[19]中华人民共和国国家知识产权局

[51]Int.Cl[6]
C07D417/14
A61K 31/425

[12]发明专利说明书

[21] ZL 专利号 95192264.5

[45]授权公告日 1999 年 10 月 20 日

[11]授权公告号 CN 1045776C

[22]申请日 95.3.27 [24]颁证日 99.8.21
[21]申请号 95192264.5
[30]优先权
[32]94.3.28 [33]JP [31]57192/94
[32]94.11.29 [33]JP [31]295177/94
[86]国际申请 PCT/JP95/00560 95.3.27
[87]国际公布 WO95/26347 英 95.10.5
[85]进入国家阶段日期 96.9.25
[73]专利权人 日产化学工业株式会社
地址 日本东京
[72]发明人 小原义夫 铃木干夫 宫地伸英
加藤克浩 大土井启 祐小林彻也
鹿田谦一 内藤刚 四元孝志
[56]参考文献
JP－A－0605228 1994. 7. 6 C07D417/14
JP－A－55064586 1980. 5.15 C07D409/06
审查员 田 欣

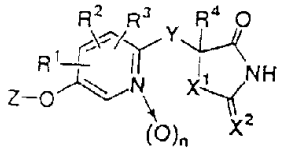
[74]专利代理机构 上海专利商标事务所
代理人 白益华

权利要求书 2 页 说明书 163 页 附图页数 0 页

[54]发明名称 吡啶环取代的噻唑烷和噁唑烷以及它们作为降血糖药的用途

[57]摘要

本发明提供了新的吡啶型噻唑烷化合物及其盐，由结构式Ⅰ表示：(其中 X^1是 S 或 O；X^2是 S，O 或 NH；Y 是 CR^6R^7(R^6是氢原子、C_{1-7}烷基或 C_{3-7}环烷基，R^7是氢原子、C_{1-7}烷基或 C_{3-7}环烷 基或与 R^4键合)，或 SO_2；Z 是 C_{1-10}烷基、C_{2-10}链烯基、C_{2-10}炔基、C_{3-7}环烷基、C_{3-7}环烯基(所述的烷基、链 烯基、炔基、环烷基和环烯基各自可以至多被羟基、氧代、C_{1-7}烷基和 C_{1-7}烷氧基 3 个所取代)，苯基、联苯基、α－萘基、β－萘基、苄基 或杂环基。这些化合物具有降血糖作用。

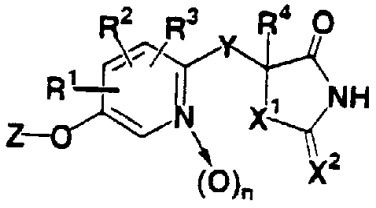


(Ⅰ)

ISSN1008-4274

权　利　要　求　书

1.吡啶型噻唑烷化合物或其盐，其特征在于，由以下结构式 I 表示:



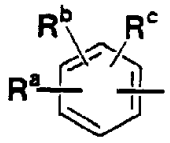
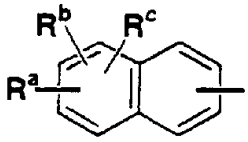
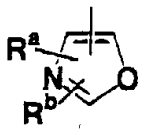
（I）

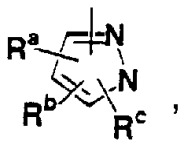
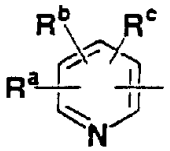
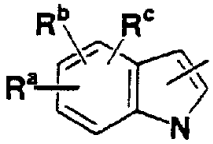
其中，X^1是 S；

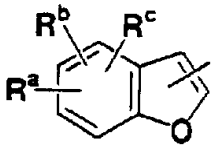
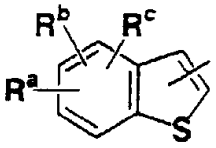
X^2是 S 或 O；

Y 是 CR^6R^7，R^6和 R^7各自为氢原子，或者 R^7与 R^4键合;

Z 是甲基，被甲氧基取代的甲基，取代的甲硅烷基，或-A-B，其中的 A 是二价的 C_1 - C_2饱和烃基，所述烃基可被至多 3 个羟基或氧基取代，其中的 B 是


，

，

，


，

，

，


或


其中的 R^a和 R^b各自是氢原子、甲基、苯基、α-萘基、β-萘基或呋喃基，所述的苯基、α-萘基、β-萘基或呋喃基可被甲基、甲氧基、卤原子或苯基所取代;

R^c是氢原子或甲基;

R^1，R^2和 R^3是氢原子;

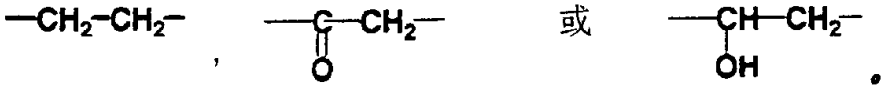
R^4是氢原子或与 R^7键合;

n 是 0。

2.根据权利要求 1 所述的化合物或其盐，其中的 Y 是-CH_2-；R^4是氢原子.

3.根据权利要求 1 所述的化合物或其盐，其中的 Y 是 CHR^7，R^7与 R^4键合。

4.根据权利要求 1 所述的化合物或其盐，其中的 A 是



5

5.一种用于预防和治疗糖尿病和糖尿病并发症的药剂，其特征在于，其中含有根据权利要求 1 所述的吡啶型噻唑化合物或其盐作为有效成份。

说　明　书

吡啶环取代的噻唑烷和噁唑烷以及它们作为降血糖药的用途

技术领域

本发明涉及具有降血糖作用和抗非酶促糖基化作用的新吡啶型噻唑烷，它们可用于医药和兽医领域，尤其可用于预防或治疗糖尿病和糖尿病并发症。

背景技术

至今，已有多种磺酰脲类衍生物和双胍衍生物被广泛用作降低血糖水平的口服降血糖药。但是，这些药剂的缺点在于会引起严重的低血糖昏迷和乳酸酸中毒，所以在实际使用中必须尽可能的注意。“Chem. Pharm. Bull., vol. 30, p. 3563 (1982)”，“J. Med. Chem., vol. 32, p. 421 (1989)”，“J. Med. Chem., vol. 34, p. 318 (1991)”，“J. Med. Chem., vol. 33, p. 1418 (1990)”，未审定的日本专利公告 No. 64586/1980，和欧洲专利公告 No. 177353，No. 283035，No. 283036，No. 332331，No. 332332 和 No. 605228 公开了多种具有降血糖作用的噻唑烷二酮，它们对于治疗 II 型糖尿病特别有用，并且被说成是不易象前述口服降糖药那样引起低血糖症状的药剂。但是，虽然这些化合物能够有效地降低血糖浓度，但是并未证实这些化合物具有减少或防止如糖尿病性肾病、糖尿病性白内障、糖尿病性视网膜病变、糖尿病性神经病变等，各种由糖尿病引起的慢性症状的作用。

另一方面，最近报道了重要蛋白质的非酶促糖基化作用会引起多种糖尿病并发症和脉硬化。通常，由食物加热或在食物保存过程引起的还原糖与氨基酸和蛋白质之间的反应被称为 Maillard 反应。在 70 年代，人们认识到 Maillard 反应实际上会在生物体内发生，这种反应现在被称为非酶促糖基化（参见“J. Biol. Chem., vol. 252, p. 2998 (1977)”）。而且还证实了，在慢性高血糖状态（如糖尿病时）中，非酶促糖基化加剧，并将其推断成引起各种糖尿病并发症的诱因（参见“New Eng. J. Med., vol. 314, p. 403 (1986)”）。非酶促糖基化的过程还不完全清楚，但一般认为各种重要蛋白质与还原糖反应而非酶促地形成 Schiff 碱，该物质在引起 Amadori 重排后交联并转化为有荧光的棕黄色物质，即 AGE（深度

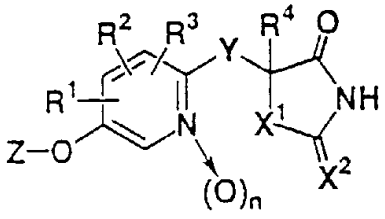
糖基化终产物)。已经认识到,大鼠糖尿病性白内障时,晶状体蛋白的非酶促糖基化加剧。而且,人们推断,髓鞘质蛋白的非酶促糖基化引起糖尿病性神经病变,而存在于结缔组织中的胶原蛋白和弹性硬蛋白的非酶促糖基化引起会诱导肾机能不良的肾小球基底膜增厚和动脉粥样硬化。Brownlee 等报道了在患有糖尿病的大鼠体内,氨基胍的抗非酶促糖基化作用能防止动脉壁上 AGE 蛋白的形成,氨基胍由此成为受人注目的防止糖尿病等疾病的药物(参见"Science, vol. 232, p. 1629 (1986)")。但是,氨基胍的上述作用不一定充分,至今尚未找到具有令人满意的抗非酶促糖基化作用的药物。

另一方面,已知醛糖还原酶(AR)是在生物体内将葡萄糖和半乳糖之类醛糖还原成多元醇如山梨醇和半乳糖醇的酶。而且已知,由这种酶产生的多元醇在器官中的积累会导致或加剧各种糖尿病并发症(如糖尿病性视网膜病变、糖尿病性神经病变和糖尿病性肾病),所以,该酶的抑制剂是治疗这些糖尿病并发症的有效药物。

在此情况下,本发明者合成了前述文献中未公开过的多种噻唑烷,并对它们的性能进行了研究。结果,本发明者发现了一种具有抗非酶促糖基化作用和醛糖还原酶抑制作用的化合物,前述的已知化合物并未表现出有这些作用。所以,本发明提供了能够防止或治疗糖尿病和糖尿病并发症的吡啶型噻唑烷。

发明内容

本发明的新吡啶型噻唑烷衍生物指吡啶型噻唑烷和它们的盐,由以下结构式(I)表示:



(I)

(其中,X^1 是 S 或 O;

X^2 是 S、O 或 NH;

Y 是 C R^6R^7(R^6 是氢原子、C_1-C_7 烷基或 C_3-C_7 环烷基,R^7 是氢原子、C_1-C_7 烷基或 C_3-C_7 环烷基或与 R^4 键合)或 SO_2;

Z 是 C_1-C_{10}烷基、C_2-C_{10}链烯基、C_2-C_{10}炔基、C_3-C_7 环烷基、C_3-C_7 环

烯基(所述的烷基、链烯基、炔基、环烷基和环烯基各自可以至多被羟基、氧代、C_1—C_7烷基和C_1—C_7烷氧基共3个所取代),苯基、联苯基、α-萘基、β-萘基、苄基、吡啶基、嘧啶基、哒嗪基、呋喃基、噻吩基、吡咯基、吡唑基、咪唑基、吡喃基(所述的苯基、联苯基、α-萘基、β-萘基、苄基、吡啶基、嘧啶基、哒嗪基、呋喃基、噻吩基、吡咯基、吡唑基、咪唑基、吡喃基各自可以至多被羟基、C_1—C_7烷基和C_1—C_7烷氧基和卤原子共3个所取代),取代的甲硅烷基、C_1—C_{14}脂肪族酰基、C_6—C_{10}芳香族酰基或—A—B(A是二价的C_1—C_6饱和的或C_2—C_6不饱和的烃基,该烃基可以至多被羟基、氧代、C_1—C_7烷基共3个所取代,B是C_3—C_{10}环烷基、C_3—C_7环烯基、C_6—C_{14}芳基或C_4—C_{12}杂环芳基,至多共可有5个取代基(所述的杂环芳基可以含有至多5个作为杂环组份的杂原子,它们选自氧原子、硫原子和氮原子),或C_4—C_6杂环脂族基(所述的杂环脂族基可以含有至多3个作为杂环组份的杂原子,它们选自氧原子、硫原子和氮原子));

R^1、R^2和R^3各自分别是氢原子、C_1—C_7烷基(可被羟基取代)、C_3—C_7环烷基、羟基或卤原子;

R^4是氢原子或C_1—C_7烷基、或与R^7键合;

n是0或1。)

说明性实施例说明了本发明中结构式I的化合物中的取代基,但本发明的范围并不限于这些实施例。

下文将具体说明结构式I中的各取代基。

C_1—C_{10}烷基的实例包括甲基、乙基、正丙基、异丙基、正丁基、异丁基、仲丁基、叔丁基、1-戊基、2-戊基、3-戊基、异戊基、新戊基、叔戊基、1-己基、2-己基、3-己基、1-甲基-1-乙基正戊基、1,1,2-三甲基正丙基、1,2,2-三甲基正丙基、3,3-二甲基正丁基、1-庚基、2-庚基、1-乙基-1,2-二甲基正丙基、1-乙基-2,2-二甲基正丙基、1-辛基、3-辛基、4-甲基-3-正庚基、6-甲基-2-正庚基、2-丙基-1-正庚基、2,4,4-三甲基-1-正戊基、1-壬基、2-壬基、2,6-二甲基-4-正庚基、3-乙基-2,2-二甲基-3-正戊基、3,5,5-三甲基-1-正己基、1-癸基、2-癸基、4-癸基、3,7-二甲基-1-正辛基、3,7-二甲基-3-正辛基等。

C_1—C_7烷基的实例包括甲基、乙基、正丙基、异丙基、正丁基、异丁基、仲丁基、叔丁基、1-戊基、2-戊基、3-戊基、异戊基、新戊基、叔戊基、1-己基、2-己基、3-己基、1-甲基-1-乙基正戊基、1,1,2-三甲基正丙基、1,2,2-三甲基正丙基、3,3-二甲基正丁基、1-庚基、2-庚基、1-乙基-1,2-二甲基正丙基、1-乙基-2,2-二甲基正丙基等。

C_1—C_3烷基的实例包括甲基、乙基、正丙基、异丙基等。

C_2—C_{10}链烯基的实例包括乙烯基、1-甲基乙烯基、1-丙烯基、1-甲基-1-丙烯基、1-甲基-2-丙烯基、2-甲基-2-丙烯基、1-乙基-2-乙烯基、1,2-二甲基1-丙烯基、1,2-二甲基-2-丙烯基、1-乙基-1-丙烯基、1-乙基-2-丙烯基、1-甲基-1-丁烯基、1-甲基-2-丁烯基、2-甲基-1-丁烯基、1-异丙基乙烯基、1-甲基-1-戊烯基、烯丙基、1-丁烯基、2-丁烯基、3-丁烯基、1-戊烯基、2-戊烯基、3-戊烯基、4-戊烯基、2,4-戊二烯基、1-己烯基、2-己烯基、3-己烯基、4-己烯基、5-己烯基、2,4-己二烯基、1-庚烯基、1-辛烯基、1-壬烯基、1-癸烯基等。

C_2—C_{10}炔基的实例包括乙炔基、丙炔基、1-丁炔基、2-丁炔基、3-丁炔基、1-戊炔基、2-戊炔基、3-戊炔基、4-戊炔基、1-己炔基、2-己炔基、3-己炔基、4-己炔基、5-己炔基、1-庚炔基、1-辛炔基、1-壬炔基、1-癸炔基等。

C_3—C_{10}环烷基的实例包括环丙基、1-甲基环丙基、2-甲基环丙基、环丙基甲基、4-甲基环己基、环丁基、环戊基、环己基、环庚基、环辛基、环壬基、环癸基、二环〔2.2.1〕庚基、二环〔3.1.1〕庚基、二环〔2.2.2〕辛基、1-金刚烷基、2-金刚烷基等。

C_3—C_7环烷基的实例包括环丙基、1-甲基环丙基、2-甲基环丙基、环丙基甲基、4-甲基环己基、环丁基、环戊基、环己基、环庚基等。

C_3—C_7环烯基的实例包括1-环己烯基、2-环己烯基、3-环己烯基、环戊二烯基、2-二环〔2.2.1〕庚烯基、2,5-二环〔2.2.1〕庚二烯基等。

C_1—C_7烷氧基的实例包括甲氧基、乙氧基、正丙氧基、异丙氧基、正丁氧基、异丁氧基、仲丁氧基、叔丁氧基、戊氧基、己氧基、庚氧基等。

取代甲硅烷基的实例包括三甲基甲硅烷基、三乙基甲硅烷基、三正丙基甲硅烷基、三异丙基甲硅烷基、三正丁基甲硅烷基、三异丁基甲硅烷基、三正己基甲硅烷基、二甲基乙基甲硅烷基、二甲基正丙基甲硅烷基、二甲基正丁基甲硅烷基、二甲基异丁基甲硅烷基、二甲基叔丁基甲硅烷基、二甲基正戊基甲硅烷基、二甲基正辛基甲硅烷基、二甲基环己基甲硅烷基、二甲基己基甲硅烷基、二甲基-2,3-二甲基丙基甲硅烷基、二甲基-2-(二环庚基)甲硅烷基、二甲基苄基甲硅烷基、二甲基苯基甲硅烷基、二甲基对甲苯基甲硅烷基、二甲基flophemesyl甲硅烷基、甲基二苯基甲硅烷基、二苯基乙烯基甲硅烷基、二苯基正丁基甲硅烷基、苯基甲基乙烯基甲硅烷基等。

C_1—C_{14}脂肪族酰基的实例包括甲酰基、乙酰基、丙酰基、丁酰基、异丁酰基、戊酰基、异戊酰基、新戊酰基、十二酰基、十四酰基、丙烯酰基、丙炔酰基、甲基丙

烯酰基、丁烯酰基等。

C_1—C_{10}芳酰基的实例包括苯甲酰基、2-甲苯酰基、3-甲苯酰基、4-甲苯酰基、α-萘酰基、β-萘酰基、肉桂酰基等。

C_6—C_{14}芳基的实例包括苯基、α-萘基、β-萘基、1-茚基、2-茚基、3-茚基、4-茚基、5-茚基、6-茚基、7-茚基、2,3-二氢化茚-1-基、2,3-二氢化茚-2-基、2,3-二氢化茚-4-基、2,3-二氢化茚-5-基、1-芴基、2-芴基、3-芴基、4-芴基、9-芴基等。

C_4—C_{12}杂环芳基的实例包括2-呋喃基、3-呋喃基、2-噻吩基、3-噻吩基、1-吡咯基、2-吡咯基、3-吡咯基、2-噁唑基、4-噁唑基、5-噁唑基、2-噻唑基、4-噻唑基、5-噻唑基、3-异噁唑基、4-异噁唑基、5-异噁唑基、3-异噻唑基、4-异噻唑基、5-异噻唑基、3-呋咱基、1-吡唑基、3-吡唑基、4-吡唑基、3-氧代吡唑-1-基、3-氧代吡唑-2-基、3-氧代吡唑-3-基、3-氧代吡唑-4-基、4-氧代吡唑-3-基、1-咪唑基、2-咪唑基、4-咪唑基、2-氧代咪唑-1-基、2-氧代咪唑-4-基、1,2,3-三唑-1-基、1,2,3-三唑-2-基、1,2,3-三唑-4-基、1,2,4-三唑-1-基、1,2,4-三唑-3-基、1,2,4-三唑-4-基、1,2,4(2H,4H)-三唑-3-酮-2-基、1,2,4(2H,4H)-三唑-3-酮-4-基、1,2,4(2H,4H)-三唑-3-酮-5-基、1,2,4(1H,2H)-三唑-3-酮-1-基、1,2,4(1H,2H)-三唑-3-酮-2-基、1,2,4(1H,2H)-三唑-3-酮-5-基、1-四唑基、2-四唑基、5-四唑基、2-吡喃基、3-吡喃基、4-吡喃基、2-吡啶基、3-吡啶基、4-吡啶基、2-吡啶酮-1-基、2-吡啶酮-3-基、2-吡啶酮-4-基、2-吡啶酮-5-基、2-吡啶酮-6-基、4-吡啶酮-1-基、4-吡啶酮-2-基、4-吡啶酮-3-基、3-哒嗪基、4-哒嗪基、3(2H)-哒嗪酮-2-基、3(2H)-哒嗪酮-4-基、3(2H)-哒嗪酮-5-基、3(2H)-哒嗪酮-6-基、4(1H)-哒嗪酮-1-基、4(1H)-哒嗪酮-3-基、4(1H)-哒嗪酮-5-基、4(1H)-哒嗪酮-6-基、2-嘧啶基、4-嘧啶基、5-嘧啶基、2(1H)-嘧啶酮-1-基、2(1H)-嘧啶酮-4-基、2(1H)-嘧啶酮-5-基、2(1H)-嘧啶酮-6-基、4(3H)-嘧啶酮-2-基、4(3H)-嘧啶酮-3-基、4(3H)-嘧啶酮-5-基、4(3H)-嘧啶酮-6-基、4(1H)-嘧啶酮-1-基、4(1H)-嘧啶酮-2-基、4(1H)-嘧啶酮-5-基、4(1H)-嘧啶酮-6-基、2-吡嗪基、2(1H)-吡嗪-1-基、2(1H)-吡嗪-3-基、2(1H)-吡嗪-5-基、2(1H)-吡嗪-6-基、1,2,3-三嗪-4-基、1,2,3-三嗪-5-基、1,2,4-三嗪-3-基、1,2,4-三嗪-5-基、1,2,4-三嗪-6-基、1,2,3,4-四嗪-5-基、1,2,4,5-四嗪-3-基、1-吲哚基、2-吲哚基、3-吲哚基、4-吲哚基、5-吲哚基、6-吲哚基、7-吲哚基、2-喹啉基、3-喹啉基、4-喹啉基、5-喹啉基、6-喹啉基、7-喹啉基、8-喹啉基、2-喹诺酮-1-基、2-喹诺酮-3-基、2-喹诺酮-4-基、2-喹诺酮-5-基、2-喹诺酮-6-基、2-喹诺酮-7-基、2-喹诺酮-8-基、4-喹诺酮-1-基、4-喹诺酮-2-基、4-喹诺酮-3-基、4-喹诺酮-5-基、4-喹诺酮-6-基、4-喹诺酮-7-基、4-喹诺酮-8-基、2-苯并呋喃基、3-苯并呋喃

基、4-苯并呋喃基、5-苯并呋喃基、6-苯并呋喃基、7-苯并呋喃基、2-苯并噻吩基、3-苯并噻吩基、4-苯并噻吩基、5-苯并噻吩基、6-苯并噻吩基、7-苯并噻吩基、1-异喹啉基、3-异喹啉基、4-异喹啉基、5-异喹啉基、6-异喹啉基、7-异喹啉基、8-异喹啉基、1-异喹诺酮-2-基、1-异喹诺酮-3-基、1-异喹诺酮-4-基、1-异喹诺酮-5-基、1-异喹诺酮-6-基、1-异喹诺酮-7-基、1-异喹诺酮-8-基、3-异喹诺酮-2-基、3-异喹诺酮-4-基、3-异喹诺酮-5-基、3-异喹诺酮-6-基、3-异喹诺酮-7-基、3-异喹诺酮-8-基、2-苯并噁唑基、4-苯并噁唑基、5-苯并噁唑基、6-苯并噁唑基、7-苯并噁唑基、2-苯并噻唑基、4-苯并噻唑基、5-苯并噻唑基、6-苯并噻唑基、7-苯并噻唑基、1-苯并吡唑基、2-苯并吡唑基、3-苯并吡唑基、4-苯并吡唑基、5-苯并吡唑基、6-苯并吡唑基、7-苯并吡唑基、1-苯并咪唑基、2-苯并咪唑基、4-苯并咪唑基;5-苯并咪唑基、1-苯并三唑基、4-苯并三唑基、5-苯并三唑基、2-苯并吡喃基、3-苯并吡喃基、4-苯并吡喃基、5-苯并吡喃基、6-苯并吡喃基、7-苯并吡喃基、8-苯并吡喃基、1-中氮茚基、2-中氮茚基、3-中氮茚基、5-中氮茚基、6-中氮茚基、7-中氮茚基、8-中氮茚基、2-嘌呤基、6-嘌呤基、7-嘌呤基、8-嘌呤基、1-酞嗪基、5-酞嗪基、6-酞嗪基、1-氧代酞嗪-2-基、1-氧代酞嗪-4-基、1-氧代酞嗪-5-基、1-氧代酞嗪-6-基、1-氧代酞嗪-7-基、1-氧代酞嗪-8-基、1,5-二氮杂萘-2-基、1,5-二氮杂萘-3-基、1,5-二氮杂萘-4-基、2-喹喔啉基、5-喹喔啉基、6-喹喔啉基、2-喹唑啉基、4-喹唑啉基、5-喹唑啉基、6-喹唑啉基、7-喹唑啉基、8-喹唑啉基、1,2-二氮杂萘-3-基、1,2-二氮杂萘-4-基、1,2-二氮杂萘-5-基、1,2-二氮杂萘-6-基、1,2-二氮杂萘-7-基、1,2-二氮杂萘-8-基、1,4-苯并二噁烷-2-基、1,4-苯并二噁烷-5-基、1,4-苯并二噁烷-6-基、1,4-氧代萘-2-基、1,4-氧代萘-5-基、1,4-氧代萘-6-基、2,3-二氢-4-苯并呋喃基、2,3-二氢-5-苯并呋喃基、2,3-二氢-6-苯并呋喃基、2,3-二氢-7-苯并呋喃基、1,4-苯并噻嗪-2-基、1,4-苯并噻嗪-3-基、1,4-苯并噻嗪-4-基、1,4-苯并噻嗪-5-基、1,4-苯并噻嗪-6-基、1,4-苯并噻嗪-7-基、1,4-苯并噻嗪-8-基、2-喋啶基、4-喋啶基、6-喋啶基、7-喋啶基、吡唑并〔1,5-a〕嘧啶-2-基、吡唑并〔1,5-a〕嘧啶-3-基、吡唑〔1,5-a〕并嘧啶-5-基、吡唑并〔1,5-a〕嘧啶-6-基、吡唑并〔1,5-a〕嘧啶-7-基、吡唑并〔5,1 -c〕〔1,2,4〕三嗪-3-基、吡唑并〔5,1-c〕〔1,2,4〕三嗪-4-基、吡唑并〔5,1-c〕〔1,2,4〕三嗪-7-基、吡唑并〔5,1-c〕〔1,2,4〕三嗪-8-基、噻唑并〔3,2-b〕三唑-2-基、噻唑并〔3,2-b〕三唑-5-基、噻唑并〔3,2-b〕三唑-6-基、苯并吡喃并〔2,3-b〕吡啶-2-基、苯并吡喃并〔2,3-b〕吡啶-3-基、苯并吡喃并〔2,3-b〕吡啶-4-基、苯并吡喃并〔2,3-b〕吡啶-5-基、苯并吡喃并〔2,3-b〕吡啶-6-基、苯并吡喃并〔2,3-b〕吡啶-7-基、苯并吡喃并〔2,3-b〕吡啶-8-基、苯并吡喃并〔2,3-b〕吡啶-9-基、5H-苯并吡

喃并〔2,3-b〕吡啶-5-酮-2-基、5H-苯并吡喃并〔2,3-b〕吡啶-5-酮-3-基、5H-苯并吡喃并〔2,3-b〕吡啶-5-酮-4-基、5H-苯并吡喃并〔2,3-b〕吡啶-5-酮-6-基、5H-苯并吡喃并〔2,3-b〕吡啶-5-酮-7-基、5H-苯并吡喃并〔2,3-b〕吡啶-5-酮-8-基、1-呫吨基、2-呫吨基、3-呫吨基、4-呫吨基、9-呫吨基、1-吩噁噻基、2-吩噁噻基、3-吩噁噻基、4-吩噁噻基、1-咔唑基、2-咔唑基、3-咔唑基、4-咔唑基、9-咔唑基、1-吖啶基、2-吖啶基、3-吖啶基、4-吖啶基、9-吖啶基、1-吩嗪基、2-吩嗪基、3-吩嗪基、4-吩嗪基、1-吩噻嗪基、2-吩噻嗪基、3-吩噻嗪基、4-吩噻嗪基、10-吩噻嗪基、1-吩噁嗪基、2-吩噁嗪基、3-吩噁嗪基、4-吩噁嗪基、10-吩噁嗪基、1-噻蒽基、2-噻蒽基、3-噻蒽基、4-噻蒽基、6-噻蒽基、7-噻蒽基、8-噻蒽基、9-噻蒽基等。

C_4—C_6杂环脂族基团的实例包括1-哌啶基、2-哌啶基、3-哌啶基、4-哌啶基、1-吡咯烷基、2-吡咯烷基、3-吡咯烷基、1-咪唑烷基、2-咪唑烷基、4-咪唑烷基、1-吡唑烷基、3-吡唑烷基、4-吡唑烷基、2-吗啉基、3-吗啉基、4-吗啉基、2-四氢呋喃基、3-四氢呋喃基等。

本说明中，“n”表示正，“i”表示异，“s”表示仲，“t”表示叔，“c”表示环，“Me”表示甲基，“Et”表示乙基，“Pr”表示丙基，“Bu”表示丁基，“Pen”表示戊基，“Hex”表示己基，“Ph”表示苯基、“Hal”表示卤素。

在这些化合物中，有一种化合物在噻唑烷环的5位有一个不对称碳原子。具有前述结构式I的该化合物包括所有光学异构体以及它们的混合物。

下文将进一步说明本发明结构式I化合物的优选实施例1至10。

(1)结构式I所示的吡啶型噻唑烷化合物及其盐，其中：

X^2是S或O；

Y是CR^6R^7(R^6是一个氢原子或C_1—C_3烷基，R^7是一个氢原子或C_1—C_3烷基或与R^4键合)；

Z是-A-B(A是一个二价的C_1—C_6饱和或C_2—C_6不饱和烃基，该烃基可以至多被羟基、氧代和C_1—C_7烷基三取代，B是C_3—C_{10}环烷基、C_3—C_7环烯基、C_6—C_{14}芳基和C_4—C_{12}杂环芳基，这些基团至多共可有5个取代基(所述的杂环芳基至多可含有5个作为杂环组份的杂原子，杂原子选自氧原子、硫原子和氮原子)，或一个C_4—C_6杂环脂族基(所述的杂环脂族基至多可以有3个作为杂环成份的杂原子，杂原子选自氧原子、硫原子和氮原子))，

各种B基团中，所述的C_3—C_{10}环烷基是环丙基、环丁基、环戊基、环己基、环庚基、环辛基、环壬基、环癸基、二环〔2.2.1〕庚基、二环〔3.1.1〕庚基、二环〔2.2.2〕辛基、1-金刚烷基或2-金刚烷基，所述的C_3—C_7环烯基是1-环己烯基、2-环己

烯基、3-环己烯基、环戊二烯基、2-二环〔2.2.1〕庚烯基或2,5-二环〔2.2.1〕庚二烯基，所述的C_6—C_{14}芳基是苯基、α-萘基，β-萘基、1-茚基、2-茚基、3-茚基、4-茚基、5-茚基、6-茚基、7-茚基、2,3-二氢化茚-1-基、2,3-二氢化茚-2-基、2,3-二氢化茚-4-基、2,3-二氢化茚-5-基、1-芴基、2-芴基、3-芴基、4-芴基或9-芴基，所述的C_4—C_{12}杂环芳基是2-呋喃基、3-呋喃基、2-噻吩基、3-噻吩基、1-吡咯基、2-吡咯、3-吡咯基、2-噁唑基、4-噁唑基、5-噁唑基、2-噻唑基、4-噻唑基、5-噻唑基、3-异噁唑基、4-异噁唑基、5-异噁唑基、3-异噻唑基、4-异噻唑基、5-异噻唑基、3-呋咱基、1-吡唑基、3-吡唑基、4-吡唑基、3-氧代吡唑-1-基、3-氧代吡唑-2-基、3-氧代吡唑-3-基、3-氧代吡唑-4-基、4-氧代吡唑-3-基、1-咪唑基、2-咪唑基、4-咪唑基、2-氧代咪唑-1-基、2-氧代咪唑-4-基、1,2,3-三唑-1-基、1,2,3-三唑-2-基、1,2,3-三唑-4-基、1,2,4-三唑-1-基、1,2,4-三唑-3-基、1,2,4-三唑-4-基、1,2,4(2H,4H)-三唑-3-酮-2-基、1,2,4(2H,4H)-三唑-3-酮-4-基、1,2,4(2H,4H)-三唑-3-酮-5-基、1,2,4(1H,2H)-三唑-3-酮-1-基、1,2,4(1H,2H)-三唑-3-酮-2-基、1,2,4(1H,2H)-三唑-3-酮-5-基、1-四唑基、2-四唑基、5-四唑基、2-吡喃基、3-吡喃基、4-吡喃基、2-吡啶基、3-吡啶基、4-吡啶基、2-吡啶酮-1-基、2-吡啶酮-3-基、2-吡啶酮-4-基、2-吡啶酮-5-基、2-吡啶酮-6-基、4-吡啶酮-1-基、4-吡啶酮-2-基、4-吡啶酮-3-基、3-哒嗪基、4-哒嗪基、3(2H)-哒嗪酮-2-基、3(2H)-哒嗪酮-4-基、3(2H)-哒嗪酮-5-基、3(2H)-哒嗪酮-6-基、4(1H)-哒嗪酮-1-基、4(1H)-哒嗪酮-3-基、4(1H)-哒嗪酮-5-基、4(1H)-哒嗪酮-6-基、2-嘧啶基、4-嘧啶基、5-嘧啶基、2(1H)-嘧啶酮-1-基、2(1H)-嘧啶酮-4-基、2(1H)-嘧啶酮-5-基、2(1H)-嘧啶酮-6-基、4(3H)-嘧啶酮-2-基、4(3H)-嘧啶酮-3-基、4(3H)-嘧啶酮-5-基、4(3H)-嘧啶酮-6-基、4(1H)-嘧啶酮-1-基、4(1H)-嘧啶酮-2-基、4(1H)-嘧啶酮-5-基、4(1H)-嘧啶酮-6-基、2-吡嗪基、2(1H)-吡嗪-1-基、2(1H)-吡嗪-3-基、2(1H)-吡嗪-5-基、2(1H)-吡嗪-6-基、1,2,3-三嗪-4-基、1,2,3-三嗪-5-基、1,2,4-三嗪-3-基、1,2,4-三嗪-5-基、1,2,4-三嗪-6-基、1,2,3,4-四嗪-5-基、1,2,4,5-四嗪-3-基、1-吲哚基、2-吲哚基、3-吲哚基、4-吲哚基、5-吲哚基、6-吲哚基、7-吲哚基、2-喹啉基、3-喹啉基、4-喹啉基、5-喹啉基、6-喹啉基、7-喹啉基、8-喹啉基、2-喹诺酮-1-基、2-喹诺酮-3-基、2-喹诺酮-4-基、2-喹诺酮-5-基、2-喹诺酮-6-基、2-喹诺酮-7-基、2-喹诺酮-8-基、4-喹诺酮-1-基、4-喹诺酮-2-基、4-喹诺酮-3-基、4-喹诺酮-5-基、4-喹诺酮-6-基、4-喹诺酮-7-基、4-喹诺酮-8-基、2-苯并呋喃基、3-苯并呋喃基、4-苯并呋喃基、5-苯并呋喃基、6-苯并呋喃基、7-苯并呋喃基、2-苯并噻吩基、3-苯并噻吩基、4-苯并噻吩基、5-苯并噻吩基、6-苯并噻吩基、7-苯并噻吩基、1-异喹啉基、3-异喹啉

基、4-异喹啉基、5-异喹啉基、6-异喹啉基、7-异喹啉基、8-异喹啉基、1-异喹诺酮-2-基、1-异喹诺酮-3-基、1-异喹诺酮-4-基、1-异喹诺酮-5-基、1-异喹诺酮-6-基、1-异喹诺酮-7-基、1-异喹诺酮-8-基、3-异喹诺酮-2-基、3-异喹诺酮-4-基、3-异喹诺酮-5-基、3-异喹诺酮-6-基、3-异喹诺酮-7-基、3-异喹诺酮-8-基、2-苯并噁唑基、4-苯并噁唑基、5-苯并噁唑基、6-苯并噁唑基、7-苯并噁唑基、2-苯并噻唑基、4-苯并噻唑基、5-苯并噻唑基、6-苯并噻唑基、7-苯并噻唑基、1-苯并吡唑基、2-苯并吡唑基、3-苯并吡唑基、4-苯并吡唑基、5-苯并吡唑基、6-苯并吡唑基、7-苯并吡唑基、1-苯并咪唑基、2-苯并咪唑基、4-苯并咪唑基、5-苯并咪唑基、1-苯并三唑基、4-苯并三唑基、5-苯并三唑基、2-苯并吡喃基、3-苯并吡喃基、4-苯并吡喃基、5-苯并吡喃基、6-苯并吡喃基、7-苯并吡喃基、8-苯并吡喃基、1-中氮茚基、2-中氮茚基、3-中氮茚基、5-中氮茚基、6-中氮茚基、7-中氮茚基、8-中氮茚基、2-嘌呤基、6-嘌呤基、7-嘌呤基、8-嘌呤基、1-酞嗪基、5-酞嗪基、6-酞嗪基、1-氧代酞嗪-2-基、1-氧代酞嗪-4-基、1-氧代酞嗪-5-基、1-氧代酞嗪-6-基、1-氧代酞嗪-7-基、1-氧代酞嗪-8-基、1,5-二氮杂萘-2-基、1,5-二氮杂萘-3-基、1,5-二氮杂萘-4-基、2-喹喔啉基、5-喹喔啉基、6-喹喔啉基、2-喹唑啉基、4-喹唑啉基、5-喹唑啉基、6-喹唑啉基、7-喹唑啉基、8-喹唑啉基、1,2-二氮杂萘-3-基、1,2-二氮杂萘-4-基、1,2-二氮杂萘-5-基、1,2-二氮杂萘-6-基、1,2-二氮杂萘-7-基、1,2-二氮杂萘-8-基、1,4-苯并二噁烷-2-基、1,4-苯并二噁烷-5-基、1,4-苯并二噁烷-6-基、1,4-氧代萘-2-基、1,4-氧代萘-5-基、1,4-氧代萘-6-基、2,3-二氢-4-苯并呋喃基、2,3-二氢-5-苯并呋喃基、2,3-二氢-6-苯并呋喃基、2,3-二氢-7-苯并呋喃基、1,4-苯并噻嗪-2-基、1,4-苯并噻嗪-3-基、1,4-苯并噻嗪-4-基、1,4-苯并噻嗪-5-基、1,4-苯并噻嗪-6-基、1,4-苯并噻嗪-7-基、1,4-苯并噻嗪-8-基、2-喋啶基、4-喋啶基、6-喋啶基、7-喋啶基、吡唑并〔1,5-a〕嘧啶-2-基、吡唑并〔1,5-a〕嘧啶-3-基、吡唑并〔1,5-a〕嘧啶-5-基、吡唑并〔1,5-a〕嘧啶-6-基、吡唑并〔1,5-a〕嘧啶-7-基、吡唑并〔5，1-c〕〔1,2,4〕三嗪-3-基、吡唑并〔5，1-c〕〔1,2,4〕三嗪-4-基、吡唑并〔5，1-c〕〔1,2,4〕三嗪-7-基、吡唑并〔5，1-c〕〔1,2,4〕三嗪-8-基、噻唑并〔3,2-b〕三唑-2-基、噻唑并〔3,2-b〕三唑-5-基、噻唑并〔3,2-b〕三唑-6-基、苯并吡喃并〔2,3-b〕吡啶-2-基、苯并吡喃并〔2,3-b〕吡啶-3-基、苯并吡喃并〔2,3-b〕吡啶-4-基、苯并吡喃并〔2,3-b〕吡啶-5-基、苯并吡喃并〔2,3-b〕吡啶-6-基、苯并吡喃并〔2,3-b〕吡啶-7-基、苯并吡喃并〔2,3-b〕吡啶-8-基、苯并吡喃并〔2,3-b〕吡啶-9-基、5H-苯并吡喃并〔2,3-b〕吡啶-5-酮-2-基、5H-苯并吡喃并〔2,3-b〕吡啶-5-酮-3-基、5H-苯并吡喃并〔2,3-b〕吡啶-5-酮-4-基、5H-苯并吡喃并〔2,3-b〕吡啶-5-酮-6-基、5H-苯并吡喃并〔2,3-b〕吡

啶-5-酮-7-基、5H-苯并吡喃并〔2,3-b〕吡啶-5-酮-8-基、1-呫吨基、2-呫吨基、3-呫吨基、4-呫吨基、9-呫吨基、1-吩噁噻基、2-吩噁噻基、3-吩噁噻基、4-吩噁噻基、1-咔唑基、2-咔唑基、3-咔唑基、4-咔唑基、9-咔唑基、1-吖啶基、2-吖啶基、3-吖啶基、4-吖啶基、9-吖啶基、1-吩嗪基、2-吩嗪基、3-吩嗪基、4-吩嗪基、1-吩噻嗪基、2-吩噻嗪基、3-吩噻嗪基、4-吩噻嗪基、10-吩噻嗪基、1-吩噁嗪基、2-吩噁嗪基、3-吩噁嗪基、4-吩噁嗪基、10-吩噁嗪基、1-噻蒽基、2-噻蒽基、3-噻蒽基、4-噻蒽基、6-噻蒽基、7-噻蒽基、8-噻蒽基或9-噻蒽基，所述的C_4—C_6杂环脂族基是1-哌啶基、2-哌啶基、3-哌啶基、4-哌啶基、1-吡咯烷基、2-吡咯烷基、3-吡咯烷基、1-咪唑烷基、2-咪唑烷基、4-咪唑烷基、1-吡唑烷基、3-吡唑烷基、4-吡唑烷基、2-吗啉基、3-吗啉基、4-吗啉基、2-四氢呋喃基、3-四氢呋喃基；

R^1,R^2和R^3各自分别是氢原子、C_1—C_3烷基(可以被羟基取代)，羟基或卤原子；

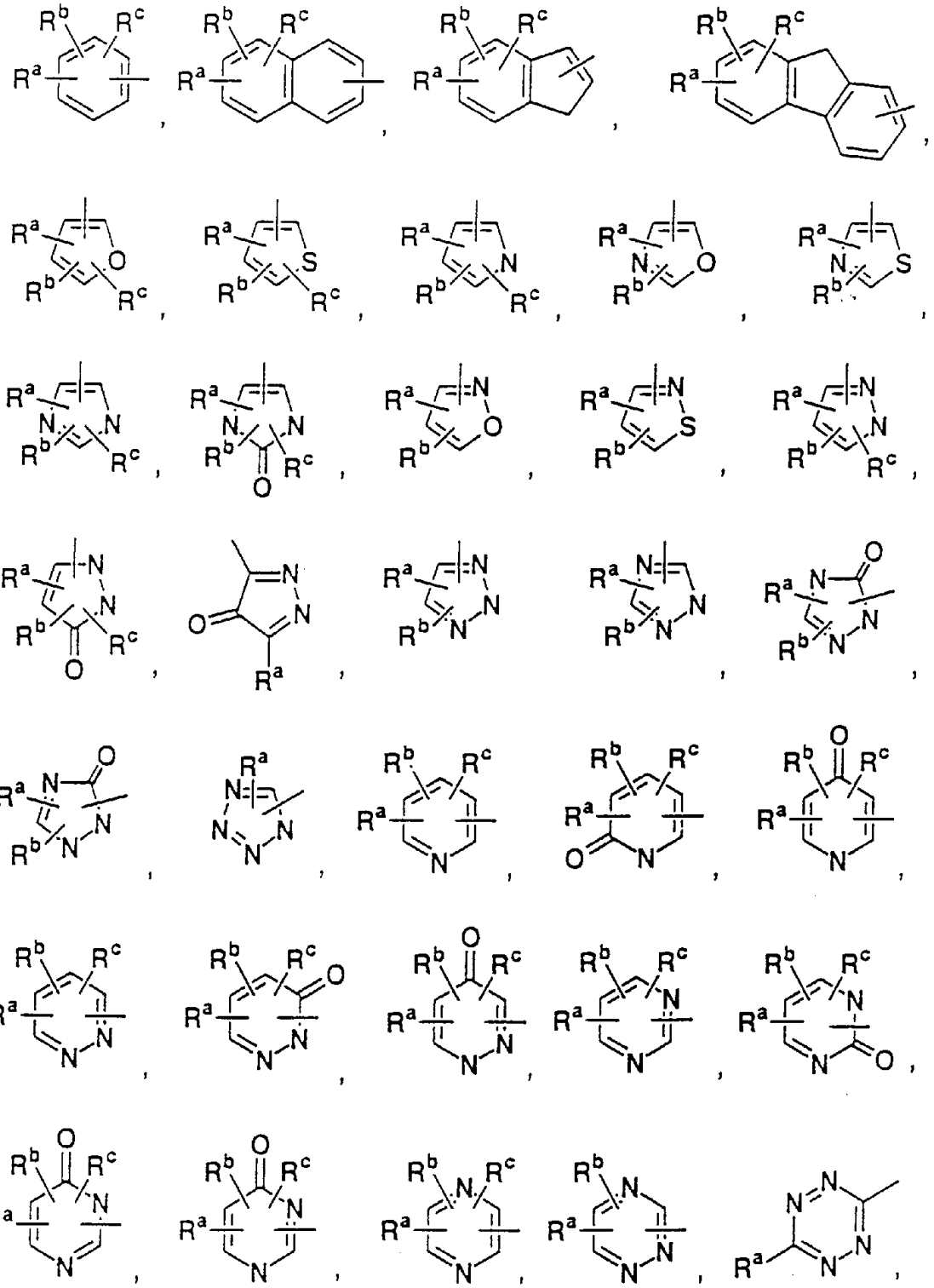
R^4是氢原子或C_1—C_3烷基、或与R^7键合；

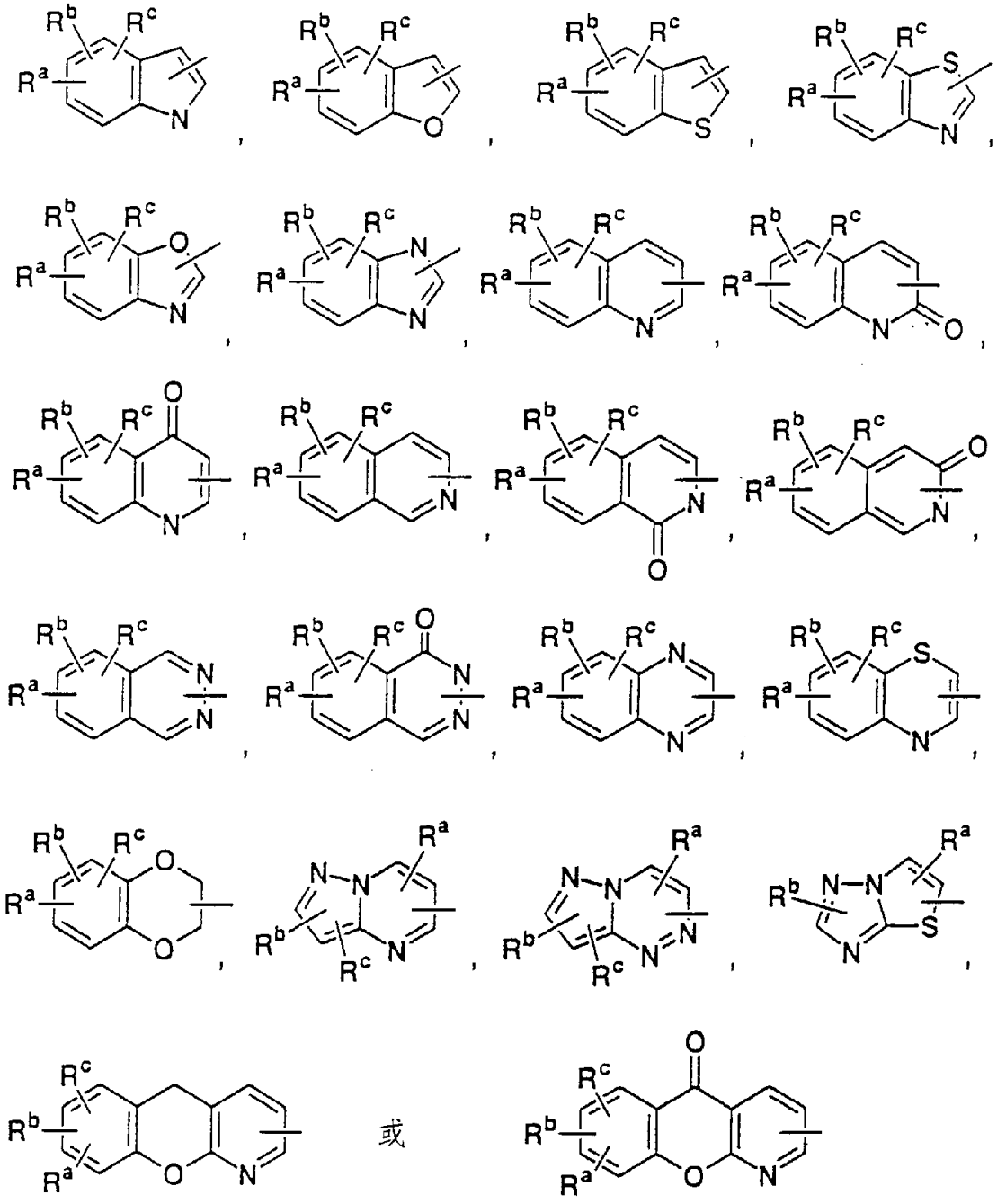
n是0。

(2)结构式I所示的吡啶型噻唑烷化合物及其盐，其中：

R^1,R^2和R^3各自分别是氢原子、甲基、羟基或氯原子；

B是：





或

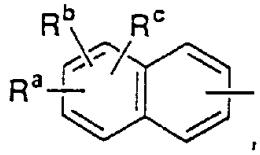
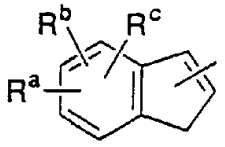
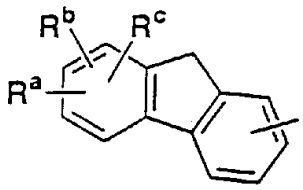
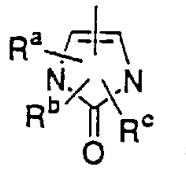
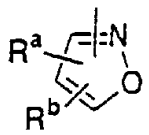
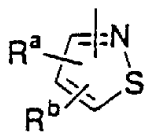
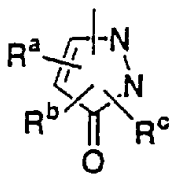
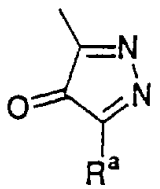
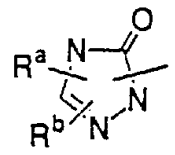
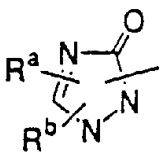
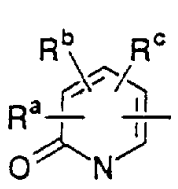
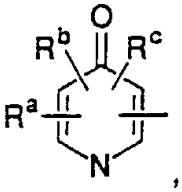
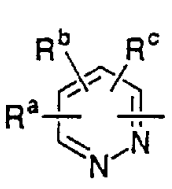
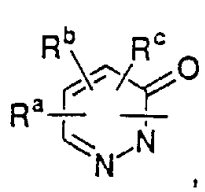
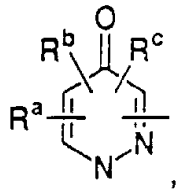
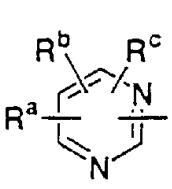
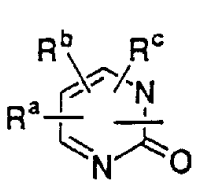
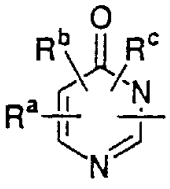
(其中 R^a 和 R^b 各自分别是氢原子，C_1—C_7 烷基，C_3—C_7 环烷基，C_3—C_7 环烯基(所述的烷基、环烷基和环烯基可以被一个羟基取代)，羟基、C_1—C_7 烷氧基，C_1—C_7 烷硫基，氟原子，氯原子，溴原子，三氟甲基，硝基，氨基，甲基氨基，二甲基氨基，乙酰胺基，甲磺酰胺基，羧基，C_1—C_3 烷氧基羰基，腈基、氨基甲酰基，氨磺酰基、苯氧基，苄氧基，苯基，α-萘基，β-萘基，呋喃基，噻吩基，咪唑基，吡啶基或苄基(所述的苯基、α-萘基，β-萘基，呋喃基，噻吩基，咪唑基，吡啶基和苄基至多可以被选自甲基、乙基、正丙基、异丙基、环丙基、正丁基、异丁基、仲丁基、叔丁基、正己基、环己基、甲氧基、乙氧基、正丙氧基、异丙氧基、甲硫基、乙硫基、正丙硫基、异丙硫基、羟基、氟原子、氯原子、溴原子、硝基和二甲基氨基的 5 个取代基取代)，1-四唑基，3-四唑基，5-四唑基，噻唑烷二酮-5 基或噻唑烷二酮-5-基甲基，

