



(19) 대한민국특허청(KR)

(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2014년12월16일

(11) 등록번호 10-1472248

(24) 등록일자 2014년12월05일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)

A61K 31/4184 (2006.01) A61K 31/4355

(2006.01)

A61K 31/4709 (2006.01) A61P 21/02 (2006.01)

(21) 출원번호 10-2013-7027768(분할)

(22) 출원일자(국제) 2007년02월09일

심사청구일자 2013년11월21일

(85) 번역문제출일자 2013년10월22일

(65) 공개번호 10-2013-0129476

(43) 공개일자 2013년11월28일

(62) 원출원 특허 10-2008-7022077

원출원일자(국제) 2007년02월09일

심사청구일자 2012년02월08일

(86) 국제출원번호 PCT/GB2007/050055

(87) 국제공개번호 WO 2007/091106

국제공개일자 2007년08월16일

(30) 우선권주장

0602768.4 2006년02월10일 영국(GB)

(뒷면에 계속)

(56) 선행기술조사문헌

R. S. POTTORF et al, Parallel synthesis of benzoxazoles via microwave-assisted dielectric heating, TETRAHEDRON LETTERS, 2003, Vol.44, pp. 175-178

전체 청구항 수 : 총 11 항

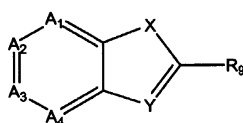
심사관 : 최영희

(54) 발명의 명칭 뒤시엔느 근이영양증의 치료

(57) 요약

뒤시엔느 근이영양증, 베커 근이영양증 또는 악액질의 치료학적 및/또는 예방적 치료를 위한 의약 제조에서 하기 화학식 I의 화합물 또는 그의 제약상 허용되는 염을 개시한다.

<화학식 I>



식 중,

동일하거나 상이할 수 있는 A₁, A₂, A₃ 및 A₄는 N 또는 CR₁을 나타내고,

X는 O, S(O)_n, C=W, NR₄, NC(=O)R₅ 및 CR₆R₇로부터 선택되는 2가 기이고,

W는 O, S, NR₂₀이고,

Y는 N 또는 CR₈이고,

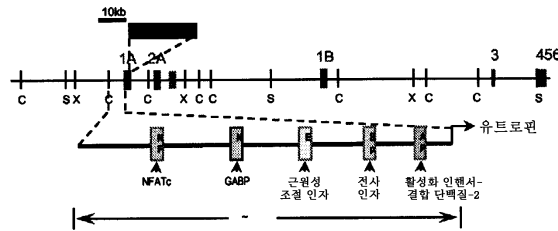
R₄, R₅, R₆, R₈, R₉ 및 NR₂₀ 중 하나는 -L-R₃을 나타내고, 여기서, L은 단일 결합 또는 연결기이고,

또한,

(뒷면에 계속)

대표도 - 도1

루시페라제 리포터 분석(유된 H2K 세포)



동일하거나 상이할 수 있는 R_1 , R_3 내지 R_9 는 독립적으로 수소 또는 치환기를 나타내고,

R_{20} 은 수소, 히드록실, 아릴로 임의 치환된 알킬, 아릴로 임의 치환된 알콕시, 아릴, CN, 임의 치환된 알콕시, 임의 치환된 아릴옥시, 임의 치환된 알카노일, 임의 치환된 아로일, NO_2 , $\text{NR}_{30}\text{R}_{31}$ 을 나타내고, 여기서, 동일하거나 상이할 수 있는 R_{30} 및 R_{31} 은 수소, 임의 치환된 알킬 또는 임의 치환된 아릴을 나타내고; 또한, R_{30} 및 R_{31} 중 하나는 임의 치환된 알카노일 또는 임의 치환된 아로일을 나타낼 수 있고,

n 은 0 내지 2의 정수를 나타내고,

또한,

인접한 한 쌍의 A_1 내지 A_4 가 각각 CR_1 을 나타내는 경우, 인접한 탄소 원자는 그의 치환기와 함께 고리 B를 형성할 수 있고,

X가 CR_6R_7 인 경우, R_6 및 R_7 은 이들이 부착되어 있는 탄소 원자와 함께 고리 C를 형성할 수 있다.

(72) 발명자

존슨, 피터 데이빗

영국 오엑스14 4알와이 옥스포드셔 애빙던 밀튼 파크 91 바스톡스 피엘씨

프라이스, 폴 다미엔

영국 오엑스14 4알와이 옥스포드셔 애빙던 밀튼 파크 91 바스톡스 피엘씨

드 무어, 올리비에

영국 오엑스14 4알와이 옥스포드셔 애빙던 밀튼 파크 91 바스톡스 피엘씨

누젠트, 게리

영국 오엑스14 4알와이 옥스포드셔 애빙던 밀튼 파크 91 바스톡스 피엘씨

스토러, 리차드

영국 오엑스14 4알와이 옥스포드셔 애빙던 밀튼 파크 91 바스톡스 피엘씨

파이, 리차드 조셉

영국 오엑스14 4알와이 옥스포드셔 애빙던 밀튼 파크 91 바스톡스 피엘씨

도르간, 폴린 리차드

영국 오엑스14 4알와이 옥스포드셔 애빙던 밀튼 파크 91 바스톡스 피엘씨

(30) 우선권주장

0614690.6 2006년07월24일 영국(GB)

0619281.9 2006년09월29일 영국(GB)

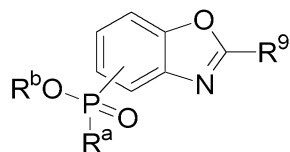
0623983.4 2006년11월30일 영국(GB)

특허청구의 범위

청구항 1

하기 화학식 1a의 화합물.

<화학식 1a>



식 중,

R^a 는 메틸, 에틸 또는 프로필이고,

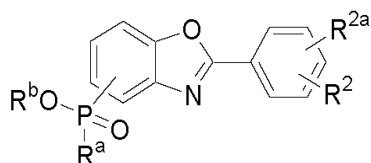
R^b 는 메틸 또는 에틸이고,

R^9 는 $L-R^3$ (여기서, L은 단일 결합이고, R^3 은 치환 또는 비치환 아틸)이다.

청구항 2

제1항에 있어서, 하기 화학식 1b의 화합물.

<화학식 1b>



식 중,

R^2 는 할로 또는 트리플루오로메틸이고,

R^{2a} 는 수소, 할로 또는 트리플루오로메틸이고,

R^2 와 R^{2a} 는 이들이 결합된 탄소 원자와 함께 방향족 또는 헤테로시클릭 고리를 형성한다.

청구항 3

제1항에 있어서, R^a 가 에틸인 화합물.

청구항 4

제2항에 있어서, R^2 및 R^{2a} 중 하나 또는 둘 다가 클로로, 플루오로 및 트리플루오로메틸에서 선택되는 화합물.

청구항 5

제2항에 있어서, R^a 가 에틸이고, R^2 및 R^{2a} 중 하나 또는 둘 다가 클로로 및 플루오로에서 선택되는 화합물.

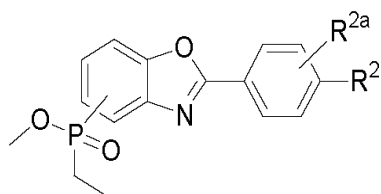
청구항 6

제2항에 있어서, R^a 가 에틸이고, R^2 및 R^{2a} 중 하나 또는 둘 다가 클로로, 플루오로 또는 트리플루오로메틸인 화

합물.

청구항 7

제3항에 있어서, 하기 화학식의 화합물.



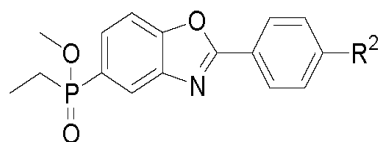
식 중,

R^2 는 클로로 및 플루오로에서 선택되고,

R^{2a} 는 수소, 클로로 및 플루오로에서 선택된다.

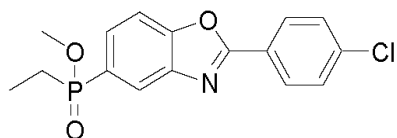
청구항 8

제7항에 있어서, 하기 화학식의 화합물.



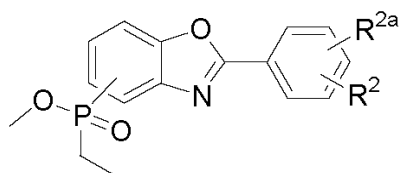
청구항 9

제8항에 있어서, 하기 화학식의 화합물.



청구항 10

제2항에 있어서, 하기 화학식의 화합물.



식 중, R^2 와 R^{2a} 는 이들이 결합된 탄소 원자와 함께 나프틸렌 또는 퀴놀린을 형성한다.

청구항 11

제1항 내지 제10항 중 어느 한 항에 따른 화합물을 포함하는, 뒤시엔느(Duchenne) 근이영양증 또는 베커(Becker) 근이영양증의 치료를 위한 제약 조성물.

청구항 12

삭제

청구항 13

삭제

청구항 14

삭제

청구항 15

삭제

청구항 16

삭제

청구항 17

삭제

청구항 18

삭제

청구항 19

삭제

청구항 20

삭제

청구항 21

삭제

청구항 22

삭제

청구항 23

삭제

청구항 24

삭제

청구항 25

삭제

청구항 26

삭제

청구항 27

삭제

청구항 28

삭제

청구항 29

삭제

청구항 30

삭제

청구항 31

삭제

청구항 32

삭제

청구항 33

삭제

청구항 34

삭제

청구항 35

삭제

청구항 36

삭제

청구항 37

삭제

청구항 38

삭제

명세서

기술분야

[0001] 본 발명은 뒤시엔느 근이영양증의 치료 방법에 관한 것이다.

배경기술

[0002] 뒤시엔느 근이영양증(Duchenne muscular dystrophy, DMD)은 근육 기능의 점진적 저하와 관련된 보편적인 유전적 신경근육 질환으로, 150년 전 프랑스 신경과 의사인 뒤시엔느 드 불로뉴(Duchenne de Boulogne)에 의해 최초 기재되고, 그의 이름을 따서 명명되었다. DMD는 디스트로핀 유전자 내 돌연변이에 의해 야기되며 남성 3,500명 중 1명이 걸리는 X-관련 열성 장애로 특징지어진다. 2,600,000개의 DNA 염기쌍을 포함하고 79개의 엑손을 함유하는 상기 유전자는 인간 게놈 중 가장 크다. 디스트로핀 돌연변이의 대략 60%는 프레임시프트 에러 다운스트림(frameshift errors downstream)을 유발하는 대량 삽입 또는 결실인 반면, 대략 40%는 점돌연변이 또는 작은 프레임시프트 재정렬이다. DMD 환자의 대부분은 디스트로핀 단백질이 결여된다. 베커(Becker) 근이영양증은 디스트로핀 단백질의 양 감소 또는 크기 변경으로 인한 보다 경미한 형태의 DMD이다. DMD의 높은 발생률(정자 또는 난자 10,000개 중 하나)은 유전학적 스크리닝으로 상기 질환이 결코 제거되지 않을 것임을 의미하므로, 효과적인 요법이 상당히 요구된다.

[0003] 많은 천연 및 조작된 DMD 동물 모델이 존재하며, 임상전시험에 대한 토대를 제공한다 [Allamand, V. &

Campbell, K. P. Animal models for muscular dystrophy: valuable tools for the development of therapies. Hum. Mol. Genet. 9, 2459-2467 (2000)]. 마우스, 고양이 및 개 모델 모두가 DMD 유전자 내 돌연변이를 가지며 인간에서 발견되는 바와 유사한 생화학적 디스트로핀병증을 나타내지만, 이들은 표현형에 있어서 놀랍고도 상당한 변이를 나타낸다. 인간과 같이, 개 (골든 리트리버 근이영양증 및 독일 단모 포인터) 모델은 중증 표현형을 가지며, 이들 개는 전형적으로 심부전증으로 죽는다. 개는 인간 질환에 대한 최상의 표현형 모사를 제공하며, 임상전시험에 대한 주요 기준으로 고려된다. 유감스럽게도, 이들 동물을 사육하는 것은 비용이 많이 들고 어려우며, 임상 시간 진행이 한배 새끼 사이에서 가변적일 수 있다.

[0004] mdx 마우스는 입수가능성, 짧은 임신 기간 및 성숙 기간, 비교적 저렴한 비용으로 인해 가장 광범위하게 사용되는 모델이다 [Bulfield, G., Siller, W. G., Wight, P. A. & Moore, K. J. X chromosome-linked muscular dystrophy (mdx) in the mouse. Proc. Natl Acad. Sci. USA 81, 1189-1192 (1984)].

[0005] 약 20년 전 DMD 유전자의 발견 이후로, DMD 치료에 있어서 다양한 정도의 성공이 임상전 동물 시험에서 달성되었고, 이들 중 일부는 인간에서 수행되었다. 현 치료 방법은 크게 하기 3가지 군으로 나눌 수 있다: 첫째, 유전자 요법적 접근법, 둘째, 세포 요법, 및 마지막으로 약리 요법. 유전자- 및 세포-기재 요법은, 특히 질환 진행의 초기에 시작된 경우 제2 결함/병리 (예를 들면, 구축)를 따로 고칠 필요성을 미연에 방지하는 중요한 이점을 제공한다. 유감스럽게도, 이들 접근법은 많은 기술적 장애에 직면하고 있다. 독성, 안정한 발현 결여 및 전달 곤란성 뿐만 아니라, 바이러스 벡터, 근육모세포 및 새로 합성된 디스트로핀에 대한 면역 반응이 또한 보고되고 있다.

발명의 내용

해결하려는 과제

[0006] 근이영양증의 치료를 위한 약리학적 접근법은 결손 유전자 및/또는 단백질을 전달하도록 고안되지 않았다는 점에서 유전자- 및 세포-기재 접근법과는 상이하다. 일반적으로, 약리학적 방법은 염증을 감소시키고, 칼슘 항상성을 개선하며, 근육 전구체 증식 또는 결정(commitment)을 증가시키는 것과 같은 방법으로 표현형을 개선하려는 시도에 약물/분자를 사용한다. 이들 방법은 전신성 전달이 용이하며, 벡터 및 세포-기재 요법과 관련된 많은 면역 및/또는 독성 문제를 회피할 수 있다는 이점을 제공한다. 염증을 감소시키기 위해 코르티코스테로이드 및 나트륨 크로모글리세이트를, 칼슘 항상성을 유지하기 위해 단트롤렌을, 및 근육을 증가시키기 위해 클렌부테롤을 사용한 연구에서 장래성 있는 결과를 얻었지만, 이들 가능한 요법은 모두 DMD를 치료하는 데 있어서는 효과적인 것으로 나타나지 않았다.

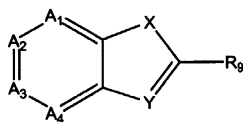
[0007] 또다른 약리학적 접근법은 상향조절 요법이다. 상향조절 요법은 결손 유전자를 대체하기 위한 또다른 유전자의 발현 증가에 기초하며, 특히, 이전에 없던 단백질에 대해 면역 반응이 시작되는 경우에 유리하다. 디스트로핀의 상염색체 파라로그(paralogue)인 유티로핀의 상향조절이 DMD에 대해 가능한 요법으로 제안되어 왔다 [Perkins & Davies, Neuromuscul Disord, S1: S78-S89 (2002), Khurana & Davies, Nat Rev Drug Discov 2:379-390 (2003)]. 유티로핀이 트랜스제닉 mdx 마우스에서 과발현되는 경우, 근육 세포의 횡문근형질막을 국소화하고 디스트로핀-관련 단백질 복합체 (DAPC)의 성분을 회복시켜, 이영양성 발병을 예방하고, 이어서 골격 근육의 기능 개선을 가져온다. 개에서 유티로핀의 아데노바이러스성 전달이 병리를 예방하는 것으로 나타났다. 마우스 모델에서 출생 직후 증가된 유티로핀 발현 개시가 효과적일 수 있고, 유티로핀이 도처에서 발현되는 경우 독성이 관찰되지 않는 데, 이는 이 요법의 인간 적용에 대해 장래성을 제시한다. 병리를 감소시키기에 충분한 수준으로 내인성 유티로핀을 상향조절하는 것은 작은 확산가능한 화합물의 전달에 의해 달성될 수 있다.

과제의 해결 수단

[0008] 본 발명에 와서야, 예언적 스크리닝(predictive screen)에서 내인성 유티로핀을 상향조절하고, 이에 따라 DMD의 치료에 유용할 수 있는 화합물 군이 발견되었다.

[0009] 본 발명에 따라, 뒤시엔스 근이영양증, 베커 근이영양증 또는 악액질의 치료학적 및/또는 예방적 치료를 위한 의약 제조에서 하기 화학식 I의 화합물 또는 그의 제약상 허용되는 염의 용도가 제공된다.

[0010] <화학식 I>



[0011]

[0012] 식 중,

[0013] 동일하거나 상이할 수 있는 A_1 , A_2 , A_3 및 A_4 는 N 또는 CR_1 을 나타내고,

[0014] X는 O, $S(O)_n$, $C=W$, NR_4 , $NC(=O)R_5$ 및 CR_6R_7 로부터 선택되는 2가 기이고,

[0015] W는 O, S, NR_{20} 이고,

[0016] Y는 N 또는 CR_8 이고,

[0017] R_4 , R_5 , R_6 , R_8 , R_9 및 NR_{20} 중 하나는 $-L-R_3$ 을 나타내고, 여기서, L은 단일 결합 또는 연결기이고,

[0018] 또한, 동일하거나 상이할 수 있는 R_3 내지 R_9 는 독립적으로 수소 또는 치환기를 나타내고,

[0019] R_{20} 은 수소, 히드록실, 아릴로 임의 치환된 알킬, 아릴로 임의 치환된 알콕시, 아릴, CN, 임의 치환된 알콕시, 임의 치환된 아릴옥시, 임의 치환된 알카노일, 임의 치환된 아로일, NO_2 , $NR_{30}R_{31}$ 을 나타내고, 여기서, 동일하거나 상이할 수 있는 R_{30} 및 R_{31} 은 수소, 임의 치환된 알킬 또는 임의 치환된 아릴을 나타내고; 또한, R_{30} 및 R_{31} 중 하나는 임의 치환된 알카노일 또는 임의 치환된 아로일을 나타낼 수 있고,

[0020] n은 0 내지 2의 정수를 나타내고,

[0021] 또한,

[0022] 인접한 한 쌍의 A_1 내지 A_4 가 각각 CR_1 을 나타내는 경우, 인접한 탄소 원자는 그의 치환기와 함께 고리 B를 형성할 수 있고,

[0023] X가 CR_6R_7 인 경우, R_6 및 R_7 은 이들이 부착되어 있는 탄소 원자와 함께 고리 C를 형성할 수 있고,

[0024] A_1 내지 A_4 중 하나가 CR_1 이고, R_1 이 COR_{16} 을 나타내는 경우, R_{16} 은 바람직하게는 알콕시 또는 $NR_{10}R_{11}$ 이다.

[0025] 화학식 I의 화합물은 호변이성질체, 거울상이성질체 및 부분입체이성질체 형태로 존재할 수 있으며, 이들 모두가 본 발명의 범주에 포함된다.

[0026] 특정한 화학식 I의 화합물은 신규하다. 본 발명에 따라, 신규한 화학식 I의 화합물 및 그의 제조 방법, 그를 함유하는 조성물 및 그의 제약으로서의 용도가 또한 제공된다.

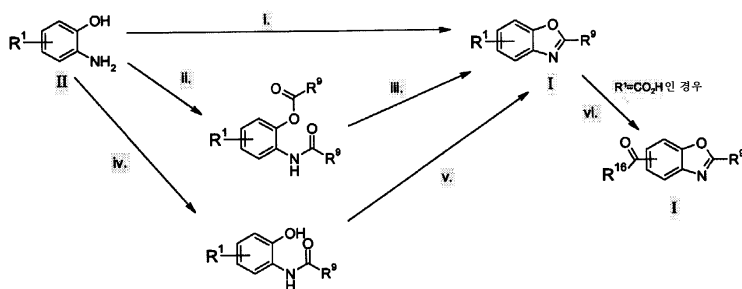
[0027] 화학식 I의 범주에 포함되는 화합물 중 일부가 공지되어 있지만, 예컨대 제약으로서는 공지되지 않았다. 본 발명에 따라, 제약으로서의 용도에 대해서는 이전에 기재되지 않았던 당업계에 공지된 화합물을 제약으로서 청구한다.

[0028] 화학식 I의 화합물은 모두 통상의 방법으로 제조될 수 있다. 헤테로방향족 고리계를 제조하는 방법이 당업계에 널리 공지되어 있다. 특히, 합성 방법은 문헌 [Comprehensive Heterocyclic Chemistry, Vol. 1 (Eds.: AR Katritzky, CW Rees), Pergamon Press, Oxford, 1984 and Comprehensive Heterocyclic Chemistry II: A Review of the Literature 1982-1995 The Structure, Reactions, Synthesis, and Uses of Heterocyclic Compounds, Alan R. Katritzky (Editor), Charles W. Rees (Editor), E.F.V. Scriven (Editor), Pergamon Pr, June 1996]에서 논의된다. 중요한 화합물의 합성을 돕는 다른 일반적인 방법으로는 문헌 [March's Advanced Organic Chemistry: Reactions, Mechanisms, and Structure, Wiley-Interscience; 5th edition (January 15, 2001)]을 들 수 있다. WO 2006/044503호에서 논의된 합성 방법이 특히 적합하다.

[0029] 일부 일반적인 합성 방법은 다음과 같다.

[0030] 화학식 I의 벤즈옥사졸 또는 그의 제약상 허용되는 염을 화학식 II의 화합물로부터 제조할 수 있다.

[0031] <반응식 1>



[0032]

[0033] 반응 조건:

[0034] i. R^9CO_2H (또는 R^9COCl), PPA, 가열; 또는 R^9COCl , 디옥산, μ 과, 이어서 NaOH

[0035] ii. R^9COCl , 피리딘, rt

[0036] iii. TsOH, 크실렌

[0037] iv. R^9CO_2H , HATU, 피리딘, DMF

[0038] v. PPA, 가열

[0039] vi. HATU, DMF, iPr_2Net , 알킬NH₂, rt

[0040] 벤즈옥사졸 I의 형성을 상기에 예시된 바와 같이 다양한 방식으로 수행할 수 있다.

[0041] 예를 들면, 화학식 II의 화합물과 아실 유도체, 예컨대 산 또는 산 클로라이드를 반응시키고, 산 촉매, 예를 들면 폴리인산의 존재하에 적절한 용매 및 적절한 온도에서 가열한다. 이는 상기에서 단계 i로 예시된다.

[0042] 상기 반응은 비양성자성 용매, 바람직하게는 극성 비양성자성 용매, 예를 들면 테트라히드로푸란, 및 -10 °C 내지 +150 °C의 온도에서 수행될 수 있다. 일반적으로, 상기 반응은 정상압에서 용매의 환류 온도에서 수행될 수 있다.

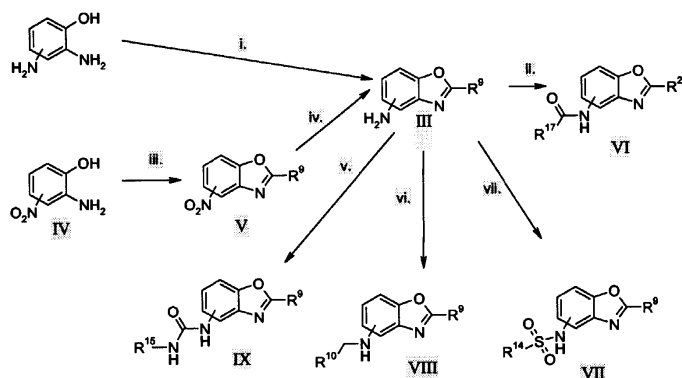
[0043] 별법으로, 화학식 II의 화합물을 먼저, 아실화가 산소 및 질소 모두에서 발생하도록 과량의 아실 유도체 R^9COX (식 중, X는 예를 들면 Cl임)와 반응시킬 수 있다. 이는, 예를 들면 실온에서 피리딘 내 반응으로 일어날 수 있다 (단계 ii). 이어서, 예를 들면 이중 아실화된 생성물을 산 촉매, 예컨대 술폰산의 존재하에 크실렌에서 가열하는 후속적인 고리 폐쇄 단계에서 화학식 II의 화합물을 형성하기 위한 고리 폐쇄가 일어날 수 있다 (단계 iii).

[0044] 화학식 I의 화합물의 형성의 또다른 일례를 단계 iv 및 v로 나타낸다. 먼저, 펩티드 커플링 시약을 사용하여 아민과 산을 커플링한다. 이용가능한 커플링 시약은 당업계에 널리 공지되어 있으며, HBTU, TBTU 및 HATU를 들 수 있다. 적절한 커플링 시약의 존재하에 아마이드 형성은, 예를 들면 친핵성 촉매, 예컨대 피리딘의 존재하에 DMF에서 일어난다.

[0045] $R^1 = CO_2H$ 인 경우, 상기 산은 단계 vi에서 나타낸 바와 같이 아민과 커플링될 수 있다. 적합한 커플링 조건으로는 실온에서 iPr_2Net , $R^{16}NH_2$ 의 존재하에 DMF 중 HATU의 사용을 들 수 있다.

[0046] 6원 고리가 아마이드 유도체로 치환된 화합물이 특히 중요하다. 이는 중간체 아민 유도체 III으로부터 생성될 수 있다.

[0047] <반응식 2>



[0048]

[0049] 반응 조건:

[0050] i. i의 경우; 반응식 1

[0051] ii. R¹⁷COCl, 피리딘 (또는 NEt₃, DCM); 또는 R⁹CO₂H, HATU, 피리딘, DMF

[0052] iii. i의 경우; 반응식 1

[0053] iv. SnCl₂, EtOH, 가열; 또는 Pd/C, H₂, IMS; 또는 Fe, NH₄Cl, IMS/물, 가열

[0054] v. R⁹NCO, DCM, rt

[0055] vi. NaBH(OAc)₃, R¹⁰CHO, DCE, rt

[0056] vii. R¹⁴SO₂Cl, 피리딘, DCM, rt

[0057] 중간체 아민 III은 반응식 1, 단계 i에서 약술한 방법 (여기서, R₁ = NH₂임) 또는 별법으로 반응식 2의 단계 iii 및 iv로 정의된 2단계 방법으로 합성될 수 있다. 니트로 치환된 벤즈옥사졸 유도체 V는 니트로 치환된 페닐 유도체 IV로부터, 또한 반응식 1, 단계 1에서 예시된 바와 유사한 방법으로 생성되고, 이어서 니트로-벤즈옥사졸 유도체 V를 후속 단계에서 환원하여 중간체 아민 III을 제공한다. 당업자는 니트로기를 환원하여 아민을 제공하는 적합한 방법을 알고 있다. NO₂를 NH₂로 환원하는 선택적인 방법으로는 0 °C 내지 80 °C의 온도에서 적합한 용매, 예를 들면 에탄올 중 Sn/HCl 또는 H₂/Pd/C, 또는 공업용 메틸화 스피릿/물 중 철, NH₄Cl의 존재하에 가열하는 것을 들 수 있다.

[0058] 이어서, 중간체 아민 III을 필요한 경우 커플링할 수 있다.

[0059] 아민 III과 아실 유도체를 커플링하여 화학식 VI의 아마이드 유도체를 생성할 수 있다. 이는, 예를 들면 피리딘 또는 CH₂Cl₂ 중 적절한 산 클로라이드와의 반응으로 달성될 수 있다 (단계 ii).

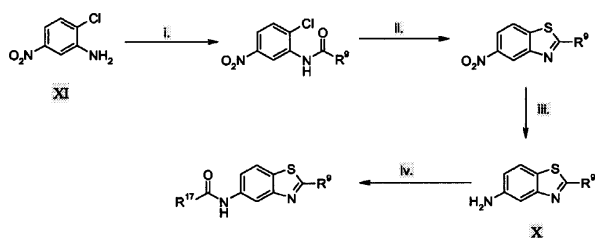
[0060] 실온에서 피리딘의 존재하에, 예를 들면 CH₂Cl₂에서 아민 III을 적절한 술폰일 클로라이드와 반응시켜 술폰아미드 유도체 VII을 생성할 수 있다.

[0061] 적절한 환원성 아민화 방법을 이용하여 아민 유도체 VIII을 생성할 수 있다. 환원성 아민화 방법은 당업계에 널리 공지되어 있다. 이로는, 예를 들면 1,2-디클로로에탄에서 아민과 적절한 알데히드 및 나트륨 트리세톡시보로히드라이드와의 반응을 들 수 있다.

[0062] 예를 들면, CH₂Cl₂ 중 실온에서 아민 III을 적절한 이소시아네이트와 반응시켜 화학식 IX의 우레아 유도체를 생성할 수 있다.

[0063] 화학식 X의 벤조티아졸 또는 그의 제약상 허용되는 염을 화학식 XI의 화합물로부터 제조할 수 있다.

[0064] <반응식 3>



[0065]

[0066] 반응 조건:

[0067] i. R^9COCl , 피리딘, rt

[0068] ii. Na_2S , S_8 , IMS, 가열

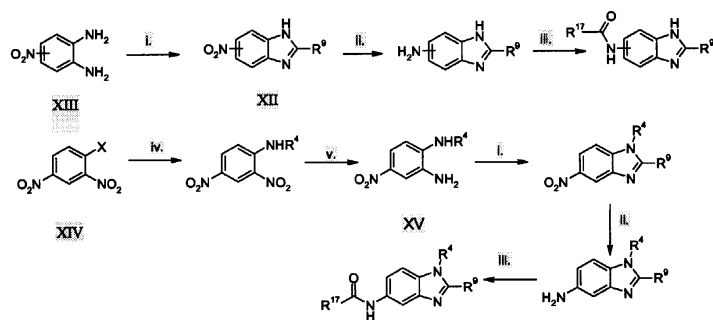
[0069] iii. Fe , NH_4Cl , IMS, 가열

[0070] iv. $R^{17}COCl$, 피리딘 (또는 NEt_3 , DCM); 또는 $R^{17}CO_2H$, HATU, 피리딘, DMF

[0071] 화학식 XI의 화합물을, 예를 들면 피리딘 중 적절한 산 클로라이드와의 반응 (단계 i)으로 또는 적절한 펩티드 커플링 시약을 사용하여 상응하는 아마이드로 전환시킬 수 있다. 이러한 방법은 상기에서 논의된 바와 같이 당업계에 널리 공지되어 있다.

[0072] 이어서, 아마이드를, 공업용 메틸화 스피릿 내 승온에서 Na_2S , S_8 과의 반응을 포함한 원-포트(one-pot) 반응에서 화학식 XII의 니트로-벤조티아졸로 전환시킬 수 있다. 상기 니트로 유도체 XII를 상기에서 논의된 바와 같이 환원할 수 있고, 생성된 1급 아민을 반응식 2, 단계 ii, v, vi 및 vii에서 1급 아민에 대한 방식과 유사하게 조작할 수 있다.

[0073] <반응식 4>



[0074]

[0075] 반응 조건:

[0076] i. R^9CO_2H , PPA, 가열; 또는 R^9COCl , 피리딘; 이어서 PPA, 가열

[0077] ii. $SnCl_2$, IMS, 가열; 또는 Pd/C , H_2 , IMS

[0078] iii. $R^{17}COCl$, 피리딘 등 (반응식 1에 따름)

[0079] iv. R^4NH_2 , DMSO, 염기, 가열

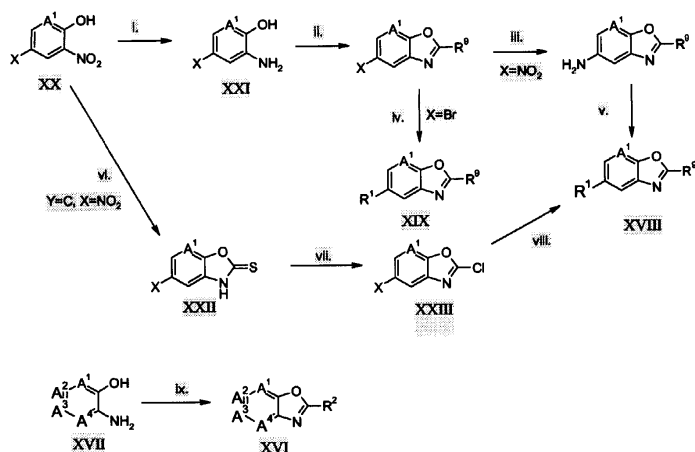
[0080] v. 나트륨 디티오나이트, THF/물; 또한 ii 참조

[0081] 화학식 XII의 벤즈이미다졸을 반응식 4에 따라 생성할 수 있다. 산 촉매, 예를 들면 폴리인산의 존재하에 적절한 용매 및 적절한 온도에서 화학식 XIII의 디아미노페닐 유도체와 아실 유도체, 예컨대 산 또는 산 클로라이드와의 반응은 화학식 XII의 벤즈이미다졸 유도체를 생성한다. 이는 상기에서 단계 i로 예시된다. 이어서, 니트

로기를 환원 및 조작하여 상기에서 논의된 바와 같이 기타 관능성을 형성할 수 있다.

[0082] 방법으로, 예를 들어 염기의 존재하에 승온에서 DMSO 내 화학식 XIV의 디-니트로 화합물 (식 중, X는 이탈기, 바람직하게는 할로젠, 예컨대 염소 또는 브로소를 나타냄)과 아민과의 반응으로 벤즈이미다졸을 생성할 수 있다. 이어서, THF/물 중 나트륨 디티오나이트를 이용하여 하나의 니트로기의 후속적인 선택적 환원을 수행하여 화학식 XV의 디아민을 제공할 수 있다. 이어서, 벤즈이미다졸 형성을 위한 고리 폐쇄 및 니트로기의 조작을 상기에서 예시 및 논의된 바와 같이 수행할 수 있다.

[0083] <반응식 5>



[0084]

[0085] 반응 조건:

[0086] i. Na₂S 수화물, MeOH, NH₄Cl, 물; 또는 Na₂S₂O₄/EtOH; 또는 SnCl₂, EtOH

[0087] ii. i의 경우, 반응식 1; 또는 R⁹COCl, 피리딘; 이어서 PPA, 가열

[0088] iii. SnCl₂, EtOH, 가열

[0089] iv. R¹B(OH)₂, Pd(PPh₃)₄, K₂CO₃, 디옥산/물, μ 파

[0090] v. R¹⁷COCl, 피리딘, rt

[0091] vi. EtOC(S)SK, 피리딘, 가열

[0092] vii. SOCl₂; 또는 POCl₃

[0093] viii. R³B(OH)₂, Pd(PPh₃)₄, K₂CO₃, 용매

[0094] ix. PPA, R²CO₂H, 가열

[0095] 화학식 XVI의 벤즈옥사졸을 상기에서 논의된 바와 유사한 방법으로 제조할 수 있다. 예를 들면, 상기 ix에 예시된 방법은 화학식 XVII의 화합물을 산 촉매 및 적절한 아실 유도체, 예를 들어 카르복실산의 존재하에 적절한 용매에서 가열하는 것을 포함한다.

[0096] 화학식 XVIII 및 XIX의 벤즈옥사졸을 화학식 XX의 적절한 니트로 화합물로부터 합성할 수 있다. 니트로 화합물 XX의 환원은 상응하는 아미노 알코올 XXI (예를 들면, Sn/HCl 또는 당업계에 공지된 임의의 다른 적절한 방법 이용)을 제공한다. 이어서, 본원에 개시된 임의의 방법을 이용하여 아미노 알코올과 적절한 아실 유도체와의 반응을 통해 벤즈옥사졸 형성을 달성할 수 있다.

[0097] 화학식 XXIII (식 중, X = Br)의 옥사졸의 경우, 이어서 스즈끼(Suzuki) 커플링 반응을 이용하여 추가 유도체를 제공할 수 있다. 적절한 조건의 예는 R¹B(OH)₂, Pd(PPh₃)₄, K₂CO₃, 디옥산/물, μ 파이고, 여기서, 화학식 XIX의 벤즈옥사졸이 얻어진다. 당업자는 스즈끼 커플링 반응에 정통하고, 조건을 용이하게 조작하여 다양한 화합물을

생성할 수 있다.

- [0098] $X = NO_2$ 인 단계 ii에 의해 생성된 옥사졸의 경우, 상기에서 논의된 당업계에 널리 공지된 임의의 방법을 이용하여 니트로기를 상응하는 아민으로 환원할 수 있다. 이어서, 아민을, 예를 들면 상기 반응식 2에서 논의된 임의의 방법을 이용하여 조작하여, 예를 들면 화학식 XVIII의 화합물을 수득할 수 있다.
- [0099] 별법으로, 화학식 XVIII의 벤즈옥사졸은 또한, 피리딘에서 화학식 XX의 화합물을 EtOC(S)SK와 함께 가열하여 생성된 티오펜카바메이트 XXII를 통해 화학식 XX의 화합물로부터 제조될 수 있다. 화학식 XXII의 화합물을, 예를 들면 공지된 시약, 예컨대 $SOCl_2$ 또는 $POCl_3$ 을 사용하여 화학식 XXIII의 클로라이드로 전환할 수 있다. 예를 들면, 상기 단계 viii에서 예시된 조건을 이용하여 스즈키 커플링하여 화학식 XVIII의 벤즈옥사졸을 수득한다.
- [0100] 상기 방법에서, 출발 물질에 존재하는 임의의 관능성 기, 예를 들면 히드록시 또는 아미노 기가 보호될 필요가 있을 수 있고, 따라서 하나 이상의 보호기를 제거하여 화학식 I의 화합물을 생성하는 것이 필요할 수 있다.
- [0101] 적합한 보호기 및 그의 제거 방법은, 예를 들면 문헌 ["Protective Groups in Organic Synthesis" by T. Greene and P.G.M. Wutts, John Wiley and Sons Inc., 1991]에 기재된 방법이다. 히드록시기를, 예를 들면 아릴메틸기, 예컨대 페닐메틸, 디페닐메틸 또는 트리페닐메틸; 아실기, 예컨대 아세틸, 트리클로로아세틸 또는 트리플루오로아세틸에 의해; 또는 테트라히드로피라닐 유도체로서 보호할 수 있다. 적합한 아미노 보호기로는 아릴메틸기, 예컨대 벤질, (R,S)- α -페닐에틸, 디페닐메틸 또는 트리페닐메틸, 및 아실기, 예컨대 아세틸, 트리클로로아세틸 또는 트리플루오로아세틸을 들 수 있다. 수소화분해, 산 또는 염기 가수분해, 또는 광분해를 포함한 통상의 탈보호 방법이 이용될 수 있다. 아릴메틸기는, 예를 들면 금속 촉매, 예컨대 목탄상 팔라듐의 존재 하에 수소화분해로 제거될 수 있다. 테트라히드로피라닐기는 산성 조건하 가수분해로 절단될 수 있다. 아실기는 염기, 예컨대 수산화나트륨 또는 탄산칼륨을 이용한 가수분해로 제거될 수 있거나, 또는 트리클로로아세틸과 같은 기는, 예를 들면 아연 및 아세트산을 이용한 환원으로 제거될 수 있다.
- [0102] 화학식 I의 화합물 및 그의 염을 통상의 기술을 이용하여 그의 반응 혼합물로부터 분리할 수 있다.
- [0103] 유리 산 또는 그의 염, 또는 유리 염기 또는 그의 염 또는 유도체와 1당량 이상의 적절한 염기 또는 산과의 반응으로 화학식 I의 화합물의 염을 형성할 수 있다. 상기 반응은 염이 불용성인 용매 또는 매질에서, 또는 염이 가용성인 용매, 예를 들면 에탄올, 테트라히드로퓨란 또는 디에틸 에테르에서 수행될 수 있고, 이는 진공에서 또는 동결 건조로 제거될 수 있다. 상기 반응은 또한 상호교환 방법일 수 있거나, 또는 이온 교환 수지 상에서 수행될 수 있다.
- [0104] 화학식 I의 화합물의 제약상 허용되는 염으로는 알칼리 금속 염, 예를 들면 나트륨 및 칼륨 염; 알칼리 토금속 염, 예를 들면 칼슘 및 마그네슘 염; III족 원소의 염, 예를 들면 알루미늄 염; 및 암모늄 염을 들 수 있다. 적합한 유기 염기와 염, 예를 들면, 히드록시아민; 저급 알킬아민, 예를 들면 메틸아민 또는 에틸아민; 치환된 저급 알킬아민, 예를 들면 히드록시 치환된 알킬아민; 또는 모노시클릭 질소 헤테로시클릭 화합물, 예를 들면 피페리딘 또는 모르폴린과의 염; 및 아미노산, 예를 들면 아르기닌 또는 리신 등, 또는 그의 N-알킬 유도체; 또는 아미노당, 예를 들면 N-메틸-D-글루카민 또는 글루코사민과의 염이 있다. 예를 들면, 생성물 분리 또는 정제에서 기타 염도 또한 유용하지만, 비독성 생리학상 허용되는 염이 바람직하다.
- [0105] 부분입체이성질체를 통상의 기술, 예를 들면 크로마토그래피 또는 분별 결정화를 이용하여 분리할 수 있다. 통상의 기술, 예를 들면 분별 결정화 또는 HPLC를 이용한 라세미체 또는 기타 화합물의 혼합물의 분리로 다양한 광학 이성질체를 분리할 수 있다. 별법으로, 라세미화를 유발하지 않을 조건하에서 적절한 광학 활성 출발 물질의 반응으로 목적하는 광학 이성질체를 제조할 수 있다.
- [0106] 알킬이 나타낼 수 있는 치환기로는 메틸, 에틸, 부틸, 예컨대 sec 부틸을 들 수 있다.
- [0107] 할로젠은 F, Cl, Br 및 I, 특히 Cl을 나타낼 수 있다.
- [0108] 화학식 I의 화합물 중 R_3 이 나타낼 수 있는 치환기의 예로는 알킬, 알콕시 또는 아릴을 들 수 있고, 이들 각각은 동일하거나 상이할 수 있는 하나 이상의, 바람직하게는 1 내지 3개의 치환기 R_2 로 임의의 치환될 수 있다.
- [0109] 또한, L이 단일 결합인 경우, R_3 은
- [0110] 알킬 또는 임의의 치환된 아릴로 임의의 치환된 티오알킬,

- [0111] 아릴이 임의 치환된 티오아릴,
- [0112] 임의 치환된 아릴,
- [0113] 히드록실,
- [0114] NO_2 ,
- [0115] CN ,
- [0116] $\text{NR}_{10}\text{R}_{11}$,
- [0117] 할로젠,
- [0118] SO_2R_{12} ,
- [0119] $\text{NR}_{13}\text{SO}_2\text{R}_{14}$,
- [0120] $\text{C}(=\text{W})\text{R}_{16}$,
- [0121] $\text{OC}(=\text{W})\text{NR}_{10}\text{R}_{11}$,
- [0122] $\text{NR}_{15}\text{C}(=\text{W})\text{R}_{17}$,
- [0123] $\text{P}(=\text{O})\text{OR}_{40}\text{R}_{41}$
- [0124] 을 나타낼 수 있고,
- [0125] 동일하거나 상이할 수 있는 R_{10} , R_{11} , R_{12} , R_{13} , R_{14} , R_{15} , R_{16} , R_{17} , R_{40} 및 R_{41} 은 수소, 임의 치환된 아릴로 임의 치환된 알킬, 임의 치환된 아릴을 나타내고,
- [0126] 또한,
- [0127] $\text{NR}_{10}\text{R}_{11}$ 은 이들이 부착되어 있는 질소와 함께 고리를 형성할 수 있고,
- [0128] R_{12} 는 $\text{NR}_{10}\text{R}_{11}$ 과 동일한 의미를 가질 수 있고,
- [0129] R_{17} 이 $\text{NR}_{10}\text{R}_{11}$ 을 나타내는 경우, 동일하거나 상이할 수 있는 R_{10} 및 R_{11} 은 수소, CO알킬 및 CO 임의 치환된 아릴을 나타낼 수 있고,
- [0130] 동일하거나 상이할 수 있는 R_{16} 및 R_{17} 은 각각
- [0131] 하나 이상의 할로젠, 알콕시 임의 치환된 아릴 또는 임의 치환된 아릴로 치환된 알킬,
- [0132] 임의 치환된 아릴옥시,
- [0133] 아릴 또는 $\text{NR}_{10}\text{R}_{11}$
- [0134] 을 나타낼 수 있고,
- [0135] R_{16} 또는 R_{17} 이 $\text{NR}_{10}\text{R}_{11}$ 을 나타내는 경우, R_{10} 및 R_{11} 중 하나는 또한 임의 치환된 CO알킬 또는 임의 치환된 CO아릴을 나타낼 수 있고,
- [0136] 또한, R_{16} 은 R_{17} 과 공유하는 정의 뿐만 아니라, 히드록시를 나타낼 수 있다.
- [0137] 동일하거나 상이할 수 있는 R_1 및 R_2 가 나타낼 수 있는 치환기의 예로는
- [0138] 하나 이상의 할로젠, 알콕시 또는 임의 치환된 아릴, 티오아릴 또는 아릴옥시로 임의 치환된 알킬,
- [0139] 알킬 또는 임의 치환된 아릴로 임의 치환된 알콕시,
- [0140] 히드록실,

- [0141] $OC(=W)NR_{10}R_{11}$,
- [0142] 임의 치환된 아릴,
- [0143] 알킬 또는 임의 치환된 아릴로 임의 치환된 티오알킬,
- [0144] 아릴이 임의 치환된 티오아릴,
- [0145] NO_2 ,
- [0146] CN ,
- [0147] $NR_{10}R_{11}$,
- [0148] 할로젠,
- [0149] SO_2R_{12} ,
- [0150] $NR_{13}SO_2R_{14}$,
- [0151] $C(=W)R_{16}$,
- [0152] $NR_{15}C(=W)R_{17}$
- [0153] 을 들 수 있고,
- [0154] 동일하거나 상이할 수 있는 R_{10} , R_{11} , R_{12} , R_{13} , R_{14} , R_{15} , R_{16} 및 R_{17} 은 수소, 임의 치환된 아릴로 임의 치환된 알킬, 임의 치환된 아릴을 나타내고,
- [0155] 또한,
- [0156] $NR_{10}R_{11}$ 은 이들이 부착되어 있는 질소와 함께 고리를 형성할 수 있고,
- [0157] R_{12} 는 $NR_{10}R_{11}$ 과 동일한 의미를 가질 수 있고,
- [0158] R_{17} 이 $NR_{10}R_{11}$ 을 나타내는 경우, 동일하거나 상이할 수 있는 R_{10} 및 R_{11} 은 수소, CO알킬 및 CO 임의 치환된 아릴을 나타낼 수 있고,
- [0159] R_{16} 은 히드록시, 알콕시 또는 $NR_{10}R_{11}$ 을 나타낼 수 있고,
- [0160] R_{17} 은 하나 이상의 할로젠, 알콕시, 임의 치환된 아릴 또는 $NR_{10}R_{11}$ 로 치환된 알킬을 나타낼 수 있고,
- [0161] R_{17} 이 $NR_{10}R_{11}$ 을 나타내는 경우, $NR_{10}R_{11}$ 은 수소, CO알킬 및 CO 임의 치환된 아릴을 나타낼 수 있다.
- [0162] L이 연결기를 나타내는 경우, L이 나타낼 수 있는 연결기의 예로는
- [0163] O, S, $(CO)_nNR_{18}$,
- [0164] 알킬렌, 알케닐렌, 알키닐렌 (이들 각각은 하나 이상의 O, S, NR_{18} , 또는 하나 이상의 C-C 단일, 이중 또는 삼중 결합으로 임의 개재될 수 있음),
- [0165] -N-N- 단일 또는 이중 결합
- [0166] 을 들 수 있고,
- [0167] R_{18} 은 수소, 알킬, COR_{16} 을 나타낸다.
- [0168] L이 $(CO)_nNR_{18}$ 인 경우, n은 0, 1 또는 2를 나타낼 수 있고, n이 1 또는 2인 경우, R_{18} 은 바람직하게는 수소를 나타낸다.
- [0169] R_4 , R_5 , R_6 , R_7 및 R_8 의 변화의 범위가 넓지만, 바람직하게는 R_4 , R_5 , R_6 , R_7 및 R_8 은 수소, 알킬 또는 임의 치환

된 아틸을 나타낸다.

[0170] 바람직하게는, Y는 N을 나타내고, X는 O, S 또는 NR_4 를 나타낸다. 바람직하게는, 화학식 I에 따른 화합물이 벤즈옥사졸, 벤즈티아졸 또는 벤즈이미다졸이다.

[0171] R_4 , R_6 , R_8 또는 R_9 중 임의의 하나가 $-L-R_3$ 을 나타낼 수 있지만, 바람직한 화합물에서는 R_9 가 $-L-R_3$ 을 나타낸다.

[0172] 알킬은 임의의 알킬 쇄를 나타낼 수 있다. 알킬은 직쇄 및 분지된, 포화 및 불포화 알킬 뿐만 아니라 시클릭 알킬, 예컨대 시클로프로필, 시클로부틸, 시클로펜틸, 시클로헥실 및 시클로헵틸을 포함한다. 그러나, 바람직하게는, 임의 치환기가 알킬을 나타내는 경우, 알킬은 포화, 선형 또는 분지되며, 1 내지 10개의 탄소 원자, 바람직하게는 1 내지 8개의 탄소 원자, 보다 바람직하게는 1 내지 6개의 탄소 원자를 갖는다. 임의 치환기가 알킬을 나타내는 경우, 특히 바람직한 기는 시클로알킬, 예를 들면 시클로프로필, 시클로부틸, 시클로펜틸, 시클로헥실 및 시클로헵틸이다.

[0173] 아틸은 임의의 방향족 시스템을 나타낼 수 있다. 바람직하게는, 화학식 I의 화합물에서, 아틸은 방향족 탄화수소, 또는 고리 성분으로서 탄소 이외에 산소 원자, 황 원자 및 질소 원자로부터 선택되는 1 내지 4개의 헤테로원자를 함유하는 5 내지 10원 방향족 헤테로사이클이다. 1 또는 2개의 헤테로원자를 함유하는 헤테로사이클이 바람직하다. 언급될 수 있는 방향족 헤테로사이클로는 푸란, 티오펜, 피롤, 피리딘을 들 수 있다.

[0174] 특히 바람직하게는, 아틸이 방향족 탄화수소인 경우, 아틸은 6 내지 10원 모노시클릭 또는 바이시클릭 시스템, 예를 들면 페닐 또는 나프탈렌을 나타낸다.

[0175] 언급될 수 있는 포화 및 불포화 헤테로사이클로는 4 내지 7개의 고리 원자, 바람직하게는 5 또는 6개의 고리 원자를 함유하고, 바람직하게는 N, S 및 O로부터 선택되는 1 내지 2개의 헤테로원자를 함유하는 것들을 들 수 있다. 언급될 수 있는 헤테로사이클로는 피롤리딘, 피페리딘, 테트라히드로푸란, 피페라진 및 모르폴린을 들 수 있다. 예를 들어, $NR_{10}R_{11}$ 이 헤테로시클릭 고리를 형성하는 경우, N-함유 헤테로사이클이 특히 바람직하다.

[0176] 상술한 바와 같이, 인접한 한 쌍의 A_1 내지 A_4 가 각각 CR_1 을 나타내는 경우, 그의 치환기와 함께 인접한 탄소 원자는 고리 B를 형성할 수 있다. 또한, X가 CR_6R_7 인 경우, R_6 및 R_7 은 이들이 부착되어 있는 탄소와 함께 고리 C를 형성할 수 있다. 바람직하게는, 고리 B 및/또는 고리 C는 포화 또는 불포화된 3 내지 10원 카르보시클릭 또는 헤테로시클릭 고리이다.

[0177] 특히 바람직하게는, 고리 B는 벤젠 고리이다.

[0178] 특히 바람직하게는, 고리 C는 3 내지 10원 포화 또는 불포화 카르보시클릭 고리이다.

[0179] 하나 이상의 R_1 이 $NR_{15}C(=W)R_{17}$, 보다 특히 $NR_{15}COR_{17}$ 기를 나타내는 화합물이 특히 바람직하다.

[0180] 또한, 하나 이상의 R_1 이 $CONR_{10}R_{11}$ 을 나타내는 화합물이 바람직하다.

[0181] 특히 바람직한 화합물의 한 군에 있어서, 하나 이상의 R_1 은 아미드기 $NHCOR_{17}$ 을 나타내고, 여기서, R_{17} 은

[0182] 알킬 C_1-C_6 ,

[0183] 페닐로 치환된 알킬 C_1-C_6 ,

[0184] 알콕시 C_1-C_6 으로 치환된 알킬 C_1-C_6 ,

[0185] 할로알킬 C_1-C_6 ,

[0186] 퍼플루오로알킬 C_1-C_6 ,

[0187] 하나 이상의 할로젠, 알킬 C_1-C_6 , 알콕시 C_1-C_6 , 아미노, (알킬 C_1-C_6)아미노, 디(알킬 C_1-C_6)아미노 또는 페닐로 임의 치환된 페닐,

[0188] $CH:CH$ 페닐,

- [0189] 나프틸, 피리디닐, 티오펜 및 푸라닐
- [0190]로부터 선택된다.
- [0191] R_1 및 R_2 중 하나 또는 둘 모두가 -COOH 이외의 것인 화합물이 바람직하다.
- [0192] 특히 바람직한 화합물의 또다른 군에 있어서, 하나 이상의 R_1 은 $NR_{15}CONR_{10}R_{11}$ 기를 나타내고, 여기서, 동일하거나 상이할 수 있는 R_{10} 및 R_{11} 은 임의 치환된 아릴, 알킬 및 임의 치환된 CO아릴로부터 선택된다. 하나 이상의 R_1 이 $NHCONHR_{15}$ 를 나타낼 수 있고, R_{15} 가 하나 이상의 할로겐으로 임의 치환된 페닐, 알킬 C_1-C_6 및 CO페닐로부터 선택되는 군이 특히 바람직하다.
- [0193] 특히 바람직한 화합물의 또다른 군에 있어서, 하나 이상의 R_1 은 페닐 또는 N, S 및 O로부터 선택되는 1 내지 2개의 헤테로원자를 함유하는 5 또는 6원 포화 또는 불포화 헤테로사이클로 임의 치환된 알킬 C_1-C_6 을 나타낸다.
- [0194] 특히 바람직한 화합물의 또다른 군에 있어서, 하나 이상의 R_1 은 COR_{16} 을 나타내고, R_{16} 은 알콕시 C_1-C_6 , 아미노, (알킬 C_1-C_6)아미노 또는 디(알킬 C_1-C_6)아미노를 나타낸다.
- [0195] 특히 바람직한 화합물의 또다른 군에 있어서, 하나 이상의 R_1 은
- [0196] NO_2 ,
- [0197] 할로젠,
- [0198] 아미노 또는 (알킬 C_1-C_6)아미노 또는 디(알킬 C_1-C_6)아미노 (여기서, 알킬 C_1-C_6 은 페닐 또는 5원 또는 6원 포화 또는 불포화 헤테로사이클로 임의 치환됨),
- [0199] $NHSO_2$ 알킬 C_1-C_6 , $NHSO_2$ 페닐,
- [0200] SO_2 알킬 C_1-C_6 ,
- [0201] 알콕시 C_1-C_6 으로 임의 치환된 페닐,
- [0202] N, S 및 O로부터 선택되는 1 내지 3개의 헤테로원자를 함유하는 5 내지 10원 포화 또는 불포화, 모노- 또는 바이-시클릭 헤테로사이클
- [0203]을 나타낸다.
- [0204] R_3 기의 변화에 대한 범위 또한 광범위하다. 바람직하게는, R_3 은 아릴을 나타내고, 동일하거나 상이할 수 있는 1 내지 3개의 치환기 R_2 로 임의 치환된다.
- [0205] 특히 바람직하게는, R_3 은 5 내지 10원 방향족 모노- 또는 바이-시클릭 시스템, 특히 탄화수소 5 내지 10원 방향족 모노- 또는 바이-시클릭 시스템, 예를 들면 벤젠 또는 나프탈렌이다.
- [0206] 다르게는, 5 내지 10원 방향족 모노- 또는 바이-시클릭 시스템은 N, O 및 S로부터 선택되는 3개 이하의 헤테로원자를 함유하는 헤테로시클릭 시스템, 예를 들면 티오펜, 푸란, 피리딘 또는 피롤일 수 있다.
- [0207] 바람직하게는, 치환기 R_2 는
- [0208] 티오펜 또는 페녹시 (이들 각각은 할로겐으로 임의 치환됨)로 임의 치환된 알킬 C_1-C_6 ,
- [0209] 알콕시 C_1-C_6 ,
- [0210] 페닐,
- [0211] 티오알킬 C_1-C_6 ,
- [0212] 할로겐으로 임의 치환된 티오펜,

- [0213] NO_2 ,
- [0214] CN
- [0215] $\text{NR}_{10}\text{R}_{11}$ (식 중, 동일하거나 상이할 수 있는 R_{10} 및 R_{11} 은 수소, 알킬 $\text{C}_1\text{-C}_6$ 을 나타내거나, 또는 이들이 부착되어 있는 질소와 함께 N, O 및 S로부터 선택되는 하나 이상의 추가 헤테로원자를 함유할 수 있는 5원 내지 7원 고리를 형성함),
- [0216] 할로겐,
- [0217] SO_2R_{12} (식 중, R_{12} 는 N, O 및 S로부터 선택되는 하나 이상의 추가 헤테로원자를 함유할 수 있는 5원 내지 7원 고리를 나타냄),
- [0218] NHCOR_{17} (식 중, R_{17} 은 페닐 또는 할로겐, 또는 알콕시 $\text{C}_1\text{-C}_6$, 카르복시 또는 할로겐으로 임의 치환된 페닐, 또는 5원 또는 6원 포화 또는 불포화 헤테로사이클로 임의 치환된 알킬 $\text{C}_1\text{-C}_6$; 할로겐, 알콕시 $\text{C}_1\text{-C}_6$, 카르복시 또는 $\text{SO}_2\text{NR}_{10}\text{R}_{11}$ 기로 임의 치환된 페닐 또는 5원 또는 6원 포화 또는 불포화 헤테로사이클을 나타냄)
- [0219] 로부터 선택된다.
- [0220] 특히 바람직하게는, R_2 가 $\text{NR}_{10}\text{R}_{11}$ 을 나타내는 경우, $\text{NR}_{10}\text{R}_{11}$ 은 N-피롤, N-피페리딘, $\text{N}'(\text{C}_1\text{-C}_6)$ 알킬 N 피페라진 또는 N-모르폴린을 나타낸다.
- [0221] 바람직하게는, 연결기 L은
- [0222] $-\text{NH}\cdot\text{NH}-$,
- [0223] $-\text{CH}=\text{CH}$,
- [0224] $-\text{NCOR}_{16}$ (식 중, R_{16} 은 할로겐, 알콕시 $\text{C}_1\text{-C}_6$, 카르복시로 임의 치환된 페닐 또는 5원 또는 6원 포화 또는 불포화 헤테로사이클을 나타냄)
- [0225] 을 나타낸다.
- [0226] A_1 내지 A_4 는 N 또는 CR_1 을 나타낼 수 있다. 결과적으로, 벤즈옥사졸 6원 고리는 1, 2, 3 또는 4개의 질소 원자를 함유할 수 있다. 본 발명의 실시양태는 A_1 내지 A_4 중 2개가 질소를 나타내고, A_1 내지 A_4 중 1개가 질소를 나타내며, A_1 내지 A_4 모두가 CR_1 을 나타내는 것으로 존재한다.
- [0227] 뒤시엔느 근이영양증, 베커 근이영양증 또는 약액질의 치료학적 및/또는 예방적 치료를 위한 의약 제조에서 특히 바람직한 군의 화합물 또는 그의 제약상 허용되는 염에서,
- [0228] 동일하거나 상이할 수 있는 A_1 , A_2 , A_3 및 A_4 는 N 또는 CR_1 을 나타내고,
- [0229] X는 O, $\text{S}(\text{O})_n$, C=W, NR_4 , $\text{NC}(=\text{O})\text{R}_5$ 및 CR_6R_7 로부터 선택되는 2가 기이고,
- [0230] W는 O, S, NR_{20} 이고,
- [0231] Y는 N 또는 CR_8 이고,
- [0232] R_4 , R_5 , R_6 , R_8 , R_9 및 NR_{20} 중 하나는 $-\text{L}-\text{R}_3$ 을 나타내고, 여기서, L은 단일 결합 또는 연결기이고,
- [0233] 또한, 동일하거나 상이할 수 있는 R_4 내지 R_9 는 독립적으로 수소 또는 치환기를 나타내며,
- [0234] R_{20} 은 수소, 히드록실, 아릴로 임의 치환된 알킬, 아릴로 임의 치환된 알콕시, 아릴, CN, 임의 치환된 알콕시, 임의 치환된 아릴옥시, 임의 치환된 알카노일, 임의 치환된 아로일, NO_2 , $\text{NR}_{30}\text{R}_{31}$ 을 나타내고, 여기서, 동일하거나 상이할 수 있는 R_{30} 및 R_{31} 은 수소, 임의 치환된 알킬 또는 임의 치환된 아릴을 나타내고; 또한, R_{30} 및 R_{31} 중 하나는 임의 치환된 알카노일 또는 임의 치환된 아로일을 나타낼 수 있고,
- [0235] n은 0 내지 2의 정수를 나타내고,

- [0236] R_3 은 알킬, 알콕시 또는 아릴을 나타내고, 이들 각각은 동일하거나 상이할 수 있는 1 내지 3개의 치환기 R_2 로 임의 치환되고,
- [0237] 동일하거나 상이할 수 있는 R_1 및 R_2 는
- [0238] 하나 이상의 할로젠, 알콕시 또는 임의 치환된 아릴, 티오아릴 또는 아릴옥시로 임의 치환된 알킬,
- [0239] 알킬 또는 임의 치환된 아릴로 임의 치환된 알콕시,
- [0240] 히드록실,
- [0241] $OC(=W)NR_{10}R_{11}$,
- [0242] 임의 치환된 아릴,
- [0243] 알킬 또는 임의 치환된 아릴로 임의 치환된 티오알킬
- [0244] 아릴이 임의 치환된 티오아릴,
- [0245] NO_2 ,
- [0246] CN ,
- [0247] $NR_{10}R_{11}$,
- [0248] 할로젠,
- [0249] SO_2R_{12} ,
- [0250] $NR_{13}SO_2R_{14}$,
- [0251] $C(=W)R_{16}$,
- [0252] $NR_{15}C(=W)R_{17}$
- [0253] 을 나타내고,
- [0254] 동일하거나 상이할 수 있는 R_{10} , R_{11} , R_{12} , R_{13} , R_{14} , R_{15} , R_{16} 및 R_{17} 은 수소, 임의 치환된 아릴로 임의 치환된 알킬, 임의 치환된 아릴을 나타내고,
- [0255] 또한,
- [0256] $NR_{10}R_{11}$ 은 이들이 부착되어 있는 질소와 함께 고리를 형성할 수 있고,
- [0257] R_{12} 는 $NR_{10}R_{11}$ 과 동일한 의미를 가질 수 있고,
- [0258] R_{17} 이 $NR_{10}R_{11}$ 을 나타내는 경우, $NR_{10}R_{11}$ 은 수소, CO알킬 및 CO 임의 치환된 아릴을 나타낼 수 있고,
- [0259] R_{16} 은 히드록시, 알콕시 또는 $NR_{10}R_{11}$ 을 나타낼 수 있고,
- [0260] R_{17} 은 하나 이상의 할로젠, 알콕시, 임의 치환된 아릴 또는 $NR_{10}R_{11}$ 로 치환된 알킬을 나타낼 수 있고,
- [0261] R_{17} 이 $NR_{10}R_{11}$ 을 나타내는 경우, $R_{10}R_{11}$ 은 수소, CO알킬 및 CO 임의 치환된 아릴을 나타낼 수 있고,
- [0262] 또한,
- [0263] 인접한 한 쌍의 A_1 내지 A_4 가 각각 CR_1 을 나타내는 경우, 인접한 탄소 원자는 그의 치환기와 함께 고리 B를 형성할 수 있고,
- [0264] X가 CR_6R_7 인 경우, R_6 및 R_7 은 이들이 부착되어 있는 탄소 원자와 함께 고리 C를 형성할 수 있다.
- [0265] 유효량의 화학식 I의 화합물 또는 제약상 허용되는 염을 뒤시엔느 근이영양증, 베커 근이영양증 또는 악액질의 치료 또는 예방을 필요로 하는 환자에게 투여하는 것을 포함하는, 상기 환자에서 상기 질환을 치료 또는 예방하

는 방법이 제공된다.

