

(19) 대한민국특허청(KR)  
(12) 등록특허공보(B1)

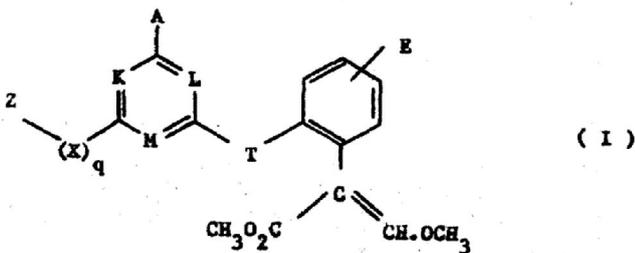
(51) Int. Cl. <sup>6</sup> C07D 239/56	(45) 공고일자 1999년06월 15일
	(11) 등록번호 10-0200936
	(24) 등록일자 1999년03월 11일
(21) 출원번호 10-1991-0012964	(65) 공개번호 특 1992-0002560
(22) 출원일자 1991년07월 27일	(43) 공개일자 1992년02월 28일
(30) 우선권주장 9016583.8 1990년07월 27일 영국(GB) 9020748.1 1990년09월 24일 영국(GB)	
(73) 특허권자 임페리알 케미칼 인더스트리즈 피엘씨	앤츨 슈레이크 바쉬어; 마틴 험프리스
(72) 발명자 영국 런던 에스퍼블유 1피 3제이에프 밀뱅크 임페리알 케미칼 하우스 존 마틴 클러프 영국 버크셔 알쥐12 6 이와이 블랙넬 젤롯'스 힐리서치 스테이션 크리스토퍼 리차드 에이레스 갓프레이 영국 버크셔 알쥐12 6 이와이 블랙넬 젤롯'스 힐 리서치 스테이션 아이언 토마스 스트리팅 영국 버크셔 알쥐12 6 이와이 블랙넬 젤롯'스 힐리서치 스테이션 렉스 치탐 영국 버크셔 알쥐12 6 이와이 블랙넬 젤롯'스 힐 리서치 스테이션 폴 존드 프레인 영국 버크셔 알쥐12 6 이와이 블랙넬 젤롯'스 힐 리서치 스테이션 데이비드 미솔로유 영국 버크셔 알쥐12 6 이와이 블랙넬 젤롯'스 힐 리서치 스테이션 제임스 존 에셀바이 영국 버크셔 알쥐12 6 이와이 블랙넬 젤롯'스 힐 리서치 스테이션 목돈상, 목영동, 목선영	
(74) 대리인	

심사관 : 뒤-이병현

(54) 살균제

요약

본 발명은 다음 구조식 (I)을 갖는 살균 화합물에 관한 것이다.



식중, T는 O 또는 S :

K, L 및 M의 어떤 두개는 질소이고 그 나머지 것은 CB ;

Z는 임의로 치환된 아릴 또는 헤테로아릴 :

X는 특정 결합 그룹 :

q는 0 또는 1 :

A, B 및 E는 독립적으로 H, 하이드록시, 할로, C<sub>1-4</sub>알킬, C<sub>1-4</sub>알콕시, C<sub>1-4</sub>할로알킬, C<sub>1-4</sub>할로알콕시, C<sub>1-4</sub>알킬카보닐, C<sub>1-4</sub>알콕시카보닐, 패녹시, 니프로 또는 시아노.

명세서

[발명의 명칭]

살균제

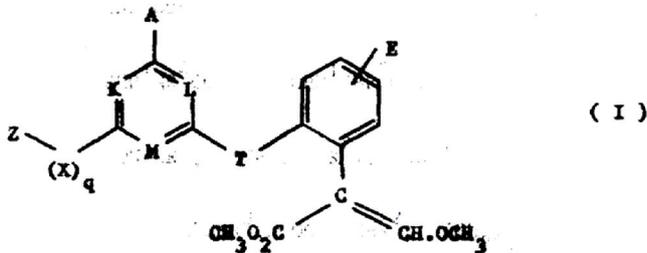
[발명의 상세한 설명]

본 발명은 살균제로서 유용한 프로펜산 유도체, 이의 제조방법, 이들이 함유된 살균 조성물 및 이들을 사용하여 균류, 특히 식물을 감염시킨 균을 퇴치하는 방법에 관한 것이다.

살충성 알킬 2-(치환된) 피리디닐-및 피리디닐옥시페닐-3-알콕시프로페노에이트가 KP-A-0242081에 기재되었다.

본 발명은 다음 구조식(1)을 갖는 화합물 및 이것의 입체이성체를 제공한다.

화학식 1



식중, K, L 및 M의 어떤 두개는 질소이고 그 나머지 것은 CB ;

T는 산소 또는 황 ;

Z는 임의로 치환된 아릴 또는 임의로 치환된 헤테로시클릴 ;

X는 O, S(O)<sub>n</sub>, NR<sup>4</sup>, N(CHO), CR<sup>1</sup>R<sup>2</sup>, CHR<sup>5</sup>, CO, CR<sup>1</sup>(OR<sup>2</sup>), C=CR<sup>1</sup>R<sup>2</sup>, CHR<sup>1</sup>CHR<sup>2</sup>, CR<sup>1</sup>=CR<sup>2</sup>, CHR<sup>1</sup>CR<sup>2</sup>=CH, C≡C, OCHR<sup>1</sup>, CHR<sup>1</sup>O, CH(CF<sub>3</sub>)O, CH(CN)O, OCHR<sup>1</sup>O, S(O)<sub>n</sub>CHR<sup>1</sup>, S(O)<sub>n</sub>CHR<sup>1</sup>O, CHR<sup>1</sup>S(O)<sub>n</sub>, CHR<sup>1</sup>OSO<sub>2</sub>, NR<sup>4</sup>CHR<sup>1</sup>, CHR<sup>1</sup>NR<sup>4</sup>, CO<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>C, SO<sub>2</sub>O, OSO<sub>2</sub>, CO.CO, COCHR<sup>1</sup>, COCHR<sup>1</sup>O, CHR<sup>1</sup>CO, CHOH.CHR<sup>1</sup>, CHR<sup>1</sup>.CHOH,

, CONR<sup>4</sup>, OCONR<sup>4</sup>, NR<sup>4</sup>CO, CSNR<sup>4</sup>, OCS.NR<sup>4</sup>, SCO.NR<sup>4</sup>, NR<sup>4</sup>CO<sub>2</sub>, NR<sup>4</sup>CS, NR<sup>4</sup>CSO, NR<sup>4</sup>COS, NR<sup>4</sup>CONR<sup>4</sup>, S(O)<sub>n</sub>NR<sup>4</sup>, NR<sup>4</sup>S(O)<sub>n</sub>, CS<sub>2</sub>, S<sub>2</sub>C, CO.S, SCO, N=N, N=CR<sup>1</sup>, CR<sup>1</sup>=N, CHR<sup>1</sup>CHR<sup>2</sup>CH(OH), CHR<sup>1</sup>OCO, CHR<sup>1</sup>SCO, CHR<sup>1</sup>NR<sup>4</sup>CO, (CHR<sup>1</sup>NR<sup>4</sup>CONR<sup>4</sup>), CHR<sup>1</sup>CHR<sup>2</sup>CO, (CR<sup>1</sup>=NO, C(NR<sup>1</sup>R<sup>2</sup>)=NO, O.N=CR<sup>1</sup>, ON=C(NR<sup>1</sup>R<sup>2</sup>), CHR<sup>1</sup>O.N=CR<sup>2</sup>, CO.OCR<sup>1</sup>R<sup>2</sup>, CHR<sup>1</sup>CHR<sup>2</sup>CHR<sup>3</sup>, OCHR<sup>1</sup>CHR<sup>2</sup>, (CH<sub>2</sub>)<sub>m</sub>O, CHR<sup>1</sup>OCHR<sup>2</sup>, CHR<sup>1</sup>CHR<sup>2</sup>O, OCHR<sup>1</sup>CHR<sup>2</sup>O, S(O)<sub>n</sub>CHR<sup>1</sup>CHR<sup>2</sup>, SCHR<sup>1</sup>CHR<sup>2</sup>O, CHR<sup>1</sup>S(O)<sub>n</sub>CHR<sup>2</sup>, CHR<sup>1</sup>CHR<sup>2</sup>S(O)<sub>n</sub>, CR<sup>1</sup>=NNR<sup>4</sup>, NR<sup>4</sup>N=CR<sup>1</sup>, CHR<sup>1</sup>CONR<sup>2</sup>, CHR<sup>1</sup>OCO.NR<sup>2</sup>, CH=CHCH<sub>2</sub>O, C≡CCH<sub>2</sub>O, COCHR<sup>1</sup>CHR<sup>2</sup>O, 또는 (R<sup>5</sup>)<sub>2</sub>P<sup>+</sup>CHR<sup>2</sup>Q<sup>-</sup> ;