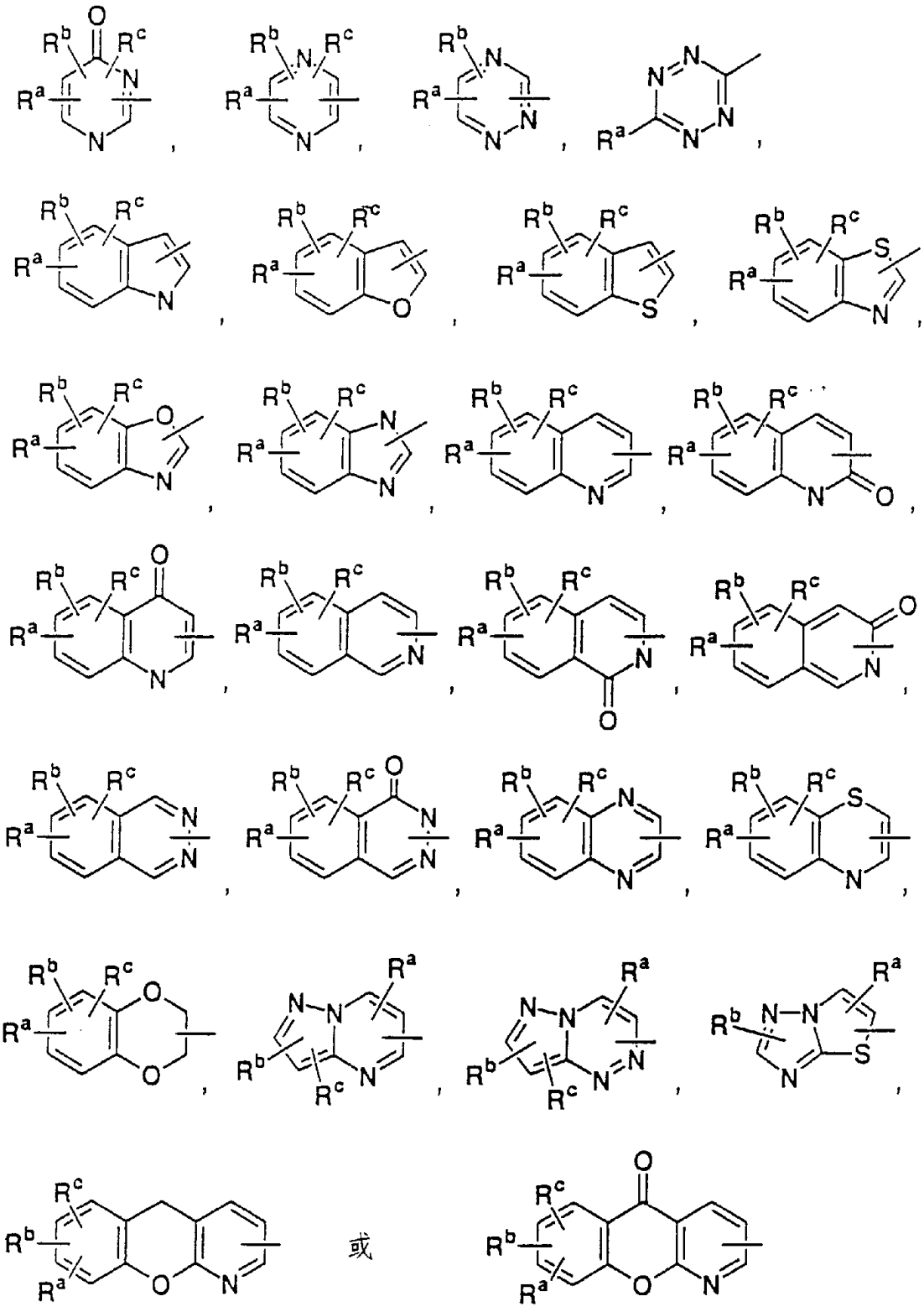
R^c 是氢原子，C_1—C_7 烷基，C_3—C_7 环烷基或羟甲基)。

(3)结构式 I 所示的吡啶型噻唑烷及其盐，其中：

R^1，R^2 和 R^3 各自分别是氢原子，甲基，羟基或氯原子；

B 是


，

，

，

，

，

，

，

，

，

，

，

，

，

，

，

，

，

，



(其中 R^a 和 R^b 各自分别是氢原子，C_1—C_7 烷基，C_3—C_7 环烷基，C_3—C_7 环烯基(所述的烷基、环烷基和环烯基可以被一个羟基取代)，羟基、C_1—C_7 烷氧基，C_1—C_7 烷硫基，氟原子，氯原子，溴原子，三氟甲基，硝基，氨基，甲基氨基，二甲基氨基，乙酰胺基，甲磺酰胺基，羧基，C_1—C_3 烷氧基羰基，氰基、氨基甲酰基，氨磺酰基、苯氧基，苄氧基，苯基，α-萘基，β-萘基，呋喃基，噻吩基，咪唑基，吡啶基或苄基(所述的苯基、α-萘基，β-萘基，呋喃基，噻吩基，咪唑基，吡啶基和苄基至多可以被选自甲基、乙基、正丙基、异丙基、环丙基、正丁基、异丁基、仲丁基、叔丁基、正己基、环己基、甲氧基、乙氧基、正丙氧基、异丙氧基、甲硫基、乙硫基、正丙硫基、异丙硫基、羟基、氟原子、氯原子、溴原子、硝基和二甲基氨基的 5 个取代基取代)，1-四唑基，3-四唑基，5-四唑基，噻唑烷二酮-5 基或噻唑烷二酮-5-基甲基，

R^c 是氢原子，C_1—C_7 烷基，C_3—C_7 环烷基或羟甲基)。

(4)结构式 I 所示的吡啶型噻唑烷化合物及其盐，其中：

X^1 是 S；

R^1，R^2 和 R^3 是氢原子；

Y 是 CR^6R^7(R^6 是氢原子或甲基，R^7 是氢原子或与 R^4 键合)；

R^4 是氢原子或甲基，或与 R^7 键合；

A 是二价的 C_1—C_6 饱和或 C_2—C_6 不饱和烃基，该烃基至多可以被 2 个羟基、氧代和 C_1—C_7 烷基(如果与结构式 I 化合物中吡啶环上 5 位氧结合的第一个碳原子不被羟基或氧取代)取代。

(5)结构式 I 所示的吡啶型噻唑烷化合物及其盐，其中：

Y 是-CH_2-；

R^4 是氢原子。

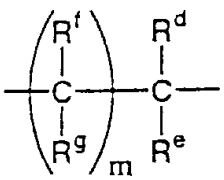
(6)结构式 I 所示的吡啶型噻唑烷化合物及其盐，其中：

Y 是 CHR^7(R^7 与 R^4 成键)；

R^4 与 R^7 成键。

(7)结构式 I 所示的吡啶型噻唑烷化合物及其盐，其中：

A 是



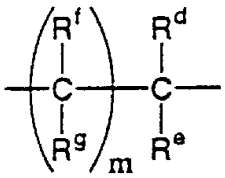
(其中的m是0至5，

R^d和R^e各自分别是氢原子或甲基，

R^f和R^g各自分别是氢原子，甲基或羟基，或者R^f和R^g共同形成一氧代基，或者相邻的R^d和R^f共同形成一双键，或相邻的R^d，R^f，R^e和R^g共同形成一三键，或者当m为2至5时，相邻的R^f共同形成双键，或相邻的R^f和R^g共同形成一三键)。

(8)结构式I所示的吡啶型噻唑烷化合物及其盐，其中：

A是



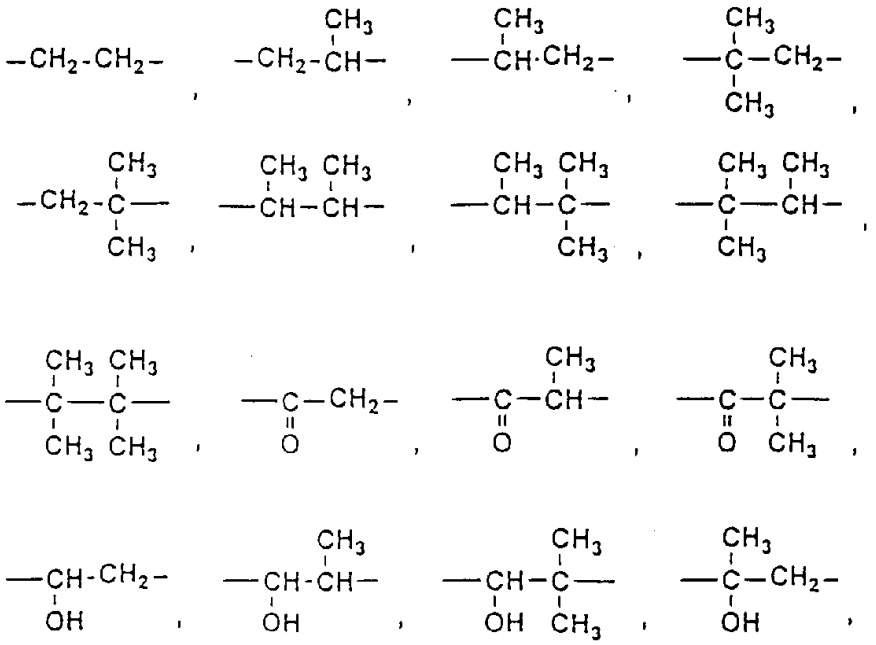
(其中的m是0至2，

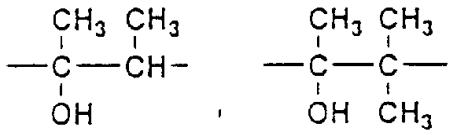
R^d和R^e各自分别是氢原子或甲基，

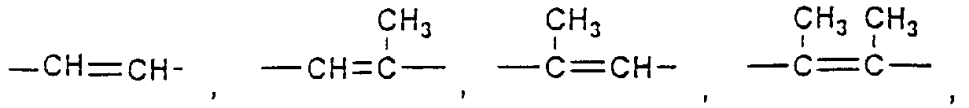
R^f和R^g各自分别是氢原子，甲基或羟基，或者R^f和R^g共同形成一氧代基，或者相邻的R^d和R^f共同形成一双键，或相邻的R^d，R^f，R^e和R^g共同形成一三键，或者当m为2时，相邻的R^f共同形成双键，或相邻的R^f和R^g共同形成一三键)。

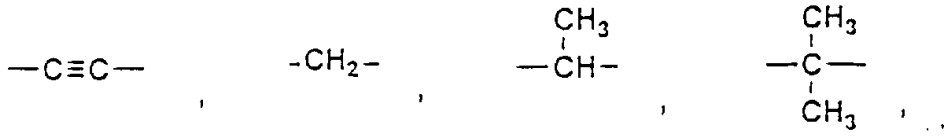
(9)结构式I所示的吡啶型噻唑烷化合物及其盐，其中：

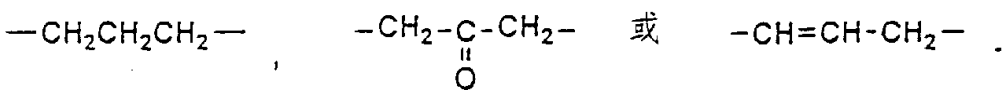
A是





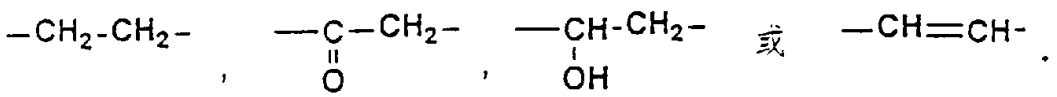






(10)结构式I所示的吡啶型噻唑烷化合物及其盐，其中：

A是



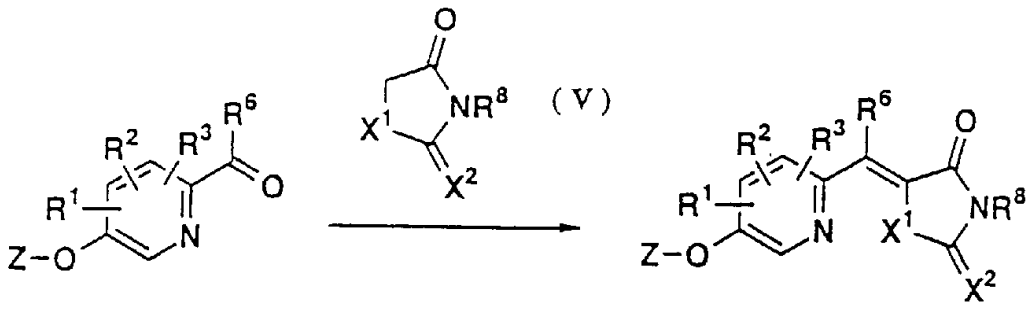
由于结构式I所示的本发明化合物在同一分子中既在噻唑烷环上具有酸性的氢原子又在吡啶环上具有碱性的氮原子，所以它可以根据需要与适当的碱或酸形成药学上可接受的无毒的盐。结构式I所示的化合物可以以其游离形式或某种药学上认可的盐的形式用于本发明的目的。碱性盐的实例包括碱金属盐(锂盐、钠盐、钾盐等)，碱土金属盐(钙盐、镁盐等)，铝盐，铵盐(可以是非取代的或被甲基、乙基或苄基取代的)，有机胺盐(甲胺盐、乙胺盐、二甲基胺盐、二乙基胺盐、三甲基胺盐、三乙基胺盐、环己基胺盐、乙二胺盐、二环己基胺盐、乙醇胺盐、二乙醇胺盐、三乙醇胺盐、哌嗪盐、二苄基哌啶盐、脱氢枞胺盐、N,N′-二脱氢枞胺盐、苄星(N,N′-二苄基乙二胺)盐、葡糖胺盐、麦格鲁明(N-甲基葡糖胺)盐、苯乙苄胺(N-苄基苯乙基胺)盐、氨基丁三醇(2-氨基-2-羟甲基-1,3-丙二醇)盐、胆碱盐、普鲁卡因盐)，碱性氨基酸盐(赖氨酸盐、乌氨酸盐、精氨酸盐等)，吡啶盐，可立丁盐，喹啉盐等。酸加成盐的实例包括无机酸盐(盐酸盐、氢溴酸盐、硫酸盐、硫酸氢盐、硝酸盐、磷酸盐、磷酸氢盐、磷酸二氢盐等)，有机酸盐(甲酸盐、乙酸盐、

丙酸盐、琥珀酸盐、丙二酸盐、草酸盐、马来酸盐、富马酸盐、苹果酸盐、柠檬酸盐、酒石酸盐、乳酸盐、谷氨酸盐、天冬氨酸盐、苦味酸盐、碳酸盐等)，磺酸盐(甲烷磺酸盐、苯磺酸盐、甲苯磺酸盐等)等。这些盐都可由已知方法制得。

具有结构式 I 的化合物，即吡啶型噻唑烷，可以由如下合成法制备。

制备中使用的溶剂在反应条件下必须是稳定的，而且最好惰性到不至于干扰反应。反应溶剂的实例包括水、醇(如甲醇、乙醇、丙醇、丁醇和辛醇)，溶纤剂(如甲氧基乙醇和乙氧基乙醇)，非质子极性有机溶剂(如二甲基甲酰胺、二甲基亚砜、二甲基乙酰胺、四甲基脲、四氢噻吩砜和 N,N-二甲基咪唑烷酮)，醚(如乙醚、异丙醚、四氢呋喃和二噁烷)，脂肪烃(戊烷、正己烷、环己烷、辛烷、萘烷和石油醚)，芳香烃(苯、氯苯、硝基苯、二甲苯、1,2,3,4-四氢化萘)，卤代烃(氯仿、二氯甲烷和二氯乙烷)，酮(丙酮、丁酮和 2-己酮)，低级脂肪酸酯(乙酸甲酯、乙酸乙酯和丙酸甲酯)，烷氧基烷烃(二甲氧基乙烷和二乙氧基乙烷)，乙腈等。这些溶剂的选用取决于目标反应的反应性，可以单独使用也可以混合使用。有时，通过使用脱水剂或干燥剂将它们以无水溶剂的形式使用。上述溶剂只是可以用于本发明反应的实例，本发明并不局限于此。

方法 1



(II)　　(I-1)

(其中 R^1,R^2,R^3,R^6,X^1,X^2 和 Z 的定义同上，R^8 是氢原子或酰胺的保护基(如 Tr:三苯甲基))。

结构式 I 中的 R^4 和 R^7 结合在一起的化合物，即结构式 I-1 所示的化合物，可以通过结构式 II 化合物和结构式 V 化合物的脱水缩合反应制得。结构式 V 化合物是公知化合物，或可根据"J. Prakt. Chem."(vol. 2, p. 253, 1909)，"J. Prakt. Chem."(vol. 3, p. 45, 1919)，"Chem. Ber"(vol. 118, p. 774, 1985)和德国专利公告 No. DE-3045059 中描述的方法合成。R^8 为氢原子的结构式 V 化合物可以在利用公知的方法以合适的取代基(如 Tr:三苯甲基)将其碱性酰胺质

子保护起来后用于此反应。

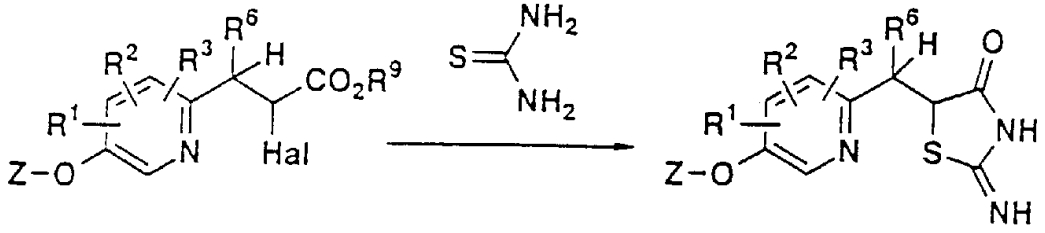
此反应通常在碱或酸的存在下在合适的有机溶剂中进行。这种溶剂的实例包括醇、溶纤剂、非质子极性有机溶剂、醚、芳香烃、卤代烃、烷氧基烷烃和乙腈。

碱和酸的实例包括有机胺(如二甲基胺、二乙基胺、二异丙基胺、二异丙基乙基胺、三甲基胺、三乙基胺、哌啶、哌嗪、吡咯烷酮、吗啉、吡啶、甲醇胺和乙醇胺),金属醇盐(如甲醇钠、乙醇钠和异丙醇锂),无机碱金属盐(如碳酸钾、碳酸钠、碳酸氢钠、碳酸氢钾、氢化钠、乙酸钠和乙酸钾),有机酸(如乙酸、三氯乙酸和三氟乙酸),无机酸(如磷酸)等。这些物质的正确选用取决于目标反应的反应性。

利用合适的脱水剂(例如分子筛和无水硫酸钠)或用 Dean-Stark 管进行共沸蒸馏将反应过程中形成的水从系统中除去可促进此反应的进行。

此反应通常在 0℃至溶剂沸点间的某温度进行,以 20℃至 120℃为佳,反应进行 0.5 至 30 小时。

方法 2



(VIII)　　(I-2e)
(X^1=S, X^2=NH)

(其中 R^1,R^2,R^3,R^6 和 Z 的定义同上,R^9 是甲基、乙基、正丙基、异丙基、正丁基和叔丁基之类的 C_1—C_4 烷基,Hal 是氯原子、溴原子或碘原子)。

结构式 I 化合物中的 R^4 和 R^7 是氢原子,X^1 是 S,X^2 是 NH 的化合物,即结构式 I-2e 所示的化合物(R^4,R^7=H,X^1=S,X^2=NH),可以通过硫脲和结构式 VIII 所示的卤代羧酸酯反应制得。

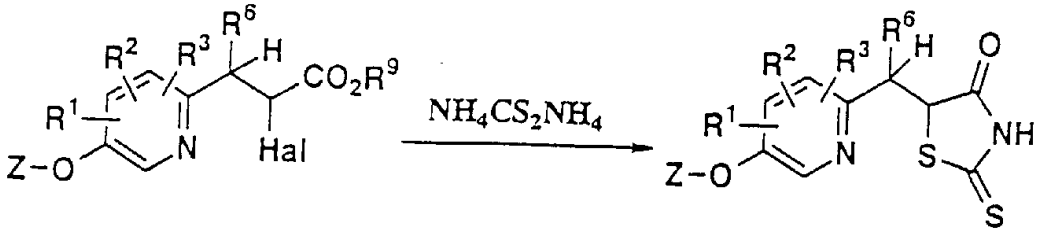
此反应通常在碱或酸存在下在合适的有机溶剂中进行。这种溶剂的实例包括醇、溶纤剂、非质子极性有机溶剂,优选使用四氢噻吩砜。

此反应通常在 0℃至溶剂沸点间的某温度下进行,以 50℃至 150℃为佳,反应进行 0.5 至 10 小时。

反应中的副产物是卤化氢,但可以用合适的碱来吸收,从而促进反应。这样使用的碱的实例包括有机胺(如二甲基胺、二乙基胺、二异丙基胺、二异丙基乙基

胺、三甲基胺、三乙基胺、哌啶、哌嗪、吡咯烷、吗啉、吡啶、甲醇胺和乙醇胺），无机碱金属盐（如乙酸钠和乙酸钾）等。

方法 3



（VIII）　　（I-2b）
（X^1=S, X^2=S）

（其中 R^1，R^2，R^3，R^6，R^9、Hal 和 Z 的定义同上）。

结构式 I 中的 R^4 和 R^7 是氢原子，X^1 和 X^2 是 S，即结构式 I-2b 所示的化合物（R^4，R^7=H，X^1，X^2=S），可以通过二硫代氨基甲酸铵和结构式 VIII 所示的卤代羧酸酯反应制得。

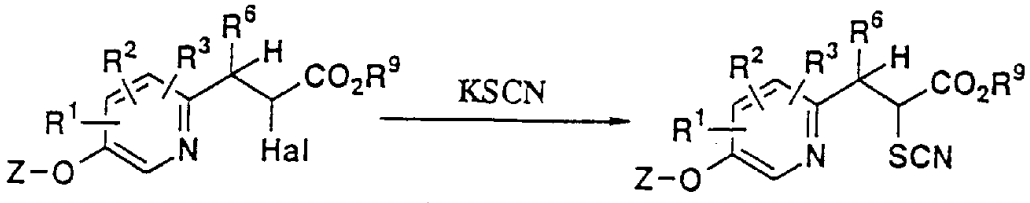
此反应通常在水或合适的有机溶剂，或在它们的混合物中进行。溶剂的实例包括醇、溶纤剂和非质子极性有机溶剂。

此反应通常在-10℃至 50℃间的某温度进行，以 0℃至 30℃为佳，反应进行 0.5 至 50 小时。

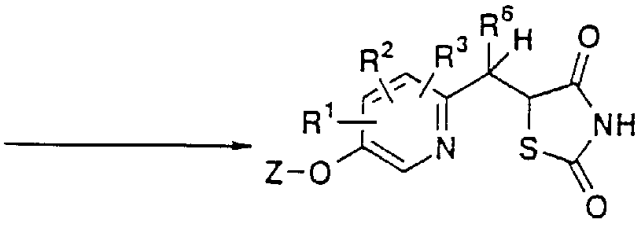
反应中的副产物是卤化氢，但可以用合适的碱来吸收，从而促进反应。这样使用的碱的实例包括有机胺（如二甲基胺、二乙基胺、二异丙基胺、二异丙基乙基胺、三甲基胺、三乙基胺、哌啶、哌嗪、吡咯烷、吗啉、吡啶、甲醇胺和乙醇胺），无机碱金属盐（如碳酸钾、碳酸钠、乙酸钠和乙酸钾）等。

用酸（如盐酸）处理如此获得的加成产物以获取结构式 I-2b 所示的化合物。

方法 4



（VIII）　　（XII）



(I-2a)

(X^1=S, X^2=O)

(其中 R^1,R^2,R^3,R^6,R^9、Hal 和 Z 的定义同上)。

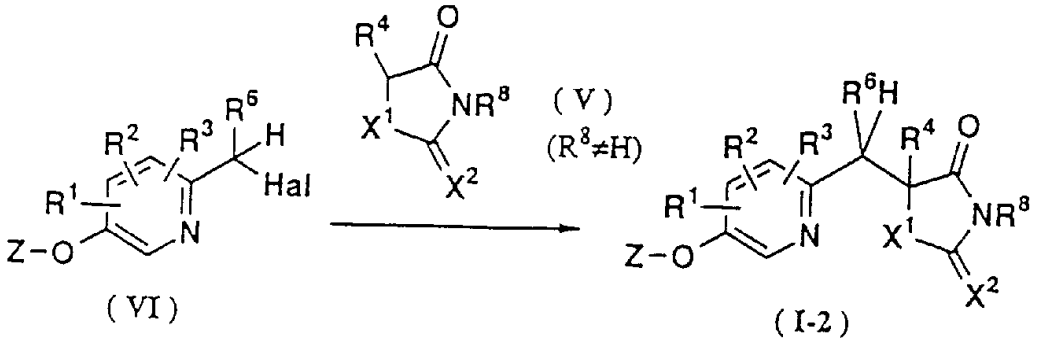
结构式 I 中的 R^4 和 R^7 是 H,X^1 是 S,X^2 是 O,即结构式 I-2a 所示的化合物(R^4,R^7=H,X^1=O,X^2=S),可以通过硫氰酸碱金属盐和结构式 VIII 所示的卤代羧酸酯反应制得结构式 XII 所示的化合物再用酸处理制备而成。

此反应通常在合适的有机溶剂中进行。溶剂的实例有非质子极性有机溶剂。

此反应通常在 50℃至 150℃间的某温度进行,以 80℃至 120℃为佳,反应进行 0.5 至 10 小时。

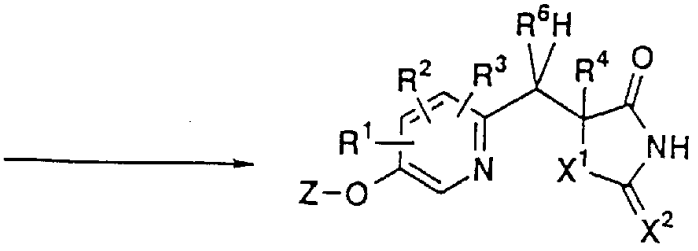
分离出结构式 XII 化合物,或者不进行分离而在反应系统中对其进行酸处理,从而制得结构式 I-2a 目标化合物。这种酸的实例有盐酸,并且,酸处理是在醇或非质子极性有机溶剂中进行的。此反应在 50℃至 150℃间的某温度进行,以 70℃至 100℃为佳,反应进行 5 至 50 小时。

方法 5



(VI)　　(V)　(R^8≠H)　　(I-2)

(R^7=H, R^8≠H)



(I-2)

(R^7=H, R^8=H)

(其中 R^1,R^2,R^3,R^4、R^6,R^8,X^1,X^2, Hal 和 Z 的定义同上)。

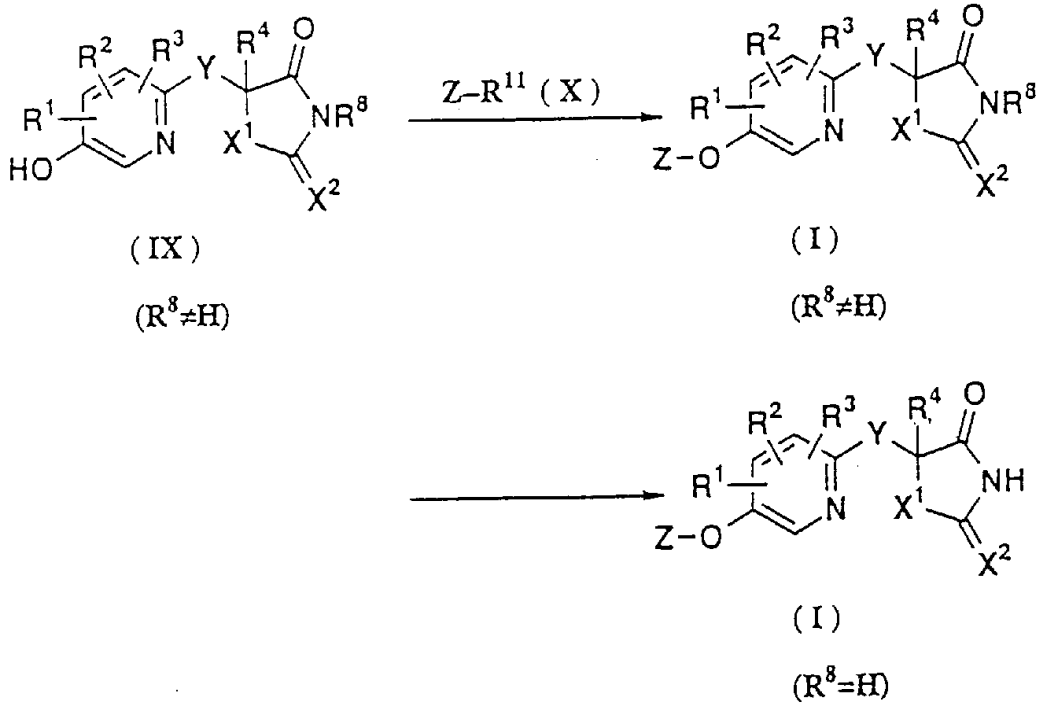
结构式 I 中的 R^7 是氢原子,即结构式 I-2 所示的化合物可以通过结构式 V 化合物和结构式 VI 所示的卤代吡啶反应制得。在此所用的结构式 V 化合物是公知化合物,或者可以利用"Ukr. Khim. Zr."(vol. 16, p. 545, 1950),"J. Med. Chem."(vol. 34, p. 1538, 1991),"J. Prakt. Chem."(vol. 2, 79, p. 253, 1909),"J. Prakt. Chem."(vol. 2, 99, p. 56, 1919)或日本未审定的专利公告 No. 216882/1984 中所描述的方法来合成。R^8 为氢原子的结构式 V 化合物最好在用已知方法以合适的取代基(如 Tr:三苯甲基)将其碱性酰胺质子保护起来后用于此反应。

此反应通常在碱存在下在合适的有机溶剂中进行。这种溶剂的实例有非质子极性有机溶剂、醚和烷氧基烷烃。碱的实例有氨基碱金属(如氨基钠和氨基钾)之类的强碱。这些物质的选用取决于目标反应的反应性。

此反应也可以根据"J. Amer. Chem. Soc."(vol. 87, p. 4588, 1965)或"J. Med. Chem. "(vol. 34, p. 1538, 1991)描述的方法来进行。此时,结构式 V 所示的化合物与甲基碳酸镁在氮气之类惰性气体中,在二甲基甲酰胺之类的非质子极性有机溶剂中反应,形成螯合化合物,如此形成的螯合化合物再与结构式 VI 所示的卤代吡啶反应,以获取结构式 I-2 所示的化合物。此反应通常在 20℃至 150℃间的某温度下进行,以 70℃至 100℃为佳。反应时间根据所用的物质而不同,但螯合化合物的形成耗时 0.5 至 2 小时,与卤代吡啶反应耗时 0.5 至 5 小时。

有时,可以用已熟知的方法对所得的结构式 I—2 所示的化合物中噻唑烷环 3 位上的酰胺基去保护。R^8 是 Tr(三苯甲基)时,用以三氟乙酸和三氯乙酸为例的有机酸或以盐酸和硫酸为例的无机酸来实施此方法。此反应可以不在溶剂中进行,或者在包括四氢呋喃和二噁烷在内的醚和包括氯仿和二氯甲烷在内的卤代溶剂之类溶剂中进行,反应温度为 0℃至 100℃,以 10℃至 50℃为佳,反应 0.1 至 5 小时。

方法 6



(其中 R^1,R^2,R^3,R^4,R^8,X^1,X^2, Y 和 Z 的定义同上,R^{11}是一个合适的亲核取代反应中的离去基团,其实例包括氯、溴、碘等卤原子以及对甲苯磺酰氧基、苯磺酰氧基和甲磺酰氧基等芳香族或脂族磺酰氧基)。

结构式 I 所示的化合物中,有一种化合物其中的 A 是 $COCH_2$(m=1, R^d, R^e=H, R^f 和 R^g 一起构成氧代基),该化合物可以由以 B-$COCH_2$-Hal(Z=B-$COCH_2$,R^{11}=Hal, B 和 Hal 是前述的取代基)为例的结构式 X 所示的化合物制得。这种化合物是公知的,并且是可以购得的,或者可以用已熟知的方法(例如,英国专利公告 No. 1107677 公开的化合物中 B 为吡咯,日本未审定的专利公告 No. 85372/1986 公开的化合物中 B 为噁唑或噻唑,美国专利 No. 4,167,626 公开的化合物中 B 是三唑)制得。这种化合物也可以通过以合适的已熟知的卤化方法(例如,日本未审定的专利公告 No. 85372/1986 中公开的方法)卤化起始物质 B-$COCH_3$(例如,"Bull. Soc. Chim. Fr., p. 1760(1973)"公开的化合物中 B 为呋喃,"Tetrahedron, 29(2), p. 413(1973)"公开的化合物中 B 为噻吩,"J. Heterocyclic Chem., 27(5), p. 1209(1990)"公开的化合物中 B 为吡咯,"Bull. Soc. Chem. Fr., p540(1988)","Bull. Soc. Chem. Fr., p. 318(1987)","J. Heterocyclic Chem., 23(1), p. 257(1986)","Arch. Pharm., 316(7), p. 608(1983)"和"Synlett., (7), p. 483(1991)"公开的化合物中 B 为吡唑,"J. Hete-

rocyclic Chem.，17(8)，p.1723(1980)"公开的化合物中B为咪唑，"J. Chem. Soc. C(20)，p.2005(1976)"和"Heterocycles，26(3)，p.745(1987)"公开的化合物中B为三唑)来制得。这种化合物也可以如下制得：以B-CO_2R'(R'＝低级烷基，或取代或非取代的苄基)(例如，"Z. Chem.，9(1)，p.22(1969)"和"Synth. commun.，20(16)，p.2537(1990)"公开的化合物中B为噻吩，"J. Org. Chem.，55(15)，p.4735(1990)"和"Chem. Pharm. Bull.，17(3)，p.582(1969)"公开的化合物中B为吡咯，欧洲专利公告No.506194公开的化合物中B为咪唑，"Chem. Ber.，117(3)，p.1194(1984)"公开的化合物中B为吡唑或三唑)为起始物进行合适的公知的氧化还原反应(例如，用氢化二异丁基铝还原后再以二氧化锰氧化)制得B-CHO，然后利用合适的方法(例如"Tetrahedron Letters，p.4661(1972)"公开的方法)将此产物转化为B-$COCH_2$-Hal。

结构式I所示的化合物还可以通过结构式X所示的化合物与结构式IX所示的5位上有一个羟基的化合物经亲核取代反应制得。结构式IX所示的化合物最好通过以合适的取代基(例如Tr：三苯甲基)取代R^8的氢原子加以保护。

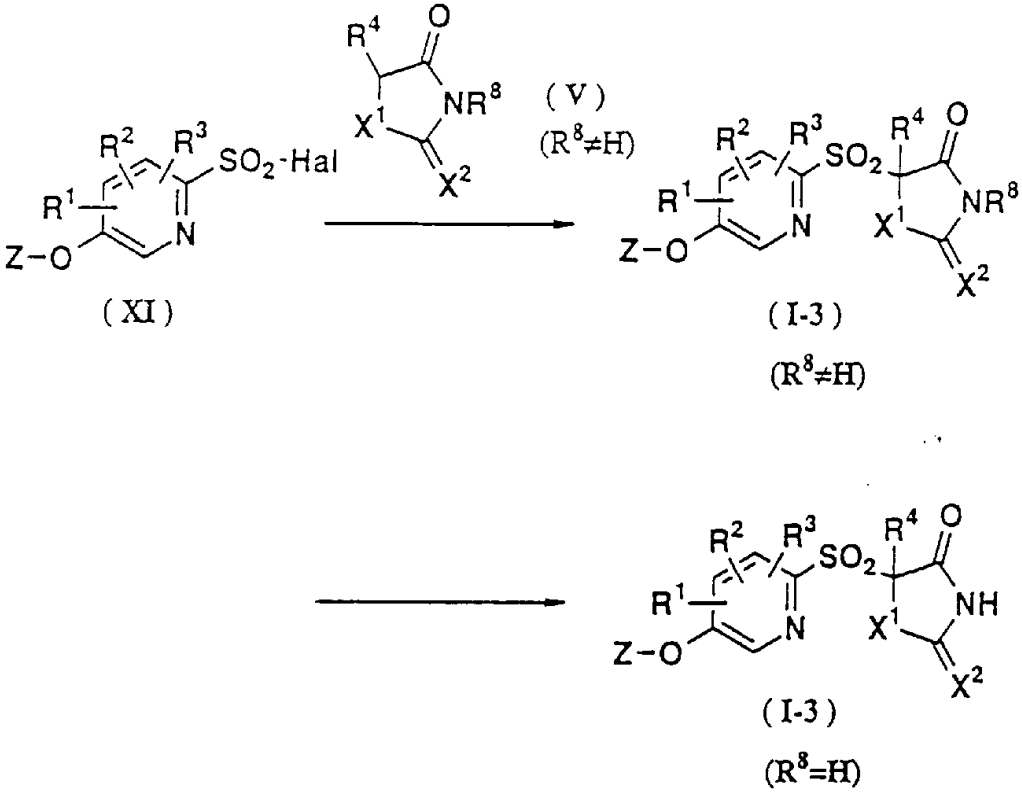
此反应通常在碱存在下在合适的有机溶剂中进行。所用的溶剂的实例包括非质子极性有机溶剂、醚、芳香烃、氯化烃、烷氧基烷烃、乙腈等。

所用的碱的实例包括有机胺(如二甲基胺、二乙基胺、二异丙基胺、二异丙基乙基胺、三甲基胺、三乙基胺、哌啶、哌嗪、吡咯烷、吗啉、吡啶、甲醇胺和乙醇胺)，金属醇盐(如甲醇钠、乙醇钠、异丙醇锂和叔丁醇钾)，无机碱金属盐(如氢氧化钠、氢氧化钾、氢氧化锂、碳酸钾、碳酸钠、碳酸氢钠、碳酸氢钾、氢化钠、乙酸钠和乙酸钾)，以及氨基化碱金属(如氨基钠)。这些物质的正确选用取决于目标反应的反应性。

此反应通常在－20℃至溶剂沸点间的某温度下进行，以20℃至150℃为佳，反应进行0.5至30小时。

结构式I所示化合物的噻唑烷3位的氨基可以利用方法5中所述的方法去保护。

方法 7



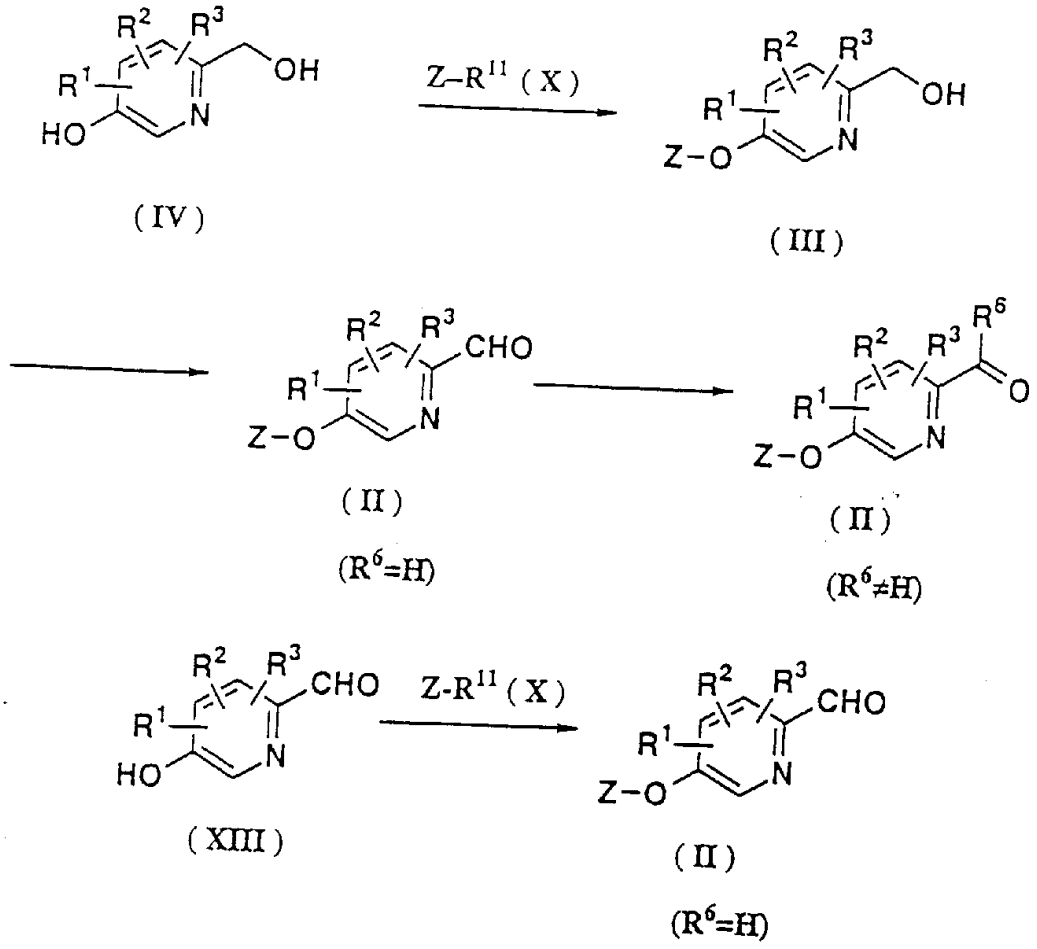
(其中 R^1,R^2,R^3,R^4,R^8,X^1,X^2,Z 和 Hal 的定义同上)。

结构式 I 所示的化合物中有一种,其 Y 是 SO_2,即结构式 I-3 所示的化合物($Y=SO_2$),它可以由结构式 V 所示的化合物与结构式 XI 所示的化合物反应制得。结构式 XI 所示的吡啶磺酰卤代物可以如下制得:以 5-羟基-2-吡啶磺酸为起始物,烷基化其 5 位的羟基(如"J. Chim. Phys. Phys. -Chim. Biol., vol. 79 (3), p. 265(1982)"中的公开内容),再用合适的卤化剂(如"Org. Synth. Coll. vol. I, p. 84(1941)"和"J. Amer. Chem. Soc., vol. 69, p. 1170(1947)"公开的 PCl_5 和"Helv. Chim. Acta., vol. 42, p. 1653(1959)"公开的 $SOCl_2$/DMF)卤化该烷基化产物。

此反应通常在氮气等惰性气体下,在合适的有机溶剂中,在强碱存在下进行。溶剂的实例包括醚,最好是四氢呋喃。碱的实例包括氨基化碱金属(如 LDA:二异丙基氨基锂),芳香族或脂族锂化合物(如正丁基锂、叔丁基锂和苯基锂)。这些物质的正确选用取决于目标反应的反应性。

此反应通常在-100℃至 50℃间的某温度进行,以-78℃至 20℃为佳,反应进行 0.1 至 10 小时。

如下所述制备用于合成本发明化合物的中间体。



(其中 R^1,R^2,R^3,R^6,R^{11}和 Z 的定义同上)。

结构式 II 表示的化合物中的一种,其 R^6 是氢原子的可以如下制备:结构式 X 所示的化合物与结构式 IV 所示的 5 位上有一个羟基的 5-羟基吡啶甲醇通过亲核取代反应生成结构式 III 所示的化合物,再氧化由此产生的结构式 III 化合物 2 位的羟甲基。

结构式 IV 所示的 5-羟基吡啶甲醇可以利用美国专利 No. 4,202,901 公开的方法来合成。在此方法中,可以如下制得 5-羟基吡啶甲醇:用合适的氧化剂(如在醋酸中用过氧化氢)将 5-羟基-2-甲基吡啶氧化成吡啶-N-氧化物,用合适的有机酸酐(如乙酸酐)将吡啶-N-氧化物转化成酰氧基甲基吡啶,再用合适的酸或碱将酰氧基甲基吡啶水解成 5-羟基吡啶甲醇。也可以利用"J. Med. Chem., vol. 20(10), p. 1528(1977)"和"J. Med. Chem., vol. 35(20), p. 3667(1992)"公开的方法制备一种甲基取代的产物,利用"Bull. Chem. Sci. Jpn., vol. 52(1), p. 107(1979)"公开的方法制备一种羟基取代的产物,利用美国专利 No. 4,025,333 和"J. Med. Chem., vol. 17(2), p. 172(1974)"公开的方法制备溴、氯取代的产物。

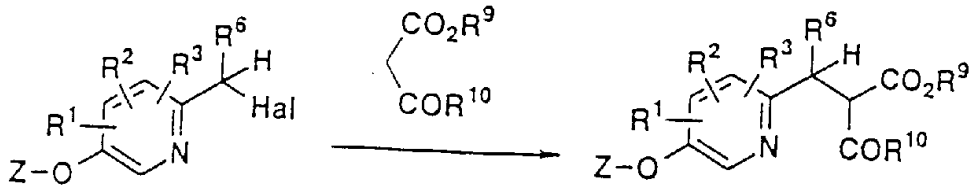
制备结构式 III 所示的化合物的步骤可在相同于方法 6 的条件下进行。

可以用合适的氧化剂(如二氧化锰,PCC:氯铬酸吡啶镒,PDC:重铬酸吡啶镒,DDQ:二氯二氰基苯醌,氯醌,Swern 氧化:草酰氯-二甲基亚砜-叔胺,和三氧化硫—吡啶复合物)来制备结构式 II 所示的化合物。

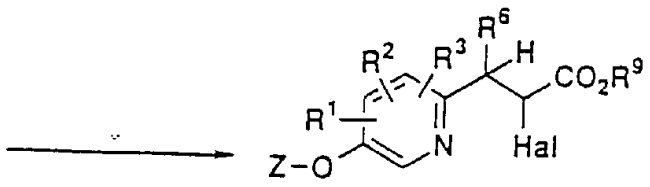
结构式 II 所示的化合物也可以由结构式 X 所示的化合物与 5 位上有一羟基的结构式 XIII 所示的羟基吡啶醛通过亲核取代反应来制得。结构式 XIII 所示的羟基吡啶醛可利用未审定的日本专利公告 No. 273659/1990 中公开的方法来制备,或者以合适的公知氧化剂(如 PCC(氯铬酸吡啶镒))氧化结构式 IV 所示化合物的羟甲基来制备。结构式 II 所示化合物的制备步骤是令反应物在合适的有机溶剂或在碱存在下反应进行的。在此所用溶剂的实例包括非质子极性有机溶剂、醚、芳香烃、卤代烃、烷氧基烷烃和乙腈,其中,优选二甲基甲酰胺(DMF)。在此所用的碱的实例包括有机胺(如二甲基胺,二乙基胺、二异丙基胺、二异丙基乙基胺、三甲基胺、三乙基胺、哌啶、哌嗪、吡咯烷、吗啉、吡啶、甲醇胺、乙醇胺、酸受体 H:3,4-二氢-2H-吡啶并〔1,2-a〕嘧啶-2-酮和酸受体 9M:9-甲基-3,4-二氢-2H-吡啶并〔1,2-a〕嘧啶-2-酮),以及无机碱金属盐(如氢氧化钠、氢氧化钾、氢氧化锂、碳酸钾、碳酸钠、碳酸氢钠、碳酸氢钾、氢化钠 、乙酸钠、乙酸钾),其中优选二异丙基乙基胺、酸受体 9M 和碳酸氢钠。这些物质的正确选用取决于目标反应的反应性。此反应通常在-10℃至 100℃间的某温度下进行,以 0℃至 50℃为佳,反应进行 0.5 至 5 小时。

用公知方法以合适的烷化剂烷基化甲酰基可以进一步将由上述方法制得的结构式 II 所示(R^6=H)化合物修饰为结构式 II 所示(R^6≠H)的化合物。

此步反应可根据"Tetrahedron Letters, p. 955(1963)"和"Chem. Ber. vol. 40, p479(1907)"中公开的使用重氮甲烷的方法,"Synth. Commun., vol. 14 (8), p. 743(1984)"中公开的使用卤代烷的方法或"J. Org. Chem., vol. 30, p. 226(1965)"中公开的使用烷基锂的方法来进行。



(VI) (VII)



(VIII)

(其中 R^1,R^2,R^3,R^6,R^9,Z 和 Hal 的定义同上,R^{10}代表 OR^9(R^9 的定义同上)或甲基、乙基、正丙基和异丙基等 C_1—C_3 烷基)。

结构式 VIII 所示的卤代羧酸酯可如下制得:由已知方法使卤代甲基吡啶与丙二酸酯或低级酰基乙酸酯反应形成结构式 VII 所示的化合物,然后卤化由此形成的化合物。

结构式 VI 所示的卤代甲基吡啶可利用"Bull. Pol. Acad. Sci. Chem., vol. 38, No. 1-12, p. 17(1990)"中公开的方法来制得。照此,可以用合适的卤化剂(如亚硫酰氯、三卤氧化磷、三卤化磷、五卤化磷、盐酸和氢溴酸)卤化结构式 III 或 IV 所示化合物的合成中描述的酰氧基甲基吡啶来制备结构式 VI 所示的卤代甲基吡啶。其制备也可以用三卤氧化磷、苯磺酰卤或对甲苯磺酰卤按美国专利 No. 5,202,321,"J. Org. Chem., vol. 27, p. 3856(1962)"或"J. Org. Chem., vol. 38, p. 927(1973)"公开的方法卤化作为起始物的吡啶-N-氧化物。

结构式 VII 所示的化合物中,其 R^{10}是 C_1—C_3 烷基的化合物,可以根据"J. Amer. Chem. Soc. vol. 64, p. 435(1942)"公开的方法,在合适的碱(如氢氧化钠、氢氧化钾、甲醇钠、乙醇钠、氨基钠、氨基钾、二异丙基胺、丁基锂、金属钠和碳酸钾)存在下,通过结构式 VI 所示的卤甲基吡啶与低级酰基醋酸酯(如乙酰乙酸甲酯和乙酰乙酸乙酯)反应制备。

结构式 VII 所示的化合物中,R^{10}是 OR^9 的化合物,可以根据"J. Amer. Chem. Soc. vol. 74, p. 831(1952)"和"Org. Synth. Coll. vol. 3, p. 705(1955)"公开的方法,在上述合适的碱存在下,通过结构式 VI 所示的卤甲基吡啶与丙二酸酯(如丙二酸二乙酯和丙二酸二叔丁酯)反应制得。

合成结构式 VIII 所示化合物这步可以根据"J. Amer. Chem. Soc. vol. 71, p. 3107(1949)"和"Tetrahedron Letters, vol. 28, p. 5505(1987)"公开的方法,在合适的碱(如氢氧化钠、甲醇钠和碳酸钾)存在下使用合适的卤化剂(如溴和 N-氯琥珀酰亚胺)来进行。

结构式 VIII 所示的化合物也可以根据"Zur. Russ. Fiz-Chim., vol. 21, p.

