

(19)日本国特許庁(JP)

(12)公表特許公報(A)

(11)公表番号
特表2024-531229
(P2024-531229A)

(43)公表日 令和6年8月29日(2024.8.29)

(51)国際特許分類		F I		テーマコード (参考)	
C 0 7 D	209/16 (2006.01)	C 0 7 D	209/16	4 C 0 8 6	
C 0 7 D	333/58 (2006.01)	C 0 7 D	333/58	C S P	4 H 0 5 0
A 6 1 K	31/381 (2006.01)	A 6 1 K	31/381		
A 6 1 K	31/4365(2006.01)	A 6 1 K	31/4365		
C 0 7 D	495/04 (2006.01)	C 0 7 D	495/04	1 0 5 A	
		審査請求	未請求	予備審査請求	未請求 (全253頁) 最終頁に続く
(21)出願番号	特願2024-508631(P2024-508631)	(71)出願人	524054060		
(86)(22)出願日	令和4年8月11日(2022.8.11)		クレオン リミティド ライアビリティ		
(85)翻訳文提出日	令和6年4月5日(2024.4.5)		カンパニー		
(86)国際出願番号	PCT/US2022/040048		アメリカ合衆国, ワシントン 9 8 1 0		
(87)国際公開番号	WO2023/018864		7 - 5 2 3 2 , シアトル, セブンティー		
(87)国際公開日	令和5年2月16日(2023.2.16)		ンス アベニュー ノースウエスト 5 6 0		
(31)優先権主張番号	63/232,539		8 , スイート 1 4 9 2		
(32)優先日	令和3年8月12日(2021.8.12)	(74)代理人	100099759		
(33)優先権主張国・地域又は機関	米国(US)		弁理士 青木 篤		
(31)優先権主張番号	63/232,548	(74)代理人	100123582		
(32)優先日	令和3年8月12日(2021.8.12)		弁理士 三橋 真二		
(33)優先権主張国・地域又は機関	米国(US)	(74)代理人	100117019		
(31)優先権主張番号	63/232,614		弁理士 渡辺 陽一		
		(74)代理人	100141977		
			弁理士 中島 勝		
		最終頁に続く		最終頁に続く	

(54)【発明の名称】 幻覚誘発性及び非幻覚誘発性セロトニン受容体アゴニストならびにそれを作製する方法及び使用する方法

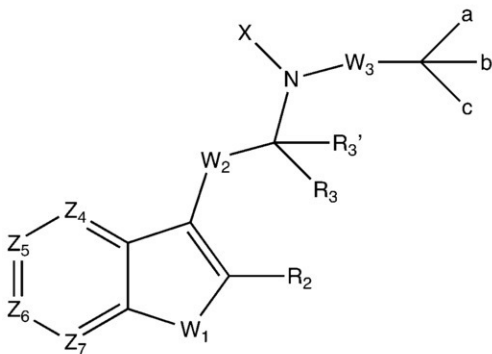
(57)【要約】
幻覚誘発性及び非幻覚誘発性セロトニン受容体アゴニストが、それを作製する方法及び使用する方法に加えて本明細書に開示される。
【選択図】 なし

【特許請求の範囲】

【請求項 1】

式 I I の化合物：

【化 1】



式 I I

(式中、

X は、水素または重水素であり；

W₃ は、 $-(CZ'_2)_n-$ (式中、n は、1 及び 2 から選択される整数であり、各 Z' は、独立して、水素、重水素、及びフッ素から選択される) から選択され；

a、b 及び c は、それぞれ独立して、水素、重水素、及びフッ素から選択され；

W₁ は、NR₁、Se、Se(O)、SeO₂、O、S、S(O)、及びSO₂ から選択され；

W₂ は、 $-CD_2-$ 、 $-CHD-$ 、 $-(CD_2)_2-$ 、 $-CH_2-$ 及び $-(CH_2)_2-$ から選択され；

Z₄ は、N 及び CR₄ から選択され；Z₅ は、N 及び CR₅ から選択され；Z₆ は、N 及び CR₆ から選択され；Z₇ は、N 及び CR₇ から選択され；

R₂、R₃、R₃'、R₆ 及び R₇ は、それぞれ独立して、水素、重水素、 $-N(R_9)_2$ 、 $-SR_9$ 、ハロ、任意に置換された C₁-C₈ アルキル、 $-C_1-C_8$ アルコキシ、及び任意に置換された C₂-C₈ アルケニルから選択され；

R₄ 及び R₅ は、それぞれ独立して、水素、重水素、任意に置換された C₁-C₈ アルキル、任意に置換された C₂-C₈ アルケニル、ハロ、ヒドロキシル、 $-N(R_9)_2$ 、 $-SR_9$ 、 $-C_1-C_8$ アルコキシ、 $-OC(O)R_8$ 、 $-OC(O)OR_8$ 、 $-OP(O)O_2(R_9)_2$ 、及び $-OSO_2R_8$ から選択され；

R₁ は、水素、重水素、任意に置換された C₁-C₈ アルキル、任意に置換された C₂-C₈ アルケニル、 $-C(O)R_8$ 、 $-C(O)OR_8$ 、 $-P(O)O_2(R_9)_2$ 、 $-C(O)N(R_9)_2$ 、 $-SOR_8$ 、及び $-SO_2R_8$ から選択され；

R₈ は、任意に置換された C₁-C₈ アルキル、任意に置換された C₂-C₈ アルケニル、及び任意に置換されたアリールから選択され；

R₉ は、独立して、水素、重水素、任意に置換された C₁-C₈ アルキル、任意に置換された C₂-C₈ アルケニル、及び任意に置換されたアリールから選択される)；ならびに

その塩、溶媒和物、水和物、及びプロドラッグ。

【請求項 2】

Z₄ は、CR₄ であり、R₄ は、フッ素である、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 3】

W₃ は、 $-(CH_2)_n-$ である、先行請求項のいずれか 1 つに記載の化合物。

【請求項 4】

a、b 及び c はそれぞれ、水素である、請求項 1～3 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【請求項 5】

n = 1 である、請求項 1～4 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【請求項 6】

n = 2 である、請求項 1～4 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【請求項 7】

W₂ は、-CH₂- である、請求項 1～6 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【請求項 8】

R₃ 及び R₃ はいずれとも、水素である、請求項 1～7 のいずれか 1 項に記載の化合物。 10

【請求項 9】

W₁ は、Se、Se(O)、SeO₂、O、S、S(O)、及びSO₂ から選択される、請求項 1～8 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【請求項 10】

W₁ は、NR₁ である、請求項 1～8 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【請求項 11】

R₃ は、水素であり、R₃ は、重水素であり、それにより立体中心を形成する、請求項 1～7 または 9～10 のいずれか 1 項に記載の化合物。 20

【請求項 12】

W₁ は、Se、Se(O)、SeO₂、O、S、S(O)、及びSO₂ から選択される、請求項 11 に記載の化合物。

【請求項 13】

W₁ は、NR₁ である、請求項 11 に記載の化合物。

【請求項 14】

前記立体中心は、相対(D)配置を含む、請求項 11～13 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【請求項 15】

前記立体中心は、相対(L)配置を含む、請求項 11～13 のいずれか 1 項に記載の化合物。 30

【請求項 16】

R₄ は、水素である、請求項 1、3～13 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【請求項 17】

Z₄、Z₅、Z₆ または Z₇ のうちの少なくとも 1 つは、窒素である、請求項 1～16 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【請求項 18】

Z₄ は、N であり、Z₅ は、CR₅ であり、Z₆ は、CR₆ であり、Z₇ は、CR₇ である、請求項 1 または 3～17 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【請求項 19】

Z₅ は、N であり、Z₄ は、CR₄ であり、Z₆ は、CR₆ であり、Z₇ は、CR₇ である、請求項 1～17 のいずれか 1 項に記載の化合物。 40

【請求項 20】

Z₆ は、N であり、Z₅ は、CR₅ であり、Z₄ は、CR₄ であり、Z₇ は、CR₇ である、請求項 1～17 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【請求項 21】

Z₇ は、N であり、Z₅ は、CR₅ であり、Z₆ は、CR₆ であり、Z₄ は、CR₄ である、請求項 1～17 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【請求項 22】

W₂ は、-CD₂-、-CHD-、及び -CH₂- から選択される、請求項 1～7 または 8～21 のいずれか 1 項に記載の化合物。 50

【請求項 23】

W₃は、 $-(CZ')_n-$ （式中、Z'は、独立して、各存在について水素及び重水素から選択される）から選択される、請求項1、2、または4～22のいずれか1項に記載の化合物。

【請求項 24】

n = 1である、請求項7～23のいずれか1項に記載の化合物。

【請求項 25】

n = 2である、請求項7～23のいずれか1項に記載の化合物。

【請求項 26】

W₁は、Se、Se(O)、SeO₂、O、S、S(O)、及びSO₂から選択される、請求項14～25のいずれか1項に記載の化合物。

10

【請求項 27】

R₄は、ハロ、ヒドロキシル、 $-C_1-C_8$ アルコキシ、 $-OC(O)R_8$ 、及び $-OC(O)OR_8$ から選択される、請求項1、3～17または19～26のいずれか1項に記載の化合物。

【請求項 28】

R₄は、ヒドロキシル及び $-OC(O)R_8$ から選択される、請求項1、3～17または19～27のいずれか1項に記載の化合物。

【請求項 29】

W₁は、Seである、請求項1～9、11、12または14～28のいずれか1項に記載の化合物。

20

【請求項 30】

W₁は、Sである、請求項1～9、11、12または14～28のいずれか1項に記載の化合物。

【請求項 31】

W₁は、Oである、請求項1～9、11、12または14～28のいずれか1項に記載の化合物。

【請求項 32】

R₁、R₂、R₃、R₃′、R₄、R₅、R₆、R₇、R₈及びR₉の各々についての任意の置換基は、独立して、アリール、重水素、ヘテロアリール、ヒドロキシ、アルコキシ、アルキルスルホンアミド、アリールスルホンアミド、及びハロから選択される、先行請求項のいずれか1つに記載の化合物。

30

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

関連出願の相互参照

本出願は、2022年3月30日に出願された米国仮出願番号63/325,515、2022年3月11日に出願された米国仮出願番号63/319,200、2022年2月26日に出願された米国仮出願番号63/314,379、2022年2月26日に出願された米国仮出願番号63/314,378、2022年2月26日に出願された米国仮出願番号63/314,377、2021年12月3日に出願された米国仮出願番号63/285,688、2021年12月3日に出願された米国仮出願番号63/285,679、2021年12月3日に出願された米国仮出願番号63/285,656、2021年9月2日に出願された米国仮出願番号63/239,965、2021年9月2日に出願された米国仮出願番号63/239,964、2021年9月2日に出願された米国仮出願番号63/239,963、2021年8月28日に出願された米国仮出願番号63/238,135、2021年8月28日に出願された米国仮出願番号63/238,134、2021年8月28日に出願された米国仮出願番号63/238,133、2021年8月28日に出願された米国仮出願番号63/238,132、2021年8月12日に出願された米国仮出願番号63/232,614、2021年8月12日に出願

40

50

された米国仮出願番号 63 / 232, 548、及び 2021 年 8 月 12 日に出版された米国仮出願番号 63 / 232, 539 の優先権を主張し、各々の内容全体は、すべての目的のために参照により本明細書に組み込まれる。

【0002】

本開示は、幻覚誘発性及び非幻覚誘発性セロトニン受容体アゴニスト化合物、それらの組み合わせ、及び多様なヒト病態を処置及び予防するためにそれらを使用する方法に関する。

【背景技術】

【0003】

世界の多くの人々は、精神的または気分障害、例えば、鬱病、不安症、衝動強迫、及び外傷後ストレス障害（PTSD）に罹患している。これらのタイプの疾患及び障害に罹患している脳において変化したシナプス接続が観察されている。所定の「幻覚性」薬、例えば、サイロシビン及び LSD は、臨床試験において鬱病及び PTSD の症状を軽減することが見出されている。これは、神経可塑性と呼ばれるものを刺激する、5-HT_{2A} 受容体のシグナル伝達に起因すると考えられる。神経可塑性は、脳が新たな神経接続を形成することを補助し、これは、迅速かつ持続的な前向きな気分作用を生み出すと考えられている。研究において、サイロシビンベースの心理療法は、単一の高用量後に患者における抑鬱症状をほぼ即座に低減することを実証している。

【0004】

しかしながら、幻覚剤ベースの薬物療法は、それらの幅広い採用を阻害するいくつかの制限を有する。中でも注目すべきは、サイロシビン及び LSD のようなトリプタミン薬は、幻覚誘発性であり、医療専門家の存在下で臨床環境で投与されなければならない。二番目に、サイロシン（プロドラッグサイロシビンの活性化化合物）のようなよく知られている 5-HT_{2A} 受容体アゴニストは、5-HT_{2B} 受容体でそれらの強力なアゴニスト性効果により、心臓毒性であることが知られている。

【0005】

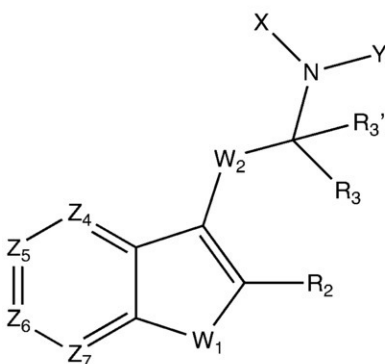
現在まで、5-HT_{2A} 受容体を調節するそれらの能力を維持しながら、非幻覚誘発性及び非心臓毒性であるトリプタミン様アナログまたはトリプタミン模倣体を開発する研究は、（あったとしても）ほとんど行われていない。したがって、医療専門家の見落としなく彼ら自身の家で一人で毎日／毎週投与され得る治療的オプションを患者に提供するためにこれらの特性を示す新規活性化化合物を開発することが以前として必要とされている。

【発明の概要】

【0006】

本明細書には、式 I の幻覚誘発性及び非幻覚誘発性化合物：

【化 1】



式 I

（式中、

X 及び Y は、それぞれ独立して、水素、重水素、任意に置換された C₁ - C₈ アルキル

、及び任意に置換された $C_2 - C_8$ アルケニルから選択され、または Y は、 X 及びそれらの間の窒素原子と一緒に、 O 、 S 、 $S(O)$ 、 SO_2 、及び NR_9 から選択される 1 ～ 2 個の追加の環ヘテロ部位を任意に含む 3 ～ 7 員複素環式環を形成し；

W_1 は、 NR_1 、 O 、 Se 、 $Se(O)$ 、 SeO_2 、 S 、 $S(O)$ 、及び SO_2 から選択され；

W_2 は、 $-CD_2-$ 、 $-CHD-$ 、 $-(CD_2)_2-$ 、 $-CH_2-$ 及び $-(CH_2)_2-$ から選択され；

Z_4 は、 N 及び CR_4 から選択され；

Z_5 は、 N 及び CR_5 から選択され；

Z_6 は、 N 及び CR_6 から選択され；

Z_7 は、 N 及び CR_7 から選択され；

R_1 は、水素、重水素、任意に置換された $C_1 - C_8$ アルキル、任意に置換された $C_2 - C_8$ アルケニル、 $-C(O)R_8$ 、 $-C(O)OR_8$ 、 $-P(O)O_2(R_9)_2$ 、 $-C(O)N(R_9)_2$ 、 $-SOR_8$ 、及び $-SO_2R_8$ から選択され；

R_2 、 R_3 、 R_3 、 R_6 及び R_7 は、それぞれ独立して、水素、重水素、 $-N(R_9)_2$ 、 $-SR_9$ 、ハロ、任意に置換された $C_1 - C_8$ アルキル、 $-C_1 - C_8$ アルコキシ、及び任意に置換された $C_2 - C_8$ アルケニルから選択され、または Y は、非存在であり、 R_3 は、それが結合した炭素及び X が結合した窒素原子と一緒に、 O 、 S 、 $S(O)$ 、 SO_2 、及び NR_9 から選択される 1 ～ 2 個の追加の環ヘテロ部位を任意に含む 3 ～ 7 員複素環式環を形成し；

R_4 及び R_5 は、それぞれ独立して、水素、重水素、任意に置換された $C_1 - C_8$ アルキル、任意に置換された $C_2 - C_8$ アルケニル、ハロ、ヒドロキシル、 $-N(R_9)_2$ 、 $-SR_9$ 、 $-C_1 - C_8$ アルコキシ、 $-OC(O)R_8$ 、 $-OC(O)OR_8$ 、 $-OP(O)O_2(R_9)_2$ 、及び $-OSO_2R_8$ から選択され；

R_8 は、任意に置換された $C_1 - C_8$ アルキル、任意に置換された $C_2 - C_8$ アルケニル、及び任意に置換されたアリールから選択され；

R_9 は、独立して、水素、重水素、任意に置換された $C_1 - C_8$ アルキル、任意に置換された $C_2 - C_8$ アルケニル、及び任意に置換されたアリールから選択される)；ならびに

その塩、溶媒和物、水和物、及びプロドラッグが開示される。

【0007】

本開示はまた、式 I の化合物及び賦形剤を含む、それからなる、またはそれから本質的になる組成物に関する。本開示はさらに、治療的有効量の式 I の化合物を含む薬学的組成物であって、賦形剤は、薬学的に許容可能な担体である、薬学的組成物に関する。

【0008】

本開示はさらに、精神障害を予防または処置する方法であって、治療的有効量の式 I の化合物またはそれを含有する薬学的組成物をそれを必要とする対象に投与する工程を含む、方法に関する。

【0009】

本開示の実施形態はまた、式 I の化合物から選択される第 1 の化合物；及び第 2 の活性化合物を含む、それからなる、またはそれから本質的になる組成物に関する。所定の実施形態では、第 2 の活性化合物は、セロトニン作動性化合物を含む。

【0010】

また、本明細書には、炎症及び／または疼痛を予防または処置する方法であって、治療的有効量の式 I の化合物、または前記式 I の化合物を含有する組成物（例えば、薬学的に許容可能な組成物）をそれを必要とする対象に投与することを含む、方法が記載される。

【0011】

別途文脈が相違して示さない限り、式 I の化合物に対する言及には、式 I のすべての亜属（例えば、式 Ia、Ib、II 等）が含まれる。

【発明を実施するための形態】

10

20

30

40

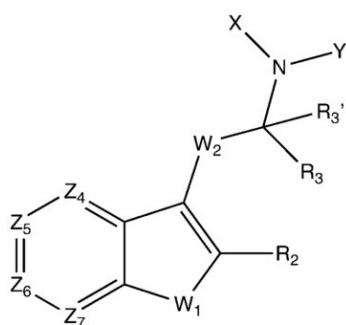
50

【 0 0 1 2 】

化合物

本明細書には、式 I の化合物：

【 化 2 】



式 I

10

(X 及び Y は、それぞれ独立して、水素、重水素、任意に置換された $C_1 - C_8$ アルキル、及び任意に置換された $C_2 - C_8$ アルケニルから選択され、または Y は、X 及びそれらの間の窒素原子と一緒に、O、S、S(O)、 SO_2 、及び NR_9 から選択される 1 ~ 2 個の追加の環ヘテロ部位を任意に含む 3 ~ 7 員複素環式環を形成し；

20

W_1 は、 NR_1 、O、Se、Se(O)、 SeO_2 、S、S(O)、及び SO_2 から選択され；

W_2 は、 $-CD_2-$ 、 $-CHD-$ 、 $-(CD_2)_2-$ 、 $-CH_2-$ 及び $-(CH_2)_2-$ から選択され；

Z_4 は、N 及び CR_4 から選択され；

Z_5 は、N 及び CR_5 から選択され；

Z_6 は、N 及び CR_6 から選択され；

Z_7 は、N 及び CR_7 から選択され；

R_1 は、水素、重水素、任意に置換された $C_1 - C_8$ アルキル、任意に置換された $C_2 - C_8$ アルケニル、 $-C(O)R_8$ 、 $-C(O)OR_8$ 、 $-P(O)O_2(R_9)_2$ 、 $-C(O)N(R_9)_2$ 、 $-SOR_8$ 、及び $-SO_2R_8$ から選択され；

30

R_2 、 R_3 、 R_3' 、 R_6 及び R_7 は、それぞれ独立して、水素、重水素、 $-N(R_9)_2$ 、 $-SR_9$ 、ハロ、任意に置換された $C_1 - C_8$ アルキル、 $-C_1 - C_8$ アルコキシ、及び任意に置換された $C_2 - C_8$ アルケニルから選択され、または Y は、非存在であり、 R_3 は、それが結合した炭素及び X が結合した窒素原子と一緒に、O、S、S(O)、 SO_2 、及び NR_9 から選択される 1 ~ 2 個の追加の環ヘテロ部位を任意に含む 3 ~ 7 員複素環式環を形成し；

R_4 及び R_5 は、それぞれ独立して、水素、重水素、任意に置換された $C_1 - C_8$ アルキル、任意に置換された $C_2 - C_8$ アルケニル、ハロ、ヒドロキシル、 $-N(R_9)_2$ 、 $-SR_9$ 、 $-C_1 - C_8$ アルコキシ、 $-OC(O)R_8$ 、 $-OC(O)OR_8$ 、 $-OP(O)O_2(R_9)_2$ 、及び $-OSO_2R_8$ から選択され；

40

R_8 は、任意に置換された $C_1 - C_8$ アルキル、任意に置換された $C_2 - C_8$ アルケニル、及び任意に置換されたアリールから選択され；

R_9 は、独立して、水素、重水素、任意に置換された $C_1 - C_8$ アルキル、任意に置換された $C_2 - C_8$ アルケニル、及び任意に置換されたアリールから選択される)；ならびに

その塩、溶媒和物、水和物、及びプロドラッグが開示される。

【 0 0 1 3 】

本明細書で使用される場合、用語「アルキル」は、直鎖、分岐状または環状飽和炭化水素基を指す。本明細書で使用される場合、アルキルは、1 ~ 20 個の炭素原子、1 ~ 10

50

個の炭素原子、1～8個の炭素原子、1～6個の炭素原子または1～3個の炭素原子を有する。アルキル基の例には、メチル、エチル、プロピル、イソプロピル、*n*-ブチル、イソブチル、*sec*-ブチル、*tert*-ブチルペンチル、イソペンチル、ヘキシル、ヘプチル、オクチル、シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル、シクロヘプチル、シクロオクチル、シクロノニル、及びシクロデシルが含まれる。特定数の炭素を有するアルキル残基が化学名によって命名される場合または分子式によって特定される場合、その炭素数を有するすべての位置異性体が包含され得る；よって、例えば、「ブチル」には、*n*-ブチル、イソブチル、*sec*-ブチル、及び*tert*-ブチルが含まれ；「プロピル」には、*n*-プロピル及びイソプロピルが含まれる。いくつかの実施形態では、重水素原子は、水素原子のための置き換えであり得る。本明細書に記載のアルキルが「置換された」と称される場合、それらは、本明細書に開示される例示的な化合物及び実施形態に見られるもの、ならびに重水素、アリール、ヘテロアリール、ヒドロキシ、アルコキシ、アルキルスルホンアミド、アリールスルホンアミド、及びハロのような任意の置換基（複数可）で置換され得る。

10

20

【0014】

本明細書で使用される場合、用語「アルケニル」は、1つ以上の炭素-炭素二重結合を含有するアルキル基を指す。「アルキニル」基は、1つ以上の炭素-炭素三重結合を含有するアルキル基である。不飽和アルキル基の例には、とりわけ、ビニル、アリル、 $\text{CH}=\text{CH}(\text{CH}_3)$ 、 $-\text{CH}=\text{C}(\text{CH}_3)_2$ 、 $-\text{C}(\text{CH}_3)=\text{CH}_2$ 、 $-\text{C}(\text{CH}_3)=\text{CH}(\text{CH}_3)$ 、 $-\text{C}(\text{CH}_2\text{CH}_3)=\text{CH}_2$ 、 $-\text{C}\equiv\text{CH}$ 、 $-\text{C}\equiv\text{C}(\text{CH}_3)$ 、 $-\text{C}\equiv\text{C}(\text{CH}_2\text{CH}_3)$ 、 $-\text{CH}_2\text{C}\equiv\text{CH}$ 、 $\text{CH}_2\text{C}\equiv\text{C}(\text{CH}_3)$ 及び $\text{CH}_2\text{C}\equiv\text{C}(\text{CH}_2\text{CH}_3)$ が含まれるがこれらに限定されない。本明細書に記載のアルケニル及びアルキニルが「置換された」と称される場合、それらは、本明細書に開示される例示的な化合物及び実施形態に見られるもの、ならびに重水素、アリール、ヘテロアリール、ヒドロキシ、アルコキシ、アルキルスルホンアミド、アリールスルホンアミド、及びハロのような任意の置換基（複数可）で置換され得る。

【0015】

本明細書で使用される場合、用語「アルコキシ」は、 $-\text{O}-$ （アルキル）であって、アルキルが、上で定義されているとおりであるものを指す。

【0016】

本明細書で使用される場合、用語「アリール」は、単一の環（例えば、フェニル）または複数の縮合環（例えば、ナフチルまたはアントリル）を有する6～14個の炭素原子の芳香族炭素環式基を指す。いくつかの実施形態では、ヘテロアリール基は、基の環部分において6～14個の炭素、他の場合では、6～12個またはさらに6～10個の炭素原子を含有する。特定のアリールには、フェニル、ビフェニル、ナフチル等が含まれる。語句「アリール基」にはまた、縮合環を含有する基、例えば、縮合芳香族-脂肪族環系（例えば、インダニル、テトラヒドロナフチル等）が含まれる。本明細書に記載のアリールが「置換された」と称される場合、それらは、本明細書に開示される例示的な化合物及び実施形態に見られるもの、ならびに重水素、アリール、アルキル、ヘテロアリール、ヒドロキシ、及びハロのような任意の置換基（複数可）で置換され得る。

30

40

【0017】

本明細書で使用される場合、用語「ヘテロアリール」は、ヘテロ芳香族環系において環原子として1～4個のヘテロ原子を有する芳香族環系であって、原子の残りが炭素原子であるものを指す。いくつかの実施形態では、ヘテロアリール基は、基の環部分において3～6個の環原子、他の場合では、6～9個またはさらに6～10個の原子を含有する。好適なヘテロ原子には、酸素、硫黄及び窒素が含まれる。所定の実施形態では、ヘテロアリール環系は、単環式または二環式である。

【0018】

本明細書で使用される場合、用語「複素環式環」または「ヘテロシクリル」または「ヘテロシクロアルキル」は、非芳香族シクロアルキルであって、環炭素原子の1～4個が、

50

独立して、O、S及びNから選択されるヘテロ原子で置き換えられているものを指す。いくつかの実施形態では、ヘテロシクリル基は、3～10個の環メンバーを含む一方で、他のそのような基は、3～5、3～6、または3～8個の環メンバーを有する。ヘテロシクリルはまた、任意の環原子で（すなわち、複素環式環の任意の炭素原子またはヘテロ原子）で他の基に結合され得る。ヘテロシクロアルキル基は、置換または非置換であり得る。ヘテロシクリル基は、飽和及び部分飽和環系を包含する。さらに、ヘテロシクリルという用語は、少なくとも1つのヘテロ原子を含有する任意の非芳香族環を包含することが意図され、その環は、分子の残部への結合にかかわらず、アリールまたはヘテロアリール環に縮合され得る。語句にはまた、ヘテロ原子を含有する架橋多環式環系が含まれる。

【0019】

本明細書で使用される場合、用語「ヘテロ部位」は、ヘテロ原子を含有する任意の基、例えば、アミノ、O、Se、Se(O)、SeO₂、S、S(O)、及びSO₂を指す。

【0020】

本明細書で使用される場合、用語「ハロ」または「ハロゲン」は、フッ素、塩素、臭素またはヨウ素原子を指す。

【0021】

本明細書で使用される場合、用語「ヒドロキシル」は、-OH基を指す。

【0022】

本明細書で使用される場合、用語「アルキルスルホンアミド」は、-S(=O)₂-NR₂を含有する部位であって、各R基が、アルキルまたはHから選択されるものを指す。

【0023】

本明細書で使用される場合、用語「アリールスルホンアミド」は、-S(=O)₂-NR₂を含有する部位であって、各R基が、アリールまたはHから選択されるものを指す。

【0024】

いくつかの実施形態では、式Iの化合物は、1つ以上のキラル中心を含有する。いくつかの状況では、式Iの化合物は、ラセミ混合物を含む。いくつかの実施形態では、式Iの化合物は、(S)エナンチオマーを含む。いくつかの実施形態では、式Iの化合物は、(R)エナンチオマーを含む。いくつかの実施形態では、(S)及び(R)名称は、複数の立体中心を有する化合物の絶対立体化学を指す。そのような場合では、それらのキラル中心の1つのコンフォメーションは、その相対(D)または(L)配置の観点から言及され得る。

【0025】

いくつかの実施形態では、X及びYは、独立して、水素、重水素、及び任意に置換されたC₁-C₈アルキルから選択され、アルキル基は、シクロアルキル部位（例えば、シクロプロピル、シクロブチル等）を含む。

【0026】

いくつかの実施形態では、R₂、R₃、R₃′、R₆及びR₇は、それぞれ独立して、水素、重水素、ハロ、-N(R₉)₂、-SR₉、任意に置換されたC₁-C₈アルキル、-C₁-C₈アルコキシ、及び任意に置換されたC₂-C₈アルケニルから選択され、またはYは、非存在であり、R₃は、それが結合した炭素及びXが結合した窒素原子と一緒に、O、S、S(O)、SO₂、及びNR₉から選択される1～2個の追加の環ヘテロ部位を任意に含む3～7員複素環式環を形成する。いくつかの実施形態では、R₂、R₃、R₆及びR₇は、それぞれ独立して、水素、重水素、ハロ、任意に置換されたC₁-C₈アルキル、及び任意に置換されたC₂-C₈アルケニルから選択される。

【0027】

いくつかの実施形態では、R₄及びR₅は、それぞれ独立して、水素、重水素、-N(R₉)₂、-SR₉、任意に置換されたC₁-C₈アルキル、任意に置換されたC₂-C₈アルケニル、ハロ、ヒドロキシル、-C₁-C₈アルコキシ、-OC(O)R₈、-OC(O)OR₈、-OP(O)O₂(R₉)₂、及び-O-SO₂R₈から選択される。いくつかの実施形態では、R₄及びR₅は、それぞれ独立して、水素、重水素、任意に置換さ

10

20

30

40

50

れた $C_1 - C_8$ アルキル、任意に置換された $C_2 - C_8$ アルケニル、ハロ、ヒドロキシル、 $-C_1 - C_8$ アルコキシ、 $-OC(O)R_8$ 、 $-OC(O)OR_8$ 、 $-OP(O)O_2(R_9)_2$ 、及び $-OSO_2R_8$ から選択される。

【0028】

所定の実施形態では、 R_4 及び R_5 のうちの少なくとも1つは、 $C_1 - C_5$ アルコキシ基、またはいくつかの実施形態では $C_2 - C_4$ アルコキシ基から選択され、それは、直鎖または分岐状 $C_1 - C_5$ アルコキシ基または $C_2 - C_4$ アルコキシ基、例えば直鎖であり得、メトキシまたはエトキシであり得る。いくつかの実施形態では、 R_5 は、 $C_1 - C_5$ アルコキシである。いくつかの実施形態では、 R_4 は、水素及びフッ素から選択され、 R_5 は、 $C_1 - C_5$ アルコキシである。いくつかの実施形態では、 R_4 及び R_5 のうちの少なくとも1つは、 $C_1 - C_5$ アルキルまたは $C_1 - C_4$ アルキル、例えば直鎖 $C_1 - C_4$ アルキルから選択される。いくつかの実施形態では、 R_5 は、メチル、エチル、 n -プロピルまたは n -ブチル、及び例えばメチルまたはエチルから選択される。いくつかの実施形態では、 R_4 及び R_5 のうちの少なくとも1つは、ハロである。いくつかの実施形態では、 R_4 は、フルオロである。いくつかの実施形態では、 R_4 は、フルオロであり、 R_5 は、水素及び $C_1 - C_5$ アルコキシから選択される。いくつかの実施形態では、 R_4 及び R_5 のうちの少なくとも1つは、 $-OC(O)R_8$ である。いくつかの実施形態では R_4 は、 $-OC(O)R_8$ から選択され、 R_5 は、水素またはフルオロである。

10

【0029】

いくつかの実施形態では、 R_8 は、任意に置換された $C_1 - C_8$ アルキル、任意に置換された $C_2 - C_8$ アルケニル、及び任意に置換されたアリールから選択される。いくつかの実施形態では、 R_9 は、水素、重水素、任意に置換された $C_1 - C_8$ アルキル、任意に置換された $C_2 - C_8$ アルケニル、及び任意に置換されたアリールから選択される。いくつかの実施形態では、 R_8 は、メチル、エチル、プロピル、及びイソプロピルから選択される。いくつかの実施形態では、 R_9 は、メチル、エチル、プロピル、及びイソプロピルから選択される。

20

【0030】

式 I の化合物のための例示的なハロ残基には、クロロ、ブロモ、フルオロ、及びヨードが含まれる。所定の実施形態では、式 I の化合物は、少なくとも1つのフルオロ残基を含む。

30

【0031】

いくつかの実施形態では、 W_1 は、 NR_1 、 O 、 Se 、 $Se(O)$ 、 SeO_2 、 S 、 $S(O)$ 、及び SO_2 から選択される。いくつかの実施形態では、 W_1 は、 NR_1 である。いくつかの実施形態では、 W_1 は、 O である。いくつかの実施形態では、 W_1 は、 S である。いくつかの実施形態では、 W_1 は、 Se である。いくつかの実施形態では、 Z_4 は、 N 及び CR_4 から選択され； Z_5 は、 N 及び CR_5 から選択され； Z_6 は、 N 及び CR_6 から選択され； Z_7 は、 N 及び CR_7 から選択される。いくつかの実施形態では、 Z_4 は、 N である。いくつかの実施形態では、 Z_5 は、 N である。いくつかの実施形態では、 Z_6 は、 N である。いくつかの実施形態では、 Z_7 は、 N である。

【0032】

いくつかの実施形態では、 R_1 は、水素、重水素、任意に置換された $C_1 - C_8$ アルキル、任意に置換された $C_2 - C_8$ アルケニル、 $-C(O)R_8$ 、 $-C(O)OR_8$ 、 $-P(O)O_2(R_9)_2$ 、 $-C(O)N(R_9)_2$ 、 $-SOR_8$ 、及び $-SO_2R_8$ から選択される。いくつかの実施形態では、 R_1 は、水素である。いくつかの実施形態では、 R_1 は、任意に置換された $C_1 - C_8$ アルキルである。いくつかの実施形態では、 R_1 は、任意に置換された $C_2 - C_4$ アルキルである。いくつかの実施形態では、 R_1 は、メチルである。いくつかの実施形態では、 R_1 は、エチルである。いくつかの実施形態では、 R_1 は、イソプロピルである。

40

【0033】

いくつかの実施形態では、 W_2 は、 $-CD_2-$ 、 $-CDH-$ 、 $-(CD_2)_2-$ 、 $-C$

50

H₂ー及びー(CH₂)₂ーから選択される。いくつかの実施形態では、W₂は、ーCH₂ーから選択される。いくつかの実施形態では、W₂は、ー(CH₂)₂ーから選択される。いくつかの実施形態では、W₂は、ーCD₂ーから選択される。いくつかの実施形態では、W₂は、ー(CD₂)₂ーから選択される。いくつかの実施形態では、W₂は、ーCDHーである。いくつかの実施形態ではW₂がーCDHーである場合、W₂は、(R)または(S)コンフォメーションにおける立体中心を表す。

【0034】

所定の実施形態では、式Iのアルキル基は、C₁ーC₈アルキル、C₂ーC₈アルキル、C₃ーC₈アルキル、及びC₄ーC₈アルキル、またはメチル、エチル、プロピル、イソプロピル、nーブチル、イソブチル、secーブチル、tertーブチルペンチル、イソペンチル、ヘキシル、ヘプチル、オクチル等から選択される。所定の実施形態では、式Iのアルケニル基は、C₂ーC₈アルケニル、C₃ーC₈アルケニル、及びC₄ーC₈アルケニル、またはエテニル、プロペニル、ブテニル、ペンテニル、ヘキセニル、ヘプテニル、オクテニル等から選択される。所定の実施形態では、式Iのアルキル及びアルケニル基は、非置換であり、またはアリール、ヘテロアリール、ヒドロキシ、アルコキシ、アルキルスルホンアミド、アリールスルホンアミド、及びハロから選択される1つ以上の基で置換され得る。所定の実施形態では、式Iのアリール基は、非置換であり、またはアリール、アルキル、ヘテロアリール、ヒドロキシル、及びハロから選択される1つ以上の基で置換され得る。所定の実施形態では、式Iのアルコキシ基は、非置換であり、またはアリール、アルキル、ヘテロアリール、ヒドロキシル、及びハロから選択される1つ以上の基で置換され得る。

10

20

【0035】

いくつかの実施形態では、X及び／またはYは、直鎖C₁ーC₄アルキル、またはC₂ーC₄アルケニルであり得る。いくつかの実施形態では、X及びYはそれぞれメチルであり、X及びYはそれぞれエチルであり、またはXはメチルであり、Yはエチルである。所定の実施形態ではX及び／またはYは、少なくとも1つのハロ基、例えば、フッ素で任意に置換されたC₁ーC₈アルキルまたはC₂ーC₈アルケニルである。所定の実施形態では、XまたはYのうちの少なくとも1つは、ーCF₃、ーCHF₂、ーCH₂F、ーCH₂CF₃、ーCH₂CHF₂、及びーCH₂CH₂Fから選択される基を含む。所定の実施形態では、XまたはYのうちの少なくとも1つは、ーCD₃、ーCH₂CD₃、ーCD₂CH₃、及びーCD₂CD₃から選択される基を含む。

30

【0036】

いくつかの実施形態では、Xは、非置換C₁ーC₈アルキルである。いくつかの実施形態では、Xは、メチルである。いくつかの実施形態では、Xは、エチルである。いくつかの実施形態では、Xは、nープロピルである。いくつかの実施形態では、Xは、イソプロピルである。いくつかの実施形態では、Xは、シクロプロピルである。いくつかの実施形態では、Yは、水素である。いくつかの実施形態では、Yは、非置換C₁ーC₈アルキルである。いくつかの実施形態では、Yは、メチルである。いくつかの実施形態では、Yは、エチルである。いくつかの実施形態では、Yは、nープロピルである。いくつかの実施形態では、Yは、イソプロピルである。いくつかの実施形態では、Yは、シクロプロピルである。

40

【0037】

いくつかの実施形態では、R₂、R₃、R₃′、R₆及びR₇は、それぞれ独立して、水素、重水素、ハロ、またはC₁ーC₄アルキル、例えば直鎖C₁ーC₄アルキルから選択される。いくつかの実施形態では、R₂、R₃、R₆及びR₇は、それぞれ独立して、水素、重水素、ハロ、メチル、エチル、nープロピル、イソプロピル、nーブチル及びイソブチルから選択される。他の実施形態では、R₂、R₃、R₆及びR₇は、それぞれ独立して、水素、重水素、メチル、及びエチルから選択される。

【0038】

いくつかの実施形態では、R₂は、水素である。いくつかの実施形態では、R₃及びR

50

R_3 は、それぞれ独立して、水素、メチル、及びエチルから選択される。いくつかの実施形態では、 R_3 は、水素である。いくつかの実施形態では、 R_3 は、メチルであり、 R_3' は、水素である。いくつかの実施形態では、 R_3 及び R_3' はいずれとも、水素である。いくつかの実施形態では、 R_3 及び R_3' はいずれとも、重水素である。いくつかの実施形態では、 R_3 は、水素であり、 R_3' は、重水素である。いくつかの実施形態では、 R_3 及び R_3' が同じではない場合、それは立体中心を表し、その場合、式 I の化合物は、ラセミ混合物を含む。いくつかの実施形態では、 R_3 及び R_3' が同じではない場合、それは立体中心を表し、その場合、式 I の化合物は、(S) エナンチオマーを含む。いくつかの実施形態では、 R_3 が水素ではない場合、それは立体中心を表し、その場合、式 I の化合物は、(R) エナンチオマーを含む。いくつかの実施形態では、ラセミ混合物は、純粋エナンチオマーまたは (R) または (S) エナンチオマーのいずれかで増強された混合物を提供するために分割され得る。

10

【0039】

いくつかの実施形態では、 R_6 及び R_7 は、それぞれ独立して、水素、ハロ、メチル、エチル、 n -プロピル、イソプロピル、 n -ブチル及びイソブチルから選択される。いくつかの実施形態では、 R_6 は、水素及びハロから選択される。いくつかの実施形態では、 R_6 は、水素及びフッ素から選択される。いくつかの実施形態では、 R_6 は、フッ素である。いくつかの実施形態では、 R_7 は、水素及び任意に置換された C_1-C_4 アルキルから選択される。いくつかの実施形態では、 R_7 は、水素、メチル及びエチルから選択される。いくつかの実施形態では、 R_7 は、任意に置換された C_1-C_4 アルキルである。いくつかの実施形態では、 R_6 がフルオロである場合、そのときは R_7 は、水素及び任意に置換された C_1-C_4 アルキルから選択される。

20

【0040】

いくつかの実施形態では、 R_4 は、水素であり、 R_5 は、任意に置換された C_1-C_8 アルキル、任意に置換された C_2-C_8 アルケニル、ハロ、ヒドロキシル、 $-C_1-C_8$ アルコキシ、 $-OC(O)R_8$ 、 $-OC(O)OR_8$ 、 $-OP(O)O_2(R_9)_2$ 、及び $-OSO_2R_8$ から選択される。いくつかの実施形態では、 R_5 は、非置換 C_1-C_8 アルキル、ヒドロキシル、 $-C_1-C_8$ アルコキシ、 $-OC(O)R_8$ 、 $-OC(O)OR_8$ 、 $-OP(O)O_2(R_9)_2$ 、及び $-OSO_2R_8$ から選択される。いくつかの実施形態では、 R_5 は、非置換 C_2-C_8 アルキル、ヒドロキシル、 $-C_1-C_8$ アルコキシ、 $-OC(O)R_8$ 、 $-OC(O)OR_8$ 、 $-OP(O)O_2(R_9)_2$ 、及び $-OSO_2R_8$ から選択される。いくつかの実施形態では、 R_5 は、ヒドロキシである。いくつかの実施形態では、 R_5 は、 $-OC(O)R_8$ である。いくつかの実施形態では、 R_8 は、非置換 C_1-C_4 アルキルである。いくつかの実施形態では、 R_8 は、メチルである。

30

【0041】

いくつかの実施形態では、 R_5 は、水素であり、 R_4 は、任意に置換された C_1-C_8 アルキル、任意に置換された C_2-C_8 アルケニル、ハロ、ヒドロキシル、 $-C_1-C_8$ アルコキシ、 $-OC(O)R_8$ 、 $-OC(O)OR_8$ 、 $-OP(O)O_2(R_9)_2$ 、及び $-OSO_2R_8$ から選択される。いくつかの実施形態では、 R_4 は、非置換 C_1-C_8 アルキル、ヒドロキシル、 $-C_1-C_8$ アルコキシ、 $-OC(O)R_8$ 、 $-OC(O)OR_8$ 、 $-OP(O)O_2(R_9)_2$ 、及び $-OSO_2R_8$ から選択される。いくつかの実施形態では、 R_5 は、非置換 C_1-C_8 アルキル、 $-C_2-C_8$ アルコキシ、 $-OC(O)R_8$ 、 $-OC(O)OR_8$ 、 $-OP(O)O_2(R_9)_2$ 、及び $-OSO_2R_8$ から選択される。いくつかの実施形態では、 R_5 は、 $-OC(O)R_8$ である。いくつかの実施形態では、 R_8 は、非置換 C_1-C_4 アルキルである。いくつかの実施形態では、 R_8 は、メチルである。

40

【0042】

所定の実施形態では、式 I の化合物上の 1 つ以上の水素原子は、1 つ以上の重水素原子で置き換えられ得る。例えば、所定の実施形態では、 R_6 は、水素のための置き換えとして重水素原子を含み得、または R_7 が $-CH_3$ である場合、各水素原子は、 $-CD_3$ 残基

50

を形成するために置き換えられ得る。同様に、別の非限定的な例には、X及び／またはYが $-CH_3$ である場合、各水素原子が $-CD_3$ 残基を形成するために置き換えられ得ることが含まれる。

【0043】

いくつかの実施形態では、 R_4 は、ハロではない。いくつかの実施形態では、 R_5 は、ハロではない。いくつかの実施形態では、 R_4 及び R_5 の一方は、水素であり、 R_4 及び R_5 の他方は、ヒドロキシル、 $-OC(O)R_8$ 、 $-OC(O)OR_8$ 、及び $-C_1-C_8$ アルコキシから選択され； R_6 は、水素及びフッ素から選択され； R_7 は、水素、メチル及びエチルから選択される。

【0044】

式Iの化合物についてのいくつかの実施形態では、X及びYがいずれともメチルであり、 W_1 がSであり、 W_2 が $-CH_2-$ であり、 Z_4 が CR_4 であり、 Z_5 が CR_5 であり、 Z_6 が CR_6 であり、 Z_7 が CR_7 であり、 R_2 、 R_3 、 R_5 、 R_6 、及び R_7 がすべて水素である場合、そのときは R_4 は、ヒドロキシルでもメトキシでもない。

【0045】

式Iの化合物についてのいくつかの実施形態では、X及びYがいずれともメチルであり、 W_1 がSであり、 W_2 が $-CH_2-$ であり、 Z_4 が CR_4 であり、 Z_5 が CR_5 であり、 Z_6 が CR_6 であり、 Z_7 が CR_7 であり、 R_2 、 R_3 、 R_4 、 R_6 、及び R_7 がすべて水素である場合、そのときは R_5 は、ヒドロキシルでもメトキシでもない。

【0046】

式Iの化合物についてのいくつかの実施形態では、X及びYがいずれともエチルであり、 W_1 がSであり、 W_2 が $-CH_2-$ であり、 Z_4 が CR_4 であり、 Z_5 が CR_5 であり、 Z_6 が CR_6 であり、 Z_7 が CR_7 であり、 R_2 、 R_3 、 R_4 、 R_6 、及び R_7 がすべて水素である場合、そのときは R_5 は、メトキシではない。

【0047】

式Iの化合物についてのいくつかの実施形態では、X及びYがいずれともメチルであり、 W_1 がSであり、 W_2 が $-CH_2-$ であり、 Z_4 が CR_4 であり、 Z_5 が CR_5 であり、 Z_6 が CR_6 であり、 Z_7 が CR_7 である場合、そのときは R_2 、 R_3 、 R_4 、 R_5 、 R_6 、または R_7 のうちの少なくとも1つは、水素ではない。

【0048】

式Iの化合物についてのいくつかの実施形態では、X及びYがいずれともプロピルであり、 W_1 がSであり、 W_2 が $-CH_2-$ であり、 Z_4 が CR_4 であり、 Z_5 が CR_5 であり、 Z_6 が CR_6 であり、 Z_7 が CR_7 である場合、そのときは R_2 、 R_3 、 R_4 、 R_5 、 R_6 、または R_7 のうちの少なくとも1つは、水素ではない。

【0049】

式Iの化合物についてのいくつかの実施形態では、Xがメチルであり、Yが水素であり、 W_1 がSであり、 W_2 が $-CH_2-$ であり、 Z_4 が CR_4 であり、 Z_5 が CR_5 であり、 Z_6 が CR_6 であり、 Z_7 が CR_7 である場合、そのときは R_2 、 R_3 、 R_4 、 R_5 、 R_6 、または R_7 のうちの少なくとも1つは、水素ではない。

【0050】

式Iの化合物についてのいくつかの実施形態では、Xがエチルであり、Yが水素であり、 W_1 がSであり、 W_2 が $-CH_2-$ であり、 Z_4 が CR_4 であり、 Z_5 が CR_5 であり、 Z_6 が CR_6 であり、 Z_7 が CR_7 である場合、そのときは R_2 、 R_3 、 R_4 、 R_5 、 R_6 、または R_7 のうちの少なくとも1つは、水素ではない。

【0051】

式Iの化合物についてのいくつかの実施形態では、X及びYがいずれともメチルであり、 W_1 がSeであり、 W_2 が $-CH_2-$ であり、 Z_4 が CR_4 であり、 Z_5 が CR_5 であり、 Z_6 が CR_6 であり、 Z_7 が CR_7 であり、 R_2 、 R_3 、 R_5 、 R_6 、及び R_7 がすべて水素である場合、そのときは R_4 は、ヒドロキシルでもメトキシでもない。

【0052】

式 I の化合物についてのいくつかの実施形態では、X 及び Y がいずれともメチルであり、 W_1 が O であり、 W_2 が $-CH_2-$ であり、 Z_4 が CR_4 であり、 Z_5 が CR_5 であり、 Z_6 が CR_6 であり、 Z_7 が CR_7 であり、 R_2 、 R_3 、 R_4 、 R_6 、及び R_7 がすべて水素である場合、そのときは R_5 は、ヒドロキシでも、メトキシでも、またはブロモでもない。

【0053】

式 I の化合物についてのいくつかの実施形態では、X 及び Y がいずれともメチルであり、 W_1 が O であり、 W_2 が $-CH_2-$ であり、 Z_4 が CR_4 であり、 Z_5 が CR_5 であり、 Z_6 が CR_6 であり、 Z_7 が CR_7 であり、 R_2 、 R_3 、 R_4 、 R_5 、及び R_6 がすべて水素である場合、そのときは R_7 は、メトキシではない。

10

【0054】

式 I の化合物についてのいくつかの実施形態では、X がメチルまたはエチルであり、Y が水素であり、 W_1 が O であり、 W_2 が $-CH_2-$ であり、 Z_4 が CR_4 であり、 Z_5 が CR_5 であり、 Z_6 が CR_6 であり、 Z_7 が CR_7 であり、 R_2 、 R_3 、 R_4 、 R_6 、及び R_7 がすべて水素である場合、そのときは R_5 は、メトキシではない。

【0055】

式 I の化合物についてのいくつかの実施形態では、X がメチルであり、Y が水素であり、 W_1 が O であり、 W_2 が $-CH_2-$ であり、 Z_4 が CR_4 であり、 Z_5 が CR_5 であり、 Z_6 が CR_6 であり、 Z_7 が CR_7 である場合、そのときは R_2 、 R_3 、 R_4 、 R_5 、 R_6 、または R_7 のうちの少なくとも 1 つは、水素ではない。

20

【0056】

式 I の化合物についてのいくつかの実施形態では、X がメチルであり、Y が水素であり、 W_1 が O であり、 W_2 が $-CH_2-$ であり、 Z_4 が CR_4 であり、 Z_5 が CR_5 であり、 Z_6 が CR_6 であり、 Z_7 が CR_7 であり、 R_2 、 R_3 、 R_4 、 R_5 、及び R_7 がすべて水素である場合、そのときは R_6 は、メトキシではない。

【0057】

式 I の化合物についてのいくつかの実施形態では、X がメチルであり、Y が水素であり、 W_1 が O であり、 W_2 が $-CH_2-$ であり、 Z_4 が CR_4 であり、 Z_5 が CR_5 であり、 Z_6 が CR_6 であり、 Z_7 が CR_7 であり、 R_2 、 R_3 、 R_4 、 R_5 、及び R_6 がすべて水素である場合、そのときは R_7 は、メトキシではない。

30

【0058】

式 I の化合物についてのいくつかの実施形態では、X 及び Y がいずれともメチルであり、 W_1 が NH であり、 W_2 が $-CH_2-$ であり、 Z_4 が N であり、 Z_5 が CR_5 であり、 Z_6 が CR_6 であり、 Z_7 が CR_7 である場合、 R_2 、 R_3 、 R_5 、 R_6 または R_7 のうちの少なくとも 1 つは、水素ではない。

【0059】

式 I の化合物についてのいくつかの実施形態では、X 及び Y がいずれともメチルであり、 W_1 が NH であり、 W_2 が $-CH_2-$ であり、 Z_4 が N であり、 Z_5 が CR_5 であり、 Z_6 が CR_6 であり、 Z_7 が CR_7 であり、 R_2 、 R_3 、 R_6 及び R_7 がすべて水素である場合、 R_5 は、メチルでもメトキシでもない。

40

【0060】

式 I の化合物についてのいくつかの実施形態では、X 及び Y がいずれともメチルであり、 W_1 が NH であり、 W_2 が $-CH_2-$ であり、 Z_4 が CR_4 であり、 Z_5 が N であり、 Z_6 が CR_6 であり、 Z_7 が CR_7 である場合、 R_2 、 R_3 、 R_4 、 R_6 または R_7 のうちの少なくとも 1 つは、水素ではない。

【0061】

式 I の化合物についてのいくつかの実施形態では、X 及び Y がいずれともメチルであり、 W_1 が NH であり、 W_2 が $-CH_2-$ であり、 Z_4 が CR_4 であり、 Z_5 が N であり、 Z_6 が CR_6 であり、 Z_7 が CR_7 であり、 R_3 、 R_4 、 R_6 及び R_7 がすべて水素である場合、 R_2 は、エチルでもヨードでもない。

50

【0062】

式Iの化合物についてのいくつかの実施形態では、X及びYがいずれともエチルであり、 W_1 がNHであり、 W_2 が $-CH_2-$ であり、 Z_4 が CR_4 であり、 Z_5 が CR_5 であり、 Z_6 がNであり、 Z_7 が CR_7 である場合、 R_2 、 R_3 、 R_4 、 R_5 または R_7 のうちの少なくとも1つは、水素ではない。

【0063】

式Iの化合物についてのいくつかの実施形態では、X及びYがいずれともメチルであり、 W_1 がNHであり、 W_2 が $-CH_2-$ であり、 Z_4 が CR_4 であり、 Z_5 が CR_5 であり、 Z_6 が CR_6 であり、 Z_7 がNであり、 R_2 、 R_3 、 R_4 、及び R_5 がすべて水素である場合、 R_6 は、クロロではない。

10

【0064】

式Iの化合物についてのいくつかの実施形態では、Xが水素であり、Yがメチルであり、 W_1 がNHであり、 W_2 が $-CH_2-$ であり、 Z_4 が CR_4 であり、 Z_5 が CR_5 であり、 Z_6 が CR_6 であり、 Z_7 がNであり、 R_2 、 R_3 、 R_4 、及び R_5 がすべて水素である場合、 R_6 は、クロロではない。

【0065】

式Iの化合物についてのいくつかの実施形態では、X及びYがいずれともメチルであり、 W_1 がNHであり、 W_2 が $-CH_2-$ であり、 Z_4 が CR_4 であり、 Z_5 が CR_5 であり、 Z_6 が CR_6 であり、 Z_7 がNである場合、 R_2 、 R_3 、 R_4 、 R_5 または R_6 のうちの少なくとも1つは、水素ではない。

20

【0066】

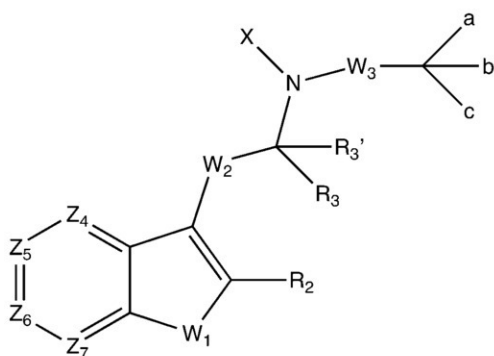
いくつかの実施形態では、X及びYがいずれともメチルであり、 W_1 がNHであり、 W_2 が $-CH_2-$ であり、 Z_4 が CR_4 であり、 Z_5 が CR_5 であり、 Z_6 が CR_6 であり、 Z_7 がNであり、 R_3 、 R_4 、 R_5 及び R_6 がすべて水素である場合、 R_2 は、エチルでもヨードでもない。

【0067】

いくつかの実施形態では、式Iの化合物は、式IIの化合物：

【化3】

30



式II

40

(式中、

Xは、水素及び重水素から選択され；

W_3 は、非存在であり、または $-(CZ'_2)_n-$ (式中、nは、1及び2から選択される整数であり、各 Z' は、独立して、水素、重水素、及びフッ素から選択される) から選択され；

a、b及びcは、それぞれ独立して、水素、重水素、及びフッ素から選択され；

すべての他の可変要素は、上で定義されたとおりである) によって表される。

【0068】

式IIの化合物についての所定の実施形態では、 W_3 は、非存在である。所定の実施形

50

態では、 $n = 1$ である。所定の実施形態では、 Z_4 は、 CR_4 であり、 R_4 は、フッ素である。所定の実施形態では、 Z_6 は、 CR_6 であり、 R_6 は、フッ素である。所定の実施形態では、 Z_4 は、 N である。所定の実施形態では、 Z_5 は、 N である。所定の実施形態では、 Z_6 は、 N である。所定の実施形態では、 Z_7 は、 N である。所定の実施形態では、 W_3 は、 $-CH_2-$ 、 $-CHF-$ 、 $-CF_2-$ 、及び $-CD_2-$ から選択される。所定の実施形態では、 a は、フッ素であり、 b 及び c はそれぞれ、水素である。所定の実施形態では、 a は、水素であり、 b 及び c はそれぞれ、フッ素である。所定の実施形態では、 a 、 b 及び c はすべて、フッ素である。所定の実施形態では、 a 、 b 及び c はすべて、水素である。所定の実施形態では、 a 、 b 及び c はすべて、重水素である。

【0069】

所定の実施形態では、 W_2 は、 $-CH_2-$ 、 $-CD_2-$ 及び $-CHD-$ から選択される。所定の実施形態では、 R_3 及び R_3 はいずれとも、水素である。所定の実施形態では、 R_3 及び R_3 はいずれとも、重水素である。所定の実施形態では、 R_3 は、水素であり、 R_3 は、重水素である。所定の実施形態では、 W_2 は、 $-CHD-$ であり、 R_3 は、水素であり、 R_3 は、重水素である。所定の実施形態では、 W_3 は、 $-CH_2-$ である。所定の実施形態では、 W_3 は、 $-CD_2-$ である。いくつかの実施形態では、 W_2 は、 $-CH_2-$ であり、 R_3 は、水素であり、 R_3 は、重水素であり、 Z_4 は、 CR_4 であり、 Z_5 は、 CR_5 であり、 Z_6 は、 CR_6 であり、 Z_7 は、 CR_7 であり、 R_2 、 R_4 、 R_5 、 R_6 及び R_7 はすべて、水素である。いくつかの実施形態では、 W_2 は、 $-CH_2-$ であり、 R_3 は、重水素であり、 R_3 は、水素であり、 Z_4 は、 CR_4 であり、 Z_5 は、 CR_5 であり、 Z_6 は、 CR_6 であり、 Z_7 は、 CR_7 であり、 R_2 、 R_4 、 R_5 、 R_6 及び R_7 はすべて、水素である。

【0070】

例示的な式Iの化合物には、

10

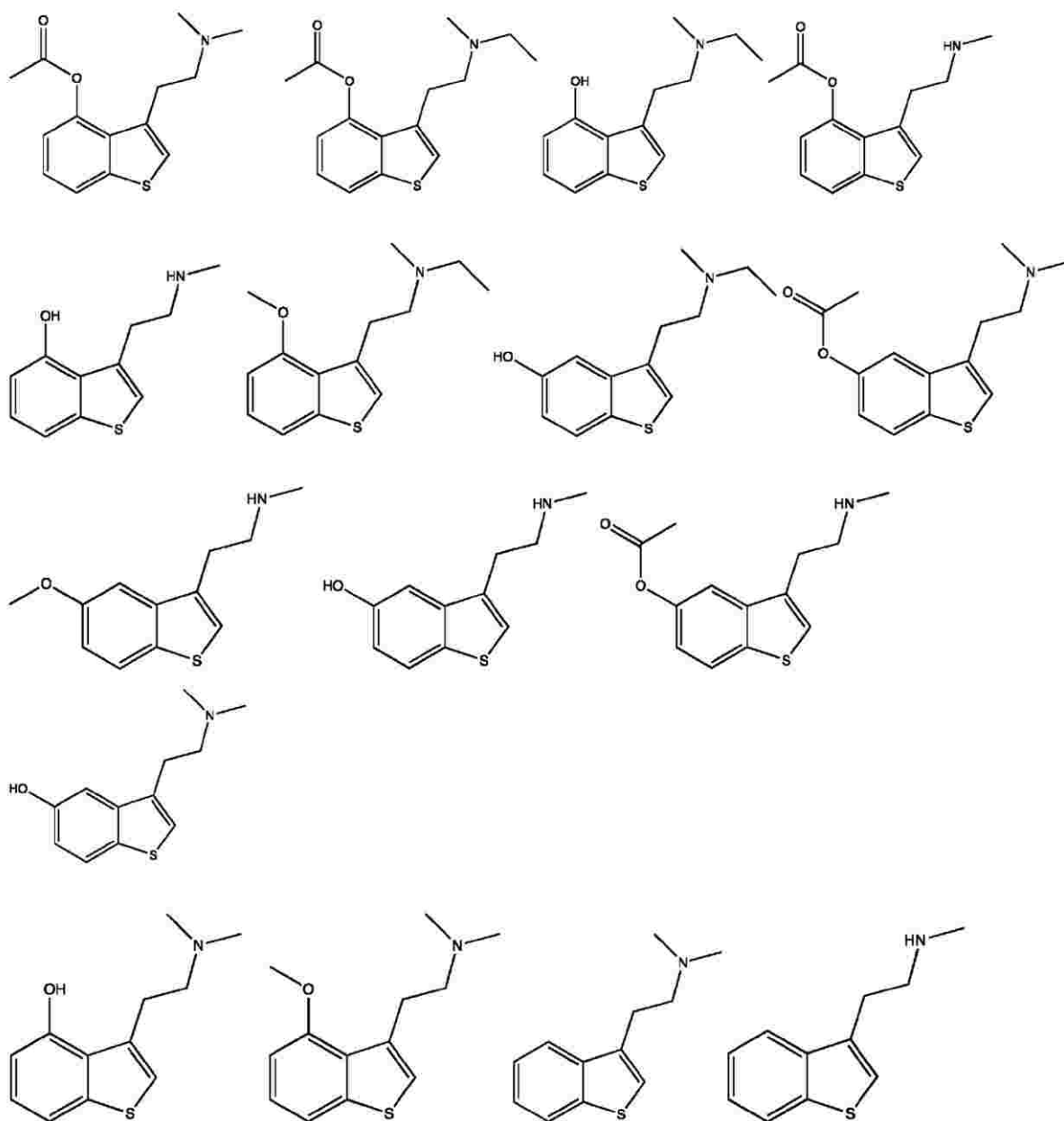
20

30

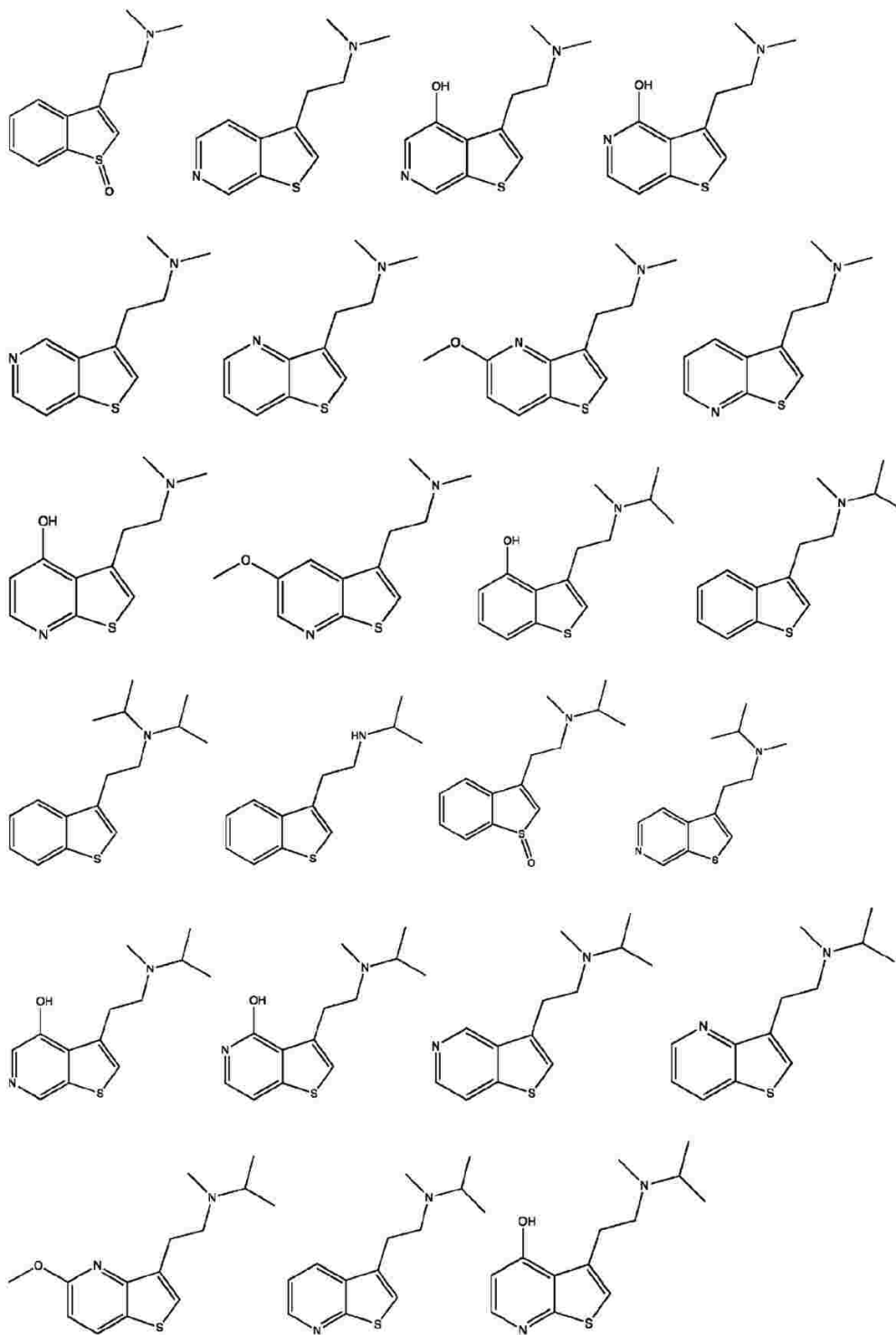
40

50

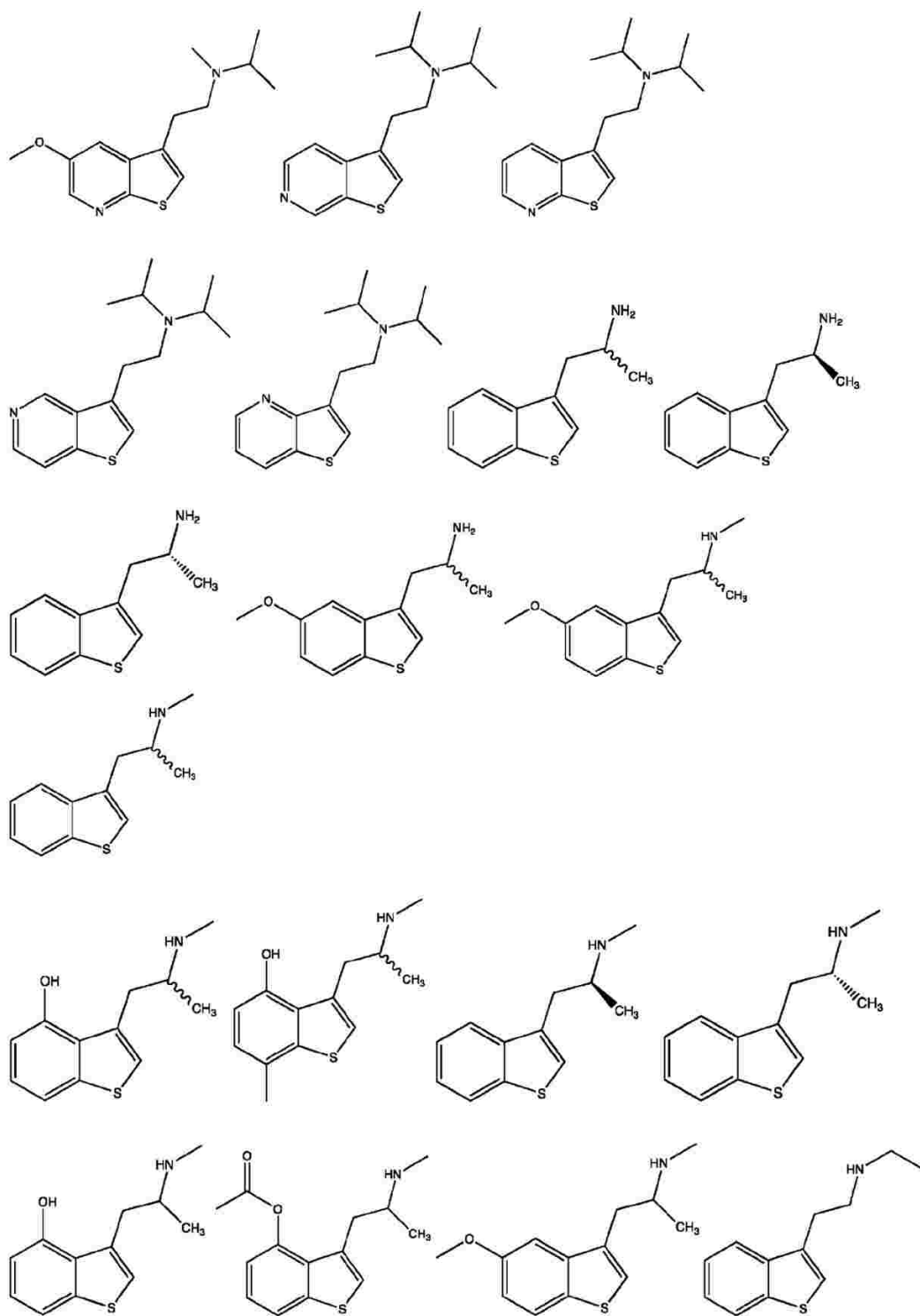
【化 4 - 1】



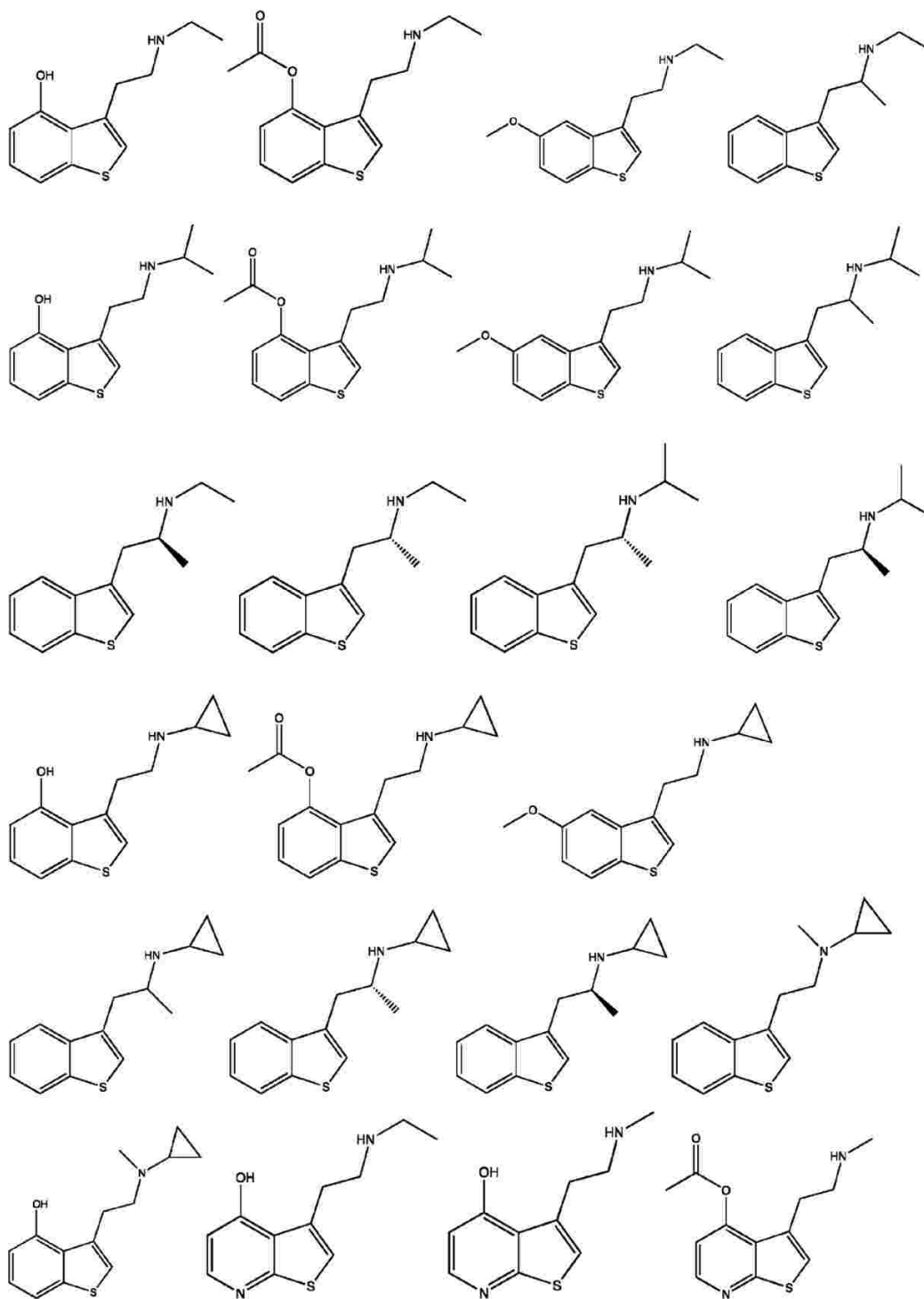
【化 4 - 2】



【化 4 - 3】



【化 4 - 4】



10

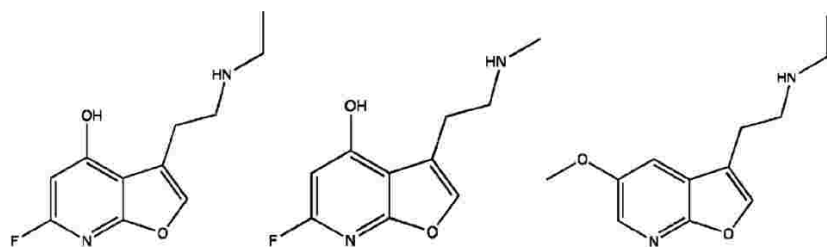
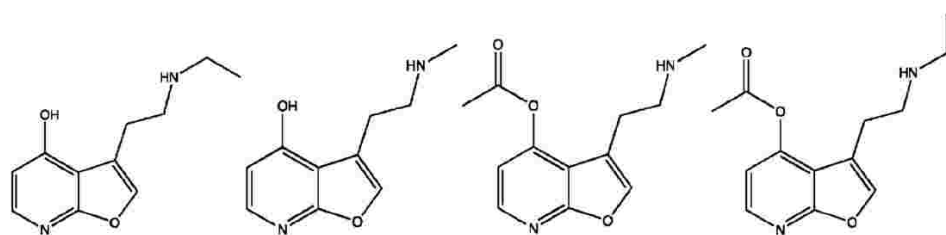
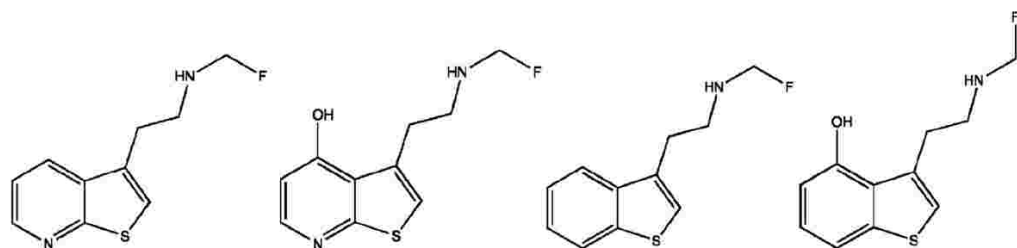
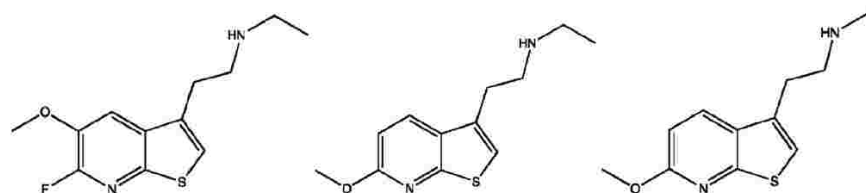
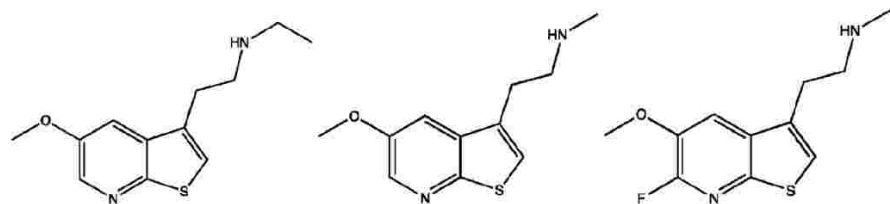
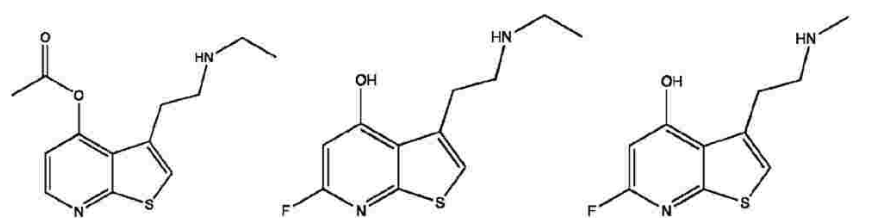
20

30

40

50

【化 4 - 5】



10

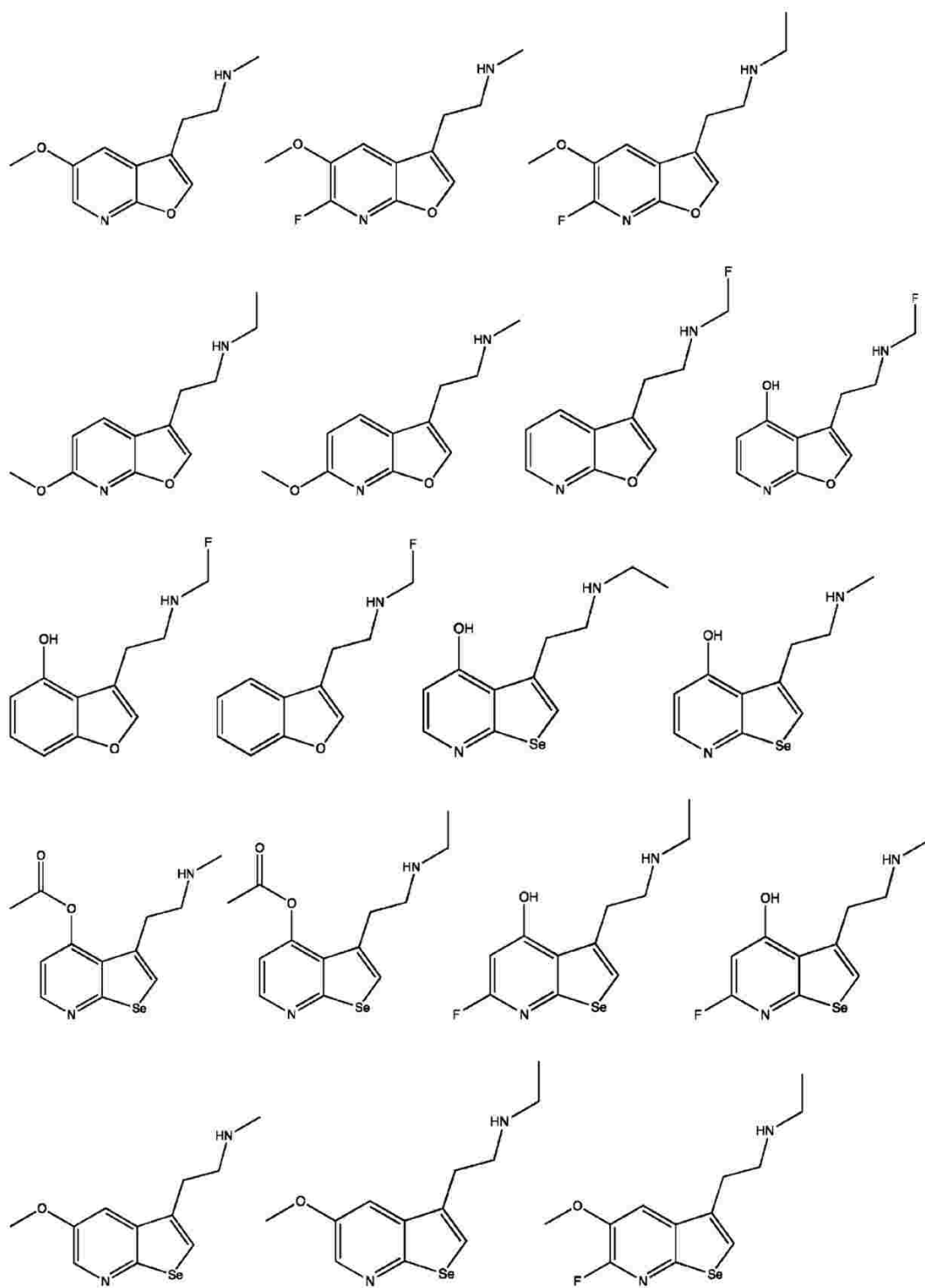
20

30

40

50

【化 4 - 6】



10

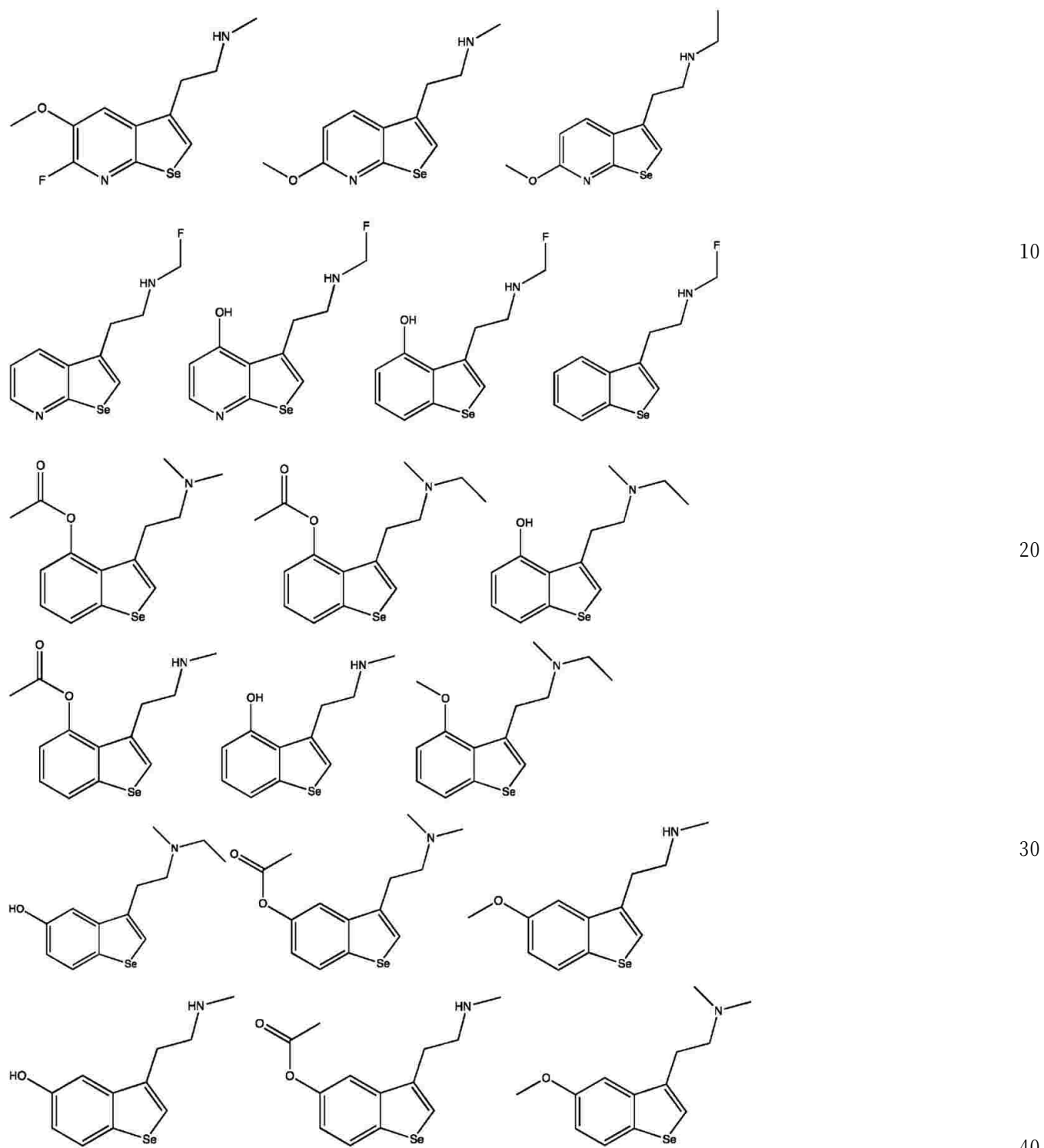
20

30

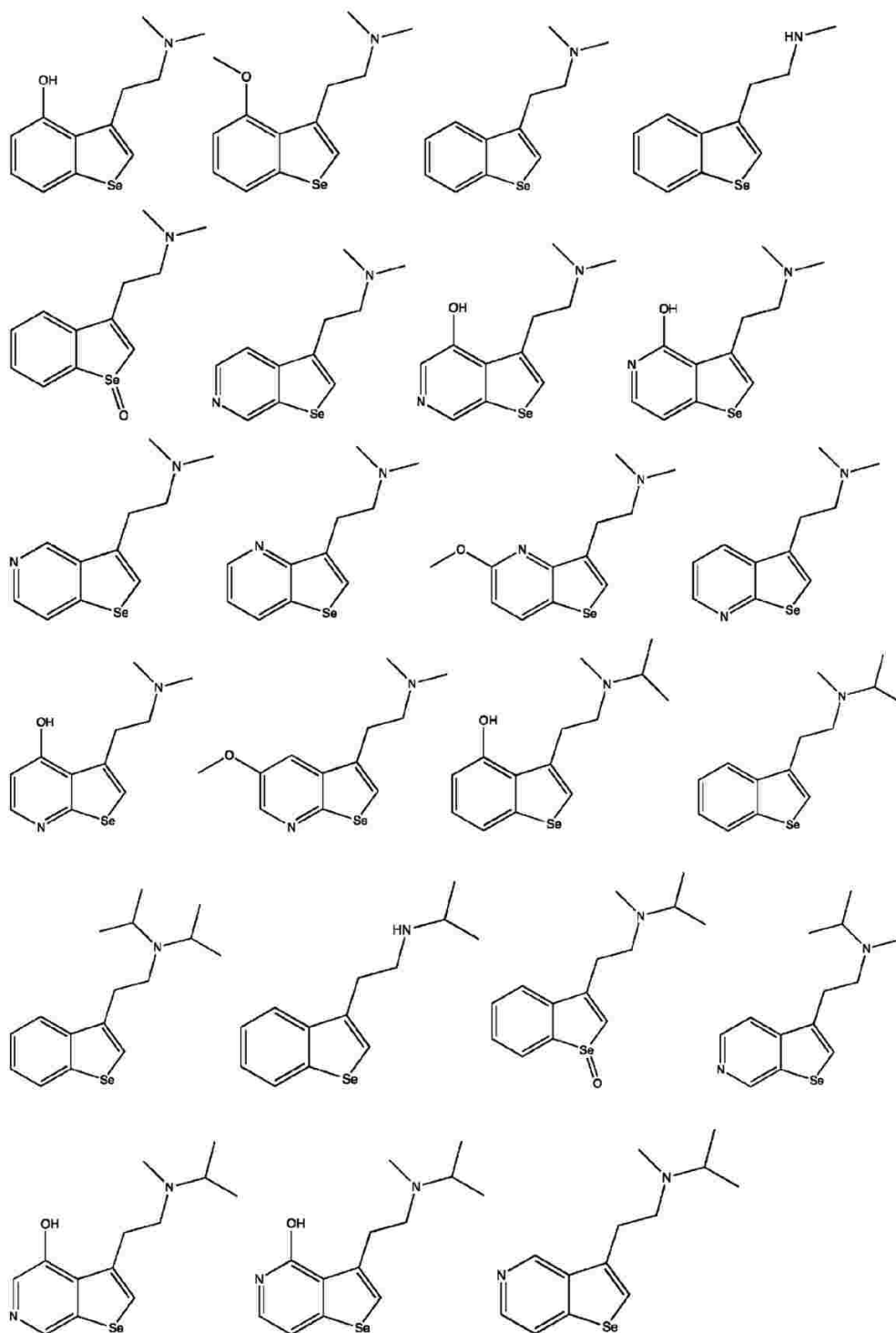
40

50

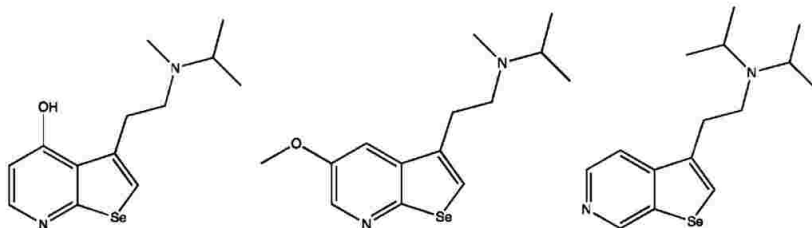
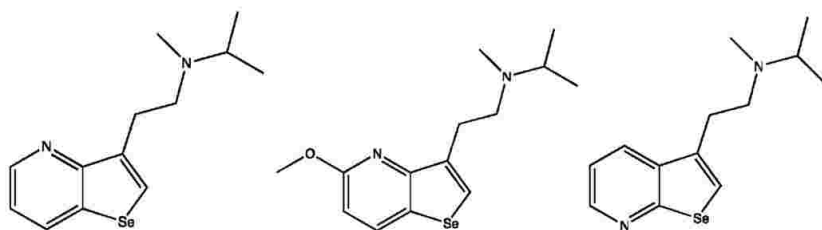
【化 4 - 7】