- [0266] DMD의 치료에 사용하기 위한 화학식 I의 화합물은 일반적으로 제약 조성물의 형태로 투여될 것이다.
- [0267] 따라서, 본 발명의 추가 면에 따라, 바람직하게는 80% w/w 미만, 보다 바람직하게는 50% w/w 미만, 예를 들면 0.1 내지 20%의 상기에서 정의된 화학식 I의 화합물 또는 그의 제약상 허용되는 염을 제약상 허용되는 희석제 또는 담체와의 혼합물로 포함하는 제약 조성물이 제공된다.
- [0268] 또한, 성분들을 혼합하는 것을 포함하는 상기 제약 조성물의 제조 방법이 제공된다. 사용될 수 있는 제약 제제 및 적합한 희석제 또는 담체의 예는 다음과 같다:
- [0269] 정맥내 주사 또는 주입용 - 정제된 물 또는 염수 용액;
- [0270] 흡입 조성물용 - 조립자 락토스;
- [0271] 정제, 캡슐 및 당의정용 - 미세결정성 셀룰로스, 인산칼슘, 규조토, 당, 예컨대 락토스, 텍스트로스 또는 만니톨, 활석, 스테아르산, 전분, 중탄산나트륨 및/또는 젤라틴;
- [0272] 좌제용 - 천연 또는 경화유 또는 왁스.
- [0273] 예를 들면 주입을 위해 화합물을 수용액으로 사용하는 경우, 다른 부형제를 혼입하는 것이 필요할 수 있다. 특히, 킬레이트제 또는 붕쇄제, 향산화제, 장성 조정제, pH-개질제 및 완충제를 언급할 수 있다.
- [0274] 화학식 I의 화합물을 함유하는 용액을, 원한다면, 동결 건조 또는 분무 건조로 증발시켜 고체 조성물을 수득할 수 있고, 이를 사용 전에 재구성할 수 있다.
- [0275] 용액이 아닌 경우, 화학식 I의 화합물은 바람직하게는 0.01 내지 10 μm 의 질량 중위 직경을 갖는 형태이다. 조성물은 또한 적합한 보존제, 안정화제 및 습윤제, 가용화제, 예를 들어 수용성 셀룰로스 중합체, 예컨대 히드록시프로필 메틸셀룰로스, 또는 수용성 글리콜, 예컨대 프로필렌 글리콜, 감미제 및 착색제 및 향미제를 함유할 수 있다. 적합한 경우, 조성물은 지속 방출형으로 제제화될 수 있다.
- [0276] 제약 조성물 내 화학식 I의 화합물의 함량은 전체 제제에 대해 일반적으로 약 0.01 내지 약 99.9 중량%, 바람직하게는 약 0.1 내지 약 50 중량%이다.
- [0277] 화학식 I의 화합물의 투여량은 연령, 체중, 일반적인 건강 상태, 식이 요법, 투여 시간, 투여 방법, 제거율, 약물의 조합, 환자가 치료받고 있는 질환의 수준 및 기타 요인을 고려하여 결정된다.
- [0278] 투여량은 표적 질환, 상태, 투여 대상체, 투여 방법 등에 따라 다양하지만, 뒤시엔느 근이영양증을 앓고 있는 환자에서 상기 질환의 치료를 위한 치료제로서 경구 투여하는 경우, 0.01 mg 내지 10 g, 바람직하게는 0.1 내지 100 mg이고, 바람직하게는 단일 투여 또는 1일 2 또는 3회 나누어서 투여된다.
- [0279] DMD의 치료에 사용하기 위한 화학식 I의 화합물의 가능한 활성을 하기 예언적 분석 및 스크리닝에서 증명할 수 있다.
- [0280] 1. 루시페라제 리포터 분석 (뮤린 H2K 세포)
- [0281] 스크리닝에 사용된 세포주는, 루시페라제 리포터 유전자에 연결된 최초 비번역된 엑손을 포함한 유트로핀 A 프로모터의 약 5kb 단편을 함유하는 플라스미드로 안정하게 형질감염된 불멸화 mdx 마우스 H2K 세포주이다 (도 1 참조).
- [0282] 저온 및 인터페론 함유 배지의 조건하에, 세포를 근육모세포로 유지한다. 이들을 96웰 플레이트로 플레이팅하고, 화합물의 존재하에 3일 동안 배양한다. 이어서, 세포를 용해하고, 발현된 루시페라제 유전자로부터의 출력량을 플레이트 루미노미터를 이용하여 판독함으로써 루시페라제의 수준을 측정한다.
- [0283] 상기 분석에서 화합물의 약리 투여 반응의 예를 도 2에 나타낸다.
- [0284] 2. mdx 마우스
- [0285] ADMET 데이터로부터 얻은 데이터를 우선순위화하고, 비히클만을 단독 투여한 대조 동물과 비교시 임의의 화합물이 디스트로핀 결핍 근육에서 유트로핀 단백질의 수준을 증가시키는 능력을 갖는지 여부가 결과로 확인되는 구상 연구의 mdx 입증에서 시험하기 위해 시험관내 루시페라제 활성이 가장 높은 화합물 및 합당한 ADMET 데이터를 우선순위화했다.

- [0286] 28일 동안 매일 복강내 투여된 화합물 10 mg/kg을 주사한 2마리의 동물과 동년배의 대조군이 있었다. 근육 샘플을 취하여, 절편화 (유티로핀의 횡문근형질막 염색 증가를 확인하기 위한 것) 및 웨스턴 블로팅 (유티로핀 수준의 전반적인 증가를 확인하기 위한 것)을 수행하였다.
- [0287] 도 3은 마우스 유티로핀에 특이적인 항체로 염색한 TA 근육 절편의 예를 나타낸다. 비히클만을 단독 주사한 mdx 근육과 비교시 횡문근형질막-결합된 유티로핀의 양에서 증가가 나타난다.
- [0288] 상기 처치된 마우스로부터의 근육을 또한 절제하고, 웨스턴 블로팅을 수행하고, 특이 항체로 염색하였다 (도 4). CPD-A를 투여한 근육 재사용은 TA 다리 근육 및 횡경막에 모두 존재하는 유티로핀의 전반적인 수준에서 유의한 증가를 나타낸다. CPD-A (V2 및 V3)에 노출된 마우스는 모두 대조군과 비교하여 증가된 유티로핀 발현 수준을 나타내었다.
- [0289] 이어서, 최초 28일 연구로부터의 양성 상향조절 데이터가 추가 2 마우스 28일 연구에서도 반복되었다. 2벌의 총 3가지 상이한 화합물은 28일 동안 매일 ip 전달시 mdx 마우스에서 유티로핀 발현 수준을 증가시키는 능력을 나타내었다. 지금까지 공개된 모든 데이터는 3배를 초과하는 유티로핀 수준 증가가 디스트로핀 결핍 근육에 유의한 작용 효과를 갖는다는 것을 증명하였지만, 상기 데이터는 ip 전달시 화합물의 능력은 mdx 근육에서 발견되는 유티로핀의 수준을 유의하게 증가시킨다는 것을 증명하며, 따라서 본 접근법이 상기 질환을 완화시킬 것이라는 확신을 제공한다.
- [0290] H2K/mdx/유티로(Utro) A 리포터 세포주 유지
- [0291] H2K/mdx/유티로 A 리포터 세포주를 $\leq 30\%$ 컨플루언트까지 주 2회 계대하였다. 상기 세포를 10% CO₂의 존재하에 33 °C에서 성장시켰다.
- [0292] 플레이팅을 위한 근육모세포를 제거하기 위해, 단일층이 떨어지기 시작할 때까지 트립신/EDTA와 함께 인큐베이션하였다.
- [0293] 성장 배지
- [0294] DMEM 기브코(Gibco) 41966
- [0295] 20% FCS
- [0296] 1% 펜/스트렙(Pen/Strep)
- [0297] 1% 글루타민
- [0298] 병아리 태아 추출물(Chick embryo extract) 10 ml
- [0299] 인터페론 (1276 905 로체(Roche)) 첨가 신규 배지 10 μ l/배지 50 ml
- [0300] 96웰 플레이트에 대해 루시퍼라제 분석
- [0301] H2K/mdx/유티로 A 리포터 세포주 세포를 보통 성장 배지 190 μ l에서 대략 5000 세포/웰의 밀도로 96웰 플레이트 (팔콘(Falcon) 353296, 백색 불투명)에서 플레이팅하였다. 이어서, 상기 플레이트를 10% CO₂의 존재하 33 °C에서 24시간 동안 인큐베이션하였다.
- [0302] 최종 농도가 10 μ M인 각각의 웰에 희석한 화합물 10 μ l를 첨가하여 화합물을 투여하였다. 이어서, 상기 플레이트를 48시간 더 인큐베이션하였다.
- [0303] 이어서, 제조 프로토콜 (프로메가 스테디-글로 루시퍼라제 분석 시스템(Promega Steady-Glo Luciferase Assay System) (E2520))에 따라 세포를 동일계내에서 용해하였다. 이어서, 플레이트 루미노미터 (빅터(Victor) 1420)를 이용하여 10초 동안 계수하였다.
- [0304] 화합물 저장
- [0305] 스크리닝을 위한 화합물을 필요할 때까지 100% DMSO 중 10 mM 스톱으로서 -20 °C에서 저장하였다.
- [0306] mdx 마우스에 화합물 주입
- [0307] 번식 콜로니로부터 mdx를 시험용으로 선택하였다. 복강내 경로 (ip)를 이용하여 비히클 또는 화합물 10 mg/kg을 매일 마우스에 주사하였다. 마우스를 칭량하고, 화합물을 PBS 중 5% DMSO, 0.1% 트윈에 희석하였다.

- [0308] 목적하는 시점에 상기 마우스를 경추탈골로 희생시키고, 분석을 위해 근육을 제거하였다.
- [0309] 근육 분석
- [0310] 면역조직화학
- [0311] 절편화하기 위한 조직을 절개하고, OCT (브라이트 크리오-엠-베드(Bright Cryo-M-Bed))에 침지시키고, 액체 질소 냉각된 이소펜탄 상에서 동결시켰다. 고정되지 않은 8 μ M 냉동절편(cryosection)을 브라이트 저온유지장치(Bright Cryostat) 상에서 절단하고, -80 $^{\circ}$ C에서 저장하였다.
- [0312] 염색을 준비하고, 절편을 PBS 중 5% 소태아혈청에서 30분 동안 블로킹하였다. 1차 항체를 블로킹 시약에서 희석하고, 습윤 챔버 내에서 1.5시간 동안 상기 절편 상에서 인큐베이션하고, 이어서 PBS에서 5분 동안 3회 세척하였다. 또한 블로킹 시약에서 희석된 2차 항체를 암실 내 습윤 챔버에서 1시간 동안 인큐베이션하였다. 최종적으로, 상기 절편을 PBS에서 5분 동안 3회 세척하고, 커버슬립을 히드로마운트(hydromount)와 함께 탑재하였다. 라이카(Leica) 형광 현미경을 사용하여 슬라이드를 분석하였다.
- [0313] 결과
- [0314] 뮤린 H2K 세포에서 루시퍼라제 리포터 분석을 이용하여 생물학적 활성을 평가하고, 하기와 같이 분류하였다.
- [0315] + 대조군과 비교하여 200% 이하
- [0316] ++ 대조군과 비교하여 201% 내지 300%
- [0317] +++ 대조군과 비교하여 301% 내지 400%
- [0318] ++++ 대조군과 비교하여 401% 이상

표 1

본원에 기재된 방법으로 제조된 화합물

실시예	화합명	활성
1	N-(2-(4-(디메틸아미노)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)이소니코틴아미드	+
2	N-(2-(4-(플루오로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)푸란-2-카르복사미드	+
3	2-((4-클로로페녹시)에틸)-1-에틸-1H-벤조[d]이미다졸	+++
4	2-((4-메톡시페녹시)에틸)-1H-벤조[d]이미다졸	++
5	페닐(2-페닐-1H-벤조[d]이미다졸-6-일)메탄	+
6	N-(2-페닐벤조[d]옥사졸-5-일)니코틴아미드	+
7	3-페닐-N-(2-페닐벤조[d]옥사졸-5-일)프로판아미드	+
8	N-(2-페닐벤조[d]옥사졸-5-일)아세트아미드	++
9	N-(2-페닐벤조[d]옥사졸-5-일)프로피온아미드	++
10	N-(2-페닐벤조[d]옥사졸-5-일)부티르아미드	+++
11	N-(2-페닐벤조[d]옥사졸-5-일)펜탄아미드	++
12	N-(2-페닐벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드	++
13	N-(2-페닐벤조[d]옥사졸-5-일)푸란-2-카르복사미드	++
14	2-페닐벤조[d]옥사졸-5-아민	+++
15	2-(4-(트리플루오로메틸)페닐)벤조[d]옥사졸-5-아민	+
16	2-(4-(디에틸아미노)페닐)벤조[d]옥사졸-5-아민	++
17	2-(4-(디에틸아미노)페닐)벤조[d]옥사졸-5-아민	+
18	2-p-톨릴벤조[d]옥사졸-5-아민	+
19	4-클로로-N-(2-p-톨릴벤조[d]옥사졸-5-일)벤즈아미드	+
20	4-메톡시-N-(2-p-톨릴벤조[d]옥사졸-5-일)벤즈아미드	+
21	2-(5-니트로벤조[d]옥사졸-2-일)페놀	+
22	N-(2-페닐벤조[d]옥사졸-5-일)이소니코틴아미드	+
23	4-클로로-N-(2-페닐벤조[d]옥사졸-5-일)벤즈아미드	+

[0319]

24	4-메틸-N-(2-페닐벤조[d]옥사졸-5-일)벤즈아미드	+
25	4-메톡시-N-(2-페닐벤조[d]옥사졸-5-일)벤즈아미드	+
26	2-메톡시-N-(2-페닐벤조[d]옥사졸-5-일)벤즈아미드	+
27	4-(디메틸아미노)-N-(2-페닐벤조[d]옥사졸-5-일)벤즈아미드	+
28	3,4-디클로로-N-(2-페닐벤조[d]옥사졸-5-일)벤즈아미드	+
29	N-(2-페닐벤조[d]옥사졸-5-일)-4-(트리플루오로메틸)벤즈아미드	+
30	3,5-디클로로-N-(2-페닐벤조[d]옥사졸-5-일)벤즈아미드	+
31	4-플루오로-N-(2-페닐벤조[d]옥사졸-5-일)벤즈아미드	+
32	N-(2-페닐벤조[d]옥사졸-5-일)비페닐-4-카르복스아미드	+
33	2-페닐-N-(2-페닐벤조[d]옥사졸-5-일)아세트아미드	+
34	N-(2-페닐벤조[d]옥사졸-5-일)신남아미드	+
35	N-(2-페닐벤조[d]옥사졸-5-일)-1-나프트아미드	+
36	N-(2-페닐벤조[d]옥사졸-5-일)-2-나프트아미드	+
37	N-(2-페닐벤조[d]옥사졸-5-일)티오펜-2-카르복스아미드	++
38	2-(5-아미노벤조[d]옥사졸-2-일)페놀	+++
39	N-(2-(피리딘-3-일)벤조[d]옥사졸-5-일)벤즈아미드	+
40	4-클로로-N-(2-(피리딘-3-일)벤조[d]옥사졸-5-일)벤즈아미드	+
41	4-메틸-N-(2-(피리딘-3-일)벤조[d]옥사졸-5-일)벤즈아미드	+
42	4-메톡시-N-(2-(피리딘-3-일)벤조[d]옥사졸-5-일)벤즈아미드	+
43	2-메톡시-N-(2-(피리딘-3-일)벤조[d]옥사졸-5-일)벤즈아미드	+
44	4-(디메틸아미노)-N-(2-(피리딘-3-일)벤조[d]옥사졸-5-일)벤즈아미드	+
45	3,4-디클로로-N-(2-(피리딘-3-일)벤조[d]옥사졸-5-일)벤즈아미드	+
46	N-(2-(피리딘-3-일)벤조[d]옥사졸-5-일)-4-(트리플루오로메틸)벤즈아미드	+
47	3,5-디클로로-N-(2-(피리딘-3-일)벤조[d]옥사졸-5-일)벤즈아미드	+
48	4-플루오로-N-(2-(피리딘-3-일)벤조[d]옥사졸-5-일)벤즈아미드	+
49	N-(2-(피리딘-3-일)벤조[d]옥사졸-5-일)비페닐-4-카르복스아미드	+
50	2-페닐-N-(2-(피리딘-3-일)벤조[d]옥사졸-5-일)아세트아미드	+
51	3-페닐-N-(2-(피리딘-3-일)벤조[d]옥사졸-5-일)프로판아미드	+
52	N-(2-(피리딘-3-일)벤조[d]옥사졸-5-일)신남아미드	+
53	N-(2-(피리딘-3-일)벤조[d]옥사졸-5-일)프로피온아미드	+
54	N-(2-(피리딘-3-일)벤조[d]옥사졸-5-일)부티르아미드	+
55	N-(2-(피리딘-3-일)벤조[d]옥사졸-5-일)헨탄아미드	+
56	N-(2-(피리딘-3-일)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드	++
57	N-(2-(피리딘-3-일)벤조[d]옥사졸-5-일)푸란-2-카르복스아미드	+
58	N-(2-(피리딘-3-일)벤조[d]옥사졸-5-일)푸란-2-카르복스아미드	+

[0320]

59	N-(2-페닐벤조[d]옥사졸-5-일)벤즈아미드	++
60	N-(2-(4-(디에틸아미노)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)니코틴아미드	++
61	N-(2-(4-(디에틸아미노)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)이소니코틴아미드	+
62	N-(2-(4-(디에틸아미노)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)벤즈아미드	+
63	4-클로로-N-(2-(4-(디에틸아미노)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)벤즈아미드	+
64	N-(2-(4-(디에틸아미노)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)-4-메틸벤즈아미드	+
65	N-(2-(4-(디에틸아미노)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)-4-메톡시벤즈아미드	+
66	N-(2-(4-(디에틸아미노)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)-2-메톡시벤즈아미드	+
67	N-(2-(4-(디에틸아미노)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)-4-(디에틸아미노)벤즈아미드	++
68	3,4-디클로로-N-(2-(4-(디에틸아미노)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)벤즈아미드	+
69	N-(2-(4-(디에틸아미노)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)-4-(트리플루오로메틸)벤즈아미드	+
70	3,5-디클로로-N-(2-(4-(디에틸아미노)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)벤즈아미드	+
71	N-(2-(4-(디에틸아미노)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)-4-플루오로벤즈아미드	+
72	N-(2-(4-(디에틸아미노)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)비페닐-4-카르복스아미드	+
73	N-(2-(4-(디에틸아미노)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)-2-페닐아세트아미드	++
74	N-(2-(4-(디에틸아미노)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)-3-페닐프로판아미드	+
75	N-(2-(4-(디에틸아미노)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)프로피온아미드	++
76	N-(2-(4-(디에틸아미노)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)부티르아미드	+
77	N-(2-(4-(디에틸아미노)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)펜탄아미드	++
78	N-(2-(4-(디에틸아미노)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드	+
79	N-(2-(4-(디에틸아미노)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)티오펜-2-카르복스아미드	+
80	3-(5-프로필벤조[d]옥사졸-2-일)벤조산	+
81	N-(2-(피리딘-3-일)벤조[d]옥사졸-5-일)니코틴아미드	+
82	5-아미노-2-(5-아미노벤조[d]옥사졸-2-일)페놀	++
83	4-메톡시-N-(2-(4-메톡시페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)벤즈아미드	+
84	5-(에틸술포닐)-2-페닐벤조[d]옥사졸	++
85	2,5-디페닐벤조[d]옥사졸	+++
86	2-페닐나프토[1,2-d]옥사졸	+++
87	N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)이소니코틴아미드	+
88	N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)벤즈아미드	+
89	4-클로로-N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)벤즈아미드	+
90	N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)-4-메틸벤즈아미드	+
91	N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)-4-메톡시벤즈아미드	+
92	N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)-2-메톡시벤즈아미드	+

[0321]

93	N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)-4-(디메틸아미노)벤즈아미드	+
94	N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)-4-(트리플루오로메틸)벤즈아미드	+
95	3,5-디클로로-N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)벤즈아미드	+
96	N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)-4-플루오로벤즈아미드	+
97	N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)-2-페닐아세트아미드	++
98	N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)-3-페닐프로판아미드	+
99	N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)부티르아미드	++++
100	N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)펜탄아미드	++
101	N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드	++++
102	N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)푸란-2-카르복사아미드	+
103	N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)티오펜-2-카르복사아미드	+
104	5-아미노-2-(5,6-디메틸-1H-벤조[d]이미다졸-2-일)페놀	++
105	2-(3-메틸-4-니트로페닐)-1H-벤조[d]이미다졸	++++
106	2-(6-니트로-1H-벤조[d]이미다졸-2-일)페놀	+
107	2-페닐벤조[d]옥사졸-5-카르복실산	+++
108	2-(4-프로필페닐)벤조[d]옥사졸-5-카르복실산	+
109	2-(4-프로필페닐)벤조[d]옥사졸-6-카르복실산	+
110	2'-(4-프로필페닐)-2,6'-비벤조[d]옥사졸-6-카르복실산	+
111	5-클로로-2-페닐벤조[d]옥사졸	++
112	6-클로로-2-페닐벤조[d]옥사졸	+
113	N-(2-p-톨릴벤조[d]옥사졸-5-일)니코틴아미드	+
114	N-(2-p-톨릴벤조[d]옥사졸-5-일)이소니코틴아미드	+
115	N-(2-p-톨릴벤조[d]옥사졸-5-일)프로피온아미드	++++
116	N-(2-p-톨릴벤조[d]옥사졸-5-일)부티르아미드	++++
117	N-(2-p-톨릴벤조[d]옥사졸-5-일)펜탄아미드	+++
118	N-(2-p-톨릴벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드	++
119	N-(2-p-톨릴벤조[d]옥사졸-5-일)푸란-2-카르복사아미드	+
120	N-(2-p-톨릴벤조[d]옥사졸-5-일)티오펜-2-카르복사아미드	++
121	N-(2-(4-(트리플루오로메틸)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)니코틴아미드	+
122	N-(2-(4-(트리플루오로메틸)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)이소니코틴아미드	+
123	N-(2-(4-(트리플루오로메틸)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)아세트아미드	++
124	N-(2-(4-(트리플루오로메틸)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)프로피온아미드	+
125	N-(2-(4-(트리플루오로메틸)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)부티르아미드	+
126	N-(2-(4-(트리플루오로메틸)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)펜탄아미드	+
127	N-(2-(4-(트리플루오로메틸)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드	+

[0322]

128	N-(2-(4-(트리플루오로메틸)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)푸란-2-카르복사미드	+
129	5-tert-부틸-2-페닐벤조[d]옥사졸	++++
130	6-니트로-2-페닐벤조[d]옥사졸	++
131	4-(5-클로로벤조[d]옥사졸-2-일)-N,N-디에틸아닐린	+++
132	4-(6-클로로벤조[d]옥사졸-2-일)-N,N-디에틸아닐린	++++
133	2-(5-아미노-1H-벤조[d]이미다졸-2-일)페놀	+
134	N-(2-(4-메톡시페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)이소니코틴아미드	+
135	N-(2-(4-메톡시페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)아세트아미드	+++
136	N-(2-(4-메톡시페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)프로피온아미드	+++
137	N-(2-(4-메톡시페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)부티르아미드	++
138	N-(2-(4-메톡시페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)펜탄아미드	+
139	N-(2-(4-메톡시페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드	++
140	N-(2-(4-메톡시페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)푸란-2-카르복사미드	+
141	N-(2-(4-메톡시페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)티오펜-2-카르복사미드	+
142	4-(5-tert-부틸벤조[d]옥사졸-2-일)-N,N-디에틸아닐린	++
143	4-(벤조[d]옥사졸-2-일)-N,N-디에틸아닐린	++
144	N,N-디에틸-4-(5-(에틸술포닐)벤조[d]옥사졸-2-일)아닐린	+
145	N,N-디에틸-4-(5-페닐벤조[d]옥사졸-2-일)아닐린	+
146	N,N-디에틸-4-(나프토[1,2-d]옥사졸-2-일)아닐린	++
147	2-(피리딘-2-일)벤조[d]옥사졸	+
148	N-(2-(4-클로로페닐)-2H-벤조[d][1,2,3]트리아졸-5-일)프로피온아미드	++++
149	2-(4-(피롤리딘-1-일)페닐)벤조[d]옥사졸-5-아민	++
150	2-(4-(피페리딘-1-일)페닐)벤조[d]옥사졸-5-아민	++
151	2-(4-(4-메틸피페라진-1-일)페닐)벤조[d]옥사졸-5-아민	++
152	2-(4-(디에틸아미노)페닐)벤조[d]옥사졸-5-카르복실산	+
153	6-니트로-2-페닐옥사졸로[5,4-b]피리딘	+
154	2-프로필벤조[d]옥사졸-5-아민	+
155	2-페닐벤조[d]옥사졸-6-아민	+++
156	N-벤질-2-페닐벤조[d]옥사졸-5-아민	+++
157	2-p-톨릴옥사졸로[5,4-b]피리딘	+++
158	2-p-톨릴옥사졸로[4,5-b]피리딘	+
159	2-(4-모르폴리노페닐)벤조[d]옥사졸-5-아민	+
160	3-메톡시-N-(2-p-톨릴벤조[d]옥사졸-5-일)프로판아미드	++++
161	5-페닐-2-p-톨릴벤조[d]옥사졸	+++
162	2-(4-클로로페닐)-5-페닐벤조[d]옥사졸	+

[0323]

163	2-시클로헥실-5-니트로벤조[d]옥사졸	+
164	2-(4-클로로페닐)-6-니트로-1H-벤조[d]이미다졸	++
165	N-(2-벤질벤조[d]옥사졸-5-일)-2-페닐아세트아미드	+
166	N-(2-p-톨릴-1H-벤조[d]이미다졸-5-일)부티르아미드	+
167	N-부틸-2-페닐벤조[d]옥사졸-5-아민	++++
168	N-이소부틸-2-페닐벤조[d]옥사졸-5-아민	++++
169	2-페닐옥사졸로[5,4-b]피리딘-6-아민	+
170	N-(2-페닐옥사졸로[5,4-b]피리딘-6-일)부티르아미드	+
171	5-니트로-2-(피리딘-2-일)벤조[d]옥사졸	+
172	5-tert-부틸-2-p-톨릴벤조[d]옥사졸	++++
173	2-p-톨릴벤조[d]옥사졸	+++
174	2-(3-(트리플루오로메틸)페닐)벤조[d]옥사졸-5-아민	+
175	N-(2-p-톨릴-1H-벤조[d]이미다졸-5-일)이소부티르아미드	+
176	N-부틸-2-p-톨릴벤조[d]옥사졸-5-카르복스아미드	++
177	N-프로필-2-p-톨릴벤조[d]옥사졸-5-카르복스아미드	++++
178	N-(2-(4-클로로페닐)-1H-벤조[d]이미다졸-5-일)부티르아미드	+
179	5-(에틸술포닐)-2-p-톨릴벤조[d]옥사졸	++++
180	2-(4-클로로페닐)-5-(에틸술포닐)벤조[d]옥사졸	++++
181	N-이소프로필-2-p-톨릴벤조[d]옥사졸-5-카르복스아미드	+++
182	N-부틸-2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-아민	+++
183	2-(4-클로로페닐)-N-이소부틸벤조[d]옥사졸-5-아민	+++
184	N-벤질-2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-아민	+
185	N-부틸-2-p-톨릴벤조[d]옥사졸-5-아민	+++
186	N-이소부틸-2-p-톨릴벤조[d]옥사졸-5-아민	+++
187	N-벤질-2-p-톨릴벤조[d]옥사졸-5-아민	+++
188	N-(2-페닐-1H-벤조[d]이미다졸-5-일)이소부티르아미드	+++
189	4-니트로-2-p-톨릴벤조[d]옥사졸	+
190	6-니트로-2-p-톨릴벤조[d]옥사졸	+++
191	2-(4-클로로페닐)-6-니트로벤조[d]옥사졸	++
192	2-p-톨릴옥사졸로[4,5-c]피리딘	+
193	N-(2-페닐벤조[d]옥사졸-5-일)프로판-1-술포아미드	++
194	N-(2-페닐-1H-벤조[d]이미다졸-5-일)부티르아미드	++
195	N-(2-(4-클로로페닐)-1H-벤조[d]이미다졸-5-일)이소부티르아미드	++
196	2-m-톨릴벤조[d]옥사졸-5-아민	+
197	2-(3-(디메틸아미노)페닐)벤조[d]옥사졸-5-아민	+

[0324]

198	5-브로모-2-p-톨릴벤조[d]옥사졸	+++
199	5-(4-메톡시페닐)-2-p-톨릴벤조[d]옥사졸	+
200	N-(2-m-톨릴벤조[d]옥사졸-5-일)부티르아미드	++++
201	N-(2-(3-(디메틸아미노)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)부티르아미드	+
202	N-(2-m-톨릴벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드	++++
203	N-(2-(3-(트리플루오로메틸)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드	+
204	N-(2-(3-(디메틸아미노)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드	++++
205	2-o-톨릴벤조[d]옥사졸-5-아민	+++
206	2-(2-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-아민	++
207	N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)프로피온아미드	++++
208	N-(2-p-톨릴벤조[d]옥사졸-5-일)피발아미드	++
209	2,2,2-트리플루오로-N-(2-p-톨릴벤조[d]옥사졸-5-일)아세트아미드	++
210	N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)피발아미드	++
211	N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)-2,2,2-트리플루오로아세트아미드	++
212	6-브로모-2-p-톨릴옥사졸로[5,4-b]피리딘	++
213	2-p-톨릴벤조[d]티아졸-5-아민	+
214	2-벤질-5-니트로벤조[d]옥사졸	+
215	5,6-디메틸-2-p-톨릴벤조[d]옥사졸	++++
216	N-(2-p-톨릴벤조[d]티아졸-5-일)부티르아미드	++++
217	N-(2-p-톨릴벤조[d]티아졸-5-일)이소부티르아미드	++++
218	2-p-톨릴벤조[d]옥사졸-5-카르복사미드	++++
219	N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)-N-메틸프로피온아미드	+++
220	N-(2-페닐벤조[d]옥사졸-5-일)프로판-2-술폰아미드	++
221	N-(2-페닐벤조[d]옥사졸-5-일)벤젠술폰아미드	+
222	2-(4-클로로페닐)-5,6-디메틸벤조[d]옥사졸	++++
223	6-니트로-2-(피리딘-2-일)벤조[d]옥사졸	+
224	2-(2,4-디클로로페닐)-5,6-디메틸벤조[d]옥사졸	++++
225	N-(2-(3-(트리플루오로메틸)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)부티르아미드	+
226	N-(2-o-톨릴벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드	++++
227	N-(2-벤질벤조[d]옥사졸-5-일)부티르아미드	+
228	N-(2-벤질벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드	+
229	N-(2-(2-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)부티르아미드	+++
230	N-(2-(2-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드	++++
231	N-(2-(3-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드	++++
232	2-(3-플루오로페닐)벤조[d]옥사졸-5-아민	++++

[0325]

233	4,4,4-트리플루오로-N-(2-p-톨릴벤조[d]옥사졸-5-일)부탄아미드	+
234	2-p-톨릴벤조[d]옥사졸-4-아민	+++
235	N-(2-p-톨릴벤조[d]옥사졸-4-일)부티르아미드	+
236	N-(2-p-톨릴벤조[d]옥사졸-4-일)이소부티르아미드	+
237	2-p-톨릴벤조[d]옥사졸-6-아민	++++
238	2-(2,4-디플루오로벤즈아미도)-4,5-디메틸페닐 2,4-디플루오로벤조에이트	+
239	N-(2-(3-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)부티르아미드	+
240	1-페닐-3-(2-페닐벤조[d]옥사졸-5-일)우레아	+++
241	1-이소프로필-3-(2-페닐벤조[d]옥사졸-5-일)우레아	+
242	N-(2-(2-플루오로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)부티르아미드	+
243	N-(2-(2-플루오로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드	+++
244	N-(2-(3-플루오로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)부티르아미드	++++
245	N-(2-(3-플루오로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드	+++
246	tert-부틸 3-옥소-3-(2-페닐벤조[d]옥사졸-5-일아미노)프로필카르바메이트	+
247	2-(2,4-디플루오로페닐)-5,6-디메틸벤조[d]옥사졸	++
248	N-(2-시클로헥실벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드	++++
249	N-(2-시클로헥실벤조[d]옥사졸-5-일)부티르아미드	+
250	2-(5-부틸피리딘-2-일)-5-니트로벤조[d]옥사졸	+
251	2-페닐벤조[d]티아졸-5-아민	+++
252	N-(4-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)페닐)아세트아미드	+++
253	N-(2-p-톨릴벤조[d]옥사졸-5-일)프로판-1-술폰아미드	+
254	3,3,3-트리플루오로-N-(2-p-톨릴벤조[d]옥사졸-5-일)프로판아미드	++
255	N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-6-일)이소부티르아미드	++++
256	N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-6-일)부티르아미드	++
257	N-(2-(2,4-디클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드	+
258	N-(2-(4-플루오로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드	+++
259	N-(2-p-톨릴벤조[d]옥사졸-5-일)프로판-2-술폰아미드	+
260	N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)프로판-1-술폰아미드	+
261	N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)프로판-2-술폰아미드	+
262	2-(5-부틸피리딘-2-일)-6-니트로벤조[d]옥사졸	++
263	2-(4-클로로페닐)-N-이소프로필벤조[d]옥사졸-5-카르복스아미드	+++
264	2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-카르복스아미드	++++
265	N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)시클로프로판카르복스아미드	++++
266	N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)시클로부탄카르복스아미드	+++
267	N-(2-페닐벤조[d]티아졸-5-일)이소부티르아미드	++++

[0326]

268	N-(2-(3,4-디클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드	++++
269	2-(4-클로로페닐)-5-(4-(에틸술포닐)페닐)벤조[d]옥사졸	+
270	N-(2-(5-클로로피리딘-2-일)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드	++++
271	N-(2-(3,5-디클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드	++
272	(S)-2-아미노-N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)프로판아미드	+++
273	N-(2-(2,3-디클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드	++++
274	2-(4-클로로페닐)-N-이소프로필벤조[d]옥사졸-5-카르보티오아미드	+
275	N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)-2-메틸프로판티오아미드	++
276	2-(4-클로로페닐)벤조[d]티아졸-5-아민	++++
277	N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]티아졸-5-일)이소부티르아미드	+++
278	2-(4-클로로페닐)-N-이소프로필-N-메틸벤조[d]옥사졸-5-카르복스아미드	+++
279	2-(4-클로로페닐)-N-메틸벤조[d]옥사졸-5-카르복스아미드	+++
280	2-페닐벤조[d]옥사졸-5-아민	++++
281	2-(4-클로로페닐)-5-(이소프로필술포닐)벤조[d]옥사졸	++++
282	2-(2-클로로페닐)벤조[d]티아졸-5-아민	++++
283	2-(3-클로로페닐)벤조[d]티아졸-5-아민	++++
284	2-(3,4-디클로로페닐)벤조[d]티아졸-5-아민	++++
285	3-모르폴리노-N-(2-페닐벤조[d]옥사졸-5-일)프로판아미드	+
286	2-(벤조[d][1,3]디옥솔-5-일)-5-니트로벤조[d]옥사졸	+++
287	메틸 4-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)벤조에이트	+
288	5-브로모-2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸	++++
289	4-(5-클로로벤조[d]옥사졸-2-일)아닐린	++++
290	4-(6-클로로벤조[d]옥사졸-2-일)아닐린	+++
291	2-(4-클로로페닐)-5-(4-모르폴리노페닐)벤조[d]옥사졸	++
292	2-(4-클로로페닐)-5-(3-(에틸티오)페닐)벤조[d]옥사졸	++
293	2-(3-클로로페닐)-5-(에틸술포닐)벤조[d]옥사졸	++++
294	N-(2-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)페닐)아세트아미드	+
295	N-(2-(2-클로로페닐)벤조[d]티아졸-5-일)이소부티르아미드	++++
296	N-(2-(3-클로로페닐)벤조[d]티아졸-5-일)이소부티르아미드	++++
297	N-(2-(3,4-디클로로페닐)벤조[d]티아졸-5-일)이소부티르아미드	++++
298	2-(2-클로로페닐)-5-(에틸술포닐)벤조[d]옥사졸	++
299	2-(벤조[d][1,3]디옥솔-5-일)벤조[d]옥사졸-5-아민	++
300	N-(2-(벤조[d][1,3]디옥솔-5-일)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드	+++
301	2-(3,4-디클로로페닐)-5-(에틸술포닐)벤조[d]옥사졸	++
302	N-(2-페닐벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드	+

[0327]

303	N-(2-(2,3-디클로로페닐)벤조[d]티아졸-5-일)이소부티르아미드	+++
304	2-(2,3-디클로로페닐)-5-(에틸술포닐)벤조[d]옥사졸	+
305	2-(4-클로로페닐)-5-(6-메톡시피리딘-3-일)벤조[d]옥사졸	++
306	2-(4-클로로페닐)-5-(6-메톡시피리딘-3-일)벤조[d]옥사졸	+
307	2-(2,3-디클로로페닐)벤조[d]티아졸-5-아민	+++
308	2-(1-페닐에틸)벤조[d]옥사졸-5-아민	+
309	N-(2-(1-페닐에틸)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드	+
310	2-(4-클로로페닐)-5,6-메틸렌디옥시벤조옥사졸	+++
311	N-(2-(2,5-디클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드	+
312	2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-술포산	+
313	3-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)벤조산	+
314	2-(4-클로로페닐)-5-(6-클로로피리딘-3-일)벤조[d]옥사졸	+
315	2-(4-클로로페닐)-5-(6-플루오로피리딘-3-일)벤조[d]옥사졸	+
316	2-(4-클로로페닐)-5-(6-모트폴리노피리딘-3-일)벤조[d]옥사졸	+
317	N-(4-(5-클로로벤조[d]옥사졸-2-일)페닐)아세트아미드	+++
318	N-(4-(5-클로로벤조[d]옥사졸-2-일)페닐)이소부티르아미드	++
319	N-(4-(5-클로로벤조[d]옥사졸-2-일)페닐)티오펜-2-카르복스아미드	+
320	N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)-N-메틸이소부티르아미드	++
321	5-tert-부틸-2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸	++++
322	2-(4-클로로페닐)-N-이소부틸-N-메틸벤조[d]옥사졸-5-아민	+
323	N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)-3-메톡시프로판아미드	++++
324	2-(3,4-디클로로페닐)-6-니트로벤조[d]옥사졸	++
325	2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-술포아미드	++++
326	5-클로로-2-(4-클로로페닐)-6-니트로벤조[d]옥사졸	+++
327	2-(4-클로로페닐)-5-(6-메톡시피리딘-2-일)벤조[d]옥사졸	+
328	3-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)아닐린	++++
329	4-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)아닐린	++++
330	5-클로로-2-(피리딘-4-일)벤조[d]옥사졸	+
331	6-클로로-2-(피리딘-4-일)벤조[d]옥사졸	+
332	N-(4-(6-클로로벤조[d]옥사졸-2-일)페닐)아세트아미드	+++
333	N-(4-(6-클로로벤조[d]옥사졸-2-일)페닐)이소부티르아미드	++
334	N-(4-(6-클로로벤조[d]옥사졸-2-일)페닐)티오펜-2-카르복스아미드	+
335	2-(4-클로로페닐)-N,N-다이소부틸벤조[d]옥사졸-5-아민	+
336	4-(5-브로모벤조[d]옥사졸-2-일)아닐린	++++
337	4-아미노-N-(4-(5-브로모벤조[d]옥사졸-2-일)페닐)벤조아미드	+

[0328]

338	5-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)페리딘-2-아민	++++
339	2-(4-클로로페닐)-5-페닐-1H-인돌	+
340	N-(2-(2-클로로-4-플루오로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드	++++
341	N-(2-(2-클로로-6-플루오로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드	+
342	N-(2-(3-클로로-2-플루오로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드	++++
343	N-(2-(4-클로로-2-플루오로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드	++++
344	N-(2-(2-클로로-5-플루오로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드	+
345	N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)-3,3,3-트리플루오로프로판아미드	+++
346	N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)시클로헥탄카르복사아미드	+
347	N-(5-클로로-2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-6-일)이소부티르아미드	++
348	5-니트로-2-(4-(트리플루오로메톡시)페닐)벤조[d]옥사졸	++
349	N-(2-(테트라히드로-2H-피란-4-일)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드	+
350	2-(4-(트리플루오로메톡시)페닐)벤조[d]옥사졸-5-아민	++
351	N-(2-(3,4-디클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)시클로프로판카르복사아미드	++++
352	N-(2-(3,4-디클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)-3,3,3-트리플루오로프로판아미드	++++
353	N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-6-일)시클로프로판카르복사아미드	++
354	N-(2-(2,3-디클로로페닐)벤조[d]옥사졸-6-일)이소부티르아미드	+++
355	N-(2-(4-(트리플루오로메톡시)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드	+
356	4-(5-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-2-일)아닐린	+
357	2-모르폴리노-5-니트로벤조[d]옥사졸	+
358	N-(5-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)페리딘-2-일)아세트아미드	+
359	N-(4-(5-브로모벤조[d]옥사졸-2-일)페닐)아세트아미드	++++
360	2-모르폴리노벤조[d]옥사졸-5-아민	+
361	2-(3,4-클로로페닐)-5,6-메틸렌디옥시벤조옥사졸	+
362	(S)-N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)피롤리딘-2-카르복사아미드	++
363	N-(2-(2,3-디클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)-3,3,3-트리플루오로프로판아미드	++++
364	N-(2-시클로헥틸벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드	+
365	N-(4-(5-아세트아미도벤조[d]옥사졸-2-일)페닐)아세트아미드	+
366	2-(푸란-2-일)-5-니트로벤조[d]옥사졸	+
367	N-(4-(2-(4-클로로페닐)-1H-인돌-5-일)페닐)아세트아미드	+
368	N-(2-(2-클로로-3-(트리플루오로메틸)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드	+
369	2-(3,4-디클로로페닐)벤조[d]옥사졸-6-아민	++++
370	N-(2-(3,4-디클로로페닐)벤조[d]옥사졸-6-일)이소부티르아미드	++++
371	2-(벤조[d][1,3]디옥솔-5-일)-5-클로로-6-니트로벤조[d]옥사졸	+++
372	N-(4-(5-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-2-일)페닐)아세트아미드	+

[0329]

373	N-(2-(나프탈렌-2-일)벤조[d]옥사졸-5-일)아세트아미드	++++
374	N-(2-(4-아세트아미도페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드	+
375	N-(2-페닐-1H-인돌-6-일)이소부티르아미드	+
376	2,3-디클로로-N-(2-(2,3-디클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)벤즈아미드	+
377	(S)-N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)-2-(메틸아미노)프로판아미드	+++
378	N-(1-메틸-1H-인돌-6-일)이소부티르아미드	+
379	2-(4-클로로벤질티오)-5-니트로벤조[d]옥사졸	+
380	2-(4-클로로벤질티오)벤조[d]옥사졸-5-아민	+
381	N2-(4-클로로벤질)벤조[d]옥사졸-2,5-디아민	+
382	2-(4-메틸벤질티오)-5-니트로벤조[d]옥사졸	+
383	N-(2-(4-클로로벤질티오)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드	+
384	N-(2-(나프탈렌-2-일)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드	+++
385	N-(2-(나프탈렌-2-일)벤조[d]옥사졸-5-일)티오퀸-2-카르복스아미드	+
386	에틸 2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일카르바메이트	+
387	N-(1-벤질-1H-인돌-6-일)이소부티르아미드	+
388	5-니트로-2-(티오퀸-2-일)벤조[d]옥사졸	+
389	N-(1-메틸-2-페닐-1H-인돌-6-일)이소부티르아미드	+
390	5-(에틸술포닐)-2-(나프탈렌-2-일)벤조[d]옥사졸	+++
391	2-(3-클로로-2-플루오로페닐)-5-(에틸술포닐)벤조[d]옥사졸	++
392	2-시클로헥실-5-(에틸술포닐)벤조[d]옥사졸	+
393	2-(5-클로로피리딘-2-일)-5-(에틸술포닐)벤조[d]옥사졸	++
394	2-(벤조[d][1,3]디옥솔-5-일)-5-(에틸술포닐)벤조[d]옥사졸	++++
395	5-클로로-2-(4-(메틸술포닐)페닐)벤조[d]옥사졸	++
396	N-(2-페닐벤조푸란-5-일)이소부티르아미드	++++
397	2-(벤조[d][1,3]디옥솔-5-일)-5-클로로벤조[d]옥사졸-6-아민	+++
398	N-(2-(벤조[d][1,3]디옥솔-5-일)-5-클로로벤조[d]옥사졸-6-일)이소부티르아미드	+
399	2-(4-클로로페닐)-6-(메틸티오)벤조[d]티아졸	+++
400	2-(4-클로로페닐)-5-(메틸술포닐)벤조[d]옥사졸	++
401	2-(비페닐-4-일)벤조[d]옥사졸-5-아민	+++
402	2-(퀴놀린-2-일)벤조[d]옥사졸-5-아민	+++
403	2-(퀴놀린-3-일)벤조[d]옥사졸-5-아민	+++
404	2-(6-메톡시나프탈렌-2-일)벤조[d]옥사졸-5-아민	++
405	2-(6-브로모나프탈렌-2-일)벤조[d]옥사졸-5-아민	+
406	2-(4-클로로페닐)-6-(메틸술포닐)벤조[d]티아졸	++++
407	S-2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일 에탄티오에이트	+

[0330]

408	2-페닐-5-(3',3',3'-트리플루오로프로판아미도)벤조푸란	+
409	2-(4-클로로페닐)나프토[1,2-d]옥사졸	++++
410	N-(2-(나프탈렌-1-일)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드	+
411	N-(2-(비페닐-4-일)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드	+
412	N-(2-(6-메톡시나프탈렌-2-일)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드	+
413	N-(2-(6-브로모나프탈렌-2-일)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드	+
414	2-(4'-클로로페닐)-5-이소부티르아미도-벤조푸란	+
415	N-(2-(퀴놀린-3-일)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드	++++
416	N-(2-(퀴놀린-2-일)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드	++++
417	1-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)프로판-1-온	++++
418	5-(에틸술포닐)-2-(5-메틸티오펜-2-일)벤조[d]옥사졸	++++
419	N-(2-(푸란-2-일)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드	++++
420	1-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)에타논	++++
421	2-(4-시클로헥실페닐)벤조[d]옥사졸-5-아민	++++
422	5-(에틸술포닐)-2-(퀴놀린-2-일)벤조[d]옥사졸	++++
423	5-(에틸술포닐)-2-(퀴놀린-3-일)벤조[d]옥사졸	++++
424	2-(6-브로모나프탈렌-2-일)-5-(에틸술포닐)벤조[d]옥사졸	+
425	2-(4-시클로헥실페닐)-5-(에틸술포닐)벤조[d]옥사졸	+
426	2-(비페닐-4-일)-5-(에틸술포닐)벤조[d]옥사졸	+
427	5-(에틸술포닐)-2-(나프탈렌-1-일)벤조[d]옥사졸	+
428	5-아미노-2-(5,6-디클로로벤조[d]옥사졸-2-일)페놀	+++
429	5-(에틸술포닐)-2-(티오펜-2-일)벤조[d]옥사졸	++
430	N-(2-(4-시클로헥실페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드	+
431	5-(에틸술포닐)-2-(6-플루오로나프탈렌-2-일)벤조[d]옥사졸	+
432	2-(벤조[b]티오펜-5-일)-5-(에틸술포닐)벤조[d]옥사졸	++++
433	N-(4-(5,6-디메틸벤조[d]옥사졸-2-일)-3-히드록시페닐)아세트아미드	++
434	2-(3,4-디클로로페닐)-5-(이소프로필술포닐)벤조[d]옥사졸	+++
435	N-(4-(5,6-디메틸벤조[d]옥사졸-2-일)-3-히드록시페닐)아세트아미드	++
436	5-(에틸술포닐)-2-(3-메틸티오펜-2-일)벤조[d]옥사졸	++
437	2-(5-(에틸술포닐)벤조[d]옥사졸-2-일)나프탈렌-1-올	++++
438	2-(2,2-디플루오로벤조[d][1,3]디옥솔-5-일)-5-(에틸술포닐)벤조[d]옥사졸	+
439	2-(4'-클로로페닐)-5-(N,N-디에틸술포나미드)-벤즈옥사졸	+
440	4-(5,6-디클로로벤조[d]옥사졸-2-일)아닐린	++++
441	5-(에틸술포닐)-2-(5-메틸푸란-2-일)벤조[d]옥사졸	+++
442	N-(4-(나프토[1,2-d]옥사졸-2-일)페닐)이소부티르아미드	+++

[0331]

443	5-(에틸술포닐)-2-(4-메틸티오펜-2-일)벤조[d]옥사졸	++++
444	5-(에틸술포닐)-2-(5,6,7,8-테트라히드로나프탈렌-2-일)벤조[d]옥사졸	+++
445	2-(벤조푸란-5-일)-5-(에틸술포닐)벤조[d]옥사졸	++++
446	2-(4'-클로로페닐)-5-(1'-히드록시에틸)-벤즈옥사졸	++++
447	5-아미노-2-(5-(에틸술포닐)벤조[d]옥사졸-2-일)페놀	++
448	2-(나프탈렌-2-일)-5-(트리플루오로메톡시)벤조[d]옥사졸	++++
449	2-(나프탈렌-2-일)벤조[d]옥사졸-5-카복실산	++++
450	2-(나프탈렌-2-일)벤조[d]옥사졸	++++
451	5-tert-부틸-2-(나프탈렌-2-일)벤조[d]옥사졸	+
452	5,6-디플루오로-2-(나프탈렌-2-일)벤조[d]옥사졸	++++
453	1-(2'-(3",4"-디클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5'-일)에타논	++++
454	N-(4-(벤조[d]옥사졸-2-일)페닐)이소부티르아미드	++++
455	메틸 2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일(에틸)포스피네이트	++++
456	2-(3',4'-디클로로페닐)-5-(11-히드록시에틸)-벤즈옥사졸	++++
457	2-(4-클로로페닐)-6-메틸벤조[d]옥사졸	++++
458	5-메틸-2-(나프탈렌-2-일)벤조[d]옥사졸	++++

[0332]

표 2

본원에 기재된 바와 유사한 방법, 또는 당업자에게 공지되거나 이들에 의해 개조된 방법으로 제조된 화합물

459	화학명	활성
460	2-(4-((4-클로로페닐티오)메틸)페닐)-1H-벤조[d]이미다졸	+
461	2-((2,4-디클로로페녹시)메틸)-1H-벤조[d]이미다졸	+++
462	2,6-디클로로-N-(5-메틸벤조[d]티아졸-2-일카르바모일)벤즈아미드	+
463	2-(티오펜-2-일)-1H-벤조[d]이미다졸	+
464	N-(3-(1H-벤조[d]이미다졸-2-일)페닐)벤즈아미드	+
465	1-(2-클로로벤질)-2-((2,4-디클로로페녹시)메틸)-1H-벤조[d]이미다졸	+
466	1-(2-메틸벤조[d]옥사졸-6-일)-3-페닐우레아	+
467	1-메틸-3-(2-메틸벤조[d]옥사졸-6-일)우레아	+
468	2-클로로-N-(2-메틸벤조[d]옥사졸-6-일카르바모일)벤즈아미드	+
469	2-(4-클로로페닐)-5-(피페리딘-1-일메틸)벤조[d]옥사졸	+
470	2-(4-메톡시페닐)-1H-벤조[d]이미다졸	++
471	2-(페녹시메틸)-1H-벤조[d]이미다졸	++
472	1-메틸-2-(4-니트로페닐)-1H-벤조[d]이미다졸	+

[0333]