851(1951)"公开的方法，由结构式 VI 所示的卤甲基吡啶和重氮乙酸酯在铜催化剂存在下反应制得。



(I-1)
(R^4, R^7=bond)

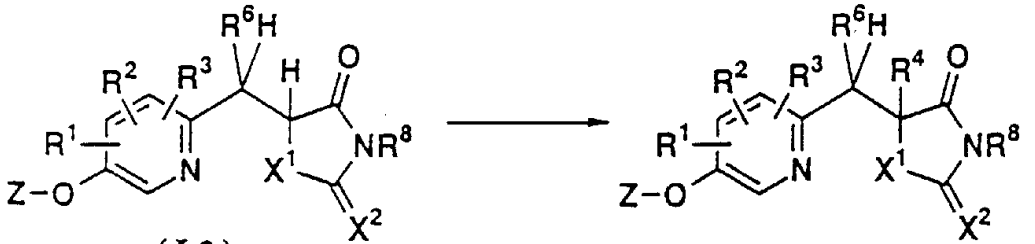
(I-2)
(R^4=H, R^7=H)

(其中 R^1,R^2,R^3,R^6,R^8,X^1,X^2 和 Z 的定义同上)。

适当还原吡啶环和噻唑烷环之间的双键(例如使用合适的金属-氢复合物，或在甲醇中使用镁汞齐或钠汞齐，或通过合适的催化剂存在下的催化加氢作用)，可将由前述方法制得的结构式 I-1 所示的化合物(其中 R^4 和 R^7 结合在一起)修饰为结构式 I-2 所示的化合物(R^4 和 R^7=H)。

催化加氢作用通常在醇、溶纤剂、非质子极性有机溶剂、醚、烷氧基烷烃、低级脂肪酸酯或低级脂肪酸中进行，特别优选单独或混合使用甲醇、乙醇、甲氧基乙醇、二甲基甲酰胺、四氢呋喃、二噁烷、二甲氧基乙烷、乙酸乙酯或乙酸。所用的催化剂的实例包括钯黑、钯碳和氧化铂。此反应可在常温常压下进行，但最好在较高的温度和压力下进行，这取决于目标反应的反应性。

利用金属-氢复合物的还原反应是使用硼氢化钠、硼氢化钾、硼氢化锂、硼氢化四甲基铵或硼氢化锌，在非质子极性有机溶剂中，在 0℃至 150℃间(以 0℃至 30℃为佳)的某温度下进行的。在此还原反应中，在二甲基乙二肟、2,2′-联吡啶或 1,10-菲咯啉(参见 WO93/13095)之类配位体存在下，使用如 $CoCl_2$、$CoCl_3$ 或 $Co(OAc)_2$ 等钴试剂可以抑制不利的副反应。



(I-2)
(R^4=H, R^7=H)

(I-2)
(R^4≠H, R^7=H)

(其中 R^1,R^2,R^3,R^4,R^6,R^8,X^1,X^2 和 Z 的定义同上)。

根据公知的方法,以合适的烷化剂(如包括甲基碘或乙基碘在内的卤代烷,包括硫酸二甲酯或硫酸二乙酯在内的硫酸烷基酯,和包括甲苯磺酸甲酯或甲磺酸甲酯在内的脂族或芳香族磺酸酯)烷基化噻唑烷 5 位的氢原子,可以将结构式 I-2(R^4,R^7=H)所示的化合物修饰成结构式 I-2(R^4≠H,R^7=H)所示的化合物。

此反应通常在碱存在下,在合适的有机溶剂中进行。在此所用的溶剂的实例包括非质子极性有机溶剂、醚、烷氧基烷烃等,其中特别优选的是四氢呋喃和二甲氧基乙烷。碱的实例包括氨基化碱金属(如二异丙基氨基化锂(LDA)和氨基化钾)和脂族或芳香族锂化合物(如正丁基锂、叔丁基锂和苯基锂)。这些物质的正确选用取决于目标反应的反应性。

此反应的进行温度通常在−20℃至 100℃,以−10℃至 30℃为佳,反应进行 0.1 至 10 小时。



(I-2e)
(X^1=S, X^2=NH)

(I-2a)
(X^1=S, X^2=O)

(其中 R^1,R^2,R^3,R^6 和 Z 的定义同上)。

根据公知的方法,水解噻唑烷 2 位上的亚氨基,可以将结构式 I-2e(X^1=S,X^2=NH)所示的化合物修饰成结构式 I-2a(X^1=S,X^2=O)所示的化合物。

此反应通常在水或酸存在下,在合适的有机溶剂中进行。所用的溶剂的实例包括醇、溶纤剂、非质子极性有机溶剂、醚、烷氧基烷烃等,特别优选的是甲醇、乙醇、甲氧基乙醇、四氢噻吩砜、二噁烷和二甲氧基乙烷。所用的酸的实例包括无机酸(如盐酸、硫酸和氢溴酸)。这些物质的正确选用取决于目标反应的反应性。

此反应的进行温度通常在 50℃至溶剂沸点间,以 80℃至 150℃为佳,反应进行 0.5 至 30 小时。



(Ic)
(X^1=O, X^2=S)

(Id)
(X^1=O, X^2=O)

(其中 R^1, R^2, R^3, Y 和 Z 的定义同上)。

根据公知的方法，氧化噻唑烷 2 位上的硫代基，可以将结构式 Ic(X^1=O, X^2=S)所示的化合物修饰成结构式 I-d(X^1=O, X^2=O)所示的化合物。

此反应通常在水或溶剂(例如非质子极性有机溶剂(如二甲基甲酰胺、二甲基亚砜、二甲基乙酰胺、四甲基脲、四氢噻吩砜和 N,N-二甲基咪唑烷酮)、醚(四氢呋喃和二噁烷)、烷氧基烷烃(二甲氧基乙烷和二乙氧基乙烷))中，使用合适的氧化剂(例如过氧化氢，包括过乙酸、过苯甲酸、间氯过苯甲酸、单过马来酸、单过邻苯二甲酸等在内的有机过氧化物、汞离子、溴氯及偏高碘酸)来进行。这些物质的正确选用取决于目标反应的反应性，可以分别单独使用或混合使用。

此反应的进行温度通常在 0℃至溶剂沸点间，以 20℃至 100℃为佳，反应进行 0.5 至 30 小时。

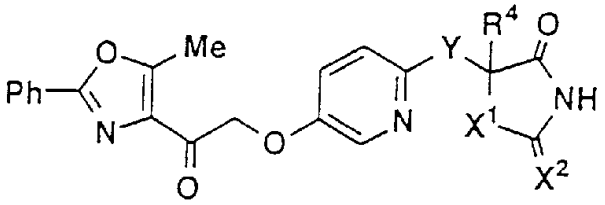
根据公知的方法，利用合适的氧化剂氧化吡啶环上的氮原子，可以将结构式 I 所示的化合物转化成相应的 N-氧化物形式。所用的氧化剂的实例包括过氧化氢(在乙酸或三氟乙酸中使用，温度为 0℃至 100℃，以 50℃至 80℃为佳，反应时间为 1 至 20 小时，以 3 至 10 小时为佳，可以加入催化剂量的硫酸以促进反应)，过乙酸(在水或乙酸中使用，可以在四氢呋喃或乙酸乙酯为例的有机溶剂中使用，温度为 0℃至 100℃，以 40℃至 80℃为佳，反应时间为 1 至 10 小时，以 3 至 5 小时为佳)，过苯甲酸或间氯过苯甲酸(在氯仿或苯等有机溶剂中使用，温度为 0℃至 50℃，以 10℃至 30℃为佳，反应时间为 0.1 至 3 小时，也可以超过 2 周)，和单过马来酸或单过邻苯二甲酸(在氯仿或乙醇等有机溶剂中使用，温度为 −10℃至 50℃，以 0℃至 30℃为佳，反应时间为 0.5 至 50 小时，以 1 至 10 小时为佳)。这些氧化剂可以混合使用。也可以根据公知的方法，使用合适的还原剂还原吡啶环上的氮原子，将 N-氧化物产物还原成相应的吡啶产物。用于此方法的还原剂的实例包括催化加氢(在乙酸、乙酸酐、甲醇或乙醇之类有机溶剂或其混

合物中使用，温度为 0℃至 100℃，以 10℃至 70℃为佳，压力为大气压至 30 大气压，以常压至 10 个大气压为佳，有 Raney 镍、Urushibara 镍、钯碳或氧化铂等催化剂存在），铁（在乙酸中，温度为 50℃至 100℃，以 70℃至 80℃为佳，反应时间为 0.5 至 5 小时，以 1 至 2 小时为佳），锌（在乙酸中，可以有催化量的硫酸存在），三氯化磷、五氯化磷和三溴化磷（在氯仿或乙酸乙酯等有机溶剂中，温度为 0℃至 100℃，以 20℃至 80℃为佳，反应时间为 0.5 至 5 小时，以 1 至 3 小时为佳），三乙基膦、三苯基膦和亚磷酸三乙酯（在乙酸乙酯等有机溶剂中，温度为 150℃至 300℃，反应时间为 0.5 至 10 小时），和硫及二氧化硫（在苯或氯苯等有机溶剂中，温度为 150℃至 200℃，反应时间为 0.5 至 30 小时）。

上述化合物 II，III，IV，VI，VII，VIII，IX 和 X 是新的化合物，可用作制备本发明中结构式 I 所示化合物的中间产物。

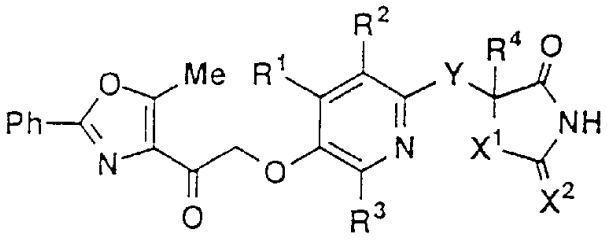
以下表格 1 至 16 说明了本发明中具有结构式 I-1，I-2 和 I-3 的化合物的实例。而且，本发明化合物还包括利用公知方法，氧化吡啶环上的氮原子而得的吡啶-N-氧化物和由噻唑烷环上的碱性氮反应而得的盐。

表 1



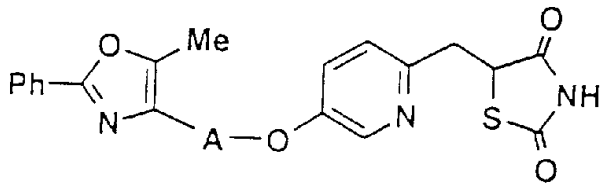
Y	R^4	X^1	X^2
-C(Me)=	与 R^7 键合	S	O
$-CH_2-$	Me	S	O
-CH(Me)-	H	S	O
-CH(Me)-	Me	S	O
$-SO_2-$	H	S	O
$-SO_2-$	Me	S	O
-CH=	与 R^7 键合	S	O
-CH=	与 R^7 键合	S	S
-CH=	与 R^7 键合	O	S
-CH=	与 R^7 键合	O	O
-CH=	与 R^7 键合	S	NH
$-CH_2-$	H	S	O
$-CH_2-$	H	S	S
$-CH_2-$	H	O	S
$-CH_2-$	H	O	O
$-CH_2-$	H	S	NH

表 2



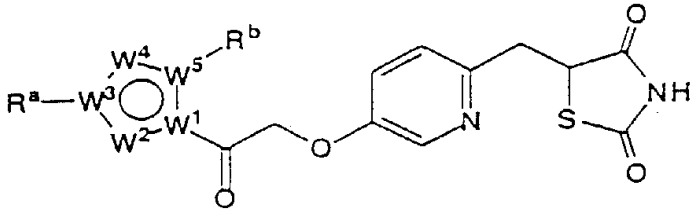
R^1	R^2	R^3	Y	R^4	X^1	X^2
H	Cl	H	-CH=	与 R^7 键合	S	O
Br	H	Br	-CH=	与 R^7 键合	S	O
I	H	H	-CH=	与 R^7 键合	S	O
H	OMe	H	-CH=	与 R^7 键合	S	O
OMe	H	H	-CH=	与 R^7 键合	S	O
H	Me	H	-CH=	与 R^7 键合	S	O
Me	H	H	-CH=	与 R^7 键合	S	O
H	H	Me	-CH=	与 R^7 键合	S	O
H	OH	H	-CH=	与 R^7 键合	S	O
OH	H	H	-CH=	与 R^7 键合	S	O
H	Cl	H	$-CH_2-$	H	S	O
Br	H	Br	$-CH_2-$	H	S	O
H	OMe	H	$-CH_2-$	H	S	O
OMe	H	H	$-CH_2-$	H	S	O
H	Me	H	$-CH_2-$	H	S	O
Me	H	H	$-CH_2-$	H	S	O
H	H	Me	$-CH_2-$	H	S	O
H	OH	H	$-CH_2-$	H	S	O
OH	H	H	$-CH_2-$	H	S	O

表 3



A
$-CH_2-$
$-CH(Me)-$
$-C(Me_2)-$
$-CH_2CH_2-$
$-CH_2CH(Me)-$
$-CH_2C(Me_2)-$
$-COCH_2-$
$-COCH(Me)-$
$-COC(Me_2)-$
$-CH(OH)CH_2-$
$-CH(OH)CH(Me)-$
$-CH(OH)C(Me_2)-$
$-CH=CH-$
$-CH=CH(Me)-$
$-C\equiv C-$

表 4



W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	N	C	O	C	Ph	H
C	N	C	O	C	Ph	Me
C	N	C	O	C	Ph	Et
C	N	C	O	C	Ph	n-Hex
C	N	C	O	C	Ph	c-Pr
C	N	C	O	C	Ph	c-Hex
C	N	C	O	C	Ph	OH
C	N	C	O	C	Ph	CH_2OH
C	N	C	O	C	Ph	OMe
C	N	C	O	C	Ph	SMe
C	N	C	O	C	Ph	Cl
C	N	C	O	C	Ph	CF_3
C	N	C	O	C	Ph	Ph
C	N	C	O	C	H	H
C	N	C	O	C	H	Me
C	N	C	O	C	H	Et
C	N	C	O	C	H	n-Hex
C	N	C	O	C	H	c-Pr
C	N	C	O	C	H	c-Hex
C	N	C	O	C	H	OH
C	N	C	O	C	H	CH_2OH
C	N	C	O	C	H	OMe
C	N	C	O	C	H	SMe
C	N	C	O	C	H	Cl
C	N	C	O	C	H	CF_3
C	N	C	O	C	H	Ph
C	N	C	O	C	Me	H
C	N	C	O	C	Me	Me
C	N	C	O	C	Me	Et
C	N	C	O	C	Me	n-Hex
C	N	C	O	C	Me	c-Pr
C	N	C	O	C	Me	c-Hex
C	N	C	O	C	Me	OH
C	N	C	O	C	Me	CH_2OH
C	N	C	O	C	Me	OMe

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	N	C	O	C	Me	SMe
C	N	C	O	C	Me	Cl
C	N	C	O	C	Me	CF_3
C	N	C	O	C	Me	Ph
C	N	C	O	C	Et	H
C	N	C	O	C	Et	Me
C	N	C	O	C	Et	Et
C	N	C	O	C	Et	n-Hex
C	N	C	O	C	Et	c-Pr
C	N	C	O	C	Et	c-Hex
C	N	C	O	C	Et	OH
C	N	C	O	C	Et	CH_2OH
C	N	C	O	C	Et	OMe
C	N	C	O	C	Et	SMe
C	N	C	O	C	Et	Cl
C	N	C	O	C	Et	CF_3
C	N	C	O	C	Et	Ph
C	N	C	O	C	n-Pr	H
C	N	C	O	C	n-Pr	Me
C	N	C	O	C	n-Pr	Et
C	N	C	O	C	n-Pr	n-Hex
C	N	C	O	C	n-Pr	c-Pr
C	N	C	O	C	n-Pr	c-Hex
C	N	C	O	C	n-Pr	OH
C	N	C	O	C	n-Pr	CH_2OH
C	N	C	O	C	n-Pr	OMe
C	N	C	O	C	n-Pr	SMe
C	N	C	O	C	n-Pr	Cl
C	N	C	O	C	n-Pr	CF_3
C	N	C	O	C	n-Pr	Ph
C	N	C	O	C	n-Hex	H
C	N	C	O	C	n-Hex	Me
C	N	C	O	C	n-Hex	Et
C	N	C	O	C	n-Hex	n-Hex
C	N	C	O	C	n-Hex	c-Pr
C	N	C	O	C	n-Hex	c-Hex
C	N	C	O	C	n-Hex	OH
C	N	C	O	C	n-Hex	CH_2OH
C	N	C	O	C	n-Hex	OMe
C	N	C	O	C	n-Hex	SMe
C	N	C	O	C	n-Hex	Cl
C	N	C	O	C	n-Hex	CF_3
C	N	C	O	C	n-Hex	Ph
C	N	C	O	C	i-Pr	H

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	N	C	O	C	i-Pr	Me
C	N	C	O	C	i-Pr	Et
C	N	C	O	C	i-Pr	n-Hex
C	N	C	O	C	i-Pr	c-Pr
C	N	C	O	C	i-Pr	c-Hex
C	N	C	O	C	i-Pr	OH
C	N	C	O	C	i-Pr	CH_2OH
C	N	C	O	C	i-Pr	OMe
C	N	C	O	C	i-Pr	SMe
C	N	C	O	C	i-Pr	Cl
C	N	C	O	C	i-Pr	CF_3
C	N	C	O	C	i-Pr	Ph
C	N	C	O	C	t-Bu	H
C	N	C	O	C	t-Bu	Me
C	N	C	O	C	t-Bu	Et
C	N	C	O	C	t-Bu	n-Hex
C	N	C	O	C	t-Bu	c-Pr
C	N	C	O	C	t-Bu	c-Hex
C	N	C	O	C	t-Bu	OH
C	N	C	O	C	t-Bu	CH_2OH
C	N	C	O	C	t-Bu	OMe
C	N	C	O	C	t-Bu	SMe
C	N	C	O	C	t-Bu	Cl
C	N	C	O	C	t-Bu	CF_3
C	N	C	O	C	t-Bu	Ph
C	N	C	O	C	c-Hex	H
C	N	C	O	C	c-Hex	Me
C	N	C	O	C	c-Hex	Et
C	N	C	O	C	c-Hex	n-Hex
C	N	C	O	C	c-Hex	c-Pr
C	N	C	O	C	c-Hex	c-Hex
C	N	C	O	C	c-Hex	OH
C	N	C	O	C	c-Hex	CH_2OH
C	N	C	O	C	c-Hex	OMe
C	N	C	O	C	c-Hex	SMe
C	N	C	O	C	c-Hex	Cl
C	N	C	O	C	c-Hex	CF_3
C	N	C	O	C	c-Hex	Ph
C	N	C	O	C	3-c-己烯基	H
C	N	C	O	C	3-c-己烯基	Me
C	N	C	O	C	3-c-己烯基	Et
C	N	C	O	C	3-c-己烯基	n-Hex
C	N	C	O	C	3-c-己烯基	c-Pr
C	N	C	O	C	3-c-己烯基	c-Hex

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	N	C	O	C	3-c-己烯基	OH
C	N	C	O	C	3-c-己烯基	CH_2OH
C	N	C	O	C	3-c-己烯基	OMe
C	N	C	O	C	3-c-己烯基	SMe
C	N	C	O	C	3-c-己烯基	Cl
C	N	C	O	C	3-c-己烯基	CF_3
C	N	C	O	C	3-c-己烯基	Ph
C	N	C	O	C	CH_2OH	H
C	N	C	O	C	CH_2OH	Me
C	N	C	O	C	CH_2OH	Et
C	N	C	O	C	CH_2OH	n-Hex
C	N	C	O	C	CH_2OH	c-Pr
C	N	C	O	C	CH_2OH	c-Hex
C	N	C	O	C	CH_2OH	OH
C	N	C	O	C	CH_2OH	CH_2OH
C	N	C	O	C	CH_2OH	OMe
C	N	C	O	C	CH_2OH	SMe
C	N	C	O	C	CH_2OH	Cl
C	N	C	O	C	CH_2OH	CF_3
C	N	C	O	C	CH_2OH	Ph
C	N	C	O	C	CH_2Ph	H
C	N	C	O	C	CH_2Ph	Me
C	N	C	O	C	CH_2Ph	Et
C	N	C	O	C	CH_2Ph	n-Hex
C	N	C	O	C	CH_2Ph	c-Pr
C	N	C	O	C	CH_2Ph	c-Hex
C	N	C	O	C	CH_2Ph	OH
C	N	C	O	C	CH_2Ph	CH_2OH
C	N	C	O	C	CH_2Ph	OMe
C	N	C	O	C	CH_2Ph	SMe
C	N	C	O	C	CH_2Ph	Cl
C	N	C	O	C	CH_2Ph	CF_3
C	N	C	O	C	CH_2Ph	Ph
C	N	C	O	C	α-萘基	H
C	N	C	O	C	α-萘基	Me
C	N	C	O	C	α-萘基	Et
C	N	C	O	C	α-萘基	n-Hex
C	N	C	O	C	α-萘基	c-Pr
C	N	C	O	C	α-萘基	c-Hex
C	N	C	O	C	α-萘基	OH
C	N	C	O	C	α-萘基	CH_2OH
C	N	C	O	C	α-萘基	OMe
C	N	C	O	C	α-萘基	SMe
C	N	C	O	C	α-萘基	Cl

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	N	C	O	C	α-萘基	CF_3
C	N	C	O	C	α-萘基	Ph
C	N	C	O	C	β-萘基	H
C	N	C	O	C	β-萘基	Me
C	N	C	O	C	β-萘基	Et
C	N	C	O	C	β-萘基	n-Hex
C	N	C	O	C	β-萘基	c-Pr
C	N	C	O	C	β-萘基	c-Hex
C	N	C	O	C	β-萘基	OH
C	N	C	O	C	β-萘基	CH_2OH
C	N	C	O	C	β-萘基	OMe
C	N	C	O	C	β-萘基	SMe
C	N	C	O	C	β-萘基	Cl
C	N	C	O	C	β-萘基	CF_3
C	N	C	O	C	β-萘基	Ph
C	N	C	O	C	2-吡啶基	H
C	N	C	O	C	2-吡啶基	Me
C	N	C	O	C	2-吡啶基	Et
C	N	C	O	C	2-吡啶基	n-Hex
C	N	C	O	C	2-吡啶基	c-Pr
C	N	C	O	C	2-吡啶基	c-Hex
C	N	C	O	C	2-吡啶基	OH
C	N	C	O	C	2-吡啶基	CH_2OH
C	N	C	O	C	2-吡啶基	OMe
C	N	C	O	C	2-吡啶基	SMe
C	N	C	O	C	2-吡啶基	Cl
C	N	C	O	C	2-吡啶基	CF_3
C	N	C	O	C	2-吡啶基	Ph
C	N	C	O	C	3-吡啶基	H
C	N	C	O	C	3-吡啶基	Me
C	N	C	O	C	3-吡啶基	Et
C	N	C	O	C	3-吡啶基	n-Hex
C	N	C	O	C	3-吡啶基	c-Pr
C	N	C	O	C	3-吡啶基	c-Hex
C	N	C	O	C	3-吡啶基	OH
C	N	C	O	C	3-吡啶基	CH_2OH
C	N	C	O	C	3-吡啶基	OMe
C	N	C	O	C	3-吡啶基	SMe
C	N	C	O	C	3-吡啶基	Cl
C	N	C	O	C	3-吡啶基	CF_3
C	N	C	O	C	3-吡啶基	Ph
C	N	C	O	C	4-吡啶基	H
C	N	C	O	C	4-吡啶基	Me
C	N	C	O	C	4-吡啶基	Et

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	N	C	O	C	4-吡啶基	n-Hex
C	N	C	O	C	4-吡啶基	c-Pr
C	N	C	O	C	4-吡啶基	c-Hex
C	N	C	O	C	4-吡啶基	OH
C	N	C	O	C	4-吡啶基	CH_2OH
C	N	C	O	C	4-吡啶基	OMe
C	N	C	O	C	4-吡啶基	SMe
C	N	C	O	C	4-吡啶基	Cl
C	N	C	O	C	4-吡啶基	CF_3
C	N	C	O	C	4-吡啶基	Ph
C	N	C	O	C	2-呋喃基	H
C	N	C	O	C	2-呋喃基	Me
C	N	C	O	C	2-呋喃基	Et
C	N	C	O	C	2-呋喃基	n-Hex
C	N	C	O	C	2-呋喃基	c-Pr
C	N	C	O	C	2-呋喃基	c-Hex
C	N	C	O	C	2-呋喃基	OH
C	N	C	O	C	2-呋喃基	CH_2OH
C	N	C	O	C	2-呋喃基	OMe
C	N	C	O	C	2-呋喃基	SMe
C	N	C	O	C	2-呋喃基	Cl
C	N	C	O	C	2-呋喃基	CF_3
C	N	C	O	C	2-呋喃基	Ph
C	N	C	O	C	2-噻吩基	H
C	N	C	O	C	2-噻吩基	Me
C	N	C	O	C	2-噻吩基	Et
C	N	C	O	C	2-噻吩基	n-Hex
C	N	C	O	C	2-噻吩基	c-Pr
C	N	C	O	C	2-噻吩基	c-Hex
C	N	C	O	C	2-噻吩基	OH
C	N	C	O	C	2-噻吩基	CH_2OH
C	N	C	O	C	2-噻吩基	OMe
C	N	C	O	C	2-噻吩基	SMe
C	N	C	O	C	2-噻吩基	Cl
C	N	C	O	C	2-噻吩基	CF_3
C	N	C	O	C	2-噻吩基	Ph
C	N	C	O	C	2-甲苯基	H
C	N	C	O	C	2-甲苯基	Me
C	N	C	O	C	2-甲苯基	Et
C	N	C	O	C	2-甲苯基	n-Hex
C	N	C	O	C	2-甲苯基	c-Pr
C	N	C	O	C	2-甲苯基	c-Hex
C	N	C	O	C	2-甲苯基	OH
C	N	C	O	C	2-甲苯基	CH_2OH

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	N	C	O	C	2-甲苯基	OMe
C	N	C	O	C	2-甲苯基	SMe
C	N	C	O	C	2-甲苯基	Cl
C	N	C	O	C	2-甲苯基	CF_3
C	N	C	O	C	2-甲苯基	Ph
C	N	C	O	C	3-甲苯基	H
C	N	C	O	C	3-甲苯基	Me
C	N	C	O	C	3-甲苯基	Et
C	N	C	O	C	3-甲苯基	n-Hex
C	N	C	O	C	3-甲苯基	c-Pr
C	N	C	O	C	3-甲苯基	c-Hex
C	N	C	O	C	3-甲苯基	OH
C	N	C	O	C	3-甲苯基	CH_2OH
C	N	C	O	C	3-甲苯基	OMe
C	N	C	O	C	3-甲苯基	SMe
C	N	C	O	C	3-甲苯基	Cl
C	N	C	O	C	3-甲苯基	CF_3
C	N	C	O	C	3-甲苯基	Ph
C	N	C	O	C	4-甲苯基	H
C	N	C	O	C	4-甲苯基	Me
C	N	C	O	C	4-甲苯基	Et
C	N	C	O	C	4-甲苯基	n-Hex
C	N	C	O	C	4-甲苯基	c-Pr
C	N	C	O	C	4-甲苯基	c-Hex
C	N	C	O	C	4-甲苯基	OH
C	N	C	O	C	4-甲苯基	CH_2OH
C	N	C	O	C	4-甲苯基	OMe
C	N	C	O	C	4-甲苯基	SMe
C	N	C	O	C	4-甲苯基	Cl
C	N	C	O	C	4-甲苯基	CF_3
C	N	C	O	C	4-甲苯基	Ph
C	N	C	O	C	Ph-2,3-Me_2	H
C	N	C	O	C	Ph-2,3-Me_2	Me
C	N	C	O	C	Ph-2,3-Me_2	Et
C	N	C	O	C	Ph-2,3-Me_2	n-Hex
C	N	C	O	C	Ph-2,3-Me_2	c-Pr
C	N	C	O	C	Ph-2,3-Me_2	c-Hex
C	N	C	O	C	Ph-2,3-Me_2	OH
C	N	C	O	C	Ph-2,3-Me_2	CH_2OH
C	N	C	O	C	Ph-2,3-Me_2	OMe
C	N	C	O	C	Ph-2,3-Me_2	SMe
C	N	C	O	C	Ph-2,3-Me_2	Cl
C	N	C	O	C	Ph-2,3-Me_2	CF_3
C	N	C	O	C	Ph-2,3-Me_2	Ph

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	N	C	O	C	Ph-3,4-Me_2	H
C	N	C	O	C	Ph-3,4-Me_2	Me
C	N	C	O	C	Ph-3,4-Me_2	Et
C	N	C	O	C	Ph-3,4-Me_2	n-Hex
C	N	C	O	C	Ph-3,4-Me_2	c-Pr
C	N	C	O	C	Ph-3,4-Me_2	c-Hex
C	N	C	O	C	Ph-3,4-Me_2	OH
C	N	C	O	C	Ph-3,4-Me_2	CH_2OH
C	N	C	O	C	Ph-3,4-Me_2	OMe
C	N	C	O	C	Ph-3,4-Me_2	SMe
C	N	C	O	C	Ph-3,4-Me_2	Cl
C	N	C	O	C	Ph-3,4-Me_2	CF_3
C	N	C	O	C	Ph-3,4-Me_2	Ph
C	N	C	O	C	Ph-3,5-Me_2	H
C	N	C	O	C	Ph-3,5-Me_2	Me
C	N	C	O	C	Ph-3,5-Me_2	Et
C	N	C	O	C	Ph-3,5-Me_2	n-Hex
C	N	C	O	C	Ph-3,5-Me_2	c-Pr
C	N	C	O	C	Ph-3,5-Me_2	c-Hex
C	N	C	O	C	Ph-3,5-Me_2	OH
C	N	C	O	C	Ph-3,5-Me_2	CH_2OH
C	N	C	O	C	Ph-3,5-Me_2	OMe
C	N	C	O	C	Ph-3,5-Me_2	SMe
C	N	C	O	C	Ph-3,5-Me_2	Cl
C	N	C	O	C	Ph-3,5-Me_2	CF_3
C	N	C	O	C	Ph-3,5-Me_2	Ph
C	N	C	O	C	Ph-2,6-Me_2	H
C	N	C	O	C	Ph-2,6-Me_2	Me
C	N	C	O	C	Ph-2,6-Me_2	Et
C	N	C	O	C	Ph-2,6-Me_2	n-Hex
C	N	C	O	C	Ph-2,6-Me_2	c-Pr
C	N	C	O	C	Ph-2,6-Me_2	c-Hex
C	N	C	O	C	Ph-2,6-Me_2	OH
C	N	C	O	C	Ph-2,6-Me_2	CH_2OH
C	N	C	O	C	Ph-2,6-Me_2	OMe
C	N	C	O	C	Ph-2,6-Me_2	SMe
C	N	C	O	C	Ph-2,6-Me_2	Cl
C	N	C	O	C	Ph-2,6-Me_2	CF_3
C	N	C	O	C	Ph-2,6-Me_2	Ph
C	N	C	O	C	Ph-2-Cl	H
C	N	C	O	C	Ph-2-Cl	Me
C	N	C	O	C	Ph-2-Cl	Et
C	N	C	O	C	Ph-2-Cl	n-Hex
C	N	C	O	C	Ph-2-Cl	c-Pr

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	N	C	O	C	Ph-2-Cl	c-Hex
C	N	C	O	C	Ph-2-Cl	OH
C	N	C	O	C	Ph-2-Cl	CH_2OH
C	N	C	O	C	Ph-2-Cl	OMe
C	N	C	O	C	Ph-2-Cl	SMe
C	N	C	O	C	Ph-2-Cl	Cl
C	N	C	O	C	Ph-2-Cl	CF_3
C	N	C	O	C	Ph-2-Cl	Ph
C	N	C	O	C	Ph-3-Cl	H
C	N	C	O	C	Ph-3-Cl	Me
C	N	C	O	C	Ph-3-Cl	Et
C	N	C	O	C	Ph-3-Cl	n-Hex
C	N	C	O	C	Ph-3-Cl	c-Pr
C	N	C	O	C	Ph-3-Cl	c-Hex
C	N	C	O	C	Ph-3-Cl	OH
C	N	C	O	C	Ph-3-Cl	CH_2OH
C	N	C	O	C	Ph-3-Cl	OMe
C	N	C	O	C	Ph-3-Cl	SMe
C	N	C	O	C	Ph-3-Cl	Cl
C	N	C	O	C	Ph-3-Cl	CF_3
C	N	C	O	C	Ph-3-Cl	Ph
C	N	C	O	C	Ph-4-Cl	H
C	N	C	O	C	Ph-4-Cl	Me
C	N	C	O	C	Ph-4-Cl	Et
C	N	C	O	C	Ph-4-Cl	n-Hex
C	N	C	O	C	Ph-4-Cl	c-Pr
C	N	C	O	C	Ph-4-Cl	c-Hex
C	N	C	O	C	Ph-4-Cl	OH
C	N	C	O	C	Ph-4-Cl	CH_2OH
C	N	C	O	C	Ph-4-Cl	OMe
C	N	C	O	C	Ph-4-Cl	SMe
C	N	C	O	C	Ph-4-Cl	Cl
C	N	C	O	C	Ph-4-Cl	CF_3
C	N	C	O	C	Ph-4-Cl	Ph
C	N	C	O	C	Ph-3,4-Cl_2	H
C	N	C	O	C	Ph-3,4-Cl_2	Me
C	N	C	O	C	Ph-3,4-Cl_2	Et
C	N	C	O	C	Ph-3,4-Cl_2	n-Hex
C	N	C	O	C	Ph-3,4-Cl_2	c-Pr
C	N	C	O	C	Ph-3,4-Cl_2	c-Hex
C	N	C	O	C	Ph-3,4-Cl_2	OH
C	N	C	O	C	Ph-3,4-Cl_2	CH_2OH
C	N	C	O	C	Ph-3,4-Cl_2	OMe
C	N	C	O	C	Ph-3,4-Cl_2	SMe

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	N	C	O	C	Ph-3,4-Cl_2	Cl
C	N	C	O	C	Ph-3,4-Cl_2	CF_3
C	N	C	O	C	Ph-3,4-Cl_2	Ph
C	N	C	O	C	Ph-4-F	H
C	N	C	O	C	Ph-4-F	Me
C	N	C	O	C	Ph-4-F	Et
C	N	C	O	C	Ph-4-F	n-Hex
C	N	C	O	C	Ph-4-F	c-Pr
C	N	C	O	C	Ph-4-F	c-Hex
C	N	C	O	C	Ph-4-F	OH
C	N	C	O	C	Ph-4-F	CH_2OH
C	N	C	O	C	Ph-4-F	OMe
C	N	C	O	C	Ph-4-F	SMe
C	N	C	O	C	Ph-4-F	Cl
C	N	C	O	C	Ph-4-F	CF_3
C	N	C	O	C	Ph-4-F	Ph
C	N	C	O	C	Ph-4-Br	H
C	N	C	O	C	Ph-4-Br	Me
C	N	C	O	C	Ph-4-Br	Et
C	N	C	O	C	Ph-4-Br	n-Hex
C	N	C	O	C	Ph-4-Br	c-Pr
C	N	C	O	C	Ph-4-Br	c-Hex
C	N	C	O	C	Ph-4-Br	OH
C	N	C	O	C	Ph-4-Br	CH_2OH
C	N	C	O	C	Ph-4-Br	OMe
C	N	C	O	C	Ph-4-Br	SMe
C	N	C	O	C	Ph-4-Br	Cl
C	N	C	O	C	Ph-4-Br	CF_3
C	N	C	O	C	Ph-4-Br	Ph
C	N	C	O	C	Ph-2-OMe	H
C	N	C	O	C	Ph-2-OMe	Me
C	N	C	O	C	Ph-2-OMe	Et
C	N	C	O	C	Ph-2-OMe	n-Hex
C	N	C	O	C	Ph-2-OMe	c-Pr
C	N	C	O	C	Ph-2-OMe	c-Hex
C	N	C	O	C	Ph-2-OMe	OH
C	N	C	O	C	Ph-2-OMe	CH_2OH
C	N	C	O	C	Ph-2-OMe	OMe
C	N	C	O	C	Ph-2-OMe	SMe
C	N	C	O	C	Ph-2-OMe	Cl
C	N	C	O	C	Ph-2-OMe	CF_3
C	N	C	O	C	Ph-2-OMe	Ph
C	N	C	O	C	Ph-3-OMe	H
C	N	C	O	C	Ph-3-OMe	Me

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	N	C	O	C	Ph-3-OMe	Et
C	N	C	O	C	Ph-3-OMe	n-Hex
C	N	C	O	C	Ph-3-OMe	c-Pr
C	N	C	O	C	Ph-3-OMe	c-Hex
C	N	C	O	C	Ph-3-OMe	OH
C	N	C	O	C	Ph-3-OMe	CH_2OH
C	N	C	O	C	Ph-3-OMe	OMe
C	N	C	O	C	Ph-3-OMe	SMe
C	N	C	O	C	Ph-3-OMe	Cl
C	N	C	O	C	Ph-3-OMe	CF_3
C	N	C	O	C	Ph-3-OMe	Ph
C	N	C	O	C	Ph-4-OMe	H
C	N	C	O	C	Ph-4-OMe	Me
C	N	C	O	C	Ph-4-OMe	Et
C	N	C	O	C	Ph-4-OMe	n-Hex
C	N	C	O	C	Ph-4-OMe	c-Pr
C	N	C	O	C	Ph-4-OMe	c-Hex
C	N	C	O	C	Ph-4-OMe	OH
C	N	C	O	C	Ph-4-OMe	CH_2OH
C	N	C	O	C	Ph-4-OMe	OMe
C	N	C	O	C	Ph-4-OMe	SMe
C	N	C	O	C	Ph-4-OMe	Cl
C	N	C	O	C	Ph-4-OMe	CF_3
C	N	C	O	C	Ph-4-OMe	Ph
C	N	C	O	C	Ph-3,4-$(OMe)_2$	H
C	N	C	O	C	Ph-3,4-$(OMe)_2$	Me
C	N	C	O	C	Ph-3,4-$(OMe)_2$	Et
C	N	C	O	C	Ph-3,4-$(OMe)_2$	n-Hex
C	N	C	O	C	Ph-3,4-$(OMe)_2$	c-Pr
C	N	C	O	C	Ph-3,4-$(OMe)_2$	c-Hex
C	N	C	O	C	Ph-3,4-$(OMe)_2$	OH
C	N	C	O	C	Ph-3,4-$(OMe)_2$	CH_2OH
C	N	C	O	C	Ph-3,4-$(OMe)_2$	OMe
C	N	C	O	C	Ph-3,4-$(OMe)_2$	SMe
C	N	C	O	C	Ph-3,4-$(OMe)_2$	Cl
C	N	C	O	C	Ph-3,4-$(OMe)_2$	CF_3
C	N	C	O	C	Ph-3,4-$(OMe)_2$	Ph
C	N	C	O	C	Ph-2-OH	H
C	N	C	O	C	Ph-2-OH	Me
C	N	C	O	C	Ph-2-OH	Et
C	N	C	O	C	Ph-2-OH	n-Hex
C	N	C	O	C	Ph-2-OH	c-Pr
C	N	C	O	C	Ph-2-OH	c-Hex
C	N	C	O	C	Ph-2-OH	OH

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	N	C	O	C	Ph-2-OH	CH_2OH
C	N	C	O	C	Ph-2-OH	OMe
C	N	C	O	C	Ph-2-OH	SMe
C	N	C	O	C	Ph-2-OH	Cl
C	N	C	O	C	Ph-2-OH	CF_3
C	N	C	O	C	Ph-2-OH	Ph
C	N	C	O	C	Ph-3-OH	H
C	N	C	O	C	Ph-3-OH	Me
C	N	C	O	C	Ph-3-OH	Et
C	N	C	O	C	Ph-3-OH	n-Hex
C	N	C	O	C	Ph-3-OH	c-Pr
C	N	C	O	C	Ph-3-OH	c-Hex
C	N	C	O	C	Ph-3-OH	OH
C	N	C	O	C	Ph-3-OH	CH_2OH
C	N	C	O	C	Ph-3-OH	OMe
C	N	C	O	C	Ph-3-OH	SMe
C	N	C	O	C	Ph-3-OH	Cl
C	N	C	O	C	Ph-3-OH	CF_3
C	N	C	O	C	Ph-3-OH	Ph
C	N	C	O	C	Ph-4-OH	H
C	N	C	O	C	Ph-4-OH	Me
C	N	C	O	C	Ph-4-OH	Et
C	N	C	O	C	Ph-4-OH	n-Hex
C	N	C	O	C	Ph-4-OH	c-Pr
C	N	C	O	C	Ph-4-OH	c-Hex
C	N	C	O	C	Ph-4-OH	OH
C	N	C	O	C	Ph-4-OH	CH_2OH
C	N	C	O	C	Ph-4-OH	OMe
C	N	C	O	C	Ph-4-OH	SMe
C	N	C	O	C	Ph-4-OH	Cl
C	N	C	O	C	Ph-4-OH	CF_3
C	N	C	O	C	Ph-4-OH	Ph
C	N	C	O	C	Ph-3,4-$(OH)_2$	H
C	N	C	O	C	Ph-3,4-$(OH)_2$	Me
C	N	C	O	C	Ph-3,4-$(OH)_2$	Et
C	N	C	O	C	Ph-3,4-$(OH)_2$	n-Hex
C	N	C	O	C	Ph-3,4-$(OH)_2$	c-Pr
C	N	C	O	C	Ph-3,4-$(OH)_2$	c-Hex
C	N	C	O	C	Ph-3,4-$(OH)_2$	OH
C	N	C	O	C	Ph-3,4-$(OH)_2$	CH_2OH
C	N	C	O	C	Ph-3,4-$(OH)_2$	OMe
C	N	C	O	C	Ph-3,4-$(OH)_2$	SMe
C	N	C	O	C	Ph-3,4-$(OH)_2$	Cl
C	N	C	O	C	Ph-3,4-$(OH)_2$	CF_3

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	N	C	O	C	Ph-3,4-$(OH)_2$	Ph
C	N	C	O	C	Ph-3-SMe	H
C	N	C	O	C	Ph-3-SMe	Me
C	N	C	O	C	Ph-3-SMe	Et
C	N	C	O	C	Ph-3-SMe	n-Hex
C	N	C	O	C	Ph-3-SMe	c-Pr
C	N	C	O	C	Ph-3-SMe	c-Hex
C	N	C	O	C	Ph-3-SMe	OH
C	N	C	O	C	Ph-3-SMe	CH_2OH
C	N	C	O	C	Ph-3-SMe	OMe
C	N	C	O	C	Ph-3-SMe	SMe
C	N	C	O	C	Ph-3-SMe	Cl
C	N	C	O	C	Ph-3-SMe	CF_3
C	N	C	O	C	Ph-3-SMe	Ph
C	N	C	O	C	Ph-3-CF_3	H
C	N	C	O	C	Ph-3-CF_3	Me
C	N	C	O	C	Ph-3-CF_3	Et
C	N	C	O	C	Ph-3-CF_3	n-Hex
C	N	C	O	C	Ph-3-CF_3	c-Pr
C	N	C	O	C	Ph-3-CF_3	c-Hex
C	N	C	O	C	Ph-3-CF_3	OH
C	N	C	O	C	Ph-3-CF_3	CH_2OH
C	N	C	O	C	Ph-3-CF_3	OMe
C	N	C	O	C	Ph-3-CF_3	SMe
C	N	C	O	C	Ph-3-CF_3	Cl
C	N	C	O	C	Ph-3-CF_3	CF_3
C	N	C	O	C	Ph-3-CF_3	Ph
C	N	C	O	C	Ph-3-NO_2	H
C	N	C	O	C	Ph-3-NO_2	Me
C	N	C	O	C	Ph-3-NO_2	Et
C	N	C	O	C	Ph-3-NO_2	n-Hex
C	N	C	O	C	Ph-3-NO_2	c-Pr
C	N	C	O	C	Ph-3-NO_2	c-Hex
C	N	C	O	C	Ph-3-NO_2	OH
C	N	C	O	C	Ph-3-NO_2	CH_2OH
C	N	C	O	C	Ph-3-NO_2	OMe
C	N	C	O	C	Ph-3-NO_2	SMe
C	N	C	O	C	Ph-3-NO_2	Cl
C	N	C	O	C	Ph-3-NO_2	CF_3
C	N	C	O	C	Ph-3-NO_2	Ph
C	N	C	O	C	Ph-4-NMe_2	H
C	N	C	O	C	Ph-4-NMe_2	Me
C	N	C	O	C	Ph-4-NMe_2	Et
C	N	C	O	C	Ph-4-NMe_2	n-Hex

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	N	C	O	C	Ph-4-NMe_2	c-Pr
C	N	C	O	C	Ph-4-NMe_2	c-Hex
C	N	C	O	C	Ph-4-NMe_2	OH
C	N	C	O	C	Ph-4-NMe_2	CH_2OH
C	N	C	O	C	Ph-4-NMe_2	OMe
C	N	C	O	C	Ph-4-NMe_2	SMe
C	N	C	O	C	Ph-4-NMe_2	Cl
C	N	C	O	C	Ph-4-NMe_2	CF_3
C	N	C	O	C	Ph-4-NMe_2	Ph
C	N	C	S	C	Ph	H
C	N	C	S	C	Ph	Me
C	N	C	S	C	Ph	Et
C	N	C	S	C	Ph	n-Hex
C	N	C	S	C	Ph	c-Pr
C	N	C	S	C	Ph	c-Hex
C	N	C	S	C	Ph	OH
C	N	C	S	C	Ph	CH_2OH
C	N	C	S	C	Ph	OMe
C	N	C	S	C	Ph	SMe
C	N	C	S	C	Ph	Cl
C	N	C	S	C	Ph	CF_3
C	N	C	S	C	Ph	Ph
C	N	C	S	C	H	H
C	N	C	S	C	H	Me
C	N	C	S	C	H	Et
C	N	C	S	C	H	n-Hex
C	N	C	S	C	H	c-Pr
C	N	C	S	C	H	c-Hex
C	N	C	S	C	H	OH
C	N	C	S	C	H	CH_2OH
C	N	C	S	C	H	OMe
C	N	C	S	C	H	SMe
C	N	C	S	C	H	Cl
C	N	C	S	C	H	CF_3
C	N	C	S	C	H	Ph
C	N	C	S	C	Me	H
C	N	C	S	C	Me	Me
C	N	C	S	C	Me	Et
C	N	C	S	C	Me	n-Hex
C	N	C	S	C	Me	c-Pr
C	N	C	S	C	Me	c-Hex
C	N	C	S	C	Me	OH
C	N	C	S	C	Me	CH_2OH
C	N	C	S	C	Me	OMe

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	N	C	S	C	Me	SMe
C	N	C	S	C	Me	Cl
C	N	C	S	C	Me	CF_3
C	N	C	S	C	Me	Ph
C	N	C	S	C	Et	H
C	N	C	S	C	Et	Me
C	N	C	S	C	Et	Et
C	N	C	S	C	Et	n-Hex
C	N	C	S	C	Et	c-Pr
C	N	C	S	C	Et	c-Hex
C	N	C	S	C	Et	OH
C	N	C	S	C	Et	CH_2OH
C	N	C	S	C	Et	OMe
C	N	C	S	C	Et	SMe
C	N	C	S	C	Et	Cl
C	N	C	S	C	Et	CF_3
C	N	C	S	C	Et	Ph
C	N	C	S	C	n-Pr	H
C	N	C	S	C	n-Pr	Me
C	N	C	S	C	n-Pr	Et
C	N	C	S	C	n-Pr	n-Hex
C	N	C	S	C	n-Pr	c-Pr
C	N	C	S	C	n-Pr	c-Hex
C	N	C	S	C	n-Pr	OH
C	N	C	S	C	n-Pr	CH_2OH
C	N	C	S	C	n-Pr	OMe
C	N	C	S	C	n-Pr	SMe
C	N	C	S	C	n-Pr	Cl
C	N	C	S	C	n-Pr	CF_3
C	N	C	S	C	n-Pr	Ph
C	N	C	S	C	n-Hex	H
C	N	C	S	C	n-Hex	Me
C	N	C	S	C	n-Hex	Et
C	N	C	S	C	n-Hex	n-Hex
C	N	C	S	C	n-Hex	c-Pr
C	N	C	S	C	n-Hex	c-Hex
C	N	C	S	C	n-Hex	OH
C	N	C	S	C	n-Hex	CH_2OH
C	N	C	S	C	n-Hex	OMe
C	N	C	S	C	n-Hex	SMe
C	N	C	S	C	n-Hex	Cl
C	N	C	S	C	n-Hex	CF_3
C	N	C	S	C	n-Hex	Ph
C	N	C	S	C	i-Pr	H

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	N	C	S	C	i-Pr	Me
C	N	C	S	C	i-Pr	Et
C	N	C	S	C	i-Pr	n-Hex
C	N	C	S	C	i-Pr	c-Pr
C	N	C	S	C	i-Pr	c-Hex
C	N	C	S	C	i-Pr	OH
C	N	C	S	C	i-Pr	CH_2OH
C	N	C	S	C	i-Pr	OMe
C	N	C	S	C	i-Pr	SMe
C	N	C	S	C	i-Pr	Cl
C	N	C	S	C	i-Pr	CF_3
C	N	C	S	C	i-Pr	Ph
C	N	C	S	C	t-Bu	H
C	N	C	S	C	t-Bu	Me
C	N	C	S	C	t-Bu	Et
C	N	C	S	C	t-Bu	n-Hex
C	N	C	S	C	t-Bu	c-Pr
C	N	C	S	C	t-Bu	c-Hex
C	N	C	S	C	t-Bu	OH
C	N	C	S	C	t-Bu	CH_2OH
C	N	C	S	C	t-Bu	OMe
C	N	C	S	C	t-Bu	SMe
C	N	C	S	C	t-Bu	Cl
C	N	C	S	C	t-Bu	CF_3
C	N	C	S	C	t-Bu	Ph
C	N	C	S	C	c-Hex	H
C	N	C	S	C	c-Hex	Me
C	N	C	S	C	c-Hex	Et
C	N	C	S	C	c-Hex	n-Hex
C	N	C	S	C	c-Hex	c-Pr
C	N	C	S	C	c-Hex	c-Hex
C	N	C	S	C	c-Hex	OH
C	N	C	S	C	c-Hex	CH_2OH
C	N	C	S	C	c-Hex	OMe
C	N	C	S	C	c-Hex	SMe
C	N	C	S	C	c-Hex	Cl
C	N	C	S	C	c-Hex	CF_3
C	N	C	S	C	c-Hex	Ph
C	N	C	S	C	3-c-己烯基	H
C	N	C	S	C	3-c-己烯基	Me
C	N	C	S	C	3-c-己烯基	Et
C	N	C	S	C	3-c-己烯基	n-Hex
C	N	C	S	C	3-c-己烯基	c-Pr
C	N	C	S	C	3-c-己烯基	c-Hex

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	N	C	S	C	3-c-己烯基	OH
C	N	C	S	C	3-c-己烯基	CH_2OH
C	N	C	S	C	3-c-己烯基	OMe
C	N	C	S	C	3-c-己烯基	SMe
C	N	C	S	C	3-c-己烯基	Cl
C	N	C	S	C	3-c-己烯基	CF_3
C	N	C	S	C	3-c-己烯基	Ph
C	N	C	S	C	CH_2OH	H
C	N	C	S	C	CH_2OH	Me
C	N	C	S	C	CH_2OH	Et
C	N	C	S	C	CH_2OH	n-Hex
C	N	C	S	C	CH_2OH	c-Pr
C	N	C	S	C	CH_2OH	c-Hex
C	N	C	S	C	CH_2OH	OH
C	N	C	S	C	CH_2OH	CH_2OH
C	N	C	S	C	CH_2OH	OMe
C	N	C	S	C	CH_2OH	SMe
C	N	C	S	C	CH_2OH	Cl
C	N	C	S	C	CH_2OH	CF_3
C	N	C	S	C	CH_2OH	Ph
C	N	C	S	C	CH_2Ph	H
C	N	C	S	C	CH_2Ph	Me
C	N	C	S	C	CH_2Ph	Et
C	N	C	S	C	CH_2Ph	n-Hex
C	N	C	S	C	CH_2Ph	c-Pr
C	N	C	S	C	CH_2Ph	c-Hex
C	N	C	S	C	CH_2Ph	OH
C	N	C	S	C	CH_2Ph	CH_2OH
C	N	C	S	C	CH_2Ph	OMe
C	N	C	S	C	CH_2Ph	SMe
C	N	C	S	C	CH_2Ph	Cl
C	N	C	S	C	CH_2Ph	CF_3
C	N	C	S	C	CH_2Ph	Ph
C	N	C	S	C	α-萘基	H
C	N	C	S	C	α-萘基	Me
C	N	C	S	C	α-萘基	Et
C	N	C	S	C	α-萘基	n-Hex
C	N	C	S	C	α-萘基	c-Pr
C	N	C	S	C	α-萘基	c-Hex
C	N	C	S	C	α-萘基	OH
C	N	C	S	C	α-萘基	CH_2OH
C	N	C	S	C	α-萘基	OMe
C	N	C	S	C	α-萘基	SMe
C	N	C	S	C	α-萘基	Cl

