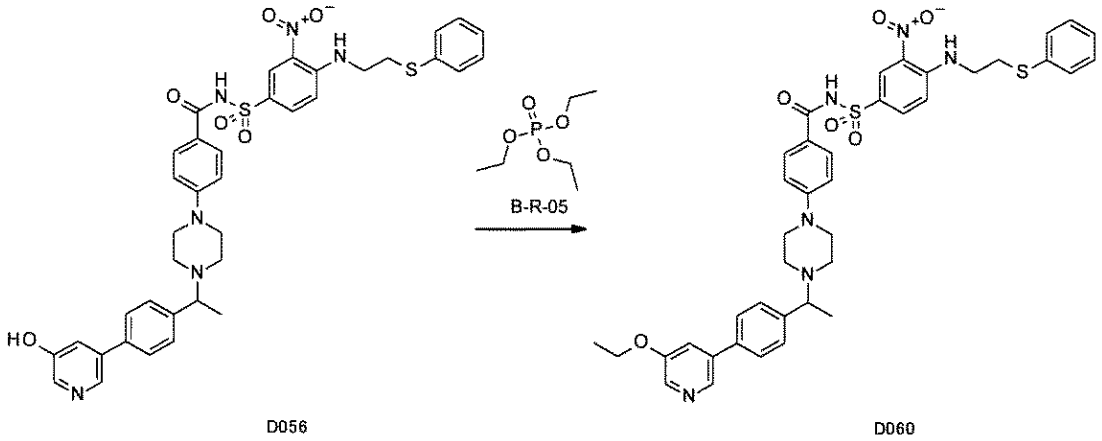
保持時間：１．０４４分（分析条件　ＳＭＤ－ＦＡ０５－１，２９０ｎｍ）。

実施例８－１６－１５で合成法を例示したＤ０５９は、本明細書内において、化合物Ｂ２Ｑ０９７－０１と表記することもある。

【０８２２】

実施例８－１６－１６：４－［４－［１－［４－（５－エトキシピリジン－３－イル）フェニル］エチル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－［３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニルベンズアミド［Ｄ０６０（Ｂ２Ｑ０９８－０１）］の合成

【化１８１】

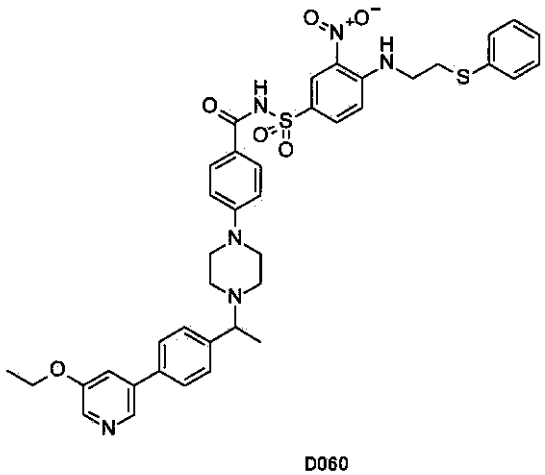


【０８２３】

窒素雰囲気下、１ｍＬのスクリューキャップバイアルに４－［４－［１－［４－（５－ヒドロキシピリジン－３－イル）フェニル］エチル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－［３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニルベンズアミド（Ｄ０５６，１３．４ｍｇ，０．０１８ｍｍｏｌ）とＤＭＩ（０．２６ｍＬ）を加えた。その溶液にＢＴＰＰ（８３．０μＬ，０．２７２ｍｍｏｌ）とリン酸トリエチル（Ｂ－Ｒ－０５，４６．４μＬ，２７２ｍｍｏｌ）を加え、８０℃で２２時間撹拌した。得られた残渣に炭酸水素アンモニウム（２８．７ｍｇ，０．３６３ｍｍｏｌ）を加え、逆相カラムクロマトグラフィー（Ｃ１８，０－６０％アセトニトリル／１０ｍＭ炭酸水素アンモニウム水溶液）で精製し、標題化合物Ｄ０６０（６．０ｍｇ，７．８μｍｏｌ，４３％）を黄色固体として得た。

【０８２４】

【化１８２】



化合物Ｄ０６０

【０８２５】

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（４００ＭＨｚ，CD_2Cl_2）δ８．６９（ｄ，Ｊ＝２．０Ｈｚ，１Ｈ），８．４２（ｄ，Ｊ＝１．６Ｈｚ，１Ｈ），８．３６（ｔ，Ｊ＝５．６Ｈｚ，１Ｈ），８．２３（ｄ，Ｊ＝２．８Ｈｚ，１Ｈ），８．０３（ｄｄ，Ｊ＝８．８，２．０Ｈｚ，１Ｈ），７．８９（ｄ，Ｊ＝８．８Ｈｚ，２Ｈ），７．５６（ｄ，Ｊ＝８．４Ｈｚ，２Ｈ），７．４７－７．３７（ｍ，５Ｈ），７．３３－７．２１（ｍ，３Ｈ），６．７６（ｄ，Ｊ＝９．２Ｈｚ，２Ｈ），６．７６（ｄ，Ｊ＝９．２Ｈｚ，１Ｈ），４．１５（ｑ，Ｊ＝７．

２Ｈｚ，２Ｈ），３．５３（ｑ，Ｊ＝６．８Ｈｚ，２Ｈ），３．４５（ｑ，Ｊ＝６．８Ｈｚ，１Ｈ），３．２６－３．１８（ｍ，２Ｈ），３．１３－３．０９（ｍ，２Ｈ），２．６８－２．６３（ｍ，２Ｈ），２．５６－２．５１（ｍ，２Ｈ），１．８１－１．７８（ｍ，２Ｈ），１．４５（ｔ，Ｊ＝６．８Ｈｚ，３Ｈ），１．４０（ｄ，Ｊ＝６．８Ｈｚ，３Ｈ）。