A, B 및 E 는 같거나 다를수있고, H, 하이드록시, 할로, C<sub>1-4</sub>알킬, C<sub>1-4</sub>알콕시, C<sub>1-4</sub>할로알킬, C<sub>1-4</sub>할로알콕시, C<sub>1-4</sub>알킬카보닐, C<sub>1-4</sub>알콕시카보닐, 페녹시, 니트로 또는 시아노 ;

R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup> 및 R<sup>3</sup>는 같거나 다를수있고, H, C<sub>1-4</sub>알킬 또는 페닐 ;

R<sup>4</sup>는 H, C<sub>1-4</sub>알킬 또는 COR<sup>1</sup> ;

R<sup>5</sup>는 임의로 치환된 페닐 ;

Q-는 할라이드 음이온 ;

n은 0, 1 또는 2 ;

m은 3, 4 또는 5 ;

q는 0 또는 1인데, 단 q가 0이고 z가 최소한 하나의 3가 질소 원자를 함유하는 임의로 치환된 3--6-원 복소환식 고리일 경우, z는 상기 3가 질소 원자에 의해 중앙의 피리미딘 고리에 결합 되지 않고, q 가 1 이고 x가 0일 경우, z는 임의로 치환된 페닐 또는 임의로 치환된 피리디닐이 아님.

프로페노에이트 그룹의 이중 결합이 비대칭적으로 치환되었기 때문에 본 발명의 화합물은 (E) - 및 (Z)-기하이성체 형태로 얻어질 수 있다. 그러나, 이러한 혼합물은 각각의 개별 이성체로 분리될 수 있어 본 발명은 상기 이성체 및 주로 (Z)-이성체로 이루어진 것 및 주로 (E)-이성체로 이루어진 것을 포함하는 모든 비율의 (E)-이성체와 (Z)-이성체의 혼합물을 포함한다. -CO<sub>2</sub>CH<sub>3</sub> 및 -OCH<sub>3</sub>가 프로페노에이트 그룹의 올레핀 결합에 대해 서로 반대 위치에 있는 (E)-이성체가 살균적으로 더 활성적이며 본 발명의 바람직한

구체예를 이룬다.

화합물 (1)에 있는 치환체 Z는 임의로 치환된 아릴 또는 임의로 치환된 헤테로시클릴이다. 원자가가 허용하는 경우, 임의로 치환된 아릴 또는 헤테로시클릴 각 그룹은 5개까지의 치환체를 가질수있다. 아릴로는 페닐, 특히 나프틸이 포함된다. 헤테로시클릴로는 각기 하나 이상의 이종원자 O, S 및 N (바람직하게 S 또는 N)을 함유하는 5-원 및 6-원 복소환식 그룹, 융합 벤젠노이드 및 복소방향족 고리 시스템, 및 각 경우의 당해 N-옥사이드가 포함된다. 지시한 경우를 제외하고 Z 일수있는 헤테로시클릴 그룹의 예로 피리디닐, 피리미디닐, 피라지닐, 피리디지닐, 1, 2, 3-, 1, 2, 4- 및 1, 3, 5-트리아지닐, 1, 2, 4, 5-테트라지닐, 1, 2, 3-및 1, 2, 4-트리아졸릴, 이미다졸릴, 티에닐, 퓨릴, 피롤릴, 피라졸릴, 티아졸릴, 이소티아졸릴, 옥사졸릴, 이숙사졸릴, 1, 2, 4-및 1, 3, 5-티아디아졸릴, 옥사디아졸릴, 퓨리닐, 퀴놀리닐, 이소퀴놀리닐, 퀴놀살리닐, 벤조티에닐, 벤족사졸릴, 벤즈티아졸릴, 피페리디닐, 모포리닐, 피롤리디닐 및 테트라하이드로피라닐 및 적당한 경우 당해 N-옥사이드가 있다. 임의로 치환된 아릴 및 헤테로시클릴 부분에 존재할 수 있는 치환체에 하나이상의 다음 것들이 포함된다: 할로, 하이드록시, 옥소, 머캅토, C<sub>1-4</sub>알킬(특히 메틸 및 에틸), C<sub>2-4</sub>알케닐(특히 알릴), C<sub>2-4</sub>알키닐(특히 프로파길), C<sub>1-4</sub>알콕시(특히 메톡시), C<sub>2-4</sub>알케닐옥시(특히 알릴옥시), C<sub>2-4</sub>알키닐옥시(특히 프로파길옥시), 할로(C<sub>1-4</sub>)알킬(특히 트리플루오로메틸), 할로(C<sub>1-4</sub>)알콕시(특히 트리플루오로메톡시), C<sub>1-4</sub>알킬티오(특히 메틸티오), C<sub>2-4</sub>알케닐티오, 하이드록시(C<sub>1-4</sub>)알킬, C<sub>1-4</sub>알콕시(C<sub>1-4</sub>)알킬, C<sub>3-6</sub>시클로알킬, C<sub>3-6</sub>시클로알킬 (C<sub>1-4</sub>)알킬, 임의로 치환된 아릴(특히 임의로 치환된 페닐), 임의로 치환된 헤테로시클릴(특히 임의로 치환된 피리디닐 또는 피리미디닐), 임의로 치환된 아릴옥시(특히 임의로 치환된 페녹시), 임의로 치환된 페닐티오, 임의로 치환된 헤테로아릴옥시(특히 임의로 치환된 피리디닐옥시 또는 피리미디닐옥시), 알킬 부분이 하이드록시로 임의 치환된 임의로 치환된 아릴(C<sub>1-4</sub>)알킬(특히 임의로 치환된 벤질, 임의로 치환된 펜에틸 및 임의로 치환된 페닐-프-프로필), 임의로 치환된 헤테로아릴(C<sub>1-4</sub>)알킬(특히 임의로 치환된 피리디닐-또는 피리미디닐(C<sub>1-4</sub>)알킬), 임의로 치환된 아릴(C<sub>2-4</sub>)알케닐(특히 임의로 치환된 페닐에레닐), 임의로 치환된 헤테로아릴(C<sub>2-4</sub>)알케닐(특히 임의로 치환된 피리디닐에테닐, 피리미디닐에테닐 또는 1-(이미다졸-1-일)비닐), 임의로 치환된 아릴(C<sub>1-4</sub>)알콕시(특히 임의로 치환된 벤질옥시), 임의로 치환된 헤테로아릴(C<sub>1-4</sub>)알콕시(특히 임의로 치환된 피리디닐-또는 피리미디닐(C<sub>1-4</sub>)알콕시), 임의로 치환된 아릴옥시(C<sub>1-4</sub>)알킬(특히 페녹시메틸), 임의로 치환된 헤테로아릴옥시(C<sub>1-4</sub>)알킬(특히 임의로 치환된 피리디닐옥시-또는 피리미디닐옥시(C<sub>1-4</sub>)알킬), C<sub>1-4</sub>알카노일옥시(특히 아세틸옥시) 및 벤조일옥시를 포함하는 아실옥시, 시아노, 이소시아노, 티오시아네이토, 이소티오시아네이토, 니트로, R' 및 R가 독립적으로 수소, 하이드록시, C<sub>1-4</sub>알킬, C<sub>1-4</sub>알콕시, C<sub>1-4</sub>알킬티오, C<sub>3-6</sub>시클로알킬, C<sub>3-6</sub>시클로알킬(C<sub>1-4</sub>)알킬, C<sub>2-4</sub>알케닐, C<sub>2-4</sub>알케닐옥시, 페닐, 페녹시 또는 벤질이고 여기에서의 페닐, 페녹시 또는 벤질 그룹이 할로겐, C<sub>1-4</sub>알킬, C<sub>1-4</sub>알콕시 또는 서로 오르토 위치에있을때 결합하여 임의로 하나이상의 산소, 황, 또는 질소원자를 함유하는 5-또는 6-원환 지방족 또는 방향족 고리를 형성하는 두개의 치환체로 임의 치환되는 -NR'R, -N<sub>3</sub>, -NHCONR'R, -NR'COR, -CONR'R, CR'=NOR, CHR'CO<sub>2</sub>R, CSNR'R, -CO<sub>2</sub>R', -OSO<sub>2</sub>R', -SO<sub>2</sub>R', -SOR', SO<sub>2</sub>OR', SO<sub>2</sub>NR'R, -COR', -OCOR', -CR'=NR, N=CHNR'R, NHSO<sub>2</sub>R' 또는 -N=CR'R가 포함된다.