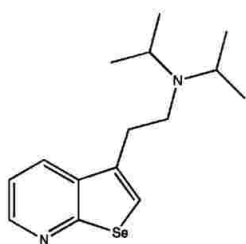
【化 4 - 8】



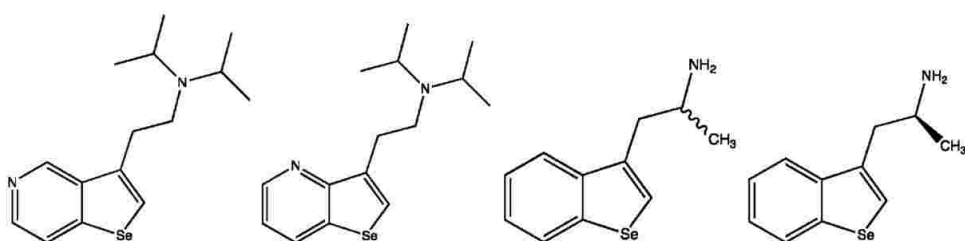
【化 4 - 9】



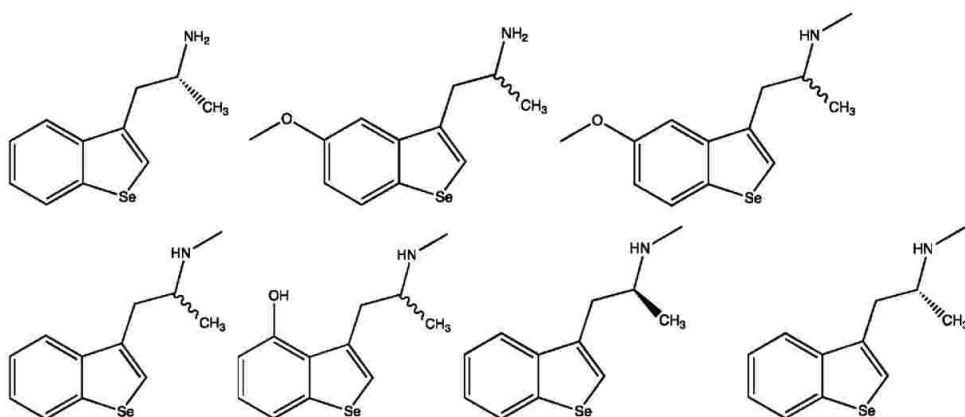
10



20



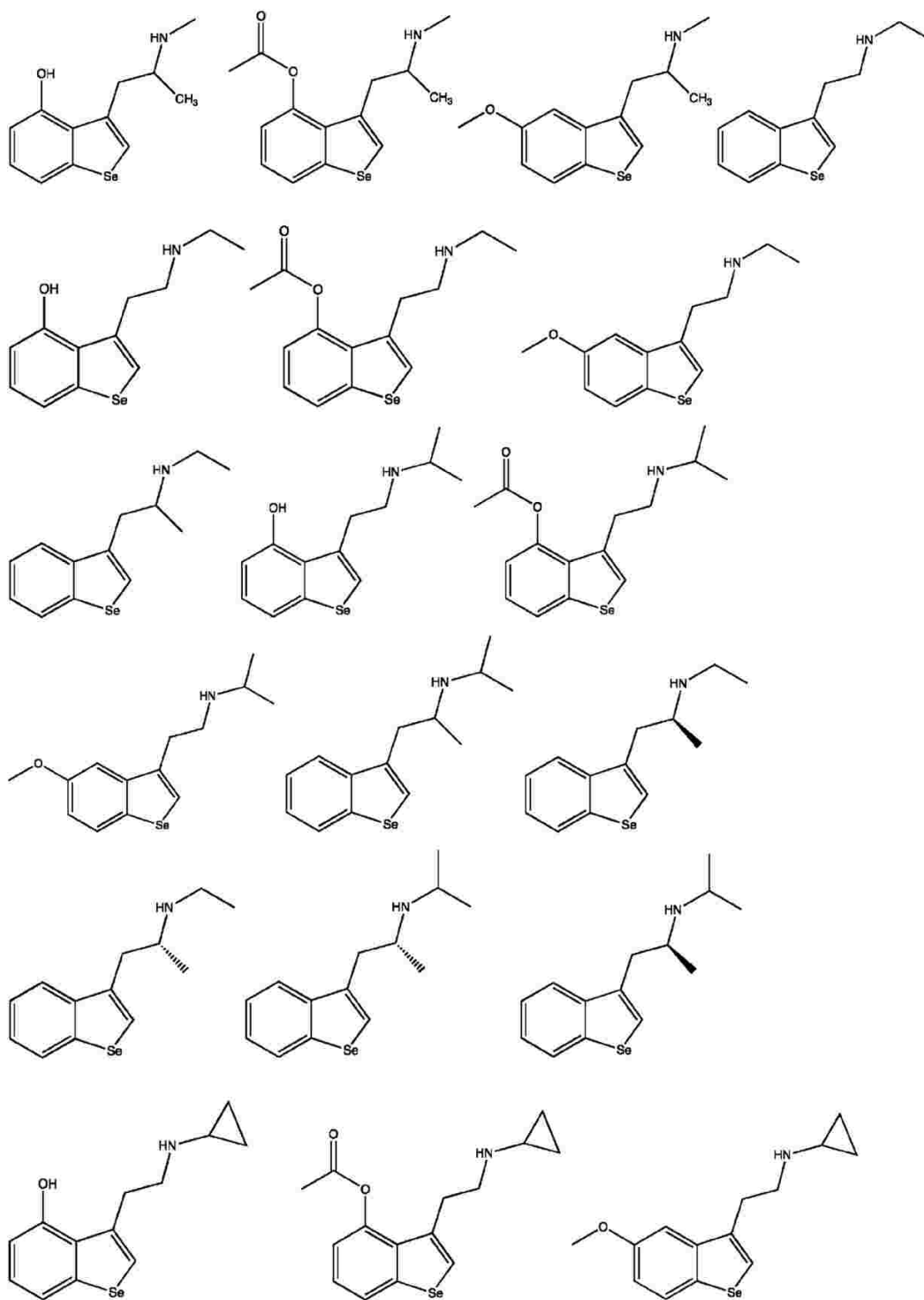
30



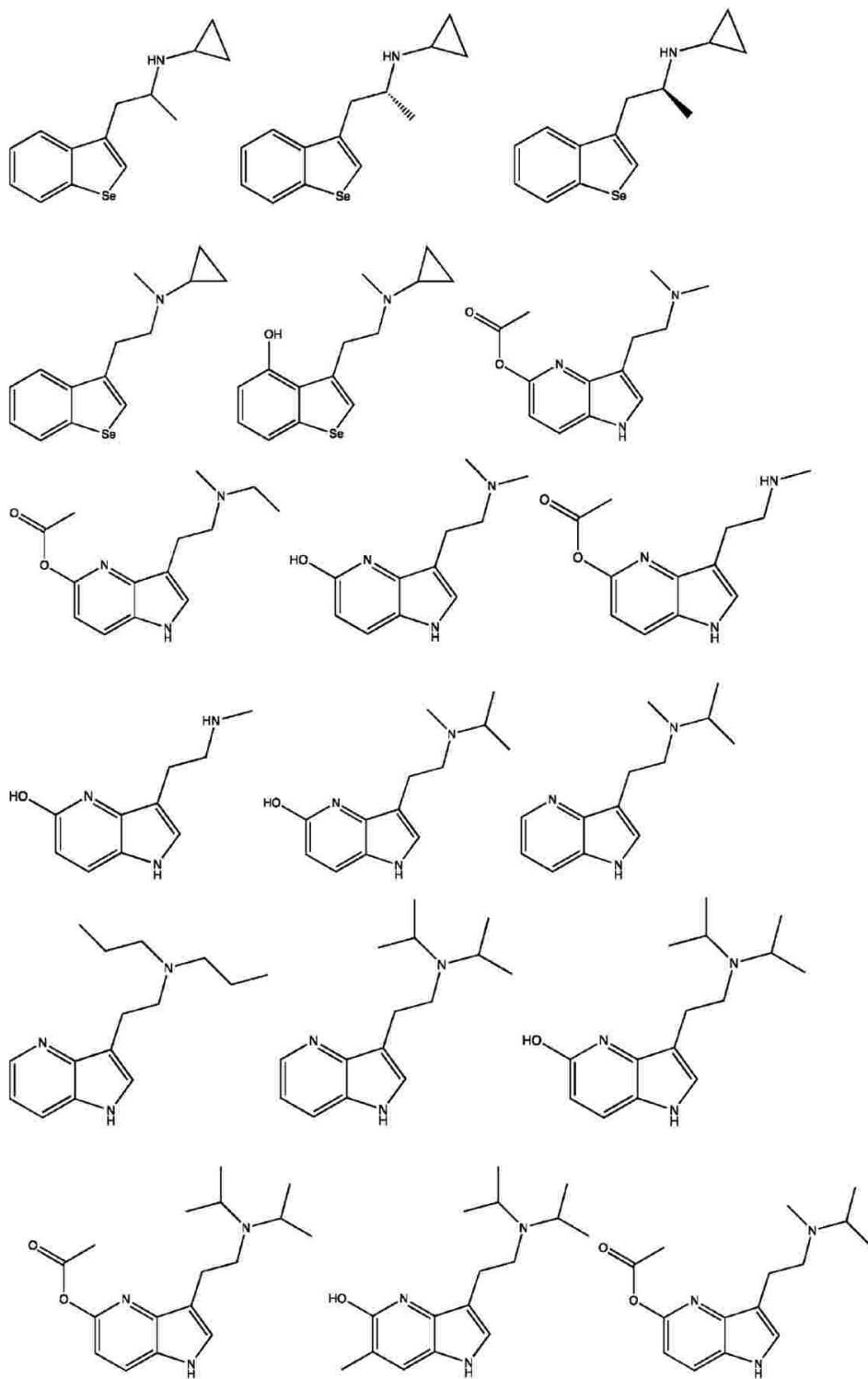
40

50

【化 4 - 1 0】



【化 4 - 1 1】



10

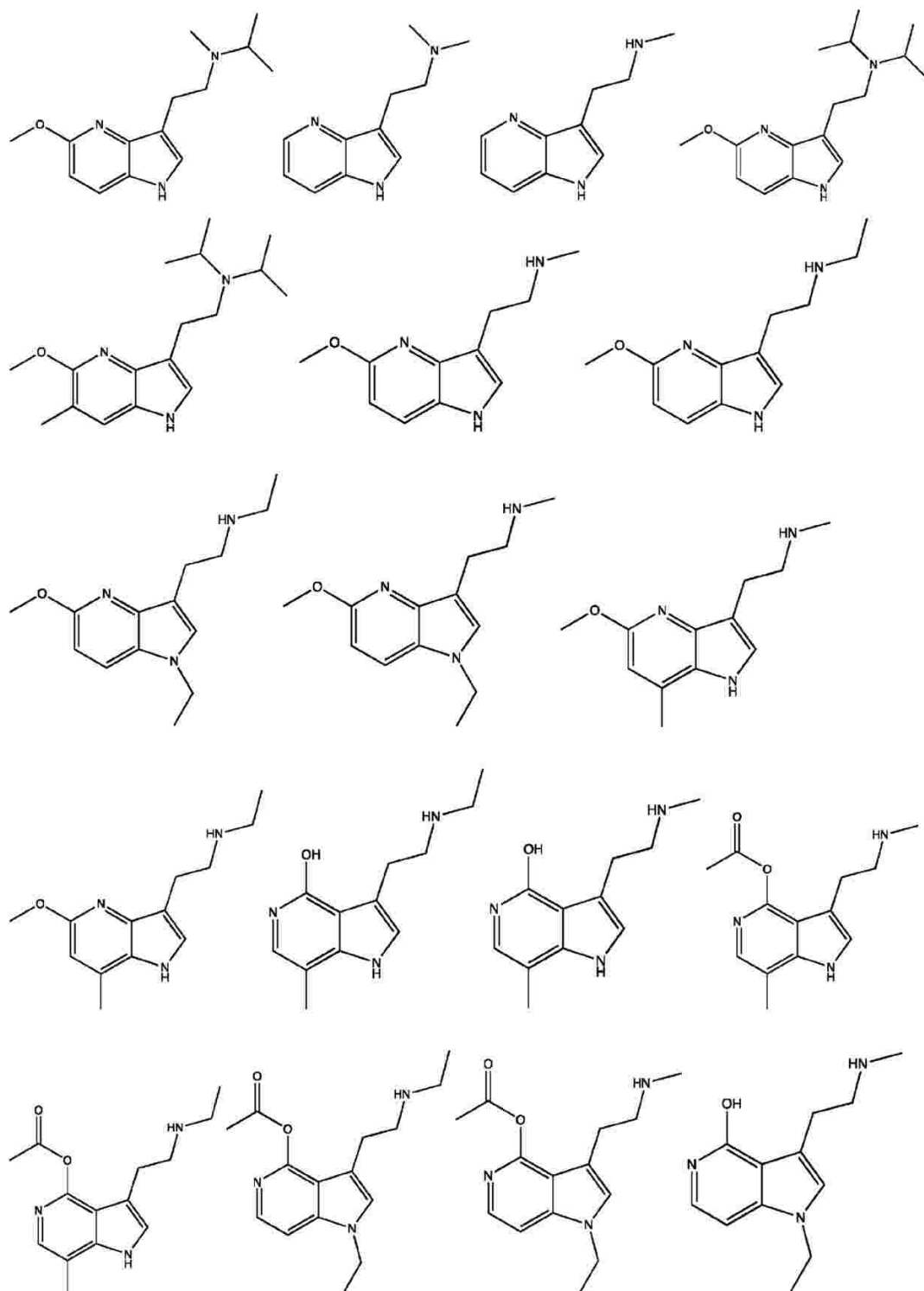
20

30

40

50

【化 4 - 1 2】



10

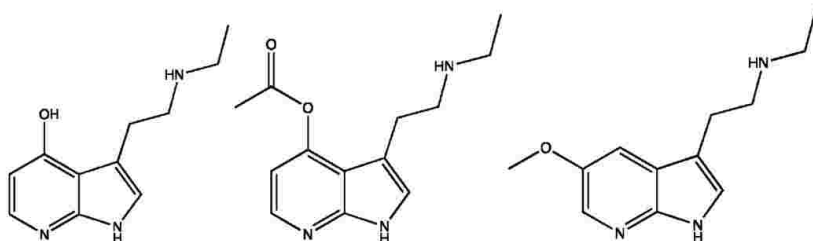
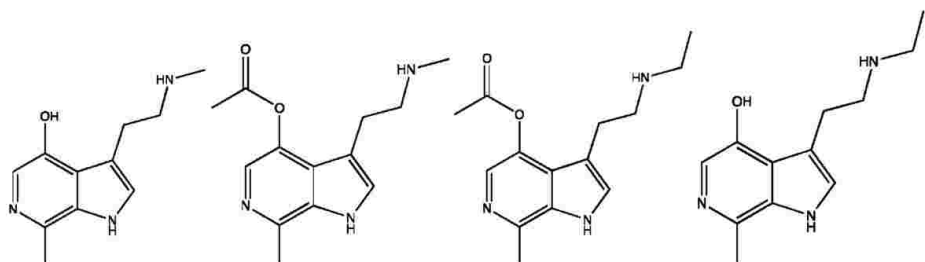
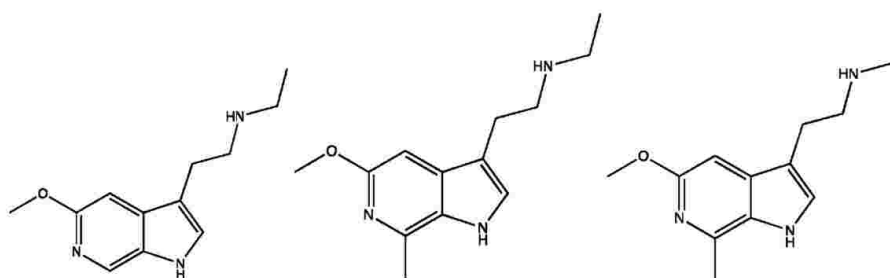
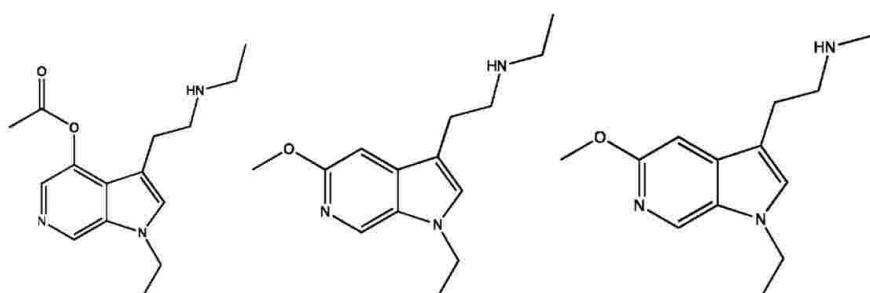
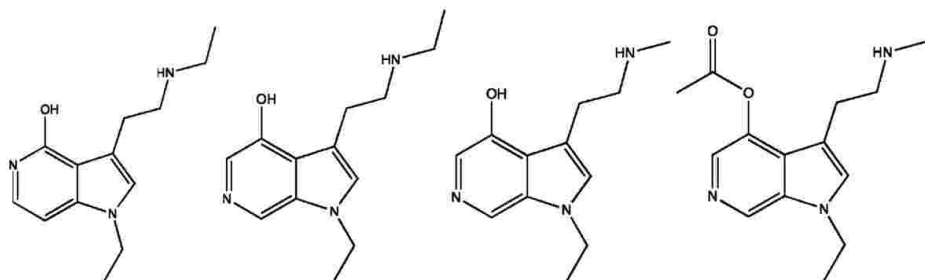
20

30

40

50

【化 4 - 1 3】



10

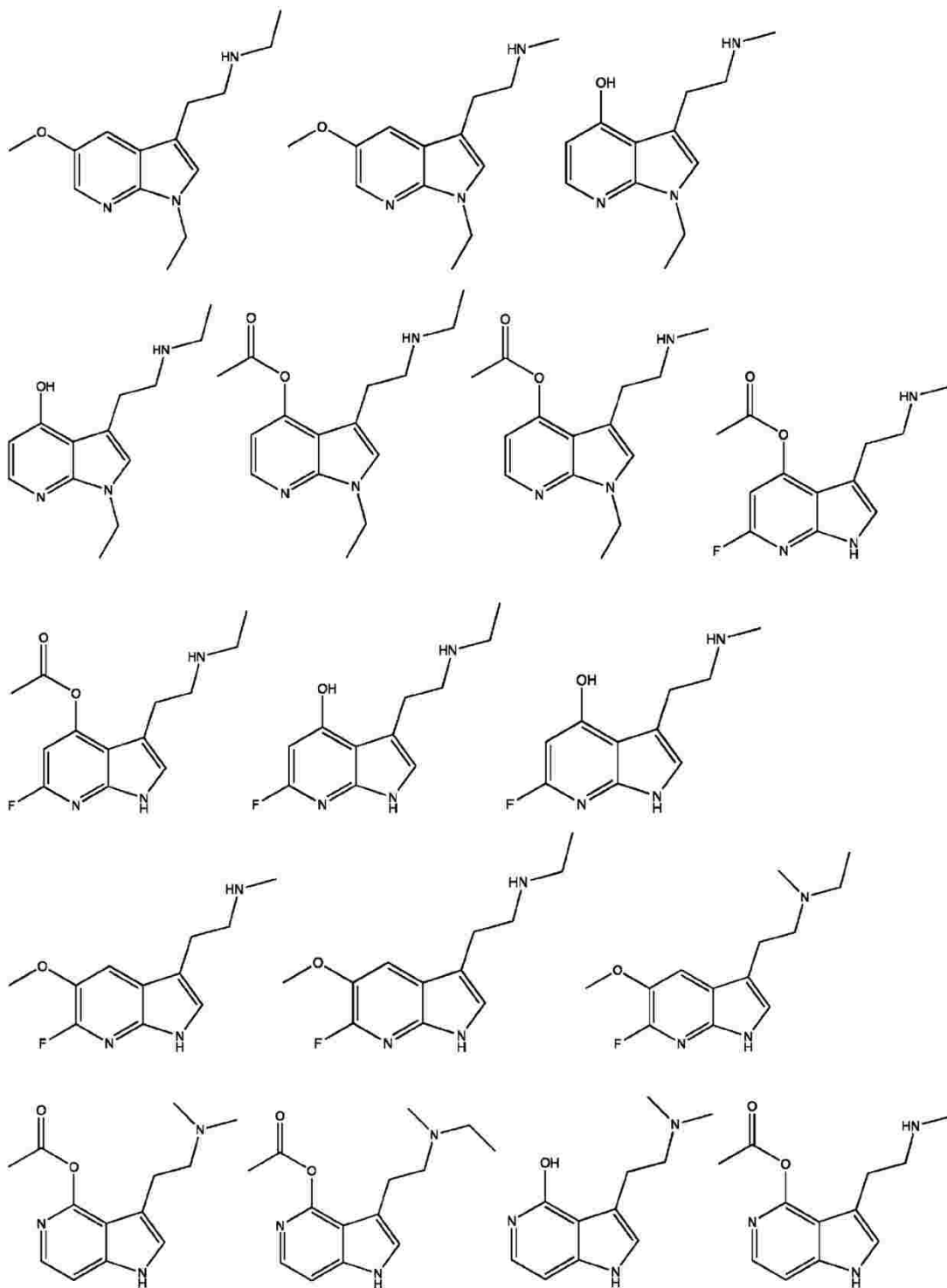
20

30

40

50

【化 4 - 1 4】



10

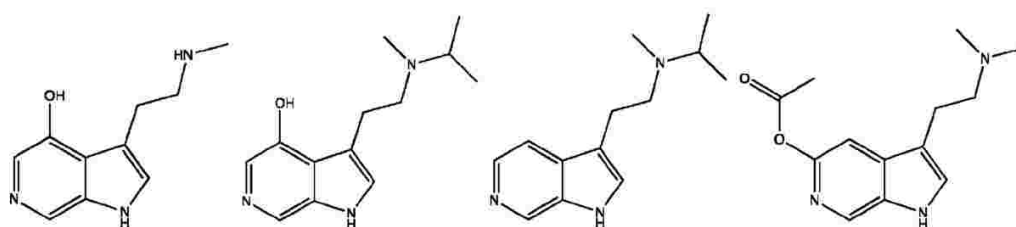
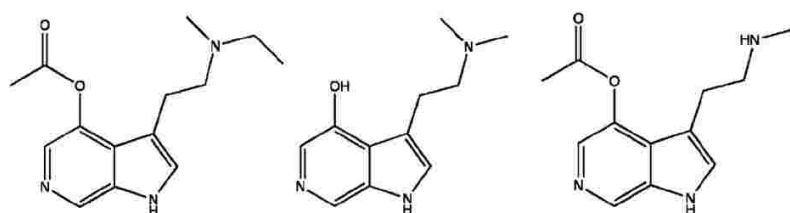
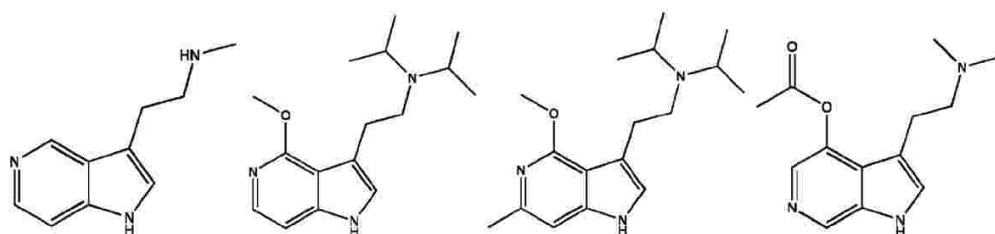
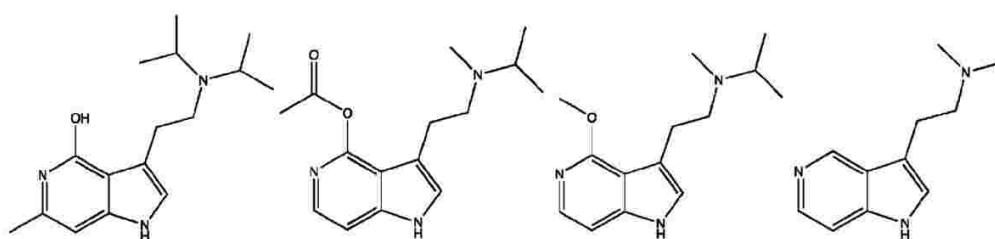
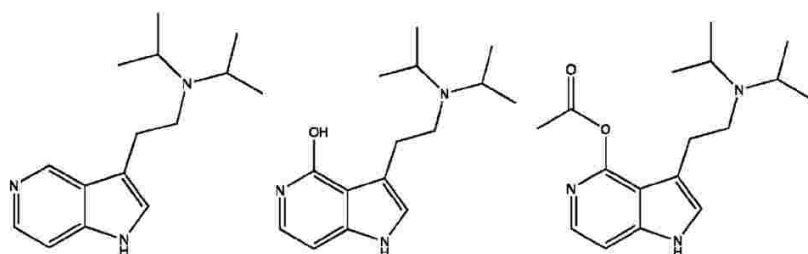
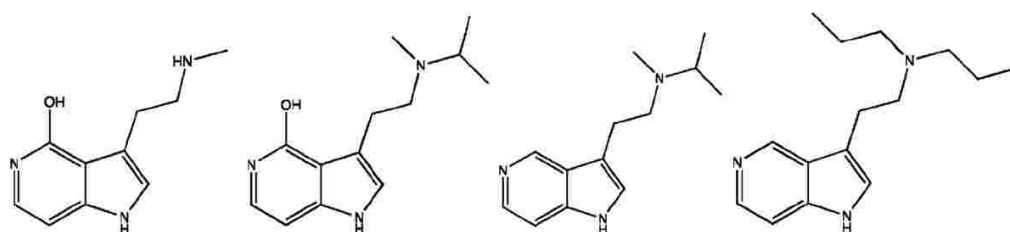
20

30

40

50

【化 4 - 1 5】



10

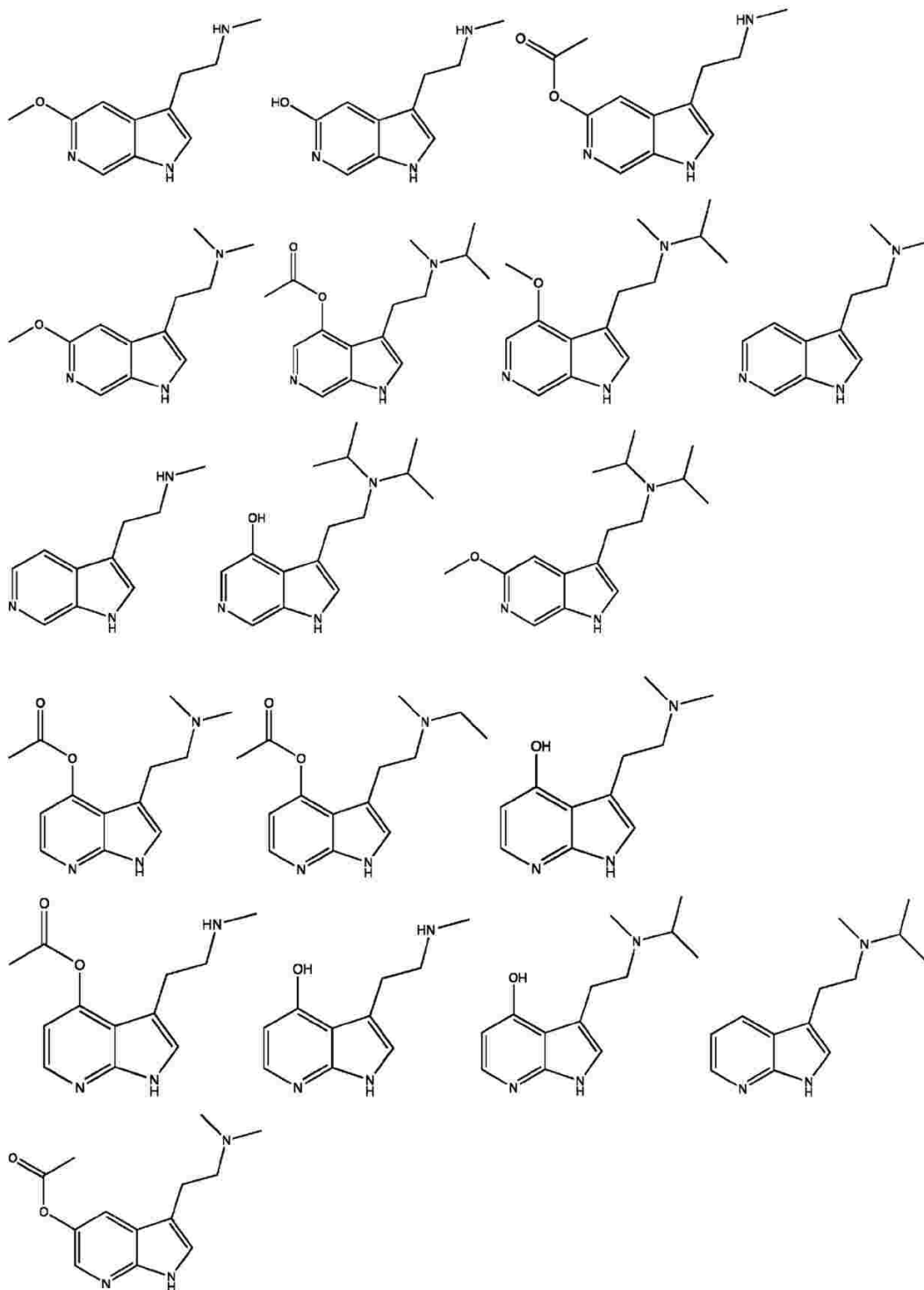
20

30

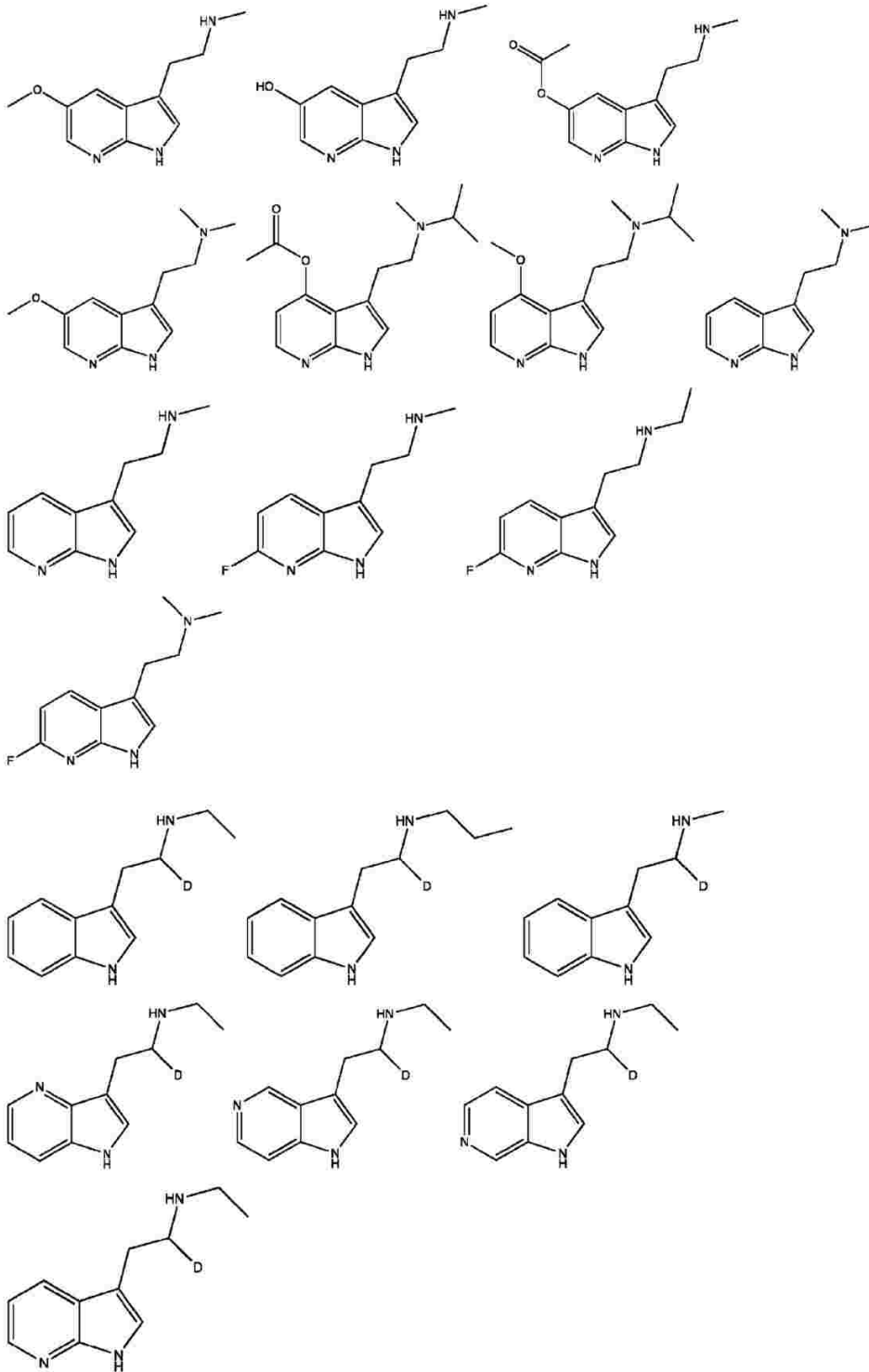
40

50

【化 4 - 1 6】



【化 4 - 1 7】



10

20

30

40

ならびに前述のものの化合物のいずれかの塩、溶媒和物、水和物、及びプロドラッグが含まれる。

【0071】

いくつかの実施形態では、式 I の化合物は、塩を含む。いくつかの実施形態では、式 I の化合物は、薬学的に許容可能な塩を含む。例示的な塩には、HCl、HI、HBr、HF、アスコルビン酸塩、ヒドロフマル酸塩、フマル酸塩、シュウ酸塩、マレイン酸塩等が含まれるがこれらに限定されない。所定の実施形態では、式 I の化合物は、その遊離塩基形態である。いくつかの実施形態では、式 I の化合物は、塩、例えば、[1:1] 塩（例えば、HCl、ヒドロフマル酸塩）または [2:1] 塩（例えば、シュウ酸塩、フマル酸

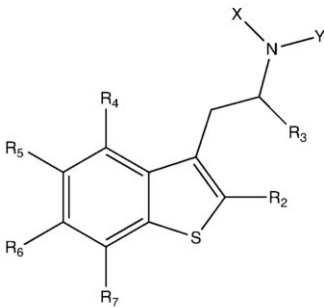
50

塩)を含む。〔1：1〕塩について、1つの式Ⅰの化合物の1つのアンモニウムカチオンは、単一のアニオン(C⁻、I⁻等)によって均衡化される。〔2：1〕塩について、式Ⅰの2つの分子の2つのアンモニウムカチオンは、二酸、例えば、シュウ酸及びフマル酸に由来するジアニオン等のジアニオン性種によって均衡化される。他の例示的な塩には、式Ⅰの化合物の双性イオン性形態、例えば、R₄が-O P(O)O₂(R₉)₂であり、各R₉が水素である場合(R₄上の-OHの脱プロトン化が、得られる-O⁻と第4級エチルアンモニウム残基(例えば、-(CH₂)₂N⁺H(CH₃)₂)との分子内配位をもたらし得る)が含まれる。

【0072】

他の例示的な式Ⅰの化合物には、以下の表1におけるものが含まれ、これはまた、式Ⅰ

【化5】



式Ⅰ a

【表1-1】

表1

参照	X	Y	R ₂	R ₃	R ₄	R ₅	R ₆	R ₇
1	-CH ₃	-CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
2	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
3	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
4	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
5	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
6	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
7	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
8	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
9	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
10	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
11	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
12	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H

10

20

30

40

50

【表 1 - 2】

13	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	H	H	$-\text{OCH}_3$	H	H	H
14	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OCH}_3$	H	H	H
15	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	H	H	$-\text{OCH}_3$	H	H	H
16	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	H	H	$-\text{OCH}_3$	H	H	H
17	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OCH}_3$	H	H	H
18	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	H	H	$-\text{OCH}_3$	H	H	H
19	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OCH}_3$	H	H	H
20	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	H	H	$-\text{OCH}_3$	H	H	H
21	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	H	H	$-\text{OCH}_3$	H	H	H
22	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OH}$	H	H	H
23	$-\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OH}$	H	H	H
24	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	H	H	$-\text{OH}$	H	H	H
25	$-\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OH}$	H	H	H
26	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	H	H	$-\text{OH}$	H	H	H
27	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OH}$	H	H	H
28	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OH}$	H	H	H
29	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	H	H	$-\text{OH}$	H	H	H
30	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OH}$	H	H	H
31	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	H	H	$-\text{OH}$	H	H	H
32	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OH}$	H	H	H
33	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	H	H	$-\text{OH}$	H	H	H
34	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OH}$	H	H	H
35	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	H	H	$-\text{OH}$	H	H	H
36	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	H	H	$-\text{OH}$	H	H	H
37	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OH}$	H	H	H
38	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	H	H	$-\text{OH}$	H	H	H
39	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OH}$	H	H	H
40	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	H	H	$-\text{OH}$	H	H	H
41	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	H	H	$-\text{OH}$	H	H	H
42	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	H
43	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	H
44	$-\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	H
45	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	H
46	$-\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	H
47	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	H
48	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	H
49	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	H
50	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	H
51	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	H
52	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	H
53	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	H
54	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	H
55	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	H
56	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	H
57	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	H
58	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	H
59	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	H
60	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	H
61	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	H
62	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	H
63	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	H	H	H	$-\text{OCH}_2\text{CH}_3$	H	H
64	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	H	H	H	$-\text{OCH}_3$	H	H
65	$-\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	H	H	H	$-\text{OCH}_3$	H	H
66	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	H	H	H	$-\text{OCH}_3$	H	H

10

20

30

40

50

【表 1 - 3】

67	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	H
68	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	H
69	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	H
70	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	H
71	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	H
72	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	H
73	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	H
74	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	H
75	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	H
76	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	H
77	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	H
78	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	H
79	-CH(CH ₃) ₂	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	H
80	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	H
81	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	H
82	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	H
83	-CH ₂ -HC=CH ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	H
84	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	-OH	H	H
85	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OH	H	H
86	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OH	H	H
87	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OH	H	H
88	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OH	H	H
89	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	-OH	H	H
90	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OH	H	H
91	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OH	H	H
92	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OH	H	H
93	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OH	H	H
94	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OH	H	H
95	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OH	H	H
96	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OH	H	H
97	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OH	H	H
98	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OH	H	H
99	-CH(CH ₃) ₂	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OH	H	H
100	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OH	H	H
101	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OH	H	H
102	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OH	H	H
103	-CH ₂ -HC=CH ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OH	H	H
104	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
105	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
106	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
107	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
108	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
109	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
110	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
111	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
112	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
113	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
114	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
115	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
116	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
117	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
118	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
119	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
120	-CH(CH ₃) ₂	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H

10

20

30

40

50

【表 1 - 4】

121	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
122	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
123	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
124	-CH ₂ -HC=CH ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
125	-CH ₃	-CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃
126	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃
127	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃
128	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃
129	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃
130	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃
131	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃
132	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃
133	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃
134	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃
135	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃
135	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃
137	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃
138	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃
139	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃
140	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃
141	-CH(CH ₃) ₂	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃
142	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃
143	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃
144	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃
145	-CH ₂ -HC=CH ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃
146	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₃
147	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₃
148	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	H	-CH ₃
149	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₃
150	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	-CH ₃
151	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₃
152	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₃
153	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	H	-CH ₃
154	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₃
155	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	-CH ₃
156	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₃
157	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	H	-CH ₃
158	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₃
159	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	-CH ₃
160	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	H	-CH ₃
161	-CH(CH ₃) ₂	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₃
162	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	-CH ₃
163	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₃
164	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	-CH ₃
165	-CH ₂ -HC=CH ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	-CH ₃
166	-CH ₃	-CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃
167	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃
168	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃
169	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃
170	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃
171	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃
172	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃
173	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃
174	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃

10

20

30

40

50

【表 1 - 5】

175	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃
176	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃
177	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃
178	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃
179	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃
180	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃
181	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃
182	-CH(CH ₃) ₂	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃
183	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃
184	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃
185	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃
186	-CH ₂ -HC=CH ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃
187	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
188	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
189	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
190	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
191	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
192	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
193	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
194	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
195	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
196	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
197	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
198	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
199	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
200	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
201	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
202	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
203	-CH(CH ₃) ₂	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
204	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
205	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
206	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
207	-CH ₂ -HC=CH ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
208	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	-OH	H	-CH ₃
209	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OH	H	-CH ₃
210	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OH	H	-CH ₃
211	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OH	H	-CH ₃
212	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OH	H	-CH ₃
213	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	-OH	H	-CH ₃
214	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OH	H	-CH ₃
215	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OH	H	-CH ₃
216	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OH	H	-CH ₃
217	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OH	H	-CH ₃
218	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OH	H	-CH ₃
219	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OH	H	-CH ₃
220	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OH	H	-CH ₃
221	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OH	H	-CH ₃
222	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OH	H	-CH ₃
223	-CH(CH ₃) ₂	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OH	H	-CH ₃
224	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OH	H	-CH ₃
225	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OH	H	-CH ₃
226	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OH	H	-CH ₃
227	-CH ₂ -HC=CH ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OH	H	-CH ₃
228	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃

10

20

30

40

50

【表 1 - 6】

229	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃
230	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃
231	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃
232	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃
233	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃
234	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃
235	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃
236	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃
237	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃
238	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃
239	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃
240	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃
241	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃
242	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃
243	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃
244	-CH(CH ₃) ₂	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃
245	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃
246	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃
247	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃
248	-CH ₂ -HC=CH ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	OC(O)CH ₃	H	-CH ₃
249	-CH ₃	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	H	H
250	-CH ₃	-CH ₃	-CH ₃	H	-OH	H	H	H
251	-CH ₃	-CH ₃	-CH ₃	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
252	-CH ₃	-CH ₃	-CH ₃	H	-OCH ₃	H	H	H
253	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	-CH ₃	H	H	H	H	H
254	-CH ₃	-CH ₂ (CH ₃) ₂	-CH ₃	H	H	H	H	H
255	-CH ₃	-CH ₃	-CH ₃	H	F	H	H	H
256	-CH ₃	-CH ₃	H	-CH ₃	H	H	H	H
257	-CH ₃	-CH ₃	H	-CH ₃	-OH	H	H	H
258	-CH ₃	-CH ₃	H	-CH ₃	-OC(O)CH ₃	H	H	H
259	-CH ₃	-CH ₃	H	-CH ₃	-OCH ₃	H	H	H
260	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	-CH ₃	H	H	H	H
261	-CH ₃	-CH ₂ (CH ₃) ₂	H	-CH ₃	H	H	H	H
262	-CH ₃	-CH ₃	H	-CH ₃	F	H	H	H
263	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	H	F	H
264	-CH ₃	-CH ₃	H	H	-OH	H	F	H
265	-CH ₃	-CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	F	H
266	-CH ₃	-CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	F	H
267	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	F	H
268	-CH ₃	-CH ₂ (CH ₃) ₂	H	H	H	H	F	H
269	-CH ₃	-CH ₃	H	H	F	H	F	H
270	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	H	H	-CH ₃
271	-CH ₃	-CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₃
272	-CH ₃	-CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃
273	-CH ₃	-CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃
274	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	H	-CH ₃
275	-CH ₃	-CH ₂ (CH ₃) ₂	H	H	H	H	H	-CH ₃
276	-CH ₃	-CH ₃	H	H	F	H	H	-CH ₃
277	-CH ₃	-CH ₃	-CH ₃	H	H	-OH	H	H
278	-CH ₃	-CH ₃	-CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
279	-CH ₃	-CH ₃	-CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H
280	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	-CH ₃	H	H	H	H	H
281	-CH ₃	-CH ₂ (CH ₃) ₂	-CH ₃	H	H	H	H	H
282	-CH ₃	-CH ₃	-CH ₃	H	H	F	H	H

10

20

30

40

50

【表 1 - 7】

283	-CH ₃	-CH ₃	H	-CH ₃	H	H	H	H
284	-CH ₃	-CH ₃	H	-CH ₃	H	-OH	H	H
285	-CH ₃	-CH ₃	H	-CH ₃	H	-OC(O)CH ₃	H	H
286	-CH ₃	-CH ₃	H	-CH ₃	H	-OCH ₃	H	H
287	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	-CH ₃	H	H	H	H
288	-CH ₃	-CH ₂ (CH ₃) ₂	H	-CH ₃	H	H	H	H
289	-CH ₃	-CH ₃	H	-CH ₃	H	F	H	H
290	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	H	F	H
291	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	-OH	F	H
292	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	F	H
293	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	F	H
294	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	F	H
295	-CH ₃	-CH ₂ (CH ₃) ₂	H	H	H	H	F	H
296	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	F	F	H
297	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	H	H	-CH ₃
298	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	-OH	H	-CH ₃
299	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃
300	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
301	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	H	-CH ₃
302	-CH ₃	-CH ₂ (CH ₃) ₂	H	H	H	H	H	-CH ₃
303	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	H	F	-CH ₃
304	H	-CH ₃	H	H	H	H	H	H
305	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	H	H
306	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	H	H	H
307	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	H	H
308	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	H	H
309	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	H	H
310	H	-CH ₃	H	-CH ₃	H	H	H	H
310a	H	-CH ₂ CH ₃	H	-CH ₃	H	H	H	H
311	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	-CH ₃	H	H	H	H
312	H	-CH(CH ₃) ₂	H	-CH ₃	H	H	H	H
313	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	-CH ₃	H	H	H	H
314	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	-CH ₃	H	H	H	H
315	H	-CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
316	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
317	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
318	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	H	H
319	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
320	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	H
321	H	-CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
322	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
324	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
325	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
326	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
327	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
328	H	-CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	H
329	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	H
330	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	H
331	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	H
332	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	H
333	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	H
334	H	-CH ₃	H	H	H	H	F	H
335	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	F	H
336	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	H	F	H

10

20

30

40

50

【表 1 - 8】

337	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	F	H
338	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	F	H
339	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	F	H
340	H	-CH ₃	H	-CH ₃	-OH	H	H	H
341	H	-CH ₂ CH ₃	H	-CH ₃	-OH	H	H	H
342	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	-CH ₃	-OH	H	H	H
343	H	-CH(CH ₃) ₂	H	-CH ₃	-OH	H	H	H
344	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	-CH ₃	-OH	H	H	H
345	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	-CH ₃	-OH	H	H	H
346	H	-CH ₃	H	-CH ₃	-OC(O)CH ₃	H	H	H
347	H	-CH ₂ CH ₃	H	-CH ₃	-OC(O)CH ₃	H	H	H
348	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	-CH ₃	-OC(O)CH ₃	H	H	H
349	H	-CH(CH ₃) ₂	H	-CH ₃	-OC(O)CH ₃	H	H	H
350	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	-CH ₃	-OC(O)CH ₃	H	H	H
351	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	-CH ₃	-OC(O)CH ₃	H	H	H
352	H	-CH ₃	H	-CH ₃	H	-OCH ₃	H	H
353	H	-CH ₂ CH ₃	H	-CH ₃	H	-OCH ₃	H	H
354	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	-CH ₃	H	-OCH ₃	H	H
355	H	-CH(CH ₃) ₂	H	-CH ₃	H	-OCH ₃	H	H
356	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	-CH ₃	H	-OCH ₃	H	H
357	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	-CH ₃	H	-OCH ₃	H	H
358	H	-CH ₃	H	-CH ₃	H	H	F	H
359	H	-CH ₂ CH ₃	H	-CH ₃	H	H	F	H
360	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	-CH ₃	H	H	F	H
361	H	-CH(CH ₃) ₂	H	-CH ₃	H	H	F	H
362	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	-CH ₃	H	H	F	H
363	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	-CH ₃	H	H	F	H
364	H	シクロプロピル	H	H	H	H	H	H
365	H	シクロプロピル	H	-CH ₃	H	H	H	H
366	H	シクロプロピル	H	H	-OH	H	H	H
367	H	シクロプロピル	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
368	H	シクロプロピル	H	H	H	-OCH ₃	H	H
369	H	シクロプロピル	H	H	H	H	F	H
370	H	シクロプロピル	H	H	H	H	H	H
371	H	シクロプロピル	H	-CH ₃	-OH	H	F	H
372	H	シクロプロピル	H	-CH ₃	-OH	H	H	H
373	H	シクロプロピル	H	-CH ₃	-OC(O)CH ₃	H	H	H
374	H	シクロプロピル	H	-CH ₃	H	-OCH ₃	H	H
375	H	シクロプロピル	H	-CH ₃	H	H	F	H
376	-CH ₃	シクロプロピル	H	H	H	H	H	H
377	-CH ₃	シクロプロピル	H	-CH ₃	H	H	H	H
378	-CH ₃	シクロプロピル	H	H	-OH	H	H	H
379	-CH ₃	シクロプロピル	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
380	-CH ₃	シクロプロピル	H	H	H	-OCH ₃	H	H
381	-CH ₃	シクロプロピル	H	H	H	H	F	H
382	-CH ₃	シクロプロピル	H	H	H	H	H	H
383	-CH ₃	シクロプロピル	H	-CH ₃	-OH	H	F	H
384	-CH ₃	シクロプロピル	H	-CH ₃	-OH	H	H	H
385	-CH ₃	シクロプロピル	H	-CH ₃	-OC(O)CH ₃	H	H	H
386	-CH ₃	シクロプロピル	H	-CH ₃	H	-OCH ₃	H	H
387	-CH ₃	シクロプロピル	H	-CH ₃	H	H	F	H
388	-CH ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	H	H	H	H	H
389	-CH ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	-CH ₃	H	H	H	H
390	-CH ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	H	-OH	H	H	H

10

20

30

40

50

【表 1 - 9】

391	-CH ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
392	-CH ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	H	H	-OCH ₃	H	H
393	-CH ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	H	H	H	F	H
394	-CH ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	H	H	H	H	H
395	-CH ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	-CH ₃	-OH	H	F	H
396	-CH ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	-CH ₃	-OH	H	H	H
397	-CH ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	-CH ₃	-OC(O)CH ₃	H	H	H
398	-CH ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	-CH ₃	H	-OCH ₃	H	H
399	-CH ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	-CH ₃	H	H	F	H
400	-(CH ₂) ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	H	H	H	H	H
401	-(CH ₂) ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	-CH ₃	H	H	H	H
402	-(CH ₂) ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	H	-OH	H	H	H
403	-(CH ₂) ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
404	-(CH ₂) ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	H	H	-OCH ₃	H	H
405	-(CH ₂) ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	H	H	H	F	H
406	-(CH ₂) ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	H	H	H	H	H
407	-(CH ₂) ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	-CH ₃	-OH	H	F	H
408	-(CH ₂) ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	-CH ₃	-OH	H	H	H
409	-(CH ₂) ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	-CH ₃	-OC(O)CH ₃	H	H	H
410	-(CH ₂) ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	-CH ₃	H	-OCH ₃	H	H
411	-(CH ₂) ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	-CH ₃	H	H	F	H
412	-CH ₂ (CH ₃) ₂	シクロプロピル	H	H	H	H	H	H
413	-CH ₂ (CH ₃) ₂	シクロプロピル	H	-CH ₃	H	H	H	H
414	-CH ₂ (CH ₃) ₂	シクロプロピル	H	H	-OH	H	H	H
415	-CH ₂ (CH ₃) ₂	シクロプロピル	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
416	-CH ₂ (CH ₃) ₂	シクロプロピル	H	H	H	-OCH ₃	H	H
417	-CH ₂ (CH ₃) ₂	シクロプロピル	H	H	H	H	F	H
418	-CH ₂ (CH ₃) ₂	シクロプロピル	H	H	H	H	H	H
419	-CH ₂ (CH ₃) ₂	シクロプロピル	H	-CH ₃	-OH	H	F	H
420	-CH ₂ (CH ₃) ₂	シクロプロピル	H	-CH ₃	-OH	H	H	H
421	-CH ₂ (CH ₃) ₂	シクロプロピル	H	-CH ₃	-OC(O)CH ₃	H	H	H
422	-CH ₂ (CH ₃) ₂	シクロプロピル	H	-CH ₃	H	-OCH ₃	H	H
423	-CH ₂ (CH ₃) ₂	シクロプロピル	H	-CH ₃	H	H	F	H
424	シクロプロピル	シクロプロピル	H	-CH ₃	H	H	H	H
425	シクロプロピル	シクロプロピル	H	H	-OH	H	H	H
426	シクロプロピル	シクロプロピル	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
427	シクロプロピル	シクロプロピル	H	H	H	-OCH ₃	H	H
428	シクロプロピル	シクロプロピル	H	H	H	H	F	H
429	シクロプロピル	シクロプロピル	H	H	H	H	H	H
430	シクロプロピル	シクロプロピル	H	-CH ₃	-OH	H	F	H
431	シクロプロピル	シクロプロピル	H	-CH ₃	-OH	H	H	H
432	シクロプロピル	シクロプロピル	H	-CH ₃	-OC(O)CH ₃	H	H	H
433	シクロプロピル	シクロプロピル	H	-CH ₃	H	-OCH ₃	H	H
434	シクロプロピル	シクロプロピル	H	-CH ₃	H	H	F	H
435	H	-CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₃
436	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₃
437	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₃
438	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	H	-CH ₃
439	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₃
440	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	-CH ₃
441	H	-CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃
442	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃
443	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃
444	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃

10

20

30

40

50

【表 1 - 10】

445	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃
446	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃
447	H	-CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
448	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
449	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
450	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
451	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
452	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
453	H	-CH ₃	H	H	-OH	H	F	H
454	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	F	H
455	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	F	H
456	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	F	H
457	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	F	H
458	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	F	H
459	H	-CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	F	H
460	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	F	H
461	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	F	H
462	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	F	H
463	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	F	H
464	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	F	H
465	H	-CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	F	H
466	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	F	H
467	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	F	H
468	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OCH ₃	F	H
469	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	F	H
470	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OCH ₃	F	H
471	H	-CD ₃	H	H	H	H	H	H
472	H	-CD ₃	H	H	-OH	H	H	H
473	H	-CD ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
474	H	-CD ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	H
475	H	-CD ₃	H	H	H	H	F	H
476	H	-CD ₃	H	H	-OH	H	F	H
477	H	-CD ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	F	H
478	H	-CD ₃	H	H	H	-OCH ₃	F	H
479	H	-CD ₃	H	H	H	H	H	-CH ₃
480	H	-CD ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₃
481	H	-CD ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃
482	H	-CD ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
483	H	-CD ₃	H	H	H	H	F	-CH ₃
484	H	-CD ₃	H	H	-OH	H	F	-CH ₃
485	H	-CD ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	F	-CH ₃
486	H	-CD ₃	H	H	H	-OCH ₃	F	-CH ₃
487	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	H	H	H	H
488	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	-OH	H	H	H
489	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
490	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	H
491	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	H	H	F	H
492	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	-OH	H	F	H
493	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	F	H
494	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	H	-OCH ₃	F	H
495	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	H	H	H	-CH ₃
496	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₃
497	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃
498	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃

10

20

30

40

50

【表 1 - 1 1】

499	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	H	H	F	-CH ₃
500	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	-OH	H	F	-CH ₃
501	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	F	-CH ₃
502	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	H	-OCH ₃	F	-CH ₃
503	H	-CH ₃	H	H	-OH	H	F	-CH ₃
504	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	F	-CH ₃
505	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	F	-CH ₃
506	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	F	-CH ₃
507	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	F	-CH ₃
508	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	F	-CH ₃
509	H	-CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	F	-CH ₃
510	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	F	-CH ₃
511	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	F	-CH ₃
512	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	F	-CH ₃
513	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	F	-CH ₃
514	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	F	-CH ₃
515	H	-CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	F	-CH ₃
516	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	F	-CH ₃
517	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	F	-CH ₃
518	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OCH ₃	F	-CH ₃
519	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	F	-CH ₃
520	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OCH ₃	F	-CH ₃
521	H	-CH ₃	H	D	H	H	H	H
522	H	-CH ₂ CH ₃	H	D	H	H	H	H
523	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	D	H	H	H	H
524	H	-CH(CH ₃) ₂	H	D	H	H	H	H
525	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	D	H	H	H	H
526	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	D	H	H	H	H
527	H	-CH ₃	H	D	-OH	H	H	H
528	H	-CH ₂ CH ₃	H	D	-OH	H	H	H
529	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	D	-OH	H	H	H
530	H	-CH(CH ₃) ₂	H	D	-OH	H	H	H
531	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	D	-OH	H	H	H
532	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	D	-OH	H	H	H
533	H	-CH ₃	H	D	-OC(O)CH ₃	H	H	H
534	H	-CH ₂ CH ₃	H	D	-OC(O)CH ₃	H	H	H
535	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	D	-OC(O)CH ₃	H	H	H
536	H	-CH(CH ₃) ₂	H	D	-OC(O)CH ₃	H	H	H
537	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	D	-OC(O)CH ₃	H	H	H
538	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	D	-OC(O)CH ₃	H	H	H
539	H	-CH ₃	H	D	H	-OCH ₃	H	H
540	H	-CH ₂ CH ₃	H	D	H	-OCH ₃	H	H
541	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	D	H	-OCH ₃	H	H
542	H	-CH(CH ₃) ₂	H	D	H	-OCH ₃	H	H
543	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	D	H	-OCH ₃	H	H
544	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	D	H	-OCH ₃	H	H
545	H	-CH ₃	H	D	H	H	F	H
546	H	-CH ₂ CH ₃	H	D	H	H	F	H
547	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	D	H	H	F	H
548	H	-CH(CH ₃) ₂	H	D	H	H	F	H
549	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	D	H	H	F	H
550	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	D	H	H	F	H
551	H	-CH ₃	H	D	H	H	F	CH ₃
552	H	-CH ₂ CH ₃	H	D	H	H	F	CH ₃

10

20

30

40

【表 1 - 1 2】

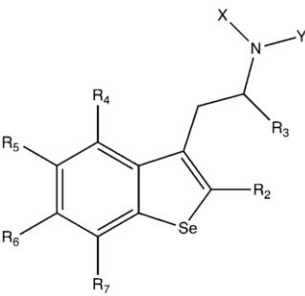
553	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	D	H	H	F	CH ₃
554	H	-CH(CH ₃) ₂	H	D	H	H	F	CH ₃
555	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	D	H	H	F	CH ₃
556	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	D	H	H	F	CH ₃

【0 0 7 3】

他の例示的な式 I の化合物には、以下の表 2 におけるものが含まれ、これはまた、式 I b によって表される：

50

【化 6】



式 I b

【表 2 - 1】

表 2

参照	X	Y	R ₂	R ₃	R ₄	R ₅	R ₆	R ₇
1	-CH ₃	-CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
2	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
3	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
4	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
5	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
6	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
7	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
8	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
9	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
10	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
11	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
12	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
13	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
14	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
15	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
16	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
17	-CH(CH ₃) ₂	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
18	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
19	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
20	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
21	-CH ₂ -HC=CH ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
22	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
23	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
24	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	H	H
25	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
26	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	H
27	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
28	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H

【表 2 - 2】

29	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	H	H
30	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
31	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	H
32	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
33	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	H	H
34	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
35	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	H
36	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	H	H
37	-CH(CH ₃) ₂	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
38	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	H
39	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
40	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	H
41	-CH ₂ -HC=CH ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	H
42	-CH ₃	-CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
43	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
44	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
45	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
46	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
47	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
48	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
49	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
50	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
51	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
52	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
53	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
54	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
55	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
56	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
57	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
58	-CH(CH ₃) ₂	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
59	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
60	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
61	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
62	-CH ₂ -HC=CH ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
63	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	-OCH ₂ CH ₃	H	H
64	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	H
65	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	H
66	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	H
67	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	H
68	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	H
69	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	H
70	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	H
71	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	H
72	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	H
73	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	H
74	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	H
75	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	H
76	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	H
77	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	H
78	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	H
79	-CH(CH ₃) ₂	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	H
80	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	H
81	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	H
82	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	H

10

20

30

40

50

【表 2 - 3】

83	-CH ₂ -HC=CH ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	H
84	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	-OH	H	H
85	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OH	H	H
86	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OH	H	H
87	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OH	H	H
88	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OH	H	H
89	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	-OH	H	H
90	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OH	H	H
91	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OH	H	H
92	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OH	H	H
93	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OH	H	H
94	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OH	H	H
95	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OH	H	H
96	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OH	H	H
97	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OH	H	H
98	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OH	H	H
99	-CH(CH ₃) ₂	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OH	H	H
100	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OH	H	H
101	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OH	H	H
102	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OH	H	H
103	-CH ₂ -HC=CH ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OH	H	H
104	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
105	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
106	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
107	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
108	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
109	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
110	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
111	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
112	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
113	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
114	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
115	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
116	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
117	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
118	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
119	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
120	-CH(CH ₃) ₂	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
121	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
122	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
123	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
124	-CH ₂ -HC=CH ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
125	-CH ₃	-CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃
126	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃
127	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃
128	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃
129	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃
130	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃
131	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃
132	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃
133	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃
134	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃
135	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃
135	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃

10

20

30

40

50

40

137	$-(CH_2)_2CH_3$	$-CH(CH_3)_2$	H	H	$-OCH_3$	H	H	$-CH_3$
138	$-(CH_2)_2CH_3$	$-(CH_2)_3CH_3$	H	H	$-OCH_3$	H	H	$-CH_3$
139	$-(CH_2)_2CH_3$	$-CH_2-HC=CH_2$	H	H	$-OCH_3$	H	H	$-CH_3$
140	$-CH(CH_3)_2$	$-CH(CH_3)_2$	H	H	$-OCH_3$	H	H	$-CH_3$
141	$-CH(CH_3)_2$	$-(CH_2)_3CH_3$	H	H	$-OCH_3$	H	H	$-CH_3$
142	$-CH(CH_3)_2$	$-CH_2-HC=CH_2$	H	H	$-OCH_3$	H	H	$-CH_3$
143	$-(CH_2)_3CH_3$	$-(CH_2)_3CH_3$	H	H	$-OCH_3$	H	H	$-CH_3$
144	$-(CH_2)_3CH_3$	$-CH_2-HC=CH_2$	H	H	$-OCH_3$	H	H	$-CH_3$
145	$-CH_2-HC=CH_2$	$-CH_2-HC=CH_2$	H	H	$-OCH_3$	H	H	$-CH_3$
146	$-CH_3$	$-CH_2CH_3$	H	H	$-OH$	H	H	$-CH_3$
147	$-CH_3$	$-(CH_2)_2CH_3$	H	H	$-OH$	H	H	$-CH_3$
148	$-CH_3$	$-CH(CH_3)_2$	H	H	$-OH$	H	H	$-CH_3$
149	$-CH_3$	$-(CH_2)_3CH_3$	H	H	$-OH$	H	H	$-CH_3$
150	$-CH_3$	$-CH_2-HC=CH_2$	H	H	$-OH$	H	H	$-CH_3$
151	$-CH_2CH_3$	$-CH_2CH_3$	H	H	$-OH$	H	H	$-CH_3$
152	$-CH_2CH_3$	$-(CH_2)_2CH_3$	H	H	$-OH$	H	H	$-CH_3$
153	$-CH_2CH_3$	$-CH(CH_3)_2$	H	H	$-OH$	H	H	$-CH_3$
154	$-CH_2CH_3$	$-(CH_2)_3CH_3$	H	H	$-OH$	H	H	$-CH_3$
155	$-CH_2CH_3$	$-CH_2-HC=CH_2$	H	H	$-OH$	H	H	$-CH_3$
156	$-(CH_2)_2CH_3$	$-(CH_2)_2CH_3$	H	H	$-OH$	H	H	$-CH_3$
157	$-(CH_2)_2CH_3$	$-CH(CH_3)_2$	H	H	$-OH$	H	H	$-CH_3$
158	$-(CH_2)_2CH_3$	$-(CH_2)_3CH_3$	H	H	$-OH$	H	H	$-CH_3$
159	$-(CH_2)_2CH_3$	$-CH_2-HC=CH_2$	H	H	$-OH$	H	H	$-CH_3$
160	$-CH(CH_3)_2$	$-CH(CH_3)_2$	H	H	$-OH$	H	H	$-CH_3$
161	$-CH(CH_3)_2$	$-(CH_2)_3CH_3$	H	H	$-OH$	H	H	$-CH_3$
162	$-CH(CH_3)_2$	$-CH_2-HC=CH_2$	H	H	$-OH$	H	H	$-CH_3$
163	$-(CH_2)_3CH_3$	$-(CH_2)_3CH_3$	H	H	$-OH$	H	H	$-CH_3$
164	$-(CH_2)_3CH_3$	$-CH_2-HC=CH_2$	H	H	$-OH$	H	H	$-CH_3$
165	$-CH_2-HC=CH_2$	$-CH_2-HC=CH_2$	H	H	$-OH$	H	H	$-CH_3$
166	$-CH_3$	$-CH_3$	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	H	$-CH_3$
167	$-CH_3$	$-CH_2CH_3$	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	H	$-CH_3$
168	$-CH_3$	$-(CH_2)_2CH_3$	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	H	$-CH_3$
169	$-CH_3$	$-CH(CH_3)_2$	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	H	$-CH_3$
170	$-CH_3$	$-(CH_2)_3CH_3$	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	H	$-CH_3$
171	$-CH_3$	$-CH_2-HC=CH_2$	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	H	$-CH_3$
172	$-CH_2CH_3$	$-CH_2CH_3$	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	H	$-CH_3$
173	$-CH_2CH_3$	$-(CH_2)_2CH_3$	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	H	$-CH_3$
174	$-CH_2CH_3$	$-CH(CH_3)_2$	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	H	$-CH_3$
175	$-CH_2CH_3$	$-(CH_2)_3CH_3$	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	H	$-CH_3$
176	$-CH_2CH_3$	$-CH_2-HC=CH_2$	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	H	$-CH_3$
177	$-(CH_2)_2CH_3$	$-(CH_2)_2CH_3$	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	H	$-CH_3$
178	$-(CH_2)_2CH_3$	$-CH(CH_3)_2$	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	H	$-CH_3$
179	$-(CH_2)_2CH_3$	$-(CH_2)_3CH_3$	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	H	$-CH_3$
180	$-(CH_2)_2CH_3$	$-CH_2-HC=CH_2$	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	H	$-CH_3$
181	$-CH(CH_3)_2$	$-CH(CH_3)_2$	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	H	$-CH_3$
182	$-CH(CH_3)_2$	$-(CH_2)_3CH_3$	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	H	$-CH_3$
183	$-CH(CH_3)_2$	$-CH_2-HC=CH_2$	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	H	$-CH_3$
184	$-(CH_2)_3CH_3$	$-(CH_2)_3CH_3$	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	H	$-CH_3$
185	$-(CH_2)_3CH_3$	$-CH_2-HC=CH_2$	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	H	$-CH_3$
186	$-CH_2-HC=CH_2$	$-CH_2-HC=CH_2$	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	H	$-CH_3$
187	$-CH_3$	$-CH_3$	H	H	H	$-OCH_3$	H	$-CH_3$
188	$-CH_3$	$-CH_2CH_3$	H	H	H	$-OCH_3$	H	$-CH_3$
189	$-CH_3$	$-(CH_2)_2CH_3$	H	H	H	$-OCH_3$	H	$-CH_3$
190	$-CH_3$	$-CH(CH_3)_2$	H	H	H	$-OCH_3$	H	$-CH_3$

【表 2 - 5】

191	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
192	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
193	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
194	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
195	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
196	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
197	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
198	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
199	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
200	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
201	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
202	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
203	-CH(CH ₃) ₂	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
204	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
205	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
206	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
207	-CH ₂ -HC=CH ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
208	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	-OH	H	-CH ₃
209	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OH	H	-CH ₃
210	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OH	H	-CH ₃
211	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OH	H	-CH ₃
212	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OH	H	-CH ₃
213	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	-OH	H	-CH ₃
214	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OH	H	-CH ₃
215	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OH	H	-CH ₃
216	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OH	H	-CH ₃
217	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OH	H	-CH ₃
218	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OH	H	-CH ₃
219	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OH	H	-CH ₃
220	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OH	H	-CH ₃
221	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OH	H	-CH ₃
222	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OH	H	-CH ₃
223	-CH(CH ₃) ₂	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OH	H	-CH ₃
224	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OH	H	-CH ₃
225	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OH	H	-CH ₃
226	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OH	H	-CH ₃
227	-CH ₂ -HC=CH ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OH	H	-CH ₃
228	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃
229	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃
230	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃
231	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃
232	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃
233	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃
234	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃
235	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃
236	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃
237	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃
238	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃
239	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃
240	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃
241	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃
242	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃
243	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃
244	-CH(CH ₃) ₂	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃

10

20

30

40

50

【表 2 - 6】

245	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃
246	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃
247	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃
248	-CH ₂ -HC=CH ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	OC(O)CH ₃	H	-CH ₃
249	-CH ₃	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	H	H
250	-CH ₃	-CH ₃	-CH ₃	H	-OH	H	H	H
251	-CH ₃	-CH ₃	-CH ₃	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
252	-CH ₃	-CH ₃	-CH ₃	H	-OCH ₃	H	H	H
253	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	-CH ₃	H	H	H	H	H
254	-CH ₃	-CH ₂ (CH ₃) ₂	-CH ₃	H	H	H	H	H
255	-CH ₃	-CH ₃	-CH ₃	H	F	H	H	H
256	-CH ₃	-CH ₃	H	-CH ₃	H	H	H	H
257	-CH ₃	-CH ₃	H	-CH ₃	-OH	H	H	H
258	-CH ₃	-CH ₃	H	-CH ₃	-OC(O)CH ₃	H	H	H
259	-CH ₃	-CH ₃	H	-CH ₃	-OCH ₃	H	H	H
260	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	-CH ₃	H	H	H	H
261	-CH ₃	-CH ₂ (CH ₃) ₂	H	-CH ₃	H	H	H	H
262	-CH ₃	-CH ₃	H	-CH ₃	F	H	H	H
263	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	H	F	H
264	-CH ₃	-CH ₃	H	H	-OH	H	F	H
265	-CH ₃	-CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	F	H
266	-CH ₃	-CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	F	H
267	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	F	H
268	-CH ₃	-CH ₂ (CH ₃) ₂	H	H	H	H	F	H
269	-CH ₃	-CH ₃	H	H	F	H	F	H
270	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	H	H	-CH ₃
271	-CH ₃	-CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₃
272	-CH ₃	-CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃
273	-CH ₃	-CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃
274	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	H	-CH ₃
275	-CH ₃	-CH ₂ (CH ₃) ₂	H	H	H	H	H	-CH ₃
276	-CH ₃	-CH ₃	H	H	F	H	H	-CH ₃
277	-CH ₃	-CH ₃	-CH ₃	H	H	-OH	H	H
278	-CH ₃	-CH ₃	-CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
279	-CH ₃	-CH ₃	-CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H
280	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	-CH ₃	H	H	H	H	H
281	-CH ₃	-CH ₂ (CH ₃) ₂	-CH ₃	H	H	H	H	H
282	-CH ₃	-CH ₃	-CH ₃	H	H	F	H	H
283	-CH ₃	-CH ₃	H	-CH ₃	H	H	H	H
284	-CH ₃	-CH ₃	H	-CH ₃	H	-OH	H	H
285	-CH ₃	-CH ₃	H	-CH ₃	H	-OC(O)CH ₃	H	H
286	-CH ₃	-CH ₃	H	-CH ₃	H	-OCH ₃	H	H
287	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	-CH ₃	H	H	H	H
288	-CH ₃	-CH ₂ (CH ₃) ₂	H	-CH ₃	H	H	H	H
289	-CH ₃	-CH ₃	H	-CH ₃	H	F	H	H
290	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	H	F	H
291	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	-OH	F	H
292	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	F	H
293	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	F	H
294	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	F	H
295	-CH ₃	-CH ₂ (CH ₃) ₂	H	H	H	H	F	H
296	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	F	F	H
297	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	H	H	-CH ₃
298	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	-OH	H	-CH ₃

10

20

30

40

【表 2 - 7】

299	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃
300	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
301	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	H	-CH ₃
302	-CH ₃	-CH ₂ (CH ₃) ₂	H	H	H	H	H	-CH ₃
303	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	H	F	-CH ₃
304	H	-CH ₃	H	H	H	H	H	H
305	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	H	H
306	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	H	H	H
307	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	H	H
308	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	H	H
309	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	H	H
310	H	-CH ₃	H	-CH ₃	H	H	H	H
310a	H	-CH ₂ CH ₃	H	-CH ₃	H	H	H	H
311	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	-CH ₃	H	H	H	H
312	H	-CH(CH ₃) ₂	H	-CH ₃	H	H	H	H
313	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	-CH ₃	H	H	H	H
314	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	-CH ₃	H	H	H	H
315	H	-CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
316	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
317	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
318	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	H	H
319	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
320	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	H
321	H	-CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
322	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
324	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
325	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
326	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
327	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
328	H	-CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	H
329	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	H
330	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	H
331	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	H
332	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	H
333	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	H
334	H	-CH ₃	H	H	H	H	F	H
335	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	F	H
336	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	H	F	H
337	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	F	H
338	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	F	H
339	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	F	H
340	H	-CH ₃	H	-CH ₃	-OH	H	H	H
341	H	-CH ₂ CH ₃	H	-CH ₃	-OH	H	H	H
342	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	-CH ₃	-OH	H	H	H
343	H	-CH(CH ₃) ₂	H	-CH ₃	-OH	H	H	H
344	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	-CH ₃	-OH	H	H	H
345	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	-CH ₃	-OH	H	H	H
346	H	-CH ₃	H	-CH ₃	-OC(O)CH ₃	H	H	H
347	H	-CH ₂ CH ₃	H	-CH ₃	-OC(O)CH ₃	H	H	H
348	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	-CH ₃	-OC(O)CH ₃	H	H	H
349	H	-CH(CH ₃) ₂	H	-CH ₃	-OC(O)CH ₃	H	H	H
350	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	-CH ₃	-OC(O)CH ₃	H	H	H
351	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	-CH ₃	-OC(O)CH ₃	H	H	H
352	H	-CH ₃	H	-CH ₃	H	-OCH ₃	H	H

10

20

30

40

50

【表 2 - 8】

353	H	-CH ₂ CH ₃	H	-CH ₃	H	-OCH ₃	H	H
354	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	-CH ₃	H	-OCH ₃	H	H
355	H	-CH(CH ₃) ₂	H	-CH ₃	H	-OCH ₃	H	H
356	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	-CH ₃	H	-OCH ₃	H	H
357	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	-CH ₃	H	-OCH ₃	H	H
358	H	-CH ₃	H	-CH ₃	H	H	F	H
359	H	-CH ₂ CH ₃	H	-CH ₃	H	H	F	H
360	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	-CH ₃	H	H	F	H
361	H	-CH(CH ₃) ₂	H	-CH ₃	H	H	F	H
362	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	-CH ₃	H	H	F	H
363	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	-CH ₃	H	H	F	H
364	H	シクロプロピル	H	H	H	H	H	H
365	H	シクロプロピル	H	-CH ₃	H	H	H	H
366	H	シクロプロピル	H	H	-OH	H	H	H
367	H	シクロプロピル	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
368	H	シクロプロピル	H	H	H	-OCH ₃	H	H
369	H	シクロプロピル	H	H	H	H	F	H
370	H	シクロプロピル	H	H	H	H	H	H
371	H	シクロプロピル	H	-CH ₃	-OH	H	F	H
372	H	シクロプロピル	H	-CH ₃	-OH	H	H	H
373	H	シクロプロピル	H	-CH ₃	-OC(O)CH ₃	H	H	H
374	H	シクロプロピル	H	-CH ₃	H	-OCH ₃	H	H
375	H	シクロプロピル	H	-CH ₃	H	H	F	H
376	-CH ₃	シクロプロピル	H	H	H	H	H	H
377	-CH ₃	シクロプロピル	H	-CH ₃	H	H	H	H
378	-CH ₃	シクロプロピル	H	H	-OH	H	H	H
379	-CH ₃	シクロプロピル	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
380	-CH ₃	シクロプロピル	H	H	H	-OCH ₃	H	H
381	-CH ₃	シクロプロピル	H	H	H	H	F	H
382	-CH ₃	シクロプロピル	H	H	H	H	H	H
383	-CH ₃	シクロプロピル	H	-CH ₃	-OH	H	F	H
384	-CH ₃	シクロプロピル	H	-CH ₃	-OH	H	H	H
385	-CH ₃	シクロプロピル	H	-CH ₃	-OC(O)CH ₃	H	H	H
386	-CH ₃	シクロプロピル	H	-CH ₃	H	-OCH ₃	H	H
387	-CH ₃	シクロプロピル	H	-CH ₃	H	H	F	H
388	-CH ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	H	H	H	H	H
389	-CH ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	-CH ₃	H	H	H	H
390	-CH ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	H	-OH	H	H	H
391	-CH ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
392	-CH ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	H	H	-OCH ₃	H	H
393	-CH ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	H	H	H	F	H
394	-CH ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	H	H	H	H	H
395	-CH ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	-CH ₃	-OH	H	F	H
396	-CH ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	-CH ₃	-OH	H	H	H
397	-CH ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	-CH ₃	-OC(O)CH ₃	H	H	H
398	-CH ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	-CH ₃	H	-OCH ₃	H	H
399	-CH ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	-CH ₃	H	H	F	H
400	-(CH ₂) ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	H	H	H	H	H
401	-(CH ₂) ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	-CH ₃	H	H	H	H
402	-(CH ₂) ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	H	-OH	H	H	H
403	-(CH ₂) ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
404	-(CH ₂) ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	H	H	-OCH ₃	H	H
405	-(CH ₂) ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	H	H	H	F	H
406	-(CH ₂) ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	H	H	H	H	H

10

20

30

40

50

【表 2 - 9】

407	$-(CH_2)_2CH_3$	シクロプロピル	H	$-CH_3$	$-OH$	H	F	H
408	$-(CH_2)_2CH_3$	シクロプロピル	H	$-CH_3$	$-OH$	H	H	H
409	$-(CH_2)_2CH_3$	シクロプロピル	H	$-CH_3$	$-OC(O)CH_3$	H	H	H
410	$-(CH_2)_2CH_3$	シクロプロピル	H	$-CH_3$	H	$-OCH_3$	H	H
411	$-(CH_2)_2CH_3$	シクロプロピル	H	$-CH_3$	H	H	F	H
412	$-CH_2(CH_3)_2$	シクロプロピル	H	H	H	H	H	H
413	$-CH_2(CH_3)_2$	シクロプロピル	H	$-CH_3$	H	H	H	H
414	$-CH_2(CH_3)_2$	シクロプロピル	H	H	$-OH$	H	H	H
415	$-CH_2(CH_3)_2$	シクロプロピル	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	H	H
416	$-CH_2(CH_3)_2$	シクロプロピル	H	H	H	$-OCH_3$	H	H
417	$-CH_2(CH_3)_2$	シクロプロピル	H	H	H	H	F	H
418	$-CH_2(CH_3)_2$	シクロプロピル	H	H	H	H	H	H
419	$-CH_2(CH_3)_2$	シクロプロピル	H	$-CH_3$	$-OH$	H	F	H
420	$-CH_2(CH_3)_2$	シクロプロピル	H	$-CH_3$	$-OH$	H	H	H
421	$-CH_2(CH_3)_2$	シクロプロピル	H	$-CH_3$	$-OC(O)CH_3$	H	H	H
422	$-CH_2(CH_3)_2$	シクロプロピル	H	$-CH_3$	H	$-OCH_3$	H	H
423	$-CH_2(CH_3)_2$	シクロプロピル	H	$-CH_3$	H	H	F	H
424	シクロプロピル	シクロプロピル	H	$-CH_3$	H	H	H	H
425	シクロプロピル	シクロプロピル	H	H	$-OH$	H	H	H
426	シクロプロピル	シクロプロピル	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	H	H
427	シクロプロピル	シクロプロピル	H	H	H	$-OCH_3$	H	H
428	シクロプロピル	シクロプロピル	H	H	H	H	F	H
429	シクロプロピル	シクロプロピル	H	H	H	H	H	H
430	シクロプロピル	シクロプロピル	H	$-CH_3$	$-OH$	H	F	H
431	シクロプロピル	シクロプロピル	H	$-CH_3$	$-OH$	H	H	H
432	シクロプロピル	シクロプロピル	H	$-CH_3$	$-OC(O)CH_3$	H	H	H
433	シクロプロピル	シクロプロピル	H	$-CH_3$	H	$-OCH_3$	H	H
434	シクロプロピル	シクロプロピル	H	$-CH_3$	H	H	F	H
435	H	$-CH_3$	H	H	$-OH$	H	H	$-CH_3$
436	H	$-CH_2CH_3$	H	H	$-OH$	H	H	$-CH_3$
437	H	$-(CH_2)_2CH_3$	H	H	$-OH$	H	H	$-CH_3$
438	H	$-CH(CH_3)_2$	H	H	$-OH$	H	H	$-CH_3$
439	H	$-(CH_2)_3CH_3$	H	H	$-OH$	H	H	$-CH_3$
440	H	$-CH_2-HC=CH_2$	H	H	$-OH$	H	H	$-CH_3$
441	H	$-CH_3$	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	H	$-CH_3$
442	H	$-CH_2CH_3$	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	H	$-CH_3$
443	H	$-(CH_2)_2CH_3$	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	H	$-CH_3$
444	H	$-CH(CH_3)_2$	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	H	$-CH_3$
445	H	$-(CH_2)_3CH_3$	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	H	$-CH_3$
446	H	$-CH_2-HC=CH_2$	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	H	$-CH_3$
447	H	$-CH_3$	H	H	H	$-OCH_3$	H	$-CH_3$
448	H	$-CH_2CH_3$	H	H	H	$-OCH_3$	H	$-CH_3$
449	H	$-(CH_2)_2CH_3$	H	H	H	$-OCH_3$	H	$-CH_3$
450	H	$-CH(CH_3)_2$	H	H	H	$-OCH_3$	H	$-CH_3$
451	H	$-(CH_2)_3CH_3$	H	H	H	$-OCH_3$	H	$-CH_3$
452	H	$-CH_2-HC=CH_2$	H	H	H	$-OCH_3$	H	$-CH_3$
453	H	$-CH_3$	H	H	$-OH$	H	F	H
454	H	$-CH_2CH_3$	H	H	$-OH$	H	F	H
455	H	$-(CH_2)_2CH_3$	H	H	$-OH$	H	F	H
456	H	$-CH(CH_3)_2$	H	H	$-OH$	H	F	H
457	H	$-(CH_2)_3CH_3$	H	H	$-OH$	H	F	H
458	H	$-CH_2-HC=CH_2$	H	H	$-OH$	H	F	H
459	H	$-CH_3$	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	F	H
460	H	$-CH_2CH_3$	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	F	H

10

20

30

40

50

【表 2 - 1 0】

461	H	$-(CH_2)_2CH_3$	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	F	H
462	H	$-CH(CH_3)_2$	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	F	H
463	H	$-(CH_2)_3CH_3$	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	F	H
464	H	$-CH_2-CH=CH_2$	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	F	H
465	H	$-CH_3$	H	H	H	$-OCH_3$	F	H
466	H	$-CH_2CH_3$	H	H	H	$-OCH_3$	F	H
467	H	$-(CH_2)_2CH_3$	H	H	H	$-OCH_3$	F	H
468	H	$-CH(CH_3)_2$	H	H	H	$-OCH_3$	F	H
469	H	$-(CH_2)_3CH_3$	H	H	H	$-OCH_3$	F	H
470	H	$-CH_2-CH=CH_2$	H	H	H	$-OCH_3$	F	H
471	H	$-CD_3$	H	H	H	H	H	H
472	H	$-CD_3$	H	H	$-OH$	H	H	H
473	H	$-CD_3$	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	H	H
474	H	$-CD_3$	H	H	H	$-OCH_3$	H	H
475	H	$-CD_3$	H	H	H	H	F	H
476	H	$-CD_3$	H	H	$-OH$	H	F	H
477	H	$-CD_3$	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	F	H
478	H	$-CD_3$	H	H	H	$-OCH_3$	F	H
479	H	$-CD_3$	H	H	H	H	H	$-CH_3$
480	H	$-CD_3$	H	H	$-OH$	H	H	$-CH_3$
481	H	$-CD_3$	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	H	$-CH_3$
482	H	$-CD_3$	H	H	H	$-OCH_3$	H	$-CH_3$
483	H	$-CD_3$	H	H	H	H	F	$-CH_3$
484	H	$-CD_3$	H	H	$-OH$	H	F	$-CH_3$
485	H	$-CD_3$	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	F	$-CH_3$
486	H	$-CD_3$	H	H	H	$-OCH_3$	F	$-CH_3$
487	H	$-CD_2CD_3$	H	H	H	H	H	H
488	H	$-CD_2CD_3$	H	H	$-OH$	H	H	H
489	H	$-CD_2CD_3$	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	H	H
490	H	$-CD_2CD_3$	H	H	H	$-OCH_3$	H	H
491	H	$-CD_2CD_3$	H	H	H	H	F	H
492	H	$-CD_2CD_3$	H	H	$-OH$	H	F	H
493	H	$-CD_2CD_3$	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	F	H
494	H	$-CD_2CD_3$	H	H	H	$-OCH_3$	F	H
495	H	$-CD_2CD_3$	H	H	H	H	H	$-CH_3$
496	H	$-CD_2CD_3$	H	H	$-OH$	H	H	$-CH_3$
497	H	$-CD_2CD_3$	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	H	$-CH_3$
498	H	$-CD_2CD_3$	H	H	H	$-OCH_3$	H	$-CH_3$
499	H	$-CD_2CD_3$	H	H	H	H	F	$-CH_3$
500	H	$-CD_2CD_3$	H	H	$-OH$	H	F	$-CH_3$
501	H	$-CD_2CD_3$	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	F	$-CH_3$
502	H	$-CD_2CD_3$	H	H	H	$-OCH_3$	F	$-CH_3$
503	H	$-CH_3$	H	H	$-OH$	H	F	$-CH_3$
504	H	$-CH_2CH_3$	H	H	$-OH$	H	F	$-CH_3$
505	H	$-(CH_2)_2CH_3$	H	H	$-OH$	H	F	$-CH_3$
506	H	$-CH(CH_3)_2$	H	H	$-OH$	H	F	$-CH_3$
507	H	$-(CH_2)_3CH_3$	H	H	$-OH$	H	F	$-CH_3$
508	H	$-CH_2-CH=CH_2$	H	H	$-OH$	H	F	$-CH_3$
509	H	$-CH_3$	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	F	$-CH_3$
510	H	$-CH_2CH_3$	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	F	$-CH_3$
511	H	$-(CH_2)_2CH_3$	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	F	$-CH_3$
512	H	$-CH(CH_3)_2$	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	F	$-CH_3$
513	H	$-(CH_2)_3CH_3$	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	F	$-CH_3$
514	H	$-CH_2-CH=CH_2$	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	F	$-CH_3$

10

20

30

40

50

【表 2 - 1 1】

515	H	-CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	F	-CH ₃
516	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	F	-CH ₃
517	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	F	-CH ₃
518	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OCH ₃	F	-CH ₃
519	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	F	-CH ₃
520	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OCH ₃	F	-CH ₃
521	H	-CH ₃	H	D	H	H	H	H
522	H	-CH ₂ CH ₃	H	D	H	H	H	H
523	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	D	H	H	H	H
524	H	-CH(CH ₃) ₂	H	D	H	H	H	H
525	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	D	H	H	H	H
526	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	D	H	H	H	H
527	H	-CH ₃	H	D	-OH	H	H	H
528	H	-CH ₂ CH ₃	H	D	-OH	H	H	H
529	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	D	-OH	H	H	H
530	H	-CH(CH ₃) ₂	H	D	-OH	H	H	H
531	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	D	-OH	H	H	H
532	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	D	-OH	H	H	H
533	H	-CH ₃	H	D	-OC(O)CH ₃	H	H	H
534	H	-CH ₂ CH ₃	H	D	-OC(O)CH ₃	H	H	H
535	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	D	-OC(O)CH ₃	H	H	H
536	H	-CH(CH ₃) ₂	H	D	-OC(O)CH ₃	H	H	H
537	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	D	-OC(O)CH ₃	H	H	H
538	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	D	-OC(O)CH ₃	H	H	H
539	H	-CH ₃	H	D	H	-OCH ₃	H	H
540	H	-CH ₂ CH ₃	H	D	H	-OCH ₃	H	H
541	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	D	H	-OCH ₃	H	H
542	H	-CH(CH ₃) ₂	H	D	H	-OCH ₃	H	H
543	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	D	H	-OCH ₃	H	H
544	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	D	H	-OCH ₃	H	H
545	H	-CH ₃	H	D	H	H	F	H
546	H	-CH ₂ CH ₃	H	D	H	H	F	H
547	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	D	H	H	F	H
548	H	-CH(CH ₃) ₂	H	D	H	H	F	H
549	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	D	H	H	F	H
550	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	D	H	H	F	H
551	H	-CH ₃	H	D	H	H	F	CH ₃
552	H	-CH ₂ CH ₃	H	D	H	H	F	CH ₃
553	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	D	H	H	F	CH ₃
554	H	-CH(CH ₃) ₂	H	D	H	H	F	CH ₃
555	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	D	H	H	F	CH ₃
556	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	D	H	H	F	CH ₃

10

20

30

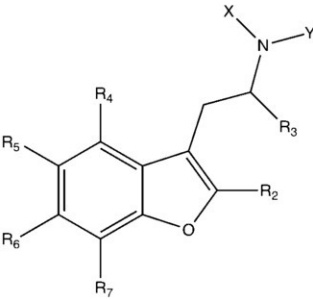
【 0 0 7 4 】

他の例示的な式Ⅰの化合物には、以下の表 3 におけるものが含まれ、これはまた、式Ⅰ c によって表される：

40

50

【化 7】



式 I c

【表 3 - 1】

表 3

参照	X	Y	R ₂	R ₃	R ₄	R ₅	R ₆	R ₇
1	-CH ₃	-CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
2	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
3	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
4	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
5	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
6	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
7	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
8	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
9	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
10	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
11	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
12	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
13	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
14	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
15	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
16	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
17	-CH(CH ₃) ₂	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
18	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
19	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
20	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
21	-CH ₂ -HC=CH ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
22	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
23	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
24	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	H	H
25	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
26	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	H
27	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
28	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
29	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	H	H
30	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
31	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	H
32	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
33	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	H	H
34	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
35	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	H
36	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	H	H
37	-CH(CH ₃) ₂	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
38	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	H

【表 3 - 2】

39	$-(CH_2)_3CH_3$	$-(CH_2)_3CH_3$	H	H	-OH	H	H	H
40	$-(CH_2)_3CH_3$	$-CH_2-CH=CH_2$	H	H	-OH	H	H	H
41	$-CH_2-CH=CH_2$	$-CH_2-CH=CH_2$	H	H	-OH	H	H	H
42	$-CH_3$	$-CH_3$	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	H	H
43	$-CH_3$	$-CH_2CH_3$	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	H	H
44	$-CH_3$	$-(CH_2)_2CH_3$	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	H	H
45	$-CH_3$	$-CH(CH_3)_2$	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	H	H
46	$-CH_3$	$-(CH_2)_3CH_3$	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	H	H
47	$-CH_3$	$-CH_2-CH=CH_2$	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	H	H
48	$-CH_2CH_3$	$-CH_2CH_3$	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	H	H
49	$-CH_2CH_3$	$-(CH_2)_2CH_3$	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	H	H
50	$-CH_2CH_3$	$-CH(CH_3)_2$	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	H	H
51	$-CH_2CH_3$	$-(CH_2)_3CH_3$	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	H	H
52	$-CH_2CH_3$	$-CH_2-CH=CH_2$	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	H	H
53	$-(CH_2)_2CH_3$	$-(CH_2)_2CH_3$	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	H	H
54	$-(CH_2)_2CH_3$	$-CH(CH_3)_2$	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	H	H
55	$-(CH_2)_2CH_3$	$-(CH_2)_3CH_3$	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	H	H
56	$-(CH_2)_2CH_3$	$-CH_2-CH=CH_2$	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	H	H
57	$-CH(CH_3)_2$	$-CH(CH_3)_2$	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	H	H
58	$-CH(CH_3)_2$	$-(CH_2)_3CH_3$	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	H	H
59	$-CH(CH_3)_2$	$-CH_2-CH=CH_2$	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	H	H
60	$-(CH_2)_3CH_3$	$-(CH_2)_3CH_3$	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	H	H
61	$-(CH_2)_3CH_3$	$-CH_2-CH=CH_2$	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	H	H
62	$-CH_2-CH=CH_2$	$-CH_2-CH=CH_2$	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	H	H
63	$-CH_3$	$-CH_3$	H	H	H	$-OCH_2CH_3$	H	H
64	$-CH_3$	$-CH_2CH_3$	H	H	H	$-OCH_3$	H	H
65	$-CH_3$	$-(CH_2)_2CH_3$	H	H	H	$-OCH_3$	H	H
66	$-CH_3$	$-CH(CH_3)_2$	H	H	H	$-OCH_3$	H	H
67	$-CH_3$	$-(CH_2)_3CH_3$	H	H	H	$-OCH_3$	H	H
68	$-CH_3$	$-CH_2-CH=CH_2$	H	H	H	$-OCH_3$	H	H
69	$-CH_2CH_3$	$-CH_2CH_3$	H	H	H	$-OCH_3$	H	H
70	$-CH_2CH_3$	$-(CH_2)_2CH_3$	H	H	H	$-OCH_3$	H	H
71	$-CH_2CH_3$	$-CH(CH_3)_2$	H	H	H	$-OCH_3$	H	H
72	$-CH_2CH_3$	$-(CH_2)_3CH_3$	H	H	H	$-OCH_3$	H	H
73	$-CH_2CH_3$	$-CH_2-CH=CH_2$	H	H	H	$-OCH_3$	H	H
74	$-(CH_2)_2CH_3$	$-(CH_2)_2CH_3$	H	H	H	$-OCH_3$	H	H
75	$-(CH_2)_2CH_3$	$-CH(CH_3)_2$	H	H	H	$-OCH_3$	H	H
76	$-(CH_2)_2CH_3$	$-(CH_2)_3CH_3$	H	H	H	$-OCH_3$	H	H
77	$-(CH_2)_2CH_3$	$-CH_2-CH=CH_2$	H	H	H	$-OCH_3$	H	H
78	$-CH(CH_3)_2$	$-CH(CH_3)_2$	H	H	H	$-OCH_3$	H	H
79	$-CH(CH_3)_2$	$-(CH_2)_3CH_3$	H	H	H	$-OCH_3$	H	H
80	$-CH(CH_3)_2$	$-CH_2-CH=CH_2$	H	H	H	$-OCH_3$	H	H
81	$-(CH_2)_3CH_3$	$-(CH_2)_3CH_3$	H	H	H	$-OCH_3$	H	H
82	$-(CH_2)_3CH_3$	$-CH_2-CH=CH_2$	H	H	H	$-OCH_3$	H	H
83	$-CH_2-CH=CH_2$	$-CH_2-CH=CH_2$	H	H	H	$-OCH_3$	H	H
84	$-CH_3$	$-CH_2CH_3$	H	H	H	-OH	H	H
85	$-CH_3$	$-(CH_2)_2CH_3$	H	H	H	-OH	H	H
86	$-CH_3$	$-CH(CH_3)_2$	H	H	H	-OH	H	H
87	$-CH_3$	$-(CH_2)_3CH_3$	H	H	H	-OH	H	H
88	$-CH_3$	$-CH_2-CH=CH_2$	H	H	H	-OH	H	H
89	$-CH_2CH_3$	$-CH_2CH_3$	H	H	H	-OH	H	H
90	$-CH_2CH_3$	$-(CH_2)_2CH_3$	H	H	H	-OH	H	H
91	$-CH_2CH_3$	$-CH(CH_3)_2$	H	H	H	-OH	H	H
92	$-CH_2CH_3$	$-(CH_2)_3CH_3$	H	H	H	-OH	H	H