ＬＣＭＳ：ｍ／ｚ　７６７［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。

保持時間：２．０２０分（分析条件　ＳＭＤ－ＴＦＡ０５－ｌｏｎｇ，２９０ｎｍ）。

実施例８－１６－１６で合成法を例示したＤ０６０は、本明細書内において、化合物Ｂ２Ｑ０９８－０１と表記することもある。

【０８２６】

実施例９：表面プラズモン共鳴（ＳＰＲ）によるＢｃｌ－２に対する化合物の結合評価

［表ＡＫ－０１］に示す実施例８にて合成した化合物のＢｃｌ－２に対する化合物の結合親和性を解析するため、表面プラズモン共鳴法を用いた。装置としてＢｉａｃｏｒｅ Ｔ２００（ＧＥ　Ｈｅａｌｔｈｃａｒｅ）用い、ランニングバッファーには１ｍＭ　ＤＴＴ，３ｍＭ　ＥＤＴＡ、０．０１％Ｔｗｅｅｎ２０及び４％ＤＭＳＯが添加されたＨＢＳ（１０ｍＭ　ＨＥＰＥＳ－ＮａＯＨ，１５０ｍＭ　ＮａＣｌ，ｐＨ７．４）を用いた。ヒトＢｃｌ－２タンパク質（Ｎｏｖｕｓ　Ｂｉｏｌｏｇｉｃａｌｓ）を、ＥＺ－Ｌｉｎｋ　Ｓｕｌｆｏ－ＮＨＳ－ＬＣ－ＬＣ－ビオチン（Ｔｈｅｒｍｏｆｉｓｈｅｒ　ｓｃｉｅｎｔｉｆｉｃ）を用いてビオチン化し、Ｓｅｎｓｏｒ　Ｃｈｉｐ　ＳＡ（ＧＥ　Ｈｅａｌｔｈｃａｒｅ）の表面に固定化した。その後、複数の濃度の化合物溶液およびランニングバッファー（ブランク）を、Ｂｃｌ－２固定化表面に添加し、化合物の結合レスポンスを得た。測定は１５℃で行った。

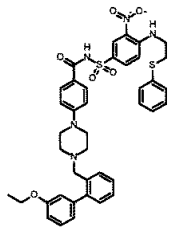
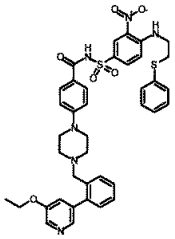
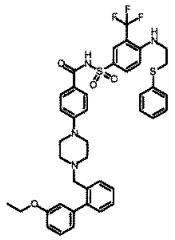
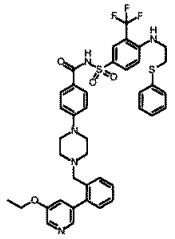
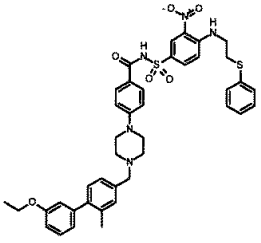
得られたセンサーグラムはＢｉａｃｏｒｅ　Ｔ２００　Ｅｖａｌｕｔｉｏｎ　Ｓｏｆｔｗａｒｅにて処理し、各化合物のＢｃｌ－２に対する平衡解離定数$Ｋ_{Ｄ}$を以下の［表ＡＫ－０２］、［表ＡＫ－０３］に示したように決定した。

【０８２７】

［表ＡＫ－０１］：本実施例にて用いた化合物の化合物の構造式

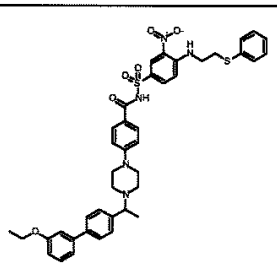
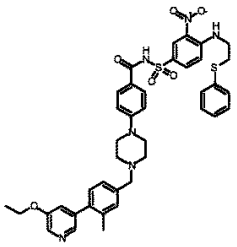
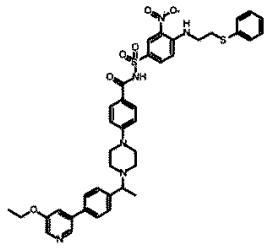
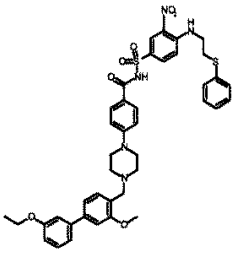
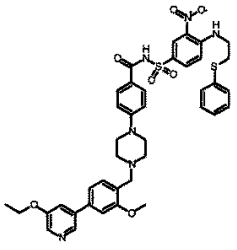
【表１４２】

表AK－01

実施例9中の化合物番号	実施例8における化合物番号	Structure
B2Q045－01	AG005	
B2Q046－01	AG007	
B2R045－01	AG012	
B2R046－01	AG013	
B2Q047－01	AG016	

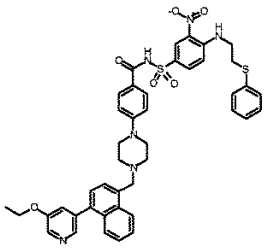
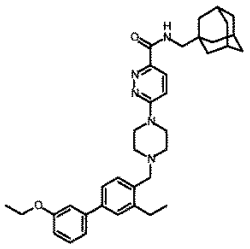
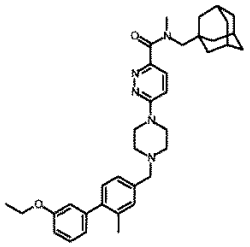
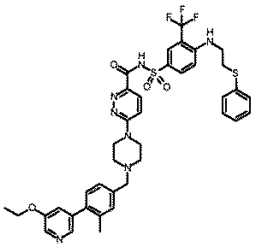
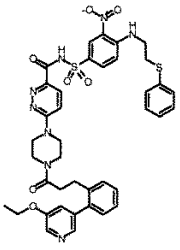
【０８２８】

【表１４３】

実施例9中の化合物番号	実施例8における化合物番号	Structure
B2Q097−01	D059	
B2Q048−01	AG018	
B2Q098−01	D060	
B2Q053−01	AG045	
B2Q054−01	AG022	

【０８２９】

【表１４４】

実施例9中の化合物番号	実施例8における化合物番号	Structure
B2Q066－01	AG025	
B1A075－01	AG038	
B3A073－01	AG042	
B2R074－01	AG052	
B2Q012－01	AG051	