473	2-((4-메톡시페녹시)메틸)-1H-벤조[d]이미다졸	++
474	1-메틸-2-(페녹시메틸)-1H-벤조[d]이미다졸	+
475	4-(1H-벤조[d]이미다졸-2-일)아닐린	+
476	2,2'-(1,4-페닐렌)비스(1H-벤조[d]이미다졸-6-아민)	+
477	2-(4-니트로페닐)벤조[d]옥사졸	+
478	4-(벤조[d]옥사졸-2-일)아닐린	++
479	5-(벤조[d]티아졸-2-일)-2-메틸아닐린	++
480	2-(3,4-디클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-아민	++
481	2-(4-에틸페닐)벤조[d]옥사졸-5-아민	++
482	2-(3,5-디메틸페닐)벤조[d]옥사졸-5-아민	+
483	2-(벤조[d]티아졸-2-일)페놀	+
484	5-아미노-2-(벤조[d]옥사졸-2-일)페놀	++
485	4-(5,6-디메틸벤조[d]옥사졸-2-일)아닐린	++
486	4-(벤조[d]옥사졸-2-일)-N,N-디메틸아닐린	+
487	2-(4-아미노페닐)-1H-벤조[d]이미다졸-6-아민	+
488	2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-아민	++
489	2-(3-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-아민	++
490	2-(4-아미노페닐)-1-메틸-1H-벤조[d]이미다졸-5-아민	+
491	2-(4-(디메틸아미노)페닐)벤조[d]옥사졸-5-아민	++
492	5-니트로-2-페닐벤조[d]옥사졸	++
493	N-(4-(1H-벤조[d]이미다졸-2-일)페닐)-2-(티오펜-2-일)아세트아미드	+
494	N-(4-(1H-벤조[d]이미다졸-2-일)페닐)-3,4-디메톡시벤즈아미드	+
495	2-((4-클로로페녹시)메틸)-1H-벤조[d]이미다졸	+
496	4-(5-아미노벤조[d]옥사졸-2-일)페놀	++
497	N-(4-(1H-벤조[d]이미다졸-2-일)페닐)벤즈아미드	+
498	4-(1H-벤조[d]이미다졸-2-일)-N,N-디메틸아닐린	+
499	2-(메톡시메틸)-1H-벤조[d]이미다졸	+
500	N-(2-(1H-벤조[d]이미다졸-2-일)페닐)-2,4-디클로로벤즈아미드	+
501	N-(4-(1H-벤조[d]이미다졸-2-일)페닐)-2-페닐아세트아미드	+
502	3-(5-메틸벤조[d]옥사졸-2-일)아닐린	++
503	N-(3-(1H-벤조[d]이미다졸-2-일)페닐)아세트아미드	+
504	N-(3-(1H-벤조[d]이미다졸-2-일)페닐)티오펜-2-카르복사미드	+
505	5-메틸-2-(4-니트로페닐)벤조[d]옥사졸	++
506	4-(6-메틸벤조[d]옥사졸-2-일)아닐린	+
507	2-(2-플루오로페닐)-1H-벤조[d]이미다졸	++

[0334]

508	2-(푸란-2-일)-5-니트로-1H-벤조[d]이미다졸	+
509	N,N-디메틸-4-(5-니트로-1H-벤조[d]이미다졸-2-일)아닐린	++
510	2-(푸란-2-일)-1H-벤조[d]이미다졸-5-아민 디히드로클로라이드	+
511	N-(2-(1H-벤조[d]이미다졸-2-일)페닐)-4-(피롤리딘-1-일술포닐)벤즈아미드	+
512	2-(4-메톡시페닐)벤조[d]옥사졸-5-아민	+
513	N-(3-(벤조[d]티아졸-2-일)페닐)아세트아미드	+
514	2-(3-클로로페닐)-1H-벤조[d]이미다졸	+
515	2-(3,4-디메톡시페닐)벤조[d]옥사졸-5-아민	++
516	2-(4-(피페리딘-1-일술포닐)페닐)벤조[d]티아졸	++
517	N-(2-(2,4-디클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)아세트아미드	++
518	4-(5,7-디클로로벤조[d]옥사졸-2-일)아닐린	++
519	N-(2-(3-클로로-4-메톡시페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)아세트아미드	++
520	2-(3,4-디메톡시페닐)-5-니트로-1H-벤조[d]이미다졸	+
521	2-(3,4-디메톡시페닐)-1-메틸-1H-벤조[d]이미다졸	+
522	2-(2-메톡시페닐)벤조[d]티아졸	+
523	2-(4-클로로-3-니트로페닐)벤조[d]티아졸	+
524	2-(2-클로로-5-니트로페닐)벤조[d]티아졸	+
525	2-(4-플루오로페닐)-5-니트로벤조[d]옥사졸	+
526	2-(3-클로로-4-메틸페닐)벤조[d]옥사졸-5-아민	++
527	2-(2-클로로-4-메틸페닐)벤조[d]옥사졸-5-아민	++
528	2-((4-메톡시페녹시)메틸)-1-메틸-1H-벤조[d]이미다졸	++
529	N-(4-(5,7-디메틸벤조[d]옥사졸-2-일)페닐)아세트아미드	++
530	2-((1H-벤조[d]이미다졸-2-일)메틸티오)-5-페닐-1,3,4-옥사디아졸	+
531	2-(p-톨릴옥시메틸)-1H-벤조[d]이미다졸	++
532	4-(5-메틸-1H-벤조[d]이미다졸-2-일)아닐린	+
533	5-니트로-2-m-톨릴벤조[d]옥사졸	++
534	N-(2-(푸란-2-일)-1H-벤조[d]이미다졸-5-일)아세트아미드	+
535	2-(4-메톡시페닐)-1H-벤조[d]이미다졸-5-아민	++
536	N-(2-(푸란-2-일)-1H-벤조[d]이미다졸-5-일)-4-메틸벤젠술포나미드	+
537	2-(3,4-디메톡시페닐)-5-니트로벤조[d]옥사졸	+
538	N-(3-(6-메틸-1H-벤조[d]이미다졸-2-일)페닐)푸란-2-카르복사미드	+
539	5-클로로-2-(3-메틸-4-니트로페닐)벤조[d]옥사졸	+
540	N-(4-(1H-벤조[d]이미다졸-2-일)페닐)벤조[d][1,3]디옥솔-5-카르복사미드	+
541	2-(4-클로로페닐)-1-메틸-1H-벤조[d]이미다졸	++
542	N-(5-(벤조[d]티아졸-2-일)-2-메톡시페닐)아세트아미드	++

[0335]

543	2-(4-(에틸티오)페닐)-1H-벤조[d]이미다졸	++
544	2-(4-아미노페닐)벤조[d]옥사졸-6-아민	++
545	2-(4-(6-메틸벤조[d]티아졸-2-일)페닐카르바모일)벤조산	+
546	(Z)-1-(벤조[d]티아졸-2-일)-4-(1-(시클로프로필아미노)에틸리덴)-3-메틸-1H-피라졸-5(4H)-온	+
547	(E)-2-스티릴-1H-벤조[d]이미다졸	+++
548	2-((2,5-디메틸페녹시)메틸)-1H-벤조[d]이미다졸	+
549	2-(4-에콕시페닐)벤조[d]옥사졸-5-아민	+
550	4-아미노-2-(5-아미노벤조[d]티아졸-2-일)페놀	+
551	4-아미노-2-(5-에틸벤조[d]옥사졸-2-일)페놀	+
552	2-(2-페닐히드라지닐)벤조[d]티아졸	+
553	4-(5-에틸벤조[d]옥사졸-2-일)아닐린	++++
554	2-(5-메틸-1H-벤조[d]이미다졸-2-일)아닐린	+++
555	N-(6-에콕시벤조[d]티아졸-2-일)벤즈아미드	+
556	N-(4-(6-아세트아미도-5-클로로-1H-벤조[d]이미다졸-2-일)페닐)아세트아미드	+
557	4-(4-(1H-벤조[d]이미다졸-2-일)페녹시)아닐린	++++
558	2-(비페닐-4-일)-1H-벤조[d]이미다졸	+
559	4-아미노-2-(5,6-디메틸벤조[d]옥사졸-2-일)페놀	+++
560	2-(4-클로로페닐)-1H-벤조[d]이미다졸-5-아민	+++
561	2-(티오퀸-2-일)-1H-나프토[2,3-d]이미다졸	+++
562	N-(4-(1H-벤조[d]이미다졸-2-일)페닐)푸란-2-카르복사미드	+++
563	2-(에틸티오)벤조[d]티아졸-6-아민	++
564	N-(4-(6-메틸벤조[d]옥사졸-2-일)페닐)이소부티르아미드	+
565	5-아미노-2-(5-이소프로필벤조[d]옥사졸-2-일)페놀	+++
566	3-(5-클로로벤조[d]옥사졸-2-일)-2-메틸아닐린	+
567	N-(벤조[d]티아졸-2-일)-2-클로로-4-메틸벤즈아미드	+
568	N-(5-(1H-벤조[d]이미다졸-2-일)-2-메틸페닐)-2,2,2-트리플루오로아세트아미드	+++
569	2-(2-플루오로페닐)벤조[d]옥사졸-5-아민	+++
570	2-부틸-5-(에틸술포닐)벤조[d]옥사졸	+
571	5-(에틸술포닐)-2-프로필벤조[d]옥사졸	+
572	2-에틸-5-(에틸술포닐)벤조[d]옥사졸	+
573	5-(에틸술포닐)벤조[d]옥사졸	+
574	5-(에틸술포닐)벤조[d]옥사졸-2-티올	+
575	N-(3-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)페닐)아세트아미드	++++
576	1-(2-tert-부틸-1H-인돌-5-일)-3-에틸우레아	+
577	2-(나프탈렌-1-일)벤조[d]옥사졸-5-아민	+

[0336]

578	2-(4-클로로페닐)-5-(프로필술포닐)벤조[d]옥사졸	+
579	2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-6-올	++++
580	N-(4-(5-메틸-1H-벤조[d]이미다졸-2-일)페닐)푸란-2-카르복사미드	+++
581	페닐 (2-페닐-1H-벤조[d]이미다졸-6-일)메탄론	+
582	2-(4-메톡시페닐)벤조[d]티아졸	++++
583	2-(4-메톡시페닐)벤조[d]옥사졸	+++
584	2-(4-메톡시페닐)-6-니트로벤조[d]옥사졸	+++
585	N-(4-(1H-벤조[d]이미다졸-2-일)페닐)티오펜-2-카르복사미드	++++
586	2-(4-메톡시페닐)-5-니트로-1H-벤조[d]이미다졸	++
587	N-(4-(1H-벤조[d]이미다졸-2-일)페닐)테트라히드로푸란-2-카르복사미드	+++
588	1-메틸-2-p-톨릴-1H-벤조[d]이미다졸	+++
589	N-(4-(벤조[d]옥사졸-2-일)페닐)아세트아미드	+++
590	4-(4,6-디메틸벤조[d]옥사졸-2-일)아닐린	++++
591	N-(4-(1H-벤조[d]이미다졸-2-일)페닐)아세트아미드	+++
592	5-(벤조[d]티아졸-2-일)-2-클로로아닐린	++++
593	4-(5-Tert-부틸벤조[d]옥사졸-2-일)아닐린	+++
594	3-(벤조[d]티아졸-2-일)페놀	++++
595	2-(2,4-디클로로페닐)벤조[d]티아졸	++
596	5-(벤조[d]티아졸-2-일)-2-메톡시페놀	++++
597	5-(벤조[d]티아졸-2-일)-2-메톡시아닐린	+++
598	2-(3-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-6-아민	+++
599	2-(3-메틸-4-니트로페닐)벤조[d]티아졸	++++
600	2-(3-메톡시페닐)-1H-벤조[d]이미다졸	++
601	4-(벤조[d]티아졸-2-일)아닐린	+++
602	3-(벤조[d]티아졸-2-일)아닐린	+++
603	2-(3,4-디메틸페닐)벤조[d]옥사졸-5-아민	+++
604	6-니트로-2-페닐-1H-벤조[d]이미다졸	+++
605	5-메틸-2-(4-니트로페닐)-1H-벤조[d]이미다졸	+++
606	2-(3-메톡시페닐)벤조[d]티아졸	+++
607	2-(3-메틸-4-니트로페닐)벤조[d]옥사졸	++++
608	2-(벤조[d][1,3]디옥솔-5-일)벤조[d]티아졸	++++
609	4-(5-Sec-부틸벤조[d]옥사졸-2-일)아닐린	+++
610	5-아미노-2-(5,6-디메틸벤조[d]옥사졸-2-일)페놀	++++
611	6-메틸-2-(4-(트리플루오로메틸)페닐)벤조[d]옥사졸	+++
612	5-메틸-2-(티오펜-2-일)벤조[d]옥사졸	++

[0337]

613	2-p-톨릴-1H-벤조[d]이미다졸	+++
614	2-(벤조[d][1,3]디옥솔-5-일옥시)-N-(벤조[d]티아졸-2-일)아세트아미드	+
615	1-에틸-2-메틸-N-페닐-1H-벤조[d]이미다졸-5-카르복스아미드	++++
616	N-(벤조[d]티아졸-2-일)-2-브로모벤즈아미드	++++
617	2-(벤조[d]티아졸-2-일티오)-1-(피페리딘-1-일)에탄논	++++
618	N-(벤조[d][1,3]디옥솔-5-일)-3-클로로벤조[b]티오엔-2-카르복스아미드	++++
619	5-(벤조[d]옥사졸-2-일)-2-메톡시아닐린	++++
620	5-(1H-벤조[d]이미다졸-2-일)-2-메틸아닐린	++++
621	3-클로로-N-(2-플루오로페닐)벤조[b]티오엔-2-카르복스아미드	++++
622	3-(5-클로로벤조[d]옥사졸-2-일)아닐린	++++
623	N-(3-(5,6-디메틸벤조[d]옥사졸-2-일)페닐)푸란-2-카르복스아미드	++++
624	N-(4-(1H-벤조[d]이미다졸-2-일)페닐)-3-메틸부탄아미드	++++
625	5-(5-에틸벤조[d]옥사졸-2-일)-2-메틸아닐린	++++
626	N-(벤조[d]티아졸-2-일)벤조푸란-2-카르복스아미드	++++
627	2-클로로-5-(5,7-디메틸벤조[d]옥사졸-2-일)아닐린	++++
628	3-아미노-N-(4-플루오로페닐)-6,7-디히드로-5H-시클로펜타[e]티에노[2,3-b]피리딘-2-카르복스아미드	++++
629	2-브로모-N-(6-플루오로벤조[d]티아졸-2-일)벤즈아미드	++++
630	3-(5-메톡시벤조[d]옥사졸-2-일)아닐린	++++
631	N-(4-(1H-벤조[d]이미다졸-2-일)페닐)-2-메틸부탄아미드	++++
632	6-메틸-2-(5-메틸-1H-벤조[d]이미다졸-2-일)티에노[2,3-b]피리딘-3-아민	++++
633	2-(페녹시메틸)벤조[d]티아졸	+++
634	1-에틸-2-메틸-5-페닐-1H-벤조[d]이미다졸	+++
635	2-메틸-5-(6-메틸벤조[d]옥사졸-2-일)아닐린	+++
636	2-클로로-5-(5-메틸벤조[d]옥사졸-2-일)아닐린	+++
637	1-(벤조[d]티아졸-2-일)-3-p-톨릴우레아	+++
638	N-(4-(6-메틸벤조[d]티아졸-2-일)페닐)니코틴아미드	+++
639	2-(퀴놀린-2-일)벤조[d]티아졸	+++
640	2-(4-메톡시벤질티오)-1H-벤조[d]이미다졸	+++
641	2-클로로-N-(4-(옥사졸로[4,5-b]피리딘-2-일)페닐)벤즈아미드	+++
642	N-(3-(5-에틸벤조[d]옥사졸-2-일)페닐)아세트아미드	+++
643	4-(6-메틸벤조[d]티아졸-2-일)페놀	+++
644	N-(3-(5-메틸벤조[d]옥사졸-2-일)페닐)프로피온아미드	+++
645	2-(3-플루오로-4-메톡시벤질티오)-1-메틸-1H-벤조[d]이미다졸	+++
646	4-클로로-3-(5,6-디메틸벤조[d]옥사졸-2-일)아닐린	+++
647	3-(벤조[d]티아졸-2-일)-N-(피리딘-4-일메틸)아닐린	+++

[0338]

648	N-(1H-벤조[d]이미다졸-2-일)-2-메틸벤즈아미드	+++
649	2-(4-브로모-3-메틸페닐)벤조[d]옥사졸-5-아민	+++
650	3-아미노-4,6-디메틸-N-m-톨릴티에노[2,3-b]피리딘-2-카르복스아미드	+++
651	N-(4-(벤조[d]티아졸-2-일)페닐)이소부티라미드	+++
652	N-(6-메틸벤조[d]티아졸-2-일)푸란-2-카르복스아미드	+++
653	5-(1H-벤조[d]이미다졸-2-일)-2-클로로아닐린	+++
654	2-(4H-1,2,4-트리아졸-3-일티오)-N-(4-(6-메틸벤조[d]티아졸-2-일)페닐)아세트아미드	+++
655	4-(4-(1H-벤조[d]이미다졸-2-일)페닐카르바모일)페닐 아세테이트	+++
656	3,5,6-트리메틸-N-(피리딘-4-일메틸)벤조푸란-2-카르복스아미드	+++
657	2-에폭시-N-(4-(6-메틸벤조[d]티아졸-2-일)페닐)아세트아미드	+++
658	N-(6-플루오로벤조[d]티아졸-2-일)티오펜-2-카르복스아미드	+++
659	1-(1H-벤조[d]이미다졸-2-일)-3-메틸-4-페닐-1H-피라졸-5-아민	+++
660	3-에폭시-N-(4-(6-메틸벤조[d]티아졸-2-일)페닐)프로판아미드	+++
661	N-(4-(벤조[d]티아졸-2-일)페닐)시클로프로판카르복스아미드	+++
662	N-(4-(5-메틸벤조[d]옥사졸-2-일)페닐)아세트아미드	+++
663	N-(2-브로모-4-메틸페닐)-2-(1H-인돌-3-일)-2-옥소아세트아미드	+++
664	4-(6-메틸벤조[d]티아졸-2-일)아닐린	++
665	N-페닐벤조푸란-2-카르복스아미드	++
666	4-클로로-N-(1-(1-메틸-1H-벤조[d]이미다졸-2-일)메틸)아닐린	++
667	N-(4-(벤조[d]티아졸-2-일)페닐)프로피온아미드	++
668	N-(2-m-톨릴벤조[d]옥사졸-5-일)프로피온아미드	++
669	N-(1-메틸-1H-벤조[d]이미다졸-2-일)벤즈이미드아미드	++
670	4-메틸-N-(1-메틸-1H-벤조[d]이미다졸-5-일)벤즈아미드	++
671	N-(벤조[d]티아졸-2-일)-5-브로모-2-클로로벤즈아미드	++
672	N-(4-(6-메틸벤조[d]옥사졸-2-일)페닐)티오펜-2-카르복스아미드	++
673	3-아미노-N-(2-플루오로페닐)-6,7-디히드로-5H-시클로펜타[e]티에노[2,3-b]피리딘-2-카르복스아미드	++
674	(3-(벤조푸란-2-일)-1-페닐-1H-피라졸-4-일)메탄올	++
675	2-(4-에폭시페닐)-5-메틸벤조[d]옥사졸	++
676	4-에폭시-N-(1-(1-메틸-1H-벤조[d]이미다졸-2-일)메틸)아닐린	++
677	N-(2-클로로-5-(5-메틸벤조[d]옥사졸-2-일)페닐)푸란-2-카르복스아미드	++
678	N-(4-메틸-6,7-디히드로-5H-시클로펜타[d]피리미딘-2-일)벤조[d]옥사졸-2-아민	++
679	N-(1H-벤조[d]이미다졸-2-일)-3-클로로벤즈아미드	++
680	N-(4-(벤조[d]티아졸-2-일)페닐)테트라히드로푸란-2-카르복스아미드	++
681	1-(2-(벤조[d]옥사졸-2-일아미노)-4,6-디메틸피리미딘-5-일)에타논	++

[0339]

682	N-(4-메틸피리미딘-2-일)벤조[d]옥사졸-2-아민	++
683	N-(6-(N,N-디메틸술폰과모일)벤조[d]티아졸-2-일)티오펜-2-카르복스아미드	++
684	5-브로모-N-(4-히드록시-3-(5-메틸벤조[d]옥사졸-2-일)페닐)니코틴아미드	++
685	2-(1H-1,2,4-트리아졸-3-일티오)-N-(4-(벤조[d]티아졸-2-일)페닐)아세트아미드	++
686	5-(5-에폭시벤조[d]옥사졸-2-일)-2-메틸아닐린	++
687	N-(6-(N-메틸술폰과모일)벤조[d]티아졸-2-일)티오펜-2-카르복스아미드	++
688	2-클로로-N-(4-(5-메틸벤조[d]티아졸-2-일)페닐)-5-(4H-1,2,4-트리아졸-4-일)벤즈아미드	++
689	N-(2-플루오로페닐)-2-(1H-인돌-3-일)-2-옥소아세트아미드	++
690	N-(2,3-디히드로벤조[b][1,4]다옥신-6-일)-2-(1H-인돌-3-일)-2-옥소아세트아미드	++

[0340]

도면의 간단한 설명

[0341]

도 1: 루시퍼라제 리포터 분석 (뮤린 H2K 세포)

도 2: 투여량 의존성 루시퍼라제 유도

도 3: 마우스 유트로핀에 특이적인 항체로 염색된 TA 근육 절편의 일례

도 4: 대조군에 비해 증가된 수준의 유트로핀 발현을 나타내는, CPD-A (V2 및 V3에 노출된 마우스

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0342]

실험

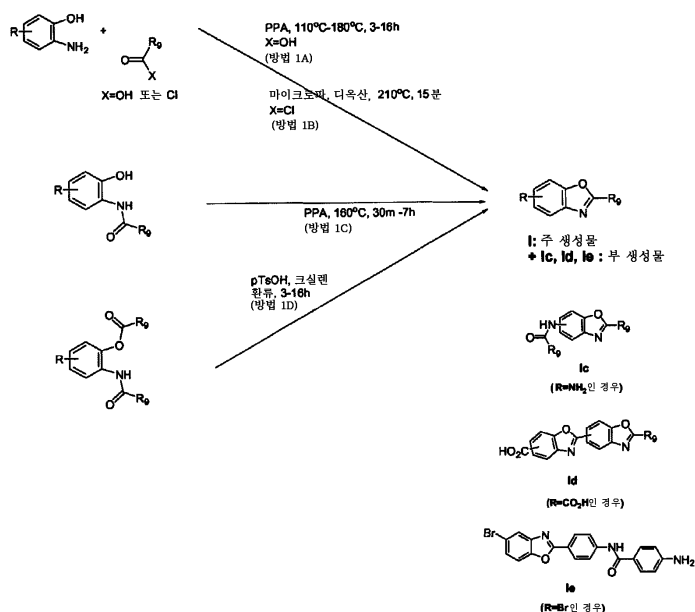
[0343]

길슨(Gilson) 170 DAD에 의해 수행되는 검출을 갖는 길슨 321HPLC 및 전자분무 이온화 모드에서 수행되는 피니간(Finnigan) AQA 질량 분석계 상에서 HPLC-UV-MS를 수행하였다. 사용된 HPLC 컬럼은 페노메넥스 게미니(Phenomenex Gemini) C18 150 x 4.6 mm이었다. 길슨 170 DAD에 의해 수행된 검출을 갖는 길슨 321 상에서 정

제용 HPLC를 수행하였다. 길은 215 분획 수집기를 사용하여 분획을 수집하였다. 사용된 정제용 HPLC 컬럼은 페노메덱스 게메니 C18 150x 10 mm이고, 이동상은 아세토니트릴/물이었다.

[0344] 300 MHz에서 수행되는 브루커 장치 상에서 ^1H NMR 스펙트럼을 기록하였다. 참조 표준으로 클로로포름 (7.25 ppm) 또는 DMSO-D₆ (2.50 ppm)을 사용하여 CDCl₃ 용액 (ppm으로 기록)으로서 NMR 스펙트럼을 얻었다. 피크 다양성을 기록할 때 하기 약어를 사용하였다; s (단일향), d (이중향), t (삼중향), m (다중향), br (브로드), dd (이중 이중향), dt (이중 삼중향), td (삼중 이중향). 결합 상수가 주어진 경우, 헤르쯔 (Hz)로 기록하였다.

[0345] 플래쉬 크로마토그래피 (40-65 μm 실리카겔) 또는 자동 정제 시스템 (바이오타지(Biotage, 등록상표)로부터의 SP1 (상표명) 정제 시스템)을 사용하여 컬럼 크로마토그래피를 수행하였다. 마이크로웨이브 내 반응을 이니시에이터 8(Initiator 8, 상표명) (바이오타지)에서 수행하였다. 사용된 약어는 DMSO (디메틸설폭사이드), HATU (0-(7-아자벤조트리아졸-1일)-N,N,N',N'-테트라메틸우로늄 헥사플루오로포스페이트), HCl (염산), MgSO₄ (황산마그네슘), NaOH (수산화나트륨), Na₂CO₃ (탄산나트륨), NaHCO₃ (중탄산나트륨), STAB (나트륨 트리아세톡시보로히드라이드), THF (테트라히드로푸란)이다.



[0346]

[0347] 방법 1A (화합물 I)

[0348] 2-페닐벤조[d]옥사졸-5-아민

[0349] 110 °C에서 폴리인산에 2,4-디아미노페놀 이염산염 (7.88 g, 40 mmol) 및 벤조산 (4.88 g, 40 mmol)을 동시에 첨가하였다. 이어서, 생성된 혼합물을 180 °C로 3시간 동안 가열하였다. 이어서, 상기 용액을 물에 부었다. 생성된 침전물을 여과에 의해 수집하고, 포화 중탄산나트륨 용액으로 세척하였다. 조 생성물을 에탄올/물로부터 재결정화하여 8.15 g (97%)의 표제 화합물을 수득하였다.

(LCMS RT= 5.17분, MH⁺ 211.1)

^1H NMR (DMSO): 8.15-8.12 (2H, m), 7.60-7.56 (3H, m), 7.42 (1H, d, J 8.7 Hz), 6.89 (1H, d, J 2.1 Hz), 6.68 (1H, dd, J 8.6 2.2 Hz), 5.12 (2H, s)

[0350]

[0351] 하기 모든 화합물을 동일한 일반 방법에 따라 제조하고, 분쇄, 재결정화 또는 컬럼 크로마토그래피로 정제하였다.

[0352] 2-(4-(트리플루오로메틸)페닐)벤조[d]옥사졸-5-아민

LCMS RT= 8.98분, MH⁺ 279.0; ^1H NMR (DMSO): 8.26 (2H, d, J 8.2 Hz), 7.88 (2H, d, J 8.3 Hz), 7.40 (1H, d, J 8.7 Hz), 6.84 (1H, d, J 2.1 Hz), 6.66 (1H, dd, J 8.8 2.2 Hz), 5.13 (2H, s)

[0353]

- [0354] 2-(4-(디에틸아미노)페닐)벤조[d]옥사졸-5-아민
- LCMS RT= 8.98분, MH⁺ 282.2; ¹H NMR (DMSO):** 7.89 (2H, d, *J* 9.1 Hz), 7.30 (1H, d, *J* 8.5 Hz), 6.80-6.76 (3H, m), 6.54 (1H, dd, *J* 8.8 2.2 Hz), 4.99 (2H, s), 3.42 (2H, q, *J* 7.1 Hz), 1.14 (3H, q, *J* 7.1 Hz)
- [0355]
- [0356] 2-(피리딘-3-일)벤조[d]옥사졸-5-아민
- LCMS RT= 6.42분, MH⁺ 212.2; ¹H NMR (DMSO):** 9.29 (1H, d, *J* 1.9 Hz), 8.77 (1H, dd, *J* 4.8 1.4 Hz), 8.48-8.44 (1H, m), 7.62 (1H, dd, *J* 9.0 4.8 Hz), 7.46 (1H, d, *J* 8.8 Hz), 6.91 (1H, d, *J* 2.0 Hz), 6.71 (1H, dd, *J* 8.7 2.1 Hz), 5.18 (2H, s)
- [0357]
- [0358] 2-(5-니트로벤조[d]옥사졸-2-일)페놀
- LCMS RT= 6.94분, ¹H NMR (DMSO):** 10.91 (1H, s), 8.74 (1H, d, *J* 2.3 Hz), 8.37 (1H, dd, *J* 9.0 2.4 Hz), 8.11-8.04 (2H, m), 7.60-7.55 (1H, m), 7.18-7.08 (2H, m)
- [0359]
- [0360] 2-(5-아미노벤조[d]옥사졸-2-일)페놀
- LCMS RT= 6.08분, MH⁺ 227.2; ¹H NMR (DMSO):** 11.46 (1H, s), 8.02 (1H, dd, *J* 7.8 1.6 Hz), 7.58-7.53 (2H, m), 7.18-7.10 (2H, m), 6.96 (1H, d, *J* 2.1 Hz), 6.77 (1H, dd, *J* 8.7 2.2 Hz), 5.29 (2H, s)
- [0361]
- [0362] 3-(5-프로필벤조[d]옥사졸-2-일)벤조산
- LCMS RT= 4.58분, MH⁺ 282.1; ¹H NMR (DMSO):** 13.44 (1H, s), 8.78 (1H, s), 8.47 (1H, d, *J* 8.0 Hz), 8.22 (1H, d, *J* 8.4 Hz), 7.84-7.74 (2H, m), 7.70 (1H, s), 7.35 (1H, d, *J* 9.0 Hz), 2.78-2.73 (2H, m), 1.71 (2H, q, *J* 7.6 Hz), 0.98 (3H, d, *J* 7.2 Hz)
- [0363]
- [0364] 5-아미노-2-(5-아미노벤조[d]옥사졸-2-일)페놀
- LCMS RT= 5.24분, MH⁺ 242.2; ¹H NMR (DMSO):** 11.40 (1H, s), 7.63 (1H, d, *J* 8.6 Hz), 7.40 (1H, d, *J* 8.7 Hz), 6.83 (1H, d, *J* 2.1 Hz), 6.63 (1H, dd, *J* 8.6 2.3 Hz), 6.31 (1H, d, *J* 8.4 2.2 Hz), 6.22 (1H, d, *J* 1.9 Hz), 6.05 (2H, s), 5.15 (2H, s)
- [0365]
- [0366] 5-(에틸술폰닐)-2-페닐벤조[d]옥사졸
- LCMS RT= 5.94분, MH⁺ 288.1; ¹H NMR (DMSO):** 8.32 (1H, d, *J* 1.3 Hz), 8.26 (2H, dd, *J* 6.4 1.6 Hz), 8.10 (1H, d, *J* 8.5 Hz), 7.97 (1H, dd, *J* 8.5 1.7 Hz), 7.72-7.64 (3H, m), 3.43-3.38 (2H, m), 1.14 (3H, t, *J* 7.4 Hz)
- [0367]
- [0368] 2,5-디페닐벤조[d]옥사졸
- LCMS RT= 9.41분, MH⁺ 271.9; ¹H NMR (DMSO):** 8.26-8.23 (2H, m), 8.08 (1H, d, *J* 1.3 Hz), 7.89 (1H, d, *J* 8.5 Hz), 7.77-7.72 (3H, m), 7.68-7.61 (3H, m), 7.51 (2H, t, *J* 7.7 Hz), 7.43-7.38 (1H, m)
- [0369]
- [0370] 2-페닐나프토[1,2-d]옥사졸
- LCMS RT= 8.75분, MH⁺ 246.2; ¹H NMR (DMSO):** 8.48 (1H, d, *J* 8.1 Hz), 8.32-8.27 (2H, m), 8.14 (1H, d, *J* 8.1 Hz), 8.01 (2H, s), 7.78-7.72 (1H, m), 7.68-7.60 (4H, m)
- [0371]
- [0372] 2-페닐벤조[d]옥사졸-5-카르복실산
- LCMS RT= 4.41분, MH⁺ 240.1; ¹H NMR (DMSO):** 13.00 (1H, br), 8.33 (1H, dd, *J* 1.6 0.5 Hz), 8.26-8.23 (2H, m), 8.06 (1H, dd, *J* 8.6 1.7 Hz), 7.91 (1H, dd, *J* 8.5 0.5 Hz), 7.72-7.62 (3H, m)
- [0373]

- [0374] 2-(4-프로필페닐)벤조[d]옥사졸-5-카르복실산
- ¹H NMR (DMSO):** 13.10 (1H, br), 8.30 (1H, dd, *J* 1.5 0.4 Hz), 8.15 (2H, d, *J* 8.3 Hz), 8.04 (1H, dd, *J* 8.6 1.7 Hz), 7.88 (1H, d, *J* 8.5 Hz), 7.47 (2H, d, *J* 8.4 Hz), 2.68 (2H, t, *J* 8.0 Hz), 1.70-1.62 (2H, m), 0.93 (3H, t, *J* 7.5 Hz)
- [0375]
- [0376] 2-(4-프로필페닐)벤조[d]옥사졸-6-카르복실산
- ¹H NMR (DMSO):** 13.10 (1H, br), 8.27 (1H, dd, *J* 1.5 0.5 Hz), 8.16 (2H, d, *J* 8.3 Hz), 8.02 (1H, dd, *J* 8.3 1.5 Hz), 7.88 (1H, dd, *J* 8.3 0.5 Hz), 7.48 (2H, d, *J* 8.4 Hz), 2.68 (2H, t, *J* 8.0 Hz), 1.72-1.58 (2H, m), 0.93 (3H, t, *J* 7.5 Hz)
- [0377]
- [0378] 5-클로로-2-페닐벤조[d]옥사졸
- LCMS RT=** 8.61분, **MH⁺** 230.1; **¹H NMR (DMSO):** 8.21 (2H, dd, *J* 7.6 1.4 Hz), 7.94 (1H, d, *J* 2.1 Hz), 7.86 (1H, d, *J* 8.7 Hz), 7.72-7.60 (3H, m), 7.49 (1H, dd, *J* 8.7 2.1 Hz)
- [0379]
- [0380] 6-클로로-2-페닐벤조[d]옥사졸
- LCMS RT=** 9.00분, **MH⁺** 230.1; **¹H NMR (DMSO):** 8.22-8.18 (2H, m), 8.02 (1H, d, *J* 1.9 Hz), 7.84 (1H, d, *J* 8.5 Hz), 7.70-7.60 (3H, m), 7.48 (1H, dd, *J* 8.5 2.0 Hz)
- [0381]
- [0382] 5-Tert-부틸-2-페닐벤조[d]옥사졸
- LCMS RT=** 9.82분, **MH⁺** 252.0; **¹H NMR (DMSO):** 7.72-7.70 (4H, m), 7.59 (2H, dt, *J* 7.6 1.0 Hz), 7.46-7.40 (2H, m), 1.38 (9H, s)
- [0383]
- [0384] 6-니트로-2-페닐벤조[d]옥사졸
- LCMS RT=** 7.30분; **¹H NMR (DMSO):** 8.77-8.76 (1H, m), 8.34 (1H, d, *J* 8.8 Hz), 8.27 (2H, d, *J* 7.7 Hz), 8.05 (1H, d, *J* 8.8 Hz), 7.80-7.65 (3H, m)
- [0385]
- [0386] 4-(5-클로로벤조[d]옥사졸-2-일)-N,N-디에틸아닐린
- LCMS RT=** 10.17분, **MH⁺** 301.1; **¹H NMR (DMSO):** 8.03 (2H, d, *J* 8.9 Hz), 7.82-7.76 (2H, m), 7.40 (1H, dd, *J* 8.6 2.0 Hz), 6.89 (2H, d, *J* 8.9 Hz)
- [0387]
- [0388] 4-(6-클로로벤조[d]옥사졸-2-일)-N,N-디에틸아닐린
- LCMS RT=** 10.28분, **MH⁺** 301.0; **¹H NMR (DMSO):** 7.95 (2H, d, *J* 9.1 Hz), 7.87 (1H, d, *J* 1.7 Hz), 7.67 (1H, d, *J* 8.4 Hz), 7.38 (1H, dd, *J* 8.4 2.1 Hz), 6.83 (2H, d, *J* 9.1 Hz), 3.45 (4H, q, *J* 7.2 Hz), 1.15 (6H, t, *J* 7.1 Hz)
- [0389]
- [0390] 4-(5-Tert-부틸벤조[d]옥사졸-2-일)-N,N-디에틸아닐린
- LCMS RT=** 13.81분, **MH⁺** 323.2; **¹H NMR (DMSO):** 7.94 (2H, d, *J* 9.3 Hz), 7.66 (1H, d, *J* 1.5 Hz), 7.58 (1H, d, *J* 8.6 Hz), 7.36 (1H, dd, *J* 8.6 1.9 Hz), 6.82 (2H, d, *J* 9.2 Hz), 3.44 (4H, q, *J* 7.0 Hz), 1.35 (9H, s), 1.15 (6H, t, *J* 7.1 Hz)
- [0391]
- [0392] 4-(벤조[d]옥사졸-2-일)-N,N-디에틸아닐린
- LCMS RT=** 10.50분, **MH⁺** 267.0; **¹H NMR (DMSO):** 7.97 (2H, d, *J* 9.1 Hz), 7.71-7.64 (2H, m), 7.36-7.30 (2H, m), 6.82 (2H, d, *J* 9.2 Hz), 3.44 (4H, q, *J* 7.0 Hz), 1.15 (6H, t, *J* 7.1 Hz)
- [0393]
- [0394] N,N-디에틸-4-(5-(에틸술포닐)벤조[d]옥사졸-2-일)아닐린
- LCMS RT=** 7.45분, **MH⁺** 358.9; **¹H NMR (DMSO):** 8.13 (1H, dd, *J* 1.3 0.4 Hz), 8.00 (2H, d, *J* 9.1 Hz), 7.95 (1H, dd, *J* 8.1 0.4 Hz), 7.83 (1H, dd, *J* 8.4 1.8 Hz), 6.85 (2H, d, *J* 9.2 Hz), 3.50-3.39 (6H, m), 1.23-1.04 (9H, m)
- [0395]

- [0396] N,N-디에틸-4-(5-페닐벤조[d]옥사졸-2-일)아닐린
- LCMS RT=** 15.22분, **MH⁺** 343.1; **¹H NMR (DMSO):** 7.99 (2H, d, *J* 8.9 Hz), 7.93 (1H, s), 7.77-7.71 (3H, m), 7.60 (1H, d, *J* 8.3 Hz), 7.52-7.46 (2H, m), 7.40-7.35 (1H, m), 6.84 (2H, d, *J* 9.0 Hz), 3.44 (4H, q, *J* 7.0 Hz), 1.15 (6H, t, *J* 7.1 Hz)
- [0397]
- [0398] N,N-디에틸-4-(나프토[1,2-d]옥사졸-2-일)아닐린
- LCMS RT=** 11.21분, **MH⁺** 317.1; **¹H NMR (DMSO):** 8.41 (1H, d, *J* 8.3 Hz), 8.12-8.02 (3H, m), 7.94-7.86 (2H, m), 7.72-7.66 (1H, m), 7.60-7.55 (1H, m), 6.85 (2H, d, *J* 9.0 Hz), 3.44 (4H, q, *J* 7.0 Hz), 1.15 (6H, t, *J* 7.1 Hz)
- [0399]
- [0400] 2-(피리딘-2-일)벤조[d]옥사졸
- LCMS RT=** 5.68분, **MH⁺** 197.0; **¹H NMR (DMSO):** 8.87 (1H, d, *J* 4.4 Hz), 8.41 (1H, d, *J* 8.0 Hz), 8.14 (1H, dt, *J* 7.8 1.5 Hz), 7.93 (2H, t, *J* 7.4 Hz), 7.73-7.69 (1H, m), 7.60-7.50 (2H, m)
- [0401]
- [0402] 2-(4-(피페리딘-1-일)페닐)벤조[d]옥사졸-5-아민
- LCMS RT=** 6.95분, **MH⁺** 206.1; **¹H NMR (DMSO):** 7.92 (2H, d, *J* 9.0 Hz), 7.32 (1H, d, *J* 9.0 Hz), 7.05 (2H, d, *J* 9.0 Hz), 6.80 (1H, d, *J* 2.1 Hz), 6.58 (1H, dd, *J* 8.0 2.0 Hz), 5.01 (2H, s), 1.60 (6H, m)
- [0403]
- [0404] 2-(4-(4-메틸피페라진-1-일)페닐)벤조[d]옥사졸-5-아민
- LCMS RT=** 5.34분, **MH⁺** 309.1; **¹H NMR (DMSO):** 7.94 (2H, d, *J* 9.0 Hz), 7.33 (1H, d, *J* 9.0 Hz), 7.08 (2H, d, *J* 9.0 Hz), 6.80 (1H, d, *J* 2.1 Hz), 6.58 (1H, dd, *J* 8.0 2.0 Hz), 5.03 (2H, s), 2.60-2.57 (4H, m), 2.45-2.42 (4H, m), 2.23 (3H, s)
- [0405]
- [0406] 2-(4-(디에틸아미노)페닐)벤조[d]옥사졸-5-카르복실산
- ¹H NMR (DMSO):** 13.00 (1H, br), 8.17 (1H, d, *J* 1.5 Hz), 7.99 (2H, d, *J* 9.0 Hz), 7.94 (1H, dd, *J* 8.5 1.7 Hz), 7.77 (1H, d, *J* 8.4 Hz), 6.84 (2H, d, *J* 9.1 Hz), 3.45 (4H, q, *J* 7.0 Hz), 1.15 (6H, t, *J* 7.0 Hz)
- [0407]
- [0408] 2-프로필벤조[d]옥사졸-5-아민
- LCMS RT=** 6.81분, **MH⁺** 177.2; **¹H NMR (DMSO):** 7.26 (1H, d, *J* 8.6 Hz), 6.76 (1H, d, *J* 2.2 Hz), 6.57 (1H, dd, *J* 8.6 2.2 Hz), 4.98 (2H, s), 2.80 (2H, t, *J* 7.3 Hz), 1.81-1.70 (2H, m), 0.96 (3H, t, *J* 7.4 Hz)
- [0409]
- [0410] 2-p-톨릴옥사졸로[5,4-b]피리딘
- LCMS RT=** 6.72분, **MH⁺** 211.1; **¹H NMR (DMSO):** 8.38 (1H, dd, *J* 5.0 1.5 Hz), 8.26 (1H, dd, *J* 7.9 1.6 Hz), 8.14 (2H, d, *J* 8.2 Hz), 7.53-7.45 (3H, m), 2.44 (3H, s)
- [0411]
- [0412] 2-p-톨릴옥사졸로[4,5-b]피리딘
- LCMS RT=** 6.12분, **MH⁺** 211.1; **¹H NMR (DMSO):** 8.54 (1H, dd, *J* 4.9 1.4 Hz), 8.23 (1H, dd, *J* 8.2 1.4 Hz), 8.16 (2H, d, *J* 8.2 Hz), 7.59-7.44 (3H, m), 2.44 (3H, s)
- [0413]
- [0414] 2-(4-모르폴리노페닐)벤조[d]옥사졸-5-아민
- LCMS RT=** 5.52분, **MH⁺** 295.8; **¹H NMR (DMSO):** 7.97 (2H, d, *J* 9.0 Hz), 7.33 (1H, d, *J* 9.0 Hz), 7.09 (2H, d, *J* 9.0 Hz), 6.81 (1H, d, *J* 2.1 Hz), 6.59 (1H, dd, *J* 8.0 2.0 Hz), 5.04 (2H, s), 3.77-3.74 (4H, m), 3.29-3.24 (4H, m)
- [0415]

- [0416] 5-페닐-2-p-톨릴벤조[d]옥사졸
- LCMS RT=** 10.00분, **MH⁺** 286.1; **¹H NMR (DMSO):** 8.12 (2H, d, *J* 8.5 Hz), 8.06 (1H, d, *J* 1.8 Hz), 7.86 (1H, d, *J* 8.6 Hz), 7.77-7.70 (3H, m), 7.53-7.37 (5H, m), 2.43 (3H, s)
- [0417]
- [0418] 2-(4-클로로페닐)-5-페닐벤조[d]옥사졸
- LCMS RT=** 10.54분, **MH⁺** 306.0; **¹H NMR (DMSO):** 8.24 (2H, d, *J* 8.6 Hz), 8.09 (1H, d, *J* 1.8 Hz), 7.89 (1H, d, *J* 8.6 Hz), 7.77-7.70 (5H, m), 7.53-7.34 (3H, m)
- [0419]
- [0420] 2-시클로헥실-5-니트로벤조[d]옥사졸
- LCMS RT=** 7.90분, **MH⁺** 247.3; **¹H NMR (CDCl₃):** 8.62 (1H, d, *J* 2.2 Hz), 8.33 (1H, dd, *J* 8.9 2.3 Hz), 7.63 (1H, d, *J* 8.9 Hz), 3.11-3.01 (1H, m), 2.27-2.21 (2H, m), 1.98-1.92 (2H, m), 1.84-1.71 (3H, m), 1.57-1.37 (3H, m)
- [0421]
- [0422] 5-Tert-부틸-2-p-톨릴벤조[d]옥사졸
- LCMS RT=** 10.53분, **MH⁺** 266.1; **¹H NMR (DMSO):** 8.08 (2H, d, *J* 8.2 Hz), 7.78 (1H, d, *J* 1.6 Hz), 7.68 (1H, d, *J* 8.6 Hz), 7.48 (1H, dd, *J* 8.7 2.0 Hz), 7.43 (2H, d, *J* 8.0 Hz), 2.42 (3H, s), 1.37 (9H, s)
- [0423]
- [0424] 2-p-톨릴벤조[d]옥사졸
- LCMS RT=** 7.82분, **MH⁺** 210.1; **¹H NMR (DMSO):** 8.11 (2H, d, *J* 8.2 Hz), 7.81-7.76 (2H, m), 7.46-7.40 (4H, m), 2.42 (3H, s)
- [0425]
- [0426] 2-(3-(트리플루오로메틸)페닐)벤조[d]옥사졸-5-아민
- LCMS RT=** 6.39분, **MH⁺** 279.0; **¹H NMR (DMSO):** 8.41 (1H, d, *J* 8.0 Hz), 8.37 (1H, s), 7.98 (1H, d, *J* 8.0 Hz), 7.84 (1H, t, *J* 8.0 Hz), 7.46 (1H, d, *J* 8.9 Hz), 6.91 (1H, d, *J* 1.9 Hz), 6.72 (1H, d, *J* 8.6 2.0 Hz), 5.18 (2H, s)
- [0427]
- [0428] 5-(에틸술포닐)-2-p-톨릴벤조[d]옥사졸
- LCMS RT=** 6.46분, **MH⁺** 302.0; **¹H NMR (DMSO):** 8.28 (1H, d, *J* 1.6 Hz), 8.14 (2H, d, *J* 8.2 Hz), 8.06 (1H, d, *J* 8.6 Hz), 7.94 (1H, dd, *J* 8.6 1.7 Hz), 7.47 (2H, d, *J* 8.1 Hz), 3.42-3.34 (2H, m), 2.44 (3H, s), 1.12 (3H, t, *J* 7.3 Hz)
- [0429]
- [0430] 2-(4-클로로페닐)-5-(에틸술포닐)벤조[d]옥사졸
- LCMS RT=** 6.63분, **MH⁺** 322.1; **¹H NMR (CDCl₃):** 8.39 (1H, d, *J* 1.7 Hz), 8.27 (2H, d, *J* 8.7 Hz), 8.00 (1H, dd, *J* 8.5 1.8 Hz), 7.80 (1H, d, *J* 8.5 Hz), 7.60 (2H, d, *J* 8.6 Hz), 3.23 (2H, q, *J* 7.6 Hz), 1.36 (3H, t, *J* 7.4 Hz)
- [0431]
- [0432] 4-니트로-2-p-톨릴벤조[d]옥사졸
- LCMS RT=** 6.97분, **MH⁺** 255.0; **¹H NMR (DMSO):** 8.27 (1H, dd, *J* 8.1 0.8 Hz), 8.23 (1H, dd, *J* 8.2 0.8 Hz), 8.18 (2H, d, *J* 8.2 Hz), 7.65 (1H, t, *J* 8.2 Hz), 7.49 (2H, d, *J* 8.0 Hz), 2.45 (3H, s)
- [0433]
- [0434] 6-니트로-2-p-톨릴벤조[d]옥사졸
- LCMS RT=** 7.83분, **MH⁺** 255.0; **¹H NMR (DMSO):** 8.74 (1H, d, *J* 2.2 Hz), 8.33 (1H, dd, *J* 8.7 2.2 Hz), 8.17 (2H, d, *J* 8.2 Hz), 8.02 (1H, d, *J* 8.8 Hz), 7.49 (2H, d, *J* 7.9 Hz), 2.45 (3H, s)
- [0435]
- [0436] 2-(4-클로로페닐)-6-니트로벤조[d]옥사졸
- LCMS RT=** 7.76분, **¹H NMR (DMSO):** 8.77 (1H, d, *J* 2.2 Hz), 8.35 (1H, dd, *J* 8.7 2.2 Hz), 8.27 (2H, d, *J* 8.2 Hz), 8.06 (1H, d, *J* 8.8 Hz), 7.76 (2H, d, *J* 7.9 Hz)
- [0437]

- [0438] 2-p-톨릴옥사졸로[4,5-c]피리딘
- LCMS RT=** 6.24분, **MH⁺** 211.0; **¹H NMR (DMSO):** 9.11 (1H, d, *J* 0.9 Hz), 8.59 (1H, d, *J* 5.6 Hz), 8.14 (2H, d, *J* 8.2 Hz), 7.90 (1H, dd, *J* 5.6 1.0 Hz), 7.47 (2H, d, *J* 8.0 Hz), 2.44 (3H, s)
- [0439]
- [0440] 2-m-톨릴벤조[d]옥사졸-5-아민
- LCMS RT=** 6.18분, **MH⁺** 225.0; **¹H NMR (DMSO):** 7.97-7.91 (2H, m), 7.50-7.39 (3H, m), 6.87 (1H, d, *J* 2.0 Hz), 6.67 (1H, dd, *J* 8.7 2.2 Hz), 5.11 (2H, s), 2.42 (3H, s)
- [0441]
- [0442] 2-(3-(디메틸아미노)페닐)벤조[d]옥사졸-5-아민
- LCMS RT=** 6.12분, **MH⁺** 254.0; **¹H NMR (DMSO):** 7.48-7.31 (4H, m), 6.96-6.92 (1H, m), 6.87 (1H, d, *J* 2.2 Hz), 6.66 (1H, dd, *J* 8.6 2.2 Hz), 5.09 (2H, s), 3.00 (6H, s)
- [0443]
- [0444] 5-브로모-2-p-톨릴벤조[d]옥사졸
- LCMS RT=** 9.41분, **MH⁺** 289.8; **¹H NMR (DMSO):** 8.10 (2H, d, *J* 8.2 Hz), 8.04 (1H, d, *J* 1.9 Hz), 7.78 (1H, d, *J* 8.6 Hz), 7.58 (1H, dd, *J* 8.7 2.0 Hz), 7.45 (2H, d, *J* 8.0 Hz), 2.43 (3H, s)
- [0445]
- [0446] 2-o-톨릴벤조[d]옥사졸-5-아민
- LCMS RT=** 6.16분, **MH⁺** 225.0; **¹H NMR (DMSO):** 8.05 (1H, d, *J* 7.7 Hz), 7.53-7.37 (4H, m), 6.90 (1H, d, *J* 2.2 Hz), 6.68 (1H, dd, *J* 8.7 2.2 Hz), 5.10 (2H, s), 2.71 (3H, s)
- [0447]
- [0448] 2-(2-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-아민
- LCMS RT=** 4.31분, **MH⁺** 245.0; **¹H NMR (DMSO):** 8.10 (1H, d, *J* 7.3 Hz), 7.75-7.52 (3H, m), 7.45 (1H, d, *J* 8.6 Hz), 6.92 (1H, d, *J* 1.6 Hz), 6.73 (1H, dd, *J* 8.8 2.1 Hz), 5.16 (2H, s)
- [0449]
- [0450] 6-브로모-2-p-톨릴옥사졸로[5,4-b]피리딘
- LCMS RT=** 8.40분, **MH⁺** 288.8; **¹H NMR (DMSO):** 8.59 (1H, d, *J* 2.1 Hz), 8.50 (1H, d, *J* 2.2 Hz), 8.13 (2H, d, *J* 8.2 Hz), 7.48 (2H, d, *J* 8.0 Hz)
- [0451]
- [0452] 5,6-디메틸-2-p-톨릴벤조[d]옥사졸
- LCMS RT=** 8.76분, **MH⁺** 238.0; **¹H NMR (DMSO):** 8.06 (2H, d, *J* 8.2 Hz), 7.56 (2H, s), 7.41 (2H, d, *J* 8.2 Hz), 2.41 (3H, s), 2.35 (3H, s), 2.33 (3H, s)
- [0453]
- [0454] 2-(4-클로로페닐)-5,6-디메틸벤조[d]옥사졸
- LCMS RT=** 9.07분, **MH⁺** 258.0; **¹H NMR (DMSO):** 8.19 (2H, d, *J* 8.6 Hz), 7.69 (2H, d, *J* 8.6 Hz), 7.60 (2H, s), 2.38 (3H, s), 2.36 (3H, s)
- [0455]
- [0456] 2-(2,4-디클로로페닐)-5,6-디메틸벤조[d]옥사졸
- LCMS RT=** 9.68분, **MH⁺** 291.9; **¹H NMR (DMSO):** 8.16 (1H, d, *J* 8.5 Hz), 7.90 (1H, d, *J* 2.1 Hz), 7.69-7.61 (3H, m), 2.38 (3H, s), 2.36 (3H, s)
- [0457]
- [0458] 2-(3-플루오로페닐)벤조[d]옥사졸-5-아민
- LCMS RT=** 9.45분, **MH⁺** 229.1; **¹H NMR (DMSO):** 7.98 (1H, d, *J* 8.0 Hz), 7.89-7.84 (1H, m), 7.68-7.60 (1H, m), 7.48-7.42 (2H, m), 6.89 (1H, d, *J* 2.1 Hz), 6.71 (1H, dd, *J* 8.7 2.2 Hz), 5.15 (2H, s)
- [0459]

- [0460] 2-(5-부틸피리딘-2-일)-6-니트로벤조[d]옥사졸
- LCMS RT=** 7.34분, **MH⁺** 298.0; **¹H NMR (DMSO):** 8.81 (1H, d, *J* 2.1 Hz), 8.71 (1H, d, *J* 1.5 Hz), 8.37-8.32 (2H, m), 8.08 (1H, d, *J* 8.8 Hz), 7.95 (1H, dd, *J* 8.1 2.1 Hz), 2.75 (2H, t, *J* 7.6 Hz), 1.70-1.59 (2H, m), 1.41-1.29 (2H, m), 0.93 (3H, t, *J* 7.3 Hz)
- [0461]
- [0462] 2-(4-클로로페닐)-5-(이소프로필술폰닐)벤조[d]옥사졸
- LCMS RT=** 6.98분; **¹H NMR (DMSO):** 8.29-8.24 (3H, m), 8.09 (1H, d, *J* 8.6 Hz), 7.94 (1H, dd, *J* 8.6 1.7 Hz), 7.74 (2H, d, *J* 8.6 Hz), 3.56-3.50 (1H, m), 1.19 (6H, d, *J* 6.8 Hz)
- [0463]
- [0464] 5-브로모-2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸
- LCMS RT=** 9.09분, **MH⁺** 307.9; **¹H NMR (DMSO):** 8.21 (2H, d, *J* 8.7 Hz), 8.08 (1H, d, *J* 1.9 Hz), 7.80 (1H, d, *J* 8.7 Hz), 7.71 (2H, d, *J* 8.7 Hz), 7.62 (1H, dd, *J* 8.7 2.0 Hz)
- [0465]
- [0466] 4-(5-클로로벤조[d]옥사졸-2-일)아닐린
- LCMS RT=** 6.48분, **MH⁺** 244.9; **¹H NMR (DMSO):** 7.86 (2H, d, *J* 8.5 Hz), 7.74 (1H, d, *J* 2.1 Hz), 7.70 (1H, d, *J* 8.6 Hz), 7.34 (1H, dd, *J* 8.8 2.1 Hz), 6.70 (2H, d, *J* 8.7 Hz), 6.06 (2H, s)
- [0467]
- [0468] 4-(6-클로로벤조[d]옥사졸-2-일)아닐린
- LCMS RT=** 6.57분, **MH⁺** 245.0; **¹H NMR (DMSO):** 7.87-7.82 (3H, m), 7.66 (1H, d, *J* 8.5 Hz), 7.37 (1H, dd, *J* 8.7 2.0 Hz), 6.70 (2H, d, *J* 8.8 Hz), 6.04 (2H, s)
- [0469]
- [0470] 2-(3-클로로페닐)-5-(에틸술폰닐)벤조[d]옥사졸
- LCMS RT=** 6.78분, **¹H NMR (DMSO):** 8.34 (1H, d, *J* 1.3 Hz), 8.23-8.20 (2H, m), 8.10 (1H, d, *J* 8.6 Hz), 7.99 (1H, dd, *J* 8.6 1.8 Hz), 7.80-7.76 (1H, m), 7.72-7.67 (1H, m), 3.40 (2H, q, *J* 7.3 Hz), 1.13 (3H, t, *J* 7.3 Hz)
- [0471]
- [0472] 2-(2-클로로페닐)-5-(에틸술폰닐)벤조[d]옥사졸
- LCMS RT=** 6.37분, **¹H NMR (DMSO):** 8.39 (1H, d, *J* 1.6 Hz), 8.20 (1H, dd, *J* 7.6 1.7 Hz), 8.12 (1H, d, *J* 8.6 Hz), 8.01 (1H, dd, *J* 8.6 1.8 Hz), 7.78-7.60 (3H, m), 1.14 (3H, t, *J* 7.3 Hz)
- [0473]
- [0474] 2-(3,4-디클로로페닐)-5-(에틸술폰닐)벤조[d]옥사졸
- LCMS RT=** 7.25분; **¹H NMR (DMSO):** 8.39 (1H, d, *J* 2.0 Hz), 8.35 (1H, d, *J* 1.4 Hz), 8.19 (1H, dd, *J* 8.4 2.0 Hz), 8.10 (1H, d, *J* 8.6 Hz), 7.99 (1H, dd, *J* 8.6 1.8 Hz), 7.94 (1H, d, *J* 8.4 Hz), 3.41 (2H, q, *J* 7.3 Hz), 1.13 (3H, t, *J* 7.3 Hz)
- [0475]
- [0476] 2-(2,3-디클로로페닐)-5-(에틸술폰닐)벤조[d]옥사졸
- LCMS RT=** 6.80분; **¹H NMR (DMSO):** 8.42 (1H, d, *J* 1.8 0.6 Hz), 8.17-8.13 (2H, m), 8.05-7.96 (2H, m), 7.65 (1H, t, *J* 8.0 Hz), 3.41 (2H, q, *J* 7.3 Hz), 1.14 (3H, t, *J* 7.3 Hz)
- [0477]
- [0478] 2-(1-페닐에틸)벤조[d]옥사졸-5-아민
- LCMS RT=** 5.80분, **MH⁺** 239.0; **¹H NMR (DMSO):** 7.35-7.23 (6H, m), 6.80 (1H, d, *J* 2.1 Hz), 6.57 (1H, dd, *J* 8.6 2.2 Hz), 5.02 (2H, s), 4.42 (1H, q, *J* 7.1 Hz), 1.66 (3H, d, *J* 7.2 Hz)
- [0479]