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	N	C	S	C	α-萘基	CF_3
C	N	C	S	C	α-萘基	Ph
C	N	C	S	C	β-萘基	H
C	N	C	S	C	β-萘基	Me
C	N	C	S	C	β-萘基	Et
C	N	C	S	C	β-萘基	n-Hex
C	N	C	S	C	β-萘基	c-Pr
C	N	C	S	C	β-萘基	c-Hex
C	N	C	S	C	β-萘基	OH
C	N	C	S	C	β-萘基	CH_2OH
C	N	C	S	C	β-萘基	OMe
C	N	C	S	C	β-萘基	SMe
C	N	C	S	C	β-萘基	Cl
C	N	C	S	C	β-萘基	CF_3
C	N	C	S	C	β-萘基	Ph
C	N	C	S	C	2-吡啶基	H
C	N	C	S	C	2-吡啶基	Me
C	N	C	S	C	2-吡啶基	Et
C	N	C	S	C	2-吡啶基	n-Hex
C	N	C	S	C	2-吡啶基	c-Pr
C	N	C	S	C	2-吡啶基	c-Hex
C	N	C	S	C	2-吡啶基	OH
C	N	C	S	C	2-吡啶基	CH_2OH
C	N	C	S	C	2-吡啶基	OMe
C	N	C	S	C	2-吡啶基	SMe
C	N	C	S	C	2-吡啶基	Cl
C	N	C	S	C	2-吡啶基	CF_3
C	N	C	S	C	2-吡啶基	Ph
C	N	C	S	C	3-吡啶基	H
C	N	C	S	C	3-吡啶基	Me
C	N	C	S	C	3-吡啶基	Et
C	N	C	S	C	3-吡啶基	n-Hex
C	N	C	S	C	3-吡啶基	c-Pr
C	N	C	S	C	3-吡啶基	c-Hex
C	N	C	S	C	3-吡啶基	OH
C	N	C	S	C	3-吡啶基	CH_2OH
C	N	C	S	C	3-吡啶基	OMe
C	N	C	S	C	3-吡啶基	SMe
C	N	C	S	C	3-吡啶基	Cl
C	N	C	S	C	3-吡啶基	CF_3
C	N	C	S	C	3-吡啶基	Ph
C	N	C	S	C	4-吡啶基	H
C	N	C	S	C	4-吡啶基	Me
C	N	C	S	C	4-吡啶基	Et

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	N	C	S	C	4-吡啶基	n-Hex
C	N	C	S	C	4-吡啶基	c-Pr
C	N	C	S	C	4-吡啶基	c-Hex
C	N	C	S	C	4-吡啶基	OH
C	N	C	S	C	4-吡啶基	CH_2OH
C	N	C	S	C	4-吡啶基	OMe
C	N	C	S	C	4-吡啶基	SMe
C	N	C	S	C	4-吡啶基	Cl
C	N	C	S	C	4-吡啶基	CF_3
C	N	C	S	C	4-吡啶基	Ph
C	N	C	S	C	2-呋喃基	H
C	N	C	S	C	2-呋喃基	Me
C	N	C	S	C	2-呋喃基	Et
C	N	C	S	C	2-呋喃基	n-Hex
C	N	C	S	C	2-呋喃基	c-Pr
C	N	C	S	C	2-呋喃基	c-Hex
C	N	C	S	C	2-呋喃基	OH
C	N	C	S	C	2-呋喃基	CH_2OH
C	N	C	S	C	2-呋喃基	OMe
C	N	C	S	C	2-呋喃基	SMe
C	N	C	S	C	2-呋喃基	Cl
C	N	C	S	C	2-呋喃基	CF_3
C	N	C	S	C	2-呋喃基	Ph
C	N	C	S	C	2-噻吩基	H
C	N	C	S	C	2-噻吩基	Me
C	N	C	S	C	2-噻吩基	Et
C	N	C	S	C	2-噻吩基	n-Hex
C	N	C	S	C	2-噻吩基	c-Pr
C	N	C	S	C	2-噻吩基	c-Hex
C	N	C	S	C	2-噻吩基	OH
C	N	C	S	C	2-噻吩基	CH_2OH
C	N	C	S	C	2-噻吩基	OMe
C	N	C	S	C	2-噻吩基	SMe
C	N	C	S	C	2-噻吩基	Cl
C	N	C	S	C	2-噻吩基	CF_3
C	N	C	S	C	2-噻吩基	Ph
C	N	C	S	C	2-甲苯基	H
C	N	C	S	C	2-甲苯基	Me
C	N	C	S	C	2-甲苯基	Et
C	N	C	S	C	2-甲苯基	n-Hex
C	N	C	S	C	2-甲苯基	c-Pr
C	N	C	S	C	2-甲苯基	c-Hex
C	N	C	S	C	2-甲苯基	OH
C	N	C	S	C	2-甲苯基	CH_2OH

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	N	C	S	C	2-甲苯基	OMe
C	N	C	S	C	2-甲苯基	SMe
C	N	C	S	C	2-甲苯基	Cl
C	N	C	S	C	2-甲苯基	CF_3
C	N	C	S	C	2-甲苯基	Ph
C	N	C	S	C	3-甲苯基	H
C	N	C	S	C	3-甲苯基	Me
C	N	C	S	C	3-甲苯基	Et
C	N	C	S	C	3-甲苯基	n-Hex
C	N	C	S	C	3-甲苯基	c-Pr
C	N	C	S	C	3-甲苯基	c-Hex
C	N	C	S	C	3-甲苯基	OH
C	N	C	S	C	3-甲苯基	CH_2OH
C	N	C	S	C	3-甲苯基	OMe
C	N	C	S	C	3-甲苯基	SMe
C	N	C	S	C	3-甲苯基	Cl
C	N	C	S	C	3-甲苯基	CF_3
C	N	C	S	C	3-甲苯基	Ph
C	N	C	S	C	4-甲苯基	H
C	N	C	S	C	4-甲苯基	Me
C	N	C	S	C	4-甲苯基	Et
C	N	C	S	C	4-甲苯基	n-Hex
C	N	C	S	C	4-甲苯基	c-Pr
C	N	C	S	C	4-甲苯基	c-Hex
C	N	C	S	C	4-甲苯基	OH
C	N	C	S	C	4-甲苯基	CH_2OH
C	N	C	S	C	4-甲苯基	OMe
C	N	C	S	C	4-甲苯基	SMe
C	N	C	S	C	4-甲苯基	Cl
C	N	C	S	C	4-甲苯基	CF_3
C	N	C	S	C	4-甲苯基	Ph
C	N	C	S	C	Ph-2,3-Me_2	H
C	N	C	S	C	Ph-2,3-Me_2	Me
C	N	C	S	C	Ph-2,3-Me_2	Et
C	N	C	S	C	Ph-2,3-Me_2	n-Hex
C	N	C	S	C	Ph-2,3-Me_2	c-Pr
C	N	C	S	C	Ph-2,3-Me_2	c-Hex
C	N	C	S	C	Ph-2,3-Me_2	OH
C	N	C	S	C	Ph-2,3-Me_2	CH_2OH
C	N	C	S	C	Ph-2,3-Me_2	OMe
C	N	C	S	C	Ph-2,3-Me_2	SMe
C	N	C	S	C	Ph-2,3-Me_2	Cl
C	N	C	S	C	Ph-2,3-Me_2	CF_3
C	N	C	S	C	Ph-2,3-Me_2	Ph

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	N	C	S	C	Ph-3,4-Me_2	H
C	N	C	S	C	Ph-3,4-Me_2	Me
C	N	C	S	C	Ph-3,4-Me_2	Et
C	N	C	S	C	Ph-3,4-Me_2	n-Hex
C	N	C	S	C	Ph-3,4-Me_2	c-Pr
C	N	C	S	C	Ph-3,4-Me_2	c-Hex
C	N	C	S	C	Ph-3,4-Me_2	OH
C	N	C	S	C	Ph-3,4-Me_2	CH_2OH
C	N	C	S	C	Ph-3,4-Me_2	OMe
C	N	C	S	C	Ph-3,4-Me_2	SMe
C	N	C	S	C	Ph-3,4-Me_2	Cl
C	N	C	S	C	Ph-3,4-Me_2	CF_3
C	N	C	S	C	Ph-3,4-Me_2	Ph
C	N	C	S	C	Ph-3,5-Me_2	H
C	N	C	S	C	Ph-3,5-Me_2	Me
C	N	C	S	C	Ph-3,5-Me_2	Et
C	N	C	S	C	Ph-3,5-Me_2	n-Hex
C	N	C	S	C	Ph-3,5-Me_2	c-Pr
C	N	C	S	C	Ph-3,5-Me_2	c-Hex
C	N	C	S	C	Ph-3,5-Me_2	OH
C	N	C	S	C	Ph-3,5-Me_2	CH_2OH
C	N	C	S	C	Ph-3,5-Me_2	OMe
C	N	C	S	C	Ph-3,5-Me_2	SMe
C	N	C	S	C	Ph-3,5-Me_2	Cl
C	N	C	S	C	Ph-3,5-Me_2	CF_3
C	N	C	S	C	Ph-3,5-Me_2	Ph
C	N	C	S	C	Ph-2,6-Me_2	H
C	N	C	S	C	Ph-2,6-Me_2	Me
C	N	C	S	C	Ph-2,6-Me_2	Et
C	N	C	S	C	Ph-2,6-Me_2	n-Hex
C	N	C	S	C	Ph-2,6-Me_2	c-Pr
C	N	C	S	C	Ph-2,6-Me_2	c-Hex
C	N	C	S	C	Ph-2,6-Me_2	OH
C	N	C	S	C	Ph-2,6-Me_2	CH_2OH
C	N	C	S	C	Ph-2,6-Me_2	OMe
C	N	C	S	C	Ph-2,6-Me_2	SMe
C	N	C	S	C	Ph-2,6-Me_2	Cl
C	N	C	S	C	Ph-2,6-Me_2	CF_3
C	N	C	S	C	Ph-2,6-Me_2	Ph
C	N	C	S	C	Ph-2-Cl	H
C	N	C	S	C	Ph-2-Cl	Me
C	N	C	S	C	Ph-2-Cl	Et
C	N	C	S	C	Ph-2-Cl	n-Hex
C	N	C	S	C	Ph-2-Cl	c-Pr

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	N	C	S	C	Ph-2-Cl	c-Hex
C	N	C	S	C	Ph-2-Cl	OH
C	N	C	S	C	Ph-2-Cl	CH_2OH
C	N	C	S	C	Ph-2-Cl	OMe
C	N	C	S	C	Ph-2-Cl	SMe
C	N	C	S	C	Ph-2-Cl	Cl
C	N	C	S	C	Ph-2-Cl	CF_3
C	N	C	S	C	Ph-2-Cl	Ph
C	N	C	S	C	Ph-3-Cl	H
C	N	C	S	C	Ph-3-Cl	Me
C	N	C	S	C	Ph-3-Cl	Et
C	N	C	S	C	Ph-3-Cl	n-Hex
C	N	C	S	C	Ph-3-Cl	c-Pr
C	N	C	S	C	Ph-3-Cl	c-Hex
C	N	C	S	C	Ph-3-Cl	OH
C	N	C	S	C	Ph-3-Cl	CH_2OH
C	N	C	S	C	Ph-3-Cl	OMe
C	N	C	S	C	Ph-3-Cl	SMe
C	N	C	S	C	Ph-3-Cl	Cl
C	N	C	S	C	Ph-3-Cl	CF_3
C	N	C	S	C	Ph-3-Cl	Ph
C	N	C	S	C	Ph-4-Cl	H
C	N	C	S	C	Ph-4-Cl	Me
C	N	C	S	C	Ph-4-Cl	Et
C	N	C	S	C	Ph-4-Cl	n-Hex
C	N	C	S	C	Ph-4-Cl	c-Pr
C	N	C	S	C	Ph-4-Cl	c-Hex
C	N	C	S	C	Ph-4-Cl	OH
C	N	C	S	C	Ph-4-Cl	CH_2OH
C	N	C	S	C	Ph-4-Cl	OMe
C	N	C	S	C	Ph-4-Cl	SMe
C	N	C	S	C	Ph-4-Cl	Cl
C	N	C	S	C	Ph-4-Cl	CF_3
C	N	C	S	C	Ph-4-Cl	Ph
C	N	C	S	C	Ph-3,4-Cl_2	H
C	N	C	S	C	Ph-3,4-Cl_2	Me
C	N	C	S	C	Ph-3,4-Cl_2	Et
C	N	C	S	C	Ph-3,4-Cl_2	n-Hex
C	N	C	S	C	Ph-3,4-Cl_2	c-Pr
C	N	C	S	C	Ph-3,4-Cl_2	c-Hex
C	N	C	S	C	Ph-3,4-Cl_2	OH
C	N	C	S	C	Ph-3,4-Cl_2	CH_2OH
C	N	C	S	C	Ph-3,4-Cl_2	OMe
C	N	C	S	C	Ph-3,4-Cl_2	SMe

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	N	C	S	C	Ph-3,4-Cl_2	Cl
C	N	C	S	C	Ph-3,4-Cl_2	CF_3
C	N	C	S	C	Ph-3,4-Cl_2	Ph
C	N	C	S	C	Ph-4-F	H
C	N	C	S	C	Ph-4-F	Me
C	N	C	S	C	Ph-4-F	Et
C	N	C	S	C	Ph-4-F	n-Hex
C	N	C	S	C	Ph-4-F	c-Pr
C	N	C	S	C	Ph-4-F	c-Hex
C	N	C	S	C	Ph-4-F	OH
C	N	C	S	C	Ph-4-F	CH_2OH
C	N	C	S	C	Ph-4-F	OMe
C	N	C	S	C	Ph-4-F	SMe
C	N	C	S	C	Ph-4-F	Cl
C	N	C	S	C	Ph-4-F	CF_3
C	N	C	S	C	Ph-4-F	Ph
C	N	C	S	C	Ph-4-Br	H
C	N	C	S	C	Ph-4-Br	Me
C	N	C	S	C	Ph-4-Br	Et
C	N	C	S	C	Ph-4-Br	n-Hex
C	N	C	S	C	Ph-4-Br	c-Pr
C	N	C	S	C	Ph-4-Br	c-Hex
C	N	C	S	C	Ph-4-Br	OH
C	N	C	S	C	Ph-4-Br	CH_2OH
C	N	C	S	C	Ph-4-Br	OMe
C	N	C	S	C	Ph-4-Br	SMe
C	N	C	S	C	Ph-4-Br	Cl
C	N	C	S	C	Ph-4-Br	CF_3
C	N	C	S	C	Ph-4-Br	Ph
C	N	C	S	C	Ph-2-OMe	H
C	N	C	S	C	Ph-2-OMe	Me
C	N	C	S	C	Ph-2-OMe	Et
C	N	C	S	C	Ph-2-OMe	n-Hex
C	N	C	S	C	Ph-2-OMe	c-Pr
C	N	C	S	C	Ph-2-OMe	c-Hex
C	N	C	S	C	Ph-2-OMe	OH
C	N	C	S	C	Ph-2-OMe	CH_2OH
C	N	C	S	C	Ph-2-OMe	OMe
C	N	C	S	C	Ph-2-OMe	SMe
C	N	C	S	C	Ph-2-OMe	Cl
C	N	C	S	C	Ph-2-OMe	CF_3
C	N	C	S	C	Ph-2-OMe	Ph
C	N	C	S	C	Ph-3-OMe	H
C	N	C	S	C	Ph-3-OMe	Me

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	N	C	S	C	Ph-3-OMe	Et
C	N	C	S	C	Ph-3-OMe	n-Hex
C	N	C	S	C	Ph-3-OMe	c-Pr
C	N	C	S	C	Ph-3-OMe	c-Hex
C	N	C	S	C	Ph-3-OMe	OH
C	N	C	S	C	Ph-3-OMe	CH_2OH
C	N	C	S	C	Ph-3-OMe	OMe
C	N	C	S	C	Ph-3-OMe	SMe
C	N	C	S	C	Ph-3-OMe	Cl
C	N	C	S	C	Ph-3-OMe	CF_3
C	N	C	S	C	Ph-3-OMe	Ph
C	N	C	S	C	Ph-4-OMe	H
C	N	C	S	C	Ph-4-OMe	Me
C	N	C	S	C	Ph-4-OMe	Et
C	N	C	S	C	Ph-4-OMe	n-Hex
C	N	C	S	C	Ph-4-OMe	c-Pr
C	N	C	S	C	Ph-4-OMe	c-Hex
C	N	C	S	C	Ph-4-OMe	OH
C	N	C	S	C	Ph-4-OMe	CH_2OH
C	N	C	S	C	Ph-4-OMe	OMe
C	N	C	S	C	Ph-4-OMe	SMe
C	N	C	S	C	Ph-4-OMe	Cl
C	N	C	S	C	Ph-4-OMe	CF_3
C	N	C	S	C	Ph-4-OMe	Ph
C	N	C	S	C	Ph-3,4-$(OMe)_2$	H
C	N	C	S	C	Ph-3,4-$(OMe)_2$	Me
C	N	C	S	C	Ph-3,4-$(OMe)_2$	Et
C	N	C	S	C	Ph-3,4-$(OMe)_2$	n-Hex
C	N	C	S	C	Ph-3,4-$(OMe)_2$	c-Pr
C	N	C	S	C	Ph-3,4-$(OMe)_2$	c-Hex
C	N	C	S	C	Ph-3,4-$(OMe)_2$	OH
C	N	C	S	C	Ph-3,4-$(OMe)_2$	CH_2OH
C	N	C	S	C	Ph-3,4-$(OMe)_2$	OMe
C	N	C	S	C	Ph-3,4-$(OMe)_2$	SMe
C	N	C	S	C	Ph-3,4-$(OMe)_2$	Cl
C	N	C	S	C	Ph-3,4-$(OMe)_2$	CF_3
C	N	C	S	C	Ph-3,4-$(OMe)_2$	Ph
C	N	C	S	C	Ph-2-OH	H
C	N	C	S	C	Ph-2-OH	Me
C	N	C	S	C	Ph-2-OH	Et
C	N	C	S	C	Ph-2-OH	n-Hex
C	N	C	S	C	Ph-2-OH	c-Pr
C	N	C	S	C	Ph-2-OH	c-Hex
C	N	C	S	C	Ph-2-OH	OH

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	N	C	S	C	Ph-2-OH	CH_2OH
C	N	C	S	C	Ph-2-OH	OMe
C	N	C	S	C	Ph-2-OH	SMe
C	N	C	S	C	Ph-2-OH	Cl
C	N	C	S	C	Ph-2-OH	CF_3
C	N	C	S	C	Ph-2-OH	Ph
C	N	C	S	C	Ph-3-OH	H
C	N	C	S	C	Ph-3-OH	Me
C	N	C	S	C	Ph-3-OH	Et
C	N	C	S	C	Ph-3-OH	n-Hex
C	N	C	S	C	Ph-3-OH	c-Pr
C	N	C	S	C	Ph-3-OH	c-Hex
C	N	C	S	C	Ph-3-OH	OH
C	N	C	S	C	Ph-3-OH	CH_2OH
C	N	C	S	C	Ph-3-OH	OMe
C	N	C	S	C	Ph-3-OH	SMe
C	N	C	S	C	Ph-3-OH	Cl
C	N	C	S	C	Ph-3-OH	CF_3
C	N	C	S	C	Ph-3-OH	Ph
C	N	C	S	C	Ph-4-OH	H
C	N	C	S	C	Ph-4-OH	Me
C	N	C	S	C	Ph-4-OH	Et
C	N	C	S	C	Ph-4-OH	n-Hex
C	N	C	S	C	Ph-4-OH	c-Pr
C	N	C	S	C	Ph-4-OH	c-Hex
C	N	C	S	C	Ph-4-OH	OH
C	N	C	S	C	Ph-4-OH	CH_2OH
C	N	C	S	C	Ph-4-OH	OMe
C	N	C	S	C	Ph-4-OH	SMe
C	N	C	S	C	Ph-4-OH	Cl
C	N	C	S	C	Ph-4-OH	CF_3
C	N	C	S	C	Ph-4-OH	Ph
C	N	C	S	C	Ph-3,4-$(OH)_2$	H
C	N	C	S	C	Ph-3,4-$(OH)_2$	Me
C	N	C	S	C	Ph-3,4-$(OH)_2$	Et
C	N	C	S	C	Ph-3,4-$(OH)_2$	n-Hex
C	N	C	S	C	Ph-3,4-$(OH)_2$	c-Pr
C	N	C	S	C	Ph-3,4-$(OH)_2$	c-Hex
C	N	C	S	C	Ph-3,4-$(OH)_2$	OH
C	N	C	S	C	Ph-3,4-$(OH)_2$	CH_2OH
C	N	C	S	C	Ph-3,4-$(OH)_2$	OMe
C	N	C	S	C	Ph-3,4-$(OH)_2$	SMe
C	N	C	S	C	Ph-3,4-$(OH)_2$	Cl
C	N	C	S	C	Ph-3,4-$(OH)_2$	CF_3

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	N	C	S	C	Ph-3,4-$(OH)_2$	Ph
C	N	C	S	C	Ph-3-SMe	H
C	N	C	S	C	Ph-3-SMe	Me
C	N	C	S	C	Ph-3-SMe	Et
C	N	C	S	C	Ph-3-SMe	n-Hex
C	N	C	S	C	Ph-3-SMe	c-Pr
C	N	C	S	C	Ph-3-SMe	c-Hex
C	N	C	S	C	Ph-3-SMe	OH
C	N	C	S	C	Ph-3-SMe	CH_2OH
C	N	C	S	C	Ph-3-SMe	OMe
C	N	C	S	C	Ph-3-SMe	SMe
C	N	C	S	C	Ph-3-SMe	Cl
C	N	C	S	C	Ph-3-SMe	CF_3
C	N	C	S	C	Ph-3-SMe	Ph
C	N	C	S	C	Ph-3-CF_3	H
C	N	C	S	C	Ph-3-CF_3	Me
C	N	C	S	C	Ph-3-CF_3	Et
C	N	C	S	C	Ph-3-CF_3	n-Hex
C	N	C	S	C	Ph-3-CF_3	c-Pr
C	N	C	S	C	Ph-3-CF_3	c-Hex
C	N	C	S	C	Ph-3-CF_3	OH
C	N	C	S	C	Ph-3-CF_3	CH_2OH
C	N	C	S	C	Ph-3-CF_3	OMe
C	N	C	S	C	Ph-3-CF_3	SMe
C	N	C	S	C	Ph-3-CF_3	Cl
C	N	C	S	C	Ph-3-CF_3	CF_3
C	N	C	S	C	Ph-3-CF_3	Ph
C	N	C	S	C	Ph-3-NO_2	H
C	N	C	S	C	Ph-3-NO_2	Me
C	N	C	S	C	Ph-3-NO_2	Et
C	N	C	S	C	Ph-3-NO_2	n-Hex
C	N	C	S	C	Ph-3-NO_2	c-Pr
C	N	C	S	C	Ph-3-NO_2	c-Hex
C	N	C	S	C	Ph-3-NO_2	OH
C	N	C	S	C	Ph-3-NO_2	CH_2OH
C	N	C	S	C	Ph-3-NO_2	OMe
C	N	C	S	C	Ph-3-NO_2	SMe
C	N	C	S	C	Ph-3-NO_2	Cl
C	N	C	S	C	Ph-3-NO_2	CF_3
C	N	C	S	C	Ph-3-NO_2	Ph
C	N	C	S	C	Ph-4-NMe_2	H
C	N	C	S	C	Ph-4-NMe_2	Me
C	N	C	S	C	Ph-4-NMe_2	Et
C	N	C	S	C	Ph-4-NMe_2	n-Hex

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	N	C	S	C	Ph-4-NMe_2	c-Pr
C	N	C	S	C	Ph-4-NMe_2	c-Hex
C	N	C	S	C	Ph-4-NMe_2	OH
C	N	C	S	C	Ph-4-NMe_2	CH_2OH
C	N	C	S	C	Ph-4-NMe_2	OMe
C	N	C	S	C	Ph-4-NMe_2	SMe
C	N	C	S	C	Ph-4-NMe_2	Cl
C	N	C	S	C	Ph-4-NMe_2	CF_3
C	N	C	S	C	Ph-4-NMe_2	Ph
C	O	C	N	C	Ph	H
C	O	C	N	C	Ph	Me
C	O	C	N	C	Ph	Et
C	O	C	N	C	Ph	n-Hex
C	O	C	N	C	Ph	c-Pr
C	O	C	N	C	Ph	c-Hex
C	O	C	N	C	Ph	OH
C	O	C	N	C	Ph	CH_2OH
C	O	C	N	C	Ph	OMe
C	O	C	N	C	Ph	SMe
C	O	C	N	C	Ph	Cl
C	O	C	N	C	Ph	CF_3
C	O	C	N	C	Ph	Ph
C	O	C	N	C	H	H
C	O	C	N	C	H	Me
C	O	C	N	C	H	Et
C	O	C	N	C	H	n-Hex
C	O	C	N	C	H	c-Pr
C	O	C	N	C	H	c-Hex
C	O	C	N	C	H	OH
C	O	C	N	C	H	CH_2OH
C	O	C	N	C	H	OMe
C	O	C	N	C	H	SMe
C	O	C	N	C	H	Cl
C	O	C	N	C	H	CF_3
C	O	C	N	C	H	Ph
C	O	C	N	C	Me	H
C	O	C	N	C	Me	Me
C	O	C	N	C	Me	Et
C	O	C	N	C	Me	n-Hex
C	O	C	N	C	Me	c-Pr
C	O	C	N	C	Me	c-Hex
C	O	C	N	C	Me	OH
C	O	C	N	C	Me	CH_2OH
C	O	C	N	C	Me	OMe

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	O	C	N	C	Me	SMe
C	O	C	N	C	Me	Cl
C	O	C	N	C	Me	CF_3
C	O	C	N	C	Me	Ph
C	O	C	N	C	Et	H
C	O	C	N	C	Et	Me
C	O	C	N	C	Et	Et
C	O	C	N	C	Et	n-Hex
C	O	C	N	C	Et	c-Pr
C	O	C	N	C	Et	c-Hex
C	O	C	N	C	Et	OH
C	O	C	N	C	Et	CH_2OH
C	O	C	N	C	Et	OMe
C	O	C	N	C	Et	SMe
C	O	C	N	C	Et	Cl
C	O	C	N	C	Et	CF_3
C	O	C	N	C	Et	Ph
C	O	C	N	C	n-Pr	H
C	O	C	N	C	n-Pr	Me
C	O	C	N	C	n-Pr	Et
C	O	C	N	C	n-Pr	n-Hex
C	O	C	N	C	n-Pr	c-Pr
C	O	C	N	C	n-Pr	c-Hex
C	O	C	N	C	n-Pr	OH
C	O	C	N	C	n-Pr	CH_2OH
C	O	C	N	C	n-Pr	OMe
C	O	C	N	C	n-Pr	SMe
C	O	C	N	C	n-Pr	Cl
C	O	C	N	C	n-Pr	CF_3
C	O	C	N	C	n-Pr	Ph
C	O	C	N	C	n-Hex	H
C	O	C	N	C	n-Hex	Me
C	O	C	N	C	n-Hex	Et
C	O	C	N	C	n-Hex	n-Hex
C	O	C	N	C	n-Hex	c-Pr
C	O	C	N	C	n-Hex	c-Hex
C	O	C	N	C	n-Hex	OH
C	O	C	N	C	n-Hex	CH_2OH
C	O	C	N	C	n-Hex	OMe
C	O	C	N	C	n-Hex	SMe
C	O	C	N	C	n-Hex	Cl
C	O	C	N	C	n-Hex	CF_3
C	O	C	N	C	n-Hex	Ph
C	O	C	N	C	i-Pr	H

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	O	C	N	C	i-Pr	Me
C	O	C	N	C	i-Pr	Et
C	O	C	N	C	i-Pr	n-Hex
C	O	C	N	C	i-Pr	c-Pr
C	O	C	N	C	i-Pr	c-Hex
C	O	C	N	C	i-Pr	OH
C	O	C	N	C	i-Pr	CH_2OH
C	O	C	N	C	i-Pr	OMe
C	O	C	N	C	i-Pr	SMe
C	O	C	N	C	i-Pr	Cl
C	O	C	N	C	i-Pr	CF_3
C	O	C	N	C	i-Pr	Ph
C	O	C	N	C	t-Bu	H
C	O	C	N	C	t-Bu	Me
C	O	C	N	C	t-Bu	Et
C	O	C	N	C	t-Bu	n-Hex
C	O	C	N	C	t-Bu	c-Pr
C	O	C	N	C	t-Bu	c-Hex
C	O	C	N	C	t-Bu	OH
C	O	C	N	C	t-Bu	CH_2OH
C	O	C	N	C	t-Bu	OMe
C	O	C	N	C	t-Bu	SMe
C	O	C	N	C	t-Bu	Cl
C	O	C	N	C	t-Bu	CF_3
C	O	C	N	C	t-Bu	Ph
C	O	C	N	C	c-Hex	H
C	O	C	N	C	c-Hex	Me
C	O	C	N	C	c-Hex	Et
C	O	C	N	C	c-Hex	n-Hex
C	O	C	N	C	c-Hex	c-Pr
C	O	C	N	C	c-Hex	c-Hex
C	O	C	N	C	c-Hex	OH
C	O	C	N	C	c-Hex	CH_2OH
C	O	C	N	C	c-Hex	OMe
C	O	C	N	C	c-Hex	SMe
C	O	C	N	C	c-Hex	Cl
C	O	C	N	C	c-Hex	CF_3
C	O	C	N	C	c-Hex	Ph
C	O	C	N	C	3-c-己烯基	H
C	O	C	N	C	3-c-己烯基	Me
C	O	C	N	C	3-c-己烯基	Et
C	O	C	N	C	3-c-己烯基	n-Hex
C	O	C	N	C	3-c-己烯基	c-Pr
C	O	C	N	C	3-c-己烯基	c-Hex

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	O	C	N	C	3-c-己烯基	OH
C	O	C	N	C	3-c-己烯基	CH_2OH
C	O	C	N	C	3-c-己烯基	OMe
C	O	C	N	C	3-c-己烯基	SMe
C	O	C	N	C	3-c-己烯基	Cl
C	O	C	N	C	3-c-己烯基	CF_3
C	O	C	N	C	3-c-己烯基	Ph
C	O	C	N	C	CH_2OH	H
C	O	C	N	C	CH_2OH	Me
C	O	C	N	C	CH_2OH	Et
C	O	C	N	C	CH_2OH	n-Hex
C	O	C	N	C	CH_2OH	c-Pr
C	O	C	N	C	CH_2OH	c-Hex
C	O	C	N	C	CH_2OH	OH
C	O	C	N	C	CH_2OH	CH_2OH
C	O	C	N	C	CH_2OH	OMe
C	O	C	N	C	CH_2OH	SMe
C	O	C	N	C	CH_2OH	Cl
C	O	C	N	C	CH_2OH	CF_3
C	O	C	N	C	CH_2OH	Ph
C	O	C	N	C	CH_2Ph	H
C	O	C	N	C	CH_2Ph	Me
C	O	C	N	C	CH_2Ph	Et
C	O	C	N	C	CH_2Ph	n-Hex
C	O	C	N	C	CH_2Ph	c-Pr
C	O	C	N	C	CH_2Ph	c-Hex
C	O	C	N	C	CH_2Ph	OH
C	O	C	N	C	CH_2Ph	CH_2OH
C	O	C	N	C	CH_2Ph	OMe
C	O	C	N	C	CH_2Ph	SMe
C	O	C	N	C	CH_2Ph	Cl
C	O	C	N	C	CH_2Ph	CF_3
C	O	C	N	C	CH_2Ph	Ph
C	O	C	N	C	α-萘基	H
C	O	C	N	C	α-萘基	Me
C	O	C	N	C	α-萘基	Et
C	O	C	N	C	α-萘基	n-Hex
C	O	C	N	C	α-萘基	c-Pr
C	O	C	N	C	α-萘基	c-Hex
C	O	C	N	C	α-萘基	OH
C	O	C	N	C	α-萘基	CH_2OH
C	O	C	N	C	α-萘基	OMe
C	O	C	N	C	α-萘基	SMe
C	O	C	N	C	α-萘基	Cl

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	O	C	N	C	α-萘基	CF_3
C	O	C	N	C	α-萘基	Ph
C	O	C	N	C	β-萘基	H
C	O	C	N	C	β-萘基	Me
C	O	C	N	C	β-萘基	Et
C	O	C	N	C	β-萘基	n-Hex
C	O	C	N	C	β-萘基	c-Pr
C	O	C	N	C	β-萘基	c-Hex
C	O	C	N	C	β-萘基	OH
C	O	C	N	C	β-萘基	CH_2OH
C	O	C	N	C	β-萘基	OMe
C	O	C	N	C	β-萘基	SMe
C	O	C	N	C	β-萘基	Cl
C	O	C	N	C	β-萘基	CF_3
C	O	C	N	C	β-萘基	Ph
C	O	C	N	C	2-吡啶基	H
C	O	C	N	C	2-吡啶基	Me
C	O	C	N	C	2-吡啶基	Et
C	O	C	N	C	2-吡啶基	n-Hex
C	O	C	N	C	2-吡啶基	c-Pr
C	O	C	N	C	2-吡啶基	c-Hex
C	O	C	N	C	2-吡啶基	OH
C	O	C	N	C	2-吡啶基	CH_2OH
C	O	C	N	C	2-吡啶基	OMe
C	O	C	N	C	2-吡啶基	SMe
C	O	C	N	C	2-吡啶基	Cl
C	O	C	N	C	2-吡啶基	CF_3
C	O	C	N	C	2-吡啶基	Ph
C	O	C	N	C	3-吡啶基	H
C	O	C	N	C	3-吡啶基	Me
C	O	C	N	C	3-吡啶基	Et
C	O	C	N	C	3-吡啶基	n-Hex
C	O	C	N	C	3-吡啶基	c-Pr
C	O	C	N	C	3-吡啶基	c-Hex
C	O	C	N	C	3-吡啶基	OH
C	O	C	N	C	3-吡啶基	CH_2OH
C	O	C	N	C	3-吡啶基	OMe
C	O	C	N	C	3-吡啶基	SMe
C	O	C	N	C	3-吡啶基	Cl
C	O	C	N	C	3-吡啶基	CF_3
C	O	C	N	C	3-吡啶基	Ph
C	O	C	N	C	4-吡啶基	H
C	O	C	N	C	4-吡啶基	Me
C	O	C	N	C	4-吡啶基	Et

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	O	C	N	C	4-吡啶基	n-Hex
C	O	C	N	C	4-吡啶基	c-Pr
C	O	C	N	C	4-吡啶基	c-Hex
C	O	C	N	C	4-吡啶基	OH
C	O	C	N	C	4-吡啶基	CH_2OH
C	O	C	N	C	4-吡啶基	OMe
C	O	C	N	C	4-吡啶基	SMe
C	O	C	N	C	4-吡啶基	Cl
C	O	C	N	C	4-吡啶基	CF_3
C	O	C	N	C	4-吡啶基	Ph
C	O	C	N	C	2-呋喃基	H
C	O	C	N	C	2-呋喃基	Me
C	O	C	N	C	2-呋喃基	Et
C	O	C	N	C	2-呋喃基	n-Hex
C	O	C	N	C	2-呋喃基	c-Pr
C	O	C	N	C	2-呋喃基	c-Hex
C	O	C	N	C	2-呋喃基	OH
C	O	C	N	C	2-呋喃基	CH_2OH
C	O	C	N	C	2-呋喃基	OMe
C	O	C	N	C	2-呋喃基	SMe
C	O	C	N	C	2-呋喃基	Cl
C	O	C	N	C	2-呋喃基	CF_3
C	O	C	N	C	2-呋喃基	Ph
C	O	C	N	C	2-噻吩基	H
C	O	C	N	C	2-噻吩基	Me
C	O	C	N	C	2-噻吩基	Et
C	O	C	N	C	2-噻吩基	n-Hex
C	O	C	N	C	2-噻吩基	c-Pr
C	O	C	N	C	2-噻吩基	c-Hex
C	O	C	N	C	2-噻吩基	OH
C	O	C	N	C	2-噻吩基	CH_2OH
C	O	C	N	C	2-噻吩基	OMe
C	O	C	N	C	2-噻吩基	SMe
C	O	C	N	C	2-噻吩基	Cl
C	O	C	N	C	2-噻吩基	CF_3
C	O	C	N	C	2-噻吩基	Ph
C	O	C	N	C	2-甲苯基	H
C	O	C	N	C	2-甲苯基	Me
C	O	C	N	C	2-甲苯基	Et
C	O	C	N	C	2-甲苯基	n-Hex
C	O	C	N	C	2-甲苯基	c-Pr
C	O	C	N	C	2-甲苯基	c-Hex
C	O	C	N	C	2-甲苯基	OH
C	O	C	N	C	2-甲苯基	CH_2OH

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	O	C	N	C	2-甲苯基	OMe
C	O	C	N	C	2-甲苯基	SMe
C	O	C	N	C	2-甲苯基	Cl
C	O	C	N	C	2-甲苯基	CF_3
C	O	C	N	C	2-甲苯基	Ph
C	O	C	N	C	3-甲苯基	H
C	O	C	N	C	3-甲苯基	Me
C	O	C	N	C	3-甲苯基	Et
C	O	C	N	C	3-甲苯基	n-Hex
C	O	C	N	C	3-甲苯基	c-Pr
C	O	C	N	C	3-甲苯基	c-Hex
C	O	C	N	C	3-甲苯基	OH
C	O	C	N	C	3-甲苯基	CH_2OH
C	O	C	N	C	3-甲苯基	OMe
C	O	C	N	C	3-甲苯基	SMe
C	O	C	N	C	3-甲苯基	Cl
C	O	C	N	C	3-甲苯基	CF_3
C	O	C	N	C	3-甲苯基	Ph
C	O	C	N	C	4-甲苯基	H
C	O	C	N	C	4-甲苯基	Me
C	O	C	N	C	4-甲苯基	Et
C	O	C	N	C	4-甲苯基	n-Hex
C	O	C	N	C	4-甲苯基	c-Pr
C	O	C	N	C	4-甲苯基	c-Hex
C	O	C	N	C	4-甲苯基	OH
C	O	C	N	C	4-甲苯基	CH_2OH
C	O	C	N	C	4-甲苯基	OMe
C	O	C	N	C	4-甲苯基	SMe
C	O	C	N	C	4-甲苯基	Cl
C	O	C	N	C	4-甲苯基	CF_3
C	O	C	N	C	4-甲苯基	Ph
C	O	C	N	C	Ph-2,3-Me_2	H
C	O	C	N	C	Ph-2,3-Me_2	Me
C	O	C	N	C	Ph-2,3-Me_2	Et
C	O	C	N	C	Ph-2,3-Me_2	n-Hex
C	O	C	N	C	Ph-2,3-Me_2	c-Pr
C	O	C	N	C	Ph-2,3-Me_2	c-Hex
C	O	C	N	C	Ph-2,3-Me_2	OH
C	O	C	N	C	Ph-2,3-Me_2	CH_2OH
C	O	C	N	C	Ph-2,3-Me_2	OMe
C	O	C	N	C	Ph-2,3-Me_2	SMe
C	O	C	N	C	Ph-2,3-Me_2	Cl
C	O	C	N	C	Ph-2,3-Me_2	CF_3
C	O	C	N	C	Ph-2,3-Me_2	Ph

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	O	C	N	C	Ph-3,4-Me_2	H
C	O	C	N	C	Ph-3,4-Me_2	Me
C	O	C	N	C	Ph-3,4-Me_2	Et
C	O	C	N	C	Ph-3,4-Me_2	n-Hex
C	O	C	N	C	Ph-3,4-Me_2	c-Pr
C	O	C	N	C	Ph-3,4-Me_2	c-Hex
C	O	C	N	C	Ph-3,4-Me_2	OH
C	O	C	N	C	Ph-3,4-Me_2	CH_2OH
C	O	C	N	C	Ph-3,4-Me_2	OMe
C	O	C	N	C	Ph-3,4-Me_2	SMe
C	O	C	N	C	Ph-3,4-Me_2	Cl
C	O	C	N	C	Ph-3,4-Me_2	CF_3
C	O	C	N	C	Ph-3,4-Me_2	Ph
C	O	C	N	C	Ph-3,5-Me_2	H
C	O	C	N	C	Ph-3,5-Me_2	Me
C	O	C	N	C	Ph-3,5-Me_2	Et
C	O	C	N	C	Ph-3,5-Me_2	n-Hex
C	O	C	N	C	Ph-3,5-Me_2	c-Pr
C	O	C	N	C	Ph-3,5-Me_2	c-Hex
C	O	C	N	C	Ph-3,5-Me_2	OH
C	O	C	N	C	Ph-3,5-Me_2	CH_2OH
C	O	C	N	C	Ph-3,5-Me_2	OMe
C	O	C	N	C	Ph-3,5-Me_2	SMe
C	O	C	N	C	Ph-3,5-Me_2	Cl
C	O	C	N	C	Ph-3,5-Me_2	CF_3
C	O	C	N	C	Ph-3,5-Me_2	Ph
C	O	C	N	C	Ph-2,6-Me_2	H
C	O	C	N	C	Ph-2,6-Me_2	Me
C	O	C	N	C	Ph-2,6-Me_2	Et
C	O	C	N	C	Ph-2,6-Me_2	n-Hex
C	O	C	N	C	Ph-2,6-Me_2	c-Pr
C	O	C	N	C	Ph-2,6-Me_2	c-Hex
C	O	C	N	C	Ph-2,6-Me_2	OH
C	O	C	N	C	Ph-2,6-Me_2	CH_2OH
C	O	C	N	C	Ph-2,6-Me_2	OMe
C	O	C	N	C	Ph-2,6-Me_2	SMe
C	O	C	N	C	Ph-2,6-Me_2	Cl
C	O	C	N	C	Ph-2,6-Me_2	CF_3
C	O	C	N	C	Ph-2,6-Me_2	Ph
C	O	C	N	C	Ph-2-Cl	H
C	O	C	N	C	Ph-2-Cl	Me
C	O	C	N	C	Ph-2-Cl	Et
C	O	C	N	C	Ph-2-Cl	n-Hex
C	O	C	N	C	Ph-2-Cl	c-Pr

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	O	C	N	C	Ph-2-Cl	c-Hex
C	O	C	N	C	Ph-2-Cl	OH
C	O	C	N	C	Ph-2-Cl	CH_2OH
C	O	C	N	C	Ph-2-Cl	OMe
C	O	C	N	C	Ph-2-Cl	SMe
C	O	C	N	C	Ph-2-Cl	Cl
C	O	C	N	C	Ph-2-Cl	CF_3
C	O	C	N	C	Ph-2-Cl	Ph
C	O	C	N	C	Ph-3-Cl	H
C	O	C	N	C	Ph-3-Cl	Me
C	O	C	N	C	Ph-3-Cl	Et
C	O	C	N	C	Ph-3-Cl	n-Hex
C	O	C	N	C	Ph-3-Cl	c-Pr
C	O	C	N	C	Ph-3-Cl	c-Hex
C	O	C	N	C	Ph-3-Cl	OH
C	O	C	N	C	Ph-3-Cl	CH_2OH
C	O	C	N	C	Ph-3-Cl	OMe
C	O	C	N	C	Ph-3-Cl	SMe
C	O	C	N	C	Ph-3-Cl	Cl
C	O	C	N	C	Ph-3-Cl	CF_3
C	O	C	N	C	Ph-3-Cl	Ph
C	O	C	N	C	Ph-4-Cl	H
C	O	C	N	C	Ph-4-Cl	Me
C	O	C	N	C	Ph-4-Cl	Et
C	O	C	N	C	Ph-4-Cl	n-Hex
C	O	C	N	C	Ph-4-Cl	c-Pr
C	O	C	N	C	Ph-4-Cl	c-Hex
C	O	C	N	C	Ph-4-Cl	OH
C	O	C	N	C	Ph-4-Cl	CH_2OH
C	O	C	N	C	Ph-4-Cl	OMe
C	O	C	N	C	Ph-4-Cl	SMe
C	O	C	N	C	Ph-4-Cl	Cl
C	O	C	N	C	Ph-4-Cl	CF_3
C	O	C	N	C	Ph-4-Cl	Ph
C	O	C	N	C	Ph-3,4-Cl_2	H
C	O	C	N	C	Ph-3,4-Cl_2	Me
C	O	C	N	C	Ph-3,4-Cl_2	Et
C	O	C	N	C	Ph-3,4-Cl_2	n-Hex
C	O	C	N	C	Ph-3,4-Cl_2	c-Pr
C	O	C	N	C	Ph-3,4-Cl_2	c-Hex
C	O	C	N	C	Ph-3,4-Cl_2	OH
C	O	C	N	C	Ph-3,4-Cl_2	CH_2OH
C	O	C	N	C	Ph-3,4-Cl_2	OMe
C	O	C	N	C	Ph-3,4-Cl_2	SMe

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	O	C	N	C	Ph-3,4-Cl_2	Cl
C	O	C	N	C	Ph-3,4-Cl_2	CF_3
C	O	C	N	C	Ph-3,4-Cl_2	Ph
C	O	C	N	C	Ph-4-F	H
C	O	C	N	C	Ph-4-F	Me
C	O	C	N	C	Ph-4-F	Et
C	O	C	N	C	Ph-4-F	n-Hex
C	O	C	N	C	Ph-4-F	c-Pr
C	O	C	N	C	Ph-4-F	c-Hex
C	O	C	N	C	Ph-4-F	OH
C	O	C	N	C	Ph-4-F	CH_2OH
C	O	C	N	C	Ph-4-F	OMe
C	O	C	N	C	Ph-4-F	SMe
C	O	C	N	C	Ph-4-F	Cl
C	O	C	N	C	Ph-4-F	CF_3
C	O	C	N	C	Ph-4-F	Ph
C	O	C	N	C	Ph-4-Br	H
C	O	C	N	C	Ph-4-Br	Me
C	O	C	N	C	Ph-4-Br	Et
C	O	C	N	C	Ph-4-Br	n-Hex
C	O	C	N	C	Ph-4-Br	c-Pr
C	O	C	N	C	Ph-4-Br	c-Hex
C	O	C	N	C	Ph-4-Br	OH
C	O	C	N	C	Ph-4-Br	CH_2OH
C	O	C	N	C	Ph-4-Br	OMe
C	O	C	N	C	Ph-4-Br	SMe
C	O	C	N	C	Ph-4-Br	Cl
C	O	C	N	C	Ph-4-Br	CF_3
C	O	C	N	C	Ph-4-Br	Ph
C	O	C	N	C	Ph-2-OMe	H
C	O	C	N	C	Ph-2-OMe	Me
C	O	C	N	C	Ph-2-OMe	Et
C	O	C	N	C	Ph-2-OMe	n-Hex
C	O	C	N	C	Ph-2-OMe	c-Pr
C	O	C	N	C	Ph-2-OMe	c-Hex
C	O	C	N	C	Ph-2-OMe	OH
C	O	C	N	C	Ph-2-OMe	CH_2OH
C	O	C	N	C	Ph-2-OMe	OMe
C	O	C	N	C	Ph-2-OMe	SMe
C	O	C	N	C	Ph-2-OMe	Cl
C	O	C	N	C	Ph-2-OMe	CF_3
C	O	C	N	C	Ph-2-OMe	Ph
C	O	C	N	C	Ph-3-OMe	H
C	O	C	N	C	Ph-3-OMe	Me

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	O	C	N	C	Ph-3-OMe	Et
C	O	C	N	C	Ph-3-OMe	n-Hex
C	O	C	N	C	Ph-3-OMe	c-Pr
C	O	C	N	C	Ph-3-OMe	c-Hex
C	O	C	N	C	Ph-3-OMe	OH
C	O	C	N	C	Ph-3-OMe	CH_2OH
C	O	C	N	C	Ph-3-OMe	OMe
C	O	C	N	C	Ph-3-OMe	SMe
C	O	C	N	C	Ph-3-OMe	Cl
C	O	C	N	C	Ph-3-OMe	CF_3
C	O	C	N	C	Ph-3-OMe	Ph
C	O	C	N	C	Ph-4-OMe	H
C	O	C	N	C	Ph-4-OMe	Me
C	O	C	N	C	Ph-4-OMe	Et
C	O	C	N	C	Ph-4-OMe	n-Hex
C	O	C	N	C	Ph-4-OMe	c-Pr
C	O	C	N	C	Ph-4-OMe	c-Hex
C	O	C	N	C	Ph-4-OMe	OH
C	O	C	N	C	Ph-4-OMe	CH_2OH
C	O	C	N	C	Ph-4-OMe	OMe
C	O	C	N	C	Ph-4-OMe	SMe
C	O	C	N	C	Ph-4-OMe	Cl
C	O	C	N	C	Ph-4-OMe	CF_3
C	O	C	N	C	Ph-4-OMe	Ph
C	O	C	N	C	Ph-3,4-$(OMe)_2$	H
C	O	C	N	C	Ph-3,4-$(OMe)_2$	Me
C	O	C	N	C	Ph-3,4-$(OMe)_2$	Et
C	O	C	N	C	Ph-3,4-$(OMe)_2$	n-Hex
C	O	C	N	C	Ph-3,4-$(OMe)_2$	c-Pr
C	O	C	N	C	Ph-3,4-$(OMe)_2$	c-Hex
C	O	C	N	C	Ph-3,4-$(OMe)_2$	OH
C	O	C	N	C	Ph-3,4-$(OMe)_2$	CH_2OH
C	O	C	N	C	Ph-3,4-$(OMe)_2$	OMe
C	O	C	N	C	Ph-3,4-$(OMe)_2$	SMe
C	O	C	N	C	Ph-3,4-$(OMe)_2$	Cl
C	O	C	N	C	Ph-3,4-$(OMe)_2$	CF_3
C	O	C	N	C	Ph-3,4-$(OMe)_2$	Ph
C	O	C	N	C	Ph-2-OH	H
C	O	C	N	C	Ph-2-OH	Me
C	O	C	N	C	Ph-2-OH	Et
C	O	C	N	C	Ph-2-OH	n-Hex
C	O	C	N	C	Ph-2-OH	c-Pr
C	O	C	N	C	Ph-2-OH	c-Hex
C	O	C	N	C	Ph-2-OH	OH

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	O	C	N	C	Ph-2-OH	CH_2OH
C	O	C	N	C	Ph-2-OH	OMe
C	O	C	N	C	Ph-2-OH	SMe
C	O	C	N	C	Ph-2-OH	Cl
C	O	C	N	C	Ph-2-OH	CF_3
C	O	C	N	C	Ph-2-OH	Ph
C	O	C	N	C	Ph-3-OH	H
C	O	C	N	C	Ph-3-OH	Me
C	O	C	N	C	Ph-3-OH	Et
C	O	C	N	C	Ph-3-OH	n-Hex
C	O	C	N	C	Ph-3-OH	c-Pr
C	O	C	N	C	Ph-3-OH	c-Hex
C	O	C	N	C	Ph-3-OH	OH
C	O	C	N	C	Ph-3-OH	CH_2OH
C	O	C	N	C	Ph-3-OH	OMe
C	O	C	N	C	Ph-3-OH	SMe
C	O	C	N	C	Ph-3-OH	Cl
C	O	C	N	C	Ph-3-OH	CF_3
C	O	C	N	C	Ph-3-OH	Ph
C	O	C	N	C	Ph-4-OH	H
C	O	C	N	C	Ph-4-OH	Me
C	O	C	N	C	Ph-4-OH	Et
C	O	C	N	C	Ph-4-OH	n-Hex
C	O	C	N	C	Ph-4-OH	c-Pr
C	O	C	N	C	Ph-4-OH	c-Hex
C	O	C	N	C	Ph-4-OH	OH
C	O	C	N	C	Ph-4-OH	CH_2OH
C	O	C	N	C	Ph-4-OH	OMe
C	O	C	N	C	Ph-4-OH	SMe
C	O	C	N	C	Ph-4-OH	Cl
C	O	C	N	C	Ph-4-OH	CF_3
C	O	C	N	C	Ph-4-OH	Ph
C	O	C	N	C	Ph-3,4-$(OH)_2$	H
C	O	C	N	C	Ph-3,4-$(OH)_2$	Me
C	O	C	N	C	Ph-3,4-$(OH)_2$	Et
C	O	C	N	C	Ph-3,4-$(OH)_2$	n-Hex
C	O	C	N	C	Ph-3,4-$(OH)_2$	c-Pr
C	O	C	N	C	Ph-3,4-$(OH)_2$	c-Hex
C	O	C	N	C	Ph-3,4-$(OH)_2$	OH
C	O	C	N	C	Ph-3,4-$(OH)_2$	CH_2OH
C	O	C	N	C	Ph-3,4-$(OH)_2$	OMe
C	O	C	N	C	Ph-3,4-$(OH)_2$	SMe
C	O	C	N	C	Ph-3,4-$(OH)_2$	Cl
C	O	C	N	C	Ph-3,4-$(OH)_2$	CF_3