【０８３０】

［表ＡＫ－０２］：ライブラリ合成実施前に合成した化合物の平衡解離定数K_D

【表１４５】

化合物	K_D [μmol／L]
B2Q045－01	1．2
B2Q046－01	8．1
B2R045－01	Bound
B2R046－01	Bound

【０８３１】

［表ＡＫ－０３］：合成ライブラリのＡＳ－ＭＳ評価により見出した化合物の平衡解離定数K_D

【表１４６】

化合物	組成式	K_D [μmol／L]
B2Q047－01	$C_{41}H_{43}N_5O_6S_2$	0．70
B2Q097－01	$C_{41}H_{43}N_5O_6S_2$	Binding not observed
B2Q048－01	$C_{40}H_{42}N_6O_6S_2$	0．48
B2Q098－01	$C_{40}H_{42}N_6O_6S_2$	Binding not observed
B2Q053－01	$C_{41}H_{43}N_5O7S2$	Binding not observed
B2Q054－01	$C_{40}H_{42}N_6O_7S_2$	1．27
B2Q066－01	$C_{43}H_{42}N_6O_6S_2$	0．95
B1A075－01	$C_{37}H_{47}N_5O_2$	Binding not observed
B3A073－01	$C_{37}H_{47}N_5O_2$	Binding not observed
B2R074－01	$C_{39}H_{40}F_3N_7O_4S_2$	Binding not observed
B2Q012－01	$C_{39}H_{40}N_8O_7S_2$	Bound

【０８３２】

［表ＡＫ－０２］ならびに［表ＡＫ－０３］に示すように、事前にＢｃｌ－２に対する結合能を評価した化合物Ｂ２Ｑ０４５－０１よりも平衡解離定数K_Dが小さく、Ｂｃｌ－２に対する結合の高い化合物（Ｂ２Ｑ０４７－０１、Ｂ２Ｑ０４８－０１）を見出した。

実施例６－５－１、６－５－２にて本発明の手法を用いてアレノールがエチル化された混合物ライブラリから、実施例７にてＡＳ－ＭＳでＢｃｌ－２に対する結合能を有する化合物を見出せたことは前述の通りである。その結果を踏まえて実施例８で個別合成した化合物から、ＳＰＲによってＢｃｌ－２に対する結合能が確認できた。換言すれば、実施例６での本発明によるエチル化によって、高官能基選択的に目的の化合物群を与えたことを意味する。すなわち、本発明は、複数の基質存在下、高官能基選択的に所望の酸性官能基

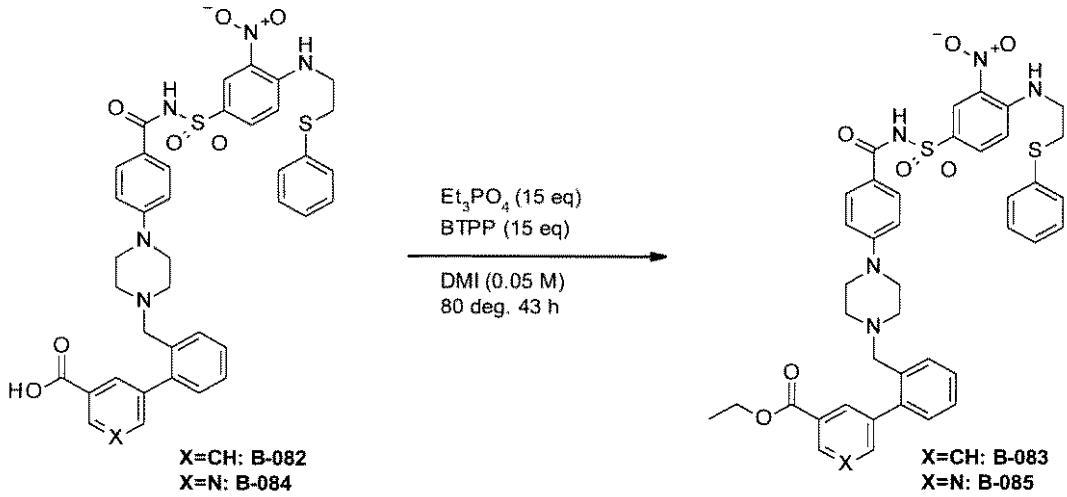
をアルキル化できる実用的な方法を提供可能であることが実証された。また、本発明を混合物ライブラリの調製に適用でき、その混合物ライブラリは医薬品のヒット探索に用いることができることが示された。

【０８３３】

実施例１０：分子中に複数の反応性官能基を有する基質に対するカルボン酸のＯ－選択的なエチル化検討

実施例１０－１：アニリンＮＨ基を有する基質として３－［２－［［４－［４－［［３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニルカルバモイル］フェニル］ピペラジン－１－イル］メチル］フェニル］安息香酸（Ｂ－０８２）と５－［２－［［４－［４－［［３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニルカルバモイル］フェニル］ピペラジン－１－イル］メチル］フェニル］ピリジン－３－カルボン酸（Ｂ－０８４）を用いたカルボン酸のＯ－選択的なエチル化

【化１８３】



【０８３４】

窒素置換されたグローブバッグ中、０．６ｍＬのスクリューキャップバイアルに、３－［２－［［４－［４－［［３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニルカルバモイル］フェニル］ピペラジン－１－イル］メチル］フェニル］安息香酸（Ｂ－０８２）（７．５ｍｇ，１０．０μｍｏｌ，１．０当量，表１０－１，Ｒｕｎ１）とＤＭＩ（１８８．０μＬ）を加えた。得られた溶液にＢＴＰＰ（４５．９μＬ，１５０．０μｍｏｌ，１５．０当量）を加え１５～２０秒混合させた後に、リン酸トリエチル（２５．６μＬ，１５０．０μｍｏｌ，１５．０当量）を加えた。得られた反応混合物を８００ｒｐｍの回転数で８０℃で４３時間撹拌させた。また、表１０－１、Ｒｕｎ２では５－［２－［［４－［４－［［３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニルカルバモイル］フェニル］ピペラジン－１－イル］メチル］フェニル］ピリジン－３－カルボン酸（Ｂ－０８４）（７．５ｍｇ，１０．０μｍｏｌ，１．０当量，表１０－１，Ｒｕｎ２）を用いてＲｕｎ１と同様に反応を実施し、反応進行度を測定した。