10

20

30

40

50

【表 3 - 3】

93	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OH	H	H
94	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OH	H	H
95	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OH	H	H
96	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OH	H	H
97	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OH	H	H
98	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OH	H	H
99	-CH(CH ₃) ₂	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OH	H	H
100	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OH	H	H
101	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OH	H	H
102	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OH	H	H
103	-CH ₂ -HC=CH ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OH	H	H
104	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
105	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
106	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
107	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
108	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
109	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
110	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
111	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
112	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
113	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
114	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
115	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
116	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
117	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
118	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
119	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
120	-CH(CH ₃) ₂	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
121	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
122	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
123	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
124	-CH ₂ -HC=CH ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
125	-CH ₃	-CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃
126	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃
127	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃
128	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃
129	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃
130	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃
131	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃
132	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃
133	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃
134	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃
135	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃
135	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃
137	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃
138	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃
139	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃
140	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃
141	-CH(CH ₃) ₂	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃
142	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃
143	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃
144	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃
145	-CH ₂ -HC=CH ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃
146	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₃

10

20

30

40

50

【表 3 - 4】

147	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₃
148	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	H	-CH ₃
149	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₃
150	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	-CH ₃
151	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₃
152	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₃
153	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	H	-CH ₃
154	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₃
155	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	-CH ₃
156	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₃
157	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	H	-CH ₃
158	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₃
159	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	-CH ₃
160	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	H	-CH ₃
161	-CH(CH ₃) ₂	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₃
162	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	-CH ₃
163	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₃
164	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	-CH ₃
165	-CH ₂ -HC=CH ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	-CH ₃
166	-CH ₃	-CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃
167	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃
168	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃
169	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃
170	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃
171	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃
172	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃
173	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃
174	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃
175	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃
176	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃
177	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃
178	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃
179	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃
180	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃
181	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃
182	-CH(CH ₃) ₂	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃
183	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃
184	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃
185	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃
186	-CH ₂ -HC=CH ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃
187	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
188	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
189	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
190	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
191	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
192	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
193	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
194	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
195	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
196	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
197	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
198	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
199	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
200	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃

10

20

30

40

50

【表 3 - 5】

201	$-(CH_2)_2CH_3$	$-CH_2-HC=CH_2$	H	H	H	$-OCH_3$	H	$-CH_3$
202	$-CH(CH_3)_2$	$-CH(CH_3)_2$	H	H	H	$-OCH_3$	H	$-CH_3$
203	$-CH(CH_3)_2$	$-(CH_2)_3CH_3$	H	H	H	$-OCH_3$	H	$-CH_3$
204	$-CH(CH_3)_2$	$-CH_2-HC=CH_2$	H	H	H	$-OCH_3$	H	$-CH_3$
205	$-(CH_2)_3CH_3$	$-(CH_2)_3CH_3$	H	H	H	$-OCH_3$	H	$-CH_3$
206	$-(CH_2)_3CH_3$	$-CH_2-HC=CH_2$	H	H	H	$-OCH_3$	H	$-CH_3$
207	$-CH_2-HC=CH_2$	$-CH_2-HC=CH_2$	H	H	H	$-OCH_3$	H	$-CH_3$
208	$-CH_3$	$-CH_2CH_3$	H	H	H	$-OH$	H	$-CH_3$
209	$-CH_3$	$-(CH_2)_2CH_3$	H	H	H	$-OH$	H	$-CH_3$
210	$-CH_3$	$-CH(CH_3)_2$	H	H	H	$-OH$	H	$-CH_3$
211	$-CH_3$	$-(CH_2)_3CH_3$	H	H	H	$-OH$	H	$-CH_3$
212	$-CH_3$	$-CH_2-HC=CH_2$	H	H	H	$-OH$	H	$-CH_3$
213	$-CH_2CH_3$	$-CH_2CH_3$	H	H	H	$-OH$	H	$-CH_3$
214	$-CH_2CH_3$	$-(CH_2)_2CH_3$	H	H	H	$-OH$	H	$-CH_3$
215	$-CH_2CH_3$	$-CH(CH_3)_2$	H	H	H	$-OH$	H	$-CH_3$
216	$-CH_2CH_3$	$-(CH_2)_3CH_3$	H	H	H	$-OH$	H	$-CH_3$
217	$-CH_2CH_3$	$-CH_2-HC=CH_2$	H	H	H	$-OH$	H	$-CH_3$
218	$-(CH_2)_2CH_3$	$-(CH_2)_2CH_3$	H	H	H	$-OH$	H	$-CH_3$
219	$-(CH_2)_2CH_3$	$-CH(CH_3)_2$	H	H	H	$-OH$	H	$-CH_3$
220	$-(CH_2)_2CH_3$	$-(CH_2)_3CH_3$	H	H	H	$-OH$	H	$-CH_3$
221	$-(CH_2)_2CH_3$	$-CH_2-HC=CH_2$	H	H	H	$-OH$	H	$-CH_3$
222	$-CH(CH_3)_2$	$-CH(CH_3)_2$	H	H	H	$-OH$	H	$-CH_3$
223	$-CH(CH_3)_2$	$-(CH_2)_3CH_3$	H	H	H	$-OH$	H	$-CH_3$
224	$-CH(CH_3)_2$	$-CH_2-HC=CH_2$	H	H	H	$-OH$	H	$-CH_3$
225	$-(CH_2)_3CH_3$	$-(CH_2)_3CH_3$	H	H	H	$-OH$	H	$-CH_3$
226	$-(CH_2)_3CH_3$	$-CH_2-HC=CH_2$	H	H	H	$-OH$	H	$-CH_3$
227	$-CH_2-HC=CH_2$	$-CH_2-HC=CH_2$	H	H	H	$-OH$	H	$-CH_3$
228	$-CH_3$	$-CH_3$	H	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	$-CH_3$
229	$-CH_3$	$-CH_2CH_3$	H	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	$-CH_3$
230	$-CH_3$	$-(CH_2)_2CH_3$	H	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	$-CH_3$
231	$-CH_3$	$-CH(CH_3)_2$	H	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	$-CH_3$
232	$-CH_3$	$-(CH_2)_3CH_3$	H	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	$-CH_3$
233	$-CH_3$	$-CH_2-HC=CH_2$	H	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	$-CH_3$
234	$-CH_2CH_3$	$-CH_2CH_3$	H	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	$-CH_3$
235	$-CH_2CH_3$	$-(CH_2)_2CH_3$	H	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	$-CH_3$
236	$-CH_2CH_3$	$-CH(CH_3)_2$	H	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	$-CH_3$
237	$-CH_2CH_3$	$-(CH_2)_3CH_3$	H	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	$-CH_3$
238	$-CH_2CH_3$	$-CH_2-HC=CH_2$	H	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	$-CH_3$
239	$-(CH_2)_2CH_3$	$-(CH_2)_2CH_3$	H	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	$-CH_3$
240	$-(CH_2)_2CH_3$	$-CH(CH_3)_2$	H	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	$-CH_3$
241	$-(CH_2)_2CH_3$	$-(CH_2)_3CH_3$	H	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	$-CH_3$
242	$-(CH_2)_2CH_3$	$-CH_2-HC=CH_2$	H	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	$-CH_3$
243	$-CH(CH_3)_2$	$-CH(CH_3)_2$	H	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	$-CH_3$
244	$-CH(CH_3)_2$	$-(CH_2)_3CH_3$	H	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	$-CH_3$
245	$-CH(CH_3)_2$	$-CH_2-HC=CH_2$	H	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	$-CH_3$
246	$-(CH_2)_3CH_3$	$-(CH_2)_3CH_3$	H	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	$-CH_3$
247	$-(CH_2)_3CH_3$	$-CH_2-HC=CH_2$	H	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	$-CH_3$
248	$-CH_2-HC=CH_2$	$-CH_2-HC=CH_2$	H	H	H	$-OC(O)CH_3$	H	$-CH_3$
249	$-CH_3$	$-CH_3$	$-CH_3$	H	H	H	H	H
250	$-CH_3$	$-CH_3$	$-CH_3$	H	$-OH$	H	H	H
251	$-CH_3$	$-CH_3$	$-CH_3$	H	$-OC(O)CH_3$	H	H	H
252	$-CH_3$	$-CH_3$	$-CH_3$	H	$-OCH_3$	H	H	H
253	$-CH_3$	$-CH_2CH_3$	$-CH_3$	H	H	H	H	H
254	$-CH_3$	$-CH_2(CH_3)_2$	$-CH_3$	H	H	H	H	H

10

20

30

40

50

【表 3 - 6】

255	-CH ₃	-CH ₃	-CH ₃	H	F	H	H	H
256	-CH ₃	-CH ₃	H	-CH ₃	H	H	H	H
257	-CH ₃	-CH ₃	H	-CH ₃	-OH	H	H	H
258	-CH ₃	-CH ₃	H	-CH ₃	-OC(O)CH ₃	H	H	H
259	-CH ₃	-CH ₃	H	-CH ₃	-OCH ₃	H	H	H
260	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	-CH ₃	H	H	H	H
261	-CH ₃	-CH ₂ (CH ₃) ₂	H	-CH ₃	H	H	H	H
262	-CH ₃	-CH ₃	H	-CH ₃	F	H	H	H
263	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	H	F	H
264	-CH ₃	-CH ₃	H	H	-OH	H	F	H
265	-CH ₃	-CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	F	H
266	-CH ₃	-CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	F	H
267	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	F	H
268	-CH ₃	-CH ₂ (CH ₃) ₂	H	H	H	H	F	H
269	-CH ₃	-CH ₃	H	H	F	H	F	H
270	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	H	H	-CH ₃
271	-CH ₃	-CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₃
272	-CH ₃	-CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃
273	-CH ₃	-CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃
274	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	H	-CH ₃
275	-CH ₃	-CH ₂ (CH ₃) ₂	H	H	H	H	H	-CH ₃
276	-CH ₃	-CH ₃	H	H	F	H	H	-CH ₃
277	-CH ₃	-CH ₃	-CH ₃	H	H	-OH	H	H
278	-CH ₃	-CH ₃	-CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
279	-CH ₃	-CH ₃	-CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H
280	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	-CH ₃	H	H	H	H	H
281	-CH ₃	-CH ₂ (CH ₃) ₂	-CH ₃	H	H	H	H	H
282	-CH ₃	-CH ₃	-CH ₃	H	H	F	H	H
283	-CH ₃	-CH ₃	H	-CH ₃	H	H	H	H
284	-CH ₃	-CH ₃	H	-CH ₃	H	-OH	H	H
285	-CH ₃	-CH ₃	H	-CH ₃	H	-OC(O)CH ₃	H	H
286	-CH ₃	-CH ₃	H	-CH ₃	H	-OCH ₃	H	H
287	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	-CH ₃	H	H	H	H
288	-CH ₃	-CH ₂ (CH ₃) ₂	H	-CH ₃	H	H	H	H
289	-CH ₃	-CH ₃	H	-CH ₃	H	F	H	H
290	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	H	F	H
291	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	-OH	F	H
292	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	F	H
293	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	F	H
294	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	F	H
295	-CH ₃	-CH ₂ (CH ₃) ₂	H	H	H	H	F	H
296	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	F	F	H
297	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	H	H	-CH ₃
298	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	-OH	H	-CH ₃
299	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃
300	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
301	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	H	-CH ₃
302	-CH ₃	-CH ₂ (CH ₃) ₂	H	H	H	H	H	-CH ₃
303	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	H	F	-CH ₃
304	H	-CH ₃	H	H	H	H	H	H
305	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	H	H
306	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	H	H	H
307	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	H	H
308	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	H	H

10

20

30

40

50

【表 3 - 7】

309	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	H	H
310	H	-CH ₃	H	-CH ₃	H	H	H	H
310a	H	-CH ₂ CH ₃	H	-CH ₃	H	H	H	H
311	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	-CH ₃	H	H	H	H
312	H	-CH(CH ₃) ₂	H	-CH ₃	H	H	H	H
313	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	-CH ₃	H	H	H	H
314	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	-CH ₃	H	H	H	H
315	H	-CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
316	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
317	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
318	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	H	H
319	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
320	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	H
321	H	-CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
322	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
324	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
325	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
326	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
327	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
328	H	-CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	H
329	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	H
330	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	H
331	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	H
332	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	H
333	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	H
334	H	-CH ₃	H	H	H	H	F	H
335	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	F	H
336	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	H	F	H
337	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	F	H
338	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	F	H
339	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	F	H
340	H	-CH ₃	H	-CH ₃	-OH	H	H	H
341	H	-CH ₂ CH ₃	H	-CH ₃	-OH	H	H	H
342	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	-CH ₃	-OH	H	H	H
343	H	-CH(CH ₃) ₂	H	-CH ₃	-OH	H	H	H
344	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	-CH ₃	-OH	H	H	H
345	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	-CH ₃	-OH	H	H	H
346	H	-CH ₃	H	-CH ₃	-OC(O)CH ₃	H	H	H
347	H	-CH ₂ CH ₃	H	-CH ₃	-OC(O)CH ₃	H	H	H
348	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	-CH ₃	-OC(O)CH ₃	H	H	H
349	H	-CH(CH ₃) ₂	H	-CH ₃	-OC(O)CH ₃	H	H	H
350	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	-CH ₃	-OC(O)CH ₃	H	H	H
351	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	-CH ₃	-OC(O)CH ₃	H	H	H
352	H	-CH ₃	H	-CH ₃	H	-OCH ₃	H	H
353	H	-CH ₂ CH ₃	H	-CH ₃	H	-OCH ₃	H	H
354	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	-CH ₃	H	-OCH ₃	H	H
355	H	-CH(CH ₃) ₂	H	-CH ₃	H	-OCH ₃	H	H
356	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	-CH ₃	H	-OCH ₃	H	H
357	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	-CH ₃	H	-OCH ₃	H	H
358	H	-CH ₃	H	-CH ₃	H	H	F	H
359	H	-CH ₂ CH ₃	H	-CH ₃	H	H	F	H
360	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	-CH ₃	H	H	F	H
361	H	-CH(CH ₃) ₂	H	-CH ₃	H	H	F	H
362	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	-CH ₃	H	H	F	H

10

20

30

40

50

【表 3 - 8】

363	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	-CH ₃	H	H	F	H
364	H	シクロプロピル	H	H	H	H	H	H
365	H	シクロプロピル	H	-CH ₃	H	H	H	H
366	H	シクロプロピル	H	H	-OH	H	H	H
367	H	シクロプロピル	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
368	H	シクロプロピル	H	H	H	-OCH ₃	H	H
369	H	シクロプロピル	H	H	H	H	F	H
370	H	シクロプロピル	H	H	H	H	H	H
371	H	シクロプロピル	H	-CH ₃	-OH	H	F	H
372	H	シクロプロピル	H	-CH ₃	-OH	H	H	H
373	H	シクロプロピル	H	-CH ₃	-OC(O)CH ₃	H	H	H
374	H	シクロプロピル	H	-CH ₃	H	-OCH ₃	H	H
375	H	シクロプロピル	H	-CH ₃	H	H	F	H
376	-CH ₃	シクロプロピル	H	H	H	H	H	H
377	-CH ₃	シクロプロピル	H	-CH ₃	H	H	H	H
378	-CH ₃	シクロプロピル	H	H	-OH	H	H	H
379	-CH ₃	シクロプロピル	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
380	-CH ₃	シクロプロピル	H	H	H	-OCH ₃	H	H
381	-CH ₃	シクロプロピル	H	H	H	H	F	H
382	-CH ₃	シクロプロピル	H	H	H	H	H	H
383	-CH ₃	シクロプロピル	H	-CH ₃	-OH	H	F	H
384	-CH ₃	シクロプロピル	H	-CH ₃	-OH	H	H	H
385	-CH ₃	シクロプロピル	H	-CH ₃	-OC(O)CH ₃	H	H	H
386	-CH ₃	シクロプロピル	H	-CH ₃	H	-OCH ₃	H	H
387	-CH ₃	シクロプロピル	H	-CH ₃	H	H	F	H
388	-CH ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	H	H	H	H	H
389	-CH ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	-CH ₃	H	H	H	H
390	-CH ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	H	-OH	H	H	H
391	-CH ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
392	-CH ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	H	H	-OCH ₃	H	H
393	-CH ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	H	H	H	F	H
394	-CH ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	H	H	H	H	H
395	-CH ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	-CH ₃	-OH	H	F	H
396	-CH ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	-CH ₃	-OH	H	H	H
397	-CH ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	-CH ₃	-OC(O)CH ₃	H	H	H
398	-CH ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	-CH ₃	H	-OCH ₃	H	H
399	-CH ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	-CH ₃	H	H	F	H
400	-(CH ₂) ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	H	H	H	H	H
401	-(CH ₂) ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	-CH ₃	H	H	H	H
402	-(CH ₂) ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	H	-OH	H	H	H
403	-(CH ₂) ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
404	-(CH ₂) ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	H	H	-OCH ₃	H	H
405	-(CH ₂) ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	H	H	H	F	H
406	-(CH ₂) ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	H	H	H	H	H
407	-(CH ₂) ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	-CH ₃	-OH	H	F	H
408	-(CH ₂) ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	-CH ₃	-OH	H	H	H
409	-(CH ₂) ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	-CH ₃	-OC(O)CH ₃	H	H	H
410	-(CH ₂) ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	-CH ₃	H	-OCH ₃	H	H
411	-(CH ₂) ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	-CH ₃	H	H	F	H
412	-CH ₂ (CH ₃) ₂	シクロプロピル	H	H	H	H	H	H
413	-CH ₂ (CH ₃) ₂	シクロプロピル	H	-CH ₃	H	H	H	H
414	-CH ₂ (CH ₃) ₂	シクロプロピル	H	H	-OH	H	H	H
415	-CH ₂ (CH ₃) ₂	シクロプロピル	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
416	-CH ₂ (CH ₃) ₂	シクロプロピル	H	H	H	-OCH ₃	H	H

10

20

30

40

50

【表 3 - 9】

417	-CH ₂ (CH ₃) ₂	シクロプロピル	H	H	H	H	F	H
418	-CH ₂ (CH ₃) ₂	シクロプロピル	H	H	H	H	H	H
419	-CH ₂ (CH ₃) ₂	シクロプロピル	H	-CH ₃	-OH	H	F	H
420	-CH ₂ (CH ₃) ₂	シクロプロピル	H	-CH ₃	-OH	H	H	H
421	-CH ₂ (CH ₃) ₂	シクロプロピル	H	-CH ₃	-OC(O)CH ₃	H	H	H
422	-CH ₂ (CH ₃) ₂	シクロプロピル	H	-CH ₃	H	-OCH ₃	H	H
423	-CH ₂ (CH ₃) ₂	シクロプロピル	H	-CH ₃	H	H	F	H
424	シクロプロピル	シクロプロピル	H	-CH ₃	H	H	H	H
425	シクロプロピル	シクロプロピル	H	H	-OH	H	H	H
426	シクロプロピル	シクロプロピル	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
427	シクロプロピル	シクロプロピル	H	H	H	-OCH ₃	H	H
428	シクロプロピル	シクロプロピル	H	H	H	H	F	H
429	シクロプロピル	シクロプロピル	H	H	H	H	H	H
430	シクロプロピル	シクロプロピル	H	-CH ₃	-OH	H	F	H
431	シクロプロピル	シクロプロピル	H	-CH ₃	-OH	H	H	H
432	シクロプロピル	シクロプロピル	H	-CH ₃	-OC(O)CH ₃	H	H	H
433	シクロプロピル	シクロプロピル	H	-CH ₃	H	-OCH ₃	H	H
434	シクロプロピル	シクロプロピル	H	-CH ₃	H	H	F	H
435	H	-CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₃
436	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₃
437	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₃
438	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	H	-CH ₃
439	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₃
440	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	-CH ₃
441	H	-CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃
442	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃
443	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃
444	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃
445	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃
446	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃
447	H	-CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
448	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
449	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
450	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
451	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
452	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
453	H	-CH ₃	H	H	-OH	H	F	H
454	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	F	H
455	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	F	H
456	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	F	H
457	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	F	H
458	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	F	H
459	H	-CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	F	H
460	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	F	H
461	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	F	H
462	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	F	H
463	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	F	H
464	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	F	H
465	H	-CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	F	H
466	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	F	H
467	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	F	H
468	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OCH ₃	F	H
469	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	F	H
470	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OCH ₃	F	H

10

20

30

40

50

【表 3 - 1 0】

471	H	-CD ₃	H	H	H	H	H	H
472	H	-CD ₃	H	H	-OH	H	H	H
473	H	-CD ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
474	H	-CD ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	H
475	H	-CD ₃	H	H	H	H	F	H
476	H	-CD ₃	H	H	-OH	H	F	H
477	H	-CD ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	F	H
478	H	-CD ₃	H	H	H	-OCH ₃	F	H
479	H	-CD ₃	H	H	H	H	H	-CH ₃
480	H	-CD ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₃
481	H	-CD ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃
482	H	-CD ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
483	H	-CD ₃	H	H	H	H	F	-CH ₃
484	H	-CD ₃	H	H	-OH	H	F	-CH ₃
485	H	-CD ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	F	-CH ₃
486	H	-CD ₃	H	H	H	-OCH ₃	F	-CH ₃
487	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	H	H	H	H
488	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	-OH	H	H	H
489	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
490	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	H
491	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	H	H	F	H
492	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	-OH	H	F	H
493	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	F	H
494	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	H	-OCH ₃	F	H
495	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	H	H	H	-CH ₃
496	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₃
497	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃
498	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃
499	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	H	H	F	-CH ₃
500	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	-OH	H	F	-CH ₃
501	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	F	-CH ₃
502	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	H	-OCH ₃	F	-CH ₃
503	H	-CH ₃	H	H	-OH	H	F	-CH ₃
504	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	F	-CH ₃
505	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	F	-CH ₃
506	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	F	-CH ₃
507	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	F	-CH ₃
508	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	F	-CH ₃
509	H	-CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	F	-CH ₃
510	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	F	-CH ₃
511	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	F	-CH ₃
512	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	F	-CH ₃
513	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	F	-CH ₃
514	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	F	-CH ₃
515	H	-CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	F	-CH ₃
516	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	F	-CH ₃
517	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	F	-CH ₃
518	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OCH ₃	F	-CH ₃
519	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	F	-CH ₃
520	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OCH ₃	F	-CH ₃
521	H	-CH ₃	H	D	H	H	H	H
522	H	-CH ₂ CH ₃	H	D	H	H	H	H
523	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	D	H	H	H	H
524	H	-CH(CH ₃) ₂	H	D	H	H	H	H

10

20

30

40

50

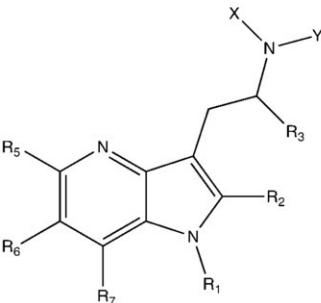
【表 3 - 1 1】

525	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	D	H	H	H	H
526	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	D	H	H	H	H
527	H	-CH ₃	H	D	-OH	H	H	H
528	H	-CH ₂ CH ₃	H	D	-OH	H	H	H
529	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	D	-OH	H	H	H
530	H	-CH(CH ₃) ₂	H	D	-OH	H	H	H
531	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	D	-OH	H	H	H
532	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	D	-OH	H	H	H
533	H	-CH ₃	H	D	-OC(O)CH ₃	H	H	H
534	H	-CH ₂ CH ₃	H	D	-OC(O)CH ₃	H	H	H
535	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	D	-OC(O)CH ₃	H	H	H
536	H	-CH(CH ₃) ₂	H	D	-OC(O)CH ₃	H	H	H
537	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	D	-OC(O)CH ₃	H	H	H
538	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	D	-OC(O)CH ₃	H	H	H
539	H	-CH ₃	H	D	H	-OCH ₃	H	H
540	H	-CH ₂ CH ₃	H	D	H	-OCH ₃	H	H
541	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	D	H	-OCH ₃	H	H
542	H	-CH(CH ₃) ₂	H	D	H	-OCH ₃	H	H
543	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	D	H	-OCH ₃	H	H
544	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	D	H	-OCH ₃	H	H
545	H	-CH ₃	H	D	H	H	F	H
546	H	-CH ₂ CH ₃	H	D	H	H	F	H
547	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	D	H	H	F	H
548	H	-CH(CH ₃) ₂	H	D	H	H	F	H
549	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	D	H	H	F	H
550	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	D	H	H	F	H
551	H	-CH ₃	H	D	H	H	F	CH ₃
552	H	-CH ₂ CH ₃	H	D	H	H	F	CH ₃
553	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	D	H	H	F	CH ₃
554	H	-CH(CH ₃) ₂	H	D	H	H	F	CH ₃
555	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	D	H	H	F	CH ₃
556	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	D	H	H	F	CH ₃

【 0 0 7 5 】

他の例示的な式 I の化合物には、以下の表 4 におけるものが含まれ、これはまた、式 I d によって表される：

【化 8】



式 I d

【表 4 - 1】

表 4

参照	X	Y	R ₂	R ₃	R ₅	R ₆	R ₇	R ₁
1	-CH ₃	-CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
2	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
3	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
4	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
5	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
6	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
7	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
8	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
9	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
10	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
11	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
12	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
13	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
14	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
15	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
16	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
17	-CH(CH ₃) ₂	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
18	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
19	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
20	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
21	-CH ₂ -HC=CH ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
22	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
23	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
24	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	H	H
25	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
26	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	H
27	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
28	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
29	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	H	H
30	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
31	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	H
32	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
33	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	H	H
34	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
35	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	H
36	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	H	H
37	-CH(CH ₃) ₂	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
38	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	H
39	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
40	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	H
41	-CH ₂ -HC=CH ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	H
42	-CH ₃	-CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
43	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
44	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
45	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
46	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
47	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
48	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
49	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
50	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
51	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H

10

20

30

40

50

【表 4 - 2】

52	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
53	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
54	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
55	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
56	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
57	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
58	-CH(CH ₃) ₂	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
59	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
60	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
61	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
62	-CH ₂ -HC=CH ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
63	-CH ₃	-CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
64	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
65	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
66	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
67	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
68	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
69	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
70	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
71	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
72	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
73	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
74	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
75	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
76	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
77	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
78	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
79	-CH(CH ₃) ₂	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
80	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
81	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
82	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
83	-CH ₂ -HC=CH ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
84	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	F	H	H
85	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	F	H	H
86	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	F	H	H
87	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	F	H	H
88	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	F	H	H
89	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	F	H	H
90	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	F	H	H
91	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	F	H	H
92	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	F	H	H
93	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	F	H	H
94	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	F	H	H
95	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	F	H	H
96	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	F	H	H
97	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	F	H	H
98	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	F	H	H
99	-CH(CH ₃) ₂	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	F	H	H
100	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	F	H	H
101	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	F	H	H
102	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	F	H	H
103	-CH ₂ -HC=CH ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	F	H	H
104	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	H	-CH ₃	H
105	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	-CH ₃	H

10

20

30

40

50

【表 4 - 3】

106	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	H	-CH ₃	H
107	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	-CH ₃	H
108	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	-CH ₃	H
109	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	-CH ₃	H
110	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	-CH ₃	H
111	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	H	-CH ₃	H
112	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	-CH ₃	H
113	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	-CH ₃	H
114	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	-CH ₃	H
115	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	H	-CH ₃	H
116	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	-CH ₃	H
117	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	-CH ₃	H
118	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	-CH ₃	H
119	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	-CH ₃	H
120	-CH(CH ₃) ₂	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	-CH ₃	H
121	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	-CH ₃	H
122	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	-CH ₃	H
123	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	-CH ₃	H
124	-CH ₂ -HC=CH ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	-CH ₃	H
125	-CH ₃	-CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃	H
126	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃	H
127	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃	H
128	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃	H
129	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃	H
130	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃	H
131	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃	H
132	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃	H
133	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃	H
134	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃	H
135	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃	H
135	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃	H
137	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃	H
138	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃	H
139	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃	H
140	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃	H
141	-CH(CH ₃) ₂	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃	H
142	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃	H
143	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃	H
144	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃	H
145	-CH ₂ -HC=CH ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃	H
146	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	F	H	H
147	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	F	H	H
148	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OCH ₃	F	H	H
149	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	F	H	H
150	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	F	H	H
151	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	F	H	H
152	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	F	H	H
153	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OCH ₃	F	H	H
154	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	F	H	H
155	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	F	H	H
156	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	F	H	H
157	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OCH ₃	F	H	H
158	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	F	H	H
159	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	F	H	H

10

20

30

40

50

【表 4 - 4】

160	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OCH ₃	F	H	H
161	-CH(CH ₃) ₂	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	F	H	H
162	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	F	H	H
163	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	F	H	H
164	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	F	H	H
165	-CH ₂ -HC=CH ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	F	H	H
166	H	-CH ₃	H	H	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
167	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
168	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
169	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
170	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
171	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
171a	H	-CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
172	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
173	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
174	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
175	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
176	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
177	H	-CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
178	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
179	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
180	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
181	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
182	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
183	H	-CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃	H
184	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃	H
185	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃	H
186	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃	H
187	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃	H
188	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃	H
189	H	-CH ₃	H	H	H	F	-CH ₃	H
190	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	F	-CH ₃	H
191	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	F	-CH ₃	H
192	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	F	-CH ₃	H
193	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	F	-CH ₃	H
194	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	F	-CH ₃	H
195	H	-CH ₃	H	H	-OCH ₃	F	H	H
196	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	F	H	H
197	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	F	H	H
198	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OCH ₃	F	H	H
199	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	F	H	H
200	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	F	H	H
201	H	-CH ₃	H	H	H	H	-CH ₃	H
202	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	-CH ₃	H
203	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	H	-CH ₃	H
204	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	-CH ₃	H
205	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	-CH ₃	H
206	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	-CH ₃	H
207	H	-CH ₃	H	H	H	F	H	H
208	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	F	H	H
209	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	F	H	H
210	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	F	H	H
211	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	F	H	H
212	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	F	H	H

10

20

30

40

50

【表 4 - 5】

212a	シクロプロピル	-CH ₃	H	H	H	H	H	H
213	シクロプロピル	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	H	H
214	シクロプロピル	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	H	H	H
215	シクロプロピル	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	H	H
216	シクロプロピル	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	H	H
217	シクロプロピル	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	H	H
218	シクロプロピル	-CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
219	シクロプロピル	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
220	シクロプロピル	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
221	シクロプロピル	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
222	シクロプロピル	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
223	シクロプロピル	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
224	シクロプロピル	-CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
225	シクロプロピル	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
226	シクロプロピル	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
227	シクロプロピル	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	H	H
228	シクロプロピル	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
229	シクロプロピル	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	H
230	シクロプロピル	-CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
231	シクロプロピル	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
232	シクロプロピル	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
233	シクロプロピル	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
234	シクロプロピル	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
235	シクロプロピル	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
236	シクロプロピル	-CH ₃	H	H	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
237	シクロプロピル	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
238	シクロプロピル	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
239	シクロプロピル	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
240	シクロプロピル	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
241	シクロプロピル	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
242	シクロプロピル	-CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
243	シクロプロピル	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
244	シクロプロピル	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
245	シクロプロピル	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
246	シクロプロピル	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
247	シクロプロピル	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
248	H	-CH ₃	H	H	H	H	H	H
249	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	H	H
250	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	H	H	H
251	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	H	H
252	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	H	H
253	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	H	H
254	H	シクロプロピル	H	H	H	H	H	H
255	H	-CH ₃	H	-CH ₃	H	H	H	H
256	H	-CH ₂ CH ₃	H	-CH ₃	H	H	H	H
257	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	-CH ₃	H	H	H	H
258	H	-CH(CH ₃) ₂	H	-CH ₃	H	H	H	H
259	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	-CH ₃	H	H	H	H
260	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	-CH ₃	H	H	H	H
261	H	シクロプロピル	H	-CH ₃	H	H	H	H
262	H	-CH ₃	H	-CH ₃	-OCH ₃	H	H	H
263	H	-CH ₂ CH ₃	H	-CH ₃	-OCH ₃	H	H	H
264	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	-CH ₃	-OCH ₃	H	H	H
265	H	-CH(CH ₃) ₂	H	-CH ₃	-OCH ₃	H	H	H

10

20

30

40

50

【表 4 - 6】

266	H	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	$-\text{CH}_3$	$-\text{OCH}_3$	H	H	H
267	H	$-\text{CH}_2\text{-HC=CH}_2$	H	$-\text{CH}_3$	$-\text{OCH}_3$	H	H	H
268	H	シクロプロピル	H	$-\text{CH}_3$	$-\text{OCH}_3$	H	H	H
269	H	$-\text{CH}_3$	H	$-\text{CH}_3$	H	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
270	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	H	$-\text{CH}_3$	H	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
271	H	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	H	$-\text{CH}_3$	H	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
272	H	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	H	$-\text{CH}_3$	H	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
273	H	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	$-\text{CH}_3$	H	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
274	H	$-\text{CH}_2\text{-HC=CH}_2$	H	$-\text{CH}_3$	H	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
275	H	シクロプロピル	H	$-\text{CH}_3$	H	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
276	H	$-\text{CH}_3$	H	$-\text{CH}_3$	$-\text{OCH}_3$	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
277	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	H	$-\text{CH}_3$	$-\text{OCH}_3$	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
278	H	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	H	$-\text{CH}_3$	$-\text{OCH}_3$	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
279	H	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	H	$-\text{CH}_3$	$-\text{OCH}_3$	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
280	H	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	$-\text{CH}_3$	$-\text{OCH}_3$	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
281	H	$-\text{CH}_2\text{-HC=CH}_2$	H	$-\text{CH}_3$	$-\text{OCH}_3$	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
282	H	シクロプロピル	H	$-\text{CH}_3$	$-\text{OCH}_3$	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
283	H	$-\text{CH}_3$	H	$-\text{CH}_3$	H	H	$-\text{CH}_3$	H
284	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	H	$-\text{CH}_3$	H	H	$-\text{CH}_3$	H
285	H	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	H	$-\text{CH}_3$	H	H	$-\text{CH}_3$	H
286	H	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	H	$-\text{CH}_3$	H	H	$-\text{CH}_3$	H
287	H	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	$-\text{CH}_3$	H	H	$-\text{CH}_3$	H
288	H	$-\text{CH}_2\text{-HC=CH}_2$	H	$-\text{CH}_3$	H	H	$-\text{CH}_3$	H
289	H	シクロプロピル	H	$-\text{CH}_3$	H	H	$-\text{CH}_3$	H
290	H	$-\text{CH}_3$	H	$-\text{CH}_3$	H	F	H	H
291	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	H	$-\text{CH}_3$	H	F	H	H
292	H	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	H	$-\text{CH}_3$	H	F	H	H
293	H	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	H	$-\text{CH}_3$	H	F	H	H
294	H	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	$-\text{CH}_3$	H	F	H	H
295	H	$-\text{CH}_2\text{-HC=CH}_2$	H	$-\text{CH}_3$	H	F	H	H
296	H	シクロプロピル	H	$-\text{CH}_3$	H	F	H	H
297	H	$-\text{CH}_3$	H	$-\text{CH}_3$	$-\text{OCH}_3$	H	$-\text{CH}_3$	H
298	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	H	$-\text{CH}_3$	$-\text{OCH}_3$	H	$-\text{CH}_3$	H
299	H	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	H	$-\text{CH}_3$	$-\text{OCH}_3$	H	$-\text{CH}_3$	H
300	H	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	H	$-\text{CH}_3$	$-\text{OCH}_3$	H	$-\text{CH}_3$	H
301	H	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	$-\text{CH}_3$	$-\text{OCH}_3$	H	$-\text{CH}_3$	H
302	H	$-\text{CH}_2\text{-HC=CH}_2$	H	$-\text{CH}_3$	$-\text{OCH}_3$	H	$-\text{CH}_3$	H
303	H	シクロプロピル	H	$-\text{CH}_3$	$-\text{OCH}_3$	H	$-\text{CH}_3$	H
304	H	$-\text{CH}_3$	H	$-\text{CH}_3$	$-\text{OCH}_3$	F	H	H
305	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	H	$-\text{CH}_3$	$-\text{OCH}_3$	F	H	H
306	H	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	H	$-\text{CH}_3$	$-\text{OCH}_3$	F	H	H
307	H	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	H	$-\text{CH}_3$	$-\text{OCH}_3$	F	H	H
308	H	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	$-\text{CH}_3$	$-\text{OCH}_3$	F	H	H
309	H	$-\text{CH}_2\text{-HC=CH}_2$	H	$-\text{CH}_3$	$-\text{OCH}_3$	F	H	H
310	H	シクロプロピル	H	$-\text{CH}_3$	$-\text{OCH}_3$	F	H	H
311	H	H	H	$-\text{CH}_3$	H	H	H	H
312	H	H	H	$-\text{CH}_3$	$-\text{OCH}_3$	H	H	H
313	H	H	H	$-\text{CH}_3$	H	F	H	H
314	H	H	H	$-\text{CH}_3$	H	H	$-\text{CH}_3$	H
315	H	H	H	$-\text{CH}_3$	H	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
316	H	H	H	$-\text{CH}_3$	$-\text{OCH}_3$	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
317	H	H	H	$-\text{CH}_3$	$-\text{OCH}_3$	H	$-\text{CH}_3$	H
318	H	H	H	$-\text{CH}_3$	$-\text{OCH}_3$	F	$-\text{CH}_3$	H
319	H	H	H	$-\text{CH}_3$	$-\text{OH}$	F	H	H

10

20

30

40

50

【表 4 - 7】

320	H	H	H	-CH ₃	-OCH ₃	H	H	-CH ₃
321	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	H	H	H
322	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	H	H
323	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	H	H	H
324	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	H	H
325	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	H	H
326	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	H	H
327	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	H	H
328	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	H	H	H
329	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	H	H
330	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	H	H
331	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	H	H
332	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	H	H	H
333	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	H	H
334	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	H	H
335	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	H	H
336	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	H	H
337	-CH(CH ₃) ₂	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	H	H
338	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	H	H
339	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	H	H
340	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	H	H
341	-CH ₂ -HC=CH ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	H	H
342	H	-CD ₃	H	H	H	H	H	H
343	H	-CD ₃	H	H	-OH	H	H	H
344	H	-CD ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
345	H	-CD ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
346	H	-CD ₃	H	H	H	F	H	H
347	H	-CD ₃	H	H	-OH	F	H	H
348	H	-CD ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	F	H	H
349	H	-CD ₃	H	H	-OCH ₃	F	H	H
350	H	-CD ₃	H	H	H	H	-CH ₃	H
351	H	-CD ₃	H	H	-OH	H	-CH ₃	H
352	H	-CD ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃	H
353	H	-CD ₃	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃	H
354	H	-CD ₃	H	H	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
355	H	-CD ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
356	H	-CD ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
357	H	-CD ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
358	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	H	H	H	H
359	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	-OH	H	H	H
360	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
361	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
362	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	H	F	H	H
363	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	-OH	F	H	H
364	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	F	H	H
365	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	-OCH ₃	F	H	H
366	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	H	H	-CH ₃	H
367	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	-OH	H	-CH ₃	H
368	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃	H
369	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃	H
370	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
371	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
372	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
373	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃

10

20

30

40

50

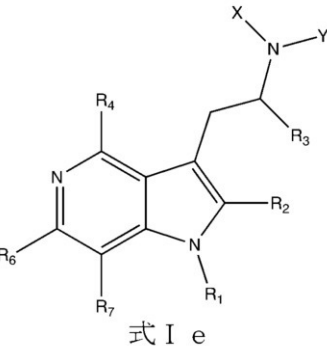
【表 4－8】

374	H	-CH ₃	H	D	H	H	H	H
375	H	-CH ₂ CH ₃	H	D	H	H	H	H
376	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	D	H	H	H	H
377	H	-CH(CH ₃) ₂	H	D	H	H	H	H
378	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	D	H	H	H	H
379	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	D	H	H	H	H
380	H	-CH ₃	H	D	-OCH ₃	H	H	H
381	H	-CH ₂ CH ₃	H	D	-OCH ₃	H	H	H
382	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	D	-OCH ₃	H	H	H
383	H	-CH(CH ₃) ₂	H	D	-OCH ₃	H	H	H
384	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	D	-OCH ₃	H	H	H
385	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	D	-OCH ₃	H	H	H
386	H	-CH ₃	H	D	-OCH ₃	F	H	H
387	H	-CH ₂ CH ₃	H	D	-OCH ₃	F	H	H
388	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	D	-OCH ₃	F	H	H
389	H	-CH(CH ₃) ₂	H	D	-OCH ₃	F	H	H
390	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	D	-OCH ₃	F	H	H
391	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	D	-OCH ₃	F	H	H
392	H	-CH ₃	H	D	-OCH ₃	H	-CH ₃	H
393	H	-CH ₂ CH ₃	H	D	-OCH ₃	H	-CH ₃	H
394	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	D	-OCH ₃	H	-CH ₃	H
395	H	-CH(CH ₃) ₂	H	D	-OCH ₃	H	-CH ₃	H
396	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	D	-OCH ₃	H	-CH ₃	H
397	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	D	-OCH ₃	H	-CH ₃	H
398	H	-CH ₃	H	D	H	F	-CH ₃	H
399	H	-CH ₂ CH ₃	H	D	H	F	-CH ₃	H
400	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	D	H	F	-CH ₃	H
401	H	-CH(CH ₃) ₂	H	D	H	F	-CH ₃	H
402	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	D	H	F	-CH ₃	H
403	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	D	H	F	-CH ₃	H
404	H	-CH ₃	H	D	H	F	H	H
405	H	-CH ₂ CH ₃	H	D	H	F	H	H
406	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	D	H	F	H	H
407	H	-CH(CH ₃) ₂	H	D	H	F	H	H
408	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	D	H	F	H	H
409	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	D	H	F	H	H
410	H	-CH ₃	H	D	H	H	-CH ₃	H
411	H	-CH ₂ CH ₃	H	D	H	H	-CH ₃	H
412	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	D	H	H	-CH ₃	H
413	H	-CH(CH ₃) ₂	H	D	H	H	-CH ₃	H
414	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	D	H	H	-CH ₃	H
415	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	D	H	H	-CH ₃	H

【0076】

他の例示的な式Ⅰの化合物には、以下の表5におけるものが含まれ、これはまた、式Ⅰeによって表される：

【化9】



10

20

30

40

50

【表 5 - 1】

表 5

参照	X	Y	R ₂	R ₃	R ₄	R ₆	R ₇	R ₁
1	-CH ₃	-CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
2	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
3	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
4	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
5	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
6	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
7	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
8	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
9	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
10	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
11	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
12	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
13	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
14	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
15	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
16	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
17	-CH(CH ₃) ₂	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
18	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
19	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
20	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
21	-CH ₂ -HC=CH ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
22	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
23	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
24	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	H	H
25	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
26	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	H
27	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
28	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
29	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	H	H
30	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
31	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	H
32	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
33	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	H	H
34	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
35	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	H
36	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	H	H
37	-CH(CH ₃) ₂	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
38	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	H

【表 5 - 2】

39	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	H	-OH	H	H	H
40	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	H	H	-OH	H	H	H
41	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	H	H	-OH	H	H	H
42	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	H
43	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	H
44	$-\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	H
45	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	H
46	$-\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	H
47	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	H
48	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	H
49	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	H
50	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	H
51	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	H
52	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	H
53	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	H
54	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	H
55	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	H
56	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	H
57	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	H
58	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	H
59	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	H
60	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	H
61	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	H
62	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	H
63	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	H	H	-OH	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
64	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	H	H	-OH	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
65	$-\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	H	H	-OH	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
66	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	H	H	-OH	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
67	$-\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	H	-OH	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
68	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	H	H	-OH	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
69	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	H	H	-OH	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
70	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	H	H	-OH	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
71	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	H	H	-OH	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
72	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	H	-OH	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
73	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	H	H	-OH	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
74	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	H	H	-OH	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
75	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	H	H	-OH	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
76	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	H	-OH	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
77	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	H	H	-OH	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
78	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	H	H	-OH	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
79	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	H	-OH	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
80	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	H	H	-OH	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
81	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	H	-OH	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
82	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	H	H	-OH	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
83	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	H	H	-OH	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
84	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	H	H	H	F	H	H
85	$-\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	H	H	H	F	H	H
86	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	H	H	H	F	H	H
87	$-\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	H	H	F	H	H
88	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	H	H	H	F	H	H
89	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	H	H	H	F	H	H
90	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	H	H	H	F	H	H
91	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	H	H	H	F	H	H
92	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	H	H	F	H	H

10

20

30

40

50

【表 5 - 3】

93	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	F	H	H
94	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	F	H	H
95	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	F	H	H
96	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	F	H	H
97	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	F	H	H
98	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	F	H	H
99	-CH(CH ₃) ₂	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	F	H	H
100	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	F	H	H
101	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	F	H	H
102	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	F	H	H
103	-CH ₂ -HC=CH ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	F	H	H
104	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	H	-CH ₃	H
105	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	-CH ₃	H
106	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	H	-CH ₃	H
107	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	-CH ₃	H
108	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	-CH ₃	H
109	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	-CH ₃	H
110	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	-CH ₃	H
111	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	H	-CH ₃	H
112	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	-CH ₃	H
113	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	-CH ₃	H
114	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	-CH ₃	H
115	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	H	-CH ₃	H
116	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	-CH ₃	H
117	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	-CH ₃	H
118	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	-CH ₃	H
119	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	-CH ₃	H
120	-CH(CH ₃) ₂	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	-CH ₃	H
121	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	-CH ₃	H
122	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	-CH ₃	H
123	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	-CH ₃	H
124	-CH ₂ -HC=CH ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	-CH ₃	H
125	-CH ₃	-CH ₃	H	H	-OH	H	-CH ₃	H
126	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	-CH ₃	H
127	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	-CH ₃	H
128	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	-CH ₃	H
129	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	-CH ₃	H
130	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	-CH ₃	H
131	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	-CH ₃	H
132	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	-CH ₃	H
133	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	-CH ₃	H
134	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	-CH ₃	H
135	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	-CH ₃	H
135	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	-CH ₃	H
137	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	-CH ₃	H
138	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	-CH ₃	H
139	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	-CH ₃	H
140	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	-CH ₃	H
141	-CH(CH ₃) ₂	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	-CH ₃	H
142	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	-CH ₃	H
143	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	-CH ₃	H
144	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	-CH ₃	H
145	-CH ₂ -HC=CH ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	-CH ₃	H
146	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OH	F	H	H

10

20

30

40

50

【表 5 - 4】

147	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	F	H	H
148	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	F	H	H
149	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	F	H	H
150	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	F	H	H
151	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OH	F	H	H
152	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	F	H	H
153	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	F	H	H
154	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	F	H	H
155	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	F	H	H
156	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	F	H	H
157	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	F	H	H
158	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	F	H	H
159	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	F	H	H
160	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	F	H	H
161	-CH(CH ₃) ₂	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	F	H	H
162	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	F	H	H
163	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	F	H	H
164	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	F	H	H
165	-CH ₂ -HC=CH ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	F	H	H
166	H	-CH ₃	H	H	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
167	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
168	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
169	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
170	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
171	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
171a	H	-CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
172	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
173	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
174	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	H	H
175	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
176	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	H
177	H	-CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
178	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
179	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
180	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
181	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
182	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
183	H	-CH ₃	H	H	-OH	H	-CH ₃	H
184	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	-CH ₃	H
185	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	-CH ₃	H
186	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	-CH ₃	H
187	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	-CH ₃	H
188	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	-CH ₃	H
189	H	-CH ₃	H	H	H	F	-CH ₃	H
190	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	F	-CH ₃	H
191	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	F	-CH ₃	H
192	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	F	-CH ₃	H
193	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	F	-CH ₃	H
194	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	F	-CH ₃	H
195	H	-CH ₃	H	H	-OH	F	H	H
196	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OH	F	H	H
197	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	F	H	H
198	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	F	H	H
199	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	F	H	H

10

20

30

40

50

【表 5 - 5】

200	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	F	H	H
201	H	-CH ₃	H	H	H	H	-CH ₃	H
202	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	-CH ₃	H
203	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	H	-CH ₃	H
204	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	-CH ₃	H
205	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	-CH ₃	H
206	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	-CH ₃	H
207	H	-CH ₃	H	H	H	F	H	H
208	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	F	H	H
209	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	F	H	H
210	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	F	H	H
211	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	F	H	H
212	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	F	H	H
212a	シクロプロピル	-CH ₃	H	H	H	H	H	H
213	シクロプロピル	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	H	H
214	シクロプロピル	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	H	H	H
215	シクロプロピル	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	H	H
216	シクロプロピル	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	H	H
217	シクロプロピル	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	H	H
218	シクロプロピル	-CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
219	シクロプロピル	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
220	シクロプロピル	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
221	シクロプロピル	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
222	シクロプロピル	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
223	シクロプロピル	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
224	シクロプロピル	-CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
225	シクロプロピル	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
226	シクロプロピル	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
227	シクロプロピル	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	H	H
228	シクロプロピル	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
229	シクロプロピル	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	H
230	シクロプロピル	-CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
231	シクロプロピル	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
232	シクロプロピル	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
233	シクロプロピル	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
234	シクロプロピル	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
235	シクロプロピル	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
236	シクロプロピル	-CH ₃	H	H	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
237	シクロプロピル	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
238	シクロプロピル	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
239	シクロプロピル	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
240	シクロプロピル	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
241	シクロプロピル	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
242	シクロプロピル	-CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
243	シクロプロピル	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
244	シクロプロピル	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
245	シクロプロピル	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
246	シクロプロピル	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
247	シクロプロピル	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
248	H	-CH ₃	H	H	H	H	H	H
249	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	H	H
250	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	H	H	H
251	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	H	H
252	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	H	H

10

20

30

40

50

【表 5 - 6】

253	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	H	H
254	H	シクロプロピル	H	H	H	H	H	H
255	H	-CH ₃	H	-CH ₃	H	H	H	H
256	H	-CH ₂ CH ₃	H	-CH ₃	H	H	H	H
257	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	-CH ₃	H	H	H	H
258	H	-CH(CH ₃) ₂	H	-CH ₃	H	H	H	H
259	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	-CH ₃	H	H	H	H
260	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	-CH ₃	H	H	H	H
261	H	シクロプロピル	H	-CH ₃	H	H	H	H
262	H	-CH ₃	H	-CH ₃	-OH	H	H	H
263	H	-CH ₂ CH ₃	H	-CH ₃	-OH	H	H	H
264	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	-CH ₃	-OH	H	H	H
265	H	-CH(CH ₃) ₂	H	-CH ₃	-OH	H	H	H
266	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	-CH ₃	-OH	H	H	H
267	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	-CH ₃	-OH	H	H	H
268	H	シクロプロピル	H	-CH ₃	-OH	H	H	H
269	H	-CH ₃	H	-CH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
270	H	-CH ₂ CH ₃	H	-CH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
271	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	-CH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
272	H	-CH(CH ₃) ₂	H	-CH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
273	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	-CH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
274	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	-CH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
275	H	シクロプロピル	H	-CH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
276	H	-CH ₃	H	-CH ₃	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
277	H	-CH ₂ CH ₃	H	-CH ₃	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
278	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	-CH ₃	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
279	H	-CH(CH ₃) ₂	H	-CH ₃	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
280	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	-CH ₃	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
281	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	-CH ₃	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
282	H	シクロプロピル	H	-CH ₃	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
283	H	-CH ₃	H	-CH ₃	H	H	-CH ₃	H
284	H	-CH ₂ CH ₃	H	-CH ₃	H	H	-CH ₃	H
285	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	-CH ₃	H	H	-CH ₃	H
286	H	-CH(CH ₃) ₂	H	-CH ₃	H	H	-CH ₃	H
287	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	-CH ₃	H	H	-CH ₃	H
288	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	-CH ₃	H	H	-CH ₃	H
289	H	シクロプロピル	H	-CH ₃	H	H	-CH ₃	H
290	H	-CH ₃	H	-CH ₃	H	F	H	H
291	H	-CH ₂ CH ₃	H	-CH ₃	H	F	H	H
292	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	-CH ₃	H	F	H	H
293	H	-CH(CH ₃) ₂	H	-CH ₃	H	F	H	H
294	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	-CH ₃	H	F	H	H
295	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	-CH ₃	H	F	H	H
296	H	シクロプロピル	H	-CH ₃	H	F	H	H
297	H	-CH ₃	H	-CH ₃	-OH	H	-CH ₃	H
298	H	-CH ₂ CH ₃	H	-CH ₃	-OH	H	-CH ₃	H
299	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	-CH ₃	-OH	H	-CH ₃	H
300	H	-CH(CH ₃) ₂	H	-CH ₃	-OH	H	-CH ₃	H
301	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	-CH ₃	-OH	H	-CH ₃	H
302	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	-CH ₃	-OH	H	-CH ₃	H
303	H	シクロプロピル	H	-CH ₃	-OH	H	-CH ₃	H
304	H	-CH ₃	H	-CH ₃	-OH	F	H	H
305	H	-CH ₂ CH ₃	H	-CH ₃	-OH	F	H	H
306	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	-CH ₃	-OH	F	H	H

10

20

30

40

50

【表 5 - 7】

307	H	-CH(CH ₃) ₂	H	-CH ₃	-OH	F	H	H
308	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	-CH ₃	-OH	F	H	H
309	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	-CH ₃	-OH	F	H	H
310	H	シクロプロピル	H	-CH ₃	-OH	F	H	H
311	H	H	H	-CH ₃	H	H	H	H
312	H	H	H	-CH ₃	-OH	H	H	H
313	H	H	H	-CH ₃	H	F	H	H
314	H	H	H	-CH ₃	H	H	-CH ₃	H
315	H	H	H	-CH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
316	H	H	H	-CH ₃	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
317	H	H	H	-CH ₃	-OH	H	-CH ₃	H
318	H	H	H	-CH ₃	-OH	F	-CH ₃	H
319	H	H	H	-CH ₃	-OH	F	H	H
320	H	H	H	-CH ₃	-OH	H	H	-CH ₃
321	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	H	H	H
322	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	H	H
323	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	H	H	H
324	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	H	H
325	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	H	H
326	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	H	H
327	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	H	H
328	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	H	H	H
329	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	H	H
330	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	H	H
331	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	H	H
332	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	H	H	H
333	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	H	H
334	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	H	H
335	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	H	H
336	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	H	H
337	-CH(CH ₃) ₂	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	H	H
338	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	H	H
339	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	H	H
340	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	H	H
341	-CH ₂ -HC=CH ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	H	H
342	H	-CD ₃	H	H	H	H	H	H
343	H	-CD ₃	H	H	-OH	H	H	H
344	H	-CD ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
345	H	-CD ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
346	H	-CD ₃	H	H	H	F	H	H
347	H	-CD ₃	H	H	-OH	F	H	H
348	H	-CD ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	F	H	H
349	H	-CD ₃	H	H	-OCH ₃	F	H	H
350	H	-CD ₃	H	H	H	H	-CH ₃	H
351	H	-CD ₃	H	H	-OH	H	-CH ₃	H
352	H	-CD ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃	H
353	H	-CD ₃	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃	H
354	H	-CD ₃	H	H	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
355	H	-CD ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
356	H	-CD ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
357	H	-CD ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
358	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	H	H	H	H
359	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	-OH	H	H	H
360	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H

10

20

30

40

50

【表 5 - 8】

361	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
362	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	H	F	H	H
363	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	-OH	F	H	H
364	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	F	H	H
365	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	-OCH ₃	F	H	H
366	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	H	H	-CH ₃	H
367	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	-OH	H	-CH ₃	H
368	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃	H
369	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃	H
370	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
371	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
372	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
373	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
374	H	-CH ₃	H	D	H	H	H	H
375	H	-CH ₂ CH ₃	H	D	H	H	H	H
376	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	D	H	H	H	H
377	H	-CH(CH ₃) ₂	H	D	H	H	H	H
378	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	D	H	H	H	H
379	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	D	H	H	H	H
380	H	-CH ₃	H	D	-OH	H	H	H
381	H	-CH ₂ CH ₃	H	D	-OH	H	H	H
382	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	D	-OH	H	H	H
383	H	-CH(CH ₃) ₂	H	D	-OH	H	H	H
384	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	D	-OH	H	H	H
385	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	D	-OH	H	H	H
386	H	-CH ₃	H	D	-OH	F	H	H
387	H	-CH ₂ CH ₃	H	D	-OH	F	H	H
388	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	D	-OH	F	H	H
389	H	-CH(CH ₃) ₂	H	D	-OH	F	H	H
390	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	D	-OH	F	H	H
391	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	D	-OH	F	H	H
392	H	-CH ₃	H	D	-OH	H	-CH ₃	H
393	H	-CH ₂ CH ₃	H	D	-OH	H	-CH ₃	H
394	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	D	-OH	H	-CH ₃	H
395	H	-CH(CH ₃) ₂	H	D	-OH	H	-CH ₃	H
396	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	D	-OH	H	-CH ₃	H
397	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	D	-OH	H	-CH ₃	H
398	H	-CH ₃	H	D	H	F	-CH ₃	H
399	H	-CH ₂ CH ₃	H	D	H	F	-CH ₃	H
400	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	D	H	F	-CH ₃	H
401	H	-CH(CH ₃) ₂	H	D	H	F	-CH ₃	H
402	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	D	H	F	-CH ₃	H
403	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	D	H	F	-CH ₃	H
404	H	-CH ₃	H	D	H	F	H	H
405	H	-CH ₂ CH ₃	H	D	H	F	H	H
406	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	D	H	F	H	H
407	H	-CH(CH ₃) ₂	H	D	H	F	H	H
408	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	D	H	F	H	H
409	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	D	H	F	H	H
410	H	-CH ₃	H	D	H	H	-CH ₃	H
411	H	-CH ₂ CH ₃	H	D	H	H	-CH ₃	H
412	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	D	H	H	-CH ₃	H
413	H	-CH(CH ₃) ₂	H	D	H	H	-CH ₃	H
414	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	D	H	H	-CH ₃	H
415	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	D	H	H	-CH ₃	H

10

20

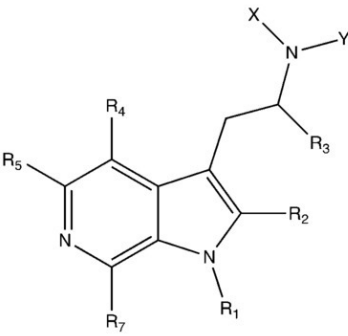
30

40

【 0 0 7 7 】

他の例示的な式 I の化合物には、以下の表 6 におけるものが含まれ、これはまた、式 I f によって表される：

【化 1 0】



式 I f

【表 6 - 1】

表 6

参照	X	Y	R ₂	R ₃	R ₄	R ₅	R ₇	R ₁
1	-CH ₃	-CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
2	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
3	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
4	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
5	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
6	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
7	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
8	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
9	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
10	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
11	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
12	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
13	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
14	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
15	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
16	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
17	-CH(CH ₃) ₂	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
18	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
19	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
20	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
21	-CH ₂ -HC=CH ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
22	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
23	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
24	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	H	H
25	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
26	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	H
27	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
28	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
29	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	H	H
30	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H

【表 6 - 2】

31	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	H
32	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
33	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	H	H
34	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
35	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	H
36	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	H	H
37	-CH(CH ₃) ₂	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
38	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	H
39	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
40	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	H
41	-CH ₂ -HC=CH ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	H
42	-CH ₃	-CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
43	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
44	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
45	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
46	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
47	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
48	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
49	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
50	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
51	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
52	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
53	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
54	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
55	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
56	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
57	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
58	-CH(CH ₃) ₂	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
59	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
60	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
61	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
62	-CH ₂ -HC=CH ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
63	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	H
64	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	H
65	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	H
66	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	H
67	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	H
68	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	H
69	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	H
70	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	H
71	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	H
72	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	H
73	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	H
74	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	H
75	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	H
76	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	H
77	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	H
78	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	H
79	-CH(CH ₃) ₂	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	H
80	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	H
81	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	H
82	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	H
83	-CH ₂ -HC=CH ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	H
83b	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	-OH	H	H

10

20

30

40

50

【表 6 - 3】

84	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	-OH	H	H
85	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OH	H	H
86	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OH	H	H
87	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OH	H	H
88	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OH	H	H
89	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	-OH	H	H
90	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OH	H	H
91	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OH	H	H
92	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OH	H	H
93	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OH	H	H
94	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OH	H	H
95	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OH	H	H
96	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OH	H	H
97	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OH	H	H
98	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OH	H	H
99	-CH(CH ₃) ₂	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OH	H	H
100	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OH	H	H
101	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OH	H	H
102	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OH	H	H
103	-CH ₂ -HC=CH ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OH	H	H
104	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
105	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
106	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
107	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
108	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
109	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
110	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
111	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
112	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
113	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
114	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
115	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
116	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
117	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
118	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
119	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
120	-CH(CH ₃) ₂	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
121	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
122	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
123	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
124	-CH ₂ -HC=CH ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
125	-CH ₃	-CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
126	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
127	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
128	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
129	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
130	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
131	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
132	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
133	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
134	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
135	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
135	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
137	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃

10

20

30

40

50

【表 6-4】

138	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	H	-OH	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
139	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2\text{-HC=CH}_2$	H	H	-OH	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
140	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	H	H	-OH	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
141	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	H	-OH	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
142	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	$-\text{CH}_2\text{-HC=CH}_2$	H	H	-OH	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
143	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	H	-OH	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
144	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2\text{-HC=CH}_2$	H	H	-OH	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
145	$-\text{CH}_2\text{-HC=CH}_2$	$-\text{CH}_2\text{-HC=CH}_2$	H	H	-OH	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
145b	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	H	H	-OH	H	$-\text{CH}_3$	H
146	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	H	H	-OH	H	$-\text{CH}_3$	H
147	$-\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	H	H	-OH	H	$-\text{CH}_3$	H
148	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	H	H	-OH	H	$-\text{CH}_3$	H
149	$-\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	H	-OH	H	$-\text{CH}_3$	H
150	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2\text{-HC=CH}_2$	H	H	-OH	H	$-\text{CH}_3$	H
151	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	H	H	-OH	H	$-\text{CH}_3$	H
152	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	H	H	-OH	H	$-\text{CH}_3$	H
153	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	H	H	-OH	H	$-\text{CH}_3$	H
154	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	H	-OH	H	$-\text{CH}_3$	H
155	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2\text{-HC=CH}_2$	H	H	-OH	H	$-\text{CH}_3$	H
156	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	H	H	-OH	H	$-\text{CH}_3$	H
157	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	H	H	-OH	H	$-\text{CH}_3$	H
158	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	H	-OH	H	$-\text{CH}_3$	H
159	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2\text{-HC=CH}_2$	H	H	-OH	H	$-\text{CH}_3$	H
160	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	H	H	-OH	H	$-\text{CH}_3$	H
161	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	H	-OH	H	$-\text{CH}_3$	H
162	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	$-\text{CH}_2\text{-HC=CH}_2$	H	H	-OH	H	$-\text{CH}_3$	H
163	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	H	-OH	H	$-\text{CH}_3$	H
164	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2\text{-HC=CH}_2$	H	H	-OH	H	$-\text{CH}_3$	H
165	$-\text{CH}_2\text{-HC=CH}_2$	$-\text{CH}_2\text{-HC=CH}_2$	H	H	-OH	H	$-\text{CH}_3$	H
166	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
167	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
168	$-\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
169	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
170	$-\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
171	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2\text{-HC=CH}_2$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
172	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
173	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
174	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
175	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
176	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2\text{-HC=CH}_2$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
177	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
178	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
179	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
180	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2\text{-HC=CH}_2$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
181	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
182	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
183	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	$-\text{CH}_2\text{-HC=CH}_2$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
184	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
185	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2\text{-HC=CH}_2$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
186	$-\text{CH}_2\text{-HC=CH}_2$	$-\text{CH}_2\text{-HC=CH}_2$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
187	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	$-\text{CH}_3$	H
188	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	$-\text{CH}_3$	H
189	$-\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	$-\text{CH}_3$	H
190	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	$-\text{CH}_3$	H

10

20

30

40

【表 6 - 5】

191	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃	H
192	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃	H
193	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃	H
194	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃	H
195	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃	H
196	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃	H
197	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃	H
198	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃	H
199	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃	H
200	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃	H
201	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃	H
202	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃	H
203	-CH(CH ₃) ₂	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃	H
204	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃	H
205	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃	H
206	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃	H
207	-CH ₂ -HC=CH ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃	H
207b	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₂ CH ₃
208	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₂ CH ₃
209	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₂ CH ₃
210	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₂ CH ₃
211	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₂ CH ₃
212	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₂ CH ₃
213	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₂ CH ₃
214	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₂ CH ₃
215	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₂ CH ₃
216	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₂ CH ₃
217	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₂ CH ₃
218	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₂ CH ₃
219	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₂ CH ₃
220	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₂ CH ₃
221	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₂ CH ₃
222	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₂ CH ₃
223	-CH(CH ₃) ₂	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₂ CH ₃
224	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₂ CH ₃
225	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₂ CH ₃
226	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₂ CH ₃
227	-CH ₂ -HC=CH ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₂ CH ₃
228	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	-CH ₃	H
229	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	-CH ₃	H
230	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	-CH ₃	H
231	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OCH ₃	-CH ₃	H
232	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	-CH ₃	H
233	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OCH ₃	-CH ₃	H
234	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	-CH ₃	H
235	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	-CH ₃	H
236	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OCH ₃	-CH ₃	H
237	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	-CH ₃	H
238	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OCH ₃	-CH ₃	H
239	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	-CH ₃	H
240	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OCH ₃	-CH ₃	H
241	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	-CH ₃	H
242	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OCH ₃	-CH ₃	H
243	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OCH ₃	-CH ₃	H

10

20

30

40

50

【表 6 - 6】

244	-CH(CH ₃) ₂	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	-CH ₃	H
245	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OCH ₃	-CH ₃	H
246	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	-CH ₃	H
247	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OCH ₃	-CH ₃	H
248	-CH ₂ -HC=CH ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OCH ₃	-CH ₃	H
249	H	-CH ₃	H	H	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
250	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
251	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
252	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
253	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
254	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
255	H	-CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
256	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
257	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
258	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	H	H
259	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
260	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	H
261	H	-CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
262	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
263	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
264	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
265	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
266	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
267	H	-CH ₃	H	H	-OH	H	-CH ₃	H
268	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	-CH ₃	H
269	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	-CH ₃	H
270	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	-CH ₃	H
271	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	-CH ₃	H
272	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	-CH ₃	H
273	H	-CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	-CH ₃	H
274	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	-CH ₃	H
275	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	-CH ₃	H
276	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OCH ₃	-CH ₃	H
277	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	-CH ₃	H
278	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OCH ₃	-CH ₃	H
279	H	-CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
280	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
281	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
282	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
283	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
284	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
285	H	-CH ₃	H	H	H	H	-CH ₃	H
286	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	-CH ₃	H
287	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	H	-CH ₃	H
288	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	-CH ₃	H
289	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	-CH ₃	H
290	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	-CH ₃	H
291	H	-CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	H
292	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	H
293	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	H
294	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	H
295	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	H
296	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	H
297	シクロプロピル	-CH ₃	H	H	H	H	H	H

10

20

30

40

50

【表 6 - 7】

298	シクロプロピル	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	H	H
299	シクロプロピル	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	H	H	H
300	シクロプロピル	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	H	H
301	シクロプロピル	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	H	H
302	シクロプロピル	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	H	H
303	シクロプロピル	-CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
304	シクロプロピル	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
305	シクロプロピル	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
306	シクロプロピル	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
307	シクロプロピル	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
308	シクロプロピル	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
309	シクロプロピル	-CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
310	シクロプロピル	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
311	シクロプロピル	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
312	シクロプロピル	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	H	H
313	シクロプロピル	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
314	シクロプロピル	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	H
315	シクロプロピル	-CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
316	シクロプロピル	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
317	シクロプロピル	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
318	シクロプロピル	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
319	シクロプロピル	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
320	シクロプロピル	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
321	シクロプロピル	-CH ₃	H	H	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
322	シクロプロピル	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
323	シクロプロピル	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
324	シクロプロピル	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
325	シクロプロピル	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
326	シクロプロピル	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
327	シクロプロピル	-CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
328	シクロプロピル	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
329	シクロプロピル	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
330	シクロプロピル	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
331	シクロプロピル	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
332	シクロプロピル	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
333	H	-CH ₃	H	H	H	H	H	H
334	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	H	H
335	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	H	H	H
336	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	H	H
337	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	H	H
338	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	H	H
339	H	シクロプロピル	H	H	H	H	H	H
340	H	-CH ₃	H	-CH ₃	H	H	H	H
341	H	-CH ₂ CH ₃	H	-CH ₃	H	H	H	H
342	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	-CH ₃	H	H	H	H
343	H	-CH(CH ₃) ₂	H	-CH ₃	H	H	H	H
344	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	-CH ₃	H	H	H	H
345	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	-CH ₃	H	H	H	H
346	H	シクロプロピル	H	-CH ₃	H	H	H	H
347	H	-CH ₃	H	-CH ₃	-OH	H	H	H
348	H	-CH ₂ CH ₃	H	-CH ₃	-OH	H	H	H
349	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	-CH ₃	-OH	H	H	H
350	H	-CH(CH ₃) ₂	H	-CH ₃	-OH	H	H	H
351	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	-CH ₃	-OH	H	H	H

10

20

30

40

50

【表 6 - 8】

352	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	-CH ₃	-OH	H	H	H
353	H	シクロプロピル	H	-CH ₃	-OH	H	H	H
354	H	-CH ₃	H	-CH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
355	H	-CH ₂ CH ₃	H	-CH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
356	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	-CH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
357	H	-CH(CH ₃) ₂	H	-CH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
358	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	-CH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
359	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	-CH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
360	H	シクロプロピル	H	-CH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
361	H	-CH ₃	H	-CH ₃	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
362	H	-CH ₂ CH ₃	H	-CH ₃	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
363	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	-CH ₃	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
364	H	-CH(CH ₃) ₂	H	-CH ₃	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
365	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	-CH ₃	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
366	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	-CH ₃	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
367	H	シクロプロピル	H	-CH ₃	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
368	H	-CH ₃	H	-CH ₃	H	H	-CH ₃	H
369	H	-CH ₂ CH ₃	H	-CH ₃	H	H	-CH ₃	H
370	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	-CH ₃	H	H	-CH ₃	H
371	H	-CH(CH ₃) ₂	H	-CH ₃	H	H	-CH ₃	H
372	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	-CH ₃	H	H	-CH ₃	H
373	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	-CH ₃	H	H	-CH ₃	H
374	H	シクロプロピル	H	-CH ₃	H	H	-CH ₃	H
375	H	-CH ₃	H	-CH ₃	H	-OCH ₃	H	H
376	H	-CH ₂ CH ₃	H	-CH ₃	H	-OCH ₃	H	H
377	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	-CH ₃	H	-OCH ₃	H	H
378	H	-CH(CH ₃) ₂	H	-CH ₃	H	-OCH ₃	H	H
379	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	-CH ₃	H	-OCH ₃	H	H
380	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	-CH ₃	H	-OCH ₃	H	H
381	H	シクロプロピル	H	-CH ₃	H	-OCH ₃	H	H
382	H	-CH ₃	H	-CH ₃	-OH	H	-CH ₃	H
383	H	-CH ₂ CH ₃	H	-CH ₃	-OH	H	-CH ₃	H
384	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	-CH ₃	-OH	H	-CH ₃	H
385	H	-CH(CH ₃) ₂	H	-CH ₃	-OH	H	-CH ₃	H
386	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	-CH ₃	-OH	H	-CH ₃	H
387	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	-CH ₃	-OH	H	-CH ₃	H
388	H	シクロプロピル	H	-CH ₃	-OH	H	-CH ₃	H
389	H	-CH ₃	H	-CH ₃	-OC(O)CH ₃	H	H	H
390	H	-CH ₂ CH ₃	H	-CH ₃	-OC(O)CH ₃	H	H	H
391	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	-CH ₃	-OC(O)CH ₃	H	H	H
392	H	-CH(CH ₃) ₂	H	-CH ₃	-OC(O)CH ₃	H	H	H
393	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	-CH ₃	-OC(O)CH ₃	H	H	H
394	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	-CH ₃	-OC(O)CH ₃	H	H	H
395	H	シクロプロピル	H	-CH ₃	-OC(O)CH ₃	H	H	H
396	H	H	H	-CH ₃	H	H	H	H
397	H	H	H	-CH ₃	-OH	H	H	H
398	H	H	H	-CH ₃	H	-OCH ₃	H	H
399	H	H	H	-CH ₃	H	H	-CH ₃	H
400	H	H	H	-CH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
401	H	H	H	-CH ₃	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
402	H	H	H	-CH ₃	-OH	H	-CH ₃	H
403	H	H	H	-CH ₃	-OH	-OCH ₃	-CH ₃	H
404	H	H	H	-CH ₃	-OH	F	H	H
405	H	H	H	-CH ₃	-OH	H	H	-CH ₃

10

20

30

40

50

【表 6 - 9】

406	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	H	H	H
407	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	H	H
408	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	H	H	H
409	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	H	H
410	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	H	H
411	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	H	H
412	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	H	H
413	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	H	H	H
414	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	H	H
415	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	H	H
416	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	H	H
417	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	H	H	H
418	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	H	H
419	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	H	H
420	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	H	H
421	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	H	H
422	-CH(CH ₃) ₂	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	H	H
423	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	H	H
424	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	H	H
425	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	H	H
426	-CH ₂ -HC=CH ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	H	H
427	H	-CD ₃	H	H	H	H	H	H
428	H	-CD ₃	H	H	-OH	H	H	H
429	H	-CD ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
430	H	-CD ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	H
431	H	-CD ₃	H	H	H	H	H	H
432	H	-CD ₃	H	H	-OH	H	H	H
433	H	-CD ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
434	H	-CD ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	H
435	H	-CD ₃	H	H	H	H	-CH ₃	H
436	H	-CD ₃	H	H	-OH	H	-CH ₃	H
437	H	-CD ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃	H
438	H	-CD ₃	H	H	H	-OCH ₃	-CH ₃	H
439	H	-CD ₃	H	H	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
440	H	-CD ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
441	H	-CD ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
442	H	-CD ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₂ CH ₃
443	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	H	H	H	H
444	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	-OH	H	H	H
445	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
446	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	H
447	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	H	H	H	H
448	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	-OH	H	H	H
449	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
450	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	H
451	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	H	H	-CH ₃	H
452	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	-OH	H	-CH ₃	H
453	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃	H
454	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	H	-OCH ₃	-CH ₃	H
455	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
456	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
457	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
458	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₂ CH ₃
458	H	-CH ₃	H	D	H	H	H	H

10

20

30

40

50

【表 6 - 1 0】

459	H	-CH ₂ CH ₃	H	D	H	H	H	H
460	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	D	H	H	H	H
461	H	-CH(CH ₃) ₂	H	D	H	H	H	H
462	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	D	H	H	H	H
463	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	D	H	H	H	H
464	H	-CH ₃	H	D	-OH	H	H	H
465	H	-CH ₂ CH ₃	H	D	-OH	H	H	H
466	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	D	-OH	H	H	H
467	H	-CH(CH ₃) ₂	H	D	-OH	H	H	H
468	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	D	-OH	H	H	H
469	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	D	-OH	H	H	H
470	H	-CH ₃	H	D	-OC(O)CH ₃	H	H	H
471	H	-CH ₂ CH ₃	H	D	-OC(O)CH ₃	H	H	H
472	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	D	-OC(O)CH ₃	H	H	H
473	H	-CH(CH ₃) ₂	H	D	-OC(O)CH ₃	H	H	H
474	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	D	-OC(O)CH ₃	H	H	H
475	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	D	-OC(O)CH ₃	H	H	H
476	H	-CH ₃	H	D	-OH	H	-CH ₃	H
477	H	-CH ₂ CH ₃	H	D	-OH	H	-CH ₃	H
478	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	D	-OH	H	-CH ₃	H
479	H	-CH(CH ₃) ₂	H	D	-OH	H	-CH ₃	H
480	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	D	-OH	H	-CH ₃	H
481	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	D	-OH	H	-CH ₃	H
482	H	-CH ₃	H	D	H	-OMe	-CH ₃	H
483	H	-CH ₂ CH ₃	H	D	H	-OMe	-CH ₃	H
484	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	D	H	-OMe	-CH ₃	H
485	H	-CH(CH ₃) ₂	H	D	H	-OMe	-CH ₃	H
486	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	D	H	-OMe	-CH ₃	H
487	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	D	H	-OMe	-CH ₃	H
488	H	-CH ₃	H	D	H	-OMe	H	H
489	H	-CH ₂ CH ₃	H	D	H	-OMe	H	H
490	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	D	H	-OMe	H	H
491	H	-CH(CH ₃) ₂	H	D	H	-OMe	H	H
492	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	D	H	-OMe	H	H
493	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	D	H	-OMe	H	H
494	H	-CH ₃	H	D	H	H	-CH ₃	H
495	H	-CH ₂ CH ₃	H	D	H	H	-CH ₃	H
496	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	D	H	H	-CH ₃	H
497	H	-CH(CH ₃) ₂	H	D	H	H	-CH ₃	H
498	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	D	H	H	-CH ₃	H
499	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	D	H	H	-CH ₃	H

10

20

30

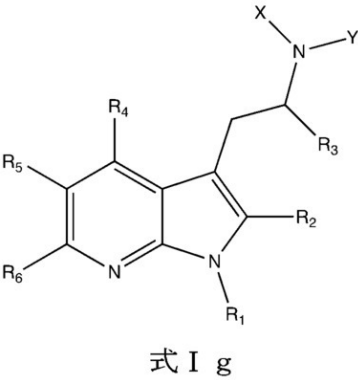
【 0 0 7 8 】

他の例示的な式 I の化合物には、以下の表 7 におけるものが含まれ、これはまた、式 I g によって表される：

40

50

【化 1 1】



【表 7 - 1】

表 7

参照	X	Y	R ₂	R ₃	R ₄	R ₅	R ₆	R ₁
1	-CH ₃	-CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
2	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
3	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
4	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
5	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
6	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
7	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
8	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
9	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
10	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
11	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
12	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
13	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
14	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
15	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
16	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
17	-CH(CH ₃) ₂	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
18	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
19	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
20	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
21	-CH ₂ -HC=CH ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
22	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
23	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
24	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	H	H
25	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
26	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	H
27	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
28	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
29	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	H	H
30	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
31	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	H
32	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
33	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	H	H
34	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
35	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	H
36	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	H	H
37	-CH(CH ₃) ₂	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
38	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	H

10

20

30

40

50

【表 7 - 2】

39	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	H	-OH	H	H	H
40	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	H	H	-OH	H	H	H
41	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	H	H	-OH	H	H	H
42	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	H
43	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	H
44	$-\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	H
45	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	H
46	$-\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	H
47	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	H
48	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	H
49	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	H
50	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	H
51	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	H
52	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	H
53	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	H
54	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	H
55	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	H
56	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	H
57	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	H
58	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	H
59	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	H
60	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	H
61	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	H
62	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	H
63	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	H	H	H	$-\text{OCH}_3$	H	H
64	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	H	H	H	$-\text{OCH}_3$	H	H
65	$-\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	H	H	H	$-\text{OCH}_3$	H	H
66	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	H	H	H	$-\text{OCH}_3$	H	H
67	$-\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	H	H	$-\text{OCH}_3$	H	H
68	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	H	H	H	$-\text{OCH}_3$	H	H
69	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	H	H	H	$-\text{OCH}_3$	H	H
70	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	H	H	H	$-\text{OCH}_3$	H	H
71	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	H	H	H	$-\text{OCH}_3$	H	H
72	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	H	H	$-\text{OCH}_3$	H	H
73	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	H	H	H	$-\text{OCH}_3$	H	H
74	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	H	H	H	$-\text{OCH}_3$	H	H
75	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	H	H	H	$-\text{OCH}_3$	H	H
76	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	H	H	$-\text{OCH}_3$	H	H
77	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	H	H	H	$-\text{OCH}_3$	H	H
78	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	H	H	H	$-\text{OCH}_3$	H	H
79	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	H	H	$-\text{OCH}_3$	H	H
80	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	H	H	H	$-\text{OCH}_3$	H	H
81	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	H	H	$-\text{OCH}_3$	H	H
82	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	H	H	H	$-\text{OCH}_3$	H	H
83	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	H	H	H	$-\text{OCH}_3$	H	H
83b	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	H	H	H	-OH	H	H
84	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	H	H	H	-OH	H	H
85	$-\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	H	H	H	-OH	H	H
86	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	H	H	H	-OH	H	H
87	$-\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	H	H	-OH	H	H
88	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	H	H	H	-OH	H	H
89	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	H	H	H	-OH	H	H
90	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	H	H	H	-OH	H	H
91	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	H	H	H	-OH	H	H

10

20

30

40

50

【表 7 - 3】

92	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OH	H	H
93	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OH	H	H
94	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OH	H	H
95	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OH	H	H
96	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OH	H	H
97	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OH	H	H
98	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OH	H	H
99	-CH(CH ₃) ₂	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OH	H	H
100	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OH	H	H
101	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OH	H	H
102	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OH	H	H
103	-CH ₂ -HC=CH ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OH	H	H
104	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
105	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
106	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
107	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
108	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
109	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
110	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
111	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
112	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
113	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
114	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
115	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
116	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
117	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
118	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
119	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
120	-CH(CH ₃) ₂	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
121	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
122	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
123	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
124	-CH ₂ -HC=CH ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H
125	-CH ₃	-CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
126	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
127	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
128	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
129	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
130	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
131	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
132	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
133	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
134	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
135	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
135	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
137	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
138	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
139	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
140	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
141	-CH(CH ₃) ₂	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
142	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
143	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
144	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
145	-CH ₂ -HC=CH ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃

10

20

30

40

50

【表 7 - 4】

145b	-CH ₃	-CH ₃	H	H	-OH	H	F	H
146	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	F	H
147	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	F	H
148	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	F	H
149	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	F	H
150	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	F	H
151	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	F	H
152	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	F	H
153	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	F	H
154	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	F	H
155	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	F	H
156	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	F	H
157	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	F	H
158	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	F	H
159	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	F	H
160	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	F	H
161	-CH(CH ₃) ₂	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	F	H
162	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	F	H
163	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	F	H
164	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	F	H
165	-CH ₂ -HC=CH ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	F	H
166	-CH ₃	-CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
167	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
168	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
169	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
170	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
171	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
172	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
173	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
174	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
175	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
176	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
177	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
178	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
179	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
180	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
181	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
182	-CH(CH ₃) ₂	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
183	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
184	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
185	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
186	-CH ₂ -HC=CH ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
187	-CH ₃	-CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	F	H
188	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	F	H
189	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	F	H
190	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	F	H
191	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	F	H
192	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	F	H
193	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	F	H
194	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	F	H
195	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	F	H
196	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	F	H
197	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	F	H
198	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	F	H

10

20

30

40

50

【表 7 - 5】

199	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	F	H
200	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	F	H
201	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	F	H
202	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	F	H
203	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	F	H
204	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	F	H
205	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	F	H
206	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	F	H
207	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	F	H
207b	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	H	H	H	$-\text{OCH}_3$	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
208	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	H	H	H	$-\text{OCH}_3$	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
209	$-\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	H	H	H	$-\text{OCH}_3$	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
210	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	H	H	H	$-\text{OCH}_3$	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
211	$-\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	H	H	$-\text{OCH}_3$	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
212	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	H	H	H	$-\text{OCH}_3$	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
213	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	H	H	H	$-\text{OCH}_3$	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
214	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	H	H	H	$-\text{OCH}_3$	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
215	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	H	H	H	$-\text{OCH}_3$	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
216	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	H	H	$-\text{OCH}_3$	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
217	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	H	H	H	$-\text{OCH}_3$	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
218	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	H	H	H	$-\text{OCH}_3$	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
219	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	H	H	H	$-\text{OCH}_3$	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
220	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	H	H	$-\text{OCH}_3$	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
221	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	H	H	H	$-\text{OCH}_3$	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
222	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	H	H	H	$-\text{OCH}_3$	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
223	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	H	H	$-\text{OCH}_3$	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
224	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	H	H	H	$-\text{OCH}_3$	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
225	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	H	H	$-\text{OCH}_3$	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
226	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	H	H	H	$-\text{OCH}_3$	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
227	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	H	H	H	$-\text{OCH}_3$	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
228	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	H	H	H	$-\text{OCH}_3$	F	H
229	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	H	H	H	$-\text{OCH}_3$	F	H
230	$-\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	H	H	H	$-\text{OCH}_3$	F	H
231	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	H	H	H	$-\text{OCH}_3$	F	H
232	$-\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	H	H	$-\text{OCH}_3$	F	H
233	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	H	H	H	$-\text{OCH}_3$	F	H
234	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	H	H	H	$-\text{OCH}_3$	F	H
235	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	H	H	H	$-\text{OCH}_3$	F	H
236	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	H	H	H	$-\text{OCH}_3$	F	H
237	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	H	H	$-\text{OCH}_3$	F	H
238	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	H	H	H	$-\text{OCH}_3$	F	H
239	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	H	H	H	$-\text{OCH}_3$	F	H
240	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	H	H	H	$-\text{OCH}_3$	F	H
241	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	H	H	$-\text{OCH}_3$	F	H
242	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	H	H	H	$-\text{OCH}_3$	F	H
243	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	H	H	H	$-\text{OCH}_3$	F	H
244	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	H	H	$-\text{OCH}_3$	F	H
245	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	H	H	H	$-\text{OCH}_3$	F	H
246	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	H	H	$-\text{OCH}_3$	F	H
247	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	H	H	H	$-\text{OCH}_3$	F	H
248	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	H	H	H	$-\text{OCH}_3$	F	H
249	H	$-\text{CH}_3$	H	H	H	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
250	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	H	H	H	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$
251	H	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	H	H	H	H	H	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$

10

20

30

40

50

【表 7 - 6】

252	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
253	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
254	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
255	H	-CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
256	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
257	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
258	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	H	H
259	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
260	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	H
261	H	-CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
262	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
263	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
264	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
265	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
266	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
267	H	-CH ₃	H	H	-OH	H	F	H
268	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	F	H
269	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	F	H
270	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	F	H
271	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	F	H
272	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	F	H
273	H	-CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	F	H
274	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	F	H
275	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	F	H
276	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OCH ₃	F	H
277	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	F	H
278	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OCH ₃	F	H
279	H	-CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
280	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
281	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
282	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
283	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
284	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
285	H	-CH ₃	H	H	H	H	F	H
286	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	F	H
287	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	H	F	H
288	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	F	H
289	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	F	H
290	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	F	H
291	H	-CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	H
292	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	H
293	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	H
294	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	H
295	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	H
296	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	-OCH ₃	H	H
297	シクロプロピル	-CH ₃	H	H	H	H	H	H
298	シクロプロピル	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	H	H
299	シクロプロピル	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	H	H	H
300	シクロプロピル	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	H	H
301	シクロプロピル	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	H	H
302	シクロプロピル	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	H	H
303	シクロプロピル	-CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
304	シクロプロピル	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
305	シクロプロピル	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H

10

20

30

40

50

【表 7 - 7】

306	シクロプロピル	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
307	シクロプロピル	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
308	シクロプロピル	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
309	シクロプロピル	-CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
310	シクロプロピル	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
311	シクロプロピル	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
312	シクロプロピル	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	H	H
313	シクロプロピル	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	H	H
314	シクロプロピル	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	H
315	シクロプロピル	-CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
316	シクロプロピル	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
317	シクロプロピル	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
318	シクロプロピル	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
319	シクロプロピル	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
320	シクロプロピル	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
321	シクロプロピル	-CH ₃	H	H	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
322	シクロプロピル	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
323	シクロプロピル	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
324	シクロプロピル	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
325	シクロプロピル	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
326	シクロプロピル	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
327	シクロプロピル	-CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
328	シクロプロピル	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
329	シクロプロピル	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
330	シクロプロピル	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
331	シクロプロピル	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
332	シクロプロピル	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
333	H	-CH ₃	H	H	H	H	H	H
334	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	H	H
335	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	H	H	H
336	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	H	H
337	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	H	H
338	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	H	H
339	H	シクロプロピル	H	H	H	H	H	H
340	H	-CH ₃	H	-CH ₃	H	H	H	H
341	H	-CH ₂ CH ₃	H	-CH ₃	H	H	H	H
342	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	-CH ₃	H	H	H	H
343	H	-CH(CH ₃) ₂	H	-CH ₃	H	H	H	H
344	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	-CH ₃	H	H	H	H
345	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	-CH ₃	H	H	H	H
346	H	シクロプロピル	H	-CH ₃	H	H	H	H
347	H	-CH ₃	H	-CH ₃	-OH	H	H	H
348	H	-CH ₂ CH ₃	H	-CH ₃	-OH	H	H	H
349	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	-CH ₃	-OH	H	H	H
350	H	-CH(CH ₃) ₂	H	-CH ₃	-OH	H	H	H
351	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	-CH ₃	-OH	H	H	H
352	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	-CH ₃	-OH	H	H	H
353	H	シクロプロピル	H	-CH ₃	-OH	H	H	H
354	H	-CH ₃	H	-CH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
355	H	-CH ₂ CH ₃	H	-CH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
356	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	-CH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
357	H	-CH(CH ₃) ₂	H	-CH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
358	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	-CH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
359	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	-CH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃

10

20

30

40

50

【表 7 - 8】

360	H	シクロプロピル	H	-CH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
361	H	-CH ₃	H	-CH ₃	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
362	H	-CH ₂ CH ₃	H	-CH ₃	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
363	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	-CH ₃	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
364	H	-CH(CH ₃) ₂	H	-CH ₃	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
365	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	-CH ₃	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
366	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	-CH ₃	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
367	H	シクロプロピル	H	-CH ₃	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
368	H	-CH ₃	H	-CH ₃	H	H	F	H
369	H	-CH ₂ CH ₃	H	-CH ₃	H	H	F	H
370	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	-CH ₃	H	H	F	H
371	H	-CH(CH ₃) ₂	H	-CH ₃	H	H	F	H
372	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	-CH ₃	H	H	F	H
373	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	-CH ₃	H	H	F	H
374	H	シクロプロピル	H	-CH ₃	H	H	F	H
375	H	-CH ₃	H	-CH ₃	H	-OCH ₃	H	H
376	H	-CH ₂ CH ₃	H	-CH ₃	H	-OCH ₃	H	H
377	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	-CH ₃	H	-OCH ₃	H	H
378	H	-CH(CH ₃) ₂	H	-CH ₃	H	-OCH ₃	H	H
379	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	-CH ₃	H	-OCH ₃	H	H
380	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	-CH ₃	H	-OCH ₃	H	H
381	H	シクロプロピル	H	-CH ₃	H	-OCH ₃	H	H
382	H	-CH ₃	H	-CH ₃	-OH	H	F	H
383	H	-CH ₂ CH ₃	H	-CH ₃	-OH	H	F	H
384	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	-CH ₃	-OH	H	F	H
385	H	-CH(CH ₃) ₂	H	-CH ₃	-OH	H	F	H
386	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	-CH ₃	-OH	H	F	H
387	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	-CH ₃	-OH	H	F	H
388	H	シクロプロピル	H	-CH ₃	-OH	H	F	H
389	H	-CH ₃	H	-CH ₃	-OC(O)CH ₃	H	H	H
390	H	-CH ₂ CH ₃	H	-CH ₃	-OC(O)CH ₃	H	H	H
391	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	-CH ₃	-OC(O)CH ₃	H	H	H
392	H	-CH(CH ₃) ₂	H	-CH ₃	-OC(O)CH ₃	H	H	H
393	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	-CH ₃	-OC(O)CH ₃	H	H	H
394	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	-CH ₃	-OC(O)CH ₃	H	H	H
395	H	シクロプロピル	H	-CH ₃	-OC(O)CH ₃	H	H	H
396	H	H	H	-CH ₃	H	H	H	H
397	H	H	H	-CH ₃	-OH	H	H	H
398	H	H	H	-CH ₃	H	-OCH ₃	H	H
399	H	H	H	-CH ₃	H	H	F	H
400	H	H	H	-CH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
401	H	H	H	-CH ₃	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
402	H	H	H	-CH ₃	-OH	H	F	H
403	H	H	H	-CH ₃	-OH	-OCH ₃	F	H
404	H	H	H	-CH ₃	-OH	F	H	H
405	H	H	H	-CH ₃	-OH	H	H	-CH ₃
406	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	H	H	H
407	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	H	H
408	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	H	H	H
409	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	H	H
410	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	H	H
411	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	H	H
412	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	H	H
413	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	H	H	H