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	O	C	N	C	Ph-3,4-$(OH)_2$	Ph
C	O	C	N	C	Ph-3-SMe	H
C	O	C	N	C	Ph-3-SMe	Me
C	O	C	N	C	Ph-3-SMe	Et
C	O	C	N	C	Ph-3-SMe	n-Hex
C	O	C	N	C	Ph-3-SMe	c-Pr
C	O	C	N	C	Ph-3-SMe	c-Hex
C	O	C	N	C	Ph-3-SMe	OH
C	O	C	N	C	Ph-3-SMe	CH_2OH
C	O	C	N	C	Ph-3-SMe	OMe
C	O	C	N	C	Ph-3-SMe	SMe
C	O	C	N	C	Ph-3-SMe	Cl
C	O	C	N	C	Ph-3-SMe	CF_3
C	O	C	N	C	Ph-3-SMe	Ph
C	O	C	N	C	Ph-3-CF_3	H
C	O	C	N	C	Ph-3-CF_3	Me
C	O	C	N	C	Ph-3-CF_3	Et
C	O	C	N	C	Ph-3-CF_3	n-Hex
C	O	C	N	C	Ph-3-CF_3	c-Pr
C	O	C	N	C	Ph-3-CF_3	c-Hex
C	O	C	N	C	Ph-3-CF_3	OH
C	O	C	N	C	Ph-3-CF_3	CH_2OH
C	O	C	N	C	Ph-3-CF_3	OMe
C	O	C	N	C	Ph-3-CF_3	SMe
C	O	C	N	C	Ph-3-CF_3	Cl
C	O	C	N	C	Ph-3-CF_3	CF_3
C	O	C	N	C	Ph-3-CF_3	Ph
C	O	C	N	C	Ph-3-NO_2	H
C	O	C	N	C	Ph-3-NO_2	Me
C	O	C	N	C	Ph-3-NO_2	Et
C	O	C	N	C	Ph-3-NO_2	n-Hex
C	O	C	N	C	Ph-3-NO_2	c-Pr
C	O	C	N	C	Ph-3-NO_2	c-Hex
C	O	C	N	C	Ph-3-NO_2	OH
C	O	C	N	C	Ph-3-NO_2	CH_2OH
C	O	C	N	C	Ph-3-NO_2	OMe
C	O	C	N	C	Ph-3-NO_2	SMe
C	O	C	N	C	Ph-3-NO_2	Cl
C	O	C	N	C	Ph-3-NO_2	CF_3
C	O	C	N	C	Ph-3-NO_2	Ph
C	O	C	N	C	Ph-4-NMe_2	H
C	O	C	N	C	Ph-4-NMe_2	Me
C	O	C	N	C	Ph-4-NMe_2	Et
C	O	C	N	C	Ph-4-NMe_2	n-Hex

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	O	C	N	C	Ph-4-NMe_2	c-Pr
C	O	C	N	C	Ph-4-NMe_2	c-Hex
C	O	C	N	C	Ph-4-NMe_2	OH
C	O	C	N	C	Ph-4-NMe_2	CH_2OH
C	O	C	N	C	Ph-4-NMe_2	OMe
C	O	C	N	C	Ph-4-NMe_2	SMe
C	O	C	N	C	Ph-4-NMe_2	Cl
C	O	C	N	C	Ph-4-NMe_2	CF_3
C	O	C	N	C	Ph-4-NMe_2	Ph
C	S	C	N	C	Ph	H
C	S	C	N	C	Ph	Me
C	S	C	N	C	Ph	Et
C	S	C	N	C	Ph	n-Hex
C	S	C	N	C	Ph	c-Pr
C	S	C	N	C	Ph	c-Hex
C	S	C	N	C	Ph	OH
C	S	C	N	C	Ph	CH_2OH
C	S	C	N	C	Ph	OMe
C	S	C	N	C	Ph	SMe
C	S	C	N	C	Ph	Cl
C	S	C	N	C	Ph	CF_3
C	S	C	N	C	Ph	Ph
C	S	C	N	C	H	H
C	S	C	N	C	H	Me
C	S	C	N	C	H	Et
C	S	C	N	C	H	n-Hex
C	S	C	N	C	H	c-Pr
C	S	C	N	C	H	c-Hex
C	S	C	N	C	H	OH
C	S	C	N	C	H	CH_2OH
C	S	C	N	C	H	OMe
C	S	C	N	C	H	SMe
C	S	C	N	C	H	Cl
C	S	C	N	C	H	CF_3
C	S	C	N	C	H	Ph
C	S	C	N	C	Me	H
C	S	C	N	C	Me	Me
C	S	C	N	C	Me	Et
C	S	C	N	C	Me	n-Hex
C	S	C	N	C	Me	c-Pr
C	S	C	N	C	Me	c-Hex
C	S	C	N	C	Me	OH
C	S	C	N	C	Me	CH_2OH
C	S	C	N	C	Me	OMe

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	S	C	N	C	Me	SMe
C	S	C	N	C	Me	Cl
C	S	C	N	C	Me	CF_3
C	S	C	N	C	Me	Ph
C	S	C	N	C	Et	H
C	S	C	N	C	Et	Me
C	S	C	N	C	Et	Et
C	S	C	N	C	Et	n-Hex
C	S	C	N	C	Et	c-Pr
C	S	C	N	C	Et	c-Hex
C	S	C	N	C	Et	OH
C	S	C	N	C	Et	CH_2OH
C	S	C	N	C	Et	OMe
C	S	C	N	C	Et	SMe
C	S	C	N	C	Et	Cl
C	S	C	N	C	Et	CF_3
C	S	C	N	C	Et	Ph
C	S	C	N	C	n-Pr	H
C	S	C	N	C	n-Pr	Me
C	S	C	N	C	n-Pr	Et
C	S	C	N	C	n-Pr	n-Hex
C	S	C	N	C	n-Pr	c-Pr
C	S	C	N	C	n-Pr	c-Hex
C	S	C	N	C	n-Pr	OH
C	S	C	N	C	n-Pr	CH_2OH
C	S	C	N	C	n-Pr	OMe
C	S	C	N	C	n-Pr	SMe
C	S	C	N	C	n-Pr	Cl
C	S	C	N	C	n-Pr	CF_3
C	S	C	N	C	n-Pr	Ph
C	S	C	N	C	n-Hex	H
C	S	C	N	C	n-Hex	Me
C	S	C	N	C	n-Hex	Et
C	S	C	N	C	n-Hex	n-Hex
C	S	C	N	C	n-Hex	c-Pr
C	S	C	N	C	n-Hex	c-Hex
C	S	C	N	C	n-Hex	OH
C	S	C	N	C	n-Hex	CH_2OH
C	S	C	N	C	n-Hex	OMe
C	S	C	N	C	n-Hex	SMe
C	S	C	N	C	n-Hex	Cl
C	S	C	N	C	n-Hex	CF_3
C	S	C	N	C	n-Hex	Ph
C	S	C	N	C	i-Pr	H

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	S	C	N	C	i-Pr	Me
C	S	C	N	C	i-Pr	Et
C	S	C	N	C	i-Pr	n-Hex
C	S	C	N	C	i-Pr	c-Pr
C	S	C	N	C	i-Pr	c-Hex
C	S	C	N	C	i-Pr	OH
C	S	C	N	C	i-Pr	CH_2OH
C	S	C	N	C	i-Pr	OMe
C	S	C	N	C	i-Pr	SMe
C	S	C	N	C	i-Pr	Cl
C	S	C	N	C	i-Pr	CF_3
C	S	C	N	C	i-Pr	Ph
C	S	C	N	C	t-Bu	H
C	S	C	N	C	t-Bu	Me
C	S	C	N	C	t-Bu	Et
C	S	C	N	C	t-Bu	n-Hex
C	S	C	N	C	t-Bu	c-Pr
C	S	C	N	C	t-Bu	c-Hex
C	S	C	N	C	t-Bu	OH
C	S	C	N	C	t-Bu	CH_2OH
C	S	C	N	C	t-Bu	OMe
C	S	C	N	C	t-Bu	SMe
C	S	C	N	C	t-Bu	Cl
C	S	C	N	C	t-Bu	CF_3
C	S	C	N	C	t-Bu	Ph
C	S	C	N	C	c-Hex	H
C	S	C	N	C	c-Hex	Me
C	S	C	N	C	c-Hex	Et
C	S	C	N	C	c-Hex	n-Hex
C	S	C	N	C	c-Hex	c-Pr
C	S	C	N	C	c-Hex	c-Hex
C	S	C	N	C	c-Hex	OH
C	S	C	N	C	c-Hex	CH_2OH
C	S	C	N	C	c-Hex	OMe
C	S	C	N	C	c-Hex	SMe
C	S	C	N	C	c-Hex	Cl
C	S	C	N	C	c-Hex	CF_3
C	S	C	N	C	c-Hex	Ph
C	S	C	N	C	3-c-己烯基	H
C	S	C	N	C	3-c-己烯基	Me
C	S	C	N	C	3-c-己烯基	Et
C	S	C	N	C	3-c-己烯基	n-Hex
C	S	C	N	C	3-c-己烯基	c-Pr
C	S	C	N	C	3-c-己烯基	c-Hex

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	S	C	N	C	3-c-己烯基	OH
C	S	C	N	C	3-c-己烯基	CH_2OH
C	S	C	N	C	3-c-己烯基	OMe
C	S	C	N	C	3-c-己烯基	SMe
C	S	C	N	C	3-c-己烯基	Cl
C	S	C	N	C	3-c-己烯基	CF_3
C	S	C	N	C	3-c-己烯基	Ph
C	S	C	N	C	CH_2OH	H
C	S	C	N	C	CH_2OH	Me
C	S	C	N	C	CH_2OH	Et
C	S	C	N	C	CH_2OH	n-Hex
C	S	C	N	C	CH_2OH	c-Pr
C	S	C	N	C	CH_2OH	c-Hex
C	S	C	N	C	CH_2OH	OH
C	S	C	N	C	CH_2OH	CH_2OH
C	S	C	N	C	CH_2OH	OMe
C	S	C	N	C	CH_2OH	SMe
C	S	C	N	C	CH_2OH	Cl
C	S	C	N	C	CH_2OH	CF_3
C	S	C	N	C	CH_2OH	Ph
C	S	C	N	C	CH_2Ph	H
C	S	C	N	C	CH_2Ph	Me
C	S	C	N	C	CH_2Ph	Et
C	S	C	N	C	CH_2Ph	n-Hex
C	S	C	N	C	CH_2Ph	c-Pr
C	S	C	N	C	CH_2Ph	c-Hex
C	S	C	N	C	CH_2Ph	OH
C	S	C	N	C	CH_2Ph	CH_2OH
C	S	C	N	C	CH_2Ph	OMe
C	S	C	N	C	CH_2Ph	SMe
C	S	C	N	C	CH_2Ph	Cl
C	S	C	N	C	CH_2Ph	CF_3
C	S	C	N	C	CH_2Ph	Ph
C	S	C	N	C	α-萘基	H
C	S	C	N	C	α-萘基	Me
C	S	C	N	C	α-萘基	Et
C	S	C	N	C	α-萘基	n-Hex
C	S	C	N	C	α-萘基	c-Pr
C	S	C	N	C	α-萘基	c-Hex
C	S	C	N	C	α-萘基	OH
C	S	C	N	C	α-萘基	CH_2OH
C	S	C	N	C	α-萘基	OMe
C	S	C	N	C	α-萘基	SMe
C	S	C	N	C	α-萘基	Cl

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	S	C	N	C	α-萘基	CF_3
C	S	C	N	C	α-萘基	Ph
C	S	C	N	C	β-萘基	H
C	S	C	N	C	β-萘基	Me
C	S	C	N	C	β-萘基	Et
C	S	C	N	C	β-萘基	n-Hex
C	S	C	N	C	β-萘基	c-Pr
C	S	C	N	C	β-萘基	c-Hex
C	S	C	N	C	β-萘基	OH
C	S	C	N	C	β-萘基	CH_2OH
C	S	C	N	C	β-萘基	OMe
C	S	C	N	C	β-萘基	SMe
C	S	C	N	C	β-萘基	Cl
C	S	C	N	C	β-萘基	CF_3
C	S	C	N	C	β-萘基	Ph
C	S	C	N	C	2-吡啶基	H
C	S	C	N	C	2-吡啶基	Me
C	S	C	N	C	2-吡啶基	Et
C	S	C	N	C	2-吡啶基	n-Hex
C	S	C	N	C	2-吡啶基	c-Pr
C	S	C	N	C	2-吡啶基	c-Hex
C	S	C	N	C	2-吡啶基	OH
C	S	C	N	C	2-吡啶基	CH_2OH
C	S	C	N	C	2-吡啶基	OMe
C	S	C	N	C	2-吡啶基	SMe
C	S	C	N	C	2-吡啶基	Cl
C	S	C	N	C	2-吡啶基	CF_3
C	S	C	N	C	2-吡啶基	Ph
C	S	C	N	C	3-吡啶基	H
C	S	C	N	C	3-吡啶基	Me
C	S	C	N	C	3-吡啶基	Et
C	S	C	N	C	3-吡啶基	n-Hex
C	S	C	N	C	3-吡啶基	c-Pr
C	S	C	N	C	3-吡啶基	c-Hex
C	S	C	N	C	3-吡啶基	OH
C	S	C	N	C	3-吡啶基	CH_2OH
C	S	C	N	C	3-吡啶基	OMe
C	S	C	N	C	3-吡啶基	SMe
C	S	C	N	C	3-吡啶基	Cl
C	S	C	N	C	3-吡啶基	CF_3
C	S	C	N	C	3-吡啶基	Ph
C	S	C	N	C	4-吡啶基	H
C	S	C	N	C	4-吡啶基	Me
C	S	C	N	C	4-吡啶基	Et

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	S	C	N	C	4-吡啶基	n-Hex
C	S	C	N	C	4-吡啶基	c-Pr
C	S	C	N	C	4-吡啶基	c-Hex
C	S	C	N	C	4-吡啶基	OH
C	S	C	N	C	4-吡啶基	CH_2OH
C	S	C	N	C	4-吡啶基	OMe
C	S	C	N	C	4-吡啶基	SMe
C	S	C	N	C	4-吡啶基	Cl
C	S	C	N	C	4-吡啶基	CF_3
C	S	C	N	C	4-吡啶基	Ph
C	S	C	N	C	2-呋喃基	H
C	S	C	N	C	2-呋喃基	Me
C	S	C	N	C	2-呋喃基	Et
C	S	C	N	C	2-呋喃基	n-Hex
C	S	C	N	C	2-呋喃基	c-Pr
C	S	C	N	C	2-呋喃基	c-Hex
C	S	C	N	C	2-呋喃基	OH
C	S	C	N	C	2-呋喃基	CH_2OH
C	S	C	N	C	2-呋喃基	OMe
C	S	C	N	C	2-呋喃基	SMe
C	S	C	N	C	2-呋喃基	Cl
C	S	C	N	C	2-呋喃基	CF_3
C	S	C	N	C	2-呋喃基	Ph
C	S	C	N	C	2-噻吩基	H
C	S	C	N	C	2-噻吩基	Me
C	S	C	N	C	2-噻吩基	Et
C	S	C	N	C	2-噻吩基	n-Hex
C	S	C	N	C	2-噻吩基	c-Pr
C	S	C	N	C	2-噻吩基	c-Hex
C	S	C	N	C	2-噻吩基	OH
C	S	C	N	C	2-噻吩基	CH_2OH
C	S	C	N	C	2-噻吩基	OMe
C	S	C	N	C	2-噻吩基	SMe
C	S	C	N	C	2-噻吩基	Cl
C	S	C	N	C	2-噻吩基	CF_3
C	S	C	N	C	2-噻吩基	Ph
C	S	C	N	C	2-甲苯基	H
C	S	C	N	C	2-甲苯基	Me
C	S	C	N	C	2-甲苯基	Et
C	S	C	N	C	2-甲苯基	n-Hex
C	S	C	N	C	2-甲苯基	c-Pr
C	S	C	N	C	2-甲苯基	c-Hex
C	S	C	N	C	2-甲苯基	OH
C	S	C	N	C	2-甲苯基	CH_2OH

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	S	C	N	C	2-甲苯基	OMe
C	S	C	N	C	2-甲苯基	SMe
C	S	C	N	C	2-甲苯基	Cl
C	S	C	N	C	2-甲苯基	CF_3
C	S	C	N	C	2-甲苯基	Ph
C	S	C	N	C	3-甲苯基	H
C	S	C	N	C	3-甲苯基	Me
C	S	C	N	C	3-甲苯基	Et
C	S	C	N	C	3-甲苯基	n-Hex
C	S	C	N	C	3-甲苯基	c-Pr
C	S	C	N	C	3-甲苯基	c-Hex
C	S	C	N	C	3-甲苯基	OH
C	S	C	N	C	3-甲苯基	CH_2OH
C	S	C	N	C	3-甲苯基	OMe
C	S	C	N	C	3-甲苯基	SMe
C	S	C	N	C	3-甲苯基	Cl
C	S	C	N	C	3-甲苯基	CF_3
C	S	C	N	C	3-甲苯基	Ph
C	S	C	N	C	4-甲苯基	H
C	S	C	N	C	4-甲苯基	Me
C	S	C	N	C	4-甲苯基	Et
C	S	C	N	C	4-甲苯基	n-Hex
C	S	C	N	C	4-甲苯基	c-Pr
C	S	C	N	C	4-甲苯基	c-Hex
C	S	C	N	C	4-甲苯基	OH
C	S	C	N	C	4-甲苯基	CH_2OH
C	S	C	N	C	4-甲苯基	OMe
C	S	C	N	C	4-甲苯基	SMe
C	S	C	N	C	4-甲苯基	Cl
C	S	C	N	C	4-甲苯基	CF_3
C	S	C	N	C	4-甲苯基	Ph
C	S	C	N	C	Ph-2,3-Me_2	H
C	S	C	N	C	Ph-2,3-Me_2	Me
C	S	C	N	C	Ph-2,3-Me_2	Et
C	S	C	N	C	Ph-2,3-Me_2	n-Hex
C	S	C	N	C	Ph-2,3-Me_2	c-Pr
C	S	C	N	C	Ph-2,3-Me_2	c-Hex
C	S	C	N	C	Ph-2,3-Me_2	OH
C	S	C	N	C	Ph-2,3-Me_2	CH_2OH
C	S	C	N	C	Ph-2,3-Me_2	OMe
C	S	C	N	C	Ph-2,3-Me_2	SMe
C	S	C	N	C	Ph-2,3-Me_2	Cl
C	S	C	N	C	Ph-2,3-Me_2	CF_3
C	S	C	N	C	Ph-2,3-Me_2	Ph

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	S	C	N	C	Ph-3,4-Me_2	H
C	S	C	N	C	Ph-3,4-Me_2	Me
C	S	C	N	C	Ph-3,4-Me_2	Et
C	S	C	N	C	Ph-3,4-Me_2	n-Hex
C	S	C	N	C	Ph-3,4-Me_2	c-Pr
C	S	C	N	C	Ph-3,4-Me_2	c-Hex
C	S	C	N	C	Ph-3,4-Me_2	OH
C	S	C	N	C	Ph-3,4-Me_2	CH_2OH
C	S	C	N	C	Ph-3,4-Me_2	OMe
C	S	C	N	C	Ph-3,4-Me_2	SMe
C	S	C	N	C	Ph-3,4-Me_2	Cl
C	S	C	N	C	Ph-3,4-Me_2	CF_3
C	S	C	N	C	Ph-3,4-Me_2	Ph
C	S	C	N	C	Ph-3,5-Me_2	H
C	S	C	N	C	Ph-3,5-Me_2	Me
C	S	C	N	C	Ph-3,5-Me_2	Et
C	S	C	N	C	Ph-3,5-Me_2	n-Hex
C	S	C	N	C	Ph-3,5-Me_2	c-Pr
C	S	C	N	C	Ph-3,5-Me_2	c-Hex
C	S	C	N	C	Ph-3,5-Me_2	OH
C	S	C	N	C	Ph-3,5-Me_2	CH_2OH
C	S	C	N	C	Ph-3,5-Me_2	OMe
C	S	C	N	C	Ph-3,5-Me_2	SMe
C	S	C	N	C	Ph-3,5-Me_2	Cl
C	S	C	N	C	Ph-3,5-Me_2	CF_3
C	S	C	N	C	Ph-3,5-Me_2	Ph
C	S	C	N	C	Ph-2,6-Me_2	H
C	S	C	N	C	Ph-2,6-Me_2	Me
C	S	C	N	C	Ph-2,6-Me_2	Et
C	S	C	N	C	Ph-2,6-Me_2	n-Hex
C	S	C	N	C	Ph-2,6-Me_2	c-Pr
C	S	C	N	C	Ph-2,6-Me_2	c-Hex
C	S	C	N	C	Ph-2,6-Me_2	OH
C	S	C	N	C	Ph-2,6-Me_2	CH_2OH
C	S	C	N	C	Ph-2,6-Me_2	OMe
C	S	C	N	C	Ph-2,6-Me_2	SMe
C	S	C	N	C	Ph-2,6-Me_2	Cl
C	S	C	N	C	Ph-2,6-Me_2	CF_3
C	S	C	N	C	Ph-2,6-Me_2	Ph
C	S	C	N	C	Ph-2-Cl	H
C	S	C	N	C	Ph-2-Cl	Me
C	S	C	N	C	Ph-2-Cl	Et
C	S	C	N	C	Ph-2-Cl	n-Hex
C	S	C	N	C	Ph-2-Cl	c-Pr

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	S	C	N	C	Ph-2-Cl	c-Hex
C	S	C	N	C	Ph-2-Cl	OH
C	S	C	N	C	Ph-2-Cl	CH_2OH
C	S	C	N	C	Ph-2-Cl	OMe
C	S	C	N	C	Ph-2-Cl	SMe
C	S	C	N	C	Ph-2-Cl	Cl
C	S	C	N	C	Ph-2-Cl	CF_3
C	S	C	N	C	Ph-2-Cl	Ph
C	S	C	N	C	Ph-3-Cl	H
C	S	C	N	C	Ph-3-Cl	Me
C	S	C	N	C	Ph-3-Cl	Et
C	S	C	N	C	Ph-3-Cl	n-Hex
C	S	C	N	C	Ph-3-Cl	c-Pr
C	S	C	N	C	Ph-3-Cl	c-Hex
C	S	C	N	C	Ph-3-Cl	OH
C	S	C	N	C	Ph-3-Cl	CH_2OH
C	S	C	N	C	Ph-3-Cl	OMe
C	S	C	N	C	Ph-3-Cl	SMe
C	S	C	N	C	Ph-3-Cl	Cl
C	S	C	N	C	Ph-3-Cl	CF_3
C	S	C	N	C	Ph-3-Cl	Ph
C	S	C	N	C	Ph-4-Cl	H
C	S	C	N	C	Ph-4-Cl	Me
C	S	C	N	C	Ph-4-Cl	Et
C	S	C	N	C	Ph-4-Cl	n-Hex
C	S	C	N	C	Ph-4-Cl	c-Pr
C	S	C	N	C	Ph-4-Cl	c-Hex
C	S	C	N	C	Ph-4-Cl	OH
C	S	C	N	C	Ph-4-Cl	CH_2OH
C	S	C	N	C	Ph-4-Cl	OMe
C	S	C	N	C	Ph-4-Cl	SMe
C	S	C	N	C	Ph-4-Cl	Cl
C	S	C	N	C	Ph-4-Cl	CF_3
C	S	C	N	C	Ph-4-Cl	Ph
C	S	C	N	C	Ph-3,4-Cl_2	H
C	S	C	N	C	Ph-3,4-Cl_2	Me
C	S	C	N	C	Ph-3,4-Cl_2	Et
C	S	C	N	C	Ph-3,4-Cl_2	n-Hex
C	S	C	N	C	Ph-3,4-Cl_2	c-Pr
C	S	C	N	C	Ph-3,4-Cl_2	c-Hex
C	S	C	N	C	Ph-3,4-Cl_2	OH
C	S	C	N	C	Ph-3,4-Cl_2	CH_2OH
C	S	C	N	C	Ph-3,4-Cl_2	OMe
C	S	C	N	C	Ph-3,4-Cl_2	SMe

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	S	C	N	C	Ph-3,4-Cl_2	Cl
C	S	C	N	C	Ph-3,4-Cl_2	CF_3
C	S	C	N	C	Ph-3,4-Cl_2	Ph
C	S	C	N	C	Ph-4-F	H
C	S	C	N	C	Ph-4-F	Me
C	S	C	N	C	Ph-4-F	Et
C	S	C	N	C	Ph-4-F	n-Hex
C	S	C	N	C	Ph-4-F	c-Pr
C	S	C	N	C	Ph-4-F	c-Hex
C	S	C	N	C	Ph-4-F	OH
C	S	C	N	C	Ph-4-F	CH_2OH
C	S	C	N	C	Ph-4-F	OMe
C	S	C	N	C	Ph-4-F	SMe
C	S	C	N	C	Ph-4-F	Cl
C	S	C	N	C	Ph-4-F	CF_3
C	S	C	N	C	Ph-4-F	Ph
C	S	C	N	C	Ph-4-Br	H
C	S	C	N	C	Ph-4-Br	Me
C	S	C	N	C	Ph-4-Br	Et
C	S	C	N	C	Ph-4-Br	n-Hex
C	S	C	N	C	Ph-4-Br	c-Pr
C	S	C	N	C	Ph-4-Br	c-Hex
C	S	C	N	C	Ph-4-Br	OH
C	S	C	N	C	Ph-4-Br	CH_2OH
C	S	C	N	C	Ph-4-Br	OMe
C	S	C	N	C	Ph-4-Br	SMe
C	S	C	N	C	Ph-4-Br	Cl
C	S	C	N	C	Ph-4-Br	CF_3
C	S	C	N	C	Ph-4-Br	Ph
C	S	C	N	C	Ph-2-OMe	H
C	S	C	N	C	Ph-2-OMe	Me
C	S	C	N	C	Ph-2-OMe	Et
C	S	C	N	C	Ph-2-OMe	n-Hex
C	S	C	N	C	Ph-2-OMe	c-Pr
C	S	C	N	C	Ph-2-OMe	c-Hex
C	S	C	N	C	Ph-2-OMe	OH
C	S	C	N	C	Ph-2-OMe	CH_2OH
C	S	C	N	C	Ph-2-OMe	OMe
C	S	C	N	C	Ph-2-OMe	SMe
C	S	C	N	C	Ph-2-OMe	Cl
C	S	C	N	C	Ph-2-OMe	CF_3
C	S	C	N	C	Ph-2-OMe	Ph
C	S	C	N	C	Ph-3-OMe	H
C	S	C	N	C	Ph-3-OMe	Me

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	S	C	N	C	Ph-3-OMe	Et
C	S	C	N	C	Ph-3-OMe	n-Hex
C	S	C	N	C	Ph-3-OMe	c-Pr
C	S	C	N	C	Ph-3-OMe	c-Hex
C	S	C	N	C	Ph-3-OMe	OH
C	S	C	N	C	Ph-3-OMe	CH_2OH
C	S	C	N	C	Ph-3-OMe	OMe
C	S	C	N	C	Ph-3-OMe	SMe
C	S	C	N	C	Ph-3-OMe	Cl
C	S	C	N	C	Ph-3-OMe	CF_3
C	S	C	N	C	Ph-3-OMe	Ph
C	S	C	N	C	Ph-4-OMe	H
C	S	C	N	C	Ph-4-OMe	Me
C	S	C	N	C	Ph-4-OMe	Et
C	S	C	N	C	Ph-4-OMe	n-Hex
C	S	C	N	C	Ph-4-OMe	c-Pr
C	S	C	N	C	Ph-4-OMe	c-Hex
C	S	C	N	C	Ph-4-OMe	OH
C	S	C	N	C	Ph-4-OMe	CH_2OH
C	S	C	N	C	Ph-4-OMe	OMe
C	S	C	N	C	Ph-4-OMe	SMe
C	S	C	N	C	Ph-4-OMe	Cl
C	S	C	N	C	Ph-4-OMe	CF_3
C	S	C	N	C	Ph-4-OMe	Ph
C	S	C	N	C	Ph-3,4-$(OMe)_2$	H
C	S	C	N	C	Ph-3,4-$(OMe)_2$	Me
C	S	C	N	C	Ph-3,4-$(OMe)_2$	Et
C	S	C	N	C	Ph-3,4-$(OMe)_2$	n-Hex
C	S	C	N	C	Ph-3,4-$(OMe)_2$	c-Pr
C	S	C	N	C	Ph-3,4-$(OMe)_2$	c-Hex
C	S	C	N	C	Ph-3,4-$(OMe)_2$	OH
C	S	C	N	C	Ph-3,4-$(OMe)_2$	CH_2OH
C	S	C	N	C	Ph-3,4-$(OMe)_2$	OMe
C	S	C	N	C	Ph-3,4-$(OMe)_2$	SMe
C	S	C	N	C	Ph-3,4-$(OMe)_2$	Cl
C	S	C	N	C	Ph-3,4-$(OMe)_2$	CF_3
C	S	C	N	C	Ph-3,4-$(OMe)_2$	Ph
C	S	C	N	C	Ph-2-OH	H
C	S	C	N	C	Ph-2-OH	Me
C	S	C	N	C	Ph-2-OH	Et
C	S	C	N	C	Ph-2-OH	n-Hex
C	S	C	N	C	Ph-2-OH	c-Pr
C	S	C	N	C	Ph-2-OH	c-Hex
C	S	C	N	C	Ph-2-OH	OH

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	S	C	N	C	Ph-2-OH	CH_2OH
C	S	C	N	C	Ph-2-OH	OMe
C	S	C	N	C	Ph-2-OH	SMe
C	S	C	N	C	Ph-2-OH	Cl
C	S	C	N	C	Ph-2-OH	CF_3
C	S	C	N	C	Ph-2-OH	Ph
C	S	C	N	C	Ph-3-OH	H
C	S	C	N	C	Ph-3-OH	Me
C	S	C	N	C	Ph-3-OH	Et
C	S	C	N	C	Ph-3-OH	n-Hex
C	S	C	N	C	Ph-3-OH	c-Pr
C	S	C	N	C	Ph-3-OH	c-Hex
C	S	C	N	C	Ph-3-OH	OH
C	S	C	N	C	Ph-3-OH	CH_2OH
C	S	C	N	C	Ph-3-OH	OMe
C	S	C	N	C	Ph-3-OH	SMe
C	S	C	N	C	Ph-3-OH	Cl
C	S	C	N	C	Ph-3-OH	CF_3
C	S	C	N	C	Ph-3-OH	Ph
C	S	C	N	C	Ph-4-OH	H
C	S	C	N	C	Ph-4-OH	Me
C	S	C	N	C	Ph-4-OH	Et
C	S	C	N	C	Ph-4-OH	n-Hex
C	S	C	N	C	Ph-4-OH	c-Pr
C	S	C	N	C	Ph-4-OH	c-Hex
C	S	C	N	C	Ph-4-OH	OH
C	S	C	N	C	Ph-4-OH	CH_2OH
C	S	C	N	C	Ph-4-OH	OMe
C	S	C	N	C	Ph-4-OH	SMe
C	S	C	N	C	Ph-4-OH	Cl
C	S	C	N	C	Ph-4-OH	CF_3
C	S	C	N	C	Ph-4-OH	Ph
C	S	C	N	C	Ph-3,4-$(OH)_2$	H
C	S	C	N	C	Ph-3,4-$(OH)_2$	Me
C	S	C	N	C	Ph-3,4-$(OH)_2$	Et
C	S	C	N	C	Ph-3,4-$(OH)_2$	n-Hex
C	S	C	N	C	Ph-3,4-$(OH)_2$	c-Pr
C	S	C	N	C	Ph-3,4-$(OH)_2$	c-Hex
C	S	C	N	C	Ph-3,4-$(OH)_2$	OH
C	S	C	N	C	Ph-3,4-$(OH)_2$	CH_2OH
C	S	C	N	C	Ph-3,4-$(OH)_2$	OMe
C	S	C	N	C	Ph-3,4-$(OH)_2$	SMe
C	S	C	N	C	Ph-3,4-$(OH)_2$	Cl
C	S	C	N	C	Ph-3,4-$(OH)_2$	CF_3

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	S	C	N	C	Ph-3,4-$(OH)_2$	Ph
C	S	C	N	C	Ph-3-SMe	H
C	S	C	N	C	Ph-3-SMe	Me
C	S	C	N	C	Ph-3-SMe	Et
C	S	C	N	C	Ph-3-SMe	n-Hex
C	S	C	N	C	Ph-3-SMe	c-Pr
C	S	C	N	C	Ph-3-SMe	c-Hex
C	S	C	N	C	Ph-3-SMe	OH
C	S	C	N	C	Ph-3-SMe	CH_2OH
C	S	C	N	C	Ph-3-SMe	OMe
C	S	C	N	C	Ph-3-SMe	SMe
C	S	C	N	C	Ph-3-SMe	Cl
C	S	C	N	C	Ph-3-SMe	CF_3
C	S	C	N	C	Ph-3-SMe	Ph
C	S	C	N	C	Ph-3-CF_3	H
C	S	C	N	C	Ph-3-CF_3	Me
C	S	C	N	C	Ph-3-CF_3	Et
C	S	C	N	C	Ph-3-CF_3	n-Hex
C	S	C	N	C	Ph-3-CF_3	c-Pr
C	S	C	N	C	Ph-3-CF_3	c-Hex
C	S	C	N	C	Ph-3-CF_3	OH
C	S	C	N	C	Ph-3-CF_3	CH_2OH
C	S	C	N	C	Ph-3-CF_3	OMe
C	S	C	N	C	Ph-3-CF_3	SMe
C	S	C	N	C	Ph-3-CF_3	Cl
C	S	C	N	C	Ph-3-CF_3	CF_3
C	S	C	N	C	Ph-3-CF_3	Ph
C	S	C	N	C	Ph-3-NO_2	H
C	S	C	N	C	Ph-3-NO_2	Me
C	S	C	N	C	Ph-3-NO_2	Et
C	S	C	N	C	Ph-3-NO_2	n-Hex
C	S	C	N	C	Ph-3-NO_2	c-Pr
C	S	C	N	C	Ph-3-NO_2	c-Hex
C	S	C	N	C	Ph-3-NO_2	OH
C	S	C	N	C	Ph-3-NO_2	CH_2OH
C	S	C	N	C	Ph-3-NO_2	OMe
C	S	C	N	C	Ph-3-NO_2	SMe
C	S	C	N	C	Ph-3-NO_2	Cl
C	S	C	N	C	Ph-3-NO_2	CF_3
C	S	C	N	C	Ph-3-NO_2	Ph
C	S	C	N	C	Ph-4-NMe_2	H
C	S	C	N	C	Ph-4-NMe_2	Me
C	S	C	N	C	Ph-4-NMe_2	Et
C	S	C	N	C	Ph-4-NMe_2	n-Hex

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	S	C	N	C	Ph-4-NMe_2	c-Pr
C	S	C	N	C	Ph-4-NMe_2	c-Hex
C	S	C	N	C	Ph-4-NMe_2	OH
C	S	C	N	C	Ph-4-NMe_2	CH_2OH
C	S	C	N	C	Ph-4-NMe_2	OMe
C	S	C	N	C	Ph-4-NMe_2	SMe
C	S	C	N	C	Ph-4-NMe_2	Cl
C	S	C	N	C	Ph-4-NMe_2	CF_3
C	S	C	N	C	Ph-4-NMe_2	Ph
C	N	N	N	C	Ph	H
C	N	N	N	C	Ph	Me
C	N	N	N	C	Ph	Et
C	N	N	N	C	Ph	n-Hex
C	N	N	N	C	Ph	c-Pr
C	N	N	N	C	Ph	c-Hex
C	N	N	N	C	Ph	OH
C	N	N	N	C	Ph	CH_2OH
C	N	N	N	C	Ph	OMe
C	N	N	N	C	Ph	SMe
C	N	N	N	C	Ph	Cl
C	N	N	N	C	Ph	CF_3
C	N	N	N	C	Ph	Ph
C	N	N	N	C	H	H
C	N	N	N	C	H	Me
C	N	N	N	C	H	Et
C	N	N	N	C	H	n-Hex
C	N	N	N	C	H	c-Pr
C	N	N	N	C	H	c-Hex
C	N	N	N	C	H	OH
C	N	N	N	C	H	CH_2OH
C	N	N	N	C	H	OMe
C	N	N	N	C	H	SMe
C	N	N	N	C	H	Cl
C	N	N	N	C	H	CF_3
C	N	N	N	C	H	Ph
C	N	N	N	C	Me	H
C	N	N	N	C	Me	Me
C	N	N	N	C	Me	Et
C	N	N	N	C	Me	n-Hex
C	N	N	N	C	Me	c-Pr
C	N	N	N	C	Me	c-Hex
C	N	N	N	C	Me	OH
C	N	N	N	C	Me	CH_2OH
C	N	N	N	C	Me	OMe

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	N	N	N	C	Me	SMe
C	N	N	N	C	Me	Cl
C	N	N	N	C	Me	CF_3
C	N	N	N	C	Me	Ph
C	N	N	N	C	Et	H
C	N	N	N	C	Et	Me
C	N	N	N	C	Et	Et
C	N	N	N	C	Et	n-Hex
C	N	N	N	C	Et	c-Pr
C	N	N	N	C	Et	c-Hex
C	N	N	N	C	Et	OH
C	N	N	N	C	Et	CH_2OH
C	N	N	N	C	Et	OMe
C	N	N	N	C	Et	SMe
C	N	N	N	C	Et	Cl
C	N	N	N	C	Et	CF_3
C	N	N	N	C	Et	Ph
C	N	N	N	C	n-Pr	H
C	N	N	N	C	n-Pr	Me
C	N	N	N	C	n-Pr	Et
C	N	N	N	C	n-Pr	n-Hex
C	N	N	N	C	n-Pr	c-Pr
C	N	N	N	C	n-Pr	c-Hex
C	N	N	N	C	n-Pr	OH
C	N	N	N	C	n-Pr	CH_2OH
C	N	N	N	C	n-Pr	OMe
C	N	N	N	C	n-Pr	SMe
C	N	N	N	C	n-Pr	Cl
C	N	N	N	C	n-Pr	CF_3
C	N	N	N	C	n-Pr	Ph
C	N	N	N	C	n-Hex	H
C	N	N	N	C	n-Hex	Me
C	N	N	N	C	n-Hex	Et
C	N	N	N	C	n-Hex	n-Hex
C	N	N	N	C	n-Hex	c-Pr
C	N	N	N	C	n-Hex	c-Hex
C	N	N	N	C	n-Hex	OH
C	N	N	N	C	n-Hex	CH_2OH
C	N	N	N	C	n-Hex	OMe
C	N	N	N	C	n-Hex	SMe
C	N	N	N	C	n-Hex	Cl
C	N	N	N	C	n-Hex	CF_3
C	N	N	N	C	n-Hex	Ph
C	N	N	N	C	i-Pr	H

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	N	N	N	C	i-Pr	Me
C	N	N	N	C	i-Pr	Et
C	N	N	N	C	i-Pr	n-Hex
C	N	N	N	C	i-Pr	c-Pr
C	N	N	N	C	i-Pr	c-Hex
C	N	N	N	C	i-Pr	OH
C	N	N	N	C	i-Pr	CH_2OH
C	N	N	N	C	i-Pr	OMe
C	N	N	N	C	i-Pr	SMe
C	N	N	N	C	i-Pr	Cl
C	N	N	N	C	i-Pr	CF_3
C	N	N	N	C	i-Pr	Ph
C	N	N	N	C	t-Bu	H
C	N	N	N	C	t-Bu	Me
C	N	N	N	C	t-Bu	Et
C	N	N	N	C	t-Bu	n-Hex
C	N	N	N	C	t-Bu	c-Pr
C	N	N	N	C	t-Bu	c-Hex
C	N	N	N	C	t-Bu	OH
C	N	N	N	C	t-Bu	CH_2OH
C	N	N	N	C	t-Bu	OMe
C	N	N	N	C	t-Bu	SMe
C	N	N	N	C	t-Bu	Cl
C	N	N	N	C	t-Bu	CF_3
C	N	N	N	C	t-Bu	Ph
C	N	N	N	C	c-Hex	H
C	N	N	N	C	c-Hex	Me
C	N	N	N	C	c-Hex	Et
C	N	N	N	C	c-Hex	n-Hex
C	N	N	N	C	c-Hex	c-Pr
C	N	N	N	C	c-Hex	c-Hex
C	N	N	N	C	c-Hex	OH
C	N	N	N	C	c-Hex	CH_2OH
C	N	N	N	C	c-Hex	OMe
C	N	N	N	C	c-Hex	SMe
C	N	N	N	C	c-Hex	Cl
C	N	N	N	C	c-Hex	CF_3
C	N	N	N	C	c-Hex	Ph
C	N	N	N	C	3-c-己烯基	H
C	N	N	N	C	3-c-己烯基	Me
C	N	N	N	C	3-c-己烯基	Et
C	N	N	N	C	3-c-己烯基	n-Hex
C	N	N	N	C	3-c-己烯基	c-Pr
C	N	N	N	C	3-c-己烯基	c-Hex

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	N	N	N	C	3-c-己烯基	OH
C	N	N	N	C	3-c-己烯基	CH_2OH
C	N	N	N	C	3-c-己烯基	OMe
C	N	N	N	C	3-c-己烯基	SMe
C	N	N	N	C	3-c-己烯基	Cl
C	N	N	N	C	3-c-己烯基	CF_3
C	N	N	N	C	3-c-己烯基	Ph
C	N	N	N	C	CH_2OH	H
C	N	N	N	C	CH_2OH	Me
C	N	N	N	C	CH_2OH	Et
C	N	N	N	C	CH_2OH	n-Hex
C	N	N	N	C	CH_2OH	c-Pr
C	N	N	N	C	CH_2OH	c-Hex
C	N	N	N	C	CH_2OH	OH
C	N	N	N	C	CH_2OH	CH_2OH
C	N	N	N	C	CH_2OH	OMe
C	N	N	N	C	CH_2OH	SMe
C	N	N	N	C	CH_2OH	Cl
C	N	N	N	C	CH_2OH	CF_3
C	N	N	N	C	CH_2OH	Ph
C	N	N	N	C	CH_2Ph	H
C	N	N	N	C	CH_2Ph	Me
C	N	N	N	C	CH_2Ph	Et
C	N	N	N	C	CH_2Ph	n-Hex
C	N	N	N	C	CH_2Ph	c-Pr
C	N	N	N	C	CH_2Ph	c-Hex
C	N	N	N	C	CH_2Ph	OH
C	N	N	N	C	CH_2Ph	CH_2OH
C	N	N	N	C	CH_2Ph	OMe
C	N	N	N	C	CH_2Ph	SMe
C	N	N	N	C	CH_2Ph	Cl
C	N	N	N	C	CH_2Ph	CF_3
C	N	N	N	C	CH_2Ph	Ph
C	N	N	N	C	α-萘基	H
C	N	N	N	C	α-萘基	Me
C	N	N	N	C	α-萘基	Et
C	N	N	N	C	α-萘基	n-Hex
C	N	N	N	C	α-萘基	c-Pr
C	N	N	N	C	α-萘基	c-Hex
C	N	N	N	C	α-萘基	OH
C	N	N	N	C	α-萘基	CH_2OH
C	N	N	N	C	α-萘基	OMe
C	N	N	N	C	α-萘基	SMe
C	N	N	N	C	α-萘基	Cl

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	N	N	N	C	α-萘基	CF_3
C	N	N	N	C	α-萘基	Ph
C	N	N	N	C	β-萘基	H
C	N	N	N	C	β-萘基	Me
C	N	N	N	C	β-萘基	Et
C	N	N	N	C	β-萘基	n-Hex
C	N	N	N	C	β-萘基	c-Pr
C	N	N	N	C	β-萘基	c-Hex
C	N	N	N	C	β-萘基	OH
C	N	N	N	C	β-萘基	CH_2OH
C	N	N	N	C	β-萘基	OMe
C	N	N	N	C	β-萘基	SMe
C	N	N	N	C	β-萘基	Cl
C	N	N	N	C	β-萘基	CF_3
C	N	N	N	C	β-萘基	Ph
C	N	N	N	C	2-吡啶基	H
C	N	N	N	C	2-吡啶基	Me
C	N	N	N	C	2-吡啶基	Et
C	N	N	N	C	2-吡啶基	n-Hex
C	N	N	N	C	2-吡啶基	c-Pr
C	N	N	N	C	2-吡啶基	c-Hex
C	N	N	N	C	2-吡啶基	OH
C	N	N	N	C	2-吡啶基	CH_2OH
C	N	N	N	C	2-吡啶基	OMe
C	N	N	N	C	2-吡啶基	SMe
C	N	N	N	C	2-吡啶基	Cl
C	N	N	N	C	2-吡啶基	CF_3
C	N	N	N	C	2-吡啶基	Ph
C	N	N	N	C	3-吡啶基	H
C	N	N	N	C	3-吡啶基	Me
C	N	N	N	C	3-吡啶基	Et
C	N	N	N	C	3-吡啶基	n-Hex
C	N	N	N	C	3-吡啶基	c-Pr
C	N	N	N	C	3-吡啶基	c-Hex
C	N	N	N	C	3-吡啶基	OH
C	N	N	N	C	3-吡啶基	CH_2OH
C	N	N	N	C	3-吡啶基	OMe
C	N	N	N	C	3-吡啶基	SMe
C	N	N	N	C	3-吡啶基	Cl
C	N	N	N	C	3-吡啶基	CF_3
C	N	N	N	C	3-吡啶基	Ph
C	N	N	N	C	4-吡啶基	H
C	N	N	N	C	4-吡啶基	Me
C	N	N	N	C	4-吡啶基	Et

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	N	N	N	C	4-吡啶基	n-Hex
C	N	N	N	C	4-吡啶基	c-Pr
C	N	N	N	C	4-吡啶基	c-Hex
C	N	N	N	C	4-吡啶基	OH
C	N	N	N	C	4-吡啶基	CH_2OH
C	N	N	N	C	4-吡啶基	OMe
C	N	N	N	C	4-吡啶基	SMe
C	N	N	N	C	4-吡啶基	Cl
C	N	N	N	C	4-吡啶基	CF_3
C	N	N	N	C	4-吡啶基	Ph
C	N	N	N	C	2-呋喃基	H
C	N	N	N	C	2-呋喃基	Me
C	N	N	N	C	2-呋喃基	Et
C	N	N	N	C	2-呋喃基	n-Hex
C	N	N	N	C	2-呋喃基	c-Pr
C	N	N	N	C	2-呋喃基	c-Hex
C	N	N	N	C	2-呋喃基	OH
C	N	N	N	C	2-呋喃基	CH_2OH
C	N	N	N	C	2-呋喃基	OMe
C	N	N	N	C	2-呋喃基	SMe
C	N	N	N	C	2-呋喃基	Cl
C	N	N	N	C	2-呋喃基	CF_3
C	N	N	N	C	2-呋喃基	Ph
C	N	N	N	C	2-噻吩基	H
C	N	N	N	C	2-噻吩基	Me
C	N	N	N	C	2-噻吩基	Et
C	N	N	N	C	2-噻吩基	n-Hex
C	N	N	N	C	2-噻吩基	c-Pr
C	N	N	N	C	2-噻吩基	c-Hex
C	N	N	N	C	2-噻吩基	OH
C	N	N	N	C	2-噻吩基	CH_2OH
C	N	N	N	C	2-噻吩基	OMe
C	N	N	N	C	2-噻吩基	SMe
C	N	N	N	C	2-噻吩基	Cl
C	N	N	N	C	2-噻吩基	CF_3
C	N	N	N	C	2-噻吩基	Ph
C	N	N	N	C	2-甲苯基	H
C	N	N	N	C	2-甲苯基	Me
C	N	N	N	C	2-甲苯基	Et
C	N	N	N	C	2-甲苯基	n-Hex
C	N	N	N	C	2-甲苯基	c-Pr
C	N	N	N	C	2-甲苯基	c-Hex
C	N	N	N	C	2-甲苯基	OH
C	N	N	N	C	2-甲苯基	CH_2OH

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	N	N	N	C	2-甲苯基	OMe
C	N	N	N	C	2-甲苯基	SMe
C	N	N	N	C	2-甲苯基	Cl
C	N	N	N	C	2-甲苯基	CF_3
C	N	N	N	C	2-甲苯基	Ph
C	N	N	N	C	3-甲苯基	H
C	N	N	N	C	3-甲苯基	Me
C	N	N	N	C	3-甲苯基	Et
C	N	N	N	C	3-甲苯基	n-Hex
C	N	N	N	C	3-甲苯基	c-Pr
C	N	N	N	C	3-甲苯基	c-Hex
C	N	N	N	C	3-甲苯基	OH
C	N	N	N	C	3-甲苯基	CH_2OH
C	N	N	N	C	3-甲苯基	OMe
C	N	N	N	C	3-甲苯基	SMe
C	N	N	N	C	3-甲苯基	Cl
C	N	N	N	C	3-甲苯基	CF_3
C	N	N	N	C	3-甲苯基	Ph
C	N	N	N	C	4-甲苯基	H
C	N	N	N	C	4-甲苯基	Me
C	N	N	N	C	4-甲苯基	Et
C	N	N	N	C	4-甲苯基	n-Hex
C	N	N	N	C	4-甲苯基	c-Pr
C	N	N	N	C	4-甲苯基	c-Hex
C	N	N	N	C	4-甲苯基	OH
C	N	N	N	C	4-甲苯基	CH_2OH
C	N	N	N	C	4-甲苯基	OMe
C	N	N	N	C	4-甲苯基	SMe
C	N	N	N	C	4-甲苯基	Cl
C	N	N	N	C	4-甲苯基	CF_3
C	N	N	N	C	4-甲苯基	Ph
C	N	N	N	C	Ph-2,3-Me_2	H
C	N	N	N	C	Ph-2,3-Me_2	Me
C	N	N	N	C	Ph-2,3-Me_2	Et
C	N	N	N	C	Ph-2,3-Me_2	n-Hex
C	N	N	N	C	Ph-2,3-Me_2	c-Pr
C	N	N	N	C	Ph-2,3-Me_2	c-Hex
C	N	N	N	C	Ph-2,3-Me_2	OH
C	N	N	N	C	Ph-2,3-Me_2	CH_2OH
C	N	N	N	C	Ph-2,3-Me_2	OMe
C	N	N	N	C	Ph-2,3-Me_2	SMe
C	N	N	N	C	Ph-2,3-Me_2	Cl
C	N	N	N	C	Ph-2,3-Me_2	CF_3
C	N	N	N	C	Ph-2,3-Me_2	Ph