【０８３５】

反応追跡

途中、反応開始から１．５，２６，４３時間経過時に、グローブバッグ中にて反応液を５μＬサンプリングしてCH_3CN（１０００μＬ）で希釈し、ＬＣサンプルを調製した。ＬＣＭＳ測定を行うことで反応進行度を測定した。結果は表１０－１、Ｒｕｎ１～Ｒｕｎ２に示すとおりだった。

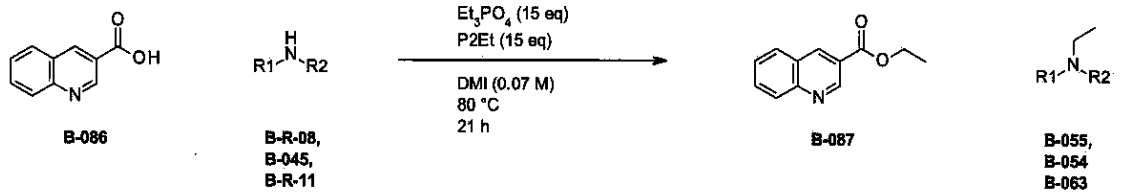
【０８３６】

エチル　３－［２－［［４－［４－［［３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニルカルバモイル］フェニル］ピペラジン－１－イル］メチル］フェニル］ベンゾアト：化合物Ｂ－０８３。
ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：７８０．２［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。
保持時間：１．０８５分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。
（原料ＡｒＣＯ$_{2}$Ｈの保持時間は、０．９４０分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。
【０８３７】
エチル　５－［２－［［４－［４－［［３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニルカルバモイル］フェニル］ピペラジン－１－イル］メチル］フェニル］ピリジン－３－カルボキシラート：化合物Ｂ－０８５。
ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：７８１．２［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。
保持時間：１．０４０分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。
（原料ＡｒＣＯ$_{2}$Ｈの保持時間は、０．９００分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。
【０８３８】
［表１０－１］
【表１４７】

Run	Substrate	X	Time (h)	SM (CO2H) (area%)	CO2Et (area%)	Byproducts (area%) (not identified)
1	B-082	CH	1.5	68.9	29.3	1.8
			26	ND	97.1	2.9
			43	ND	97.0	3.0
2	B-084	N	1.5	79.7	19.0	1.3
			26	1.1	97.1	1.8
			43	0.3	97.9	1.8

【０８３９】
以上、表１０－１に示したように、実施例３－６－３で設定した反応条件は、種々の官能基を有するカルボン酸に対し、Ｏ－選択的にエチル化を行うことができる事を確認した。具体的には、３級アミン、アシルスルホンアミド、アニリン、ピリジン環といった官能基共存下での、カルボン酸のＯ－選択的なエチル化条件を見いだした。なお、本発明の本手法は、本実施例に例示した官能基に限定されずに、広く適用可能な手法である。
【０８４０】
実施例１０－２：実施例３－６－３で設定した反応条件における、さらなる官能基選択性の確認
実施例１０－１において、実施例３－６－３で設定した反応条件は多くの官能基が共存する場合にも選択的にカルボン酸のＯ－エチル化が行えることが確認できた。本反応条件において、さらなる官能基選択性の確認を行った。確認の方法は、官能基を有する化合物をカルボン酸のモデル基質（キノリン－３－カルボン酸（Ｂ－０８６）（ｐＫａ^{a}＝１．１５）、または［１，１’－ビフェニル］－３－カルボン酸（Ｂ－０８８）（ｐＫａ^{a}＝４．１９）のエチル化反応に添加し、官能基を有する化合物のエチル化が進行するかを検討した。つまり、添加した官能基を有する化合物に対して、カルボン酸のモデル基質（Ｂ－０８６もしくはＢ－０８８）のカルボン酸が選択的にエチル化された場合に、官能基選択

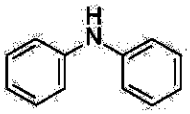
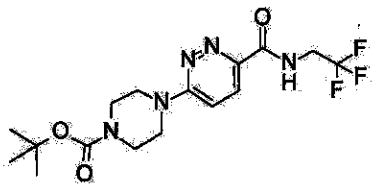
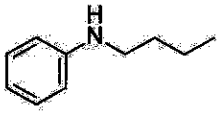
性が確認されたことになる。
[a]：ＡＤＭＥＴ　ｐｒｅｄｉｃｔｏｒ（ｖｅｒｓｉｏｎ９．５）（変更しうるパラメータはすべて初期値のまま使用）
【０８４１】
実施例１０－２－１：キノリン－３－カルボン酸（Ｂ－０８６）を基質とした各種ＮＨ基存在下でのエチル化反応確認
反応中に各種ＮＨ基が存在する場合における、ＮＨ基のＮ－エチル化の可能性を検討した。以下に、各種ＮＨ官能基の適用可能な範囲の特定方法を、一例として例示する。
【化１８４】



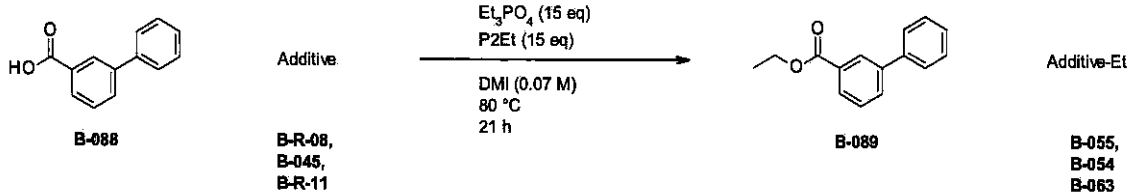
B-086　　B-R-08, B-045, B-R-11　　B-087　　B-055, B-054 B-063