10

20

30

40

50

【表 7 - 9】

414	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	H	H
415	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	H	H
416	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	H	H
417	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	H	H	H
418	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	H	H
419	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	H	H
420	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	H	H
421	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	H	H
422	-CH(CH ₃) ₂	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	H	H
423	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	H	H
424	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	H	H
425	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	H	H
426	-CH ₂ -HC=CH ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	H	H
427	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	H	-OMe	H
428	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	-OMe	H
429	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	H	-OMe	H
430	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	-OMe	H
431	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	-OMe	H
432	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	-OMe	H
433	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	-OMe	H
434	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	H	-OMe	H
435	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	-OMe	H
436	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	-OMe	H
437	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	-OMe	H
438	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	H	-OMe	H
439	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	-OMe	H
440	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	-OMe	H
441	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	-OMe	H
442	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	-OMe	H
443	-CH(CH ₃) ₂	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	-OMe	H
444	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	-OMe	H
445	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	-OMe	H
446	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	-OMe	H
447	-CH ₂ -HC=CH ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	-OMe	H
448	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	H	-OMe	-CH ₂ CH ₃
449	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	-OMe	-CH ₂ CH ₃
450	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	H	-OMe	-CH ₂ CH ₃
451	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	-OMe	-CH ₂ CH ₃
452	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	-OMe	-CH ₂ CH ₃
453	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	-OMe	-CH ₂ CH ₃
454	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	-OMe	-CH ₂ CH ₃
455	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	H	-OMe	-CH ₂ CH ₃
456	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	-OMe	-CH ₂ CH ₃
457	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	-OMe	-CH ₂ CH ₃
458	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	-OMe	-CH ₂ CH ₃
459	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	H	-OMe	-CH ₂ CH ₃
460	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	-OMe	-CH ₂ CH ₃
461	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	-OMe	-CH ₂ CH ₃
462	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	-OMe	-CH ₂ CH ₃
463	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	-OMe	-CH ₂ CH ₃
464	-CH(CH ₃) ₂	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	-OMe	-CH ₂ CH ₃
465	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	-OMe	-CH ₂ CH ₃
466	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	-OMe	-CH ₂ CH ₃
467	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	-OMe	-CH ₂ CH ₃

10

20

30

40

50

【表 7 - 1 0】

468	-CH ₂ -HC=CH ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	-OMe	-CH ₂ CH ₃
469	-CH ₃	シクロプロピル	H	H	H	H	-OMe	H
470	-CH ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	H	H	H	-OMe	H
471	-(CH ₂) ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	H	H	H	-OMe	H
472	-CH(CH ₃) ₂	シクロプロピル	H	H	H	H	-OMe	H
473	-(CH ₂) ₃ CH ₃	シクロプロピル	H	H	H	H	-OMe	H
474	-CH ₂ -HC=CH ₂	シクロプロピル	H	H	H	H	-OMe	H
475	シクロプロピル	シクロプロピル	H	H	H	H	-OMe	H
476	-CH ₃	シクロプロピル	H	H	H	H	-OMe	-CH ₂ CH ₃
477	-CH ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	H	H	H	-OMe	-CH ₂ CH ₃
478	-(CH ₂) ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	H	H	H	-OMe	-CH ₂ CH ₃
479	-CH(CH ₃) ₂	シクロプロピル	H	H	H	H	-OMe	-CH ₂ CH ₃
480	-(CH ₂) ₃ CH ₃	シクロプロピル	H	H	H	H	-OMe	-CH ₂ CH ₃
481	-CH ₂ -HC=CH ₂	シクロプロピル	H	H	H	H	-OMe	-CH ₂ CH ₃
482	シクロプロピル	シクロプロピル	H	H	H	H	-OMe	-CH ₂ CH ₃
483	H	-CH ₃	H	H	H	H	-OMe	H
484	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	-OMe	H
485	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	H	-OMe	H
486	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	-OMe	H
487	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	-OMe	H
488	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	-OMe	H
489	H	シクロプロピル	H	H	H	H	-OMe	H
490	H	-CH ₃	H	H	H	H	-OMe	-CH ₂ CH ₃
491	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	-OMe	-CH ₂ CH ₃
492	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	H	-OMe	-CH ₂ CH ₃
493	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	-OMe	-CH ₂ CH ₃
494	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	-OMe	-CH ₂ CH ₃
495	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	-OMe	-CH ₂ CH ₃
496	H	シクロプロピル	H	H	H	H	-OMe	-CH ₂ CH ₃
497	H	-CD ₃	H	H	H	H	H	H
498	H	-CD ₃	H	H	-OH	H	H	H
499	H	-CD ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
500	H	-CD ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	H
501	H	-CD ₃	H	H	H	H	H	H
502	H	-CD ₃	H	H	-OH	H	H	H
503	H	-CD ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
504	H	-CD ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	H
505	H	-CD ₃	H	H	H	H	F	H
506	H	-CD ₃	H	H	-OH	H	F	H
507	H	-CD ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	F	H
508	H	-CD ₃	H	H	H	-OCH ₃	F	H
509	H	-CD ₃	H	H	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
510	H	-CD ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
511	H	-CD ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
512	H	-CD ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₂ CH ₃
513	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	H	H	H	H
514	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	-OH	H	H	H
515	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
516	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	H
517	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	H	H	H	H
518	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	-OH	H	H	H
519	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H
520	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	H
521	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	H	H	F	H

10

20

30

40

50

【表 7 - 1 1】

522	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	-OH	H	F	H
523	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	F	H
524	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	H	-OCH ₃	F	H
525	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
526	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
527	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
528	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₂ CH ₃
529	H	-CH ₃	H	D	H	H	H	H
530	H	-CH ₂ CH ₃	H	D	H	H	H	H
531	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	D	H	H	H	H
532	H	-CH(CH ₃) ₂	H	D	H	H	H	H
533	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	D	H	H	H	H
534	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	D	H	H	H	H
535	H	-CH ₃	H	D	-OH	H	H	H
536	H	-CH ₂ CH ₃	H	D	-OH	H	H	H
537	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	D	-OH	H	H	H
538	H	-CH(CH ₃) ₂	H	D	-OH	H	H	H
539	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	D	-OH	H	H	H
540	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	D	-OH	H	H	H
541	H	-CH ₃	H	D	-OH	H	F	H
542	H	-CH ₂ CH ₃	H	D	-OH	H	F	H
543	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	D	-OH	H	F	H
544	H	-CH(CH ₃) ₂	H	D	-OH	H	F	H
545	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	D	-OH	H	F	H
546	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	D	-OH	H	F	H
547	H	-CH ₃	H	D	H	-OMe	F	H
548	H	-CH ₂ CH ₃	H	D	H	-OMe	F	H
549	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	D	H	-OMe	F	H
550	H	-CH(CH ₃) ₂	H	D	H	-OMe	F	H
551	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	D	H	-OMe	F	H
552	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	D	H	-OMe	F	H
553	H	-CH ₃	H	D	H	-OMe	H	H
554	H	-CH ₂ CH ₃	H	D	H	-OMe	H	H
555	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	D	H	-OMe	H	H
556	H	-CH(CH ₃) ₂	H	D	H	-OMe	H	H
557	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	D	H	-OMe	H	H
558	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	D	H	-OMe	H	H
559	H	-CH ₃	H	D	-OC(O)CH ₃	H	H	H
560	H	-CH ₂ CH ₃	H	D	-OC(O)CH ₃	H	H	H
561	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	D	-OC(O)CH ₃	H	H	H
562	H	-CH(CH ₃) ₂	H	D	-OC(O)CH ₃	H	H	H
563	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	D	-OC(O)CH ₃	H	H	H
564	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	D	-OC(O)CH ₃	H	H	H
565	H	-CH ₃	H	D	-OC(O)CH ₃	H	F	H
566	H	-CH ₂ CH ₃	H	D	-OC(O)CH ₃	H	F	H
567	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	D	-OC(O)CH ₃	H	F	H
568	H	-CH(CH ₃) ₂	H	D	-OC(O)CH ₃	H	F	H
569	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	D	-OC(O)CH ₃	H	F	H
570	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	D	-OC(O)CH ₃	H	F	H

10

20

30

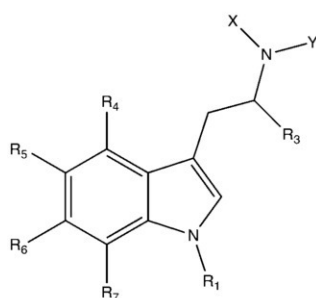
40

【0079】

他の例示的な式Ⅰの化合物には、以下の表 8 におけるものが含まれ、これはまた、式Ⅰhによって表される：

50

【化 1 2】



式 I h

【表 8 - 1】

表 8

参照	X	Y	R ₃	R ₄	R ₅	R ₆	R ₇	R ₁
1	-CH ₃	-CH ₃	H	-OCH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
2	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	-OCH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
3	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	-OCH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
4	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	-OCH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
5	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	-OCH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
6	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	-OCH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
7	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	-OCH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
8	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	-OCH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
9	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	-OCH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
10	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	-OCH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
11	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	-OCH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
12	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	-OCH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
13	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	-OCH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
14	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	-OCH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
15	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	-OCH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
16	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	H	-OCH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
17	-CH(CH ₃) ₂	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	-OCH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
18	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	-OCH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
19	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	-OCH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
20	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	-OCH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
21	-CH ₂ - HC=CH ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	-OCH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
22	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	-OH	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
23	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	-OH	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
24	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	-OH	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
25	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	-OH	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
26	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	-OH	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
27	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	-OH	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
28	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	-OH	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
29	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	-OH	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
30	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	-OH	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
31	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	-OH	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
32	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	-OH	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
33	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	-OH	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
34	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	-OH	H	H	H	-CH ₂ CH ₃

10

20

30

40

50

40

35	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	-OH	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
36	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	H	-OH	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
37	-CH(CH ₃) ₂	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	-OH	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
38	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	-OH	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
39	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	-OH	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
40	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	-OH	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
41	-CH ₂ - HC=CH ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	-OH	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
42	-CH ₃	-CH ₃	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
43	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
44	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
45	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
46	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
47	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
48	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
49	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
50	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
51	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
52	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
53	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
54	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
55	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
56	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
57	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
58	-CH(CH ₃) ₂	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
59	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
60	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
61	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
62	-CH ₂ - HC=CH ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
63	-CH ₃	-CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
64	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
65	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
66	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
67	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
68	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
69	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
70	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
71	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
72	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃

【表 8 - 3】

86	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
87	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
88	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
89	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
90	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
91	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
92	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
93	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
94	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
95	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
96	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
97	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
98	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
99	-CH(CH ₃) ₂	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
100	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
101	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
102	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
103	-CH ₂ - HC=CH ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	H	-CH ₂ CH ₃
104	-CH ₃	-CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
105	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
106	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
107	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
108	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
109	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
110	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
111	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
112	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
113	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
114	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
115	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
116	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
117	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
118	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
119	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
120	-CH(CH ₃) ₂	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
121	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
122	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
123	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
124	-CH ₂ - HC=CH ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
125	-CH ₃	-CH ₃	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃	H
126	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃	H
127	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃	H
128	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃	H
129	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃	H
130	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃	H
131	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃	H
132	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃	H
133	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃	H
134	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃	H
135	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃	H
135	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃	H
137	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₃	H

10

20

30

40

50

20

40

【表 8 - 5】

189	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃	H
190	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃	H
191	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃	H
192	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃	H
193	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃	H
194	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃	H
195	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃	H
196	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃	H
197	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃	H
198	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃	H
199	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃	H
200	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃	H
201	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃	H
202	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃	H
203	-CH(CH ₃) ₂	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃	H
204	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃	H
205	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃	H
206	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃	H
207	-CH ₂ - HC=CH ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃	H
208	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	-CH ₃	H
209	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	-CH ₃	H
210	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	-CH ₃	H
211	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	-CH ₃	H
212	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	-CH ₃	H
213	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	-CH ₃	H
214	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	-CH ₃	H
215	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	-CH ₃	H
216	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	-CH ₃	H
217	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	-CH ₃	H
218	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OH	H	-CH ₃	H
219	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	-CH ₃	H
220	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	-CH ₃	H
221	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	-CH ₃	H
222	-CH(CH ₃) ₂	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OH	H	-CH ₃	H
223	-CH(CH ₃) ₂	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	-CH ₃	H
224	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	-CH ₃	H
225	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OH	H	-CH ₃	H
226	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	-CH ₃	H
227	-CH ₂ - HC=CH ₂	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OH	H	-CH ₃	H
228	-CH ₃	-CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃	H
229	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃	H
230	-CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃	H
231	-CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃	H
232	-CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃	H
233	-CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃	H
234	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃	H
235	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃	H
236	-CH ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃	H
237	-CH ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃	H
238	-CH ₂ CH ₃	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃	H
239	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃	H
240	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃	H

10

20

30

40

50

【表 8 - 6】

241	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	$-\text{CH}_3$	H
242	$-(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	$-\text{CH}_3$	H
243	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	$-\text{CH}_3$	H
244	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	$-\text{CH}_3$	H
245	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	$-\text{CH}_3$	H
246	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	$-\text{CH}_3$	H
247	$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	$-\text{CH}_3$	H
248	$-\text{CH}_2-$ $\text{HC}=\text{CH}_2$	$-\text{CH}_2-\text{HC}=\text{CH}_2$	H	H	$\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	$-\text{CH}_3$	H
249	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	H	H	H	F	H	H
250	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	H	$-\text{OH}$	H	F	H	H
251	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	F	H	H
252	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	H	$-\text{OCH}_3$	H	F	H	H
253	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	H	H	H	F	H	H
254	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2(\text{CH}_3)_2$	H	H	H	F	H	H
255	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	H	F	H	H	H	H
256	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	H	H	H	H	H
257	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	$-\text{OH}$	H	H	H	H
258	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	H	H
259	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	$-\text{OCH}_3$	H	H	H	H
260	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	H	H	H	H	H
261	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2(\text{CH}_3)_2$	$-\text{CH}_3$	H	H	H	H	H
262	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	F	H	H	H	H
263	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	H	H	F	H	H
264	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	$-\text{OH}$	H	F	H	H
265	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	F	H	H
266	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	$-\text{OCH}_3$	H	F	H	H
267	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	H	H	F	H	H
268	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2(\text{CH}_3)_2$	$-\text{CH}_3$	H	H	F	H	H
269	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	F	H	H	H	H
270	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	H	H	F	$-\text{CH}_3$	H
271	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	$-\text{OH}$	H	F	$-\text{CH}_3$	H
272	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	F	$-\text{CH}_3$	H
273	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	$-\text{OCH}_3$	H	F	$-\text{CH}_3$	H
274	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	H	H	F	$-\text{CH}_3$	H
275	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2(\text{CH}_3)_2$	$-\text{CH}_3$	H	H	F	$-\text{CH}_3$	H
276	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	F	H	H	$-\text{CH}_3$	H
277	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OH}$	H	H	$-\text{CH}_3$
278	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	$-\text{CH}_3$
279	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OCH}_3$	H	H	$-\text{CH}_3$
280	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	H	H	H	H	H	$-\text{CH}_3$
281	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2(\text{CH}_3)_2$	H	H	H	H	H	$-\text{CH}_3$
282	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	H	H	F	H	H	$-\text{CH}_3$
283	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	H	H	H	H	$-\text{CH}_3$
284	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	H	$-\text{OH}$	H	H	$-\text{CH}_3$
285	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	H	H	$-\text{CH}_3$
286	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	H	$-\text{OCH}_3$	H	H	$-\text{CH}_3$
287	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	H	H	H	H	$-\text{CH}_3$
288	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_2(\text{CH}_3)_2$	$-\text{CH}_3$	H	H	H	H	$-\text{CH}_3$
289	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	H	F	H	H	$-\text{CH}_3$
290	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	H	H	H	F	H	$-\text{CH}_3$
291	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OH}$	F	H	$-\text{CH}_3$
292	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_3$	F	H	$-\text{CH}_3$
293	$-\text{CH}_3$	$-\text{CH}_3$	H	H	$-\text{OCH}_3$	F	H	$-\text{CH}_3$

10

20

30

40

50

【表 8 - 7】

294	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	F	H	-CH ₃
295	-CH ₃	-CH ₂ (CH ₃) ₂	H	H	H	F	H	-CH ₃
296	-CH ₃	-CH ₃	H	H	F	F	H	-CH ₃
297	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	H	-CH ₃	-CH ₃
298	-CH ₃	-CH ₃	H	H	-OH	H	-CH ₃	-CH ₃
299	-CH ₃	-CH ₃	H	H	-OC(O)CH ₃	H	-CH ₃	-CH ₃
300	-CH ₃	-CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃	-CH ₃
301	-CH ₃	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	-CH ₃	-CH ₃
302	-CH ₃	-CH ₂ (CH ₃) ₂	H	H	H	H	-CH ₃	-CH ₃
303	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	F	-CH ₃	-CH ₃
304	H	-CH ₃	H	H	H	H	H	H
305	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	H	H	H
306	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	H	H	H
307	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	H	H	H
308	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	H	H	H
309	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	H	H	H
310	H	-CH ₃	-CH ₃	H	H	H	H	H
310a	H	-CH ₂ CH ₃	-CH ₃	H	H	H	H	H
311	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₃	H	H	H	H	H
312	H	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₃	H	H	H	H	H
313	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-CH ₃	H	H	H	H	H
314	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	-CH ₃	H	H	H	H	H
315	H	-CH ₃	H	-OH	H	H	H	H
316	H	-CH ₂ CH ₃	H	-OH	H	H	H	H
317	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	-OH	H	H	H	H
318	H	-CH(CH ₃) ₂	H	-OH	H	H	H	H
319	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	-OH	H	H	H	H
320	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	-OH	H	H	H	H
321	H	-CH ₃	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H	H
322	H	-CH ₂ CH ₃	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H	H
324	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H	H
325	H	-CH(CH ₃) ₂	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H	H
326	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H	H
327	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H	H
328	H	-CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
329	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
330	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
331	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
332	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	H	H
333	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	H	H
334	H	-CH ₃	H	H	H	F	H	H
335	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	H	F	H	H
336	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	H	F	H	H
337	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	H	F	H	H
338	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	H	F	H	H
339	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	H	F	H	H
340	H	-CH ₃	-CH ₃	-OH	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
341	H	-CH ₂ CH ₃	-CH ₃	-OH	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
342	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	-CH ₃	-OH	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
343	H	-CH(CH ₃) ₂	-CH ₃	-OH	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
344	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	-CH ₃	-OH	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
345	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	-CH ₃	-OH	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
346	H	-CH ₃	-CH ₃	-OC(O)CH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
347	H	-CH ₂ CH ₃	-CH ₃	-OC(O)CH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃

10

20

30

40

50

【表 8 - 8】

348	H	$-(CH_2)_2CH_3$	$-CH_3$	$-OC(O)CH_3$	H	H	H	$-CH_2CH_3$
349	H	$-CH(CH_3)_2$	$-CH_3$	$-OC(O)CH_3$	H	H	H	$-CH_2CH_3$
350	H	$-(CH_2)_3CH_3$	$-CH_3$	$-OC(O)CH_3$	H	H	H	$-CH_2CH_3$
351	H	$-CH_2-HC=CH_2$	$-CH_3$	$-OC(O)CH_3$	H	H	H	$-CH_2CH_3$
352	H	$-CH_3$	$-CH_3$	H	$-OCH_3$	H	H	$-CH_2CH_3$
353	H	$-CH_2CH_3$	$-CH_3$	H	$-OCH_3$	H	H	$-CH_2CH_3$
354	H	$-(CH_2)_2CH_3$	$-CH_3$	H	$-OCH_3$	H	H	$-CH_2CH_3$
355	H	$-CH(CH_3)_2$	$-CH_3$	H	$-OCH_3$	H	H	$-CH_2CH_3$
356	H	$-(CH_2)_3CH_3$	$-CH_3$	H	$-OCH_3$	H	H	$-CH_2CH_3$
357	H	$-CH_2-HC=CH_2$	$-CH_3$	H	$-OCH_3$	H	H	$-CH_2CH_3$
358	H	$-CH_3$	$-CH_3$	H	H	F	H	$-CH_2CH_3$
359	H	$-CH_2CH_3$	$-CH_3$	H	H	F	H	$-CH_2CH_3$
360	H	$-(CH_2)_2CH_3$	$-CH_3$	H	H	F	H	$-CH_2CH_3$
361	H	$-CH(CH_3)_2$	$-CH_3$	H	H	F	H	$-CH_2CH_3$
362	H	$-(CH_2)_3CH_3$	$-CH_3$	H	H	F	H	$-CH_2CH_3$
363	H	$-CH_2-HC=CH_2$	$-CH_3$	H	H	F	H	$-CH_2CH_3$
364	H	シクロプロピル	H	H	H	H	H	H
365	H	シクロプロピル	$-CH_3$	H	H	H	H	H
366	H	シクロプロピル	H	$-OH$	H	H	H	H
367	H	シクロプロピル	H	$-OC(O)CH_3$	H	H	H	H
368	H	シクロプロピル	H	H	$-OCH_3$	H	H	H
369	H	シクロプロピル	H	H	H	F	H	H
370	H	シクロプロピル	H	H	H	H	H	$-CH_2CH_3$
371	H	シクロプロピル	$-CH_3$	$-OH$	H	F	H	$-CH_2CH_3$
372	H	シクロプロピル	$-CH_3$	$-OH$	H	H	H	$-CH_2CH_3$
373	H	シクロプロピル	$-CH_3$	$-OC(O)CH_3$	H	H	H	$-CH_2CH_3$
374	H	シクロプロピル	$-CH_3$	H	$-OCH_3$	H	H	$-CH_2CH_3$
375	H	シクロプロピル	$-CH_3$	H	H	F	H	$-CH_2CH_3$
376	$-CH_3$	シクロプロピル	H	H	H	H	H	H
377	$-CH_3$	シクロプロピル	$-CH_3$	H	H	H	H	H
378	$-CH_3$	シクロプロピル	H	$-OH$	H	H	H	H
379	$-CH_3$	シクロプロピル	H	$-OC(O)CH_3$	H	H	H	H
380	$-CH_3$	シクロプロピル	H	H	$-OCH_3$	H	H	H
381	$-CH_3$	シクロプロピル	H	H	H	F	H	H
382	$-CH_3$	シクロプロピル	H	H	H	H	H	$-CH_2CH_3$
383	$-CH_3$	シクロプロピル	$-CH_3$	$-OH$	H	F	H	$-CH_2CH_3$
384	$-CH_3$	シクロプロピル	$-CH_3$	$-OH$	H	H	H	$-CH_2CH_3$
385	$-CH_3$	シクロプロピル	$-CH_3$	$-OC(O)CH_3$	H	H	H	$-CH_2CH_3$
386	$-CH_3$	シクロプロピル	$-CH_3$	H	$-OCH_3$	H	H	$-CH_2CH_3$
387	$-CH_3$	シクロプロピル	$-CH_3$	H	H	F	H	$-CH_2CH_3$
388	$-CH_2CH_3$	シクロプロピル	H	H	H	H	H	H
389	$-CH_2CH_3$	シクロプロピル	$-CH_3$	H	H	H	H	H
390	$-CH_2CH_3$	シクロプロピル	H	$-OH$	H	H	H	H
391	$-CH_2CH_3$	シクロプロピル	H	$-OC(O)CH_3$	H	H	H	H
392	$-CH_2CH_3$	シクロプロピル	H	H	$-OCH_3$	H	H	H
393	$-CH_2CH_3$	シクロプロピル	H	H	H	F	H	H
394	$-CH_2CH_3$	シクロプロピル	H	H	H	H	H	$-CH_2CH_3$
395	$-CH_2CH_3$	シクロプロピル	$-CH_3$	$-OH$	H	F	H	$-CH_2CH_3$
396	$-CH_2CH_3$	シクロプロピル	$-CH_3$	$-OH$	H	H	H	$-CH_2CH_3$
397	$-CH_2CH_3$	シクロプロピル	$-CH_3$	$-OC(O)CH_3$	H	H	H	$-CH_2CH_3$
398	$-CH_2CH_3$	シクロプロピル	$-CH_3$	H	$-OCH_3$	H	H	$-CH_2CH_3$
399	$-CH_2CH_3$	シクロプロピル	$-CH_3$	H	H	F	H	$-CH_2CH_3$
400	$-(CH_2)_2CH_3$	シクロプロピル	H	H	H	H	H	H
401	$-(CH_2)_2CH_3$	シクロプロピル	$-CH_3$	H	H	H	H	H

10

20

30

40

50

【表 8 - 9】

402	-(CH ₂) ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	-OH	H	H	H	H
403	-(CH ₂) ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H	H
404	-(CH ₂) ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	H	-OCH ₃	H	H	H
405	-(CH ₂) ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	H	H	F	H	H
406	-(CH ₂) ₂ CH ₃	シクロプロピル	H	H	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
407	-(CH ₂) ₂ CH ₃	シクロプロピル	-CH ₃	-OH	H	F	H	-CH ₂ CH ₃
408	-(CH ₂) ₂ CH ₃	シクロプロピル	-CH ₃	-OH	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
409	-(CH ₂) ₂ CH ₃	シクロプロピル	-CH ₃	-OC(O)CH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
410	-(CH ₂) ₂ CH ₃	シクロプロピル	-CH ₃	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
411	-(CH ₂) ₂ CH ₃	シクロプロピル	-CH ₃	H	H	F	H	-CH ₂ CH ₃
412	-CH ₂ (CH ₃) ₂	シクロプロピル	H	H	H	H	H	H
413	-CH ₂ (CH ₃) ₂	シクロプロピル	-CH ₃	H	H	H	H	H
414	-CH ₂ (CH ₃) ₂	シクロプロピル	H	-OH	H	H	H	H
415	-CH ₂ (CH ₃) ₂	シクロプロピル	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H	H
416	-CH ₂ (CH ₃) ₂	シクロプロピル	H	H	-OCH ₃	H	H	H
417	-CH ₂ (CH ₃) ₂	シクロプロピル	H	H	H	F	H	H
418	-CH ₂ (CH ₃) ₂	シクロプロピル	H	H	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
419	-CH ₂ (CH ₃) ₂	シクロプロピル	-CH ₃	-OH	H	F	H	-CH ₂ CH ₃
420	-CH ₂ (CH ₃) ₂	シクロプロピル	-CH ₃	-OH	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
421	-CH ₂ (CH ₃) ₂	シクロプロピル	-CH ₃	-OC(O)CH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
422	-CH ₂ (CH ₃) ₂	シクロプロピル	-CH ₃	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
423	-CH ₂ (CH ₃) ₂	シクロプロピル	-CH ₃	H	H	F	H	-CH ₂ CH ₃
424	シクロプロピル	シクロプロピル	-CH ₃	H	H	H	H	H
425	シクロプロピル	シクロプロピル	H	-OH	H	H	H	H
426	シクロプロピル	シクロプロピル	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H	H
427	シクロプロピル	シクロプロピル	H	H	-OCH ₃	H	H	H
428	シクロプロピル	シクロプロピル	H	H	H	F	H	H
429	シクロプロピル	シクロプロピル	H	H	H	H	H	H
430	シクロプロピル	シクロプロピル	-CH ₃	-OH	H	F	H	-CH ₂ CH ₃
431	シクロプロピル	シクロプロピル	-CH ₃	-OH	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
432	シクロプロピル	シクロプロピル	-CH ₃	-OC(O)CH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
433	シクロプロピル	シクロプロピル	-CH ₃	H	-OCH ₃	H	H	-CH ₂ CH ₃
434	シクロプロピル	シクロプロピル	-CH ₃	H	H	F	H	-CH ₂ CH ₃
435	H	-CH ₃	H	-OH	H	H	-CH ₃	H
436	H	-CH ₂ CH ₃	H	-OH	H	H	-CH ₃	H
437	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	-OH	H	H	-CH ₃	H
438	H	-CH(CH ₃) ₂	H	-OH	H	H	-CH ₃	H
439	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	-OH	H	H	-CH ₃	H
440	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	-OH	H	H	-CH ₃	H
441	H	-CH ₃	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃	H
442	H	-CH ₂ CH ₃	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃	H
443	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃	H
444	H	-CH(CH ₃) ₂	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃	H
445	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃	H
446	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃	H
447	H	-CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃	H
448	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃	H
449	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃	H
450	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃	H
451	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃	H
452	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	H	-CH ₃	H
453	H	-CH ₃	H	-OH	H	F	H	H
454	H	-CH ₂ CH ₃	H	-OH	H	F	H	H
455	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	-OH	H	F	H	H

10

20

30

40

50

【表 8 - 1 0】

456	H	-CH(CH ₃) ₂	H	-OH	H	F	H	H
457	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	-OH	H	F	H	H
458	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	-OH	H	F	H	H
459	H	-CH ₃	H	-OC(O)CH ₃	H	F	H	H
460	H	-CH ₂ CH ₃	H	-OC(O)CH ₃	H	F	H	H
461	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	-OC(O)CH ₃	H	F	H	H
462	H	-CH(CH ₃) ₂	H	-OC(O)CH ₃	H	F	H	H
463	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	-OC(O)CH ₃	H	F	H	H
464	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	-OC(O)CH ₃	H	F	H	H
465	H	-CH ₃	H	H	-OCH ₃	F	H	H
466	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	F	H	H
467	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	F	H	H
468	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OCH ₃	F	H	H
469	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	F	H	H
470	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	F	H	H
471	H	-CD ₃	H	H	H	H	H	H
472	H	-CD ₃	H	-OH	H	H	H	H
473	H	-CD ₃	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H	H
474	H	-CD ₃	H	H	-OMe	H	H	H
475	H	-CD ₃	H	H	H	F	H	H
476	H	-CD ₃	H	-OH	H	F	H	H
477	H	-CD ₃	H	-OC(O)CH ₃	H	F	H	H
478	H	-CD ₃	H	H	-OMe	F	H	H
479	H	-CD ₃	H	H	H	H	-CH ₃	H
480	H	-CD ₃	H	-OH	H	H	-CH ₃	H
481	H	-CD ₃	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃	H
482	H	-CD ₃	H	H	-OMe	H	-CH ₃	H
483	H	-CD ₃	H	H	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
484	H	-CD ₃	H	-OH	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
485	H	-CD ₃	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
486	H	-CD ₃	H	H	-OMe	H	H	-CH ₂ CH ₃
487	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	H	H	H	H
488	H	-CD ₂ CD ₃	H	-OH	H	H	H	H
489	H	-CD ₂ CD ₃	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H	H
490	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	-OMe	H	H	H
491	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	H	F	H	H
492	H	-CD ₂ CD ₃	H	-OH	H	F	H	H
493	H	-CD ₂ CD ₃	H	-OC(O)CH ₃	H	F	H	H
494	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	-OMe	F	H	H
495	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	H	H	-CH ₃	H
496	H	-CD ₂ CD ₃	H	-OH	H	H	-CH ₃	H
497	H	-CD ₂ CD ₃	H	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃	H
498	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	-OMe	H	-CH ₃	H
499	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
500	H	-CD ₂ CD ₃	H	-OH	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
501	H	-CD ₂ CD ₃	H	-OC(O)CH ₃	H	H	H	-CH ₂ CH ₃
502	H	-CD ₂ CD ₃	H	H	-OMe	H	H	-CH ₂ CH ₃
503	H	-CH ₃	H	-OH	H	F	-CH ₃	H
504	H	-CH ₂ CH ₃	H	-OH	H	F	-CH ₃	H
505	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	-OH	H	F	-CH ₃	H
506	H	-CH(CH ₃) ₂	H	-OH	H	F	-CH ₃	H
507	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	-OH	H	F	-CH ₃	H
508	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	-OH	H	F	-CH ₃	H
509	H	-CH ₃	H	-OC(O)CH ₃	H	F	-CH ₃	H

10

20

30

40

50

【表 8 - 1 1】

510	H	-CH ₂ CH ₃	H	-OC(O)CH ₃	H	F	-CH ₃	H
511	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	-OC(O)CH ₃	H	F	-CH ₃	H
512	H	-CH(CH ₃) ₂	H	-OC(O)CH ₃	H	F	-CH ₃	H
513	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	-OC(O)CH ₃	H	F	-CH ₃	H
514	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	-OC(O)CH ₃	H	F	-CH ₃	H
515	H	-CH ₃	H	H	-OCH ₃	F	-CH ₃	H
516	H	-CH ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	F	-CH ₃	H
517	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	H	H	-OCH ₃	F	-CH ₃	H
518	H	-CH(CH ₃) ₂	H	H	-OCH ₃	F	-CH ₃	H
519	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	H	H	-OCH ₃	F	-CH ₃	H
520	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	H	H	-OCH ₃	F	-CH ₃	H
521	H	-CH ₃	D	-OH	H	H	-CH ₃	H
522	H	-CH ₂ CH ₃	D	-OH	H	H	-CH ₃	H
523	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	D	-OH	H	H	-CH ₃	H
524	H	-CH(CH ₃) ₂	D	-OH	H	H	-CH ₃	H
525	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	D	-OH	H	H	-CH ₃	H
526	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	D	-OH	H	H	-CH ₃	H
527	H	-CH ₃	D	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃	H
528	H	-CH ₂ CH ₃	D	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃	H
529	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	D	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃	H
530	H	-CH(CH ₃) ₂	D	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃	H
531	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	D	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃	H
532	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	D	-OC(O)CH ₃	H	H	-CH ₃	H
533	H	-CH ₃	D	H	-OCH ₃	H	-CH ₃	H
534	H	-CH ₂ CH ₃	D	H	-OCH ₃	H	-CH ₃	H
535	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	D	H	-OCH ₃	H	-CH ₃	H
536	H	-CH(CH ₃) ₂	D	H	-OCH ₃	H	-CH ₃	H
537	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	D	H	-OCH ₃	H	-CH ₃	H
538	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	D	H	-OCH ₃	H	-CH ₃	H
539	H	-CH ₃	D	-OH	H	F	H	H
540	H	-CH ₂ CH ₃	D	-OH	H	F	H	H
541	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	D	-OH	H	F	H	H
542	H	-CH(CH ₃) ₂	D	-OH	H	F	H	H
543	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	D	-OH	H	F	H	H
544	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	D	-OH	H	F	H	H
545	H	-CH ₃	D	-OC(O)CH ₃	H	F	H	H
546	H	-CH ₂ CH ₃	D	-OC(O)CH ₃	H	F	H	H
547	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	D	-OC(O)CH ₃	H	F	H	H
548	H	-CH(CH ₃) ₂	D	-OC(O)CH ₃	H	F	H	H
549	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	D	-OC(O)CH ₃	H	F	H	H
550	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	D	-OC(O)CH ₃	H	F	H	H
551	H	-CH ₃	D	H	-OCH ₃	F	H	H
552	H	-CH ₂ CH ₃	D	H	-OCH ₃	F	H	H
553	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	D	H	-OCH ₃	F	H	H
554	H	-CH(CH ₃) ₂	D	H	-OCH ₃	F	H	H
555	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	D	H	-OCH ₃	F	H	H
556	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	D	H	-OCH ₃	F	H	H
557	H	-CH ₃	D	H	H	H	H	H
558	H	-CH ₂ CH ₃	D	H	H	H	H	H
559	H	-(CH ₂) ₂ CH ₃	D	H	H	H	H	H
560	H	-CH(CH ₃) ₂	D	H	H	H	H	H
561	H	-(CH ₂) ₃ CH ₃	D	H	H	H	H	H
562	H	-CH ₂ -HC=CH ₂	D	H	H	H	H	H

10

20

30

40

【0080】

組成物及び方法

本明細書で使用される場合、用語「5-HT1A」は、5-HT1A受容体を指す。本明細書で使用される場合、用語「5-HT2A」は、5-HT2A受容体を指す。

【0081】

本明細書で使用される場合、本明細書に開示される化合物に関連して用語「有効量」は、本明細書に開示される障害、疾患もしくは病態、またはその症状を処置または予防することが可能な量を意味する。

【0082】

50

本明細書で使用される場合、用語「幻覚」（及び関連用語、例えば、「幻覚誘発性」及び「幻覚剤」）は、現実の知覚の性質を有する外部刺激物の非存在下での知覚を指す。いくつかの実施形態では、幻覚は、鮮明で、実質的であり得、外部の客観的空間に位置すると知覚される。本明細書で使用される場合、幻覚は、視覚、聴覚、嗅覚、味覚、触覚、固有受容、平衡受容、侵害受容、熱受容及び時間受容を含むがこれらに限定されない任意の感覚モダリティにおいて生じ得る。いくつかの実施形態では、幻覚は、幻視、幻聴、嗅覚幻覚、味覚幻覚、触覚幻覚、固有受容幻覚、平衡受容幻覚、侵害幻覚、熱受容幻覚、時間受容幻覚及びそれらの任意の組み合わせから選択される。いくつかの実施形態では、幻覚は、幻視である。

【0083】

本明細書で使用される場合、用語「予防する」または「予防すること」は、全体的または部分的に、障害、疾患または病態の発症、再発または広がりや遅延させること及び／または除外すること；対象が障害、疾患、または病態を獲得することを阻止すること；または障害、疾患、または病態を獲得する対象のリスクを低減することの方法を意味することを指す。

【0084】

本明細書で使用される場合、用語「処置する」または「処置すること」は、障害、疾患もしくは病態、または障害、疾患、もしくは病態に関連する症状の1つ以上の全体的または部分的な軽減、またはそれらの症状のさらなる進行または悪化の減速または停止、または障害、疾患、もしくは病態自体の原因（複数可）を緩和または根絶することを指す。

【0085】

本開示のさらなる実施形態では、新規化合物及び組成物、ならびにそれを投与する方法が記載される。いくつかの実施形態では、本明細書で提供される化合物は、本明細書で提供される方法において使用するためのものである。いくつかの実施形態では、本開示は、本明細書で提供される疾患または障害の1つ以上を処置するための医薬品の調製における本明細書で提供される化合物の使用を提供する。

【0086】

所定の実施形態では、方法は、セロトニン5-HT_{1A}アゴニスト及びセロトニン5-HT_{2A}アゴニストを投与することを含む。任意の特定の理論に縛られることなく、所定の実施形態では、セロトニン5-HT_{1A}アゴニスト及びセロトニン5-HT_{2A}アゴニストを投与することは、本明細書に記載の病態の1つ以上を予防または処置する際に有効であり得ることが驚くべきことに発見された。所定の実施形態では、セロトニン5-HT_{1A}アゴニスト及び幻覚誘発性5-HT_{2A}アゴニストを投与することは、患者が5-HT_{2A}アゴニストの幻覚誘発性効果を経験することなく患者を有効に処置し得ることも驚くべきことに発見された。任意の特定の理論によって縛られることを意図していないが、患者は、5-HT_{2A}アゴニストの投与に典型的に起因する幻覚誘発性兆候を経験することなく治療効果を経験し得るが、その理由は、5-HT_{1A}アゴニストは、5-HT_{2A}受容体でのそのアゴニズムを有意に改変することなく5-HT_{2A}アゴニストの幻覚誘発性効果を「消す」ことができるからであると考えられる。いくつかの実施形態では、5-HT_{1A}アゴニストは、部分的アゴニストである。いくつかの実施形態では、5-HT_{1A}アゴニストは、完全アゴニストである。いくつかの実施形態では、5-HT_{2A}アゴニストは、部分的アゴニストである。いくつかの実施形態では、5-HT_{2A}アゴニストは、完全アゴニストである。いくつかの実施形態では、5-HT_{1A}及び／または5-HT_{2A}アゴニストは、本明細書における式Iの化合物から選択され得る。いくつかの実施形態では、5-HT_{1A}及び5-HT_{2A}アゴニストは、同じ化合物（例えば、式Iの化合物）である。

【0087】

本明細書で定義される場合、「完全アゴニスト」は、その特定の受容体アッセイのために産業で受け入れられている対照化合物（例えば、セロトニン（5-OH-トリプタミン））と比較した場合、関連するセロトニン受容体アゴニストアッセイ（例えば、BRET

10

20

30

40

50

2、カルシウム動員、ベーターアレスチン) について少なくとも90%のE_{max}%を有するアゴニストを意味するものとする。いくつかの実施形態では、「完全アゴニスト」は、少なくとも90、少なくとも91、少なくとも92、少なくとも93、少なくとも94、少なくとも95、少なくとも96、少なくとも97、少なくとも98、または少なくとも99%のE_{max}%を示すであろう。また、本明細書で定義される場合、「部分的アゴニスト」は、その特定の受容体アッセイのために産業で受け入れられている対照化合物(例えば、セロトニン(5-OH-トリプタミン))と比較した場合、関連するセロトニン受容体について90%未満のE_{max}%を有するアゴニストを意味するものとする。いくつかの実施形態では、「部分的アゴニスト」は、85、80、75、70、65、60、55、50、45、40、35、30、25、20、15、10%未満、またはさらに5%未満のE_{max}%を示すであろう。いくつかの実施形態では、部分的アゴニストは、約0.1~約89.9%、例えば、約1~約89、約5~約85、約50~約88、約40~約85、約35~約75、約25~約65、または約20~約55%のE_{max}%を示すであろう。

10

20

30

40

50

【0088】

いくつかの実施形態では、5-HT_{1A}アゴニストは、本明細書で使用される場合、ブスピロン(8-[4-(4-ピリミジン-2-イルピペラジン-1-イル)ブチル]-8-アザスピロ[4.5]デカン-7,9-ジオン)、5-OH-ブスピロン、6-OH-ブスピロン、タンドスピロン((1R,2R,6S,7S)-4-{4-[4-(ピリミジン-2-イル)ピペラジン-1-イル]ブチル}-4-アザトリシクロ[5.2.1.0^{2,6}]デカン-3,5-ジオン)、ゲピロン(4,4-ジメチル-1-[4-(4-ピリミジン-2-イルピペラジン-1-イル)ブチル]ピペリジン-2,6-ジオン)、アルネスピロン((+)-4-ジヒドロ-2H-クロメン-3-イル]-プロピルアミノ]ブチル]-8-アザスピロ[4.5]デカン-7,9-ジオン)、ピノスピロン(8-[2-(2,3-ジヒドロ-1,4-ベンゾジオキシン-2-イルメチルアミノ)エチル]-8-アザスピロ[4.5]-デカン-7,9-ジオン)、イプサピロン(9,9-ジオキソ-8-[4-(4-ピリミジン-2-イルピペラジン-1-イル)ブチル]-9-ラムダ.6-チア-8-アザビシクロ[4.3.0]ノナ-1,3,5-トリエン-7-オン)、ペロスピロン(3aR,7aS)-2-{4-[4-(1,2-ベンズイソチアゾール-3-イル)ピペラジン-1-イル]ブチル}ヘキサヒドロ-1H-イソインドール-1,3(2H)-ジオン、ベフィラドール(F-13,640)(3-クロロ-4-フルオロフェニル-[4-フルオロ-4-([5-メチルピリジン-2-イル)メチルアミノ]メチル)ピペリジン-1-イル]メタノン、レピノタン((R)-(-)-2-[4-[4-(クロマン-2-イルメチル)-アミノ]-ブチル]-1,1-ジオキソ-ベンゾ[d]イソチアゾロン)、ピクロゾタン(3-クロロ-4-[4-[4-(2-ピリジニル)-1,2,3,6-テトラヒドロピリジン-1-イル]ブチル]-1,4-ベンゾキサゼピン-5(4H)-オン)、オセモゾタン(5-(3-[(2S)-1,4-ベンゾジオキサン-2-イルメチル]アミノ]プロポキシ)-1,3-ベンゾジオキソール)、フレッシュノキサン(4-フルオロ-N-[2-[4-[4-(3S)-3-(ヒドロキシメチル)-2,3-ジヒドロ-1,4-ベンゾジオキシン-8-イル]ピペラジン-1-イル]エチル]ベンズアミド)、フリバンセリン(1-(2-{4-[3-(トリフルオロメチル)フェニル]ピペラジン-1-イル}エチル)-1,3-ジヒドロ-2H-ベンズイミダゾール-2-オン)、8-OH-DPAT(7-(ジプロピルアミノ)-5,6,7,8-テトラヒドロナフタレン-1-オール)、及びサリゾタン(EMD-128,130)(1-[(2R)-3,4-ジヒドロ-2H-クロメン-2-イル]-N-([5-(4-フルオロフェニル)ピリジン-3-イル]メチル)メタンアミン)、式Iの化合物、またはそのプロドラッグ、塩、もしくは誘導体から選択される。

【0089】

いくつかの実施形態では、セロトニン5-HT_{1A}アゴニスト及び5-HT_{2A}アゴニストは、同時に投与される。いくつかの実施形態では、セロトニン5-HT_{1A}アゴニス

ト及び5-HT_{2A}アゴニストは、異なる時間で投与される。いくつかの実施形態では、セロトニン5-HT_{1A}アゴニスト及び5-HT_{2A}アゴニストは、順次に投与される。いくつかの実施形態では、セロトニン5-HT_{1A}アゴニストが1番目に投与され、5-HT_{2A}アゴニストが2番目に投与される。いくつかの実施形態では、セロトニン5-HT_{2A}アゴニストは、5-HT_{1A}アゴニストの投与から約30分～約12時間後、例えば、約1時間～約6時間後に投与される。いくつかの実施形態では、セロトニン5-HT_{1A}アゴニスト及び5-HT_{2A}アゴニストは、同じ組成物において同時に投与される。いくつかの実施形態では、5-HT_{1A}アゴニストは、ブスピロン、5-OH-ブスピロン、6-OH-ブスピロン、及び8-OH-DPATから選択される。いくつかの実施形態では、5-HT_{1A}アゴニストは、ブスピロンである。いくつかの実施形態では、5-HT_{1A}アゴニストは、式Iの化合物、例えば、式IIの化合物等から選択される。いくつかの実施形態では、5-HT_{2A}アゴニストは、幻覚誘発性である。いくつかの実施形態では、5-HT_{2A}アゴニストは、非幻覚誘発性である。いくつかの実施形態では、5-HT_{2A}アゴニストは、式Iの化合物、例えば、式IIの化合物等から選択される。
【0090】

10

いくつかの実施形態では、5-HT_{2A}アゴニスト及び5-HT_{1A}アゴニストは、同じ化合物を含み得る。いくつかの実施形態では、本明細書に記載の式Iの化合物（例えば、式IIの化合物）は、5-HT_{1A}及び5-HT_{2A}受容体アゴニストの両方として作用し得る。いくつかの実施形態では、本明細書に記載の化合物は、5-HT_{1A}及び5-HT_{2A}の両方に対する完全アゴニストである。
【0091】

20

いくつかの実施形態では、5-HT_{1A}アゴニスト及び5-HT_{2A}アゴニストは、5-HT_{1A}受容体及び5-HT_{2A}受容体それぞれに対する完全アゴニストである。いくつかの実施形態では、5-HT_{1A}アゴニストは、5-HT_{2A}アゴニストが5-HT_{2A}受容体を活性化する場合に示すものよりも高いレベルの、5-HT_{1A}受容体を活性化するためのモル濃度効力（すなわち、より低いEC₅₀）を示す。任意の特定の科学的理論に縛られることなく、所定の実施形態では、5-HT_{1A}及び5-HT_{2A}についてのアゴニスト（但し、5-HT_{1A}についてより高いモル濃度効力を示す）である化合物は、非幻覚誘発性5-HT_{2A}調節を必要とする／所望とする患者にとって有用であり得るが驚くべきことに発見された。他の実施形態では、5-HT_{1A}アゴニストは、部分的アゴニスト（例えば、ブスピロン）であり、5-HT_{2A}アゴニストは、5-HT_{1A}受容体及び5-HT_{2A}受容体についてそれぞれ完全アゴニストである。他の実施形態では、5-HT_{1A}アゴニストは、部分的アゴニスト（例えば、ブスピロン）であり、5-HT_{2A}アゴニストは、5-HT_{1A}受容体及び5-HT_{2A}受容体についてそれぞれ部分的アゴニストである。
【0092】

30

所定の実施形態では、5-HT_{1A}受容体の調節を含む非幻覚誘発性治療的処置レジメンを介して疾患または障害を処置、予防、改善、または治療するための方法が記載される。所定の実施形態では、方法は、5-HT_{1A}受容体の調節に関連する疾患または病態のための処置を必要とする対象を同定すること；式Iの化合物（例えば、式IIを含む）を選択すること；及び処置を必要とする対象に化合物を投与することを含み、化合物は、5-HT_{1A}及び5-HT_{2A}受容体の両方で活性を調節する。所定の実施形態では、式Iの化合物は、5-HT_{1A}受容体の完全アゴニストである。所定の実施形態では、式Iの化合物は、5-HT_{1A}及び5-HT_{2A}受容体の両方に対する完全アゴニストである。所定の実施形態では、式Iの化合物は、5-HT_{1A}受容体に対する部分的アゴニスト及び5-HT_{2A}受容体に対する完全アゴニストである。所定の実施形態では、式Iの化合物は、5-HT_{1A}受容体に対する部分的アゴニスト及び5-HT_{2A}受容体に対する部分的アゴニストである。所定の実施形態では、式Iの化合物は、5-HT_{2A}受容体と比較した場合、5-HT_{1A}受容体に対してより高いモル濃度効力（より低いEC₅₀）を示す。

40

50

【0093】

所定の実施形態では、5-HT_{1A}アゴニストは、約100nM未満、例えば、約75nm未満、約50nm未満、約25nm未満、約15nm未満、約10nm未満、または約5nm未満の5-HT_{1A}受容体を活性化するためのEC₅₀を有する。所定の実施形態では、5-HT_{2A}アゴニストは、約100nM未満、例えば、約75nm未満、約50nm未満、約25nm未満、約15nm未満、約10nm未満、または約5nm未満の5-HT_{2A}受容体を活性化するためのEC₅₀を有する。所定の実施形態では、5-HT_{1A}アゴニストは、約0.01nM～約100nM、例えば、約0.05～約50nm、約0.1～約25nM、または約0.5～約10nMの5-HT_{1A}受容体を活性化するためのEC₅₀を示す。所定の実施形態では、5-HT_{2A}アゴニストは、約0.01nM～約100nM、例えば、約0.05～約50nm、約0.1～約25nM、または約0.5～約10nMの5-HT_{2A}受容体を活性化するためのEC₅₀を示す。所定の実施形態では、5-HT_{2A}アゴニストは、約5nm～約75nm、例えば、約10～約60nm、約15～約50nM、または約20～約40nMの5-HT_{2A}受容体を活性化するためのEC₅₀を示す。いくつかの実施形態では、5-HT_{1A}アゴニスト／5-HT_{2A}アゴニストは、約1：2～約1：100、例えば、約1：5～約1：50または約1：10～約1：40の範囲の5-HT_{1A}受容体：5-HT_{2A}受容体EC₅₀比を示す。いくつかの実施形態では、式Iの化合物の1つ以上は、独立して、約1：2～約1：100、例えば、約1：5～約1：50または約1：10～約1：40の範囲の5-HT_{1A}受容体：5-HT_{2A}受容体EC₅₀比を示す。完全対部分的アゴニズム（Emax%）及びモル濃度効力（EC₅₀）を決定するための関連試験パラメータには、当業者に知られているもの、例えば、以下にさらに記載される5-HT機能性アッセイが含まれる。

10

20

【0094】

いくつかの実施形態では、新規化合物及び組成物、ならびにそれを投与方法も記載される。所定の実施形態では、方法は、セロトニン5-HT_{2A}アゴニスト及びセロトニン5-HT_{2B}アンタゴニストを投与することを含む。任意の特定の理論に縛られることなく、所定の実施形態では、セロトニン5-HT_{2A}アゴニスト及びセロトニン5-HT_{2B}アンタゴニストを投与することは、本明細書に記載の病態の1つ以上を予防または処置する際に有効であり得ることが驚くべきことに発見された。いくつかの実施形態では、セロトニン5-HT_{2A}アゴニスト及びセロトニン5-HT_{2B}アンタゴニストを投与することは、セロトニン5-HT_{2B}誘導心臓毒性（例えば、心臓弁線維症及び肥大）も低減しながら患者を有効に処置し得ることが驚くべきことに発見された。所定の実施形態では、セロトニン5-HT_{2B}アンタゴニスト及び5-HT_{2A}アゴニストを投与することは、患者が幻覚誘発性5-HT_{2A}アゴニストに関連し得る幻覚誘発性を経験することなく、本明細書に記載される患者を処置するために安全かつ有効に使用され得ることも驚くべきことに発見された。いくつかの実施形態では、5-HT_{2A}アゴニストは、完全アゴニストである。いくつかの実施形態では、5-HT_{2A}アゴニストは、部分的アゴニストである。いくつかの実施形態では、5-HT_{2B}アンタゴニストは、完全アンタゴニストである。いくつかの実施形態では、5-HT_{2B}アンタゴニストは、部分的アンタゴニストである。

30

40

【0095】

例示的なセロトニン5-HT_{2B}受容体アンタゴニストには、アゴメラチン、アミスルブリド、アリプラゾール、カルブラジン、クロザピン、シプロヘプタジン、mCCP、サルポグレラート、リスリド、テガスロド、メタドキシン、及びプロメタジンが含まれるがこれらに限定されない。所定の実施形態では、5-HT_{2B}アンタゴニストは、5-HT_{1A}及び5-HT_{2A}等の他のセロトニン5-HTタイプ受容体サブタイプのいずれかでアンタゴニストではない。所定の実施形態では、5-HT_{2B}受容体アンタゴニストはまた、5-HT_{1A}及び／または5-HT_{2A}受容体で完全または部分アゴニストとなる。

【0096】

50

いくつかの実施形態では、セロトニン 5-HT_{2A} アゴニスト及び 5-HT_{2B} アンタゴニストは、同時に投与される。いくつかの実施形態では、セロトニン 5-HT_{2A} アゴニスト及び 5-HT_{2B} アンタゴニストは、異なる時間で投与される。いくつかの実施形態では、セロトニン 5-HT_{2A} アゴニスト及び 5-HT_{2B} アンタゴニストは、同じ組成物において同時に投与される。いくつかの実施形態では、セロトニン 5-HT_{1A} アゴニスト及び 5-HT_{2B} アンタゴニストは、順次に投与される。いくつかの実施形態では、セロトニン 5-HT_{2B} アンタゴニストが 1 番目に投与され、5-HT_{2A} アゴニストが 2 番目に投与される。いくつかの実施形態では、セロトニン 5-HT_{2A} アゴニストは、5-HT_{2B} アンタゴニストの投与から約 30 分～約 12 時間後、例えば、約 1 時間～約 6 時間後に投与される。いくつかの実施形態では、5-HT_{2A} アゴニストは、幻覚誘発性である。いくつかの実施形態では、5-HT_{2A} アゴニストは、非幻覚誘発性である。いくつかの実施形態では、5-HT_{2A} アゴニストは、式 I の化合物、例えば、式 II の化合物等から選択される。

10

【0097】

式 I の化合物についての所定の実施形態では、出願人は、X 及び／または Y についてのアルキル基のサイズ及び特質が、そのような化合物の代謝に劇的に影響を及ぼし得ることを発見した。例えば、5-MeO-ジメチルトリプタミン (5-MeO-DMT) 及びジメチルトリプタミン (DMT) 等の化合物は、モノアミンオキシダーゼ (MAO) 酵素によるメチルアミノ残基の急速な代謝により、経口投与で不活性であることが理論づけられている。他方で、サイロシン (4-OH-ジメチルトリプタミン) の経口安定性は、4-OH 基とジメチルアミノ残基との間の分子内配位 (水素結合) に大きく起因し、これは、急速な MAO 分解を有効に遮断／阻害することも理論づけられている。

20

【0098】

任意の特定の科学的理論に縛られることなく、出願人は、アルキル基 X 及び／または Y を置換基、例えば、重水素及びフッ素で置換することが、4 位 (例えば、式 I における R₄) で水素結合供与体 (例えば、-OH) の非存在下であってもそれらの基の MAO 分解の阻害を補助し得ることを驚くべきことに見出した。また、または代替手段において、出願人は、X 及び／または Y のために非メチルアルキル基、例えば、エチルまたは n-プロピルを使用すること (または式 II において W₃ が -(CH₂)_n-であり、a、b 及び c がそれぞれ水素であり、n が 1 または 2 である場合) がまた、経口投与で急速な MAO 代謝を減速させ、または阻害し得ることを発見した。これにより、ひいては、特別な製剤化手順 (例えば、MAO 阻害剤を含有する投薬) も、いくつかの場合では基礎化合物の特性に負の影響 (例えば、5-HT_{1A} 及び／または 5-HT_{2A} アゴニズムの低減) を与え得る 4 位での水素結合形成供与体の存在も必要としない非常に活性なセロトニン作動薬である経口で利用可能な式 I の化合物の調製が可能となる。

30

【0099】

いくつかの実施形態では、出願人はまた、式 I の化合物のアルファ-重水素化 (R₃ 及び／または R₃ が重水素である) が、それらの化合物の薬物動態を劇的に改善し得ることを驚くべきことに発見した。任意の特定の科学的理論に縛られることなく、より重い重水素同位体は、それらの化合物の酵素代謝を妨害すると考えられる。しかしながら、いくつかの実施形態では、例えば、望ましくない様式で化合物の薬物動態プロファイル (例えば、大幅に延長した半減期) をさらに改変し得る、X 及び Y についての残基についての重水素化種またはベータ位置 (すなわち、W₂) での重水素化をさらに含め、化合物を「過度に重水素化」することは望ましくない場合がある。したがって、いくつかの実施形態では、出願人は、最小の重水素化が、所望の薬物動態アウトカムを達成するために使用され得ることを発見した。例えば、いくつかの実施形態では、アルファ位置 (すなわち、R₃ または R₃) での単一の重水素原子は、所望の薬物動態プロファイルを大幅に向上させ得る。これは、部分的に、化合物を代謝する酵素の能力 (例えば、MAO 分解の妨害及び／または代謝プロセス中に酵素がアルファ位置を酸化する能力) に影響を与える重水素化によるアルファ位置での立体中心の生成に起因し得ると理論づけられる。

40

50

【0100】

一実施形態では、本明細書に記載の式Ⅰの化合物、方法、及び薬学的組成物は、治療的有効量の式Ⅰの化合物を投与することによって神経伝達物質受容体の活性を調節するために使用される。方法には、本明細書で論述されるもの等の精神障害を予防または処置するための治療的有効量の式Ⅰの化合物の投与が含まれる。式Ⅰの化合物は、そのまままたは以下に論述されるように式Ⅰの化合物を含む薬学的組成物として投与され得る。

【0101】

いくつかの実施形態では、式Ⅰの化合物は、精神障害を予防及び／または処置するために使用され得る。本開示は、上で論述される例示的な実施形態を含む、治療的有効量の式Ⅰの化合物を必要とする対象に投与することによって精神障害を予防及び／または処置するための方法を提供する。精神障害は、鬱病；精神病性障害；統合失調症；統合失調様障害（急性統合失調症エピソード）；統合失調感情障害；双極Ⅰ型障害（躁病、躁病障害、躁鬱病）；双極性Ⅱ型障害；大鬱病性障害；精神病性特徴を伴う大鬱病性障害（精神病性鬱病）；妄想障害（パラノイア）；共有精神病性障害（共有パラノイア障害）；短期精神病性障害（他の及び特定不能反応精神病）；他に特定されない精神病性障害（特定不能精神病）；パラノイドパーソナリティ障害；統合失調質パーソナリティ障害；統合失調症型パーソナリティ障害；不安障害；社交不安障害；物質誘導不安障害；場面緘黙症；パニック障害；パニック発作；広場恐怖症；注意欠陥症候群、心的外傷後ストレス障害（PTSD）、月経前不快気分障害（PMD）、及び月経前症候群（PMS）から選択され得る。

【0102】

いくつかの実施形態では、式Ⅰの化合物は、脳障害を予防及び／または処置するために使用され得る。本開示は、上で論述される例示的な実施形態を含む、治療的有効量の式Ⅰの化合物を必要とする対象に投与することによって脳障害を予防及び／または処置するための方法を提供する。脳障害は、ハンチントン病、アルツハイマー病、認知症、及びパーキンソン病から選択され得る。

【0103】

いくつかの実施形態では、式Ⅰの化合物は、発達障害、せん妄、認知症、健忘障害及び他の認知障害、体細胞病態による精神障害、薬物関連障害、統合失調症及び他の精神病性障害、気分障害、不安障害、身体型障害、虚偽性障害、解離性障害、摂食障害、睡眠障害、衝動制御障害、調整障害、またはパーソナリティ障害を予防及び／または処置するために使用され得る。本開示は、上で論述される例示的な実施形態を含む、治療的有効量の式Ⅰの化合物を必要とする対象に投与することによってこれらの障害を予防及び／または処置するための方法を提供する。

【0104】

いくつかの実施形態では、式Ⅰの化合物は、炎症及び／または疼痛、例えば、炎症性骨格または筋肉疾患または病態に関連する炎症及び／または疼痛等を予防及び／または処置するために使用され得る。したがって、本開示は、上で論述される例示的な実施形態を含む、治療的有効量の式Ⅰの化合物を必要とする対象に投与することによって炎症及び／または疼痛を予防及び／または処置するための方法に関する。一般的に言えば、処置可能な「疼痛」には、侵害性、神経性、及び混合型が含まれる。本開示の方法は、いくつかの場合では急性または慢性の腫れ、疼痛、赤み、温度上昇、または機能の喪失によって特性化される炎症の局在化兆候を処置することを含むがこれらに限定されない、炎症に関連する症状を低減または軽減し得る。本開示の方法は、様々な重症度、すなわち、軽度、中等度及び重度の疼痛、急性疼痛及び慢性疼痛の疼痛を低減することを含むがこれらに限定されない、疼痛の原因にかかわらず疼痛の症状を低減または軽減し得る。本開示の方法は、炎症、例えば、関節リウマチによって引き起こされる関節痛、筋肉痛、腱痛、火傷痛、及び疼痛を処置する際に有効である。処置され得る骨格または筋肉疾患または病態には、筋骨格捻挫、筋骨格歪み、腱障害、末梢神経根障害、変形性関節症、関節変形疾患、リウマチ性多発筋痛、若年性関節炎、痛風、強直性脊椎炎、乾癬性関節炎、全身性エリテマトー

デス、肋軟骨炎、腱炎、滑液包炎、例えば、一般的外側上顆炎（テニス肘）、内側上顆炎（野球肘）及び転子滑液包炎、側頭下顎骨関節症候群、ならびに線維筋痛が含まれるがこれらに限定されない。

【0105】

他の実施形態では、本明細書に開示される方法及び組成物は、式Ⅰの化合物を含む製剤で神経伝達物質受容体の活性を制御することを含む。一実施形態では、本明細書に開示される方法及び組成物は、少なくとも1つの式Ⅰの化合物及び第2の活性化合物を含む第1の投薬製剤を投与することを含む。一実施形態では、本明細書に開示される方法は、式Ⅰの化合物及び神経伝達物質活性調節剤（例えば、第2のセロトニン作動薬）を含む第1の投薬製剤を投与することを含む。一実施形態では、本明細書に開示される方法は、少なく

10

【0106】

本開示は、有効量の式Ⅰの化合物及び賦形剤を含む、それから本質的になる、またはそれからなる組成物に関する。用語「組成物」及び「製剤」は、本明細書で互換的に使用される。他の実施形態は、治療的有效量の式Ⅰの化合物（上で論述されるものを含む）、及び薬学的に許容可能な賦形剤（薬学的に許容可能な担体としても知られている）を含む、それから本質的になる、またはそれからなる薬学的組成物に関する。上で論述されるように、式Ⅰの化合物は、例えば、精神障害、脳障害、疼痛及び炎症ならびに他の障害、例えば、上で論述されるものを予防及び／または処置するために治療的に有用であり得る。

20

【0107】

いくつかの実施形態では、本明細書に記載の組成物は、少なくとも1つの式Ⅰの化合物、及び第2のセロトニン作動薬、カンナビノイド、テルペン、またはMAO阻害剤のうちの少なくとも1つから選択される第2の化合物を含み得る。所定の実施形態では、第2の化合物は、天然源、例えば、真菌（例えば、シビレタケ；ヤマブシタケ（テルペン、例えば、エリナシン及びヘリセノンを含む））及び植物（例えば、アサ）に由来し得る。したがって、所定の実施形態では、第2の化合物は、真菌または植物物質に由来し、またはそれから抽出され得、これは、前記第2の化合物が、源となった抽出された手法に応じて「精製される」場合があり、またはされない場合があることを意味する。

30

【0108】

本開示の文脈内で、用語「精製された」は、他の化合物または物質、例えば、植物または真菌物質、例えば、タンパク質、キチン、セルロース、または水から分離されたことを意味する。一実施形態では、用語「精製された」は、他の物質を実質的に含まない化合物を指す。一実施形態では、用語「精製された」は、第2の化合物を実質的に含まない化合物（例えば、分割後に99%のエナンチオマー余剰を示す式Ⅰのエナンチオマー化合物）を指す。一実施形態では、用語「精製された」は、生物学的物質、例えば、カビ、真菌、植物物質、または細菌を実質的に含まない化合物を指す。

【0109】

一実施形態では、用語「精製された」は、結晶化された化合物または組成物を指す。一実施形態では、用語「精製された」は、例えば、ガスクロマトグラフィー、液体クロマトグラフィー（例えば、LC、HPLC等）等によってクロマトグラフィーされた化合物または組成物を指す。一実施形態では、用語「精製された」は、蒸留された化合物または組成物を指す。一実施形態では、用語「精製された」は、昇華された化合物または組成物を指す。一実施形態では、用語「精製された」は、結晶化、クロマトグラフィー、蒸留、または昇華から選択される2つ以上の工程に供された化合物または組成物を指す。

40

【0110】

一実施形態では、用語「精製された」は、約80%～約100%の範囲の純度を有する化合物を指し、化合物が組成物の総質量の約80%～約100%を構成することを意味する。一実施形態では、用語「精製された」は、約90%～約100%の範囲の純度を有す

50

る化合物を指し、化合物が組成物の総質量の約90%～約100%を構成することを意味する。一実施形態では、用語「精製された」は、約95%～約100%の範囲の純度を有する化合物を指し、化合物が組成物の総質量の約95%～約100%を構成することを意味する。一実施形態では、用語「精製された」は、約99%～約100%純粋の範囲の純度を有する化合物を指し、化合物が組成物の総質量の約99%～約100%を構成することを意味する。一実施形態では、用語「精製された」は、約99.9%～約100%の範囲の純度を有する化合物を指し、化合物が組成物の総質量の約99.9%～約100%を構成することを意味する。

【0111】

本明細書で使用される場合、用語「特定の比」は、別の化合物（複数可）の量に対するある化合物の量を指す。一実施形態では、4-ヒドロキシ-N, N-ジメチルトリプタミンに対する4-アセトキシ-3-[2-(ジメチルアミノ)エチル]-ベンゾ[b]チオフェンの約1:1の比が存在する。一実施形態では、化合物の特定の比は、同じ単位、例えば、グラム、キログラム、ポンド、オンス等によって測定される。一実施形態では、化合物の特定の比は、モル、すなわち、モル濃度割合またはモル比で測定される。

【0112】

本明細書で使用される場合、用語「特定の量」は、化合物または化合物の量を指す。一実施形態では、特定の量は、サンプル内の2つの化合物の組み合わせた量である。一実施形態では、特定の量は、乾燥重量によって測定される。一実施形態では、特定の量は、1、2、3、または4桁の有効数字を有する。

【0113】

本明細書には、式Iの化合物及び第2の化合物を含む組成物が開示される。一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、約10:1～約1:10の範囲の式Iの化合物（例えば、5-HT_{2A}受容体アゴニストを含む）の第2の化合物（例えば、5-HT_{1A}受容体アゴニストを含む）に対するモル比を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、約100:1～約1:100の範囲の式Iの化合物の第2の化合物に対するモル比を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、約1,000:1～約1:1,000の範囲の式Iの化合物の第2の化合物に対するモル比を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、約10,000:1～約1:10,000の範囲の式Iの化合物の第2の化合物に対するモル比を含む。

【0114】

本開示の文脈内で、別途特定されない限り、本明細書に記載のセロトニン作動性化合物（例えば、トリプタミン化合物）は、状況、例えば、溶液または組成物のpHに応じて、それらのプロトン化または脱プロトン化（塩または遊離塩基）形態またはそれらの混合物で存在し得る。しかしながら、所定の実施形態では、本明細書に記載のセロトニン作動性化合物は、脂溶性となり、これは、それらが脂質及び脂肪と組み合わせる傾向があり、動物またはヒトの身体における生物学的膜（例えば、血液脳関門）を容易に通過し得ることを意味する。所定の実施形態では、遊離塩基形態のセロトニン作動性化合物は、脂溶性となる。

【0115】

本明細書で使用される場合、用語「塩」は、中和されたイオン性化合物を指す。一実施形態では、塩は、酸及び塩基の中和から形成される。一実施形態では、塩は、電氣的に中性である。

【0116】

一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、第1のカンナビノイドを投与することを含む。一実施形態では、第1のカンナビノイドは、第1の精製されたカンナビノイドである。

【0117】

本明細書で使用される場合、用語「カンナビノイド」は、アサ属の植物に一般的に見られる分子のクラスからの化合物及びそれらの誘導体を指す。一実施形態では、カンナビノ

10

20

30

40

50

イドは、動物に対して内因性、すなわち、内因性カンナビノイドである。一実施形態では、カンナビノイドは、植物、例えば、アサ属の植物、例えば、フィトカンナビノイドに由来する。一実施形態では、カンナビノイドは、実験室で人工的に作製される、すなわち、合成カンナビノイドである。多くのカンナビノイドは、それらの化学名における「カンナビ」という文字によって特定され得る。アサから単離された少なくとも113種の異なるカンナビノイドが存在し、様々な（同様及び異なる）効果を示す。

【0118】

本開示の文脈内のカンナビノイドの例には、以下の分子：カンナビクロメン（CBC）、カンナビクロメン酸（CBCA）、カンナビクロメバリン（CBCV）、カンナビクロメバリン酸（CBCVA）、カンナビシクロール（CBL）、カンナビシクロ酸（CBLA）、カンナビシクロバリン（CBLV）、カンナビジオール（CBD）、カンナビジオールモノメチルエーテル（CBDM）、カンナビジオール酸（CBDA）、カンナビジオールコール（CBD-C1）、カンナビジバリン（CBDV）、カンナビジバリン酸（CBDVA）、カンナビエルソイン酸B（CBEA-B）、カンナビエルソイン（CBE）、カンナビエルソイン酸A（CBEA-A）、カンナビゲロール（CBG）、カンナビゲロールモノメチルエーテル（CBGM）、カンナビゲロール酸（CBGA）、カンナビゲロール酸モノメチルエーテル（CBGAM）、カンナビゲロバリン（CBGV）、カンナビゲロバリン酸（CBGVA）、カンナビノジオール（CBND）、カンナビノジバリン（CBDV）、カンナビノール（CBN）、カンナビノールメチルエーテル（CBNM）、カンナビノール-C2（CBN-C2）、カンナビノール-C4（CBN-C4）、カンナビノール酸（CBNA）、カンナビオルクール（CBN-C1）、カンナビバリン（CBV）、カンナビトリオール（CBT）、カンナビトリオールバリン（CBTV）、10-エトキシ-9-ヒドロキシ-デルタ-6a-テトラヒドロカンナビノール、カンナビシトラン（CBT）、カンナビリプソール（CBR）、8,9-ジヒドロキシ-デルタ-6a-テトラヒドロカンナビノール、デルタ-8-テトラヒドロカンナビノール（.デルタ.8-THC）、デルタ-8-テトラヒドロカンナビノール酸（.デルタ.8-THCA）、デルタ-9-テトラヒドロカンナビノール（THC）、デルタ-9-テトラヒドロカンナビノール-C4（THC-C4）、デルタ-9-テトラヒドロカンナビノール酸A（THCA-A）、デルタ-9-テトラヒドロカンナビノール酸B（THCA-B）、デルタ-9-テトラヒドロカンナビノール酸-C4（THCA-C4）、デルタ-9-テトラヒドロカンナビオール（THC-C1）、デルタ-9-テトラヒドロカンナビオール酸（THCA-C1）、デルタ-9-テトラヒドロカンナビバリン（THCV）、デルタ-9-テトラヒドロカンナビバリン酸（THCVA）、10-オキソ-デルタ-6a-テトラヒドロカンナビノール（OTHCH）、カンナビクロマノン（CBCF）、カンナビフラン（CBF）、カンナビグレンドール、デルタ-9-cis-テトラヒドロカンナビノール（cis-THC）、トリヒドロキシ-デルタ-9-テトラヒドロカンナビノール（トリOH-THC）、デヒドロカンナビフラン（DCBF）、及び3,4,5,6-テトラヒドロ-7-ヒドロキシ-アルファ-アルファ-2-トリメチル-9-n-プロピル-2,6-メタ-ノ-2H-1-ベンゾキソシン-5-メタノールが含まれる。

【0119】

一実施形態では、用語「カンナビノイド」は、THC、THCA、THCV、THCVA、CBC、CBCA、CBCV、CBCVA、CBD、CBDA、CBDV、CBDVA、CBG、CBGA、CBGV、またはCBGVAから選択される化合物を指す。

【0120】

本開示の文脈内で、用語「THC」は、デルタ-9-テトラヒドロカンナビノールの任意の誘導体及び／またはその塩を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、THC及び式Iの化合物を含む。一実施形態では、THCは、精製されたTHCである。一実施形態では、本明細書に開示される方法は、THC及び式Iの化合物を含む組成物を投与することを含む。一実施形態では、THCは、精製されたTHCである。

【0121】

本開示の文脈内で、用語「THCA」は、テトラヒドロカンナビノール酸の任意の誘導体及び／またはその塩を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、THCA及び式Iの化合物を含む。一実施形態では、THCAは、精製されたTHCAである。一実施形態では、本明細書に開示される方法は、THCA及び式Iの化合物を含む組成物を投与することを含む。一実施形態では、THCAは、精製されたTHCAである。

【0122】

本開示の文脈内で、用語「THCV」は、デルター9-テトラヒドロカンナビバリンの任意の誘導体及び／またはその塩を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、THCV及び式Iの化合物を含む。一実施形態では、THCVは、精製されたTHCVである。一実施形態では、本明細書に開示される方法は、THCV及び式Iの化合物を含む組成物を投与することを含む。一実施形態では、THCVは、精製されたTHCVである。

10

【0123】

本開示の文脈内で、用語「THCVA」は、デルター9-テトラヒドロカンナビバリン酸の任意の誘導体及び／またはその塩を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、THCVA及び式Iの化合物を含む。一実施形態では、THCVAは、精製されたTHCVAである。一実施形態では、本明細書に開示される方法は、THCVA及び式Iの化合物を含む組成物を投与することを含む。一実施形態では、THCVAは、精製されたTHCVAである。

【0124】

本開示の文脈内で、用語「CBC」は、カンナビクロメンの任意の誘導体及び／またはその塩を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、CBC及び式Iの化合物を含む。一実施形態では、CBCは、精製されたCBCである。一実施形態では、本明細書に開示される方法は、CBC及び式Iの化合物を含む組成物を投与することを含む。一実施形態では、CBCは、精製されたCBCである。

20

【0125】

本開示の文脈内で、用語「CBCA」は、カンナビクロメン酸の任意の誘導体及び／またはその塩を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、CBCA及び式Iの化合物を含む。一実施形態では、CBCAは、精製されたCBCAである。一実施形態では、本明細書に開示される方法は、CBCA及び式Iの化合物を含む組成物を投与することを含む。一実施形態では、CBCAは、精製されたCBCAである。

30

【0126】

本開示の文脈内で、用語「CBCV」は、カンナビクロメバリンの任意の誘導体及び／またはその塩を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、CBCV及び式Iの化合物を含む。一実施形態では、CBCVは、精製されたCBCVである。一実施形態では、本明細書に開示される方法は、CBCV及び式Iの化合物を含む組成物を投与することを含む。一実施形態では、CBCVは、精製されたCBCVである。

【0127】

本開示の文脈内で、用語「CBCVA」は、カンナビクロメバリン酸の任意の誘導体及び／またはその塩を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、CBCVA及び式Iの化合物を含む。一実施形態では、CBCVAは、精製されたCBCVAである。一実施形態では、本明細書に開示される方法は、CBCVA及び式Iの化合物を含む組成物を投与することを含む。一実施形態では、CBCVAは、精製されたCBCVAである。

40

【0128】

本開示の文脈内で、用語「CBD」は、カンナビジオールの任意の誘導体及び／またはその塩を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、CBD及び式Iの化合物を含む。一実施形態では、CBDは、精製されたCBDである。一実施形態では、本明細書に開示される方法は、CBD及び式Iの化合物を含む組成物を投与することを含む。一実施形態では、CBDは、精製されたCBDである。

50

【0129】

本開示の文脈内で、用語「CBDA」は、カンナビジオール酸の任意の誘導体及び／またはその塩を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、CBDA及び式Iの化合物を含む。一実施形態では、CBDAは、精製されたCBDAである。一実施形態では、本明細書に開示される方法は、CBDA及び式Iの化合物を含む組成物を投与することを含む。一実施形態では、CBDAは、精製されたCBDAである。

【0130】

本開示の文脈内で、用語「CBDV」は、カンナビジバリンの任意の誘導体及び／またはその塩を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、CBDV及び式Iの化合物を含む。一実施形態では、CBDVは、精製されたCBDVである。一実施形態では、本明細書に開示される方法は、CBDV及び式Iの化合物を含む組成物を投与することを含む。一実施形態では、CBDVは、精製されたCBDVである。

10

【0131】

本開示の文脈内で、用語「CBDVA」は、カンナビジバリン酸の任意の誘導体及び／またはその塩を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、CBDVA及び式Iの化合物を含む。一実施形態では、CBDVAは、精製されたCBDVAである。一実施形態では、本明細書に開示される方法は、CBDVA及び式Iの化合物を含む組成物を投与することを含む。一実施形態では、CBDVAは、精製されたCBDVAである。

【0132】

本開示の文脈内で、用語「CBG」は、カンナビゲロールの任意の誘導体及び／またはその塩を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、CBG及び式Iの化合物を含む。一実施形態では、CBGは、精製されたCBGである。一実施形態では、本明細書に開示される方法は、CBG及び式Iの化合物を含む組成物を投与することを含む。一実施形態では、CBGは、精製されたCBGである。

20

【0133】

本開示の文脈内で、用語「CBGA」は、カンナビゲロール酸の任意の誘導体及び／またはその塩を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、CBGA及び式Iの化合物を含む。一実施形態では、CBGAは、精製されたCBGAである。一実施形態では、本明細書に開示される方法は、CBGA及び式Iの化合物を含む組成物を投与することを含む。一実施形態では、CBGAは、精製されたCBGAである。

30

【0134】

本開示の文脈内で、用語「CBGV」は、カンナビゲロバリンの任意の誘導体及び／またはその塩を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、CBGV及び式Iの化合物を含む。一実施形態では、CBGVは、精製されたCBGVである。一実施形態では、本明細書に開示される方法は、CBGV及び式Iの化合物を含む組成物を投与することを含む。一実施形態では、CBGVは、精製されたCBGVである。

【0135】

本開示の文脈内で、用語「CBGVA」は、カンナビゲロバリン酸の任意の誘導体及び／またはその塩を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、CBGVA及び式Iの化合物を含む。一実施形態では、CBGVAは、精製されたCBGVAである。一実施形態では、本明細書に開示される方法は、CBGVA及び式Iの化合物を含む組成物を投与することを含む。一実施形態では、CBGVAは、精製されたCBGVAである。

40

【0136】

一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、約100:1～約1:100の範囲の特定の比（例えば、モル比）の式Iの化合物及び精製されたカンナビノイドを含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、約75:1～約1:75の範囲の特定の比（例えば、モル比）の式Iの化合物及び精製されたカンナビノイドを含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、約50:1～約1:50の範囲の特定の比（例えば、モル比）の式Iの化合物及び精製されたカンナビノイドを含む。一実施形態では、本

50

明細書に開示される組成物は、約 25 : 1 ~ 約 1 : 25 の範囲の特定の比（例えば、モル比）の式 I の化合物及び精製されたカンナビノイドを含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、約 10 : 1 ~ 約 1 : 10 の範囲の特定の比（例えば、モル比）の式 I の化合物及び精製されたカンナビノイドを含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、約 5 : 1 ~ 約 1 : 5 の範囲の特定の比（例えば、モル比）の式 I の化合物及び精製されたカンナビノイドを含む。

【0137】

一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、式 I の化合物、第 1 の精製されたカンナビノイド、及び第 2 の精製されたカンナビノイドを含む。一実施形態では、第 2 の精製されたカンナビノイドは、THC、THCA、THCV、THCVA、CBC、CBCA、CBCV、CBCVA、CBD、CBDA、CBDV、CBDVA、CBG、CBGA、CBGV、または CBGVA から選択される。

10

【0138】

一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、約 100 : 1 ~ 約 1 : 100 の範囲の特定の比（例えば、モル比）の式 I の化合物ならびに第 1 の精製されたカンナビノイド及び第 2 の精製されたカンナビノイドの合計を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、約 75 : 1 ~ 約 1 : 75 の範囲の特定の比（例えば、モル比）の式 I の化合物ならびに第 1 の精製されたカンナビノイド及び第 2 の精製されたカンナビノイドの合計を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、約 50 : 1 ~ 約 1 : 50 の範囲の特定の比（例えば、モル比）の式 I の化合物ならびに第 1 の精製されたカンナビノイド及び第 2 の精製されたカンナビノイドの合計を含む。

20

【0139】

一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、約 25 : 1 ~ 約 1 : 25 の範囲の特定の比（例えば、モル比）の式 I の化合物ならびに第 1 の精製されたカンナビノイド及び第 2 の精製されたカンナビノイドの合計を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、約 10 : 1 ~ 約 1 : 10 の範囲の特定の比（例えば、モル比）の式 I の化合物ならびに第 1 の精製されたカンナビノイド及び第 2 の精製されたカンナビノイドの合計を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、約 5 : 1 ~ 約 1 : 5 の範囲の特定の比（例えば、モル比）の式 I の化合物ならびに第 1 の精製されたカンナビノイド及び第 2 の精製されたカンナビノイドの合計を含む。

30

【0140】

一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、式 I の化合物及びテルペンを投与することを含む。一実施形態では、テルペンは、精製されたテルペンである。

【0141】

本明細書で使用される場合、用語「テルペン」は、しばしば 5 炭素イソプレン単位から生合成される化合物の大きなクラスに属する化合物を指す。一実施形態では、テルペンは、植物、例えば、針葉樹、アサ、バジル等から単離される。一実施形態では、テルペンは、昆虫、例えば、シロアリまたはアゲハチョウによって生成される。一実施形態では、テルペンは、揮発性化合物である。一実施形態では、テルペンは、臭気を生成する。一実施形態では、テルペンは、天然樹脂の主要な成分、例えば、樹脂から生成されたテレピン油である。一実施形態では、テルペンは、分子式 C_5H_8 を有する、イソプレンの単位に生合成的に由来する。一実施形態では、テルペンの分子式は、 $(C_5H_8)_n$ （式中、 n は、連結されたイソプレン単位の数、例えば、1 ~ 5 である）の倍数である。

40

【0142】

本開示の文脈内で、テルペンが化学的に、例えば、炭素骨格の酸化または転位によって修飾される場合、得られる化合物は、「テルペノイド」と称される。関連する技術分野において、テルペノイドは、時にイソプレノイドと称される。

【0143】

一実施形態では、テルペンは、植物及び／または花からの精油の主な構成要素（複数可）である。精油は、香料、医薬、及び代替医薬、例えば、アロマセラピーにおいて芳香剤

50

として広く使用されている。

【0144】

一実施形態では、テルペンは、化合物におけるイソプレン (C_5H_8) 単位の数に従って分類される (例えば、モノテルペン ($C_{10}H_{16}$)、セスキテルペン ($C_{15}H_{24}$)、ジテルペン ($C_{20}H_{32}$)、トリテルペン ($C_{30}H_{48}$)、またはテトラテルペン ($C_{40}H_{64}$))。

【0145】

本開示の文脈内のテルペンの例には、アセトアニソール、アセチルセドレン、アネトール、アニソール、ベンズアルデヒド、酢酸ボルニル、ボルネオール、カジネン、カフェストール、コーヒー酸、カンフェン、カンファー、カプサイシン、カレン、カロテン、カルバクロール、カルボン、アルファーカリオフィレン、ベーターカリオフィレン、カリオフィレンオキシド、セドレン、セドレンエポキシド、セカナール、セドロール、センブレン、シンナムアルデヒド、桂皮酸、シトロネラル、シトロネロール、シメン、エイコサン、エレメン、エストラゴール、酢酸エチル、エチルシンナメート、エチルマルトール、ユーカリプトール／1, 8-シネオール、オイデスマール、オイゲノール、ユーフォル、ファルネセン、ファルネソール、フェンコン、ゲラニオール、ゲラニルアセテート、グアイアー1 (10), 11-ジエン、グアヤコール、グアイオール、グアイエン、グルジュネン、ヘルニアリン、ヘキサンアルデヒド、ヘキサン酸、フムレン、イオノン、イプスジエノール、イソアミルアセテート、イソアミルアルコール、イソアミルフォルメート、イソボルネオール、イソミルセノール、イソプレン、イソプレゴール、イソ吉草酸、ラバンジュロール、リモネン、ガンマーリノレン酸、リナロール、ロンギホレン、リコペン、メントール、酪酸メチル、3-メルカプト-2-メチルペンタナール、ベーターメルカプトエタノール、メルカプト酢酸、サリチル酸メチル、メチルブテノール、メチル-2-メチルバレレート、メチルチオブチレート、ベーターミルセン、ガンマムウロレン、ネペタラクトン、ネロール、ネロリドール、ネリルアセテート、ノナンアルデヒド、ノナン酸、オシメン、オクタナール、オクタン酸、酪酸ペンチル、フェランドレン、フェニルアセトアルデヒド、フェニル酢酸、フェニルエタンチオール、フィトール、ピネン、プロパンチオール、プリスチメリン、プレゴン、レチノール、ルチン、サビネン、スクアレン、タキシジエン、ターピネオール、テルピン-4-オール、テルピノレネン、ツジョン、チモール、ウンベリフェロン、ウンデカナール、ベルドキサン、及びバニリンが含まれる。

【0146】

一実施形態では、精製されるテルペンは、酢酸ボルニル、アルファービサボロール、ボルネオール、カンフェン、カンファー、カレン、ベーターカリオフィレン、セドレン、シメン、エレメン、ユーカリプトール、オイデスマール、ファルネセン、フェンコール、ゲラニオール、グアヤコール、フムレン、イソボルネオール、リモネン、リナロール、メントール、ベーターミルセン、ネロリドール、オシメン、フェランドレン、フィトール、ピネン、プレゴン、サビネン、ターピネオール、テルピノレネン、またはバレンセンから選択される。

【0147】

本開示の文脈内で、用語「酢酸ボルニル」は、その任意の異性体的、構造的、及び／またはエナンチオマー的バリエーションを含む、任意の誘導体及び／またはその塩を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、酢酸ボルニル及び式Iの化合物を含む。一実施形態では、酢酸ボルニルは、精製された酢酸ボルニルを含む。一実施形態では、本明細書に開示される方法は、酢酸ボルニル及び式Iの化合物を含む組成物を投与することを含む。一実施形態では、酢酸ボルニルは、精製された酢酸ボルニルを含む。

【0148】

本開示の文脈内で、用語「アルファービサボロール」は、その任意の異性体的、構造的、及び／またはエナンチオマー的バリエーションを含む、任意の誘導体及び／またはその塩を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、アルファービサボロール及び式Iの化合物を含む。一実施形態では、アルファービサボロールは、精製されたアルフ

ァービスボロールを含む。一実施形態では、本明細書に開示される方法は、アルファァービスボロール及び式Ⅰの化合物を含む組成物を投与することを含む。一実施形態では、アルファァービスボロールは、精製されたアルファァービスボロールを含む。

【0149】

本開示の文脈内で、用語「ボルネオール」は、その任意の異性体的、構造的、及び／またはエナンチオマー的バリエーションを含む、任意の誘導体及び／またはその塩を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、ボルネオール及び式Ⅰの化合物を含む。一実施形態では、ボルネオールは、精製されたボルネオールを含む。一実施形態では、本明細書に開示される方法は、ボルネオール及び式Ⅰの化合物を含む組成物を投与することを含む。一実施形態では、ボルネオールは、精製されたボルネオールである。

10

【0150】

本開示の文脈内で、用語「カンフェン」は、その任意の異性体的、構造的、及び／またはエナンチオマー的バリエーションを含む、任意の誘導体及び／またはその塩を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、カンフェン及び式Ⅰの化合物を含む。一実施形態では、カンフェンは、精製されたカンフェンを含む。一実施形態では、本明細書に開示される方法は、カンフェン及び式Ⅰの化合物を含む組成物を投与することを含む。一実施形態では、カンフェンは、精製されたカンフェンである。

【0151】

本開示の文脈内で、用語「カンファー」は、その任意の異性体的、構造的及び／またはエナンチオマー的バリエーションを含む、任意の誘導体及び／またはその塩を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、カンファー及び式Ⅰの化合物を含む。一実施形態では、カンファーは、精製されたカンファーを含む。一実施形態では、本明細書に開示される方法は、カンファー及び式Ⅰの化合物を含む組成物を投与することを含む。一実施形態では、カンファーは、精製されたカンファーである。

20

【0152】

本開示の文脈内で、用語「カレン」は、その任意の異性体的、構造的、及び／またはエナンチオマー的バリエーションを含む、任意の誘導体及び／またはその塩を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、カレン及び式Ⅰの化合物を含む。一実施形態では、カレンは、精製されたカレンを含む。一実施形態では、本明細書に開示される方法は、カレン及び式Ⅰの化合物を含む組成物を投与することを含む。一実施形態では、カレンは、精製されたカレンである。

30

【0153】

本開示の文脈内で、用語「ベーターカリオフィレン」は、その任意の異性体的、構造的、及び／またはエナンチオマー的バリエーションを含む、任意の誘導体及び／またはその塩を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、ベーターカリオフィレン及び式Ⅰの化合物を含む。一実施形態では、ベーターカリオフィレンは、精製されたベーターカリオフィレンを含む。一実施形態では、本明細書に開示される方法は、ベーターカリオフィレン及び式Ⅰの化合物を含む組成物を投与することを含む。一実施形態では、ベーターカリオフィレンは、精製されたベーターカリオフィレンを含む。

【0154】

本開示の文脈内で、用語「セドレン」は、その任意の異性体的、構造的、及び／またはエナンチオマー的バリエーションを含む、任意の誘導体及び／またはその塩を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、セドレン及び式Ⅰの化合物を含む。一実施形態では、セドレンは、精製されたセドレンを含む。一実施形態では、本明細書に開示される方法は、セドレン及び式Ⅰの化合物を含む組成物を投与することを含む。一実施形態では、セドレンは、精製されたセドレンである。

40

【0155】

本開示の文脈内で、用語「シメン」は、その任意の異性体的、構造的、及び／またはエナンチオマー的バリエーションを含む、任意の誘導体及び／またはその塩を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、シメン及び式Ⅰの化合物を含む。一実施形態

50

では、シメンは、精製されたシメンを含む。一実施形態では、本明細書に開示される方法は、シメン及び式Ⅰの化合物を含む組成物を投与することを含む。一実施形態では、シメンは、精製されたシメンである。

【0156】

本開示の文脈内で、用語「エレメン」は、その任意の異性体的、構造的、及び／またはエナンチオマー的バリエーションを含む、任意の誘導体及び／またはその塩を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、エレメン及び式Ⅰの化合物を含む。一実施形態では、エレメンは、精製されたエレメンを含む。一実施形態では、本明細書に開示される方法は、エレメン及び式Ⅰの化合物を含む組成物を投与することを含む。一実施形態では、エレメンは、精製されたエレメンである。