R<sup>5</sup>의 페닐 고리내에 존재할수있거나 또는 전기한 어떤 치환체의 아릴 또는 헤테로시클릴 고리내에 존재할 수 있는 치환체로는 하나이상의 다음 것들이 포함된다 ; 할로, 하이드록시,머캅토, C<sub>1-4</sub>알킬, C<sub>2-4</sub>알케닐, C<sub>2-4</sub>알콕시, C<sub>2-4</sub>알케닐옥시, C<sub>2-4</sub>알키닐옥시, 할로(C<sub>1-4</sub>)알킬, 할로(C<sub>1-4</sub>)알콕시, C<sub>1-4</sub>알킬티오, 하이드록시(C<sub>1-4</sub>)알킬, (C<sub>1-4</sub>)알콕시(C<sub>1-4</sub>)알킬, C<sub>3-6</sub>시클로알킬, C<sub>3-6</sub>시클로알킬(C<sub>1-4</sub>)알킬, 알카노일옥시, 벤질옥시, 시아노, 티오시아네이토, 니트로, R' 및 R가 전기한 바와같은 -NR'R, -NHCOR', -NHCONR'R, -CONR'R, -CO<sub>2</sub>R', -OSO<sub>2</sub>R', -SO<sub>2</sub>R', -COR', -CR'=NR, 또는 -N=CR'R가 포함된다.

치환체중 어떤 것의 지방족 부분은 하나이상의 할로겐, 시아노, R' 및 R가 전기한 바와같은 OR', SR', NR'R, SIR', 또는 OCOR'로 치환될 수 있다.

A, B 및 E 치환체의 어떤 것은 C<sub>1-4</sub>알킬 또는 C<sub>1-4</sub>알콕시이고 여기에서의 알킬 부분은 직쇄 또는 분지쇄 형태일 수 있는데, 즉 알킬부분은 메틸, 에틸, n-또는 이소-프로필 또는 n-sec-iso-또는 t-부틸일 수 있다. 본원에서 C<sub>1-4</sub>알킬 및 C<sub>1-4</sub>알콕시에 대한 것은 상기한 것과 동일한 의미로 사용된다. 시클로알킬 그룹은 C<sub>3-6</sub>를 가지며 이것으로는 시클로프로필 및 시클로헥실이 포함된다.

알케닐 그룹은 직쇄 또는 분지쇄 형태일 수 있고 적당한 경우(E)-또는 (Z)-배열 상태로 존재할 수 있다. 그러한 그룹의 예로는 비닐, 알릴, -C(CH<sub>3</sub>)=CH<sub>2</sub> 및 (E)-및 (Z)-크로틸이 있다.

할로겐은 대표적으로 불소, 염소 또는 브롬이다.

구조식(1)에서 K, L 및 M을 포함하는 고리는 고리의 질소원자에 가까이 있는 고리의 탄소원자중의 어떤 두개에 의해 T 및 Z(X)q에 결합될수있는 피리미딘 고리이다. 특히 관심이 있는 것은 K 및 L이 질소이고 M 이 CB인 구조식(1)화합물이다.

다른 일면으로 본 발명은 K, L 및 M의 어떤 두개는 질소이고 그 이외의 것은 CB; T는 산소 또는 황 ; Z는 임의로 치환된 아릴 또는 임의로 치환된 헤테로시클릴 ; X가 S(O)<sub>n</sub> NR<sup>4</sup>, N(CHO), CR<sup>1</sup>R<sup>2</sup>, CHR<sup>5</sup>, CO, CR<sup>1</sup>(OR<sup>2</sup>), C=CR<sup>1</sup>R<sup>2</sup>, CHR<sup>1</sup>CHR<sup>2</sup>, CR<sup>1</sup>=CR<sup>2</sup>, CHR<sup>1</sup>CR<sup>2</sup>=CH, C≡C, OCHR<sup>1</sup>, CHR<sup>1</sup>O, CH(CF<sub>3</sub>)O, CH(CN)O, OCHR<sup>1</sup>O, S(O)<sub>n</sub>CHR<sup>1</sup>, S(O)<sub>n</sub>CHR<sup>1</sup>O, CHR<sup>1</sup>S(O)<sub>n</sub>, CHR<sup>1</sup>OSO<sub>2</sub>, NR<sup>4</sup>CHR<sup>1</sup>, CHR<sup>1</sup>NR<sup>4</sup>, CO<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>C, SO<sub>2</sub>O, OSO<sub>2</sub>, CO.CO, COCHR<sup>1</sup>,