【０８４２】
窒素置換されたグローブバッグ中、１．５ｍＬのスクリューキャップバイアルに、キノリン－３－カルボン酸（Ｂ－０８６）（６．１ｍｇ，３５．０μｍｏｌ，１．０当量）、ジフェニルアミン（Ｂ－Ｒ－０８）（５．９ｍｇ，３５．０μｍｏｌ，１．０当量）とＤＭＩ（０．５ｍＬ）を加えた。その溶液にＢＴＰＰ（１６１．０μＬ，５２５．０μｍｏｌ，１５．０当量）を加え混合を確認後、リン酸トリエチル（Ｂ－Ｒ－０５）（８９．０μＬ，５２５．０μｍｏｌ，１５．０当量）を加えた。得られた反応混合物を８００ｒｐｍの回転数で８０℃で撹拌させた。
【０８４３】
また、ジフェニルアミン（Ｂ－Ｒ－０８）の替わりに、ｔｅｒｔ－ブチル　４－［６－（２，２，２－トリフルオロエチルカルバモイル）ピリダジン－３－イル］ピペラジン－１－カルボキシラート（Ｂ－０４５）（６．８ｍｇ，１８．０μｍｏｌ，０．５当量，Ｒｕｎ２）、Ｎ－ブチルアニリン（Ｂ－Ｒ－１１）（１４．０μＬ，８８．０μｍｏｌ，２．５当量，Ｒｕｎ３）を用いて、同様に反応を実施した。
【０８４４】
反応追跡
反応開始から２１時間経過時に、グローブバッグ中にて反応液を５μＬサンプリングしてＣＨ$_3$ＣＮ（１０００μＬ）で希釈し、ＬＣサンプルを調製した。ＬＣＭＳ測定を行うことで反応進行度を測定した。結果は表１０－２－１に示すとおりだった。
エチル　キノリン－３－カルボキシラート：化合物Ｂ－０８７。
ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：２０２．１［Ｍ＋Ｈ］$^+$。
保持時間：０．９３９分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。
（原料ＡｒＣＯ$_2$Ｈの保持時間は、０．５２１分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。
【０８４５】
実施例１０－２－１の結果を表１０－２－１に示す。なお、表１０－２－１に示したｃｏｎｖｅｒｓｉｏｎ　ｒａｔｅ（％）（Ｂ－０８７／Ｂ－０８６）は、（Ｂ－０８７，ａｒｅａ％）／〔（Ｂ－０８６，ａｒｅａ％）＋（Ｂ－０８７，ａｒｅａ％）〕×１００として算出した。また、ｃｏｎｖｅｒｓｉｏｎ　ｒａｔｅ（％）（ａｄｄｉｔｉｖｅ）は、（ａｄｄｉｔｉｖｅのエチル化体，ａｒｅａ％）／〔（ａｄｄｉｔｉｖｅのエチル化体，ａｒｅａ％）＋（ａｄｄｉｔｉｖｅ，ａｒｅａ％）〕×１００として算出した。ａｄｄｉｔｉｖｅがエチル化された際の標品は実施例１－３に示した通り合成し、表１－３のＲｅｔｅｎｔｉｏｎ　ｔｉｍｅと検出ＭＳを参照しながら確認した。
【０８４６】

［表１０－２－１］
【表１４８】

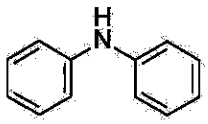
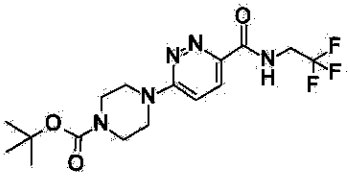
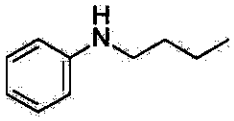
Run	Additive		Additive (equivalent)	Conversion rate (%) B-087 / B-086	Conversion rate (%) Additive
1	B-R-08		1.0	97.6	< 0.1
2	B-045		0.5	97.7	< 0.1
3	B-R-11		2.5	95.5	< 0.1

【０８４７】
表１０－２－１に示すように、キノリン－３－カルボン酸（Ｂ－０８６）は本条件でエチル化が進行したが、添加したジアリールアミン体（Ｂ－Ｒ－０８）、アミド体（Ｂ－０４５）、２級アニリン（Ｂ－Ｒ－１１）は０．１％以下の反応変換率であったことを確認した。この結果から、本発明の本手法は、本実施例に例示した存在下に限定されず、各種アミンＮＨ基が反応系中に存在した場合においてもカルボン酸がＯ－選択的にアルキル化を実施できることを示している。
【０８４８】
実施例１０－２－２：［１，１’－ビフェニル］－３－カルボン酸（Ｂ－０８８）を基質とした各種ＮＨ基存在下でのエチル化反応確認
ｐＫａ^{a}＝４．１９であるカルボン酸［１，１’－ビフェニル］－３－カルボン酸（Ｂ－０８８））を基質として使用し、反応中に各種ＮＨ基が存在する場合における、ＮＨ基のＮ－エチル化の可能性を検討した。以下に、［１，１’－ビフェニル］－３－カルボン酸を基質とした各種ＮＨ官能基の適用可能な範囲の特定方法を、一例として例示する。
【化１８５】



【０８４９】
窒素置換されたグローブバッグ中、１．５ｍＬのスクリューキャップバイアルに、［１，１’－ビフェニル］－３－カルボン酸（Ｂ－０８８）（６．９ｍｇ，３５．０μｍｏｌ，１．０当量）、ジフェニルアミン（Ｂ－Ｒ－０８）（５．９ｍｇ，３５．０μｍｏｌ，１．０当量）とＤＭＩ（０．５ｍＬ）を加えた。その溶液にＢＴＰＰ（１６１．０μＬ，５２５．０μｍｏｌ，１５．０当量）を加え混合を確認後、リン酸トリエチル（Ｂ－Ｒ－０５）（８９．０μＬ，５２５．０μｍｏｌ，１５．０当量）を加えた。得られた反応混合物を８００ｒｐｍの回転数で８０℃で撹拌させた。