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	N	N	N	C	Ph-3,4-Me_2	H
C	N	N	N	C	Ph-3,4-Me_2	Me
C	N	N	N	C	Ph-3,4-Me_2	Et
C	N	N	N	C	Ph-3,4-Me_2	n-Hex
C	N	N	N	C	Ph-3,4-Me_2	c-Pr
C	N	N	N	C	Ph-3,4-Me_2	c-Hex
C	N	N	N	C	Ph-3,4-Me_2	OH
C	N	N	N	C	Ph-3,4-Me_2	CH_2OH
C	N	N	N	C	Ph-3,4-Me_2	OMe
C	N	N	N	C	Ph-3,4-Me_2	SMe
C	N	N	N	C	Ph-3,4-Me_2	Cl
C	N	N	N	C	Ph-3,4-Me_2	CF_3
C	N	N	N	C	Ph-3,4-Me_2	Ph
C	N	N	N	C	Ph-3,5-Me_2	H
C	N	N	N	C	Ph-3,5-Me_2	Me
C	N	N	N	C	Ph-3,5-Me_2	Et
C	N	N	N	C	Ph-3,5-Me_2	n-Hex
C	N	N	N	C	Ph-3,5-Me_2	c-Pr
C	N	N	N	C	Ph-3,5-Me_2	c-Hex
C	N	N	N	C	Ph-3,5-Me_2	OH
C	N	N	N	C	Ph-3,5-Me_2	CH_2OH
C	N	N	N	C	Ph-3,5-Me_2	OMe
C	N	N	N	C	Ph-3,5-Me_2	SMe
C	N	N	N	C	Ph-3,5-Me_2	Cl
C	N	N	N	C	Ph-3,5-Me_2	CF_3
C	N	N	N	C	Ph-3,5-Me_2	Ph
C	N	N	N	C	Ph-2,6-Me_2	H
C	N	N	N	C	Ph-2,6-Me_2	Me
C	N	N	N	C	Ph-2,6-Me_2	Et
C	N	N	N	C	Ph-2,6-Me_2	n-Hex
C	N	N	N	C	Ph-2,6-Me_2	c-Pr
C	N	N	N	C	Ph-2,6-Me_2	c-Hex
C	N	N	N	C	Ph-2,6-Me_2	OH
C	N	N	N	C	Ph-2,6-Me_2	CH_2OH
C	N	N	N	C	Ph-2,6-Me_2	OMe
C	N	N	N	C	Ph-2,6-Me_2	SMe
C	N	N	N	C	Ph-2,6-Me_2	Cl
C	N	N	N	C	Ph-2,6-Me_2	CF_3
C	N	N	N	C	Ph-2,6-Me_2	Ph
C	N	N	N	C	Ph-2-Cl	H
C	N	N	N	C	Ph-2-Cl	Me
C	N	N	N	C	Ph-2-Cl	Et
C	N	N	N	C	Ph-2-Cl	n-Hex
C	N	N	N	C	Ph-2-Cl	c-Pr

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	N	N	N	C	Ph-2-Cl	c-Hex
C	N	N	N	C	Ph-2-Cl	OH
C	N	N	N	C	Ph-2-Cl	CH_2OH
C	N	N	N	C	Ph-2-Cl	OMe
C	N	N	N	C	Ph-2-Cl	SMe
C	N	N	N	C	Ph-2-Cl	Cl
C	N	N	N	C	Ph-2-Cl	CF_3
C	N	N	N	C	Ph-2-Cl	Ph
C	N	N	N	C	Ph-3-Cl	H
C	N	N	N	C	Ph-3-Cl	Me
C	N	N	N	C	Ph-3-Cl	Et
C	N	N	N	C	Ph-3-Cl	n-Hex
C	N	N	N	C	Ph-3-Cl	c-Pr
C	N	N	N	C	Ph-3-Cl	c-Hex
C	N	N	N	C	Ph-3-Cl	OH
C	N	N	N	C	Ph-3-Cl	CH_2OH
C	N	N	N	C	Ph-3-Cl	OMe
C	N	N	N	C	Ph-3-Cl	SMe
C	N	N	N	C	Ph-3-Cl	Cl
C	N	N	N	C	Ph-3-Cl	CF_3
C	N	N	N	C	Ph-3-Cl	Ph
C	N	N	N	C	Ph-4-Cl	H
C	N	N	N	C	Ph-4-Cl	Me
C	N	N	N	C	Ph-4-Cl	Et
C	N	N	N	C	Ph-4-Cl	n-Hex
C	N	N	N	C	Ph-4-Cl	c-Pr
C	N	N	N	C	Ph-4-Cl	c-Hex
C	N	N	N	C	Ph-4-Cl	OH
C	N	N	N	C	Ph-4-Cl	CH_2OH
C	N	N	N	C	Ph-4-Cl	OMe
C	N	N	N	C	Ph-4-Cl	SMe
C	N	N	N	C	Ph-4-Cl	Cl
C	N	N	N	C	Ph-4-Cl	CF_3
C	N	N	N	C	Ph-4-Cl	Ph
C	N	N	N	C	Ph-3,4-Cl_2	H
C	N	N	N	C	Ph-3,4-Cl_2	Me
C	N	N	N	C	Ph-3,4-Cl_2	Et
C	N	N	N	C	Ph-3,4-Cl_2	n-Hex
C	N	N	N	C	Ph-3,4-Cl_2	c-Pr
C	N	N	N	C	Ph-3,4-Cl_2	c-Hex
C	N	N	N	C	Ph-3,4-Cl_2	OH
C	N	N	N	C	Ph-3,4-Cl_2	CH_2OH
C	N	N	N	C	Ph-3,4-Cl_2	OMe
C	N	N	N	C	Ph-3,4-Cl_2	SMe

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	N	N	N	C	Ph-3,4-Cl_2	Cl
C	N	N	N	C	Ph-3,4-Cl_2	CF_3
C	N	N	N	C	Ph-3,4-Cl_2	Ph
C	N	N	N	C	Ph-4-F	H
C	N	N	N	C	Ph-4-F	Me
C	N	N	N	C	Ph-4-F	Et
C	N	N	N	C	Ph-4-F	n-Hex
C	N	N	N	C	Ph-4-F	c-Pr
C	N	N	N	C	Ph-4-F	c-Hex
C	N	N	N	C	Ph-4-F	OH
C	N	N	N	C	Ph-4-F	CH_2OH
C	N	N	N	C	Ph-4-F	OMe
C	N	N	N	C	Ph-4-F	SMe
C	N	N	N	C	Ph-4-F	Cl
C	N	N	N	C	Ph-4-F	CF_3
C	N	N	N	C	Ph-4-F	Ph
C	N	N	N	C	Ph-4-Br	H
C	N	N	N	C	Ph-4-Br	Me
C	N	N	N	C	Ph-4-Br	Et
C	N	N	N	C	Ph-4-Br	n-Hex
C	N	N	N	C	Ph-4-Br	c-Pr
C	N	N	N	C	Ph-4-Br	c-Hex
C	N	N	N	C	Ph-4-Br	OH
C	N	N	N	C	Ph-4-Br	CH_2OH
C	N	N	N	C	Ph-4-Br	OMe
C	N	N	N	C	Ph-4-Br	SMe
C	N	N	N	C	Ph-4-Br	Cl
C	N	N	N	C	Ph-4-Br	CF_3
C	N	N	N	C	Ph-4-Br	Ph
C	N	N	N	C	Ph-2-OMe	H
C	N	N	N	C	Ph-2-OMe	Me
C	N	N	N	C	Ph-2-OMe	Et
C	N	N	N	C	Ph-2-OMe	n-Hex
C	N	N	N	C	Ph-2-OMe	c-Pr
C	N	N	N	C	Ph-2-OMe	c-Hex
C	N	N	N	C	Ph-2-OMe	OH
C	N	N	N	C	Ph-2-OMe	CH_2OH
C	N	N	N	C	Ph-2-OMe	OMe
C	N	N	N	C	Ph-2-OMe	SMe
C	N	N	N	C	Ph-2-OMe	Cl
C	N	N	N	C	Ph-2-OMe	CF_3
C	N	N	N	C	Ph-2-OMe	Ph
C	N	N	N	C	Ph-3-OMe	H
C	N	N	N	C	Ph-3-OMe	Me

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	N	N	N	C	Ph-3-OMe	Et
C	N	N	N	C	Ph-3-OMe	n-Hex
C	N	N	N	C	Ph-3-OMe	c-Pr
C	N	N	N	C	Ph-3-OMe	c-Hex
C	N	N	N	C	Ph-3-OMe	OH
C	N	N	N	C	Ph-3-OMe	CH_2OH
C	N	N	N	C	Ph-3-OMe	OMe
C	N	N	N	C	Ph-3-OMe	SMe
C	N	N	N	C	Ph-3-OMe	Cl
C	N	N	N	C	Ph-3-OMe	CF_3
C	N	N	N	C	Ph-3-OMe	Ph
C	N	N	N	C	Ph-4-OMe	H
C	N	N	N	C	Ph-4-OMe	Me
C	N	N	N	C	Ph-4-OMe	Et
C	N	N	N	C	Ph-4-OMe	n-Hex
C	N	N	N	C	Ph-4-OMe	c-Pr
C	N	N	N	C	Ph-4-OMe	c-Hex
C	N	N	N	C	Ph-4-OMe	OH
C	N	N	N	C	Ph-4-OMe	CH_2OH
C	N	N	N	C	Ph-4-OMe	OMe
C	N	N	N	C	Ph-4-OMe	SMe
C	N	N	N	C	Ph-4-OMe	Cl
C	N	N	N	C	Ph-4-OMe	CF_3
C	N	N	N	C	Ph-4-OMe	Ph
C	N	N	N	C	Ph-3,4-$(OMe)_2$	H
C	N	N	N	C	Ph-3,4-$(OMe)_2$	Me
C	N	N	N	C	Ph-3,4-$(OMe)_2$	Et
C	N	N	N	C	Ph-3,4-$(OMe)_2$	n-Hex
C	N	N	N	C	Ph-3,4-$(OMe)_2$	c-Pr
C	N	N	N	C	Ph-3,4-$(OMe)_2$	c-Hex
C	N	N	N	C	Ph-3,4-$(OMe)_2$	OH
C	N	N	N	C	Ph-3,4-$(OMe)_2$	CH_2OH
C	N	N	N	C	Ph-3,4-$(OMe)_2$	OMe
C	N	N	N	C	Ph-3,4-$(OMe)_2$	SMe
C	N	N	N	C	Ph-3,4-$(OMe)_2$	Cl
C	N	N	N	C	Ph-3,4-$(OMe)_2$	CF_3
C	N	N	N	C	Ph-3,4-$(OMe)_2$	Ph
C	N	N	N	C	Ph-2-OH	H
C	N	N	N	C	Ph-2-OH	Me
C	N	N	N	C	Ph-2-OH	Et
C	N	N	N	C	Ph-2-OH	n-Hex
C	N	N	N	C	Ph-2-OH	c-Pr
C	N	N	N	C	Ph-2-OH	c-Hex
C	N	N	N	C	Ph-2-OH	OH

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	N	N	N	C	Ph-2-OH	CH_2OH
C	N	N	N	C	Ph-2-OH	OMe
C	N	N	N	C	Ph-2-OH	SMe
C	N	N	N	C	Ph-2-OH	Cl
C	N	N	N	C	Ph-2-OH	CF_3
C	N	N	N	C	Ph-2-OH	Ph
C	N	N	N	C	Ph-3-OH	H
C	N	N	N	C	Ph-3-OH	Me
C	N	N	N	C	Ph-3-OH	Et
C	N	N	N	C	Ph-3-OH	n-Hex
C	N	N	N	C	Ph-3-OH	c-Pr
C	N	N	N	C	Ph-3-OH	c-Hex
C	N	N	N	C	Ph-3-OH	OH
C	N	N	N	C	Ph-3-OH	CH_2OH
C	N	N	N	C	Ph-3-OH	OMe
C	N	N	N	C	Ph-3-OH	SMe
C	N	N	N	C	Ph-3-OH	Cl
C	N	N	N	C	Ph-3-OH	CF_3
C	N	N	N	C	Ph-3-OH	Ph
C	N	N	N	C	Ph-4-OH	H
C	N	N	N	C	Ph-4-OH	Me
C	N	N	N	C	Ph-4-OH	Et
C	N	N	N	C	Ph-4-OH	n-Hex
C	N	N	N	C	Ph-4-OH	c-Pr
C	N	N	N	C	Ph-4-OH	c-Hex
C	N	N	N	C	Ph-4-OH	OH
C	N	N	N	C	Ph-4-OH	CH_2OH
C	N	N	N	C	Ph-4-OH	OMe
C	N	N	N	C	Ph-4-OH	SMe
C	N	N	N	C	Ph-4-OH	Cl
C	N	N	N	C	Ph-4-OH	CF_3
C	N	N	N	C	Ph-4-OH	Ph
C	N	N	N	C	Ph-3,4-$(OH)_2$	H
C	N	N	N	C	Ph-3,4-$(OH)_2$	Me
C	N	N	N	C	Ph-3,4-$(OH)_2$	Et
C	N	N	N	C	Ph-3,4-$(OH)_2$	n-Hex
C	N	N	N	C	Ph-3,4-$(OH)_2$	c-Pr
C	N	N	N	C	Ph-3,4-$(OH)_2$	c-Hex
C	N	N	N	C	Ph-3,4-$(OH)_2$	OH
C	N	N	N	C	Ph-3,4-$(OH)_2$	CH_2OH
C	N	N	N	C	Ph-3,4-$(OH)_2$	OMe
C	N	N	N	C	Ph-3,4-$(OH)_2$	SMe
C	N	N	N	C	Ph-3,4-$(OH)_2$	Cl
C	N	N	N	C	Ph-3,4-$(OH)_2$	CF_3

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	N	N	N	C	Ph-3,4-$(OH)_2$	Ph
C	N	N	N	C	Ph-3-SMe	H
C	N	N	N	C	Ph-3-SMe	Me
C	N	N	N	C	Ph-3-SMe	Et
C	N	N	N	C	Ph-3-SMe	n-Hex
C	N	N	N	C	Ph-3-SMe	c-Pr
C	N	N	N	C	Ph-3-SMe	c-Hex
C	N	N	N	C	Ph-3-SMe	OH
C	N	N	N	C	Ph-3-SMe	CH_2OH
C	N	N	N	C	Ph-3-SMe	OMe
C	N	N	N	C	Ph-3-SMe	SMe
C	N	N	N	C	Ph-3-SMe	Cl
C	N	N	N	C	Ph-3-SMe	CF_3
C	N	N	N	C	Ph-3-SMe	Ph
C	N	N	N	C	Ph-3-CF_3	H
C	N	N	N	C	Ph-3-CF_3	Me
C	N	N	N	C	Ph-3-CF_3	Et
C	N	N	N	C	Ph-3-CF_3	n-Hex
C	N	N	N	C	Ph-3-CF_3	c-Pr
C	N	N	N	C	Ph-3-CF_3	c-Hex
C	N	N	N	C	Ph-3-CF_3	OH
C	N	N	N	C	Ph-3-CF_3	CH_2OH
C	N	N	N	C	Ph-3-CF_3	OMe
C	N	N	N	C	Ph-3-CF_3	SMe
C	N	N	N	C	Ph-3-CF_3	Cl
C	N	N	N	C	Ph-3-CF_3	CF_3
C	N	N	N	C	Ph-3-CF_3	Ph
C	N	N	N	C	Ph-3-NO_2	H
C	N	N	N	C	Ph-3-NO_2	Me
C	N	N	N	C	Ph-3-NO_2	Et
C	N	N	N	C	Ph-3-NO_2	n-Hex
C	N	N	N	C	Ph-3-NO_2	c-Pr
C	N	N	N	C	Ph-3-NO_2	c-Hex
C	N	N	N	C	Ph-3-NO_2	OH
C	N	N	N	C	Ph-3-NO_2	CH_2OH
C	N	N	N	C	Ph-3-NO_2	OMe
C	N	N	N	C	Ph-3-NO_2	SMe
C	N	N	N	C	Ph-3-NO_2	Cl
C	N	N	N	C	Ph-3-NO_2	CF_3
C	N	N	N	C	Ph-3-NO_2	Ph
C	N	N	N	C	Ph-4-NMe_2	H
C	N	N	N	C	Ph-4-NMe_2	Me
C	N	N	N	C	Ph-4-NMe_2	Et
C	N	N	N	C	Ph-4-NMe_2	n-Hex

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	N	N	N	C	Ph-4-NMe_2	c-Pr
C	N	N	N	C	Ph-4-NMe_2	c-Hex
C	N	N	N	C	Ph-4-NMe_2	OH
C	N	N	N	C	Ph-4-NMe_2	CH_2OH
C	N	N	N	C	Ph-4-NMe_2	OMe
C	N	N	N	C	Ph-4-NMe_2	SMe
C	N	N	N	C	Ph-4-NMe_2	Cl
C	N	N	N	C	Ph-4-NMe_2	CF_3
C	N	N	N	C	Ph-4-NMe_2	Ph
C	N	C	N	N	Ph	H
C	N	C	N	N	Ph	Me
C	N	C	N	N	Ph	Et
C	N	C	N	N	Ph	n-Hex
C	N	C	N	N	Ph	c-Pr
C	N	C	N	N	Ph	c-Hex
C	N	C	N	N	Ph	OH
C	N	C	N	N	Ph	CH_2OH
C	N	C	N	N	Ph	OMe
C	N	C	N	N	Ph	SMe
C	N	C	N	N	Ph	Cl
C	N	C	N	N	Ph	CF_3
C	N	C	N	N	Ph	Ph
C	N	C	N	N	H	H
C	N	C	N	N	H	Me
C	N	C	N	N	H	Et
C	N	C	N	N	H	n-Hex
C	N	C	N	N	H	c-Pr
C	N	C	N	N	H	c-Hex
C	N	C	N	N	H	OH
C	N	C	N	N	H	CH_2OH
C	N	C	N	N	H	OMe
C	N	C	N	N	H	SMe
C	N	C	N	N	H	Cl
C	N	C	N	N	H	CF_3
C	N	C	N	N	H	Ph
C	N	C	N	N	Me	H
C	N	C	N	N	Me	Me
C	N	C	N	N	Me	Et
C	N	C	N	N	Me	n-Hex
C	N	C	N	N	Me	c-Pr
C	N	C	N	N	Me	c-Hex
C	N	C	N	N	Me	OH
C	N	C	N	N	Me	CH_2OH
C	N	C	N	N	Me	OMe

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	N	C	N	N	Me	SMe
C	N	C	N	N	Me	Cl
C	N	C	N	N	Me	CF_3
C	N	C	N	N	Me	Ph
C	N	C	N	N	Et	H
C	N	C	N	N	Et	Me
C	N	C	N	N	Et	Et
C	N	C	N	N	Et	n-Hex
C	N	C	N	N	Et	c-Pr
C	N	C	N	N	Et	c-Hex
C	N	C	N	N	Et	OH
C	N	C	N	N	Et	CH_2OH
C	N	C	N	N	Et	OMe
C	N	C	N	N	Et	SMe
C	N	C	N	N	Et	Cl
C	N	C	N	N	Et	CF_3
C	N	C	N	N	Et	Ph
C	N	C	N	N	n-Pr	H
C	N	C	N	N	n-Pr	Me
C	N	C	N	N	n-Pr	Et
C	N	C	N	N	n-Pr	n-Hex
C	N	C	N	N	n-Pr	c-Pr
C	N	C	N	N	n-Pr	c-Hex
C	N	C	N	N	n-Pr	OH
C	N	C	N	N	n-Pr	CH_2OH
C	N	C	N	N	n-Pr	OMe
C	N	C	N	N	n-Pr	SMe
C	N	C	N	N	n-Pr	Cl
C	N	C	N	N	n-Pr	CF_3
C	N	C	N	N	n-Pr	Ph
C	N	C	N	N	n-Hex	H
C	N	C	N	N	n-Hex	Me
C	N	C	N	N	n-Hex	Et
C	N	C	N	N	n-Hex	n-Hex
C	N	C	N	N	n-Hex	c-Pr
C	N	C	N	N	n-Hex	c-Hex
C	N	C	N	N	n-Hex	OH
C	N	C	N	N	n-Hex	CH_2OH
C	N	C	N	N	n-Hex	OMe
C	N	C	N	N	n-Hex	SMe
C	N	C	N	N	n-Hex	Cl
C	N	C	N	N	n-Hex	CF_3
C	N	C	N	N	n-Hex	Ph
C	N	C	N	N	i-Pr	H

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	N	C	N	N	Me	SMe
C	N	C	N	N	Me	Cl
C	N	C	N	N	Me	CF_3
C	N	C	N	N	Me	Ph
C	N	C	N	N	Et	H
C	N	C	N	N	Et	Me
C	N	C	N	N	Et	Et
C	N	C	N	N	Et	n-Hex
C	N	C	N	N	Et	c-Pr
C	N	C	N	N	Et	c-Hex
C	N	C	N	N	Et	OH
C	N	C	N	N	Et	CH_2OH
C	N	C	N	N	Et	OMe
C	N	C	N	N	Et	SMe
C	N	C	N	N	Et	Cl
C	N	C	N	N	Et	CF_3
C	N	C	N	N	Et	Ph
C	N	C	N	N	n-Pr	H
C	N	C	N	N	n-Pr	Me
C	N	C	N	N	n-Pr	Et
C	N	C	N	N	n-Pr	n-Hex
C	N	C	N	N	n-Pr	c-Pr
C	N	C	N	N	n-Pr	c-Hex
C	N	C	N	N	n-Pr	OH
C	N	C	N	N	n-Pr	CH_2OH
C	N	C	N	N	n-Pr	OMe
C	N	C	N	N	n-Pr	SMe
C	N	C	N	N	n-Pr	Cl
C	N	C	N	N	n-Pr	CF_3
C	N	C	N	N	n-Pr	Ph
C	N	C	N	N	n-Hex	H
C	N	C	N	N	n-Hex	Me
C	N	C	N	N	n-Hex	Et
C	N	C	N	N	n-Hex	n-Hex
C	N	C	N	N	n-Hex	c-Pr
C	N	C	N	N	n-Hex	c-Hex
C	N	C	N	N	n-Hex	OH
C	N	C	N	N	n-Hex	CH_2OH
C	N	C	N	N	n-Hex	OMe
C	N	C	N	N	n-Hex	SMe
C	N	C	N	N	n-Hex	Cl
C	N	C	N	N	n-Hex	CF_3
C	N	C	N	N	n-Hex	Ph
C	N	C	N	N	i-Pr	H

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	N	C	N	N	i-Pr	Me
C	N	C	N	N	i-Pr	Et
C	N	C	N	N	i-Pr	n-Hex
C	N	C	N	N	i-Pr	c-Pr
C	N	C	N	N	i-Pr	c-Hex
C	N	C	N	N	i-Pr	OH
C	N	C	N	N	i-Pr	CH_2OH
C	N	C	N	N	i-Pr	OMe
C	N	C	N	N	i-Pr	SMe
C	N	C	N	N	i-Pr	Cl
C	N	C	N	N	i-Pr	CF_3
C	N	C	N	N	i-Pr	Ph
C	N	C	N	N	t-Bu	H
C	N	C	N	N	t-Bu	Me
C	N	C	N	N	t-Bu	Et
C	N	C	N	N	t-Bu	n-Hex
C	N	C	N	N	t-Bu	c-Pr
C	N	C	N	N	t-Bu	c-Hex
C	N	C	N	N	t-Bu	OH
C	N	C	N	N	t-Bu	CH_2OH
C	N	C	N	N	t-Bu	OMe
C	N	C	N	N	t-Bu	SMe
C	N	C	N	N	t-Bu	Cl
C	N	C	N	N	t-Bu	CF_3
C	N	C	N	N	t-Bu	Ph
C	N	C	N	N	c-Hex	H
C	N	C	N	N	c-Hex	Me
C	N	C	N	N	c-Hex	Et
C	N	C	N	N	c-Hex	n-Hex
C	N	C	N	N	c-Hex	c-Pr
C	N	C	N	N	c-Hex	c-Hex
C	N	C	N	N	c-Hex	OH
C	N	C	N	N	c-Hex	CH_2OH
C	N	C	N	N	c-Hex	OMe
C	N	C	N	N	c-Hex	SMe
C	N	C	N	N	c-Hex	Cl
C	N	C	N	N	c-Hex	CF_3
C	N	C	N	N	c-Hex	Ph
C	N	C	N	N	3-c-己烯基	H
C	N	C	N	N	3-c-己烯基	Me
C	N	C	N	N	3-c-己烯基	Et
C	N	C	N	N	3-c-己烯基	n-Hex
C	N	C	N	N	3-c-己烯基	c-Pr
C	N	C	N	N	3-c-己烯基	c-Hex

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	N	C	N	N	3-c-己烯基	OH
C	N	C	N	N	3-c-己烯基	CH_2OH
C	N	C	N	N	3-c-己烯基	OMe
C	N	C	N	N	3-c-己烯基	SMe
C	N	C	N	N	3-c-己烯基	Cl
C	N	C	N	N	3-c-己烯基	CF_3
C	N	C	N	N	3-c-己烯基	Ph
C	N	C	N	N	CH_2OH	H
C	N	C	N	N	CH_2OH	Me
C	N	C	N	N	CH_2OH	Et
C	N	C	N	N	CH_2OH	n-Hex
C	N	C	N	N	CH_2OH	c-Pr
C	N	C	N	N	CH_2OH	c-Hex
C	N	C	N	N	CH_2OH	OH
C	N	C	N	N	CH_2OH	CH_2OH
C	N	C	N	N	CH_2OH	OMe
C	N	C	N	N	CH_2OH	SMe
C	N	C	N	N	CH_2OH	Cl
C	N	C	N	N	CH_2OH	CF_3
C	N	C	N	N	CH_2OH	Ph
C	N	C	N	N	CH_2Ph	H
C	N	C	N	N	CH_2Ph	Me
C	N	C	N	N	CH_2Ph	Et
C	N	C	N	N	CH_2Ph	n-Hex
C	N	C	N	N	CH_2Ph	c-Pr
C	N	C	N	N	CH_2Ph	c-Hex
C	N	C	N	N	CH_2Ph	OH
C	N	C	N	N	CH_2Ph	CH_2OH
C	N	C	N	N	CH_2Ph	OMe
C	N	C	N	N	CH_2Ph	SMe
C	N	C	N	N	CH_2Ph	Cl
C	N	C	N	N	CH_2Ph	CF_3
C	N	C	N	N	CH_2Ph	Ph
C	N	C	N	N	α-萘基	H
C	N	C	N	N	α-萘基	Me
C	N	C	N	N	α-萘基	Et
C	N	C	N	N	α-萘基	n-Hex
C	N	C	N	N	α-萘基	c-Pr
C	N	C	N	N	α-萘基	c-Hex
C	N	C	N	N	α-萘基	OH
C	N	C	N	N	α-萘基	CH_2OH
C	N	C	N	N	α-萘基	OMe
C	N	C	N	N	α-萘基	SMe
C	N	C	N	N	α-萘基	Cl

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	N	C	N	N	α-萘基	CF_3
C	N	C	N	N	α-萘基	Ph
C	N	C	N	N	β-萘基	H
C	N	C	N	N	β-萘基	Me
C	N	C	N	N	β-萘基	Et
C	N	C	N	N	β-萘基	n-Hex
C	N	C	N	N	β-萘基	c-Pr
C	N	C	N	N	β-萘基	c-Hex
C	N	C	N	N	β-萘基	OH
C	N	C	N	N	β-萘基	CH_2OH
C	N	C	N	N	β-萘基	OMe
C	N	C	N	N	β-萘基	SMe
C	N	C	N	N	β-萘基	Cl
C	N	C	N	N	β-萘基	CF_3
C	N	C	N	N	β-萘基	Ph
C	N	C	N	N	2-吡啶基	H
C	N	C	N	N	2-吡啶基	Me
C	N	C	N	N	2-吡啶基	Et
C	N	C	N	N	2-吡啶基	n-Hex
C	N	C	N	N	2-吡啶基	c-Pr
C	N	C	N	N	2-吡啶基	c-Hex
C	N	C	N	N	2-吡啶基	OH
C	N	C	N	N	2-吡啶基	CH_2OH
C	N	C	N	N	2-吡啶基	OMe
C	N	C	N	N	2-吡啶基	SMe
C	N	C	N	N	2-吡啶基	Cl
C	N	C	N	N	2-吡啶基	CF_3
C	N	C	N	N	2-吡啶基	Ph
C	N	C	N	N	3-吡啶基	H
C	N	C	N	N	3-吡啶基	Me
C	N	C	N	N	3-吡啶基	Et
C	N	C	N	N	3-吡啶基	n-Hex
C	N	C	N	N	3-吡啶基	c-Pr
C	N	C	N	N	3-吡啶基	c-Hex
C	N	C	N	N	3-吡啶基	OH
C	N	C	N	N	3-吡啶基	CH_2OH
C	N	C	N	N	3-吡啶基	OMe
C	N	C	N	N	3-吡啶基	SMe
C	N	C	N	N	3-吡啶基	Cl
C	N	C	N	N	3-吡啶基	CF_3
C	N	C	N	N	3-吡啶基	Ph
C	N	C	N	N	4-吡啶基	H
C	N	C	N	N	4-吡啶基	Me
C	N	C	N	N	4-吡啶基	Et

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	N	C	N	N	4-吡啶基	n-Hex
C	N	C	N	N	4-吡啶基	c-Pr
C	N	C	N	N	4-吡啶基	c-Hex
C	N	C	N	N	4-吡啶基	OH
C	N	C	N	N	4-吡啶基	CH_2OH
C	N	C	N	N	4-吡啶基	OMe
C	N	C	N	N	4-吡啶基	SMe
C	N	C	N	N	4-吡啶基	Cl
C	N	C	N	N	4-吡啶基	CF_3
C	N	C	N	N	4-吡啶基	Ph
C	N	C	N	N	2-呋喃基	H
C	N	C	N	N	2-呋喃基	Me
C	N	C	N	N	2-呋喃基	Et
C	N	C	N	N	2-呋喃基	n-Hex
C	N	C	N	N	2-呋喃基	c-Pr
C	N	C	N	N	2-呋喃基	c-Hex
C	N	C	N	N	2-呋喃基	OH
C	N	C	N	N	2-呋喃基	CH_2OH
C	N	C	N	N	2-呋喃基	OMe
C	N	C	N	N	2-呋喃基	SMe
C	N	C	N	N	2-呋喃基	Cl
C	N	C	N	N	2-呋喃基	CF_3
C	N	C	N	N	2-呋喃基	Ph
C	N	C	N	N	2-噻吩基	H
C	N	C	N	N	2-噻吩基	Me
C	N	C	N	N	2-噻吩基	Et
C	N	C	N	N	2-噻吩基	n-Hex
C	N	C	N	N	2-噻吩基	c-Pr
C	N	C	N	N	2-噻吩基	c-Hex
C	N	C	N	N	2-噻吩基	OH
C	N	C	N	N	2-噻吩基	CH_2OH
C	N	C	N	N	2-噻吩基	OMe
C	N	C	N	N	2-噻吩基	SMe
C	N	C	N	N	2-噻吩基	Cl
C	N	C	N	N	2-噻吩基	CF_3
C	N	C	N	N	2-噻吩基	Ph
C	N	C	N	N	2-甲苯基	H
C	N	C	N	N	2-甲苯基	Me
C	N	C	N	N	2-甲苯基	Et
C	N	C	N	N	2-甲苯基	n-Hex
C	N	C	N	N	2-甲苯基	c-Pr
C	N	C	N	N	2-甲苯基	c-Hex
C	N	C	N	N	2-甲苯基	OH
C	N	C	N	N	2-甲苯基	CH_2OH

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	N	C	N	N	2-甲苯基	OMe
C	N	C	N	N	2-甲苯基	SMe
C	N	C	N	N	2-甲苯基	Cl
C	N	C	N	N	2-甲苯基	CF_3
C	N	C	N	N	2-甲苯基	Ph
C	N	C	N	N	3-甲苯基	H
C	N	C	N	N	3-甲苯基	Me
C	N	C	N	N	3-甲苯基	Et
C	N	C	N	N	3-甲苯基	n-Hex
C	N	C	N	N	3-甲苯基	c-Pr
C	N	C	N	N	3-甲苯基	c-Hex
C	N	C	N	N	3-甲苯基	OH
C	N	C	N	N	3-甲苯基	CH_2OH
C	N	C	N	N	3-甲苯基	OMe
C	N	C	N	N	3-甲苯基	SMe
C	N	C	N	N	3-甲苯基	Cl
C	N	C	N	N	3-甲苯基	CF_3
C	N	C	N	N	3-甲苯基	Ph
C	N	C	N	N	4-甲苯基	H
C	N	C	N	N	4-甲苯基	Me
C	N	C	N	N	4-甲苯基	Et
C	N	C	N	N	4-甲苯基	n-Hex
C	N	C	N	N	4-甲苯基	c-Pr
C	N	C	N	N	4-甲苯基	c-Hex
C	N	C	N	N	4-甲苯基	OH
C	N	C	N	N	4-甲苯基	CH_2OH
C	N	C	N	N	4-甲苯基	OMe
C	N	C	N	N	4-甲苯基	SMe
C	N	C	N	N	4-甲苯基	Cl
C	N	C	N	N	4-甲苯基	CF_3
C	N	C	N	N	4-甲苯基	Ph
C	N	C	N	N	Ph-2,3-Me_2	H
C	N	C	N	N	Ph-2,3-Me_2	Me
C	N	C	N	N	Ph-2,3-Me_2	Et
C	N	C	N	N	Ph-2,3-Me_2	n-Hex
C	N	C	N	N	Ph-2,3-Me_2	c-Pr
C	N	C	N	N	Ph-2,3-Me_2	c-Hex
C	N	C	N	N	Ph-2,3-Me_2	OH
C	N	C	N	N	Ph-2,3-Me_2	CH_2OH
C	N	C	N	N	Ph-2,3-Me_2	OMe
C	N	C	N	N	Ph-2,3-Me_2	SMe
C	N	C	N	N	Ph-2,3-Me_2	Cl
C	N	C	N	N	Ph-2,3-Me_2	CF_3
C	N	C	N	N	Ph-2,3-Me_2	Ph

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	N	C	N	N	Ph-3,4-Me_2	H
C	N	C	N	N	Ph-3,4-Me_2	Me
C	N	C	N	N	Ph-3,4-Me_2	Et
C	N	C	N	N	Ph-3,4-Me_2	n-Hex
C	N	C	N	N	Ph-3,4-Me_2	c-Pr
C	N	C	N	N	Ph-3,4-Me_2	c-Hex
C	N	C	N	N	Ph-3,4-Me_2	OH
C	N	C	N	N	Ph-3,4-Me_2	CH_2OH
C	N	C	N	N	Ph-3,4-Me_2	OMe
C	N	C	N	N	Ph-3,4-Me_2	SMe
C	N	C	N	N	Ph-3,4-Me_2	Cl
C	N	C	N	N	Ph-3,4-Me_2	CF_3
C	N	C	N	N	Ph-3,4-Me_2	Ph
C	N	C	N	N	Ph-3,5-Me_2	H
C	N	C	N	N	Ph-3,5-Me_2	Me
C	N	C	N	N	Ph-3,5-Me_2	Et
C	N	C	N	N	Ph-3,5-Me_2	n-Hex
C	N	C	N	N	Ph-3,5-Me_2	c-Pr
C	N	C	N	N	Ph-3,5-Me_2	c-Hex
C	N	C	N	N	Ph-3,5-Me_2	OH
C	N	C	N	N	Ph-3,5-Me_2	CH_2OH
C	N	C	N	N	Ph-3,5-Me_2	OMe
C	N	C	N	N	Ph-3,5-Me_2	SMe
C	N	C	N	N	Ph-3,5-Me_2	Cl
C	N	C	N	N	Ph-3,5-Me_2	CF_3
C	N	C	N	N	Ph-3,5-Me_2	Ph
C	N	C	N	N	Ph-2,6-Me_2	H
C	N	C	N	N	Ph-2,6-Me_2	Me
C	N	C	N	N	Ph-2,6-Me_2	Et
C	N	C	N	N	Ph-2,6-Me_2	n-Hex
C	N	C	N	N	Ph-2,6-Me_2	c-Pr
C	N	C	N	N	Ph-2,6-Me_2	c-Hex
C	N	C	N	N	Ph-2,6-Me_2	OH
C	N	C	N	N	Ph-2,6-Me_2	CH_2OH
C	N	C	N	N	Ph-2,6-Me_2	OMe
C	N	C	N	N	Ph-2,6-Me_2	SMe
C	N	C	N	N	Ph-2,6-Me_2	Cl
C	N	C	N	N	Ph-2,6-Me_2	CF_3
C	N	C	N	N	Ph-2,6-Me_2	Ph
C	N	C	N	N	Ph-2-Cl	H
C	N	C	N	N	Ph-2-Cl	Me
C	N	C	N	N	Ph-2-Cl	Et
C	N	C	N	N	Ph-2-Cl	n-Hex
C	N	C	N	N	Ph-2-Cl	c-Pr

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	N	C	N	N	Ph-2-Cl	c-Hex
C	N	C	N	N	Ph-2-Cl	OH
C	N	C	N	N	Ph-2-Cl	CH_2OH
C	N	C	N	N	Ph-2-Cl	OMe
C	N	C	N	N	Ph-2-Cl	SMe
C	N	C	N	N	Ph-2-Cl	Cl
C	N	C	N	N	Ph-2-Cl	CF_3
C	N	C	N	N	Ph-2-Cl	Ph
C	N	C	N	N	Ph-3-Cl	H
C	N	C	N	N	Ph-3-Cl	Me
C	N	C	N	N	Ph-3-Cl	Et
C	N	C	N	N	Ph-3-Cl	n-Hex
C	N	C	N	N	Ph-3-Cl	c-Pr
C	N	C	N	N	Ph-3-Cl	c-Hex
C	N	C	N	N	Ph-3-Cl	OH
C	N	C	N	N	Ph-3-Cl	CH_2OH
C	N	C	N	N	Ph-3-Cl	OMe
C	N	C	N	N	Ph-3-Cl	SMe
C	N	C	N	N	Ph-3-Cl	Cl
C	N	C	N	N	Ph-3-Cl	CF_3
C	N	C	N	N	Ph-3-Cl	Ph
C	N	C	N	N	Ph-4-Cl	H
C	N	C	N	N	Ph-4-Cl	Me
C	N	C	N	N	Ph-4-Cl	Et
C	N	C	N	N	Ph-4-Cl	n-Hex
C	N	C	N	N	Ph-4-Cl	c-Pr
C	N	C	N	N	Ph-4-Cl	c-Hex
C	N	C	N	N	Ph-4-Cl	OH
C	N	C	N	N	Ph-4-Cl	CH_2OH
C	N	C	N	N	Ph-4-Cl	OMe
C	N	C	N	N	Ph-4-Cl	SMe
C	N	C	N	N	Ph-4-Cl	Cl
C	N	C	N	N	Ph-4-Cl	CF_3
C	N	C	N	N	Ph-4-Cl	Ph
C	N	C	N	N	Ph-3,4-Cl_2	H
C	N	C	N	N	Ph-3,4-Cl_2	Me
C	N	C	N	N	Ph-3,4-Cl_2	Et
C	N	C	N	N	Ph-3,4-Cl_2	n-Hex
C	N	C	N	N	Ph-3,4-Cl_2	c-Pr
C	N	C	N	N	Ph-3,4-Cl_2	c-Hex
C	N	C	N	N	Ph-3,4-Cl_2	OH
C	N	C	N	N	Ph-3,4-Cl_2	CH_2OH
C	N	C	N	N	Ph-3,4-Cl_2	OMe
C	N	C	N	N	Ph-3,4-Cl_2	SMe

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	N	C	N	N	Ph-3,4-Cl_2	Cl
C	N	C	N	N	Ph-3,4-Cl_2	CF_3
C	N	C	N	N	Ph-3,4-Cl_2	Ph
C	N	C	N	N	Ph-4-F	H
C	N	C	N	N	Ph-4-F	Me
C	N	C	N	N	Ph-4-F	Et
C	N	C	N	N	Ph-4-F	n-Hex
C	N	C	N	N	Ph-4-F	c-Pr
C	N	C	N	N	Ph-4-F	c-Hex
C	N	C	N	N	Ph-4-F	OH
C	N	C	N	N	Ph-4-F	CH_2OH
C	N	C	N	N	Ph-4-F	OMe
C	N	C	N	N	Ph-4-F	SMe
C	N	C	N	N	Ph-4-F	Cl
C	N	C	N	N	Ph-4-F	CF_3
C	N	C	N	N	Ph-4-F	Ph
C	N	C	N	N	Ph-4-Br	H
C	N	C	N	N	Ph-4-Br	Me
C	N	C	N	N	Ph-4-Br	Et
C	N	C	N	N	Ph-4-Br	n-Hex
C	N	C	N	N	Ph-4-Br	c-Pr
C	N	C	N	N	Ph-4-Br	c-Hex
C	N	C	N	N	Ph-4-Br	OH
C	N	C	N	N	Ph-4-Br	CH_2OH
C	N	C	N	N	Ph-4-Br	OMe
C	N	C	N	N	Ph-4-Br	SMe
C	N	C	N	N	Ph-4-Br	Cl
C	N	C	N	N	Ph-4-Br	CF_3
C	N	C	N	N	Ph-4-Br	Ph
C	N	C	N	N	Ph-2-OMe	H
C	N	C	N	N	Ph-2-OMe	Me
C	N	C	N	N	Ph-2-OMe	Et
C	N	C	N	N	Ph-2-OMe	n-Hex
C	N	C	N	N	Ph-2-OMe	c-Pr
C	N	C	N	N	Ph-2-OMe	c-Hex
C	N	C	N	N	Ph-2-OMe	OH
C	N	C	N	N	Ph-2-OMe	CH_2OH
C	N	C	N	N	Ph-2-OMe	OMe
C	N	C	N	N	Ph-2-OMe	SMe
C	N	C	N	N	Ph-2-OMe	Cl
C	N	C	N	N	Ph-2-OMe	CF_3
C	N	C	N	N	Ph-2-OMe	Ph
C	N	C	N	N	Ph-3-OMe	H
C	N	C	N	N	Ph-3-OMe	Me

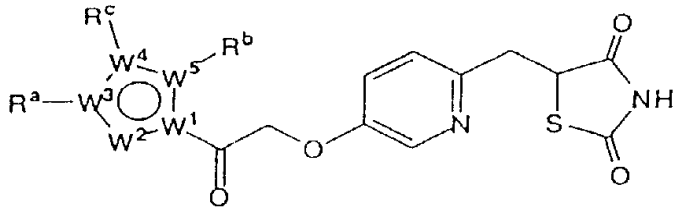
W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	N	C	N	N	Ph-3-OMe	Et
C	N	C	N	N	Ph-3-OMe	n-Hex
C	N	C	N	N	Ph-3-OMe	c-Pr
C	N	C	N	N	Ph-3-OMe	c-Hex
C	N	C	N	N	Ph-3-OMe	OH
C	N	C	N	N	Ph-3-OMe	CH_2OH
C	N	C	N	N	Ph-3-OMe	OMe
C	N	C	N	N	Ph-3-OMe	SMe
C	N	C	N	N	Ph-3-OMe	Cl
C	N	C	N	N	Ph-3-OMe	CF_3
C	N	C	N	N	Ph-3-OMe	Ph
C	N	C	N	N	Ph-4-OMe	H
C	N	C	N	N	Ph-4-OMe	Me
C	N	C	N	N	Ph-4-OMe	Et
C	N	C	N	N	Ph-4-OMe	n-Hex
C	N	C	N	N	Ph-4-OMe	c-Pr
C	N	C	N	N	Ph-4-OMe	c-Hex
C	N	C	N	N	Ph-4-OMe	OH
C	N	C	N	N	Ph-4-OMe	CH_2OH
C	N	C	N	N	Ph-4-OMe	OMe
C	N	C	N	N	Ph-4-OMe	SMe
C	N	C	N	N	Ph-4-OMe	Cl
C	N	C	N	N	Ph-4-OMe	CF_3
C	N	C	N	N	Ph-4-OMe	Ph
C	N	C	N	N	Ph-3,4-$(OMe)_2$	H
C	N	C	N	N	Ph-3,4-$(OMe)_2$	Me
C	N	C	N	N	Ph-3,4-$(OMe)_2$	Et
C	N	C	N	N	Ph-3,4-$(OMe)_2$	n-Hex
C	N	C	N	N	Ph-3,4-$(OMe)_2$	c-Pr
C	N	C	N	N	Ph-3,4-$(OMe)_2$	c-Hex
C	N	C	N	N	Ph-3,4-$(OMe)_2$	OH
C	N	C	N	N	Ph-3,4-$(OMe)_2$	CH_2OH
C	N	C	N	N	Ph-3,4-$(OMe)_2$	OMe
C	N	C	N	N	Ph-3,4-$(OMe)_2$	SMe
C	N	C	N	N	Ph-3,4-$(OMe)_2$	Cl
C	N	C	N	N	Ph-3,4-$(OMe)_2$	CF_3
C	N	C	N	N	Ph-3,4-$(OMe)_2$	Ph
C	N	C	N	N	Ph-2-OH	H
C	N	C	N	N	Ph-2-OH	Me
C	N	C	N	N	Ph-2-OH	Et
C	N	C	N	N	Ph-2-OH	n-Hex
C	N	C	N	N	Ph-2-OH	c-Pr
C	N	C	N	N	Ph-2-OH	c-Hex
C	N	C	N	N	Ph-2-OH	OH

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	N	C	N	N	Ph-2-OH	CH_2OH
C	N	C	N	N	Ph-2-OH	OMe
C	N	C	N	N	Ph-2-OH	SMe
C	N	C	N	N	Ph-2-OH	Cl
C	N	C	N	N	Ph-2-OH	CF_3
C	N	C	N	N	Ph-2-OH	Ph
C	N	C	N	N	Ph-3-OH	H
C	N	C	N	N	Ph-3-OH	Me
C	N	C	N	N	Ph-3-OH	Et
C	N	C	N	N	Ph-3-OH	n-Hex
C	N	C	N	N	Ph-3-OH	c-Pr
C	N	C	N	N	Ph-3-OH	c-Hex
C	N	C	N	N	Ph-3-OH	OH
C	N	C	N	N	Ph-3-OH	CH_2OH
C	N	C	N	N	Ph-3-OH	OMe
C	N	C	N	N	Ph-3-OH	SMe
C	N	C	N	N	Ph-3-OH	Cl
C	N	C	N	N	Ph-3-OH	CF_3
C	N	C	N	N	Ph-3-OH	Ph
C	N	C	N	N	Ph-4-OH	H
C	N	C	N	N	Ph-4-OH	Me
C	N	C	N	N	Ph-4-OH	Et
C	N	C	N	N	Ph-4-OH	n-Hex
C	N	C	N	N	Ph-4-OH	c-Pr
C	N	C	N	N	Ph-4-OH	c-Hex
C	N	C	N	N	Ph-4-OH	OH
C	N	C	N	N	Ph-4-OH	CH_2OH
C	N	C	N	N	Ph-4-OH	OMe
C	N	C	N	N	Ph-4-OH	SMe
C	N	C	N	N	Ph-4-OH	Cl
C	N	C	N	N	Ph-4-OH	CF_3
C	N	C	N	N	Ph-4-OH	Ph
C	N	C	N	N	Ph-3,4-$(OH)_2$	H
C	N	C	N	N	Ph-3,4-$(OH)_2$	Me
C	N	C	N	N	Ph-3,4-$(OH)_2$	Et
C	N	C	N	N	Ph-3,4-$(OH)_2$	n-Hex
C	N	C	N	N	Ph-3,4-$(OH)_2$	c-Pr
C	N	C	N	N	Ph-3,4-$(OH)_2$	c-Hex
C	N	C	N	N	Ph-3,4-$(OH)_2$	OH
C	N	C	N	N	Ph-3,4-$(OH)_2$	CH_2OH
C	N	C	N	N	Ph-3,4-$(OH)_2$	OMe
C	N	C	N	N	Ph-3,4-$(OH)_2$	SMe
C	N	C	N	N	Ph-3,4-$(OH)_2$	Cl
C	N	C	N	N	Ph-3,4-$(OH)_2$	CF_3

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	N	C	N	N	Ph-3,4-$(OH)_2$	Ph
C	N	C	N	N	Ph-3-SMe	H
C	N	C	N	N	Ph-3-SMe	Me
C	N	C	N	N	Ph-3-SMe	Et
C	N	C	N	N	Ph-3-SMe	n-Hex
C	N	C	N	N	Ph-3-SMe	c-Pr
C	N	C	N	N	Ph-3-SMe	c-Hex
C	N	C	N	N	Ph-3-SMe	OH
C	N	C	N	N	Ph-3-SMe	CH_2OH
C	N	C	N	N	Ph-3-SMe	OMe
C	N	C	N	N	Ph-3-SMe	SMe
C	N	C	N	N	Ph-3-SMe	Cl
C	N	C	N	N	Ph-3-SMe	CF_3
C	N	C	N	N	Ph-3-SMe	Ph
C	N	C	N	N	Ph-3-CF_3	H
C	N	C	N	N	Ph-3-CF_3	Me
C	N	C	N	N	Ph-3-CF_3	Et
C	N	C	N	N	Ph-3-CF_3	n-Hex
C	N	C	N	N	Ph-3-CF_3	c-Pr
C	N	C	N	N	Ph-3-CF_3	c-Hex
C	N	C	N	N	Ph-3-CF_3	OH
C	N	C	N	N	Ph-3-CF_3	CH_2OH
C	N	C	N	N	Ph-3-CF_3	OMe
C	N	C	N	N	Ph-3-CF_3	SMe
C	N	C	N	N	Ph-3-CF_3	Cl
C	N	C	N	N	Ph-3-CF_3	CF_3
C	N	C	N	N	Ph-3-CF_3	Ph
C	N	C	N	N	Ph-3-NO_2	H
C	N	C	N	N	Ph-3-NO_2	Me
C	N	C	N	N	Ph-3-NO_2	Et
C	N	C	N	N	Ph-3-NO_2	n-Hex
C	N	C	N	N	Ph-3-NO_2	c-Pr
C	N	C	N	N	Ph-3-NO_2	c-Hex
C	N	C	N	N	Ph-3-NO_2	OH
C	N	C	N	N	Ph-3-NO_2	CH_2OH
C	N	C	N	N	Ph-3-NO_2	OMe
C	N	C	N	N	Ph-3-NO_2	SMe
C	N	C	N	N	Ph-3-NO_2	Cl
C	N	C	N	N	Ph-3-NO_2	CF_3
C	N	C	N	N	Ph-3-NO_2	Ph
C	N	C	N	N	Ph-4-NMe_2	H
C	N	C	N	N	Ph-4-NMe_2	Me
C	N	C	N	N	Ph-4-NMe_2	Et
C	N	C	N	N	Ph-4-NMe_2	n-Hex

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b
C	N	C	N	N	Ph-4-NMe_2	c-Pr
C	N	C	N	N	Ph-4-NMe_2	c-Hex
C	N	C	N	N	Ph-4-NMe_2	OH
C	N	C	N	N	Ph-4-NMe_2	CH_2OH
C	N	C	N	N	Ph-4-NMe_2	OMe
C	N	C	N	N	Ph-4-NMe_2	SMe
C	N	C	N	N	Ph-4-NMe_2	Cl
C	N	C	N	N	Ph-4-NMe_2	CF_3
C	N	C	N	N	Ph-4-NMe_2	Ph

表 5



W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b	R^c
C	N	C	C	N	Ph	Me	Me
C	N	C	C	N	Ph	Me	Et
C	N	C	C	N	Ph	Me	n-Hex
C	N	C	C	N	Ph	Me	c-Pr
C	N	C	C	N	Ph	Me	c-Hex
C	N	C	C	N	Ph	Me	OH
C	N	C	C	N	Ph	Me	CH_2OH
C	N	C	C	N	Ph	Me	OMe
C	N	C	C	N	Ph	Me	SMe
C	N	C	C	N	Ph	Me	Cl
C	N	C	C	N	Ph	Me	CF_3
C	N	C	C	N	Ph	Me	Ph
C	N	C	C	N	Ph	Me	H
C	N	C	C	N	H	Me	Me
C	N	C	C	N	H	Me	Et
C	N	C	C	N	H	Me	n-Hex
C	N	C	C	N	H	Me	c-Pr
C	N	C	C	N	H	Me	c-Hex
C	N	C	C	N	H	Me	OH
C	N	C	C	N	H	Me	CH_2OH
C	N	C	C	N	H	Me	OMe
C	N	C	C	N	H	Me	SMe
C	N	C	C	N	H	Me	Cl
C	N	C	C	N	H	Me	CF_3
C	N	C	C	N	H	Me	Ph
C	N	C	C	N	Me	Me	H
C	N	C	C	N	Me	Me	Me
C	N	C	C	N	Me	Me	Et
C	N	C	C	N	Me	Me	n-Hex
C	N	C	C	N	Me	Me	c-Pr
C	N	C	C	N	Me	Me	c-Hex
C	N	C	C	N	Me	Me	OH
C	N	C	C	N	Me	Me	CH_2OH
C	N	C	C	N	Me	Me	OMe
C	N	C	C	N	Me	Me	SMe
C	N	C	C	N	Me	Me	Cl