- [0480] 2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-술폰산
- LCMS RT= 4.44분, MH⁺ 309.9; ¹H NMR (DMSO):** 8.28 (2H, d, *J* 8.7 Hz), 8.03 (1H, s), 7.83-7.73 (4H, m)
- [0481]
- [0482] 5-클로로-2-(피리딘-4-일)벤조[d]옥사졸
- LCMS RT= 6.51분, MH⁺ 231.0; ¹H NMR (DMSO):** 8.87 (2H, d, *J* 8.6 Hz), 8.11 (2H, d, *J* 6.1 Hz), 8.04 (1H, d, *J* 1.8 Hz), 7.92 (1H, d, *J* 8.8 Hz), 7.57 (1H, dd, *J* 8.7 2.1 Hz)
- [0483]
- [0484] 6-클로로-2-(피리딘-4-일)벤조[d]옥사졸
- LCMS RT= 6.49분, MH⁺ 231.0; ¹H NMR (DMSO):** 8.87 (2H, d, *J* 6.1 Hz), 8.10-8.08 (3H, m), 7.93 (1H, d, *J* 8.6 Hz), 7.54 (1H, dd, *J* 8.6 2.0 Hz)
- [0485]
- [0486] 4-(5-브로모벤조[d]옥사졸-2-일)아닐린
- LCMS RT= 6.70분, MH⁺ 289.2; ¹H NMR (DMSO):** 7.88-7.83 (3H, m), 7.66 (1H, d, *J* 8.6 Hz), 7.46 (1H, dd, *J* 8.6 2.1 Hz), 6.69 (2H, d, *J* 8.8 Hz), 6.09 (2H, s)
- [0487]
- [0488] 2-(4-클로로페닐)-5-(메틸술폰닐)벤조[d]옥사졸
- LCMS RT= 6.43분, MH⁺ 308.2; ¹H NMR (CDCl₃):** 8.43 (1H, dd, *J* 1.8 0.3 Hz), 8.28 (2H, d, *J* 8.7 Hz), 8.05 (1H, dd, *J* 8.6 1.9 Hz), 7.81 (1H, dd, *J* 8.5 0.4 Hz), 7.61 (2H, d, *J* 8.8 Hz), 3.18 (3H, s)
- [0489]
- [0490] 2-(4-클로로페닐)-5-(프로필술폰닐)벤조[d]옥사졸
- LCMS RT= 7.09분, MH⁺ 335.9; ¹H NMR (CDCl₃):** 8.38 (1H, dd, *J* 1.7 0.4 Hz), 8.27 (2H, d, *J* 8.8 Hz), 8.00 (1H, dd, *J* 8.5 1.8 Hz), 7.80 (1H, dd, *J* 8.5 0.4 Hz), 7.60 (2H, d, *J* 8.8 Hz), 3.21-3.15 (2H, m), 1.89-1.76 (2H, m), 1.05 (3H, t, *J* 7.4 Hz)
- [0491]
- [0492] 2-(나프탈렌-1-일)벤조[d]옥사졸-5-아민
- LCMS RT= 6.59분, MH⁺ 261.1; ¹H NMR (DMSO):** 9.41 (1H, d, *J* 8.6 Hz), 8.38 (1H, dd, *J* 7.3 1.0 Hz), 8.19 (1H, d, *J* 8.2 Hz), 8.09 (1H, dd, *J* 7.8 0.9 Hz), 7.79-7.64 (3H, m), 7.49 (1H, d, *J* 8.7 Hz), 6.99 (1H, d, *J* 2.1 Hz), 6.74 (1H, d, *J* 8.7 2.2 Hz), 5.17 (2H, s)
- [0493]
- [0494] 2-(비페닐-4-일)벤조[d]옥사졸-5-아민
- LCMS RT= 6.92분, MH⁺ 287.1; ¹H NMR (DMSO):** 8.22 (2H, d, *J* 8.2 Hz), 7.90 (2H, d, *J* 8.3 Hz), 7.81-7.76 (2H, m), 7.53 (2H, t, *J* 7.8 Hz), 7.47-7.41 (2H, m), 6.90 (1H, d, *J* 2.2 Hz), 6.69 (1H, d, *J* 8.6 2.2 Hz), 5.14 (2H, s)
- [0495]
- [0496] 2-(퀴놀린-2-일)벤조[d]옥사졸-5-아민
- LCMS RT= 5.78분, MH⁺ 262.1; ¹H NMR (DMSO):** 8.60 (1H, d, *J* 8.7 Hz), 8.39 (1H, d, *J* 8.6 Hz), 8.19 (1H, dd, *J* 8.3 0.5 Hz), 8.10 (1H, dd, *J* 8.4 0.8 Hz), 7.92-7.86 (1H, m), 7.76-7.70 (1H, m), 7.56 (1H, d, *J* 8.7 Hz), 6.97 (1H, d, *J* 2.1 Hz), 6.79 (1H, dd, *J* 8.7 2.2 Hz), 5.22 (2H, s)
- [0497]
- [0498] 2-(퀴놀린-3-일)벤조[d]옥사졸-5-아민
- LCMS RT= 5.76분, MH⁺ 262.1; ¹H NMR (DMSO):** 9.58 (1H, d, *J* 2.1 Hz), 8.14 (1H, d, *J* 2.0 Hz), 8.24 (1H, dd, *J* 7.8 0.8 Hz), 8.13 (1H, d, *J* 8.3 Hz), 7.93-7.88 (1H, m), 7.74 (1H, td, *J* 8.0 0.9 Hz), 7.49 (1H, d, *J* 8.6 Hz), 6.95 (1H, d, *J* 2.1 Hz), 6.74 (1H, dd, *J* 8.7 2.2 Hz), 5.20 (2H, s)
- [0499]

- [0500] 2-(6-메톡시나프탈렌-2-일)벤조[d]옥사졸-5-아민
- LCMS RT=** 6.56분, **MH⁺** 291.1; **¹H NMR (DMSO):** 8.67 (1H, d, *J* 1.3 Hz), 8.16 (1H, dd, *J* 8.6 1.7 Hz), 8.07 (1H, d, *J* 9.1 Hz), 7.99 (1H, d, *J* 8.8 Hz), 7.45-7.42 (2H, m), 7.27 (1H, dd, *J* 8.7 2.5 Hz), 6.90 (1H, d, *J* 2.0 Hz), 6.68 (1H, dd, *J* 8.6 2.2 Hz), 5.12 (2H, s), 3.92 (3H, s)
- [0501]
- [0502] 2-(6-브로모나프탈렌-2-일)벤조[d]옥사졸-5-아민
- LCMS RT=** 7.59분, **MH⁺** 339.3; **¹H NMR (DMSO):** 8.78 (1H, s), 8.34 (1H, d, *J* 1.7 Hz), 8.26 (1H, d, *J* 8.6 1.6 Hz), 8.14 (1H, d, *J* 8.9 Hz), 8.09 (1H, d, *J* 8.7 Hz), 7.76 (1H, dd, *J* 8.9 2.0 Hz), 7.46 (1H, d, *J* 8.7 Hz), 6.92 (1H, d, *J* 2.2 Hz), 6.72 (1H, dd, *J* 8.6 2.2 Hz), 5.16 (2H, s)
- [0503]
- [0504] 2-(4-클로로페닐)나프토[1,2-d]옥사졸
- LCMS RT=** 9.55분, **MH⁺** 280.1; **¹H NMR (DMSO):** 8.47 (1H, dd, *J* 8.2 0.6 Hz), 8.29 (2H, d, *J* 8.7 Hz), 8.17-8.13 (1H, m), 8.02 (2H, s), 7.78-7.70 (3H, m), 7.67-7.61 (1H, m)
- [0505]
- [0506] 1-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)프로판-1-온
- LCMS RT=** 7.92분, **MH⁺** 286.1; **¹H NMR (DMSO):** 8.44 (1H, dd, *J* 1.7 0.4 Hz), 8.24 (2H, d, *J* 8.7 Hz), 8.09 (1H, dd, *J* 8.6 1.7 Hz), 7.93 (1H, dd, *J* 8.6 0.4 Hz), 7.73 (2H, d, *J* 8.8 Hz), 3.17 (2H, q, *J* 7.2 Hz), 1.13 (3H, t, *J* 7.1 Hz)
- [0507]
- [0508] 1-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)에타논
- LCMS RT=** 7.27분, **MH⁺** 271.7; **¹H NMR (DMSO):** 8.44 (1H, dd, *J* 1.7 0.4 Hz), 8.24 (2H, d, *J* 8.8 Hz), 8.08 (1H, dd, *J* 8.6 1.7 Hz), 7.93 (1H, dd, *J* 8.5 0.5 Hz), 7.73 (2H, d, *J* 8.8 Hz), 2.69 (3H, s)
- [0509]
- [0510] 2-(4-시클로헥실페닐)벤조[d]옥사졸-5-아민
- LCMS RT=** 8.15분, **MH⁺** 293.1; **¹H NMR (DMSO):** 8.05 (2H, d, *J* 8.4 Hz), 7.45-7.38 (3H, m), 6.86 (1H, d, *J* 2.0 Hz), 6.65 (1H, dd, *J* 8.8 2.2 Hz), 5.10 (2H, s), 2.64-2.56 (1H, m), 1.83-1.70 (5H, m), 1.51-1.23 (5H, m)
- [0511]
- [0512] 5-(에틸술포닐)-2-(퀴놀린-2-일)벤조[d]옥사졸
- LCMS RT=** 6.14분, **MH⁺** 339.1; **¹H NMR (DMSO):** 8.69 (1H, dd, *J* 8.5 2.2 Hz), 8.52-8.43 (2H, m), 8.28-8.21 (2H, m), 8.16 (1H, d, *J* 8.1 Hz), 8.09-8.04 (1H, m), 7.97-7.90 (1H, m), 7.82-7.76 (1H, m), 3.48-3.38 (2H, m), 1.15 (3H, td, *J* 7.3 1.3 Hz)
- [0513]
- [0514] 5-(에틸술포닐)-2-(퀴놀린-3-일)벤조[d]옥사졸
- LCMS RT=** 6.05분, **MH⁺** 339.1; **¹H NMR (DMSO):** 9.65 (1H, d, *J* 2.1 Hz), 9.31 (1H, d, *J* 2.1 Hz), 8.40 (1H, d, *J* 1.8 Hz), 8.31 (1H, d, *J* 8.1 Hz), 8.17 (2H, dd, *J* 8.3 2.2 Hz), 8.02 (1H, dd, *J* 8.7 1.8 Hz), 8.00-7.93 (1H, m), 7.82-7.76 (1H, m), 3.43 (2H, q, *J* 7.3 Hz), 1.15 (3H, t, *J* 7.5 Hz)
- [0515]
- [0516] 2-(6-브로모나프탈렌-2-일)-5-(에틸술포닐)벤조[d]옥사졸
- LCMS RT=** 7.86분, **MH⁺** 418.0; **¹H NMR (DMSO):** 8.95 (1H, m), 8.39-8.33 (3H, m), 8.21 (1H, d, *J* 9.0 Hz), 8.17 (1H, d, *J* 8.9 Hz), 8.13 (1H, dd, *J* 8.5 0.5 Hz), 7.99 (1H, dd, *J* 8.6 1.8 Hz), 7.81 (1H, dd, *J* 8.7 1.9 Hz), 3.41 (2H, q, *J* 7.3 Hz), 1.15 (3H, t, *J* 7.5 Hz)
- [0517]

- [0518] 2-(4-시클로헥실페닐)-5-(에틸술포닐)벤조[d]옥사졸
- LCMS RT= 8.56분; ¹H NMR (DMSO):** 8.29 (1H, dd, *J* 1.8 0.4 Hz), 8.17 (2H, d, *J* 8.3 Hz), 8.07 (1H, dd, *J* 8.6 0.5 Hz), 7.94 (1H, dd, *J* 8.5 1.8 Hz), 7.51 (2H, d, *J* 8.4 Hz), 3.39 (2H, q, *J* 7.3 Hz), 2.74-2.60 (1H, m), 1.84-1.71 (5H, m), 1.53-1.24 (5H, m), 1.13 (3H, t, *J* 7.5 Hz)
- [0519]
- [0520] 2-(비페닐-4-일)-5-(에틸술포닐)벤조[d]옥사졸
- LCMS RT= 7.31분, MH⁺ 364.1; ¹H NMR (DMSO):** 8.36-8.32 (3H, m), 8.11 (1H, dd, *J* 8.6 0.5 Hz), 8.00-7.95 (3H, m), 7.84-7.79 (2H, m), 7.57-7.43 (3H, m), 3.41 (2H, q, *J* 7.3 Hz), 1.14 (3H, t, *J* 7.5 Hz)
- [0521]
- [0522] 5-(에틸술포닐)-2-(나프탈렌-1-일)벤조[d]옥사졸
- LCMS RT= 7.03분, MH⁺ 338.1; ¹H NMR (DMSO):** 9.41 (1H, d, *J* 8.8 Hz), 8.52 (1H, dd, *J* 7.2 1.2 Hz), 8.44 (1H, d, *J* 1.7 Hz), 8.30 (1H, d, *J* 8.3 Hz), 8.17-8.12 (2H, m), 8.02 (1H, dd, *J* 8.6 1.8 Hz), 7.84-7.68 (3H, m), 3.43 (2H, q, *J* 7.3 Hz), 1.15 (3H, t, *J* 7.5 Hz)
- [0523]
- [0524] 5-(에틸술포닐)-2-(6-플루오로나프탈렌-2-일)벤조[d]옥사졸
- LCMS RT= 7.29분, MH⁺ 356.1; ¹H NMR (DMSO):** 8.97 (1H, m), 8.37-8.32 (3H, m), 8.17 (1H, d, *J* 8.9 Hz), 8.12 (1H, d, *J* 8.6 Hz), 7.99 (1H, dd, *J* 8.6 1.6 Hz), 7.89 (1H, dd, *J* 10.0 2.0 Hz), 7.61 (1H, td, *J* 8.7 2.0 Hz), 3.41 (2H, q, *J* 7.3 Hz), 1.14 (3H, t, *J* 7.5 Hz)
- [0525]
- [0526] 2-(벤조[b]티오펜-5-일)-5-(에틸술포닐)벤조[d]옥사졸
- LCMS RT= 6.77분, MH⁺ 344.1; ¹H NMR (CDCl₃):** 8.70 (1H, d, *J* 1.2 Hz), 8.27 (1H, dd, *J* 1.8 0.4 Hz), 8.18 (1H, dd, *J* 8.5 1.5 Hz), 7.99 (1H, d, *J* 8.6 Hz), 7.88 (1H, dd, *J* 8.5 1.8 Hz), 7.70 (1H, dd, *J* 8.5 0.4 Hz), 7.52 (1H, d, *J* 5.5 Hz), 7.43 (1H, dd, *J* 5.5 0.6 Hz), 3.12 (2H, q, *J* 7.4 Hz), 1.25 (3H, t, *J* 7.4 Hz)
- [0527]
- [0528] 5-아미노-2-(5,6-디클로로벤조[d]옥사졸-2-일)페놀
- LCMS RT= 7.83분, MH⁺ 295.1; ¹H NMR (DMSO):** 10.88 (1H, s), 8.19 (1H, s), 8.06 (1H, s), 7.69 (1H, d, *J* 8.7 Hz), 6.35 (1H, dd, *J* 8.7 2.1 Hz), 6.29 (2H, br), 6.24 (1H, d, *J* 2.1 Hz)
- [0529]
- [0530] 2-(3,4-디클로로페닐)-5-(이소프로필술포닐)벤조[d]옥사졸
- LCMS RT= 7.68분; ¹H NMR (DMSO):** 8.41 (1H, d, *J* 2.0 Hz), 8.31 (1H, dd, *J* 1.8 0.4 Hz), 8.21 (1H, dd, *J* 8.4 2.0 Hz), 8.11 (1H, dd, *J* 8.6 0.5 Hz), 7.98-7.93 (2H, m), 3.59-3.50 (1H, m), 1.19 (6H, d, *J* 6.8 Hz)
- [0531]
- [0532] N-(4-(5,6-디메틸벤조[d]옥사졸-2-일)-3-히드록시페닐)아세트아미드
- LCMS RT= 6.70분, MH⁺ 263.1; ¹H NMR (DMSO):** 10.83 (1H, s), 8.02 (1H, dd, *J* 9.9 6.9 Hz), 7.85 (1H, dd, *J* 10.4 7.5 Hz), 7.62 (1H, d, *J* 8.6 Hz), 6.29 (1H, dd, *J* 8.7 2.1 Hz), 6.18 (1H, d, *J* 2.0 Hz), 6.15 (2H, br)
- [0533]
- [0534] 4-(5,6-디클로로벤조[d]옥사졸-2-일)아닐린
- LCMS RT= 7.27분, MH⁺ 279.0; ¹H NMR (DMSO):** 8.10 (1H, s), 7.97 (1H, s), 7.85 (2H, d, *J* 8.7 Hz), 6.70 (2H, d, *J* 8.8 Hz), 6.14 (2H, s)
- [0535]
- [0536] 5-(에틸술포닐)-2-(5,6,7,8-테트라히드로나프탈렌-2-일)벤조[d]옥사졸
- LCMS RT= 7.71분, MH⁺ 342.2; ¹H NMR (CDCl₃):** 8.03 (1H, dd, *J* 1.8 0.5 Hz), 7.93-7.87 (2H, m), 7.85 (1H, dd, *J* 8.5 1.8 Hz), 7.65 (1H, dd, *J* 8.5 0.5 Hz), 7.23-7.15 (1H, m), 3.11 (2H, q, *J* 7.4 Hz), 2.85-2.76 (4H, m), 1.81-1.76 (4H, m), 1.24 (3H, t, *J* 7.3 Hz)
- [0537]

- [0538] 5-아미노-2-(5-(에틸술폰닐)벤조[d]옥사졸-2-일)페놀
- LCMS RT= 5.99분, MH⁺ 319.2; ¹H NMR (DMSO):** 10.88 (1H, s), 8.16 (1H, dd, *J* 1.8 0.5 Hz), 7.97 (1H, dd, *J* 8.5 0.5 Hz), 7.84 (1H, dd, *J* 8.4 1.9 Hz), 7.69 (1H, d, *J* 8.6 Hz), 6.31 (1H, dd, *J* 8.7 2.1 Hz), 6.24 (2H, s), 6.20 (1H, d, *J* 2.1 Hz), 3.37 (2H, q, *J* 7.5 Hz), 1.12 (3H, t, *J* 7.3 Hz)
- [0539]
- [0540] 방법 1A (화합물 Ic)
- [0541] N-(2-(피리딘-3-일)벤조[d]옥사졸-5-일)니코틴아미드
- LCMS RT= 4.64분, MH⁺ 317.1; ¹H NMR (DMSO):** 10.67 (1H, s), 9.37 (1H, d, *J* 1.5 Hz), 9.16 (1H, d, *J* 1.6 Hz), 8.84-8.78 (2H, m), 8.56 (1H, dt, *J* 8.0 1.7 Hz), 8.36-8.32 (2H, m), 7.86 (1H, d, *J* 8.8 Hz), 7.80 (1H, dd, *J* 8.9 2.0 Hz), 7.70-7.58 (2H, m)
- [0542]
- [0543] 4-메톡시-N-(2-(4-메톡시페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)벤즈아미드
- ¹H NMR (DMSO):** 10.25 (1H, s), 8.23 (1H, s), 8.16 (2H, d, *J* 8.9 Hz), 8.00 (2H, d, *J* 8.9 Hz), 7.72 (2H, s), 7.17 (2H, d, *J* 9.0 Hz), 7.09 (2H, d, *J* 8.8 Hz), 3.88 (3H, s), 3.85 (3H, s)
- [0544]
- [0545] N-(2-벤질벤조[d]옥사졸-5-일)-2-페닐아세트아미드
- LCMS RT= 6.22분, MH⁺ 343.1; ¹H NMR (CDCl₃):** 7.70 (1H, s), 7.42 (1H, s), 7.30-7.15 (12H, m), 4.14 (2H, s), 3.63 (2H, s)
- [0546]
- [0547] 2,3-디클로로-N-(2-(2,3-디클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)벤즈아미드
- LCMS RT= 8.09분, MH⁺ 450.9; ¹H NMR (DMSO):** 10.84 (1H, s), 8.32 (1H, d, *J* 1.7 Hz), 8.14 (1H, dd, *J* 8.9 1.5 Hz), 7.95 (1H, dd, *J* 8.1 1.6 Hz), 7.85 (1H, d, *J* 8.8 Hz), 7.81 (1H, dd, *J* 8.0 1.6 Hz), 7.73 (1H, dd, *J* 8.8 2.1 Hz), 7.65-7.50 (3H, m)
- [0548]
- [0549] 방법 1A (화합물 Id)
- [0550] 2'-(4-프로필페닐)-2,6'-비벤조[d]옥사졸-6-카르복실산
- ¹H NMR (DMSO):** 13.20 (1H, br), 8.58 (1H, dd, *J* 1.5 0.4 Hz), 8.33-8.30 (2H, m), 8.19 (2H, d, *J* 8.2 Hz), 8.06-8.02 (2H, m), 7.93 (1H, d, *J* 8.3 Hz), 7.50 (2H, d, *J* 8.4 Hz), 2.69 (2H, t, *J* 7.8 Hz), 1.73-1.61 (2H, m), 0.94 (3H, t, *J* 7.4 Hz)
- [0551]
- [0552] 방법 1A (화합물 Ie)
- [0553] 4-아미노-N-(4-(5-브로모벤조[d]옥사졸-2-일)페닐)벤즈아미드
- LCMS RT= 6.87분, MH⁺ 408.0; ¹H NMR (DMSO):** 10.14 (1H, s), 8.16 (2H, d, *J* 8.9 Hz), 8.07-8.01 (3H, m), 7.79-7.74 (3H, m), 7.57 (1H, dd, *J* 8.6 2.0 Hz), 6.62 (2H, d, *J* 8.7 Hz), 5.86 (2H, s)
- [0554]
- [0555] 방법 1B (화합물 I)
- [0556] 2-벤질-5-니트로벤조[d]옥사졸
- [0557] 디옥산 (2.5 mL) 중 2-아미노-4-니트로페놀 (300 mg, 1.95 mmol)에 2-페닐아세틸 클로라이드 (290 μL, 2.15 mmol)를 실온에서 첨가하였다. 상기 반응 용기를 마이크로웨이브 내 210 °C에서 15분 동안 가열하였다. 냉각시킨 후, 혼합물을 1 M 수성 수산화나트륨 (50 mL)에 서서히 붓고, 생성된 침전물을 여과 제거하고, 물로 세척하였다. 생성된 고체를 구매 (에틸 아세테이트/헥산 1:7 v/v 내지 에틸 아세테이트/헥산 1:5 v/v)를 이용하여 용리하는 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 165 mg (33%)의 표제 화합물을 수득하였다.
- (LCMS RT= 6.47분, MH⁺ 255.2)**
- ¹H NMR (DMSO):** 8.60 (1H, d, *J* 2.4 Hz), 8.30 (1H, dd, *J* 9.0 2.4 Hz), 7.95 (1H, d, *J* 9.0 Hz), 7.43-7.27 (5H, m), 4.44 (2H, s)
- [0558]
- [0559] 하기 모든 화합물을 동일한 일반 방법에 따라 제조하였다. 사용된 산 클로라이드는 시판되는 화합물이거나 또

는 표준 조건을 이용하여 상응하는 카르복실산으로부터 합성되었다.

- [0560] 2-(벤조[d][1,3]디옥솔-5-일)-5-니트로벤조[d]옥사졸
- LCMS RT= 6.74분, MH^+ 284.9; 1H NMR (DMSO):** 8.60 (1H, d, J 2.3 Hz), 8.31 (1H, dd, J 8.9 2.3 Hz), 7.99 (1H, d, J 9.0 Hz), 7.82 (1H, dd, J 8.2 1.7 Hz), 7.66 (1H, d, J 1.6 Hz), 7.18 (1H, d, J 8.4 Hz), 6.20 (2H, s)
- [0561]
- [0562] 2-(4-클로로페닐)-5,6-메틸렌디옥시벤즈옥사졸
- LCMS RT= 7.54분, MH^+ 274.0; 1H NMR (DMSO):** 8.11 (2H, d, J 8.8 Hz), 7.66 (2H, d, J 8.7 Hz), 7.49 (1H, s), 7.36 (1H, s), 6.13 (2H, s)
- [0563]
- [0564] 5-Tert-부틸-2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸
- LCMS RT= 10.20분, MH^+ 286.0; 1H NMR (DMSO):** 8.20 (2H, d, J 8.6 Hz), 7.80 (1H, d, J 1.9 Hz), 7.72-7.68 (3H, m), 7.52 (1H, dd, J 8.7 2.0 Hz), 1.37 (9H, s)
- [0565]
- [0566] 2-(3,4-디클로로페닐)-6-니트로벤조[d]옥사졸
- LCMS RT= 8.40분; 1H NMR (DMSO):** 8.77 (1H, d, J 2.1 Hz), 8.40 (1H, d, J 2.0 Hz), 8.36 (1H, dd, J 8.8 2.2 Hz), 8.21 (1H, dd, J 8.5 2.1 Hz), 8.07 (1H, d, J 8.8 Hz), 7.96 (1H, d, J 8.4 Hz)
- [0567]
- [0568] 2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-술폰아미드
- LCMS RT= 6.04분; 1H NMR (DMSO):** 8.27-8.22 (3H, m), 8.02 (1H, d, J 8.6 Hz), 7.95-7.91 (1H, m), 7.74-7.71 (2H, m), 7.50 (2H, s)
- [0569]
- [0570] 5-클로로-2-(4-클로로페닐)-6-니트로벤조[d]옥사졸
- LCMS RT= 8.10분; 1H NMR (DMSO):** 8.73 (1H, s), 8.31 (1H, s), 8.24 (2H, d, J 8.7 Hz), 7.76 (2H, d, J 8.7 Hz)
- [0571]
- [0572] 5-니트로-2-(4-(트리플루오로메톡시)페닐)벤조[d]옥사졸
- LCMS RT= 7.66분; 1H NMR (DMSO):** 8.72 (1H, d, J 2.3 Hz), 8.38 (3H, m), 8.09 (1H, d, J 8.8 Hz), 7.66 (2H, d, J 8.2 Hz)
- [0573]
- [0574] 2-(3,4-디클로로페닐)벤조[d]옥사졸[1,3]디옥솔
- LCMS RT= 8.70분, MH^+ 307.9; 1H NMR (CDCl₃):** 8.18 (1H, d, J 2.0 Hz), 7.91 (1H, dd, J 8.4 2.0 Hz), 7.50 (1H, d, J 8.4 Hz), 7.09 (1H, s), 6.99 (1H, s), 5.99 (2H, s)
- [0575]
- [0576] 2-(푸란-2-일)-5-니트로벤조[d]옥사졸
- LCMS RT= 6.24분; 1H NMR (DMSO):** 8.66 (1H, d, J 2.3 Hz), 8.35 (1H, dd, J 9.0 2.4 Hz), 8.18 (1H, d, J 1.0 Hz), 8.05 (1H, d, J 9.0 Hz), 7.62 (1H, d, J 3.5 Hz), 6.90-6.88 (1H, m)
- [0577]
- [0578] 2-(벤조[d][1,3]디옥솔-5-일)-5-클로로-6-니트로벤조[d]옥사졸
- LCMS RT= 7.21분; 1H NMR (DMSO):** 8.68 (1H, s), 8.23 (1H, s), 7.83 (1H, dd, J 8.2 1.6 Hz), 7.66 (1H, d, J 1.7 Hz), 7.20 (1H, d, J 8.4 Hz), 6.22 (2H, s)
- [0579]
- [0580] 5-(에틸술폰닐)-2-(나프탈렌-2-일)벤조[d]옥사졸
- LCMS RT= 6.94분, MH^+ 338.1; 1H NMR (DMSO):** 8.90 (1H, br), 8.34 (1H, d, J 1.4 Hz), 8.30 (1H, dd, J 8.6 1.7 Hz), 8.24-8.05 (4H, m), 7.99 (1H, dd, J 8.5 1.8 Hz), 7.73-7.64 (2H, m), 3.41 (2H, q, J 7.3 Hz), 1.15 (3H, t, J 7.3 Hz)
- [0581]

- [0582] 2-(3-클로로-2-플루오로페닐)-5-(에틸술포닐)벤조[d]옥사졸
- LCMS RT= 6.48분, MH⁺ 338.8; ¹H NMR (DMSO):** 8.40 (1H, dd, *J* 1.7 0.5 Hz), 8.27-8.21 (1H, m), 8.14 (1H, dd, *J* 8.6 0.4 Hz), 8.01 (1H, dd, *J* 8.6 1.8 Hz), 7.97-7.92 (1H, m), 7.51 (1H, td, *J* 8.0 1.0 Hz), 3.41 (2H, q, *J* 7.3 Hz), 1.13 (3H, t, *J* 7.3 Hz)
- [0583]
- [0584] 2-시클로헥실-5-(에틸술포닐)벤조[d]옥사졸
- LCMS RT= 6.57분, MH⁺ 293.9; ¹H NMR (DMSO):** 8.20 (1H, d, *J* 1.5 Hz), 7.97 (1H, dd, *J* 8.5 Hz), 7.88 (1H, dd, *J* 8.6 1.8 Hz), 3.35 (2H, q, *J* 7.4 Hz), 3.13-3.04 (1H, m), 2.14-2.09 (2H, m), 1.82-1.58 (5H, m), 1.50-1.18 (3H, m), 1.10 (3H, t, *J* 7.4 Hz)
- [0585]
- [0586] 2-(5-클로로피리딘-2-일)-5-(에틸술포닐)벤조[d]옥사졸
- LCMS RT= 5.92분, MH⁺ 323.1; ¹H NMR (DMSO):** 8.91 (1H, d, *J* 2.4 Hz), 8.42-8.39 (2H, m), 8.25 (1H, dd, *J* 8.5 2.4 Hz), 8.16 (1H, d, *J* 8.6 Hz), 8.03 (1H, dd, *J* 8.6 1.8 Hz), 3.41 (2H, q, *J* 7.2 Hz), 1.13 (3H, t, *J* 7.3 Hz)
- [0587]
- [0588] 2-(벤조[d][1,3]디옥솔-5-일)-5-(에틸술포닐)벤조[d]옥사졸
- LCMS RT= 6.09분, MH⁺ 332.0; ¹H NMR (DMSO):** 8.26 (1H, dd, *J* 1.8 0.5 Hz), 8.03 (1H, dd, *J* 8.5 0.5 Hz), 7.92 (1H, dd, *J* 8.5 1.8 Hz), 7.83 (1H, dd, *J* 8.2 1.7 Hz), 7.68 (1H, d, *J* 1.6 Hz), 7.19 (1H, d, *J* 8.2 Hz), 6.20 (2H, s), 3.39 (2H, q, *J* 7.3 Hz), 1.12 (3H, t, *J* 7.3 Hz)
- [0589]
- [0590] 5-클로로-2-(4-(메틸술포닐)페닐)벤조[d]옥사졸
- LCMS RT= 6.43분, ¹H NMR (DMSO):** 8.45 (2H, d, *J* 8.4 Hz), 8.18 (2H, d, *J* 8.5 Hz), 8.02 (1H, d, *J* 1.9 Hz), 7.92 (1H, d, *J* 8.7 Hz), 7.56 (1H, dd, *J* 8.7 2.1 Hz)
- [0591]
- [0592] 2-(2,2-디플루오로벤조[d][1,3]디옥솔-5-일)-5-(에틸술포닐)벤조[d]옥사졸
- LCMS RT= 6.70분, ¹H NMR (DMSO):** 8.32 (1H, dd, *J* 1.8 0.5 Hz), 8.24 (1H, d, *J* 1.6 Hz), 8.16 (1H, dd, *J* 8.5 1.7 Hz), 8.09 (1H, dd, *J* 8.6 0.5 Hz), 7.97 (1H, dd, *J* 8.5 1.8 Hz), 7.71 (1H, d, *J* 8.5 Hz), 3.40 (2H, q, *J* 7.3 Hz), 1.13 (3H, t, *J* 7.4 Hz)
- [0593]
- [0594] 2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-6-올
- LCMS RT= 6.42분, MH⁺ 246.0; ¹H NMR (DMSO):** 9.94 (1H, s), 8.13 (2H, d, *J* 8.6 Hz), 7.66 (2H, d, *J* 8.6 Hz), 7.60 (1H, d, *J* 8.6 Hz), 7.10 (1H, d, *J* 2.2 Hz), 6.87 (1H, dd, *J* 8.7 2.3 Hz)
- [0595]
- [0596] 2-(5-(에틸술포닐)벤조[d]옥사졸-2-일)나프탈렌-1-올
- LCMS RT= 7.77분, MH⁺ 353.9; ¹H NMR (DMSO):** 12.24 (1H, s), 8.44-8.39 (2H, m), 8.19-7.98 (4H, m), 7.77-7.63 (3H, m), 3.42 (2H, q, *J* 7.3 Hz), 1.15 (3H, t, *J* 7.3 Hz)
- [0597]
- [0598] 2-(벤조푸란-5-일)-5-(에틸술포닐)벤조[d]옥사졸
- LCMS RT= 6.47분, MH⁺ 328.2; ¹H NMR (DMSO):** 8.61 (1H, d, *J* 1.7 Hz), 8.31 (1H, d, *J* 1.7 Hz), 8.22 (1H, dd, *J* 8.5 1.7 Hz), 8.19 (1H, d, *J* 2.2 Hz), 8.09 (1H, d, *J* 8.5 Hz), 7.95 (1H, dd, *J* 8.5 1.9 Hz), 7.88 (1H, d, *J* 8.7 Hz), 7.19-7.17 (1H, m), 3.40 (2H, q, *J* 7.4 Hz), 1.15 (3H, t, *J* 7.3 Hz)
- [0599]
- [0600] 2-(4-클로로페닐)-N,N-디에틸벤조[d]옥사졸-5-술폰아미드
- LCMS RT= 7.75분, MH⁺ 364.9; ¹H NMR (DMSO):** 8.26-8.21 (3H, m), 8.03 (1H, d, *J* 8.6 Hz), 7.89 (1H, dd, *J* 8.6 1.8 Hz), 7.74 (2H, d, *J* 8.6 Hz), 3.22 (4H, q, *J* 7.2 Hz), 1.06 (6H, t, *J* 7.2 Hz)
- [0601]

[0602] 2-(나프탈렌-2-일)-5-(트리플루오로메톡시)벤조[d]옥사졸

LCMS RT= 9.10분, **MH⁺** 330.1; **¹H NMR (DMSO):** 8.88 (1H, br), 8.27 (1H, dd, *J* 8.5 1.7 Hz), 8.23-8.19 (1H, m), 8.16 (1H, d, *J* 8.7 Hz), 8.08-8.04 (1H, m), 7.97 (1H, d, *J* 8.9 Hz), 7.95-7.93 (1H, m), 7.73-7.64 (2H, m), 7.52-7.47 (1H, m)

[0603]

[0604] 2-(나프탈렌-2-일)벤조[d]옥사졸-5-카르복실산

LCMS RT= 4.83분, **MH⁺** 289.0; **¹H NMR (DMSO):** 13.20 (1H, br), 8.89 (1H, br), 8.36 (1H, dd, *J* 1.6 0.5 Hz), 8.30 (1H, dd, *J* 8.6 1.8 Hz), 8.24-8.20 (1H, m), 8.17 (1H, d, *J* 8.8 Hz), 8.10-8.04 (2H, m), 7.94 (1H, dd, *J* 8.5 0.5 Hz), 7.73-7.63 (2H, m)

[0605]

[0606] 2-(나프탈렌-2-일)벤조[d]옥사졸

LCMS RT= 8.19분, **MH⁺** 246.1; **¹H NMR (DMSO):** 8.86 (1H, br), 8.29 (1H, dd, *J* 8.6 1.8 Hz), 8.22-8.18 (1H, m), 8.15 (1H, d, *J* 8.7 Hz), 8.07-8.03 (1H, m), 7.88-7.83 (2H, m), 7.71-7.62 (2H, m), 7.51-7.42 (2H, m)

[0607]

[0608] 5-tert-부틸-2-(나프탈렌-2-일)벤조[d]옥사졸

LCMS RT= 10.50분, **MH⁺** 302.2; **¹H NMR (CDCl₃):** 8.70 (1H, s), 8.25 (1H, dd, *J* 8.6 1.5 Hz), 7.94-7.89 (2H, m), 7.85-7.81 (1H, m), 7.77 (1H, d, *J* 1.6 Hz), 7.54-7.45 (3H, m), 7.37 (1H, dd, *J* 8.5 1.8 Hz), 1.35 (9H, s)

[0609]

[0610] 5,6-디플루오로-2-(나프탈렌-2-일)벤조[d]옥사졸

LCMS RT= 8.57분, **MH⁺** 282.1; **¹H NMR (DMSO):** 8.82 (1H, br), 8.24 (1H, dd, *J* 8.6 1.8 Hz), 8.21-8.12 (3H, m), 8.07-8.00 (2H, m), 7.72-7.63 (2H, m)

[0611]

[0612] 1-(2'-(3",4"-디클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5'-일)에타논

LCMS RT= 8.19분, **MH⁺** 305.9; **¹H NMR (DMSO):** 8.45 (1H, dd, *J* 1.7 0.5 Hz), 8.38 (1H, d, *J* 2.0 Hz), 8.18 (1H, dd, *J* 8.5 2.1 Hz), 8.09 (1H, dd, *J* 8.6 1.8 Hz), 7.96-7.91 (2H, m), 2.69 (3H, s)

[0613]

[0614] 2-(4-클로로페닐)-6-메틸벤조[d]옥사졸

LCMS RT= 8.41분, **MH⁺** 244.1; **¹H NMR (DMSO):** 8.18 (2H, d, *J* 8.7 Hz), 7.72-7.61 (4H, m), 7.27-7.23 (1H, m), 2.48 (3H, s)

[0615]

[0616] 5-메틸-2-(나프탈렌-2-일)벤조[d]옥사졸

LCMS RT= 8.82분, **MH⁺** 260.2; **¹H NMR (DMSO):** 8.83 (1H, d, *J* 1.1 Hz), 8.26 (1H, dd, *J* 8.6 1.7 Hz), 8.21-8.16 (1H, m), 8.13 (1H, d, *J* 8.7 Hz), 8.06-8.02 (1H, m), 7.72-7.64 (4H, m), 7.30-7.26 (1H, m), 2.47 (3H, s)

[0617]

[0618] 방법 1C (화합물 I)

[0619] 6-니트로-2-페닐옥사졸로[5,4-b]피리딘

[0620]

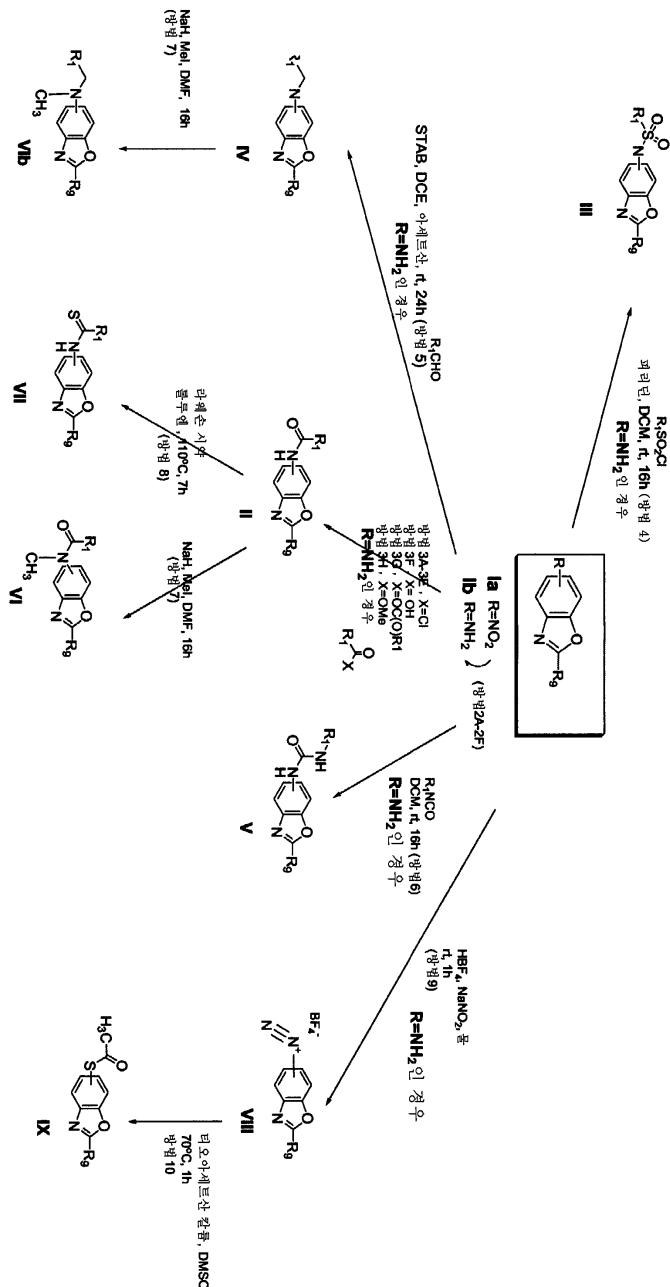
165 °C에서 폴리인산에 N-(5-니트로-2-옥소-1,2-디히드로피리딘-3-일)벤즈아미드 (300 mg, 1.16 mmol)를 첨가하였다. 이어서, 생성된 혼합물을 30분 동안 165 °C로 가열하고, 상기 용액을 물에 부었다. 생성된 침전물을 여과에 의해 수집하고, 디에틸 에테르에 용해하고, 알루미늄을 통해 여과하고, 증발시켜 9 mg (3%)의 표제 화합물을 수득하였다.

¹H NMR (DMSO): 9.31 (1H, d, *J* 2.5 Hz), 9.12 (1H, d, *J* 2.5 Hz), 8.32-8.27 (2H, m), 7.79-7.67 (3H, m)

[0621]

[0622] 하기 모든 화합물을 동일한 일반 방법에 따라 제조하였다.

- [0623] 5-니트로-2-(피리딘-2-일)벤조[d]옥사졸
- LCMS RT= 5.83분, MH^+ 241.9; 1H NMR (DMSO): 8.87-8.84 (1H, m), 8.78 (1H, d, J 2.3 Hz), 8.44-8.40 (2H, m), 8.16-8.10 (2H, m), 7.74-7.69 (1H, m)**
- [0624]
- [0625] 6-니트로-2-(피리딘-2-일)벤조[d]옥사졸
- LCMS RT= 5.84분, MH^+ 242.0; 1H NMR (DMSO): 8.79-8.76 (2H, m), 8.34 (1H, dt, J 7.9 1.0 Hz), 8.29 (1H, dd, J 8.8 2.0 Hz), 8.07-8.02 (2H, m), 7.64 (1H, ddd, J 7.7 4.8 1.2 Hz)**
- [0626]
- [0627] 2-(5-부틸피리딘-2-일)-5-니트로벤조[d]옥사졸
- LCMS RT= 7.32분, MH^+ 298.1; 1H NMR (DMSO): 8.68 (1H, dd, J 2.3 0.3 Hz), 8.64 (1H, dd, J 2.1 0.5 Hz), 8.33 (1H, dd, J 9.0 2.4 Hz), 8.26 (1H, dd, J 8.0 0.6 Hz), 8.05 (1H, dd, J 9.0 0.3 Hz), 7.88 (1H, dd, J 8.1 2.1 Hz), 2.70-2.66 (2H, m), 1.62-1.52 (2H, m), 1.34-1.22 (2H, m), 0.86 (3H, t, J 7.4 Hz)**
- [0628]
- [0629] 방법 1D (화합물 I)
- [0630] 2-(2,4-디플루오로페닐)-5,6-디메틸벤조[d]옥사졸
- [0631] 크실렌 (2 mL) 중 2-(2,4-디플루오로벤즈아미도)-4,5-디메틸페닐 2,4-디플루오로벤조에이트 (90 mg, 0.22 mmol) 및 4-메틸벤젠술포산 (82 mg, 0.43 mmol)의 현탁액을 환류 온도에서 16시간 동안 가열하였다. 냉각시킨 후, 상기 용액을 에틸 아세테이트로 희석하고, 중탄산나트륨 수용액 및 이이서 염수로 세척하였다. 합한 유기층을 무수 $MgSO_4$ 상에서 건조시키고, 증발시켰다. 생성된 고체를 에틸 아세테이트/헥산 1:15 v/v로 용리하는 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 36 mg (64%)의 표제 화합물을 수득하였다 (LCMS RT= 7.81분, MH^+ 260.0).
- 1H NMR (DMSO): 8.30-8.22 (1H, m), 7.63-7.52 (3H, m), 7.39-7.30 (1H, m), 2.37 (3H, s), 2.35 (3H, s)**
- [0632]



방법 2A (화합물 Ib)

2-p-톨릴벤조[d]옥사졸-5-아민

에틸 아세테이트/아세트산 (250 mL/1 mL) 중 5-니트로-2-p-톨릴벤조[d]옥사졸 (4.8 g, 18.90 mmol)에 탄소상 팔라듐 (480 mg)을 첨가하였다. 상기 반응 용기를 질소로 3시간 및 이어서 수소로 3시간 동안 퍼징하고, 이어서 수소하에 16시간 동안 교반하였다. 상기 반응 용기를 최종적으로 질소로 3시간 동안 퍼징한 후, 셀라이트 (Celite, 등록상표) 패드 상에서 여과하고, 에틸 아세테이트로 세척하였다. 유기 용액을 포화 수성 Na₂CO₃ 및 이어서 염수로 세척하였다. 합한 유기층을 무수 MgSO₄ 상에서 건조시키고, 증발시켜 2.5 g (60%)의 표제 화합물을 수득하였다.

¹H NMR (DMSO): 8.02 (2H, d, J 8.2 Hz), 7.39 (3H, d, J 8.5 Hz), 6.86 (1H, d, J 2.0 Hz), 6.65 (1H, dd, J 8.7 2.2 Hz), 5.09 (2H, s), 2.40 (3H, s)

방법 2B (화합물 Ib)

에틸 아세테이트/아세트산 대신 에탄올을 사용하였다는 점을 제외하고는 방법 2A와 같다. 용매를 증발시킨 후,

상기 물질을 2 M HCl에 용해하고, 생성된 침전물을 폐기하고, 용액을 2 N NaOH로 염기화하여 표제 화합물을 침전물로 수득하였다.

[0640] 2-페닐벤조[d]옥사졸-6-아민

LCMS RT= 5.93분, MH⁺ 211.1; ¹H NMR (DMSO): 8.10-8.07 (2H, m), 7.58-7.54 (3H, m), 7.42 (1H, d, J 8.4 Hz), 6.83 (1H, d, J 1.9 Hz), 6.65 (1H, dd, J 8.5 2.0 Hz), 5.46 (2H, s)

[0641]

방법 2C (화합물 Ib)

[0642]

2-(4-(트리플루오로메톡시)페닐)벤조[d]옥사졸-5-아민

[0643]

에탄올 (20 mL) 중 5-니트로-2-(4-(트리플루오로메톡시)페닐)벤조[d]옥사졸 (850 mg, 2.62 mmol)에 포름산암모늄 (827 mg, 13.1 mmol) 및 탄소상 팔라듐 (85 mg)을 첨가하였다. 상기 혼합물을 실온에서 20분 동안 교반하고, 이어서 셀라이트 (등록상표) 패드를 통해 여과하고, 에틸 아세테이트로 세척하였다. 유기 용액을 물 및 이어서 염수로 세척하였다. 합한 유기층을 무수 MgSO₄ 상에서 건조시키고, 증발시켜 434 mg (56%)의 표제 화합물을 수득하였다.

[0644]

**(LCMS RT= 6.51분, MH⁺ 294.9)
¹H NMR (DMSO): 8.25 (2H, d, J 8.9 Hz), 7.62-7.56 (2H, m), 7.44 (1H, d, J 8.7 Hz), 6.89 (1H, d, J 2.0 Hz), 6.70 (1H, dd, J 8.7 2.3 Hz), 5.16 (2H, s)**

[0645]

방법 2D (화합물 Ib)

[0646]

2-p-톨릴벤조[d]옥사졸-4-아민

[0647]

에탄올 (20 mL) 중 4-니트로-2-p-톨릴벤조[d]옥사졸 (330 mg, 1.30 mmol)에 염화주석 (II) (1.23 g, 6.5 mmol)을 첨가하였다. 상기 현탁액을 70 °C에서 16시간 동안 교반하였다. 냉각시킨 후, 상기 용액을 얼음/물에 붓고, 포화 수성 NaHCO₃으로 중화하였다. 이어서, 수성층을 에틸 아세테이트 (500 mL)로 2회 추출하였다. 합한 유기층을 무수 MgSO₄ 상에서 건조시키고, 증발시켜 188 mg (65%)의 표제 화합물을 수득하였다.

[0648]

**(LCMS RT= 6.76분, MH⁺ 225.1)
¹H NMR (DMSO): 8.04 (2H, d, J 8.2 Hz), 7.41 (2H, d, J 8.0 Hz), 7.07 (1H, t, J 8.0 Hz), 6.85 (1H, dd, J 8.0 0.8 Hz), 6.55 (1H, dd, J 8.0 0.8 Hz), 5.67 (2H, s), 2.41 (3H, s)**

[0649]

하기 화합물을 동일한 일반 방법에 따라 제조하였다.

[0650]

2-페닐옥사졸로[5,4-b]피리딘-6-아민

[0651]

LCMS RT= 5.41분, MH⁺ 212.1; ¹H NMR (DMSO): 8.19-8.15 (2H, m), 7.73 (1H, d, J 2.4 Hz), 7.63-7.58 (3H, m), 7.32 (1H, d, J 2.4 Hz), 5.38 (2H, s)

[0652]

방법 2E (화합물 Ib)

[0653]

2-p-톨릴벤조[d]옥사졸-6-아민

[0654]

70 °C에서 에탄올:물 2:1 v/v (60 mL) 중 6-니트로-2-p-톨릴벤조[d]옥사졸 (2.1 g, 8.27 mmol)에 철 분말 (2.14 g, 38.3 mmol) 및 염화암모늄 (819 mg, 15.3 mmol)을 첨가하였다. 현탁액을 환류 온도에서 16시간 동안 교반하였다. 냉각시킨 후, 용액을 셀라이트 (등록상표) 패드를 통해 여과하고, 에탄올로 세척하였다. 용매를 증발시킨 후, 수성층을 에틸 아세테이트로 2회 추출하였다. 합한 유기층을 무수 MgSO₄ 상에서 건조시키고, 증발시켰다. 생성된 고체를 에틸 아세테이트:헥산 1:3 v/v로 용리하는 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 70 mg (4%)의 표제 화합물을 수득하였다.

[0655]

**(LCMS RT= 6.12분, MH⁺ 223.1)
¹H NMR (DMSO): 7.97 (2H, d, J 8.1 Hz), 7.40-7.36 (3H, m), 6.82 (1H, d, J 1.9 Hz), 6.64 (1H, dd, J 8.5 2.0 Hz), 5.41 (2H, s), 2.39 (3H, s)**

[0656]

하기 모든 화합물을 동일한 일반 방법에 따라 제조하였다.

[0657]

[0658] 2-페닐에틸벤조[d]옥사졸-5-아민

LCMS RT= 5.82분, **MH⁺** 238.9; **¹H NMR (DMSO):** 7.29-7.16 (6H, m), 6.76 (1H, d, *J* 1.9 Hz), 6.57 (1H, dd, *J* 8.6 2.2 Hz), 4.98 (2H, s), 3.19-3.06 (4H, m)

[0659]

[0660] 2-(벤조[d][1,3]디옥솔-5-일)벤조[d]옥사졸-5-아민

LCMS RT= 5.77분, **MH⁺** 254.9; **¹H NMR (DMSO):** 7.69 (1H, dd, *J* 8.2 1.7 Hz), 7.58 (1H, d, *J* 1.7 Hz), 7.37 (1H, d, *J* 8.6 Hz), 7.11 (1H, d, *J* 8.2 Hz), 6.84 (1H, d, *J* 2.0 Hz), 6.64 (1H, dd, *J* 8.8 2.2 Hz), 6.16 (2H, s), 5.07 (2H, s)

[0661]

[0662] 2-(벤조[d][1,3]디옥솔-5-일)-5-클로로벤조[d]옥사졸-6-아민

LCMS RT= 6.52분, **MH⁺** 289.1; **¹H NMR (DMSO):** 7.72 (1H, dd, *J* 8.2 1.8 Hz), 7.69 (1H, s), 7.61 (1H, d, *J* 1.6 Hz), 7.17 (1H, d, *J* 8.2 Hz), 7.13 (1H, s), 6.21 (2H, s), 5.66 (2H, s)

[0663]

[0664] 방법 2F (화합물 Ib)

[0665] 에탄올:물 (2:1 v/v) 대신 THF:물 (2:1 v/v)을 사용하였다는 점을 제외하고는 방법 2E와 같다.

[0666] 2-(3,4-디클로로페닐)벤조[d]옥사졸-6-아민

LCMS RT= 7.12분, **MH⁺** 278.1; **¹H NMR (DMSO):** 8.22 (1H, d, *J* 1.8 Hz), 8.03 (1H, dd, *J* 8.4 2.0 Hz), 7.83 (1H, d, *J* 8.4 Hz), 7.44 (1H, d, *J* 8.4 Hz), 6.82 (1H, d, *J* 2.0 Hz), 6.68 (1H, dd, *J* 8.6 2.0 Hz), 5.57 (2H, s)

[0667]

[0668] 방법 3A (화합물 II)

[0669] 3-페닐-N-(2-페닐벤조[d]옥사졸-5-일)프로판아미드

[0670] 실온에서 디클로로메탄 (2 mL) 중 2-페닐벤조[d]옥사졸-5-아민 (50 mg, 0.24 mmol)의 용액에 3-페닐프로판노일 클로라이드 (44.1 mg, 0.26 mmol) 및 이어서 즉시 디이소프로필에틸아민 (82 μ L, 0.48 mmol)을 첨가하였다. 생성된 혼합물을 실온에서 16시간 동안 교반하였다. 디클로로메탄을 첨가하고, 유기층을 포화 수성 Na₂CO₃으로 세척하였다. 합한 유기층을 무수 MgSO₄ 상에서 건조시키고, 증발시켰다. 생성된 고체를 메탄올에 용해시키고, 산성 스캐빈저 컬럼 (바이오타지 (등록상표)로부터의 실리카-기재 4급 아민 SPE-AX)을 통해 통과시키고, 이어서 증발시켜 61.1 mg (75%)의 표제 화합물을 수득하였다.

(LCMS RT= 6.45분, **MH⁺** 343.2)
¹H NMR (DMSO): 10.11 (1H, s), 8.22-8.15 (3H, m), 7.71 (1H, d, *J* 8.8 Hz), 7.66-7.59 (3H, m), 7.51 (1H, dd, *J* 8.9 2.1 Hz), 7.33-7.17 (5H, m), 2.96 (2H, t, *J* 7.2 Hz), 2.67 (2H, t, *J* 7.1 Hz)

[0671]

[0672] 하기 모든 화합물을 동일한 일반 방법에 따라 제조하였다.