【０８５０】
また、ジフェニルアミン（Ｂ－Ｒ－０８）の替わりに、ｔｅｒｔ－ブチル　４－［６－（２，２，２－トリフルオロエチルカルバモイル）ピリダジン－３－イル］ピペラジン－１－カルボキシラート（Ｂ－０４５）（６．８ｍｇ，１８．０μｍｏｌ，０．５当量，Ｒｕｎ２）、Ｎ－ブチルアニリン（Ｂ－Ｒ－１１）（１４．０μＬ，８８．０μｍｏｌ，２．５当量，Ｒｕｎ３）を用いて、同様に反応を実施した。
【０８５１】
反応追跡
反応開始から２１時間経過時に、グローブバッグ中にて反応液を５μＬサンプリングしてＣＨ$_3$ＣＮ（１０００μＬ）で希釈し、ＬＣサンプルを調製した。ＬＣＭＳ測定を行うことで反応進行度を測定した。結果は表１０－２－１に示すとおりだった。
エチル　３－フェニルベンゾアト：化合物Ｂ－０８９。
保持時間：１．３５６分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。
（原料ＡｒＣＯ$_2$Ｈの保持時間は、１．０１６分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。
【０８５２】
実施例１０－２－２の結果を表１０－２－２に示す。なお、表１０－２－２に示したｃｏｎｖｅｒｓｉｏｎ　ｒａｔｅ（％）（Ｂ－０８９／Ｂ－０８８）は、（Ｂ－０８９，ａｒｅａ％）／〔（Ｂ－０８９，ａｒｅａ％）＋（Ｂ－００８８，ａｒｅａ％）〕×１００として算出した。また、ｃｏｎｖｅｒｓｉｏｎ　ｒａｔｅ（％）（ａｄｄｉｔｉｖｅ）は、（ａｄｄｉｔｉｖｅのエチル化体，ａｒｅａ％）／〔（ａｄｄｉｔｉｖｅのエチル化体，ａｒｅａ％）＋（ａｄｄｉｔｉｖｅ，ａｒｅａ％）〕×１００として算出した。ａｄｄｉｔｉｖｅがエチル化された際の標品は実施例１－３に示した通り合成し、表１－３のＲｅｔｅｎｔｉｏｎ　ｔｉｍｅと検出ＭＳを参照しながら確認した。
【０８５３】
［表１０－２－２］
【表１４９】

Run	Additive		Additive (equivalent)	Conversion rate (%) B-089 / B-088	Conversion rate (%) Additive
1	B-R-08		1.0	98.4	< 0.1
2	B-045		0.5	98.7	< 0.1
3	B-R-11		2.5	95.3	< 0.1

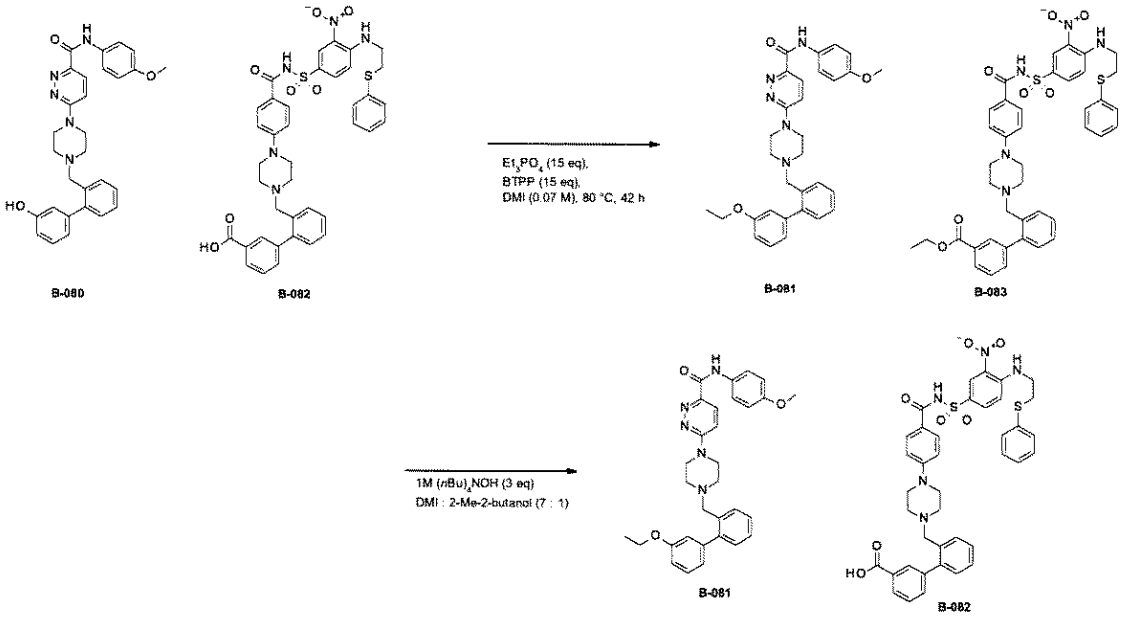
【０８５４】
表１０－２－２に示すように、［１，１′－ビフェニル］－３－カルボン酸（Ｂ－０８８）は本条件でエチル化が進行したが、添加したジアリールアミン体（Ｂ－Ｒ－０８）、アミド体（Ｂ－０４５）、２級アニリン（Ｂ－Ｒ－１１）は０．１％以下の反応変換率であったことを確認した。この結果から、本発明の本手法は、本実施例に例示した存在下に

限定されず、各種アミンＮＨ基が反応系中に存在した場合においてもカルボン酸がＯ－選択的にアルキル化を実施できることを示している。実施例３－８で確認したアレノールのＯ－エチル化反応における官能基選択性の結果と同様に、各種ＮＨ官能基（ジアリールアミン、アミド、２級アニリン、１級アニリン、３級アミン）は本条件においてもアルキル化の進行が５％以下であることから、本実施例にて例示したアミン官能基に限定されず、アミン官能基が存在していてもカルボン酸を選択的にアルキル化できる事を確認した。

【０８５５】

実施例１０－３：種々の官能基を有するアレノールとカルボン酸が存在する系において、アレノールとカルボン酸のどちらにもアルキル化を実施し、カルボン酸のアルキル化体のみを加水分解することによってカルボン酸を再生する合成法（カルボン酸の保護としてのアルキル化／脱保護としての加水分解）