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b	R^c
C	N	C	C	N	Me	Me	CF_3
C	N	C	C	N	Me	Me	Ph
C	N	C	C	N	Et	Me	H
C	N	C	C	N	Et	Me	Me
C	N	C	C	N	Et	Me	Et
C	N	C	C	N	Et	Me	n-Hex
C	N	C	C	N	Et	Me	c-Pr
C	N	C	C	N	Et	Me	c-Hex
C	N	C	C	N	Et	Me	OH
C	N	C	C	N	Et	Me	CH_2OH
C	N	C	C	N	Et	Me	OMe
C	N	C	C	N	Et	Me	SMe
C	N	C	C	N	Et	Me	Cl
C	N	C	C	N	Et	Me	CF_3
C	N	C	C	N	Et	Me	Ph
C	N	C	C	N	n-Pr	Me	H
C	N	C	C	N	n-Pr	Me	Me
C	N	C	C	N	n-Pr	Me	Et
C	N	C	C	N	n-Pr	Me	n-Hex
C	N	C	C	N	n-Pr	Me	c-Pr
C	N	C	C	N	n-Pr	Me	c-Hex
C	N	C	C	N	n-Pr	Me	OH
C	N	C	C	N	n-Pr	Me	CH_2OH
C	N	C	C	N	n-Pr	Me	OMe
C	N	C	C	N	n-Pr	Me	SMe
C	N	C	C	N	n-Pr	Me	Cl
C	N	C	C	N	n-Pr	Me	CF_3
C	N	C	C	N	n-Pr	Me	Ph
C	N	C	C	N	n-Hex	Me	H
C	N	C	C	N	n-Hex	Me	Me
C	N	C	C	N	n-Hex	Me	Et
C	N	C	C	N	n-Hex	Me	n-Hex
C	N	C	C	N	n-Hex	Me	c-Pr
C	N	C	C	N	n-Hex	Me	c-Hex
C	N	C	C	N	n-Hex	Me	OH
C	N	C	C	N	n-Hex	Me	CH_2OH
C	N	C	C	N	n-Hex	Me	OMe
C	N	C	C	N	n-Hex	Me	SMe
C	N	C	C	N	n-Hex	Me	Cl
C	N	C	C	N	n-Hex	Me	CF_3
C	N	C	C	N	n-Hex	Me	Ph
C	N	C	C	N	i-Pr	Me	H
C	N	C	C	N	i-Pr	Me	Me
C	N	C	C	N	i-Pr	Me	Et

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b	R^c
C	N	C	C	N	i-Pr	Me	n-Hex
C	N	C	C	N	i-Pr	Me	c-Pr
C	N	C	C	N	i-Pr	Me	c-Hex
C	N	C	C	N	i-Pr	Me	OH
C	N	C	C	N	i-Pr	Me	CH_2OH
C	N	C	C	N	i-Pr	Me	OMe
C	N	C	C	N	i-Pr	Me	SMe
C	N	C	C	N	i-Pr	Me	Cl
C	N	C	C	N	i-Pr	Me	CF_3
C	N	C	C	N	i-Pr	Me	Ph
C	N	C	C	N	t-Bu	Me	H
C	N	C	C	N	t-Bu	Me	Me
C	N	C	C	N	t-Bu	Me	Et
C	N	C	C	N	t-Bu	Me	n-Hex
C	N	C	C	N	t-Bu	Me	c-Pr
C	N	C	C	N	t-Bu	Me	c-Hex
C	N	C	C	N	t-Bu	Me	OH
C	N	C	C	N	t-Bu	Me	CH_2OH
C	N	C	C	N	t-Bu	Me	OMe
C	N	C	C	N	t-Bu	Me	SMe
C	N	C	C	N	t-Bu	Me	Cl
C	N	C	C	N	t-Bu	Me	CF_3
C	N	C	C	N	t-Bu	Me	Ph
C	N	C	C	N	c-Hex	Me	H
C	N	C	C	N	c-Hex	Me	Me
C	N	C	C	N	c-Hex	Me	Et
C	N	C	C	N	c-Hex	Me	n-Hex
C	N	C	C	N	c-Hex	Me	c-Pr
C	N	C	C	N	c-Hex	Me	c-Hex
C	N	C	C	N	c-Hex	Me	OH
C	N	C	C	N	c-Hex	Me	CH_2OH
C	N	C	C	N	c-Hex	Me	OMe
C	N	C	C	N	c-Hex	Me	SMe
C	N	C	C	N	c-Hex	Me	Cl
C	N	C	C	N	c-Hex	Me	CF_3
C	N	C	C	N	c-Hex	Me	Ph
C	N	C	C	N	3-c-己烯基	Me	H
C	N	C	C	N	3-c-己烯基	Me	Me
C	N	C	C	N	3-c-己烯基	Me	Et
C	N	C	C	N	3-c-己烯基	Me	n-Hex
C	N	C	C	N	3-c-己烯基	Me	c-Pr
C	N	C	C	N	3-c-己烯基	Me	c-Hex
C	N	C	C	N	3-c-己烯基	Me	OH
C	N	C	C	N	3-c-己烯基	Me	CH_2OH

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b	R^c
C	N	C	C	N	3-c-己烯基	Me	OMe
C	N	C	C	N	3-c-己烯基	Me	SMe
C	N	C	C	N	3-c-己烯基	Me	Cl
C	N	C	C	N	3-c-己烯基	Me	CF_3
C	N	C	C	N	3-c-己烯基	Me	Ph
C	N	C	C	N	CH_2OH	Me	H
C	N	C	C	N	CH_2OH	Me	Me
C	N	C	C	N	CH_2OH	Me	Et
C	N	C	C	N	CH_2OH	Me	n-Hex
C	N	C	C	N	CH_2OH	Me	c-Pr
C	N	C	C	N	CH_2OH	Me	c-Hex
C	N	C	C	N	CH_2OH	Me	OH
C	N	C	C	N	CH_2OH	Me	CH_2OH
C	N	C	C	N	CH_2OH	Me	OMe
C	N	C	C	N	CH_2OH	Me	SMe
C	N	C	C	N	CH_2OH	Me	Cl
C	N	C	C	N	CH_2OH	Me	CF_3
C	N	C	C	N	CH_2OH	Me	Ph
C	N	C	C	N	CH_2Ph	Me	H
C	N	C	C	N	CH_2Ph	Me	Me
C	N	C	C	N	CH_2Ph	Me	Et
C	N	C	C	N	CH_2Ph	Me	n-Hex
C	N	C	C	N	CH_2Ph	Me	c-Pr
C	N	C	C	N	CH_2Ph	Me	c-Hex
C	N	C	C	N	CH_2Ph	Me	OH
C	N	C	C	N	CH_2Ph	Me	CH_2OH
C	N	C	C	N	CH_2Ph	Me	OMe
C	N	C	C	N	CH_2Ph	Me	SMe
C	N	C	C	N	CH_2Ph	Me	Cl
C	N	C	C	N	CH_2Ph	Me	CF_3
C	N	C	C	N	CH_2Ph	Me	Ph
C	N	C	C	N	α-萘基	Me	H
C	N	C	C	N	α-萘基	Me	Me
C	N	C	C	N	α-萘基	Me	Et
C	N	C	C	N	α-萘基	Me	n-Hex
C	N	C	C	N	α-萘基	Me	c-Pr
C	N	C	C	N	α-萘基	Me	c-Hex
C	N	C	C	N	α-萘基	Me	OH
C	N	C	C	N	α-萘基	Me	CH_2OH
C	N	C	C	N	α-萘基	Me	OMe
C	N	C	C	N	α-萘基	Me	SMe
C	N	C	C	N	α-萘基	Me	Cl
C	N	C	C	N	α-萘基	Me	CF_3
C	N	C	C	N	α-萘基	Me	Ph

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b	R^c
C	N	C	C	N	β-萘基	Me	H
C	N	C	C	N	β-萘基	Me	Me
C	N	C	C	N	β-萘基	Me	Et
C	N	C	C	N	β-萘基	Me	n-Hex
C	N	C	C	N	β-萘基	Me	c-Pr
C	N	C	C	N	β-萘基	Me	c-Hex
C	N	C	C	N	β-萘基	Me	OH
C	N	C	C	N	β-萘基	Me	CH_2OH
C	N	C	C	N	β-萘基	Me	OMe
C	N	C	C	N	β-萘基	Me	SMe
C	N	C	C	N	β-萘基	Me	Cl
C	N	C	C	N	β-萘基	Me	CF_3
C	N	C	C	N	β-萘基	Me	Ph
C	N	C	C	N	2-吡啶基	Me	H
C	N	C	C	N	2-吡啶基	Me	Me
C	N	C	C	N	2-吡啶基	Me	Et
C	N	C	C	N	2-吡啶基	Me	n-Hex
C	N	C	C	N	2-吡啶基	Me	c-Pr
C	N	C	C	N	2-吡啶基	Me	c-Hex
C	N	C	C	N	2-吡啶基	Me	OH
C	N	C	C	N	2-吡啶基	Me	CH_2OH
C	N	C	C	N	2-吡啶基	Me	OMe
C	N	C	C	N	2-吡啶基	Me	SMe
C	N	C	C	N	2-吡啶基	Me	Cl
C	N	C	C	N	2-吡啶基	Me	CF_3
C	N	C	C	N	2-吡啶基	Me	Ph
C	N	C	C	N	3-吡啶基	Me	H
C	N	C	C	N	3-吡啶基	Me	Me
C	N	C	C	N	3-吡啶基	Me	Et
C	N	C	C	N	3-吡啶基	Me	n-Hex
C	N	C	C	N	3-吡啶基	Me	c-Pr
C	N	C	C	N	3-吡啶基	Me	c-Hex
C	N	C	C	N	3-吡啶基	Me	OH
C	N	C	C	N	3-吡啶基	Me	CH_2OH
C	N	C	C	N	3-吡啶基	Me	OMe
C	N	C	C	N	3-吡啶基	Me	SMe
C	N	C	C	N	3-吡啶基	Me	Cl
C	N	C	C	N	3-吡啶基	Me	CF_3
C	N	C	C	N	3-吡啶基	Me	Ph
C	N	C	C	N	4-吡啶基	Me	H
C	N	C	C	N	4-吡啶基	Me	Me
C	N	C	C	N	4-吡啶基	Me	Et
C	N	C	C	N	4-吡啶基	Me	n-Hex
C	N	C	C	N	4-吡啶基	Me	c-Pr

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b	R^c
C	N	C	C	N	4-吡啶基	Me	c-Hex
C	N	C	C	N	4-吡啶基	Me	OH
C	N	C	C	N	4-吡啶基	Me	CH_2OH
C	N	C	C	N	4-吡啶基	Me	OMe
C	N	C	C	N	4-吡啶基	Me	SMe
C	N	C	C	N	4-吡啶基	Me	Cl
C	N	C	C	N	4-吡啶基	Me	CF_3
C	N	C	C	N	4-吡啶基	Me	Ph
C	N	C	C	N	2-呋喃基	Me	H
C	N	C	C	N	2-呋喃基	Me	Me
C	N	C	C	N	2-呋喃基	Me	Et
C	N	C	C	N	2-呋喃基	Me	n-Hex
C	N	C	C	N	2-呋喃基	Me	c-Pr
C	N	C	C	N	2-呋喃基	Me	c-Hex
C	N	C	C	N	2-呋喃基	Me	OH
C	N	C	C	N	2-呋喃基	Me	CH_2OH
C	N	C	C	N	2-呋喃基	Me	OMe
C	N	C	C	N	2-呋喃基	Me	SMe
C	N	C	C	N	2-呋喃基	Me	Cl
C	N	C	C	N	2-呋喃基	Me	CF_3
C	N	C	C	N	2-呋喃基	Me	Ph
C	N	C	C	N	2-噻吩基	Me	H
C	N	C	C	N	2-噻吩基	Me	Me
C	N	C	C	N	2-噻吩基	Me	Et
C	N	C	C	N	2-噻吩基	Me	n-Hex
C	N	C	C	N	2-噻吩基	Me	c-Pr
C	N	C	C	N	2-噻吩基	Me	c-Hex
C	N	C	C	N	2-噻吩基	Me	OH
C	N	C	C	N	2-噻吩基	Me	CH_2OH
C	N	C	C	N	2-噻吩基	Me	OMe
C	N	C	C	N	2-噻吩基	Me	SMe
C	N	C	C	N	2-噻吩基	Me	Cl
C	N	C	C	N	2-噻吩基	Me	CF_3
C	N	C	C	N	2-噻吩基	Me	Ph
C	N	C	C	N	2-甲苯基	Me	H
C	N	C	C	N	2-甲苯基	Me	Me
C	N	C	C	N	2-甲苯基	Me	Et
C	N	C	C	N	2-甲苯基	Me	n-Hex
C	N	C	C	N	2-甲苯基	Me	c-Pr
C	N	C	C	N	2-甲苯基	Me	c-Hex
C	N	C	C	N	2-甲苯基	Me	OH
C	N	C	C	N	2-甲苯基	Me	CH_2OH
C	N	C	C	N	2-甲苯基	Me	OMe
C	N	C	C	N	2-甲苯基	Me	SMe

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b	R^c
C	N	C	C	N	2-甲苯基	Me	Cl
C	N	C	C	N	2-甲苯基	Me	CF_3
C	N	C	C	N	2-甲苯基	Me	Ph
C	N	C	C	N	3-甲苯基	Me	H
C	N	C	C	N	3-甲苯基	Me	Me
C	N	C	C	N	3-甲苯基	Me	Et
C	N	C	C	N	3-甲苯基	Me	n-Hex
C	N	C	C	N	3-甲苯基	Me	c-Pr
C	N	C	C	N	3-甲苯基	Me	c-Hex
C	N	C	C	N	3-甲苯基	Me	OH
C	N	C	C	N	3-甲苯基	Me	CH_2OH
C	N	C	C	N	3-甲苯基	Me	OMe
C	N	C	C	N	3-甲苯基	Me	SMe
C	N	C	C	N	3-甲苯基	Me	Cl
C	N	C	C	N	3-甲苯基	Me	CF_3
C	N	C	C	N	3-甲苯基	Me	Ph
C	N	C	C	N	4-甲苯基	Me	H
C	N	C	C	N	4-甲苯基	Me	Me
C	N	C	C	N	4-甲苯基	Me	Et
C	N	C	C	N	4-甲苯基	Me	n-Hex
C	N	C	C	N	4-甲苯基	Me	c-Pr
C	N	C	C	N	4-甲苯基	Me	c-Hex
C	N	C	C	N	4-甲苯基	Me	OH
C	N	C	C	N	4-甲苯基	Me	CH_2OH
C	N	C	C	N	4-甲苯基	Me	OMe
C	N	C	C	N	4-甲苯基	Me	SMe
C	N	C	C	N	4-甲苯基	Me	Cl
C	N	C	C	N	4-甲苯基	Me	CF_3
C	N	C	C	N	4-甲苯基	Me	Ph
C	N	C	C	N	Ph-2,3-Me_2	Me	H
C	N	C	C	N	Ph-2,3-Me_2	Me	Me
C	N	C	C	N	Ph-2,3-Me_2	Me	Et
C	N	C	C	N	Ph-2,3-Me_2	Me	n-Hex
C	N	C	C	N	Ph-2,3-Me_2	Me	c-Pr
C	N	C	C	N	Ph-2,3-Me_2	Me	c-Hex
C	N	C	C	N	Ph-2,3-Me_2	Me	OH
C	N	C	C	N	Ph-2,3-Me_2	Me	CH_2OH
C	N	C	C	N	Ph-2,3-Me_2	Me	OMe
C	N	C	C	N	Ph-2,3-Me_2	Me	SMe
C	N	C	C	N	Ph-2,3-Me_2	Me	Cl
C	N	C	C	N	Ph-2,3-Me_2	Me	CF_3
C	N	C	C	N	Ph-2,3-Me_2	Me	Ph
C	N	C	C	N	Ph-3,4-Me_2	Me	H
C	N	C	C	N	Ph-3,4-Me_2	Me	Me

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b	R^c
C	N	C	C	N	Ph-3,4-Me_2	Me	Et
C	N	C	C	N	Ph-3,4-Me_2	Me	n-Hex
C	N	C	C	N	Ph-3,4-Me_2	Me	c-Pr
C	N	C	C	N	Ph-3,4-Me_2	Me	c-Hex
C	N	C	C	N	Ph-3,4-Me_2	Me	OH
C	N	C	C	N	Ph-3,4-Me_2	Me	CH_2OH
C	N	C	C	N	Ph-3,4-Me_2	Me	OMe
C	N	C	C	N	Ph-3,4-Me_2	Me	SMe
C	N	C	C	N	Ph-3,4-Me_2	Me	Cl
C	N	C	C	N	Ph-3,4-Me_2	Me	CF_3
C	N	C	C	N	Ph-3,4-Me_2	Me	Ph
C	N	C	C	N	Ph-3,5-Me_2	Me	H
C	N	C	C	N	Ph-3,5-Me_2	Me	Me
C	N	C	C	N	Ph-3,5-Me_2	Me	Et
C	N	C	C	N	Ph-3,5-Me_2	Me	n-Hex
C	N	C	C	N	Ph-3,5-Me_2	Me	c-Pr
C	N	C	C	N	Ph-3,5-Me_2	Me	c-Hex
C	N	C	C	N	Ph-3,5-Me_2	Me	OH
C	N	C	C	N	Ph-3,5-Me_2	Me	CH_2OH
C	N	C	C	N	Ph-3,5-Me_2	Me	OMe
C	N	C	C	N	Ph-3,5-Me_2	Me	SMe
C	N	C	C	N	Ph-3,5-Me_2	Me	Cl
C	N	C	C	N	Ph-3,5-Me_2	Me	CF_3
C	N	C	C	N	Ph-3,5-Me_2	Me	Ph
C	N	C	C	N	Ph-2,6-Me_2	Me	H
C	N	C	C	N	Ph-2,6-Me_2	Me	Me
C	N	C	C	N	Ph-2,6-Me_2	Me	Et
C	N	C	C	N	Ph-2,6-Me_2	Me	n-Hex
C	N	C	C	N	Ph-2,6-Me_2	Me	c-Pr
C	N	C	C	N	Ph-2,6-Me_2	Me	c-Hex
C	N	C	C	N	Ph-2,6-Me_2	Me	OH
C	N	C	C	N	Ph-2,6-Me_2	Me	CH_2OH
C	N	C	C	N	Ph-2,6-Me_2	Me	OMe
C	N	C	C	N	Ph-2,6-Me_2	Me	SMe
C	N	C	C	N	Ph-2,6-Me_2	Me	Cl
C	N	C	C	N	Ph-2,6-Me_2	Me	CF_3
C	N	C	C	N	Ph-2,6-Me_2	Me	Ph
C	N	C	C	N	Ph-2-Cl	Me	H
C	N	C	C	N	Ph-2-Cl	Me	Me
C	N	C	C	N	Ph-2-Cl	Me	Et
C	N	C	C	N	Ph-2-Cl	Me	n-Hex
C	N	C	C	N	Ph-2-Cl	Me	c-Pr
C	N	C	C	N	Ph-2-Cl	Me	c-Hex
C	N	C	C	N	Ph-2-Cl	Me	OH

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b	R^c
C	N	C	C	N	Ph-2-Cl	Me	CH_2OH
C	N	C	C	N	Ph-2-Cl	Me	OMe
C	N	C	C	N	Ph-2-Cl	Me	SMe
C	N	C	C	N	Ph-2-Cl	Me	Cl
C	N	C	C	N	Ph-2-Cl	Me	CF_3
C	N	C	C	N	Ph-2-Cl	Me	Ph
C	N	C	C	N	Ph-3-Cl	Me	H
C	N	C	C	N	Ph-3-Cl	Me	Me
C	N	C	C	N	Ph-3-Cl	Me	Et
C	N	C	C	N	Ph-3-Cl	Me	n-Hex
C	N	C	C	N	Ph-3-Cl	Me	c-Pr
C	N	C	C	N	Ph-3-Cl	Me	c-Hex
C	N	C	C	N	Ph-3-Cl	Me	OH
C	N	C	C	N	Ph-3-Cl	Me	CH_2OH
C	N	C	C	N	Ph-3-Cl	Me	OMe
C	N	C	C	N	Ph-3-Cl	Me	SMe
C	N	C	C	N	Ph-3-Cl	Me	Cl
C	N	C	C	N	Ph-3-Cl	Me	CF_3
C	N	C	C	N	Ph-3-Cl	Me	Ph
C	N	C	C	N	Ph-4-Cl	Me	H
C	N	C	C	N	Ph-4-Cl	Me	Me
C	N	C	C	N	Ph-4-Cl	Me	Et
C	N	C	C	N	Ph-4-Cl	Me	n-Hex
C	N	C	C	N	Ph-4-Cl	Me	c-Pr
C	N	C	C	N	Ph-4-Cl	Me	c-Hex
C	N	C	C	N	Ph-4-Cl	Me	OH
C	N	C	C	N	Ph-4-Cl	Me	CH_2OH
C	N	C	C	N	Ph-4-Cl	Me	OMe
C	N	C	C	N	Ph-4-Cl	Me	SMe
C	N	C	C	N	Ph-4-Cl	Me	Cl
C	N	C	C	N	Ph-4-Cl	Me	CF_3
C	N	C	C	N	Ph-4-Cl	Me	Ph
C	N	C	C	N	Ph-3,4-Cl_2	Me	H
C	N	C	C	N	Ph-3,4-Cl_2	Me	Me
C	N	C	C	N	Ph-3,4-Cl_2	Me	Et
C	N	C	C	N	Ph-3,4-Cl_2	Me	n-Hex
C	N	C	C	N	Ph-3,4-Cl_2	Me	c-Pr
C	N	C	C	N	Ph-3,4-Cl_2	Me	c-Hex
C	N	C	C	N	Ph-3,4-Cl_2	Me	OH
C	N	C	C	N	Ph-3,4-Cl_2	Me	CH_2OH
C	N	C	C	N	Ph-3,4-Cl_2	Me	OMe
C	N	C	C	N	Ph-3,4-Cl_2	Me	SMe
C	N	C	C	N	Ph-3,4-Cl_2	Me	Cl
C	N	C	C	N	Ph-3,4-Cl_2	Me	CF_3

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b	R^c
C	N	C	C	N	Ph-3,4-Cl_2	Me	Ph
C	N	C	C	N	Ph-4-F	Me	H
C	N	C	C	N	Ph-4-F	Me	Me
C	N	C	C	N	Ph-4-F	Me	Et
C	N	C	C	N	Ph-4-F	Me	n-Hex
C	N	C	C	N	Ph-4-F	Me	c-Pr
C	N	C	C	N	Ph-4-F	Me	c-Hex
C	N	C	C	N	Ph-4-F	Me	OH
C	N	C	C	N	Ph-4-F	Me	CH_2OH
C	N	C	C	N	Ph-4-F	Me	OMe
C	N	C	C	N	Ph-4-F	Me	SMe
C	N	C	C	N	Ph-4-F	Me	Cl
C	N	C	C	N	Ph-4-F	Me	CF_3
C	N	C	C	N	Ph-4-F	Me	Ph
C	N	C	C	N	Ph-4-Br	Me	H
C	N	C	C	N	Ph-4-Br	Me	Me
C	N	C	C	N	Ph-4-Br	Me	Et
C	N	C	C	N	Ph-4-Br	Me	n-Hex
C	N	C	C	N	Ph-4-Br	Me	c-Pr
C	N	C	C	N	Ph-4-Br	Me	c-Hex
C	N	C	C	N	Ph-4-Br	Me	OH
C	N	C	C	N	Ph-4-Br	Me	CH_2OH
C	N	C	C	N	Ph-4-Br	Me	OMe
C	N	C	C	N	Ph-4-Br	Me	SMe
C	N	C	C	N	Ph-4-Br	Me	Cl
C	N	C	C	N	Ph-4-Br	Me	CF_3
C	N	C	C	N	Ph-4-Br	Me	Ph
C	N	C	C	N	Ph-2-OMe	Me	H
C	N	C	C	N	Ph-2-OMe	Me	Me
C	N	C	C	N	Ph-2-OMe	Me	Et
C	N	C	C	N	Ph-2-OMe	Me	n-Hex
C	N	C	C	N	Ph-2-OMe	Me	c-Pr
C	N	C	C	N	Ph-2-OMe	Me	c-Hex
C	N	C	C	N	Ph-2-OMe	Me	OH
C	N	C	C	N	Ph-2-OMe	Me	CH_2OH
C	N	C	C	N	Ph-2-OMe	Me	OMe
C	N	C	C	N	Ph-2-OMe	Me	SMe
C	N	C	C	N	Ph-2-OMe	Me	Cl
C	N	C	C	N	Ph-2-OMe	Me	CF_3
C	N	C	C	N	Ph-2-OMe	Me	Ph
C	N	C	C	N	Ph-3-OMe	Me	H
C	N	C	C	N	Ph-3-OMe	Me	Me
C	N	C	C	N	Ph-3-OMe	Me	Et
C	N	C	C	N	Ph-3-OMe	Me	n-Hex

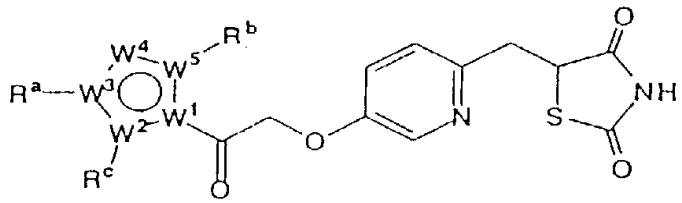
W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b	R^c
C	N	C	C	N	Ph-3-OMe	Me	c-Pr
C	N	C	C	N	Ph-3-OMe	Me	c-Hex
C	N	C	C	N	Ph-3-OMe	Me	OH
C	N	C	C	N	Ph-3-OMe	Me	CH_2OH
C	N	C	C	N	Ph-3-OMe	Me	OMe
C	N	C	C	N	Ph-3-OMe	Me	SMe
C	N	C	C	N	Ph-3-OMe	Me	Cl
C	N	C	C	N	Ph-3-OMe	Me	CF_3
C	N	C	C	N	Ph-3-OMe	Me	Ph
C	N	C	C	N	Ph-4-OMe	Me	H
C	N	C	C	N	Ph-4-OMe	Me	Me
C	N	C	C	N	Ph-4-OMe	Me	Et
C	N	C	C	N	Ph-4-OMe	Me	n-Hex
C	N	C	C	N	Ph-4-OMe	Me	c-Pr
C	N	C	C	N	Ph-4-OMe	Me	c-Hex
C	N	C	C	N	Ph-4-OMe	Me	OH
C	N	C	C	N	Ph-4-OMe	Me	CH_2OH
C	N	C	C	N	Ph-4-OMe	Me	OMe
C	N	C	C	N	Ph-4-OMe	Me	SMe
C	N	C	C	N	Ph-4-OMe	Me	Cl
C	N	C	C	N	Ph-4-OMe	Me	CF_3
C	N	C	C	N	Ph-4-OMe	Me	Ph
C	N	C	C	N	Ph-3,4-$(OMe)_2$	Me	H
C	N	C	C	N	Ph-3,4-$(OMe)_2$	Me	Me
C	N	C	C	N	Ph-3,4-$(OMe)_2$	Me	Et
C	N	C	C	N	Ph-3,4-$(OMe)_2$	Me	n-Hex
C	N	C	C	N	Ph-3,4-$(OMe)_2$	Me	c-Pr
C	N	C	C	N	Ph-3,4-$(OMe)_2$	Me	c-Hex
C	N	C	C	N	Ph-3,4-$(OMe)_2$	Me	OH
C	N	C	C	N	Ph-3,4-$(OMe)_2$	Me	CH_2OH
C	N	C	C	N	Ph-3,4-$(OMe)_2$	Me	OMe
C	N	C	C	N	Ph-3,4-$(OMe)_2$	Me	SMe
C	N	C	C	N	Ph-3,4-$(OMe)_2$	Me	Cl
C	N	C	C	N	Ph-3,4-$(OMe)_2$	Me	CF_3
C	N	C	C	N	Ph-3,4-$(OMe)_2$	Me	Ph
C	N	C	C	N	Ph-2-OH	Me	H
C	N	C	C	N	Ph-2-OH	Me	Me
C	N	C	C	N	Ph-2-OH	Me	Et
C	N	C	C	N	Ph-2-OH	Me	n-Hex
C	N	C	C	N	Ph-2-OH	Me	c-Pr
C	N	C	C	N	Ph-2-OH	Me	c-Hex
C	N	C	C	N	Ph-2-OH	Me	OH
C	N	C	C	N	Ph-2-OH	Me	CH_2OH
C	N	C	C	N	Ph-2-OH	Me	OMe

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b	R^c
C	N	C	C	N	Ph-2-OH	Me	SMe
C	N	C	C	N	Ph-2-OH	Me	Cl
C	N	C	C	N	Ph-2-OH	Me	CF_3
C	N	C	C	N	Ph-2-OH	Me	Ph
C	N	C	C	N	Ph-3-OH	Me	H
C	N	C	C	N	Ph-3-OH	Me	Me
C	N	C	C	N	Ph-3-OH	Me	Et
C	N	C	C	N	Ph-3-OH	Me	n-Hex
C	N	C	C	N	Ph-3-OH	Me	c-Pr
C	N	C	C	N	Ph-3-OH	Me	c-Hex
C	N	C	C	N	Ph-3-OH	Me	OH
C	N	C	C	N	Ph-3-OH	Me	CH_2OH
C	N	C	C	N	Ph-3-OH	Me	OMe
C	N	C	C	N	Ph-3-OH	Me	SMe
C	N	C	C	N	Ph-3-OH	Me	Cl
C	N	C	C	N	Ph-3-OH	Me	CF_3
C	N	C	C	N	Ph-3-OH	Me	Ph
C	N	C	C	N	Ph-4-OH	Me	H
C	N	C	C	N	Ph-4-OH	Me	Me
C	N	C	C	N	Ph-4-OH	Me	Et
C	N	C	C	N	Ph-4-OH	Me	n-Hex
C	N	C	C	N	Ph-4-OH	Me	c-Pr
C	N	C	C	N	Ph-4-OH	Me	c-Hex
C	N	C	C	N	Ph-4-OH	Me	OH
C	N	C	C	N	Ph-4-OH	Me	CH_2OH
C	N	C	C	N	Ph-4-OH	Me	OMe
C	N	C	C	N	Ph-4-OH	Me	SMe
C	N	C	C	N	Ph-4-OH	Me	Cl
C	N	C	C	N	Ph-4-OH	Me	CF_3
C	N	C	C	N	Ph-4-OH	Me	Ph
C	N	C	C	N	Ph-3,4-$(OH)_2$	Me	H
C	N	C	C	N	Ph-3,4-$(OH)_2$	Me	Me
C	N	C	C	N	Ph-3,4-$(OH)_2$	Me	Et
C	N	C	C	N	Ph-3,4-$(OH)_2$	Me	n-Hex
C	N	C	C	N	Ph-3,4-$(OH)_2$	Me	c-Pr
C	N	C	C	N	Ph-3,4-$(OH)_2$	Me	c-Hex
C	N	C	C	N	Ph-3,4-$(OH)_2$	Me	OH
C	N	C	C	N	Ph-3,4-$(OH)_2$	Me	CH_2OH
C	N	C	C	N	Ph-3,4-$(OH)_2$	Me	OMe
C	N	C	C	N	Ph-3,4-$(OH)_2$	Me	SMe
C	N	C	C	N	Ph-3,4-$(OH)_2$	Me	Cl
C	N	C	C	N	Ph-3,4-$(OH)_2$	Me	CF_3
C	N	C	C	N	Ph-3,4-$(OH)_2$	Me	Ph
C	N	C	C	N	Ph-3-SMe	Me	H

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b	R^c
C	N	C	C	N	Ph-3-SMe	Me	Me
C	N	C	C	N	Ph-3-SMe	Me	Et
C	N	C	C	N	Ph-3-SMe	Me	n-Hex
C	N	C	C	N	Ph-3-SMe	Me	c-Pr
C	N	C	C	N	Ph-3-SMe	Me	c-Hex
C	N	C	C	N	Ph-3-SMe	Me	OH
C	N	C	C	N	Ph-3-SMe	Me	CH_2OH
C	N	C	C	N	Ph-3-SMe	Me	OMe
C	N	C	C	N	Ph-3-SMe	Me	SMe
C	N	C	C	N	Ph-3-SMe	Me	Cl
C	N	C	C	N	Ph-3-SMe	Me	CF_3
C	N	C	C	N	Ph-3-SMe	Me	Ph
C	N	C	C	N	Ph-3-CF_3	Me	H
C	N	C	C	N	Ph-3-CF_3	Me	Me
C	N	C	C	N	Ph-3-CF_3	Me	Et
C	N	C	C	N	Ph-3-CF_3	Me	n-Hex
C	N	C	C	N	Ph-3-CF_3	Me	c-Pr
C	N	C	C	N	Ph-3-CF_3	Me	c-Hex
C	N	C	C	N	Ph-3-CF_3	Me	OH
C	N	C	C	N	Ph-3-CF_3	Me	CH_2OH
C	N	C	C	N	Ph-3-CF_3	Me	OMe
C	N	C	C	N	Ph-3-CF_3	Me	SMe
C	N	C	C	N	Ph-3-CF_3	Me	Cl
C	N	C	C	N	Ph-3-CF_3	Me	CF_3
C	N	C	C	N	Ph-3-CF_3	Me	Ph
C	N	C	C	N	Ph-3-NO_2	Me	H
C	N	C	C	N	Ph-3-NO_2	Me	Me
C	N	C	C	N	Ph-3-NO_2	Me	Et
C	N	C	C	N	Ph-3-NO_2	Me	n-Hex
C	N	C	C	N	Ph-3-NO_2	Me	c-Pr
C	N	C	C	N	Ph-3-NO_2	Me	c-Hex
C	N	C	C	N	Ph-3-NO_2	Me	OH
C	N	C	C	N	Ph-3-NO_2	Me	CH_2OH
C	N	C	C	N	Ph-3-NO_2	Me	OMe
C	N	C	C	N	Ph-3-NO_2	Me	SMe
C	N	C	C	N	Ph-3-NO_2	Me	Cl
C	N	C	C	N	Ph-3-NO_2	Me	CF_3
C	N	C	C	N	Ph-3-NO_2	Me	Ph
C	N	C	C	N	Ph-3-NO_2	Me	H
C	N	C	C	N	Ph-4-NMe_2	Me	Me
C	N	C	C	N	Ph-4-NMe_2	Me	Et
C	N	C	C	N	Ph-4-NMe_2	Me	n-Hex
C	N	C	C	N	Ph-4-NMe_2	Me	c-Pr
C	N	C	C	N	Ph-4-NMe_2	Me	c-Hex

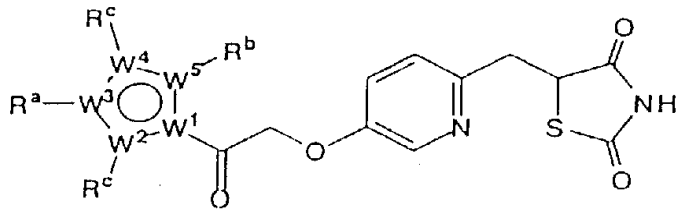
W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b	R^c
C	N	C	C	N	Ph-4-NMe_2	Me	OH
C	N	C	C	N	Ph-4-NMe_2	Me	CH_2OH
C	N	C	C	N	Ph-4-NMe_2	Me	OMe
C	N	C	C	N	Ph-4-NMe_2	Me	SMe
C	N	C	C	N	Ph-4-NMe_2	Me	Cl
C	N	C	C	N	Ph-4-NMe_2	Me	CF_3
C	N	C	C	N	Ph-4-NMe_2	Me	Ph
C	N	C	C	N	Ph	Me	H
C	N	C	C	N	Ph	Me	H
C	O	C	C	C	Ph	Me	H
C	S	C	C	C	Ph	Me	H
C	N	N	C	C	Ph	Me	H

表 6



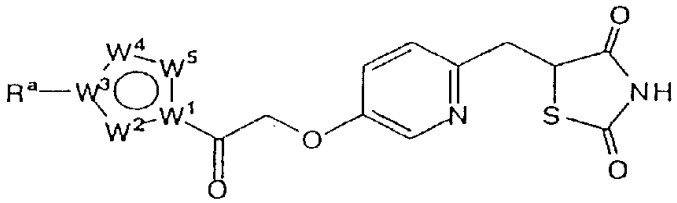
W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b	R^c
C	C	C	NH	C	Ph	Me	H
C	C	C	NH	C	Br	H	H
C	C	C	NH	C	Br	H	Me
C	C	C	NH	C	Br	Me	Me
C	N	C	C	C	Ph	Me	H
C	N	C	C	C	Ph	Me	Me
C	N	C	C	C	Ph	H	Me
C	N	C	C	C	Ph	H	H
C	N	C	C	C	H	H	Me
C	N	C	C	C	H	H	H
C	N	C	C	C	H	Me	Me
C	N	C	C	C	H	Me	H
C	C	C	O	C	Ph	Me	H
C	C	C	O	C	Me	Me	H
C	C	C	O	C	H	Me	Me
C	C	C	S	C	Ph	Me	H
C	C	C	S	C	Me	Me	H
C	C	C	S	C	H	H	H
C	C	N	N	C	Ph	Me	H
C	C	N	N	C	Ph	H	Me
C	C	N	N	C	Ph	H	H
C	C	C	N	N	Ph	Me	H
C	N	C	N	C	Ph	Me	H
C	N	C	N	C	Ph	Me	Me
C	N	C	N	C	Ph	H	Me
C	N	C	N	C	Ph	H	H

表 7



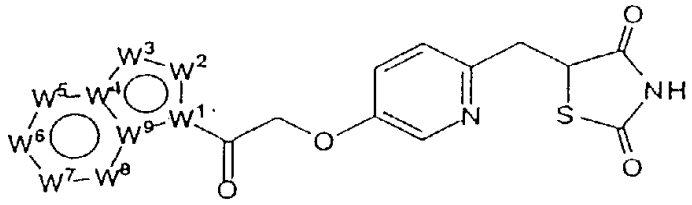
W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a	R^b	R^c
N	C	C	C	C	Ph	Me	H
C	C	C	C	N	Ph	Me	H
C	C	N	C	C	Ph	Me	H
N	C	C	C	N	Ph	Me	H
N	N	N	C	C	Ph	Me	H
N	N	C	C	N	Ph	Me	H
N	C	C	N	N	Ph	Me	H
C	C	N	N	N	Ph	Me	H

表 8



W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	R^a
C	C	C	N	O	Ph
C	C	C	N	O	Ph-2,4-Cl_2
C	C	C	N	O	Ph-3,4-Cl_2
C	C	C	N	O	Ph-2,4-Me_2
C	C	N	C	N	Ph
C	S	C	C	N	H
C	S	C	C	N	Ph
C	N	C	C	S	Ph

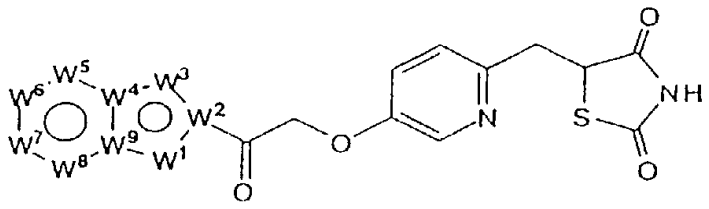
表 9



W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	W^6	W^7	W^8	W^9
CH	CH	CH	C	CH	CH	CH	CH	C
C	CMe	NH	C	CH	CH	CH	CH	C
C	CMe	NMe	C	CH	CH	CH	CH	C
C	CH	NH	C	CH	CH	CH	CH	C
C	CH	S	C	CH	CH	CH	CH	C
N	CH	N	C	CH	CH	CH	CH	C
C	CH	O	C	CH	CH	CH	CH	C
C	CH	CH	C	CH	CH	CH	CH	N
C	N	NH	C	CH	CH	CH	CH	C
C	N	NMe	C	CH	CH	CH	CH	C
N	N	N	C	CH	CH	CH	CH	C
N	CH	N	C	N	CH	N	CH	C
C	CH	N	N	CH	CH	CH	N	C
C	CH	N	N	CH	CH	N	N	C
C	CMe	S	C	N	CCF_3	N	-*	N
C	CMe	S	C	N	CMe	N	-	N
C	CH	S	C	N	CH	N	-	N

*：共价键

表 10

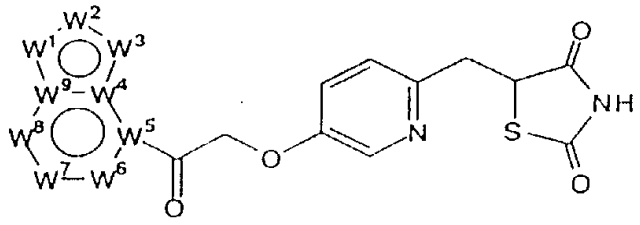


W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	W^6	W^7	W^8	W^9
CH_2	C	CMe	C	CH	CH	CH	CH	C
CH_2	C	CH	C	CH	CH	CH	CH	C
NMe	C	CH	C	CH	CH	CH	CH	C
NH	C	CH	C	CH	CH	CH	CH	C
NMe	C	CMe	C	CH	CH	CH	CH	C
NH	C	CMe	C	CH	CH	CH	CH	C
NH	C	CH	C	CH	CMe	CH	CH	C
NH	C	CH	C	CH	CBr	CH	CH	C
NH	C	CH	C	CH	CPh	CH	CH	C
NMe	C	CH	C	CH	CMe	CH	CH	C
NMe	C	CH	C	CH	CBr	CH	CH	C
NMe	C	CH	C	CH	CPh	CH	CH	C
S	C	CMe	C	CH	CCl	CH	CH	C
S	C	CMe	C	CH	CH	CH	CH	C
S	C	CH	C	CH	CH	CH	CH	C
S	C	CH	C	CH	CPh	CH	CH	C
S	C	CMe	C	CH	CPh	CH	CH	C
O	C	CH	C	CH	CH	CH	COMe	C
O	C	CMe	C	CH	CH	CH	CH	C
O	C	CH	C	CH	CH	CH	CH	C
O	C	CH	C	CH	CPh	CH	CH	C
O	C	CMe	C	CH	CPh	CH	CH	C
NH	C	N	C	CH	CH	CH	CH	C
NMe	C	N	C	CH	CH	CH	CH	C
NH	C	N	C	CH	CMe	CMe	CH	C
NMe	C	N	C	CH	CMe	CMe	CH	C
NH	C	N	C	CH	CPh	CH	CH	C
NMe	C	N	C	CH	CPh	CH	CH	C
NMe	C	N	C	CH	CH	CPh	CH	C
N	C	O	C	CH	CH	CH	CH	C
N	C	O	C	CH	CPh	CH	CH	C
N	C	O	C	CH	CH	CPh	CH	C
N	C	O	C	CH	CMe	CH	CH	C
N	C	O	C	CH	CH	CMe	CH	C
N	C	S	C	CH	CH	CH	CH	C

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	W^6	W^7	W^8	W^9
N	C	S	C	CH	CPh	CH	CH	C
N	C	S	C	CH	CH	CPh	CH	C
N	C	S	C	CH	CMe	CH	CH	C
N	C	S	C	CH	CH	CMe	CH	C
CH	C	CH	C	CH	CH	CH	CH	N
NH	C	N	C	N	CH	N	CH	C
NMe	C	N	C	N	CH	N	CH	C
N	C	CH	C	N	CH	CH	CH	N
N	C	CH	C	N	N	CH	CH	N
S	C	CMe	N	N	CCF_3	N	–*	C
S	C	CMe	N	N	CMe	N	–	C
S	C	CH	N	N	CH	N	–	C

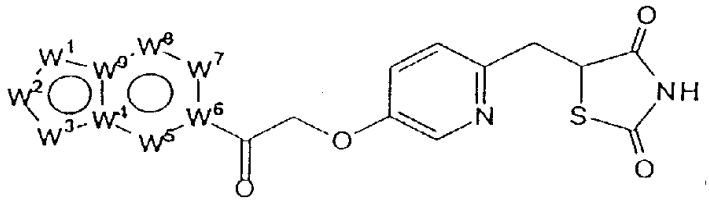
*：共价键

表 11



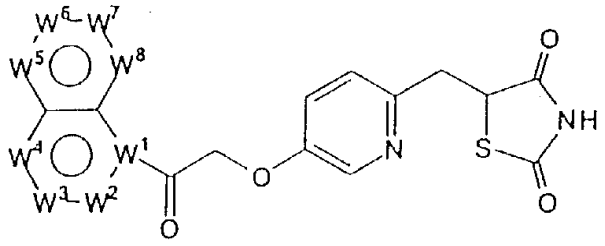
W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	W^6	W^7	W^8	W^9
CH_2	CH	CH	C	C	CH	CH	CH	C
CH	CH	CH_2	C	C	CH	CH	CH	C
NMe	CH	CH	C	C	CH	CH	CH	C
CH	CH	NMe	C	C	CH	CH	CH	C
S	CH	CH	C	C	CH	CH	CH	C
CH	CH	S	C	C	CH	CH	CH	C
O	CH	CH	C	C	CH	CH	CH	C
CH	CH	O	C	C	CH	CH	CH	C
NH	C	N	C	C	CH	CH	CH	C
NMe	C	N	C	C	CH	CH	CH	C
N	C	NMe	C	C	CH	CH	CH	C
N	C	O	C	C	CH	CH	CH	C
O	C	N	C	C	CH	CH	CH	C
N	C	S	C	C	CH	CH	CH	C
S	C	N	C	C	CH	CH	CH	C
CH	CH	CH	C	C	CH	CH	CH	N
CH	CH	CH	N	C	CH	CH	CH	C
NH	CH	N	C	C	N	CH	N	C
CH	CH	N	N	C	CH	CH	N	C
CH	CH	N	N	C	CH	N	N	C

表 12



W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	W^6	W^7	W^8	W^9
CH_2	CH	CH	C	CH	C	CH	CH	C
CH	CH	CH_2	C	CH	C	CH	CH	C
NMe	CH	CH	C	CH	C	CH	CH	C
CH	CH	NMe	C	CH	C	CH	CH	C
S	CH	CH	C	CH	C	CH	CH	C
CH	CH	S	C	CH	C	CH	CH	C
S	CH_2	CH_2	C	CH	C	CH	CH	C
CH_2	CH_2	S	C	CH	C	CH	CH	C
O	CH	CH	C	CH	C	CH	CH	C
CH	CH	O	C	CH	C	CH	CH	C
O	CH_2	CH_2	C	CH	C	CH	CH	C
CH_2	CH_2	O	C	CH	C	CH	CH	C
NH	C	N	C	CH	C	CH	CH	C
NMe	C	N	C	CH	C	CH	CH	C
N	C	NMe	C	CH	C	CH	CH	C
N	C	O	C	CH	C	CH	CH	C
O	C	N	C	CH	C	CH	CH	C
N	C	S	C	CH	C	CH	CH	C
S	C	N	C	CH	C	CH	CH	C
CH	CH	CH	C	CH	C	CH	CH	N
CH	CH	CH	N	CH	C	CH	CH	C
NH	CH	N	C	N	C	N	CH	C
CH	CH	N	N	CH	C	CH	N	C
CH	CMe	N	N	CMe	C	CH	N	C
CH	CH	N	N	CH	C	N	N	C
CH	CMe	N	N	CMe	C	N	N	C
CH	CPh	N	N	CMe	C	CH	N	C
CH	CPh	N	N	CMe	C	N	N	C

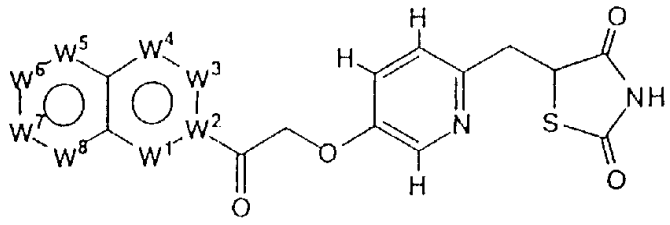
表 13



W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	W^6	W^7	W^8
C	CH	CH	CH	CH	CH	CH	CH
C	CH	CH	CH	CH	CH	CH	N
C	CH	CH	CH	N	CH	CH	CH
C	CH	CH	N	CH	CH	CH	CH
C	CH	CH	CH	CH	CH	N	CH
C	CH	CH	CH	CH	N	CH	CH
C	CH	N	CH	CH	CH	CH	CH
C	N	CH	CH	CH	CH	CH	CH
C	CH	CH	CH	O	CH_2	CH_2	O
C	CH	CH	CH	O	CH	CH	O
C	N	N	CH	CH	CH	CH	CH
C	CH	CH	CH	CH	N	N	CH
C	CH	CH	N	N	CH	CH	CH
C	CH	CH	CH	N	CH	CH	N
C	CH	CH	CH	CH	N	CH	N
C	CH	CH	CH	N	CH	N	CH
C	CH	CH	CH	CH	CH	N	N
C	CH	CH	CH	N	N	CH	CH
C	N	CH	N	N	CH	CH	N
N	CH	CH	S	CH	CH	CH	CH
C	CH	CH	CH	S	CH	CH	NH
C	CH	CH	CH	S	CH	CH	NMe
C	CH	CH	CH	NH	CH	CH	S
C	CH	CH	CH	NMe	CH	CH	S
N	CO	CH	CH	CH	CH	CH	CH
N	CH	CH	CO	CH	CH	CH	CH
C	CH	CH	CH	NH	CO	CH	CH
C	CH	CH	CH	NMe	CO	CH	CH
C	CH	CH	CH	CH	CH	CO	NH
C	CH	CH	CH	CH	CH	CO	NMe
C	CH	CH	CH	NH	CH	CH	CO
C	CH	CH	CH	NMe	CH	CH	CO
C	CH	CH	CH	CO	CH	CH	NH
C	CH	CH	CH	CO	CH	CH	NMe
C	CH	NH	CO	CH	CH	CH	CH

W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	W^6	W^7	W^8
C	CH	NMe	CO	CH	CH	CH	CH
C	CH	CH	CH	CO	NH	CH	CH
C	CH	CH	CH	CO	NMe	CH	CH
C	CH	CH	CH	CH	CH	NH	CO
C	CH	CH	CH	CH	CH	NMe	CO
C	CO	NH	CH	CH	CH	CH	CH
C	CO	NMe	CH	CH	CH	CH	CH
C	NH	CO	CH	CH	CH	CH	CH
C	NMe	CO	CH	CH	CH	CH	CH
C	CH	CH	CH	CH	NH	CO	CH
C	CH	CH	CH	CH	NMe	CO	CH
C	CH	CH	CH	CH	CO	NH	CH
C	CH	CH	CH	CH	CO	NMe	CH
C	N	NH	CO	CH	CH	CH	CH
C	N	NMe	CO	CH	CH	CH	CH
C	CH	CH	CH	CH	N	NH	CO
C	CH	CH	CH	CH	N	NMe	CO
C	CH	CH	CH	CO	NH	N	CH
C	CH	CH	CH	CO	NMe	N	CH