[0673] N-(2-페닐벤조[d]옥사졸-5-일)아세트아미드

LCMS RT= 5.16분, **MH⁺** 253.1; **¹H NMR (DMSO):** 10.14 (1H, s), 8.21-8.14 (3H, m), 7.71 (1H, d, *J* 8.8 Hz), 7.65-7.60 (3H, m), 7.51 (1H, dd, *J* 9.0 2.1 Hz), 2.09 (3H, s)

[0674]

[0675] N-(2-페닐벤조[d]옥사졸-5-일)프로피온아미드

LCMS RT= 5.49분, **MH⁺** 267.1; **¹H NMR (DMSO):** 10.09 (1H, s), 8.21-8.16 (3H, m), 7.71 (1H, d, *J* 8.8 Hz), 7.66-7.61 (3H, m), 7.54 (1H, dd, *J* 9.0 2.1 Hz), 2.37 (2H, q, *J* 7.6 Hz), 1.12 (3H, t, *J* 7.6 Hz)

[0676]

[0677] N-(2-페닐벤조[d]옥사졸-5-일)부티르아미드

LCMS RT= 5.78분, **MH⁺** 281.1; **¹H NMR (DMSO):** 10.09 (1H, s), 8.21-8.16 (3H, m), 7.71 (1H, d, *J* 8.8 Hz), 7.64-7.60 (3H, m), 7.54 (1H, dd, *J* 9.0 2.1 Hz), 2.33 (2H, q, *J* 7.6 Hz), 1.69-1.61 (2H, m), 0.94 (3H, t, *J* 7.6 Hz)

[0678]

- [0679] N-(2-페닐벤조[d]옥사졸-5-일)펜탄아미드
- LCMS RT=** 6.21분, **MH⁺** 295.1; **¹H NMR (DMSO):** 10.09 (1H, s), 8.21-8.16 (3H, m), 7.71 (1H, d, *J* 8.8 Hz), 7.65-7.60 (3H, m), 7.54 (1H, dd, *J* 9.0 2.1 Hz), 2.35 (2H, q, *J* 7.6 Hz), 1.66-1.58 (2H, m), 1.39-1.31 (2H, m), 0.92 (3H, t, *J* 7.6 Hz)
- [0680]
- [0681] N-(2-페닐벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드
- LCMS RT=** 5.79분, **MH⁺** 281.1; **¹H NMR (DMSO):** 10.02 (1H, s), 8.22-8.18 (3H, m), 7.71 (1H, d, *J* 8.8 Hz), 7.66-7.60 (3H, m), 7.55 (1H, dd, *J* 9.0 2.1 Hz), 2.67-2.58 (1H, m), 1.14 (6H, s)
- [0682]
- [0683] N-(2-페닐벤조[d]옥사졸-5-일)푸란-2-카르복스아미드
- LCMS RT=** 5.82분, **MH⁺** 305.1; **¹H NMR (DMSO):** 10.42 (1H, s), 8.26-8.20 (3H, m), 7.97 (1H, dd, *J* 1.7 0.8 Hz), 7.77 (2H, d, *J* 1.3 Hz), 7.66-7.62 (3H, m), 7.38 (1H, d, *J* 3.4 Hz), 6.73 (1H, dd, *J* 3.4 1.7 Hz)
- [0684]
- [0685] 4-클로로-N-(2-p-톨릴벤조[d]옥사졸-5-일)벤즈아미드
- LCMS RT=** 7.23분, **MH⁺** 363.1; **¹H NMR (DMSO):** 10.55 (1H, s), 8.32-8.31 (1H, m), 8.17 (2H, d, *J* 8.1 Hz), 8.08 (2H, d, *J* 8.6 Hz), 7.84-7.77 (2H, m), 7.70 (2H, d, *J* 8.6 Hz), 7.50 (2H, d, *J* 8.1 Hz), 2.49 (3H, s)
- [0686]
- [0687] 4-메톡시-N-(2-p-톨릴벤조[d]옥사졸-5-일)벤즈아미드
- LCMS RT=** 6.41분, **MH⁺** 359.1; **¹H NMR (DMSO):** 10.35 (1H, s), 8.33 (1H, s), 8.17 (2H, d, *J* 8.1 Hz), 8.07 (2H, d, *J* 8.7 Hz), 7.81 (2H, s), 7.51 (2H, d, *J* 8.3 Hz), 7.16 (2H, d, *J* 8.8 Hz), 3.17 (3H, s), 2.49 (3H, s)
- [0688]
- [0689] 방법 3B (화합물 II)
- [0690] 염기로서 디이소프로필아민 대신 트리에틸아민을 사용하였다는 점을 제외하고는 방법 3A와 같다.
- [0691] N-(2-페닐벤조[d]옥사졸-5-일)니코틴아미드
- LCMS RT=** 5.48분, **MH⁺** 316.1; **¹H NMR (DMSO):** 10.70 (1H, s), 9.21 (1H, d, *J* 2.1 Hz), 8.85 (1H, dd, *J* 4.8 1.6 Hz), 8.40 (1H, dt, *J* 8.0 2.0 Hz), 8.37 (1H, d, *J* 1.8 Hz), 8.30-8.27 (2H, m), 7.89-7.80 (2H, m), 7.72-7.64 (4H, m)
- [0692]
- [0693] N-(2-페닐벤조[d]옥사졸-5-일)이소니코틴아미드
- LCMS RT=** 5.46분, **MH⁺** 316.1; **¹H NMR (DMSO):** 10.76 (1H, s), 8.88 (2H, d, *J* 5.9 Hz), 8.36 (1H, d, *J* 1.7 Hz), 8.31-8.27 (2H, m), 7.97 (2H, d, *J* 6.1 Hz), 7.90-7.80 (2H, m), 7.73-7.68 (3H, m)
- [0694]
- [0695] 4-클로로-N-(2-페닐벤조[d]옥사졸-5-일)벤즈아미드
- LCMS RT=** 7.07분, **MH⁺** 349.1; **¹H NMR (DMSO):** 10.57 (1H, s), 8.35-8.34 (1H, m), 8.30-8.27 (2H, m), 8.09 (2H, d, *J* 8.6 Hz), 7.88-7.80 (2H, m), 7.72-7.67 (5H, m)
- [0696]
- [0697] 4-메틸-N-(2-페닐벤조[d]옥사졸-5-일)벤즈아미드
- LCMS RT=** 6.80분, **MH⁺** 329.2; **¹H NMR (DMSO):** 10.41 (1H, s), 8.37-8.35 (1H, m), 8.30-8.26 (2H, m), 7.98 (2H, d, *J* 8.1 Hz), 7.84 (2H, s), 7.72-7.67 (3H, m), 7.43 (2H, d, *J* 8.0 Hz), 2.47 (3H, s)
- [0698]
- [0699] 4-메톡시-N-(2-페닐벤조[d]옥사졸-5-일)벤즈아미드
- LCMS RT=** 6.37분, **MH⁺** 345.1; **¹H NMR (DMSO):** 10.33 (1H, s), 8.35 (1H, s), 8.30-8.26 (2H, m), 8.06 (2H, d, *J* 8.7 Hz), 7.83 (2H, s), 7.71-7.67 (3H, m), 7.14 (2H, d, *J* 8.8 Hz), 3.92 (3H, s)
- [0700]

- [0701] 2-메톡시-N-(2-페닐벤조[d]옥사졸-5-일)벤즈아미드
- LCMS RT=** 7.06분, **MH⁺** 345.1; **¹H NMR (DMSO):** 10.37 (1H, s), 8.38-8.36 (1H, m), 8.30-8.26 (2H, m), 7.84-7.56 (7H, m), 7.27 (1H, d, *J* 8.4 Hz), 7.14 (1H, t, *J* 7.3 Hz), 3.99 (3H, s)
- [0702]
- [0703] 4-(디메틸아미노)-N-(2-페닐벤조[d]옥사졸-5-일)벤즈아미드
- LCMS RT=** 6.63분, **MH⁺** 358.2; **¹H NMR (DMSO):** 10.10 (1H, s), 8.35-8.34 (1H, m), 8.30-8.26 (2H, m), 7.96 (2H, d, *J* 8.9 Hz), 7.82-7.80 (2H, m), 7.71-7.68 (3H, m), 6.84 (2H, d, *J* 8.9 Hz), 3.08 (6H, s)
- [0704]
- [0705] 3,4-디클로로-N-(2-페닐벤조[d]옥사졸-5-일)벤즈아미드
- LCMS RT=** 7.95분, **MH⁺** 382.8; **¹H NMR (DMSO):** 10.63 (1H, s), 8.37-8.26 (4H, m), 8.04 (1H, dd, *J* 8.4 2.1 Hz), 7.92-7.78 (3H, m), 7.73-7.65 (3H, m)
- [0706]
- [0707] N-(2-페닐벤조[d]옥사졸-5-일)-4-(트리플루오로메틸)벤즈아미드
- LCMS RT=** 7.19분, **MH⁺** 383.1; **¹H NMR (DMSO):** 10.72 (1H, s), 8.37-8.24 (5H, m), 8.00 (2H, d, *J* 8.4 Hz), 7.89-7.82 (2H, m), 7.74-7.67 (3H, m)
- [0708]
- [0709] 3,5-디클로로-N-(2-페닐벤조[d]옥사졸-5-일)벤즈아미드
- LCMS RT=** 8.30분, **MH⁺** 382.9; **¹H NMR (DMSO):** 10.67 (1H, s), 8.33-8.26 (3H, m), 8.09 (2H, d, *J* 2.1 Hz), 7.96 (1H, t, *J* 2.0 Hz), 7.89-7.78 (2H, m), 7.72-7.67 (3H, m)
- [0710]
- [0711] 4-플루오로-N-(2-페닐벤조[d]옥사졸-5-일)벤즈아미드
- LCMS RT=** 6.53분, **MH⁺** 333.2; **¹H NMR (DMSO):** 10.50 (1H, s), 8.34-8.33 (1H, m), 8.39-8.26 (2H, m), 8.16-8.11 (2H, m), 7.86-7.79 (2H, m), 7.71-7.65 (3H, m), 7.45 (2H, t, *J* 8.8 Hz)
- [0712]
- [0713] N-(2-페닐벤조[d]옥사졸-5-일)비페닐-4-카르복스아미드
- LCMS RT=** 7.74분, **MH⁺** 391.1; **¹H NMR (DMSO):** 10.55 (1H, s), 8.39-8.38 (1H, m), 8.31-8.27 (2H, m), 8.17 (2H, d, *J* 8.5 Hz), 7.93 (2H, d, *J* 8.4 Hz), 7.86-7.83 (4H, m), 7.72-7.69 (3H, m), 7.62-7.50 (3H, m)
- [0714]
- [0715] 2-페닐-N-(2-페닐벤조[d]옥사졸-5-일)아세트아미드
- LCMS RT=** 6.32분, **MH⁺** 329.2; **¹H NMR (DMSO):** 10.42 (1H, s), 8.27-8.21 (3H, m), 7.78 (1H, d, *J* 8.9 Hz), 7.71-7.65 (3H, m), 7.61 (1H, dd, *J* 8.9 2.1 Hz), 7.45-7.30 (5H, m), 3.75 (2H, s)
- [0716]
- [0717] N-(2-페닐벤조[d]옥사졸-5-일)신남아미드
- LCMS RT=** 6.86분, **MH⁺** 341.1; **¹H NMR (DMSO):** 10.48 (1H, s), 8.37 (1H, d, *J* 1.9 Hz), 8.29-8.26 (2H, m), 7.83 (1H, d, *J* 8.9 Hz), 7.73-7.67 (7H, m), 7.56-7.48 (3H, m), 6.93 (1H, d, *J* 15.6 Hz)
- [0718]
- [0719] N-(2-페닐벤조[d]옥사졸-5-일)-1-나프트아미드
- LCMS RT=** 7.07분, **MH⁺** 365.0; **¹H NMR (DMSO):** 10.82 (1H, s), 8.44 (1H, s), 8.31-8.28 (3H, m), 8.18-8.10 (2H, m), 7.88-7.83 (3H, m), 7.73-7.65 (6H, m)
- [0720]
- [0721] N-(2-페닐벤조[d]옥사졸-5-일)-2-나프트아미드
- LCMS RT=** 7.37분, **MH⁺** 365.1; **¹H NMR (DMSO):** 10.69 (1H, s), 8.69 (1H, s), 8.42 (1H, s), 8.31-8.28 (2H, m), 8.20-8.08 (4H, m), 7.90-7.88 (2H, m), 7.75-7.68 (5H, m)
- [0722]

- [0723] N-(2-페닐벤조[d]옥사졸-5-일)티오펜-2-카르복스아미드
- LCMS RT=** 6.31분, **MH⁺** 321.1; **¹H NMR (DMSO):** 10.47 (1H, s), 8.30-8.26 (3H, m), 8.12 (1H, dd, *J* 3.8 1.1 Hz), 7.94 (1H, dd, *J* 5.0 1.1 Hz), 7.85 (1H, d, *J* 8.8 Hz), 7.77 (1H, dd, *J* 8.9 2.0 Hz), 7.73-7.65 (3H, m), 7.33-7.30 (1H, m)
- [0724]
- [0725] N-(2-(피리딘-3-일)벤조[d]옥사졸-5-일)벤즈아미드
- LCMS RT=** 5.63분, **MH⁺** 315.8; **¹H NMR (DMSO):** 10.53 (1H, s), 9.45-9.42 (1H, m), 8.88 (1H, dd, *J* 4.9 1.6 Hz), 8.62 (1H, dt, *J* 8.0 1.8 Hz), 8.42-8.40 (1H, m), 8.06 (2H, dd, *J* 6.6 1.2 Hz), 7.88 (2H, s), 7.75-7.59 (4H, m)
- [0726]
- [0727] 4-클로로-N-(2-(피리딘-3-일)벤조[d]옥사졸-5-일)벤즈아미드
- LCMS RT=** 6.12분, **MH⁺** 349.9; **¹H NMR (DMSO):** 10.58 (1H, s), 9.43-9.42 (1H, m), 8.89-8.87 (1H, m), 8.64-8.59 (1H, m), 8.40-8.38 (1H, m), 8.09 (2H, d, *J* 8.5 Hz), 7.91-7.83 (2H, m), 7.76-7.69 (3H, m)
- [0728]
- [0729] 4-메틸-N-(2-(피리딘-3-일)벤조[d]옥사졸-5-일)벤즈아미드
- LCMS RT=** 5.91분, **MH⁺** 330.2; **¹H NMR (DMSO):** 10.43 (1H, s), 9.43 (1H, dd, *J* 2.1 0.9 Hz), 8.88 (1H, dd, *J* 4.8 1.6 Hz), 8.61 (1H, dt, *J* 8.0 1.9 Hz), 8.40 (1H, t, *J* 1.2 Hz), 7.98 (2H, d, *J* 8.2 Hz), 7.87 (2H, d, *J* 1.2 Hz), 7.75-7.70 (1H, m), 7.43 (2H, d, *J* 8.0 Hz), 2.47 (3H, s)
- [0730]
- [0731] 4-메톡시-N-(2-(피리딘-3-일)벤조[d]옥사졸-5-일)벤즈아미드
- LCMS RT=** 5.64분, **MH⁺** 345.9; **¹H NMR (DMSO):** 10.37 (1H, s), 9.45 (1H, dd, *J* 1.6 0.8 Hz), 8.90 (1H, dd, *J* 4.9 1.7 Hz), 8.63 (1H, dt, *J* 8.0 1.9 Hz), 8.41 (1H, t, *J* 1.2 Hz), 8.08 (2H, d, *J* 8.5 Hz), 7.88 (2H, d, *J* 1.2 Hz), 7.77-7.72 (1H, m), 7.17 (2H, d, *J* 8.7 Hz), 3.94 (3H, s)
- [0732]
- [0733] 2-메톡시-N-(2-(피리딘-3-일)벤조[d]옥사졸-5-일)벤즈아미드
- LCMS RT=** 6.02분, **MH⁺** 345.9; **¹H NMR (DMSO):** 10.33 (1H, s), 9.38-9.36 (1H, m), 8.82 (1H, dd, *J* 4.9 1.7 Hz), 8.55 (1H, dt, *J* 8.0 1.8 Hz), 8.36-8.34 (1H, m), 7.82-7.73 (2H, m), 7.69-7.65 (2H, m), 7.57-7.50 (1H, m), 7.21 (1H, d, *J* 8.4 Hz), 7.09 (1H, t, *J* 7.6 Hz), 3.93 (3H, s)
- [0734]
- [0735] 4-(디메틸아미노)-N-(2-(피리딘-3-일)벤조[d]옥사졸-5-일)벤즈아미드
- LCMS RT=** 5.82분, **MH⁺** 358.9; **¹H NMR (DMSO):** 10.13 (1H, s), 9.45 (1H, dd, *J* 2.3 0.9 Hz), 8.88 (1H, dd, *J* 4.8 1.6 Hz), 8.64-8.59 (1H, m), 8.40-8.39 (1H, m), 7.97 (2H, d, *J* 9.1 Hz), 7.86-7.85 (2H, m), 7.75-7.70 (1H, m), 6.86 (2H, d, *J* 9.1 Hz), 3.08 (6H, s)
- [0736]
- [0737] 3,4-디클로로-N-(2-(피리딘-3-일)벤조[d]옥사졸-5-일)벤즈아미드
- LCMS RT=** 6.78분, **MH⁺** 383.5; **¹H NMR (DMSO):** 10.66 (1H, s), 9.43 (1H, d, *J* 2.1 0.6 Hz), 8.88 (1H, dd, *J* 4.8 1.6 Hz), 8.61 (1H, dt, *J* 8.0 2.0 Hz), 8.37 (1H, d, *J* 2.0 Hz), 8.32 (1H, d, *J* 2.1 Hz), 8.04 (1H, dd, *J* 8.4 2.1 Hz), 7.92-7.82 (3H, m), 7.75-7.71 (1H, m)
- [0738]
- [0739] N-(2-(피리딘-3-일)벤조[d]옥사졸-5-일)-4-(트리플루오로메틸)벤즈아미드
- LCMS RT=** 6.32분, **MH⁺** 383.6; **¹H NMR (DMSO):** 10.68 (1H, s), 9.37 (1H, d, *J* 2.1 Hz), 8.82 (1H, dd, *J* 4.9 1.5 Hz), 8.56 (1H, dt, *J* 8.0 2.0 Hz), 8.34 (1H, d, *J* 1.7 Hz), 8.20 (2H, d, *J* 8.1 Hz), 7.95 (2H, d, *J* 8.4 Hz), 7.88-7.79 (2H, m), 7.69-7.65 (1H, m)
- [0740]

- [0741] 3,5-디클로로-N-(2-(피리딘-3-일)벤조[d]옥사졸-5-일)벤즈아미드
- LCMS RT= 7.06분, MH⁺ 383.7; ¹H NMR (DMSO):** 10.69 (1H, s), 9.43-9.41 (1H, m), 8.88 (1H, dd, *J* 4.9 1.7 Hz), 8.61 (1H, dt, *J* 8.0 2.0 Hz), 8.37 (1H, d, *J* 1.9 Hz), 8.09 (2H, d, *J* 1.9 Hz), 7.96-7.82 (3H, m), 7.75-7.71 (1H, m)
- [0742]
- [0743] 4-플루오로-N-(2-(피리딘-3-일)벤조[d]옥사졸-5-일)벤즈아미드
- LCMS RT= 5.70분, MH⁺ 334.0; ¹H NMR (DMSO):** 10.47 (1H, s), 9.38-9.36 (1H, m), 8.82 (1H, dd, *J* 4.9 1.7 Hz), 8.56 (1H, dt, *J* 8.0 2.0 Hz), 8.33-8.32 (1H, m), 8.11-8.06 (2H, m), 7.85-7.80 (2H, m), 7.69-7.65 (1H, m), 7.40 (2H, t, *J* 8.9 Hz)
- [0744]
- [0745] N-(2-(피리딘-3-일)벤조[d]옥사졸-5-일)비페닐-4-카르복스아미드
- LCMS RT= 6.78분, MH⁺ 391.6;**
- [0746]
- [0747] 2-페닐-N-(2-(피리딘-3-일)벤조[d]옥사졸-5-일)아세트아미드
- LCMS RT= 5.63분, MH⁺ 329.7; ¹H NMR (DMSO):** 10.46 (1H, s), 9.41-9.39 (1H, m), 8.87 (1H, dd, *J* 4.9 1.7 Hz), 8.59 (1H, dt, *J* 8.0 2.0 Hz), 8.26 (1H, d, *J* 2.0 Hz), 7.82 (1H, d, *J* 8.8 Hz), 7.73-7.69 (1H, m), 7.64 (1H, dd, *J* 8.8 2.0 Hz), 7.44-7.30 (5H, m), 3.75 (2H, s)
- [0748]
- [0749] 3-페닐-N-(2-(피리딘-3-일)벤조[d]옥사졸-5-일)프로판아미드
- LCMS RT= 5.84분, MH⁺ 343.8; ¹H NMR (DMSO):** 10.14 (1H, s), 9.35-9.34 (1H, m), 8.81 (1H, dd, *J* 4.9 1.7 Hz), 8.53 (1H, dt, *J* 8.0 2.0 Hz), 8.19 (1H, d, *J* 2.0 Hz), 7.76 (1H, d, *J* 8.8 Hz), 7.69-7.63 (1H, m), 7.54 (1H, dd, *J* 8.8 2.0 Hz), 7.33-7.17 (5H, m), 2.95 (2H, t, *J* 7.6 Hz), 2.67 (2H, t, *J* 8.0 Hz)
- [0750]
- [0751] N-(2-(피리딘-3-일)벤조[d]옥사졸-5-일)신남아미드
- LCMS RT= 6.03분, MH⁺ 342.0; ¹H NMR (DMSO):** 10.46 (1H, s), 9.37-9.35 (1H, m), 8.82 (1H, dd, *J* 4.9 1.7 Hz), 8.55 (1H, dt, *J* 8.0 2.0 Hz), 8.35 (1H, d, *J* 1.9 Hz), 7.82 (1H, d, *J* 8.9 Hz), 7.69-7.63 (5H, m), 7.49-7.41 (3H, m), 6.87 (1H, d, *J* 15.8 Hz)
- [0752]
- [0753] N-(2-(피리딘-3-일)벤조[d]옥사졸-5-일)프로피온아미드
- LCMS RT= 4.97분, MH⁺ 267.9; ¹H NMR (DMSO):** 10.08 (1H, s), 9.34 (1H, dd, *J* 2.2 0.7 Hz), 8.81 (1H, dd, *J* 4.9 1.7 Hz), 8.53 (1H, dt, *J* 8.0 2.0 Hz), 8.21 (1H, d, *J* 2.0 Hz), 7.76 (1H, d, *J* 8.9 Hz), 7.68-7.63 (1H, m), 7.57 (1H, dd, *J* 9.0 2.1 Hz), 2.37 (2H, q, *J* 7.6 Hz), 1.12 (3H, t, *J* 7.6 Hz)
- [0754]
- [0755] N-(2-(피리딘-3-일)벤조[d]옥사졸-5-일)부티르아미드
- LCMS RT= 5.26분, MH⁺ 281.9; ¹H NMR (DMSO):** 10.17 (1H, s), 9.43 (1H, dd, *J* 2.2 0.7 Hz), 8.89 (1H, dd, *J* 4.9 1.7 Hz), 8.62 (1H, dt, *J* 8.0 2.0 Hz), 8.29 (1H, d, *J* 2.0 Hz), 7.84 (1H, d, *J* 8.9 Hz), 7.76-7.72 (1H, m), 7.65 (1H, dd, *J* 9.0 2.1 Hz), 2.42 (2H, q, *J* 7.6 Hz), 1.80-1.67 (2H, m), 1.03 (3H, t, *J* 7.6 Hz)
- [0756]
- [0757] N-(2-(피리딘-3-일)벤조[d]옥사졸-5-일)펜탄아미드
- LCMS RT= 5.60분, MH⁺ 296.0; ¹H NMR (DMSO):** 10.09 (1H, s), 9.36-9.33 (1H, m), 8.81 (1H, dd, *J* 4.9 1.7 Hz), 8.53 (1H, dt, *J* 8.0 2.0 Hz), 8.20 (1H, d, *J* 2.0 Hz), 7.75 (1H, d, *J* 8.9 Hz), 7.648-7.64 (1H, m), 7.57 (1H, dd, *J* 9.0 2.1 Hz), 2.35 (2H, q, *J* 7.6 Hz), 1.66-1.56 (2H, m), 1.42-1.29 (2H, m), 0.92 (3H, t, *J* 7.6 Hz)
- [0758]

- [0759] N-(2-(피리딘-3-일)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드
- LCMS RT=** 5.22분, **MH⁺** 282.0; **¹H NMR (DMSO):** 10.11 (1H, s), 9.41 (1H, dd, *J* 2.2 0.7 Hz), 8.87 (1H, dd, *J* 4.9 1.7 Hz), 8.60 (1H, dt, *J* 8.0 2.0 Hz), 8.29 (1H, d, *J* 2.0 Hz), 7.83 (1H, d, *J* 8.9 Hz), 7.74-7.69 (1H, m), 7.65 (1H, dd, *J* 9.0 2.1 Hz), 2.70 (1H, t, *J* 6.8 Hz), 1.20 (6H, d, *J* 6.8 Hz)
- [0760]
- [0761] N-(2-(피리딘-3-일)벤조[d]옥사졸-5-일)푸란-2-카르복스아미드
- LCMS RT=** 5.23분, **MH⁺** 305.7; **¹H NMR (DMSO):** 10.41 (1H, s), 9.37 (1H, dd, *J* 2.2 0.8 Hz), 8.82 (1H, dd, *J* 4.9 1.7 Hz), 8.55 (1H, dt, *J* 8.0 2.0 Hz), 8.30 (1H, t, *J* 1.3 Hz), 7.97 (1H, dd, *J* 1.7 0.8 Hz), 7.82-7.81 (2H, m), 7.69-7.64 (1H, m), 7.37 (1H, dd, *J* 3.5 0.8 Hz), 6.74 (1H, dd, *J* 3.5 1.7 Hz)
- [0762]
- [0763] N-(2-(피리딘-3-일)벤조[d]옥사졸-5-일)티오펜-2-카르복스아미드
- LCMS RT=** 5.55분, **MH⁺** 322.0; **¹H NMR (DMSO):** 10.44 (1H, s), 9.37 (1H, dd, *J* 2.2 0.8 Hz), 8.82 (1H, dd, *J* 4.9 1.7 Hz), 8.56 (1H, dt, *J* 8.0 2.0 Hz), 8.28 (1H, t, *J* 1.3 Hz), 8.06 (1H, dd, *J* 1.7 0.8 Hz), 7.89 (1H, dd, *J* 5.0 1.0 Hz), 7.83 (1H, d, *J* 9.0 Hz), 7.77-7.73 (1H, m), 7.70-7.65 (1H, m), 7.26 (1H, dd, *J* 5.0 1.2 Hz)
- [0764]
- [0765] N-(2-페닐벤조[d]옥사졸-5-일)벤즈아미드
- LCMS RT=** 6.82분, **MH⁺** 314.9; **¹H NMR (DMSO):** 10.43 (1H, s), 8.31-8.30 (1H, m), 8.25-8.20 (2H, m), 8.02-7.98 (2H, m), 7.79 (2H, d, *J* 1.2 Hz), 7.65-7.53 (6H, m)
- [0766]
- [0767] N-(2-(4-(디에틸아미노)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)니코틴아미드
- LCMS RT=** 6.55분, **MH⁺** 386.8; **¹H NMR (DMSO):** 10.57 (1H, s), 9.14 (1H, d, *J* 2.1 Hz), 8.78 (1H, dd, *J* 4.8 1.6 Hz), 8.33 (1H, dt, *J* 8.0 2.0 Hz), 8.14 (1H, d, *J* 1.8 Hz), 7.96 (2H, d, *J* 9.0 Hz), 7.70-7.52 (3H, m), 6.82 (2H, d, *J* 9.1 Hz), 3.50-3.41 (4H, m), 1.15 (6H, t, *J* 7.0 Hz)
- [0768]
- [0769] N-(2-(4-(디에틸아미노)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)이소니코틴아미드
- LCMS RT=** 6.63분, **MH⁺** 386.8; **¹H NMR (DMSO):** 10.69 (1H, s), 8.87 (2H, d, *J* 6.1 Hz), 8.20 (1H, d, *J* 1.5 Hz), 8.04 (2H, d, *J* 9.1 Hz), 7.96 (2H, d, *J* 6.0 Hz), 7.77-7.69 (2H, m), 6.89 (2H, d, *J* 9.1 Hz), 3.50-3.46 (4H, m), 1.21 (6H, t, *J* 7.0 Hz)
- [0770]
- [0771] N-(2-(4-(디에틸아미노)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)벤즈아미드
- LCMS RT=** 7.84분, **MH⁺** 386.1; **¹H NMR (DMSO):** 10.43 (1H, s), 8.22-8.20 (1H, m), 8.06-8.01 (4H, m), 7.72 (2H, d, *J* 1.2 Hz), 7.68-7.58 (3H, m), 6.89 (2H, d, *J* 9.1 Hz), 3.51 (4H, q, *J* 7.0 Hz), 1.21 (6H, t, *J* 7.0 Hz)
- [0772]
- [0773] 4-클로로-N-(2-(4-(디에틸아미노)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)벤즈아미드
- LCMS RT=** 8.60분, **MH⁺** 419.9; **¹H NMR (DMSO):** 10.44 (1H, s), 8.13 (1H, s), 8.00-7.95 (4H, m), 7.66-7.62 (4H, m), 6.82 (2H, d, *J* 9.1 Hz), 3.45 (4H, q, *J* 7.0 Hz), 1.15 (6H, t, *J* 7.0 Hz)
- [0774]
- [0775] N-(2-(4-(디에틸아미노)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)-4-메틸벤즈아미드
- LCMS RT=** 8.28분, **MH⁺** 400.2; **¹H NMR (DMSO):** 10.28 (1H, s), 8.14 (1H, s), 7.97 (2H, d, *J* 8.9 Hz), 8.03 (2H, d, *J* 8.1 Hz), 7.65 (2H, d, *J* 1.2 Hz), 7.36 (2H, d, *J* 8.1 Hz), 6.82 (2H, d, *J* 9.1 Hz), 3.44 (4H, q, *J* 7.0 Hz), 2.40 (3H, s), 1.15 (6H, t, *J* 7.0 Hz)
- [0776]

- [0777] N-(2-(4-(디에틸아미노)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)-4-메톡시벤즈아미드
- LCMS RT=** 7.86분, **MH⁺** 416.2; **¹H NMR (DMSO):** 10.20 (1H, s), 8.13-8.12 (1H, m), 8.00-7.95 (4H, m), 7.64 (2H, d, *J* 1.3 Hz), 7.07 (2H, d, *J* 8.9 Hz), 6.82 (2H, d, *J* 9.1 Hz), 3.85 (3H, s), 3.44 (4H, q, *J* 7.0 Hz), 1.15 (6H, t, *J* 7.0 Hz)
- [0778]
- [0779] N-(2-(4-(디에틸아미노)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)-2-메톡시벤즈아미드
- LCMS RT=** 8.69분, **MH⁺** 416.0; **¹H NMR (DMSO):** 10.24 (1H, s), 8.15 (1H, d, *J* 1.5 Hz), 7.96 (2H, d, *J* 8.9 Hz), 7.68-7.49 (4H, m), 7.19 (1H, d, *J* 8.4 Hz), 7.08 (1H, t, *J* 7.5 Hz), 6.83 (2H, d, *J* 9.1 Hz), 3.92 (3H, s), 3.44 (4H, q, *J* 7.0 Hz), 1.15 (6H, t, *J* 7.0 Hz)
- [0780]
- [0781] N-(2-(4-(디에틸아미노)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)-4-(디메틸아미노)벤즈아미드
- LCMS RT=** 8.08분, **MH⁺** 429.0; **¹H NMR (DMSO):** 9.98 (1H, s), 8.13 (1H, s), 7.96 (2H, d, *J* 8.9 Hz), 7.90 (2H, d, *J* 8.9 Hz), 7.64-7.61 (2H, m), 6.84-6.76 (4H, m), 3.44 (4H, q, *J* 7.0 Hz), 3.01 (6H, s), 1.15 (6H, t, *J* 7.0 Hz)
- [0782]
- [0783] 3,4-디클로로-N-(2-(4-(디에틸아미노)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)벤즈아미드
- LCMS RT=** 9.66분, **MH⁺** 453.9; **¹H NMR (DMSO):** 10.52 (1H, s), 8.25 (1H, d, *J* 2.0 Hz), 8.12 (1H, d, *J* 1.8 Hz), 7.98-7.94 (3H, m), 7.85 (1H, d, *J* 8.4 Hz), 7.70-7.60 (2H, m), 6.82 (2H, d, *J* 9.2 Hz), 3.45 (4H, q, *J* 7.0 Hz), 1.15 (6H, t, *J* 7.0 Hz)
- [0784]
- [0785] N-(2-(4-(디에틸아미노)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)-4-(트리플루오로메틸)벤즈아미드
- LCMS RT=** 8.87분, **MH⁺** 454.4; **¹H NMR (DMSO):** 10.60 (1H, s), 8.20-8.15 (3H, m), 7.99-7.93 (4H, m), 7.70-7.63 (2H, m), 6.83 (2H, d, *J* 9.2 Hz), 3.45 (4H, q, *J* 7.0 Hz), 1.15 (6H, t, *J* 7.0 Hz)
- [0786]
- [0787] 3,5-디클로로-N-(2-(4-(디에틸아미노)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)벤즈아미드
- LCMS RT=** 10.25분, **MH⁺** 453.8; **¹H NMR (DMSO):** 10.63 (1H, s), 8.21-8.19 (1H, m), 8.09 (2H, d, *J* 1.9 Hz), 8.05 (2H, d, *J* 9.1 Hz), 7.97 (1H, t, *J* 1.9 Hz), 7.78-7.69 (2H, m), 6.91 (2H, d, *J* 9.1 Hz), 3.50 (4H, q, *J* 7.0 Hz), 1.23 (6H, t, *J* 7.0 Hz)
- [0788]
- [0789] N-(2-(4-(디에틸아미노)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)-4-플루오로벤즈아미드
- LCMS RT=** 7.95분, **MH⁺** 404.1; **¹H NMR (DMSO):** 10.38 (1H, s), 8.13-8.12 (1H, m), 8.09-8.04 (2H, m), 7.96 (2H, d, *J* 9.1 Hz), 7.68-7.61 (2H, m), 7.39 (2H, t, *J* 8.9 Hz), 6.82 (2H, d, *J* 9.2 Hz), 3.45 (4H, q, *J* 7.0 Hz), 1.15 (6H, t, *J* 7.0 Hz)
- [0790]
- [0791] N-(2-(4-(디에틸아미노)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)비페닐-4-카르복스아미드
- LCMS RT=** 9.67분, **MH⁺** 461.9; **¹H NMR (DMSO):** 10.42 (1H, s), 8.18-8.17 (1H, m), 8.09 (2H, d, *J* 8.5 Hz), 7.98 (2H, d, *J* 9.0 Hz), 7.87 (2H, d, *J* 8.6 Hz), 7.78 (2H, d, *J* 7.1 Hz), 7.71-7.65 (2H, m), 7.45-7.41 (3H, m), 6.82 (2H, d, *J* 9.2 Hz), 3.45 (4H, q, *J* 7.0 Hz), 1.15 (6H, t, *J* 7.0 Hz)
- [0792]
- [0793] N-(2-(4-(디에틸아미노)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)-2-페닐아세트아미드
- LCMS RT=** 7.70분, **MH⁺** 400.1; **¹H NMR (DMSO):** 10.29 (1H, s), 8.00 (1H, d, *J* 1.8 Hz), 7.94 (2H, d, *J* 9.1 Hz), 7.59 (1H, d, *J* 8.7 Hz), 7.45-7.23 (6H, m), 6.81 (2H, d, *J* 9.2 Hz), 3.67 (2H, s), 3.43 (4H, q, *J* 7.0 Hz), 1.14 (6H, t, *J* 7.0 Hz)
- [0794]

- [0795] N-(2-(4-(디에틸아미노)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)-3-페닐프로판아미드
- LCMS RT**= 8.10분, **MH⁺** 413.9; **¹H NMR (DMSO)**: 10.03 (1H, s), 7.99 (1H, d, *J* 1.9 Hz), 7.94 (2H, d, *J* 9.1 Hz), 7.58 (1H, d, *J* 8.7 Hz), 7.40 (1H, dd, *J* 8.7 2.0 Hz), 7.36-7.17 (5H, m), 6.82 (2H, d, *J* 9.2 Hz), 3.44 (4H, q, *J* 7.0 Hz), 2.94 (2H, d, *J* 8.1 Hz), 2.65 (1H, d, *J* 8.3 Hz), 1.15 (6H, t, *J* 7.0 Hz)
- [0796]
- [0797] N-(2-(4-(디에틸아미노)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)프로피온아미드
- LCMS RT**= 6.79분, **MH⁺** 338.2; **¹H NMR (DMSO)**: 10.11 (1H, s), 8.07 (1H, d, *J* 1.9 Hz), 7.99 (2H, d, *J* 9.0 Hz), 7.65 (1H, d, *J* 8.7 Hz), 7.48 (1H, dd, *J* 8.8 2.0 Hz), 6.87 (2H, d, *J* 9.1 Hz), 3.49 (4H, q, *J* 7.0 Hz), 2.41 (2H, q, *J* 7.5 Hz), 1.24-1.14 (9H, m)
- [0798]
- [0799] N-(2-(4-(디에틸아미노)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)부티르아미드
- LCMS RT**= 7.24분, **MH⁺** 352.2; **¹H NMR (DMSO)**: 9.97 (1H, s), 8.00 (1H, d, *J* 1.9 Hz), 7.95 (2H, d, *J* 9.0 Hz), 7.58 (1H, d, *J* 8.7 Hz), 7.43 (1H, dd, *J* 8.8 2.0 Hz), 6.81 (2H, d, *J* 9.1 Hz), 3.44 (4H, q, *J* 7.0 Hz), 2.31 (2H, t, *J* 7.4 Hz), 1.68-1.58 (2H, m), 1.15 (6H, t, *J* 7.0 Hz), 0.94 (3H, t, *J* 7.4 Hz)
- [0800]
- [0801] N-(2-(4-(디에틸아미노)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)펜탄아미드
- LCMS RT**= 7.84분, **MH⁺** 366.0; **¹H NMR (DMSO)**: 9.98 (1H, s), 8.00 (1H, d, *J* 1.9 Hz), 7.95 (2H, d, *J* 9.0 Hz), 7.58 (1H, d, *J* 8.7 Hz), 7.42 (1H, dd, *J* 8.8 2.0 Hz), 6.81 (2H, d, *J* 9.1 Hz), 3.44 (4H, q, *J* 7.0 Hz), 2.33 (2H, t, *J* 7.5 Hz), 1.65-1.55 (2H, m), 1.41-1.28 (2H, m), 1.15 (6H, t, *J* 7.0 Hz), 0.91 (3H, t, *J* 7.4 Hz)
- [0802]
- [0803] N-(2-(4-(디에틸아미노)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드
- LCMS RT**= 7.25분, **MH⁺** 352.2; **¹H NMR (DMSO)**: 9.99 (1H, s), 8.08 (1H, d, *J* 1.9 Hz), 8.01 (2H, d, *J* 9.0 Hz), 7.65 (1H, d, *J* 8.7 Hz), 7.51 (1H, dd, *J* 8.8 2.0 Hz), 6.88 (2H, d, *J* 9.1 Hz), 3.50 (4H, q, *J* 7.0 Hz), 2.70-2.64 (1H, m), 1.24-1.17 (12H, m)
- [0804]
- [0805] N-(2-(4-(디에틸아미노)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)티오펜-2-카르복스아미드
- LCMS RT**= 7.77분, **MH⁺** 392.1; **¹H NMR (DMSO)**: 10.41 (1H, s), 8.14 (1H, d, *J* 1.8 Hz), 8.12 (1H, dd, *J* 3.8 1.0 Hz), 8.04 (2H, d, *J* 9.1 Hz), 7.95 (1H, dd, *J* 4.9 1.0 Hz), 7.73 (1H, d, *J* 8.6 Hz), 7.66 (1H, dd, *J* 8.7 1.9 Hz), 7.34-7.30 (1H, m), 6.90 (2H, d, *J* 9.2 Hz), 3.51 (4H, q, *J* 7.0 Hz), 1.22 (6H, t, *J* 7.0 Hz)
- [0806]
- [0807] N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)이소니코틴아미드
- LCMS RT**= 6.36분, **MH⁺** 350.0; **¹H NMR (DMSO)**: 10.71 (1H, s), 8.82 (2H, d, *J* 9.0 Hz), 8.32-8.30 (1H, m), 8.22 (2H, d, *J* 8.6 Hz), 7.90 (2H, d, *J* 6.0 Hz), 7.85-7.79 (2H, m), 7.71 (2H, d, *J* 8.6 Hz)
- [0808]
- [0809] N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)벤즈아미드
- LCMS RT**= 7.67분, **MH⁺** 349.0; **¹H NMR (DMSO)**: 10.46 (1H, s), 8.32 (1H, s), 8.22 (2H, d, *J* 8.5 Hz), 8.01-7.98 (2H, m), 7.79 (2H, d, *J* 1.1 Hz), 7.71 (2H, d, *J* 8.6 Hz), 7.65-7.50 (3H, m)
- [0810]
- [0811] 4-클로로-N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)벤즈아미드
- LCMS RT**= 8.51분, **MH⁺** 383.2; **¹H NMR (DMSO)**: 10.52 (1H, s), 8.30 (1H, s), 8.22 (2H, d, *J* 8.8 Hz), 8.03 (2H, d, *J* 8.8 Hz), 7.82-7.77 (2H, m), 7.71 (2H, d, *J* 8.4 Hz), 7.64 (2H, d, *J* 8.4 Hz)
- [0812]

[0813] N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)-4-메틸벤즈아미드

LCMS RT= 8.21분, **MH⁺** 362.8; **¹H NMR (DMSO)**: 10.36 (1H, s), 8.31 (1H, s), 8.22 (2H, d, *J* 8.7 Hz), 7.92 (2H, d, *J* 8.2 Hz), 7.78 (2H, d, *J* 1.3 Hz), 7.71 (2H, d, *J* 8.7 Hz), 7.37 (2H, d, *J* 8.0 Hz), 2.41 (3H, s)

[0814]

[0815] N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)-4-메톡시벤즈아미드

LCMS RT= 7.62분, **MH⁺** 378.7; **¹H NMR (DMSO)**: 10.28 (1H, s), 8.30 (1H, s), 8.22 (2H, d, *J* 8.9 Hz), 7.99 (2H, d, *J* 8.9 Hz), 7.77 (2H, s), 7.70 (2H, d, *J* 8.3 Hz), 7.08 (2H, d, *J* 8.9 Hz), 3.86 (3H, s)

[0816]

[0817] N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)-2-메톡시벤즈아미드

LCMS RT= 8.55분, **MH⁺** 379.0; **¹H NMR (DMSO)**: 10.29 (1H, s), 8.29 (1H, d, *J* 1.5 Hz), 8.18 (2H, d, *J* 8.6 Hz), 7.77-7.62 (5H, m), 7.52-7.46 (1H, m), 7.17 (1H, d, *J* 8.3 Hz), 7.05 (1H, t, *J* 7.5 Hz), 3.89 (3H, s)

[0818]

[0819] N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)-4-(디메틸아미노)벤즈아미드

LCMS RT= 7.96분, **MH⁺** 392.3; **¹H NMR (DMSO)**: 10.12 (1H, s), 8.36 (1H, s), 8.27 (2H, d, *J* 8.6 Hz), 7.96 (2H, d, *J* 8.8 Hz), 7.83-7.81 (2H, m), 7.76 (2H, d, *J* 8.5 Hz), 6.84 (2H, d, *J* 9.0 Hz), 3.07 (6H, s)

[0820]

[0821] N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)-4-(트리플루오로메틸)벤즈아미드

LCMS RT= 8.65분, **MH⁺** 416.7; **¹H NMR (DMSO)**: 10.67 (1H, s), 8.32 (1H, s), 8.24-8.18 (4H, m), 7.95 (2H, d, *J* 8.6 Hz), 7.84-7.77 (2H, m), 7.71 (2H, d, *J* 8.6 Hz)

[0822]

[0823] 3,5-디클로로-N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)벤즈아미드

LCMS RT= 10.09분, **MH⁺** 417.1; **¹H NMR (DMSO)**: 10.68 (1H, s), 8.34 (1H, d, *J* 1.8 Hz), 8.28 (2H, d, *J* 8.6 Hz), 8.08 (2H, d, *J* 1.9 Hz), 7.96 (1H, t, *J* 1.9 Hz), 7.89-7.78 (2H, m), 7.76 (2H, d, *J* 8.7 Hz)

[0824]

[0825] N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)-4-플루오로벤즈아미드

LCMS RT= 7.78분, **MH⁺** 367.3; **¹H NMR (DMSO)**: 10.58 (1H, s), 8.35 (1H, s), 8.28 (2H, d, *J* 8.9 Hz), 8.16-8.11 (2H, m), 7.90-7.82 (2H, m), 7.77 (2H, d, *J* 8.4 Hz), 7.52-7.42 (2H, m)

[0826]

[0827] N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)-2-페닐아세트아미드

LCMS RT= 7.48분, **MH⁺** 362.8; **¹H NMR (DMSO)**: 10.38 (1H, s), 8.22-8.17 (3H, m), 7.75-7.65 (3H, m), 7.55 (1H, dd, *J* 9.0 2.1 Hz), 7.38-7.24 (5H, m), 3.69 (2H, s)

[0828]

[0829] N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)-3-페닐프로판아미드

LCMS RT= 7.92분, **MH⁺** 377.3; **¹H NMR (DMSO)**: 10.12 (1H, s), 8.19 (2H, d, *J* 8.8 Hz), 8.16 (1H, d, *J* 1.8 Hz), 7.74-7.68 (3H, m), 7.51 (1H, dd, *J* 8.8 2.0 Hz), 7.33-7.17 (5H, m), 2.95 (2H, t, *J* 7.3 Hz), 2.67 (2H, t, *J* 7.3 Hz),

[0830]

[0831] N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)부티르아미드

LCMS RT= 7.04분, **MH⁺** 315.1; **¹H NMR (DMSO)**: 10.07 (1H, s), 8.21-8.18 (3H, m), 7.73-7.67 (3H, m), 7.54 (1H, dd, *J* 8.8 1.9 Hz), 2.32 (2H, t, *J* 7.4 Hz), 1.72-1.58 (2H, m), 0.94 (3H, t, *J* 7.4 Hz)

[0832]

- [0833] N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)펜탄아미드
- LCMS RT=** 7.66분, **MH⁺** 329.1; **¹H NMR (DMSO):** 10.07 (1H, s), 8.22-8.16 (3H, m), 7.73-7.68 (3H, m), 7.56-7.51 (1H, m), 2.34 (2H, t, *J* 7.5 Hz), 1.66-1.56 (2H, m), 1.42-1.30 (2H, m), 0.92 (3H, t, *J* 7.2 Hz)
- [0834]
- [0835] N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드
- LCMS RT=** 7.04분, **MH⁺** 315.1; **¹H NMR (DMSO):** 10.03 (1H, s), 8.22-8.18 (3H, m), 7.74-7.67 (3H, m), 7.56 (1H, dd, *J* 8.9 2.1 Hz), 2.67-2.59 (1H, m), 1.14 (6H, d, *J* 6.8 Hz)
- [0836]
- [0837] N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)푸란-2-카르복스아미드
- LCMS RT=** 7.01분, **MH⁺** 338.9; **¹H NMR (DMSO):** 10.40 (1H, s), 8.27 (1H, d, *J* 1.1 Hz), 8.22 (2H, d, *J* 8.5 Hz), 7.97 (1H, s), 7.78 (2H, s), 7.70 (2H, d, *J* 8.5 Hz), 7.36 (1H, d, *J* 3.4 Hz), 6.74-6.73 (1H, m)
- [0838]
- [0839] N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)티오펜-2-카르복스아미드
- LCMS RT=** 7.54분, **MH⁺** 355.0; **¹H NMR (DMSO):** 10.42 (1H, s), 8.25-8.21 (3H, m), 8.06 (1H, dd, *J* 3.9 1.2 Hz), 7.89 (1H, dd, *J* 5.0 1.0 Hz), 7.80 (1H, d, *J* 8.8 Hz), 7.74-7.69 (3H, m), 7.26 (1H, dd, *J* 5.0 3.8 Hz)
- [0840]
- [0841] N-(2-p-톨릴벤조[d]옥사졸-5-일)니코틴아미드
- LCMS RT=** 6.12분, **MH⁺** 330.1; **¹H NMR (DMSO):** 10.62 (1H, s), 9.15 (1H, dd, *J* 2.1 0.7 Hz), 8.79 (1H, dd, *J* 4.8 1.7 Hz), 8.34 (1H, dt, *J* 7.9 1.8 Hz), 8.27 (1H, d, *J* 1.6 Hz), 8.11 (2H, d, *J* 8.2 Hz), 7.82-7.72 (2H, m), 7.63-7.58 (1H, m), 7.44 (2H, d, *J* 8.0 Hz), 2.43 (3H, s)
- [0842]
- [0843] N-(2-p-톨릴벤조[d]옥사졸-5-일)이소니코틴아미드
- LCMS RT=** 6.17분, **MH⁺** 330.1; **¹H NMR (DMSO):** 10.68 (1H, s), 8.82 (2H, d, *J* 6.0 Hz), 8.27 (1H, d, *J* 1.5 Hz), 8.22 (2H, d, *J* 8.2 Hz), 7.90 (2H, d, *J* 6.0 Hz), 7.81-7.72 (2H, m), 7.45 (2H, d, *J* 8.0 Hz), 2.43 (3H, s)
- [0844]
- [0845] N-(2-p-톨릴벤조[d]옥사졸-5-일)프로피온아미드
- LCMS RT=** 6.34분, **MH⁺** 281.0; **¹H NMR (DMSO):** 10.03 (1H, s), 8.14 (1H, d, *J* 1.8 Hz), 8.08 (2H, d, *J* 8.2 Hz), 7.69 (1H, d, *J* 8.8 Hz), 7.51 (1H, dd, *J* 8.8 2.0 Hz), 7.44 (2H, d, *J* 8.0 Hz), 2.42 (3H, s), 2.36 (2H, q, *J* 7.5 Hz), 1.12 (3H, t, *J* 7.6 Hz)
- [0846]
- [0847] N-(2-p-톨릴벤조[d]옥사졸-5-일)부티르아미드
- LCMS RT=** 6.73분, **MH⁺** 295.1; **¹H NMR (DMSO):** 10.04 (1H, s), 8.13 (1H, d, *J* 1.8 Hz), 8.08 (2H, d, *J* 8.2 Hz), 7.69 (1H, d, *J* 8.8 Hz), 7.51 (1H, dd, *J* 8.8 2.0 Hz), 7.43 (2H, d, *J* 8.0 Hz), 2.42 (3H, s), 2.32 (2H, t, *J* 7.4 Hz), 1.71-1.58 (2H, m), 0.94 (3H, t, *J* 7.4 Hz)
- [0848]
- [0849] N-(2-p-톨릴벤조[d]옥사졸-5-일)펜탄아미드
- LCMS RT=** 7.20분, **MH⁺** 309.1; **¹H NMR (DMSO):** 10.04 (1H, s), 8.13 (1H, d, *J* 1.8 Hz), 8.08 (2H, d, *J* 8.2 Hz), 7.68 (1H, d, *J* 8.8 Hz), 7.51 (1H, dd, *J* 8.8 2.0 Hz), 7.43 (2H, d, *J* 8.0 Hz), 2.42 (3H, s), 2.34 (2H, t, *J* 7.4 Hz), 1.67-1.56 (2H, m), 1.41-1.29 (2H, m), 0.92 (3H, t, *J* 7.4 Hz)
- [0850]
- [0851] N-(2-p-톨릴벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드
- LCMS RT=** 6.74분, **MH⁺** 295.1; **¹H NMR (DMSO):** 10.00 (1H, s), 8.15 (1H, d, *J* 1.8 Hz), 8.09 (2H, d, *J* 8.2 Hz), 7.69 (1H, d, *J* 8.8 Hz), 7.53 (1H, dd, *J* 8.8 2.0 Hz), 7.43 (2H, d, *J* 8.0 Hz), 2.66-2.60 (1H, m), 2.42 (3H, s), 1.13 (6H, d, *J* 6.8 Hz)
- [0852]

- [0853] N-(2-p-톨릴벤조[d]옥사졸-5-일)푸란-2-카르복스아미드
- LCMS RT=** 6.71분, **MH⁺** 319.0; **¹H NMR (DMSO):** 10.37 (1H, s), 8.23 (1H, s), 8.10 (2H, d, *J* 8.2 Hz), 7.98-7.96 (1H, m), 7.75 (2H, d, *J* 1.0 Hz), 7.44 (2H, d, *J* 8.0 Hz), 7.36 (1H, d, *J* 3.6 Hz), 6.74-6.72 (1H, m), 2.43 (3H, s)
- [0854]
- [0855] N-(2-p-톨릴벤조[d]옥사졸-5-일)티오펜-2-카르복스아미드
- LCMS RT=** 7.15분, **MH⁺** 335.0; **¹H NMR (DMSO):** 10.40 (1H, s), 8.21 (1H, d, *J* 1.7 Hz), 8.11 (2H, d, *J* 8.2 Hz), 8.05 (1H, dd, *J* 3.8 1.0 Hz), 7.89 (1H, d, *J* 4.9 1.0 Hz), 7.76 (1H, d, *J* 8.8 Hz), 7.69 (1H, dd, *J* 8.9 2.0 Hz), 7.44 (2H, d, *J* 8.0 Hz), 7.26 (1H, dd, *J* 5.0 3.8 Hz), 2.43 (3H, s)
- [0856]
- [0857] N-(2-(4-(트리플루오로메틸)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)니코틴아미드
- LCMS RT=** 6.49분, **MH⁺** 383.9; **¹H NMR (DMSO):** 10.70 (1H, s), 9.20-9.18 (1H, m), 8.82 (1H, dd, *J* 4.6 1.5 Hz), 8.46 (2H, d, *J* 8.1 Hz), 8.40-8.36 (2H, m), 8.04 (2H, d, *J* 8.0 Hz), 7.92-7.82 (2H, m), 7.66-7.61 (1H, m)
- [0858]
- [0859] N-(2-(4-(트리플루오로메틸)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)이소니코틴아미드
- LCMS RT=** 6.52분, **¹H NMR (DMSO):** 10.80 (1H, s), 8.90 (2H, d, *J* 6.0 Hz), 8.51 (2H, d, *J* 8.2 Hz), 8.44 (1H, d, *J* 1.6 Hz), 8.09 (2H, d, *J* 8.2 Hz), 8.01-7.93 (3H, m), 7.89 (1H, dd, *J* 8.9 1.9 Hz)
- [0860]
- [0861] N-(2-(4-(트리플루오로메틸)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)아세트아미드
- LCMS RT=** 6.30분, **MH⁺** 320.7; **¹H NMR (DMSO):** 10.17 (1H, s), 8.40 (2H, d, *J* 8.7 Hz), 8.22-8.19 (1H, m), 7.99 (2H, d, *J* 8.5 Hz), 7.77 (1H, d, *J* 8.7 Hz), 7.58-7.53 (1H, m), 2.09 (3H, s)
- [0862]
- [0863] N-(2-(4-(트리플루오로메틸)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)프로피온아미드
- LCMS RT=** 6.73분, **MH⁺** 335.0; **¹H NMR (DMSO):** 10.09 (1H, s), 8.40 (2H, d, *J* 7.8 Hz), 8.23 (1H, d, *J* 1.9 Hz), 7.99 (2H, d, *J* 8.2 Hz), 7.77 (1H, d, *J* 8.7 Hz), 7.57 (1H, dd, *J* 8.8 2.0 Hz), 2.37 (2H, q, *J* 7.5 Hz), 1.12 (3H, t, *J* 7.5 Hz)
- [0864]
- [0865] N-(2-(4-(트리플루오로메틸)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)부티르아미드
- LCMS RT=** 7.18분, **MH⁺** 348.9; **¹H NMR (DMSO):** 10.10 (1H, s), 8.40 (2H, d, *J* 7.8 Hz), 8.23 (1H, d, *J* 1.9 Hz), 7.99 (2H, d, *J* 8.2 Hz), 7.77 (1H, d, *J* 8.7 Hz), 7.58 (1H, dd, *J* 8.8 2.0 Hz), 2.33 (2H, t, *J* 7.3 Hz), 1.69-1.59 (2H, m), 0.94 (3H, t, *J* 7.6 Hz)
- [0866]
- [0867] N-(2-(4-(트리플루오로메틸)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)펜탄아미드
- LCMS RT=** 7.74분, **MH⁺** 363.1; **¹H NMR (DMSO):** 10.10 (1H, s), 8.40 (2H, d, *J* 7.8 Hz), 8.22 (1H, d, *J* 1.9 Hz), 7.99 (2H, d, *J* 8.2 Hz), 7.77 (1H, d, *J* 8.7 Hz), 7.57 (1H, dd, *J* 8.8 2.0 Hz), 2.36 (2H, t, *J* 7.3 Hz), 1.66-1.58 (2H, m), 1.42-1.29 (2H, m), 0.92 (3H, t, *J* 7.6 Hz)
- [0868]
- [0869] N-(2-(4-(트리플루오로메틸)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드
- LCMS RT=** 7.15분, **MH⁺** 349.1; **¹H NMR (DMSO):** 10.09 (1H, s), 8.43 (2H, d, *J* 7.8 Hz), 8.27 (1H, d, *J* 1.9 Hz), 8.02 (2H, d, *J* 8.2 Hz), 7.80 (1H, d, *J* 8.7 Hz), 7.63 (1H, dd, *J* 8.8 2.0 Hz), 2.72-2.63 (1H, m), 1.18 (6H, d, *J* 6.8 Hz)
- [0870]

[0871] N-(2-(4-(트리플루오로메틸)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)푸란-2-카르복스아미드

LCMS RT= 7.15분, **MH⁺** 373.0; **¹H NMR (DMSO)**: 10.28 (1H, s), 8.27 (2H, d, *J* 8.0 Hz), 8.18-8.16 (1H, m), 7.86 (2H, d, *J* 8.2 Hz), 7.84-7.82 (1H, m), 7.69-7.67 (2H, m), 7.23 (1H, dd, *J* 3.5 0.8 Hz), 6.59 (1H, dd, *J* 3.5 1.7 Hz)

[0872]

[0873] N-(2-(4-메톡시페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)이소니코틴아미드

LCMS RT= 5.76분, **MH⁺** 346.0; **¹H NMR (DMSO)**: 10.66 (1H, s), 8.81 (2H, d, *J* 6.1 Hz), 8.24 (1H, d, *J* 1.7 Hz), 8.16 (2H, d, *J* 9.0 Hz), 7.90 (2H, d, *J* 6.1 Hz), 7.77 (1H, d, *J* 8.8 Hz), 7.72 (1H, dd, *J* 8.8 1.9 Hz), 7.18 (2H, d, *J* 8.9 Hz), 3.88 (3H, s)

[0874]

[0875] N-(2-(4-메톡시페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)아세트아미드

LCMS RT= 5.59분, **MH⁺** 283.0; **¹H NMR (DMSO)**: 10.09 (1H, s), 8.13 (2H, d, *J* 8.9 Hz), 8.08 (1H, d, *J* 1.8 Hz), 7.67 (1H, d, *J* 8.9 Hz), 7.47 (1H, dd, *J* 8.8 2.0 Hz), 7.16 (2H, d, *J* 9.0 Hz), 3.87 (3H, s), 2.08 (3H, s)

[0876]

[0877] N-(2-(4-메톡시페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)프로피온아미드

LCMS RT= 5.89분, **MH⁺** 297.1; **¹H NMR (DMSO)**: 10.02 (1H, s), 8.15-8.10 (3H, m), 7.67 (1H, d, *J* 8.7 Hz), 7.49 (1H, dd, *J* 8.8 1.8 Hz), 7.16 (2H, d, *J* 8.8 Hz), 3.88 (3H, s), 2.36 (2H, q, *J* 7.7 Hz), 1.11 (3H, t, *J* 7.5 Hz)

[0878]

[0879] N-(2-(4-메톡시페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)부티르아미드

LCMS RT= 6.19분, **MH⁺** 311.1; **¹H NMR (DMSO)**: 10.02 (1H, s), 8.13 (2H, d, *J* 9.0 Hz), 8.10 (1H, d, *J* 1.9 Hz), 7.66 (1H, d, *J* 8.9 Hz), 7.49 (1H, dd, *J* 8.8 1.8 Hz), 7.16 (2H, d, *J* 9.0 Hz), 3.87 (3H, s), 2.32 (2H, t, *J* 7.3 Hz), 1.70-1.58 (2H, m), 0.94 (3H, t, *J* 7.5 Hz)

[0880]

[0881] N-(2-(4-메톡시페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)펜탄아미드

LCMS RT= 6.59분, **MH⁺** 325.1; **¹H NMR (DMSO)**: 10.02 (1H, s), 8.13 (2H, d, *J* 9.0 Hz), 8.10 (1H, d, *J* 1.9 Hz), 7.66 (1H, d, *J* 8.9 Hz), 7.49 (1H, dd, *J* 8.8 1.8 Hz), 7.16 (2H, d, *J* 9.0 Hz), 3.87 (3H, s), 2.34 (2H, t, *J* 7.3 Hz), 1.66-1.56 (2H, m), 1.41-1.29 (2H, m), 0.92 (3H, t, *J* 7.5 Hz)

[0882]

[0883] N-(2-(4-메톡시페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드

LCMS RT= 6.19분, **MH⁺** 311.1; **¹H NMR (DMSO)**: 9.98 (1H, s), 8.15-8.11 (3H, m), 7.66 (1H, d, *J* 8.9 Hz), 7.51 (1H, dd, *J* 8.8 1.8 Hz), 7.16 (2H, d, *J* 9.0 Hz), 3.88 (3H, s), 1.13 (6H, d, *J* 6.9 Hz)

[0884]

[0885] N-(2-(4-메톡시페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)푸란-2-카르복스아미드

LCMS RT= 6.16분, **MH⁺** 335.1; **¹H NMR (DMSO)**: 10.36 (1H, s), 8.20-8.13 (3H, m), 7.96 (1H, dd, *J* 1.8 0.8 Hz), 7.72 (2H, d, *J* 1.2 Hz), 7.36 (1H, dd, *J* 3.5 0.8 Hz), 7.17 (2H, d, *J* 9.0 Hz), 6.73 (1H, dd, *J* 3.5 1.7 Hz), 3.88 (3H, s)

[0886]

[0887] N-(2-(4-메톡시페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)티오펜-2-카르복스아미드

LCMS RT= 6.54분, **MH⁺** 351.0; **¹H NMR (DMSO)**: 10.38 (1H, s), 8.19-8.14 (3H, m), 8.05 (1H, dd, *J* 3.7 1.0 Hz), 7.88 (1H, dd, *J* 4.1 1.0 Hz), 7.74 (1H, d, *J* 8.8 Hz), 7.67 (1H, dd, *J* 8.8 2.0 Hz), 7.27-7.23 (1H, m), 7.17 (2H, d, *J* 8.9 Hz), 3.88 (3H, s)