$\text{COCHR}^1\text{O}$ ,  $\text{CHR}^1\text{CO}$ ,  $\text{CHOH}\cdot\text{CHR}^1$ ,  $\text{CHR}^1\cdot\text{CHOH}$ ,  $\text{CR}^1-\text{CH}_2-\text{CR}^2$ ,  $\text{CR}^1-\text{O}-\text{CR}^2$ ,  $\text{CONR}^4$ ,  $\text{OCONR}^4$ ,  $\text{NR}^4\text{CO}$ ,  $\text{CSNR}^4$ ,  $\text{OCS}\cdot\text{NR}^4$ ,  $\text{SCO}\cdot\text{NR}^4$ ,  $\text{NR}^4\text{CO}_2$ ,  $\text{NR}^4\text{CS}$ ,  $\text{NR}^4\text{CSO}$ ,  $\text{NR}^4\text{COS}$ ,  $\text{NR}^4\text{CONR}^4$ ,  $\text{S}(\text{O})_n\text{NR}^4$ ,  $\text{NR}^4\text{S}(\text{O})_n$ ,  $\text{CS}_2$ ,  $\text{S}_2\text{C}$ ,  $\text{CO}\cdot\text{S}$ ,  $\text{SCO}$ ,  $\text{N}=\text{N}$ ,  $\text{N}=\text{CR}^1$ ,  $\text{CR}^1=\text{N}$ ,  $\text{CHR}^1\text{CHR}^2\text{CH}(\text{OH})$ ,  $\text{CHR}^1\text{OCO}$ ,  $\text{CHR}^1\text{SCO}$ ,  $\text{CHR}^1\text{NR}^4\text{CO}$ ,  $\text{CHR}^1\text{CHR}^2\text{CO}$ ,  $\text{O}\cdot\text{N}=\text{CR}^1$ ,  $\text{CHR}^1\text{O}\cdot\text{N}=\text{CR}^2$ ,  $\text{CO}\cdot\text{OCR}^1\text{R}^2$ ,  $\text{CHR}^1\text{CHR}^2\text{CHR}^3$ ,  $\text{OCHR}^1\text{CHR}^2$ ,  $(\text{CH}_2)_m\text{O}$ ,  $\text{CHR}^1\text{OCHR}^2$ ,  $\text{CHR}^1\text{CHR}^2\text{O}$ ,  $\text{OCHR}^1\text{CHR}^2\text{O}$ ,  $\text{S}(\text{O})_n\text{CHR}^1\text{CHR}^2$ ,  $\text{SCHR}^1\text{CHR}^2\text{O}$ ,  $\text{CHR}^1\text{S}(\text{O})_n\text{CHR}^2$ ,  $\text{CHR}^1\text{CHR}^2\text{S}(\text{O})_n$ ,  $\text{CR}^1=\text{NNR}^4$ ,  $\text{NR}^4\text{N}=\text{CR}^1$ ,  $\text{CHR}^1\text{CONR}^2$ ,  $\text{CHR}^1\text{OCO}\cdot\text{NR}^2$ ,  $\text{CH}=\text{CHCH}_2\text{O}$ ,  $\text{C}\equiv\text{CCH}_2\text{O}$ ,  $\text{COCHR}^1\text{CHR}^2\text{O}$ , 또는  $(\text{R}^5)_2\text{P}^+\text{CHR}^2\text{Q}^-$ ; A, B 및 E는 같거나 다를수 있고, H, 하이드록시, 할로, C<sub>1-4</sub>알킬, C<sub>1-4</sub>알콕시, C<sub>1-4</sub>할로알킬, C<sub>1-4</sub>할로알콕시, C<sub>1-4</sub>알킬카보닐, C<sub>1-4</sub>알콕시카보닐, 페녹시, 니트로 또는 시아노; R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup> 및 R<sup>3</sup>는 같거나 다를수 있고, H, C<sub>1-4</sub>알킬 또는 페닐; R<sup>4</sup>는 H, C<sub>1-4</sub>알킬 또는 COR<sup>1</sup>, R<sup>5</sup>는 임의로 치환된 페닐; Q<sup>-</sup>는 할라이드 음이온; n은 0, 1 또는 2, m은 3, 4, 5; q는 0 또는 1인데, 단 q가 0 이고 z가 최소한 하나의 3가 질소 원자를 함유하는 임의로 치환된 3~6-원 복소환식 고일일 경우, z는 상기 3가 질소원자로 중앙의 피미딘 고리에 결합되지 않는 구조식(1) 화합물 및 이것의 입체 이성체를 제공한다.

그 구조식에서 아릴 로는 페닐, 특히 나프틸이 포함되고,

헤테로아릴로는 각기 하나이상의 이종원자 O, S 및 N (바람직하게 S 또는 N)을 함유하는 5-원 및 6-원 복소환식 그룹, 융합 벤젠노이드 및 복소방향족 고리 시스템, 및 각 경우의 당해 N-옥사이드가 포함된다. 원자가가 허용하는 경우, 임의로 치환된 아릴, 또는 헤테로아릴 각 그룹은 5개까지의 치환체를 가질 수 있다.

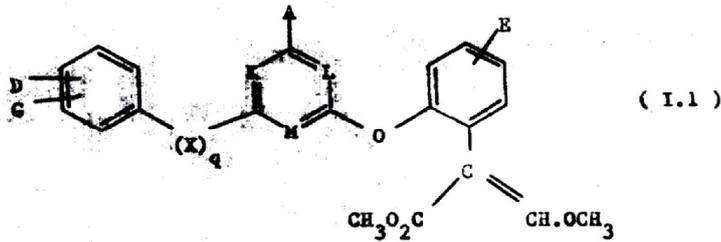
Z 일수있는 헤테로시클릴 그룹의 예로는 피리디닐, 피리미디닐, 피라지닐, 피리다지닐, 1, 2, 3-, 1, 2, 4- 및 1, 3, 5-트리아지닐, 1, 2, 4, 5-테트라지닐, 1, 2, 3- 및 1, 2, 4-트리아졸릴, 티에닐, 퓨릴, 피롤릴, 티아졸릴, 옥사디아졸릴, 퓨리닐, 퀴놀리닐, 이소퀴놀리닐, 퀴놀살리닐, 벤조티에닐, 벤조사졸릴 및 벤즈티아졸릴, 및 적당한 경우 당해 N-옥사이드가 있다. 임의로 치환된 아릴 및 헤테로아릴 부분에 존재할수있는 치환체에 하나이상의 다음 것들이 포함된다:

할로, 하이드록시, 옥소, 머캅토, C<sub>1-4</sub>알킬(특히 메틸 및 에틸), C<sub>2-4</sub>알케닐(특히 알릴), C<sub>2-4</sub>알킬닐(특히 프로파길), C<sub>1-4</sub>알콕시(특히 메톡시), C<sub>2-4</sub>알케닐옥시(특히 알릴옥시), C<sub>2-4</sub>알킬닐옥시(특히 프로파길옥시), 할로(C<sub>1-4</sub>)알킬(특히 트리플루오로메틸), 할로(C<sub>1-4</sub>)알콕시(특히 트리플루오로메톡시), C<sub>1-4</sub>알킬티오(특히 메틸티오), 하이드록시(C<sub>1-4</sub>)알킬, C<sub>1-4</sub>알콕시(C<sub>1-4</sub>)알킬, C<sub>3-6</sub>시클로알킬, C<sub>3-6</sub>시클로알킬(C<sub>1-4</sub>)알킬, 임의로 치환된 아릴(특히 임의로 치환된 페닐), 임의로 치환된 헤테로아릴(특히 임의로 치환된 피리디닐 또는 피리미디닐), 임의로 치환된 아릴옥시(특히 임의로 치환된 페녹시), 임의로 치환된 헤테로아릴옥시(특히 임의로 치환된 피리디닐옥시 또는 피리미디닐옥시), 알킬 부분이 하이드록시로 임의로 치환된 임의로 치환된 아릴(C<sub>1-4</sub>)알킬(특히 임의로 치환된 벤질, 임의로 치환된 펜에틸 및 임의로 치환된 페닐-η-프로필), 임의로 치환된 헤테로아릴(C<sub>1-4</sub>)알킬(특히 임의로 치환된 피리디닐-또는 피리미디닐(C<sub>1-4</sub>)알킬), 임의로 치환된 아릴(C<sub>2-4</sub>)알케닐(특히 임의로 치환된 페닐에테닐), 임의로 치환된 헤테로아릴(C<sub>2-4</sub>)알케닐(특히 임의로 치환된 피리디닐에테닐 또는 피리미디닐에테닐), 임의로 치환된 아릴(C<sub>1-4</sub>)알콕시(특히 임의로 치환된 벤질옥시), 임의로 치환된 헤테로아릴(C<sub>1-4</sub>)알콕시(특히 임의로 치환된 피리디닐-또는 피리미디닐(C<sub>1-4</sub>)알콕시), 임의로 치환된 아릴옥시(C<sub>1-4</sub>)알킬(특히 페녹시메틸), 임의로 치환된 헤테로아릴옥시(C<sub>1-4</sub>)알킬(특히 임의로 치환된 피리디닐옥시-또는 피리미디닐옥시(C<sub>1-4</sub>)알킬), C<sub>1-4</sub>알카노일옥시(특히 아세틸옥시) 및 벤조일옥시를 포함하는 아실옥시, 시아노, 티오시아네이토, 니트로, R<sup>1</sup> 및 R가 독립적으로 수소, C<sub>1-4</sub>알킬, C<sub>1-4</sub>알콕시, C<sub>1-4</sub>알킬티오, C<sub>3-6</sub>시클로알킬, C<sub>3-6</sub>시클로알킬(C<sub>1-4</sub>)알킬, 페닐 또는 벤질이고 여기에서의 페닐 또는 벤질 그룹이 할로겐, C<sub>1-4</sub>알킬 또는 C<sub>1-4</sub>알콕시로 임의로 치환되는 -NR<sup>1</sup>R, -NHCOR<sup>1</sup>, NHCONR<sup>1</sup>R, -CONR<sup>1</sup>R, -CO<sub>2</sub>R<sup>1</sup>, -OSO<sub>2</sub>R<sup>1</sup>, -SO<sub>2</sub>R<sup>1</sup>, -COR<sup>1</sup>, -CR<sup>1</sup>=NR, 또는 -N=CR<sup>1</sup>R가 포함된다.