10

【0157】

本開示の文脈内で、用語「ユーカリプトール」は、その任意の異性体的、構造的、及び／またはエナンチオマー的バリエーションを含む、任意の誘導体及び／またはその塩を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、ユーカリプトール及び式Ⅰの化合物を含む。一実施形態では、ユーカリプトールは、精製されたユーカリプトールを含む。一実施形態では、本明細書に開示される方法は、ユーカリプトール及び式Ⅰの化合物を含む組成物を投与することを含む。一実施形態では、ユーカリプトールは、精製されたユーカリプトールである。

【0158】

本開示の文脈内で、用語「オイデスマール」は、その任意の異性体的、構造的、及び／またはエナンチオマー的バリエーションを含む、任意の誘導体及び／またはその塩を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、オイデスマール及び式Ⅰの化合物を含む。一実施形態では、オイデスマールは、精製されたオイデスマールを含む。一実施形態では、本明細書に開示される方法は、オイデスマール及び式Ⅰの化合物を含む組成物を投与することを含む。一実施形態では、オイデスマールは、精製されたオイデスマールである。

20

【0159】

本開示の文脈内で、用語「ファルネセン」は、その任意の異性体的、構造的、及び／またはエナンチオマー的バリエーションを含む、任意の誘導体及び／またはその塩を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、ファルネセン及び式Ⅰの化合物を含む。一実施形態では、ファルネセンは、精製されたファルネセンを含む。一実施形態では、本明細書に開示される方法は、ファルネセン及び式Ⅰの化合物を含む組成物を投与することを含む。一実施形態では、ファルネセンは、精製されたファルネセンである。

30

【0160】

本開示の文脈内で、用語「フェンコール」は、その任意の異性体的、構造的、及び／またはエナンチオマー的バリエーションを含む、任意の誘導体及び／またはその塩を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、フェンコール及び式Ⅰの化合物を含む。一実施形態では、フェンコールは、精製されたフェンコールを含む。一実施形態では、本明細書に開示される方法は、フェンコール及び式Ⅰの化合物を含む組成物を投与することを含む。一実施形態では、フェンコールは、精製されたフェンコールである。

40

【0161】

本開示の文脈内で、用語「ゲラニオール」は、その任意の異性体的、構造的、及び／またはエナンチオマー的バリエーションを含む、任意の誘導体及び／またはその塩を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、ゲラニオール及び式Ⅰの化合物を含む。一実施形態では、ゲラニオールは、精製されたゲラニオールを含む。一実施形態では、本明細書に開示される方法は、ゲラニオール及び式Ⅰの化合物を含む組成物を投与することを含む。一実施形態では、ゲラニオールは、精製されたゲラニオールである。

【0162】

本開示の文脈内で、用語「グアヤコール」は、その任意の異性体的、構造的、及び／またはエナンチオマー的バリエーションを含む、任意の誘導体及び／またはその塩を含む。

50

一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、グアヤコール及び式Ⅰの化合物を含む。一実施形態では、グアヤコールは、精製されたグアヤコールを含む。一実施形態では、本明細書に開示される方法は、グアヤコール及び式Ⅰの化合物を含む組成物を投与することを含む。一実施形態では、グアヤコールは、精製されたグアヤコールである。

【0163】

本開示の文脈内で、用語「フムレン」は、その任意の異性体的、構造的、及び／またはエナンチオマー的バリエーションを含む、任意の誘導体及び／またはその塩を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、フムレン及び式Ⅰの化合物を含む。一実施形態では、フムレンは、精製されたフムレンを含む。一実施形態では、本明細書に開示される方法は、フムレン及び式Ⅰの化合物を含む組成物を投与することを含む。一実施形態では、フムレンは、精製されたフムレンである。

10

【0164】

本開示の文脈内で、用語「イソボルネオール」は、その任意の異性体的、構造的、及び／またはエナンチオマー的バリエーションを含む、任意の誘導体及び／またはその塩を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、イソボルネオール及び式Ⅰの化合物を含む。一実施形態では、イソボルネオールは、精製されたイソボルネオールを含む。一実施形態では、本明細書に開示される方法は、イソボルネオール及び式Ⅰの化合物を含む組成物を投与することを含む。一実施形態では、イソボルネオールは、精製されたイソボルネオールである。

【0165】

本開示の文脈内で、用語「リモネン」は、その任意の異性体的、構造的、及び／またはエナンチオマー的バリエーションを含む、任意の誘導体及び／またはその塩を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、リモネン及び式Ⅰの化合物を含む。一実施形態では、リモネンは、精製されたリモネンを含む。一実施形態では、本明細書に開示される方法は、リモネン及び式Ⅰの化合物を含む組成物を投与することを含む。一実施形態では、リモネンは、精製されたリモネンである。

20

【0166】

本開示の文脈内で、用語「リナロール」は、その任意の異性体的、構造的及び／またはエナンチオマー的バリエーションを含む、任意の誘導体及び／またはその塩を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、リナロール及び式Ⅰの化合物を含む。一実施形態では、リナロールは、精製されたリナロールを含む。一実施形態では、本明細書に開示される方法は、リナロール及び式Ⅰの化合物を含む組成物を投与することを含む。一実施形態では、リナロールは、精製されたリナロールである。

30

【0167】

本開示の文脈内で、用語「メントール」は、その任意の異性体的、構造的及び／またはエナンチオマー的バリエーションを含む、任意の誘導体及び／またはその塩を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、メントール及び式Ⅰの化合物を含む。一実施形態では、メントールは、精製されたメントールを含む。一実施形態では、本明細書に開示される方法は、メントール及び式Ⅰの化合物を含む組成物を投与することを含む。一実施形態では、メントールは、精製されたメントールである。

40

【0168】

本開示の文脈内で、用語「ベーターミルセン」は、その任意の異性体的、構造的、及び／またはエナンチオマー的バリエーションを含む、任意の誘導体及び／またはその塩を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、ベーターミルセン及び式Ⅰの化合物を含む。一実施形態では、ベーターミルセンは、精製されたベーターミルセンを含む。一実施形態では、本明細書に開示される方法は、ベーターミルセン及び式Ⅰの化合物を含む組成物を投与することを含む。一実施形態では、ベーターミルセンは、精製されたベーターミルセンを含む。

【0169】

本開示の文脈内で、用語「ネロリドール」は、その任意の異性体的、構造的及び／また

50

はエナンチオマー的バリエーションを含む、任意の誘導体及び／またはその塩を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、ネロリドール及び式Ⅰの化合物を含む。一実施形態では、ネロリドールは、精製されたネロリドールを含む。一実施形態では、本明細書に開示される方法は、ネロリドール及び式Ⅰの化合物を含む組成物を投与することを含む。一実施形態では、ネロリドールは、精製されたネロリドールである。

【0170】

本開示の文脈内で、用語「オシメン」は、その任意の異性体的、構造的及び／またはエナンチオマー的バリエーションを含む、任意の誘導体及び／またはその塩を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、オシメン及び式Ⅰの化合物を含む。一実施形態では、オシメンは、精製されたオシメンを含む。一実施形態では、本明細書に開示される方法は、オシメン及び式Ⅰの化合物を含む組成物を投与することを含む。一実施形態では、オシメンは、精製されたオシメンである。

10

【0171】

本開示の文脈内で、用語「フェランドレン」は、その任意の異性体的、構造的及び／またはエナンチオマー的バリエーションを含む、任意の誘導体及び／またはその塩を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、フェランドレン及び式Ⅰの化合物を含む。一実施形態では、フェランドレンは、精製されたフェランドレンを含む。一実施形態では、本明細書に開示される方法は、フェランドレン及び式Ⅰの化合物を含む組成物を投与することを含む。一実施形態では、フェランドレンは、精製されたフェランドレンである。

20

【0172】

本開示の文脈内で、用語「フィトール」は、その任意の異性体的、構造的及び／またはエナンチオマー的バリエーションを含む、任意の誘導体及び／またはその塩を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、フィトール及び式Ⅰの化合物を含む。一実施形態では、フィトールは、精製されたフィトールを含む。一実施形態では、本明細書に開示される方法は、フィトール及び式Ⅰの化合物を含む組成物を投与することを含む。一実施形態では、フィトールは、精製されたフィトールである。

【0173】

本開示の文脈内で、用語「ピネン」は、その任意の異性体的、構造的、及び／またはエナンチオマー的バリエーションを含む、任意の誘導体及び／またはその塩を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、ピネン及び式Ⅰの化合物を含む。一実施形態では、ピネンは、精製されたピネンを含む。一実施形態では、本明細書に開示される方法は、ピネン及び式Ⅰの化合物を含む組成物を投与することを含む。一実施形態では、ピネンは、精製されたピネンである。

30

【0174】

本開示の文脈内で、用語「プレゴン」は、その任意の異性体的、構造的、及び／またはエナンチオマー的バリエーションを含む、任意の誘導体及び／またはその塩を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、プレゴン及び式Ⅰの化合物を含む。一実施形態では、プレゴンは、精製されたプレゴンを含む。一実施形態では、本明細書に開示される方法は、プレゴン及び式Ⅰの化合物を含む組成物を投与することを含む。一実施形態では、プレゴンは、精製されたプレゴンである。

40

【0175】

本開示の文脈内で、用語「サビネン」は、その任意の異性体的、構造的、及び／またはエナンチオマー的バリエーションを含む、任意の誘導体及び／またはその塩を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、サビネン及び式Ⅰの化合物を含む。一実施形態では、サビネンは、精製されたサビネンを含む。一実施形態では、本明細書に開示される方法は、サビネン及び式Ⅰの化合物を含む組成物を投与することを含む。一実施形態では、サビネンは、精製されたサビネンである。

【0176】

本開示の文脈内で、用語「ターピネオール」は、その任意の異性体的、構造的、及び／

50

またはエナンチオマー的バリエーションを含む、任意の誘導体及び／またはその塩を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、ターピネオール及び式Ⅰの化合物を含む。一実施形態では、ターピネオールは、精製されたターピネオールを含む。一実施形態では、本明細書に開示される方法は、ターピネオール及び式Ⅰの化合物を含む組成物を投与することを含む。一実施形態では、ターピネオールは、精製されたターピネオールである。

【0177】

本開示の文脈内で、用語「テルピノレネン」は、その任意の異性体的、構造的、及び／またはエナンチオマー的バリエーションを含む、任意の誘導体及び／またはその塩を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、テルピノレネン及び式Ⅰの化合物を含む。一実施形態では、テルピノレネンは、精製されたテルピノレネンを含む。一実施形態では、本明細書に開示される方法は、テルピノレネン及び式Ⅰの化合物を含む組成物を投与することを含む。一実施形態では、テルピノレネンは、精製されたテルピノレネンである。

10

【0178】

本開示の文脈内で、用語「バレンセン」は、その任意の異性体的、構造的、及び／またはエナンチオマー的バリエーションを含む、任意の誘導体及び／またはその塩を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、バレンセン及び式Ⅰの化合物を含む。一実施形態では、バレンセンは、精製されたバレンセンを含む。一実施形態では、本明細書に開示される方法は、バレンセン及び式Ⅰの化合物を含む組成物を投与することを含む。一実施形態では、バレンセンは、精製されたバレンセンである。

20

【0179】

一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法には、任意に精製された1つ以上のエリナシン分子が含まれる。一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、エリナシンAを含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、エリナシンBを含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、エリナシンCを含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、エリナシンDを含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、エリナシンEを含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、エリナシンFを含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、エリナシンGを含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、エリナシンHを含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、エリナシンIを含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、エリナシンJを含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、エリナシンKを含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、エリナシンPを含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、エリナシンQを含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、エリナシンRを含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、エリナシンSを含む。一実施形態では、エリナシン分子は、精製されたエリナシン分子である。一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、1つ以上の精製されたエリナシン分子及び精製されたピリジン-3-カルボン酸を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、1つ以上の精製されたエリナシン分子及び精製されたカンナビノイド、例えば、CBDを含む。

30

40

【0180】

本開示の文脈内で、用語「エリナシンA」は、その任意の異性体的、構造的、及び／またはエナンチオマー的バリエーションを含む、任意の誘導体及び／またはその塩を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、エリナシンA及び式Ⅰの化合物を含む製剤を投与することを含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、精製されたエリナシンA及び式Ⅰの化合物の製剤を投与することを含む。

【0181】

本開示の文脈内で、用語「エリナシンB」は、その任意の異性体的、構造的、及び／ま

50

物を含む製剤を投与することを含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、精製されたエリナシン J 及び式 I の化合物の製剤を投与することを含む。

【0190】

本開示の文脈内で、用語「エリナシン K」は、その任意の異性体的、構造的、及び／またはエナンチオマー的バリエーションを含む、任意の誘導体及び／またはその塩を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、エリナシン K 及び式 I の化合物を含む製剤を投与することを含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、精製されたエリナシン K 及び式 I の化合物の製剤を投与することを含む。

【0191】

本開示の文脈内で、用語「エリナシン P」は、その任意の異性体的、構造的、及び／またはエナンチオマー的バリエーションを含む、任意の誘導体及び／またはその塩を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、エリナシン P 及び式 I の化合物を含む製剤を投与することを含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、精製されたエリナシン P 及び式 I の化合物の製剤を投与することを含む。

【0192】

本開示の文脈内で、用語「エリナシン Q」は、その任意の異性体的、構造的、及び／またはエナンチオマー的バリエーションを含む、任意の誘導体及び／またはその塩を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、エリナシン Q 及び式 I の化合物を含む製剤を投与することを含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、精製されたエリナシン Q 及び式 I の化合物の製剤を投与することを含む。

【0193】

本開示の文脈内で、用語「エリナシン R」は、その任意の異性体的、構造的、及び／またはエナンチオマー的バリエーションを含む、任意の誘導体及び／またはその塩を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、エリナシン R 及び式 I の化合物を含む製剤を投与することを含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、精製されたエリナシン R 及び式 I の化合物の製剤を投与することを含む。

【0194】

本開示の文脈内で、用語「エリナシン S」は、その任意の異性体的、構造的、及び／またはエナンチオマー的バリエーションを含む、任意の誘導体及び／またはその塩を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、エリナシン S 及び式 I の化合物を含む製剤を投与することを含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、精製されたエリナシン S 及び式 I の化合物の製剤を投与することを含む。

【0195】

エリナシン化学的構造は、Li I-C, Lee L-Y, Tzeng T W, et al. Neurohealth properties of Hericium erinaceus mycelia enriched with erinacines. In: Behavioural Neurology. 2018. doi:10.1155/2018/5802634 から得られる。

【0196】

一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法には、任意に精製された 1 つ以上のヘリセノン分子が含まれる。一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、ヘリセノン A を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、ヘリセノン B を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、ヘリセノン C を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、ヘリセノン D を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、ヘリセノン E を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、ヘリセノン F を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、ヘリセノン G を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、精製されたヘリセノン H を含む。

【0197】

本開示の文脈内で、用語「ヘリセノン A」は、その任意の異性体的、構造的、及び／ま

10

20

30

40

50

たはエナンチオマー的バリエーションを含む、任意の誘導体及び／またはその塩を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、ヘリセノンA及び式Iの化合物を含む製剤を投与することを含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、精製されたヘリセノンA及び式Iの化合物の製剤を投与することを含む。

【0198】

本開示の文脈内で、用語「ヘリセノンB」は、その任意の異性体的、構造的、及び／またはエナンチオマー的バリエーションを含む、任意の誘導体及び／またはその塩を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、ヘリセノンB及び式Iの化合物を含む製剤を投与することを含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、精製されたヘリセノンB及び式Iの化合物の製剤を投与することを含む。

10

【0199】

本開示の文脈内で、用語「ヘリセノンC」は、その任意の異性体的、構造的、及び／またはエナンチオマー的バリエーションを含む、任意の誘導体及び／またはその塩を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、ヘリセノンC及び式Iの化合物を含む製剤を投与することを含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、精製されたヘリセノンC及び式Iの化合物の製剤を投与することを含む。

【0200】

本開示の文脈内で、用語「ヘリセノンD」は、その任意の異性体的、構造的、及び／またはエナンチオマー的バリエーションを含む、任意の誘導体及び／またはその塩を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、ヘリセノンD及び式Iの化合物を含む製剤を投与することを含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、精製されたヘリセノンD及び式Iの化合物の製剤を投与することを含む。

20

【0201】

本開示の文脈内で、用語「ヘリセノンE」は、その任意の異性体的、構造的、及び／またはエナンチオマー的バリエーションを含む、任意の誘導体及び／またはその塩を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、ヘリセノンE及び式Iの化合物を含む製剤を投与することを含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、精製されたヘリセノンE及び式Iの化合物の製剤を投与することを含む。

【0202】

本開示の文脈内で、用語「ヘリセノンF」は、その任意の異性体的、構造的、及び／またはエナンチオマー的バリエーションを含む、任意の誘導体及び／またはその塩を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、ヘリセノンF及び式Iの化合物を含む製剤を投与することを含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、精製されたヘリセノンF及び式Iの化合物の製剤を投与することを含む。

30

【0203】

本開示の文脈内で、用語「ヘリセノンG」は、その任意の異性体的、構造的、及び／またはエナンチオマー的バリエーションを含む、任意の誘導体及び／またはその塩を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、ヘリセノンG及び式Iの化合物を含む製剤を投与することを含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、精製されたヘリセノンG及び式Iの化合物の製剤を投与することを含む。

40

【0204】

本開示の文脈内で、用語「ヘリセノンH」は、その任意の異性体的、構造的、及び／またはエナンチオマー的バリエーションを含む、任意の誘導体及び／またはその塩を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、ヘリセノンH及び式Iの化合物を含む製剤を投与することを含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、精製されたヘリセノンH及び式Iの化合物の製剤を投与することを含む。

【0205】

一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、1つ以上の精製されたヘリセノン分子及び精製されたピリジン-3-カルボン酸を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、1つ以上の精製されたヘリセノン分子及び精製されたカ

50

ンナビノイド、例えば、CBDを含む。

【0206】

本開示の文脈内で、用語「ピリジン-3-カルボン酸」は、その任意の異性体的、構造的、及び／またはエナンチオマー的バリエーションを含む、任意の誘導体及び／またはその塩を含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、ピリジン-3-カルボン酸及び式Iの化合物を含む製剤を投与することを含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、精製されたピリジン-3-カルボン酸及び式Iの化合物の製剤を投与することを含む。

【0207】

一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法には、1つ以上の精製されたヘリセノン分子及び1つ以上の精製されたエリナシン分子が含まれる。

10

【0208】

一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法には、1つ以上の精製されたセロトニン作動性誘導体、1つ以上の精製されたヘリセノン分子及び1つ以上の精製されたエリナシン分子が含まれる。

【0209】

一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法には、1つ以上の精製されたセロトニン作動性誘導体、1つ以上の精製されたヘリセノン分子、1つ以上の精製されたエリナシン分子及び1つ以上の精製されたカンナビノイドが含まれる。

【0210】

一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法には、1つ以上の精製されたセロトニン作動性誘導体、1つ以上の精製されたヘリセノン分子、1つ以上の精製されたエリナシン分子及び精製されたピリジン-3-カルボン酸が含まれる。

20

【0211】

一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法には、1つ以上の式Iの化合物及び*Bacopa monnieri*（例えば、精製された分子バコシドA3）、*Centella asiatica*（例えば、精製された分子アシアチコシド）、*Ginkgo biloba*（例えば、精製された分子ミリセチン）、*Zingiber officinale*（例えば、精製された分子ジンゲロン）、*Ocimum sanctum*（例えば、精製された分子リナロール）、*Polygonum cuspidatum*（例えば、精製された分子レスペラトロール）、*Origanum vulgare*（例えば、精製された分子カルバクロール）、*Origanum onites*（例えば、精製された分子チモール）、*Rosmarinus officinalis*（例えば、精製された分子ロスマリン酸）、*Rosmarinus eriocalyx*（例えば、精製された分子カンファー）、*Curcuma longa*（例えば、精製された分子クルクミン）、*Camellia sinensis*（例えば、精製された分子テオブロミン）、*Lavandula spica*（例えば、精製された分子カリオフィレン）、*Scutellaria lateriflora*（例えば、精製された分子バイカリン）、*Avena sativa*（例えば、精製された分子アベナリン）、*Avena byzantina*（例えば、精製された分子ベータグルカン）、*Salvia divinorum*（例えば、精製された分子サルビノリンA）、*Banisteriopsis caapi*（例えば、精製された分子ハルミン）、*Psychotria*種（例えば、精製された分子ジメチルトリプタミン）、*Tabernanthe iboga*（例えば、精製された分子イボガイン）、*Voacanga africana*（例えば、精製された分子ボアカンギン）、*Tabernaemontana undulata*（例えば、精製された分子イボガミン）、*Lophophora williamsii*（例えば、精製された分子メスカリン）、*Ipomoea tricolor*（例えば、精製された分子エルゴノビン）、及び／または*Argyrea nervosa*（例えば、精製された分子エルギン）から選択される生物から1つ以上の化合物を抽出し、その後精製することによって獲得される1つ以上の精製された分子が含まれる。

30

40

50

【0212】

一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、約100：1～約1：100の範囲の特定の比（例えば、モル比）の式Iの化合物誘導体及び精製されたテルペンを含む。

【0213】

一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、約75：1～約1：75の範囲の特定の比（例えば、モル比）の式Iの化合物及び精製されたテルペンを含む。

【0214】

一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、約50：1～約1：50の範囲の特定の比（例えば、モル比）の式Iの化合物及び精製されたテルペンを含む。

【0215】

一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、約25：1～約1：25の範囲の特定の比（例えば、モル比）の式Iの化合物及び精製されたテルペンを含む。

【0216】

一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、約10：1～約1：10の範囲の特定の比（例えば、モル比）の式Iの化合物及び精製されたテルペンを含む。

【0217】

一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、約5：1～約1：5の範囲の特定の比（例えば、モル比）の式Iの化合物及び精製されたテルペンを含む。

【0218】

一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、式Iの化合物、精製されたカンナビノイド、及び精製されたテルペンを含む。

【0219】

一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、約100：1～約1：100の範囲の特定の比（例えば、モル比）の式Iの化合物及び精製されたカンナビノイドならびに約100：1～約1：100の範囲の特定の比（例えば、モル比）の式Iの化合物及び精製されたテルペンを含む。

【0220】

一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、約75：1～約1：75の範囲の特定の比（例えば、モル比）の式Iの化合物及び精製されたカンナビノイドならびに約75：1～約1：75の範囲の特定の比（例えば、モル比）の式Iの化合物及び精製されたテルペンを含む。

【0221】

一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、約50：1～約1：50の範囲の特定の比（例えば、モル比）の式Iの化合物及び精製されたカンナビノイドならびに約50：1～約1：50の範囲の特定の比（例えば、モル比）の式Iの化合物及び精製されたテルペンを含む。

【0222】

一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、約25：1～約1：25の範囲の特定の比（例えば、モル比）の式Iの化合物及び精製されたカンナビノイドならびに約25：1～約1：25の範囲の特定の比（例えば、モル比）の式Iの化合物及び精製されたテルペンを含む。

【0223】

一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、約10：1～約1：10の範囲の特定の比（例えば、モル比）の式Iの化合物及び精製されたカンナビノイドならびに約10：1～約1：10の範囲の特定の比（例えば、モル比）の式Iの化合物及び精製されたテルペンを含む。

【0224】

一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、約5：1～約1：5の範囲の特定の比（例えば、モル比）の式Iの化合物及び精製されたカンナビノイドならびに約5：1～約1：5の範囲の特定の比（例えば、モル比）の式Iの化合物及び精製されたテルペンを含む。

10

20

30

40

50

含む。

【0225】

一実施形態では、精製されたテルペンは、神経伝達物質活性調節剤、例えば、式Ⅰの化合物、セロトニン作動薬、アドレナリン作動薬、ドパミン作動薬、サイロシビン誘導体等の活性を調節する。

【0226】

本明細書で使用される場合、用語「セロトニン作動薬」は、セロトニン受容体に結合する、それを遮断する、またはそうでなければ（アロステリック反応を介して）その活性に影響を及ぼす化合物を指す。一実施形態では、セロトニン作動薬は、セロトニン受容体に結合する。一実施形態では、セロトニン作動薬は、例えば、セロトニン受容体で他の分子の反応性に影響を及ぼす相互作用を介して、セロトニン受容体に間接的に影響を及ぼす。一実施形態では、セロトニン作動薬は、アゴニスト、例えば、セロトニン受容体を活性化

10

【0227】

一実施形態では、セロトニン作動薬は、抗鬱剤である。

20

【0228】

一実施形態では、セロトニン作動薬は、抗不安剤である。

【0229】

一実施形態では、セロトニン作動薬は、選択的セロトニン再取り込み阻害剤である。

【0230】

一実施形態では、セロトニン作動薬は、選択的セロトニンノルエピネフリン再取り込み阻害剤である。

【0231】

いくつかの実施形態では、式Ⅰの化合物は、セロトニン作動薬である。いくつかの実施形態では、少なくとも1つの式Ⅰの化合物は、第2のセロトニン作動薬、例えば、以下に特定されるセロトニン作動薬の1つと共に投与される。

30

【0232】

いくつかの例示的なセロトニン作動薬には、以下の分子：4-ヒドロキシ-N-メチルトリプタミン（別名3-[2-(メチルアミノ)エチル]-1H-インドール-4-オール）、アエルギナシン（別名[3-[2-(トリメチルアザニウム)エチル]-1H-インドール-4-イル]水素ホスフェート）、ベオシスチン（別名[3-[2-(メチルアミノ)エチル]-1H-インドール-4-イル]二水素ホスフェート）、ブフォテニジン（別名3-[2-(トリメチルアザニウム)エチル]-1H-インドール-5-オレート）、ブフォテニン（別名3-[2-(ジメチルアミノ)エチル]-1H-インドール-5-オール）、エトシビン（別名[3-[2-(ジエチルアミノ)エチル]-1H-インドール-4-イル]二水素ホスフェート）、ノルベオシスチン（別名[3-(2-アミノエチル)-1H-インドール-4-イル]二水素ホスフェート）、ノルサイロシン、サイロシン（別名3-[2-(ジメチルアミノ)エチル]-1H-インドール-4-オール）、サイロシビン（別名[3-[2-(ジメチルアミノ)エチル]-1H-インドール-4-イル]二水素ホスフェート）、セロトニン（別名3-(2-アミノエチル)-1H-インドール-5-オール）、1P-LS D（別名(6aR, 9R)-N, N-ジエチル-7-メチル-4-プロパノイル-6, 6a, 8, 9-テトラヒドロインドロ[4, 3-fg]キノリン-9-カルボキサミド）、ALD-52（別名(6aR, 9R)-4-アセチル-N, N-ジエチル-7-メチル-6, 6a, 8, 9-テトラヒドロインドロ[4, 3-fg]キノリン-9-カルボキサミド）、AL-LAD（別名(6aR, 9R)-N, N-

40

50

ジエチル-7-プロブ-2-エニル-6, 6a, 8, 9-テトラヒドロ-4H-インドロ
 [4, 3-fg] キノリン-9-カルボキサミド)、BU-LAD (別名 (6aR, 9R)
)-7-ブチル-N, N-ジエチル-6, 6a, 8, 9-テトラヒドロ-4H-インドロ
 [4, 3-fg] キノリン-9-カルボキサミド)、DAL (別名 (6aR, 9R)-7-
 -メチル-N, N-ビス (プロブ-2-エニル)-6, 6a, 8, 9-テトラヒドロ-4
 H-インドロ [4, 3-fg] キノリン-9-カルボキサミド)、DAM-57 (別名
 (6aR, 9R)-N, N, 7-トリメチル-6, 6a, 8, 9-テトラヒドロ-4H-
 インドロ [4, 3-fg] キノリン-9-カルボキサミド)、EIPLA (別名 (6a
 R, 9R)-N-エチル-7-メチル-N-プロパン-2-イル-6, 6a, 8, 9-テ
 トラヒドロ-4H-インドロ [4, 3-fg] キノリン-9-カルボキサミド)、ET
 H-LAD (別名 (6aR, 9R)-N, N, 7-トリエチル-6, 6a, 8, 9-テト
 ラヒドロ-4H-インドロ [4, 3-fg] キノリン-9-カルボキサミド)、LAE
 -32 (別名 (6aR, 9R)-N-エチル-7-メチル-6, 6a, 8, 9-テトラヒ
 ドロ-4H-インドロ [4, 3-fg] キノリン-9-カルボキサミド)、LPD-8
 24 (別名 [(6aR, 9R)-7-メチル-6, 6a, 8, 9-テトラヒドロ-4H-
 インドロ [4, 3-fg] キノリン-9-イル]-ピロリジン-1-イルメタノン)、LSB
 (別名 (6aR, 9R)-N-ブタン-2-イル-7-メチル-6, 6a, 8, 9-テ
 トラヒドロ-4H-インドロ [4, 3-fg] キノリン-9-カルボキサミド)、LS
 A (別名 (6aR, 9R)-7-メチル-6, 6a, 8, 9-テトラヒドロ-4H-イン
 ドロ [4, 3-fg] キノリン-9-カルボキシ-アミド)、LSD-25 (別名 (6a
 R, 9R)-N, N-ジエチル-7-メチル-6, 6a, 8, 9-テトラヒドロ-4H-
 インドロ [4, 3-fg] キノリン-9-カルボキサミド)、LSD-PIP (別名 (7-
 -メチル-6, 6a, 8, 9-テトラヒドロ-4H-インドロ [4, 3-fg] キノリン
 -9-イル)-ピペリジン-1-イルメタノン)、LSM-775 (別名 [(6aR,
 9R)-7-メチル-6, 6a, 8, 9-テトラヒドロ-4H-インドロ [4, 3-fg]
] キノリン-9-イル)-モルホリン-4-イルメタノン)、LSP (別名 (6aR, 9
 R)-7-メチル-N-ペンタン-3-イル-6, 6a, 8, 9-テトラヒドロ-4H-
 インドロ [4, 3-fg] キノリン-9-カルボキサミド)、LSZ (別名 [(6aR,
 9R)-7-メチル-6, 6a, 8, 9-テトラヒドロ-4H-インドロ [4, 3-fg]
] キノリン-9-イル)-[-(2S, 4S)-2, 4-ジメチルアゼチジン-1-イル
]メタノン)、メテルギン (別名 (6aR, 9R)-N-(1-ヒドロキシブタン-2-
 イル)-7-メチル-6, 6a, 8, 9-テトラヒドロ-4H-インドロ [4-, 3-f
 g] キノリン-9-カルボキサミド)、MiPLA (別名 (6aR, 9R)-N, 7-ジ
 メチル-N-プロパン-2-イル-6, 6a, 8, 9-テトラヒドロ-4H-インドロ [4,
 3-fg]-キノリン-9-カルボキサミド)、NDTDI、PARGY-LAD、
 PRO-LAD (別名 (6aR, 9R)-N, N-ジエチル-7-プロピル-6, 6a,
 8, 9-テトラヒドロ-4H-インドロ [4, 3-fg] キノリン-9-カルボキサミド)
)、2-Me-DET (別名 N, N-ジエチル-2-(2-メチル-1H-インドール-
 3-イル)エタンアミン)、2-Me-DMT (別名 N, N-ジメチル-2-(2-メチ
 ル-1H-インドール-3-イル)エタンアミン)、2, アルファ-DMT (別名 1-(
 2-メチル-1H-インドール-3-イル)プロパン-2-アミン)、4-AcODA
 LT (別名 [3-[2-[ビス (プロブ-2-エニル) アミノ] エチル]-1H-イン
 ドール-4-イル]アセテート)、4-AcO-DET (別名 [3-[2-(ジエチルアミ
 ノ) エチル]-1H-インドール-4-イル]アセテート)、4-AcO-DIPT (別
 名 3-[2-(ジイソプロピルアミノ) エチル]-1H-インドール-4-イルアセテ
 ート)、4-AcO-DMT (別名 [3-[2-(ジメチルアミノ) エチル]-1H-イン
 ドール-4-イル]アセテート)、4-AcO-DPT (別名 [3-[2-(ジプロピル
 アミノ) エチル]-1H-インドール-4-イル]アセテート)、4-AcO-EPT (別
 名 3-{2-[エチル (プロピル) アミノ] エチル}-1H-インドール-4-イルア
 セテート)、4-AcO-MET (別名 [3-[2-[エチル (メチル) アミノ] エチル

10

20

30

40

50

] - 1 H - インドール - 4 - イル] アセテート)、4 - A c O - M I P T (別名 [3 - [2 - [メチル (プロパン - 2 - イル) アミノ] エチル] - 1 H - インドール - 4 - イル] アセテート)、4 - A c O - M P T、4 - H O - D B T (別名 3 - [2 - (ジブチルアミノ) エチル] - 1 H - インドール - 4 - オール)、4 - H O - D E T (別名 3 - [2 - (ジエチルアミノ) エチル] - 1 H - インドール - 4 - オール)、4 - H O - D I P T (別名 3 - [2 - [ジ (プロパン - 2 - イル) アミノ] エチル] - 1 H - インドール - 4 - オール)、4 - H O - D P T (別名 3 - [2 - (ジプロピルアミノ) エチル] - 1 H - インドール - 4 - オール)、4 - H O - E P T、4 - H O - M C P T、4 - H O - M E T (別名 3 - [2 - [エチル (メチル) アミノ] エチル] - 1 H - インドール - 4 - オール)、4 - H O - M I P T (別名 3 - [2 - [メチル (プロパン - 2 - イル) アミノ] エチル] - 1 H - インドール - 4 - オール)、4 - H O - M P M I (別名 3 - [(1 - メチルピロリジン - 2 - イル) メチル] - 1 H - インドール - 4 - オール)、4 - H O - M P T (別名 3 - [2 - [メチル (プロピル) アミノ] エチル] - 1 H - インドール - 4 - オール)、4 - H O - ピル - T (別名 3 - (2 - ピロリジン - 1 - イルエチル) - 1 H - インドール - 4 - オール)、4 - M e O - M I P T (別名 N - [2 - (4 - メトキシ - 1 H - インドール - 3 - イル) エチル] - N - メチルプロパン - 2 - アミン)、4, 5 - M D O - D I P T (別名 N - [2 - (6 H - [1, 3] ジオキソロ [4, 5 - e] インドール - 8 - イル) エチル] - N - プロパン - 2 - イルプロパン - 2 - アミン)、4, 5 - M D O - D M T (別名 2 - (6 H - [1, 3] ジオキソロ [4, 5 - e] インドール - 8 - イル) - N, N - ジメチルエタンアミン)、5 - B R O M O - D M T (別名 2 - (5 - ブロモ - 1 H - インドール - 3 - イル) - N, N - ジメチルエタンアミン)、5 - クロロ - アルファ - M T (別名 1 - (5 - クロロ - 1 H - インドール - 3 - イル) プロパン - 2 - アミン)、5 - フルオロ - A M T (別名 1 - (5 - フルオロ - 1 H - インドール - 3 - イル) プロパン - 2 - アミン)、5 - M e O - A E T (別名 1 - (5 - メトキシ - 1 H - インドール - 3 - イル) ブタン - 2 - アミン)、5 - M e O - A M T (別名 1 - (5 - メトキシ - 1 H - インドール - 3 - イル) プロパン - 2 - アミン)、5 - M e O - D A L T (別名 N - [2 - (5 - メトキシ - 1 H - インドール - 3 - イル) エチル] - N - プロブ - 2 - エニルプロブ - 2 - エン - 1 - アミン)、5 - M e O - D E T (別名 N, N - ジエチル - 2 - (5 - メトキシ - 1 H - インドール - 3 - イル) エタンアミン)、5 - M e O - D i P T (別名 N - [2 - (5 - メトキシ - 1 H - インドール - 3 - イル) エチル] - N - プロパン - 2 - イルプロパン - 2 - アミン)、5 - M e O - D M T (別名 2 - (5 - メトキシ - 1 H - インドール - 3 - イル) - N, N - ジメチルエタンアミン)、5 - M e O - D P T (別名 N - [2 - (5 - メトキシ - 1 H - インドール - 3 - イル) エチル] - N - プロピルプロパン - 1 - アミン)、5 - M e O - E i P T (別名 N - エチル - N - [2 - (5 - メトキシ - 1 H - インドール - 3 - イル) エチル] プロパン - 2 - アミン)、5 - M e O - M A L T (別名 N - [2 - (5 - メトキシ - 1 H - インドール - 3 - イル) エチル] - N - メチルプロブ - 2 - エン - 1 - アミン)、5 - M e O - M i P T (別名 N - [2 - (5 - メトキシ - 1 H - インドール - 3 - イル) エチル] - N - メチルプロパン - 2 - アミン)、5 - M e O - N M T (別名 2 - (5 - メトキシ - 1 H - インドール - 3 - イル) - N - メチルエタンアミン; 塩酸塩)、5 - M e O - ピル - T (別名 4 - フルオロ - 5 - メトキシ - 3 - (2 - ピロリジン - 1 - イルエチル) - 1 H - インドール)、5 - M e O - T M T (別名 2 - (5 - メトキシ - 2 - メチル - 1 H - インドール - 3 - イル) - N, N - ジメチルエタンアミン)、5 - M e S - D M T (別名 N, N - ジメチル - 2 - (5 - メチルスルファニル - 1 H - インドール - 3 - イル) エタンアミン)、5, 6 - M D O - D I P T (別名 N - [2 - (5 H - [1, 3] ジオキソロ [4, 5 - f] インドール - 7 - イル) エチル] - N - プロパン - 2 - イルプロパン - 2 - アミン)、5, 6 - M D O - D M T (別名 2 - (5 H - [1, 3] ジオキソロ [4, 5 - f] インドール - 7 - イル) - N, N - ジメチルエタンアミン)、5, 6 - M D O - M I P T (別名 N - [2 - (5 H - [1, 3] ジオキソロ [4, 5 - f] インドール - 7 - イル) エチル] - N - エチルプロパン - 2 - アミン)、5, 6 - M e O - M I P T (別名 N - [2 - (5, 6 - ジメト

10

20

30

40

50

キシ-1H-インドール-3-イル)エチル]-N-メチルプロパン-2-アミン)、5
 , N, N-TMT (別名N, N-ジメチル-2-(5-メチル-1H-インドール-3-
 エタンアミン)、6-MeO-THH (別名6-メトキシ-1-メチル-2, 3, 4, 9
 -テトラヒドロ-1H-ピリド[3, 4-b]インドール)、アルファ-ET (別名1-
 (1H-インドール-3-イル)ブタン-2-アミン)、アルファ-MT (別名1-(1
 H-インドール-3-イル)プロパン-2-アミン)、アルファ-TMT (別名1-(1
 H-インドール-3-イル)-N, N-ジメチルプロパン-2-アミン)、アルファ, N
 -DMT (別名2-(1H-インドール-3-イル)-N, N-ジメチルエタンアミン)
 、アルファ, N, O-TMS (別名1-(5-メトキシ-1H-インドール-3-イル)
 -N-メチルプロパン-2-アミン)、アルファ, O-DMS (別名1-(5-メトキシ
 1H-インドール-3-イル)プロパン-2-アミン)、DAL T (別名N-[2-(1
 H-インドール-3-イル)エチル]-N-プロパン-2-エニルプロパン-2-エン-1-ア
 ミン)、DBT (別名N-ブチル-N-[2-(1H-インドール-3-イル)エチル]
 ブタン-1-アミン)、DET (別名N, N-ジエチル-2-(1H-インドール-3-
 イル)エタンアミン)、DiPT (別名N-[2-(5-メトキシ-1H-インドール-
 3-イル)エチル]-N-プロパン-2-イルプロパン-2-アミン)、DMT (別名2-
 (1H-インドール-3-イル)-N, N-ジメチルエタンアミン)、DPT (別名N
 -[2-(1H-インドール-3-イル)エチル]-N-プロピルプロパン-1-アミン
)、EiPT (別名N-エチル-N-[2-(1H-インドール-3-イル)エチル]プロ
 パン-2-アミン)、ハルマリン (別名7-メトキシ-1-メチル-3, 4-ジヒドロ
 -2H-ピリド[3, 4-b]インドール)、ハルミン (別名7-メトキシ-1-メチル
 -9H-ピリド[3, 4-b]インドール)、MALT、MBT (別名3H-1, 3-ベ
 ンゾチアゾール-2-チオン)、メラトニン (別名N-[2-(5-メトキシ-1H-イ
 ンドール-3-イル)エチル]アセトアミド)、MET (別名N-エチル-2-(1H-
 インドール-3-イル)-N-メチルエタンアミン)、MiPT (別名N-[2-(1H-
 インドール-3-イル)エチル]-N-メチルプロパン-2-アミン)、MPT (別名
 3-[2-[メチル(プロピル)アミノ]エチル]-1H-インドール-4-オール)、
 NET (別名N-エチル-2-(1H-インドール-3-イル)エタンアミン)、NMT
 (別名2-(1H-インドール-3-イル)-N-メチルエタンアミン)、PiPT (別
 名N-[2-(1H-インドール-3-イル)エチル]-N-プロパン-2-イルプロパ
 ン-1-アミン)、ビル-T (別名3-(2-ピロリジン-1-イルエチル)-1H-イ
 ンドール)、T (別名2-(1H-インドール-3-イル)エタンアミン)、テトラヒド
 ロハルミン (別名7-メトキシ-1-メチル-2, 3, 4, 9-テトラヒドロ-1H-ピ
 リド[3, 4-b]インドール)、2-Br-4, 5-MDA (別名1-(6-ブromo-
 1, 3-ベンゾジオキソール-5-イル)プロパン-2-アミン)、2-TIM (別名2-
 (3, 4-ジメトキシ-2-メチルスルファニルフェニル)エタンアミン)、2-TO
 ET (別名1-(4-エチル-5-メトキシ-2-メチルスルファニルフェニル)プロパ
 ン-2-アミン)、2-TOM (別名1-(5-メトキシ-4-メチル-2-メチルスル
 ファニルフェニル)プロパン-2-アミン)、2, 4-DMA (別名1-(2, 4-ジメ
 トキシフェニル)プロパン-2-アミン)、2, 5-DMA (別名1-(2, 5-ジメト
 キシフェニル)プロパン-2-アミン)、2C-B (別名2-(4-ブromo-2, 5-ジ
 メトキシフェニル)エタンアミン)、2C-C (別名2-(4-クロロ-2, 5-ジメト
 キシフェニル)エタンアミン)、2C-D (別名2-(2, 5-ジメトキシ-4-メトキ
 シフェニル)エタンアミン)、2C-E (別名2-(4-エチル-2, 5-ジメトキシフ
 ェニル)エタンアミン)、2C-F (別名2-(4-フルオロ-2, 5-ジメトキシフ
 ェニル)エタンアミン)、2C-G (別名2-(2, 5-ジメトキシ-3, 4-ジメチルフ
 ェニ)エタンアミン)、2C-G-3 (別名2-(4, 7-ジメトキシ-2, 3-ジヒド
 ロ-1H-インデン-5-イル)エタンアミン)、2C-G-4 (別名2-(1, 4-ジ
 メトキシ-5, 6, 7, 8-テトラヒドロナフタレン-2-イル)エタンアミン)、2C

10

20

30

40

50

-G-5 (別名CAS 207740-20-3)、2C-G-N (別名2-(1,4-ジ
 メトキシナフタレン-2-イル)エタンアミン)、2C-H (別名2-(2,5-ジメト
 キシフェニル)エタンアミン)、2C-I (別名2-(4-ヨード-2,5-ジメトキシ
 フェニル)エタンアミン)、2C-N (別名2-(2,5-ジメトキシ-4-ニトロフェ
 ニル)エタンアミン)、2C-O-4 (別名2-(2,5-ジメトキシ-4-プロパン-
 2-イルオキシフェニル)エタンアミン)、2C-P (別名2-(2,5-ジメトキシ-
 4-プロピルフェニル)エタンアミン)、2C-SE (別名2-(2,5-ジメトキシ-
 4-メチルセラニルフェニル)エタンアミン)、2C-T (別名2-(2,5-ジメトキシ
 -4-メチルスルファニルフェニル)エタンアミン)、2C-T-13 (別名2-[2
 ,5-ジメトキシ-4-(2-メトキシエチルスルファニル)フェニル]エタンアミン)
 、2C-T-15 (別名2-(4-シクロプロピルスルファニル-2,5-ジメトキシフ
 ェニル)エタンアミン)、2C-T-17 (別名2-(4-ブタン-2-イルスルファニ
 ル-2,5-ジメトキシフェニル)エタンアミン)、2C-T-2 (別名2-(4-エチ
 ルスルファニル-2,5-ジメトキシフェニ)エタンアミン)、2C-T-2 (別名2-
 [4-(2-フルオロエチルスルファニル)-2,5-ジメトキシフェニル]エタンアミ
 ン)、2C-T-4 (別名2-(2,5-ジメトキシ-4-プロパン-2-イルスルファ
 ニルフェニ)エタンアミン)、2C-T-7 (別名2-(2,5-ジメトキシ-4-プロ
 ピルスルファニルフェニル)エタンアミン)、2C-T-8 (別名2-[4-(シクロプ
 ロピルメチルスルファニル)-2,5-ジメトキシフェニル]エタンアミン)、2C-T
 -9 (別名2-(4-ブチルスルファニル-2,5-ジメトキシフェニ)エタンアミン)
 、2C-TFM (別名2-[2,5-ジメトキシ-4-(トリフルオロメチル)フェニル
]エタンアミン)、2T-MMDA-3a (別名1-(4-メチルスルファニル-1,3
 -ベンゾジオキソール-5-イル)プロパン-2-アミン)、3-T-トリス (別名2-
 (3,4-ジエトキシ-5-エチルスルファニルフェニル)エタンアミン)、3-TAS
 B (別名2-(3-エトキシ-4-エチルスルファニル-5-メトキシフェニル)エタン
 アミン)、3-TE (別名2-(4-エトキシ-3-メトキシ-5-メチルスルファニル
 フェニル)エタンアミン)、3-TFM (別名2-(2,4-ジメトキシ-3-メチルス
 ルファニルフェニル)エタンアミン)、3-TM (別名2-(3,4-ジメトキシ-5-
 メチルスルファニルフェニ)エタンアミン)、3-TME (別名2-(3-エチルスル
 ファニル-4,5-ジメトキシフェニル)エタンアミン)、3-TSB (別名2-(3-エ
 トキシ-5-エチルスルファニル-4-メトキシフェニル)エタンアミン)、3,4-D
 MA (別名1-(3,4-ジメトキシフェニル)プロパン-2-アミン)、3C-BZ (別
 名1-(3,5-ジメトキシ-4-フェニルメトキシフェニル)プロパン-2-アミン)
 、3C-E (別名1-(4-エトキシ-3,5-ジメトキシフェニル)プロパン-2-
 アミン)、4-Br-3,5-DMA (別名1-(4-ブromo-3,5-ジメトキシフェ
 ニル)プロパン-2-アミン)、4-D (別名CAS 1020518-87-9)、4-
 MA (別名1-(4-メトキシフェニル)プロパン-2-アミン)、4-T-TRIS (別
 名2-(3,5-ジエトキシ-4-エチルスルファニルフェニル)エタンアミン)、4
 -TASB (別名2-(3-エトキシ-4-エチルスルファニル-5-メトキシフェニ)
 エタンアミン)、4-TE (別名2-(4-エチルスルファニル-3,5-ジメトキシフ
 ェニル)エタンアミン)、4-TIM (別名2-(2,3-ジメトキシ-4-メチルスル
 ファニルフェニル)エタンアミン)、4-TM (別名2-(3,5-ジメトキシ-4-メ
 チルスルファニルフェニル)エタンアミン)、4-TME (別名2-(3-エトキシ-5
 -メトキシ-4-メチルスルファニルフェニ)エタンアミン)、4-TSB (別名2-
 (3,5-ジエトキシ-4-メチルスルファニルフェニル)エタンアミン)、4T-MMD
 A-2 (別名1-(5-メトキシ-1,3-ベンゾキサチオール-6-イル)プロパン-
 2-アミン)、5-TASB (別名2-(3,4-ジエトキシ-5-メチルスルファニル
 フェニル)エタンアミン)、5-TME (別名2-(3-エトキシ-4-メトキシ-5-
 メチルスルファニルフェニル)エタンアミン)、5-TOET (別名1-(4-エチル-
 2-メトキシ-5-メチルスルファニルフェニル)プロパン-2-アミン)、5-TOM

10

20

30

40

50

(別名 1 - (2 - メトキシ - 4 - メチル - 5 - メチルスルファニルフェニル) プロパン - 2 - アミン)、25B-NBF (別名 2 - (4 - ブロモ - 2, 5 - ジメトキシフェニル) - N - [(2 - フルオロフェニル) メチル] エタンアミン)、25B-NBOH (別名 2 - [[2 - (4 - ブロモ - 2, 5 - ジメトキシフェニル) エチルアミノ] メチル] フェノール)、25B-NBOMe (別名 2 - (4 - ブロモ - 2, 5 - ジメトキシフェニル) - N - [(2 - メトキシフェニル) メチル] エタンアミン)、25C-NB3OMe (別名 2 - (4 - クロロ - 2, 5 - ジメトキシフェニル) - N - [(3 - メトキシフェニル) メチル] エタンアミン)、25C-NB4OMe (別名 2 - (4 - クロロ - 2, 5 - ジメトキシフェニル) - N - [(4 - メトキシフェニル) メチル] エタンアミン)、25C-NBF (別名 2 - (4 - クロロ - 2, 5 - ジメトキシフェニル) - N - [(2 - フルオロフェニル) メチル] エタンアミン)、25C-NBOH (別名 2 - (4 - クロロ - 2, 5 - ジメトキシフェニル) エチルアミノ] メチル] フェノール)、25C-NBOMe (別名 2 - (4 - クロロ - 2, 5 - ジメトキシフェニル) - N - [(2 - メトキシフェニル) メチル] エタンアミン)、25CN-NBOH (別名 4 - [2 - [(2 - ヒドロキシフェニル) メチルアミノ] エチル] - 2, 5 - ジメトキシベンゾニトリル)、25CN-NBOMe (別名 CAS 1354632-16-8)、25D-NBOMe (別名 2 - (2, 5 - ジメトキシ - 4 - メトキシフェニル) - N - [(2 - メトキシフェニル) メチル] エタンアミン)、25E-NBOMe (別名 2 - (4 - エチル - 2, 5 - ジメトキシフェニル) - N4 (2 - メトキシフェニル) メチル] エタンアミン)、25G-NBOMe (別名 2 - (2, 5 - ジメトキシ - 3, 4 - ジメチルフェニル) - N - [(2 - メトキシフェニル) メチル] エタンアミン)、25H-NBOMe (別名 2 - (2, 5 - ジメトキシフェニル) - N - [(2 - メトキシフェニル) メチル] エタンアミン)、25H-NB34MD (別名 N - (1, 3 - ベンゾジオキソール - 5 - イルメチル) - 2 - (4 - ヨード - 2, 5 - ジメトキシフェニル) エタンアミン)、25I-NB3OMe (別名 2 - (4 - ヨード - 2, 5 - ジメトキシフェニル) - N - [(3 - メトキシフェニル) メチル] エタンアミン)、25I-NB4OMe (別名 2 - (4 - ヨード - 2, 5 - ジメトキシフェニル) - N - [(4 - メトキシフェニル) メチル] エタンアミン)、25I-NBF (別名 N - [(2 - フルオロフェニル) メチル] - 2 - (4 - ヨード - 2, 5 - ジメトキシフェニル) エタンアミン)、25I-NBMD (別名 N - (1, 3 - ベンゾジオキソール - 4 - イルメチル) - 2 - (4 - ヨード - 2, 5 - ジメトキシフェニル) エタンアミン)、25I-NBOH (別名 2 - [[2 - (4 - ヨード - 2, 5 - ジメトキシフェニル) エチルアミノ] メチル] フェノール)、25I-NBOMe (別名 2 - (4 - ヨード - 2, 5 - ジメトキシフェニル) - N - [(2 - メトキシフェニル) メチル] エタンアミン)、25iP-NBOMe (別名 2 - (2, 5 - ジメトキシ - 4 - ブロパン - 2 - イルフェニル) - N - [(2 - メトキシフェニル) メチル] エタンアミン)、25N-NBOMe (別名 2 - (2, 5 - ジメトキシ - 4 - ニトロフェニル) - N - [(2 - メトキシフェニル) メチル] エタンアミン)、25P-NBOMe (別名 2 - (2, 5 - ジメトキシ - 4 - プロピルフェニル) - N - [(2 - メトキシフェニル) メチル] エタンアミン)、25TFM-NBOMe (別名 2 - [2, 5 - ジメトキシ - 4 - (トリフルオロメチル) フェニル] - N - [(2 -

2 - メトキシフェニル) メチル] エタンアミン)、2CBCB-NBOMe (別名 1 - [(7R) - 3 - ブロモ - 2, 5 - ジメトキシ - 7 - ビシクロ [4.2.0] オクター - 1 (6), 2, 4 - トリエニル] - N - [(2 - メトキシフェニル) メチル] エタンアミン)、2CBFly-NBOMe (別名 2 - (4 - ブロモ - 2, 3, 6, 7 - テトラヒドロフロ [2, 3 - f] [1] ベンゾフラン - 8 - イル) - N - [(2 - メトキシフェニル) メチル] エタンアミン)、AEM (別名 1 - (3, 4, 5 - トリメトキシフェニル) ブタン - 2 - アミン)、AL (別名 2 - (3, 5 - ジメトキシ - 4 - プロプ - 2 - エノキシフェニル) エタンアミン)、ALEPH (別名 1 - (2, 5 - ジメトキシ - 4 - メチルスルファニルフェニル) プロパン - 2 - アミン; 塩酸塩)、ALEPH-2 (別名 1 - (4 - エチルスルファニル - 2, 5 - ジメトキシフェニル) プロパン - 2 - アミン)、ALEPH-

10

20

30

40

50

4 (別名 1 - (2, 5 - ジメトキシ - 4 - プロパン - 2 - イルスルファニルフェニル) プロパン - 2 - アミン)、ALEPH - 6 (別名 1 - (2, 5 - ジメトキシ - 4 - フェニルスルファニルフェニル) プロパン - 2 - アミン)、ALEPH - 7 (別名 1 - (2, 5 - ジメトキシ - 4 - プロピルスルファニルフェニル) プロパン - 2 - アミン)、ARIADNE (別名 (2R) - 1 - (2, 5 - ジメトキシ - 4 - メトキシフェニル) ブタン - 2 - アミン)、ASB (別名 2 - (3, 4 - ジエトキシ - 5 - メトキシフェニル) エタンアミン)、B (別名 2 - (4 - ブトキシ - 3, 5 - ジメトキシフェニル) エタンアミン)、BEATRICE (別名 1 - (2, 5 - ジメトキシ - 4 - メトキシフェニル) - N - メチルプロパン - 2 - アミン)、ベータ - D (別名 2, 2 - ジジュテリオ - 2 - (3, 4, 5 - トリメトキシフェニル) エタンアミン)、BIS - TOM (別名 1 - [4 - メチル - 2, 5 - ビス (メチルスルファニル) フェニル] プロパン - 2 - アミン)、bk - 2C - B (別名 2 - アミノ - 1 - (4 - プロモ - 2, 5 - ジメトキシフェニル) エタノン)、BOB (別名 2 - (4 - プロモ - 2, 5 - ジメトキシフェニル) - 2 - メトキシエタンアミン)、BOD (別名 2 - (2, 5 - ジメトキシ - 4 - メトキシフェニル) - 2 - メトキシエタンアミン)、BOH (別名 2 - (1, 3 - ベンゾジオキソール - 5 - イル) - 2 - メトキシエタンアミン)、BOHD (別名 2 - アミノ - 1 - (2, 5 - ジメトキシ - 4 - メチルフェニ) エタノール)、BOM (別名 2 - メトキシ - 2 - (3, 4, 5 - トリメトキシフェニル) エタンアミン)、プロモドラゴンFLY (別名 1 - (4 - プロモフロ [2, 3 - f] [1] ベンゾフラン - 8 - イル) プロパン - 2 - アミン)、ブチロン (別名 1 - (1, 3 - ベンゾジオキシル - 5 - イル) - 2 - (メチルアミノ) ブタン - 1 - オン)、CPM (別名 2 - [4 - (シクロプロピルメトキシ) - 3, 5 - ジメトキシフェニル] エタンアミン)、DESOXY (別名 2 - (3, 5 - ジメトキシ - 4 - メチルフェニ) エタンアミン)、DMCPA (別名 2 - (2, 5 - ジメトキシ - 4 - メトキシフェニル) シクロプロパン - 1 - アミン)、DME (別名 2 - アミノ - 1 - (3, 4 - ジメトキシフェニル) エタノール)、DMMDA (別名 1 - (4, 7 - ジメトキシ - 1, 3 - ベンゾジオキソール - 5 - イル) プロパン - 2 - アミン)、DMMDA - 2 (別名 1 - (6, 7 - ジメトキシ - 1, 3 - ベンゾジオキソール - 5 - イル) プロパン - 2 - アミン)、DMPEA (別名 2 - (3, 4 - ジメトキシフェニル) エタンアミン)、DOAM (別名 1 - (2, 5 - ジメトキシ - 4 - ベンチルフェニル) プロパン - 2 - アミン)、DOB (別名 1 - (4 - プロモ - 2, 5 - ジメトキシフェニル) プロパン - 2 - アミン)、DOBU (別名 1 - (4 - ブチル - 2, 5 - ジメトキシフェニル) プロパン - 2 - アミン)、DOC (別名 1 - (4 - クロロ - 2, 5 - ジメトキシフェニル) プロパン - 2 - アミン)、DOEF (別名 1 - [4 - (2 - フルオロエチル) - 2, 5 - ジメトキシフェニル] プロパン - 2 - アミン)、DOET (別名 1 - (4 - エチル - 2, 5 - ジメトキシフェニル) プロパン - 2 - アミン)、DOF (別名 1 - (4 - フルオロ - 2, 5 - ジメトキシフェニル) プロパン - 2 - アミン)、DOI (別名 1 - (4 - ヨード - 2, 5 - ジメトキシフェニル) プロパン - 2 - アミン)、DOM (別名 1 - (2, 5 - ジメトキシ - 4 - メトキシフェニル) プロパン - 2 - アミン)、DON (別名 1 - (2, 5 - ジメトキシ - 4 - ニトロフェニル) プロパン - 2 - アミン)、DOPR (別名 1 - (2, 5 - ジメトキシ - 4 - プロピルフェニル) プロパン - 2 - アミン)、DOTFM (別名 1 - [2, 5 - ジメトキシ - 4 - (トリフルオロメチル) フェニル] プロパン - 2 - アミン)、E (別名 2 - (4 - エトキシ - 3, 5 - ジメトキシフェニル) エタンアミン)、EBDP (別名 1 - (1, 3 - ベンゾジオキソール - 5 - イル) - N - エチルペンタン - 2 - アミン)、EEE (別名 1 - (2, 4, 5 - トリエトキシフェニル) プロパン - 2 - アミン)、EEM (別名 1 - (2, 4 - ジエトキシ - 5 - メトキシフェニル) プロパン - 2 - アミン)、EME (別名 1 - (2, 5 - ジエトキシ - 4 - メトキシフェニル) プロパン - 2 - アミン)、EMM (別名 1 - (2 - エトキシ - 4, 5 - ジメトキシフェニル) プロパン - 2 - アミン)、ETHYL - J (別名 1 - (1, 3 - ベンゾジオキソール - 5 - イル) - N - エチルブタン - 2 - アミン)、ETHYL - K (別名 1 - (1, 3 - ベンゾジオキソール - 5 - イル) - N - エチルペンタン - 2 - アミン)、F - 2 (別名 1 - (5 - メトキシ - 2 - メチル - 2, 3 - ジヒ

10

20

30

40

50

ドロー１－ベンゾフラン－６－イル）プロパン－２－アミン）、F－２２（別名１－（５－メトキシ－２，２－ジメチル－３Ｈ－１－ベンゾフラン－６－イル）プロパン－２－アミン）、FLEA（別名N－〔１－（１，３－ベンゾジオキソール－５－イル）プロパン－２－イル〕－N－メチルヒドロキシルアミン）、G－３（別名１－（４，７－ジメトキシ－２，３－ジヒドロ－１Ｈ－インデン－５－イル）プロパン－２－アミン）、G－４（別名１－（１，４－ジメトキシ－５，６，７，８－テトラヒドロナフタレン－２－イル）プロパン－２－アミン）、G－５（別名３，６－ジメトキシ－４－（２－アミノプロピル）ベンゾノルボルナン）、G－N（別名１－（１，４－ジメトキシナフタレン－２－イル）プロパン－２－アミン）、GANESHA（別名１－（２，５－ジメトキシ－３，４－ジメチルフェニル）プロパン－２－アミン）、HOT－１７（別名N－〔２－（４－ブタン－２－イルスルファニル－２，５－ジメトキシフェニ）エチル〕ヒドロキシルアミン）、HOT－２（別名N－〔２－（４－エチルスルファニル－２，５－ジメトキシフェニ）エチル〕ヒドロキシルアミン）、HOT－７（別名N－〔２－（２，５－ジメトキシ－４－プロピルスルファニルフェニ）エチル〕ヒドロキシルアミン）、IDNNA（別名１－（４－ヨード－２，５－ジメトキシフェニル）－N，N－ジメチルプロパン－２－アミン）、IM（別名２－（２，３，４－トリメトキシフェニル）エタンアミン）、IP（別名２－（３，５－ジメトキシ－４－プロパン－２－イルオキシフェニル）エタンアミン）、IRIS（別名１－（５－エトキシ－２－メトキシ－４－メトキシフェニル）プロパン－２－アミン）、J（別名１－（１，３－ベンゾジオキソール－５－イル）ブタン－２－アミン）、ジムスカリン（別名〔（１R）－４，５，６－トリメトキシ－２，３－ジヒドロ－１Ｈ－インデン－１－イル〕メタンアミン）、LOPHOPHINE（別名２－（７－メトキシ－１，３－ベンゾジオキソール－５－イル）エタンアミン）、M（別名２－（３，４，５－トリメトキシフェニ）エタンアミン）、MADAM－６（別名N－メチル－１－（６－メチル－１，３－ベンゾジオキソール－５－イル）プロパン－２－アミン）、MAL（別名２－〔３，５－ジメトキシ－４－（２－メチルプロブ－２－エノキシ）フェニル〕エタンアミン）、MDA（別名１－（１，３－ベンゾジオキソール－５－イル）プロパン－２－アミン）、MDAL（別名１－（１，３－ベンゾジオキソール－５－イル）－N－プロブ－２－エニルプロパン－２－アミン）、MDBU（別名N－〔１－（１，３－ベンゾジオキソール－５－イル）プロパン－２－イル〕ブタン－１－アミン）、MDBZ（別名１－（１，３－ベンゾジオキソール－５－イル）－N－ベンジルプロパン－２－アミン）、MDCPM（別名１－（３a，7a－ジヒドロ－１，３－ベンゾジオキソール－５－イル）－N－（シクロプロピルメチル）プロパン－２－アミン）、MDDM（別名１－（１，３－ベンゾジオキソール－５－イル）－N，N－ジメチルプロパン－２－アミン）、MDE（別名１－（１，３－ベンゾジオキソール－５－イル）－N－エチルプロパン－２－アミン）、MDHOET（別名２－〔１－（１，３－ベンゾジオキソール－５－イル）プロパン－２－イルアミノ〕エタノール）、MDIP（別名１－（１，３－ベンゾジオキソール－５－イル）－N－プロパン－２－イルプロパン－２－アミン）、MDMA（別名１－（１，３－ベンゾジオキソール－５－イル）－N－メチルプロパン－２－アミン）、MDMC（別名１－（２，３－ジヒドロ－１，４－ベンゾジオキシン－６－イル）－N－メチルプロパン－２－アミン）、MDMEO（別名１－（１，３－ベンゾジオキソール－５－イル）－N－メトキシプロパン－２－アミン）、MDMEOET（別名１－（１，３－ベンゾジオキソール－５－イル）－N－（２－メトキシエチル）プロパン－２－アミン）、MDMP（別名１－（１，３－ベンゾジオキソール－５－イル）－N，２－ジメチルプロパン－２－アミン）、MDOH（別名N－〔１－（１，３－ベンゾジオキソール－５－イル）プロパン－２－イル〕ヒドロキシルアミン）、MDPEA（別名２－（１，３－ベンゾジオキソール－５－イル）エタンアミン）、MDPH（別名１－（１，３－ベンゾジオキソール－５－イル）－２－メチルプロパン－２－アミン）、MDPL（別名１－（１，３－ベンゾジオキソール－５－イル）－N－プロブ－２－イニルプロパン－２－アミン）、MDPR（別名１－（１，３－ベンゾジオキソール－５－イル）－N－プロピルプロパン－２－アミン）、ME（別名２－（３－エトキシ－４，５－ジメトキシフェニ

10

20

30

40

50

ル) エタンアミン)、MEDA (別名1-(5-メトキシ-2,3-ジヒドロ-1,4-ベンゾジオキシン-7-イル)プロパン-2-アミン)、MEE (別名1-(4,5-ジエトキシ-2-メトキシフェニル)プロパン-2-アミン)、MEM (別名1-(4-エトキシ-2,5-ジメトキシフェニル)プロパン-2-アミン)、MEPEEA (別名2-(4-エトキシ-3-メトキシフェニル)エタンアミン)、META-DOB (別名1-(5-プロモ-2,4-ジメトキシフェニル)プロパン-2-アミン)、META-DOT (別名1-(2,4-ジメトキシ-5-メチルスルファニルフェニル)プロパン-2-アミン)、METHYL-DMA (別名1-(2,5-ジメトキシフェニル)-N-メチルプロパン-2-アミン)、METHYL-DOB (別名1-(4-プロモ-2,5-ジメトキシフェニル)-N-メチルプロパン-2-アミン)、METHYL-J (別名1-(1,3-ベンゾジオキソール-5-イル)-N-メチルブタン-2-アミン)、METHYL-K (別名1-(1,3-ベンゾジオキソール-5-イル)-N-メチルペンタン-2-アミン)、METHYL-MA (別名1-(4-メトキシフェニル)-N-メチルプロパン-2-アミン)、METHYL-MMDA-2 (別名1-(6-メトキシ-1,3-ベンゾジオキソール-5-イル)-N-メチルプロパン-2-アミン)、MMDA (別名1-(7-メトキシ-1,3-ベンゾジオキソール-5-イル)プロパン-2-アミン)、MMDA-2 (別名1-(6-メトキシ-1,3-ベンゾジオキソール-5-イル)プロパン-2-アミン)、MMDA-3a (別名1-(4-メトキシ-1,3-ベンゾ

10

ジ
オキソール-5-イル)プロパン-2-アミン)、MMDA-3b (別名1-(7-メトキシ-1,3-ベンゾジオキソール-4-イル)プロパン-2-アミン)、MME (別名1-(5-エトキシ-2,4-ジメトキシフェニル)プロパン-2-アミン)、MP (別名2-(3,4-ジメトキシ-5-プロポキシフェニル)エタンアミン)、MPM (別名1-(2,4-ジメトキシ-5-プロポキシフェニル)プロパン-2-アミン)、NBOMe-メスカリン (別名N-[(2-メトキシフェニル)メチル]-2-(3,4,5-トリメトキシフェニ)エタンアミン)、ORTHO-DOT (別名1-(4,5-ジメトキシ-2-メチルスルファニルフェニル)プロパン-2-アミン)、P (別名2-(3,5-ジメトキシ-4-プロポキシフェニル)エタンアミン)、PE (別名2-[3,5-ジメトキシ-4-(2-フェニルエトキシ)フェニル]エタンアミン)、PEA (別名2-フェニルエタンアミン)、プロピニル (別名2-(3,5-ジメトキシ-4-プロポ-2-イノキシフェニル)エタンアミン)、プサイ-2C-T-4、プサイ-DOM (別名1-(2,6-ジメトキシ-4-メトキシフェニル)プロパン-2-アミン)、SB (別名2-(3,5-ジエトキシ-4-メトキシフェニル)エタンアミン)、TA (別名1-(2,3,4,5-テトラメトキシフェニル)プロパン-2-アミン)、TB (別名2-(4-ブチルスルファニル-3,5-ジメトキシフェニ)エタンアミン)、TCB-2 (別名(3-プロモ-2,5-ジメトキシ-7-ビシクロ[4.2.0]オクター-1(6)-2,4-トリエニル)メタンアミン;臭化水素酸塩)、TMA (別名1-(3,4,5-トリメトキシフェニル)プロパン-2-アミン)、TMA-2 (別名1-(2,4,5-トリメトキシフェニル)プロパン-2-アミン)、TMA-3 (別名1-(2,3,4-トリメトキシフェニル)プロパン-2-アミン)、TMA-4 (別名1-(2,3,5-トリメトキシフェニル)プロパン-2-アミン)、TMA-5 (別名1-(2,3,6-トリメトキシフェニル)プロパン-2-アミン)、TMA-6 (別名1-(2,4,6-トリメトキシフェニル)プロパン-2-アミン)、TMPEA (別名2-(2,4,5-トリメトキシフェニル)エタンアミン)、TOMSO (別名1-(2-メトキシ-4-メチル-5-メチルスルフィニルフェニル)プロパン-2-アミン)、TP (別名2-(3,5-ジメトキシ-4-プロピルスルファニルフェニル)エタンアミン)、及びトリス (別名2-(3,4,5-トリエトキシフェニル)エタンアミン)が含まれる。

20

30

40

【0233】

一実施形態では、セロトニン作動薬は、アルプラゾラム、アンフェタミン、アリピプラゾール、アザピロン、バルビツール酸、プロマゼパム、ブプロピオン、ブスピロン、カン

50

ナビノイド、クロルジアゼポキシド、シタロプラム、クロナゼパム、クロラゼプ酸、デキストロメトルファン、ジアゼパム、デュロキセチン、エスシタロプラム、フルオキシセチン、フルラゼパム、フルボキサミン、ロラゼパム、リゼルグ酸ジエチルアミド、リゼルグアミド、3, 4-メチレンジオキシメタンフェタミン、ミルナシプラン、ミルタザピン、ナラトリプタン、パロキシセチン、ペチジン、フェネチルアミン、プシカイン、オキサゼパム、レボキシセチン、セレニック、セロトニン、セルトラリン、テマゼパム、トラマドール、トリアゾラム、トリプタミン、ベンラファキシン、ボルチオキシセチン、及び／またはその誘導体から選択される。

【0234】

一実施形態では、セロトニンは、セロトニン受容体で、例えば、5-HT受容体でリガンドとして作用することによって作用する。一実施形態では、セロトニンは、生物内の神経伝達物質として使用するためにその生物によって生成される。一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、セロトニン受容体で活性を増加させる。一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、セロトニン受容体で活性を低下させる。

【0235】

本明細書で使用される場合、用語「セロトニン受容体」は、シグナルを受け取り、細胞反応を引き起こす内部シグナル伝達経路を活性化することが可能な細胞外のタンパク質の集合体を指す。一実施形態では、セロトニン受容体は、生物の中枢神経系内の細胞上に見られる。一実施形態では、セロトニン受容体は、生物の末梢神経系内の細胞上に見られる。一実施形態では、セロトニンは、セロトニン受容体に対する天然リガンドである。一実施形態では、セロトニン受容体は、神経伝達物質、例えば、グルタメート、ガンマーアミノ酪酸、ドパミン、エピネフリン（ノルエピネフリンとしても知られている）、アセチルコリン等の放出を調節する。一実施形態では、セロトニン受容体は、ホルモン、例えば、オキシトシン、プロラクチン、バソプレシン、コルチゾール、コルチコトロピン、サブスタンスP等の放出を調節する。

【0236】

セロトニン受容体の例には、5-HT_{1A}、5-HT_{1B}、5-HT_{1D}、5-HT_{1E}、5-HT_{2A}、5-HT_{2B}、5-HT_{2C}、5-HT₃、5-HT₄、5-HT_{5A}、5-HT_{5B}、5-HT₆、及び5-HT₇が含まれるがこれらに限定されない。

【0237】

本明細書で使用される場合、用語「アドレナリン作動薬」は、アドレナリン受容体に結合する、それを遮断する、またはそうでなければ（アロステリック反応を介して）その活性に影響を及ぼす化合物を指す。一実施形態では、アドレナリン作動薬は、アドレナリン作動性受容体に結合する。一実施形態では、アドレナリン作動薬は、例えば、アドレナリン受容体で他の分子の反応性に影響を及ぼす相互作用を介して、アドレナリン受容体に間接的に影響を及ぼす。一実施形態では、アドレナリン作動薬は、アゴニスト、例えば、アドレナリン受容体を活性化する化合物である。一実施形態では、アドレナリン作動薬は、アンタゴニスト、例えば、アドレナリン受容体に結合するが活性化しない、例えば、受容体を遮断する化合物である。一実施形態では、アドレナリン作動薬は、エフェクター分子、例えば、アロステリック制御のための酵素に結合する化合物である。一実施形態では、アドレナリン作動薬は、複数のタイプの受容体（例えば、5-HT、ドパミン、アドレナリン作動性、アセチルコリン等）で（直接的にまたは間接的のいずれかで）作用する。

【0238】

一実施形態では、アドレナリン作動薬は、抗鬱剤である。

【0239】

一実施形態では、アドレナリン作動薬は、ノルエピネフリントランスポーター阻害剤である。

【0240】

一実施形態では、アドレナリン作動薬は、小胞モノアミントランスポーター阻害剤である。

10

20

30

40

50

【0241】

一実施形態では、アドレナリン作動薬は、アドレナリン、アグマチン、アモキサピン、アブタザピン、アトモキセチン、ブプロピオン、クロニジン、ドキシセピン、デュロキシセチン、エスミルタズピン、ミアンセリン、ミアンセリン、ミルタザピン、ノルエピネフリン、フェントラミン、フェニレフリン、ピペロキサン、レセルピン、リトドリン、セチプチリン、テソフェンシン、チモロール、トラゾドン、トリミプラミン、またはキシラジンから選択される。

【0242】

一実施形態では、アドレナリン作動薬は、アドレナリン作動性受容体で、例えば、アドレナリン作動性受容体でリガンドとして作用することによって作用する。一実施形態では、アドレナリンは、生物内の神経伝達物質として使用するためにその生物によって生成される。一実施形態では、ノルエピネフリンは、生物内の神経伝達物質として使用するためにその生物によって生成される。一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、アドレナリン作動性受容体で活性を増加させる。一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、アドレナリン作動性受容体で活性を低下させる。

【0243】

本明細書で使用される場合、用語「アドレナリン作動性受容体」は、シグナルを受け取り、細胞反応を引き起こす内部シグナル伝達経路を活性化することが可能な細胞外のタンパク質の集合体を指す。一実施形態では、アドレナリン作動性受容体は、生物の中樞神経系内の細胞上に見られる。一実施形態では、アドレナリン作動性受容体は、生物の交感神経系内の細胞上に見られる。

【0244】

本明細書で使用される場合、用語「ドパミン作動薬」は、ドパミン受容体に結合する、それを遮断する、またはそうでなければ（アロステリック反応を介して）その活性に影響を及ぼす化合物を指す。一実施形態では、ドパミン作動薬は、ドパミン受容体に結合する。一実施形態では、ドパミン作動薬は、例えば、ドパミン受容体で他の分子の反応性に影響を及ぼす相互作用を介して、ドパミン受容体に間接的に影響を及ぼす。一実施形態では、ドパミン作動薬は、アゴニスト、例えば、ドパミン受容体を活性化する化合物である。一実施形態では、ドパミン作動薬は、アンタゴニスト、例えば、ドパミン受容体に結合するが活性化しない、例えば、受容体を遮断する化合物である。一実施形態では、ドパミン作動薬は、エフェクター分子、例えば、アロステリック制御のための酵素に結合する化合物である。一実施形態では、ドパミン作動薬は、複数のタイプの受容体（例えば、5HT、ドパミン、アドレナリン作動性、アセチルコリン等）で（直接的にまたは間接的にいずれかで）作用する。

【0245】

一実施形態では、ドパミン作動薬は、ドパミントランスポーター阻害剤である。

【0246】

一実施形態では、ドパミン作動薬は、小胞モノアミントランスポーター阻害剤である。

【0247】

一実施形態では、ドパミン作動薬は、アミネプチン、アポモルヒネ、ベンジルピペラジン、プロモクリプチン、カベルゴリン、クロルプロマジン、クロザピン、ジヒドレキシジン、ドンペリドン、ドパミン、フルフェナジン、ハロペリドール、ケタミン、ロキサピン、メタンフェタミン、オランザピン、ペモリン、ペルフェナジン、ペルゴリド、フェンサイクリジン、フェネチルアミン、フェンメトラジン、ピモジド、ピリベジル、精神刺激剤、レセルピン、リスペリドン、ロピニロール、テトラベナジン、またはチオリダジンから選択される。

【0248】

一実施形態では、ドパミン作動薬は、ドパミン受容体で、例えば、ドパミン受容体でリガンドとして作用することによって作用する。一実施形態では、ドパミンは、生物内の神経伝達物質として使用するためにその生物によって生成される。一実施形態では、本明細

書に開示される組成物及び方法は、ドパミン受容体で活性を増加させる。一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、ドパミン受容体で活性を低下させる。

【0249】

本明細書で使用される場合、用語「ドパミン受容体」は、シグナルを受け取り、細胞反応を引き起こす内部シグナル伝達経路を活性化することが可能な細胞外のタンパク質の集合体を指す。一実施形態では、ドパミン受容体は、生物の中枢神経系内の細胞上に見られる。

【0250】

一実施形態では、精製されたテルペンは、そのネイティブ受容体での神経伝達物質、例えば、セロトニン受容体でのセロトニン、ドパミン作動薬でのドパミン、アドレナリン作動性受容体でのノルエフェドリンノルエフェドリン等の活性を調節する。

【0251】

一実施形態では、精製されたテルペンは、1つ以上の受容体、例えば、セロトニン受容体、アドレナリン作動性受容体、ドパミン受容体、GABA作動性受容体、グルタミン作動性受容体、ヒスタミン作動性受容体、コリン作動性受容体、オピオイド受容体、またはグリシン作動性受容体で活性である。

【0252】

一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、モノアミンオキシダーゼ阻害剤を含む。

【0253】

本明細書で使用される場合、用語「モノアミンオキシダーゼ阻害剤」は、モノアミンオキシダーゼ酵素に結合し、それによりモノアミンオキシダーゼ酵素の活性を低減する分子を指す。本開示の文脈内で、モノアミンオキシダーゼ阻害剤の例には、オーロリクス、デプレニル、エルデプリル、エムサム、ヒューモリル、ヒドラカルバジン、イソカルボキサジド、リネゾリド、マネリックス、ニドラジド、フェネルジン、ピラジドール、プロカルバジン、ラサギリン、及びトラニルシプロミンが含まれる。一実施形態では、モノアミンオキシダーゼは、モノアミン、例えば、セロトニン、ドパミン、ノルエピネフリン、アンフェタミン、アドレナリン等の酸化を触媒する。

【0254】

一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、安定化剤を含む。本明細書で使用される場合、用語「安定化剤」は、活性成分、例えば、式Iの化合物、サイロシビン誘導体、カンナビノイド、テルペン等の分解を防止するために有用な化合物を指す。一実施形態では、安定化剤は、活性成分が分解することを防止する。一実施形態では、安定化剤は、セロトニン作動薬が組成物における他の化合物、例えば、カンナビノイド、テルペン、塩基、酸等と反応することを防止する。一実施形態では、安定化剤は、セロトニン作動薬が周囲雰囲気、例えば、熱、光、水、及び／または酸素と反応することを防止する。一実施形態では、安定化剤は、抗酸化剤を含む。一実施形態では、安定化剤は、pH緩衝液を含む。

【0255】

一実施形態では、本明細書に開示される方法及び組成物は、抗酸化剤を含む。本明細書で使用される場合、用語「抗酸化剤」は、酸化を予防するために有用な化合物及び／または組成物を指す。一実施形態では、抗酸化剤は、「フリーラジカル」から活性成分を保護する。本開示の文脈内で、「フリーラジカル」は、非対原子価電子を有する原子、分子、またはイオンである。一実施形態では、抗酸化剤は、電子供与体である。

【0256】

一実施形態では、抗酸化剤は、アスコルビン酸、リコペン、トコフェロール、メラトニン、レチノール、アスタキサンチン、ルテイン、アピゲニン、カルノシン、セレン、亜鉛、クルクミン、及び／またはその塩または誘導体から選択される。

【0257】

一実施形態では、抗酸化剤は、アスコルビン酸及び／またはその塩または誘導体である

10

20

30

40

50

。本開示の文脈内で、用語「アスコルビン酸」は、ビタミンC及び／またはその塩または誘導体を含む。

【0258】

一実施形態では、抗酸化剤は、本明細書に開示される1つ以上の化合物、例えば、式Iの化合物、サイロシピン誘導体、カンナビノイド、テルペン、及び／またはそれらの混合物を含む組成物の酸化を防止する。例えば、サイロシピン誘導体に結合されたフェノール性基の酸化を防止すること。

【0259】

本明細書で使用される場合、用語「酸化」は、電子の形式的喪失及び／または形式的酸化状態の増加及び／または酸素原子（複数可）の付加を指す。本明細書で使用される場合、「還元」は、電子の形式的獲得及び／または形式的酸化状態の減少を指す。Zundahl, Steven S., et al. Chemistry, 7th. Cengage Learning, 2018.