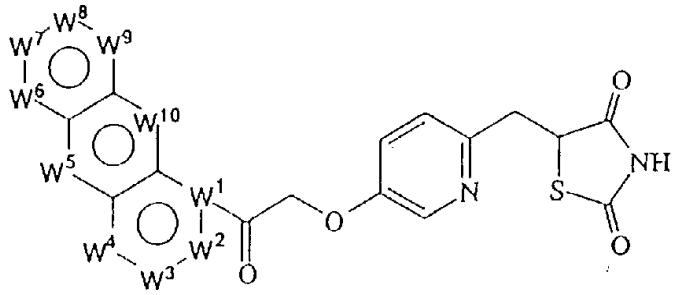
表 14



W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	W^6	W^7	W^8
CH	C	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CH	C	CH	CH	CH	CH	CH	N
CH	C	CH	CH	N	CH	CH	CH
N	C	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CH	C	CH	N	CH	CH	CH	CH
CH	C	CH	CH	CH	CH	N	CH
CH	C	CH	CH	CH	N	CH	CH
CH	C	N	CH	CH	CH	CH	CH
CH	C	CH	CH	O	CH_2	CH_2	O
CH	C	CH	CH	O	CH	CH	O
CH	C	CH	CH	CH	N	N	CH
CH	C	CH	N	N	CH	CH	CH
N	C	CH	CH	CH	CH	CH	N
N	C	CH	N	CH	CH	CH	CH
CH	C	CH	CH	N	CH	CH	N
N	C	N	CH	CH	CH	CH	CH
CH	C	CH	CH	CH	N	CH	N
CH	C	CH	CH	N	CH	N	CH
CH	C	N	N	CH	CH	CH	CH
CH	C	CH	CH	CH	CH	N	N
CH	C	CH	CH	N	N	CH	CH
N	C	N	CH	N	CH	CH	N
N	C	CH	N	CH	N	CH	N
N	C	CH	N	N	CH	N	CH
S	C	CH	NH	CH	CH	CH	CH
S	C	CH	NMe	CH	CH	CH	CH
NH	C	CH	S	CH	CH	CH	CH
NMe	C	CH	S	CH	CH	CH	CH
CH	C	CH	CH	NH	CH	CH	S
CH	C	CH	CH	NMe	CH	CH	S
CH	C	CH	CH	S	CH	CH	NH
CH	C	CH	CH	S	CH	CH	NMe
S	C	CMe	NH	CH	CH	CH	CH
S	C	CMe	NMe	CH	CH	CH	CH
CH	C	CO	NH	CH	CH	CH	CH

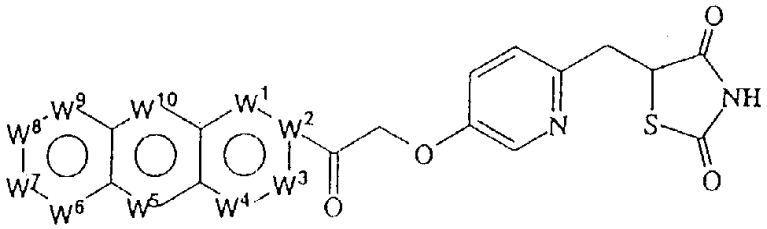
W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	W^6	W^7	W^8
CH	C	CO	NMe	CH	CH	CH	CH
CH	C	CH	CH	NH	CO	CH	CH
CH	C	CH	CH	NMe	CO	CH	CH
CH	C	CH	CH	CH	CH	CO	NH
CH	C	CH	CH	CH	CH	CO	NMe
NH	C	CH	CO	CH	CH	CH	CH
NMe	C	CH	CO	CH	CH	CH	CH
CO	C	CH	NH	CH	CH	CH	CH
CO	C	CH	NMe	CH	CH	CH	CH
CO	N	CH	CH	CH	CH	CH	CH
CH	C	NH	CO	CH	CH	CH	CH
CH	C	NMe	CO	CH	CH	CH	CH
CH	C	CH	CH	CO	NH	CH	CH
CH	C	CH	CH	CO	NMe	CH	CH
CH	C	CH	CH	CH	CH	NH	CO
CH	C	CH	CH	CH	CH	NMe	CO
CH	N	CO	CH	CH	CH	CH	CH
CH	C	CH	CH	CH	CO	NH	CH
CH	C	CH	CH	CH	CO	NMe	CH
CH	C	CH	CH	CH	NH	CO	CH
CH	C	CH	CH	CH	NMe	CO	CH
CO	N	N	CH	CH	CH	CH	CH
CH	C	CH	CH	CH	N	NH	CO
CH	C	CH	CH	CH	N	NMe	CO
CH	C	CH	CH	CO	NH	N	CH
CH	C	CH	CH	CO	NMe	N	CH

表 15



W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	W^6	W^7	W^8	W^9	W^{10}
C	CH	CH	CH	O	CH	CH	CH	CH	CH_2
C	CH	CH	CH	CH_2	CH	CH	CH	CH	O
C	CH	CH	CH	O	CH	CH	CH	CH	S
C	CH	CH	CH	S	CH	CH	CH	CH	O
C	CH	CH	CH	S	CH	CH	CH	CH	S
C	CH	CH	CH	N	CH	CH	CH	CH	CH
C	CH	CH	CH	CH	CH	CH	CH	CH	N
C	CH	CH	CH	N	CH	CH	CH	CH	N
C	CH	CH	CH	S	CH	CH	CH	CH	NH
C	CH	CH	CH	S	CH	CH	CH	CH	NMe
C	CH	CH	CH	NH	CH	CH	CH	CH	S
C	CH	CH	CH	NMe	CH	CH	CH	CH	S
C	CH	CH	CH	O	CH	CH	CH	CH	NH
C	CH	CH	CH	NH	CH	CH	CH	CH	O
C	CH	CH	N	O	CH	CH	CH	CH	CH_2
C	CH	CH	CH	O	N	CH	CH	CH	CH_2
C	CH	CH	CH	CH_2	CH	CH	CH	N	O
C	CH	CH	N	O	CH	CH	CH	CH	CO
C	CH	CH	CH	O	N	CH	CH	CH	CO
C	CH	CH	CH	CO	CH	CH	CH	N	O
C	CH	CH	CH	–	CH	CH	CH	CH	CH_2
C	CH	CH	CH	CH_2	CH	CH	CH	CH	–
C	CH	CH	CH	–	CH	CH	CH	CH	NH
C	CH	CH	CH	–	CH	CH	CH	CH	NMe
C	CH	CH	CH	NH	CH	CH	CH	CH	–
C	CH	CH	CH	NMe	CH	CH	CH	CH	–

表 16



W^1	W^2	W^3	W^4	W^5	W^6	W^7	W^8	W^9	W^{10}
CH	C	CH	CH	O	CH	CH	CH	CH	CH_2
CH	C	CH	CH	CH_2	CH	CH	CH	CH	O
CH	C	CH	CH	O	CH	CH	CH	CH	S
CH	C	CH	CH	S	CH	CH	CH	CH	O
CH	C	CH	CH	S	CH	CH	CH	CH	S
CH	C	CH	CH	N	CH	CH	CH	CH	CH
CH	C	CH	CH	CH	CH	CH	CH	CH	N
CH	C	CH	CH	N	CH	CH	CH	CH	N
CH	C	CH	CH	S	CH	CH	CH	CH	NH
CH	C	CH	CH	S	CH	CH	CH	CH	NMe
CH	C	CH	CH	NH	CH	CH	CH	CH	S
CH	C	CH	CH	NMe	CH	CH	CH	CH	S
CH	C	CH	CH	O	CH	CH	CH	CH	NH
CH	C	CH	CH	NH	CH	CH	CH	CH	O
CH	C	CH	N	O	CH	CH	CH	CH	CH_2
N	C	CH	CH	CH_2	CH	CH	CH	CH	O
CH	C	CH	CH	O	N	CH	CH	CH	CH_2
CH	C	CH	CH	CH_2	CH	CH	CH	N	O
CH	C	CH	N	O	CH	CH	CH	CH	CO
N	C	CH	CH	CO	CH	CH	CH	CH	O
CH	C	CH	CH	O	N	CH	CH	CH	CO
CH	C	CH	CH	CO	CH	CH	CH	N	O
CH	C	CH	CH	–*	CH	CH	CH	CH	CH_2
CH	C	CH	CH	CH_2	CH	CH	CH	CH	–
CH	C	CH	CH	–	CH	CH	CH	CH	NH
CH	C	CH	CH	–	CH	CH	CH	CH	NMe
CH	C	CH	CH	NH	CH	CH	CH	CH	–
CH	C	CH	CH	NMe	CH	CH	CH	CH	–
CH	C	CMe	N	O	CH	CH	CH	CH	CO
CH	C	CMe	N	O	CH	CH	CMe	CH	CO

*：共价键

以下实验结果表明，本发明的化合物 I 或其药学上可接受的盐具有降低血糖的作用，可以单独使用，或者与药学上可接受的粘合剂、赋形剂、润滑剂或崩解剂混合使用，用于预防或治疗哺乳动物（包括人、小鼠、大鼠、兔、狗、猴、牛、马、猪等）的糖尿病。本发明的化合物 I 或其药学上可接受的盐还可以与各种口服降血糖药，如胰岛素衍生物、磺酰脲和双胍衍生物，以及醛糖还原酶抑制剂混合使用。

而且，以下实验结果表明，本发明的化合物 I 或其药学上可接受的盐具有抗非酶促糖基化作用和醛糖还原酶抑制剂的作用，所以可以用于预防或治疗包括糖尿病性眼病（糖尿病性白内障、糖尿病性视网膜病变等）、糖尿病性神经病变、糖尿病性肾病、糖尿病性坏疽等在内的糖尿病并发症。

可以将本发明的化合物 I 配制成各种合适的制剂，这取决于给药方式。本发明化合物的给药可以是游离噻唑烷的形式，或者是生理上可水解并在药学上可接受的盐的形式（如钠盐或钾盐）。

本发明的药物组合物最好是口服给药，其形式可以是本发明化合物的固有形态，或是由本发明的化合物与合适的药学上可接受的载体（如羟丙基纤维素、糖浆、阿拉伯胶、明胶、山梨醇、黄蓍胶、聚乙烯吡咯烷酮或 CMC－Ca）、赋形剂（如乳糖、蔗糖、玉米淀粉、磷酸钙、山梨醇、甘油或微晶纤维素粉）、润滑剂（如硬脂酸镁、滑石、聚乙二醇或二氧化硅）和崩解剂（如土豆淀粉）混合而配成的粉剂、粒剂、片剂或胶囊。

但是，本发明的药物组合物并不限于口服给药，也可以肠胃外给药。例如，它的给药形式可以是例如用可可脂、聚乙二醇、羊毛脂或脂肪酸甘油三酯等油性基质配制而成的栓剂，用液体石蜡、白凡士林、高级醇、Macrogol 软膏、亲水性软膏或水凝胶基质配制而成的透皮吸收治疗基质，用一种或多种以下物质配制而成的注射针剂，这些物质是聚乙二醇、水凝胶基质、蒸馏水、注射用蒸馏水和乳糖或玉米淀粉之类的赋形剂，或者是通过如眼内粘膜、鼻粘膜和口腔粘膜等粘膜给药的制剂。

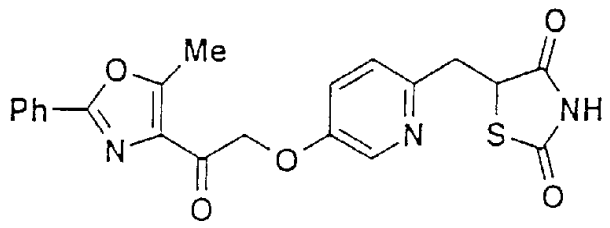
本发明化合物的日剂量为病人每 kg 体重 0.05 至 50mg，较好的是 0.1 至 10mg，每日给药 1 至 3 次。当然，可以根据病人的年龄、体重或病情改变剂量。

本发明的最佳实施方式

现在，将通过本发明化合物药理活性的测试实施例、它们的制备实施例和配制实施例，对本发明进行更为详细的描述。但是，应该明白，本发明绝不局限于这些具体实施例

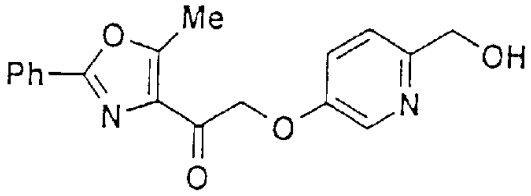
实施例 1

5-((5-(2-氧代-2-(2-苯基-5-甲基-4-噁唑基)乙氧基)-2-吡啶基)甲基)噻唑烷-2,4-二酮(化合物 No. I-1a-1)的制备



第一步

5-(2-氧代-2-(2-苯基-5-甲基-4-噁唑基)乙氧基)-2-吡啶甲醇(化合物 No. III-1)的制备



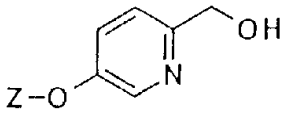
将 4.04g(25mmol)盐酸 5-羟基吡啶甲醇(化合物 No. IV-1)(根据美国专利 No. 4,202,901 公开的方法制备)和 7.00g(25mmol)4-溴乙酰-5-甲基-2-苯基噁唑(根据"J. Chem. Soc. (C), p. 1397(1968)"和未审定的日本专利公告 85372/1986 公开的方法利用 4-乙酰-5-甲基-2-苯基噁唑制备而成)溶于 100ml 用分子筛脱水的二甲基甲酰胺。在形成的溶液中加入 5.18g 无水碳酸钾,所得的溶液在室温下搅拌 4 小时。用蒸发器在 60℃减压蒸发除去反应液中的溶剂,用 100ml 氯仿萃取由此获得的粘稠残留物。用盐水洗涤由此获得的溶液,以无水硫酸镁干燥。滤去干燥剂后,减压蒸除溶剂,得到的残留物进行硅胶柱色谱分离(洗脱剂:50%的乙酸乙酯/苯,然后是乙酸乙酯,最后是 5%的甲醇/氯仿),得到 2.58g (31.9%)黄棕色目标产物(化合物 No. III-1)。

mp:133—134℃

MS(FAB) m/e:325$(M+H)^+$

^{1}H-NMR($CDCl_3$)δ:2.74(3H, s),3.5(1H),4.74(2H, s),5.44(2H, s),7.3—7.4(2H, m),7.48—7.51(3H, m),8.04—8.06(2H, m),8.34—8.35(1H, m)

进行与上述相同的操作，以Z-卤代物为基础物料，在二甲基甲酰胺或氯仿中，在氢化钠或三乙胺之类的碱存在下，制取以下化合物No.III－2至III－5。（在下表中，Z对应于结构式III化合物的各取代基）



化合物No.	Z	特征	熔点(℃)	MS(m/e)
III-2	$MeOCH_2$	浅棕色油状物		170$(M+H)^+$FAB
III-3	$PhCH_2$	棕色油状物		
III-4	PhCO	浅棕色粉末		
III-5	Me_3Si	浅棕色油状物		

III-2

^{1}H-NMR($CDCl_3$)δ:3.45(3H, s),4.2(1H),4.65(2H, s),5.15(2H, s),7.2－7.4(2H, m),8.2－8.3 (1H, m)

III-3

^{1}H-NMR($CDCl_3$)δ:3.3(1H, s),4.65(2H, s),5.15(2H, s),7.1－7.3(2H, m),7.3－7.5(5H, m),8.2－8.3 (1H, m)

III-4

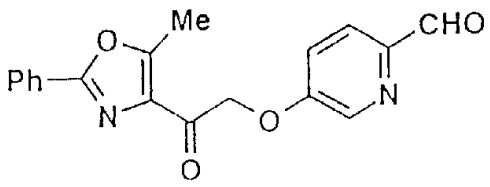
^{1}H-NMR($CDCl_3$)δ:3.7(1H),4.75(2H, s),7.1－8.5(8H, m)

III-5

^{1}H-NMR($CDCl_3$)δ:1.1(9H, s),4. 5(2H, s),6.9－8.2(13H, m)

第二步

5-(2-氧代-2-(2-苯基-5-甲基-4-噁唑基)乙氧基-2-吡啶甲醛(化合物No.II-1)的制备



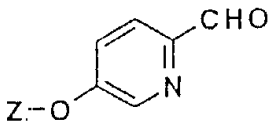
将 0.15g(0.47mmol)化合物 No.III-1 溶于 5ml 无水氯仿。在溶液中加入 340mg 活性二氧化锰，形成的溶液在室温下搅拌 5 天。薄层色谱确认已无起始物后，滤去氧化剂残渣。用活性炭处理由此得到的溶液，减压蒸除溶剂后得到 0.11g(72.8%)棕色粉末状的目标产物(化合物 No.II-1)。

mp：115－118℃

MS(FAB) m/e：323$(M+H)^+$

^{1}H-NMR($CDCl_3$)δ：2.74(3H，s)，5.54(2H，s)，7.36－7.38(1H，m)，7.49－7.52(3H，m)，7.97－7.99(1H，m)，8.0－8.1(1H，m)，8.53－8.54(1H，m)，10.04(1H，s)

以同上方式制取以下化合物 No.II-2 至 II-5。(在下表中，Z 对应于结构式 II 化合物的各取代基)



化合物 No.	Z	特征	熔点(℃)	MS(m/e)
II-2	$MeOCH_2$	棕色油状物		168$(M+H)^+$FAB
II-3	$PhCH_2$	浅黄色蜡状物	22－23	
II-4	PhCO	浅棕色粉末	85－87	
II-5	Me_3Si	棕色油状物		

II-2

^{1}H-NMR($CDCl_3$)δ：3.48(3H，s)，5.25(2H，s)，7.3－7.6(1H，m)，7.8－8.0(1H，m)，8.4－8.5(1H，m)，9.90 (1H，s)

II-3

^{1}H-NMR($CDCl_3$)δ：5.17(2H，s)，7.3－7.5(6H，m)，7.8－8.1(1H，m)，8.4－8.5(1H，m)，9.90 (1H，s)

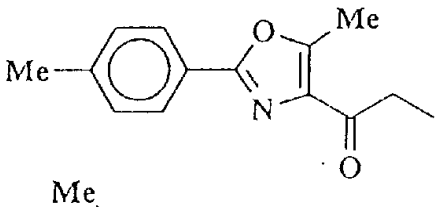
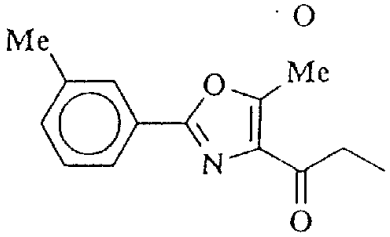
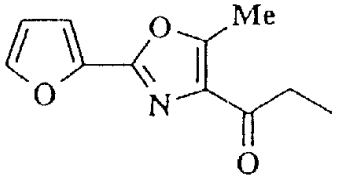
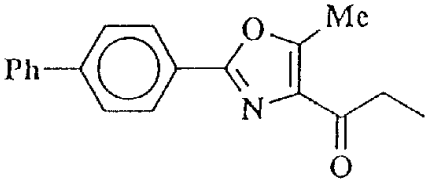
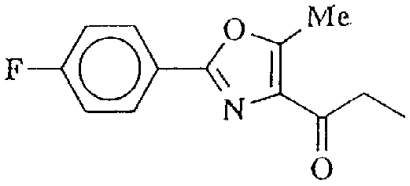
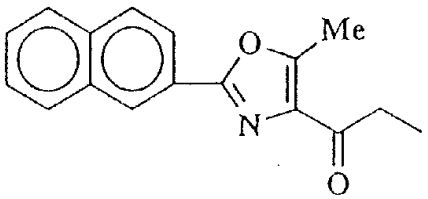
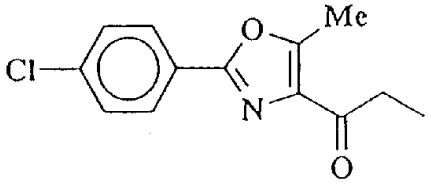
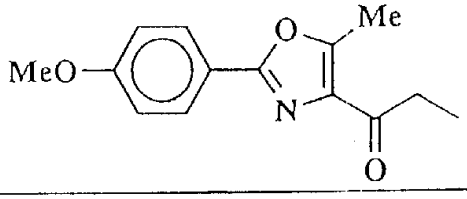
II-4

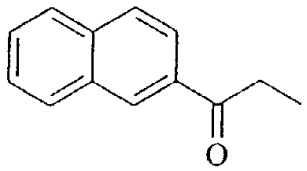
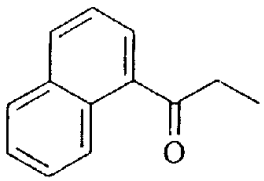
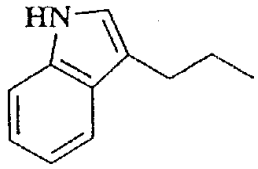
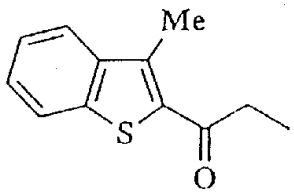
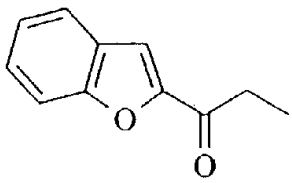
^{1}H-NMR($CDCl_3$)δ：7.2－8.3(7H，m)，8.6－8.8(1H，m)，9.97 (1H，s)

将 0.756g(6.14mmol)5-羟基-2-吡啶甲醛(化合物 No.XIII-1)(根据未审定的日本专利公告 No.273659/1990 公开的方法制备而成)和 1.72g(6.14mmol)

4-溴乙酰-5-甲基-2-苯基噁唑溶于 29ml 用分子筛脱水的二甲基甲酰胺中，在室温下搅拌此溶液。在此溶液中缓慢加入 1.6ml(9.21mmol)二异丙基乙基胺，所得的溶液室温下搅拌 2.5 小时。薄层色谱确认反应终点后，在所得溶液中加入 200ml 氯仿，以盐水洗涤由此得到的溶液。以无水硫酸钠干燥有机层。过滤去除干燥剂后，减压蒸发去除溶剂。对由此获得的残留物进行硅胶柱色谱分离(50%的乙酸乙酯/己烷)，得到 1.318g(61%)目标产物(化合物 No. II-1)。

以同上方式制取以下化合物 No. II-6 至 II-18。(在下表中，Z 对应于结构式 II 化合物的各取代基)

化合物	Z	特征	MS(m/e)
II-6		无色蜡状	337(M^++1)
II-7		浅棕色粉末	337(M^++1)
II-8		浅棕色粉末	311(M^+-1)
II-9		浅棕色粉末	398(M^+)
II-10		浅棕色粉末	339(M^+)
II-11		浅棕色粉末	372(M^+)
II-12		浅棕色粉末	357(M^++1)
II-13		浅棕色粉末	351(M^+-1)

化合物	Z	特征 熔点(℃)	MS(m/e)
II-14		浅黄色晶体 127-129	292(M+H)$^+$ FAB
II-15		无色晶体 137-138	
II-16		无色晶体 120-122	
II-17		无色晶体 136-138	312(M+H)$^+$ FAB
II-18		无色晶体 134-136	

II-6

^{1}H-NMR($CDCl_3$)δ:2.35(3H, s),2.61(3H, s),5.38(2H, s),7.16(3H, m),7.80(3H, m),8.40(1H, m),9.86 (1H, s)

II-7

^{1}H-NMR($CDCl_3$)δ:2.42(3H, s),2.68(3H, s),5.48(2H, s),7.33(3H, m),7.90(3H, m),8.50(1H, m),9.96 (1H, s)

II-8

^{1}H-NMR($CDCl_3$)δ:2.68(3H, s),5.44(2H, s),6.86(1H, m),7.55(1H, m),7.87(1H, m),8.05 (2H, m),8.51(1H, m),9.99 (1H, s)

II-9

^{1}H-NMR($CDCl_3$)δ:2.74(3H, s),5.51(2H, s),7.1—8.5(12H, m),10.03 (1H, s)

II-10

^{1}H-NMR($CDCl_3$)δ:2.68(3H, s),5.46(2H, s),7.24(3H, m),7.95(3H, m),8.5(1H, m),10.03 (1H, s)

II-11

^{1}H-NMR($CDCl_3$)δ:2.83(3H, s),5.52(2H, s),7.35(3H, m),7.85(5H, m),8.50(2H, m),9.97 (1H, s)

II-12

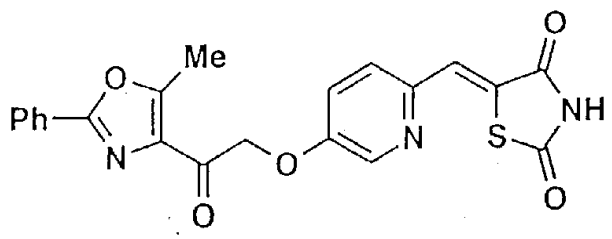
^{1}H-NMR($CDCl_3$)δ:2.70(3H, s),5.49(2H, s),7.40(2H, m),7.93(4H, m),8.45(1H, m),9.96 (1H, s)

II-13

^{1}H-NMR($CDCl_3$)δ:2.70(3H, s),3.88(3H, s),5.51(2H, s),6.99(2H, m),7.35(1H, m),7.97(3H, m),8.51(1H, m),10.0(1H, s)。

第三步

5-((5-(2-氧代-2-(2-苯基-5-甲基-4-噁唑基)乙氧基)-2-吡啶基)亚甲基)噻唑烷-2,4-二酮(化合物 No. I-1a-1)的制备



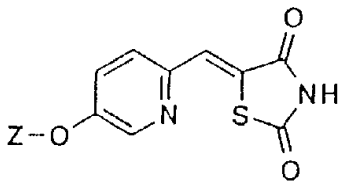
将 0.15g(0.47mmol)化合物 No. II-1 和 0.11g 噻唑烷二酮悬浮在 10ml 用分子筛脱水的甲苯中。在溶液中加入 8.4mg 冰醋酸，再加入 7.9mg 哌啶，形成的溶液于 130℃搅拌 15 小时。薄层色谱确认已无起始物后，向反应混合物中加入氯仿和甲醇以溶解沉淀物。用盐水洗涤由此得到的溶液，以无水硫酸镁干燥。过滤去除干燥剂后，减压蒸除溶剂，对由此得到的残留物进行硅胶柱色谱分离(洗脱剂：氯仿，然后是 5%的甲醇/氯仿)，得到 0.18g(94.1%)浅棕色粉末状的目标产物(化合物 No. I-1a-1)。

mp：229－231℃

MS(FAB) m/e：422$(M+H)^+$

^{1}H-NMR(d^6－DMSO)δ：2.69(3H, s)，5.65(2H, s)，7.5－7.6(4H, m)，7.78－7.81(2H, m)，7.9－8.0(2H, m)，8.49－8.52(1H, m)，12.3(1H, brs)

以同上方式制取以下化合物 No. I-1a-2 至 I-1a-18。(在下表中，Z 对应于结构式 I-1a 化合物的各取代基)



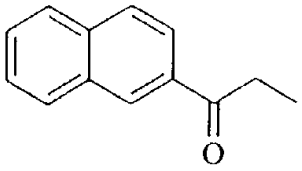
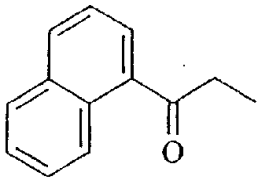
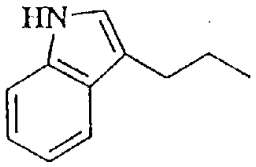
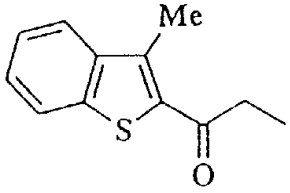
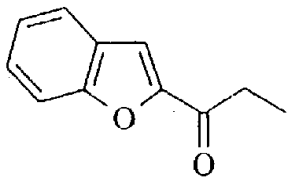
化合物 No.	Z	特征	熔点(℃)	MS(m/e)
I-1a-2	$MeOCH_2$	浅棕色粉末	179.5－196	267$(M+H)^+$FAB
I-1a-3	$PhCH_2$	浅棕色粉末	207.5－209.5	313$(M+H)^+$FAB
I-1a -4	PhCO	棕色油状物		
I-1a -5	Me_3Si	棕色油状物		

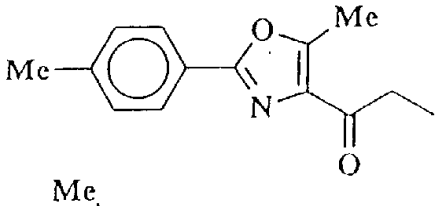
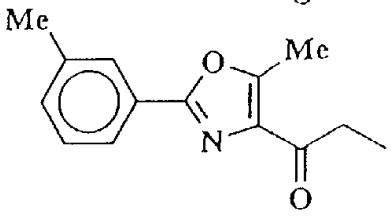
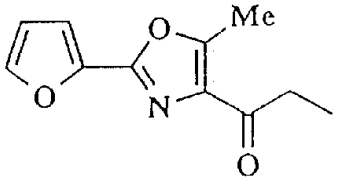
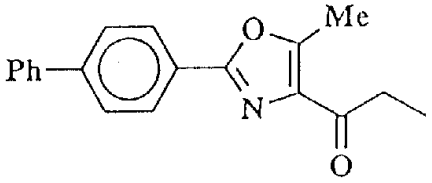
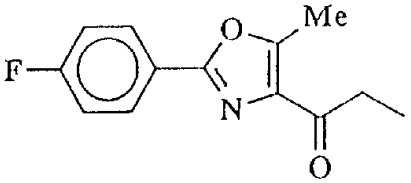
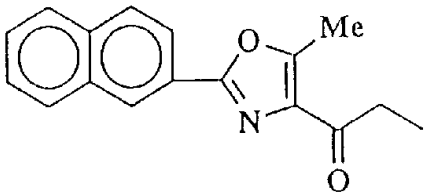
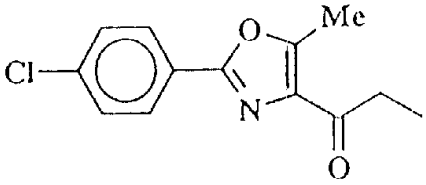
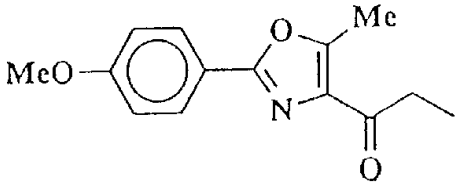
I-1a-2

^{1}H-NMR(d^6－DMSO)δ：3.14(3H, s)，5.34(2H, s)，7.5－7.6(1H, m)，7.77－7.83(2H, m)，8.51－8.52(1H, m)，12.3 (1H)

I-1a-3

^{1}H-NMR(d^6－DMSO)δ：5.27(2H, s)，7.34－7.49(5H, m)，7.59－7.61(1H, m)，7.78－7.84(2H, m)，8.54－8.55(m, 1H)，12.3 (1H)

化合物	Z	特征 熔点(℃)	MS(m/e)
I-1a-14		棕色粉末 >209 (dec.)	
I-1a-15		白色粉末 234-236	
I-1a-16		无色晶体 94-98	
I-1a-17		浅黄色针状体 267-269 (dec.)	410(M^+) FD
I-1a-18		黄棕色粉末 >174 (dec.)	

化合物	Z	特征 熔点(℃)	MS(m/e)
I-1a-6		白色粉末	436(M^++1)
I-1a-7		白色粉末	436(M^++1)
I-1a-8		棕色粉末	412(M^++1)
I-1a-9		棕绿色粉末	497(M^+)
I-1a-10		浅灰色晶体	440(M^++1)
I-1a-11		浅灰色晶体	471(M^+)
I-1a-12		浅黄色晶体 207-215	455, 457(M^+)
I-1a-13		浅黄色晶体 250- (dec.)	451(M^+)

I-1a-6

^{1}H-NMR(DMSO,500MHz)δ:2.40(3H, s),2.68(3H, s),5.65(2H, s),7.40(2H, m),7.55(1H, m),7.80(2H, m),7.93(2H, m),8.52 (1H, m)

I-1a-7

^{1}H-NMR($CDCl_3$,500MHz)δ:2.46(3H, s),2.75(3H, s),5.52(2H, s),7.35(3H, m),7.55(2H, m),7.70(1H, s),7.88(2H, m),8.55 (1H, s)

I-1a-8

^{1}H-NMR($CDCl_3$,500MHz)δ:2.70(3H, s),5.45(2H, s),6.88(1H, m),7.46(1H, m),7.54(1H, m),7.72 (1H, m),8.06(2H, m),8.52 (1H, m)

I-1a-9

^{1}H-NMR($CDCl_3$,500MHz)δ:2.76(3H, s),5.52(2H, s),7.45(5H, m),7.75(4H, m),8.15(3H, m),8.65 (1H, m)

I-1a-10

^{1}H-NMR($CDCl_3$,500MHz)δ:2.74(3H, s),5.49(2H, s),7.21(2H, m),7.29(1H, m),7.46(1H, m),7.72(1H, m),8.05(2H, m),8.52(1H, m),9.4 (1H, bs)

I-1a-11

^{1}H-NMR ($CDCl_3$, 500MHz)δ: 2.79(3H, s),5.55(2H, m),7.2－7.5(3H, m),7.56(1H, m),7.90(4H, m),8.15 (1H, m),8.55(2H, m)

I-1a-12

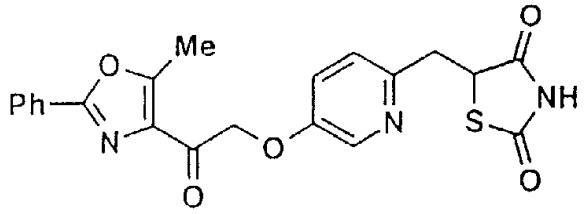
^{1}H-NMR($CDCl_3$,500MHz)δ:2.74(3H, s),5.49(2H, s),7.16(1H, m),7.48(3H, m),7.71(1H, m),8.00(2H, m),8.52 (1H, m)

I-1a-13

^{1}H-NMR($CDCl_3$,500MHz)δ:2.72(3H, s),3.88(3H, s),5.49(2H, s),6.70(2H, m),7.15(1H, m),7.25(1H, m),7.35(1H, m),8.00(2H, m),8.35(1H, s)。

实施例 2

5-((5-(2-氧代-2-(2-苯基-5-甲基-4-噁唑基)乙氧基)-2-吡啶基)甲基)噻唑烷-2,4-二酮(化合物 No. I-2a-1)的制备



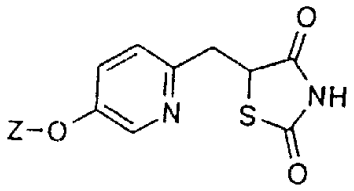
将0.48g(1.1mmol) 5-((5-(2-氧代-2-(2-苯基-5-甲基-4-噁唑基)乙氧基)-2-吡啶基)亚甲基)噻唑烷-2,4-二酮(化合物No.I-1a-1)溶解在50ml用分子筛脱水的四氢呋喃中。在此溶液中加入0.9g 10%的钯碳，催化还原反应在室温下，在7个大气压的氢气下进行5天。过滤去除催化剂后，减压蒸除溶剂，对由此得到的残留物进行硅胶柱色谱分离(洗脱剂：5%的甲醇/氯仿)，得到0.38g(26.3%)浅黄色粉末状的目标产物(化合物No. I-2a-1)。

mp：56－62℃

MS(FAB) m/e：422$(M+H)^+$

^{1}H-NMR($CDCl_3$)δ：2.67(3H, s)，3.26(1H, dd, J＝10.3, 15.7Hz)，3.67(1H, dd, J＝3.8, 15.7Hz)，4.76(1H, dd, J＝3.8, 10.3Hz)，5.36(2H, s)，7.06－7.08(1H, m)，7.1－7.2(1H, m)，7.42－7.44(3H, m)，7.97－7.99(2H, m)，8.23－8.24(1H, m)，8.4(1H, brs)

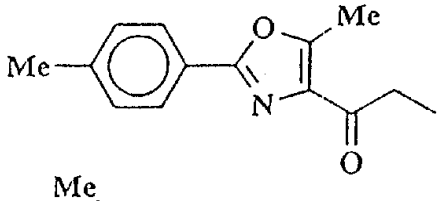
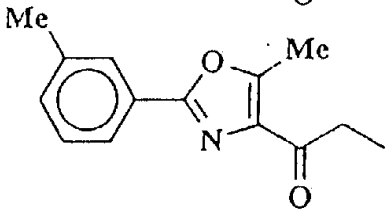
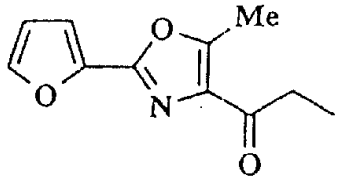
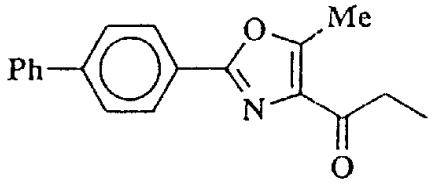
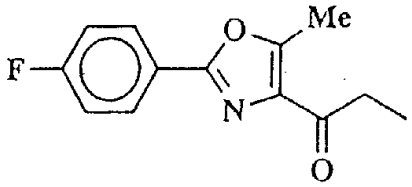
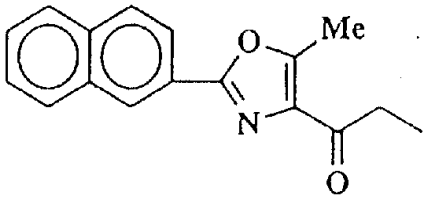
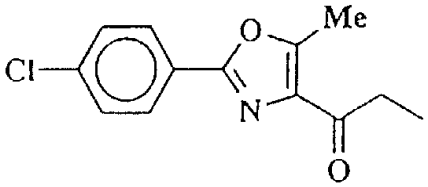
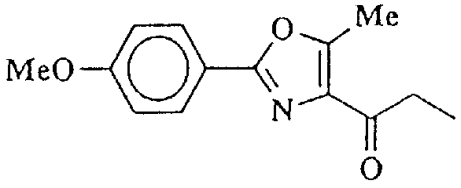
以同上方式制取以下化合物No.I-2a-2和No.I-2a-4至I-2a-11。(在下表中，Z对应于结构式I-2a化合物的各取代基)



化合物No.	Z	特征	熔点(℃)	MS(m/e)
I-2a-2	$MeOCH_2$	浅黄色油状物		269$(M+H)^+$FAB

I-2a-2

^{1}H-NMR(d^6-DMSO)δ：3.34(1H, dd, J＝10, 15Hz)，3.49(3H, s)，3.73(1H, dd, J＝5, 15Hz)，4.83(1H, dd, J＝5, 10Hz)，5.19(2H, s)，7.11－7.14(1H, m)，7.33－7.36(1H, m)，8.32－8.35(1H, m)，9.0 (1H)

化合物	Z	特征 熔点(℃)	MS(m/e)
I-2a-4		白色粉末	438(M^++1)
I-2a-5		无色蜡	437(M^++1)
I-2a-6		浅黄色粉末 175-178	
I-2a-7		浅棕色粉末 55-63	
I-2a-8		浅棕色粉末 60-63	
I-2a-9		浅棕色粉末 75-80	
I-2a-10		浅黄色粉末 145-152	
I-2a-11		白色粉末 155-162	

I-2a-4

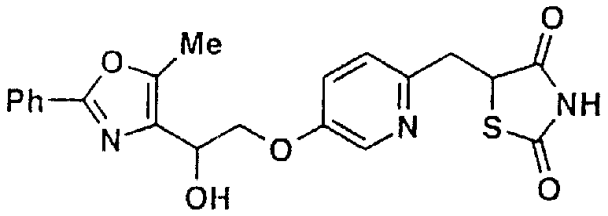
^{1}H-NMR($CDCl_3$,90MHz)δ:2.44(3H, s),2.72(3H, s),3.75(2H, m),4.90(1H, m),5.48(2H, m),7.31(3H, m),7.92(3H, m),8.35(1H, m)

I-2a-5

^{1}H-NMR($CDCl_3$,90MHz)δ:2.40(3H, s),2.70(3H, s),3.50(2H, m),4.80(1H, m),5.38(2H, s),7.25(3H, m),7.83(3H, m),8.29 (1H, m)

实施例 3

5-((5-(2-羟基-2-(2-苯基-5-甲基-4-噁唑基)乙氧基)-2-吡啶基)甲基)噻唑烷-2,4-二酮(化合物 No. I-2a-3)的制备



将 200mg(0.47mmol) 5-((5-(2-氧代-2-(2-苯基-5-甲基-4-噁唑基)乙氧基)-2-吡啶基)甲基)噻唑烷-2,4-二酮(化合物 No. I-2a-1)溶解在 5ml 用分子筛脱水的甲醇中。在此溶液中加入 21.5mg 硼氢化钠,形成的溶液在室温下搅拌 1 天。用氯化铵饱和水溶液终止此反应,用氯仿萃取反应混合物。用盐水洗涤由此获得的反应产物,用无水硫酸镁干燥。过滤去除干燥剂后,减压蒸除溶剂,对由此得到的残留物进行硅胶柱色谱分离(洗脱剂:10%的甲醇/氯仿),得到 203mg(定量)浅棕色粉末状的目标产物(化合物 No. I-2a-3)。

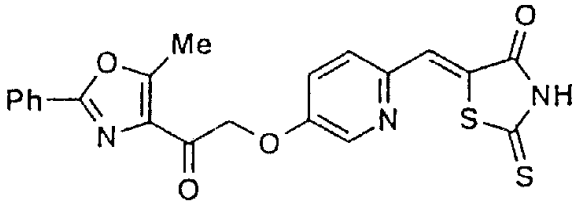
mp:55—72℃

MS(FAB) m/e:426$(M+H)^+$

^{1}H-NMR(d^6-DMSO)δ:2.46(3H, s),3.33(1H, dd, J=10.0, 15.6Hz),3.69(1H, dd, J=3.4, 15.6Hz),4.24(1H, dd, J=4.6, 9.5Hz),4.37(1H, dd, J=7.6, 9.5Hz),4.81(1H, dd, J=3.4, 10.0Hz),5.10(1H, dd, J=4.6, 7.6Hz),7.10—7.15(1H, m),7.2—7.3(1H, m),7.4—7.5(3H, m),7.95—8.05(2H, m),8.25—8.30(1H, m),8.7(1H, brs)

实施例 4

5-((5-(2-羟基-2-(2-苯基-5-甲基-4-噁唑基)乙氧基)-2-吡啶基)亚甲基)绕丹宁(化合物 No. I-1b-1)的制备



将200mg(0.62mmol)化合物No.II-1和91mg绕丹宁悬浮在10ml用分子筛脱水的甲苯中，加热使形成的悬浮液溶解。在水冷却下，向此溶液中加入11.2mg冰醋酸和10.6mg哌啶，形成的溶液在室温下搅拌2天。薄层色谱确认已无起始物后，过滤分离沉淀出的晶体。用冷的甲苯洗涤由此获得的晶体，在50℃干燥2.5小时，得到220mg(81.1%)黄色粉末状的目标产物(化合物No.I-1b-1)。从去除晶体的滤液中还可以回收到50mg目标产物。

mp:217.5—218.5℃

MS(FAB) m/e:438$(M+H)^+$

^{1}H-NMR(d^6-DMSO)δ:2.69(3H, s),5.66(2H, s),7.5—7.7(5H, m),7.8—7.9(1H, m),8.0—8.1(2H, m),8.5—8.6(1H, m),13.6(1H, brs)

测试实施例1:降血糖效果的测定

从Nihon Clea购得KK小鼠和KKAy小鼠非胰岛素依赖型糖尿病(NIDDM)模型(雄性，6—7周龄)(Nakamura, Proc. Jpn. Acad. 38, 348-352, 1962;Iwatsuka等, Endocrinol Jpn, 17, 23-35, 1970)。让它们自由进食高热量食物(CMF,Oriental Yeast)和水。对重约40g的小鼠进行检查。

从眶后窦采集的血样(20μl)，稀释在60单位肝素钠溶液中，并用微型离心机离心。分析上清液。用葡萄糖氧化酶法(葡萄糖分析仪II型,Beckman)测定葡萄糖浓度。由3至4只小鼠组成一组，该组小鼠血中的葡萄糖浓度高于200mg/dl，而且在一次口服0.5%的羧甲基纤维素(CMC)-盐水后24小时，其血糖值的下降不超过10%，对该组进行测试。

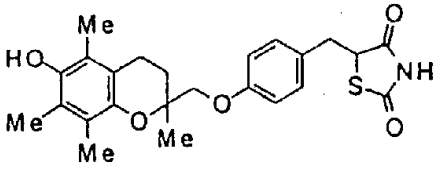
所有被测化合物都悬浮在0.5%的羧甲基纤维素(CMC)-盐水中，给小鼠口服。在服药前和服药24小时后，从眶后窦采集血样，以前述方式测定血糖值。计算出服药前和服药24小时后血糖降低的百分比，以此表示降血糖作用。

KK 小鼠

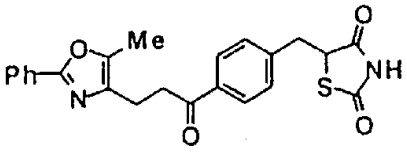
化合物 No.	剤量 (mg/kg)	% 降低
I-1a-1	30	48.9
I-2a-1	30	65.1
格列本脲	30	−3.6
CS-045	30	24.2
CP-86325	30	39.4

KKA^{y} 小鼠

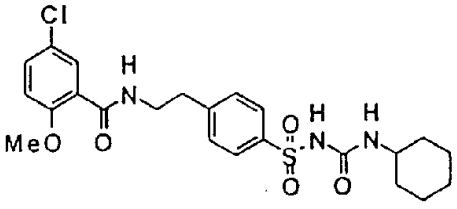
化合物 No.	剤量 (mg/kg)	% 降低
I-1a-1	30	48.6
I-2a-1	30	50.0
I-2a-2	30	39.9
I-2a-5	30	47.7
格列本脲	30	−2.5
CS-045	30	−3.0
CP-86325	30	39.5



CS−045



CP−86325



格列本脲

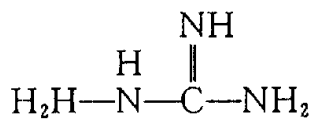
与用作对照的CS-045和CP-86325相比，本发明化合物表现出的降血糖作用相同或更高。在此测试中，格列本脲(胰岛素释放剂)未表现出降血糖作用。

测试实施例2：抗非酶促糖基化效果的测定

当糖尿病人体内长时间维持高血糖浓度时，某些蛋白质会被非酶促糖基化。一般认为非酶促糖基化后的蛋白质会诱导糖尿病并发症(Brownlee，Diabetes，41 suppl 2，57-60，1992)。

因为糖基化蛋白是有荧光的，所以根据现有报道(Doi等，Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.，89，2873-2877，1992；Mitsuhashi等，Diabetes，Vol. 42，826—832，1993)，可以利用荧光来测定糖基化蛋白的量。对其中的实验步骤进行了如下修改。含有0.5M葡萄糖-6-磷酸二Na的5%牛血清白蛋白(BSA)(5% BSA-0.5 M G6P)过滤除菌(用0.45μm孔径的滤器)，并在37℃孵育；阳性对照与1%的二甲基亚砜(DMSO)在37℃孵育；空白在4℃孵育。所有供试溶解在DMSO(DMSO的最终浓度低于1%)中，被加至5%BSA-0.5 M G6P中。在5% BSA-0.5 M G6P与化合物孵育10天后，阳性对照和空白对2L磷酸盐缓冲的盐水透析24小时(分级分子量：12,000-14,000)。透析后的溶液在水中稀释4倍，然后测定荧光(激发波长(ex.)370nm-发射波长(em.)440nm)。利用Lowry法测定透析后溶液(10μL用蒸馏水稀释至20倍)中的蛋白质浓度，表示出每mg蛋白质的荧光。对照(100%)等于阳性对照减空白。抗非酶促糖基化作用计算为对照的百分比。

化合物	浓　度	%降低
I—1a—1	100μg/ml (0.24mM)	42.3
I—1a—2	100μg/ml (0.38mM)	24.1
I—1a—3	100μg/ml (0.32mM)	34.1
CS—045	100μg/ml	10.1
CP—86325	100μg/ml	10.3
氨基胍	(1mM)	21.4
氨基胍	(10mM)	48.9
氨基胍	(100mM)	80.2



氨基胍

本发明化合物表现出的抗非酶促糖基化作用比用作对照的氨基胍强。CS-045 和 CP-86325 未表现出抗非酶促糖基化作用。

测试实施例 3:醛糖还原酶抑制作用的测定

如下制备大鼠肾的醛糖还原酶(AR):用冰冷却的盐水灌注大鼠的肾以除去血液,然后在聚四氟乙烯均质器中用 3 倍体积的冷的 5mM Tris-HCl 缓冲液(pH7.4)将其均质化。匀浆在 45,000×g 离心 40 分钟以去除不溶物,取上清液用作醛糖还原酶样品。

AR 和被测化合物作用的测定

改良的 Inukai 等的方法(Jpn. J. Pharmacol 61, 221-227, 1993),用于测定 AR 活性。用分光光度计(UV-240, Shimadzu, Kyoto)测定 NADPH 的吸光度(340nm),即 AR 辅因子的氧化作用。该实验在 0.1M 的磷酸钠(pH6.2)中进行,其中含有 0.4M 硫酸锂、0.15mM NADPH、酶、各种浓度的被测化合物和 10mM DL-甘油醛。参考空白含有全部上述成份,但不含 DL-甘油醛。加入底物(DL-甘油醛)开始反应。在 30℃测定反应速度 2 分钟。将所有的被测化合物溶解在二甲基亚砜(DMSO)中。反应混合物中 DMSO 的最终浓度决不超过 1%。将抑制剂的作用按抑制 50%的酶活性所需的化合物浓度(IC_{50})来评价。

结果,本发明化合物表现出令人满意的醛糖还原酶抑制活性。

配制实施例 1

片剂

本发明的化合物	1.0g
乳糖	5.0g
结晶纤维素粉末	8.0g
玉米淀粉	3.0g
羟丙基纤维素	1.0g
CMC—Ca	1.5g
硬脂酸镁	0.5g
总计	20.0g

用一般方法将上述成份混合,然后制成 100 片片剂,每片含 10mg 有效成份。

配制实施例 2

胶囊

本发明的化合物	1.0g
乳糖	3.5g
结晶纤维素粉末	10.0g
硬脂酸镁	0.5g
总计	15.0g

用一般方法将上述成份混合，然后将其装入 No.4 明胶胶囊，制得 100 粒胶囊，每粒含 10mg 有效成份。

配制实施例 3

软胶囊

本发明的化合物	1.00g
PEG(聚乙二醇)400	3.89g
饱和脂肪酸甘油三酯	15.00g
薄荷油	0.01g
多乙氧基醚(polysorbate-80)	0.10g
总计	20.00g

用一般方法混合上述成份并将其装入 No.3 软明胶胶囊，制得 100 粒软胶囊，每粒含 10mg 有效成份。

配制实施例 4

软膏

本发明的化合物	1.0g(10.0g)
液体石蜡	10.0g(10.0g)
十六烷醇	20.0g(20.0 g)
白凡士林	68.4g(59.4g)
对羟基苯甲酸乙酯	0.1g(0.1g)
l-蓋醇	0.5g(0.5g)
总计	100.0g

用一般方法将上述成份混合得出 1%(10%)的软膏。

配制实施例 5

栓剂

本发明的化合物	1.0g
Witepsol H15 *	46.9g
Witepsol W35 *	52.0g
多乙氧基醚(polysorbate-80)	0.1g
总计	100.0g

*甘油三酯化合物的商品名

用一般方法熔融混合上述成份并将其倒入栓剂容器中，冷却固化后制得100颗1g重的栓剂，每颗含10mg有效成份。

配制实施例6

粒剂

本发明的化合物	1.0g
乳糖	6.0g
结晶纤维素粉末	6.5g
玉米淀粉	5.0g
羟丙基纤维素	1.0g
硬脂酸镁	0.5g
总计	20.0g

用一般方法将上述成份制成粒状并包装成100包，每包含200mg粒剂，所以每包含10mg有效成份。

工业实用性

由于本发明的化合物具有降血糖作用、抗非酶促糖基化活性以及醛糖还原酶抑制活性，而且毒性较小，所以可用于防止或治疗糖尿病并发症，其中包括糖尿病性眼病(如糖尿病性白内障和糖尿病性视网膜病变)，糖尿病性神经病变，糖尿病性肾病，糖尿病性坏疽等。