【化１８６】



【０８５６】

第一工程：アルキル化

窒素置換されたグローブバッグ中、０．６ｍＬのスクリューキャップバイアルに、６－［４－［［２－（３－ヒドロキシフェニル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－（４－メトキシフェニル）ピリダジン－３－カルボキサミド（Ｂ－０８０）（３．５ｍｇ，７．０μｍｏｌ，１．０当量）、３－［２－［［４－［４－［［３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニルカルバモイル］フェニル］ピペラジン－１－イル］メチル］フェニル］安息香酸（Ｂ－０８２）（５．３ｍｇ，７．０μｍｏｌ，１．０当量）とＤＭＩ（１００．０μＬ）を加えた。得られた溶液にＢＴＰＰ（３２．１μＬ，１０５．０μｍｏｌ，１５．０当量）を加え１５～２０秒混合させた後に、リン酸トリエチル（１７．９μＬ，１０５．０μｍｏｌ，１５．０当量）を加えた。得られた反応混合物を８００ｒｐｍの回転数で８０℃で４２時間撹拌させた。

【０８５７】

反応追跡

途中、反応開始から２１，４２時間経過時に、グローブバッグ中にて反応液を５μＬサンプリングしてCH_3CN（１０００μＬ）で希釈し、ＬＣサンプルを調製した。ＬＣＭＳ測定を行うことで反応進行度を測定した。結果は表１０－３－１、Ｒｕｎ１に示すとおりだった。

６－［４－［［２－（３－エトキシフェニル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－（４－メトキシフェニル）ピリダジン－３－カルボキサミド：化合物Ｂ－０８

１。
ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：５２４．３［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。
保持時間：０．９０１分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。
（原料ＡｒＯＨの保持時間は、０．７５１分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。
【０８５８】
エチル　３－［２－［［４－［４－［［３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニルカルバモイル］フェニル］ピペラジン－１－イル］メチル］フェニル］ベンゾアト：化合物Ｂ－０８３。
ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：７８０．２［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。
保持時間：１．０９５分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。
（原料ＡｒCO_2Ｈの保持時間は、０．９５７分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。
【０８５９】
第二工程：加水分解
窒素置換されたグローブバッグ中、第一工程のアルキル化で得られた０．６ｍＬのスクリューキャップバイアルの反応混合液にテトラブチルアンモニウムヒドロキシド（０．１Ｍ，２１．０μＬ，２１．０μｍｏｌ，３．０当量）と２－メチル２－ブタノール（２８．５μＬ）を加えた。得られた反応混合物を２５℃で１９時間撹拌させた。
【０８６０】
反応追跡
途中、反応開始から１９時間経過時に、グローブバッグ中にて反応液を５μＬサンプリングしてCH_3CN（１０００μＬ）で希釈し、ＬＣサンプルを調製した。ＬＣＭＳ測定を行うことで反応進行度を測定した。結果は表１０－３－１、Ｒｕｎ２に示すとおりだった。
６－［４－［［２－（３－エトキシフェニル）フェニル］メチル］ピペラジン－１－イル］－Ｎ－（４－メトキシフェニル）ピリダジン－３－カルボキサミド：化合物Ｂ－０８１。
ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：５２４．３［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。
保持時間：０．９０１分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。
【０８６１】
３－［２－［［４－［４－［［３－ニトロ－４－（２－フェニルスルファニルエチルアミノ）フェニル］スルホニルカルバモイル］フェニル］ピペラジン－１－イル］メチル］フェニル］安息香酸（Ｂ－０８２）。
ＬＣＭＳ（ＥＳＩ，ｍ／ｚ）：７５２．１［Ｍ＋Ｈ］$^{+}$。
保持時間：０．９５２分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。
（原料ＡｒCO_2Ｅｔの保持時間は、１．０９５分（分析条件ＳＭＤ－ＦＡ０５－１）。
【０８６２】
［表１０－３］
【表１５０】

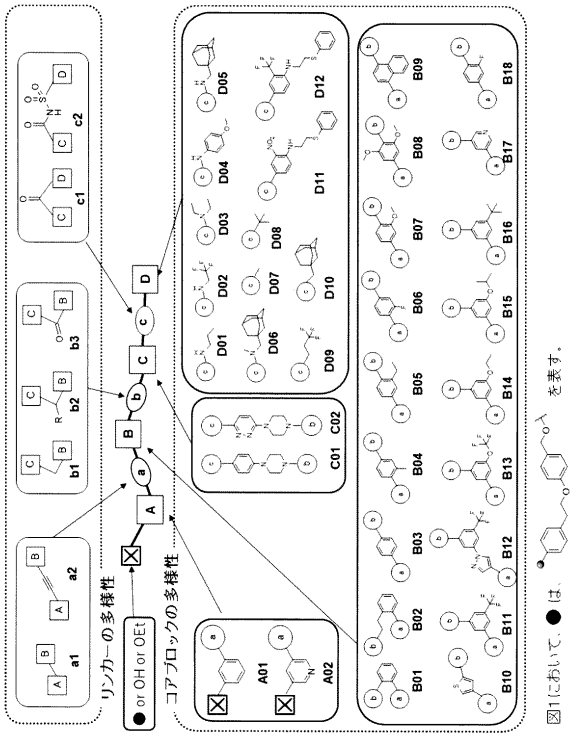
Run	Time (h)	ArOH (B-080) (area%)	ArOEt (B081) (area%)	ArCO2H (B-082) (area%)	ArCO2Et (B-083) (area%)	Byproducts (area%) (not identified)
1	0	38.3		59.7		2.0
	21	2.5	41.1	0.7	52.1	3.6
	42	ND	46.6	0.3	50.1	3.0
2	19	0.3	43.8	53.3	ND	2.6