R<sup>5</sup>의 페닐 고리내에 존재할 수 있거나 또는 전기한 어떤 치환제의 아릴 또는 헤테로아릴 고리내에 존재할 수있는 치환체로는 하나이상의 다음 것들이 포함된다; 할로, 하이드록시,머캅토, C<sub>1-4</sub>알킬, C<sub>2-4</sub>알케닐, C<sub>2-4</sub>알케닐, C<sub>1-4</sub>알콕시, C<sub>2-4</sub>알케닐옥시, C<sub>2-4</sub>알킬닐옥시, 할로(C<sub>1-4</sub>)알킬, 할로(C<sub>1-4</sub>)알콕시, C<sub>1-4</sub>알킬티오, 하이드록시(C<sub>1-4</sub>)알킬, (C<sub>1-4</sub>)알콕시(C<sub>1-4</sub>)알킬, C<sub>3-6</sub>시클로알킬, C<sub>3-6</sub>시클로알킬(C<sub>1-4</sub>)알킬, 알카노일옥시, 벤질옥시, 시아노, 티오시아네이토, 니트로, R; 및 R가 전기한 바와같은 -NR<sup>1</sup>R, -NHCOR<sup>1</sup>, -NHCONR<sup>1</sup>R, -CONR<sup>1</sup>R, -CO<sub>2</sub>R<sup>1</sup>, -OSO<sub>2</sub>R<sup>1</sup>, -SO<sub>2</sub>R<sup>1</sup>, -COR<sup>1</sup>, -CR<sup>1</sup>=NR, 또는 -N=CR<sup>1</sup>R가 포함된다.

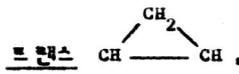
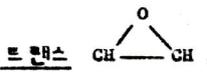
또다른 일면으로 본 발명은 다음 구조식(1,1)화합물을 제공한다.

화학식 2



식중, K, L 및 M의 어떤 두개는 질소이고, 그 나머지 것은 CB ;

X는 n이 0, 1 또는 2인 S(O)<sub>3</sub>, NH, NCH<sub>3</sub>, NCH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>, NCOCH<sub>3</sub>, NCH(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>, CH<sub>2</sub>, CH(CH<sub>3</sub>), C(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>, CO, C=CH<sub>2</sub>, C=C(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>, CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>, CH(CH<sub>3</sub>)CH<sub>2</sub>, CH<sub>2</sub>CH(CH<sub>3</sub>), (E)-CH=CH, (Z)-CH=CH, (E)-C(CH<sub>3</sub>)=C(CH<sub>3</sub>), C≡C, C≡CCH<sub>2</sub>O, OCH<sub>2</sub>, OCH(CH<sub>3</sub>), p가 1-5의 정수인 (CH<sub>2</sub>)<sub>p</sub>, CH(CH<sub>3</sub>)O, CH(CN)O, CH(CF<sub>3</sub>)O, SCH<sub>2</sub>, SCH(CH<sub>3</sub>), S(O)CH<sub>2</sub>, S(O)CH(CH<sub>3</sub>), S(O)<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>, S(O)<sub>2</sub>CH(CH<sub>3</sub>), CH<sub>2</sub>S, CH(CH<sub>3</sub>)S, CH<sub>2</sub>S(O), CH(CH<sub>3</sub>)S(O), CH<sub>2</sub>S(O)<sub>2</sub>, CH(CH<sub>3</sub>)S(O)<sub>2</sub>, NHCH<sub>2</sub>, N(CHO), N(CH<sub>3</sub>)CH<sub>2</sub>, N(COCH<sub>3</sub>)CH<sub>2</sub>, NHCH(CH<sub>3</sub>), N(CH<sub>3</sub>)CH(CH<sub>3</sub>), N(COCH<sub>3</sub>)CH(CH<sub>3</sub>), CH<sub>2</sub>NH, CH<sub>2</sub>N(CH<sub>3</sub>), CH<sub>2</sub>N(COCH<sub>3</sub>), CH(CH<sub>3</sub>)NH, CH(CH<sub>3</sub>)N(CH<sub>3</sub>), CH(CH<sub>3</sub>)N(COCH<sub>3</sub>), CO<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>C, SO<sub>2</sub>O, OSO<sub>2</sub>, CO.CO, COCH<sub>2</sub>, COCH(CH<sub>3</sub>), CON(COC<sub>6</sub>H<sub>5</sub>), CH<sub>2</sub>CO, CH(CH<sub>3</sub>)CO, CH(OH)CH<sub>2</sub>, CH(OH)CH(CH<sub>3</sub>), CH<sub>2</sub>CH(OH), CH(CH<sub>3</sub>)CH(OH), CONH, CON(CH<sub>3</sub>), CON(CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>), CON(CHO), CON(COCH<sub>3</sub>), NHCO, N(CH<sub>3</sub>)CO, N(CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>)CO, N(CHO)CO, N(COCH<sub>3</sub>)CO, CSN(CH<sub>3</sub>), CSNH, NHCS, N(CH<sub>3</sub>)CS, SO<sub>2</sub>NH, SO<sub>2</sub>N(CH<sub>3</sub>), NHSO<sub>2</sub>, N(CH<sub>3</sub>)SO<sub>2</sub>, N(CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>)SO<sub>2</sub>, CS<sub>2</sub>, CS<sub>2</sub>, S<sub>2</sub>C, COS, SCO, (E)-N=N, (E)-N=CH, (E)-N=C(CH<sub>3</sub>), (E)-CH<sub>2</sub>=N, (E)-(CH<sub>3</sub>)=N, CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>, CH(CH<sub>3</sub>)CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>, CH<sub>2</sub>CH(CH<sub>3</sub>)CH<sub>2</sub>, CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>CH(CH<sub>3</sub>), OCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>, CH<sub>2</sub>OCH<sub>2</sub>, SCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>, S(O)CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>, S(O)<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>, SCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>O, CH<sub>2</sub>SCH<sub>2</sub>, CH<sub>2</sub>S(O)CH<sub>2</sub>, CH<sub>2</sub>S(O)<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>, CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>S, CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>S(O), CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>S(O)<sub>2</sub>, (E)-CH=NNH, (E)-C(CH<sub>3</sub>)=NNH, (E)-CH=NN(CH<sub>3</sub>), (E)-NHN=CH, (E)-NHN=C(CH<sub>3</sub>), (E)-N(CH<sub>3</sub>)N=CH, CH<sub>2</sub>CONH, CH(CH<sub>3</sub>)CON(CH<sub>3</sub>), CH(CH<sub>3</sub>)CON(CH<sub>3</sub>), (E)-CH=CHCH<sub>2</sub>O,

COCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>O, 트립스 , 트립스 , CH(C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>), COCH<sub>2</sub>O, CH(OH), CO<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>, (C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>)<sub>2</sub>P<sup>+</sup>CH<sub>2</sub>Br<sup>-</sup>, CH<sub>2</sub>OCO, CH<sub>2</sub>NHCO, CH<sub>2</sub>SCO, OCH<sub>2</sub>O, OCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>O, S(O)CH<sub>2</sub>O, COCH(CH<sub>3</sub>)O, (E)-CH<sub>2</sub>ON=CH, (Z)-CH<sub>2</sub>ON=CH, CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>CH(OH), (E)-CH<sub>2</sub>CH=CH, C(CH<sub>3</sub>)(OH), CH<sub>2</sub>OSO<sub>2</sub>, CH<sub>2</sub>NHCO.NH, OCO.NH, NHCO.NH 또는 CH<sub>2</sub>OCO.NH;

q는 0 또는 1 ;

A 및 B는 독립적으로 H, 할로, C<sub>1-4</sub>알킬, C<sub>1-4</sub>알콕시, C<sub>1-4</sub>알킬티오 또는 아미노 ;

E는 H 또는 할로 ;

D는 H, 하이드록시, 할로, C<sub>1-4</sub>알킬, C<sub>1-4</sub>알콕시, 니트로, 시아노, 할로 (C<sub>1-4</sub>알킬)(특히 트리플루오로메틸), 할로(C<sub>1-4</sub>알콕시(특히 트리플루오로메톡시), 페닐, 페녹시, R<sup>6</sup>이 C<sub>1-4</sub>알킬(특히 메틸) 또는 페닐이고 R<sup>7</sup> 및 R<sup>8</sup>가 독립적으로 H 또는 C<sub>1-4</sub>알킬인 CO<sub>2</sub>R<sup>7</sup>, NHCOR<sup>6</sup>, NHSO<sub>2</sub>R<sup>6</sup>, NR<sup>7</sup>R<sup>8</sup> 또는 CH<sub>3</sub>O<sub>2</sub>C.C=CH.OCH<sub>3</sub> ;

G는 H, 할로, C<sub>1-4</sub>알킬, C<sub>1-4</sub>알콕시 또는 니트로 ; 또는

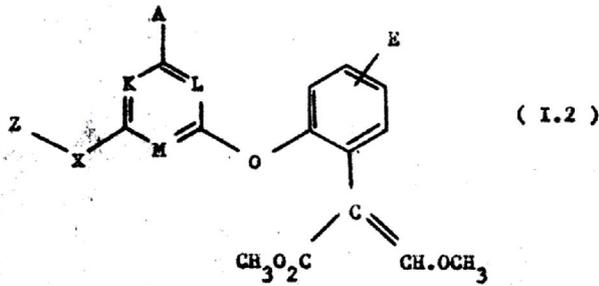
D 및 G는 서로 인접해 있을때 벤젠 또는 피리딘 고리형성

특히 본 발명에는 K, L 및 M중의 어떤 두개가 질소이고 그 나머지 것은 CB : X가 n이 0, 1 또는 2인 S(O)<sub>n</sub>, CH<sub>2</sub>, CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>, OCH<sub>2</sub>, p가 1-5의 정수인 (CH<sub>2</sub>)<sub>p</sub>O, OCH<sub>2</sub>O, OCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>O, SCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>O, CH(CH), CO, CO<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>C, COS, SCO, CO<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>, SO<sub>2</sub>O, (Z)-CH=CH, (E)-CH=CH, (E)-CH=CHCH<sub>2</sub>O, C≡CCH<sub>2</sub>O, CH(CH<sub>3</sub>)O, SCH<sub>2</sub>, SCH<sub>2</sub>O, S(O)CH<sub>2</sub>, S(O)CH<sub>2</sub>O, CH(CN)O, CH(CF<sub>3</sub>)O, S(O)<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>, CONH, CSNH, NH, NCH<sub>3</sub>, CH<sub>2</sub>NH, N(CH<sub>3</sub>)CH<sub>2</sub>, NHCO, N(CHO), CON(COC<sub>6</sub>H<sub>5</sub>), CH<sub>2</sub>OCO.NH, N(COCH<sub>3</sub>), NHSO<sub>2</sub>, (E)-N=N, (Z)-N=N, (E)-N=CH, (E)-N(CH<sub>3</sub>)N=CH, (E)-CH<sub>2</sub>ON=N, (Z)-CH<sub>2</sub>ON=CH, CH(C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>), COCH<sub>2</sub>O, COCH(CH<sub>3</sub>)O, CH<sub>2</sub>OCO, CH<sub>2</sub>NHCO, CH<sub>2</sub>SCO, 또는 (C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>)<sub>2</sub>P<sup>+</sup>CH<sub>2</sub>Br<sup>-</sup> ;

q가 1 : A, B 및 E 모두가 H : D가 H, 하이드록시, 할로, C<sub>1-4</sub>알킬, C<sub>1-4</sub>알콕시, 니트로, 시아노, 트리플루오로메틸, 트리플루오로메톡시, 페닐, 페녹시, 아미노 또는 CH<sub>3</sub>O<sub>2</sub>C.C=CH.OCH<sub>3</sub> ; G가 H, 할로, C<sub>1-4</sub>메틸, 니트로이거나 : 또는 D 및 G가 서로 인접해있을때 결합하여 벤젠 고리 또는 피리딘 고리를 형성하는 구조식(1,1)화합물이 포함된다.

또다른 일면으로, 본 발명은 다음 구조식(1.2)화합물 및 이들의 N-옥사이드 및 N-알킬 염을 제공한다.

화학식 3



식중, K, L 및 M중의 어떤 두개는 질소이고 그 나머지 것은 CB;

X는 산소 또는 황;

Z는 임의로 치환된 5-또는 6-원 복소환식 고리(피리딘 제외);

A, B 및 E는 독립적으로 수소, 할로겐(특히 불소 및 염소), C<sub>1-4</sub>알킬(특히 메틸), C<sub>1-4</sub>알콕시(특히 메톡시), 시아노, 니트로 또는 트리플루오로메틸.

구조식(1.2)에서, K,L 및 M을 포함하는 피리미딘 고리는 고리내 질소 원자에 인접해있는 고리내 어떤 두개의 탄소 원자에 의해 치환 페녹시 및 -X-Z그룹에 결합될 수 있다.

Z그룹은 피리딘을 제외한 임의로 치환된 어떤 5- 또는 6-원복소환식 고리일 수 있다. 이중방향족이 적당하지만 반드시 이것일 필요는 없는 복소환식 고리는 예를들어 다음 고리중의 하나일수 있으며, 각 경우에 원자가가 허용하는 Z고리의 어떤 원자로 연결될 수 있다 ; 퓨란, 티오펜, 피롤, 이미다졸, 피라졸, 티아졸, 이소티아졸, 옥사졸, 이속사졸, 1, 2, 4-트리아졸, 1, 2, 3-트리아졸, 1, 2, 4-티아디아졸, 1, 3, 4-티아디아졸, 피리미딘, 피라진, 피리다진, 1, 2, 4-트리아진, 1, 3, 5-트리아진, 피페리딘, 모폴린, 피롤리딘 또는 레트라하이드로퓨란.