【0260】

一実施形態では、本明細書に開示される方法及び組成物は、pH緩衝液を含む。

【0261】

本明細書で使用される場合、用語「pH緩衝液」は、組成物のpHを維持するために有用な化合物または組成物を指す。一実施形態では、pH緩衝液は、弱酸及び対応するコンジュゲート塩基を含む。一実施形態では、pH緩衝液は、弱塩基及び対応するコンジュゲート酸を含む。一実施形態では、pH緩衝液は、強酸及び／または塩基の添加で組成物のpHを変化させない。

【0262】

一実施形態では、pH緩衝液は、約7の組成物のpHを維持する。一実施形態では、pH緩衝液は、約7未満の組成物のpHを維持する。一実施形態では、pH緩衝液は、約7を超える組成物のpHを維持する。一実施形態では、pH緩衝液は、約2～約6の範囲の組成物のpHを維持する。一実施形態では、pH緩衝液は、約5～約7の範囲の組成物のpHを維持する。一実施形態では、pH緩衝液は、約6～約8の範囲の組成物のpHを維持する。一実施形態では、pH緩衝液は、約7～約10の範囲の組成物のpHを維持する。

【0263】

一実施形態では、pH緩衝液は、クエン酸、酢酸、リン酸一ナトリウム、N-シクロヘキシル-2-アミノエタンスルホン酸、ボレート、塩酸、及び／または水酸化ナトリウムを含む。

【0264】

一実施形態では、本明細書に開示される方法は、酸を含む組成物を投与することを含む。

【0265】

本明細書で使用される場合、用語「酸」は、プロトン、すなわち、 H^+ を供与する及び／または電子を受容することが可能な分子またはイオンを指す。一実施形態では、「酸」は、ルイス酸を指す。一実施形態では、「酸」は、ブレンステッド酸を指す。一実施形態では、酸は、組成物のpHによって決定される。一実施形態では、7未満のpHは、酸の存在を示す。

【0266】

一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、塩基を含む製剤を投与することを含む。

【0267】

本明細書で使用される場合、用語「塩基」は、プロトン、すなわち、 H^+ を受容することが可能な分子またはイオンを指す。一実施形態では、「塩基」は、電子対を供与することが可能な分子、すなわち、ルイス塩基を指す。一実施形態では、塩基の存在は、化合物のpHによって決定される。一実施形態では、7を超えるpHは、塩基の存在を示す。

【0268】

一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、非水溶性組成物を投与することを含む。

【0269】

いくつかの実施形態では、本明細書に記載の組成物は、非水性である。

【0270】

本明細書で使用される場合、用語「水溶性」は、標準温度及び圧力で水に溶解することが可能な化合物または組成物を指す。一例では、1 gの化合物は、1 Lの水に溶解する。一例では、2 gの化合物は、1 Lの水に溶解する。一例では、5 gの化合物は、1 Lの水に溶解する。一例では、10 gの化合物は、1 Lの水に溶解する。一実施形態では、水における化合物の溶解性は、化合物の固有の特性である。一実施形態では、水における化合物の溶解性は、別の化合物、例えば、賦形剤によって促進され得る。

10

【0271】

一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、投薬製剤内の均質混合物として存在する及び／または均質混合物内に存在する式Ⅰの化合物を投与することを含む。

【0272】

一実施形態では、本明細書に開示される組成物及び方法は、投薬製剤内の均質混合物として存在する及び／または均質混合物内に存在する式Ⅰの化合物及び少なくとも1つの第2の化合物（例えば、セロトニン作動薬、カンナビノイド、テルペン、賦形剤、安定化剤、抗酸化剤等）を投与することを含む。

20

【0273】

本明細書で使用される場合、用語「均質混合物」は、1つの状態または物の中に存在する2つ以上の化合物を有する固体、液体、または気体組成物、例えば、透明で無色の溶液を指す。一実施形態では、本明細書に開示される均質混合物は、異なるサンプルにわたって同じ割合、濃度、及び／または比のその成分を有する。一実施形態では、均質混合物における成分は、同じ物質の状態である。一実施形態では、均質混合物は、溶液内に1つ以上の化合物、例えば、透明な溶液内に式Ⅰの化合物及びカンナビノイドを含む。一実施形態では、本明細書に開示される組成物は、均質混合物、例えば、粒状物を有しない溶液、サンプル間で同等の濃度を有する溶液、同様の粒子サイズの粉末等として存在する。

【0274】

本明細書には、神経伝達物質受容体で活性を調節する方法であって、
神経伝達物質活性調節剤を投与すること；及び
式Ⅰの化合物を含む投薬製剤を処置を必要とする人に投与することであって、投薬製剤は、神経伝達物質受容体で活性を調節する、投与することを含む、方法が開示される。

30

【0275】

本明細書で使用される場合、用語「神経伝達物質活性調節剤の活性を調節すること」は、化合物または組成物が神経伝達物質受容体に影響を及ぼす能力を変化させること、操作すること、及び／または調整することを指す。一実施形態では、神経伝達物質活性調節剤の活性を調節することは、神経伝達物質受容体でアゴニストを投与することを含む。一実施形態では、神経伝達物質活性調節剤の活性を調節することは、神経伝達物質受容体でアンタゴニストを投与することを含む。

40

【0276】

本明細書で使用される場合、用語「投与すること」（例えば、薬物を投与すること）は、投薬すること、処置すること、与えること、及び／またはを提供することを指す。一実施形態では、神経伝達物質活性調節剤を投与することは、神経伝達物質受容体を有する生物（例えば、ヒト）に神経伝達物質活性調節剤を提供することを含む。一実施形態では、神経伝達物質活性調節剤を投与することは、神経伝達物質活性調節剤を式Ⅰの化合物と共に、例えば、単一の投薬量で神経伝達物質活性調節剤及び式Ⅰの化合物の各々を有する製剤を提供することを含む。一実施形態では、神経伝達物質活性調節剤を投与することは、

50

経皮組成物を適用すること、例えば、神経伝達物質活性調節剤及び式Ⅰの化合物の各々を有する局所組成物を皮膚に適用することを含む。一実施形態では、神経伝達物質活性調節剤を投与することは、経粘膜調製物を与えること、例えば、神経伝達物質活性調節剤及び式Ⅰの化合物の各々を有する吸収エンハンサーを有する錠剤を急速に溶解することを提供することを含む。

【0277】

一実施形態では、本明細書に開示される方法は、血液脳関門を通過させるための吸入によって組成物を投与することを含む。

【0278】

本明細書で使用される場合、用語「神経伝達物質活性調節剤」は、神経伝達物質受容体での活性を反応させるまたはそれに影響を及ぼす化合物または組成物、例えば、式Ⅰの化合物、セロトニン作動薬、アドレナリン作動性受容体、ドパミン受容体、GABA作動性受容体、グルタミン作動性受容体、ヒスタミン作動性受容体、コリン作動性受容体、オピオイド受容体、またはグリシン作動性受容体等を指す。一実施形態では、抗不安薬は、神経伝達物質受容体に結合する。一実施形態では、神経伝達物質活性調節剤は、神経伝達物質受容体に結合する。一実施形態では、神経伝達物質活性調節剤は、例えば、神経伝達物質受容体で他の分子の反応性に影響を及ぼす相互作用を介して、神経伝達物質受容体に間接的に影響を及ぼす。一実施形態では、神経伝達物質活性調節剤は、アゴニストである。一実施形態では、神経伝達物質活性調節剤は、アンタゴニストである。一実施形態では、神経伝達物質活性調節剤は、複数のタイプの神経伝達物質受容体で（直接的または間接的のいずれかで）作用する。

【0279】

一実施形態では、神経伝達物質活性調節剤は、アリピプラゾール、ブプロピオン、シタロプラム、クロミプラミン、デキストロアンフェタミン、デュロキセチン、エスシタロプラム、フルオキセチン、フルボキサミン、ミルナシプラン、ミルタザピン、パロキセチン、クエチアピン、レボキセチン、リスペリドン、セルトラリン、及びベンラファキシンから選択される。

【0280】

本明細書で使用される場合、用語「第1の投薬製剤」は、生物内で、反応、効果、及び／または結果を引き起こす、例えば、神経伝達物質受容体での活性を引き起こす、他の化合物と反応する、他の活性成分の効果を向上させる、化合物の生合成を阻害する等の目的のために選択された化合物（複数可）を指す。一実施形態では、第1の投薬製剤は、式Ⅰの化合物を含む。一実施形態では、第1の投薬製剤は、第1の精製されたカンナビノイドを含む。一実施形態では、第1の投薬製剤は、第1の精製されたテルペンを含む。一実施形態では、第1の投薬製剤は、式Ⅰの化合物及び精製されたセロトニン作動性誘導体を含む。一実施形態では、第1の投薬製剤は、式Ⅰの化合物及び第1の精製されたカンナビノイドを含む。一実施形態では、第1の投薬製剤は、式Ⅰの化合物及び第1の精製されたテルペンを含む。一実施形態では、第1の投薬製剤は、式Ⅰの化合物、第1の精製されたカンナビノイド、及び第1の精製されたテルペンを含む。一実施形態では、第1の投薬製剤は、式Ⅰの化合物及び神経伝達物質活性調節剤を含む。

【0281】

一実施形態では、第2の投薬製剤は、式Ⅰの化合物を含む。一実施形態では、第2の投薬製剤は、第2の式Ⅰの化合物を含む。一実施形態では、第2の投薬製剤は、第2のセロトニン作動薬を含む。

【0282】

一実施形態では、本明細書に開示される方法は、第2の投薬製剤を投与することを含む。一実施形態では、本明細書に開示される方法は、第3の投薬製剤を投与することを含む。一実施形態では、本明細書に開示される方法は、第4の投薬製剤を投与することを含む。一実施形態では、本明細書に開示される方法は、4つを超える投薬製剤を投与することを含む。

【0283】

所定の実施形態では、投薬製剤は、所望の量の少なくとも1つの式Iの化合物を含有する。所定の実施形態では、投薬製剤は、約0.01～約1,000mg、例えば、約0.1～約500mg、約0.5～約100mg、または約1～約50mgの化合物を含有する。所定の実施形態では、投薬製剤は、対象のkg当たりの化合物のmg (mg/kg)に基づいて式Iの化合物の量を含むように計算される。所定の実施形態では、mg/kg範囲は、約0.001～約10mg/kg、例えば、約0.01～約5、約0.05～約4、約0.05～約3、約0.05～約3、約0.05～約2、または約0.05～約1mg/kgであり得る。いくつかの実施形態では、化合物は、約1mg/kg未満、例えば、約0.001～約0.99、約0.01～約0.85、約0.05～約0.75、約0.01～約0.50、約0.01～約0.25または約0.01～約0.10mg/kgの量で投薬される。

10

【0284】

一実施形態では、本明細書に開示される方法は、2つを超える用量で1つ以上の活性成分、例えば、式Iの化合物（複数可）、カンナビノイド、テルペン、神経伝達物質活性調節剤等を投与することを含む。

【0285】

本明細書には、精神的問題を処置する方法であって、
処置を必要とする人を同定すること；及び

式Iの化合物を処置を必要とする人に投与することであって、式Iの化合物は、神経伝達物質受容体で活性を調節する、投与することを含む、方法が開示される。

20

【0286】

本明細書で使用される場合、用語「処置を必要とする人を同定すること」は、人が疾患または病態のための処置を必要とするかどうかを分析、診断、及び／または決定することを指す。一実施形態では、処置を必要とする人を同定することは、医学的病態、例えば、神経学的障害、化学的不均衡、遺伝性病態等を有する者を診断することを含む。一実施形態では、処置を必要とする人を同定することは、精神評価を実施することを含む。一実施形態では、処置を必要とする人を同定することは、血液検査を実施することを含む。一実施形態では、処置を必要とする人を同定することは、人が強迫性障害を有するかどうかを決定することを含む。一実施形態では、処置を必要とする人を同定することは、強迫性障害を有するものとして自己同定することを含む。

30

【0287】

本明細書で使用される場合、用語「精神障害」は、複数の生活領域に影響を与え、これらの症状を経験する人にとって苦痛を引き起こす行動的及び／または精神的症状のパターンを人が示す病態を指す。一実施形態では、精神障害は、遺伝性障害によって引き起こされる。一実施形態では、精神障害は、生物学的病態、例えば、余剰のホルモン生成、神経伝達物質受容体での活性の欠如、神経伝達物質生成の欠如等によって引き起こされる。一実施形態では、神経伝達物質受容体は、セロトニン受容体である。

【0288】

一実施形態では、精神的問題は、不安障害である。一実施形態では、精神的問題は、抑鬱障害である。一実施形態では、精神的問題は、強迫性障害である。一実施形態では、精神的問題は、神経変性によって特性化される。

40

【0289】

本明細書で使用される場合、用語「不安障害」は、事象及び／または状況の予想に起因する心配、不確実性、及び／または恐怖の状態を指す。不安障害は、人の身体的及び精神的機能を破壊し得る。これらの破壊は、人の日常生活にとって小さな支障から消耗性のハンディキャップを引き起こし得る。不安障害は、生理学的症状、例えば、筋緊張、心臓動悸、発汗、目まい、息切れ等を引き起こし得る。不安障害はまた、精神的症状、例えば、死ぬことの恐怖、窮迫または屈辱の恐怖、事象発生 of 恐怖等を引き起こし得る。

50

【0290】

一実施形態では、不安障害は、急性ストレス障害、医学的病態による不安症、全般性不安障害、パニック障害、パニック発作、恐怖症、外傷後ストレス障害、分離不安障害、社交不安障害、物質誘導不安障害、または場面緘黙症を含む。

【0291】

本明細書で使用される場合、用語「急性ストレス障害」は、1つ以上の外傷性事象への曝露後に発症した病態を指す。外傷性事象の例には、戦争、レイプまたは性的暴行、身体的攻撃、強盗、小児期の身体的または性的暴行、誘拐または人質となること、テロリスト攻撃、拷問、天然災害、及び／または重大自己が含まれるがこれらに限定されない。一実施形態では、急性ストレス障害は、外傷性事象の経験の1日以内に生じる。一実施形態では、急性ストレス障害は、外傷性事象の経験の3日以内に生じる。いくつかの例では、急性ストレス障害は、外傷性事象の経験の1週間以内に生じる。いくつかの例では、急性ストレス障害は、外傷性事象の経験の1ヶ月以内に生じる。

10

【0292】

本明細書で使用される場合、用語「別の医学的病態に起因する不安症」は、非関連疾患、負傷、及び／または疾病、例えば、内分泌疾患、心臓血管障害、呼吸疾病、代謝障害、神経学的疾病等の生理学的及び精神的帰結により不安症状が発症する病態を指す。

【0293】

本明細書で使用される場合、用語「全般性不安障害」は、個体がコントロールすることが困難であると認識している様々な分野、例えば、仕事、学校、社会的環境等に関する永続的かつ過剰な不安及び心配を指す。また、個体は、落ち着きのなさ、警戒、及び／または神経質；容易に疲労すること、集中することまたは心を空っぽにすることの困難、怒りやすさ、筋緊張、及び睡眠障害を含む身体的症状を経験する。

20

【0294】

本明細書で使用される場合、用語「パニック障害」は、個体が再発の及び予期しないパニック発作を経験する病態を指す。個体は、より多くのパニック発作を有することに関して永続的に心配し、これらのパニック発作により不適応な様式で彼または彼女の行動を変化させる（例えば、運動、慣れていない場所、新たな人々の回避等）。

【0295】

本明細書で使用される場合、用語「パニック発作」は、短い時間、例えば、数秒、数分、数時間以内等にピークに達する強い恐怖または強い不快感の突然の高まりを指す。いくつかの例では、パニック発作は、身体的及び／または認知症状を指す。パニック発作は、例えば、典型的には恐怖対象または状況に対する反応において、予測可能であり得る。いくつかの例では、パニック発作は、明らかな理由がない場合に生じる。

30

【0296】

本明細書で使用される場合、用語「恐怖症」は、限局した対象及び／または状況に対して恐怖を感じることに、不安になることに、または回避することの病態を指す。いくつかの例では、恐怖症は、永続的で実際リスクと釣り合いな程度まである状況によって誘導される恐怖、不安、または回避を含む。恐怖症の例には、動物、自然環境、注射傷害の恐怖または不安等が含まれるがこれらに限定されない。

40

【0297】

本明細書で使用される場合、用語「外傷後ストレス障害」は、外傷性事象を経験及び／または目撃した後、または外傷性事象が愛する人に起こったことを知った後に発症する病態を指す。いくつかの例では、人は、外傷性事象の経験の1週間以内の外傷後ストレス障害の症状を示す。いくつかの例では、人は、外傷性事象の経験の1ヶ月以内の外傷後ストレス障害の症状を示す。いくつかの例では、人は、外傷性事象の経験の1年以上以内の外傷後ストレス障害の症状を示す。いくつかの例では、人は、外傷性事象の経験の1年以上後に外傷後ストレス障害の症状を示す。いくつかの例では、外傷後ストレス障害は、人が、事象、フラッシュバック、及び／または悪夢の煩わしい苦痛となる想起を介して外傷事象を再経験することを含む。いくつかの例では、外傷後ストレス障害の症状は、感情のまひ及

50

び外傷を思い出させる場所、人々、及び活動の回避を含む。いくつかの例では、外傷後ストレス障害の症状は、覚醒の増加、例えば、睡眠及び集中の困難、不安感、ならびにいらしやういこと及び怒りやういことを含む。

【0298】

本明細書で使用される場合、用語「神経変性」は、ニューロンの死を含むがこれらに限定されない、ニューロンの構造または機能の進行性喪失を指す。多くの神経変性疾患（筋萎縮性側索硬化症、パーキンソン病、アルツハイマー病、及びハンチントン病を含む）は、神経変性プロセスの結果として生じる。そのような疾患は、治療不可能であり、ニューロン細胞の進行性変性及び／または死をもたらす。真菌及び植物抽出物を使用してそのような疾患及び病態を処置するためにいくつかの試みがなされてきた。しかし、それらの方法

10

【0299】

本明細書で使用される場合、用語「分離不安障害」は、個体が、発達的に不適切である程度まで、愛着者からの分離に関して恐怖及び／または不安となる病態を指す。いくつかの例では、分離不安障害は、愛着者に危害が及ぶことに関する恐怖または不安を含む。いくつかの例では、分離不安障害は、愛着者からの喪失または分離をもたらす事象の恐怖及び愛着者から離れたがらないことを含む。いくつかの例では、分離不安障害は、苦痛の悪夢及び／または精神的症状を含む。

20

【0300】

本明細書で使用される場合、用語「社交不安障害」は、個体が、観察される可能性を伴う社交的交流及び状況への恐怖、それに対する不安、またはそれを回避する病態を指す。これらの社交的交流及び状況には、知らない人々に会うこと、個体が飲食を観察され得る状況、個体が他人の前でパフォーマンスする状況等が含まれる。いくつかの例では、社交不安障害は、他人によって否定的に評価されること、恥をかかされること、屈辱が与えられること、拒絶されること、及び／または他人を不快にさせることの恐怖によって引き起こされる。

【0301】

本明細書で使用される場合、用語「物質誘導不安障害」は、物質中毒及び／または離脱によってまたは医学的処置に対して不安が引き起こされる病態を指す。いくつかの例では、物質からの離脱は、不安を増加させる。

30

【0302】

本明細書で使用される場合、用語「場面緘黙症」は、会話が期待される社交的状況、例えば、学校、講義、会議等において、個体が他の状況では会話するとしても、個体の一貫した会話不能によって特性化される病態を指す。会話の不能は、学業、職業環境における達成に有意な帰結を有し、及び／またはそうでなければ正常な社交的コミュニケーションを妨げる。

【0303】

いくつかの例では、不安障害は、Diagnostic and Statistical Manual of Medical Disorders, 5th Edからの基準及び分類に基づく医学的診断を含む。いくつかの例では、不安障害は、独立した医学的評価に基づく医学的診断を含む。いくつかの例では、不安障害は、自己評価に基づく医学的診断を含む。

40

【0304】

一実施形態では、本明細書に開示される方法及び組成物は、抗不安薬を投与することを含む。

【0305】

本明細書で使用される場合、用語「抗不安薬」は、神経伝達物質受容体での活性を反応させるまたはそれに影響を及ぼす化合物または組成物、例えば、式Iの化合物、セロトニ

50

ン作動薬、アドレナリン作動性受容体、ドパミン受容体、GABA作動性受容体、グルタミン作動性受容体、ヒスタミン作動性受容体、コリン作動性受容体、オピオイド受容体、またはグリシン作動性受容体等を指す。一実施形態では、抗不安薬は、神経伝達物質受容体に結合する。一実施形態では、抗不安薬は、例えば、神経伝達物質受容体で他の分子の反応性に影響を及ぼす相互作用を介して、神経伝達物質受容体に間接的に影響を及ぼす。一実施形態では、抗不安薬は、アゴニストである。一実施形態では、抗不安薬は、アンタゴニストである。一実施形態では、抗不安薬は、複数のタイプの神経伝達物質受容体で（直接的または間接的のいずれかで）作用する。

【0306】

一実施形態では、抗不安薬は、アルプラゾラム、アルファブロッカー、抗ヒスタミン剤、バルビツール酸、ベータブロッカー、プロマゼパム、カルバメート、クロルジアゼポキシド、クロナゼパム、クロラゼパム、ジアゼパム、フルラゼパム、ロラゼパム、オピオイド、オキサゼパム、テマゼパム、またはトリアゾラムから選択される。

【0307】

本明細書で使用される場合、用語「抑鬱障害」は、所定期間持続する人の思考、行動、感情、及び幸福感に影響を及ぼし得る気分低下及び活動に対する嫌悪の病態を指す。一実施形態では、抑鬱障害は、人の身体的及び精神的機能を破壊する。一実施形態では、抑鬱障害は、生理学的症状、例えば、体重減少、痛みまたは疼痛、頭痛、けいれん、消化問題等を引き起こす。一実施形態では、抑鬱障害は、精神的症状、例えば、永続的悲しみ；不安；絶望及び怒りやすさの感情；罪悪感、無価値、または無力感の感情；趣味及び活動における興味または楽しみの喪失；集中、想起、または決断の困難等を引き起こす。

【0308】

一実施形態では、抑鬱障害は、非定型鬱病、双極性障害、緊張性鬱病、医学的病態に起因する鬱病、大鬱病性障害、産後鬱病、月経前不快気分障害、または季節性情動障害から選択される。

【0309】

本明細書で使用される場合、用語「非定型鬱病」は、個体が気分反応性（すなわち、気分が実際のまたは潜在的な陽性事象に反応して明るくなる）の兆候、有意な体重増加、食欲の増加、過眠、腕または脚における重い鉛のような感覚、及び／または個人間拒絶感受性の長年のパターン（重大な社交的または職業的障害をもたらす）を示す病態を指す。非定型鬱病の例示的な症状には、日々の悲しみまたは落ち込んだ気分；かつて楽しむことができた物事における楽しみの喪失；主要な体重の変化（増加または減少）または食欲の変化；ほぼ毎日の不眠または過眠；身体的落ち着きのなさまたは他人によって気づくことが可能な疲労の状態；日々の疲労またはエネルギーの喪失；ほぼ毎日の絶望、無価値、または過度な罪悪感の感情；ほぼ毎日の集中または決断の問題；死もしくは自殺、自殺計画、または自殺企図の再発する思考が含まれるがこれらに限定されない。

【0310】

本明細書で使用される場合、用語「双極性障害」は、気分、エネルギー、活動レベル、及び日常業務を遂行する能力における異常な変化を個体が経験することを引き起こす病態を指す。双極性障害を有する個体は、異常に強い感情の期間、睡眠パターン及び活動レベルの変化、ならびに異常な行動を経験する。これらの区別される期間は、「気分エピソード」と呼ばれる。気分エピソードは、その人に典型的な気分及び行動とは劇的に異なる。躁病の過度の行動の例示的な症状には、異常な陽気、神経質、または神経過敏な行動；増加した活動、エネルギー、または動揺；誇大な幸福感及び自信；睡眠欲求の減少；異常な多弁；競走思考；散漫性；及び不適切な決断、例えば、散財すること、性的リスクをとること、または愚策な投資を行うことが含まれるがこれらに限定されない。抑鬱エピソード、低い気分の例示的な症状には、落ち込んだ気分、例えば、悲しみ、空虚、絶望、または泣くことの感情；興味の著しい喪失またはすべてまたはほぼすべての活動において喜びを感じないこと；有意な体重減少、体重増加、または食欲の減少もしくは増加；不眠または過眠；落ち着きのなさまたは減速した行動；疲労またはエネルギーの喪失；無価値または

10

20

30

40

50

過剰なもしくは不適切な罪悪感の感情；考えるまたは集中する能力の低下、または優柔不断；及び自殺の思考、計画または企図を含むがこれらに限定されない。

【0311】

本明細書で使用される場合、用語「緊張性鬱病」は、個体が長期間無言及び無動のままであることを引き起こす病態を指す。緊張性鬱病の例示的な症状には、日々生じ得る悲しみの感情、ほとんどの活動における興味の喪失、急激な体重増加または減少、食欲の変化、入眠困難、寝起き困難、落ち着きのなさの感情、怒りやすさ、無価値の感情、罪悪感の感情、疲労、集中困難、思考困難、決断困難、自殺または死の思考、及び／または自殺企図が含まれるがこれらに限定されない。

【0312】

本明細書で使用される場合、用語「医学的病態に起因する抑鬱障害」は、個体が別の疾病によって引き起こされる抑鬱症状を経験する病態を指す。抑鬱障害を引き起こすことが知られている医学的病態の例には、HIV／AIDS、糖尿病、関節炎、脳卒中、脳障害、例えば、パーキンソン病、ハンチントン病、多発性硬化症、及びアルツハイマー病、代謝病態（例えば、ビタミンB12欠乏症）、自己免疫性病態（例えば、ループス及び関節リウマチ）、ウイルス性または他の感染症（肝炎、単核球症、ヘルペス）、背痛、及び所定のがん（例えば、膵臓）が含まれるがこれらに限定されない。

【0313】

本明細書で使用される場合、用語「大鬱病性障害」は、ほとんどの状況にわたって存在する気分の落ち込みの期間によって特性化される病態を指す。大鬱病性障害は、しばしば、低い自尊心、通常は楽しめる活動における興味の喪失、少ないエネルギー、及び明らかな原因のない疼痛を伴う。いくつかの例では、大鬱病性障害は、2週によって特性化される。いくつかの例では、個体は、年を隔てて鬱病の期間を経験する。いくつかの例では、個体は、ほぼ常に存在する鬱病の症状を経験する。大鬱病性障害は、人の個人的、仕事、または学校生活、ならびに睡眠、摂食習慣、及び全般的健康状態に悪影響を及ぼし得る。大鬱病性障害を有する成人の2～7%は、自殺を企図し、自殺を企図する人々の最大で60%は、大鬱病性障害または別の関連する気分障害を有していた。気分変調は、重症度はより低いがより長く続く症状を有する、大鬱病性障害と同じ認知及び身体的問題からなる大鬱病性障害のサブタイプである。大鬱病性障害の例示的な症状には、悲しみ、泣くこと、空虚または絶望の感情；小さな事柄に関することであっても、怒りの爆発、怒りやすさまたはフラストレーション；ほとんどまたはすべての正常な活動における興味または楽しみの喪失；不眠または過眠を含む睡眠障害；疲労及びエネルギーの欠如；食欲減退、体重減少または増加；不安、動揺または落ち着きのなさ；減速した思考、会話、または身体の動き；無価値または罪悪感の感情、過去の失敗に対するこだわりまたは自己非難；思考、集中、決断、及び物覚えの問題；死の頻繁な思考、自殺思考、自殺企図、または自殺；及び原因不明の身体的問題、例えば、背痛または頭痛が含まれるがこれらに限定されない。

【0314】

本明細書で使用される場合、用語「産後鬱病」は、出産及びホルモン変化、親であることに対する精神的調整、及び／または疲労の結果としての病態を指す。産後鬱病は、しばしば、女性に関連するが、男性もまた同様に、産後鬱病に罹患し得る。産後鬱病の例示的な症状には、悲しみ、絶望、空虚、または圧倒されていることの感情；通常よりも頻繁にまたは明らかな理由なく泣くこと；過度に不安を心配することまたは感じること；不機嫌に、怒りやすく、または落ち着きがないと感じること；過眠、または赤ん坊が寝ているときであっても睡眠できないこと；集中すること、詳細を思い出すこと、及び決断することの問題を有すること；怒りまたは激怒を経験すること；通常は楽しめる活動における興味の喪失；頻繁な頭痛、胃障害、及び筋肉痛を含む、身体的痛み及び疼痛に罹患していること；過度に少なくまたは過度に多く摂食すること；友人及び家族から手を引くことまたは回避すること；赤ん坊との情緒的愛着を結びつけることまたは形成することの問題を有すること；赤ん坊を世話する彼または能力を執拗に疑うこと；及び彼ら自身または赤ん坊に危害を加えることに関する思考が含まれるがこれらに限定されない。

【0315】

本明細書で使用される場合、用語「月経前不快気分障害」は、周期の月経前期の間に繰り返し生じ、その月経の開始前後またはその直後に寛解する気分不安定、怒りやすさ、情動不安、及び不安症状を個体が発現する状態を指す。月経前不快気分障害の例示的な症状には、不安定（例えば、気分変動）、怒りやすさまたは怒り、落ち込んだ気分、不安、及び緊張、通常の活動における興味の低下、集中困難、無気力及びエネルギーの欠如、食欲の変化（例えば、過食または特定の食品の欲求）、過眠または不眠、圧倒されたと感じることまたはコントロール不能と感ずること、身体的症状（例えば、乳房圧痛または腫れ、関節または筋肉痛、「膨満」の感覚及び体重増加）、自己卑下の思考、興奮またはイライラしている感情、通常の活動（例えば、仕事、学校、友人、趣味）における興味の低下、主観的集中困難、及び易疲労性が含まれるがこれらに限定されない。

10

【0316】

本明細書で使用される場合、用語「季節性情動障害」は、個体が1年の時間をベースとする気分の変化を経験する病態を指す。いくつかの例では、個体は、秋及び／または冬の季節の間に気分低下、少ないエネルギー、または他の抑鬱症状を経験する。いくつかの例では、個体は、春及び／または夏の季節の間に気分低下、少ないエネルギー、または他の抑鬱症状を経験する。季節性情動障害の例示的な症状には、1日のほとんどまたはほぼ毎日抑鬱に感ずること；かつて楽しめた活動における興味の喪失；低いエネルギーを有すること；睡眠問題を有すること；食欲または体重の変化を経験すること；だるさまたは動揺を感ずること；集中困難を有すること；絶望、無価値、または罪悪感を感ずること；及び死または自殺の頻繁な思考を有することが含まれるがこれらに限定されない。

20

【0317】

一実施形態では、抑鬱障害は、Diagnostic and Statistical Manual of Medical Disorders, 5th Edからの基準及び分類に基づく医学的診断を含む。一実施形態では、抑鬱障害は、独立した医学的評価に基づく医学的診断を含む。

【0318】

一実施形態では、本明細書に開示される方法及び組成物は、抗鬱剤を投与することを含む。

【0319】

本明細書で使用される場合、用語「抗鬱剤」は、神経伝達物質受容体での活性を反応させるまたはそれに影響を及ぼす化合物（複数可）、例えば、式Iの化合物、セロトニン作動薬、アドレナリン作動性受容体、ドパミン受容体、GABA作動性受容体、グルタミン作動性受容体、ヒスタミン作動性受容体、コリン作動性受容体、オピオイド受容体、またはグリシン作動性受容体等を指す。一実施形態では、抗鬱剤は、神経伝達物質受容体に結合する。一実施形態では、抗鬱剤は、例えば、神経伝達物質受容体で他の分子の反応性に影響を及ぼす相互作用を介して、神経伝達物質受容体に間接的に影響を及ぼす。一実施形態では、抗鬱剤は、アゴニストである。一実施形態では、抗鬱剤は、アンタゴニストである。一実施形態では、抗鬱剤は、複数のタイプの神経伝達物質受容体で（直接的または間接的のいずれかで）作用する。

30

40

【0320】

一実施形態では、抗鬱剤は、ブプロピオン、シタロプラム、デュロキセチン、エスシタロプラム、フルオキセチン、フルボキサミン、ミルナシプラム、ミルタザピン、パロキセチン、レボキセチン、セルトラリン、及びベンラファキシンから選択される。

【0321】

本明細書には、頭痛及び／または片頭痛を処置する方法であって、処置を必要とする人を同定すること及び本明細書に開示される組成物を処置を必要とする人に投与することを含む、方法が開示される。

【0322】

本明細書には、ニコチン中毒を処置する方法であって、処置を必要とする人を同定する

50

こと及び本明細書に開示される組成物を処置を必要とする人に投与することを含む、方法が開示される。

【0323】

本明細書には、薬物中毒を処置する方法であって、処置を必要とする人を同定すること及び本明細書に開示される組成物を処置を必要とする人に投与することを含む、方法が開示される。

【0324】

本明細書には、アルコール中毒を処置する方法であって、処置を必要とする人を同定すること及び本明細書に開示される組成物を処置を必要とする人に投与することを含む、方法が開示される。

【0325】

本明細書に開示される組成物は、ヒトにおける強迫性障害、多様な難治性精神障害、慢性鬱病、外傷後ストレス障害、及び薬物またはアルコール依存症の処置のために有用である。本明細書に開示される組成物はまた、多様な状況内の瞑想的、スピリチュアル的、及び宗教的実践の状況において有用である。

【0326】

本明細書で使用される場合、用語「強迫性障害」は、個体が不安、恐怖、不安感等の感情を引き起こす強迫観念を有し、前記不安の感情を軽減するための作業を行うという衝動強迫を有する病態を指す。強迫観念は、それらを無視しまたは立ち向かう個体の努力にもかかわらず、再発し、持続する考えである。いくつかの例では、強迫観念は、不安定が残っている間は生活が通常通りには進まないという考えが付随する全般的な混乱感または緊張感を伴う、比較的曖昧なものである。他の例では、強迫観念はより強く、身近な誰かが死亡する思考またはイメージにとらわれ、または人間関係の正しさに関連した侵入であり得る。他の強迫観念は、自分以外の誰かまたは何か（例えば、神、悪魔、または疾患）が、その人、その人が大切にしている人々または物事のいずれかに危害を加えるという可能性に関するものである。いくつかの例では、個体は、強迫的儀式を行うが、その理由は彼らが、そうしなければならないと説明できないほど感じるからである。いくつかの例では、個体は、特定の強迫観念から生じる不安を和らげるために強迫的儀式を行う。その人は、これらの行動が、恐ろしい出来事が起こることをいくらか防止する、または事象を彼らの思考から遠ざけると感じている。

【0327】

一実施形態では、強迫性障害は、中毒、身体醜形障害、皮膚むしり障害、ため込み障害、強迫性障害、及び抜毛症から選択される。

【0328】

本明細書で使用される場合、用語「中毒」は、物質、活動、及び／または任意の他の習慣に対する身体的及び／または精神的依存性を指す。一実施形態では、中毒は、刺激物、例えば、多量のセロトニンを放出する物質、多量のアドレナリンを放出する活動等に反応する個体の変化した脳科学によって引き起こされる。一実施形態では、中毒は、物質、例えば、薬物、アルコール、ニコチン、食品等に対する依存性である。一実施形態では、中毒は、活動、例えば、ギャンブル、摂食、買い物等に対する依存性である。

【0329】

本明細書で使用される場合、用語「身体醜形障害」は、個体の外見のいくつかの側面が重度に欠陥があり、それを隠すまたは直すための例外的な措置を必要とすることになるという強迫的な観念によって特性化される病態を指す。身体醜形障害の例示的な症状には、他人は見えないまたは軽微に見える外見における認識された欠点に極度に気を取られていること；外見における欠陥が個体を醜いものにするまたは奇形にするという考え；他人が個体の外見を否定的に特別視するまたは個体をあざ笑うという考え；抵抗またはコントロールすることが困難な認識された欠陥を直すまたは隠すことを目的とした行動を行うこと、例えば、頻繁に鏡をチェックすること、手入れすること、または皮膚をむしること；認識された欠点をスタイリング、化粧、または衣服で隠そうとすること；自分の外見を常に

10

20

30

40

50

他人と比較すること；自分の外見について他人から安心感を常に求めること；完璧主義の傾向を有すること；満足度の低い美容処置を頻繁に求めること；社交的状況を回避すること；及び自分の外見に非常に気を取られているので、人の社会生活、仕事、学校、または他の機能分野において大きな苦痛または問題を引き起こすことが含まれるがこれらに限定されない。

【0330】

本明細書で使用される場合、用語「皮膚むしり障害」は、自分の皮膚をむしろうとする繰り返しの衝動を有する病態を指す。いくつかの例では、皮膚むしり障害は、しばしば、損傷が引き起こされる程度まで彼らの皮膚をむしることを引き起こす。

【0331】

本明細書で使用される場合、用語「ため込み障害」は、所有物を廃棄することまたは手放すことが、それらの価値にかかわらず、永続的に困難である病態を指す。ため込み障害の例示的な症状には、所有物を捨てられないこと；品物を廃棄しようとする際の重度の不安；所有物を分類するまたは整理することが非常に困難であること；何を保持すべきか、またはどこに物を置くべきかに関する優柔不断；所有物によって圧倒されるまたは恥ずかしいと感じること等の苦痛；他人が品物に触れることへの疑い；強迫観念及び行動；将来品物がなくなるまたはそれが必要になることへの恐怖；誤って廃棄した物についてゴミ箱をチェックすること；及び機能的障害、例えば、生活空間の喪失、社会的単離、家族または夫婦間の不和、経済的困難、健康危機等が含まれるがこれらに限定されない。

【0332】

本明細書で使用される場合、用語「強迫性障害」は、彼または彼女が何度も繰り返す衝動を感じる制御不能な再発する思考及び行動を個体が有する病態を指す。いくつかの例では、強迫性障害は、細菌、汚れ、または化学物質が個体を汚染するという恐怖を低減するために掃除が必要な個体としてそれ自体が現れ、個体は、彼ら自体を洗浄するのにまたは彼らの周囲を掃除するのに多くの時間を費やす。いくつかの例では、強迫性障害は、不安の払拭を必要とする個体としてそれ自体が現れる。個体は、名前、フレーズを口にし、または行動を数回繰り返し得る。個体はこれらの繰り返しが被害を実際に予防しないと考えているが、繰り返しが行われない場合は危害の恐怖が生じることになる。いくつかの例では、強迫性障害は、例えば、ドアの鍵を閉め忘れることまたは電化製品のスイッチを切り忘れることによって自分でまたは他人によって危害を加えることへの恐怖を低減することを必要とする、確認儀式を作る等の個体としてそれが現れる。いくつかの例では、強迫性障害は、不快感を低減するために彼または彼女の身の回りを整頓及び整列することを必要とする、例えば、物を所定の順序で配置する、家財を特定の手法でまたは左右対称の様式で配置する等の個体としてそれが現れる。いくつかの例では、強迫性障害は、押しつけがましい強迫観念に対応することを必要とする、例えば、不安を低減するためにまたは将来の恐ろしい事象を防止するために祈るまたはフレーズを言う個体としてそれが現れる。いくつかの例では、強迫性障害は、別の医学的病態によって引き起こされる。いくつかの例では、強迫性障害は、物質によって引き起こされる。

【0333】

本明細書で使用される場合、用語「抜毛症」は、毛髪の自己誘発的及び再発的喪失、例えば、自分の毛髪を抜く病態を指す。いくつかの例では、抜毛症は、1つの位置でそれらの髪を引き抜く個体を含む。いくつかの例では、抜毛症は、複数の位置でそれらの髪を引き抜く個体を含む。抜毛症の例示的な症状には、気づくほどの毛髪の喪失をもたらす、自分の毛髪を再発的に抜くこと；毛髪を抜く直前のまたはその行動に抵抗する際の緊張感の増加；毛髪を抜くときの楽しさ、満足感、または安堵感；その障害は別の精神障害によって説明されず、一般的な医学的病態（すなわち、皮膚病変）に起因しない；毛髪を抜くことを減少または停止させるための試みが繰り返されている；障害が社会的、職業的、または他の重要な機能的分野における大きな苦痛または機能不全を引き起こした；コントロールの喪失、金銭的困難、恥かしさの感情を含む苦痛；及び仕事、学校、または他の公共状況の回避による機能不全が含まれるがこれらに限定されない。

【0334】

一実施形態では、強迫性障害は、Diagnostic and Statistical Manual of Medical Disorders, 5th Edからの基準及び分類に基づく医学的診断を含む。一実施形態では、強迫性障害は、独立した医学的評価に基づく医学的診断を含む。

【0335】

いくつかの実施形態では、本明細書に記載の組成物は、セロトニン受容体に作用しない少なくとも1つの化合物をさらに含む。

【0336】

いくつかの実施形態では、本明細書に記載の組成物は、セロトニン作動薬を含み、セロトニン作動薬は、式Iから選択される。いくつかの実施形態では、組成物は、単一のセロトニン作動薬を含む。いくつかの実施形態では、セロトニン作動薬は、式Iの化合物から本質的になる。

10

【0337】

開示される開示は、様々な例示的な実施形態に関して記載されているが、これらの実施形態は、本開示の原理及び適用の説明にすぎないことが理解されるべきである。当業者は、本開示の範囲から逸脱することなく、例示的な実施形態に様々な修飾がなされ得ることを認識するであろう。

【0338】

特定の化合物に言及される場合、本開示はまた、その化合物の塩及び誘導体ならびに分解生成物、例えば、明示的に開示される分子の酸化バージョンを企図することが理解されるべきである。

20

【0339】

その上、本明細書における異なる実施形態の様々な特徴及び／または特性は、互いに組み合わせられ得ることが理解されるべきである。そのため、本開示の範囲から逸脱することなく、例示的な実施形態に多数の修飾がなされ得ること及び他の配置が考案され得ることを理解されたい。

【0340】

さらに、本開示の他の実施形態は、本明細書に開示される本開示の明細書及び実践の考慮から当業者に明らかになる。明細書及び実施例は、例示にすぎないものとして考慮され、範囲及び趣旨は、特許請求の範囲によって示されることが意図される。

30

【0341】

本明細書では、任意の濃度範囲、パーセンテージ範囲、比範囲、または整数範囲は、別途示されない限り、記述される範囲内の任意の整数、及び適切な場合、その分数（整数の10分の1及び100分の1等）の値も含むことを理解されたい。本明細書で使用される場合、用語「約」及び「およそ」は、別途示されない限り、示される範囲、値、または構造の平均±20%、±10%、±5%、または±1%を意味する。

【実施例】

【0342】

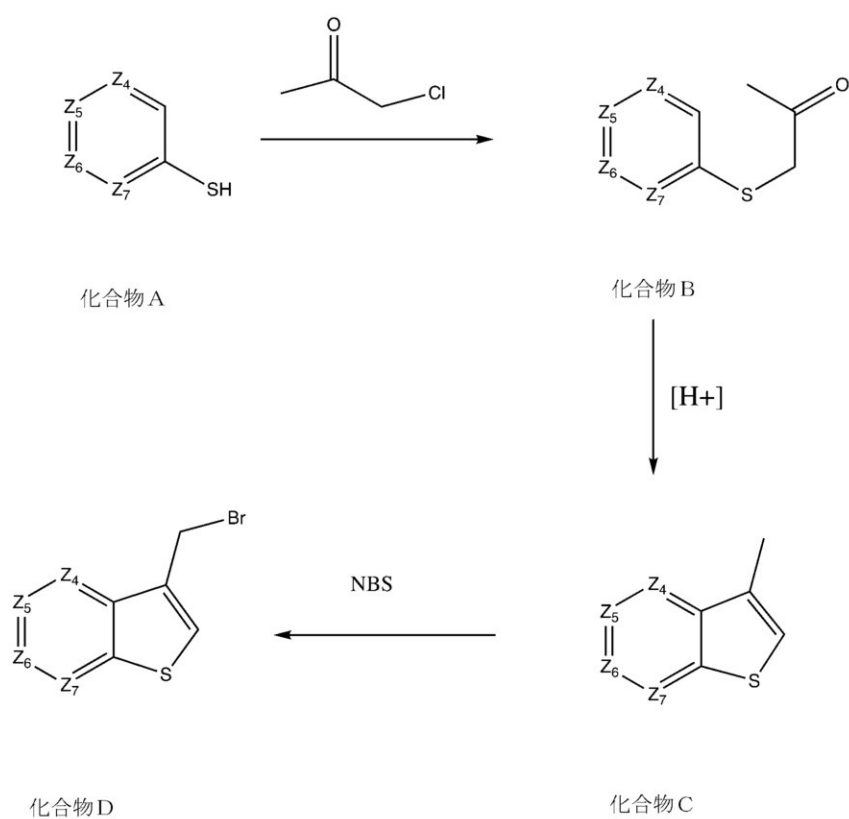
合成スキームA：ベンゾチオフエン及びチエノピリジンアナログ

40

式Iのベンゾチオフエン及びチエノピリジン化合物は、以下の例示的な手法で合成され得る：

スキーム1A

【化 1 3】



10

20

【0 3 4 3】

化合物 A であるチオフェノール出発化合物をクロロアセトンでアルキル化し、得られたチオエーテル（化合物 B）を脱水酸性条件下で環状化して 3-メチルベンゾチオフェン中間体（化合物 C）を生成する。次いで化合物 C を N-ブロモスクシンイミド（NBS）で一臭素化して、3-ブロモメチルベンゾチオフェンである化合物 D を提供する。

30

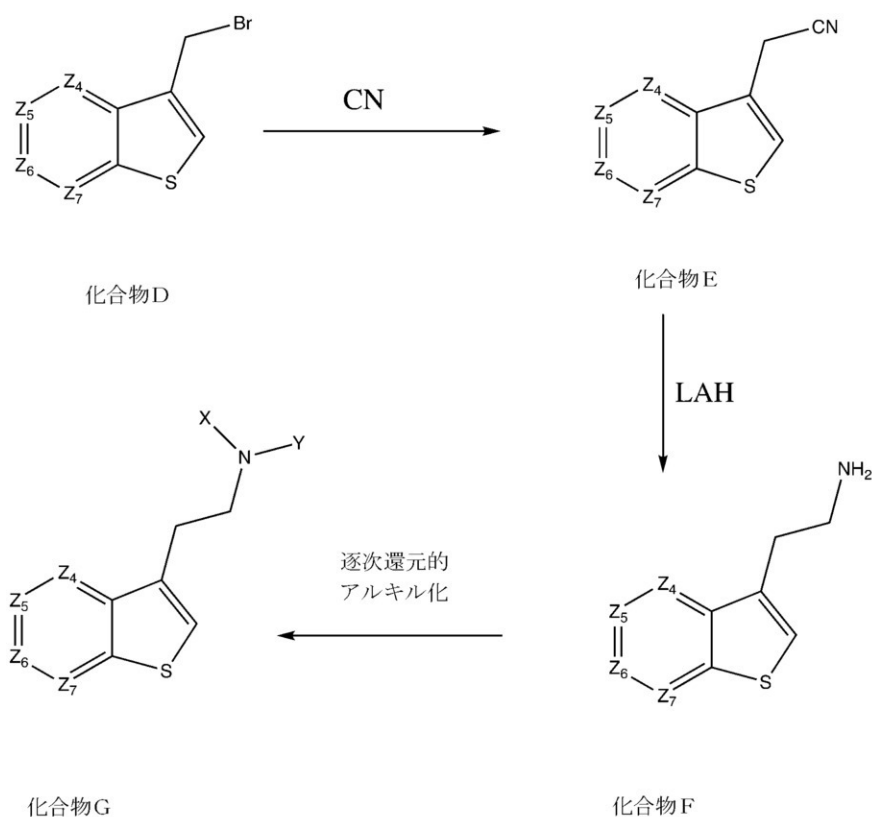
【0 3 4 4】

スキーム 2 A

40

50

【化 1 4】



10

20

【0345】

ニトリル中間体である化合物Eを、化合物Dの臭素のシアン化物での求核置換によって調製する。次いでニトリル基をEt₂O中の水素化アルミニウムリチウムで還元して、3-アミノエチルベンゾチオフェン中間体化合物Fを提供する。そこから、単一還元的アルキル化を好適な溶媒（例えば、THF、DCM等）中の対応するアルデヒドX-CHOを使用して形成して、第2級アミン残渣及び表1に列挙される参照319及び320等の化合物を形成し得る。その後、アルデヒドY-CHOを使用した還元的アルキル化を使用して、化合物Gのジアルキル化バリエーションを調製し得る。

30

【0346】

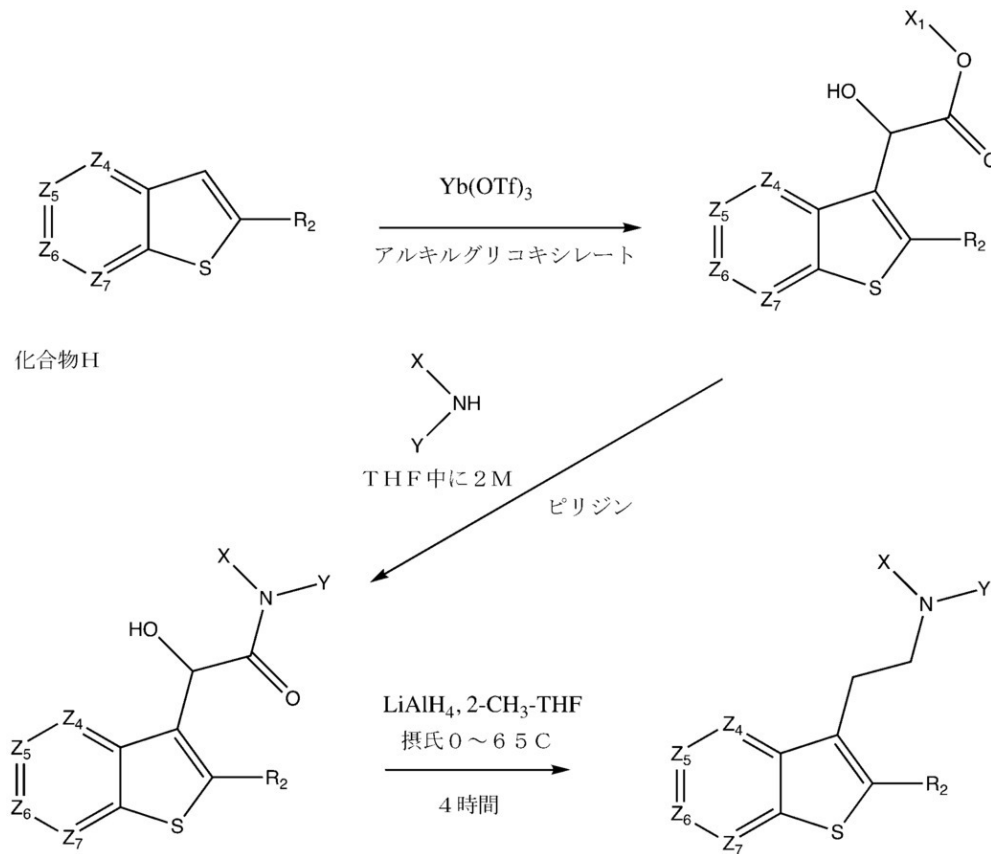
スキーム3A

化合物Hによって一般的に表される化合物を含む本開示のベンゾチオフェン及びチエノピリジン化合物の多数のバリエーションは、会社から商業的に購入される出発物質（Sigma-Aldrich（登録商標）（例えば、ベンゾチオフェン、2-メチルチアフェン、ベンゾチオフェン-2-メタノール）、Fisher Scientific（登録商標）（例えば、5-メチルベンゾチオフェン）、SpiroChem（例えば、7-メトキシ-5-メチルベンゾチオフェン））から合成され、次いでZhang et al., J. Org. Chem. 2000, 65, 4732-4735（その全体が参照により本明細書に組み込まれる）に示される方法に従って使用され得る。その例示的なスキームは、以下に示される（式中、X₁は、対応するアルキルグリオキシレートに由来するアルキル基（例えば、C₁-C₈アルキル、例えば、メチルまたはエチル）である）：

40

50

【化 1 5】



10

20

【0347】

いくつかの実施形態では、式 I の化合物（式中、W₁ は、S（O）または SO₂ である）、そのような化合物は、それらの化合物のチオ前駆体（すなわち、W₁ = S）から開始し、チオ前駆体を酸化条件、例えば、Thiemann et al., “The chemistry of thiophene S-oxides and related compounds,” Issue 5th Eurasian Conference on Heterocyclic Chemistry, ARKIVOC 2009 (ix) 96-113（すべての目的のために参照により本明細書に組み込まれる）に示されるものに供することによって調製され得る。

30

【0348】

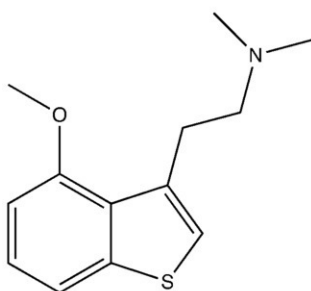
実施例 1 A。

4-メトキシ-3-N,N-ジメチルアミノエチルベンゾチオフェン（別名 4-メトキシ Thiopsil（商標））の生成

40

50

【化 1 6】



10

4-メトキシThiopsil (商標)

【0349】

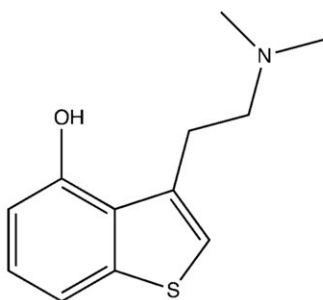
3-メチルチオフェノールを化合物Aとして使用し、スキーム1Aを遂行して4-メトキシ-3-ブプロモメチルベンゾチオフェン（化合物Dとしてされる）を提供する。スキーム2Aを介して、化合物Dをシアン化物塩と反応させて4-メトキシ-3-シアノメチルベンゾチオフェン（化合物Eとして使用される）を提供する。化合物Eを次いでLiAlH₄で還元して4-メトキシ-3-アミノエチルベンゾチオフェン（化合物F）を提供し、これを次いで好適な溶媒（例えば、THF、DCM等）を使用して2つの別々の工程で対応するアルデヒドX-CHO及びY-CHOを使用して還元的にアルキル化し、続いて粗製反応混合物を水性後処理し、シリカゲルカラムクロマトグラフィーを介して精製して、4-メトキシ-3-N,N-ジメチルアミノエチルベンゾチオフェンを提供する。

20

【0350】

実施例2A。4-ヒドロキシ-3-N,N-ジメチルアミノエチルベンゾチオフェン（別名Thiopsil (商標)）の生成

【化 1 7】



30

Thiopsil (商標)

【0351】

25mlの乾燥DMF中のNaH（0.024mol）の懸濁液に、エタントオール（0.024mol）を0℃で窒素及び激しい攪拌下で添加する。1時間後、20mlの乾燥DMF中の実施例1の生成物（0.01mol）の溶液を一度にすべて添加し、反応混合物を1時間還流する。溶媒を真空下で除去し、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー（EtOAc／ヘキサン）を介して精製して、4-ヒドロキシ-3-N,N-ジメチルアミノエチルベンゾチオフェン（別名Thiopsil）を提供する。

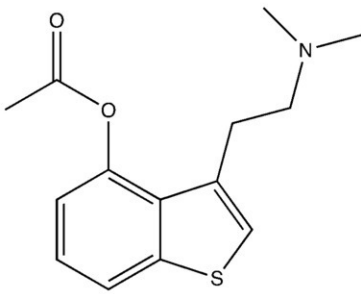
40

【0352】

実施例3A。4-アセトキシ-3-N,N-ジメチルアミノエチルベンゾチオフェン（別名Thiopsilacetin (商標)）の生成

50

【化 18】



10

Thiopsilacetin (商標)

【0353】

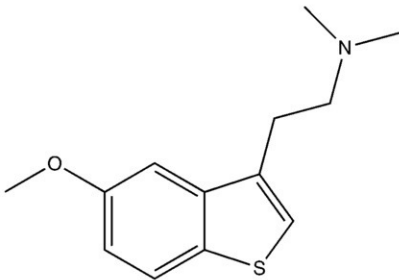
窒素ブランケット下の25℃で攪拌されたピリジン中の実施例2Aの生成物(0.01 mol)の溶液に、ピリジン(0.012 mol)中の触媒量のDMAP及びAc₂O(0.011 mol)を添加する。攪拌を1時間継続する。水性後処理でクエンチした後、溶媒を真空下で除去し、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーを介して精製してThiopsilacetinを提供する。

【0354】

実施例4A。5-メトキシ-3-N,N-ジメチルアミノエチルベンゾチオフェン(別名Bufothiophene(商標))の生成

20

【化 19】



30

Bufothiophene (商標)

【0355】

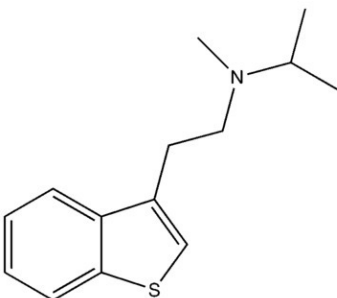
実施例1Aの合成手順を、4-メチルチオフェノール酸を出発物質として用いて繰り返して、5-メトキシ-3-N,N-ジメチルアミノエチルベンゾチオフェンを生成する。

【0356】

実施例5。N-イソプロピル-N-メチルアミノエチルベンゾチオフェンの生成

【化 20】

40



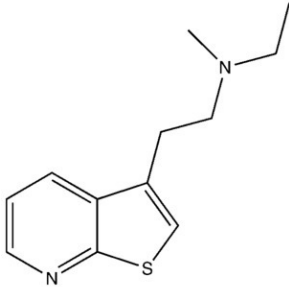
【0357】

50

実施例 1 1 A の合成手順を、イソプロピルメチルアミンを第 2 級アミンとして使用して繰り返して、N-イソプロピル-N-メチルアミノエチルベンゾチオフエンを提供した。

【0358】

実施例 6 A。N-エチル-N-メチルアミノエチルベンゾチオフエンの生成
【化 2 1】



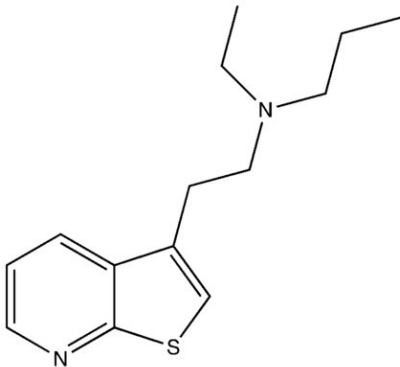
10

【0359】

実施例 1 A の合成手順を、2-メルカプトピリジンを出発物質として用い、 $\text{CH}_3\text{-CHO}$ 及び $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{-CHO}$ をアルキル化剤として用いて繰り返して、N-エチル-N-メチルアミノエチルチオフエノ [2, 3-b] ピリジン標的化合物を生成する。

【0360】

実施例 7 A。N-エチル-N-プロピルアミノエチルベンゾチオフエンの生成
【化 2 2】



30

【0361】

実施例 1 A の合成手順を、2-アミノ-3-ピリジンカルボン酸を出発物質として用い、 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{-CHO}$ 及び $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_2\text{-CHO}$ をアルキル化剤として用いて繰り返して、N-エチル-N-プロピルアミノエチルチオフエノ [2, 3-b] ピリジン標的化合物を生成する。

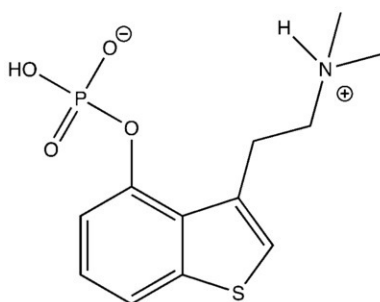
【0362】

実施例 8 A。3-(N,N-ジメチルアミノエチル)ベンゾ [b] チオフエン-4-イルホスフェート (別名 Thio cy bin (商標)) の生成

40

50

【化 2 3】



Thiocybin (商標)

10

【0363】

2000 mL の 4 口丸底フラスコに、オーバーヘッド攪拌機、J-Kem 温度コントローラー、100 mL の滴下漏斗、及び正圧の乾燥 N_2 が挿入されるゴムセブタムを備える。セブタムを除去し、フラスコに実施例 2 A の方法に従って生成された Thiopside (60.2 mmol) 及び無水 THF (500 mL) を順次に入れる。混合物を 15 分間攪拌し、フラスコを固体 CO_2 / アセトン冷却浴において $-78^\circ C$ で浸漬する。反応の内部温度が $-67^\circ C$ に達した時、ヘキサン中の 2.5 M の BuLi 溶液 (28.9 mL、72.3 mmol) を数分の時間にわたって滴下して添加し、 $-60^\circ C$ 未満の読み取り内部温度で維持する。反応混合物を 10 分間攪拌した後、テトラベンジルピロリン酸塩 (35.7 g、66.2 mmol) を一度に添加し、混合物をよく攪拌する。1.5 時間後、固体 CO_2 / アセトン冷却浴を除去し、温度を 2 時間にわたって $-25^\circ C$ に徐々に上昇させる。

20

【0364】

アミノ結合シリカゲル (30 g) を一度に添加し、反応物を EtOAc (600 mL) で希釈する。混合物をセライトのパッドを介して濾過し、EtOAc (400 mL) で洗浄する。フィルターケーキを EtOAc (400 mL) で 10 分間再スラリー化し、再度濾過する。組み合わせた濾液を濃縮し、500 mL の一口丸底フラスコに移す。必要に応じて、得られた油を DCM (100 mL) に再溶解し、ヒートガンで沸騰するまで 5 分間加熱する。フラスコを室温にし、次いで $4^\circ C$ で一晩保持する。粗製反応生成物 (双性イオン沈殿物) をブフナー漏斗を介して濾過し、次いで DCM (4 Å ~ 100 mL) でトリチュレートする。次いで双性イオン沈殿物を 250 mL の一口丸底フラスコに移し、真空オープン内で $40^\circ C$ で一晩完全に乾燥させて、ベンジル {3-[2-(ベンジルジメチルアンモニオ)エチル]-ベンゾ[b]チオフェン-4-イル} ホスフェートを提供する。

30

【0365】

2000 mL の丸底フラスコに先行段落における方法に従って生成されたベンジルホスフェート生成物 (35.6 mmol) を添加し、続いて CH_3OH (1200 mL) を添加する。混合物を脱気し、 N_2 を再充填する。10% の Pd/C (1.1 g) を添加し、混合物を脱気し、 H_2 バルーンを 1 気圧で再充填する。反応混合物を一晩室温で攪拌する。フラスコを脱気し、 N_2 を再充填し、懸濁液をブフナー漏斗を介してセライトのパッドを介して濾過する。フィルターパッドを CH_3OH (500 mL) で洗浄し、濾液を濃縮し、真空下で一晩乾燥させて粗製固体を得る。粗製固体を i-PrOH (200 mL) に懸濁し、30 分間煮沸し、次いで高温 ($50 \sim 60^\circ C$) で濾過する。収集された固体をアセトンで洗浄して着色した固体を得る。固体を次いで 25% CH_3OH / i-PrOH に懸濁し、30 分間煮沸し、高温で濾過し、25% CH_3OH / i-PrOH で洗浄して、Thiocybin 生成物である着色した固体を得る。

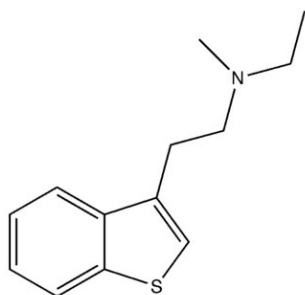
40

【0366】

実施例 9 A. N-エチル-N-メチルアミノエチルベンゾチオフェンの生成

50

【化 2 4】



10

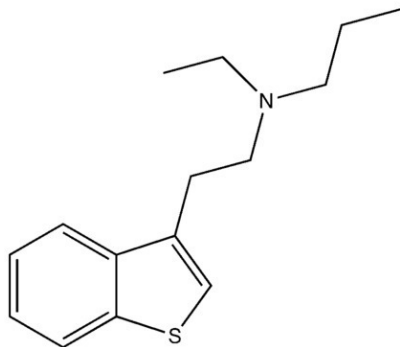
【0 3 6 7】

実施例 1 6 A の合成手順を、エチルメチルアミンを第 2 級アミンとして使用して繰り返して、所望の生成物を良好な収率で提供した。

【0 3 6 8】

実施例 1 0 A。N-エチル-N-プロピルアミノエチルベンゾチオフエンの生成

【化 2 5】



20

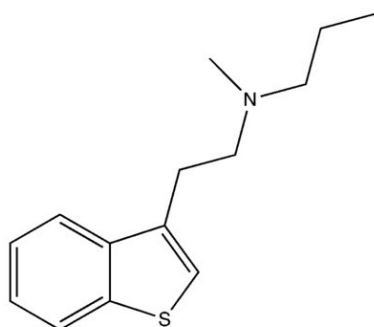
【0 3 6 9】

実施例 1 1 A の合成手順を、エチル-n-プロピルアミンを第 2 級アミンとして使用して繰り返して、N-エチル-N-プロピルアミノエチルベンゾチオフエンを提供した。

【0 3 7 0】

実施例 1 1 A。N-メチル-N-n-プロピルアミノエチルベンゾチオフエンの生成

【化 2 6】



40

【0 3 7 1】

ガラス攪拌棒を備え、かつ 5 mol % のイッテルビウムトリフレートを含有する乾燥反応フラスコにベンゾ [b] チオフエン (1 eq.) を窒素下で入れた。余剰のエチルグリオキシレートを経留し (以下に示される方法に従う*)、直接的に反応フラスコに収集し

50

た。反応物を窒素下で室温で24時間攪拌した。得られた粗製エステル中間体を真空下で濃縮し、5：1のEtOAc：ヘキサンを使用してフラッシュクロマトグラフィーを介して精製した。

【0372】

精製されたエステル中間体を乾燥反応フラスコに窒素下に入れ、続いて無水メタノール及び1.2eqの第2級アミンメチル*n*-プロピルアミンを入れた。反応物を室温で24時間またはTLC（9：1のDCM：MeOH）によって判断される場合にエステルが消費されるまで攪拌した。

【0373】

粗製乾燥ヒドロキシアミド中間体を、攪拌棒を含有する反応フラスコに窒素下に入れた。これに、2Me-THFと、続いて2Me-THF中のLiAlH₄の2.0M溶液として3eqのLiAlH₄を1分にわたって添加した。反応はわずかに発熱し、次いで65℃に4時間加熱した。反応混合物を次いで0～20℃に冷却し、THF/H₂O（4：1）で攪拌下で約30分間徐々にクエンチした。反応混合物を次いでDCM/MeOH（9：1）で慎重に希釈し、次いでセライトのパッドを介して濾過した。濾過された溶液を次いで減圧下で濃縮し、5：1のEtOAc：ヘキサンを使用してフラッシュクロマトグラフィーを介して精製して所望の生成物を無色の油として提供した。

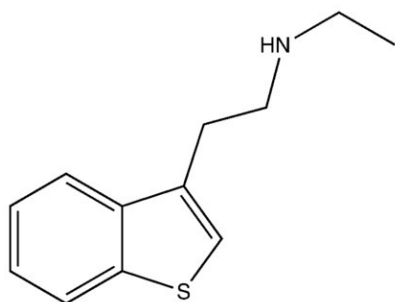
【0374】

*トルエン（Fluka）中の50%エチルグリオキシレートオリゴマーを、短い（2in）Vigreuxカラム及び油浴温度130～185℃（30分の時間にわたって徐々に上昇させた）を使用してわずかな残渣のみが残るまで大気圧で蒸留した。最初の数mLを廃棄し、次いで全量を収集した。トルエン-エチルグリオキシレート混合物を含有する得られた黄色がかった蒸留物を30Torrで直ちに再蒸留した。トルエン反応後、純粋なエチルグリオキシレートを48～50℃/30Torrで蒸留した。

【0375】

実施例12A。N-エチルアミノエチルベンゾチオフェンの生成

【化27】

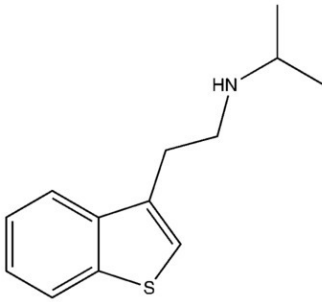


【0376】

0℃のMeCN（10mL）中の実施例15Aの方法に従って調製されたカルバルデヒド（1mmol）の激しく攪拌した溶液に、EtNH₃Cl（5mmol）及びNaOAc（5mmol）を添加した。反応混合物を0℃で15分間攪拌してから、余剰のNaHB（OAc）₃を添加した。反応混合物を0℃で5時間攪拌してから、一晚室温に徐々に温めた。反応混合物を1M HClの添加によってクエンチし、ジエチルエーテルで希釈した。相を分離し、有機相を1M HCl（x2）で洗浄した。組み合わせた酸性水相を固体NaOHの添加によって塩基性化した。水相をDCM（x3～5）で抽出し、無水硫酸ナトリウムで乾燥させた。濾過後、溶媒を真空中で除去して粗製油を得た。標的化合物をシリカゲルカラムクロマトグラフィー（DCMをロードし、1%MeOH/DCM、次いで1%NEt₃がドープされた5%MeOH/DCMで溶出する）によって黄褐色がかった固体として精製した。

【0377】

実施例 13 A。N-イソプロピルアミノエチルベンゾチオフェンの生成
【化 28】



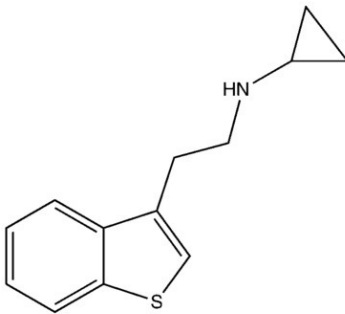
10

【0378】

実施例 16 A の合成を繰り返し、イソプロピルアミンをアミンとして使用して、標的化合物を黄褐色がかった半固体として 65% の収率で得た。

【0379】

実施例 14 A。N-シクロプロピルアミノエチルベンゾチオフェンの生成
【化 29】



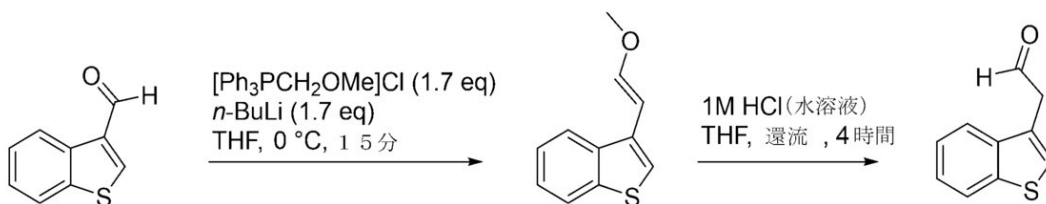
20

【0380】

実施例 16 A の合成手順を、第 2 級アミンをシクロプロピルアミンと置き換えることを除いて繰り返して、所望の生成物を生成する。

【0381】

実施例 15 A。ベンゾチオフェン伸長カルバルデヒド中間体の生成
【化 30】



40

【0382】

0 °C の THF 中のウィッティヒ塩 (3.60 g、10.5 mmol、1.7 eq) の攪拌懸濁液に、n-BuLi 溶液 (4.2 mL、10.5 mmol、1.7 eq、ヘキサン中に 2.5 M) を滴下して添加した。得られた反応混合物は、均質で赤色になった。カルバルデヒド (1.0 g、6.2 mmol、1.0 eq) を固体として一度に反応混合物に添加した。15 分後、反応混合物をジエチルエーテルによって希釈し、1 M HCl (水溶液) でクエンチした。相を分離し、水性相をジエチルエーテル (x 2) で抽出した。組

50

み合わせた有機抽出物を水及びブラインで洗浄し、無水硫酸ナトリウムで乾燥させた。濾過後、溶媒を真空中で除去した。カラムクロマトグラフィー（PhMeをロードし、ヘキサン中の0～5%酢酸エチルで溶出する）によって粗製物からエノールエーテルを淡黄色の油（862mg、73%）として単離することができた。

【0383】

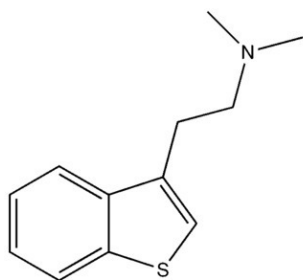
THF（12.8mL）中のエノールエーテル（607mg、3.19mmol、1.0eq）の溶液に1M HCl（水溶液19.2mL）を添加した。反応混合物を4時間還流してから、室温に冷却し、水及びジエチルエーテルで希釈した。相を分離し、水性相をジエチルエーテル（x2）で抽出した。組み合わせた有機抽出物を水及びブラインで洗浄し、無水硫酸ナトリウムで乾燥させた。濾過後、溶媒を真空中で除去して、所望の伸長カルバルデヒドである粗製油（553mg）を得た。

10

【0384】

実施例16A。N，N-ジメチルアミノエチルベンゾチオフェンの生成

【化31】



20

【0385】

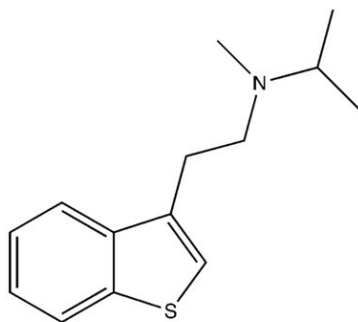
アセトニトリル（0.1M）中の実施例15Aの方法に従って生成された標的伸長カルバルデヒド（1.0eq）の溶液にジメチルアミン（2～5eq）及び活性化ホール3AMSの数個のビーズを添加した。室温で10分間攪拌した後、NaHB(OAc)₃（>5eq）を一度に添加した。反応混合物を18～24時間室温で攪拌してから、1M HClの添加によってクエンチし、ジエチルエーテルで希釈した。相を分離し、有機相を1M HCl（x2）で洗浄した。組み合わせた水相を固体NaOHの添加によって塩基性化した。水相をDCM（x3）で抽出し、組み合わせたDCM洗浄物を無水硫酸ナトリウムで乾燥させた。カラムクロマトグラフィー（DCMから1%MeOH／DCMで主要な不純物を除去し、次いで約1%NEt₃がドープされた5%MeOH／DCMで溶出する）での精製によって分析的純度が達成されて生成物を無色の油として得た。

30

【0386】

実施例17A。N-イソプロピル-N-メチルアミノエチルベンゾチオフェンの生成

【化32】



40

【0387】

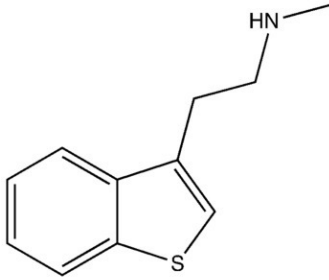
50

実施例 16 A の合成手順を、イソプロピルメチルアミンを第 2 級アミンとして使用して繰り返して、所望の生成物を無色の油として 68 % の収率で提供した。

【0388】

実施例 18 A。N-メチルアミノエチルベンゾチオフェンの生成

【化33】



10

【0389】

実施例 12 A の方法を、メチルアミン塩酸塩を第 1 級アミンとして使用して繰り返して、標的化合物を 61 % の収率でオフホワイト色の固体として得た。

【0390】

実施例 19 A。ヒドロフマル酸塩（別名 [1 : 1] フマル酸塩）の生成

20

化合物の各 1 つの [1 : 1] ヒドロフマル酸塩を、以下の手順を使用して実施例 1 ~ 7 A、9 ~ 14 A、及び 16 ~ 18 A の化合物から別々に生成する：

1 当量の遊離塩基生成物をアセトンに溶解し、アセトン中のフマル酸（1 当量）の溶液に滴下して添加する。沈殿物が直ちに形成し、沈殿物／アセトンを -20°C で一晩保存する。固体を次いで濾過し、氷冷アセトンで洗浄して所望の結晶性ヒドロフマル酸塩を生成する。

【0391】

実施例 20 A。フマル酸塩（別名 [2 : 1] フマル酸塩）の生成

化合物の各 1 つの [2 : 1] フマル酸塩を、以下の手順を使用して実施例 1 ~ 7 A、9 ~ 14 A、及び 16 ~ 18 A の化合物から別々に生成する：

30

1 当量の遊離塩基生成物をアセトンに溶解し、アセトン中のフマル酸（0.5 当量）の溶液に滴下して添加する。沈殿物が直ちに形成し、沈殿物／アセトンを -20°C で一晩保存する。固体を次いで濾過し、氷冷アセトンで洗浄して所望の結晶性フマル酸塩を生成する。

【0392】

合成スキーム B：

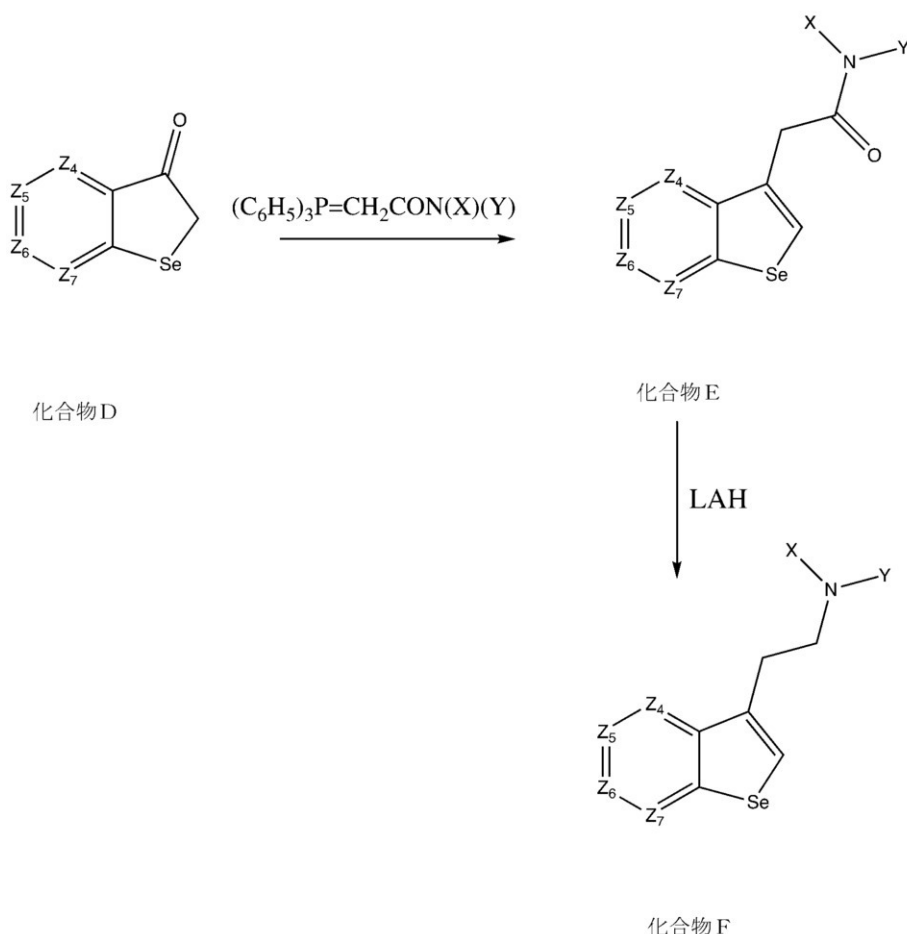
ベンゾセレノフェン及びセレノフェノピリジンアナログ

以下に示されるように、化合物 A 出発物質は、式 I のベンゾセレノフェン及びセレノフェノピリジン化合物に変換され得る：

スキーム 1 B

40

【化 3 5】



10

20

【0396】

ジアルキルカルバモイルメチレントリフェニルホスホラン調製：トリフェニルホスフィン及び所望のジアルキルクロロアセトアミドの溶液を2時間還流する。冷却後、固体を濾過し、空気乾燥させる。ホスホニウム塩中間体の白色結晶が得られる。ホスホニウム塩を水及びCHCl₃に懸濁する。NaOHの滴下添加後、混合物を2時間激しく攪拌する。溶媒のデカンテーション及び除去後、固体を再結晶化してホスホラン中間体を提供する。

30

【0397】

セレノインドキシル中間体である化合物Dをホスホランと組み合わせ、乾燥トルエン中で24時間窒素下で還流する。溶媒の除去後、残渣を再結晶化してアミド化合物Eを提供し、これをクロマトグラフィーによってさらに精製し得る。

【0398】

乾燥THF（50ml）中のLiAlHの懸濁液に、乾燥THF中のアミド化合物Eの溶液を滴下して添加する。混合物を1時間還流し、冷却し（0℃）、水及びNaOHで連続的に加水分解する。塩の濾過後、ケーキをTHFで洗浄し、有機相を乾燥させ、真空下で蒸発させて化合物Fを生成する。

40

【0399】

所定の実施形態では、化合物Fは、R₄またはR₅でアルコキシ基（例えば、メトキシ）を含み得る。アルコキシ残基をヒドロキシル基に変換するために、化合物Fを乾燥DMF中のNaHで処理し得ると共に、エタノールを0℃で窒素及び激しい攪拌下で添加する。1時間後、乾燥DMF中の化合物Fの溶液を一度にすべて添加し、反応混合物を1時間還流する。溶媒を真空下で除去し、残渣を水で希釈する。抽出及びカラムクロマトグラフィーは、精製された化合物を提供し得る。

50

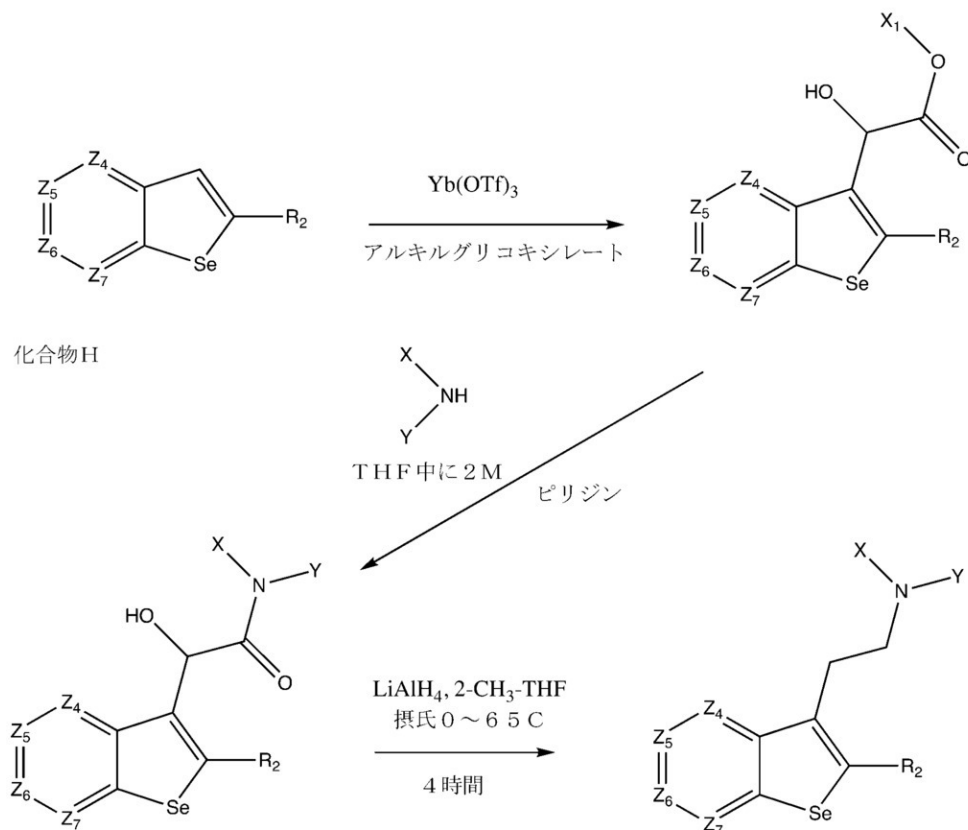
【0400】

スキーム3B

化合物Hによって一般的に表される化合物を含む、本開示のベンゾセレノフェン及びセレノフェノピリジン化合物の多数のバリエーションは、Accella（登録商標）等の会社から商業的に購入される出発物質、例えば、ベンゾセレノフェンから合成され、次いでZhang et al., J. Org. Chem. 2000, 65, 4732-4735（その全体が参照により本明細書に組み込まれる）に示される方法に従って使用され得る。その例示的なスキームは、以下に示される（式中、X₁は、対応するアルキルグリオキシレートに由来するアルキル基（例えば、C₁-C₈アルキル、例えば、メチルまたはエチル）である）：

10

【化36】



20

30

【0401】

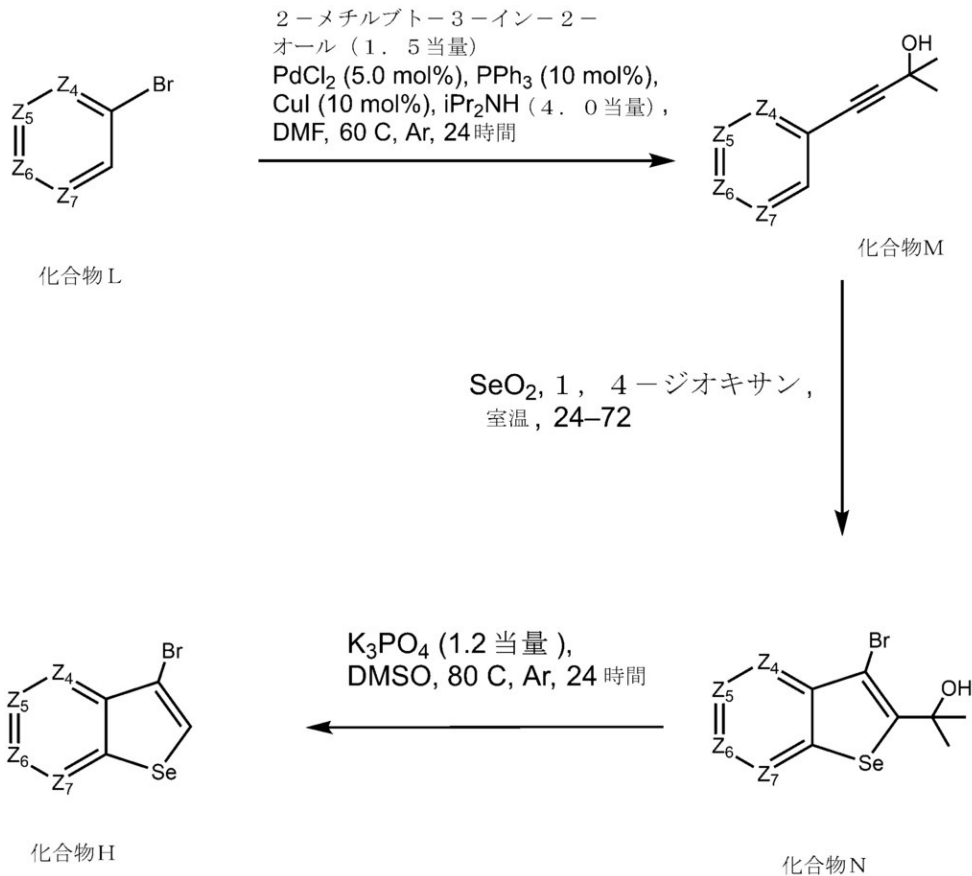
スキーム4B

化合物Oによって一般的に表される化合物を含む、本開示のベンゾセレノフェン及びセレノフェノピリジン化合物の多数のバリエーションは、Accella（登録商標）等の会社から商業的に購入される出発物質、例えば、ブロモベンゼンから合成され、次いでE. Paegle, et al., Chem Asian J 2016 Vol. 11 Issue 13 Pages 1929-38（その全体が参照により本明細書に組み込まれる）に示される方法に従って使用され得る。例示的なスキームが以下に示される。

40

50

【化 3 7】



10

20

30

40

50

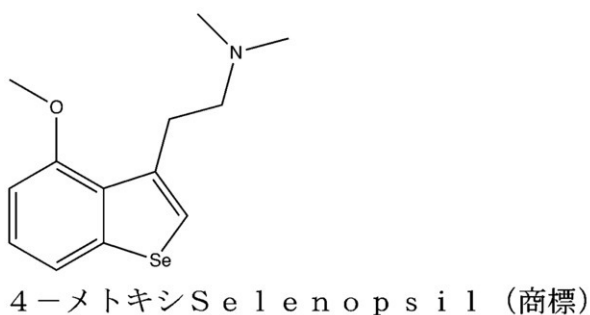
【0402】

いくつかの実施形態では、式 I の化合物（式中、 W_1 は、 $\text{Se}(\text{O})$ または SeO_2 である）、そのような化合物は、それらの化合物のセレノ前駆体（すなわち、 $W_1 = \text{Se}$ ）から開始し、セレノ前駆体を酸化条件、例えば、Nakayama et al., “Oxidation of Tetraarylselenophenes and Benzo[b]selenophene with m-Chloroperbenzoic Acid,” Chemistry Letters, 495 (1995)（すべての目的のために参照により本明細書に組み込まれる）に示されるものに供することによって調製され得る。

【0403】

実施例 1 B。4-メトキシ-3-N, N-ジメチルアミノエチルベンゾセレノフェン（別名 4-メトキシ Selenopsil（商標））の生成

【化 3 8】



【0404】

6-メトキシアントラニル酸を化合物 A として使用し、スキーム 1 B を遂行して、4-

メトキシベンゾ [b] セレノフェン-3 (2h) -オン (化合物 D として使用される) を提供する。スキーム 2 B を介して、化合物 D を、トリフェニルホスフィン及びジメチルクロロアセトアミドから調製される所望のホスホランと反応させて、4-メトキシ-N, N-ジメチルベンゾ [b] セレノフェン-3-アセトアミド (化合物 E として使用される) を提供する。次いで化合物 E を LiAlH_4 で還元してスキーム 2 を完了させ、4-メトキシ Selenopsil の粗製反応混合物を提供し、これをクエンチし、水性後処理を介して抽出し、シリカゲルカラムクロマトグラフィー (EtOAc / ヘキサン) を介して精製して、4-メトキシ-3-N, N-ジメチルアミノエチルベンゾセレノフェンを提供する。

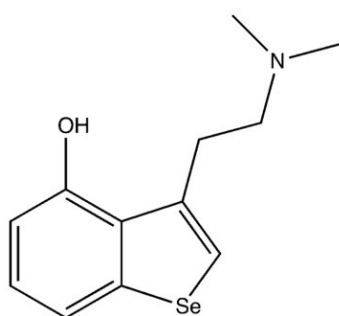
【0405】

10

実施例 2 B。4-ヒドロキシ-3-N, N-ジメチルアミノエチルベンゾセレノフェン (別名 Selenopsil (商標)) の生成

【化 39】

20



Selenopsil (商標)

【0406】

25 ml の乾燥 DMF 中の NaH (0.024 mol) の懸濁液に、エタントール (0.024 mol) を 0°C で窒素及び激しい攪拌下で添加する。1 時間後、20 ml の乾燥 DMF 中の実施例 1 の生成物 (0.01 mol) の溶液を一度にすべて添加し、反応混合物を 1 時間還流する。溶媒を真空下で除去し、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー (EtOAc / ヘキサン) を介して精製して、4-ヒドロキシ-3-N, N-ジメチルアミノエチルベンゾセレノフェン (別名 Selenopsil) を提供する。

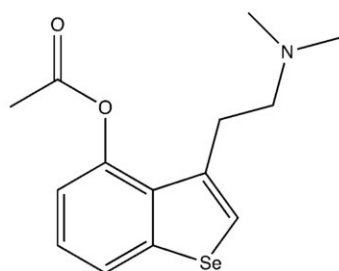
30

【0407】

実施例 3 B。4-アセトキシ-3-N, N-ジメチルアミノエチルベンゾセレノフェン (別名 Selenopsilacetin (商標)) の生成

【化 40】

40



Selenopsilacetin (商標)

【0408】

窒素ブランケット下の 25°C で攪拌されたピリジン中の実施例 2 B の生成物 (0.01 mol) の溶液に、ピリジン (0.012 mol) 中の触媒量の DMAP 及び Ac_2O (0.011 mol) を添加する。攪拌を 1 時間継続する。水性後処理でクエンチした後、

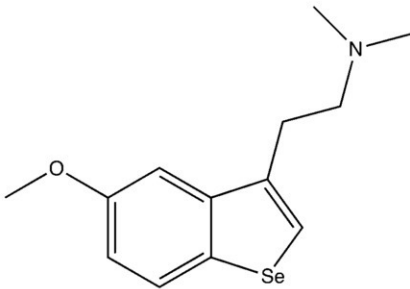
50

溶媒を真空下で除去し、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーを介して精製して **Selenopsilacetin** を提供する。

【0409】

実施例 4 B。5-メトキシ-3-N,N-ジメチルアミノエチルベンゾセレノフェン（別名 **Bufoselenophene**（商標））の生成

【化 4 1】



10

Bufoselenophene（商標）

【0410】

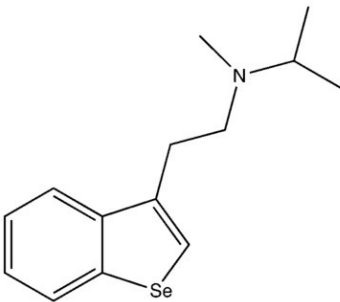
実施例 1 B の合成手順を、5-メトキシアントラニル酸を出発物質として用いて繰り返して、5-メトキシ-3-N,N-ジメチルアミノエチルベンゾセレノフェンを生成する。

20

【0411】

実施例 5 B。N-イソプロピル-N-メチルアミノエチルベンゾセレノフェンの生成

【化 4 2】



30

【0412】

実施例 1 1 B の合成手順を、イソプロピルメチルアミンを第 2 級アミンとして使用して繰り返して、N-イソプロピル-N-メチルアミノエチルベンゾセレノフェン標的化合物を提供した。

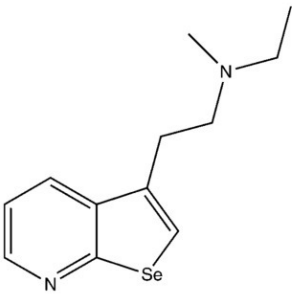
【0413】

実施例 6 B。N-エチル-N-メチルアミノエチルベンゾセレノフェン [2, 3-b] ピリジンの生成

40

50

【化 4 3】



10

【 0 4 1 4 】

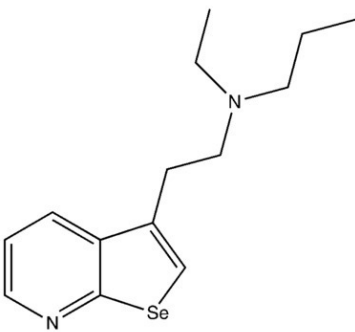
実施例 1 B の合成手順を、出発物質としての 2-アミノ-3-ピリジンカルボン酸及び 2-クロロ-N-エチル-N-メチルアセトアミドを用いて繰り返して所望のホスホランを形成し、最終的に N-エチル-N-メチルアミノエチルセレンフェノ [2, 3-b] ピリジン標的化合物を生成する。

【 0 4 1 5 】

実施例 7 B。N-エチル-N-プロピルアミノエチルベンゾセレンフェノ [2, 3-b] ピリジンの生成

【化 4 4】

20



30

【 0 4 1 6 】

実施例 1 B の合成手順を、出発物質としての 2-アミノ-3-ピリジンカルボン酸及び 2-クロロ-N-プロピルアセトアミドを用いて繰り返して所望のホスホランを形成し、最終的に N-エチル-N-プロピルアミノエチルセレンフェノ [2, 3-b] ピリジン標的化合物を生成する。

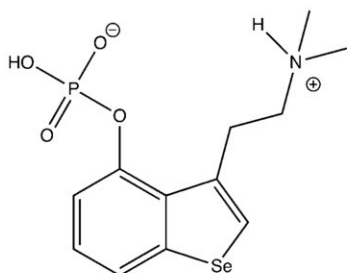
【 0 4 1 7 】

実施例 8 B。3-(N, N-ジメチルアミノエチル)ベンゾ [b] セレンフェン-4-イルホスフェート (別名 *Selenocycin* (商標)) の生成

40

50

【化 4 5】



10

Selenocycin (商標)

【0418】

2000 mL の 4 口丸底フラスコに、オーバーヘッド攪拌機、J-Kem 温度コントローラー、100 mL の滴下漏斗、及び正圧の乾燥 N_2 が挿入されるゴムセブタムを備える。セブタムを除去し、フラスコに実施例 2 の方法に従って生成された Selenopsil (60.2 mmol) 及び無水 THF (500 mL) を順次に入れる。混合物を 15 分間攪拌し、フラスコを固体 CO_2 / アセトン冷却浴において $-78^\circ C$ で浸漬する。反応の内部温度が $-67^\circ C$ に達した時、ヘキサン中の 2.5 M の BuLi 溶液 (28.9 mL、72.3 mmol) を数分の時間にわたって滴下して添加し、 $-60^\circ C$ 未満の読み取り内部温度で維持する。反応混合物を 10 分間攪拌した後、テトラベンジルピロリン酸塩 (35.7 g、66.2 mmol) を一度に添加し、混合物をよく攪拌する。1.5 時間後、固体 CO_2 / アセトン冷却浴を除去し、温度を 2 時間にわたって $-25^\circ C$ に徐々に上昇させる。

20

【0419】

アミノ結合シリカゲル (30 g) を一度に添加し、反応物を EtOAc (600 mL) で希釈する。混合物をセライトのパッドを介して濾過し、EtOAc (400 mL) で洗浄する。フィルターケーキを EtOAc (400 mL) で 10 分間再スラリー化し、再度濾過する。組み合わせた濾液を濃縮し、500 mL の一口丸底フラスコに移す。必要に応じて、得られた油を DCM (100 mL) に再溶解し、ヒートガンで沸騰するまで 5 分間加熱する。フラスコを室温にし、次いで $4^\circ C$ で一晩保持する。粗製反応生成物 (双性イオン沈殿物) をブフナー漏斗を介して濾過し、次いで DCM (4 Å ~ 100 mL) でトリチュレートする。次いで双性イオン沈殿物を 250 mL の一口丸底フラスコに移し、真空オープン内で $40^\circ C$ で一晩完全に乾燥させて、ベンジル {3-[2-(ベンジルジメチルアンモニオ)エチル]-ベンゾ[b]セレノフェン-4-イル} ホスフェートを提供する。

30

【0420】

2000 mL の丸底フラスコに先行段落における方法に従って生成されたベンジルホスフェート生成物 (35.6 mmol) を添加し、続いて CH_3OH (1200 mL) を添加する。混合物を脱気し、 N_2 を再充填する。10% の Pd/C (1.1 g) を添加し、混合物を脱気し、 H_2 バルーンを 1 気圧で再充填する。反応混合物を一晩室温で攪拌する。フラスコを脱気し、 N_2 を再充填し、懸濁液をブフナー漏斗を介してセライトのパッドを介して濾過する。フィルターパッドを CH_3OH (500 mL) で洗浄し、濾液を濃縮し、真空下で一晩乾燥させて粗製固体を得る。粗製固体を i-PrOH (200 mL) に懸濁し、30 分間煮沸し、次いで高温 ($50 \sim 60^\circ C$) で濾過する。収集された固体をアセトンで洗浄して着色した固体を得る。固体を次いで 25% CH_3OH / i-PrOH に懸濁し、30 分間煮沸し、高温で濾過し、25% CH_3OH / i-PrOH で洗浄して、Selenocycin 生成物である着色した固体を得る。

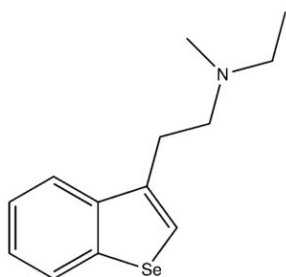
40

【0421】

実施例 9 B。N-エチル-N-メチルアミノエチルベンゾセレノフェンの生成

50

【化 4 6】



10

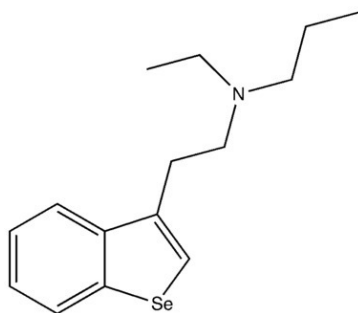
【0 4 2 2】

実施例 1 6 A の合成を、実施例 1 6 B の伸長カルバルデヒドを出発物質として使用し、エチルメチルアミンを第 2 級アミンとして使用したことを除いて繰り返して、標的化合物を茶色かった油として 6 2 % の収率で得た。

【0 4 2 3】

実施例 1 0 B。N-エチル-N-プロピルアミノエチルベンゾセレノフェンの生成
【化 4 7】

20



【0 4 2 4】

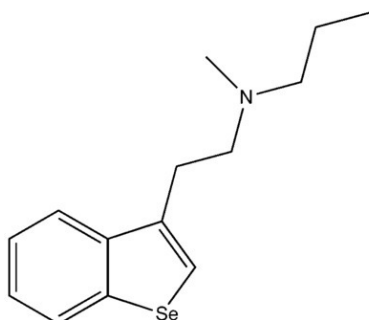
実施例 1 1 B の合成手順を、エチル-n-プロピルアミンを第 2 級アミンとして使用して繰り返して、N-エチル-N-プロピルアミノエチルベンゾセレノフェン標的化合物を提供した。

30

【0 4 2 5】

実施例 1 1 B。N-メチル-N-n-プロピルアミノエチルベンゾセレノフェンの生成
【化 4 8】

40



【0 4 2 6】

ガラス攪拌棒を備え、かつ 5 m o l % のイッテルビウムトリフレートを含有する乾燥反応フラスコにベンゾ [b] セレノフェン (1 e q .) を窒素下で入れた。余剰のエチルグ

50

リオキシレートを蒸留し（以下に示される方法に従う＊）、直接的に反応フラスコに収集した。反応物を窒素下で室温で24時間撹拌した。得られた粗製エステル中間体を真空下で濃縮し、5：1のEtOAc：ヘキサンを使用してフラッシュクロマトグラフィーを介して精製した。

【0427】

精製されたエステル中間体を乾燥反応フラスコに窒素下に入れ、続いて無水メタノール及び1.2eqの第2級アミンメチル*n*-プロピルアミンを入れた。反応物を室温で24時間またはTLC（9：1のDCM：MeOH）によって判断される場合にエステルが消費されるまで撹拌した。

【0428】

粗製乾燥ヒドロキシアミド中間体を、撹拌棒を含有する反応フラスコに窒素下に入れた。これに、2Me-THFと、続いて2Me-THF中のLiAlH₄の2.0M溶液として3eqのLiAlH₄を1分にわたって添加した。反応はわずかに発熱し、次いで65℃に4時間加熱した。反応混合物を次いで0～20℃に冷却し、THF／H₂O（4：1）で撹拌下で約30分間徐々にクエンチした。反応混合物を次いでDCM／MeOH（9：1）で慎重に希釈し、次いでセライトのパッドを介して濾過した。濾過された溶液を次いで減圧下で濃縮し、5：1のEtOAc：ヘキサンを使用してフラッシュクロマトグラフィーを介して精製して所望の生成物を提供した。

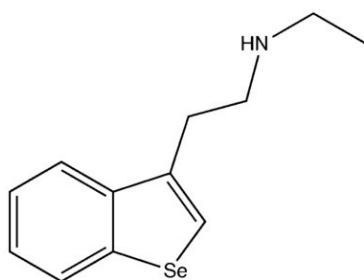
【0429】

＊トルエン（Fluka）中の50％エチルグリオキシレートオリゴマーを、短い（2in）Vigreuxカラム及び油浴温度130～185℃（30分187ibendにわたって徐々に上昇させた）を使用してわずかな残渣のみが残るまで大気圧で蒸留した。最初の数mLを廃棄し、次いで全量を収集した。トルエン-エチルグリオキシレート混合物を含有する得られた黄色がかった蒸留物を30Torrで直ちに再蒸留した。トルエン反応後、純粋なエチルグリオキシレートを48～50℃／30Torrで蒸留した。

【0430】

実施例12B。N-エチルアミノエチルベンゾセレノフェンの生成

【化49】



【0431】

実施例12Aの合成を、実施例16Bの伸長カルバルデヒドを出発物質として使用し、エチルアミン塩酸塩を第1級アミンとして使用したことを除いて繰り返して、標的化合物を黄褐色がかった半固体として59％の収率で得た。