【０８６３】

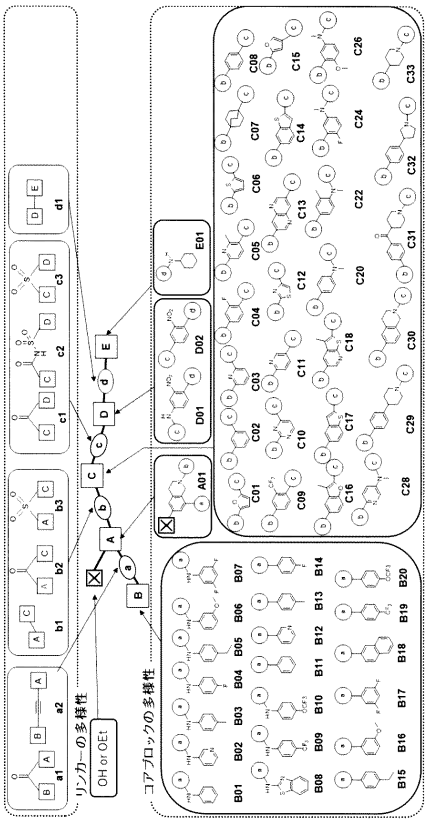
以上、表１０－３に示したように、実施例３－６－３、１０－１で設定した反応条件は、種々の官能基を有するアレノールとカルボン酸の混合物に対し、アレノールのＯ－選択的、並びにカルボン酸Ｏ－選択的にエチル化を行うことができる事を確認した。具体的には、３級アミン、アシルスルホンアミド、アニリン、ピリジン環といった官能基共存下での、アレノールとカルボン酸のＯ－選択的なエチル化条件を見いだした。また、カルボン酸のアルキル化体はアレノールのＯ－アルキル体や、他の官能基共存下での選択的な加水分解によりカルボン酸に変換可能であることも見出した。このことは本手法がカルボン酸の保護基として利用可能であることを示している。なお、本発明の手法は、本実施例に例示した構造に限定されずに、広く適用可能な手法である。

【図面】

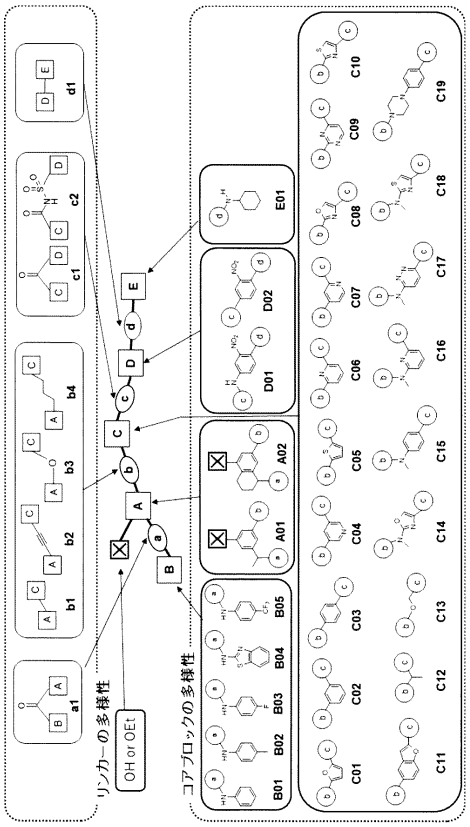
【図１】



【図２】



【図３】



フロントページの続き

(51)国際特許分類			FI		
C07C	*41/38*	*(2006.01)*	C07C	41/38	
C07C	*67/11*	*(2006.01)*	C07C	67/11	
C07C	*69/76*	*(2006.01)*	C07C	69/76	A
C07D	*213/65*	*(2006.01)*	C07D	213/65	
C07D	*213/74*	*(2006.01)*	C07D	213/74	
C07D	*213/82*	*(2006.01)*	C07D	213/82	
C07D	*237/24*	*(2006.01)*	C07D	237/24	
C07D	*239/42*	*(2006.01)*	C07D	239/42	
C07D	*295/155*	*(2006.01)*	C07D	295/155	
C07D	*295/192*	*(2006.01)*	C07D	295/192	
C07D	*295/205*	*(2006.01)*	C07D	295/205	
C07D	*401/12*	*(2006.01)*	C07D	401/12	
C07D	*401/14*	*(2006.01)*	C07D	401/14	
C07D	*213/80*	*(2006.01)*	C07D	213/80	
C07D	*215/54*	*(2006.01)*	C07D	215/54	
C07D	*333/40*	*(2006.01)*	C07D	333/40	
C07D	*409/14*	*(2006.01)*	C07D	409/14	
C07D	*239/32*	*(2006.01)*	C07D	239/32	

静岡県御殿場市駒門１丁目１３５番地 中外製薬株式会社内
(72)発明者 野村 研一
静岡県御殿場市駒門１丁目１３５番地 中外製薬株式会社内
(72)発明者 江村 岳
静岡県御殿場市駒門１丁目１３５番地 中外製薬株式会社内
審査官 奥谷 暢子
(56)参考文献
国際公開第０６／００３９０２（WO，Ａ１）
特表２００５－５３６４９２（ＪＰ，Ａ）
特開２００２－３０８８１２（ＪＰ，Ａ）
HONG,X. et al，Monofluoromethyl-Substituted Sulfonium Ylides: Preparation, Structure-Reactivity Study and Substrate，Chinese Journal of Chemistry，2020年，Vol.38, No.11，p.1317-1331
REGUEIRO-REN,A. et al，Novel semi-synthetic nocathiacin antibiotics: synthesis and antibacterial activity of bis- and mono-，Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters，2004年，Vol.14, No.1，p.171-175
REKHA,V.V. et al，A Simple, Efficient, Green, Cost Effective and Chemoselective Process for the Esterification of Carb，Organic Process Research & Development，2009年，Vol.13, No.4，p.769-773
KIM IN-HAE et al，Journal of Medicinal Chemistry，2011年，54，1752-1761
KONDO Y et al，有機超強塩基を用いる有機合成反応，有機合成化学協会誌，2005年，Vol.63, No.5，453-463
(58)調査した分野 (Int.Cl.，ＤＢ名)
Ｃ０７Ｃ
Ｃ０７Ｄ
ＪＳＴＰｌｕｓ／ＪＭＥＤＰｌｕｓ／ＪＳＴ７５８０（ＪＤｒｅａｍＩＩＩ）
ＣＡｐｌｕｓ／ＲＥＧＩＳＴＲＹ（ＳＴＮ）