[0888]

[0889] N-(2-*m*-톨릴벤조[d]옥사졸-5-일)부티르아미드

LCMS RT= 6.67분, **MH⁺** 295.0;

[0890]

[0891] N-(2-(3-(디메틸아미노)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)부티르아미드

LCMS RT= 6.62분, **MH⁺** 324.1; **¹H NMR (DMSO):** 10.06 (1H, s), 8.13 (1H, d, *J* 1.8 Hz), 7.70 (1H, d, *J* 8.8 Hz), 7.53 (1H, dd, *J* 8.8 2.0 Hz), 7.49-7.37 (3H, m), 7.00-6.96 (1H, m), 3.00 (6H, s), 2.32 (2H, t, *J* 7.6 Hz), 1.71-1.55 (2H, m), 0.94 (3H, t, *J* 7.4 Hz)

[0892]

[0893] N-(2-m-톨릴벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드

LCMS RT= 6.64분, **MH⁺** 295.0; **¹H NMR (DMSO):** 10.02 (1H, s), 8.17 (1H, d, *J* 1.9 Hz), 8.03-7.98 (2H, m), 7.71 (1H, d, *J* 8.8 Hz), 7.56-7.44 (3H, m), 2.60-2.58 (1H, m), 2.44 (3H, s), 1.14 (6H, d, *J* 6.8 Hz)

[0894]

[0895] N-(2-(3-(트리플루오로메틸)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드

LCMS RT= 6.88분, **MH⁺** 349.0; **¹H NMR (DMSO):** 10.06 (1H, s), 8.51-8.43 (2H, m), 8.23 (1H, s), 8.03 (1H, d, *J* 7.4 Hz), 7.91-7.85 (1H, m), 7.77 (1H, d, *J* 8.5 Hz), 7.62-7.57 (1H, m), 2.63 (1H, t, *J* 6.8 Hz), 1.14 (6H, d, *J* 6.8 Hz)

[0896]

[0897] N-(2-(3-(디메틸아미노)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드

LCMS RT= 6.59분, **MH⁺** 324.1; **¹H NMR (DMSO):** 10.01 (1H, s), 8.15 (1H, d, *J* 1.8 Hz), 7.70 (1H, d, *J* 8.8 Hz), 7.55 (1H, dd, *J* 8.8 2.0 Hz), 7.49-7.37 (3H, m), 7.00-6.96 (1H, m), 3.01 (6H, s), 2.65-2.58 (1H, m), 1.13 (6H, d, *J* 7.0 Hz)

[0898]

[0899] N-(2-(3-(트리플루오로메틸)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)부티르아미드

LCMS RT= 6.85분, **MH⁺** 349.0; **¹H NMR (DMSO):** 10.08 (1H, s), 8.48 (1H, d, *J* 7.8 Hz), 8.43 (1H, s), 8.21 (1H, d, *J* 1.9 Hz), 8.02 (1H, d, *J* 8.0 Hz), 7.88 (1H, d, *J* 7.7 Hz), 7.76 (1H, d, *J* 8.8 Hz), 7.58 (1H, dd, *J* 8.8 2.0 Hz), 2.33 (2H, t, *J* 7.4 Hz), 1.71-1.59 (2H, m), 0.95 (3H, t, *J* 7.4 Hz)

[0900]

[0901] N-(2-o-톨릴벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드

LCMS RT= 6.62분, **MH⁺** 295.1; **¹H NMR (DMSO):** 10.00 (1H, s), 8.19 (1H, d, *J* 1.9 Hz), 8.12 (1H, dd, *J* 7.4 1.5 Hz), 7.71 (1H, d, *J* 8.8 Hz), 7.57-7.40 (4H, m), 2.75 (3H, s), 2.65-2.59 (1H, m), 1.14 (6H, d, *J* 6.7 Hz)

[0902]

[0903] N-(2-(2-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)부티르아미드

LCMS RT= 6.42분, **MH⁺** 315.0; **¹H NMR (DMSO):** 10.08 (1H, s), 8.22 (1H, d, *J* 1.8 Hz), 8.15 (1H, dd, *J* 7.6 1.8 Hz), 7.76-7.55 (5H, m), 2.34 (2H, t, *J* 7.4 Hz), 1.71-1.59 (2H, m), 0.95 (3H, t, *J* 7.4 Hz)

[0904]

[0905] N-(2-(2-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드

LCMS RT= 6.41분, **MH⁺** 315.0; **¹H NMR (DMSO):** 10.03 (1H, s), 8.23 (1H, d, *J* 1.8 Hz), 8.15 (1H, dd, *J* 7.6 1.7 Hz), 7.71-7.55 (5H, m), 2.68-2.58 (1H, m), 1.14 (6H, d, *J* 6.7 Hz)

[0906]

[0907] N-(2-(3-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드

LCMS RT= 6.89분, **MH⁺** 315.0; **¹H NMR (DMSO):** 10.05 (1H, s), 8.21-8.15 (3H, m), 7.75-7.63 (3H, m), 7.57 (1H, d, *J* 8.8 2.0 Hz), 2.62-2.58 (1H, m), 1.14 (6H, d, *J* 6.8 Hz)

[0908]

[0909] N-(2-(3-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)부티르아미드

LCMS RT= 6.89분, **MH⁺** 315.1; **¹H NMR (DMSO):** 10.07 (1H, s), 8.19-8.11 (3H, m), 7.75-7.63 (3H, m), 7.56 (1H, d, *J* 8.8 2.0 Hz), 2.33 (2H, t, *J* 7.4 Hz), 1.71-1.59 (2H, m), 0.94 (3H, t, *J* 7.4 Hz)

[0910]

[0911] 방법 3C (화합물 II)

- [0912] 용매 및 염기로서 디클로로메탄 중 디이소프로필아민 대신 피리딘을 사용하였다는 점을 제외하고는 방법 3A와 같다.
- [0913] N-(2-페닐옥사졸로[5,4-b]피리딘-6-일)부티르아미드
- LCMS RT= 5.95분, MH⁺ 282.0; ¹H NMR (DMSO):** 10.31 (1H, s), 8.54 (1H, d, *J* 2.3 Hz), 8.48 (1H, d, *J* 2.3 Hz), 8.24-8.21 (2H, m), 7.72-7.62 (3H, m), 2.37 (2H, t, *J* 7.3 Hz), 1.72-1.60 (2H, m), 0.95 (3H, t, *J* 7.5 Hz)
- [0914]
- [0915] N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)프로피온아미드
- LCMS RT= 6.54분, MH⁺ 301.0; ¹H NMR (DMSO):** 10.07 (1H, s), 8.21-8.18 (3H, m), 7.73-7.67 (3H, m), 7.53 (1H, dd, *J* 8.8 2.0 Hz), 2.36 (2H, q, *J* 7.6 Hz), 1.12 (3H, t, *J* 7.5 Hz)
- [0916]
- [0917] N-(2-p-톨릴벤조[d]옥사졸-5-일)피발아미드
- LCMS RT= 6.94분, MH⁺ 309.1; ¹H NMR (DMSO):** 9.36 (1H, s), 8.13 (1H, d, *J* 1.8 Hz), 8.09 (2H, d, *J* 8.2 Hz), 7.69 (1H, d, *J* 8.8 Hz), 7.61 (1H, dd, *J* 8.8 2.0 Hz), 7.43 (2H, d, *J* 8.0 Hz), 2.42 (3H, s), 1.26 (9H, s)
- [0918]
- [0919] N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)피발아미드
- LCMS RT= 7.28분, MH⁺ 329.1; ¹H NMR (DMSO):** 9.39 (1H, s), 8.20 (2H, d, *J* 8.6 Hz), 8.17 (1H, d, *J* 1.7 Hz), 7.74-7.62 (4H, m), 1.26 (9H, s)
- [0920]
- [0921] N-(2-벤질벤조[d]옥사졸-5-일)부티르아미드
- LCMS RT= 5.98분, MH⁺ 295.1; ¹H NMR (DMSO):** 9.97 (1H, s), 8.03 (1H, d, *J* 1.8 Hz), 7.56 (1H, d, *J* 8.7 Hz), 7.44 (1H, dd, *J* 8.9 2.1 Hz), 7.38-7.35 (4H, m), 7.33-7.25 (1H, m), 4.31 (2H, s), 2.28 (2H, t, *J* 7.3 Hz), 1.69-1.53 (2H, m), 0.92 (3H, t, *J* 7.5 Hz)
- [0922]
- [0923] N-(2-벤질벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드
- LCMS RT= 5.96분, MH⁺ 295.1; ¹H NMR (DMSO):** 9.93 (1H, s), 8.04 (1H, d, *J* 2.1 Hz), 7.56 (1H, d, *J* 8.9 Hz), 7.47 (1H, dd, *J* 9.0 2.0 Hz), 7.38-7.35 (4H, m), 7.33-7.28 (1H, m), 4.31 (2H, s), 2.60-2.58 (1H, m), 1.11 (6H, d, *J* 6.8 Hz)
- [0924]
- [0925] N-(2-p-톨릴벤조[d]옥사졸-4-일)부티르아미드
- LCMS RT= 7.54분, MH⁺ 295.1; ¹H NMR (DMSO):** 10.03 (1H, s), 8.13 (2H, d, *J* 8.2 Hz), 8.03 (1H, d, *J* 8.2 Hz), 7.48-7.44 (3H, m), 7.34 (1H, t, *J* 8.2 Hz), 2.43 (3H, s), 1.72-1.60 (2H, m), 1.09 (3H, t, *J* 6.9 Hz)
- [0926]
- [0927] N-(2-p-톨릴벤조[d]옥사졸-4-일)이소부티르아미드
- LCMS RT= 7.51분, MH⁺ 295.1; ¹H NMR (DMSO):** 9.78 (1H, s), 7.93 (2H, d, *J* 8.4 Hz), 7.83 (1H, d, *J* 8.2 Hz), 7.28-7.23 (3H, m), 7.14 (1H, t, *J* 8.4 Hz), 2.22 (3H, s), 0.94 (6H, d, *J* 6.8 Hz)
- [0928]
- [0929] N-(2-시클로헥실벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드
- LCMS RT= 6.48 분, MH⁺ 287.1; ¹H NMR (CDCl₃):** 7.82 (1H, d, *J* 1.7 Hz), 7.66-7.56 (1H, m), 7.46 (1H, d, *J* 8.8 Hz), 7.30-7.25 (1H, m), 3.07-2.97 (1H, m), 2.65-2.53 (1H, m), 2.26-2.16 (2H, m), 1.97-1.72 (5H, m), 1.56-1.37 (3H, m), 1.33 (6H, t, *J* 6.8 Hz)
- [0930]
- [0931] N-(2-시클로헥실벤조[d]옥사졸-5-일)부티르아미드
- LCMS RT= 6.51 분, MH⁺ 287.2; ¹H NMR (CDCl₃):** 7.69 (1H, s), 7.45 (1H, d, *J* 8.8 Hz), 7.33 (1H, d, *J* 8.8 Hz), 7.16 (1H, s), 2.93-2.83 (1H, m), 2.29 (2H, t, *J* 7.6 Hz), 2.11-2.06 (2H, m), 1.83-1.57 (6H, m), 1.43-1.18 (4H, m), 0.95 (3H, t, *J* 7.5 Hz)
- [0932]

- [0933] N-(2-(2,4-디클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드
- LCMS RT=** 7.17 분 , **MH⁺** 348.9; **¹H NMR (DMSO):** 10.11 (1H, s), 8.23 (1H, d, *J* 1.7 Hz), 8.19 (1H, d, *J* 8.8 Hz), 7.92 (1H, d, *J* 2.1 Hz), 7.75 (1H, d, *J* 9.0 Hz), 7.68 (1H, dd, *J* 8.5 2.1 Hz), 7.60 (1H, dd, *J* 8.7 2.0 Hz), 2.64 (1H, t, *J* 6.8 Hz), 1.14 (6H, d, *J* 6.8 Hz)
- [0934]
- [0935] N-(2-(4-플루오로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드
- LCMS RT=** 6.39 분 , **MH⁺** 299.0; **¹H NMR (DMSO):** 10.00 (1H, s), 8.27-8.23 (2H, m), 8.18-8.17 (1H, m), 7.70 (1H, d, *J* 8.6 Hz), 7.55 (1H, dd, *J* 8.7 2.0 Hz), 7.46 (2H, t, *J* 8.7 Hz), 2.64-2.59 (1H, m), 1.14 (6H, d, *J* 6.8 Hz)
- [0936]
- [0937] N-(2-(3,4-디클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드
- LCMS RT=** 7.55 분 , **MH⁺** 349.5; **¹H NMR (DMSO):** 10.03 (1H, s), 8.35 (1H, d, *J* 1.9 Hz), 8.21 (1H, d, *J* 1.9 Hz), 8.15 (1H, d, *J* 8.4 2.0 Hz), 7.89 (1H, d, *J* 8.4 Hz), 7.74 (1H, d, *J* 8.9 Hz), 7.58 (1H, dd, *J* 8.9 2.0 Hz), 2.67-2.60 (1H, m), 1.14 (6H, d, *J* 6.8 Hz)
- [0938]
- [0939] N-(2-(5-클로로피리딘-2-일)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드
- LCMS RT=** 5.95 분 , **MH⁺** 316.0; **¹H NMR (DMSO):** 10.05 (1H, s), 8.86 (1H, d, *J* 2.1 Hz), 8.35 (1H, d, *J* 8.5 Hz), 8.25 (1H, d, *J* 1.7 Hz), 8.19 (1H, dd, *J* 8.5 2.4 Hz), 7.77 (1H, d, *J* 8.8 Hz), 7.60 (1H, dd, *J* 8.8 2.0 Hz), 2.65-2.61 (1H, m), 1.14 (6H, d, *J* 6.7 Hz)
- [0940]
- [0941] N-(2-(3,5-디클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드
- LCMS RT=** 7.83 분 , **MH⁺** 348.7; **¹H NMR (DMSO):** 10.05 (1H, s), 8.23 (1H, d, *J* 1.9 Hz), 8.15 (2H, d, *J* 2.0 Hz), 7.92 (1H, t, *J* 2.0 Hz), 7.75 (1H, d, *J* 8.8 Hz), 7.60 (1H, dd, *J* 8.9 2.0 Hz), 2.68-2.60 (1H, m), 1.14 (6H, d, *J* 6.8 Hz)
- [0942]
- [0943] N-(2-(2,3-디클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드
- LCMS RT=** 6.80 분 , **MH⁺** 348.9; **¹H NMR (DMSO):** 10.04 (1H, s), 8.24 (1H, d, *J* 1.8 Hz), 8.11 (1H, dd, *J* 7.9 1.6 Hz), 7.93 (1H, dd, *J* 8.1 1.6 Hz), 7.76 (1H, d, *J* 8.8 Hz), 7.63-7.59 (2H, m), 2.70-2.58 (1H, m), 1.14 (6H, d, *J* 6.8 Hz)
- [0944]
- [0945] N-(2-페네틸벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드
- LCMS RT=** 6.22 분 , **MH⁺** 309.1; **¹H NMR (DMSO):** 9.92 (1H, s), 8.03 (1H, d, *J* 1.8 Hz), 7.57 (1H, d, *J* 8.8 Hz), 7.46 (1H, dd, *J* 8.7 2.0 Hz), 7.29-7.27 (4H, m), 7.23-7.16 (1H, m), 3.21-3.10 (4H, m), 1.12 (6H, d, *J* 6.7 Hz)
- [0946]
- [0947] N-(2-(1-페닐에틸)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드
- LCMS RT=** 6.23 분 , **MH⁺** 309.1; **¹H NMR (DMSO):** 9.93 (1H, s), 8.06 (1H, d, *J* 1.9 Hz), 7.54 (1H, d, *J* 8.8 Hz), 7.47 (1H, dd, *J* 8.8 2.1 Hz), 7.36-7.32 (4H, m), 7.30-7.24 (1H, m), 4.51 (1H, q, *J* 7.1 Hz), 2.65-2.57 (1H, m), 1.71 (3H, d, *J* 7.2 Hz), 1.12 (6H, d, *J* 6.8 Hz)
- [0948]
- [0949] N-(2-(2,5-디클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드
- LCMS RT=** 7.10 분 , **MH⁺** 349.0; **¹H NMR (DMSO):** 10.11 (1H, s), 8.31 (1H, d, *J* 1.8 Hz), 8.25 (1H, dd, *J* 2.4 0.5 Hz), 7.83 (2H, d, *J* 8.7 Hz), 7.80 (1H, dd, *J* 8.7 2.5 Hz), 7.67 (1H, dd, *J* 8.9 2.0 Hz), 2.74-2.64 (1H, m), 1.20 (6H, d, *J* 6.8 Hz)
- [0950]
- [0951] N-(2-(2-클로로-4-플루오로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드
- LCMS RT=** 6.59 분 , **MH⁺** 333.0; **¹H NMR (DMSO):** 10.05 (1H, s), 8.30-8.20 (2H, m), 7.77-7.73 (2H, m), 7.59 (1H, dd, *J* 8.8 2.0 Hz), 7.51-7.45 (1H, m), 2.68-2.57 (1H, m), 1.14 (6H, d, *J* 6.8 Hz)
- [0952]

- [0953] N-(2-(2-클로로-6-플루오로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드
- LCMS RT=** 6.29 분 , **MH⁺** 333.1; **¹H NMR (DMSO):** 10.08 (1H, s), 8.26 (1H, d, *J* 1.9 Hz), 7.80-7.71 (2H, m), 7.64-7.60 (2H, m), 7.57-7.50 (1H, m), 2.68-2.58 (1H, m), 1.14 (6H, d, *J* 6.9 Hz)
- [0954]
- [0955] N-(2-(3-클로로-2-플루오로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드
- LCMS RT=** 6.65 분 , **MH⁺** 333.1; **¹H NMR (DMSO):** 10.06 (1H, s), 8.31-8.16 (2H, m), 7.88 (1H, dt, *J* 8.4 1.7 Hz), 7.77 (1H, d, *J* 8.8 Hz), 7.60 (1H, dd, *J* 8.9 2.0 Hz), 7.47 (1H, dt, *J* 8.0 1.0 Hz), 2.66-2.60 (1H, m), 1.14 (6H, d, *J* 6.7 Hz)
- [0956]
- [0957] N-(2-(4-클로로-2-플루오로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드
- LCMS RT=** 6.69 분 , **MH⁺** 333.1; **¹H NMR (DMSO):** 10.05 (1H, s), 8.28-8.21 (2H, m), 7.79-7.73 (2H, m), 7.60-7.53 (2H, m), 2.67-2.58 (1H, m), 1.14 (6H, d, *J* 6.7 Hz)
- [0958]
- [0959] N-(2-(2-클로로-5-플루오로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드
- LCMS RT=** 6.54 분 , **MH⁺** 333.1; **¹H NMR (DMSO):** 10.07 (1H, s), 8.25 (1H, d, *J* 1.9 Hz), 7.99 (1H, dd, *J* 9.2 3.2 Hz), 7.80-7.75 (2H, m), 7.63-7.52 (2H, m), 2.68-2.59 (1H, m), 1.14 (6H, d, *J* 6.7 Hz)
- [0960]
- [0961] N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)시클로펜탄카르복스아미드
- LCMS RT=** 7.52 분 , **MH⁺** 341.0; **¹H NMR (DMSO):** 10.08 (1H, s), 8.20-8.16 (3H, m), 7.73-7.66 (3H, m), 7.55 (1H, dd, *J* 8.8 2.0 Hz), 2.85-2.75 (1H, m), 1.93-1.57 (8H, m)
- [0962]
- [0963] N-(5-클로로-2-(4-클로로펜틸)벤조[d]옥사졸-6-일)이소부티르아미드
- LCMS RT=** 8.10 분 ; **¹H NMR (DMSO):** 9.59 (1H, s), 8.20 (2H, d, *J* 8.8 Hz), 8.12 (1H, s), 8.02 (1H, s), 7.71 (2H, d, *J* 8.6 Hz), 2.84-2.73 (1H, m), 1.16 (6H, d, *J* 6.8 Hz)
- [0964]
- [0965] N-(2-(테트라히드로-2H-피란-4-일)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드
- LCMS RT=** 5.38 분 , **MH⁺** 289.0; **¹H NMR (DMSO):** 9.95 (1H, s), 8.04 (1H, d, *J* 1.9 Hz), 7.59 (1H, d, *J* 8.8 Hz), 7.48 (1H, dd, *J* 8.8 2.0 Hz), 3.95-3.88 (2H, m), 3.47-3.43 (3H, m), 2.64-2.55 (1H, m), 2.06-1.99 (2H, m), 1.89-1.75 (2H, m), 1.12 (6H, d, *J* 6.8 Hz)
- [0966]
- [0967] N-(2-(3,4-디클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)시클로프로판카르복스아미드
- LCMS RT=** 6.99 분 , **MH⁺** 348.8; **¹H NMR (DMSO):** 10.45 (1H, s), 8.30 (1H, dd, *J* 2.0 Hz), 8.15 (1H, d, *J* 1.9 Hz), 8.10 (1H, dd, *J* 8.4 2.0 Hz), 7.86 (1H, d, *J* 8.4 Hz), 7.71 (1H, d, *J* 8.9 Hz), 7.53 (1H, dd, *J* 8.9 2.0 Hz), 1.81-1.74 (1H, m), 0.82-0.76 (4H, m)
- [0968]
- [0969] N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-6-일)시클로프로판카르복스아미드
- LCMS RT=** 6.93 분 , **MH⁺** 312.9; **¹H NMR (DMSO):** 10.53 (1H, s), 8.27 (1H, dd, *J* 1.7 Hz), 8.18 (2H, d, *J* 8.7 Hz), 7.74 (1H, d, *J* 8.7 Hz), 7.68 (2H, d, *J* 8.7 Hz), 7.44 (1H, dd, *J* 8.7 1.9 Hz), 1.86-1.78 (1H, m), 0.85-0.80 (4H, m)
- [0970]
- [0971] N-(2-(2,3-디클로로페닐)벤조[d]옥사졸-6-일)이소부티르아미드
- LCMS RT=** 7.05 분 ; **¹H NMR (DMSO):** 10.21 (1H, s), 8.34 (1H, d, *J* 1.8 Hz), 8.11 (1H, dd, *J* 7.9 1.6 Hz), 7.92 (1H, dd, *J* 8.1 1.5 Hz), 7.81 (1H, d, *J* 8.7 Hz), 7.60 (1H, t, *J* 8.0 Hz), 7.48 (1H, dd, *J* 8.7 1.9 Hz), 2.67-2.61 (1H, m), 1.14 (6H, d, *J* 6.8 Hz)
- [0972]
- [0973] N-(2-(4-(트리플루오로메톡시)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드
- LCMS RT=** 7.04 분 ; **¹H NMR (DMSO):** 10.05 (1H, s), 8.32 (2H, d, *J* 9.0 Hz), 8.20 (1H, d, *J* 1.9 Hz), 7.74 (1H, d, *J* 8.9 Hz), 7.63-7.55 (3H, m), 2.68-2.57 (1H, m), 1.14 (6H, d, *J* 6.8 Hz)
- [0974]

- [0975] N-(2-시클로헥틸벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드
- LCMS RT=** 5.23 분, **MH⁺** 273.0; **¹H NMR (DMSO):** 9.93 (1H, s), 8.01 (1H, d, *J* 1.8 Hz), 7.57 (1H, d, *J* 8.7 Hz), 7.46 (1H, dd, *J* 8.8 1.8 Hz), 3.42-3.39 (1H, m), 2.61-2.57 (1H, m), 2.15-2.04 (2H, m), 1.95-1.87 (2H, m), 1.78-1.62 (4H, m), 1.12 (6H, d, *J* 6.8 Hz)
- [0976]
- [0977] N-(4-(5-아세트아미도벤조[d]옥사졸-2-일)페닐)아세트아미드
- LCMS RT=** 5.08 분, **MH⁺** 309.9; **¹H NMR (DMSO):** 10.31 (1H, s), 10.11 (1H, s), 8.13-8.08 (3H, m), 7.82 (2H, d, *J* 8.7 Hz), 7.68 (1H, d, *J* 8.7 Hz), 7.48 (1H, dd, *J* 8.8 2.0 Hz), 2.11 (3H, s), 2.08 (3H, s)
- [0978]
- [0979] N-(2-(2-클로로-3-(트리플루오로메틸)페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드
- LCMS RT=** 6.78분, **MH⁺** 383.0; **¹H NMR (DMSO):** 10.07 (1H, s), 8.40 (1H, dd, *J* 8.1 1.3 Hz), 8.27 (1H, d, *J* 1.8 Hz), 8.14 (1H, dd, *J* 7.9 1.3 Hz), 7.82-7.77 (2H, m), 7.62 (1H, dd, *J* 8.8 2.1 Hz), 2.66-2.61 (1H, m), 1.14 (6H, d, *J* 6.8 Hz)
- [0980]
- [0981] N-(2-(3,4-디클로로페닐)벤조[d]옥사졸-6-일)이소부티르아미드
- LCMS RT=** 7.82분, **MH⁺** 349.1; **¹H NMR (DMSO):** 10.20 (1H, s), 8.33 (1H, d, *J* 2.0 Hz), 8.31 (1H, d, *J* 1.7 Hz), 8.14 (1H, dd, *J* 8.4 2.0 Hz), 7.88 (1H, d, *J* 8.5 Hz), 7.75 (1H, d, *J* 8.8 Hz), 7.48 (1H, dd, *J* 8.7 1.9 Hz), 2.68-2.60 (1H, m), 1.14 (6H, d, *J* 6.8 Hz)
- [0982]
- [0983] N-(2-(나프탈렌-2-일)벤조[d]옥사졸-5-일)아세트아미드
- LCMS RT=** 6.45분, **MH⁺** 303.1; **¹H NMR (DMSO):** 10.15 (1H, s), 8.84 (1H, s), 8.27 (1H, dd, *J* 8.6 1.7 Hz), 8.20-8.13 (3H, m), 8.06-8.03 (1H, m), 7.76 (1H, d, *J* 8.6 Hz), 7.71-7.63 (2H, m), 7.54 (1H, dd, *J* 8.8 2.1 Hz), 2.17 (3H, s)
- [0984]
- [0985] N-(2-(4-아세트아미도페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드
- LCMS RT=** 5.52분, **MH⁺** 338.0; **¹H NMR (DMSO):** 10.46 (1H, s), 10.31 (1H, s), 8.15-8.11 (3H, m), 7.82 (2H, d, *J* 8.7 Hz), 7.67 (1H, d, *J* 8.7 Hz), 7.52 (1H, dd, *J* 8.8 1.9 Hz), 2.67-2.58 (1H, m), 2.11 (3H, s), 1.13 (6H, d, *J* 6.9 Hz)
- [0986]
- [0987] N-(2-(나프탈렌-2-일)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드
- LCMS RT=** 7.10분, **MH⁺** 331.1; **¹H NMR (DMSO):** 10.04 (1H, s), 8.84 (1H, s), 8.28-8.12 (4H, m), 8.07-8.03 (1H, m), 7.76 (1H, d, *J* 8.9 Hz), 7.77-7.62 (2H, m), 7.58 (1H, dd, *J* 8.8 2.1 Hz), 2.64 (1H, t, *J* 7.4 Hz), 1.15 (6H, d, *J* 6.9 Hz)
- [0988]
- [0989] N-(2-(나프탈렌-2-일)벤조[d]옥사졸-5-일)티오펜-2-카르복스아미드
- LCMS RT=** 7.47분, **MH⁺** 370.8; **¹H NMR (DMSO):** 10.44 (1H, s), 8.86 (1H, s), 8.30-8.14 (4H, m), 8.08-8.04 (2H, m), 7.89 (1H, dd, *J* 5.0 1.0 Hz), 7.83 (1H, d, *J* 8.8 Hz), 7.76-7.64 (3H, m), 7.28-7.25 (1H, m)
- [0990]
- [0991] N-(2-(나프탈렌-1-일)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드
- LCMS RT=** 7.25분, **MH⁺** 331.2; **¹H NMR (DMSO):** 10.07 (1H, s), 9.42 (1H, dd, *J* 8.2 0.7 Hz), 8.45 (1H, dd, *J* 7.4 1.2 Hz), 8.29 (1H, d, *J* 1.9 Hz), 8.26-8.21 (1H, m), 8.13-8.09 (1H, m), 7.81-7.66 (4H, m), 7.61 (1H, dd, *J* 8.8 2.1 Hz), 2.70-2.61 (1H, m), 1.16 (6H, d, *J* 6.8 Hz)
- [0992]

- [0993] N-(2-(비페닐-4-일)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드
- LCMS RT=** 7.56분, **MH⁺** 357.3; **¹H NMR (DMSO):** 10.03 (1H, s), 8.28 (2H, d, *J* 8.5 Hz), 8.20 (1H, d, *J* 2.0 Hz), 7.94 (2H, d, *J* 8.6 Hz), 7.82-7.78 (2H, m), 7.74 (1H, d, *J* 8.8 Hz), 7.58-7.41 (4H, m), 2.68-2.59 (1H, m), 1.15 (6H, d, *J* 6.8 Hz)
- [0994]
- [0995] N-(2-(6-메톡시나프탈렌-2-일)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드
- LCMS RT=** 7.02분, **MH⁺** 361.2; **¹H NMR (DMSO):** 10.03 (1H, s), 8.75 (1H, d, *J* 0.8 Hz), 8.21 (2H, dd, *J* 8.9 1.6 Hz), 8.10 (1H, d, *J* 9.0 Hz), 8.02 (1H, d, *J* 8.7 Hz), 7.73 (1H, d, *J* 8.7 Hz), 7.56 (1H, dd, *J* 8.8 2.0 Hz), 7.46 (1H, d, *J* 2.3 Hz), 7.29 (1H, dd, *J* 8.8 2.5 Hz), 3.93 (3H, s), 2.68-2.58 (1H, m), 1.15 (6H, d, *J* 6.8 Hz)
- [0996]
- [0997] N-(2-(6-브로모나프탈렌-2-일)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드
- LCMS RT=** 8.13분, **MH⁺** 411.1; **¹H NMR (DMSO):** 10.06 (1H, s), 8.86 (1H, s), 8.36 (1H, d, *J* 1.7 Hz), 8.31 (1H, d, *J* 8.7 1.7 Hz), 8.23 (1H, d, *J* 1.9 Hz), 8.18 (1H, d, *J* 8.9 Hz), 8.13 (1H, d, *J* 8.7 Hz), 7.80-7.74 (2H, m), 7.58 (1H, dd, *J* 8.9 2.2 Hz), 2.68-2.59 (1H, m), 1.15 (6H, d, *J* 6.8 Hz)
- [0998]
- [0999] N-(2-(퀴놀린-3-일)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드
- LCMS RT=** 6.24분, **MH⁺** 332.2; **¹H NMR (DMSO):** 10.08 (1H, s), 9.62 (1H, d, *J* 2.1 Hz), 9.22 (1H, d, *J* 1.9 Hz), 8.29-8.24 (2H, m), 8.15 (1H, d, *J* 8.6 Hz), 7.95-7.90 (1H, m), 7.80-7.73 (2H, m), 7.61 (1H, dd, *J* 8.8 2.2 Hz), 2.69-2.60 (1H, m), 1.15 (6H, d, *J* 6.9 Hz)
- [1000]
- [1001] N-(2-(퀴놀린-2-일)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드
- LCMS RT=** 6.28분, **MH⁺** 332.2; **¹H NMR (DMSO):** 10.09 (1H, s), 8.64 (1H, d, *J* 8.4 Hz), 8.45 (1H, d, *J* 8.5 Hz), 8.32 (1H, d, *J* 1.8 Hz), 8.22 (1H, d, *J* 8.7 Hz), 8.13 (1H, dd, *J* 8.5 0.9 Hz), 7.94-7.84 (2H, m), 7.78-7.73 (1H, m), 7.63 (1H, dd, *J* 8.8 2.0 Hz), 2.69-2.60 (1H, m), 1.15 (6H, d, *J* 6.8 Hz)
- [1002]
- [1003] N-(2-(4-시클로헥실페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드
- LCMS RT=** 8.87분, **MH⁺** 363.3; **¹H NMR (DMSO):** 10.00 (1H, s), 8.15 (1H, d, *J* 1.9 Hz), 8.11 (2H, d, *J* 8.4 Hz), 7.69 (1H, d, *J* 8.7 Hz), 7.53 (1H, dd, *J* 8.8 2.1 Hz), 7.47 (2H, d, *J* 8.3 Hz), 2.67-2.58 (2H, m), 1.84-1.71 (5H, m), 1.52-1.23 (5H, m), 1.13 (6H, d, *J* 6.8 Hz)
- [1004]
- [1005] N-(2-(벤조[d][1,3]디옥솔-5-일)-5-클로로벤조[d]옥사졸-6-일)이소부티르아미드
- ¹H NMR (DMSO):** 9.56 (1H, s), 8.05 (1H, s), 7.94 (1H, s), 7.77 (1H, dd, *J* 8.1 1.7 Hz), 7.64 (1H, d, *J* 1.6 Hz), 7.16 (1H, d, *J* 8.2 Hz), 6.19 (2H, s), 2.83-2.72 (1H, m), 1.15 (6H, d, *J* 6.8 Hz)
- [1006]
- [1007] N-(2-(푸란-2-일)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드
- LCMS RT=** 5.75분, **MH⁺** 271.1; **¹H NMR (DMSO):** 9.95 (1H, s), 8.08 (1H, d, *J* 1.8 Hz), 8.01 (1H, dd, *J* 1.7 0.7 Hz), 7.62 (1H, d, *J* 8.9 Hz), 7.47 (1H, dd, *J* 8.9 2.0 Hz), 7.39 (1H, dd, *J* 3.5 0.7 Hz), 6.75 (1H, dd, *J* 3.5 1.8 Hz), 2.60-2.50 (1H, m), 1.07 (6H, d, *J* 6.8 Hz)
- [1008]
- [1009] N-(4-(나프토[1,2-d]옥사졸-2-일)페닐)이소부티르아미드
- LCMS RT=** 7.49분, **MH⁺** 331.1; **¹H NMR (DMSO):** 10.22 (1H, s), 8.45 (1H, d, *J* 8.1 Hz), 8.22 (2H, d, *J* 8.7 Hz), 8.13 (1H, d, *J* 8.5 Hz), 7.98 (2H, s), 7.89 (2H, d, *J* 8.9 Hz), 7.77-7.70 (1H, m), 7.65-7.59 (1H, m), 2.69-2.60 (1H, m), 1.14 (6H, d, *J* 6.7 Hz)
- [1010]

- [1011] N-(4-(벤조[d]옥사졸-2-일)페닐)이소부티르아미드
- LCMS RT=** 6.48분, **MH⁺** 281.1; **¹H NMR (DMSO):** 10.23 (1H, s), 8.14 (2H, d, *J* 8.9 Hz), 7.86 (2H, d, *J* 8.8 Hz), 7.79-7.75 (2H, m), 7.42-7.38 (2H, m), 2.70-2.60 (1H, m), 1.13 (6H, d, *J* 6.8 Hz)
- [1012]
- [1013] 방법 3D (화합물 II)
- [1014] 디클로로메탄 중 디이소프로필에틸아민 대신 디클로로메탄 중 피리딘을 사용하였다는 점을 제외하고는 방법 3A와 같다.
- [1015] N-(2-(2-플루오로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)부티르아미드
- LCMS RT=** 6.10분, **MH⁺** 299.0; **¹H NMR (DMSO):** 10.07 (1H, s), 8.25-8.19 (2H, m), 7.75 (1H, d, *J* 8.8 Hz), 7.72-7.66 (1H, m), 7.58-7.42 (3H, m), 2.33 (2H, t, *J* 7.5 Hz), 1.71-1.59 (2H, m), 0.94 (3H, t, *J* 7.4 Hz)
- [1016]
- [1017] N-(2-(2-플루오로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드
- LCMS RT=** 6.09분, **MH⁺** 299.0; **¹H NMR (DMSO):** 10.09 (1H, s), 8.31-8.25 (2H, m), 7.81 (1H, d, *J* 8.8 Hz), 7.78-7.72 (1H, m), 7.64 (1H, d, *J* 8.7 1.8 Hz), 7.58-7.48 (2H, m), 2.74-2.65 (1H, m), 1.20 (6H, d, *J* 6.8 Hz)
- [1018]
- [1019] N-(2-(3-플루오로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)부티르아미드
- LCMS RT=** 6.39분, **MH⁺** 299.0; **¹H NMR (DMSO):** 10.12 (1H, s), 8.24 (1H, d, *J* 1.9 Hz), 8.12-8.08 (1H, m), 8.02-7.97 (1H, m), 7.79 (1H, d, *J* 8.8 Hz), 7.75-7.70 (1H, m), 7.63-7.53 (2H, m), 2.38 (2H, t, *J* 7.4 Hz), 1.77-1.64 (2H, m), 1.00 (3H, t, *J* 7.4 Hz)
- [1020]
- [1021] N-(2-(3-플루오로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드
- LCMS RT=** 6.37분, **MH⁺** 299.0; **¹H NMR (DMSO):** 10.08 (1H, s), 8.26 (1H, d, *J* 1.9 Hz), 8.12-8.08 (1H, m), 8.02-7.97 (1H, m), 7.79 (1H, d, *J* 9.0 Hz), 7.75-7.69 (1H, m), 7.63 (1H, dd, *J* 8.8 1.9 Hz), 7.59-7.52 (1H, m), 2.73-2.66 (1H, m), 1.19 (6H, d, *J* 6.9 Hz)
- [1022]
- [1023] N-(2-(벤조[d][1,3]디옥솔-5-일)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드
- LCMS RT=** 6.14분, **MH⁺** 324.9; **¹H NMR (DMSO):** 10.04 (1H, s), 8.18 (1H, d, *J* 1.8 Hz), 7.82 (1H, dd, *J* 8.2 1.8 Hz), 7.73-7.69 (2H, m), 7.58 (1H, dd, *J* 8.7 2.0 Hz), 7.20 (1H, d, *J* 8.2 Hz), 6.24 (2H, s), 2.72-2.65 (1H, m), 1.19 (6H, d, *J* 6.9 Hz)
- [1024]
- [1025] 에틸 2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일카르바메이트
- LCMS RT=** 7.14분, **MH⁺** 317.1; **¹H NMR (DMSO):** 9.80 (1H, s), 8.18 (2H, d, *J* 8.6 Hz), 7.96 (1H, d, *J* 1.7 Hz), 7.71-7.67 (3H, m), 7.45 (1H, dd, *J* 8.8 2.0 Hz), 4.16 (2H, q, *J* 7.2 Hz), 1.27 (3H, t, *J* 7.1 Hz)
- [1026]
- [1027] 방법 3E (화합물 II)
- [1028] DMAP의 박편을 반응물에 첨가하였다는 점을 제외하고는 방법 3C와 같다.
- [1029] N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-6-일)이소부티르아미드
- LCMS RT=** 7.07분, **MH⁺** 314.9; **¹H NMR (DMSO):** 10.15 (1H, s), 8.29 (1H, d, *J* 1.7 Hz), 8.18 (2H, d, *J* 8.8 Hz), 7.73 (1H, d, *J* 8.7 Hz), 7.68 (2H, d, *J* 8.7 Hz), 7.49 (1H, dd, *J* 8.7 1.9 Hz), 2.64 (1H, t, *J* 6.8 Hz), 1.14 (6H, d, *J* 6.8 Hz)
- [1030]

- [1031] N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-6-일)부티르아미드
- LCMS RT=** 7.07분, **MH⁺** 314.9; **¹H NMR (DMSO):** 10.20 (1H, s), 8.29 (1H, d, *J* 1.7 Hz), 8.18 (2H, d, *J* 8.8 Hz), 7.73 (1H, d, *J* 8.7 Hz), 7.68 (2H, d, *J* 8.7 Hz), 7.43 (1H, dd, *J* 8.7 1.9 Hz), 2.34 (2H, t, *J* 7.3 Hz), 1.71-1.59 (2H, m), 0.94 (3H, t, *J* 7.4 Hz)
- [1032]
- [1033] N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)시클로프로판카르복스아미드
- LCMS RT=** 6.69분, **MH⁺** 313.1; **¹H NMR (DMSO):** 10.39 (1H, s), 8.20-8.15 (3H, m), 7.74-7.68 (3H, m), 7.54 (1H, d, *J* 8.9 2.1 Hz), 1.84-1.76 (1H, m), 0.81-0.78 (4H, m)
- [1034]
- [1035] N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)시클로부탄카르복스아미드
- LCMS RT=** 7.07분, **MH⁺** 327.0; **¹H NMR (DMSO):** 9.91 (1H, s), 8.21-8.17 (3H, m), 7.73-7.67 (3H, m), 7.55 (1H, d, *J* 8.9 2.1 Hz), 2.33-1.81 (7H, m)
- [1036]
- [1037] 방법 3F (화합물 II)
- [1038] 4,4,4-트리플루오로-N-(2-p-톨릴벤조[d]옥사졸-5-일)부탄아미드
- [1039] 건조 디메틸포름아미드 (5 mL) 중 4,4,4-트리플루오로부탄산 (128 mg, 0.90 mmol)에 HATU (397 mg, 1.05 mmol) 및 다이소프로필에틸아민 (496 μ L, 2.85 mmol)을 첨가하였다. 이어서, 상기 혼합물을 실온에서 10분 동안 교반하였다. 이어서, 2-p-톨릴벤조[d]옥사졸-5-아민 (200 mg, 0.95 mmol)을 첨가하고, 생성된 혼합물을 실온에서 16시간 동안 교반하였다. 에틸 아세테이트를 첨가하고, 유기층을 포화 수성 Na₂CO₃으로 1회 세척하고, 이어서 염수로 또다른 세척을 하였다. 합한 유기층을 무수 MgSO₄ 상에서 건조시키고, 증발시켰다. 생성된 고체를 에틸 아세테이트/헥산 40:60 v/v로 용리하는 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 26.7 mg (8%)의 표제 화합물을 수득하였다.
- (LCMS RT=** 6.77분, **MH⁺** 348.9)
- ¹H NMR (DMSO):** 10.28 (1H, s), 8.12 (1H, d, *J* 1.9 Hz), 8.08 (2H, d, *J* 8.2 Hz), 7.72 (1H, d, *J* 8.8 Hz), 7.50 (1H, dd, *J* 8.8 2.1 Hz), 7.43 (2H, d, *J* 8.1 Hz), 2.67-2.56 (4H, m), 2.42 (3H, s)
- [1040]
- [1041] 하기 모든 화합물을 동일한 일반 방법에 따라 제조하였다.
- [1042] 3-메톡시-N-(2-p-톨릴벤조[d]옥사졸-5-일)프로판아미드
- LCMS RT=** 6.03분, **MH⁺** 311.0; **¹H NMR (DMSO):** 10.13 (1H, s), 8.14 (1H, d, *J* 2.2 Hz), 8.08 (2H, d, *J* 8.4 Hz), 7.70 (1H, d, *J* 8.9 Hz), 7.52 (1H, dd, *J* 8.9 2.0 Hz), 7.43 (2H, d, *J* 8.3 Hz), 3.65 (2H, t, *J* 6.2 Hz), 3.26 (3H, s), 2.61-2.56 (2H, m), 2.42 (3H, s)
- [1043]
- [1044] Tert-부틸-3-옥소-3-(2-페닐벤조[d]옥사졸-5-일아미노)프로필카르바메이트
- LCMS RT=** 6.22분, **MH⁺** 382.0; **¹H NMR (CDCl₃):** 8.19-8.14 (2H, m), 7.89 (2H, s), 7.50-7.42 (5H, m), 5.15-5.05 (1H, br), 3.49-3.43 (2H, m), 2.59 (2H, t, *J* 7.6 Hz), 1.38 (9H, s)
- [1045]
- [1046] 3,3,3-트리플루오로-N-(2-p-톨릴벤조[d]옥사졸-5-일)프로판아미드
- LCMS RT=** 14.01분, **MH⁺** 335.0; **¹H NMR (DMSO):** 10.48 (1H, s), 8.11-8.08 (3H, m), 7.75 (1H, d, *J* 9.0 Hz), 7.49 (1H, dd, *J* 8.7 2.1 Hz), 7.44 (2H, d, *J* 8.0 Hz), 3.55 (2H, q, *J* 10.9 Hz)
- [1047]
- [1048] N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)-3-메톡시프로판아미드
- LCMS RT=** 6.32분, **MH⁺** 331.1; **¹H NMR (DMSO):** 10.17 (1H, s), 8.22-8.17 (3H, m), 7.74-7.68 (3H, m), 7.54 (1H, dd, *J* 8.9 2.1 Hz), 3.65 (2H, t, *J* 6.1 Hz), 3.26 (3H, s), 2.59 (2H, t, *J* 6.1 Hz)
- [1049]

- [1050] N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)-3,3,3-트리플루오로프로판아미드
- LCMS RT=** 6.72분, **MH⁺** 354.7; **¹H NMR (DMSO):** 10.52 (1H, s), 8.21 (2H, d, *J* 8.7 Hz), 8.14 (1H, d, *J* 2.0 Hz), 7.78 (1H, d, *J* 8.7 Hz), 7.70 (2H, d, *J* 8.7 Hz), 7.52 (1H, dd, *J* 8.8 2.1 Hz), 3.56 (2H, q, *J* 11.1 Hz)
- [1051]
- [1052] N-(2-(3,4-디클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)-3,3,3-트리플루오로프로판아미드
- LCMS RT=** 7.41분, **MH⁺** 388.8; **¹H NMR (DMSO):** 10.54 (1H, s), 8.36 (1H, d, *J* 2.0 Hz), 8.17-8.14 (2H, m), 7.90 (1H, d, *J* 8.4 Hz), 7.80 (1H, d, *J* 8.8 Hz), 7.54 (1H, dd, *J* 8.9 2.1 Hz), 3.56 (2H, q, *J* 11.1 Hz)
- [1053]
- [1054] N-(2-(2,3-디클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)-3,3,3-트리플루오로프로판아미드
- LCMS RT=** 6.76분, **MH⁺** 388.9; **¹H NMR (DMSO):** 10.55 (1H, s), 8.20 (1H, d, *J* 1.9 Hz), 8.12 (1H, dd, *J* 7.9 1.6 Hz), 7.94 (1H, dd, *J* 8.1 1.6 Hz), 7.83 (1H, d, *J* 8.8 Hz), 7.64-7.55 (2H, m), 3.58 (2H, q, *J* 11.1 Hz)
- [1055]
- [1056] 하기 화합물을 적절한 Boc-아미노산을 사용하여 방법 3F로 수득하였다. 커플링하고, 이어서 실온에서 20분 동안 디옥산 중 4 M HCl을 사용하여 Boc기를 탈보호하였다.
- [1057] (S)-N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)피롤리딘-2-카르복스아미드
- LCMS RT=** 4.54분, **MH⁺** 342.0; **¹H NMR (DMSO):** 10.15 (1H, s), 8.23 (1H, d, *J* 1.7 Hz), 8.19 (2H, d, *J* 8.7 Hz), 7.74-7.63 (4H, m), 3.75-3.69 (1H, m), 2.91 (2H, t, *J* 6.5 Hz), 2.12-2.00 (1H, m), 1.90-1.60 (3H, m)
- [1058]
- [1059] (S)-N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)-2-(메틸아미노)프로판아미드
- LCMS RT=** 4.46분, **MH⁺** 330.1; **¹H NMR (DMSO):** 8.20-8.10 (3H, m), 7.67 (2H, d, *J* 8.8 Hz), 7.58-7.47 (2H, m), 3.00 (1H, q, *J* 6.8 Hz), 2.24 (3H, s), 1.16 (3H, d, *J* 6.8 Hz)
- [1060]
- [1061] 하기 화합물을 적절한 Fmoc-아미노산을 사용하여 방법 3F로 수득하였다. 커플링하고, 이어서 피페리딘/DMF 20:80 v/v를 사용하여 Fmoc기를 탈보호하였다.
- [1062] (S)-2-아미노-N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)프로판아미드
- LCMS RT=** 4.46분, **MH⁺** 316.1; **¹H NMR (CDCl₃):** 9.56 (1H, s), 8.11 (2H, d, *J* 8.7 Hz), 7.98 (1H, d, *J* 1.9 Hz), 7.55 (1H, dd, *J* 8.8 2.1 Hz), 7.46-7.41 (3H, m), 3.60 (1H, q, *J* 7.0 Hz), 1.41 (3H, d, *J* 7.0 Hz)
- [1063]
- [1064] 방법 3G (화합물 II)
- [1065] 산 클로라이드 대신 상응하는 무수물을 사용하였다는 점을 제외하고는 방법 3C와 같다.
- [1066] 2,2,2-트리플루오로-N-(2-p-톨릴벤조[d]옥사졸-5-일)아세트아미드
- LCMS RT=** 6.93분, **MH⁺** 321.0; **¹H NMR (DMSO):** 11.46 (1H, br), 8.22 (2H, d, *J* 8.6 Hz), 8.15 (1H, d, *J* 1.9 Hz), 7.85 (1H, d, *J* 8.8 Hz), 7.73-7.68 (3H, m)
- [1067]
- [1068] N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)-2,2,2-트리플루오로아세트아미드
- LCMS RT=** 7.12분, **MH⁺** 340.8; **¹H NMR (DMSO):** 11.43 (1H, br), 8.12-8.09 (3H, m), 7.82 (1H, d, *J* 8.8 Hz), 7.67 (1H, dd, *J* 8.9 2.1 Hz), 7.45 (2H, d, *J* 8.0 Hz)
- [1069]
- [1070] 방법 3H (화합물 II)
- [1071] 3-모르폴리노-N-(2-페닐벤조[d]옥사졸-5-일)프로판아미드
- [1072] 톨루엔 (2.5 mL) 중 2-페닐벤조[d]옥사졸-5-아민 (75 mg, 0.36 mmol) 및 메틸 3-모르폴리노프로파노에이트 (63 μ L, 0.39 mmol)에 톨루엔 (0.22 mL, 0.43 mmol) 중 트리메틸알루미늄의 2 M 용액을 첨가하였다. 생성된 용액을 마이크로웨이브 내 160 $^{\circ}$ C에서 5분 동안 2회 가열하였다. 냉각시킨 후, 중탄산나트륨 용액을 첨가하고, 수

성층을 에틸 아세테이트로 추출하였다. 이어서, 유기층을 염수로 세척하고, 합한 유기층을 무수 MgSO_4 로 건조시켰다. 증발시킨 후, 에틸 아세테이트/헥산 50:50 v/v로 용리하는 실리카 패드를 통과시켜 불순물을 증발 제거하고, 메탄올로 용리하여 목적하는 생성물을 얻어 17.5 mg (14%)의 표제 화합물을 수득하였다.

(LCMS RT= 5.54분, MH^+ 352.0)

$^1\text{H NMR}$ (DMSO): 10.25 (1H, s), 8.22-8.15 (3H, m), 7.73 (1H, d, J 8.8 Hz), 7.65-7.59 (3H, m), 7.52 (1H, dd, J 8.8 2.0 Hz), 3.60-3.57 (4H, m), 2.68-2.64 (2H, m), 2.44-2.41 (4H, m)

[1073]

방법 4 (화합물 III)

[1074]

N-(2-페닐벤조[d]옥사졸-5-일)프로판-1-술폰아미드

[1075]

실온에서 디클로로메탄 (2 mL) 중 2-페닐벤조[d]옥사졸-5-아민 (100 mg, 0.48 mmol)의 용액에 피리딘 (83 μL , 0.95 mmol) 및 이어서 프로판-1-술폰닐 클로라이드 (61 μL , 0.52 mmol)를 첨가하였다. 이어서, 생성된 용액을 실온에서 16시간 동안 교반하였다. 디클로로메탄을 첨가하고, 유기층을 황산구리 포화 수용액으로 세척하였다. 합한 유기층을 무수 MgSO_4 상에서 건조시키고, 증발시켰다. 생성된 불용성 고체를 포화 수성 NaHCO_3 으로 세척하여 37.2 mg (25%)의 표제 화합물을 수득하였다.

[1076]

(LCMS RT= 6.25분, MH^+ 317.0)

$^1\text{H NMR}$ (DMSO): 9.89 (1H, br), 8.21-8.18 (2H, m), 7.77 (1H, d, J 8.8 Hz), 7.66-7.59 (4H, m), 7.28 (1H, dd, J 8.8 2.1 Hz), 3.10-3.04 (2H, m), 1.77-1.64 (2H, m), 0.94 (3H, t, J 7.5 Hz)

[1077]

하기 화합물을 동일한 일반 방법에 따라 제조하고, 에틸 아세테이트:헥산 30:70 v/v로 용리하는 컬럼 크로마토그래피로 정제하였다.

[1078]

N-(2-페닐벤조[d]옥사졸-5-일)프로판-2-술폰아미드

[1079]

LCMS RT= 6.16분, MH^+ 317.0; $^1\text{H NMR}$ (DMSO): 9.89 (1H, br), 8.21-8.18 (2H, m), 7.76 (1H, d, J 8.8 Hz), 7.69-7.59 (4H, m), 7.30 (1H, dd, J 8.8 2.2 Hz), 1.26 (6H, d, J 6.9 Hz)

[1080]

N-(2-페닐벤조[d]옥사졸-5-일)벤젠술폰아미드

[1081]

LCMS RT= 6.43분, MH^+ 350.8; $^1\text{H NMR}$ (DMSO): 10.40 (1H, br), 8.15 (2H, dd, J 7.2 1.6 Hz), 7.77-7.74 (2H, m), 7.68-7.51 (7H, m), 7.46 (1H, d, J 2.1 Hz), 7.12 (1H, dd, J 8.8 2.1 Hz)

[1082]

N-(2-p-톨릴벤조[d]옥사졸-5-일)프로판-1-술폰아미드

[1083]

LCMS RT= 6.53분, MH^+ 331.0; $^1\text{H NMR}$ (DMSO): 9.85 (1H, br), 8.80 (2H, d, J 7.8 Hz), 7.74 (1H, d, J 9.0 Hz), 7.60 (1H, d, J 2.0 Hz), 7.44 (2H, d, J 8.1 Hz), 7.26 (1H, dd, J 8.7 2.2 Hz), 3.09-3.04 (2H, m), 2.42 (3H, s), 1.74-1.64 (2H, m), 0.94 (3H, t, J 7.6 Hz)

[1084]

N-(2-p-톨릴벤조[d]옥사졸-5-일)프로판-2-술폰아미드

[1085]

LCMS RT= 6.58분, MH^+ 330.9; $^1\text{H NMR}$ (DMSO): 9.85 (1H, br), 8.08 (2H, d, J 8.2 Hz), 7.72 (1H, d, J 8.6 Hz), 7.62 (1H, d, J 1.8 Hz), 7.43 (2H, d, J 8.2 Hz), 7.28 (1H, dd, J 8.8 2.2 Hz), 2.60-2.57 (1H, m), 2.42 (3H, s), 1.26 (6H, d, J 6.8 Hz)

[1086]

N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)프로판-1-술폰아미드

[1087]

LCMS RT= 6.81분, MH^+ 350.9; $^1\text{H NMR}$ (DMSO): 9.73 (1H, br), 8.20 (2H, d, J 8.7 Hz), 7.77 (1H, d, J 8.6 Hz), 7.71 (2H, d, J 8.7 Hz), 7.63 (1H, d, J 1.9 Hz), 7.29 (1H, dd, J 8.8 2.2 Hz), 3.10-3.05 (2H, m), 1.77-1.65 (2H, m), 0.94 (3H, t, J 7.6 Hz)

[1088]

[1089] N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)프로판-2-술폰아미드

LCMS RT= 6.68분, **MH⁺** 351.0; **¹H NMR (DMSO):** 9.88 (1H, br), 8.19 (2H, d, *J* 8.7 Hz), 7.76 (1H, d, *J* 8.8 Hz), 7.70 (2H, d, *J* 8.7 Hz), 7.65 (1H, d, *J* 2.0 Hz), 7.32 (1H, dd, *J* 8.8 2.2 Hz), 3.24 (1H, t, *J* 6.7 Hz), 1.26 (6H, d, *J* 6.7 Hz)

[1090]

[1091] 방법 5 (화합물 IV)

[1092] N-(피리딘-4-일메틸)-2-p-톨릴벤조[d]옥사졸-5-아민

[1093] 실온에서 1,2-디클로로에탄 (20 mL) 중 2-p-톨릴벤조[d]옥사졸-5-아민 (500 mg, 2.32 mmol)에 아세트산 (142 μ L, 2.32 mmol) 및 이소니코틴알데히드 (222.5 μ L, 2.29 mmol)를 첨가하고, 상기 혼합물을 실온에서 1시간 동안 교반하였다. 이어서, 나트륨 트리아세톡시보로하이드리드 (707 mg, 3.35 mmol)를 첨가하고, 혼합물을 실온에서 24시간 동안 교반하였다. 이어서, 상기 혼합물을 디클로로메탄으로 희석하고, 유기층을 포화 수성 NaHCO₃으로 세척하였다. 합한 유기층을 무수 MgSO₄ 상에서 건조시키고, 증발시켰다. 생성된 고체를 에틸 아세테이트:헥산 20:80으로 용리하는 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 328 mg (47%)의 표제 화합물을 수득하였다 (LCMS RT= 6.27분, **MH⁺** 316.1).

¹H NMR (DMSO): 8.50 (2H, d, *J* 6.0 Hz), 8.00 (2H, d, *J* 8.1 Hz), 7.48-7.37 (5H, m), 6.76-6.72 (2H, m), 6.51 (1H, t, *J* 6.2 Hz), 4.38 (2H, d, *J* 6.1 Hz), 2.39 (3H, s)

[1094]

[1095] 하기 모든 화합물을 동일한 일반 방법에 따라 제조하였다.