【0432】

実施例13B。N-イソプロピルアミノエチルベンゾセレノフェンの生成

10

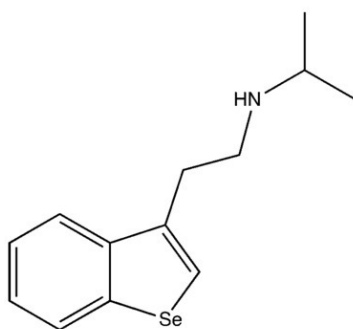
20

30

40

50

【化 5 0】



10

【0 4 3 3】

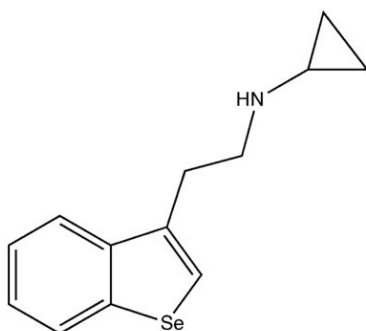
11. 9 mg の 3 - (アミノエチル) ベンゾセレンフェンを窒素下で 7 mL の THF に懸濁し、続いて THF 中の標準溶液としてのアセトンに懸濁した。次いで酢酸（これも THF 中の標準溶液として）、及びナトリウムトリアセトキシボロヒドリドを添加し、反応混合物を 24 時間攪拌した。反応を NaHCO_3 でクエンチし、 Et_2O で抽出し、次いで減圧下で濃縮した。粗生成物を、溶離剤として DCM 中の 10% MeOH を用いる SiO_2 クロマトグラフィーを使用して精製して所望の生成物を生成した。

20

【0 4 3 4】

実施例 14 B。N-シクロプロピルアミノエチルベンゾセレンフェンの生成

【化 5 1】



30

【0 4 3 5】

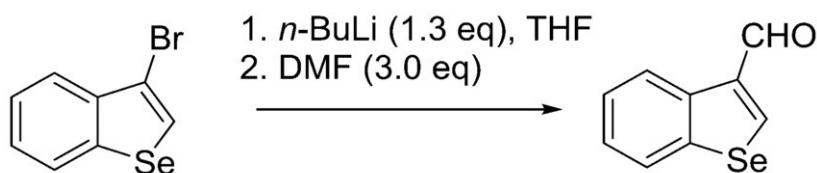
実施例 16 A の合成を、実施例 16 B の伸長カルバルデヒドを出発物質として使用し、シクロプロピルアミンをアミンとして使用したことを除いて繰り返して、標的化合物を黄褐色がかった固体として 45% の収率で得た。

【0 4 3 6】

実施例 15 B。セレンフェンカルバルデヒド中間体の生成

【化 5 2】

40



【0 4 3 7】

-78 °C の THF (15 mL) 中の 3-ブロモセレンフェン (3.6 mmol) の溶液に $n\text{-BuLi}$ (4.7 mmol) を滴下して添加した。反応混合物をこの温度で 15 分

50

10

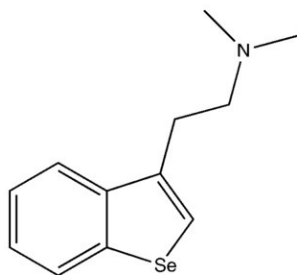
20

30

40

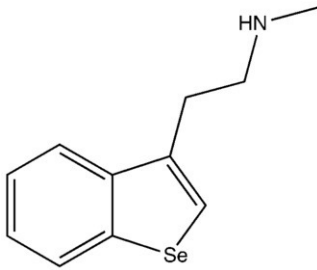


【化 5 4】



実施例 18B。N-メチルベンゾセレノフェンの生成

【化 5 5】



10

【0 4 4 3】

実施例 1 2 A の合成を、実施例 1 6 B の伸長カルバルデヒドを出発物質として使用し、メチルアミン塩酸塩を第 1 級アミンとして使用したことを除いて繰り返して、標的化合物を白みがかった油として 5 4 % の収率で得た。

【0 4 4 4】

実施例 1 9 B。ヒドロフマル酸塩（別名 [1 : 1] フマル酸塩）の生成

化合物の各 1 つの [1 : 1] ヒドロフマル酸塩を、以下の手順を使用して実施例 1 ~ 7 B、9 ~ 1 4 B 及び 1 7 ~ 1 8 B の化合物から別々に生成する：

1 当量の遊離塩基生成物をアセトンに溶解し、アセトン中のフマル酸（1 当量）の溶液に滴下して添加する。沈殿物が直ちに形成し、沈殿物／アセトンを -20°C で一晩保存する。固体を次いで濾過し、氷冷アセトンで洗浄して所望の結晶性ヒドロフマル酸塩を生成する。

20

【0 4 4 5】

実施例 2 0 B。フマル酸塩（別名 [2 : 1] フマル酸塩）の生成

化合物の各 1 つの [2 : 1] フマル酸塩を、以下の手順を使用して実施例 1 ~ 7 B、9 ~ 1 4 B 及び 1 7 ~ 1 8 B の化合物から別々に生成する：

1 当量の遊離塩基生成物をアセトンに溶解し、アセトン中のフマル酸（0.5 当量）の溶液に滴下して添加する。沈殿物が直ちに形成し、沈殿物／アセトンを -20°C で一晩保存する。固体を次いで濾過し、氷冷アセトンで洗浄して所望の結晶性フマル酸塩を生成する。

30

【0 4 4 6】

合成スキーム C：

ベンゾフラン及びフロピリジンアナログ

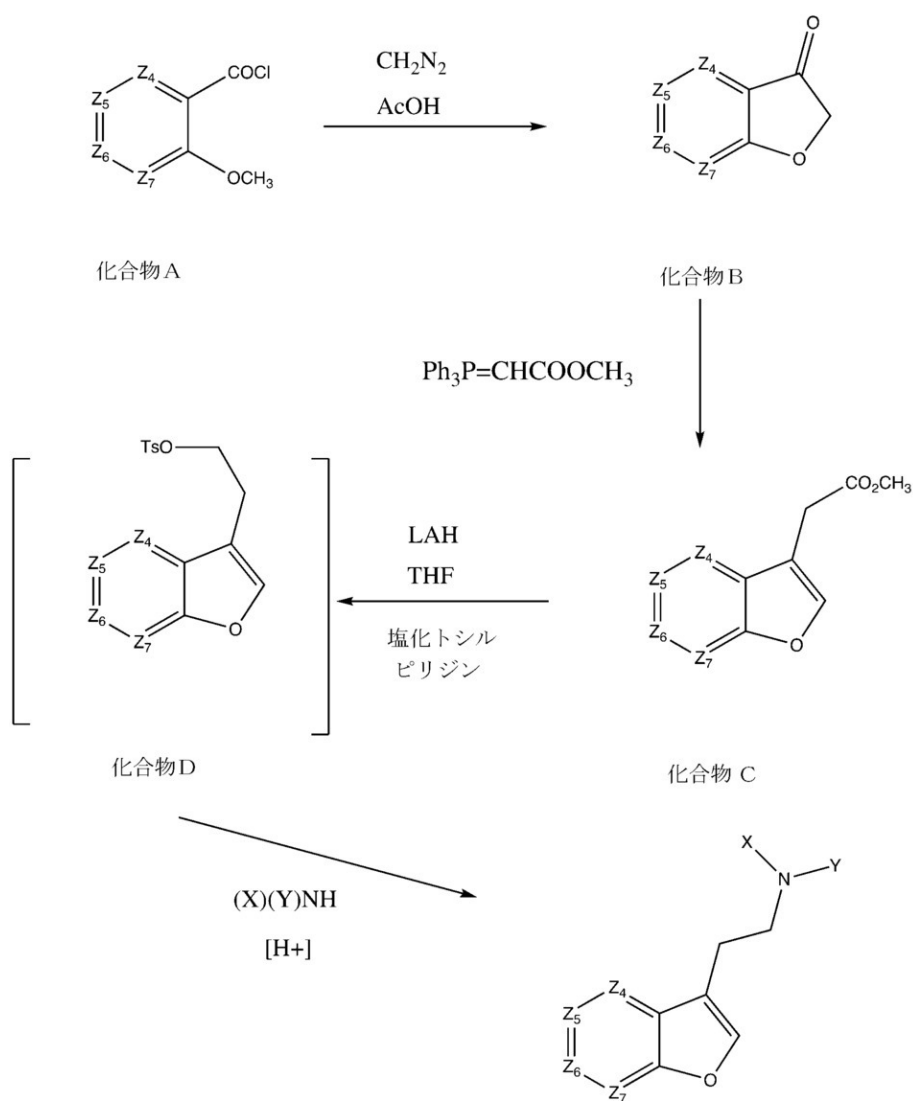
以下に示されるように、化合物 A 出発物質は、式 I のベンゾフラン及びフロピリジン化合物に変換され得る：

スキーム 1 C

40

50

【化 5 6】



10

20

30

40

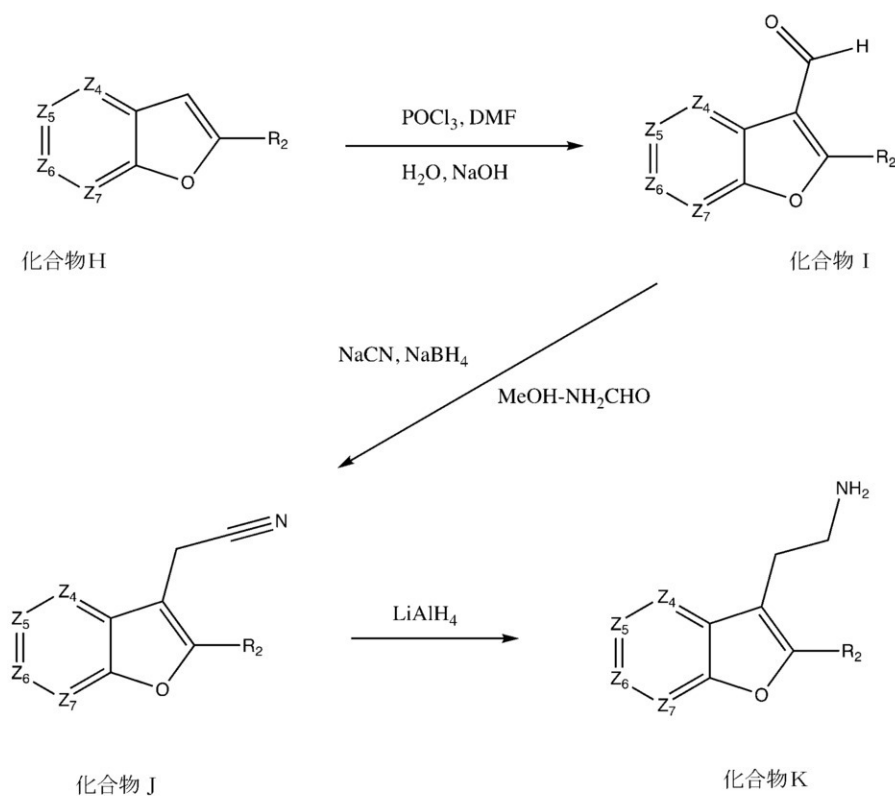
50

【 0 4 4 7 】

スキーム 2 C

化合物 H によって一般的に表される化合物を含む、ベンゾフラン及びフロピリジン出発物質の多数のバリエーションは、例えば、Sigma Aldrich（登録商標）等の会社から商業的に購入され（例えば、ベンゾフラン、2-メチルベンゾフラン、5-ブロモベンゾフラン、2-フェニルベンゾフラン）、次いで以下に示される例示的なスキームに従って使用されて化合物 K が生成され得、これはその後、既知の方法を使用して塩基の存在下で適切なアルキルハロゲン化物を使用してアルキル化されて、式 I の所望のモノアルキルまたはジアルキルアミノエチルアナログが形成され得る：

【化 5 7】



10

20

【0 4 4 8】

スキーム 3 C

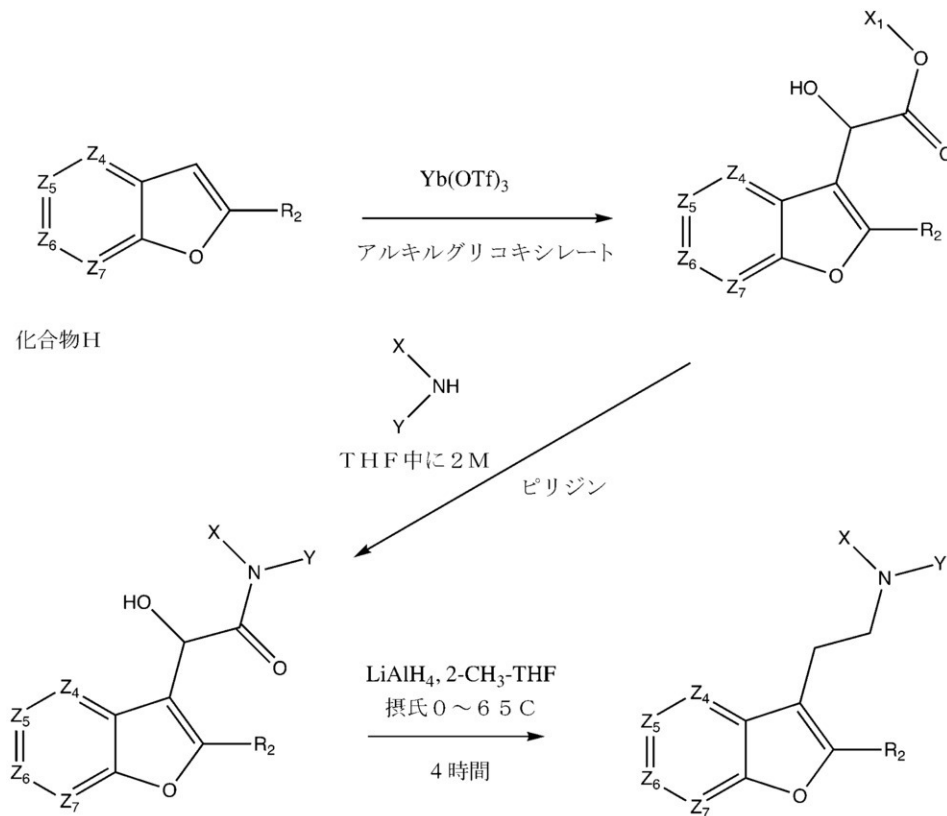
化合物 H によって一般的に表される化合物を含む本開示のベンゾフラン及びフラノピリジン化合物の多数のバリエーションは、会社から商業的に購入される出発物質（例えば、Sigma（登録商標）（例えば、ベンゾフラン）及び Santa Cruz（登録商標）（例えば、5-メトキシベンゾフラン））から合成され、次いで Zhang et al., J. Org. Chem. 2000, 65, 4732-4735（その全体が参照により本明細書に組み込まれる）に示される方法に従って使用され得る。その例示的なスキームは、以下に示される（式中、X₁は、対応するアルキルグリオキシレートに由来するアルキル基（例えば、C₁-C₈アルキル、例えば、メチルまたはエチル）である）：

30

40

50

【化 5 8】



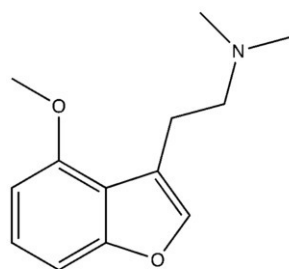
10

20

【0449】

実施例1C。4-メトキシ-3-N,N-ジメチルアミノエチルベンゾフラン（別名4-メトキシFuranopsil（商標））の生成

【化 5 9】



4-メトキシFuranopsil（商標）

30

【0450】

2,6-ジメトキシベンゾイルクロリドを化合物Aとして使用し、スキーム1を遂行して、4-メトキシベンゾ[b]フラン-3(2h)-オン（化合物B）を提供する。化合物Bをメチル（トリフェニルホスホルアニリデン）アセテートと反応させて、4-メトキシ-N,N-ジメチルベンゾ[b]フラン-3-アセトアミド（化合物C）を提供し、これをその後、LiAlH₄で第1級アルコールに還元し、トシル化して化合物Dを形成する。トシレートを次いで酸性条件下でジメチルアミンと置き換え、反応混合物をクエンチし、水性後処理を介して抽出し、シリカゲルカラムクロマトグラフィー（EtOAc／ヘキサン）を介して精製して、4-メトキシ-3-N,N-ジメチルアミノエチルベンゾフランを提供する。

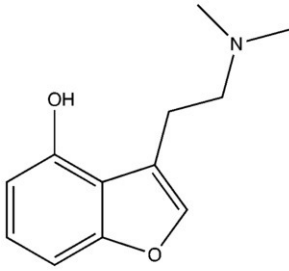
40

【0451】

実施例2C。4-ヒドロキシ-3-N,N-ジメチルアミノエチルベンゾフラン（別名

50

furanopsil (商標) の生成
【化60】



Furanopsil (商標)

10

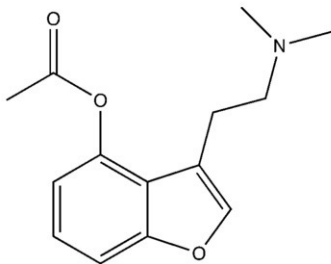
【0452】

25 ml の乾燥 DMF 中の NaH (0.024 mol) の懸濁液に、エタントール (0.024 mol) を 0℃ で窒素及び激しい攪拌下で添加する。1 時間後、20 ml の乾燥 DMF 中の実施例 1 の生成物 (0.01 mol) の溶液を一度にすべて添加し、反応混合物を 1 時間還流する。溶媒を真空下で除去し、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー (EtOAc / ヘキサン) を介して精製して、4-ヒドロキシ-3-N, N-ジメチルアミノエチルベンゾフラン (別名 Furanopsil) を提供する。

【0453】

実施例 3 C。4-アセトキシ-3-N, N-ジメチルアミノエチルベンゾフラン (別名 Furanopsilacetin (商標)) の生成

【化61】



Furanopsilacetin (商標)

30

【0454】

窒素ブランケット下の 25℃ で攪拌されたピリジン中の実施例 2 C の生成物 (0.01 mol) の溶液に、ピリジン (0.012 mol) 中の触媒量の DMAP 及び Ac₂O (0.011 mol) を添加する。攪拌を 1 時間継続する。水性後処理でクエンチした後、溶媒を真空下で除去し、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーを介して精製して Furanopsilacetin を提供する。

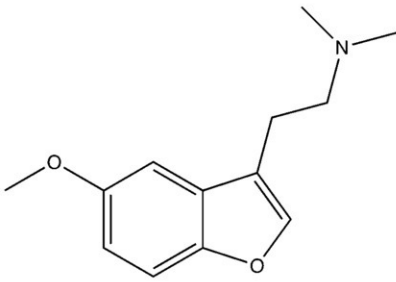
【0455】

実施例 4 C。5-メトキシ-3-N, N-ジメチルアミノエチルベンゾフラン (別名 Bufuranopsil (商標)) の生成

40

50

【化 6 2】



10

Bufofuranopsil (商標)

【0 4 5 6】

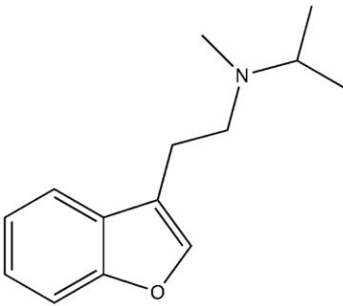
実施例 1 C の合成手順を、2, 5-ジメトキシベンジルクロリドを出発物質として用いて繰り返して、5-メトキシ-3-N, N-ジメチルアミノエチルベンゾフランを生成する。

【0 4 5 7】

実施例 5 C。N-イソプロピル-N-メチルアミノエチルベンゾフランの生成

【化 6 3】

20



【0 4 5 8】

30

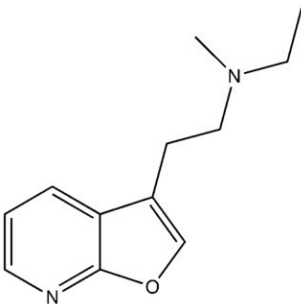
実施例 1 1 C の合成手順を、イソプロピルメチルアミンを第 2 級アミンとして使用して従って、N-イソプロピル-N-メチルアミノエチルベンゾフラン標的化合物を提供した。

【0 4 5 9】

実施例 6 C。N-エチル-N-メチルアミノエチルフロ [2, 3-b] ピリジンの生成

【化 6 4】

40



【0 4 6 0】

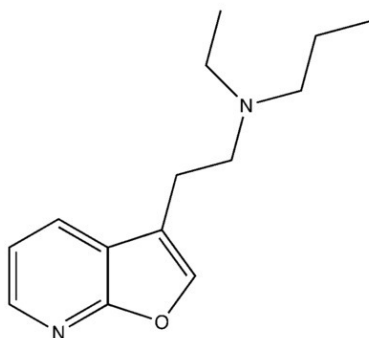
実施例 4 C の合成手順を、2-メトキシ-3-ピリジンカルボニルクロリド及びメチルエチルアミンを用いて繰り返して、最終的に N-エチル-N-メチルアミノエチルフロ [2, 3-b] ピリジン標的化合物を生成する。

50

【 0 4 6 1 】

実施例 7 C。N-エチル-N-プロピルアミノエチルフロ [2 , 3 - b] ピリジンの生成

【 化 6 5 】



10

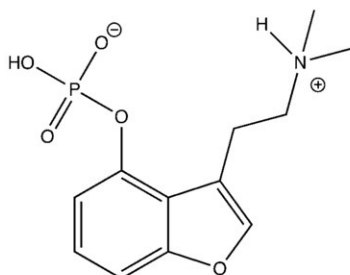
【 0 4 6 2 】

実施例 5 C の合成手順を、メチルエチルアミンの代わりにエチル n-プロピルアミンを用いて繰り返して、最終的に N-エチル-N-プロピルアミノエチルフロ [2 , 3 - b] ピリジン標的化合物を生成する。

【 0 4 6 3 】

実施例 8 C。3- (N , N -ジメチルアミノエチル) ベンゾ [b] フラン-4-イルホスフェート (別名 F u r o c y b i n (商 標)) の生成

【 化 6 6 】



20

30

F u r o c y b i n (商 標)

【 0 4 6 4 】

2 0 0 0 m L の 4 口 丸 底 フ ラ ス コ に、オーバ-ヘッド攪拌機、J-Kem 温度コントローラー、1 0 0 m L の 滴 下 漏 斗、及び正圧の乾燥 N₂ が挿入されるゴムセブタムを備える。セブタムを除去し、フラスコに実施例 2 の方法に従って生成された F u r a n o p s i l (6 0 . 2 m m o l) 及び無水 T H F (5 0 0 m L) を順次に入れる。混合物を 1 5 分間攪拌し、フラスコを固体 C O₂ / アセトン冷却浴において - 7 8 ° C で浸漬する。反応の内部温度が - 6 7 ° C に達した時、ヘキサン中の 2 . 5 M の B u L i 溶液 (2 8 . 9 m L、7 2 . 3 m m o l) を数分の時間にわたって滴下して添加し、- 6 0 ° C 未満の読み取り内部温度で維持する。反応混合物を 1 0 分間を攪拌した後、テトラベンジルピロホスフェート (3 5 . 7 g、6 6 . 2 m m o l) を一度に添加し、混合物をよく攪拌する。1 . 5 時間後、固体 C O₂ / アセトン冷却浴を除去し、温度を 2 時間にわたって - 2 5 ° C に徐々に上昇させる。

40

【 0 4 6 5 】

アミノ結合シリカゲル (3 0 g) を一度に添加し、反応物を E t O A c (6 0 0 m L) で希釈する。混合物をセライトのパッドを介して濾過し、E t O A c (4 0 0 m L) で洗浄する。フィルターケーキを E t O A c (4 0 0 m L) で 1 0 分間再スラリー化し、再度

50

濾過する。組み合わせた濾液を濃縮し、500 mL の一口丸底フラスコに移す。必要に応じて、得られた油を DCM (100 mL) に再溶解し、ヒートガンで沸騰するまで5分間加熱する。フラスコを室温にし、次いで4℃で一晩保持する。粗製反応生成物(双性イオン沈殿物)をブフナー漏斗を介して濾過し、次いでDCM (4 Å ~ 100 mL) でトリチュレートする。次いで双性イオン沈殿物を250 mL の一口丸底フラスコに移し、真空オーブン内で40℃で一晩完全に乾燥させて、ベンジル {3-[2-(ベンジルジメチルアンモニオ)エチル]-ベンゾ[b]フラン-4-イル} ホスフェートを提供する。

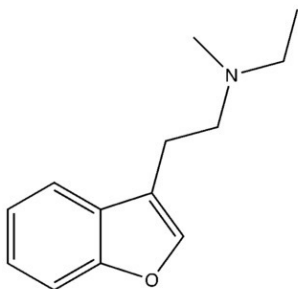
【0466】

2000 mL の丸底フラスコに先行段落における方法に従って生成されたベンジルホスフェート生成物(35.6 mmol)を添加し、続いてCH₃OH (1200 mL) を添加する。混合物を脱気し、N₂を再充填する。10%のPd/C (1.1 g) を添加し、混合物を脱気し、H₂バルーンを1気圧で再充填する。反応混合物を一晩室温で攪拌する。フラスコを脱気し、N₂を再充填し、懸濁液をブフナー漏斗を介してセライトのパッドを介して濾過する。フィルターパッドをCH₃OH (500 mL) で洗浄し、濾液を濃縮し、真空下で一晩乾燥させて粗製固体を得る。粗製固体をi-PrOH (200 mL) に懸濁し、30分間煮沸し、次いで高温(50~60℃)で濾過する。収集された固体をアセトンで洗浄して着色した固体を得る。固体を次いで25%CH₃OH/i-PrOHに懸濁し、30分間煮沸し、高温で濾過し、25%CH₃OH/i-PrOHで洗浄して、フラノシピン生成物である着色した固体を得る。

【0467】

実施例9C。N-エチル-N-メチルアミノエチルベンゾフランの生成

【化67】



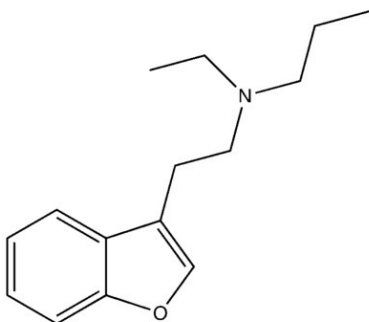
【0468】

実施例11Cの合成手順を、エチルメチルアミンを第2級アミンとして使用して繰り返して、N-エチル-N-メチルアミノエチルベンゾフラン標的化合物を提供した。

【0469】

実施例10C。N-エチル-N-プロピルアミノエチルベンゾフランの生成

【化68】

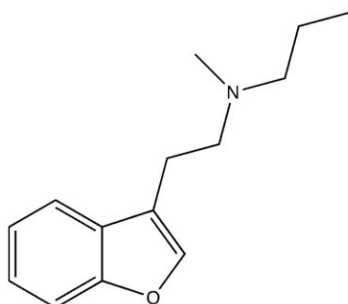


【0470】

実施例 11C の合成手順を、エチル-*n*-プロピルアミンを第 2 級アミンとして使用して繰り返して、*N*-エチル-*N*-プロピルアミノエチルベンゾフラン標的化合物を提供した。

【0471】

実施例 11C。 *N*-メチル-*N*-*n*-プロピルアミノエチルベンゾフランの生成
【化 69】



10

【0472】

ガラス攪拌棒を備え、かつ 5 mol % のイッテルビウムトリフレートを含有する乾燥反応フラスコにベンゾ [b] フラン (1 eq.) を窒素下で入れた。余剰のエチルグリオキシレートを蒸留し (以下に示される方法に従う*)、直接的に反応フラスコに収集した。反応物を窒素下で室温で 24 時間攪拌した。得られた粗製エステル中間体を真空下で濃縮し、5 : 1 の EtOAc : ヘキサンを使用してフラッシュクロマトグラフィーを介して精製した。

20

【0473】

精製されたエステル中間体を乾燥反応フラスコに窒素下で入れ、続いて無水メタノール及び 1.2 eq の第 2 級アミンメチル *n*-プロピルアミンを入れた。反応物を室温で 24 時間または TLC (9 : 1 の DCM : MeOH) によって判断される場合にエステルが消費されるまで攪拌した。

【0474】

粗製乾燥ヒドロキシアミド中間体を、攪拌棒を含有する反応フラスコに窒素下で入れた。これに、2 Me-THF と、続いて 2 Me-THF 中の LiAlH₄ の 2.0 M 溶液として 3 eq の LiAlH₄ を 1 分にわたって添加した。反応はわずかに発熱し、次いで 65 °C に 4 時間加熱した。反応混合物を次いで 0 ~ 20 °C に冷却し、THF / H₂O (4 : 1) で攪拌下で約 30 分間徐々にクエンチした。反応混合物を次いで慎重に DCM / MeOH (9 : 1) で希釈し、次いでセライトのパッドを介して濾過した。濾過された溶液を次いで減圧下で濃縮し、5 : 1 の EtOAc : ヘキサンを使用してフラッシュクロマトグラフィーを介して精製して所望の生成物を提供した。

30

【0475】

*トルエン (Fluka) 中の 50 % エチルグリオキシレートオリゴマーを、短い (2 in) Vigreux カラム及び油浴温度 130 ~ 185 °C (30 分の時間にわたって徐々に上昇させた) を使用してわずかな残渣のみが残るまで大気圧で蒸留した。最初の数 mL を廃棄し、次いで全量を収集した。トルエン-エチルグリオキシレート混合物を含有する得られた黄色がかった蒸留物を 30 Torr で直ちに再蒸留した。トルエン反応後、純粋なエチルグリオキシレートを 48 ~ 50 °C / 30 Torr で蒸留した。

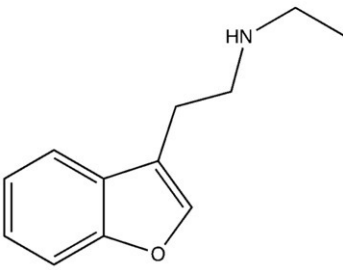
40

【0476】

実施例 12C。 *N*-エチルアミノエチルベンゾフランの生成

50

【化 7 0】



10

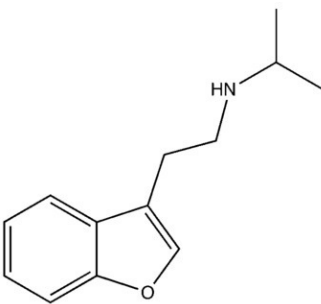
【 0 4 7 7】

実施例 1 2 A の合成を、実施例 1 6 C の伸長カルバルデヒドを出発物質として使用し、エチルアミン塩酸塩を第 1 級アミンとして使用したことを除いて繰り返して、標的化合物を白みがかった固体として 1 5 % の収率で得た。

【 0 4 7 8】

実施例 1 3 C。N-イソプロピルアミノエチルベンゾフランの生成

【化 7 1】



20

【 0 4 7 9】

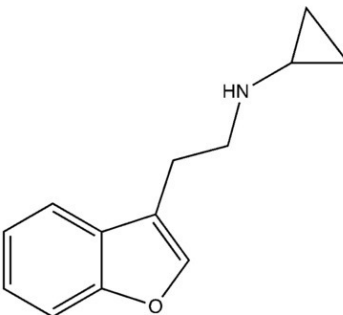
実施例 1 6 A の合成を、実施例 1 6 C の伸長カルバルデヒドを出発物質として使用し、イソプロピルアミンをアミンとして使用したことを除いて繰り返して、標的化合物を白みがかった固体として 2 7 % の収率で得た。

30

【 0 4 8 0】

実施例 1 4 C。N-シクロプロピルアミノエチルベンゾフランの生成

【化 7 2】



40

【 0 4 8 1】

実施例 1 6 A の合成を、実施例 1 6 C の伸長カルバルデヒドを出発物質として使用し、シクロプロピルアミンをアミンとして使用したことを除いて繰り返して、標的化合物を白みがかった固体として全体で 2 2 % の収率で得た。

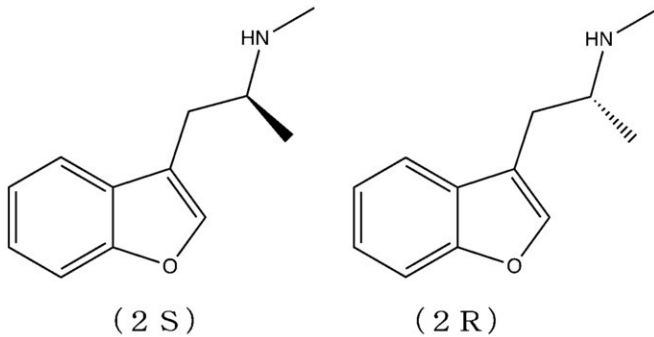
【 0 4 8 2】

50

実施例 15 C。(2 R) - 及び (2 S) - 1 - (ベンゾフラン-3-イル) - N - メチルプロパン-2-アミンの生成

ラセミ 1 - (ベンゾフラン-3-イル) - N - メチルプロパン-2-アミン塩酸塩 (Cayman Chemical) を遊離塩基に変換し、HPLC 分離に供して、(S) 及び (R) エナンチオマーがそれぞれ濃縮された 2 つの別々の組成物を提供した：

【化 7 3】

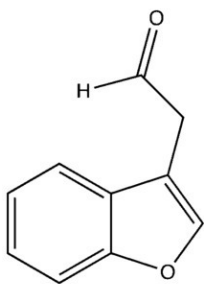


10

【0483】

実施例 16 C。伸長ベンゾカルバルデヒド中間体の生成

【化 7 4】



20

30

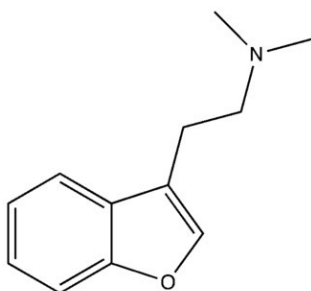
【0484】

標的伸長ベンゾフラノカルバルデヒド中間体を、ベンゾフラノ-3-カルバルデヒドを出発物質として使用したことを除いて実施例 15 A の方法を使用して生成して、標的伸長カルバルデヒドを淡橙色の油として 54% の粗製物収率で生成した。

【0485】

実施例 17 C。N, N - ジメチルアミノエチルベンゾフランの生成

【化 7 5】



40

【0486】

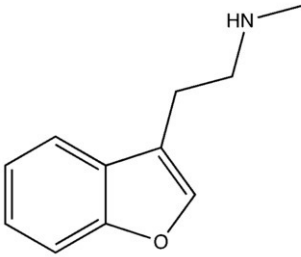
実施例 16 A の合成を、実施例 16 C の伸長カルバルデヒドを出発物質として使用したことを除いて繰り返して、標的化合物を黄色の油として 20% の収率で得た。

50

【0487】

実施例18C。N-メチルアミノエチルベンゾフランの生成

【化76】



10

【0488】

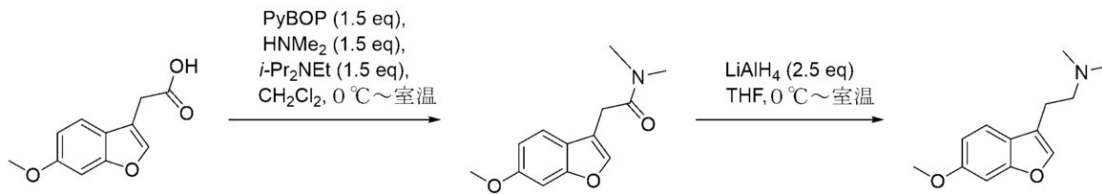
実施例16Aの合成を、実施例16Cの伸長カルバルデヒドを出発物質として使用し、メチルアミン塩酸塩を第1級アミンとして使用したことを除いて繰り返して、標的化合物を白みがかった固体として35%の収率で得た。

【0489】

実施例19C。6-メトキシ-N,N-ジメチルアミノエチルベンゾフランの生成

【化77】

20



【0490】

N₂雰囲気下の0°Cのジクロロメタン中のカルボン酸(1eq)の溶液にPyBOP(1.5eq)、i-Pr₂NEt(1.5-3.0eq)、及びジメチルアミン(1.5eq)を順次に添加した。反応混合物を室温に温め、2時間攪拌した。反応の完了後、混合物を真空中で濃縮し、粗製油をシリカゲルクロマトグラフィー(ヘキサン中の50%酢酸エチル)で精製して、ジメチルアミドをオフホワイト色の固体として90%の収率で得た。

30

【0491】

ジメチルアミド中間体(1eq)を不活性雰囲気下でTHFに溶解し、0°Cに冷却した。2-Me-THF(2.3M、2.5eq)中のLiAlH₄の溶液を滴下して添加した。反応混合物を室温に温め、16時間攪拌した。混合物を0°CのEt₂O及び水の添加によってクエンチし、セライトのパッドで濾過した。水層をEtOAc(3x)で抽出し、組み合わせた有機層をブライン(3x)で洗浄し、Na₂SO₄で乾燥させ、真空中で濃縮した。粗製油をシリカゲルクロマトグラフィー(CH₂Cl₂中の5%MeOH)で精製して標的アミンを黄色の固体として43%の収率で得た。

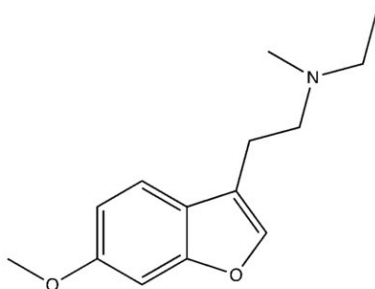
40

【0492】

実施例20C。6-メトキシ-N-エチルアミノエチルベンゾフランの生成

50

【化 7 8】



10

【0 4 9 3】

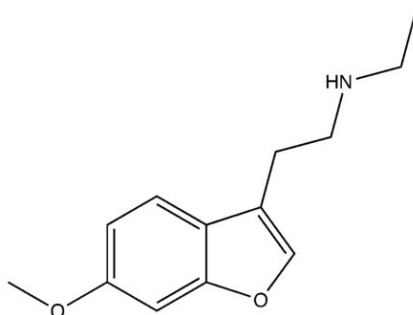
実施例 1 9 C の手順を、エチルメチルアミンを第 2 級アミンとして使用したことを除いて繰り返して、標的化合物を黄色がかった油として 3 8 % の収率で得た。

【0 4 9 4】

実施例 2 1 C。6-メトキシ-N-エチル-N-メチルアミノエチルベンゾフランの生成

【化 7 9】

20



【0 4 9 5】

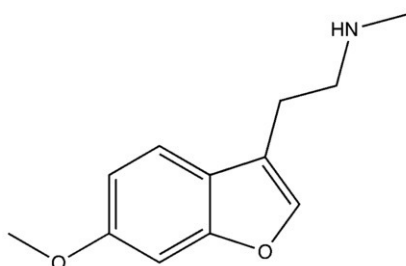
実施例 1 9 C の手順を、エチルアミン塩酸塩を第 1 級アミンとして使用したことを除いて繰り返して、標的化合物を白みがかった固体として 4 1 % の収率で得た。

【0 4 9 6】

実施例 2 2 C。6-メトキシ-N-メチルアミノエチルベンゾフランの生成

【化 8 0】

40



【0 4 9 7】

実施例 1 9 C の手順を、メチルアミン塩酸塩を第 1 級アミンとして使用したことを除いて繰り返して、標的化合物を黄褐色がかった固体として 3 2 % の収率で得た。

【0 4 9 8】

* 実施例 1 9 C の手順に対する他の改変：3 . 5 e q の L A H を使用し、3 6 時間還流した。

50

【0499】

実施例23C。ヒドロフマル酸塩（別名〔1：1〕フマル酸塩）の生成

化合物の各1つの〔1：1〕ヒドロフマル酸塩を、以下の手順を使用して実施例1～7C、9～15C及び17～22Cの化合物から別々に生成する：

1当量の遊離塩基生成物をアセトンに溶解し、アセトン中のフマル酸（1当量）の溶液に滴下して添加する。沈殿物が直ちに形成し、沈殿物／アセトンを -20°C で一晩保存する。固体を次いで濾過し、氷冷アセトンで洗浄して所望の結晶性ヒドロフマル酸塩を生成する。

【0500】

実施例24C。フマル酸塩（別名〔2：1〕フマル酸塩）の生成

化合物の各1つの〔2：1〕フマル酸塩を、以下の手順を使用して実施例1～7C、9～15C及び17～22Cの化合物から別々に生成する：

1当量の遊離塩基生成物をアセトンに溶解し、アセトン中のフマル酸（0.5当量）の溶液に滴下して添加する。沈殿物が直ちに形成し、沈殿物／アセトン -20°C で一晩保存する。固体を次いで濾過し、氷冷アセトンで洗浄して所望の結晶性フマル酸塩を生成する。

【0501】

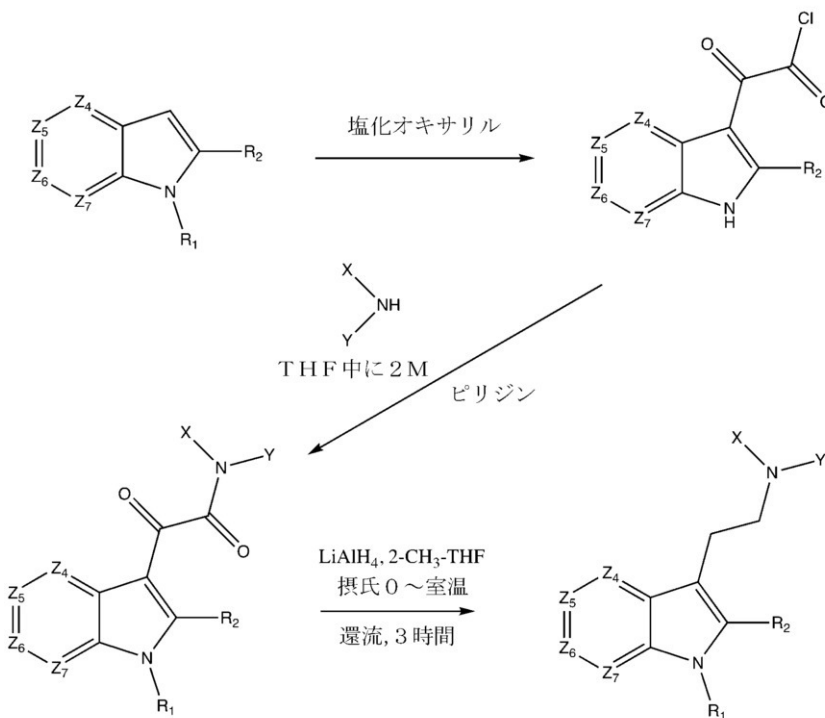
合成スキームD：

インドール及びアザインドールアナログ

以下に説明されるように、式Iのインドール及びアザインドール化合物は、以下の例示的な手法で合成され得る：

スキーム1D

【化81】



【0502】

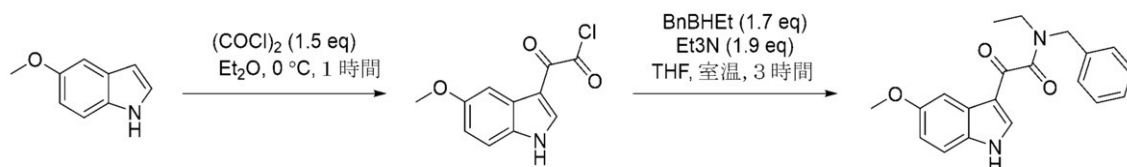
インドール、4-アザインドール、5-アザインドール、6-アザインドール、及び7-アザインドールは、上に示される一般的合成スキームを使用して、関連するインドール出発物質から出発して調製され得る。例示的なインドール出発物質には、4-ベンジルオキシ-7-メチルインドール（VulcanChem）、6-フルオロインドール（Sigma）、5-メトキシ-6-フルオロインドール（Biosynth CarboSy

n t h)、1-エチルインドール等が含まれる。4-アザインドール、5-アザインドール、6-アザインドール、及び7-アザインドール (Sigma) ; 6-フルオロ-4-アザインドール (Synthonix) ; 5-メトキシ-7-メチル-4-アザインドール (Sigma) ; 6-フルオロ-7-アザインドール (Shanghai Jizhi) ; 5-メトキシ-7-アザインドール及び6-フルオロ-5-メトキシ-7-アザインドール (Achemblock) 等を含む例示的なアザインドール出発物質が購入される。

【0503】

実施例1D。5-メトキシケトアミド中間体の生成

【化82】



10

【0504】

添加漏斗を備える3口丸底フラスコに不活性雰囲気下で5 mLの無水Et₂O中の塩化オキサリル (0.185 mL、2.18 mmol、1.5 eq) を入れた。フラスコを0 °Cに冷却し、5 mLのエーテル中の5-メトキシインドール (240 mg、1.45 mmol、1 eq) の溶液を添加漏斗を介して滴下して添加した。完全な添加後、反応物を0 °Cで1時間攪拌した。反応混合物を無水ヘキサンで希釈した。得られた明るい橙色の固体をハーシュ漏斗を介して濾過し、(3/1)ヘキサン/Et₂O混合物で数回洗浄した。固体を次の工程においてさらなる精製をせずに使用した。

20

【0505】

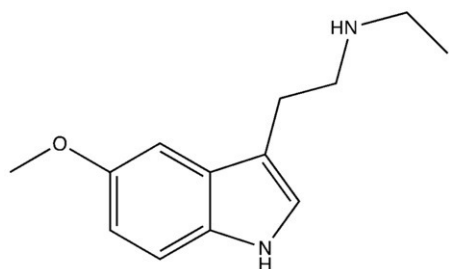
2口丸底フラスコにおいて、酸塩化物中間体 (336 mg、1.31 mmol、1 eq) を不活性雰囲気下でTHF (10 mL) に溶解した。ベンジルエチルアミン (0.33 mL、2.2 mmol、1.7 eq) 及びトリエチルアミン (0.26 mL、1.9 mmol、1.5 eq) をシリンジを介して添加した。反応混合物を室温で3時間攪拌した。無水ヘキサン (10 mL) を添加し、40 °Cで30分間攪拌した。得られた塩酸塩をハーシュ漏斗を介して濾過し、ケトアミドがオフホワイト色の固体として母液から沈殿した。固体を収集し、次の工程のためにさらなる精製をせずに使用した。

30

【0506】

実施例2D。3-(エチルアミノエチル)-5-メトキシインドールの生成

【化83】



40

【0507】

凝縮器が取り付けられた2口丸底フラスコにおいて、実施例1Dの方法に従って生成されたケトアミド (100 mg、0.28 mmol、1 eq) を不活性雰囲気下でTHF (5 mL) に溶解した。フラスコを0 °Cに冷却し、LAH (53 mg、1.4 mmol、5 eq) を添加し、混合物を加熱して4時間還流した。反応混合物をDI H₂O (10 mL)

50

L) の添加によってクエンチし、水層を Et_2O (3 x 5 mL) で抽出した。組み合わせた有機層をブライン (3 x 10 mL) で洗浄し、硫酸ナトリウムで乾燥させ、真空中で濃縮した。粗製固体を SiO_2 カラムクロマトグラフィーを介して精製してベンジルエチルアミン中間体生成物を黄色の油として得た。

【0508】

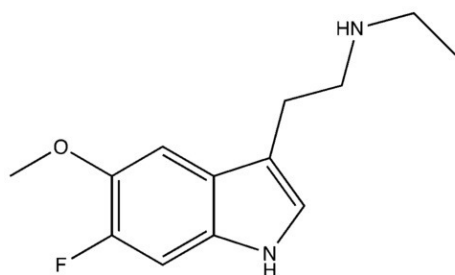
MeOH (10 mL) 中の精製されたベンジルメチルアミン中間体 (1 mmol) に 10 wt / wt % の Pd/C (10 ~ 15 %) を添加した。反応混合物を脱気して酸素を除去し、水素雰囲気 (1 気圧) 下で 18 ~ 24 時間攪拌した。完了後、反応混合物をセライトのパッドで濾過し、溶媒を真空中で除去して粗製油を得た。シリカゲルクロマトグラフィー (DCM をロードし、1 % MeOH/DCM 、次いで 1 % NEt_3 がドープされた 5 % MeOH/DCM で溶出する) での精製によって粗製物から標的エチルアミン生成物を白みがかった固体として単離した。

10

【0509】

実施例 3 D。3 - (エチルアミノエチル) - 6 - フルオロ - 5 - メトキシ - 7 - アザインドールの生成

【化 8 4】



20

【0510】

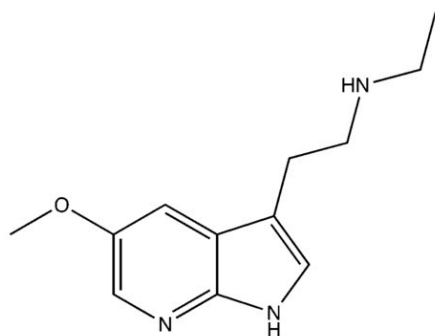
実施例 1 D 及び 2 D の合成手順を、6 - フルオロ - 5 - メトキシインドールを出発物質として使用したことを除いて繰り返して、所望の生成物を黄色がかった固体として 75 % の収率で提供した。

30

【0511】

実施例 4 D。3 - (エチルアミノエチル) - 5 - メトキシ - 7 - アザインドールの生成

【化 8 5】



40

【0512】

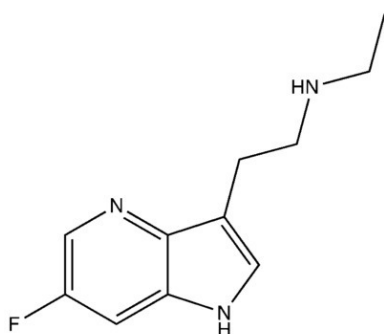
実施例 1 D 及び 2 D の合成手順を、5 - メトキシ - 7 - アザインドールを出発物質として使用することを除いて繰り返して、所望の生成物を良好な収率で提供する。

【0513】

実施例 5 D。3 - (エチルアミノエチル) - 4 - ヒドロキシ - 7 - メチルインドールの生成

50

【化 8 6】



10

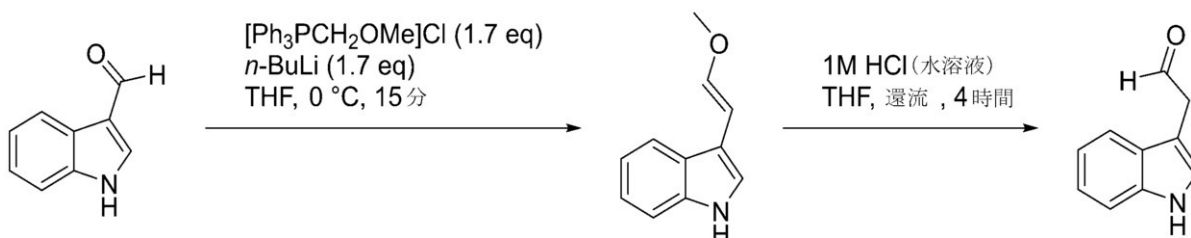
【0514】

実施例 1 D 及び 2 D の合成手順を、6-フルオロ-4-アザインドールを出発物質として使用することを除いて繰り返して、所望の生成物を良好な収率で提供する。

【0515】

実施例 6 D。インドールカルバルデヒド中間体の生成。

【化 8 7】



20

【0516】

0 °C の THF 中のウィッティヒ塩 (10.5 mmol、1.7 eq) の攪拌懸濁液に、*n*-BuLi 溶液 (10.5 mmol、1.7 eq、ヘキサン中に 2.5 M) を滴下して添加した。得られた反応混合物は、均質で赤色になった。カルバルデヒド出発物質 (6.2 mmol、1.0 eq) を固体として一度に反応混合物に添加した。15 分後、反応混合物をジエチルエーテルによって希釈し、1 M HCl (水溶液) でクエンチした。相を分離し、水性相をジエチルエーテル (x 2) で抽出した。組み合わせた有機抽出物を水及びブラインで洗浄し、無水硫酸ナトリウムで乾燥させた。濾過後、溶媒を真空中で除去した。カラムクロマトグラフィー (PhMe をロードし、ヘキサン中の 0 ~ 5 % 酢酸エチルで溶出する) によって粗製物からエノールエーテルを油として単離することができた。

30

【0517】

THF (4.8 mL) 中のエノールエーテル (1 mmol、1.0 eq) の溶液に 1 M HCl (水溶液 7.2 mL) を添加した。反応混合物を 4 時間還流してから、室温に冷却し、水及びジエチルエーテルで希釈した。相を分離し、水性相をジエチルエーテル (x 2) で抽出した。組み合わせた有機抽出物を水及びブラインで洗浄し、無水硫酸ナトリウムで乾燥させた。濾過後、溶媒を真空中で除去して、粗製油を得、これを次の工程においてさらなる精製をせずに使用した。

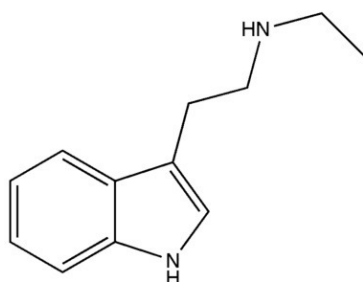
40

【0518】

実施例 7 D。3-(エチルアミノエチル)-インドールの生成

50

【化 8 8】



10

【0519】

アセトニトリル（0.1 M）中の実施例 6 D の方法に従って生成されたカルバルデヒド中間体（1.0 eq）の溶液にベンジルエチルアミン（2～5 eq）及び活性化ホール 3 A M S の数個のビーズを添加した。室温で 10 分間攪拌した後、 $\text{NaHB}(\text{OAc})_3$ （>5 eq）を一度に添加した。反応混合物を 18～24 時間室温で攪拌してから、1 M HCl の添加によってクエンチし、ジエチルエーテルで希釈した。相を分離し、有機相を 1 M HCl （ $\times 2$ ）で洗浄した。組み合わせた水相を固体 NaOH の添加によって塩基性化した。水相を DCM （ $\times 3$ ）で抽出し、組み合わせた DCM 洗浄物を無水硫酸ナトリウムで乾燥させた。濾過後、溶媒を真空中で除去して、ベンジルエチルアミン中間体化合物を良好な収率純度で得た。カラムクロマトグラフィー（ DCM から 1 % MeOH / DCM で主要な不純物を除去し、次いで約 1 % NEt_3 がドープされた 5 % MeOH / DCM で溶出する）での精製によって分析的純度が達成された。

20

【0520】

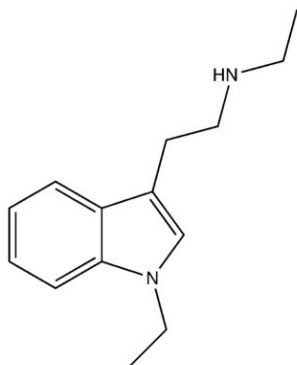
MeOH （10 mL）中のベンジルエチルアミン中間体（1 mmol）の溶液に 10 wt / wt % の Pd/C （10～15 %）を添加した。反応混合物を脱気して酸素を除去し、水素雰囲気（1 気圧）下で 18～24 時間攪拌した。完了後、反応混合物をセライトのパッドで濾過し、溶媒を真空中で除去して粗製油を得た。シリカゲルクロマトグラフィー（ DCM をロードし、1 % MeOH / DCM 、次いで 1 % NEt_3 がドープされた 5 % MeOH / DCM で溶出する）での精製によって粗製物から標的エチルアミンをオフホワイト色の固体として 56 % の収率で単離した。

30

【0521】

実施例 8 D。1-エチル-3-(エチルアミノエチル)-インドールの生成

【化 8 9】



40

【0522】

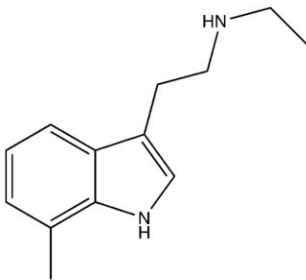
実施例 6 D 及び 7 D の手順を、1-エチルインドール-3-カルバルデヒドを出発物質として用いて繰り返して、所望の生成物を良好な収率で白みがかった半固体として良好な収率で提供した。

50

【 0 5 2 3 】

実施例 8 D。7-メチル-3-(エチルアミノエチル)-インドールの生成

【 化 9 0 】



10

【 0 5 2 4 】

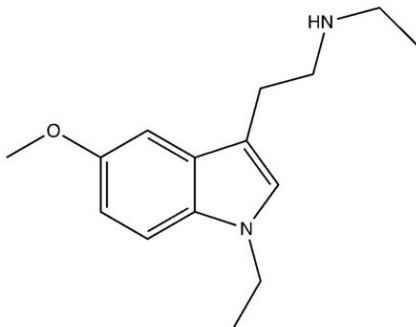
実施例 6 D 及び 7 D の手順を、7-メチルインドール-3-カルバルデヒドを出発物質として用いて繰り返して、所望の生成物を白みがかった半固体として 65% の収率で提供した。

【 0 5 2 5 】

実施例 9 D。1-エチル-5-メトキシ-3-(エチルアミノエチル)-インドールの生成

20

【 化 9 1 】



30

【 0 5 2 6 】

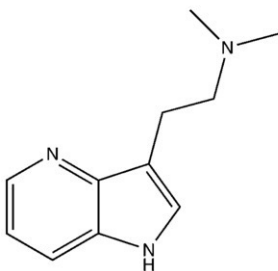
実施例 6 D 及び 7 D の手順を、5-メトキシ-1-エチインドール-3-カルバルデヒドを出発物質として用いて繰り返して、所望の生成物を良好な収率で提供した。

【 0 5 2 7 】

実施例 10 D。3-(N,N-ジメチルアミノエチル)-ピロロ[3,2-b]ピリジンの生成

【 化 9 2 】

40



【 0 5 2 8 】

実施例 6 D 及び 7 D の手順を、1H-ピロロ[3,2-b]ピリジン-3-カルバルデ

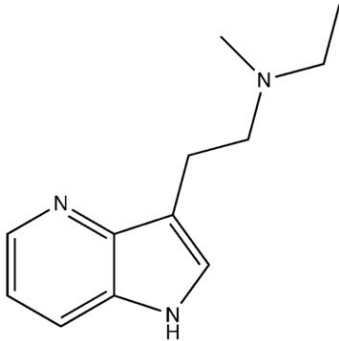
50

ヒドを出発物質として及びジメチルアミンを第２級アミンとして用いること（Pd／C脱ベンジル化の必要なし）を除いて繰り返して、所望の生成物を白みがかった油として全体で約１０％の収率で提供した。

【０５２９】

実施例１１Ｄ。３－（Ｎ－エチル－Ｎ－メチルアミノエチル）－ピロロ〔３，２－ｂ〕ピリジンの生成

【化９３】



10

【０５３０】

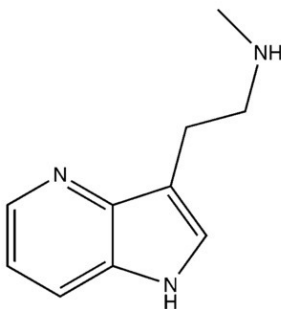
実施例１０Ｄの手順を、エチルメチルアミンを第２級アミンとして用いたことを除いて繰り返して、所望の生成物を白みがかった油として全体で約３２％の収率で提供した。

20

【０５３１】

実施例１２Ｄ。３－（Ｎ－メチルアミノエチル）－ピロロ〔３，２－ｂ〕ピリジンの生成

【化９４】



30

【０５３２】

実施例１０Ｄの手順を、メチルアミン塩酸塩を第２級アミンとして用いたことを除いて繰り返して、所望の生成物を白みがかった油として全体で約１４％の収率で提供した。

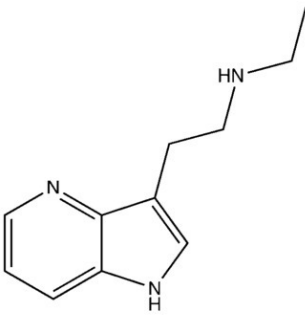
【０５３３】

実施例１３Ｄ。３－（Ｎ－エチルアミノエチル）－ピロロ〔３，２－ｂ〕ピリジンの生成

40

50

【化 9 5】



10

【0 5 3 4】

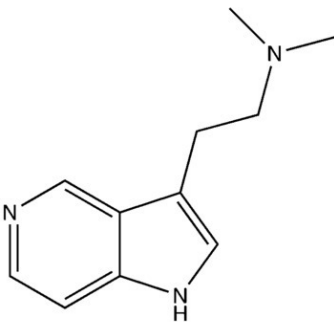
実施例 1 0 D の手順を、エチルアミン塩酸塩を第 2 級アミンとして用いたことを除いて繰り返して、所望の生成物を白みがかった油として全体で約 3 1 % の収率で提供した。

【0 5 3 5】

実施例 1 4 D。3 - (N , N - ジメチルアミノエチル) - ピロロ [3 , 2 - c] ピリジンの生成

【化 9 6】

20



30

【0 5 3 6】

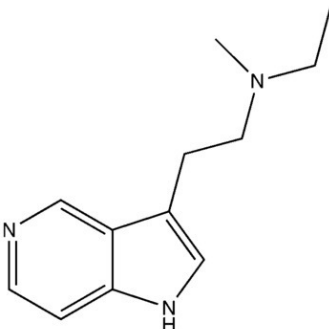
実施例 1 0 D の手順を、1 H - ピロロ [3 , 2 - b] ピリジン - 3 - カルバルデヒドを出発物質として用いたことを除いて繰り返して、所望の生成物を白みがかった油として全体で約 3 0 % の収率で提供した。

【0 5 3 7】

実施例 1 5 D。3 - (N - エチル - N - メチルアミノエチル) - ピロロ [3 , 2 - c] ピリジンの生成

【化 9 7】

40



【0 5 3 8】

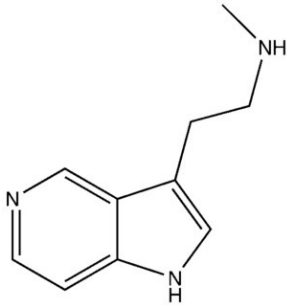
50

実施例 11 D の手順を、1 H-ピロロ [3, 2-b] ピリジン-3-カルバルデヒドを出発物質として用いたことを除いて繰り返して、所望の生成物を白みがかった油として全体で約 29 % の収率で提供した。

【0539】

実施例 16 D。3-(N-メチルアミノエチル)-ピロロ [3, 2-c] ピリジンの生成

【化98】



10

【0540】

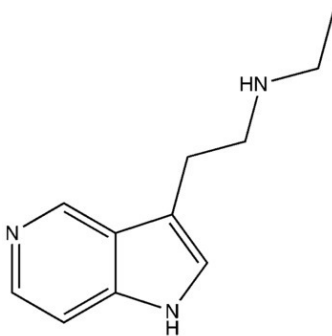
実施例 12 D の手順を、1 H-ピロロ [3, 2-b] ピリジン-3-カルバルデヒドを出発物質として用いたことを除いて繰り返して、所望の生成物を白みがかった固体として全体で約 26 % の収率で提供した。

20

【0541】

実施例 17 D。3-(N-エチルアミノエチル)-ピロロ [3, 2-c] ピリジンの生成

【化99】



30

【0542】

実施例 13 D の手順を、1 H-ピロロ [3, 2-b] ピリジン-3-カルバルデヒドを出発物質として用いたことを除いて繰り返して、所望の生成物を白みがかった固体として全体で約 29 % の収率で提供した。

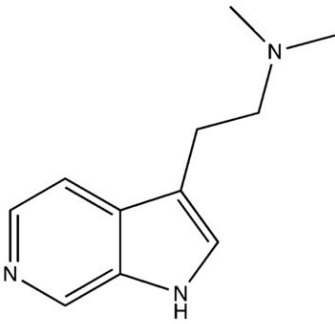
40

【0543】

実施例 18 D。3-(N,N-ジメチルアミノエチル)-ピロロ [2, 3-c] ピリジンの生成

50

【化 1 0 0】



10

【 0 5 4 4】

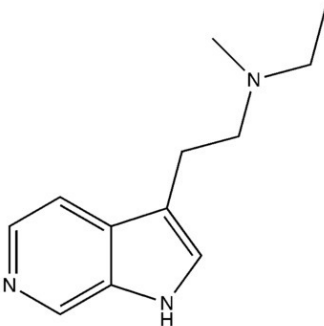
実施例 1 0 D の手順を、1 H - ピロロ [2 , 3 - c] ピリジン - 3 - カルバルデヒドを出発物質として用いたことを除いて繰り返して、所望の生成物を白みがかった固体として全体で約 2 2 % の収率で提供した。

【 0 5 4 5】

実施例 1 9 D。3 - (N - エチル - N - メチルアミノエチル) - ピロロ [2 , 3 - c] ピリジンの生成

【化 1 0 1】

20



30

【 0 5 4 6】

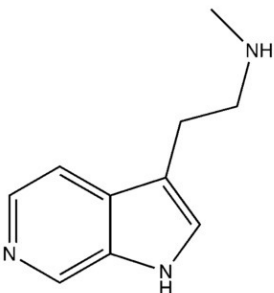
実施例 1 1 D の手順を、1 H - ピロロ [2 , 3 - c] ピリジン - 3 - カルバルデヒドを出発物質として用いたことを除いて繰り返して、所望の生成物を白みがかった油として全体で約 2 5 % の収率で提供した。

【 0 5 4 7】

実施例 2 0 D。3 - (N - メチルアミノエチル) - ピロロ [2 , 3 - c] ピリジンの生成

【化 1 0 2】

40



【 0 5 4 8】

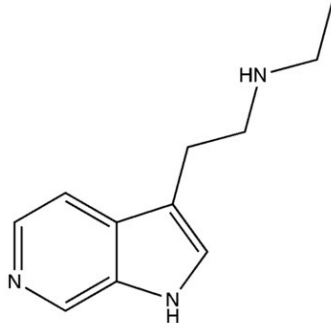
50

実施例 1 2 D の手順を、1 H-ピロロ [2, 3-c] ピリジン-3-カルバルデヒドを出発物質として用いたことを除いて繰り返して、所望の生成物を白みがかった固体として全体で約 27 % の収率で提供した。

【0549】

実施例 2 1 D。3-(N-エチルアミノエチル)-ピロロ [2, 3-c] ピリジンの生成

【化 103】



10

【0550】

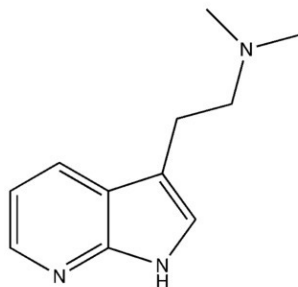
実施例 1 3 D の手順を、1 H-ピロロ [2, 3-c] ピリジン-3-カルバルデヒドを出発物質として用いたことを除いて繰り返して、所望の生成物を白みがかった油として全体で約 20 % の収率で提供した。

20

【0551】

実施例 2 2 D。3-(N,N-ジメチルアミノエチル)-ピロロ [2, 3-b] ピリジンの生成

【化 104】



30

【0552】

実施例 1 0 D の手順を、1 H-ピロロ [2, 3-b] ピリジン-3-カルバルデヒドを出発物質として用いたことを除いて繰り返して、所望の生成物を白みがかった固体として全体で約 31 % の収率で提供した。

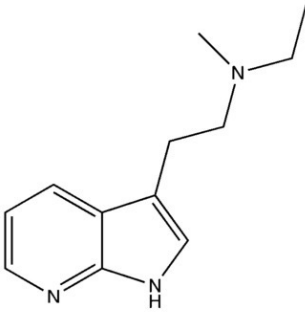
40

【0553】

実施例 2 3 D。3-(N-エチル-N-メチルアミノエチル)-ピロロ [2, 3-b] ピリジンの生成

50

【化 1 0 5】



10

【0 5 5 4】

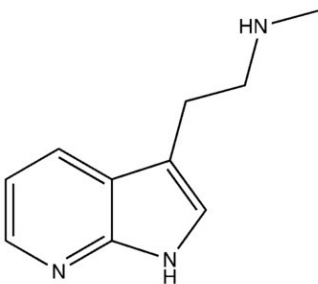
実施例 1 1 D の手順を、1 H-ピロロ [2, 3-b] ピリジン-3-カルバルデヒドを出発物質として用いたことを除いて繰り返して、所望の生成物を白みがかった油として全体で約 4 0 % の収率で提供した。

【0 5 5 5】

実施例 2 4 D。3-(N-メチルアミノエチル)-ピロロ [2, 3-b] ピリジンの生成

【化 1 0 6】

20



30

【0 5 5 6】

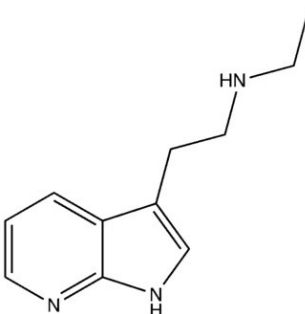
実施例 1 2 D の手順を、1 H-ピロロ [2, 3-b] ピリジン-3-カルバルデヒドを出発物質として用いたことを除いて繰り返して、所望の生成物を白みがかった固体として全体で約 3 4 % の収率で提供した。

【0 5 5 7】

実施例 2 5 D。3-(N-エチルアミノエチル)-ピロロ [2, 3-b] ピリジンの生成

【化 1 0 7】

40



【0 5 5 8】

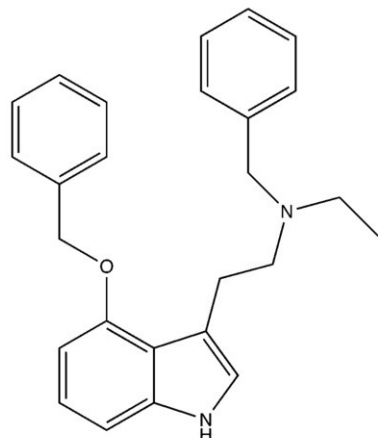
50

実施例 13D の手順を、1H-ピロロ[2,3-b]ピリジン-3-カルバルデヒドを出発物質として用いたことを除いて繰り返して、所望の生成物を白みがかった固体として全体で約 35% の収率で提供した。

【0559】

実施例 26D。4-ベンジルオキシ-3-(N-ベンジル-N-エチルアミノエチル)インドールの生成

【化108】



10

20

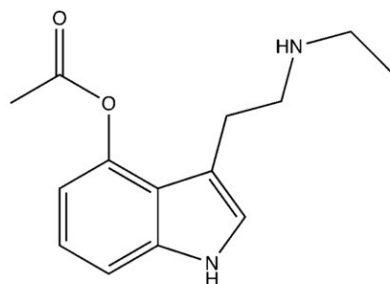
【0560】

実施例 1D 及び 2D の手順を、4-ベンジルオキシインドールを出発インドールとして使用し、ベンジルエチルアミンを第 2 級アミンとして使用した（実施例 2D の Pd/C 脱ベンジル化工程は実施しなかった）ことを除いて繰り返して、所望の生成物を白みがかった固体として提供した。

【0561】

実施例 27D。4-アセトキシ-3-(N-エチルアミノエチル)インドールの生成

【化109】



30

【0562】

MeOH (10 mL) 中の実施例 26D の手順に従って生成されたベンジルエチルアミン中間体 (1 mmol) の溶液に 10 wt/wt% の Pd/C (10~15%) を添加した。反応混合物を脱気して酸素を除去し、水素雰囲気 (1 気圧) 下で 18~24 時間攪拌した。完了後、反応混合物をセライトのパッドで濾過し、溶媒を真空中で除去して粗製油を得、これは脱ベンジル化フェノール性インドールを表していた。

40

【0563】

脱ベンジル化フェノール性中間体を窒素下で無水 DCM (10 mL) に溶解し、0℃に冷却した。Et₃N (1.2 eq) を溶液に添加し、続いて Boc-無水物 (1.1 eq) を滴下様式で添加し、反応混合物を、TLC によってモニタリングされるように出発物質の消失まで室温で攪拌した。反応ミックスを次いで DCM (20 mL) で希釈し、水及

50

びブラインで順次に洗浄した。有機層を次いで硫酸ナトリウムで乾燥させ、濃縮してN-BOC保護中間体を生成した。

【0564】

N-BOC保護中間体を次いでDCM(15 mL)に取り入れ、溶液を0℃に冷却した。Et₃N(2.1 eq)を溶液に添加し、続いて滴下様式で塩化アセチル(1.3 eq)を滴下して添加し、次いで内容物を出発物質の消失まで(TLCに従う)室温で撹拌した。完了後、反応混合物をDCMで希釈し、水及びブライン洗浄物で洗浄した。有機層を除去し、硫酸ナトリウム下で乾燥させ、加圧下で還元して油性残渣を得た。

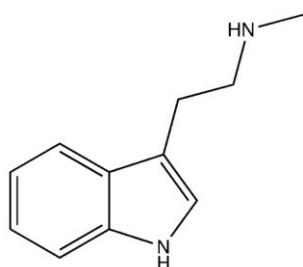
【0565】

残渣を次いで無水DCMに取り入れ、これにエーテル中のHCl(2 N; 10当量)を、0℃で撹拌されている溶液に滴下様式で添加した。出発物質がTLCモニタリングによって消費されるまで撹拌を継続した。反応の完了後の得られた沈殿物を濾過し、低温DCM、ジエチルエーテルで洗浄し、真空下で乾燥させて所望の化合物を黄色がかった固体として33%の全体収率で生成した。

【0566】

実施例28D。3-(N-メチルアミノエチル)インドールの生成

【化110】



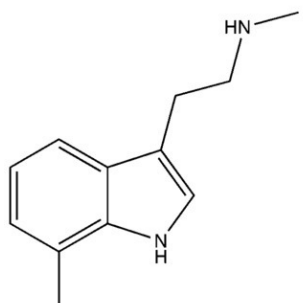
【0567】

実施例7Dに従う方法を、ベンジルメチルアミンを第2級アミンとして使用したことを除いて繰り返して、所望の生成物を白みがかった固体として52%の収率で得た。

【0568】

実施例29D。7-メチル-3-(メチルアミノエチル)-インドールの生成

【化111】



【0569】

実施例6D及び7Dの手順を、7-メチルインドール-3-カルバルデヒドを出発物質として及びメチルベンジルアミンを第2級アミンとして用いて繰り返して、所望の生成物を白みがかった半固体として62%の収率で提供した。

【0570】

実施例30D。6-フルオロ-5-メトキシ-3-(N-メチルアミノエチル)インドールの生成

10

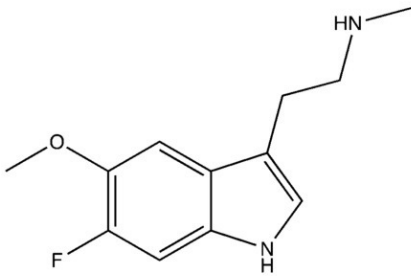
20

30

40

50

【化 1 1 2】



10

【0 5 7 1】

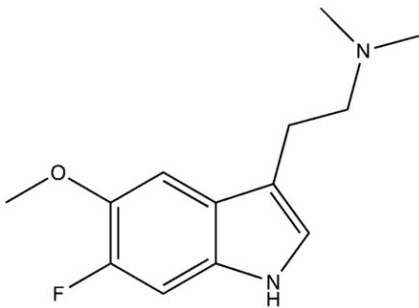
実施例 1 D 及び 2 D の手順を、6-フルオロ-5-メトキシインドールを出発インドールとして使用し、ベンジルメチルアミンを第 2 級アミンとして使用したことを除いて繰り返して、所望の生成物を白みがかった固体として約 3 4 % の全体収率で提供した。

【0 5 7 2】

実施例 3 1 D。6-フルオロ-5-メトキシ-3-(N,N-ジメチルアミノエチル)インドールの生成

【化 1 1 3】

20



【0 5 7 3】

30

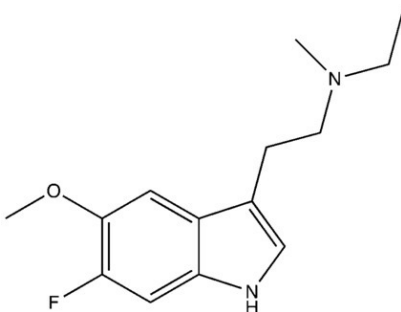
実施例 1 D 及び 2 D の手順を、6-フルオロ-5-メトキシインドールを出発インドールとして使用し、ジメチルアミンを第 2 級アミンとして使用した（実施例 2 D の Pd / C 脱ベンジル化工程は実施しなかった）ことを除いて繰り返して、所望の生成物を白みがかった固体として約 4 0 % の全体収率で提供した。

【0 5 7 4】

実施例 3 2 D。6-フルオロ-5-メトキシ-3-(N-エチル-N-メチルアミノエチル)インドールの生成

【化 1 1 4】

40



【0 5 7 5】

50

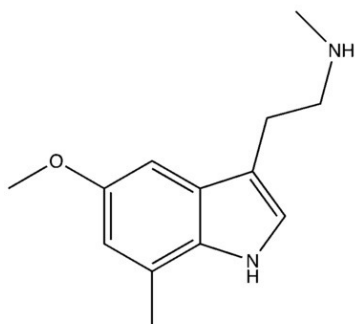
実施例 1 D 及び 2 D の手順を、6-フルオロ-5-メトキシインドールを出発インドールとして使用し、エチルメチルアミンを第 2 級アミンとして使用した（実施例 2 D の Pd/C 脱ベンジル化工程は実施しなかった）ことを除いて繰り返して、所望の生成物を黄色がかった固体として約 48% の全体収率で提供した。

【0576】

実施例 33 D。5-メトキシ-7-メチル-3-(N-メチルアミノエチル)インドールの生成

【化 115】

10



【0577】

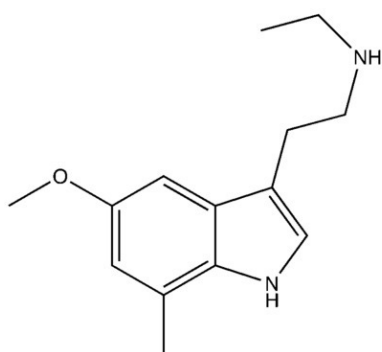
実施例 1 D 及び 2 D の手順を、5-メトキシ-7-メチルインドールを出発インドールとして使用し、ベンジルメチルアミンを第 2 級アミンとして使用したことを除いて繰り返して、所望の生成物を白みがかった固体として約 32% の全体収率で提供した。

【0578】

実施例 34 D。5-メトキシ-7-メチル-3-(N-エチルアミノエチル)インドールの生成

【化 116】

30



【0579】

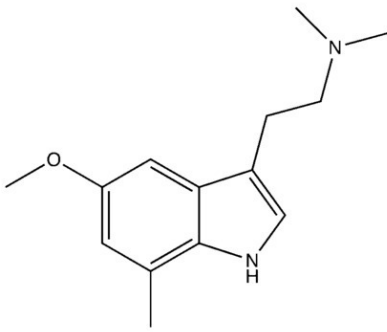
実施例 1 D 及び 2 D の手順を、5-メトキシ-7-メチルインドールを出発インドールとして使用し、ベンジルエチルアミンを第 2 級アミンとして使用したことを除いて繰り返して、所望の生成物を白みがかった固体として約 36% の全体収率で提供した。

【0580】

実施例 35 D。5-メトキシ-7-メチル-3-(N,N-ジメチルアミノエチル)インドールの生成

50

【化 1 1 7】



10

【0 5 8 1】

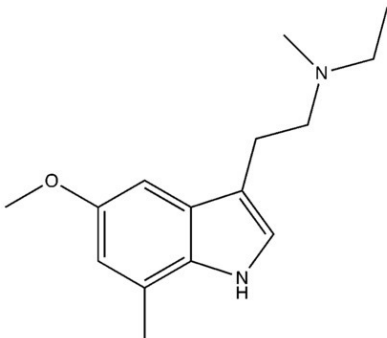
実施例 1 D 及び 2 D の手順を、5-メトキシ-7-メチルインドールを出発インドールとして使用し、ジメチルアミンを第 2 級アミンとして使用した（実施例 2 D の Pd / C 脱ベンジル化工程は実施しなかった）ことを除いて繰り返して、所望の生成物を白みがかった固体として約 48 % の全体収率で提供した。

【0 5 8 2】

実施例 3 6 D。5-メトキシ-7-メチル-3-(N-エチル-N-メチルアミノエチル)インドールの生成

20

【化 1 1 8】



30

【0 5 8 3】

実施例 1 D 及び 2 D の手順を、5-メトキシ-7-メチルインドールを出発インドールとして使用し、エチルメチルアミンを第 2 級アミンとして使用した（実施例 2 D の Pd / C 脱ベンジル化工程は実施しなかった）ことを除いて繰り返して、所望の生成物を黄色がかった固体として約 52 % の全体収率で提供した。

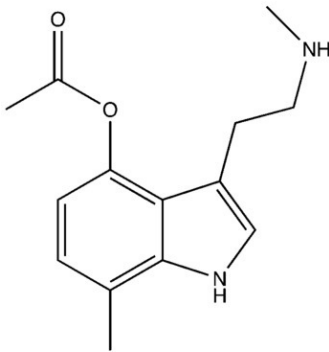
【0 5 8 4】

実施例 3 7 D。4-アセトキシ-7-メチル-3-(N-メチルアミノエチル)インドールの生成

40

50

【化 1 1 9】



10

【0 5 8 5】

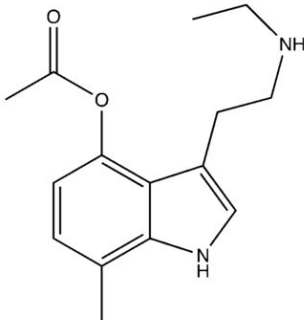
実施例 2 6 D 及び 2 7 D の手順を、4-ベンジルオキシ-7-メチルインドールを出発インドールとして使用し、ベンジルメチルアミンを第 2 級アミンとして使用したことを除いて繰り返して、所望の生成物を白みがかった固体として約 2 7 % の全体収率で提供した。

【0 5 8 6】

実施例 3 8 D。4-アセトキシ-7-メチル-3-(N-エチルアミノエチル)インドールの生成

20

【化 1 2 0】



30

【0 5 8 7】

実施例 2 6 D 及び 2 7 D の手順を、4-ベンジルオキシ-7-メチルインドールを出発インドールとして使用し、ベンジリエチルアミンを第 2 級アミンとして使用したことを除いて繰り返して、所望の生成物を白みがかった固体として約 4 5 % の全体収率で提供した。

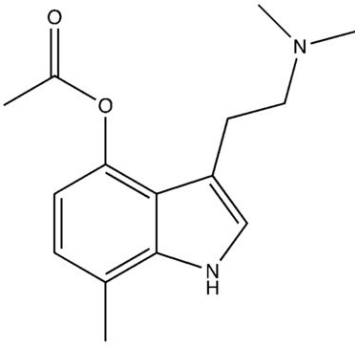
【0 5 8 8】

実施例 3 9 D。4-アセトキシ-7-メチル-3-(N,N-ジメチルアミノエチル)インドールの生成

40

50

【化 1 2 1】



10

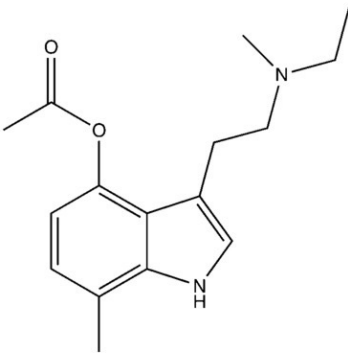
【0 5 8 9】

実施例 2 6 D 及び 2 7 D の手順を、4-ベンジルオキシ-7-メチルインドールを出発インドールとして使用し、ジメチルアミンを第 2 級アミンとして使用したことを除いて繰り返して、所望の生成物を薄い油として約 3 9 % の全体収率で提供した。

【0 5 9 0】

実施例 4 0 D。4-アセトキシ-7-メチル-3-(N-エチル-N-メチルアミノエチル)インドールの生成

【化 1 2 2】



20

30

【0 5 9 1】

実施例 2 6 D 及び 2 7 D の手順を、4-ベンジルオキシ-7-メチルインドールを出発インドールとして使用し、エチルメチルアミンを第 2 級アミンとして使用したことを除いて繰り返して、所望の生成物を薄い油として約 3 7 % の全体収率で提供した。

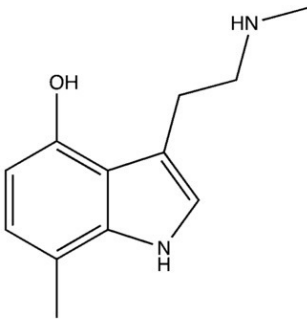
【0 5 9 2】

実施例 4 1 D。4-ヒドロキシ-7-メチル-3-(N-メチルアミノエチル)インドールの生成

40

50

【化 1 2 3】



10

【0 5 9 3】

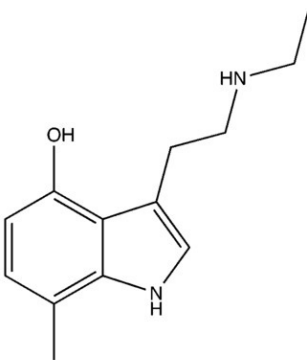
水性メタノール（4：1、0.1 M）中の実施例 3 7 D の手順に従って調製されたアセトキシアミン（1.0 mmol）の溶液に酢酸アンモニウム（617 mg、8 mmol）を不活性雰囲気下で添加し、室温で 4 時間攪拌した。メタノールを真空中で除去し、残渣を酢酸エチル（3 x）で抽出し、ブラインで洗浄してから、無水硫酸ナトリウムで乾燥させた。乾燥有機相の濃縮は、粗製フェノールをもたらし、これをシリカゲルクロマトグラフィー（CH₂Cl₂ 中の 5 % MeOH）を介して精製して標的フェノールを白色の固体として 86 % の収率で得た。

20

【0 5 9 4】

実施例 4 2 D。4-ヒドロキシ-7-メチル-3-(N-エチルアミノエチル)インドールの生成

【化 1 2 4】



30

【0 5 9 5】

実施例 4 1 D の手順を、実施例 3 8 D のアセトキシインドールが出発物質として機能したことを除いて繰り返して、所望の生成物を白色の固体として 90 % の収率で提供した。

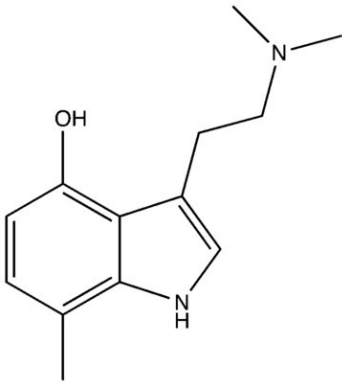
【0 5 9 6】

実施例 4 3 D。4-ヒドロキシ-7-メチル-3-(N,N-ジメチルアミノエチル)インドールの生成

40

50

【化 1 2 5】



10

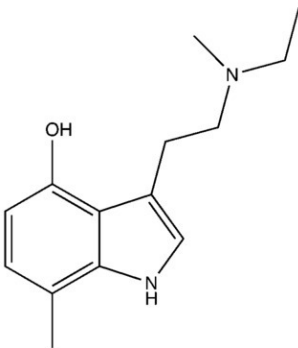
【0 5 9 7】

実施例 4 1 D の手順を、実施例 3 9 D のアセトキシインドールが出発物質として機能したことを除いて繰り返して、所望の生成物を白色の固体として 9 6 % の収率で提供した。

【0 5 9 8】

実施例 4 4 D。4-ヒドロキシ-7-メチル-3-(N-エチル-N-メチルアミノエチル)インドールの生成

【化 1 2 6】



30

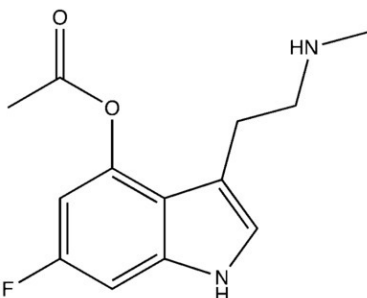
【0 5 9 9】

実施例 4 1 D の手順を、実施例 4 0 D のアセトキシインドールが出発物質として機能したことを除いて繰り返して、所望の生成物を白色の固体として 9 2 % の収率で提供した。

【0 6 0 0】

実施例 4 5 D。4-アセトキシ-6-フルオロ-3-(N-メチルアミノエチル)インドールの生成

【化 1 2 7】



40

【0 6 0 1】

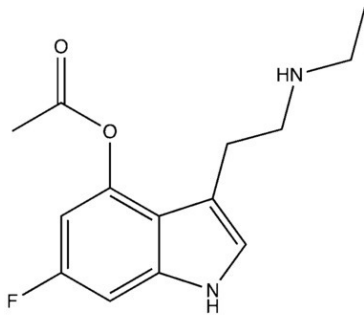
50

実施例 26 D 及び 27 D の手順を、4-ベンジルオキシ-6-フルオロインドールを出発インドールとして使用し、ベンジルメチルアミンを第 2 級アミンとして使用したことを除いて繰り返して、所望の生成物を白みがかった固体として約 22 % の全体収率で提供した。

【0602】

実施例 46 D。4-アセトキシ-6-フルオロ-3-(N-エチルアミノエチル)インドールの生成

【化128】



10

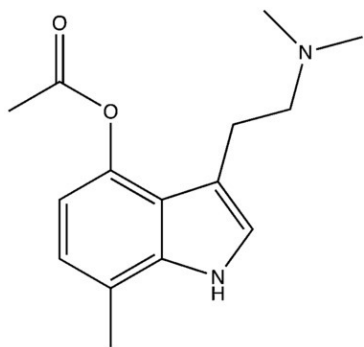
【0603】

実施例 26 D 及び 27 D の手順を、4-ベンジルオキシ-6-フルオロインドールを出発インドールとして使用し、ベンジルエチルアミンを第 2 級アミンとして使用したことを除いて繰り返して、所望の生成物を白みがかった固体として約 45 % の全体収率で提供した。

【0604】

実施例 47 D。4-アセトキシ-7-メチル-3-(N,N-ジメチルアミノエチル)インドールの生成

【化129】



30

【0605】

実施例 26 D 及び 27 D の手順を、4-ベンジルオキシ-7-メチルインドールを出発インドールとして使用し、ジメチルアミンを第 2 級アミンとして使用したことを除いて繰り返して、所望の生成物を薄い油として約 39 % の全体収率で提供した。

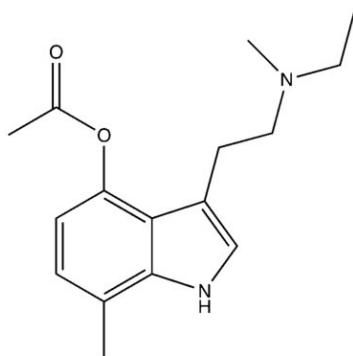
【0606】

実施例 48 D。4-アセトキシ-7-メチル-3-(N-エチル-N-メチルアミノエチル)インドールの生成

40

50

【化 1 3 0】



10

【0 6 0 7】

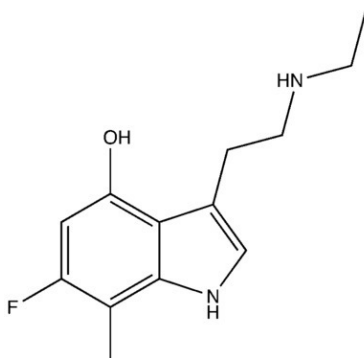
実施例 2 6 D 及び 2 7 D の手順を、4-ベンジルオキシ-7-メチルインドールを出発インドールとして使用し、エチルメチルアミンを第 2 級アミンとして使用したことを除いて繰り返して、所望の生成物を薄い油として約 3 7 % の全体収率で提供した。

【0 6 0 8】

実施例 4 9 D。4-ヒドロキシ-6-フルオロ-7-メチル-3-(N-エチルアミノエチル)インドールの生成

20

【化 1 3 1】



30

【0 6 0 9】

実施例 1 D の手順を、6-フルオロ-7-メチル-1-(トリイソプロピルシリル)インドールを出発インドールとして使用することを除いて繰り返して、所望のシリル保護ケトアミド中間体をさらなる精製をせずに提供する。

【0 6 1 0】

TIPS 保護ケトアミド (1 eq)、Pd(OAc)₂ (0.1 eq)、及びグリシン (4 eq) を、火力乾燥させた反応フラスコに入れ、続いて空気下でシリンジを介して HFIP / AcOH (3 / 2) 1 mL を添加する。反応混合物を室温で 10 分間攪拌し、次いで事前加熱された油浴に 80 °C で 17 時間入れてから、酢酸エチルで希釈し、NaHCO₃ でクエンチする。反応混合物を酢酸エチルで 3 回抽出し、無水硫酸ナトリウムを使用して乾燥させ、これを次いで濾過し、真空中で濃縮して 4-アセチル化ケトアミド中間体を提供する。

40

【0 6 1 1】

不活性雰囲気下の 0 °C の THF 中の 4-アセチル化ケトアミド (1 eq) の溶液に、LiAlH₄ (53 mg、1.4 mmol、5 eq) を一度に添加し、混合物を還流下で 4 時間加熱する。反応を水の添加によってクエンチし、水性層を Et₂O で抽出する。組み合わせた有機層をブラインで洗浄し、無水硫酸ナトリウムで乾燥させ、真空中で濃縮して