복소환식 고리 Z의 임의적인 치환체로는 하나이상의 할로겐, C<sub>1-4</sub>알킬, C<sub>3-6</sub>시클로알킬, C<sub>2-4</sub>알케닐, C<sub>2-4</sub>알케닐옥시, C<sub>2-4</sub>알킬닐옥시, 페닐, 벤질옥시, 시아노, 이소시아노, 이소티오시아네이트, 니트로, NR'R, NR'OR, N<sub>3</sub>, NHCOR', NR'COR, NHCONR'R, N=CHNR'R, NHSO<sub>2</sub>R', OR', OCOR', OSO<sub>2</sub>R', SR', SOR', SO<sub>2</sub>R', SO<sub>2</sub>OR', SO<sub>2</sub>NR'R, COR', CR'=NOR, CHR'CO<sub>2</sub>R, CO<sub>2</sub>R', CONR'R, CSNR'R, CH<sub>3</sub>O<sub>2</sub>C.C:CH.OCH<sub>3</sub>;

1-(이미다졸-1-일)비닐, 하나, 두개또는 세개의 질소 이중원자를 포함하는 5-또는 6원 복소환식 고리, 또는 하나 또는 두개의 산소 또는 황 이중원자, 임의로 질소 이중원자 및 임의로 하나 또는 두개의 옥소 또는 티옥소 치환체를 갖는 5-또는 6-원 복소환식 고리가 포함되거나 또는 두개의 치환체는 서로 오르토 위치에 있을때 임의로 하나 또는 그 이상의 산소, 황 또는 질소 원자를 포함하는 5-또는 6-원 지방족 고리 또는 방향족 고리를 형성한다. R' 및 R는 독립적으로 수소, C<sub>1-4</sub>알킬, C<sub>2-4</sub>알케닐 또는 페닐이다.

치환체중 어떤것의 지방족 부분은 하나이상의 할로겐, 시아노, OR', SR', NR'R, SIR<sub>3</sub>' 또는 OCOR' 로 치환될수있고 치환체중 어떤 것의 페닐부분은 하나 이상의 할로겐, C<sub>1-4</sub>알킬, C<sub>1-4</sub>알콕시, 니트로 또는 시아노로 치환될 수 있다.

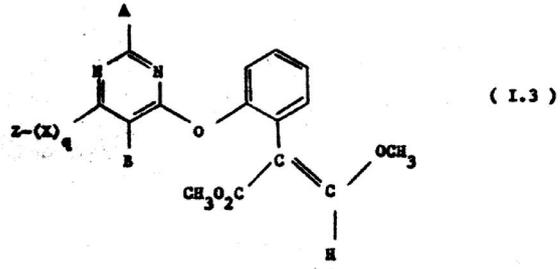
특히 관심있는 것은 K 및 L 이 질소이고 M이 CH인 구조식 (1.2)화합물이다.

본 발명이 다음 표 I-VI에 수록된 화합물로 예시된다.

표 I-VI의 화합물은 각각 (1.3)-(1.8)의 구조식을 갖으며, A, B, Z, X 및 q는 표 1에 기재된 바와 같다.

표에서 메틸 3-메톡시프로페노에이트 그룹은 (E)-배열을 갖는다.

[표 1a]



화학물질 번호	Z	X	q	A	B
1	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	S	1	H	H
2	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	SO	1	H	H
3	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	SO <sub>2</sub>	1	H	H
4	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	NH	1	H	H
5	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	NCH <sub>3</sub>	1	H	H
6	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	NCH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	1	H	H
7	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	NCOCH <sub>3</sub>	1	H	H
8	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	NCH(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	1	H	H
9	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	CH <sub>2</sub>	1	H	H
10	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	CH(CH <sub>3</sub> )	1	H	H
11	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	1	H	H
12	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	CO	1	H	H
13	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	C=CH <sub>2</sub>	1	H	H
14	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	C=C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	1	H	H
15	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub>	1	H	H
16	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	CH(CH <sub>3</sub> )CH <sub>2</sub>	1	H	H
17	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	CH <sub>2</sub> CH(CH <sub>3</sub> )	1	H	H

[표 1b]

화합물 번호	Z	X	q	A	B
18	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	(E)-CH=CH	1	H	H
19	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	(E)-C(CH <sub>3</sub> )=C(CH <sub>3</sub> )	1	H	H
20	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	C≡C	1	H	H
21	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	OCH <sub>2</sub>	1	H	H
22	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	OCH(CH <sub>3</sub> )	1	H	H
23	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	CH <sub>2</sub> O	1	H	H
24	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	CH(CH <sub>3</sub> )O	1	H	H
25	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	SCH <sub>2</sub>	1	H	H
26	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	SCH(CH <sub>3</sub> )	1	H	H
27	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	S(O)CH <sub>2</sub>	1	H	H
28	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	S(O)CH(CH <sub>3</sub> )	1	H	H
29	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	S(O) <sub>2</sub> CH <sub>2</sub>	1	H	H
30	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	S(O) <sub>2</sub> CH(CH <sub>3</sub> )	1	H	H
31	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	CH <sub>2</sub> S	1	H	H
32	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	CH(CH <sub>3</sub> )S	1	H	H
33	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	CH <sub>2</sub> S(O)	1	H	H
34	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	CH(CH <sub>3</sub> )S(O)	1	H	H
35	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	CH <sub>2</sub> S(O) <sub>2</sub>	1	H	H
36	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	CH(CH <sub>3</sub> )S(O) <sub>2</sub>	1	H	H
37	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	NHCH <sub>2</sub>	1	H	H
38	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	N(CH <sub>3</sub> )CH <sub>2</sub>	1	H	H
39	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	N(COCH <sub>3</sub> )CH <sub>2</sub>	1	H	H
40	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	NHCH(CH <sub>3</sub> )	1	H	H
41	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	N(CH <sub>3</sub> )CH(CH <sub>3</sub> )	1	H	H
42	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	N(COCH <sub>3</sub> )CH(CH <sub>3</sub> )	1	H	H
43	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	CH <sub>2</sub> NH	1	H	H
44	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	CH <sub>2</sub> N(CH <sub>3</sub> )	1	H	H
45	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	CH <sub>2</sub> N(COCH <sub>3</sub> )	1	H	H
46	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	CH(CH <sub>3</sub> )NH	1	H	H
47	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	CH(CH <sub>3</sub> )N(CH <sub>3</sub> )	1	H	H
48	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	CH(CH <sub>3</sub> )N(COCH <sub>3</sub> )	1	H	H
49	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	CO <sub>2</sub>	1	H	H

[표 1c]

화합물 번호	Z	X	q	A	B
50	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	O <sub>2</sub> C	1	H	H
51	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	SO <sub>2</sub> O	1	H	H
52	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	OSO <sub>2</sub>	1	H	H
53	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	CO.CO	1	H	H
54	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	COCH <sub>2</sub>	1	H	H
55	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	COCH(CH <sub>3</sub> )	1	H	H
56	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	CH <sub>2</sub> CO	1	H	H
57	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	CH(CH <sub>3</sub> )CO	1	H	H
58	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	CH(OH)CH <sub>2</sub>	1	H	H
59	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	CH(OH)CH(CH <sub>3</sub> )	1	H	H
60	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	CH <sub>2</sub> CH(OH)	1	H	H
61	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	CH(CH <sub>3</sub> )CH(OH)	1	H	H
62	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	CONH	1	H	H
63	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	CON(CH <sub>3</sub> )	1	H	H
64	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	CON(CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub> )	1	H	H
65	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	CON(CHO)	1	H	H
66	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	CON(COCH <sub>3</sub> )	1	H	H
67	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	NHCO	1	H	H
68	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	N(CH <sub>3</sub> )CO	1	H	H
69	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	N(CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> )CO	1	H	H
70	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	N(CHO)CO	1	H	H
71	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	N(COCH <sub>3</sub> )CO	1	H	H
72	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	CSN(CH <sub>3</sub> )	1	H	H
73	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	CSNH	1	H	H
74	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	NHCS	1	H	H
75	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	N(CH <sub>3</sub> )CS	1	H	H
76	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	SO <sub>2</sub> NH	1	H	H
77	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	SO <sub>2</sub> N(CH <sub>3</sub> )	1	H	H
78	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	NHSO <sub>2</sub>	1	H	H
79	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	N(CH <sub>3</sub> )SO <sub>2</sub>	1	H	H
80	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	N(CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub> )SO <sub>2</sub>	1	H	H