[1096] N-벤질-2-페닐벤조[d]옥사졸-5-아민

LCMS RT= 7.90분, **MH⁺** 301.0; **¹H NMR (DMSO):** 9.14-8.10 (2H, m), 7.61-7.56 (3H, m), 7.48-7.21 (6H, m), 6.79-6.75 (2H, m), 6.39 (1H, t, *J* 6.0 Hz), 4.32 (2H, d, *J* 6.1 Hz)

[1097]

[1098] N-부틸-2-페닐벤조[d]옥사졸-5-아민

LCMS RT= 8.25분, **MH⁺** 267.0; **¹H NMR (DMSO):** 8.16-8.12 (2H, m), 7.61-7.58 (3H, m), 7.47 (1H, d, *J* 8.7 Hz), 6.81 (1H, d, *J* 2.1 Hz), 6.72 (1H, dd, *J* 8.8 2.3 Hz), 6.64 (1H, t, *J* 5.5 Hz), 3.08-3.00 (2H, m), 1.64-1.51 (2H, m), 1.49-1.35 (2H, m), 0.94 (3H, t, *J* 7.2 Hz)

[1099]

[1100] N-이소부틸-2-페닐벤조[d]옥사졸-5-아민

LCMS RT= 8.26분, **MH⁺** 267.0; **¹H NMR (DMSO):** 8.15-8.12 (2H, m), 7.62-7.51 (3H, m), 7.46 (1H, d, *J* 8.8 Hz), 6.81 (1H, d, *J* 2.1 Hz), 6.74 (1H, dd, *J* 8.8 2.3 Hz), 5.73 (1H, t, *J* 5.6 Hz), 2.87 (2H, t, *J* 6.1 Hz), 1.95-1.82 (1H, m), 0.97 (6H, d, *J* 6.6 Hz)

[1101]

[1102] N-부틸-2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-아민

LCMS RT= 9.58분, **MH⁺** 301.1; **¹H NMR (DMSO):** 8.14 (2H, d, *J* 8.7 Hz), 7.66 (2H, d, *J* 8.7 Hz), 7.47 (1H, d, *J* 8.7 Hz), 6.81 (1H, d, *J* 2.1 Hz), 6.73 (1H, dd, *J* 8.8 2.2 Hz), 6.67 (1H, t, *J* 5.7 Hz), 3.07-3.00 (2H, m), 1.62-1.53 (2H, m), 1.48-1.36 (2H, m), 0.94 (3H, t, *J* 7.2 Hz)

[1103]

[1104] 2-(4-클로로페닐)-N-이소부틸벤조[d]옥사졸-5-아민

LCMS RT= 8.85분, **MH⁺** 301.0; **¹H NMR (DMSO):** 8.14 (2H, d, *J* 8.7 Hz), 7.66 (2H, d, *J* 8.7 Hz), 7.47 (1H, d, *J* 8.8 Hz), 6.80 (1H, d, *J* 2.0 Hz), 6.75 (1H, dd, *J* 8.8 2.2 Hz), 5.75 (1H, t, *J* 5.7 Hz), 2.87 (2H, d, *J* 6.2 Hz), 1.93-1.82 (1H, m), 0.97 (6H, d, *J* 6.7 Hz)

[1105]

[1106] N-벤질-2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-아민

LCMS RT= 8.39분, **MH⁺** 335.0; **¹H NMR (DMSO):** 8.11 (2H, d, *J* 8.8 Hz), 7.65 (2H, d, *J* 8.7 Hz), 7.47 (1H, d, *J* 9.4 Hz), 7.42-7.21 (5H, m), 6.81-6.78 (2H, m), 6.42 (1H, t, *J* 5.8 Hz), 4.32 (2H, d, *J* 6.8 Hz)

[1107]

[1108] N-부틸-2-p-톨릴벤조[d]옥사졸-5-아민

LCMS RT= 8.44분, **MH⁺** 281.0; **¹H NMR (DMSO):** 8.02 (2H, d, *J* 8.2 Hz), 7.46-7.38 (3H, m), 6.79 (1H, d, *J* 2.0 Hz), 6.69 (1H, dd, *J* 8.8 2.4 Hz), 5.62 (1H, t, *J* 5.7 Hz), 3.06-3.00 (2H, m), 2.40 (3H, s), 1.62-1.53 (2H, m), 1.48-1.36 (2H, m), 0.94 (3H, t, *J* 7.2 Hz)

[1109]

[1110] N-이소부틸-2-p-톨릴벤조[d]옥사졸-5-아민

LCMS RT= 8.48분, **MH⁺** 281.0; **¹H NMR (DMSO):** 8.03 (2H, d, *J* 8.1 Hz), 7.45-7.38 (3H, m), 6.79 (1H, d, *J* 2.1 Hz), 6.71 (1H, dd, *J* 8.8 2.3 Hz), 5.70 (1H, t, *J* 5.7 Hz), 2.86 (2H, t, *J* 6.3 Hz), 2.40 (3H, s), 1.95-1.81 (1H, m), 0.97 (6H, d, *J* 6.7 Hz)

[1111]

[1112] N-벤질-2-p-톨릴벤조[d]옥사졸-5-아민

LCMS RT= 7.95분, **MH⁺** 315.1; **¹H NMR (DMSO):** 8.00 (2H, d, *J* 8.1 Hz), 7.46-7.21 (8H, m), 6.77-6.73 (2H, m), 6.37 (1H, t, *J* 6.4 Hz), 4.32 (2H, d, *J* 6.0 Hz), 2.40 (3H, s)

[1113]

[1114] 2-(4-클로로페닐)-N,N-디이소부틸벤조[d]옥사졸-5-아민

LCMS RT= 17.03분, **MH⁺** 357.1; **¹H NMR (DMSO):** 8.26 (2H, d, *J* 8.5 Hz), 7.80 (2H, d, *J* 8.6 Hz), 7.67 (1H, d, *J* 9.0 Hz), 7.09 (1H, d, *J* 2.3 Hz), 6.96 (1H, dd, *J* 9.1 2.4 Hz), 3.32 (4H, d, *J* 7.2 Hz), 2.20-2.10 (2H, m), 1.02 (12H, d, *J* 6.6 Hz)

[1115]

[1116] 방법 6 (화합물 V)

[1117] 1-페닐-3-(2-페닐벤조[d]옥사졸-5-일)우레아

[1118] 실온에서 디클로로메탄 (2 mL) 중 2-페닐벤조[d]옥사졸-5-아민 (75 mg, 0.36 mmol)에 페닐 이소시아네이트 (43 μ L, 0.39 mmol)를 첨가하였다. 상기 용액을 실온에서 16시간 동안 교반하였다. 생성된 침전물을 여과 제거하고, 디클로로메탄으로 세척하여 99.9 mg (85%)의 표제 화합물을 수득하였다.

(**LCMS RT=** 6.45분, **MH⁺** 330.1)
¹H NMR (DMSO): 8.85 (1H, s), 8.71 (1H, s), 8.22-8.19 (2H, m), 8.00 (1H, d, *J* 2.0 Hz), 7.71 (1H, d, *J* 8.9 Hz), 7.65-7.60 (3H, m), 7.50-7.47 (2H, m), 7.40 (1H, dd, *J* 8.8 2.1 Hz), 7.30 (2H, t, *J* 8.4 Hz), 7.02-6.95 (1H, m)

[1119]

[1120] 하기 화합물을 동일한 일반 방법에 따라 제조하였다.

[1121] 1-이소프로필-3-(2-페닐벤조[d]옥사졸-5-일)우레아

LCMS RT= 5.94분, **MH⁺** 296.0; **¹H NMR (DMSO):** 8.47 (1H, s), 8.20-8.16 (2H, m), 7.93 (1H, d, *J* 1.9 Hz), 7.64-7.59 (4H, m), 7.30 (1H, dd, *J* 8.8 2.1 Hz), 6.03 (1H, d, *J* 7.5 Hz), 3.85-3.74 (1H, m), 1.12 (6H, d, *J* 6.5 Hz)

[1122]

[1123] 방법 7 (화합물 VI)

[1124] N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)-N-메틸프로피온아미드

[1125] 질소하 0 °C에서 수소화나트륨 (15 mg, 0.37 mmol)에 디메틸포름아미드 (10 mL) 중 N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)프로피온아미드 (100 mg, 0.33 mmol)의 용액을 첨가하였다. 0 °C에서 10분 후, 메틸 요오드화물 (56 μ L, 0.37 mmol)을 첨가하고, 상기 용액을 16시간 동안 실온 이하로 가온하였다. 이어서, 상기 혼합물을 에틸 아세테이트로 희석하고, 이어서 3시간 동안 물로 세척하였다. 합한 유기층을 무수 MgSO₄ 상에서 건조시키고, 증발시켰다. 생성된 고체를 에틸 아세테이트/헥산 50:50 v/v로 용리하는 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 36.4 mg (35%)의 표제 화합물을 수득하였다.

(**LCMS RT=** 7.00분, **MH⁺** 315.0)
¹H NMR (CDCl₃): 8.13 (2H, d, *J* 8.6 Hz), 7.55-7.52 (2H, m), 7.46 (2H, d, *J* 8.6 Hz), 7.13 (1H, dd, *J* 8.3 2.0 Hz), 3.26 (3H, s), 2.04 (2H, q, *J* 7.6 Hz), 1.00 (3H, t, *J* 7.6 Hz)

[1126]

[1127] 방법 7 (화합물 VIb)

[1128] N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)-N-메틸이소부티르아미드

LCMS RT= 7.44분, MH⁺ 329.1; ¹H NMR (DMSO): 8.22 (2H, d, J 8.7 Hz), 7.91-7.87 (2H, m), 7.72 (2H, d, J 8.6 Hz), 7.43 (1H, d, J 8.3 Hz), 3.20 (3H, s), 2.46-2.42 (1H, m), 0.93 (6H, d, J 6.6 Hz)

[1129] 2-(4-클로로페닐)-N-이소부틸-N-메틸벤조[d]옥사졸-5-아민

LCMS RT= 10.59분, MH⁺ 315.1; ¹H NMR (DMSO): 8.15 (2H, d, J 8.6 Hz), 7.67 (2H, d, J 8.6 Hz), 7.56 (1H, d, J 9.0 Hz), 6.96 (1H, d, J 2.5 Hz), 6.84 (1H, dd, J 9.1 2.5 Hz), 3.17 (2H, d, J 7.3 Hz), 2.97 (3H, s), 2.13-1.97 (1H, m), 0.90 (6H, d, J 6.7 Hz)

[1131] 방법 8 (화합물 VII)

[1133] N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)-2-메틸프로판티오아미드

[1134] 110 °C에서 톨루엔 (2 mL) 중 N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드 (50 mg, 0.16 mmol)에 라웨손 시약 (35 mg, 0.09 mmol)을 첨가하였다. 생성된 용액을 110 °C에서 7시간 동안 가열하였다. 냉각시킨 후, 용액을 물로 희석하고, 에틸 아세테이트로 추출하였다. 합한 유기층을 염수로 세척한 다음, 무수 MgSO₄ 상에서 건조시키고, 증발시켰다. 생성된 고체를 에틸 아세테이트/헥산 20:80 v/v로 용리하는 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 13.8 mg (26%)의 표제 화합물을 수득하였다.

(LCMS RT= 7.36분, MH⁺ 331.2)
¹H NMR (DMSO): 11.59 (1H, s), 8.37 (1H, d, J 2.0 Hz), 8.22 (2H, d, J 8.8 Hz), 7.83 (1H, d, J 8.7 Hz), 7.73-7.65 (3H, m), 3.18-3.09 (1H, m), 1.25 (6H, d, J 6.7 Hz)

[1135] 방법 9 (화합물 VIII)

[1137] 2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-디아조늄 테트라플루오로보산 염

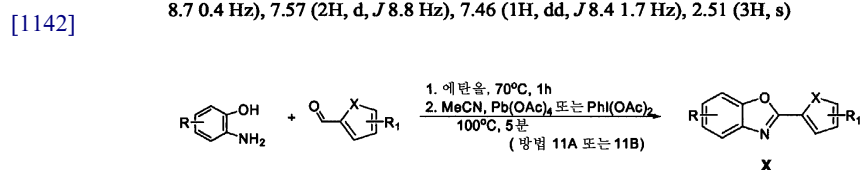
[1138] 0 °C에서 물 (3 mL) 및 테트라플루오로보산 (물 중 50%, 2 mL) 중 2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-아민 (500 mg, 2.04 mmol)의 용액에 물 (2 mL) 중 아질산나트륨 (140 mg, 2.04 mmol)의 용액을 5분에 걸쳐 적가하였다. 생성된 혼합물을 0 °C에서 15분 동안, 및 이어서 실온에서 1시간 동안 교반하였다. 이어서, 고체를 여과하고, 묶은 수성 테트라플루오로보산 용액 및 메탄올로 세척하여 370 mg (53%)의 표제 화합물을 수득하고, 이를 특성화 없이 바로 사용하였다.

[1139] 방법 10 (화합물 IX)

[1140] S-2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일 에탄티오에이트

[1141] 실온에서 DMSO (2.8 mL) 중 칼륨 티오아세테이트 (130 mg, 1.13 mmol)의 교반 용액에 DMSO (1.4 mL) 중 2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-디아조늄 테트라플루오로보산 염 (370 mg, 1.08 mmol)을 적가하였다. 15분 후, 상기 혼합물을 70 °C에서 1시간 동안 가열하였다. 냉각시킨 후, 혼합물을 물로 희석하고, 이어서 수 시간 동안 에틸 아세테이트로 추출하였다. 합한 유기층을 염수로 세척하고, 무수 MgSO₄ 상에서 건조시키고, 증발시켰다. 생성된 고체를 구배 (에틸 아세테이트/헥산 5:95 v/v 내지 에틸 아세테이트/헥산 15:85 v/v)를 이용하여 용리하는 컬럼 크로마토그래피로 정제하고, 디에틸 에테르/헥산으로 처리하여 11.3 mg (3%)의 표제 화합물을 수득하였다.

(LCMS RT= 7.89분, MH⁺ 304.2)
¹H NMR (CDCl₃): 8.24 (2H, d, J 8.7 Hz), 7.88 (1H, dd, J 1.7 0.4 Hz), 7.67 (1H, dd, J 8.7 0.4 Hz), 7.57 (2H, d, J 8.8 Hz), 7.46 (1H, dd, J 8.4 1.7 Hz), 2.51 (3H, s)



[1143] 방법 11A (화합물 X)

[1145] 5-(에틸술포닐)-2-(5-메틸티오펜-2-일)벤조[d]옥사졸

[1146] 에탄올 (17 mL) 중 2-아미노-4-(에틸술포닐)페놀 (452.7 mg, 2.25 mmol)의 교반 용액에 5-메틸-2-티오펜카르복스알데히드 (242 μ L, 2.25 mmol)를 첨가하였다. 상기 혼합물을 70 $^{\circ}$ C에서 70분 동안 가열하였다. 냉각시킨 후, 소량의 침전물이 형성되었다. 여과 및 여액을 증발시킨 후, 생성된 생성물을 아세토니트릴 (9.8 mL)에 용해하고, 납 테트라아세테이트 (887 mg, 2 mmol)를 첨가하였다. 생성된 혼합물을 100 $^{\circ}$ C에서 5분 동안 가열하였다. 냉각시킨 후, 반응 혼합물을 여과하고, 여액을 진공하에 증발시켰다. 생성된 혼합물을 에틸 아세테이트/헥산 20:80 v/v로 용리하는 컬럼 크로마토그래피로 정제하고, 이어서 역상 HPLC로 정제하여 2.2 mg (0.3%)의 표제 생성물을 수득하였다.

(LCMS RT= 6.41분, MH^{+} 308.1)

1H NMR (DMSO): 8.22 (1H, dd, J 1.8 0.5 Hz), 8.02 (1H, dd, J 8.6 0.5 Hz), 7.92-7.88 (2H, m), 7.08 (1H, dd, J 3.7 1.0 Hz), 3.37 (2H, q, J 7.3 Hz), 2.60 (3H, d, J 0.6 Hz), 1.12 (3H, t, J 7.4 Hz)

[1147]

[1148] 방법 11B (화합물 X)

[1149] 납 테트라아세테이트 대신 요오도이소벤젠 디아세테이트를 사용하였다는 점을 제외하고는 방법 11A와 같다.

[1150] 5-(에틸술포닐)-2-(티오펜-2-일)벤조[d]옥사졸

LCMS RT= 6.08분, MH^{+} 294.1; 1H NMR (DMSO): 8.26 (1H, d, J 1.7 Hz), 8.08-8.04 (3H, m), 7.93 (1H, dd, J 8.5 1.8 Hz), 7.36 (1H, dd, J 4.9 3.8 Hz), 3.38 (2H, q, J 7.3 Hz), 1.13 (3H, t, J 7.4 Hz)

[1151]

[1152] 5-(에틸술포닐)-2-(3-메틸티오펜-2-일)벤조[d]옥사졸

LCMS RT= 6.45분, MH^{+} 308.1; 1H NMR (DMSO): 8.02 (1H, d, J 1.8 0.5 Hz), 7.81 (1H, dd, J 8.5 0.5 Hz), 7.69-7.66 (2H, m), 6.98 (1H, dd, J 5.0 0.4 Hz), 3.15 (2H, q, J 7.3 Hz), 2.47 (3H, s), 0.88 (3H, t, J 7.4 Hz)

[1153]

[1154] 5-(에틸술포닐)-2-(5-메틸푸란-2-일)벤조[d]옥사졸

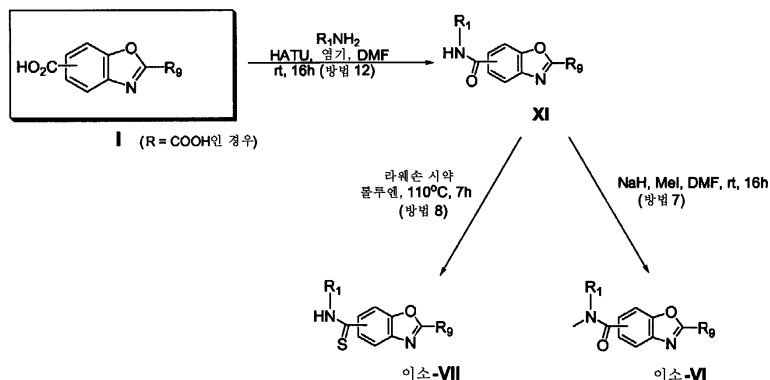
LCMS RT= 5.53분, MH^{+} 292.1; 1H NMR (DMSO): 8.00 (1H, d, J 1.8 0.6 Hz), 7.81 (1H, d, J 6.6 Hz), 7.69 (1H, dd, J 8.6 1.9 Hz), 7.26 (1H, d, J 3.7 Hz), 6.31-6.27 (1H, m), 3.18-3.14 (2H, m), 2.24 (3H, s), 0.90 (3H, t, J 7.4 Hz)

[1155]

[1156] 5-(에틸술포닐)-2-(4-메틸티오펜-2-일)벤조[d]옥사졸

LCMS RT= 6.40분, MH^{+} 616.9; 1H NMR (DMSO): 8.24 (1H, d, J 1.8 0.5 Hz), 8.03 (1H, dd, J 8.6 0.5 Hz), 7.94-7.89 (2H, m), 7.65 (1H, t, J 1.2 Hz), 3.42-3.36 (2H, m), 2.32 (3H, d, J 0.6 Hz), 1.12 (3H, t, J 7.5 Hz)

[1157]



[1158]

[1159] 방법 12 (화합물 XI)

[1160] N-부틸-2-p-톨릴벤조[d]옥사졸-5-카르복스아미드

[1161] 건조 디메틸포름아미드 (10 mL) 중 2-p-톨릴벤조[d]옥사졸-5-카르복실산 (100 mg, 0.39 mmol)에 HATU (165 mg, 0.44 mmol) 및 디이소프로필에틸아민 (206 μ L, 1.18 mmol)을 첨가하였다. 이어서, 상기 혼합물을 실온에서 10 분 동안 교반하였다. 이어서, 부탄-1-아민 (43 μ L, 0.44 mmol)을 첨가하고, 생성된 혼합물을 실온에서 16시간 동안 교반하였다. 에틸 아세테이트를 첨가하고, 유기층을 3시간 동안 물로 세척하였다. 합한 유기층을 무수 MgSO_4 상에서 건조시키고, 증발시켰다. 생성된 고체를 에틸 아세테이트/헥산 40:60 v/v로 용리하는 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 26 mg (11%)의 표제 화합물을 수득하였다.

(LCMS RT= 6.81분, MH^+ 309.1)
 $^1\text{H NMR}$ (CDCl_3): 8.22-8.15 (3H, m), 7.89 (1H, dd, J 8.1 1.1 Hz), 7.67 (1H, d, J 8.3 Hz), 7.40 (2H, d, J 7.5 Hz), 6.17 (1H, br), 3.59-3.52 (2H, m), 2.51 (3H, s), 1.72-1.64 (2H, m), 1.54-1.46 (2H, m), 1.03 (3H, t, J 7.3 Hz)

[1162]
 [1163] 하기 모든 화합물을 동일한 일반 방법에 따라 제조하였다.

[1164] N-프로필-2-p-톨릴벤조[d]옥사졸-5-카르복스아미드
 LCMS RT= 6.42분, MH^+ 295.1; $^1\text{H NMR}$ (CDCl_3): 8.08 (2H, d, J 8.2 Hz), 8.04 (1H, d, J 1.4 Hz), 7.77 (1H, dd, J 8.5 1.7 Hz), 7.54 (1H, d, J 8.6 Hz), 7.28 (2H, d, J 7.9 Hz), 6.07 (1H, br), 3.44-3.37 (2H, m), 2.39 (3H, s), 1.65-1.55 (2H, m), 0.95 (3H, t, J 7.5 Hz)

[1166] N-이소프로필-2-p-톨릴벤조[d]옥사졸-5-카르복스아미드
 LCMS RT= 6.38분, MH^+ 295.1; $^1\text{H NMR}$ (CDCl_3): 8.20 (2H, d, J 8.2 Hz), 8.15 (1H, d, J 1.4 Hz), 7.87 (1H, dd, J 8.5 1.8 Hz), 7.65 (1H, d, J 8.5 Hz), 7.40 (2H, d, J 8.0 Hz), 6.00 (1H, br), 4.43-4.31 (1H, m), 2.51 (3H, s), 1.35 (6H, d, J 6.6 Hz)

[1168] 2-p-톨릴벤조[d]옥사졸-5-카르복스아미드
 LCMS RT= 5.61분, MH^+ 253.0; $^1\text{H NMR}$ (DMSO): 8.30 (1H, d, J 1.2 Hz), 8.12 (2H, d, J 8.2 Hz), 7.98 (1H, dd, J 8.5 1.7 Hz), 7.81 (1H, d, J 8.5 Hz), 7.45 (2H, d, J 8.0 Hz), 2.44 (3H, s)

[1170] 2-(4-클로로페닐)-N-이소프로필벤조[d]옥사졸-5-카르복스아미드
 LCMS RT= 6.68분, MH^+ 315.5; $^1\text{H NMR}$ (DMSO): 8.36-8.31 (2H, m), 8.23 (2H, d, J 8.7 Hz), 7.98 (1H, dd, J 8.5 1.7 Hz), 7.87 (1H, d, J 8.5 Hz), 7.72 (2H, d, J 8.7 Hz), 4.19-4.08 (1H, m), 1.21 (6H, d, J 6.6 Hz)

[1172] 2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-카르복스아미드
 LCMS RT= 5.81분, MH^+ 273.2; $^1\text{H NMR}$ (DMSO): 8.11 (1H, s), 8.01 (2H, d, J 8.3 Hz), 7.89 (1H, br), 7.78 (1H, d, J 8.6 Hz), 7.64 (1H, d, J 8.6 Hz), 7.49 (2H, d, J 8.3 Hz), 7.25 (1H, br)

[1174] 방법 8 (화합물 이소-VI)

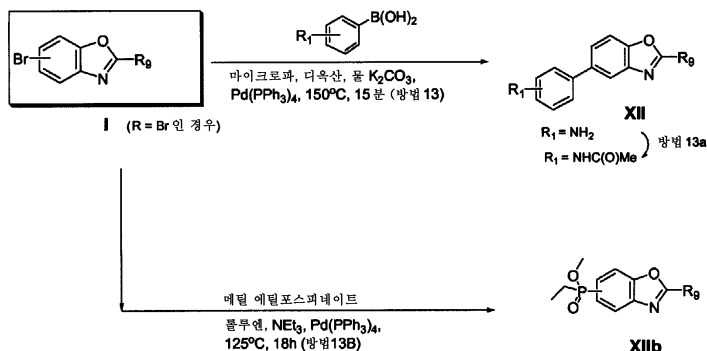
[1175] 2-(4-클로로페닐)-N-메틸벤조[d]옥사졸-5-카르복스아미드
 LCMS RT= 6.09분, MH^+ 286.9; $^1\text{H NMR}$ (DMSO): 8.57 (1H, br), 8.28 (1H, d, J 1.2 Hz), 8.23 (2H, d, J 8.7 Hz), 7.96 (1H, dd, J 8.6 1.7 Hz), 7.87 (1H, d, J 8.6 Hz), 7.72 (2H, d, J 8.6 Hz), 2.83 (3H, d, J 4.5 Hz)

[1177] 2-(4-클로로페닐)-N-이소프로필-N-메틸벤조[d]옥사졸-5-카르복스아미드
 LCMS RT= 6.90분, MH^+ 329.0; $^1\text{H NMR}$ (DMSO): 8.23 (2H, d, J 8.6 Hz), 7.88-7.81 (2H, m), 7.72 (2H, d, J 8.7 Hz), 7.44 (1H, d, J 8.2 Hz), 2.88-2.78 (3H, m), 1.18-1.12 (6H, m)

[1179] 방법 7 (화합물 이소-VII)

[1180] 2-(4-클로로페닐)-N-이소프로필벤조[d]옥사졸-5-카르보티오아미드

[1181] **LCMS RT= 7.37분, MH⁺ 331.0; ¹H NMR (DMSO): 10.18 (1H, d, J 7.3 Hz), 8.23 (2H, d, J 8.8 Hz), 8.11 (1H, dd, J 1.7 0.5 Hz), 7.88 (1H, dd, J 8.6 1.8 Hz), 7.83 (1H, dd, J 8.8**



[1182]

[1183] 방법 13 (화합물 XII)

[1184] 5-(4-메톡시페닐)-2-p-톨릴벤조[d]옥사졸

[1185] 디옥산 (1.5 mL) 중 5-브로모-2-p-톨릴벤조[d]옥사졸 (146.1 mg, 0.50 mmol)의 용액에 물 (0.5 mL), 4-메톡시페닐보론산 (114 mg, 0.75 mmol), 탄산칼륨 (138 mg, 1.00 mmol) 및 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) (3 mg)을 첨가하였다. 생성된 현탁액을 마이크로웨이브 내 150 °C에서 15분 동안 가열하였다. 냉각시킨 후, 상기 반응물을 물로 희석하고, 에틸 아세테이트로 추출하였다. 합한 유기층을 무수 $MgSO_4$ 상에서 건조시키고, 증발시켰다. 생성된 고체를 에틸 아세테이트/헥산 1:99 v/v로 용리하는 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 60 mg (38%)의 표제 화합물을 수득하였다.

(**LCMS RT= 9.18분, MH⁺ 316.1**)
¹H NMR (DMSO): 8.12 (2H, d, J 8.2 Hz), 7.99 (1H, d, J 1.5 Hz), 7.82 (1H, d, J 8.5 Hz), 7.71-7.64 (3H, m), 7.45 (2H, d, J 8.0 Hz), 7.06 (2H, d, J 8.8 Hz), 3.82 (3H, s), 2.43 (3H, s)

[1186]

[1187] 하기 모든 화합물을 동일한 일반 방법에 따라 제조하였다.

[1188] N-(4-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)페닐)아세트아미드

LCMS RT= 7.51분, MH⁺ 362.8; ¹H NMR (DMSO): 10.04 (1H, s), 8.23 (2H, d, J 8.5 Hz), 8.05 (1H, d, J 1.6 Hz), 7.86 (1H, d, J 8.5 Hz), 7.73-7.69 (7H, m), 2.09 (3H, s)

[1189]

[1190] 2-(4-클로로페닐)-5-(4-(에틸술포닐)페닐)벤조[d]옥사졸

LCMS RT= 8.31분, MH⁺ 397.8; ¹H NMR (DMSO): 8.27-8.23 (3H, m), 8.09-7.94 (5H, m), 7.85 (1H, dd, J 8.6 1.8 Hz), 7.73 (2H, d, J 8.7 Hz), 3.39-3.34 (2H, m), 1.16 (3H, t, J 7.5 Hz)

[1191]

[1192] 메틸 4-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)벤조에이트

LCMS RT= 9.34분, MH⁺ 363.9; ¹H NMR (DMSO): 8.25 (2H, d, J 8.7 Hz), 8.20 (1H, d, J 1.3 Hz), 8.08 (2H, d, J 8.6 Hz), 7.95-7.91 (3H, m), 7.83 (1H, dd, J 8.6 1.8 Hz), 7.73 (2H, d, J 8.7 Hz), 3.90 (3H, s)

[1193]

[1194] N-(3-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)페닐)아세트아미드

LCMS RT= 7.40분, MH⁺ 363.0; ¹H NMR (DMSO): 10.05 (1H, s), 8.25 (2H, d, J 8.7 Hz), 8.00 (1H, d, J 1.4 Hz), 7.98-7.95 (1H, m), 7.90 (1H, d, J 8.5 Hz), 7.72 (2H, d, J 8.8 Hz), 7.67 (1H, dd, J 8.5 1.8 Hz), 7.60-7.57 (1H, m), 7.42-7.40 (2H, m), 2.09 (3H, s)

[1195]

- [1196] 2-(4-클로로페닐)-5-(4-모르폴리노페닐)벤조[d]옥사졸
- LCMS RT=** 17.49분, **MH⁺** 391.0; **¹H NMR (DMSO):** 8.23 (2H, d, *J* 8.9 Hz), 8.00 (1H, d, *J* 1.4 Hz), 7.83 (1H, d, *J* 8.6 Hz), 7.74-7.67 (3H, m), 7.64 (2H, d, *J* 8.9 Hz), 7.06 (2H, d, *J* 8.9 Hz), 3.79-3.75 (4H, m), 3.19-3.15 (4H, m)
- [1197]
- [1198] 2-(4-클로로페닐)-5-(3-(에틸티오)페닐)벤조[d]옥사졸
- LCMS RT=** 10.82분, **MH⁺** 365.7; **¹H NMR (DMSO):** 8.25 (2H, d, *J* 8.7 Hz), 8.11 (1H, d, *J* 1.4 Hz), 7.89 (1H, d, *J* 8.6 Hz), 7.77-7.70 (3H, m), 7.62 (1H, t, *J* 1.7 Hz), 7.55 (1H, dt, *J* 7.6 1.2 Hz), 7.44 (1H, t, *J* 7.6 Hz), 7.35-7.32 (1H, m), 3.09 (2H, q, *J* 7.3 Hz), 1.29 (3H, t, *J* 7.4 Hz)
- [1199]
- [1200] N-(2-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)페닐)아세트아미드
- LCMS RT=** 6.84분, **MH⁺** 363.0; **¹H NMR (DMSO):** 9.29 (1H, s), 8.24 (2H, d, *J* 8.6 Hz), 7.86 (1H, d, *J* 8.4 Hz), 7.78-7.76 (1H, m), 7.72 (2H, d, *J* 8.5 Hz), 7.53-7.29 (5H, m), 1.87 (3H, s)
- [1201]
- [1202] 2-(4-클로로페닐)-5-(4-메톡시피리딘-3-일)벤조[d]옥사졸
- LCMS RT=** 7.46분, **MH⁺** 337.0; **¹H NMR (DMSO):** 8.49 (1H, d, *J* 5.8 Hz), 8.45 (1H, s), 8.24 (2H, d, *J* 8.9 Hz), 7.95 (1H, d, *J* 1.7 0.5 Hz), 7.87 (1H, dd, *J* 8.5 0.6 Hz), 7.72 (2H, d, *J* 8.8 Hz), 7.58 (1H, dd, *J* 8.5 1.7 Hz), 7.21 (1H, d, *J* 5.8 Hz), 3.89 (3H, s)
- [1203]
- [1204] 2-(4-클로로페닐)-5-(6-메톡시피리딘-3-일)벤조[d]옥사졸
- LCMS RT=** 8.83분, **MH⁺** 337.0; **¹H NMR (DMSO):** 8.57 (1H, dd, *J* 2.6 0.6 Hz), 8.24 (2H, d, *J* 8.8 Hz), 8.13-8.10 (2H, m), 7.89 (1H, dd, *J* 8.6 0.5 Hz), 7.75-7.70 (3H, m), 6.95 (1H, dd, *J* 8.6 0.6 Hz), 3.92 (3H, s)
- [1205]
- [1206] 3-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)벤조산
- LCMS RT=** 4.62분, **MH⁺** 350.1; **¹H NMR (DMSO):** 8.27-8.23 (3H, m), 8.12 (1H, d, *J* 1.4 Hz), 8.03-7.95 (2H, m), 7.91 (1H, d, *J* 8.7 Hz), 7.78 (1H, dd, *J* 8.5 1.8 Hz), 7.72 (2H, d, *J* 8.8 Hz), 7.64 (1H, t, *J* 7.7 Hz)
- [1207]
- [1208] 2-(4-클로로페닐)-5-(6-클로로피리딘-3-일)벤조[d]옥사졸
- LCMS RT=** 8.59분, **MH⁺** 340.9; **¹H NMR (DMSO):** 8.33 (1H, d, *J* 2.2 Hz), 8.28-8.23 (4H, m), 7.95 (1H, d, *J* 8.6 Hz), 7.83 (1H, dd, *J* 8.5 1.8 Hz), 7.73 (2H, d, *J* 8.7 Hz), 7.65 (1H, d, *J* 8.4 Hz)
- [1209]
- [1210] 2-(4-클로로페닐)-5-(6-플루오로피리딘-3-일)벤조[d]옥사졸
- LCMS RT=** 8.05분, **MH⁺** 325.0; **¹H NMR (DMSO):** 8.65 (1H, d, *J* 2.7 Hz), 8.39 (1H, td, *J* 8.2 2.7 Hz), 8.25 (2H, d, *J* 8.7 Hz), 8.20 (1H, dd, *J* 1.8 0.5 Hz), 7.94 (1H, dd, *J* 8.6 0.6 Hz), 7.80 (1H, dd, *J* 8.6 1.9 Hz), 7.73 (2H, d, *J* 8.7 Hz), 7.33 (1H, dd, *J* 8.6 3.0 Hz)
- [1211]
- [1212] 2-(4-클로로페닐)-5-(6-모르폴리노피리딘-3-일)벤조[d]옥사졸
- LCMS RT=** 8.46분, **MH⁺** 391.8; **¹H NMR (DMSO):** 8.55 (1H, d, *J* 2.4 Hz), 8.23 (2H, d, *J* 8.7 Hz), 8.06 (1H, d, *J* 1.4 Hz), 7.98 (1H, dd, *J* 8.9 2.6 Hz), 7.86 (1H, d, *J* 8.8 Hz), 7.73-7.69 (3H, m), 6.96 (1H, d, *J* 8.9 Hz), 3.75-3.71 (4H, m), 3.53-3.49 (4H, m)
- [1213]
- [1214] 2-(4-클로로페닐)-5-(6-메톡시피리딘-2-일)벤조[d]옥사졸
- LCMS RT=** 9.84분, **MH⁺** 337.1; **¹H NMR (DMSO):** 8.54 (1H, d, *J* 1.6 Hz), 8.26-8.23 (3H, m), 7.91 (1H, d, *J* 8.7 Hz), 7.82 (1H, t, *J* 7.9 Hz), 7.74-7.68 (3H, m), 6.81 (1H, d, *J* 8.1 Hz), 4.00 (3H, s)
- [1215]

[1216] 3-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)아닐린

LCMS RT= 7.78분, **MH⁺** 321.1; **¹H NMR (DMSO):** 8.24 (2H, d, *J* 8.7 Hz), 7.73 (1H, dd, *J* 1.8 0.4 Hz), 7.85 (1H, d, *J* 8.5 Hz), 7.72 (2H, d, *J* 8.8 Hz), 7.63 (1H, dd, *J* 8.6 1.8 Hz), 7.13 (1H, t, *J* 7.8 Hz), 6.90 (1H, t, *J* 1.9 Hz), 6.87-6.82 (1H, m), 6.62-6.57 (1H, m), 5.19 (2H, s)

[1217]

[1218] 4-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)아닐린

LCMS RT= 7.77분, **MH⁺** 321.1; **¹H NMR (DMSO):** 8.22 (2H, d, *J* 8.7 Hz), 7.91 (1H, d, *J* 1.5 Hz), 7.78 (1H, d, *J* 8.6 Hz), 7.71 (2H, d, *J* 8.6 Hz), 7.61 (1H, dd, *J* 8.6 1.8 Hz), 7.43 (2H, d, *J* 8.6 Hz), 6.67 (2H, d, *J* 8.6 Hz), 5.26 (2H, s)

[1219]

[1220] 5-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)피리딘-2-아민

LCMS RT= 7.12분, **MH⁺** 322.1; **¹H NMR (DMSO):** 8.32 (1H, d, *J* 2.2 Hz), 8.23 (2H, d, *J* 8.7 Hz), 7.98 (1H, d, *J* 1.4 Hz), 7.84-7.77 (2H, m), 7.72 (2H, d, *J* 8.7 Hz), 7.64 (1H, dd, *J* 8.5 1.8 Hz), 6.56 (1H, d, *J* 8.6 Hz), 6.09 (2H, s)

[1221]

[1222] 4-(5-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-2-일)아닐린

LCMS RT= 7.73분, **MH⁺** 320.9; **¹H NMR (DMSO):** 7.94 (1H, d, *J* 1.5 Hz), 7.89 (2H, d, *J* 8.6 Hz), 7.78-7.74 (3H, m), 7.60 (1H, dd, *J* 8.6 1.8 Hz), 7.53 (2H, d, *J* 8.6 Hz), 6.71 (2H, d, *J* 8.7 Hz), 6.04 (2H, s)

[1223]

[1224] 방법 13a (화합물 XIIa)

[1225] N-(5-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)피리딘-2-일)아세트아미드

[1226] 실온에서 건조 피리딘 (3 mL) 중 5-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)피리딘-2-아민 (96.5 mg, 0.30 mmol)에 아세틸 클로라이드 (26 μ L, 0.36 mmol)를 첨가하고, 80 °C에서 40시간 동안 교반하였다. 냉각시킨 후, 상기 혼합물을 물에 부어 침전물을 수득하고, 여과 제거하였다. 생성된 고체를 에틸 아세테이트/헥산 20:80 v/v로 용리하는 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 45 mg (41%)의 표제 화합물을 수득하였다.

¹H NMR (DMSO): 10.61 (1H, s), 8.73-8.71 (1H, m), 8.24 (2H, d, *J* 8.6 Hz), 8.18-8.16 (3H, m), 7.91 (1H, d, *J* 8.5 Hz), 7.79 (1H, dd, *J* 8.6 1.8 Hz), 7.73 (2H, d, *J* 8.6 Hz), 2.13 (3H, s)

[1227]

[1228] 방법 13b (화합물 XIIb)

[1229] 메틸 에틸포스피네이트

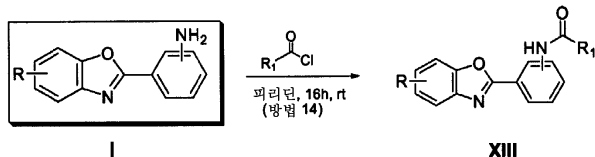
[1230] 널리 공지된 절차 ([Xu, Y. et al., Synthesis, 1984, 778-780.] 참조)에 따라, 디에틸 에테르 (15 mL) 중 메탄올 (2.70 mL, 66.75 mmol) 및 트리에틸아민 (4.23 mL, 30.35 mmol)의 용액을 0 °C에서 디에틸 에테르 (30 mL) 중 에틸 디클로로포스핀 (3.15 mL, 30.35 mmol)의 용액에 적가하였다. 첨가가 완료된 후, 생성된 슬러리를 1시간 동안 환류하였다. 0 °C에서 냉각시킨 후, 침전된 고체를 여과하고, 디에틸 에테르로 세척하였다. 이어서, 여과물을 농축시켜 무색 오일을 수득하고, 이를 어떠한 정제도 없이 다음 단계에서 사용하였다.

[1231] 메틸 2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일(에틸)포스피네이트

[1232] 무수 톨루엔 (10 mL) 중 5-브로모-2-*p*-톨릴벤조[d]옥사졸 (519.7 mg, 1.68 mmol) 및 메틸 에틸포스피네이트 (276.9 mg, 2.02 mmol)에 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) (101.6 mg) 및 트리에틸아민 (7.5 mL, 5.4 mmol)을 첨가하였다. 생성된 현탁액을 질소하 18시간 동안 환류하였다. 냉각시킨 후, 에틸 아세테이트를 첨가하고, 유기층을 물로 세척하였다. 합한 유기층을 무수 MgSO₄ 상에서 건조시키고, 증발시켰다. 생성된 고체를 구배 (헥산으로 출발하여 에틸 아세테이트, 및 이어서 메탄올/에틸 아세테이트 5:95 v/v)를 이용하여 용리하는 컬럼 크로마토그래피로 정제하고, 이어서 역상 HPLC로 정제하여 10.4 mg (2%)의 표제 생성물을 수득하였다.

(LCMS RT= 6.32분, MH^+ 336.1)

1H NMR (DMSO): 8.24 (2H, d, J 8.7 Hz), 8.18-8.13 (1H, m), 8.00 (1H, ddd, J 8.5 2.4 0.6 Hz), 7.81 (1H, ddd, J 10.9 8.2 1.4 Hz), 7.73 (2H, d, J 8.7 Hz), 3.54 (3H, d, J 10.9 Hz), 2.09-1.94 (2H, m), 1.04-0.91 (3H, m)



방법 14 (화합물 XIII)

N-(4-(5-클로로벤조[d]옥사졸-2-일)페닐)아세트아미드

실온에서 피리딘 (3 mL) 중 4-(5-클로로벤조[d]옥사졸-2-일)아닐린 (122.3 mg, 0.50 mmol)의 용액에 아세틸 클로라이드 (39 μ L, 0.55 mmol)를 첨가하였다. 생성된 혼합물을 실온에서 16시간 동안 교반하였다. 이어서, 상기 용액을 물에 붓고, 생성된 침전물을 여과에 의해 수집하였다. 고체를 묶은 염산 용액, 묶은 수산화나트륨 용액, 및 이어서 물로 세척하여 120 mg (84%)의 표제 화합물을 수득하였다.

(LCMS RT= 6.38분, MH^+ 287.0)

1H NMR (DMSO): 10.33 (1H, s), 8.14 (2H, d, J 8.7 Hz), 7.88-7.80 (4H, m), 7.45 (1H, dd, J 8.7 2.1 Hz), 2.11 (3H, s)

하기 모든 화합물을 동일한 일반 방법에 따라 제조하였다.

N-(4-(5-클로로벤조[d]옥사졸-2-일)페닐)이소부티르아미드

LCMS RT= 7.03분, MH^+ 315.1; 1H NMR (DMSO): 10.22 (1H, s), 8.14 (2H, d, J 8.7 Hz), 7.88-7.79 (4H, m), 7.45 (1H, dd, J 8.7 2.1 Hz), 2.70-2.61 (1H, m), 1.13 (6H, d, J 6.8 Hz)

N-(4-(5-클로로벤조[d]옥사졸-2-일)페닐)티오펜-2-카르복스아미드

LCMS RT= 7.44분, MH^+ 355.0; 1H NMR (DMSO): 10.57 (1H, s), 8.21 (2H, d, J 8.9 Hz), 8.09 (1H, dd, J 3.8 1.1 Hz), 8.02 (2H, d, J 8.9 Hz), 7.93-7.90 (2H, m), 7.82 (1H, d, J 8.6 Hz), 7.46 (1H, dd, J 8.6 2.1 Hz), 7.27 (1H, dd, J 4.9 3.8 Hz)

N-(4-(6-클로로벤조[d]옥사졸-2-일)페닐)아세트아미드

LCMS RT= 6.37분, MH^+ 287.0; 1H NMR (DMSO): 10.32 (1H, s), 8.13 (2H, d, J 8.8 Hz), 7.96 (1H, d, J 1.8 Hz), 7.84-7.77 (3H, m), 7.45 (1H, dd, J 8.4 1.9 Hz), 2.11 (3H, s)

N-(4-(6-클로로벤조[d]옥사졸-2-일)페닐)이소부티르아미드

LCMS RT= 7.18분, MH^+ 315.1; 1H NMR (DMSO): 10.22 (1H, s), 8.12 (2H, d, J 8.8 Hz), 7.96 (1H, d, J 1.8 Hz), 7.86 (2H, d, J 8.9 Hz), 7.79 (1H, d, J 8.5 Hz), 7.45 (1H, dd, J 8.5 2.0 Hz), 2.70-2.61 (1H, m), 1.13 (6H, d, J 6.9 Hz)

N-(4-(6-클로로벤조[d]옥사졸-2-일)페닐)티오펜-2-카르복스아미드

LCMS RT= 7.61분, MH^+ 354.9; 1H NMR (DMSO): 10.57 (1H, s), 8.19 (2H, d, J 8.9 Hz), 8.09 (1H, dd, J 3.7 1.0 Hz), 8.01 (2H, d, J 8.9 Hz), 7.98 (1H, d, J 1.8 Hz), 7.92 (1H, dd, J 5.0 1.0 Hz), 7.81 (1H, d, J 8.5 Hz), 7.46 (1H, dd, J 8.5 2.0 Hz), 7.26 (1H, dd, J 5.0 3.8 Hz)

[1250] N-(4-(5-브로모벤조[d]옥사졸-2-일)페닐)아세트아미드

¹H NMR (DMSO): 10.35 (1H, s), 8.14 (2H, d, *J* 8.8 Hz), 8.01 (1H, d, *J* 1.8 Hz), 7.83 (2H, d, *J* 8.7 Hz), 7.76 (1H, d, *J* 8.6 Hz), 7.57 (1H, dd, *J* 8.6 2.0 Hz), 2.11 (3H, s)

[1251]

[1252] N-(4-(5-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-2-일)페닐)아세트아미드

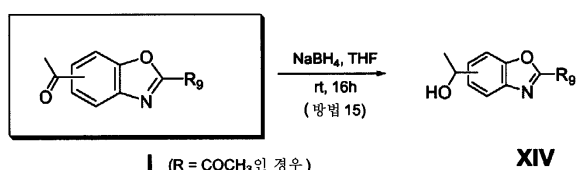
LCMS RT= 7.53분, **MH⁺** 363.0; **¹H NMR (DMSO):** 10.34 (1H, s), 8.17 (2H, d, *J* 8.7 Hz), 8.06-8.04 (1H, m), 7.87-7.82 (3H, m), 7.78 (2H, d, *J* 8.5 Hz), 7.72-7.67 (1H, m), 7.55 (2H, d, *J* 8.6 Hz), 2.12 (3H, s)

[1253]

[1254] N-(4-(5,6-디메틸벤조[d]옥사졸-2-일)-3-히드록시페닐)아세트아미드

LCMS RT= 7.22분, **MH⁺** 297.2; **¹H NMR (DMSO):** 11.24 (1H, br), 10.24 (1H, s), 7.91 (1H, d, *J* 8.6 Hz), 7.59 (2H, d, *J* 6.4 Hz), 7.51 (1H, d, *J* 1.9 Hz), 7.22 (1H, dd, *J* 8.7 2.0 Hz), 2.37 (3H, s), 2.34 (3H, s), 2.09 (3H, s)

[1255]



[1256]

[1257] 방법 15 (화합물 XIV)

[1258] 1-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)에탄올

[1259] 0 °C에서 테트라히드로푸란 중 1-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)에탄올 (150 mg, 0.55 mmol)의 용액에 수소화붕소나트륨 (52 mg, 1.38 mmol)을 첨가하였다. 생성된 혼합물을 실온에서 16시간 동안 교반하였다. 이어서, 반응물을 0 °C에서 1 M 염산 용액으로 킨칭하고, 에틸 아세테이트로 3회 추출하였다. 합한 유기층을 무수 MgSO₄ 상에서 건조시키고, 증발시켰다. 생성된 고체를 구배 (에틸 아세테이트/헥산 1:3 v/v 내지 에틸 아세테이트/헥산 1:2 v/v)를 이용하여 용리하는 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 81.7 mg (54%)의 표제 화합물을 수득하였다.

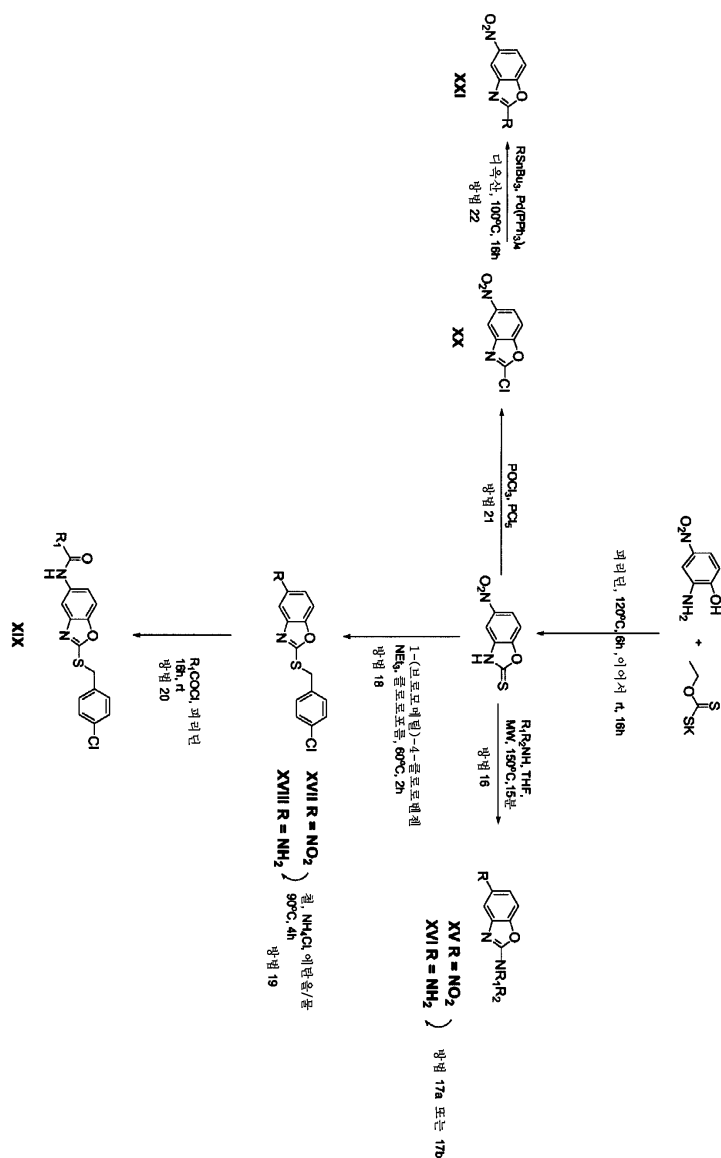
(LCMS RT= 6.47분, **MH⁺** 274.0)
¹H NMR (DMSO): 8.20 (2H, d, *J* 8.7 Hz), 7.76-7.68 (4H, m), 7.44 (1H, dd, *J* 8.6 1.6 Hz), 5.31 (1H, d, *J* 4.3 Hz), 4.92-4.83 (1H, m), 1.38 (3H, d, *J* 6.4 Hz)

[1260]

[1261] 2-(3',4'-디클로로페닐)-5-(1'-히드록시 에틸)-벤즈옥사졸

LCMS RT= 7.18분, **MH⁺** 308.1; **¹H NMR (DMSO):** 8.36 (1H, d, *J* 2.0 Hz), 8.16 (1H, dd, *J* 8.5 2.0 Hz), 7.90 (1H, d, *J* 8.4 Hz), 7.78-7.77 (1H, m), 7.74 (1H, d, *J* 8.4 Hz), 7.47 (1H, dd, *J* 8.6 1.7 Hz), 5.32 (1H, d, *J* 4.3 Hz), 4.93-4.84 (1H, m), 1.39 (3H, d, *J* 6.4 Hz)

[1262]



[1263]

[1264] 5-니트로벤조[d]옥사졸-2(3H)-티온

[1265] 널리 공지된 절차 ([Batista-Parra, A. et al. Heterocycles, 2003, 60, 1367] 참조)에 따라, 건조 피리딘 (10 mL) 중 2-아미노-4-니트로페놀 (1.54 g, 10 mmol) 및 칼륨 0-에틸 카르보디티오에이트 (1.68 g, 10.5 mmol)의 현탁액을 120 °C에서 6시간 동안, 및 이어서 실온에서 16시간 동안 교반하였다. 용액을 물에 붓고, 염산 수용액을 첨가하였다. 생성된 침전물을 여과에 의해 수집하고, 묶은 염산 수용액 및 이어서 물로 세척하고, 진공 오븐에서 건조하여 3.3 g (84%)의 표제 화합물을 수득하였다.

[1266]

¹H NMR (DMSO): 8.18 (1H, dd, J 8.9 2.4 Hz), 7.94 (1H, dd, J 2.4 0.4 Hz), 7.73 (1H, dd, J 8.9 0.4 Hz)

[1267]

방법 16 (화합물 XV)

[1268]

2-모르폴리노-5-니트로벤조[d]옥사졸

[1269]

테트라히드로푸란 (3 mL) 중 5-니트로벤조[d]옥사졸-2(3H)-티온 (98.1 mg, 0.5 mmol) 및 모르폴린 (66 μL, 0.75 mmol)을 마이크로웨이브 내 150 °C에서 15분 동안 가열하였다. 냉각시킨 후, 상기 혼합물을 물에 붓고, 에틸 아세테이트로 추출하였다. 유기층을 염수로 세척하고, 무수 MgSO₄ 상에서 건조시키고, 실리카 상에서 흡착시켰다. 에틸 아세테이트/헥산 25:75 v/v로 용리하는 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 115 mg (92%)의 표제 화합물을 수득하였다.

¹H NMR (DMSO): 8.10 (1H, d, *J* 2.3 Hz), 8.00 (1H, dd, *J* 8.8 2.4 Hz), 7.66 (1H, d, *J* 8.8 Hz), 3.76-3.72 (4H, m), 3.67-3.64 (4H, m)

[1270]

방법 17a (화합물 XVI)

[1271]

2-모르폴리노벤조[d]옥사졸-5-아민

[1272]

에탄올/물 1:1 v/v (10 mL) 중 2-모르폴리노-5-니트로벤조[d]옥사졸 (130 mg, 0.52 mmol)의 용액을 나트륨 디티오나이트 (182 mg, 1.04 mmol)로 실온에서 처리하고, 이어서 16시간 동안 환류하였다. 냉각시킨 후, 혼합물을 물로 희석하고, 에틸 아세테이트로 추출하였다. 유기층을 무수 MgSO₄ 상에서 건조시키고, 증발시켜 35 mg (30%)의 표제 화합물을 수득하였다.

[1273]

¹H NMR (DMSO): 7.03 (1H, d, *J* 8.5 Hz), 6.50 (1H, d, *J* 2.1 Hz), 6.25 (1H, dd, *J* 8.4 2.2 Hz), 4.80 (2H, s), 3.71-3.68 (4H, m), 3.53-3.50 (4H, m)

[1274]

방법 17b (화합물 XVI)

[1275]

N-2-(4-클로로벤질)벤조[d]옥사졸-2,5-디아민

[1276]

90 °C에서 에탄올/물 1:1 v/v (10 mL) 중 N-(4-클로로벤질)-5-니트로벤조[d]옥사졸-2-아민 (150 mg, 0.50 mmol)의 현탁액에 염화암모늄 (53 mg, 1.0 mmol) 및 이어서 철 분말 (140 mg, 2.5 mmol)을 첨가하였다. 생성된 혼합물을 90 °C에서 4시간 동안 교반하였다. 냉각시킨 후, 에틸 아세테이트를 첨가하고, 용액을 셀라이트 (등록상표) 패드를 통해 통과시켰다. 이어서, 유기층을 염수로 세척하고, 무수 MgSO₄ 상에서 건조시키고, 증발시켰다. 생성된 고체를 에틸 아세테이트/헥산 50:50 v/v로 용리하는 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 60 mg (44%)의 표제 화합물을 수득하였다.

[1277]

(LCMS RT= 5.60분, MH⁺ 274.0)

¹H NMR (DMSO): 8.20 (1H, t, *J* 6.2 Hz), 7.42-7.36 (4H, m), 6.97 (1H, d, *J* 8.4 Hz), 6.45 (1H, d, *J* 2.1 Hz), 6.20 (1H, dd, *J* 8.4 2.2 Hz), 4.72 (2H, s), 4.46 (2H, d, *J* 6.2 Hz)

[1278]

방법 18 (화합물 XVII)

[1279]

2-(4-클로로벤질티오)-5-니트로벤조[d]옥사졸

[1280]

클로로포름 (10 mL) 중 5-니트로벤조[d]옥사졸-2(3H)-티온 (196.2 mg, 1.0 mmol)의 현탁액에 트리에틸아민 (278 μL, 2 mmol) 및 이어서 1-(브로모메틸)-4-클로로벤젠 (226 mg, 1.1 mmol)을 첨가하였다. 상기 반응물을 60 °C에서 2시간 동안 교반하였다. 냉각시킨 후, 상기 반응물을 에틸 아세테이트로 희석하고, 묶은 염산 수용액 및 염수로 세척하였다. 합한 유기층을 무수 MgSO₄ 상에서 건조시키고, 증발시켰다. 생성된 고체를 에틸 아세테이트/헥산 1:10 v/v로 용리하는 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 250 mg (78%)의 표제 화합물을 수득하였다.

[1281]

(LCMS RT= 7.64분)

¹H NMR (DMSO): 8.52 (1H, d, *J* 2.3 Hz), 8.27 (1H, dd, *J* 8.9 2.3 Hz), 7.92 (1H, d, *J* 9.0 Hz), 7.58 (2H, d, *J* 8.5 Hz), 7.42 (2H, d, *J* 8.5 Hz), 4.67 (2H, s)

[1282]

방법 19 (화합물 XVIII)

[1283]

2-(4-클로로벤질티오)벤조[d]옥사졸-5-아민

[1284]

90 °C에서 에탄올/물 (5 mL/5 mL) 중 2-(4-클로로벤질티오)-5-니트로벤조[d]옥사졸 (220 mg, 0.70 mmol)의 현탁액에 염화암모늄 (75 mg, 1.4 mmol) 및 이어서 철 분말 (192 mg, 3.44 mmol)을 첨가하였다. 생성된 혼합물을 90 °C에서 4시간 동안 교반하였다. 냉각시킨 후, 에틸 아세테이트를 첨가하고, 용액을 셀라이트 (등록상표) 패드를 통해 통과시켰다. 이어서, 유기층을 염수로 세척하고, 무수 MgSO₄ 상에서 건조시키고, 증발시켜 190 mg (94%)의 표제 화합물을 수득하였다.

[1285]

(LCMS RT= 6.54분, MH⁺ 290.9)

¹H NMR (DMSO): 7.52 (2H, d, *J* 8.7 Hz), 7.40 (2H, d, *J* 8.5 Hz), 7.26 (1H, d, *J* 8.7 Hz), 6.74 (1H, d, *J* 1.9 Hz), 6.54 (1H, dd, *J* 8.7 2.2 Hz), 5.06 (2H, s), 4.55 (2H, s)

[1286]

[1287] 방법 20 (화합물 XIX)

[1288] N-(2-(4-클로로벤질티오)벤조[d]옥사졸-5-일)아세트아미드

[1289] 실온에서 건조 피리딘 (3 mL) 중 2-(4-클로로벤질티오)벤조[d]옥사졸-5-아민 (87 mg, 0.30 mmol)의 용액에 아세트릴 클로라이드 (21 μ L, 0.30 mmol)를 첨가하였다. 생성된 용액을 실온에서 16시간 동안 교반하였다. 이어서, 물을 첨가하고, 침전물을 여과에 의해 수집하고, 묽은 염산 수용액 및 이어서 물로 세척하였다. 디에틸 에테르로 처리하여 40 mg (40%)의 표제 화합물을 수득하였다.