50

粗製ベンジルエチルアミン中間体を提供する。

【0612】

TIPS保護基を保有するベンジルエチルアミン中間体（1eq）を不活性雰囲気下で室温でTHFに懸濁してから、テトラヒドロフラン中のテトラブチルアンモニウムフルオリド（TBAF）の1M溶液を添加する。溶液を10分間室温で攪拌し、次いで炭酸ナトリウムの飽和溶液に注ぎ、ジクロロメタン（3×10mL）で抽出する。組み合わせた有機層を水で洗浄し、硫酸ナトリウムで乾燥させ、減圧下で蒸発させる。残渣をシリカゲルクロマトグラフィー（DCM中の5～9%のMeOH）を介して精製して、脱保護されたベンズエチルアミン中間体を得る。

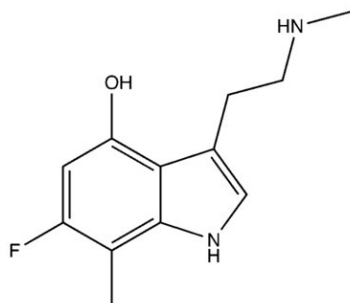
【0613】

MeOH中の脱保護されたベンジルエチルアミン中間体（1当量）の溶液に10wt/wt%のPd/C（10～15%）を添加する。反応混合物を脱気して酸素を除去し、水素雰囲気（1気圧）下で18～24時間攪拌する。完了後、反応混合物をセライトのパッドで濾過し、溶媒を真空中で除去する。シリカゲルクロマトグラフィー（DCMをロードし、1%MeOH/DCM、次いで1%NEt₃がドープされた5%MeOH/DCMで溶出する）での精製によって粗製物から標的脱ベンジル化エチルアミン標的化合物を単離することができた。

【0614】

実施例50D。4-ヒドロキシ-6-フルオロ-7-メチル-3-(N-メチルアミノエチル)インドールの生成

【化132】



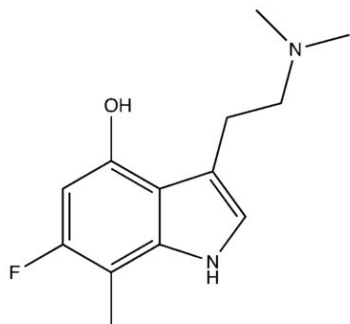
【0615】

実施例49Dの手順を、ベンジルメチルアミンを第2級アミンとして使用することを除いて繰り返して、所望の生成物を提供する。

【0616】

実施例51D。4-ヒドロキシ-6-フルオロ-7-メチル-3-(N,N-ジメチルアミノエチル)インドールの生成

【化133】



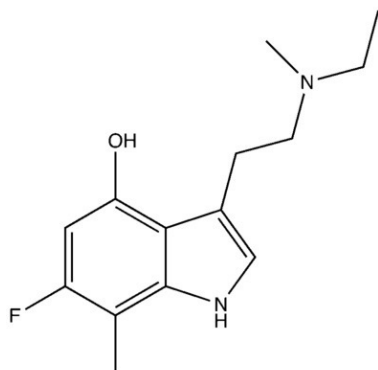
【0617】

実施例 50D の手順を、ジメチルアミンを第 2 級アミンとして使用すること（及び最終 Pd / C 脱ベンジル化工程を行わないこと）を除いて繰り返して、所望の生成物を提供する。

【0618】

実施例 52D。4-ヒドロキシ-6-フルオロ-7-メチル-3-(N-エチル-N-メチルアミノエチル)インドールの生成

【化134】



10

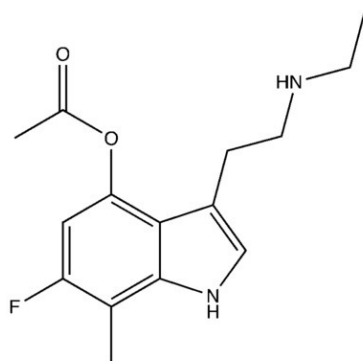
【0619】

実施例 50D の手順を、エチルメチルアミンを第 2 級アミンとして使用すること（及び最終 Pd / C 脱ベンジル化工程を行わないこと）を除いて繰り返して、所望の生成物を提供する。

【0620】

実施例 53D。4-アセトキシ-6-フルオロ-7-メチル-3-(N-エチルアミノエチル)インドールの生成

【化135】



30

【0621】

実施例 49D の方法に従って調製された 4-ヒドロキシル生成物（1 eq）を窒素下で無水 DCM に溶解し、0℃に冷却する。Et₃N（1.2 eq）を溶液に添加し、続いて Boc-無水物（1.1 eq）を滴下様式で添加し、反応混合物を、TLC によってモニタリングされるように出発物質の消失まで室温で攪拌した。反応ミックスを次いで DCM で希釈し、水及びブラインで順次に洗浄する。有機層を次いで硫酸ナトリウムで乾燥させ、濃縮して N-BOC 保護中間体を生成する。

【0622】

N-BOC 保護中間体を次いで DCM に取り入れ、溶液を 0℃に冷却する。Et₃N（2.1 eq）を溶液に添加し、続いて滴下様式で塩化アセチル（1.3 eq）を滴下して添加し、次いで反応物を出発物質の消失まで（TLC に従う）室温で攪拌する。完了後、

40

50

反応混合物を D C M で希釈し、水及びブライン洗浄物で洗浄する。有機層を除去し、硫酸ナトリウム下で乾燥させ、加圧下で還元して油性残渣を得る。

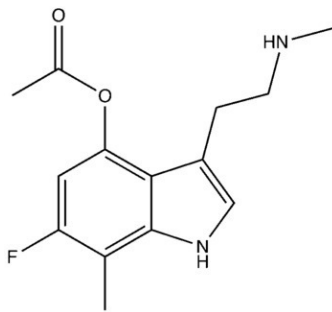
【 0 6 2 3 】

残渣を次いで無水 D C M に取り入れ、これにエーテル中の H C l (2 M ; 1 2 当量) を、 0 ° C で攪拌されている溶液に滴下様式で添加した。出発物質が T L C モニタリングによって消費されるまで攪拌を継続する。反応の完了後の得られた沈殿物を濾過し、低温 D C M 、ジエチルエーテルで洗浄し、真空下で乾燥させて所望の化合物を生成する。

【 0 6 2 4 】

実施例 5 4 D。4-アセトキシ-6-フルオロ-7-メチル-3-(N-メチルアミノエチル)インドールの生成

【化 1 3 6】



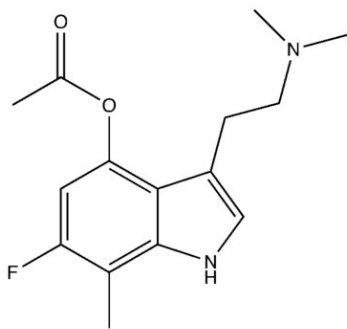
【 0 6 2 5 】

実施例 5 3 D の手順を、実施例 5 0 D の方法に従って調製された生成物を出発物質として使用して繰り返して所望の生成物を提供する。

【 0 6 2 6 】

実施例 5 5 D。4-アセトキシ-6-フルオロ-7-メチル-3-(N,N-ジメチルアミノエチル)インドールの生成

【化 1 3 7】



【 0 6 2 7 】

実施例 5 3 D の手順を、実施例 5 1 D の方法に従って調製された生成物を出発物質として使用することを除いて繰り返し、所望の生成物を提供する。

【 0 6 2 8 】

実施例 5 6 D。4-アセトキシ-6-フルオロ-7-メチル-3-(N-エチル-N-メチルアミノエチル)インドールの生成

10

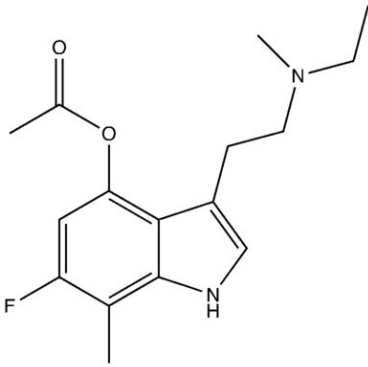
20

30

40

50

【化 1 3 8】



10

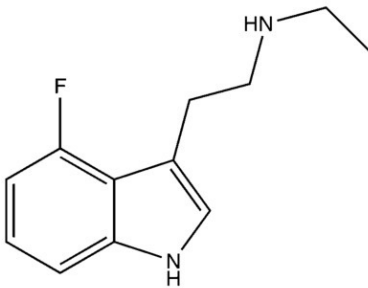
【0 6 2 9】

実施例 5 5 D の手順を、実施例 5 2 D によって調製された生成物を除いて繰り返して、所望の生成物を提供する。

【0 6 3 0】

実施例 5 7 D。4-フルオロ-3-(N-エチルアミノエチル)インドールの生成
【化 1 3 9】

20



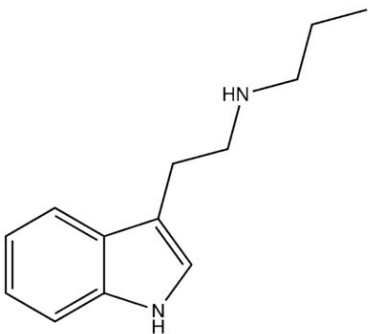
【0 6 3 1】

実施例 1 D 及び 2 D の手順を、4-フルオロインドールを出発物質として使用すること
を除いて繰り返して、所望の生成物を提供する。

【0 6 3 2】

実施例 5 8 D。3-(N-n-プロピルアミノエチル)インドールの生成
【化 1 4 0】

30



40

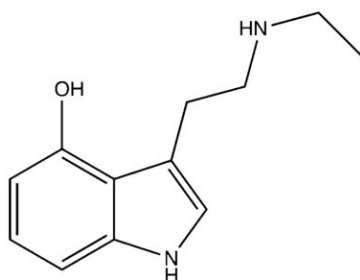
【0 6 3 3】

実施例 1 D 及び 2 D の手順を、インドールを出発物質として使用し、ベンジル-n-プロ
ピルアミンを第 2 級アミンとして使用することを除いて繰り返して、所望の生成物を提
供する。

50

【0634】

実施例59D。4-ヒドロキシ-3-(N-エチルアミノエチル)インドールの生成
【化141】



10

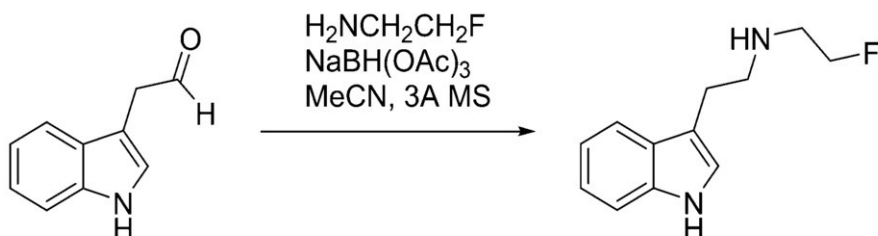
【0635】

実施例38D及び42Dの手順を、4-ベンジルオキシインドールを出発インドールとして使用したことを除いて従って、所望の生成物を良好な収率で提供した。

【0636】

実施例60D。3-(N-2-フルオロエチルアミノエチル)インドールの生成
【化142】

20



【0637】

アセトニトリル(0.1M)中の承認アルデヒド(1.0eq)の溶液に、2-フルオロエチルアミン(2~5eq)及び活性化ホール3A MSの数個のビーズを添加する。室温で10分間攪拌した後、NaBH(OAc)₃(>5eq)を一度に添加する。反応混合物を18~24時間室温で攪拌してから、1M HClの添加によってクエンチし、ジエチルエーテルで希釈する。相を分離し、有機相を1M HCl(x2)で洗浄する。組み合わせた水相を固体NaOHの添加によって塩基性化する。水相をDCM(x3)で抽出し、組み合わせたDCM洗浄物を無水硫酸ナトリウムで乾燥させる。濾過後、溶媒を真空中で除去し、DCM中の1~5%のMeOHで溶出するSiO₂クロマトグラフィーを介して精製して所望の生成物を得る。

30

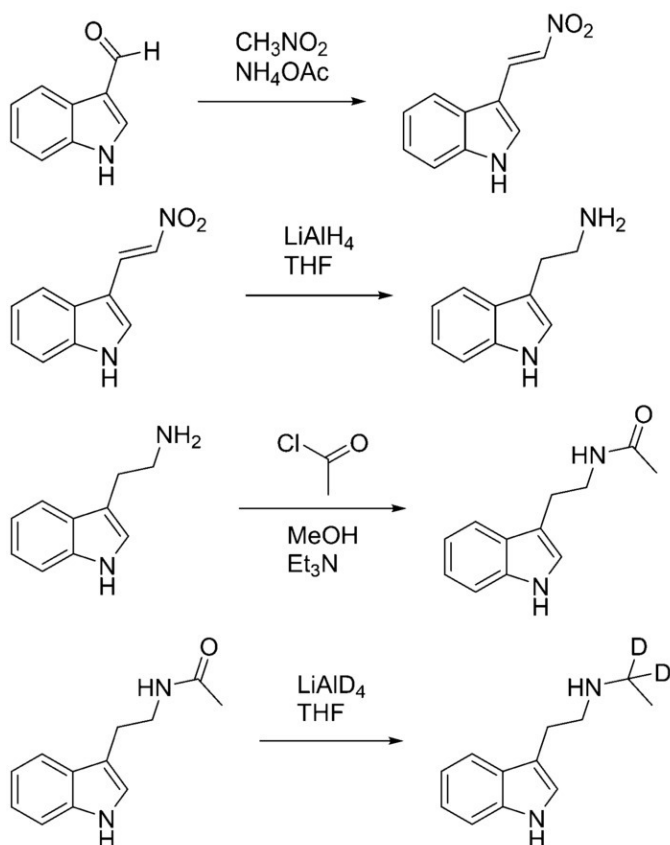
【0638】

実施例61D。3-(N-エチル-d2-アミノエチル)インドールの生成

40

50

【化 1 4 3】



10

20

【0 6 3 9】

ニトロメタン（8 mL）中の C-3 カルバルデヒド（2.5 mmol）及び酢酸アンモニウム（1.94 mmol、0.8 eq）の溶液を還流下で不活性雰囲気下で3時間または TLC によって反応が完了するまで加熱する。得られた反応混合物を室温に冷却し、沈殿した固体をブフナー漏斗での濾過を介して収集してアルファベータ不飽和ニトロ付加物を得る。

30

【0 6 4 0】

無水 THF（15 mL）中の水素化リチウムアルミニウム（18.4 mmol、5.3 当量）の溶液にアルファベータ不飽和ニトロ化合物（3.48 mmol）を部分ずつ添加する。得られた溶液を室温で不活性雰囲気下で24時間攪拌する。酢酸エチル（15 mL）を次いで反応混合物に徐々に添加し、続いて水（1 mL）及び硫酸ナトリウム六水和物を添加する。得られた混合物をさらに1時間攪拌してから、セライトを通して濾過し、減圧下で濃縮する。残留油を MeOH : TEA : EA（3 : 2 : 15）で溶出する SiO_2 クロマトグラフィーを介して精製して第1級アミンを得る。

40

【0 6 4 1】

第1級アミン（0.68 mmol）及びトリエチルアミン（1.02 mmol）をメタノールに溶解し、次いで 0°C に冷却してから、塩化アセチル（0.68 mmol、1.0 eq）を滴下して添加する。得られた混合物を室温に温め、4時間攪拌する。TLC に従って出発物質が消費された場合、それを真空中で濃縮し、残渣をジクロロメタンに取り入れてから、10%クエン酸、飽和重炭酸ナトリウム、及びブラインで洗浄する。有機層を組み合わせ、硫酸ナトリウムを使用して乾燥させ、濾過し、濃縮して所望のアミド中間体を得る。

【0 6 4 2】

0°C の不活性雰囲気下の THF（15 mL）中のアミド中間体（1.0 mmol）の溶液に、 LiAlD_4 粉末（3.5 eq）を部分ずつ添加してから、還流下で24時間加熱

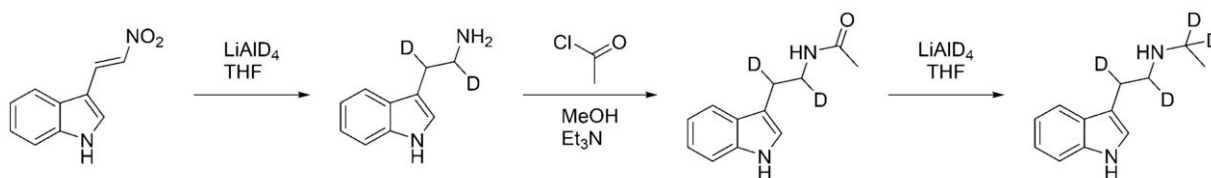
50

する。反応を 0℃で Et₂O (20 mL) 及び水 (2 mL) を使用してクエンチし、続いてセライトのパッドを介して濾過する。水相を酢酸エチルで 3 回抽出し、組み合わせた有機層をブラインで 3 回洗浄してから、無水硫酸ナトリウムで乾燥させ、真空中で濃縮する。粗生成物を、DCM 中の 5% MeOH を使用して SiO₂ クロマトグラフィーを介して精製して所望の生成物を得る。

【0643】

実施例 62D。3-(N-エチル-d₂-アミノエチル-d₂) インドールの生成

【化144】



10

【0644】

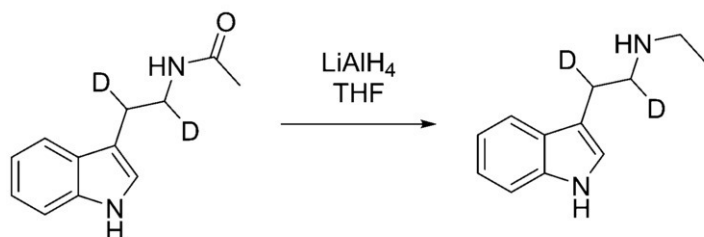
アルファ-ベータ不飽和ニトロ出発物質を実施例 61D の方法に従って調製する。無水 THF (15 mL) 中の重水素化リチウムアルミニウム (18.4 mmol、5.3 当量) の溶液にアルファベータ不飽和ニトロ化合物 (3.48 mmol) を部分ずつ添加する。得られた溶液を室温で不活性雰囲気下で 24 時間攪拌する。酢酸エチル (15 mL) を次いで反応混合物に徐々に添加し、続いて水 (1 mL) 及び硫酸ナトリウム六水和物を添加する。得られた混合物をさらに 1 時間攪拌してから、セライトを通して濾過し、減圧下で濃縮する。残渣を MeOH:TEA:EA (3:2:15) で溶出する SiO₂ クロマトグラフィーを介して精製して d₄ 第 1 級アミンを得る。d₄ 第 1 級アミンのアセチル化及び重水素化物還元を実施例 61D の手順に従って進行させて所望の d₅ インドール生成物を得る。

20

【0645】

実施例 63D。3-(N-エチルアミノエチル-d₂) インドールの生成

【化145】



30

【0646】

実施例 62D の手順を、アミドの還元を重水素化リチウムアルミニウムの代わりに水素化アルミニウムリチウムを用いて行うことを除いて繰り返して、所望の重水素化インドールを得る。

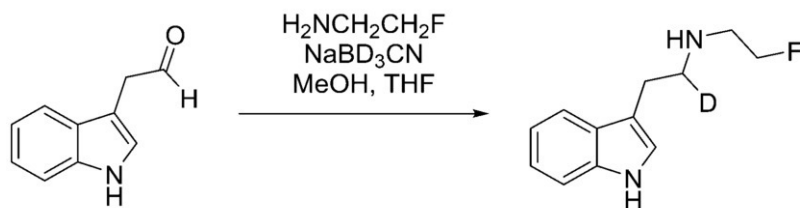
40

【0647】

実施例 64D。3-(N-2-フルオロエチルアミノエチル-d₁) インドールの生成

50

【化 1 4 6】



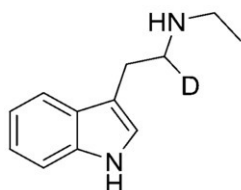
【0 6 4 8】

実施例 6 0 D の手順を、シアノ重水素化ホウ素ナトリウムをナトリウムトリアセトキシボロヒドリドの代わりに使用し、反応を MeOH 及び THF 溶媒系において実行することを除いて繰り返して、所望の重水素化インドールを得る。

【0 6 4 9】

実施例 6 5 D。3 - (N - エチルアミノエチル - d 1) インドールの生成

【化 1 4 7】



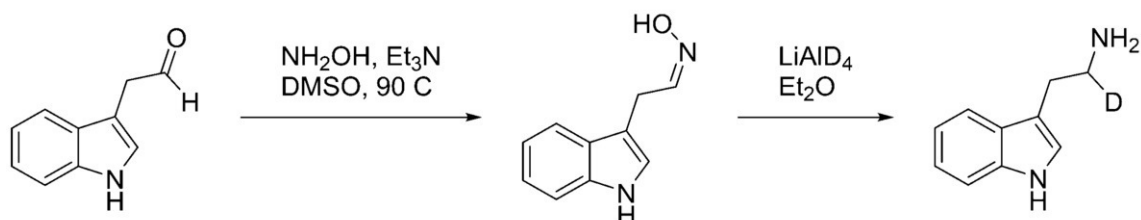
【0 6 5 0】

実施例 6 4 D の手順を、ベンジルエチルアミンを 2 - F - エチルアミンの代わりに使用することを除いて繰り返し、これを次いで 2 7 D に従って脱ベンジルして所望の重水素化インドールを得る。

【0 6 5 1】

実施例 6 6 D。トリプタミン d 1 の生成

【化 1 4 8】



【0 6 5 2】

攪拌棒を備えるバイアルに承認アルデヒド (1 e q) を添加し、続いてトリエチルアミン (1 . 5 e q) ヒドロキシルアミン塩酸塩 (1 . 2 e q) 及び DMSO を添加した。バイアルをキャップし、9 0 ° C で 1 時間加熱した。反応混合物を室温に冷却し、水及びエーテルをバイアルに添加した。水層を除去し、エーテルで抽出した。組み合わせたエーテル性層を水、次いでブラインで洗浄し、MgSO₄ で乾燥させ、減圧下で濃縮した。得られた淡い残渣をさらなる精製をせずに粗製で使用した。

【0 6 5 3】

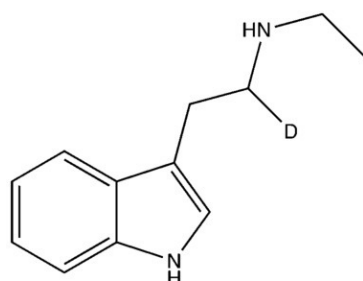
無水エーテル中の重水素化リチウムアルミニウム (5 . 3 e q) の溶液にエーテル中のオキシム (3 . 4 8 mmol) を徐々に添加した。得られた溶液を不活性雰囲気下で 8 時間還流した。冷却後、余剰のヒドリドを水の滴下添加によって分解した。複合体を 3 0 % 水酸化ナトリウム溶液の添加によって加水分解した。混合物を室温で 3 0 分間攪拌した。

次いで水の追加のアリコートを追加した。次いでエーテル層を金属水酸化物の粒状残渣からデカントした。残渣をエーテルで数回洗浄し、すべての洗浄物を元のエーテル画分と組み合わせ、セライトを通して濾過した。組み合わせたエーテル画分を次いで、溶媒を次いで減圧下で濃縮し、MeOH:TEA:EA(3:2:15)で溶出するSiO₂クロマトグラフィーを介して精製して所望の第1級アミンを得た。

【0654】

実施例67D。3-(N-エチルアミノエチル-d1)インドールの生成

【化149】



10

【0655】

実施例62D及び63Dの手順を、実施例66Dのアルファ重水素化トリプタミンをアミドを形成するために利用し、LAHを還元剤として使用することを除いて繰り返して、所望の重水素化インドールを生成する。

20

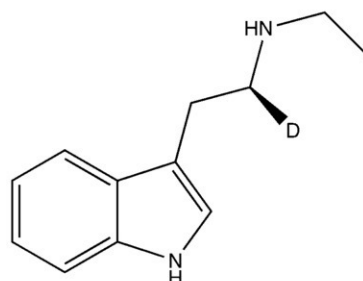
【0656】

実施例68D。3-(N-エチルアミノエチル-d1)インドールの分割

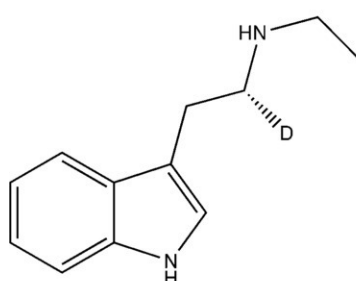
実施例67Dに従って生成された生成物を、既知のエナンチオマー分割方法、例えば、HPLCまたはForeman et al., J. Pharm. Sci., 58(2):189-192(1969)(すべての目的のためにその全体が参照により本明細書に組み込まれる)に記載のビタルトレートジアステレオマーの環状結晶化方法を使用して分割し、その2つは、(S)及び(R)エナンチオマーが濃縮された2つの別々の組成物をそれぞれ提供する：

30

【化150】



(2S)



(2R)

40

【0657】

実施例69D。ヒドロフマル酸塩(別名[1:1]フマル酸塩)の生成

化合物の各1つの[1:1]ヒドロフマル酸塩を、以下の手順を使用して実施例2~5D、7~25D及び27~68Dの化合物から別々に生成する：

1当量の遊離塩基生成物をアセトンに溶解し、アセトン中のフマル酸(1当量)の溶液に滴下して添加する。沈殿物が直ちに形成し、沈殿物/アセトンを-20℃で一晩保存する。固体を次いで濾過し、氷冷アセトンで洗浄して所望の結晶性ヒドロフマル酸塩を生成する。

50

【0658】

実施例70D。フマル酸塩（別名〔2：1〕フマル酸塩）の生成

化合物の各1つの〔2：1〕フマル酸塩を、以下の手順を使用して実施例2～5D、7～25D及び27～68Dの化合物から別々に生成する：

1当量の遊離塩基生成物をアセトンに溶解し、アセトン中のフマル酸（0.5当量）の溶液に滴下して添加する。沈殿物が直ちに形成し、沈殿物／アセトンを -20°C で一晩保存する。固体を次いで濾過し、氷冷アセトンで洗浄して所望の結晶性フマル酸塩を生成する。

【0659】

生物学的研究

頭部・引きつり反応（HTR）実験。

用量－反応研究。式Iの化合物についての用量－反応研究を4つの連続的工程で実施する：

（a）．製剤化処理。化合物を溶解するために使用され得る好適な（非毒性）ビヒクルを同定する。

【0660】

（b）．パイロット用量－知見研究。HTR誘導薬は、典型的には、上昇相及び下降相を伴う、二相ベル型（逆U字型）用量－反応機能を有する。HTR用量－反応研究における薬物の効力を定量するために、上昇相の全範囲をカバーする用量、及び下降相に該当する少なくとも1つの用量が含まれるべきである。パイロット用量－知見研究は、それらの条件に一致する用量のセットを同定するために実施する。パイロットのため、雄のC57BL／6Jマウスに、IPまたはSC経路によって様々な用量（典型的には0.3～30mg／kg）を注入し、次いで挙動を最大で150分間磁力計チャンバーにおいて記録する。

【0661】

（c）．用量－反応研究。磁石埋込物を有する雄のC57BL／6Jマウスの群に、ビヒクルまたは4～5用量の化合物（ $n=5\sim7$ 匹のマウス／群）をIPまたはSC経路によって注入し、次いで挙動を磁力計チャンバー内で少なくとも30分間記録する。

【0662】

（d）．繰り返し試験。効力は、典型的には、単回用量－反応研究を基礎として定量され得るが、いくつかの例では、繰り返しの試験が必要であり得る。例えば、試験のために選択される用量は、有効用量中央値（ED50値）を計算するために理想的ではなかった場合がある。必要に応じて、第2または第3の用量－反応研究を実施する。

【0663】

分析：以下の分析を用量－反応研究について実施する：

HTRカウントは、1元ANOVAと、それに続く事後検定（ダネットの検定）を使用して分析されるであろう。

【0664】

化合物についての有効用量中央値（ED50値）（mg／kgまたはmol／kg）は、ガウスまたはシグモイドモデルを使用して非線形回帰によって計算されるであろう。化合物及び他の参照化合物の効力はまた、余分平方和F検定を使用して統計的に比較され得る。

【0665】

HTRカウントは、ビンングされ（例えば、1、2、5、または10分のブロック）、2元ANOVA（薬物×時間）と、それに続く事後検定（ダネットの検定またはテューキーの検定）を使用して分析され得る。

【0666】

5－HT_{2A}アンタゴニスト遮断研究。磁石埋込物を有する雄のC57BL／6Jマウスの4つの群を、選択的5－HT_{2A}アンタゴニストM100907（ビヒクル、0.001、0.01、または0.1mg／kg）でSCで事前処置する。20分後、動物のす

10

20

30

40

50

べてにIPまたはSCで1つの用量の化合物を注入し（ $n = 5 \sim 7$ 匹のマウス／群）、次いで挙動を磁力計チャンバー内で30分間記録する。

【0667】

5-HT_{1A}アンタゴニスト遮断研究。磁石埋込物を有する雄のC57BL/6Jマウス（ $n = 5 \sim 7$ 匹のマウス／群）の4つの群を、選択的5-HT_{1A}アンタゴニストWAY-100635（ビヒクルまたは1mg/kg）でSCで事前処置する。20分後、動物にIPまたはSCでビヒクルまたは1つの用量の化合物を注入し、次いで挙動を磁力計チャンバー内で少なくとも30分間記録する。

【0668】

延長時間経過研究。磁石埋込物を有する雄のC57BL/6Jマウスに、IPまたはSCで最大で3つの異なる処置（ $n = 5 \sim 6$ 匹のマウス／群）を注入し、次いで挙動を磁力計チャンバー内で最大で5時間記録する（使用される正確な評価期間は、試験される物質の作用継続期間に依存する）。

【0669】

脳透過試験。HTRを誘導しない5-HT_{2A}リガンドがマウスにおいて脳浸透性であるかどうかを試験するためにこれらの研究を使用する。磁石埋込物を有する雄のC57BL/6JマウスをIPまたはSCでビヒクルまたは3用量の5-HT_{2A}リガンド（ $n = 5 \sim 7$ 匹のマウス／群）で事前処置する；20分後、マウスのすべてに、1mg/kg（±）-DOI HClを注入し、次いで挙動を磁力計チャンバー内で20～30分間記録する。

【0670】

hERG阻害研究。

すべての実験は、パッチクランプ技術のホールセルモードでHEKA EPC-10増幅器を使用して室温で手動で行う。G418選択下でhKv11.1（hERG）を安定的に発現するHEK293細胞がUniversity of Wisconsin, Madisonから調達され得る。細胞を、10%ウシ胎仔血清、2mMグルタミン、1mMピルビン酸ナトリウム、100U/ml-1ストレプトマイシン、及び500mg/ml-1ペニシリン、100μg/ml-1 G418を含有するDMEM中で培養する。細胞株は認証されておらず、またはマイコプラズマ汚染について試験されていない。実験前に、細胞を60～80%のコンフルエントまで成長させ、TrypLEを使用して浮遊させ、ポリ-レーリジン被覆カバースリップ上に播種する。パッチピペットは、ソーダ石灰ガラス（マイクロヘマトクリットチューブ）から引き抜かれ、2～4MΩの抵抗を示すはずである。外部溶液については、通常のリソチアリンゲルを使用する（160mM NaCl、4.5mM KCl、2mM CaCl₂、1mM MgCl₂、10mM HEPES、pH 7.4及び290～310mOsm）。使用される内部溶液は、ATPを有するフッ化カリウムである（160mM KF、2mM MgCl₂、10mM EGTA、10mM HEPES、4mM NaATP、pH = 7.2及び300～320mOsm）。最初は-80mVから2秒間40mV、次いで4秒間-60mVの2工程パルス（10秒毎に印加する）を使用してhERG電流を誘発させる。試験される式Iの化合物によるテール電流振幅の低減割合を決定し、データを平均±s.d.として示す（データ点当たり $n = 3 \sim 4$ ）。すべての実験について、薬物の溶液は、DMSO中の10mMストックから新たに調製する。最終DMSO濃度は1%を超えることはない。

【0671】

セロトニン及びオピオイド受容体機能性アッセイ。

5-HT及びオピオイド受容体での機能性アッセイスクリーニングを、同じ化合物希釈物及び384ウェル形式のハイスループットアッセイプラットフォームを使用して並行に実施する。マウス5-HT_{2A}受容体について述べた場合を除き、受容体のすべてのヒトアイソフォームでの活性を評価するためにアッセイを使用する。pcDNAベクターにおける受容体コンストラクトを、少しの修飾を伴うPresto-Tango GPCRライブラリ39から生成する。式Iのすべての試験化合物を薬物緩衝液（HBSS、20m

10

20

30

40

50

M HEPES、pH 7.4 (0.1%ウシ血清アルブミン及び0.01%アスコルビン酸が補充されている))に連続希釈し、FLIPR Tetra自動化ディスペンサーヘッド(Molecular Devices)を使用して384ウェルアッセイプレートに分注する。すべてのプレートは、陽性対照、例えば、5-HT (すべての5-HT受容体について)、DADLE (DOR)、サルビノリンA (KOR)、及びDAMGO (MOR)を含む。5-HT_{2A}、5-HT_{2B}、及び5-HT_{2C}のGq媒介カルシウム流機能の測定のため、HEK Flp-In 293、T-Rex安定細胞株(Invitrogen)にFluo-4色素を1時間ロードし、化合物で刺激し、25℃でFLIPR Tetraシステムでベースライン(0~10秒)及びピークのベース蛍光に対する倍率(5分)について読み取る。5-HT_{6Gs}及び5-HT_{7a}機能性アッセイの測定のため、媒介されたcAMP蓄積を、25℃での薬物インキュベート中に15分でMicrobeta Trilux(Perkin Elmer)で発光を測定する、HEKT細胞におけるスプリットルシフェラーゼGloSensorアッセイを使用して検出する。5-HT_{1A}、5-HT_{1B}、5-HT_{1F}、MOR、KOR及びDOR機能性アッセイのため、Gi/o媒介cAMP阻害を、0.3 µMイソプロテレノール(5-HT_{1A}、5-HT_{1B}、5-HT_{1F})または1 µMフォルスコリン(MOR、KOR及びDOR)のいずれかと組み合わせて内因性cAMP蓄積を刺激することを除いて上記のものと同様に行われる、HEKT細胞におけるスプリットルシフェラーゼGloSensorアッセイを使用して検出する。5-HT_{1D}、5-HT_{1E}、5-HT₄、及び5-HT_{5A}機能性アッセイの測定のため、β-アレスチン2動員を、少しの改変を伴って先行記載されるように、タバコエッチウイルス(TEV)融合βアレスチン2を発現するHTLA細胞を使用してタンゴアッセイによって測定する。細胞株は認証されなかったが、それらはマイコプラズマ非含有で購入し、マイコプラズマ汚染について試験した。すべてのアッセイについてのデータをプロットし、GraphPad Prismにおける「log(アゴニスト)対反応」を使用して非線形回帰を実施して、有効性の推定値(E_{max}及び最大半数有効濃度(EC₅₀))を得る。

10

20

30

40

50

【0672】

薬物動態研究。

雄及び雌のC57/BL6Jマウス(12週齢)に、50 mg kg⁻¹、10 mg kg⁻¹または1 mg kg⁻¹のいずれかの用量で静脈注入を介して式Iの化合物を投与する。マウスを、注入から15分または3時間後に頸椎脱臼によって安楽死させる。2匹の雄及び2匹の雌を用量及び時点につき使用する。脳及び肝臓を収集し、液体窒素中で瞬間凍結し、メタボロミック処理まで-80℃で保存する。全脳及び肝臓切片を完全に乾燥するまで一晚凍結乾燥させ、次いで50秒間1,500 rpmでGenoGrinderを使用して3.2 mmの直径のステンレス鋼ビーズでホモジナイズする。次いで粉碎した組織を225 µlの低温メタノール、190 µlの水、750 µlのメチルtert-ブチルエーテル(MTBE)を使用して抽出する。7つの方法ブランク及び7つの品質コントロールサンプル(プールされたヒト血清、BioIVT)を同時にサンプルとして抽出する。MTBEの非極性画分を真空下で乾燥させ、内部標準として1-シクロヘキシルドデカン酸ウレアを含有する60 µlの90:10(v/v)のメタノール:トルエン中で再構成する。次いでサンプルをボルテックスし、超音波処理し、遠心分離してから分析する。

【0673】

肝臓及び脳における試験化合物の分析のため、サンプルを方法ブランクでの注入前に無作為化し、品質コントロールサンプルを10個の研究サンプル毎の間で分析する。6点校正曲線を、ブランク注入を使用したカラム平衡化の後、次いですべての研究サンプルの後分析する。ブランクを校正曲線後に注入して、試験化合物のいずれもカラムに保持されず、サンプルにキャリーオーバーされないことを確保する。再構成したサンプル(5 µl)を、TSQ Altis三連四重極質量分析計(Thermo Fisher Scientific)に連結されたVanquish UHPLCを使用してAcquity

UPLC CSH C18 Vanguardプレカラム (Waters) を有する Waters Acquity UPLC CSH C18カラム (100mm×2.1mm、1.7µmの粒子サイズ) に注入する。移動相 A は、10mMギ酸アンモニウム及び0.1%ギ酸を有する60:40v/vのアセトニトリル/水からなる。移動相 B は、10mMギ酸アンモニウム及び0.1%ギ酸を有する90:10v/vのイソプロパノール/アセトニトリルからなる。グラジエントを15%のBで0~2分; 30%のBで2~2.5分; 48%のBで2.5~4.5分; 99%のBで4.5~7.3分; 15%のBで7.3~10分実行する。流速は0.600mL/分であり、カラムを65℃に加熱する。質量分析計条件を、直接的注入による標的化合物について最適化する。試験化合物のために最適化された衝突エネルギー、ソースフラグメンテーション、及び高周波を用いて、上位5イオンについて選択された反応モニタリングを実施する。データをTraceFinder 4.1 (Thermo Fisher Scientific) で処理する。器官重量を報告する。器官の重量で除算された器官全体における標的化合物のモルの経験的に決定された数値を使用して脳における濃度を計算する。

10

【0674】

5-HT受容体機能性アッセイ。

Olsen et al., Nat. Chem. Biol., 2020 Aug.; 16(8): 841-49 (その全体がすべての目的のために参照により本明細書に組み込まれる) に記載のそれらの方法を含む、セロトニン受容体活性化を測定するための様々なアッセイが当業者に知られている。本明細書に記載のアッセイは、5-HT1A、5-HT2A、5-HT2B、及び5-HT2Cを含む、本明細書に記載のセロトニン受容体サブタイプのいずれかの機能的活性を測定するめに利用され得る。所定の実施形態では、セロトニン (5-ヒドロキシトリプタミン) を参照化合物として使用する。

20

【0675】

細胞培養

10% FBS、100単位/mLペニシリン、及び100µg/mLストレプトマイシン (Gibco-ThermoFisher, Waltham, MA) を含有するDMEM培地において加湿雰囲気中で37℃及び5%CO₂でHEK293T細胞を維持、継代、及びトランスフェクションする。トランスフェクション後、細胞は、BRET2、カルシウム、及びGloSensorアッセイのために1%の透析されたFBS、100単位/mLペニシリン、及び100µg/mLストレプトマイシンを含有するDMEMに播種する。

30

【0676】

BRET2アッセイ

細胞を、6ウェル皿において700,000~800,000細胞/ウェルの密度で、または10cm皿において7~8百万細胞/皿のいずれかで播種する。細胞を、1:1:1:1の受容体:Gα-RLuc8:Gβ:Gγ-GFP2のDNA比 (6ウェル皿の場合は100ng/コンストラクト、10-cm皿の場合は750ng/コンストラクト) を使用して2~4時間後にトランスフェクションする (Gβ1-4-のエタノール供沈殿混合物をその通常の比の2倍 (1:1:2:1) で使用するGγ-GFP2スクリーンを除く)。Transit 2020 (Mirus Biosciences, Madison, WI) を、OptiMEM (Gibco-ThermoFisher, Waltham, MA) 中の3µLのTransit/µg DNAの比で10ng DNA/µLのOptiMEMの濃度でDNAを複合体化するために使用する。翌日、細胞を、Versene (0.1M PBS+0.5mM EDTA、pH7.4) を使用してプレートから採取し、ポリ-D-リジン被覆白色透明底96ウェルアッセイプレート (Greiner Bio-One, Monroe, NC) において30,000~50,000細胞/ウェルの密度で播種する。

40

【0677】

96ウェルアッセイプレートにおける播種の1日後、白色の裏張り (Perkin E

50

lmer, Waltham, MA) をプレート底に貼付し、成長培地を慎重に吸引し、60 μ L のアッセイ緩衝液 (1x HBSS + 20mM HEPES, pH 7.4) で直ちに置き換え、続いて新たに調製された 50 μ M セレンテラジン 400a (Nanolight Technologies, Pinetop, AZ) を 10 μ L 添加する。5 分の平衡化期間の後、細胞を 30 μ L の薬物でさらに 5 分間処理する。プレートを次いで、395 nm (RLuc8-セレンテラジン 400a) 及び 510 nm (GFP2) の発光フィルターを有する LB940 Mithras プレートリーダー (Berthold Technologies, Oak Ridge, TN) で 1 秒/ウェルの積分時間で読み取る。プレートを 6 回連続で読み取り、6 回の読み取りからの測定結果をすべての分析において使用した。BRET2 比は、RLuc8 発光に対する GFP2 発光の比として計算される。

10

【0678】

カルシウム動員アッセイ

細胞を、BRET2 プロトコルに記載されているように 10 cm プレートに播種し、受容体 (1 μ g) 及び G α -サブユニット (1 μ g) cDNA でコトランスフェクションする。翌日、細胞を、ポリ-D-リジン被覆黒色透明底 384 ウェルプレート (Greiner Bio-One, Monroe, NC) において 15,000 細胞/ウェルで播種する。翌日、成長培地を吸引し、1x Fluor-4 Direct Calcium Dye (ThermoFisher Scientific, Waltham, MA) を含有する 20 μ L のアッセイ緩衝液に置き換え、60 分間 37 $^{\circ}$ C でインキュベートする (CO₂ なし)。プレートを 10 分間暗所で室温としてから、FLIPR Tetra (登録商標) 液体取り扱いロボット及びプレートリーダー (Molecular Devices, San Jose, CA) に搭載した。ベースライン蛍光測定結果を 10 秒間取得し、続いてロボット薬物添加 (10 μ L) 及び 60 秒の測定 (1 測定/秒) を行った。アンタゴニストアッセイのため、細胞を、まずアンタゴニストで処理し、暗所で室温で 10 分間維持してから、FLIPR Tetra (登録商標) ロボットによってアゴニストを添加する。この時間の間の最大反応を、カルシウム過渡現象の振幅を計算するために使用する。測定結果を、コンストラクトについての最大シグナル振幅のパーセンテージとして解析した。

20

【0679】

GloSensor cAMP アッセイ

細胞を先行記載されているように 10 cm プレートに播種する。細胞を、GloSensor レポーター (Promega, Madison, WI)、受容体、及び G α -サブユニットのための cDNA をコードするプラスミドを 2:1:1 の比 (2 μ g:1 μ g:1 μ g) でトランスフェクションする。翌日、細胞を、黒色透明底 384 ウェル白色プレートに播種する。アッセイの日に培地の吸入後、細胞を、アッセイ緩衝液中で新たに調製された 20 μ L の 5mM ルシフェリン基質 (GoldBio, St. Louis, MO) と 60 分間 37 $^{\circ}$ C でインキュベートする。G α s 活性のため、10 μ L の薬物を、FLIPR Tetra (登録商標) 液体取り扱いロボットを使用して添加し、0.5 秒のシグナル積分時間で Spectramax 発光プレートリーダー (Molecular Devices, San Jose, CA) において 15 分後に読み取る。G α i 活性のため、10 μ L の薬物を 15 分のインキュベート期間のために添加する。その後、10 μ L のイソプロテレノール (200 nM の最終濃度) を添加し、さらに 15 分インキュベートしてから読み取る。

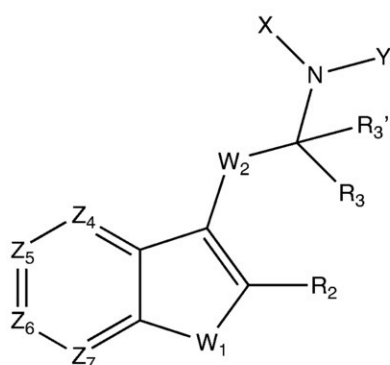
40

【0680】

例示的な実施形態

実施形態 1: 式 I の化合物:

【化 1 5 1】



式 I

(式中、

X 及び Y は、それぞれ独立して、水素、重水素、任意に置換された $C_1 - C_8$ アルキル、及び任意に置換された $C_2 - C_8$ アルケニルから選択され、または Y は、X 及びそれらの間の窒素原子と一緒に、O、S、S(O)、 SO_2 、及び NR_9 から選択される 1 ~ 2 個の追加の環ヘテロ部位を任意に含む 3 ~ 7 員複素環式環を形成し；

W_1 は、 NR_1 、Se、Se(O)、 SeO_2 、O、S、S(O)、及び SO_2 から選択され；

W_2 は、 $-CD_2-$ 、 $-(CD_2)_2-$ 、 $-CHD-$ 、 $-CH_2-$ 及び $-(CH_2)_2-$ から選択され；

Z_4 は、N 及び CR_4 から選択され；

Z_5 は、N 及び CR_5 から選択され；

Z_6 は、N 及び CR_6 から選択され；

Z_7 は、N 及び CR_7 から選択され；

R_2 、 R_3 、 R_3' 、 R_6 及び R_7 は、それぞれ独立して、水素、重水素、 $-N(R_9)$ 、 $-SR_9$ 、ハロ、任意に置換された $C_1 - C_8$ アルキル、 $-C_1 - C_8$ アルコキシ、及び任意に置換された $C_2 - C_8$ アルケニルから選択され、または Y は、非存在であり、 R_3 は、それが結合した炭素及び X が結合した窒素原子と一緒に、O、S、S(O)、 SO_2 、及び NR_9 ；から選択される 1 ~ 2 個の追加の環ヘテロ部位を任意に含む 3 ~ 7 員複素環式環を形成し；

R_4 及び R_5 は、それぞれ独立して、水素、重水素、任意に置換された $C_1 - C_8$ アルキル、任意に置換された $C_2 - C_8$ アルケニル、ハロ、ヒドロキシル、 $-N(R_9)_2$ 、 $-SR_9$ 、 $-C_1 - C_8$ アルコキシ、 $-OC(O)R_8$ 、 $-OC(O)OR_8$ 、 $-OP(O)O_2(R_9)_2$ 、及び $-OSO_2R_8$ から選択され；

R_1 は、水素、重水素、任意に置換された $C_1 - C_8$ アルキル、任意に置換された $C_2 - C_8$ アルケニル、 $-C(O)R_8$ 、 $-C(O)OR_8$ 、 $-P(O)O_2(R_9)_2$ 、 $-C(O)N(R_9)_2$ 、 $-SOR_8$ 、及び $-SO_2R_8$ から選択され；

R_8 は、任意に置換された $C_1 - C_8$ アルキル、任意に置換された $C_2 - C_8$ アルケニル、及び任意に置換されたアリールから選択され；

R_9 は、独立して、水素、重水素、任意に置換された $C_1 - C_8$ アルキル、任意に置換された $C_2 - C_8$ アルケニル、及び任意に置換されたアリールから選択される)；ならびに

その塩、溶媒和物、水和物、及びプロドラッグ。

【0681】

実施形態 2：X 及び Y は、それぞれ独立して、水素、重水素及び $C_1 - C_8$ アルキルから選択される、実施形態 1 に記載の化合物。

【0682】

実施形態 3 : R_2 、 R_3 、 R_3 、 R_6 及び R_7 は、それぞれ独立して、水素、ハロ、任意に置換された $C_1 - C_8$ アルキル、及び任意に置換された $C_2 - C_8$ アルケニルから選択される、先行実施形態のいずれか 1 つに記載の化合物。

【0683】

実施形態 4 : X は、非置換 $C_1 - C_8$ アルキルである、先行実施形態のいずれか 1 つに記載の化合物。

【0684】

実施形態 5 : X は、メチルである、実施形態 4 に記載の化合物。

【0685】

実施形態 6 : X は、エチルである、実施形態 4 に記載の化合物。

10

【0686】

実施形態 7 : X は、 n -プロピルである、実施形態 4 に記載の化合物。

【0687】

実施形態 8 : X は、イソプロピルである、実施形態 4 に記載の化合物。

【0688】

実施形態 9 : Y は、水素または重水素である、先行実施形態のいずれか 1 つに記載の化合物。

【0689】

実施形態 10 : Y は、非置換 $C_1 - C_8$ アルキルである、実施形態 1 ~ 8 のいずれか 1 つに記載の化合物。

20

【0690】

実施形態 11 : Y は、メチルである、実施形態 10 に記載の化合物。

【0691】

実施形態 12 : Y は、エチルである、実施形態 10 に記載の化合物。

【0692】

実施形態 13 : Y は、 n -プロピルである、実施形態 10 に記載の化合物。

【0693】

実施形態 14 : Y は、イソプロピルである、実施形態 10 に記載の化合物。

【0694】

実施形態 15 : Z_4 、 Z_5 、 Z_6 または Z_7 のうちの少なくとも 1 つは、 N である、先行実施形態のいずれか 1 つに記載の化合物。

30

【0695】

実施形態 16 : Z_4 は、 CR_4 である、先行実施形態のいずれか 1 つに記載の化合物。

【0696】

実施形態 17 : Z_5 は、 CR_5 である、先行実施形態のいずれか 1 つに記載の化合物。

【0697】

実施形態 18 : Z_6 は、 CR_6 である、先行実施形態のいずれか 1 つに記載の化合物。

【0698】

実施形態 19 : Z_7 は、 CR_7 である、先行実施形態のいずれか 1 つに記載の化合物。

【0699】

40

実施形態 20 : R_4 は、水素であり、 R_5 は、任意に置換された $C_1 - C_8$ アルキル、任意に置換された $C_2 - C_8$ アルケニル、ハロ、ヒドロキシル、 $-C_1 - C_8$ アルコキシ、 $-OC(O)R_8$ 、 $-OC(O)OR_8$ 、 $-OP(O)O_2(R_9)_2$ 、及び $-OSO_2R_8$ から選択される、先行実施形態のいずれか 1 つに記載の化合物。

【0700】

実施形態 21 : R_5 は、非置換 $C_1 - C_8$ アルキル、ヒドロキシル、 $-C_1 - C_8$ アルコキシ、 $-OC(O)R_8$ 、 $-OC(O)OR_8$ 、 $-OP(O)O_2(R_9)_2$ 、及び $-OSO_2R_8$ から選択される、実施形態 20 に記載の化合物。

【0701】

実施形態 22 : R_5 は、非置換 $C_1 - C_8$ アルキル、ヒドロキシル、 $-C_2 - C_8$ アル

50

コキシ、 $-\text{OC}(\text{O})\text{R}_8$ 、 $-\text{OC}(\text{O})\text{OR}_8$ 、 $-\text{OP}(\text{O})\text{O}_2(\text{R}_9)_2$ 、及び $-\text{OSO}_2\text{R}_8$ から選択される、実施形態20に記載の化合物。

【0702】

実施形態23： R_5 は、ヒドロキシである、実施形態22に記載の化合物。

【0703】

実施形態24： R_5 は、 $-\text{OC}(\text{O})\text{R}_8$ である、実施形態22に記載の化合物。

【0704】

実施形態25： R_8 は、非置換 C_1-C_4 アルキルである、実施形態24に記載の化合物。

【0705】

実施形態26： R_5 は、メトキシである、実施形態21に記載の化合物。

【0706】

実施形態27： R_5 は、水素であり、 R_4 は、任意に置換された C_1-C_8 アルキル、任意に置換された C_2-C_8 アルケニル、ハロ、ヒドロキシル、 $-\text{C}_1-\text{C}_8$ アルコキシ、 $-\text{OC}(\text{O})\text{R}_8$ 、 $-\text{OC}(\text{O})\text{OR}_8$ 、 $-\text{OP}(\text{O})\text{O}_2(\text{R}_9)_2$ 、及び $-\text{OSO}_2\text{R}_8$ から選択される、実施形態1～19のいずれか1つに記載の化合物。

【0707】

実施形態28： R_4 は、非置換 C_1-C_8 アルキル、ヒドロキシル、 $-\text{C}_1-\text{C}_8$ アルコキシ、 $-\text{OC}(\text{O})\text{R}_8$ 、 $-\text{OC}(\text{O})\text{OR}_8$ 、 $-\text{OP}(\text{O})\text{O}_2(\text{R}_9)_2$ 、及び $-\text{OSO}_2\text{R}_8$ から選択される、実施形態27に記載の化合物。

【0708】

実施形態29： R_4 は、非置換 C_1-C_8 アルキル、 $-\text{C}_2-\text{C}_8$ アルコキシ、 $-\text{OC}(\text{O})\text{R}_8$ 、 $-\text{OC}(\text{O})\text{OR}_8$ 、 $-\text{OP}(\text{O})\text{O}_2(\text{R}_9)_2$ 、及び $-\text{OSO}_2\text{R}_8$ から選択される、実施形態27に記載の化合物。

【0709】

実施形態30： R_4 は、 $-\text{OC}(\text{O})\text{R}_8$ である、実施形態28に記載の化合物。

【0710】

実施形態31： R_8 は、非置換 C_1-C_4 アルキルである、実施形態30に記載の化合物。

【0711】

実施形態32： R_8 は、メチルである、実施形態31に記載の化合物。

【0712】

実施形態33： R_8 は、メチルである、実施形態25に記載の化合物。

【0713】

実施形態34： R_4 は、フルオロである、実施形態27に記載の化合物。

【0714】

実施形態35： R_4 は、ヒドロキシである、実施形態28に記載の化合物。

【0715】

実施形態36： R_2 は、水素である、先行請求項のいずれか1つに記載の化合物。

【0716】

実施形態37： R_6 及び R_7 は、それぞれ独立して、水素、ハロ、及び任意に置換された C_1-C_4 アルキルから選択される、先行請求項のいずれか1つに記載の化合物。

【0717】

実施形態38： R_6 は、水素またはハロである、先行請求項のいずれか1つに記載の化合物。

【0718】

実施形態39： R_6 は、水素またはフッ素である、先行請求項のいずれか1つに記載の化合物。

【0719】

実施形態40： R_7 は、水素及び任意に置換された C_1-C_4 アルキルから選択される

10

20

30

40

50

、先行請求項のいずれか 1 つに記載の化合物。

【0720】

実施形態 41：R₇ は、水素、メチル、及びエチルから選択される、先行請求項のいずれか 1 つに記載の化合物。

【0721】

実施形態 42：W₂ は、-CH₂- または -CHD- である、先行請求項のいずれか 1 つに記載の化合物。

【0722】

実施形態 43：W₁ は、NR₁ である、先行請求項のいずれか 1 つに記載の化合物。

【0723】

実施形態 44：R₁ は、水素及び非置換 C₁ - C₄ アルキルから選択される、実施形態 43 に記載の化合物。

【0724】

実施形態 45：R₁ は、メチル、エチル及びプロピルから選択される、実施形態 44 に記載の化合物。

【0725】

実施形態 46：W₁ は、S である、実施形態 1～42 のいずれか 1 つに記載の化合物。

【0726】

実施形態 47：W₁ は、Se である、実施形態 1～42 のいずれか 1 つに記載の化合物。

【0727】

実施形態 48：W₁ は、O である、実施形態 1～42 のいずれか 1 つに記載の化合物。

【0728】

実施形態 49：R₃ は、水素である、先行請求項のいずれか 1 つに記載の化合物。

【0729】

実施形態 50：R₃ は、メチルである、実施形態 1～48 のいずれか 1 つに記載の化合物。

【0730】

実施形態 51：前記化合物は、[1：1] 塩を含む、先行請求項のいずれか 1 つに記載の化合物。

【0731】

実施形態 52：前記化合物は、[2：1] 塩を含む、実施形態 1～50 のいずれか 1 つに記載の化合物。

【0732】

実施形態 53：前記 [2：1] 塩は、シュウ酸塩またはフマル酸塩を含む、実施形態 52 に記載の化合物。

【0733】

実施形態 54：前記化合物は、結晶性である、先行実施形態のいずれか 1 つに記載の化合物。

【0734】

実施形態 55：実施形態 1～54 のいずれか 1 つに記載の化合物及び賦形剤を含む、それから本質的になる、またはそれからなる組成物。

【0735】

実施形態 56：前記組成物は、治療的有効量の実施形態 1～54 のいずれか 1 つに記載の化合物及び薬学的に許容可能な賦形剤を含む、それから本質的になる、またはそれからなる薬学的組成物である、実施形態 55 に記載の組成物。

【0736】

実施形態 57：第 1 の成分として：実施形態 1～54 のいずれか 1 つに記載の化合物；及び (a) セロトニン作動薬、(b) カンナビノイド及び (c) テルペンから選択される第 2 の成分；ならびに薬学的に許容可能な賦形剤を含む、それから本質的になる、または

10

20

30

40

50

それからなる組成物。

【0737】

実施形態58：前記第2の成分は、精製されている、実施形態57に記載の組成物。

【0738】

実施形態59：精神障害を予防または処置する方法であって、治療的有効量の実施形態1～54のいずれか1つに記載の化合物または実施形態55～58のいずれか1つに記載の組成物を、それを必要とする対象に投与することを含む、前記方法。

【0739】

実施形態60：炎症及び／または疼痛を予防または処置する方法であって、治療的有効量の実施形態1～54のいずれか1つに記載の化合物または実施形態55～58のいずれか1つに記載の組成物を、それを必要とする対象に投与することを含む、前記方法。

10

【0740】

実施形態61：神経伝達物質受容体で活性を調節する方法であって、

5-HT_{2A}受容体の調節に関連する疾患または病態のための処置を必要とする対象を同定すること；及び

実施形態1～54のいずれか1つに記載の化合物または実施形態55～58のいずれか1つに記載の組成物を前記処置を必要とする対象に投与することを含む、前記方法。

【0741】

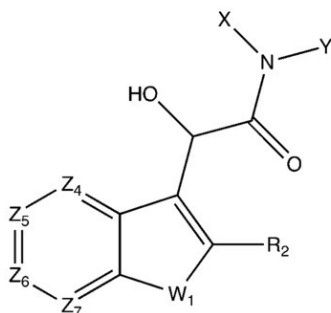
実施形態62：治療的有効量の前記化合物が、前記ヒト対象に投与される、実施形態61に記載の方法。

20

【0742】

実施形態63：式IIIの化合物：

【化152】



式III

30

(式中、

X及びYは、それぞれ独立して、水素、重水素、任意に置換されたC₁－C₈アルキル、及び任意に置換されたC₂－C₈アルケニルから選択され、またはYは、X及びそれらの間の窒素原子と一緒に、O、S、S(O)、SO₂、及びNR₉から選択される1～2個の追加の環ヘテロ部位を任意に含む3～7員複素環式環を形成し；

40

W₁は、NR₁、O、Se、Se(O)、SeO₂、S、S(O)、及びSO₂から選択され；

Z₄は、N及びCR₄から選択され；

Z₅は、N及びCR₅から選択され；

Z₆は、N及びCR₆から選択され；

Z₇は、N及びCR₇から選択され；

R₁は、水素、重水素、任意に置換されたC₁－C₈アルキル、任意に置換されたC₂－C₈アルケニル、－C(O)R₈、－C(O)OR₈、－P(O)O₂(R₉)₂、－C(O)N(R₉)₂、－SOR₈、及び－SO₂R₈から選択され；

50

R_2 、 R_6 及び R_7 は、それぞれ独立して、水素、重水素、 $-N(R_9)_2$ 、 $-SR_9$ 、ハロ、任意に置換された C_1-C_8 アルキル、 $-C_1-C_8$ アルコキシ、及び任意に置換された C_2-C_8 アルケニルから選択され、または Y は、非存在であり、 R_3 は、それが結合した炭素及び X が結合した窒素原子と一緒に、 O 、 S 、 $S(O)$ 、 SO_2 、及び NR_9 から選択される 1～2 個の追加の環ヘテロ部位を任意に含む 3～7 員複素環式環を形成し；

R_4 及び R_5 は、それぞれ独立して、水素、重水素、任意に置換された C_1-C_8 アルキル、任意に置換された C_2-C_8 アルケニル、ハロ、ヒドロキシル、 $-N(R_9)_2$ 、 $-SR_9$ 、 $-C_1-C_8$ アルコキシ、 $-OC(O)R_8$ 、 $-OC(O)OR_8$ 、 $-OP(O)O_2(R_9)_2$ 、及び $-OSO_2R_8$ から選択され；

R_8 は、任意に置換された C_1-C_8 アルキル、任意に置換された C_2-C_8 アルケニル、及び任意に置換されたアリールから選択され；

R_9 は、独立して、水素、重水素、任意に置換された C_1-C_8 アルキル、任意に置換された C_2-C_8 アルケニル、及び任意に置換されたアリールから選択される)；ならびに

その塩、溶媒和物、水和物、及びプロドラッグ。

【0743】

実施形態 64：但し、 Z_4 が CR_4 であり、 Z_5 が CR_5 であり、 Z_6 が CR_6 であり、 Z_7 が CR_7 、 R_4 が水素であり、 R_5 が水素であり、 R_6 が水素であり、 R_7 が水素であり、 R_2 が水素である場合、 X 及び Y はいずれとも、水素ではない、実施形態 63 に記載の化合物。

【0744】

実施形態 65：但し、 Y が水素であり、 Z_4 が CR_4 であり、 Z_5 が CR_5 であり、 Z_6 が CR_6 であり、 Z_7 が CR_7 であり、 R_4 が水素であり、 R_5 がメチルまたはクロロであり、 R_6 が水素であり、 R_7 が水素であり、 R_2 が水素である場合、 X は、メチル、または 3-ヘプチルではない、実施形態 63～64 のいずれか 1 つに記載の化合物。

【0745】

実施形態 66： X 及び Y は、それぞれ独立して、任意に置換された C_1-C_8 アルキル及び任意に置換された C_2-C_8 アルケニルから選択される、実施形態 63～65 のいずれか 1 つに記載の化合物。

【0746】

実施形態 67： R_2 、 R_6 及び R_7 は、それぞれ独立して、水素、ハロ、任意に置換された C_1-C_8 アルキル、及び任意に置換された C_2-C_8 アルケニルから選択される、実施形態 63～66 のいずれか 1 つに記載の化合物。

【0747】

実施形態 68： X は、非置換 C_1-C_8 アルキルである、実施形態 63～67 のいずれか 1 つに記載の化合物。

【0748】

実施形態 69： X は、メチルである、実施形態 68 に記載の化合物。

【0749】

実施形態 70： X は、エチルである、実施形態 68 に記載の化合物。

【0750】

実施形態 71： X は、 n -プロピルである、実施形態 68 に記載の化合物。

【0751】

実施形態 72： X は、イソプロピルである、実施形態 68 に記載の化合物。

【0752】

実施形態 73： Y は、非置換 C_1-C_8 アルキルである、実施形態 63～72 のいずれか 1 つに記載の化合物。

【0753】

実施形態 74： Y は、メチルである、実施形態 73 に記載の化合物。

【0754】

実施形態75：Yは、エチルである、実施形態73に記載の化合物。

【0755】

実施形態76：Yは、n-プロピルである、実施形態73に記載の化合物。

【0756】

実施形態77：Yは、イソプロピルである、実施形態73に記載の化合物。

【0757】

実施形態78：Yは、水素である、実施形態63～72のいずれか1つに記載の化合物。

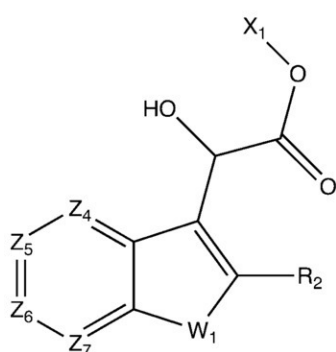
【0758】

実施形態79：W₁は、S、O、またはSeである、実施形態63～78のいずれか1つに記載の化合物。

【0759】

実施形態80：式IVの化合物：

【化153】



式IV

(式中、

X₁は、水素、重水素、任意に置換されたC₁－C₈アルキル、及び任意に置換されたC₂－C₈アルケニルから選択され；

W₁は、NR₁、O、Se、Se(O)、SeO₂、S、S(O)、及びSO₂から選択され；

Z₄は、N及びCR₄から選択され；

Z₅は、N及びCR₅から選択され；

Z₆は、N及びCR₆から選択され；

Z₇は、N及びCR₇から選択され；

R₁は、水素、重水素、任意に置換されたC₁－C₈アルキル、任意に置換されたC₂－C₈アルケニル、－C(O)R₈、－C(O)OR₈、－P(O)O₂(R₉)₂、－C(O)N(R₉)₂、－SOR₈、及び－SO₂R₈から選択され；

R₂、R₆及びR₇は、それぞれ独立して、水素、重水素、－N(R₉)₂、－SR₉、ハロ、任意に置換されたC₁－C₈アルキル、－C₁－C₈アルコキシ、及び任意に置換されたC₂－C₈アルケニルから選択され；

R₄及びR₅は、それぞれ独立して、水素、重水素、任意に置換されたC₁－C₈アルキル、任意に置換されたC₂－C₈アルケニル、ハロ、ヒドロキシル、－N(R₉)₂、－SR₉、－C₁－C₈アルコキシ、－OC(O)R₈、－OC(O)OR₈、－OP(O)O₂(R₉)₂、及び－OSO₂R₈から選択され；

R₈は、任意に置換されたC₁－C₈アルキル、任意に置換されたC₂－C₈アルケニル、及び任意に置換されたアリールから選択され；

R_9 は、独立して、水素、重水素、任意に置換された $C_1 - C_8$ アルキル、任意に置換された $C_2 - C_8$ アルケニル、及び任意に置換されたアリールから選択される) ; ならびに

その塩、溶媒和物、水和物、及びプロドラッグ。

【0760】

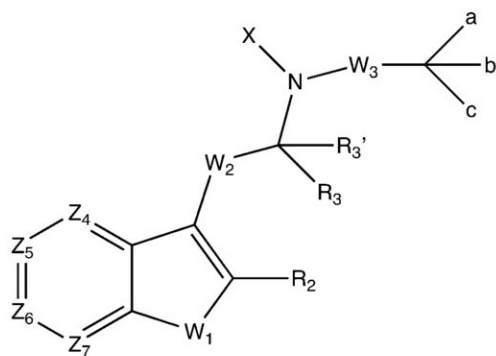
実施形態 81 : X_1 は、非置換 $C_1 - C_8$ アルキルである、実施形態 80 に記載の化合物。

【0761】

実施形態 82 : 式 I I の化合物 :

【化154】

10



20

式 I I

(式中、

X は、水素または重水素であり ;

W_3 は、非存在であり、または $-(CZ'_2)_n-$ (式中、 n は、1 及び 2 から選択される整数であり、各 Z' は、独立して、水素、重水素、及びフッ素から選択される) から選択され ;

a 、 b 及び c は、それぞれ独立して、水素、重水素、及びフッ素から選択され ;

W_1 は、 NR_1 、 Se 、 $Se(O)$ 、 SeO_2 、 O 、 S 、 $S(O)$ 、及び SO_2 から選択され ;

30

W_2 は、 $-CD_2-$ 、 $-CHD-$ 、 $-(CD_2)_2-$ 、 $-CH_2-$ 及び $-(CH_2)_2-$ から選択され ;

Z_4 は、 N 及び CR_4 から選択され ;

Z_5 は、 N 及び CR_5 から選択され ;

Z_6 は、 N 及び CR_6 から選択され ;

Z_7 は、 N 及び CR_7 から選択され ;

R_2 、 R_3 、 R_3' 、 R_6 及び R_7 は、それぞれ独立して、水素、重水素、 $-N(R_9)_2$ 、 $-SR_9$ 、ハロ、任意に置換された $C_1 - C_8$ アルキル、 $-C_1 - C_8$ アルコキシ、及び任意に置換された $C_2 - C_8$ アルケニルから選択され ;

40

R_4 及び R_5 は、それぞれ独立して、水素、重水素、任意に置換された $C_1 - C_8$ アルキル、任意に置換された $C_2 - C_8$ アルケニル、ハロ、ヒドロキシル、 $-N(R_9)_2$ 、 $-SR_9$ 、 $-C_1 - C_8$ アルコキシ、 $-OC(O)R_8$ 、 $-OC(O)OR_8$ 、 $-OP(O)O_2(R_9)_2$ 、及び $-OSO_2R_8$ から選択され ;

R_1 は、水素、重水素、任意に置換された $C_1 - C_8$ アルキル、任意に置換された $C_2 - C_8$ アルケニル、 $-C(O)R_8$ 、 $-C(O)OR_8$ 、 $-P(O)O_2(R_9)_2$ 、 $-C(O)N(R_9)_2$ 、 $-SOR_8$ 、及び $-SO_2R_8$ から選択され ;

R_8 は、任意に置換された $C_1 - C_8$ アルキル、任意に置換された $C_2 - C_8$ アルケニル、及び任意に置換されたアリールから選択され ;

R_9 は、独立して、水素、重水素、任意に置換された $C_1 - C_8$ アルキル、任意に置換

50

された $C_2 - C_8$ アルケニル、及び任意に置換されたアリールから選択される) ; ならびに

その塩、溶媒和物、水和物、及びプロドラッグ。

【0762】

実施形態83: W_3 は、非存在である、実施形態82に記載の化合物。

【0763】

実施形態84 W_3 は、 $-(CZ'_2)_n-$ であり、 $n=1$ である、実施形態82に記載の化合物。

【0764】

実施形態85: W_3 は、 $-CH_2-$ 、 $-CHF-$ 、 $-CF_2-$ 、及び $-CD_2-$ から選択される、実施形態84に記載の化合物。

10

【0765】

実施形態86: W_3 は、 $-CD_2-$ である、実施形態85に記載の化合物。

【0766】

実施形態87: a は、フッ素であり、 b 及び c はそれぞれ、水素である、実施形態82~86のいずれか1つに記載の化合物。

【0767】

実施形態88: a は、水素であり、 b 及び c はそれぞれ、フッ素である、実施形態82~86のいずれか1つに記載の化合物。

【0768】

20

実施形態89: a 、 b 及び c はすべて、フッ素である、実施形態82~86のいずれか1つに記載の化合物。

【0769】

実施形態90: a 、 b 及び c はすべて、水素である、実施形態82~86のいずれか1つに記載の化合物。

【0770】

実施形態91: a 、 b 及び c はすべて、重水素である、実施形態82~86のいずれか1つに記載の化合物。

【0771】

実施形態92: Z_4 、 Z_5 、 Z_6 または Z_7 のうちの少なくとも1つは、 N である、実施形態82~91のいずれか1つに記載の化合物。

30

【0772】

実施形態93: Z_4 は、 CR_4 である、実施形態82~92のいずれか1つに記載の化合物。

【0773】

実施形態94: Z_5 は、 CR_5 である、実施形態82~93のいずれか1つに記載の化合物。

【0774】

実施形態95: Z_6 は、 CR_6 である、実施形態82~94のいずれか1つに記載の化合物。

40

【0775】

実施形態96: Z_7 は、 CR_7 である、実施形態82~95のいずれか1つに記載の化合物。

【0776】

実施形態97: R_4 は、水素またはフッ素であり、 R_5 は、水素、任意に置換された $C_1 - C_8$ アルキル、任意に置換された $C_2 - C_8$ アルケニル、ハロ、ヒドロキシル、 $-C_1 - C_8$ アルコキシ、 $-OC(O)R_8$ 、 $-OC(O)OR_8$ 、 $-OP(O)O_2(R_9)_2$ 、及び $-OSO_2R_8$ から選択される、実施形態82~96のいずれか1つに記載の化合物。

【0777】

50

実施形態 98 : R_5 は、非置換 $C_1 - C_8$ アルキル、ヒドロキシル、 $-C_1 - C_8$ アルコキシ、 $-OC(O)R_8$ 、 $-OC(O)OR_8$ 、 $-OP(O)O_2(R_9)_2$ 、及び $-OSO_2R_8$ から選択される、実施形態 97 に記載の化合物。

【0778】

実施形態 99 : R_5 は、メトキシである、実施形態 98 に記載の化合物。

【0779】

実施形態 100 : R_5 は、水素またはフッ素であり、 R_4 は、水素、任意に置換された $C_1 - C_8$ アルキル、任意に置換された $C_2 - C_8$ アルケニル、ハロ、ヒドロキシル、 $-C_1 - C_8$ アルコキシ、 $-OC(O)R_8$ 、 $-OC(O)OR_8$ 、 $-OP(O)O_2(R_9)_2$ 、及び $-OSO_2R_8$ から選択される、実施形態 82 ~ 96 のいずれか 1 つに記載の化合物。

10

【0780】

実施形態 101 : R_4 は、フッ素、ヒドロキシル、 $-OC(O)R_8$ 、及び $-OC(O)OR_8$ から選択される、実施形態 100 に記載の化合物。

【0781】

実施形態 102 : R_8 は、非置換 $C_1 - C_4$ アルキルである、実施形態 101 に記載の化合物。

【0782】

実施形態 103 : R_8 は、メチル、エチル、 n -プロピル、イソプロピル、 n -ブチル、イソブチル、及び sec -ブチルから選択される、実施形態 102 に記載の化合物。

20

【0783】

実施形態 104 : R_2 は、水素である、実施形態 82 ~ 103 のいずれか 1 つに記載の化合物。

【0784】

実施形態 105 : R_6 及び R_7 は、それぞれ独立して、水素、ハロ、及び任意に置換された $C_1 - C_4$ アルキルから選択される、実施形態 82 ~ 104 のいずれか 1 つに記載の化合物。

【0785】

実施形態 106 : R_6 は、水素またはハロである、実施形態 105 に記載の化合物。

【0786】

30

実施形態 107 : R_6 は、水素またはフッ素である、実施形態 105 に記載の化合物。

【0787】

実施形態 108 : R_7 は、水素及び任意に置換された $C_1 - C_4$ アルキルから選択される、実施形態 82 ~ 107 のいずれか 1 つに記載の化合物。

【0788】

実施形態 109 : R_7 は、水素、メチル、及びエチルから選択される、実施形態 82 ~ 107 のいずれか 1 つに記載の化合物。

【0789】

実施形態 110 : W_2 は、 $-CH_2-$ または $-CHD-$ である、実施形態 82 ~ 109 のいずれか 1 つに記載の化合物。

40

【0790】

実施形態 111 : W_1 は、 NR_1 である、実施形態 82 ~ 110 のいずれか 1 つに記載の化合物。

【0791】

実施形態 112 : R_1 は、水素及び非置換 $C_1 - C_4$ アルキルから選択される、実施形態 111 に記載の化合物。

【0792】

実施形態 113 : R_1 は、メチル、エチル及びプロピルから選択される、実施形態 111 に記載の化合物。

【0793】

50

実施形態 114 : W_1 は、S である、実施形態 82 ~ 110 のいずれか 1 つに記載の化合物。

【0794】

実施形態 115 : W_1 は、Se である、実施形態 82 ~ 110 のいずれか 1 つに記載の化合物。

【0795】

実施形態 116 : W_1 は、O である、実施形態 82 ~ 110 のいずれか 1 つに記載の化合物。

【0796】

実施形態 117 : R_3 は、水素である、実施形態 82 ~ 116 のいずれか 1 つに記載の化合物。

【0797】

実施形態 118 : R_3 は、メチルである、実施形態 82 ~ 116 のいずれか 1 つに記載の化合物。

【0798】

実施形態 119 : R_3 は、水素である、実施形態 82 ~ 118 のいずれか 1 つに記載の化合物。

【0799】

実施形態 120 : R_3 は、重水素である、実施形態 82 ~ 118 のいずれか 1 つに記載の化合物。

【0800】

実施形態 121 : R_4 、 R_6 、及び a のうちの少なくとも 1 つは、フッ素である、実施形態 82 ~ 120 のいずれか 1 つに記載の化合物。

【0801】

実施形態 122 : R_4 は、フッ素である、実施形態 121 に記載の化合物。

【0802】

実施形態 123 : R_6 は、フッ素である、実施形態 121 に記載の化合物。

【0803】

実施形態 124 : R_4 は、フッ素ではない、実施形態 123 に記載の化合物。

【0804】

実施形態 125 : R_1 は、水素である、実施形態 123 に記載の化合物。

【0805】

実施形態 126 : R_4 、 R_5 または R_7 のうちの少なくとも 1 つは、水素ではない、実施形態 123 に記載の化合物。

【0806】

実施形態 127 : a は、フッ素である、実施形態 121 に記載の化合物。

【0807】

実施形態 128 : 前記化合物は、[1 : 1] 塩を含む、実施形態 82 ~ 127 のいずれか 1 つに記載の化合物。

【0808】

実施形態 129 : 前記化合物は、[2 : 1] 塩を含む、実施形態 82 ~ 127 のいずれか 1 つに記載の化合物。

【0809】

実施形態 130 : 前記 [2 : 1] 塩は、シュウ酸塩またはフマル酸塩を含む、実施形態 129 に記載の化合物。

【0810】

実施形態 131 : 前記化合物は、結晶性である、実施形態 82 ~ 130 のいずれか 1 つに記載の化合物。

【0811】

実施形態 132 : 実施形態 82 ~ 131 のいずれか 1 つに記載の化合物及び賦形剤を含

10

20

30

40

50

む、それから本質的になる、またはそれからなる組成物。

【0812】

実施形態133：前記組成物は、治療的有効量の実施形態82～130のいずれか1つに記載の化合物及び薬学的に許容可能な賦形剤を含む、それから本質的になる、またはそれからなる薬学的組成物である、実施形態132に記載の組成物。

【0813】

実施形態134：精神障害を予防または処置する方法であって、治療的有効量の実施形態82～131のいずれか1つに記載の化合物または実施形態132～133のいずれか1つに記載の組成物を、それを必要とする対象に投与することを含む、前記方法。

【0814】

実施形態135：炎症及び／または疼痛を予防または処置する方法であって、治療的有効量の実施形態82～131のいずれか1つに記載の化合物または実施形態132～133のいずれか1つに記載の組成物を、それを必要とする対象に投与することを含む、前記方法。

【0815】

実施形態136：神経伝達物質受容体で活性を調節する方法であって、

5-HT_{1A}受容体の調節に関連する疾患または病態のための処置を必要とする対象を同定すること；

実施形態82～131のいずれか1つに記載の化合物を選択すること；及び治療的有効量の前記化合物を前記処置を必要とする対象に投与することを含む、前記方法。

【0816】

実施形態137：前記対象は、ヒト対象である、実施形態136に記載の方法。

【0817】

実施形態138：前記化合物は、5-HT_{1A}受容体の完全アゴニストである、実施形態134～137のいずれか1つに記載の方法。

【0818】

実施形態139：前記化合物は、5-HT_{2A}受容体の完全アゴニストである、実施形態134～138のいずれか1つに記載の方法。

【0819】

実施形態140：前記化合物は、5-HT_{2A}受容体を活性化するために示すEC₅₀よりも低い、5-HT_{1A}受容体を活性化するためのEC₅₀を示す、実施形態134～139のいずれか1つに記載の方法。

【0820】

実施形態141：前記化合物は、約10nM未満の5-HT_{1A}受容体を活性化するためのEC₅₀を示す、実施形態140に記載の方法。

【0821】

実施形態142：前記化合物は、約20～約40nMの5-HT_{2A}受容体を活性化するためのEC₅₀を示す、実施形態141に記載の方法。

【0822】

実施形態143：前記化合物は、5-ヒドロキシトリプタミンと比較した場合、5-HT_{1A}受容体のアゴニズムについて少なくとも約90%のE_{max}%を示す、実施形態134～142のいずれか1つに記載の方法。

【0823】

実施形態144：前記化合物は、5-ヒドロキシトリプタミンと比較した場合、5-HT_{1A}受容体のアゴニズムについて少なくとも約95%のE_{max}%を示す、実施形態134～142のいずれか1つに記載の方法。

【0824】

実施形態145：前記化合物は、5-ヒドロキシトリプタミンと比較した場合、5-HT_{1A}受容体のアゴニズムについて少なくとも約99%のE_{max}%を示す、実施形態1

10

20

30

40

50

34～142のいずれか1つに記載の方法。

【0825】

実施形態146：前記化合物は、5-ヒドロキシトリプタミンと比較した場合、5-HT_{2A}受容体のアゴニズムについて少なくとも約90%のE_{max}%を示す、実施形態134～145のいずれか1つに記載の方法。

【0826】

実施形態147：前記化合物は、5-ヒドロキシトリプタミンと比較した場合、5-HT_{2A}受容体のアゴニズムについて少なくとも約95%のE_{max}%を示す、実施形態134～145のいずれか1つに記載の方法。

【0827】

実施形態148：前記化合物は、5-ヒドロキシトリプタミンと比較した場合、5-HT_{2A}受容体のアゴニズムについて少なくとも約99%のE_{max}%を示す、実施形態134～145のいずれか1つに記載の方法。

【0828】

実施形態149：前記対象は、前記化合物によって引き起こされる幻聴または幻視を経験しない、実施形態134～145のいずれか1つに記載の方法。

【0829】

実施形態150：前記化合物は、投薬形態で前記対象に投与される、実施形態134～149のいずれか1つに記載の方法。

【0830】

実施形態151：前記投薬形態は、約1～約100mgの前記化合物を含有する、実施形態150に記載の方法。

【0831】

実施形態152：前記化合物は、約1mg/kg未満の量で前記対象に投与される、実施形態134～151のいずれか1つに記載の方法。

【0832】

実施形態153：前記化合物は、約0.05～約0.75mg/kgの量で前記対象に投与される、実施形態134～151のいずれか1つに記載の方法。

【0833】

実施形態154：前記化合物は、約0.01～約0.50mg/kgの量で前記対象に投与される、実施形態134～151のいずれか1つに記載の方法。

【0834】

実施形態155：前記化合物は、5-HT_{1A}受容体及び5-HT_{2A}受容体の両方で活性を調節する、実施形態136～154のいずれか1つに記載の方法。

【0835】

最後に、本明細書及び添付の特許請求の範囲において使用される場合、単数形「a」、「an」、及び「the」には、1つの指示対象に明示的かつ明白に限定されない限り、複数の指示対象が含まれ、その逆も同様であることが留意される。本明細書で使用される場合、用語「含む(include)」または「含む(comprising)」及びその文法的变化形は、項目(複数可)の記述が、記述される項目(複数可)に置換または付加され得る他の同様の項目を排除しないように非限定的であることが意図される。

10

20

30

40

50

【国際調査報告】

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/US22/40048

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

IPC - INV. A61K 31/495, A61K 31/33, C07D 209/04, C07D 209/02 (2022.01)

ADD.

CPC - INV. A61K 31/495, A61K 31/33, C07D 209/04, C07D 209/02

ADD. A61K 31/3958

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

See Search History document

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

See Search History document

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)

See Search History document

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	US 2020/0030309 A1 (The Regents of the University of California), 30 January 2020 (30.01.2020), entire document, especially para[0152], [0153], [0170-[0182]]	1-3
A	"Pubchem CID 6092". Create date:08 August 2005 (08.08.2005), entire document, especially page 2, compound listed	1-3
A	US 6,699,883 B1 (Doernling, et al.), 02 March 2004 (02.03.2004), entire document, especially col 6, first compound listed	1-3
A	WO 2018/133854 A1 (National Institute of Biological Sciences, Beijing), 26 July 2018 (26.07.2018), entire document, especially para[003], [004], [], Table 1	1-3
A	US 2018/0221396 A1 (GaarnTech, LLC), 09 August 2018 (09.08.2018), entire document, especially para[0002], [0019], [0082]	1-3
A	WO 2020/245133 A1 (Small Pharma LTD), 10 December 2020 (10.12.2020), entire document, especially page 1, para 1-2; page 6, table listed	1-3
A	Malaca et al., "Toxicology and Analysis of Psychoactive Tryptamines", International Journal of Molecular Sciences, 04 December 2020 (04.12.2020), 21, 9279, pages 1-30, entire document, especially page 1, abstract, para 1; page 2, para 5; Table 1; Figure 1	1-3
A	WO 2014/018888 A1 (Confluence Life Sciences Inc.), 30 January 2014 (30.01.2014), entire document, especially para[0014], [0023], [0041], [00165]	1-3

☐ Further documents are listed in the continuation of Box C.☐ See patent family annex.

* Special categories of cited documents:

"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance

"D" document cited by the applicant in the international application

"E" earlier application or patent but published on or after the international filing date

"L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)

"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means

"P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed

"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention

"X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone

"Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art

"&" document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search

30 September 2022 (30.09.2022)

Date of mailing of the international search report

25 October 2022

Name and mailing address of the ISA/US

Mail Stop PCT, Attn: ISA/US, Commissioner for Patents
P.O. Box 1450, Alexandria, Virginia 22313-1450

Facsimile No. 571-273-8300

Authorized officer

Kari Rodriguez

Telephone No. PCT Helpdesk: 571-272-4300

Form PCT/ISA/210 (second sheet) (July 2019)

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/US22/40048

Box No. II Observations where certain claims were found unsearchable (Continuation of item 2 of first sheet)

This international search report has not been established in respect of certain claims under Article 17(2)(a) for the following reasons:

1. ☐ Claims Nos.:
because they relate to subject matter not required to be searched by this Authority, namely:
2. ☐ Claims Nos.:
because they relate to parts of the international application that do not comply with the prescribed requirements to such an extent that no meaningful international search can be carried out, specifically:
3. ☒ Claims Nos.: 4-32
because they are dependent claims and are not drafted in accordance with the second and third sentences of Rule 6.4(a).

Box No. III Observations where unity of invention is lacking (Continuation of item 3 of first sheet)

This International Searching Authority found multiple inventions in this international application, as follows:

1. ☐ As all required additional search fees were timely paid by the applicant, this international search report covers all searchable claims.
2. ☐ As all searchable claims could be searched without effort justifying additional fees, this Authority did not invite payment of additional fees.
3. ☐ As only some of the required additional search fees were timely paid by the applicant, this international search report covers only those claims for which fees were paid, specifically claims Nos.:
4. ☐ No required additional search fees were timely paid by the applicant. Consequently, this international search report is restricted to the invention first mentioned in the claims; it is covered by claims Nos.:

Remark on Protest

- ☐ The additional search fees were accompanied by the applicant's protest and, where applicable, the payment of a protest fee.
- ☐ The additional search fees were accompanied by the applicant's protest but the applicable protest fee was not paid within the time limit specified in the invitation.
- ☐ No protest accompanied the payment of additional search fees.

フロントページの続き

(51)国際特許分類	F I	テーマコード (参考)
A 6 1 K 31/67 (2006.01)	A 6 1 K 31/67	
A 6 1 K 31/33 (2006.01)	A 6 1 K 31/33	
A 6 1 K 31/343 (2006.01)	A 6 1 K 31/343	
C 0 7 D 307/81 (2006.01)	C 0 7 D 307/81	
C 0 7 D 491/048 (2006.01)	C 0 7 D 491/048	
A 6 1 K 31/4355(2006.01)	A 6 1 K 31/4355	
A 6 1 K 31/665 (2006.01)	A 6 1 K 31/665	
A 6 1 K 31/4045(2006.01)	A 6 1 K 31/4045	
C 0 7 D 471/04 (2006.01)	C 0 7 D 471/04	1 0 4 Z
A 6 1 K 31/437 (2006.01)	A 6 1 K 31/437	
A 6 1 P 25/00 (2006.01)	A 6 1 P 25/00	
A 6 1 P 43/00 (2006.01)	A 6 1 P 43/00	1 1 4
C 0 7 F 9/6553(2006.01)	C 0 7 F 9/6553	

(32)優先日 令和3年8月12日(2021.8.12)

(33)優先権主張国・地域又は機関
米国(US)

(31)優先権主張番号 63/238,132

(32)優先日 令和3年8月28日(2021.8.28)

(33)優先権主張国・地域又は機関
米国(US)

(31)優先権主張番号 63/238,133

(32)優先日 令和3年8月28日(2021.8.28)

(33)優先権主張国・地域又は機関
米国(US)

(31)優先権主張番号 63/238,134

(32)優先日 令和3年8月28日(2021.8.28)

(33)優先権主張国・地域又は機関
米国(US)

(31)優先権主張番号 63/238,135

(32)優先日 令和3年8月28日(2021.8.28)

(33)優先権主張国・地域又は機関
米国(US)

(31)優先権主張番号 63/239,963

(32)優先日 令和3年9月2日(2021.9.2)

(33)優先権主張国・地域又は機関
米国(US)

(31)優先権主張番号 63/239,964

(32)優先日 令和3年9月2日(2021.9.2)

(33)優先権主張国・地域又は機関
米国(US)

(31)優先権主張番号 63/239,965

(32)優先日 令和3年9月2日(2021.9.2)

(33)優先権主張国・地域又は機関
米国(US)

(31)優先権主張番号 63/285,656

(32)優先日 令和3年12月3日(2021.12.3)

(33)優先権主張国・地域又は機関
米国(US)

(31)優先権主張番号 63/285,679

(32)優先日 令和3年12月3日(2021.12.3)

(33)優先権主張国・地域又は機関

米国(US)

(31)優先権主張番号 63/285,688

(32)優先日 令和3年12月3日(2021.12.3)

(33)優先権主張国・地域又は機関

米国(US)

(31)優先権主張番号 63/314,377

(32)優先日 令和4年2月26日(2022.2.26)

(33)優先権主張国・地域又は機関

米国(US)

(31)優先権主張番号 63/314,378

(32)優先日 令和4年2月26日(2022.2.26)

(33)優先権主張国・地域又は機関

米国(US)

(31)優先権主張番号 63/314,379

(32)優先日 令和4年2月26日(2022.2.26)

(33)優先権主張国・地域又は機関

米国(US)

(31)優先権主張番号 63/319,200

(32)優先日 令和4年3月11日(2022.3.11)

(33)優先権主張国・地域又は機関

米国(US)

(31)優先権主張番号 63/325,515

(32)優先日 令和4年3月30日(2022.3.30)

(33)優先権主張国・地域又は機関

米国(US)

(31)優先権主張番号 63/292,567

(32)優先日 令和3年12月22日(2021.12.22)

(33)優先権主張国・地域又は機関

米国(US)

(31)優先権主張番号 63/301,196

(32)優先日 令和4年1月20日(2022.1.20)

(33)優先権主張国・地域又は機関

米国(US)

(81)指定国・地域 AP(BW,GH,GM,KE,LR,LS,MW,MZ,NA,RW,SD,SL,ST,SZ,TZ,UG,ZM,ZW),EA(AM,AZ,BY,KG,KZ,RU,TJ,TM),EP(AL,AT,BE,BG,CH,CY,CZ,DE,DK,EE,ES,FI,FR,GB,GR,HR,HU,IE,IS,IT,LT,LU,LV,MC,MK,MT,NL,NO,PL,PT,RO,RS,SE,SI,SK,SM,TR),OA(BF,BJ,CF,CG,CI,CM,GA,GN,GQ,GW,KM,ML,MR,NE,SN,TD,TG),AE,AG,AL,AM,AO,AT,AU,AZ,BA,BB,BG,BH,BN,BR,BW,BY,BZ,CA,CH,CL,CN,CO,CR,CU,CV,CZ,DE,DJ,DK,DM,DO,DZ,EC,EE,EG,ES,FI,GB,GD,GE,GH,GM,GT,HN,HR,HU,ID,IL,IN,IQ,IR,IS,IT,JM,JO,JP,KE,KG,KH,KN,KP,KR,KW,KZ,LA,LC,LK,LR,LS,LU,LY,MA,MD,ME,MG,MK,MN,MW,MX,MY,MZ,NA,NG,NI,NO,NZ,OM,PA,PE,PG,PH,PL,PT,QA,RO,RS,RU,RW,SA,SC,SD,SE,SG,SK,SL,ST,SV,SY,TH,TJ,TM,TN,TR,TT,TZ,UA,UG,US,UZ,VC,VN,WS,ZA,ZM,ZW

(74)代理人 100138210

弁理士 池田 達則

(74)代理人 100170852

弁理士 白樫 依子

(72)発明者 デイビッド ジル

アメリカ合衆国, ワシントン 98107-5232, シアトル, セブンティーンズ アベニュー ノースウエスト 5608, スイート 1492, シー／オー クレオン リミティド ライアビリティ

カンパニー

F ターム (参考)	4C086	AA02 AA03 BA06 BB03 BC13 BC95 CB05 CB22 CB26 DA36
		DA37 MA01 MA04 NA14 ZA02 ZC14
	4H050	AA01 AB21