[표 1d]

화합물 번호	Z	X	q	A	B
81	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	CS <sub>2</sub>	1	H	H
82	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	S <sub>2</sub> C	1	H	H
83	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	COS	1	H	H
84	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	SCO	1	H	H
85	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	(E)-N=N	1	H	H
86	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	(E)-N=CH	1	H	H
87	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	(E)-N=C(CH <sub>3</sub> )	1	H	H
88	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	(E)-CH=N	1	H	H
89	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	(E)-C(CH <sub>3</sub> )=N	1	H	H
90	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub>	1	H	H
91	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	CH(CH <sub>3</sub> )CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub>	1	H	H
92	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	CH <sub>2</sub> CH(CH <sub>3</sub> )CH <sub>2</sub>	1	H	H
93	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH(CH <sub>3</sub> )	1	H	H
94	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	OCH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub>	1	H	H
95	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	CH <sub>2</sub> OCH <sub>2</sub>	1	H	H
96	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> O	1	H	H
97	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	SCH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub>	1	H	H
98	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	S(O)CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub>	1	H	H
99	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	S(O) <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub>	1	H	H
100	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	CH <sub>2</sub> SCH <sub>2</sub>	1	H	H
101	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	CH <sub>2</sub> S(O)CH <sub>2</sub>	1	H	H
102	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	CH <sub>2</sub> S(O) <sub>2</sub> CH <sub>2</sub>	1	H	H
103	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> S	1	H	H
104	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> S(O)	1	H	H
105	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> S(O) <sub>2</sub>	1	H	H
106	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	(E)-CH=NNH	1	H	H
107	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	(E)-C(CH <sub>3</sub> )=NNH	1	H	H
108	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	(E)-CH=NN(CH <sub>3</sub> )	1	H	H
109	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	(E)-NHN=CH	1	H	H
110	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	(E)-NHN=C(CH <sub>3</sub> )	1	H	H

[표 1e]

화합물 번호	Z	X	q	A	B
111	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	(E)-N(CH <sub>3</sub> )N=CH	1	H	H
112	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	CH <sub>2</sub> CONH	1	H	H
113	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	CH(CH <sub>3</sub> )CON(CH <sub>3</sub> )	1	H	H
114	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	CH(CH <sub>3</sub> )CON(CH <sub>3</sub> )	1	H	H
115	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	(E)-CH=CHCH <sub>2</sub> O	1	H	H
116	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	COCH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> O	1	H	H
117	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	*	1	H	H
118	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	*	1	H	H
119	2-Cl-C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	S	1	H	H
120	3-Cl-C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	N(CH <sub>3</sub> )	1	H	H
121	4-Cl-C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	NH	1	H	H
122	2-F-C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	OCH <sub>2</sub>	1	H	H
123	3-F-C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	CH <sub>2</sub> O	1	H	H
124	4-F-C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	S	1	H	H
125	2-CH <sub>3</sub> -C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	N(CH <sub>3</sub> )	1	H	H
126	3-CH <sub>3</sub> -C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	CH <sub>2</sub>	1	H	H
127	4-CH <sub>3</sub> -C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	OCH <sub>2</sub>	1	H	H
128	2-CH <sub>3</sub> O-C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	CH <sub>2</sub> O	1	H	H
129	3-CH <sub>3</sub> O-C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	S	1	H	H
130	4-CH <sub>3</sub> O-C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	N(CH <sub>3</sub> )	1	H	H
131	2-NO <sub>2</sub> -C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	NH	1	H	H
132	3-NO <sub>2</sub> -C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	OCH <sub>2</sub>	1	H	H
133	4-NO <sub>2</sub> -C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	CH <sub>2</sub> O	1	H	H
134	2- <sup>o</sup> Cl-C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	S	1	H	H
135	3- <sup>o</sup> Cl-C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	N(CH <sub>3</sub> )	1	H	H
136	4- <sup>o</sup> Cl-C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	CH <sub>2</sub>	1	H	H
137	2-Br-C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	OCH <sub>2</sub>	1	H	H
138	3-Br-C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	CH <sub>2</sub> O	1	H	H
139	4-Br-C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	S	1	H	H
140	2-CF <sub>3</sub> -C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	N(CH <sub>3</sub> )	1	H	H

[표 1f]

화합물 번호	Z	X	q	A	B
141	3-CF <sub>3</sub> -C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	NH	1	H	H
142	4-CF <sub>3</sub> -C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	OCH <sub>2</sub>	1	H	H
143	2-C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> O-C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	CH <sub>2</sub> O	1	H	H
144	3-C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> O-C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	S	1	H	H
145	4-C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> O-C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	N(CH <sub>3</sub> )	1	H	H
146	2-CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> O-C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	CH <sub>2</sub>	1	H	H
147	3-CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> O-C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	OCH <sub>2</sub>	1	H	H
148	4-CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> O-C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	CH <sub>2</sub> O	1	H	H
149	2-C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> -C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	S	1	H	H
150	3-C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> -C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	N(CH <sub>3</sub> )	1	H	H
151	4-C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> -C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	NH	1	H	H
152	2,3- <sup>o</sup> -Cl-C <sub>6</sub> H <sub>3</sub>	OCH <sub>2</sub>	1	H	H
153	2,4- <sup>m</sup> -Cl-C <sub>6</sub> H <sub>3</sub>	CH <sub>2</sub> O	1	H	H
154	2,5- <sup>p</sup> -Cl-C <sub>6</sub> H <sub>3</sub>	S	1	H	H
155	2,6- <sup>o</sup> -Cl-C <sub>6</sub> H <sub>3</sub>	N(CH <sub>3</sub> )	1	H	H
156	3,4- <sup>m</sup> -Cl-C <sub>6</sub> H <sub>3</sub>	CH <sub>2</sub>	1	H	H
157	3,5- <sup>p</sup> -Cl-C <sub>6</sub> H <sub>3</sub>	OCH <sub>2</sub>	1	H	H
158	2-Cl-3-CH <sub>3</sub> O-C <sub>6</sub> H <sub>3</sub>	CH <sub>2</sub> O	1	H	H
159	2-Cl-4-CH <sub>3</sub> O-C <sub>6</sub> H <sub>3</sub>	S	1	H	H
160	2-Cl-5-CH <sub>3</sub> O-C <sub>6</sub> H <sub>3</sub>	N(CH <sub>3</sub> )	1	H	H
161	2-Cl-6-CH <sub>3</sub> O-C <sub>6</sub> H <sub>3</sub>	NH	1	H	H
162	3-Cl-4-CH <sub>3</sub> O-C <sub>6</sub> H <sub>3</sub>	OCH <sub>2</sub>	1	H	H
163	3-Cl-5-CH <sub>3</sub> O-C <sub>6</sub> H <sub>3</sub>	CH <sub>2</sub> O	1	H	H
164	2-CH <sub>3</sub> O-3-Cl-C <sub>6</sub> H <sub>3</sub>	S	1	H	H
165	2-CH <sub>3</sub> O-4-Cl-C <sub>6</sub> H <sub>3</sub>	N(CH <sub>3</sub> )	1	H	H
166	2-CH <sub>3</sub> O-5-Cl-C <sub>6</sub> H <sub>3</sub>	CH <sub>2</sub>	1	H	H
167	3-CH <sub>3</sub> O-4-Cl-C <sub>6</sub> H <sub>3</sub>	OCH <sub>2</sub>	1	H	H
168	1- <sup>o</sup> -프틸	CH <sub>2</sub> O	1	H	H
169	2- <sup>m</sup> -프틸	S	1	H	H
170	2-(E)-(CH <sub>3</sub> O) <sub>2</sub> C=C(CH <sub>3</sub> )C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	N(CH <sub>3</sub> )	1	H	H
171	"	NH	1	H	H