(LCMS RT= 6.40분, MH⁺ 333.1)
¹H NMR (DMSO): 10.08 (1H, s), 8.01 (1H, d, J 1.8 Hz), 7.58-7.52 (3H, m), 7.43-7.35 (3H, m), 4.60 (2H, s), 2.06 (3H, s)

[1290] 하기 화합물을 동일한 일반 방법에 따라 제조하였다.

[1292] N-(2-(4-클로로벤질티오)벤조[d]옥사졸-5-일)이소부티르아미드

LCMS RT= 7.00분, MH⁺ 361.1; ¹H NMR (DMSO): 9.96 (1H, s), 8.04 (1H, d, J 1.8 Hz), 7.58-7.52 (3H, m), 7.43-7.39 (3H, m), 4.60 (2H, s), 2.65-2.60 (1H, m), 1.12 (6H, d, J 6.8 Hz)

[1294] 방법 21 (화합물 XX)

[1295] 2-클로로-5-니트로벤조[d]옥사졸

[1296] 옥시염화인 (21 mL) 중 5-니트로벤조[d]옥사졸-2(3H)-티온 (2.52 g, 12.86 mmol)의 용액에 오염화인 (2.68g, 12.86 mmol)을 한 번에 첨가하였다. 상기 혼합물을 2.5시간 동안 100 °C로 가열하였다. 냉각시킨 후, 과량의 옥시염화인을 진공하에 제거하고, 생성된 혼합물을 특성화 없이 그대로 사용하였다.

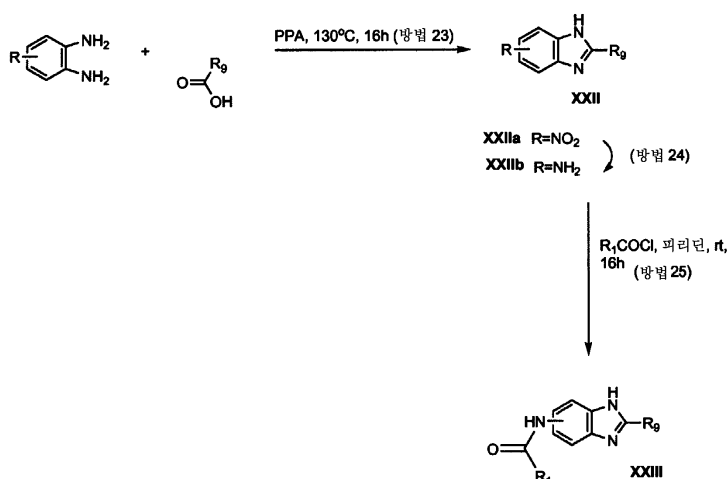
[1297] 방법 22 (화합물 XXI)

[1298] 5-니트로-2-(티오펜-2-일)벤조[d]옥사졸

[1299] 디옥산 (12.2 mL) 중 2-클로로-5-니트로벤조[d]옥사졸 (404 mg, 2.04 mmol), 2-(트리부틸스테닐)-티오펜 (648 μ L, 2.04 mmol) 및 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) (40.8 mg)의 혼합물을 질소하 100 °C에서 16시간 동안 가열하였다. 에틸 아세테이트를 첨가하고, 유기층을 물로 세척하고, 무수 MgSO₄ 상에서 건조시키고, 증발시켰다. 생성된 고체를 에틸 아세테이트/헥산 10:90 v/v로 용리하는 컬럼 크로마토그래피로 정제하고, 이어서 역상 HPLC로 정제하여 3 mg (2%)의 표제 생성물을 수득하였다.

(LCMS RT= 6.95분)
¹H NMR (DMSO): 8.54 (1H, d, J 2.2 Hz), 8.27 (1H, dd, J 9.0 2.3 Hz), 8.04 (1H, dd, J 5.4 1.2 Hz), 7.93 (1H, d, J 9.0 Hz), 7.69 (1H, dd, J 3.7 1.2 Hz), 7.29 (1H, dd, J 5.4 3.7 Hz)

[1300]



[1301]

- [1302] 방법 23 (화합물 XXII)
- [1303] 5-아미노-2-(5,6-디메틸-1H-벤조[d]이미다졸-2-일)페놀
- [1304] 130 °C에서 폴리인산에 4,5-디메틸벤젠-1,2-디아민 (500 mg, 3.67 mmol) 및 4-아미노-2-히드록시벤조산 (562 mg, 3.67 mmol)을 첨가하고, 이어서 생성된 혼합물을 16시간 동안 130 °C로 가열하였다. 이어서, 상기 용액을 물에 붓고, 생성된 침전물을 에틸 아세테이트에 용해하고, Na₂CO₃으로 세척하였다. 수성층을 분리하고, 에틸 아세테이트로 2회 추출하였다. 합한 유기층을 무수 MgSO₄ 상에서 건조시키고, 증발시켰다. 생성된 고체를 에틸 아세테이트/헥산 50:50 v/v로 용리하는 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 260 mg (28%)의 표제 화합물을 수득하였다.
- (LCMS RT= 6.14분, MH⁺ 254.1)
- ¹H NMR (DMSO): 13.07 (1H, s), 12.40 (1H, s), 7.61 (1H, d, J 8.3 Hz), 7.35 (1H, s), 7.24 (1H, s), 6.19 (1H, dd, J 8.5 2.2 Hz), 6.12 (1H, d, J 2.1 Hz), 5.59 (2H, s), 2.32 (3H, s), 2.30 (3H, s)
- [1305]
- [1306] 하기 모든 화합물을 동일한 일반 방법에 따라 제조하였다.
- [1307] 2-(3-메틸-4-니트로페닐)-1H-벤조[d]이미다졸
- LCMS RT= 5.87분, MH⁺ 254.1; ¹H NMR (DMSO): 13.20 (1H, br), 9.31 (1H, s), 8.21-8.19 (2H, m), 7.67-7.64 (2H, m), 7.28-7.25 (2H, m), 2.65 (3H, s)
- [1308]
- [1309] 2-(6-니트로-1H-벤조[d]이미다졸-2-일)페놀
- LCMS RT= 6.48분, MH⁺ 256.0; ¹H NMR (DMSO): 13.50 (1H, br), 12.40 (1H, br), 8.56 (1H, s), 8.20-8.14 (2H, m), 7.84 (1H, d, J 8.8 Hz), 7.48-7.43 (1H, m), 7.12-7.04 (2H, m)
- [1310]
- [1311] 2-(4-클로로페닐)-6-니트로-1H-벤조[d]이미다졸
- LCMS RT= 6.24분, MH⁺ 273.9; ¹H NMR (DMSO): 13.80 (1H, br), 8.54 (1H, d, J 2.1 Hz), 8.29 (2H, d, J 8.6 Hz), 8.21 (1H, dd, J 8.9 2.2 Hz), 7.84 (1H, d, J 8.9 Hz), 7.75 (2H, d, J 8.5 Hz)
- [1312]
- [1313] 방법 24 (화합물 XXIIb)
- [1314] 2-(5-아미노-1H-벤조[d]이미다졸-2-일)페놀
- [1315] 에틸 아세테이트/물/아세트산 1:1:0.01 v/v/v (10 mL) 중 2-(5-니트로-1H-벤조[d]이미다졸-2-일)페놀 (90 mg, 0.35 mmol)에 탄소상 팔라듐 (15 mg)을 첨가하였다. 상기 반응 용기를 질소로 3시간 동안 및 이어서 수소로 3시간 동안 퍼징하고, 이어서 수소하 2시간 동안 교반하였다. 상기 반응 용기를 최종적으로 질소로 3시간 동안 퍼징한 후, 셀라이트 (등록상표) 패드 상에서 여과하고, 에틸 아세테이트로 세척하였다. 유기층을 포화 수성 NaHCO₃으로 세척하였다. 합한 유기층을 무수 MgSO₄ 상에서 건조시키고, 증발시켰다. 생성된 고체를 에틸 아세테이트/헥산 2:1 v/v로 용리하는 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 60 mg (76%)의 표제 화합물을 수득하였다.
- (LCMS RT= 5.39분, MH⁺ 226.1)
- ¹H NMR (DMSO): 13.28 (1H, br), 12.63 (1H, br), 7.72 (1H, d, J 8.4 Hz), 7.33-7.28 (2H, m), 6.99-6.94 (2H, m), 6.71-6.58 (2H, m), 5.12 (2H, s)
- [1316]
- [1317] 방법 25 (화합물 XXIII)
- [1318] N-(2-p-톨릴-1H-벤조[d]이미다졸-5-일)부티르아미드
- [1319] 실온에서 피리딘 (10 mL) 중 2-p-톨릴-1H-벤조[d]이미다졸-5-아민 (150 mg, 0.67 mmol)의 용액에 부티릴 클로라이드 (77 μL, 0.74 mmol)를 첨가하였다. 생성된 혼합물을 실온에서 16시간 동안 교반하였다. 에틸 아세테이트를 첨가하고, 유기층을 포화 수성 황산구리로 2회, 및 이어서 중탄산나트륨 및 염수로 세척하였다. 합한 유기층을 무수 MgSO₄ 상에서 건조시키고, 증발시켰다. 생성된 고체를 에틸 아세테이트/헥산 50:50 v/v로 용리하는 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 56 mg (28%)의 표제 화합물을 수득하였다.

(LCMS RT= 6.96분, MH^+ 294.0)
 1H NMR (DMSO): 12.68 (1H, br), 9.87 (1H, s), 8.08-8.00 (3H, m), 7.52-7.20 (4H, m), 2.38 (3H, s), 2.31 (2H, t, J 7.3 Hz), 1.70-1.58 (2H, m), 0.94 (3H, t, J 7.4 Hz)

[1320]

하기 모든 화합물을 동일한 일반 방법에 따라 제조하였다.

[1321]

N-(2-p-톨릴-1H-벤조[d]이미다졸-5-일)이소부티르아미드

[1322]

LCMS RT= 5.43분, MH^+ 294.1; 1H NMR (DMSO): 12.67 (1H, br), 9.91 (1H, s), 8.08-8.01 (3H, m), 7.50-7.28 (4H, m), 4.03 (1H, q, J 7.2 Hz), 2.38 (3H, s), 1.13 (6H, d, J 6.8 Hz)

[1323]

N-(2-(4-클로로페닐)-1H-벤조[d]이미다졸-5-일)부티르아미드

[1324]

LCMS RT= 5.54분, MH^+ 314.0; 1H NMR (DMSO): 12.85 (1H, br), 9.90 (1H, s), 8.14 (3H, d, J 8.6 Hz), 7.62 (2H, d, J 8.7 Hz), 7.53 (1H, br), 7.25 (1H, br), 2.32 (2H, t, J 7.1 Hz), 1.71-1.58 (2H, m), 0.94 (3H, t, J 7.5 Hz)

[1325]

N-(2-페닐-1H-벤조[d]이미다졸-5-일)이소부티르아미드

[1326]

LCMS RT= 5.32분, MH^+ 280.0; 1H NMR (DMSO): 12.80 (1H, br), 9.85 (1H, s), 8.16-8.09 (3H, m), 7.58-7.47 (4H, m), 7.28 (1H, d, J 8.1 Hz), 2.68-2.60 (1H, m), 1.13 (6H, d, J 6.9 Hz)

[1327]

N-(2-페닐-1H-벤조[d]이미다졸-5-일)부티르아미드

[1328]

LCMS RT= 5.32분, MH^+ 280.0; 1H NMR (DMSO): 12.77 (1H, br), 9.90 (1H, s), 8.15-8.12 (3H, m), 7.58-7.45 (4H, m), 7.26 (1H, br), 2.31 (2H, t, J 7.1 Hz), 1.71-1.58 (2H, m), 0.94 (3H, t, J 7.5 Hz)

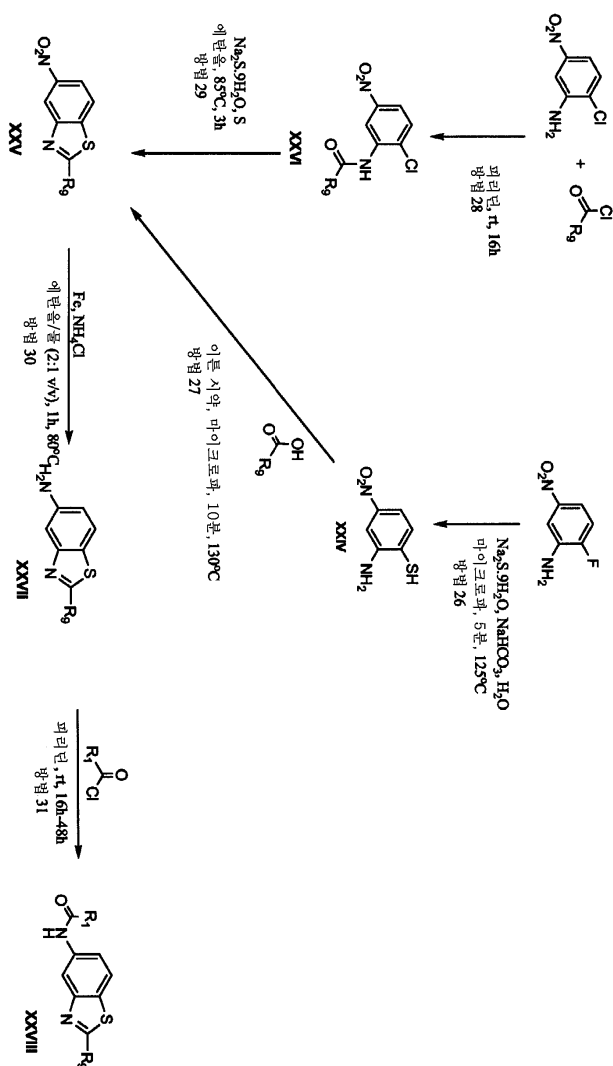
[1329]

N-(2-(4-클로로페닐)-1H-벤조[d]이미다졸-5-일)이소부티르아미드

[1330]

LCMS RT= 5.71분, MH^+ 314.0; 1H NMR (DMSO): 12.89 (1H, br), 9.86 (1H, s), 8.18-8.10 (3H, m), 7.62 (2H, d, J 8.8 Hz), 7.52 (1H, d, J 8.8 Hz), 7.29 (1H, d, J 8.3 Hz), 2.66-2.60 (1H, m), 1.13 (6H, d, J 6.9 Hz)

[1331]



[1332]

[1333] 방법 26 (화합물 XXIV)

[1334] 2-아미노-4-니트로벤젠티올

[1335] 2-플루오로-5-니트로아닐린 (1 g, 6.41 mmol), 황화나트륨 9수화물 (1.7 g, 7.05 mmol), 중탄산나트륨 (600 mg, 7.05 mmol) 및 물 (15 mL)을 합하고, 마이크로웨이브 내 125 °C에서 5분 동안 가열하였다. 냉각시킨 후, 디클로로메탄을 첨가하고, 유기층을 2 M 염산 수용액 및 이어서 염수로 세척하였다. 합한 유기층을 무수 MgSO₄ 상에서 건조시키고, 중발시켜 1.1 g (33%)의 표제 화합물을 수득하였다.

[1336] **¹H NMR (DMSO):** 7.61-7.55 (2H, m), 7.47 (1H, d, *J* 8.2 Hz), 7.31 (3H, s)

[1337] 방법 27 (화합물 XXV)

[1338] 2-(2-클로로페닐)-5-니트로벤조[d]티아졸

[1339] 2-아미노-4-니트로벤젠티올 (315 mg, 1.85 mmol), 2-클로로벤조산 (290 mg, 1.85 mmol) 및 이튼 시약 (5 mL)을 합하고, 마이크로웨이브 내 130 °C에서 10분 동안 가열하였다. 냉각시킨 후, 상기 혼합물을 물에 붓고, 5 M 수성 수산화나트륨으로 염기화하여 침전물을 수득하고, 이를 여과 제거하고, 건조시켜 530 mg (98%)의 표제 화합물을 수득하였다.

¹H NMR (DMSO): 8.93 (1H, d, *J* 2.2 Hz), 8.53 (1H, d, *J* 8.9 Hz), 8.37 (1H, dd, *J* 8.9 2.2 Hz), 8.29 (1H, dd, *J* 7.4 1.9 Hz), 7.78-7.75 (1H, m), 7.70-7.60 (2H, m)

[1340]

[1341] 방법 28 (화합물 XXVI)

- [1342] N-(2-클로로-5-니트로페닐)-4-메틸벤즈아미드
- [1343] 실온에서 피리딘 (5 mL) 중 2-클로로-5-니트로아닐린 (2 g, 11.59 mmol)에 4-메틸염화벤조일 (1.6 mL, 12.17 mmol) 및 이어서 피리딘 (5 mL)을 첨가하였다. 이어서, 상기 혼합물을 실온에서 16시간 동안 교반하였다. 이어서, 에틸 아세테이트를 상기 용액에 첨가하여 침전물을 수득하고, 이를 여과 제거하고, 에틸 아세테이트 및 이어서 헥산으로 2회 세척하였다. 이어서, 생성된 고체를 수성 중탄산나트륨, 1 M 수성 수산화나트륨, 물 및 헥산으로 세척하여 표제 화합물 (1.4 g, 42%)을 수득하였다.
- [1344] **¹H NMR (DMSO):** 10.26 (1H, s), 8.58 (1H, d, *J* 2.8 Hz), 8.11 (1H, dd, *J* 8.9 2.8 Hz), 7.93 (2H, d, *J* 8.2 Hz), 7.87 (1H, d, *J* 8.9 Hz), 7.38 (2H, d, *J* 8.0 Hz), 2.41 (3H, s)
- [1345] 방법 29 (화합물 XXV)
- [1346] 5-니트로-2-p-톨릴벤조[d]티아졸
- [1347] 황화나트륨 9수화물 (875 mg, 3.78 mmol) 및 황 (120 mg, 3.78 mmol)을 녹을 때까지 가열하였다. 질소로 물을 제거하여 고체를 수득하였다. 수득한 고체를 85 °C에서 에탄올 (20 mL) 중 N-(2-클로로-5-니트로페닐)-4-메틸벤즈아미드 (1 g, 3.44 mmol)에 조금씩 첨가하였다. 상기 용액을 85 °C에서 3시간 동안 교반하였다. 냉각시킨 후, 2 M 수성 HCl을 첨가하고, 용액을 에틸 아세테이트로 3회 추출하였다. 합한 유기층을 무수 MgSO₄ 상에서 건조시키고, 증발시켰다. 생성된 고체를 에틸 아세테이트/헥산 10:90 v/v로 용리하는 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 400 mg (43%)의 표제 화합물을 수득하였다.
- [1348] **¹H NMR (DMSO):** 8.81 (1H, d, *J* 2.2 Hz), 8.45 (1H, d, *J* 8.8 Hz), 8.29 (1H, dd, *J* 8.8 2.3 Hz), 8.06 (2H, d, *J* 8.2 Hz), 7.44 (2H, d, *J* 8.0 Hz), 2.42 (3H, s)
- [1349] 방법 30 (화합물 XXVII)
- [1350] 2-p-톨릴벤조[d]티아졸-5-아민
- [1351] 5-니트로-2-p-톨릴벤조[d]티아졸 (400 mg, 1.48 mmol)을 에탄올/물 (8 mL/4 mL)에 현탁하고, 80 °C에서 가열하였다. 염화암모늄 (160 mg, 2.96 mmol) 및 철 분말 (414 mg, 7.40 mmol)을 상기 현탁액에 첨가하고, 혼합물을 80 °C에서 75분 동안 교반하였다. 냉각시킨 후, 상기 용액을 셀라이트 (등록상표) 패드를 통해 여과하고, 상기 패드를 에탄올로 세척하였다. 물을 상기 여액에 붓고, 에탄올을 증발시키고, 남은 수성층을 에틸 아세테이트로 추출하였다. 합한 유기층을 무수 MgSO₄ 상에서 건조시키고, 증발시켜 220 mg (62%)의 표제 화합물을 수득하였다.
- [1352] (LCMS RT= 6.51분, MH⁺ 241.0)
¹H NMR (DMSO): 7.91 (2H, d, *J* 8.1 Hz), 7.68 (1H, d, *J* 8.6 Hz), 7.35 (2H, d, *J* 8.0 Hz), 7.15 (1H, d, *J* 2.0 Hz), 6.77 (1H, dd, *J* 8.6 2.0 Hz), 5.32 (2H, s), 2.39 (3H, s)
- [1353] 하기 모든 화합물을 동일한 일반 방법에 따라 제조하였다.
- [1354] 2-페닐벤조[d]티아졸-5-아민
- [1355] LCMS RT= 6.11분, MH⁺ 227.1; **¹H NMR (DMSO):** 8.04-8.01 (2H, m), 7.71 (1H, d, *J* 8.5 Hz), 7.56-7.53 (3H, m), 7.18 (1H, d, *J* 2.1 Hz), 6.79 (1H, dd, *J* 8.6 2.3 Hz), 5.33 (2H, s)
- [1356] 2-(4-클로로페닐)벤조[d]티아졸-5-아민
- [1357] LCMS RT= 6.72분, MH⁺ 260.7; **¹H NMR (DMSO):** 8.04 (2H, d, *J* 8.7 Hz), 7.72 (1H, d, *J* 8.6 Hz), 7.61 (2H, d, *J* 8.7 Hz), 7.17 (1H, d, *J* 2.0 Hz), 6.80 (1H, dd, *J* 8.6 2.2 Hz), 5.35 (2H, s)
- [1358] 2-(2-클로로페닐)벤조[d]티아졸-5-아민
- [1359] LCMS RT= 6.49분, MH⁺ 260.8; **¹H NMR (DMSO):** 8.19-8.16 (1H, m), 7.76 (1H, d, *J* 8.6 Hz), 7.69-7.66 (1H, m), 7.56-7.52 (2H, m), 7.22 (1H, d, *J* 2.0 Hz), 6.85 (1H, dd, *J* 8.6 2.1 Hz), 5.37 (2H, s)

[1360] 2-(3-클로로페닐)벤조[d]티아졸-5-아민

LCMS RT= 6.79분, **MH⁺** 260.8; **¹H NMR (DMSO):** 8.05-8.04 (1H, m), 7.96 (1H, dt, *J* 7.0 1.7 Hz), 7.74 (1H, d, *J* 8.6 Hz), 7.64-7.55 (2H, m), 7.19 (1H, d, *J* 1.7 Hz), 6.82 (1H, dd, *J* 8.6 2.2 Hz), 5.37 (2H, s)

[1361]

[1362] 2-(3,4-디클로로페닐)벤조[d]티아졸-5-아민

LCMS RT= 7.49분, **MH⁺** 294.9; **¹H NMR (DMSO):** 8.24 (1H, d, *J* 2.1 Hz), 8.00 (1H, dd, *J* 8.4 2.1 Hz), 7.82 (1H, d, *J* 8.4 Hz), 7.76 (1H, d, *J* 8.6 Hz), 7.20 (1H, d, *J* 1.9 Hz), 6.84 (1H, dd, *J* 8.6 2.2 Hz), 5.41 (2H, s)

[1363]

[1364] 2-(2,3-디클로로페닐)벤조[d]티아졸-5-아민

LCMS RT= 7.00분, **MH⁺** 294.9; **¹H NMR (DMSO):** 8.08 (1H, dd, *J* 7.9 1.6 Hz), 7.84 (1H, dd, *J* 8.0 1.6 Hz), 7.78 (1H, d, *J* 8.6 Hz), 7.55 (1H, t, *J* 8.0 Hz), 7.22 (1H, d, *J* 2.0 Hz), 6.87 (1H, dd, *J* 8.6 2.2 Hz), 5.38 (2H, s)

[1365]

[1366] 방법 31 (화합물 XXVIII)

[1367] N-(2-p-톨릴벤조[d]티아졸-5-일)부티르아미드

[1368] 실온에서 피리딘 (3 mL) 중 2-p-톨릴벤조[d]티아졸-5-아민 (110 mg, 0.46 mmol)의 용액에 부티릴 클로라이드 (53 μ L, 0.50 mmol)를 첨가하였다. 생성된 혼합물을 실온에서 2일 동안 교반하였다. 에틸 아세테이트를 첨가하고, 유기층을 포화 수성 황산구리, 이어서 수성 중탄산나트륨 및 최종적으로 염수로 세척하였다. 합한 유기층을 무수 MgSO₄ 상에서 건조시키고, 증발시켰다. 생성된 고체를 에틸 아세테이트/헥산 50:50 v/v로 용리하는 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 25 mg (18%)의 표제 화합물을 수득하였다.

(LCMS RT= 7.10분, **MH⁺** 311.0)

¹H NMR (DMSO): 10.12 (1H, s), 8.43 (1H, d, *J* 1.8 Hz), 8.02-7.96 (3H, m), 7.58 (1H, dd, *J* 8.6 2.0 Hz), 7.38 (2H, d, *J* 8.0 Hz), 2.40 (3H, s), 2.35 (2H, t, *J* 7.5 Hz), 1.72-1.60 (2H, m), 0.95 (3H, t, *J* 7.4 Hz)

[1369]

[1370] 하기 모든 화합물을 동일한 일반 방법에 따라 제조하였다.

[1371] N-(2-p-톨릴벤조[d]티아졸-5-일)이소부티르아미드

LCMS RT= 7.06분, **MH⁺** 311.0; **¹H NMR (DMSO):** 10.08 (1H, s), 8.44 (1H, d, *J* 1.3 Hz), 8.03-7.96 (3H, m), 7.60 (1H, dd, *J* 8.7 1.6 Hz), 7.38 (2H, d, *J* 8.0 Hz), 2.69-2.60 (1H, m), 2.40 (3H, s), 1.15 (6H, d, *J* 6.8 Hz)

[1372]

[1373] N-(2-페닐벤조[d]티아졸-5-일)이소부티르아미드

LCMS RT= 6.56분, **MH⁺** 297.0; **¹H NMR (DMSO):** 10.07 (1H, s), 8.47 (1H, d, *J* 1.8 Hz), 8.11-8.07 (2H, m), 8.04 (1H, d, *J* 8.6 Hz), 7.64-7.56 (4H, m), 2.70-2.61 (1H, m), 1.15 (6H, d, *J* 6.8 Hz)

[1374]

[1375] N-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]티아졸-5-일)이소부티르아미드

LCMS RT= 7.42분, **MH⁺** 331.0; **¹H NMR (DMSO):** 10.08 (1H, s), 8.47 (1H, d, *J* 1.9 Hz), 8.10 (2H, d, *J* 8.6 Hz), 8.05 (1H, d, *J* 8.7 Hz), 7.67-7.61 (3H, m), 2.70-2.60 (1H, m), 1.15 (6H, d, *J* 6.8 Hz)

[1376]

[1377] N-(2-(2-클로로페닐)벤조[d]티아졸-5-일)이소부티르아미드

LCMS RT= 6.99분, **MH⁺** 330.9; **¹H NMR (DMSO):** 10.12 (1H, s), 8.55 (1H, d, *J* 1.9 Hz), 8.25-8.22 (1H, m), 8.10 (1H, d, *J* 8.8 Hz), 7.74-7.55 (4H, m), 2.72-2.63 (1H, m), 1.17 (6H, d, *J* 6.8 Hz)

[1378]

[1379] N-(2-(3-클로로페닐)벤조[d]티아졸-5-일)이소부티르아미드

LCMS RT= 7.34분, **MH⁺** 330.9; **¹H NMR (DMSO):** 10.11 (1H, s), 8.50 (1H, d, *J* 1.7 Hz), 8.13-8.03 (3H, m), 7.69-7.60 (3H, m), 2.71-2.62 (1H, m), 1.17 (6H, d, *J* 6.8 Hz)

[1380]

[1381] N-(2-(3,4-디클로로페닐)벤조[d]티아졸-5-일)이소부티르아미드

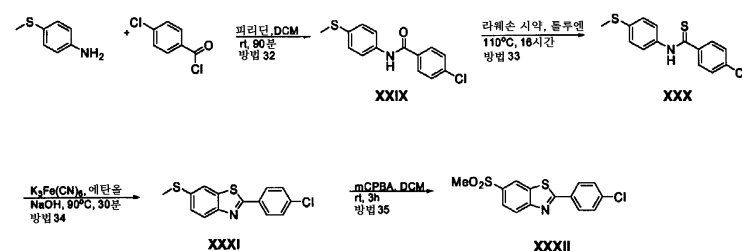
LCMS RT= 8.21분, **MH⁺** 364.7; **¹H NMR (DMSO):** 10.11 (1H, s), 8.52-8.50 (1H, m), 8.30 (1H, d, *J* 2.1 Hz), 8.10-8.04 (2H, m), 7.85 (1H, d, *J* 8.4 Hz), 7.69-7.64 (1H, m), 2.71-2.64 (1H, m), 1.17 (6H, d, *J* 6.8 Hz)

[1382]

[1383] N-(2-(2,3-디클로로페닐)벤조[d]티아졸-5-일)이소부티르아미드

LCMS RT= 7.62분, **MH⁺** 364.9; **¹H NMR (DMSO):** 10.12 (1H, s), 8.55 (1H, d, *J* 1.7 Hz), 8.14-8.10 (2H, m), 7.88 (1H, dd, *J* 8.0 1.4 Hz), 7.67 (1H, dd, *J* 8.8 2.0 Hz), 7.58 (1H, t, *J* 8.0 Hz), 2.70-2.61 (1H, m), 1.15 (6H, d, *J* 6.8 Hz)

[1384]



[1385]

[1386] 방법 32 (화합물 XXIX)

[1387] 4-클로로-N-(4-(메틸티오)페닐)벤즈아미드

[1388] 디클로로메탄 (20 mL) 중 4-(메틸티오)아닐린 (1 mL, 8.19 mmol)에 피리딘 (2 mL, 24.6 mmol)을 첨가하였다. 생성된 용액을 10 내지 15 °C로 냉각하고, 4-클로로염화벤조일 (1.14 mL, 9.00 mmol)을 5분에 걸쳐 첨가하였다. 상기 혼합물을 실온에서 90분 동안 교반하였다. 침전물을 여과 제거하고, 디클로로메탄, 1 M 수산화나트륨 수용액 및 1 M 염산 수용액으로 세척하여 2.12 g (93%)의 표제 화합물을 수득하였다.

¹H NMR (DMSO): 10.31 (1H, s), 7.98 (2H, d, *J* 8.7 Hz), 7.73 (2H, d, *J* 8.8 Hz), 7.61 (2H, d, *J* 8.8 Hz), 7.28 (2H, d, *J* 8.8 Hz), 2.47 (3H, s)

[1389]

[1390] 방법 33 (화합물 XXX)

[1391] 4-클로로-N-(4-(메틸티오)페닐)벤조티오아미드

[1392] 톨루엔 (25 mL) 중 4-클로로-N-(4-(메틸티오)페닐)벤즈아미드 (1 g, 3.60 mmol) 및 라웨손 시약 (875 mg, 2.16 mmol)의 현탁액을 16시간 동안 110 °C로 가열하였다. 냉각시킨 후, 톨루엔을 진공하에 제거하고, 생성된 고체를 구배 (헥산 내지 에틸 아세테이트/헥산 30:70 v/v)를 이용하여 용리하는 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 503 mg (48%)의 표제 화합물을 수득하였다.

LCMS RT= 6.98분, **MH⁺** 294.1; **¹H NMR (DMSO):** 11.80 (1H, s), 7.85 (2H, d, *J* 8.6 Hz), 7.78 (2H, d, *J* 8.7 Hz), 7.54 (2H, d, *J* 8.6 Hz), 7.33 (2H, d, *J* 8.7 Hz)

[1393]

[1394] 방법 34 (화합물 XXXI)

[1395] 2-(4-클로로페닐)-6-(메틸티오)벤조[d]티아졸

[1396] 90 °C에서 물 (5 mL) 중 6시아노철산(III)칼륨 (670 mg, 2.04 mmol)의 용액에 에탄올 (2 mL) 및 3 M 수산화나트륨 수용액 (1.4 mL, 4.08 mmol) 중 4-클로로-N-(4-(메틸티오)페닐)벤조티오아미드 (150 mg, 0.51 mmol)의 용액을 5분에 걸쳐 첨가하였다. 생성된 혼합물을 90 °C에서 30분 동안 가열하였다. 냉각시킨 후, 형성된 침전물을 여과 제거하고, 물로 세척하여 황색 고체를 수득하였다. 황색 고체를 구배 (헥산 내지 에틸 아세테이트/헥산 5:95 v/v)를 이용하여 용리하는 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 100 mg (67%)의 표제 화합물을 수득하였다.

(LCMS RT= 9.37분, MH^+ 292.2)

1H NMR (DMSO): 8.11-8.06 (3H, m), 7.98 (1H, d, J 8.6 Hz), 7.65 (2H, d, J 8.7 Hz), 7.45 (1H, dd, J 8.6 1.9 Hz), 2.58 (3H, s)

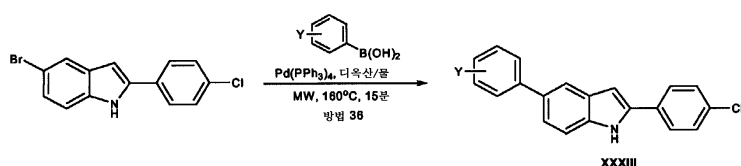
방법 35 (화합물 XXXII)

2-(4-클로로페닐)-6-(메틸술폰닐)벤조[d]티아졸

디클로로메탄 (20 mL) 중 2-(4-클로로페닐)-6-(메틸티오)벤조[d]티아졸 (240 mg, 0.82 mmol)의 용액에 3-클로로퍼옥시벤조산 (물 중 77%, 710 mg, 4.11 mmol)을 5분에 걸쳐 첨가하였다. 생성된 혼합물을 실온에서 3시간 동안 교반하였다. 1 M 수산화나트륨 수용액을 조심스럽게 첨가하고, 이어서 상기 혼합물을 5분 동안 교반하고, 유기층을 1 M 수산화나트륨 수용액으로 세척하고, 무수 $MgSO_4$ 상에서 건조시키고, 증발시켰다. 생성된 고체를 고온의 에틸 아세테이트로부터 재결정화하여 125 mg (47%)의 표제 화합물을 수득하였다.

(LCMS RT= 6.81분, MH^+ 324.0)

1H NMR ($CDCl_3$): 8.61 (1H, dd, J 1.8 0.4 Hz), 8.26 (1H, dd, J 8.6 0.5 Hz), 8.14-8.09 (3H, m), 7.57 (2H, d, J 8.6 Hz), 3.19 (3H, s)



방법 36 (화합물 XXXIII)

2-(4-클로로페닐)-5-페닐-1H-인돌

디옥산/물 4:1 v/v (5 mL) 중 5-브로모-2-(4-클로로페닐)-1H-인돌 (200 mg, 0.65 mmol)의 현탁액에 페닐보론산 (87 mg, 0.72 mmol) 및 수 밀리그램의 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0)을 첨가하였다. 생성된 현탁액을 마이크로웨이브 내 160 °C에서 15분 동안 가열하였다. 냉각시킨 후, 상기 반응물을 물에 부어 침전물을 수득하고, 이를 여과 제거하고, 물로 세척하였다. 생성된 고체를 구배 (헥산 내지 에틸 아세테이트/헥산 30:70 v/v)를 이용하여 용리하는 컬럼 크로마토그래피로 정제하고, 이어서 고온의 에틸 아세테이트로부터 재결정화하여 21 mg (11%)의 표제 화합물을 수득하였다.

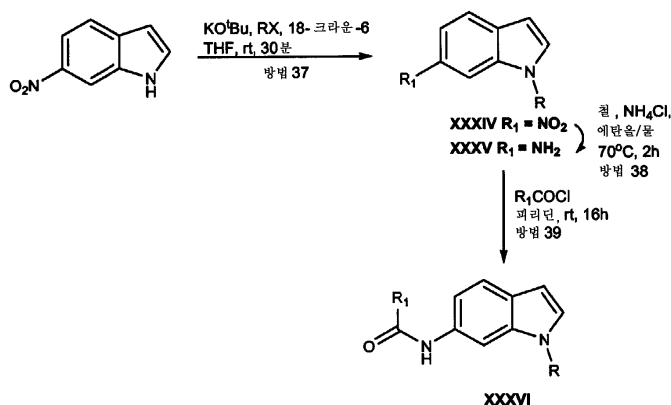
(LCMS RT= 8.54분, MH^+ 304.1)

1H NMR (DMSO): 11.68 (1H, s), 7.91 (2H, d, J 8.6 Hz), 7.81 (1H, d, J 1.1 Hz), 7.70-7.66 (2H, m), 7.55 (2H, d, J 8.6 Hz), 7.50-7.41 (4H, m), 7.33-7.28 (1H, m), 7.01 (1H, d, J 1.2 Hz)

하기 화합물을 동일한 일반 방법에 따라 제조하였다.

N-(4-(2-(4-클로로페닐)-1H-인돌-5-일)페닐)아세트아미드

LCMS RT= 6.69분, MH^+ 361.0; 1H NMR (DMSO): 11.64 (1H, s), 9.98 (1H, s), 7.91 (2H, d, J 8.6 Hz), 7.77 (1H, d, J 1.0 Hz), 7.68-7.60 (4H, m), 7.54 (2H, d, J 8.6 Hz), 7.46 (1H, d, J 8.3 Hz), 7.41 (1H, dd, J 8.5 1.6 Hz), 6.99 (1H, d, J 1.5 Hz), 2.07 (3H, s)



방법 37 (화합물 XXXIV)

1-메틸-6-니트로-1H-인돌

실온에서 무수 테트라히드로푸란 (2 mL) 중 6-니트로-1H-인돌 (100 mg, 0.62 mmol) 및 18-크라운-6 (180 mg, 0.68 mmol)의 용액에 칼륨 *tert*-부톡사이드 (76 mg, 0.68 mmol) 및 이어서 메틸 요오드화물 (42 μL , 0.68 mmol)을 서서히 첨가하였다. 상기 용액을 실온에서 30분 동안 교반하였다. 테트라히드로푸란을 진공하에 제거하였다. 에틸 아세테이트를 첨가하고, 유기층을 물 및 이어서 염수로 세척하였다. 합한 유기층을 무수 MgSO_4 상에서 건조시키고, 증발시켜 91 mg (84%)의 표제 화합물을 수득하였다.

$^1\text{H NMR}$ (CDCl_3): 8.16 (1H, d, J 1.8 Hz), 7.85 (1H, dd, J 8.7 1.9 Hz), 7.49 (1H, d, J 8.7 Hz), 7.19 (1H, d, J 3.1 Hz), 6.43 (1H, dd, J 3.1 0.9 Hz), 3.74 (3H, s)

방법 38 (화합물 XXXV)

1-메틸-1H-인돌-6-아민

1-메틸-6-니트로-1H-인돌 (90 mg, 0.51 mmol), 염화암모늄 (55 mg, 1.02 mmol) 및 철 분말 (143 mg, 2.55 mmol)을 에탄올/물 (2 mL/1 mL)에 현탁시키고, 70 °C에서 2시간 동안 가열하였다. 냉각시킨 후, 상기 용액을 셀라이트 (등록상표) 패드를 통해 여과하고, 이를 에탄올로 세척하였다. 에틸 아세테이트를 여액에 첨가하고 유기층을 물로 2회 세척하였다. 합한 유기층을 무수 MgSO_4 상에서 건조시키고, 증발시켜 30 mg (37%)의 표제 화합물을 수득하였다.

$^1\text{H NMR}$ (DMSO): 7.17 (1H, d, J 8.4 Hz), 6.93 (1H, d, J 3.1 Hz), 6.51-6.49 (1H, m), 6.41 (1H, dd, J 8.3 1.9 Hz), 6.16 (1H, d, J 3.1 Hz), 4.76 (2H, s), 3.60 (3H, s)

방법 39 (화합물 XXXVD)

N-(1-메틸-1H-인돌-6-일)이소부티르아미드

실온에서 피리딘 (2 mL) 중 1-메틸-1H-인돌-6-아민 (45 mg, 0.31 mmol)의 용액에 이소부틸릴 클로라이드 (35 μL , 0.34 mmol)를 첨가하였다. 생성된 혼합물을 실온에서 16시간 동안 교반하였다. 에틸 아세테이트를 첨가하고, 유기층을 3시간 동안 염수로 세척하였다. 합한 유기층을 무수 MgSO_4 상에서 건조시키고, 증발시켜 24.3 mg (36%)의 표제 화합물을 수득하였다.

(LCMS RT= 5.73분, MH^+ 217.2)

$^1\text{H NMR}$ (DMSO): 9.78 (1H, s), 7.96 (1H, m), 7.44 (1H, d, J 8.4 Hz), 7.24 (1H, d, J 3.1 Hz), 7.08 (1H, dd, J 8.4 1.7 Hz), 6.35 (1H, dd, J 3.0 0.7 Hz), 3.73 (3H, s), 2.68-2.61 (1H, m), 1.13 (6H, d, J 6.9 Hz)

하기 화합물을 동일한 일반 방법에 따라 제조하였다.

(90 mL) 중 N-(2-히드록시-5-니트로페닐)부티르아미드 (1 g, 4.46 mmol)의 용액을 첨가하였다. 이어서, 상기 용액을 0 °C에서 30분 동안 교반하였다. 트리플루오로메탄술폰산 무수물 (825 μ L, 4.90 mmol)을 10분에 걸쳐 0 °C에서 적가하였다. 0 °C에서 3시간 후, 상기 용액을 실온에서 3시간 동안 교반하였다. 물을 첨가하고, 수성층을 에틸 아세테이트로 추출하였다. 이어서, 유기층을 묽은 염산 수용액, 수성 중탄산나트륨 및 염수로 세척하였다. 합한 유기층을 무수 $MgSO_4$ 상에서 건조시키고, 증발시켰다. 생성된 오일을 구배 (헥산 내지 에틸 아세테이트/헥산 25:75 v/v)를 이용하여 용리하는 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 860 mg (54%)의 표제 화합물을 수득하였다.

¹H NMR (CDCl₃): 9.37 (1H, d, *J* 2.8 Hz), 8.09 (1H, dd, *J* 9.1 2.8 Hz), 7.53 (2H, d, *J* 9.1 Hz), 2.50 (2H, t, *J* 7.6 Hz), 1.91-1.78 (2H, m), 1.09 (3H, t, *J* 7.5 Hz)

방법 42 (화합물 XXXIX)

N-(5-니트로-2-(페닐에티닐)페닐)부티르아미드

질소하 건조 아세트니트릴 (30 mL) 중 2-부티르아미도-4-니트로페닐 트리플루오로메탄술포네이트 (860 mg, 2.42 mmol)의 용액에 테트라부틸암모늄 요오드화물 (1.34 g, 3.62 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) (280 mg, 0.24 mmol) 및 요오드화구리 (140 mg, 0.72 mmol)를 첨가하였다. 이어서, 트리에틸아민 (6 mL) 및 이어서 페닐 아세틸렌 (530 μ L, 4.83 mmol)을 첨가하였다. 생성된 용액을 실온에서 2시간 동안 교반하였다. 이어서, 염화암모늄을 첨가하여 상기 반응을 캔칭하고, 수성층을 에틸 아세테이트로 추출하였다. 유기층을 염수로 세척하였다. 합한 유기층을 무수 $MgSO_4$ 상에서 건조시키고, 증발시켰다. 생성된 고체를 구배 (헥산 내지 에틸 아세테이트)를 이용하여 용리하는 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 580 mg (78%)의 표제 화합물을 수득하였다.

¹H NMR (DMSO): 9.81 (1H, s), 8.74 (1H, d, *J* 2.3 Hz), 8.01 (1H, dd, *J* 8.6 2.4 Hz), 7.83 (1H, d, *J* 8.6 Hz), 7.70-7.67 (2H, m), 7.52-7.49 (3H, m), 1.73-1.61 (2H, m), 0.96 (3H, t, *J* 7.5 Hz)

방법 43 (화합물 XLa)

6-니트로-2-페닐-1H-인돌

질소하 1-메틸-2-피롤리딘논 (20 mL) 중 N-(5-니트로-2-(페닐에티닐)페닐)부티르아미드 (580 mg, 1.88 mmol)의 용액에 칼륨 *tert*-부톡사이드 (243 mg, 2.16 mmol)를 첨가하였다. 생성된 용액을 70 °C에서 6시간 동안 가열하고, 이어서 실온에서 16시간 두었다. 물을 첨가하고, 수성층을 에틸 아세테이트로 수 회 추출하였다. 합한 유기층을 물로 10시간 동안, 염수로 3시간 동안 세척하고, 무수 $MgSO_4$ 상에서 건조시키고, 증발시켰다. 생성된 물질을 에틸 아세테이트/헥산 15:85 v/v로 용리하는 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 175 mg (39%)의 표제 화합물을 수득하였다.

¹H NMR (DMSO): 12.35 (1H, s), 8.30 (1H, d, *J* 2.1 Hz), 7.97-7.90 (3H, m), 7.73 (1H, d, *J* 8.9 Hz), 7.57-7.52 (2H, m), 7.47-7.42 (1H, m), 7.17 (1H, dd, *J* 2.0 0.8 Hz)

방법 44 (화합물 XLb)

1-메틸-6-니트로-2-페닐-1H-인돌

실온에서 무수 테트라히드로푸란 (2 mL) 중 6-니트로-2-페닐-1H-인돌 (106 mg, 0.44 mmol) 및 18-크라운-6 (130 mg, 0.49 mmol)의 용액에 칼륨 *tert*-부톡사이드 (55 mg, 0.49 mmol) 및 이어서 메틸 요오드화물 (31 μ L, 0.49 mmol)을 첨가하였다. 상기 용액을 실온에서 30분 동안 교반하였다. 테트라히드로푸란을 진공하에 제거하였다. 에틸 아세테이트를 첨가하고, 유기층을 물 및 이어서 염수로 세척하였다. 합한 유기층을 무수 $MgSO_4$ 상에서 건조시키고, 증발시켜 110 mg (98%)의 표제 화합물을 수득하였다.

¹H NMR (DMSO): 8.60 (1H, d, *J* 2.1 Hz), 8.03 (1H, dd, *J* 8.8 2.1 Hz), 7.82 (1H, d, *J* 8.7 Hz), 7.74-7.71 (2H, m), 7.67-7.57 (3H, m), 6.87 (1H, d, *J* 0.8 Hz), 3.95 (3H, s)

방법 45 (화합물 XLI)

2-페닐-1H-인돌-6-아민

[1449] 6-니트로-2-페닐-1H-인돌 (175 mg, 0.73 mmol), 염화암모늄 (80 mg, 1.47 mmol) 및 철 분말 (205 mg, 3.68 mmol)을 에탄올/물 (4 mL/2 mL)에 현탁시키고, 70 °C에서 2시간 동안 가열하였다. 냉각시킨 후, 용액을 셀라이트 (등록상표) 패드를 통해 여과하고, 이를 에탄올로 세척하였다. 유기층을 진공에서 증발시켜 고체를 수득하고, 구배 (에틸 아세테이트/헥산 10:90 v/v 내지 에틸 아세테이트/헥산 50:50 v/v)를 이용하여 용리하는 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 54 mg (35%)의 표제 화합물을 수득하였다.

¹H NMR (DMSO): 10.88 (1H, s), 7.76-7.72 (2H, m), 7.39 (2H, t, *J* 7.9 Hz), 7.23-7.16 (2H, m), 6.67 (1H, dd, *J* 2.0 0.7 Hz), 6.59-6.57 (1H, m), 6.39 (1H, dd, *J* 8.4 2.0 Hz), 4.82 (2H, s)

[1450]

[1451] 방법 46 (화합물 XLII)

[1452] N-(2-페닐-1H-인돌-6-일)이소부티르아미드

[1453] 실온에서 피리딘 (2 mL) 중 2-페닐-1H-인돌-6-아민 (54 mg, 0.26 mmol)의 용액에 이소부틸 클로라이드 (30 μL, 0.29 mmol)를 첨가하였다. 생성된 혼합물을 실온에서 2일 동안 교반하였다. 물을 첨가하였을 때, 침전물이 형성되었다. 상기 고체를 고온의 에틸 아세테이트로부터 재결정화하여 15 mg (21%)의 표제 화합물을 수득하였다.

(LCMS RT= 6.27분, MH⁺ 279.0)

¹H NMR (DMSO): 11.40 (1H, s), 9.74 (1H, s), 8.02 (1H, s), 7.82 (2H, d, *J* 7.5 Hz), 7.47-7.40 (3H, m), 7.28 (1H, t, *J* 7.3 Hz), 7.07 (1H, dd, *J* 8.5 1.6 Hz), 6.83 (1H, d, *J* 1.1 Hz), 2.67-2.60 (1H, m), 1.13 (6H, d, *J* 6.7 Hz)

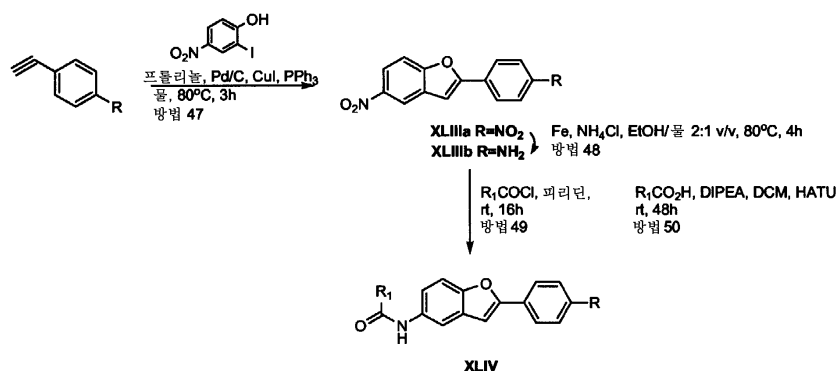
[1454]

[1455] 하기 화합물을 동일한 일반 방법에 따라 제조하였다.

[1456] N-(1-메틸-2-페닐-1H-인돌-6-일)이소부티르아미드

LCMS RT= 6.66분, MH⁺ 293.2; ¹H NMR (DMSO): 9.83 (1H, s), 8.02 (1H, s), 7.61-7.39 (6H, m), 7.13 (1H, dd, *J* 8.5 1.7 Hz), 6.50 (1H, d, *J* 0.5 Hz), 3.69 (3H, s), 2.69-2.60 (1H, m), 1.13 (6H, d, *J* 6.8 Hz)

[1457]



[1458]

[1459] 방법 47 (화합물 XLIIIa)

[1460] 5-니트로-2-페닐벤조푸란

[1461] 물 (6 mL) 중 2-요오도-4-니트로페놀 (500 mg, 1.89 mmol), 프롤리놀 (573 mg, 5.66 mmol), 탄소상 팔라듐 (60 mg, 0.06 mmol), 트리페닐포스핀 (59.4 mg, 0.226 mmol) 및 요오드화구리 (22 mg, 0.113 mmol)의 용액을 1시간 동안 실온에서 교반하였다. 에틸벤젠 (482 mg, 4.72 mmol)을 서서히 첨가하고, 생성된 혼합물을 80 °C에서 3시간 동안 가열하였다. 냉각시킨 후, 에틸 아세테이트를 첨가하고, 혼합물을 셀라이트 (등록상표) 패드를 통과시켰다. 여액을 물로 세척하였다. 합한 유기층을 무수 MgSO₄ 상에서 건조시키고, 증발시켰다. 생성된 물질을 에틸 아세테이트/헥산 1:40 v/v로 용리하는 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 134 mg (30%)의 표제 화합물을 수득하였다.

¹H NMR (DMSO): 8.62 (1H, d, *J* 2.4 Hz), 8.23 (1H, dd, *J* 9.1 2.5 Hz), 8.00-7.96 (2H, m), 7.89 (1H, d, *J* 9.0 Hz), 7.66 (1H, d, *J* 0.4 Hz), 7.60-7.46 (3H, m)

방법 48 (화합물 XLIIIb)

2-페닐벤조푸란-5-아민

80 °C에서 에탄올/물 2:1 v/v (12 mL) 중 5-니트로-2-페닐벤조푸란 (250 mg, 1.04 mmol)에 염화암모늄 (112 mg, 2.09 mmol) 및 철 분말 (292 mg, 5.23 mmol)을 첨가하였다. 생성된 혼합물을 80 °C에서 4시간 동안 가열하였다. 냉각시킨 후, 용액을 셀라이트 (등록상표) 패드를 통해 여과하고, 이를 에탄올로 세척하였다. 유기층을 진공에서 증발시켜 고체를 수득하고, 이어서 에틸 아세테이트에 용해하고, 물로 세척하였다. 합한 유기층을 무수 MgSO₄ 상에서 건조시키고, 증발시켜 211 mg (96%)의 표제 화합물을 수득하였다.

¹H NMR (DMSO): 7.87-7.83 (2H, m), 7.50-7.44 (2H, m), 7.40-7.34 (1H, m), 7.28 (1H, d, *J* 8.7 Hz), 7.20 (1H, d, *J* 0.7 Hz), 6.74 (1H, d, *J* 2.2 Hz), 6.60 (1H, dd, *J* 8.7 2.3 Hz), 4.88 (2H, s)

방법 49 (화합물 XLIV)

N-(2-페닐벤조푸란-5-일)이소부티르아미드

실온에서 피리딘 (5 mL) 중 2-페닐벤조푸란-5-아민 (210 mg, 1.00 mmol)의 용액에 이소부티릴 클로라이드 (120 μL, 1.10 mmol)를 첨가하였다. 생성된 혼합물을 실온에서 16시간 동안 교반하였다. 에틸 아세테이트를 첨가하고, 유기층을 황산구리 포화 수용액 및 이어서 탄산칼륨 포화 수용액으로 세척하였다. 합한 유기층을 무수 MgSO₄ 상에서 건조시키고, 증발시켰다. 생성된 물질을 구배 (에틸 아세테이트/헥산 1:3 v/v 내지 에틸 아세테이트/헥산 1:2 v/v)를 이용하여 용리하는 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 134 mg (48%)의 표제 화합물을 수득하였다.

(LCMS RT= 6.81분, MH⁺ 280.1)

¹H NMR (DMSO): 9.87 (1H, s), 8.05 (1H, s), 7.91 (2H, d, *J* 7.4 Hz), 7.58-7.48 (3H, m), 7.45-7.38 (3H, m), 2.66-2.54 (1H, m), 1.13 (6H, d, *J* 6.8 Hz)

하기 화합물을 동일한 일반 방법에 따라 제조하였다.

2-(4'-클로로페닐)-5-이소부티르아미도-벤조푸란

LCMS RT= 7.41분, MH⁺ 314.2; ¹H NMR (DMSO): 9.88 (1H, s), 8.06 (1H, d, *J* 1.9 Hz), 7.92 (2H, d, *J* 8.7 Hz), 7.59-7.53 (3H, m), 7.49 (1H, d, *J* 0.8 Hz), 7.43 (1H, dd, *J* 9.0 2.2 Hz), 2.66-2.56 (1H, m), 1.13 (6H, d, *J* 6.8 Hz)

방법 50 (화합물 XLIV)

2-페닐-5-(3',3',3'-트리플루오로프로판아미도)벤조푸란

건조 디클로로메탄 (10 mL) 중 3,3,3-트리플루오로프로판산 (136 mg, 1.06 mmol)에 HATU (468 mg, 1.23 mmol) 및 디이소프로필에틸아민 (580 μL, 3.35 mmol)을 첨가하였다. 이어서, 혼합물을 실온에서 10분 동안 교반하였다. 이어서, 2-페닐벤조푸란-5-아민 (234 mg, 1.12 mmol)을 첨가하고, 생성된 혼합물을 실온에서 48시간 동안 교반하였다. 에틸 아세테이트를 첨가하고, 유기층을 포화 수성 물로 1회 세척하였다. 합한 유기층을 MgSO₄ 상에서 건조시키고, 증발시켰다. 생성된 고체를 구배 (에틸 아세테이트/헥산 1:3 v/v 내지 에틸 아세테이트/헥산 1:1 v/v)를 이용하여 용리하는 컬럼 크로마토그래피로 정제하고, 이어서 에틸 아세테이트에서 처리하여 99.3 mg (28%)의 표제 화합물을 수득하였다.

(LCMS RT= 6.62분)

¹H NMR (DMSO): 10.37 (1H, s), 8.01 (1H, d, *J* 2.0 Hz), 7.92 (2H, dd, *J* 7.5 1.5 Hz), 7.61 (1H, d, *J* 8.8 Hz), 7.55-7.41 (4H, m), 7.38 (1H, dd, *J* 8.9 2.2 Hz), 3.53 (2H, q, *J* 11.2 Hz)

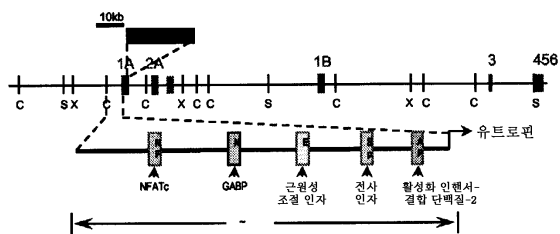
표 2에 열거된 화합물은 상기에 기재된 바와 유사한 방법, 또는 당업자에게 공지되거나 이들에 의해 개조된 방

법으로 제조될 수 있다.

도면

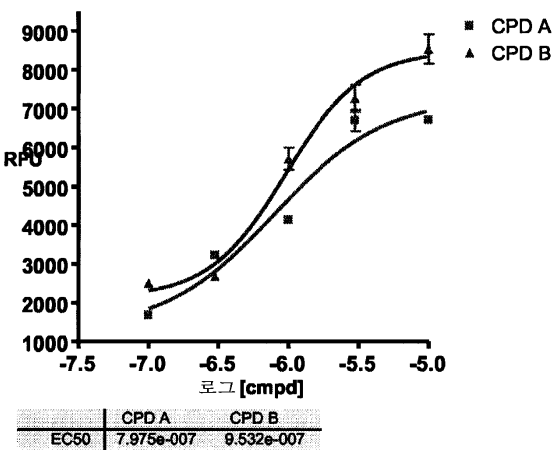
도면1

루시페라제 리포터 분석(뮤린 H2K 세포)



도면2

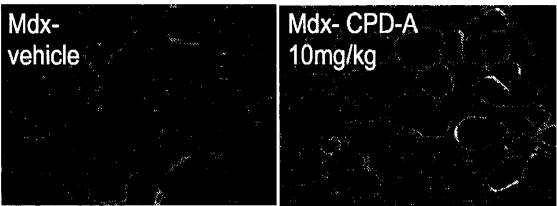
투여량 의존성 루시페라제 유도



CPD A - 5-아미노-2-(5,6-디메틸벤조[d]옥사졸-2-일)페놀
CPD B - 2-(4-(디에틸아미노)페닐)-6-메틸-2H-벤조[d][1,2,3]트리아졸-5-아민

도면3

마우스 유트로핀에 특이적인 항체로 염색된 TA 근육 절편의 일례



도면4

대조군에 비해 증가된 수준의 유트로핀 발현을 나타내는,
CPD-A (V2 및 V3)에 노출된 마우스

